

МАЗАГАЕВА МАРИНА КУРБАНАЛИЕВНА

**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ЧЕТЫРЕХВЕРШИННОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА
НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ**

1.3.8. Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

МАХАЧКАЛА- 2024

Диссертационная работа выполнена в Институте физики им. Х.И. Амирханова – обособленного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук

Научный руководитель: **Муртазаев Акай Курбанович**
член-корреспондент РАН, доктор
физико-математических наук, профессор, директор
ФГБУН ДФИЦ РАН

Официальные оппоненты: **Гареева Зухра Владимировна**

*доктор физико-математических наук, доцент ИФМК
УФИЦ РАН Институт физики молекул и кристаллов*

Павлухина Оксана Олеговна
*кандидат физико-математических наук,
ФГБОУ ВО Челябинский государственный
университет*

Ведущая организация: **ФГАОУ ВО Дальневосточный федеральный университет**

Защита состоится **20 декабря 2024 г.** в 14⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета 24.2.431.01 на базе ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» Министерства образования и науки РФ по адресу: 454001, г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Челябинского государственного университета.

Автореферат разослан « _____ » 2024 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.2.431.01,
кандидат физ.-мат. наук

Матюнина М.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Исследования фазовых переходов и критических явлений, магнитных и термодинамических свойств в спиновых системах с фрустрациями занимает центральное место в современной физике конденсированного состояния [1-4]. Фрустрации могут привести к изменению ряда свойств фундаментального характера в магнитных спиновых системах. Особый интерес представляет исследование влияния возмущений различной природы, таких как внешнее магнитное поле, взаимодействие следующих за ближайшими соседями, немагнитные примеси и др. на природу фазовых переходов, термодинамические и магнитные свойства магнитных материалов с фрустрациями [5-7].

Фазовые переходы и критические явления спиновых систем успешно исследуются методами вычислительной физики, а именно методами Монте-Карло на основе специально разработанных алгоритмов [8-10]. Численный эксперимент стал надежным и самостоятельным инструментом в исследовании сложных спиновых систем наряду с физическим экспериментом и аналитическими подходами [11-12].

На сегодняшний день недостаточно хорошо изучена природа фазовых переходов и термодинамические свойства двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$. Это связано с трудностями постановки такого рода экспериментальных исследований. Для двумерной модели Поттса с различным числом состояний спина q существует совсем немного надежно установленных фактов. Данная модель интересна тем, что значение $q=4$ является граничным значением интервала $2 \leq q \leq 4$, где наблюдается фазовый переход второго рода и области значений $q>4$, в котором фазовый переход происходит как переход первого рода [13].

Исследование фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств магнетиков, описываемых двумерными решеточными моделями Поттса, имеет большой научный интерес и открывает широкие перспективы для их практического применения. Такой интерес обусловлен тем, что данная модель описывает большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. Исследование двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с фазовыми переходами и термодинамическими свойствами низкоразмерных решеточных систем. Следовательно, исследования фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств двумерной четырехвершинной модели Поттса методом Монте-Карло на сегодняшний день являются актуальными [14-15].

Таким образом, исследование фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств спиновых систем с фрустрациями, исходя из микроскопических гамильтонианов, является **важной** и **актуальной** проблемой современной статистической физики решеточных систем.

Целью диссертационной работы является исследование типа фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств двумерной четырехвершинной модели Поттса на гексагональной решетке с учетом конкурирующего обменного взаимодействия и внешнего магнитного поля на основе современных и высокоэффективных алгоритмов (репличный обменный алгоритм и алгоритм Ванга-Ландау) метода Монте-Карло. Для достижения указанной цели поставлены следующие задачи:

1. Разработать комплекс программ для ЭВМ, с помощью которого можно исследовать природу фазовых переходов, магнитные и термодинамические свойства двумерных моделей Поттса с $q=4$ на гексагональной решетке фрустрациями;
2. Исследовать природу фазовых переходов, магнитные и термодинамические свойства ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на гексагональной решетке; построить фазовую диаграмму зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей; определить типы фазовых переходов при различных значениях величины обменного взаимодействия;
3. Изучить магнитные и термодинамические свойства, а также особенности влияния конкурирующих обменных взаимодействий на поведение двумерной антиферромагнитной модели Поттса с $q=4$ на гексагональной решетке; построить фазовую диаграмму зависимости критической температуры от соотношения взаимодействий первых и вторых ближайших соседей; определить тип фазового перехода для широкого интервала соотношения взаимодействий первых и вторых ближайших соседей;
4. Исследовать влияние внешнего магнитного поля на природу фазовых переходов, магнитные и термодинамические свойства модели Поттса с $q=4$ на гексагональной решетке с учетом конкурирующего обменного взаимодействия первых и вторых ближайших соседей;
5. Построить зависимости намагниченности от величины внешнего магнитного поля, определить типы магнитного упорядочения основного состояния в широком интервале значений магнитного поля.

Практическая ценность работы

Полученные в диссертации результаты исследования фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств фрустрированной модели Поттса привлекают внимание для дальнейших исследований в теории магнетизма, физики фазовых переходов и статистической теории конденсированного состояния, с целью применения в современных устройствах записи и хранения информации.

Разработанный комплекс программ для ЭВМ на основе репличного обменного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло дает возможность проводить высокоточные исследования фазовых переходов и термодинамических свойств в фрустрированных спиновых системах. И как следствие, позволяет прогнозировать поведение магнитных материалов, успешно описываемых решеточной

спиновой моделью. Разработанные алгоритмы являются неотъемлемым инструментом исследования таких систем. Результаты численного эксперимента, полученные в данной работе, используются для чтения спецкурсов: «Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло», «Компьютерное моделирование в физике», «Методы вычислительной физики в магнетизме», а часть программ для ЭВМ при выполнении лабораторных работ по указанным спецкурсам в Дагестанском государственном университете.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_C от величины взаимодействия вторых ближайших соседей J_2 двумерной ферромагнитной четырехвершинной модели Поттса на гексагональной решетке. Определение типа фазового перехода при различных соотношениях обменного взаимодействия первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей ($r=|J_2/J_1|$). Доказательство зависимости типа фазового перехода от соотношения обменного взаимодействия r . Доказательство существования фрустрированной точки в данной модели при $r = 0.5$.
2. Зависимость критической температуры от соотношения взаимодействий первых и вторых ближайших соседей r (фазовая диаграмма) двумерной антиферромагнитной четырехвершинной модели Поттса на гексагональной решетке. Определение типа фазового перехода при различных значениях r .
3. Фазовые переходы двумерной четырехвершинной модели Поттса на гексагональной решетке при соотношении величины обменного взаимодействия $r=1.0$ для различных значений внешнего магнитного поля h . Установлено, что в двумерной четырехвершинной ферромагнитной модели магнитное поле приводит к смене фазового перехода. Показано, что в двумерной антиферромагнитной модели Поттса магнитное поле приводит к фрустрациям.
4. Зависимость типа магнитного упорядочения основного состояния от величины внешнего магнитного поля h двумерной четырехвершинной модели Поттса на гексагональной решетке. Показана ступенчатая зависимость намагниченности от h . Установлено, что образование ступенек вызвано сменой типа магнитного упорядочения основного состояния.

Научная новизна работы

В рамках диссертационной работы были впервые проведены комплексные исследования фазовых переходов, термодинамических и магнитных свойств двумерной четырехвершинной модели Поттса с фрустрациями на основе единой методики.

Впервые определены закономерности влияния различных факторов (величина и тип обменного взаимодействия вторых ближайших соседей, внешнее магнитное поле и т.д.) на фазовые переходы, термодинамические и магнитные свойства данной модели.

Впервые построены фазовые диаграммы зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей для двумерной ферромагнитной и антиферромагнитной моделей Поттса с числом состояний спина $q=4$ на гексагональной решетке.

Впервые определены типы фазовых переходов для двумерной ферромагнитной и антиферромагнитной моделей Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке при различных значениях величины внешнего магнитного поля.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях и семинарах: Международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах» – (Махачкала, 2019, 2021 и 2023); XX Юбилейной Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС - 20) – (Екатеринбург, 2019 и 2021); Второй международной конференции «Физика конденсированных состояний», посвященной 90-летию со дня рождения академика Ю. А. Осипьяна – (Черноголовка, 2021 и 2023); XXIV Международной научной конференции «Новое в Магнетизме и Магнитных Материалах» – (Москва, 2021); XII Всероссийской конференции «ФЭ-2022» – (Махачкала, 2022); Материалы международной научно-практической онлайн-конференции «Междисциплинарные исследования науки, техники и образования (НТО-1)». – Грозный, 2023.

