DOI: 10.51790/2712-9942-2023-4-3-01

# КРИТИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ СПИНОВОЙ МОДЕЛИ НА ПОЛНОСВЯЗНОМ ГРАФЕ ПРИ НАЛИЧИИ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

**Б. В. Крыжановский[а], В. И. Егоров[б]**
*Федеральное государственное учреждение «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук», г. Москва, Российская Федерация*
[а] *kryzhanov@mail.ru*, [б] ✍ *rvladegorov@rambler.ru*

*Аннотация*: рассмотрена спиновая система на полносвязном графе, состоящая из двух взаимодействующих подансамблей: спины, принадлежащие одну и тому же подансамблю, взаимодействуют ферромагнитным образом, а перекрестное взаимодействие между спинами разных подансамблей – антиферромагнитное. Введено условие сбалансированности системы, означающее, что число ближайших соседей для спина первого подансабля равно числу ближайших соседей у спина во втором подансамбле. Показано, что критические показатели и функция скейлинга сбалансированной системы кардинально отличаются от классических, присущих несбалансированной системе. Полученные результаты подтверждаются Монте-Карло симуляцией трехмерной слоистой спиновой модели, проведенной для сбалансированной и несбалансированной систем.

*Ключевые слова*: фазовый переход, слоистая среда, критическая температура, антиферромагнетик, полносвязный граф.

*Благодарности*: работа выполнена в рамках государственного задания ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН по теме № FNEF-2022-0003.

*Для цитирования*: Крыжановский Б. В., Егоров В. И. Критические показатели спиновой модели на полносвязном графе при наличии антиферромагнитного взаимодействия. *Успехи кибернетики*. 2023;4(3):7–18. DOI: 10.51790/2712-9942-2023-4-3-01.

*Поступила в редакцию: 28.07.2023.* *В окончательном варианте: 10.09.2023.*

# CRITICAL VARIABLES OF THE SPIN MODEL ON THE COMPLETE GRAPH IN THE PRESENCE OF ANTIFERROMAGNETIC INTERACTION

**B. V. Kryzhanovsky[a], V. I. Egorov[b]**
*Federal State Institution "Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences", Moscow, Russian Federation*
[a] *kryzhanov@mail.ru*, [b] ✍ *rvladegorov@rambler.ru*

*Abstract:* we studied the spin system on the complete graph consisting of two interacting sub-ensembles. The spins that belong to the same ensemble have ferromagnetic interactions; the inter-ensemble interactions are antiferromagnetic. We introduced the "balanced system" term, which defines the equality of the number of the nearest neighbors for spins of different sub-ensembles. It is shown that the critical variables and the scaling function are different from the classical ones of the unbalanced system. These results are confirmed by the Monte-Carlo simulation of the 3D layered spin model for both balanced and unbalanced systems.

*Keywords*: phase transitions, layered media, critical temperature, antiferromagnetic material, complete graph.

*Acknowledgements*: this study is a part of the FNEF-2022-0003 government order contracted to the Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences.

*Cite this article*: Kryzhanovsky B. V., Egorov V. I. Critical Variables of the Spin Model on The Complete Graph in the Presence of Antiferromagnetic Interaction. *Russian Journal of Cybernetics*. 2023;4(3):7–18. DOI: 10.51790/2712-9942-2023-4-3-01.

*Original article submitted: 28.07.2023.* *Revision submitted: 10.09.2023.*

## Введение

Магнитные свойства многослоевых суперрешеток активно изучаются как теоретически, так и экспериментально. Особое внимание уделяется многослойным структурам, состоящим из тонких слоев различных ферромагнитных и антиферромагнитных материалов [1–3]. Примером такой структуры являются материалы с чередованием ферромагнитных и неферромагнитных слоев. При этом толщина неферромагнитного слоя подбирается таким образом, чтобы дальнодействующее обменное взаимодействие между ферромагнитными слоями имело антиферромагнитный характер [4]. Материалы такого типа обладают гигантским магнитосопротивлением. В работах [5, 6] представлено теоретическое исследование на основе модели Гейзенберга ферромагнитных слоистых структур с антиферромагнитным межслоевым взаимодействием. В этих работах показано, что в данной системе может существовать множество различных фаз: ферромагнитная, антиферромагнитная, парамагнитная, завихренная. В работах [7, 8] было исследовано влияние слабого взаимодействия между двумя квадратными изинговыми решетками на фазовые переходы в них. Если в материале чередуются слои различных ферромагнитных материалов, то возможно возникновение температуры компенсации, то есть температуры ниже критической, при которой полная намагниченность решетки равна нулю [9–11].

В последнее время большое внимание уделяется исследованию спиновых систем с конкурирующими ферро- и антиферромагнитными взаимодействиями или наличием разупорядывающих взаимодействий между различными группами спинов [12–15]. Такие системы обычно имеют очень сложную поверхность свободной энергии с множеством локальных минимумов, отделенных от глобального глубокими потенциальными барьерами.

В данной работе рассмотрена спиновая система на полносвязном графе, имеющая, помимо глобального, ещё и локальный минимум энергии. Спины исследуемой системы разделены на две подгруппы (подансамбля). Взаимодействие спинов внутри подансамбля полагается ферромагнитным, а спины разных подансамблей могут взаимодействовать как ферромагнитно, так и антиферромагнитно. Для сравнения свойств рассматриваемой модели с реальными решетками было проведено Монте-Карло моделирование слоистой модели, где взаимодействие внутри слоя является ферромагнитным, а взаимодействие между спинами разных групп – антиферромагнитным. Результаты компьютерной симуляции подтверждают предсказания рассмотренной здесь модели.

**Описание модели**

Рассмотрим спиновую систему, определенную на полносвязном графе, разбитую на две группы I и II с числом спинов $p_1N$ и $p_2N$ в каждой ($N = p_1N+p_2N$, $p_1+p_2 = 1$). Связь между спинами в первой группе задана величиной $J_{11} = a_1/N$, связи во второй группе – величиной $J_{22} = a_2/N$, а перекрестные связи между спинами первой и второй групп – величиной $J_{12} = c/N$.

Для определенности дальнейших рассуждений будем считать, что взаимодействие спинов внутри каждой из групп ферромагнитное, между спинами разных групп – антиферромагнитное, а направление внешнего магнитного поля $H$ выбираем положительным: $a_1 \geq 0$, $a_2 \geq 0$, $c \leq 0$, $H \geq 0$. Случай $c > 0$ мы не рассматриваем, так как он детально исследован во множестве работ (см. ссылки в [17–19]).

