

"УТВЕРЖДАЮ"

Врио директора ФГБУН Института
физики им. Х.И. Амирханова
Дагестанского научного центра РАН,
кандидат физико-математических наук

 / К.Ш. Хизриев

« ____ » _____ 2018 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра Российской академии наук

Диссертация «Фазовые переходы и критические свойства спиновых решеточных моделей с конкурирующими взаимодействиями» выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Института физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра Российской академии наук (ФГБУН Институт физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН), в лаборатории «Вычислительной физики и физики фазовых переходов».

В период подготовки диссертации соискатель Курбанова Джума Рамазановна работала в ФГБУН Института физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН с 2013 г. по настоящее время в должности младшего научного сотрудника.

С 2013 г. по 2015 г. обучалась очно в аспирантуре ФГБУН Института физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».

Кандидатский экзамен по предмету «История и философия науки» сдан в 2013 г., по иностранному языку - в 2014 г. и по специальности «Физика конденсированного состояния» - в 2018 г. Соответствующие удостоверения о сдаче кандидатских экзаменов выданы в 2018 г.

Научный руководитель – член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор Муртазаев Акай Курбанович, заведующий лабораторией «Вычислительной физики и физики фазовых переходов» ФГБУН Института физики им.

Х.И. Амирханова ДНЦ РАН, утвержден на заседании Ученого совета Института физики ДНЦ РАН от 15 сентября 2014г. (протокол № 8).

Научный консультант – кандидат физико-математических наук, Рамазанов Магомедшейх Курбанович, ведущий научный сотрудник лаборатории «Вычислительной физики и физики фазовых переходов» ФГБУН Института физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН, утвержден на заседании Ученого совета Института физики ДНЦ РАН от 15 сентября 2014г. (протокол № 8).

ПРИСУТСТВОВАЛИ: Врио директора ФГБУН Института физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН, кандидат физ.-мат. наук Хизриев К.Ш., врио председателя ДНЦ РАН, член-корр. РАН, доктор физ.-мат. наук, профессор, зав. лабораторией «Вычислительной физики и физики фазовых переходов» Муртазаев А.К., ученый секретарь ФГБУН Института физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН кандидат физ.-мат. наук Ибаев Ж.Г., зам. директора ФГБУН Института физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН, доктор физ.-мат. наук, зав. лабораторией «Теплофизика и термоэлектричество» Каллаев С.Н., доктор физ.-мат. наук, зав. лабораторией «Оптические явления в конденсированных средах» Бабаев А.А., зав. лабораторией «Физика низких температур и сверхпроводимости», кандидат физ.-мат. наук Алиев А.М., зав. сектором теоретической физики, кандидат физ.-мат. наук Агаларов А.М., зав. лабораторией «Термодинамика жидкости и критических явлений», кандидат физ.-мат. наук Расулов С.М., зав. лабораторией «Физика полупроводников и полупроводниковых структур», кандидат физ.-мат. наук Гаджиев Г.М., зав. сектором биофизики, кандидат физ.-мат. наук Магомедов М.А., вед. научн. сотр., кандидат физ.-мат. наук Сайпуллаева Л.А., вед. научн. сотр., кандидат физ.-мат. наук Рамазанов М.К., вед. научн. сотр., кандидат физ.-мат. наук Бабаев А.Б., ст. науч. сотр., кандидат физ.-мат. наук Арсланов Т.Р., вед. научн. сотр., кандидат тех. наук Мирская В.А., вед. научн. сотр., кандидат физ.-мат. наук Гаджиев Г.Г., ст. науч. сотр., кандидат физ.-мат. наук Бадиев М.К. и другие.

По результатам рассмотрения диссертации «Фазовые переходы и критические свойства спиновых решеточных моделей с конкурирующими взаимодействиями» принято следующее заключение:

Актуальность темы диссертационной работы обусловлена тем, что фрустрация, как результат конкурирующих взаимодействий, является источником вырождения и беспорядка, и приводит к появлению новых и интересных физических явлений. На сегодняшний день недостаточно хорошо изучено влияние фрустраций на природу фазовых переходов, тепловые, термодинамические, критические и магнитные свойства

