

## Энергетический анализ основного состояния трехвершинной модели Поттса

А.Б. Бабаев<sup>1,2</sup>, А.К. Муртазаев<sup>1,3</sup>, Ф.А. Кассан-Оглы<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН, г. Махачкала, 367003, Россия*  
E-mail: b\_albert78@mail.ru

<sup>2</sup>*Дагестанский государственный педагогический университет, г. Махачкала, 367003, Россия*

<sup>3</sup>*Дагестанский государственный университет, г. Махачкала, 367025, Россия*

<sup>4</sup>*Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, 620990, Россия*

Статья поступила в редакцию 23 марта 2018 г., после переработки 13 июня 2018 г.,  
опубликована онлайн 26 сентября 2018 г.

Проведен энергетический анализ основного состояния трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с учетом первых и вторых ближайших соседей с величинами взаимодействия  $J_1$  и  $J_2$ . На основе численного эксперимента выявлены диапазоны существования упорядоченных и неупорядоченных фаз в спиновых структурах, описываемых этой моделью, с величинами взаимодействия  $J_1 < 0$ ,  $J_2 < 0$  и  $J_1 > 0$ ,  $J_2 < 0$ .

Ключевые слова: беспорядок, фрустрации, модель Поттса, основное состояние.

### Введение

В последние десятилетия интенсивно обсуждаются фазовые переходы (ФП) и критические явления (КЯ) в магнетиках, описываемых моделями Изинга и Поттса на различных решетках [1–4]. Это обусловлено тем, что спиновые решеточные модели как на двумерных, так и на трехмерных решетках описывают большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [5,6]. Эффекты фрустраций играют важную роль в различных магнитных системах. Экспериментальные [7] и теоретические [8] исследования позволили установить, что фрустрированные системы проявляют необычные свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. Антиферромагнетик (АФ) на треугольной решетке является примером фрустрированной спиновой системы. Однако необходимо отметить, что в случае трехвершинной АФ модели Поттса на треугольной решетке при учете взаимодействия только между ближайшими соседями в основном состоянии фрустрации, обусловленные геометрией решетки в случае модели Изинга, отсутствуют и магнитная система упорядочена при конечной температуре. При учете вторых ближайших соседей конкуренция обменных взаимодействий может привести к фрустрациям, т.е. такому пространственному расположе-

нию магнитных моментов атомов в кристалле, при котором невозможно одновременное упорядочение всех взаимодействующих спинов (см. рис. 1).

Влияние фрустраций, возникающих при конкурирующих взаимодействиях, на фазовые переходы и особенности термодинамических и магнитных свойств низкоразмерных систем исследовано в работе [9].

На основе точных решений для модели Изинга (с учетом взаимодействий только между ближайшими соседями) на квадратной решетке [10], на треугольной и гексагональной [11] и на решетке кагоме [12] исследованы явления возникновения и исчезновения фрустраций в зависимости от знаков и величин отношений взаимодействий по различным направлениям в решетке. Для 2D трехвершинной модели Поттса не получено ни одного точного решения, вследствие чего для исследования термодинамических и магнитных свойств, а также фазовых переходов в этой модели используются самые разнообразные приближенные и численные методы: кластерный метод [13], низкотемпературные разложения [14], исследование нулей статсуммы [15], разные ре-норм-групповые подходы [16,17], многочисленные варианты моделирования методом Монте-Карло [18–20], в которых определяется класс универсальности, род перехода, расчет критических индексов, определение фазовых диаграмм, нахождение мультикритических точек и