Достоверность результатов обеспечивается математической обоснованностью и использованием хорошо апробированных современных алгоритмов метода Монте-Карло, применением теоретической базы для объяснения полученных результатов, а также сравнением с имеющимися в литературе данными других авторов. Данные, приведенные в диссертации, проверены с помощью независимых алгоритмов: репличный обменный алгоритм и алгоритм Ванга-Ландау метода Монте-Карло. Полученные результаты в пределах погрешности согласуются между собой.

Личный вклад автора

В ходе выполнения научно-квалификационной работы автор принимала активное участие в формулировке целей и задач исследования, в разработке теоретической модели и выборе метода численного моделирования совместно с научным руководителем Муртазаевым А.К. Для исследования четырехвершинной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ с учетом конкурирующего обменного взаимодействия и внешнего магнитного поля совместно с Магомедовым М.А. разработала программы на основе алгоритма Ванга-Ландау и репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло. Обработка результатов численных экспериментов проведено лично автором диссертации. Обсуждение результатов и подготовка публикаций выполнено совместно с Рамазановым М.К. По всем этапам работ,

представленным в диссертации, вклад автора был определяющим или существенным в достаточной степени, чтобы выносить их на защиту.

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 24 научные работы, в том числе: 10 статей в журналах, индексируемых в наукометрических базах Web of Science и Scopus, 3 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ. Список основных публикаций приведен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации

Диссертационная работа состоит из введения, 4-х глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, а также списка использованной литературы. Работа изложена на 137 страницах; содержит 66 рисунков. Список литературы содержит 140 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы цели и задачи исследования, а также основные положения, выносимую на защиту.

В первой главе представлен аналитический обзор литературы по модели Поттса. Приведено описание планарной и стандартной моделей Поттса. Описаны особенности микроканонического гамильтониана исследуемой модели. Обсуждаются причины возникновения фрустрации и ее влияние на особенности формирования различных магнитных фаз.

Вторая глава посвящена методу исследования моделей магнитных систем: описывается метод Монте-Карло, его преимущества и особенности. Описаны стандартный алгоритм Метрополиса, репличный обменный алгоритм, алгоритм Ванга-Ландау. Рассмотрен способ вычисления погрешности измерений в методе Монте-Карло.

В третьей главе приведены результаты исследований фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств двумерной четырехвершинной ферромагнитной модели Поттса с учетом конкурирующего обменного взаимодействия вторых ближайших соседей, а также с учетом влияния внешнего магнитного поля. Приведены фазовые диаграммы, определены типы фазовых переходов при различных соотношениях обменных взаимодействий вторых и первых соседей, а также при различных значениях величины магнитного поля.

Ферромагнитная модель Поттса с конкурирующим обменным взаимодействием

Для исследования четырехвершинной модели Поттса на гексагональной решетке использовался алгоритм Ванга-Ландау метода Монте-Карло. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 12 \div 120$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки. Гамильтониан модели имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2}J_1 \sum_{i,j} \cos \theta_{i,j} - \frac{1}{2}J_2 \sum_{i,k} \cos \theta_{i,k}, \quad (1)$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$, $r = |J_2/J_1|$ – соотношение обменных взаимодействий. Соотношение обменных взаимодействий меняется в интервале $0.0 \leq r \leq 1.0$. Для расчета внутренней энергии U , свободной энергии F , энтропии S и теплоемкость C использовались следующие выражения:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle_T, \quad (2)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left(\sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (3)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \quad (4)$$

$$C(T) = \frac{\partial U(T)}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (5)$$

Схематическое описание двумерной модели Поттса на гексагональной решетке

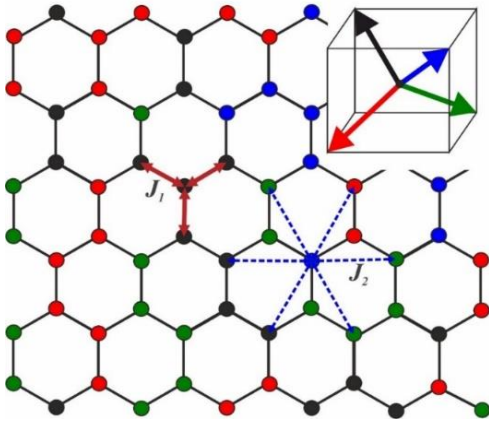


Рис.1. Модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке.

представлено на рисунке 1. Как видно на рисунке, у каждого спина есть три ближайших и шесть вторых ближайших соседа. Спины, обозначенные кружками одного и того же цвета, имеют одинаковое направление. На вставке к рисунку для каждого из четырех возможных направлений спина приведено соответствующее цветовое представление. Направления спинов задано таким образом, что выполняется равенство:

$$\begin{aligned} \cos \theta_{i,j} &= \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j \\ -1/3, & \text{если } S_i \neq S_j \end{cases} \rightarrow \\ \theta_{i,j} &= \begin{cases} 0, & \text{если } S_i = S_j \\ 109.47^\circ, & \text{если } S_i \neq S_j \end{cases} \end{aligned} \quad (6)$$

На рисунке 2 представлены магнитные структуры основного состояния для различных соотношений обменного взаимодействия r . Как видно из рисунка 2 (а), в диапазоне $0.0 \leq r < 0.25$ сохраняется ферромагнитный тип упорядочения. Однако с ростом величины конкурирующего обменного взаимодействия вторых антиферромагнитных соседей, наблюдается изменение типа магнитного упорядочения. Это продемонстрировано на рисунке 2(б) и (в). В интервале $0.5 < r \leq 1.0$ наблюдается димерное упорядочение (рис. 2 (б)). В интервале $0.25 \leq r \leq 0.5$ реализуются два типа упорядочения, которое можно назвать страйповым и гексагональным.

Температурные зависимости теплоемкости для разных значений r представлены на рис. 3. Как видно из рисунка в интервале величины обменного взаимодействия $0.0 \leq r \leq 0.2$ вблизи критической точки наблюдаются ярко выраженные максимумы. При увеличении значения r максимум теплоемкости уменьшается и смещается в сторону низких температур. Такое поведение теплоемкости, вероятно, объясняется уменьшением энергии основного состояния, которое приводит к уменьшению критической температуры.

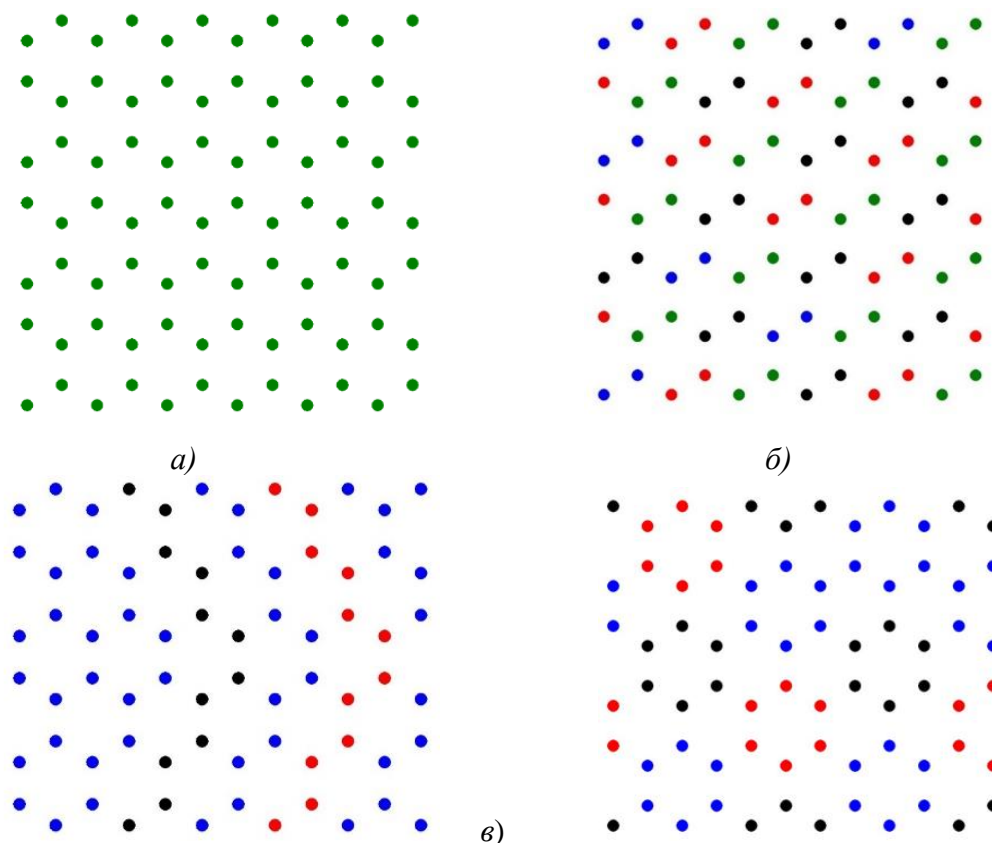


Рис.2. Магнитные структуры основного состояния:
 а) $0.0 \leq r < 0.25$; б) $0.5 < r \leq 1.0$; в) $0.25 \leq r \leq 0.5$.

