

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования

**«Уральский федеральный университет  
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина»**

Институт естественных наук и математики  
Кафедра теоретической и математической физики

*На правах рукописи*

Ясинская Дарья Николаевна

**ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
РАЗБАВЛЕННОГО ИЗИНГОВСКОГО МАГНЕТИКА**

Специальность 1.3.3. – Теоретическая физика

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
кандидат физико-математических наук,  
доцент Панов Юрий Демьянович

Екатеринбург – 2025

## Оглавление

	Стр.
<b>Список сокращений и условных обозначений</b> . . . . .	<b>4</b>
<b>Введение</b> . . . . .	<b>5</b>
<b>Глава 1. Обзор литературы</b> . . . . .	<b>14</b>
1.1 Низкоразмерные системы изинговских спинов . . . . .	14
1.2 Фрустрированные спиновые системы . . . . .	16
1.3 Спиновые системы с беспорядком . . . . .	18
1.4 История и формулировка рассматриваемой модели разбавленного магнетика .	19
1.5 Обзор методов исследования . . . . .	23
1.5.1 Методы исследования спиновых цепочек . . . . .	23
1.5.2 Исследование фазовых переходов методами Монте-Карло . . . . .	24
1.5.3 Моделирование спиновых систем с фиксированным параметром порядка	25
1.6 Выводы к Главе 1 . . . . .	28
<b>Глава 2. Фазовые состояния разбавленного магнетика</b> . . . . .	<b>30</b>
2.1 Диаграммы основного состояния с участием химического потенциала и описание фаз . . . . .	30
2.2 Поиск энергии основного состояния как каноническая задача линейного программирования . . . . .	34
2.3 Свойства фаз основного состояния и фазовые диаграммы . . . . .	35
2.4 Выводы к Главе 2 . . . . .	39
<b>Глава 3. Свойства разбавленной цепочки</b> . . . . .	<b>41</b>
3.1 Метод трансфер-матрицы для одномерных систем . . . . .	41
3.1.1 Стандартный подход . . . . .	41
3.1.2 Расчёт термодинамических величин через средние . . . . .	44
3.2 Использование марковских цепей для анализа свойств цепочки . . . . .	48
3.2.1 Отображение спиновой цепочки на марковскую цепь . . . . .	48
3.2.2 Локальные распределения вероятностей по узлам цепочки . . . . .	51
3.2.3 Остаточная энтропия фаз основного состояния . . . . .	52
3.2.4 Остаточная энтропия на границе раздела фаз . . . . .	54
3.3 Остаточная энтропия фаз основного состояния . . . . .	55
3.4 Отображение фрустрированных фаз цепочки на марковские цепи . . . . .	57
3.4.1 Фрустрированные фазы в магнитном поле . . . . .	57
3.4.2 Фрустрированные фазы в отсутствие магнитного поля . . . . .	60
3.4.3 Типы марковских цепей . . . . .	61
3.4.4 Остаточная энтропия на границе раздела фаз и критерий Рохаса . . .	64
3.5 Псевдопереходы . . . . .	67

	Стр.
3.5.1 Псевдопереходы «первого рода» . . . . .	69
3.5.2 Феноменология псевдопереходов «второго рода» . . . . .	76
3.5.3 Квазифазовые диаграммы плотности . . . . .	81
3.6 Выводы к Главе 3 . . . . .	82
<b>Глава 4. Свойства двумерной и трёхмерной разбавленной модели Изинга .</b>	<b>85</b>
4.1 Моделирование методом Монте-Карло . . . . .	85
4.2 Методы исследования критических явлений . . . . .	87
4.2.1 Статические критические индексы . . . . .	87
4.2.2 Гипотеза конечно-размерного масштабирования . . . . .	89
4.2.3 Определение критической температуры и рода фазового перехода методом Монте-Карло . . . . .	91
4.2.4 Определение критических индексов методом Монте-Карло . . . . .	95
4.2.5 Алгоритм Метрополиса и критическое замедление . . . . .	96
4.3 Особенности фазового расслоения в системах больших размерностей . . . . .	97
4.4 Свойства основного состояния . . . . .	103
4.4.1 Фазовые диаграммы основного состояния, полученные методом Монте-Карло . . . . .	103
4.4.2 Вырождение основного состояния . . . . .	105
4.5 Возвратные переходы и переходы типа порядок-порядок . . . . .	109
4.6 Особенности критического поведения . . . . .	114
4.6.1 Фазовые переходы первого рода вблизи точки фрустрации . . . . .	115
4.6.2 Метастабильные состояния и смещение точки фрустрации . . . . .	117
4.6.3 Неуниверсальность критических индексов . . . . .	120
4.7 Выводы к Главе 4 . . . . .	124
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>126</b>
<b>Благодарности . . . . .</b>	<b>129</b>
<b>Список литературы . . . . .</b>	<b>130</b>
Публикации в рецензируемых изданиях, включённых в перечень ВАК РФ и индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus . . . . .	141
Тезисы докладов конференций . . . . .	141
Охранные документы на интеллектуальную собственность . . . . .	145
<b>Приложение А. Фазы основного состояния как решения канонической задачи</b>	<b>146</b>

## Список сокращений и условных обозначений

- 1D, 2D, 3D – одномерный, двумерный, трёхмерный
- AFM – антиферромагнитный (antiferromagnetic)
- CO – зарядовый порядок (charge order)
- FM – ферромагнитный (ferromagnetic)
- FR – фрустрированный (frustrated)
- I – примесный (impurity)
- NO – неупорядоченный (non-ordered)
- PM – парамагнитный (paramagnetic)
- SF – структурный фактор (structure factor)
- CUDA – Compute Unified Device Architecture
- БП – ближний порядок
- модель БЭГ – модель Блюма-Эмери-Гриффитса
- КИ – критические индексы
- КРС – конечно-размерный скейлинг
- МК – Монте-Карло
- ПГУ – периодические граничные условия
- ОЦК решётка – объёмцентрированная кубическая решётка
- ПК решётка – простая кубическая решётка
- ПСП – приближение среднего поля
- СПС – спин-псевдоспиновый
- ФП – фазовый переход

## Введение

### Актуальность темы исследования

Исследование поведения сложных систем многих взаимодействующих частиц до сих пор остаётся одной из центральных проблем физики конденсированного состояния, теоретической физики, магнетизма и статистической механики. В настоящее время особое внимание уделяется изучению свойств низкоразмерных [1–4], анизотропных [5; 6], неупорядоченных и фрустрированных магнетиков [7–9], а также разбавленных систем [10; 11]. Эта проблема стала особенно важной в последнее время из-за открытия нового множества экзотических магнитных состояний, включая спиновые стекла, спиновый лёд и магнитные состояния с регулируемыми свойствами. Развитие новых технологических применений как классических, так и квантовых спиновых систем для средств современной электроники, устройств хранения информации, средств вычислений и сенсоров привело к новому подъёму в теоретическом изучении магнетиков. В основном при описании свойств таких систем используются решёточные спиновые модели, например, модели Изинга, Поттса, Гейзенберга, XY-модель, а также различные их расширения и усложнения, вроде (псевдо)спиновых моделей Блюма-Эмери-Гриффитса (БЭГ) и Блюма-Капеля.

Фрустрированные системы демонстрируют высокую степень вырождения, неколлинеарные конфигурации спинов и сложные фазовые переходы (ФП). Они могут проявлять эффекты “порядка из беспорядка” [12] и имеют связь со спиновыми жидкостями и другими экзотическими фазами [8; 9]. Фрустрации в магнитных системах также влияют на ФП, магнитные свойства и усиливают магнетокалорический эффект [13; 14]. Наличие фрустраций в системе зачастую приводит к новым особенностям критического поведения, таким как ФП первого рода, изменение классов универсальности, неуниверсальное критическое поведение [7]. Это связано с тем, что вырождение состояния системы приводит к ослаблению (псевдо)спиновых связей и, следовательно, к повышенной чувствительности к различным внешним воздействиям [15]. Эти аспекты делают фрустрированные спиновые системы интересными для изучения и понимания их сложного поведения.

Неупорядоченные и неоднородные магнитные системы представляют собой более сложные и интересные объекты исследования по сравнению с “чистыми” магнетиками. В реальных материалах всегда присутствуют тот или иной беспорядок, а решёточные модели легко могут быть адаптированы для систем с немагнитным разбавлением, дефектами или случайными магнитными полями. Внесение в модель беспорядка расширяет возможности её использования для описания реальных физических систем. Более того, по мере совершенствования экспериментальных методов, особенно в области наномасштабных материалов, возрастает потребность в теоретических моделях, способных предсказывать поведение сложных систем с различными типами дефектов. Беспорядок, обусловленный внесением в систему примесей и различных дефектов структуры, существенно влияет на критическое поведение и фазовые состояния спиновых систем [10; 11; 16; 17]. Вмороженные примеси способны

нарушать дальнедействующие флуктуации, что приводит к сглаживанию сингулярностей термодинамических функций, исчезновению критического поведения [17], или даже установлению нового критического поведения [18]. Введение примесей может привести к появлению локализованных состояний и магнитной фрустрации, а также потенциально приводить к появлению новых фаз или изменению существующих. Беспорядок формирует сложный ландшафт свободной энергии, содержащий множество локальных метастабильных термодинамических состояний, в которых система может застрять. Наличие примесей способно индуцировать новые ФП, менять их тип, приводить к эффектам перколяции, изменять критические показатели, может привести к новым фиксированным точкам в ренормгрупповом анализе [19]. С точки зрения магнитных свойств введение беспорядка обычно приводит к подавлению дальнего магнитного порядка при конечных температурах, влияя на намагниченность и восприимчивость. Таким образом, влияние примесей на ФП до сих пор является одним из актуальных вопросов теории критических явлений.

Отдельной актуальной задачей является исследование свойств низкоразмерных анизотропных спиновых и псевдоспиновых систем. Основой их уникального поведения является отсутствие или затруднённое формирование дальнего порядка. Также наличие фрустраций и анизотропия зачастую играют для низкоразмерных магнетиков принципиальную роль в формировании фазовой диаграммы и являются ответственными такие яркие явления, как магнитные плато [5], ступенчатый характер кривых намагничивания [20], квазифазы и псевдопереходы [21]. Вместо ФП в упорядоченное состояние в ряде фрустрированных (квази)одномерных магнетиков наблюдаются переходы между квазифазами – не вполне упорядоченными состояниями. При этом физические величины не испытывают настоящих разрывов, однако их термодинамическое поведение очень похоже на поведение при ФП, поэтому эти тонкие критические явления называют псевдопереходами. Эти явления дают надежду на приближение к запрещенным в низкоразмерных системах с короткодействующими взаимодействиями ФП при конечных температурах [3]. Кроме того, одномерные анизотропные спиновые модели применяются для описания свойств реальных материалов, в числе которых гетерометаллические соединения на молекулярной основе [22], полимерные координационные соединения [23], купраты [24; 25] и ванадаты [26].

Данное исследование направлено на расширение теоретических основ понимания сложного поведения низкоразмерных, фрустрированных и неупорядоченных магнитных систем, что подчеркивает его **теоретическую значимость**. Развитые в диссертации аналитические методы могут послужить основой для разработки новых теоретических подходов к изучению других низкоразмерных систем. Работа может внести вклад в понимание ФП, критического поведения, особенностей формирования фазовых состояний в системах с конкурирующими взаимодействиями (фрустрацией) и беспорядком, что имеет большое значение в современной физике конденсированного состояния.

Несмотря на теоретическую направленность работы, результаты диссертации обладают высоким потенциалом применения в различных областях науки и технологий. Результаты исследования могут быть использованы для направленного создания новых магнитных материалов с заданными свойствами, такими как материалы для спинтроники, магнитной записи

информации или магнитных сенсоров. Понимание влияния разбавления и фрустрации на критическое поведение может способствовать оптимизации характеристик уже существующих материалов. Методы, разработанные в данной диссертации, могут быть применены и к другим сложным системам, в которых присутствуют различные конкурирующие и сосуществующие взаимодействия, а также фрустрации и неупорядоченные структуры. Эти соображения подчеркивают **практическую значимость** диссертационной работы.

### Степень разработанности темы исследования

Тема исследования, связанная с разбавленными и фрустрированными системами изинговских спинов, до сих пор является активно развивающейся областью в физике конденсированного состояния. На сегодняшний день существует значительное количество теоретических и экспериментальных работ, посвященных различным аспектам поведения низкоразмерных, анизотропных, фрустрированных и разбавленных магнитных систем.

В последние десятилетия наблюдается значительный интерес к низкоразмерным спиновым системам, в частности, к сложным декорированным цепочкам с необычной геометрией и сочетанием различных обменных взаимодействий. Отсутствие традиционных ФП в одномерных моделях с короткодействующими взаимодействиями было установлено давно строгими теоремами [27]. В последние годы внимание ученых привлекли псевдопереходы, которые представляют собой резкие особенности термодинамических величин при конечных температурах и напоминают явления, наблюдаемые при обычных ФП. Изучение этих новых критических явлений открывает новые горизонты для понимания термодинамического поведения низкоразмерных систем [3; 21]. Экспериментальное подтверждение псевдопереходов остается предметом обсуждения. Тем не менее, уникальные особенности этих явлений могут быть использованы в различных приложениях, таких как создание датчиков температуры и других устройств [3].

Исследования фрустрированных спиновых систем также расширяются за счет изучения их связи с экзотическими состояниями материи, такими как спиновые жидкости и нематические фазы [7–9]. Фрустрация в магнитных системах приводит к сложным фазовым диаграммам и уникальным критическим и магнитным свойствам. Введение беспорядка в модели позволяет достовернее отражать характеристики реальных материалов, в которых почти неизбежно присутствуют структурные дефекты и примеси. Влияние беспорядка и примесей на критическое поведение и фазовые свойства спиновых систем также долгие годы является предметом активных исследований начиная с 70-х годов и до сих пор [10; 11; 16; 17]. Это направление исследований активно развивается, так как требует новых теоретических подходов для предсказания поведения таких систем.

Таким образом, степень разработанности темы исследования высока, однако требуется дальнейший углубленный анализ и теоретическое обоснование для понимания сложного поведения низкоразмерных, фрустрированных и неупорядоченных магнитных систем.

### Объект и предмет исследования

**Объектом** данной диссертационной работы является спин-псевдоспиновая модель изинговского магнетика, разбавленного заряженными подвижными примесями, способными вступать в заряд-зарядовое взаимодействие. Модель анализируется в различных пространственных размерностях, включая 1D цепочку, 2D квадратную и 3D простую решётки. Источником фрустрации системы является два механизма: конкуренция между зарядовыми и магнитными взаимодействиями, которая при определённых параметрах не позволяет одновременно минимизировать все слагаемые в гамильтониане, а также наличие подвижных взаимодействующих примесей, которое приводит к вырождению основного состояния системы. **Предметом** исследования являются фазовые свойства спин-псевдоспиновой модели разбавленного изинговского магнетика, включая анализ фазового состава, температурных фазовых диаграмм и диаграмм основного состояния. Особое внимание уделяется критическим свойствам системы, таким как фазовые переходы, псевдопереходы, критические индексы и классы универсальности системы. В исследовании также акцентируется внимание на влиянии фрустрации, немагнитных примесей и пространственной размерности системы на рассматриваемые физические свойства.

### Цель и задачи работы

**Цель** данной работы состояла в комплексном анализе фазовых состояний и критических свойств спин-псевдоспиновой модели фрустрированного изинговского магнетика, разбавленного заряженными подвижными взаимодействующими примесями, в различных пространственных размерностях. Для достижения поставленной цели были сформулированы и решены следующие **задачи**:

1. Провести исчерпывающее перечисление и анализ основных свойств и структуры фаз основного состояния системы для произвольной пространственной размерности. Рассчитать энергии фаз и соответствующие параметры порядка, построить фазовые диаграммы.
2. Построить точное решение обобщённой разбавленной изинговской цепочки во внешнем магнитном поле в рамках подхода трансфер-матрицы и теории марковских цепей, получить выражения для корреляторов и термодинамических величин. Получить аналитические выражения для остаточной энтропии и провести классификацию фрустрированных фаз.
3. Исследовать псевдокритические свойства разбавленной цепочки, определить наличие псевдопереходов, провести их классификацию и разработать феноменологическую теорию, объясняющую природу этих переходов.
4. Провести моделирование системы с большей пространственной размерностью (2D, 3D) методом Монте-Карло. Исследовать критические свойства разбавленного магнетика, определить типы ФП, а также рассчитать критические индексы системы в рамках теории конечно-размерного скейлинга и определить классы универсальности. Проанализировать комплексное влияние фрустрации и немагнитных примесей



на критические свойства, особенности формирования фазовых состояний системы, фазового расслоения и вырождения основного состояния. Провести сравнение свойств разбавленного магнетика разных пространственных размерностей.

5. Разработать комплекс программ для ЭВМ, с помощью которого можно исследовать фазовые и критические свойства изинговских моделей разбавленных магнетиков.

### **Методология и методы исследования**

Для введения в спиновую систему немагнитных взаимодействующих примесей используется псевдоспиновый формализм [28], в рамках которого с помощью псевдоспина  $S = 1$  описываются два заряженных состояния примесей с  $S_z = \pm 1$ , а состояние  $S_z = 0$  является магнитным и описывается обычным изинговским спином  $s = 1/2$ . Рассмотренные в данной работе допированные заряженные примеси обладают подвижностью и взаимодействуют с зарядовой подсистемой. Учёт условия сохранения полного заряда осуществляется через фиксацию псевдонамагниченности. Таким образом, немагнитные примеси выступают в качестве узловых дефектов для спиновой подсистемы, но способны создавать собственное зарядовое упорядочение.

Методы исследования, применяемые для анализа разбавленной цепочки, включают аналитические подходы, которые развиваются в данной диссертации. К ним относится расширение стандартного метода трансфер-матрицы, позволяющее быстро и эффективно рассчитывать термодинамические величины и корреляторы с заданной точностью, а также методика отображения спиновой цепочки на марковскую цепь.

Для моделирования систем бóльших пространственных размерностей использовался метод Монте-Карло с модифицированным алгоритмом Кавасаки-Метрополиса, сочетающий динамику Кавасаки для псевдоспинов, позволяющую сохранять полный заряд, и динамику Глаубера для спинов, проявляющуюся в обычном алгоритме Метрополиса.

### **Научная новизна работы**

Новизну работы определяют как оригинальные теоретические подходы, предложенные для точного и численного анализа исследуемой системы, так и ряд результатов и выводов, полученных впервые.

1. Разработан и представлен новый метод точного расчёта термодинамических свойств разбавленных спиновых цепочек в рамках большого канонического ансамбля. Выведены общие выражения для средних и корреляторов, а также для всех основных термодинамических величин. Данный метод превосходит традиционные подходы, обеспечивая более высокую скорость и эффективность расчётов. Кроме того, метод является универсальным и может быть обобщён для применения к другим (квази)одномерным системам. В рамках данного подхода детально рассмотрено точное решение одномерной модели Изинга с подвижными немагнитными взаимодействующими примесями при наличии условия сохранения полного заряда.

2. Для анализа свойств фаз основного состояния впервые использован универсальный подход отображения спиновых цепочек на марковские цепи. Данный метод позволяет получать аналитические выражения для остаточной энтропии различных фрустрированных фаз, а также на границах раздела фаз, что является труднодостижимым в рамках стандартного подхода. Методика обеспечивает возможность определения равновесных свойств фаз, расчёта корреляционных функций и корреляционных длин, а также углублённого анализа структуры фрустрированных фаз, который представляет сложность для традиционного анализа. Обнаружено большое многообразие фрустрированных фаз, классификация которых возможна по типу соответствующей марковской цепи.
3. Ранее в ряде сложных декорированных фрустрированных цепочек были обнаружены псевдопереходы – особенности термодинамического поведения, похожие на ФП. В данной работе впервые обнаружены псевдопереходы в цепочках с примесями. Кроме того, впервые обнаружен новый тип псевдоперехода «второго рода», основной механизм которого связан с фазовым расслоением. Построена феноменологическая теория, описывающая псевдопереходы «второго рода».
4. Проведенное моделирование методом Монте-Карло привело к выявлению ФП типа порядок-порядок и возвратных ФП, а также к наблюдению вырождения основного состояния, которое проявляется не только в точке фрустрации, но и в её окрестности. Эти эффекты обусловлены комплексным влиянием конкуренции двух упорядочений и наличия немагнитных примесей.
5. Впервые показано, что в 2D и 3D системах вблизи области фрустрации присутствуют сильно выраженные ФП первого рода, которые соотносятся с областями псевдопереходов в 1D цепочке. Выявлен класс универсальности модели Изинга, который нарушается при увеличении плотности заряда в системе, что приводит к появлению неуниверсального критического поведения.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Развита новая аналитическая методика исследования разбавленных цепочек. Предложено расширение метода трансфер-матрицы в большом каноническом ансамбле, которое позволяет быстро и эффективно рассчитывать термодинамические величины и корреляторы при фиксированной плотности частиц. Развита методика исследования свойств фрустрированных фаз, основанная на отображении спиновых цепочек на марковские цепи, которая позволяет получать аналитические выражения для остаточной энтропии, определять равновесные состояния, проводить анализ структуры фрустрированных фаз, аналитически рассчитывать корреляционные функции, и проводить классификацию фаз по их свойствам.
2. Обнаружено большое разнообразие фаз основного состояния, большинство из которых является фрустрированными с ненулевой остаточной энтропией. Эти фазы формируют сложные и богатые фазовые диаграммы основного состояния, вид которых качественно не зависит от пространственной размерности системы; их тип

- определяется степенью разбавления немагнитными примесями и величиной внешнего магнитного поля.
3. Проведён детальный анализ точного решения обобщённой одномерной модели Изинга с подвижными заряженными взаимодействующими примесями при наличии условия сохранения полного заряда примесей. Показано, что два типа фрустрированных фаз определяются типом соответствующей марковской цепи, а переходы между различными типами фаз можно осуществить с помощью магнитного поля.
  4. В «чистой» цепочке присутствуют псевдопереходы «первого рода» – особенности термодинамического поведения, напоминающие ФП между зарядовой и магнитной квазифазами. Энтропия и намагниченность демонстрируют скачки, напоминающие ФП первого рода, тогда как теплоёмкость и восприимчивость имеют острые пики и универсальные псевдокритические показатели, что напоминает критическое поведение при ФП второго рода.
  5. В разбавленной цепочке выявлен новый тип псевдопереходов «второго рода», напоминающих ФП второго рода с особенностями в температурных зависимостях энтропии и намагниченности, и резкими скачками теплоёмкости и восприимчивости. Природа новых псевдопереходов связана с фазовым расслоением на магнитоупорядоченную часть и зарядовые капли – макроскопические области, содержащие только одноимённо заряженные примеси. Применение феноменологического подхода в рамках построения Максвелла для описания фазового расслоения демонстрирует отличное согласование с точным решением.
  6. Обнаружено, что комплексное влияние конкуренции зарядовых и магнитных упорядочений, а также присутствия немагнитных примесей, проявляется во множестве необычных эффектов. Разбавленная магнитная фаза формируется путём двух последовательных ФП: первый представляет собой магнитный переход к (анти)ферромагнитному упорядочению, а второй – низкотемпературный переход, сопровождающийся фазовым расслоением с образованием зарядовой капли. Основное состояние системы оказывается вырожденным из-за конкуренции двух типов упорядочений в области фрустрации, а не в конкретной точке пространства параметров. Вблизи области фрустрации наблюдаются ФП типа «порядок-порядок» и возвратные переходы, что подчеркивает сложность поведения системы в этом диапазоне. Вблизи области фрустрации наблюдаются сильно выраженные ФП первого рода, которые в системах больших размерностей соотносятся с областями псевдопереходов в цепочке. Выявлен класс универсальности модели Изинга, который нарушается при увеличении плотности заряда в системе, что приводит к появлению неуниверсального критического поведения.

**Достоверность научных результатов** подтверждается независимыми численными расчетами и сравнением их результатов с прочими известными результатами моделирования; близостью результатов, полученных в различных приближениях, их сравнением с точными

решениями; непротиворечивостью используемых моделей и основных положений статистической физики.

### **Апробация работы**

Основные результаты работы докладывались на 24 конференциях международного и всероссийского уровней: Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка» (2020, 2022, Верхняя Сысерть; 2024, Абзаково); Проблемы физики твердого тела и высоких давлений (2022, 2023, 2024, Сочи); Materials Science and Nanotechnology MSN-2024 (Екатеринбург, 2024); XXIII Международный симпозиум «Нанопизика и наноэлектроника» (2019, 2020, 2021, 2023, Нижний Новгород); XX Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (2017, 2018, 2019, 2022, Екатеринбург); VIII Euro-Asian Symposium EASTMAG-2022: Trends in MAGnetism (2022, Казань); Intermag Conference (Virtual, Online, 2020); Международный молодежный научный форум «ЛОМОНОСОВ-2020» (2020, Москва); Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах (2019, Махачкала); 17th Czech and Slovak Conference on Magnetism (2019, Кошице, Словакия); Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (2017, Екатеринбург; 2019, Севастополь); XVIIth International Feofilov Symposium on Spectroscopy of Crystals Doped with Rare Earth and Transition Metal Ions (2018, Екатеринбург); Новое в магнетизме и магнитных материалах: XXIII Международная конференция (2018, Москва)

Диссертационная работа была выполнена при поддержке грантов: Российского научного фонда № 24-22-00196 (2024–2025) и № 24-21-20147 (2024–2025); Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» № 22-1-5-123-1 (2022–2026); Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Программа развития Уральского федерального университета в рамках Программы «Приоритет-2030»; Государственные задания FEUZ-2023-0017, FEUZ-2020-0054); РФФИ № 18-32-00837/18 (2018–2019);

### **Публикации по диссертации**

Список всех публикаций автора по теме диссертации представлен в Разделе 4.7 на стр. 141. Он включает в себя 7 статей, рекомендованных ВАК РФ, из них 6 статей индексируются базами Web of Science и Scopus, а также 31 тезис докладов всероссийских и международных научных конференций. Получено 1 свидетельство регистрации базы данных и 1 свидетельство регистрации программы для ЭВМ.

### **Личный вклад автора**

В содержании диссертации и основных положениях, выносимых на защиту, в полной мере отражен личный вклад автора в опубликованные исследования. Тема диссертации была определена совместно с научным руководителем, к.ф.-м.н. Пановым Ю. Д., что позволило четко сформулировать цели и задачи работы, а также выбрать адекватные методики исследования. Все задачи, представленные в диссертации, были решены автором лично. Автор также

принимала активное непосредственное участие в написании всех публикаций; её вклад в работы, выполненные в соавторстве, считается равнозначным.

### Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из оглавления, списка сокращений и условных обозначений, введения, 4 глав, заключения и 1 приложения. Полный объём диссертации составляет 146 страниц, включая 52 рисунка и 8 таблиц. Список литературы содержит 201 наименование.

В **первой главе** проведён детальный обзор современных исследований, посвящённых моделированию и исследованию фазовых состояний и критических свойств низкоразмерных магнетиков, фрустрированных, разбавленных систем. Введена исследуемая модель, рассматриваются основные аналитические и численные подходы к её решению. **Вторая глава** посвящена общим фазовым свойствам разбавленного изинговского магнетика для произвольной пространственной размерности. **Третья глава** рассматривает точное решение цепочки в рамках расширенного подхода трансфер-матрицы и отображения системы на марковскую цепь. Особое внимание уделяется обнаружению и анализу псевдопереходов в цепочке, предложено феноменологическое описание псевдопереходов, связанное с фазовым расслоением. В **четвёртой** главе представлены результаты моделирования двумерной и трёхмерной систем, представлен модифицированный алгоритм Кавасаки-Метрополиса, рассмотрены фазовые и критические свойства, влияние фрустрации и немагнитных примесей на них.

## Глава 1. Обзор литературы

### 1.1 Низкоразмерные системы изинговских спинов

Отсутствие традиционных ФП при конечных температурах в одномерных моделях с короткодействующими взаимодействиями было установлено достаточно давно строгими теоремами [27]. Хотя существуют некоторые одномерные модели с дальнедействующими взаимодействиями, которые демонстрируют ФП при конечной температуре, например, одномерная модель Изинга с дальнедействующим обменным взаимодействием [29—31]. Существует ряд примеров одномерных систем с короткими взаимодействиями, которые являются неравновесными [1], неоднородными [32] или неупорядоченными [33]. Кроме того, некоторые особые одномерные модели демонстрируют при конечной температуре ФП I рода, такие как модель Киттеля [34], модель Чуи-Уикса [35] и модель Доксуа-Пейрара [36].

В том числе, отсутствие ФП в одномерных моделях является прямым следствием теоремы Перрона-Фробениуса [37]. ФП наступил бы в случае, если бы трансфер-матрица имела вырождение собственных значений. Однако, если рассмотреть случай, когда некое собственное значение трансфер-матрицы находится крайне близко к наибольшему собственному значению, то будет наблюдаться кроссовер, сильно приближенный к ФП. Не так давно были обнаружены так называемые псевдопереходы, в которых наблюдается данный эффект. Впервые термин «псевдопереходы», наряду с термином «квазифазы» был использован Тимониным для описания особенностей термодинамического поведения модели спинового льда в магнитном поле [38]. Однако далее псевдопереходы стали ассоциировать с вполне определёнными универсальными особенностями термодинамического поведения, которые были обнаружены в широком классе различных (квази)одномерных систем.

Псевдопереходы проявляются как резкие особенности разных термодинамических величин при конечных температурах. С одной стороны, их поведение напоминало ФП I рода, поскольку первые производные термодинамического потенциала, такие как энтропия и намагниченность, испытывали резкие конечные скачки. Тем не менее, термодинамические величины не демонстрировали настоящих разрывов первого рода, и оставались непрерывными функциями температуры и других параметров. С другой стороны, вторые производные термодинамического потенциала, такие как удельная теплоёмкость и магнитная восприимчивость, демонстрировали резкие особенности, напоминающие ФП II рода. Максимальные значения пиков достигали гигантских величин, но всё же конечных. Кроме того, теплоёмкость, восприимчивость и корреляционная длина характеризовались универсальным набором (псевдо)критических индексов [2; 39]. Общей чертой псевдопереходов является то, что некоторые недиагональные элементы трансфер-матрицы становятся очень малыми (почти нулевыми), поскольку соответствующие состояния имеют очень большую, хотя и конечную энергию.

Одной из популярных реальных систем с похожими особенностями является азурит ( $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ ) [40], теоретические исследования которого привели к оформлению нового класса точно решаемых моделей – декорированных изинговских цепочек. Позднее именно в таких цепочках и были обнаружены псевдопереходы [21]. Хотя экспериментальное обнаружение псевдопереходов все еще является предметом дискуссии, уникальные особенности этих явлений могли бы найти множество приложений [41]. На практике псевдокритическая область может быть настолько узкой, что псевдопереход стал бы неотличимым от настоящего ФП в рамках лабораторных измерений. Осуществление подобных наблюдений не только бы имело фундаментальное значение в области понимания ФП, но и дало бы многообещающий потенциал в технических приложениях [41]. Особенностью псевдопереходов является возможность независимо управлять псевдокритической температурой различными параметрами системы и величиной скачков термодинамических функций, что является привлекательным свойством для проектирования, например, датчиков температуры. Зачастую даже удаётся получить в явном виде зависимости температуры псевдоперехода от параметров гамильтониана, и управлять ей, к примеру, внешним магнитным полем. Кроме того, с фундаментальной точки зрения псевдопереходы дают надежду на приближение к запрещенным ФП при конечных температурах [3; 41]. Хотя теоретически возможно проектировать искусственные материалы с заданными свойствами, например, с помощью кубитов [42], это ещё не было реализовано.

Существование псевдоперехода подчиняется правилу, сформулированному Рохасом [43; 44]: если остаточная энтропия непрерывна хотя бы с одной стороны на границе между фазами основного состояния, псевдопереход при конечной температуре будет наблюдаться вблизи этой границы. На микроскопическом уровне это правило означает [39], что фазы основного состояния с одинаковой энергией на границе не образуют смешанного состояния с более высокой энтропией, чем у соседних фаз. Практически это довольно редкая ситуация, которая накладывает существенные ограничения на природу соседних фаз и делает псевдопереход достаточно редким явлением. Высокотемпературное состояние при псевдопереходе характеризуется высокой энтропией, однако это не просто следствие беспорядка. В отличие от обычных ФП типа порядок-беспорядок, это состояние представляет собой фрустрированную квазифазу, не смешивающуюся с низкотемпературным низкоэнтропийным состоянием на микроскопическом уровне. Таким образом, фрустрация является необходимым наличием в системе псевдопереходов, однако же не достаточным.

Прежние исследования псевдопереходов были сосредоточены на изучении сложных фрустрированных (квази)одномерных систем, включая декорированные цепочки [2; 45], такие как алмазоподобные цепочки [46–48], лестницы [49; 50], трубки [51], двойные тетраэдрические цепочки [52; 53] и гексагональные нанопроволоки [54]. Кроме того, псевдопереходы были обнаружены в анизотропных моделях Поттса с  $q$ -состояниями [39; 55].

На самом деле, источником фрустраций в спиновых цепочках могут быть примеси. В качестве источника немагнитных примесей, помимо химического замещения, важно упомянуть фотоиндуцированное изменение магнитного состояния ионов в одноцепочечных магнетиках [56], а также реакцию диспропорционирования заряда, характерную для широко-

го класса магнетиков [57]. Однако ранее в разбавленных спиновых системах с фрустрацией, вызванной беспорядком, псевдопереходы не наблюдались. Ранее было доказано отсутствие псевдопереходов в разбавленной цепочке Изинга с одним типом взаимодействующих примесей [58]. Хотя примеси и формировали отдельную фазу, всё же в данной разбавленной системе отсутствовали фрустрированные фазы с необходимыми свойствами.

В целом, изучение низкоразмерных спиновых моделей затрагивает теоретическую основу, необходимую для понимания быстрорастущего класса материалов, известных как одноцепочечные магнетики [4; 59]. В последние десятилетия вновь наблюдается большой интерес к изучению низкоразмерных систем изинговских спинов из-за их возможных технологических применений. Благодаря медленной магнитной релаксации при конечных температурах такие магнетики можно рассматривать для создания устройств хранения информации, сенсоров. Кроме того, модели изинговских магнетиков имеют принципиальное значение с фундаментальной точки зрения, поскольку они являются наиболее базовыми моделями в статистической физике, и являются полигонами для проверки возможностей многих теоретических подходов.

Одним из важных вопросов является влияние одноионной анизотропии на магнитные свойства изинговских магнетиков, которую можно учесть расширением до модели Блюма-Капеля. В присутствии анизотропии некоторые низкоразмерные магнитные системы демонстрируют магнитные плато [5], и это может повлиять на критические свойства системы. Ступенчатый характер кривых намагничивания изинговских магнетиков согласуется со многими экспериментальными данными [20]. Также механизм возникновения магнитных плато в спиновых цепочках может обеспечиваться фрустрацией, димеризацией и периодическим магнитным полем [6].

## 1.2 Фрустрированные спиновые системы

Первоначально фрустрированные спиновые системы характеризовались конкурирующими взаимодействиями между спинами, которые не могут быть удовлетворены одновременно, что приводит к сложным основным состояниям и богатым физическим явлениям. Концепция фрустрации была введена Жераром Тулузом в 1977 году [60], и первоначально она подразумевала только геометрическую, или сильную фрустрацию. В геометрической концепции фрустрация может быть вызвана структурой решетки с антиферромагнитным взаимодействием между ближайшими соседями (как происходит в треугольной, гранецентрированной кубической, гексагональной плотноупакованной, КагOME, сотовидной и т.д. решетках). Пожалуй, антиферромагнитная модель Изинга на треугольной решётке [61] является самым известным примером спиновой системы с геометрической фрустрацией. В этом случае невозможно расположить все спины так, чтобы каждая пара соседних спинов была антипараллельна и удовлетворяла обменное взаимодействие в гамильтониане.



Долгое время считалось, что фрустрация существует только при наличии треугольной геометрии. Однако обширные исследования различных моделей и реальных материалов, демонстрирующих фрустрацию показали, что это не так [7; 14; 15; 58; 62–67]. Следующая основная концепция фрустрации – наличие конкуренции двух и более взаимодействий, которая ведет к вырождению основного состояния [62]. Например, такими конкурирующими взаимодействиями могут выступать ферромагнитные и антиферромагнитные обменные взаимодействия, как в модели Изинга со вторыми соседями на квадратной решётке [63; 64]. Однако фрустрации возможны не только в многомерных системах, но и в цепочках. Один из таких примеров – модель Изинга на одномерной цепочке с антиферромагнитным взаимодействием между ближайшими соседями во внешнем магнитном поле [68].

Системы с ненулевой энтропией основного состояния (остаточной энтропией) также можно назвать фрустрированными [67]. В таком случае можно говорить о вырождении основного состояния с точки зрения существования бесконечного числа конфигураций, имеющих одинаковую наименьшую внутреннюю энергию. Однако наличие ненулевой остаточной энтропии также является необязательным, ведь число различных конфигураций с минимальной энергией может быть конечным, и в термодинамическом пределе энтропия будет равна нулю, а система будет упорядоченной или частично упорядоченной. В таком случае вырождение основного состояния системы будет слабым, и асимптотически незначимым.

Фрустрированные системы демонстрируют уникальное поведение, такое как высокая степень вырождения основного состояния, неколлинеарные конфигурации спинов, сложности формирования упорядоченного состояния, и эффекты снятия вырождения “порядок из беспорядка” [12]. Интерес к моделям фрустрированных магнетиков как в одномерном, так и в двумерном случаях растет в связи с их тесной связью со спиновыми жидкостями [8], льдами [9], нематиками и другими физическими системами, обладающими экзотическими свойствами. Квантовые спиновые жидкости характеризуются дробными возбуждениями и отсутствием магнитного порядка, в то время как нематические фазы демонстрируют направленный порядок без трансляционной симметрии. Эти фазы часто стабилизируются высокой степенью вырождения и конкуренцией между различными взаимодействиями в системе. Фрустрации в магнитных системах также влияют на ФП, магнитные свойства и усиливают магнетокалорический эффект [13; 14].

Наличие фрустраций в системе зачастую приводит к новым особенностям критического поведения, таким как ФП I рода, изменение классов универсальности, неуниверсальное критическое поведение. Это обусловлено тем, что вырождение состояния системы приводит к ослаблению (псевдо)спиновых связей и, следовательно, к повышенной чувствительности к различным внешним воздействиям [15]. К ним можно отнести дополнительные взаимодействия в гамильтониане, слабые магнитные поля, тепловые флуктуации, а также анизотропии, дефекты и примеси. Такие эффекты, в частности, наблюдаются во фрустрированной модели Изинга с конкуренцией взаимодействий между первыми и вторыми соседями разной размерности [63–66], фрустрированной XY модели [69; 70], антиферромагнитной модели Гейзенберга [71] на треугольной решётке, фрустрированной модели Поттса [72].

Исследование критического поведения в таких системах сопряжено с серьезными техническими трудностями, в частности, связанными со сложным ландшафтом свободной энергии, содержащим множество локальных метастабильных термодинамических состояний, в которых система может застрять. В связи с этим обычно фрустрированные системы требуют использования более сложных численных алгоритмов [7]. Также превращения во фрустрированных системах могут иметь характер фазовых переходов первого рода, при этом возникают трудности с определением критических точек из-за высокой степени вырождения состояний.

В данной работе концепция фрустрации реализуется через два основных механизма. Во-первых, это связано с конкуренцией между зарядовыми и магнитными взаимодействиями в гамильтониане. Во-вторых, наличие подвижных примесей приводит к тому, что большинство фаз при температуре  $T = 0$  демонстрируют выраженное вырождение основного состояния с ненулевой остаточной энтропией, что также является проявлением фрустрации. Сочетание этих двух эффектов придаёт рассматриваемой системе особую сложность и делает её интересной для изучения.

### 1.3 Спиновые системы с беспорядком

Решеточные модели могут быть адаптированы не только для “чистых” магнетиков, но и для систем с немагнитным разбавлением, дефектами или случайными магнитными полями. Эти неупорядоченные и неоднородные магнитные системы представляют собой более сложные и интересные объекты исследования по сравнению с “чистыми” магнетиками. В реальных материалах всегда присутствуют тот или иной беспорядок – структурные дефекты, неоднородности, примеси, поэтому внесение в беспорядка расширяет возможности использования рассматриваемой модели для описания реальных физических систем. Более того, по мере совершенствования экспериментальных методов, особенно в наномасштабных материалах, растет потребность в теоретических основах, которые могут предсказывать поведение сложных систем с множественными типами дефектов.

Беспорядок, обусловленный внесением в систему примесей и различных дефектов структуры, существенно влияет на критическое поведение и фазовые состояния спиновых систем [10; 11; 16]. Введение примесей может привести к локализованным состояниям и магнитной фрустрации, изменять симметрию системы и потенциально приводить к появлению новых фаз или изменению существующих. Примеси могут иметь различную природу и оказывать разное влияние на ФП и свойства систем. Беспорядок может изменить природу ФП от первого ко второму роду или вызвать эффекты скругления в низкоразмерных системах [73]. Исследования показали, что неупорядоченные системы демонстрируют сложное поведение, такое как метастабильность и явления замораживания во время ФП. Наличие примесей способно индуцировать новые ФП, менять их тип, приводить к эффектам перколяции, изменять критические показатели, может привести к новым фиксированным точкам в ренормгруппо-

вом анализе [19]. С точки зрения магнитных свойств введение беспорядка обычно приводит к подавлению дальнего магнитного порядка при конечных температурах, влияя на намагниченность и восприимчивость.

Влияние примесей на ФП II рода изучалось достаточно давно [74], и до сих пор является одним из актуальных вопросов теории критических явлений. Вмороженные примеси способны нарушать дальнедействующие флуктуации, что приводит к сглаживанию сингулярностей термодинамических функций и исчезновению критического поведения [17]. Также было обнаружено, что введение примесей способно установить новое критическое поведение с новыми критическими индексами (КИ) [18]. Был предложен критерий Харриса, который позволяет качественно предсказать влияние примесей, основываясь исключительно на КИ чистой системы [17]. Согласно этому критерию, примеси изменяют критическое поведение, если КИ удельной теплоёмкости чистой системы  $\alpha > 0$ . В противоположном случае вмороженные примеси не влияют на критическое поведение. В классической работе Доенко [16] также было обнаружено сохранение класса универсальности Изинга в пределе малых концентраций примесей для модели Изинга со случайными связями.

Специфика беспорядка в рассматриваемой системе заключается в том, что допированные заряженные примеси обладают подвижностью, что позволяет им перемещаться по системе. Примеси взаимодействуют с зарядовой подсистемой посредством заряд-зарядовых корреляций и выступают в качестве фиксированного «псевдоспинового» поля, которое поддерживает псевдонамагниченность системы (характеризуемую полным зарядом). Для спиновой подсистемы эти примеси являются узельными дефектами, рвущими связи между спинами. Таким образом, реализуется случай отождённого (annealed) беспорядка, противопоставляемый случаю вмороженного (quenched) беспорядка [11].

## 1.4 История и формулировка рассматриваемой модели разбавленного магнетика

Выяснение микроскопической природы необычных свойств систем с сильными межчастичными взаимодействиями становится особенно сложной задачей в условиях конкуренции и/или сосуществования различных типов упорядочений. Особенно актуально эта проблема стояла для высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) купратов, где наблюдается сосуществование и конкуренция спинового, сверхпроводящего и зарядового упорядочений.

Исследования корреляции между магнетизмом и сверхпроводимостью в купратах проводились уже давно [75], однако позже появились многочисленные экспериментальные данные, указывающие на существование зарядового упорядочения и взаимное влияние спинового и зарядового упорядочений в купратах [76; 77]. Однако общее понимание механизмов формирования богатого многообразия фаз таких сложных систем с “переплетенными порядками” на данный момент недоступно.

Таблица 1 — Псевдоспиновый формализм для  $\text{CuO}_4$  центров в СПС модели ВТСП купратов

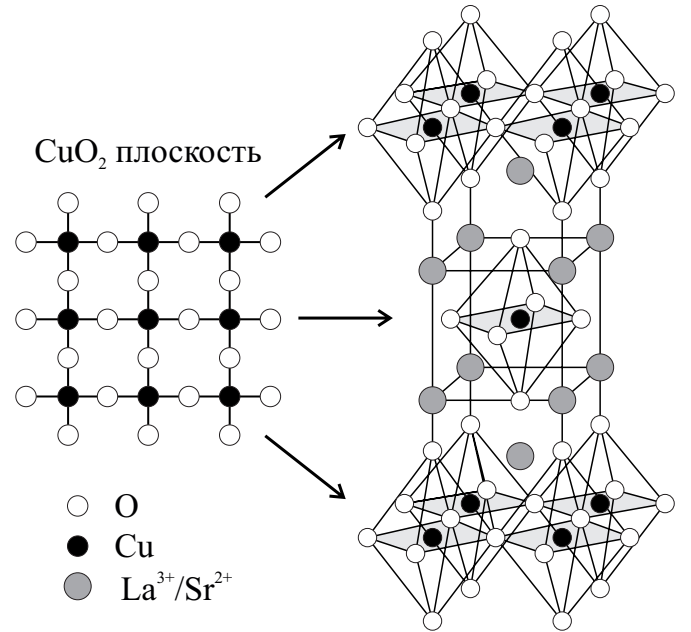
состояние $\text{CuO}_4$ центра	эффективный ионный Cu центр	состояние псевдоспина $S = 1$	спиновое состояние
$[\text{CuO}_4]^{7-}$	$\text{Cu}^{1+} (3d^{10})$	-1	0
$[\text{CuO}_4]^{6-}$	$\text{Cu}^{2+} (3d^9)$	0	$\pm 1/2$
$[\text{CuO}_4]^{5-}$	$\text{Cu}^{3+} (3d^8)$	+1	0

Для описания систем с различными типами степеней свободы широко используются псевдоспиновые модели [28; 78]. Рассматриваемая в данной работе спин-псевдоспиновая (СПС) модель в двумерном варианте была введена нами ранее [78; 79] как минимальная модель, описывающая конкуренцию зарядовой (связанной с псевдоспином) и спиновой степеней свободы в квазидвумерном ВТСП купрате в нормальном состоянии. Эта модель является статическим пределом полной модели [28; 78; 80–85], учитывающей одно- и двухчастичный переносы и обменное взаимодействие Гейзенберга.

Большинство ВТСП материалов имеют слоистую кристаллическую структуру, и основную роль в таких сверхпроводниках играют плоскости  $\text{CuO}_2$ , разделенные слоями других ионов (см. Рисунок 1.1 для соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ). В купратах величина параметра решетки в направлении, перпендикулярном  $\text{CuO}_2$  плоскостям, существенно превышает внутривещественные линейные размеры [86]. Из-за этого межплоскостные волновые функции слабо перекрываются, и основную роль в физике всех слоистых ВТСП купратов играют гибридные орбитали меди и кислорода, лежащие в плоскости. В связи с этим купраты чаще всего рассматриваются как квазидвумерные системы.

В псевдоспиновом формализме локальное гильбертово пространство состояний медь-кислородных купратов сводится к лишь трём эффективным валентным состояниям ионов меди в плоскостях  $\text{CuO}_2$ . Многоэлектронные валентные центры  $[\text{CuO}_4]^{7-,6-,5-}$  (номинально  $\text{Cu}^{1+,2+,3+}$ ) соответствуют компонентам псевдоспинового  $S = 1$  зарядового триплета. Наряду с  $[\text{CuO}_4]^{6-}$  центрами, обладающими спином  $1/2$ , рассматриваются взаимодействующие  $[\text{CuO}_4]^{5-}$  и  $[\text{CuO}_4]^{7-}$ -центры со спином 0 в основном состоянии. Три валентных  $[\text{CuO}_4]$ -центра являются зарядовым триплетом и связаны с тремя состояниями псевдоспина  $S = 1$  (см. Таблицу 1).

Электронный  $[\text{CuO}_4]^{7-}$  и дырочный  $[\text{CuO}_4]^{5-}$  центры являются немагнитными

Рисунок 1.1 — Кристаллическая структура соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  и структура  $\text{CuO}_2$  плоскости

состояниями с зарядами  $\pm 1$ , отсчитываемыми от заряда, которым обладает магнитное состояние  $[\text{CuO}_4]^{6-}$ . Это магнитное состояние с  $S_z = 0$  является спиновым дублетом  $s = 1/2$ . Таким образом, система имеет две зарядовые степени свободы, связанные с двумя состояниями псевдоспина  $S = 1$ , и две спиновые степени свободы, связанные с двумя состояниями спина  $s = 1/2$ . Оксиды меди на основе кластеров  $\text{CuO}_4$  рассматриваются как системы, неустойчивые относительно реакции диспропорционирования



с образованием электронных и дырочных центров. С этой точки зрения рассматриваемая модель является самым простым представлением конкуренции разных упорядочений в системах со смешанной валентностью, в которые входит большой ряд соединений, включая купраты, ортоникелаты, ванадаты [57; 87]. Конкурирующим механизмом снятия орбитального вырождения в таких магнетиках является  $d-d$ -диспропорционирование, предполагающее образование системы связанных или относительно свободных электронных  $d^{n+1}$  и дырочных  $d^{n-1}$  центров, отличающихся парой электронов или дырок [57].

В более общем смысле рассматриваемая нами СПС модель принадлежит к широкому классу псевдоспиновых моделей типа БЭГ [88], которая первоначально была использована для описания ФП и фазового расслоения в смеси  $\text{He}^3$ - $\text{He}^4$  нормального и сверхтекучего жидкого гелия. Расширения модели БЭГ широко используются для описания свойств смесей квантовых и классических жидкостей, бинарных и тройных сплавов [89; 90], микроэмульсий [91], холодных атомов, сверхпроводников [92] и многих других физических систем [93]. Таким образом, псевдоспиновые модели во многом универсальны и хорошо приспособлены для описания систем с различными степенями свободы, а также позволяют включать различные типы взаимодействий, что предоставляет широкую возможность для расширения и улучшения модельного описания сложных систем вроде высокотемпературных сверхпроводников. Аналогичная “спин-зарядовая” модель типа БЭГ для купратов была рассмотрена в работе [94]. В одномерном варианте данная модель позволяет исследовать особенности одномерных купратов типа  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$ ,  $\text{Ca}_2\text{CuO}_3$  или  $\text{SrCuO}_2$ , содержащих купратные цепочки  $[\text{CuO}]_\infty$  в качестве своего основного структурного элемента [25].

Самый общий, и наиболее простой физической реализацией рассматриваемой модели является изинговский магнетик, разбавленный немагнитными подвижными взаимодействующими примесями, состояния которых описываются тремя проекциями псевдоспина  $S = 1$ . Описание такой системы в рамках псевдоспинового формализма представлено в Таблице 2. Таким образом, каждый узел системы может находиться либо в одном из заряженных состояний (бесспиновые состояния псевдоспина  $S_z = \pm 1$  для положительно и отрицательно заряженных примесей соответственно), либо в одном из спиновых состояний (состояния спина  $s_z = \pm 1/2$ , соответствуют проекции псевдоспина  $S_z = 0$ ).

Гамильтониан рассматриваемой  $d$ -мерной системы имеет следующий вид:

$$\mathcal{H} = \Delta \sum_{i=1}^N S_{z,i}^2 + V \sum_{\langle ij \rangle} S_{z,i} S_{z,j} + J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_{z,i} \sigma_{z,j} - h \sum_{i=1}^N \sigma_{z,i} - \mu \sum_{i=1}^N S_{z,i}, \quad (1.1)$$

Таблица 2 — Псевдоспиновый формализм для модели разбавленного изинговского магнетика с немагнитными подвижными примесями

состояние псевдоспина $S = 1$	состояние спина $s = 1/2$	физический смысл
+1	0	примесь с $\oplus$ зарядом (бесспиновый центр)
0	$\pm 1/2$	магнитное состояние (спиновый дублет)
-1	0	примесь с $\ominus$ зарядом (бесспиновый центр)

где  $\Delta$  – одноузельные заряд-зарядовые корреляции, которые имеют вид одноионной анизотропии для псевдоспина;  $V$  – межузельное заряд-зарядовое взаимодействие псевдоспинов,  $J$  – изинговское обменное взаимодействие спинов,  $h$  – внешнее магнитное поле. Здесь и ниже введено обозначение  $\sigma_{z,i} = P_{i,0}s_{i,z}/s^2$ , где  $P_{i,0} = 1 - S_{i,z}^2$  – оператор проектирования на магнитные состояния со спином  $s = 1/2$ . Суммирование проводится по  $N = L^d$  узлам,  $L$  – линейный размер системы,  $\langle ij \rangle$  означает суммирование по ближайшим соседям. С помощью химического потенциала  $\mu$  на систему наложено ограничение в виде сохранения полного заряда, что можно выразить в виде фиксации плотности заряда немагнитных примесей:

$$n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_{z,i} = const. \quad (1.2)$$

«Взаимодействие» и конкуренция между зарядовым и спиновым упорядочениями в модели обусловлены кинематическим ограничением, связанным с условием полноты набора возможных состояний на данном узле решетки: спинового дублета с  $S_z = 0$  и  $s_z = \pm 1/2$  и зарядового дублета с  $S_z = \pm 1$  и  $s = 0$ . В явном виде в гамильтониане (1.1) эта связь учтена во входящем в  $\sigma_z$  проекционном операторе  $P_0$ , где он играет роль оператора спиновой плотности.

Отметим также, что к выражению (1.1) в приближении точечных зарядов может быть приведено заряд-зарядовое взаимодействие  $\hat{V}$  достаточно общего вида. Используя проекторы на различные состояния узла,  $P_{\pm 1,0}$ , запишем

$$\hat{V} = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{a,b} V_{ab} P_{ia} P_{jb}.$$

Предполагая, что для ближайших соседей на квадратной решетке  $V_{ab} = V q_a q_b$ , где  $q_0$  – заряд спинового центра,  $q_1 = q_0 + 1$  и  $q_{-1} = q_0 - 1$  – заряды псевдоспиновых центров, соответственно, и учитывая тождество  $S_{iz} = P_{i1} - P_{i,-1}$ , получим выражение

$$\hat{V} = V \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz} + 4V q_0 \sum_i S_{iz} + 2NV q_0^2,$$

которое отличается от приведённого в (1.1) только сдвигом уровней отсчета энергии и химического потенциала.



Подобно системам с сохраняющимся параметром порядка [95; 96], решеточным бозонам или расширенным моделям Хаббарда [97–100], данная модель демонстрирует различные формы разделения фаз. Двумерная версия этой модели рассматривалась в рамках приближения среднего поля (ПСП) и приближения Бете в работах [79; 101–105], а также с помощью метода Монте-Карло [J0].

## 1.5 Обзор методов исследования

### 1.5.1 Методы исследования спиновых цепочек

Классические спиновые цепочки являются фундаментальными моделями в статистической механике, магнетизме и физике конденсированного состояния. Их преимуществом является то, что для спиновых цепочек часто удается получить точное решение. Это допустимо для взаимодействий с конечным радиусом, включая экспоненциально затухающие и экранированные кулоновские взаимодействия. Однако такие модели с короткодействующими парными взаимодействиями (в частности, экспоненциально затухающие) обладают серьезным ограничением в контексте исследования критических явлений: они не демонстрируют ФП при ненулевых температурах. Однако одномерные модели являются удобными “полигонами” для проверки новых методов исследования более сложных систем, а их точные решения закладывают основу для понимания сложного поведения реальных физических систем и занимают важное место в изучении таких явлений, как ФП в статистической физике. Модель Изинга [106] является самой простой, и исторически самой первой моделью в магнетизме и статистической физике, решаемой точно даже в двумерном случае (знаменитое решение Онсагера [107]). Цепочка Изинга имеет лишь одну стабильную “критическую точку” – при нуле температур в отсутствие внешнего поля. Но даже она позволяет качественно описывать магнитные и термодинамические свойства реальных систем, и использоваться для проверки гипотез подобия [108].

Методы, используемые для изучения этих систем, варьируются от точных решений до различных приближений и численного моделирования. Для одномерных спиновых цепочек часто удается получить точное решение с использованием трансфер-матрицы Крамерса-Ванье [109]. Сложности возникают при рассмотрении замороженного беспорядка, что требует применения различных приближений [110]. Но поскольку подвижные примеси являются частью статистического ансамбля системы, включение в гамильтониан члена с химическим потенциалом позволяет точно учесть наличие таких примесей в цепочке.

В Главе 3, наряду с более эффективным универсальным подходом трансфер-матрицы для спиновых цепочек, будет представлен новый подход к анализу фазовых свойств цепочек, основанный на отображении их на марковскую цепь. Несмотря на возможность точного ре-

шения, анализ фазовых состояний одномерных разбавленных систем в рамках стандартного формализма представляет собой нетривиальную задачу, особенно для состояний на границах между различными фазами. Альтернативным подходом в этом случае может служить построение отображения одномерной модели на марковскую цепь, которое ранее было использовано для анализа фрустрированных фазовых состояний разбавленной цепочки Изинга в магнитном поле [58; 111; 112], а также для модели Поттса на алмазной цепочке [55]. Такое отображение может быть построено для любой модели, статистическая сумма которой допускает представление через трансфер-матрицу, что справедливо, в частности, для различных вариантов моделей Изинга, Поттса, Блюма-Капеля и БЭГ [88].

### 1.5.2 Исследование фазовых переходов методами Монте-Карло

Одним из рубежей современной физики конденсированного состояния является описание ФП в сложных системах с сильными конкурирующими взаимодействиями, различными дефектами структуры и примесями, с декорированными решетками и сверхрешетками, анизотропией и многими другими усложняющими факторами, приближающими модели к реальным физическим системам. Большая часть теоретических подходов к изучению критических явлений основаны на использовании схем вычислений в рамках ренормализационно-группового метода и  $\epsilon$ -разложения, разложений в ряд и т.д. [96; 113; 114]. Однако исследование сложных реалистичных систем с помощью подобных теоретических методов является крайне нетривиальной задачей. Поэтому в настоящее время ФП и КЯ в модельных системах интенсивно исследуются именно методами численного эксперимента – в основном, методами МК [96; 115; 116].

С помощью методов МК можно исследовать не только более сложные и реалистичные системы, но и получать результаты, которые по точности не уступают прочим методам исследований [117]. Методы МК стали мощными инструментами для моделирования и анализа ФП благодаря их способности обрабатывать сложные взаимодействия и большие размеры систем. Это в первую очередь связано с большим увеличением мощностей современных электронно-вычислительных машин и с развитием новых высокоточных алгоритмов метода МК. В настоящее время методы МК успешно используются для изучения критических явлений в моделях с различными примесями (см., например [118–120]) и в фрустрированных системах с конкурирующими взаимодействиями [7; 15; 62–67; 69–72; 121].

Методы Монте-Карло представляют собой мощный инструмент стохастической выборки, используемый для оценки физических свойств различных систем. В контексте спиновых систем эти методы позволяют моделировать поведение спинов на решетке при различных температурах, а также анализировать полученные конфигурации. Из основных алгоритмов, применяемые в данной области, выделяются методы переворота одного спина и кластерные алгоритмы [96; 122; 123]. Последние значительно повышают эффективность расчетов,



позволяя одновременно переворачивать группы спинов, что способствует более быстрому и точному исследованию термодинамических свойств системы.

Последние достижения в этой области включают в себя интеграцию методов машинного обучения с моделированием МК для улучшения обнаружения ФП, расчёта критических температур, построения фазовых диаграмм [124; 125], а также существенного улучшения эффективности и точности методов МК при анализе сложных спиновых моделей.

Однако же исследование ФП методами МК встречает ряд проблем, которые могут существенно повлиять на точность и достоверность результатов, о чём важно помнить при моделировании спиновых систем. По-первых, достижение равновесия и сходимости алгоритма может потребовать существенных вычислительных мощностей, особенно вблизи критических точек, когда сильные корреляции могут раздувать дисперсию вычисляемых наблюдаемых, что затрудняет достижение статистической значимости без большого количества независимых выборок. Во-вторых, моделирование МК обычно выполняется на конечных системах, что может скрыть истинное поведение ФП. В конечных системах ФП размазаны, и критические явления могут не проявляться так, как они проявлялись бы в термодинамическом пределе. Это ограничение усложняет точное определение точек ФП и критических показателей. По мере увеличения размеров системы увеличивается не только время, необходимое для моделирования, но и ресурсы, необходимые для хранения и обработки данных. Тем не менее, с развитием компьютерных технологий и внедрением новых эффективных алгоритмов МК обе проблемы становятся менее актуальными. Вопрос точности расчётов по большей части зависит от имеющихся в распоряжении вычислительных мощностей и используемого алгоритма МК. Это является одним из основных преимуществ методов МК, т.к. влияние перечисленных проблем можно оценить и контролировать, как и саму погрешность расчёта критических показателей.

### 1.5.3 Моделирование спиновых систем с фиксированным параметром порядка

Рассматриваемая модель с гамильтонианом (1.1) благодаря условию сохранения полного заряда (1.2), то есть условия фиксированной псевдонамагниченности, по сути является частным случаем системы с сохранённым параметром порядка [96]. Самый известный пример такого рода систем – это модель Изинга с сохранённой полной намагниченностью, где, в отличие от глауберовской стохастической динамики, используется спин-обменная динамика Кавасаки [126]. Чаще всего такие модели используются для моделирования решёточных газов или бинарных сплавов [127; 128], динамики, роста и диффузии доменов [129; 130].

В отличие от обычных подходов, сложность в численном моделировании состоит в том, что не все конфигурации состояний спинов на решётке являются допустимыми. Только конфигурации, удовлетворяющие условию (1.2) должны учитываться в статистической вы-

борке. Таким образом, имеется ещё один параметр, который мы можем задавать при расчёте – плотность псевдоспинов, или плотность заряда в решётке  $n$ . При этом никаких ограничений на спиновую составляющую не накладывается.

Ни алгоритмы Монте-Карло (МК), основанные на перевороте одного спина (такие как алгоритм Метрополиса-Гастингса [131; 132]), ни кластерные алгоритмы (такие как алгоритм Свендсена-Янга [122] и алгоритм Вольфа [123]) не могут быть использованы для моделирования моделей с сохраняющимся параметром порядка, поскольку переворот одного спина или кластера одинаково ориентированных спинов изменит общую намагниченность, что является недопустимым. Самый простой подходящий алгоритм – это алгоритм Кавасаки [133]. В отличие от алгоритма Метрополиса, случайным образом выбирается не один спин, а пара соседних спинов на решётке. Вместо переворота спина шагом МК будет обмен значениями спина. Таким образом, общая намагниченность решётки всегда будет сохраняться. Далее стандартно считается изменение энергии при обмене пары спинов  $\Delta E = E_\nu - E_\mu$  между состояниями  $\mu$  и  $\nu$  системы до и после обмена, и шаг МК принимается или отклоняется с обычной вероятностью Метрополиса:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta\Delta E}, & \text{если } \Delta E > 0 \\ 1 & \text{в обратном случае} \end{cases}. \quad (1.3)$$

Вместо рассматривания соседних узлов можно осуществлять нелокальные изменения с обменом состояний на двух любых случайных узлах. Этот способ является более эффективным [134], чем обычный алгоритм Кавасаки, а также менее подвержен критическому замедлению [135]. Однако в большинстве работ рассматривались системы, где намагниченность фиксировалась на нулевом значении [134; 136; 137]. В нашем же случае плотность заряда может быть любой, и необходимо найти способ сохранять заряд достаточно точно.