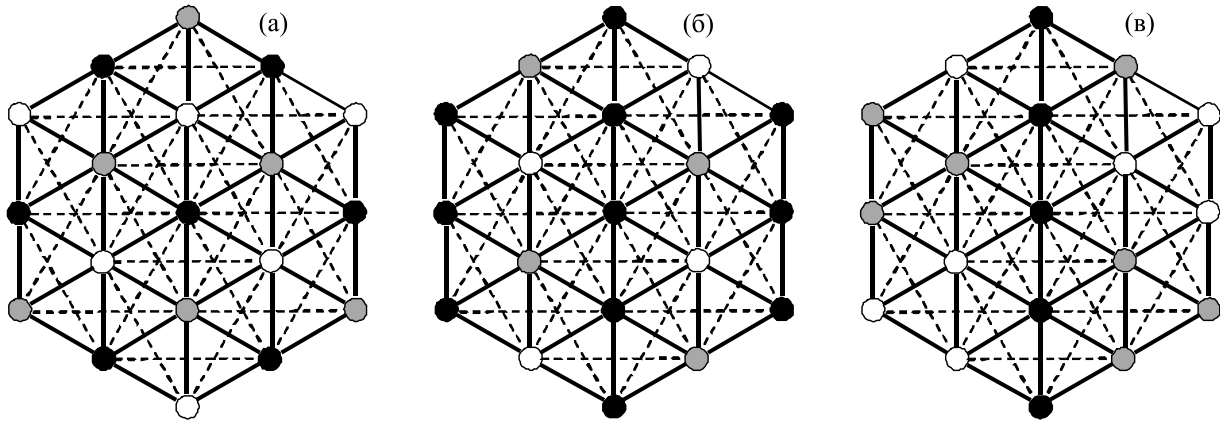


Рис. 1. Магнитные структуры в трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса с величинами взаимодействий  $J_1 < 0$  и  $J_2 < 0$  на треугольной решетке. Исходная фаза соответствует параметру  $r = J_2/J_1$  в диапазоне  $0 < r < 0,2$  (а); промежуточная фаза —  $0,2 \leq r \leq 1,0$  (б); конечная фаза — в диапазоне  $1,0 < r < 2,0$  (в).

даже уточнение точек фазовых переходов до шестого знака [20].

За последние тридцать лет исследованию спиновых систем, описываемых ферромагнитными и антиферромагнитными моделями Поттса на треугольной решетке с взаимодействием между ближайшими соседями, было посвящено значительное число работ [17,18–22], в которых были получены ответы на многие вопросы. Учет взаимодействия вторых ближайших соседей может привести к возникновению фрустраций, что существенно усложняет решение этой модели. Для спиновых систем, в которых возникают фрустрации, основными являются следующие вопросы: какие условия необходимы для существования фрустраций и в каких решетках они могут существовать? Каковы самые общие качественные и количественные критерии? Какое основное состояние спиновой системы? Кроме того, следует иметь в виду, что при исследовании спиновых систем, в которых возможны фрустрации, очень важно, что в системе может существовать огромное количество состояний с низкой энергией, близкой к энергии основного состояния. Эти состояния благодаря ненулевой энтропии  $S$  могут вносить конечный вклад в термодинамику даже в пределе низких температур [23]. Следует отметить, что в результате многочисленных исследований антиферромагнитных моделей Поттса на разнообразных решетках обнаружилась замечательная особенность. Треугольная решетка оказалась единственной, в которой наблюдается фазовый переход при антиферромагнитном взаимодействии между ближайшими соседями.

Нами в работах [24,25] на основе метода Монте-Карло (МК) исследовалась трехвершинная антиферромагнитная модель Поттса на треугольной решетке с учетом первых и вторых ближайших соседей в диапазоне значений  $r = 0-1$ ,  $r = J_2/J_1$ . Было обнаружено, что

в этой модели в интервале изменений величины  $0 \leq r < 0,2$  наблюдается ФП первого рода, в то время как в интервале изменений  $0,2 \leq r \leq 1,0$  в системе возникают фрустрации и нет ФП. В этих работах подробно не рассматривался вопрос об основном состоянии магнитной структуры, описываемой трехвершинной моделью Поттса на треугольной решетке. Не были получены зависимости энергии основного состояния системы от величины  $r$  для случаев  $J_1 < 0$ ,  $J_2 < 0$  и  $J_1 > 0$ ,  $J_2 < 0$ . Определение основного состояния магнитной структуры, описываемой трехвершинной моделью Поттса, в зависимости от величин и знаков обменных интегралов  $J_1$  и  $J_2$  является главной целью этой работы.