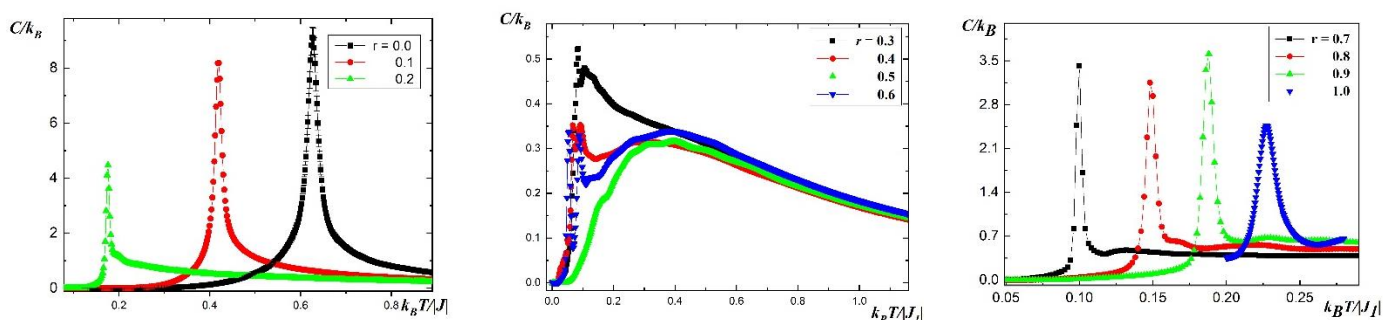


Рис. 3. Температурные зависимости теплоемкости C .

В интервале значений $0.7 \leq r \leq 1.0$. с ростом величины обменного взаимодействия, наоборот, максимум теплоемкости смещается в сторону высоких температур. В этом интервале, увеличение r приводит к росту энергии основного состояния, что приводит к увеличению критической температуры. Это связано с изменением магнитной структуры основного состояния в интервале значений $0.7 \leq r \leq 1.0$. Совсем иная

картина наблюдается в интервале $0.3 \leq r \leq 0.6$. При значениях $r=0.3, 0.4$ и 0.6 наблюдается расщепление теплоемкости на два максимума. Последнее вероятно вызвано реализацией двух типов упорядочения, гексагонального и страйпового. Однако при значении $r = 0.5$ наблюдается только один куполообразный максимум. Такое поведение теплоемкости позволяет предположить о том, что для значения $r = 0.5$ система становится фрустрированной.

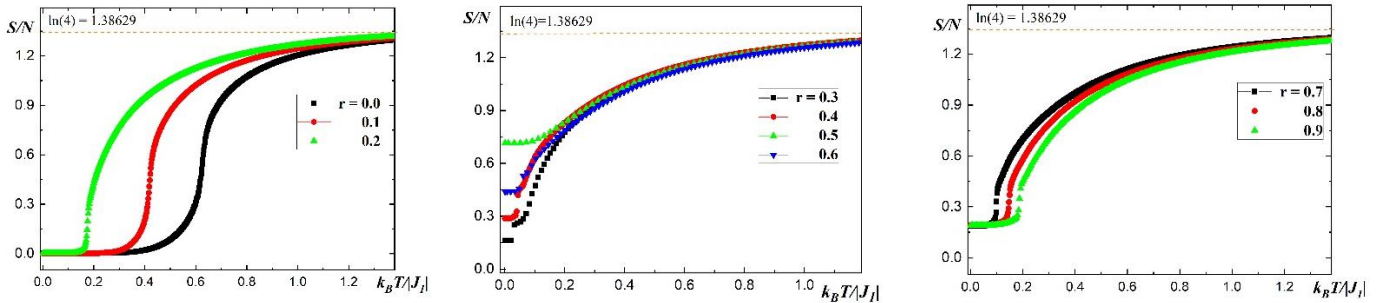


Рис.4. Температурная зависимость энтропии S/N .

На рисунке 4 мы представили температурные зависимости энтропии S для различных значений r . Как показано на этом рисунке в диапазоне $0.0 \leq r \leq 0.2$ в низкотемпературной области энтропия стремится к нулю, а в диапазоне $0.2 \leq r \leq 1.0$ значение энтропии принимает отличное от нуля значение в низкотемпературной области. При этом наибольшее значение энтропии приходится для значения $r=0.5$ ($S/N = 0.72$), т.е. в основном состоянии система является наиболее вырожденной. Известно, что ненулевое значение энтропии основного состояния могут свидетельствовать о наличии в системе фрустраций.

Для анализа характера фазовых переходов и определения критической температуры T_C был использован метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [16]:

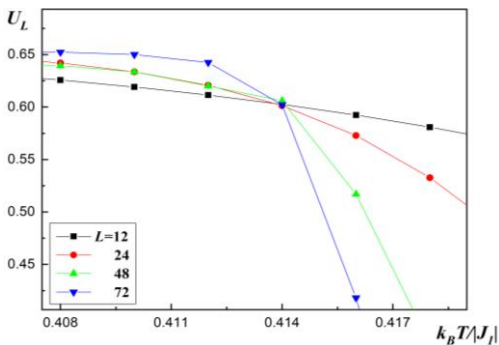


Рис.5. Температурные зависимости кумулянта Биндера U_L для $r = 0.2$.

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

где U_L – кумулянт по намагниченности. Выражение (7) позволяет определить критическую температуру T_C с большой точностью. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип фазового перехода в системе. В случае фазового перехода второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения, которая является критической точкой. Температурные зависимости кумулянта Биндера U_L представлены на рисунке 5. Графики построены для случая $r = 0.2$ для различных значений L . Как видно из рисунка температурные зависимости U_L для различных значений L в критической области пересекаются в одной точке. Такое поведение свидетельствует в пользу наличия фазового перехода второго рода. Аналогичное поведение U_L наблюдается в диапазоне $0.0 \leq r \leq 0.2$. Для диапазона $0.2 < r \leq 1.0$ установить род фазового перехода из данных, полученных на основе метода кумулянта Биндера

четвертого порядка, не удалось. Поэтому, для более подробного анализа рода фазового перехода использовался гистограммный анализ данных метода Монте-Карло. На рисунке 6 и 7 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L=96$. Графики построены при температурах близких к критической температуре. Из рисунка 6 видно, что в зависимости вероятности $P(E)$ от энергии E/N для значения $r = 0.1$ наблюдается один максимум. Такое поведение характерно для систем, в которых происходит фазовый переход второго рода. Для значения $r=1.0$ наблюдаются два ярко выраженных максимума, которые свидетельствует о фазовом переходе первого рода. Наличие двойного максимума на гистограммах распределения энергии является характерным признаком для фазового перехода первого рода. Аналогичная картина наблюдается в интервале $0.7 \leq r \leq 1.0$.

На рис. 8 представлена зависимость минимальной энергии E_{min} от величины r . На этом рисунке мы наблюдаем три разные области. В первой области, в интервале $0.0 \leq r < 0.25$, мы наблюдаем рост энергии при увеличении r . Эта область соответствует ферромагнитному типу упорядочения.

