13,07,05

Фазовые переходы в трехмерной ферромагнитной модели Поттса на слоистой гексагональной решетке

© М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Махачкала, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в Редакцию 21 января 2026 г.
В окончательной редакции 27 января 2026 г.
Принята к публикации 3 февраля 2026 г.

Методом Монте-Карло проведено исследование фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств трехмерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на слоистой гексагональной решетке с взаимодействиями ближайших соседей. Построены температурные зависимости энергии, теплоёмкости, намагниченности и восприимчивости. На основе гистограммного метода анализа данных и метода кумулянтов Биндера четвертого порядка проведен анализ природы фазового перехода. Показано, что в исследуемой модели наблюдается фазовый переход первого рода.

Ключевые слова: энергия, намагниченность, восприимчивость, теплоемкость.

DOI: 10.61011/FTT.2026.02.62725.9015

1. Введение

Исследование фазовых переходов (ФП), магнитных и термодинамических свойств магнитных спиновых систем является актуальной задачей физики конденсированного состояния [1–5]. Для изучения особенностей термодинамического поведения и природы ФП успешно используются различные решеточные модели. На их основе получено большое количество интересных результатов. Решеточные спиновые модели позволяют описать целый ряд реальных магнитных материалов. Исследования сложных спиновых решеточных моделей на основе микроскопических гамильтонианов успешно проводятся методами численного эксперимента [6,7].

Одной из спиновых решеточных моделей, применяемых для описания физических систем, является модель Поттса. Модель Поттса является обобщением модели Изинга, полученная путем изменения числа спиновых состояний q. Фазовые переходы в модели Поттса, демонстрируют более разнообразные свойства, чем в модели Изинга, поскольку число состояний спина q связано с симметрией параметра порядка. Одной из интересных особенностей модели Поттса является зависимость рода фазового перехода от значения q: в двумерном случае при $q > 4$ система демонстрирует ФП первого рода, в то время как при $q \leq 4$ переход непрерывен [8,9].

Ферромагнитная модель Поттса достаточно хорошо изучена в двумерном случае [8–11]. Несмотря на достигнутые успехи, до сих пор остаются неизученными вопросы, связанные с зависимостью физических свойств модели Поттса от пространственной размерности решетки, числа состояний спина q, величины взаимодействия вторых соседей, внешнего магнитного поля, геометрии решетки и других факторов [9–16]. Модель Поттса интересна еще и тем, что она описывает большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [8,17]. Например, структурные ФП в таких материалах как $SrTiO_3$ или $Pb_3(PO_4)_2$ [18] хорошо описываются двумерной моделью Поттса с числом спиновых состояний $q = 3$, а ФП в пирохлоре KOs_2O_6 — трехмерной ферромагнитной моделью Поттса с числом спиновых состояний $q = 4$ [19].

В данной работе нами проводится исследование ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на слоистой гексагональной решетке. Работ, посвященных изучению ФП, магнитных и термодинамических свойств трехкомпонентной модели Поттса на слоистой гексагональной решетке очень мало. Данные аналитических подходов для трехмерной модели Поттса в случае $q > 3$ свидетельствует в пользу ФП первого рода, но строгого аргумента, доказывающего или опровергающего этого факта нет. Данные, полученные методом Монте-Карло (МК) показывают, что в трехмерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на слоистой гексагональной решетке [20] и на решетке Кагоме [21] наблюдается фазовый переход первого рода. Результаты исследований методом перенормировки и ε-разложения свидетельствуют, о том, что в трехмерной модели Поттса с $q = 3$ реализуется ФП первого рода [22,23]. В то же время непертурбативное ренормгрупповое исследование данной модели, показывает, что метод перенормировки и ε-разложения может потерпеть неудачу [24,25].

В связи с этим, нами на основе репличного обменного алгоритма метода МК проведено исследование ФП, магнитных и термодинамических свойств ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на слоистой гексагональной решетке. Исследование данной модели на основе современных методов и идей позволит

получить ответ на ряд вопросов, связанных с ФП и термодинамическими свойствами трехмерных спиновых решеточных систем.

