

13,07,05

## Фазовые переходы в трехмерной ферромагнитной модели Поттса на решетке кагоме

© М.К. Рамазанов<sup>1,2</sup>, А.К. Муртазаев<sup>1,2</sup>, Т.Р. Ризванова<sup>1</sup>, М.Р. Джамалудинов<sup>1</sup>, М.А. Магомедов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Махачкала, Россия

<sup>2</sup> Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в Редакцию 13 мая 2025 г.

В окончательной редакции 20 августа 2025 г.

Принята к публикации 26 августа 2025 г.

Методом Монте-Карло проведены исследования фазовых переходов и термодинамических свойств трехмерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на решетке кагоме с взаимодействиями ближайших соседей. Построены температурные зависимости энергии и теплоемкости. Методом кумулянтов Биндера четвертого порядка и на основе гистограммного метода проведен анализ природа фазового перехода. Обнаружено, что в данной модели наблюдается фазовый переход первого рода.

**Ключевые слова:** метод Монте-Карло, кумулянты Биндера, взаимодействия спинов, теплоемкость.

DOI: 10.61011/FTT.2025.09.61630.117-25

### 1. Введение

Исследование фазовых переходов (ФП) и термодинамических свойств спиновых решеточных моделей по-прежнему привлекает большое внимание специалистов [1–5]. При изучении ФП и критических явлений наиболее плодотворными оказались идеи, заложенные в гипотезе скейлинга, универсальности и в теории ренормализационной группы [6]. В последние годы ФП в спиновых системах успешно изучаются методом трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье [7,8]. Исследование сложных спиновых решеточных моделей на основе микроскопических гамильтонианов методами теоретической физики — задача чрезвычайно сложная. Это привело к тому, что ФП и критические явления исследуются методами численного эксперимента [6,9].

Одной из спиновых решеточных моделей, к которой в настоящее время наблюдается повышенный интерес, является модель Поттса. Интерес к этой модели обусловлен тем, что модель Поттса служит основой теоретического описания широкого круга физических свойств в физике конденсированных сред. К их числу относятся некоторые классы адсорбированных газов на графите, сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, различные многослойные магнитные системы, спиновые стекла, многокомпонентные сплавы и др. [10–12]. В качестве примера веществ, описываемых моделью Поттса, можно привести адсорбированные пленки: адсорбированные атомы водорода ( $2 \times 2$ ) —  $2\text{H|Ni}(111)$  на поверхности никеля  $\text{Ni}(111)$  размещаются в узлах решетки [13]. В таких адсорбированных структурах ФП описываются клас-

сом универсальности двумерных моделей Поттса с  $q = 4$  [14].

Физические свойства модели Поттса зависят от пространственной размерности решетки, числа состояний спина  $q$  и от геометрии решетки [10,15–23]. В зависимости от числа состояний спина  $q$  и пространственной размерности модель Поттса демонстрирует ФП первого или второго рода. Ферромагнитная модель Поттса достаточно хорошо изучена в двумерном случае [10,24]: при  $q > 4$  система демонстрирует ФП первого порядка, тогда как при  $q \leq 4$  переход непрерывен. Для трехмерного случая известно, что при  $q > 3$  в системе наблюдается ФП первого рода. Поведение антиферромагнитной модели Поттса считается более сложной. В трехмерной антиферромагнитной модели Поттса для  $q = 3$  и 4 на простой кубической решетке наблюдается ФП второго рода, тогда как для  $q = 5$  наблюдается нулевой температурный переход, а для  $q = 6$  нет порядка ни при каких температурах [25].

В отличие от ферромагнитной двумерной модели Поттса, которая достаточно хорошо изучена благодаря ее универсальности, для трехмерной модели все еще остаются открытыми вопросы, связанные с изучением природы и характера ФП, влияния внешних возмущающих факторов на критические и термодинамические свойства и др.

В связи с этим, в настоящей работе нами предпринята попытка на основе репличного алгоритма метода Монте-Карло (МК) провести исследование ФП и термодинамических свойств трехмерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на решетке кагоме с взаимодействиями ближайших соседей.

