

УДК 519.6+536.75+519.245

MSC2020 82B30 + 68U99

© В. С. Стронгин<sup>1,2</sup>; Ю. А. Шевченко<sup>2,3</sup>; К. В. Нефедев<sup>1,2</sup>

## Нарушение эргодичности фрустрированных спиновых систем

В работе исследуется эргодичность дипольных спиновых систем с различной геометрией решёток с использованием метрики Тирумалай – Маунтейн, определяемой по цепочке микросостояний, сгенерированной каноническим алгоритмом Метрополиса. Рассматриваются классическая двумерная модель Изинга на квадратной решётке, вершинно-фрустрированная двумерная кагоме-решётка и послойно уложенная трёхмерная кагоме-решётка с дальнедействующим дипольным взаимодействием. Анализ температурной зависимости ТМ-метрики и скорости эргодизации позволяет явно проследить влияние критического замедления и геометрической фрустрации на восстановление эргодичности. Полученные для двумерных решёток результаты согласуются с известными ранее данными и подтверждают, что в квадратной решётке Изинга эргодичность нарушается только вблизи критической температуры, тогда как в кагоме-решётке фрустрация приводит к сохранению неэргодичного поведения в широком низкотемпературном диапазоне. Показано, что для трёхмерного кагоме спинового льда эргодичность реализуется лишь в парамагнитной фазе, тогда как в упорядоченной и замороженной фазах система остаётся практически неэргодичной. Эти результаты демонстрируют, что анализ ТМ-метрики может служить практическим критерием применимости алгоритма Метрополиса для получения термодинамических средних во фрустрированных спиновых системах.

**Ключевые слова:** *гексагональный спиновый лёд, алгоритм Метрополиса, статистическая термодинамика.*

DOI: <https://doi.org/10.47910/FEMJ202613>

### Введение

Модель Изинга — это упрощённая математическая модель, позволившая объяснить физику фазовых переходов, используя статистический подход к описанию

<sup>1</sup> Департамент теоретической физики и интеллектуальных технологий, Институт наукоемких технологий и передовых материалов, Дальневосточный федеральный университет. 690922, Россия, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10.

<sup>2</sup> Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7.

<sup>3</sup> Научный центр информационных технологий и искусственного интеллекта, Научно-технологический университет «Сириус», 354340, Россия, Федеральная территория «Сириус», Олимпийский пр., д.1

Электронная почта: [strongin.vs@dvfu.ru](mailto:strongin.vs@dvfu.ru) (В. С. Стронгин).

термодинамических состояний. Существует множество вариаций этой модели, которые отличаются числом состояний спина, законом взаимодействия между ними (модель Поттса, Гейзенберга, дипольная и т.д.) и топологией связей между спинами.

Свободная энергия для физической системы с фиксированным числом частиц определяется как  $F = E - T \cdot S$ , где  $E$  — внутренняя энергия,  $T$  — температура,  $S$  — энтропия. Этот закон применяется к процессам, которые всегда находятся во мгновенном равновесии (т. е. к «квазистатическим» процессам), и в общем случае сводится к первому началу термодинамики, согласно которому изменение внутренней энергии равно тепловому потоку, поступающему в систему, за вычетом работы, выполняемой системой. Однако второе начало термодинамики — увеличение энтропии — выходит за рамки рассмотрения равновесия. В течение достаточно длительного времени энтропия всегда растет до состояния максимального значения, которое свидетельствует о состоянии теплового равновесия. Согласно третьему началу термодинамики  $S$  минимальна при  $T \rightarrow 0$  так же, как и  $E$ . Минимальной энергии могут соответствовать несколько конфигураций системы (обозначим их как  $G_{gs}$ ), и в таком случае  $S = k_B \ln [G_{gs}]$ , что принято называть остаточной энтропией.

Магнитная система в определенный момент времени находится в некотором микросостоянии. Микросостояние развивается в соответствии с динамикой, которая статистически задается распределением Гиббса. Статистико-механический подход к описанию магнитной системы не подразумевает динамических эффектов, то есть подразумевается, что в  $F$  отсутствуют вклады энергий, вызванные внешними причинами.

