13,07,05

Фазовые переходы в трехмерной ферромагнитной модели Поттса на решетке кагоме

© М.К. Рамазанов [1,2], А.К. Муртазаев [1,2], Т.Р. Ризванова [1], М.Р. Джамалудинов [1], М.А. Магомедов [1,2]

[1] Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Махачкала, Россия
[2] 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 (2×2) — 2H|Ni(111) на поверхности никеля Ni(111) размешаются в узлах решетки [13]. В таких адсорбированных структурах ФП описываются классом 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.

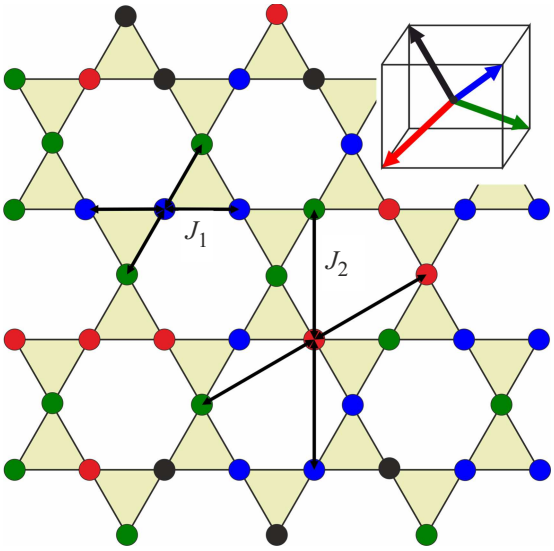

Рис. 1. Модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на решетке кагоме.

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:

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

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:

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

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 $X_1, X_2, \ldots, X_N$ с температурами $T_1, T_2, \ldots, T_N$.

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.

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

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]

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

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

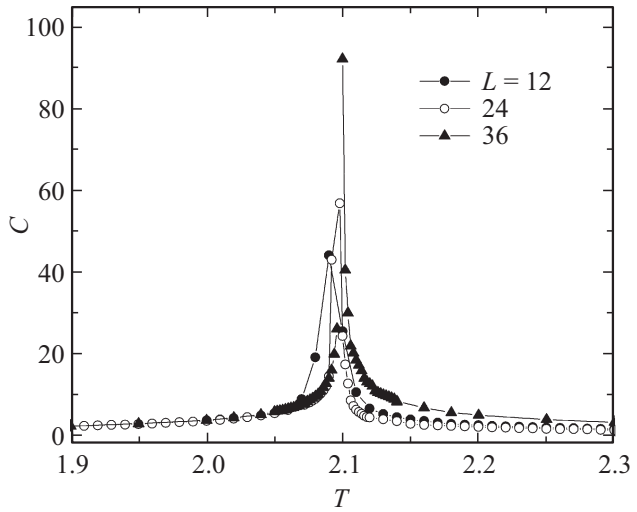

Рис. 2. Температурные зависимости теплоемкости C.

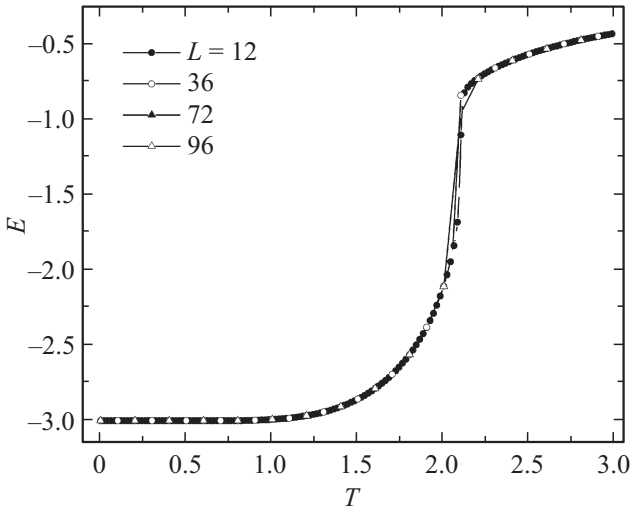

Рис. 3. Температурные зависимости энергии E.

