

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Уральский федеральный университет  
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина»

*На правах рукописи*

*Ясинская*

**Ясинская Дарья Николаевна**

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

Специальность 1.3.3. Теоретическая физика

**Автореферат**

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург — 2025

Работа выполнена на кафедре теоретической и математической физики  
ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б. Н. Ельцина»

Научный руководитель:

кандидат физико-математических наук, доцент  
**Панов Юрий Демьянович**

Официальные оппоненты:

**Васин Михаил Геннадьевич** – доктор физико-математических наук, Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (г. Москва), ведущий научный сотрудник лаборатории сверхпроводящих и квантовых технологий;

**Прудников Павел Владимирович** – доктор физико-математических наук, профессор, Центр новых химических Технологий Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук» (Омский филиал), главный научный сотрудник отдела материаловедения и физико-химических методов исследования;

**Стрельцов Сергей Владимирович** – доктор физико-математических наук, профессор РАН, член-корреспондент РАН, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (г. Екатеринбург), заведующий лабораторией теории низкоразмерных спиновых систем.

Защита состоится «02» июня 2025 г. в 13:00 часов на заседании диссертационного совета УрФУ 1.3.04.16 по адресу: 620000, г. Екатеринбург, ул. Ленина, д. 51, зал диссертационных советов, комн. 248.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»:

<https://dissovet2.urfu.ru/mod/data/view.php?d=12&rid=7058>

Автореферат разослан «\_\_\_» апреля 2025 года.

Учёный секретарь диссертационного совета, доктор физико-математических наук, доцент



Овчинников А.С.

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы исследования.** Моделирование и 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—3], анизотропных [4, 5], неупорядоченных и фрустрированных магнетиков [6—9], а также разбавленных систем [10—13]. 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 и Блюма-Капеля.

Фрустрированные системы демонстрируют высокую степень вырождения, неколлинеарные конфигурации спинов и сложные фазовые переходы (ФП). Они могут проявлять эффекты “порядка из беспорядка” и имеют связь со спиновыми жидкостями и другими экзотическими фазами [7]. Фрустрации в магнитных системах также влияют на ФП, магнитные свойства и усиливают магнетокалорический эффект [8, 9]. Наличие фрустраций в системе зачастую приводит к новым особенностям критического поведения, таким как ФП первого рода, изменение классов универсальности, неуниверсальное критическое поведение [6]. Это связано с тем, что вырождение состояния системы приводит к ослаблению (псевдо)спиновых связей и, следовательно, к повышенной чувствительности к различным внешним воздействиям. 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—12]. Вмороженные примеси способны нарушать дальнедействующие флуктуации, что приводит к сглаживанию сингулярностей термодинамических функций, исчезновению критического поведения, или даже установлению нового критического поведения [12]. 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 [13]. 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 затруднённость формирования дальнего порядка. Также наличие фрустраций и анизотропии зачастую играют для низкоразмерных магнетиков принципиальную роль в формировании фазовой диаграммы и являются ответственными за такие яркие явления, как магнитные плато [4], ступенчатый характер кривых намагничивания [3], квазифазы и псевдопереходы [1]. В ряде фрустрированных (квази)одномерных магнетиков вместо ФП в упорядоченное состояние при конечных температурах 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 [2]. Кроме того, одномерные анизотропные спиновые модели применяются для описания свойств реальных материалов, в числе которых гетерометаллические соединения на молекулярной основе, полимерные координационные соединения, купраты и ванадаты.

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 взаимодей-

ствиями (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. Глубокое понимание влияния разбавления и фрустрации на критическое поведение может помочь в 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 возрос интерес к низкоразмерным спиновым системам, особенно к декорированным цепочкам с необычной геометрией и обменными взаимодействиями. Отсутствие традиционных ФП в одномерных моделях с короткодействующими взаимодействиями было установлено давно строгими теоремами. Совсем недавно ученых заинтересовали псевдопереходы – резкие изменения термодинамических величин при конечных температурах, похожие на обычные ФП. Изучение этих новых критических явлений открывает новые горизонты для понимания термодинамического поведения низкоразмерных систем [1, 2]. 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 [2].

Исследования фрустрированных спиновых систем также расширяются за счет изучения их связи с экзотическими состояниями материи, такими как спиновые жидкости и нематические фазы [6, 7]. Фрустрация в магнитных системах приводит к сложным фазовым диаграммам и уникальным критическим и магнитным свойствам. Введение беспорядка в модели помогает лучше отражать характеристики реальных материалов, где неизбежны структурные дефекты и примеси. Влияние этих факторов на критическое поведение спиновых систем активно изучается с 70-х годов и до сих пор [10–12]. Это направление исследований активно развивается, так как требует новых теоретических подходов для

предсказания поведения таких систем.

**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 кубическую решётки. Источниками фрустрации системы являются два механизма: во-первых, конкуренция между зарядовыми и магнитными взаимодействиями, которая при определённых параметрах не позволяет одновременно минимизировать все слагаемые в гамильтониане, и, во-вторых, наличие подвижных взаимодействующих примесей, приводящее 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 ФП, 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.

**Целью** данной работы является комплексный анализ 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 приме-

сей 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 [14], 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 взаимодействуют с зарядовой подсистемой и обладают подвижностью, т.е. реализуется случай отождённого беспорядка. 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 больших 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.

#### **Основные 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, который 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 согласие 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.

**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 впервые 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.

**Достоверность** изложенных в работе результатов обеспечивается независимыми численными расчетами и сравнением их результатов с прочими известными результатами моделирования; близостью результатов, полученных в различных приближениях, их сравнением с точны-

ми 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).