Классическое обоснование этого подхода опирается на понятие эргодичности. Эргодическая гипотеза предполагает, что для любой термодинамической системы и для типичных начальных условий средние по времени величины равны термодинамическому среднему значению по микросостояниям. Временные масштабы, характеризующие процесс релаксации, экспоненциально возрастают при понижении температуры и обычно невозпроизводимы экспериментально. Предполагается, что усреднение по ансамблю микросостояний, удовлетворяющему закону распределения Гиббса, можно использовать как альтернативу усреднению ансамбля микросостояний по времени. Это допущение работает только для эргодичных систем. Поэтому перед статистическим исследованием термодинамики по ансамблю микросостояний конкретной системы крайне необходимо доказать её эргодичность.

Например, модель Изинга на простой квадратной решетке является эргодичной при любой температуре, кроме температуры фазового перехода, в то время как модель спинового льда на решетке Апамея является эргодичной только при температурах выше фазового перехода [1]. Существует множество вариаций модели Изинга, где геометрия решетки может накладывать конфигурационные ограничения, из-за которых не все парные взаимодействия могут быть одновременно удовлетворены при  $T \rightarrow 0$ , что обычно сопровождается высокой остаточной энтропией. Это явление называется фрустрацией, а системы — фрустрированными. Отдельным классом являются вершинно-фрустрированные решетки [2,3], в которых коллективное упорядочение спинов рассматривается в контексте вершин решетки, к которым эти спины примыкают. Причиной вершинных фрустраций является невозможность

всех вершин пребывать в конфигурации с наименьшей энергией из-за топологических ограничений. К ним относятся модифицированные структуры квадратного спинового льда [4], такие как Brickwork [5, 6], Shakti [7–9], Tetris [10], Santa Fe [11], Saint George [12] и другие, такие как Kagome [8, 13–17] и Cairo [18–22].

Открытым является следующий вопрос: всегда ли вершинные фрустрации приводят к нарушению эргодичности? Эргодичность некоторых решеток проверена натурным экспериментом [1, 23, 24]. Для статистического исследования термодинамики распространенным инструментом является численный метод Метрополиса [25–27], результатом работы которого является ансамбль микросостояний, чья энергия имеет распределение Гиббса. Принято считать, что сама последовательность микросостояний (цепь Маркова) не имеет физического смысла и не может быть использована для описания термодинамического поведения системы. В работе [28] на примере переохлажденной жидкости была предложена метрика определения эргодичности на основе цепочки микросостояний. Впоследствии метрика была адаптирована [29] для модели Изинга и называется фамилиями авторов «Тирумалай – Маунтейн» (ТМ).

В этой работе демонстрируется поведение ТМ-метрики для моделей Изинга на примере нескольких геометрий решеток. Сравнивается простая квадратная решетка, Kagome 2D решетка, которая является вершинно-фрустрированной, а также послойно уложенная 3D Kagome [30], показывающая фрустрации при определенном значении расстояния между слоями. Последовательность микросостояний получена Монте-Карло семплированием в рамках канонического алгоритма Метрополиса, который по определению должен работать только для эргодичных систем. Таким образом показано, что решение о применимости алгоритма Метрополиса для получения термодинамических средних можно принимать на основе анализа последовательности микросостояний, полученных этим же алгоритмом Метрополиса.

## 1. Математическая модель. Метод Метрополиса

Модель Изинга представляет собой систему взаимодействующих друг с другом спинов, каждый из которых принимает дискретное значение  $s_i = \pm 1$ . Энергия системы задается выражением:

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} s_i s_j,$$

где  $J_{i,j}$  — обменная константа, определяющая знак и силу взаимодействия каждой пары спинов. Суммирование проходит по всем уникальным парам взаимодействия. Правило определения парных спинов приведено далее для каждой решетки отдельно. Значения  $s_i$  в модели являются переменными, в то время как  $J_{ij}$  константны и определены фиксированной геометрией решетки:

$$J_{ij} = \frac{(\vec{m}_i \vec{m}_j)}{|\vec{r}_{ij}|^3} - 3 \frac{(\vec{m}_i \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^5}.$$

Здесь  $r_{ij}$  — радиус-вектор между спинами  $i$  и  $j$ ,  $\vec{m}_i$  — базовое направление вектора магнитного момента спина  $i$ . Переворотом спина  $i$  называется смена знака переменной  $s_i$ , которая в используемой модели приводит к смене направления соответствующего вектора  $\vec{m}_i$  на противоположное.

