

10,11,05

## Фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Поттса на решетке кагоме

© М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, Т.Р. Ризванова

Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН,  
Махачкала, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в Редакцию 13 июля 2022 г.

В окончательной редакции 13 июля 2022 г.

Принята к публикации 5 августа 2022 г.

Методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на решетке кагоме с учетом обменных взаимодействий первых  $J_1$  и вторых  $J_2$  ближайших соседей. Исследования проведены для величины взаимодействия вторых ближайших соседей в интервале  $-1.0 \leq J_2 \leq 0.0$ . Проведен анализ характера фазовых переходов. Показано, что в интервале  $-1.0 \leq J_2 \leq -0.1$  наблюдается фазовый переход второго рода, а при значении  $J_2 = 0.0$  фрустрации нарушают порядок в системе и приводят к исчезновению фазового перехода.

**Ключевые слова:** фрустрации, фазовый переход, метод Монте-Карло, модель Поттса.

DOI: 10.21883/FTT.2022.12.53655.436

### 1. Введение

В настоящее время большой научный интерес представляют исследования фазовых переходов (ФП), критических, магнитных и термодинамических свойств магнетиков, описываемых двумерными решеточными моделями Изинга и Поттса [1–3]. Эти модели описывают большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [1,4,5]. В отличие от модели Изинга, для двумерной модели Поттса с различным числом состояний спина  $q$  существует совсем немного надежно установленных фактов. Большинство имеющихся результатов получены для модели Поттса с числом состояний спина  $q = 2$  и  $q = 3$  [6–8]. В зависимости от числа состояний спина  $q$  и пространственной размерности, модель Поттса демонстрирует ФП первого или второго рода. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  практически уникальна и до сих пор мало изучена. Эта модель может быть использована для описания поведения некоторых классов адсорбированных газов на графите [9]. Данная модель интересна и тем, что значение  $q = 4$  является граничным значением интервала  $2 \leq q \leq 4$ , где наблюдается ФП второго рода, и области значений  $q > 4$ , в котором ФП происходит как переход первого рода [4].

Результаты исследований двумерной ферромагнитной модели Поттса с конкурирующими обменными взаимодействиями на треугольной [10] и гексагональной [11,12] решетках и на решетке кагоме [13] методом Монте-Карло (МК) показывают, что характер ФП и термодинамическое поведение этой модели зависят от типа решетки. Это связано с тем, что степень вырождения основного состояния системы и точка фрустрации зависят от типа решетки.

Исследование двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на решетке кагоме с учетом обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей в литературе практически не встречается. Данная модель, даже без учета взаимодействий вторых ближайших соседей, вследствие особой геометрии является фрустрированной. Учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в данной модели может привести к изменению степени вырождения основного состояния и появлению различных фаз и ФП, а также повлиять на описание его термодинамических и магнитных свойств.

В работе [14] при исследовании соединений, имеющих решетку кагоме, обнаружены уникальные электронные и квантовые свойства. Такое поведение авторы связывают с особенностью строения решетки кагоме. Например, слоистые антимиониды ванадия  $AV_3Sb_5$  ( $A = K, Rb, Cs$ ), которые представляют собой семейство топологических металлов с решеткой кагоме, демонстрируют ряд сильно коррелированных электронных фаз, включая порядок заряда и сверхпроводимость. Схематическое представление такой решетки представлено на рис. 1.

В связи с этим, в настоящей работе нами предпринята попытка на основе метода МК провести исследование ФП и термодинамических свойств двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на решетке кагоме с взаимодействием первых ( $J_1$ ) и вторых ближайших ( $J_2$ ) соседей. Поскольку поведение модели Поттса зависит от величины  $J_2$ , особый интерес представляет изучение природы ФП для этой модели при различных соотношениях величины антиферромагнитного взаимодействия вторых ближайших соседей. Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить характер ФП и закономерности изменения термодинамического поведения

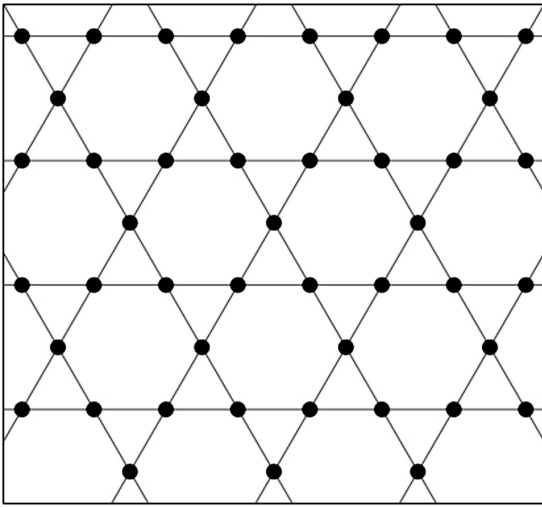


Рис. 1. Схематическое представление решетки кагоме.

