

УДК 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2026-41-2-44–60

М. А. Магомедов<sup>1, 2</sup>, А. К. Муртазаев<sup>1, 2</sup>, Л. К. Магомедова<sup>2</sup>, Х. Н. Наврузалиева<sup>2</sup>

**Влияние внешнего магнитного поля на свойства модели Гейзенберга на решетке кагоме**

<sup>1</sup> Институт физики ДФИЦ РАН; Россия, 367015, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94; [magomedov\\_ma@mail.ru](mailto:magomedov_ma@mail.ru)

<sup>2</sup> Дагестанский государственный университет; Россия, 367000, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 43а

**Аннотация.** Исследовано влияние внешнего магнитного поля на термодинамические свойства классической модели Гейзенберга на фрустрированной решетке кагоме с учетом обменных взаимодействий между ближайшими и следующими соседями. Численное моделирование выполнено методом Монте-Карло с использованием репличного обменного алгоритма, эффективно применяемого для исследования систем со сложным энергетическим ландшафтом.

Расчеты проведены в широком диапазоне температур и напряженностей внешнего магнитного поля при фиксированных значениях обменных параметров  $J_1 = -1$  и  $J_2 = 1$ . Получены температурные и полевые зависимости внутренней энергии, теплоемкости, полной намагниченности, магнитной восприимчивости и параметров порядка. Исследована эволюция взаимной ориентации магнитных моментов трех подрешеток.

Показано, что увеличение напряженности магнитного поля приводит к постепенному подавлению критических флуктуаций, сопровождающемуся уменьшением максимумов теплоемкости и магнитной восприимчивости. Одновременно происходит рост полной намагниченности, усиление магнитного упорядочения и непрерывная перестройка спиновой структуры. Установлено, что при достаточно сильном магнитном поле система переходит в состояние, близкое к магнитному насыщению, при котором магнитные моменты преимущественно ориентированы вдоль направления внешнего поля.

Полученные результаты расширяют представления о влиянии внешнего магнитного поля на поведение геометрически фрустрированных магнитных систем и могут быть использованы при интерпретации экспериментальных данных для соединений со структурой кагоме, а также при исследовании материалов с конкурирующими обменными взаимодействиями.

**Ключевые слова:** модель Гейзенберга, решетка кагоме, фрустрация, магнитное поле, метод Монте-Карло.

*Благодарности:* исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-12-20029, <https://rscf.ru/project/25-12-20029/>

## Введение

В последние годы исследование геометрически фрустрированных магнитных систем занимает одно из ведущих мест в физике конденсированного состояния. Причиной устойчивого интереса к таким объектам является сочетание простоты используемых спиновых моделей с необычайно богатым спектром коллективных явлений, возникающих вследствие конкуренции обменных взаимодействий. Для подобных систем характерны высокая вырожденность основного состояния, сильные тепловые и квантовые флуктуации, сложные фазовые диаграммы и возможность реализации новых типов магнитного упорядочения, отсутствующих в обычных нефрустрированных магнетиках. Исследование подобных эффектов имеет значение не только для развития статистической физики и теории фазовых переходов, оно представляет практический интерес при создании перспективных магнитных материалов, используемых в устройствах спинтроники, магнитной памяти и квантовых информационных технологий [1].

Особое место среди геометрически фрустрированных структур занимает решетка кагоме, представляющая собой двумерную сеть из взаимосвязанных треугольников. При антиферромагнитном взаимодействии между ближайшими и следующими ближайшими соседями геометрия такой решетки не позволяет одновременно минимизировать энергию всех обменных связей, вследствие чего возникает макроскопическая вырожденность основного состояния. Именно эта особенность определяет существование большого числа почти эквивалентных спиновых конфигураций и делает решетку кагоме удобным объектом для исследования коллективных эффектов, обусловленных фрустрацией [2; 5; 6].

Интерес к системам со структурой кагоме существенно возрос после экспериментального обнаружения признаков квантовой спиновой жидкости в гербертсмитите  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ . Впоследствии аналогичные особенности магнитного поведения были выявлены и в других соединениях данного класса, включая капелласит  $\text{Cu}_3\text{Zn}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$  и хайдеит  $\text{Cu}_3\text{Mg}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ . Экспериментальные исследования показали, что даже небольшие изменения обменных взаимодействий способны приводить к качественной перестройке магнитного состояния системы, вызывая появление новых фаз и существенно изменяя характер магнитного отклика [2–11].

В последние годы круг материалов с кагоме-подобной структурой значительно расширился. Наряду с природными минералами интенсивно исследуются искусственно синтезированные соединения, в которых геометрическая фрустрация сочетается с конкуренцией нескольких обменных взаимодействий. Для подобных материалов характерно проявление необычных магнитных состояний, включая квантовую спиновую жидкость, магнитные плато, экзотические коллективные возбуждения, аномальный эффект Холла и ряд других эффектов, представляющих большой интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения [2; 6–12].

Теоретическое описание подобных систем в большинстве случаев основано на использовании спиновых моделей Изинга, ХУ и Гейзенберга. Наиболее общей среди них является модель Гейзенберга, допускающая непрерывное изменение направления магнитного момента. Благодаря этому она позволяет значительно точнее описывать широкий класс реальных магнитных материалов, в которых магнитные моменты не

ограничены фиксированным набором направлений. Включение взаимодействий между ближайшими и следующими ближайшими соседями делает модель более реалистичной, поскольку именно конкуренция нескольких обменных интегралов во многом определяет характер магнитного упорядочения и положение фазовых границ [8; 9; 12].

Одним из наиболее эффективных способов управления магнитным состоянием подобных систем является внешнее магнитное поле. Его действие приводит к частичному или полному снятию вырождения основного состояния, изменению взаимной ориентации магнитных моментов, перераспределению относительной устойчивости различных магнитных конфигураций и изменению характера фазовых переходов. В результате существенно изменяются температурные зависимости основных термодинамических характеристик – внутренней энергии, теплоемкости, магнитной восприимчивости, намагниченности и параметра порядка. Исследование этих величин позволяет установить механизмы формирования магнитного порядка и определить роль внешнего поля в эволюции спиновой структуры [9–12].

