

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МЕТАЛЛОВ ИМЕНИ М.Н. МИХЕЕВА  
УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

Прошкин Алексей Игоревич

**ТЕПЛОВЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА  
МНОГОВЕРШИННЫХ МОДЕЛЕЙ ПОТТСА**

Специальность 01.04.11 —

Физика магнитных явлений

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук  
Кассан-Оглы Феликс Александрович

Екатеринбург

2016

## Оглавление

	Стр.
<b>Введение</b> . . . . .	5
<b>Глава 1. Обзор литературных источников</b> . . . . .	12
1.1 Модели Поттса . . . . .	12
1.2 Основные формулы и методы . . . . .	17
1.3 Явление фрустраций в физике магнетизма . . . . .	21
1.4 Магнитные и термодинамические особенности пниктидов и халькогенидов актиноидов и редких земель . . . . .	26
1.5 Постановка задачи исследования . . . . .	34
<b>Глава 2. Модель Изинга</b> . . . . .	36
2.1 Модель Изинга с учетом произвольного спина . . . . .	36
2.1.1 Взаимодействия между ближайшими соседями в магнитном поле . . . . .	36
2.1.2 Взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями при отсутствии магнитного поля . . . . .	38
2.1.3 Взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями в магнитном поле . . . . .	40
2.2 Корреляционная функция одномерной модели Изинга со спином $s = 1/2$ . . . . .	44
2.2.1 Корреляционная функция при отсутствии внешнего магнитного поля . . . . .	45
2.2.2 Корреляционная функция с учетом внешнего магнитного поля . . . . .	48
2.3 Модель Изинга на квадратной решетке . . . . .	50
2.3.1 Взаимодействия между ближайшими соседями . . . . .	51
2.3.2 Взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями . . . . .	54
2.3.3 Взаимодействия между ближайшими и третьими соседями . . . . .	58
2.4 Выводы по главе . . . . .	61

<b>Глава 3. Трехвершинная модель Поттса</b> . . . . .	63
3.1 Трехвершинная модель Поттса на линейной цепочке . . . . .	64
3.1.1 Магнитное поле ориентировано вдоль одного из направлений спинов . . . . .	64
3.1.2 Магнитное поле ориентировано против одного из направлений спинов . . . . .	67
3.2 Трехвершинная модель Поттса на треугольной решетке . . . . .	68
3.3 Выводы по главе . . . . .	72
<b>Глава 4. Четырехвершинная стандартная модель Поттса</b> . . . . .	74
4.1 Взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями при отсутствии магнитного поля . . . . .	75
4.2 Взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями в магнитном поле . . . . .	76
4.2.1 Направление поля вдоль [111] . . . . .	76
4.2.2 Направление поля вдоль [110] . . . . .	80
4.2.3 Направление поля вдоль [100] . . . . .	83
4.3 Сравнение с экспериментальными данными . . . . .	85
4.4 Выводы по главе . . . . .	86
<b>Глава 5. Двенадцативершинная модифицированная модель Поттса</b> . . . . .	88
5.1 Случай нулевого магнитного поля . . . . .	88
5.2 Случай ненулевого магнитного поля . . . . .	90
5.2.1 Ферромагнитное взаимодействие . . . . .	94
5.2.2 Антиферромагнитное взаимодействие . . . . .	95
5.3 Фрустрации и энтропия в двенадцативершинной модифицированной модели . . . . .	98
5.4 Сравнение с экспериментальными данными . . . . .	101
5.5 Выводы по главе . . . . .	103
<b>Глава 6. Магнитокалорический эффект в магнитных системах,         описываемых в рамках моделей Изинга и Поттса</b> . . . . .	104
6.1 Общее поведение магнитокалорического эффекта в одномерных магнетиках . . . . .	104
6.2 Выводы по главе . . . . .	107

<b>Глава 7. Намагниченность поликристаллов магнетиков, описываемых в рамках моделей Поттса . . . . .</b>	<b>109</b>
7.1 Трехвершинная модель Поттса . . . . .	109
7.2 Четырехвершинная стандартная модель Поттса . . . . .	113
7.3 Шестивершинная модифицированная модель Поттса . . . . .	116
7.4 Восьмивершинная модифицированная модель Поттса . . . . .	117
7.5 Выводы по главе . . . . .	121
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>123</b>
<b>Список публикаций . . . . .</b>	<b>126</b>
<b>Список литературы . . . . .</b>	<b>128</b>

## Введение

К настоящему времени накоплен обширный экспериментальный материал по магнитным структурам и свойствам множества соединений типа AX со структурой NaCl, называемых монопниктидами и монохалькогенидами, где A — редкоземельный элемент или актиноид, а X — элемент V или VI групп (UAs, NpAs, EuSe, UTe, USb и т.д.). Надежно установлено, что данный класс материалов обладает сильной магнитокристаллической анизотропией (причем не простого одноосного типа), значительно превосходящей обменное взаимодействие. К экспериментальным свидетельствам этого факта относятся перекрещивающиеся кривые намагничивания в различных кристаллографических направлениях [1; 2], сильное различие величины намагниченности насыщения в них (намагниченность насыщения равна магнитному моменту только вдоль оси легкого намагничивания) [3–8], и необычный ход поведения теплоемкости [9–13]. Более того, величина магнитного момента, определенная методом асимптотической намагниченности, всегда ниже таковой, определенной из нейтронографических экспериментов [4; 14]. Как резонно указал Фогт, «кривые намагничивания в таких кристаллах не могут быть представлены функцией Бриллюэна» [4, с. 207], и «для переориентации всех магнитных моментов вдоль выбранного направления магнитного поля требуются поля порядка миллиона эрстед, недоступные в настоящее время» [там же].

Первые работы по определению магнитных структур урановых соединений, проведенные на поликристаллах UN [15], UP [16], USb [17] и UBi [18], показали, что все они имеют антиферромагнитную структуру типа I (AF 1), которая представляет из себя набор чередующихся плоскостей (001), в каждой плоскости спины упорядочены ферромагнитно, а между плоскостями — антиферромагнитно. Волновой вектор такой магнитной структуры  $\mathbf{k} = (0, 0, 1)$ . Исключением оказался арсенид урана [17], которому была приписана структура с волновым вектором  $\mathbf{k} = (0, 0, 1/2)$  (антиферромагнитная структура типа IA).

С развитием метода магнитной нейтронографии [19] стало проводиться все больше и больше экспериментов по определению магнитных структур различных соединений, и урановые пниктиды не оказались исключением. Группой Россата-Миньё [20] было показано, что для описания экспериментальных данных соеди-

нений UP, UAs и USb одной компоненты волнового вектора недостаточно. Были предложены мульти-**k** структуры, волновой вектор которых содержит более одной компоненты (соответственно 2-**k** структуры для двухкомпонентного волнового вектора и 3-**k** для трехкомпонентного). Обнаружение мульти-**k** структур в реальных кристаллах однозначно показало, что магнитные моменты ряда «новых» материалов уже не являются коллинеарными друг другу, а для описания их магнитных свойств нужны модели, в которых бы с самого начала присутствовала жесткая связь магнитных моментов с кристаллической структурой.

Одной из самых простых моделей в физике магнетизма является модель Изинга, в которой, в классическом случае, спины могут принимать всего два значения  $s = \pm 1$ . Эта модель используется, в частности, для описания свойств магнетиков со структурными типами I и IA, о которых шла речь выше. Обобщением модели Изинга на число возможных направлений спина больше двух являются модели Поттса: стандартные, в которых углы между любыми двумя направлениями спина совпадают, и модифицированные, в которых это условие не соблюдается. В данной работе предлагается описывать термодинамические и магнитные свойства монониктидов и монохалькогенидов лантаноидов и актиноидов в рамках моделей Изинга и Поттса.

**Цель** данной работы состояла в разработке последовательной системы физических представлений для наблюдаемых магнитных и термодинамических свойств большого класса соединений редких земель и актиноидов со структурой NaCl, а также магнитных фазовых переходов в них.

Для достижения цели были поставлены следующие **задачи**:

1. Исследовать трех-, четырех- и двенадцативершинные одномерные модели Поттса, модель Изинга на цепочке с произвольным значением спина, классическую модель Изинга на квадратной решетке, а также трехвершинную модель Поттса на треугольной решетке. Получить ряд точных аналитических выражений для фрустрационных полей и энтропии в них при  $T \rightarrow 0$ , выявить особенности, характерные для всех фрустрированных систем. Выяснить, имеется ли качественное совпадение физических свойств магнетиков, описываемых в рамках одномерных и двумерных моделей;
2. Изучить поведение магнитокалорического эффекта (отношения  $\partial T / \partial H$ ) в пара-, ферро- и антиферромагнетиках, описываемых в рамках предла-

гаемых моделей и подходов, определить общие закономерности, характерные для всего класса рассматриваемых магнитных материалов;

3. Рассмотреть особенности поведения одномерных поликристаллических моделей Поттса, определить возможные причины расхождения экспериментальных данных по определению магнитного момента в пниктидах и халькогенидах актиноидов и редких земель.

#### **Актуальность исследования.**

Экспериментальный материал по магнитным и термодинамическим свойствам монопниктидов и монохалькогенидов весьма богат, в том числе имеются данные, полученные на монокристаллах высокого качества. Однако, надлежащая интерпретация и теоретическое объяснение очень многих экспериментальных фактов в настоящее время отсутствует: кривые температурной зависимости намагниченности значительно отклоняются от бриллюэновского поведения, теория не дает перекрещивающихся кривых намагничивания в трех основных кристаллографических направлениях кубической решетки, причины сильнейшего различия величин намагниченности насыщения в этих трех направлениях остаются не установленными. Между тем класс обсуждаемых магнетиков довольно велик. Все это порождает довольно крупную проблему в физике магнитных явлений, причем проблему теоретическую. Она требует обновления физических моделей взаимодействий и новых подходов в расчетах свойств таких магнетиков. Именно такая цель и была поставлена при работе над настоящей диссертацией.

Следует отметить, что в 2010 году россиянину Станиславу Смирнову была присуждена Филдсовская премия «за доказательство конформной инвариантности двумерной перколяции и модели Изинга в статистической физике». Все это говорит о том, что к статистическим моделям до сих пор проявляется огромный интерес, причем не только в физике. Так, модели Изинга и Поттса нашли свое применение в биологии, кибернетике, экономике, и во многих других областях знаний.

#### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Показано, что поскольку в пниктидах и халькогенидах лантаноидов и актиноидов магнитокристаллическая анизотропия значительно превосходит обменное взаимодействие, то для описания их физических свойств в качестве отправной точки необходимо рассматривать не изотропную модель Гайзенберга, а анизотропные модели Изинга и Поттса, поскольку

- ку при таком подходе с самого начала присутствует жесткая связь магнитных моментов с кристаллической структурой;
2. Установлено, что критерием существования фазового перехода и отсутствия фрустраций на языке конфигураций является тот факт, что все энергетически выгодные конфигурации должны обладать трансляционной инвариантностью. Если среди энергетически выгодных конфигураций существуют таковые, не обладающие трансляционной инвариантностью, то возникают фрустрации и фазовый переход отсутствует;
  3. Обнаружено, что вблизи любой точки фрустрации или фрустрационного поля (в любой модели на любой решетке в системе любой размерности) возникает расщепление магнитной теплоемкости на два пика (острый лямбда-образный пик и широкий куполообразный максимум);
  4. Выяснена причина расхождения значения магнитного момента, определенного методами асимптотической намагниченности и из нейтронографических экспериментов. Показано, что в поликристаллах исследуемого класса магнетиков с увеличением магнитного поля не все спины ориентируются вдоль выбранного поля и, как следствие, намагниченность стремится к некоторому асимптотическому значению, которое всегда меньше величины магнитного момента;
  5. Определено, что энтропия в точке фрустрации при  $T \rightarrow 0$  не всегда стремится к ненулевому значению. Если число конфигураций, обладающих одинаковой энергией, порядка  $q^N$ , где  $q$  — число возможных направлений спина на узле, а  $N$  — общее число узлов, то энтропия такой системы при  $T = 0$  отлична от нуля. Если это условие не соблюдается, то энтропия при  $T = 0$  равна нулю;
  6. Показано, что в некоторых моделях (например, в трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке) могут существовать целые области таких значений обменных интегралов и магнитного поля, при которых основное состояние системы является фрустрированным.

### **Научная новизна.**

В работе детально исследованы термодинамические (теплоемкость, энтропия, магнитокалорический эффект) и магнитные (намагниченность, магнитная восприимчивость) свойства материалов, описываемых в рамках моделей Изинга



и Поттса. Установлены критерии существования фрустраций и фазовых переходов в рассматриваемых системах, получены точные аналитические формулы для точек и полей фрустраций. Исследовано общее поведение магнитокалорического эффекта в пара-, ферро- и антиферромагнитных материалах рассматриваемого класса соединений. Для одномерной модели Изинга впервые в мировой литературе получены формулы для намагниченности и энтропии при нулевой температуре для произвольного спина. Впервые продемонстрировано, что фрустрации могут наблюдаться не только в отдельных точках и фрустрационных полях, но и в целых диапазонах мультикомпонентного пространства обменных взаимодействий и магнитного поля.

**Научная и практическая значимость** заключается в понимании природы магнетизма пниктидов и халькогенидов лантаноидов и актиноидов, условий возникновения фрустраций и их влияния на фазовые переходы.

**Достоверность** полученных результатов обеспечивается строгой обоснованностью принятых приближений и допущений, использованием широко разработанных и обоснованных в мировой литературе аналитических и численных методов, а также тем фактом, что результаты находятся в согласии с теоретическими и экспериментальными работами других авторов.

**Публикации.** По материалам диссертации имеется 29 публикаций, в том числе 11 статей [A1–A11] (стр. 126) в реферируемых научных журналах, входящих в перечень рекомендованных ВАК, а также 18 тезисов докладов на Российских и международных конференциях.

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались на семинарах Института Физики Металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, а также на ряде Российских и международных конференций и симпозиумов:

1. VI Всероссийская научно-техническая конференция «Физические свойства металлов и сплавов» (ФСМиС–VI), 17 – 19 октября 2011 года, Екатеринбург;
2. XXII Международная конференция Новое в Магнетизме и Магнитных Материалах (НМММ–22), 17 – 21 сентября 2012 года, Астрахань;
3. 46-я Школа ФГБУ «ПИЯФ» по физике конденсированного состояния (ПИЯФ–46), 12 – 17 марта 2012 года, Санкт-Петербург;

4. XIII Всероссийская молодежная школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС–13), 7 – 14 ноября 2012 года, Екатеринбург;
5. 47-я Школа ФГБУ «ПИЯФ» по физике конденсированного состояния (ПИЯФ–47), 11 – 16 марта 2013 года, Санкт-Петербург;
6. Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка–XXXV», 23 февраля – 1 марта 2014 года, Верхняя Сысерть;
7. Научная сессия Института физики металлов УрО РАН по итогам 2013 года, 31 марта – 4 апреля 2014 года, Екатеринбург;
8. Московский международный симпозиум по магнетизму (Moscow International Symposium on Magnetism, MISM–2014), 29 июня – 3 июля 2014 года, Москва;
9. Научная сессия Института физики металлов УрО РАН по итогам 2014 года, 30 марта – 3 апреля 2015 года, Екатеринбург;
10. Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах, 24 – 28 августа 2015 года, Челябинск;
11. Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка–XXXVI», 21 – 27 февраля 2016 года, Верхняя Сысерть.

Проведенные исследования были поддержаны Российский Фондом Фундаментальных Исследований — грант № 16-32-00032 мол\_а «Исследование низкоразмерных моделей Изинга и Поттса. Расчет магнитных структур с учетом одноионной анизотропии, произвольного спина, различных знаков обменных взаимодействий и внешнего поля».

**Личный вклад.** Автор самостоятельно проводил поиск и анализ научной литературы по теме работы, под руководством научного руководителя выполнял задачи, поставленные в начале работы над диссертацией, участвовал в получении и обсуждении ряда результатов, написании тезисов и статей.

**Содержание диссертации соответствует** пункту 3: «исследование изменений различных физических свойств вещества, связанных с изменением их магнитных состояний и магнитных свойств» паспорта научной специальности 01.04.11 — физика магнитных явлений.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, семи глав основного текста и заключения. Полный объем диссертации составляет 139 страниц с 76 рисунками. Список литературы содержит 125 наименований.

### **Краткое содержание диссертации.**

Во *введении* обоснована актуальность выбранной темы исследования, описаны цель и задачи диссертационной работы. В *первой главе* представлено современное состояние проблемы исследования магнитных свойств пниктидов и халькогенидов лантаноидов и актиноидов, приведены теоретические обоснования применимости моделей Изинга и Поттса, рассмотрены общие свойства фрустрированных систем. *Вторая глава* посвящена исследованию модели Изинга на одномерной цепочке и квадратной решетке с различными знаками обменных взаимодействий, а также с учетом магнитного поля. Получен ряд точных аналитических решений, проведен анализ результатов, полученных для двумерной модели Изинга с таковыми, полученными для одномерной задачи. В *главах с третьей по пятую* рассмотрены одномерные трех-, четырех- и двенадцативершинные модели Поттса, найдены точные аналитические выражения для намагниченности и энтропии в точках и полях фрустраций при  $T \rightarrow 0$ . В третьей главе также рассматривается трехвершинная модель Поттса на треугольной решетке, в которой обнаружен целый интервал значений отношений величин обменных взаимодействий, при которых основное состояние системы является фрустрированным. *Шестая глава* диссертации посвящена исследованию магнитокалорического эффекта пара-, ферро- и антиферромагнитных материалов, описываемых в рамках моделей Изинга и Поттса. Показано, что в антиферромагнетиках рассматриваемого класса материалов магнитокалорический эффект имеет особенность в каждой из фрустрационных точек. В *седьмой главе* рассматриваются поликристаллические трех-, четырех-, шести- и восьмивершинные модели Поттса, аналитически определены значения намагниченностей насыщения для различных моделей. Показано, насколько магнитный момент, определенный методом асимптотической намагниченности, может отличаться от момента, определенного из нейтронографических экспериментов.

Основные результаты работы приведены в выводах по каждой главе и обобщены в заключении настоящей диссертаций.

## Глава 1. Обзор литературных источников

### 1.1 Модели Поттса

Главной задачей равновесной статистической механики, как известно, является вычисление статистической суммы — суммы по состояниям:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp \frac{-\mathcal{H}(s)}{k_B T}, \quad (1.1)$$

где  $\mathcal{H}(s)$  — гамильтониан,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура и суммирование выполняется по всем допустимым состояниям  $\sigma$  системы. Для систем с непрерывным спектром эта сумма превращается в интеграл, а для квантовомеханических систем — в сумму диагональных элементов матрицы плотности. Результат такого вычисления позволяет записать свободную энергию  $F = -k_B T \ln Z$  и найти все интересующие параметры, такие как намагниченность, теплоемкость и другие, простым дифференцированием.

К сожалению, для любых реалистичных систем вычисление  $Z$  представляет собой безнадежно трудную задачу. Приходится следовать по одному из двух путей:

1. Выбрать приближение, позволяющее вычислить сумму по состояниям  $\sigma$ ;
2. Заменить реальную систему некоторой простой идеализированной системой, называемой моделью, в которой эту сумму удастся вычислить.

Следуя по первому пути, можно привести некоторые из наиболее известных схем приближений:

1. Приближение ячеек и кластеров. В этом случае свойства системы получают в результате экстраполяции свойств небольшой совокупности элементов, заключенной внутри некоторой «ячейки», и затем приближенно оценивают взаимодействия ячейки с остальной частью системы. К таковым относится, прежде всего, приближение среднего поля [21; 22]. Численные расчеты, проведенные этим методом, довольно точны, однако неприменимы в ближайшей окрестности критической точки [23].

2. Численное моделирование. Из огромного числа вариантов необходимо отметить методы Монте-Карло: алгоритм Метрополиса [24], кластерные алгоритмы Швендсена–Янга [25] и Вольфа [26], а также хорошо зарекомендовавший себя алгоритм Ванга–Ландау [27]. Вычисление проводится для систем достаточно больших в микроскопическом масштабе, но все же не макроскопического размера. По существу, методы численного моделирования представляют собой именно аппроксимации, а не точные расчеты.
3. Разложения в ряд по обратной температуре. Для достаточно реалистичных моделей может быть вычислено только небольшое число членов ряда, хотя в случае трехмерной модели Изинга было вычислено до сорока членов соответствующего разложения [28; 29].
4. Метод ренормализационной группы [30; 31]. В этом методе вычисление статсуммы выполняется последовательно, причем на каждом шаге «ренормализационная» функция Гамильтона определяется заново. Метод ренормгруппового подхода может быть проведен до конца точно, однако сделать это труднее, чем выполнить прямое вычисление статистической суммы, поэтому в каждом конкретном случае пользуются какими-то приближенными методами.

Второй подход состоит в том, чтобы найти модели, в которых статистическая сумма может быть вычислена точно, что позволит качественно понять поведение системы, особенно в критических точках. Самой простой моделью в статистической физике является модель Изинга [32], но, к сожалению, в трехмерном случае точное решение не получено даже для нее. В литературе известно несколько точных решений для двумерной модели Изинга при отсутствии внешнего магнитного поля [33–35]. Здесь на помощь приходят одномерные модели, которые могут быть решены точно и, как будет показано ниже, позволяют качественно описывать магнитные и термодинамические свойства реальных систем.

В классической модели Изинга спины могут принимать только два значения  $s = \pm 1$  (рисунок 1.1а). Обобщением модели Изинга на число возможных направлений спина больше двух являются модели Поттса. Четырехкомпонентная версия этой модели была впервые изучена Ашкином и Теллером [36]. Более общая модель, состоящая из  $q$ -компонент, была определена Поттсом. Последний рассмотрел систему взаимодействующих спинов, ориентация каждого из кото-

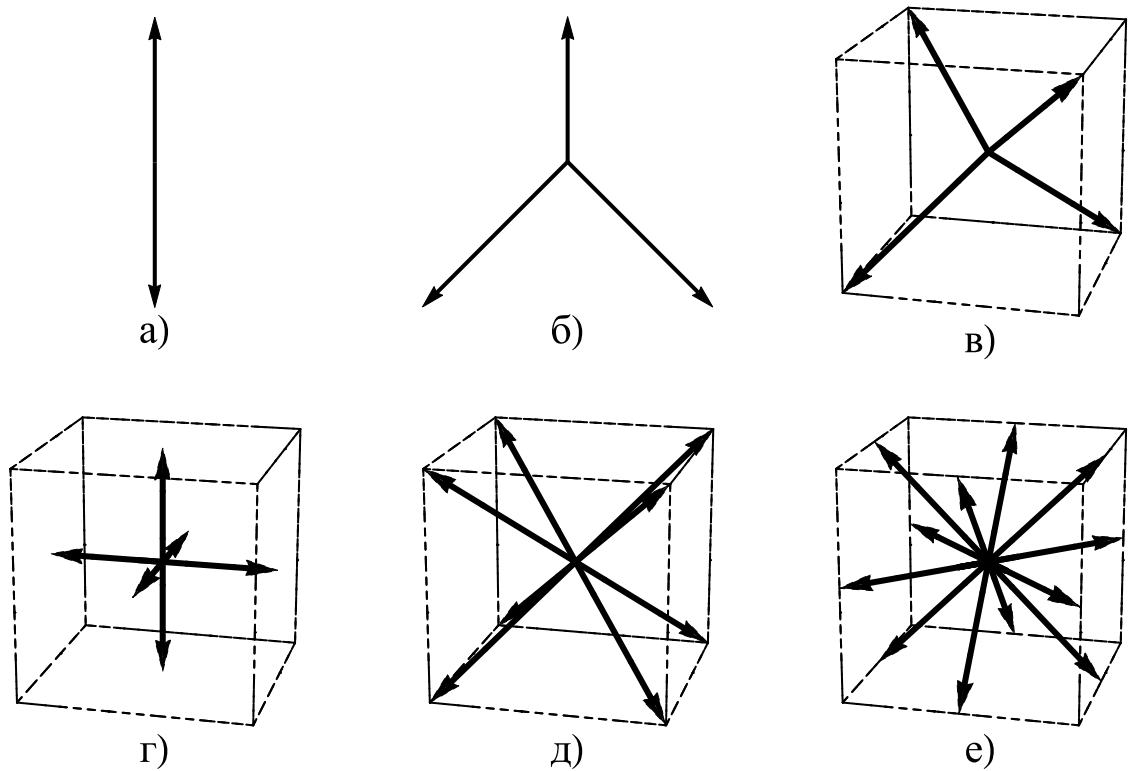


Рисунок 1.1 — Модели Поттса: а) двухвершинная (модель Изинга), б) трехвершинная планарная, в) четырехвершинная стандартная, г) шестивершинная модифицированная, д) восьмивершинная модифицированная, е) двенадцативершинная модифицированная

рых определяется углами:

$$\theta_n = 2\pi n/q, \quad n = (0, 1, \dots, q-1). \quad (1.2)$$

Такая модель называется планарной моделью Поттса, а модель Изинга является её частным случаем с  $q = 2$ .

Взаимодействие только между ближайшими соседями зависит от относительного угла между двумя векторами и для планарной модели было предложено записывать гамильтониан в виде:

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \sum_{n_i, n_{i+1}} \cos(\theta_{n_i} - \theta_{n_{i+1}}). \quad (1.3)$$

Кроме планарной, имеется стандартная модель Поттса [37]. В ней спины, занимающие узлы решетки, могут ориентироваться в  $q$ -симметричных направлениях гипертетраэдра в пространстве размерности  $q-1$ , так что углы между любы-

ми двумя различными направлениями равны. Примеры для  $q = 2, 3, 4$  приведены на рисунках 1.1а, 1.1б и 1.1в соответственно. Взаимодействие между ближайшими соседями в этой модели описывается следующей формулой:

$$J_{n_i, n_{i+1}} = \frac{J}{q} [1 + (q - 1) e^{n_i} e^{n_{i+1}}], \quad (1.4)$$

где  $e^{n_i}$  — единичные векторы, ориентированные по  $q$ -симметричным направлениям гипертетраэдра. Выражение (1.4) подразумевает, что взаимодействие отлично от нуля только между сонаправленными спинами. Однако Поттс [38] и Домб [39] несколько иначе определяют стандартную модель, а именно, они задают взаимодействие между ориентированными одинаково соседями величиной  $J_0$ , а ориентированными различно —  $J_1$ , так что

$$J_{n_i, n_{i+1}} = J_0 \delta_{n_i, n_{i+1}} + J_1 (1 - \delta_{n_i, n_{i+1}}). \quad (1.5)$$

Если положить, в частности,  $J_1 = -J_0/2$  в трехвершинной стандартной модели Поттса, и  $J_1 = -J_0/3$  в четырехвершинной стандартной модели, тогда для обеих моделей взаимодействие может быть записано в виде (удобном для задач магнетизма) произведения:

$$J_{n_i, n_{i+1}} = J S_{n_i} S_{n_{i+1}} \cos(\theta_{n_i, n_{i+1}}) = J (\mathbf{S}_{n_i} \cdot \mathbf{S}_{n_{i+1}}), \quad (1.6)$$

где подразумевается, что векторы  $\mathbf{S}$  имеют единичную длину и могут быть ориентированы только по  $q$  направлениям. Если учесть влияние внешнего магнитного поля  $\mathbf{H}$ , то гамильтониан примет вид:

$$\mathcal{H} = -J \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}) - \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}). \quad (1.7)$$

Аналогичным образом можно дополнить гамильтониан членом, отвечающим за взаимодействие между вторыми соседями:

$$\mathcal{H} = -J \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}) - J' \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}) - \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}). \quad (1.8)$$

Модели Поттса могут быть применены для описания монопниктидов и монохалькогенидов лантаноидов и актиноидов — магнетиков, которые при опреде-

ленных температурах обладают кубической структурой типа NaCl из взаимно проникающих ГЦК решеток анионов и катионов. Исходя из конкретных значений ионных радиусов (см., например, [40]), можно сказать, что катионы в них находятся в почти плотноупакованных октаэдрах анионов, слегка раздвигая последние.

Однако, если катион обладает магнитным моментом, то это приводит к небольшому отклонению формы катиона от идеальной сферы. Сведения о пространственном распределении магнитного момента могут быть получены из измерений зависимости магнитного форма-фактора иона от вектора рассеяния (см., например, [41; 42]). Такие измерения, проведенные на кристаллах USb [43] и UAs [44], привели к выводу, что магнитный момент катиона, в зависимости от типа окружающих его анионов, испытывает либо дипольное (вытянутый (prolate) или сплюснутый (oblate) эллипсоид вращения), либо квадрупольное искажения. Возможные формы дипольного искажения изображены на рисунке 1.2.

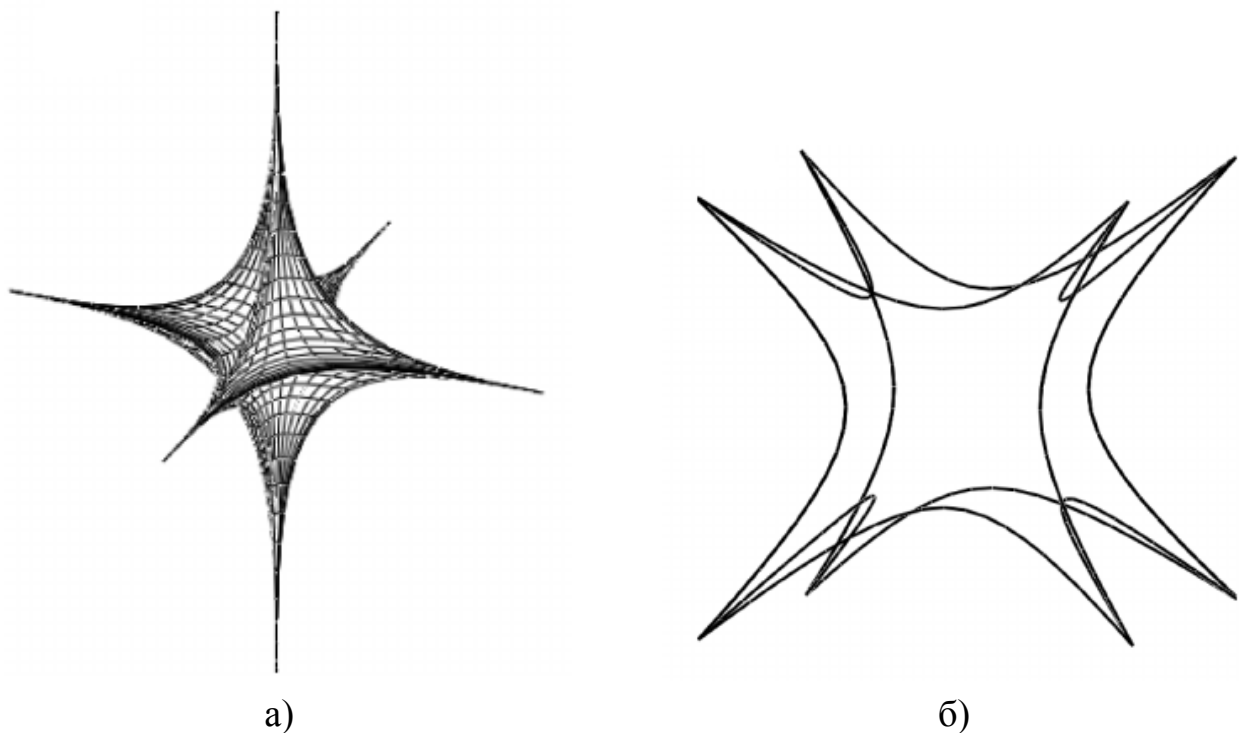


Рисунок 1.2 — Вероятность ориентировок сплюснутого а) и вытянутого б) эллипсоида в октаэдрическом окружении анионов-шаров

Будем считать анионы идеальными, а катионы слегка искаженными твердыми шарами. Анализ приводит к тому, что в зависимости от формы они ориентируются по-разному. Вытянутому эллипсоиду выгоднее ориентироваться длинной осью в промежутки между анионами, поэтому для него имеется восемь наиболее



вероятных кристаллографических направлений типа [111]. Сплюснутому эллипсоиду выгоднее ориентироваться короткой осью по шести кристаллографическим направлениям типа [001]. При квадрупольном искажении выгодна ориентировка по двенадцати направлениям типа [110]. Модели, ограничивающиеся только такими ориентациями спина, введены в работе [45] и называются модифицированными шести-, восьми- и двенадцативершинными моделями Поттса (рисунок 1.1г–е). Модифицированные модели являются естественным обобщением стандартных и планарных моделей и могут быть применены для описания различных свойств реальных кристаллов [46–48]. Следует отметить, что модифицированные модели Поттса определены в реальном трехмерном пространстве, сильно анизотропны и противопоставлены сферически симметричной модели Гайзенберга .

В работе [45] были получены точные аналитические решения и подробно исследованы одномерные шести- и восьмивершинные модели при учете взаимодействия между ближайшими соседями во внешнем магнитном поле. Использование полученных точных решений оказалось плодотворным, и в [49] была построена теория магнитных и структурных фазовых переходов для материалов с осями легкого намагничивания типа [001] и [111] на основе шести- и восьмивершинной моделей соответственно. Модифицированные шести- и восьмивершинные модели Поттса использовались и в работах [50; 51] для описания фазовых переходов в арсениде урана.

## 1.2 Основные формулы и методы

В 1941 году Крамерс и Ваннье показали, что выражение для статсуммы, содержащей бесконечное множество слагаемых, можно представить как максимальное собственное значение некоторой матрицы (с тех пор называемой трансфер-матрицей Крамерса–Ваннье) конечной размерности [52]. В настоящем разделе рассмотрен принцип построения трансфер-матрицы на примере модели Изинга на одномерной цепочке спинов  $s = 1/2$ . Такой выбор обусловлен, во-первых, простотой модели и, во-вторых, тем фактом, что она подробно исследуется в следующей главе настоящей диссертации.

Рассмотрим одномерную модель Изинга, состоящую из  $N$  узлов, расположенных вдоль одной линии и пронумерованных по порядку индексами  $i = 1, 2, \dots, N$ . Гамильтониан такой системы описывается выражением:

$$\mathcal{H}(s) = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - H \sum_{i=1}^N s_i, \quad (1.9)$$

где  $s$  — дискретная спиновая переменная, принимающая значения  $\pm 1/2$ ,  $H$  — величина внешнего магнитного поля,  $J$  — энергия взаимодействия двух спинов.

Предполагается, что за узлом  $N$  снова следует узел 1, так что  $s_{N+1}$  совпадает с  $s_1$ . Это эквивалентно наложению на систему периодических граничных условий Борна-Кармана. Такой выбор существенно облегчает расчет и широко используется хотя бы потому, что обеспечивает эквивалентность узлов и трансляционную инвариантность системы.

Из (1.9) можно получить выражение для статсуммы:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left( K \sum_i s_i s_{i+1} + h \sum_i s_i \right), \quad (1.10)$$

где  $K = J/k_B T$ ,  $h = H/k_B T$ . Здесь и далее в настоящей диссертации  $H$  и  $T$  измеряются в величинах  $|J|$ , а постоянная Больцмана положена равной единице, как это обычно принято в теории низкоразмерных систем.

Заметим, что экспонента в формуле (1.10) может быть представлена в виде произведения сомножителей, каждый из которых зависит только от одной пары соседних спинов:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} V(s_1, s_2) V(s_2, s_3) \cdot \dots \cdot V(s_{N-1}, s_N) V(s_N, s_1), \quad (1.11)$$

где  $V(s_i, s_j) = \exp \left( K s_i s_j + \frac{h}{2} (s_i + s_j) \right)$ .

При таком выборе  $V$  выполняется соотношение  $V(s_i, s_j) = V(s_j, s_i)$ .

Правая часть (1.11) может быть представлена в виде матрицы размерности  $2 \times 2$ :

$$V = \begin{pmatrix} V(+,+) & V(+,-) \\ V(-,+) & V(-,-) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp \left( \frac{K}{4} + \frac{h}{2} \right) & \exp \left( -\frac{K}{4} \right) \\ \exp \left( -\frac{K}{4} \right) & \exp \left( \frac{K}{4} - \frac{h}{2} \right) \end{pmatrix}. \quad (1.12)$$

На каждом шаге вычислительной процедуры умножение на матрицу  $V$  соответствует суммированию по конфигурациям еще одного узла решетки. Матрица  $V$  называется трансфер-матрицей Крамерса–Ваннье, которая может быть определена для моделей в одном, двух и трех измерениях. При этом выполняется соотношение:

$$Z_N = \text{Sp}V^N. \quad (1.13)$$

Как известно, след матрицы является одним из инвариантов ее ортогонального преобразования. Существует ортогональное преобразование  $T$ , приводящее ее к диагональной форме  $\tilde{V}$ :

$$\tilde{V} = T^{-1}VT = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

где  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  — собственные значения матрицы  $V$ :

$$\lambda_{1,2} = \exp \frac{K}{4} \left( \cosh \frac{h}{2} \pm \sqrt{\sinh^2 \frac{h}{2} + \exp(-K)} \right). \quad (1.15)$$

Поскольку

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N = \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix}, \quad (1.16)$$

то свободная энергия  $f$  выражается через  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  ( $\lambda_1 > \lambda_2$ ) следующим образом:

$$f = -T \ln Z = -T \ln (\lambda_1^N + \lambda_2^N) = -T \left[ N \ln \lambda_1 + \ln \left( 1 + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) \right]. \quad (1.17)$$

В термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ ) слагаемое  $\ln \left( 1 + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right)$  стремится к нулю; отсюда найдем асимптотическое значение свободной энергии в расчете на один узел  $F = f/N$ :

$$F = -T \ln \left[ \exp \frac{J}{4T} \left( \cosh \frac{H}{2T} + \sqrt{\sinh^2 \frac{H}{2T} + \exp \frac{-J}{T}} \right) \right]. \quad (1.18)$$

Такие параметры, как намагниченность  $M$ , магнитная восприимчивость  $\chi$ , энтропия  $S$ , магнитная теплоемкость  $C$  и магнитокалорический эффект (здесь

и далее под магнитокалорическим эффектом понимается отношение изменения температуры к изменению магнитного поля  $\partial T/\partial H$ )  $MCE$  могут быть выражены только через максимальное собственное значение  $\lambda_{\max} = \lambda_1$  по обычным формулам термодинамики (см., например, [53]):

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = \frac{T}{\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial H}, \quad (1.19)$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \ln \lambda_{\max} + \frac{T}{\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T}, \quad (1.20)$$

$$\chi = -\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} = \frac{T}{\lambda_{\max}} \frac{\partial^2 \lambda_{\max}}{\partial H^2} - \frac{T}{\lambda_{\max}^2} \left( \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial H} \right)^2, \quad (1.21)$$

$$C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = 2 \frac{T}{\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T} + T^2 \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T}, \quad (1.22)$$

$$\begin{aligned} MCE &= -\frac{T}{C} \left( \frac{\partial S}{\partial H} \right) = -\frac{T}{C} \left( \frac{\partial M}{\partial T} \right) = \\ &= \frac{\lambda_{\max} \partial \lambda_{\max} / \partial H + T \lambda_{\max} \partial^2 \lambda_{\max} / \partial T \partial H - T \partial \lambda_{\max} / \partial T \partial \lambda_{\max} / \partial H}{2 \lambda_{\max} \partial \lambda_{\max} / \partial T - T (\partial \lambda_{\max} / \partial T)^2 + T \lambda_{\max} \partial^2 \lambda_{\max} / \partial T^2}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Трансфер-матрицы для моделей Изинга и Поттса с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями приведены в работах [45; 54; 55].

Для изучения двумерных и трехмерных задач в статистической физике уже несколько десятилетий применяют различные варианты компьютерного моделирования в методе Монте-Карло (см., например, [56]). Это и классический алгоритм Метрополиса [24], и кластерные алгоритмы Швендсена–Янга [25] и Вольфа [26], и появившийся относительно недавно, но весьма эффективный, алгоритм Ванга–Ландау [27]. Суть последнего заключается в том, что изначально заданная плотность состояний корректируется на каждом шаге расчетной процедуры, что позволяет, во-первых, приближенно считать статсумму сразу при любой температуре, во-вторых, получать зависимости энтропии и теплоемкости независимо друг от друга. Все предшествующие алгоритмы не позволяют напрямую получать энтропию, а только через интегрирование теплоемкости. Как будет показано дальше, в монопниктидах и монохалькогенидах лантаноидов и актиноидов энтропия основного состояния в точке фрустрации не всегда стремится к нулю при  $T \rightarrow 0$  и интегрирование теплоемкости может приводить к ошибочным результатам в поведении энтропии. В последнее время методу Ванга–Ландау посвящается большое количество работ, в которых подробно исследуется его сходимость, а

также предлагаются модификации к оригинальному методу, позволяющие быстрее и аккуратнее вычислять плотность состояний [57–61].

### 1.3 Явление фрустраций в физике магнетизма

Термин «фрустрация» был введен в магнетизм Жераром Тулузом в 1977 году [62] и поначалу использовался для описания только геометрических фрустраций, которые вкратце будут описаны ниже. На сегодняшний день концепция фрустраций включает в себя и магнитоупругие связи, и орбитальные степени свободы, и электронное допирование.

В общем смысле под фрустрациями понимают невозможность одновременной минимизации всех слагаемых гамильтониана (1.8). Типичный пример геометрической фрустрации — антиферромагнитная модель Изинга на треугольной решетке с учетом взаимодействия только ближайших соседей. В ней невозможно расположить все спины так, чтобы каждая пара соседей была антипараллельна (рисунок 1.3а). Отсюда возникло мнение, что фрустрации возможны только на треугольных решетках, однако это не так. На рисунке 1.3б приведена трехвершинная антиферромагнитная модель Поттса на той же треугольной решетке. Как видно, при учете только ближайших соседей фрустрации в этой системе отсутствуют.

В теории магнетизма сформировалось несколько устойчивых представлений касательно фрустраций в магнитных системах [63–65]:

1. Фрустраций в одномерных системах не бывает;
2. Для существования фрустраций необходимо иметь треугольную решетку;
3. Фрустрации существуют, если при  $T \rightarrow 0$  энтропия не равна нулю.

Оказывается, что все эти представления ошибочны.

Модель Изинга со спином  $s = 1/2$  на одномерной цепочке с учетом антиферромагнитного взаимодействия только между ближайшими соседями во внешнем поле является простейшей моделью, в которой можно обнаружить фрустрации [54]. Максимальное собственное значение трансфер-матрицы, как было по-

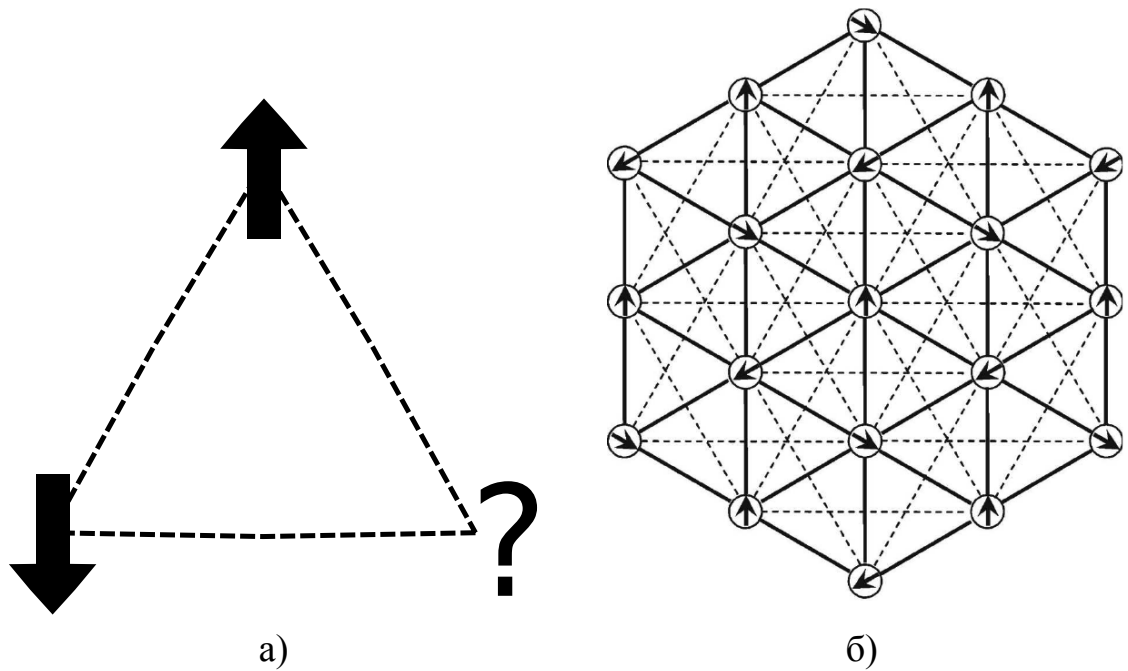


Рисунок 1.3 — а) Модель Изинга и б) трехвершинная модель Поттса на треугольной решетке

казано в предыдущем разделе, имеет вид:

$$\lambda_{\max} = \exp \frac{J}{4T} \left( \cosh \frac{H}{2T} + \sqrt{\sinh^2 \frac{H}{2T} + \exp \frac{-J}{T}} \right). \quad (1.24)$$

Основное состояние системы при  $H = 0$ ,  $T = 0$  — антиферромагнитное упорядочение типа  $+-+-$ . С ростом поля все спины выстраиваются вдоль магнитного поля — возникает ферромагнитное упорядочение  $++++$ . Можно показать, что в критическом поле  $H_{\text{fr}} = 1$ , называемом фрустрирующим, энергии этих двух конфигураций совпадают, и имеется бесконечное число различных конфигураций, обладающих одинаковой энергией. С помощью формул (1.24) и (1.19–1.23) можно показать, что в точке фрустрации при  $T \rightarrow 0$  энтропия равна натуральному логарифму знаменитого золотого сечения  $\ln \{(1 + \sqrt{5}) / 2\}$ , а намагниченность —  $1/2\sqrt{5}$ .

Модель Изинга с учетом ближайших  $J_1$  и вторых  $J_2$  соседей при отсутствии внешнего поля является фрустрированной при конкурирующих обменных взаимодействиях ( $J_1 < 0$ ,  $J_2 < 0$  и  $J_1 > 0$ ,  $J_2 < 0$ ) в точке  $R = |J_2/J_1| = 0,5$ , причем энтропия здесь при  $T \rightarrow 0$  также равна натуральному логарифму золотого сечения.