фрустрированной модели Поттса на решетке кагоме с числом состояний спина  $q = 4$ , и эти вопросы до сих пор остаются открытыми. Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с природой ФП и термодинамическим поведением фрустрированных спиновых систем.

## 2. Модель и метод исследования

Гамильтониан модели Поттса с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей может быть представлен в следующем виде

$$\begin{aligned}
 H &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} S_i S_k \\
 &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \cos \theta_{i,k}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

где  $J_1$  и  $J_2$  — параметры обменных антиферромагнитных взаимодействий ( $J_1 < 0, J_2 < 0$ ) соответственно для первых и вторых ближайших соседей,  $\theta_{i,j}, \theta_{i,k}$  — углы между взаимодействующими спинами  $S_i - S_j$  и  $S_i - S_k$ . Величина взаимодействия вторых ближайших соседей менялась в интервале  $-1.0 \leq J_2 \leq 0.0$ .

Направления векторов заданы таким образом, что выполняется равенство

$$\begin{aligned}
 \theta_{i,j} &= \begin{cases} 0, & \text{если } S_i = S_j \\ 109.47^\circ, & \text{если } S_i \neq S_j \end{cases}, \\
 \cos \theta_{i,j} &= \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j \\ -1/3, & \text{если } S_i \neq S_j \end{cases}. \quad (2)
 \end{aligned}$$

Такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [15–21]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним

из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга–Ландау [22,23], особенно в низкотемпературной области. Поэтому нами в настоящем исследовании был использован данный алгоритм. Алгоритм Ванга–Ландау является реализацией метода энтропийного моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы. Алгоритм Ванга–Ландау был использован нами в следующем виде:

- задается произвольная начальная конфигурация спинов, стартовые значения плотности состояний  $g(E) = 1$ , гистограммы распределений по энергиям  $H(E) = 0$ , стартовый модификационный фактор  $f = f_0 = e_1 \approx 2.71828$ ;

- многократно совершаем шаги в фазовом пространстве, пока не получим относительно плоскую гистограмму  $H(E)$  (т.е. пока не будут посещены примерно одинаковое количество раз все возможные энергетические состояния системы). При этом вероятность перехода из состояния с энергией  $E_1$  в состояние с энергией  $E_2$  определяется по формуле  $p = g(E_1)/g(E_2)$ . Если переход в состояние с энергией  $E_2$  состоялся, то значение плотности состояний  $g(E_2)$  с энергией  $E_2$  умножается на фактор  $f$  и гистограмма с этой энергией  $H(E_2)$  увеличивается на 1 ( $g(E_2) := f g(E_2), H(E_2) := H(E_2) + 1$ ). Иначе все это делается для энергии  $E_1$  ( $g(E_1) := f g(E_1), H(E_1) := H(E_1) + 1$ );

- если гистограмма стала „плоской“, то обнуляем гистограмму ( $H(E) := 0$ ), уменьшаем модификационный фактор ( $f := \sqrt{f}$ ) и продолжаем снова, пока  $f \geq f_{\min}$ . В нашем случае  $f_{\min} = 1.0000000001$ ;

- определив плотность состояний системы, можно рассчитать значения термодинамических параметров при любой температуре — в частности, внутреннюю энергию  $U$ , свободную энергию  $F$ , удельную теплоемкость  $C$  и энтропию  $S$  можно вычислить, используя следующие выражения:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \cong \langle E \rangle_T, \quad (3)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left( \sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (4)$$

$$C = \frac{(|J_1| k_B T)^2}{N} (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (5)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \quad (6)$$

где  $N$  — число частиц,  $k_B$  — константа Больцмана,  $T$  — температура (здесь и далее температура дана в единицах  $|J_1|/k_B$ ).

