

# ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МОДЕЛИ ПОТТСА НА СЛОИСТОЙ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

*М. К. Рамазанов\**, *М. А. Магомедов*, *А. К. Муртазаев*, *М. К. Мазагаева*

*Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра  
Российской академии наук  
367015, Матячкала, Россия*

Поступила в редакцию 2 июня 2025 г.,  
после переработки 10 июля 2025 г.  
Принята к публикации 16 июля 2025 г.

Методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и термодинамических свойств ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на слоистой гексагональной решетке с взаимодействиями ближайших соседей. 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.

DOI: 10.31857/S0044451025100050

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Решеточная модель Поттса является теоретическим инструментом, применяемым для изучения физических явлений в статистической физике и физике конденсированного состояния [1–3]. Широкое разнообразие описываемых физических свойств делает модель Поттса предметом интенсивных исследований. Повышенный интерес вызван зависимостью универсальности критического поведения модели Поттса от размерности системы  $d$  и числа спиновых состояний  $q$ . Согласно гипотезе универсальности, для каждой размерности существует критическое значение числа спиновых состояний  $q_c$ . В классической ферромагнитной модели Поттса существует фазовый переход (ФП) первого рода при  $q > q_c$ , а в случае  $q \leq q_c$  — ФП второго рода [2]. Однако критическое значение числа спиновых состояний  $q_c$  классической антиферромагнитной модели Поттса зависит от микроструктуры решетки и при  $q > q_c$  ФП отсутствует [4, 5]. Более того, обнаружены наборы решеток, которые вовсе не имеют критического значения спиновых состояний  $q_c$  [6]. До сих пор актуальными являются вопросы, связанные с зависимостью физических свойств модели Поттса от пространственной размерности решетки, числа

состояний спина  $q$ , величины взаимодействия вторых соседей, внешнего магнитного поля и от геометрии решетки [7–15]. Модель Поттса описывает большой класс реальных физических систем, таких как слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [2, 16]. К примеру, структурные ФП в таких материалах, как  $\text{SrTiO}_3$  или  $\text{Pb}_3(\text{PO}_4)_2$  [17], хорошо описываются двумерной моделью Поттса с числом спиновых состояний  $q = 3$ , а ФП в пирохлоре  $\text{KOS}_2\text{O}_6$  — трехмерной ферромагнитной моделью Поттса с числом спиновых состояний  $q = 4$  [18]. В данной работе проводится исследование ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на слоистой гексагональной решетке. К настоящему моменту двумерная модель Поттса изучена достаточно хорошо [12–15]. Работ, посвященных изучению ФП и термодинамических свойств четырехкомпонентной модели Поттса на слоистой гексагональной решетке, очень мало. В основном, встречаются работы, посвященные исследованию трехмерной трехкомпонентной модели Поттса. Данные аналитических подходов для трехмерной модели Поттса в случае  $q > 3$  свидетельствуют в пользу ФП первого рода, но строгого аргумента, доказывающего или опровергающего этот факт, нет. Например, выводы, сделанные на основе результатов исследования методом перенормировки и  $\epsilon$ -разложения, говорят о том, что в трехмерной модели Поттса с  $q = 3$  реализуется ФП первого рода [19, 20]. Но в то же

\* E-mail: sheikh77@mail.ru

время непертурбативное ренормгрупповое исследование данной модели показывает, что метод перенормировки и  $\varepsilon$ -разложения может потерпеть неудачу [21, 22]. В связи с этим, в данной работе на основе репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло (МК) проведено исследование ФП ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  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  $q = 4$  с учетом взаимодействий ближайших соседей может быть представлен в следующем виде:

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

где  $J_1$  — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия,  $\theta_{i,j}$ , — угол между взаимодействующими спинами  $S_i, S_j$ . Суммирование в уравнении (1) проводится для каждой пары соседних спинов.

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 ближайших слоях. Соседние слои расположены параллельно друг другу, без смещений. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 24, 36, 48, 60$ , где  $L$  имеет размерность элементарной ячейки.

Направления спинов заданы таким образом, что выполняется равенство

$$\theta_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{если } S_i = S_j, \\ 109.47^\circ, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$$

или

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

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.

В настоящее время спиновые системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются методом МК [23–27]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм [24], используемый в данном исследовании в следующем виде.

