

Дагестанский научный центр Российской академии наук Институт физики Лаборатория вычислительной физики и физики фазовых переходов 367003, Российская Федерация, Махачкала, Ярагского, 94, Институт физики ДагНЦ РАН тел: (8722) 62-66-75, (8722) 62-89-00 факс: (8722) 62-89-00 e-mail: akai2005@mail.ru



<u>А.К. Муртазаев</u> Институт физики ДНЦ РАН, Махачкала e-mail: akai2005@mail.ru.



Содержание:

- 1. Фрустрированные системы.
- 2. Спиновые системы с фрустрациями (особенности).
- 3. Спиновый лед.
- 4. Дипольный спиновый лед.
- 5. Универсальность.
- 6. Универсальность и фрустрации (современное состояние).
- 7. Фазовые переходы в широком смысле: случайные системы, «малые миры», безмасштабные системы.
- 8. АФ модель Изинга с взаимодействиями со вторыми соседями.
- 9. Слоистая модель Изинга на кубической решетке с внутрислойными взаимодействиями со вторыми соседями.
- **10.** Модель Изинга на ОЦК решетке с взаимодействиями со вторыми соседями.
- 11. Какого рода фазовые переходы?
- 12. Выводы.

Фрустрации!

Фрустрации в физике это явление невозможности одновременной минимизации всех слагаемых гамильтониана в присутствии конкурирующих взаимодействий. В магнетизм термин «фрустрация» введен Жераром Тулузом в 1977.

Обычно приводят пример антиферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке с учетом взаимодействия только ближайших соседей. В ней невозможно расположить направления спинов так, чтобы каждая пара соседей была бы антипараллельна.







Фрустрированные системы.

1.Stacked triangular antiferromagnetic lattices (STA) 2.Body-centered-tetragonal (bct) Helimagnets 3. The simple cubic $J_1 - J_2$ lattice 4. Villain lattice and fully frustrated simple cubic lattice 5.Face-centered cubic lattice (fcc) 6.Hexagonal-close-packed lattice (hcp) 7.Stacked Triangular Antiferromagnetic lattices with Rigidity (STAR) 8.Dihedral lattices V_{N2} 9.Right-handed trihedral lattices V_{3.3} 10. Спиновый лед 11. Дипольный спиновый лед 12. Множество вершинных моделей 13. И т.д.





ОЦК решетка с взаимод. со 2 соседями











Эти ужасные фазовые диаграммы!!



Почему фрустрации мы не видим ???

В фрустрированных системах много разных эффектов и состояний!!!

- 1. Фаза Берри
- 2. Фаза Гриффитса
- 3. Фаза Гриффитса-Маккоя
- 4. Несоизмеримая фаза
- 5. Deconfined phases
- 6. Спин жидкостная фаза
- 7. Спиновый лед
- 8. Дипольный спиновый лед
- 9. Кагоме лед
- 10. Киральный магнитный монополь
- 11. Линия беспорядка
- 12. Скрытый порядок Найжа-Роммельса
- 13. N-линия (Нишимори)
- 14. Эффект "order by disorder"
- 15. "Sponge-like object"
- 16. Допирование, давление, поля и др. факторы дают множество эффектов...

Какие модели используются для описания фруст. систем?

- 1. Модель Изинга
- 2. ХҮ-модель
- 3. Модель Гейзенберга
- 4. Модель Поттса
- 5. Модель Ашкина-Теллера
- 6. Модель Шерингтона-Киркпатрик
- 7. ± Ј модель
- 8. Сигма модель
- 9. Нелинейная сигма модель
- 10. Поперечная модель Изинга
- 11. Поперечно-продольная модель Изинга
- 12. J1-J2 модель
- 13. Модель Можумдара-Гоша (для спиновых жидкостей)
- 14. Модель Штифеля
- 15. Модель зигзаг (zig-zag)
- 16. Модель Андерсона
- 17. Модель Ваньера
- 18. Модель Паулинга
- 19. Множество вершинных моделей
- 20. И еще большее количество комбинированных моделей...

Спиновый лед. Дипольный спиновый лед. $$\begin{split} H &= -J \sum_{\langle ij \rangle} \boldsymbol{S}_{i}^{\hat{z}_{i}} \cdot \boldsymbol{S}_{j}^{\hat{z}_{j}} \\ &+ Dr_{nn}^{3} \sum_{i>j} \frac{\boldsymbol{S}_{i}^{\hat{z}_{i}} \cdot \boldsymbol{S}_{j}^{\hat{z}_{j}}}{|\boldsymbol{r}_{ij}|^{3}} - \frac{3(\boldsymbol{S}_{i}^{\hat{z}_{i}} \cdot \boldsymbol{r}_{ij})(\boldsymbol{S}_{j}^{\hat{z}_{j}} \cdot \boldsymbol{r}_{ij})}{|\boldsymbol{r}_{ij}|^{5}} \end{split}$$ Термин «спиновый лед» введен в работе: М. J. Harris,... Phys. Rev. Lett, 79, 2554 (1997). J_{nn}≈ D_{nn} 10¹ AF J_{nn} FM J_{nn} 1. Изинговская АФ модель Андерсона 2. Модель треугольного АФ Ваньера 10⁰ T/D_{nn} 3. Модель льда Паулинга Spin Ice 10^{-1} 1. $HO_2Ti_2O_7(J_{nn} = -0.52 \text{ K})$ AF 2. $Dy_2Ti_2O_7$ ($J_{nn} = -1.24$ K, $D_{nn} = 2.35$ K) (q=0) $q = (0, 0, 2\pi/a)$ 3. $Yb_2Ti_2U_7$ -2-1 4. Ho₂GaSbO₇ J_{nn}/D_{nn} T_c=0.07D_{nn}.) R. G. Melko, M. Enjalran, B. C. den Hertog, J. P. Gingras, cond - mat/0308282 (2003).