Расчеты проводились для систем с периодически граничными условиями и линейными размерами  $L \times L = N, L = 12-96$  ( $L$  измеряется в размерах элементарной ячейки) в диапазоне  $-1.0 \leq J_2 \leq 0.0$ .

### 3. Результаты моделирования

На рис. 2 приведены температурные зависимости энергии  $E$  для разных значений обменного взаимодействия  $J_2$ . На рисунке видно, что в низкотемпературной области  $E = 0$  для всех значений  $J_2$ . Это объясняется отсутствием порядка в системе в основном состоянии. С увеличением температуры мы наблюдаем, что характер изменения энергии системы зависит от величины  $J_2$ . При увеличении температуры для систем с большим значением  $J_2$  рост энергии происходит быстрее (наблюдается более резкий скачок).

На рис. 3 приведены температурные зависимости энтропии  $S/N$  для разных значений обменного взаимодействия  $J_2$ . При увеличении температуры энтропия для всех значений  $J_2$  стремится к теоретически предсказанному значению  $\ln 4$ . При низких температурах

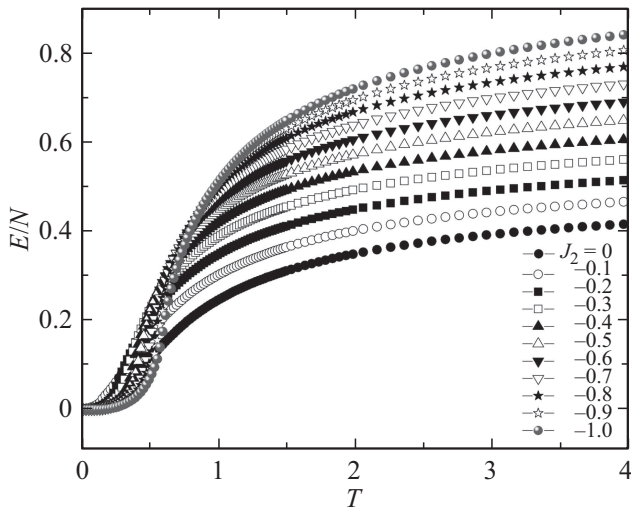


Рис. 2. Температурные зависимости энергии  $E$  для разных значений  $J_2$ .

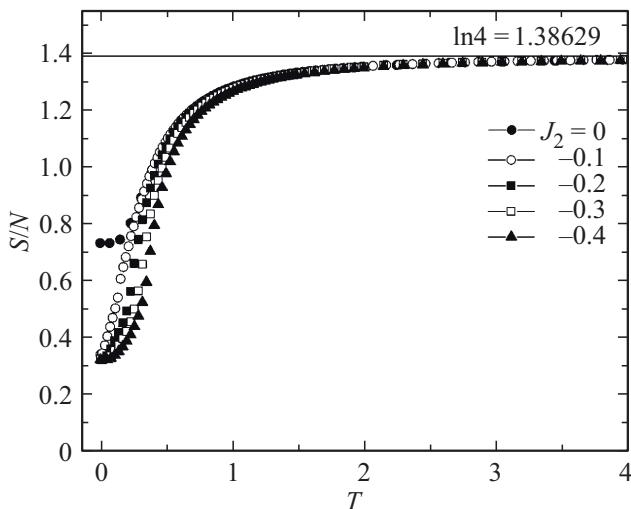


Рис. 3. Температурные зависимости энтропии  $S/N$  для разных значений  $J_2$ .

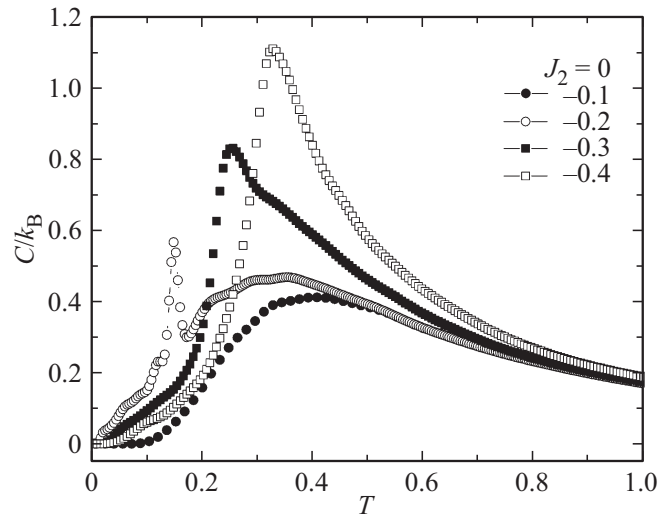


Рис. 4. Температурные зависимости теплоемкости  $C$  для разных значений  $J_2$ .