1. Одновременно моделируются  $R$  реплик  $X_1, X_2, \dots, X_R$  с температурами  $T_1, T_2, \dots, T_R$ .

2. После выполнения одного МК-шага/спин для всех реплик осуществляется обмен данными между парой соседних реплик  $X_i$  и  $X_{i+1}$  в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

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

где  $\Delta = -(E_i - E_{i+1})(1/T_i - 1/T_{i+1})$ ,  $E_i$  и  $E_{i+1}$  — внутренние энергии реплик,  $T$  — температура (здесь и далее температура дана в единицах  $|J|/k_B$ ).

Главное преимущество этого алгоритма перед другими в том, что вероятность обмена априори 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 «застывания» системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией, характерной для спиновых систем с фрустрациями. Для повышения эффективности этого метода необходимо увеличение числа реплик, что требует серьезного роста вычислительных мощностей. Современные компьютеры обладают достаточной мощностью, что позволяет моделировать необходимое количество реплик и получать результаты с высокой точностью.

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости  $C$  использовано выражение

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

где  $K = |J|/k_B T$ .

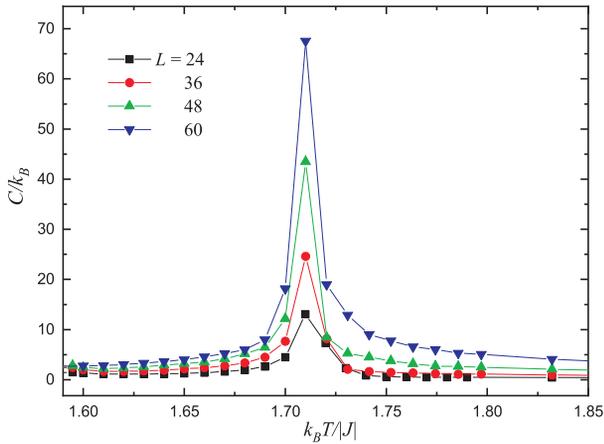


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости для систем с различными линейными размерами

На рис. 1 представлены температурные зависимости теплоемкости для систем с различными линейными размерами  $L$  (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Как видно на рисунке, для всех значений  $L$  на температурной зависимости теплоемкости наблюдаются ярко выраженные максимумы. С ростом линейных размеров системы наблюдается рост максимумов теплоемкости, причем максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру. Такое поведение свидетельствует о высокой эффективности использованного способа добавления ПГУ и о достижении насыщения по числу моделируемых спинов  $N$  для многих исследуемых нами параметров. Ярко выраженный максимум теплоемкости может указывать на существование ФП в исследуемой модели.

Температурная зависимость энергии для системы с  $L = 60$  представлена на рис. 2. Как видно на рисунке, вблизи критической температуры ( $T_C = 1.709$ ) наблюдается резкий скачок энергии. Известно, что скачкообразный рост энергии в критической области в спиновых системах свидетельствует о ФП первого рода. Поведение температурной зависимости энергии в данной модели свидетельствует в пользу ФП первого рода.