Несмотря на сравнительно простой вид гамильтониана, аналитическое исследование модели Гейзенберга на геометрически фрустрированных решетках представляет собой чрезвычайно сложную задачу. Основная трудность связана с наличием большого числа локальных минимумов свободной энергии, разделенных высокими энергетическими барьерами. В подобных условиях традиционные аналитические методы оказываются малоприменимыми, а наиболее достоверные результаты получают с использованием методов статистического моделирования, прежде всего алгоритмов Монте-Карло [1].

При исследовании фрустрированных систем применение стандартного алгоритма Метрополиса нередко сопровождается медленной релаксацией и длительным пребыванием системы в локальных минимумах энергии. Одним из наиболее эффективных способов преодоления этой проблемы является репличный обменный алгоритм, основанный на периодическом обмене конфигурациями между репликами, моделируемыми при различных температурах. Использование такого подхода значительно ускоряет достижение термодинамического равновесия и позволяет получать надежные статистические оценки термодинамических характеристик даже для сильно фрустрированных систем [13; 14].

Нами в последние годы выполнен цикл исследований спиновых моделей на решетке кагоме с применением современных высокоэффективных алгоритмов и методов Монте-Карло. С использованием алгоритма Ванга – Ландау энтропийного метода Монте-Карло была исследована плотность и структура основного состояния модели Изинга с учетом взаимодействий ближайших и следующих соседей, построены фазовые диаграммы и изучены особенности магнитного упорядочения [15–18]. Позднее аналогичный подход был использован при исследовании моделей Поттса с различным числом спиновых состояний  $q$ , что позволило установить особенности фазовых переходов и влияние геометрической фрустрации на термодинамические свойства системы [19–23]. Полученные результаты показали, что конкуренция обменных взаимодействий существенно усложняет структуру фазовых диаграмм и приводит к появлению новых упорядоченных состояний.

Дальнейший фокус наших исследований сместился в сторону моделей с непрерывной симметрией – XY-модели и модели Гейзенберга. Следует отметить, что влияние внешнего магнитного поля на термодинамические свойства классической модели Гейзенберга на решетке кагоме при одновременном учете взаимодействий ближайших соседей остается слабо изученным. В литературе основное внимание уделяется либо квантовым моделям, либо исследованию отдельных областей фазовой диаграммы, тогда как комплексный анализ температурных и полевых зависимостей основных термодинамических характеристик выполнен лишь для ограниченного числа моделей [8; 9; 11; 12]. В связи с этим представляет интерес исследование системы в широком диапазоне температур и напряженностей внешнего магнитного поля.

Цель данной работы – исследование влияния внешнего магнитного поля на термодинамические свойства классической модели Гейзенберга на решетке кагоме с учетом обменных взаимодействий между ближайшими соседями. Для решения поставленной задачи использован репличный обменный алгоритм метода Монте-Карло. Нами проведен анализ температурных и полевых зависимостей внутренней энергии, теплоемкости, полной намагниченности, магнитной восприимчивости и параметров порядка отдельных подрешеток. Особое внимание уделено исследованию изменения взаимной ориентации магнитных моментов под действием внешнего магнитного поля и определению особенностей процессов магнитного упорядочения в условиях геометрической фрустрации.

### Модель

Нами исследуется классическая модель Гейзенберга на двумерной решетке кагоме с учетом обменных взаимодействий между ближайшими и следующими ближайшими соседями во внешнем магнитном поле. Такая модель является одной из наиболее распространенных при описании магнитных материалов, в которых локализованные магнитные моменты обладают практически непрерывной вращательной симметрией и не имеют выраженной одноосной анизотропии.

Решетка кагоме представляет собой двумерную систему из соединенных между собой треугольников, обладающую высокой степенью геометрической фрустрации. При антиферромагнитном взаимодействии между ближайшими соседями невозможно одновременно минимизировать энергию всех обменных связей внутри элементарных треугольников. В результате система характеризуется большим числом энергетически близких состояний, что существенно усложняет процессы магнитного упорядочения и приводит к возникновению богатой фазовой структуры.

Гамильтониан исследуемой модели имеет вид

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} (\vec{S}_i \vec{S}_j) - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} (\vec{S}_i \vec{S}_k) - h \sum_{\langle i \rangle} \vec{S}_i, \quad |\vec{S}_i| = 1, \quad (1)$$

где  $J_1$  и  $J_2$  – параметры обменных взаимодействий. Внешнее поле было направлено вдоль оси  $z$ . В данной работе обменные взаимодействия принимались равными  $J_1 = -1$  и  $J_2 = 1$ . Внешнее магнитное поле изменялось в диапазоне  $0 \leq h \leq 10.0$  с шагом 0.1.

Схематическое изображение модели приведено на рисунке 1. Каждая вершина решетки соответствует локализованному магнитному моменту. Для удобства анализа

система разбита на три взаимопроникающие подрешетки, обозначенные A, B, C. Спины, принадлежащие одной подрешетке, показаны одинаковым цветом.

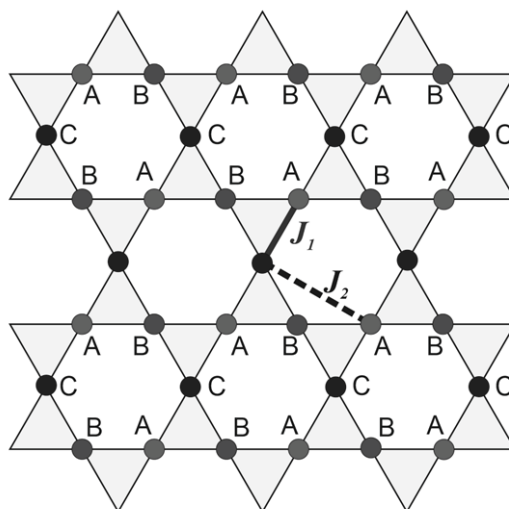


Рис. 1. Модель Гейзенберга на решетке кагоме

На рисунке также обозначены все обменные взаимодействия, учитываемые в настоящей работе. Сплошными линиями показаны связи между ближайшими соседями, соответствующие параметру обмена  $J_1$ , а тонкими линиями – взаимодействия между следующими ближайшими соседями, описываемые параметром  $J_2$ . Каждый узел решетки имеет четыре ближайших и четыре следующих ближайших соседа. Именно такое сочетание геометрии решетки и конкурирующих обменных взаимодействий приводит к высокой степени магнитной фрустрации и обуславливает сложное поведение термодинамических характеристик системы во внешнем магнитном поле.