Один из возможных способов – использование в гамильтониана члена с химическим потенциалом:  $-\mu \sum_i S_{iz}$ . Величина  $\sum_i S_{iz}$ , а значит, и величина  $n$  (1.2) контролируется автоматической подборкой параметра  $\mu$ . По сути задача сводится к минимизации функционала (1.1) с ограничениями путём подбора штрафной функции [138; 139]. В принципе, именно этот подход и используется в методе трансфер-матрицы для одномерной системы в рамках большого канонического ансамбля, обсуждаемый выше. Подбор химического потенциала осуществлялся путём решения самосогласованного уравнения:

$$n(\mu) = n. \quad (1.4)$$

В рамках же компьютерного моделирования определяется концентрационная зависимость химического потенциала, и подбирается  $\mu$  для необходимой плотности  $n$  на каждом шаге.

Однако для численного моделирования методом МК этот подход не оправдывает себя. Во-первых, при подборе химического потенциала создаются небольшие флуктуации энергии и параметра порядка, которые, однако, становятся существенными при низких температурах. Это приводит к расхождению величин, определяющихся через эти флуктуации, таких как удельная теплоёмкость и магнитная восприимчивость [139]. Кроме того, рассмотрим зависимость плотности заряда от  $\mu$  для различных температур, изображённую в качестве примера

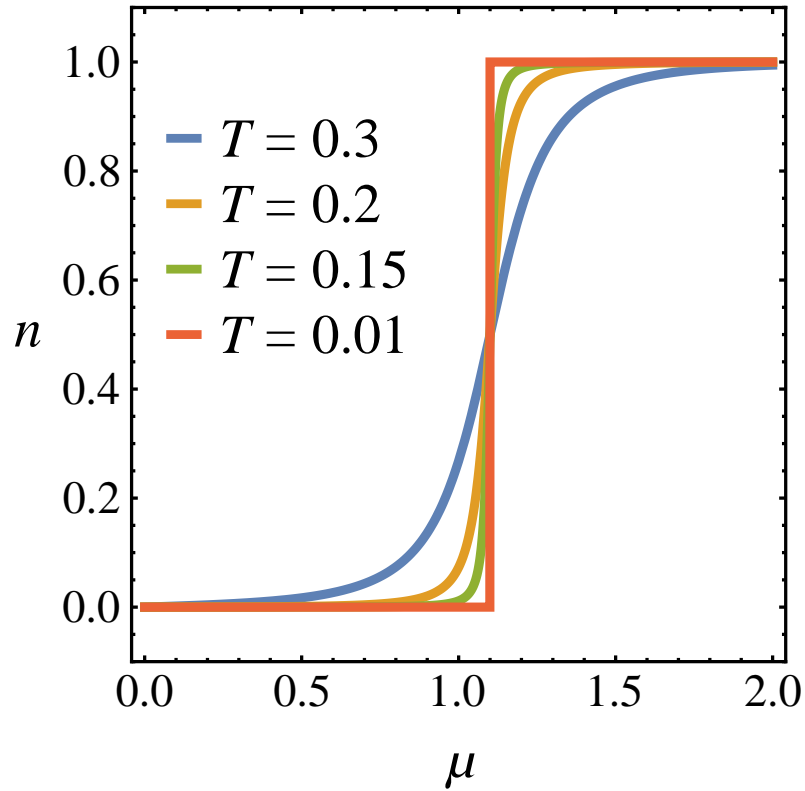


Рисунок 1.2 — Зависимость плотности заряда от химического потенциала для одномерной цепочки для различных температур. Для низких температур кривая имеет ступенчатый характер, что усложняет решение уравнения (1.4)

для одномерной цепочки на Рисунке 1.2. Для систем больших размерностей наблюдается аналогичное поведение.

На Рисунке 1.2 можно наблюдать, что кривые становятся всё более ступенчатыми по мере понижения температуры. Это значит, что условие сохранения заряда (1.4) становится сложным для выполнения на скачкообразных участках, что затрудняет расчёты в рамках большого канонического ансамбля: при низких температурах приходится существенно увеличивать разбиение по  $\mu$ . Если для одномерной цепочки это лишь приводит к увеличению времени сходимости метода бисекции, с помощью которого решается самосогласованное уравнение (1.4) и находится величина  $\mu$ , то в численных расчётах методом МК эта задача практически неразрешима. Число разбиения по интервалу  $\mu$ , чтобы попасть в необходимое значение  $n$ , оказывается слишком большим, а также необходимо увеличивать количество шагов МК. Это приводит к замедлению алгоритма и ухудшению результатов. Таким образом, численное моделирование методами МК в рамках формализма большого канонического ансамбля является сложной задачей.

В работе [139] был предложен алгоритм, который по сути является расширением алгоритма Кавасаки. На каждом шаге МК алгоритм учитывает условие сохранения заряда (1.2) путём сохранения заряда на паре случайных узлов. При этом имеется возможность распараллелить алгоритм, что было проделано в оригинальной работе с использованием технологии CUDA (Compute Unified Device Architecture) с использованием графических процессоров фирмы Nvidia.

Так же, как и в прочих алгоритмах метода МК, для реализации выборки по значимости состояния перебираются в рамках регулярного эргодического марковского процесса [96]. Это значит, что из любого состояния конфигурационного пространства (ограниченного условием (1.2)) можно достичь любого другого состояния этого пространства с помощью последовательности попарных изменений состояния узлов. В этом суть сведения задачи о сохранении полного заряда к задаче о сохранении заряда на паре узлов. Таким образом, в данном подходе сочетается подход Глаубера для спинов с несохраняющейся кинетикой и зависящей от времени намагниченностью, и подход Кавасаки для псевдоспинов, позволяющий сохранять псевдонамагниченность.

Данный алгоритм будет изложен и использован при моделировании свойств многомерных спиновых систем в Главе 4.

## 1.6 Выводы к Главе 1

В данной главе был проведён детальный обзор современных исследований, касающихся моделирования и изучения фазовых состояний и критических свойств низкоразмерных магнетиков, фрустрированных, разбавленных и неупорядоченных систем, введена исследуемая в работе спин-псевдоспиновая модель разбавленного изинговского магнетика, а также проведён обзор основных методов исследования.

Изучение низкоразмерных спиновых моделей открывает новые горизонты в понимании термодинамических явлений и их потенциальных приложений в современных технологиях. Низкоразмерные системы изинговских спинов демонстрируют динамику, характеризующуюся отсутствием традиционных фазовых переходов. Но несмотря на свою очевидную простоту по сравнению с многомерными системами, они обладают рядом уникальных свойств. Одним из таких свойств является наличие псевдопереходов, которые проявляются в термодинамическом поведении и напоминают фазовые переходы, но не имеют настоящих разрывов термодинамических величин. Фрустрация является необходимым условием для возникновения псевдопереходов, однако сама по себе она не достаточна.

Фрустрированные системы демонстрируют высокую степень вырождения, неколлинеарные конфигурации спинов и сложные магнитные структуры, фазовые переходы с несколькими параметрами порядка. Они могут проявлять эффекты “порядка из беспорядка” и имеют связь со спиновыми жидкостями и другими экзотическими фазами. Наличие фрустрации может привести к новым особенностям критического поведения и изменению классов универсальности. Эти аспекты делают фрустрированные спиновые системы интересными для изучения и понимания их сложного поведения. В данной работе рассматриваются два основных механизма фрустрации: конкуренция между зарядовыми и магнитными взаимодействиями в гамильтониане и наличие подвижных примесей, что приводит к выраженному вырождению основного состояния.

Решеточные модели могут быть использованы для изучения не только чистых магнетиков, но и систем с немагнитным разбавлением, дефектами и случайными магнитными полями, что делает их более сложными и интересными для исследования. Беспорядок, проявляющийся в виде структурных дефектов и примесей, оказывает значительное влияние на критическое поведение и фазовые состояния спиновых систем. Он может изменить свойства фазовых переходов и приводить к их размытию, уменьшению скачков термодинамических величин и их скруглению, подавлению дальнего магнитного порядка. Эти выводы подчеркивают важность учета беспорядка в изучении магнитных систем для более точного описания их поведения в реальных условиях. Рассмотренные в данной работе допированные заряженные примеси обладают подвижностью и взаимодействуют с зарядовой подсистемой, создавая псевдоспиновое поле, которое поддерживает псевдонамагниченность системы. Они выступают в качестве узельных дефектов для спиновой подсистемы.

В главе кратко представлен псевдоспиновый формализм, в рамках которого описываются зарядовые и магнитные степени свободы системы. Гамильтониан рассматриваемой системы включает заряд-зарядовые корреляции, межузельные взаимодействия и обменное взаимодействие спинов, что позволяет учитывать кинематические ограничения и взаимосвязь между различными упорядочениями. Исторически рассматриваемая модель была введена для понимания конкуренции зарядовых и спиновых степеней свободы в ВТСП купратах в нормальном состоянии, где в рамках псевдоспинового формализма выделялись три эффективных валентных состояния, связывающихся с тремя состояниями псевдоспина 1.

Методы исследования рассматриваемой системы включают в себя как аналитические подходы для одномерных изинговских цепочек, так и методы МК для систем больших размерностей. Представлен анализ различных подходов к системам с фиксированным параметром порядка, предложен подход, основанный на динамике Глаубера для спинов и динамике Кавасаки для псевдоспинов.

## Глава 2. Фазовые состояния разбавленного магнетика

В главе обсуждаются общие фазовые свойства исследуемой модели вне зависимости от пространственной размерности. Рассматриваются фазовый состав, фазовые диаграммы, а также свойства фаз основного состояния, их структура, внутренняя энергия и параметры порядка.

### 2.1 Диаграммы основного состояния с участием химического потенциала и описание фаз

Основываясь на виде гамильтониана (1.1), можно напрямую получить выражения для большого термодинамического потенциала системы в расчете на один узел для разных двух-подрешёточных фаз основного состояния:

$$\begin{aligned} \omega_{\text{I}}^{\pm} &= \Delta + d \cdot V \pm \mu, & \omega_{\text{CO}} &= \Delta - d \cdot V, & \omega_{\text{FM}}^{\pm} &= d \cdot J \pm h, \\ \omega_{\text{AFM}} &= -d \cdot J, & \omega_{\text{PM}}^{\pm\pm} &= \frac{\Delta \pm h \pm \mu}{2}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Примесная (I), ферромагнитная (FM), антиферромагнитная (AFM), шахматная зарядовая (CO) и парамагнитная (PM) фазы соответствуют следующим конфигурациям состояний ближайших соседей для  $h > 0$ : I $^{\pm} \rightarrow (\pm 1, \pm 1)$ , FM  $\rightarrow (+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2})$ , AFM  $\rightarrow (+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ , CO  $\rightarrow (1, -1)$ , PM $^{\pm} \rightarrow (\pm 1, +\frac{1}{2})$ . Эти «чистые» фазы характеризуются следующими значениями плотности заряда примесей:  $n_{\text{I}^{\pm}} = \pm 1$ ,  $n_{\text{FM}} = n_{\text{AFM}} = n_{\text{CO}} = 0$ ,  $n_{\text{PM}^{\pm}} = \pm \frac{1}{2}$ . Фаза I включает только примеси одного типа заряда, а фаза FM состоит из ориентированных по полю спинов. AFM фаза представляет собой классическое состояние Нееля и состоит из чередующихся по подрешёткам спинов. Фаза шахматного зарядового порядка, CO, демонстрирует регулярное чередование по подрешёткам отрицательно и положительно заряженных примесей. В фазе PM одна подрешётка заполнена примесями одного типа заряда, в то время как другая подрешётка содержит направленные по полю спины, что и обуславливает парамагнитный отклик этой фазы.

Минимизируя большой термодинамический потенциал системы (2.1), можно построить фазовые диаграммы в переменных  $(J, \mu)$ . Двумерные области в этом случае будут соответствовать «чистым» фазам с крайними по  $n$  значениями для диаграмм, построенных в представлении с заданным  $n$ . Напротив, границы между областями на фазовых диаграммах в переменных  $(J, \mu)$  будут соответствовать «смешанным» фазам с промежуточным значением  $n$ . Эти фазы представляют собой смесь состояний граничащих «чистых» фаз, и могут проявляться, в том числе, в форме фазового расслоения. Основное состояние в этих фазах будет вырождено, поскольку существует множество различных конфигураций, имеющих одинаковую наименьшую внутреннюю энергию. Соответственно, «смешанные» фазы являются

фрустрированными и могут обладать ненулевой остаточной энтропией. На Рисунке 2.1 схематично изображены все фазы основного состояния системы на примере одномерной цепочки для «чистых» фаз и двумерной решётки для «смешанных», фрустрированных фаз. Точки соответствуют зарядовым состояниям примесей, а стрелки – магнитным состояниям изинговского спина.

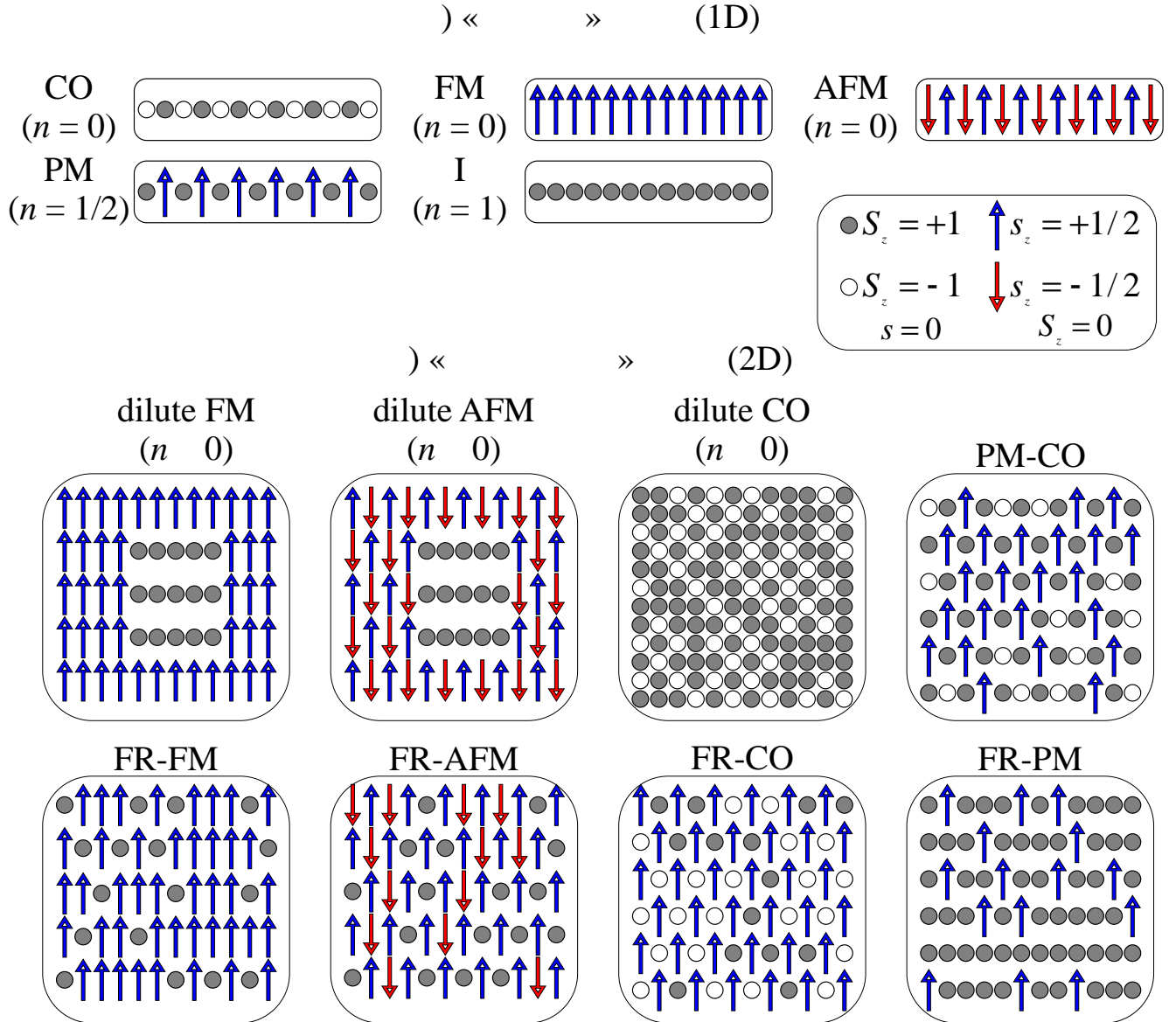


Рисунок 2.1 — Фазы основного состояния: а) «чистые» фазы на примере одномерной цепочки, соответствуют двумерным областям на диаграммах 2.2; б) «смешанные» фазы на примере двумерной квадратной решётки, соответствуют границам между областями на диаграммах 2.2. Для простоты все фазы изображены при  $n \geq 0$  в магнитном поле  $h > 0$ , которое «подмагничивает» спины вдоль оси  $z$ . Серые ( $\bullet$ ) и белые ( $\circ$ ) точки обозначают два зарядовых состояния псевдospина:  $S_z = \pm 1$ . Синяя ( $\uparrow$ ) и красная ( $\downarrow$ ) стрелки обозначают два магнитных состояния спина,  $s_z = \pm 1/2$ , которые соответствуют  $S_z = 0$

В сильном магнитном поле ( $|h| \geq 2d \cdot V$ ) реализуются четыре типа фазовых диаграмм, представленных на Рисунке 2.2. Так, для больших отрицательных  $\Delta$  «чистыми» фазами являются фазы (A)FM, CO (реализуются для  $n = 0$ ) и  $I^\pm$  ( $n = \pm 1$ ).

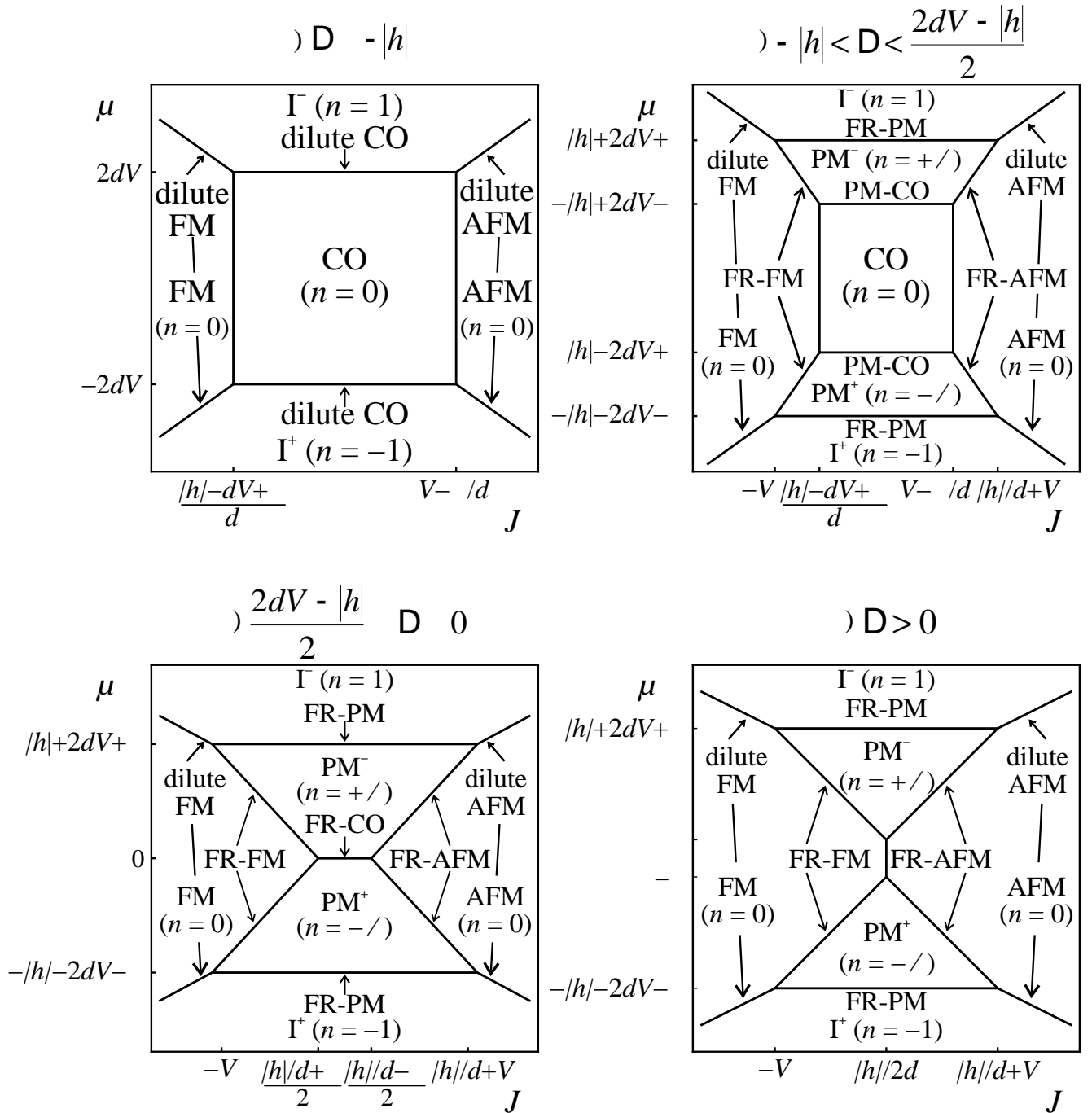


Рисунок 2.2 — Фазовые диаграммы основного состояния для  $|h| \geq 2d \cdot V$  (случай сильного магнитного поля) в переменных  $(J, \mu)$

Тогда пересечения областей (A)FM фазы и тривиальной примесной фазы I даст разбавленную (анти)ферромагнитную фазу (dilute (A)FM) с фазовым расслоением на магнитные домены и зарядовые капли — макроскопические области с суммарным объемом  $|n|$ , содержащие только занятые примесями узлы. Число перестановок заряженных капель на решётке, не меняющих энергию основного состояния, имеет степенную асимптотику и при переходе к термодинамическому пределу  $N \rightarrow \infty$  остаточная энтропия этих фаз будет стремиться к нулю. Пересечение областей CO и I является фазой разбавленного зарядового порядка (dilute CO). В ней заряженные примеси одного типа случайным образом распределены на фоне шахматного зарядового порядка. При этом имеется экспоненциально большое число перестановок



«избыточных» примесей без изменения энергии, что приведёт к ненулевой остаточной энтропии. Плотность заряда примесей для обеих разбавленных фаз может быть любой:  $0 < |n| < 1$ .

При  $\Delta = -|h|$  (Рисунок 2.2(б)) появляется «чистая» парамагнитная фаза  $\text{PM}^\pm$  ( $n = \pm\frac{1}{2}$ ), которая на границе с СО порождает зарядовую парамагнитную фазу  $\text{PM-CO}$ , реализующуюся для  $0 < |n| < \frac{1}{2}$ .  $\text{PM-CO}$  представляет собой разбавленный шахматный зарядовый порядок с парамагнитными центрами в виде одиночных спинов, которые в основном состоянии направлены по полю. Границы (А)FM с  $\text{PM}$  дают фрустрированную (анти)ферромагнитную фазу  $\text{FR-(A)FM}$  с  $0 < |n| < \frac{1}{2}$ . Она представляет собой разбавленную (А)FM фазу с (анти)ферромагнитно упорядоченными кластерами (или одиночными спинами, сонаправленными с магнитным полем), разделёнными одиночными немагнитными примесями с плотностью заряда  $n$ . Здесь, в отличие от разбавленной dilute (А)FM фазы, немагнитные примеси не собираются в зарядовую каплю, а разбросаны по всей системе случайным образом, что приводит к ненулевой остаточной энтропии. Границы  $\text{PM}^\pm$  фазы с примесной  $\text{I}^\pm$  при  $\mu = \mp(|h| + 2dV + \Delta)$  формируют фрустрированную парамагнитную  $\text{FR-PM}$ , которая существует только в случае большой плотности заряда примесей:  $\frac{1}{2} \leq |n| < 1$ . Эта фаза соответствует направленным по полю одиночным спинам, которые разделены кластерами из немагнитных примесей одного типа. Поэтому система в этой фазе обладает парамагнитным откликом, а также ненулевой остаточной энтропией.

При  $\frac{2V-|h|}{2} \leq \Delta \leq 0$  (Рисунок 2.2(в)) появляется дополнительная граница между двумя парамагнитными фазами  $\text{PM}^+$  и  $\text{PM}^-$ , которая соответствует фрустрированной зарядовой фазе  $\text{FR-CO}$  с чередующимися по подрешёткам направленными по полю спинами и немагнитными примесями обоих зарядов. Эта фаза реализуется при  $0 < |n| < \frac{1}{2}$ .

Обычно физически задаваемым параметром является не химический потенциал  $\mu$ , а плотность заряда примесей  $n$ , которые связаны друг с другом сложной параметрической зависимостью (1.4). Например, чтобы вычислить выражения для остаточной энтропии фрустрированных фаз в рамках «стандартного» подхода трансфер-матрицы, необходимо найти наибольшее собственное значение трансфер-матрицы, с помощью химического потенциала определить параметрическую зависимость энтропии от плотности заряда  $n$ , и найти предел при нулевой температуре. Это представляет собой нетривиальную и технически сложную задачу, особенно при низких температурах, и в областях с фазовым расслоением, где зависимости  $n(\mu)$  имеют практически ступенчатый вид. Ниже будет представлен подход к определению фазовых состояний, упрощающий переход от большого канонического ансамбля с заданным химическим потенциалом  $\mu$  к каноническому ансамблю с фиксированной плотностью  $n$ . Тем не менее, представленные выше диаграммы с участием химического потенциала являются удобным представлением сложных фрустрированных фаз как «смешанных» состояний на границах между «чистыми» фазами.

## 2.2 Поиск энергии основного состояния как каноническая задача линейного программирования

Задачу по определению энергии фаз основного состояния как функции плотности заряда  $n$ , как и по поиску всех возможных основных состояний, можно представить как каноническую задачу линейного программирования по минимизации линейной целевой функции с наличием системы уравнений в виде ограничений, связанных с фиксацией плотности заряда  $n$ . Преимуществом данного подхода является независимость формы целевой функции от размерности системы  $d$ . Она будет входить лишь в качестве одного из параметров, что означает универсальность фазовых состояний для систем разных пространственных размерностей.

Выразим энергию системы с гамильтонианом (1.1) в каноническом виде (без члена с химическим потенциалом  $\mu$ ) в виде суммы по связям между соседними узлами. Введем  $N_{a,b}$  – число связей с одним узлом в состоянии  $a$  и другим, соседним узлом в состоянии  $b$ , так что  $\sum_{a,b} N_{a,b} = N$ . Суммирование предполагается по неупорядоченным парам индексов, и перебирает всех ближайших соседей. Определим концентрации связей  $x_{a,b}$  через отношения:

$$x_{a,a} = \frac{N_{a,a}}{N}; \quad x_{a,b} = \frac{N_{a,b} + N_{b,a}}{N}, \text{ если } a \neq b; \quad \sum_{a,b} x_{a,b} = 1. \quad (2.2)$$

Тогда нормированную энергию  $\varepsilon = E/N$  в основном состоянии с гамильтонианом (1.1) можно выразить как линейную функцию концентраций связей  $x_{a,b}$ :

$$\begin{aligned} \varepsilon = \Delta \left( x_{1,1} + x_{-1,-1} + x_{1,-1} + \frac{1}{2} \left( x_{1,\frac{1}{2}} + x_{-1,\frac{1}{2}} + x_{1,-\frac{1}{2}} + x_{-1,-\frac{1}{2}} \right) \right) + d \cdot V \left( x_{1,1} + x_{-1,-1} - x_{1,-1} \right) + \\ + d \cdot J \left( x_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} + x_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} - x_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \right) - h \left( x_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} - x_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left( x_{\frac{1}{2},1} + x_{\frac{1}{2},-1} - x_{-\frac{1}{2},1} - x_{-\frac{1}{2},-1} \right) \right) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Выразим концентрацию заряженных примесей (1.2) через концентрацию связей:

$$n = x_{1,1} - x_{-1,-1} + \frac{1}{2} \left( x_{1,\frac{1}{2}} + x_{1,-\frac{1}{2}} - x_{-1,\frac{1}{2}} - x_{-1,-\frac{1}{2}} \right) \quad (2.4)$$

С учетом (2.2), запишем

$$1 - n = 2x_{-1,-1} + x_{1,-1} + x_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} + x_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + x_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left( x_{1,\frac{1}{2}} + x_{1,-\frac{1}{2}} \right) + \frac{3}{2} \left( x_{-1,\frac{1}{2}} + x_{-1,-\frac{1}{2}} \right) \quad (2.5)$$

Тогда проблема нахождения минимума энергии основного состояния (2.3) примет форму канонической задачи линейного программирования по минимизации линейной целевой функции с наличием системы уравнений в виде ограничений:

$$\begin{cases} \varepsilon(x_{a,b}) \rightarrow \min, \\ x_{a,b} \geq 0, \\ x_{1,1} - x_{-1,-1} + \frac{1}{2} \left( x_{1,\frac{1}{2}} + x_{1,-\frac{1}{2}} - x_{-1,\frac{1}{2}} - x_{-1,-\frac{1}{2}} \right) = n, \\ 2x_{-1,-1} + x_{1,-1} + x_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} + x_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + x_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left( x_{1,\frac{1}{2}} + x_{1,-\frac{1}{2}} \right) + \frac{3}{2} \left( x_{-1,\frac{1}{2}} + x_{-1,-\frac{1}{2}} \right) = 1 - n. \end{cases} \quad (2.6)$$

Решения задачи (2.6) будут представлять собой вершины, рёбра или грани многогранника, ограничивающего область возможных значений переменных  $x_{a,b}$ . Таким образом, мы имеем систему из 2 уравнений и 10 неизвестных. Для того, чтобы найти допустимое базисное решение будем полагать 8 переменных равными нулю, а остальные 2 будут определяться решением системы исходных уравнений. Каждое решение будет соответствовать вершине многогранника допустимых решений.

Также, используя значения концентраций связей, можно определить величины параметров порядка для каждой из фаз. Так, ферромагнитный, антиферромагнитный и шахматный зарядовый параметры порядка соответственно равны:

$$\mathcal{O} = \begin{cases} \text{FM} = m = x_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} - x_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left( x_{1,\frac{1}{2}} - x_{1,-\frac{1}{2}} + x_{-1,\frac{1}{2}} - x_{-1,-\frac{1}{2}} \right) \\ \text{AFM} = m_1 - m_2 = x_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left( x_{1,\frac{1}{2}} - x_{1,-\frac{1}{2}} + x_{-1,\frac{1}{2}} - x_{-1,-\frac{1}{2}} \right) \\ \text{CO} = M_1 - M_2 = x_{1,-1} + \frac{1}{2} \left( x_{1,\frac{1}{2}} + x_{1,-\frac{1}{2}} - x_{-1,\frac{1}{2}} - x_{-1,-\frac{1}{2}} \right), \end{cases} \quad (2.7)$$

где  $m = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_{iz}$  – намагниченность системы,  $m_\lambda = \frac{1}{N} \sum_{i \in \lambda} \sigma_{iz}$  – намагниченность подрешётки  $\lambda = 1, 2$ , разделяющей четные и нечетные узлы,  $M = \frac{1}{N} \sum_i S_{iz}$  – псевдонамагниченность системы,  $M_\lambda = \frac{1}{N} \sum_{i \in \lambda} S_{iz}$ .

## 2.3 Свойства фаз основного состояния и фазовые диаграммы


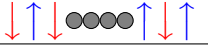
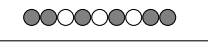




Рассматривая каноническую задачу линейного программирования по минимизации внутренней энергии с учётом ограничения в виде сохранения заряда, определим все реализующиеся фазы основного состояния.

Всего в основном состоянии реализуется 37 нетривиальных решений, каждое из которых соответствует определённой фазе. Полная симплекс-таблица канонической задачи, энергии решений, а также, для наглядности, соответствующие конфигурации (псевдо)спинов для одномерной цепочки, изображены в Таблице 8, расположенной в Приложении А. Если учесть симметрию при смене знака  $n$ ,  $J$  или  $V$ , часть из этих фаз будет повторять друг друга.

Энергия многих решений оказывается выше минимальной энергии при заданных параметрах, так что соответствующие фазы не будут формироваться в основном состоянии. В целом, для  $V \geq 0$  (что соответствует отталкиванию одноимённых зарядов) реализуются лишь 8 фаз, представленных в Таблице 3. Примечательно, что эти фазы в представлении с фиксированным  $n$  будут соответствовать «чистым» фазам (при крайних значениях  $n = 0, \pm\frac{1}{2}, \pm 1$ ) и «смешанным» фазам (при промежуточных значениях  $n$ ), полученных ранее в рамках большого канонического ансамбля с участием химического потенциала.

Основываясь на симплекс-таблице, построим фазовые диаграммы основного состояния для спин-псевдоспиновой системы произвольной пространственной размерности  $d$ . На Рисунках 2.3-2.5 представлены фазовые диаграммы основного состояния, построенные путём сравнения энергий различных фаз в определенном диапазоне величины  $n$ . Во избежание

Таблица 3 — Фазы, реализующиеся в основном состоянии для  $d$ -мерного разбавленного изинговского магнетика

№	Фаза	Энергия	Параметр порядка			вид цепочки
			CO	FM	AFM	
1	(dilute) FM	$( h  - d \cdot J)( n  - 1) +  n (\Delta + d \cdot V)$	0	$1 -  n $	0	
2	(dilute) AFM	$d \cdot J( n  - 1) +  n (\Delta + d \cdot V)$	0	0	$1 -  n $	
3	(dilute) CO	$\Delta + d \cdot V(2 n  - 1)$	$1 -  n $	0	0	
4	PM-CO	$d \cdot V(2 n  - 1) + \Delta(1 -  n ) -  n  h $	$1 -  n $	$ n $	$ n $	
5	FR-AFM	$d \cdot J(2 n  - 1) +  n (\Delta -  h )$	$ n $	$ n $	$1 -  n $	
6	FR-FM	$d \cdot J(1 - 2 n ) +  h ( n  - 1) + \Delta n $	$ n $	$1 -  n $	$ n $	
7	FR-PM	$d \cdot V(2 n  - 1) +  h ( n  - 1) + \Delta n $	$1 -  n $	$1 -  n $	$1 -  n $	
8	FR-CO	$\frac{\Delta -  h }{2}$	$ n $	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	

дублирования рисунков на этих же диаграммах обозначены свойства, которые будут обсуждать в Главах 3, 4 ниже. Красными пунктирными линиями обозначены границы раздела фаз основного состояния, для которых энтропия остаётся непрерывной величиной, так что выполняется критерий Рохаса [43], и в одномерном случае можно ожидать существование псевдопереходов в областях, схематично отмеченных красной штриховкой (см. Главу 4). Для систем больших размерностей ( $d = 2, 3$ ) красная штриховка обозначает области с ФП I рода, обсуждаемые в Главе 4.

Фазовые диаграммы можно условно разделить на 3 типа в зависимости от величины плотности заряда немагнитных примесей  $n$ . В «чистом» случае  $n = 0$  (Рисунок 2.3) наблюдается лишь 4 фазы – FM, AFM, CO, и FR-CO (в большом магнитном поле). В случае малой плотности заряда немагнитных примесей  $0 < |n| < \frac{1}{2}$  (Рисунок 2.4) наблюдаются все фазы Таблицы 3, кроме фрустрированной парамагнитной фазы FR-PM. Для большой плотности  $|n| \geq \frac{1}{2}$  (Рисунок 2.5) наблюдаются только 4 фазы при всех магнитных полях – FM, AFM, CO и FR-PM.

FM и AFM фазы существуют при любых  $0 \leq |n| < 1$ . На фазовых диаграммах они разделены друг с другом критическим магнитным полем  $|h| = 2d \cdot J$  – полем спин-флип перехода. Направление спинов в ферромагнитной фазе совпадает с направлением магнитного поля. В случае отсутствия немагнитных примесей,  $n = 0$ , формируются «чистые» фазы. Однако наличие подвижных немагнитных взаимодействующих примесей,  $n \neq 0$ , приводит к наличию макроскопического фазового расслоения. Примеси собираются в одной области, формируя зарядовую каплю объёмом, равным  $|n|$ . Тогда магнитные параметры порядка будут равны  $1 - |n|$ . Фазовое расслоение наблюдается в случае, если обменное взаимодействие спинов сильнее, чем заряд-зарядовое отталкивание ( $J < -V < 0$  для ферромагнитной и  $J > V + |h|/d > 0$  для антиферромагнитной фаз). В таком случае уменьшение энергии между примесями и магнитной подсистемой будет больше, чем проигрыш в энергии за счёт отталкивания одноимённых зарядов. Ниже будет показано, что эти две фазы являются единственными нефрустрированными фазами (т.е. фазами, обладающими нулевой остаточной

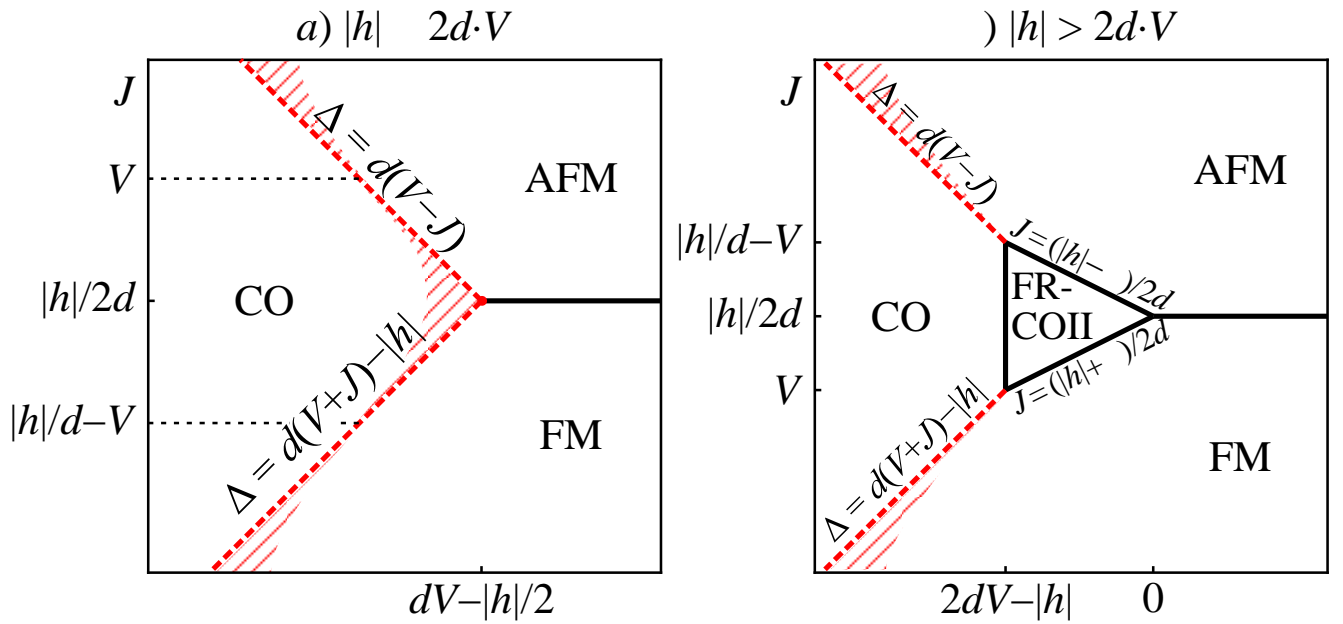


Рисунок 2.3 — Фазовые диаграммы основного состояния в переменных  $\Delta - J$  для случая  $n = 0$  в (а) слабом магнитном поле  $|h| \leq 2d \cdot V$ , (б) сильном магнитном поле  $|h| > 2d \cdot V$ . Красной штриховкой схематически обозначены области, где наблюдаются псевдопереходы для одномерной цепочки, и ФП I рода для систем больших размерностей. Фазовые границы, обозначенные красными пунктирными линиями, удовлетворяют критерию Рохаса для цепочки

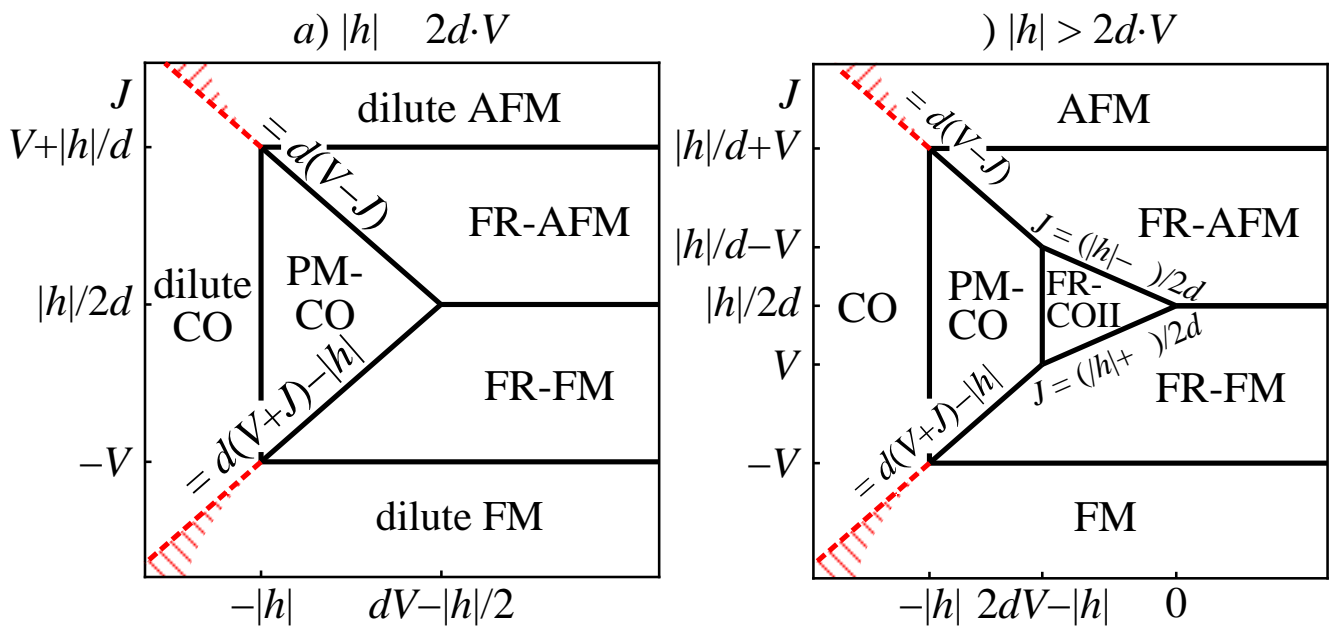


Рисунок 2.4 — Фазовые диаграммы основного состояния в переменных  $\Delta - J$  для случая  $0 < |n| < \frac{1}{2}$  в (а) слабом магнитном поле  $|h| \leq 2d \cdot V$ , (б) сильном магнитном поле  $|h| > 2d \cdot V$ . Красной штриховкой схематически обозначены области, где предположительно наблюдаются псевдопереходы для одномерной цепочки, и фазовые переходы I рода для систем больших размерностей. Фазовые границы, обозначенные красными пунктирными линиями, удовлетворяют критерию Рохаса для цепочки

энтропией). Существует конечное число перестановок зарядовой капли по системе, не меняющих энергию основного состояния, однако при переходе к термодинамическому пределу  $N \rightarrow \infty$  остаточная энтропия этих фаз будет стремиться к нулю.

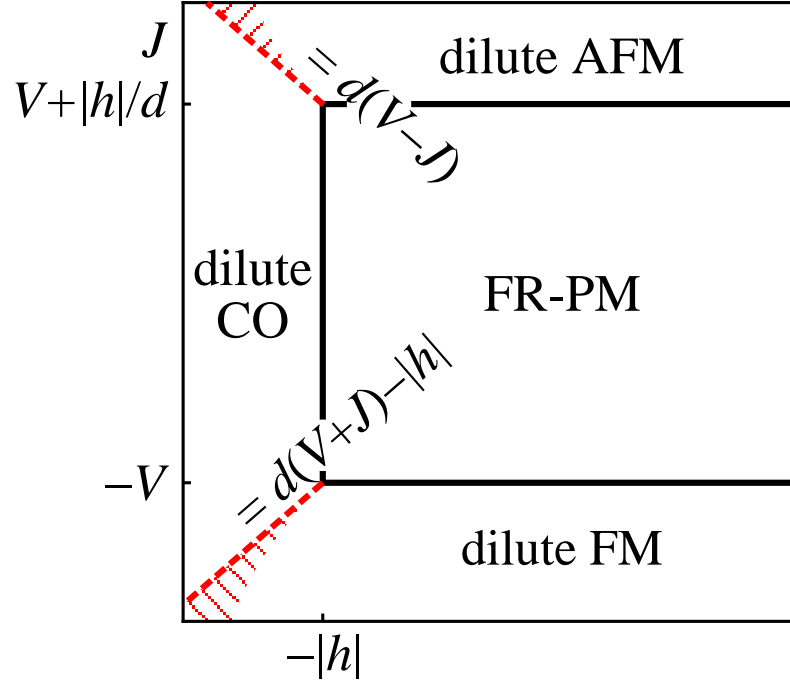


Рисунок 2.5 — Фазовые диаграммы основного состояния в переменных  $\Delta - J$  для случая  $|n| \geq \frac{1}{2}$ . Красной штриховкой схематически обозначены области, где предположительно наблюдаются псевдопереходы для одномерной цепочки, и фазовые переходы I рода для систем больших размерностей. Фазовые границы, обозначенные красными пунктирными линиями, удовлетворяют критерию Рохаса для цепочки

Фаза шахматного зарядового порядка CO также существует при любых  $0 \leq |n| < 1$ . Эта фаза состоит только из зарядовых состояний, и в ней происходит шахматное чередование знаков зарядов примесей. Энергия этой фазы не зависит ни от константы спинового обмена, ни от магнитного поля. Для  $|n| \neq 0$  избыточные примеси плотностью заряда  $n$  распределены по системе случайным образом. Тогда CO параметр порядка будет равен  $1 - |n|$ . При этом имеется макроскопическое количество перестановок избыточных примесей по системе без изменения энергии, что свидетельствует о вырождении основного состояния и ненулевой остаточной энтропии. Таким образом, CO фаза является фрустрированной. Граница CO с AFM определяется выражением  $\Delta = d(V - J)$ , а с FM —  $\Delta = d(V + J) - |h|$ . Таким образом, с помощью критического магнитного поля  $|h| = d(V + J) - \Delta$  можно индуцировать переход из зарядового упорядочения в ферромагнитное.

Особенной является фаза FR-CO, которая формируется при  $0 \leq |n| < \frac{1}{2}$ . Её отличительными чертами являются независимость энергии от обеих констант взаимодействия и  $|n|$ , независимость (A)FM параметров порядка от  $|n|$  (они оба равны  $\frac{1}{2}$ ), существование только в больших магнитных полях  $|h| \geq 2d \cdot V$ , а также, как будет показано ниже, ненулевая остаточная энтропия даже при  $n = 0$ . Таким образом, эта фаза является фрустрированной даже при отсутствии избыточных примесей. Фрустрация обеспечивается перестановками зарядовых

состояний без изменений энергии. Эта необычная фаза представляет собой чередующиеся направленные по полю спины и немагнитные примеси двух типов. Таким образом, ни примеси, ни спины никогда не имеют соседей такого же типа. Для  $n = 0$  FR-CO фаза граничит с CO при  $\Delta = 2d \cdot V - |h|$ , а также с (A)FM при  $J = \frac{|h| \pm \Delta}{2d}$ .

Фаза PM-CO представляет собой разбавленный шахматный зарядовый порядок с парамагнитными центрами в виде одиночных спинов, сонаправленных со внешним магнитным полем. За счёт этого фаза имеет парамагнитный отклик. Она реализуется только в случае малой плотности заряда:  $0 < |n| < \frac{1}{2}$ . Энергия этой фазы не зависит от константы обменного взаимодействия  $J$ . CO параметр порядка также равен  $1 - |n|$ , однако из-за наличия в системе одиночных спинов, (A)FM параметр порядка будет равен  $|n|$ . PM-CO фаза имеет минимум энергии при  $-|h| < \Delta < 2dV - |h|$  и граничит с фрустрированной (анти)ферромагнитной фазой FR-(A)FM таким же образом, как граничила CO фаза с (A)FM.

Если спин-обменное взаимодействие слабее, чем отталкивание зарядов,  $|J| < V$  немагнитные примеси не собираются в зарядовые капли, а хаотично распределяются по системе. Таким образом, устанавливаются фрустрированные магнитные фазы FR-(A)FM. Эти фазы существуют при  $0 < |n| < \frac{1}{2}$  и имеют ненулевую остаточную энтропию в этом диапазоне. Их энергия не зависит от константы заряд-зарядового взаимодействия  $V$ . Они представляют собой разбавленные FM и AFM фазы с (анти)ферромагнитно упорядоченными кластерами (или одиночными спинами, сонаправленными с магнитным полем), разделёнными одиночными немагнитными примесями плотностью  $n$ . (A)FM параметр порядка для FR-(A)FM фазы равен  $1 - |n|$ , тогда как остальные параметры порядка равны  $|n|$ . Эти фазы имеют минимальную энергию при  $-V < J < \frac{|h|}{2d}$  для FR-FM и  $\frac{|h|}{2d} < J < V + \frac{|h|}{d}$  для FR-AFM. Таким образом, они переходят друг в друга при критическом магнитном поле спин-флипа  $|h| = 2d \cdot J$ , а также FR-(A)FM переходит в (A)FM для случаев сильного магнитного обмена (при  $J < -V$  для FM и  $J > V + |h|/d$  для AFM).

При достижении  $|n| = 1/2$  фазы FR-(A)FM, PM-CO, FR-CO переходят во фрустрированную парамагнитную фазу FR-PM. Энергия этой фазы не зависит от константы обменного взаимодействия  $J$ . С точки зрения замены псевдоспиновых состояний спиновыми состояниями наблюдается симметрия с фазой FR-FM в магнитном поле.

## 2.4 Выводы к Главе 2

1. Структура фаз основного состояния, а также форма фазовых диаграмм основного состояния разбавленного изинговского магнетика с гамильтонианом (1.1) одинаковы для любой пространственной размерности. Обнаружено большое разнообразие фаз основного состояния, большинство из которых является фрустрированными в смысле ненулевой остаточной энтропии. Рассчитаны энергии, параметры порядка, определена структура всех фаз.

2. Областям на диаграммах основного состояния в зависимости от химического потенциала будут соответствовать «чистые» фазы с крайними по  $n$  значениями – тривиальная примесная фаза I ( $n = \pm 1$ ), магнитные фазы (A)FM и фаза шахматного зарядового порядка CO ( $n = 0$ ), а также парамагнитная фаза PM ( $n = \pm \frac{1}{2}$ ). Границы между двумерными областями соответствуют «смешанным» фазам с более сложной структурой, многие из которых являются фрустрированными.

3. Определение энергии основного состояния как функции плотности заряда  $n$  было представлено как каноническая задача линейного программирования по минимизации энергетического функционала при наличии ограничений, связанных с фиксацией плотности заряда. Это подход позволяет находить все возможные основные состояния и их параметры порядка для различных фаз.

3. Фазовые диаграммы основного состояния в зависимости от величины плотности заряда примесей  $n$  делятся на 3 типа: для «чистой» системы ( $n = 0$ ), для слабо разбавленной системы ( $0 < n < \frac{1}{2}$ ) и для сильно разбавленной системы ( $n \geq \frac{1}{2}$ ). Первые 2 типа также подразделяются на диаграммы в условиях слабого ( $h \leq 2d \cdot V$ ) и сильного ( $h > 2d \cdot V$ ) магнитного поля.

Результаты, представленные в данной главе, были опубликованы в работах [A6, A7].



## Глава 3. Свойства разбавленной цепочки

Модель с гамильтонианом (1.1) допускает точное решение в одномерном случае  $d = 1$  в рамках метода трансфер-матрицы. В данном разделе будет представлен расширенный подход к расчёту характеристик в рамках метода трансфер-матрицы, с помощью которого будут исследоваться термодинамические и магнитные свойства системы.

Особое внимание будет уделено (псевдо)критическим свойствам системы: будут обнаружены и классифицированы псевдопереходы, определены их основные характеристики. В главе раскрыта природа псевдопереходов, связанная с фазовым расслоением, и предложено их феноменологическое описание.

Кроме того, в данном разделе будет проведён анализ свойств и структуры фрустрированных фаз основного состояния разбавленной цепочки Изинга с использованием подхода марковских цепей. На основании марковского свойства будут выведены аналитические выражения для остаточной энтропии фаз и состояний на границах раздела фаз. С помощью отображения на марковские цепи будет проведена классификация фрустрированных фаз основного состояния.

### 3.1 Метод трансфер-матрицы для одномерных систем

#### 3.1.1 Стандартный подход

В 1941 году Крамерс и Ваннье продемонстрировали, что статическая сумма, вообще говоря, состоящая из бесконечного числа членов, может быть выражена через максимальное собственное значение матрицы конечного размера, известной как трансфер-матрица Крамерса-Ваннье [109]. По существу метод трансфер-матрицы представляет собой технику, при которой статистическая сумма представляется в виде простой формы – произведения трансфер-матриц:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} T(\sigma_1, \sigma_2) \dots T(\sigma_{N-1}, \sigma_N) T(\sigma_N, \sigma_1) = \text{Tr} \prod_{i=1}^N \hat{T} = \text{Tr} \hat{T}^N, \quad (3.1)$$

где суммирование производится по всем допустимым состояниям системы  $\{\sigma\} = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ , трансфер-матрица для пары соседних узлов

$$T(\sigma, \sigma') = \exp \left[ -\frac{1}{k_B T} \mathcal{H}(\sigma, \sigma') \right]. \quad (3.2)$$

Трансфер-матрица одномерной системы с гамильтонианом (1.1) для  $d = 1$  в локальном базисе состояний  $\Phi = \{|S_z, s_z\rangle\} = \{|+1, 0\rangle, |-1, 0\rangle, |0, +\frac{1}{2}\rangle, |0, -\frac{1}{2}\rangle\} \equiv \{+1, -1, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$

имеет структуру

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} e^{-\beta(\Delta+V-\mu)} & e^{-\beta(\Delta-V)} & e^{-\frac{\beta(\Delta-h-\mu)}{2}} & e^{-\frac{\beta(\Delta+h-\mu)}{2}} \\ e^{-\beta(\Delta-V)} & e^{-\beta(\Delta+V+\mu)} & e^{-\frac{\beta(\Delta-h+\mu)}{2}} & e^{-\frac{\beta(\Delta+h+\mu)}{2}} \\ e^{-\frac{\beta(\Delta-h-\mu)}{2}} & e^{-\frac{\beta(\Delta-h+\mu)}{2}} & e^{-\beta(J-h)} & e^{\beta J} \\ e^{-\frac{\beta(\Delta+h-\mu)}{2}} & e^{-\frac{\beta(\Delta+h+\mu)}{2}} & e^{\beta J} & e^{-\beta(J+h)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-\beta\omega_I^-} & e^{-\beta\omega_{CO}} & e^{-\beta\omega_{PM}^-} & e^{-\beta\omega_{PM}^{+-}} \\ e^{-\beta\omega_{CO}} & e^{-\beta\omega_I^+} & e^{-\beta\omega_{PM}^+} & e^{-\beta\omega_{PM}^{++}} \\ e^{-\beta\omega_{PM}^-} & e^{-\beta\omega_{PM}^{+-}} & e^{-\beta\omega_{FM}^-} & e^{-\beta\omega_{AFM}} \\ e^{-\beta\omega_{PM}^{+-}} & e^{-\beta\omega_{PM}^{++}} & e^{-\beta\omega_{AFM}} & e^{-\beta\omega_{FM}^+} \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

где использованы обозначения (2.1) для большого термодинамического потенциала,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $T$  – температура,  $k_B = 1$  – постоянная Больцмана, принятая за 1.

Диагонализуя трансфер-матрицу под знаком следа в выражении (3.1), статистическая сумма выразится через собственные значения  $\{\lambda_m, m = 1 \dots 4\}$  трансфер-матрицы:

$$Z = \sum_{m=1}^4 \lambda_m^N. \quad (3.4)$$

Собственные значения определяются путём решения уравнения четвёртой степени:

$$|\hat{T} - \lambda \hat{I}| = \lambda^4 + a\lambda^3 + b\lambda^2 + c\lambda + d = 0, \quad (3.5)$$

где  $\hat{I}$  представляет собой единичную матрицу размером  $4 \times 4$ , а коэффициенты равны

$$a = -2e^{-\frac{J}{T}} \cosh \frac{h}{T} - 2e^{-\frac{\Delta+V}{T}} \cosh \frac{\mu}{T}, \quad (3.6)$$

$$b = -8e^{-\frac{2\Delta+V+J}{2T}} \cosh \frac{h}{T} \cosh \frac{\mu}{T} \sinh \frac{J+V}{2T} - 2 \sinh \frac{2J}{T} - 2e^{-\frac{2\Delta}{T}} \sinh \frac{2V}{T}, \quad (3.7)$$

$$c = 8e^{-\frac{\Delta}{T}} \sinh \frac{J}{T} \cosh \frac{\mu}{T} \left( e^{-\frac{V}{T}} \cosh \frac{J}{T} - 1 \right) + 8e^{-\frac{2\Delta}{T}} \sinh \frac{V}{T} \cosh \frac{h}{T} \left( e^{-\frac{J}{T}} \cosh \frac{V}{T} - 1 \right), \quad (3.8)$$

$$d = 16e^{-\frac{2\Delta}{T}} \left( \cosh \frac{V}{T} \cosh \frac{J}{T} - 1 \right) \sinh \frac{V}{T} \sinh \frac{J}{T}. \quad (3.9)$$

Четвёртая степень является наивысшей, при которой существует аналитическое решение в радикалах. Решения уравнения (3.5) для собственных значений трансфер-матрицы можно получить с помощью метода Феррари [140]:

$$\lambda_{1,2,3,4} = -\frac{a}{4} + \frac{\pm_s \sqrt{\alpha + 2y} \pm_t \sqrt{-(3\alpha + 2y \pm_s \frac{2\beta}{\sqrt{\alpha+2y}})}}{2}, \quad (3.10)$$

где

$$\alpha = -\frac{3a^2}{8} + b, \quad (3.11)$$

$$\beta = \frac{a^3}{8} - \frac{ab}{2} + c, \quad (3.12)$$

$$\gamma = -\frac{3a^4}{256} + \frac{a^2b}{16} - \frac{ac}{4} + d, \quad (3.13)$$

$$p = -\frac{\alpha^2}{12} - \gamma, \quad (3.14)$$

$$q = -\frac{\alpha^3}{108} + \frac{\alpha\gamma}{3} - \frac{\beta^2}{8}, \quad (3.15)$$

$$r = -\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}, \quad (3.16)$$

$$u = \sqrt[3]{r}, \quad (3.17)$$

$$y = -\frac{5}{6}\alpha + u + \begin{cases} -\sqrt[3]{q}, & u = 0; \\ -\frac{p}{3u}, & u \neq 0. \end{cases} \quad (3.18)$$

Здесь  $\pm_s$  и  $\pm_t$  – два независимых параметра, каждый из которых равен либо +, либо –. Число возможных пар их значений равно четырем, и каждая пара дает одно из четырех собственных значений. Наибольшее собственное значение  $\lambda_1$  соответствует  $\pm_s = \pm_t = +$ .

Если положить  $h = 0$  и  $\mu = 0$ , можно получить достаточно простые выражения для собственных значений, аналогичные тем, которые были определены в [21]:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left( w_1 + w_2 \pm \sqrt{(w_1 - w_2)^2 + 16w_0^2} \right), \quad (3.19)$$

$$\lambda_3 = -2 \sinh \frac{J}{T}, \quad (3.20)$$

$$\lambda_4 = -2w_0^2 \sinh \frac{V}{T}, \quad (3.21)$$

где

$$w_1 = 2 \cosh \frac{J}{T}, \quad w_2 = 2e^{-\frac{\Delta}{T}} \cosh \frac{V}{T}, \quad w_0 = e^{-\frac{\Delta}{2T}}. \quad (3.22)$$

Согласно теореме Перрона-Фробериуса [37], у трансфер-матрицы будет существовать лишь одно наибольшее собственное значение,  $\lambda_1$ . Тогда большой термодинамический потенциал в термодинамическом пределе будет выражаться только через  $\lambda_1$ :

$$\omega = \frac{\Omega}{N} = -\frac{T}{N} \ln Z = -\frac{T}{N} \ln \left[ \lambda_1^N \sum_{m=1}^4 \left( \frac{\lambda_m}{\lambda_1} \right)^N \right] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} -T \ln \lambda_1. \quad (3.23)$$

Стандартный метод далее предполагает, что все термодинамические величины, такие как энтропия, теплоёмкость, намагниченность, магнитная восприимчивость и т. д., а также локальные корреляторы и парные корреляционные функции, выражаются через собственное значение  $\lambda_1$ . Однако выражение для  $\lambda_1$  довольно громоздко. Кроме того, аналитическое выражение в радикалах для собственного значения представляет ценность для анализа лишь в ряде предельных случаев, когда можно вывести определённые соотношения для критических параметров. Для расчета термодинамических величин приходится работать с ещё более

сложными выражениями для разных производных  $\lambda_1$ . Следовательно, это становится более сложной и трудоёмкой задачей, особенно при низких температурах. Эта проблема обостряется, когда возникает необходимость перейти к фиксированной плотности заряда примесей  $n \neq 0$ , где  $n$  также выражается через  $\lambda_1$  и её производную. В этом случае для каждого значения температуры и других параметров необходимо численно решить самосогласованное уравнение (1.4), чтобы найти соответствующий химический потенциал  $\mu$ .

### 3.1.2 Расчёт термодинамических величин через средние

В данной работе предложен универсальный подход, в рамках которого средние значения различных термодинамических функций можно вычислять непосредственно с помощью матриц, построенных на собственных векторах трансфер-матрицы. Диагонализация трансфер-матрицы с заданным уровнем точности, вычисление производных в собственном базисе и манипулирование соответствующими элементами матрицы – более эффективный подход по сравнению с обработкой сложных выражений для  $\lambda_1$  и его производных.