магнитных материалов. Наличие фрустраций приводит к существенному изменению ряда свойств фундаментального характера. Среди них можно отметить проблемы, связанные с определением характера фазового перехода, с особенностями и факторами, влияющими на формирование классов универсальности магнитного критического поведения фрустрированных спиновых систем, с влиянием фрустраций на критические и магнитные свойства магнитных материалов и др. Решение этих вопросов требует тщательного исследования спиновых систем с фрустрациями. Имеющиеся результаты теоретических исследований не проясняют ситуацию. Часть результатов свидетельствуют о наличии в таких системах фазового перехода второго рода, а часть – в пользу наличия слабо выраженного фазового перехода первого рода. Сложной выглядит ситуация и с экспериментальными исследованиями. Большинство результатов свидетельствуют о наличии в фрустрированных спиновых системах фазового перехода второго рода. При этом критические параметры сильно отличаются друг от друга не только рассчитанные разными авторами, но и в зависимости от экспериментального метода и методики расчета. Наиболее надежными методами исследования такого рода систем являются методы вычислительной физики, в частности, методы Монте-Карло. Эти методы позволяют исследовать сложные модельные системы, в том числе и учитывающие взаимодействие не только ближайшего окружения. Учет взаимодействия вторых ближайших соседей в таких системах может приводить к возникновению фрустрированного состояния, а также к смене рода фазового перехода. Особенности фазового перехода при разных значениях соотношения обменных взаимодействий между первыми J_1 и вторыми ближайшими соседями J_2 известны лишь в общих чертах. Следовательно, **актуальность** исследования сложных спиновых решеточных моделей с конкурирующими взаимодействиями не вызывает сомнения.

Научная новизна обусловлена основными положениями, которые выносятся на защиту:

- Фазовая диаграмма модели Изинга с взаимодействиями первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей на двухмерной квадратной решетке. Доказательство (численное) возникновения частично фрустрированного состояния при $k=J_2/J_1=0.5$.
- Расчет критических параметров и определение класса универсальности критического поведения в диапазоне $k \leq 0.5$. Расчет критических параметров (T_N , α , β , γ , ν , η) и демонстрация отсутствия универсальности критического поведения при $0.67 \leq k \leq 1.0$.

- Фазовая диаграмма модели Изинга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей.
- Расчет критических параметров, определение класса универсальности критического поведения в интервале $0 \leq k < 2/3$. Определение критических параметров и доказательство отсутствия универсальности критического поведения в диапазоне $0.75 < k \leq 1.0$.
- Фазовая диаграмма модели Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей.
- Расчет критических параметров и определение класса универсальности критического поведения в интервале $0 \leq k \leq 2/3$.
- Доказательство (численное) отсутствия полностью фрустрированного состояния в моделях Изинга и Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей.
- Разработка сложного комплекса программ для ЭВМ, основанного на использовании современных высокоэффективных алгоритмов, позволяющего проводить высокоточные исследования статических критических явлений в моделях фрустрированных спиновых систем.

Практическая ценность работы состоит в том, что:

Полученные в диссертации результаты по исследованию фазовых переходов и статических критических свойств фрустрированных спиновых решеточных моделей представляют интерес для дальнейших исследований в теории магнетизма, физики фазовых переходов и статистической теории конденсированного состояния. Разработанный комплекс программ для ЭВМ формирует базу, на основе которой возможны высокоточные исследования фазовых переходов и статических критических явлений в фрустрированных спиновых системах.

Использование репличного алгоритма метода Монте-Карло для исследования моделей фрустрированных спиновых систем показало, что репличные алгоритмы являются ценным инструментом при исследовании фрустрированных систем. Они позволяют определять с высокой степенью надежности критические параметры системы и являются значительно более эффективными по сравнению с классическим алгоритмом (алгоритм Метрополиса). Эти алгоритмы успешно справляются с проблемой локальных энергетических минимумов, в решении которой другие алгоритмы метода МК (стандартный алгоритм Метрополиса и ряд других) оказались малоэффективными.

Применение алгоритма Ванга-Ландау показало, что это очень эффективный метод в преодолении энергетических барьеров путем итеративного определения плотности состояний, энергии и основного состояния системы.

Важным **практическим результатом** работы является демонстрация высокой эффективности использованных в ходе работы алгоритмов метода Монте-Карло для исследования фрустрированных спиновых систем.

Результаты численного эксперимента, полученные в данной работе, используются для чтения спецкурсов: «Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло», «Компьютерное моделирование в физике», «Методы вычислительной физики в магнетизме», а часть программ для ЭВМ при выполнении лабораторных работ по указанным спецкурсам в Дагестанском государственном университете.

Работа характеризуется логичностью построения, аргументированностью основных научных положений и выводов, а также четкостью изложения.

Основные положения диссертации получили полное отражение в 1 свидетельстве о государственной регистрации программы для ЭВМ и 34 научных работах, в том числе в изданиях, рекомендованных ВАК РФ – 5, и реферируемых изданиях – 6.

Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ:

Программа для исследования критических свойств модели Изинга на объёмно-центрированной кубической решетке репличным методом Монте-Карло / Курбанова Д.Р., А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев // 2017663606, дата регистрации 7.12.2017г.

