

УДК 511.21+517.965+517.547.582

MSC2020 11B37 + 33E05

© В. С. Стронгин^{1,2}; П. А. Овчинников^{1,2}; Э. А. Лобанова²;
И. В. Трефилов^{1,2}; Ю. А. Шевченко^{1,2}

Разбавленная модель кубического спинового льда

Методом Метрополиса в системе Изинг-подобных точечных диполей, расположенных на ребрах простой кубической решетки, получено температурное поведение теплоемкости, намагниченности и магнитной восприимчивости в модели, учитывающей только ближние диполь-дипольные взаимодействия, а также модели с ограниченным дальним радиусом взаимодействия. В системе присутствуют три термодинамические магнитные фазы: дальний порядок, ближний порядок и беспорядок. Фаза дальнего порядка в модели ближайших соседей отсутствует. Фаза ближнего порядка характеризуется высоким уровнем энтропии, наведенной геометрией решетки. Внешнее магнитное поле вдоль одной из базисных осей приводит к конкуренции параметров порядка в модели с ограниченным дальним радиусом взаимодействия и к исчезновению остаточной энтропии в модели учитывающей только ближние взаимодействия. Показана нелинейная зависимость критической температуры теплоемкости от концентрации разбавления системы немагнитными вакансиями в модели с ближними взаимодействиями.

Ключевые слова: *кубический спиновый лед, алгоритм Метрополиса, статистическая термодинамика.*

DOI: <https://doi.org/10.47910/FEMJ202411>

Введение

Искусственный спиновый лед это группа метаматериалов, состоящих из ферромагнитных наночастиц вытянутой формы, расположенных в пространстве в виде повторяющейся решетки таким образом, что образующаяся магнитная структура проявляет коллективные магнитные свойства, которыми не обладает отдельная наночастица. Наночастицы являются однодоменными, и в то же время магнитное поле,

¹ Институт прикладной математики, Дальневосточное отделение Российской академии наук. 690041, Россия, г. Владивосток, ул. Радио, д. 7.

² Департамент теоретической физики и интеллектуальных технологий, Институт наукоемких технологий и передовых материалов, Дальневосточный федеральный университет. 690922, Россия, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10.

Электронная почта: shevchenko.ya@dvfu.ru (Ю. А. Шевченко).

наводимое соседними частицами, достаточно для изменения ориентации магнитного момента. Наночастицы взаимодействуют посредством диполь-дипольного обмена. Далее термины «спин» и «диполь» будут использоваться в качестве синонимов.

В природных трехмерных кристаллах между спинами атомов металлов действует простая обменная связь, описываемая классической моделью Изинга. Эта модель позволяет математически описать процесс фазового перехода материала из «ферромагнетика» в «парамагнетик», источником беспорядка в которой являются случайные температурные флуктуации, а значение спина определено дискретной величиной ± 1 . Экспериментальное наблюдение за значениями спинов атомов объемного кристалла одновременно в хорошем пространственном и временном разрешении невозможно при текущем уровне развития методов микроскопии. Неоднократно было показано, что искусственные спиновые льды пригодны для экспериментального моделирования поведения спинов Изинга на двумерных решетках [1]. Благодаря площади наноструктуры порядка 20000 нм^2 возможно экспериментальное наблюдение за процессом фазового перехода с хорошим пространственным и временным разрешением. А отсутствие ограничений в геометрии решетки позволяет конструировать магнитные системы, обладающие свойствами, не проявляемыми в натуральных материалах.

Геометрия решетки может накладывать ограничения на конфигурации, из-за которых не все парные магнитные взаимодействия между наномagnитами могут быть одновременно удовлетворены. Это явление называется фрустрацией, а системы — фрустрированными [2]. Фрустрации являются разновидностью возбуждений, т.к. приводят к обширному вырождению низкоэнергетических конфигураций магнитной системы и, как следствие, к ненулевой остаточной энтропии при стремлении температуры к нулю. По этой причине явление фрустраций можно считать источником беспорядка магнитных конфигураций наравне с температурными случайными флуктуациями. Фрустрированные системы не укладываются в каноническую картину классификации магнитных фазовых переходов типа «порядок» — «беспорядок». В таких системах может присутствовать более двух фаз, каждая из которых характеризуется разными критериями упорядоченности (параметрами порядка).

Удобно рассматривать магнитную конфигурацию системы в контексте вершин, а именно прилегающих к ним диполей. Вершиной называется узел решетки, расположенный на пересечении ребер. Для решетки квадратного спинового льда в конфигурациях с минимальной энергией все вершины подчиняются правилу льда: два спина намагничены по направлению «к вершине», два «от вершины». Отдельным классом являются вершинно-фрустрированные решетки [1, 3], в которых в силу топологических ограничений невозможно сделать так, чтобы все вершины удовлетворяли правилу льда.

