

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ДВУМЕРНОЙ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ С УЧЕТОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ВТОРЫХ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

А. Б. Бабаев ^{a,b*}, М. А. Магомедов ^{a,c}, А. К. Муртазаев ^{a,c},
Ф. А. Кассан-Оглы ^d, А. И. Прошкин ^d

^a ФГБУН Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Россия

^b Дагестанский государственный педагогический университет
367003, Махачкала, Россия

^c Дагестанский государственный университет
367025, Махачкала, Россия

^d Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 15 мая 2015 г.

Методом Монте-Карло исследованы фазовые переходы и фрустрации в двумерных структурах, описываемых трехвершинной антиферромагнитной моделью Поттса на треугольной решетке с учетом первых и вторых ближайших соседей с величинами взаимодействия соответственно J_1 и J_2 . Изучены фазовые переходы в этих моделях для отношений обменных взаимодействий вторых и ближайших соседей в диапазоне значений $|r| = 0 - 1.0$, $r = J_2/J_1$. На основе анализа низкотемпературных значений энтропии, функции плотности состояния системы и кумулянтов Биндера четвертого порядка показано, что в модели Поттса с величинами взаимодействия $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ в интервале изменений величины $0 \leq r < 0.2$ наблюдается фазовый переход первого рода, в то время как для случая $0.2 \leq r \leq 1.0$ в системе возникают фрустрации. В то же время для случая $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ фрустрации возникают в интервале изменений величины $0.5 < |r| < 1.0$ и в диапазоне значений $0 \leq |r| \leq 1/3$ в этой модели наблюдается фазовый переход второго рода.

DOI: 10.7868/S0044451016020127

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия интенсивно обсуждаются фазовые переходы (ФП) и критические явления (КЯ) в магнетиках, описываемых двумерными (2D) решеточными моделями Изинга и Поттса [1]. Это обусловлено тем, что низкоразмерные решеточные модели на треугольной решетке описывают большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [2, 3]. Антиферромагнетик на треугольной ре-

шетке является примером фрустрированной спиновой системы. Эффекты фрустраций играют важную роль в различных магнитных системах. Экспериментальные [4] и теоретические исследования [5] позволили установить, что фрустрированные системы проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. Однако необходимо отметить, что в случае трехвершинной антиферромагнитной (АФ) модели Поттса на треугольной решетке в основном состоянии фрустрация, обусловленная геометрией решетки, отсутствует и магнитная система упорядочена при конечной температуре. При учете вторых ближайших соседей конкуренция обменных взаимодействий может привести к фрустрациям, т. е. к такому пространственному рас-

* E-mail: b_albert78@mail.ru

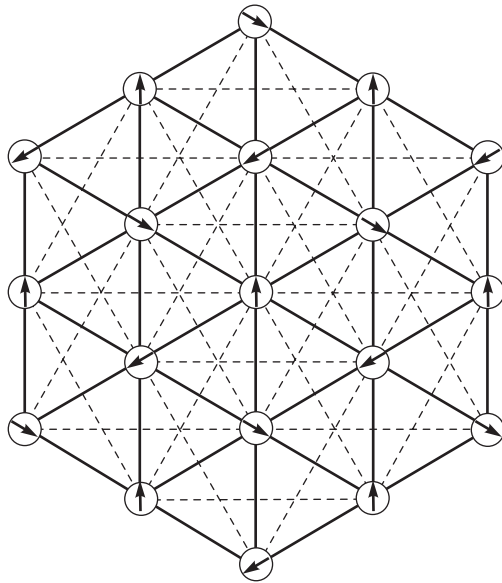


Рис. 1. Двумерная трехвершинная антиферромагнитная модель Поттса с учетом вторых ближайших соседей (при $r < 0.2$) на треугольной решетке

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

На основе точных решений для двумерной модели Изинга на квадратной решетке [6], на треугольной и гексагональной решетке [7], и на решетке кагоме [8] исследованы явления возникновения и исчезновения фрустраций в зависимости от знаков и величины отношения взаимодействий J_2/J_1 . Для трехвершинной 2D-модели Поттса не получено ни одного точного решения, вследствие чего для исследования термодинамических и магнитных свойств, а также фазовых переходов в этой модели используются самые разнообразные приближенные и численные методы: кластерный метод [9], низкотемпературные разложения [10], исследование нулей статистической суммы [11], разные ренормгрупповые подходы [12], многочисленные варианты моделирования методом Монте-Карло [13, 14], в которых определяются класс универсальности, род перехода, расчет критических индексов, определение фазовых диаграмм, нахождение мультикритических точек и даже уточнение точек фазовых переходов до шестого знака [15].

За последние двадцать лет исследованию спиновых систем, описываемых ферромагнитными и антиферромагнитными моделями Поттса на треугольной решетке с взаимодействием между ближайши-

ми соседями, было посвящено значительное число работ [13, 16–20], в которых были получены ответы на многие вопросы. Учет взаимодействия вторых ближайших соседей может привести к возникновению фрустраций, что существенно усложняет решение этой модели. Для спиновых систем, в которых могут возникать фрустрации, основными являются следующие вопросы: какие условия необходимы для существования фрустраций и в каких решетках они могут существовать? Каковы самые общие качественные и количественные критерии? Кроме того, следует иметь в виду, что при исследовании спиновых систем, в которых возможны фрустрации, очень важно, что в системе может существовать огромное количество состояний с низкой энергией, близкой к энергии основного состояния. Эти состояния благодаря своей большой энтропии S могут вносить конечный вклад в термодинамику даже в пределе низких температур [21]. Следует отметить, что в результате многочисленных исследований антиферромагнитных моделей Поттса на разнообразных решетках обнаружилась замечательная особенность. Треугольная решетка оказалась единственной, в которой наблюдается фазовый переход при антиферромагнитном взаимодействии между ближайшими соседями.