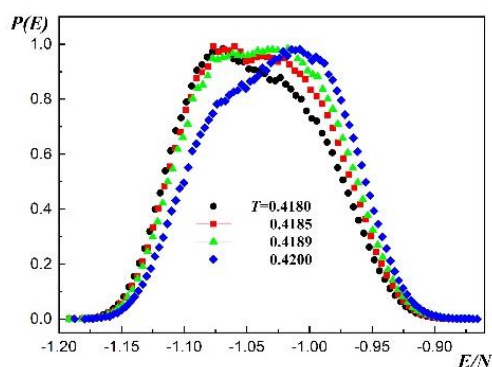


Рис. 6. Гистограммы распределения энергии для $L = 96$ и $r = 0.1$ при различных температурах.

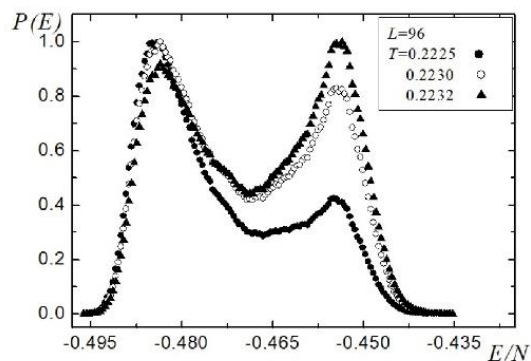


Рис.7. Гистограммы распределения энергии для $L = 96$ и $r = 1.0$ при различных температурах.

Во второй области, где соотношение r меняется в интервале $0.25 \leq r \leq 0.5$, энергия системы слабо зависит от величины r . Это вызвано скорее всего тем, что в данной области реализуется два типа упорядочения. В третьей области, в интервале $0.5 < r \leq 1.0$, наблюдается медленный спад энергии с ростом соотношения r . Данная область соответствует димерному типу упорядочения.

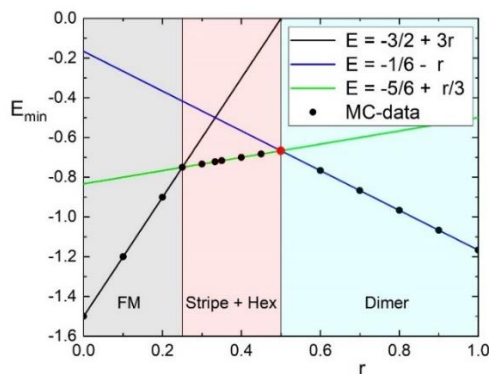


Рис.8. Зависимость минимальной энергии E_{min} от r .

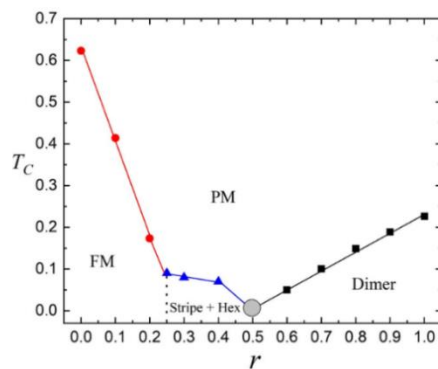


Рис.9. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от r .

Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от соотношения r приведена на рисунке 9. На диаграмме отмечены четыре различные фазы: ферромагнитная (FM), парамагнитная (PM), имерная (DIMER) и фаза Stripe+Hex, в которой одновременно реализуются страйповое и гексагональное упорядочение. Переход из ферромагнитной фазы в парамагнитную происходит в интервале $0.0 \leq r < 0.25$. В интервале $0.25 \leq r \leq 0.5$ конкуренция обменных взаимодействий первых и вторых соседей в данной модели приводит к появлению упорядочения типа Stripe+Hex. Интервал $0.5 < r \leq 1.0$ соответствует переходу из фазы с димерным типом упорядочения в парамагнитную фазу. Анализ полученных данных свидетельствует, что значение $r = 0.5$ в данной модели является точкой фрустрации.

Ферромагнитная модель Поттса в магнитном поле

Гамильтониан модели Поттса с учетом взаимодействия первых и вторых соседей, а также внешнего магнитного поля имеет следующий вид:

$$H = -\frac{1}{2}J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j} - \frac{1}{2}J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \cos \theta_{i,k} - h \sum_{\langle i \rangle} S_i, \quad (8)$$

Исследования проводились на основе репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло. Схематическое изображение данной модели Поттса представлено на рисунке 1. В данном исследовании магнитное поле направлено вдоль спина, обозначенного черным цветом. Намагниченность m , энтропию S и теплоемкость C можно вычислить, используя выражения:

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i, \quad (9)$$

$$C = (NK^2) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (10)$$

$$S = \int_0^T \frac{C}{T} dT, \quad (11)$$

На рисунке 10 представлены магнитные структуры основного состояния при разных значениях магнитного поля h для случая $r = 1.0$. Было показано, что при отсутствии внешнего магнитного поля ($h = 0.0$) в данной модели в основном состоянии реализуется димерная структура. В интервале поля $0.0 < h < 1.5$ димерное упорядочение нарушается и образуются полосовая структура.

В интервале поля $1.5 < h < 2.5$ наблюдается страйповый тип упорядочения. Дальнейший рост поля в интервале значений $2.5 < h < 4.0$ приводит к изменению типа страйпового упорядочения. Это связано с увеличением числа спинов ориентированных вдоль внешнего поля. Включение сильных полей ($h \geq 4.5$) приводит упорядочению всех спинов в системе вдоль внешнего магнитного поля.

На рисунке 11 представлены температурные зависимости теплоемкости C для различных значений магнитного поля при $L = 24$. На рисунке видно, что в интервале $0.0 \leq h \leq 3.5$ наблюдаются ярко выраженные максимумы теплоемкости, кроме значений поля $h = 1.5$ и 2.5 . Для значений поля $h = 1.5$ и 2.5 наблюдаются плавные максимумы. При включении магнитного поля ($h = 0.5$) максимум теплоемкости смещается в сторону высоких температур. Дальнейший рост поля приводит к сдвигу максимума теплоемкости в сторону низких температур. Такое поведение объясняется тем, что увеличение величины магнитного поля приводит упорядочению системы,

уменьшению флуктуаций и соответственно изменению температуры фазового перехода. Из рисунка 11, видно, что для полей $h \geq 4.0$ характерные максимумы теплоемкости приобретают пологий вид. Что свидетельствует о подавлении магнитным полем фазового перехода.