Классическая модель Изинга на квадратной решетке является частным случаем, где между всеми парами ближайших спинов одинаковое расстояние и  $\vec{m}_i$  всех спинов идентично, следовательно  $J_{i,j} = J$ , и магнитные свойства определяются только знаком  $J$  и правилом определения парных спинов. Уравнение энергии упрощается до следующего:

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad J = \pm 1.$$

Рассмотрены три решетки: классическая модель Изинга на квадратной решетке, двумерная кагоме-решетка и трехмерная кагоме-решетка.

Классическая двумерная модель Изинга описывает систему спинов, расположенных на узлах квадратной решетки и взаимодействующих с ближайшими соседями в отсутствие внешнего поля. Эта модель имеет точное решение [31], что делает ее удобным полигоном для исследования. В данной модели рассматриваются частицы, расположенные в узлах квадратной решетки. Частицы расположены в плоскости XY, а моменты частиц расположены вдоль оси Z. В парных взаимодействиях учитываются только ближайшие соседи.

Двумерная кагоме-решетка описывает спины Изинга на ребрах гексагональной решетки. Система является геометрически фрустрированной, что делает ее интересной для исследования. Все расстояния в решетке нормированы на расстояние между ближайшими соседями.

Трехмерная кагоме-решетка представляет собой слои двумерной кагоме-решетки, соединенные между собой дополнительными спинами. Более подробно параметры данных решеток описаны в [30]. Расстояние между слоями выбрано таким, чтобы энергия ближайших парных взаимодействий между спинами внутри слоя была равна энергии взаимодействия межслойного спина с ближайшими к нему спинами слоя. Благодаря этому в системе достигается максимальный уровень остаточной энтропии и, как следствие, высокий уровень фрустраций.

Для решеток кагоме использовалась модель с неограниченным радиусом взаимодействия, а для модели Изинга — модель ближайших соседей. Для каждой исследуемой температуры было выполнено пять запусков программы с различными начальными значениями генератора псевдослучайных чисел.

Таблица 1. Число частиц в исследуемых моделях.

Модель	Число частиц $N$
Двумерная Изинга	1600
Двумерная кагоме	1200
Трехмерная кагоме	1080

Плотность распределения энергий термодинамической системы определяется распределением Гиббса. Последовательность микросостояний, удовлетворяющих распределению, в этой работе получена алгоритмом Метрополиса. Каждую итерацию предпринимается попытка переворота случайного спина ( $s_i \rightarrow -s_i$ ) с вероятностью

$$P_{\text{acc}} = \min \left( 1, \exp \left( -\frac{\Delta E}{k_B T} \right) \right),$$

где  $\Delta E$  — изменение энергии системы в результате переворота спина,  $T$  — температура,  $k_B$  — постоянная Больцмана.  $T$  является частью распределения Гиббса и является константой во время семплирования. Один Монте-Карло шаг (МК-шаг) включает в себя  $N$  попыток переворота случайно выбранных спинов, где  $N$  — число спинов в системе.

За стартовую конфигурацию семплирования берется конфигурация с минимальной найденной энергией; если в процессе вычислений встречается конфигурация с более низкой энергией, то она становится новым стартовым состоянием, а алгоритм перезапускается сначала. Первые 50000 МК-шагов исключаются из расчетов, чтобы нивелировать влияние начальной конфигурации и связанной с ней цепочки микросостояний на итоговое распределение.

Измерения наблюдаемых величин не выполняются после каждого отдельного переворота спина, а делаются каждый МК-шаг, чтобы уменьшить корреляцию между последовательными отсчётами. В работе используются периодические граничные условия для исключения эффекта границ.

