



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 118 за 2019 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Иванов А.В.

Учет корреляций между
ближайшими соседями при
микромагнитном
моделировании

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Иванов А.В. Учет корреляций между ближайшими соседями при микромагнитном моделировании // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 118. 30 с. doi:[10.20948/prepr-2019-118](https://doi.org/10.20948/prepr-2019-118)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-118>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.КЕЛДЫША
Российской академии наук**

А.В. Иванов

**Учет корреляций между ближайшими
соседями при микромагнитном
моделировании**

Москва — 2019

Иванов А.В.

e-mail: aivanov@keldysh.ru

Учет корреляций между ближайшими соседями при микромагнитном моделировании

Микромагнитное моделирование на основе уравнения Ландау–Лифшица–Блоха (УЛЛБ) с учетом температурных флуктуаций в настоящий момент является неотъемлемой частью при создании устройств спинтроники и магнитной микроэлектроники. Основным недостатком УЛЛБ является приближение среднего поля, которое за счет отбрасывания корреляций между ближайшими соседями приводит к неверным значениям энергии и временам релаксации, что снижает адекватность результатов моделирования.

В данной работе на основе аппроксимации двухчастичной функции распределения, учитывающей корреляции между ближайшими соседями, построено микромагнитное уравнение типа УЛЛБ, дополненное уравнением на парные корреляции. Результаты построенной модели хорошо согласуются с результатами моделирования «атом-в-атом» в различных постановках.

Ключевые слова: Уравнение Ландау–Лифшица–Блоха, цепочка Боголюбова, двухчастичные корреляции

Anton Valeryevich Ivanov

e-mail: aivanov@keldysh.ru

The account for correlations between nearest neighbors in micromagnetic modeling

At present, micromagnetic modeling based on the Landau–Lifshitz–Bloch equation (LLB) with account for temperature fluctuations is an integral part in creating spintronics and magnetic microelectronics devices. The main disadvantage of such modelling is the mean field approximation that is used in the construction of the LLB equation. Since the correlations between the nearest neighbors are neglected, incorrect values of energy and relaxation times are obtained, which reduces the adequacy of the simulation results.

In this paper, based on the approximation of the two-particle distribution function, and taking into account the correlation between the nearest neighbors a micromagnetic equation of the LLB type supplemented by an equation for pair correlations is constructed. The results of the constructed model are in good agreement with atomistic simulation results under various conditions.

Keywords: The Landau–Lifshitz–Bloch equation, the BBGKY hierarchy, two-particle correlations

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 19-01-00602.

Содержание

1	Введение	3
2	Основные уравнения	4
3	Приближение среднего поля и континуальная модель	6
4	Уравнение Ландау–Лифшица–Блоха	9
5	Аппроксимация двухчастичной функции распределения	10
6	Уравнение на парные корреляции	12
7	Расчет и аппроксимация интегральных коэффициентов	17
8	Результаты моделирования	20
9	Заключение	28
	Список литературы	29

Введение

Создание устройств спинтроники и магнитной микроэлектроники требует проведения значительных объемов численного моделирования [1–3]. При этом оптимальным с точки зрения соотношения адекватность/вычислительная сложность является уравнение Ландау–Лифшица–Блоха (УЛЛБ, [4, 5]), описывающее эволюцию непрерывного распределения средней намагниченности по пространству.

Основным недостатком УЛЛБ является приближение среднего поля (мультипликативности), в рамках которого пренебрегается корреляциями между ближайшими соседями. Такой подход хорошо работает для плазмы (за счет дальнего действующего кулоновского потенциала) и разреженных газов, но плохо применим для жидкостей и магнетиков. В магнитных материалах, за счет сильного обменного взаимодействия между ближайшими соседями, магнитные моменты ближайших соседей скоррелированы даже в парамагнитной фазе, когда дальний порядок в системе уже отсутствует.

Пренебрежение корреляциями между ближайшими соседями приводит к целому ряду артефактов — смещению температуры Кюри, неверным значениям обменной энергии и заниженным временам релаксации. Смещение температуры Кюри может быть скомпенсировано за счет учета флуктуаций среднего поля [6], неверные значения обменной энергии не играют, как правило, большого значения, а вот неверные времена релаксации могут значительно снижать адекватность результатов моделирования, особенно если речь идет о моделировании ячеек магнеторезистивной памяти.

Отказ от приближения среднего поля и аппроксимация двухчастичной функции распределения с учетом корреляций между ближайшими соседями позволяет получить уравнение типа УЛЛБ, при этом влияние обменного поля проявляется в виде антидиффузии в пространстве магнитных моментов, коэффициент антидиффузии зависит от средней обменной энергии (парных корреляций).

Для обменной энергии можно вывести уравнение на основе уравнения для эволюции двухчастичной функции распределения, замыкание которого требует, в свою очередь, аппроксимации трехчастичных функций распределения, но эта проблема может быть решена с необходимой точностью.

Основные уравнения

В качестве исходной модели магнетика мы будем рассматривать систему уравнений Ландау–Лифшица, описывающую эволюцию N магнитных моментов $\mathbf{m}_i(t)$, $|\mathbf{m}_i(t)| = 1$, расположенных в узлах кристаллической решетки с координатами \mathbf{r}_i :

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{m}_i}{dt} &= -\gamma[\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] - \alpha\gamma[\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]] + 2\sqrt{\alpha\gamma T}\boldsymbol{\xi}(\mathbf{m}_i, t); \quad (1) \\ \mathbf{H}_i^{\text{eff}} &= -\nabla_{\mathbf{m}_i}W = \mathbf{H}_i^{\text{exch}} + \mathbf{H}_i^{\text{anis}} + \mathbf{H}_i^{\text{dip}} + \mathbf{H}_i^{\text{ext}}; \\ W^{\text{exch}} &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij}(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j), \quad \mathbf{H}_i^{\text{exch}} = \sum_j J_{ij}\mathbf{m}_j; \\ W^{\text{anis}} &= -K \sum_i (\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{m}_i)^2, \quad \mathbf{H}_i^{\text{anis}} = 2K \sum_i \mathbf{n}_K (\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{m}_i); \\ \mathbf{H}_i^{\text{dip}} &= \sum_j \frac{3(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{m}_j r_{ij}^2}{r_{ij}^5}, \quad \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j; \\ W^{\text{ext}} &= -\sum_i \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{ext}}; \end{aligned}$$

где γ — гиромагнитное соотношение, α — параметр затухания, \mathbf{H}^{eff} — эффективное магнитное поле, W — полная энергия системы, T — температура системы в единицах энергии, $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{m}, t)$ — случайный источник, сохраняющий модуль магнитного момента и обеспечивающий единичную дисперсию по направлениям [7], $\nabla_{\mathbf{m}_i}$ — оператор ∇ по магнитному моменту \mathbf{m}_i , W^{exch} и \mathbf{H}^{exch} — энергия и поле обменного взаимодействия, J_{ij} — обменный интеграл (как правило, отличен от нуля только для ближайших соседей), W^{anis} и \mathbf{H}^{anis} — энергия и поле анизотропии, K — параметр анизотропии, \mathbf{n}_K — направление оси анизотропии, $|\mathbf{n}_K| = 1$, $\mathbf{H}_i^{\text{dip}}$ — поле диполь–дипольного (магнитостатического) взаимодействия [8], W^{ext} — энергия взаимодействия с однородным внешним полем. Здесь и далее мы будем использовать безразмерную систему единиц.

Система уравнений (1) позволяет корректно учитывать температурные флуктуации, дефекты кристаллической решетки и ряд других тонких физических эффектов, однако оказывается слишком сложна с вычислительной точки зрения для моделирования реальных устройств. Для упрощения задачи необходимо перейти к уравнениям сплошной среды, при этом основную сложность

вызывает корректный учет сильного обменного взаимодействия между ближайшими соседями.

Пусть $f^{(N)}(\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_N, t)$ — N -частичная функция распределения магнитных моментов, тогда от (1) с учетом температурных флуктуаций можно достаточно строго перейти к уравнению в частных производных

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} + \gamma \sum_{i=1}^N \nabla_{\circ i} [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] f^{(N)} = \alpha \gamma \sum_{i=1}^N \nabla_{\circ i} [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times (\mathbf{H}_i^{\text{eff}} - T \nabla_{\circ i}) f^{(N)}]], \quad (2)$$

где $\nabla_{\circ i}$ — сферический градиент по \mathbf{m}_i :

$$\nabla_{\circ i} = \nabla_{\mathbf{m}_i} - \frac{\mathbf{m}_i (\mathbf{m}_i \cdot \nabla_{\mathbf{m}_i})}{\mathbf{m}_i^2}.$$

Введем одночастичную функцию распределения f_i :

$$f_i(\mathbf{m}_i, t) = \int_{\text{sph}} \dots \int f^{(N)}(\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_i, \dots, \mathbf{m}_N, t) d\mathbf{m}_{1, \dots, i-1, i+1, \dots, N},$$

(здесь под $\int_{\text{sph}} d\mathbf{m}$ понимается интегрирование по сфере единичного радиуса) и проинтегрируем* (2) по $N - 1$ магнитному моменту, что даст нам систему из N уравнений в частных производных

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{m}_i, t)}{\partial t} + \gamma \nabla_{\circ i} [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}(2)}] f_i = \alpha \gamma \nabla_{\circ i} [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times (\mathbf{H}_i^{\text{eff}(2)} - T \nabla_{\circ i}) f_i]], \quad (3)$$

$$\mathbf{H}_i^{\text{eff}(2)} = \frac{1}{f_i} \mathbf{H}_i^{\text{exch}(2)} + \frac{1}{f_i} \mathbf{H}_i^{\text{dip}(2)} + \mathbf{H}_i^{\text{anis}} + \mathbf{H}^{\text{ext}}, \quad (4)$$

$$\mathbf{H}_i^{\text{exch}(2)} = \sum_j J_{ij} \int_{\text{sph}} \mathbf{m}_j f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j; \quad (5)$$

$$\mathbf{H}_i^{\text{dip}(2)} = \sum_j \int_{\text{sph}} \frac{3(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij}) \mathbf{r}_{ij} - \mathbf{m}_j r_{ij}^2}{r_{ij}^5} f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j; \quad (6)$$

где $f^{(2)}$ — двухчастичная функция распределения

$$f_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, t) = \int_{\text{sph}} \dots \int f^{(N)} d\mathbf{m}_{1, \dots, i-1, i+1, \dots, j-1, j+1, \dots, N}.$$

* с учетом теоремы Гаусса $\int_{\text{sph}} \nabla_{\circ} A d\mathbf{m} = 0 \forall A$

Средняя энергия системы примет вид

$$\langle W \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \iint_{\text{sph}} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j + \langle W^{\text{dip}(2)} \rangle - K \sum_i \langle (\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{m}_i)^2 \rangle - \mathbf{H}^{\text{ext}} \sum_i \langle \mathbf{m}_i \rangle, \quad (7)$$

где при помощи $\langle \dots \rangle$ обозначается усреднение

$$\langle \mathbf{m}_i \rangle = \int_{\text{sph}} \mathbf{m}_i f_i d\mathbf{m}_i, \quad \langle (\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{m}_i)^2 \rangle = \int_{\text{sph}} (\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{m}_i)^2 f_i d\mathbf{m}_i.$$

Уравнение (3) было впервые получено Брауном в 1963 году для суперпарамагнетика (системы монодоменных ферромагнитных микрочастиц, т.е. без учета обменного и диполь–дипольного взаимодействия, что сводит всю систему к одному уравнению) на основе метода Ланжевена [9].