2. Модель и метод исследования

Гамильтониан модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ с учетом взаимодействий ближайших соседей может быть представлен в следующем виде:

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

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

Решетка состоит из гексагональных слоев, сложенных вдоль оси z. Спины расположены в узлах решетки. Каждый спин имеет пять ближайших соседей: три соседа на плоскости и два соседа в соседних слоях. Соседние слои расположены параллельно друг другу, без смещений. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 12 \div 48$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки.

Схематическое описание модели для двумерного случая представлено на рис. 1.

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

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

Согласно условию (2) для двух спинов S_i и S_j энергия парного обменного взаимодействия $E_{i,j} = -J$, если $S_i = S_j$. В случае, когда $S_i \neq S_j$, энергия $E_{i,j} = J/2$. 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 $q = 3$ 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 современных алгоритмов метода МК [10,26–28]. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм [29]. В данном 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

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

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

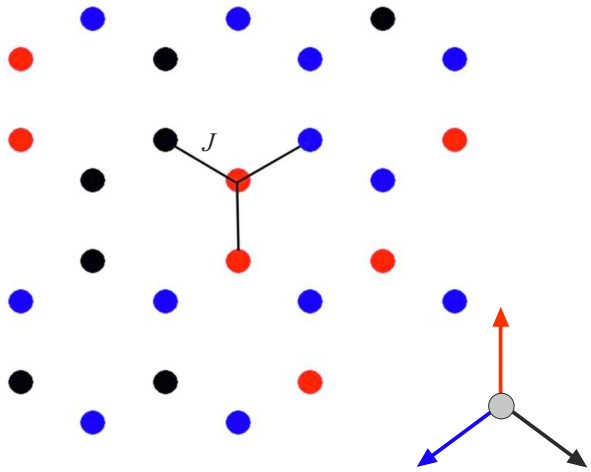

Рис. 1. Модель Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на гексагональной решетке.

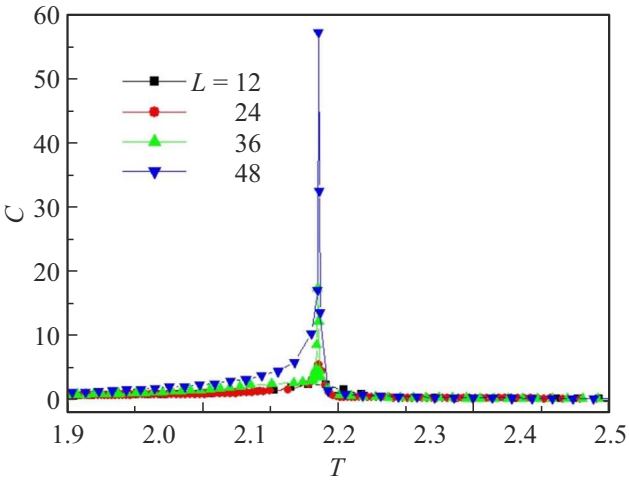

Рис. 2. Температурные зависимости теплоемкости C.

3. Результаты исследований

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости C нами использовалось выражение:

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

где $K = |J|/k_B T$, U — внутренняя энергия.

На рис. 2 приведены температурные зависимости теплоемкости C (здесь и далее статистическая погрешность