Среднее значение одноузельной физической величины  $A$ , по определению, равно

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} \hat{A} e^{-\beta \mathcal{H}} = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} T(\sigma_1, \sigma_2) \dots A(\sigma_i) T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \dots T(\sigma_N, \sigma_1) = \frac{\text{Tr}(\hat{A} \hat{T}^N)}{\text{Tr}(\hat{T}^N)}, \quad (3.24)$$

где использовалась циклическая перестановка под следом,  $\hat{A}$  – диагональная в локальном базисе матрица оператора  $A$ . Последнее отражает трансляционную инвариантность системы, поскольку среднее значение одноузельной величины не зависит от положения узла в цепочке.

Рассмотрим оператор, удовлетворяющий соотношению

$$A = \frac{\partial(-\mathcal{H}/T)}{\partial \alpha}, \quad (3.25)$$

где  $\alpha$  – некий сопряжённый параметр (им может выступать температура  $T$ , магнитное поле  $h$  или химический потенциал  $\mu$ ). Введём обозначение производной трансфер-матрицы по параметру  $\alpha$ :  $\hat{a} = \frac{\partial \hat{T}}{\partial \alpha}$ . В таком случае, среднее значение этого оператора можно выразить следующим образом:

$$\langle A \rangle = \frac{\partial \ln Z}{\partial \alpha} = \frac{1}{Z} \frac{\partial \text{Tr}(\hat{T}^N)}{\partial \alpha} = \frac{N}{Z} \text{Tr} \left( \frac{\partial \hat{T}}{\partial \alpha} \hat{T}^{N-1} \right) = \frac{N}{Z} \text{Tr}(\hat{a} \hat{T}^{N-1}). \quad (3.26)$$

Поскольку под знаком следа можно переходить к другому базису, перейдём к базису, построенному на собственных векторах трансфер-матрицы  $|U_m\rangle$  (собственный базис). В этом базисе и сама трансфер-матрица, и её производная будут иметь диагональный вид, так что

$$\langle A \rangle = \frac{N \sum_m a_{mm} \lambda_m^{N-1}}{\sum_m \lambda_m^N}. \quad (3.27)$$

Значит, в термодинамическом пределе среднее значение величины, для которой выполняется соотношение (3.25), выражается только через наибольшее собственное значение трансфер-матрицы, и через первый диагональный элемент матрицы производной в собственном базисе:

$$\frac{\langle A \rangle}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{a_{11}}{\lambda_1}. \quad (3.28)$$

Для двух коммутирующих операторов  $A$  и  $B$ , где  $B = \frac{\partial(-\mathcal{H}/T)}{\partial\beta}$  и имеет матрицу  $\hat{B}$  в собственном базисе, среднее их произведения также выразится через трансфер-матрицу:

$$\langle AB \rangle = \frac{\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}e^{-\mathcal{H}/T})}{\text{Tr}(e^{-\mathcal{H}/T})} = \frac{N\text{Tr}\left(\frac{\partial^2\hat{T}}{\partial\alpha\partial\beta}\hat{T}^{N-1}\right) + N\sum_{k=0}^{N-2}\text{Tr}\left(\frac{\partial\hat{T}}{\partial\alpha}\hat{T}^k\frac{\partial\hat{T}}{\partial\beta}\hat{T}^{N-2-k}\right)}{\text{Tr}(\hat{T}^N)}. \quad (3.29)$$

Введём обозначения  $\hat{b} = \frac{\partial\hat{T}}{\partial\beta}$ ,  $\hat{a}\hat{b} = \frac{\partial^2\hat{T}}{\partial\alpha\partial\beta}$ . В собственном базисе сумма следов в (3.29) сворачивается в сумму геометрической прогрессии:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{N-2}\text{Tr}\left(\hat{a}\hat{T}^k\hat{b}\hat{T}^{N-2-k}\right) &= \sum_{k=0}^{N-2}\sum_{mn}a_{mn}\lambda_m^k b_{nm}\lambda_n^{N-2-k} = \\ &= (N-1)\sum_m a_{mm}b_{mm}\lambda_m^{N-2} + \sum_{m \neq n} a_{mn}b_{nm}\frac{\lambda_n^{N-1} - \lambda_m^{N-1}}{\lambda_m - \lambda_n}. \end{aligned}$$

В термодинамическом пределе ведущим элементам будет соответствовать наибольшее собственное значение:

$$\frac{\langle AB \rangle}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda_1}ab_{11} + \frac{N-1}{\lambda_1^2}a_{11}b_{11} + \frac{2}{\lambda_1^2}\sum_{m \neq 1}^4 \frac{a_{1m}b_{m1}}{1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}}. \quad (3.30)$$

Наконец, ковариация двух коммутирующих операторов  $A$  и  $B$  равна:

$$\frac{\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda_1}ab_{11} - \frac{1}{\lambda_1^2}a_{11}b_{11} + \frac{2}{\lambda_1^2}\sum_{m \neq 1} \frac{a_{1m}b_{m1}}{1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}}. \quad (3.31)$$

Аналогичным образом можно получить среднее от произведения трёх коммутирующих операторов  $A$ ,  $B$  и  $C$ , где  $C = \frac{\partial(-\mathcal{H}/T)}{\partial\gamma}$  и имеет матрицу  $\hat{C}$  в собственном базисе, а также введены матрицы  $\hat{c} = \frac{\partial\hat{T}}{\partial\gamma}$ ,  $\hat{a}\hat{c} = \frac{\partial^2\hat{T}}{\partial\alpha\partial\gamma}$ ,  $\hat{b}\hat{c} = \frac{\partial^2\hat{T}}{\partial\beta\partial\gamma}$  и  $\hat{a}\hat{b}\hat{c} = \frac{\partial^3\hat{T}}{\partial\alpha\partial\beta\partial\gamma}$ :

$$\begin{aligned} \langle ABC \rangle &= \frac{\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}e^{-\mathcal{H}/T})}{\text{Tr}(e^{-\mathcal{H}/T})} = \text{Tr}\left(\hat{a}\hat{b}\hat{c}\hat{T}^{N-1}\right) + \\ &+ \sum_{k=0}^{N-2} \left[ \text{Tr}\left(\hat{a}\hat{b}\hat{T}^k\hat{c}\hat{T}^{N-2-k}\right) + \text{Tr}\left(\hat{a}\hat{c}\hat{T}^k\hat{b}\hat{T}^{N-2-k}\right) + \text{Tr}\left(\hat{a}\hat{T}^k\hat{b}\hat{c}\hat{T}^{N-2-k}\right) \right] + \\ &+ \sum_{k=0}^{N-2} \text{Tr}\left(\sum_{j=0}^{k-1} \hat{a}\hat{T}^j\hat{c}\hat{T}^{k-1-j}\hat{b}\hat{T}^{N-2-k} + \sum_{j=0}^{N-3-k} \hat{a}\hat{T}^k\hat{b}\hat{T}^j\hat{c}\hat{T}^{N-3-j-k}\right). \end{aligned}$$

В термодинамическом пределе получим

$$\begin{aligned} \frac{\langle ABC \rangle}{N} &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{abc_{11}}{\lambda_1} + \frac{N-1}{\lambda_1^2} (ab_{11}c_{11} + ac_{11}b_{11} + bc_{11}a_{11}) + \frac{2}{\lambda_1^2} \sum_{m \neq 1} \frac{ab_{1m}c_{m1} + ac_{1m}b_{m1} + bc_{1m}a_{m1}}{1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}} + \\ &+ \frac{(N-2)(N-1)}{\lambda_1^3} a_{11}b_{11}c_{11} + \frac{2}{\lambda_1^3} \sum_{m \neq 1} \frac{a_{mm}b_{m1}c_{1m} + a_{1m}b_{mm}c_{m1} + a_{m1}b_{1m}c_{mm}}{\left(1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}\right)^2} + \\ &+ \frac{2}{\lambda_1^3} \sum_{m \neq 1} \frac{[(N-2) - (N-1)\lambda_m/\lambda_1] (a_{11}b_{1m}c_{m1} + b_{11}a_{m1}c_{1m} + c_{11}a_{1m}b_{m1})}{\left(1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}\right)^2} + \\ &+ \frac{2}{\lambda_1^3} \sum_{m \neq n \neq 1} \frac{a_{mn}b_{n1}c_{1m} + a_{1n}b_{nm}c_{m1} + a_{m1}b_{1n}c_{nm}}{\left(1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}\right) \left(1 - \frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)}. \end{aligned}$$

Тогда кумулянт третьего порядка выразится как

$$\begin{aligned} &\frac{\langle ABC \rangle - \langle A \rangle \langle BC \rangle - \langle B \rangle \langle AC \rangle - \langle C \rangle \langle AB \rangle + 2 \langle A \rangle \langle B \rangle \langle C \rangle}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \\ &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{abc_{11}}{\lambda_1} + \frac{2}{\lambda_1^3} a_{11}b_{11}c_{11} - \frac{1}{\lambda_1^2} (ab_{11}c_{11} + ac_{11}b_{11} + bc_{11}a_{11}) + \frac{2}{\lambda_1^2} \sum_{m \neq 1} \frac{ab_{1m}c_{m1} + ac_{1m}b_{m1} + bc_{1m}a_{m1}}{1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}} + \\ &+ \frac{2}{\lambda_1^3} \left[ \sum_{m \neq 1} \frac{a_{mm}b_{m1}c_{1m} + a_{1m}b_{mm}c_{m1} + a_{m1}b_{1m}c_{mm} + \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_1} - 2\right) (a_{11}b_{1m}c_{m1} + b_{11}a_{m1}c_{1m} + c_{11}a_{1m}b_{m1})}{\left(1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}\right)^2} + \right. \\ &\left. + \sum_{m \neq n \neq 1} \frac{a_{mn}b_{n1}c_{1m} + a_{1n}b_{nm}c_{m1} + a_{m1}b_{1n}c_{nm}}{\left(1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}\right) \left(1 - \frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)} \right]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

В Таблице 4 представлены выражения для расчёта различных термодинамических величин двумя способами. Распространённый стандартный метод предполагает выражение величин через наибольшее собственное значение  $\lambda_1$  и различные его производные. Соответствующие выражения представлены во втором столбце в рамках большого канонического ансамбля. Эти же величины можно выразить через различные средние, а их, в свою очередь, через производные трансфер-матрицы. Можно выделить следующие правила для перехода от выражений с  $\lambda_1$ :

$$\frac{\partial \lambda_1}{\partial \alpha} \longrightarrow \left( \frac{\partial \hat{T}}{\partial \alpha} \right)_{11}; \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \alpha \partial \beta} \longrightarrow \left( \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \alpha \partial \beta} \right)_{11} + \frac{2}{\lambda_1} \sum_{m \neq 1}^4 \frac{\left( \frac{\partial \hat{T}}{\partial \alpha} \right)_{1m} \left( \frac{\partial \hat{T}}{\partial \beta} \right)_{m1}}{1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}}. \quad (3.34)$$

Кроме того, использование метода вычисления средних напрямую из трансфер-матрицы позволяет вычислять различные парные корреляционные функции. Тогда выражения для пространственных корреляторов двух одноузельных операторов  $A$  и  $B$  в термодинамическом пределе примут следующий вид:

$$\langle A_i B_{i+l} \rangle = \frac{\text{Tr} \left( \hat{T}^i \hat{A} \hat{T}^l \hat{B} \hat{T}^{N-l} \right)}{\text{Tr} \left( \hat{T}^N \right)} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \sum_{m=1}^4 (\hat{A})_{1m} (\hat{B})_{m1} \left( \frac{\lambda_m}{\lambda_1} \right)^l, \quad (3.35)$$

Таблица 4 — Выражения для расчёта термодинамических величин через наибольшее собственное значение трансфер-матрицы  $\lambda_1$  и его производные, а также через средние с помощью расчёта производных трансфер-матрицы в собственном базисе по различным сопряжённым параметрам

Величина	Через $\lambda_1$ и его производные	Через средние и элементы матриц в собственном базисе
Большой термодинамический потенциал $\omega = -T \ln Z$	$-T \ln \lambda_1$	$-T \ln \lambda_1$
Энтропия $S = -\left(\frac{\partial \omega}{\partial T}\right)_{h,\mu} = \frac{1}{N} \ln Z + \frac{T}{N} \frac{\partial Z}{\partial T}$	$\ln \lambda_1 + \frac{T}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial T}$	$\frac{1}{NT} [-\Omega + \langle \mathcal{H} \rangle] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \ln \lambda_1 + \frac{T}{\lambda_1} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial T}\right)_{11}$
Плотность заряда $n = -\left(\frac{\partial \omega}{\partial \mu}\right)_{T,h} = \frac{T}{N} \frac{\partial Z}{\partial \mu}$	$\frac{T}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial \mu}$	$\langle S_z \rangle \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{T}{\lambda_1} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu}\right)_{11}$
Намагниченность $m = -\left(\frac{\partial \omega}{\partial h}\right)_{T,\mu} = \frac{T}{N} \frac{\partial Z}{\partial h}$	$\frac{T}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial h}$	$\langle s_z \rangle = \frac{T}{NZ} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{T}{\lambda_1} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial h}\right)_{11}$
Внутренняя энергия $E = \omega + TS + \mu n$	$\frac{T}{\lambda_1} \left(T \frac{\partial \lambda_1}{\partial T} + \mu \frac{\partial \lambda_1}{\partial \mu}\right)$	$\frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} + \mu \langle S_z \rangle \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{T}{\lambda_1} \left[T \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial T}\right)_{11} + \mu \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu}\right)_{11}\right]$
Удельная теплоёмкость $C_{h,n} = T \left[ \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{h,\mu} - \left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_{h,\mu} \right] - \left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_{T,h}$	$\frac{T}{\lambda_1} \left[ 2 \frac{\partial \lambda_1}{\partial T} + T \left( \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial T^2} - \frac{1}{\lambda_1} \left( \frac{\partial \lambda_1}{\partial T} \right)^2 \right) - \frac{\left\{ \frac{\partial \lambda_1}{\partial \mu} + T \left( \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial T \partial \mu} - \frac{1}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial T} \frac{\partial \lambda_1}{\partial \mu} \right) \right\}^2}{T \left( \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \mu^2} - \frac{1}{\lambda_1} \left( \frac{\partial \lambda_1}{\partial \mu} \right)^2 \right)} \right]$	$\frac{1}{N^2 T^2} \left[ \langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2 - \frac{(\langle \mathcal{H} S_z \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle \langle S_z \rangle)^2}{\langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2} \right] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{T}{\lambda_1} \left[ 2 \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial T}\right)_{11} + T \left( \left(\frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial T^2}\right)_{11} - \frac{1}{\lambda_1} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial T}\right)_{11}^2 + \frac{2}{\lambda_1} \sum_{m \neq 1}^4 \frac{\left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial T}\right)_{1m}^2}{1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}} \right) - \frac{\left\{ \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu}\right)_{11} + T \left( \left(\frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \mu \partial T}\right)_{11} - \frac{1}{\lambda_1} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu}\right)_{11} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial T}\right)_{11} + \frac{2}{\lambda_1} \sum_{m \neq 1}^4 \frac{\left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu}\right)_{1m} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial T}\right)_{m1}}{1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}} \right\}^2}{T \left( \left(\frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \mu^2}\right)_{11} - \frac{1}{\lambda_1} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu}\right)_{11}^2 + \frac{2}{\lambda_1} \sum_{m \neq 1}^4 \frac{\left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu}\right)_{1m}^2}{1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}} \right)} \right]$
Магнитная восприимчивость $\chi_{T,n} = \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_{T,\mu} - \frac{\left(\frac{\partial n}{\partial h}\right)_{T,\mu}}{\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_{T,h}}$	$\frac{1}{\lambda_1} \left[ T \left( \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial h^2} - \frac{1}{\lambda_1} \left( \frac{\partial \lambda_1}{\partial h} \right)^2 \right) - \frac{\left\{ \frac{\partial \lambda_1}{\partial \mu} + T \left( \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial h \partial \mu} - \frac{1}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial h} \frac{\partial \lambda_1}{\partial \mu} \right) \right\}^2}{T \left( \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \mu^2} - \frac{1}{\lambda_1} \left( \frac{\partial \lambda_1}{\partial \mu} \right)^2 \right)} \right]$	$\frac{1}{T} \left[ \langle s_z^2 \rangle - \langle s_z \rangle^2 - \frac{(\langle s_z S_z \rangle - \langle s_z \rangle \langle S_z \rangle)^2}{\langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2} \right] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda_1} \left[ \left( \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial h}\right)_{11}^2 \right) - \frac{1}{\lambda_1} \left( \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial h^2} \right)_{11} + \frac{2}{\lambda_1} \sum_{m \neq 1}^4 \frac{\left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial h}\right)_{1m}^2}{1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}} - \frac{\left\{ \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu \partial h}\right)_{11} - \frac{1}{\lambda_1} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu}\right)_{11} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial h}\right)_{11} + \frac{2}{\lambda_1} \sum_{m \neq 1}^4 \frac{\left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu}\right)_{1m} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial h}\right)_{m1}}{1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}} \right\}^2}{\left(\frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \mu^2}\right)_{11} - \frac{1}{\lambda_1} \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu}\right)_{11}^2 + \frac{2}{\lambda_1} \sum_{m \neq 1}^4 \frac{\left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mu}\right)_{1m}^2}{1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_1}} \right)} \right]$

где  $l = |j - i|$  — расстояние между узлами  $i$  и  $j$ , а матрицы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  взяты в собственном базисе. Тогда, учитывая, что среднее одноузельного оператора также можно записать как

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(\hat{A}\hat{T}^N)}{\text{Tr}(\hat{T}^N)} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} (\hat{A})_{11} \quad (3.36)$$

Соответственно, корреляционная функция для двух операторов системы

$$K^{(A,B)}(l) = \langle A_i B_{i+l} \rangle - \langle A_i \rangle \langle B_{i+l} \rangle \quad (3.37)$$

запишется через выражения (3.35), (3.36) следующим образом:

$$K^{(A,B)}(l) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \sum_{m \neq 1}^4 (\hat{A})_{1m} (\hat{B})_{m1} \left( \frac{\lambda_m}{\lambda_1} \right)^l \quad (3.38)$$

В качестве одночастичных операторов, в частности, рассматриваются спиновый оператор намагниченности

$$\hat{\sigma}_z = \langle U | \text{diag}(0, 0, 1, -1) | U \rangle, \quad (3.39)$$

зарядовый оператор псевдонамагниченности

$$\hat{S}_z = \langle U | \text{diag}(1, -1, 0, 0) | U \rangle, \quad (3.40)$$

а также различные операторы числа частиц с определённой проекцией (псевдо)спина. Здесь  $U$  — симметричная матрица, построенная на нормированных собственных векторах трансфер-матрицы, так что  $\langle U | U \rangle = \hat{1}$ .

Выражение для корреляционной длины обычно выбирается следующим образом [2]:

$$\xi^{-1} = \ln \left| \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right|. \quad (3.41)$$

## 3.2 Использование марковских цепей для анализа свойств цепочки

### 3.2.1 Отображение спиновой цепочки на марковскую цепь

Марковская цепь или марковский процесс — это стохастический процесс развития событий, при котором вероятность перехода системы из одного состояния в другое зависит только от текущего состояния системы и не зависит от прошлого. Таким образом, марковский процесс обладает свойством «отсутствия памяти» (или марковским свойством), то есть будущее состояние системы зависит только от текущего состояния, но не зависит от предыдущих состояний. Благодаря этому свойству марковские цепи часто используются для моделирования процессов, которые могут быть описаны как последовательность случайных событий.



Для моделирования магнитных систем с использованием марковских процессов можно применять различные методы и подходы. Одним из популярных методов является метод МК, в частности, используемый в данной работе алгоритм Метрополиса-Гастингса, который позволяет моделировать стохастическое поведение системы на основе случайного блуждания в конфигурационном пространстве. В случае магнитных систем, состояниями в конфигурационном пространстве могут быть различные ориентации магнитных моментов. Подробнее про данный метод и результаты моделирования разбавленного изинговского магнетика больших размерностей будет изложено далее в Главе 4.

Здесь же сосредоточимся на новом подходе, который основан на отображении спиновых цепочек на марковские цепи путём построения переходной матрицы из трансфер-матрицы. Ранее такое отображение было использовано для анализа фрустрированных фазовых состояний разбавленной цепочки Изинга в магнитном поле [58; 111], а также для модели Поттса на алмазной цепочке [55].

Как известно, модель Изинга можно представить как марковскую цепь, где текущее состояние системы зависит только от предыдущего состояния [141]. Это связано с тем, что взаимодействие между узлами в модели Изинга следует простому набору правил и не зависят от всей предыстории всей системы. Одномерной системе, статистическую сумму которой можно представить через трансфер-матрицу, можно поставить в соответствие некоторую марковскую цепь.

В таком случае пространство состояний цепи Маркова дискретно, и совпадает с пространством локальных состояний рассматриваемой спиновой цепочки, на котором изначально и строится трансфер-матрица. Кроме того, пространство состояний будет конечно, а значит, распределение вероятностей перехода к следующему состоянию цепи может быть представлено матрицей, называемой переходной матрицей  $\hat{\pi}$ . Она служит основой для вычисления следующего состояния системы, а также множества важных характеристик. Каждый ряд матрицы перехода соответствует текущему состоянию системы, а каждый столбец – последующему состоянию. Переходная вероятность  $\pi_{ab}$  обозначает условную вероятность нахождения системы в состоянии  $b$  при условии, что предыдущим состоянием было  $a$ . Если переходные вероятности не зависят от момента времени, на котором мы рассматриваем переход (т.е. от расположения узлов цепочки), то система обладает марковским свойством. Для каждой однородной цепи Маркова матрица переходов является стохастической и, наоборот, любая стохастическая матрица может быть рассмотрена как матрица переходов некоторой однородной марковской цепи. На этом и основывается метод отображения реальных спиновых цепочек на цепи Маркова с помощью трансфер-матрицы, из которой можно построить стохастическую переходную матрицу.

В качестве элементов переходной матрицы возьмём условные вероятности  $P(b|a)$  реализации состояния  $b$  на  $(i + 1)$ -м узле при условии, что  $i$ -й узел находится в состоянии  $a$ . Условные вероятности  $P(b|a)$  можно определить по формуле Байеса

$$P(ab) = P(a)P(b|a).$$

Здесь  $P(a)$  – вероятность реализации состояния  $a$  на  $i$ -м узле, имеет физический смысл одноузельного среднего от  $P_{a,i}$  – проектора на состояние  $a$  для узла  $i$ :

$$P(a) = \langle P_{a,i} \rangle. \quad (3.42)$$

$P(ab)$  – вероятность совместной реализации состояний  $a$  и  $b$  на соседних  $i$ -м и  $(i+1)$ -м узлах соответственно, равна парной функции распределения для соседних узлов:

$$P(ab) = \langle P_{a,i} P_{b,i+1} \rangle. \quad (3.43)$$

Таким образом, условные вероятности связаны с корреляциями между состояниями, что раскрывает физический смысл данного подхода:

$$P(b|a) = \frac{P(ab)}{P(a)} = \frac{\langle P_{a,i} P_{b,i+1} \rangle}{\langle P_{a,i} \rangle} = \pi_{ab}. \quad (3.44)$$

Используя трансфер-матрицу (3.3), построенную на состояниях  $a$ , найдём эти корреляторы

$$\langle P_{a,i} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr} \left( \hat{T}^i \hat{P}_a \hat{T}^{N-i} \right)}{\text{Tr} \left( \hat{T}^N \right)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sum_k \langle a | \lambda_k \rangle \lambda_k^N \langle \lambda_k | a \rangle}{\sum_k \lambda_k^N} = \langle a | \lambda_1 \rangle \langle \lambda_1 | a \rangle, \quad (3.45)$$

$$\langle P_{a,i} P_{b,i+l} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr} \left( \hat{P}_a \hat{T}^l \hat{P}_b \hat{T}^{N-l} \right)}{\text{Tr} \left( \hat{T}^N \right)} = \langle a | \lambda_1 \rangle \frac{T_{ab}^l}{\lambda_1^l} \langle \lambda_1 | b \rangle, \quad (3.46)$$

где  $\lambda_1$  – наибольшее собственное значение трансфер-матрицы,  $\langle a | \lambda_1 \rangle = \mathbf{v}_a$  – элемент собственного вектора трансфер-матрицы для состояния  $a$ , соответствующий наибольшему собственному значению  $\lambda_1$ .

Мы получили, что условные вероятности выражаются через элементы трансфер-матрицы, её наибольшее собственное значение и собственные вектора:

$$P(b|a) = \pi_{ab} = \frac{T_{ab} \mathbf{v}_b}{\lambda_1 \mathbf{v}_a}. \quad (3.47)$$

Отсюда непосредственно можно получить, что переходная матрица является левой стохастической:

$$\sum_b \pi_{ab} = \frac{1}{\lambda_1 \mathbf{v}_a} \sum_b T_{ab} \mathbf{v}_b = 1.$$

Выражение (3.47) для построения переходной матрицы из некоей диагональной матрицы известно из теории неотрицательных стохастических матриц [142].

Равновесное (стационарное) состояние системы определяется предельным распределением  $\mathbf{p}$  марковской цепи, т.е. распределением, которое система принимает после бесконечного количества переходов. Оно представляет собой вектор-строку с неотрицательными элементами, в сумме равными 1, которая не изменяется в результате действия на неё матрицы перехода. Соответственно, для компонент  $p_a$  предельного распределения выполняется:

$$\sum_a p_a \pi_{ab} = p_b, \quad \sum_a p_a = 1, \quad (3.48)$$

$$p_a = P(a) = \langle P_{a,i} \rangle. \quad (3.49)$$

Сравнивая это определение с определением собственного вектора, мы видим, что эти два понятия связаны, и что предельное распределение на самом деле является нормализованным левым собственным вектором матрицы перехода  $\hat{\pi}$  с собственным значением, равным 1. Тогда, учитывая (3.45), для симметричных трансфер-матриц предельное распределение связано с нормированным собственным вектором, соответствующим наибольшему собственному значению трансфер-матрицы:

$$p_a = v_a^2. \quad (3.50)$$

В принципе, такое распределение не обязано быть единственным. Однако со стационарным распределением связано важное свойство марковских цепей – эргодичность. Оно гарантирует существование единственного стационарного распределения, к которому сходится любое начальное распределение. В результате, независимо от начального состояния, в конечном итоге марковская цепь придет к установившемуся состоянию равновесия. Со статистической точки зрения следствием эргодичности является то, что среднее по времени (асимптотически) совпадает со средним по пространству. В более общем плане цепь Маркова является эргодической, если из каждого состояния можно достичь любого другого состояния за конечное число шагов, что иногда называют свойством полного перехода. Это свойство критически важно для обеспечения возможности моделирования всех возможных переходов между состояниями, что является обязательным условием для корректного воссоздания физического процесса. В частности, эргодичность является основным принципом в моделировании методом МК [143], где случайное блуждание в конфигурационном пространстве системы осуществляется путём марковского процесса.

Парные функции распределения также можно выразить с помощью переходной матрицы, если воспользоваться следствием теоремы Колмогорова-Чепмена:

$$\langle P_{a,i} P_{b,i+l} \rangle = \sum_{s_1, \dots, s_{l-1}} P(a)P(a|s_1)P(s_1|s_2) \dots P(s_{l-1}|b) = p_a \pi_{ab}^l = \pi_{ba}^l p_b. \quad (3.51)$$

Корреляционная функция для состояний  $a$  и  $b$ , таким образом, имеет следующий вид:

$$K_{ab}(l) = \langle P_{a,i} P_{b,i+l} \rangle - \langle P_{a,i} \rangle \langle P_{b,i} \rangle = p_a \pi_{ab}^l - p_a p_b = p_b \pi_{ba}^l - p_a p_b. \quad (3.52)$$

Учитывая, что компоненты спина можно выразить как  $\sigma_{z,i} = P_{0,i} s_{z,i} / s = P_{\frac{1}{2},i} - P_{-\frac{1}{2},i}$ , можно рассчитать спиновую корреляционную функцию следующим образом:

$$C(l) = \langle \sigma_{z,i} \sigma_{z,i+l} \rangle - \langle \sigma_{z,i} \rangle^2. \quad (3.53)$$

### 3.2.2 Локальные распределения вероятностей по узлам цепочки

Как и в случае модели Изинга, парные корреляционные функции рассматриваемой разбавленной модели Изинга также можно представить в виде  $l$ -степени матрицы условных вероятностей для соответствующих состояний.

Марковское свойство позволяет найти вероятность любого заданного набора состояний  $(a, b, \dots, c, d)$  через матричные элементы соответствующих матриц перехода:

$$P(ab \dots cd) = P(a|b) \dots P(c|d)P(d) = P(d|c) \dots P(b|a)P(a). \quad (3.54)$$

Пусть  $\sigma = \sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_k$  – упорядоченный набор состояний  $k$  соседних узлов. Вероятность существования этого набора равна

$$P(\sigma) = P(\sigma_1|\sigma_2) \dots P(\sigma_{k-1}|\sigma_k)P(\sigma_k). \quad (3.55)$$

Рассмотрим последовательность из  $l$  повторяющихся блоков  $\sigma$ . Вероятность существования такой последовательности равна [144]

$$P_l(\sigma) = \sum_{\sigma' \neq \sigma, \sigma'' \neq \sigma} P(\sigma' \sigma^l \sigma'') = q_\sigma^{l-1} P_1(\sigma), \quad (3.56)$$

где  $q_\sigma$  – вероятность цикла из состояний  $\sigma$ :

$$q_\sigma = P(\sigma_1|\sigma_2) \dots P(\sigma_{k-1}|\sigma_k)P(\sigma_k|\sigma_1); \quad (3.57)$$

$P_1(\sigma)$  – вероятность изолированного блока  $\sigma$ :

$$P_1(\sigma) = \sum_{\sigma' \neq \sigma, \sigma'' \neq \sigma} P(\sigma' \sigma \sigma''). \quad (3.58)$$

В работе [144] показано, что нормированное распределение вероятностей (3.56) для последовательностей из  $l$  блоков  $\sigma$  подчиняется геометрическому распределению:

$$p_l(\sigma) = (1 - q_\sigma) q_\sigma^{l-1}. \quad (3.59)$$

Средняя длина последовательности  $\sigma$ , а также дисперсия длины равны, соответственно

$$\bar{l}_\sigma = \frac{1}{1 - q_\sigma}, \quad D(l_\sigma) = \frac{q_\sigma}{(1 - q_\sigma)^2}. \quad (3.60)$$

### 3.2.3 Остаточная энтропия фаз основного состояния

Чтобы вычислить выражения для остаточной энтропии фрустрированных фаз в рамках «стандартного» подхода трансфер-матрицы, необходимо найти наибольшее собственное значение трансфер-матрицы, с помощью химического потенциала определить параметрическую зависимость энтропии от плотности заряда, и найти предел при нулевой температуре. Это представляет собой нетривиальную задачу, однако, основываясь на марковском свойстве разбавленной цепочки Изинга, можно аналитически определить концентрационные зависимости остаточной энтропии всех фрустрированных фаз основного состояния альтернативным методом [58].

Учитывая марковское свойство рассматриваемой изинговской цепочки, вероятность, что цепочка из  $N$  узлов находится в состоянии  $(a_1, a_2, \dots, a_N)$  запишется как произведение условных вероятностей:

$$P(a_1, a_2, \dots, a_N) = P(a_1|a_2)P(a_2|a_3) \cdots P(a_{N-1}|a_N) = \prod_{ab} P(b|a)^{N_{a,b}}. \quad (3.61)$$

Условные вероятности связаны с концентрациями связей между соседними узлами (2.2) следующим образом:

$$P(a|a) = \frac{x_{a,a}}{P(a)}, \quad P(a|b) = \frac{x_{a,b}}{2P(b)}, \quad P(b|a) = \frac{x_{a,b}}{2P(a)},$$

где вероятность  $P(a)$  – концентрация состояния  $a$  в цепочке. Запишем концентрации состояний разбавленной цепочки Изинга через концентрации связей:

$$\begin{aligned} P(1) &= x_{1,1} + \frac{1}{2} \left( x_{1,-1} + x_{1,\frac{1}{2}} + x_{1,-\frac{1}{2}} \right); & P\left(\frac{1}{2}\right) &= x_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left( x_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + x_{1,\frac{1}{2}} + x_{-1,\frac{1}{2}} \right); \\ P(-1) &= x_{-1,-1} + \frac{1}{2} \left( x_{1,-1} + x_{-1,\frac{1}{2}} + x_{-1,-\frac{1}{2}} \right); & P\left(-\frac{1}{2}\right) &= x_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left( x_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + x_{1,-\frac{1}{2}} + x_{-1,-\frac{1}{2}} \right). \end{aligned} \quad (3.62)$$

Учитывая определение концентраций связи (2.2), вероятность состояния (3.61) запишется следующим образом:

$$P(a_1, a_2, \dots, a_N) = p_0^N, \quad (3.63)$$

где

$$\begin{aligned} p_0 &= \left( \frac{x_{1,1}}{P(1)} \right)^{x_{1,1}} \left( \frac{x_{-1,-1}}{P(-1)} \right)^{x_{-1,-1}} \left( \frac{x_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}}{P(\frac{1}{2})} \right)^{x_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}} \left( \frac{x_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}}{P(-\frac{1}{2})} \right)^{x_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}} \times \\ &\times \left( \frac{x_{1,-1}^2}{4P(1)P(-1)} \right)^{\frac{x_{1,-1}}{2}} \left( \frac{x_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^2}{4P(\frac{1}{2})P(-\frac{1}{2})} \right)^{\frac{x_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}}{2}} \left( \frac{x_{1,\frac{1}{2}}^2}{4P(1)P(\frac{1}{2})} \right)^{\frac{x_{1,\frac{1}{2}}}{2}} \times \\ &\times \left( \frac{x_{1,-\frac{1}{2}}^2}{4P(1)P(-\frac{1}{2})} \right)^{\frac{x_{1,-\frac{1}{2}}}{2}} \left( \frac{x_{-1,\frac{1}{2}}^2}{4P(-1)P(\frac{1}{2})} \right)^{\frac{x_{-1,\frac{1}{2}}}{2}} \left( \frac{x_{-1,-\frac{1}{2}}^2}{4P(-1)P(-\frac{1}{2})} \right)^{\frac{x_{-1,-\frac{1}{2}}}{2}}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Вообще говоря, это выражение справедливо при любых температурах, однако с помощью него можно точно определить остаточную энтропию при нулевой температуре. Мы полагаем, что в основном состоянии реализуется микроканоническое распределение, так что все состояния системы, отвечающие энергии основного состояния (2.3), будут равновероятны. Тогда сумма этих вероятностей равна 1, а статистический вес  $\Gamma$  основного состояния можно определить через

$$P([E(x_{a,b})]) = 1 = \Gamma P(a_1, a_2, \dots, a_N).$$

Тогда остаточную энтропию основного состояния можно выразить через его статистический вес с помощью микроканонического выражения для энтропии:

$$s = \frac{\ln \Gamma}{N} = -\frac{\ln P(a_1, a_2, \dots, a_N)}{N} = -\ln p_0. \quad (3.65)$$

В итоге получим универсальное для цепочек выражение для остаточной энтропии:

$$s = - \sum_{\alpha} x_{\alpha} \ln x_{\alpha} + P_2 \ln 2 + \sum_a P(a) \ln P(a), \quad (3.66)$$

где суммирование ведётся по связям  $\alpha$  и состояниям  $a$ , а  $P_2$  является концентрацией связей между состояниями различных типов:

$$P_2 = x_{1,-1} + x_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + x_{1,\frac{1}{2}} + x_{1,-\frac{1}{2}} + x_{-1,\frac{1}{2}} + x_{-1,-\frac{1}{2}}.$$

Выражение (3.66) позволяет определить концентрационные зависимости остаточной энтропии от плотности заряда  $n$  для каждой из фаз основного состояния. Этот способ значительно проще, чем расчёт энтропии через наибольшее собственное значение трансформатрицы, определение зависимости энтропии от плотности заряда  $n$ , используя химический потенциал  $\mu$  как решение самосогласованного уравнения уравнения (1.4), и рассмотрения предела  $T \rightarrow 0$ .

### 3.2.4 Остаточная энтропия на границе раздела фаз

Пользуясь полученным выражением для остаточной энтропии (3.66), можно аналитически определить выражения для остаточной энтропии на границе раздела фаз путём поиска её максимума. Состояние на границе между фазами является суперпозицией состояний соседних фаз, которые имеют одинаковую энергию. Концентрации связей для состояния на границе  $x_{a,b}$  можно выразить в виде линейной комбинации связей для соседствующих фаз  $x_{a,b}^y$ :

$$x_{a,b} = \sum_y C_y x_{a,b}^y, \quad (3.67)$$

где  $C_y \geq 0$  – варьируемые коэффициенты, дающие в сумме 1, которые можно определить из требования максимальной энтропии (3.66). Таким образом, мы получим нелинейную задачу оптимизации по поиску максимальной энтропии с ограничениями на коэффициенты-доли связей соседствующих фаз:

$$\begin{cases} s(C_y) \rightarrow \max, \\ C_y \geq 0, \\ \sum_y C_y = 1. \end{cases}$$

Для всех межфазных границ, а также для большинства критических точек эта задача допускает аналитическое нахождение глобального оптимума.

### 3.3 Остаточная энтропия фаз основного состояния

Используя данные для величин концентраций связей, с помощью полученного выражения (3.66) вычислим остаточную энтропию для каждой из фаз одномерной цепочки, представленных в Таблице 3. Аналитические выражения для энтропии цепочки в основном состоянии представлены в Таблице 5. Серым цветом выделены фазы, обладающими ненулевой остаточной энтропией, что означает вырождение основного состояния, и фрустрацию системы. Таким образом, шесть из восьми фаз основного состояния испытывают вырождение.

Таблица 5 — Остаточная энтропия фаз основного состояния цепочки. Серым цветом выделены фрустрированные фазы

Фаза	Остаточная энтропия цепочки
1, 2 (dilute) (A)FM	0
3 (dilute) CO	$\frac{1+ n }{2} \ln \frac{1+ n }{2} - \frac{1- n }{2} \ln \frac{1- n }{2} -  n  \ln  n $
4 PM-CO	$-\left(\frac{1}{2} -  n \right) \ln(1 - 2 n ) - \begin{cases}  n  \ln 2 n , & h \neq 0 \\  n  \ln  n , & h = 0 \end{cases}$
5 FR-AFM	$\begin{cases} -\left(\frac{1}{2} -  n \right) \ln(1 - 2 n ) -  n  \ln 2 n , & h \neq 0 \\ -(1 - 2 n ) \ln(1 - 2 n ) + (1 -  n ) \ln(1 -  n ) -  n  \ln \frac{ n }{2}, & h = 0 \end{cases}$
6 FR-FM	$(1 -  n ) \ln(1 -  n ) - (1 - 2 n ) \ln(1 - 2 n ) -  n  \ln  n  + \begin{cases} 0, & h \neq 0 \\  n  \ln 2, & h = 0 \end{cases}$
7 FR-PM	$-(1 -  n ) \ln(1 -  n ) - (2 n  - 1) \ln(2 n  - 1) +  n  \ln  n  + \begin{cases} 0, & h \neq 0 \\ (1 -  n ) \ln 2, & h = 0 \end{cases}$
8 FR-CO	$-(1 - 2 n ) \ln(1 - 2 n ) - (1 + 2 n ) \ln(1 + 2 n ) + \frac{1}{2} \ln 2$

Зависимости остаточной энтропии фаз основного состояния от плотности заряда примесей  $n$  представлены на Рисунке 3.1 в нулевом (б) и отличном от нуля магнитном поле (а). Фазы (dilute) (A)FM имеют нулевую остаточную энтропию при всех величинах плотности заряда  $n$ : перестановки макроскопической зарядовой капли в данной фазе внесут конечный вклад в число микросостояний системы при одинаковой энергии, что в термодинамическом пределе даст нулевую величину энтропии. Фаза CO имеет ненулевую энтропию для  $n \neq 0$ , не зависящую от магнитного поля. Энтропия достигает максимального значения, равного  $\frac{1}{2} \ln \frac{\sqrt{5}+1}{\sqrt{5}-1} \approx 0.481$  при  $|n| = \frac{1}{\sqrt{5}} \approx 0.447$ . Фазы PM-CO и FR-AFM в ненулевом поле имеют идентичные остаточные энтропии, поскольку они являются симметричными относительно замены спиновых состояний на псевдоспиновые. Анизотропия проявляется в отсутствие магнитного поля, поскольку спины могут принимать любые направления, в отличие от псевдоспинов. Максимальная величина энтропии этих фаз равна  $\frac{\ln 3}{2} \approx 0.347$  в магнитном поле, и достигается при  $|n| = \frac{1}{4}$ , тогда как при  $h = 0$  максимальные значения достигают  $\frac{\ln 3}{2}$  и  $\ln 2$  при

$|n| = \frac{1}{3}$  для PM-CO и FR-AFM соответственно. Энтропии FR-FM и FR-PM фаз симметричны относительно краевой точки  $|n| = \frac{1}{2}$ , и достигают своих максимальных значений, равных  $\frac{1}{2} \ln \frac{\sqrt{5}+1}{\sqrt{5}-1} \approx 0.481$  при  $|n| = \frac{5 \pm \sqrt{5}}{10} \approx \frac{1}{2} \mp 0.224$  для  $h \neq 0$  и  $\ln 2$  при  $|n| = \frac{1}{2} \mp \frac{1}{6}$  при  $h = 0$ . Отдельный интерес представляют фаза FR-CO, которая реализуется только в сильном магнитном поле,  $h \geq 2V$ . Остаточная энтропия этой фазы отлична от нуля и достигает максимума, равного  $\frac{\ln 2}{2} \approx 0.347$ , при  $n = 0$ , что связано с возможными перестановками зарядовых состояний без изменения энергии. Это единственная фаза, которая остаётся фрустрированной при  $n = 0$ .

Чёрными точками на Рисунке 3.1 отмечены краевые точки, на которых реализуются «чистые» фазы CO, (A)FM, PM, I, а также энтропия на границе разделения FM и AFM фаз, которая существует лишь при  $n = 0$ .

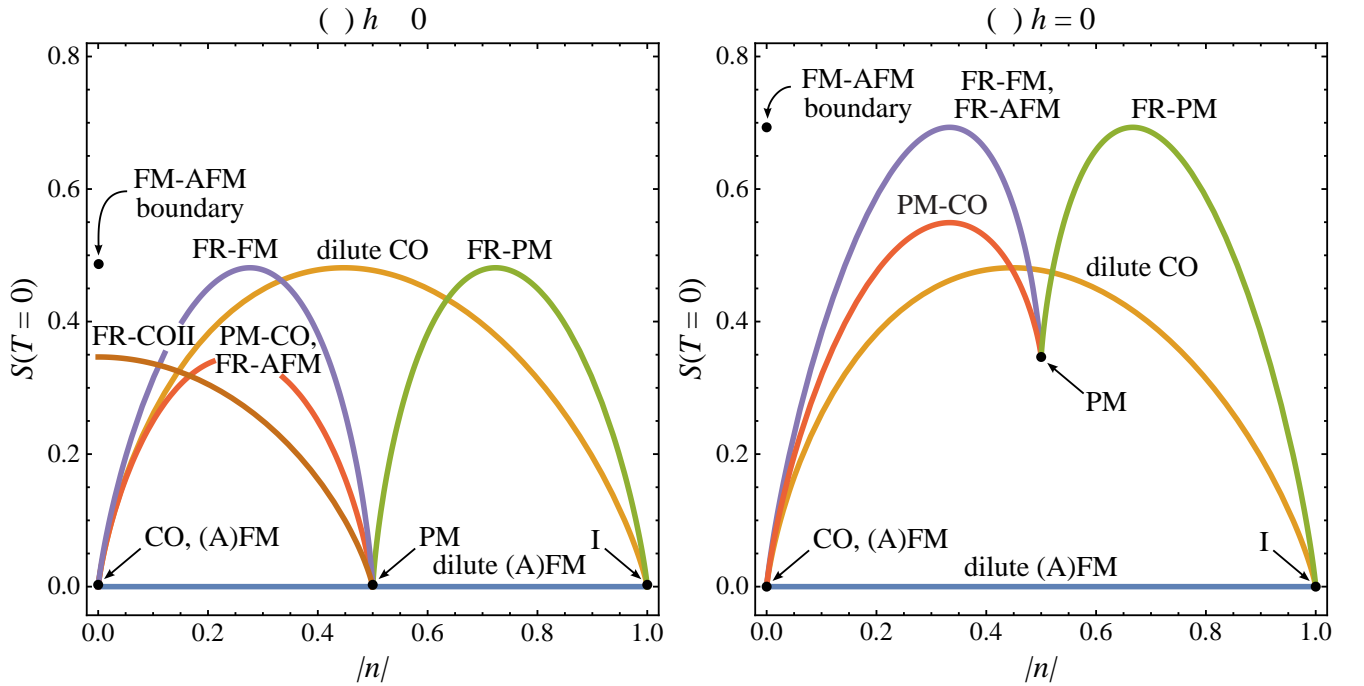


Рисунок 3.1 — Зависимость остаточной энтропии различных фаз основного состояния от плотности заряда немагнитных примесей  $n$  при (а)  $h \neq 0$ ; (б)  $h = 0$

Можно заметить, что максимальные значения энтропии фрустрированных фаз FR-CO, PM-CO, FR-AFM меньше, чем у dilute CO, FR-FM, FR-PM. Кроме того, в нулевом магнитном поле энтропии фаз FR-FM, FR-AFM, PM-CO, FR-PM становятся ещё больше, что видно во второй части Рисунка 3.1,б. Причина этого кроется в их структуре, детальный анализ которой также можно осуществить с использованием отображения одномерной системы во фрустрированной фазе на марковскую цепь [55; 111], что будет проделано ниже.



### 3.4 Отображение фрустрированных фаз цепочки на марковские цепи

Введём для трансфер-матрицы (3.3) сокращённые обозначения и запишем её в следующем виде:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} a^- & b & e^{--} & e^{+-} \\ b & a^+ & e^{-+} & e^{++} \\ e^{--} & e^{-+} & c^- & d \\ e^{+-} & e^{++} & d & c^+ \end{pmatrix}. \quad (3.68)$$

Для построения переходной матрицы и соответствующей марковской цепи для определённой фрустрированной фазы основного состояния в трансфер-матрице можно оставить только элементы ведущего порядка, а остальными элементами пренебречь ввиду их экспоненциальной малости при низких температурах.

В качестве примера, проделаем это для фрустрированных магнитных фаз FR-AFM и FR-FM. Рассмотрим свойства марковских цепей этих двух фаз, и выявим их отличия и изменения в зависимости от внешнего магнитного поля.

#### 3.4.1 Фрустрированные фазы в магнитном поле

##### 1. Фрустрированная антиферромагнитная фаза FR-AFM.

Для удобства примем  $h > 0$ , а также  $n > 0$ . Это повлияет лишь на то, какие именно зависящие от знака  $h$  и  $\mu$  члены трансфер-матрицы будут экспоненциально малы, что не повлияет на принципиальные свойства марковских цепей.

Удобно обратиться к фазовым диаграммам в переменных  $(J, \mu)$ , представленным на Рисунке 2.2. На них видно, что фаза FR-AFM появляется на линии пересечения фаз FM и PM (PM<sup>-</sup> для  $n > 0, h > 0$ ). Оставим в трансфер-матрице члены, соответствующие необходимым конфигурациям состояний соседей:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 0 & e^{--} & 0 \\ e^{--} & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e & 0 \\ e & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{pmatrix}.$$

Состояние  $-1$  отсутствует, пространство состояний системы сократится до  $\Phi = \{+1, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$ . Наибольшее собственное значение трансфер-матрицы равно  $\lambda_1 = \sqrt{d^2 + e^2}$  с собственным вектором  $\mathbf{v} = \left( \frac{e}{\sqrt{2\lambda_1}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{d}{\sqrt{2\lambda_1}} \right)^T$ .

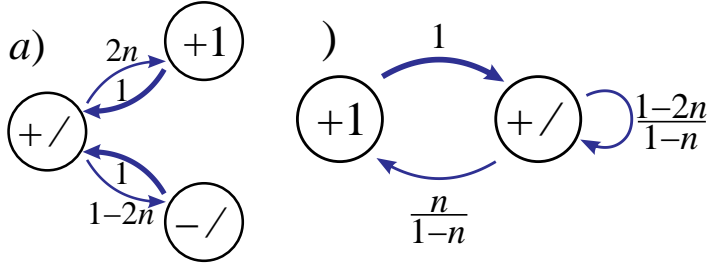


Рисунок 3.2 — Графы переходов между состояниями марковской цепи для переходной матрицы фаз а) FR-AFM; б) FR-FM

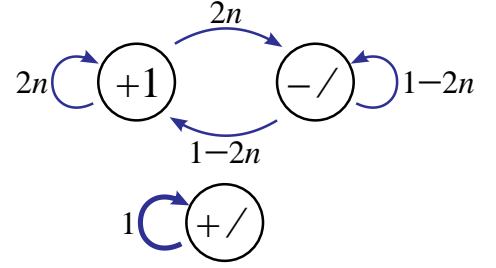


Рисунок 3.3 — Граф двухшаговой переходной матрицы для фазы FR-AFM демонстрирует периодическую структуру

Согласно формулам (3.47), (3.50) определим вид переходной матрицы и предельного распределения для данной фазы:

$$\hat{\pi} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{e^2}{\lambda_1^2} & 0 & \frac{d^2}{\lambda_1^2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p} = \frac{1}{2\lambda_1^2} \begin{pmatrix} e^2 \\ \lambda_1^2 \\ d^2 \end{pmatrix}. \quad (3.69)$$

Условие постоянства плотности заряда примесей можно записать в виде

$$n = P(1) - P(-1) = p_1 - p_{-1}. \quad (3.70)$$

Тогда элементы переходной матрицы и предельного распределения можно выразить через  $n$ :

$$\hat{\pi} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 2n & 0 & 1-2n \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p} = \begin{pmatrix} n \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} - n \end{pmatrix}. \quad (3.71)$$

Для фазы FR-AFM равновесное состояние представляет собой состояние, когда половина цепочки заполнена спинами  $+\frac{1}{2}$ , а оставшаяся часть системы является смесью положительно заряженных примесей плотностью  $n$  (с псевдоспином  $+1$ ) и спинов  $-\frac{1}{2}$  плотностью  $\frac{1}{2} - n$ .

Дискретные цепи Маркова удобно представлять в виде стохастического графа возможных переходов. Это взвешенный ориентированный граф, в вершинах которого расположены состояния цепи, стрелки от одной вершины к другой указывают возможные переходы между состояниями, а веса ребер между состояниями равны вероятностям перехода за один шаг между этими состояниями. Для фазы FR-AFM он представлен на Рисунке 3.2,а. Более жирные линии соответствуют бóльшим условным вероятностям перехода. Переходы в состояние  $+\frac{1}{2}$  из прочих происходят с вероятностью 1, значит, это состояние полностью занимает одну подрешётку, а вторая подрешётка хаотично заполнена состояниями  $+1$  и  $-\frac{1}{2}$  в соответствии с фиксированным значением  $n$ .

Используя формулы (3.52), (3.53), примесная и спиновая корреляционные функции для фазы FR-AFM равны соответственно

$$K_{+,+1}(l) = (-1)^l n^2, \quad C(l) = (-1)^l (1-n)^2. \quad (3.72)$$

Поскольку отсутствует экспоненциальная зависимость, обе корреляционные функции характеризуются бесконечной корреляционной длиной:  $\xi = \infty$ . Это парадоксально, поскольку бесконечная корреляционная длина означает упорядоченное состояние, которое, казалось бы, противоречит фрустрированному состоянию с ненулевой энтропией. Причина этого кроется в структуре цепочки.

Цепочка разбивается на две подрешётки. Одна из них полностью упорядочена – заполнена спинами  $+\frac{1}{2}$ , что и даёт бесконечную корреляционную длину. Во второй подрешётке спины  $-\frac{1}{2}$  заменяются на примеси  $+1$  с ростом  $n$  и расположены хаотично. Состояние этой подрешётки является фрустрированным и характеризуется корреляционными функциями, равными нулю. За счет этого в фазе FR-AFM сочетается упорядоченность на одной подрешётке и хаотичность на второй, что даёт одновременно бесконечную корреляционную длину и ненулевую энтропию. Явным образом это видно при рассмотрении двухшаговой переходной матрицы марковской цепи:

$$\hat{\pi}^2 = \begin{pmatrix} 2n & 0 & 1 - 2n \\ 0 & 1 & 0 \\ 2n & 0 & 1 - 2n \end{pmatrix} \quad (3.73)$$

Пространство состояний двухшаговой марковской цепи распадается на два независимых подпространства:  $\Phi_2 = \{+\frac{1}{2}\} \cup \{+1, -\frac{1}{2}\}$ , которые описывают две подрешётки спиновой цепочки. Соответствующий граф переходов через два узла цепочки изображён на Рисунке 3.3.

В результате, фазу FR-AFM можно представить как набор AFM кластеров, разделённых одиночными примесями. При этом AFM кластеры всегда содержат нечётное количество спинов и имеют на краях состояния  $+\frac{1}{2}$ , сонаправленные со внешним магнитным полем  $h > 0$ .

Средняя длина AFM-последовательности  $\sigma = (+\frac{1}{2} - \frac{1}{2})$  зависит от плотности заряда

$$\bar{l}_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2n}$$

и становится бесконечной при  $n = 0$ , т.е. при отсутствии дополнительных примесей. При этом фаза FR-AFM переходит в AFM с нулевой энтропией.

Средняя длина спин-зарядовой последовательности  $\sigma = (+1 + \frac{1}{2})$  равна

$$\bar{l}_{+1+\frac{1}{2}} = \frac{1}{1 - 2n}$$

и становится бесконечной при  $n = \frac{1}{2}$ , когда фаза FR-AFM переходит в FR-PM.

## 2. Фрустрированная ферромагнитная фаза. FR-FM

Рассмотрим аналогичную фрустрированную ферромагнитную фазу FR-FM в магнитном поле  $h > 0$ . Она соответствует границе между фазами FM и PM на  $(J, \mu)$ -диаграмме (см. Рис. 2.2). Трансфер-матрица, переходная матрица и равновесное состояние системы в данной фазе будут иметь следующий вид:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 0 & e^{--} \\ e^{--} & c^+ \end{pmatrix}, \quad \hat{\pi} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{n}{1-n} & \frac{1-2n}{1-n} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p} = \begin{pmatrix} n \\ 1 - n \end{pmatrix}. \quad (3.74)$$

Теперь пространство состояний сократилось до  $\Phi = \{+1, +\frac{1}{2}\}$ . Равновесное состояние системы представляет собой ферромагнитные кластеры, разделённые одиночными немагнитными примесями. Граф переходов представлен на Рис. 3.2,б.

Примесная и спиновая корреляционные функции одинаковы

$$K_{+1+1}(l) = K_{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}(l) = C(l) = (-1)^l n(1-n)e^{-l/\xi} \quad (3.75)$$

и имеют экспоненциальную зависимость, где корреляционная длина  $\xi$  является конечной и зависит от плотности заряда

$$\xi = \left[ \ln \left( \frac{1-n}{n} \right) \right]^{-1}. \quad (3.76)$$

Это означает, что при  $h \neq 0$  отсутствуют критические флуктуации, а состояние остаётся фрустрированным и неупорядоченным даже при  $T = 0$ . Корреляционная длина становится равной нулю лишь при  $n = 0$ , когда FR-FM фаза переходит в упорядоченную FM фазу с энтропией, равной нулю.

Средняя длина последовательности спинов  $\sigma = (+\frac{1}{2})$  равна

$$\bar{l}_{+\frac{1}{2}} = \frac{1-n}{n}$$

и расходится при  $n = 0$ , когда система переходит в «чистую» FM фазу. Средняя длина спин-зарядовой последовательности  $\sigma = (+1 + \frac{1}{2})$

$$\bar{l}_{+1+\frac{1}{2}} = \frac{n}{1-2n}$$

расходится при  $n = \frac{1}{2}$ , когда FR-FM фаза переходит в FR-PM.

### 3.4.2 Фрустрированные фазы в отсутствие магнитного поля

При  $h \neq 0$  существовало выделенное направление спинов, понижающее вариативность перестановок по цепочке без изменения энергии, что приводило к более низкой остаточной энтропии. В отсутствие внешнего магнитного поля,  $h = 0$ , обе проекции будут равносильны, так что свойства фаз FR-AFM и FR-FM несколько изменятся. Для фазы FR-AFM в марковской цепи добавятся обоюдные связи между примесным состоянием  $+1$  и спиновым  $-\frac{1}{2}$ . Для фазы FR-FM появится спиновое состояние  $-\frac{1}{2}$ , обладающее такой же связью с примесями, как и состояние  $+\frac{1}{2}$ . Теперь спиновые состояния  $\pm\frac{1}{2}$  входят в марковскую цепь симметричным образом. Корреляционные функции в нулевом поле убывают по экспоненте для обеих фаз:

$$K_{+1+1}^{\text{FR-AFM}}(l) = K_{+1+1}^{\text{FR-FM}} = (-1)^l (1-n)ne^{-l/\xi_c}, \quad (3.77)$$

$$C^{\text{FR-AFM}}(l) = (-1)^l C^{\text{FR-FM}}(l) = (-1)^l (1-n)e^{-l/\xi_s}, \quad (3.78)$$

где зарядовая и спиновые корреляционные длины равны соответственно

$$\xi_c = \left[ \ln \left( \frac{1-n}{n} \right) \right]^{-1}, \quad \xi_s = \left[ \ln \left( \frac{1-n}{1-2n} \right) \right]^{-1}. \quad (3.79)$$

В результате, если в антиферромагнитной фазе FR-AFM при включении магнитного поля происходит тонкая перестройка состояний таким образом, что на одной из подрешёток формируется дальнейшее упорядочение с бесконечной корреляционной длиной, то в ферромагнитной фазе FR-FM происходит только переворачивание спиновых кластеров по направлению магнитного поля.

Таким образом, анализ фаз основного состояния с использованием марковских цепей позволяет выявить особенности структуры фаз и скрытого упорядочения в них, аналитически определить корреляционные функции и корреляционные длины, и, кроме того, посчитать остаточную энтропию.

### 3.4.3 Типы марковских цепей

Классифицируем типы марковских цепей для одномерной разбавленной модели Изинга и определим их вид для имеющихся фрустрированных фаз. Результаты для фрустрированных фаз основного состояния представлены в Таблице 6, где для каждой из фаз приведены переходная матрица  $\hat{\pi}$ , вид равновесного состояния  $\mathbf{p}$ , граф переходов между состояниями в пространстве  $\Phi$ , вид корреляционных функций и длины.

В присутствии магнитного поля можно выделить 2 типа марковских цепей, они представлены в первых двух частях Таблицы 6. Фазы FR-AFM, FR-CO и PM-CO имеют марковские цепи с периодом 2 и бесконечную корреляционную длину за счёт упорядоченной подрешётки. За счёт этого их остаточная энтропия меньше, чем у фрустрированных фаз второго типа. Фазы второго типа FR-FM, dilute CO и FR-PM характеризуются марковской цепью из двух состояний и конечной корреляционной длиной, зависящей от  $n$ .

Перестройки марковских цепей при  $h = 0$  происходят и в других чувствительных к магнитному полю фазах. Характеристики марковских цепей для таких фаз при отсутствии магнитного поля представлены в последней части Таблицы 6. Марковская цепь для парамагнитной зарядовой фазы PM-CO в отсутствие магнитного поля сохраняет период 2, однако теперь, равноценно с состоянием  $+\frac{1}{2}$ , появляется противоположное спиновое состояние  $-\frac{1}{2}$ . Хотя дальнейшее упорядочение примесей на подрешётке сохраняется при любом магнитном поле, в отсутствие магнитного поля спиновые состояния оказываются нескоррелированы. Марковская цепь фрустрированной парамагнитной фазы FR-PM в нулевом поле содержит дополнительное состояние  $-\frac{1}{2}$ , симметричное  $+\frac{1}{2}$ . Зарядовая корреляционная длина не претерпевает изменений, однако спиновая корреляционная функция становится равной нулю, за счёт чего и увеличивается остаточная энтропия данной фазы.

На Рисунке 3.4 в логарифмическом масштабе представлены концентрационные зависимости корреляционных длин различных фрустрированных фаз Таблицы 6 в магнитном

Таблица 6 — Таблица отображений фрустрированных фаз на марковские цепи ( $n > 0$ )

Тип марковской цепи	Фаза	Переходная матрица $\hat{\pi}$	Равновесное состояние $\mathbf{p}$	Граф переходов	Корреляционные функции $K_{+1+1}(l)$ , $C(l)$ и корреляционные длины
Периодическая с периодом 2	FR-AFM ( $h > 0$ )	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 2n & 0 & 1-2n \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} n \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} - n \end{pmatrix}$		$K_{+1+1}(l) = (-1)^l n^2$ , $C(l) = (-1)^l (1-n)^2$ , $\xi = \infty$
	PM-CO ( $h > 0$ )	$\begin{pmatrix} 0 & 1-2n & 2n \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} - n \\ n \end{pmatrix}$		$K_{+1+1}(l) = \frac{(-1)^l}{4}$ , $C(l) = (-1)^l n^2$ , $\xi = \infty$
	FR-CO	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{2} + n & \frac{1}{2} - n & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1+2n}{4} \\ \frac{1-2n}{4} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$		$K_{+1+1}(l) = \frac{(-1)^l (1+2n)^2}{16}$ , $C(l) = \frac{(-1)^l}{4}$ , $\xi = \infty$
Апериодическая	FR-FM ( $h > 0$ )	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{n}{1-n} & \frac{1-2n}{1-n} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} n \\ 1-n \end{pmatrix}$		$K_{+1+1}(l) = C(l) = (-1)^l n(1-n)e^{-l/\xi}$ , $\xi = \left[ \ln \left( \frac{1-n}{n} \right) \right]^{-1}$
	FR-PM ( $h > 0$ )	$\begin{pmatrix} \frac{2n-1}{n} & \frac{1-n}{n} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$			$K_{+1+1}(l) = C(l) = (-1)^l n(1-n)e^{-l/\xi}$ , $\xi = \left[ \ln \left( \frac{n}{1-n} \right) \right]^{-1}$
	dilute CO	$\begin{pmatrix} \frac{2n}{1+n} & \frac{1-n}{1+n} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1+n}{2} \\ \frac{1-n}{2} \end{pmatrix}$		$K_{+1+1}(l) = \frac{(-1)^l}{4} (1-n^2) e^{-l/\xi}$ , $\xi = \left[ \ln \left( \frac{1+n}{1-n} \right) \right]^{-1}$
Периодическая с периодом 2	PM-CO ( $h = 0$ )	$\begin{pmatrix} 0 & 1-2n & n & n \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} - n \\ \frac{n}{2} \\ \frac{n}{2} \end{pmatrix}$		$K_{+1,+1} = \frac{(-1)^l}{4}$ , $\xi_c = \infty$ , $C(l) = 0$
Апериодическая	FR-AFM ( $h = 0$ )	$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{n}{1-n} & 0 & \frac{1-2n}{1-n} \\ \frac{n}{1-n} & \frac{1-2n}{1-n} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} n \\ \frac{1-n}{2} \\ \frac{1-n}{2} \end{pmatrix}$		$K_{+1,+1} = (-1)^l (1-n) n e^{-l/\xi_c}$ , $\xi_c = \left[ \ln \left( \frac{1-n}{n} \right) \right]^{-1}$ , $C(l) = (\mp 1)^l (1-n) e^{-l/\xi_s}$ , $\xi_s = \left[ \ln \left( \frac{1-n}{1-2n} \right) \right]^{-1}$
	FR-FM ( $h = 0$ )	$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{n}{1-n} & \frac{1-2n}{1-n} & 0 \\ \frac{n}{1-n} & 0 & \frac{1-2n}{1-n} \end{pmatrix}$			
	FR-PM ( $h = 0$ )	$\begin{pmatrix} \frac{2n-1}{n} & \frac{1-n}{2n} & \frac{1-n}{2n} \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$			$K_{+1,+1} = (-1)^l n e^{-l/\xi}$ , $\xi_c = \left[ \ln \left( \frac{n}{1-n} \right) \right]^{-1}$ , $C(l) = 0$

поле  $h$  и без него. Корреляционные длины фаз с марковскими цепями периодического типа не изображены, поскольку они являются бесконечными для любых  $n$ .