Двумерные модели, в отличие от одномерных, упорядочиваются при некоторых отличных от нуля температурах. На рисунке 1.4 приведены кривые теплоемкости и энтропии, полученные на основе точного решения модели Изинга на треугольной решетке [35]. Видно, что ферромагнитная модель не является фрустрированной и имеет острый пик теплоемкости и равную нулю энтропию при  $T \rightarrow 0$ , тогда как антиферромагнитная модель является фрустрированной. Теплоемкость в этом случае острого  $\lambda$ -образного пика не имеет, а энтропия при  $T \rightarrow 0$  отлична от нуля.

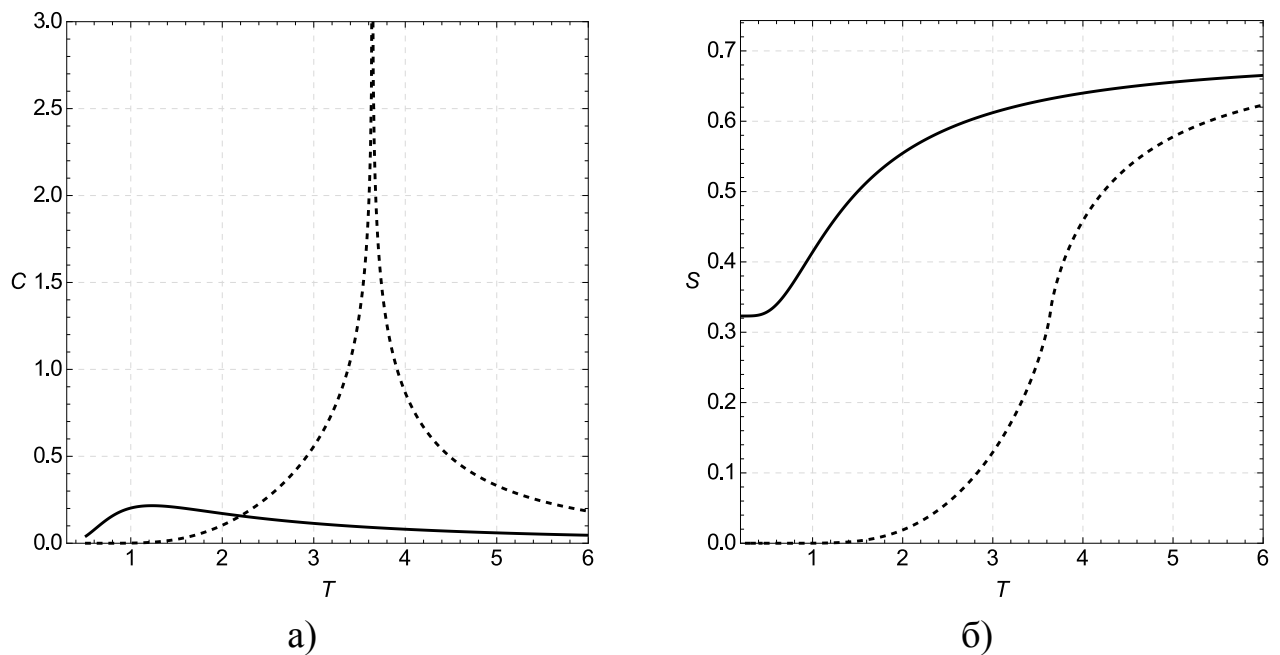


Рисунок 1.4 — Теплоемкость а) и энтропия б) в модели Изинга на треугольной решетке. Сплошные линии — антиферромагнетик,  $J < 0$ , пунктирные — ферромагнетик,  $J > 0$

Характерной особенностью фрустрированных систем является расщепление теплоемкости вблизи точек фрустраций на острый  $\lambda$ -образный пик и широкий плавный горб, причем эта особенность присуща любой модели на любой решетке. Если, например, воспользоваться точным решением Онзагера для модели Изинга на квадратной решетке [33], зафиксировать взаимодействие вдоль одного ребра квадрата  $J_x = -1$ , изменять  $J_y$  от  $-0,1$  до  $+0,1$  и ввести обозначение  $R = J_y/J_x$ , то мы получим, что энтропия равна нулю при любом значении  $R$ , даже при  $R = 0$ , хоть это и точка фрустрации. На рисунке 1.5а температура фазового перехода в этом случае изображена сплошной линией, а зависимость плавного максимума — кружками ( $\circ$ ). Теплоемкость при  $R = 0,01$  приведена на рисунке 1.5б, на котором отчетливо видны два максимума.

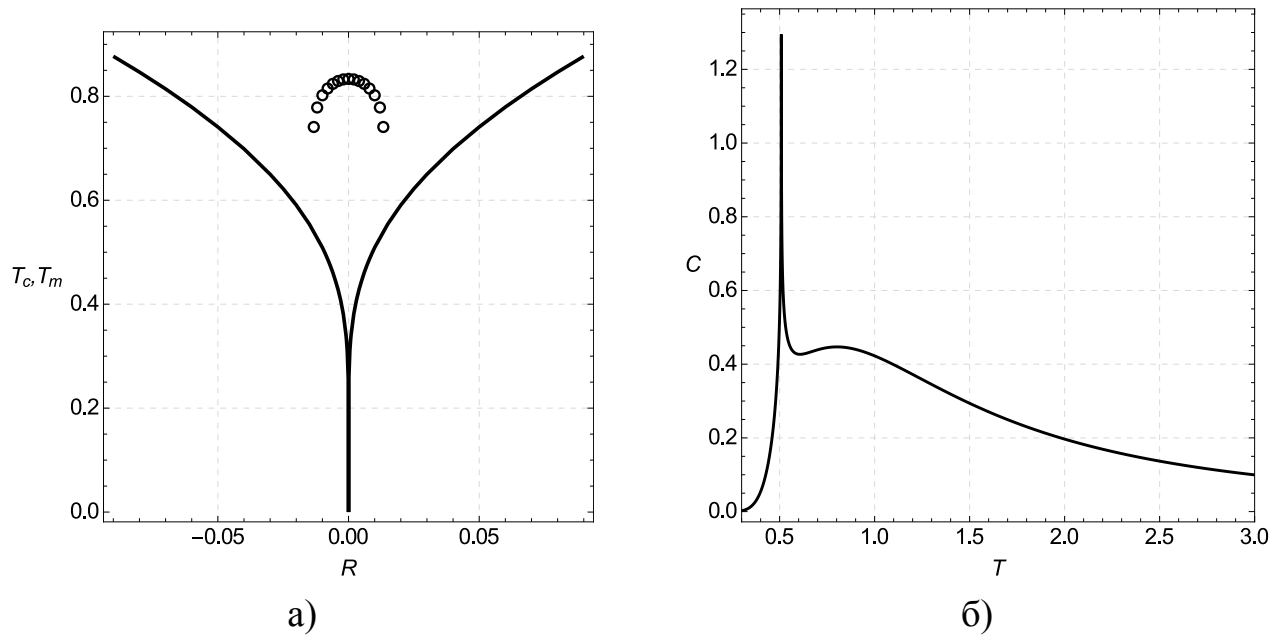


Рисунок 1.5 — Температура фазового перехода (сплошная линия) и положение максимума широкого пика теплоемкости ( $\circ$ ) а). Теплоемкость как функция температуры при  $R = 0,01$  б)

Таким образом, не всегда в точке фрустрации энтропия при  $T \rightarrow 0$  не равна нулю, что объясняется частичным упорядочением системы (или упорядочением с понижением размерности). Легко показать, что энтропия, приходящаяся на один узел, при  $T \rightarrow 0$  равна  $\ln N'/N$ , где  $N \rightarrow \infty$  есть общее число узлов и  $N'$  есть число конфигураций с минимальной энергией, то есть тех, которые выживают при  $T \rightarrow 0$ . Если  $N'$  конечно (например, для антиферромагнитной модели Изинга  $N' = 2$  при  $T = 0$ ), то энтропия равна нулю, и система является упорядоченной. Если  $N'$  бесконечно и является функцией вида  $q^N$ , где  $q$  — некоторое число, то энтропия отлична от нуля, и в системе отсутствует какое-либо упорядочение. Примером может служить трехвершинная модель Поттса на одномерной цепочке с учетом взаимодействий только между ближайшими соседями при нулевой температуре. В таком случае каждый третий спин может ориентироваться по двум различным направлениям, так что имеется  $2^{N/3}$  различных конфигураций, обладающих одинаковой энергией. Энтропия такого состояния отлична от нуля и равна  $1/3 \ln 2$ , что может быть легко получено по формуле, приведенной в начале этого абзаца. Наконец,  $N'$  может быть бесконечным, но не вида  $q^N$ . Так, в предыдущем параграфе было сказано, что в модели Изинга на квадратной решетке в точке фрустрации  $R = 0$  энтропия равна нулю. Это объясняется тем, что при  $R = 0$  система разбивается на бесконечное число невзаимодействующих



одномерных антиферромагнитных цепочек спинов. Если обозначить за  $N_x$  число спинов вдоль оси  $x$ , а за  $N_y$  число спинов вдоль оси  $y$ , то получим, что  $N$  в этом случае равно  $N_x \times N_y$ , а  $N' = 2^{N_y}$  и энтропия такой системы закономерно равна нулю, несмотря на то, что состояние является фрустрированным (отсутствует трансляционная инвариантность вдоль оси  $y$ ).

На рисунке 1.6 представлены примеры частичного упорядочения для модели Изинга на квадратной и треугольной решетках. Видно, что имеется упорядочение только вдоль оси  $x$ , тогда как вдоль оси  $y$  никакого упорядочения нет. Это фрустрация, но с равной нулю энтропией (при  $T = 0$ ).

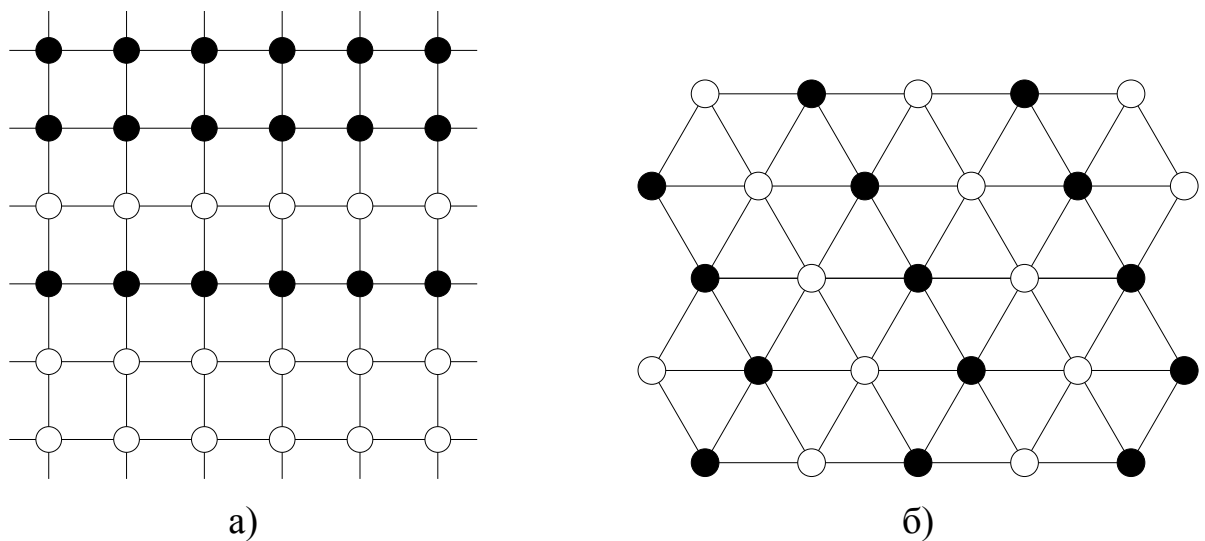


Рисунок 1.6 — Частичное упорядочение в модели Изинга на квадратной а) и треугольной б) решетках

Таким образом, из обсуждений, приведенных выше, можно сделать общие выводы, касающиеся фрустраций:

1. Фрустрации могут существовать в системах любой размерности;
2. Фрустрации могут существовать на одной решетке, но для разных моделей и наоборот, для одной модели, но на разных решетках;
3. Если основное состояние системы имеет трансляционную инвариантность только по одному направлению, то, несмотря на тот факт, что такое состояние является фрустрированным, энтропия его при  $T \rightarrow 0$  равна нулю.

#### 1.4 Магнитные и термодинамические особенности пниктидов и халькогенидов актиноидов и редких земель

До появления первых экспериментальных данных по монопниктидам актиноидов в начале 60-х годов прошлого столетия, основной интерес исследователей был сосредоточен на изучении магнитных свойств элементов группы железа и редкой земли. Огромный вклад в понимание свойств этих «классических» магнитных систем был внесен в том числе и советскими учеными, в частности академиком С.В. Вонсовским, которому принадлежит монументальный труд по магнетизму [66]. Публикации первых работ по новому классу материалов в начале 60-х и синтезирование хороших монокристаллов в начале 70-х вызвали повышенный интерес к исследованию пниктидов и халькогенидов актиноидов и редких земель, поскольку оказалось, что эти соединения обладают рядом новых и уникальных свойств, не получающих объяснений с точки зрения классических методов и подходов. Несмотря на тот факт, что эти соединения исследуются уже на протяжении 50 лет, природа их магнитных свойств до сих пор не ясна. Так, целью данной диссертации является обоснование того факта, что при построении теории магнитных свойств этого класса материалов необходимо опираться не на изотропную модель Гайзенберга, а на анизотропные модели Поттса, что будет продемонстрировано в последующих главах настоящей диссертации.

К необычным свойствам монопниктидов и монохалькогенидов лантаноидов и актиноидов относится, прежде всего, наличие сильной магнитной анизотропии, главным экспериментальным свидетельством которой являются перекрещивающиеся кривые намагничивания для различных направлений магнитного поля. На рисунке 1.7 представлены кривые намагничивания соединений PuSb (рисунок 1.7а) и UThSb (рисунок 1.7б), взятые из работ [1] и [2] соответственно. Хорошо видно, что намагниченность насыщения имеет разное значение для различных направлений магнитного поля: для соединения PuSb, например, авторы отмечают о соотношении намагниченностей насыщения  $1 : 1/\sqrt{2} : 1/\sqrt{3}$  для направлений поля  $[100] : [110] : [111]$  соответственно.

Другим примером является соединение UTe, полевое и температурное поведение намагниченности которого приведено на рисунке 1.8. Хорошо видно, что намагниченность насыщения различна для всех трех выбранных направлений по-

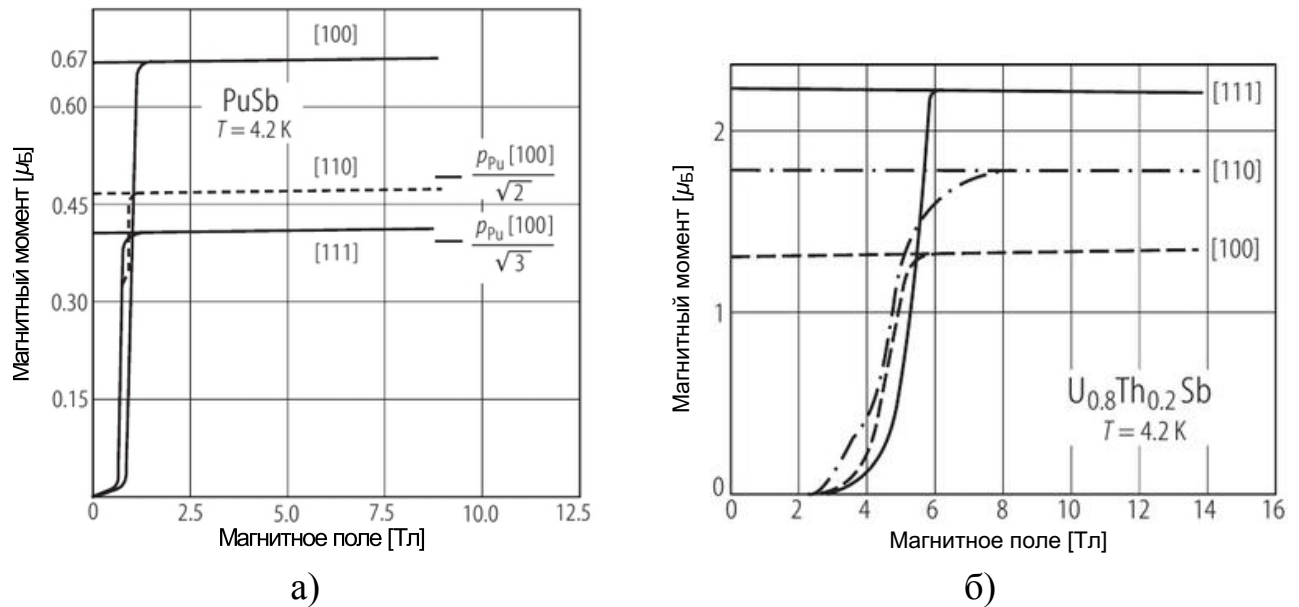


Рисунок 1.7 — Намагниченность как функция магнитного поля для соединений а) PuSb [1] и б)  $U_{0.8}Th_{0.2}Sb$  [2]

ля. По оценкам Фогта «для переориентации магнитных моментов в этом материале требуются поля порядка миллиона эрстед» [4, с. 207]. Более того, «температурная зависимость намагниченности в этом материале не может быть представлена функцией Бриллюэна независимо от выбора параметра  $J$ » [там же].

Подобное необычное поведение намагниченности характерно для всего рассматриваемого класса материалов. Так, среди прочих соединений, оно наблюдалось в UP [3], USe [4], NpP [5], EuSe [6], DyBi [67], а также в DyS, HoS и HoSe [7]. Удельная намагниченность UTe как функция температуры при различных значениях магнитного поля исследовалась и в работе [8].

Фогт отмечает, что «причиной такого поведения намагниченности является наличие необычайно сильной анизотропии, причем не простого одноосного типа» [4, с. 206].

Как уже было отмечено, магнитная теплоемкость подобных материалов тоже ведет себя необычным способом [9–13]. Вдали от некоторого критического магнитного поля теплоемкость имеет стандартный онзагеровский острый пик, соответствующий фазовому переходу (упорядочению), однако вблизи этого критического поля теплоемкость расщепляется на два максимума, которые не находят должного объяснения в мировой литературе.

Зависимости магнитной теплоемкости от температуры для соединений ErBi и TmS приведены на рисунке 1.9, для TmTe — на рисунке 1.10. На обоих ри-

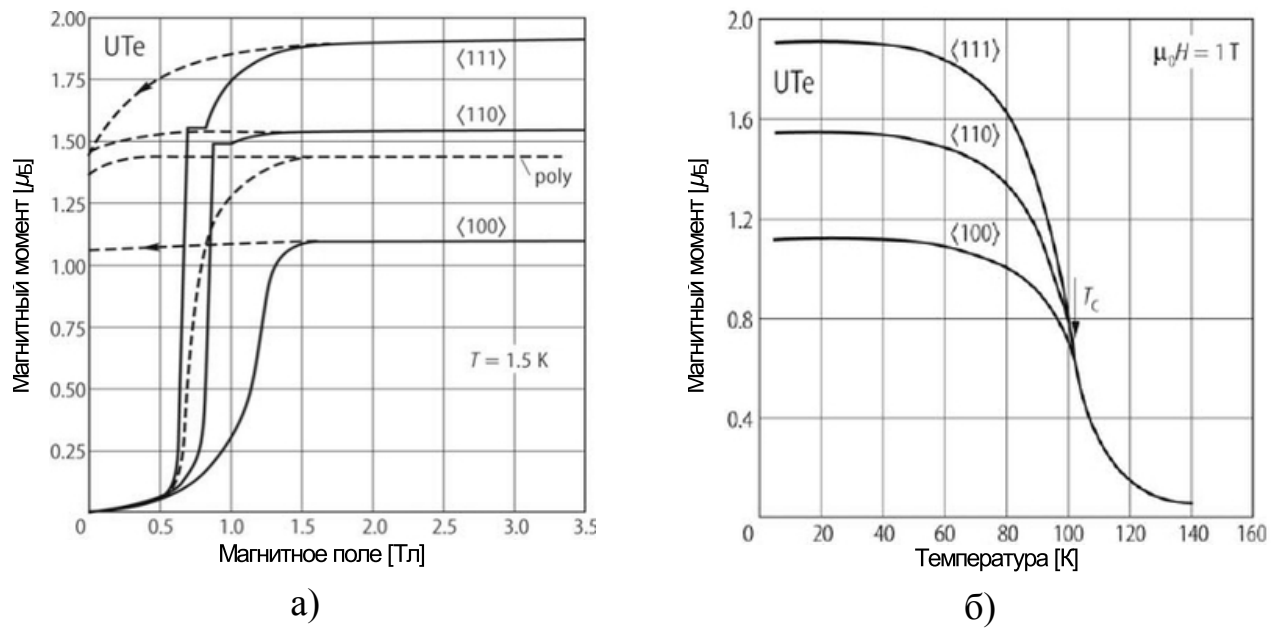


Рисунок 1.8 — Намагниченность UTe как а) функция магнитного поля [3] и б) температуры [4]

сунках сплошные кривые соответствуют теоретически рассчитанным теплоемкостям. Хорошо видно, что, во-первых, «теоретические кривые не воспроизводят экспериментальные» [13, с. 739], во-вторых, все определенные экспериментально теплоемкости имеют два ярко выраженных максимума. Один максимум является острым, второй — плавным. Последний, к тому же, всегда находится правее (в стороне больших температур).

Для описания свойств монопниктидов и монохалькогенидов лантаноидов и актиноидов традиционная модель Гайзенберга неприменима. Гамильтониан Гайзенберга без учета анизотропии имеет вид [68]:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{j,k} \left( S_j^x S_{j+k}^x + S_j^y S_{j+k}^y + S_j^z S_{j+k}^z \right). \quad (1.25)$$

В широком смысле анизотропия — это «зависимость равновесных физических свойств твердого тела от направления» [69, с. 83]. В традиционной модели Гайзенберга анизотропия (например, одноионная) является, по-существу, всего лишь поправкой к изотропному гамильтониану обменного взаимодействия. Она слегка изменяет вероятность ориентации по одному из направлений:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{j,k} \left( S_j^x S_{j+k}^x + S_j^y S_{j+k}^y + S_j^z S_{j+k}^z \right) - D \sum_j (S_j^z)^2, \quad (1.26)$$

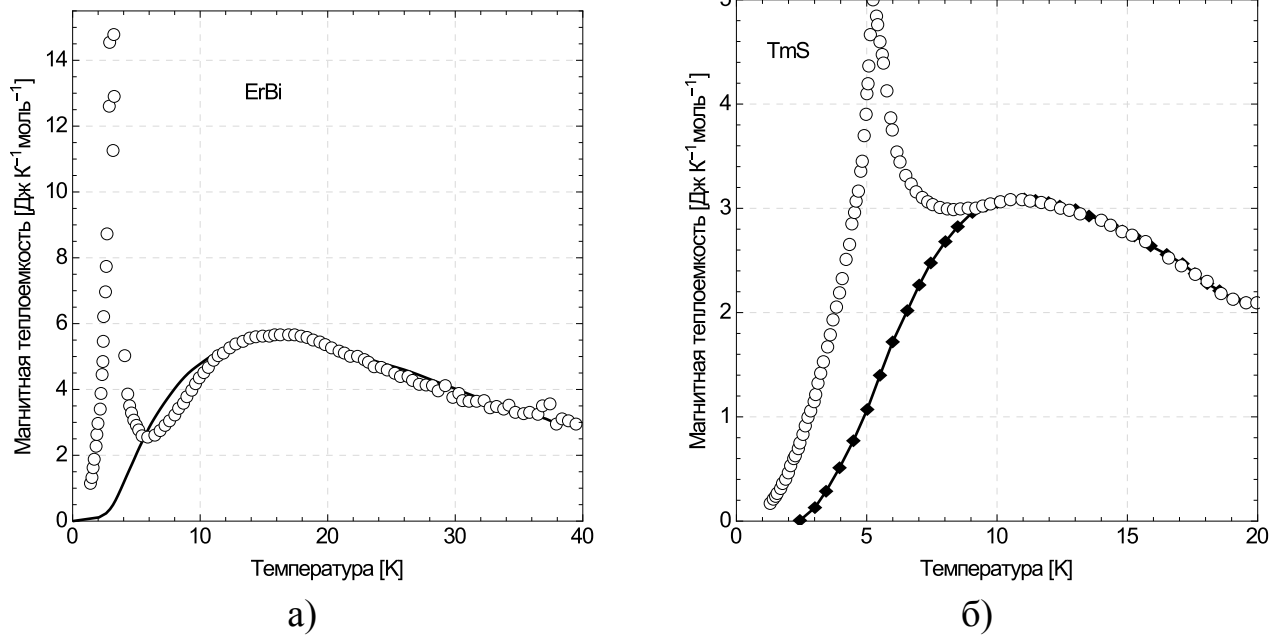


Рисунок 1.9 — Магнитная теплоемкость а) ErBi [11] и б) TmS [12]

где  $D$  — константа анизотропии.

Если для классических магнетиков первое слагаемое в формуле (1.26) значительно превышает второе, то в рассматриваемом классе материалов, наоборот, анизотропия значительно превосходит обменное взаимодействие [4]. Все это приводит к тому, что возникает необходимость в главной части гамильтониана учесть именно эту анизотропию. Таковую возможность обеспечивают модели Изинга и Поттса, в которых доминирующей энергией является анизотропия, а не однородный обмен. При таком подходе с самого начала присутствует жесткая связь магнитных моментов с кристаллической структурой.

Еще одной отличительной особенностью рассматриваемого класса магнитных материалов является тот факт, что величина магнитного момента, определенная методом намагниченности на поликристаллах и из магнитных нейтронографических экспериментов, не совпадает, причем по методу намагниченности она всегда оказывается меньшей [4]. Так, авторы [5] отмечают, что магнитный момент  $\text{NpR}$ , определенный методом асимптотической намагниченности, равен  $1,73\mu_B$ , а из эксперимента по рассеянию нейтронов —  $1,9/2,2\mu_B$ . На основании этого авторы работы утверждают, что при намагничивании ферромагнитное состояние не было достигнуто. На рисунке 1.8а, в частности, имеется кривая намагничивания поликристалла  $\text{UTe}$ . Видно, что намагниченность насыщения поликристаллического образца заметно ниже, чем монокристаллического, когда поле направлено вдоль

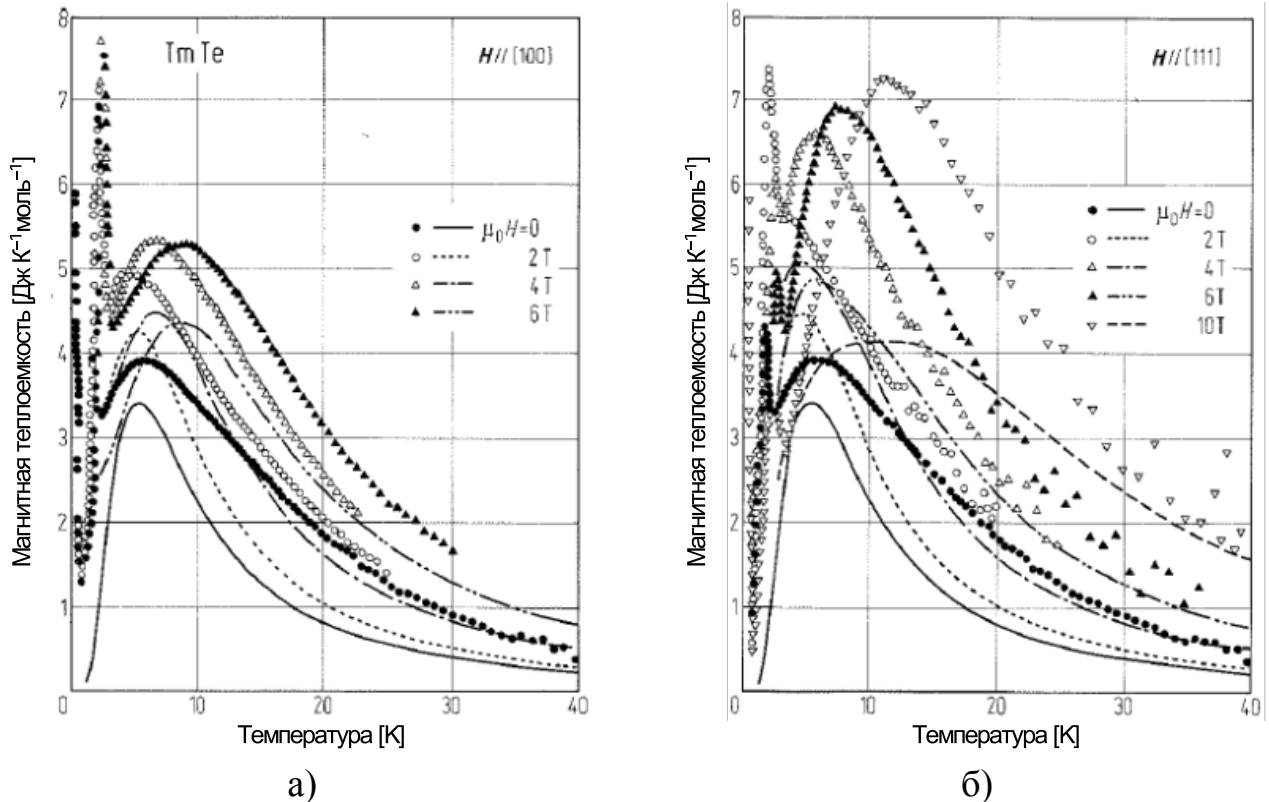


Рисунок 1.10 — Магнитная теплоемкость TmTe для двух направлений внешнего поля а) [100] и б) [111] [13]

оси легкого намагничивания. Это же явление наблюдалось на поликристаллах US и USe [14].

Помимо прочего, немалый теоретический и практический интерес представляет исследование магнитокалорического эффекта в рассматриваемых материалах. Магнитокалорический эффект (в дальнейшем МКЭ) — магнитотепловое явление, возникающее при воздействии магнитного поля на вещество, обладающее магнитными свойствами. МКЭ был открыт в 1881 году Е. Варбургом, который наблюдал, как под действием магнитного поля железный образец нагревался и охлаждался [70]. Этот эффект нашел свое техническое применение через 50 лет, когда двое американских ученых — П. Дебай [71] и У. Джиок [72] — независимо друг от друга предложили использовать МКЭ для магнитного охлаждения. Джиок в 1949 году получил Нобелевскую премию по химии.

Экспериментальное исследование магнитокалорического эффекта в комплексе с исследованием теплоемкости магнитного материала позволяет получить дополнительные сведения о природе магнитного упорядоченного состояния, а также взаимосвязи магнитных и тепловых характеристик. К тому же, изучение магнитокалорического эффекта связано с возможностью получения информации



о магнитных фазовых переходах в магнитных материалах, поскольку наибольших значений величина МКЭ достигает в области критических явлений. Поскольку в некоторых пунктидах и халькогенидах имеется целый каскад фазовых переходов, в которых при  $T \rightarrow 0$  МКЭ может достигать огромных значений, то они могут быть рассмотрены как перспективные кандидаты в материалы для магнитных холодильных установок.

При описании структур монопниктидов и монохалькогенидов чаще всего принимается, что магнитная структура имеет вид упорядоченных «ферромагнитных» плоскостей типа (100) или (111) в последовательности  $+-+-$ . Фактически это означает, что внутри каждой плоскости спины ориентированы ферромагнитно, а между плоскостями — антиферромагнитно. Это кажется парадоксальным, так как в ГЦК решетке расстояния между любыми ближайшими атомами в точности одинаковы. Первым подобную структуру предложил основатель магнитной нейтрографии К. Шалл для оксида марганца [19], хотя впоследствии она неоднократно пересматривалась [73–75].

Известно, что в ГЦК решетке на один атом приходится 12 ближайших соседей. При заполнении ГЦК решетки антиферромагнитной моделью Изинга каждый атом стремится окружить себя спинами противоположного направления, однако, из-за наличия всего двух возможных направлений магнитного момента, сделать это невозможно. Топологически возможны только конфигурации, когда на каждый атом приходится 4, 6 или 8 противоположных ему по направлению соседа. Из этих трех возможных конфигураций наименьшей энергией обладает структура типа 8–4, когда у каждого атома имеется 8 ближайших соседей с противоположным направлением спина. Такая структура известна еще со времен первых работ по теории коллинеарного антиферромагнетизма как структура типа I в ГЦК решетке. Обычно таких структур коллинеарного упорядочения выделяют шесть: I, II, IIIA, IIIB, IVA и IVB [76]. Однако, в работе [49] показано, что не все из этих структур являются энергетически выгодными. Так, например, доказано, что структуры IIIB, IVA и IVB не могут реализоваться ни при каких значениях обменных интегралов (положительных или отрицательных), но возможны две дополнительные конфигурации: IIВ и IIС (обозначения соответствуют [76]). Все эти структуры изображены на рисунке 1.11.

К тому же в работе [49] показано, что определение структуры I как чередование плоскостей с ферромагнитным взаимодействием внутри каждой плоскости

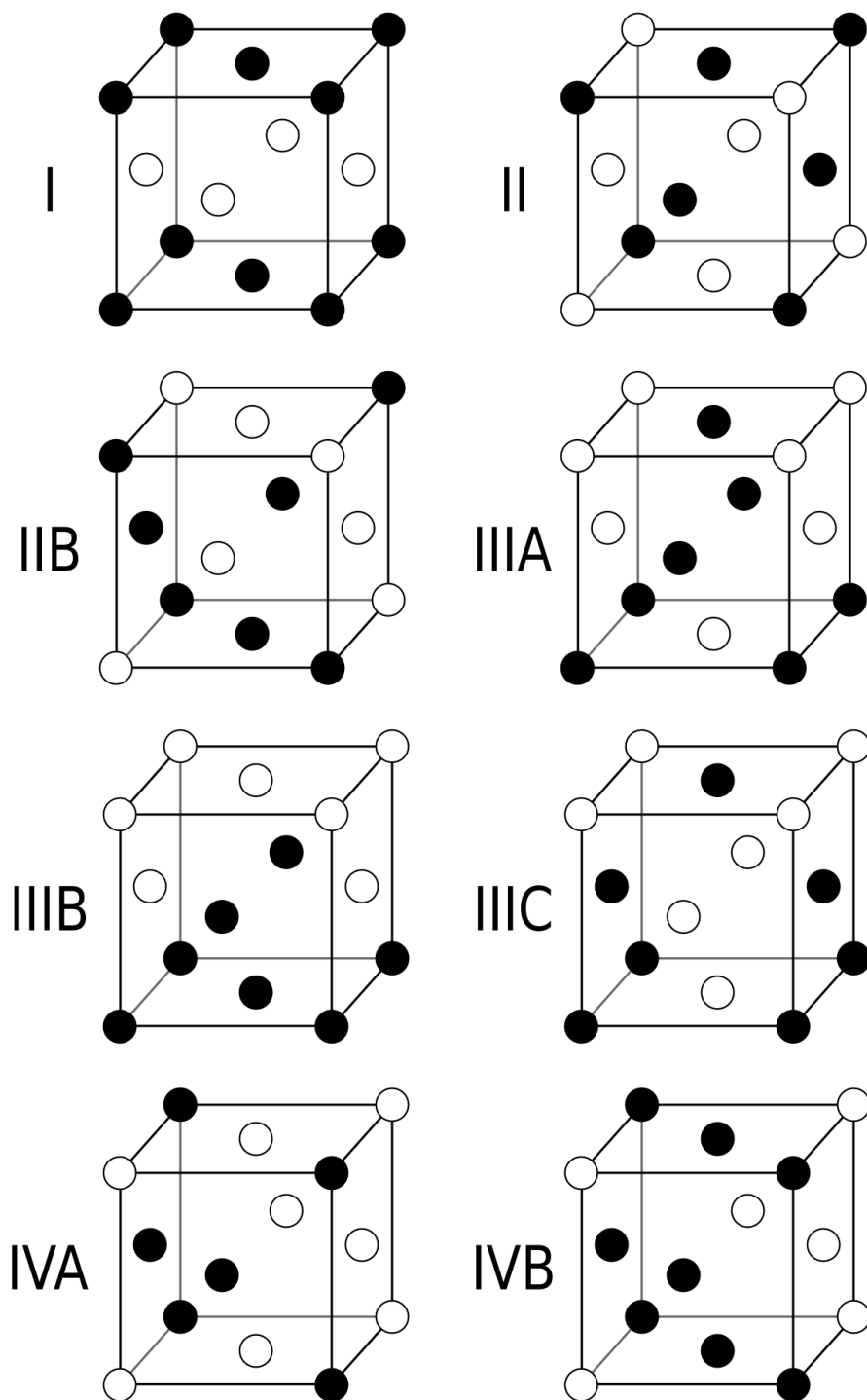


Рисунок 1.11 — Типы антиферромагнитного упорядочения в ГЦК решетке.  
 Различные обозначения (●,○) отвечают антипараллельным ориентациям  
 атомных спинов



некорректно, потому что такая структура реализуется и в том случае, когда обменное взаимодействие между соседями антиферромагнитно и ни о каком ферромагнетизме речи не идет. Тем не менее, такая структура поначалу была приписана многим соединениям: CeP [77], UN [15], UP [78], UAs [17; 79] и USb [17; 43]. В UAs [17; 79] при температуре  $T \simeq T_N/2$  происходит фазовый переход первого рода в структуру типа IA, которой соответствует последовательность слоев  $++--$ .

С развитием техники магнитной нейтронографии были обнаружены структуры с неколлинеарными направлениями магнитных моментов. По числу компонент волнового вектора в структурах типа I и IA возможны следующие случаи:

1. 1-**k** структуры. Состоят из чередующихся плоскостей, внутри которых спины ориентированы ферромагнитно, а между — антиферромагнитно. Спины перпендикулярны плоскостям (001)
2. 2-**k** структуры. Спины ориентированы вдоль [110] в плоскостях (001);
3. 3-**k** структуры. Спины ориентированы вдоль [111].

Магнитные мульти-**k** структуры, связанные с упорядочениями типа I и IA, изображены на рисунке 1.12.

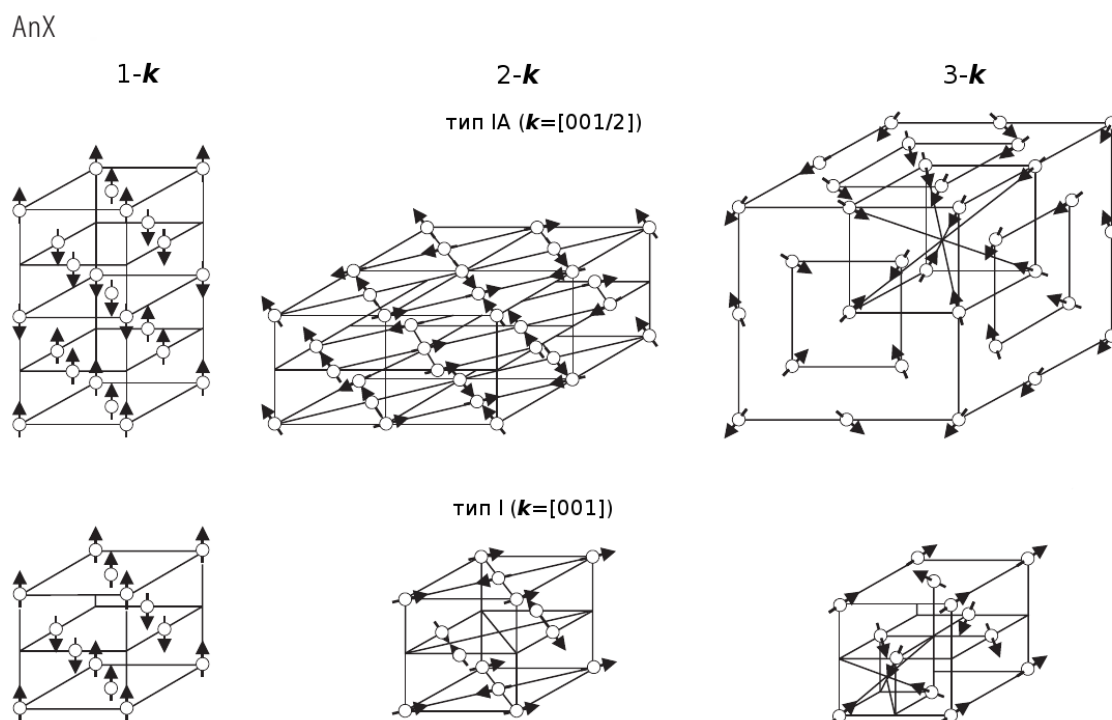


Рисунок 1.12 — Мульти-**k** структуры, связанные с упорядочениями типа I и IA в ГЦК решетке

Так, например, было показано, что расшифровка нейтронограммы кристалла USb в модели 3-**k** структуры лучше согласуется с экспериментальными дан-

ными, чем в модели коллинеарной структуры [80; 81]. Эта 3-к структура в свою очередь уже не является моделью коллинеарного магнетизма и в точности соответствует четырехвершинной стандартной модели Поттса, изображенной на рисунке 1.1в. Следует отметить, что 2-к структуры соответствуют четырехвершинной планарной модели Поттса.

При низкой температуре по коллинеарному типу I упорядочивается UN [15; 80]. UAs при температуре ниже  $T_N = (123,0 \pm 1)$  К упорядочивается по типу I с магнитными моментами вдоль [001], однако при температуре ниже  $T_{IA} = 62$  К упорядочивается в 2-к структуру типа IA [80]. UP при температуре ниже  $T_N = 123$  К имеет коллинеарную структуру типа I, однако при  $T = 23$  К происходит переход в структуру 2-к типа I [16; 80; 82].

## 1.5 Постановка задачи исследования

Из приведенного выше обзора магнитных и тепловых свойств пниктидов и халькогенидов лантаноидов и актиноидов видно, что данный класс магнитных материалов обладает рядом уникальных свойств, не находящих должного объяснения в рамках существующих моделей и подходов: величина намагниченности насыщения сильно зависит от направления магнитного поля, магнитная теплоемкость может иметь два ярко выраженных максимума, а величина магнитного момента, определенная методами асимптотической намагниченности и из нейтронографических экспериментов, не совпадает, причем по методу намагниченности она всегда оказывается меньшей. Все это свидетельствует о том, что рассматриваемый класс магнитных материалов обладает сильной магнитокристаллической анизотропией, значительно превосходящей обменное взаимодействие. Необходимы новые подходы в расчетах свойств таких магнетиков и обновление физических моделей взаимодействий. В настоящей диссертационной работе предлагается рассматривать физические свойства данного класса материалов в рамках сильно анизотропных моделей Изинга и Поттса, поскольку при таком подходе с самого начала присутствует жесткая связь магнитных моментов с кристаллической структурой.

Цель настоящей диссертационной работы состояла в разработке последовательной системы физических представлений для наблюдаемых магнитных и термодинамических свойств большого класса соединений редких земель и актиноидов со структурой NaCl, а также магнитных фазовых переходов в них.

Для достижения намеченной цели были поставлены следующие задачи:

1. Исследовать трех-, четырех- и двенадцативершинные одномерные модели Поттса, модель Изинга на цепочке с произвольным значением спина, классическую модель Изинга на квадратной решетке, а также трехвершинную модель Поттса на треугольной решетке. Получить ряд точных аналитических выражений для фрустрационных полей и энтропии в них при  $T \rightarrow 0$ , выявить особенности, характерные для всех фрустрированных систем. Выяснить, имеется ли качественное совпадение физических свойств магнетиков, описываемых в рамках одномерных и двумерных моделей;
2. Изучить поведение магнитокалорического эффекта (отношения  $\partial T / \partial H$ ) в пара-, ферро- и антиферромагнетиках, описываемых в рамках предлагаемых моделей и подходов, определить общие закономерности, характерные для всего класса рассматриваемых магнитных материалов;
3. Рассмотреть особенности поведения одномерных поликристаллических моделей Поттса, определить возможные причины расхождения экспериментальных данных по определению магнитного момента в пниктидах и халькогенидах актиноидов и редких земель.

## Глава 2. Модель Изинга

### 2.1 Модель Изинга с учетом произвольного спина

Несмотря на тот факт, что за последние десятилетия модель Изинга была довольно подробно изучена, отсутствуют работы, в которых бы рассматривалась эта модель с учетом произвольного значения спина. Вообще, в литературе известна только одна формула для произвольного спина — функция Бриллюэна [83], описывающая зависимость намагниченности идеального парамагнетика от магнитного поля, однако, как уже было отмечено в предыдущей главе, она не годится для описания свойств монопниктидов и монохалькогенидов актиноидов и редких земель.

Будем рассматривать модель Изинга на цепочке со следующим гамильтонианом:

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{nn} S_i S_j - J_2 \sum_{nnn} S_i S_k - H \sum_i S_i, \quad (2.1)$$

где  $J_1$  и  $J_2$  — обменные взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями соответственно;  $nn$  и  $nnn$  означают, соответственно, суммирование по всем ближайшим парам соседей и вторым парам соседей;  $S_i$  принимает  $2s + 1$  значений  $-s, -s + 1, \dots, s - 1, s$ ;  $H$  — внешнее магнитное поле.

#### 2.1.1 Взаимодействия между ближайшими соседями в магнитном поле

В этом случае  $J_2$  в (2.1) равно нулю,  $J_1 = J$  выбрано отрицательным, что соответствует антиферромагнитному взаимодействию. Основное состояние антиферромагнитно упорядочено с энергией, приходящейся на один спин,  $E_{af} = Js^2$ . Энергия ферромагнитного упорядочения равна  $E_f = -Js^2 - Hs$ . Сравнивая эти величины, легко получить выражение для фрустрирующего поля, то есть такого значения напряженности внешнего магнитного поля, когда энергии ферромагнит-

ной и антиферромагнитной конфигураций совпадают:

$$H_{\text{fr}} = -2sJ. \quad (2.2)$$

Находя для каждой конкретной трансфер-матрицы максимальное собственное значение и дифференцируя его, можно обобщить получаемые точные выражения для намагниченности и энтропии во фрустрирующих полях (2.2) при  $T \rightarrow 0$  на произвольное значение спина  $s$ :

$$M_{\text{fr}} = \left( \frac{2s - 1}{4} \right) + \left( \frac{2s + 1}{4} \right) \frac{1}{\sqrt{1 + 8s}}, \quad (2.3)$$

$$S_{\text{fr}} = \ln \left( \frac{1 + \sqrt{1 + 8s}}{2} \right). \quad (2.4)$$

На рисунке 2.1 графически изображены формулы (2.3) и (2.4). В случае  $s = 1/2$  энтропия во фрустрирующем поле равна натуральному логарифму золотого сечения  $\ln [(1 + \sqrt{5}) / 2]$ , что совпадает со значением, полученным для классической модели Изинга [A4]. Интересно отметить, что в формуле (2.4) в скобках стоит выражение, которое является корнем уравнения  $x^2 - x - 2s = 0$ , так что его можно условно назвать «обобщенным» золотым сечением.