В работе [22] мы на основе метода Монте-Карло исследовали трехвершинную антиферромагнитную модель Поттса на треугольной решетке с учетом первых и вторых ближайших соседей с величинами взаимодействия $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$. Было обнаружено, что в этой модели возможны фрустрации. В этой работе анализ различных термодинамических характеристик в широком интервале изменения температур в зависимости от величины и знака вторых ближайших соседей не проводился. Исследование термодинамических параметров в зависимости от величины и знака первых и вторых ближайших соседей и определение значений отношения вторых ближайших соседей к первым $r = |J_2/J_1|$, при которых в магнитной структуре, описываемой трехвершинной 2D-моделью Поттса на треугольной решетке, возникают фрустрации, расчет энтропии, а также температуры фазового перехода в зависимости от этого отношения являются главными задачами этой работы.

2. МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Ферро- и антиферромагнитная трехвершинная ($q = 3$) модель Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей

(см. рис. 1) описывается следующим микроскопическим гамильтонианом [2]:

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

где J_1 и J_2 — параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$, $J_2 > 0$) или антиферромагнитного ($J_1 < 0$, $J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для ближайших и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ — углы между взаимодействующими спинами соответственно $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$.

Численные расчеты, проведенные в работах [18–22], показали, что при учете только первых ближайших соседей с величиной $J_1 < 0$ эта модель демонстрирует поведение, характерное для фазового перехода первого рода, в соответствии с предсказаниями теоретических работ [2]. При учете первых и вторых ближайших соседей с величинами соответственно $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ в рассматриваемой модели возможны фрустрации. Фрустрации также возможны, если взять обменное взаимодействие для ближайших соседей с величиной $J_1 > 0$, а для вторых соседей — с величиной $J_2 < 0$.

Для выяснения наличия фрустраций в трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке исследования проводились на основе алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло (МК) [23]. Данный алгоритм является реализацией метода энтропического моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы.

Приведем здесь алгоритм Ванга–Ландау метода МК в той форме, в которой мы его реализовали.

1. Задается произвольная начальная конфигурация спинов. Стартовые значения плотности состояний нами задавались равными $g(E) = 1$. Поскольку значения $g(E)$ достигают огромных значений, на практике для хранения в памяти ЭВМ используются значения $\ln(g(E))$. Гистограммы распределений по энергиям $H(E) = 0$. Стартовый модификационный фактор $f = f_0 = e^1 \approx 2.71828$.

2. Случайно выбираем один из узлов решетки и пытаемся повернуть спин, занимающий этот узел. Вероятность перехода из состояния с энергией E_1 (старое состояние) в состояние с энергией E_2 (новое состояние) определяется по формуле $p = g(E_1)/g(E_2)$. Если переход в состояние с энергией E_2 состоялся, то $g(E_2) \rightarrow fg(E_2)$, $H(E_2) \rightarrow H(E_2) + 1$, иначе $g(E_1) \rightarrow fg(E_1)$, $H(E_1) \rightarrow H(E_1) + 1$.

3. Многократно повторяем п. 2 (например, $n_{MC} = n \cdot 10^5$ раз), после чего проверяем, не стала

ли гистограмма «плоской». Плоской гистограмма считается в случае, если ее значения для всех возможных значений энергии не отличаются от среднего значения более чем, к примеру, на 10%. В случае, если гистограмма не удовлетворяет условию «плоскости», п. 2 повторяется снова.

4. После того как гистограмма стала плоской, меняем модификационный фактор по формуле $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ и приравниваем нулю гистограмму $H(E) = 0$. Процедура продолжается до тех пор, пока модификационный фактор не станет меньше заранее заданной величины, в нашем случае $f_{min} \approx 1.000000000582$. Модификационный фактор выступает как параметр точности рассчитанной плотности состояний $g(E)$, а также от его величины зависит, как много шагов Монте-Карло придется совершить для получения ровной гистограммы.

В результате выполнения пп. 1–4 мы должны получить плотность состояний, близкую к истинной $g(E)$. Точность расчета пропорциональна $\ln(f)$ на каждом шаге итерации. Таким образом, чем меньшее значение мы примем в качестве f_{min} , тем точнее будет конечный результат. Однако слишком малое значение приведет к бесконечным расчетам. Хотя общее количество состояний растет экспоненциально с ростом линейных размеров системы, число возможных энергетических уровней растет линейно, вследствие чего достаточно легко провести расчет плотности состояний для достаточно больших систем. Зная плотность состояний, мы не только можем рассчитать значения различных термодинамических параметров для любой температуры, но также получаем возможность для расчета энтропии и свободной энергии, практически недоступной для обычного метода Монте-Карло. Более подробно алгоритм Ванга–Ландау изложен в работе [23].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости использовались флуктуационные соотношения [24]

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

$$\chi(NK) (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (3)$$

где $K = |J|/k_B T$, $N = L^2$ — число магнитных узлов, U — внутренняя энергия, m — параметр порядка системы, угловые скобки означают термодинамическое усреднение.

