

УДК 519.6+536.75+519.245

MSC2020 82B30 + 68U99

© В. С. Стронгин^{1,2}; Э. А. Лобанова^{1,2}; М. Д. Черкасов²; И. В. Трефилов¹;
П. А. Овчинников^{1,2}; Ю. А. Шевченко^{1,2}

Термодинамика и основные состояния спинового льда на объемной гексагональной решетке

В работе рассмотрена магнитная структура Изинг-подобных точечных диполей, расположенных на ребрах трехмерной гексагональной решетки с векторами магнитных моментов, ориентированными вдоль ребер решетки. Объемная решетка спинового льда представляет собой многослойно уложенную плоскую гексагональную решетку без сдвига слоев относительно друг друга. Между слоями добавлены диполи с магнитным моментом, направленным перпендикулярно слою. Такие межслойные диполи корреляционно связывают конфигурации в узлах решетки и влияют на магнитное упорядочение структуры спинового льда. Аналитически получено критическое расстояние между слоями, при котором все парные энергии спинов, прилегающих к узлу решетки, скомпенсированы. Для трех случаев, когда расстояние меньше критического, равно и больше критического, описаны конфигурации основных состояний. Методом Метрополиса для всех трех случаев получены температурные поведения средней энергии и теплоемкости. Во всех случаях в системе присутствуют две температурные фазы: «порядок» и «беспорядок», — в то время как для двумерного спинового льда на гексагональной решетке фаза порядка делится на «дальний» и «ближний». Для случая, когда межслойное расстояние ниже критического, основное состояние не вырождено, в системе доминирует ближний порядок. Для случая, когда межслойное расстояние выше критического, кратность вырождения основного состояния зависит от числа спинов, упорядочение системы также задается ближайшими диполь-дипольными взаимодействиями. При межслойном расстоянии, равном критическому, основное состояние вырождено в 6 раз, ближние взаимодействия полностью скомпенсированы, доминирует дальний порядок.

Ключевые слова: Гексагональный спиновый лед, алгоритм Метрополиса, статистическая термодинамика.

DOI: <https://doi.org/10.47910/FEMJ202424>

¹ Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 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: strongin.vs@dvfu.ru (В. С. Стронгин).

Введение

Искусственный спиновый лед — это группа метаматериалов, состоящих из ферромагнитных наночастиц вытянутой формы, расположенных в пространстве так, что образующаяся магнитная структура проявляет коллективные магнитные свойства, которыми не обладает отдельная наночастица. Геометрия размещения наночастиц в пространстве является основным варьируемым параметром, влияющим на магнитные свойства полученного метаматериала. Наночастицы являются однодоменными. Для перемагничивания наночастицы достаточно магнитного поля, наводимого соседними. Наночастицы взаимодействуют посредством диполь-дипольного обмена.

В природных трехмерных материалах между спинами атомов металлов действует простая обменная связь, которую можно обобщить до модели Гейзенберга при описании коллективного поведения атомов. В модели Гейзенберга каждый спин представлен в виде трехмерного вектора. В некоторых случаях параметры материала допускают упрощение до модели Изинга, где значение спина — скалярная величина, определяемая дискретными значениями ± 1 . Эти модели позволяют математически описать процесс смены фаз материала между «ферромагнетиком» и «парамагнетиком», источником беспорядка в которых являются случайные температурные флуктуации. Экспериментальное наблюдение за значениями спинов атомов объемного кристалла одновременно в хорошем пространственном и временном разрешении невозможно при текущем уровне развития методов микроскопии. Искусственные материалы спинового льда позволяют в наномасштабе имитировать поведение спинов Изинга на двумерных решетках [1]. Благодаря площади поверхности nanoостровка порядка 20000 нм^2 возможно экспериментальное наблюдение за процессом фазового перехода с хорошим пространственным и временным разрешением. А отсутствие ограничений в геометрии расположения nanoострочков в материале позволяет конструировать магнитные системы, обладающие свойствами, не проявляющимися в натуральных материалах. Для исследования влияния температуры на процесс упорядочения спинового льда имеет смысл избавиться от всех других источников случайности. Преимущественно исследуются геометрии периодических решеток с гомогенной геометрией nanoострочков.