Энергия такой системы, приходящая на один спин, имеет вид:

$$E = -\frac{1}{2}\left(a_1p_1^2m_1^2 + 2cp_1p_2m_1m_2 + a_2p_2^2m_2^2\right) - H(p_1m_1 + p_2m_2), \tag{1}$$

где

$$m_1 = \frac{1}{Np_1}\sum_{i=1}^{Np_1}\sigma_i, \quad m_2 = \frac{1}{Np_2}\sum_{j=1}^{Np_2}\sigma'_j, \quad M = p_1m_1 + p_2m_2. \tag{2}$$

Здесь $\sigma = \pm1$ и $\sigma' = \pm1$ – значения спинов групп I и II, соответственно, $m_1$ и $m_2$ – парциальные намагниченности этих групп, а $M$ – полная намагниченность системы. Суммы в (2) берутся по всем спинам соответствующих групп. Отметим, что выражение (1) в точности повторяет вид гамильтониана, исследуемого в теории среднего поля [17]. Соответственно, все получаемые здесь выражения мы будем сравнивать с теорией среднего поля.

Свободная энергия (нормированная на один спин) задается выражением [18]:

$$F = p_1S_1 + p_2S_2 + KE, \tag{3}$$

где $K$ – обратная температура и введены обозначения:

$$S_i = \frac{1+m_i}{2}\ln\frac{1+m_i}{2} + \frac{1-m_i}{2}\ln\frac{1-m_i}{2}, \quad i = 1, 2, \tag{4}$$

а уравнения состояния ($\partial F/\partial m_1 = 0$, $\partial F/\partial m_2 = 0$) имеют вид:

$$\begin{array}{l} \dfrac{1}{2K}\ln\dfrac{1+m_1}{1-m_1} = a_1p_1m_1 - |c|\,p_2m_2 + H \\ \dfrac{1}{2K}\ln\dfrac{1+m_2}{1-m_2} = a_2p_2m_2 - |c|\,p_1m_1 + H \end{array}. \tag{5}$$

Определим критическую температуру фазового перехода $K_c$. В случае $c \neq 0$, полагая $H = 0$ и $m_1 \to 0$, $m_2 \to 0$ ($K \to K_c$), из (5) получим:

$$K_c = \frac{2}{a_1p_1 + a_2p_2 + \sqrt{(a_1p_1 - a_2p_2)^2 + 4p_1p_2c^2}}. \tag{6}$$

Случай $c = 0$ мы рассматривать не будем, поскольку это тривиальная задача о системе, разбитой на две невзаимодействующие подсистемы.

**Условие баланса. «Критическое» значение $c = \bar{c}$**

Сбалансированной мы будем называть систему, в которой эффективное число «ближайших соседей» у спина в первом подансамбле равно эффективному числу «ближайших соседей» у спина во втором подансамбле (здесь и далее мы используем термины из теории среднего поля [17]). Это равенство имеет вид:

$$a_1p_1 + cp_2 = a_2p_2 + cp_1. \tag{7}$$

Действительно, спин первого подансамбля имеет $a_1p_1$ соседей из этого же подансамля и $cp_2$ соседей из другого подансамбя. Аналогично и для спина из второго подансамбля. Мы используем термин «эффективное» число соседей, поскольку соседи с антиферромагнитным взаимодействием вносят отрицательный вклад в это число.

Условие баланса (7) возможно только при определенном соотношении параметров взаимодействия. Для симметричной системы, в которой $a_1 = a_2$, из (7) следует, что система сбалансирована при любом значении $c$.

В более общем случае ($p_1 \neq p_2$) условие сбалансированности (7) можно записать в виде $c = \bar{c}$, где $\bar{c} < 0$ есть некоторое «критическое» значение антиферромагнитного взаимодействия:

$$\bar{c} = \frac{a_1p_1 - a_2p_2}{p_1 - p_2}, \quad \bar{c} < 0. \tag{8}$$

Отметим, что система может быть сбалансированной только в определенной области изменений параметров $p_{1,2}$ и $a_{1,2}$. Действительно, из (8) следует, что условие антиферромагнитности $\bar{c} < 0$ можно записать в виде:

$$\bar{c} < 0 \quad if \quad \begin{cases} \dfrac{a_2}{a_1 + a_2} \le p_1 < \dfrac{1}{2} \quad , \quad a_1 \ge a_2 \\ \dfrac{1}{2} < p_1 \le \dfrac{a_2}{a_1 + a_2} \quad , \quad a_1 \le a_2 \end{cases}. \tag{9}$$

Ниже мы будем использовать обозначение $\bar{c}$, чтобы соотношениями $c = \bar{c}$ или $c \neq \bar{c}$ подчеркивать, что описывается сбалансированная или несбалансированная система. Дальнейший анализ показывает, что термодинамические характеристики существенно разнятся у сбалансированной и несбалансированной систем.

**Критические показатели**

Рассмотрим поведение физических величин вблизи критической температуры, обращая особое внимание на разницу в критических показателях в общем случае ($c \neq \bar{c}$) и в случае «критического» антиферромагнитного взаимодействия ($c = \bar{c}$).

Введем в рассмотрение относительную температуру:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} = \frac{K_c - K}{K}. \tag{10}$$

**1. *Спонтанная намагниченность. Критический показатель*** $\beta$

i). Случай несбалансированной системы ($c \neq \bar{c}$). Рассмотрим уравнения состояния (5) при $H = 0$ и $m_{1,2} \to 0$. Проведем там разложение по малым параметрам $m_{1,2}$ с точностью до членов порядка $m_{1,2}^3$ и $t$. Тогда для парциальных намагниченностей вблизи критической температуры ($K > K_c$) получим:

$$m_1^2 = -3tD_1, \quad m_2^2 = -3tD_2, \tag{11}$$

где

$$\begin{aligned} D_1 &= \frac{p_2(1 - K_c a_2 p_2)\,[2 - K_c(a_1 p_1 + a_2 p_2)]}{p_1(1 - K_c a_1 p_1)^2 + p_2(1 - K_c a_2 p_2)^2} \\ D_2 &= \frac{p_1(1 - K_c a_1 p_1)\,[2 - K_c(a_1 p_1 + a_2 p_2)]}{p_1(1 - K_c a_1 p_1)^2 + p_2(1 - K_c a_2 p_2)^2} \end{aligned}. \tag{12}$$

Полная спонтанная намагниченность $M_0$ определяется следующим выражением:

$$M_0 = p_1 m_1 + p_2 m_2 = \pm\sqrt{-3t}\left(p_1\sqrt{D_1} - p_2\sqrt{D_2}\right). \tag{13}$$

Здесь мы учли, что при $H = 0$ и $c < 0$ имеет место соотношение $m_1 m_2 < 0$.

ii). Случай сбалансированной системы ($c = \bar{c}$). В этом случае $p_1\sqrt{D_1} = p_2\sqrt{D_2}$ и выражение в скобках в уравнении (13) принимает нулевое значение. Это означает, что в выражениях, получаемых при разложении уравнений состояния (5), необходимо сохранять члены порядка $t^2$. Спонтанная намагниченность вблизи критической температуры в этом случае будет описываться выражением:

$$M_0 = \pm\,(-t)^{\frac{3}{2}}\frac{\sqrt{3}\,p_1 p_2(p_1 - p_2)}{K_c\,|\bar{c}|\,(1 - 3p_1 p_2)^{3/2}}. \tag{14}$$

Таким образом, в несбалансированной системе ($c \neq \bar{c}$) критический показатель имеет вид $\beta = 1/2$, что согласуется с результатами классической теории среднего поля. В сбалансированной системе ($c = \bar{c}$) критический показатель принимает «неклассическое» значение $\beta = 3/2$.