В качестве параметра порядка для ферромагнитной (m_F) и антиферромагнитной (m_{AF}) трехвер-

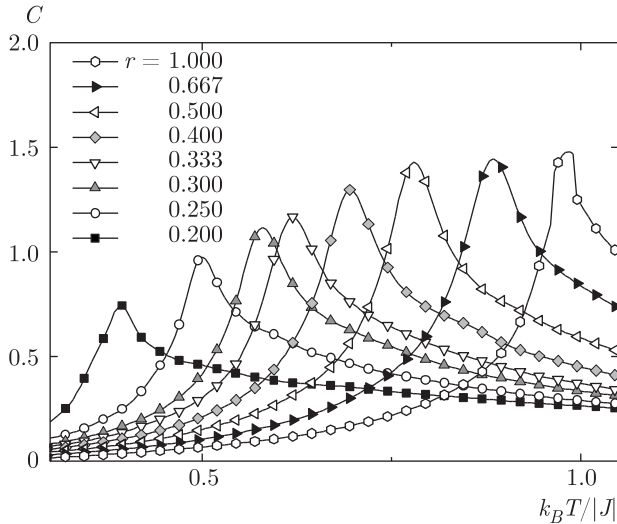


Рис. 2. Температурная зависимость теплоемкости C/k_B для двумерной трехвершинной модели Поттса в диапазоне значений $0.2 \leq r \leq 1.0$

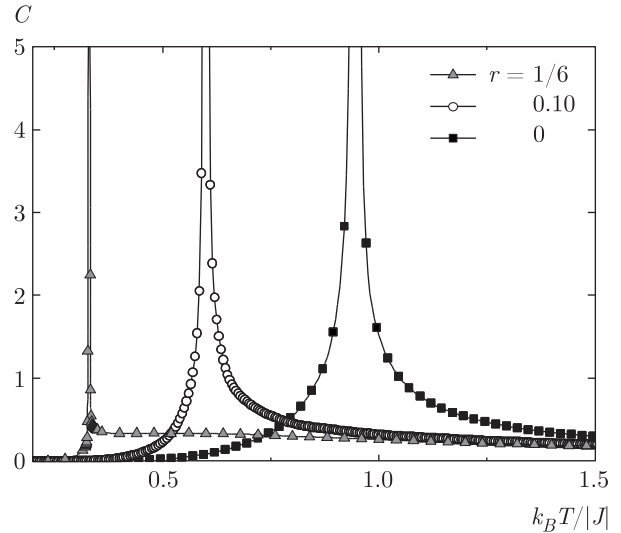


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости C/k_B для двумерной трехвершинной модели Поттса в диапазоне значений $0 \leq r \leq 1/6$

шинной модели Поттса использовались следующие выражения [13]:

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

$$m_{AF} = \left\langle \frac{3}{2} \sum_{\alpha \neq \beta \neq \gamma} \left(\frac{N_\alpha + N_\beta + N_\gamma}{N} - \frac{1}{3} \right) \right\rangle^{1/2}, \quad (5)$$

где $N_{\alpha,\beta,\gamma} = \{N_1, N_2, N_3\}$, 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 $q = 3$, $N_\alpha, N_\beta, N_\gamma$ — число спинов соответственно в подрешетке A, B и C, $N = L^2$.

На рис. 2 и 3 представлены характерные зависимости теплоемкости C от температуры T для случая $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ при различных значениях r , полученные для систем с линейными размерами $L = 60$. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков. Как видно на рис. 2, для всех рассмотренных систем зависимость теплоемкости имеет вид плавного максимума. Кроме того, уменьшение значения r в интервале $0.2 \leq r \leq 1.0$ приводит к сдвигу максимумов в сторону более низких температур. При этом наблюдается и уменьшение абсолютных значений максимумов теплоемкости. Такое поведение температурных зависимостей теплоемкости в зависимости от r обусловлено тем, что с уменьшением взаимодействия вторых соседей

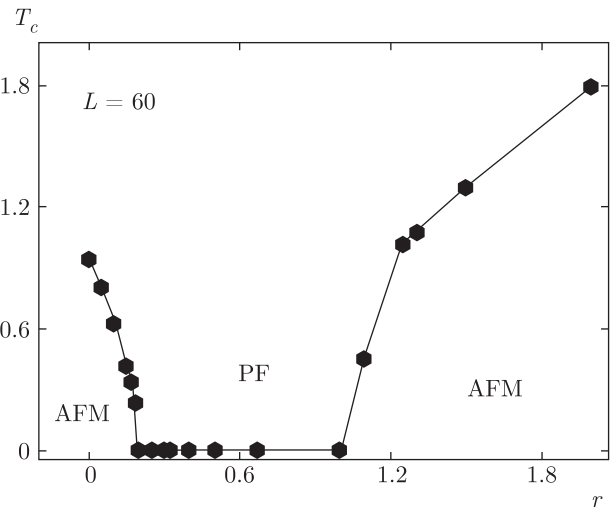


Рис. 4. Фазовая диаграмма для двумерной трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействия $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$

уменьшается вклад энергии взаимодействия по модулю, что уменьшает жесткость системы и, соответственно, понижает температуру фазового перехода. Уменьшение абсолютных значений максимумов теплоемкости происходит за счет конкуренции первых и вторых ближайших соседей.