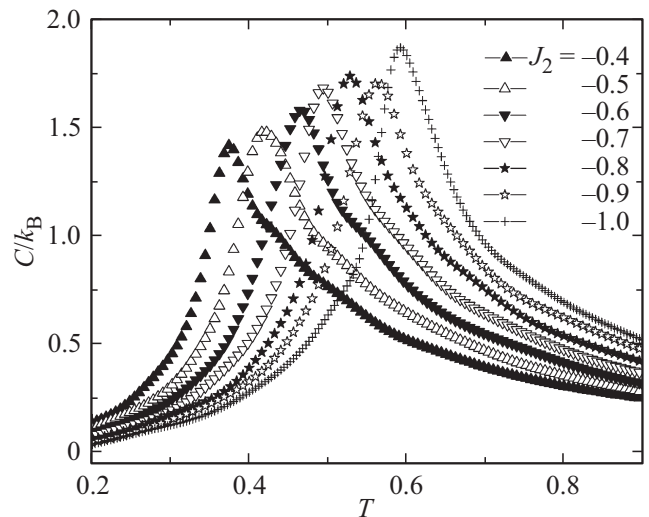


Рис. 5. Температурные зависимости теплоемкости  $C$  для разных значений  $J_2$ .

энтропия для всех значений  $J_2$  стремится к ненулевому значению  $S_0$ . Такое поведение энтропии свидетельствует о вырождении основного состояния. Следует отметить, что для значения  $J_2 = 0.0$  энтропия в низкотемпературной области принимает наибольшее значение  $S_0 = 0.73$ , что обусловлено сильным вырождением основного состояния. При значении  $J_2 = 0.0$  система является сильно фрустрированной. Учет взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к уменьшению значения  $S_0$ , что говорит и об уменьшении вырождения основного состояния. Наши данные показывают, что во всем интервале  $-1.0 \leq J_2 \leq -0.1$  значение  $S_0 = 0.33$ .

На рис. 4 и 5 представлены температурные зависимости теплоемкости  $C$  для разных значений обменного

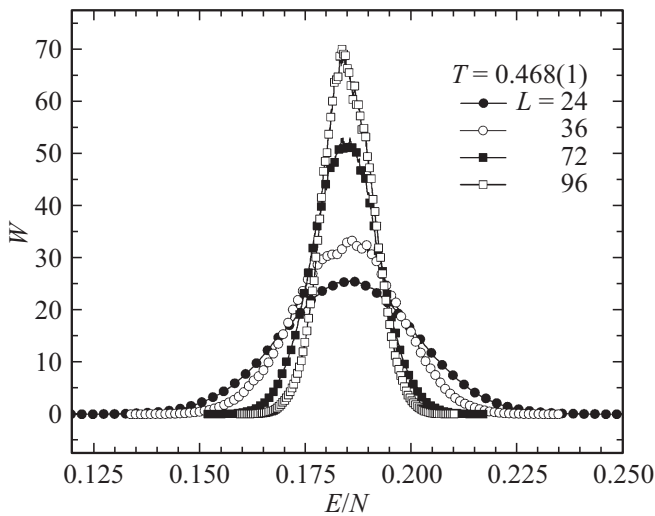


Рис. 6. Гистограммы распределения энергии для величины  $J_2 = -0.5$ .

взаимодействия  $J_2$ . Из рисунка видно, что для значения  $J_2 = 0.0$  эффекты фрустрации наиболее сильно выражены: отсутствует острый пик, наблюдается сглаженный максимум. При значении  $J_2 = 0.0$  система является полностью фрустрированной, и в системе отсутствует порядок. При  $J_2 = -0.1$  наблюдается расщепление теплоемкости, что является характерной особенностью фрустрированных систем (вблизи точек фрустраций наблюдается острый пик и куполообразный максимум) [24]. В интервале  $-1.0 \leq J_2 \leq -0.2$  теплоемкость имеет острый пик, положение которого соответствует температуре ФП. Как видно на рисунке, этот пик с увеличением величины  $J_2$  растет и смещается сторону более высоких температур. Для анализа рода ФП мы использовали гистограммный анализ данных метода МК [22,23]. Гистограммный анализ — один из наиболее точных методов, позволяющих установить род ФП.