### Методы исследований и результаты

В последние годы разработано много новых алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм. В ходе работы над данным проектом был использован этот алгоритм.

Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде:

1. Одновременно моделируются  $N$  реплик  $X_1, X_2, \dots, X_N$  с температурами  $T_1, T_2, \dots, T_N$ .
2. После выполнения одного МК-шага/спинов для всех реплик производится обмен данными между парой соседних реплик  $X_i$  и  $X_{i+1}$  в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

$$w(X_i \rightarrow X_{i+1}) = \begin{cases} 1, & \text{for } \Delta \leq 0, \\ \exp(-\Delta), & \text{for } \Delta > 0, \end{cases} \quad (2)$$

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

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, которая характерна для спино-

вых систем с фрустрациями. Для повышения эффективности этого метода необходимо увеличение числа реплик, что требует серьезного роста компьютерных мощностей. Современные компьютеры позволяют моделировать необходимое количество реплик и получать результаты с высокой точностью. Нами использовалось 300 реплик.

Для анализа природы и характера ФП использовался гистограммный метод. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной  $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$  шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до  $\tau = 500 \tau_0$  шагов МК на спин. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами  $0.75 \times L \times L = N$ ,  $L = 12, 24$  и  $48$ , где  $L$  – линейный размер решетки,  $N$  – количество спинов в системе.

Для наблюдения за температурным ходом поведения унамагниченности  $m$ , восприимчивости  $\chi$  и теплоемкости  $C$  нами использовались следующие выражения:

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{S}_i, \quad (3)$$

$$\chi = (NK) \left( \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right), \quad (4)$$

$$C = (NK^2) \left( \langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right), \quad (5)$$

где  $K = |J_1|/k_B T$ ,  $U$  – внутренняя энергия.

После проверки корректности реализации репличного обменного алгоритма был выполнен анализ вероятности обмена конфигурациями между соседними репликами. Полученные результаты представлены на рисунке 2.

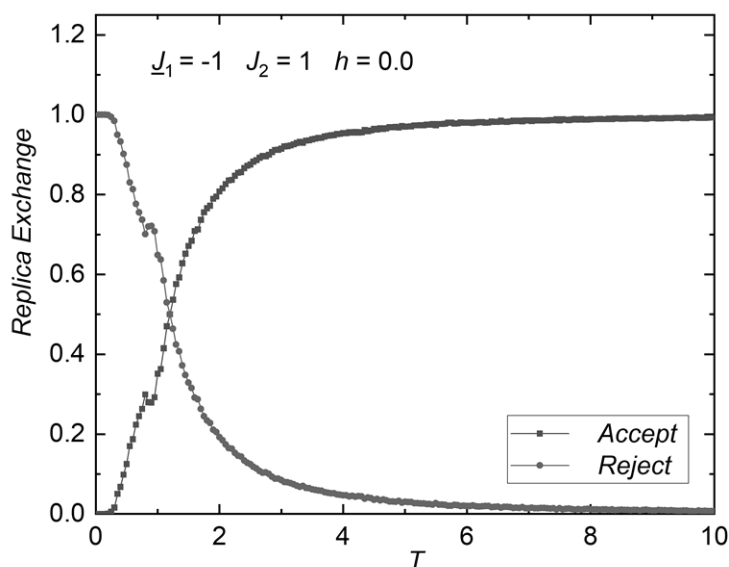


Рис. 2. Температурная зависимость вероятности обмена реплик (Асепт – удачный обмен реплик, Reject – неудачный обмен реплик)

Как следует из рисунка 2, вероятность обмена между соседними репликами мала при низких температурах, однако растет с повышением температуры.

Температурные зависимости полной энергии системы при различных значениях внешнего магнитного поля представлены на рисунке 3. Внутренняя энергия является одной из основных термодинамических характеристик, непосредственно отражающих изменение магнитной структуры системы при изменении температуры и напряженности внешнего магнитного поля.

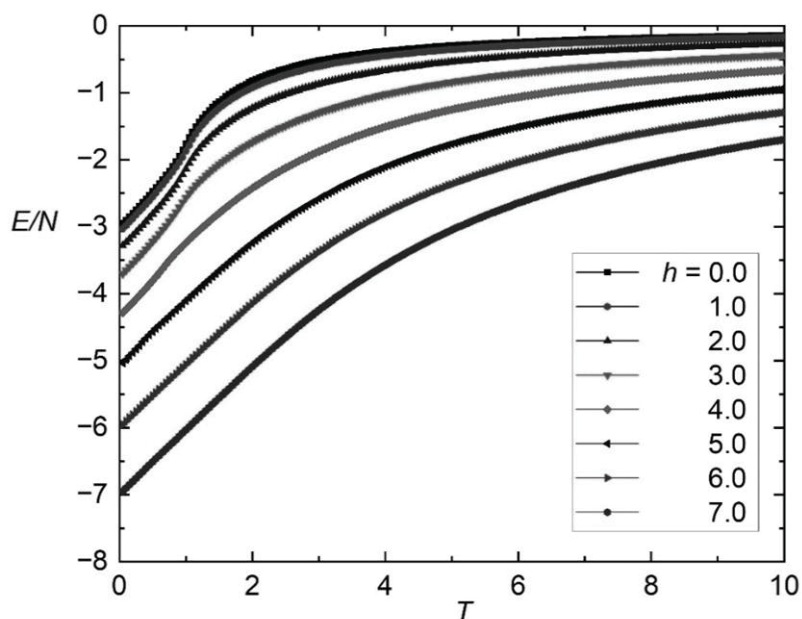


Рис. 3. Температурная зависимость полной энергии системы

При отсутствии внешнего поля энергия системы в области низких температур принимает минимальные значения, соответствующие наиболее устойчивым спиновым конфигурациям. По мере повышения температуры происходит постепенное разрушение магнитного порядка вследствие усиления тепловых флуктуаций, что сопровождается монотонным ростом внутренней энергии. С увеличением магнитного поля энергетические кривые смещаются в области более низких значений и становятся более плавными.