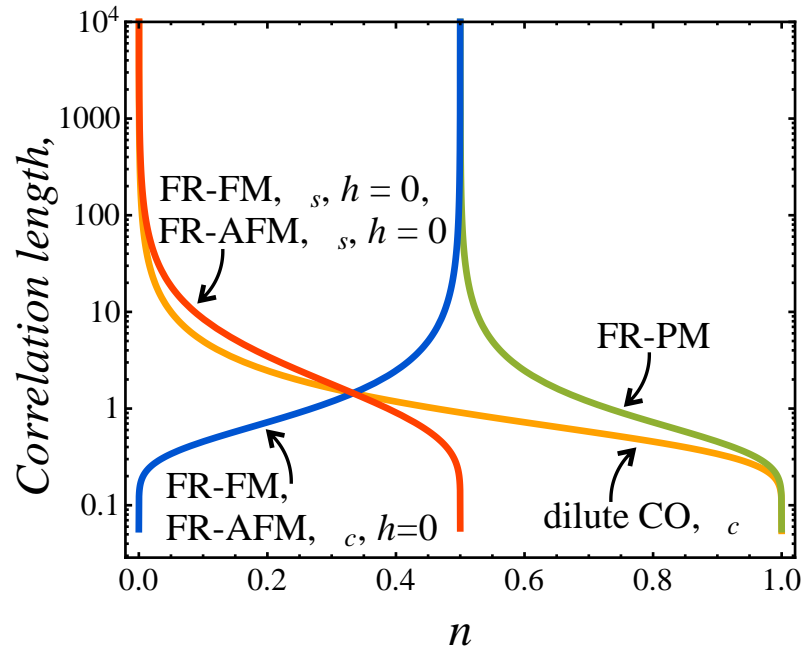


Рисунок 3.4 — Зависимость корреляционной длины различных фаз основного состояния от плотности заряда немагнитных примесей  $n$  в логарифмическом масштабе.

Примесная корреляционная длина  $\xi_c$  для фаз FR-(A)FM при  $h = 0$  такая же, как для FR-FM фазы при  $h \neq 0$ . Она становится равной нулю при  $n = 0$ , когда фрустрированные фазы переходят в «чистые» фазы (A)FM. При этом спиновая корреляционная длина  $\xi_s$  стремится к бесконечности. Это свидетельствует о магнитном фазовом переходе при  $T = 0$ , когда (A)FM состояние становится полностью упорядоченным. Другой граничной точкой является  $n = \frac{1}{2}$ , соответствующая «чистому» парамагнитному упорядочению PM. В этой точке примесная корреляционная длина расходится, тогда как спиновая равна нулю. В фазе FR-PM, по сравнению с фазой FR-FM, примесные и спиновые состояния меняются местами, что приводит к симметрии свойств этих фаз относительно точки  $n = \frac{1}{2}$ ; исключением является отсутствие в фазе FR-PM спин-спиновых корреляций в нулевом магнитном поле. В фазе шахматного разбавленного порядка dilute CO дальнейшее зарядовое упорядочение при  $T = 0$  наступает лишь в «чистом» пределе CO, при  $n = 0$ , когда зарядовая корреляционная длина расходится.

Показано, что в фазах, характеризующихся периодическими цепями Маркова, в одной подрешетке проявляется дальнейшее упорядочение, в то время как другая подрешетка остается неупорядоченной. Это приводит к уникальному сочетанию ненулевой остаточной энтропии и бесконечной корреляционной длины. И наоборот, в фрустрированных фазах с аperiodическими цепочками дальний порядок отсутствует и корреляционная длина конечна. Показано, что при включении магнитного поля наиболее значимому изменению структуры спиновой цепочки соответствует изменение типа марковской цепи: аperiodическая цепь становится периодической, что означает появление в системе дальнего порядка.

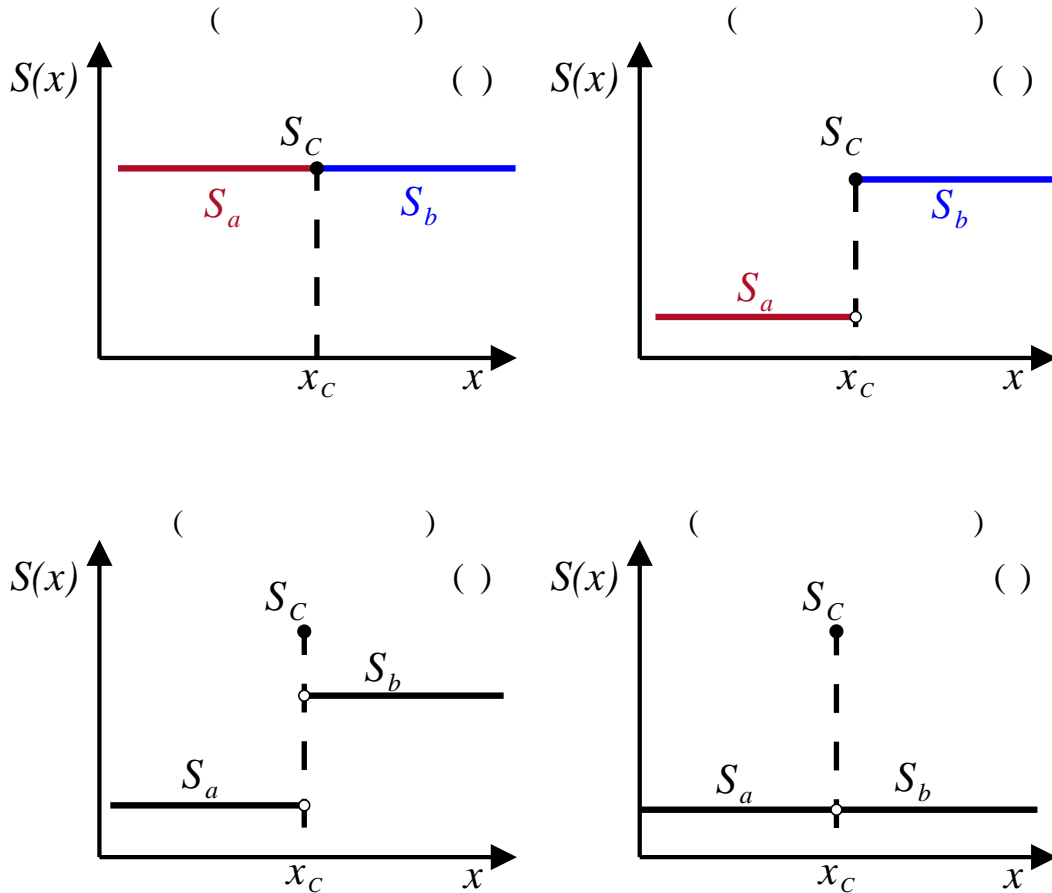


Рисунок 3.5 — Типичные зависимости остаточной энтропии при нулевой температуре от некоторого параметра  $x$  вблизи границы между двумя различными фазами  $a$  и  $b$ , рисунок взят из [43]

### 3.4.4 Остаточная энтропия на границе раздела фаз и критерий Рохаса

На основе подхода марковских цепей можно определить не только остаточную энтропию фаз, но и энтропию состояния, которое реализуется на границах разделения этих фаз. Это исследование важно с точки зрения поиска таких критических явлений как псевдопереходы. Подробнее про явление псевдопереходов, их свойства и характеристики будет изложено в следующем разделе. Здесь же рассмотрим энтропийные свойства основного состояния системы на границах раздела двух и более фаз в целях поиска областей, где могут наблюдаться псевдопереходы.

Типично на границе разделения двух фаз возможно 4 ситуации для остаточной энтропии. Они схематично изображены на Рисунке 3.5 [43]. Обычно энтропия на границе разделения фаз возрастает, что свидетельствует о том, что имеется в системе в основном состоянии больше доступных состояний на границе, чем внутри самих фаз. Тогда для энтропии при  $T = 0$  наблюдается точка разрыва, как показано на Рисунке 3.5, в и г. И, действительно, эта ситуация реализуется на большинстве границ разделения фаз.



Если же остаточная энтропия непрерывна на границе хотя бы с одной стороны, т.е. совпадает по величине с энтропией одной из соседствующих фаз (Рисунок 3.5, а и б), то тогда в области со стороны второй, низкоэнтропийной фазы можно ожидать наличие псевдопереходов. Это условие получило название энтропийного критерия Рохаса [43].

Такие решения на всех границах разделения фаз, а также для ряда критических точек, представлены в Таблице 7. Таблица разделена на три части: границы для «чистой» цепочки,  $n = 0$ ; границы, существующие при любой степени разбавления,  $\forall n \neq 0$ ; границы для слабо разбавленной и сильно разбавленной системы,  $0 < |n| < \frac{1}{2}$  и  $|n| \geq \frac{1}{2}$  соответственно. Решения, для которых выполняется энтропийный критерий Рохаса, выделены в Таблице серым цветом.

Таблица 7 — Решения на границах разделения фаз, и их энтропия. Серым цветом выделены границы, энтропия которых равна энтропии одной из граничащих фаз, что свидетельствует о наличии псевдопереходов

Фазы	Энтропия
$n = 0$	
CO—FM	0
CO—AFM	
FM—AFM	$\begin{cases} \frac{1}{2} \ln \frac{\sqrt{5}+1}{\sqrt{5}-1} = \operatorname{arccoth} \sqrt{5}, & h \neq 0 \\ \ln 2, & h = 0 \end{cases}$
CO—FM—AFM	
CO—FR—CO	$\ln 2$
FM—FR—CO	
AFM—FR—CO	$\frac{\ln 3}{2}$
$\forall n \neq 0$	
(dilute) CO—(A)FM, CO—FM <sup>+</sup> —FM <sup>-</sup>	$\frac{1+ n }{2} \ln \frac{1+ n }{2} - \frac{1- n }{2} \ln \frac{1- n }{2} -  n  \ln  n  = \mathcal{S}_{\text{CO}}(n)$
$0 <  n  < \frac{1}{2}$	
CO—PM—CO	$-(1-n) \ln(1-n) - n \ln n$
FM—FR—FM	
AFM—FR—AFM	$\frac{1}{2} [(1-n(1-\alpha)) \ln(1-n(1-\alpha)) - (1-n(1+\alpha)) \ln(1-n(1+\alpha))] -$ $n\alpha \ln 2n - n(1-\alpha) \ln(1-\alpha) - 2n\alpha \ln \alpha,$ $\alpha - \text{корень } n = \frac{1-\alpha}{1+\alpha(\sqrt{1+\alpha(5\alpha-2)}-1)}$
FR—FM <sup>+</sup> —FR—FM <sup>-</sup>	$-n \ln n + n \ln 2 - (1-2n) \ln(1-2n) + (1-n) \ln(1-n)$
FR—AFM <sup>+</sup> —FR—AFM <sup>-</sup>	
PM—CO <sup>+</sup> —PM—CO <sup>-</sup>	$\frac{1-2n}{2} \ln(1-2n) - n \ln n$
FR—FM—FR—AFM	$(\alpha(2n-1) - n) \ln 2 - \frac{(\alpha+1)(1-2n)}{2} \ln(1-2n) + \frac{(\alpha-1)(1-2n)}{2} \ln(1-\alpha) -$ $\alpha(1-2n) \ln \alpha + \frac{1+\alpha(1-2n)}{2} \ln(1+\alpha(1-2n)) - n \ln n,$ $\alpha = \frac{1}{n+\sqrt{5-n(10-n)}}$

Таблица 7 — Решения на границах разделения фаз, и их энтропия. Серым цветом выделены границы, энтропия которых равна энтропии одной из граничащих фаз, что свидетельствует о наличии псевдопереходов

Фазы	Энтропия
PM-CO—FR-FM	$\frac{1}{2}(-2n \ln 2 - 4n \ln n - (1 + \alpha)(1 - 2n) \ln(1 - 2n) - (1 - \alpha - 2n(1 - \alpha)) \ln(1 - \alpha) + 2\alpha(2n - 1) \ln \alpha + 2(n + \alpha(1 - 2n)) \ln(n + \alpha(1 - 2n)) + (1 + \alpha(2n - 1)) \ln(1 - \alpha(1 - 2n))),$ $\alpha = \frac{2 - 5n + \sqrt{4 - n(4 + 7n)}}{8(1 - 2n)}$
PM-CO—FR-AFM	$-(\frac{1}{2} - n) \ln(\frac{1}{2} - n) - 2n \ln 2n + (\frac{1}{2} + n) \ln(\frac{1}{2} - n)$
PM-CO—FR-CO	$\frac{1}{4}((1 - 3\alpha(1 - 2n)) \ln 4 - (\alpha + 1)(1 - 2n) \ln(1 - 2n) - 2(1 - \alpha)(1 - 2n) \ln(1 - \alpha) - 4\alpha(1 - 2n) \ln \alpha + (\alpha + 1)(1 - 2n) \ln(\alpha + 1) + (1 + \alpha - 2n(\alpha - 1)) \ln(1 + \alpha - 2n(\alpha - 1)) + 2(1 - \alpha(1 - 2n)) \ln(1 - \alpha(1 - 2n)) - 2(1 - \alpha + 2n(\alpha + 1)) \ln(1 - \alpha + 2n(\alpha + 1))),$ $\alpha - \text{корень } \frac{2^6 \alpha^4 (1 - 2n)(1 - \alpha(1 - 2n))^2}{(1 - \alpha)^2 (1 + \alpha)(1 - \alpha + 2n(1 + \alpha))^2 (1 + \alpha + 2n(1 - \alpha))} = 1$
FR-FM—FR-CO	$\frac{1}{4}[(1 + 3\alpha(2n - 1)) \ln 4 - (1 + 3\alpha)(1 - 2n) \ln(1 - 2n) - (1 - \alpha - 2n(1 - \alpha)) \ln(1 - \alpha) + 4\alpha(2n - 1) \ln \alpha + 2(1 + \alpha(1 - 2n)) \ln(1 + \alpha(1 - 2n)) - (1 + 2n - \alpha(1 - 2n)) \ln(1 + 2n - \alpha(1 - 2n))],$ $\alpha - \text{второй корень } \frac{2^6 \alpha^4 (1 - 2n)^3}{(1 - \alpha)(1 + \alpha(1 - 2n))^2 (1 - \alpha + 2n(1 + \alpha))} = 1$
FR-AFM—FR-CO	$\frac{1}{4}(2 \ln 2 - 2\alpha(1 - 2n) \ln 2\alpha - (\alpha + 1)(1 - 2n) \ln(1 - 2n) - (1 - \alpha - 2n(1 - \alpha)) \ln(1 - \alpha) - (1 + 2n - \alpha(1 - 2n)) \ln(1 + 2n - \alpha(1 - 2n))),$ $\alpha = \frac{2\sqrt{1 - 3n^2} - 1}{3(1 - 2n)}$
$\frac{1}{2} \leq  n  < 1$	
CO—FR-PM	$-(1 - n) \ln(1 - n) - n \ln(n)$
FM—FR-PM	
AFM—FR-PM	$n \ln n - (1 - \alpha)(1 - n) \ln 2(1 - n)(1 - \alpha)^2 + \frac{1 - n}{2} [(2 - \alpha) \ln(2 - \alpha) - \alpha \ln(\alpha)] - (\alpha(1 - n) + 2n - 1) \ln(\alpha(1 - n) + 2n - 1),$ $\alpha - \text{третье решение } \frac{4 - 2(1 - \alpha)^2 \sqrt{(2 - \alpha)\alpha - (2 - \alpha)\alpha(5\alpha - 11) + 10}}{4 - (2 - \alpha)\alpha(12 + \alpha(5\alpha - 12))} = n$
FR-PM <sup>+</sup> —FR-PM <sup>-</sup>	$n \ln n + (1 - n) \ln 2 - (1 - n) \ln(1 - n) - (2n - 1) \ln(2n - 1)$

Обнаружено лишь три границы, на которых остаточная энтропия имеет по крайней мере односторонний предел. Именно они отмечены красной штриховыми линиями на фазовых диаграммах основного состояния, Рисунки 2.3, 2.4, 2.5.

Первая граница разделяет зарядовую фазу CO и (анти)ферромагнитную фазу (A)FM при  $n = 0$ . Важно отметить, что фазы CO и (A)FM сосуществуют только в том случае, если заряд-зарядовое отталкивание уравновешивается спин-обменным взаимодействием,  $V = |J|$ . В этом случае система распадается на магнитно- и зарядоупорядоченные кластеры, но полная остаточная энтропия все равно остается равной нулю. В случае сильной спин-обменной связи  $V < |J|$ , состояние на границе является CO, так что наблюдается двусторонний предел остаточной энтропии, и можно ожидать наличие псевдопереходов со стороны (A)FM

фазы. Зависимость энтропии при низких температурах для данной границы представлена на Рисунке 3.6,а.

И наоборот, в пределе слабого обмена ( $V > |J|$ ) реализуется симметричный сценарий с формированием магнитного состояния на границе CO–(A)FM. Мы также наблюдаем двусторонний предел для энтропии, однако теперь ожидается псевдопереход со стороны CO. Далее, особый интерес представляет трикритическая точка (CO–FM–AFM) при  $n = 0$  в слабых магнитных полях,  $|h| < 2V$ . Она обозначена красной точкой на Рисунке 2.3,а. При приближении к этой точке по линии  $J = \frac{|h|}{2}$  наблюдается скачок остаточной энтропии, как представлено на Рисунке 3.6,б. Следовательно, наблюдается односторонний предел для остаточной энтропии. Состояние в трикритической точке, как и на границе FM–AFM, представляет собой фрустрированную смесь FM и AFM кластеров с ненулевой остаточной энтропией.

Третье решение реализуется при любых  $n \neq 0$  на границе разделения фазы CO и (A)FM фазы. Однако теперь границы раздела зарядовой и магнитной фаз наблюдаются только в случае сильного спинового обмена,  $|J| > V$ ,  $\Delta = V - |J|$ . Магнитные фазы испытывают фазовое расслоение при  $n \neq 0$ , однако обладают нулевой остаточной энтропией. Тогда как CO является высокоэнтропийной фазой с энтропией, равной

$$\mathcal{S}_{\text{CO}}(n) = \frac{1 + |n|}{2} \ln \frac{1 + |n|}{2} - \frac{1 - |n|}{2} \ln \frac{1 - |n|}{2} - |n| \ln |n|, \quad (3.80)$$

которая и будет реализовываться на границе CO–(A)FM, что приводит к одностороннему пределу для энтропии, как можно наблюдать на Рисунке 3.6,в. Таким образом, в области магнитной фазы (A)FM, близкой к границе разделения CO–(A)FM можно также ожидать наличие псевдопереходов при  $n \neq 0$ .

Хотя рассматриваемая система имеет большое разнообразие фрустрированных фазовых состояний, только самые простые из них, фазы CO и (A)FM, соответствуют необходимым условиям для наличия псевдопереходов. Границы между всеми другими фазами демонстрируют более высокую остаточную энтропию, чем у отдельных фаз, что приводит к разрывам и невыполнению критерия Рохаса. Это проиллюстрировано на Рисунке 3.6,г, демонстрирующем пример точек с конечными разрывами остаточной энтропии на границах между фазами CO и FM-CO, FM-CO и FR-AFM.

### 3.5 Псевдопереходы

Основываясь на полученной в Подразделе 3.4.4 информации о границах, на которых выполняется критерий Рохаса, рассмотрим термодинамические свойства одномерной разбавленной цепочки Изинга с заряженными примесями двух типов. Отметим, что без потери общности ниже для выражений будет рассматриваться случай нулевого внешнего поля,  $h = 0$ . Магнитное поле влияет на величины энтропии фрустрированных фаз, как обсуждалось в Разделе 3.4; также магнитным полем сдвигаются границы раздела фаз, что влияет на расположение псевдопереходов и псевдокритические температуры. Тем не менее,

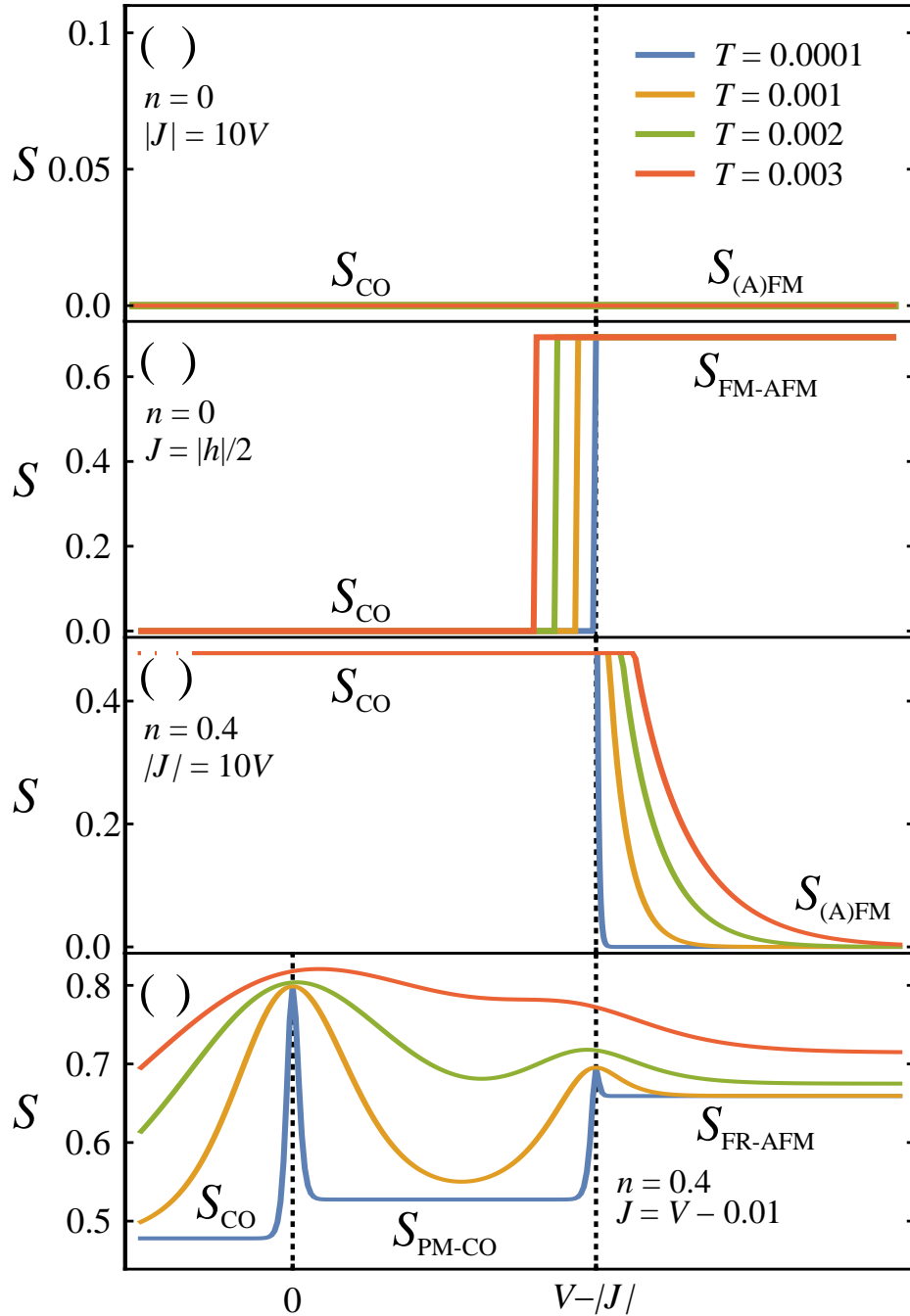


Рисунок 3.6 — Зависимости энтропии от  $\Delta$  при низких температурах  $T = 10^{-4}$ ,  $10^{-3}$ ,  $2 \cdot 10^{-3}$ ,  $3 \cdot 10^{-3}$  вблизи различных фазовых границ. Представлены типичные сценарии непрерывной и разрывной остаточной энтропии на этих границах: (а) непрерывная остаточная энтропия равна нулю как со стороны CO, так и со стороны (A)FM, при  $n = 0$ ,  $|J| = 10V$ ; (б) непрерывная остаточная энтропия в трикритической точке CO—FM—AFM имеет односторонний предел со стороны FM—AFM на линии  $J = \frac{|h|}{2}$  при  $n = 0$ ; (в) непрерывная остаточная энтропия на границе CO—(A)FM имеет односторонний предел со стороны CO,  $n = 0.4$ ,  $|J| = 10V$ ; (г) разрывная остаточная энтропия имеет конечный разрыв на границе PM-CO—FR-AFM при  $n = 0.4$ ,  $|J| = V/2$ . Только случаи (а)–(в) предполагают наличие псевдопереходов на основе энтропийного критерия Рохаса [43]

присутствие магнитного поля в целях исследования свойств псевдопереходов не является существенным.

Двигаясь дальше, мы сосредоточимся лишь на границе между фазами (dilute) CO и (A)FM, где выполняется энтропийный критерий. Для облегчения обсуждения мы введем значение смещения от этой фазовой границы основного состояния для  $h = 0$ :

$$\delta\varepsilon_0 = \varepsilon_{\text{CO}}^0(0) - \varepsilon_{(\text{A})\text{FM}}^0(0) = \Delta - V + |J|, \quad (3.81)$$

где индекс 0 означает  $T = 0$ , а значение плотности заряда  $n$  считается равным 0.

### 3.5.1 Псевдопереходы «первого рода»

Рассмотрим термодинамические свойства «чистой» системы при  $n = 0$  и сосредоточимся на возникновении псевдопереходов в этом случае. В силу энтропийного критерия мы ожидаем наличие псевдопереходов вблизи границы между зарядовой и магнитной фазами, за исключением критической точки  $V = |J|$ . Диапазон параметров, в которых наблюдаются псевдопереходы, зависит от близости к этой критической точке, причем этот диапазон становится значительно уже при  $V \sim |J|$ . Эти области были обозначены красной штриховкой на Рисунке 2.3. Так что наблюдение псевдоперехода вблизи критической точки на практике оказывается сложной задачей. В крайних случаях, когда  $V$  существенно превышает  $J$  или наоборот, псевдопереход становится особенно заметен со стороны фаз CO или (A)FM соответственно.

Это будет продемонстрировано путем исследования температурных зависимостей термодинамических величин. Было обнаружено, что псевдопереходы идентичны в двух симметричных областях,  $V \gg |J|$  и  $|J| \gg V$ , для  $\delta\varepsilon_0 > 0$  и  $\delta\varepsilon_0 < 0$  соответственно. Например, рассмотрим две симметричные ситуации, когда  $V = 10|J| = 1$  и  $|J| = 10V = 1$ . Этот сценарий иллюстрируется на Рисунке 3.7, где показаны температурные зависимости большого термодинамического потенциала, энтропии, удельной теплоёмкости, корреляционной длины, (псевдо)намагниченности и (псевдо)магнитной восприимчивости для различных значений  $\delta\varepsilon_0$ , но необходимо взять  $\delta\varepsilon_0 > 0$  для  $V \gg |J|$  и  $\delta\varepsilon_0 < 0$  для  $V \ll |J|$ . Кривые будут идентичны для этих двух соотношений. Под (псевдо)намагниченностью понимаются соответствующие параметры порядка (4.1) для реализующихся квазифаз, а под (псевдо)магнитной восприимчивостью – восприимчивости по соответствующим параметрам порядка.

Высокоэнтропийное состояние на границе характеризуется плавным уменьшением энтропии до нуля с температурой, что демонстрируется зелёной кривой на Рисунке 3.7(б). Состояния в непосредственной близости от границы демонстрируют резкий переход в состояние с низкой энтропией и спонтанной (псевдо)намагниченностью (CO параметром порядка для  $V \gg |J|$  и (A)FM параметром порядка для  $|J| \gg V$ ). Этот переход становится всё более ярко выраженным по мере приближения к фазовой границе. Соответственно, существует узкая область псевдоперехода, где большой термодинамический потенциал имеет точку излома,

(псевдо)намагниченность меняется скачком, а энтропия внезапно падает до нуля, что напоминает типичный ФП I рода. Тем не менее, разрывов нет, и термодинамические величины остаются гладкими аналитическими функциями. Во время этого псевдоперехода происходит переход в квазифазу, которая при этих параметрах станет основным состоянием при  $T = 0$ . Дальнейшее удаление от фазовой границы приводит к тому, что псевдопереход происходит при более высоких температурах, при этом большой термодинамический потенциал, энтропия и (псевдо)намагниченность становятся более гладкими функциями.

Для вторых производных во время псевдоперехода отчетливо наблюдаются высокие острые пики, напоминающие ФП II рода, как изображено в полулогарифмическом масштабе для корреляционной длины, теплоёмкости и (псевдо)магнитной восприимчивости на Рисунке 3.7(г,д,е). Следует отметить, что эти пики являются большими, но конечными, так что функции не имеют расходимостей. При удалении от границы фаз при повышении температуры высота пиков уменьшается, а сами пики уширяются.

Таким образом, мы явно видим признаки псевдопереходов, которые встречались ранее в ряде прочих фрустрированных (квази)одномерных системах [2; 21; 39; 43; 44; 53–55; 145]. Производные первого порядка от большого термодинамического потенциала, включая энтропию и намагниченность, демонстрируют скачки, напоминающие разрывы при ФП I рода. Производные второго порядка, такие как теплоёмкость и магнитная восприимчивость, демонстрируют резкие пики, подобные ФП II рода, но без каких-либо сингулярностей.

Выражение для псевдокритической температуры в нулевом магнитном поле можно получить аналитически из квадратного корня собственных значений трансфер-матрицы, полагая  $h = 0$  и  $\mu = 0$  в выражениях (3.20) для  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ . Точка псевдоперехода определяется условием  $w_1 = w_2$ . В этом случае собственные значения  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  будут сходиться максимально близко. Тогда мы приходим к трансцендентному уравнению, определяющему температуру псевдоперехода  $T_{p,1}$ :

$$\frac{\Delta}{T_{p,1}} = \ln \frac{\cosh \frac{V}{T_{p,1}}}{\cosh \frac{J}{T_{p,1}}}. \quad (3.82)$$

Из этого выражения очевидно, что в критической точке  $V = |J|$  псевдопереходы не наблюдаются.

Если остаточная энтропия испытывает скачок на границе фаз  $a$  и  $b$ , то существует известное выражение [2] для температуры псевдоперехода  $T_p$ :

$$E_a - E_b = T_p(S_a - S_b). \quad (3.83)$$

Это условие выполняется для границы СО–FM–AFM, как видно из Рисунка 3.6(б). Тогда вблизи трикритической точки СО–FM–AFM, на прямой  $J = \frac{|h|}{2} = 0$ , аналитическое выражение для (псевдо)критической температуры имеет следующий простой вид:

$$T_{p,1} = \frac{V - \Delta}{\ln 2}. \quad (3.84)$$

Поскольку вторые производные демонстрируют критическое поведение, напоминающее второй род, проанализируем критические показатели термодинамических величин. На

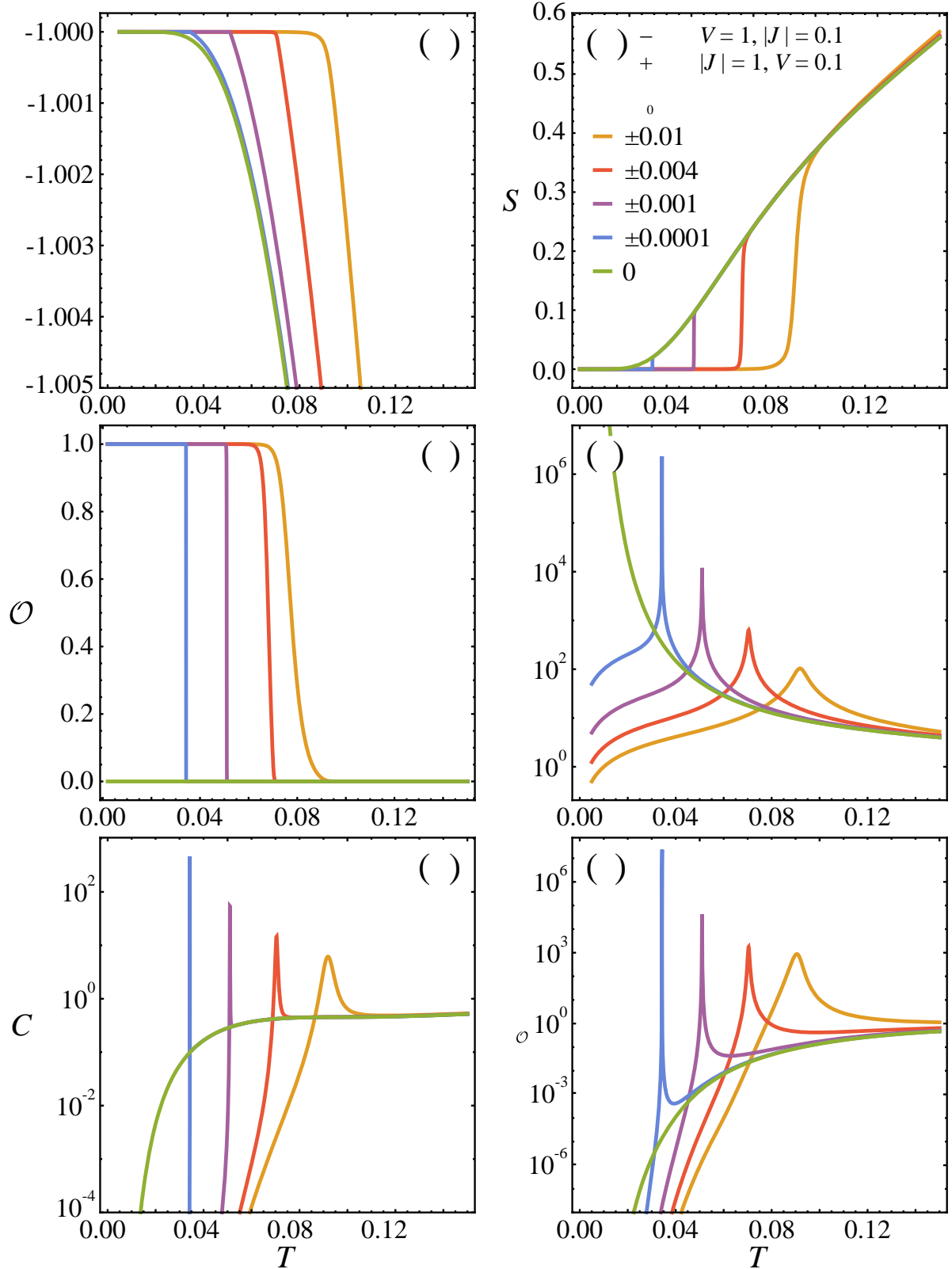


Рисунок 3.7 — Температурные зависимости (а) большого термодинамического потенциала, (б) энтропии, (в) (псевдо)намагниченности, (г) корреляционной длины, (д) удельной теплоёмкости и (е) (псевдо)магнитной восприимчивости при  $n = 0$  и различных значениях  $\delta\epsilon_0$  демонстрируют типичное поведение, характерное для псевдопереходов «первого рода»

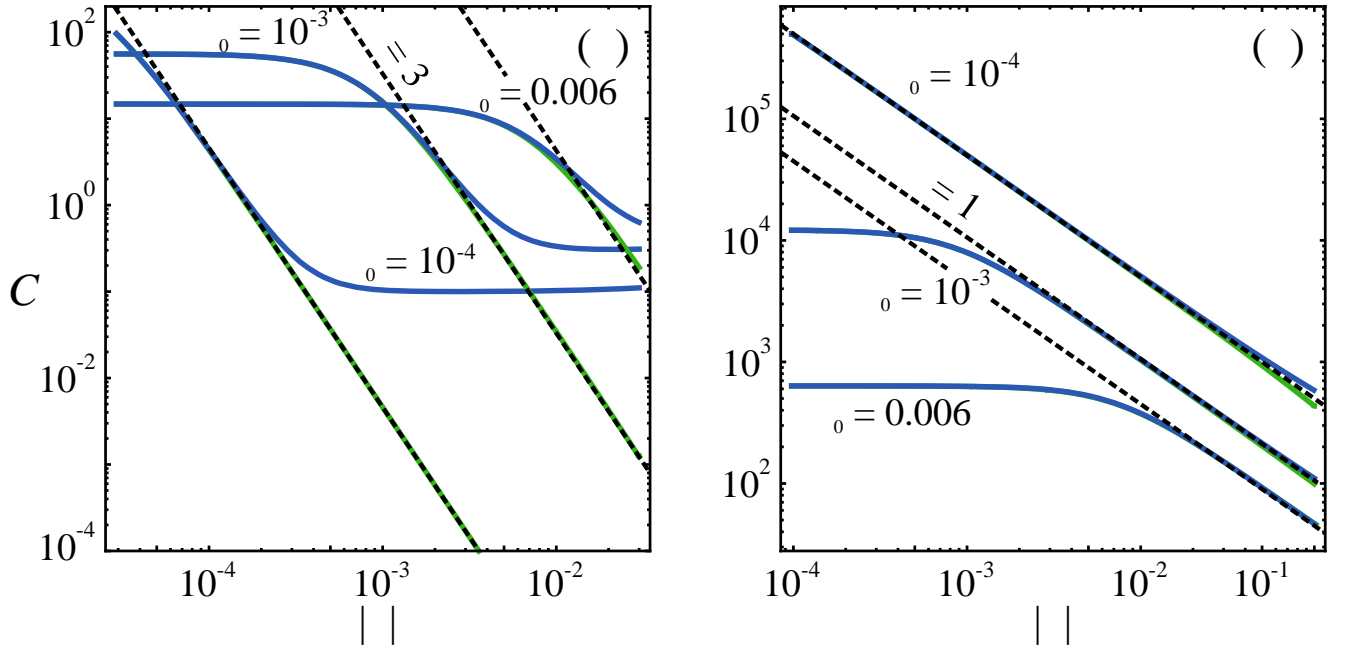


Рисунок 3.8 — Зависимости теплоёмкости (слева) и корреляционной длины (справа) от температуры  $\tau = T - T_p$  в двойном логарифмическом масштабе. Пунктирные линии представляют собой степенные функции  $\ln C(\tau) \sim -3 \ln |\tau|$  для теплоёмкости и  $\ln \xi(\tau) \sim -\ln |\tau|$ , а сплошные линии соответствуют величинам при  $\tau > 0$  (синие) и  $\tau < 0$  (зелёные)

Рисунке 3.8 показаны температурные зависимости теплоёмкости и корреляционной длины в логарифмическом масштабе в окрестности псевдокритической температуры  $\tau = T - T_p$  для того же набора параметров, что и ранее. Можно заметить, что существует промежуточный температурный диапазон, достаточно близкий к псевдокритической температуре, в котором теплоёмкость и корреляционная длина подчиняются степенному закону с псевдокритическими показателями  $\alpha = \alpha' = 3$  и  $\nu = \nu' = 1$  соответственно, как показано прямыми пунктирными линиями в логарифмическом масштабе. Кроме того, аналогичное псевдокритическое поведение наблюдается и для магнитной восприимчивости, которая в этом промежуточном интервале температур также демонстрирует степенную зависимость с псевдокритическими показателями  $\gamma = \gamma' = 3$  (не показана на Рисунке 3.8).

Однако следует подчеркнуть, что корреляционная длина, в сравнении с теплоёмкостью, следует соответствующей степенной функции в более широком диапазоне температур симметрично вокруг псевдокритической точки  $\tau = 0$ . В частности, этот диапазон шире для низкотемпературных ветвей ( $\tau < 0$ ) по сравнению с высокотемпературными ветвями ( $\tau > 0$ ) как для удельной теплоёмкости, так и для магнитной восприимчивости. Тем не менее, можно заключить, что полученные показатели  $\alpha = 3$ ,  $\gamma = 3$ ,  $\nu = 1$  удовлетворяют тому же классу универсальности, найденному ранее для других одномерных моделей, см., например [2; 145].

Таким образом, наблюдаемое псевдокритическое поведение происходит в «чистом» случае,  $n = 0$ , вблизи границы между зарядовым и магнитным порядками. Этот результат не вызывает удивления, поскольку эти две фазы не смешиваются друг с другом. Очевиден переход между несовместимыми квазифазами с резким уменьшением энтропии. Первые производные большого термодинамического потенциала, включая энтропию и намагниченность,



демонстрируют скачки, напоминающие разрывы при ФП I рода. Вторые производные, такие как удельная теплоёмкость и магнитная восприимчивость, демонстрируют острые пики, похожие на ФП II рода, но без каких-либо сингулярностей. Этот псевдопереход с универсальными псевдокритическими показателями был описан в литературе для различных одномерных и квазиодномерных систем. Кроме того, в работе [146] был выявлен этот тип псевдопереходов в аналогичной одномерной модели для купратов в условиях слабого спинового обмена. Ограничение электронейтральности, наложенное в этой работе, аналогично «чистому» случаю в большом каноническом формализме,  $n = 0$ , используемом в нашем исследовании.

## Псевдопереходы «второго рода»

Теперь рассмотрим разбавленный случай,  $n \neq 0$ . Как упоминалось ранее, на границе dilute CO и dilute (A)FM фаз наблюдается скачок остаточной энтропии со стороны CO (см. Рисунок 3.6(в)). Фаза разбавленной CO демонстрирует высокую энтропию  $\mathcal{S}_{CO}(n)$  (3.80), тогда как фаза разбавленной (A)FM с разделением фаз демонстрирует нулевую остаточную энтропию. Определим псевдопереход вблизи этой границы.

Здесь, в отличие от случая  $n = 0$ , присущая симметрия спиновой и псевдоспиновой систем нарушается. Теперь псевдопереход может происходить исключительно только со стороны (A)FM, так как  $|J| > V$ . При этом область фазовой диаграммы основного состояния (см. Рисунки 2.4 и 2.5), соответствующая фазе CO, с  $|J| < V$ , заменяется фазой PM-CO для  $0 < |n| < 1/2$ , или фазой FR-PM для  $|n| \geq 1/2$ . Тогда как область фазы (A)FM станет занята фазами FR(A)FM и FR-PM соответственно. Следовательно, граница  $\Delta = V - |J|$  при слабом магнитном обмене,  $|J| < V$ , не удовлетворяет критерию Рохаса в разбавленном случае.

На Рисунке 3.9 представлены температурные зависимости большого термодинамического потенциала, энтропии, намагниченности, корреляционной длины, удельной теплоёмкости и магнитной восприимчивости для  $n = 0.4$  и различных значений  $\delta\epsilon_0 > 0$ , по мере приближения к границе (dilute) CO—(A)FM со стороны dilute (A)FM, и  $|J| > V$ . Большой термодинамический потенциал демонстрирует почти линейное поведение вплоть до температуры псевдоперехода, характеризующейся внезапной точкой излома. Впоследствии, при низких температурах, большой термодинамический потенциал стабилизируется на почти постоянном значении, соответствующем основному состоянию. Энтропия постепенно уменьшается при более высоких температурах, в конечном итоге достигая плато, где она остается почти постоянной. При этом значение энтропии на этом плато соответствует величине остаточной энтропии фазы CO. Можно сделать вывод, что при выходе на плато система достигает фрустрированной квазифазы CO (квазифазы, поскольку температура отлична от нуля, и это нельзя назвать полностью однородным состоянием). Затем наблюдается чёткая псевдокритическая точка излома в энтропии, отмечающая начало её постепенного уменьшения вплоть до нуля. Тем не менее, энтропия по-прежнему остается всюду непрерывной функцией. Кроме того, после псевдоперехода намагниченность плавно достигает своего максимального значе-

ния  $1 - |n|$ , как показано на Рисунке 3.9(в). Таким образом, происходит псевдопереход из фрустрированной квазифазы CO в разбавленную квазифазу (A)FM.

Демонстрация изменений состояния цепочки во время этого процесса показана на Рисунке 3.10 для AFM случая. Интересно, что капля в разбавленной магнитной квазифазе содержит ближний зарядовый порядок, что и приводит к ненулевой энтропии. По мере понижения температуры энтропия плавно уменьшается, капля становится более однородной, пока её объем не станет равен  $|n|$ , а энтропия не достигнет нуля.

Рассмотрим на Рисунке 3.9(г,д,е) температурные зависимости вторых производных большого термодинамического потенциала, которые представлены в виде удельной теплоёмкости и магнитной восприимчивости, а также корреляционную длину, определённую согласно (3.41). Вблизи границы  $\Delta = V - |J|$  ( $\delta\epsilon_0 = 0$ ) теплоёмкость и восприимчивость имеют два небольших пика. Первый из них указывает на образование ближнего зарядового квазипорядка. По мере того, как энтропия выходит на плато, удельная теплоёмкость и магнитная восприимчивость достигают минимума, что указывает на то, что квазифаза CO практически заморожена. В точке псевдоперехода происходит резкий конечный скачок, напоминающий разрыв при ФП II рода. Однако, опять же, при этом теплоёмкость и восприимчивость остаются непрерывными функциями. В дальнейшем эти величины постепенно снижаются до нуля. По мере удаления от границы область скачка расширяется, псевдопереход происходит более плавно и при более высоких температурах. Далее, на значительном расстоянии от границы псевдопереход исчезает, и в квазифазе появляется магнитный порядок с зарядовой каплей, которая сразу является однородной. Примечательно поведение корреляционной длины: она демонстрирует значительное резкое увеличение при  $T = T_p$ , как показано на Рисунке 3.9(г), с последующим расхождением при приближении температуры к нулю.

Учитывая, что такое аномальное температурное поведение напоминает “справочный” ФП II рода в классификации Эренфеста, характеризующийся разрывами вторых производных большого термодинамического потенциала (теплоёмкости, корреляционной длины и магнитной восприимчивости), мы определяем этот обнаруженный псевдопереход как псевдопереход «второго рода». Следуя аналогии с классификацией Эренфеста, переходы, обсуждавшиеся в предыдущем разделе, были названы псевдопереходами «первого рода», как указано в названии Подраздела 3.5.1.

Однако важно отметить, что эта классификация может быть не совсем подходящей. Псевдопереходы «первого рода» демонстрируют почти-разрывы как для первых, так и для вторых производных большого потенциала. При этом вторые производные имеют универсальные критические показатели  $\alpha$ ,  $\gamma$  и  $\nu$ . По сути, псевдопереходы «первого рода» демонстрируют характеристики как ФП I, так и II рода. С другой стороны, псевдопереходы «второго рода» не имеют критических показателей, обычно ассоциированных с ФП II рода. Кроме того, дальнейшее феноменологическое объяснение псевдоперехода «второго рода» будет сосредоточено вокруг зародышеобразования, характеристики, чаще наблюдаемой в ФП I рода.

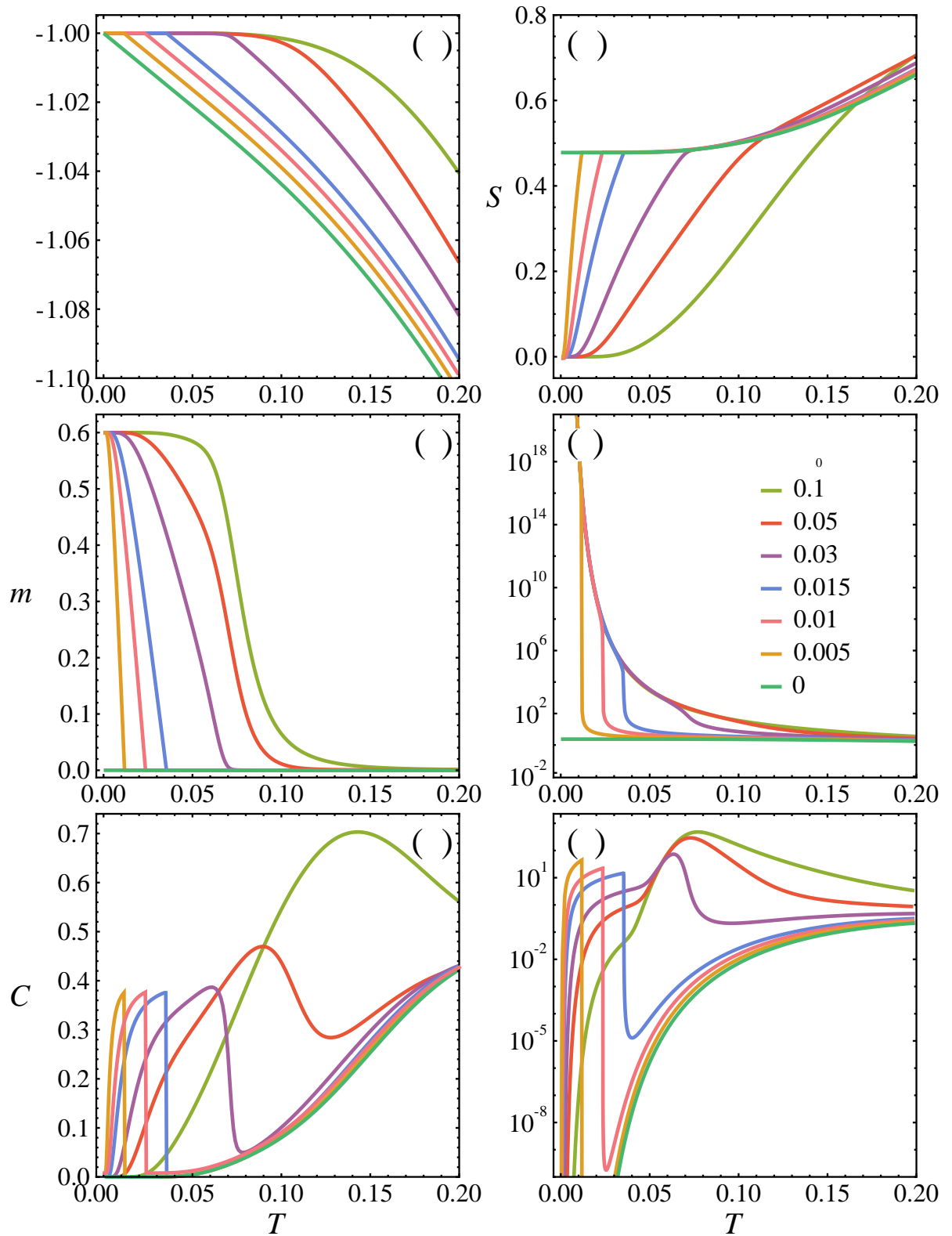


Рисунок 3.9 — Температурные зависимости (а) большого термодинамического потенциала, (б) энтропии, (в) намагниченности, (г) корреляционной длины, (д) удельной теплоёмкости и (е) магнитной восприимчивости для  $n = 0.4$ ,  $V = 1/10$ ,  $|J| = 1$  и различных значений  $\delta\epsilon_0$ . Наблюдается существенно иное поведение по сравнению с предыдущими псевдопереходами, которое напоминает ФП II рода

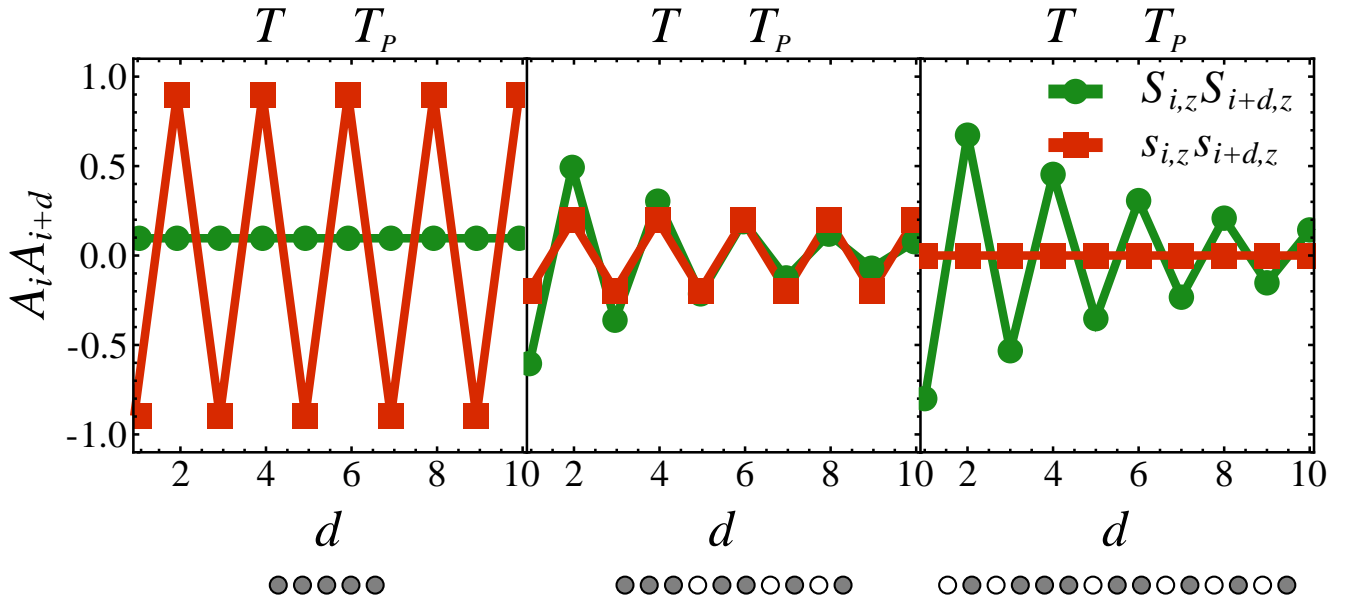


Рисунок 3.10 — Схематические иллюстрации, изображающие изменения в состоянии цепочки во время псевдоперехода «второго рода»,  $n = 0.1$ ,  $\delta\epsilon_0 = 0.002$ ,  $J = 1$ . Зеленые кружки обозначают заряд-зарядовый коррелятор  $\langle S_{i,z} S_{i+d,z} \rangle$ , красные квадраты соответствуют спиновому коррелятору  $\langle s_{i,z} s_{i+d,z} \rangle$ . Расстояние между узлами обозначено как  $d = j - i$ . Серые (●) и белые точки (○) обозначают два зарядовых состояния псевдоспина, при этом  $S_z = \pm 1$ . Синие (↑) и красные (↓) стрелки обозначают два магнитных состояния спина, при этом  $s_z = \pm 1/2$ , что соответствует  $S_z = 0$ . Система переходит из разбавленной квазифазы CO в квазифазу AFM с каплей с ближним зарядовым упорядочением. При понижении температуры капля становится однородной

### 3.5.2 Феноменология псевдопереходов «второго рода»

Поскольку псевдопереходы «второго рода» сопровождаются формированием зарядовой капли с частичным упорядочением, для феноменологического определения псевдокритических температур воспользуемся построением Максвелла для фазового расслоения [98; 147–150].

Предполагая наличие двух сосуществующих макроскопических однородных фаз 1 и 2, свободная энергия состояния фазового расслоения на узел выражается как

$$f_{\text{PS}} = p f_1(n_1) + (1 - p) f_2(n_2), \quad (3.85)$$

где  $p$  — это доля системы с плотностью  $n_1$ ,  $1 - p$  — доля системы с плотностью  $n_2$ , так что

$$p n_1 + (1 - p) n_2 = n.$$

В нашем случае первая фаза представляет собой зародыш (A)FM, который возникает в результате псевдоперехода. Вторая фаза — это разбавленная квазифаза CO, которая формируется при  $T \gtrsim T_p$ , когда энтропия достигает плато. Следовательно,  $n_1 = 0$ , а  $n_2 = n + \delta n$ , поскольку CO подсистема вынуждена увеличить плотность заряда, чтобы компенсировать

уменьшение своего объёма из-за нуклеации фазы (A)FM. Если  $p = 0$ , то выполняется равенство  $f_{\text{PS}} = f_{\text{CO}}(n)$ . Предполагая, что в небольшой окрестности ниже точки псевдоперехода  $p \rightarrow 0$ , а  $\delta n = p \cdot n \rightarrow 0$ , проварьируем уравнение (3.85), чтобы получить

$$f_{(\text{A})\text{FM}}(0) - f_{\text{CO}}(n) + n f'_{\text{CO}}(n) = 0. \quad (3.86)$$

Мы полагаем, что свободные энергии фаз (A)FM и CO равны соответственно

$$f_{(\text{A})\text{FM}}(0) \simeq \varepsilon_{(\text{A})\text{FM}}(0) \simeq \varepsilon_{(\text{A})\text{FM}}^0(0), \quad (3.87)$$

$$f_{\text{CO}}(n) = \varepsilon_{\text{CO}}(n) - T \mathcal{S}_{\text{CO}}(n) \simeq \varepsilon_{\text{CO}}^0(n) - T \mathcal{S}_{\text{CO}}(n). \quad (3.88)$$

Индекс 0 обозначает основное состояние,  $T = 0$ . Это означает, что мы полагаем, что квазифаза CO практически стационарна при  $T \gtrsim T_p$ , и обладает энергией и энтропией, практически такими же, как в основном состоянии, так что  $\mathcal{S}_{\text{CO}}(n)$  определяется выражением (3.80) для энтропии фазы основного состояния CO.

Таким образом, можно получить следующее выражение для температуры псевдоперехода «второго рода»:

$$T_{p,2} = \frac{2 \delta \varepsilon_0}{\ln(1 + |n|) - \ln(1 - |n|)}. \quad (3.89)$$

На Рисунке 3.11 представлена концентрационная зависимость псевдокритической температуры для  $\delta \varepsilon_0 = 0.01$ . Очевидно, что в области высоких концентраций зависимость близко согласуется с уравнением (3.89), поскольку наше предположение (3.88) о слабой зависимости энтропии от температуры хорошо подтверждается для высокотемпературной квазифазы CO.

Однако при малых значениях  $n$  энтропия и энергия этой квазифазы начинают зависеть от температуры, и наше приближение перестает быть справедливым. Температурные зависимости энтропии для различных величин плотности заряда, изображенные на Рисунке 3.12(a) раскрывают причину этого отклонения: энтропия высокотемпературной квазифазы CO существенно зависит от  $T$  при  $|n| < 0.2$ , и это не учитывается при получении выражения (3.89). Горизонтальные штриховые линии на Рисунке 3.12(a) указывают на остаточную энтропию  $\mathcal{S}_{\text{CO}}(n)$  разбавленной фазы CO (3.80), а при  $|n| \geq 0.2$  энтропийные зависимости имеют плато как раз на уровне  $\mathcal{S}_{\text{CO}}(n)$ . Именно это и предполагается в выражении (3.88), что делает оценку (3.89) для  $T_{p,2}$  уместной.

В пределе крайне малых  $n$  зависимость псевдокритической температуры от  $n$  на Рисунке 3.11 достигает значения, равного псевдокритической температуре для псевдоперехода «первого рода», определяемого уравнением (3.82). Более того, термодинамические функции также сохраняют черты псевдоперехода «первого рода» при низких плотностях заряда. Рисунок 3.12 иллюстрирует температурные зависимости энтропии, удельной теплоёмкости и абсолютного значения спинового коррелятора между двумя соседними узлами для  $\delta \varepsilon_0 = 0.01$  и различных значений  $n$ . Зависимости удельной теплоёмкости для  $n = 0, 0.001, 0.03$  имеют схожие пики при  $T = T_p$ , причем высота пика уменьшается с ростом  $n$ . В то же время уменьшение энтропии при  $T < T_p$  для этих  $n$  оказывается резким, подобно поведению, характерному для псевдопереходов «первого рода» на Рисунке 3.7(б). Также наблюдается

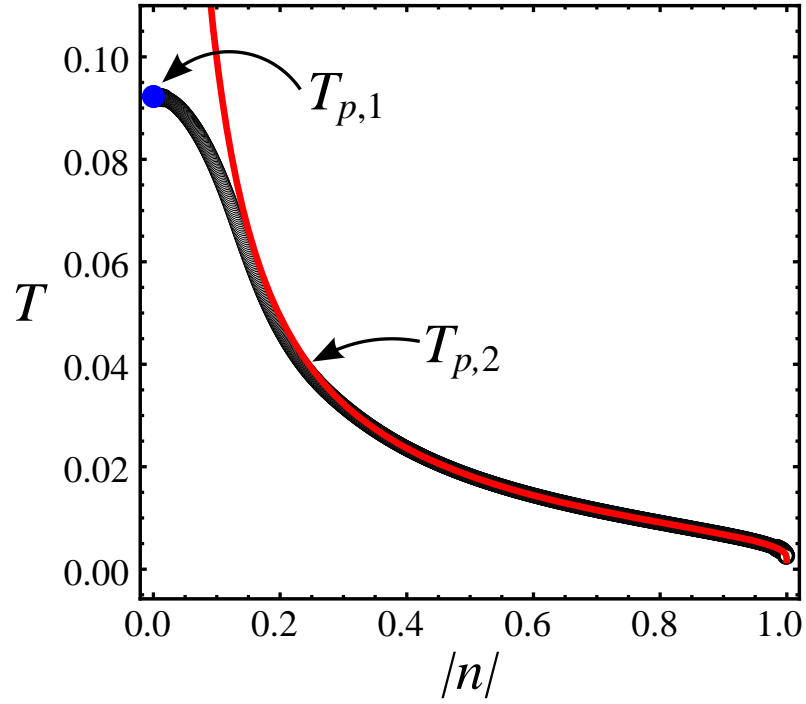


Рисунок 3.11 — Зависимость псевдокритической температуры от плотности заряда  $n$  при  $V = 0.1$ ,  $|J| = 1$ . Черные кружки соответствуют точному расчету, основанному на максимуме теплоёмкости, а красная сплошная линия соответствует уравнению (3.89). Синяя точка соответствует уравнению (3.82) для псевдоперехода «первого рода»

отсутствие плато при  $T \gtrsim T_p$ , которое соответствовало бы остаточной энтропии фазы CO. Соответствующие значения  $\mathcal{S}_{\text{CO}}(n)$  изображены черными стрелками на Рисунке 3.12(а).