Кроме того, на рис. 3 в интервале изменения $0 \leq r \leq 1/6$ для всех температурных зависимостей теплоемкости C в рассмотренном интервале r наблюдается противоположная картина. Уменьше-

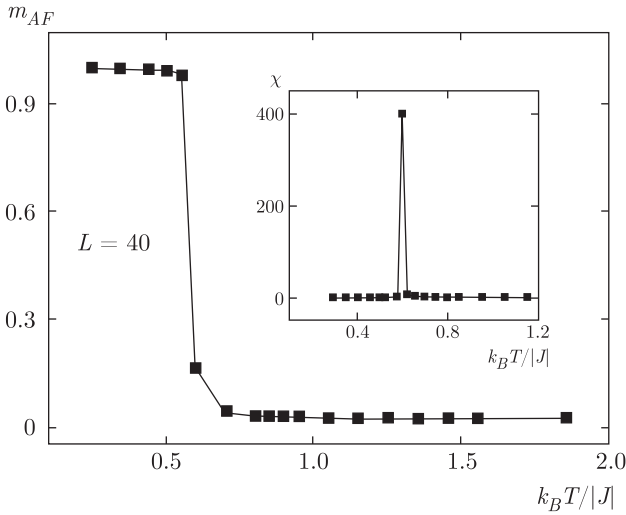


Рис. 5. Температурная зависимость параметра порядка m_{AF} и восприимчивости χ для двумерной трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействия $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ при $r = 0.1$

ние r в рассматриваемом интервале приводит к смещению температуры фазового перехода в сторону высоких температур. Вблизи критической температуры для всех рассмотренных систем наблюдаются острые пики. Кроме того, на рис. 3 видно, что при $r = 1/6$ наблюдается явление расщепления теплоемкости, которое обычно проявляется вблизи точек фрустрации. Для значений $r < 1/6$ расщепление теплоемкости не наблюдалось. Фазовая диаграмма для случая $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ представлена на рис. 4. Точки на этой диаграмме соответствуют критическим температурам из соответствующих зависимостей теплоемкости.

На рис. 5 представлены температурные зависимости параметра порядка m_{AF} и восприимчивости χ для двумерной антиферромагнитной модели Поттса с $q = 3$ при $r = 0.1$. Как видно на рис. 5, температурные зависимости параметра порядка и восприимчивости демонстрируют поведение, характерное для фазового перехода первого рода (в критической области проявляется скачок). Такая же картина наблюдалась и для других значений из интервала $0 \leq r \leq 1/6$.

Для анализа характера фазового перехода и особенностей поведения термодинамических параметров вблизи критической точки в сложных спиновых системах наиболее эффективным оказался алгоритм Ванга – Ландау метода МК [23]. Этот метод позволяет достаточно легко получить функцию распределения плотности состояния системы:

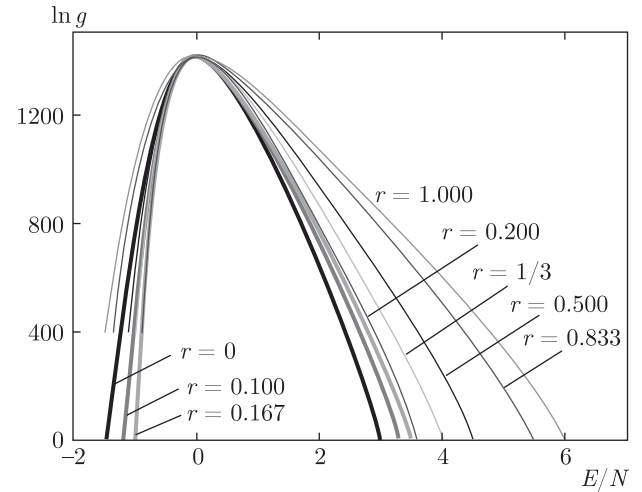


Рис. 6. Плотность состояний $g(E)$ двумерной трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке в диапазоне значений $0 \leq r \leq 1$

$$P(E, T) = g(E) \exp[-E/k_B T], \quad (6)$$

где $g(E)$ — плотность состояний системы, E — энергия системы, k_B — постоянная Больцмана. Преимущество метода Ванга – Ландау заключается в том, что плотность состояний системы $g(E)$ не зависит от температуры. Таким образом, определив плотность состояний системы, мы можем рассчитать значения термодинамических параметров при любой температуре. Внутреннюю энергию всей системы можно определить в соответствии с выражением

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle_T. \quad (7)$$

Плотности состояний системы $g(E)$ для трехвершинной антиферромагнитной 2D-модели Поттса в диапазоне значений $0 \leq r \leq 1$ представлены на рис. 6. На рис. 6 видно, что при значениях $r = 0, 0.1, 1/6$ плотность состояний $g(E)$ для основного состояния (состояния с минимумом энергии) стремится к небольшим значениям, что свидетельствует об отсутствии сильного вырождения основного состояния, приводящего к фрустрации [21]. Для значений $r \geq 0.2$ наблюдаем противоположную картину. В этом случае $g(E)$ стремится к большим значениям, что говорит о сильном вырождении основного состояния. Для проверки существования фрустрации в зависимости от величины r мы анализировали и температурные зависимости энтропии системы.