**Личный вклад.** 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.

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 38 печатных изданиях, 7 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК РФ, 6 из них индексируются базами Web of Science и Scopus, а 31 — опубликованы в виде тезисов докладов всероссийских и международных научных конференций. Получено 1 свидетельство регистрации базы данных и 1 свидетельство регистрации программы для ЭВМ.

# Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность и значимость исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится краткий обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, сформулированы научная новизна и основные положения диссертации.

**Первая глава** посвящена детальному обзору современных исследований по моделированию и анализу фазовых состояний и критических свойств низкоразмерных магнетиков (раздел 1.1), фрустрированных (раздел 1.2), разбавленных систем (раздел 1.3). Представлена исследуемая модель (раздел 1.4), рассматриваются основные аналитические и численные подходы к её решению (раздел 1.5).

Каждый узел решёточной модели может находиться либо в одном из зарядовых 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:

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

где параметр  $\Delta$  описывает 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  $P_{i,0} = 1 - S_{z,i}^2$  – 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:

$$n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_{z,i} = \text{const}. \quad (2)$$

«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) эта связь учтена во входящем в  $\sigma_z$  проекционном операторе  $P_0$ , где он играет роль оператора спиновой плотности.

Во **второй главе** обсуждаются общие свойства фаз основного состояния исследуемой модели для произвольной пространственной размерности. Проводится анализ структуры фаз, определяется их внутренняя энергия и параметры порядка. Рассматриваются фазовые диаграммы основного состояния в зависимости от различных переменных. В разделе 2.1 показано, что областям на диаграммах в зависимости от химического потенциала будут соответствовать «чистые» фазы с крайними значениями плотности заряда  $n$  – тривиальная примесная фаза ( $n = \pm 1$ ), ферро- и антиферромагнитная фаза и фаза шахматного зарядового порядка ( $n = 0$ ), а также парамагнитная фаза ( $n = \pm \frac{1}{2}$ ). Границы между двумерными областями соответствуют «смешанным» фазам с более сложной структурой, которые являются фрустрированными в смысле вырождения основного состояния из-за наличия различных конфигураций распределения примесей при одинаковой минимальной энергии. Среди таких фаз – разбавленная (анти)ферромагнитная фаза (dilute (A)FM) с фазовым расслоением на магнитные домены и заряженные капли – макроскопические области с суммарным объемом  $|n|$ , содержащие только занятые примесями узлы; фаза разбавленного зарядового порядка (dilute CO), в которой заряженные примеси одного типа случайным образом распределены на фоне шахматного зарядового порядка; зарядовая парамагнитная фаза (PM-CO), представляющая собой разбавленный шахматный зарядовый порядок с парамагнитными центрами в виде одиночных спинов; фрустрированная (анти)ферромагнитная фаза (FR-(A)FM), в которой (анти)ферромагнитно упорядоченные кластеры разделены одиночными немагнитными примесями; фрустрированная зарядовая фаза (FR-CO) с чередующимися по подрешёткам направленными по полю спинами и немагнитными примесями обоих зарядов; фрустрированная парамагнитная фаза (FR-PM) соответствует направленным по полю одиночным спинам, которые разделены кластерами из немагнитных примесей одного типа.

Определение энергии основного состояния как функции плотности заряда  $n$  было представлено в разделе 2.2 как каноническая задача линейного программирования по минимизации энергетического функционала при наличии ограничений, связанных с фиксацией плотности заряда. Этот универсальный для спиновых моделей подход позволяет находить все возможные основные состояния и их параметры порядка для различных фаз.

Основные свойства фаз основного состояния и фазовые диаграммы были рассмотрены в разделе 2.3. Фазовые диаграммы 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.

**Третья глава** диссертации рассматривает свойства разбавленной цепочки с использованием расширенного метода трансфер-матрицы для анализа термодинамических и магнитных свойств системы, а также подхода марковских цепей для анализа свойств и структуры фрустрированных фаз основного состояния разбавленной цепочки. Особое внимание уделяется (псевдо)критическим свойствам системы: обнаружены и классифицированы псевдопереходы. В главе раскрыта природа впервые обнаруженных псевдопереходов, связанная с наличием в цепочке фазового расслоения, предложено их феноменологическое описание в рамках построения Максвелла.

В разделе 3.1 разработан универсальный эффективный метод точного расчёта термодинамических свойств разбавленной цепочки в рамках большого канонического ансамбля, который использует свойства трансфер-матрицы системы. Вместо традиционного подхода, основанного на работе с наибольшим собственным значением трансфер-матрицы предлагается вычислять величины непосредственно из производных матриц физических величин, построенных на собственных векторах трансфер-матрицы. Выведены общие выражения для средних и корреляторов в базисе собственных векторов трансфер-матрицы, а также для всех основных термодинамических величин.

В разделе 3.2 представлен универсальный подход к отображению спиновых цепочек на марковские цепи. Данный метод 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.