Температурные зависимости теплоемкости при различных значениях внешнего магнитного поля представлены на рисунке 4. Теплоемкость является одной из наиболее информативных термодинамических характеристик, поскольку непосредственно отражает величину энергетических флуктуаций и позволяет определить температурные области, в которых происходят наиболее существенные изменения магнитной структуры системы.

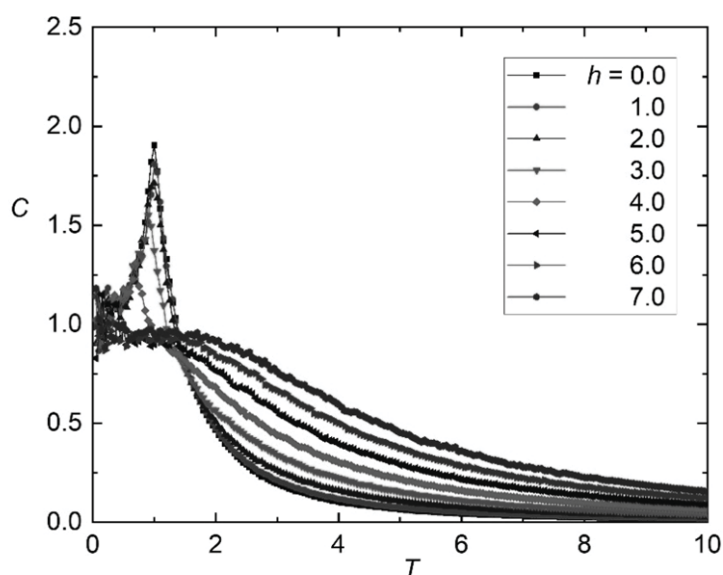


Рис. 4. Температурная зависимость теплоемкости системы

Как видно из рисунка 4, в отсутствие внешнего магнитного поля на температурной зависимости теплоемкости наблюдается выраженный максимум, соответствующий области фазового перехода. При увеличении напряженности магнитного поля высота максимума постепенно уменьшается, а сам пик становится более широким. Такое поведение указывает на ослабление коллективных флуктуаций и постепенное подавление фазового перехода. Одновременно снижается влияние конкуренции обменных взаимодействий, характерной для геометрически фрустрированной решетки кагоме, вследствие чего магнитное состояние системы становится более устойчивым.

Температурные зависимости полной намагниченности системы при различных значениях внешнего магнитного поля представлены на рисунке 5. Поведение данной величины позволяет проследить изменение суммарного магнитного момента системы под действием температуры и определить влияние внешнего поля на процессы магнитного упорядочения.

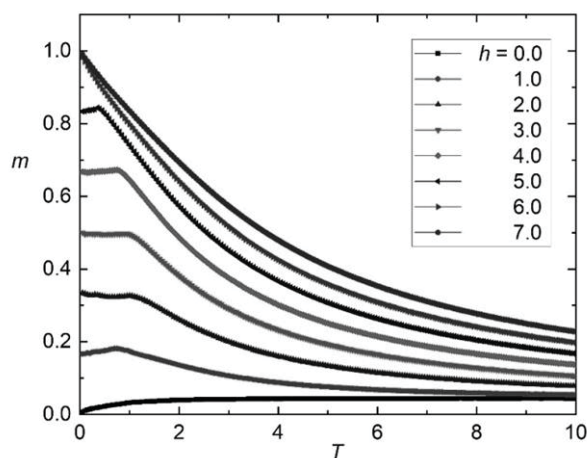


Рис. 5. Температурная зависимость намагниченности системы

При отсутствии внешнего магнитного поля полная намагниченность во всей исследованной области температур остается близкой к нулю. Такое поведение обусловлено высокой симметрией основного состояния и взаимной компенсацией магнитных моментов различных подрешеток. Незначительные отклонения от нулевого значения связаны исключительно с конечным размером моделируемой системы и наличием тепловых флуктуаций.

После включения магнитного поля симметрия системы нарушается, вследствие чего возникает преимущественная ориентация магнитных моментов вдоль направления поля. Уже при сравнительно малых значениях напряженности наблюдается появление конечной намагниченности, величина которой постепенно возрастает по мере увеличения поля.

Во всем исследованном диапазоне температур увеличение внешнего магнитного поля сопровождается ростом полной намагниченности. Наиболее интенсивное изменение наблюдается в области низких температур, где тепловые флуктуации минимальны и действие поля проявляется наиболее эффективно. При повышении температуры тепловое движение препятствует упорядочению спинов, вследствие чего различия между кривыми постепенно уменьшаются.

При напряженности поля около ( $h \approx 6$ ) достигается состояние магнитного насыщения. В этой области практически все магнитные моменты ориентируются вдоль направления внешнего поля, а дальнейшее увеличение его величины уже не приводит к заметному изменению полной намагниченности. Таким образом, температурные зависимости, приведенные на рисунке 5, демонстрируют постепенный переход системы от практически полностью компенсированного состояния к состоянию полного магнитного насыщения.

Температурные зависимости магнитной восприимчивости при различных значениях внешнего магнитного поля приведены на рисунке 6. Магнитная восприимчивость характеризует чувствительность системы к изменению внешнего поля и является одной из наиболее информативных величин при исследовании процессов магнитного упорядочения.