Тонкая настройка формы и геометрии искусственных структур спинового льда в теории позволяет добиться необходимых эффектов при заданных характеристиках. Например, за счет баланса между магнитной анизотропией спина, его магнитным полем и параметром решетки можно добиться сдвига температуры фазового перехода из «порядка» в «замороженный беспорядок» в зону выше комнатной температуры, при этом оставив высокую магнитную восприимчивость материала. Но не

всех эффектов можно добиться в двумерных решетках из-за низкой (по сравнению с трехмерными структурами) плотности упаковки частиц на решетке. Использование объемного искусственного спинового льда позволяет добиться более устойчивых и стабильных экзотических магнитных состояний и, как следствие, более плотной упаковки электронных устройств, использующих в основе работы эффекты спинового льда. Появление трехмерной литографии позволяет создавать решетки, которые напрямую имитируют геометрию объемного спинового льда [4–7], но с возможностью настройки магнитного момента спина и геометрии решетки.

Трехмерные структуры искусственного спинового льда в теории более подвержены эффектам фрустраций, могут обладать такими эффектами, как струны Дирака и подвижные магнитные монополи, которыми можно управлять с помощью приложенного магнитного поля [8]. Они потенциально могут быть использованы в наноэлектронике, как элементная база.

В этой работе представлены результаты исследования статистических свойств фрустрированной трехмерной решетки спинового льда и влияния эффекта случайного разбавления решетки наночастиц, а также эффектов внешнего магнитного поля. Такая решетка имеет три конкурирующих источника беспорядка: геометрический (фрустрации), температурный (флуктуации) и разбавление, антиподом которых является фактор упорядочения — внешнее магнитное поле, изменяющее моменты макроспинов вдоль своего направления.

Количество температурных флуктуаций регулируется параметром β в распределении Гиббса, которое статистически описывает процесс термализации вещества. Плотность распределения задается как

$$w_j = \frac{e^{-\beta E_j}}{\sum_k e^{-\beta E_k}}, \quad (1)$$

где E_i — энергия i -го макросостояния магнитной системы, являющаяся функцией значений всех спинов. Флуктуации называются температурными, так как действует соотношение $\beta = 1/k_B T$, где T — температура, а k_B — постоянная Больцмана. Сумма в знаменателе взята по всем возможным микросостояниям системы.

Уравнение (1) определяет плотность распределения априорных вероятностей. Аналитическое решение уравнения (1) возможно только при наличии всех членов суммы в знаменателе (называемом статсуммой), число которых равно 2^N для системы из N спинов, способных принимать только значения ± 1 . Полный перебор всех состояний для $N > 400$ невозможен на текущем уровне развития вычислительных мощностей. Увеличение N на единицу удваивает вычислительную сложность.

Результаты настоящей работы получены при помощи алгоритма Метрополиса. В процессе работы алгоритма при заданном β генерируются цепочки состояний системы (сэмплы), отличающиеся друг от друга значением одного из спинов. Вероятность состояния в цепочке определена в апостериорной форме в виде w_i/w_j при переходе из состояния i в состояние j . С помощью алгоритма Метрополиса создаётся обратимая цепь Маркова, равновесное распределение которой — это целевое апостериорное

распределение. Таким образом, математическое ожидание любого параметра, который является функцией состояния в заданной цепочке, будет равно математическому ожиданию w при заданном β . Длина генерируемой цепочки состояний (число шагов Метрополиса) прямо влияет на точность w .

Так как цепочка состояний неразрывна, то процесс семплирования не поддается «вертикальному» параллелизму на уровне алгоритма. В нашей работе используется «горизонтальный» подход, при котором математическое ожидание одного параметра параллельно вычисляется для разных β .

1. Математическая модель

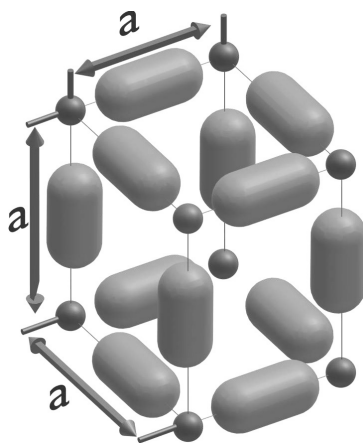


Рис. 1. Схема решетки кубического спинового льда. Магнитные нанострочки обозначены серыми эллипсоидами, вершины решетки синими шарами. a — параметр решетки, одинаковый в трех базисных направлениях.