Приближение среднего поля и континуальная модель

Полученная система уравнений (3) является первым звеном цепочки Боголюбова. Для замыкания цепочки необходимо аппроксимировать $f^{(2)}$ либо получить аналогичным образом систему уравнений на $f^{(2)}$ и аппроксимировать входящую в нее трехчастичную функцию распределения и т.д.

Традиционным вариантом является так называемое приближение среднего поля (мультипликативности)

$$f_{ij}^{(2)} = f_i f_j, \quad (8)$$

предполагающее отсутствие корреляций между магнитными моментами \mathbf{m}_i и \mathbf{m}_j . Такое приближение хорошо работает для систем с коллективным дальнедействующим потенциалом, например разреженной плазмы или при вычислении диполь–дипольного взаимодействия $\mathbf{H}^{\text{dip}(2)}$. Для вычисления обменного поля $\mathbf{H}^{\text{exch}(2)}$ такое приближение некорректно, но является самым простым приближением и приводит к ряду полезных результатов.

После подстановки (8) в (3) уравнение (3) не меняется, но поля и энергия системы примут вид

$$\mathbf{H}_i^{\text{exch}(1)} = \sum_j J_{ij} \langle \mathbf{m}_j \rangle; \quad (9)$$

$$\mathbf{H}_i^{\text{dip}(1)} = \sum_j \frac{3(\langle \mathbf{m}_j \rangle \cdot \mathbf{r}_{ij}) \mathbf{r}_{ij} - \langle \mathbf{m}_j \rangle r_{ij}^2}{r_{ij}^5}; \quad (10)$$

$$\langle W^{\text{exch}(1)} \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\langle \mathbf{m}_i \rangle \cdot \langle \mathbf{m}_j \rangle). \quad (11)$$

Предположим, что одночастичная функция распределения $f_i(\mathbf{m}, t)$ медленно меняется от атома к атому, и может быть на масштабах много больше периода кристаллической решетки задана некоторой непрерывной функцией $f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)$. Тогда можно говорить о некотором непрерывном распределении намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle(\mathbf{r})$, и расчет поля $\mathbf{H}^{\text{dip}(1)}$ может осуществляться одним из традиционных для микромагнитного приближения способов [8]. В дальнейшем мы будем упоминать диполь–дипольное взаимодействие по необходимости, но ограничимся рассмотрением постановок, в которых оно не играет большой роли или может быть учтено как часть внешнего поля или анизотропии.

Пусть элементы матрицы J_{ij} отличны от нуля только для ближайших соседей и равны J , тогда поле обменного взаимодействия может быть преобразовано

$$\mathbf{H}_i^{\text{exch}(1)} = \sum_j J_{ij} \langle \mathbf{m}_j \rangle = \sum_j J_{ij} \langle \mathbf{m}_j \rangle \pm n_b J \langle \mathbf{m}_i \rangle \approx a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + n_b J \langle \mathbf{m} \rangle, \quad (12)$$

где a — расстояние между атомами, $\Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle$ — покомпонентный лапласиан от средней намагниченности в конфигурационном пространстве, n_b — число ближайших соседей. В итоге, система из N трехмерных уравнений на $f_i(\mathbf{m}, t)$ сводится к одному шестимерному уравнению на $f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)$:

$$\frac{\partial f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \gamma \nabla_{\circ} [\mathbf{m} \times \mathbf{H}^{\text{eff}(1)}] f = \alpha \gamma \nabla_{\circ} [\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times (\mathbf{H}^{\text{eff}(1)} - T \nabla_{\circ}) f]], \quad (13)$$

$$\mathbf{H}^{\text{eff}(1)} = a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + n_b J \langle \mathbf{m} \rangle + \mathbf{H}^{\text{dip}(1)} + 2K \mathbf{n}_K (\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{m}) + \mathbf{H}^{\text{ext}}. \quad (14)$$

В случае антиферромагнетика или образца со сложной кристаллической решеткой (например если параметры для различных подрешеток различаются) можно аналогичным образом перейти к нескольким уравнениям, описывающим эволюцию функций распределения для отдельных подрешеток и связанных между собой через обменное и диполь–дипольное взаимодействие.

Нетрудно видеть, что в равновесном и пространственно–однородном случае решением уравнения (13) является распределение Больцмана

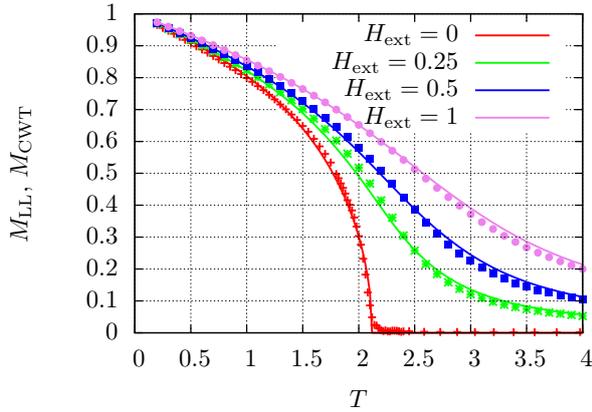
$$f_{\text{eq}}(\mathbf{m}) = \frac{1}{Z} \exp \frac{n_b J \mathbf{m} \langle \mathbf{m} \rangle + K (\mathbf{n}_K \mathbf{m})^2 + \mathbf{H}^{\text{ext}} \mathbf{m}}{T}, \quad (15)$$

$$Z = \int_{\text{sph}} \exp \frac{n_b J \mathbf{m} \langle \mathbf{m} \rangle + K (\mathbf{n}_K \mathbf{m})^2 + \mathbf{H}^{\text{ext}} \mathbf{m}}{T} d\mathbf{m},$$

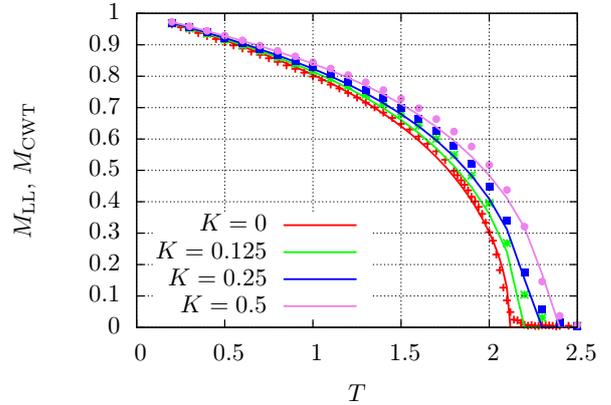
что отвечает теории среднего поля Кюри–Вейсса. При отсутствии анизотропии можно получить трансцендентное уравнение на среднюю намагниченность

$$\langle m \rangle = L \left(\frac{J n_b \langle m \rangle + H^{\text{ext}}}{T} \right), \quad \langle \mathbf{m} \rangle \parallel \mathbf{H}^{\text{ext}}, \quad L(x) = \text{cth } x - \frac{1}{x}, \quad (16)$$

где L — функция Ланжевена.

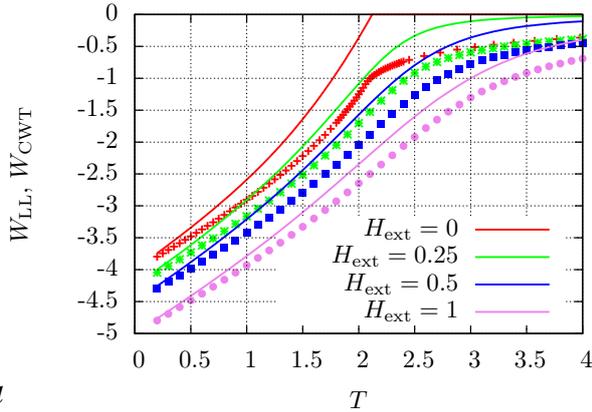


a

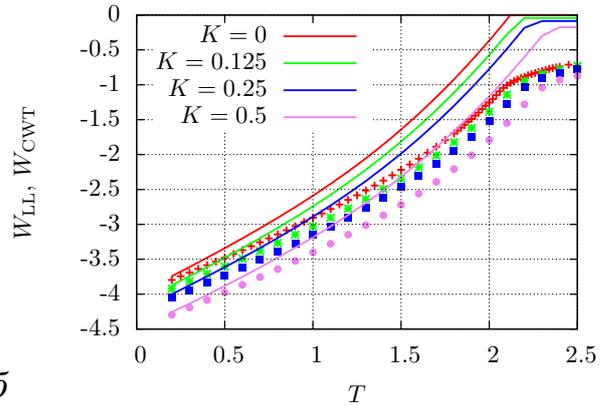


б

Рис. 1. Сравнение средней намагниченности, полученной из прямого моделирования уравнения Ландау–Лифшица «атом-в-атом» (M_{LL} , точки) и из теории Кюри–Вейсса (M_{CWT} , сплошные линии) от температуры T при различных значениях внешнего поля H_{ext} (*a*) и анизотропии K



a



б

Рис. 2. Сравнение средней энергии, полученной из прямого моделирования уравнения Ландау–Лифшица «атом-в-атом» (W_{LL} , точки) и из теории Кюри–Вейсса (W_{CWT} , сплошные линии) от температуры T при различных значениях внешнего поля H_{ext} (*a*) и анизотропии K (*б*)

В отсутствие внешнего поля и анизотропии теория Кюри–Вейсса дает критическую температуру фазового перехода $T_c^{CWT} = n_b J/3$, в то же время прямое численное моделирование «атом-в-атом» [10, 11] для кубического образца с ОЦК решеткой (число соседей $n_b = 8$) размерами 64^3 ячейки с периодическими граничными условиями дает $T_c^{LL} \approx 2.12J$. Это расхождение было объяснено Гараниным [6] на основе флуктуаций среднего поля, для исправления ситуации было предложено вычислять обменный вклад в эффективное поле как

$$\mathbf{H}^{exch(1)} \approx a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + n_b \varepsilon_G J \langle \mathbf{m} \rangle(\mathbf{r}), \quad \varepsilon_G = \frac{T_c^{LL}}{T_c^{CWT}}.$$

Множитель ε_G может быть рассчитан из статистической физики независимо

от атомистического моделирования, но его определение через критическую температуру в нашем случае оказывается проще. При наличии внешнего поля и анизотропии для ОЦК решетки ε_G может быть феноменологически задан как

$$\varepsilon_G \approx 0.795 + 0.205 L \left(\frac{H^{\text{ext}}}{J \langle m \rangle} + \frac{K}{J} \right), \quad (17)$$

что приводит к хорошим результатам для зависимости средней намагниченности $\langle m \rangle (T, H^{\text{ext}})$, за исключением случаев с сильной анизотропией, рис. 1. В то же время результаты для энергии системы оказываются значительно хуже, рис. 2.