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]:

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

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

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

$$V_L = V^* + bL^{-d} \tag{6}$$

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

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

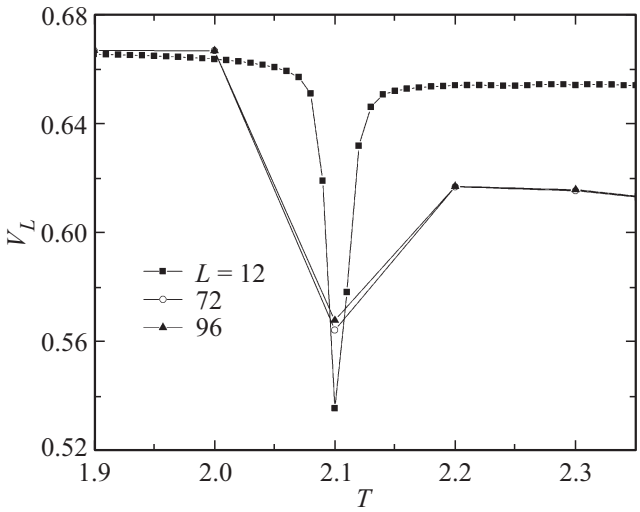

Рис. 4. Температурные зависимости магнитного кумулянта Биндера V_L.

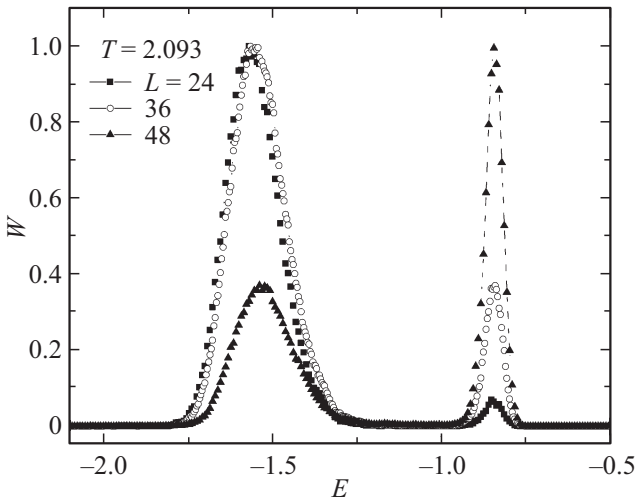

Рис. 5. Гистограммы распределения энергии для различных L.

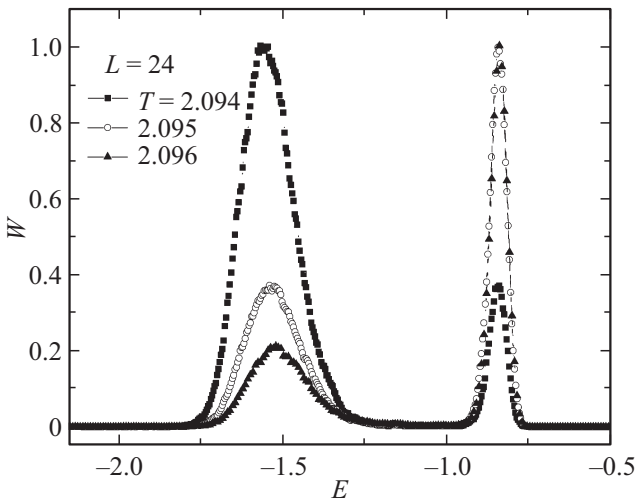

Рис. 6. Гистограммы распределения энергии для различных T.

энергии наблюдается два максимума, которые свидетельствует 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 реплического 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. Камилов, 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. Tsuvarev, 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. Pfnür. Phys. Rev. Lett. **73**, *2*, 296 (1994).
[14] K. Budde, L. Schwenger, C. Voges, H. Pfnür. 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