Антиферромагнитная двумерная модель Изинга (треугольная решетка, расчеты)

• Фрустрации существуют только при определенном соотношении и знаке взаимодействий: $J_1 = J_2 \ge J_3$ (в частности, при $J_1 = J_2 = J_3$).





Houtappel R.M.F. Physica 16, 425 (1950).

Антиферромагнитная двумерная модель Изинга (треугольная решетка, расчеты)



Двумерная модель Изинга (треугольная решетка, расчеты)

заменим два из обменных параметров на положительные: фрустрация или фазовый переход?



Интересная физическая особенность наличия фрустраций: вблизи точки фрустрации теплоемкость расщепляется!!!



Двумерная модель Изинга (квадратная решетка)





Фрустрации существуют только при определенных соотношениях взаимодействий: $J_1 + J_2 = 2 J_3 + 2 J_4$ (при $J_1 = J_2 < 0, J_3 < 0, J_4 < 0$) или $J_1 + J_2 = -2J_3 - 2J_4$ (при $J_1 > 0, J_2 > 0, J_3 < 0, J_4 < 0$). При отклонениях от этих соотношений

фрустрации исчезают и возникает фазовый переход.

Заблуждения !!

- Первое. Фрустраций в одномерных решетках не бывает.
- Второе. Для существования фрустраций необходимо иметь в решетке треугольный элемент, как в треугольной, кагоме или ГЦК решетке.
- Третье. Фрустрации могут существовать только при наличии конкурирующих взаимодействий.
- Четвертое. Фрустрации существуют только в антиферромагнетиках.

Условия существования

- 1. Что необходимо для существования фрустраций?
- 2. В каких решетках возможны фрустрации?
- 3. Существуют ли качественные и количественные критерии?

Выводы (о фрустрациях)

- Фрустрации и фазовые переходы это взаимоисключающие явления.
- Фрустрации могут существовать в решетках любой размерности.
- Фрустрации могут существовать или отсутствовать в одной и той же решетке, но для разных моделей.
- Фрустрации могут существовать не только при наличии конкурирующих взаимодействий, но и при наличии одного взаимодействия.
- Существование фрустраций это свойство модели. Они возникают только при специфических численных соотношениях параметров взаимодействия.
- Внешнее магнитное поле и давление могут как порождать, так и подавлять фрустрации, и эти явления зависят не только от соотношений между параметрами взаимодействия и величины поля, но и от направления поля.
- При переходе через точку фрустраций всегда происходит кардинальное изменение структуры.

Почему экспериментаторы часто не видят фрустраций??!

 $O(N) / O(N-P) \Rightarrow S_{I} \otimes O(N) / O(N-P)$ $S_{L} = 1, Z_{2}, Z_{3} \dots; P = \overline{1, N};$ Решетка STA имеет симметрию при $J_2 = 0$ 1. O(N)/O(N-2) или $Z_2 \otimes SO(2)$ N = 2 при N > 2 SO(N)/SO(N-2)2. $0.125 \le J_1 / J_2 \le 1$ $Z_3 \otimes O(N) / O(N-1)$ $Z_3 \otimes SO(2)$ при N = 2 $Z_3 \otimes SO(N)/SO(N-1)$ при N > 2 3. $J_1/J_2 > 1$ - группа симметрии $Z_3 \otimes O(N) / O(N-2)$ ДЛЯ $Z_3 \otimes Z_2 \otimes SO(2)$ N = 2 ДЛЯ $Z_3 \otimes SO(3)$ N = 3ДЛЯ $Z_3 \otimes SO(N)/SO(N-2)$ $N \ge 4$

Симметрия фрустрированных систем

 $O(N) \Rightarrow$ - ортогональная трансформ группа в N - мерном Евклидовом пространстве $O(N) \equiv Z_2 \otimes SO(N) \qquad \qquad H = -J_i \sum (\vec{S}_i \vec{S}_j)$ *SO*(*N*) - специальная ортогональная группа, $|\vec{S}_i| = 1$ *Z*₂ - изинговская группа зеркального отражения. Для модели Поттса симметрия - Z_a O(N) $T > T_c$ O(N-1) $T < T_c$ $O(1) \equiv Z_2$ $O(0) \equiv 1$ $SO(1) \equiv 1$ O(N)/O(N-1) $O(1) / O(0) = Z_2$ N = 1O(2)/O(1) = SO(2) N = 2 $O(N) \equiv Z_2 \otimes SO(N)$ N > 2D. Loison, 2005, (Обзор), р. 4.

 $O(N) \rightarrow O(N)/O(N-P) \Rightarrow S_L \otimes O(N)/O(N-P)$





Универсальность (классическая)!

Класс универсальности критического поведения зависит:

- 1. От размерности пространства d;
- 2. От числи компонент параметра порядка n;
- 3. От радиуса характерного взаимодействия;
- 4. От симметрии системы;
- 5. От еще чего-нибудь ???

Критич.	Класс универсальности, d=3.					
параметр	Изинг (n=1)	ХУ (n=2)	Гейз. (n=3)			
1 / <i>T</i> _c	0.2216595	0.4542	0.6930			
ν	0.6305	0.671	0.706			
α	0.108	-0.012	-0.117			
β	0.3265	0.3485	0.366			
γ	1.239	1.315	1.386			
η	0.037	0.040	0.038			
δ	4.795	4.773	4.8187			

Скейлинг!

Дипольный;
 Полимерный.