Геометрия решетки может накладывать ограничения на конфигурации, из-за которых не все парные магнитные взаимодействия между наномагнитами 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. Фрустрированные системы не укладываются в каноническую картину классификации магнитных фазовых переходов. В таких системах, помимо фаз «порядок» и «беспорядок», могут присутствовать дополнительные, каждая из которых характеризуется разными критериями упорядоченности (параметрами порядка).

Не всех эффектов можно добиться в двумерных решетках из-за низкой (по срав-

нению с трехмерными структурами) плотности упаковки частиц на решетке. Использование объемного вместо плоского искусственного спинового льда позволяет добиться более устойчивых и стабильных экзотических магнитных фаз и, как следствие, более плотной упаковки электронных устройств, использующих в основе работы эффекты спинового льда. Достижения в области трехмерной нанолитографии позволяют создавать материалы, которые напрямую имитируют геометрию объемного спинового льда, но с возможностью настройки магнитного момента спина и геометрии решетки.

Трехмерные структуры искусственного спинового льда более подвержены эффектам фрустраций, чем двумерные, и могут обладать такими эффектами, как струны Дирака и подвижные магнитные монополи, которыми можно управлять с помощью приложенного магнитного поля. Как было показано ранее для системы спинового льда на простой кубической решетке [3], эффект фрустраций можно контролировать путем приложения внешнего магнитного поля.

Задача исследования системы взаимодействующих спинов Изинга подобна гравитационной задаче взаимодействия N тел, где так же заранее не известно упорядоченное состояние системы и не существует аналитического решения. Степень свободы каждого тела (макроспина) ограничена одной переменной с дискретным набором значений ± 1 , что дает возможность полного перебора всех возможных конфигураций системы с небольшим числом макроспинов для решения задачи поиска основного состояния. На текущем уровне развития вычислительных устройств максимальное счетное число макроспинов $N = 60$, так как вычислительная сложность растет экспоненциально, как $O(2^N)$. Исследование статистических и коллективных свойств упорядочения систем многих тел имеет смысл когда система избавлена от краевых эффектов и размер системы больше корреляционного расстояния. Для этого необходимо увеличить N минимум на два порядка. Для расчета больших систем за полиномиальное время используется подход Монте-Карло, а именно алгоритм Метрополиса.

Ранее было показано, что в экспериментально исследуемых системах спинового льда поведение макроспинового ферромагнитного наностроек повторяет точечный диполь [2, 4, 5]. Далее термины «спин», «макроспин», «диполь», «частица», «наночастица» будут использованы в качестве синонимов.

Для гексагональной решетки было показано наличие трех фаз магнитного упорядочения [2]. Позже наблюдаемые эффекты были подтверждены экспериментально [6]. Гексагональная решетка имеет альтернативное название «Honeycomb» (перевод: пчелиные соты), такое же упорядочение имеет атомная структура двумерного материала графена. Объемная многослойная структура графена, в которой слои сдвинуты друг относительно друга на половину периода решетки, представляет собой материал графит. В этой работе рассмотрена аналогичная объемная решетка спинового льда, которая представляет собой многослойно уложенную плоскую гексагональную решетку, но без сдвига слоев относительно друг друга. Между слоями добавлены диполи с магнитным моментом, направленным перпендикулярно слою. Такие межслойные диполи корреляционно связывают конфигурации в слоях и влияют на упорядочение. Подобный эффект уже наблюдался в работе [3].