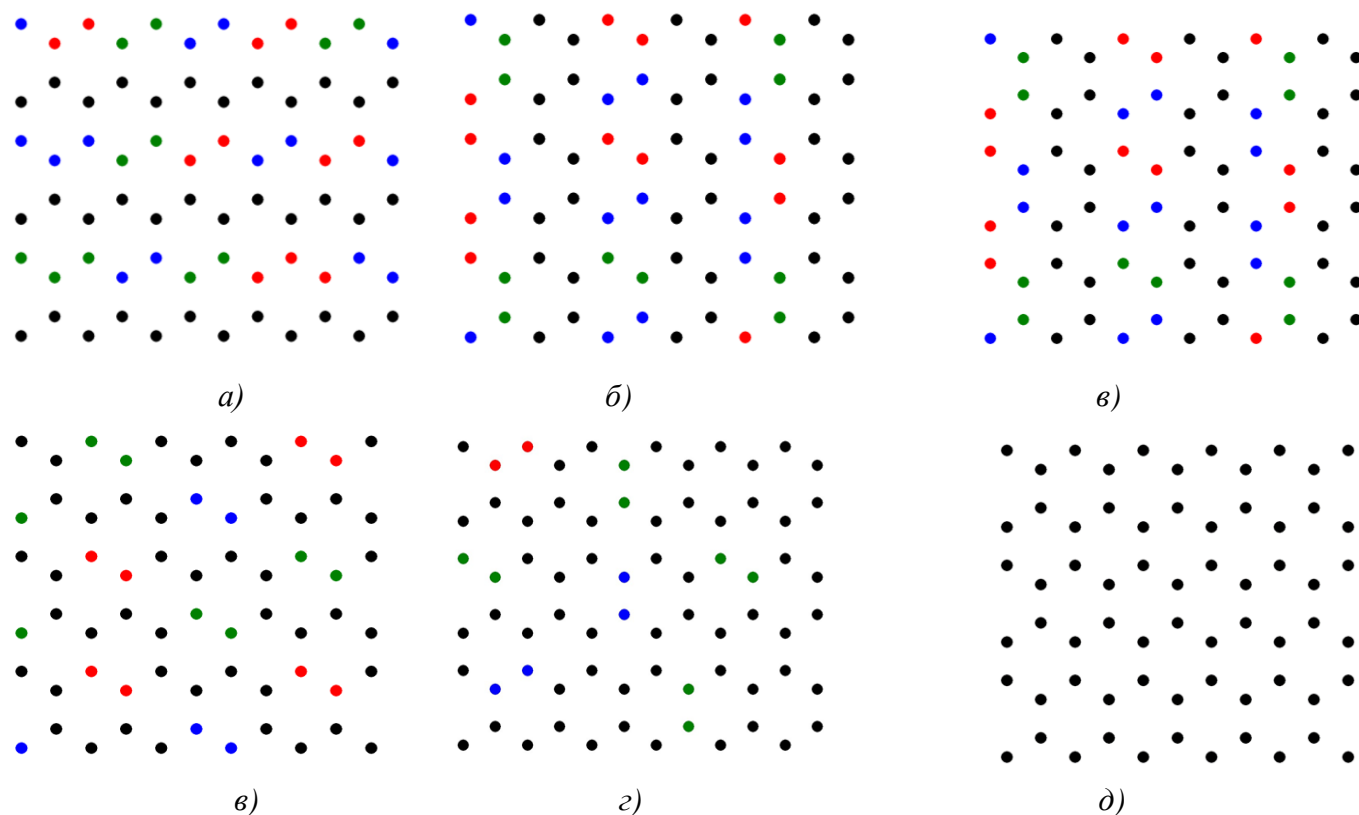


Рис.10. Магнитные структуры основного состояния для случая $r = 1.0$: а) $0.0 < h < 1.5$; б) $1.5 < h < 2.5$; в) $2.5 < h < 4.0$; г) $h = 4.0$ д) $h \geq 4.5$.

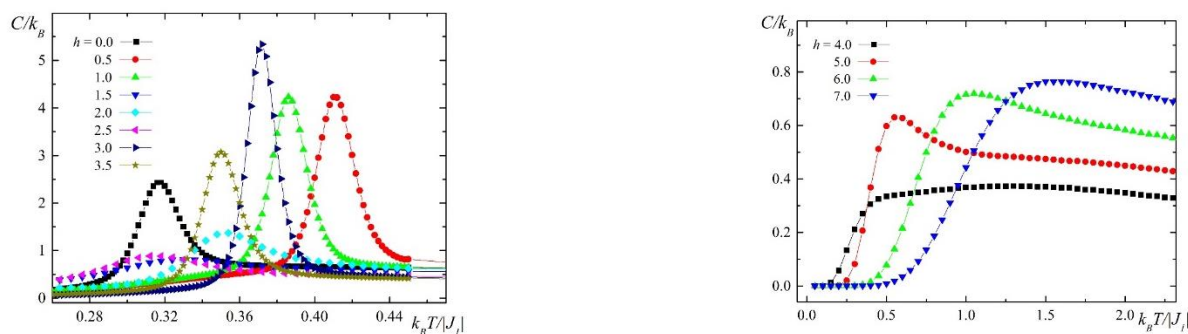


Рис.11. Температурные зависимости теплоемкости C/k_B в интервале $0.0 \leq h \leq 7.0$ для $r = 1.0$.

На рисунке 12 приведены зависимости намагниченности m от величины магнитного поля h для случая $r = 1.0$. На этом рисунке наблюдается четыре плато намагниченности. Плато I соответствует магнитному упорядочению, при котором только одно состояние спина совпадает с направлением внешнего поля. При увеличении внешнего магнитного поля еще одно состояние спина выстраивается вдоль внешнего поля. Это приводит к возникновению плато II на графике. При дальнейшем увеличении поля, вдоль внешнего поля выстраивается следующее состояние спина (третье). Этим обусловлено возникновение ступеньки III на графике.

При значении поля $h \geq 4.5$ все спины ориентируются вдоль внешнего поля. Намагниченность выходит на насыщение. Полученные данные хорошо коррелируют с данными графика зависимости минимальной энергии от величины магнитного поля. Это продемонстрировано на рисунке 13. На данном рисунке можно выделить четыре области, с различной линейной зависимостью энергии от величины поля. Эти области соответствуют каждому плато намагниченности.

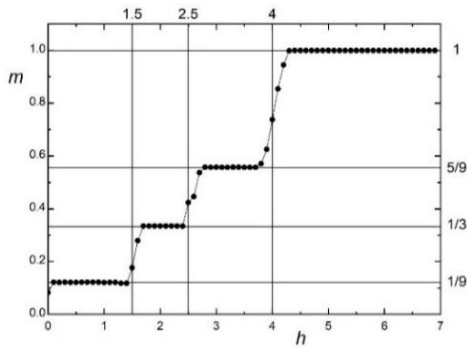


Рис.12. График зависимости параметра порядка m от магнитного поля для случая $r = 1.0$ при $T = 0.01$.

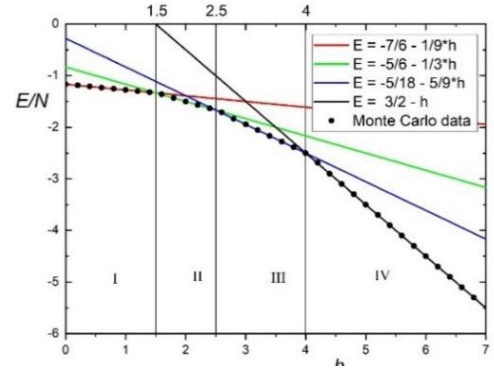


Рис.13. Зависимость минимальной энергии E_{min} от магнитного поля h при температуре $k_B T/|J_1|=0.01$ для случая $r = 1.0$.

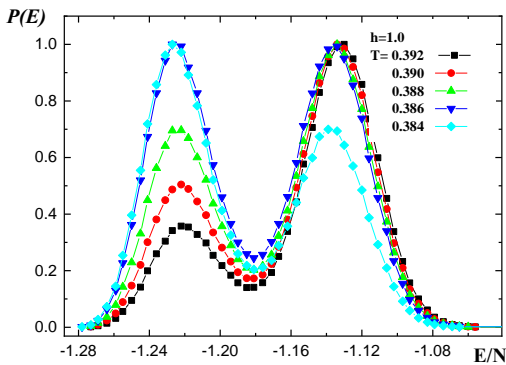


Рис.14. Гистограммы распределения энергии для случая $r = 1.0$ для поля $h=1.0$

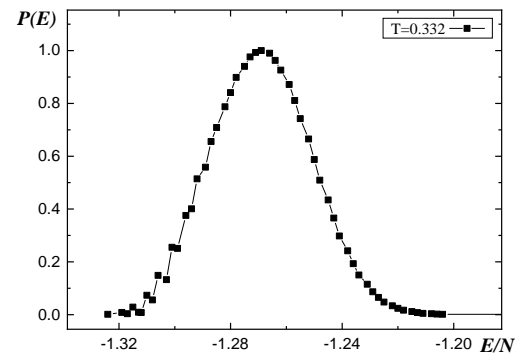


Рис.15. Гистограммы распределения энергии для случая $r = 1.0$ для поля $h=1.5$.

На рисунках 14 и 15 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 60$ для значений поля $h = 1.0$ и 1.5 . Графики построены при различных температурах близких критической температуре. На рисунках 14 видно, что в зависимости вероятности $P(E)$ от энергии E/N для значений поля $h = 1.0$ наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые свидетельствует о фазовом переходе первого рода. Аналогичная картина наблюдается при $h = 2.0$ и $h = 3.0$. Однако для значения поля $h = 1.5$ наблюдается один максимум. Наличие одного максимума на гистограмме распределения энергии свидетельствует в пользу фазового перехода второго рода. Следует отметить, аналогичная картина наблюдается и при $h = 2.5$. Можно предположить, что смена типа фазового перехода связана с изменением магнитной структуры основного состояния под влиянием внешнего магнитного поля.

Четвертая глава посвящена описанию результатов исследования фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств двумерной четырехвершинной

антиферромагнитной модели Поттса с учетом конкурирующего обменного взаимодействия вторых ближайших соседей, а также внешнего магнитного поля.

Антиферромагнитная модель Поттса с конкурирующим обменным взаимодействием

Гамильтониан модели Поттса приведен в выражении 1, где J_1 и J_2 – величины обменных антиферромагнитных ($J_1 < 0$ и $J_2 < 0$) взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Схематическое изображение модели представлено на рисунке 1. Исследования проводились в интервале соотношений обменного взаимодействия $0.0 \leq r \leq 1.0$ на основе алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло.