Уравнение Ландау–Лифшица–Блоха

Домножая (13) на \mathbf{m} и интегрируя по частям, после некоторых преобразований получаем [4]

$$\langle \dot{\mathbf{m}} \rangle = -\gamma \langle \mathbf{m} \times \mathbf{H}^{\text{eff}} \rangle - \alpha\gamma \langle \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{H}^{\text{eff}}] \rangle - 2\alpha\gamma T \langle \mathbf{m} \rangle,$$

или

$$\langle \dot{\mathbf{m}} \rangle = -\gamma \left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\text{L}} \right] - \alpha\gamma \left\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \hat{I} \right\rangle \cdot \left(\mathbf{H}^{\text{L}} + n_b \varepsilon_G J \langle \mathbf{m} \rangle \right) - 2\gamma K \Phi - 2\alpha\gamma K \Theta - 2\alpha\gamma T \langle \mathbf{m} \rangle, \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{\text{L}} &= \mathbf{H}^{\text{ext}} + \mathbf{H}^{\text{dip}} + a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle, \\ \Phi &= \langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_K (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle, \\ \Theta &= \langle \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{n}_K] (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle, \end{aligned}$$

где \hat{I} — единичная матрица, \mathbf{H}^{L} — внешнее и линейные по $\langle \mathbf{m} \rangle$ поля, Φ и Θ — интегральные вклады анизотропии. Для замыкания полученного уравнения (вычисления зависимости старших моментов функции распределения на основе $\langle \mathbf{m} \rangle$) необходимо задать вид функции распределения, что аналогично введению уравнения состояния при выводе уравнений газовой динамики из уравнения Больцмана. Хорошей аппроксимацией является

$$\begin{aligned} f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t) &= \frac{e^{\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{m}}}{\mathcal{Z}(p)}, \quad \mathcal{Z}(p) = \int_{\text{sph}} e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}} d\mathbf{m} = \frac{4\pi}{p} \text{sh } p, \\ \langle \mathbf{m} \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}(p)} \int_{\text{sph}} \mathbf{m} e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}} d\mathbf{m} = \mathbf{n}_p L(p), \quad \mathbf{n}_p = \frac{\mathbf{p}}{p}, \end{aligned} \quad (19)$$

где \mathbf{p} — некоторый вектор, являющийся параметром модельной функции распределения $\mathbf{p} \parallel \langle \mathbf{m} \rangle$. Многочисленные сравнения с результатами прямого численного моделирования «атом-в-атом» показывают, что ошибка такой аппроксимации

одночастичной функции распределения при актуальных значениях параметров находится на уровне второго знака, что является вполне удовлетворительным результатом.

В результате, интегральные коэффициенты в (18) могут быть рассчитаны и аппроксимированы с точностью до третьего знака как [12]:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \hat{I} \rangle &= \langle m_{\parallel p}^2 \rangle \frac{3n_{pi}n_{pj} - \delta_{ij}}{2} - \frac{\delta_{ij} + n_{pi}n_{pj}}{2} \rightarrow -\frac{2}{3}\delta_{ij} \text{ при } \langle m \rangle \rightarrow 0, \\ \langle m_{\parallel p}^2 \rangle &= \langle (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_p)^2 \rangle = 1 - \frac{2\langle m \rangle}{p} \approx \\ &\approx \frac{1}{3} + 0.4115 \cdot \langle m \rangle^2 + 0.0303 \cdot \langle m \rangle^4 + 0.3523 \cdot \langle m \rangle^6 - 0.1261 \cdot \langle m \rangle^8, \\ \langle m_{\parallel p}^3 \rangle &\approx 0.6026 \cdot \langle m \rangle \left[1 + 0.00669 \cdot \text{ch} (5.288 \langle m \rangle) \right], \\ \Phi &\approx \left(0.59256 + 0.21515 \cdot \langle m \rangle^2 + 0.2008 \cdot \langle m \rangle^4 \right) (\langle \mathbf{m} \rangle \cdot \mathbf{n}_K) [\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{n}_K], \\ \Theta &\approx \langle \mathbf{m} \rangle \left[\frac{\langle m_{\parallel p}^3 \rangle}{\langle m \rangle} - 1 \right] \frac{3\beta^2 - 1}{2} + [\langle \mathbf{m} \rangle \times [\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{n}_K]] \frac{\langle m_{\parallel p}^3 \rangle}{\langle m \rangle^2} \beta, \end{aligned} \quad (20)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера, $\langle m \rangle \equiv |\langle \mathbf{m} \rangle|$, $\beta = \mathbf{n}_p \cdot \mathbf{n}_K = \langle \mathbf{m} \rangle \cdot \mathbf{n}_K / \langle m \rangle$.

Аппроксимация двухчастичной функции распределения

Для учета корреляций между ближайшими соседями необходимо построить соответствующую аппроксимацию двухчастичной функции распределения $f^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, t)$. На основе результатов прямого численного моделирования «атом-в-атом» можно восстанавливать различные характеристики системы, включая $f^{(2)}$, однако функция такой высокой размерности трудна для анализа и будет иметь весьма низкую точность за счет ограниченного числа магнитных моментов в образце. Поскольку в отсутствие внешнего поля и анизотропии двухчастичная функция распределения имеет множество симметрий, гораздо удобнее работать с функцией, зависящей от одного аргумента $\eta = \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j$

$$f^{(2)}(\eta, t) = \iint_{\text{sph}} f^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, t) \delta(\eta - \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j) d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j, \quad (21)$$

рисунок 3. Поскольку должно выполняться условие

$$\int_{\text{sph}} f^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j) d\mathbf{m}_j = f(\mathbf{m}_i), \quad \int_{\text{sph}} f^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j) d\mathbf{m}_i = f(\mathbf{m}_j), \quad (22)$$

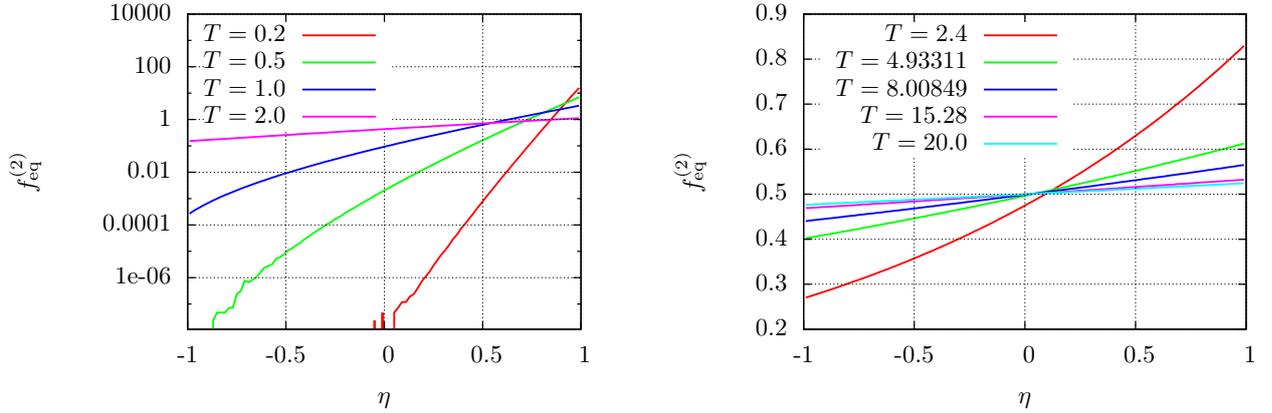


Рис. 3. Равновесные двухчастичные функции распределения $f_{\text{eq}}^{(2)}(\eta)$ для различных значений температуры, полученные из прямого моделирования уравнений Ландау–Лифшица «атом-в-атом»

хорошей аппроксимацией $f^{(2)}$ [13, 14] является

$$f_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, t) \approx \frac{1}{Z^{(2)}} \left[f_i(\mathbf{m}_i, t) f_j(\mathbf{m}_j, t) \right]^\rho e^{\lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}, \quad (23)$$

$$Z^{(2)} = \iint_{\text{sph}} \left[f_i(\mathbf{m}_i, t) f_j(\mathbf{m}_j, t) \right]^\rho e^{\lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j,$$

$$\rho = \arg \min \int_{\text{sph}} \left[f_i(\mathbf{m}_i, t) - \int_{\text{sph}} f_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, t) d\mathbf{m}_j \right]^2 d\mathbf{m}_i, \quad (24)$$

где $\lambda \geq 0$ — параметр, описывающий корреляции (включая косвенные) между ближайшими магнитными моментами \mathbf{m}_i и \mathbf{m}_j , $\frac{1}{2} \leq \rho \leq 1$ — степень, необходимая для выполнения условия (22). При $\lambda \ll 1$ аппроксимация (23) переходит в приближение среднего поля и $\rho \rightarrow 1$. При $\lambda \gg 1$ экспонента в аппроксимации (23) фактически переходит в δ -функцию $\delta(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)$ и $\rho \rightarrow \frac{1}{2}$.

Несмотря на степень ρ , за счет $Z^{(2)}$ размерность аппроксимации (23) отвечает правильной размерности двухчастичной функции распределения.

Из (23) и условия (22) следует, что

$$\frac{1}{Z^{(2)}} \int_{\text{sph}} \left[f_j(\mathbf{m}_j, t) \right]^\rho e^{\lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j} d\mathbf{m}_j \approx \left[f_i(\mathbf{m}_i, t) \right]^{1-\rho}. \quad (25)$$

Рассмотрим обменное поле в континуальной модели (12):

$$\mathbf{H}^{\text{exch}(1)} \approx a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + n_b J \langle \mathbf{m} \rangle.$$

Масштабы, отвечающие физически бесконечно малому объему, много больше расстояния между атомами, соответственно, на таких масштабах корреляциями между ближайшими соседями можно пренебречь и первый член с $\Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle$, отвечающий за взаимодействие физически бесконечно малых объемов друг с другом, должен остаться без изменений. Этот член отвечает за возникновение спиновых волн, установление пространственно–неоднородных распределений намагниченности и т.д., и мы будем называть его внешним (по отношению к данному физически бесконечно малому объему) обменным полем.