- 1. L-класс;
- 2. U-класс;
- 3. UL-класс;
- 4. UTL-класс.

Универсальность (в системах с фрустрациями)!

Класс универсальности фрустрированных систем зависит:

- 1. От размерности пространства d;
- 2. От числи компонент параметра порядка n;
- 3. От радиуса характерного взаимодействия;
- 4. От симметрии системы;
- 5. От еще чего-нибудь ???

Критич. параметр	Клас	с универсальнос фрустрация	STA – Stacked	
	Гейз. (n=3)	ХУ (n=2), STA		
1 / <i>T</i> _c	0.6930			Antilerromagnetic
ν	0.706	0.54(2)	0.59(2)	
α	-0.117	0.34(6)	0.24(8)	Фиксированная точка
β	0.366	0.253(10)	0.30(2)	Zumbach (1994).
γ	1.386	1.13(5)	1.17(7)	В этой точке имеем
v _k		0.55(2)	0.60(3)	«ФП почти второго рода»
β _k		0.45(2)	0.55(4)	$\gamma/\nu=2-\eta \rightarrow \gamma/\nu=2-\eta+c$
γ_k		4.77(5)	0.72(8)	

Универсальность (не классическая)!



1. Дипольный:

```
Изинг - α=0; β=1/2; γ=1; Гейзенберг - α=-0.135; β=0.381; γ=1.372.
```

```
2. Полимерный - α=0.235; β=0.3025; γ=1.160.
```



С – средняя доля соседних вершин, соединенных с заданной вершиной



Главное условие степенного закона распределения - избирательность

- 1. ФП в многих системах не зависят от конкретных свойств объектов (сети!!!);
- 2. Много явлений подчиняющихся степенным законам распределения (избирательность);
- 3. Динамика сетей!!!

Большой мир !!

Интерес к этим моделям обусловлен следующими основными причинами:

- 1. При изучении ФС вопрос о существовании нового кирального класса универсальности на многих решетках, в частности, треугольных до сих пор является дискуссионным;
- 2. Многие важные физические свойства ФС сильно зависят от геометрии решетки (от степени фрустрации). Такая зависимость может привести к сужению классов универсальности критического поведения, и этот вопрос все еще недостаточно полно изучен;
- 3. Первые попытки исследования этих моделей предпринимались в то время, когда мощности вычислительных машин и используемые алгоритмы метода МК не позволяли рассчитывать критические параметры с необходимой степенью точности.
- 4. До сих пор остается дискуссионным вопрос о зависимости критических индексов от изменения величины и знака межслойного обменного взаимодействия и вторых ближайших соседей.
- **5.** Какого рода ФП ???

РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕОРИИ

Критические индексы 3d модели Гейзенберга.

L _{max}	α	β	γ	v	η	Ref.
36(N=6)	-0.100	0.359	1.383	0.700	0.025	1

1. D. Loison ,A.I.Sokolov and et. JETP Letters 76, 337, (2000).

TABLE III. Critical exponents γ and η for N = 2 calculated within three-loop (approximant [3/1]) and two-loop (approximant [2/1]) approximations.

		1	2	3	4	5	6	7	8
γ	[3/1]	1	1.4260	1.3099	1.3360	1.3098	1.3355	1.3102	1.3357
-	$[2/1]^{a}$	1	1.4347	1.3218	1.3259	1.3218	1.3799	1.3218	1.3799
η	[3/1]	0	0.0257	0.0261	0.0261	0.0260	0.0261	0.0260	0.0261
	$[2/1]^{a}$	0	0.0273	0.0288	0.0287	0.0288	0.0286	0.0288	0.0286

u = 0.677 , $\alpha = -0.030$, $\beta = 0.347$

S.A. Antonenko and A.I. Sokolov, Phys. Rev. B V49 (1994)

3S. A. Antonenko, A. I. Sokolov, and B. N. Shalaev, Fiz. Tverd. Tela (Leningrad) **33**, 1447 (1991) [Sov. Phys. Solid State **33**, 815 (1991)].

ТЕОРИЯ!

TABLE IV. Critical exponents γ and η for N = 3 calculated within three-loop (approximant [3/1]) and two-loop (approximant [2/1]) approximations.

		1	2	3	4
γ	[3/1]	1	1.5164	1.3099	1.3291
	$[2/1]^{\mathbf{a}}$	1	1.5217	1.3218	1.3220
$\overline{\eta}$	[3/1]	0	0.0238	0.0261	0.0261
	$[2/1]^{\mathbf{a}}$	0	0.0246	0.0288	0.0286

S.A. Antonenko and A.I. Sokolov, Phys. Rev. B V49 (1994)

aS. A. Antonenko, A. I. Sokolov, and B. N. Shalaev, Fiz. Tverd. Tela (Leningrad) **33**, 1447 (1991) [Sov. Phys. Solid State **33**, 815 (1991)].

while point 4 in Table IV is characterized by $\nu = 0.673$, $\alpha = -0.020$, and $\beta = 0.345$.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Crystal	method	Ref.	α	β	γ	ν
CsMnBr_3	Neutron	[32]		0.22(2)		
CsMnBr_3	Neutron	[33]		0.25(1)		
CsMnBr_3	Neutron	[34]		0.24(2)		
CsMnBr_3	Neutron	[35]		0.21(2)	1.01(8)	0.54(3)
CsMnBr_3	Neutron	[36]			1.10(5)	0.57(3)
CsMnBr_3	Calorimetry	[37]	0.39(9)			
CsMnBr_3	Calorimetry	[40]	0.40(5)			
${ m RbMnBr_3}$	Neutron	[42]		0.28(2)		
${ m RbMnBr_3}$	Calorimetry	[43]	0.22-0.42			
CsCuCl_3	Calorimetry	[47]	$0.35(5)$ if $10^{-3} < t < 5 \times 10^{-2}$			
CsCuCl_3	Calorimetry	[47]	> 0.6 if $5 \times 10^{-5} < t < 5 \times 10^{-3}$			

Table 1. Experimental values of critical exponents for compound AXB_3 .