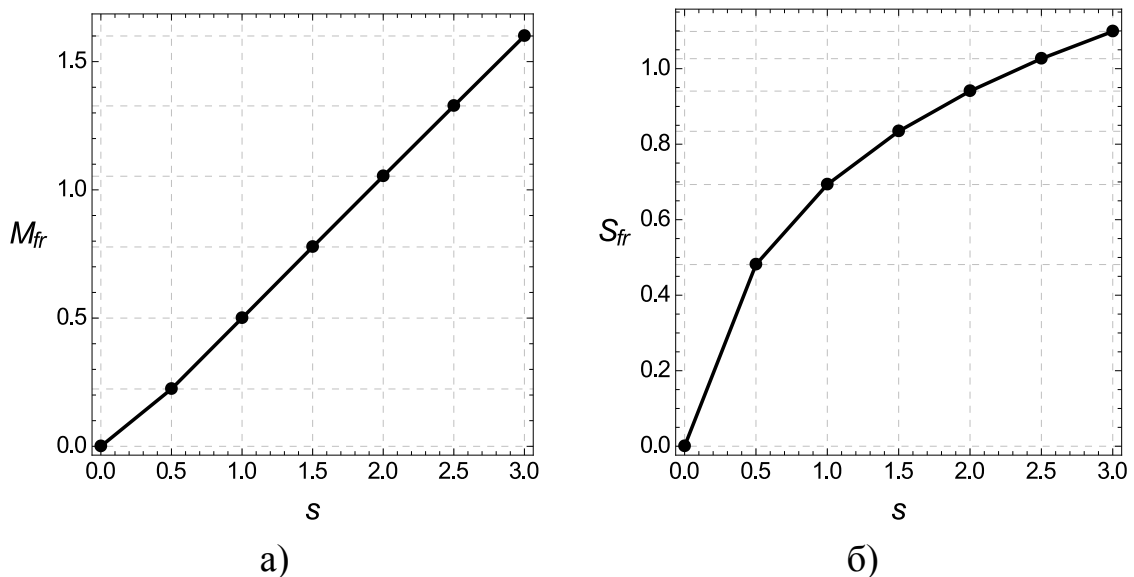


Рисунок 2.1 — Намагниченность а) и энтропия б) во фрустрационном поле как функции  $s$

### 2.1.2 Взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями при отсутствии магнитного поля

Учет вторых соседей с антиферромагнитным взаимодействием приводит к двум различным основным состояниям при  $T \rightarrow 0$  в зависимости от параметра  $R = |J_2/J_1|$ . При этом возможны два случая конкурирующих взаимодействий:

1.  $J_1 < 0, J_2 < 0$ . Основное состояние:

1)  $+ - + -$ ,  $R < 0,5$ ;

2)  $++ --$ ,  $R > 0,5$ .

2.  $J_1 > 0, J_2 < 0$ . Основное состояние:

1)  $++++$ ,  $R < 0,5$ ;

2)  $++ --$ ,  $R > 0,5$ .

Видно, что фрустрации возникают в точке  $R = 0,5$  для обоих случаев конкурирующих взаимодействий. Трансфер-матрица в данном случае имеет вид (см., например, [84]):

$$V = \begin{pmatrix} e^{\frac{J_1 + J_2}{4T}} & e^{\frac{J_1 - J_2}{4T}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{-J_1 + J_2}{4T}} & e^{\frac{-J_1 - J_2}{4T}} \\ e^{\frac{-J_1 - J_2}{4T}} & e^{\frac{-J_1 + J_2}{4T}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{J_1 - J_2}{4T}} & e^{\frac{J_1 + J_2}{4T}} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Максимальное собственное значение матрицы (2.5):

$$\lambda_{\max} = \exp \frac{J_2}{4T} \left( \cosh \frac{J_1}{4T} + \sqrt{\sinh^2 \frac{J_1}{4T} + \exp \frac{-J_2}{T}} \right). \quad (2.6)$$

Интересно отметить, что выражение (2.6) может быть получено из максимального собственного значения трансфер-матрицы для модели Изинга с учетом взаимодействия между ближайшими соседями в магнитном поле (1.24) путем замены  $J \rightarrow J_2, H \rightarrow J_1$ . Таким образом, взаимодействие между ближайшими

соседями в (2.6) играет роль магнитного поля, а между вторыми — роль взаимодействия между ближайшими соседями, согласно (1.24).

Находя максимальные собственные значения трансфер-матрицы для различных  $s$ , можно обобщить получаемые выражения для энтропии в точке фрустрации при  $T \rightarrow 0$ : для обоих случаев конкурирующих взаимодействий они совпадают и могут быть записаны в виде:

$$S_{fr} = \ln \left\{ \frac{1}{3} \left[ 1 + \left( 27s - 8 + 3\sqrt{3}\sqrt{27s^2 - 16s} \right)^{1/3} + \left( 27s - 8 - 3\sqrt{3}\sqrt{27s^2 - 16s} \right)^{1/3} \right] \right\}. \quad (2.7)$$

В частном случае  $s = 1/2$  энтропия равна натуральному логарифму золотого сечения. Аргумент логарифма в (2.7) является корнем уравнения  $x^3 - x^2 - x - (2s - 1) = 0$ . Результаты представлены на рисунке 2.2.

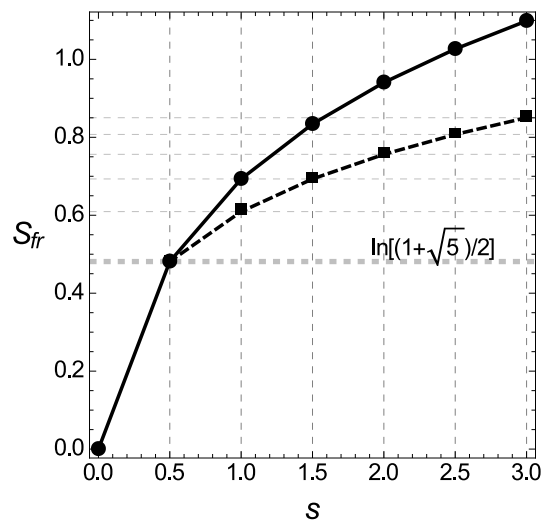


Рисунок 2.2 — Энтропия модели Изинга с взаимодействием ближайших соседей во фрустрирующем поле (сплошная кривая) и с взаимодействием ближайших и вторых соседей в отсутствие магнитного поля в точке фрустрации (пунктирная кривая)

### 2.1.3 Взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями в магнитном поле

Общее поведение одномерной модели Изинга с взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями в магнитном поле описано в работе [54]. Эти результаты можно обобщить на случай произвольного спина.

**Антиферромагнитное взаимодействие между ближайшими соседями.** Для начала рассмотрим первый случай конкурирующих взаимодействий  $J_1 < 0$ ,  $J_2 < 0$ . В этом случае конфигурация основного состояния зависит от параметра  $R$ . Возникающие в данной модели структуры представлены на рисунке 2.3.

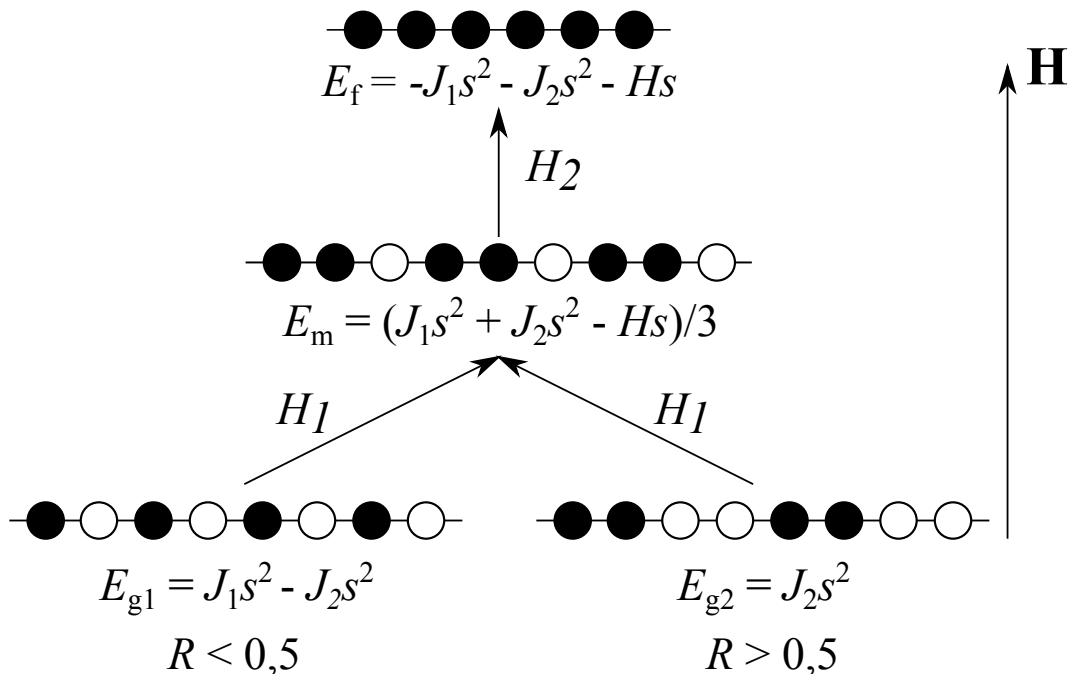


Рисунок 2.3 — Структуры, возникающие в антиферромагнитной модели Изинга с антиферромагнитным взаимодействием между ближайшими и вторыми соседями.  $\mathbf{H}$  — внешнее магнитное поле,  $(\bullet)$  — спин, направленный вдоль поля,  $(\circ)$  — спин, направленный против поля. Приведены выражения для энергии, приходящейся на один спин, для каждой из конфигураций



Сравнивая энергии конфигураций, представленные на рисунке 2.3, получим, что в рассматриваемой модели имеют место два фрустрирующих поля:

$$H_1 = \begin{cases} -2sJ_1 + 4sJ_2, & \text{при } 0 < R \leq 0,5; \\ sJ_1 - 2sJ_2, & \text{при } R \geq 0,5. \end{cases} \quad (2.8)$$

$$H_2 = -2sJ_1 - 2sJ_2.$$

На рисунке 2.4 приведены кривые намагниченности в случае  $s = 1$  для семи значений параметра  $R$  при температуре  $T = 0,01$ . Хорошо видны скачки намагниченности во фрустрирующих полях.

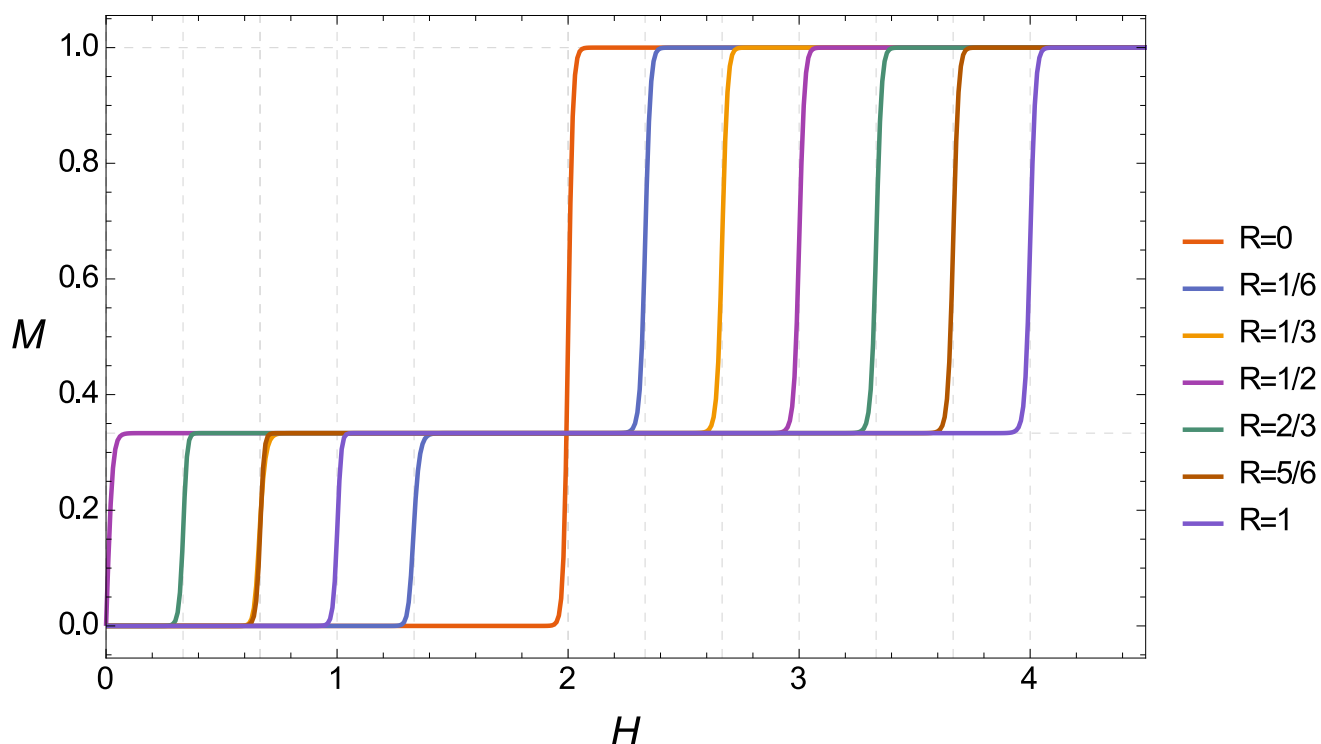


Рисунок 2.4 — Намагниченность антиферромагнитной модели Изинга со спином  $s = 1$  для семи значений параметра  $R$  при  $T = 0,01$

*Первое фрустрирующее поле,  $R < 0,5$ .* Несмотря на тот факт, что в общем случае трансфер-матрица имеет размерность  $(2s + 1)^2 \times (2s + 1)^2$ , в пределе  $T \rightarrow 0$  уравнение, содержащее максимальное собственное значение, имеет вид:

$$\lambda^3 - \exp\left(\frac{2s^2(1 - R)}{T}\right)\lambda - \exp\left(\frac{s^2(1 + R) + sH}{T}\right) = 0. \quad (2.9)$$

Выражение (2.9) получено путем обобщения уравнений для максимального собственного значения трансфер-матриц при различных  $s$ .

Из (2.9) можно получить выражение для намагниченности во фрустрирующем поле:

$$M_{\text{fr}} = \frac{s}{3} \left[ 1 - \left( \left( \frac{4}{23} + \frac{12}{23} \sqrt{\frac{3}{23}} \right)^{1/3} + \left( \frac{4}{23} - \frac{12}{23} \sqrt{\frac{3}{23}} \right)^{1/3} \right) \right]. \quad (2.10)$$

Энтропия во фрустрирующем поле в данном случае не зависит от  $s$  и может быть записана как натуральный логарифм от корня уравнения  $x^3 - x - 1 = 0$ :

$$S_{\text{fr}} = \ln \left[ \left( \frac{27}{2} + \frac{3\sqrt{69}}{2} \right)^{1/3} + \left( \frac{27}{2} - \frac{3\sqrt{69}}{2} \right)^{1/3} \right] - \ln 3 \approx 0,2812. \quad (2.11)$$

*Первое фрустрирующее поле,  $R > 0,5$ .* Уравнение, содержащее максимальное собственное значение соответствующей трансфер-матрицы при  $T \rightarrow 0$ , имеет вид:

$$\lambda^4 - \exp \left( \frac{s^2(1+R) + sH}{T} \right) \lambda - \exp \left( \frac{4s^2R}{T} \right) = 0. \quad (2.12)$$

Намагниченность и энтропия во фрустрирующем поле при  $T \rightarrow 0$  в этом случае может быть записана как:

$$M_{\text{fr}} = s \left( \sqrt{\frac{2}{283}} \sqrt{3 - 2\xi^2} + \sqrt{\frac{283}{3 + 4\xi^2}} - \sqrt{\frac{3 + 4\xi^2}{283}} \right), \quad (2.13)$$

$$S_{\text{fr}} = \ln \left[ \sqrt{\frac{2}{\xi} - \xi^2} + \xi \right] - \ln 2, \quad (2.14)$$

где

$$\xi = \sqrt{\left( \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{64}{27} + \frac{1}{4}} \right)^{1/3} + \left( \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{64}{27} + \frac{1}{4}} \right)^{1/3}}.$$

Энтропия в этом случае также не зависит от  $s$  и может быть рассчитана как натуральный логарифм корня уравнения  $x^4 - x - 1 = 0$ .

*Первое фрустрирующее поле,  $R = 0,5$ .* В этом случае, как можно убедиться по формулам (2.8), первое фрустрирующее поле равно нулю. Это означает, что основное состояние является фрустрированным даже при  $H = 0$ , и энтропия при  $T \rightarrow 0$  может быть найдена по формуле (2.7).

*Второе фрустрирующее поле.* Уравнение, содержащее максимальное собственное значение при  $T \rightarrow 0$ , в этом случае имеет вид:

$$\lambda^3 - \exp\left(\frac{-s^2(1+R) + sH}{T}\right)\lambda^2 - \sum_{i=0}^{2s-1} \exp\left(\frac{(s+i)H + s(s-2i)(1+R)}{T}\right) = 0. \quad (2.15)$$

Энтропия при этом зависит от  $s$ , и когда  $T \rightarrow 0$  может быть найдена как натуральный логарифм корня уравнения  $x^3 - x^2 - 2s = 0$ :

$$S_{\text{fr}} = \ln \left\{ \frac{1}{3} \left[ 1 + \left( 1 + 27s + 3\sqrt{3}\sqrt{27s^2 + 2s} \right)^{1/3} + \left( 1 + 27s - 3\sqrt{3}\sqrt{27s^2 + 2s} \right)^{1/3} \right] \right\}. \quad (2.16)$$

**Ферромагнитное взаимодействие между ближайшими соседями.** В зависимости от параметра  $R$  в системе могут реализоваться два основных состояния: ферромагнитное, когда  $R < 0,5$  и антиферромагнитное при  $R > 0,5$ . Когда  $R = 0,5$  основное состояние является фрустрированным, причем фрустрирующее поле равно нулю, и энтропия при  $T \rightarrow 0$  может быть найдена по формуле (2.7). Случай  $R < 0,5$  не представляет интереса, поскольку фрустрации в этом случае не возникают, поэтому остановимся только на варианте  $R > 0,5$ . Фрустрирующее поле в этом случае равно:

$$H_{\text{fr}} = -sJ_1 - 2sJ_2. \quad (2.17)$$

Уравнение, содержащее максимальное собственное значение трансфер-матрицы, при  $T \rightarrow 0$  имеет вид:

$$\lambda^4 - \exp\left(\frac{sH + s^2(1+R)}{T}\right)\lambda^3 - \exp\left(\frac{-4s^2R}{T}\right) = 0. \quad (2.18)$$

Энтропия в данном случае не зависит от  $s$  и может быть найдена как натуральный логарифм корня уравнения  $x^4 - x^3 - 1 = 0$ :

$$S_{\text{fr}} = \ln \left[ 1 + \xi + \sqrt{3 - \xi^2 + \frac{2}{\xi}} \right] - \ln 4 \approx 0,3223, \quad (2.19)$$

где

$$\xi = \sqrt{1 - \frac{2^{5/3}}{3^{2/3}} \left( \left(9 + \sqrt{849}\right)^{1/3} + \left(9 - \sqrt{849}\right)^{1/3} \right)}.$$

## 2.2 Корреляционная функция одномерной модели Изинга со спином $s = 1/2$

Вычисление корреляционной функции одномерной модели Изинга позволит получить дополнительную информацию о поведении системы в точке фрустрации. Рассмотрим фурье-образ парной спиновой корреляционной функции (всюду в тексте под корреляционной функцией будет пониматься именно ее фурье-образ) одномерной модели Изинга со спином  $s = 1/2$ :

$$K(q) = \frac{1}{N} \sum_{r,r'} \sum_{\{\sigma\}} \frac{\exp(-\beta \mathcal{H}(\mathbf{S}_r, \mathbf{S}_{r'}))}{Z} \exp(-iqa(r - r')), \quad (2.20)$$

где  $q$  — вектор рассеяния,  $\beta = 1/T$ ,  $a$  — постоянная решетки,  $N$  — число атомов,  $Z$  — статистическая сумма,  $s$  — величина спина, суммирование выполняется по всем узлам решетки  $r, r'$  и всем конфигурациям  $\sigma$ . Оператор спина в рассматриваемой модели имеет вид квадратной диагональной матрицы  $2 \times 2$  со значениями  $\pm 1/2$ .

Методом трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье фурье-образ парной спиновой корреляционной функции в этом представлении принимает вид [68]:

$$K(q) = \frac{1}{N} \sum_{r=0}^N \sum_{r'=0}^N \frac{\text{Sp}(V_1 V_2 \dots S_r V_r \dots S_{r'} V_{r'} \dots V_N)}{\text{Sp}(V_1 V_2 \dots V_N)} \exp(-iqa(r - r')), \quad (2.21)$$

где  $V_r$  — трансфер-матрица, которая не зависит от номера узла  $r$  и имеет вид (1.12):

$$V = \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{J}{4T} + \frac{H}{2T}\right) & \exp\left(\frac{-J}{4T}\right) \\ \exp\left(\frac{-J}{4T}\right) & \exp\left(\frac{J}{4T} - \frac{H}{2T}\right) \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Рассмотрим случаи  $H = 0$  и  $H \neq 0$ .

### 2.2.1 Корреляционная функция при отсутствии внешнего магнитного поля

В случае, когда внешнее поле отсутствует, трансфер-матрица одномерной модели Изинга со спином  $s = 1/2$  имеет простой вид:

$$V = \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{J}{4T}\right) & \exp\left(\frac{-J}{4T}\right) \\ \exp\left(\frac{-J}{4T}\right) & \exp\left(\frac{J}{4T}\right) \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

Матрица операторов Изинга:

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Вычислим сначала статсумму  $Z_N = \text{Sp}(V_1 V_2 \dots V_N)$ , то есть знаменатель выражения (2.21). Удобнее всего это сделать при помощи диагонализующей матрицы:

$$T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

так что в эквивалентном представлении:

$$\tilde{V} = T^{-1} V T = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

где

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \exp\frac{J}{4T} + \exp\frac{-J}{4T}, \\ \lambda_2 &= \exp\frac{J}{4T} - \exp\frac{-J}{4T}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Видно, что  $\lambda_1$  является максимальным собственным значением трансфер-матрицы при любых значениях параметров  $J$  и  $T$ . В термодинамическом пределе

$N \rightarrow \infty$  имеем:

$$Z_N = \text{Sp} \left( \tilde{V}^N \right) = \lambda_1^N + \lambda_2^N = \lambda_1^N \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] = \lambda_1^N. \quad (2.28)$$

Матрица операторов спина в эквивалентном представлении имеет вид:

$$\tilde{S} = T^{-1} S T = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Перейдем в (2.21) от суммирования по  $r$  и  $r'$  к суммированию по  $r$  и  $m = r - r'$  и получим:

$$K(q) = \frac{1}{N} \sum_{r=0}^N \left[ \frac{1}{4} + \sum_{m=1}^N \frac{e^{iqam} + e^{-iqam}}{\lambda_1^N} \times \right. \\ \left. \times \text{Sp} \left( \tilde{V}_1 \tilde{V}_2 \cdots \tilde{S}_r \tilde{V}_r \cdots \tilde{S}_{r+m} \tilde{V}_{r+m} \cdots \tilde{V}_N \right) \right]. \quad (2.30)$$

Поскольку

$$\begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1^m & 0 \\ 0 & \lambda_2^m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\lambda_2^m}{4} & 0 \\ 0 & \frac{\lambda_1^m}{4} \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

то

$$\text{Sp} \left( \tilde{V}_1 \tilde{V}_2 \cdots \tilde{S}_r \tilde{V}_r \cdots \tilde{S}_{r+m} \tilde{V}_{r+m} \cdots \tilde{V}_N \right) = \frac{1}{4} \lambda_1^m \lambda_2^{N-m} + \frac{1}{4} \lambda_2^m \lambda_1^{N-m}. \quad (2.32)$$

Тогда, подставив выражение (2.32) в формулу (2.30), просуммировав две геометрические прогрессии и перейдя к термодинамическому пределу, получим:

$$K(q) = \frac{1}{4} \cdot \frac{1 - \eta^2}{1 - 2\eta \cos(q) + \eta^2}, \quad (2.33)$$

где  $\eta = \lambda_2/\lambda_1$ , а параметр решетки  $a$  положен равным единице. Зависимость корреляционной функции от волнового вектора (2.33) для четырех значений температур приведена на рисунке 2.5.

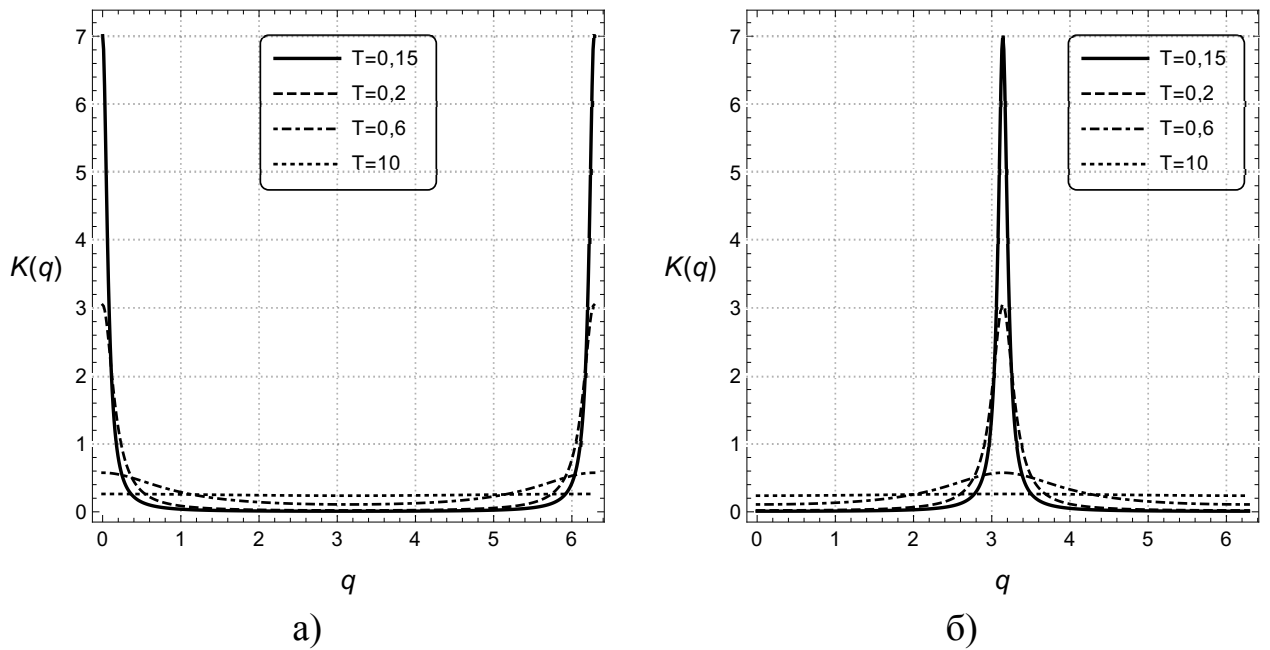


Рисунок 2.5 — Зависимость корреляционной функции от волнового вектора для одномерной модели Изинга  $s = 1/2$  при отсутствии магнитного поля в случае ферромагнетика (а) и антиферромагнетика (б) для четырех значений температур

Из рисунка 2.5а следует, что в случае ферромагнетика корреляционная функция имеет максимумы точно в позициях брэгговских рефлексов  $q_n = 2\pi n$ ,  $n = (0, \pm 1, \pm 2, \dots)$  и при стремлении температуры к нулю принимает вид дельта-функции, что говорит о фазовом переходе в системе (в одномерных моделях фазовый переход имеет место при нулевой температуре).

На рисунке 2.5б изображена корреляционная функция для антиферромагнетика и хорошо видно, что максимумы расположены точно посередине между позициями брэгговских рефлексов  $q_n = \pi(2n + 1)$ ,  $n = (0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ , поскольку основное состояние в данном случае  $(+-+-)$  обладает удвоенным, по сравнению с решеткой, периодом трансляций. При стремлении температуры к нулю корреляционная функция также принимает вид дельта-функции, что свидетельствует о фазовом переходе.

### 2.2.2 Корреляционная функция с учетом внешнего магнитного поля

Корреляционная функция (2.21) одномерной модели Изинга со спином  $s = 1/2$  во внешнем магнитном поле состоит из двух слагаемых:

$$K(q) = M^2 L(q) + D(q), \quad (2.34)$$

где функция Лауэ  $L(q)$  задает положения брэгговских рефлексов, а  $D(q)$  — определяет диффузное рассеяние,

$$L(q) = \frac{1}{N} \frac{\sin^2(qN/2)}{\sin^2(q/2)}, \quad (2.35)$$

$$D(q) = \left( \frac{1}{4} - M^2 \right) \frac{1 - \eta^2}{1 - 2\eta \cos(q) + \eta^2}, \quad (2.36)$$

где  $M$  — намагниченность, определяемая выражением:

$$M = \frac{\sinh \frac{H}{2T}}{2\sqrt{\sinh^2 \frac{H}{2T} + \exp \frac{-J}{T}}}, \quad (2.37)$$

а  $\eta = \lambda_2/\lambda_1$ , причем собственные значения имеют вид:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \exp \frac{J}{4T} \left( \cosh \frac{H}{2T} + \sqrt{\sinh^2 \frac{H}{2T} + \exp \frac{-J}{T}} \right), \\ \lambda_2 &= \exp \frac{J}{4T} \left( \cosh \frac{H}{2T} - \sqrt{\sinh^2 \frac{H}{2T} + \exp \frac{-J}{T}} \right). \end{aligned} \quad (2.38)$$

Функция Лауэ определяет брэгговское рассеяние, которое задается параметрами исходной решетки и не зависит от знака обменного взаимодействия. Внешнее магнитное поле, индуцируя намагниченность, усложняет расчет интенсивности рассеяния. Вся температурная зависимость содержится в параметре  $\eta$ . Поэтому, исследуя температурное поведение корреляционной функции, стоит рассматривать только функцию диффузного рассеяния  $D(q)$ . Более того, поскольку функция диффузного рассеяния модулирована множителем  $(1/4 - M^2)$ , то в ферромагнетике при низких температурах  $D(q) = 0$  уже при небольших полях (в



модели Изинга со спином  $s = 1/2$  намагниченность насыщения равна  $1/2$ ). На основании вышесказанного рассмотрим поведение функции диффузного рассеяния только в антиферромагнитном случае ( $J < 0$ ).

На рисунке 2.6а приведена кривая намагниченности для одномерной антиферромагнитной модели Изинга со спином  $s = 1/2$ , а на рисунке 2.6б — зависимость корреляционной функции от волнового вектора в той же модели.

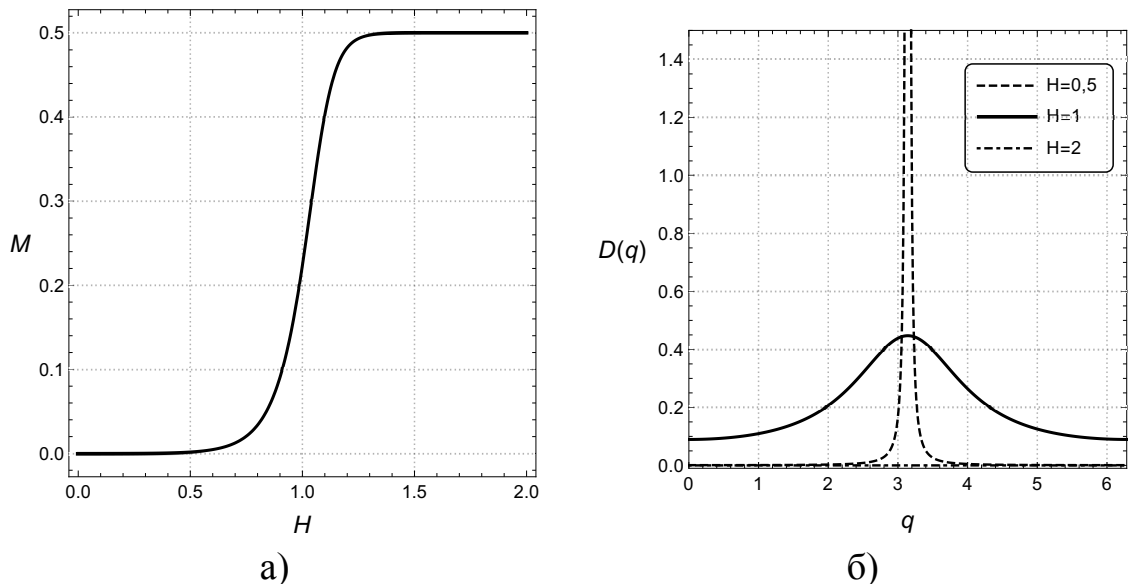


Рисунок 2.6 — (а) Намагниченность как функция поля и (б) корреляционная функция в зависимости от волнового вектора для одномерной антиферромагнитной модели Изинга со спином  $s = 1/2$  при температуре  $T = 0,05$

Хорошо видно, что при низких температурах выше фрустрирующего поля ( $H > 1$ ) диффузное рассеяние отсутствует (поскольку обращается в нуль коэффициент  $(1/4 - M^2)$ ). В полях ниже фрустрирующего ( $H < 1$ ) корреляционная функция при стремлении температуры к нулю приобретает дельта-образный вид, что свидетельствует о фазовом переходе. В самой же точке фрустрации ( $H = 1$ ) корреляционная функция имеет плавный максимум и не переходит в дельта-функцию ни при каких температурах, что говорит об отсутствии фазового перехода.

Подобное поведение корреляционной функции присуще трехвершинной и четырехвершинной моделям Поттса [85; 86]. Таким образом, фрустрация — совершенно особое состояние. В ней намагниченность испытывает скачок, энтропия при стремлении температуры к нулю стремится к ненулевым значениям (в данном случае к натуральному логарифму золотого сечения), а диффузное рас-

сеяние имеет плавный максимум и не переходит в дельта-функцию ни при каких температурах. Последнее свидетельствует о том, что в самой точке фрустрации подавляющее большинство конфигураций не обладает трансляционной инвариантностью.

### 2.3 Модель Изинга на квадратной решетке

В данном разделе рассматривается «классическая» модель Изинга ( $S = \pm 1$ ) на квадратной решетке. Известно лишь несколько точных решений двумерной модели Изинга на различных решетках: Онзагера для квадратной решетки [33], Гутаппеля для треугольной и гексагональной решеток [35], Кано и Найя для решетки кагоме [34]. Несмотря на то, что в настоящее время точное решение этой модели с учетом взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями в магнитном поле отсутствует, тем не менее имеется ряд работ, в которых используются различные приближенные методы: приближение среднего поля, разложение в ряд [87–90], вычисление интерфейсной свободной энергии [91], методы ренормализационной группы [92–94], конечномерный скейлинг трансформатрицы [95; 96], определение нулей статистической суммы [97; 98], различные алгоритмы Монте-Карло [99–109].

Подавляющее большинство статей по модели Изинга на квадратной решетке посвящены таким проблемам, как построение фазовых диаграмм для магнитных структур, установление порядка и класса универсальности фазового перехода, вычисление критических экспонент и т. д. Тем не менее, до сих пор остались противоречия в полученных результатах, что связано с различными, используемыми для решения задачи, подходами и недостаточным размером решетки, применяемой в численных расчетах. Такой вопрос, как поведение намагниченности в магнитном поле в этой модели, практически не освещался.

Рассмотрим модель Изинга на квадратной решетке с антиферромагнитными взаимодействиями между соседями вплоть до третьих. Модель задачи представлена на рисунке 2.7. Общий гамильтониан (1.8) имеет вид:

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}) - J_2 \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}) - J_3 \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+3}) - \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}). \quad (2.39)$$

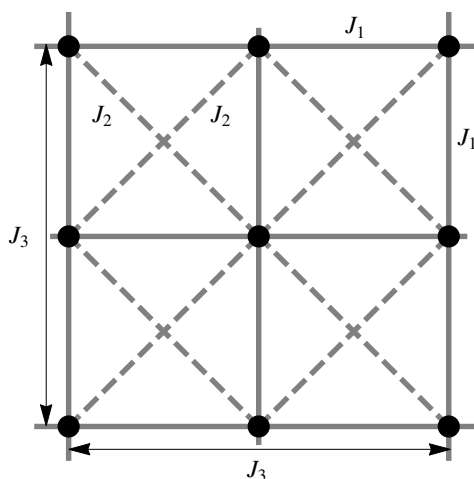


Рисунок 2.7 — Ближайшие  $J_1$ , вторые  $J_2$  и третьи  $J_3$  соседи в модели Изинга на квадратной решетке

### 2.3.1 Взаимодействия между ближайшими соседями

Для начала рассмотрим случай, когда  $J_2 = J_3 = 0$ ,  $J_1 = J < 0$  в гамильтониане (2.39). На рисунке 2.8 приведены зависимости намагниченности от внешнего поля на одномерной цепочке спинов (а) и квадратной решетке (б). Видно, что в обоих случаях имеются фрустрирующие поля  $H_{\text{fr.1D}} = 2|J|$  и  $H_{\text{fr.2D}} = 4|J|$  для одномерной цепочки и квадратной решетки соответственно. Если обозначить за  $z$  число ближайших соседей, то оба фрустрирующих поля могут быть записаны как  $H_{\text{fr}} = z|J|$ .

На рисунке 2.9 представлены эти же кривые намагничивания, но как функции перемасштабированного магнитного поля  $h = H/z$ . Следует отметить, что при таком выборе  $h$  намагниченности практически неразличимы.

На рисунке 2.10 приведены кривые намагничивания для линейной цепочки и квадратной решетки как функции перемасштабированной температуры  $t = T/z$  при различных значениях магнитного поля: непосредственно в точке фрустрации, а также выше и ниже ее. Хорошо видно, что поведение намагниченностей качественно совпадает. При  $t \rightarrow 0$  и  $H > H_{\text{fr}}$  намагниченность стремится к единице, при  $H < H_{\text{fr}}$  она стремится к нулю, а во фрустрирующем поле  $H = H_{\text{fr}}$  стремится к некоторому постоянному значению, которое, вообще говоря, различно. Точное

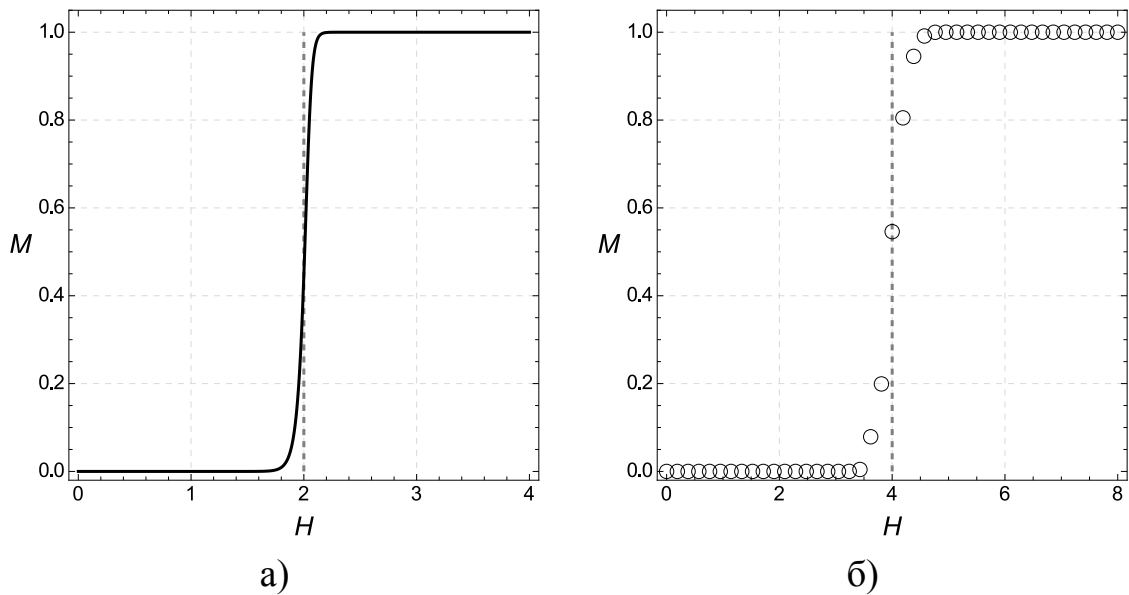


Рисунок 2.8 — Полевая зависимость намагниченности одномерной цепочки при  $T = 0,05$  а) и квадратной решетки при  $T = 0,1$  б)

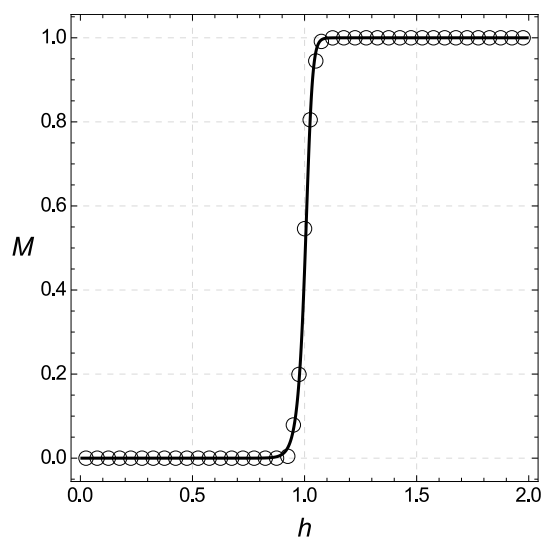


Рисунок 2.9 — Полевая зависимость намагниченности для одномерной цепочки при  $T = 0,05$  (сплошная кривая) и квадратной решетки при  $T = 0,1$  (пунктирная кривая)

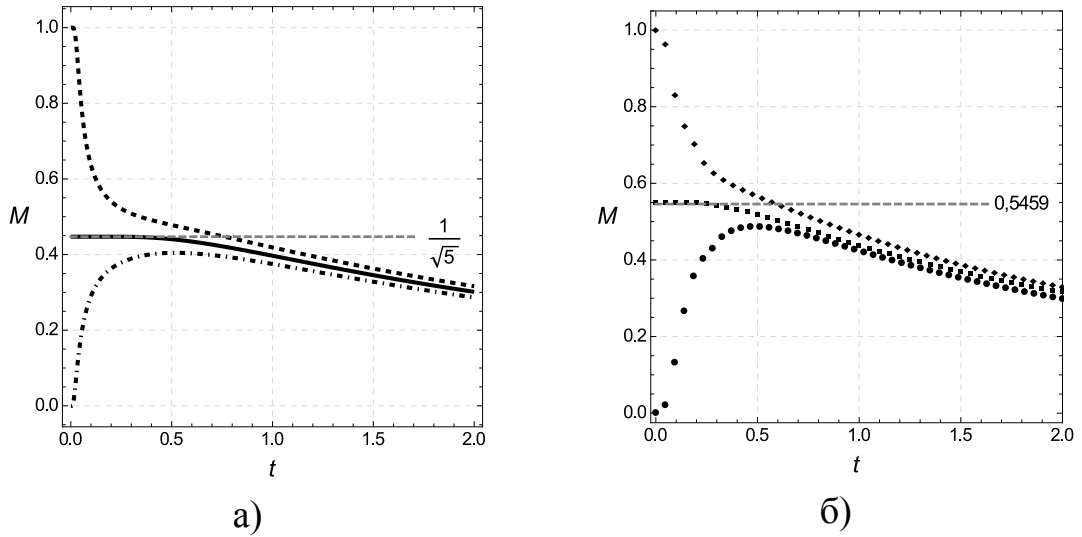


Рисунок 2.10 — Температурная зависимость намагниченности одномерной цепочки а) и квадратной решетки б) при  $H = H_{fr}$  (средние кривые),  $H = 0,95H_{fr}$  (нижние кривые) и  $H = 1,05H_{fr}$  (верхние кривые)

значение для одномерной цепочки  $1/\sqrt{5} \simeq 0,4472$  получено из решения соответствующей трансфер-матрицы, тогда как значение  $0,5459$  для квадратной решетки является результатом численного расчета. Другими словами, качественно намагниченности совпадают, но количественно — нет.

Что касается энтропии, то ее поведение во фрустрирующем поле для одномерной цепочки и квадратной решетки приведено на рисунке 2.11. Видно, что в обоих случаях при  $T \rightarrow 0$  энтропия стремится к ненулевому значению. В одномерном случае этот предел можно вычислить точно, и он равен натуральному логарифму золотого сечения.

Наличие ненулевой энтропии при  $T = 0$  свидетельствует об исчезновении фазового перехода (см., например, [110]) и подтверждает тот факт, что это точка фрустрации. Подавление температуры перехода на квадратной решетке при  $H_{fr,1D} = 4|J|$  было обнаружено в работе [91], в которой авторы предложили уравнение связи температуры фазового перехода с магнитным полем:

$$\cosh\left(\frac{H}{T_c}\right) = \sinh^2\left(\frac{2|J|}{T_c}\right). \quad (2.40)$$

Соотношение (2.40) было более или менее подтверждено поздними работами [94; 101].