## 2. Метрика Тирумалай – Маунтейн

Метрика ТМ используется для определения эргодичности на основе последовательности микросостояний, полученных алгоритмом Метрополиса. Метрика определяется как

$$\Omega(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [g_i(t) - \langle g(t) \rangle_t]^2,$$

где  $g_i(t)$  — усредненное значение спина  $i$  по первым  $t$  МК-шагам цепочки микросостояний:

$$g_i(t) = \frac{1}{t} \sum_{j=1}^t s_i(t_j),$$

а  $\langle g(t) \rangle_t$  — усреднённое по спином значение  $g$  на шаге  $t$ :

$$\langle g(t) \rangle_t = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N g_j(t).$$

Метрика ТМ измеряет разброс временных средних значений наблюдаемой  $g$  по разным спином. В эргодической системе, по мере роста времени наблюдения, временные средние для всех спинов должны сходиться к общему значению, что приводит к уменьшению  $\Omega(t)$  к нулю при  $t \rightarrow \infty$ . Таким образом, поведение  $\Omega(t)$  во времени служит индикатором эргодичности системы. В качестве наблюдаемой  $g$  в данной работе используется ориентация спина  $s_i = \pm 1$ .

Для вычисления скорости эргодизации системы используется нормированная обратная метрика ТМ:

$$R(t) = \frac{\Omega(0)}{\Omega(t)}.$$

Поведение  $R(t)$  во времени позволяет оценить скорость эргодизации: в эргодической системе  $R(t)$  растёт с течением времени, отражая уменьшение разброса временных средних значений спинов. В неэргодической системе  $R(t)$  остаётся малым или стагнирует, указывая на отсутствие сближения временных средних значений спинов. Поведение  $R(t)$  аппроксимируется функцией вида  $R(t) = D \cdot t + C$ , где параметр  $D$  характеризует скорость эргодизации системы.

### 3. Результаты численного моделирования

На рисунке 1 представлено поведение ТМ-метрики для критических точек и замороженного состояния для исследуемых решеток. В модели Изинга на квадратной решётке при  $T < T_{c_1}$  величина  $\Omega$  быстро стремится к нулю, что соответствует быстрой эргодизации системы. Вблизи  $T = T_{c_1}$  затухание  $\Omega$  занимает больше МК-шагов, чем при любой другой температуре, что указывает на эффект «критического замедления».

2D кагоме-решетка имеет две критические температуры —  $T_{c_1}$  и  $T_{c_2}$ , которые разделяют три термодинамические фазы [14] «порядок» — «замороженный беспорядок» — «беспорядок». Вторым важным отличием от модели Изинга на простой квадратной решетке является то, что упорядоченная фаза характеризуется высоким уровнем остаточной энтропии. В отличие от квадратной решетки, при  $T < T_{c_1}$  ТМ-метрика не изменяется и  $\Omega$  остается крайне малой. Также на графике 1 видно отличие в форме линий  $\Omega$  при  $T_{c_1}$  и  $T_{c_2}$ , объясняемое разными типами фазовых переходов.

В термодинамике трёхмерной кагоме-решетки, так же как и в двумерном случае, есть две критические температуры:  $T_{c_1}$  и  $T_{c_2}$ . Как и в двумерном случае,  $\Omega$  при  $T < T_{c_1}$  практически не изменяется. Главным отличием от предыдущих результатов является то, что  $\Omega$  при  $T_{c_1}$  стремится к ненулевому значению в бесконечном пределе

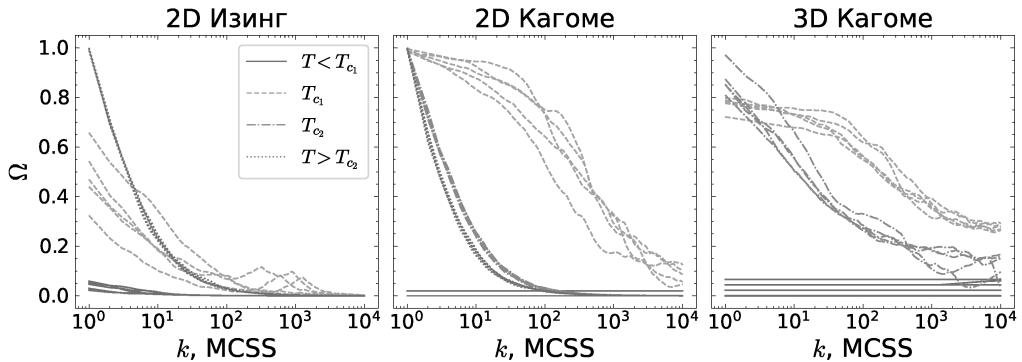


Рис. 1. Зависимость ТМ-метрики от МК-шагов для двумерной модели Изинга, двумерной кагоме-решётки и трёхмерной кагоме-решётки вблизи критических точек. Несколько однотипных линий соответствуют различным запускам.