**2. *Скачок теплоемкости (*$H = 0$*). Критический показатель*** $\alpha$

В критической точке теплоемкость $C$ испытывает конечный скачок. Действительно, при $t > 0$ теплоемкость $C = 0$, а при $t \to 0^-$ величину $C = -K\,dE/dK$ легко вычислить, используя выражения (1) и (5). Тогда для скачка теплоемкости в критической точке в общем случае получим:

$$\Delta C = \lim_{t \to 0^-} C = \frac{3}{2}K_c p_1 p_2 \frac{(a_1 p_1 - a_2 p_2)^2 + 4p_1 p_2 c^2}{p_1\,(1 - K_c a_1 p_1)^2 + p_2\,(1 - K_c a_2 p_2)^2}. \tag{15}$$

В частном случае сбалансированной системы ($c = \bar{c}$) выражение (15) принимает вид:

$$\Delta C = \frac{3}{2K_c}\frac{p_1 p_2}{p_1^3 + p_2^3}. \tag{16}$$

Так как теплоемкость стремится к конечному значению в критической точке, то классическое определение критического показателя $\alpha$ теряет смысл. В этом случае следует пользоваться альтернативным определением [17]: $F(K_c - t) - F(K + t) \sim t^{2-\alpha}$ при $t \to 0$. Из этого следует $\alpha = 0$, что согласуется с классической моделью среднего поля. Причем этот результат не зависит от величины антиферромагнитного взаимодействия, т. е. справедлив как при $c = \bar{c}$, так и при $c \neq \bar{c}$.

**3. *Восприимчивость $\chi$ ($H = 0$). Критические показатели $\gamma$ и $\gamma'$***

Рассмотрим поведение восприимчивости системы вблизи критической точки при $H = 0$. Определим полную и парциальные восприимчивости следующим образом:

$$\chi = \frac{\partial M(K,H)}{\partial H} = p_1\chi_1 + p_2\chi_2, \quad \chi_1 = \frac{\partial m_1(K,H)}{\partial H}, \quad \chi_2 = \frac{\partial m_2(K,H)}{\partial H}. \tag{17}$$

Дифференцируя уравнения состояния (5) по $H$ и разрешая полученные уравнения относительно $\chi_1$ и $\chi_2$ с учетом (11), получим:

$$\begin{cases} \chi_1 = \dfrac{t + [1 - K_c p_2(a_2 - c)]}{t\sqrt{(a_1p_1 - a_2p_2)^2 + 4p_1p_1c^2}} \\ \chi_2 = \dfrac{t + [1 - K_c p_1(a_1 - c)]}{t\sqrt{(a_1p_1 - a_2p_2)^2 + 4p_1p_1c^2}} \end{cases} \quad if \quad t > 0 \tag{18}$$

и

$$\begin{cases} \chi_1 = -K_c \dfrac{[1 - K_c p_2(a_2 - c)] - t(1 - 3D_2)}{t\,[(1 - K_c a_1 p_1)(1 - 3D_1) + (1 - K_c a_2 p_2)(1 - 3D_2)]} \\ \chi_2 = -K_c \dfrac{[1 - K_c p_1(a_1 - c)] - t(1 - 3D_1)}{t\,[(1 - K_c a_1 p_1)(1 - 3D_1) + (1 - K_c a_2 p_2)(1 - 3D_2)]} \end{cases} \quad if \quad t < 0. \tag{19}$$

i). В случае несбалансированной системы ($c \neq \bar{c}$) члены в квадратных скобках в числителях выражений (18)–(19) отличны от нуля и величиной $t$ в числителях можно пренебречь. Тогда восприимчивость системы $\chi = p_1\chi_1 + p_2\chi_2$ принимает классический вид:

$$\chi = \frac{1 - K_c p_1 p_2(a_1 + a_2 - 2c)}{|t|\,\sqrt{(a_1p_1 - a_2p_2)^2 + 4p_1p_1c^2}} \quad if \quad t > 0 \;\; or \;\; t < 0, \tag{20}$$

справедливый как при $t > 0$, так и при $t < 0$.

ii). В случае сбалансированной системы ($c = \bar{c}$) имеют место равенства $[1 - K_c p_2(a_2 - \bar{c})] = [1 - K_c p_1(a_1 - \bar{c})] = 0$. При этом величины $\chi_1$ и $\chi_2$ в (18) и (19) обращаются в константы, а полная восприимчивость $\chi = p_1\chi_1 + p_2\chi_2$ и при $t > 0$, и при $t < 0$ принимает один и тот же «неклассический» вид:

$$\chi = \frac{1}{|\bar{c}|}. \tag{21}$$

Из (20) и (21) для критических параметров вытекает:

$$\begin{cases} \gamma = \gamma' = 1 \quad if \;\; c \neq \bar{c} \\ \gamma = \gamma' = 0 \quad if \;\; c = \bar{c} \end{cases}. \tag{22}$$

Стоит отметить, что в сбалансированной системе (7), т. е. при $c = \bar{c}$, значения парциальных восприимчивостей $\chi_1$ и $\chi_2$ испытывают конечный скачок в критической точке, а полная восприимчивость $\chi = \chi\,(K)$ при этом является непрерывной функцией.

**4. *Гипотеза подобия. Критический показатель $\delta$***

Согласно гипотезе скейлинга, поле $H$ вблизи критической точки является однородной функцией переменных $M^{1/\beta}$ и $t$. Рассмотрим, как от параметров взаимодействия зависит величина критического показателя $\delta$ и вид функции скейлинга.

i). Случай несбалансированной системы ($c \neq \bar{c}$). Разлагая уравнения состояния (5) по малым параметрам $m_1$, $m_2$, $t$ и выделив полную намагниченность $M = p_1m_1 + p_2m_2$, получим:

$$K_cH = M^3R_1 + tMR_2, \tag{23}$$

где

$$R_1 = \frac{(1 - K_c a_1 p_1)^2\, p_1 + (1 - K_c a_2 p_2)^2\, p_2}{3p_1p_2\,[1 - K_c p_1 p_2(a_1 + a_2 + 2\,|c|)]^2}, \quad R_2 = \frac{K_c\sqrt{(a_1p_1 - a_2p_2)^2 + 4p_1p_2c^2}}{1 - K_c p_1 p_2(a_1 + a_2 + 2\,|c|)}. \tag{24}$$