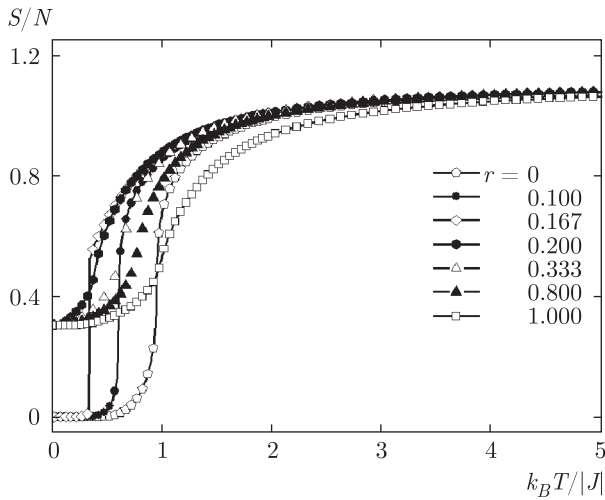


Рис. 7. Температурная зависимость энтропии S для двумерной трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса в интервале изменений величины $0 \leq r \leq 1$

Энтропия S , приходящаяся на один узел решетки, рассчитывалась в соответствии с определением [25]

$$S = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial T} (k_B T \ln Z), \quad (8)$$

где N — число частиц в системе, Z — статистическая сумма.

В системах с конкурирующими взаимодействиями энтропия S при низких температурах должна стремиться к отличному от нуля значению, а при высоких температурах энтропия должна стремиться к величине $\ln(q)$, поскольку при $T \rightarrow \infty$ статистическая сумма равна q^N . Указанные особенности представлены на рис. 7 (рисунок взят из работы [22]) для двумерной антиферромагнитной трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с величинами взаимодействия $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$. Заметим, что при $T \rightarrow 0$ энтропия S для систем с $r \geq 0.2$ стремится к отличному от нуля значению. Конечная величина энтропии наблюдалась и в работе [26] для трехмерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3, 4, 5$.

Для анализа характера фазового перехода и особенностей поведения термодинамических характеристик вблизи критической точки в такого рода исследованиях наиболее эффективным методом зарекомендовал себя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [27]:

$$V_L(T, L) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (9)$$

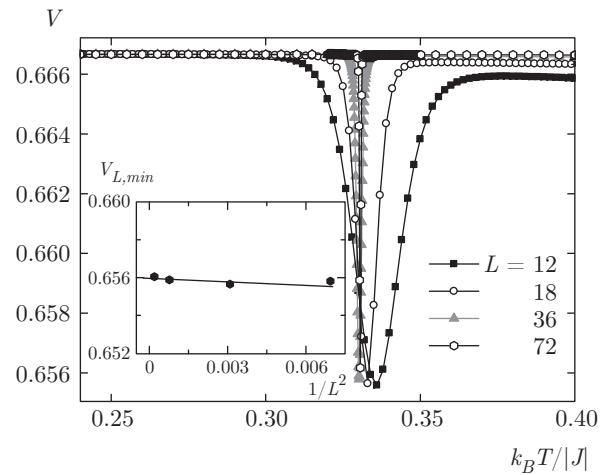


Рис. 8. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V(T)$ двумерной трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса при $r = 1/6$

$$V_L(T, L) = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}, \quad (10)$$

где E — энергия и m — параметр порядка (в случае ферромагнитной модели Поттса — m_F , в случае антиферромагнитной модели — m_{AF}) системы с линейными размерами L .

Методика определения критической температуры нами описана в работах [28, 29]. Применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо определить род фазового перехода в системе. Фазовый переход первого рода характеризуется следующими отличительными особенностями [4]: усредненная величина $V_{L,min}(T)$ при $T = T_c$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

$$V_{L,min}(T) = V^* + bL^{-d} \quad (11)$$

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_c(L)$, где V^* отлично от $2/3$, что и продемонстрировано на рис. 8 для антиферромагнитной модели Поттса с $q = 3$ при $r = 1/6$ и $T_c = 0.3305$. Аналогичное поведение наблюдалось и для величины взаимодействия вторых ближайших соседей $r = 0$ и $r = 0.1$.

Независимо от кумулянтов Биндера, для анализа рода фазового перехода мы использовали и гистограммный анализ данных метода МК [23]. Этот метод позволяет надежно определить не только род фазового перехода, но и минимальные размеры систем, в которых возможно правильно определить род фазового перехода. Определение рода фазового перехода этим методом подробно описано в работе [30]. Гистограммный анализ данных, проведенный для двумерной трехвершинной антиферромаг-

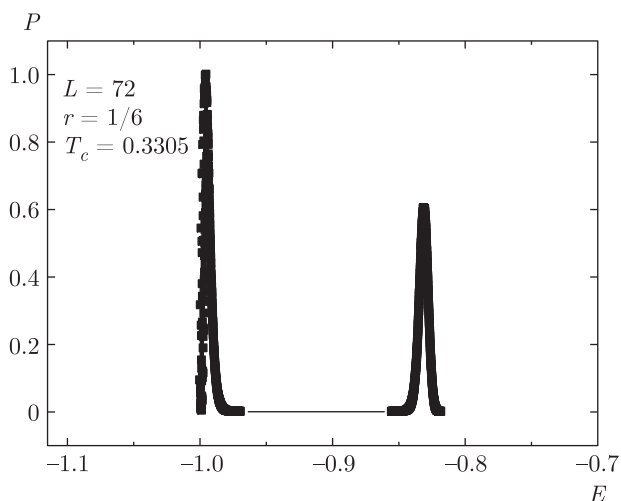


Рис. 9. Гистограмма распределения энергии для двумерной трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса при $r = 1/6$