Кривые для удельной теплоемкости при  $n = 0.1$  и  $0.15$  демонстрируют плавный переход к зависимостям, характерным для псевдопереходов «второго рода». Можно увидеть, что образование плато на температурной зависимости энтропии при  $T \gtrsim T_p$  приводит к снижению удельной теплоёмкости. Чем более ярко выражено плато, тем меньше будет величина теплоёмкости. При это характерный для «первого рода» пик плавно переходит в резкий скачок при  $T = T_p$ .

Непрерывный кроссовер от псевдоперехода «первого рода» к псевдопереходу «второго рода» указывает на общий базовый механизм, стоящий за этими явлениями. В качестве дополнения рассмотрим концентрационные зависимости парных функций распределения для спинов ближайших соседей, показанные на Рисунке 3.12(в). Эти функции представляет собой комбинацию вероятностей, связанных с четырьмя возможными парами спиновых состояний соседних узлов [144]. Однако при выбранных параметрах и низких температурах они равны полной вероятности наличия пары с (анти)ферромагнитным упорядочением спинов. Благодаря уникальной особенности фазы (A)FM, которая остается неразбавленной примесями и не смешивается с фазой CO, значение  $|\langle s_i s_{i+1} \rangle|$  представляет надежную оценку доли  $p$  этой фазы в цепочке. Как показано на Рисунке 3.12(в), доля фазы (A)FM при  $n = 0$  претерпевает резкий скачок от 0 до 1 в процессе псевдоперехода «первого рода». Напротив, при  $n > 0.15$  эта доля линейно увеличивается от 0 до максимально возможного значения  $1 - |n|$

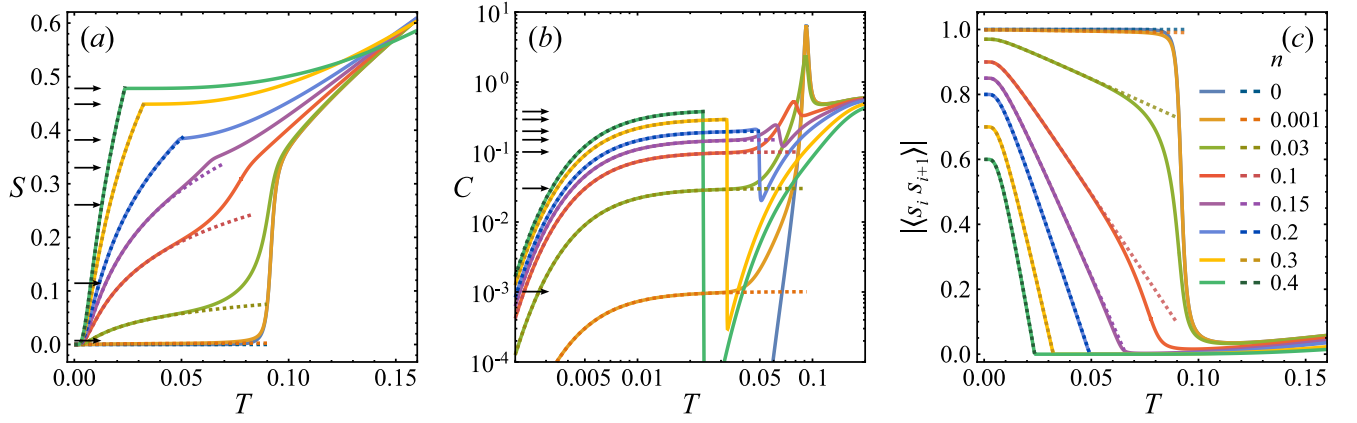


Рисунок 3.12 — Температурные зависимости (а) энтропии, (б) удельной теплоёмкости и (в) абсолютного значения спинового коррелятора между двумя соседними узлами для различных значений плотности заряда  $n$ . Сплошные цветные линии представляют результаты точных расчетов, в то время как пунктирные цветные линии изображают оценки для доли фазы (А)FM, заданной уравнением (3.93). Черные стрелки соответствуют (а) остаточной энтропии фазы СО, заданной уравнением (3.1) и (б) оценке скачка удельной теплоёмкости, заданной уравнением (3.96)

по мере понижения температуры. Зависимости для  $0 < n < 0.15$  демонстрируют некое промежуточное поведение.

Естественным образом было бы использовать ту же простую феноменологическую концепцию фазового расслоения для объяснения температурной зависимости доли фазы (А)FM, аналогично выводу уравнения (3.89), и сравнить это с точным результатом. Взяв производную  $f_{\text{PS}}$  в уравнении (3.85) по температуре, можно определить энтропию системы, которая совпадает с энтропией разбавленной фазы СО при  $T < T_{p,2}$ :

$$\frac{\partial f_{\text{PS}}}{\partial T} = -\mathcal{S}_{\text{PS}} = -(1-p) \mathcal{S}(n_{\text{CO}}), \quad (3.90)$$

где  $n_{\text{CO}} = n/(1-p)$ . Производную правой части уравнения (3.85), с учетом (3.87) и (3.88), можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial T} [p f_{(\text{A})\text{FM}}(0) + (1-p) f_{\text{CO}}(n_{\text{CO}})] = -\delta\varepsilon_0 \cdot \frac{\partial p}{\partial T} - (1-p) \mathcal{S}(n_{\text{CO}}) - T \frac{\partial}{\partial T} [(1-p) \mathcal{S}(n_{\text{CO}})], \quad (3.91)$$

где

$$\frac{\partial}{\partial T} [(1-p) \mathcal{S}(n_{\text{CO}})] = -\frac{1}{2} \ln \left( \frac{1-p+|n|}{1-p-|n|} \right) \frac{\partial p}{\partial T}. \quad (3.92)$$

Приравнивая производные правой и левой частей уравнения (3.85), получаем выражение для доли фазы (А)FM:

$$p = 1 - |n| \coth(\beta \delta\varepsilon_0). \quad (3.93)$$

Это уравнение дает  $p = 0$  при  $T = T_{p,2}$  и  $p = 1 - |n|$  при  $T = 0$ . Сравнение зависимости (3.93) с точным результатом показано на Рисунке 3.12(в) цветными штриховыми линиями.

При  $0 < n < 0.15$  феноменологическая аппроксимация довольно близка, и даже при  $n = 0.1$  и  $n = 0.03$  низкотемпературная часть кривых описывается уравнением (3.93).



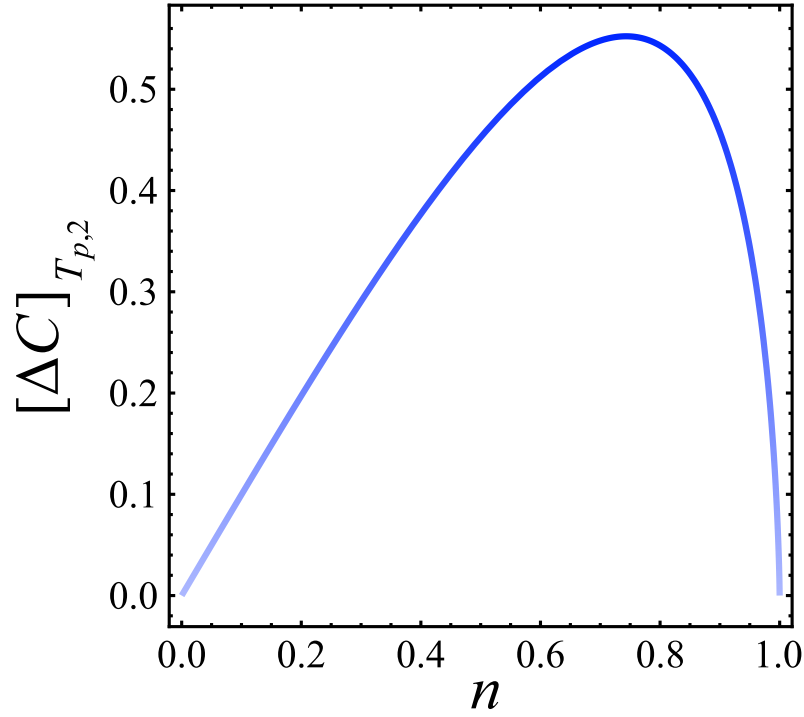


Рисунок 3.13 — Зависимость скачка удельной теплоёмкости при  $T = T_{p,2}$  от плотности заряда  $n$  определяется уравнением (3.96)

Именно температурная зависимость  $p$  вызывает изменение энтропии системы в состоянии фазового разделения, поэтому уравнение (3.93) определяет температурную зависимость при  $T < T_{p,2}$  в феноменологических выражениях для энтропии:

$$\mathcal{S}_{PS} = (1 - p) \mathcal{S} \left( \frac{n}{1 - p} \right) = |n| \{ \beta \delta \varepsilon_0 \coth(\beta \delta \varepsilon_0) - \ln [2 \sinh(\beta \delta \varepsilon_0)] \}, \quad (3.94)$$

и для удельной теплоёмкости:

$$C_{PS} = -\delta \varepsilon_0 \cdot \frac{\partial p}{\partial T} = |n| \left[ \frac{\beta \delta \varepsilon_0}{\sinh(\beta \delta \varepsilon_0)} \right]^2. \quad (3.95)$$

Эти выражения прекрасно согласуются с точными результатами для энтропии и удельной теплоёмкости в области низких температур, как показано пунктирными цветными линиями на Рисунке 3.12(а,б).

Наконец, можно использовать уравнения (3.89) и (3.95), чтобы получить скачок теплоёмкости при  $T = T_{p,2}$ . Он имеет универсальный вид и зависит только от плотности заряда  $n$ :

$$[\Delta C]_{T_{p,2}} = \frac{1 - n^2}{4|n|} \left( \ln \frac{1 + |n|}{1 - |n|} \right)^2. \quad (3.96)$$

Зависимость скачка удельной теплоёмкости при температуре псевдоперехода «второго рода» показана на Рисунке 3.13. Максимум скачка  $\Delta C_{\max} \simeq 0.55$  наблюдается при  $n \simeq 0.74$ . Точные значения этих величин аналитически недостижимы. Эти специфические значения являются не более чем результатом компромисса между тенденцией к снижению температуры псевдоперехода и к наличию более крутого наклона кривой  $\mathcal{S}_{PS}$  при увеличении  $|n|$ .



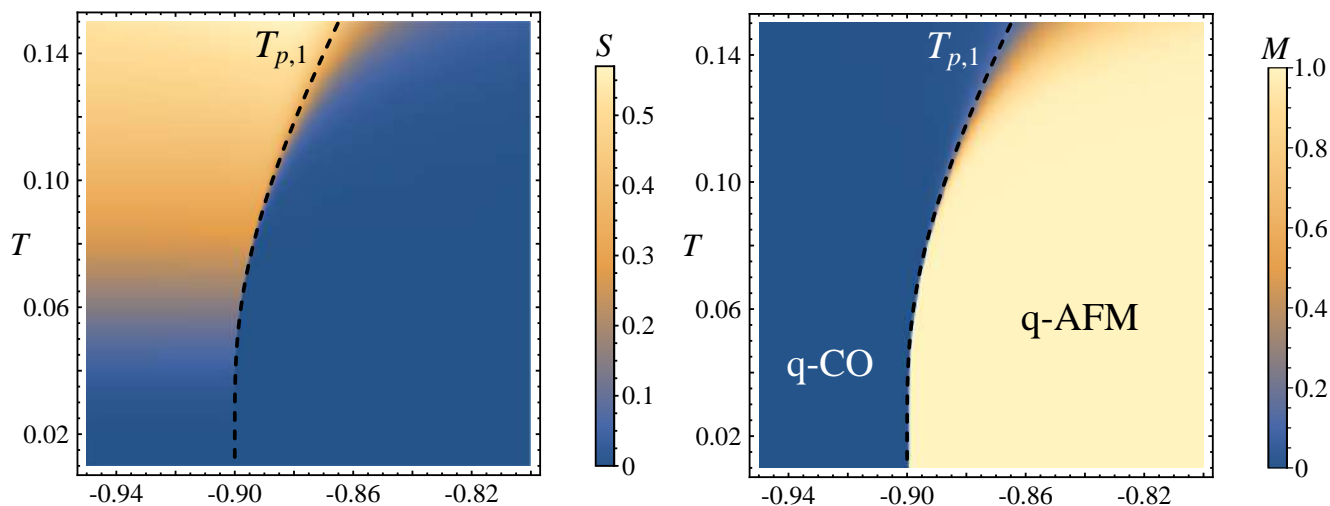


Рисунок 3.14 — Диаграмма плотности энтропии (слева) и АФМ параметра порядка (справа) в переменных  $\Delta$  и  $T$  для  $V = 0.1$ ,  $J = 1$ ,  $h = 0$ ,  $n = 0$  (псевдопереход «первого рода»). Пунктирной линией показана температура псевдоперехода, построенная в соответствии с выражением (3.82)

### 3.5.3 Квазифазовые диаграммы плотности

Рассмотрим диаграммы плотности энтропии и параметра порядка в плоскости  $T - \Delta$  на Рисунке 3.14 для случая псевдоперехода «первого рода», и на Рисунке 3.15 для случая псевдоперехода «второго рода». Пунктирными кривыми показаны псевдокритические температуры в зависимости от параметра  $\Delta$ , в соответствии с выражениями (3.82) и (3.89). Данные диаграммы напоминают температурные фазовые диаграммы, и при  $T = 0$  в точности повторяют диаграммы основного состояния (Рисунки 2.3 и 2.4). Однако, ввиду температурных флуктуаций, делающих невозможным дальний порядок в одномерных системах, фазы на данных диаграммах корректно называть “квазифазы”, что отражено в префиксе «q-» на Рисунках 3.14, 3.15.

Для большинства одномерных моделей этот тип диаграммы будет показывать только следы ФП при нулевой температуре, которые быстро исчезают при повышении температуры. Однако для псевдоперехода «первого рода» (Рисунок 3.14) видно, что диаграммы плотности имеют резкую границу между квазифазами q-CO и q-AFM, которая кажется практически независимой от тепловых флуктуаций. Эта граница прекрасно согласуется с выражением для псевдокритической температуры 3.82, которая обозначена пунктирной линией. Хотя вдали от точки раздела фаз  $\Delta = -0.9$  резкая граница постепенно исчезает при более высоких температурах. Это подчёркивает, что псевдопереходы наблюдаются особенно ярко вблизи границы раздела фаз при достаточно низких температурах. За пределами этой области тепловое возбуждение уничтожает любые следы псевдопереходов.

Рисунок 3.15 иллюстрирует, что граница между квазифазами при псевдопереходе «второго рода» не является явно выраженной, поскольку термодинамические величины из-

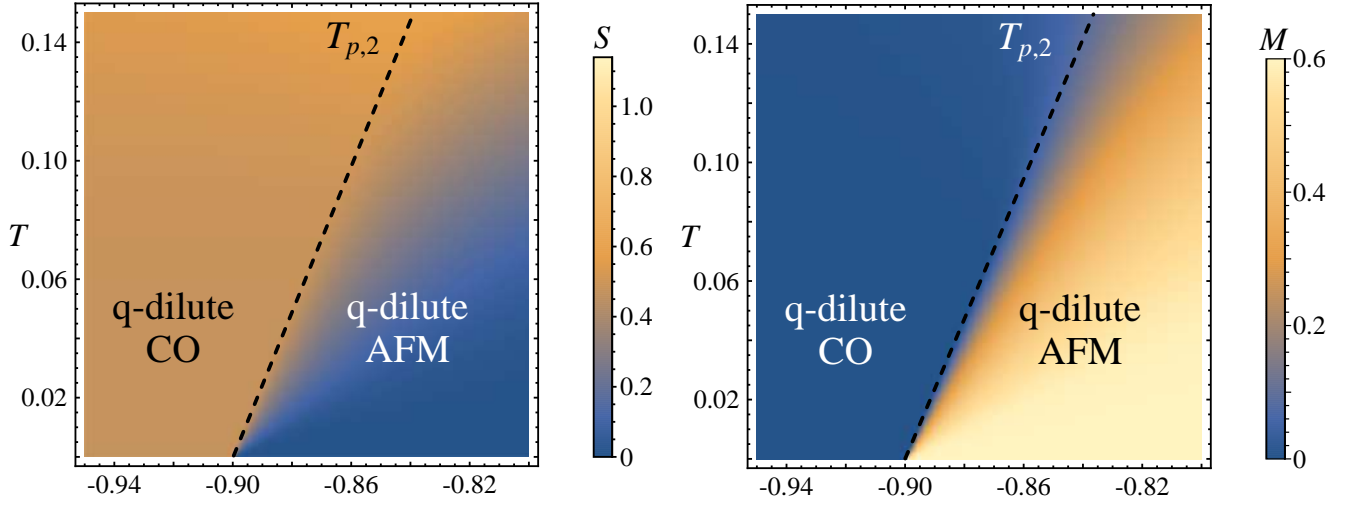


Рисунок 3.15 — Диаграмма плотности энтропии (слева) и АФМ параметра порядка (справа) в переменных  $\Delta$  и  $T$  для  $V = 0.1$ ,  $J = 1$ ,  $h = 0$ ,  $n = 0$  (псевдопереход «второго рода»). Пунктирной линией показана температура псевдоперехода, построенная в соответствии с выражением (3.89)

меняются плавно при  $T < T_{p,2}$ . Пунктирная кривая обозначает границу между квазифазами q-dilute CO и q-dilute AFM, которая соответствует псевдокритической температуре  $T_p$  как функции  $\Delta$ , согласно выражению (3.89). Видно, что при фиксированном  $n$  эта кривая представляет собой прямую линию.

Мы также можем наблюдать, как граница между квазифазами плавится более плавно при повышении температуры и удалении от границы раздела фаз. Фрустрированная квазифаза q-dilute CO формируется при достаточно высоких температурах, сохраняя при этом аналитические свойства всех термодинамических величин, без возникновения ФП. Лишь в основном состоянии, при  $T = 0$ , формируется дальнейшее CO упорядочение, а также квазифаза q-dilute AFM достигает своего равновесного состояния с минимальной энтропией.

### 3.6 Выводы к Главе 3

Рассмотрено точное решение разбавленной изинговской цепочки в рамках расширенного подхода трансфер-матрицы в термодинамическом пределе. Получены следующие результаты:

1. Разработан и представлен быстрый и эффективный метод точного расчёта термодинамических свойств разбавленной цепочки в рамках большого канонического ансамбля, который использует свойства трансфер-матрицы системы. Вместо вычисления величин через наибольшее собственное значение трансфер-матрицы и его производные предлагается вычислять величины непосредственно из производных матриц, построенных на собственных

векторах трансфер-матрицы. Выведены общие выражения для средних и корреляторов в собственном базисе, а также для всех основных термодинамических величин. Данный подход является универсальным для систем, для которых можно записать трансфер-матрицу.

2. Рассмотрено универсальное применение отображения спиновых цепочек на марковские цепи. Данный подход позволяет получать аналитические выражения для остаточной энтропии основного состояния различных фрустрированных фаз, а также на границах раздела фаз, что является недостижимым в рамках стандартного подхода. Методика также позволяет определить равновесные свойства фаз, рассчитать корреляционные функции и длины, а также прояснить структуру сложных для традиционного анализа фрустрированных фаз.

3. В разбавленной цепочке Изинга выделяются два класса фрустрированных фаз в зависимости от типа марковской цепи, на которую отображается одномерная система. Первые представляют собой фазы с периодическими марковскими цепями, обладающими периодом 2 и состоящими из трех состояний. Они характеризуются упорядочением на одной подрешётке и полным хаосом на другой. За счёт такого скрытого упорядочения корреляционная длина системы бесконечна, а остаточная энтропия сравнительно невелика. Второй класс включает полностью неупорядоченные фазы, которые представлены аperiodическими марковскими цепями с двумя состояниями. В них отсутствует дальний порядок, корреляционная длина оказывается конечной и зависит от плотности заряда, а остаточная энтропия – выше, чем у фаз первого типа. Переключение между классами фрустрированных фаз возможно под воздействием магнитного поля.

4. Аналитический расчёт остаточной энтропии фрустрированных фаз, а также состояний на границах раздела фаз обнаружил три границы, на которых остаточная энтропия имеет односторонний предел, что указывает на выполнение критерия Рохаса [43; 44] для наличия в цепочке псевдопереходов. Лишь самые структурно простые фазы, шахматный зарядовый порядок CO, и (анти)ферромагнитная (A)FM фаза, соответствуют необходимым условиям для наблюдения псевдопереходов. Причина этого – в несовместимости этих фаз и отсутствии смешения зарядовых и магнитных состояний на границе.

5. В «чистой» цепочке, при  $n = 0$ , обнаружены псевдопереходы «первого рода» – переходы между несовместимыми CO и (A)FM квазифазами с резким уменьшением энтропии. Первые производные большого потенциала, включая энтропию и намагниченность, демонстрируют скачки, напоминающие разрывы при ФП I рода. Вторые производные, такие как удельная теплоёмкость и магнитная восприимчивость, демонстрируют острые пики, похожие на ФП II рода. При этом все функции остаются аналитическими, т.е. запрет на наличие настоящих ФП в одномерных системах не нарушается. Этот псевдопереход характеризуется универсальными псевдокритическими показателями  $\alpha = 3$ ,  $\gamma = 3$ ,  $\nu = 1$ .

6. В разбавленной цепочке,  $n \neq 0$ , впервые обнаружен новый тип псевдопереходов «второго рода». Они характеризуются отчетливой точкой излома в температурной зависимости энтропии и параметра порядка, которая отличается от ступенчатого поведения, наблюдаемого в псевдопереходах «первого рода». Кроме того, удельная теплоёмкость и магнитная восприимчивость демонстрируют резкие, но конечные скачки, похожие на поведение, наблюдаемому в обычных ФП II рода.

7. Природа новых псевдопереходов «второго рода» связана с фазовым расслоением в цепочке на границе (анти)ферромагнитной и зарядово-упорядоченной квазифаз, и в определенном диапазоне плотности заряда немагнитных примесей возможно с высокой точностью описать термодинамические свойства системы в рамках простого феноменологического построения Максвелла для этих двух квазифаз. Сравнение с точным решением позволяет найти пределы применимости и понять причины ограниченности феноменологического подхода. Показано, что происходит непрерывная трансформация типа псевдопереходов, переходящих от «первого рода» при  $n = 0$  ко «второму роду» с ростом  $|n|$ .

Была создана и зарегистрирована в Роспатенте программа для ЭВМ «Программа для расчёта термодинамических величин разбавленной цепочки Изинга с заряженными примесями в поперечном магнитном поле», свидетельство № 2024687318. Результаты, приведенные в данной главе диссертации, в совокупности с представленными теоретическими подходами, опубликованы в статьях [A6, A7].

## Глава 4. Свойства двумерной и трёхмерной разбавленной модели Изинга

В Главе представлены результаты моделирования разбавленной модели Изинга на квадратной и простой кубической решётках методом МК. Представлен высокопроизводительный алгоритм, сочетающий динамику Глаубера для спинов и динамику Кавасаки для псевдоспинов, позволяющий учесть условие сохранения заряда на каждом шаге МК.

### 4.1 Моделирование методом Монте-Карло

В работе [139] был предложен модифицированный алгоритм Кавасаки-Метрополиса, который сочетает в себе “динамику Глаубера” (без закона сохранения) для спинов и “динамику Кавасаки” для псевдоспинов, что позволяет учитывать условие сохранения заряда (1.2) на каждом шаге МК путём сохранения заряда на паре случайных узлов. Разница в этих подходах к степеням свободы состоит в том [151], что в динамике Глаубера каждый спин имеет равные шансы быть выбранным на каждом шаге МК, и перевернуться с определённой вероятностью (критерий применимости изменения в нашем случае включает больцмановский вес). Динамика Кавасаки предполагает ограничения на выбор нового состояния, связанное с условием (1.2), накладываемым на псевдоспиновые степени свободы. Используемый нами подход состоит из двух частей:

I. Случайным образом генерируется начальная конфигурация системы (псевдо)спинов в соответствии с заданным полным зарядом  $n$ .

Это достигается из произвольного состояния путём переворачивания одиночных (псевдо)спинов, пока не будет достигнуто нужное значение заряда. Отметим, что, поскольку моделируются системы конечных размеров, точно подобрать конфигурацию для некоторых  $n$  не удастся. Например, для квадратной решётке размером  $100 \times 100$  узлов значение  $n = 0.1$  достигается точно, в ней 100 случайных узлов должны обладать положительным нескомпенсированным зарядом. Однако для решётки  $128 \times 128$  достигается либо заряд  $n = 0.0999756$  для 1638 узлов, либо  $n = 0.100037$  для 1639 узлов. Однако это отклонение создаёт несущественную погрешность, в особенности для систем больших размеров.

II. Осуществляется алгоритм Метрополиса со связанными парами узлов:

1. Инициализация

1.1 Случайно выбирается «связанная» пара узлов –  $i$  и  $j$ .

1.2 Рассчитывается полный заряд этой пары:  $q = S_i + S_j$ .

Напомним, что заряд может принимать 3 возможных значения:  $\pm 1$  и  $0$ . В случае, если  $S_i = 0$ , узел может принять одно из двух состояний спина  $s_i = \pm \frac{1}{2}$ . Для пары узлов имеется всего пять величин заряда. Все возможные конфигурации пары узлов для каждой величины  $q$  приведены ниже:

- $q = 0$ :  $(\pm 1, \mp 1)$ ,  $(\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2})$ ,  $(\pm \frac{1}{2}, \mp \frac{1}{2})$  – 6 конфигураций;
- $q = \pm 1$ :  $(\pm 1, \frac{1}{2})$ ,  $(\pm 1, -\frac{1}{2})$ ,  $(\frac{1}{2}, \pm 1)$ ,  $(-\frac{1}{2}, \pm 1)$  – 4 конфигурации;
- $q = \pm 2$ :  $(\pm 1, \pm 1)$  – 1 конфигурация.

## 2. Итерация

2.1 Случайным образом выбирается новая конфигурация пары, которая обладает тем же зарядом. Отметим, что если  $q = \pm 2$ , то конфигурация не может быть изменена.

2.2 Вычисляется изменение энергии  $dE$  для данной пары узлов с учётом периодических граничных условий (ПГУ):

$$dE = E' - E = \Delta \cdot E_{\Delta} + V \cdot E_V + J \cdot E_J - h \cdot E_h.$$

Изменение отличается для случая дальних и соседних узлов. Из гамильтониана (1.1) получим:

$$\begin{aligned} E_{\Delta} &= S_i^{2'} + S_j^{2'} - S_i^2 - S_j^2, \\ E_h &= s_i' + s_j' - s_i - s_j. \end{aligned}$$

Для дальних узлов получим:

$$\begin{aligned} E_V &= (S_i' - S_i^2) \left( \sum_{\langle i \rangle} S_i - \sum_{\langle j \rangle} S_j \right), \\ E_J &= (s_i' - s_i^2) \left( \sum_{\langle i \rangle} s_i - \sum_{\langle j \rangle} s_j \right), \end{aligned}$$

где  $\langle \dots \rangle$  обозначает суммирование по ближайшим соседям соответствующего узла. Для соседних узлов  $i$  и  $j$  получим:

$$\begin{aligned} E_V &= (S_i' - S_i^2) \left( \sum_{\langle i \rangle} S_i - \sum_{\langle j \rangle} S_j \right) - (S_i' - S_i)^2, \\ E_J &= (s_i' - s_i^2) \left( \sum_{\langle i \rangle} s_i - \sum_{\langle j \rangle} s_j \right) + (s_i' - s_i)(s_j' - s_j). \end{aligned}$$

В случае соседних узлов сумма  $\sum_{\langle i \rangle}$  включает и  $S_j$ , а сумма  $\sum_{\langle j \rangle}$  включает  $S_i$ . В этом выражении учтено условие постоянства заряда на паре:  $S_i' + S_j' = S_i + S_j$ .

2.3 Новая конфигурация принимается с вероятностью  $P = \min(1, e^{-\beta dE})$ .

2.4 Определяем значения требуемых физических величин (энергия, параметры порядка)

3. Повторяем итерации 2 для получения достаточного количества конфигураций

4. Расчёт термодинамических средних по конфигурациям

МК расчёты проводились на квадратной и простой кубической решётках с ПГУ, линейными размерами  $La$ , где  $a$  – постоянная решётки, принятая всюду далее за 1. Количество узлов  $N = L^d$ , где  $d$  – размерность пространства. Далее система рассматривается в нулевом магнитном поле,  $h = 0$ , если не сказано обратное.

Алгоритм позволяет получить равновесное состояние системы, поддерживает возможность визуализации эволюции состояний решётки с температурой при заданной плотности заряда. При любой температуре алгоритм позволяет посчитать все необходимые термодинамические величины. Естественным образом считается внутренней энергия  $E$ , а также три разных параметра порядка:

$$\mathcal{O} = \begin{cases} \text{FM} = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_{iz} \\ \text{AFM} = \sum_{\lambda} (-1)^{\lambda} m_{\lambda} \\ \text{CO} = \sum_{\lambda} (-1)^{\lambda} M_{\lambda}, \end{cases} \quad (4.1)$$

где  $m_{\lambda} = \frac{1}{N} \sum_{i \in \lambda} \sigma_{iz}$  – намагниченность подрешётки  $\lambda = 1, 2$ , разделяющей четные и нечетные узлы,  $M_{\lambda} = \frac{1}{N} \sum_{i \in \lambda} S_{iz}$  – псевдонамагниченность подрешётки  $\lambda$ .

Используя следствие флуктуационно-диссипативной теоремы, удельная теплоёмкость и (псевдо)магнитная восприимчивости определяются через флуктуации энергии и параметра порядка, соответственно:

$$C = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_h = \frac{1}{N} \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2}, \quad (4.2)$$

$$\chi_{\mathcal{O}} = \left( \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial h} \right)_T = \frac{1}{N} \frac{\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2}{T}. \quad (4.3)$$

## 4.2 Методы исследования критических явлений

### 4.2.1 Статические критические индексы

Поведение ряда термодинамических величин вблизи критических точек  $T_c$  для непрерывных ФП характеризуется набором критических индексов (КИ). Термодинамические величины, вроде удельной теплоёмкости, магнитной восприимчивости, параметра порядка,

корреляционной длины и т.д. описываются степенными законами, показателями которых и являются КИ. Свойства систем при ФП II рода определяются сильными и долгоживущими флуктуациями параметра порядка, мерой которых является корреляционная длина  $\xi$  – размер области с сильно скоррелированными спинами. В окрестности  $T_c$  расходимость  $\xi$  расходуется описывается КИ  $\nu$ :

$$\xi \sim |\tau|^{-\nu}, \quad (4.4)$$

где  $\tau = (T - T_c)/T_c$  – приведенная температура. Это подразумевает, что для понимания критического поведения необходимо учитывать физику на всех масштабах длины. Именно это приводит ко многим сложностям как в численных расчётах, так и в количественном описании критических явлений. Однако же, существуют модели, в которых корреляционная длина расходуется другим образом – например, логарифмически [152] или экспоненциально [153]. Однако для систем Изинговского типа, по-видимому, выражение (4.4) является корректным.

Особенности поведения удельной теплоёмкости и магнитной восприимчивости вблизи точки ФП описывается КИ  $\alpha$  и  $\gamma$ :

$$C \sim |\tau|^{-\alpha}, \quad (4.5)$$

$$\chi \sim |\tau|^{-\gamma}. \quad (4.6)$$

В принципе, значения КИ могут зависеть от того, находимся мы выше или ниже критической температуры. Однако же на практике КИ при  $T > T_c$  и  $T < T_c$  совпадают [154].

При бесконечно малом внешнем поле  $h$  ниже критической температуры намагниченность (или другой параметр порядка) является убывающей функцией температуры, которая становится равной нулю при  $T = T_c$ . В критической области при  $T < T_c$  параметр порядка имеет степенное поведение с показателем  $\beta$ :

$$\mathcal{O} \sim (-\tau)^\beta, \quad h \rightarrow 0. \quad (4.7)$$

В то же время в критической точке при малых полях параметр порядка является степенной функцией с показателем  $\delta$ :

$$\mathcal{O} \sim h^{1/\delta}, \quad \tau = 0, h \rightarrow 0. \quad (4.8)$$

Точное решение 2D модели Изинга, полученное Онсагером [155], дало  $\alpha = 0$ ,  $\nu = 1$  (КИ параметра порядка  $\beta = 1/8$  и  $\delta \approx 15$ , КИ магнитной восприимчивости  $\gamma = 7/4$ ). При этом расходимость теплоёмкости описывается логарифмическим законом, а не степенным:

$$C \sim \ln |\tau|. \quad (4.9)$$

Центральной чертой в исследовании критических явлений является универсальность, в чём и состоит главная ценность КИ. Из-за большой корреляционной длины вблизи критической точки сингулярное поведение многих термодинамических наблюдаемых оказывается независимым от микроскопических деталей системы. Тогда значения КИ зависят только от глобальных свойств системы, таких как, например, размерность пространства, симметрия



системы, число компонент параметра порядка и т.д., и не зависят от большинства параметров модели. Существует ряд классов универсальности, и каждая модель, попадающая в определенный класс, будет иметь одинаковые критические показатели. Это, в свою очередь, означает, что мы можем измерить их значения, используя некоторую простую модель, для которой расчёты относительно просты, и всё равно получить ответ, который применим к гораздо более сложной реальной системе, которая просто попадает в тот же класс. Например, фазовый переход системы жидкость/пар в её трикритической точке, как полагают [156], находится в том же классе универсальности, что и обычная модель Изинга, и действительно, измеренные критические показатели двух моделей довольно хорошо согласуются.

## 4.2.2 Гипотеза конечно-размерного масштабирования

Сингулярное поведение термодинамических характеристик проявляется в непосредственной близости к критической точке только в термодинамическом пределе, при  $N \rightarrow \infty$ . Одна из главных проблем исследования критического поведения численными методами – техническая невозможность достичь этого предела. Если размеры системы оказываются конечными, поведение термодинамических величин изменяется. Теория конечно-размерного скейлинга (КРС), или конечно-размерного масштабирования подразумевает, что сингулярная зависимость термодинамических величин от  $\tau$  есть следствие расходимости корреляционной длины. В термодинамическом пределе критические флуктуации коррелируют на расстоянии порядка корреляционной длины  $\xi$ . Корреляционная длина расходится в критической точке ФП II рода. Если размеры системы  $L$  будут конечными, то, пока  $\xi/L$  – малая величина, на термодинамические характеристики это влиять практически не будет. Вблизи критической температуры корреляционная длина является единственным параметром размерности длины в системе. Если же система близка к критической точке, где  $\xi \gtrsim L$ , эффекты конечных размеров становятся значительными. Такие системы уже не могут демонстрировать термодинамическую сингулярность. Эффект конечного размера заключается в округлении сингулярностей термодинамических величин вблизи критической точки. Поэтому в конечно-размерной системе не может наблюдаться настоящий ФП. Это приводит к “скруглению” пиков теплоёмкости и восприимчивости, смещению их по температуре.

В пределе  $V = 0$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$ ,  $|\Delta| \rightarrow \infty$  исследуемая модель переходит в спин-1/2 модель Изинга. На Рисунке 4.1 изображено сравнение температурной зависимости удельной теплоёмкости  $C$  для разных размеров двумерной решётки  $L = 4, 16, 64, 128$  и  $256$  (во вставке) при  $V = 0$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$ ,  $\Delta = 100$  с точным решением Онсагера [155] для двумерной модели Изинга на квадратной решётке. При увеличении размера решётки максимум теплоёмкости становится всё более выраженным и испытывает смещение в сторону точного решения. Однако в критической области пик теплоёмкости всегда будет иметь конечную величину.

Теория КРС была сформулирована Фишером и Барбером [157; 158], а позже была разработана техника для анализа критического поведения систем с конечными размерами

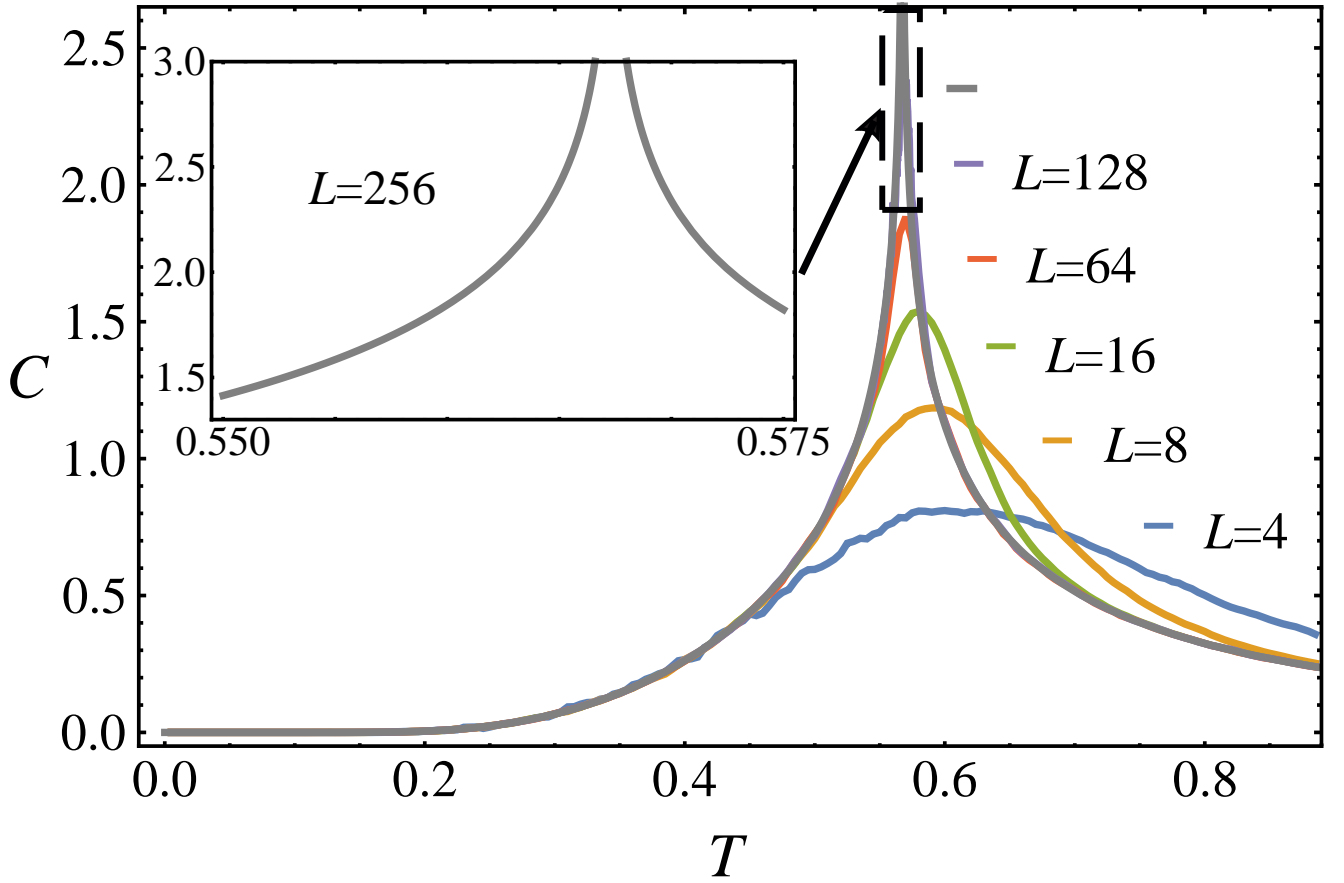


Рисунок 4.1 — Сравнение удельной теплоёмкости для  $V = 0$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$ ,  $\Delta = 100$  с решением Онсагера для 2D модели Изинга, построенной для разных размеров квадратной решётки  $L$ . Сплошной серой линией показано точное решение [155]. Для больших  $L$  теплоёмкость приближается к точному решению как по критической температуре, так и по величине максимума

методами МК [159; 160]. С помощью КРС можно получить значения КИ, наблюдая, как измеряемые величины меняются при изменении размера исследуемой системы  $L$ .

Основная идея состоит в том, что сингулярная зависимость термодинамических величин от  $\tau$  есть следствие расходимости корреляционной длины. Выразим  $|\tau|$  из (4.4) и получим для термодинамической характеристики

$$f \sim \xi^{\lambda/\nu}$$

в окрестности ФП, где  $\lambda$  - КИ термодинамической величины  $f$ . Это выражение будет справедливо для бесконечной системы. В случае системы с конечными размерами необходимо учесть отсечку термодинамических величин в случае, когда  $\xi > L$  вблизи критической точки. Пока  $\xi \ll L$ , термодинамические величины ведут себя так же, как для бесконечной системы. Учесть это можно с помощью следующего математического выражения:

$$f \sim \xi^{\lambda/\nu} f_0(L/\xi), \quad (4.10)$$

где  $f_0$  - безразмерная скейлинговая функция, имеющая следующие свойства:

$$\begin{aligned} f_0(x) &= const, & x \rightarrow \infty \\ f_0(x) &\sim x^{\lambda/\nu}, & x \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Условие выполняется в критической области, когда  $\tau \rightarrow 0$ , однако это должно быть справедливо для всех  $L$ .

Перепишем выражение для термодинамической функции (4.10) в более удобном виде, чтобы избавиться от корреляционной длины:

$$f = L^{\lambda/\nu} \tilde{f}(L^{1/\nu}|\tau|), \quad (4.12)$$

где  $\tilde{f}(x) = x^{-\lambda} f_0(x^\nu)$  – новая безразмерная скейлинговая функция.

Таким образом, для теплоёмкости, параметра порядка и восприимчивости мы можем записать:

$$C(T,L) = \tilde{C}(\tau L^{1/\nu}) \cdot L^{\alpha/\nu}, \quad (4.13)$$

$$\mathcal{O}(T,L) = \tilde{\mathcal{O}}(\tau L^{1/\nu}) \cdot L^{-\beta/\nu}, \quad (4.14)$$

$$\chi(T,L) = \tilde{\chi}(\tau L^{1/\nu}) \cdot L^{\gamma/\nu}. \quad (4.15)$$

### 4.2.3 Определение критической температуры и рода фазового перехода методом Монте-Карло

Кроме обычных термодинамических величин, с помощью метода МК вычислялись кумулянты Биндера 4-го порядка:

$$V_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3\langle E^2 \rangle_L^2} - \text{энергетический кумулянт}; \quad (4.16)$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle \mathcal{O}^4 \rangle_L}{3\langle \mathcal{O}^2 \rangle_L^2} - \text{(псевдо)магнитный кумулянт}.$$

Поведение (псевдо)магнитного кумулянта вдали от критической точки можно использовать как характеристику гауссовости распределения параметра порядка [160; 161]: Для  $T > T_c$  (псевдо)магнитный кумулянт  $U_L$  должен стремиться к нулю как  $L^{-d}$ . Для  $T < T_c$  распределение имеет два гауссовых пика при значениях спонтанного параметра порядка, и  $U_L$ , наряду с  $V_L$ , стремится к нетривиальному значению, равному  $2/3$ .

Очень полезным свойством кумулянта  $U_L$  является наличие неподвижной точки при конечно-размерном масштабировании. Это широко используется для достаточно точной оценки  $T_c$ , которая не искажается при любых предположениях о КИ. Для определения КИ необходимо достаточно точное знание критической температуры, которую нельзя определить по максимумам теплоёмкости или восприимчивости из-за эффектов конечных размеров. Можно построить графики температурных зависимостей кумулянтов  $U_L$  для различных размеров решётки  $L$  и оценить  $T_c$  из общей точки пересечения этих кривых. На Рисунке 4.2 изображено семейство таких кривых для 2D решётки в изинговском пределе больших  $\Delta$ . Как и сказано выше, наблюдается характерное для гауссового распределения намагниченности поведение кумулянтов: при низких температурах все  $U_L \rightarrow 2/3$ , тогда как при высоких температурах можно наблюдать уменьшение  $U_L$  с ростом  $L$ , что в пределе  $L \rightarrow \infty$  даст  $U_L \rightarrow 0$ . Во

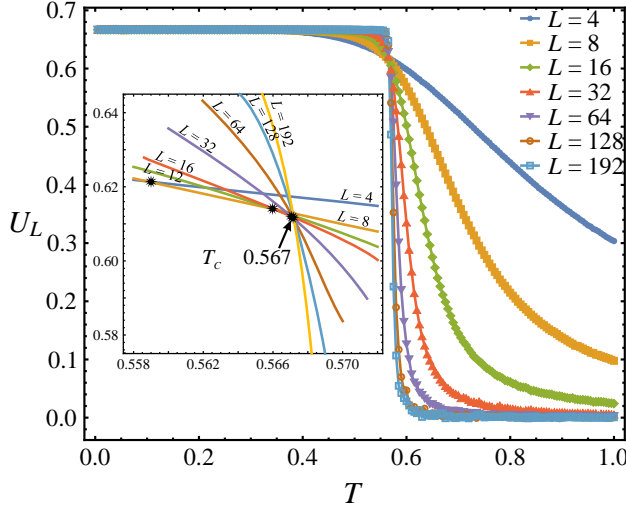


Рисунок 4.2 — Температурные зависимости магнитных кумулянтов Биндера для различных линейных размеров квадратной решётки,  $\Delta = 10$ ,  $V = 0$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$ . Кривые имеют ярко выраженную точку пересечения при  $T = T_c$ . Можно видеть, что при  $T \rightarrow 0$   $U_L \rightarrow \frac{2}{3}$ , тогда как при больших  $T$   $U_L \rightarrow 0$  при  $L \rightarrow \infty$ , что является свидетельством характерного гауссового распределения [161]

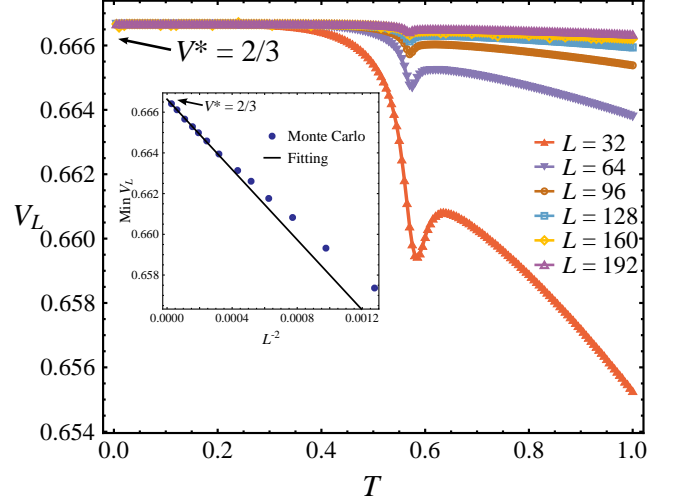


Рисунок 4.3 — Температурные зависимости энергетических кумулянтов Биндера для различных линейных размеров квадратной решётки,  $\Delta = 10$ ,  $V = 0$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$ . Во вставке изображена зависимость величин минимумов  $V_L$  от  $L^{-d}$ .  $V_L$  стремятся к величине  $V^* = 2/3$  для больших  $L$ , что свидетельствует о ФП II рода

вставке показаны кривые в критической области в увеличенном масштабе. Из-за поправок к КРС может быть некоторый разброс в точках пересечения для различных пар размеров  $(L, L')$ . Также можно рассмотреть попарные пересечения кривых для двух разных размеров решётки —  $L$  и  $L' = bL$ , с использованием свойства неподвижной точки при скейлинге

$$\left( \frac{U_{bL}}{U_L} \right)_{T=T_c} = 1. \quad (4.17)$$

При рассмотрении очень малых решёток, вообще говоря, присутствуют остаточные корректирующие члены к КРС, не позволяющие кривым иметь общую точку пересечения. Однако с увеличением размера решётки существует систематическое изменение в направлении общего пересечения при  $T_c = 0.567 \pm 0.001$ , что совпадает с известным точным значением для модели Изинга  $T_c = \frac{2Js^2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 0.567$ . Тем не менее, точность метода пересечения кумулянтов достаточно высока [117], что позволяет использовать его в качестве основного метода определения критической температуры для большого разнообразия моделей. Для определения  $T_c$  в расчётах статических КИ ниже мы будем использовать данный подход.

Если первые производные свободной энергии имеют разрыв (энтропия, параметр порядка, наряду с внутренней энергией) при температуре перехода  $T_c$ , переход называется ФП

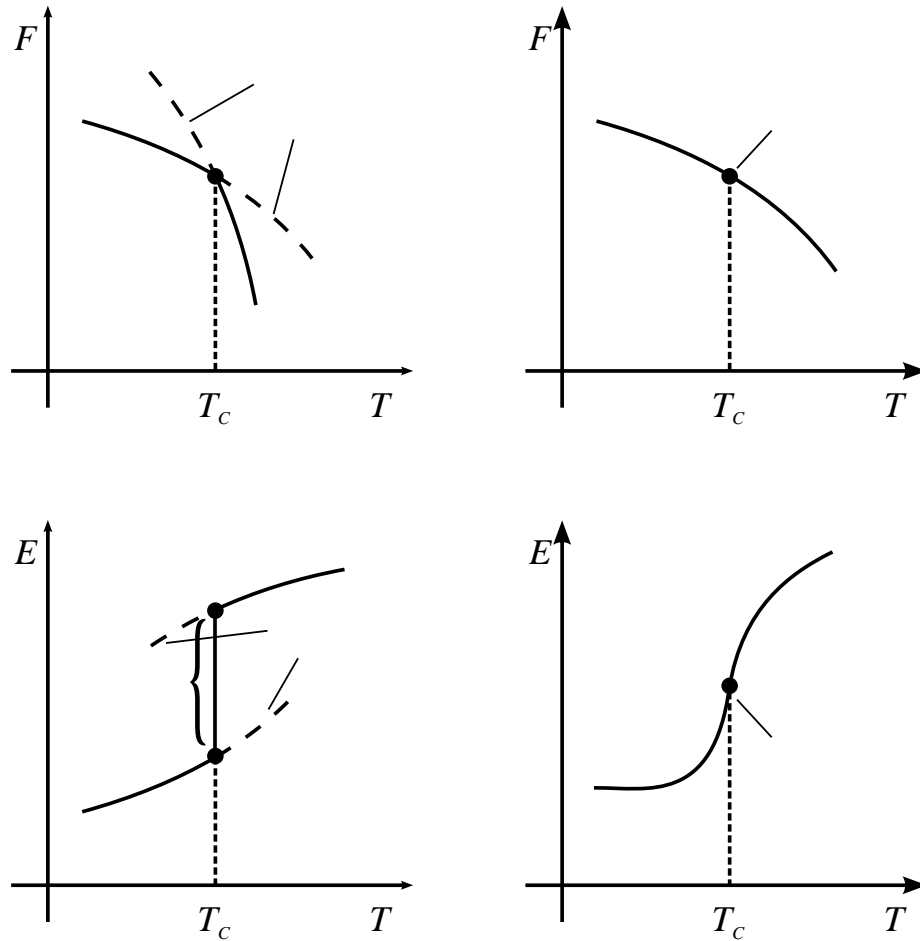


Рисунок 4.4 — Схематическая температурная зависимость свободной энергии и внутренней энергии для системы, претерпевающей ФП I рода (слева) и ФП II рода (справа)

I рода. Величина разрыва не важна с точки зрения классификации фазового перехода, но существуют различные системы либо с очень большими, либо с довольно малыми скачками. Для ФП II рода первые производные непрерывны; переходы при некоторой температуре  $T_c$  и поле  $h$  характеризуются сингулярностями во вторых производных свободной энергии, и свойства довольно разнородных систем могут быть связаны через свойство универсальности критических явлений, которое выполняется лишь для ФП II рода.

На Рисунке 4.4 показано характерное поведение свободной и внутренней энергии для обоих видов ФП. При ФП I рода кривые свободной энергии упорядоченного и неупорядоченного состояний пересекаются с конечной разницей в наклоне, так что формируется точка излома. Переход сопровождается выделением или поглощением скрытой теплоты, равной величине скачка внутренней энергии. При этом в некотором диапазоне температур существуют как стабильные, так и метастабильные состояния. Напротив, при ФП II рода две кривые свободной энергии встречаются без излома, что приводит к непрерывному переходу.

Проблема состоит в том, что равновесное термодинамическое поведение конечной системы является плавным, когда она проходит через ФП как для переходов I, так и II рода. Поэтому при моделировании зачастую затруднительно определить настоящий род перехода для бесконечно большой системы.

В решении вновь приходят следствия гипотезы КРС. Для определения рода фазового перехода есть несколько способов [69]:

1) Энергетический кумулянт  $V_L$  используют в качестве критерия определения рода ФП [162; 163]. Предполагается, что  $V_L$  зависит от размера системы следующим образом:

$$V_L = V^* + bL^{-d}, \quad (4.18)$$

где  $V^*$  – некая постоянная, по величине которой судят о роде ФП. При переходах II рода  $V_L \rightarrow 2/3$  для всех температур при  $L \rightarrow \infty$ . Для ФП I рода значение  $V_L$  стремится к  $V^* = 2/3$  для высоких и низких температур, и стремится к некоему нетривиальному значению, отличному от  $2/3$ , при критической температуре. То же самое можно сказать при рассмотрении масштабирования и минимальных значений энергетических кумулянтов [69]. На практике выражение (4.18) хорошо выполняется при больших размерах системы из-за эффектов КРС.

На Рисунке 4.3 представлены температурные зависимости энергетического кумулянта  $V_L$  для различных  $L$  и при тех же параметрах в пределе Изинга. Скейлинговая кривая для минимума  $V_L$ , изображённая во вставке, показывает, что величина  $V_L$  стремится к  $V^* = 2/3$ , в соответствии с выражением (4.18). Это свидетельствует о наличии ФП II рода.

2) Одним из наиболее надёжных способов является гистограммный анализ данных МК [164]. Для ФП I рода вблизи  $T_c$  гистограмма распределения энергии  $P(E)$  имеет двухпиковую структуру, каждый пик которой соответствует определенной (стабильной или метастабильной) фазе. Наличие двойного пика на энергетической гистограмме считается достаточным условием для ФП I рода [71]. Однако существуют примеры, когда гистограммы оказываются чувствительными к размеру системы, для которого они были рассчитаны. Так, при малых  $L$  может наблюдаться однопиковая структура, свидетельствующая о ФП II рода, тогда как при больших  $L$  может проявляться наличие двух пиков, и наоборот [63; 64]. В связи с этим иногда бывает затруднительно определить точное положение трикритической точки, в которой род ФП меняется с I на II. Поэтому в данной работе границы между ФП I и II рода носят условный характер, т.к. целью не было точное определение положения трикритических точек модели.

3) Для ФП I рода максимумы теплоёмкости и восприимчивости пропорциональны объёму системы:  $C, \chi \sim L^d$ , в отличие от ФП II рода, где термодинамические величины пропорциональны  $L^{1/\nu}$ .

4) Для ФП I рода температуры максимумов теплоёмкости и восприимчивости (критические температуры конечно-размерной системы)  $T_c(L)$  пропорциональны обратному объёму системы:  $T_c(L) = T_c + bL^{-d}$ , тогда как для ФП II рода  $T_c(L) = T_c + bL^{-1/\nu}$ .

Пункты 3 и 4 автоматически проверялись во время определения критических индексов. В качестве проверки рода ФП использовались все 4 подхода, однако, ввиду явной

выраженности особенностей критического поведения при ФП I рода в рассматриваемой системе для экстенсивных расчётов мы лишь оценивали вид температурной зависимости внутренней энергии.

#### 4.2.4 Определение критических индексов методом Монте-Карло

При определении КИ методом МК мы также сталкиваемся с проблемами конечных размеров системы. Для их решения и расчёта КИ используются изложенные выше положения теории КРС. Масштабирование термодинамической величины для разных размеров решётки позволяет определить КИ и критическую температуру. Сводится это к изображению скейлинговых функций для разных  $L$  путем построения зависимости  $f \cdot L^{-\lambda/\nu}$  от  $\tau \cdot L^{1/\nu}$  и подбора критических параметров, при которых скейлинговые функции наложатся друг на друга для разных  $L$ . Однако у такого метода есть ряд технических проблем [96], связанных со сложностью определения погрешностей. Поэтому чаще всего используют другой, более простой в реализации, однако, менее точный, метод. Его суть состоит в том, чтобы масштабировать данные не во всей критической области, а в одной точке. Этой точкой может выступать максимум скейлинговой функции, эквивалентный точке максимума термодинамической величины. Также часто используют критическую точку, соответствующую точке ФП для бесконечной системы, которая, в свою очередь, определяется методом кумулянтов Биндера 4-го порядка.

В данной работе для определения КИ используется нулевое приближение КРС (4.13)–(4.15), без учета скейлинговых поправок в соответствии с разложением Вегнера [165], поскольку целью было выявление качественных зависимостей КИ от параметров модели.

Для нулевого приближения мы полагаем обычную степенную зависимость термодинамических величин от размера системы. Таким образом, мы считаем, что при достаточно больших  $L$  для теплоёмкости, параметра порядка и восприимчивости выполняется

$$C(T = T_c, L) = C_0 L^{\alpha/\nu} \quad (4.19)$$

$$\mathcal{O}(T = T_c, L) = \mathcal{O}_0 L^{-\beta/\nu} \quad (4.20)$$

$$\chi(T = T_c, L) = \chi_0 L^{\gamma/\nu}. \quad (4.21)$$

В случае 2D модели Изинга, когда особенность поведения теплоёмкости описывается логарифмическим законом (4.9), скейлинговое соотношение также будет логарифмическим:

$$C(T = T_c, L) = C_0 \ln L. \quad (4.22)$$

В таком случае КИ  $\alpha$  принимается за 0.

Аналогично путём построения скейлинговых кривых в критической точке определяются и соотношения для КИ параметра порядка  $\beta/\nu$  (4.20) и КИ восприимчивости  $\gamma/\nu$  (4.21).



Для определения самих КИ необходимо найти КИ корреляционной длины  $\nu$ , т.к. первоначально находятся лишь относительные величины КИ. Определить КИ  $\nu$  можно несколькими способами.

Первый способ состоит в расположении пиков термодинамических производных (например, удельной теплоёмкости или магнитной восприимчивости). Расположение пиков определяет эффективную критическую температуру  $T_c(L)$  для системы размером  $L$ . Тогда скейлинговая зависимость критической температуры от размера системы имеет следующий вид:

$$T_c(L) = T_c + bL^{-1/\nu},$$

где  $T_c$  – критическая температура для бесконечной системы,  $b$  – некая постоянная величина. Недостатком данного подхода является необходимость использования данных с очень хорошей статистической точностью и для достаточно больших решёток (иначе играют роль поправки к КРС). Кроме того, результаты могут слегка отличаться в зависимости от того, пики каких термодинамических величин рассматриваются.

Во-вторых, Биндер показал [160], что наклон магнитных кумулянтов  $U_L$  в  $T_c$  изменяется с размером системы следующим образом:

$$\left. \frac{dU_L}{dT} \right|_{T=T_c} = aL^{1/\nu}. \quad (4.23)$$

Тогда можно использовать наклон магнитных кумулянтов для определения КИ  $\nu$ .

Однако наибольшей точности можно добиться с использованием скейлинговых свойств менее привычных величин, которые, тем не менее, тоже обладают теми же критическими свойствами. Такими величинами могут выступать специфические кумулянты – логарифмические производные любой  $n$ -ой степени параметра порядка [166]:

$$V_n = \frac{\partial}{\partial \beta} \langle \mathcal{O}^n \rangle = \frac{\langle \mathcal{O}^n E \rangle}{\langle \mathcal{O}^n \rangle} - \langle E \rangle, \quad (4.24)$$

где  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ . Они определялись в рамках МК расчёта наряду с прочими кумулянтами.

Эти величины имеют те же скейлинговые свойства, что и наклон магнитных кумулянтов (4.23):

$$V_n = g_n L^{1/\nu}, \quad (4.25)$$

где  $g_n$  – постоянные величины. В данной работе для определения КИ  $\nu$  мы использовали логарифмические производные  $\langle \mathcal{O}^2 \rangle$  и  $\langle \mathcal{O}^4 \rangle$ .

## 4.2.5 Алгоритм Метрополиса и критическое замедление

Главной проблемой используемого алгоритма является сильная чувствительность к критическому замедлению вблизи критической точки. Последовательные состояния конфигурации системы имеют высокую корреляцию в критической области из-за возрастания



корреляционной длины. Это приводит к необходимости увеличения времени между последующими наблюдениями, используемыми для усреднения термодинамических величин. Время релаксации системы неограниченно растёт по мере приближения к критической температуре, и степенной характер их асимптотической зависимости от приведенной температуры определяется динамическим критическим индексом  $z$ :

$$t_{\text{rel}} \sim |\tau|^{-z\nu}, \quad (4.26)$$

для которого также выполняется скейлинговый закон

$$t_{\text{rel}} \sim L^z.$$

Так, для алгоритма Метрополиса  $z \approx 2$ , что будет означать сильную степенную расходимость времени релаксации системы. Тогда как для кластерных алгоритмов характерны динамические индексы  $z \approx 0.25$  [122; 123], что делает их более пригодными для исследования критических явлений. Также при перевороте одного спина в рамках алгоритма Метрополиса осуществляется слишком малый шаг в конфигурационном пространстве, и становится практически невозможным избежать «застревания» системы в метастабильных состояниях, которых особенно много в критической области при ФП I рода. Однако, вопрос о построении оптимального кластерного алгоритма, либо алгоритма Ванга-Ландау [167], для решения задачи с условием сохранения заряда (1.2) пока остаётся открытым.

С учётом недостатков используемого алгоритма мы, по крайней мере, качественно определим критические свойства и области с ФП I рода. Наличие возможности «застревания» в метастабильных состояниях алгоритмов МК на самом деле является неочевидным преимуществом по сравнению с точным решением. В методе трансфер-матрицы все термодинамические величины являются однозначными функциями температуры и магнитного поля, тогда как в численных расчётах появляется возможность изучать явления температурного и магнитного гистерезиса.

### 4.3 Особенности фазового расслоения в системах больших размерностей

Несмотря на качественное совпадение фазовых свойств основного состояния для систем разных пространственных размерностей, температурные и критические свойства могут существенно отличаться.

Как было отмечено в Главе 4, в одномерной цепочке в случае «сильного» спинового обмена  $|J| > V$  для больших  $\Delta$  формируются разбавленные квазифазы dilute (A)FM путём единственного псевдоперехода «второго рода» (см. Рисунок 3.9). В этом случае основным состоянием с нулевой энтропией будет (A)FM состояние с фазовым расслоением в виде единичной зарядовой капли.