Второй член $n_b J \langle \mathbf{m} \rangle$ отвечает за возникновение спонтанной намагниченности за счет взаимодействия магнитных моментов внутри физически бесконечно малого объема, мы будем называть его внутренним обменным полем, и в нем необходимо учитывать корреляции между ближайшими соседями. С учетом (25)

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{\text{exch}(1)} &\approx a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \frac{n_b J}{f(\mathbf{m}, t)} \int_{\text{sph}} \mathbf{m}' f^{(2)}(\mathbf{m}, \mathbf{m}', t) d\mathbf{m}' \approx \\ &\approx a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \frac{n_b J}{\lambda} f^{\rho-1} \nabla_{\mathbf{m}} \int_{\text{sph}} [f(\mathbf{m}', t)]^{\rho} e^{\lambda \mathbf{m} \cdot \mathbf{m}'} d\mathbf{m}' \approx \\ &\approx a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \frac{n_b J}{\lambda} f^{\rho-1} \nabla_{\mathbf{m}} f^{1-\rho} = a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + n_b J \Upsilon \frac{\nabla_{\mathbf{m}} f}{f}, \quad (26) \end{aligned}$$

где коэффициент $\Upsilon = (1 - \rho)/\lambda$. Таким образом, внутреннее обменное поле проявляется как антидиффузия (с коэффициентом $n_b J \Upsilon$) в пространстве направлений магнитного момента, в то время как температурные флуктуации создают диффузию с коэффициентом T . Конкуренция этих процессов приводит к установлению равновесного значения средней намагниченности $\langle m \rangle$, в том числе и к фазовому переходу.

После подстановки (23) в (3) в уравнении Фоккера–Планка (13) изменится только обменное поле. Уравнение Ландау–Лифшица–Блоха (18) примет вид

$$\begin{aligned} \langle \dot{\mathbf{m}} \rangle &= -\gamma \left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\text{L}} \right] - \alpha \gamma \left\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \hat{I} \right\rangle \cdot \mathbf{H}^{\text{L}} - \\ &\quad - 2\gamma K \Phi - 2\alpha \gamma K \Theta - 2\alpha \gamma (T - n_b J \Upsilon) \langle \mathbf{m} \rangle. \quad (27) \end{aligned}$$

Уравнение (27) является незамкнутыми, поскольку коэффициент Υ зависит от параметров ρ и λ . Параметр ρ может быть однозначно рассчитан из намагниченности и параметра λ , вычисление параметра λ является ключевой проблемой в построенной теории и будет освещено далее.

Уравнение на парные корреляции

Появление дополнительного параметра λ в уравнении (27) требует введения дополнительного уравнения. Естественным является введение уравнения на

парные корреляции $\langle \eta \rangle = \langle \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \rangle$, которые определяют обменную энергию системы как $\langle W^{\text{exch}} \rangle = -n_b J \langle \eta \rangle / 2$.

Выпишем уравнение на эволюцию двухчастичной функции распределения для ближайших соседей (второе звено цепочки Боголюбова):

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{ij}^{(2)}}{\partial t} - \gamma \nabla_{\circ i} [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{(2)}] f^{(2)} - \gamma \nabla_{\circ j} [\mathbf{m}_j \times \mathbf{H}_j^{(2)}] f^{(2)} = \\ = \alpha \nabla_{\circ i} \left[\mathbf{m}_i \times \left[\mathbf{m}_i \times (\mathbf{H}_i^{(2)} - T \nabla_{\circ i}) f^{(2)} \right] \right] + \\ + \alpha \nabla_{\circ j} \left[\mathbf{m}_j \times \left[\mathbf{m}_j \times (\mathbf{H}_j^{(2)} - T \nabla_{\circ j}) f^{(2)} \right] \right], \quad (28) \end{aligned}$$

$$\mathbf{H}_i^{(2)} = \mathbf{H}^L + 2K(\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{m}_i)\mathbf{n}_K + J\mathbf{m}_j + \frac{1}{f_{ij}^{(2)}} \sum_{k, k \neq j} J_{ik} \int_{\text{sph}} \mathbf{m}_k f_{ijk}^{(3)} d\mathbf{m}_k.$$

Интегрируя с множителем $\eta = \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j$ по $d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j$, получаем с учетом симметрии перестановок индексов i, j

$$\begin{aligned} -\frac{\langle \dot{\eta} \rangle}{2\alpha\gamma} = \left\langle \mathbf{m}_i \cdot \left[\mathbf{m}_j \times \left[\mathbf{m}_j \times \mathbf{H}^L \right] \right] \right\rangle + 2K\Psi + \\ + J \left[\langle \eta^2 \rangle - 1 + \sum_{\substack{k \in \text{nb. } j \\ k \neq i}} Q_k \right] + 2T \langle \eta \rangle, \quad (29) \end{aligned}$$

где

$$Q_k = \left\langle \mathbf{m}_i \cdot \left[\mathbf{m}_j \times \left[\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k \right] \right] \right\rangle, \quad \Psi = \left\langle \mathbf{m}_i \cdot \left[\mathbf{m}_j \times \left[\mathbf{m}_j \times \mathbf{n}_K \right] \right] (\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{n}_K) \right\rangle,$$

суммирование ведется по соседям атома j . Прецессионные члены в (28) консервативны (сохраняют энергию) и при интегрировании обнуляются.

Поле \mathbf{H}^L можно представить в виде суммы двух векторов $\parallel \mathbf{p}$ и $\perp \mathbf{p}$, тогда с учетом (25), (20) и поскольку $\langle (\mathbf{m} \cdot \mathbf{p})(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}^{L, \perp \mathbf{p}}) \rangle = 0$ получаем

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{m}_i \cdot \left[\mathbf{m}_j \times \left[\mathbf{m}_j \times \mathbf{H}^L \right] \right] \right\rangle = \left\langle \mathbf{m}_j \cdot \left[\left[\mathbf{m}_j \times \mathbf{H}^L \right] \times \mathbf{m}_i \right] \right\rangle = \\ = \frac{1-\rho}{\lambda} \left\langle \mathbf{m} \cdot \left[\left[\mathbf{m} \times \mathbf{H}^L \right] \times \mathbf{p} \right] \right\rangle = \frac{1-\rho}{\lambda} \left[\langle (\mathbf{p} \cdot \mathbf{m})(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}^L) \rangle - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{H}^L) \right] = \\ = \frac{1-\rho}{\lambda} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{H}^L) \left[\langle m_{\parallel p}^2 \rangle - 1 \right] = -2\Upsilon \mathbf{H}^L \cdot \langle \mathbf{m} \rangle. \quad (30) \end{aligned}$$

Все интегралы в (29) являются функциями $\langle \mathbf{m} \rangle$ и $\langle \eta \rangle$ и могут быть рассчитаны численно в случае, если известны соответствующие (вплоть до трехчастичной) функции распределения. Можно рассматривать два предельных случая трехчастичной функции распределения $f_{ijk}^{(3)}$ — полностью пренебрегая

косвенными корреляциями между частицами i и k , мы будем обозначать такую трехчастичную функцию f_{ijk}^{\triangleleft} ; полагая, что $f_{ijk}^{(3)}$ полностью симметрична, то есть все связи с учетом косвенных корреляций между парами атомов ij, jk, ki равны, мы будем обозначать такую трехчастичную функцию f_{ijk}^{\triangle} .

Для начала рассмотрим трехчастичную функцию распределения f_{ijk}^{\triangleleft} , у которой отсутствуют косвенные корреляции между атомами i и k

$$f_{ijk}^{\triangleleft} \approx \frac{f_{ij}^{(2)} \cdot f_{jk}^{(2)}}{f_j}, \quad \int_{\text{sph}} f_{ijk}^{\triangleleft} d\mathbf{m}_k = f_{ij}^{(2)}, \quad \int_{\text{sph}} f_{ijk}^{\triangleleft} d\mathbf{m}_i = f_{jk}^{(2)},$$

что является обобщением приближения мультипликативности на многочастичные функции распределения. В этом случае с учетом (25)

$$\int_{\text{sph}} \mathbf{m}_k f_{ijk}^{\triangleleft} d\mathbf{m}_k = \frac{e^{\lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}}{\lambda Z^{(2)}} f_i^\rho f_j^{2\rho-1} \nabla_{\mathbf{m}_j} f_j^{1-\rho} = \frac{1-\rho}{\rho} \left[\frac{1}{\lambda} \nabla_{\mathbf{m}_j} f_{ij}^{(2)} - \mathbf{m}_i f_{ij}^{(2)} \right],$$

и полученный на ее основе коэффициент Q^{\triangleleft} принимает вид

$$Q^{\triangleleft} = \frac{1-\rho}{\rho} \left[-\frac{2}{\lambda} \langle \eta \rangle - \langle \eta^2 \rangle + 1 \right]. \quad (31)$$

Здесь и далее мы будем обозначать верхним индексом вид функции распределения, на основе которой был получен коэффициент Q , необязательный нижний индекс будет при необходимости обозначать атом или группу атомов.

В парамагнитной фазе, при $\langle m \rangle = 0$, интегралы $\langle \eta \rangle$ и $\langle \eta^2 \rangle$ можно взять аналитически по аналогии с (20) и

$$\langle \eta \rangle = L(\lambda), \quad \langle \eta^2 \rangle = 1 - \frac{2}{\lambda} \langle \eta \rangle, \quad Q^{\triangleleft} = 0. \quad (32)$$

Полностью симметричная трехчастичная функция распределения f_{ijk}^{\triangle} может быть записана как

$$f_{ijk}^{\triangle} = \frac{1}{Z^{(3)}} \exp \left[\sigma \mathbf{p} \cdot (\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_k) + \varsigma (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_k + \mathbf{m}_k \cdot \mathbf{m}_i) \right],$$

где параметры σ, ς могут быть определены из условий

$$\iiint_{\text{sph}} \mathbf{m}_i f_{ijk}^{\triangle} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j d\mathbf{m}_k = \langle \mathbf{m} \rangle, \quad \iiint_{\text{sph}} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) f_{ijk}^{\triangle} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j d\mathbf{m}_k = \langle \eta \rangle.$$

Дальнейшие рассуждения существенно зависят от вида кристаллической решетки, мы ограничимся рассмотрением гранецентрированных (ГЦК) и объемноцентрированных (ОЦК) кристаллов. В ГЦК решетке атом j имеет 12 соседей,

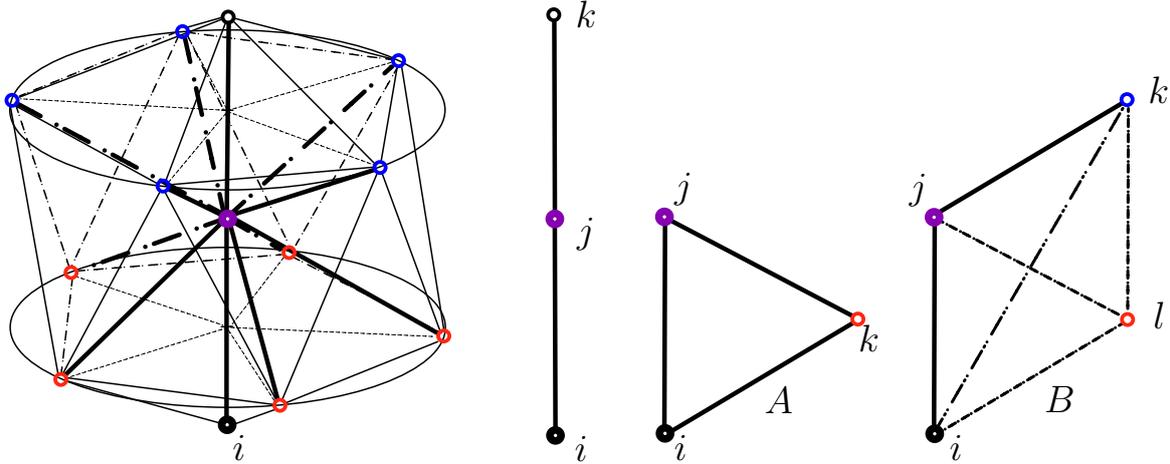


Рис. 4. Соседи атома в ГЦК решетке и различные варианты многочастичных функций распределения

расположенных в вершинах икосаэдра. Один из соседей, это атом i , если k отвечает противоположному атому, то можно пренебречь косвенными корреляциями между атомами i и k , что дает аппроксимацию (31).