нитной модели Поттса в интервале изменения величины $0 \leq r < 0.2$, также свидетельствует о фазовом переходе первого рода. Это продемонстрировано на рис. 9 для системы с $r = 1/6 \sim 0.167$. На этом рисунке представлена гистограмма распределения энергии вблизи критической точки T_c для систем с линейными размерами $L = 72$. Как видно на рисунке, для этой модели в критической точке T_c наблюдается бимодальное распределение энергии. Аналогичное распределение энергии наблюдалось и для системы с величиной $r = 0$ и $r = 0.10$. Бимодальность в распределении энергии — это основной признак, характерный для фазового перехода первого рода. Для систем с линейными размерами $L \leq 20$ распределение энергии проявляет слабо выраженные признаки бимодальности. Поэтому в наших данных для однозначного определения рода фазового перехода изучались системы только с $L > 20$.

В трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с величинами взаимодействия $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ ситуация существенно другая. В этом случае вблизи критической точки наблюдается распределение энергии с одним максимумом в интервале изменения $0 \leq |r| \leq 1/3$, и не наблюдается при $0.5 \leq |r| \leq 1.0$.

На рис. 10 и 11 представлены характерные зависимости теплоемкости от температуры для двумерной модели Поттса с $q = 3$ на треугольной решетке с величинами взаимодействия $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ в интервале значений соответственно $0 \leq |r| \leq 1/3$ и $0.5 \leq |r| \leq 1.0$. Как видно на рис. 10, для всех рассмот-

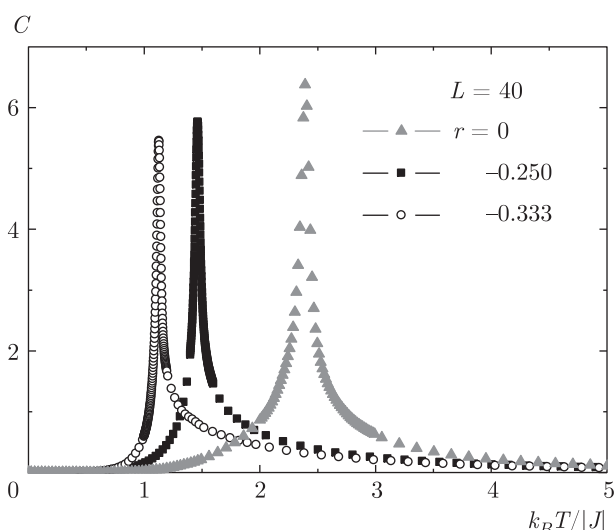


Рис. 10. Температурная зависимость теплоемкости C/k_B для двумерной трехвершинной модели Поттса в диапазоне значений $0 \leq |r| \leq 1/6$

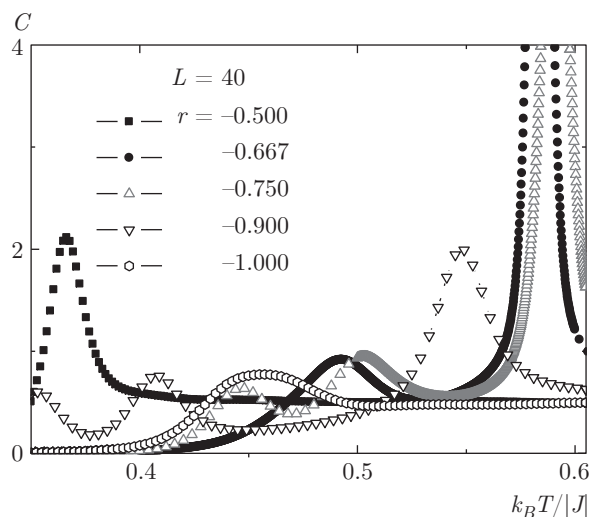


Рис. 11. Температурная зависимость теплоемкости C/k_B для двумерной трехвершинной модели Поттса в диапазоне значений $0.5 \leq |r| \leq 1.0$

ренных систем в диапазоне изменений $0 \leq |r| \leq 1/3$ в критической точке наблюдаются отчетливые максимумы. В то же время на рис. 11 видно, что для всех значений $|r| = 0.667, 0.750, 0.9$ наблюдается отчетливое расщепление теплоемкости. Такое поведение теплоемкости, как мы отметили выше, характерно вблизи точек фрустрации. Обратим внимание, что при значениях $r = -1.0, -0.5$ теплоемкость имеет вид плавного максимума (см. рис. 11),