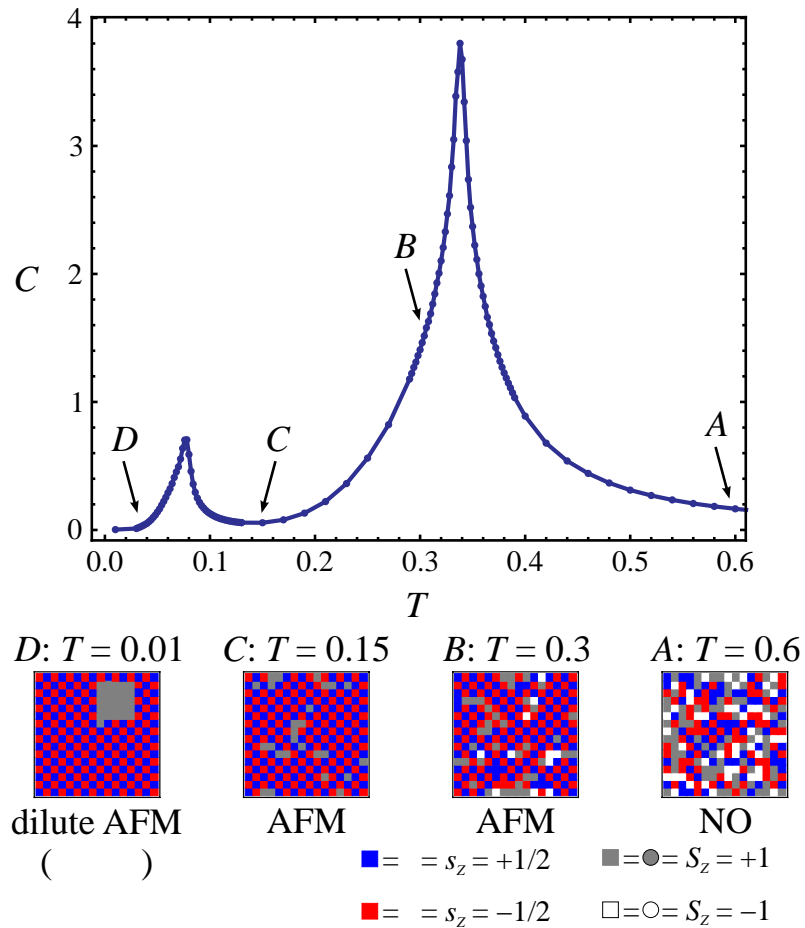


Рисунок 4.5 — Температурная зависимость удельной теплоёмкости при  $n = 0.1$ ,  $V = 0.1$ ,  $J = 0.25$  и  $\Delta = 0$  для 2D решётки размером  $64 \times 64$ . Снимки решётки  $16 \times 16$  изображены при разных температурах. Наблюдается два последовательных ФП: в магнитное AFM состояние, и в состояние с фазовым расслоением

Несмотря на совпадение фазы основного состояния, в системах больших размерностей можно наблюдать два последовательных ФП: сперва из неупорядоченной (NO) парамагнитной фазы система переходит в упорядоченное магнитное состояние, представляющее собой (A)FM порядок, разбавленный случайно распределёнными примесями плотностью заряда  $n$ . Затем, при более низких температурах происходит второй переход, уже сопровождающийся примесной нуклеацией, т.е. фазовым расслоением: заряженные состояния конденсируются в одну большую каплю или страйп. Эти переходы представлены двумя пиками на температурной зависимости удельной теплоёмкости, показанной на Рисунке 4.5 для  $n = 0.1$ ,  $V = 0.1$ ,  $J = 0.25$  и  $\Delta = 0$ . Справа изображены мгновенные снимки квадратной решётки  $16 \times 16$ , которые наглядно демонстрируют фазовые превращения системы при понижении температуры. Нуклеация примесей становится энергетически выгодной из-за минимизации поверхностной энергии в системе с конечными размерами. Сформировавшаяся AFM матрица “выдавливает” зарядовые центры, которые конденсируются в одном месте, чтобы уменьшить энергию границы с AFM подсистемой.

На Рисунке 4.6 представлены температурные зависимости термодинамических величин для различных значений  $\Delta$  при  $n = 0.1$ ,  $V = 0.1$ ,  $J = 0.25$ . При  $\Delta \leq \Delta^* = d(V - |J|) =$

–0.3 наблюдается лишь один ФП в СО состояние, характеризующийся непрерывными изменениями энергии, СО параметра порядка, и высокотемпературными пиками теплоёмкости и шахматной (staggered) зарядовой восприимчивости. При  $\Delta > \Delta^*$ , помимо аналогичного ФП в АФМ состояние, на всех термодинамических величинах можно наблюдать второй, низкотемпературный переход, сопровождающийся фазовым расслоением: упомянутые выше пики теплоёмкости, а также пики шахматной магнитной восприимчивости, и определённые перегибы в энергии и АФМ параметре порядка.

Температура перехода с фазовым расслоением оказывается практически не зависящей от параметров системы. На Рисунке 4.8 представлена температурная фазовая диаграмма в переменных  $T - \Delta$ . Критические температуры определялись по максимумам теплоёмкости и/или восприимчивости. Зависимость  $T_c$  от  $\Delta$  для первого ФП имеет характерный вид «галочки», который является типичным для многих систем с конкурирующими взаимодействиями [63; 64; 67]. Минимум критической температуры достигается в точке  $\Delta^*$ , где и проявляется конкуренция зарядового и магнитного порядков. Ниже эта точка будет называться точкой фрустрации, либо фрустрирующей точкой. При приближении к точке фрустрации второй переход с фазовым расслоением наблюдается при более высоких температурах, приближаясь к температуре АФМ упорядочения. При этом форма пиков теплоёмкости и восприимчивости становится искривлена (см. Рисунок 4.6(б и д), зелёная кривая), пока эти переходы не сливаются. Об особенностях критического поведения при приближении к точке фрустрации будет изложено в подразделах ниже. Особенностью же формирующегося фазового расслоения при  $\Delta \gtrsim \Delta^*$  является наличие ближнего зарядового порядка внутри капли, как изображено на Рисунке 4.8 на снимке решётки  $16 \times 16$ . Эта особенность напоминает формирование квазифазы АФМ с каплей с ближним зарядовым упорядочением, которое наблюдалось в одномерной разбавленной цепочке при псевдопереходах «второго рода» (см. Подраздел 3.5.1 и Рисунок 3.10). Это указывает на определённую связь особенностей формирования фазового расслоения вблизи границы раздела СО и (А)ФМ фаз для цепочки и многомерной решётки. При этом из-за зарядового порядка объём капли увеличивается за счёт объёма магнитной фазы, что приводит к уменьшению АФМ параметра порядка, как видно на Рисунке 4.6(в), зелёная кривая. Затем в процессе термализации капля становится более однородной, пока ближний зарядовый порядок не исчезнет.

Плотность заряда сильно влияет на термодинамические свойства системы. На Рисунке 4.7 представлен температурный ход удельной теплоёмкости и АФМ параметра порядка для различных величин  $n$ . Величина АФМ параметра порядка стремится к  $1 - n$  в основном состоянии, как и наблюдалось в одномерной цепочке. В «чистом» случае, при  $n = 0$ , происходит единственный ФП в упорядоченное АФМ состояние. Вторым ФП, связанный с фазовым расслоением, существует при всех  $0 < n < 1$ , и практически не испытывает влияние примесей. При повышении плотности заряда первый переход начинает сильно размываться: уменьшается величина пика теплоёмкости, он становится более пологим. Температура этого перехода также уменьшается. Очевидно, что это повлияет на критические показатели для первого перехода, что будет показано ниже. Система становится сильно разбавленной, и дальние магнитные корреляции подавляются. Это происходит до тех пор, пока заряжен-

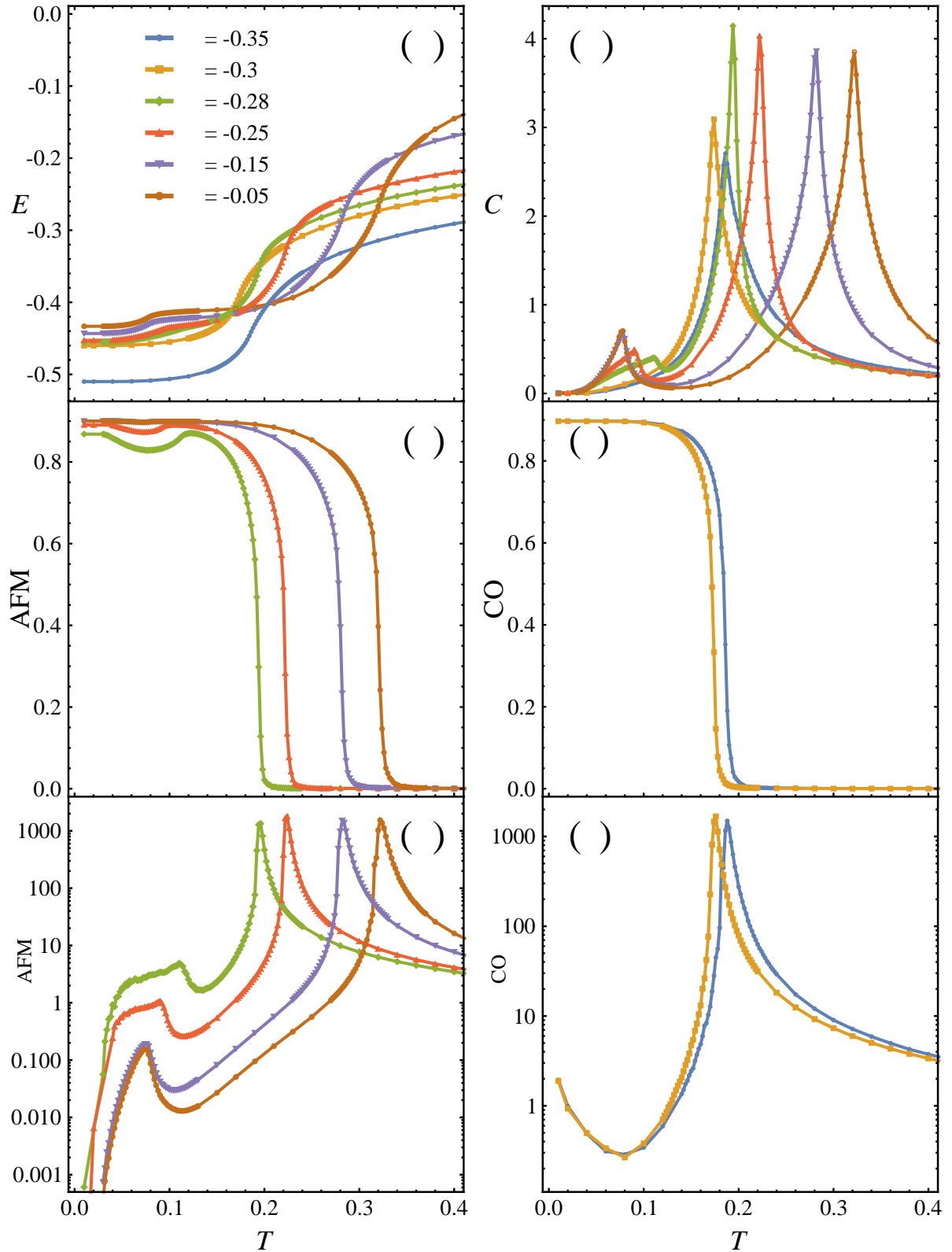


Рисунок 4.6 — Температурные зависимости (а) внутренней энергии, (б) удельной теплоёмкости, (в) AFM параметра порядка, (г) CO параметра порядка, (д) шахматной магнитной восприимчивости в логарифмическом масштабе, (е) шахматной зарядовой восприимчивости для различных величин параметра одноузельных корреляций  $\Delta$  при  $n = 0.1$ ,  $V = 0.1$ ,  $J = 0.25$ . Расчёт проводился на 2D решётке размером  $64 \times 64$

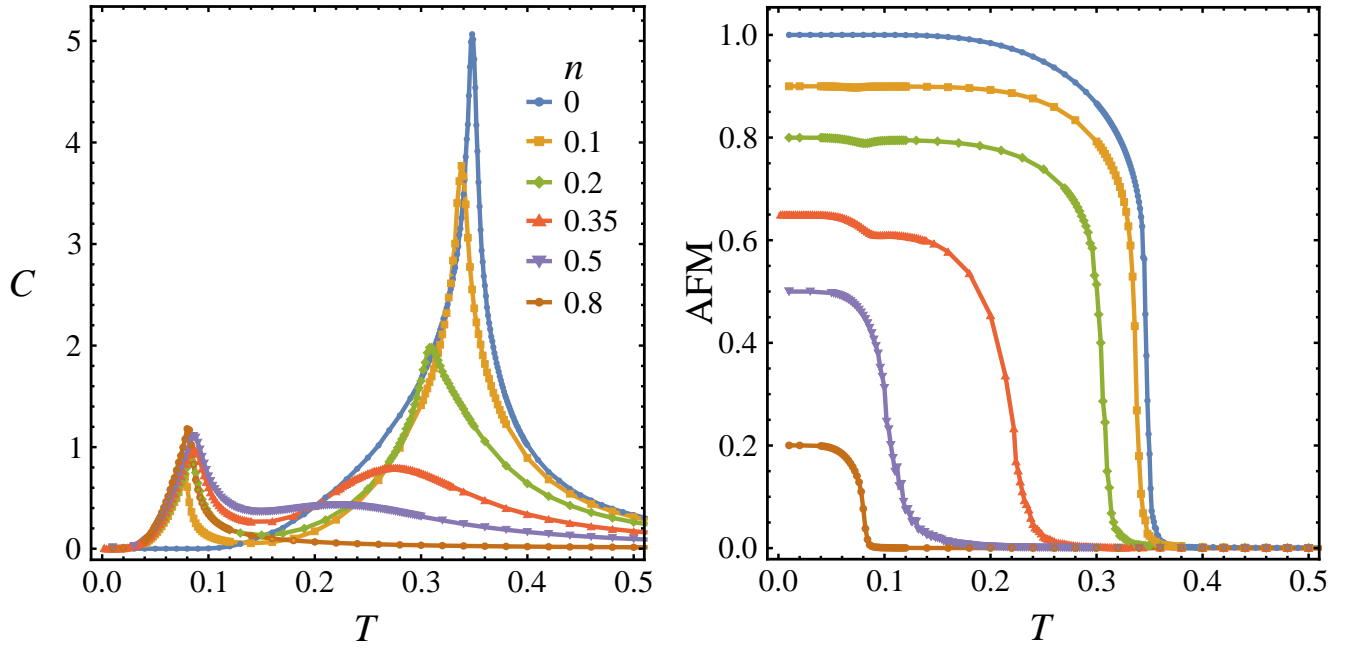


Рисунок 4.7 — Температурные зависимости удельной теплоёмкости (слева) и AFM параметра порядка (справа) для различных величин плотности заряда  $n$  при  $\Delta = 0$ ,  $V = 0.1$ ,  $J = 0.25$  и 2D решётки размером  $64 \times 64$

ных примесей не станет больше, чем магнитных центров, и тогда первый ФП сливается со вторым. Система сразу переходит в состояние с фазовым расслоением.

Подавление перехода в магнитное состояние также видно по температурной диаграмме. На Рисунке 4.9 изображена температурная фазовая диаграмма в зависимости от плотности заряда  $n$ , построенная по максимумам теплоёмкости. С увеличением  $n$  происходит подавление первого ФП в магнитное состояние, приводящее к изменению критических индексов (об этом будет доложено ниже), и к уменьшению критической температуры.

Метод МК показал, что в зависимости от  $n$  на решётке конечного размера в основном состоянии возможны различные конфигурации фазового расслоения. При малых  $n$  допированный в систему заряд собирается в одну зарядовую каплю. Далее, при больших  $n$ , формируется зарядовая полосовая структура (страйп), которая, вполне вероятно, возникает вследствие использования ПГУ при моделировании. При  $|n| > 0.5$  AFM порядок становится ближним и возникает обратная ситуация с антиферромагнитными страйпом и каплей.

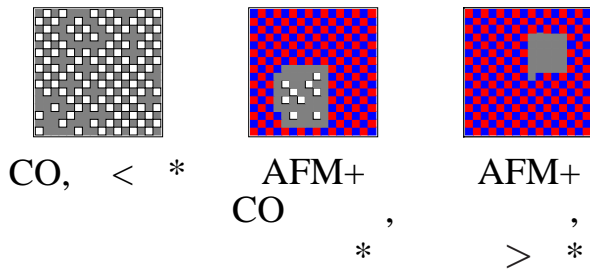
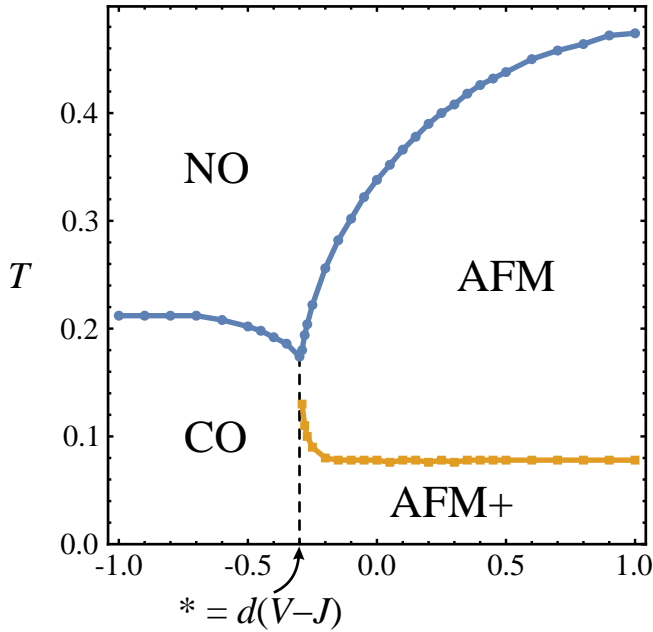


Рисунок 4.8 — Температурная фазовая диаграмма в зависимости от параметра одноузельных корреляций  $\Delta$  для  $n = 0.1$ ,  $V = 0.1$ ,  $J = 0.25$ , построенная по пикам удельной теплоёмкости для 2D решётки размером  $64 \times 64$ . Мгновенные снимки решётки  $16 \times 16$  показывают основное состояние для разных  $\Delta$ . Вблизи границы раздела CO и dilute AFM фаз  $\Delta \gtrsim \Delta^* = d(V - J)$  происходит макроскопическое фазовое расслоение на AFM упорядоченную и частично CO части

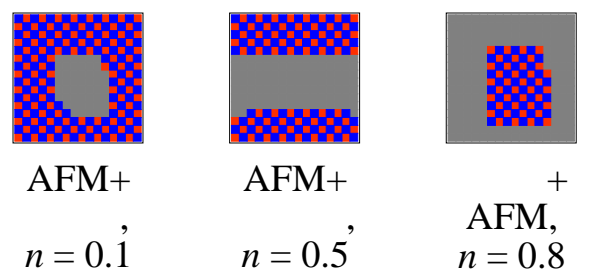
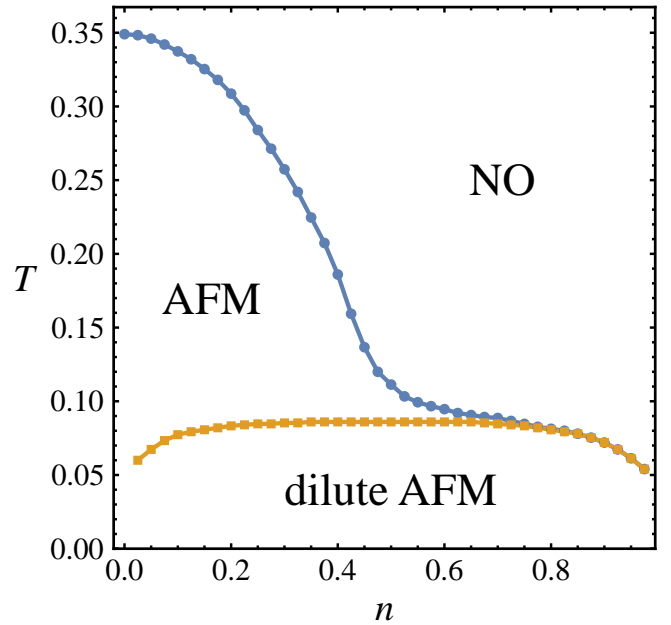


Рисунок 4.9 — Температурная фазовая диаграмма в зависимости от плотности заряда  $n$  для  $\Delta = 0$ ,  $V = 0.1$ ,  $J = 0.25$ , построенная по пикам магнитной восприимчивости (красный) и удельной теплоёмкости (зелёный) для 2D решётки размером  $64 \times 64$ . Мгновенные снимки решётки  $16 \times 16$  показывают основное состояние для разных  $n$ . МК показал, что формируются различные конфигурации фазового расслоения в зависимости от величины  $n$

## 4.4 Свойства основного состояния

### 4.4.1 Фазовые диаграммы основного состояния, полученные методом Монте-Карло

Ранее в ПСП было показано, что типы фазовых диаграмм основного состояния в переменных  $n$ - $\Delta$  будут классифицироваться по соотношению между  $V$  и  $J$  [102; 105]. Выделяются два случая: сильный спиновый обмен в сравнении с заряд-зарядовым отталкиванием ( $V/J \leq 1$ ) и слабый спиновый обмен ( $V/J > 1$ ).

На Рисунке 4.10 изображены фазовые диаграммы основного состояния в случае сильного спинового обмена для  $V/J = 0.4$  для 2D решётки. Сплошной линии на графике слева соответствует зависимость точки фрустрации  $\Delta^* = 2(V - J)(1 - |n|)$ , полученная в рамках обычного ПСП [102]. В таком случае при  $\Delta > \Delta^*$  основным состоянием будет (A)FM порядок. Учёт наличия фазового расслоения был выполнен в более поздней работе с помощью приближения Бете и построения Максвелла [105], что дало зависимость  $\Delta^* = 2(V - J)$ , совпадающую с точным результатом, представленным в Главе 3.

На Рисунке 4.10(б) представлена диаграмма основного состояния, полученная с помощью расчётов МК на квадратной решётке. Снизу показаны снимки решётки  $16 \times 16$ , демонстрирующие основное состояние МК. Расчёты проводились для 100 копий системы размером  $64 \times 64$ , осуществлялось  $2 \cdot 10^5$  шагов МК, не включая  $1 \cdot 10^5$  шагов отжига. Начальная температура была выбрана достаточно высокой,  $T = 1.5$ , чтобы гарантировать, что она значительно превышает критическую, а нижний предел температуры составил  $T = 0.001$ . Точка фрустрации  $\Delta^*$  представляет собой состояние, при котором вероятности формирования как СО, так и AFM фаз становятся одинаковыми. Об особенностях вырождения основного состояния вблизи этой точки будет сообщено ниже, в подразделе 4.4.2. Таким образом, было рассчитано состояние при достаточно низкой температуре, которое можно считать основным состоянием системы, полученным методом МК.

Точка фрустрации  $\Delta^*$  испытывает смещение при увеличении плотности заряда  $n$ , что формирует определённую нелинейную зависимость. Мы полагаем, что это является следствием недостатков алгоритма Метрополиса, застревающего в метастабильном зарядовом состоянии вблизи точки фрустрации. Эта проблема является типичной для данного алгоритма. Решением общепринято рассмотрение кластерных алгоритмов, либо алгоритма Ванга-Ландау, что является трудновыполнимым для разбавленных систем с сохранением параметра порядка. Поэтому в данной работе будет уделяться внимание возможным физически некорректным результатам, к которым привели неустраняемые недостатки алгоритма Метрополиса.

С учётом сильного разбавления результат метода МК для основного состояния будет включать в себя области с ближним порядком (БП), когда параметр порядка становится пре-

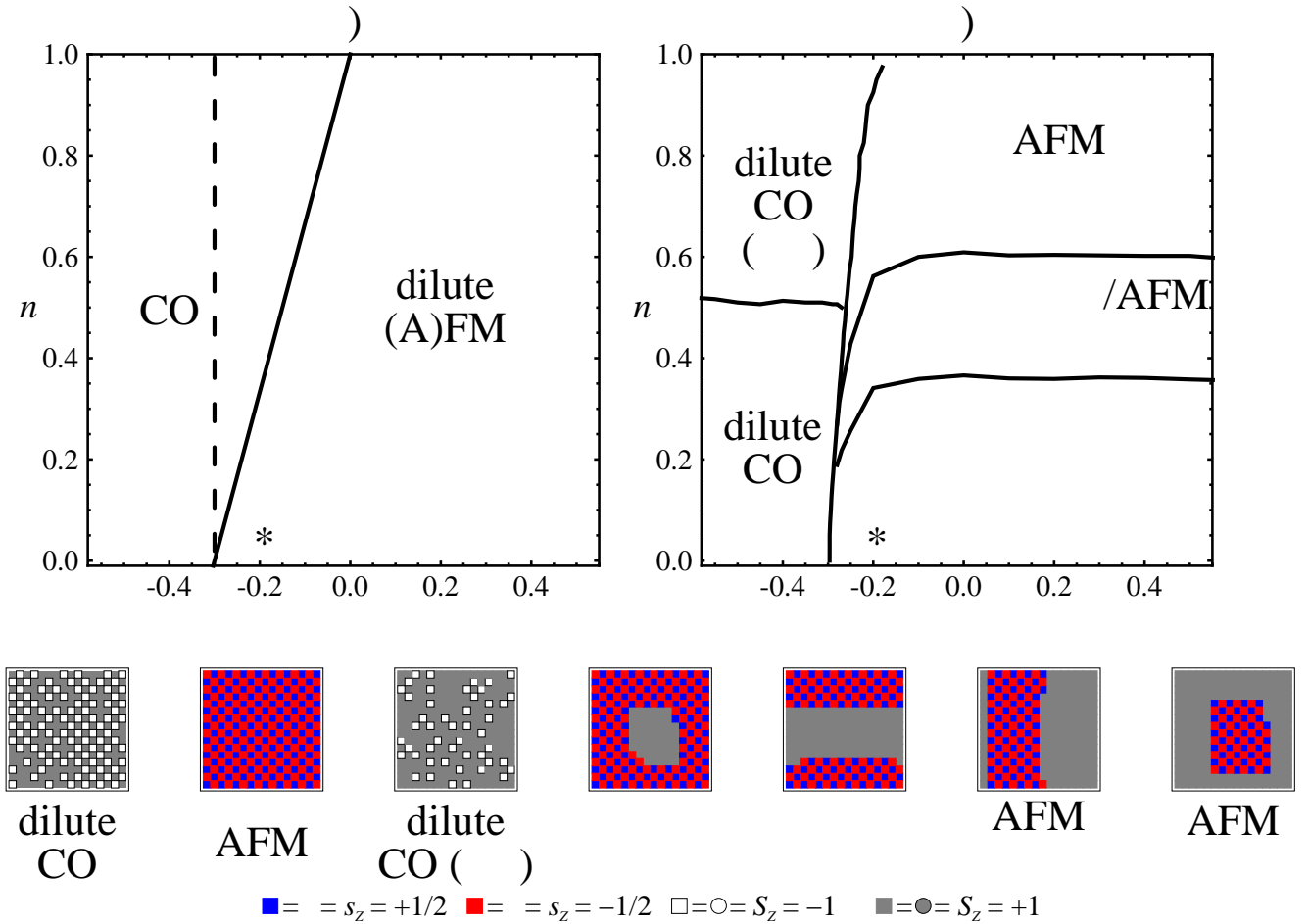


Рисунок 4.10 — Фазовые диаграммы основного состояния в переменных  $\Delta - n$  для предела сильного спинового обмена ( $V = 0.1, J = 0.25$ ), полученные в ПСП (а) и с помощью метода МК (б). Расчёты проводились на 2D решётке размером  $64 \times 64$ . Снизу представлены мгновенные снимки фрагментов решетки  $16 \times 16$ , представляющие фазы основного состояния

небрежимо малым, и мы не можем судить о наличии дальнего упорядочения. Этот эффект принципиально не может быть получен в рамках ПСП. Область ближнего разбавленного зарядового порядка при  $n \gtrsim 0.5$  обозначена dilute CO (БП) на диаграмме МК на Рисунке 4.10(б).

С учётом различных конфигураций фазового расслоения в (A)FM части можно выделить три области с зарядовой каплей, страйпом, и AFM каплей. Вблизи границы  $\Delta^*$  из-за общей неустойчивости системы по отношению к зарядовому упорядочению границы между областями с различными конфигурациями расслоения начинают искривляться, как изображено на Рисунке 4.10(б).

В случае слабого спинового обмена в ПСП [102] в основном состоянии (см. Рисунок 4.11(а)) формируются 3 фазы с зарядовым упорядочением типа шахматной доски – dilute CO, PM-CO и FR-CO, и 1 фрустрированная магнитная фаза – FR-(A)FM. Границы между фазами в ПСП полностью совпадают с точным результатом по минимизации энергии при заданном  $n$ , который обсуждался в Главе 3.



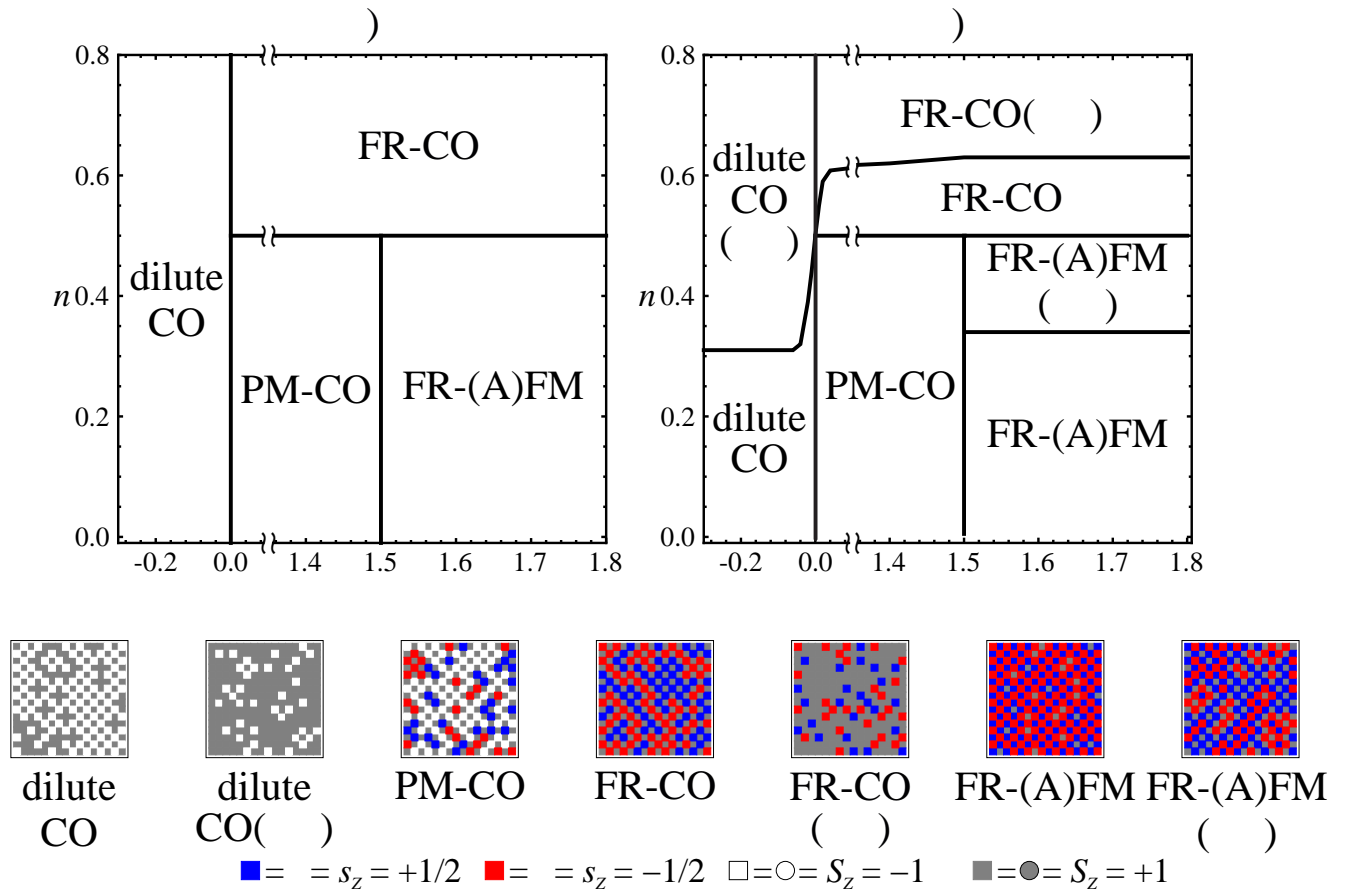


Рисунок 4.11 — Фазовые диаграммы основного состояния в переменных  $\Delta - n$  для предела слабого спинного обмена ( $V = 1, J = 0.25$ ), полученные в ПСП (а) и с помощью метода МК (б). Расчёты проводились на 2D решётке размером  $64 \times 64$ . Снизу представлены мгновенные снимки фрагментов решетки  $16 \times 16$ , представляющие фазы основного состояния

Результат МК на Рисунке 4.11(б) снова обнаруживает области с ближним упорядочением на конечной 2D решётке  $64 \times 64$ , которые существуют при  $n \gtrsim 0.33$  для CO и FR-(A)FM фаз, и при  $n \gtrsim 0.63$  для фазы FR-CO. Из-за слабого спинного обменного взаимодействия антиферромагнитно упорядоченная подсистема перестает выталкивать заряженные примеси, поэтому в данном случае фазовое расслоение не наблюдается. Однако данный предельный случай интересен большим разнообразием зарядовых упорядочений разного типа, а также необычными температурными эффектами, такими как возвратные переходы и переходы типа порядок-порядок, которые будут рассмотрены в Разделе 4.5 ниже.

#### 4.4.2 Вырождение основного состояния

Как правило, состояние на границах раздела двух или более фаз представляет собой специфическую смесь состояний соседствующих фаз. В данном контексте свойства систем большой размерности можно сопоставить с характеристиками одномерной цепочки, рассмотренными в Главе 4. Несмотря на то что аналитическое определение конкретных соотношений

между фазами на границе для двумерной и трёхмерной систем невозможно, имеется возможность качественно отслеживать формирование смеси, используя параметры порядка и мгновенные снимки решётки.

Исключением вновь является граница между СО и (А)ФМ упорядочениями, где образование смеси двух фаз оказывается невозможным. Это приводит к вырождению основного состояния системы, однако теперь это вырождение связано не с наличием ненулевой энтропии, как обсуждалось ранее в контексте распределения отождённых примесей, а возникает в результате конкуренции между двумя типами упорядочения и невозможности одновременного удовлетворения зарядовых и магнитных взаимодействий.

На Рисунке 4.12 представлен набор температурных фазовых диаграмм в зависимости от параметра локальных корреляций  $\Delta$  для случая  $n = 0$  и различных соотношений между межузельными зарядовыми и спиновыми корреляциями  $V/J$ . Диаграммы имеют характерный вид “галочек”, в правой части которых система переходит из парамагнитного состояния NO в чистое AFM упорядочение, тогда как в левой части осуществляется переход в СО упорядочение (за исключением случая  $V = 0$ , когда зарядовый порядок невозможен).

На границе этих двух фаз вырождение основного состояния обусловлено конкуренцией между зарядовым и магнитным упорядочениями, при этом фрустрирующим параметром выступает  $\Delta$ . Эта точка может рассматриваться как классический аналог квантовой критической точки. Фазовые диаграммы такого типа в фрустрированных системах достаточно часто встречаются в литературе и, например, представлены моделью Изинга с конкурирующими обменными взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями на ОЦК-или ПК-решетках [65; 121].

Обычно считается, что подобные фазовые диаграммы имеют лишь одну точку фрустрации, соответствующую минимуму зависимости температур ФП от фрустрирующего параметра [67]. Однако наши данные показывают, что основное состояние рассматриваемой системы вырождено не в одной конкретной точке, а в целой «области фрустрации». Именно эти области обозначены серыми вертикальными линиями на Рисунке 4.12.

В этих областях как зарядовое, так и антиферромагнитное упорядочения формируются в основном состоянии с отличными от нуля вероятностями. Это указывает на то, что при идентичных модельных параметрах и условиях термализации, в различных копиях системы могут наблюдаться различные упорядоченные состояния: одна часть копий демонстрирует антиферромагнитное упорядочение, в то время как другая — зарядовое. Данное явление проиллюстрировано на Рисунке 4.13, где представлены температурные зависимости СО и AFM параметров порядка для десяти различных копий системы, полученных при одинаковых параметрах  $L = 128$ ,  $V/J = 4$ ,  $\Delta = 1.455$ .

При этом зависимости СО параметра порядка ведут себя более резким образом, чем зависимости AFM-параметра, что может свидетельствовать о наличии ФП I рода. Подробнее данный вопрос будет рассмотрен в разделах ниже.

Зависимости вероятностей формирования упорядочений СО и AFM для разных соотношений  $V/J$  от фрустрирующего параметра  $\Delta$  представлены на Рисунке 4.15. Расчеты были проведены для 100 копий системы с линейными размерами решеток  $L = 128$ , а также

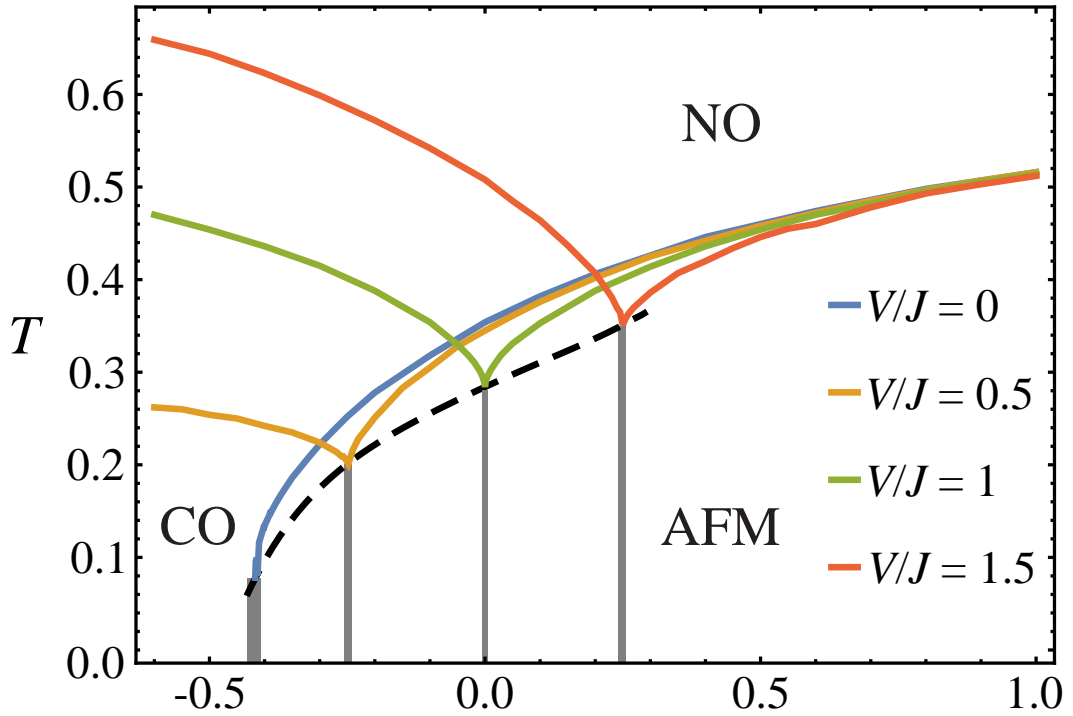


Рисунок 4.12 — Температурные фазовые диаграммы в зависимости от  $\Delta$ , полученные для двумерной решётки размером  $64 \times 64$  узлов при  $n = 0$ . Серыми точками обозначено положение точки фрустрации  $\Delta$ . Серые вертикальные полосы соответствуют областям вырождения основного состояния для каждого соотношения  $V/J$

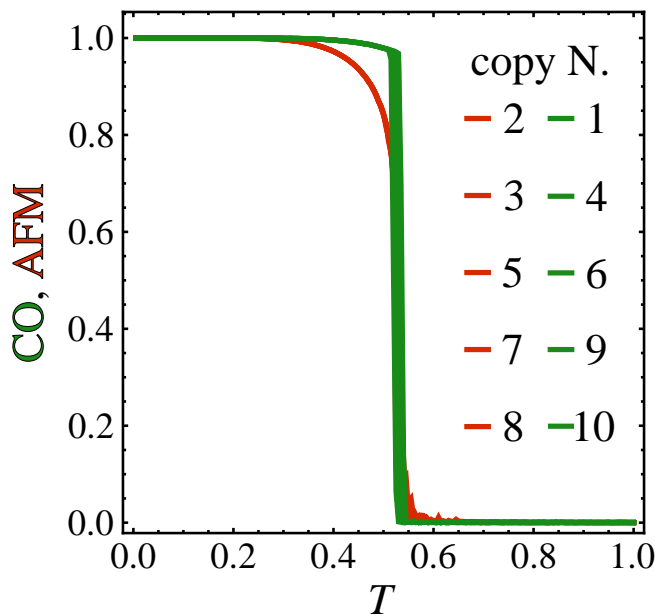


Рисунок 4.13 — Температурные зависимости CO и AFM параметров порядка для 10 разных копий системы при  $L = 128$ ,  $V/J = 4$ ,  $\Delta = 1.455$ ,  $n = 0$ . Часть копий переходит в AFM состояние, а часть — в CO

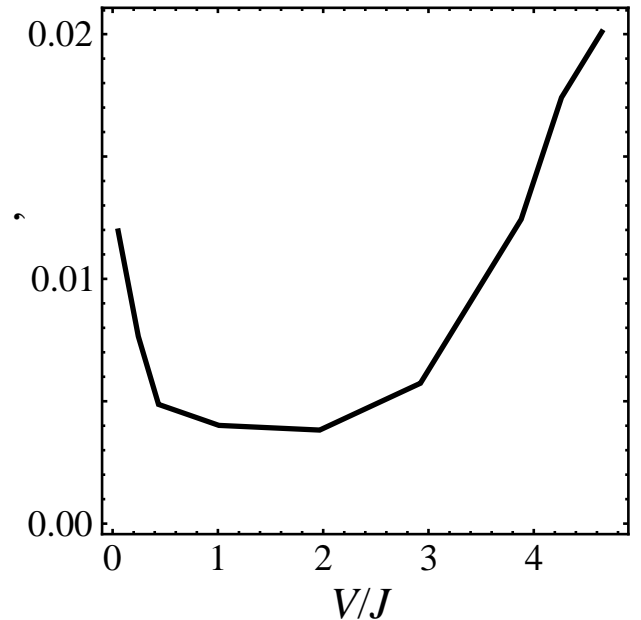


Рисунок 4.14 — Зависимость ширины области фрустрации от соотношения между параметрами  $V/J$

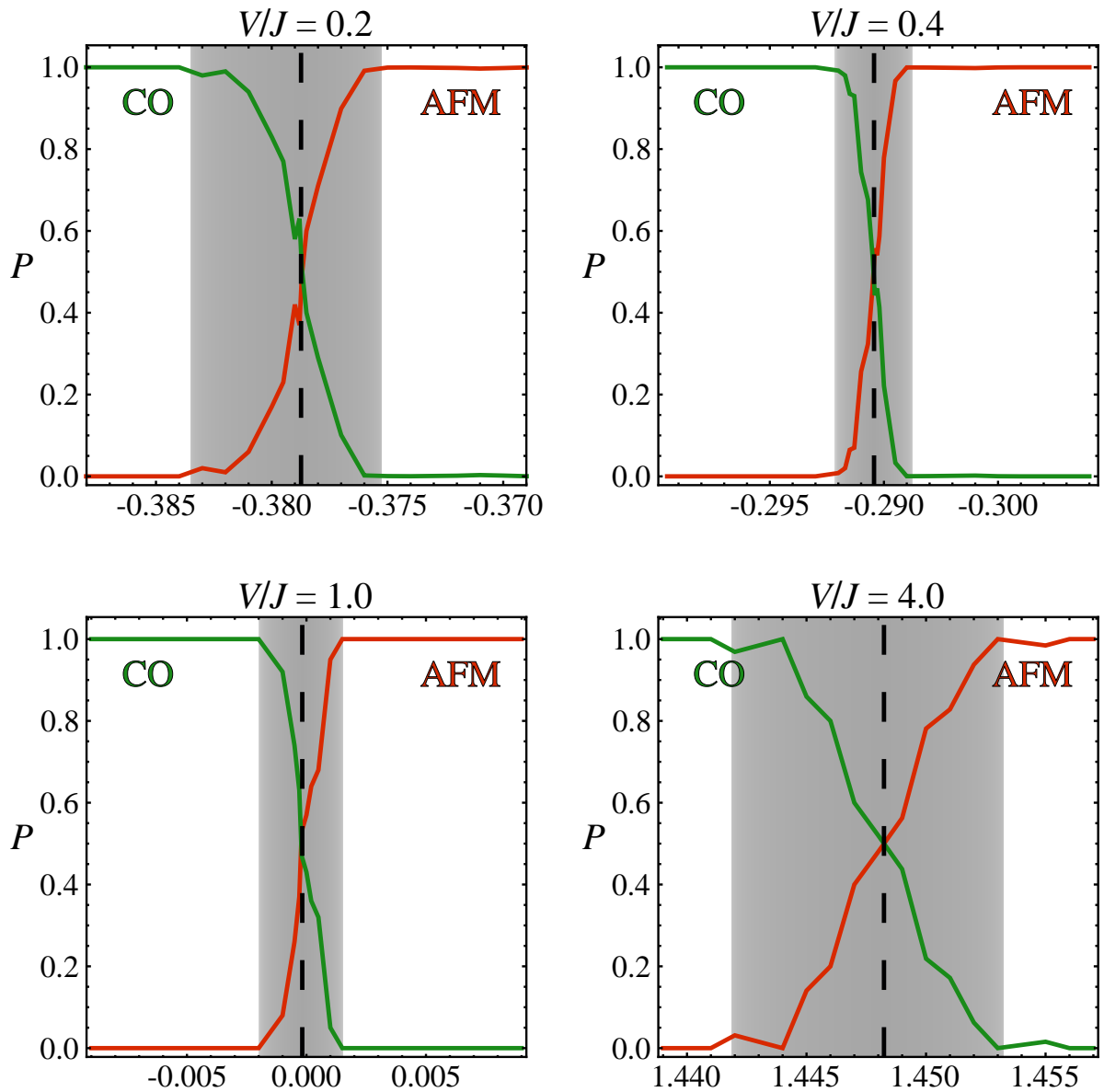


Рисунок 4.15 — Распределения вероятностей формирования AFM (красная кривая) и CO (зелёная кривая) типов упорядочений в основном состоянии вблизи точки фрустрации для разных соотношений  $V/J$ ,  $n = 0$ . Серым показаны области, в которых вероятность обнаружения обеих фаз в основном состоянии отлична от нуля

дополнительно проверены для  $L = 192$ . Вдали от точки фрустрации основное состояние системы строго определено: формируется либо CO, либо AFM-упорядочение. Однако по мере приближения к точке фрустрации энергии этих фаз становятся близки друг к другу, что позволяет в отдельных копиях системы наблюдать как CO, так и AFM фазу.

Таким образом, точкой фрустрации будем считать значение параметра  $\Delta$ , при котором обе фазы в основном состоянии имеют равные вероятности, что обозначено точками на Рисунке 4.12 и вертикальными штриховыми линиями на Рисунке 4.15). Областью фрустрации будем называть область вокруг точки фрустрации, в которой вероятности формирования обеих фаз отличны от нуля (серые области на Рисунках 4.12 и 4.15).

Ширина области фрустрации существенно зависит от соотношения между параметрами  $V$  и  $J$  (см. Рисунок 4.14). Так, при приближении к границе между предельными случаями сильного и слабого спинового обмена  $V/J \sim 1$ , ширина области вырождения основного состояния достигает минимума и не превышает  $0.005\Delta$ . При удалении от промежуточной точки, в которой оба параметра равны, ширина области фрустрации увеличивается. В случае, когда  $V/J = 0$ , ширина области фрустрации составляет примерно  $0.012\Delta$ , тогда как при  $V/J = 10$  основное состояние системы вырождается в области шириной около  $0.8\Delta$ .

## 4.5 Возвратные переходы и переходы типа порядок-порядок

В случае слабого спинового обмена допирование примесей вблизи границы между зарядовой РМ-СО и магнитной FR-(A)FM фазами приводит к особенностям формирования упорядоченного состояния при конечных температурах. Полная диаграмма возможных фазовых состояний, учитывающая высокотемпературные состояния, представлена на Рисунке 4.16. Данная диаграмма имеет вид такой же, как диаграмма основного состояния на Рисунке 4.11(б) за исключением трёх областей, обозначенных цифрами в рамках. В данных областях происходит смена типа упорядочения во время понижения температуры, т.е. переходы типа порядок-порядок.

Для каждой из областей характерен специфический тип смены упорядочения. Данный эффект подробно иллюстрируется на Рисунках 4.17, 4.18 и 4.19, где представлены температурные фазовые диаграммы для значений  $n = 0.1$ ,  $n = 0.15$  и  $n = 0.225$  соответственно. Эти диаграммы соответствуют горизонтальным линиям в областях 1, 2 и 3 на Рисунке 4.16.

Справа от температурных фазовых диаграмм представлены температурные зависимости СО и AFM параметров порядка для определённого значения  $\Delta$ , соответствующего вертикальной пунктирной линии. Точки, обозначенные буквами на этой вертикальной линии, указывают на места, где представлены мгновенные снимки фрагментов решетки размером  $16 \times 16$  узлов. Эти снимки наглядно демонстрируют изменение состояния с одного типа упорядочения на другое при переходах типа порядок-порядок.

Температурная фазовая диаграмма для  $n = 0.1$  вблизи фрустрации (см. Рисунок 4.17) отличается наличием области, в которой происходят два последовательных ФП. Справа от диаграммы изображена температурная зависимость СО и AFM параметров порядка, полученная для  $\Delta = 1.495$ . Сначала с понижением температуры наблюдается ФП из неупорядоченного состояния (NO) в фазу FR-AFM, затем, при дальнейшем снижении температуры, происходит второй ФП типа порядок-порядок, в результате которого FR-AFM упорядочение сменяется на РМ-СО. В точках  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$  были сделаны мгновенные снимки решетки; фрагменты размером  $16 \times 16$  узлов представлены справа.

Первый ФП парамагнетик-антиферромагнетик является непрерывным переходом II рода, тогда как переход типа порядок-порядок в зарядовое упорядочение является ФП I рода, о чём явно можно судить по температурным зависимостям термодинамических величин.

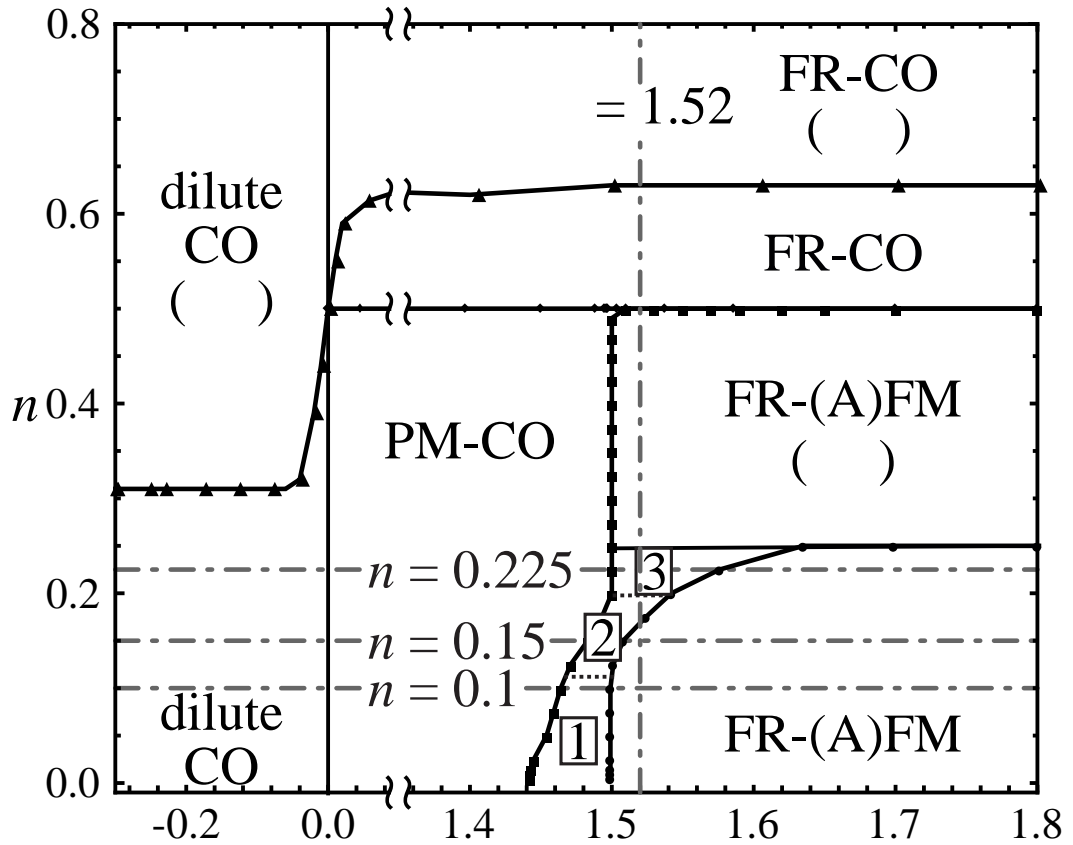


Рисунок 4.16 — Диаграмма возможных фазовых состояний для  $V = 1$ ,  $J = 0.25$ . Вблизи точки фрустрации  $\Delta^* = 2(V - J) = 1.5$  существуют области 1, 2 и 3, в которых наблюдается смена типов упорядочений при понижении температуры. Горизонтальные пунктирные линии соответствуют температурным фазовым диаграммам, изображенным на Рисунках 4.17, 4.18, 4.19 ниже. Вертикальная пунктирной линии соответствует зависимостям структурных факторов от плотности заряда  $n$ , изображённым на Рисунке 4.20 ниже

Об этом свидетельствуют резкие скачки параметров порядка и энергии, наличие зародышей PM-CO фазы вблизи критической точки. Данный вывод также подтверждается методами гистограммного анализа данных и вычисления кумулянтов Биндера. Смена типа упорядочения наблюдается при значении  $\Delta \approx 1.48$  и продолжается вплоть до точки фрустрации  $\Delta = 1.5$  с постепенным уменьшением температуры перехода типа порядок-порядок.

В промежуточной области 2 (“перемычка”) Рисунка 4.16 такая смена упорядочений происходит дважды при понижении температуры. Это изображено на Рисунке 4.18, где построена температурная фазовая диаграмма для  $n = 0.15$  вблизи области фрустрации. Справа от диаграммы изображена температурная зависимость CO и AFM параметров порядка, построенная для  $\Delta = 1.505$ . Сначала происходит магнитный ФП в FR-AFM состояние, затем смена на зарядовое упорядочение типа PM-CO, а при низких температурах происходит возвратный ФП типа порядок-порядок, когда система вновь переходит в упорядоченное FR-AFM состояние. Таким образом, происходят три последовательных ФП.

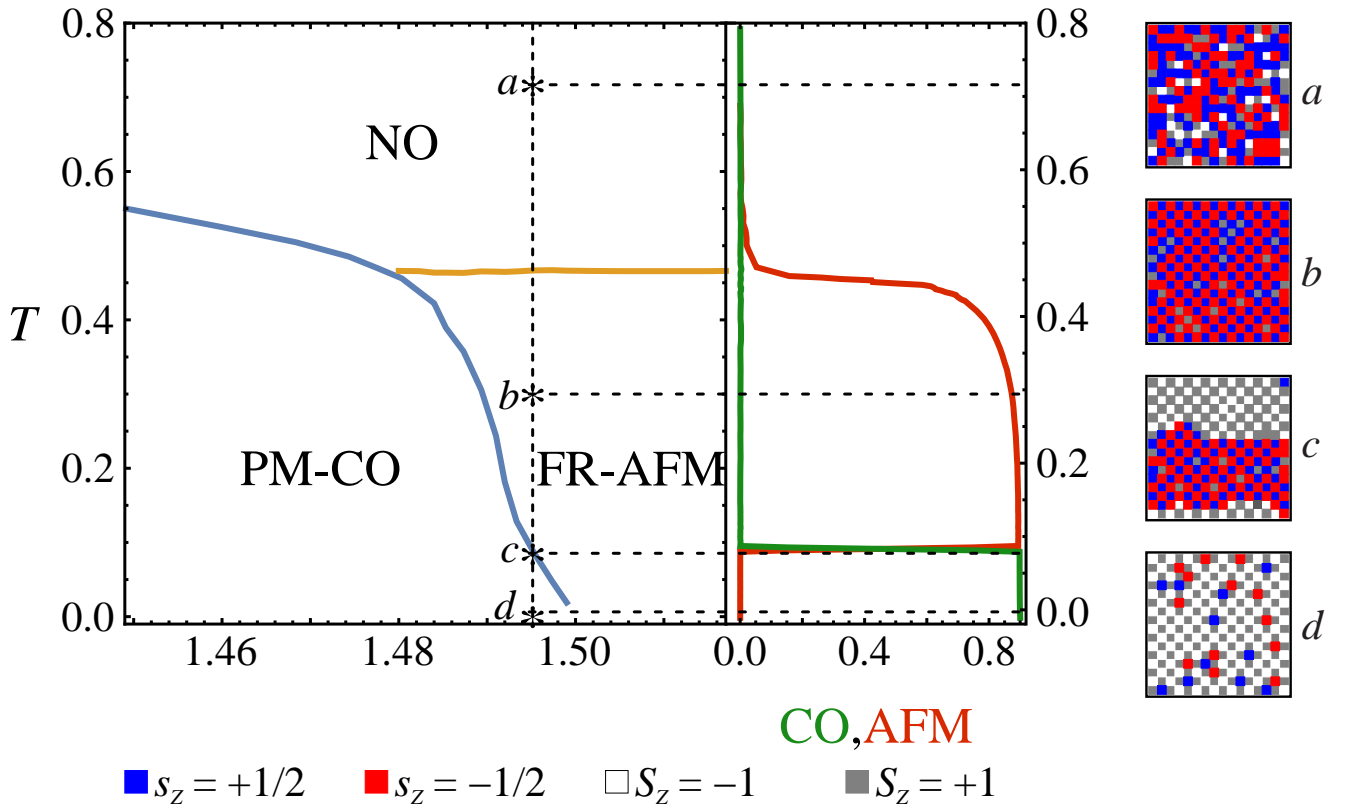


Рисунок 4.17 — Температурная фазовая диаграмма для  $n = 0.1$ ,  $V = 1$ ,  $J = 0.25$  вблизи точки фрустрации. При понижении температуры наблюдается второй ФП, сопровождающийся сменой FR-AFM упорядочения на PM-CO. Во вставке справа изображена температурная зависимость CO и AFM параметров порядка для  $\Delta = 1.495$ . Справа изображены снимки фрагментов решетки размером  $16 \times 16$ , полученные при температурах, соответствующих точкам  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$  на вертикальной линии температурной диаграммы

В области 3 Рисунок 4.16 также наблюдается смена типов упорядочения, однако в данном случае реализуется симметричный сценарий, когда PM-CO сменяется на FR-AFM. На Рисунке 4.19 изображена температурная фазовая диаграмма вблизи фрустрации системы для  $n = 0.225$ . В данном случае при  $1.5 < \Delta \lesssim 1.545$  происходят два последовательных ФП: магнитный переход NO—FR-AFM и низкотемпературный переход типа порядок-порядок FR-AFM—PM-CO.

На Рисунке 4.20 представлена зависимость максимальных значений зарядового и спинового структурных факторов в точке  $(\pi, \pi)$  от плотности заряда  $n$ . Этот график соответствует вертикальной линии  $\Delta = 1.52$  на диаграмме 4.16. Справа от Рисунка представлены фрагменты решетки размерами  $16 \times 16$  узлов, полученные в точках  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$  графика. Величина максимума спинового (зарядового) структурного фактора в точке  $(\pi, \pi)$  позволяет судить о наличии AFM (CO) упорядочения, а также установить границу между дальним и ближним порядком. В данном случае эта граница определялась по величине структурного фактора, равной 0.1.