Результаты расчётов концентрационных зависимостей остаточной энтропии фаз основного состояния в нулевом (б) и отличном от нуля (а) магнитном поле представлены на Рисунке 1 и в разделе 3.3. Большинство фаз основного состояния, рассмотренных ранее во второй главе, оказываются фрустрированными в смысле наличия ненулевой остаточной энтропии. 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 на Рисунке 1,б. Причина этого кроется в структуре этих фаз, детальный анализ которой также можно осуществить с использованием отображения одномерной системы во фрустрированной фазе на марковскую цепь. В разделе 3.4 доказано, что в разбавленной цепочке Изинга выделяют 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 упо-

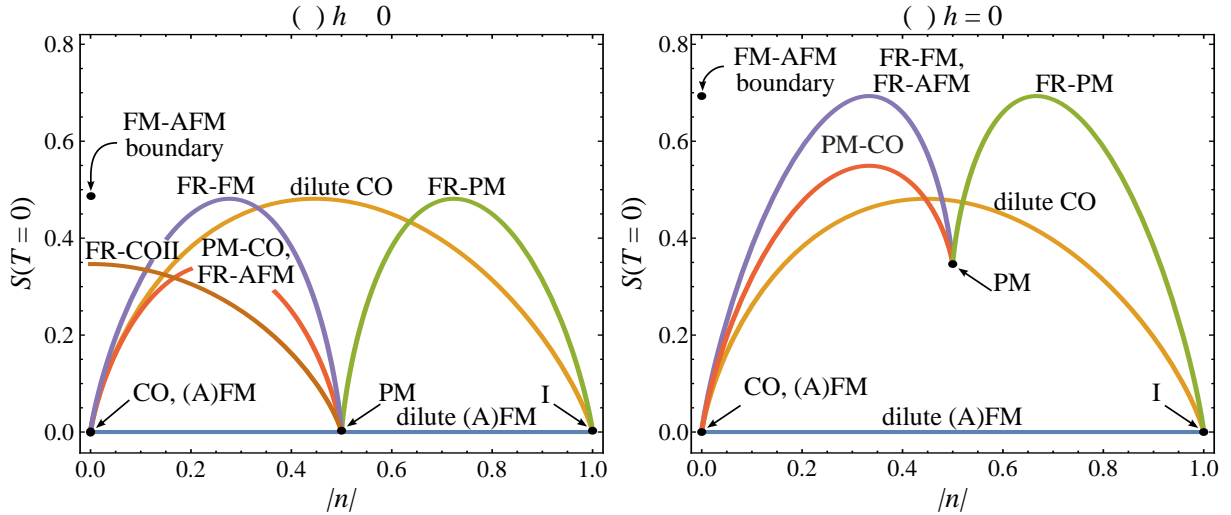


Рисунок 1 – Зависимость остаточной энтропии различных фаз основного состояния от плотности заряда немагнитных примесей  $n$  при (а)  $h \neq 0$ ; (б)  $h = 0$

рядочением 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 апериодическими 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.

Раздел 3.5 посвящён псевдокритическим свойствам цепочки. На Рисунке 2 показаны температурные зависимости энтропии и удельной теплоёмкости, демонстрирующие псевдопереходы двух типов. В «чистой» цепочке, при  $n = 0$ , обнаружены псевдопереходы «первого рода» – переходы между несовместимыми СО и (А)ФМ 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:  $\alpha = 3$ ,  $\gamma = 3$ ,  $\nu = 1$ .

В разбавленной цепочке,  $n \neq 0$ , впервые обнаружен новый тип псевдоперехода «второго рода» (см. Рисунок 2,б). Они характеризуются отчетливой точкой перегиба в температурной зависимости первых производных большого потенциала, включая энтропию и параметры порядка. Кроме того, вторые производные большого потенциала, такие как удельная теплоёмкость и магнитная восприимчивость, демонстрируют резкие, но конечные скачки, похожие на поведение, наблюдаемое при обычных