### Модель Поттса и метод исследования

Антиферромагнитная трехвершинная ( $q = 3$ ) модель Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей описывается следующим гамильтонианом [5]:

$$H = -J_1 \sum_{i,j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{i,k} \cos \theta_{i,k}, \quad (1)$$

где  $J_1$  и  $J_2$  — параметры обменных взаимодействий для ближайших и вторых ближайших соседей,  $\theta_{i,j}$ ,  $\theta_{i,k}$  — углы между взаимодействующими спинами  $S_i - S_j$  и  $S_i - S_k$ , причем  $\theta_{i,j}$  принимают три значения  $0^\circ$ ,  $120^\circ$  и  $240^\circ$ . Модель Поттса с гамильтонианом вида (1) также хорошо описывает физические свойства многих неупорядоченных структур (см. [26,27]).

Для выполнения условий эргодичности при компьютерном моделировании нами использовался кластерный алгоритм Вольфа [28] в сочетании с классическим алгоритмом Метрополиса методом Монте-Карло [29]. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины находились в разных состояниях. Для вывода системы в равновесное состояние

отсекался неравновесный участок длиной  $\tau_0$  для системы с линейными размерами  $L$ . Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводили по участку марковской цепи длиной  $\tau = 200\tau_0$ . Для самой большой системы  $L = 120$ ,  $\tau_0 = 2 \cdot 10^7$  МК шагов/спин. Кроме того, для повышения точности расчетов усредняли по 10 различным начальным конфигурациям. Затем эти данные использовались для расчета средних значений термодинамических параметров.

### Результаты компьютерного моделирования

Для наблюдения за температурным ходом энергии  $E$  использовали следующее выражение [30]:

$$E = \frac{1}{N}[\langle H \rangle], \quad (2)$$

где  $N = L_2$  — число узлов решетки с линейным размером  $L$ .

На рис. 2 приведены температурные зависимости энергии для трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействий  $J_1 < 0$ ,  $J_2 < 0$ , а на рис. 3 для случая  $J_1 > 0$ ,  $J_2 < 0$ . Зависимость энергии основного состояния от величины  $r$  для рассмотренной модели при  $J_1 < 0$ ,  $J_2 < 0$  представлена на рис. 4 и была впервые получена в работе [24]. В этой работе не рассматривались температурные зависимости энергии. Были показаны энергии трех фаз, как функции параметра  $r$ : исходной с превалированием ближайшего взаимодействия  $J_1 E_a(r) = 3J_1(0,5 - r)$  (а), промежуточной  $E_g(r) = (1 + r)3J_1/4$  (б) и конечной с превалированием второго взаимодействия  $J_2 E_f(r) = 3rJ_1/2$  (в). Кроме того, на рис. 4 видно, что существуют две особые точки,  $r = 0,2$  и  $r = 1,0$ , в которых происходит смена структур. На основе анализа численных данных, полученных в работах [24,31], можно выделить следующие диапазоны существования фаз в основном состоянии:  $0 < r < 0,2$  —

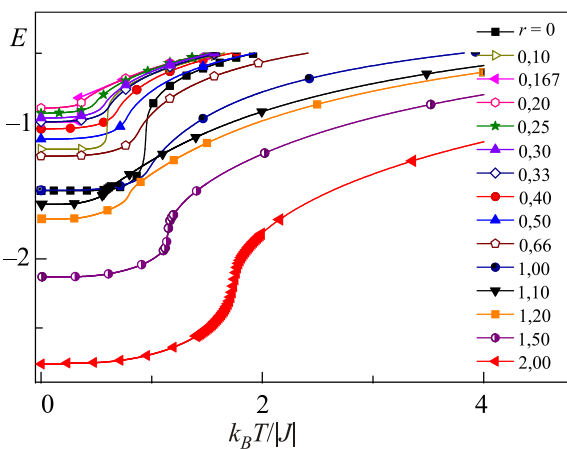


Рис. 2. (Онлайн в цвете) Температурная зависимость энергии двумерной антиферромагнитной модели Поттса с величинами взаимодействий  $J_1 < 0$  и  $J_2 < 0$ .