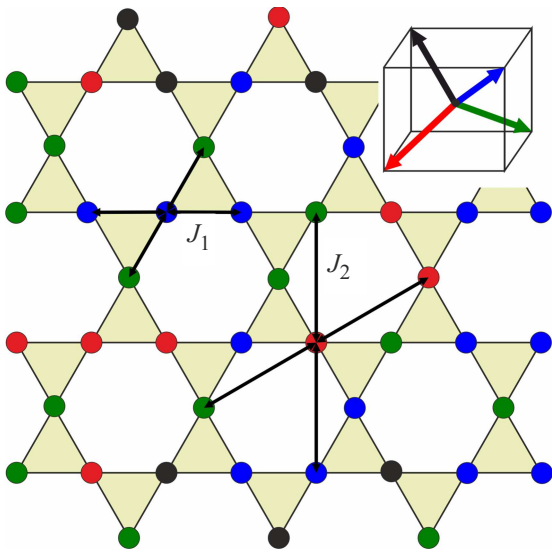


Рис. 1. Модель Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на решетке кагоме.

## 2. Модель и метод исследования

Гамильтониан модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  с учетом взаимодействий ближайших соседей может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j}, \quad (1)$$

где  $J_1$  — параметр обменного ферромагнитного ( $J_1 > 0$ ) взаимодействия ближайших соседей,  $\theta_{i,j}$  — угол между взаимодействующими спинами  $S_i - S_j$ .

Схематическое описание модели Поттса на решетке кагоме для двумерного случая представлено на рис. 1.

В настоящей работе рассматривается решетка, состоящая из таких двумерных слоев, сложенных по ортогональной оси. Как видно на рисунке, у каждого спина в каждом слое есть четыре ближайших ( $J_1$ ) и четыре вторых ( $J_2$ ) соседа. В трехмерном случае добавляются взаимодействия еще двух спинов, расположенных в ближайших слоях. Таким образом, число ближайших спинов в рассматриваемой модели равно шести. В настоящем исследовании взаимодействие вторых соседей не учитывается ( $J_2 = 0$ ).

Спины, обозначенные кружками одного и того же цвета, имеют одинаковое направление. На вставке к рисунку для каждого из четырех возможных направлений спина приведено соответствующее цветовое представление. Направления спинов заданы таким образом, что выполняется равенство:

$$\cos \theta_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j \\ -1/3, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases} \quad (2)$$

Согласно условию (2), для двух спинов  $S_i$  и  $S_j$  энергия парного обменного взаимодействия  $E_{i,j} = -J_1$ , если

$S_i = S_j$ . В случае, когда  $S_i \neq S_j$ , энергия  $E_{i,j} = J_1/3$ . Таким образом, энергия парного взаимодействия спинов равна одной величине при их одинаковом направлении, и принимает другое значение при несовпадении направлений спинов. Для модели Поттса с  $q = 4$  в трехмерном пространстве такое возможно только при ориентации спинов, как показано на вставке рис. 1.

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе МК [26–29]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм [30]. Репличный обменный алгоритм эффективен для исследования систем с большими линейными размерами и в критической области. Поэтому в настоящем исследовании был использован этот алгоритм. Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде:

1. Одновременно моделируются  $N$  реплик  $X_1, X_2, \dots, X_N$  с температурами  $T_1, T_2, \dots, T_N$ .
2. После выполнения одного МК-шага/спин для всех реплик производится обмен данными между парой соседних реплик  $X_i$  и  $X_{i+1}$  в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью
- 3.

$$w(X_i \rightarrow X_{i+1}) = \begin{cases} 1, & \text{для } \Delta \leq 0, \\ \exp(-\Delta), & \text{для } \Delta > 0, \end{cases}$$

где  $\Delta = -(U_i - U_{i+1}) \cdot (1/T_i - 1/T_{i+1})$ ,  $U_i$  и  $U_{i+1}$  — внутренние энергии реплик.

Главное преимущество этого алгоритма в том, что вероятность обмена *a priori* известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности — процедура достаточно длительная и отнимает много времени. В репличном обменном алгоритме для каждой реплики реализуется случайное блуждание по „температурному интервалу“, которое в свою очередь стимулирует случайное блуждание в поле потенциальной энергии. Это облегчает решение проблемы „застревания“ системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией, которая характерна для спиновых систем с фрустрациями.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 12-96$ , где  $L$  измеряется в размерах элементарной ячейки.

## 3. Результаты моделирования

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости  $C$  нами использовалось выражение [31]

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (3)$$

где  $K = |J_1|/(k_B T)$ ,  $U$  — внутренняя энергия.