32. T.E. Mason, M.F. Collins, B.D. Gaulin, J. Phys. C 20, L945 (1987).

33. Y. Ajiro, T. Nakashima, Y. Unno, H. Kadowaki, M. Mekata, N. Achiwa, J. Phys. Soc. Jpn 57, 2648 (1988).

34. B.D. Gaulin, T.E. Mason, M.F. Collins, J.F. Larese, Phys. Rev. Lett. 62, 1380 (1989).

35. T.E. Mason, B.D. Gaulin, M.F. Collins, Phys. Rev. B 39, 586 (1989).

36. H. Kadowaki, S.M. Shapiro, T. Inami, Y. Ajiro, J. Phys. Soc. Jpn 57, 2640 (1988).

37. J. Wang, D.P. Belanger, B.D. Gaulin, Phys. Rev. Lett. 66, 3195 (1991).

40. R. Deutschmann, H.V. L"ohneysen, J. Wosnitza, R.K. Kremer, D. Visser, Euro. Phys. Lett. 17, 637 (1992).

42. T. Kato, T. Asano, Y. Ajiro, S. Kawano, T. Ihii, K. Iio, Physica B 213-214, 182 (1995).

43. T. Kato, K. Iio, T. Hoshimo, T. Mitsui, H. Tanaka, J. Phys. Soc. Jpn 61, 275 (1992).

47. H.B. Weber, T. Werner, J. Wosnitza, H.V. L"ohneysen, U. Schotte, Phys. Rev. B 54, 15924 (1996).

Crystal	Ref.	α	β	γ	ν
Thermal expansion	[50]	$1^{\rm st}$ order			
Calorimetry	[51]	0.27(2)			
Calorimetry	[37]	0.10 - 0.22			
Neutron	[52]			1.14(10)	0.57(4)
Neutron	[53]		0.3(1)	1.24(15)	0.54(4)
Neutron	[54]		0.39(2)		
Neutron	[55]		0.39(4)		
X-ray	[53]		0.37(1)		
X-ray	[56]		0.39(4)		

 Table 2. Experimental values of critical exponents for holmium.

- 50. D.A. Tindall, M.O. Steinitz, M.L. Plumer, J. Phys. F 7, L263 (1977).
- 51. K.D. Jayasuriya, S.J. Campbell, A.M. Stewart, J. Phys. F 15, 225 (1985).
- 37. J. Wang, D.P. Belanger, B.D. Gaulin, Phys. Rev. Lett. 66, 3195 (1991).
- 52. B.D. Gaulin, M. Hagen, H.R. Child, J. Phys. France Colloq. 49, C8-327 (1988).
- 53. T.R. Thurston, G. Helgesen, D. Gibbs, J.P. Hill, B.D. Gaulin, G. Shirane, Phys. Rev. Lett. 70, 3151 (1993); T.R. Thurston, G. Helgesen, J.P. Hill, D. Gibbs, B.D. Gaulin, P.J. Simpson, Phys. Rev. B 49, 15730 (1994).
- 54. P. Du Plessis, A.M. Venter, G.H.F. Brits, J. Phys.-Cond. 7, 9863 (1995).
- 55. J. Ecker, G. Shirane, Solid State Commun. 19, 911 (1976).
- 56. G. Helgesen, J.P. Hill, T.R. Thurston, D. Gibbs, J. Kwo, M. Hong, Phys. Rev. B 50, 2990 (1994).

method	Ref.	α	β	γ	ν
Thermal expansion	[57]	$1^{\rm st}$ order			
Calorimetry	[58]	$1^{\rm st}$ order			
Calorimetry	[59]	0.18(8)			
Calorimetry	[60]	0.24(2)			
Neutron	[52]			1.05(7)	0.57(5)
Neutron	[54]		0.38(2)		
Neutron	[61]		0.38(3)		
Neutron	[62]		0.39(1)		
Mössbauer	[63]		0.335(10)		

 Table 3. Experimental values of critical exponents for dysprosium.

57. S.W. Zochowski, D.A. Tindall, M. Kahrizi, J. Genosser, M.O. Steinitz, J. Magn. Magn. Mater. 54-57, 707 (1986). 58. H.U. Astr[°]om, G. Benediktson, J. Phys. F 18, 2113 (1988).

- 59. F.L. Lederman, M.B. Salomon, Solid State Commun. 15, 1373 (1974).
- 60. K.D. Jayasuriya, S.J. Campbell, A.M. Stewart, Phys. Rev B 31, 6032 (1985).
- 52. B.D. Gaulin, M. Hagen, H.R. Child, J. Phys. France Colloq. 49, C8-327 (1988).
- 54. P. Du Plessis, A.M. Venter, G.H.F. Brits, J. Phys.-Cond. 7, 9863 (1995).

61. P. Du Plessis, C.F. Van Doorn, D.C. Van Delden, J. Magn. Magn. Mater. 40, 91 (1983).

62. G.H.F. Brits, P. Du Plessis, J. Phys. F 18, 2659 (1988).

63. E. Loh, C.L. Chien, J.C. Walker, Phys. Lett. A 49, 357 (1974).

Table 4. Experimental values of critical exponents for ter-bium.

method	Ref.	α	eta	γ	ν
Calorimetry	[64]	0.20(3)			
Neutron	[65]		0.25(1)		
Neutron	[66]		0.23(4)		
Neutron	[67]				0.53
X-ray	[68]		0.21(2)		

64. K.D. Jayasuriya, A.M. Stewart, S.J. Campbell, E.S.R. Gopal, J. Phys. F 14, 1725 (1984). 65. O.W. Dietrich, J. Als-Nielsen, Phys. Rev. 162, 315 (1967).