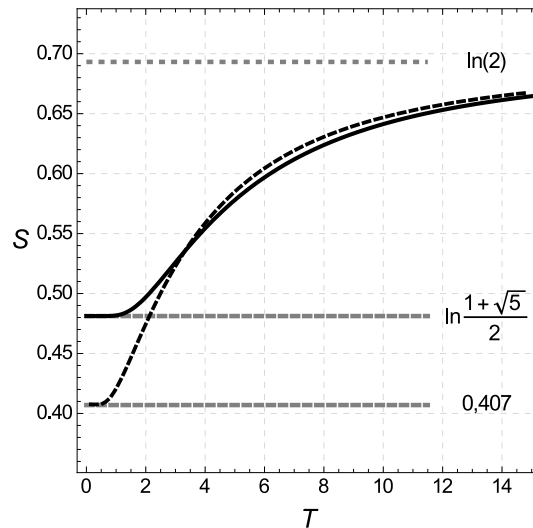


Рисунок 2.11 — Энтропия модели Изинга во фрустрирующем поле на одномерной цепочке (сплошная кривая) и квадратной решетке (пунктирная кривая)

### 2.3.2 Взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями

Рассмотрим теперь второй случай, когда вторые соседи не равны нулю  $J_2 < 0$ , а взаимодействие между третьими соседями по-прежнему отсутствует  $J_3 = 0$ . Попытаемся понять, имеется ли в этом случае какая-то аналогия между двумерными и одномерными моделями. Большинство статей по двумерной модели Изинга как-раз посвящены этому случаю, однако в них, как уже отмечалось, ничего не говорится о поведении намагниченности.

На рисунке 2.12 приведены кривые намагниченности для линейной цепочки и квадратной решетки в магнитном поле  $h = H/z$  при различных значениях отношения обменных интегралов ( $R = J_2/J_1 = 0, 0,3, 0,5, 0,7$ ). Кривая для  $R = 1$  при  $T = 0,0273$  была приведена в работе [101] и изображена на рисунке 2.13а.

Сравнивая рисунки 2.12а и 2.12б, можно отметить некоторое сходство в поведении намагниченности одномерной линейной цепочки и квадратной решетки: в обоих случаях имеется плато намагниченности и при низких полях намагниченности ведут себя характерным для антиферромагнетика образом.

Тем не менее, кривые эти сильно различаются по ряду важных моментов. Прежде всего, различается высота плато намагниченности:  $1/2$  для квадратной решетки против  $1/3$  для одномерной модели. Во-вторых, в точке фрустрации  $R = 1/2$  в одномерной решетке намагниченность ведет себя ферромагнитным

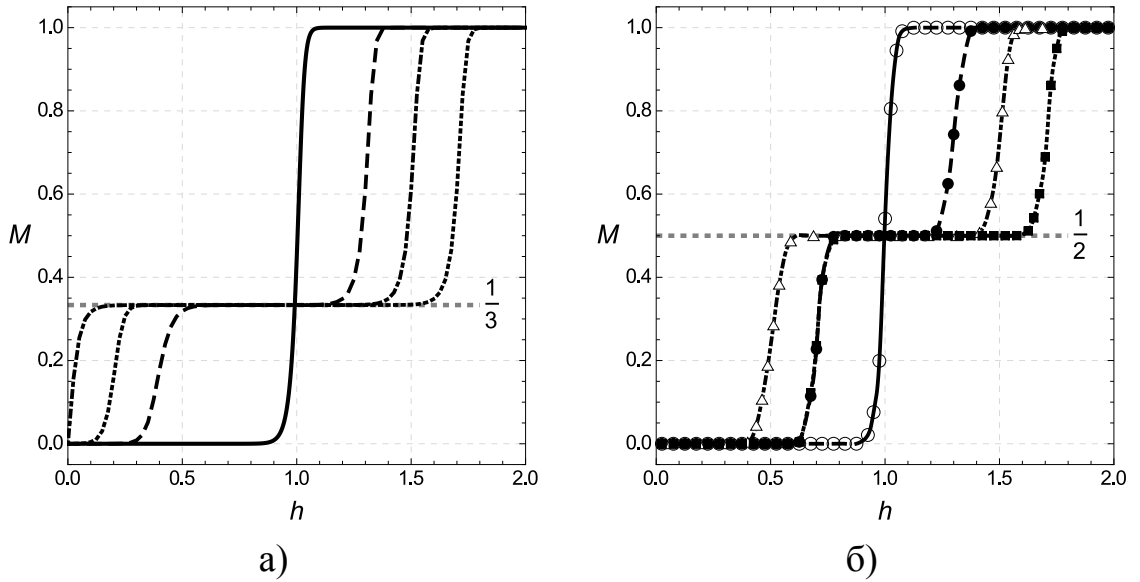


Рисунок 2.12 — Намагниченность модели Изинга на цепочке при  $R = J_2/J_1 = 0$  (сплошная кривая),  $R = 0,3$  (пунктирная кривая),  $R = 0,5$  (штрих-пунктирная кривая) и  $R = 0,7$  (точечная кривая),  $T = 0,05$  а) и на квадратной решетке при  $R = 0$  ( $\circ$ ),  $R = 0,3$  ( $\bullet$ ),  $R = 0,5$  ( $\triangle$ ) и  $R = 0,7$  ( $\blacksquare$ ),  $T = 0,1$  б)

образом (при  $H \rightarrow 0$  восприимчивость стремится к бесконечности). В-третьих, уравнения для фрустрирующего поля для одномерной и двумерной решеток не совпадают даже если перемасштабировать поле и температуру:

$$H_{\text{fr.1D}}^{\text{low}} = \begin{cases} -zJ_1 + 2zJ_2, & \text{при } 0 < R < 0,5; \\ -zJ_2 + \frac{z}{2}J_1, & \text{при } R > 0,5. \end{cases} \quad (2.41)$$

$$H_{\text{fr.1D}}^{\text{upp}} = -zJ_1 - zJ_2.$$

$$H_{\text{fr.2D}}^{\text{low}} = \begin{cases} -zJ_1 + zJ_2, & \text{при } 0 < R < 0,5; \\ -zJ_2, & \text{при } R > 0,5. \end{cases} \quad (2.42)$$

$$H_{\text{fr.2D}}^{\text{upp}} = -zJ_1 - zJ_2.$$

В модели Изинга с антиферромагнитным взаимодействием между ближайшими и вторыми соседями на квадратной решетке выражение для фрустрирующего поля (2.42) впервые было получено Биндером и Ландау в работе [101], в которой они попытались рассчитать полевую зависимость температуры фазового перехода при различных значениях  $R$  посредством приближения среднего поля. В более поздней работе [110] авторы получили правильную зависимость темпе-

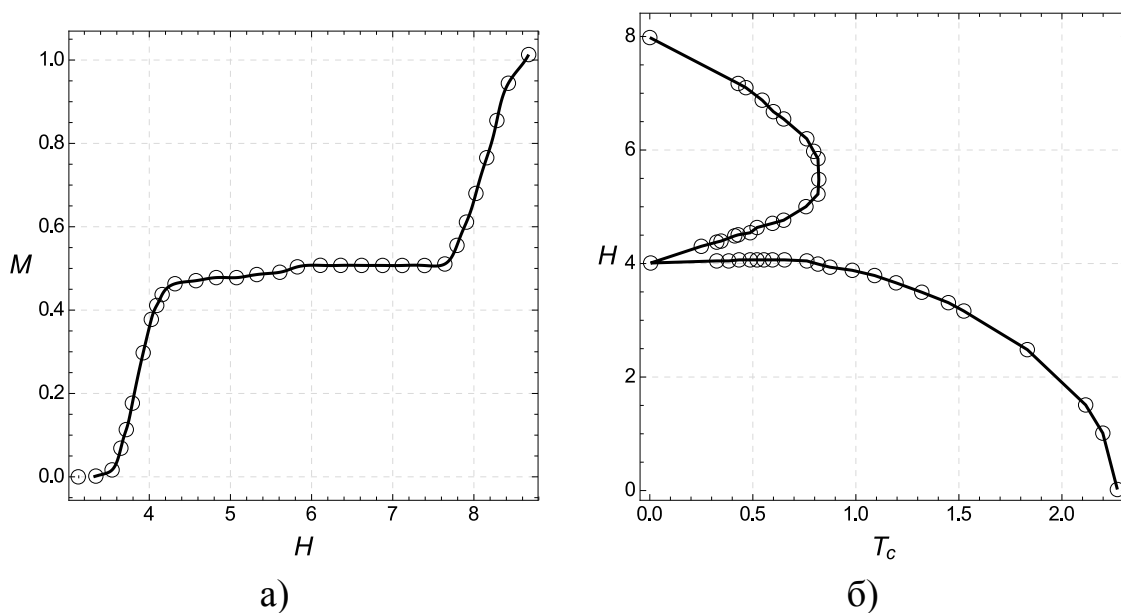


Рисунок 2.13 — Намагниченность [101] а) и фазовая диаграмма [110] модели Изинга на квадратной решетке при  $R = 1$

ратуры перехода. Фазовая диаграмма для модели Изинга на квадратной решетке с антиферромагнитным взаимодействием между ближайшими и вторыми соседями при  $R = 1$  приведена на рисунке 2.13б.

Расчет энтропии как функции температуры во фрустрирующем поле при  $R = 1/2$  для линейной цепочки и квадратной решетки приведен на рисунке 2.14. Легко видеть, что при  $T \rightarrow 0$  энтропия линейной цепочки стремится к постоянному значению натурального логарифма золотого сечения, однако для квадратной решетки она стремится к нулю, хотя расчет теплоемкости показывает, что фазовый переход все же отсутствует и это на самом деле точка фрустрации.

Как уже обсуждалось в главе 1, энтропия здесь равна нулю по причине частичного упорядочения основного состояния. Впервые, по-видимому, эти структуры были описаны в работе [111]. Когда взаимодействие между ближайшими соседями превосходит взаимодействие между вторыми  $J_1 > 2J_2$  ( $R < 1/2$ ), то имеется магнитная структура, называемая Неелевской, энергия которой на один спин равна  $E_{\text{Néel}} = 2J_1 - 2J_2$ . Она изображена на рисунке 2.15а. Темные ( $\bullet$ ) и светлые ( $\circ$ ) кружки обозначают различные значения спина  $S = \pm 1$ .

В противоположном случае, когда взаимодействие между вторыми соседями сильное  $J_2 > J_1/2$  ( $R > 1/2$ ), энергия, приходящаяся на один спин, зависит только от  $J_2$  и равна  $E_{\text{saf}} = 2J_2$ . Эта магнитная структура носит название суперантиферромагнитной структуры (согласно [111]) и изображена на рисунке 2.15б. В последующих работах эту структуру называли просто как SAF (сокращенно от



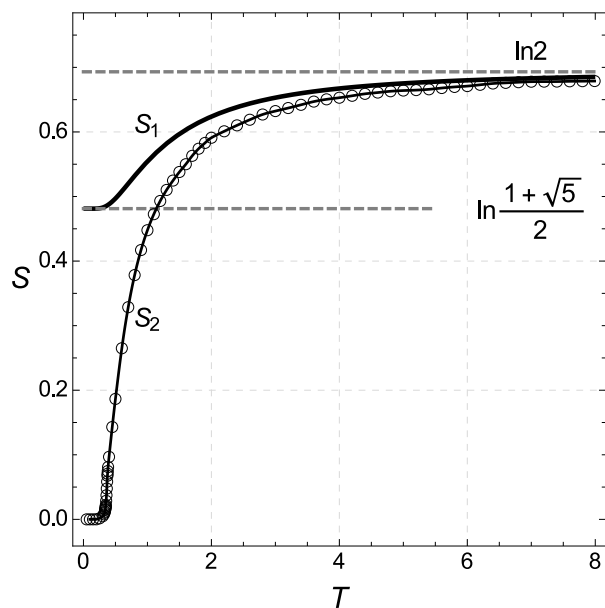


Рисунок 2.14 — Температурная зависимость энтропии в модели Изинга для цепочки ( $S_1$ ) а) и квадратной решетки ( $S_2$ ) б)

SuperAntiFerromagnetic), а также «striped» или «layered». Она выглядит как набор полос, в которой по одной оси упорядочение антиферромагнитное, а по другой — ферромагнитное. Однако такая трактовка суперантиферромагнитной структуры неверна, поскольку она возникает, когда оба обменных интеграла отрицательны (антиферромагнитны) и ни о каком ферромагнетизме речи не идет. У каждого спина в этой структуре все вторые соседи противоположно направлены.

Неелевская и суперантиферромагнитная фазы разделены точкой фрустрации  $R = 1/2$ , в которой энергии обеих структур совпадают и температура фазового перехода равна нулю. Легко показать, что число конфигураций в точке фрустрации порядка  $2^L$ , а не  $2^N$  и поэтому энтропия здесь равна нулю при  $T = 0$ .

Таким образом, основным состоянием, в зависимости от параметра  $R$ , является либо Неелевская  $R < 1/2$ , либо суперантиферромагнитная  $R > 1/2$  структуры. Выше второго фрустрирующего поля основное состояние, очевидно, упорядочено ферромагнитно. Промежуточная структура изображена на рисунке 2.16, в которой светлые кружки ( $\circ$ ) отвечают за спины, выстроенные вдоль магнитного поля. Полученная конфигурация спинов может быть описана как чередующиеся ферромагнитные и антиферромагнитные полосы вдоль ребер квадрата.

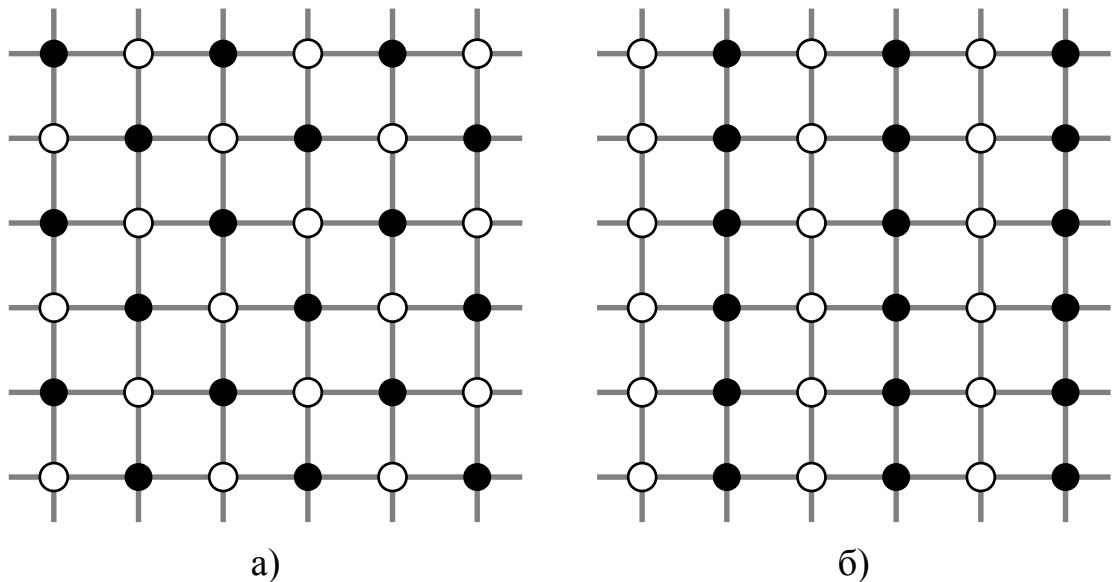


Рисунок 2.15 — Структуры: Неелевская а) и суперантиферромагнитная б)

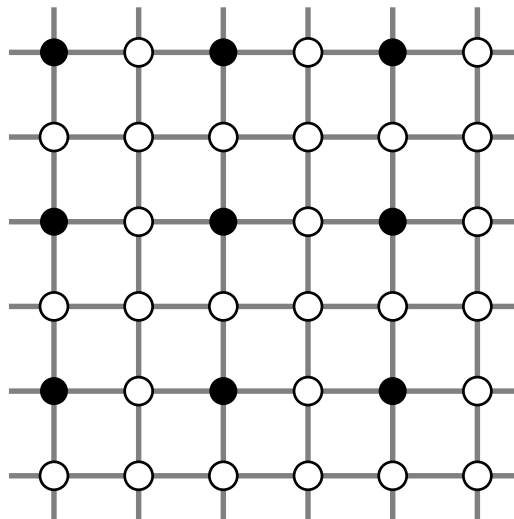


Рисунок 2.16 — Магнитная структура в промежуточном поле (между первым и вторым фрустрирующим полем)

### 2.3.3 Взаимодействия между ближайшими и третьими соседями

В этом случае взаимодействие между третьими соседями на квадратной решетке антиферромагнитно  $J_3 < 0$ , а между вторыми соседями равно нулю  $J_2 = 0$ . Результат расчета намагниченности как функции поля  $h = H/z$  для этого случая приведен на рисунке 2.17 при температуре  $T = 0,1$  для четырех значений параметра  $R$ : ( $R' = J_3/J_1 = 0, 0,3, 0,5, 0,7$ ). Сравнение рисунков 2.17 и 2.12а показывает, что имеется поразительное сходство между намагниченностью для линейной цепочки с учетом ближайших и вторых соседей и квадратной решетки

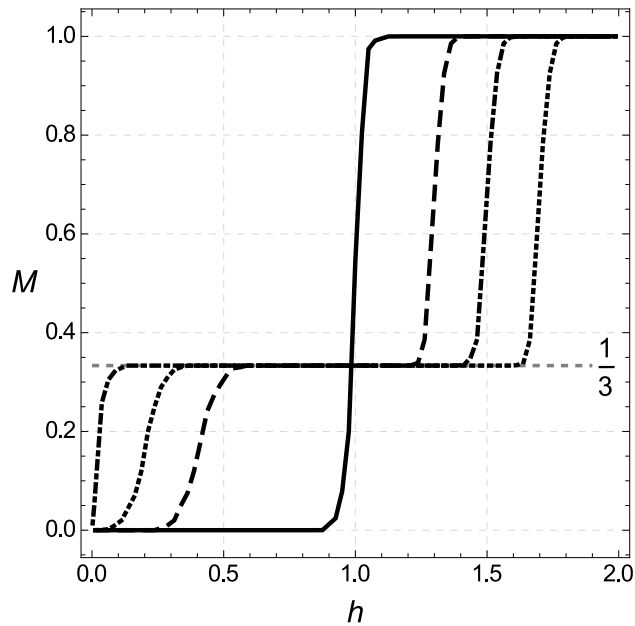


Рисунок 2.17 — Намагниченность модели Изинга на квадратной решетке.  $R' = 0$  (сплошная кривая),  $R' = 0,3$  (пунктирная кривая),  $R' = 0,5$  (штрих-пунктирная кривая),  $R' = 0,7$  (точечная кривая) при  $T = 0,1$

с учетом ближайших и третьих соседей. Следует отметить, что уравнения для фрустрирующих полей в случае квадратной решетки с взаимодействиями между первыми и третьими соседями в точности соответствуют таковым для линейной цепочки (2.41).

На рисунке 2.18 приведены результаты расчета энтропии в точке фрустрации  $R = 1/2$  для линейной цепочки  $S_1$  и квадратной решетки  $S_3$  в случае  $J_2 = 0$ ,  $J_3 \neq 0$ . Видно, что в обоих случаях энтропия при  $T \rightarrow 0$  стремится к постоянному, отличному от нуля значению (в отличие от случая  $J_2 \neq 0$ ,  $J_3 = 0$  на рисунке 2.14).

Когда обменное взаимодействие между ближайшими соседями превосходит обменное взаимодействие между третьими  $J_1 > 2J_3$  ( $R' < 1/2$ ), основным состоянием является структура Нееля (рисунок 2.15а) с энергией на спин  $E = 2J_1 - 2J_3$ . Когда обменное взаимодействие между третьими соседями превосходит таковое, между ближайшими  $J_3 > 1/2J_1$  ( $R' > 1/2$ ), энергия, приходящаяся на один узел, зависит только от  $J_3$  и равна  $E = 2J_3$ . На рисунке 2.19 приведены две такие структуры с одинаковой энергией, но разной симметрией. Неелевская и четверные являются структурами типа  $++--$  с учетверенным периодом трансляций. Они разделены точкой фрустрации  $R' = 1/2$ , в которой их энергии совпадают. В этой точке температура фазового перехода равна нулю,

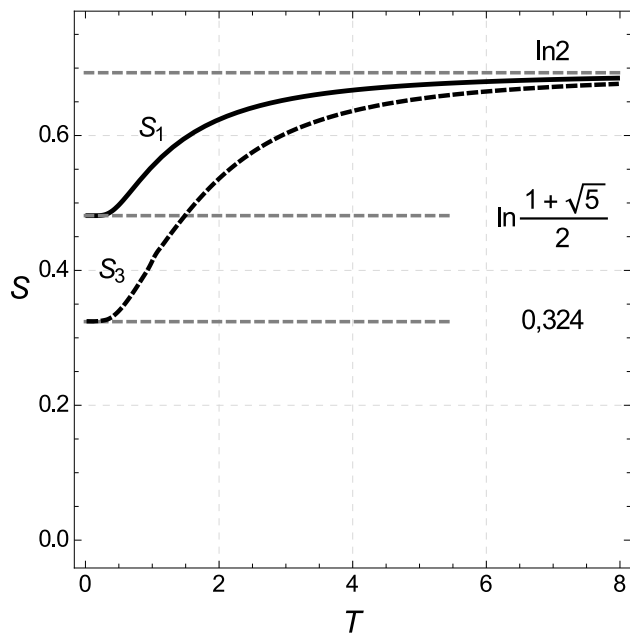


Рисунок 2.18 — Температурная зависимость энтропии для модели Изинга на линейной цепочке  $S_1$  и квадратной решетки с взаимодействиями между первыми и третьими соседями  $S_3$  в точке фрустрации  $R = 1/2$

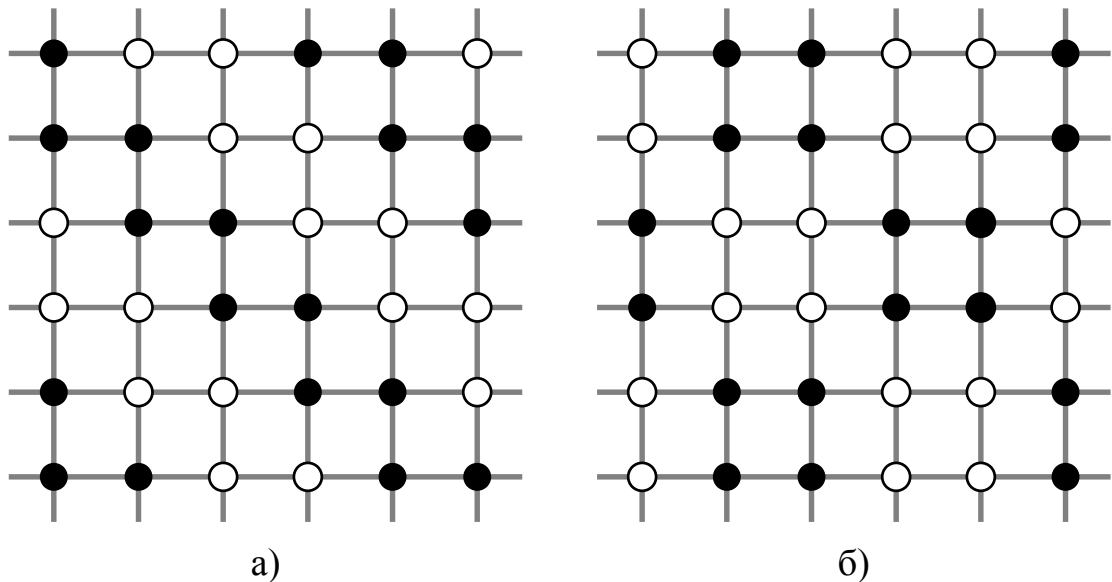


Рисунок 2.19 — Структуры с учетверенным периодом трансляций в модели Изинга для случая взаимодействий между ближайшими и третьими соседями при  $R' > 1/2$

что подтверждается расчетами теплоемкости. Это обстоятельство дополнительно свидетельствует о наличии фрустрации в системе.

Во внешнем магнитном поле основным состоянием, в зависимости от соотношения  $R'$ , является либо Неелевская структура  $R' < 1/2$ , либо структура с учетверенным периодом трансляций  $R' > 1/2$ . Выше второго фрустрирующего поля, очевидно, находится ферромагнитная структура. В промежутке между фрустрирующими полями образуется структура, представленная на рисунке 2.20. Следует отметить, что полученная структура типа  $++-$  по сути совпадает с таковой для линейной цепочки.

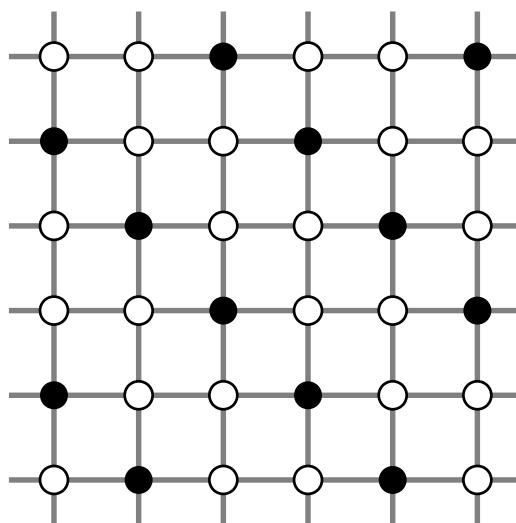


Рисунок 2.20 — Магнитная структура с утроенным периодом трансляций в промежуточном поле (между первым и вторым фрустрирующими полями) в модели Изинга с взаимодействиями между первыми и третьими соседями

## 2.4 Выводы по главе

В настоящей главе приведены результаты исследования поведения намагниченности и энтропии в системах, описываемых в рамках модели Изинга на линейной цепочке с учетом произвольного спина (разделы 2.1 и 2.2) и на квадратной решетке с учетом взаимодействий между соседями вплоть до третьих (раздел 2.3). Показано, что в данных системах при определенных значениях внешнего магнитного поля и обменных интегралов могут возникать фрустрированные состояния, в которых намагниченность испытывает скачок, энтропия при стремлении темпе-

ратуры к нулю стремится к ненулевым значениям, а корреляционная функция не превращается в дельта-функцию ни при какой температуре, что свидетельствует об отсутствии точки перехода (подавляющее большинство конфигураций в точке фрустрации не обладает трансляционной инвариантностью).

В рамках одномерной модели Изинга с учетом произвольного спина получены аналитические выражения для фрустрирующих полей, а также намагниченности и энтропии в них при  $T \rightarrow 0$ . В частном случае  $s = 1/2$  исследовано поведение фурье-образа корреляционной функции во внешнем магнитном поле, а также при его отсутствии.

В рамках двумерной модели Изинга на квадратной решетке подробно изучено поведение намагниченности при учете антиферромагнитного взаимодействия между соседями вплоть до третьих и проведено сравнение полученных результатов с одномерной задачей. Показано, что магнитные свойства модели Изинга на линейной цепочке с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями и на квадратной решетке, с учетом взаимодействий между ближайшими и третьими соседями, качественно схожи. На основании этого можно предсказать, что при определенном выборе модели, намагниченность одномерных, двумерных и даже трехмерных моделей будет иметь качественно подобный вид, несмотря на то, что в одномерных моделях фазовый переход имеет место при нулевой температуре.

Результаты, приведенные в настоящей главе, справедливы для всех фрустрированных систем.

Следует отметить, что зависимости намагниченности и энтропии в точках и полях фрустраций от спина  $s$  ранее в мировой литературе описаны не были.

Материалы главы изложены в работах [A4; A9; A11].

### Глава 3. Трехвершинная модель Поттса

Трехвершинная модель Поттса на линейной цепочке с учетом взаимодействия только между ближайшими соседями исследовалась в работе [55], где, в частности, было показано, что при ориентировании магнитного поля против одного из направлений спина, намагниченность насыщения составляет лишь  $1/2$  от величины намагниченности насыщения в поле, ориентированном вдоль одного из направлений спинов. Это свидетельствует о том, что ферромагнитное состояние не достигается. В данной главе рассматривается трехвершинная модель Поттса (рисунок 3.1) с взаимодействием между ближайшими и вторыми соседями на одномерной цепочке в магнитном поле (раздел 3.1), и на треугольной решетке при отсутствии магнитного поля (раздел 3.2).

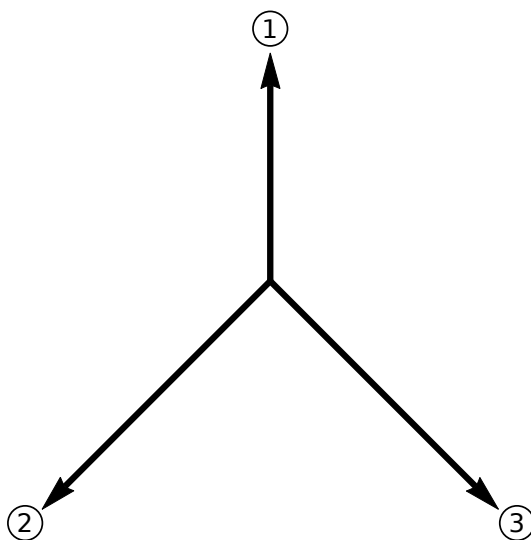


Рисунок 3.1 — Трехвершинная модель Поттса с обозначенными направлениями спина

Интерес к этой модели обусловлен тем, что модель Поттса служит основой теоретического описания широкого круга физических свойств и явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, спиновые стекла, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси. Структурные фазовые переходы в некоторых материалах, как например  $\text{SrTiO}_3$ , могут описываться моделью Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  [37].

Здесь и далее в диссертационной работе рассматриваются задачи, гамильтониан которых имеет общий вид (1.8), с антиферромагнитными взаимодействиями ( $J < 0$ ) между соседями и длинами спиновых векторов, равными единице.

### 3.1 Трехвершинная модель Поттса на линейной цепочке

#### 3.1.1 Магнитное поле ориентировано вдоль одного из направлений спинов

Фазовая диаграмма при  $T \rightarrow 0$  для трехвершинной модели Поттса в магнитном поле, ориентированном вдоль одного из направлений спинов, изображена на рисунке 3.2.

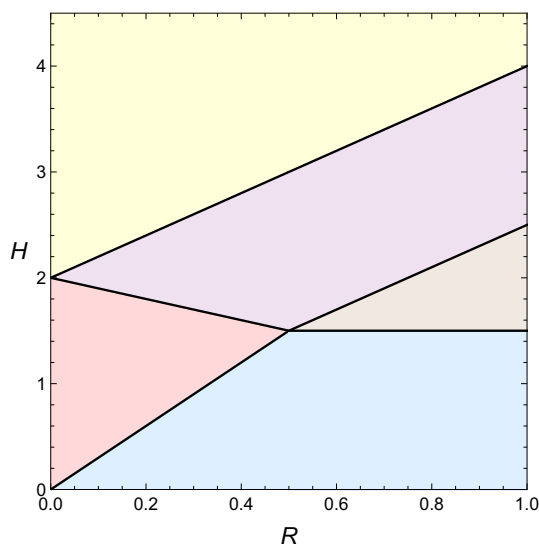


Рисунок 3.2 — Фазовая диаграмма при  $T \rightarrow 0$  для модели Поттса в магнитном поле, ориентированном вдоль одного из направлений спинов. Различным цветом обозначены различные конфигурации основного состояния (см. текст)

Различные цвета соответствуют различным конфигурациям и энергиям, а линии, разделяющие различные области, — полям фрустраций при выбранном значении  $R$  (цифрами ①, ②, ③ обозначены три возможных направления спина (рисунок 3.1), поле направлено вдоль ①):

1. Синяя область. Основное состояние ①②③①②③ с энергией, приходящейся на один спин,  $E = J_1/2 + J_2/2$ ,  $S = 0$ ;



2. Красная область. Каждый второй спин ориентирован вдоль магнитного поля: ①②①③.  $E = J_1/2 - J_2/4 - H/4$ ,  $S = 0$ ;
3. Коричневая область. Два спина из четырех направлены вдоль магнитного поля, причем каждый третий спин может ориентироваться по двум различным направлениям: ①①②③①①③②.  $E = J_1/8 + J_2/2 - H/4$ ,  $S = 1/4 \ln 2$ ;
4. Фиолетовая область. Два спина из трех ориентированы вдоль магнитного поля, причем каждый третий спин может ориентироваться по двум различным направлениям: ①①②①①③.  $E = -H/2$ ,  $S = 1/3 \ln 2$ ;
5. Желтая область. Ферромагнитное состояние: все спины ориентированы вдоль магнитного поля.  $E = -J_1 - J_2 - H$ ,  $S = 0$ .

Из рисунка 3.2 видно, что в этой модели имеет место до трех фрустрационных полей. В случае, когда вторые соседи отсутствуют  $J_2 = 0$ , основное состояние оказывается фрустрированным — каждый второй спин может ориентироваться по двум различным направлениям. Энтропия такого состояния есть  $\ln 2$ , и первое фрустрирующее поле равно нулю.

Сравнивая энергии, полученные для различных конфигураций, можно получить точные аналитические выражения для фрустрирующих полей при различных значениях отношения обменных параметров  $R = J_2/J_1$ :

$$\begin{aligned}
 H_{\text{fr.1}} &= \begin{cases} -3J_2, & \text{если } R \leq 0,5; \\ -\frac{3}{2}J_1, & \text{если } R \geq 0,5. \end{cases} \\
 H_{\text{fr.2}} &= \begin{cases} -2J_1 + J_2, & \text{если } R \leq 0,5; \\ -\frac{J_1}{2} - 2J_2, & \text{если } R \geq 0,5. \end{cases} \\
 H_{\text{fr.3}} &= -2J_1 - 2J_2.
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

На рисунке 3.3 приведены кривые намагниченности в трехвершинной модели Поттса в магнитном поле, ориентированном вдоль одного из направлений спина, для семи значений  $R = 0, 1/6, 2/6, 3/6, 4/6, 5/6, 1$ . Видно, что при  $R \neq 1/2$  имеются два плато на высотах  $1/4$  и  $1/2$ . При  $R = 1/2$  первые два фрустрирующих поля сливаются в одно  $H_{\text{fr}} = 3/2$ , и первое плато намагниченности исчезает.

Во фрустрирующих полях можно получить аналитические выражения для намагниченности и энтропии при  $T \rightarrow 0$ , однако явный вид выражения для намагниченности в некоторых случаях слишком громоздок и, поэтому, опущен.

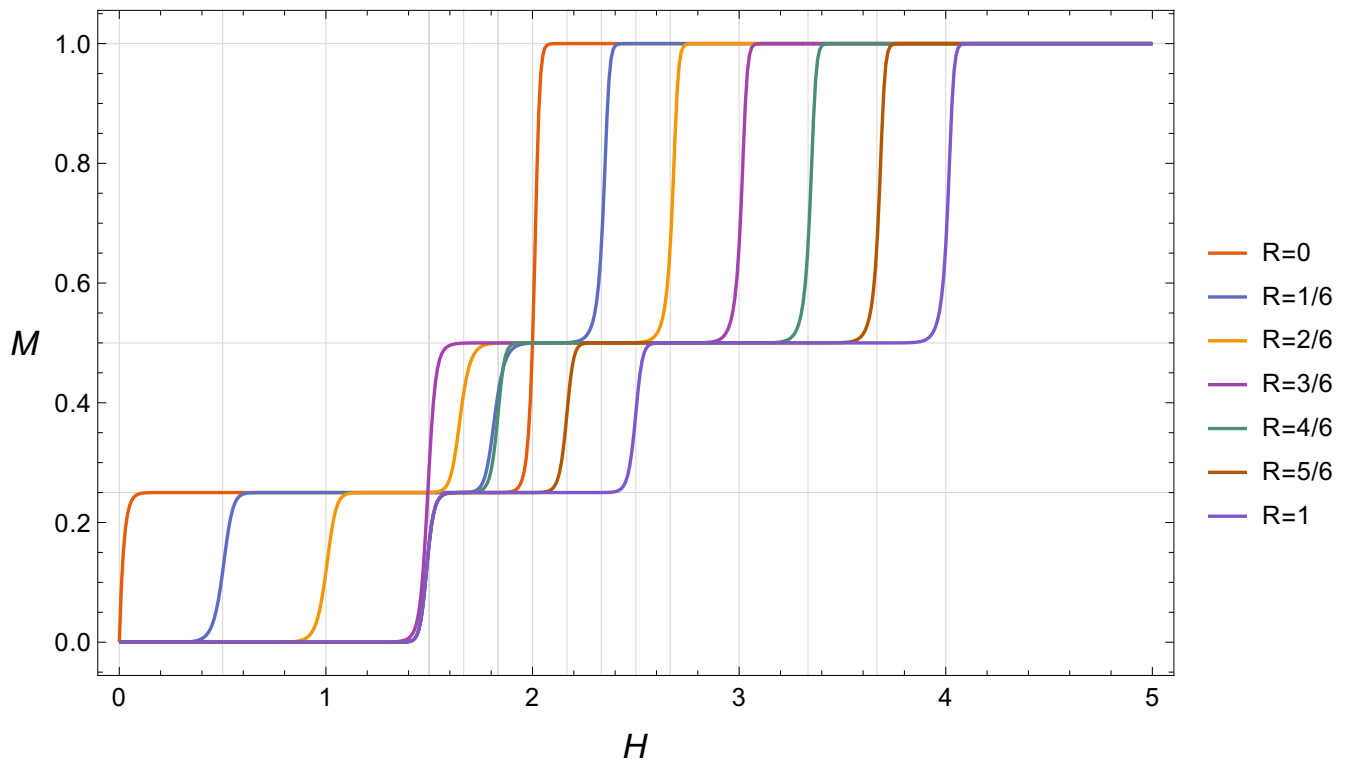


Рисунок 3.3 — Намагниченность как функция поля в трехвершинной модели Поттса для семи значений  $R = J_2/J_1$  в магнитном поле, ориентированном вдоль одного из направлений спина

$R < 1/2$ :

$$\begin{aligned}
 M_{\text{fr.1}} &= \frac{1}{\sqrt[3]{8464}} \left( \sqrt[3]{23 + 3\sqrt{69}} + \sqrt[3]{23 - 3\sqrt{69}} \right) \approx 0,1172, \\
 M_{\text{fr.2}} &= \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{1}{2\sqrt[3]{26^2}} \left( \sqrt[3]{26 + 3\sqrt{78}} + \sqrt[3]{26 - 3\sqrt{78}} \right) \right] \approx 0,4159, \\
 M_{\text{fr.3}} &= \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{1}{\sqrt[3]{58^2}} \left( \sqrt[3]{29 + 3\sqrt{87}} + \sqrt[3]{29 - 3\sqrt{87}} \right) \right] \approx 0,662.
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Энтропия во фрустрирующих полях при  $T = 0$ :

$$\begin{aligned}
 S_{\text{fr.1}} &= \ln \left( \sqrt[3]{\frac{27}{2} + \frac{3\sqrt{69}}{2}} + \sqrt[3]{\frac{27}{2} - \frac{3\sqrt{69}}{2}} \right) - \ln 3 \approx 0,2812, \\
 S_{\text{fr.2}} &= \ln \left( \sqrt[3]{27 + 3\sqrt{78}} + \sqrt[3]{27 - 3\sqrt{78}} \right) - \ln 3 \approx 0,4196, \\
 S_{\text{fr.3}} &= \ln \left( 1 + \sqrt[3]{28 + 3\sqrt{87}} + \sqrt[3]{28 - 3\sqrt{87}} \right) - \ln 3 \approx 0,528.
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Выражения для намагниченности  $M_{\text{fr.3}}$  и энтропии  $S_{\text{fr.3}}$  в третьем фрустрирующем поле совпадают при любом значении  $R > 0$ .

$R = 1/2$ :

$$S_{\text{fr.1}} = \ln \left( \sigma + \sqrt{\frac{6}{\sigma} + 2 - \sigma^2} \right) - \ln 2 \approx 0,5925,$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{1 + \frac{1}{\sqrt[3]{2^4}} \left( \sqrt[3]{97 + 9\sqrt{717}} + \sqrt[3]{97 - 9\sqrt{717}} \right)}. \quad (3.4)$$

Наконец, случай  $R > 1/2$ :

$$S_{\text{fr.1}} = \ln \left[ 1 + \frac{1}{\sqrt[3]{2}} \left( \sqrt[3]{47 + 3\sqrt{249}} + \sqrt[3]{47 - 3\sqrt{249}} \right) \right] - \ln 3 \approx 0,3024,$$

$$S_{\text{fr.2}} = \ln \left( \nu + \sqrt{\frac{4}{\nu} - \nu^2} \right) - \ln 2 \approx 0,4018,$$

$$\nu = \sqrt[6]{\frac{2}{9}} \sqrt{\sqrt[3]{9 + \sqrt{465}} + \sqrt[3]{9 - \sqrt{465}}}. \quad (3.5)$$

### 3.1.2 Магнитное поле ориентировано против одного из направлений спинов

В случае, когда магнитное поле ориентировано против одного из направлений спина, имеется лишь одно фрустрационное поле (переход либо в состояние ②③②③ с энергией  $E = J_1/2 - J_2 - H/2$  при  $R < 0,5$ , либо в состояние ②②③③ с энергией  $E = -J_1/4 + J_2/2 - H/2$  при  $R > 0,5$  (поле направлено против ①)):

$$H_{\text{fr}} = \begin{cases} -3J_2, & \text{если } R \leq 0,5; \\ -\frac{3}{2}J_1, & \text{если } R \geq 0,5. \end{cases} \quad (3.6)$$

Намагниченность насыщения равна  $1/2$  для любого значения  $R$ . Это свидетельствует о том, что ферромагнитное состояние не достигается. Для трех вари-

антов  $R$  удалось получить точные выражения для энтропии при  $T = 0$ :

$R < 1/2$  :

$$S_{\text{fr}} = \ln \left( 1 + \sqrt[3]{\frac{29}{2} + \frac{3\sqrt{93}}{2}} + \sqrt[3]{\frac{29}{2} - \frac{3\sqrt{93}}{2}} \right) - \ln 3 \approx 0,3822, \quad (3.7)$$

$R = 1/2$  :

$$S_{\text{fr}} = \ln \left( 1 + \sqrt[3]{19 + 3\sqrt{33}} + \sqrt[3]{19 - 3\sqrt{33}} \right) - \ln 3 \approx 0,6094, \quad (3.8)$$

$R > 1/2$  :

$$S_{\text{fr}} = \ln \left( \sqrt[3]{\frac{27}{2} + \frac{3\sqrt{69}}{2}} + \sqrt[3]{\frac{27}{2} - \frac{3\sqrt{69}}{2}} \right) - \ln 3 \approx 0,2812. \quad (3.9)$$

### 3.2 Трехвершинная модель Поттса на треугольной решетке

В настоящей главе рассматривается трехвершинная модель Поттса на треугольной решетке с антиферромагнитными взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями в отсутствие магнитного поля. Поскольку такая задача не имеет точного решения, то для исследования термодинамических и магнитных свойств магнетиков, описываемых в рамках данной модели, рядом авторов использовались различные приближенные методы. Это и кластерный метод [112], и низкотемпературное разложение [113], и исследование нулей статсуммы [114], и различные ренорм-групповые подходы [115; 116], и некоторые варианты моделирования Монте-Карло [117–119]. Однако исследования тепловых и магнитных свойств трехвершинной модели на треугольной решетке с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями до сих пор не проведены. Не определены точки фрустрации и не рассчитаны величины энтропии и плотности состояний системы при низких температурах.

На рисунке 3.4 приведены зависимости энергии, приходящейся на один спин, от отношения обменных параметров  $R = J_2/J_1$  для трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с антиферромагнитными взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями. Цифрами I, II, III обозначены энергии

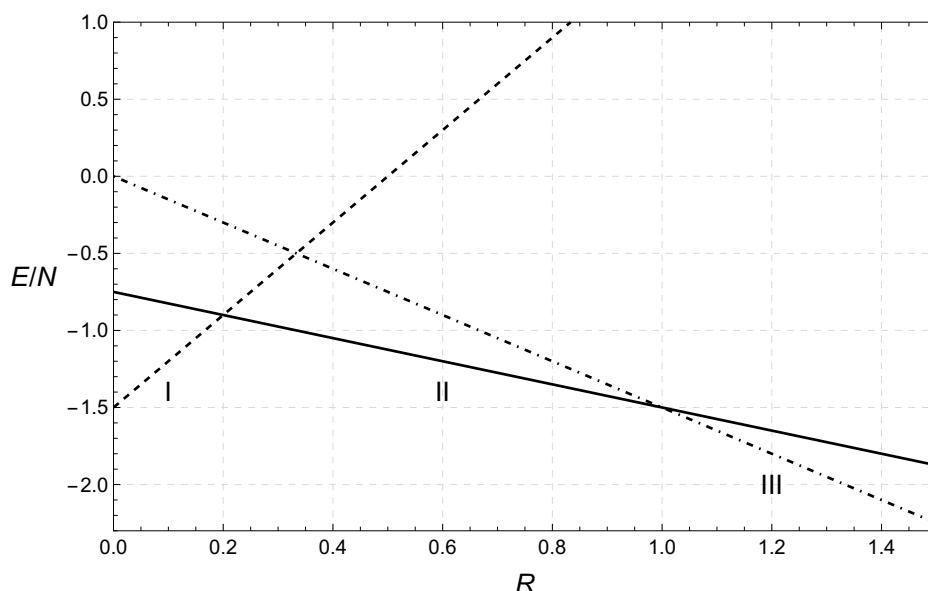


Рисунок 3.4 — Зависимость энергии, приходящейся на один спин, от соотношения обменных параметров  $R = J_2/J_1$  для трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с антиферромагнитным взаимодействием между ближайшими и вторыми соседями

структур, возможные варианты которых приведены на рисунке 3.5. Видно, что имеются две особые точки  $R = 1/5$  и  $R = 1$ , в которых происходит изменение магнитной структуры.