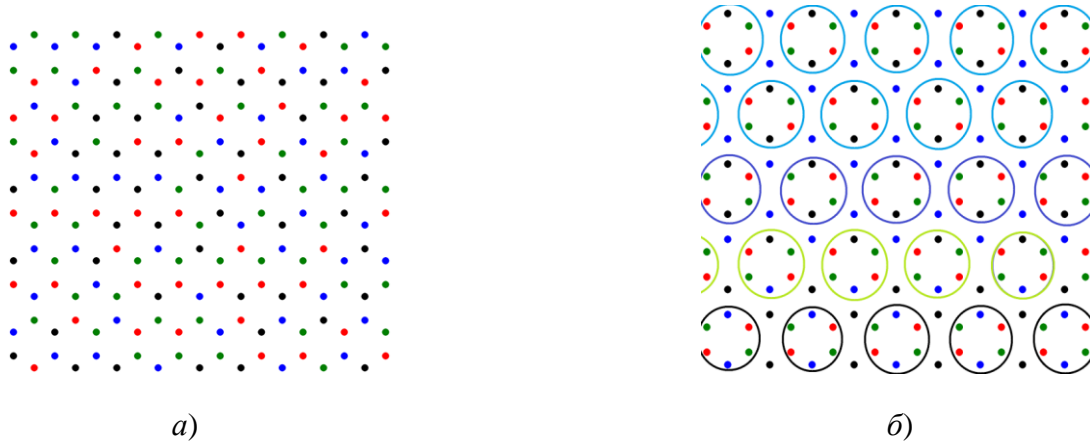


Рис.16. Магнитные структуры основного состояния для значения $r = 0.0$ (а), $r = 0.8$ (б).

На рисунке 16 представлены магнитные структуры основного состояния для значений $r = 0.0$ и 0.8 . Как видно на рисунке 16(а), при $r = 0.0$ в данной модели магнитное упорядочение отсутствует. Для значения $r = 0.8$ (рис. 16(б)) в системе наблюдается частичное упорядочение (страйповая структура по шести спином). Такая же картина наблюдается во всем диапазоне $0.1 \leq r \leq 1.0$.

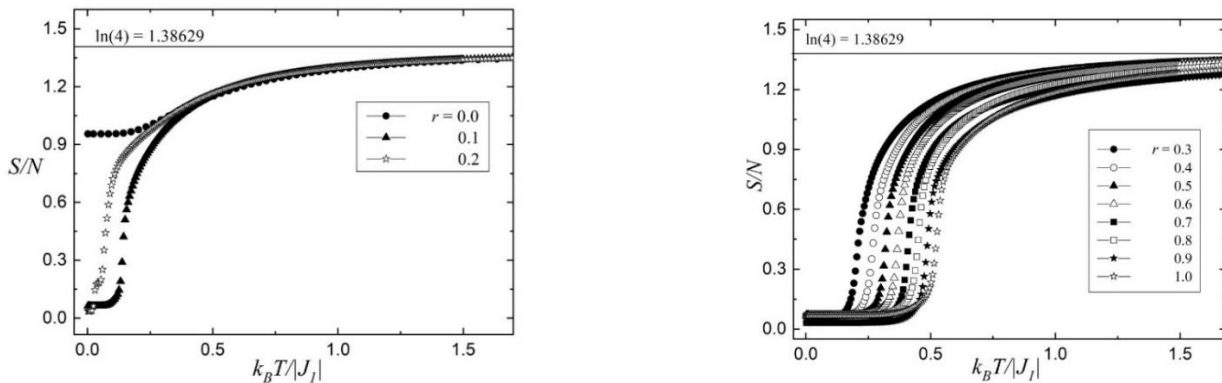


Рис.17. Температурные зависимости энтропии S/N .

Зависимости энтропии S от температуры приведены на рисунке 17. Как видно из рисунка, для всего рассмотренного диапазона значений r с увеличением температуры энтропия стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 4$. Для значения $r=0.0$ в низкотемпературной области энтропия стремится к отличному от нуля значению. Такое поведение энтропии свидетельствует о том, что при этом значении r основное состояние системы сильно вырождено. В диапазоне $0.1 \leq r \leq 1.0$ в низкотемпературной области энтропия стремится к близкому, но отличному от нуля значению. Таким образом, полученные результаты показывают, что учет антиферромагнитных

взаимодействий вторых соседей приводит к уменьшению вырождения основного состояния, даже при малых значениях r .

Полученные на основе гистограммного анализа данных результаты показывают, что в данной модели наблюдается фазовый переход первого рода. Это продемонстрировано на рисунке 18. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L=96$ для $r = 1.0$. Графики построены при различных температурах, близких критической температуре. Из рисунка видно, что в зависимости вероятности $P(E)$ от энергии E/N наблюдаются два максимума, которые свидетельствует о том, что в данной модели реализуется фазовый переход первого рода. Отметим, что два максимума на гистограммах распределения наблюдаются для всех значений r в интервале $0.1 \leq r \leq 1.0$. Таким образом, анализ полученных данных позволяет утверждать, что в рассматриваемой модели в интервале $0.1 \leq r \leq 1.0$ наблюдается фазовый переход первого рода, а для значения $r = 0.0$ в системе отсутствует порядок, наблюдается сильное вырождение основного состояния.

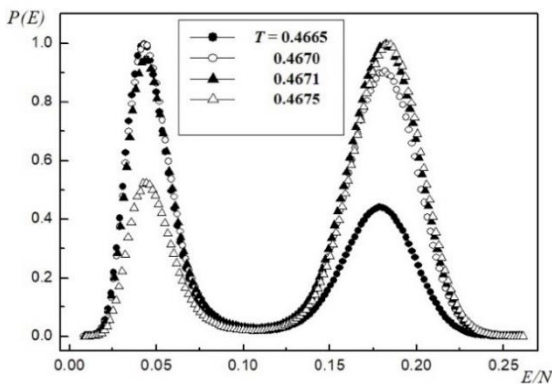


Рис.18. Гистограммы распределения энергии для $L=96$ при различных температурах.

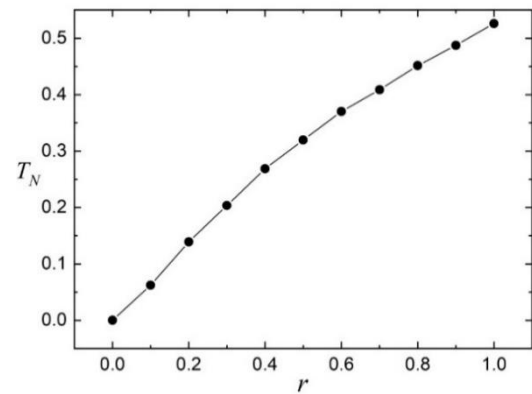


Рис.19. Фазовая диаграмма зависимости T_N от r .

Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей приведена на рисунке 19. На диаграмме наблюдаются две фазы: частично упорядоченная и парамагнитная. Для значения $r=0.0$ фазовый переход отсутствует. Это объясняется отсутствием магнитного упорядочения. Из рисунка видно, что увеличение значения r приводит к росту критической температуры.

Антиферромагнитная модель Поттса в магнитном поле

Гамильтониан модели Поттса с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, а также внешнего магнитного приведен в выражении 10, где J_1 и J_2 – величины обменных антиферромагнитных ($J_1 < 0$ и $J_2 < 0$) взаимодействий первых и вторых ближайших соседей, h - величина магнитного поля. В данном исследовании рассматривается случай, когда $|J_1|=|J_2|=1$. Величина внешнего магнитного поля менялась в интервале $0.0 \leq h \leq 10.0$. Исследования проводились на основе репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло.

Примеры магнитных структур основного состояния при разных значениях магнитного поля представлены на рисунке 20. Анализ магнитных структур основного

состояния показывает, что для определенного интервала величины магнитного поля наблюдаются однотипные магнитные структуры.