1. Математическая модель

Далее рассматривается система Изинг-подобных точечных магнитных диполей, расположенных на ребрах объемной гексагональной решетки (рис. 1). Точечный диполь расположен в середине ребра, по одному диполю на ребро. Вектор магнитного момента направлен вдоль ребра решетки. На рисунке 1 направления магнитных моментов обозначены стрелками, положения точечных магнитных диполей — точками внутри стрелок, вершины решетки — точками между стрелками. Система состоит из $N=5L^3$ одинаковых диполей, где L — линейный размер либо количество элементарных ячеек вдоль одной из осей. Одна элементарная ячейка состоит из 5 спинов. a, b — параметры решетки, где a определяет расстояния между парой ближайших диполей шестиугольника, b определяет расстояние между спином направленным вдоль оси Z , и ближайшим к нему спином шестиугольника. Расстояние между гексагональными слоями $l=2\sqrt{b^2-\frac{1}{3}}$.

Энергия взаимодействия между диполями i и j определяется как

$$E_{ij,dip} = s_i s_j \left(\frac{(\vec{m}_i \vec{m}_j)}{|\vec{r}_{ij}|^3} - 3 \frac{(\vec{m}_i \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^5} \right), \quad (1)$$

где все векторные переменные приведены к единичной длине, а размерные коэффициенты вынесены в параметр D уравнения (2). \vec{m}_i — момент единичной длины, направление которого для каждого диполя определено геометрией решетки. Момент

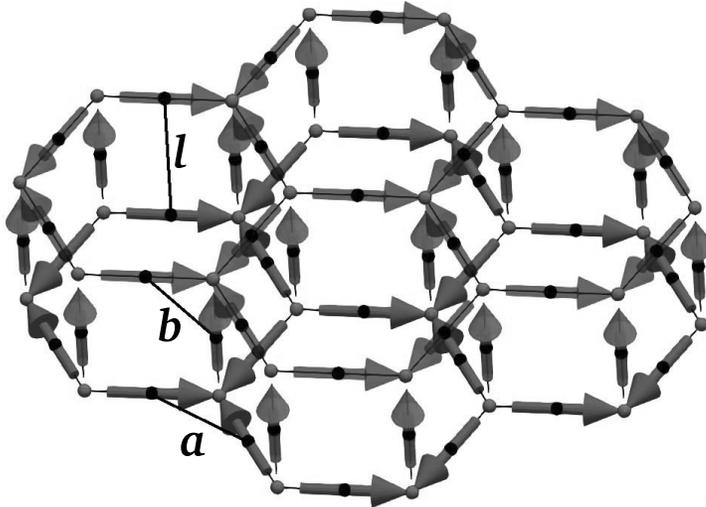


Рис. 1. Схема объемной гексагональной решетки спинового льда. Направления векторов намагниченности обозначены стрелками. a, b — параметры решетки. l — расстояние между слоями.

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 , то есть $|\vec{r}_{ij}| = 1$ для пары диполей, удаленных друг от друга на расстояние a . В уравнении (1) переменными являются только значения s . Часть уравнения в скобках константна и задана геометрией решетки.

Энергия системы определяется как

$$E = D \sum_{\langle i, j \rangle} E_{ij, dip}, \quad (2)$$

где сумма $\langle i, j \rangle$ учитывается для всех взаимодействующих пар диполей. $D = \mu_0 \mu^2 a^{-3}$ — 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.

Диполь-дипольное взаимодействие не ограничено по расстоянию, поэтому полная энергия системы является суммой $N^2/2 - N$ парных энергий. Для перехода от экспоненциальной к полиномиальной вычислительной сложности при подсчете энергии учитываются только пары диполей, для которых $|\vec{r}_{ij}| \leq 2$, то есть для каждого диполя в среднем учтено 32.6 парных взаимодействий.

Удобно рассматривать магнитные конфигурации системы в контексте вершин, а именно прилегающих к вершинам диполей. Вершиной называется узел решетки, расположенный на пересечении ребер. Для 2D-решетки квадратного спинового льда в конфигурациях с минимальной энергией все вершины подчиняются «правилу льда»: два спина намагничены по направлению «к вершине», два «от вершины». В гексагональной решетке спинового льда к вершине прилегают три диполя, и порядок характеризуется правилом: два спина «к вершине» и один «от вершины», либо два спина «от вершины» и два «к вершине». Для этих решеток существует множество конфигураций основного состояния, для них всех выполняется условие соответствия всех вершин правилу льда.