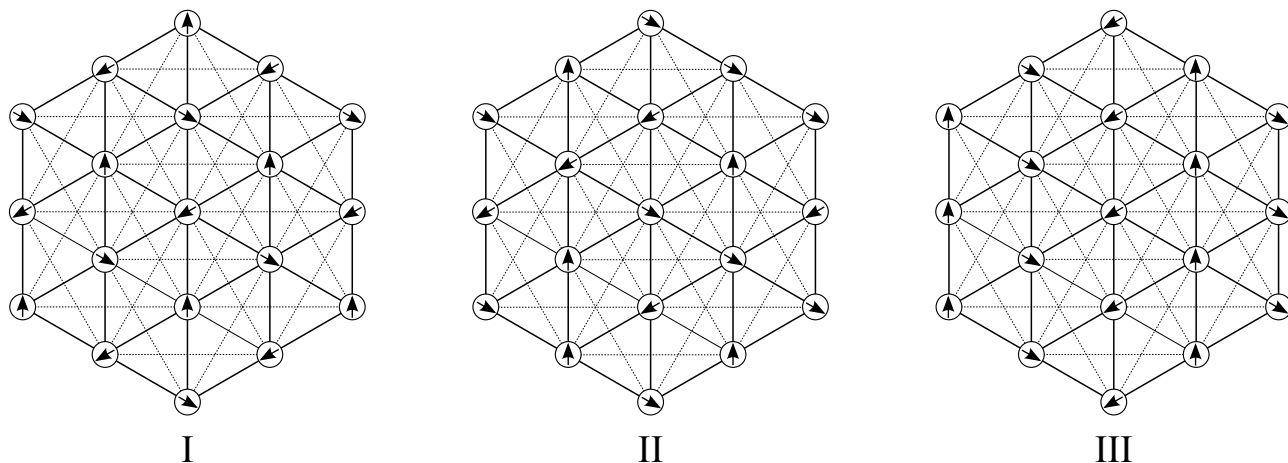


Рисунок 3.5 — Примеры магнитных структур, выживающих (то есть имеющих наименьшую энергию) в трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке при  $T = 0$  для случаев  $R \leq 1/5$  (I),  $1/5 \leq R \leq 1$  (II) и  $R \geq 1$  (III)

$R \leq 1/5$  (I). Пример возникающей в данном случае конфигурации приведен на рисунке 3.5I. Энергия, приходящаяся на один узел, равна  $E = 3/2J_1 - 3J_2$ . Эту структуру можно охарактеризовать двумя числами  $(6,0)$ , которые указывают на число, соответственно, ближайших и вторых соседей, имеющих противоположно

направленные спины для любого узла. Другими словами, каждый узел на рисунке 3.5а имеет 6 иначе направленных ближайших соседей и 6 сонаправленных с ним вторых соседей. Можно показать, что при  $T = 0$  выживает всего 6 таких конфигураций, и энтропия при  $T \rightarrow 0$  закономерно стремится к нулю.

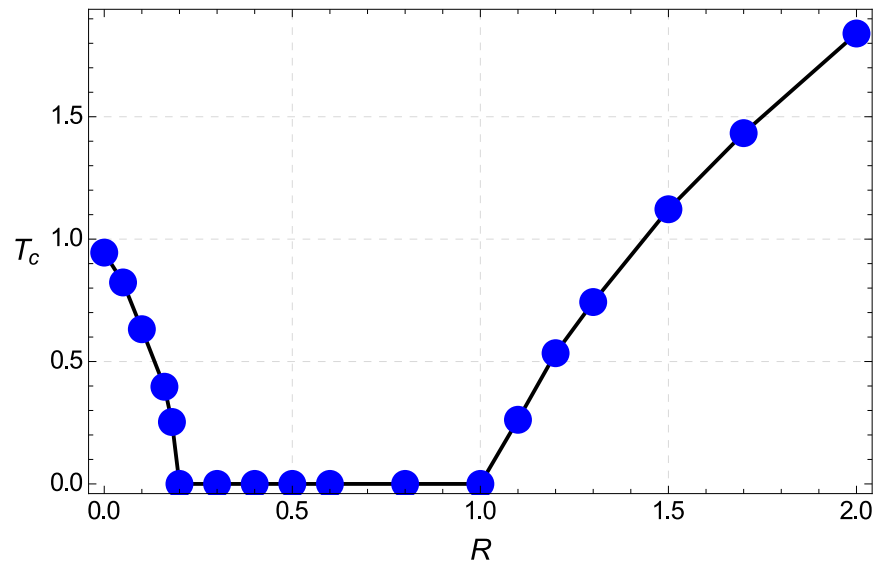
$1/5 \leq R \leq 1$  (II). Пример возникающей в данном случае конфигурации приведен на рисунке 3.5II. Охарактеризовать эту структуру двумя числами, как это было сделано в предыдущем случае, невозможно, так как каждый узел может иметь различное число сонаправленных ближайших и вторых соседей, однако энергия всей структуры, приходящаяся на один спин, равна  $E = 3/4J_1 + 3/4J_2$ . Таким образом, это состояние бесконечно вырождено, и энтропия при  $T \rightarrow 0$  стремится к некоторому ненулевому значению.

$R \geq 1$  (III). Пример возникающей в данном случае конфигурации приведен на рисунке 3.5III. Энергия, приходящаяся на один узел, равна  $E = 3/2J_2$ . Можно показать, что всего существует 216 вариантов таких конфигураций типа (4,6) с одинаковой энергией. Энтропия при  $T \rightarrow 0$  стремится к нулю.

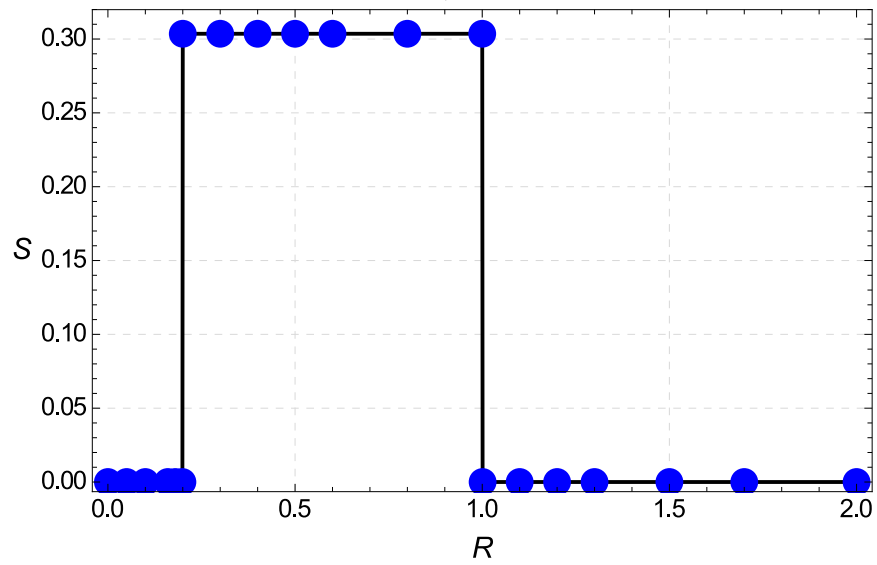
С точки зрения автора, наиболее подходящим методом для исследования данной модели является алгоритм Ванга-Ландау, который основан на представлении статистической суммы в виде разложения по плотности состояний энергии. Алгоритм Ванга-Ландау позволяет вычислить функцию плотности состояний системы и рассчитать все интересующие параметры: энтропию, теплоемкость и др. Для фрустрированных систем, энтропия которых при  $T = 0$  может принимать ненулевые значения, этот метод является весьма полезным — он позволяет избежать о возможных ошибок, которые возникают в результате вычисления энтропии через интегрирование теплоемкости, как, например, в классическом методе Метрополиса.

На рисунке 3.6 приведены рассчитанные зависимости температуры фазового перехода (3.6а) и энтропии при  $T \rightarrow 0$  (3.6б) как функции отношения обменных параметров  $R$  для трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке. Видно, что в диапазоне  $1/5 \leq R \leq 1$  фазовый переход отсутствует, и энтропия при  $T \rightarrow 0$  стремится к значению 0,302 (2) (в скобках указана точность последней цифры). Наличие ненулевой энтропии объясняется бесконечной кратностью вырождения состояния при  $1/5 \leq R \leq 1$ .

Теплоемкость в рассматриваемой модели ведет себя типичным для фрустрированных систем образом. Вдали от точек фрустраций имеется острый  $\lambda$  -



а)



б)

Рисунок 3.6 — Температура фазового перехода а) и энтропия при  $T \rightarrow 0$  б) как функции  $R$  в трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке

образный пик, положение которого соответствует температуре фазового перехода. Высота этого пика увеличивается с ростом числа узлов в рассматриваемой решетке и при  $L \rightarrow \infty$  стремится к бесконечности. В любой точке из области фрустраций имеется не острый пик, а плавный горб. Положение максимума этого горба, естественно, зависит от  $R$ , но его величина при изменении  $L$  остается практически постоянной. Пример такого поведения представлен на рисунке 3.7, где приведены кривые теплоемкости при  $R = 0$  и  $R = 1/2$ . Видно, что в первом случае теплоемкость имеет острый пик, положение которого соответствует температуре фазового перехода, а во втором случае — плавный горб. Вблизи точек фрустрации наблюдается явление расщепления теплоемкости.

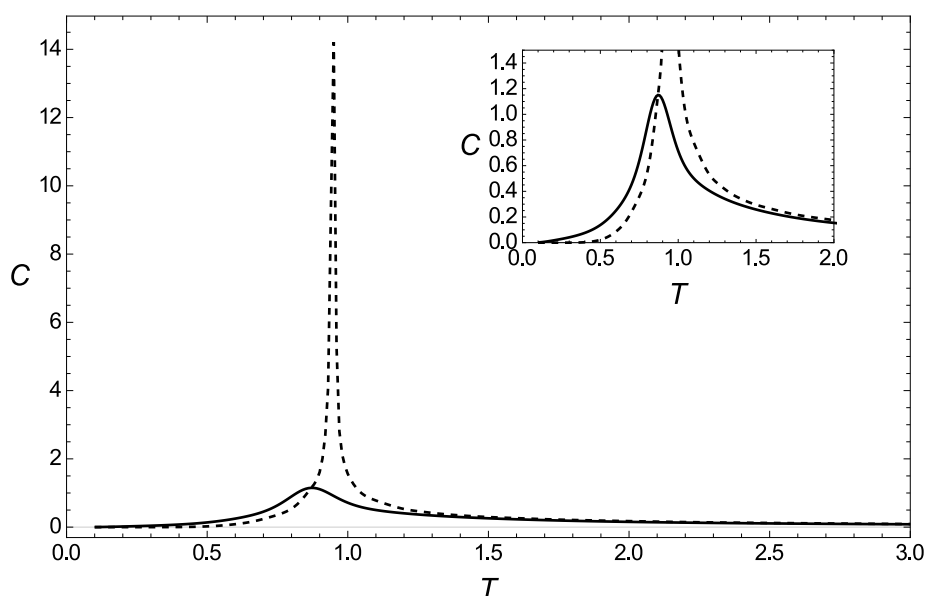


Рисунок 3.7 — Теплоемкость в трехвершинной модели на треугольной решетке при  $R = 0$  (пунктирная кривая) и  $R = 1/2$  (сплошная кривая)

### 3.3 Выводы по главе

В настоящей главе приведены результаты исследования поведения намагниченности, энтропии и магнитной теплоемкости в системах, описываемых в рамках трехвершинной модели Поттса на линейной цепочке и на треугольной решетке.

Для цепочки спинов с учетом антиферромагнитного взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями получены фазовые диаграммы  $H - R$  (маг-



нитное поле – отношение взаимодействия между вторыми соседями к таковому между ближайшими). Проанализированы возникающие конфигурации, построены кривые намагничивания, получены аналитические выражения для величин намагниченности и энтропии во фрустрирующих полях при  $T \rightarrow 0$ .

В рамках трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке получены аналитические выражения для фрустрирующих полей при  $T \rightarrow 0$ , а также обнаружена целая область значений параметров  $R$ , при которых основное состояние системы является фрустрированным. Численно определена величина энтропии фрустрированного состояния при  $T = 0$ . В рамках данной модели исследовано поведение магнитной теплоемкости. Показано, что вдали от точки фрустрации теплоемкость имеет острый лямбда-образный пик, а в самой точке фрустрации имеется широкий куполообразным максимум. В непосредственной близости от точки фрустрации теплоемкость испытывает расщепление на два пика: острый онзагеровский пик и широкий максимум. Подобное поведение теплоемкости справедливо для всех фрустрированных систем.

Следует отметить, что впервые в мировой литературе исследована система, основное состояние которой является фрустрированным в целом интервале значений  $R$ . Ранее изучались системы, в которых фрустрации имеют место только при каком-то конкретном значении  $R$ .

Результаты этой главы частично опубликованы в работах [A2; A8].

## Глава 4. Четырехвершинная стандартная модель Поттса

Как уже говорилось в разделе 1.4, в последнее время наблюдается повышенный интерес к исследованию мульти-**k** структур. В работах [80; 81] было показано, что расшифровка нейтронограммы USb в модели 3-**k** структуры лучше согласуется с экспериментальными данными, чем в модели коллинеарной структуры. Заметим, что эта 3-**k** структура в точности соответствует четырехвершинной стандартной модели Поттса, изображенной на рисунке 1.1в.

Четырехвершинная стандартная модель Поттса в случае взаимодействия между ближайшими соседями в магнитном поле на цепочке спинов исследовалась в работе [55]. В ней получен ряд точных выражений для основных термодинамических характеристик (статсуммы, намагниченности и восприимчивости) в случае различных направлений магнитного поля, определенных симметрией куба. Показано, что намагниченности насыщения соотносятся между собой как  $1 : \sqrt{2/3} : 1/\sqrt{3} : 1/3$  для направлений поля  $[111] : [110] : [100] : [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$  соответственно. Для направлений поля  $[111]$  и  $[110]$  намагниченность имеет промежуточное плато на высоте  $1/3$  и  $1/\sqrt{6}$  соответственно. Результаты для намагниченности как функции магнитного поля, полученные в работе [55], приведены на рисунке 4.1.

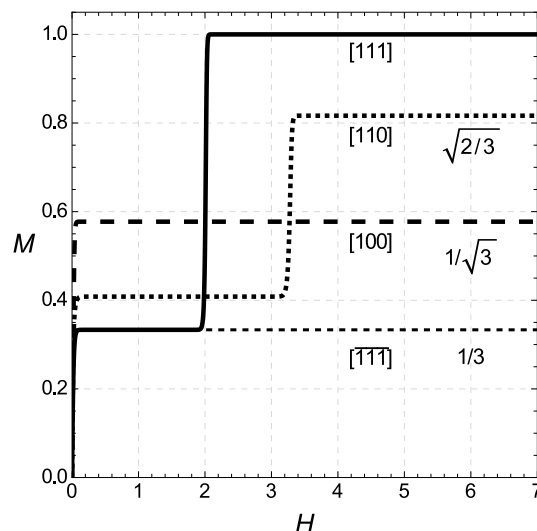


Рисунок 4.1 — Намагниченность как функция поля в четырехвершинной модели Поттса на одномерной цепочке спинов с взаимодействием между ближайшими соседями для различных направлений магнитного поля [55]

В данной главе рассматривается более общий случай при дополнительном учете взаимодействия между вторыми соседями для трех направлений магнитного поля, обозначенных на рисунке 4.2. Так же, как и другие одномерные модели, четырехвершинная модель Поттса служит отправной точкой для изучения моделей более высоких размерностей.

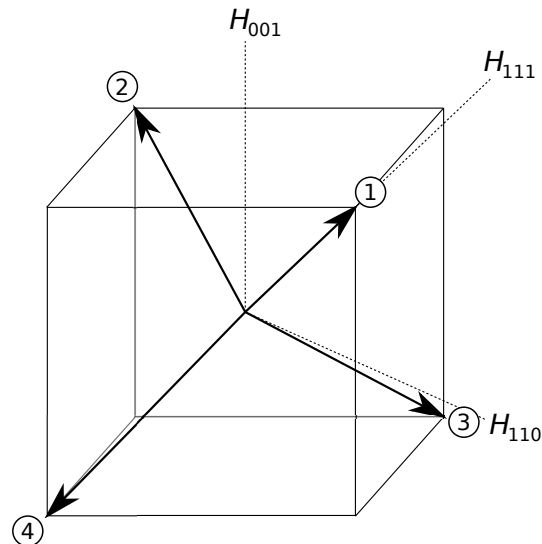


Рисунок 4.2 — Четырехвершинная модель Поттса. Штриховые линии обозначают направления магнитного поля

#### 4.1 Взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями при отсутствии магнитного поля

Как видно из рисунка 4.2, четырехвершинная модель Поттса не имеет антипараллельных направлений спинов (этим и объясняется различие намагниченностей насыщения для направлений поля  $[111]$  и  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ) и полностью фрустрирована при отсутствии магнитного поля при антиферромагнитном взаимодействии между ближайшими ( $J_1 < 0$ ) и вторыми соседями ( $J_2 < 0$ ).

Как уже отмечалось выше, в математическом смысле под фрустрацией понимается невозможность минимизации гамильтониана сразу для всех взаимодействий. В четырехвершинной модели при отсутствии вторых соседей ( $J_1 < 0, J_2 \equiv 0$ ) имеется  $4 \cdot 3^{N-1}$  различных конфигураций, обладающих при  $T = 0$  одинаковой энергией. Энтропия такой системы, как легко показать, равна  $\ln 3$ . В случае  $J_1 < 0$  и  $J_2 < 0$  при  $T = 0$  одинаковой энергией обладают  $12 \cdot 2^{N-2}$

конфигураций и энтропия такой системы равна  $\ln 2$ . Для преодоления фрустрации в четырехвершинной модели Поттса на одномерной цепочке необходим учет взаимодействия между третьими соседями, то есть случай  $J_1 < 0$ ,  $J_2 < 0$ ,  $J_3 < 0$ . При  $T = 0$  здесь выживает 24 структуры, а энтропия такой системы равняется нулю.

## 4.2 Взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями в магнитном поле

### 4.2.1 Направление поля вдоль $[111]$

Фазовая диаграмма для четырехвершинной модели Поттса в магнитном поле, направленном вдоль  $[111]$ , изображена на рисунке 4.3.

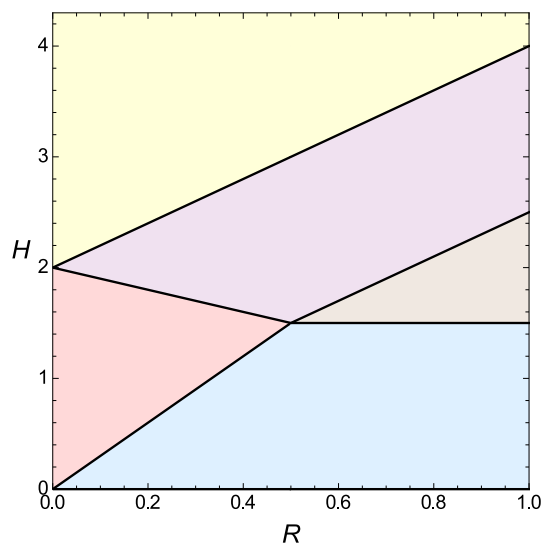


Рисунок 4.3 — Фазовая диаграмма при  $T \rightarrow 0$  для модели Поттса в магнитном поле, направленном вдоль  $[111]$ . Различные цвета обозначают различные конфигурации основного состояния (см. текст)

Различные цвета на рисунке 4.3 соответствуют различным конфигурациям и энергиям, а линии, разделяющие различные области, соответствуют полям фрустраций при выбранном значении  $R$  (цифрами ①, ②, ③, ④ обозначены четыре возможных направления спина (см. рисунок 4.2)):

1. Синяя область. Каждый третий спин ориентируется вдоль поля: ①②③①④③. Энергия, приходящаяся на один спин, равна  $E = J_1/3 + J_2/3 - H/9$ . Можно показать, что энтропия при  $T \rightarrow 0$  стремится к ненулевому значению  $S = 2/3 \ln 2$ ;
2. Красная область. Каждый второй спин ориентирован вдоль магнитного поля: ①②①③①④.  $E = J_1/3 - J_2/3 - H/3$ ,  $S = 1/2 \ln 2$ ;
3. Коричневая область. Два спина из четырех направлены вдоль магнитного поля: ①①②③①①③④.  $E = J_2/3 - H/3$ ,  $S = 1/4 \ln 6$ ;
4. Фиолетовая область. Два спина из трех ориентированы вдоль магнитного поля: ①①②①①③.  $E = -J_1/9 - J_2/9 - 5H/9$ ,  $S = 1/3 \ln 3$ ;
5. Желтая область. Ферромагнитное состояние: все спины ориентированы вдоль магнитного поля.  $E = -J_1 - J_2 - H$ ,  $S = 0$ .

Из рисунка 4.3 видно, что в системе может иметь место до четырех фрустрирующих полей (поскольку состояние при  $H = 0$  фрустрировано, то первый скачок намагниченности происходит в поле  $H_{\text{fr.1}} = 0$ ). Сравнивая энергии полученных конфигураций, можно выписать уравнения для этих полей:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{fr.2}} &= \begin{cases} -3J_2, & \text{если } R \leq 0,5; \\ -\frac{3J_1}{2}, & \text{если } R \geq 0,5. \end{cases} \\
 H_{\text{fr.3}} &= \begin{cases} -2J_1 + J_2, & \text{если } R \leq 0,5; \\ -\frac{J_1}{2} - 2J_2, & \text{если } R \geq 0,5. \end{cases} \\
 H_{\text{fr.4}} &= -2J_1 - 2J_2.
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Имеется особая точка  $R = 1/2$ ,  $H = 3/2$ , где совпадают энергии четырех различных конфигураций. Можно показать, что при  $T \rightarrow 0$  энтропия в этой точке равна

$$S_{\text{fr}} = \ln \left[ 1 + \left( \frac{173}{2} + \frac{3\sqrt{3297}}{2} \right)^{1/3} + \left( \frac{173}{2} - \frac{3\sqrt{3297}}{2} \right)^{1/3} \right] - \ln 3 \approx 0,887. \tag{4.2}$$

Рассмотрим отдельно случаи  $R < 1/2$  (слабые вторые соседи) и  $R > 1/2$  (сильные вторые соседи).

«Слабые» вторые соседи ( $R < 1/2$ ). На рисунке 4.4 приведены кривые намагниченности для четырехвершинной модели Поттса с взаимодействием между ближайшими и вторыми соседями в магнитном поле, направленном вдоль  $[111]$  как функции поля и температуры. Из рисунка 4.4а видно, что намагниченность имеет три плато, расположенных на высотах  $1/9$ ,  $3/9$ ,  $5/9$ , при этом намагниченность насыщения равна единице, что означает, что ферромагнитное состояние было достигнуто. Поля, в которых намагниченность испытывает скачок, — поля фрустраций, значения которых определяются уравнениями (4.1). На температурной зависимости намагниченности 4.4б черные кривые отвечают намагниченностям во фрустрационных полях, серые — в промежутках между ними. Видно, что при низких температурах в магнитных полях, не равных фрустрационным, намагниченность стремится к тем же значениям  $1/9$ ,  $3/9$ ,  $5/9$  и  $1$ , однако во фрустрационных полях она стремится к другим значениям, а именно:

$$\begin{aligned}
 M_{\text{fr.2}} &= \frac{1}{5}, \\
 M_{\text{fr.3}} &= \frac{5}{9} - \frac{4}{9} \sqrt[3]{\left(\frac{2}{211}\right)^2 \left[ \sqrt[3]{211 + 9\sqrt{633}} + \sqrt[3]{211 - 9\sqrt{633}} \right]} \approx 0,454, \\
 M_{\text{fr.4}} &= \frac{5}{9} + \frac{2}{9} \sqrt[3]{\left(\frac{2}{85}\right)^2 \left[ \sqrt[3]{85 + 9\sqrt{85}} + \sqrt[3]{85 - 9\sqrt{85}} \right]} \approx 0,6793.
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Во фрустрирующих полях энтропия при  $T \rightarrow 0$  стремится к ненулевым значениям, точные формулы для которых имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
 S_{\text{fr.2}} &= \ln 2 \approx 0,6931, \\
 S_{\text{fr.3}} &= \ln \left( \sqrt[3]{\frac{3}{2} + \frac{\sqrt{633}}{18}} + \sqrt[3]{\frac{3}{2} - \frac{\sqrt{633}}{18}} \right) \approx 0,6383, \\
 S_{\text{fr.4}} &= \ln \left( 1 + \sqrt[3]{\frac{83}{2} + \frac{9\sqrt{85}}{2}} + \sqrt[3]{\frac{83}{2} - \frac{9\sqrt{85}}{2}} \right) - \ln 3 \approx 0,6226.
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

При  $T \rightarrow \infty$  энтропия четырехвершинной модели Поттса не зависит от магнитного поля и равна натуральному логарифму числа состояний на узле  $\ln 4$ .

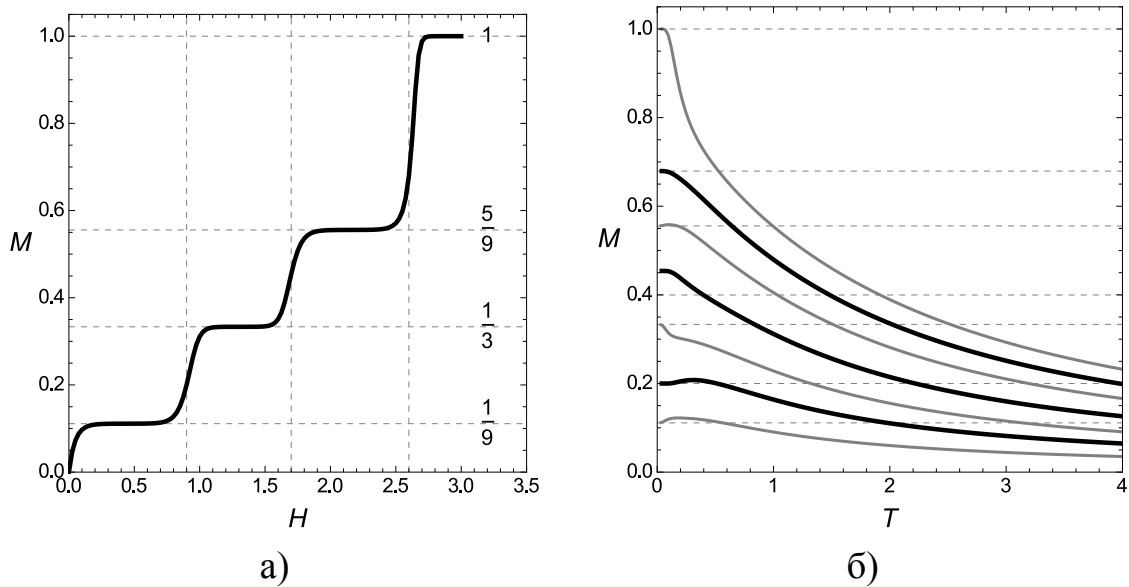


Рисунок 4.4 — Намагниченность при направлении поля вдоль  $[111]$  как функция поля при  $T = 0,023$  а) и температуры для семи значений поля (черные кривые отвечают фрустрационным полям, серые — значениям поля в промежутке между фрустрирующими) б)

«Сильные» вторые соседи ( $R > 1/2$ ). Кривые намагничивания для случая  $R > 1/2$  схожи с теми, что приведены на рисунке 4.4а. Выражения для величин фрустрирующих полей определяются формулами (4.1). Выражения для намагниченностей во фрустрационных полях в этом случае слишком громоздки, поэтому ограничимся только выражениями для энтропии в этих полях при  $T \rightarrow 0$ :

$$\begin{aligned}
 S_{\text{fr.2}} &= \ln \left( \frac{\alpha^2 + \sqrt{2\alpha - \alpha^4}}{\alpha(\alpha^2 + 1)} \right) \approx 0,6543, \quad \alpha = \sqrt{\sqrt[3]{2} - 1}, \\
 S_{\text{fr.3}} &= \ln \left( \beta + \sqrt{\frac{6}{\beta} - \beta^2} \right) - \ln 2 \approx 0,6112, \\
 \beta &= \sqrt{\left( \frac{9}{2} + \frac{\sqrt{2129}}{2} \right)^{1/3} + \left( \frac{9}{2} - \frac{\sqrt{2129}}{2} \right)^{1/3}}.
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Значение энтропии в четвертом фрустрирующем поле  $H_4 = -2J_1 - 2J_2$  при  $R > 1/2$  совпадает с таковым при  $R < 1/2$ , приведенном в формулах (4.4).

### 4.2.2 Направление поля вдоль [110]

Фазовая диаграмма для четырехвершинной модели Поттса в магнитном поле, направленном вдоль [110], изображена на рисунке 4.5.

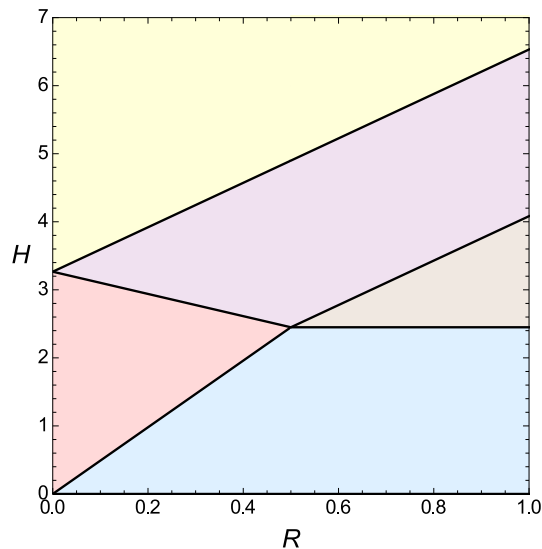


Рисунок 4.5 — Фазовая диаграмма при  $T \rightarrow 0$  для модели Поттса в магнитном поле, направленном вдоль [110]. Различные цвета обозначают различные конфигурации основного состояния (см. текст)

Различные цвета соответствует различным конфигурациям и энергиям, а линии, разделяющие различные области, соответствуют полям фрустраций при выбранном значений  $R$ :

1. Синяя область:  $\textcircled{1}\textcircled{3}\textcircled{4}\textcircled{1}\textcircled{3}\textcircled{4}$ . Энергия, приходящаяся на один спин, равна  $E = J_1/3 + J_2/3 - \sqrt{6}H/9$ . Энтропия при  $T \rightarrow 0$  равна нулю;
2. Красная область:  $\textcircled{1}\textcircled{3}\textcircled{1}\textcircled{4}$ ,  $E = J_1/3 - J_2/3 - H/\sqrt{6}$ ,  $S = 0$ ;
3. Коричневая область:  $\textcircled{1}\textcircled{1}\textcircled{3}\textcircled{4}$ ,  $E = J_2/3 - H/\sqrt{6}$ ,  $S = 1/4 \ln 2$ ;
4. Фиолетовая область:  $\textcircled{1}\textcircled{1}\textcircled{3}\textcircled{1}\textcircled{1}\textcircled{4}$ ,  $E = -J_1/9 - J_2/9 - 2\sqrt{6}H/9$ ,  $S = 1/3 \ln 2$ ;
5. Желтая область:  $\textcircled{1}\textcircled{1}\textcircled{1}$ ,  $E = -J_1 - J_2 - \sqrt{\frac{2}{3}}H$ ,  $S = 0$ .

Из рисунка 4.5 видно, что в системе может иметь место до четырех фрустрирующих полей (поскольку состояние при  $H = 0$  фрустрировано, то первый скачок происходит в поле  $H_{\text{fr},1} = 0$ ). Сравнивая энергии полученных конфигураций, можно выписать соотношения для этих фрустрационных полей:



$$\begin{aligned}
H_{\text{fr.2}} &= \begin{cases} -2\sqrt{6}J_2, & \text{если } R \leq 0,5; \\ -\sqrt{6}J_1, & \text{если } R \geq 0,5. \end{cases} \\
H_{\text{fr.3}} &= \begin{cases} -2\sqrt{\frac{2}{3}}(2J_1 - J_2), & \text{если } R \leq 0,5; \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}(J_1 + 4J_2), & \text{если } R \geq 0,5. \end{cases} \\
H_{\text{fr.4}} &= -4\sqrt{\frac{2}{3}}(J_1 + J_2).
\end{aligned} \tag{4.6}$$

«Слабые» вторые соседи ( $R < 1/2$ ). На рисунке 4.6 приведены кривые намагниченности для четырехвершинной модели Поттса с взаимодействием между ближайшими и вторыми соседями в магнитном поле, направленном вдоль [110] как функции поля и температуры. Из рисунка 4.6а видно, что намагниченность имеет три плато, расположенных на высотах  $\sqrt{6}/9$ ,  $\sqrt{6}/6$ ,  $2\sqrt{6}/6$ , намагниченность насыщения равна  $\sqrt{2/3}$ , что означает, что ферромагнитное состояние в данном случае не может быть достигнуто. Поля, в которых намагниченность испытывает скачок, есть поля фрустраций, значения которых определяются уравнениями (4.6). На температурной зависимости намагниченности 4.4б черные кривые отвечают намагниченностям во фрустрационных полях, серые — в промежутках между ними. Видно, что при низких температурах в магнитных полях не равных фрустрационным, намагниченность стремится к тем же значениям  $\sqrt{6}/9$ ,  $\sqrt{6}/6$ ,  $2\sqrt{6}/6$  и  $\sqrt{2/3}$ , однако во фрустрационных полях она стремится к другим значениям. Энтропия в этих фрустрационных полях при  $T \rightarrow 0$ :

$$\begin{aligned}
S_{\text{fr.2}} &= \ln \left( \sqrt[3]{9 + \sqrt{69}} + \sqrt[3]{9 - \sqrt{69}} \right) - \frac{2}{3} \ln 3 - \frac{1}{3} \ln 2 \approx 0,2812, \\
S_{\text{fr.3}} &= \ln \left( \sqrt[3]{27 + 3\sqrt{78}} + \sqrt[3]{27 - 3\sqrt{78}} \right) - \ln 3 \approx 0,4196, \\
S_{\text{fr.4}} &= \ln \left( 1 + \sqrt[3]{28 + 3\sqrt{87}} + \sqrt[3]{28 - 3\sqrt{87}} \right) - \ln 3 \approx 0,528.
\end{aligned} \tag{4.7}$$

«Сильные» вторые соседи ( $R > 1/2$ ). Кривые намагничивания для случая  $R > 1/2$  схожи с теми, что приведены на рисунке 4.6а. Выражения для величин

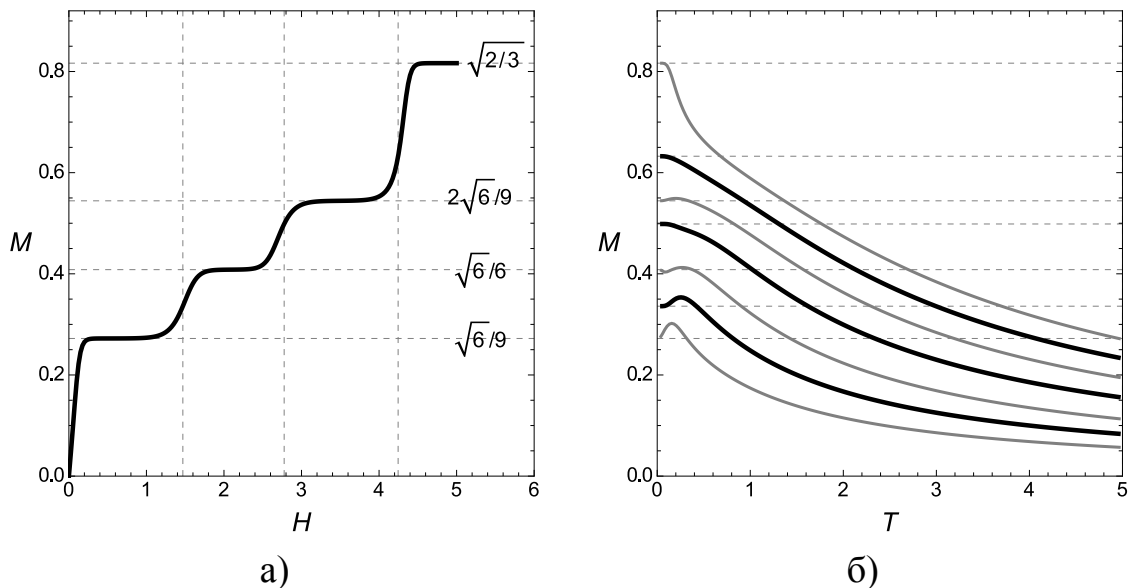


Рисунок 4.6 — Намагниченность при направлении поля вдоль  $[110]$  как функция поля при  $T = 0,031$  а) и температуры для семи значений поля (черные кривые отвечают фрустрационному полю, серые — значениям поля в промежутке между фрустрирующими) б)

фрустрирующих полей определяются формулами (4.6). Выражения для энтропии во фрустрирующих полях при  $T \rightarrow 0$  имеют вид:

$$\begin{aligned}
 S_{\text{fr.2}} &= \ln \left[ 1 + \frac{1}{\sqrt[3]{2}} \left( \sqrt[3]{47 + 3\sqrt{249}} + \sqrt[3]{47 - 3\sqrt{249}} \right) \right] - \ln 3 \approx 0,3025, \\
 S_{\text{fr.3}} &= \ln \left( \gamma + \sqrt{\frac{4}{\gamma} - \gamma^2} \right) - \ln 2 \approx 0,4018, \\
 \gamma &= \sqrt[6]{\frac{2}{9}} \sqrt{\sqrt[3]{9 + \sqrt{465}} + \sqrt[3]{9 - \sqrt{465}}}.
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

Значение энтропии в четвертом фрустрирующем поле  $H_4 = -4\sqrt{2}(J_1 + J_2)/\sqrt{3}$  при  $R > 1/2$  совпадает с таковым при  $R < 1/2$ , приведенном в формулах (4.7).

### 4.2.3 Направление поля вдоль [100]

Фазовая диаграмма для четырехвершинной модели Поттса в магнитном поле, направленном вдоль [100], изображена на рисунке 4.7.

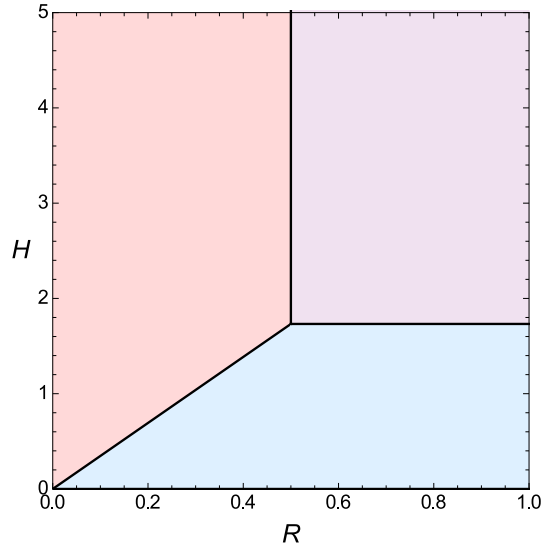


Рисунок 4.7 — Фазовая диаграмма для модели Поттса в магнитном поле, направленном вдоль [100]. Различные цвета обозначают различные конфигурации основного состояния (см. текст)

Различные цвета соответствует различным конфигурациям и энергиям, а линии, разделяющие различные области, соответствуют полям фрустраций при выбранном значений  $R$ :

1. Синяя область:  $\textcircled{1}\textcircled{3}\textcircled{2}\textcircled{1}\textcircled{4}\textcircled{2}$ . Энергия, приходящаяся на один спин, равна  $E = J_1/3 + J_2/3 - \sqrt{3}H/9$ . Энтропия при  $T \rightarrow 0$  равна  $S = 1/3 \ln 2$ ;
2. Красная область:  $\textcircled{1}\textcircled{2}\textcircled{1}\textcircled{2}$ ,  $E = J_1/3 - J_2 - \sqrt{3}H/3$ ,  $S = 0$ ;
3. Фиолетовая область:  $\textcircled{1}\textcircled{1}\textcircled{2}\textcircled{2}$ ,  $E = -J_1/3 + J_2/3 - \sqrt{3}H/3$ ,  $S = 0$ .

Из рисунка 4.7 видно, что в системе имеют место два фрустрирующих поля (поскольку состояние при  $H = 0$  фрустрировано, то первый скачок намагниченности происходит в поле  $H_{\text{fr},1} = 0$ ). Сравнивая энергии полученных конфигураций, можно выписать соотношение для второго фрустрационного поля:

$$H_{\text{fr},2} = \begin{cases} -2\sqrt{3}J_2, & \text{если } R \leq 0,5; \\ -\sqrt{3}J_1, & \text{если } R \geq 0,5. \end{cases} \quad (4.9)$$

«Слабые» вторые соседи ( $R < 1/2$ ). На рисунке 4.8 приведены кривые намагниченности для четырехвершинной модели Поттса с взаимодействием между ближайшими и вторыми соседями в магнитном поле, направленном вдоль [100] как функции поля и температуры. Из рисунка 4.8а видно, что намагниченность имеет лишь одно плато, расположенное на высоте  $\sqrt{3}/9$ , а намагниченность насыщения равна  $\sqrt{3}/3$ , что означает, что ферромагнитное состояние в данном случае тоже не может быть достигнуто. Поле, в котором намагниченность испытывает скачок, — фрустрационное поле, величина которого определяется соотношением (4.9). На температурной зависимости намагниченности 4.8б черные кривые отвечают намагниченности во фрустрационном поле, серые — намагниченностям на плато. Видно, что при низких температурах в магнитных полях, не равных фрустрационным, намагниченность стремится к значениям  $\sqrt{3}/9$  и  $\sqrt{3}/3$ , однако во фрустрационном поле она стремится к другому значению:

$$M_{\text{fr.2}} = \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{6}{\sqrt{3}\sqrt{87}} \frac{\sqrt[3]{28 - 3\sqrt{87}} - \sqrt[3]{28 + 3\sqrt{87}}}{1 + \sqrt[3]{28 - 3\sqrt{87}} + \sqrt[3]{28 + 3\sqrt{87}}} \approx 0,3171. \quad (4.10)$$

Энтропия в этом фрустрирующем поле при  $T = 0$  имеет вид:

$$S_{\text{fr.2}} = \ln \left( 1 + \sqrt[3]{28 - 3\sqrt{87}} + \sqrt[3]{28 + 3\sqrt{87}} \right) - \ln 3 \approx 0,528. \quad (4.11)$$

«Сильные» вторые соседи ( $R > 1/2$ ). В этом случае уравнения для намагниченности и энтропии во фрустрирующем поле при  $T \rightarrow 0$  имеют вид:

$$M_{\text{fr.2}} = \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{6}{\sqrt{3}\sqrt{78}} \frac{\sqrt[3]{27 - 3\sqrt{78}} - \sqrt[3]{27 + 3\sqrt{78}}}{\sqrt[3]{27 - 3\sqrt{78}} + \sqrt[3]{27 + 3\sqrt{78}}} \approx 0,322, \quad (4.12)$$

$$S_{\text{fr.2}} = \ln \left( \sqrt[3]{27 - 3\sqrt{78}} + \sqrt[3]{27 + 3\sqrt{78}} \right) - \ln 3 \approx 0,4196. \quad (4.13)$$

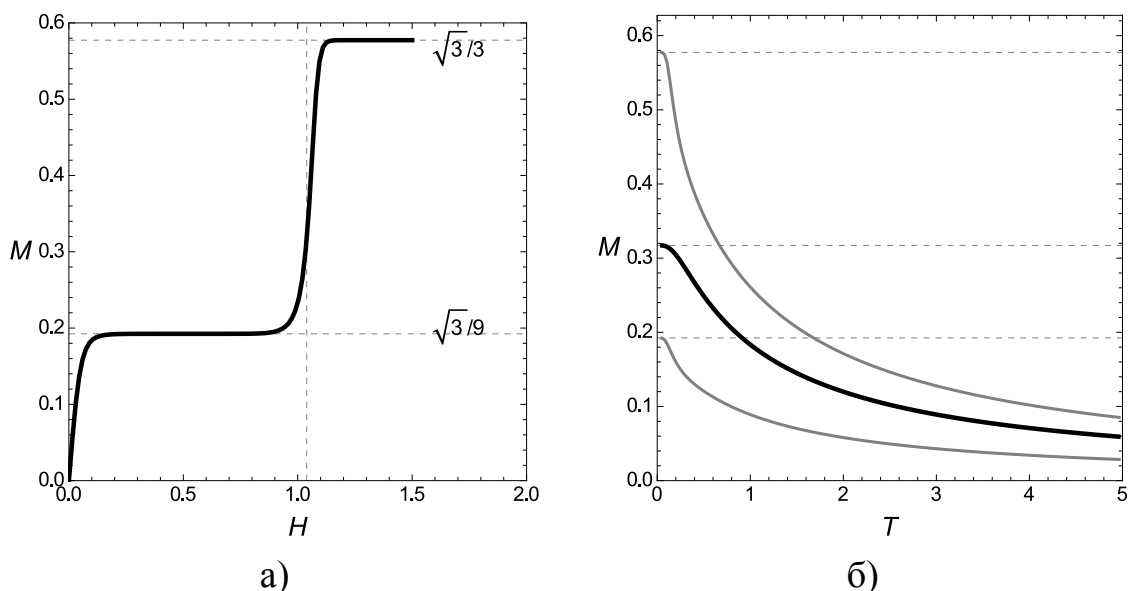


Рисунок 4.8 — Намагниченность при направлении поля вдоль  $[100]$  как функция поля при  $T = 0,015$  а) и температуры для трех значений поля (черная кривая отвечает фрустрационному полю, серые — значениям поля на плато и на насыщении) б)

### 4.3 Сравнение с экспериментальными данными

Как уже отмечалось, четырехвершинная модель может быть использована для описания магнитных и термодинамических свойств реальных магнетиков с 3-к структурой первого типа. Так, например, имеется качественное совпадение между теоретически рассчитанной намагниченностью, представленной на рисунке 4.4 и полученной экспериментально и изображенной на рисунке 4.9.

В обоих случаях имеется ряд скачков намагниченности с промежуточными плато. Существенная разница заключается в том, что экспериментальная намагниченность в области низких полей ведет себя антиферромагнитным образом, тогда как рассчитанная теоретически в области низких полей ведет себя ферромагнитно. Это объясняется тем, что одномерная четырехвершинная модель Поттса при учете взаимодействия только между ближайшими и вторыми соседями является фрустрированной в отсутствие магнитного и даже наличие небольшого поля изменяет структуру. В данном случае необходим учет взаимодействия и между третьими соседями.