Оставшиеся 10 соседей делятся на две группы по 5 атомов, рис. 4. В группе A каждый из атомов k образует с атомами i, j полностью симметричные трехчастичные функции f_{ijk}^{Δ} . Трехчастичные функции распределения f_{ijk}^B для атомов группы B могут быть найдены путем интегрирования четырехчастичных функций f_{ijkl}^{\diamond}

$$f_{ijkl}^{\diamond} \approx \frac{f_{ijl}^{\Delta} \cdot f_{jkl}^{\Delta}}{f_{jl}^{(2)}}, \quad f_{ijk}^B = \int_{\text{sph}} f_{ijkl}^{\diamond} d\mathbf{m}_l,$$

в итоге для ГЦК решетки (29) принимает вид

$$-\frac{\langle \dot{\eta} \rangle}{2\alpha\gamma} = -2\mathbf{H}^L \cdot \langle \mathbf{m} \rangle \Upsilon + 2K\Psi + J \left[\Lambda + 5Q_A^{\Delta} + 5Q_B^{\diamond} \right] + 2T \langle \eta \rangle, \quad (33)$$

$$\Lambda = \frac{1-2\rho}{\rho} \left(1 - \langle \eta^2 \rangle \right) - 2 \frac{1-\rho}{\rho\lambda} \langle \eta \rangle, \quad \lim_{\langle m \rangle \rightarrow 0} \Lambda = \langle \eta^2 \rangle - 1.$$

Ситуация с ОЦК решеткой оказывается значительно сложнее, поскольку в этом случае не удастся выделить симметричную трех- и более частичную функцию распределения с равноправными связями. Каждый атом имеет 8 соседей, расположенных в вершинах куба (рис. 5), один из соседей, это атом i , в одном из случаев сосед k отвечает противоположному атому, в этом случае можно пренебречь корреляциями между атомами i и k , что дает аппроксимацию (31). Еще шесть атомов, как и в ГЦК решетке, можно объединить в группы C и D по три атома.

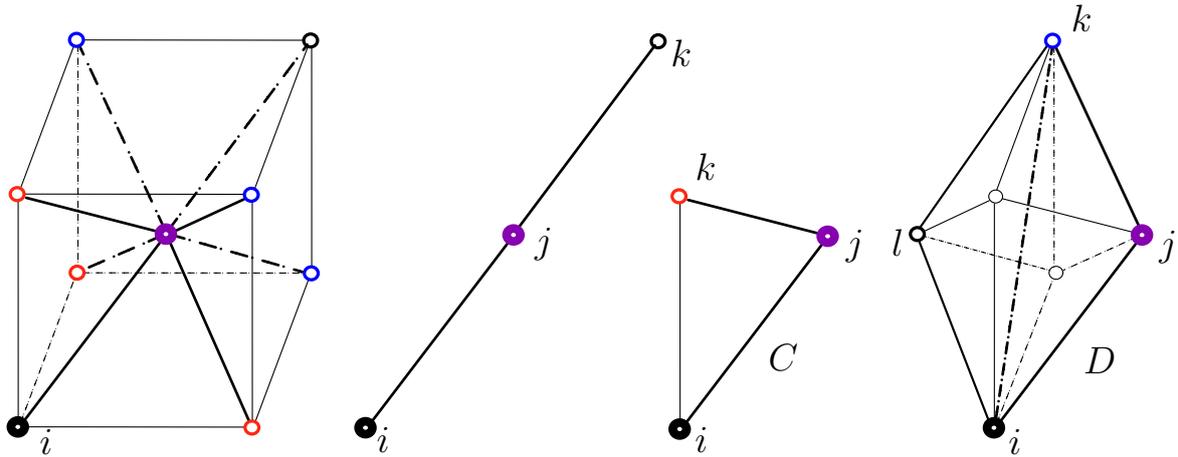


Рис. 5. Соседи атома в ОЦК решетке и различные варианты многочастичных функций распределения

Атомы трехчастичных функций группы C образуют почти правильный треугольник со сторонами $1, 1, 2/\sqrt{3} \approx 1.15$, при этом атом k принадлежит ко второй координационной сфере атома i и вдоль длинной стороны ik присутствует связь, обусловленная только косвенными корреляциями, которой нельзя пренебречь.

Атомы трехчастичных функций группы D образуют треугольник со сторонами $1, 1, 2\sqrt{2}/3 \approx 1.63$, при этом атом k принадлежит к третьей координационной сфере атома i и вдоль длинной стороны ik присутствует связь, обусловленная только косвенными корреляциями, которая хотя и слабее аналогичной связи для атомов группы C , но тоже играет важную роль.

Наиболее строгим вариантом является введение несимметричной четырехчастичной функции распределения с диагональными членами

$$f_{ijkl}^{(4)} = \frac{1}{Z^{(4)}} \exp \left[\sigma_1 \mathbf{p} \cdot (\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_k) + \sigma_2 \mathbf{p} \cdot (\mathbf{m}_j + \mathbf{m}_l) + \right. \\ \left. + \varsigma_0 (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_k + \mathbf{m}_k \cdot \mathbf{m}_l + \mathbf{m}_l \cdot \mathbf{m}_i) + \varsigma_1 \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_k + \varsigma_2 \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_l \right]$$

и определение через нее трехчастичных функций распределения

$$f_{ijk}^C = \int_{\text{sph}} f_{ijkl}^{(4)} d\mathbf{m}_l, \quad f_{jkl}^D = \int_{\text{sph}} f_{ijkl}^{(4)} d\mathbf{m}_i,$$

но возникает вопрос об определении диагональных параметров $\varsigma_{1,2}$.

Одним из решений является введение еще одного уравнения типа (29) на парные корреляции со второй координационной сферой $\langle \nu \rangle = \langle \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_k \rangle$. Другим решением может быть изучение связи между коэффициентами $\varsigma_{0,1,2}$ методами, изложенными в [14], или на основе анализа результатов моделирования «атом-в-атом».

В данной работе мы ограничимся введением симметричной четырехчастичной функции распределения вида

$$f_{ijkl}^{\boxtimes} = \frac{1}{Z^{\boxtimes}} \exp \left[\sigma \mathbf{p} \cdot (\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_k + \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_l) + \varsigma (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_k + \mathbf{m}_k \cdot \mathbf{m}_l + \mathbf{m}_l \cdot \mathbf{m}_i) + \epsilon \varsigma (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_k + \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_l) \right],$$

где $0 \leq \epsilon \leq 1$, и определением через нее трехчастичных функций распределения

$$f_{ijk}^{\boxtimes C,D} = \int_{\text{sph}} f_{ijkl}^{\boxtimes} d\mathbf{m}_l, \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 1} f_{ijk}^{\boxtimes C,D} = f_{ijk}^{\Delta}.$$

Для определения параметра ϵ предположим, что связи на сторонах четырехугольника \boxtimes (обусловленные согласно [14] суммой косвенных и прямых корреляций) отличаются от связей на диагоналях (обусловленных только косвенными корреляциями) на величину прямых корреляций J/T , то есть

$$\epsilon = \frac{1}{\varsigma} \left[\varsigma - \frac{J}{T} \right]. \quad (34)$$

В итоге для ОЦК решетки получаем уравнение на эволюцию парных корреляций

$$-\frac{\langle \dot{\eta} \rangle}{2\alpha\gamma} = -2\mathbf{H}^L \cdot \langle \mathbf{m} \rangle \Upsilon + 2K\Psi + J \left[\Lambda + 6Q^{\boxtimes} \right] + 2T \langle \eta \rangle. \quad (35)$$

Система уравнений (27) и (35), или (33) и другие варианты (29) в зависимости от типа кристаллической решетки, является замкнутой системой уравнений, описывающих эволюцию распределений средней намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle(\mathbf{r})$ и парных корреляций $\langle \eta \rangle(\mathbf{r})$. В дальнейшем мы будем называть ее системой уравнений корреляционной магнитодинамики, или CMD.

Расчет и аппроксимация интегральных коэффициентов

Можно предложить различные способы расчета функций Υ , $\langle \eta \rangle$, $\langle \eta^2 \rangle$ и степени ρ при известных параметрах $\langle m \rangle$, λ , но самым простым является прямой численный расчет интегралов вида

$$\langle \mathbf{m} \rangle(\lambda, \rho p) = \frac{1}{Z^{(2)}} \iint_{\text{sph}} \mathbf{m}_i \exp \left[\rho \mathbf{p} \cdot (\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_j) + \lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \right] d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j,$$

$$\langle \eta \rangle(\lambda, \rho p) = \frac{1}{Z^{(2)}} \iint_{\text{sph}} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) \exp \left[\rho \mathbf{p} \cdot (\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_j) + \lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \right] d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j,$$

на равномерной сетке по λ , ρp , что задает неявную функции $\Upsilon(\langle m \rangle, \langle \eta \rangle) = (1 - \rho)/\lambda$. Степень ρ определяется как $\rho = \rho p / p_M$, где ρp — параметр при расчетах интегралов, p_M является решением трансцендентного уравнения $\langle m \rangle = L(p_M)$.

Интегральные коэффициенты Λ , Ψ , и Q^ζ могут быть рассчитаны аналогичным образом. Коэффициент Ψ рассчитывается при различных взаимных ориентациях вектора \mathbf{p} и оси анизотропии \mathbf{n}_K , коэффициенты Q в различных приближениях считаются при помощи трех- и более кратного интегрирования по сфере.