Нетрудно убедиться, что гипотеза подобия подтверждается в рассматриваемом случае, поскольку при $c \neq \bar{c}$ из (13) имеем $\beta = 1/2$. Действительно, выражение (24) представимо в классическом виде $K_c H = M\,|M|^{\delta-1}\,h_s\left(t\,|M|^{-1/\beta}\right)$ с критическим показателем $\delta = 3$ и функцией скейлинга $h_s(x)$ вида:

$$h_s(x) = R_1 + R_2 x, \quad \text{где} \quad x = t/M^2. \tag{25}$$

ii). Случай сбалансированной системы ($c = \bar{c}$). Проводя аналогичные вычисления с учетом соотношений $1 - K_c p_1\,(a_1 + |\bar{c}|) = 1 - K_c p_2\,(a_2 + |\bar{c}|) = 0$, имеющих место в случае $c = \bar{c}$, получим:

$$K_c H = \begin{cases} K_c\,|\bar{c}|\,M & , \quad t > 0 \\ K_c\,|\bar{c}|\,M - |t|^{3/2} R_3 & , \quad t < 0 \end{cases}, \quad \text{где} \quad R_3 = \frac{\sqrt{3}\,p_1 p_2\,|p_1 - p_2|}{(1 - 3p_1 p_2)^{3/2}}. \tag{26}$$

Для данного случая из (14) имеем $\beta = 3/2$. Соответственно, выражение (26) можно представить в классическом виде $K_c H = M\,|M|^{\delta-1}\,h_s\left(t\,|M|^{-1/\beta}\right)$ с критическим показателем $\delta = 1$ и функцией скейлинга $h_s(x)$ вида:

$$h(x) = \begin{cases} K_c\,|\bar{c}| & , \quad t > 0 \\ K_c\,|\bar{c}| - |x|^{3/2} R_3 & , \quad t < 0 \end{cases}, \quad \text{где} \quad x = t/M. \tag{27}$$

Нетрудно заметить, что в рассматриваемом случае $c = \bar{c}$ соотношения Рушбрука $\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2$, Видома $\gamma \geq \beta(\delta - 1)$ и Гриффитса $\beta(\delta + 1) \geq 2 - \alpha$ строго выполняются как неравенства. В то же время утверждается [17], что как следствие гипотезы подобия эти соотношения должны обращаться в строгие равенства. Таким образом, справедливость гипотезы скейлинга в случае $c = \bar{c}$ остается под вопросом.

Подводя итог предыдущим пунктам этого раздела, отметим, что критические показатели рассматриваемой модели соответствуют показателям классической модели среднего поля при условии $c \neq \bar{c}$, когда эффективные числа соседей в разных подрешетках не равны друг другу (см. таблицу 1). Однако в сбалансированной системе, когда выполняется условие (7), т. е. $c = \bar{c}$, критические показатели $\beta$, $\gamma$ и $\delta$ принимают неклассические значения. При этом нарушается соотношение $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$, являющееся следствием гипотезы скейлинга.

*Таблица 1*

*Критические показатели*

| Критический показатель | $a_1 p_1 + c p_2 \neq a_2 p_2 + c p_1$ ($c \neq \bar{c}$) | $a_1 p_1 + c p_2 = a_2 p_2 + c p_1$ ($c = \bar{c}$) |
|---|---|---|
| $\alpha$ | 0 | 0 |
| $\beta$ | 1/2 | 3/2 |
| $\gamma = \gamma'$ | 1 | 0 |
| $\delta$ | 3 | 1 |
| гипотеза скейлинга | подтверждается | ? |

В заключение раздела покажем, как в случае $c = \bar{c}$ меняются зависимости некоторых физических величин. На рисунке 1a показана зависимость восприимчивости от температуры в отсутствии внешнего поля $\chi(K, 0)$. Видно, что при $c \neq \bar{c}$ восприимчивость расходится в критической точке, как и в случае классической модели среднего поля, а при $c = \bar{c}$ восприимчивость имеет конечное критическое значение, определяемое выражением (21).

При «критическом» значении антиферромагнитного взаимодействия ($c = \bar{c}$) также изменяются и зависимости парциальных намагниченностей от поля при критической температуре $m_1 = m_1(H, K_c)$ и $m_2 = m_2(H, K_c)$. Как видно на рисунке 1b, несбалансированная система ($c \neq \bar{c}$) при малых значениях поля $H$ находится в антиферромагнитном состоянии ($m_1 m_2 < 0$), переходя плавно в ферромагнитное ($m_1 m_2 > 0$) при дальнейшем увеличении поля. В то же время сбалансированная система ($c = \bar{c}$) находится в ферромагнитном состоянии при любом значении $H$. При этом парциальные намагниченности равны друг другу ($m_1 = m_2$).

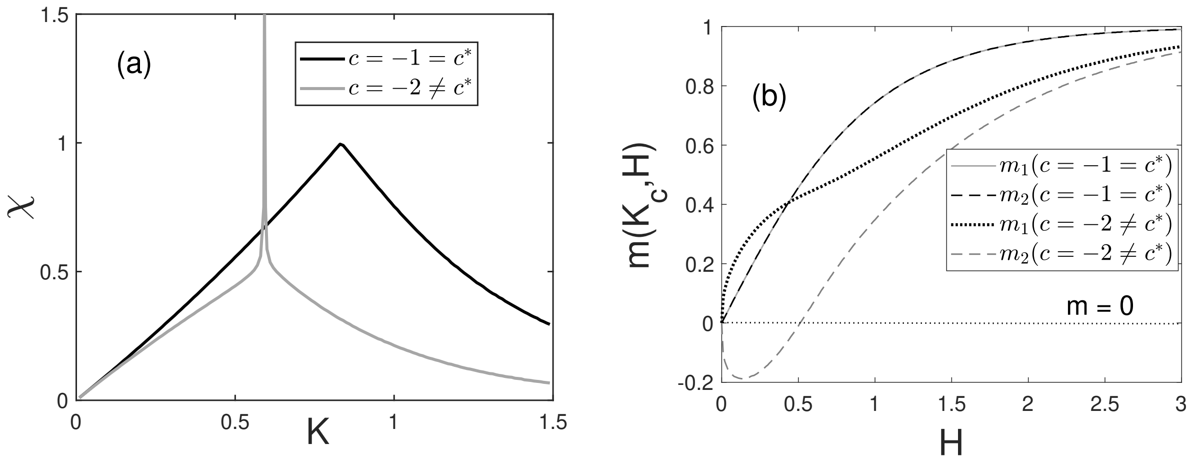


**Рис. 1.** *Изменение характера зависимостей физических величин при «критическом» значении антиферромагнитного взаимодействия: (a) зависимость восприимчивости $\chi = \chi(K, 0)$ при $H = 0$; (b) зависимости парциальных намагниченностей $m_1 = m_1(K_c, H)$ и $m_2 = m_2(K_c, H)$ от поля $H$ в критической точке ($K = K_c$). Кривые построены при $a_1 = 4$, $a_2 = 8$, $p_1 = 0.6$, $p_2 = 0.4$. На правом рисунке кривые $m_{1,2} = m_{1,2}(K_c, H)$ в случае $c = \bar{c}$ сливаются*