Ранее было показано, что в экспериментально исследуемых системах спинового льда поведение макроспинового ферромагнитного нанострочки повторяет точечный диполь [9]. В нашей работе рассматривается система Изинг-подобных точечных магнитных диполей, расположенных на ребрах простой кубической решетки. Точечный диполь расположен в середине ребра, по одному диполю на ребро. Вектор магнитного момента направлен вдоль ребра решетки. На рисунке 1 изображен один куб решетки, где магнитные нанострочки обозначены серыми эллипсоидами, а вершины решетки — синими шарами. Система состоит из $N = 3L^3$ одинаковых диполей, где L — линейный размер либо количество элементарных ячеек вдоль одной из осей. Одна элементарная ячейка состоит из 3 спинов.

Проекция системы вдоль любого базисного направления аналогична решетке квадратного спинового льда, которая была хорошо исследована как теоретически [2, 10], так и экспериментально [11]. Для квадратного спинового льда показано, что

система является фрустрированной только в модели дальнедействующих диполь-дипольных взаимодействий [2, 11]. В модели ближайших соседей существуют две возможные конфигурации, в которых все парные взаимодействия удовлетворены. Для всех вершин решетки выполняется правило льда.

Решетку кубического спинового льда альтернативно можно рассматривать как многослойно уложенную решетку квадратного спинового льда с добавлением между слоями диполей имеющих магнитный момент, направленный перпендикулярно слою. Такие межслойные диполи корреляционно связывают конфигурации в слоях и разрушают упорядочение как в модели ближайших соседей, так и в модели, учитывающей дальние междипольные взаимодействия. Кубическая решетка, в отличие от квадратной, является фрустрированной по спинам и вершинам.

Неравновесные термодинамические эффекты, такие как коэрцитивная сила островка и эффекты Стонера – Вольфарта [12], не рассматриваются в этой работе. Подразумевается, что все релаксационные неравновесные процессы завершены во время численных экспериментов.

Энергия взаимодействия между диполями i и j определяется как

$$E_{ij,dip} = s_i s_j \left(\frac{(\vec{m}_i \vec{m}_j)}{|\vec{r}_{ij}|^3} - 3 \frac{(\vec{m}_i \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^5} \right), \quad (2)$$

где все векторные переменные приведены к единичной длине, а размерные коэффициенты вынесены в параметр D уравнения (3). \vec{m}_i — момент единичной длины, направление которого для каждого диполя определено геометрией решетки. Момент имеет только два возможных противоположных направления, которые определяются дискретными переменными Изинга $s_i = \pm 1$. \vec{r}_{ij} — радиус-вектор, нормированный на параметр решетки a так, чтобы для двух ближайших коллинеарных диполей i и j выполнялось условие $|\vec{r}_{ij}| = 1$.

Далее в работе проводится сравнение двух моделей с ограниченным радиусом взаимодействия. Модель ближайших соседей, учитывающая только ближайшие пары диполей, является аналогом модели Изинга. Радиус взаимодействия в этой модели определен как $d = \sqrt{0.5}$, каждый спин всегда имеет 8 соседей. Модель ограниченного дальнего взаимодействия учитывает пары диполей, расположенные не дальше $d = 1.5$, каждый спин взаимодействует с 42 соседними спинами. Далее модели будут называться близкодействующей и дальнедействующей соответственно.

Энергия системы определяется как

$$E = D \sum_{[i,j]} E_{ij,dip} - \mu_0 \mu \sum_i s_i (\vec{m}_i \vec{H}), \quad (3)$$

где сумма $[i,j]$ взята по всем парам диполей, для которых $|\vec{r}_{ij}| \leq d$. Длина вектора внешнего магнитного поля \vec{H} определена в безразмерных величинах по аналогии с \vec{m}_i . $D = \mu_0 \mu^2 a^{-3}$ — размерный коэффициент, необходимый для перехода от безразмерных единиц измерения к абсолютным. μ_0 — магнитная постоянная, μ — намагниченность насыщения наноостровка, a — параметр решетки, изображенный на рисунке 1. Все результаты в настоящей работе представлены в единицах D . Для перехода к размерной системе единиц измерения необходимо определить параметры μ и a , с учетом геометрии магнитной системы.

В рассматриваемой модели были использованы периодические граничные условия по трем базисным направлениям с целью избавления от эффекта границ.

Для вычисления термодинамических средних значений используется канонический односпиновый алгоритм Метрополиса [13–16]. Несмотря на простоту, этот алгоритм все еще остается популярным методом статистического исследования в разных направлениях науки. Для каждой рассматриваемой в работе температуры использовалось 10^5 стабилизационных Монте-Карло шагов и 10^6 шагов для вычисления термодинамических средних. Предварительная температурная стабилизация исследуемой системы позволяет достичь термодинамического равновесия на момент начала сбора статистики. Под Монте-Карло шагом подразумевается N Монте-Карло попыток сменить знак случайного s_i . Все вычисления начинаются с одного из основных состояний решетки. Под основным состоянием понимается такой набор значений s_i , при которых E является минимально возможной. При этом минимальному значению E может соответствовать несколько конфигураций s_i . Основное состояние является наиболее вероятным при $T \rightarrow 0$. Термализация системы при повышении T менее требовательна к вычислительным ресурсам, чем при понижении T . Конфигурация основного состояния может отличаться в зависимости от направления и величины приложенного внешнего магнитного поля и индивидуальна для каждого случая магнитного разбавления.