МК-шагов.

Чтобы наглядно показать динамику  $\Omega(T)$ , на рисунке 2 мы изобразим начальные ( $\Omega_{start}$ ) и конечные ( $\Omega_{last}$ ) значения ТМ-метрики, а также скорость эргодизации  $D$  в зависимости от температуры. Легко увидеть, что резкому изменению  $\Omega_{start}$  соответствуют критические температуры  $T_{c_1}$  и  $T_{c_2}$ . Для трёхмерной кагоме-решётки в диапазоне  $T_{c_1} < T < T_{c_2}$  формируется устойчивое плато с величиной  $\Omega_{last} \simeq 0.26$ . Дальнейшее понимание происхождения этого режима требует отдельного анализа.

На графиках скорости эргодизации  $D$  отчетливо видна критическая точка фазового перехода второго рода: вблизи  $T_c$  скорость падает почти до нуля вследствие критического замедления. Для квадратной решётки Изинга после фазового перехода эргодизация восстанавливается, тогда как для кагоме-решёток — нет. Такое поведение может быть связано с существенно более сложным энергетическим ландшафтом, формируемым дальними взаимодействиями.

## Заключение

В этой работе было проведено исследование температурного поведения дипольных спиновых систем с использованием модели Изинга на различных геометриях решеток, с акцентом на влияние фрустрации и критического замедления на эргодичность. Используя численный метод Метрополиса, мы показали, как информацию о скорости изменения цепочки микросостояний можно использовать для оценки эр-

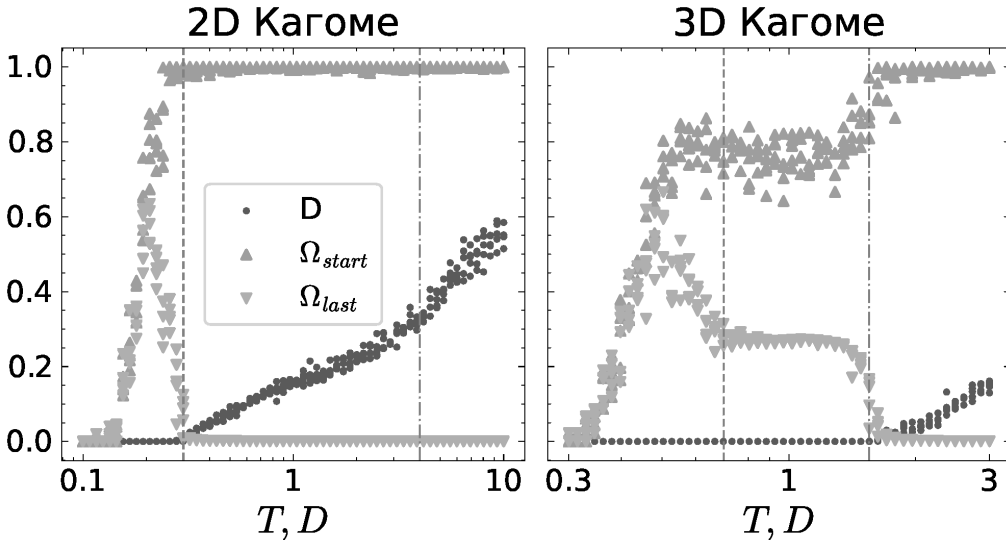


Рис. 2. Начальные ( $\Omega_{start}$ ) и конечные ( $\Omega_{last}$ ) значения ТМ-метрики, а так же скорость эргодизации  $D$  в зависимости от температуры. Пунктирной линией указана температура  $T_{c_1}$ , штрихпунктирной —  $T_{c_2}$ .