На рис. 6 представлены гистограммы распределения энергии для величины  $J_2 = -0.5$  для систем с различными линейными размерами. Графики построены при температуре, близкой к критической ( $T = 0.4687(1)$ ). На рисунке видно, что в зависимости вероятности  $W$  от энергии  $E/N$  наблюдается один максимум. Наличие одного пика на гистограммах распределения энергии является характерным признаком ФП второго рода. Как видно на рисунке, при увеличении линейных размеров системы гистограмма сужается, а пик растет. Такое поведение свойственно ФП второго рода. Отметим, что аналогичное поведение на гистограммах распределения энергии наблюдаются в интервале  $-1.0 \leq J_2 \leq -0.1$ . Можно предположить, что в рассмотренном интервале значений  $J_2$  наблюдается ФП второго рода, кроме значения  $J_2 = 0.0$ , где фрустрации нарушают порядок в системе и приводят к исчезновению ФП.

## 4. Заключение

Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на решетке кагоме с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей выполнено с использованием алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло. С использованием гистограммного метода проведен анализ природы фазовых переходов. Установлено, что в интервале  $-1.0 \leq J_2 \leq -0.1$  наблюдается фазовый переход второго рода. Показано, что для значения  $J_2 = 0.0$  в системе наблюдаются сильные фрустрации, которые приводят к исчезновению фазового перехода.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] H.T. Diep. Frustrated Spin Systems. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).
- [2] R.J. Baxter. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. Academic Press, N.Y. (1982); Мир, М. (1985).
- [3] F.Y. Wu. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. World Scientific Publishing, New Jersey (2008).
- [4] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 1, 235 (1982).
- [5] W. Zhang, Y. Deng. Phys. Rev. E **78**, 3, 031103 (2008).
- [6] M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. Lett. **44**, 13, 837 (1980).
- [7] J.L. Cardy, M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. B **22**, 5, 2560 (1980).
- [8] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Physica A **521**, 543 (2019).
- [9] E. Domany, M. Schick, J.S. Walker. Phys. Rev. Lett. **38**, 20, 1148 (1977).
- [10] A.K. Муртазаев, Д.Р. Курбанова, М.К. Рамазанов. ФТТ **61**, 11, 2195 (2019).
- [11] A.K. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **156**, 3, 502 (2019).
- [12] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. ФТТ **62**, 3, 442 (2020).
- [13] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, T.R. Rizvanova, A.A. Murtazaeva. Low Temperature Phys. **47**, 5, 396 (2021).
- [14] M. Kang, Sh. Fang, J.-K. Kim, B.R. Ortiz, S.H. Ryu, J. Kim, J. Yoo, G. Sangiovanni, D.D. Sante, B.-G. Park, C. Jozwiak, A. Bostwick, E. Rotenberg, E. Kaxiras, S.D. Wilson, J.-H. Park, R. Comin. Nature Phys. **18**, 3, 301 (2022).
- [15] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **109**, 9, 610 (2019).
- [16] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева, М.Р. Джамалудинов. ФТТ **64**, 2, 237 (2022).
- [17] A.K. Муртазаев, М.К. Мазагаева, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, А.А. Муртазаева. ФТТ **63**, 5, 622 (2021).

- [18] А.О. Сорокин. Письма в ЖЭТФ **109**, 5–6, 423 (2019).
- [19] А.О. Сорокин. Письма в ЖЭТФ **111**, 1–2, 34 (2020).
- [20] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **106**, 2, 72 (2017).
- [21] А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Рамазанов. Письма в ЖЭТФ **107**, 4, 265 (2018).
- [22] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 5, 056101 (2001).
- [23] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. Lett. **86**, 10, 2050 (2001).
- [24] F.A. Kassan-Ogly, B.N. Filippov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. J. Magn. Magn. Mater. **324**, 3418 (2012).

*Редактор Е.В. Толстякова*