Намагниченность системы  $m$  вычислялась по формуле

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i, \quad (4)$$

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

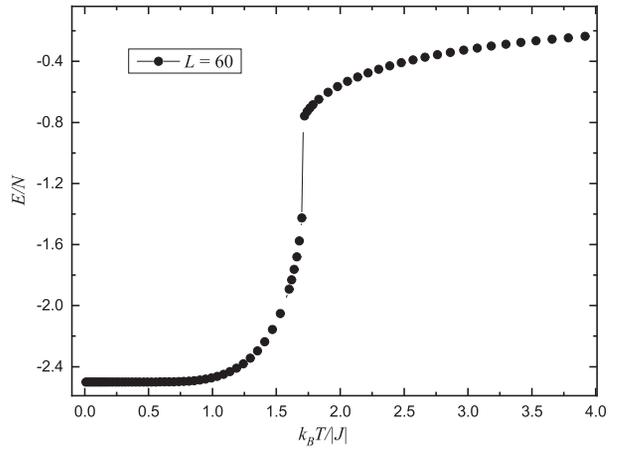


Рис. 2. Температурная зависимость энергии для  $L = 60$

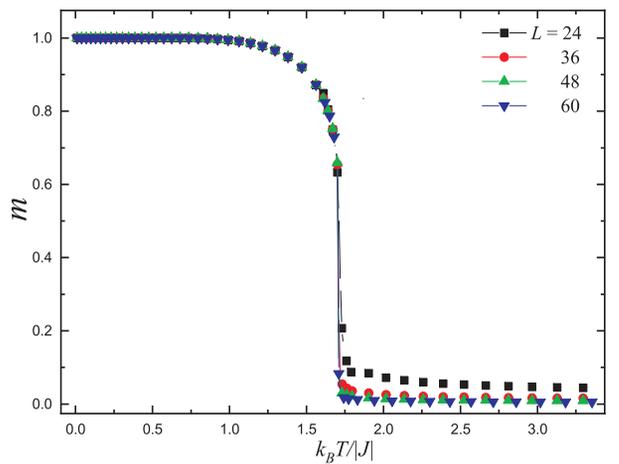


Рис. 3. Температурные зависимости намагниченности  $m$

На рис. 3 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. Такое поведение намагниченности в критической области характерно для ФП первого рода.

Для анализа характера ФП нами использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [28]:

$$V_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (5)$$

где  $V_L$  — энергетический кумулянт.

Выражение (5) позволяет хорошо тестировать тип ФП в системе. Известно, что ФП первого рода характеризуются тем, что величина  $V_L$  стремится к

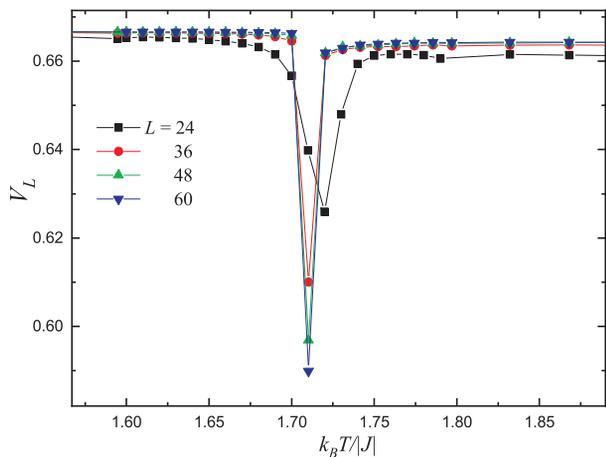


Рис. 4. Температурные зависимости магнитного кумулянта Биндера  $V_L$

некоторому нетривиальному значению  $V^*$  согласно выражению

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

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

Температурная зависимость энергетического кумулянта  $V_L$  при разных значениях  $L$  представлена на рис. 4. Как видно на графике, величина  $V_L$  при увеличении  $L$  не стремится к  $2/3$ , что характерно для ФП первого рода.

Для определения рода ФП нами также использовался гистограммный анализ данных метода МК [29, 30]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работах [31, 32]. Полученные на основе гистограммного анализа данных результаты показывают, что в данной модели наблюдается ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 5 и 6. На рис. 5 представлены гистограммы распределения энергии для систем с различными линейными размерами. Графики построены для температуры близкой к критической ( $T = 1.70963$ ). Значения  $W(E)$  нормированы таким образом, что сумма всех  $W(E)$  была равна единице:  $\sum W(E) = 1$ . На рисунке видно, что в зависимости вероятности  $W$  от энергии наблюдается два максимума для всех значений  $L$ , которые свидетельствуют о ФП первого рода. Наличие двух максимумов на гистограммах распределения энергии является достаточным условием для ФП первого рода. Кроме того, на рисунке видно, что при увеличении линейных размеров системы шири-