В качестве основных состояний для рассматриваемой системы взяты конфигурации с минимальной энергией, когда-либо полученные в ходе численных экспериментов. При нахождении конфигурации с более низкой энергией вычисления запускались заново с указанием этой конфигурации как стартовой.

2. Теплоемкость кубического спинового льда

На рисунке 2 показана теплоемкость спинового льда из $N = 1536$ диполей ($L = 8$), расположенных на кубической решетке. Теплоемкость получена как

$$C(T) = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2 N}. \quad (4)$$

Скобки $\langle \rangle$ обозначают термодинамическое усреднение по Гиббсу для заданной T . Теплоемкость считалась для каждой температурной точки независимо, данные на рисунке 2 приведены для 208 температурных точек. Точки объединены в линию для облегчения визуального восприятия.

На рисунке приведено сравнение близкодействующей и дальнодействующей моделей. Теплоемкость близкодействующей модели имеет один пик, ее поведение качественно соответствует поведению модели Изинга на простой кубической решетке [17]. Согласно стандартной классификации фазовых переходов Эренфеста, рассматриваемый пик теплоемкости связан с фазовым переходом «порядок» — «беспорядок», а критическое поведение системы хорошо изучено в литературе [18]. Теплоемкость дальнодействующей модели качественно отличается от модели близкодействия. А именно имеет два пика, каждый из которых острой формы.

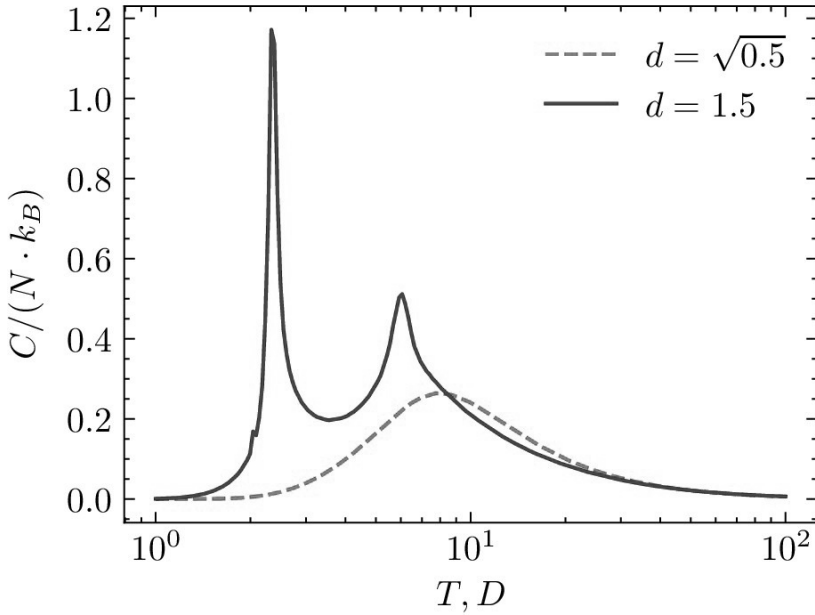


Рис. 2. Теплоемкость кубического спинового льда из $N = 1536$ диполей ($L = 8$) как функция температуры. Сравнение модели близкого действия (пунктирная линия) и дальнего действия (сплошная линия) без разбавления ($x = 0$) и внешнего магнитного поля ($|\vec{H}| = 0$).

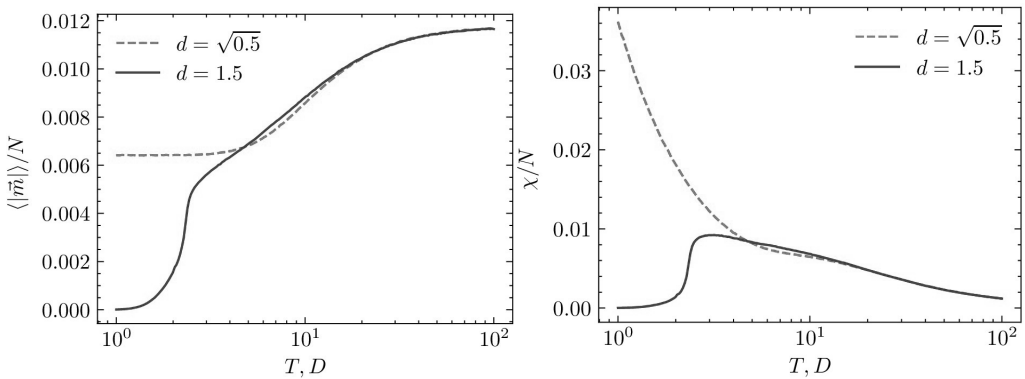


Рис. 3. Температурное поведение намагниченности (слева) и магнитной восприимчивости (справа) по направлению $[111]$ кубического спинового льда из $N = 1536$ диполей ($L = 8$).