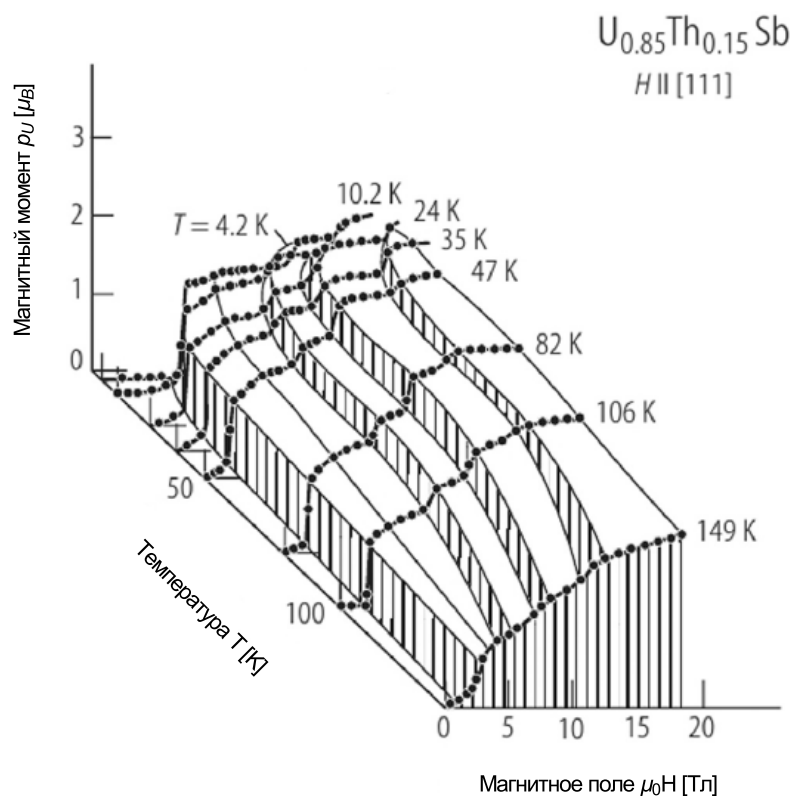


Рисунок 4.9 — Экспериментальная намагниченность  $UThSb$  [120]

#### 4.4 Выводы по главе

В настоящей главе подробно исследовано поведение намагниченности в системах, описываемых в рамках четырехвершинной модели Поттса на линейной цепочке спинов с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями в магнитном поле, направленном вдоль  $[111]$ ,  $[110]$  и  $[100]$ . Построены фазовые диаграммы  $H - R$  (магнитное поле – отношение взаимодействия между вторыми соседями к таковому между ближайшими). В рамках данной модели сделано следующее:

1. Показано, что в такой модели могут иметь место до четырех фрустрирующих полей, в которых намагниченность испытывает скачок, а энтропия при  $T \rightarrow 0$  стремится к ненулевым значениям.
2. Получены точные аналитические выражения для фрустрирующих полей для различных значений параметра  $R$  и направлений внешнего магнитного поля, а также величин намагниченности и энтропии в них при  $T \rightarrow 0$ .

3. Проведено качественное сравнение теоретически рассчитанных кривых намагничивания с таковыми, полученными экспериментально для UThSb. Показано, что между ними имеется соответствие по числу скачков намагниченности с промежуточными плато. Несоответствие в области низких полей объяснено необходимостью дополнительного учета взаимодействия между третьими соседями в четырехвершинной модели Поттса на одномерной цепочке.

Дальнейшая работа в этом направлении подразумевает исследование физических свойств магнетиков, описываемых в рамках четырехвершинной модели Поттса на ГЦК решетке, поскольку такая модель эквивалентна 3-**k** структуре типа I, о которой шла речь в главе 1. В дальнейшем автор предполагает заняться такой задачей.

Результаты, приведенные в этой главе, опубликованы в работе [A6].

## Глава 5. Двенадцативершинная модифицированная модель Поттса

Настоящая глава посвящена исследованию двенадцативершинной модели Поттса на цепочке спинов с учетом взаимодействия только между ближайшими соседями в магнитном поле. Соответствующая модель с обозначением направлений магнитных полей, определенных симметрией куба, приведена на рисунке 5.1. Осью легкого намагничивания здесь является ось  $[110]$ .

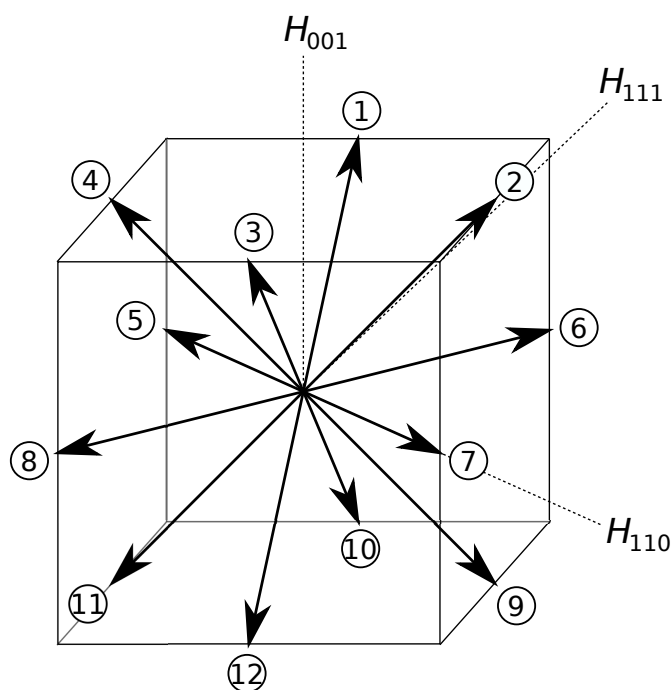


Рисунок 5.1 — Двенадцативершинная модель Поттса с обозначенными направлениями магнитного поля

### 5.1 Случай нулевого магнитного поля

Трансфер-матрица Крамерса–Ваннье двенадцативершинной модели Поттса в отсутствие магнитного поля имеет вид:



$$W = \begin{bmatrix} a^2 & a & a & 1 & a & a & 1/a & 1/a & 1 & 1/a & 1/a & 1/a^2 \\ a & a^2 & 1 & a & a & 1/a & a & 1/a & 1/a & 1 & 1/a^2 & 1/a \\ a & 1 & a^2 & a & 1/a & a & 1/a & a & 1/a & 1/a^2 & 1 & 1/a \\ 1 & a & a & a^2 & 1/a & 1/a & a & a & 1/a^2 & 1/a & 1/a & 1 \\ a & a & 1/a & 1/a & a^2 & 1 & 1 & 1/a^2 & a & a & 1/a & 1/a \\ a & 1/a & a & 1/a & 1 & a^2 & 1/a^2 & 1 & a & 1/a & a & 1/a \\ 1/a & a & 1/a & a & 1 & 1/a^2 & a^2 & 1 & 1/a & a & 1/a & a \\ 1/a & 1/a & a & a & 1/a^2 & 1 & 1 & a^2 & 1/a & 1/a & a & a \\ 1 & 1/a & 1/a & 1/a^2 & a & a & 1/a & 1/a & a^2 & a & a & 1 \\ 1/a & 1 & 1/a^2 & 1/a & a & 1/a & a & 1/a & a & a^2 & 1 & a \\ 1/a & 1/a^2 & 1 & 1/a & 1/a & a & 1/a & a & a & 1 & a^2 & a \\ 1/a^2 & 1/a & 1/a & 1 & 1/a & 1/a & a & a & 1 & a & a & a^2 \end{bmatrix}, \quad (5.1)$$

где  $a = \exp\left(\frac{J}{2T}\right)$ . Максимальное собственное значение этой матрицы, а также энтропия и удельная теплоемкость равны:

$$\lambda_{12} = e^{\frac{J}{T}} + 4e^{\frac{J}{2T}} + 2 + 4e^{\frac{-J}{2T}} + e^{\frac{-J}{T}}, \quad (5.2)$$

$$S_{12} = \ln(\lambda_{12}) - \frac{J \left( e^{\frac{J}{2T}} + 1 \right)^3 \left( e^{\frac{J}{2T}} - 1 \right)}{T \left( e^{\frac{2J}{T}} + 4e^{\frac{3J}{2T}} + 2e^{\frac{J}{T}} + 4e^{\frac{J}{2T}} + 1 \right)}, \quad (5.3)$$

$$C_{12} = \frac{J^2 e^{\frac{J}{2T}} \left( e^{\frac{2J}{T}} + 1 \right)^2 \left( e^{\frac{2J}{T}} + 10e^{\frac{J}{T}} + 1 \right)}{T^2 \left( e^{\frac{2J}{T}} + 4e^{\frac{3J}{2T}} + 2e^{\frac{J}{T}} + 4e^{\frac{J}{2T}} + 1 \right)^2}. \quad (5.4)$$

На рисунке 5.2 показана температурная зависимость удельной теплоемкости двенадцативершинной модели Поттса и модели Изинга. Из рисунка следует, что качественно температурное поведение удельной теплоемкости одинаково в обеих моделях, но в модели Поттса кривая более острая и сдвинута в сторону низких температур. Что касается энтропии, то в модели Поттса в пределе  $T \rightarrow \infty$  она равна  $\ln 12$ , тогда как в модели Изинга этот предел всегда равен  $\ln 2$ .



где  $h' = \exp\left(\frac{H}{\sqrt{2T}}\right)$ . Уравнение, содержащее максимальное собственное значение, — кубическое уравнение вида  $\lambda^3 + a'\lambda^2 + b'\lambda + c' = 0$  с коэффициентами:

$$\begin{aligned}
 a' &= 2 \left( e^{\frac{J}{T}} + 1 \right)^2 \cosh \frac{H}{\sqrt{2T}} - 4 \cosh^2 \frac{J}{2T}, \\
 b' &= 8 \left( e^{\frac{2J}{T}} + 3 \right) \left( e^{\frac{2J}{T}} - 1 \right) \cosh^2 \frac{J}{2T} \cosh \frac{H}{\sqrt{2T}} + \\
 &\quad + 64 \cosh^2 \frac{J}{4T} \left( \sinh \frac{3J}{4T} - \sinh \frac{J}{4T} \right), \\
 c' &= -16 \left( \cosh \frac{J}{2T} + 2 \right) \sinh^2 \frac{J}{T} \sinh \frac{J}{2T}.
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

Для поля [111]:

$$H_{111} = \begin{bmatrix} h''' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h''' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h''' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/h''' & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/h''' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/h''' \end{bmatrix}, \tag{5.7}$$

где  $h''' = \exp\left(\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{H}{T}\right)$ . Уравнение, содержащее максимальное собственное значение, — кубическое уравнение вида  $\lambda^3 + a'''\lambda^2 + b'''\lambda + c''' = 0$  с коэффициентами:

$$\begin{aligned}
a''' &= -2 \left( e^{\frac{J}{T}} + 2e^{\frac{J}{2T}} \right) \cosh \frac{\sqrt{2}H}{\sqrt{3}T} - 2 \cosh \frac{J}{T} - 4 \cosh \frac{J}{2T}, \\
b''' &= 2 \left( -1 + 4e^{\frac{3J}{2T}} + e^{\frac{2J}{T}} - 4 \cosh \frac{J}{2T} + 4 \sinh \frac{J}{T} \right) \cosh \frac{\sqrt{2}H}{\sqrt{3}T} + \\
&\quad + 2 \sinh \frac{2J}{T} + 8 \sinh \frac{3J}{2T} + 8 \sinh \frac{J}{T}, \\
c' &= -1024 \cosh^5 \frac{J}{T} \sinh^3 \frac{J}{4T} \cosh \frac{J}{2T} \left( \cosh \frac{J}{2T} + 2 \right).
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Наконец, для поля [110]:

$$H_{110} = \begin{bmatrix} h''^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h'' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h'' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h'' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h'' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/h'' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/h'' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/h'' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/h'' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/h''^2 \end{bmatrix}, \tag{5.9}$$

где  $h'' = \exp\left(\frac{H}{2T}\right)$ . Уравнение, содержащее максимальное собственное значение, — уравнение пятой степени вида  $\lambda^5 + a''\lambda^4 + b''\lambda^3 + c''\lambda^2 + d''\lambda + e'' = 0$  с коэффициентами:

$$\begin{aligned}
a'' &= -2 \cosh \frac{J}{T} - 2e^{\frac{J}{T}} \cosh \frac{H}{T} - 2 \left( e^{\frac{J}{T}} + e^{\frac{J}{2T}} + 1 + e^{\frac{-J}{2T}} \right) \cosh \frac{H}{2T}, \\
b'' &= 16 \sinh^4 \frac{J}{T} \cosh \frac{H}{T} \cosh \frac{H}{2T} - 4 \cosh \frac{H}{T} - \\
&\quad - 16 \cosh \frac{H}{2T} \left( 1 + \cosh \frac{H}{T} \right) \cosh^2 \frac{J}{2T} - \\
&\quad - 16 \sinh \frac{H}{T} \sinh \frac{H}{2T} \sinh \frac{J}{T} + \\
&\quad + 16 \cosh \frac{J}{2T} \cosh^2 \frac{J}{4T} \left[ \left( e^{\frac{J}{T}} \cosh \frac{H}{T} + \cosh \frac{J}{T} \right) \cosh \frac{H}{2T} + \sinh \frac{J}{T} \right] + \\
&\quad + 4 \cosh \frac{J}{T} \left( 1 + \cosh \frac{H}{2T} \right) \left( 1 + \cosh \frac{H}{T} \right) \sinh \frac{J}{T} + 4 \cosh \frac{H}{T} \cosh^2 \frac{J}{T}, \\
c'' &= 128 \sinh \frac{H}{T} \sinh \frac{H}{2T} \cosh \frac{J}{2T} \sinh^3 \frac{J}{2T} + 32 \sinh \frac{J}{T} \left( 1 + \cosh \frac{H}{T} \right) \cosh^2 \frac{J}{2T} - \\
&\quad - 32 \cosh \frac{H}{2T} \left( 1 + \cosh \frac{H}{T} \right) \left( \cosh \frac{J}{T} \sinh^4 \frac{J}{2T} - \cosh^2 \frac{J}{2T} - \sinh \frac{J}{T} \right) - \\
&\quad - 8 \left( \sinh^3 \frac{J}{T} - 16 \cosh^2 \frac{J}{2T} \sinh^2 \frac{J}{2T} \right) \cosh \frac{H}{2T} \cosh \frac{H}{T} - \\
&\quad - 64 \cosh^2 \frac{2J}{T} \left( 1 + \sinh \frac{H}{2T} \right) \left( 1 + \cosh \frac{H}{T} \right) - 8 \sinh^3 \frac{J}{T} + \\
&\quad + 32 \left( 4 \sinh^4 \frac{J}{T} + \cosh \frac{H}{2T} \sinh^2 \frac{J}{T} \right) \cosh \frac{H}{T} \cosh^2 \frac{J}{4T} \cosh \frac{J}{T},
\end{aligned} \tag{5.10}$$

$$\begin{aligned}
d'' &= 64 \sinh^4 \frac{J}{2T} \left[ 4 \cosh \frac{J}{2T} \left( 1 + \cosh \frac{H}{T} \right) \times \right. \\
&\quad \times \left( \cosh \frac{J}{2T} \cosh^2 \frac{J}{4T} - \cosh \frac{J}{2T} \right) + \sinh^2 \frac{J}{T} \cosh \frac{H}{2T} \left. \right] + \\
&\quad + 64 \cosh \frac{J}{2T} \left( \cosh \frac{H}{T} + \cosh \frac{H}{2T} \sinh \frac{J}{T} \right) \times \\
&\quad \times \left( \cosh^2 \frac{J}{4T} \sinh^2 \frac{J}{T} - 4 \cosh \frac{J}{2T} \sinh^2 \frac{J}{2T} \right), \\
e'' &= 512 \cosh \frac{J}{2T} \sinh^4 \frac{J}{2T} \left( 4 \sinh^2 \frac{J}{2T} \cosh \frac{J}{2T} - \sinh^2 \frac{J}{T} \cosh^2 \frac{J}{4T} \right).
\end{aligned}$$

Поскольку уравнения выше 4 степени в общем случае не имеют решения в радикалах, то все результаты, приведенные для направления поля [110], были получены численными способами.

### 5.2.1 Ферромагнитное взаимодействие

Теперь, по представленным выше формулам, можно рассчитать намагниченность, теплоемкость, энтропию и другие величины для произвольных параметров  $T$ ,  $H$ ,  $J$ . На рисунке 5.3а приведены кривые намагниченности в двенадцативершинной ферромагнитной модели Поттса для трех главных направлений магнитного поля при температуре  $T = 0,4$ . Это гладкие кривые, которые, на первый взгляд, согласуются с проекционной гипотезой, когда соотношение между намагниченностями составляет  $M_{110} : M_{111} : M_{001} = 1 : \sqrt{2/3} : \sqrt{1/2}$ . Однако, это соотношение верно только при больших полях, а при уменьшении магнитного поля оно нарушается, так что намагниченности сливаются в одну линию.

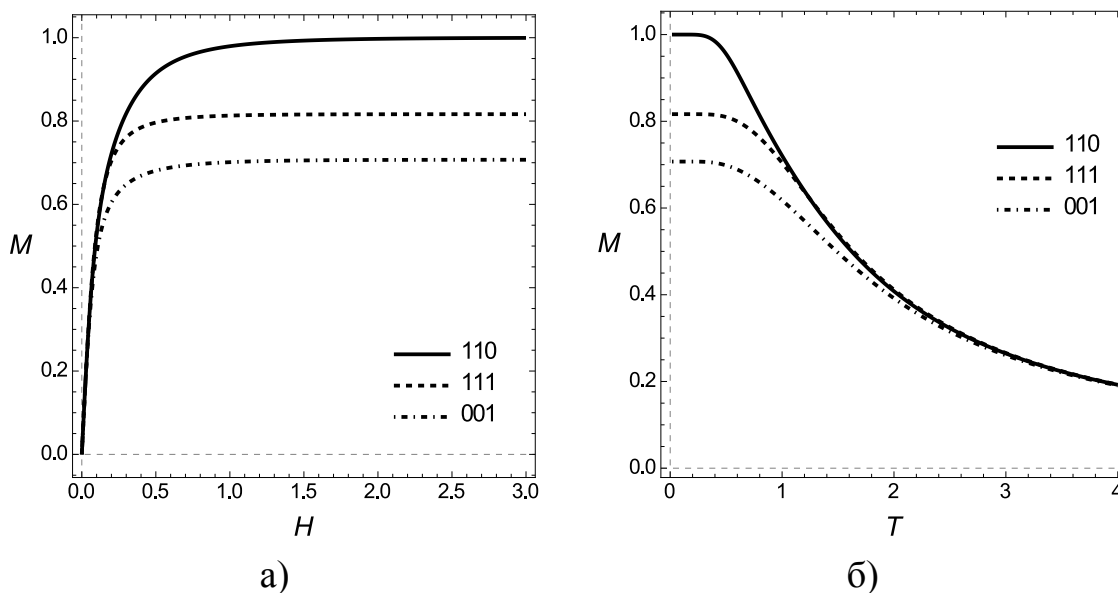


Рисунок 5.3 — Намагниченность двенадцативершинной ферромагнитной модели Поттса как функция внешнего поля при  $T = 0,4$  а) и как функция температуры при  $H = 2$  б) для трех направлений поля

На рисунке 5.3б приведены зависимости намагниченности от температуры в поле  $H = 2$ . И снова проекционная гипотеза верна только при самых низких температурах. При высоких температурах намагниченности сливаются в одну линию.

Феномен расщепления теплоемкости наблюдается и в двенадцативершинной модели Поттса под действием внешнего магнитного поля, несмотря на то, что рассматривается одномерная модель. На рисунке 5.4 продемонстрирован этот эффект, где представлены температурные зависимости теплоемкости в поле  $H = 2$

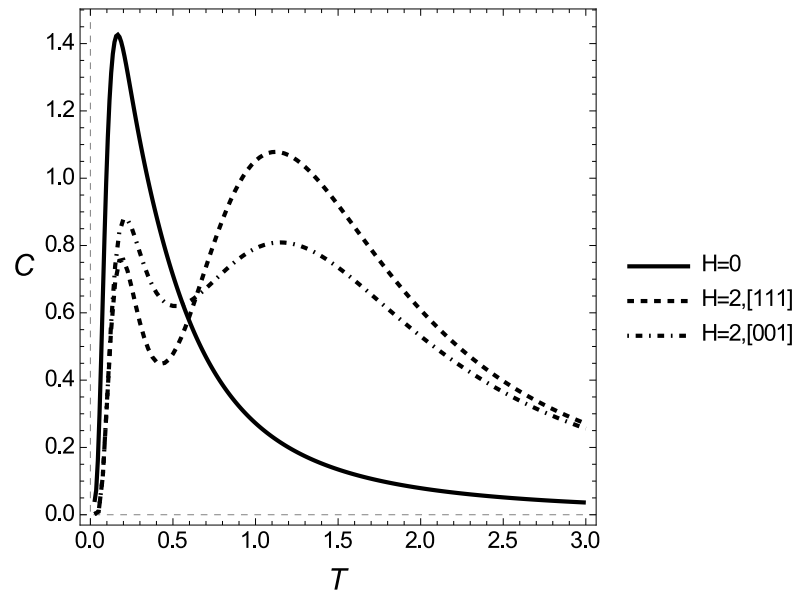


Рисунок 5.4 — Теплоемкость двенадцативершинной ферромагнитной модели Поттса для двух направлений магнитного поля  $H = 2$ , и при его отсутствии

для направлений  $[001]$  и  $[111]$ , а также, для сравнения, в отсутствие поля. В ферромагнитной модели в полях  $[111]$  и  $[001]$  имеются два ярко выраженных максимума, тогда как в отсутствие поля, а также в поле вдоль  $[110]$  максимум только один.

## 5.2.2 Антиферромагнитное взаимодействие

Поведение антиферромагнитной ( $J = -1$ ) двенадцативершинной модели Поттса гораздо более интересно, нежели ферромагнитной.

На рисунке 5.5 представлены кривые намагниченности этой модели для трех направлений поля при различных температурах: низких  $T = 0,016$ , промежуточных  $T = 0,01$ , и высоких  $T = 1$ .

Анализируя поведение намагниченности, приведенное на рисунке 5.5, можно сказать, что в рассматриваемой модели тоже имеются поля фрустраций, в которых намагниченность испытывает скачок. Если поле ориентировано вдоль  $[001]$ , то имеется только одно фрустрирующее поле  $H_{\text{fr.}001} = \sqrt{2}$  с  $M = 0$  на  $M = 1/\sqrt{2}$ . В направлении  $[111]$  имеют место два критических поля: первое  $H_{\text{fr.}111}^1 = \sqrt{3/2}$ , в котором намагниченность меняется с  $M = 0$  на  $M = 1/\sqrt{6}$ , и второе  $H_{\text{fr.}111}^2 = \sqrt{6}$ , со скачком намагниченности из  $M = 1/\sqrt{6}$  до  $M = \sqrt{2/3}$ . Наконец, в направ-

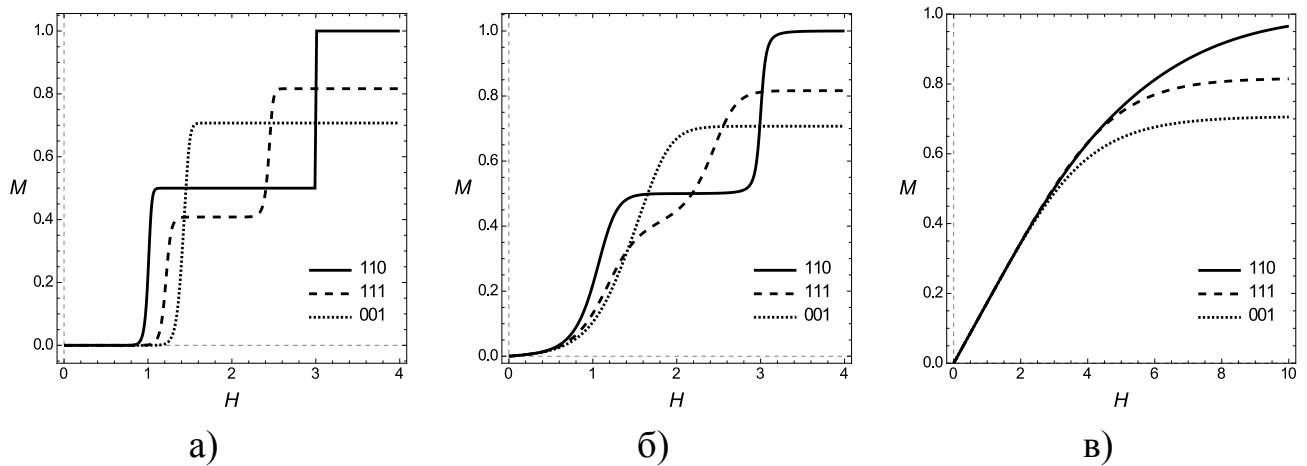


Рисунок 5.5 — Кривые намагничивания двенадцативершинной антиферромагнитной модели Поттса для трех направлений магнитного поля  $[111]$ ,  $[110]$  и  $[001]$  при  $T = 0,016$  а),  $T = 0,1$  б) и  $T = 1$  в)

лении поля  $[110]$  имеют место два фрустрирующих поля: первое  $H_{\text{fr.110}}^1 = 1$ , в котором намагниченность меняется с  $M = 0$  на  $M = 1/2$ , второе  $H_{\text{fr.110}}^2 = 3$  со скачком намагниченности из  $M = 1/2$  до  $M = 1$ . Интересно проследить за изменением намагниченности с ростом температуры при увеличении поля от нуля до больших значений в различных направлениях. На рисунке 5.6 продемонстрировано подобное поведение намагниченности в поле  $[110]$ , величина которого меняется последовательно от нуля до четырех и соответствующие кривые приведены в восходящем порядке.

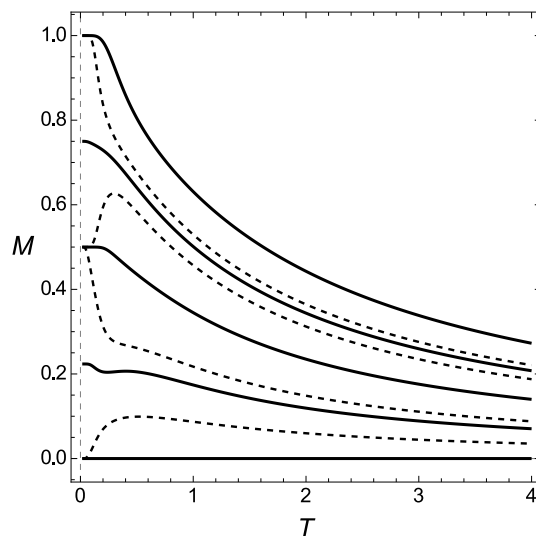


Рисунок 5.6 — Намагниченность двенадцативершинной антиферромагнитной модели Поттса как функция температуры в полях  $H = (0, 0,5, 1, 1,25, 2, 2,7, 3, 3,2, 4)$



На рисунке 5.6 сплошными линиями показаны кривые намагниченности в полях  $H = (0, 1, 2, 3, 4)$  в восходящем порядке, в которых намагниченность при  $T \rightarrow 0$  принимает значения  $0, 1/2\sqrt{5}, 1/2, 3/4, 1$  соответственно.

Пунктирными линиями на рисунке 5.6 представлены кривые намагниченности в промежуточных полях. Видно, что в них при  $T \rightarrow 0$  намагниченность испытывает либо «подъем», либо «завал» к одному из пяти значений намагниченности, приведенных выше.

Поведение теплоемкости в антиферромагнитной двенадцативершинной модели Поттса тоже интересно. В критических полях теплоемкость имеет лишь один максимум, спадающий с ростом температуры, но при приближении к этим полям слева или справа теплоемкость имеет два ярко выраженных максимума. Этот процесс имеет место для всех рассмотренных направлений магнитного поля и частично представлен на рисунке 5.7, где приведена полевая зависимость теплоемкости в поле, направленном вдоль  $[111]$ , при температуре  $T = 0,04$ . Видно, что в критических полях теплоемкость имеет глубокий минимум, слева и справа от которого имеются два ярко выраженных максимума. В случае направления поля вдоль  $[001]$ , этот процесс связан только с одним критическим полем.

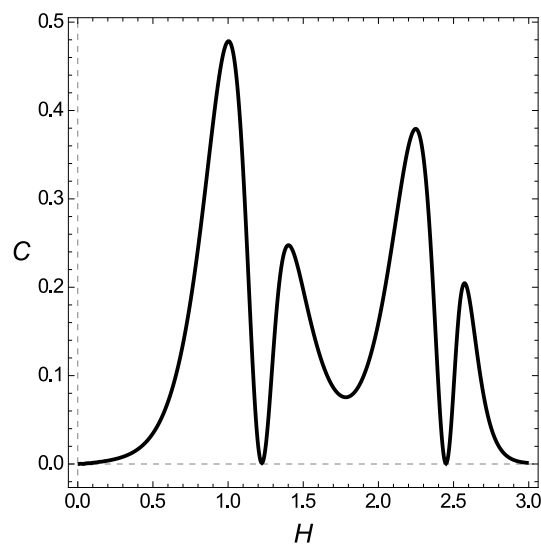


Рисунок 5.7 — Теплоемкость двенадцативершинной антиферромагнитной модели Поттса как функция внешнего магнитного поля при  $T = 0,04$

На рисунке 5.8 представлено поведение магнитокалорического эффекта в одномерной антиферромагнитной двенадцативершинной модели Поттса в поле  $[111]$ . Видно, что имеются особенности, связанные с критическими полями, а именно — происходит резкая смена знака МКЭ. То же самое наблюдается и при

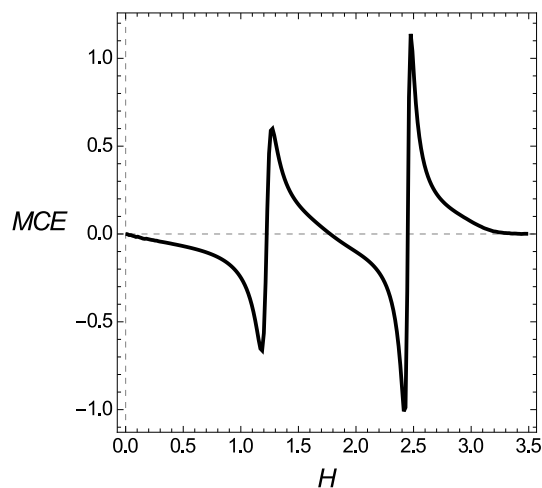


Рисунок 5.8 — Магнитокалорический эффект двенадцативершинной антиферромагнитной модели Поттса как функция внешнего магнитного поля при  $T = 0,06$

направлении поля вдоль  $[110]$ . Направление  $[001]$  отличается от представленного на рисунке 5.8 лишь наличием одного критического поля.

Более подробно поведение магнитокалорического эффекта в моделях Изинга и Поттса будет рассмотрено в главе 6.

### 5.3 Фрустрации и энтропия в двенадцативершинной модифицированной модели

Очевидно, что в отсутствие магнитного поля при  $T = 0$  в рассматриваемой модели имеется двенадцать возможных направлений спина, что порождает наличие двенадцати конфигураций с одинаковой энергией. Одномерная цепочка выстраивается таким образом, что угол между соседними спинами равен  $\pi$ , что фактически соответствует двенадцати моделям Изинга. Энтропия такого состояния равна нулю.

При включении магнитного поля вдоль  $[001]$ , как видно, в частности, из рисунка 5.5, намагниченность испытывает скачок в поле  $H = \sqrt{2}$ . Выше этого поля из двенадцати возможных направлений спина релевантными остаются только четыре (рисунок 5.9б). Все это порождает на цепочке четыре возможные конфигурации, когда угол между соседними спинами равен  $\pi/2$ . Энтропия такого состояния также равна нулю. В самом же фрустрационном поле имеется бесконечное число

различных конфигураций с одинаковой энергией. Как следствие — нет упорядочения и энтропия при  $T \rightarrow 0$  стремится к ненулевому значению:

$$S_{\text{fr.001}} = \ln \left[ \frac{2}{3} \left( 1 + 4 \cos \left( \frac{1}{3} \arccos \left( \frac{61}{128} \right) \right) \right) \right] \approx 1,1519. \quad (5.11)$$

В поле [111] ситуация развивается следующим образом: из двенадцати возможных направлений спина в отсутствие поля (рисунок 5.9е) при переходе через первое фрустрационное поле релевантными остаются только девять из них (рисунок 5.9ж), причем на цепочке это порождает порядка  $2^{N/2}$  конфигураций. Энтропия такого промежуточного состояния есть  $1/2 \ln 2$ . При переходе через второе фрустрирующее поле релевантными остаются лишь три направления спина (рисунок 5.9з), образующих своего рода «зонтик». Можно показать, что вариантов такого упорядочения  $2^{N-1}$  и энтропия здесь равна  $\ln 2$ . Что касается самих фрустрирующих полей, то ситуация здесь аналогична направлению [001], т. е. имеется бесконечное число различных конфигураций, обладающих одинаковой энергией, а при  $T \rightarrow 0$  энтропия стремится к ненулевым значениями:

$$S_{\text{fr.111}}^1 = \ln \left[ \frac{1}{3} \left( 1 + 2\sqrt{10} \cos \left( \frac{1}{3} \operatorname{arcsec} \left( 10\sqrt{10} \right) \right) \right) \right] \approx 0,7748, \quad (5.12)$$

$$S_{\text{fr.111}}^2 = \ln \left( 1 + \sqrt{3} \right) \approx 1,005. \quad (5.13)$$

Результат расчета энтропии в поле вдоль [111] для различных значений последнего приведен на рисунке 5.10.

Направление поля вдоль оси легкого намагничивания [110] имеет свои особенности. Из двенадцати возможных направлений спина в отсутствие поля (рисунок 5.9в) при переходе через первое фрустрационное поле релевантными остаются лишь пять из них (рисунок 5.9г). Энтропия здесь равна нулю. При переходе через второе фрустрационное поле остается лишь одна ферромагнитная конфигурация, когда все спины выстроены вдоль поля (рисунок 5.9д). В первом фрустрирующем поле энтропия при  $T \rightarrow 0$  равна натуральному логарифму золотого сечения:

$$S_{\text{fr.110}} = \ln \left( \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \right) \approx 0,4812. \quad (5.14)$$

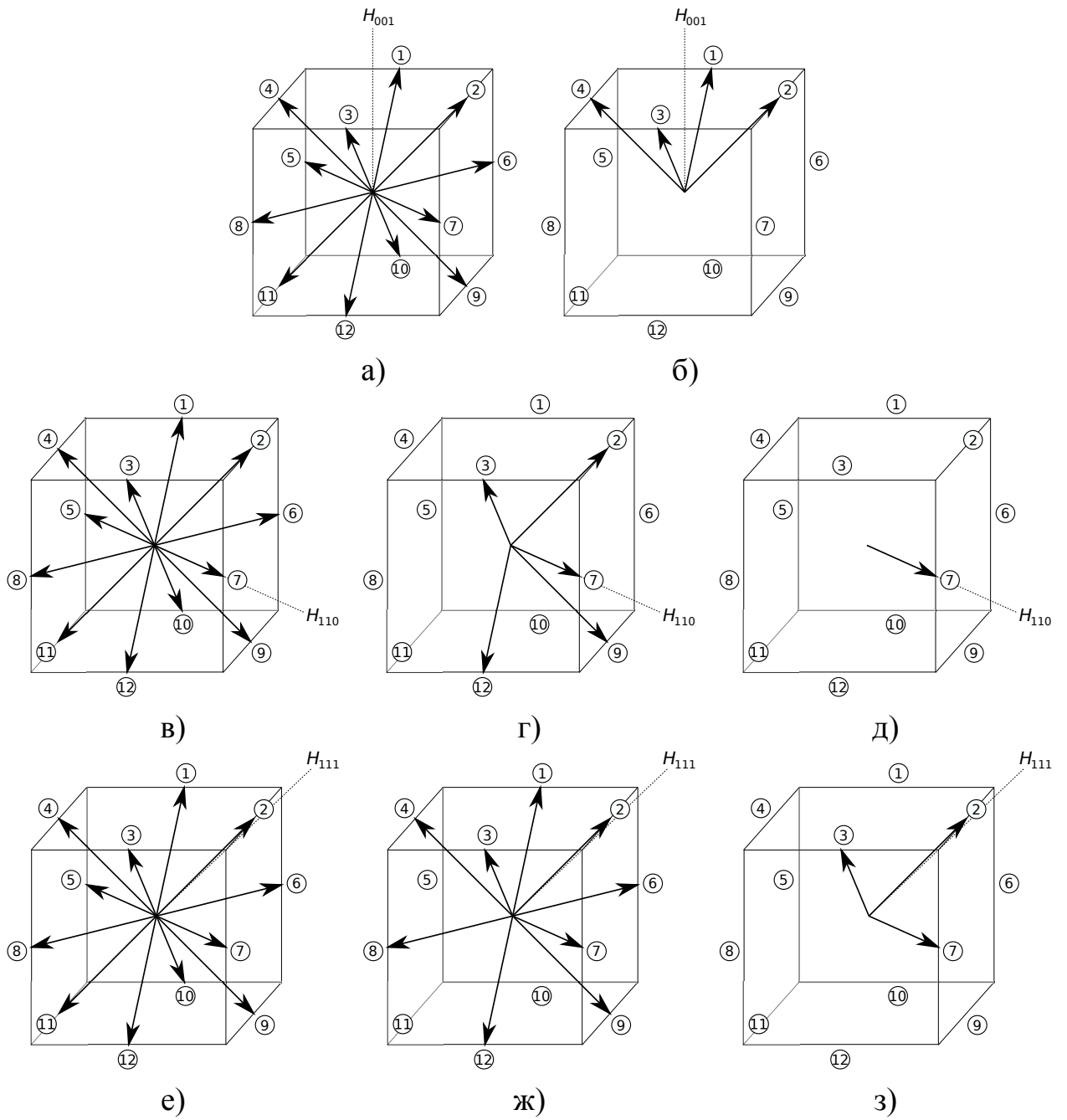


Рисунок 5.9 — Структуры, возникающие при увеличении магнитного поля в двенадцативершинной модели Поттса: (а, б) — вдоль  $[001]$ , (в–д) — вдоль  $[110]$ , (е–з) — вдоль  $[111]$

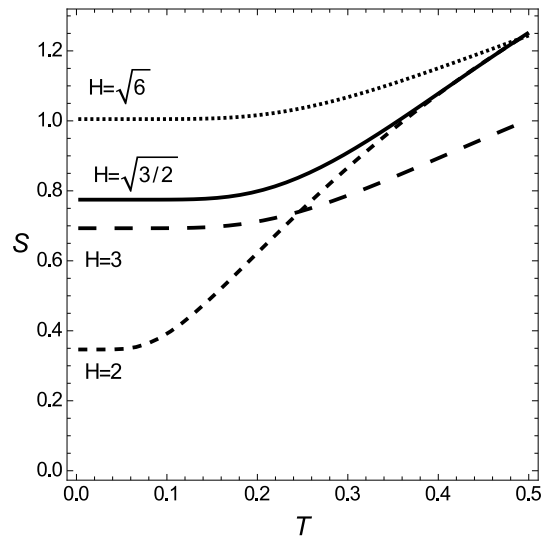


Рисунок 5.10 — Энтропия двенадцативершинной антиферромагнитной модели Поттса как функция температуры для четырех значений поля  $H = (\sqrt{3/2}, 2, \sqrt{6}, 3)$ , ориентированного вдоль [111]

Во втором фрустрирующем поле энтропия равна нулю, так как имеется лишь небольшое число различных конфигураций, любая комбинация которых приводит к невыгодному росту энергии.

#### 5.4 Сравнение с экспериментальными данными

Как уже отмечалось, перекрещивающиеся кривые намагниченности характерны для монопниктидов и монохалькогенидов лантаноидов и актиноидов. Так на рисунках 5.11 и 5.12 представлены экспериментальные кривые намагниченности соединений UP [121; 122], NpAs [5] и UAs [123]. Общей особенностью являются сильная зависимость намагниченности от направления магнитного поля и наличие оси легкого намагничивания [110]. Качественно поведение намагниченности в рассмотренной одномерной двенадцативершинной модели Поттса в магнитном поле согласуется с этими экспериментальными данными:

- намагниченность насыщения существенно зависит от направления поля;
- осью легкого намагничивания является направление [110];
- получено численное соотношение для асимптот  $M_{110} : M_{111} : M_{001} = 1 : \sqrt{2/3} : \sqrt{1/2}$ .

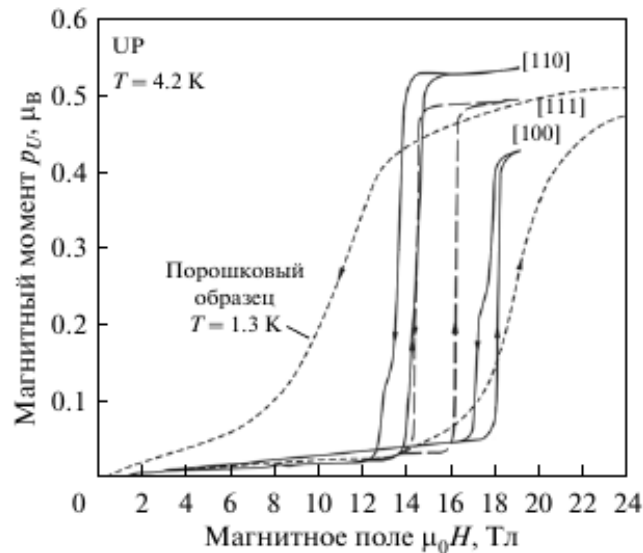


Рисунок 5.11 — Намагниченность монокристалла UP [121]. Штриховая кривая — намагниченность поликристалла UP [122]

Однако количественно между наблюдаемыми и рассчитанными кривыми намагничивания имеется заметное расхождение. Его причины кроются в отсутствии достаточно крупных монокристаллов, необходимых для проведения соответствующего эксперимента, и неизбежном явлении магнитного гистерезиса. Это то, что относится к эксперименту. С точки зрения теории, в настоящее время также имеется ряд трудностей расчетного характера: отсутствие точных выражений для статсуммы и корреляционной функции, необходимых для построения соответствующей теории. В дальнейшем мы предполагаем вернуться к этой проблеме.

Тем не менее, на основании даже качественного согласия между теоретически рассчитанной и полученной экспериментально кривыми намагничивания мы можем сказать, что только в слоистой двенадцативершинной модели Поттса могут быть адекватно описаны магнитные свойства таких соединений, как UP, NpAs (по крайней мере при  $T = 125$  K), UAs, DyS, а также других монониктидов и монохалькогенидов с осями легкой намагниченности, направленными вдоль диагоналей граней куба. Магнитная структура при низких температурах может быть рассмотрена как набор ферромагнитных плоскостей, перпендикулярных осям [110], где спины стохастически принимают двенадцать направлений модифицированной двенадцативершинной модели Поттса.

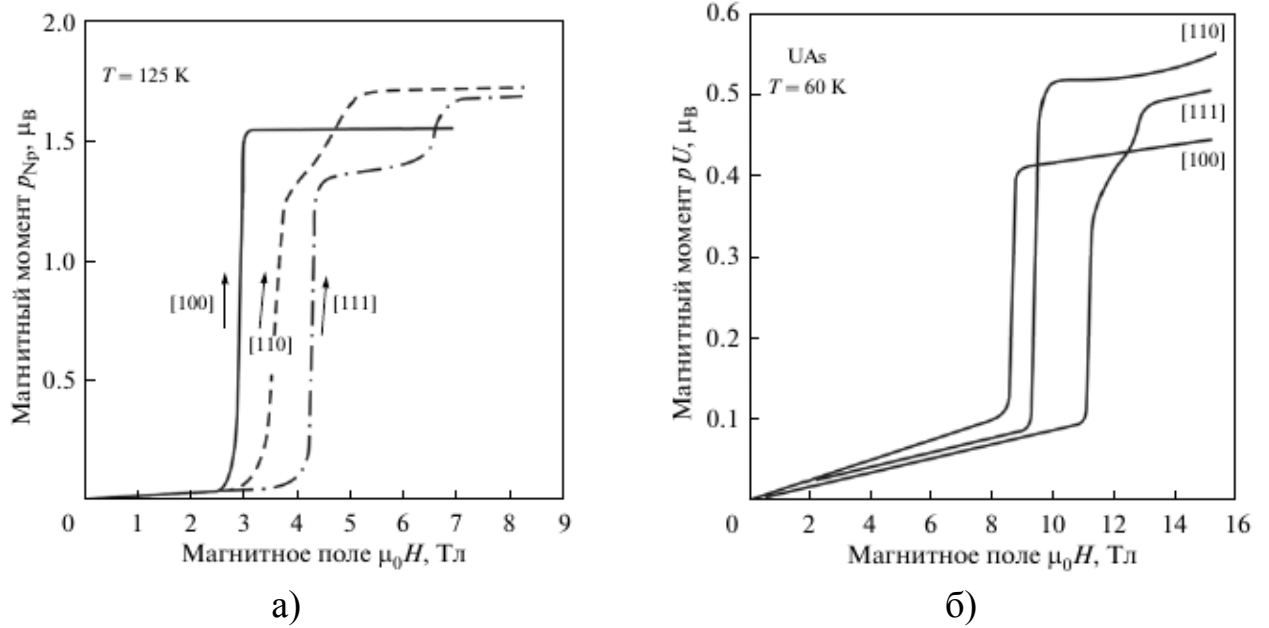


Рисунок 5.12 — Кривые намагничивания NpAs при  $T = 125$  К [5] а) b UAs при  $T = 60$  К [123] б)

## 5.5 Выводы по главе

В настоящей главе приведены результаты исследования намагниченности и энтропии в рамках одномерной модифицированной двенадцативершинной модели Поттса во внешнем магнитном поле.

1. Определены магнитные структуры, возникающие в данной модели при увеличении магнитного поля.
2. Получены точные аналитические выражения для намагниченности, магнитной теплоемкости и энтропии в полях фрустраций, изучены их температурные и полевые зависимости. Показано, что в точках фрустрации намагниченность испытывает скачок, а энтропия стремится к ненулевым значениям при стремлении температуры к нулю.
3. Показано, что полученные результаты представляют собой не только теоретический интерес: они могут быть применены для описания магнитных свойств реальных трехмерных кристаллов, таких как UP, NpAs, UAs и DyS. Объяснены сходства и различия между теоретически рассчитанными кривыми намагничивания и таковыми, полученными из экспериментальных данных.

Материалы данной главы опубликованы в работе [A5].