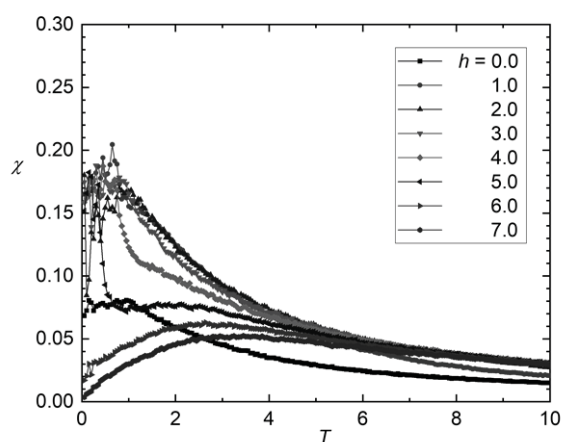


Рис. 6. Температурная зависимость восприимчивости системы  $\chi$

При малых значениях напряженности поля на температурных зависимостях восприимчивости наблюдаются сравнительно узкие максимумы. Их появление связано с усилением магнитных флуктуаций в области фазового перехода, где даже небольшое изменение температуры вызывает существенную перестройку магнитной структуры системы. По мере увеличения внешнего магнитного поля максимумы постепенно уменьшаются по высоте и одновременно становятся более широкими. Такое поведение свидетельствует об уменьшении интенсивности коллективных магнитных флуктуаций вследствие частичного снятия вырождения основного состояния. Магнитное поле стабилизирует определенную ориентацию магнитных моментов и тем самым уменьшает чувствительность системы к температурным изменениям.

При больших значениях напряженности поля восприимчивость изменяется достаточно плавно во всем исследуемом температурном диапазоне. Хорошо выраженные аномалии практически исчезают, что указывает на подавление критического поведения и переход системы в режим, где основную роль играет взаимодействие магнитных моментов с внешним полем.

Полученные зависимости находятся в полном соответствии с результатами анализа теплоемкости. В обоих случаях наблюдается постепенное исчезновение характерных аномалий при увеличении напряженности внешнего магнитного поля, что свидетельствует о существенном ослаблении коллективных процессов магнитного упорядочения в исследуемой системе.

На рисунке 7 представлены температурные зависимости параметра порядка  $q_1$ , характеризующего степень упорядочения одной из трех подрешеток решетки кагоме. При низких температурах его значение близко к  $(1/3)$ , что соответствует устойчивому магнитному состоянию со 120-градусной структурой и практически одинаковым вкладом каждой подрешетки. С повышением температуры параметр порядка монотонно уменьшается вследствие усиления тепловых флуктуаций и постепенного разрушения магнитного порядка. Наиболее быстрый спад  $q_1$  наблюдается в области фазового перехода.

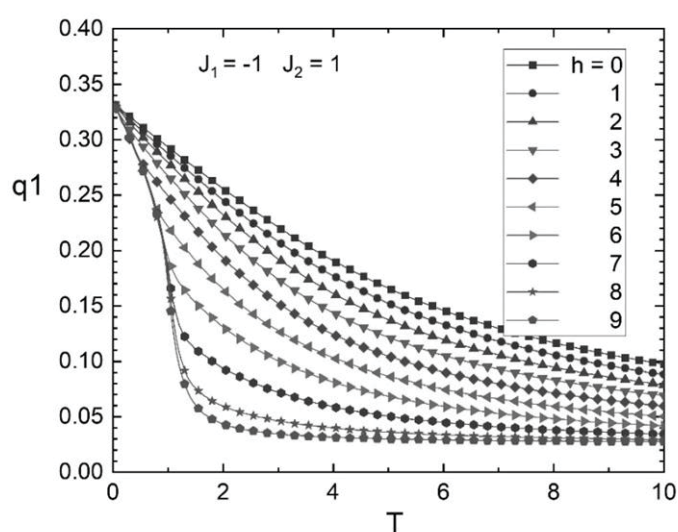


Рис. 7. Температурная зависимость параметра порядка  $q_1$

На рисунке 8 представлены полевые зависимости полной намагниченности при различных температурах. Во всех случаях с увеличением напряженности внешнего магнитного поля намагниченность монотонно возрастает вследствие постепенной ориентации магнитных моментов вдоль направления поля. При  $h \approx 6$  достигается состояние магнитного насыщения.

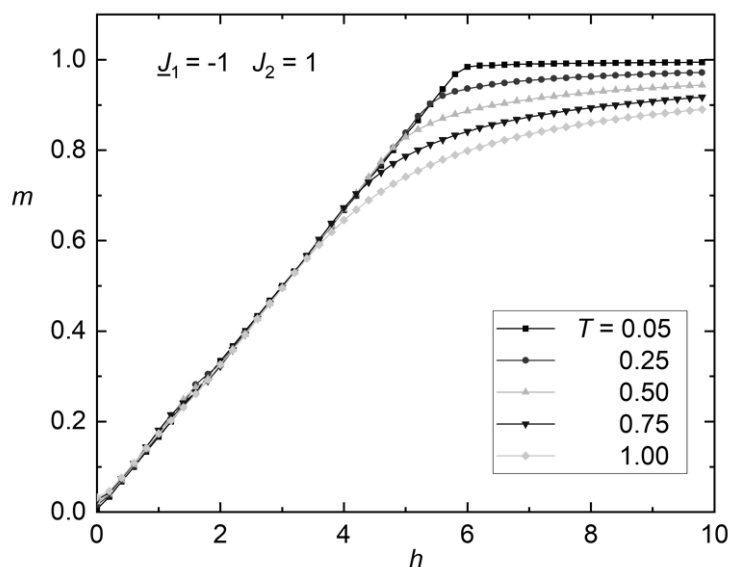


Рис. 8. Полевая зависимость намагниченности системы  $m$

На рисунке 9 представлены полевые зависимости внутренней энергии при различных температурах. С увеличением напряженности внешнего магнитного поля энергия системы изменяется монотонно, что обусловлено возрастающим вкладом зеемановского взаимодействия. После достижения состояния магнитного насыщения  $h \approx 6$  зависимости становятся практически линейными, поскольку ориентация магнитных моментов вдоль внешнего поля практически завершается.