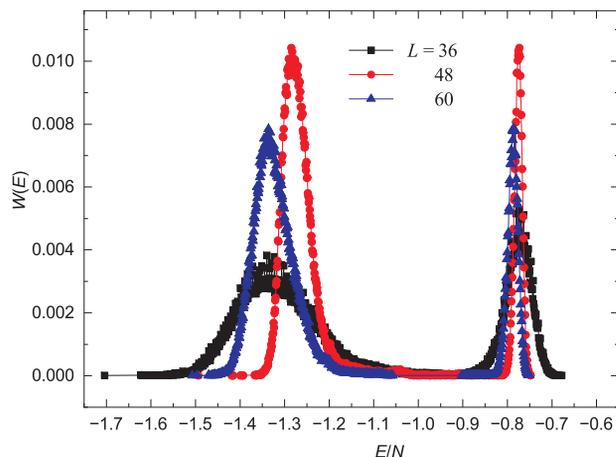


Рис. 5. Гистограммы распределения энергии для разных  $L$

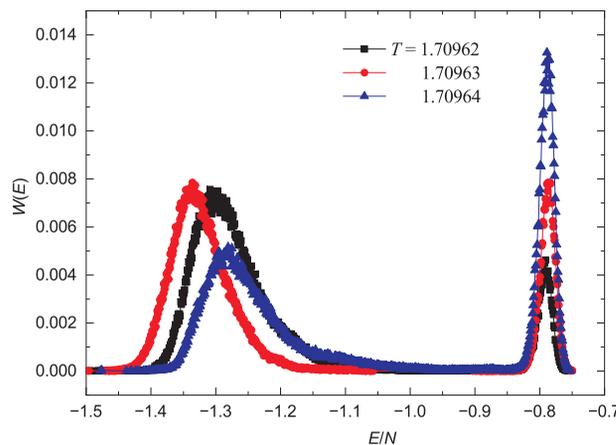


Рис. 6. Гистограммы распределения энергии для различных температур

на гистограммы увеличивается, что характерно для ФП первого рода.

На рис. 6 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами  $L = 48$ . Графики построены при различных температурах, близких к критической температуре. На рисунке видно, что в зависимости вероятности  $W$  от энергии  $E$  для всех температур наблюдаются два максимума, которые свидетельствуют о ФП первого рода. Это подтверждает, что в данной модели наблюдаются ФП первого рода.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на слоистой гексагональной решетке выполнено с использованием реп-

личного 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.** Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, грант № 25-12-20029.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
2. F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
3. R. J. Baxter, *J. Phys. C* **6**, 445 (1973).
4. P. W. Kasteleyn and C. M. Fortuin, *J. Phys. Soc. Jpn.* **26**, 11 (1969).
5. C. M. Fortuin and P. W. Kasteleyn, *Physica* **57**, 536 (1972).
6. F. Y. Wu and W. A. Guo, *Phys. Rev. E* **86**, 020101 (2012).
7. M. Nauenberg and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 837 (1980).
8. J. L. Cardy, M. Nauenberg, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **22**, 2560 (1980).
9. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, *Phys. A* **521**, 543 (2019).
10. H. Feldmann, A. J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, and S.-H. Tsai, *J. Phys. A* **31**, 2287 (1998).
11. F. A. Kassar-Ogly and A. I. Proshkin, *Phys. Solid State* **60**, 1090 (2018).
12. М. А. Фадеева, Л. Н. Щур, *ЖЭТФ* **162**, 909 (2022).
13. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Мазагаева, М. А. Магомедов, *ЖЭТФ* **156**, 502 (2019).
14. Д. Р. Курбанова, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев, *ЖЭТФ* **163**, 816 (2023).
15. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева, *ФММ* **124**, 339 (2023).
16. H. T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Sci. Publ. Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).
17. Y. Huang, K. Chen, Y. Deng, J. L. Jacobsen, R. Koteky, J. Salas, A. D. Sokal, and J. M. Swart, *Phys. Rev. E* **87**, 012136 (2013).
18. R. Igarashi and M. Ogata, *J. Phys.: Conf. Ser.* **200**, 022019 (2010).
19. G. R. Golner, *Phys. Rev. B* **8**, 3419 (1973).
20. K. G. Wilson and J. Kogut, *Phys. Rep.* **12**, 75 (1974).
21. C. A. Sanchez-Villalobos, B. Delamotte, and N. Wschebor, *Phys. Rev. E* **108**, 064120 (2023).
22. J. Gaiete, *Nucl. Phys. B* **1011**, 116801 (2025).
23. V. T. Ngo, D. T. Hoang, and H. T. Diep, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 226002 (2011).
24. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 610 (2019).
25. А. О. Сорокин, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 34 (2020).
26. R. Masrour and A. Jabar, *Physica A* **541**, 123377 (2020).
27. А. К. Муртазаев, М. К. Бадиев, М. К. Рамазанов, and М. А. Магомедов, *Physica A* **555**, 124530 (2020).
28. K. Binder and D. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction*, Springer, Berlin, Heidelberg (2010).
29. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. E* **64**, 0561011 (2001).
30. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).
31. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 522 (2016).
32. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, *Письма в ЖЭТФ* **106**, 72 (2017).