Стоит отметить, что максимальное значение структурного фактора может достигаться не в основном состоянии, а при конечных температурах в результате смены типов упорядочения. Таким образом, анализируя максимум структурного фактора, мы можем опре-

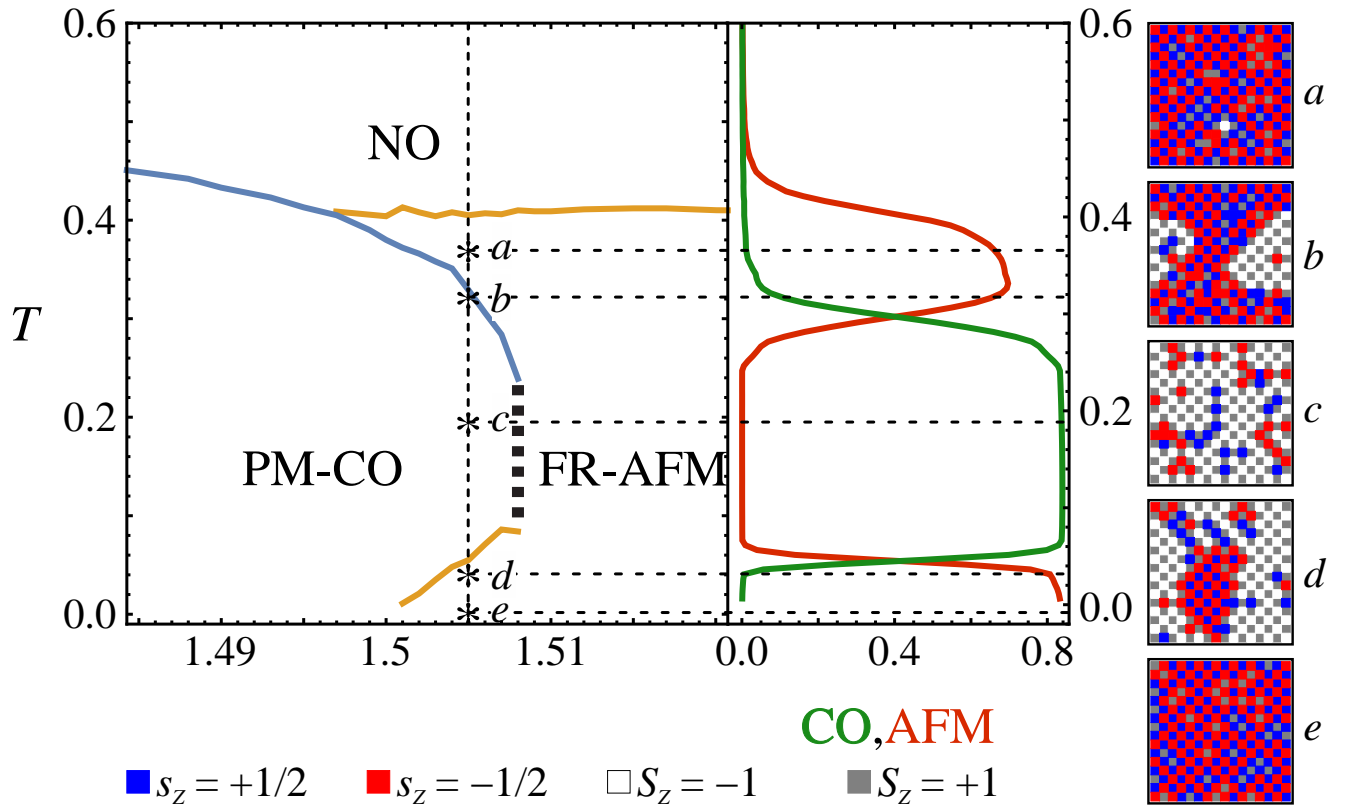


Рисунок 4.18 — Температурная фазовая диаграмма для  $n = 0.15$ ,  $V = 1$ ,  $J = 0.25$  вблизи точки фрустрации. Наблюдается три последовательных ФП и двойная смена типа упорядочения при понижении температуры, т.е. возвратный ФП из PM-CO в FR-AFM. Во вставке справа изображена температурная зависимость CO и AFM параметров порядка для  $\Delta = 1.505$ . Справа изображены снимки фрагментов решетки размером  $16 \times 16$ , полученные при температурах, соответствующих точкам  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$  и  $e$  температурной диаграммы

делить область, в которой оба типа упорядочения сосуществовали и взаимно сменяли друг друга при различных температурах.

Как показано на Рисунке 4.20, при малых значениях  $n$  в системе формируется дальний FR-AFM порядок. С увеличением  $n$  наблюдается “сосуществование” зарядового и антиферромагнитного упорядочений (области 2 и 3). В этих областях типы упорядочения сменяют друг друга при понижении температуры, как было описано выше.

Однако при значении  $n \gtrsim 0.33$  смены типов упорядочений перестают наблюдаться, а магнитная фаза оказывается сильно разбавленной. В этом случае можно говорить лишь о ближнем FR-AFM упорядочении. В данной магнитной фазе одна подрешетка целиком заполнена магнитными центрами разного типа, в то время как вторая содержит зарядовые центры одного типа, которые разбавлены небольшим количеством магнитных центров. Таким образом, фаза представляется как зарядовый порядок, дополненный ближним AFM порядком.

Условие сохранения плотности заряда (1.2) формально соответствует наличию внешнего поля, действующего на псевдоспиновую подсистему. В условиях слабого обмена при больших значениях  $n$  зарядовое упорядочение направлено на минимизацию энергии заряд-зарядовых корреляций. В этом смысле зарядовое упорядочение индуцируется условием постоянства заряда. При любой величине локальных корреляций  $\Delta$  в системе возникают



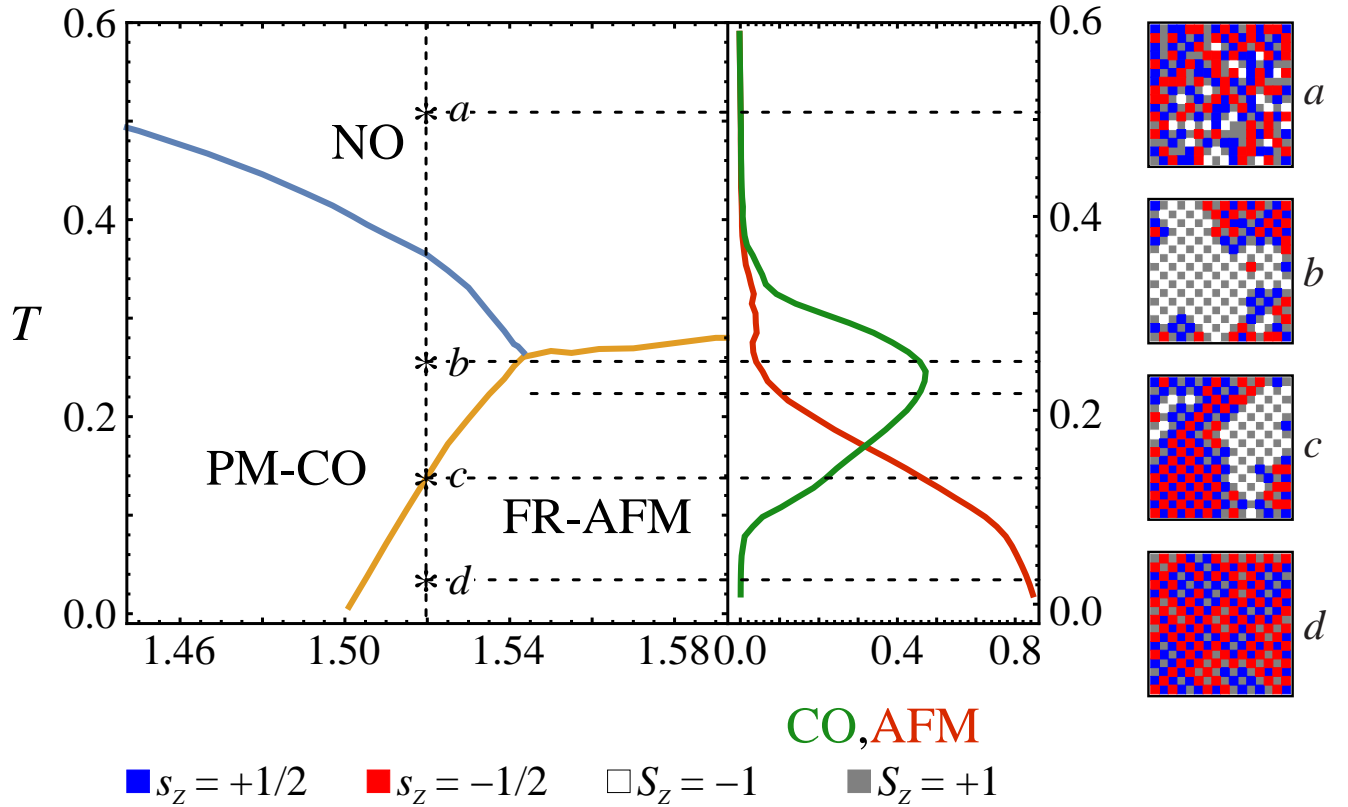


Рисунок 4.19 — Температурная фазовая диаграмма для  $n = 0.225$ ,  $V = 1$ ,  $J = 0.25$  вблизи точки фрустрации. При понижении температуры наблюдается второй ФП из PM-CO в AFM фазу. Во вставке справа изображена температурная зависимость CO и AFM параметров порядка для  $\Delta = 1.52$ . Справа изображены снимки фрагментов решетки размером  $16 \times 16$  узлов, полученные при температурах, соответствующих точкам  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$  графика

зарядовые центры, обусловленные значительным количеством заряженных примесей. Фаза FR-AFM сохраняет ближний порядок вплоть до значений  $n = 0.5$ , при этом для больших  $n$  величина пика спинового структурного фактора в точке  $(\pi, \pi)$  может не превышать 0.002. Тем не менее, даже в этих условиях слабый ближний магнитный порядок продолжает присутствовать.

В диапазоне  $0.5 \leq n \lesssim 0.66$  в основном состоянии наблюдается формирование разбавленного зарядового упорядочения FR-CO. С увеличением  $n$  зарядовый порядок становится ближним, поскольку он подвержен значительному влиянию разбавляющих заряженных примесей.

Смена типов упорядочения при конечных температурах обусловлена сложным взаимодействием нескольких факторов. В условиях слабого спинового обмена AFM подсистема не способствует фазовому расслоению, возникающему при разбавлении системой заряженными примесями. При этом значительная плотность зарядовых примесей функционирует как внешнее “псевдоспиновое” поле, способствующее возникновению зарядового упорядочения.

Кроме того, в условиях слабого обмена вблизи точки фрустрации основное состояние оказывается вырожденным по энергии для двух различных типов упорядочения: зарядового и антиферромагнитного. Это приводит к тому, что при конечных температурах вблизи

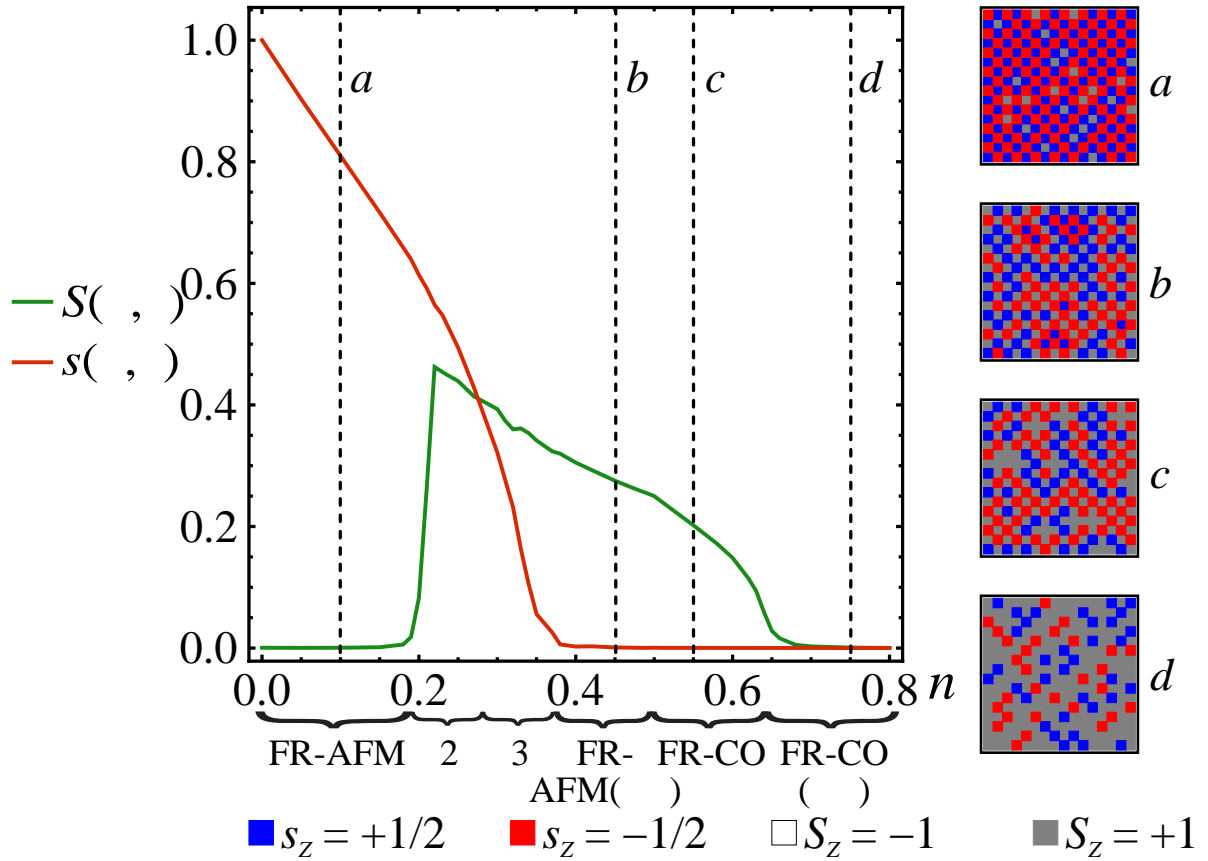


Рисунок 4.20 — Зависимость максимумов зарядового и спинового структурных факторов ( $S(\mathbf{q})$  и  $s(\mathbf{q})$ , соответственно) в точке  $(\pi, \pi)$  от плотности заряда  $n$  для  $\Delta = 1.52$ ,  $V = 1$ ,  $J = 0.25$ . Справа изображены снимки фрагментов решетки  $16 \times 16$ , полученные в основном состоянии в точках  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$  графика

точки фрустрации могут проявляться упорядочения, которые не соответствуют основному состоянию с минимальной энергией при температуре  $T = 0$ .

## 4.6 Особенности критического поведения

Наличие фрустраций в системе зачастую приводит к новым особенностям критического поведения, таким как ФП I рода, изменение классов универсальности, неуниверсальное критическое поведение. Исследование критического поведения в таких системах сопряжено с серьезными техническими трудностями, в частности, связанными с шероховатостью поверхности свободной энергии вблизи фрустрации и критической точки. Эти особенности могут приводить к фиксации системы в метастабильных состояниях и вызывать критическое замедление в окрестности температуры ФП. Наша ситуация не является исключением, и сложности с количественным определением критических характеристик становятся очевидными при использовании метода МК. Тем не менее, мы проведем качественный анализ

особенностей критического поведения, характерных для разбавленной модели Изинга на квадратной и простой кубической решётке.

### 4.6.1 Фазовые переходы первого рода вблизи точки фрустрации

В отличие от одномерных систем, в многомерных системах отсутствуют принципиальные ограничения на возможность реализации ФП. Для одномерной цепочки точное решение демонстрирует аналитический характер функций и отсутствие настоящего ФП; в то время как для систем больших размерностей мы можем лишь предполагать наличие ФП, поскольку моделирование осуществляется только для систем конечных размеров.

На Рисунке 4.21 представлены температурные зависимости теплоёмкости в полулогарифмическом масштабе и внутренней энергии для систем различных размерностей  $d$  при фиксированных параметрах  $V = 0.1$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$  вблизи точки фрустрации  $\Delta = d(V - J)$ . Заметим, что резкие особенности в зависимости удельной теплоёмкости, наряду со скачками внутренней энергии, позволяют сделать вывод о наличии ФП I рода как для 2D, так и для 3D решётки. По мере удаления от точки фрустрации  $\Delta = d(V - J)$  особенности становятся менее выраженными, что может свидетельствовать о переходе к ФП II рода и существовании некой трикритической точки. В многомерных системах такие особенности могут указывать на более сложные взаимодействия и критические явления, связанные с фрустрацией. В результате формируется дальнейшее упорядочение, в отличие от квазипорядка с конечной корреляционной длиной, как наблюдается при псевдопереходах в цепочках.

Определение положения трикритической точки сопряжено с большими техническими сложностями (даже для фрустрированной модели Изинга её положение до сих пор остаётся дискуссионным вопросом [64]). Учитывая это, мы качественно обозначили области существования ФП первого рода на фазовых диаграммах. Эти области выделены красной штриховкой на Рисунках 2.3, 2.4, 2.4 и напрямую сопоставимы с участками, в которых наблюдаются псевдопереходы «первого» и «второго рода» в одномерной цепочке (см. Главу 4).

Наличие ФП I рода подтверждается также и методом кумулянтов Биндера, и гистограммным анализом данных. В качестве примера на Рисунке 4.23 изображены гистограммы распределения энергии по шагам МК для  $V = 0.2$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$ , полученные вблизи критических точек для 2D решётки с  $L = 128$ . Биннинг данных был произведен по 1000 интервалов для  $2 \cdot 10^6$  шагов МК. При значении  $\Delta = -0.37$  гистограмма демонстрирует отчетливую двухпиковую структуру, каждый пик которой соответствует энергии той или иной фазы. Разделяющая два пика широкая область практически нулевой вероятности свидетельствует о наличии большого разрыва энергии, характерного для сильного ФП I рода. В целом, ФП I рода с такого типа гистограммами становятся различимыми уже при рассмотрении самих термодинамических величин, которые явно демонстрируют разрывы на Рисунке 4.21(б и в).

Справа на Рисунке 4.23 изображена энергетическая гистограмма с одним пиком при  $\Delta = -0.35$  (всего на 0.02 больше, чем для соседнего случая). В данном случае распределение

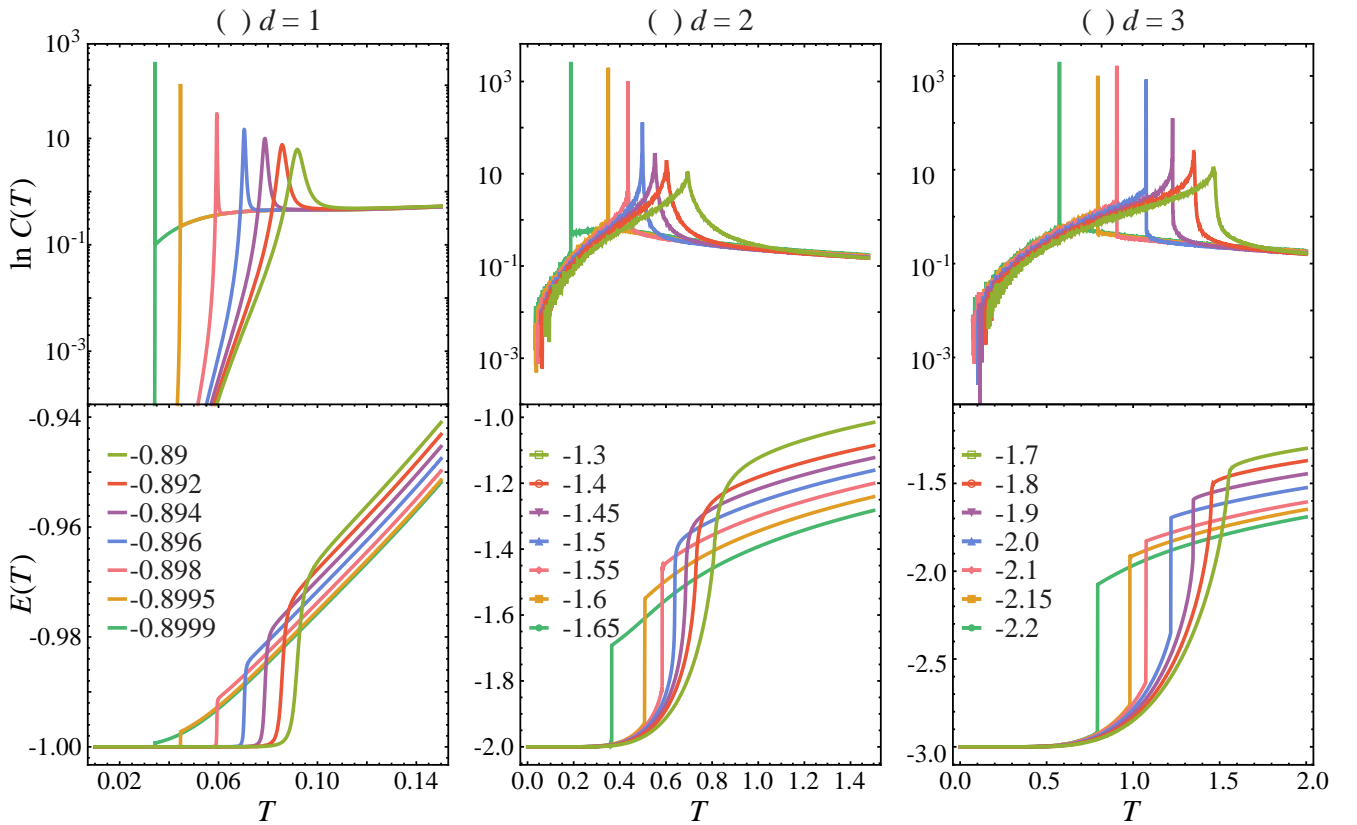


Рисунок 4.21 — Температурные зависимости удельной теплоёмкости в полулогарифмическом масштабе и внутренней энергии для систем разной пространственной размерности  $d$  при  $n = 0$  вблизи точки фрустрации  $\Delta = d(V - J)$ . Величины параметра  $\Delta$  указаны на легендах, остальные параметры фиксированы и равны  $V = 0.1$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$ . Размеры системы: (а)  $L = \infty$  для  $d = 1$ ; (б)  $L = 128$  для  $d = 2$ ; (в)  $L = 24$  для  $d = 3$ . В 1D случае наблюдаются псевдопереходы «первого рода», обсуждаемые в Главе 4. В 2D и 3D случае по резким особенностям удельной теплоёмкости, наряду со скачками внутренней энергии, можно судить о наличии ФП I рода

энергии по шагам МК уже имеет нормальный вид, где наиболее вероятное значение энергии соответствует энергии упорядоченной фазы. Изменение энергии системы происходит непрерывно, и имеет место быть ФП II рода.

Учитывая вырождение основного состояния вблизи точки фрустрации, которое обсуждалось в Разделе 4.4.2, может возникать ситуация с различными типами ФП. В соответствии с Рисунком 4.13 рассмотрим энергетические гистограммы для двух копий с различными упорядочениями. На Рисунке 4.24 представлены гистограммы распределения энергии по шагам МК, полученные для копии 1, упорядоченной зарядово, и для копии 2, упорядоченной антиферромагнитно. Гистограммы построены вблизи критической точки при  $T = 0.5255$ . Биннинг данных также был произведен по  $1000$  интервалов для  $2 \cdot 10^6$  шагов МК. На вставке представлено распределение энергии обеих копий по шагам МК.

Наличие двух пиков на гистограмме распределения энергии для копии 1 свидетельствует о том, что переход в СО-состояние является ФП I рода. Пик с большей энергией соответствует неупорядоченной фазе, тогда как низкоэнергетический пик указывает на СО

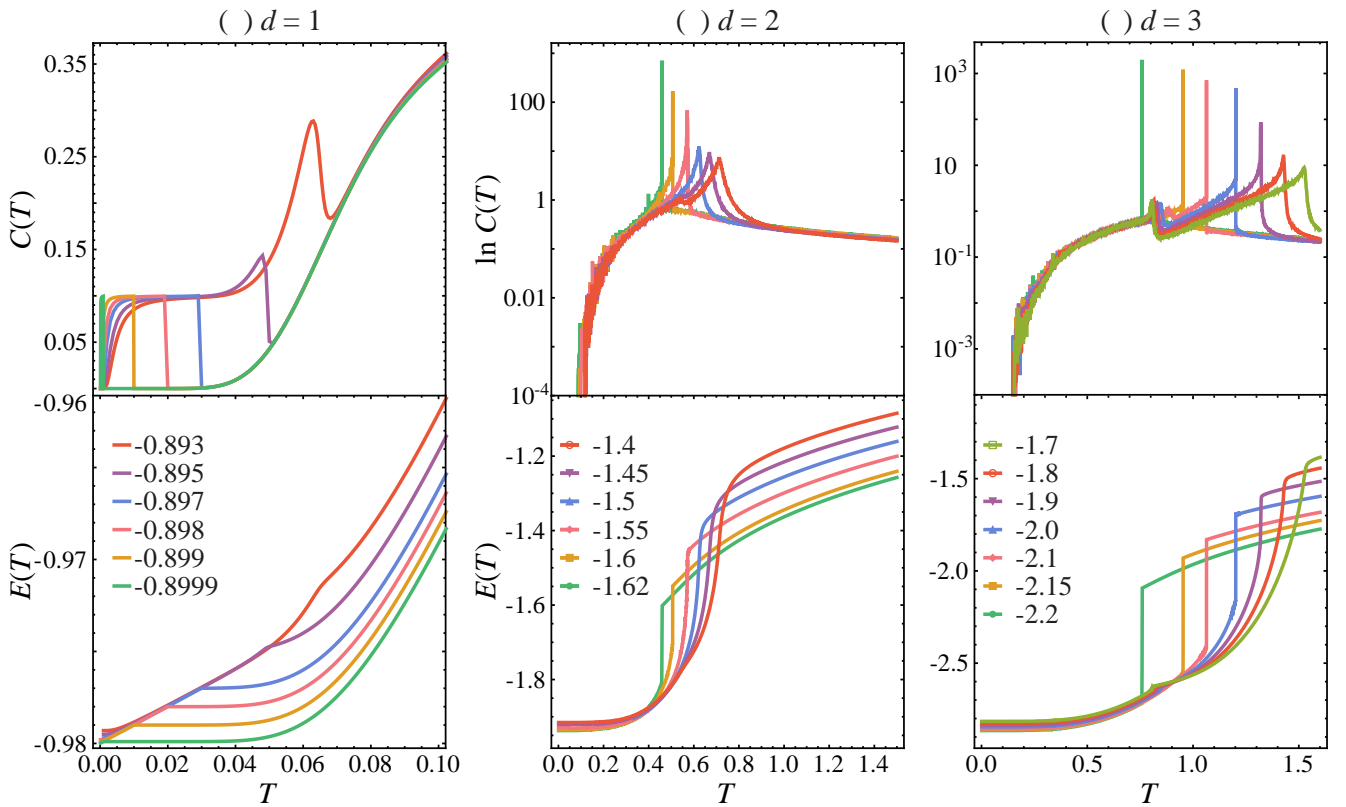


Рисунок 4.22 — Температурные зависимости удельной теплоёмкости в полулогарифмическом масштабе (б, в) и внутренней энергии для систем разной пространственной размерности  $d$  при  $n = 0.1$  вблизи точки фрустрации  $\Delta = d(V - J)$ . Величины параметра  $\Delta$  указаны на легендах, остальные параметры фиксированы и равны  $V = 0.1$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0.1$ . Размеры системы: (а)  $L = \infty$  для  $d = 1$ ; (б)  $L = 128$  для  $d = 2$ ; (в)  $L = 24$  для  $d = 3$ . В 1D случае наблюдаются псевдопереходы «второго рода», обсуждаемые в Главе 4. В 2D и 3D случае по резким особенностям удельной теплоёмкости, наряду со скачками внутренней энергии, можно судить о наличии ФП I рода

фазу. В то же время, единственный четко выраженный максимум на гистограмме для копии 2 указывает на ФП II рода в антиферромагнитное состояние.

#### 4.6.2 Метастабильные состояния и смещение точки фрустрации

Существование столь резких особенностей сопряжено с возникновением метастабильных состояний вблизи критической точки. Метастабильные состояния разделены со стабильными достаточно высоким энергетическим барьером, так что за конечное время численного расчёта настоящего термодинамического равновесия достичь не получится. Возникновение высоких потенциальных барьеров, препятствующих изменению состояния системы и наступлению равновесия, является частым явлением в системах с фрустрациями. Из-за конкуренции зарядового и магнитного порядков вблизи точки фрустрации зародыши энергетически более выгодной фазы могут не достичь критических размеров, и система за-

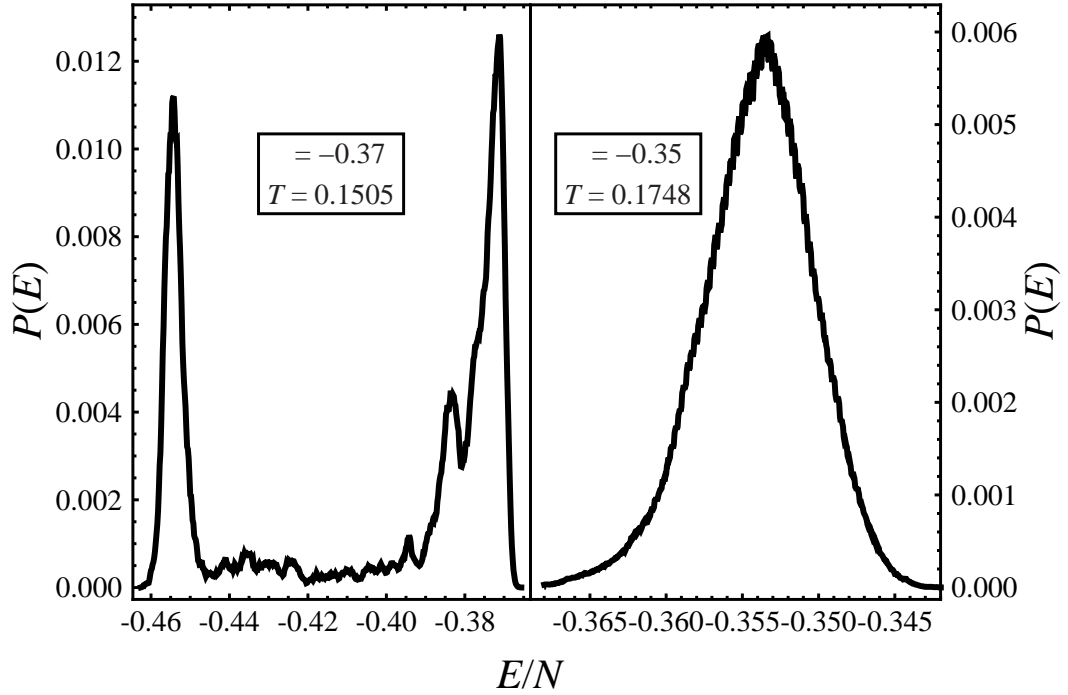


Рисунок 4.23 — Гистограммы распределения энергии для  $V = 0.2$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$ ,  $L = 128$ . Для  $\Delta = -0.37$  (слева) двухпиковая гистограмма указывает на ФП I рода. Однопиковая гауссова гистограмма для  $\Delta = -0.35$  (справа) указывает на ФП II рода

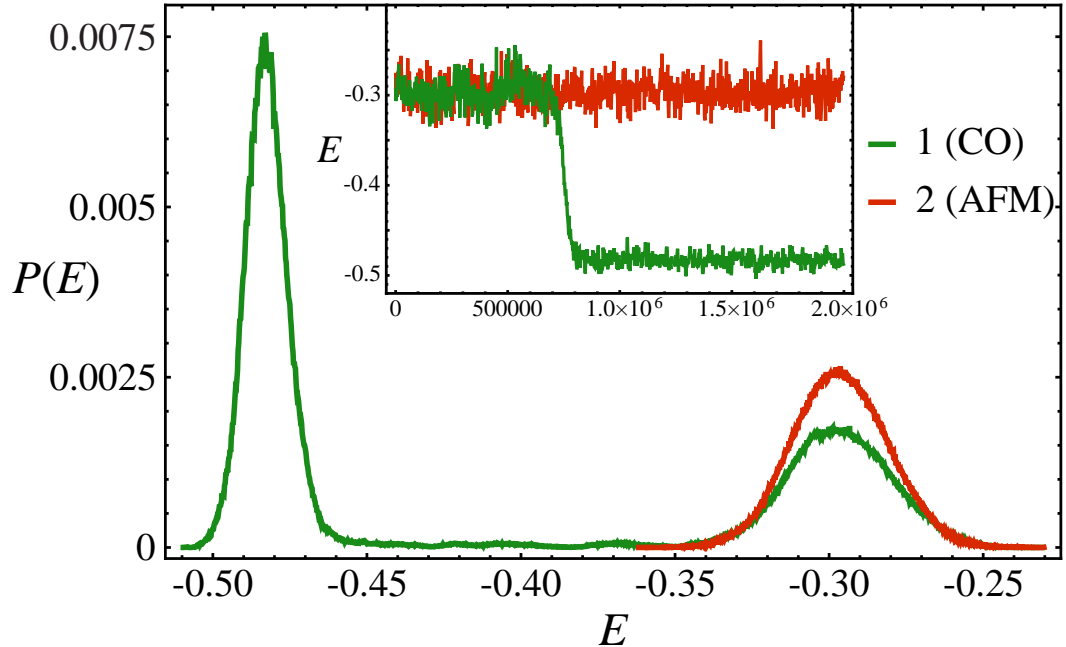


Рисунок 4.24 — Гистограммы распределения энергии для двух копий системы с параметрами  $L = 128$ ,  $V/J = 4$ ,  $\Delta = 1.455$  при температуре  $T = 0.5255$ . Температурные зависимости параметров порядка для этих копий изображены на Рисунке 4.13. Двухпиковая структура гистограммы для копии 1 (показана зелёным цветом) свидетельствует о ФП I рода в CO-состояние. Однопиковая гауссова гистограмма для копии 2 (показана красным цветом) свидетельствует о ФП II рода в AFM-состояние

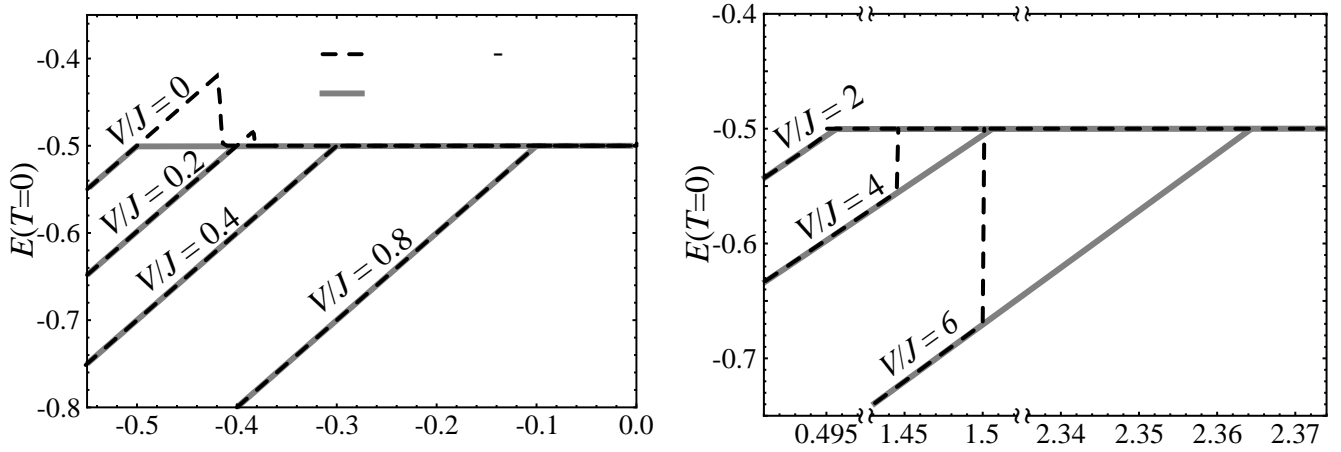


Рисунок 4.25 — Энергии основного состояния 2D решётки для разных соотношений  $V/J$  в зависимости от параметра  $\Delta$ : сравнение результата метода МК (чёрный пунктир) и точного решения (серая сплошная). Слева представлен случай сильного спинового обмена,  $J > V$ , справа изображён случай слабого обмена,  $J < V$ . Результаты расчетов энергии методом МК демонстрируют наличие “зубцов”, что указывает на более высокие значения энергии по сравнению с глобальным минимумом, определяемым точным решением. Эти “зубцы” свидетельствуют о том, что система застревает в метастабильных состояниях. В области  $J > V$  метастабильным состоянием является зарядовое состояние, тогда как в области  $J < V$  — магнитное состояние

остается в метастабильном состоянии, не способная выбраться из локального энергетического минимума из-за слишком малого шага в конфигурационном пространстве, осуществляемого используемым алгоритмом МК. Таким образом, рост центров образования фазы становится невыгодным с точки зрения поверхностной энергии, или же они не появляются вовсе. Чем более экстремально соотношение между  $V$  и  $J$ , тем сильнее проявляется застревание в метастабильных состояниях и шире область с ФП I рода.

На Рисунке 4.25 представлена зависимость энергии основного состояния от параметра  $\Delta$  для различных соотношений  $V/J$ . Данные были получены для двумерной решётки методом МК (чёрная пунктирная кривая) и с использованием точного решения, основанного на Таблице 3 (серая сплошная кривая). Кривая, полученная методом МК, демонстрирует наличие “зубцов”, что указывает на более высокие значения энергии по сравнению с глобальным минимумом, определяемым точным решением. Это свидетельствует о том, что система застревает в метастабильных состояниях, из которых она не способна выбраться с помощью алгоритма Метрополиса. В условиях сильного обмена ( $J > V$ ), на левом графике, метастабильным состоянием является СО, тогда как минимальная энергия наблюдается для АФМ-фазы. В то время как в условиях слабого обмена ( $J < V$ ), на правом графике, метастабильным состоянием становится АФМ.

В результате наблюдается смещение границы раздела между фазами СО и (А)ФМ, то есть точки фрустрации, относительно истинной границы. Это показано на фазовых диаграммах основного состояния, представленных на Рисунке 4.26. Чёрной пунктирной линией с точками показан результат, полученный методом МК, который не совпадает с серой кривой,



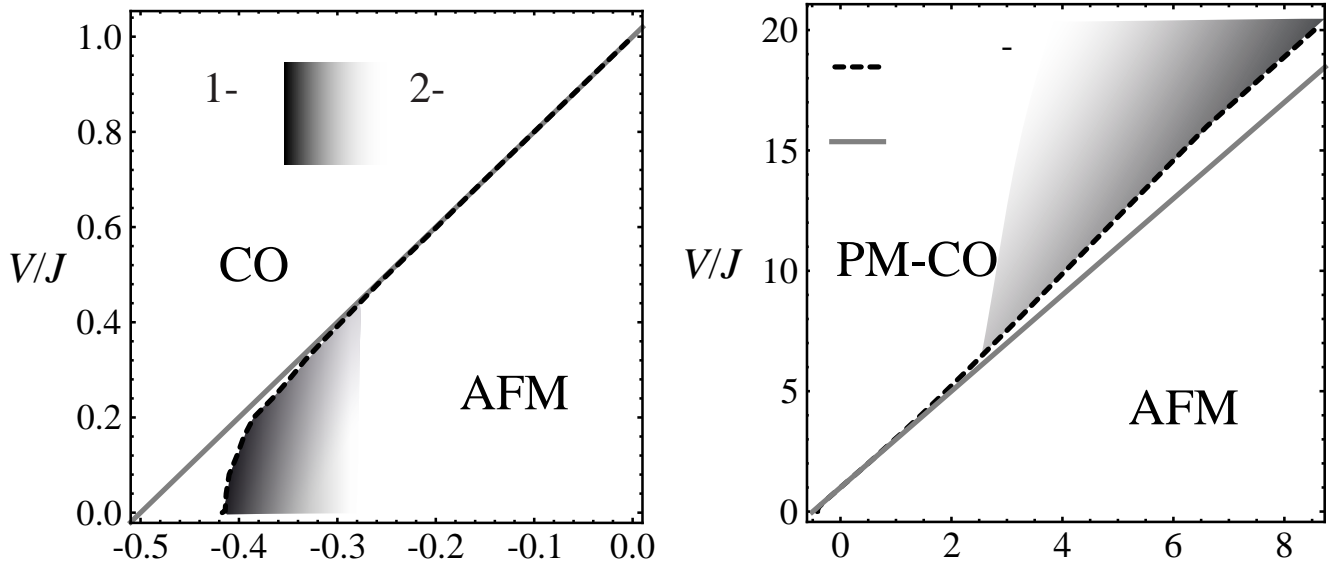


Рисунок 4.26 — Фазовые диаграммы основного состояния в переменных  $V/J-\Delta$  для  $n = 0$ : сравнение результата МК и точного решения. Слева представлен случай сильного спинового обмена,  $J > V$ , справа изображён случай слабого обмена,  $J < V$ . Вблизи области фрустрации для малых и больших отношений  $V/J$  система испытывает ФП I рода, обозначенный чёрным градиентом. В тех областях, где наблюдается расхождение между МК и точным решением, система оказывается в метастабильном состоянии. В области  $J > V$  метастабильным состоянием является зарядовое состояние, тогда как в области  $J < V$  — магнитное состояние

представляющей собой точную границу между фазами. Градиентом схематично обозначены области с различными типами ФП, черным цветом означает ФП I рода, тогда как белые области соответствуют ФП II рода. Ширина метастабильной области, как и ширина области ФП I рода, определяется отношением взаимодействий  $V$  и  $J$ . В условиях выраженного сильного и слабого спинового обменов эти области становятся наиболее широкими.

### 4.6.3 Неуниверсальность критических индексов

Для расчёта КИ и критических температур ФП II рода из неупорядоченного состояния была использован метод теории КРС в нулевом приближении. Ввиду сильного эффекта критического замедления, связанного с использованием метода МК с алгоритмом Метрополиса, расчёт КИ был выполнен с достаточно большими погрешностями, обозначенными планками на графиках ниже. Тем не менее, полученной точности достаточно, чтобы определить класс универсальности КИ и качественные особенности критического поведения. Критические температуры определялись с высокой точностью методом пересечений кумулянтов Биндера для соответствующих параметров порядка. Погрешности определения температур ФП не превышают размеров маркеров на графиках ниже.



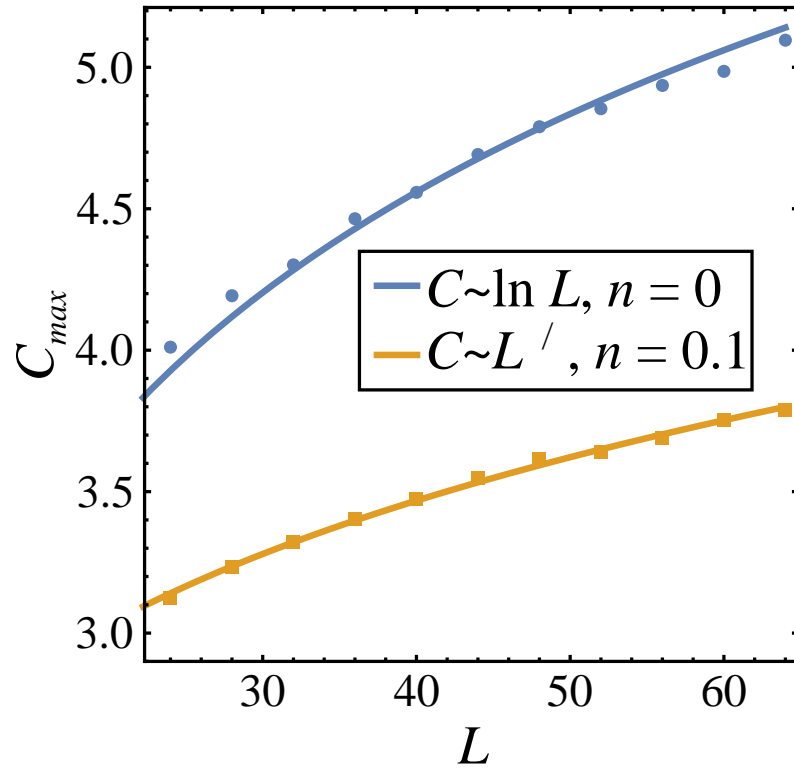


Рисунок 4.27 — Зависимость теплоёмкости в критической точке от размера системы  $L$  для  $V = 0.1$ ,  $J = 0.25$ ,  $\Delta = 0$ . Логарифмическое скейлинговое выражение для  $n = 0$  дало  $\alpha = 0 \pm 0.004$ , степенное для  $n = 0.1$  дало  $\alpha/\nu = 0.194 \pm 0.004$

На Рисунке 4.27 представлены зависимости удельной теплоёмкости в критической точке от размера решётки  $L$  для двух значений плотности заряда примесей  $n$ . В «чистой» системе, при  $n = 0$  (синяя зависимость), теплоёмкость возрастает медленнее, чем любая степенная зависимость с положительной степенью, т.е. аппроксимируется по логарифмическому закону (4.22) с меньшей погрешностью, что соответствует КИ  $\alpha = 0 \pm 0.004$ . При значении  $n = 0.1$  (оранжевая зависимость) теплоёмкость демонстрирует масштабирование в соответствии со степенным скейлинговым соотношением (4.19), что дало соотношение между КИ  $\alpha/\nu = 0.194 \pm 0.004$ .

Для определения КИ корреляционной длины использовались скейлинговые свойства величины  $V_2$  в критической точке. Как пример, на Рисунке 4.28 показана температурная зависимость величины  $V_2$  для разных  $L$  при  $\Delta = 100$ ,  $V = 0$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$ . Во вставке изображена зависимость  $V_2$  в критической точке от  $L$  в двойном логарифмическом масштабе. Тангенс угла наклона аппроксимирующей прямой дет значение КИ  $\nu = 0.998 \pm 0.003$ , что согласуется с точным значением  $\nu = 1$  для 2D модели Изинга. Далее значения  $\nu$ , полученные с помощью масштабирования величины  $V_2$  используются для определения всех оставшихся КИ. Расчеты КИ были выполнены для 100 копий 2D и 3D системы с ПГУ, суммарным числом шагов МК  $22 \cdot 10^6$  и линейными размерами решётки  $L = 32 - 72 : 4$  для  $d = 2$  и  $L = 8 - 36 : 4$  для  $d = 3$ .

Для качественного исследования влияния немагнитных примесей на критические свойства системы мы получили зависимости критических температур  $T_c$ , КИ удельной теплоёмкости  $\alpha$  и корреляционной длины  $\nu$  от плотности заряда примесей  $n$ . Эти зависимости

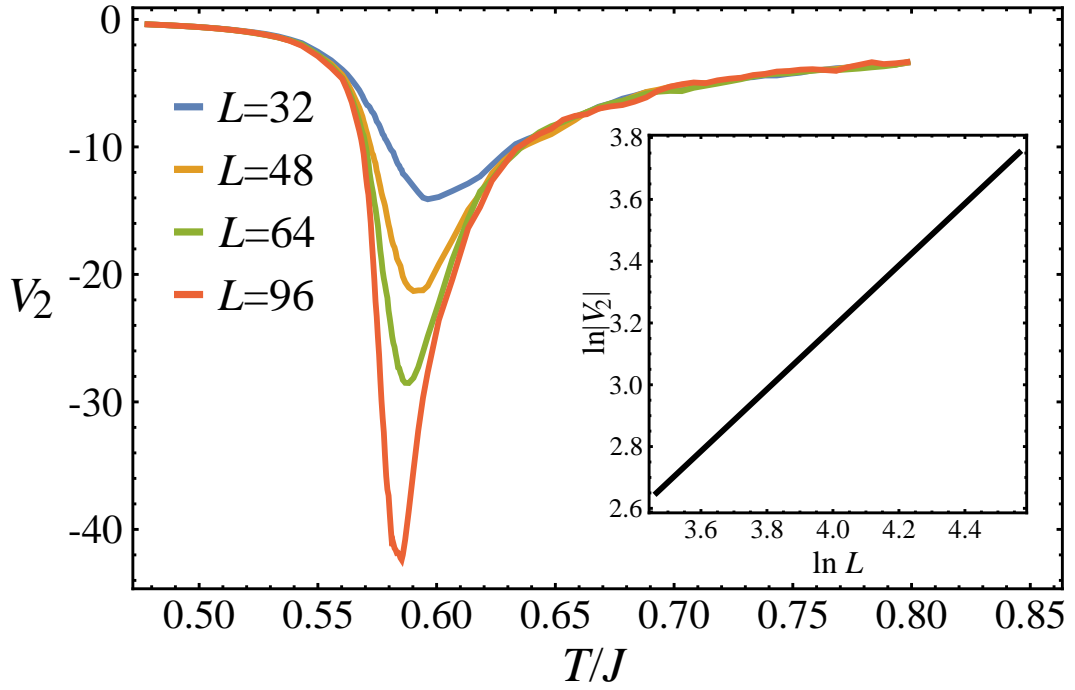


Рисунок 4.28 — Температурная зависимость величин  $V_2$  для разных размеров решетки  $L$  при  $\Delta = 100$ ,  $V = 0$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$ . Во вставке: двойная логарифмическая зависимость величины  $V_2$  в критической точке от размера решетки  $L$ . Линейная аппроксимация дала значения КИ  $\nu = 0.998 \pm 0.003$

представлены на Рисунке 4.29 для 2D решётки,  $J = 0.25$ , и а)  $V = 0.3$ ,  $\Delta = -0.5$ , что соответствует dilute CO фазе; б)  $V = 0.1$ ,  $\Delta = 0$ , что соответствует dilute AFM фазе. Для 3D решётки исследования выполнены для  $V = 0.1$ ,  $J = 0.25$  и представлены на Рисунке 4.30 для а) dilute CO,  $\Delta = -1$ ; б) dilute AFM,  $\Delta = 0$ . Темно-серый цвет на фоне графиков соответствует классу универсальности модели Изинга, светло-серый – неуниверсальному критическому поведению. Звёздочками на осях ординат отмечены известные оценки КИ для модели Изинга.

Для малых величин  $n$  КИ не зависят от параметров модели и принимают значения, характерные для класса универсальности модели Изинга:  $\alpha = 0$ ,  $\nu = 1$  для 2D модели Изинга и  $\alpha = 0.110(2)$ ,  $\nu = 0.630(1)$  для 3D модели Изинга [168]. Соответствующие значения обозначены на оси ординат черными звёздочками.

Класс универсальности Изинга характерен как для зарядовой, так и для магнитной фаз системы. Область, где наблюдается данный класс универсальности, схематично обозначена тёмно-серым цветом на Рисунках 4.29, 4.30. В 2D случае теплоёмкость при  $T = T_c$  возрастает медленнее, чем любая степенная функция с положительной степенью. В связи с этим необходимо применить логарифмическое скейлинговое соотношение (4.9), что соответствует значению  $\alpha = 0$ .

Для КИ корреляционной длины  $\nu$  было использовано степенное скейлинговое соотношение (4.25). В «чистом» случае,  $n = 0$ , в 2D системе для AFM фазы были получены величины КИ  $\alpha = 0 \pm 0.004$  и  $\nu = 1.008 \pm 0.012$ . Для CO фазы (Рисунок 4.29,б) результаты составили  $\alpha = 0 \pm 0.006$ ,  $\nu = 0.992 \pm 0.010$  и  $\Delta = -0.5$ ,  $V = 0.3$ . Однако, начиная с некоторого значения  $n$ , логарифмическая зависимость перестаёт соответствовать данным, и КИ тепло-

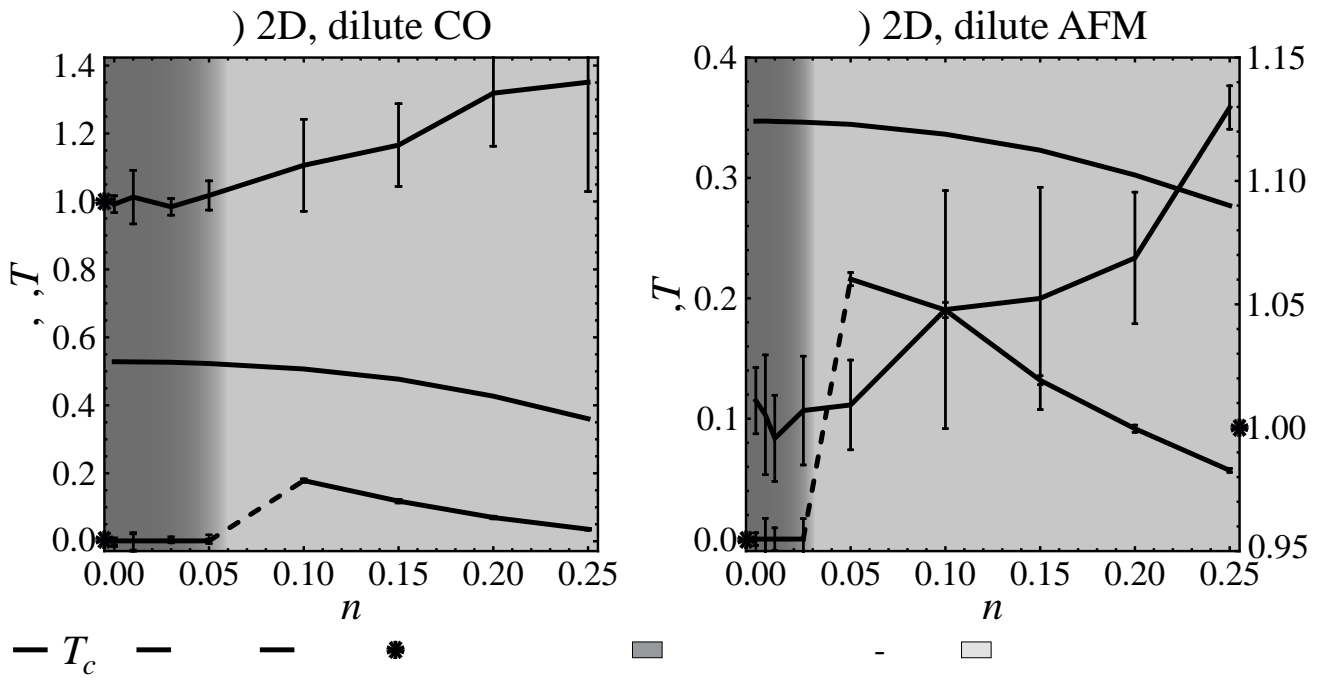


Рисунок 4.29 — Зависимости КИ теплоемкости  $\alpha$ , корреляционной длины  $\nu$  и температуры ФП  $T_c$  от плотности заряда  $n$  для 2D решётки,  $J = 0.25$  и а)  $\Delta = -0.5$ ,  $V = 0.3$ ; б)  $\Delta = 0$ ,  $V = 0.1$

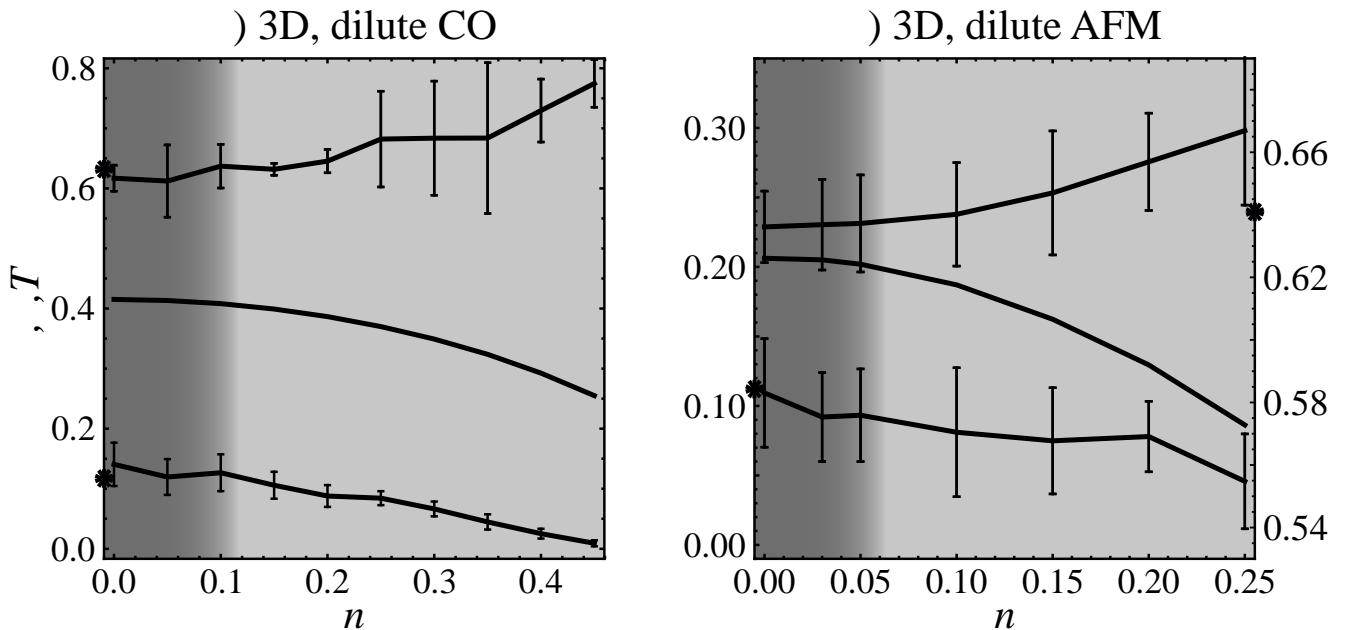


Рисунок 4.30 — Зависимости КИ теплоемкости  $\alpha$ , корреляционной длины  $\nu$  и температуры ФП  $T_c$  от плотности заряда  $n$  для 3D решётки,  $V = 0.1$ ,  $J = 0.25$  и а)  $\Delta = -1$ ; б)  $\Delta = 0$

ёмкости определяется по степенному закону (4.13). КИ начинают монотонно зависеть от от параметров системы, что свидетельствует о нарушении класса универсальности Изинга и о неуниверсальном режиме критического поведения.

Аналогичное критическое поведение наблюдается и в 3D случае. Используя скейлинговые соотношения (4.13) и (4.25), в «чистом» случае были получены значения  $\alpha = 0.109 \pm 0.040$ ,  $\nu = 0.636 \pm 0.011$  для AFM фазы, и  $\alpha = 0.135 \pm 0.022$ ,  $\nu = 0.631 \pm 0.048$  для CO фазы.

Далее, с увеличением  $n$ , КИ теплоёмкости  $\alpha$  начинает монотонно уменьшаться, в то время как КИ корреляционной длины  $\gamma$  увеличивается. Этот кроссовер визуально представлен различными оттенками серого на Рисунках 4.29 и 4.30. При больших  $n$  ФП в упорядоченное состояние сильно размывается из-за подавления дальних корреляций немагнитными примесями, что затрудняет идентификацию критической точки и расчёт КИ.

Таким образом, присутствие беспорядка в виде заряженных примесей приводит к кроссоверу между классом универсальности модели Изинга и неуниверсальным критическим поведением. Это объясняется тем, что взаимодействующие примеси вызывают рассеяние критических флуктуаций, отвечающих за фазовый переход, что согласуется с рядом работ, посвящённых критическому поведению в системах с беспорядком [10; 16–18; 74].

## 4.7 Выводы к Главе 4

В настоящей главе проведено детальное исследование фазовых, критических, магнитных и фрустрированных свойств разбавленного изинговского магнетика на двумерной квадратной и простой кубической решётках. Моделирование осуществлялось с использованием модифицированного алгоритма Метрополиса-Кавасаки, который позволяет сохранять полный заряд системы.

1. Свойства основного состояния систем в различных пространственных размерностях демонстрируют качественное сходство, в отличие от термических свойств. Разбавленная магнитная фаза с фазовым расслоением в системах больших размерностей формируется путём двух последовательных ФП: сперва из неупорядоченной парамагнитной фазы система переходит в магнитное состояние, представляющее собой (A)FM порядок, разбавленный случайно распределёнными примесями плотностью заряда  $n$ . Затем, при более низких температурах происходит второй переход, уже сопровождающийся фазовым расслоением: заряженные состояния конденсируются в одну большую каплю или страйп.

2. При увеличении плотности заряженных примесей первый переход в магнитное состояние подавляется, и формируются различные конфигурации фазового расслоения: зарядовая капля, страйп, и AFM капля. С учётом сильного разбавления результат метода МК будет включать в себя области с ближним порядком. Близки точки фрустрации, на границе раздела зарядовой и магнитной фаз, фазовое расслоение способно сохранять в себе ближний шахматный зарядовый порядок.

3. Вблизи точки фрустрации существует область, в которой вероятности формирования и зарядовой, и антиферромагнитной фаз отличны от нуля. Таким образом, одна и та же система при одинаковых условиях способна упорядочиться разным образом, т.е. основное состояние системы оказывается вырожденным не только в точке, но и в определенной

области фрустрации.

4. В разбавленной системе конкуренция зарядового и магнитного упорядочений приводит к формированию необычных фазовых состояний при конечных температурах. Вблизи точки фрустрации были обнаружены три области, в которых при конечных температурах происходит смена типов упорядочений, т.е. переходы типа порядок-порядок, а также возвратные ФП.

5. С помощью гистограммного анализа данных было обнаружено существование областей ФП I рода вблизи точки фрустрации. Качественно эти области совпадают с областями наблюдения псевдопереходов в разбавленной цепочке, что указывает на связь критических свойств систем разных размерностей. При этом алгоритм застревает в метастабильном состоянии вплоть до основного состояния, что указывает на явный недостаток используемого модифицированного алгоритма Кавасаки, и на необходимость разработки кластерного метода, позволяющего сохранять полный заряд.

6. С помощью теории КРС для ФП в упорядоченное состояние были рассчитаны КИ удельной теплоёмкости  $\alpha$  и корреляционной длины  $\nu$ . Класс универсальности Изинга обнаруживается вдали от точки фрустрации и при низких плотностях заряда примесей  $n$ . При увеличении плотности заряда немагнитных примесей происходит кроссовер к неуниверсальному критическому поведению: КИ начинают монотонно зависеть от параметра  $n$ .

Результаты, приведенные в этой главе диссертации, опубликованы в статьях [A1–A5]. По результатам расчётов МК было получено свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2023623747 “База расчётных данных двумерной спин-псевдоспиновой модели разбавленного магнетика с фрустрацией”.

## Заключение

В настоящей диссертации проведено детальное исследование фазовых состояний и критического поведения изинговского магнетика с подвижными взаимодействующими немагнитными примесями, а также конкуренцией зарядового и магнитного упорядочений. Объектом исследования выступала спин-псевдоспиновая модель этого магнетика, в которой в рамках  $S = 1$  псевдоспинового формализма введены немагнитные примеси с условием сохранения полного заряда в системе.

Исследование фазовых свойств включало в себя определение фазового состава системы, анализ структуры, основных свойств и классификацию фаз, а также построение фазовых диаграмм как для основного состояния, так и диаграмм при конечных температурах. Исследования критических свойств включали изучение псевдопереходов в одномерной цепочке и фазовых переходов в двумерных и трёхмерных системах, определение их рода, критических температур и критических индексов, а также класса универсальности системы. Особое внимание уделялось влиянию конкуренции двух типов упорядочений и наличия немагнитных примесей на физические свойства системы.