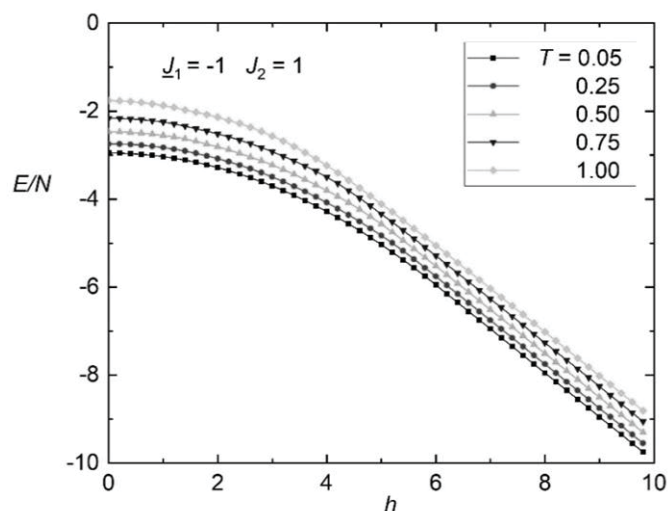


Рис. 9. Полевая зависимость полной энергии системы  $E$

На рисунке 10 представлены полевые зависимости параметров порядка трех магнитных подрешеток при температуре ( $T = 0.05$ ). Данные зависимости позволяют проследить изменение магнитного состояния каждой подрешетки отдельно и получить значительно более полную информацию о механизме формирования общего магнитного порядка, чем анализ только полной намагниченности системы.

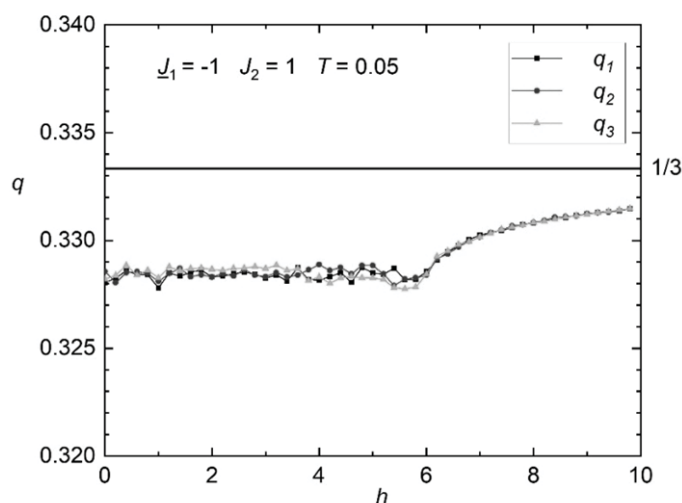


Рис. 10. Полевая зависимость параметра порядка  $q$

В отсутствие внешнего магнитного поля магнитные моменты всех трех подрешеток имеют практически одинаковые значения, близкие к  $(1/3)$ . Незначительное отклонение от этого значения обусловлено конечной температурой моделирования и остаточными тепловыми флуктуациями.

При увеличении напряженности магнитного поля магнитные моменты всех подрешеток возрастают практически одновременно. Это свидетельствует о том, что внешнее поле не нарушает эквивалентность подрешеток, а вызывает их согласованную переориентацию в направлении оси ( $z$ ).

Представленные на рисунке 11 угловые зависимости магнитных подрешеток решетки кагоме позволяют проследить эволюцию спиновой структуры в магнитном поле в дополнение к термодинамическим данным. В нулевом поле равновесная конфигурация диктуется исключительно конкуренцией обменных взаимодействий и геометрической фрустрацией, что приводит к так называемой 120-градусной структуре, при которой система разбивается на три подрешетки, ориентированные под углом 120 градусов друг относительно друга. Наложение магнитного поля приводит к постепенному повороту спинов в подрешетках вдоль поля. При этом спины внутри подрешеток остаются направленными одинаково. Таким образом, именно угловые зависимости, в отличие от термодинамических характеристик, рассмотренных выше, позволяют непосредственно проследить эволюцию магнитной структуры и установить механизм перестройки спиновой конфигурации под действием внешнего поля.

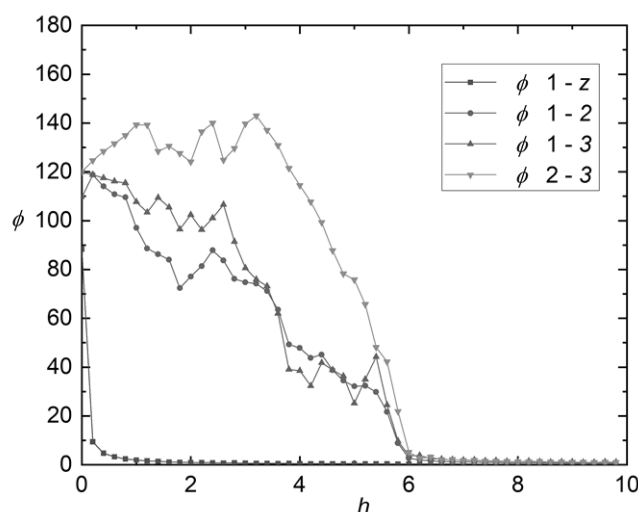


Рис. 11. Полевая зависимость углов между различными подрешетками  $\phi$

Для наглядной интерпретации результатов численного моделирования на рис. 12 приведена схема изменения взаимной ориентации магнитных моментов трех подрешеток при различных значениях внешнего магнитного поля. Данный рисунок представляет собой обобщение результатов, полученных при анализе полевых зависимостей намагниченности, параметров порядка и углов между подрешетками, и позволяет сформировать целостное представление о механизме магнитного упорядочения исследуемой системы.

При отсутствии внешнего магнитного поля магнитная структура определяется исключительно конкуренцией обменных взаимодействий между ближайшими и следующими ближайшими соседями. Геометрическая фрустрация препятствует формированию простого коллинеарного антиферромагнитного порядка, вследствие чего магнитные моменты трех подрешеток ориентируются под углами в 120 градусов, обеспечивающими минимизацию полной энергии системы.

