

УДК 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2019-34-3-45-51

Т.Р. Ризванова<sup>1</sup>, А.К. Муртазаев<sup>1,2</sup>, А.Б. Бабаев<sup>1,3</sup>

### Исследование термодинамических параметров в модели Поттса на решетке Кагоме с числом состояний $q = 3$

<sup>1</sup> Институт физики ДФИЦ РАН; Россия, 367015, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94; rizv@yandex.ru;

<sup>2</sup> Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН; Россия, 367032, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 45;

<sup>3</sup> Дагестанский государственный педагогический университет; Россия, 367025, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 57

Модель Поттса на решетке Кагоме исследована методом Монте-Карло. Получены температурные зависимости термодинамических параметров теплоемкости  $C$ , параметра порядка  $m$  и восприимчивости  $\chi$ . Исследованы системы с линейными размерами  $L \times L = N$ ,  $L = 12, 16, 26, 32$ . Для системы были заданы периодические граничные условия. На основе метода кумулянтов Биндера четвертого порядка рассчитана критическая температура ( $T_c$ ) для трехвершинной модели Поттса на решетке Кагоме. Показано, что полученные данные не противоречат данным, полученным другими методами и алгоритмами. Установлено наличие в системе фазового перехода второго рода.

Ключевые слова: модель Поттса, решетка Кагоме, фазовые переходы, метод Монте-Карло, алгоритм Метрополиса.

### Введение

Уникальные свойства низкоразмерных, квазиодномерных и двумерных структур и их использование в наносистемах выглядят многообещающе: это может позволить совершить значительный прорыв во многих научных, технологичных областях в обозримом будущем. Поэтому закономерно, что изучению этих структур сейчас уделяется большое внимание. С помощью модели Поттса на решетке Кагоме можно описать целый ряд двумерных материалов, в которых наблюдается интересное поведение термодинамических параметров, существенно влияющее на свойства таких систем. В этих свойствах можно усмотреть определенный потенциал с точки зрения их практического использования в электронике.

Несмотря на то, что вычислительная физика за полвека значительно продвинулась в изучении двумерных систем, описываемых моделями Поттса, на сегодня достоверно установленных фактов немного. В частности, известно, что для двумерных моделей Поттса с числом состояний спина  $q$  на квадратной, треугольной и гексагональных решетках были получены простые полиномиальные выражения [1], позволяющие оценить точное значение критической температуры. Справедливость этих выражений строго была доказана для ферромагнитных моделей Поттса с  $q \geq 4$  и  $q = 2$  [2]. Модель Поттса на решетке Кагоме представляет отдельный интерес, связанный с многообразием ее структурных свойств [3]. В качестве примера вещества, обладающего структурой решетки Кагоме, можно привести минерал гербертситит с химической формулой

$ZnCu_3(OH)_6Cl_2$  [4]. Делафосситы также относятся к этим материалам. Свое название они получили по имени Габриэля Делафосса, французского кристаллографа XIX века (Delafosse) [5–7]. На сегодняшний день известно свыше ста различных соединений делафосситов, которые удалось синтезировать. Большой интерес к ним связан с тем, что в будущем они могут быть применены как элементы хранения информации в электронных системах. Несмотря на простоту состава, в делафосситах более 120 структурных типов и свыше 530 соединений среди сульфидов, селенидов, оксидов, теллуридов, интерметаллов. Одним из ярких представителей семейства делафосситов является  $CuFeO_2$  (рис. 1), у которого имеется три возможных направления спинов железа. Эта система неплохо описывается моделью Поттса с числом состояний  $q = 3$  [8].

Решетка КагOME является одной из простых двумерных структур, принадлежащих к Архимедовым решеткам. Для случая  $q = 2$  эта модель была решена точно более пятидесяти лет тому назад [9].

При этом стоит отметить, что аналитические методы имеют непреодолимые трудности при попытках рассчитать критические параметры для трехвершинной модели Поттса на решетке КагOME. Это привело к разработке классических гипотез, которые позволяют примерно оценить значение критической температуры. Но справедливость этих гипотез в последнее десятилетие не доказана для случая с  $q = 3$  [10].