**Компьютерное моделирование**

Проведем сравнение полученных выше выражений с результатами компьютерного моделирования для решеток с конечным радиусом взаимодействия. Мы хотим убедиться, что в случае «критического» значения антиферромагнитного взаимодействия $c = \bar{c}$, имеющего место при выполнении условия баланса (7), критические показатели принимают неклассические значения, приведенные в таблице 1. Для этого рассмотрим трехмерную кубическую решетку, состоящую из чередующихся двумерных слоев толщиной в один спин. Взаимодействие спинов внутри слоя характеризуется константами взаимодействия $J_{11} > 0$ и $J_{22} > 0$ для четных и нечетных слоев соответственно. Взаимодействие между слоями антиферромагнитное и характеризуется константой $J_{12} < 0$. Учитывалось взаимодействие только между ближайшими соседями.

Данная слоистая модель описывается следующим гамильтонианом:

$$NE = -\left(J_{11}\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j + J_{22}\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma'_i\sigma'_j + J_{12}\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma'_j\right) - H\left(\sum_{i=1}^{N_1}\sigma_i + \sum_{j=1}^{N_2}\sigma'_j\right), \tag{28}$$

где $\langle i, j\rangle$ обозначает множество пар ближайших соседей. Связь констант взаимодействия слоистой модели с параметрами модели среднего поля задавалась выражениями:

$$a_1 = 8J_{11}, \quad a_2 = 8J_{22}, \quad c = 4J_{12}. \tag{29}$$

Используя алгоритм Метрополиса, мы провели расчет термодинамических параметров сбалансированной системы (7), когда $c = \bar{c}$, для решеток размером $N = L \times L \times L$, где $L$ – линейный размер решетки варьировался от 6 до 64.

Основные результаты компьютерного моделирования получены для простейшего случая $p_1 = p_2$, $a_1 = a_2$. Линейный размер решетки $L$ всегда выбирался четным, чтобы можно было обеспечить равенство $p_1 = p_2$. Нами также было проведено предварительное моделирование для случая $p_1 \neq p_2$, однако результаты этого моделирования показали, что в этом случае не удается добиться равенства модуля парциальных намагниченностей $|m_1| = |m_2|$ в широком диапазоне температур даже при выполнении условия равенства эффективного числа соседей (7). Возможной причиной такого результата является влияние граничных эффектов. Поэтому, чтобы возможно было изучить случай «критического» антиферромагнитного взаимодействия ($c = \bar{c}$), имеющего место в сбалансированной модели (7), моделирование проводилось только для случая $p_1 = p_2$.

Результаты моделирования представлены на рисунках 2–5 и в таблице 2.

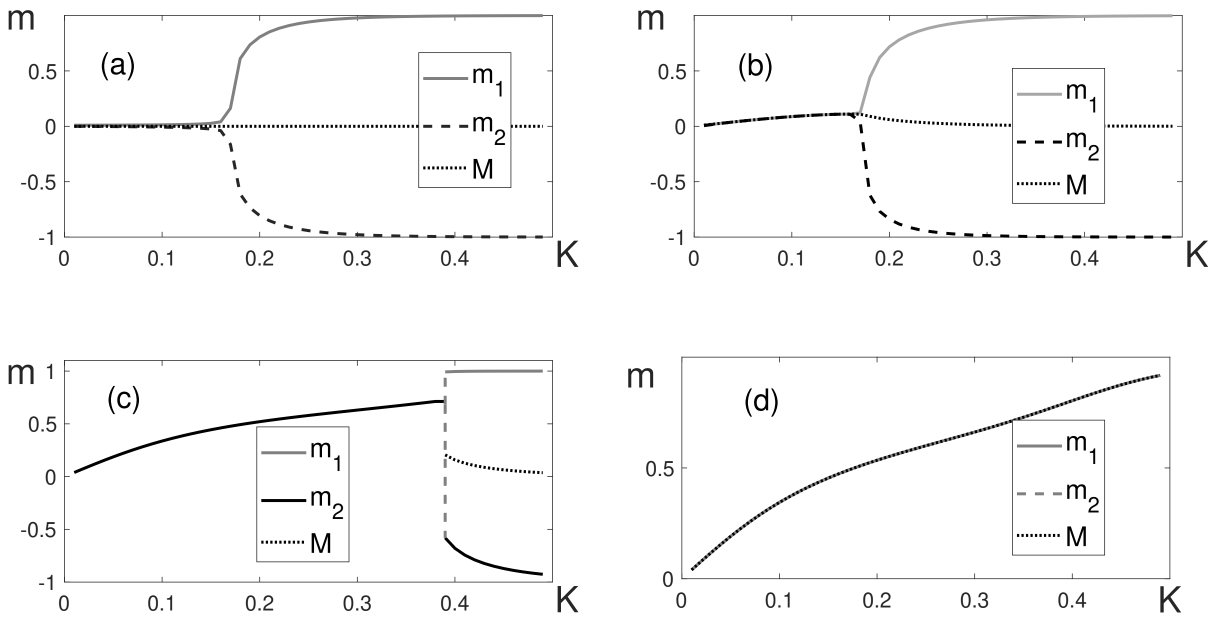


**Рис. 2.** *Вид кривых $m_1 = m_1(K)$, $m_2 = m_2(K)$ и $M = M(K)$ в сбалансированной системе при различных значениях внешнего поля. (a) $H = 0$, (b) $H = 0.25H_c$, (c) $H_c = 0.975H$, (d) $H = 0.9975H_c$. Всюду $L = 24$ и $a_1 = a_2 = 8$, $c = \bar{c} = -8$*

i) Зависимости $m_{1,2} = m_{1,2}(K)$ и $M = M(K)$. На рисунке 2 показаны температурные зависимости парциальных и полной намагниченностей слоистой модели, в случае, когда $a_1 = a_2$ и $p_1 = p_2$. Общий характер данных зависимостей аналогичен зависимостям, вытекающих из уравнений состояния (5) в случае сбалансированной системы ($c = \bar{c}$). В зависимости от величины внешнего поля может наблюдаться как «мягкий» сплиттинг (рисунок 2b), когда кривые мягко расходятся при некотором значении температуры $K = K_s$, так и «жесткий» сплиттинг (рисунок 2c), когда при $K \geq K_s$ кривые $m_1 = m_1(K)$ и $m_2 = m_2(K)$ расходятся скачком. Чтобы ход кривых на рисунке 2 стал понятнее, отметим: существует некоторое критическое значение магнитного поля $H_c = |\bar{c}|/2$, при $H < H_c$ основное состояние системы антиферромагнитно ($m_1 = -m_2 = 1$, $M = 0$), а при $H > H_c$ – ферромагнитно ($m_1 = m_2 = 1$, $M = 1$).