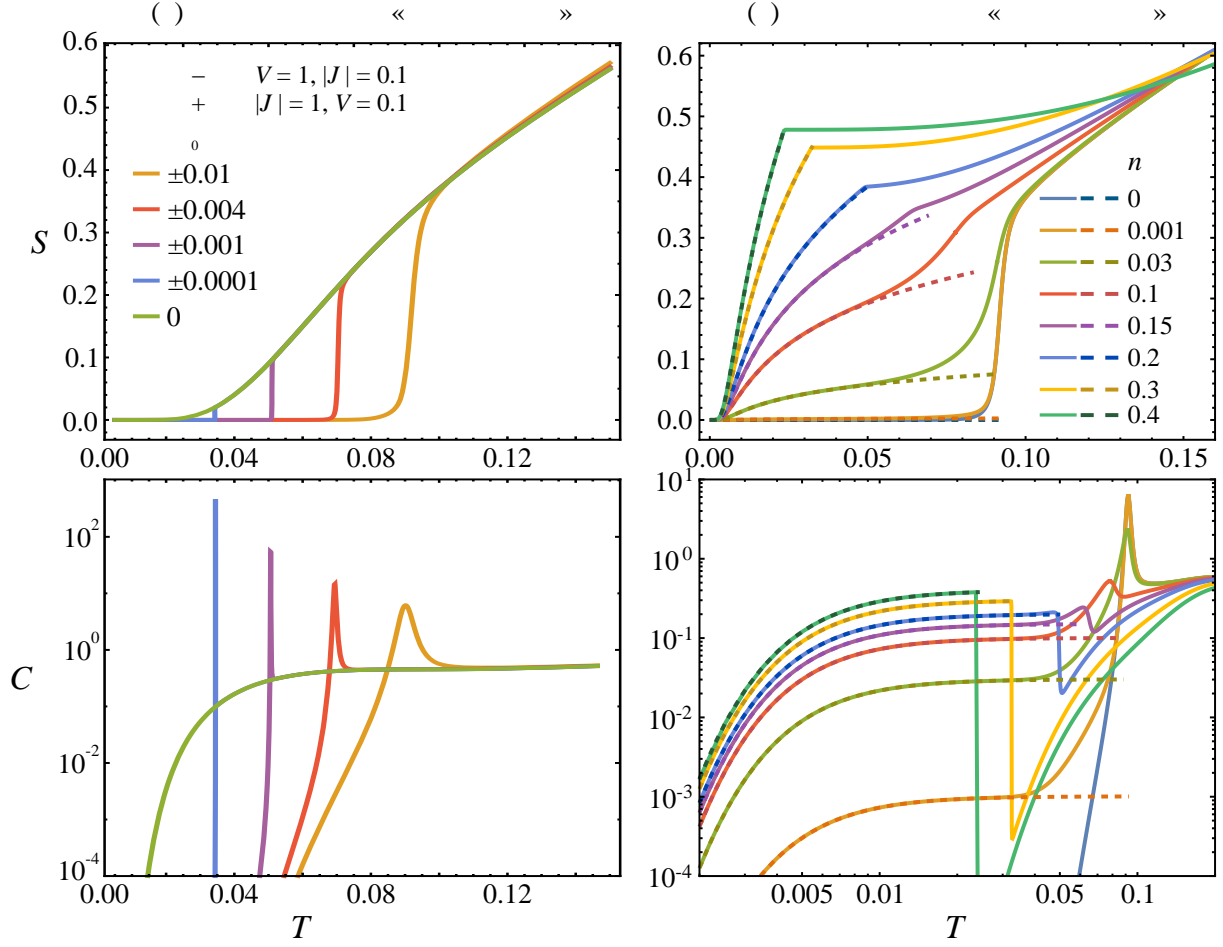


Рисунок 2 – Температурные зависимости энтропии и удельной теплоёмкости для параметров (а)  $n = 0$  и различных значений  $\delta\epsilon_0 = \Delta - V + |J|$  (поведение, характерное для псевдопереходов «первого рода»); (б)  $\delta\epsilon_0 = \Delta - V + |J| = 0.01$  и различных значений плотности заряда  $n$  (поведение, характерное для псевдопереходов «второго рода»). Сплошные цветные линии представляют результаты точных расчетов, в то время как пунктирные цветные линии изображают феноменологические приближения

ФП II рода.

Природа новых псевдопереходов «второго рода» связана с фазовым расслоением в цепочке на границе (A)FM и CO 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. Так, можно получить аналитические выражения для температуры псевдоперехода «второго рода», а также для температурных зависимостей для энтропии и удельной теплоёмкости при  $T < T_{p,2}$ . Эти выражения прекрасно согласуются с точными результатами для энтропии и удельной теплоёмкости в области низких температур, как показано пунктирными цветными линиями на Рисунке 2,б. Показано, что проис-

ходит непрерывная трансформация типа псевдопереходов, переходящих от «первого рода» при  $n = 0$  ко «второму роду» с ростом  $|n|$ .

**Четвёртая глава** посвящена детальному исследованию фазовых, критических, магнитных и фрустрированных свойств 2D и 3D разбавленной модели Изинга и включает результаты моделирования с использованием метода Монте-Карло. Моделирование осуществлялось с помощью высокопроизводительного алгоритма Кавасаки-Метрополиса, сочетающего динамику Глаубера для спинов и динамику Кавасаки для псевдоспинов, который позволяет учесть условие сохранения заряда на каждом шаге Монте-Карло. Полное описание алгоритма дано в разделе 4.1. Раздел 4.2 включает в себя обзор методов исследования критических явлений используемым методом Монте-Карло.

Свойства фазового расслоения описаны в разделе 4.3. Формирование dilute (A)FM фазы происходит в два ФП: сначала система переходит из парамагнитного неупорядоченного состояния NO в магнитное (A)FM состояние со случайно распределёнными примесями, а затем при снижении температуры происходит второй ФП, 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 (Рисунок 3,а). Температура перехода с фазовым расслоением практически не зависит от параметров системы. На температурной фазовой диаграмме (Рисунок 3,б) виден минимум критической температуры в точке фрустрации, где конкурируют зарядовый и магнитный порядки. При приближении к этой точке форма пиков теплоёмкости искривляется, а второй переход происходит при более высоких температурах, пока ФП не сольются. Фазовое расслоение при  $\Delta \gtrsim \Delta^*$  включает ближний зарядовый порядок внутри капли, как изображено на Рисунке 3,б на снимке решётки  $16 \times 16$ . Эта особенность напоминает формирование квазифазы AFM с каплей с ближним зарядовым упорядочением, которое наблюдалось в одномерной разбавленной цепочке при псевдопереходах «второго рода». Это указывает на определённую связь особенностей формирования фазового расслоения вблизи границы раздела CO и (A)FM фаз для цепочки и многомерной решётки. При этом из-за зарядового порядка объём капли увеличивается за счёт объёма магнитной фазы, что приводит к уменьшению AFM параметра порядка. Затем в процессе термализации капля становится более однородной, пока ближний зарядовый порядок не исчезнет.