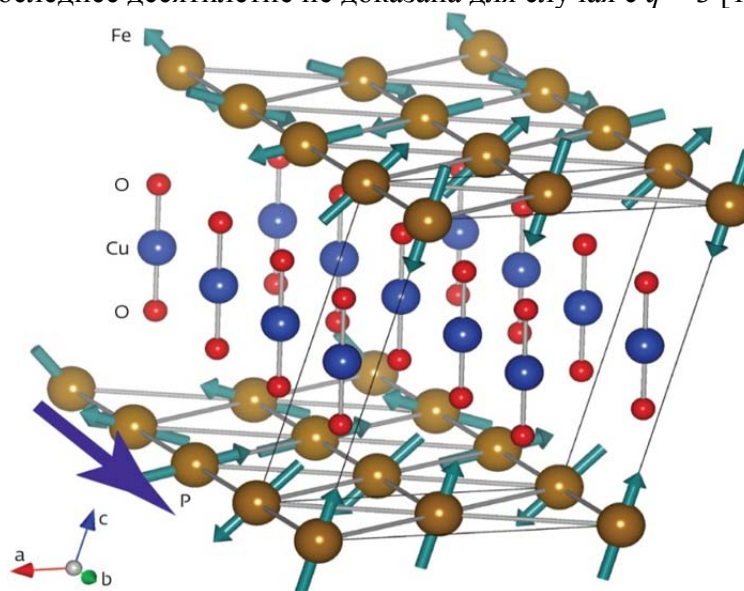


Рис. 1. Структура делафоссита  $CuFeO_2$

В связи с этим целями настоящей работы являются исследование методом Монте-Карло (МК) термодинамических свойств модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на решетке КагOME, вычисление критической температуры и анализ результатов.

Ферромагнитная (ФМ) модель Поттса – это обобщение модели Изинга. Если в модели Изинга спин может принимать одно из двух значений, то в модели Поттса он может находиться в состоянии  $q \geq 2$ . Поэтому при построении двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на решетке КагOME нужно принимать во внимание, что это треугольная решетка, из которой регулярным образом удалена четверть узлов, а остальные спины могут находиться в одном из  $q \geq 2$  состояний. Кроме того, когда взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях, энергия парного взаимодействия принимает одно значение, а если они находятся в разных состояниях, энергия взаимодействия принимает другое значение.

В данной работе мы исследуем двумерную ферромагнитную модель Поттса с числом состояний  $q = 3$  на решетке Кагоме, обменная энергия которой равна  $J = 1$ . Расчеты проведены стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло для систем с линейными размерами  $L = 12, 16, 26, 32$  с учетом взаимодействия первых четырех ближайших соседей.

Модель Поттса на решетке Кагоме с учетом взаимодействий первых ближайших соседей описывается следующим гамильтонианом [11]:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{(i,j)} \cos \theta_{i,j}, \quad (1)$$

где  $\theta_{i,j}$  – угол между взаимодействующими спинами  $S_i, S_j$ , причем  $\theta_{i,j} = \frac{2\pi n}{q}$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots, q - 1$  и при  $q = 3$  принимает три значения:  $0^\circ, 120^\circ$  и  $240^\circ$ .

Модель Поттса с гамильтонианом вида (1) также хорошо описывает физические свойства многих упорядоченных и неупорядоченных структур.

Строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы могут быть изучены методами Монте-Карло. Вычисление характеристик магнитных систем реализуется алгоритмом Метрополиса, который описывает поведение канонического ансамбля [12]. При моделировании этого поведения нужно учитывать, что у симулируемой системы конечные размеры, и, чтобы минимизировать их влияние, необходимо задать граничные условия.

Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации  $\tau_0$  для всех систем с линейными размерами  $L$ . Этот неравновесный участок отбрасывался. Затем проводилось усреднение по участку марковской цепи длиной  $\tau = 190\tau_0$ . Для большой системы  $L = 32$ ,  $\tau_0 = 2 \cdot 10^8$  МКstep/spin.