## Глава 6. Магнитокалорический эффект в магнитных системах, описываемых в рамках моделей Изинга и Поттса

### 6.1 Общее поведение магнитокалорического эффекта в одномерных магнетиках

Как уже отмечалось в главе 1, магнитокалорический эффект (МКЭ) — это изменение температуры магнетика при его адиабатическом намагничивании или размагничивании. Изменение температуры определяется по формуле:

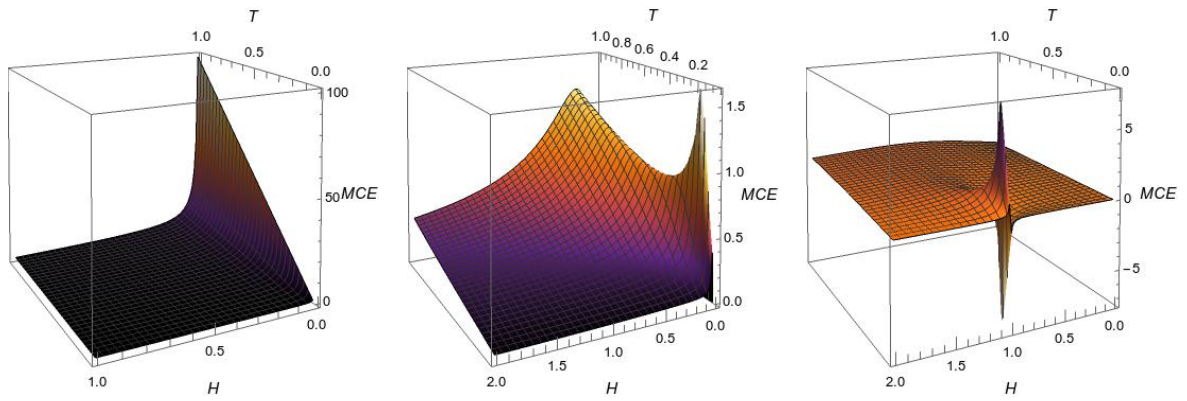
$$\partial T = -\frac{T}{C} \left( \frac{\partial S}{\partial H} \right)_T \partial H = -\frac{T}{C} \left( \frac{\partial M}{\partial T} \right)_H \partial H, \quad (6.1)$$

где  $T$  — температура,  $S$  — энтропия,  $C$  — теплоемкость,  $M$  — намагниченность,  $H$  — напряженность внешнего магнитного поля. Поскольку намагниченность, в отличие от энтропии, может быть непосредственно получена из эксперимента, то определение магнитокалорического эффекта именно через производную от намагниченности по температуре является общепринятым (см., например, [124]). В данной работе под МКЭ понимается отношение  $MCE = \partial T / \partial H$ .

Актуальность изучения состоит в следующем: во-первых, комплексное исследование магнитокалорического эффекта позволяет получить дополнительные сведения о природе магнитно-упорядоченного состояния, а также взаимосвязи магнитных и тепловых характеристик, во-вторых, дает возможность получения информации о магнитных фазовых переходах в магнетиках, поскольку наибольших значений величина эффекта достигает в области критических явлений.

В данной главе рассматривается МКЭ в одномерных магнетиках, описываемых в рамках моделей Изинга и Поттса (в качестве величины  $C$  в выражении (6.1) берется магнитная часть теплоемкости). Такой выбор обусловлен тем, что одномерные модели позволяют получить точные выражения для магнитокалорического эффекта. На рисунке 6.1 приведены зависимости магнитокалорического эффекта от внешнего поля и температуры в одномерной модели Изинга со спином  $1/2$  в случае пара-, ферро- и антиферромагнетика.





а) парамагнетик

б) ферромагнетик

в) антиферромагнетик

Рисунок 6.1 — Магнитокалорический эффект в одномерной модели Изинга  $s = 1/2$  в случаях: парамагнетика  $J = 0$  а), ферромагнетика  $J > 0$  б) и антиферромагнетика  $J < 0$  в)

**Парамагнитная система  $J = 0$ .** Выражение для свободной энергии модели Изинга со спином  $s = 1/2$  в этом случае имеет вид

$$F_p = -T \ln \left( 2 \cosh \frac{H}{2T} \right). \quad (6.2)$$

Отсюда легко получить ряд полезных соотношений для теплоемкости, энтропии и производной от энтропии по полю:

$$C_p = \frac{H^2}{4T^2} \operatorname{sech}^2 \left( \frac{H}{2T} \right), \quad (6.3)$$

$$S_p = \ln \left( 2 \cosh \left( \frac{H}{2T} \right) \right) - \frac{H}{2T} \tanh \left( \frac{H}{2T} \right), \quad (6.4)$$

$$\frac{\partial S_p}{\partial H} = -\frac{H}{4T^2} \operatorname{sech}^2 \left( \frac{H}{2T} \right). \quad (6.5)$$

Из (6.1) с учетом (6.3–6.5) следует, что магнитокалорический эффект в этом случае определяется просто соотношением  $T/H$ . Эта зависимость изображена на рисунке 6.1а.

В случае, когда взаимодействие между спинами отсутствует, то есть  $J = 0$ , статсумма, теплоемкость, энтропия, намагниченность и другие термодинамические параметры являются функциями отношения  $H/T$ , то очевидно, что магнитокалорический эффект в такой системе всегда будет пропорционален  $T/H$ .

Другими словами, если  $S = S(H/T)$  и  $C = C(H/T)$ , то:

$$\frac{\partial S}{\partial H} = \frac{\partial S}{\partial \frac{H}{T}} \frac{\partial \frac{H}{T}}{\partial H} = \frac{\partial S}{\partial \frac{H}{T}} \left( \frac{1}{T} \right), \quad (6.6)$$

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = T \frac{\partial S}{\partial \frac{H}{T}} \frac{\partial \frac{H}{T}}{\partial T} = T \frac{\partial S}{\partial \frac{H}{T}} \left( -\frac{H}{T^2} \right). \quad (6.7)$$

Подставляя выражения (6.6) и (6.7) в формулу (6.1), получим:

$$\left( \frac{\partial T}{\partial H} \right)_S = \frac{T}{H}. \quad (6.8)$$

Таким образом, магнитокалорический эффект парамагнетика из локализованных магнитных моментов для любой размерности и в любой модели равен  $T/H$ .

**Ферромагнитная система  $J > 0$ .** В модели Изинга со спином  $1/2$  магнитокалорический эффект можно описать в виде отношения  $\partial T/\partial H = a/b$ , где  $a$  и  $b$  имеют вид

$$\begin{aligned} a &= 4T e^{-\frac{J}{T}} \sinh^2 \left( \frac{J}{2T} \right) \left( J \sinh \left( \frac{H}{2T} \right) + H \cosh \left( \frac{H}{2T} \right) \right), \\ b &= 4e^{-\frac{J}{T}} \sinh^2 \left( \frac{J}{2T} \right) \left( H^2 \cosh \left( \frac{H}{2T} \right) + 2HJ \sinh \left( \frac{H}{2T} \right) \right) - \\ &\quad - 2J^2 \left( \sinh^2 \left( \frac{H}{2T} \right) + e^{-\frac{J}{T}} \right)^{3/2} + \\ &\quad + J^2 \cosh \left( \frac{H}{2T} \right) \left( 2 \sinh^2 \left( \frac{H}{2T} \right) + e^{-\frac{2J}{T}} + e^{-\frac{J}{T}} \right). \end{aligned} \quad (6.9)$$

Зависимость магнитокалорического эффекта от поля и температуры в этом случае приведена на рисунке 6.16. Видно, что при  $J > 0$  МКЭ всегда положителен и достигает максимальных значений в точке  $H \rightarrow 0, T \rightarrow 0$ . Это объясняется тем, что МКЭ всегда имеет максимум в точке фазового перехода, а в одномерных моделях фазовый переход имеет место при нулевой температуре.

**Антиферромагнитная система  $J < 0$ .** Зависимость магнитокалорического эффекта от поля и температуры для одномерной антиферромагнитной модели Изинга со спином  $1/2$  приведена на рисунке 6.1в. В такой модели имеется фрустрационное поле  $H_{\text{fr}} = 1$ , в котором МКЭ меняет знак. Слева от этого поля он отрицателен, а справа — положителен. В самом же критическом поле магнитока-

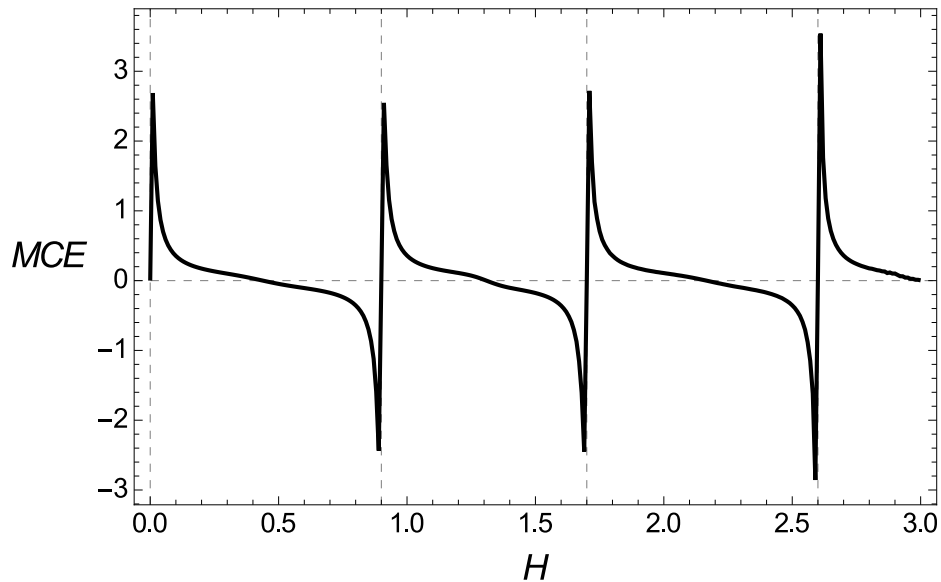


Рисунок 6.2 — Полевая зависимость магнитокалорического эффекта в четырехвершинной антиферромагнитной модели Поттса  $R = J_2/J_1 = 1/3$  при  $T = 0,036$

лорический эффект при низких температурах может достигать огромных значений. Тем не менее, при  $T \rightarrow 0$  МКЭ стремится к нулю в соответствии с третьим началом термодинамики. Для систем, в которых имеют место несколько полей фрустраций, магнитокалорический эффект имеет особенность в каждой из них. Так на рисунке 6.2 приведена зависимость МКЭ от поля для четырехвершинной антиферромагнитной модели Поттса с конкурирующими взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями, в которой имеют место четыре критических поля.

Еще одной отличительной особенностью магнитокалорического эффекта в антиферромагнетиках является наличие целой области параметров  $H$  и  $T$ , в которых этот эффект отрицателен. На рисунке 6.3а отдельно отмечена плоскость  $MCE = 0$  и на рисунке 6.3б приведена кривая, разграничивающая области отрицательных и положительных значений магнитокалорического эффекта.

## 6.2 Выводы по главе

В настоящей главе приведены результаты исследования магнитокалорического эффекта (под каковым всюду в тексте подразумевается отношение  $\partial T/\partial H$ )

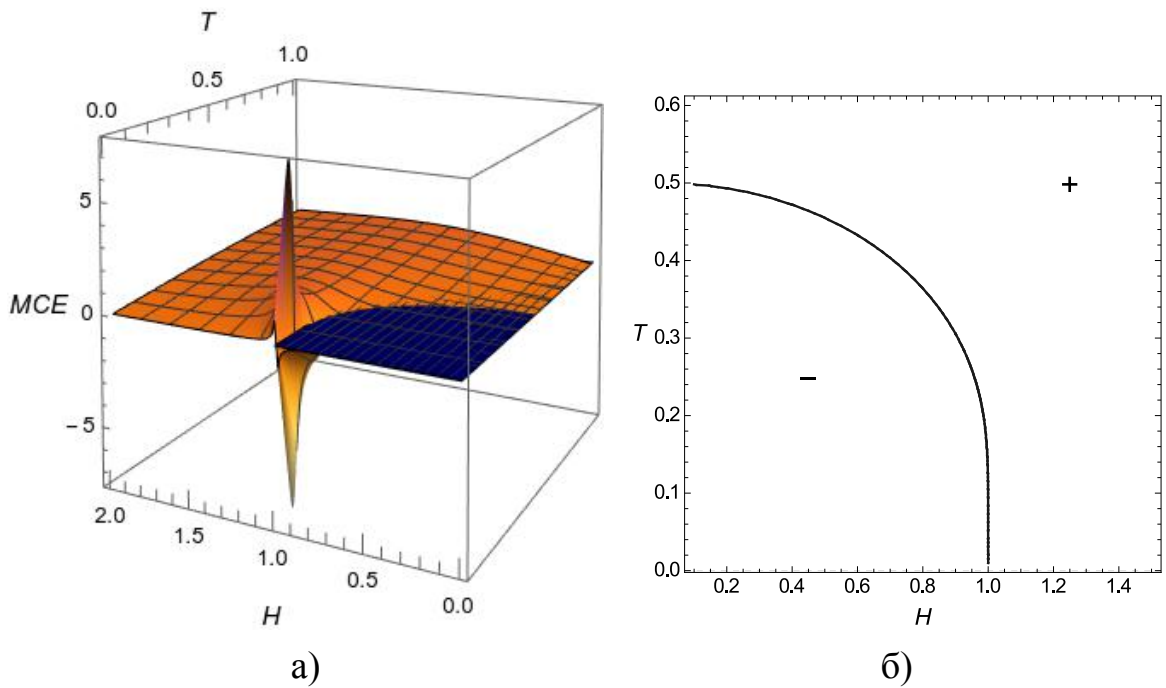


Рисунок 6.3 — Магнитокалорический эффект в одномерной модели Изинга  $s = 1/2$  в антиферромагнетике. Синяя плоскость обозначает  $MCE = 0$  а), кривая, разделяющая области положительных и отрицательных значений МКЭ б)

в рамках одномерных моделей Изинга и Поттса. На основании полученных результатов сделаны следующие выводы:

1. В парамагнетике ( $J = 0$ ) с локализованными магнитными моментами магнитокалорический эффект для любой модели любой размерности всегда равен  $T/H$ .
2. В ферромагнетике магнитокалорический эффект всегда положителен и достигает максимального значения при  $H \rightarrow 0$ ,  $T \rightarrow 0$ , поскольку в одномерных моделях фазовый переход происходит при нулевой температуре.
3. В антиферромагнетиках, благодаря наличию фрустраций, магнитокалорический эффект имеет особенность в каждой из критических точек, при этом слева от нее он отрицателен, справа — положителен.

Фрустрированные магнетики, благодаря наличию в них критических эффектов, могут быть использованы для создания магнитных холодильников, а самым эффективным методом для достижения низких температур в них будет являться циклическое переключение магнитного поля вблизи точек фрустрации.

Материалы, изложенные в этой главе, опубликованы в статьях [A1; A7].

## Глава 7. Намагниченность поликристаллов магнетиков, описываемых в рамках моделей Поттса

Как уже отмечалось в главе 1, отличительной особенностью рассматриваемого класса магнитных материалов является тот факт, что значения магнитного момента, определенные методом асимптотической намагниченности на поликристаллах и полученные из магнитных нейтронографических экспериментов, не совпадают: первые всегда оказываются меньшими. Можно предположить, что в поликристаллах пниктидов и халькогенидов лантаноидов и актиноидов состояние, в котором все спины ориентированы вдоль внешнего магнитного поля, не достигается. В этой главе предпринята попытка определить, насколько значение магнитного момента, определенное из нейтронографических экспериментов, может отличаться от найденного экспериментально по методу асимптотической намагниченности.

Рассмотрим одномерные трех-, четырех-, шести- и восьмивершинные поликристаллические модели Поттса. Трансфер-матрица в таком случае будет включать в себя в качестве параметров полярный и азимутальный углы  $\theta$  и  $\phi$ , а намагниченность рассчитываться по формуле

$$M(H, T) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi M(H, T, \phi, \theta) \sin \theta d\theta d\phi, \quad (7.1)$$

где  $M(H, T, \phi, \theta)$  — намагниченность отдельного кристаллита, ориентированного произвольно относительно поля  $H$ .

### 7.1 Трехвершинная модель Поттса

В рамках трехвершинной модели Поттса задача о пространственном распределении намагниченности может быть решена точно. Трансфер-матрица в этом случае имеет вид

$$W_3 = \begin{bmatrix} e^{\frac{J}{T} + \frac{H}{T} \sin \theta \cos \phi} & e^{\frac{-J}{2T} + \frac{H}{T} \sin \theta \cos \phi} & e^{\frac{-J}{2T} + \frac{H}{T} \sin \theta \cos \phi} \\ e^{\frac{-J}{2T} - \frac{H \sin \theta}{2T} (\cos \phi + \sqrt{3} \sin \phi)} & e^{\frac{J}{T} - \frac{H \sin \theta}{2T} (\cos \phi + \sqrt{3} \sin \phi)} & e^{\frac{-J}{2T} - \frac{H \sin \theta}{2T} (\cos \phi + \sqrt{3} \sin \phi)} \\ e^{\frac{-J}{2T} - \frac{H \sin \theta}{2T} (\cos \phi - \sqrt{3} \sin \phi)} & e^{\frac{-J}{2T} - \frac{H \sin \theta}{2T} (\cos \phi - \sqrt{3} \sin \phi)} & e^{\frac{J}{T} - \frac{H \sin \theta}{2T} (\cos \phi - \sqrt{3} \sin \phi)} \end{bmatrix}. \quad (7.2)$$

Её максимальное собственное значение определяется выражением

$$\lambda_3(\phi, \theta) = \sqrt[3]{\sqrt{\left(\frac{b}{3} - \frac{a^2}{9}\right)^3 + \left(\frac{c}{2} - \frac{ab}{6} + \frac{a^3}{27}\right)^2} - \frac{c}{2} + \frac{ab}{6} - \frac{a^3}{27} + \sqrt[3]{-\sqrt{\left(\frac{b}{3} - \frac{a^2}{9}\right)^3 + \left(\frac{c}{2} - \frac{ab}{6} + \frac{a^3}{27}\right)^2} - \frac{c}{2} + \frac{ab}{6} - \frac{a^3}{27}}, \quad (7.3)$$

где

$$\begin{aligned} a &= -e^{J/T} \left( e^{\frac{H}{T} \sin \theta \cos \phi} + 2 \cosh \left( \sqrt{3} \sin(\theta) \sin(\phi) \right) e^{-\frac{H}{2T} \sin(\theta) \cos(\phi)} \right), \\ b &= \left( e^{\frac{2J}{T}} - e^{-\frac{J}{T}} \right) \left( e^{-\frac{H}{T} \sin(\theta) \cos(\phi)} + 2 \cosh \left( \sqrt{3} \sin(\theta) \sin(\phi) \right) e^{\frac{H}{2T} \sin(\theta) \cos(\phi)} \right), \\ c &= -2e^{-\frac{3J}{2T}} - e^{\frac{3J}{T}} + 3. \end{aligned} \quad (7.4)$$

На рисунках 7.1 и 7.2 представлены теоретически рассчитанные зависимости намагниченности от поля и температуры в случае поликристаллических ферро- и антиферромагнетиков. Эти кривые имеют много общего:

- 1) поведение намагниченности при повышении температуры описывается линейной зависимостью от напряженности внешнего магнитного поля;
- 2) в больших полях кривые намагничивания поликристалла ферро- и антиферромагнетика выходят на насыщение, величина которого была рассчитана аналитически и равна  $3\sqrt{3}/8$ ;
- 3) в постоянном поле с ростом температуры намагниченность убывает.

При этом, если вид кривой 7.2 типичен для ферромагнетика, то для антиферромагнетика 7.1 имеются некоторые особенности. Из рисунка 7.1a видно, что в области низких полей и температур имеется плато на высоте  $3\sqrt{3}/16$ , что составляет половину величины намагниченности насыщения. Наличие этого плато может быть объяснено тем фактом, что в трехвершинной модели Поттса при учете взаимодействия только между ближайшими соседями основное состояние

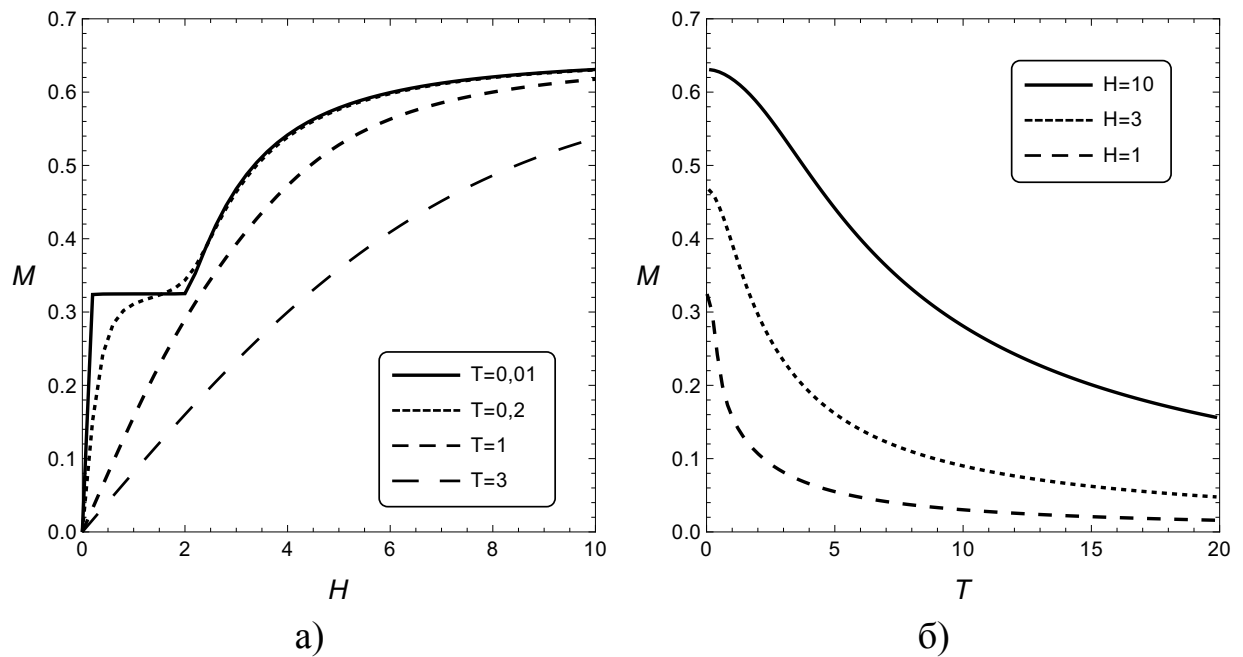


Рисунок 7.1 — Намагниченность трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса: а) как функция поля  $0 \leq H \leq 10$  для четырех значений температур; б) как функция температуры  $0,02 \leq T \leq 20$  для трех значений поля

фрустрировано, и уже при небольшом воздействии магнитного поля на систему основное состояние изменяется.

На рисунке 7.3 приведено пространственное распределение намагниченности, полученное в трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса. Из рисунка видно, что в этой модели намагниченность сильно зависит от направления магнитного поля, тогда как в классическом магнетике пространственное распределение имеет шарообразную форму.

Таким образом, можно сделать следующий вывод: при определении величины магнитного момента методом асимптотической намагниченности на поликристаллах для систем, которые могут быть описаны одномерной трехвершинной моделью Поттса, полученное значение магнитного момента отличается от такового, полученного из нейтронографических экспериментов, в  $3\sqrt{3}/8$  раз.

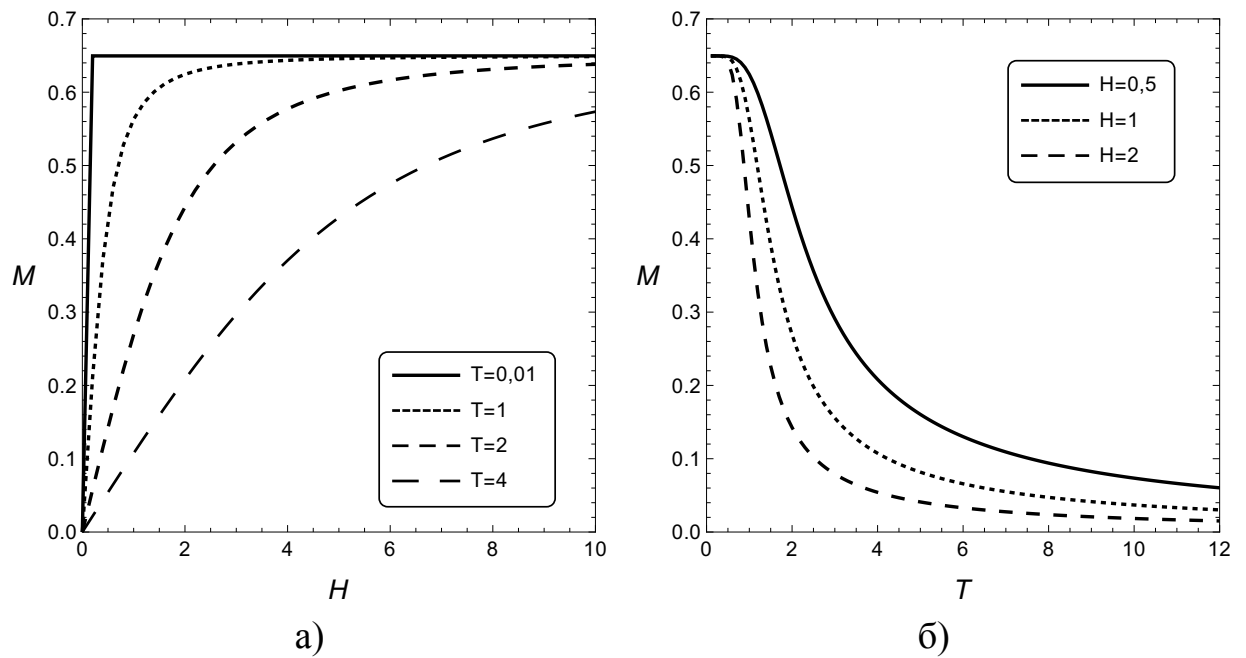


Рисунок 7.2 — Намагниченность трехвершинной ферромагнитной модели Поттса: а) как функция поля  $0 \leq H \leq 10$  для четырех значений температур; б) как функция температуры  $0,1 \leq T \leq 12$  для трех значений поля

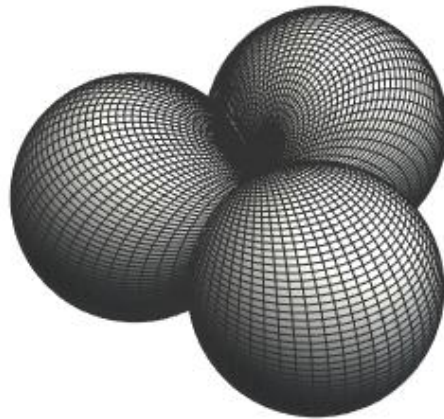


Рисунок 7.3 — Пространственное распределение намагниченности в трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса,  $J = -1$ ,  $H = 60$ ,  $T = 0,01$



## 7.2 Четырехвершинная стандартная модель Поттса

В настоящем разделе приведены результаты расчета кривой намагничивания в рамках четырехвершинной модели Поттса. Эта задача может быть решена точно: трансфер-матрица имеет вид

$$W_4 = \begin{bmatrix} \frac{B}{A^3 D} & \frac{AB}{D} & \frac{AB}{D} & \frac{AB}{D} \\ \frac{A}{BD} & \frac{1}{A^3 BD} & \frac{A}{BD} & \frac{A}{BD} \\ \frac{AD}{C} & \frac{AD}{C} & \frac{D}{A^3 C} & \frac{AD}{C} \\ ACD & ACD & ACD & \frac{CD}{A^3} \end{bmatrix}, \quad (7.5)$$

где

$$\begin{aligned} A &= \exp\left(\frac{-J}{3T}\right), & B &= \exp\left(-\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{H}{T} \sin \theta \sin \phi\right), \\ C &= \exp\left(-\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{H}{T} \sin \theta \cos \phi\right), & D &= \exp\left(-\frac{H}{\sqrt{3}T} \cos \theta\right). \end{aligned}$$

Максимальное собственное значение трансфер-матрицы определяется из уравнения четвертой степени вида  $x^4 + ax^3 + bx^2 + cx + d = 0$  с коэффициентами

$$\begin{aligned} a &= -2e^{J/T} \left[ e^{-\frac{H}{\sqrt{3}T} \cos \theta} \cosh\left(\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{H}{T} \sin \theta \sin \phi\right) + \right. \\ &\quad \left. + e^{\frac{H}{\sqrt{3}T} \cos \theta} \cosh\left(\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{H}{T} \sin \theta \cos \phi\right) \right], \\ b &= 2 \left( e^{\frac{2J}{T}} - e^{\frac{-2J}{3T}} \right) \left[ \cosh\left(\frac{2H}{\sqrt{3}T} \cosh \theta\right) + \right. \\ &\quad \left. + \cosh\left(\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{H}{T} \sin \theta (\cos \phi + \sin \phi)\right) + \right. \\ &\quad \left. + \cosh\left(\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{H}{T} \sin \theta (\cos \phi - \sin \phi)\right) \right], \quad (7.6) \end{aligned}$$

$$c = 2 \left( 3e^{\frac{J}{3T}} - e^{\frac{3J}{T}} - 2e^{-\frac{J}{T}} \right) \left( e^{\frac{H}{\sqrt{3}T} \cos \theta} \cosh \left( \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{H}{T} \sin \theta \sin \phi \right) + e^{-\frac{H}{\sqrt{3}T} \cos \theta} \cosh \left( \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{H}{T} \sin \theta \cos \phi \right) \right),$$

$$d = -3e^{-\frac{4J}{3T}} - 6e^{\frac{4J}{3T}} + e^{\frac{4J}{T}} + 8.$$

Четырехвершинная модель Поттса в случае взаимодействия между ближайшими соседями в магнитном поле на одномерной цепочке спинов исследовалась ранее [55]. В ней получен ряд точных выражений для статсуммы, намагниченности и восприимчивости для различных направлений магнитного поля, определенных симметрией куба. Показано, что намагниченности насыщения соотносятся между собой как  $1 : \sqrt{2/3} : 1/\sqrt{3} : 1/3$  для направлений поля  $[111] : [110] : [100] : [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$  соответственно. Для направлений поля  $[111]$  и  $[110]$  намагниченность имеет промежуточное плато на высоте  $1/3$  и  $1/\sqrt{6}$  соответственно. Результаты для намагниченности как функции магнитного поля, полученные в работе [55], приведены на рисунке 4.1. Рисунки 7.4 и 7.5 демонстрируют поведение намагниченности в четырехвершинной стандартной модели Поттса в случае ферро- и антиферромагнитного поликристалла.

Фактически, поведение намагниченности в рамках четырехвершинной модели в случаях ферро- и антиферромагнетика схоже с таковым для случая трехвершинной модели. Отличием здесь является величина насыщения, равная  $\frac{4\sqrt{3}}{3\pi}$ . Наличие при низких температурах плато намагниченности также может быть объяснено тем, что основное состояние четырехвершинной модели при учете взаимодействия только между ближайшими соседями является фрустрированным.

Пространственное распределение намагниченности представлено на рисунке 7.6.

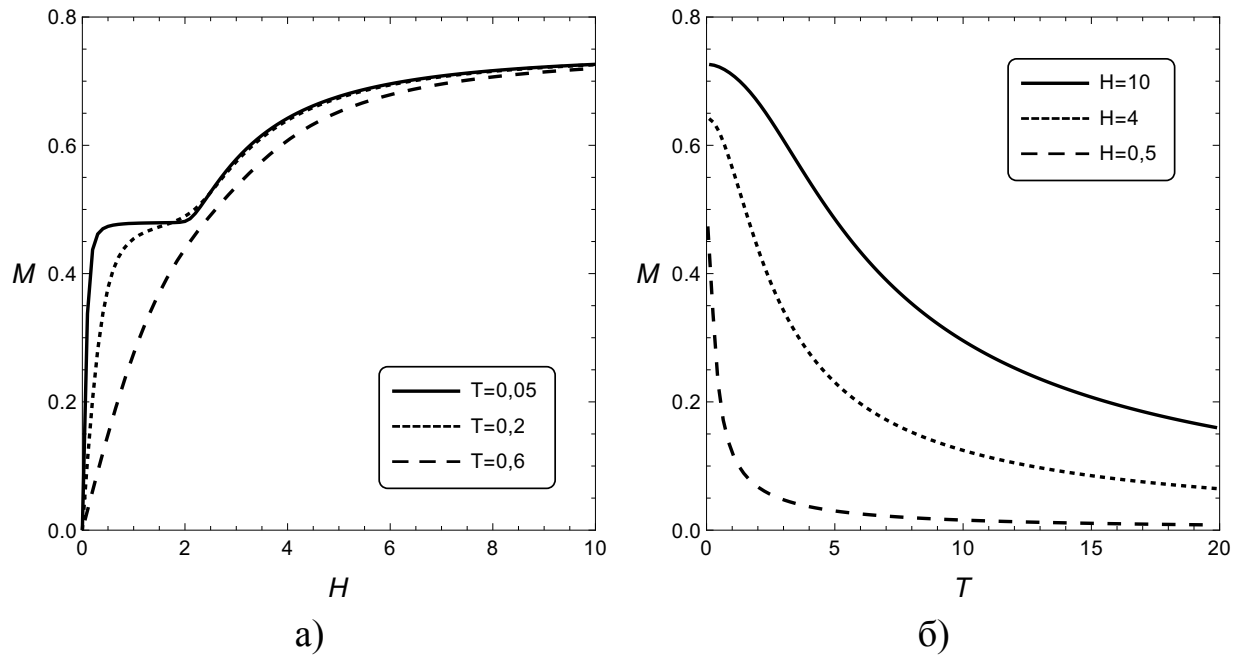


Рисунок 7.4 — Намагниченность четырехвершинной антиферромагнитной модели Поттса: а) как функция поля  $0 \leq H \leq 10$  для трех значений температур; б) как функция температуры  $0,01 \leq T \leq 20$  для трех значений поля

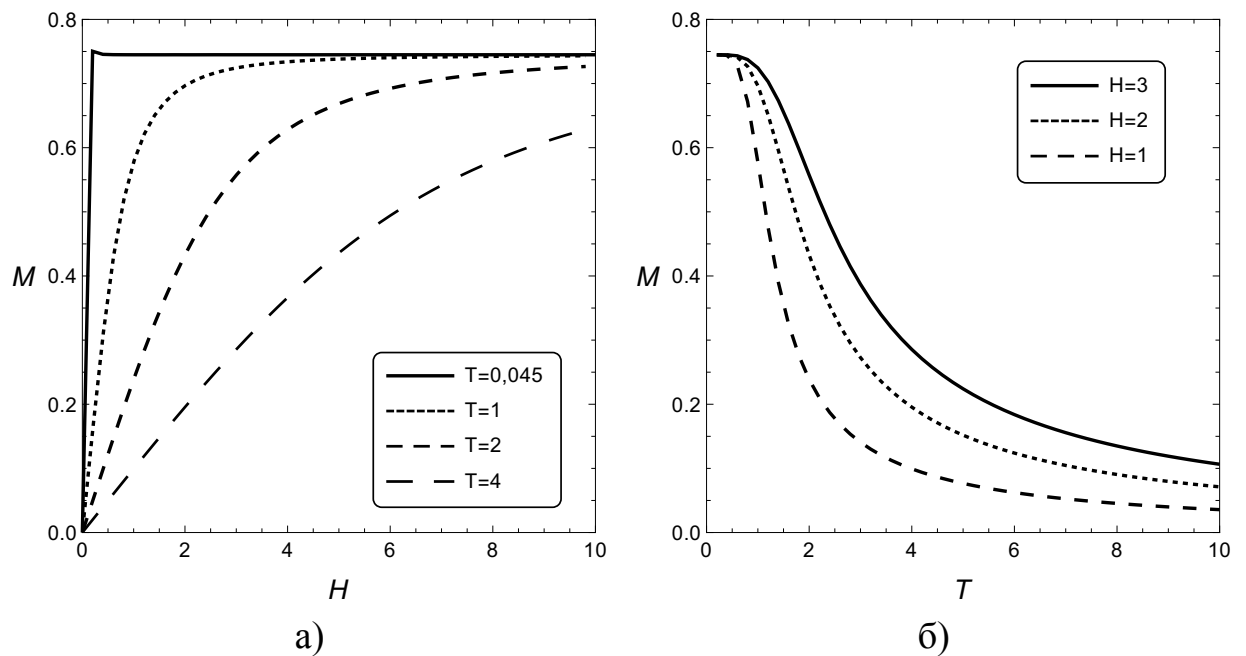


Рисунок 7.5 — Намагниченность четырехвершинной ферромагнитной модели Поттса: а) как функция поля  $0 \leq H \leq 10$  для четырех значений температур; б) как функция температуры  $0,2 \leq T \leq 10$  для трех значений поля

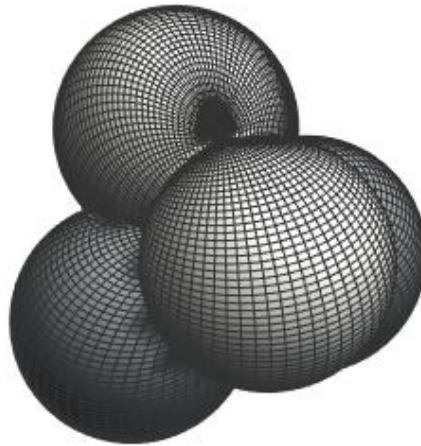


Рисунок 7.6 — Пространственное распределение намагниченности в четырехвершинной антиферромагнитной модели Поттса,

$$J = -1, H = 60, T = 0,01$$

### 7.3 Шестивершинная модифицированная модель Поттса

Задача о пространственном распределении намагниченности в рамках шестивершинной модифицированной модели Поттса, в отличие от предыдущих случаев, не может быть решена точно. Аналитическое решение может быть получено для монокристалла и только при определенных направлениях поля. В работе [45] показано, что асимптоты кривой намагничивания в этой модели соотносятся между собой как  $1 : 1/\sqrt{2} : 1\sqrt{3}$  для направлений поля  $[100]$ ,  $[110]$  и  $[111]$  соответственно.

На рисунках 7.7 и 7.8 приведены кривые намагничивания шестивершинной модели Поттса для поликристалла в случаях ферро- и антиферромагнетика. Основное отличие от рассмотренных ранее моделей Поттса — отсутствие промежуточного плато. Намагниченность насыщения определяется выражением

$$M_{\text{as.8}} = \frac{3\sqrt{2}}{\pi} \arctan \frac{1}{\sqrt{2}} \simeq 0,8311.$$

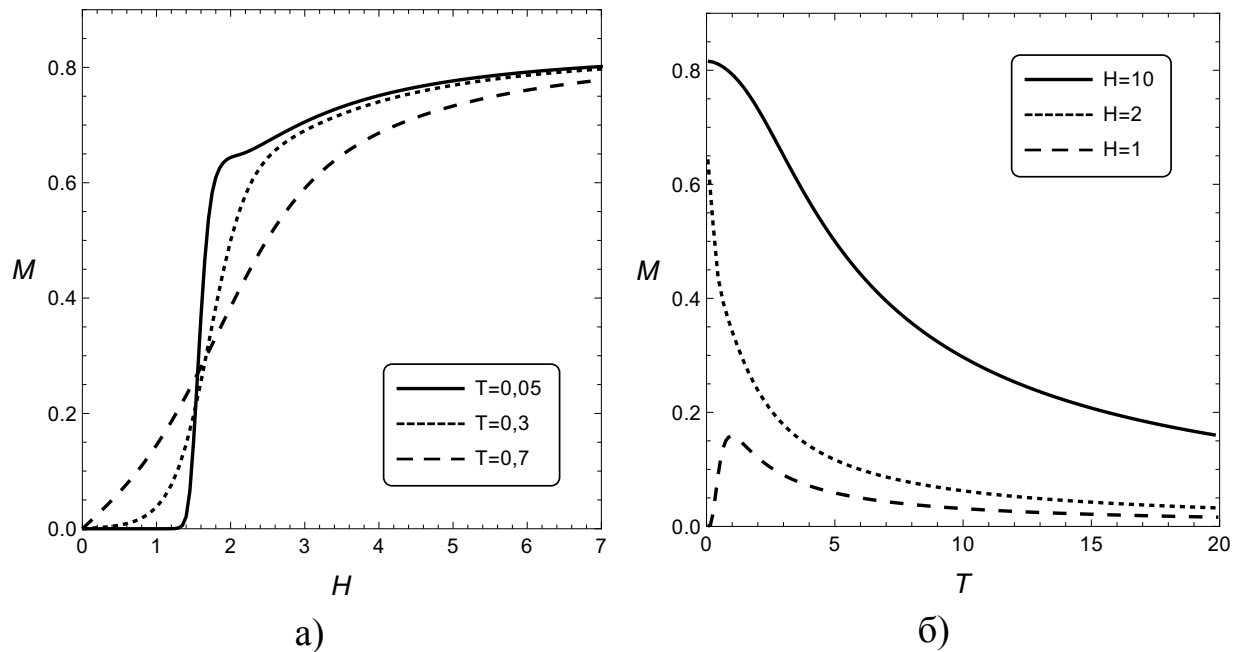


Рисунок 7.7 — Намагниченность шестивершинной антиферромагнитной модели Поттса: а) как функция поля  $0 \leq H \leq 7$  для трех значений температур; б) как функция температуры  $0,05 \leq T \leq 20$  для трех значений поля

Из рисунков 7.7 и 7.8 также видно, что намагниченность в области низких полей и температур практически равна нулю, что свидетельствует о значительной анизотропии в рассматриваемой модели.

Пространственное распределение намагниченности в этой модели приведено на рисунке 7.9.

#### 7.4 Восьмивершинная модифицированная модель Поттса

Задача о пространственном распределении намагниченности в рамках восьмивершинной модифицированной модели Поттса также не может быть решена точно. Однако в случае монокристалла существует точное решение для направлений поля, определенных кубической симметрией кристалла, которое получено ранее в работе [45]. Показано, что осью легкого намагничивания является направление  $[111]$  и асимптотические значения намагниченностей соотносятся между собой как  $1 : \sqrt{2/3} : \sqrt{1/3}$  для направлений поля  $[111]$ ,  $[110]$  и  $[100]$  соответственно. Следует отметить, что в работе [2] отмечается о таком же соотношении

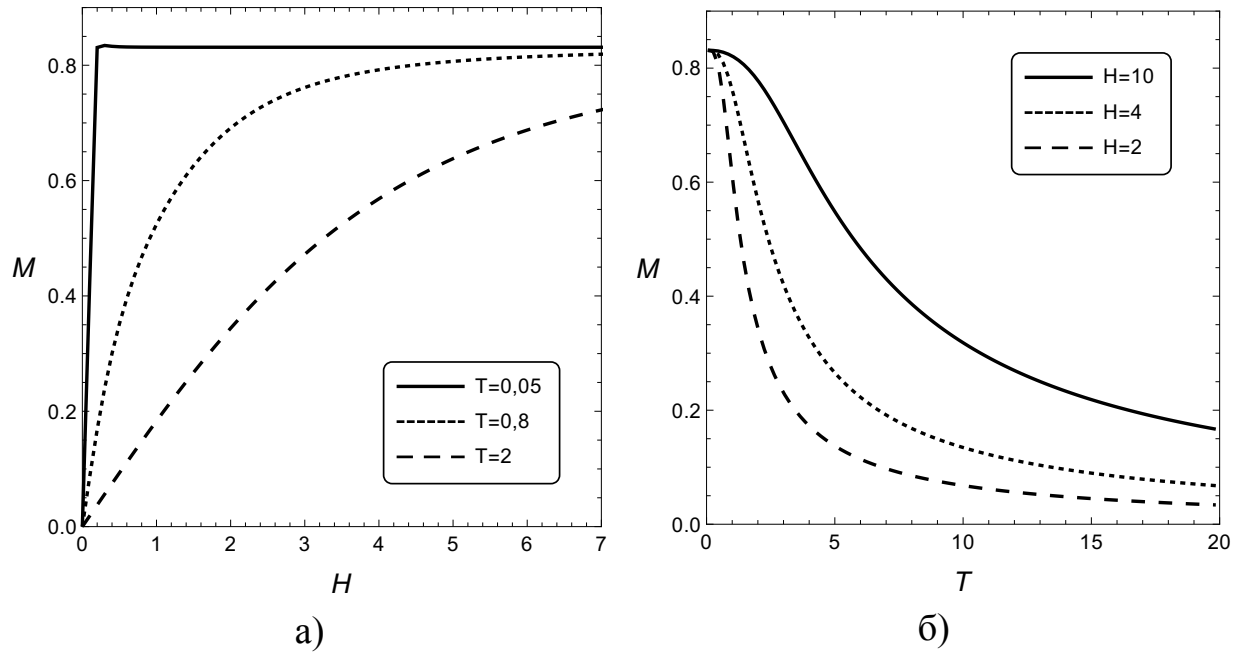


Рисунок 7.8 — Намагниченность шестивершинной ферромагнитной модели Поттса: а) как функция поля  $0 \leq H \leq 7$  для четырех значений температур; б) как функция температуры  $0,05 \leq T \leq 20$  для трех значений поля

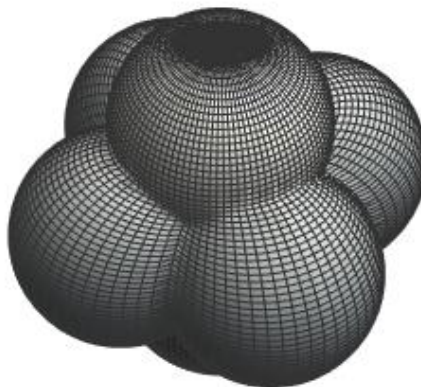


Рисунок 7.9 — Пространственное распределение намагниченности в шестивершинной антиферромагнитной модели Поттса,  
 $J = -1, H = 60, T = 0,01$

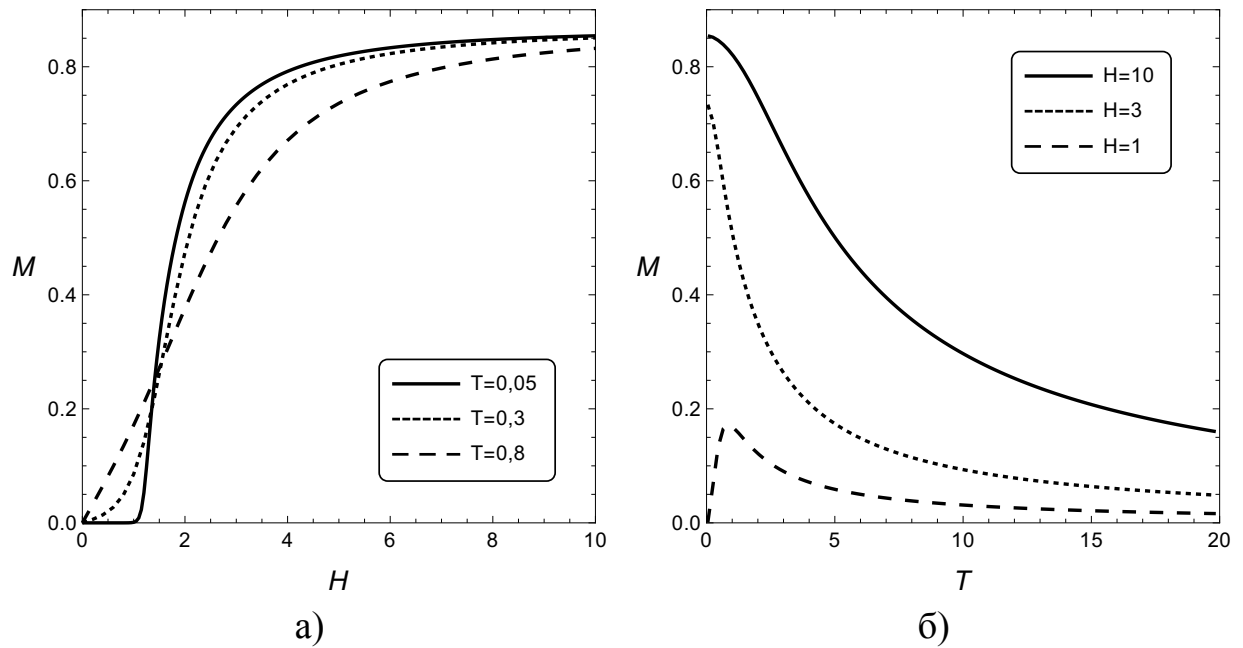


Рисунок 7.10 — Намагниченность восьмивершинной антиферромагнитной модели Поттса: а) как функция поля  $0 \leq H \leq 10$  для трех значений температур; б) как функция температуры  $0,05 \leq T \leq 20$  для трех значений поля

значений асимптот намагниченностей для соединения  $U_{0,8}Th_{0,2}Sb$  с осью легкого намагничивания [111].