С целью объяснения природы пиков теплоемкости в модели дальнего действия на рисунке 3 показаны графики температурного поведения намагниченности (слева) и магнитной восприимчивости (справа) по направлению [111] кубического спинового льда из $N = 1536$ диполей ($L = 8$). Магнитная восприимчивость определяется как

$$\chi = \frac{\langle |\vec{m}|^2 \rangle - \langle |\vec{m}| \rangle^2}{k_B T}, \quad (5)$$

где вектор намагниченности задан как суммарный вектор всех магнитных моментов системы:

$$|\vec{m}| = \left| \sum_j^N s_j \vec{m}_j \right|.$$

Поведение намагниченности дает информацию об упорядочении или хаотизации системы. Например, $|\vec{m}| = \sqrt{3}/N$ для ферромагнитного порядка и $|\vec{m}| = 0$ для полностью антиферромагнитного — когда количество спинов, ориентированных вдоль определенного направления, равно числу спинов, ориентированных в противоположную сторону. На графике намагниченности (рис. 3) видно, что конфигурации основных состояний (при $T \rightarrow 0$) отличаются в модели дальнего действия и ближнего действия, приводя к различным значениям $|\vec{m}|$.

График магнитной восприимчивости на рисунке 3 также показывает качественное отличие при $T \rightarrow 0$. С точки зрения статистики, χ определяется как дисперсия значения $|\vec{m}|$ (числитель уравнения (5)), деленная на температуру. Без температурных флуктуаций ненулевого значения χ в используемой модели можно добиться только за счет эффекта фрустраций, то есть смены конфигураций, приводящей к смене намагниченности системы, но без затрат энергии, так как в числителе теплоемкости — уравнение (4) — указана дисперсия E .

Таким образом, можно сделать вывод об остаточной энтропии в системе дипольного кубического неразбавленного спинового льда, то есть энтропии, наводимой исключительно геометрией решетки без влияния случайных температурных флуктуаций (при $T \rightarrow 0$). В дальнедействующей модели система пребывает в одном из двух возможных основных состояний, остаточная энтропия равна нулю. В модели ближнего действия вершины решетки подчиняются правилу льда, но присутствует множество основных состояний, смена которых приводит к высоким значениям χ и, как следствие, к высокому уровню остаточной энтропии.

Температура низкотемпературного пика теплоемкости совпадает с температурой резкого изменения $|\vec{m}|$ и температурой пика χ в модели дальнего действия. Поведение $|\vec{m}|$ и χ выше этой температуры качественно совпадает для обоих вариантов d . Это значит, что низкотемпературный пик теплоемкости в модели дальнего действия является фазовым переходом из абсолютного (дальнего) порядка к локальному порядку. То есть состоянию, в котором ближайшие парные взаимодействия находятся в состоянии упорядочения, а дальний порядок разрушен температурными флуктуациями. Согласно уравнению (2), $E_{ij,dip}$ обратно пропорциональна $|\vec{r}_{ij}|^3$, поэтому дальние парные взаимодействия первыми подвержены температурным флуктуациям.

3. Случайное разбавление магнитной решетки

Под разбавлением системы понимается удаление магнитных диполей из решетки. В применяемой модели для отсутствующих спинов (вакансий) устанавливается значение $s_i = 0$. Уровень концентрации случайного разбавления обычно регулируется двумя способами: путем большого канонического ансамбля (задана вероятность разбавления отдельной частицы) и канонического ансамбля (общая плотность вакансий фиксирована) [19, 20]. Концентрация разбавления определена значением x в интервале от 0 (нет вакансий) до 1 (все частицы вакантны). В нашей работе используется канонический ансамбль, когда число магнитных диполей разбавленной модели определено как $N' = N(1 - x)$, а диполи, подлежащие разбавлению, выбраны равновероятно. Для получения устойчивого статистически усредненного решения, не зависящего от фактора случайности, результаты получены и усреднены для 10 случайно разбавленных систем, для каждого рассматриваемого x . В таком случае на графиках дополнительно приведена среднеквадратичная ошибка.