годичности исследуемой магнитной системы. Наглядно продемонстрировано, как критические температуры изменяют скорость эргодизации системы.

Результаты подтвердили, что с увеличением температуры система преодолевает энергетические барьеры, что ускоряет процесс семплирования конфигураций. При этом вблизи критической температуры скорость эргодизации значительно замедляется, что является следствием фазового перехода, связанного с критическим замедлением. В высокотемпературных режимах система становится более динамичной, что способствует эффективному исследованию конфигурационного пространства и восстановлению эргодичности.

Кроме того, различия в поведении систем с разными геометриями решеток, такие как плоская и объемная гексагональная решетки, показали, что фрустрация, вызванная геометрическими особенностями решеток, оказывает существенное влияние на термодинамические свойства системы. Эти различия обостряют проблему эргодичности, делая её ещё более важной для понимания динамики и фазовых переходов в подобных системах.

Полученные результаты значительно расширяют наше понимание поведения дигольных спиновых систем в условиях фрустрации и открывают новые направления для дальнейших исследований в области статистической физики и термодинамики.

## Список литературы

- [1] Saccone M., Caravelli F., Hoffhuis K., Dhuey S., “Real-space observation of ergodicity transitions in artificial spin ice”, *nature communications*, **14**:1, (2023), 5674.
- [2] 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 (apr 2013), 045009.
- [3] Skjærvø S. H., Marrows C. H., Stamps R. L., Heyderman L. J., “Advances in artificial spin ice”, *Nature Reviews Physics*, **2**:1, (2020), 13–28.
- [4] 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.
- [5] Park J., Le B. L., Sklenar J., Chern G.-W., “Magnetic response of brickwork artificial spin ice”, *Physical Review B*, **96**:2 (jul 2017), 024436.
- [6] Li Y., Wang T., Hou Z., Liu H., “Thermodynamics and magnetization reversal in artificial brickwork spin ice”, *Physics Letters A*, **380**:22–23 (may 2016), 2013–2016.
- [7] Chern G.-W., Morrison M. J., Nisoli C., “Degeneracy and Criticality from Emergent Frustration in Artificial Spin Ice”, *Physical Review Letters*, **111**:17 (oct 2013), 177201.
- [8] 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.
- [9] Gilbert I., Chern G.-W., Zhang S., O’Brien L., “Emergent ice rule and magnetic charge screening from vertex frustration in artificial spin ice”, *Nature Physics*, **10**:9, (2014), 670–675.
- [10] Gilbert I., Lao Y., Carrasquillo I., O’Brien L., “Emergent reduced dimensionality by vertex frustration in artificial spin ice”, *Nature Physics*, **12**:2 (oct 2015), 162–165.
- [11] Zhang X., Duzgun A., Lao Y., Subzwari S., “String Phase in an Artificial Spin Ice”, *Nature Communications*, **12**:1 (nov 2021).
- [12] Stopfel H., Arnalds U. B., Stein A., Hase T. P. A., “Multiple energy scales in mesospin