В объемной гексагональной решетке к вершине прилегают 5 диполей, поэтому правило льда определяется следующим образом: три спина намагничены по направлению «к вершине» и два «от вершины», либо два спина «к вершине» и три «от вершины». Три из пяти диполей вершины находятся в плоскости $[XY]$, расстояние между ними задано константой $a = 1$. Энергия пары диполей, соединенных линией a на рисунке 1 $|E_a| = 1.75$ рассчитана по формуле (1).

Для достижения эффекта фрустраций необходимо определить значение переменной b таким образом, чтобы $|E_b| = |E_a|$, где E_b — энергия пары диполей, связанных линией b на рисунке 1.

Для этого выразим из формулы (1) параметр b :

$$E_b = \frac{\sqrt{3b^2 - 1}}{b^5}. \quad (3)$$

График уравнения (3) изображен на рисунке 2. При условии $|E_b| = |E_a| = 1.75$ существует два решения. Первое, $b \approx 0.59$, математически корректно, но физически бессмысленно, так как частицы имеют собственную длину, а такое расстояние не позволит расположить частицы между слоями. Энергии спинов между слоями (связанные прямой l на рисунке 1) в таком случае разрушают равновесие и определяют упорядочение решетки. Второе решение, $b \approx 0.94$, при котором энергии всех парных энергий спинов вершины равны, обозначим как b_c .

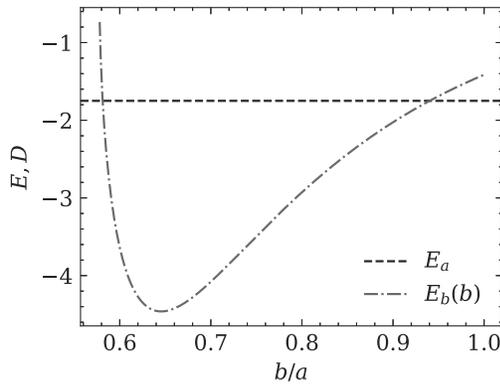


Рис. 2. Зависимость энергии E_b от параметра b .

Проекция системы вдоль оси $[Z]$ аналогична гексагональной решетке спинового льда, вдоль $[X]$ и $[Y]$ — квадратной решетке. Эти решетки были хорошо исследованы как теоретически [2, 7–11], так и экспериментально [12, 13]. При $b < b_c$ доминирует межслойное упорядочение диполей через вертикальные спины, так как слои находятся ближе друг к другу, и в системе должны проявляться эффекты фрустраций, подобные квадратной решетке. При $b > b_c$ основным является внутрислойное упорядочение, и система представляет собой слабо связанные слои гексагональной решетки, которые сами по себе являются сильно фрустрированными [2]. При $b = b_c$ ближайшие парные взаимодействия во всей решетке скомпенсированы, и порядок в системе будут определять дальние парные взаимодействия. Конфигурации основного состояния, энергия и теплоемкость как функции температуры для всех трех случаев будут рассмотрены ниже.

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

Для вычисления термодинамических средних значений используется канонический односпиновый алгоритм Метрополиса [14–17]. 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 на-

чала 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 .

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.

Неравновесные термодинамические эффекты, такие как коэрцитивная сила островка и эффекты Стонера – Вольфарта [18], не рассматриваются в этой работе. Понимается, что все релаксационные неравновесные процессы завершены во время численных экспериментов.

2. Основное состояние

На рисунке 3 изображены основные состояния для различных значений параметра b .