Все интегралы по сфере считаются на основе сетки, состоящей из пяти- и шестиугольников, дуальной треугольной сетки, полученной на основе рекурсивного разбиения пентакисдодекаэдра, реализованной в библиотеке `aiwlib` [15], рис. 6. По сравнению с традиционными сферическими координатами такая сетка не имеет сильных особенностей на полюсах и требует при заданном уровне точности (размере ячейки) вчетверо меньше узлов, что при расчете тройного интеграла по сферам дает выигрыш в 64 раза. Все расчеты интегральных коэффициентов велись на кластере К60 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Благодаря уравнению на парные корреляции (29) координаты $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$ являются наиболее естественными для данной задачи, при этом согласно (20)

$$\langle m \rangle^2 \leq \langle \eta \rangle \leq 1, \quad \lim_{\langle \eta \rangle \rightarrow \langle m \rangle^2} \Upsilon = \frac{1 - \langle m_{\parallel p}^2 \rangle}{2} = \frac{\langle m \rangle}{p}, \quad \lim_{\langle \eta \rangle \rightarrow 1} \Upsilon = 0,$$

поскольку предельный случай $\langle \eta \rangle = \langle m \rangle^2$ отвечает приближению мультипликативности. В результате, на основе анализа численного расчета функции Υ (рис. 7 а) может быть построена следующая аппроксимация с абсолютной ошибкой не хуже чем 10^{-3}

$$\begin{aligned} \Upsilon \approx \frac{1 - \langle \eta \rangle}{1 - \langle m \rangle^2} \cdot \frac{\langle m \rangle}{p} \cdot \left[1 + 0.3684 \cdot \langle \eta \rangle^2 + 0.1873 \cdot \langle \eta \rangle^3 - \right. \\ \left. - 0.3236 \cdot \langle \eta \rangle \langle m \rangle^2 - 0.2523 \cdot \langle \eta \rangle^2 \langle m \rangle^2 \right]. \end{aligned}$$

Аналогично, для функции Λ (рис. 7 б) можно построить аппроксимацию с точностью не хуже чем $2 \cdot 10^{-3}$

$$\begin{aligned} \Lambda \approx \frac{1 - \langle \eta \rangle}{1 - \langle m \rangle^2} \left[-0.6639 - 0.7617 \cdot \langle \eta \rangle + 0.2718 \cdot \langle \eta \rangle^2 - \right. \\ \left. - 1.367 \cdot \langle \eta \rangle^3 + 0.5078 \cdot \langle \eta \rangle^4 + 0.2689 \cdot \langle \eta \rangle \langle m \rangle + \right. \\ \left. + 0.3472 \cdot \langle \eta \rangle \langle m \rangle^2 - 0.418 \cdot \langle \eta \rangle^2 \langle m \rangle + 1.833 \cdot \langle \eta \rangle^2 \langle m \rangle^2 \right]. \end{aligned}$$

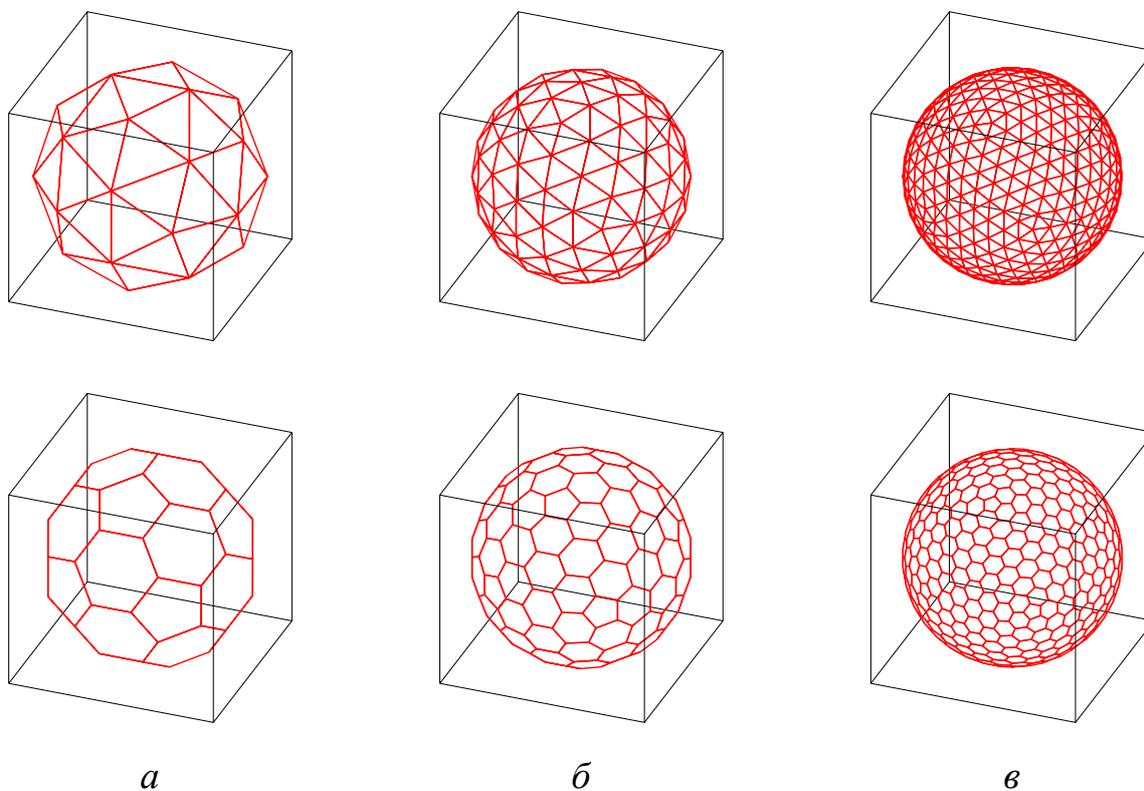


Рис. 6. Сферическая сетка из треугольников, построенная на основе рекурсивного разбиения пентакисдодекаэдра, и дуальная ей сетка из пяти- и шестиугольников: без разбиения (а), однократное разбиение (б), двукратное разбиение (в)

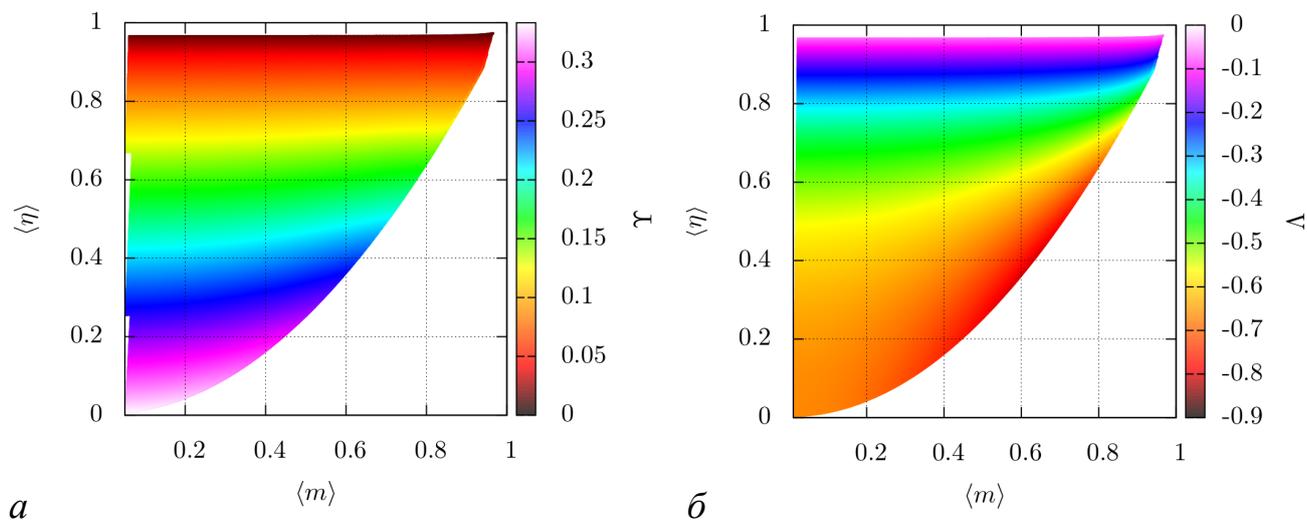


Рис. 7. Функции Υ и Λ , полученные в результате численных расчетов

Для коэффициента при анизотропии Ψ и коэффициента Q^Δ с точностью до третьего знака работают аппроксимации

$$\Psi \approx \left[0.46134 \cdot \langle m \rangle^2 - 1.3836 \cdot (\mathbf{n}_K \cdot \langle \mathbf{m} \rangle)^2 \right] (1 - \langle \eta \rangle) \langle m \rangle,$$

$$Q^\Delta \approx - \langle \eta \rangle (1 - \langle \eta \rangle) \left[0.69279 - 0.24455 \cdot \langle \eta \rangle + 1.1055 \cdot \langle \eta \rangle^2 - 0.53462 \cdot \langle \eta \rangle^3 \right].$$

Описанные в данном разделе аналитические аппроксимации интегральных коэффициентов реализованы в виде кода на языке C++ в заголовочном файле llbe библиотеки aiwlib.

Наибольшую сложность вызывает расчет коэффициента Q^\boxtimes . Проще всего рассчитать его на прямоугольной сетке в трехмерном пространстве $\sigma\rho, \varsigma, \epsilon$, что дает неявные функции Q^\boxtimes (рис. 8, 9) и ς от параметров $\langle m \rangle, \langle \eta \rangle$. Затем, вводя логарифмическую сетку по температуре, для каждого узла сетки $\langle m \rangle, \langle \eta \rangle, T$ решается алгебраическое уравнение (34), что дает значение ϵ и в итоге позволяет рассчитать сеточную функцию $Q^\boxtimes(\langle m \rangle, \langle \eta \rangle, T)$.

Табулированные значения $Q^\boxtimes(\langle m \rangle, \langle \eta \rangle, T)$ могут быть получены в текстовом и бинарном форматах вместе с библиотекой aiwlib (файлы dat/llbe/Q4T.*).

Результаты моделирования

Во всех случаях сравнивалось решение системы уравнений Ландау–Лифшица (1) для образца с ОЦК решеткой из 64^3 ячеек, результаты моделирования УЛЛБ (18) и результаты моделирования построенной в данной работе системы уравнений корреляционной магнитодинамики (27), (35).

На рисунках 10 и 11 приведены зависимости равновесных значений средней намагниченности $\langle m \rangle$ и энергии $\langle W \rangle$ системы от температуры T при различных значениях внешнего поля H^{ext} . Во всех случаях наблюдается хорошее совпадение значений намагниченности для всех трех приближений (за исключением небольших расхождений при большой анизотропии $K = 0.5J$ в области температуры Кюри), но значения энергии хорошо совпадают только для уравнений корреляционной магнитодинамики. Значения энергии, полученные при решении УЛЛБ в парамагнитной фазе в отсутствие внешнего поля, ожидаемо равны нулю.