Свойства состояния системы при низких температурах рассмотрены в разделе 4.4. Можно заключить, что свойства основного состояния и фазовые диаграммы демонстрируют качественное сходство в различных пространственных размерностях, однако результаты моделирования показывают, что 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 состоя-



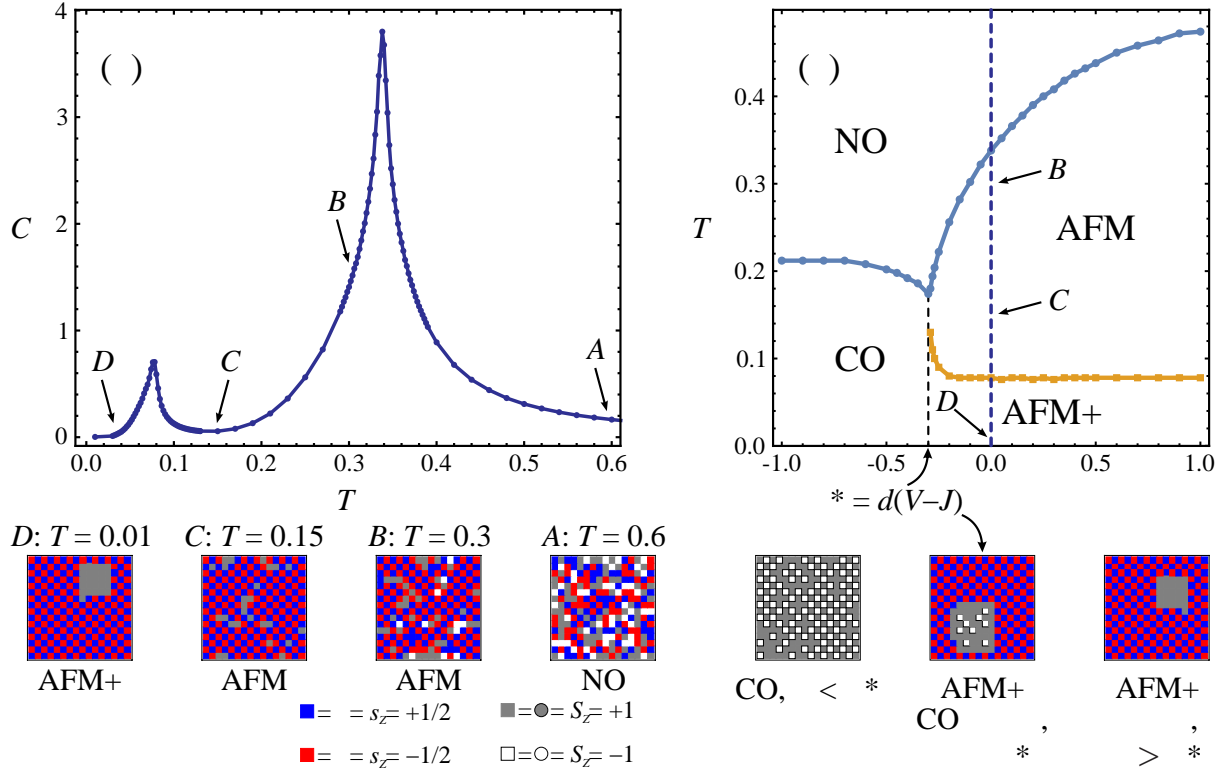


Рисунок 3 – (а) Температурная зависимость удельной теплоёмкости при  $n = 0.1$ ,  $\Delta = 0$ ,  $V = 0.1$  и  $J = 0.25$  для 2D решётки размером  $64 \times 64$ . Снимки решётки  $16 \times 16$  изображены при разных температурах. Наблюдается два последовательных ФП: в магнитное  $AFM$  состояние, и в состояние с фазовым расслоением. (б) Температурная фазовая диаграмма в зависимости от параметра одноузельных корреляций  $\Delta$  при  $n = 0.1$ ,  $V = 0.1$  и  $J = 0.25$  для 2D решётки размером  $64 \times 64$ . Мгновенные снимки решётки  $16 \times 16$  показывают основное состояние для разных  $\Delta$

ние системы оказывается вырожденным не только в точке, но и в определенной области фрустрации.

В разделе 4.5 показано, что в разбавленной системе конкуренция зарядового и магнитного упорядочений приводит к формированию ФП типа порядок-порядок, а также возвратных ФП. Это изображено на Рисунке 4, 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.

Особенности критического поведения рассмотрены в разделе 4.6. С помощью гистограммного анализа данных было обнаружено существование областей ФП I рода вблизи точки фрустрации. Качественно эти области совпадают с областями наблюдения псевдопереходов в разбавлен-