66. C.C. Tang, P.W. Haycock, W.G. Stirling, C.C. Wilson, D. Keen, D. Fort, Physica B 205, 105 (1995).67. K.H. Hirota, G. Shirane, P.M. Gehring, C.F. Majkrzak, Phys. Rev. B 49, 11967 (1994); P.M.

Gehring, K.H. Hirota, C.F. Majkrzak, G. Shirane, Phys. Rev. L 71, 1087 (1993).

68. C.C. Tang, W.G. Stirling, D.L. Jones, A.J. Rolloson, A.H. Thomas, D. Fort, J. Magn. Magn. Mater. 103, 86 (1992).

МОНТЕ-КАРЛО РЕЗУЛЬТАТЫ

Critical exponents associated to the SO(2) symmetry by Monte Carlo for XY spins (N = 2) and a BS $Z_2 \otimes SO(2)$. ^(a)Calculated by $\gamma/\nu = 2 - \eta$. The first result⁵ comes from a study at high and low temperatures and uses the FSS. The second⁶ uses the Binder parameter to find T_c and uses the FSS, the third⁷ uses the maxima in FSS region.

system	Ref.	L_{max}	α	β	γ	ν	η	
STA	5	60	0.34(6)	0.253(10)	1.13(5)	0.54(2)	$-0.09(8)^{(a)}$	
STA	6	33	0.46(10)	0.24(2)	1.03(4)	0.50(1)	$-0.06(4)^{(a)}$	
STA	7	36	0.43(10)			0.48(2)		
STA	8	126			first order			
STA	9	35			first order			
bct	19	24		first order				
STAR	34	36	first order					
$V_{2,2}$	34	36	first order					

5. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. 61, 1299 (1992), 58, 584 (1989), 56,474 (1987), 55, 2095 (1986)

6. M.L. Plumer and A. Mailhot, Phys. Rev. B 50, 16113 (1994)

7. E. H. Boubcheur, D. Loison, and H.T. Diep, Phys. Rev. B 54, 4165 (1996)

8. M. Itakura, J. Phys. Soc. Jpn 72, 74 (2003)

9. M.L. Plumer and A. Mailhot, J. Phys: Condens. Matter. 9, L165 (1997)

19. H.T. Diep, Europhys. Lett. 7, 725 (1988), Phys. Rev. B 39, 397 (1989)

34. D. Loison and K.D. Schotte, Eur. Phys. J. B 5, 735 (1998)

Critical exponents associated to the Z_2 symmetry (chirality κ) by Monte Carlo for XY spins (N = 2) and a BS $Z_2 \otimes SO(2)$. ^(a)Calculated by $\gamma/\nu = 2 - \eta$. The first result ⁵ comes from a study at high and low temperature and uses of FSS. The second ⁶ uses the Binder parameter to find T_c and uses the FSS.

system	Ref.	L_{max}	α	eta_{κ}	γ_{κ}	$ u_{\kappa}$	η_{κ}		
STA	5	60	0.34(6)	0.55(4)	0.72(8)	0.60(3)	$0.80(19)^{(a)}$		
STA	6	33	0.46(10)	0.38(1)	0.90(2)	0.55(1)	$0.28(3)^{(a)}$		
STA	8	126		first order					
STA	9	35			first ord	er			
\mathbf{bct}	19	24			first ord	er			
STAR	34	36	first order						
$V_{2,2}$	34	36		first order					

5. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. 61, 1299 (1992), 58, 584 (1989), 56,474 (1987), 55, 2095 (1986) 6. M.L. Plumer and A. Mailhot, Phys. Rev. B 50, 16113 (1994)

8. M. Itakura, J. Phys. Soc. Jpn 72, 74 (2003)

9. M.L. Plumer and A. Mailhot, J. Phys: Condens. Matter. 9, L165 (1997)

19. H.T. Diep, Europhys. Lett. 7, 725 (1988), Phys. Rev. B 39, 397 (1989)

34. D. Loison and K.D. Schotte, Eur. Phys. J. B 5, 735 (1998)
Critical exponents by Monte Carlo for Heisenberg spins (N = 3) and a BS SO(3). Calculated by ^(a) $\gamma/\nu = 2 - \eta$, ^(b) $d\nu = 2 - \alpha$, ^(c) $2\beta/\nu = d - 2 + \eta$.

system	Ref.	L_{max}	α	β	γ	ν	η		
STA	5	60	0.240(80)	0.300(20)	1.170(70)	0.590(20)	$+0.020(180)^{(a)}$		
STA	10	36	$0.242(24)^{(b)}$	0.285(11)	1.185(3)	0.586(8)	$-0.033(19)^{(a)}$		
STA	12	48	$0.245(27)^{(b)}$	0.289(15)	1.176(26)	0.585(9)	$-0.011(14)^{(a)}$		
STA	11	36	$0.230(30)^{(b)}$	0.280(15)		0.590(10)	$0.000(40)^{(c)}$		
bct	20	42	$0.287(30)^{(b)}$	0.247(10)	1.217(32)	0.571(10)	$-0.131(18)^{(a)}$		
STAR	35	42	$0.488(30)^{(b)}$	0.221(9)	1.074(29)	0.504(10)	$-0.131(13)^{(a)}$		
$V_{3,2}$	35	40	$0.479(24)^{(b)}$	0.193(4)	1.136(23)	0.507(8)	$-0.240(10)^{(a)}$		
$V_{3,2}$	8	80	first order						