В случае, когда размер решетки достаточно большой и внешнее поле $H$ близко, но меньше критического значения $H_c$, то при охлаждении система не переходит в антиферромагнитную фазу, а остается в локальном минимуме энергии (рисунок 2d). Такая же картина наблюдается и для полносвязной решетки (аналог модели среднего поля), если рассчитывать термодинамические параметры алгоритмом Метрополиса.

Во избежание недоразумений отметим, что «жесткий» сплиттинг, показанный на рисунке 2c, сопровождающийся скачком намагниченностей, наблюдался в симуляции только при относительно небольших размерах решетки $L \leq 24$, при которых можно преодолеть энергетический барьер между локальным и глобальным минимумами. Однако при больших размерах ($L = 32$, $64$) в пределе $K \to \infty$ система всегда переходила в ферромагнитное состояние с намагниченностью $M = 1$, которое в случае $H < H_c$ является локальным минимумом.

ii) Восприимчивость $\chi = \chi(K)$. На рисунке 3 представлена температурная зависимость восприимчивости $\chi = \chi(K)$ в слоистой модели при отсутствии внешнего поля $H = 0$. Как видим (рисунки

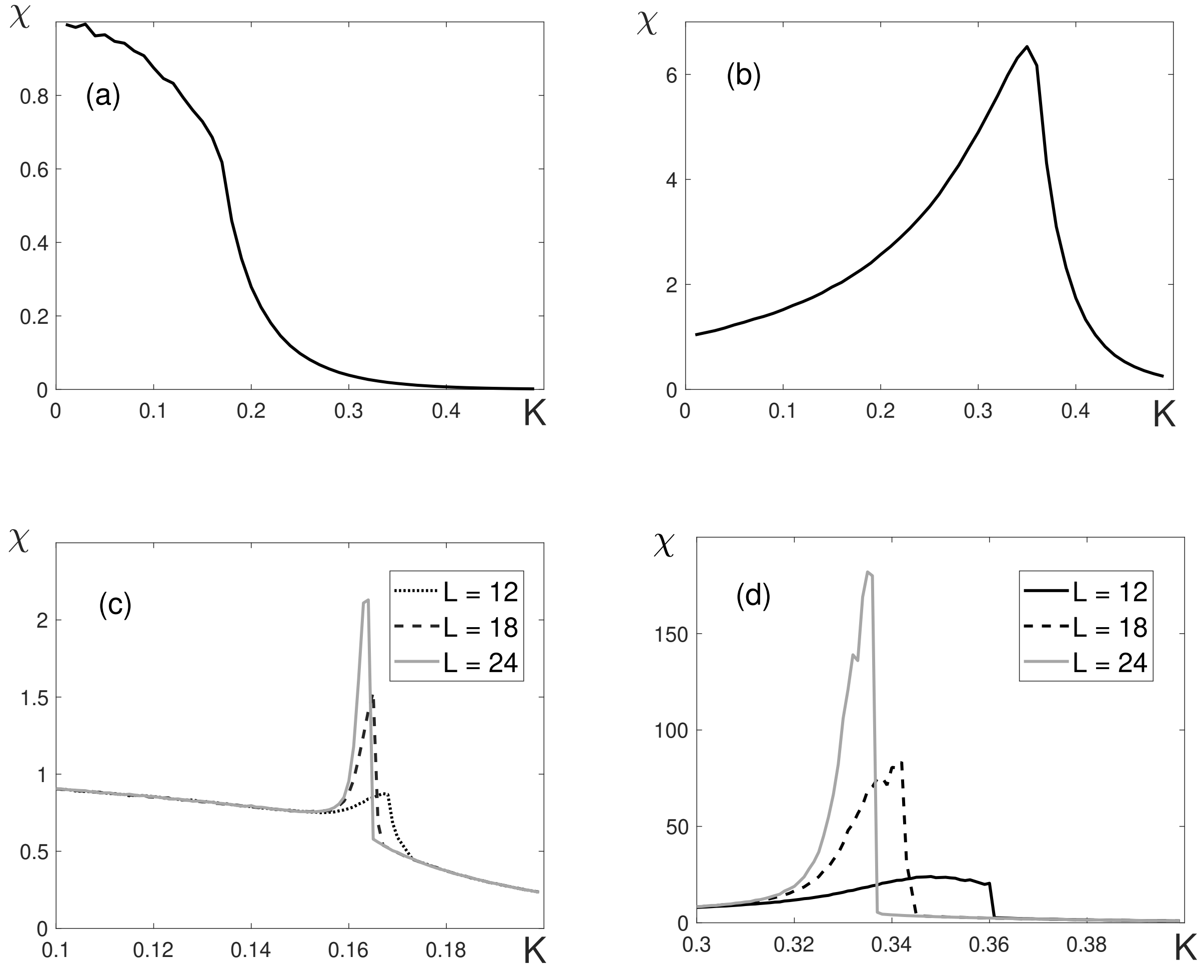


**Рис. 3.** *Зависимость $\chi = \chi(K)$. Сбалансированная система (a) $a_1 = a_2 = 8$, $c = -8$; (b) $a_1 = a_2 = 8$, $c = -0.4$. Несбалансированная система (c) $a_1 = 9.6$, $a_2 = 8$, $c = -8$; (d) $a_1 = 9.6$, $a_2 = 8$, $c = -0.4$. Для (a) и (b) кривые $\chi(K)$ не зависят от размера решетки $L$*

3a и 3b), в случае сбалансированной системы ($a_1 = a_2$, т. е. $c = \bar{c}$) вид кривой $\chi = \chi(K)$ не зависит от размера решетки $L$, и восприимчивость в критической точке принимает конечное значение. При больших значениях $|\bar{c}|$ на графике $\chi(K)$ отсутствует максимум (рисунок 3a). Таким образом, в сбалансированной системе критические показатели $\gamma = \gamma' = 0$, что согласуется с результатами в таблице 1.