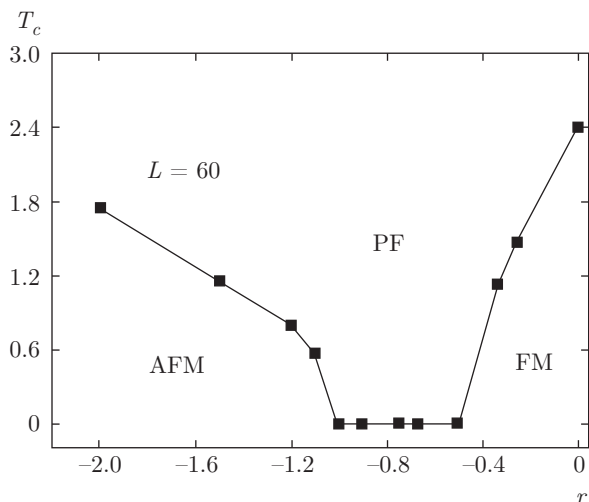


Рис. 12. Фазовая диаграмма для двумерной трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействия $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$

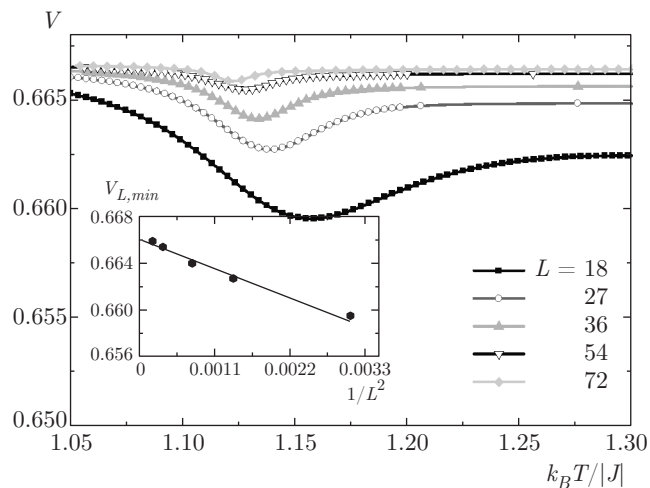


Рис. 14. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V(T)$ двумерной трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса при $|r| = 1/3$

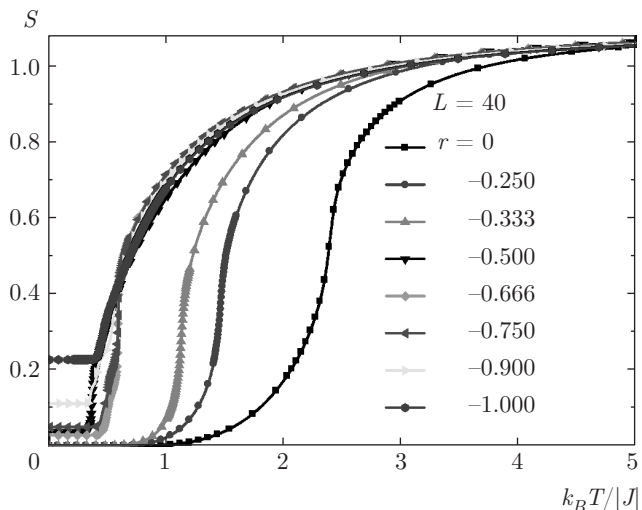


Рис. 13. Температурная зависимость энтропии S для двумерной трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса в интервале изменений величины $0 \leq |r| \leq 1$

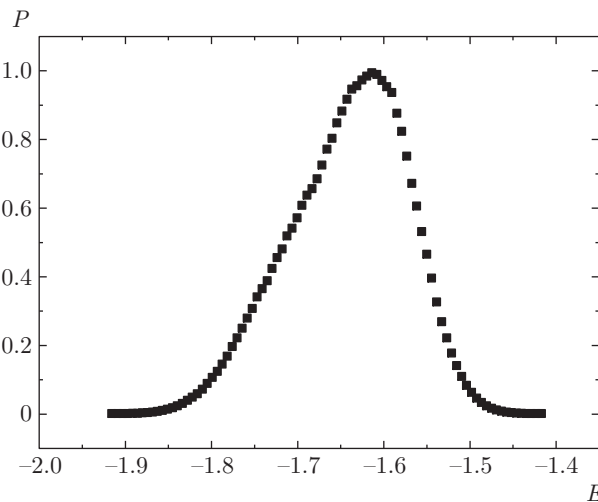


Рис. 15. Гистограмма распределения энергии для двумерной трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса при $|r| = 1/3$

что также является характерной картиной для точек фрустрации. Фазовая диаграмма зависимости T_c от величины r приведена на рис. 12. Как видно на рис. 12, в модели Поттса с величинами взаимодействия $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ в широком интервале изменения r фрустрации наблюдаются в интервале изменения $0.5 \leq |r| \leq 1.0$. Напомним, что в модели Поттса при величинах взаимодействия $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ фрустрации наблюдались в интервале изменения $0.2 \leq |r| \leq 1.0$.

При исследовании вопроса о наличии в системе фрустрации более информативными являются температурные зависимости энтропии S . Зависимости энтропии S от температуры T представлены на рис. 13, на котором видно, что для всех систем в диапазоне изменений $0.5 \leq |r| \leq 1.0$ в низкотемпературной области энтропия стремится к отличному от нуля значению. Такое поведение также является следствием конкуренций первых и вторых ближайших соседей.