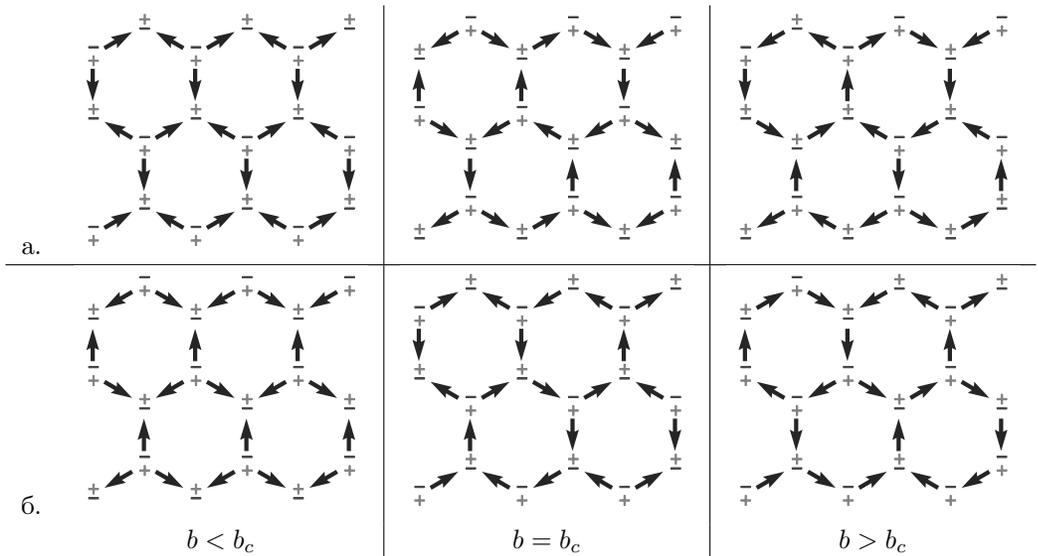


Рис. 3. Схематичное представление конфигураций основных состояний в послойном представлении для четного (а) и нечетного (б) слоев. Направление межслойных спинов обозначено в узлах решетки символом «+» для направления «вверх» и «-» для направления «вниз». Верхний символ — направление спина, находящегося над слоем, нижний символ — под слоем.

При $b < b_c$ структура слоя формируется таким образом, что в тройках частиц, расположенных в вершинах, направления их магнитных моментов направлены либо все к вершине, либо все от вершины. Несмотря на то, что три частицы внутри слоя расположены энергетически невыгодно, из-за того, что $E_b > E_a$, частицы, расположенные между слоями, компенсируют это невыгодное энергетическое состояние тем, что их магнитные моменты ориентированы в противоположную сторону от направлений в вершинах внутри слоя. Слои чередуются: четные слои представляют собой зеркальное отражение нечетных. При $b < b_c$ существует два основных состояния, независимо от N .

При $b = b_c$ для удобства введем понятия «вихрь» и «антивихрь». Под вихрем понимается конфигурация частиц на ребрах гексагонов, при которой все магнитные моменты ориентированы либо по часовой стрелке, либо против нее. Антивихрь — это состояние, в котором половина частиц ориентирована по часовой стрелке, а другая половина — против часовой стрелки. Направления спинов в вихре чередуются через один. Основное состояние слоя можно описать как чередующуюся последовательность конфигураций вида «вихрь – вихрь – антивихрь». При этом соседние вихри всегда имеют противоположные направления, а антивихри не находятся друг рядом с другом. Как и в предыдущем случае, слои чередуются и существует шесть основных состояний. Таким образом, основное состояние слоя полностью повторяет основное состояние гексагонального спинового льда. Поскольку $E_b = E_a$, из-за равенства всех ближних связей порядок определяется дальним взаимодействием. В такого рода системах существует шесть основных состояний.

При $b > b_c$ в каждой вершине выполняется правило льда, однако дальний порядок в виде чередования «вихрей – антивихрей» отсутствует. Несмотря на это, слои продолжают чередоваться, как и в других случаях. Из-за того, что $E_b < E_a$, ближний внутрислойный порядок доминирует, вызывая высокую степень фрустрированности основного состояния. Основные состояния в такого рода системах оцениваются в L^2 штук.