- 5. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. 61, 1299 (1992), 58, 584 (1989), 56,474 (1987), 55, 2095 (1986) 8. M. Itakura, J. Phys. Soc. Jpn 72, 74 (2003)
- 10. M.L. Plumer and A. Mailhot, Phys. Rev. B 50, 6854 (1994)
- 11. D. Loison and H.T. Diep, Phys. Rev. B 50, 16453 (1994)
- 12. T. Bhattacharya, A. Billoire, R. Lacaze and Th. Jolicoeur, J. Phys. I (Paris) 4, 181 (1994)
- 20. D. Loison, Physica A 275, 207 (1999)
- 35. D. Loison and K.D. Schotte, Eur. Phys. J. B 14, 125 (2000)

Critical exponents by Monte Carlo for spins with four components (N = 4) and a BS $O(4)/O(2) \equiv SO(4)/SO(2)$. Calculated by ^(a) $\gamma/\nu = 2 - \eta$, ^(b) $d\nu = 2 - \alpha$.

system	Ref.	L_{max}	α	β	γ	ν	η
STAR	36	42	$0.287(27)^{(b)}$	0.291(11)	1.133(28)	0.571(9)	$+0.015(18)^{(a)}$
$V_{4,2}$	36	40	$0.278(30)^{(b)}$	0.290(12)	1.142(34)	0.574(10)	$+0.011(25)^{(a)}$

Table 8. Critical exponents by Monte Carlo for spins with six components (N = 6) and a BS $O(6)/O(4) \equiv SO(6)/SO(4)$. Calculated by ^(a) $\gamma/\nu = 2 - \eta$, ^(b) $d\nu = 2 - \alpha$.

system	Ref.	L_{max}	α	β	γ	ν	η
STA	13	36	$-0.100(33)^{(b)}$	0.359(14)	1.383(36)	0.700(11)	$+0.025(20)^{(a)}$

 D. Loison, A.I. Sokolov, B. Delamotte, S.A. Antonenko, K.D. Schotte and H.T. Diep, JETP Letters 76,337 (2000)
 D. Loison and K.D. Schotte, Submitted to Eur. Phys. J. B Table 9.1. The estimates of the critical temperature and the exponents for the three dimensional spin glass models. The entries are categorized into three groups according to the anisotropy; easy-axis (top), isotropic (middle), and easy-plane (bottom). The entries with "*" are not quoted in the original paper but estimated through the scaling relations by the present authors. The entries with "c" are for the chiral glass transition.

Authors	Material/Model	$T_{\rm c}/J$	ν	η	β	γ	Z
Gunnarsson et al. ⁵⁶	FeMnTiO		1.7	-0.35	0.54	4.0(3)	6.2
Ogielski ⁴⁷	Ising, $\pm J$	1.175(25)	1.3(1)	-0.22(5)	0.5	2.9(3)	6.0(5)
Bhatt-Young ⁴⁶	Ising, $\pm J$	$1.2^{+0.1}_{-0.2}$	1.3(3)	-0.3(2)	0.46*	3.2	—
Singh-Chakravarty ⁵⁷	Ising, $\pm J$	1.2(1)	—			2.9(5)	—
Bhatt-Young ⁵⁸	Ising, Gaussian	0.9	1.6(4)	-0.4(2)			
Kawashima-Young ⁴⁹	Ising, $\pm J$	1.11(4)	1.7(3)	-0.35(5)	0.55*	4.0*	
Iñigues <i>et al.</i> ⁵⁹	Ising, Gaussian	1.02(5)	1.5(3)			—	
Marinari <i>et al</i> . ⁶⁰	Ising, Gaussian	0.98(5)	2.00(15)	-0.36(6)	0.64*	4.72*	
Berg-Janke ⁶¹	Ising, $\pm J$	0.88		-0.37(4)	—	—	
Palassini-Caracciolo ⁵⁰	Ising, $\pm J$	1.156(15)	1.8(2)	-0.26(4)	0.65*	4.1(5)	
Mari-Campbell ⁶²	Ising, $\pm J$	1.19(1)	1.33(5)	-0.22(2)	0.52^{*}	2.95(15)	
Ballesteros et al. ⁵¹	Ising, $\pm J$	1.138(10)	2.15(15)	-0.337(15)	0.73*	5.0*	
Mari-Campbell ⁶³	Ising, $\pm J$	1.195(15)	1.35(10)	-0.225(25)	0.55*	2.95(30)	5.65(15)
Nakamura <i>et al.</i> ⁶⁴	Ising, $\pm J$	1.17(4)	1.5(3)	-0.4(1)	0.45*	3.6(6)	6.2(2)
de Courtenary et al. ⁶⁵	CuMn,AgMn		1.4*	0.4*	1.0(1)	2.2(1)	
Bouchiat ⁶⁶	AgMn		1.4*	0.4*	1.0(1)	2.2(2)	—
Levy-Ogielski ⁶⁷	AgMn		1.3(2)	0.4*	0.9(2)	2.1(1)	5.5
Simpson ⁶⁸	CuAlMn		1.3*	0.5*	1.0*	1.9*	—
Coles-Williams ⁶⁹	PdMn		1.3*	0.4*	0.90(15)	2.0(2)	
Vincent-Hamman ⁷⁰	CdCrInS		1.25(25)	0.2*	0.75(10)	2.3(4)	5.5
Kawamura ⁷¹	Heisenberg, Gaussian	$0.157(10)^{c}$	—		$1.1(1)^{c}$		—
Hukushima-Kawamura ⁷²	Heisenberg, Gaussian	$0.160(5)^{c}$	1.2^{c}	0.8 ^c	$1.1(1)^{c}$	$1.5(3)^{c}$	—
Matsubara <i>et al</i> . ⁷³	Heisenberg, $\pm J$	0.18	—	—	—		—
Nakamura-Endoh ⁷⁴	Heisenberg, $\pm J$	$0.21 {+0.01 \atop -0.03}$	1.1(2)	0.3*	0.72(6)	1.9(4)	4.5
Lee-Young ⁷⁵	Heisenberg, Gaussian	0.16(2)	1.1(2)	—		—	
Nakamura et al. ⁶⁴	Heisenberg, $\pm J$	0.20(2)	0.8(2)	-0.3(3)		1.9(5)	6.2(5)
Kawamura-Li ⁷⁶	$XY, \pm J$	0.39(3) ^c	$1.2(2)^{c}$	$0.15(20)^{c}$			$7.4(10)^{c}$
Lee-Young ⁷⁵	XY, Gaussian	0.34(2)	1.2(2)	—			
Nakamura <i>et al.</i> ⁶⁴	$XY, \pm J$	0.43(3)		-0.4(2)			6.8(5)