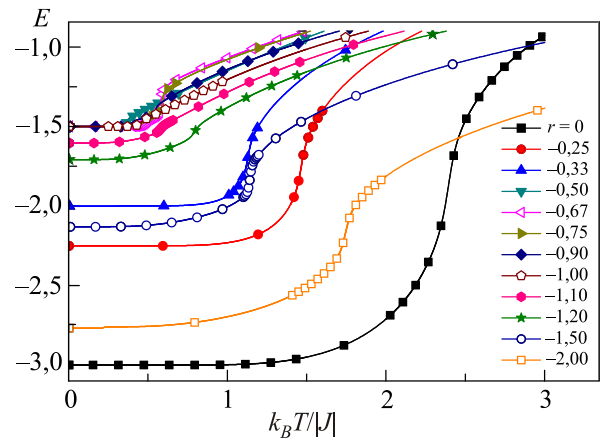


Рис. 3. (Онлайн в цвете) Температурная зависимость энергии двумерной антиферромагнитной модели Поттса с величинами взаимодействий  $J_1 > 0$  и  $J_2 < 0$ .

для исходной (а);  $0,2 \leq r \leq 1,0$  — промежуточной (б) и  $1,0 < r < 2,0$  — конечной (в) (рис. 1).

В случае сильного (превалирующего) взаимодействия между ближайшими соседями  $J_1$  ( $r \ll 1$ ) в основном состоянии реализуется фаза, в которой угол между любыми двумя ближайшими соседями не должен быть равным  $0^\circ$ , так как это энергетически невыгодно. То есть любая пара ближайших спинов не должна быть параллельна. Энергия, приходящаяся на один узел, равна в этом случае  $3J_1/2 - 3J_2 = 3J_1(0,5 - r)$ . Магнитная структура, соответствующая этим требованиям, изображена на рис. 1(а). Черный кружок означает одно из трех направлений под углом  $0^\circ$ ,  $120^\circ$  или  $240^\circ$  относительно произвольно выбранного направления. Серый кружок означает любое из этих трех направлений, но несовпадающее с черным. Направление белого кружка не должно совпадать ни с черным, ни с серым. Из-за перестановок

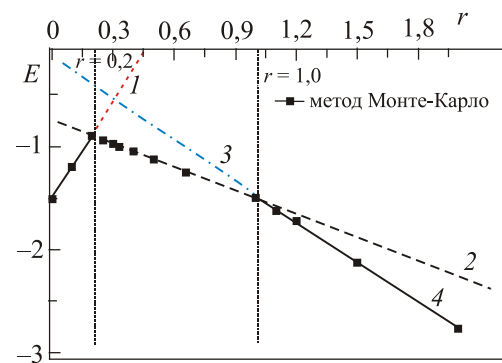


Рис. 4. (Онлайн в цвете) Энергии фаз для двумерной модели Поттса с величинами взаимодействий  $J_1 < 0$  и  $J_2 < 0$  как функция параметра  $r$ : исходная фаза — красная точечная линия (1); промежуточная фаза — штриховая линия (2); конечная фаза — голубая штрихпунктирная линия (3). Энергия основного состояния — сплошная линия (4) (данные численного метода).