### Результаты численного эксперимента

При наблюдении за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости применялись флуктуационные соотношения [13]:

$$C = (NK^2) \left( \langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right), \quad (2)$$

$$\chi = (NK) \left( \langle m_F^2 \rangle - \langle m_F \rangle^2 \right), \quad (3)$$

где  $K = |J|/k_B T$ ,  $N = 0.75L^2$  – число спинов,  $U$  – внутренняя энергия,  $m_F$  – параметр порядка системы, угловые скобки обозначают усреднение по ансамблю. В качестве намагниченности ( $m_F$ ) для ферромагнитной модели Поттса использовалось следующее выражение [14]:

$$m_F = \left\langle \frac{3}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \left( \frac{N_\alpha}{N} - \frac{1}{3} \right)^2 \right\rangle^{\frac{1}{2}}, \quad (4)$$

где  $N_\alpha = \{N_1, N_2, N_3\}$ ,  $N_1$  – число спинов в состоянии с  $q = 1$ ,  $N_2$  – число спинов в состоянии с  $q = 2$ ,  $N_3$  – число спинов в состоянии с  $q = 3$ .

На рис. 2 и 3 показана температурная зависимость теплоемкости  $C$  и восприимчивости  $\chi$  для двумерной трехвершинной ферромагнитной модели Поттса на решетке Кагоме для систем с линейными размерами  $L = 12, 16, 26, 32$ . Здесь можно увидеть, что восприимчивость  $\chi$  и теплоемкость проявляют четко выраженные максимумы, и они приходят на одну температуру. Погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков.

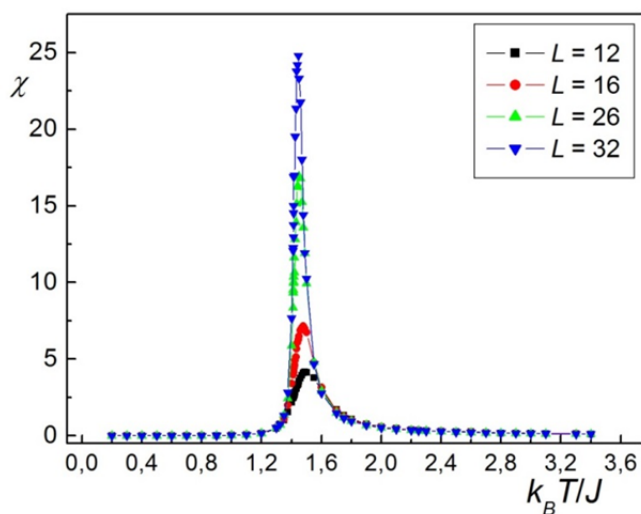


Рис. 2. Температурная зависимость восприимчивости  $\chi$  для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке КагOME

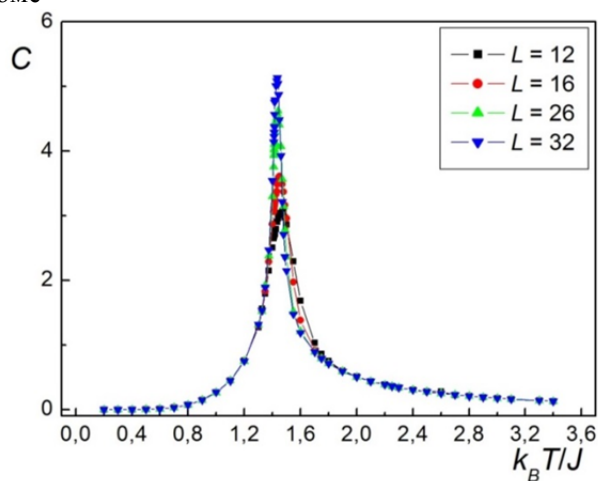


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости  $C$  для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке КагOME

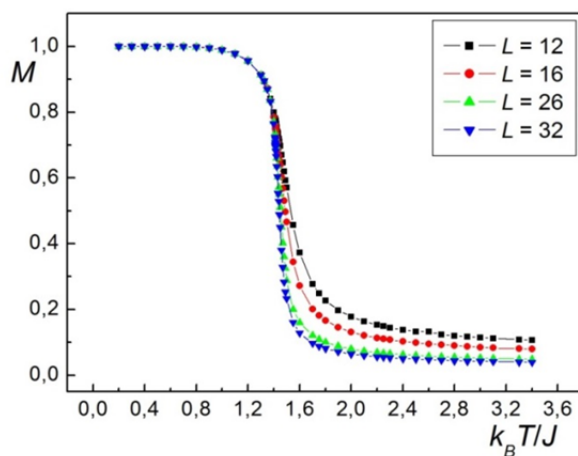


Рис. 4. Температурная зависимость намагниченности  $m_F$  для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке КагOME