3. Температурное поведение теплоемкости

На рисунке 4а представлена зависимость теплоемкости спинового льда, состоящего из $N = 1080$ диполей ($L = 6$), расположенных на объемной гексагональной решетке. Значения теплоемкости были рассчитаны по формуле

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

где скобки $\langle \rangle$ обозначают термодинамическое усреднение по Гиббсу для заданной температуры T . Теплоемкость определялась независимо для каждой точки температуры. На рисунке приведены результаты вычисления 208 температурных точек, которые соединены линией для удобного визуального восприятия данных.

Легко увидеть, что при разных параметрах b поведение теплоемкости характеризуется одним пиком. Пик теплоемкости является подтверждением фазового перехода. По количеству пиков можно судить о количестве фаз, реализующихся в системе.

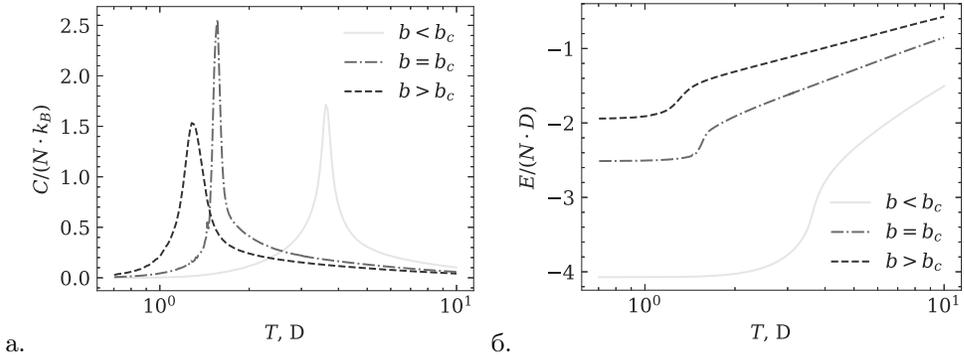


Рис. 4. а. Теплоемкость гексагонального спинового льда из $N = 1080$ диполей ($L = 6$) как функция температуры без влияния внешнего магнитного поля. б. Зависимость средней энергии от температуры.

Для всех трех случаев в системе наблюдается две фазы. Температуры пиков T_c отличаются из-за разного b и ведут себя ожидаемо.

На рисунке 4б представлена зависимость средней энергии от температуры. При понижении температуры средняя энергия уменьшается, пока не доходит до $\langle E \rangle = E_{GS}$ при $T \rightarrow 0$. На графиках видно, что один перегиб энергии соответствует одному пику теплоемкости. Из теплоемкости можно судить о том, что весь порядок обусловлен ближним взаимодействием, которое задается конкуренцией E_a и E_b и разваливается при температуре T_c . Поскольку при $b = b_c$ значения E_a и E_b равны, весь ближний порядок разрушается при одной температуре, что соответствует более высокой величине пика теплоемкости.

Для оценки степени фрустрированности системы воспользуемся параметром фрустрации P_f из [10]. Формула расчета $P_f(T)$ —

$$P_f(T) = \frac{E_{\max} - \langle E \rangle(T)}{2E_{\max}}$$

где $E_{\max} = \sum_{\langle i,j \rangle} |E_{ij,dip}|$. Так, при P_f для 1D, 2D и 3D модели Изинга равен 0, а для гексагональной решетки $P_f = 0.32$.

При $b < b_c$ $P_f = 0.4$. Такой высокий показатель объясняется тем, что каждая тройка частиц внутри слоя находится в возбужденном состоянии.

При увеличении b до b_c параметр фрустрации P_f падает до 0.27. Это поведение объясняется тем, что энергия возбуждения в слоях гексагонального спинового льда компенсируется упорядочиванием между слоями и, соответственно, уменьшением параметра фрустрации.