Для сравнения проведен эксперимент и на несбалансированной системе для случая $a_1 \neq a_2$. Как и следовало ожидать, в этом случае на кривой $\chi = \chi(K)$ в критической точке наблюдается пик восприимчивости (рисунки 3c и 3d). Высота этого пика увеличивается с ростом размера решетки $L$, то есть восприимчивость расходится в критической точке. Этот результат соответствует классическим критическим показателям $\gamma = \gamma' = 1$ .

iii) Критический показатель $\delta$. Для того, чтобы получить значение критического показателя $\delta$, необходимо сначала оценить значение критической температуры $K_c$. Оценка критической температуры производилась посредством построения температурных зависимостей кумулянтов Биндера [19] для решеток различных размеров. Асимптотическое значение $K_c$ для случая $L \to \infty$ определяется как точка пересечения данных зависимостей. Определим кумулянты Биндера для парциальных и полной намагниченностей следующим образом:

$$g_1 = 1 - \frac{\langle m_1^4 \rangle}{3\langle m_1^2 \rangle^2}, \quad g_2 = 1 - \frac{\langle m_2^4 \rangle}{3\langle m_2^2 \rangle^2}, \quad g = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}. \tag{30}$$

В случае сбалансированной системы ($a_1 = a_2$), полная намагниченность $M$ равна нулю при отсутствии внешнего поля. Поэтому критические температуры пришлось определять по кумулянтам парциальных намагниченностей (рисунок 4a). Результаты, полученные с помощью кумулянтов $g_1$ и $g_2$, дают приблизительные одинаковые значения $K_c$. Соответственно, это позволяло определять величину показателя $\delta = 1$ с точностью до $10^{-3}$ (таблица 2).

*Таблица 2*

*Оценка критического показателя $\delta$ для слоистой модели*

| Параметры модели | $K_c$ | $\delta$ |
|---|---|---|
| Сбалансированная система ($c = \bar{c}$) | | |
| $a_1 = a_2 = 8$, $c = -0.4$ | 0.3580 | 0.9982 |
| $a_1 = a_2 = 8$, $c = -2$ | 0.2710 | 0.9921 |
| $a_1 = a_2 = 8$, $c = -4$ | 0.2217 | 0.9974 |
| $a_1 = a_2 = 8$, $c = -8$ | 0.1707 | 1.0085 |
| $a_1 = a_2 = 8$, $c = -12$ | 0.1430 | 1.0012 |
| Несбалансированная система ($c \neq \bar{c}$) | | |
| $a_1 = 4$, $a_2 = 8$, $c = -8$ | 0.1985 | 2.2929 |
| $a_1 = 16$, $a_2 = 8$, $c = -4$ | 0.1615 | 4.4033 |
| $a_1 = 16$, $a_2 = 8$, $c = -8$ | 0.1310 | 2.5688 |
| $a_1 = 16$, $a_2 = 8$, $c = -12$ | 0.1125 | 3.1631 |
| $a_1 = 24$, $a_2 = 8$, $c = -8$ | 0.1010 | 3.1175 |

Если система не сбалансирована ($a_1 \neq a_2$), то кумулянты $g_1$ и $g_2$ дают различные оценки $K_c$. При этом кумулянты для полной намагниченности $g$ не пересекаются в одной точке (рисунок 4b). Поэтому в данном случае мы оценивали$K_c$ приблизительно как середину интервала, в котором происходит скачок кумулянта $g$. Как видно из таблицы 2, такая неточность определения величины $K_c$ привела к большому разбросу полученных значений показателя $\delta$.

Для оценки показателя $\delta$ были построены зависимости $\ln M$ от $\ln H$ (см. рисунок 5).

Если $a_1 = a_2$, то зависимости $\ln M$ от $\ln H$ для решеток различных размеров $L$ сливаются в одну линию уже при достаточно малых значениях $H$ (см. рисунок 5a). Величина показателя $\delta$ оценивалась по уровню наклона данной зависимости. Найдено, что показатель $\delta$ не зависит от величины соотношения $a/|c|$ и приблизительно равен 1 (таблица 2). Отклонение от значения 1 составляет порядка $10^{-3}$, что сравнимо с погрешностью нашей оценки. Таким образом, значение показателя $\delta$ в этом случае полностью совпадает с значением $\delta = 1$ в сбалансированной модели ( $c = \bar{c}$).

Если $a_1 \neq a_2$, то кривые $\ln M$ от $\ln H$ выходят на линейную зависимость при некоторой величине поля $H$, значение которого уменьшается с ростом $L$ (см. рисунок 5b). Значение показателя $\delta$, измеренного по углу наклона данной зависимости, для всех исследованных систем сильно отличается от ожидаемого результата $\delta = 3$ (таблица 2) и зависит от параметров модели.

**Обсуждение результатов**

Нами была рассмотрена спиновая система на полносвязном графе, состоящая из двух подрешеток, антиферромагнитно взаимодействующих между собой. Получены аналитические выражения для критических показателей такой системы, которые сравниваются с результатами компьютерного моделирования на слоистой модели с конечным радиусом взаимодействия. По результатам работы можно сделать следующие выводы.

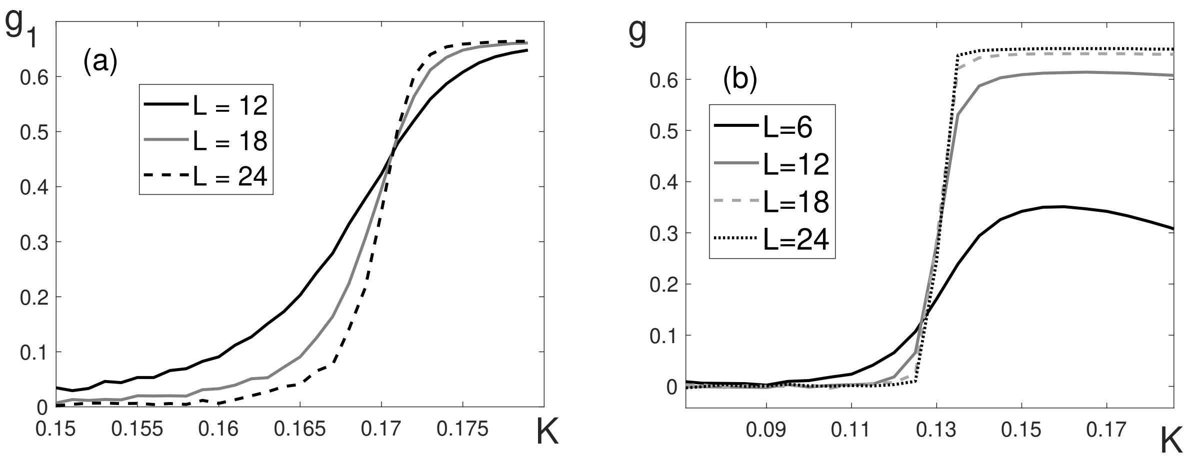


**Рис. 4.** *Кумулянты Биндера: (a) сбалансированная система* $a_1 = a_2 = 8$, $c = -8$; *(b) несбалансированная система* $a_1 = 16$, $a_2 = 8$, $c = -8$