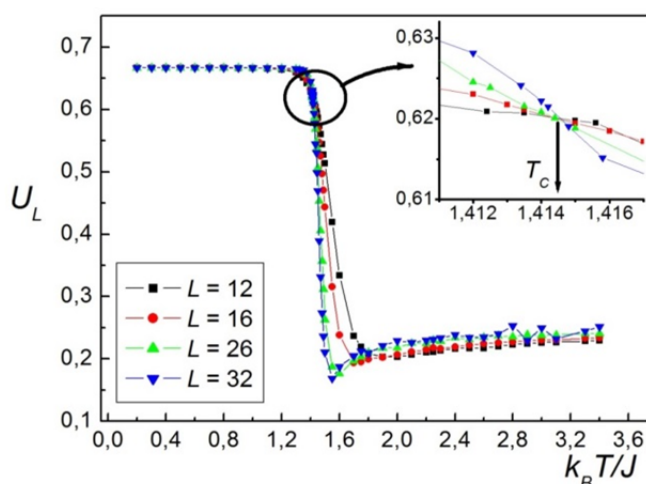


Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке КагOME. На вставке показана точка пересечения кумулянтов Биндера  $U_L(T)$ , соответствующая критической температуре  $T_c$

На рис. 4 обозначены температурные зависимости намагниченности  $M$  для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке КагOME. Из рис. 4 видно, что с ростом температуры намагниченность  $M$  монотонно снижается, а при увеличении линейного размера  $L$  идет заметное уменьшение высокотемпературных «хвостов».

Для определения критических температур и анализа характера фазового перехода использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [13]:

$$U_L(T) = 1 - \frac{\langle m^4(T, L) \rangle_L}{3 \langle m^2(T, L) \rangle_L^2}. \quad (5)$$

Эта формула дает возможность с высокой точностью определить температуру фазового перехода  $T_c$  при фазовых переходах первого и второго рода. Также метод кумулянтов Биндера позволяет качественно определить тип фазового перехода в системе. При фазовых переходах второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  имеют четко выраженную точку пересечения. На рис. 5 приведены характерные зависимости кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  для двумерной трехвершинной ферромагнитной модели Поттса на решетке КагOME от температуры для систем с разными линейными размерами  $L$ . На рис. 5 также наблюдается четко выраженная точка пересечения в критической области, что указывает на фазовый переход второго рода. Помимо этого рисунок показывает, насколько точно ( $T_c \approx 1,4145$ ) можно определить критическую температуру  $T_c$ , которая согласуется с низкоразмерным разложением [15], а также с применением метода трансфер-матриц [10] и с полученными данными на основе кластерных алгоритмов в работе [11]. Однако это значение заметно отличается от  $T_c$ , полученного в работе Wu [1]. По всей видимости, предположение Wu [1] верно только для случаев  $q = 2$  и  $q \geq 4$ . При  $q = 2$  модель Поттса на решетке КагOME имеет точное решение.

## Заключение

Таким образом, нами исследована трехвершинная модель Поттса на решетке КагOME с учетом обменных взаимодействий между первыми ближайшими соседями. Рассчитаны температурные зависимости различных термодинамических параметров и определены температуры фазовых переходов и их типы. Изучение различных свойств объектов со структурой КагOME имеет значительный потенциал для экспериментального приложения и, как следствие, большого технологического скачка в различных областях науки и техники.