К основным выводам по проделанной работе можно отнести следующие положения:

1. Фазовые свойства в основном состоянии: обнаружено значительное разнообразие фаз основного состояния, большинство из которых являются фрустрированными с ненулевой остаточной энтропией. Рассчитаны энергии и параметры порядка, определена структура всех фаз. Фазовые диаграммы основного состояния имеют сложный вид, который качественно не зависит от пространственной размерности системы; их тип определяется степенью разбавления немагнитными примесями и величиной внешнего магнитного поля.
2. Точное решение разбавленной цепочки: разработан быстрый и высокоэффективный метод точного расчёта термодинамических свойств разбавленных спиновых цепочек в рамках большого канонического ансамбля, основанный на свойствах трансфер-матрицы системы. Выведены общие выражения для средних значений и корреляторов в базисе собственных векторов трансфер-матрицы, а также для основных термодинамических величин. Этот метод превосходит традиционные подходы по скорости и эффективности расчётов и может быть обобщён для применения к другим (квази)одномерным системам.
3. Отображение спиновых цепочек на марковские цепи: рассмотрено универсальное применение отображения спиновых цепочек на марковские цепи, которое позволяет получать аналитические выражения для остаточной энтропии различных фрустрированных фаз и на границах раздела фаз. Методика обеспечивает возможность определения равновесных свойств фаз, расчёта корреляционных функций и корреляционных длин, а также углублённого анализа структуры фрустрированных фаз, который представляет сложность для традиционного подхода. Классификация по

- типу марковской цепи показало два типа фрустрированных фаз, переходы между которыми можно осуществить с помощью включения магнитного поля.
4. В «чистой» цепочке наблюдаются псевдопереходы «первого рода» – особенности термодинамического поведения, напоминающие ФП между зарядовой и магнитной квазифазами. Энтропия и намагничённость демонстрируют скачки, напоминающие ФП первого рода, тогда как теплоёмкость и восприимчивость имеют острые пики и универсальные псевдокритические показатели  $\alpha = \gamma = 3$ ,  $\nu = 1$ , что напоминает критическое поведение при ФП второго рода.
  5. В разбавленной цепочке выявлен новый тип псевдопереходов «второго рода», напоминающие ФП второго рода с перегибами в температурных зависимостях энтропии и намагничённости, и резкими скачками в температурных зависимостях теплоёмкости и восприимчивости. Природа новых псевдопереходов связана с фазовым расслоением на магнитоупорядоченную фазу и зарядовую каплю. Применение феноменологического подхода в рамках построения Максвелла для описания фазового расслоения демонстрирует отличное согласование с точным решением.
  6. Комплексное влияние конкуренции зарядовых и магнитных упорядочений, а также наличия немагнитных примесей, проявляется во множестве необычных эффектов. Разбавленная магнитная фаза формируется путём двух последовательных фазовых переходов: первый представляет собой магнитный переход к (анти)ферромагнитному упорядочению, а второй – низкотемпературный переход, сопровождающийся фазовым расслоением с образованием зарядовой капли. Основное состояние системы оказывается вырожденным из-за конкуренции двух типов упорядочений в области фрустрации, а не в конкретной точке пространства параметров. Вблизи области фрустрации наблюдаются ФП типа «порядок-порядок» и возвратные переходы, что подчеркивает сложность поведения системы в этом диапазоне. Вблизи области фрустрации в системах больших размерностей наблюдаются сильно выраженные ФП первого рода, которые соотносятся с областями псевдопереходов в цепочке. Выявлен класс универсальности модели Изинга, который нарушается при увеличении плотности заряда в системе, что приводит к кроссоверу к неуниверсальному критическому поведению.

Полученные в диссертации результаты вносят вклад в расширение теоретических основ понимания поведения сложных магнитных систем, особенно в контексте фрустрации, анизотропии и беспорядка. Развитые в работе теоретические подходы к изучению фазовых и термодинамических свойств сложных разбавленных и фрустрированных систем имеет фундаментальное значение в области физики конденсированного состояния и статистической физики. Созданные в ходе выполнения диссертационного исследования алгоритмы, программы ЭВМ, численные и аналитические методы могут быть использованы для дальнейших исследований свойств разбавленных магнитных систем.

В качестве **перспектив дальнейшей разработки тематики** можно включить ряд новых задач и направлений. Вот некоторые из них:

1. Необходимость учета дальнего и многочастичного взаимодействия для заряженных примесей может стать основой для создания более сложных моделей, что позволит более точно описывать экспериментальные данные и предсказывать новые физические явления. Исследуемая модель останется в качестве предельного случая, однако расширение и усложнение заряд-зарядового взаимодействия может привести к возникновению новых фаз и новым физическим явлениям.

2. Усложнение гамильтониана магнитного взаимодействия до модели Гейзенберга, а также решение квантовой задачи (квантовая модель Изинга в продольном магнитном поле, квантовая модель Гейзенберга с примесями).

3. Создание и оптимизация численных методов для моделирования динамики спиновых систем с учетом различных взаимодействий и наличия примесей различного типа может значительно повысить эффективность исследований в данной области. В частности, существует необходимость в разработке более эффективных алгоритмов Монте-Карло вроде алгоритма Ванга-Ландау в целях обхода проблем критического замедления и застревания алгоритма в метастабильных состояниях в области фрустрации.

4. Экспериментальная проверка теоретических моделей: проведение экспериментов для проверки предсказаний теоретических моделей, особенно в области наличия немагнитных примесей и их влияния на критические магнитные свойства систем, является важным направлением для дальнейших исследований. Область исследования псевдопереходов в (квази)одномерных системах также нуждается в наличии экспериментальных подтверждений. Несмотря на наличие ряда сложностей с обнаружением, принципиальные ограничения на наблюдение этого тонкого явления на эксперименте отсутствуют.

5. Кросс-дисциплинарные исследования могут быть расширены на другие области, такие как статистическая физика и теория сложных систем, что позволит использовать полученные результаты для решения более широких научных задач. Также модели изинговских систем могут быть адаптированы для изучения процессов в биофизике и медицине, таких как рост опухолей или электромеханические явления в клетках [169; 170].



## Благодарности

Я хочу выразить искреннюю благодарность своему научному руководителю, кандидату физико-математических наук, доценту кафедры теоретической и математической физики Института естественных наук и математики УрФУ Юрию Демьяновичу Панову, за ценные советы и консультации, полезное обсуждение полученных результатов, развитие моих профессиональных качеств, а также многолетнее руководство моей научной деятельностью. Его безукоризненный подход к научной и преподавательской работе стал для меня настоящим ориентиром.

Вместе с тем я благодарна всему коллективу отдела математического моделирования, в котором работаю с самого начала моей научной деятельности, в особенности его заведующему, доктору физ.-мат. наук, проф. Александру Сергеевичу Москвину. Я глубоко признательна ему за выдающееся лидерство, создание и развитие нашего коллектива, за организацию и ведение семинаров, где мы постоянно обсуждаем актуальные научные проблемы и текущие результаты, за конструктивный подход к критике, и вместе с тем за веру в мои способности и поддержку, а также за большой толчок, который Александр Сергеевич дал мне на начальном этапе моей научной карьеры. Совместная работа в таком дружественном, постоянно развивающемся коллективе, сыграла большую роль в развитии моих профессиональных качеств и подготовке данной кандидатской диссертации. Я отдельно хочу поблагодарить моего коллегу и соавтора, Василия Анатольевича Улитко, за нашу продуктивную совместную работу, вдохновляющие идеи и неопенимую помощь на различных этапах исследования. Хочу отметить его значимый научный вклад, как главного автора используемого алгоритма для численного моделирования, а также многочисленные технические консультации и семинары, которые имели большое значение в моём профессиональном развитии.

Я искренне признательна всему педагогическому составу физического факультета Института естественных наук и математики за огромный вклад в моё образование и развитие. Особую благодарность хочу выразить сотрудникам кафедры теоретической и математической физики, возглавляемой нынешним руководителем, доктором физико-математических наук, доцентом Екатериной Александровной Елфимовой, а также бывшим руководителем, вышеупомянутым А.С. Москвиным.

Также я выражаю глубокую благодарность и почтение оппонентам по диссертации: докторам физ.-мат. наук, профессорам Прудникову Павлу Владимировичу, Васину Михаилу Геннадьевичу, член-корреспонденту РАН Стрельцову Сергею Владимировичу, за внимательное прочтение работы, пронизательные вопросы и полезные замечания. Особая большая благодарность Павлу Владимировичу за многочисленные ценные дискуссии на протяжении всех лет моей работы, советы, предложения и замечания, а также всегда поддерживающее, внимательное и жизнерадостное отношение.

В завершение хочу выразить нежные слова благодарности моему мужу и коллеге, Виталию Рюмшину, а также моей маме, Марии Никитичне, за их безграничную любовь, заботу и поддержку.

## Список литературы

1. *Evans M. R.* Phase transitions in one-dimensional nonequilibrium systems // Brazilian Journal of Physics. — 2000. — Vol. 30. — P. 42–57.
2. Universality and quasicritical exponents of one-dimensional models displaying a quasitransition at finite temperatures / O. Rojas [et al.] // Physical Review E. — 2019. — Vol. 99, no. 4. — P. 042117.
3. *Yin W.* Paradigm for approaching the forbidden phase transition in the one-dimensional Ising model at fixed finite temperature: Single chain in a magnetic field // Phys. Rev. B. — 2024. — Vol. 109, issue 21. — P. 214413.
4. *Coulon C., Miyasaka H., Clérac R.* Single-Chain Magnets: Theoretical Approach and Experimental Systems // Structure and Bonding. Vol. 122. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2006. — P. 163–206.
5. Magnetization and quadrupolar plateaus in the one-dimensional antiferromagnetic spin-3/2 and spin-2 Blume–Capel model / E. Aydiner [et al.] // Phys. Status Solidi B. — 2006. — Oct. — Vol. 243, no. 12. — P. 2901–2912.
6. The properties of one-dimensional spin-S ( $S \geq 1$ ) antiferromagnetic Ising chain with single-ion anisotropy / X. Y. Chen [et al.] // J. Magn. Magn. Mater. — 2003. — June. — Vol. 262, no. 2. — P. 258–263.
7. Frustrated spin systems / H. T. Diep [et al.]. — World scientific, 2013.
8. *Balents L.* Spin liquids in frustrated magnets // Nature. — 2010. — Mar. — Vol. 464. — P. 199–208.
9. *Bramwell S. T., Gingras M. J. P.* Spin Ice State in Frustrated Magnetic Pyrochlore Materials // Science. — 2001. — Nov. — Vol. 294, no. 5546. — P. 1495–1501.
10. *Janssen H. K., Oerding K., Sengespeick E.* On the crossover to universal criticality in dilute Ising systems // J. Phys. A: Math. Gen. — 1995. — Nov. — Vol. 28, no. 21. — P. 6073.
11. *Giacomin G.* Disorder and Critical Phenomena Through Basic Probability Models: École d'Été de Probabilités de Saint-Flour XL–2010. Vol. 2025. — Springer Science & Business Media, 2011.
12. *Henley C. L.* Ordering due to disorder in a frustrated vector antiferromagnet // Phys. Rev. Lett. — 1989. — Apr. — Vol. 62, no. 17. — P. 2056–2059.
13. *Zhitomirsky M. E.* Enhanced magnetocaloric effect in frustrated magnets // Phys. Rev. B. — 2003. — Mar. — Vol. 67, no. 10. — P. 104421.
14. *Honecker A., Wessel S.* Magnetocaloric effect in two-dimensional spin-1/2 antiferromagnets // Physica B. — 2006. — May. — Vol. 378–380. — P. 1098–1099.

15. A study of the critical properties of the Ising model on body-centered cubic lattice taking into account the interaction of next behind nearest neighbors / A. K. Murtazaev [et al.] // *Phys. Solid State*. — 2017. — June. — Vol. 59, no. 6. — P. 1103–1109.
16. *Dotsenko V. S., Dotsenko V. S.* Critical behaviour of the phase transition in the 2D Ising Model with impurities // *Advances in Physics*. — 1983. — Vol. 32, no. 2. — P. 129–172.
17. *Harris A. B.* Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // *J. Phys. C: Solid State Phys.* — 1974. — May. — Vol. 7, no. 9. — P. 1671.
18. *Harris A. B., Lubensky T. C.* Renormalization-Group Approach to the Critical Behavior of Random-Spin Models // *Phys. Rev. Lett.* — 1974. — Dec. — Vol. 33, no. 26. — P. 1540–1543.
19. *Grinstein G., Luther A.* Application of the renormalization group to phase transitions in disordered systems // *Phys. Rev. B*. — 1976. — Feb. — Vol. 13, no. 3. — P. 1329.
20. High field magnetization in an S=1 antiferromagnetic chain with bond alternation / Y. Narumi [et al.] // *Physica B*. — 1998. — May. — Vol. 246/247. — P. 509–512.
21. *De Souza S., Rojas O.* Quasi-phases and pseudo-transitions in one-dimensional models with nearest neighbor interactions // *Solid State Communications*. — 2018. — Vol. 269. — P. 131–134.
22. Heterobimetallic Dy-Cu coordination compound as a classical-quantum ferrimagnetic chain of regularly alternating Ising and Heisenberg spins / J. Torrico [et al.] // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2018. — Vol. 460. — P. 368–380.
23. First heterotrimetallic {3d-4d-4f} single chain magnet, constructed from anisotropic high-spin heterometallic nodes and paramagnetic spacers / D. Visinescu [et al.] // *Chem.-Eur. J.* — 2009. — Vol. 15, no. 44. — P. 11808–11814.
24. Structure and magnetism of a spin ladder system:(C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CuBr<sub>4</sub> / R. D. Willett [et al.] // *Inorganic chemistry*. — 2004. — Vol. 43, no. 13. — P. 3804–3811.
25. *Strečka J., Karl'ová K.* Pseudo-transition between antiferromagnetic and charge orders in a minimal spin-pseudospin model of one-dimensional cuprates // *The European Physical Journal B*. — 2024. — Vol. 97, no. 6. — P. 74.
26. *Onoda M., Nishiguchi N.* Crystal Structure and Spin Gap State of CaV<sub>2</sub>O<sub>5</sub> // *Journal of Solid State Chemistry*. — 1996. — Vol. 127, no. 2. — P. 359–362.
27. *Cuesta J. A., Sánchez A.* General Non-Existence Theorem for Phase Transitions in One-Dimensional Systems with Short Range Interactions, and Physical Examples of Such Transitions // *Journal of Statistical Physics*. — 2004. — Vol. 115, no. 3/4. — P. 869–893.
28. *Moskvin A. S.* Pseudospin S = 1 formalism and skyrmion-like excitations in the three-body constrained extended Bose–Hubbard model // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2015. — Vol. 121, no. 3. — P. 477–490.
29. *Dyson F. J.* Existence of a phase-transition in a one-dimensional Ising ferromagnet // *Matematika*. — 1972. — Vol. 16, no. 2. — P. 137–152.

30. *Fröhlich J., Spencer T.* The phase transition in the one-dimensional Ising Model with  $1/r$  interaction energy // Communications in Mathematical Physics. — 1982. — Vol. 84, no. 1. — P. 87–101.
31. *Thouless D.* Long-range order in one-dimensional Ising systems // Physical Review. — 1969. — Vol. 187, no. 2. — P. 732.
32. *Miyamoto M.* Phase transition in one-dimensional Ising models with spatially inhomogeneous potentials // Journal of Mathematics of Kyoto University. — 1984. — Vol. 24, no. 4. — P. 679–688.
33. *Aleiner I. L., Altshuler B. L., Shlyapnikov G. V.* A finite-temperature phase transition for disordered weakly interacting bosons in one dimension // Nature Physics. — 2010. — Vol. 6, no. 11. — P. 900–904.
34. *Kittel C.* Phase transition of a molecular zipper // American Journal of Physics. — 1969. — Vol. 37, no. 9. — P. 917–920.
35. *Chui S., Weeks J. D.* Pinning and roughening of one-dimensional models of interfaces and steps // Physical Review B. — 1981. — Vol. 23, no. 5. — P. 2438.
36. *Dauxois T., Peyrard M.* Entropy-driven transition in a one-dimensional system // Physical Review E. — 1995. — Vol. 51, no. 5. — P. 4027.
37. *Frobenius G.* Über Matrizen aus nicht negativen Elementen. — Reichsdr., 1912. — (Preussische Akademie der Wissenschaften Berlin: Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin).
38. *Timonin P.* Spin ice in a field: Quasi-phases and pseudo-transitions // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2011. — Vol. 113. — P. 251–265.
39. *Panov Y., Rojas O.* Unconventional low-temperature features in the one-dimensional frustrated q-state Potts model // Physical Review E. — 2021. — Vol. 103, no. 6. — P. 062107.
40. *Ananikian N., Lazaryan H., Nalbandyan M.* Magnetic and quantum entanglement properties of the distorted diamond chain model for azurite // The European Physical Journal B. — 2012. — July. — Vol. 85, no. 7. — P. 1–6.
41. *Yin W.* Paradigm for approaching the forbidden spontaneous phase transition in the one-dimensional Ising model at a fixed finite temperature // Physical Review Research. — 2024. — Vol. 6, no. 1. — P. 013331.
42. Two-dimensional Ising model with competing interactions and its application to clusters and arrays of  $\pi$ -rings and adiabatic quantum computing / A. O’Hare [et al.] // Phys. Rev. B. — 2007. — Aug. — Vol. 76, no. 6. — P. 064528.
43. *Rojas O.* A Conjecture on the Relationship Between Critical Residual Entropy and Finite Temperature Pseudo-transitions of One-dimensional Models // Brazilian Journal of Physics. — 2020. — Vol. 50, no. 6. — P. 675–686.
44. *Rojas O.* Residual Entropy and Low Temperature Pseudo-Transition for One-Dimensional Models // Acta Physica Polonica A. — 2020. — Vol. 137, no. 5. — P. 933–935.

45. Towards low-temperature peculiarities of thermodynamic quantities for decorated spin chains / T. Krokhmalskii [et al.] // *Physica A*. — 2021. — July. — Vol. 573. — P. 125986.
46. *Hovhannisyan V. V., Strečka J., Ananikian N. S.* Exactly solvable spin-1 Ising–Heisenberg diamond chain with the second-neighbor interaction between nodal spins // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2016. — Vol. 28, no. 8. — P. 085401.
47. Quantum entanglement in the neighborhood of pseudo-transition for a spin-1/2 Ising-XYZ diamond chain / I. Carvalho [et al.] // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2018. — Vol. 465. — P. 323–327.
48. Correlation functions for a spin-1/2 Ising-XYZ diamond chain: Further evidence for quasi-phases and pseudo-transitions / I. Carvalho [et al.] // *Annals of Physics*. — 2019. — Vol. 402. — P. 45–65.
49. *Rojas O., Strečka J., De Souza S.* Thermal entanglement and sharp specific-heat peak in an exactly solved spin-1/2 Ising-Heisenberg ladder with alternating Ising and Heisenberg inter-leg couplings // *Solid State Communications*. — 2016. — Vol. 246. — P. 68–75.
50. Low-temperature thermodynamics of the two-leg ladder Ising model with trimer rungs: A mystery explained / T. Hutak [et al.] // *Physics Letters A*. — 2021. — Vol. 387. — P. 127020.
51. Spin frustration of a spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube as an indispensable ground for thermal entanglement / J. Strečka [et al.] // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2016. — Vol. 409. — P. 124–133.
52. *Gálisová L., Strečka J.* Vigorous thermal excitations in a double-tetrahedral chain of localized Ising spins and mobile electrons mimic a temperature-driven first-order phase transition // *Physical Review E*. — 2015. — Vol. 91, no. 2. — P. 022134.
53. Peculiarities in pseudo-transitions of a mixed spin-(1/2, 1) Ising–Heisenberg double-tetrahedral chain in an external magnetic field / O. Rojas [et al.] // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2020. — Vol. 32, no. 3. — P. 035804.
54. *Pimenta R., Rojas O., De Souza S.* Anomalous thermodynamics in a mixed spin-1/2 and spin-1 hexagonal nanowire system // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2022. — Vol. 550. — P. 169070.
55. *Panov Y., Rojas O.* Zero-temperature phase transitions and their anomalous influence on thermodynamic behavior in the q-state Potts model on a diamond chain // *Physical Review E*. — 2023. — Vol. 108, no. 4. — P. 044144.
56. A light-induced spin crossover actuated single-chain magnet / T. Liu [et al.] // *Nature Communications*. — 2013. — Vol. 4, no. 1. — P. 2826.
57. *Moskvin A. S.* Jahn-Teller magnets // *Magnetochemistry*. — 2023. — Vol. 9, no. 11. — P. 1–43.
58. *Panov Y.* Residual entropy of the dilute Ising chain in a magnetic field // *Physical Review E*. — 2022. — Vol. 106, no. 5. — P. 054111.

59. Single-chain magnets: beyond the Glauber model / W.-X. Zhang [et al.] // RSC Adv. — 2013. — Feb. — Vol. 3, no. 12. — P. 3772–3798.
60. *Vannimenus J., Toulouse G.* Theory of the frustration effect. II. Ising spins on a square lattice // J. Phys. C: Solid State Phys. — 1977. — Sept. — Vol. 10, no. 18. — P. L537.
61. *Wannier G. H.* Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net // Phys. Rev. — 1950. — July. — Vol. 79, no. 2. — P. 357–364.
62. *Diep H. T.* Magnetic systems with competing interactions: frustrated spin systems. — World Scientific, 1994.
63. *Kalz A., Honecker A., Moliner M.* Analysis of the phase transition for the Ising model on the frustrated square lattice // Phys. Rev. B. — 2011. — Nov. — Vol. 84, no. 17. — P. 174407.
64. *Kalz A., Honecker A.* Location of the Potts-critical end point in the frustrated Ising model on the square lattice // Phys. Rev. B. — 2012. — Oct. — Vol. 86, no. 13. — P. 134410.
65. *Ramazanov M., Murtazaev A.* Investigation of critical phenomena of the frustrated Ising model on a cubic lattice with next-nearest-neighbor intralayer interactions by the Monte Carlo method // Phase Transitions. — 2018. — Vol. 91, no. 1. — P. 83–91.
66. *Муртазаев А. К., Рамазанов М. К.* Фазовые переходы в фрустрированных моделях Изинга (Обзор) // Физика твердого тела. — 2023. — Т. 65, № 9. — С. 1455–1475.
67. *Kassan-Ogly F. A., Proshkin A. I.* Frustrations and Ordering in Magnetic Systems of Various Dimensions // Physics of the Solid State. — 2018. — June. — Vol. 60, no. 6. — P. 1090–1097.
68. *Kassan-Ogly F. A.* One-dimensional ising model with next-nearest-neighbour interaction in magnetic field // Phase Transitions: A Multinational Journal. — 2001. — Dec. — Vol. 74. — P. 353–365.
69. *Loison D., Schotte K. D.* First and second order transition in frustrated XY systems // Eur. Phys. J. B. — 1998. — Oct. — Vol. 5, no. 3. — P. 735–743.
70. *Yosefin M., Domany E.* Phase transitions in fully frustrated spin systems // Phys. Rev. B. — 1985. — Aug. — Vol. 32, no. 3. — P. 1778–1795.
71. *Ramazanov M. K.* Phase transitions in the antiferromagnetic Heisenberg model on a layered triangular lattice with the next-nearest neighbor interactions // JETP Lett. — 2011. — Oct. — Vol. 94, no. 4. — P. 311–314.
72. *Ramazanov M. K., Murtazaev A. K., Magomedov M. A.* Phase transitions in the frustrated Potts model in the magnetic field // Physica E. — 2022. — June. — Vol. 140. — P. 115226.
73. *Aizenman M., Wehr J.* Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder // Phys. Rev. Lett. — 1989. — May. — Vol. 62, no. 21. — P. 2503–2506.
74. *Rapaport D. C.* The Ising ferromagnet with impurities: a series expansion approach. I // J. Phys. C: Solid State Phys. — 1972. — July. — Vol. 5, no. 14. — P. 1830.

75. *Tranquada J. M., Xu G., Zaliznyak I. A.* Superconductivity, antiferromagnetism, and neutron scattering // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2014. — Jan. — Vol. 350. — P. 148–160.
76. Ubiquitous Interplay Between Charge Ordering and High-Temperature Superconductivity in Cuprates / *E. H. da Silva Neto [et al.]* // *Science.* — 2013. — Dec. — Vol. 343, no. 6169. — P. 393–396.
77. Striped superconductors: how spin, charge and superconducting orders intertwine in the cuprates / *E. Berg [et al.]* // *New J. Phys.* — 2009. — Nov. — Vol. 11, no. 11. — P. 115004.
78. *Moskvin A. S.* True charge-transfer gap in parent insulating cuprates // *Physical Review B.* — 2011. — Vol. 84, no. 7. — P. 075116.
79. Competition of Spin and Charge Orders in a Model Cuprate / *Y. D. Panov [et al.]* // *J. Supercond. Novel Magn.* — 2016. — Apr. — Vol. 29, no. 4. — P. 1077–1083.
80. *Moskvin A. S., Panov Y. D.* Electronic structure of hole centers in CuO<sub>2</sub> planes of cuprates // *Low Temp. Phys.* — 2011. — Mar. — Vol. 37, no. 3. — P. 261–267.
81. *Moskvin A. S., Panov Y. D.* Nature of the Pseudogap Phase of HTSC Cuprates // *Physics of the Solid State.* — 2020. — Vol. 62, no. 9. — P. 1554–1561.
82. *Moskvin A., Panov Y.* Effective-Field Theory for Model High-T<sub>c</sub> Cuprates // *Condensed Matter.* — 2021. — Vol. 6, no. 3. — P. 24.
83. *Moskvin A., Panov Y.* Model of charge triplets for high-T<sub>c</sub> cuprates // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 2022. — Vol. 550. — P. 169004.
84. *Moskvin A. S., Panov Y. D.* Phase separation in high-T<sub>c</sub> cuprates // *Journal of Physics: Conference Series.* — 2022. — Vol. 2164, no. 1. — P. 012014.
85. *Panov Y. D.* Critical Temperatures of a Model Cuprate // *Physics of Metals and Metallography.* — 2019. — Vol. 120, no. 13. — P. 1276–1281.
86. *Plakida N.* High-temperature cuprate superconductors: Experiment, theory, and applications. Vol. 166. — Springer Science & Business Media, 2010.
87. Charge Ordering as Alternative to Jahn-Teller Distortion / *I. I. Mazin [et al.]* // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Apr. — Vol. 98, no. 17. — P. 176406.
88. *Blume M., Emery V. J., Griffiths R. B.* Ising Model for the  $\lambda$  Transition and Phase Separation in He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup> Mixtures // *Phys. Rev. A.* — 1971. — Sept. — Vol. 4, no. 3. — P. 1071.
89. *Furman D., Dattagupta S., Griffiths R. B.* Global phase diagram for a three-component model // *Phys. Rev. B.* — 1977. — Jan. — Vol. 15, no. 1. — P. 441–464.
90. *Mukamel D., Blume M.* Ising model for tricritical points in ternary mixtures // *Phys. Rev. A.* — 1974. — Aug. — Vol. 10, no. 2. — P. 610–617.

91. *Schick M., Shih W.-H.* Spin-1 model of a microemulsion // *Phys. Rev. B.* — 1986. — Aug. — Vol. 34, no. 3. — P. 1797–1801.
92. *Loois C. C., Barkema G. T., Smith C. M.* Monte Carlo studies of extensions of the Blume-Emery-Griffiths model // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Nov. — Vol. 78, no. 18. — P. 184519.
93. Complete analysis of ensemble inequivalence in the Blume-Emery-Griffiths model / V. V. Hovhannisyan [et al.] // *Phys. Rev. E.* — 2017. — Dec. — Vol. 96, no. 6. — P. 062103.
94. *Cannas S. A., Stariolo D. A.* Three-state model with competing antiferromagnetic and pairing interactions // *Phys. Rev. E.* — 2019. — Apr. — Vol. 99, no. 4. — P. 042137.
95. *Yang C. N.* The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model // *Physical Review.* — 1952. — Vol. 85, no. 5. — P. 808–816.
96. *Newman M. E. J., Barkema G. T.* Monte Carlo methods in statistical physics. — Reprinted (with corr.) — Oxford : Clarendon Press [u.a.], 2010.
97. *Batrouni G. G., Scalettar R. T.* Phase Separation in Supersolids // *Physical Review Letters.* — 2000. — Vol. 84, no. 7. — P. 1599–1602.
98. *Kapcia K., Robaszkiewicz S., Micnas R.* Phase separation in a lattice model of a superconductor with pair hopping // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 2012. — Vol. 24, no. 21. — P. 215601.
99. *Kapcia K.* Interplay and Competition Between Superconductivity and Charge Orderings in the Zero-Bandwidth Limit of the Extended Hubbard Model with Pair Hopping and on-Site Attraction // *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism.* — 2013. — Vol. 26, no. 8. — P. 2647–2650.
100. *Kapcia K. J., Barański J., Ptok A.* Diversity of charge orderings in correlated systems // *Physical Review E.* — 2017. — Vol. 96, no. 4. — P. 042104.
101. Unconventional spin-charge phase separation in a model 2D cuprate / Y. D. Panov [et al.] // *JETP Letters.* — 2017. — Vol. 106, no. 7. — P. 440–445.
102. The Ground-State Phase Diagram of 2D Spin–Pseudospin System / Y. D. Panov [et al.] // *Journal of Low Temperature Physics.* — 2017. — June. — Vol. 187, no. 5/6. — P. 646–653.
103. Phase diagrams of a 2D Ising spin-pseudospin model / Y. Panov [et al.] // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 2019. — Vol. 477. — P. 162–166.
104. Phase Diagrams of a 2D Dilute Antiferromagnetic Ising Model with Charged Impurities / Y. D. Panov [et al.] // *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism.* — 2019. — Vol. 32, no. 6. — P. 1831–1835.
105. Bethe Approximation for a Two-Dimensional Spin-Pseudospin System / Y. D. Panov [et al.] // *Physics of the Solid State.* — 2019. — Sept. — Vol. 61, no. 9. — P. 1627–1633.
106. *Ising E.* Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus // *Z. Phys.* — 1925. — Feb. — Vol. 31, no. 1. — P. 253–258.



107. *Onsager L.* Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition // *Phys. Rev.* — 1944. — Feb. — Vol. 65, no. 3/4. — P. 117–149.
108. *Baxter R. J.* Exactly solved models in statistical mechanics. — Elsevier, 2016.
109. *Kramers H. A., Wannier G. H.* Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part I // *Physical Review.* — 1941. — Vol. 60, no. 3. — P. 252.
110. *Белоконов В., Семкин С.* Метод случайного поля в модели Изинга разбавленного ферромагнетика // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* — 1992. — Т. 102, № 4. — С. 1254–1258.
111. *Panov Y.* Frustrations in the ground state of a dilute Ising chain in a magnetic field // *Physics of the Solid State.* — 2023. — Vol. 65, no. 7. — P. 1148.
112. *Panov Y.* Correlation Functions and Properties of Local Distributions of Frustrated Phases in the Ground State of a Dilute Ising Chain in a Magnetic Field // *Ferroelectrics.* — 2024. — Apr. — Vol. 618, no. 5. — P. 1207–1218.
113. *Ма Ш.* Современная теория критических явлений. — 1980.
114. *Вильсон К., Когут Д.* Ренормализационная группа и эpsilon-разложение. — 1975.
115. *Биндер К., Хеерман Д.* Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. — 1995.
116. *Прудников В. В., Вакилов А. Н., Прудников П. В.* Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. — 2009.
117. *Каммилов И. К., Муртазаев А. К., Алиев Х. К.* Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло // *Успехи физических наук.* — 1999. — Т. 169, № 7. — С. 773–795.
118. Critical exponents of the three-dimensional diluted Ising model / *H. G. Ballesteros [et al.]* // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Aug. — Vol. 58, no. 5. — P. 2740–2747.
119. *Schreiber N., Adler J.* Monte Carlo study of the pure and dilute Baxter–Wu model // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 2005. — Aug. — Vol. 38, no. 33. — P. 7253.
120. *Murtazaev A. K., Babaev A. B.* Phase transitions and critical phenomena in a three-dimensional site-diluted Potts model // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2012. — Nov. — Vol. 324, no. 22. — P. 3870–3875.
121. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / *А. Муртазаев [и др.]* // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* — 2015. — Т. 147, № 1. — С. 127–131.
122. *Swendsen R. H., Wang J.-S.* Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations // *Physical review letters.* — 1987. — Vol. 58, no. 2. — P. 86.
123. *Wolff U.* Collective Monte Carlo updating for spin systems // *Physical Review Letters.* — 1989. — Vol. 62, no. 4. — P. 361.

124. *Hu W., Singh R. R. P., Scalettar R. T.* Discovering phases, phase transitions, and crossovers through unsupervised machine learning: A critical examination // *Phys. Rev. E.* — 2017. — June. — Vol. 95, no. 6. — P. 062122.
125. *Giannetti C., Lucini B., VDACCHINO D.* Machine Learning as a universal tool for quantitative investigations of phase transitions // *Nucl. Phys. B.* — 2019. — July. — Vol. 944. — P. 114639.
126. *KAWASAKI K.* Diffusion Constants near the Critical Point for Time-Dependent Ising Models. I // *Phys. Rev.* — 1966. — May. — Vol. 145, no. 1. — P. 224–230.
127. *YALDRAM K., BINDER K.* Monte Carlo simulation of phase separation and clustering in the ABV model // *J. Stat. Phys.* — 1991. — Jan. — Vol. 62, no. 1. — P. 161–175.
128. *Puri S.* Kinetics of phase transitions // *Kinetics of phase transitions.* — CRC press, 2009. — P. 13–74.
129. *BARRAT A.* Monte Carlo simulations of the violation of the fluctuation-dissipation theorem in domain growth processes // *Phys. Rev. E.* — 1998. — Mar. — Vol. 57, no. 3. — P. 3629–3632.
130. *Gonos P., Bray A. J.* Persistence in systems with conserved order parameter // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 2005. — Feb. — Vol. 38, no. 7. — P. 1427.
131. *Hastings W. K.* Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. — 1970.
132. *Metropolis N., Ulam S.* The monte carlo method // *Journal of the American statistical association.* — 1949. — Vol. 44, no. 247. — P. 335–341.
133. *KAWASAKI K.* Kinetics of Ising models // *Phase Transitions and Critical Phenomena 2.* — 1972. — P. 443–501.
134. *HADJIGAPIOU I., MALAKIS A., MARTINOS S.* Monte-Carlo study of the three-dimensional conserved-order-parameter Ising model via finite-size scaling analysis // *Rev. Adv. Mater. Sci.* — 2006. — Vol. 12. — P. 63–71.
135. *Zheng B.* Monte Carlo simulations of short-time critical dynamics // *International Journal of Modern Physics B.* — 1998. — Vol. 12, no. 14. — P. 1419–1484.
136. *Marko J., Barkema G.* Phase ordering in the Ising model with conserved spin // *Physical Review E.* — 1995. — Vol. 52, no. 3. — P. 2522.
137. *Vials J., Jasnow D.* Finite-size-scaling analysis of domain growth in the kinetic Ising model with conserved and nonconserved order parameters // *Physical Review B.* — 1988. — Vol. 37, no. 16. — P. 9582.
138. *Néron A., Lantagne G., Marcos B.* Computation of complex and constrained equilibria by minimization of the Gibbs free energy // *Chemical engineering science.* — 2012. — Vol. 82. — P. 260–271.

139. The Parallel Monte Carlo Algorithm Implementation on GPU for the Systems with an Ising Hamiltonian under the Condition of a Constant Charge Density / K. S. Budrin [и др.] // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2018) : Короткие статьи и описания плакатов. — Ростов-на-Дону: Издательский центр ЮУрГУ, 2018. — С. 23–33.
140. Korn G. A., Korn T. M. Mathematical handbook for scientists and engineers: definitions, theorems, and formulas for reference and review. — Dover Publications, 2000.
141. Malyshev V. A., Minlos R. A. Gibbs random fields: cluster expansions. Vol. 44. — Springer Science & Business Media, 2012.
142. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. — Москва : Физматлит, 2010.
143. Neirotti J., Freeman D. L., Doll J. Approach to ergodicity in Monte Carlo simulations // Physical Review E. — 2000. — Vol. 62, no. 5. — P. 7445.
144. Panov Y. D. Local distributions of the 1D dilute Ising model // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2020. — Vol. 514. — P. 167224.
145. Rojas O. Residual Entropy and Low Temperature Pseudo-Transition for One-Dimensional Models. // Acta Physica Polonica A. — 2020. — Vol. 137, no. 5.
146. Strečka J., Karl'ová K. Pseudo-transition between antiferromagnetic and charge orders in a minimal spin-pseudospin model of one-dimensional cuprates // The European Physical Journal B. — 2024. — Vol. 97, no. 6. — P. 74.
147. Plischke M., Bergersen B. Equilibrium statistical physics. — 3rd ed. — World Scientific, 2006.
148. Kapcia K., Robaszkiewicz S. The magnetic field induced phase separation in a model of a superconductor with local electron pairing // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2013. — Vol. 25, no. 6. — P. 065603.
149. Kapcia K. J. Superconductivity, Charge Orderings, Magnetism, and Their Phase Separations in the Ground State of Lattice Models of Superconductor with Very Short Coherence Length // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. — 2015. — Vol. 28, no. 4. — P. 1289–1294.
150. Magnetic orderings and phase separations in a simple model of insulating systems / K. J. Kapcia [et al.] // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2015. — Vol. 437. — P. 218–234.
151. Sadiq A., Binder K. Dynamics of the formation of two-dimensional ordered structures // J. Stat. Phys. — 1984. — June. — Vol. 35, no. 5. — P. 517–585.
152. Correlations in quantum spin ladders with site and bond dilution / K. Trinh [et al.] // Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. — 2012. — Vol. 85, no. 3. — P. 035134.
153. Approaching the Kosterlitz-Thouless transition for the classical XY model with tensor networks / L. Vanderstraeten [et al.] // Physical Review E. — 2019. — Vol. 100, no. 6. — P. 062136.

154. The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group / J. J. Binney [et al.]. — Oxford University Press, 06/1992.
155. *Onsager L.* Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition // Physical Review. — 1944. — Vol. 65, no. 3/4. — P. 117.
156. *Greer S. C.* Coexistence curves at liquid-liquid critical points: Ising exponents and extended scaling // Phys. Rev. A. — 1976. — Nov. — Vol. 14, no. 5. — P. 1770–1780.
157. *Fisher M. E.* The theory of equilibrium critical phenomena // Rep. Prog. Phys. — 1967. — July. — Vol. 30, no. 2. — P. 615.
158. *Fisher M. E., Barber M. N.* Scaling Theory for Finite-Size Effects in the Critical Region // Phys. Rev. Lett. — 1972. — June. — Vol. 28, no. 23. — P. 1516–1519.
159. *Landau D. P.* Finite-size behavior of the Ising square lattice // Phys. Rev. B. — 1976. — Apr. — Vol. 13, no. 7. — P. 2997–3011.
160. *Binder K.* Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions // Zeitschrift für Physik B Condensed Matter. — 1981. — Vol. 43. — P. 119–140.
161. *Binder K., Heermann D. W.* Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. — Cham, Switzerland : Springer International Publishing, 2019.
162. *Ferrenberg A. M., Swendsen R. H.* New Monte Carlo technique for studying phase transitions // Physical review letters. — 1988. — Vol. 61, no. 23. — P. 2635.
163. *Challa M. S. S., Landau D. P., Binder K.* Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions // Phys. Rev. B. — 1986. — Aug. — Vol. 34, no. 3. — P. 1841–1852.
164. *Wang F., Landau D. P.* Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram // Phys. Rev. E. — 2001. — Oct. — Vol. 64, no. 5. — P. 056101.
165. *Wegner F. J.* Corrections to Scaling Laws // Phys. Rev. B. — 1972. — June. — Vol. 5, no. 11. — P. 4529–4536.
166. *Ferrenberg A. M., Landau D. P.* Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study // Phys. Rev. B. — 1991. — Sept. — Vol. 44, no. 10. — P. 5081–5091.
167. *Wang F., Landau D. P.* Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States // Phys. Rev. Lett. — 2001. — Mar. — Vol. 86, no. 10. — P. 2050–2053.
168. *Pelissetto A., Vicari E.* Critical phenomena and renormalization-group theory // Phys. Rep. — 2002. — Oct. — Vol. 368, no. 6. — P. 549–727.
169. *Torquato S.* Toward an Ising model of cancer and beyond // Phys. Biol. — 2011. — Feb. — Vol. 8, no. 1. — P. 015017.
170. *Majewski J., Li H., Ott J.* The Ising Model in Physics and Statistical Genetics // Am. J. Hum. Genet. — 2001. — Aug. — Vol. 69, no. 4. — P. 853.

## Список публикаций автора по теме диссертации

### Публикации в рецензируемых изданиях, включённых в перечень ВАК РФ и индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus

- A1.** Особенности конкуренции спиновой и псевдоспиновой подсистем в модельном купрате / Ю. Д. Панов [и др.] // Физика твердого тела. – 2019. – Т. 61, № 5. – С. 822–827; Competition between the Spin and Pseudospin Subsystems in a Model Cuprate / Y. D. Panov [et al.] // Physics of the Solid State. – 2019. – Vol. 61. – P. 707–713.
- A2.** Ясинская Д. Н., Улитко В. А., Панов Ю. Д. Особенности фазовых состояний двумерного разбавленного магнетика с фрустрацией // Физика твердого тела. – 2020. – Т. 62, № 9. – С. 1543–1548; Yasinskaya D. N., Ulitko V. A., Panov Y. D. Specific features of phase states of a diluted 2D magnet with frustration // Physics of the Solid State. – 2020. – Vol. 62. – P. 1713–1718.
- A3.** Critical Behavior of a 2D Spin-Pseudospin Model in a Strong Exchange Limit / D. Yasinskaya [et al.] // Acta Physica Polonica A. – 2020. – Vol. 137, no. 5. – P. 979–981.
- A4.** Ясинская Д. Н., Улитко В. А., Панов Ю. Д. Особенности вырождения основного состояния спин-псевдоспиновой модели двумерного магнетика вблизи точки фрустрации // Физика твердого тела. – 2021. – Т. 63, № 9. – С. 1350–1354; Yasinskaya D., Ulitko V., Panov Y. D. Nontrivial Ground State Degeneracy of the Spin-Pseudospin Model of a Two-Dimensional Magnet Near the Frustration Point. // Physics of the Solid State. – 2021. – Vol. 63, no. 10. – P. 1588–1593.
- A5.** Yasinskaya D., Ulitko V., Panov Y. D. Critical Properties of a 2-D Frustrated Magnet With Non-Magnetic Impurities // IEEE Transactions on Magnetism. – 2022. – Vol. 58, no. 2. – P. 1–4.
- A6.** Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д. Использование марковских цепей для анализа состояний одномерных спиновых систем // Физика твердого тела. – 2024. – Т. 66, № 7. – С. 1106–1114.
- A7.** Yasinskaya D., Panov Y. Pseudotransitions in a dilute Ising chain // Phys. Rev. E. – 2024. – Oct. – Vol. 110, no. 4. – P. 044118.

### Тезисы докладов конференций

- T1.** Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д. Фазовые переходы и неоднородные состояния в двумерных решетках локальных бозонов // Двадцать третья Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых учёных ВНКСФ-23 : материалы конфе-

- ренции: тезисы докладов, Екатеринбург, 01–08 апреля 2017 года. — Екатеринбург: Ассоциация студентов-физиков и молодых ученых России, 2017. — С. 216.
- Т2.** Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д., Улитко В. А. Особенности фазовых переходов и топологических структур в двумерных решетках локальных бозонов // XVIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-18), 16–23 ноября 2017 года: тезисы докладов. — Екатеринбург : ИФМ УрО РАН, 2017. — С. 90.
- Т3.** Особенности структуры доменных границ сильноанизотропного  $S=1$  антиферромагнетика вблизи перехода в фазу квантового парамагнетика / В. В. Конев [и др.] // Новое в магнетизме и магнитных материалах (НМММ XXIII): XXIII Международная конференция, 30 июня – 5 июля 2018, Москва, МИРЭА – Российский технологический университет: сборник трудов. — Москва : МИРЭА – Российский технологический университет, 2018. — С. 236–237.
- Т4.** Фазово-неоднородные состояния в модели Изинга с заряженными примесями валентностью / Ю. Д. Панов [и др.] // Новое в магнетизме и магнитных материалах (НМММ XXIII): XXIII Международная конференция, 30 июня – 5 июля 2018, Москва, МИРЭА – Российский технологический университет: сборник трудов. — Москва : МИРЭА – Российский технологический университет, 2018. — С. 521–522.
- Т5.** Критическое поведение модели Изинга с заряженными примесями / В. А. Улитко [и др.] // Новое в магнетизме и магнитных материалах (НМММ XXIII): XXIII Международная конференция, 30 июня – 5 июля 2018, Москва, МИРЭА – Российский технологический университет: сборник трудов. — Москва : МИРЭА – Российский технологический университет, 2018. — С. 535–536.
- Т6.** Влияние локальных корреляций на переход "однородный изолятор-сверхпроводник" в доменных границах фазы зарядового порядка 2D-системы со смешанной валентностью / В. А. Улитко [и др.] // Нанозифика и наноэлектроника: материалы XXII Международного симпозиума, 12-15 марта 2018 г. — Нижний Новгород : Изд-во Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского, 2018. — С. 72–73.
- Т7.** Critical properties of the two-dimensional spin-pseudospin model on a square lattice / V. Ulitko [et al.] // Book of Abstracts Joint European Magnetic Symposia (JEMS 2018), Mainz, Germany, 03 – 07 September, 2018. — 2018. — P. 30.
- Т8.** Особенности критического поведения спин-псевдоспиновой системы с заряженными немагнитными примесями на двумерной решетке / Д. Н. Ясинская [и др.] // XIX Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-19), 15–22 ноября 2018 года: тезисы докладов. — Екатеринбург : ИФМ УрО РАН, 2018. — С. 100.

- T9.** Features of optical response in electronically inhomogeneous cuprates / V. Konev [et al.] // Book of abstracts of the XVIIth International Feofilov Symposium on Spectroscopy of Crystals Doped with Rare Earth and Transition Metal Ions (IFS2018), 23–28 September 2018, Ekaterinburg, Russia. — Ekaterinburg: Ural Federal University, 2018. — P. 239–240.
- T10.** Features of the spin-charge competition in a model cuprate / Y. Panov [et al.] // Book of abstracts of the XVIIth International Feofilov Symposium on Spectroscopy of Crystals Doped with Rare Earth and Transition Metal Ions (IFS2018), 23–28 September 2018, Ekaterinburg, Russia. — Ekaterinburg: Ural Federal University, 2018. — P. 241.
- T11.** Critical properties of the 2D spin system with charged impurities / D. Yasinskaya [et al.] // Book of abstracts of the XVIIth International Feofilov Symposium on Spectroscopy of Crystals Doped with Rare Earth and Transition Metal Ions (IFS2018), 23–28 September 2018, Ekaterinburg, Russia. — Ekaterinburg: Ural Federal University, 2018. — P. 242–243.
- T12.** Computer simulation of photoinduced effects in a model cuprate / V. Ulitko [et al.] // Book of abstracts of the XVIIth International Feofilov Symposium on Spectroscopy of Crystals Doped with Rare Earth and Transition Metal Ions (IFS2018), 23–28 September 2018, Ekaterinburg, Russia. — Ekaterinburg: Ural Federal University, 2018. — P. 234–235.
- T13.** Критические свойства фрустрированной спиновой системы с заряженными примесями / Д. Н. Ясинская [и др.] // Нанопизика и наноэлектроника : материалы XXIII Международного симпозиума, 11-14 марта 2019 г., Нижний Новгород. — Нижний Новгород : Изд-во Нижегородского госуниверситета им. Н. И. Лобачевского, 2019. — С. 139–140.
- T14.** Критическое поведение двумерной спин-псевдоспиновой модели в случае сильного обмена / Д. Н. Ясинская [и др.] // Сборник тезисов, материалы Двадцать пятой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-25), 19–26 апреля 2019 года, Екатеринбург – Ростов-на-Дону-Крым. — Екатеринбург: Ассоциация студентов физиков и молодых учёных России, 2019. — С. 198–199.
- T15.** Critical behavior of a 2D spin-pseudospin model in a strong exchange limit / D. Yasinskaya [et al.] // Book of abstracts of the 17th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG'19; June 3 – 7, 2019, Kosice, Slovakia. — Slovak Physical Society, 2019. — P. 242.
- T16.** Ясинская Д. Н., Улитко В. А., Панов Ю. Д. Исследование фрустрированной модели Изинга с заряженными примесями методом Монте Карло // Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах : сборник трудов международной конференции, 15-20 сентября 2019 г., Махачкала. — Махачкала : АЛЕФ, 2019. — С. 85–86.
- T17.** Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д., Улитко В. А. Фазовые диаграммы и критические свойства фрустрированной 2D модели Изинга с заряженными примесями // Тезисы докладов XX Юбилейной Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-20), 21-28 ноября 2019 года. — Екатеринбург : ИФМ УрО РАН, 2019. — С. 105.

- T18.** Особенности фазовых состояний разбавленного двумерного магнетика вблизи точки фрустрации / Ю. Д. Панов [и др.] // Коуровка – XXXVIII: тезисы докладов Международной зимней школы физиков-теоретиков («Гранатовая бухта», Верхняя Сысерть, 23-29 февраля 2020 г.) — Екатеринбург : ИФМ УрО РАН, 2020. — С. 33.
- T19.** Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д., Улитко В. А. Необычные состояния и фазовые переходы в разбавленном фрустрированном магнетике // Коуровка – XXXVIII: тезисы докладов Международной зимней школы физиков-теоретиков («Гранатовая бухта», Верхняя Сысерть, 23-29 февраля 2020 г.) — Екатеринбург : ИФМ УрО РАН, 2020. — С. 49.
- T20.** Улитко В. А., Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д. Конкуренция зарядового и магнитного упорядочений в двумерном разбавленном магнетике // Нанوفизика и наноэлектроника : материалы XXIV Международного симпозиума, 10-13 марта 2020 г., Нижний Новгород. — Нижний Новгород : Изд-во Нижегородского госуниверситета им. Н. И. Лобачевского, 2020. — С. 277–278.
- T21.** Ясинская Д. Н., Улитко В. А., Панов Ю. Д. Фазовые переходы в двумерном разбавленном магнетике с фрустрацией // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2020». — Москва : ООО "МАКС Пресс", 2020. — С. 84.
- T22.** Ясинская Д. Н., Улитко В. А., Панов Ю. Д. Фазовые состояния и критические свойства спин-псевдоспиновой модели разбавленного магнетика // Нанوفизика и наноэлектроника : материалы XXV Международного симпозиума, 09-12 марта 2021 г., Нижний Новгород. — Нижний Новгород : Изд-во Нижегородского госуниверситета им. Н. И. Лобачевского, 2021. — С. 139–140.
- T23.** Phase States and Critical Properties of a Dilute Magnet with Frustration / D. Yasinskaya [et al.] // Digests of the Intermag Conference, Virtual, Online, 26–30 April 2021. — IEEE Magnetics Society, 2019. — P. 694.
- T24.** Yasinskaya D., Ulitko V., Panov Y. Magnetic properties and hysteresis behavior of a 2d dilute ising magnet with frustration // Trends in MAGnetism EASTMAG–2022: Book of Abstracts VIII Euro-Asian Symposium, August 22–26, 2022, Kazan, Russia. Vol. II. — Kasa: Zavoisky Physical-Technical Institute FRC Kazan SC RAS, 2022. — P. 49.
- T25.** Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д. Физические свойства разбавленной одномерной модели Изинга // Проблемы физики твердого тела и высоких давлений: Тезисы XXII Всероссийской конференции, г. Сочи, пансионат «Буревестник», 23 сентября – 2 октября 2022 г. – Москва–Сочи. — ФИАН, 2022. — С. 164–165.
- T26.** Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д. Термодинамические и магнитные свойства модели Изинга с немагнитными примесями // Нанوفизика и наноэлектроника : материалы XXVII Международного симпозиума, 13-16 марта 2023 г., Нижний Новгород. Т. 1. — Нижний Новгород : Изд-во Нижегородского госуниверситета им. Н. И. Лобачевского, 2023. — С. 343–344.



- T27.** Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д. Фрустрированные свойства разбавленного изинговского магнетика // Проблемы физики твердого тела и высоких давлений: Тезисы XXII Всероссийской конференции, г. Сочи, пансионат «Буревестник», 24 сентября – 3 октября 2023 г. – Москва–Сочи. — ФИАН, 2023. — С. 158–162.
- T28.** Панов Ю. Д., Ясинская Д. Н. Использование марковских цепей для анализа состояний одномерных спиновых систем // Нанозифика и наноэлектроника : материалы XXVII Международного симпозиума, 11-15 марта 2024 г., Нижний Новгород. Т. 1. — Нижний Новгород : Изд-во Нижегородского госуниверситета им. Н. И. Лобачевского, 2024. — С. 326–327.
- T29.** Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д. Особенности низкотемпературного поведения разбавленной модели Изинга // Коуровка – XL: тезисы докладов Международной зимней школы физиков-теоретиков (ГЛК "Абзаково 2-9 февраля 2024 г.) — 2024. — С. 117.
- T30.** Yasinskaya D., Ulitko V., Panov Y. Markov chains approach for analyzing states of 1D spin systems // Materials Science and Nanotechnology (MSN-2024). Abstract Book of the Second International Conference (Ekaterinburg, August 27-30, 2024). — Ekaterinburg, Ural Federal University, 2024. — P. 101.
- T31.** Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д. Подход марковских цепей для анализа фрустрированных состояний одномерных спиновых систем // Проблемы физики твердого тела и высоких давлений: Тезисы XXIII Всероссийской конференции, г. Сочи, пансионат «Буревестник», 20–29 сентября 2024 г. – Москва–Сочи. — ФИАН, 2024. — С. 167.

## Охранные документы на интеллектуальную собственность

1. Свидетельство о государственной регистрации базы данных 2023623747 Российская Федерация. База расчётных данных двумерной спин-псевдоспиновой модели разбавленного магнетика с фрустрацией: № 2023623747 : заявл. 26.10.2023 : опубл. 03.11.2023 / Д.Н. Ясинская (RU), В.А. Улитко (RU); заявитель и правообладатель ФГАОУ ВО «УрФУ им. Б.Н.Ельцина» (RU). – 1 с.
2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2024687318 Российская Федерация. Программа для расчёта термодинамических величин разбавленной цепочки Изинга с заряженными примесями в поперечном магнитном поле: № 2023623747 : заявл. 31.10.2024 : опубл. 18.11.2024 / Д.Н. Ясинская (RU); заявитель и правообладатель ФГАОУ ВО «УрФУ им. Б.Н.Ельцина» (RU). – 2 с.

## Приложение А

## Фазы основного состояния как решения канонической задачи

(справочное)

Таблица 8 — Симплекс-таблица решений в вершинах многогранника возможных значений переменных  $x_\alpha$ .  $\bullet$  —  $S_z = +1$ ,  $\circ$  —  $S_z = -1$ ,  $\uparrow$  —  $s_z = +\frac{1}{2}$ ,  $\downarrow$  —  $s_z = -\frac{1}{2}$ ,  $d$  — размерность системы

№	Энергия	$x_{1,1}$	$x_{-1,-1}$	$x_{1,-1}$	$x_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$	$x_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$	$x_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$	$x_{1,\frac{1}{2}}$	$x_{1,-\frac{1}{2}}$	$x_{-1,\frac{1}{2}}$	$x_{-1,-\frac{1}{2}}$	Цепочка
1	$\Delta + d \cdot V$	$\frac{1+n}{2}$	$\frac{1-n}{2}$	0	0	0	0	0	0	0	0	$\bullet\bullet\bullet\bullet\circ\circ\circ\circ$
2	$\Delta + d \cdot V(2n-1)$	$n$	0	$1-n$	0	0	0	0	0	0	0	$\bullet\bullet\circ\circ\bullet\bullet\bullet\bullet$
3	$(h-d \cdot J)(n-1) + n(\Delta + d \cdot V)$	$n$	0	0	$1-n$	0	0	0	0	0	0	$\uparrow\uparrow\uparrow\bullet\bullet\bullet\uparrow\uparrow\uparrow$
4	$(-h-d \cdot J)(n-1) + n(\Delta + d \cdot V)$	$n$	0	0	0	$1-n$	0	0	0	0	0	$\downarrow\downarrow\downarrow\bullet\bullet\bullet\downarrow\downarrow\downarrow$
5	$d \cdot J(n-1) + n(\Delta + d \cdot V)$	$n$	0	0	0	0	$1-n$	0	0	0	0	$\downarrow\uparrow\downarrow\bullet\bullet\bullet\uparrow\downarrow\uparrow$
6	$d \cdot V(2n-1) + h(n-1) + \Delta n$	$2n-1$	0	0	0	0	0	$2(1-n)$	0	0	0	$\bullet\uparrow\bullet\bullet\uparrow\bullet\uparrow\bullet\uparrow$
7	$d \cdot V(2n-1) - h(n-1) + \Delta n$	$2n-1$	0	0	0	0	0	0	$2(1-n)$	0	0	$\bullet\downarrow\bullet\bullet\downarrow\bullet\downarrow\bullet\downarrow$
8	$\frac{\Delta(n+2)+d \cdot V(2n+1)+h(n-1)}{3}$	$\frac{2n+1}{3}$	0	0	0	0	0	0	0	$-\frac{2(n-1)}{3}$	0	$\circ\uparrow\circ\bullet\bullet\uparrow\circ\uparrow$
9	$\frac{\Delta(n+2)+d \cdot V(2n+1)-h(n-1)}{3}$	$\frac{2n+1}{3}$	0	0	0	0	0	0	0	0	$-\frac{2(n-1)}{3}$	$\circ\downarrow\circ\bullet\bullet\downarrow\circ\downarrow$
10	$\Delta - d \cdot V(2n+1)$	0	$-n$	$1+n$	0	0	0	0	0	0	0	$\circ\circ\bullet\bullet\circ\circ\circ\circ$
11	$(d \cdot J - h)(n+1) - n(\Delta + d \cdot V)$	0	$-n$	0	$1+n$	0	0	0	0	0	0	$\uparrow\uparrow\uparrow\circ\circ\circ\uparrow\uparrow\uparrow$
12	$(d \cdot J + h)(n+1) - n(\Delta + d \cdot V)$	0	$-n$	0	0	$1+n$	0	0	0	0	0	$\downarrow\downarrow\downarrow\circ\circ\circ\downarrow\downarrow\downarrow$
13	$-d \cdot J(n+1) - n(\Delta + d \cdot V)$	0	$-n$	0	0	0	$1+n$	0	0	0	0	$\downarrow\uparrow\downarrow\circ\circ\circ\uparrow\downarrow\uparrow$
14	$\frac{\Delta(2-n)+d \cdot V(1-2n)-h(n+1)}{3}$	0	$\frac{1-2n}{3}$	0	0	0	0	$\frac{2(n+1)}{3}$	0	0	0	$\bullet\uparrow\bullet\circ\circ\circ\uparrow\bullet\uparrow$
15	$\frac{\Delta(2-n)+d \cdot V(1-2n)+h(n+1)}{3}$	0	$\frac{1-2n}{3}$	0	0	0	0	0	$\frac{2(n+1)}{3}$	0	0	$\bullet\downarrow\bullet\circ\circ\circ\downarrow\bullet\downarrow$
16	$-d \cdot V(2n+1) - h(n+1) - n\Delta$	0	$-2n-1$	0	0	0	0	0	0	$2(n+1)$	0	$\circ\uparrow\circ\circ\circ\uparrow\circ\uparrow$
17	$-d \cdot V(2n+1) + h(n+1) - n\Delta$	0	$-2n-1$	0	0	0	0	0	0	0	$2(n+1)$	$\circ\downarrow\circ\circ\circ\downarrow\circ\downarrow$
18	$d \cdot V(2n-1) + \Delta(1-n) - nh$	0	0	$1-2n$	0	0	0	$2n$	0	0	0	$\bullet\uparrow\bullet\circ\circ\circ\uparrow\bullet\uparrow$
19	$d \cdot V(2n-1) + \Delta(1-n) + nh$	0	0	$1-2n$	0	0	0	0	$2n$	0	0	$\bullet\downarrow\bullet\circ\circ\circ\downarrow\bullet\downarrow$
20	$-d \cdot V(2n+1) + \Delta(1-n) + nh$	0	0	$1+2n$	0	0	0	0	0	$-2n$	0	$\circ\uparrow\circ\circ\circ\uparrow\circ\uparrow$
21	$-d \cdot V(2n+1) + \Delta(1-n) - nh$	0	0	$1+2n$	0	0	0	0	0	0	$-2n$	$\circ\downarrow\circ\circ\circ\downarrow\circ\downarrow$
22	$d \cdot J(1-2n) + h(n-1) + \Delta n$	0	0	0	$1-2n$	0	0	$2n$	0	0	0	$\uparrow\bullet\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\bullet\uparrow\uparrow$
23	$d \cdot J(1-2n) + h(3n-1) + \Delta n$	0	0	0	$1-2n$	0	0	0	$2n$	0	0	$\downarrow\bullet\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\bullet\downarrow\downarrow$
24	$d \cdot J(1+2n) - h(n+1) - \Delta n$	0	0	0	$1+2n$	0	0	0	0	$-2n$	0	$\uparrow\circ\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\circ\uparrow\uparrow$
25	$d \cdot J(1+2n) - h(3n+1) - \Delta n$	0	0	0	$1+2n$	0	0	0	0	0	$-2n$	$\downarrow\circ\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\circ\downarrow\downarrow$
26	$d \cdot J(1-2n) + h(1-3n) + \Delta n$	0	0	0	0	$1-2n$	0	$2n$	0	0	0	$\uparrow\bullet\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\bullet\uparrow\bullet$
27	$d \cdot J(1-2n) + h(1-n) + \Delta n$	0	0	0	0	$1-2n$	0	0	$2n$	0	0	$\downarrow\bullet\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\bullet\downarrow\downarrow$
28	$d \cdot J(1+2n) + h(1+3n) - \Delta n$	0	0	0	0	$1+2n$	0	0	0	$-2n$	0	$\uparrow\circ\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\circ\uparrow\circ$
29	$d \cdot J(1+2n) + h(1+n) - \Delta n$	0	0	0	0	$1+2n$	0	0	0	0	$-2n$	$\downarrow\circ\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\circ\downarrow\downarrow$
30	$d \cdot J(2n-1) + n(\Delta - h)$	0	0	0	0	0	$1-2n$	$2n$	0	0	0	$\uparrow\bullet\uparrow\bullet\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\bullet\uparrow$
31	$d \cdot J(2n-1) + n(\Delta + h)$	0	0	0	0	0	$1-2n$	0	$2n$	0	0	$\downarrow\bullet\downarrow\bullet\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\bullet\downarrow$
32	$-d \cdot J(2n-1) + n(-\Delta + h)$	0	0	0	0	0	$1+2n$	0	0	$-2n$	0	$\uparrow\circ\uparrow\circ\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\circ\uparrow$
33	$-d \cdot J(2n-1) - n(\Delta + h)$	0	0	0	0	0	$1+2n$	0	0	0	$-2n$	$\downarrow\circ\downarrow\circ\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\circ\downarrow$
34	$\frac{\Delta-h}{2}$	0	0	0	0	0	0	$\frac{1}{2}+n$	0	$\frac{1}{2}-n$	0	$\bullet\uparrow\circ\uparrow\bullet\uparrow\circ\uparrow\circ\uparrow$
35	$\frac{\Delta}{2} - nh$	0	0	0	0	0	0	$\frac{1}{2}+n$	0	0	$\frac{1}{2}-n$	$\uparrow\bullet\uparrow\bullet\circ\downarrow\circ\downarrow\uparrow\bullet\uparrow$
36	$\frac{\Delta}{2} + nh$	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{1}{2}+n$	$\frac{1}{2}-n$	0	$\uparrow\circ\uparrow\circ\bullet\downarrow\bullet\downarrow\uparrow\circ\uparrow$
37	$\frac{\Delta+h}{2}$	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{1}{2}+n$	0	$\frac{1}{2}-n$	$\bullet\downarrow\circ\downarrow\bullet\downarrow\circ\downarrow\circ\downarrow$