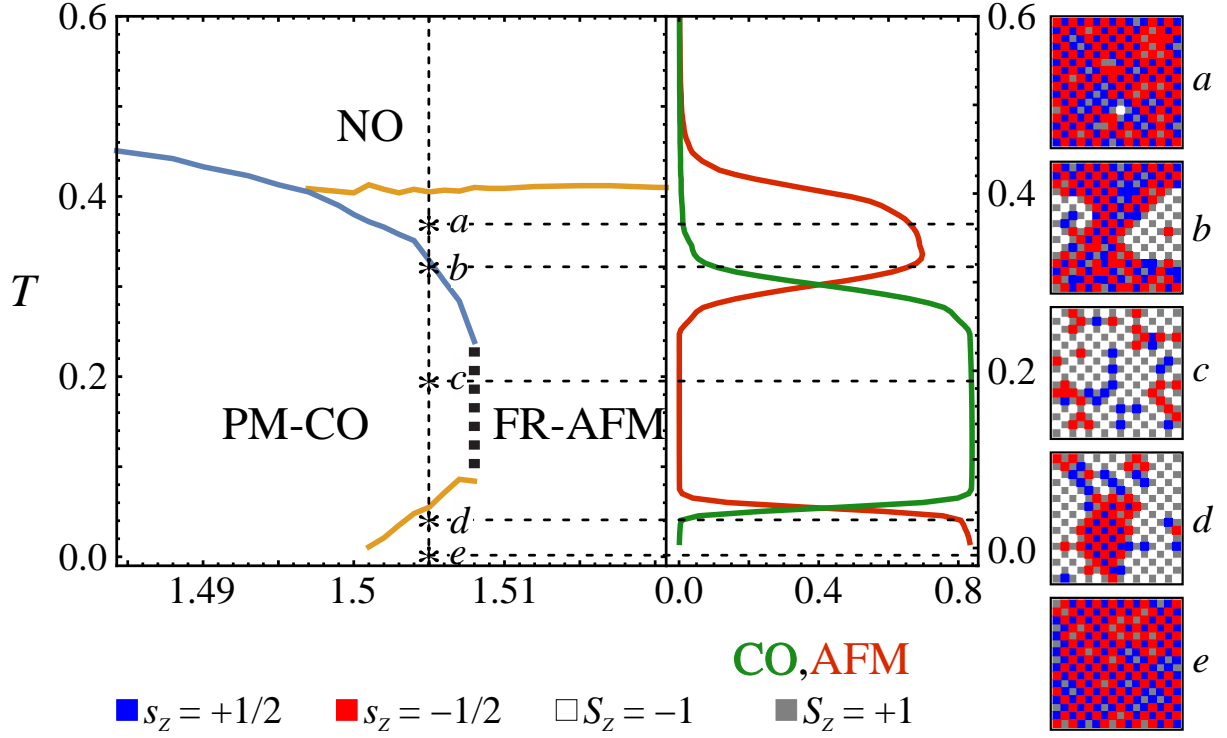


Рисунок 4 – Температурная фазовая диаграмма для  $n = 0.15$  вблизи точки фрустрации для  $V = 1, J = 0.25$ . Во вставке справа изображена температурная зависимость CO и AFM параметров порядка для  $\Delta = 1.505$ . Справа изображены снимки фрагментов решетки размером  $16 \times 16$ , полученные при температурах, соответствующих точкам  $a, b, c, d$  и  $e$  температурной диаграммы

ной цепочке, что указывает на связь критических свойств систем разных размерностей. На Рисунке 5 представлены температурные зависимости теплоёмкости и внутренней энергии для систем различных размерностей  $d$  вблизи точки фрустрации для  $n = 0$ . В 1D цепочке наблюдаются псевдопереходы «первого рода». Как для 2D, так и для 3D решётки можно наблюдать резкие особенности и скачки зависимостей, указывающие на наличие ФП I рода. 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.

В рамках теории конечно-размерного скейлинга для ФП II рода были определены критические индексы и класс универсальности. Для качественного исследования влияния немагнитных примесей на критические свойства системы получены зависимости критических температур  $T_c$ , КИ удельной теплоёмкости  $\alpha$  и корреляционной длины  $\nu$  от плотности заряда примесей  $n$ . Эти зависимости представлены на Рисунке 6 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 малых величин  $n$  что для AFM, что для CO фазы, КИ не зависят от

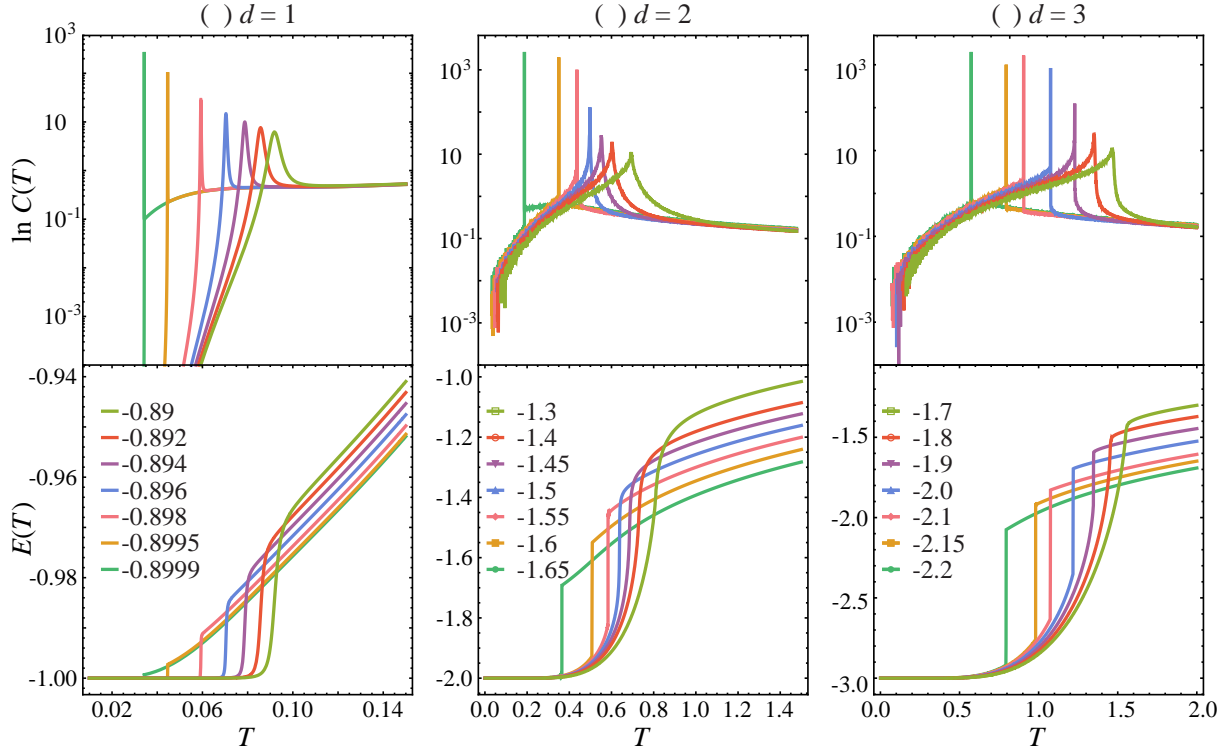


Рисунок 5 – Температурные зависимости удельной теплоёмкости в полулогарифмическом масштабе и внутренней энергии для систем разной пространственной размерности  $d$  при  $n = 0$  вблизи точки фрустрации. Величины параметра  $\Delta$  указаны на легендах, остальные параметры фиксированы и равны  $V = 0.1$ ,  $J = 1$ ,  $n = 0$ . 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». В 2D и 3D случае по резким особенностям удельной теплоёмкости, наряду со скачками внутренней энергии, можно судить о наличии ФП I рода