Трудность исследования:

проблема многочисленных локальных минимумов энергии

Большинство экспериментальных и теоретических методов сталкиваются с серьёзными трудностями.



Поведение структуры рельефа свободной энергии при понижении температуры.

Это привело к тому, что ФП и КЯ в ФС исследуются методами ВФ.

Повышают эффективность:

- 1. Репличные алгоритмы, алгоритмы с плоским распредел.
- 2. Усреднение по начальным конфигурациям
- 3. Специальные методы анализа данных



Классическое основное состояние – 120⁰ структура. В основном состоянии система вырождена

Обменная энергия для б и в одинакова,

но конфигурации различны





Элементарный спиновый треугольник в антиферромагнетиках с треугольной решеткой.

Магнитный параметр порядка:

M_A, *M_B* и *M_C* - намагниченности трех подрешеток, соответственно.

 $m = \frac{3}{N} \sqrt{\left\langle M_A^2 + M_B^2 + M_C^2 \right\rangle / 3}$ $\left\langle \left| \vec{M}_r \right| \right\rangle = \left\langle \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \right\rangle$ r = A, B, C

Киральный
параметр порядка:
Р- нумерует треугольные
плакеты $m_k = \frac{1}{N} \sum_p m_{k_p}$ Восприимчивость: $m_{k_p} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle y \rangle} [S_i \times S_j]_p$ $m_{k_p} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle y \rangle} [S_i \times S_j]_p$ $m_{k_p} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle y \rangle} [S_i \times S_j]_p$ $m_{k_p} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle y \rangle} [S_i \times S_j]_p$ $m_{k_p} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle y \rangle} [S_i \times S_j]_p$ $m_{k_p} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle y \rangle} [S_i \times S_j]_p$ $m_{k_p} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle y \rangle} [S_i \times S_j]_p$



Анализ данных на основе теории конечно-размерного скейлинга (КРС)

$$F(T,L) = L^{-d}F(tL^{1/\nu}),$$

$$C(T,L) \sim L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}),$$

 $\chi(T,L) \sim L^{\gamma/\nu} \chi_0(t L^{1/\nu}),$

L>>1, t<<1. T=T_c
$$m \sim L^{-\beta/\nu}$$
, $\chi \sim L^{\gamma/\nu}$

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - AL^{\alpha_{\nu}}$$

$$\ln(\chi/L^2) = c - \eta \ln L$$

$$\frac{k_B T_C(L)}{J} = \frac{k_B T_C}{J} + \alpha L^{-1/\nu},$$

$$m(T,L) \sim L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}),$$

$$V_{i} = \frac{\left\langle m^{i} E \right\rangle}{\left\langle m^{i} \right\rangle} - \left\langle E \right\rangle$$

$$U_L = 1 - \frac{\left\langle m^4 \right\rangle}{3 \left\langle m^2 \right\rangle^2}$$

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}$$



Анализ данных на основе теории (КРС)

 $m_k \propto L^{-\beta_k/\nu_k}$ $\chi_k \propto L^{\gamma_k/\nu_k}$





(*i*=1, 2, 3, 4).

Для определения киральных критических параметров

Анализ данных на основе теории конечноразмерного скейлинга с учетом поправки *@*.



где $b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6$ – амплитуды коррекции к скейлингу, ω -индекс коррекции к конечно-размерному скейлингу. $\omega = 0.78$. Модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями на квадратной решетке





Фрустрации существуют только:

$$J_1 + J_2 = 2J_3 + 2J_4$$

(при $J_1 < 0, J_2 < 0, J_3 < 0, J_4 < 0$),
или $J_1 + J_2 = -2J_3 - 2J_4$
(при $J_1 > 0, J_2 > 0, J_3 < 0, J_4 < 0$).