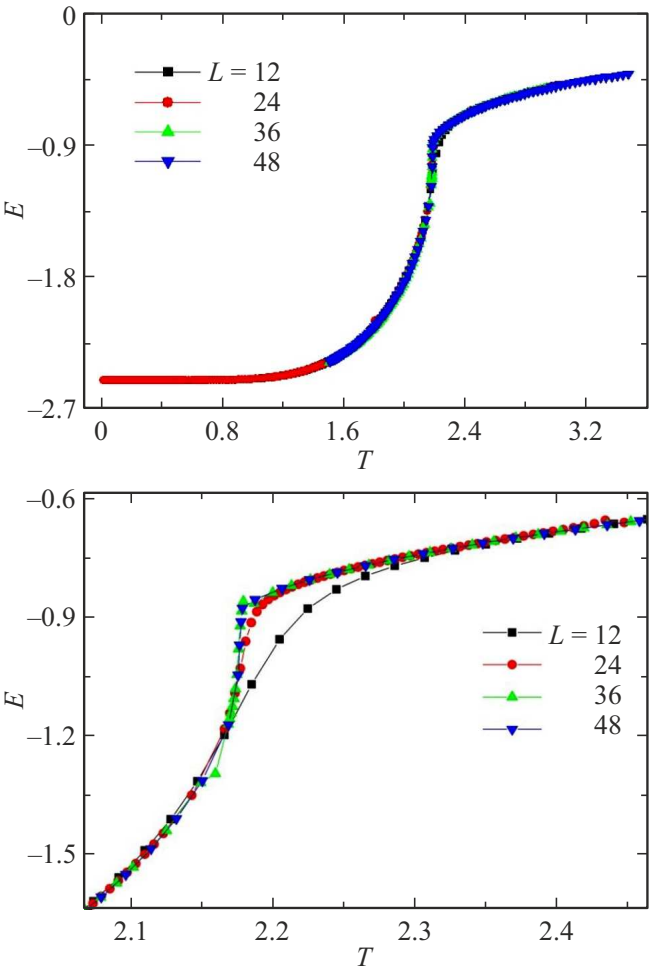

Рис. 3. Температурные зависимости энергии E.

не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей) для систем с различными линейными размерами.

На этом рисунке 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 для всех значений 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 линейными размерами 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.

Намагниченность системы m вычислялась по формуле:

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i, \tag{4}$$

где S_i — трехкомпонентный единичный вектор $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$.

На рис. 4 представлены графики зависимости намагниченности m от температуры для разных значений L. На рисунке видно, что в низкотемпературной области значение намагниченности равно единице, что характерно для ферромагнитной модели. При увеличении температуры вблизи критической области наблюдается резкий спад намагниченности. Причем, с увеличением L спад намагниченности становится более резким. Такое поведение намагниченности характерно для ФП первого рода.

Магнитная восприимчивость вычислялась по формуле:

$$\chi = \begin{cases} (NK)\left(\langle m^2\rangle - \langle |m|\rangle^2\right), & T < T_C \\ (NK)\langle m^2\rangle, & T \geq T_C \end{cases}, \tag{5}$$

где T_C — критическая температура.

На рис. 5 представлены графики зависимости восприимчивости χ от температуры для разных значений L. На рисунке видно, что в зависимости восприимчивости 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. Резкий рост максимума (острый максимум) восприимчивости с увеличением линейных размеров характерно для систем, в которых наблюдается ФП первого рода.

Для анализа характера ФП и определения критической температуры T_C нами использовался метод куму-

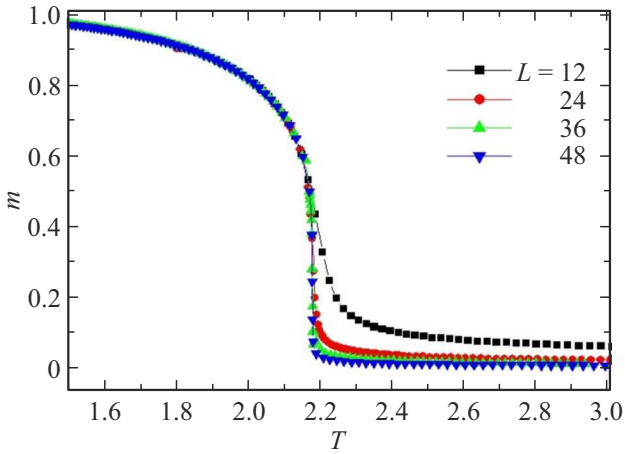

Рис. 4. Температурные зависимости намагниченности m.

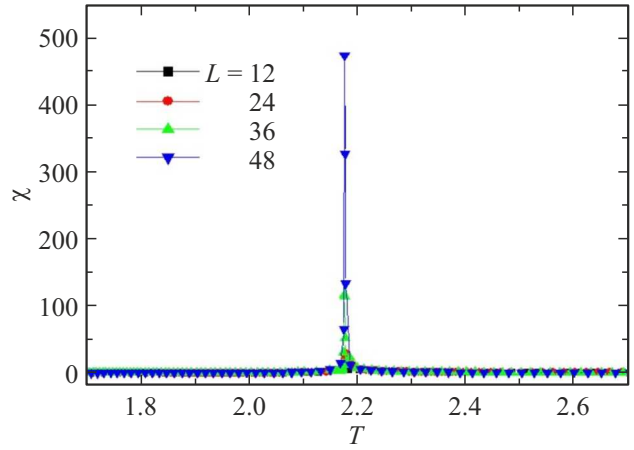

Рис. 5. Температурные зависимости восприимчивости χ.