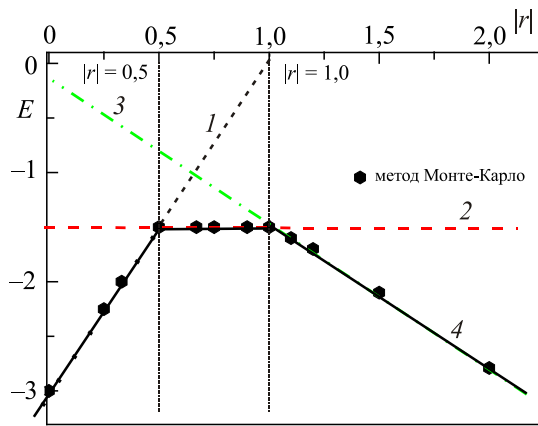


Рис. 5. (Онлайн в цвете) Энергии фаз для двумерной модели Поттса с величинами взаимодействий  $J_1 > 0$  и  $J_2 < 0$  как функция параметра  $r$ : исходная фаза — черная точечная линия (1); промежуточная фаза — красная штриховая линия (2); конечная фаза — зеленая штрихпунктирная линия (3). Энергия основного состояния — черная сплошная линия (4) (данные численного метода).

черных, серых и белых кружков магнитная структура реализуется в шести изоэнергетических конфигурациях.

В противоположном случае при преобладающем взаимодействии между вторыми соседями  $J_2 (r \gg 1)$  в основном состоянии должна реализовываться фаза, в которой угол между любыми двумя вторыми соседями не должен быть равным  $0^\circ$ , а любая пара вторых спинов не должна быть параллельна. Энергия, приходящаяся на один узел, в этом случае равна  $3J_2/2 = 3rJ_1/2$ , а соответствующая структура изображена на рис. 1(в). Эта структура реализуется также в конечном числе конфигураций, а именно: в  $216 = (6^3)$  изоэнергетических конфигурациях.

В промежуточном случае конкуренция между взаимодействиями  $J_1$  и  $J_2$  порождает многочисленные разнообразные фазы. Нами выделено подмножество энергетически наинизших структур, одна из которых изображена на рис. 1(б). Любая конфигурации этого бесконечного подмножества соответствует энергия  $3J_1/4 + 3J_2/4 = (1+r)3J_1/4$ .

Зависимость энергии от температуры и зависимость основного состояния рассматриваемой модели для случая  $J_1 > 0$  и  $J_2 < 0$  от величины  $r$  (см. рис. 3 и 5) получены впервые. Как видно на рис. 5 смена структуры происходит в точках  $r = 0,5$  и  $r = 1,0$ . В случае сильного (превалирующего) взаимодействия между ближайшими соседями  $J_1 (r \ll 1)$  в основном состоянии реализуется фаза, в которой угол между любыми двумя ближайшими соседями должен быть равным  $0^\circ$ , так как это энергетически выгодно. Таким образом, любая пара ближайших спинов должна быть параллельной. Энергия, приходящаяся на один узел, равна в этом случае  $E_a(r) = (-3 + 3r)J_1$ . Магнитная структура, соответствующая этим требованиям, изображена на рис. 6(а). В этом случае рассматриваемая система будет пребывать в ферромагнитном состоянии.

В противоположном случае при преобладающем взаимодействии между вторыми соседями  $J_2 (r \gg 1)$  в основном состоянии должна реализовываться фаза, в которой угол между любыми двумя вторыми соседями не должен быть равным  $0^\circ$ , а любая пара вторых спинов не должна быть параллельна. Энергия, приходящаяся на один узел, в этом случае равна  $E_f(r) = 3J_1r/2$ , а соответствующая структура изображена на рис. 6(б).