В нашем случае: $J_1 = J_2$ и $J_3 = J_4$

Условия эксперимента

$$L \times L = N, \ L = 20 \div 150 - размеры систем$$

 $0.1 \le r < 1 - отношения $r = J_2 / J_1$
 $\tau_0 = 4 \times 10^5$ МК-шагов/спин - неравновесный участок
 $\tau = 100 \tau_0$ МК-шагов/спин - усреднение вдоль цепи (Ns=300)$

$$C = (NK^{2}) \left(\left\langle U^{2} \right\rangle - \left\langle U \right\rangle^{2} \right),$$

$$\chi = \begin{cases} (NK) \left(\left\langle m^2 \right\rangle - \left\langle |m| \right\rangle^2 \right), T < T_N \\ (NK) \left\langle m^2 \right\rangle, \qquad T \ge T_N \end{cases}$$

$$m_{\lambda} = \frac{4}{N} \sum_{i \in \lambda} S_i,$$
 где $\lambda = 1, 2, 3, 4,$
 $m^a = [m_1 + m_2 - (m_3 + m_4)]/4,$
 $m^b = [m_1 + m_4 - (m_2 + m_3)]/4,$
 $m = \sqrt{(m^a)^2 + (m^b)^2.}$

 $K = |J| / k_B T,$

где *m*1, *m*2, *m*3, *m*4 – параметры порядка по подрешеткам



Восприимчивость









r=1



Теплоемкость

Восприимчивость

Фазовая диаграмма

Physica B: Condensed Matter (2015r)

Значения критических индексов

r	T _N	V	α	β	Ŷ	η	α+2β+γ=2
1.0	2.081(1)	0.830(1)	0.35(1)	0.09(1)	1.45(1)	0.25(1)	1.98
0.95	1.955	0.82	0.36	0.09	1.44	0.24	1.98
0.9	1.829	0.80	0.41	0.09	1.43	0.22	2.02
0.8	1.567	0.78	0.46	0.10	1.37	0.24	2.03
0.7	1.289	0.74	0.51	0.10	1.28	0.26	1.99
0.4	0.873	1.01	0.01	0.11	1.75	0.25	1.98
0.3	1.258	0.99	0.01	0.12	1.76	0.23	2.01
0.2	1.612	0.99	0.01	0.11	1.76	0.23	1.99
0.1	1.952	1.01	0.01	0.12	1.76	0.26	2.01
0.0	2.268	1	0.01	0.13	1.75	0.25	2.02
Onsager	2.262	1	0	0.125	1.75	-	2

A. R. Anjos, J. R. Viana, J. R. Sousa, *Physics Letters* A 372, 1180 (2008).

Выводы:

 С использованием репличного алгоритма метода Монте-Карло Исследована 2d модель Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей.

2. Подтверждено, что при значении r=0.5 в системе наблюдается фрустрированное состояние.

3. Показано, что для всех значений из интервала 0.1 ≤ *r* < 1 (кроме r=0.5) наблюдается фазовый переход второго рода.

 Обнаружено, что в интервале *r* [0.0, 0.4] система проявляет универсальное критическое поведение, а в интервале значений *r* [0.7, 1.0] – неуниверсальное.

2. СЛОИСТАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА НА КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ С УЧЕТОМ ВНУТРИСЛОЙНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ВТОРЫХ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ.

$$\mathbf{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l)$$

где $S_i = \pm 1$ – изинговский спин. Первый член в формуле (1) характеризует АФ взаимодействие ($J_1 < 0$). Второй - АФ взаимодействие следующих ближайших соседей ($J_2 < 0$). Рассматривается случай, когда $r=J_2/J_1=1$.

Магнитная структура основного состояния для соседних слоев.

Гистограмма распределения энергии для L=16.

Гистограмма распределения энергии для *L*=60 и *L*=90.

Зависимость кумулянта Биндера *U*_L от температуры *k*_B*T/*|*J*|.

Зависимость параметра V_i от размеров системы L при $T=T_N$.

Зависимость параметра порядка *т* восприимчивости χ от линейных размеров системы *L* при *T*=*T*_N.

Критический параметр	Наши данные (*)	[1]	[2]	модель Изинга [3]	
α	0.330(5)	0.33(5)	0.32(2)	0.108(9)	ФП 2
β	0.245(5)	-	0.25(2)	0.3265(25)	родаШ
γ	1.190(5)	-	-	1.239(4)	рода
ν	0.549(5)	0.55(2)	0.56(2)	0.6305(25)	
η	-0.16(5)	-0.28(6)	-0.10(2)	0.037(3)	
T _N	4.1730(3)	1.355(2)	1.347(1)	4.5111(3)	???)

1. H. T. Diep, P. Lallemand, and O. Nagai, J. Phys. C: Solid State Phys., 18, 1067 (1985).

2. L. W. Bernardi, at. al. J. Phys. A: Mathematical and General, 32, 1787 (1999).

3. J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, Phys. Rev. B 21, 3976 (1980).

(*) Муртазаев А.К. Письма в ЖЭТФ, 101, с. 793, (2015)

3. МОДЕЛЬ ИЗИНГА НА ОБЪЕМО-ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ С ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ ВТОРЫХ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

$$\mathbf{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) + J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l)$$

где S_{i,j,l}=±1 – изинговский спин. Первый член учитывает взаимодействие ближайших соседей J₁>0, а второй – вторых ближайших соседей J₂>0. k=J₂/J₁

температуры $k_B T/|J|$ для разных k.

температуры $k_B T/|J|$ для разных k.

Зависимость критической температуры от величины взаимодействия вторых соседей.

I – АФ фаза,

II – парамагнитная фаза,

III – АФ фаза 2-го типа [1,2].

1. J.R. Banavar, at.al. Phys. Rev. B 20, 3820 (1979).

2. M.J. Velgakis and M. Ferer. Phys. Rev. B 27, 401 (1983).

Показано, что во всем интервале 0.0≤*k*≤1.0 наблюдается фазовый переход второго рода.

Распределение энергии для случая *k*=0.0.

Распределения энергии для случая *k*=0.8.

Муртазаев А.К.... ЖЭТФ, 147, с. 127, (2015)

Выводы самые общие:

1. Фрустрации есть почти всегда и везде!!!

2. Почти всегда и везде их не видно!!!


1791

Michael Faraday (1791-1867)

Спасибо за внимание !!!