При изучении динамики системы рассматривалась релаксация средней намагниченности образца от $\langle m \rangle_0 = 1$ к ее равновесному значению. В случае ненулевого внешнего поля рассматривалось два варианта начальных условий: полностью упорядоченные ($\langle m \rangle_0 = 1$) и полностью неупорядоченные ($\langle m \rangle_0 = 0$). Во всех случаях уравнения корреляционной магнитодинамики начинали решаться с момента времени $t = 1$, в качестве начальных условий брались значения $\langle m \rangle$ и $\langle \eta \rangle$, полученные из атомистического моделирования. Такой подход связан с некоторой искусственностью рассматриваемых постановок, при нестационарных расчетах в качестве начальных условий необходимо брать стационарные

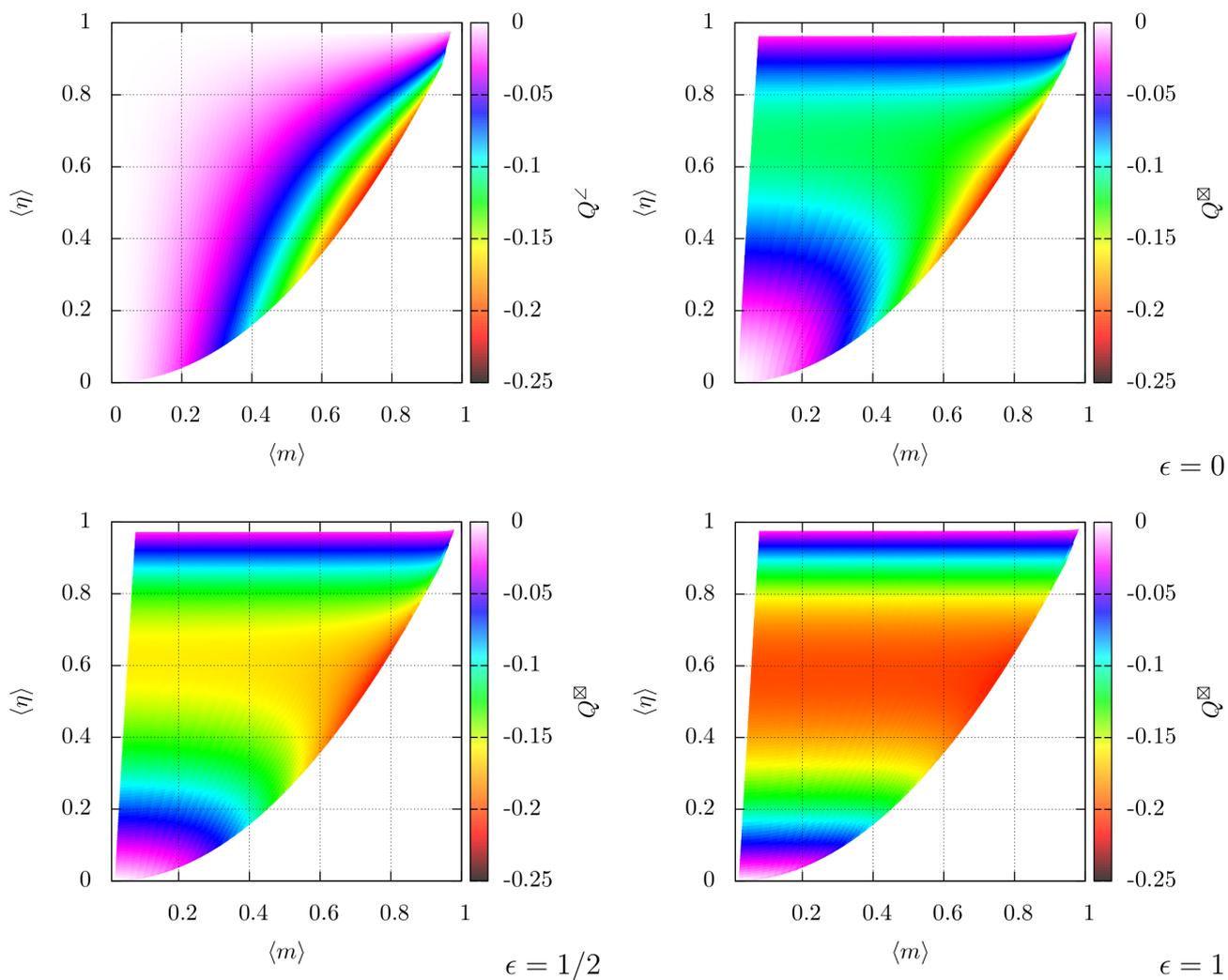


Рис. 8. Функция $Q^<$ и функции $Q^>$ при различных значениях параметра ϵ

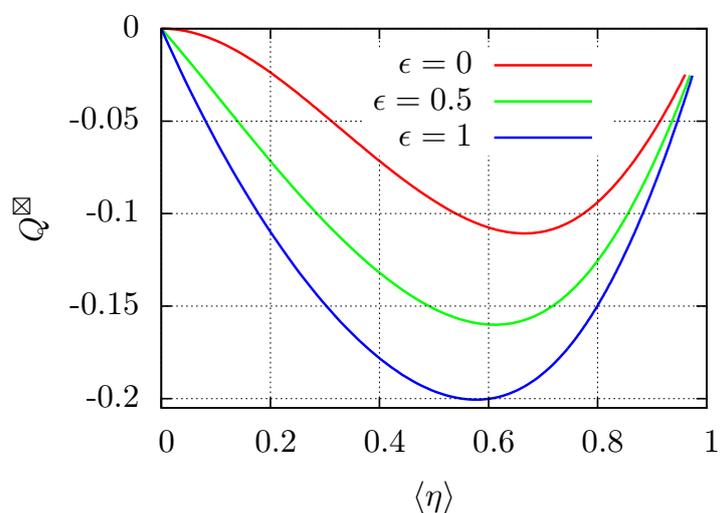


Рис. 9. Зависимости $Q^>(\langle \eta \rangle)$ в парамагнитной фазе ($\langle m \rangle = 0$) при различных значениях параметра ϵ

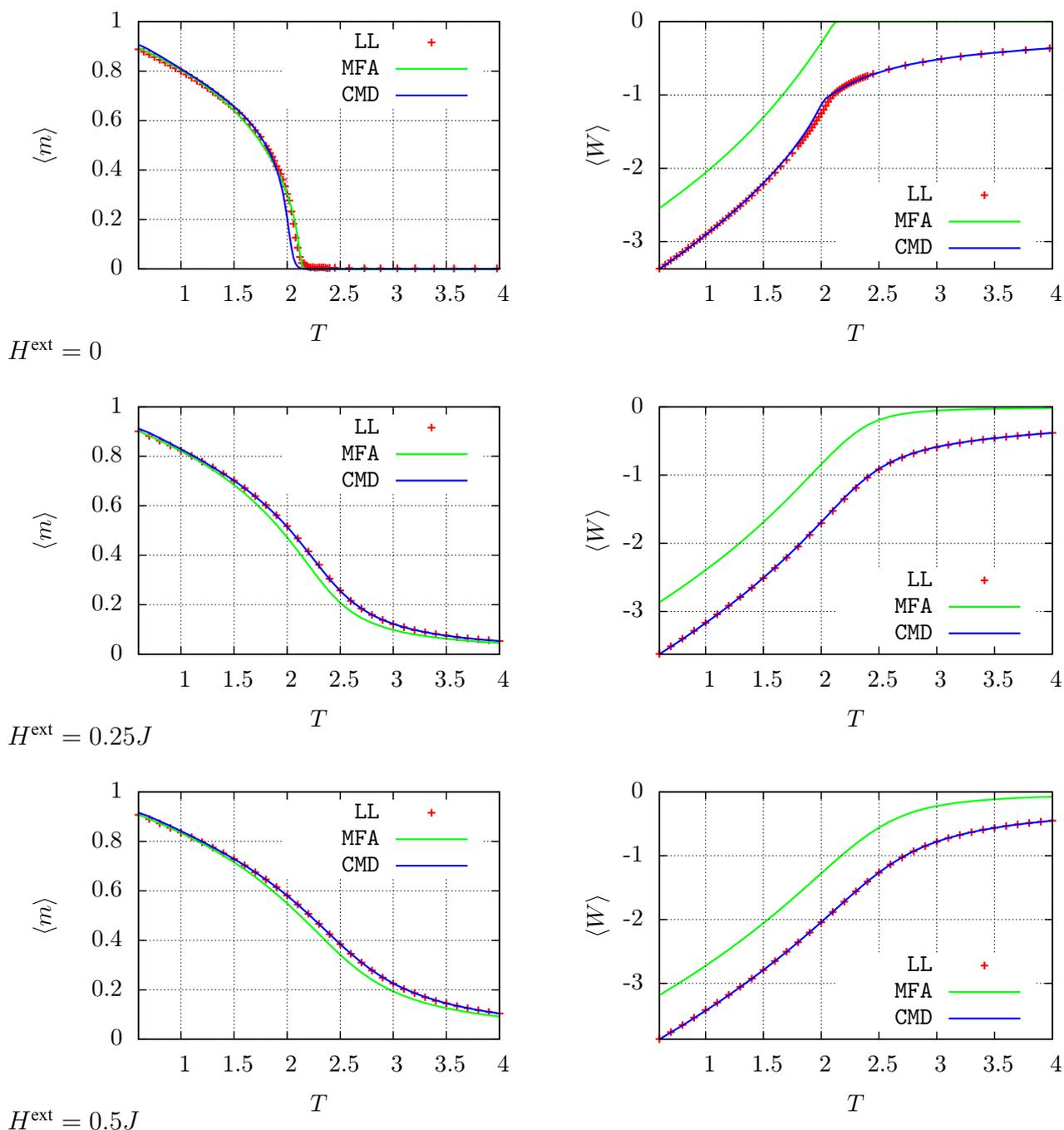


Рис. 10. Зависимости равновесных значений средней намагниченности $\langle m \rangle$ и энергии $\langle W \rangle$ системы от температуры T при различных значениях внешнего поля H^{ext} в различных приближениях: LL — моделирование «атом-в-атом», MFA — УЛЛБ (приближение среднего поля, фактически теория Кюри–Вейсса), CMD — уравнения корреляционной магнитодинамики