## Литература

1. Wu F.Y. The Potts model // *Reviews of Modern Physics*. – 1982. – Vol. 54. – P. 235–268.
2. Monroe J.L. Critical temperature of the Potts models on the Kagomé lattice // *Reviews of Modern Physics*. – 2003. – V. 67. – 017103.
3. Chen Q., Baek S.C., Granick S. Directed self-assembly of a colloidal Kagome lattice // *Nature (London)*. – 2011. – Vol. 469. – P. 38.
4. Amusia M.Ya., Popov K.G., Shaginyan V.R., Stephanovich V.A. Theory of Heavy-Fermion compounds– Springer International Publishing, Switzerland. – 2015. – Vol. 182. – 359 p.
5. Shannon R.D. Revised effective ionic radii systematic of interatomic distances in halides and chalcogenides // *Acta Cryst. A*. – 1976. – V. 32, № 5. – P. 751–767.
6. Li J., Sleight A.W. Structure of  $\beta$ -AgAlO<sub>2</sub> and structural systematics of tetrahedral MM'X<sub>2</sub> compounds // *J. Solid State Chemistry*. – 2004. – V. 177, № 3. – P. 889–894.
7. Hirakawa K., Kadowaki H., Ubukoch K. Experimental studies of triangular lattice antiferromagnets with  $S = \frac{1}{2}$ : NaTiO<sub>2</sub> and LiNiO<sub>2</sub> // *J. Phys. Soc. Japan*. – 1985. – V. 54, № 9. – P. 3526–3536.
8. Магомедов М.А., Муртазаев А.К., Магомедова Л.К., Исаева М.М. Фазовая диаграмма и структура основного состояния модели Изинга на решетке КагOME // *Вестник ДГУ*. – 2018. – Т. 33, вып. 2. – С. 57–66.
9. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. – М.: Мир, 1985. – С. 351.
10. Baek S.K., Makela H., Minnhagen P., Kim B.J. Internal energy density of the critical three-state Potts model on the Kagome lattice // *Phys. Rev. E*. – 2011. – V. 83. – P. 061104.
11. Бабаев А.Б., Муртазаев А.К. Критическая температура трехвершинной модели Поттса на решетке КагOME // *ФТТ*. – 2019. – Т. 61, вып. 7. – С. 1342–1345.
12. Поршнев С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB // *Горячая линия – Телеком*. – 2003. – С. 592.
13. Peczac P., Ferrenberg A.M., Landau D.P. Monte-Carlo Simulations of Phase Transitions in Frustrated Antiferromagnets // *Phys. Rev. B*. – 1991. – V. 43. – P. 6087.
14. Бабаев А.Б., Муртазаев А.К., Сулейманов Э.М., Ризванова Т.Р. Исследование влияния фрустраций на термодинамические свойства низкоразмерной модели Поттса методами компьютерного моделирования // *ФТТ*. – 2016. – Т. 58, вып. 10.
15. Feldman H., Guttmann A.J., Jensen I., Shrock R., Tsai Sh. Study of the Potts model on the honeycomb and triangular lattices: Low-temperature series and partition function zeros // *J. Phys.* – 1998. – V. 31. – P. 2287.

Поступила в редакцию 15 июля 2019 г.

UDC 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2019-34-3-45–51

**Investigation of thermodynamic properties of Potts model on the three-state Kagomé lattice ( $q = 3$ )**

*T.R. Rizvanova<sup>1</sup>, A.K. Murtazaev<sup>1,2</sup>, A.B. Babaev<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup> *Institute of Physics, DFRC RAS; Russia, 367015, Makhachkala, M. Yaragskiy st., 94; rizv@yandex.ru;*

<sup>2</sup> *Dagestan Federal Research Center of RAS; Russia, 367032, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 45;*

<sup>3</sup> *Dagestan State Pedagogical University; Russia, 367025, Makhachkala, M. Yaragskiy st., 57*

Potts model on the Kagomé lattice has been investigated using the Monte Carlo method. Temperature dependences of thermodynamic properties of specific heat  $C$ , the order parameter  $m$  and susceptibility  $\chi$  were obtained. Systems with linear sizes  $L \times L = N$ ,  $L = 12, 16, 26, 32$  were studied. Periodic boundary conditions were specified. Based on the fourth order Binder cumulant method critical temperature ( $T_c$ ) for a three-vertex Potts model on the Kagomé lattice was calculated. It has been demonstrated that obtained data are consistent with the data obtained with other methods and algorithms. A second order transition is shown to be occurred in the system.

Keywords: *Potts model, Kagomé lattice, phase transitions, Monte-Carlo method, Metropolis algorithm.*

*Received 15 July, 2019*