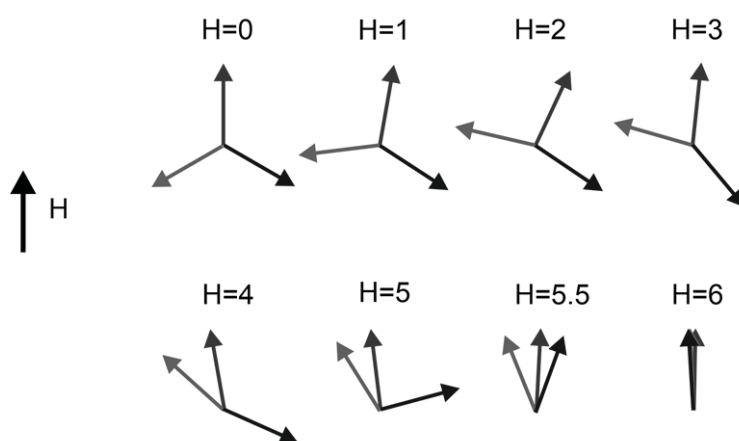


Рис. 12. Ориентация подрешеток во внешнем магнитном поле

После приложения внешнего магнитного поля начинается постепенная переориентация магнитных моментов. При этом первоначальная симметрия магнитной струк-

туры сохраняется, однако все три подрешетки синхронно поворачиваются в сторону направления внешнего поля. Скорость этого поворота определяется соотношением между обменной энергией и энергией взаимодействия магнитных моментов с магнитным полем. В области слабых полей доминируют обменные взаимодействия, тогда как при дальнейшем увеличении напряженности возрастает роль зеемановского вклада.

По мере увеличения магнитного поля углы между магнитными моментами уменьшаются, а ориентация всех трех подрешеток становится все более близкой к направлению внешнего поля. Этот процесс носит непрерывный характер и не сопровождается скачкообразной перестройкой магнитной структуры. Тем самым подтверждаются выводы, сделанные на основании анализа угловых зависимостей, приведенных на рис. 11.

В области сильных магнитных полей система достигает состояния магнитного насыщения. На этом этапе магнитные моменты практически полностью ориентированы вдоль оси внешнего поля, а влияние геометрической фрустрации становится значительно менее выраженным. Таким образом, представленная схема наглядно демонстрирует последовательность изменения магнитной структуры исследуемой модели и позволяет проследить полный путь эволюции системы – от фрустрированного многократно вырожденного состояния до практически полностью поляризованной магнитной фазы.

### Заключение и выводы

В данной работе с использованием высокоэффективного репличного обменного алгоритма методом Монте-Карло исследовано, как внешнее поле влияет на классическую модель Гейзенберга на решетке кагоме с конкурирующими взаимодействиями первых и вторых соседей. Показано, что с ростом поля пики теплоемкости и восприимчивости заметно сглаживаются – критические флуктуации слабеют, а сам переход теряет резко выраженный коллективный характер. При этом намагниченность системы растет: спины постепенно разворачиваются вдоль поля. Перестройка магнитной структуры трех подрешеток идет плавно, без скачков, и по мере усиления поля влияние геометрической фрустрации ослабевает; при  $h \approx 6$  система выходит на насыщение.

Эти результаты дополняют картину поведения фрустрированных кагоме-магнетиков во внешнем поле и могут пригодиться как при интерпретации экспериментов на реальных материалах, так и в дальнейших расчетах с более сложными обменными взаимодействиями и магнитной анизотропией.

### Литература

1. Landau, D. P. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics / D. P. Landau, K. Binder. – 3rd ed. – Cambridge: Cambridge University Press, 2009. – 471 p.
2. Norman, M. R. Colloquium: Herbertsmithite and the search for the quantum spin liquid / M. R. Norman // Reviews of Modern Physics. 2016. Vol. 88, no. 4. – Art. 041002.
3. Kolitsch, U. Kapellasite,  $\text{Cu}_3\text{Zn}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ , a new mineral from Lavrion, Greece / U. Kolitsch, A. Pring, A. R. Kampf, P. Elliott // Mineralogical Magazine. 2006. Vol. 70, no. 3. – Pp. 329–340.