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ:

1. Муртазаев А.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на объёмно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оглы, **Д.Р. Курбанова** // ЖЭТФ. - 2015. - Т. 147, вып. 1. - С. 127-131.
2. Муртазаев А.К. Критические свойства антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // Известия РАН. Серия физическая. - 2015. - Т. 79, № 11. - С. 1572-1575.
3. Муртазаев А.К. Исследование критических свойств модели Изинга на объёмно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия следующих

ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Я.К. Абуев, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // ФТТ. - 2017. - Т. 59, вып. 6. - С. 1082-1088.

4. Муртазаев А.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Я.К. Абуев, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова**, К.Ш. Муртазаев // Инженерная физика. - 2017. - Т. 8. - С. 78-83.
5. Муртазаев Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, **Д.Р. Курбанова**, М.К. Бадиев // ФТТ. - 2018. - Т. 60, вып. 6. - С. 1162-1165.

Публикации в реферируемых изданиях:

6. Муртазаев А.К. Магнитные и термодинамические свойства малых магнитных частиц с фрустрациями / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова**, Я.К. Абуев // Вестник ДНЦ РАН. - 2013. - № 51. - С. 18-22.
7. Муртазаев А.К. Модулированные структуры в магнитных наночастицах / А.К. Муртазаев, Ж.Г. Ибаев, Я.К. Абуев, Р.А. Муртазалиев, **Д.Р. Курбанова**, Т.А. Тааев, Н.А. Магомедов // Вестник ДНЦ РАН. - 2013. - № 50. - С. 9-12.
8. Муртазаев А.К. Влияние замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы и критические явления в магнитных наноструктурах, описываемых трехмерной моделью Поттса / А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева, М.А. Магомедов, Р.А. Муртазалиев, **Д.Р. Курбанова**, А.А. Муртазаева // Вестник ДГУ. - 2013. - Вып. 1. - С. 10-12.
9. Магомедов М.А. Численное моделирование процессов распространения лазерного излучения в цилиндрическом плазменном волноводе методами вычислительной физики / М.А. Магомедов, А.А. Муртазаева, Г.Ш. Шихсинов, Р.А. Муртазалиев, **Д.Р. Курбанова**, Н.А. Магомедов // Вестник ДГУ. - 2013. - Вып. 6. - С. 15-20.
10. Murtazaev A.K. Phase transitions in frustrated Ising antiferromagnet on a body-centered cubic lattice with next- nearest neighbor interactions / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, **D.R. Kurbanova** // Solid State Phenomena. - 2015. - Vol. 233-234. - P. 86-89.
11. Муртазаев А.К. Модель Изинга на треугольной решетке с взаимодействиями следующих ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Я.К. Абуев, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // Вестник ДГУ. - 2016. - Т. 31, вып. 4. - С. 64-70.

Результаты диссертации были представлены на: 16-м международном симпозиуме «Упорядочение в металлах и сплавах» ОМА-16 (Ростов-на-Дону, пос. Лоо,

2013); V Euro-Asian Symposium "Trends in MAGnetism": Nanomagnetism «EASTMAG-2013» (Krasnoyarsk, 2013); Moscow International Symposium on Magnetism «MISM» (Moscow, 2014); 17-м международном симпозиуме «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-17 (Ростов-на-Дону, пос. Южный, 2014); Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» (Нальчик, Ростов-на-Дону, Грозный, пос. Южный, 2014); VIII всероссийская конференция по «ФЭ – 2014» (Махачкала, 2014); II Всероссийская научная молодежная конференция «Актуальные проблемы нано- и микроэлектроники» (Уфа, 2014); Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» PSP&PT - 5 (Нальчик, Ростов-на-Дону, Грозный, пос. Южный, 2015); XI Международный семинар «Магнитные фазовые переходы», посвященный 80-летию член-корреспондента РАН Камилова И.К. (Махачкала, 2015); Международная конференция, посвященная 80-летию члена-корреспондента РАН И.К. Камилова «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах» (Махачкала, 2015); II Всероссийская конференция «Современные проблемы физики плазмы и физической электроники» (Махачкала, 2015); Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» (Нальчик, Ростов-на-Дону, Грозный, пос. Южный, 2016); IX Научно-практический семинар «Актуальные проблемы физики конденсированных сред» (Севастополь, 2016); VI Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism» «EASTMAG-2016» (Krasnoyarsk, 2016); Международная конференция «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах» (Махачкала, 2017); Moscow International Symposium on Magnetism «MISM» (Moscow, 2017).

Личный вклад автора: Все основные результаты получены автором лично или при его активном участии. Обработка результатов и постановка численных экспериментов проведено лично автором диссертации. Обсуждение результатов и подготовка публикаций выполнено совместно с соавторами. Формулировка защищаемых положений и выводов диссертации выполнены лично автором.

По тематике, методам исследования, предложенным новым научным положением, **диссертация соответствует паспорту специальности** научных работников 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния» в части области исследований: «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения.