параметров модели и принимают значения, характерные для класса универсальности модели Изинга. Соответствующие значения обозначены на оси ординат чёрными звёздочками. При увеличении плотности заряда примесей  $n$  КИ начинают монотонно зависеть от параметров системы, что свидетельствует о нарушении класса универсальности Изинга и о неуниверсальном режиме критического поведения. Аналогичные выводы были получены и для 3D системы.

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

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.

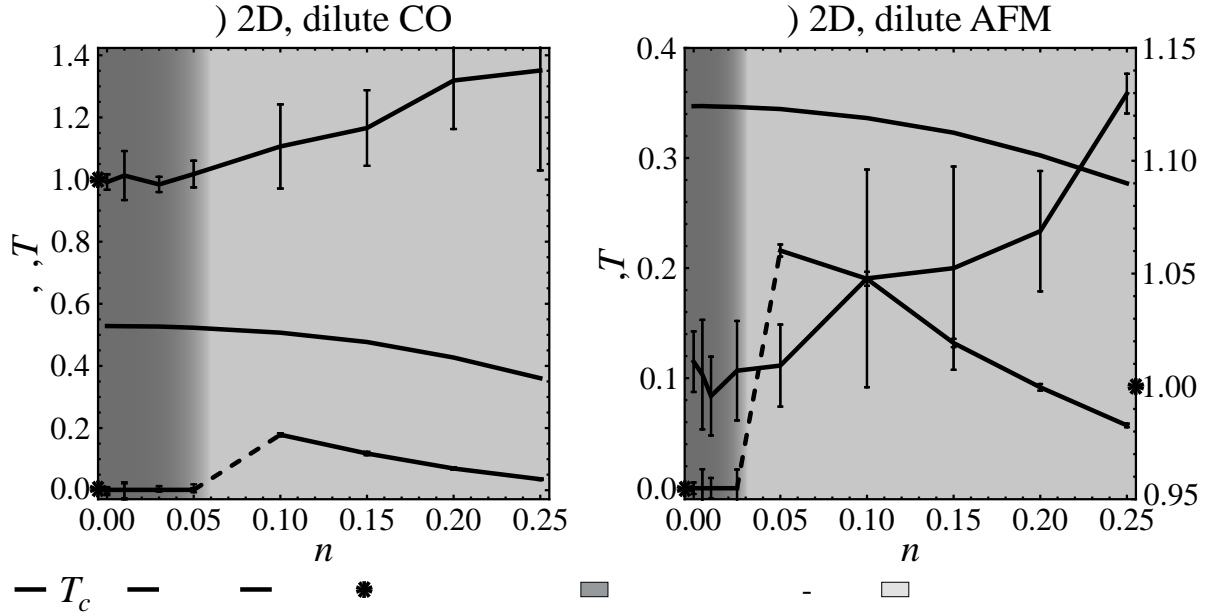


Рисунок 6 – Зависимости КИ теплоемкости  $\alpha$ , корреляционной длины  $\nu$  и температуры ФП  $T_c$  от плотности заряда  $n$  для 2D решётки,  $J = 0.25$  и а)  $\Delta = -0.5$ ,  $V = 0.3$ ; б)  $\Delta = 0$ ,  $V = 0.1$

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 намагниченность 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 намагниченности, 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. Учёт дальнедействующих и многочастичных взаимодействий между заряженными примесями может лечь в основу создания более сложных моделей, которые позволят более точно описывать экспериментальные данные и предсказывать новые физические явления. Исследуемая модель будет сохранять свою значимость как предельный случай, однако расширение и усложнение заряд-зарядового взаимодействия может привести к появлению новых фаз и физических явлений.

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.

## Публикации автора по теме диссертации

**Статьи автора по теме диссертации, опубликованные в рецензируемых научных журналах и изданиях, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ:**

1. Панов, Ю.Д. Особенности конкуренции спиновой и псевдоспиновой подсистем в модельном купрате / Ю.Д. Панов, В.А. Улитко, К.С. Будрин, **Д.Н. Ясинская**, А.А. Чиков // Физика твердого тела. – 2019. – Т. 61, № 5. – С. 822-827; 0.58 п.л./ 0.12 п.л.;  
Panov, Y.D. Competition between the Spin and Pseudospin Subsystems in a Model Cuprate / Y.D. Panov, V.A. Ulitko, K.S. Budrin, **D.N. Yasinskaya**, A.A. Chikov // Phys. Solid State. – 2019. – Vol. 61. – P. 707-713; 0.59 п.л./0.12 п.л. (*Web of Science, Scopus*).
2. **Ясинская, Д.Н.** Особенности фазовых состояний двумерного разбавленного магнетика с фрустрацией / **Д.Н. Ясинская**, В.А. Улитко, Ю.Д. Панов // Физика твердого тела. – 2020. – Т. 62, № 9. – С. 1543-1548; 0.43 п.л./0.14 п.л.;