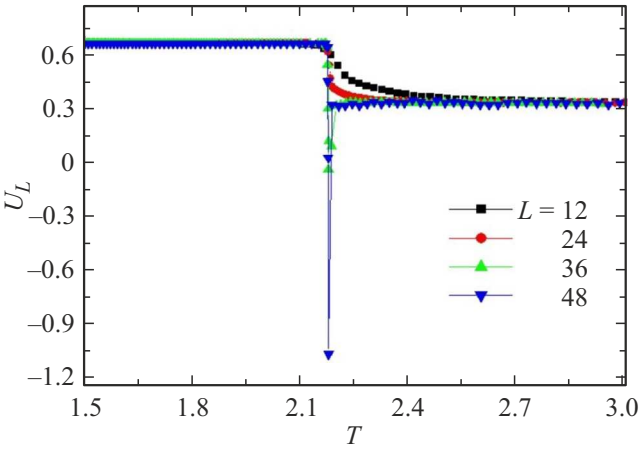

Рис. 6. Температурные зависимости кумулянта Биндера U_L.

лянтов Биндера четвертого порядка [7]:

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle_L}{3\langle U^2 \rangle_L^2}, \tag{6}$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2}, \tag{7}$$

где V_L — кумулянт по энергии, U_L — кумулянт по намагниченности.

Выражения (6) и (7) 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. В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [7]. Анализ наших данных показывает, что характерные зависимости U_L от температуры при разных значениях L в критической области не пересекаются в одной точке (рис. 6). Это свидетельствует в пользу наличия в данной модели ФП первого рода. Температурная зависимость кумулянта V_L при разных значениях L представлена на рис. 7. Как видно из этого рисунка величина V_L в критической области не стремится к 2/3 с увеличением L, что характерно для ФП первого рода.

Для определения рода ФП нами также использовался гистограммный анализ данных метода МК [30,31]. Полученные на основе гистограммного анализа данных результаты показывают, что в данной модели наблюдается ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 8. 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 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. 9 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 24$. Графики построены при различных температурах близких критической температуре. Из рисунка видно, что

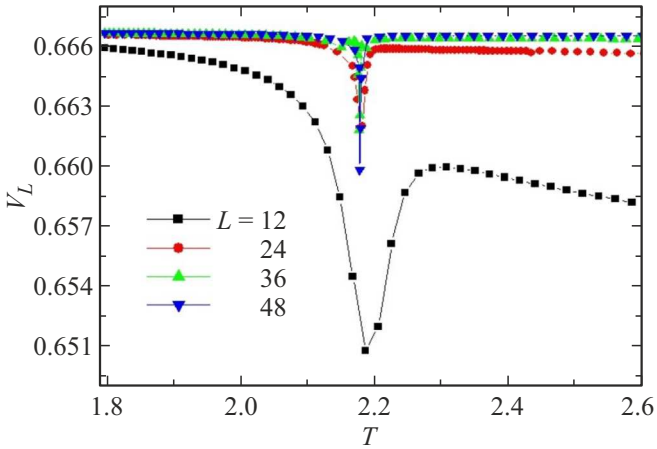

Рис. 7. Температурные зависимости кумулянта Биндера V_L.

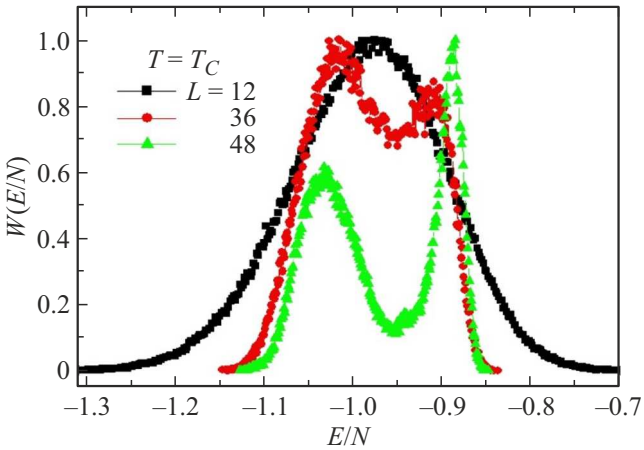

Рис. 8. Гистограммы распределения энергии для различных L.