В промежуточном случае конкуренция между взаимодействиями  $J_1$  и  $J_2$  порождает многочисленные разнообразные фазы. Нами выделено подмножество энергетически наинизших структур, одна из которых

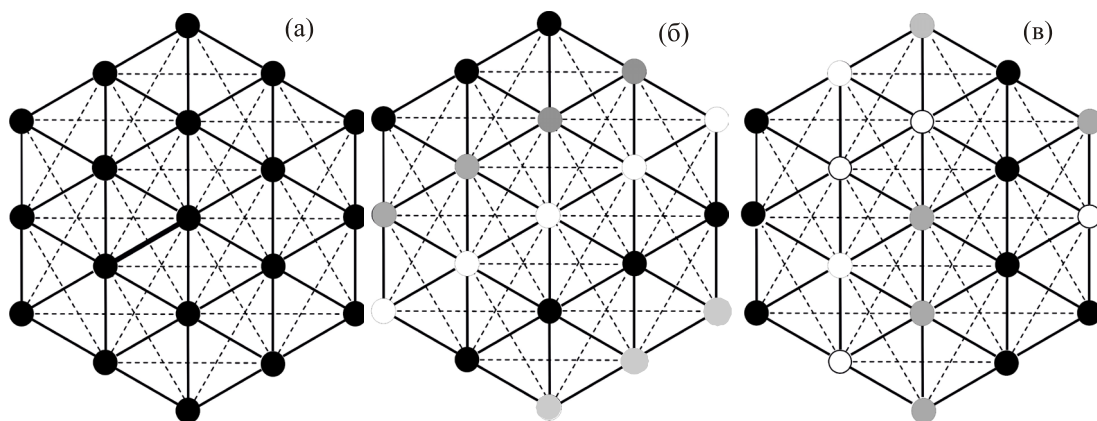


Рис. 6. Магнитные структуры в трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса с величинами взаимодействий  $J_1 > 0$  и  $J_2 < 0$  на треугольной решетке. Исходная фаза соответствует параметру  $r = J_2/J_1$  в диапазоне  $0 < |r| < 0,5$  (а); конечная фаза —  $|r| \geq 1,0$  (б); промежуточная фаза —  $0,5 \leq |r| \leq 1,0$  (в).

изображена на рис. 6(в). Любой конфигурации этого бесконечного подмножества соответствует энергия  $E_f(r) = -3J_2/2r$ . Этот случай требует тщательных исследований с привлечением графического режима для выяснения основного состояния возможных конфигураций, что станет целью другой работы.

### Заключение

В настоящей работе на основе компьютерного моделирования проведен энергетический анализ основного состояния спиновых систем, описываемых трехвершинной моделью Поттса с учетом первых и вторых ближайших соседей для случаев  $J_1 < 0, J_2 < 0$  и  $J_1 > 0, J_2 < 0$ . Результаты энергетического анализа данных свидетельствуют о следующем.

1. При  $J_1 < 0$  и  $J_2 < 0$  превалирование обменного параметра между ближайшими соседями над параметром между вторыми соседями в интервале изменений величины  $0 \leq r < 0,2$ , а также превалирование обменного параметра между вторыми соседями над параметром между ближайшими соседями в интервале изменений величины  $1,0 < r \leq 2,0$  не приводит к вырождению основного состояния системы. В рассматриваемых интервалах изменения  $r$  в системе возникают ФП. Конкуренция обменных параметров первых и вторых ближайших соседей в интервале изменений параметра  $r, 0,2 \leq r \leq 1$ , приводит к вырождению основного состояния системы и ФП отсутствует.

В случае, когда  $J_1 > 0$  и  $J_2 < 0$  превалирование обменного параметра между ближайшими соседями над параметром между вторыми соседями в интервале изменений величины  $0 \leq r < 0,5$ , а также превалирование обменного параметра между вторыми соседями над параметром между ближайшими соседями в интервале изменений величины  $1,0 < r \leq 2,0$  не приводит к вырождению основного состояния системы. В рассматриваемых интервалах также возникают ФП. Конкуренция обменных параметров первых и вторых ближайших соседей в интервале изменений параметра  $r, 0,5 \leq r \leq 1$ , приводит к вырождению основного состояния системы.

Работа поддержана грантом РФФИ №16-02-00214.