При $b > b_c$, P_f увеличивается до 0.36. Несмотря на то, что порядок системы разрушен, параметр фрустрации близок к параметру фрустрации обычной гексагональной решетки за счет выполнения правила льда.

4. Заключение

Системы искусственного спинового льда предоставляют уникальную возможность воссоздать в наномасштабе поведение структуры взаимодействующих друг с другом спинов Изинга. Благодаря размеру nanoостровков становится возможным экспериментальное наблюдение с хорошим пространственным и временным разрешением. Их геометрия позволяет тонко настраивать время релаксации наночастицы, а геометрия решетки — контролировать эффекты фрустраций.

В настоящей работе мы рассмотрели трехмерную структуру, которая представляет собой слои гексагонального спинового льда, уложенные друг относительно друга на расстоянии l вдоль оси $[Z]$. В середине между слоями добавлены спины, направленные к вершинам гексагональной решетки перпендикулярно слою. Мы ввели параметр b — расстояние между межслойным спином и ближайшим к нему внутрислойным спином такой, что $l = 2\sqrt{b^2 - \frac{1}{3}}$. Изменение межслойного расстояния приводит к изменению баланса между энергиями взаимодействия внутри слоя и между слоями.

Аналитически получено критическое значение $b_c \approx 0.94$, при котором энергия пары ближайших внутрислойных спинов равна энергии пары внутрислойного и межслойного спинов. Показано как изменение b влияет на термодинамическое поведение и энтропию системы на примере трех случаев: $b < b_c$, $b = b_c$, $b > b_c$. Обнаружено, что при $b < b_c$ возможны только 2 основных состояния, при $b = b_c$ возможно 6 основных состояний, при $b > b_c$ 8 основных состояний было найдено для $L = 2$. Необходимо заметить, что только при $b > b_c$ число основных состояний увеличивается при увеличении L и оценивается как L^2 . Для всех остальных случаев число основных состояний константно. Это является дополнительным подтверждением наличия фрустраций.

Методом Метрополиса были получены средняя энергия и теплоемкость как функции температуры. Двумерная гексагональная решетка спинового льда имеет три фазы упорядочения [2]. Трехмерная ее версия имеет две фазы и один пик теплоемкости при любых значениях b . При $b = b_c$ ближние диполь-дипольные взаимодействия в узле полностью скомпенсированы, при этом упорядочение определяется более дальними парами. Тепловую энергию можно рассматривать как хаотизирующий фактор, где температура фазового перехода пропорциональна энергии взаимодействий, которые разрушаются этой температурой. Для фазового перехода «порядок» — «беспорядок» при $b = b_c$ необходимо одновременно разрушить дальний и ближний порядок. При всех остальных значениях b разрушается только ближний порядок. Это объясняет причину, по которой значение теплоемкости в пике при $b = b_c$ сильно выше всех других случаев, а значение P_f сильно ниже.