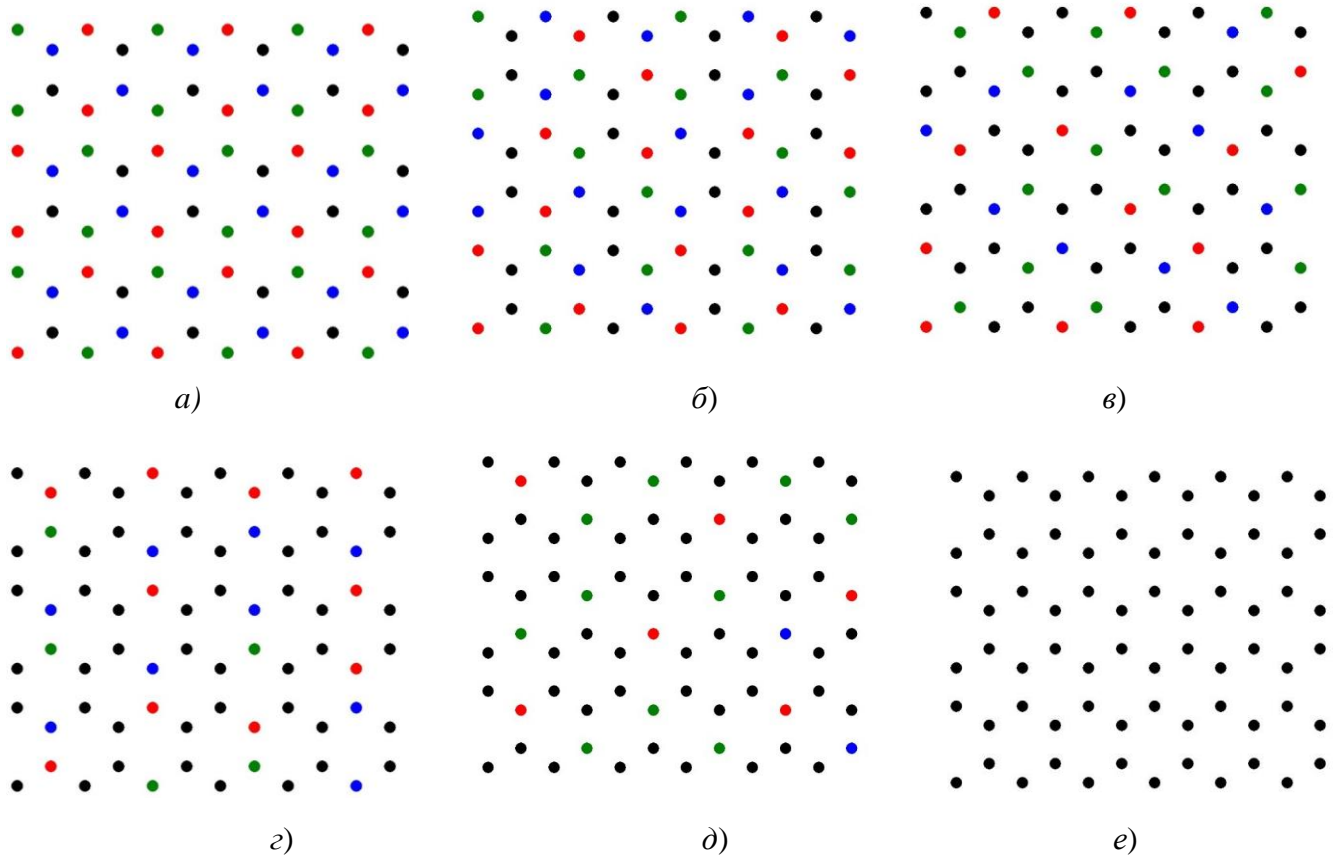


Рис.20. Примеры магнитных структур основного состояния для интервалов а) $0.0 \leq h < 2.5$; б) $2.5 \leq h < 3.0$; в) $3.5 \leq h < 6.0$; г) $6.0 \leq h < 7.0$; д) $7.0 \leq h < 9.0$; е) $h \geq 9.0$.

При отсутствии внешнего магнитного поля было обнаружено частичное упорядочение по шести спином. Следует отметить, что такой тип магнитного упорядочения сохраняется в интервале величины поля $0.0 \leq h < 2.5$ (рис. 20(a)). В интервале поля $2.5 \leq h < 3.5$ в системе наблюдается частичное упорядочение (спины черного цвета выстраиваются в полосы) (рис. 20(б)), а в интервале $3.5 \leq h < 6.0$ магнитное поле нарушает частичное упорядочение (рис. 20(в)). В интервале поля $6.0 \leq h < 7.0$ наблюдается картина, в которой спины выстраиваются в полосовую структуру (стриповое упорядочение) (рис. 20(г)). В интервале $7.0 \leq h < 9.0$ магнитное поле приводит к новому типу упорядочения (рис. 20(д)). Дальнейший рост поля ($h \geq 9.0$) приводит к упорядочению всех спинов в системе вдоль внешнего магнитного поля (рис. 23(е)). Анализ полученных магнитных структур показывает, что внешнее магнитное поле приводит к изменению типа магнитного упорядочения. В пределах интервала внешнего магнитного поля $0.0 \leq h \leq 9.0$ в данной модели наблюдается шесть различных типов магнитного упорядочения.

На рисунке 21 приведен график зависимости намагниченности m от магнитного поля h . На рисунке мы наблюдаем ступенчатую зависимость намагниченности. В зависимости от величины внешнего магнитного поля в данной модели наблюдаются шесть различных типов упорядочения. Этим объясняется образование шести плато намагниченности. Каждому плато соответствует определенный тип упорядочения (см.

рис.20). При значении поля $h \geq 9.0$ вдоль внешнего магнитного поля выстраиваются все спины, и система выходит на плато насыщения.

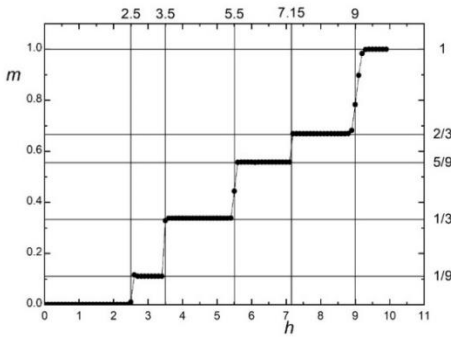


Рис. 21. Зависимость намагниченности m от магнитного поля h .

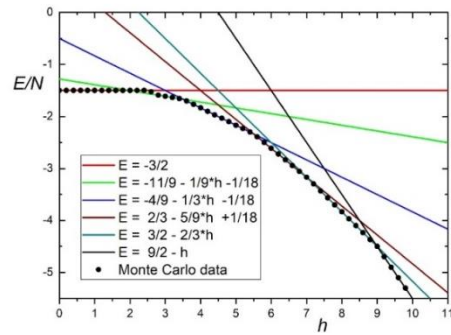


Рис. 22. Зависимость минимальной энергии E_{\min} от магнитного поля h .

График зависимости минимальной энергии системы от величины внешнего магнитного поля представлен на рисунке 22. На рисунке мы наблюдаем шесть различных областей зависимости минимальной энергии от величины магнитного поля. В первой области, где поле меняется в интервале $0.0 \leq h \leq 2.5$, энергия остается неизменной. Во всех остальных областях наблюдается спад энергии с ростом поля.

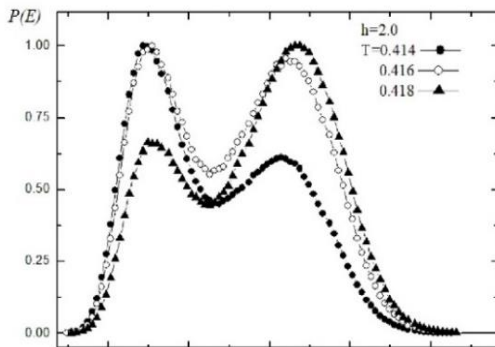


Рис. 23. Гистограммы распределения энергии.

Полученные на основе гистограммного метода анализа данных результаты показывают, что в интервалах поля $0.0 \leq h \leq 3.0$ и $6.0 \leq h \leq 6.5$ в данной модели наблюдается фазовый переход первого рода. Это продемонстрировано на рисунке 23. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 60$ для значения $h = 2.0$. Графики построены при различных температурах близких к критической температуре. На рисунках видно, что в зависимости вероятности $P(E)$ от энергии E/N наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые свидетельствуют в пользу фазового перехода первого рода. Аналогичное поведение наблюдается для всех значений поля в интервалах $0.0 \leq h \leq 3.0$ и $6.0 \leq h \leq 6.5$.