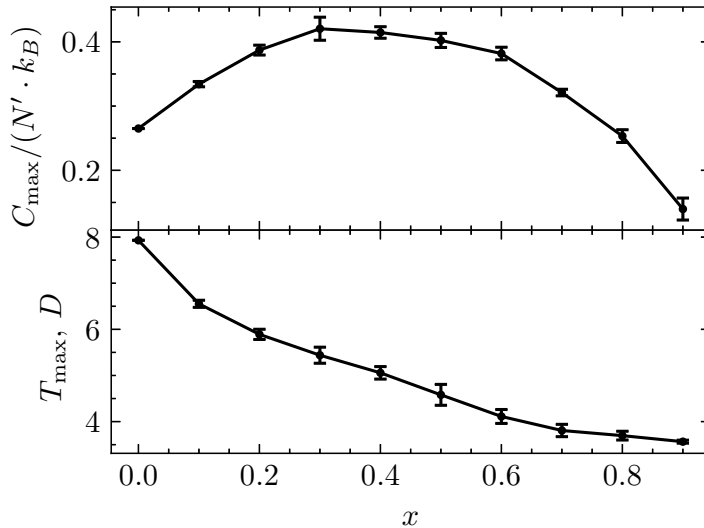


Рис. 4. Влияние разбавления на высоту (верхняя часть) и температуру (нижняя часть) пика теплоемкости для кубического спинового льда из $N = 1536$ спинов при $|\vec{H}| = 0$ и $d = \sqrt{0.5}$. Данные усреднены для 10 вариантов случайных разбавлений, бары ошибок отображают стандартное отклонение от среднего значения.

На рисунке 4 изображено влияние разбавления на высоту (верхняя часть) и температуру (нижняя часть) пика теплоемкости для кубического спинового льда в модели близкодействия при отсутствии внешнего магнитного поля. Данные получены для x в интервале от 0 до 0.9 с шагом 0.1 и отмечены круглыми точками на рисунке, бары ошибок отображают величину среднеквадратичного отклонения. Точки соединены прямыми линиями с целью улучшения визуального восприятия графика.

На нижней части рисунка 4 показана зависимость температуры пика теплоемкости кубического спинового льда от уровня концентрации разбавления. С ростом разбавления температура, при которой теплоемкость испытывает пик, уменьшается.

Функция высоты пика теплоемкости кубического спинового льда от концентрации разбавления, показанная в верхней части рисунка 4, демонстрирует нелинейное поведение. Высота пика растет при увеличении концентрации разбавления до $x=0.3$, после чего начинает уменьшаться. Такое поведение связано с геометрией решетки и ее элементарной ячейки. Разбавление $x=0.3$ является перколяционным порогом, при котором соседние слои будут замкнуты между собой, а $x=0.6$ — порогом, при котором разрушаются связи между цепочками спинов.

4. Внешнее магнитное поле

Исследовано воздействие внешнего магнитного поля вдоль одной из осей \vec{H}_x на поведение теплоемкости $C(T)$, рисунок 5. Рассмотрены две модели — дальнего действия ($d=1.5$) и ближнего действия ($d=\sqrt{0.5}$). Обнаружено существенное различие в поведении теплоемкости между этими двумя моделями.

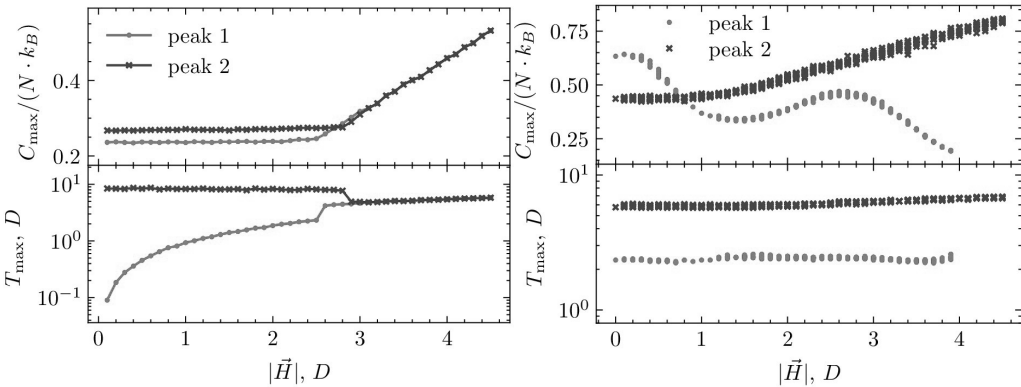


Рис. 5. Влияние внешнего магнитного поля на высоту (верхняя часть) и температуру (нижняя часть) пиков теплоемкости для кубического спинового льда из $N = 648$ спинов при $d = \sqrt{0.5}$ (левый рисунок) и $d = 1.5$ (правый рисунок).