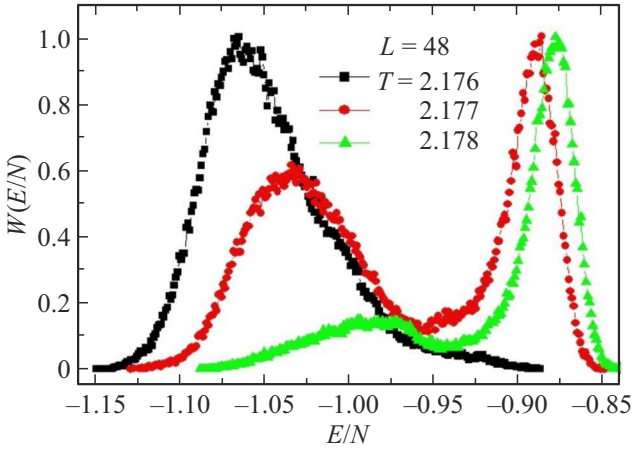

Рис. 9. Гистограммы распределения энергии для различных T.

в зависимости вероятности W от энергии E для всех температур наблюдаются два максимума, которые свидетельствует о ФП первого рода. Это подтверждает, что в данной модели наблюдается ФП первого рода.

4. Заключение

Исследование фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на слоистой гексагональной решетке с учетом взаимодействий ближайших соседей выполнено с использованием репличного алгоритма метода Монте-Карло. Проведен анализ характера фазовых переходов на основе метода кумулянтов Биндера и гистограммного анализа данных. Показано, что в рассматриваемой модели наблюдается фазовый переход первого рода.

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**, 1350 (2021).
[4] A.O. Sorokin. Physica A **602**, 127621 (2022).
[5] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов. ФТТ **65**, 1455 (2023).
[6] И.К. Камилов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев. УФН **169**, 773 (1999).
[7] K. Binder, D. Heermann. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction (Springer, Berlin, Heidelberg, 2010).
[8] R.J. Baxter. J. Phys. C **6**, 445 (1973).
[9] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
[10] М.А. Фадеева, Л.Н. Щур. ЖЭТФ **162**, 909 (2022).
[11] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. ФММ **124**, 339 (2023).
[12] M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. Lett. **44**, 837 (1980).
[13] J.L. Cardy, M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. B **22**, 2560 (1980).
[14] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Phys. A **521**, 543 (2019).
[15] H. Feldmann, A.J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, S.-H. Tsai. J. Phys. A **31**, 2287 (1998).
[16] F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin. Phys. Solid State **60**, 1090 (2018).
[17] H.T. Diep. Frustrated Spin Systems. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004). P. 624.
[18] Y. Huang, K. Chen, Y. Deng, J.L. Jacobsen, R. Kotecký, J. Salas, A.D. Sokal, J.M. Swart. Phys. Rev. E **87**, 012136 (2013).
[19] R. Igarashi, M. Ogata. J. Phys.: Conf. Ser. **200**, 022019 (2010).
[20] М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев, М.К. Мазагаева. ЖЭТФ **168**, 495 (2025).
[21] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, Т.Р. Ризванова, М.Р. Джамалудинов, М.А. Магомедов. ФТТ **67**, 1760 (2025).
[22] G.R. Golner. Phys. Rev. B **8**, 3419 (1973).
[23] K.G. Wilson, J. Kogut. Phys. Rep. **12**, 75 (1974).
[24] C.A. Sanchez-Villalobos, B. Delamotte, N. Wschebor. Phys. Rev. E **108**, 064120 (2023).
[25] J. Gaite. Nucl. Phys. B **1011**, 116801 (2025).
[26] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **106**, 72 (2017).
[27] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. ФТТ **62**, 442 (2020).
[28] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **109**, 610 (2019).
[29] A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto. Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
[30] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 0561011–1 (2001).
[31] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).

Редактор А.Н. Смирнов