Как видно из рисунков 7.10 и 7.11, намагниченность в ферро- и антиферромагнитном случаях ведет себя аналогично кривой намагничивания, рассчитанной в рамках шестивершинной модели. Намагниченность насыщения в этом случае равна  $\sqrt{3}/2$ . Из рисунка 7.10а следует, что намагниченность в области низких полей и температур практически равна нулю, что вновь свидетельствует о наличии сильной анизотропии в рассматриваемой модели.

Пространственное распределение намагниченности в рамках этой модели приведено на рисунке 7.12.

Относительно применимости полученных результатов для описания свойств реальных магнетиков, заметим, что на рисунке 7.13 представлено сравнение теоретически рассчитанной намагниченности в восьмивершинной модели Поттса (рисунок 7.13а) с экспериментальными данными (рисунок 7.13б), полученными в работе [125]. Видно, что имеется хорошее совпадение результатов расчета с экспериментальными данными, несмотря на то, что в качестве исходной модели рассматривалась одномерная цепочка спинов. Это дополнительно подтверждает сделанные в главе 1 предположения:

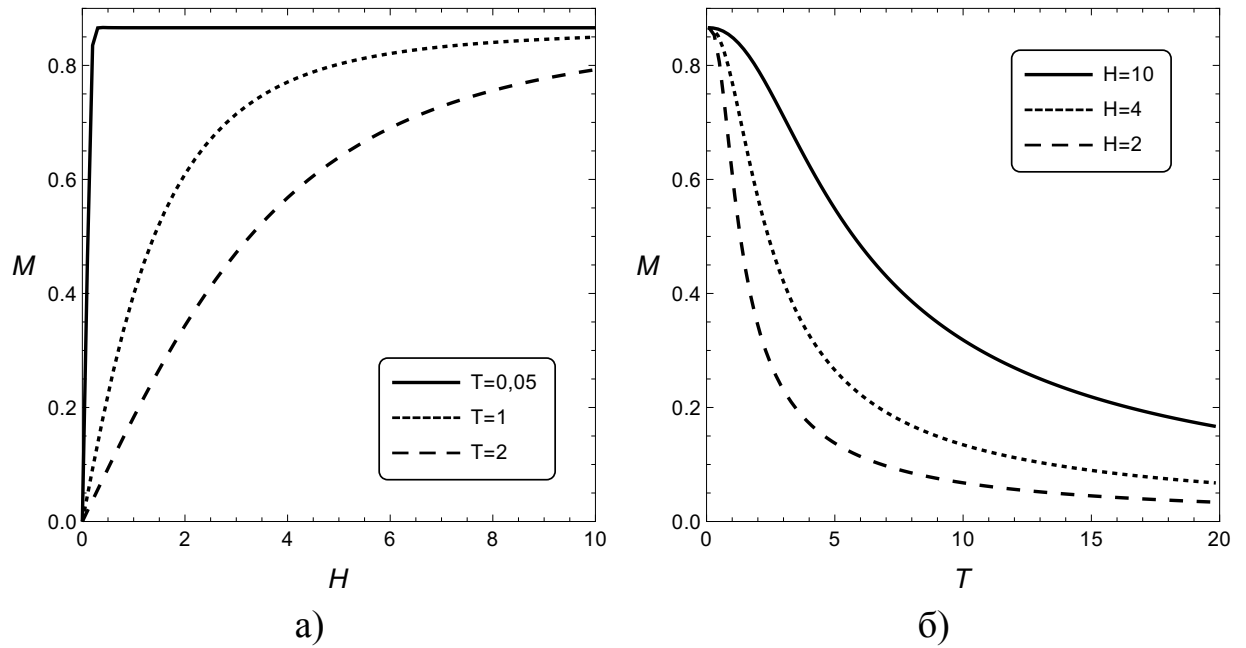


Рисунок 7.11 — Намагниченность восьмивершинной ферромагнитной модели Поттса: а) как функция поля  $0 \leq H \leq 10$  для трех значений температур; б) как функция температуры  $0,05 \leq T \leq 20$  для трех значений поля

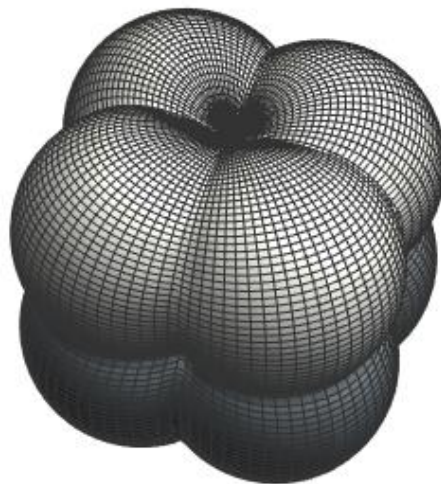


Рисунок 7.12 — Пространственное распределение намагниченности в восьмивершинной антиферромагнитной модели Поттса,

$$J = -1, H = 60, T = 0,01$$



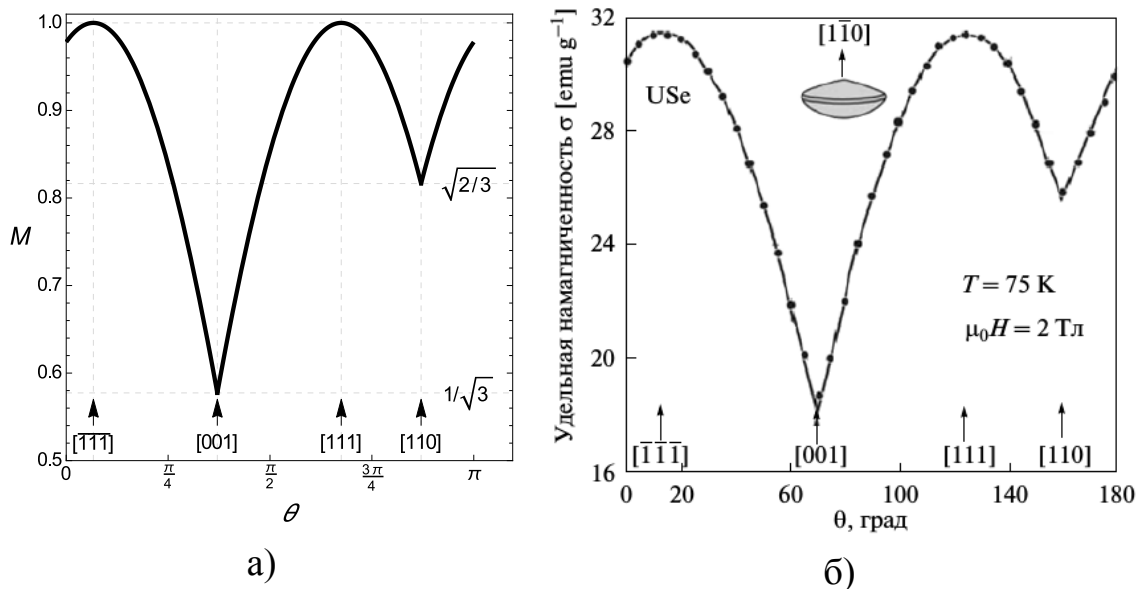


Рисунок 7.13 — Зависимость теоретически рассчитанной намагниченности в восьмивершинной модели Поттса от угла  $\theta$  а); экспериментальная зависимость намагниченности от угла  $\theta$  в  $\text{USe}$ , полученная в [125] б)

1. Описание магнитных и термодинамических свойств рассматриваемого класса материалов в рамках моделей Поттса является адекватным;
2. Одномерные модели могут также адекватно описывать наблюдаемые свойства реальных трехмерных соединений.

## 7.5 Выводы по главе

В настоящей главе в рамках трех-, четырех-, шести- и восьмивершинных моделей Поттса проведены детальные расчеты намагниченности поликристаллических (или порошковых) кубических ферро- и антиферромагнетиков с сильной магнитокристаллической анизотропией и различными типами осей легкого намагничивания для разных температур и в произвольном внешнем магнитном поле. Определены общие закономерности намагничивания поликристаллов, а также отличия от намагничивания монокристаллов:

1. При ферромагнитном обменном взаимодействии характер зависимости намагниченности от поля почти не отличается от традиционных ферромагнетиков: имея вид плавно нарастающей выпуклой (без перегибов) кривой при всех температурах, и стремящейся при  $T \rightarrow 0$  к скачкообраз-

ной зависимости в точке  $H = 0$ . Единственное отличие — значение намагниченности насыщения для поликристалла меньше, чем таковое для монокристалла при ориентировке поля вдоль легкой оси.

2. При антиферромагнитном обменном взаимодействии критические (фрустрирующие) магнитные поля приводят к появлению точек перегиба на кривой зависимости намагниченности от поля. В некоторых моделях Поттса (трехвершинной и четырехвершинной) при низких значениях магнитного поля могут существовать промежуточные плато намагниченности.
3. При величинах магнитных полей, превышающих критические, намагниченность имеет вид монотонно возрастающей выпуклой (без перегибов) кривой даже при  $T \rightarrow 0$ .

Отличия асимптотических значений намагниченности поликристаллов и монокристаллов в магнитном поле, направленном вдоль легкой оси, свидетельствует о наличии сильной анизотропии, а полученные аналитические значения асимптот намагниченностей поликристаллов и конкретные особенности кривых намагничивания позволяют сделать выбор в пользу той или иной модели для определения магнитной структуры при расшифровке магнитных нейтронограмм.

Результаты, описанные в этой главе, опубликованы в статье [A3].

## Заключение

В настоящей диссертационной работе изложены основные результаты исследования магнитных и термодинамических свойств моделей Изинга и Поттса различных размерностей и на различных решетках с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями, разных знаков обменных взаимодействий и внешнего магнитного поля. Определены точки и поля фрустраций, установлены критерии существования фрустраций и фазовых переходов в рассмотренных системах. Исследован магнитокалорический эффект. Для одномерной модели Изинга впервые в мировой литературе получены аналитические выражения для намагниченности и энтропии при нулевой температуре для произвольного спина.

Цель работы состояла в разработке последовательной системы физических представлений для наблюдаемых магнитных и термодинамических свойств большого класса соединений редких земель и актиноидов со структурой NaCl, а также магнитных фазовых переходов в них.

Для выполнения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Исследованы трех-, четырех- и двенадцативершинные одномерные модели Поттса, модель Изинга на цепочке с произвольным значением спина, классическая модель Изинга на квадратной решетке, а также трехвершинная модель Поттса на треугольной решетке. Получен ряд точных аналитических выражений для фрустрационных полей и энтропии в них при  $T \rightarrow 0$ , выявлены особенности, характерные для всех фрустрированных систем. Выяснено, имеется ли качественное совпадение физических свойств магнетиков, описываемых в рамках одномерных и двумерных моделей;
2. Изучено поведение магнитокалорического эффекта (отношения  $\partial T / \partial H$ ) в пара-, ферро- и антиферромагнетиках, описываемых в рамках предлагаемых моделей и подходов, определены общие закономерности, характерные для всего класса рассматриваемых магнитных материалов;
3. Рассмотрены особенности поведения одномерных поликристаллических моделей Поттса, определены возможные причины расхождения экспериментальных данных по определению магнитного момента в пниктидах и халькогенидах актиноидов и редких земель.

К основным выводам по проделанной работе можно отнести следующие положения:

1. Для одномерной модели Изинга с произвольным значением спина получены аналитические выражения для фрустрирующих полей, а также величин намагниченности и энтропии в них при  $T \rightarrow 0$  как функции спина  $s$ . Показано, что в точке фрустрации намагниченность испытывает скачок, энтропия может стремиться к ненулевому значению при стремлении температуры к нулю, а фурье-образ парной спиновой корреляционной функции не переходит в дельта-функцию ни при каких температурах. Последнее свидетельствует о том, что подавляющее большинство конфигураций в точке фрустрации не имеет трансляционной инвариантности.
2. В рамках модели Изинга на квадратной решетке показано, что магнитные свойства модели Изинга на линейной цепочке с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями и на квадратной решетке, с учетом взаимодействий между ближайшими и третьими соседями, качественно схожи. На основании этого можно предсказать, что при определенном выборе модели, намагниченность одномерных, двумерных и даже трехмерных моделей будет иметь качественно подобный вид, несмотря на то, что в одномерных моделях фазовый переход имеет место при нулевой температуре.
3. Для одномерных трех- и четырехвершинных моделей Поттса построены магнитные фазовые диаграммы  $H - R$  (магнитное поле – отношение взаимодействия между вторыми соседями к таковому между ближайшими). Для всех рассмотренных моделей Поттса получены аналитические выражения для фрустрирующих полей, а также величин намагниченности и энтропии в них при  $T \rightarrow 0$ . В рамках трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке впервые обнаружена целая область параметров обменных взаимодействий, при которых основное состояние системы является фрустрированным. Показано, что полученные результаты качественно объясняют экспериментальные данные реальных анизотропных магнетиков.
4. Выяснено, что в парамагнетике с локализованными магнитными моментами магнитокалорический эффект ( $\partial T / \partial H$ ) для любой модели любой

размерности всегда равен  $T/H$ . В ферромагнетике магнитокалорический эффект всегда положителен и достигает максимального значения при  $H \rightarrow 0$ ,  $T \rightarrow 0$ : в одномерных моделях фазовый переход происходит при нулевой температуре. В антиферромагнетиках, благодаря наличию фрустраций, магнитокалорический эффект имеет особенность в каждой из критических точек, при этом слева от точки фрустрации он отрицателен, справа — положителен.

5. Установлен факт отличия асимптотических значений намагниченности поликристаллов и монокристаллов в магнитном поле, направленном вдоль легкой оси. Найденные аналитические выражения для асимптотических значений намагниченности и определенные особенности кривых намагничивания позволяют сделать выбор в пользу той или иной модели при расшифровке магнитных нейтронограмм для определения магнитной структуры.
6. Обнаружено, что в любой модели на любой решетке магнитная теплоемкость в непосредственной близости от точки фрустрации испытывает расщепление — наряду с острым онзагеровским максимумом, соответствующим точке фазового перехода, возникает дополнительный куполообразный максимум.

Несмотря на то, что была проделана значительная работа, еще многое остается неясным: во-первых, вопрос о влиянии одноосной анизотропии на магнитные и термодинамические свойства магнитных систем, описываемых в рамках моделей Изинга и Поттса, во-вторых, вид нейтронограммы 3-к структуры типа I (четырёхвершинной модели Поттса на ГЦК решетке), и, наконец, поведение корреляционной функции в рамках каждой из рассмотренных моделей с различными знаками обменных взаимодействий во внешнем магнитном поле.

В заключение автор выражает глубокую благодарность научному руководителю доктору физико-математических наук Ф. А. Кассан-Оглы за предложенную тему работы и конструктивную помощь при ее выполнении.

## Список публикаций

- [A1] Магнитокалорический эффект в одномерных магнетиках / Ф. А. Кассан-Оглы, М. В. Медведев, А. И. Прошкин, А. В. Зарубин // *Известия РАН, серия физическая*. — 2013. — Т. 77, № 10. — С. 1449–1451.
- [A2] Фрустрации и фазовые переходы в трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, М. А. Магомедов, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин // *Письма в ЖЭТФ*. — 2014. — Т. 100, № 4. — С. 267–271.
- [A3] Прошкин А. И. Особенности намагниченности поликристаллов магнетиков с сильной анизотропией / А. И. Прошкин, Ф. А. Кассан-Оглы // *ФММ*. — 2014. — Т. 115, № 3. — С. 227–241.
- [A4] Ising model on a square lattice with second-neighbor and third-neighbor interactions / F. A. Kassan-Ogly, A. K. Murtazaev, A. K. Zhuravlev, M. K. Ramazanov, A. I. Proshkin // *J. Magn. Magn. Mat.* — 2015. — Vol. 384. — Pp. 247–254.
- [A5] Двенадцативершинная модель Поттса в магнитном поле / Ф. А. Кассан-Оглы, Б. Н. Филиппов, А. И. Прошкин, А. В. Зарубин // *ФММ*. — 2015. — Т. 116, № 2. — С. 123–135.
- [A6] Proshkin A. I., Kassan-Ogly F. A. Four-state standard Potts model // *J. Magn. Magn. Mat.* — 2015. — Vol. 383. — Pp. 13–18.
- [A7] Magnetocaloric effect in one-dimensional magnets / A. V. Zarubin, F. A. Kassan-Ogly, M. V. Medvedev, A. I. Proshkin // *Solid State Phenom.* — 2015. — Vol. 233–234. — Pp. 212–215.
- [A8] Фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей / А. Б. Бабаев, М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин // *ЖЭТФ*. — 2016. — Т. 149, № 2. — С. 357–366.

- [A9] *Proshkin A.* Exact solution of 1D Ising model on linear chain with arbitrary spin / A. Proshkin, F. Kassan-Ogly // *Materials Science Forum.* — 2016. — Vol. 845. — Pp. 93–96.
- [A10] Frustrations and phase-transitions in low-dimensional magnetic systems / F. Kassan-Ogly, A. Proshkin, A. Murtazaev, A. Babaev, M. Ramazanov, M. Magomedov // *Materials Science Forum.* — 2016. — Vol. 845. — Pp. 111–116.
- [A11] *Zarubin A. V.* Diffuse scattering on Ising chain with competing interactions / A. V. Zarubin, F. A. Kassan-Ogly, A. I. Proshkin // *Materials Science Forum.* — 2016. — Vol. 845. — Pp. 122–125.

## Список литературы

1. Similarities in magnetic behavior of cerium and plutonium compounds / B. R. Cooper, P. Thayamballi, J. C. Spirlet et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1983. — Vol. 51, no. 26. — Pp. 2418–2421.
2. *Cooper B. R.* Magnetization behaviour and the valence of uranium in  $(U_xTh_{1-x})Sb$  / B. R. Cooper, O. Vogt // *J. Phys. Colloq.* — 1979. — Vol. 40, no. 4. — Pp. 66–67.
3. *Vogt O.* Properties of pure single crystals of actinide compounds / O. Vogt // *J. Nucl. Mater.* — 1989. — Vol. 36. — Pp. 36–40.
4. *Vogt O.* Magnetization measurements on single crystals of uranium chalcogenides and pnictides / O. Vogt // *Physica B.* — 1980. — Vol. 102. — Pp. 206–211.
5. Magnetization measurements on single crystals of neptunium monopnictides. In: *Transuranium elements: a half century* / K. Mattenberger, O. Vogt, J. Rebizant, J. C. Spirlet; Ed. by L. R. Morss, J. Fuger. — Washington DC: Amer. Chem. Soc., 1992. — Pp. 378–396.
6. Magnetization measurement of EuSe single crystal / H. Fukuma, T. Komatsubara, T. Suzuki et al. // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 1985. — Vol. 54. — Pp. 3067–3075.
7. *Hulliger F.* Low-temperature behavior of DyS, DySe, HoS and HoSe. In: *The rare earths in modern science and technology* / F. Hulliger, M. Landolt, R. Schmelczer; Ed. by G. J. McCarthy, H. B. Silber, J. J. Rhyne. — New York: Plenum Press, 1982. — Vol. 3. — Pp. 455–458.
8. *Suski W.* Magnetic properties of some cubic uranium compounds / W. Suski, T. Mydlarz, V. U. S. Rao // *Phys. Stat. Solidi A.* — 1972. — Vol. 14. — Pp. 157–160.
9. The magnetic phase transitions in Ce-monopnictides, strong p–f mixing effect / T. Kasuya, Y. S. Kwon, T. Suzuki et al. // *J. Magn. Magn. Mat.* — 1990. — Vol. 90–91. — Pp. 389–392.
10. *Scheer E.* Specific heat of  $Eu_xSr_{1-x}Te$  / E. Scheer, J. Wosnitza, H. v. Löhneysen // *Z. Phys. B: Condens. Matter.* — 1991. — Vol. 85. — Pp. 79–86.



11. *Wada H.* Low temperature specific heat of DyBi and ErBi / H. Wada, H. Imai, M. Shiga, M. // *J. Alloys Compd.* — 1995. — Vol. 218. — Pp. 73–76.
12. Calorimetric study of trivalent Kondo compound TmS / A. Berton, J. Chaussy, J. Flouquet et al. // *Phys. Rev. B.* — 1985. — Vol. 31, no. 7. — Pp. 4313–4318.
13. *Matsumara T.* Specific heat study of the quadrupolar ordering in TmTe / T. Matsumara, H. Shida, T. Suzuki // *Physica B: Condensed Matter.* — 1997. — Vol. 230–232. — Pp. 738–740.
14. *Wedgwood F. A.* Actinide pnictides and chalcogenides: I. Study of magnetic ordering and ordered moments in uranium monochalcogenides by neutron diffraction / F. A. Wedgwood, M. Kuznietz // *J. Phys. C: Solid State Phys.* — 1972. — Vol. 5. — Pp. 3012–3020.
15. *Curry N. A.* An investigation of the magnetic structure of uranium nitride by neutron diffraction / N. A. Curry // *Proc. Phys. Soc.* — 1965. — Vol. 86. — Pp. 1193–1198.
16. *Curry N. A.* The magnetic structure of uranium monophosphide / N. A. Curry // *Proc. Phys. Soc.* — 1966. — Vol. 89. — Pp. 427–429.
17. *Leciejewicz J.* The antiferromagnetic ordering in uranium monoarsenide and monoantimonide / J. Leciejewicz, A. Murasik, R. Troć // *Phys. Stat. Solidi.* — 1968. — Vol. 30, no. 1. — Pp. 157–162.
18. *Kuznietz M.* Antiferromagnetic structures of USb and UBi / M. Kuznietz, G. H. Lander, F. P. Campos // *J. Phys. Chem. Solids.* — 1969. — Vol. 30. — Pp. 1642–1643.
19. *Shull C. G.* Neutron diffraction by paramagnetic and antiferromagnetic substances / C. G. Shull, W. A. Strauser, E. O. Wollan // *Phys. Rev.* — 1951. — Vol. 83, no. 2. — Pp. 333–345.
20. *Rossat-Mignod J.* Neutron scattering. In: *Methods of experimental physics* / J. Rossat-Mignod; Ed. by K. Skjöld, D. J. Price. — New York: Academic Press, 1987. — Vol. 23. — P. 69.
21. *Bethe H. A.* Statistical theory of superlattices / H. A. Bethe // *Proc. Roy. Soc.* — 1935. — Vol. 150, no. 871. — Pp. 552–575.

22. *Bragg W. L.* The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys / W. L. Bragg, E. J. Williams // *Proc. Roy. Soc.* — 1934. — Vol. 145, no. 855. — Pp. 699–730.
23. *Domb C.* On the theory of cooperative phenomena in crystals / C. Domb // *Adv. Phys.* — 1960. — Vol. 9, no. 34. — Pp. 149–244.
24. Equation of state calculations by fast computing machines / N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth et al. // *J. Chem. Phys.* — 1953. — Vol. 21. — Pp. 1087–1092.
25. *Swendsen R. H., Wang J. S.* Nonuniversal critical dynamics in Monte-Carlo simulations / R. H. Swendsen, J.-S. Wang // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 58, no. 2. — Pp. 86–88.
26. *Wolff U.* Collective Monte Carlo updating for spin systems / U. Wolff // *Phys. Rev. Lett.* — 1989. — Vol. 62, no. 4. — Pp. 361–364.
27. *Wang F.* Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram / F. Wang, D. P. Landau // *Phys. Rev. E.* — 2001. — Vol. 64, no. 4. — P. 056101.
28. *Sykes M. F.* Derivation of low-temperature expansions for the Ising model of a ferromagnet and an antiferromagnet / M. F. Sykes, J. W. Essam, D. S. Gaunt // *J. Math. Phys.* — 1965. — Vol. 6, no. 2. — Pp. 283–298.
29. Derivation of low-temperature expansions for Ising model. VI. Three-dimensional lattices-temperature grouping / M. F. Sykes, D. S. Gaunt, J. W. Essam, C. J. Elliott // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 1973. — Vol. 6, no. 10. — Pp. 1507–1516.
30. *Kadanoff L. P.* Scaling laws for Ising models near  $T_c$  / L. P. Kadanoff // *Physics.* — 1966. — Vol. 2, no. 5. — Pp. 263–272.
31. *Wilson K. G.* Renormalization group and critical phenomena. I. Renormalization group and the Kadanoff scaling picture / K. G. Wilson // *Phys. Rev. B.* — 1971. — Vol. 4, no. 9. — Pp. 3174–3183.
32. *Brush S. G.* History of the Lenz-Ising model / S. G. Brush // *Rev. Mod. Phys.* — 1967. — Vol. 39. — Pp. 883–893.

33. *Onsager L.* Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition / L. Onsager // *Phys. Rev.* — 1944. — Vol. 65, no. 3–4. — Pp. 117–149.
34. *Kanô K.* Antiferromagnetism. The kagomé Ising net / K. Kanô, S. Naya // *Prog. Theor. Phys.* — 1953. — Vol. 10. — Pp. 158–172.
35. *Houtappel R. M. F.* Order-disorder in hexagonal lattices / R. M. F. Houtappel // *Physica.* — 1950. — Vol. 16, no. 5. — Pp. 425–455.
36. *Ashkin J.* Statistics of two-dimensional lattices with four components / J. Ashkin, E. Teller // *Phys. Rev.* — 1943. — Vol. 64. — Pp. 178–184.
37. *Wu F. Y.* The Potts models / F. Y. Wu // *Rev. Mod. Phys.* — 1982. — Vol. 54. — Pp. 235–268.
38. *Potts R. B.* Some generalized order-disorder transformations / R. B. Potts // *Proc. Camb. Phil. Soc.* — 1952. — Vol. 48. — Pp. 106–109.
39. *Domb C.* Configurational studies of the Potts models / C. Domb // *J. Phys. A: Math. Nucl. Gen.* — 1974. — Vol. 7. — Pp. 1335–1348.
40. *Shannon R. D.* Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and chalcogenides / R. D. Shannon // *Acta Crystallographica.* — 1976. — Vol. A32. — Pp. 751–767.
41. Neutron magnetic form-factors of uranium ions / A. J. Freeman, J. P. Desclaux, G. H. Lander, J. Jr. Faber // *Phys. Rev. B.* — 1976. — Vol. 13. — Pp. 1168–1176.
42. Neutron-diffraction study of  $\text{UO}_2$ : paramagnetic state / G. H. Lander, J. Jr. Faber, A. J. Freeman, J. P. Desclaux // *Phys. Rev. B.* — 1976. — Vol. 13. — Pp. 1177–1182.
43. Neutron diffraction study of  $\text{USb}$ : The ordered state / G. H. Lander, M. H. Müller, D. M. Sparlin, O. Vogt // *Phys. Rev. B.* — 1976. — Vol. 14, no. 11. — Pp. 5035–5045.
44. Neutron scattering investigation of the phase transitions in uranium arsenide / S. K. Sinha, G. H. Lander, S. M. Shapiro, O. Vogt // *Phys. Rev. B.* — 1981. — Vol. 23, no. 9. — Pp. 4556–4566.

45. *Kassan-Ogly F. A. Modified 6-state and 8-state Potts models in magnetic field / F. A. Kassan-Ogly // Phase Transitions. — 2000. — Vol. 72. — Pp. 223–237.*
46. *Кассан-Оглы Ф. А. Корреляционная функция одномерной четырехвершинной стандартной модели Поттса с взаимодействием вторых соседей / Ф. А. Кассан-Оглы, Б. Н. Филиппов // ФММ. — 2003. — Т. 95, № 6. — С. 12–24.*
47. *Кассан-Оглы Ф. А. Одномерная четырехвершинная планарная модель Поттса в магнитном поле / Ф. А. Кассан-Оглы, В. Е. Найш, И. В. Сагарадзе // ФММ. — 2004. — Т. 98, № 2. — С. 5–10.*
48. *Кассан-Оглы Ф. А. Одномерная четырехвершинная планарная модель Поттса с учетом взаимодействия вторых соседей в магнитном поле / Ф. А. Кассан-Оглы, И. В. Сагарадзе // ФММ. — 2005. — Т. 100, № 3. — С. 5–11.*
49. *Кассан-Оглы Ф. А. Магнитные и структурные фазовые переходы в кристаллах со структурой NaCl / Ф. А. Кассан-Оглы, Б. Н. Филиппов // ФММ. — 2009. — Т. 107, № 4. — С. 1–13.*
50. *Кассан-Оглы Ф. А. Фазовые переходы и магнитное рассеяние нейтронов в UAs / Ф. А. Кассан-Оглы, Б. Н. Филиппов // ФММ. — 2005. — Т. 100, № 2. — С. 5–11.*
51. *Кассан-Оглы Ф. А. Магнитные и структурные фазовые переходы в монохалькогенидах урана / Ф. А. Кассан-Оглы, Б. Н. Филиппов // ФММ. — 2008. — Т. 105, № 3. — С. 227–234.*
52. *Kramers H. A. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part I / H. A. Kramers, G. H. Wannier // Phys. Rev. — 1941. — Vol. 60. — Pp. 252–262.*
53. *Фейнман Р. Статистическая механика / Р. Фейнман. — М.: Мир, 1978. — 408 с.*
54. *Kassan-Ogly F. A. One-dimensional ising model with next-nearest-neighbour interaction in magnetic field / F. A. Kassan-Ogly // Phase Transitions. — 2001. — Vol. 74. — Pp. 353–365.*

55. *Kassan-Ogly F. A.* One-dimensional 3-state and 4-state standard Potts models in magnetic field / F. A. Kassan-Ogly // *Phase Transitions*. — 2000. — Vol. 71, no. 1. — Pp. 39–55.
56. *Landau D. P.* A guide to monte-carlo simulations in statistical physics / D. P. Landau, K. Binder. — Cambridge: Cambridge University Press, 2009. — 471 pp.
57. *Belardinelli R. E.* Fast algorithm to calculate density of states / R. E. Belardinelli, V. D. Pereyra // *Phys. Rev. E*. — 2007. — Vol. 75. — P. 046701.
58. *Zhou C.* Optimal modification factor and convergence of the Wang-Landau algorithm / C. Zhou, J. Su // *Phys. Rev. E*. — 2008. — Vol. 78. — P. 046705.
59. *Belardinelli R. E.* Analysis of the convergence of the  $1/t$  and Wang-Landau algorithms in the calculation of multidimensional integrals / R. E. Belardinelli, S. Manzi, V. D. Pereyra // *Phys. Rev. E*. — 2008. — Vol. 78. — P. 067701.
60. *Caparica A. A.* Wang-Landau sampling: Improving accuracy / A. A. Caparica, A. G. Cunha-Netto // *Phys. Rev. E*. — 2012. — Vol. 85. — P. 046702.
61. *Koh Y. W.* Dynamically optimized Wang-Landau sampling with adaptive trial moves and modification factors / Y. W. Koh, H. K. Lee, Y. Okabe // *Phys. Rev. E*. — 2013. — Vol. 88. — P. 053302.
62. *Vannimenus J.* Theory of the frustration effect. II. Ising spins on a square lattice / J. Vannimenus, G. Toulouse // *J. Phys. C: Solid State Phys.* — 1977. — Vol. 10, no. 18. — P. L537.
63. *Misguich G.* Two-Dimensional Quantum Antiferromagnets. In: Frustrated Spin Systems / G. Misguich, C. Lhuillier; Ed. by H. T. Diep. — Singapore: World Scientific Publishing, 2004. — Pp. 229–306.
64. *Fulde P.* Strongly correlated electrons / P. Fulde, P. Thalmeier, G. Zwicknagl, G. // *Solid State Phys.* — 2006. — Vol. 60. — Pp. 1–180.
65. Frustrated magnetism in vanadium oxides / P. Thalmeier, B. Schmidt, V. Yushankhai, T. Takimoto // *Acta Physica Polonica A*. — 2009. — Vol. 115, no. 1. — Pp. 53–58.
66. *Вонсовский С. В.* Магнетизм / С. В. Вонсовский. — М.: Наука, 1971. — 1032 с.

67. *Hulliger F.* Magnetic behavior of DyBi / F. Hulliger // *J. Magn. Magn. Mat.* — 1980. — Vol. 15-18. — Pp. 1243–1244.
68. *Бэкстер Р.* Точно решаемые модели в статистической механике / Р. Бэкстер; под. ред. А. М. Бродского. — М.: Мир, 1985. — 487 с.
69. Физическая энциклопедия: [в 5 т.] Т.1. / под. ред. А. М. Прохорова. — М.: Советская энциклопедия, 1988. — 1140 с.
70. *Warburg E.* Magnetische untersuchungen über einige wirkungen der koerzitivkraft / E. Warburg // *Annals of Physics.* — 1881. — Vol. 13. — Pp. 141–164.
71. *Debye P.* Einige bemerkungen zur magnetisierung bei tiefer temperatur / P. Debye // *Annals of Physics.* — 1926. — Vol. 81. — Pp. 1154–1160.
72. *Giauque W. F. A.* A thermodynamic treatment of certain magnetic effects. A proposed method of producing temperatures considerably below 1 absolute / W. F. A. Giauque // *J. Amer. Chem. Soc.* — 1927. — Vol. 49. — Pp. 1864–1870.
73. *Kanamori J.* Theory of magnetic properties of ferrous and cobaltous oxides, I / J. Kanamori // *Progr. Theoret. Phys. (Jpn.)*. — 1957. — Vol. 17. — Pp. 177–196.
74. *Kanamori J.* Theory of magnetic properties of ferrous and cobaltous oxides, II / J. Kanamori // *Progr. Theoret. Phys. (Jpn.)*. — 1957. — Vol. 17. — Pp. 197–222.
75. *Roth W. L.* Magnetic structures of MnO, FeO, CoO, and NiO / W. L. Roth // *Phys. Rev.* — 1958. — Vol. 110. — Pp. 1333–1341.
76. Нейтроны и твердое тело: [в 3 т.] Т. 2. Нейтронография магнетиков / Ю. А. Изюмов, В. Е. Найш, Р. П. Озеров; под. общ. ред. Р. П. Озерова. — М.: Атомиздат, 1981. — 312 с.
77. Magnetic properties of CeAs and CeSb deduced from neutron scattering data / B. Rainford, K. C. Turberfield, G. Busch, O. Vogt // *J. Phys. C: Solid State Phys.* — 1968. — Vol. 1, no. 3. — Pp. 679–683.
78. Neutron diffraction study of the low temperature transition in UP / L. Heaton, M. H. Müller, K. D. Anderson, D. D. Zaubers // *J. Phys. Chem. Solids.* — 1969. — Vol. 30, no. 2. — P. 453.

79. *Lander G. H.* Magnetic phase diagram of the UAs–US system / G. H. Lander, M. H. Müller, J. F. Reddy // *Phys. Rev. B.* — 1972. — Vol. 6, no. 5. — Pp. 1880–1888.
80. *Vogt O.* Magnetic ordering in cerium and uranium monopnictides / O. Vogt // *Physica B.* — 1980. — Vol. 102. — Pp. 237–248.
81.  $(U_{1-x}Pu_x)Sb$  solid solutions. I. Magnetic configurations / P. S. Normile, W. G. Stirling, D. Mannix et al. // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66. — P. 014405.
82. *Sidhu S. S.* The antiferromagnetism of uranium monophosphide / S. S. Sidhu, W. Vogelsang, K. D. Anderson // *J. Phys. Chem. Solids.* — 1966. — Vol. 27. — Pp. 1197–1200.
83. *Brillouin L.* Notes on undulatory mechanics. Remarques sur la mécanique ondulatoire / L. Brillouin // *J. Phys. Radium.* — 1926. — Vol. 7, no. 12. — Pp. 353–368.
84. *Oguchi T.* Theory of magnetism in  $CoCl_2 \cdot 2H_2O$  / T. Oguchi // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 1965. — Vol. 20. — Pp. 2236–2243.
85. *Кассан-Оглы Ф. А.* Корреляционная функция одномерной четырехвершинной стандартной модели Поттса с взаимодействием вторых соседей / Ф. А. Кассан-Оглы, Б. Н. Филиппов // *ФММ.* — 2003. — Т. 95. — С. 12–24.
86. *Kassan-Ogly F. A.* Correlation-function of one-dimensional 3-state Potts-model with next-nearest-neighbor-interaction / F. A. Kassan-Ogly, B. N. Filippov // *Phase Transitions.* — 2004. — Vol. 77. — Pp. 261–279.
87. *Dalton N. W.* Critical point behavior of the Ising model with higher-neighbor interactions present / N. W. Dalton, D. W. Wood // *J. Math. Phys.* — 1969. — Vol. 10, no. 7. — Pp. 1271–1302.
88. *Rapaport D. C.* The smoothness postulate and the Ising antiferromagnet / D. C. Rapaport, C. Domb // *J. Phys. C: Solid state phys.* — 1971. — Vol. 4, no. 16. — Pp. 2684–2694.
89. *Oitmaa J.* The square-lattice Ising model with first and second neighbour interactions / J. Oitmaa // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 1981. — Vol. 14, no. 5. — Pp. 1159–1168.

90. *Lee S. F.* Low-temperature series expansions for the square-lattice Ising model with first and second neighbour interactions / S.-F. Lee, K.-Y. Lin // *Chin. J. Phys.* — 1996. — Vol. 34, no. 5. — Pp. 1261–1269.
91. *Müller-Hartmann E.* Interface free energy and transition temperature of the square-lattice Ising antiferromagnet at finite magnetic field / E. Müller-Hartmann, J. Zitzartz // *Z. Physik B Condens. Matt.* — 1977. — Vol. 27, no. 3. — Pp. 261–266.
92. *Nienhuis B.* Renormalization-group theory and calculations of tricritical behavior / B. Nienhuis, M. Nauenberg // *Phys. Rev. B.* — 1976. — Vol. 13, no. 5. — Pp. 2021–2027.
93. *Subbaswamy K. R.* Renormalization group results for lattice-gas phase boundaries in two dimensions / K. R. Subbaswamy, G. D. Mahan // *Phys. Rev. Lett.* — 1976. — Vol. 37, no. 11. — Pp. 642–644.
94. *Kinzel W.* New real-space renormalization techniques and their application to models of various spin and space dimensionalities / W. Kinzel // *Phys. Rev. B.* — 1979. — Vol. 19, no. 9. — Pp. 4584–4594.
95. *de Queiroz S. L. A.* Scaling behavior of a square-lattice Ising model with competing interactions in a uniform field / S. L. A. de Queiroz // *Phys. Rev. E.* — 2011. — Vol. 84, no. 3. — P. 031132.
96. *Nightingale M. P.* Universal Ising dynamics in two dimensions / M. P. Nightingale, H. W. J. Blöte // *Physica A.* — 1998. — Vol. 251, no. 1–2. — Pp. 211–223.
97. *Monroe J. L.* Phase diagram and critical exponent  $\nu$  for the nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interaction Ising model / J. L. Monroe, S.-Y. Kim // *Phys. Rev. E.* — 2007. — Vol. 76, no. 2. — P. 021123.
98. *Kim S.-Y.* Yang-Lee zeros of the antiferromagnetic Ising model / S.-Y. Kim // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 93, no. 13. — P. 130604.
99. *Murtazaev A. K.* Critical properties of an antiferromagnetic Ising model on a square lattice with interactions of the next-to-nearest neighbors / A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, M. K. Badiev // *Low Temp. Phys.* — 2011. — Vol. 37. — Pp. 1001–1005.



100. *Landau D. P.* Phase transitions in the Ising square lattice with next-nearest-neighbor interactions / D. P. Landau // *Phys. Rev. B.* — 1980. — Vol. 21, no. 3. — Pp. 1285–1297.
101. *Binder K.* Phase diagrams and critical behavior in Ising square lattices with nearest- and next-nearest-neighbor interactions / K. Binder, D. P. Landau // *Phys. Rev. B.* — 1980. — Vol. 21, no. 5. — Pp. 1941–1962.
102. *Landau D. P.* Phase diagrams and critical behavior of Ising square lattices with nearest-, next-nearest-, and third-nearest-neighbor couplings / D. P. Landau, K. Binder // *Phys. Rev. B.* — 1985. — Vol. 31, no. 9. — Pp. 5946–5953.
103. Frustrations and phase transitions in Ising model on 2D lattices / F. A. Kassan-Ogly, B. N. Filippov, V. V. Men'shenin et al. // *Solid State Phen.* — 2011. — Vol. 168–169. — Pp. 435–438.
104. Influence of field on frustrations in low-dimensional magnets / F. A. Kassan-Ogly, B. N. Filippov, A. K. Murtazaev et al. // *J. Magn. Magn. Mat.* — 2012. — Vol. 324. — Pp. 3418–3421.
105. *Malakis A.* Monte Carlo studies of the square Ising model with next-nearest-neighbor interactions / A. Malakis, P. Kalozoumis, N. Tyraskis // *Eur. Phys. J. B.* — 2006. — Vol. 50, no. 1. — Pp. 63–67.
106. Phase diagram of the Ising square lattice with competing interactions / A. Kalz, A. Honecker, S. Fuchs, T. Pruschke // *Eur. Phys. J. B.* — 2008. — Vol. 65. — Pp. 533–537.
107. Monte Carlo studies of the Ising square lattice with competing interactions / A. Kalz, A. Honecker, S. Fuchs, T. Pruschke // *J. Phys.: Conf. Series.* — 2009. — Vol. 145. — P. 012051.
108. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Кассан-Оглы, М. К. Бадиев // *ЖЭТФ.* — 2013. — Т. 144, № 6. — С. 1239–1245.

109. *Murtazaev A. K.* Critical properties of the two-dimensional Ising model on a square lattice with competing interactions / A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, M. K. Badiev // *Physica B*. — 2015. — Vol. 476. — Pp. 1–5.
110. *Yin J.* Phase diagram and critical behavior of the square-lattice Ising model with competing nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions / J. Yin, D. P. Landau // *Phys. Rev. E*. — 2009. — Vol. 80, no. 5. — P. 051117.
111. *Fan C.* Ising model with second-neighbor interaction. I. Some exact results and an approximate solution / C. Fan, F. Y. Wu // *Phys. Rev.* — 1969. — Vol. 179, no. 2. — Pp. 560–569.
112. Three-state Potts antiferromagnet on the triangular lattice / J. Adler, A. Brandt, W. Janke, S. Shmulyian // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 1995. — Vol. 28. — Pp. 5117–5129.
113. *Enting I. G.* Triangular lattice Potts models / I. G. Enting, F. Y. Wu // *J. Stat. Phys.* — 1982. — Vol. 28, no. 2. — Pp. 351–373.
114. Study of the Potts model on the honeycomb and triangular lattices: Low-temperature series and partition function zeros / H. Feldmann, A. J. Guttmann, I. Jensen et al. // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 1998. — Vol. 31, no. 10. — Pp. 2287–2310.
115. *Schick M.* Antiferromagnetic ordering in the three-state Potts model / M. Schick, R. B. Griffiths // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 1977. — Vol. 10, no. 12. — Pp. 2123–2131.
116. *Grest G. S.* Monte Carlo study of the antiferromagnetic Potts model on frustrated lattices / G. S. Grest // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 1981. — Vol. 14. — Pp. L217–L221.
117. *Saito Y.* Monte Carlo study of the three-state Potts model with two- and three-body interactions / Y. Saito // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 1982. — Vol. 15. — Pp. 1885–1892.
118. *Park H.* Three-state Potts model on triangular lattice / H. Park // *Phys. Rev. B*. — 1994. — Vol. 49, no. 18. — Pp. 12881–12887.

119. Investigation of the Potts model on triangular lattices by the second renormalization of tensor network states / M.-X. Wang, J.-W. Cai, Z.-Y. Xie et al. // *Chin. Phys. Lett.* — 2010. — Vol. 27, no. 7. — P. 076402.
120. Magnetic phase diagrams of some uranium monopnictides and monochalcogenides. In: Crystalline electric field effects in f-electron magnetism / J. Rossat-Mignod, P. Burlet, S. Quezel et al.; Ed. by R. P. Guertin, W. Suski, Z. Zolnierok. — Germany: Springer, 1982. — Pp. 501–518.
121. *Vogt O.* High field magnetization measurements on UP single crystals / O. Vogt, P. Wachter, H. Bartholin // *Physica B+C.* — 1980. — Vol. 102. — Pp. 226–228.
122. *Schinkel C. J.* Magnetization of uranium monopnictides in fields up to 40 T / C. J. Schinkel, R. Troć // *J. Magn. Magn. Mat.* — 1978. — Vol. 9, no. 4. — Pp. 339–342.
123. *Busch G.* Magnetic anisotropy of single crystals of rocksalttype uranium compounds / G. Busch, O. Vogt // *J. Less-Common Met.* — 1978. — Vol. 62. — Pp. 335–342.
124. *Oliveira N. A. de.* Theoretical aspects of the magnetocaloric effect / N. A. de Oliveira, P. J. von Ranke // *Phys. Reports.* — 2010. — Vol. 489. — Pp. 89–159.
125. *Plessis P. de V. du.* Magnetization of ferromagnetic uranium monoselenide single crystals / P. de V. du Plessis // *J. Magn. Magn. Mat.* — 1986. — Vol. 54–57. — Pp. 537–538.