В модели ближнего действия при небольших полях ($|\vec{H}| < 2.5$) высота пиков теплоемкости не изменяется. Однако с увеличением величины поля наблюдается сближение низкотемпературного пика с высокотемпературным. При достижении величины поля $|\vec{H}| = 2.5$ оба пика объединяются, что приводит к увеличению высоты пика C_{max} . Динамика этих параметров показана на рисунке 5 слева. Как уже было сказано выше, поле \vec{H} является упорядочивающим фактором, а температура T стремится разрушить этот порядок. Так как при отсутствии поля система в основном состоянии является фрустрированной, то добавление поля \vec{H} упорядочивает систему. Такого рода упорядочение приводит к резкому изменению энтропии системы, что приводит

к возникновению низкоэнергетического пика теплоемкости. При $|\vec{H}| < 2.5$ положение максимума этого пика определяется соотношением $|\vec{H}|/T = const$.

В случае дальнего действия температура максимума теплоемкости $T(C_{max})$ остается постоянной при увеличении поля, в то время как высота пиков меняется. Высокотемпературный пик растет, а низкотемпературный уменьшается до $|\vec{H}| = 1.5$, затем растет до $\vec{H} = 2.5$, затем снова падает. Динамика этих параметров показана на рисунке 5 справа. В модели дальнего действия система в основном состоянии обладает антиферромагнитным упорядочением. В свою очередь, поле \vec{H} стремится упорядочить систему ферромагнитно. Такого рода конкурирующее взаимодействие приводит к отсутствию изменения температуры пика теплоемкости $T(C_{max})$ и повышению высоты второго пика. Изменения в высоте первого пика могут быть следствием разрушения дальнего порядка под воздействием внешнего магнитного поля \vec{H} .

Заключение

Изучение решеток спиновых льдов интересно не только с точки зрения физики метаматериалов, но и с точки зрения прикладной математики. Спиновые льды представляют собой математическую модель системы многих тел. Магнитное состояние системы в реальных материалах определяется каноническим распределением Гиббса, являющимся функцией от значений спинов Изинга s_i и температуры T . s_i определены дискретной величиной ± 1 , что существенно усложняет возможность аналитического изучения системы. При $T \rightarrow 0$ энергия системы E принимает минимально возможное значение с вероятностью 100%. В классической модели Изинга минимальной E соответствуют две возможные конфигурации системы. Такие состояния можно назвать упорядоченными и выразить в виде математического уравнения, называемого параметром порядка. Например, для классической модели Изинга параметр порядка определен как сумма значений всех спинов $|\sum_i s_i|$ и при $T \rightarrow 0$ равен N (числу спинов) для ферромагнитной модели. Вероятность появления конкретной конфигурации системы определяется отношением ее энергии к температуре в распределении Гиббса. Температура, при которой в системе исчезает порядок, называется критической или температурой фазового перехода.

Во фрустрированном магнетике минимальной E соответствует множество основных состояний, являющихся равновероятными. Это происходит из-за невозможности одновременного удовлетворения всех парных взаимодействий, из-за особенностей диполь-дипольного взаимодействия и специфичной геометрии решетки. Система может случайно принимать одно из основных состояний, а математическое определение параметра порядка должно учитывать эту вероятность. Таким образом, упорядоченное состояние спинового льда характеризуется случайностью, обусловленной эффектом фрустраций. А беспорядочное высокотемпературное состояние характеризуется случайным процессом, обусловленным температурными флуктуациями.

В работе показано качественное отличие поведения теплоемкости в моделях ближнего действия и дальнего действия. Показана фрустрированность основного состояния в

модели короткодействия, которая выражается в наличии остаточной энтропии. Также продемонстрировано влияние разбавления на высоту и положение максимума теплоемкости в модели короткодействия.

Обнаружены перколяционные пороги разрушения связей между слоями и цепочками спинов при разбавлении $x=0.3$ и $x=0.6$, соответственно. Кроме того, продемонстрировано влияние внешнего магнитного поля на поведение графика теплоемкости, объяснено изменение высоты и положения пиков теплоемкости в моделях близкого действия и дальнего действия.