1. Н.Т. Дип, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).
2. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
3. А.К. Муртазаев и А.Б. Бабаев, *JETP* **116**, 101 (2013).
4. А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев, *ФНТ* **41**, 784 (2015) [*Low Temp. Phys.* **41**, 608 (2015)].
5. F.Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
6. W. Zhang and Y. Deng, *Phys. Rev. E* **78**, 031103 (2008).
7. D. Loison and K.D. Schotte, *Europ. Phys. J. B* **5**, 735 (1998).
8. P.C. Гехт, *УФН* **159**, 261 (1989).

9. A.B. Babaev, T.R. Rizvanova, and A.K. Murtazaev, *Phys. Solid State* **59**, 2444 (2017).
10. L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
11. R.M.F. Houtappel, *Physica* **16**, 425 (1950).
12. K. Kanô and S. Naya, *Prog. Theor. Phys.* **10**, 158 (1953).
13. J. Adler, A. Brandt, W. Janke, and S. Shmulyian, *J. Phys. A* **28**, 5117 (1995).
14. I.G. Enting and F.Y. Wu, *J. Stat. Phys.* **28**, 351 (1982).
15. H. Feldmann, A.J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, and S. Tsai, *J. Phys. A* **31**, 2287 (1998).
16. M. Schick and R.B. Griffiths, *J. Phys. A* **10**, 2123 (1977).
17. G.S. Grest, *J. Phys. A* **14**, L217 (1981).
18. Y. Saito, *J. Phys. A* **15**, 1885 (1982).
19. H. Pack, *Phys. Rev. B* **49**, 12881 (1994).
20. M.-X. Wang, J.-W. Cai, Z.-Y. Xie, Q.-N. Chen, H.-H. Zhao, and Z.-C. Wie, *Chin. Phys. Lett.* **27**, 076402 (2010).
21. A.K. Murtazaev and A.B. Babaev, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3870 (2012).
22. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова *ФНТ* **37**, 167 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 134 (2011)].
23. В.С. Доценко, *УФН* **163**, 1 (1993).
24. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, Ф.А. Кассан-Оглы, and А.И. Прошкин, *Solid State Commun.* **246**, 41 (2016).
25. A.B. Babaev, A.K. Murtazaev, E.M. Suleimanov, and T.R. Rizvanova, *Phys. Solid State* **58**, 2074 (2016).
26. A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, and G.Y. Aznaurova, *Solid State Phenomena* **152-153**, 571 (2009).
27. A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, and G.Y. Aznaurova, *Solid State Phenomena* **168-169**, 357 (2011).
28. U. Wolff, *Phys. Lett.* **62**, 361 (1989).
29. N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, and A.H. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
30. P. Peczac, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
31. A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, М.А. Магомедов, Ф.А. Кассан-Оглы, and А.И. Прошкин, *JETP Lett.* **100**, 242 (2014).

### Енергетичний аналіз основного стану трьохвершинної моделі Поттса

А.Б. Бабаєв, А.К. Муртазаєв, Ф.А. Кассан-Огли

Проведено енергетичний аналіз основного стану трьохвершинної моделі Поттса на трикутній ґратці з урахуванням перших та других найближчих сусідів з величинами взаємодії  $J_1$  та  $J_2$ . На основі чисельного експерименту виявлено діапазони існування впорядкованих та неврегульованих фаз у спинових структурах, які описано цією моделлю з величинами взаємодії  $J_1 < 0, J_2 < 0$  та  $J_1 > 0, J_2 < 0$ .

Ключові слова: безлад, фрустрації, модель Поттса, основний стан.

Energy analysis of the ground state of the  
three-vertex Potts model

A.B. Babaev, A.K. Murtazaev, and F.A. Kassan-Ogly

An energy analysis of the ground state of the three-state Potts model on a triangular lattice is carried out, taking into account the first and second nearest neighbors with interaction values  $J_1$  and

$J_2$ . Based on the numerical experiment, the ranges of existence of ordered and disordered phases in the spin structures described by this model with interaction values  $J_1 < 0, J_2 < 0$  and  $J_1 > 0, J_2 < 0$  are revealed.

Keywords: disorder, frustrations, Potts models, the ground state.