В заключении приведены основные выводы по результатам диссертационной работы.

Основные результаты работы:

- Показано, что в двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на гексагональной решетке реализуется фазовый переход второго рода;
- Обнаружено, что в ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на гексагональной решетке учет антиферромагнитных взаимодействий вторых соседей в интервале соотношения взаимодействия первых и вторых соседей $0.0 \leq r < 0.25$ наблюдается фазовый переход второго рода; в интервале $0.25 \leq r < 0.5$ фрустрации подавляют фазовые переходы, а при значении $r=0.5$ система становится фрустрированной; в интервале $0.5 < r \leq 1.0$ наблюдается фазовый переход первого рода;

- Показано, что в ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ с взаимодействиями вторых антиферромагнитных соседей ($r=1.0$) в интервале значений внешнего магнитного поля $0.0 \leq h \leq 3.5$, кроме значений $h = 1.5$ и 2.5 наблюдается фазовый переход первого рода. Для значений поля $h = 1.5$ и 2.5 наблюдается фазовый переход второго рода. В интервале $4.0 \leq h \leq 7.0$ магнитное поле снимает вырождение основного состояния и подавляет фазовый переход. Для $r = 0.5$ в этой модели при значении поля $h = 0.5$ наблюдается ФП первого рода;
- Обнаружено, что в двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на гексагональной решетке основное состояние сильно вырождено и в системе отсутствует фазовый переход. При учете антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в интервале $0.1 \leq r \leq 1.0$ в данной модели наблюдается фазовый переход первого рода;
- Показано, что в антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ с антиферромагнитными взаимодействиями вторых ближайших соседей ($r=1.0$) в интервалах значений внешнего магнитного поля $0.0 \leq h \leq 3.0$ и $6.0 \leq h \leq 6.5$ реализуется фазовый переход первого рода. Обнаружено, что в интервале $4.0 \leq h \leq 5.0$ система находится вблизи режима фрустрации, а при значениях внешнего поля $h = 3.5$ и 5.5 становится фрустрированной. Показано, что при сильных полях ($h > 7.0$) наблюдается подавление фазового перехода в системе.
- Разработан комплекс программ для ЭВМ, с помощью которого можно исследовать природу фазовых переходов, магнитные и термодинамические свойства фрустрированных спиновых моделей.

Список цитируемой литературы

1. Доценко, В.С. Критические явления в спиновых системах с беспорядком / В.С. Доценко. // УФН. – 1995. – Т.165. № 5. – С. 481-528.
2. Коршунов, С.Е. Фазовые переходы в двумерных системах с непрерывным вырождением / С.Е. Коршунов // УФН. – 2006. – Т. 176. – С. 233-274.
3. Малеев, С.В. Рассеяние поляризованных нейтронов в магнетиках / С.В Малеев // УФН. – 2002. – Т. 17, №6. – С. 617-646.
4. Сосин, С.С. Новые магнитные состояния в кристаллах / С.С. Сосин, Л.А. Прозорова, А.И. Смирнов // УФН. – 2005. – Т. 175. №1. – С. 92-99.
5. Calabrese, P. Critical behavior of $O(2) \times O(N)$ symmetric models / P. Calabrese, P. Parruccini, A. Pelissetto, E. Vicari // Physical Review B. – 2004. – V. 70. – P. 174439.
6. Zumbach, G. Phase transitions with $O(n)$ symmetry broken down to $O(n - p)$ / G. Zumbach // Nuclear Physics B. – 1994. – V. 413. – P. 771-791.
7. Pelissetto, A. Critical behavior of frustrated spin models with noncollinear order / A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari // Physical Review B. – 2001. – Vol. 63, - P. 140414(R).
8. Bhattacharya, T. Critical behavior of the antiferromagnetic Heisenberg model on a stacked triangular lattice / T. Bhattacharya, A. Billoire, F. Delduc, Th. Jolicoeur // J. Physique 4. – 1994. – V. 181.

9. Binder, K. Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models / K. Binder, E. Luijten // *Phys. Reports.* – 2001. – V. 344. – P. 179-253.
10. Landau, D.P. Computer simulation studies of critical phenomena / D.P. Landau // *Physica A.* – 1994. – V. 205. – P. 41- 64.
11. Крокстон, К. Физика жидкого состояния / К. Крокстон / Пер. с англ. А.Г. Башкирова, И.В. Вдовиченко; Под ред. А.И. Осипова // М.: Мир. –1978. –400 с.
12. Ермаков, С.М. Статистическое моделирование / С. М. Ермаков, Г.А. Михайлов // М.: Мир. – 1982. – 292 с.
13. Wu, F.Y. The Potts Model / F.Y. Wu // *Rev. Mod. Phys.* – 1982. –V.54. – P. 235
14. Binder, K. In Phase Transitions and Critical Phenomena / К. Binder E.C. Domb, M.S Green // New York: Academic Press. – 1976. – V. 5B
15. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы и термодинамические свойства модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на гексагональной решетке / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов // *ЖЭТФ.* – 2019. –Т.156. – С.502-506.
16. Биндер, К. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике / К. Биндер, Д.В. Хеерман // М.: Мир. – 1995.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ И РАБОТ АВТОРА

Статьи, индексируемые в Web of Science и Scopus:

1. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы и термодинамические свойства модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на гексагональной решетке / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов // *ЖЭТФ.* – 2019. –Т.156. – С.502-506.
2. Рамазанов, М.К. Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств модели Поттса с $q = 4$ на гексагональной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева // *Физика твердого тела.* – 2020. – Т.62. – Вып.3. – С.442-446.
3. Муртазаев А.К. Фазовая диаграмма модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке / А.К. Муртазаев, М.К. Мазагаева, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, А.А. Муртазаева // *Физика твердого тела.* – 2021. – Т.63. – Вып.5. – С.622-627.
4. Муртазаев, А.К. Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке / А.К. Муртазаев, М.К. Мазагаева, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов // *Физика металлов и металловедение.* – 2021. – Т.122. – Вып.5. – С.460-465.
K.Sh. Khizriev, A.K. Murtazaev // *Thin Solid Films.* – 2022. – V. 741. – P. 139040.
5. Рамазанов, М.К. Фазовые переходы и магнитные свойства модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на гексагональной решетке в слабых магнитных

полях / М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева // Письма в ЖЭТФ. – 2021. – Т.114. – Вып. 11. – С.762-767.

6. Рамазанов, М.К. Исследование влияния слабых магнитных полей на термодинамические свойства модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке / М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева, М.Р. Джамалудинов // Физика твердого тела. - 2022. - Т.64. – Вып.2. – С.237-240.
7. Рамазанов, М.К. Исследование влияния сильных магнитных полей на фазовые переходы фрустрированной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ / М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева, А.А. Муртазаева // Физика металлов и металловедение. - 2022. - Т.123. вып.3. - С.313-319.
8. Рамазанов М.К. Фазовые переходы фрустрированной четырехвершинной модели Поттса на гексагональной решетке в магнитном поле / М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева // Физика металлов и металловедение. – 2023. – Т.124. вып.5. – С.1-8.
9. Рамазанов, М.К. Исследование влияния слабых магнитных полей на фазовые переходы четырехкомпонентной антиферромагнитной модели Поттса/ М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев // Физика твердого тела. - 2023. - Т.65. – Вып.12. – С.2281-2285.
10. Ramazanov, M.K. Influence of Magnetic Field on Phase Transitions in the Antiferromagnetic Potts Model/ М.К. Ramazanov, А.К. Murtazaev, М.А. Magomedov, М.К. Mazagaeva // Physics of Metals and Metallography. – 2024. – V. 125. N. 6. – P. 563-470.

Свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ:

11. Рамазанов М.К., Мазагаева М.К. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019664586 «Программа для исследования термодинамических свойств модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на гексагональной решетке». Опубликовано: 8.11.2019. Бюл. №11.
12. Магомедов М.А., Рамазанов М.К., Мазагаева М.К. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022682017 «Программа для исследования влияния сильных магнитных полей на фазовые переходы модели Поттса на гексагональной решетке» Опубликовано:17.11.2022. Бюл. №11
13. Магомедов М.А., Мазагаева М.К., Рамазанов М.К. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023681160 «Программа для расчета магнитных характеристик модели Поттса на гексагональной решетке». Опубликовано:11.10.2023. Бюл. №10.