4. Boldrin, D. Haydeeite: a Spin-1/2 kagome ferromagnet / D. Boldrin, B. Fåk, M. Enderle, S. Bieri, J. Ollivier, S. Rols, P. Manuel, A. S. Wills. – arXiv:1503.08023v2 [cond-mat.str-el], 2015.
5. Janson, O. Modified kagome physics in the natural Spin-1/2 kagome lattice systems: Kapellasite  $\text{Cu}_3\text{Zn}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$  and Haydeeite  $\text{Cu}_3\text{Mg}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$  / O. Janson, J. Richter, H. Rosner // *Physical Review Letters*. 2008. Vol. 101. – Art. 106403.
6. Fåk, B. Kapellasite: a kagome quantum spin liquid with competing interactions / B. Fåk, E. Kermarrec, L. Messio, B. Bernu, C. Lhuillier, F. Bert, P. Mendels, B. Koteswara Rao, F. Bouquet, J. Ollivier, A. D. Hillier, A. Amato, R. H. Colman, A. S. Wills // *Physical Review Letters*. 2012. Vol. 109. – Art. 037208.
7. Han, T.-H. Fractionalized excitations in the spin-liquid state of a kagome-lattice antiferromagnet / T.-H. Han, J. S. Helton, S. Chu, et al. // *Nature*. 2012. Vol. 492. – Pp. 406–410.
8. Depenbrock, S. Nature of the spin-liquid ground state of the  $S = 1/2$  Heisenberg model on the kagome lattice / S. Depenbrock, I. P. McCulloch, U. Schollwöck // *Physical Review Letters*. 2012. Vol. 109. – Art. 067201.
9. Nishimoto, S. Controlling frustrated liquids and solids with an applied field in a kagome Heisenberg antiferromagnet / S. Nishimoto, N. Shibata, C. Hotta // *Nature Communications*. 2013. Vol. 4. – Art. 2287.
10. Mendels, P. Quantum kagome antiferromagnet  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$  / P. Mendels, F. Bert // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2010. Vol. 79, no. 1. – Art. 011001.
11. Khuntia, P. Gapless ground state in the archetypal quantum kagome antiferromagnet  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$  / P. Khuntia, et al. // *Nature Physics*. 2020. Vol. 16. – Pp. 469–474.
12. He, Y.-C. Signatures of Dirac cones in a DMRG study of the kagome Heisenberg model / Y.-C. He, M. P. Zaletel, M. Oshikawa, F. Pollmann // *Physical Review X*. 2017. Vol. 7. – Art. 031020.
13. Hagen, M. Serial replica exchange: efficient generalized ensemble simulations for complex systems / M. Hagen, B. Kim, P. Liu, et al. // *Journal of Physical Chemistry B*. 2007. Vol. 111, no. 6. – Pp. 1416–1423.
14. Sugita, Y. Replica-exchange multicanonical algorithm and multicanonical replica-exchange method for simulating systems with rough energy landscapes / Y. Sugita, Y. Okamoto // *Chemical Physics Letters*. 2000. Vol. 329, no. 3–4. – Pp. 261–270.
15. Магомедов, М. А. Термодинамика модели Изинга на решетке кагоме / М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев, М. М. Исаева // *Вестник Дагестанского государственного университета. Серия 1: Естественные науки*. 2017. Т. 32, вып. 2. – С. 19–28.
16. Магомедов, М. А. Плотность состояний и структура основного состояния модели Изинга на решетке кагоме с учетом взаимодействия ближайших и следующих соседей / М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев // *Физика твердого тела*. 2018. Т. 60, № 6. – С. 1173–1177.
17. Магомедов, М. А. Фазовая диаграмма и структура основного состояния модели Изинга на решетке кагоме / М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев, Л. К. Магомедова, М. М. Исаева // *Вестник Дагестанского государственного университета. Серия 1: Естественные науки*. 2018. Т. 33, вып. 3. – С. 57–66.

18. Ramazanov, M. K. Phase transitions and thermodynamic properties of antiferromagnetic Ising model with next-nearest-neighbor interactions on the kagome lattice / M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, M. A. Magomedov, M. K. Badiev // Phase Transitions. 2018. Vol. 91, no. 6. – Pp. 610–618.

19. Муртазаев, А. К. Фазовые переходы и термодинамические свойства модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  на решетке кагоме / А. К. Муртазаев, Т. Р. Ризванова, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов // Физика твердого тела. 2020. Т. 62, № 8. – С. 1278–1282.

20. Рамазанов, М. К. Фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Поттса на решетке кагоме / М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, Т. Р. Ризванова // Физика твердого тела. 2022. Т. 64, № 12. – С. 2016–2020.

21. Рамазанов, М. К. Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств модели Поттса с фрустрациями на решетке кагоме / М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, Т. Р. Ризванова // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2024. Т. 165, № 3. – С. 404–409.

22. Рамазанов, М. К. Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Поттса на решетке Кагоме / М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев, Т. Р. Ризванова, Р. М. Рамазанов // Физика твердого тела. 2024. Т. 66, № 2. – С. 301–305.

23. Рамазанов, М. К. Фазовые переходы в трехмерной ферромагнитной модели Поттса на решетке кагоме / М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Т. Р. Ризванова, М. Р. Джамалудинов, М. А. Магомедов // Физика твердого тела. 2025. Т. 67, № 9. – С. 1760–1764.

*Поступила в редакцию 29 мая 2026 г.*

*Принята 17 июня 2026 г.*

UDC 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2026-41-2-44–60

### **The Effect of an External Magnetic Field on the Properties of the Heisenberg Model on the Kagome Lattice**

**M. A. Magomedov<sup>1, 2</sup>, A. K. Murtazaev<sup>1, 2</sup>, L. K. Magomedova<sup>2</sup>, H. N. Navruzaliev<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *Institute of Physics DFRC RAS; Russia, 367015 Makhachkala, M. Yaragsky st., 94; [magomedov\\_ma@mail.ru](mailto:magomedov_ma@mail.ru)*

<sup>2</sup> *Dagestan State University; Russia, 367000, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 43a*

**Abstract.** The influence of an external magnetic field on the thermodynamic properties of the classical Heisenberg model on a frustrated kagome lattice with nearest- and next-nearest-neighbor exchange interactions has been investigated. Numerical simulations were performed using the Monte

Carlo method combined with the replica-exchange algorithm, which is particularly effective for studying systems with complex energy landscapes.

The calculations were carried out over a wide range of temperatures and magnetic field strengths for fixed exchange parameters,  $J_1 = -1$  and  $J_2 = 1$ . Temperature and field dependences of the internal energy, specific heat, total magnetization, magnetic susceptibility, and order parameters were obtained. In addition, the evolution of the relative orientation of the magnetic moments in the three magnetic sublattices was analyzed.

The results show that increasing the external magnetic field progressively suppresses critical fluctuations, leading to a reduction in the peaks of the specific heat and magnetic susceptibility. At the same time, the total magnetization increases, magnetic ordering is enhanced, and the spin configuration undergoes a continuous reorganization. For sufficiently strong magnetic fields, the system approaches a magnetically saturated state in which the magnetic moments become predominantly aligned with the direction of the applied field.

These findings provide new insight into the role of external magnetic fields in geometrically frustrated magnetic systems and may facilitate the interpretation of experimental results for kagome-lattice compounds as well as other materials with competing exchange interactions.

**Keywords:** Heisenberg model, kagome lattice, frustration, magnetic field, Monte Carlo method.

*Acknowledgments: the study was performed by grant of the Russian Science Foundation Project No. 25-12-20029, <https://rscf.ru/en/project/25-12-20029/>*

*Received 29 May, 2026*

*Accepted 17 June, 2026*