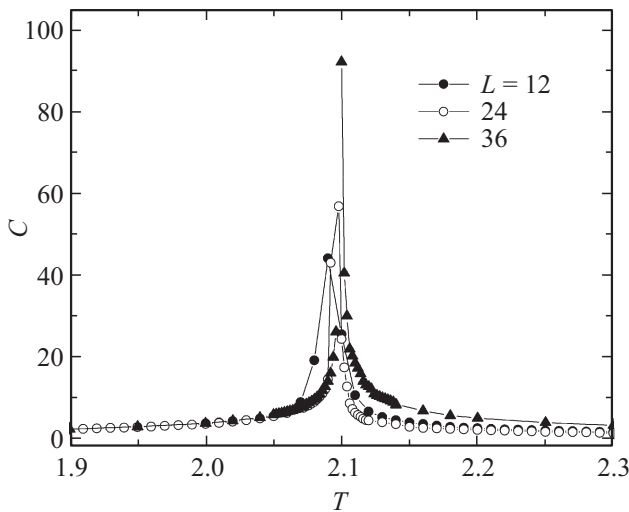


Рис. 2. Температурные зависимости теплоемкости  $C$ .

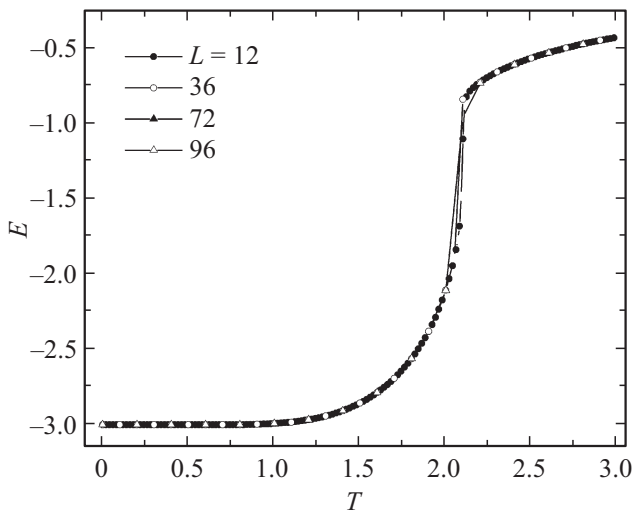


Рис. 3. Температурные зависимости энергии  $E$ .

На рис. 2 приведены температурные зависимости теплоемкости  $C$  (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей) для систем с различными линейными размерами. Видно, что в зависимости теплоемкости от температуры для всех систем вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы, которые увеличиваются с ростом числа спинов в системе, причем эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру даже для систем с наименьшим значением  $L$ . Это свидетельствует, во-первых, о высокой эффективности использованного способа добавления ПГУ, а во-вторых, о достижении насыщения по  $N$  для многих исследуемых нами параметров. Резкий рост максимума (острый максимум) теплоемкости с увеличением линейных размеров характерен для систем, в которых наблюдается ФП первого рода.

На рис. 3 представлены температурные зависимости энергии  $E$  для систем с различными  $L$ . Как видно на рисунке, для всех  $L$  в критической области наблюдается резкий скачок энергии. Такое поведение характерно для ФП первого рода. Таким образом, температурные зависимости теплоемкости и энергии свидетельствуют в пользу ФП первого рода.

Для анализа характера ФП и определения критической температуры  $T_C$  нами использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [9]:

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle_L}{3\langle U^2 \rangle_L^2} \quad (4)$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2} \quad (5)$$

где  $V_L$  — энергетический кумулянт,  $U_L$  — магнитный кумулянт.

Выражения (4) и (5) позволяют определить критическую температуру  $T_C$  с большой точностью для ФП первого и второго рода соответственно. Применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип ФП в системе. Известно, что ФП первого рода характеризуются тем, что величина  $V_L$  стремится к некоторому нетривиальному значению  $V^*$  согласно выражению

$$V_L = V^* + bL^{-d} \quad (6)$$

при  $L \rightarrow \infty$  и  $T = T_C(L)$ , где величина  $V^*$  отлична от  $2/3$ , а минимальная величина  $U_{L \min}(T = T_{\min})$  расходится:  $U_{L \min}(T = T_{\min}) \rightarrow \infty$  при  $L \rightarrow \infty$ .

В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера  $U_L$  имеют четко выраженную точку пересечения [9]. Анализ наших данных показывает, что характерные зависимости  $U_L$  от температуры при разных значениях  $L$  в критической области не пересекаются в одной точке. Это свидетельствует в пользу наличия в данной модели ФП первого рода. Температурная зависимость энергетического кумулянта  $V_L$  при разных значениях  $L$  представлена на рис. 4. Как видно из графика, величина  $V_L$  не стремится к  $2/3$ , а величина  $V^*$  не равна  $2/3$ , что характерно для ФП первого рода. Эта величина рассчитана с использованием выражения (6).