Температурные зависимости кумулянтов Биндера $V_L(T)$ от температуры для 2D-модели Поттса с $q = 3$ при $r = -1/3$ для систем с различными линейными размерами L приведены на рис. 14. Заметим, что на вставке к рис. 14 наглядно видно, что нетривиальная величина V^* , $V^* \rightarrow 2/3$ при $L \rightarrow \infty$. Такое поведение, как отмечалось, характерно для фазового перехода второго рода. Гистограммный анализ данных проведенный нами для трехвершинной 2D-модели Поттса с величинами взаимодействия $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ в интервале значений $0 \leq |r| \leq 1/3$, также свидетельствует о фазовом переходе второго рода. Для систем с $r = -1/3$ это продемонстрировано на рис. 15, на котором представлена гистограмма распределения энергии вблизи критической точки T_c для систем с линейными размерами $L = 72$. Как видно на рисунке, для этой модели в критической точке наблюдается распределение энергии с одним максимумом, что характерно для фазового перехода второго рода. Такая же картина наблюдалась и для всех значений r в интервале изменений $0 \leq |r| \leq 1/3$.

Выяснение рода фазового перехода при изменении величины в интервале $1 \leq |r| \leq 2.0$ с величинами взаимодействия $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ требует отдельного рассмотрения. Определение значений r из указанного диапазона имеет большое значение при создании различных синтетических метамагнетиков и изучении процесса упорядочения для антиферромагнитных материалов с треугольной структурой.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, наши данные, полученные для трехвершинной 2D-модели Поттса на треугольной решетке с величинами взаимодействия как при $J_1 < 0$, $J_2 < 0$, так и при $J_1 > 0$, $J_2 < 0$ на основе алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло в широком интервале изменений величины отношений вторых ближайших соседей к первым соседям r , $0 \leq |r| \leq 1.0$, свидетельствуют о следующем.

1) Конкуренция обменных параметров первых и вторых ближайших соседей с величинами взаимодействий $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ в интервале изменений величины $0 \leq r < 0.2$ не приводит к вырождению основного состояния системы. В рассматриваемом интервале изменений r в системе возникают фазовые переходы первого рода. Конкуренция обменных параметров первых и вторых ближайших соседей для этой модели в интервале изменений величины $0.2 \leq r \leq 1.0$ приводит к вырождению основного состо-

яния системы. В этом интервале возникают фрустрации;

2) Конкуренция обменных параметров первых и вторых ближайших соседей с величинами взаимодействий $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ в интервале изменений величины $0 \leq |r| \leq 1/3$ не приводит к вырождению основного состояния системы. В рассматриваемом интервале изменений r в системе возникают фазовые переходы второго рода. Конкуренция обменных параметров первых и вторых ближайших соседей для этой модели в интервале изменений величины $0.5 < |r| < 1.0$ приводит к вырождению основного состояния системы. В рассматриваемом интервале в системе возникают фрустрации.

Работа выполнена при финансовой поддержке проектной части госзадания Минобрнауки России в научной деятельности (проект 3.1262.2014К), в рамках государственного задания ФАНО России (тема «Квант», № 01201463332) и РФФИ (грант № 13-02-00220).

ЛИТЕРАТУРА

1. H. T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).
2. F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
3. W. Zhang and Y. Deng, *Phys. Rev. E* **78**, 031103 (2008).
4. D. Loison and K. D. Schotte, *Eur. Phys. J. B* **5**, 735 (1998).
5. P. C. Гехт, *УФН* **159**, 261 (1989).
6. L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
7. R. M. F. Houtappel, *Physica* **16**, 425 (1950).
8. K. Kanô and S. Naya, *Progr. Theor. Phys.* **10**, 158 (1953).
9. J. Adler, A. Brandt, W. Janke et al., *J. Phys. A: Math. Gen.* **28**, 5117 (1995).
10. I. G. Enting and F. Y. Wu, *J. Stat. Phys.* **28**, 351 (1982).
11. H. Feldmann, A. J. Guttmann, I. Jensen et al., *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 2287 (1998).
12. M. Schick and R. B. Griffiths, *J. Phys. A: Math. Gen.* **10**, 2123 (1977).
13. Y. Saito, *J. Phys. A* **15**, 1885 (1982).

14. H. Pack, Phys. Rev. B **49**, 12881 (1994).
15. M.-X. Wang, J.-W. Cai, Z.-Y. Xie et al., Chin. Phys. Lett. **27**, 076402 (2010).
16. Z. F. Wang and B. W. Southern, Phys. Rev. B **67**, 054415 (2003).
17. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Атаева, ФНТ **39**, 194 (2013).
18. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **142**, 1189 (2012).
19. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Изв. РАН, сер. физ. **77**, 1476 (2013).
20. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Изв. РАН, сер. физ. **78**, 110 (2014).
21. В. С. Доценко, УФН **163**, 1 (1993).
22. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, М. А. Магомедов и др., Письма в ЖЭТФ **100**, 267 (2014).
23. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
24. P. Peczac, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
25. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
26. Ch. Yamaguchi and Y. Okabe, J. Phys. A: Math. Gen. **34**, 8781 (2001).
27. K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
28. А. К. Муртазаев and А. В. Бабаев, J. Magn. Magn. Mat. **321**, 2630 (2009).
29. А. К. Муртазаев and А. В. Бабаев, J. Magn. Magn. Mat. **324**, 3870 (2012).
30. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **143**, 116 (2013).