- Yasinskaya, D.N.** Specific features of phase states of a diluted 2D magnet with frustration / **D.N. Yasinskaya**, V.A. Ulitko, Y.D. Panov // Phys. Solid State. – 2020. – Vol. 62. – P.1713-1718; 0.40 п.л./0.13 п.л. (*Web of Science, Scopus*).
3. **Yasinskaya, D.N.** Critical Behavior of a 2D Spin-Pseudospin Model in a Strong Exchange Limit / **D.N. Yasinskaya**, V.A. Ulitko, A.A. Chikov, Y.D. Panov // Acta Phys. Pol. A. – 2020. – Vol. 137, № 5. – P. 979-981; 0.26 п.л./0.06 п.л. (*Web of Science, Scopus*).
  4. **Ясинская, Д.Н.** Особенности вырождения основного состояния спин-псевдоспиновой модели двумерного магнетика вблизи точки фрустрации / **Д.Н. Ясинская**, В.А. Улитко, Ю.Д. Панов // Физика твердого тела. – 2021. – Т. 63, № 9. – С. 1350-1354; 0.51 п.л./0.17 п.л.; **Yasinskaya, D.N.** Nontrivial Ground State Degeneracy of the Spin-Pseudospin Model of a Two-Dimensional Magnet Near the Frustration Point / **D.N. Yasinskaya**, V.A. Ulitko, Y.D. Panov // Phys. Solid State. – 2021. – Vol. 63, № 10. – P. 1588-1593; 0.52 п.л./0.17 п.л. (*Web of Science, Scopus*).
  5. **Yasinskaya, D.N.** Critical Properties of a 2-D Frustrated Magnet With Non-Magnetic Impurities / **D.N. Yasinskaya**, V.A. Ulitko, Y.D. Panov // IEEE Trans. Magn. – 2022. – Vol. 58, № 2. – P. 1-4; 0.49 п.л./0.16 п.л. (*Web of Science, Scopus*).
  6. **Yasinskaya, D.N.** Pseudotransitions in a dilute Ising chain / **D.N. Yasinskaya**, Y.D. Panov // Phys. Rev. E. – 2024. – Vol. 110, № 4. – P. 044118; 1.52 п.л./0.76 п.л.; Q2 (*Web of Science, Scopus*).
  7. **Ясинская, Д.Н.** Использование марковских цепей для анализа состояний одномерных спиновых систем / **Д.Н. Ясинская**, Ю.Д. Панов // Физика твердого тела. – 2024. – Т. 66, № 7. – С. 1106-1114; 0.81 п.л./0.40 п.л.; K1.  
**Yasinskaya, D.N.** Markov chains for the analysis of states of one-dimensional spin systems / **D.N. Yasinskaya**, Y.D. Panov // Phys. Solid State. – 2024. – Vol. 66, № 7. – P. 1068-1075; 0.76 п.л./0.38 п.л.

#### **Охранные документы на интеллектуальную собственность:**

8. 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**, В.А. Улитко; 0.1 п.л./0.05 п.л.
9. 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**; 0.42 п.л./0.42 п.л.

## Список цитируемой литературы

1. *De Souza S., Rojas O.* Quasi-phases and pseudo-transitions in one-dimensional models with nearest neighbor interactions // *Solid State Commun.* — 2018. — Vol. 269. — P. 131–134.
2. *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, no. 21. — P. 214413.
3. High field magnetization in an  $S=1$  antiferromagnetic chain with bond alternation / *Narumi Y., M. Hagiwara, R. Sato, K. Kindo, H. Nakano, M. Takahashi* // *Physica B.* — 1998. — Vol. 246/247. — P. 509–512.
4. Magnetization and quadrupolar plateaus in the one-dimensional antiferromagnetic spin- $3/2$  and spin-2 Blume–Capel model / *Aydiner E., C. Akyüz, M. Gönülol, H. Polat* // *Phys. Status Solidi B.* — 2006. — Vol. 243, no. 12. — P. 2901–2912.
5. The properties of one-dimensional spin- $S$  ( $S \geq 1$ ) antiferromagnetic Ising chain with single-ion anisotropy / *Chen X. Y., Q. Jiang, W. Z. Shen, C. G. Zhong* // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2003. — Vol. 262, no. 2. — P. 258–263.
6. Frustrated spin systems / *Diep H. T. [et al.]*. — World scientific, 2013.
7. *Balents L.* Spin liquids in frustrated magnets // *Nature.* — 2010. — Vol. 464. — P. 199–208.
8. *Zhitomirsky M. E.* Enhanced magnetocaloric effect in frustrated magnets // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 67, no. 10. — P. 104421.
9. *Honecker A., Wessel S.* Magnetocaloric effect in two-dimensional spin- $1/2$  antiferromagnets // *Physica B.* — 2006. — Vol. 378. — P. 1098.
10. *Janssen H. K., Oerding K., Sengespeick E.* On the crossover to universal criticality in dilute Ising systems // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 1995. — Vol. 28, no. 21. — P. 6073.
11. *Giacomin G.* Disorder and Critical Phenomena Through Basic Probability Models. — Springer, Heidelberg, 2011.
12. *Harris A. B.* Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // *J. Phys. C: Solid State Phys.* — 1974. — Vol. 7, no. 9. — P. 1671.
13. *Grinstein G., Luther A.* Application of the renormalization group to phase transitions in disordered systems // *Phys. Rev. B.* — 1976. — Vol. 13, no. 3. — P. 1329.
14. *Moskvin A. S.* Pseudospin  $S = 1$  formalism and skyrmion-like excitations in the three-body constrained extended Bose–Hubbard model // *J. Exp. Theor. Phys.* — 2015. — Vol. 121, no. 3. — P. 477–490.