Список литературы

- [1] Skjærvø S. H., Marrows C. H., Stamps R. L., Heyderman L. J., “Advances in artificial spin ice”, *Nature Reviews Physics*, **2:1** (November 2019), 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] Стронгин В. С., Овчинников П. А., Лобанова Э. А., Трефилов И. В., “Разбавленная модель кубического спинового льда”, *Дальневост. матем. журн.*, **24**:1, (2024), 120–132.
- [4] Makarova K., Strongin V., Titovets I., Syrov A., “Low-energy states, ground states, and variable frustrations of the finite-size dipolar Cairo lattices”, *Physical Review E*, **103**:4 (Apr 2021), 042129.
- [5] 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.
- [6] Hoffhuis K., Skjærvø S. H., Parchenko S., Arava H., “Real-space imaging of phase transitions in bridged artificial kagome spin ice”, *Nature Physics*, **18**:6 (April 2022), 699–705.
- [7] Chern G.-W., Mellado P., Tchernyshyov O., “Two-stage ordering of spins in dipolar spin ice on the kagome lattice”, *Physical review letters*, **106**:20 (May 2011), 207202.
- [8] Chern G.-W., Tchernyshyov O., “Magnetic charge and ordering in kagome spin ice”, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **370**:1981, (2012), 5718–5737.
- [9] Möller G., Moessner R., “Magnetic multipole analysis of kagome and artificial spin-ice dipolar arrays”, *Physical Review B*, **80**:14 (Oct 2009), 140409(R).
- [10] Makarov A. G., Makarova K., Shevchenko Y. A., Andriushchenko P. D., “On the numerical calculation of frustrations in the Ising model”, *JETP Letters*, **110**:10, (2019), 702–706.
- [11] Капитан В. Ю., Васильев Е. В., Шевченко Ю. А., Пержу А. В., “Термодинамические свойства систем спинов Гейзенберга на квадратной решетке с взаимодействием Дзялошинского–Мория”, *Дальневосточный математический журнал*, **20**:1, (2020), 63–73.
- [12] Arnalds U. B., Farhan A., Chopdekar R. V., Kapaklis V., “Thermalized ground state of artificial kagome spin ice building blocks”, *Applied Physics Letters*, **101**:11, (2012), 112404.
- [13] Wang I. R., Nisoli C., Freitas R., Li J., “Artificial ‘spin ice’ in a geometrically frustrated lattice of nanoscale ferromagnetic islands”, *Nature*, **439**:7074, (2006), 303–306.
- [14] Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., “Equation of state calculations by fast computing machines”, *The journal of chemical physics*, **21**:6, (1953), 1087–1092.
- [15] Hastings W. K., “Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications”, *Biometrika*, **57**:1, (1970), 97–109.
- [16] Makarova K., Makarov A., Strongin V., Titovets I., “Canonical Monte Carlo multispin cluster method”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **427**, (2023), 115153.
- [17] Makarova X. V., Makarov A. G., Padalko M. A., Strongin V. S., “Multispin Monte Carlo Method”, *Dal’nevostochnyi Matematicheskii Zhurnal*, **20**:2, (2020), 212–220.
- [18] Stoner E. C., Wohlfarth E., “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), 599–642.

Поступила в редакцию
15 октября 2024 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}; *Lobanova E. A.*^{1,2}; *Cherkasov M. D.*²; *Trefilov I. V.*¹; *Ovchinnikov P. A.*^{1,2}; *Shevchenko Y. A.*^{1,2} Thermodynamics and ground states of spin ice on a bulk hexagonal lattice. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2024. V. 24. No 2. P. 268–279.

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

²Department of theoretical physics, Far eastern federal university, Russia

ABSTRACT

The paper considers the magnetic structure of Ising-like point dipoles located on the edges of a three-dimensional hexagonal lattice with vectors of magnetic moments oriented along the edges of the lattice. The volume lattice of spin ice is a multilayer stacked flat hexagonal lattice without shifting the layers relative to each other. Between the layers are added dipoles with magnetic moment directed perpendicularly to the layer. Such interlayer dipoles correlate the configurations in the lattice nodes and influence the magnetic ordering of the spin ice structure. The critical distance between layers at which all pairwise energies of spins adjacent to the lattice node are compensated is analytically obtained. For three cases when the distance is less than critical, equal and greater than critical, the configurations of ground states are described. The temperature behaviors of the mean energy and heat capacity are obtained by the Metropolis method for all three cases. In all cases in the system there are two temperature phases “order and “orderless”, while for two-dimensional spin ice on a hexagonal lattice the order phase is divided into “far” and “close”. For the case when the interlayer distance is below the critical distance, the ground state is not degenerate, the system is dominated by the near order. For the case when the interlayer distance is above the critical distance, the multiplicity of degeneracy of the ground state depends on the number of spins, the ordering of the system is also given by the nearest dipole-dipole interactions. When the interlayer distance is equal to the critical distance, the ground state is degenerate 6 times, the near interactions are fully compensated, and the long-range order dominates.

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