Для более точного определения рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных МК [32,33]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работах [34,35]. Полученные на основе гистограммного анализа данных результаты показывают, что в данной модели наблюдается ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 5. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для системы с различными линейными размерами. График построен для температуры близкой к критической температуре. Из рисунка видно, что в зависимости вероятности  $W$  от

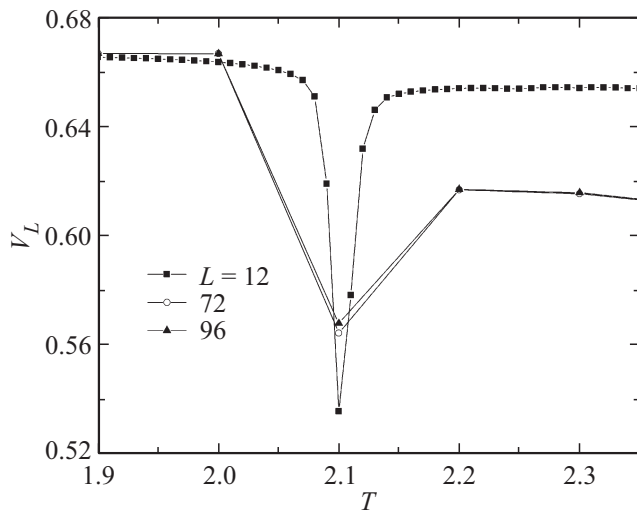


Рис. 4. Температурные зависимости магнитного кумулянта Биндера  $V_L$ .

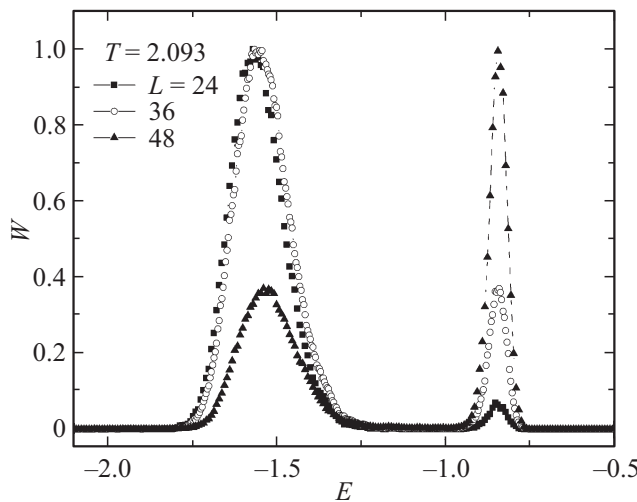


Рис. 5. Гистограммы распределения энергии для различных  $L$ .

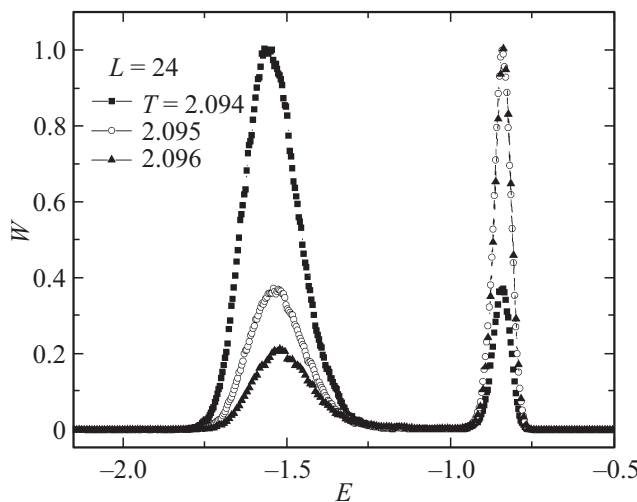


Рис. 6. Гистограммы распределения энергии для различных  $T$ .

энергии наблюдается два максимума, которые свидетельствуют о ФП первого рода. Наличие двух максимумов на гистограммах распределения энергии является достаточным условием для ФП первого рода.

На рис. 6 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами  $L = 24$ . Графики построены при различных температурах, близких к критической температуре. Из рисунка видно, что в зависимости вероятности  $W$  от энергии  $E$  для всех температур наблюдаются два максимума, которые свидетельствуют о ФП первого рода.

#### 4. Заключение

Исследование фазовых переходов в трехмерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на решетке кагоме с учетом взаимодействий ближайших соседей выполнено с использованием репличного алгоритма метода Монте-Карло. Проведен анализ характера фазовых переходов на основе метода кумулянта Биндера и гистограммного анализа данных. Показано, что в рассматриваемой модели наблюдается фазовый переход первого рода.

#### Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-12-20029.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] M. Schmidt, G.L. Kohlrausch, F.M. Zimmer. *Physica A* **596**, 127126 (2022).
- [2] K. Dutta, D. Talukdar. *JMMM* **556**, 169344 (2022).
- [3] Д.Н. Ясинская, В.А. Улитко, Ю.Д. Панов. *ФТТ* **63**, 9, 1350 (2021). [D.N. Yasinskaya, V.A. Ulitko, Yu.D. Panov. *Phys. Solid State* **63**, 10, 1588 (2021).]
- [4] A.O. Sorokin. *Physica A* **602**, 127621 (2022).
- [5] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов. *ФТТ* **65**, 9, 1455 (2023). [A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov. *Phys. Solid State* **65**, 9, 1399 (2023).]
- [6] И.К. Камиллов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев. *УФН* **169**, 7, 773 (1999). [I.K. Kamilov, A.K. Murtazaev, Kh.K. Aliev. *Phys. — Uspekhi* **42**, 7, 689 (1999).]
- [7] A.V. Zarubin, F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin. *JMMM* **514**, 167144 (2020).
- [8] Е.С. Цуварев, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. *ЖЭТФ* **158**, 3(9), 504 (2020). [E.S. Tsuvarov, F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin. *JETP* **131**, (2020).]
- [9] K. Binder, D.W. Heermann. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction*. Springer, Berlin/Heidelberg (2010).
- [10] F.Y. Wu. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 1, 235 (1982).

- [11] H.T. Diep. Frustrated Spin Systems. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004). P. 624.
- [12] W. Zhang, Y. Deng. Phys. Rev. E **78**, 3, 031103 (2008).
- [13] L. Schwenger, K. Budde, C. Voges, H. Pfür. Phys. Rev. Lett. **73**, 2, 296 (1994).
- [14] K. Budde, L. Schwenger, C. Voges, H. Pfür. Phys. Rev. B **52**, 13, 9275 (1995).
- [15] M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. Lett. **44**, 13, 837 (1980).
- [16] J.L. Cardy, M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. B **22**, 5, 2560 (1980).
- [17] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Physica A **521**, 543 (2019).
- [18] H. Feldmann, A.J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, S.-H. Tsai. J. Phys. A **31**, 10, 2287 (1998).
- [19] H. Duminil-Copin, V. Sidoravicius, V. Tassion. Commun. Math. Phys. **349**, 1, 47 (2017).
- [20] N. Schreiber, R. Cohen, S. Haber. Phys. Rev. E **97**, 3, 032106 (2018).
- [21] F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin. Phys. Solid State **60**, 1090 (2018).
- [22] М.А. Фадеева, Л.Н. Щур. ЖЭТФ **162**, 6, 909 (2022). [M.A. Fadeeva, L.N. Shchur. JETP **135**, 6, 869 (2022).]
- [23] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. ФММ **124**, 5, 339 (2023). [M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, M.K. Mazagaeva. Phys. Metals. Metallogr. **124**, 5, 429 (2023).]
- [24] R.J. Baxter. J. Phys. C **6**, 23, L445 (1973).
- [25] C. Yamaguchi, Y. Okabe. J. Phys. A **34**, 42, 8781 (2001).
- [26] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **101**, 10, 793 (2015). [M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev. JETP Lett. **101**, 10, 714 (2015).]
- [27] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **106**, 2, 72 (2017). [M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev. JETP Lett. **106**, 2, 86 (2017).]
- [28] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. ФТТ **62**, 3, 442 (2020). [M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, M.K. Mazagaeva. Phys. Solid State **62**, 3, 499 (2020).]
- [29] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **109**, 9, 610 (2019). [M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev. JETP Lett. **109**, 9, 589 (2019).]
- [30] A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto. Biopolymers (Peptide Sci.) **60**, 2, 96 (2001).
- [31] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 7, 6087 (1991).
- [32] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 5, 0561011 (2001).
- [33] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. Lett. **86**, 10, 2050 (2001).
- [34] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **103**, 7, 522 (2016). [M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev. JETP Lett. **103**, 7, 460 (2016).]
- [35] А.К. Муртазаев, Т.Р. Ризванова, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов. ФТТ **62**, 8, 1278 (2020). [A.K. Murtazaev, T.R. Rizvanova, M.K. Ramazanov, M.A. Magomedov. Phys. Solid State **62**, 8, 1434 (2020).]

Редактор Е.В. Толстякова