Список литературы

- [1] Skjærø S. H., Marrows C. H., Stamps et R. L. al., “Advances in artificial spin ice”, *Nature Reviews Physics*, **2**, (2020), 13–28.
- [2] Shevchenko Y., Makarov A., Nefedev K., “Effect of long- and short-range interactions on the thermodynamics of dipolar spin ice”, *Physics Letters A*, **381**:5, (2017), 428–434.
- [3] Morrison M. J., Nelson T. R., Nisoli C., “Unhappy vertices in artificial spin ice: new degeneracies from vertex frustration”, *New Journal of Physics*, **15**:4, (2013), 045009.
- [4] Dasgupta S., Wang X., French K. M., Villalobos E., “Xbp1s-FoxO1 axis governs lipid accumulation and contractile performance in heart failure with preserved ejection fraction”, *Nature communications*, **12**:1, (2021), 1684.
- [5] Sahoo S., May A., van Den Berg A., Mondal et A. K. al., “Observation of coherent spin waves in a three-dimensional artificial spin ice structure”, *Nano Letters*, **21**:11, (2021), 4629–4635.
- [6] Sahoo S., Mondal S., Williams G., May A., “Ultrafast magnetization dynamics in a nanoscale three-dimensional cobalt tetrapod structure”, *Nanoscale*, **10**:21, (2018), 9981–9986.
- [7] Keller L., Mamoori M. Al, Pieper J., Gspan C., “Direct-write of free-form building blocks for artificial magnetic 3D lattices”, *Scientific reports*, **8**:1, (2018), 6160.
- [8] Koraltan S., Slanovc F., Bruckner F., Nisoli C., “Tension-free Dirac strings and steered magnetic charges in 3D artificial spin ice”, *npj Computational Materials*, **7**:1, (2021), 125.
- [9] Shevchenko Y., Strongin V., Kapitan V., Soldatov K., “Order and disorder, crossovers, and phase transitions in dipolar artificial spin ice on the Cairo lattice”, *Physical Review E*, **106**:6, (2022), 064105.
- [10] Капитан В. Ю., Васильев Е. В., Шевченко Ю. А., Пержу А. В., “Термодинамические свойства систем спинов Гейзенберга на квадратной решетке с взаимодействием Дзялошинского–Мория”, *Дальневост. матем. журн.*, **20**:1, (2020), 63–73
Mi <http://mi.mathnet.ru/dvmg420>, doi <https://doi.org/10.47910/FEMJ202007>.
- [11] Wang R. F., Nisoli C., Freitas R. S., Li J., “Artificial “spin ice” in a geometrically frustrated lattice of nanoscale ferromagnetic islands”, *Nature*, **439**:7074, (2006), 303–306.
- [12] Stoner E. C., Wohlfarth E. P., “A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys”, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, **240**:826, (1948), 559–642.
- [13] Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth et M. N. al., “Equation of state calculations by fast computing machines”, *The journal of chemical physics*, **21**:6, (1953), 1087–1092.
- [14] Hastings W. K., “Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their application”, *Biometrika*, **57**, (1970), 97–109.

- [15] Makarova K., Makarov A., Strongin et V. al., “Canonical Monte Carlo multispin cluster method”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **427**, (2023), 115153.
- [16] Макарова К.В., Макаров А.Г., Падалко М.А., Стронгин В.С., “Мультиспиновый Монте-Карло метод”, *Дальневост. матем. журн.*, **20**:2, (2020), 212–220
 Mi <http://mi.mathnet.ru/dvmg433>, doi <https://doi.org/10.47910/FEMJ202020>.
- [17] Le Guillou J. C., Zinn-Justin J., “Critical exponents from field theory”, *Physical Review B*, **21**:9, (1980), 3976.
- [18] Vaz C. A. F., Bland J. A. C., Lauhoff G., “Magnetism in ultrathin film structures”, *Reports on Progress in Physics*, **71**:5, (2008), 056501.
- [19] Aharony A., Harris A. B., Wiseman S., “Critical disordered systems with constraints and the inequality $\nu > 2/d$ ”, *Phys. Rev. Lett.*, **81**:2, (1998), 252.
- [20] Marques M. I., Gonzalo J. A., “Self-averaging of random and thermally disordered diluted Ising systems”, *Phys. Rev. E*, **60**:2, (1999), 2394.

Поступила в редакцию
30 ноября 2023 г.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №23-22-00328, <https://rscf.ru/project/23-22-00328/>
 Представленные в работе результаты были получены на суперкомпьютерном вычислительном кластере Института прикладной математики ДВО РАН.

Strongin V. S.^{1,2}, *Ovchinnikov P. A.*^{1,2}, *Lobanova E. A.*², *Treflov I. V.*^{1,2}, *Shevchenko Y. A.*^{1,2} Diluted cubic spin ice model. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2024. V. 24. No 1. P. 120–132.

¹Institute for Applied Mathematics, Far Eastern Branch, Russian Academy of Sciences

²Department of theoretical physics, Far Eastern Federal University, Russia

ABSTRACT

In this paper we consider a model of Ising-like point dipoles located on the edges of a simple cubic lattice. The temperature behaviour of heat capacity, magnetization and magnetic susceptibility in the nearest-neighbour model and the model with a limited long-range interaction radius is obtained by the Metropolis method. Three thermodynamic magnetic phases are present in the system: long-range order, short-range order, and disorder. The long-range order phase is absent in the nearest-neighbour model. The short-range order phase is characterised by a high level of entropy induced by the lattice geometry. An external magnetic field along one of the basis axes leads to the competition of order parameters in the model with a limited long-range interaction radius, and to the disappearance of residual entropy as a heat capacity peak in the nearest-neighbour model. The nonlinear dependence of the critical temperature of heat capacity on the concentration of dilution of the system by nonmagnetic vacancies in the nearest-neighbour model is shown.

Key words: *cubic spin ice, Metropolis algorithm, statistical thermodynamics.*