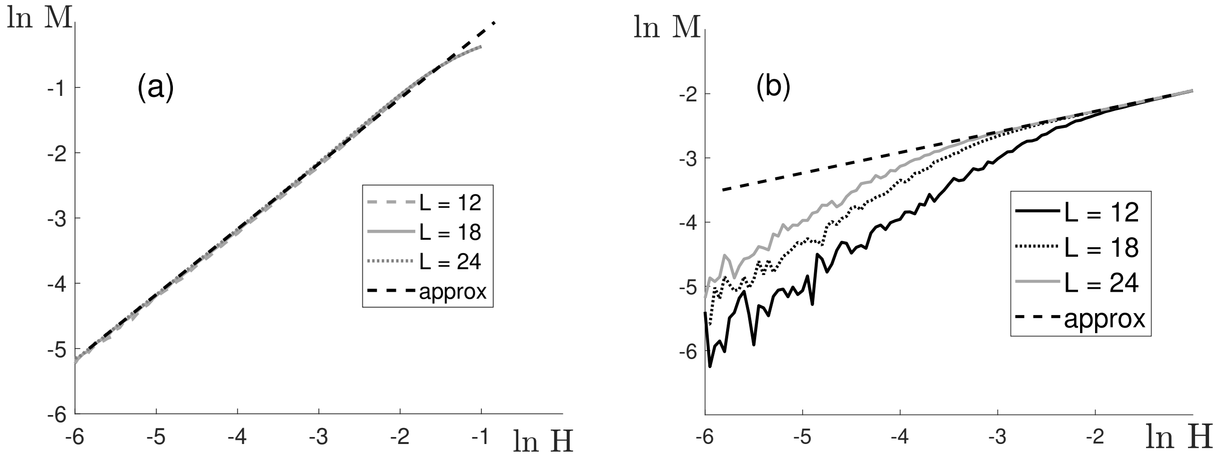


**Рис. 5.** *Зависимости* $\ln M$ *от* $\ln H$. *Черная прерывистая линия – линейная аппроксимация, по которой рассчитывался показатель* $\delta$. *(a) Сбалансированная система* $a_1 = a_2 = 8$, $c = -0.4$, *что соответствует* $c = \bar{c}$; *(b)* $a_1 = 24$, $a_2 = 8$, $c = -8$, *что соответствует* $c \neq \bar{c}$

При переходе от несбалансированной системы ($c \neq \bar{c}$) к сбалансированной ($c = \bar{c}$) классический вид критических показателей ($\alpha = 0$, $\beta = 1/2$, $\gamma = \gamma' = 1$, $\delta = 3$) сменяется неклассическим ($\alpha = 0$, $\beta = 3/2$, $\gamma = \gamma' = 0$, $\delta = 1$). Этот результат приведен в таблице 2, из которой также следует, что справедливые при $c \neq \bar{c}$ неравенства $\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2$, $\gamma \geq \beta(\delta - 1)$ и $\beta(\delta + 1) \geq 2 - \alpha$ остаются справедливыми и при $c = \bar{c}$. В то же время классический вид функции скейлинга (25), имеющий место при $c \neq \bar{c}$, при $c = \bar{c}$ сменяется «неклассическим» выражением (27).

Изменение критических параметров подтверждается результатами компьютерного моделирования на трехмерной слоистой решетке. В частности, показано, что сбалансированная ($c = \bar{c}$) система (7) действительно обладает следующими критическими показателями $\gamma = \gamma' = 0$ и $\delta = 1$. Приведенные на рисунке 2 зависимости $m_{1,2} = m_{1,2}(K)$ и $M = M(K)$, полученные в ходе компьютерного моделирования, повторяют ход теоретических кривых, вытекающих из уравнений состояния (5).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Ilkovič V. Magnetic Properties of Ising-Type Ferromagnetic Films with a Sandwich Structure. *Physica Status Solidi (b).* 1998;207(1):131–137.
2. Kuzniak-Glanowska E., Konieczny P., Pe-lka R., Muzio-l T. M., Kozie-l M., Podgajny R. Engineering of the XY Magnetic Layered System with Adeninium Cations: Monocrystalline Angle-Resolved Studies of Nonlinear Magnetic Susceptibility. *Inorganic Chemistry*. 2021;60(14):10186–10198.
3. Grünberg P. Layered Magnetic Structures in Research and Application. *Acta Materialia*. 2000;48(1):239–251.
4. Taborelli M. et al. Magnetic Coupling of Surface Adlayers: Gd on Fe (100). *Physical Review Letters*. 1986;56(26):2869.
5. Camley R. E., Tilley D. R. Phase Transitions in Magnetic Superlattices. *Physical Review B*. 1988;37(7):3413.
6. Camley R. E. Properties of Magnetic Superlattices with Antiferromagnetic Interfacial Coupling: Magnetization, Susceptibility, and Compensation Points. *Physical Review B*. 1989;39(16):12316.
7. Lipowski A. Critical Temperature in the Two-Layered Ising Model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications.* 1998;250(1–4):373–383.
8. Horiguchi T., Lipowski A., Tsushima N. Spin-32 Ising Model and Two-Layer Ising Model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1996;224(3–4):626–638.
9. Diaz I. J. L., Branco N. S. Monte Carlo Simulations of an Ising Bilayer with Non-Equivalent Planes. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications.* 2017;468:158–170.
10. Diaz I. J. L., Branco N. S. Monte Carlo Study of an Anisotropic Ising Multilayer with Antiferromagnetic Interlayer Couplings. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2018;490:904–917.
11. Gharaibeh M. et al. Compensation and Critical Behavior of Ising Mixed Spin (1-1/2-1) Three Layers System of Cubic Structure. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2020;550:124–147.
12. Drovosekov A. B., Kholin D. I., Kreinies N. M. Magnetic Properties of Layered Ferrimagnetic Structures Based on Gd and Transition 3d Metals. *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* 2020;131:149–159.
13. Telford E. J. et al. Layered Antiferromagnetism Induces Large Negative Magnetoresistance in the van der Waals Semiconductor CrSBr. *Advanced Materials.* 2020;32(37):2003240.
14. Wang Y. et al. Topological Semimetal State and Field-Induced Fermi Surface Reconstruction in the Antiferromagnetic Monopnictide NdSb. *Physical Review B*. 2018;97(11):115133.
15. Hansen P. L. et al. Two Coupled Ising Planes: Phase Diagram and Interplanar Force. *Journal of statistical physics*. 1993;73:723–749.
16. Ferrenberg A. M., Landau D. P. Monte Carlo Study of Phase Transitions in Ferromagnetic Bilayers. *Journal of applied physics.* 1991;70(10):6215–6217.
17. Baxter R. J. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics.* London; Academic Press; 1982.
18. Крыжановский Б. В., Литинский Л. Б. Обобщенное уравнение Брегга–Вильямса для систем с произвольным дальнодействием. *Доклады АН.* 2014;459(6):680–684.
19. Binder K. Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution Functions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter.* 1981;43:119–140.