- systems: The vertex-frustrated Saint George lattice”, *Physical Review Materials*, **5**:11 (nov 2021), 114410.
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] Möller G., Moessner R., “Magnetic multipole analysis of kagome and artificial spin-ice dipolar arrays”, *Physical Review B*, **80**:14 (Oct 2009), 140409(R).
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] Rousochatzakis I., Lauchli A. M., Moessner R., “Quantum magnetism on the Cairo pentagonal lattice”, *Physical Review B*, **85**:10 (mar 2012), 104415.
- [19] Abakumov A. M., Batuk D., Tsirlin A. A., Prescher C., “Frustrated pentagonal Cairo lattice in the non-collinear antiferromagnet Bi<sub>4</sub>Fe<sub>5</sub>O<sub>13</sub>F”, *Physical Review B*, **87**:2 (jan 2013), 024423.
- [20] Rojas M., Rojas O., de Souza S. M., “Frustrated Ising model on the Cairo pentagonal lattice”, *Physical Review E*, **86**:5 (nov 2012), 051116.
- [21] Tsirlin A. A., Rousochatzakis I., Filimonov D., Batuk D., “Spin-reorientation transitions in the Cairo pentagonal magnet Bi<sub>4</sub>Fe<sub>5</sub>O<sub>13</sub>F”, *Physical Review B*, **96**:9 (sep 2017), 094420.
- [22] Saccone M., Hofhuis K., Huang Y.-L., Dhuey S., “Dipolar Cairo lattice: Geometrical frustration and short-range correlations”, *Physical Review Materials*, **3**:10, (2019), 104402.
- [23] Crater D., Mueller R., Miertschin D., Dhuey S., “Direct observation of emergent ice-rule dynamics in a vertex-frustrated dipolar Cyrrhus lattice”, *Physical Review Materials*, **9**:10 (October 2025), 104410 (Publisher: American Physical Society).
- [24] Mahato G., Crater D., Hoyt C., Miertschin D., *The dipolar Aleppo lattice: Ground state ordering and ergodic dynamics in the absence of vertex frustration*, arXiv, 2025 (arXiv:2501.03375 [cond-mat]).
- [25] 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.
- [26] Hastings W. K., “Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications”, *Biometrika*, **57**:1 (04 1970), 97–109.
- [27] Makarova K., Makarov A., Strongin V., Titovets I., “Canonical Monte Carlo multispin cluster method”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **427** (aug 2023), 115153.
- [28] Thirumalai D., Mountain R. D., Kirkpatrick T. R., “Ergodic behavior in supercooled liquids and in glasses”, *Physical Review A*, **39**:7 (April 1989), 3563–3574.
- [29] Suzen M., “Effective ergodicity in single-spin-flip dynamics”, *Physical Review E*, **90**:3, (2014).
- [30] Стронгин В. С., Лобанова Э. А., Черкасов М. Д., Трефилов И. В., Овчинников П. А., Шевченко Ю. А., “Термодинамика и основные состояния спинового льда на объемной гексагональной решетке”, *дальневосточный математический журнал*, **24**:2, (2024), 268–279.
- [31] Onsager L., “Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transi-

tion”, *Physical review*, **65**:3–4, (1944), 117.

Поступила в редакцию  
24 ноября 2025 г.

Статья выполнена в рамках проекта № АСП-25-03-1.03-0029 по программе развития ДВФУ в рамках программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030», Представленные в работе результаты были получены на суперкомпьютерном вычислительном кластере Института прикладной математики ДВО РАН.

---

*Strongin V. S.*<sup>1,2</sup>, *Shevchenko Y. A.*<sup>2,3</sup>, *Nefedev K. V.*<sup>1,2</sup> Violation of ergodicity in frustrated spin systems. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2026. V. 26. No 1. P. 123–132.

<sup>1</sup>Department of theoretical physics, Far eastern federal university, Russia

<sup>2</sup>Institute of Applied Mathematics, Far Eastern Branch, Russian Academy of Sciences

<sup>3</sup>Sirius University of Science and Technology, Russia

#### ABSTRACT

In this work, we investigate the ergodicity of Ising-like dipolar spin systems on different lattice geometries using the Thirumalai - Mountain metric, defined along a sequence of microstates generated by the canonical Metropolis algorithm. We consider the classical two-dimensional Ising model on a square lattice, a vertex-frustrated two-dimensional kagome lattice, and a stacked three-dimensional kagome lattice with long-range dipolar interactions. Analysis of the temperature dependence of the TM metric and the ergodization rate makes it possible to explicitly trace the influence of critical slowing down and geometric frustration on the recovery of ergodicity. The results obtained for the two-dimensional lattices are consistent with previously reported data and confirm that, on the square Ising lattice, ergodicity is violated only in the vicinity of the critical temperature, whereas on the kagome lattice frustration leads to the persistence of non-ergodic behavior over a wide low-temperature range. We show that for the three-dimensional kagome spin ice, ergodicity is realized only in the paramagnetic phase, while in the ordered and frozen phases the system remains practically non-ergodic. These results demonstrate that analysis of the TM metric can serve as a practical criterion for assessing the applicability of the Metropolis algorithm to the calculation of thermodynamic averages in frustrated spin systems.

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