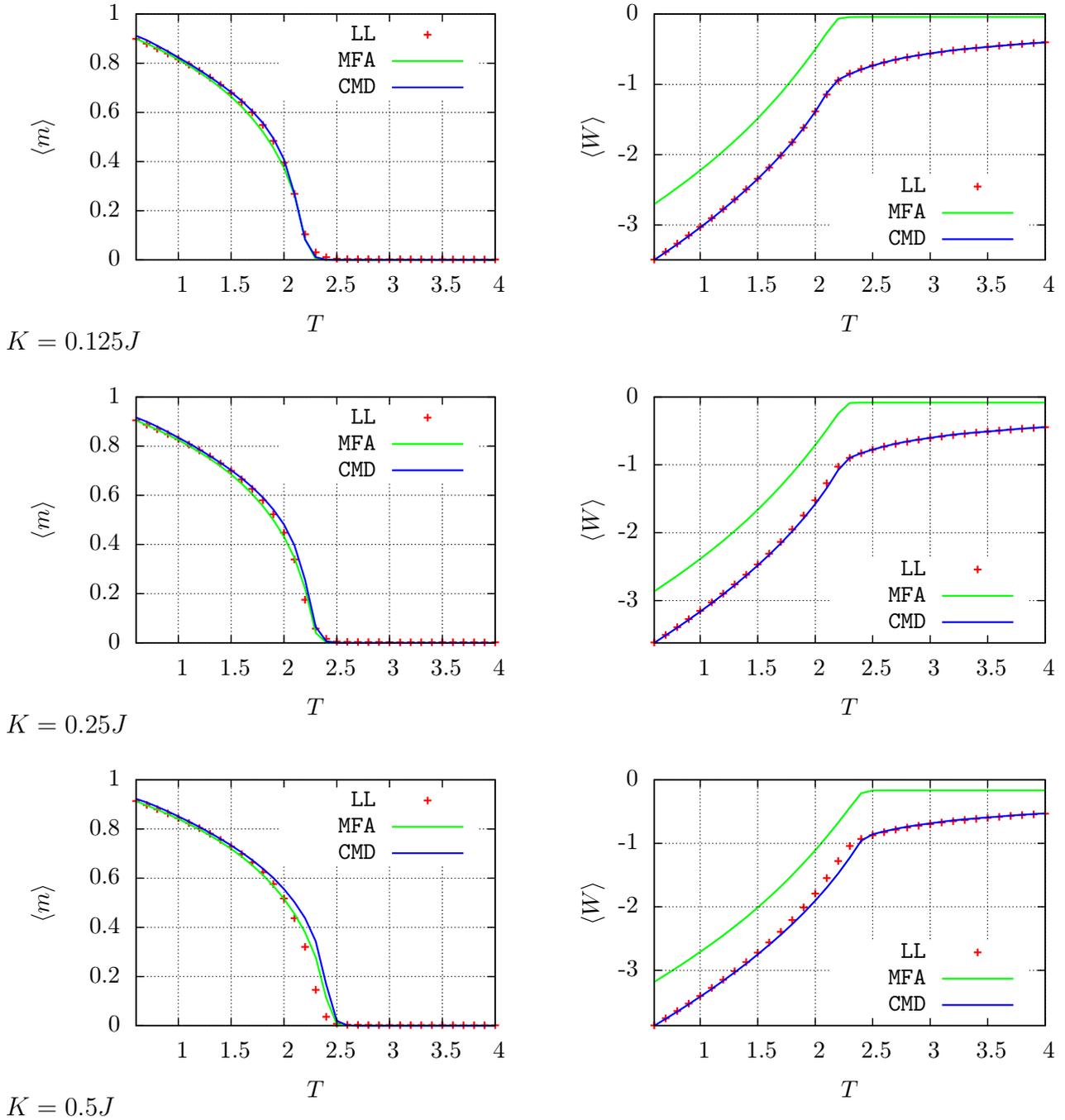


Рис. 11. Зависимости равновесных значений средней намагниченности $\langle m \rangle$ и энергии $\langle W \rangle$ системы от температуры T при различных значениях анизотропии K в различных приближениях: LL — моделирование «атом-в-атом», MFA — УЛЛБ (приближение среднего поля, фактически теория Кюри–Вейсса), CMD — уравнения корреляционной магнитодинамики

значения $\langle m \rangle$ и $\langle \eta \rangle$ которые могут быть получены независимо из уравнений корреляционной магнитодинамики.

На рисунке 12 приведена эволюция значений средней намагниченности $\langle m \rangle$ при различных значениях температуры T , внешнего поля H^{ext} и начальных условиях $\langle m \rangle_0$. Во всех случаях результаты решения системы уравнений корреляционной магнитодинамики гораздо лучше согласуются с результатами моделирования «атом-в-атом», чем результаты решения УЛЛБ.

Зависимости $\langle m \rangle (t)$ могут быть аппроксимированы как

$$\langle m \rangle (t) \approx \langle m \rangle_{\text{eq}} + C e^{-t/\tau},$$

где $\langle m \rangle_{\text{eq}}$ — равновесное значение намагниченности, C — некоторый коэффициент, τ — время релаксации, которое может быть получено из анализа $\langle m \rangle (t)$ методом наименьших квадратов. На рисунках 13 и 14 приведены зависимости $\tau(T)$ при различных значениях анизотропии, внешнего поля и различных начальных условиях.

Во всех случаях в ферромагнитной фазе (при температуре ниже температуре Кюри) времена релаксации, полученные на основе уравнений корреляционной магнитодинамики, гораздо лучше согласуются с результатами моделирования «атом-в-атом», чем времена, полученные из УЛЛБ. В парамагнитной фазе результаты всех трех моделей находятся в хорошем согласии друг с другом. Разброс времен релаксации, полученных при атомистическом моделировании, связан с температурными флуктуациями и дробовым шумом, обусловленным конечным числом атомов в образце.

Расхождения во временах релаксации между уравнениями корреляционной магнитодинамики и атомистическим подходом наблюдаются либо за счет некоторой рассогласованности критической температуры, либо при сильных внешних полях (и нарастают по мере уменьшения температуры). Эти проблемы можно объяснить достаточно грубыми приближениями, сделанными при аппроксимации трехчастичной функции распределения (34), что повлекло за собой ошибки в определении интегрального коэффициента Q .

Отдельного внимания заслуживает ошибка во временах релаксации в ферромагнитной фазе в отсутствие внешнего поля и анизотропии, рис. 15. Аномально длительная релаксация системы при моделировании «атом-в-атом» наблюдается и при меньших размерах образца из 32^3 ячеек, но все же можно предположить, что этот эффект связан с затуханием длинноволновых возмущений. Времена релаксации τ_{CMD} , полученные из уравнений корреляционной магнитодинамики, примерно втрое меньше, чем времена τ_{LL} , полученные из атомистического моделирования, но времена τ_{MFA} , полученные из УЛЛБ, оказываются меньше τ_{LL} на порядок и более. При этом τ_{LL} не зависит от температуры при $T < 1.75J$, τ_{CMD} не зависит от температуры при $T < 1.5J$, а τ_{MFA} зависит (уменьшается по мере уменьшения температуры) во всем диапазоне температур.

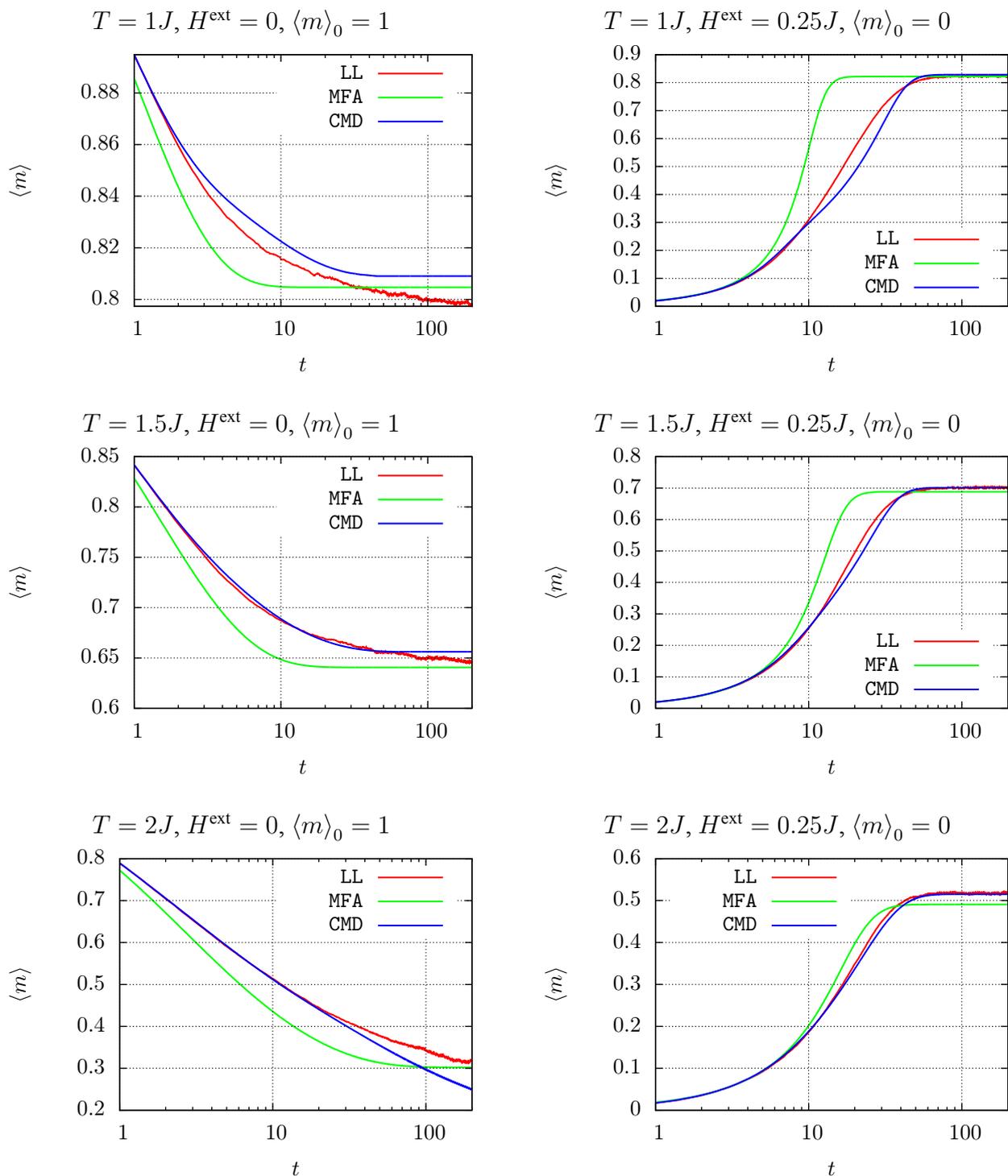


Рис. 12. Эволюция значений средней намагниченности $\langle m \rangle$ при различных значениях температуры T , внешнего поля H^{ext} и начальных условиях $\langle m \rangle_0$ в различных приближениях: LL — моделирование «атом-в-атом», MFA — УЛЛБ (приближение среднего поля), CMD — уравнения корреляционной магнетодинамики

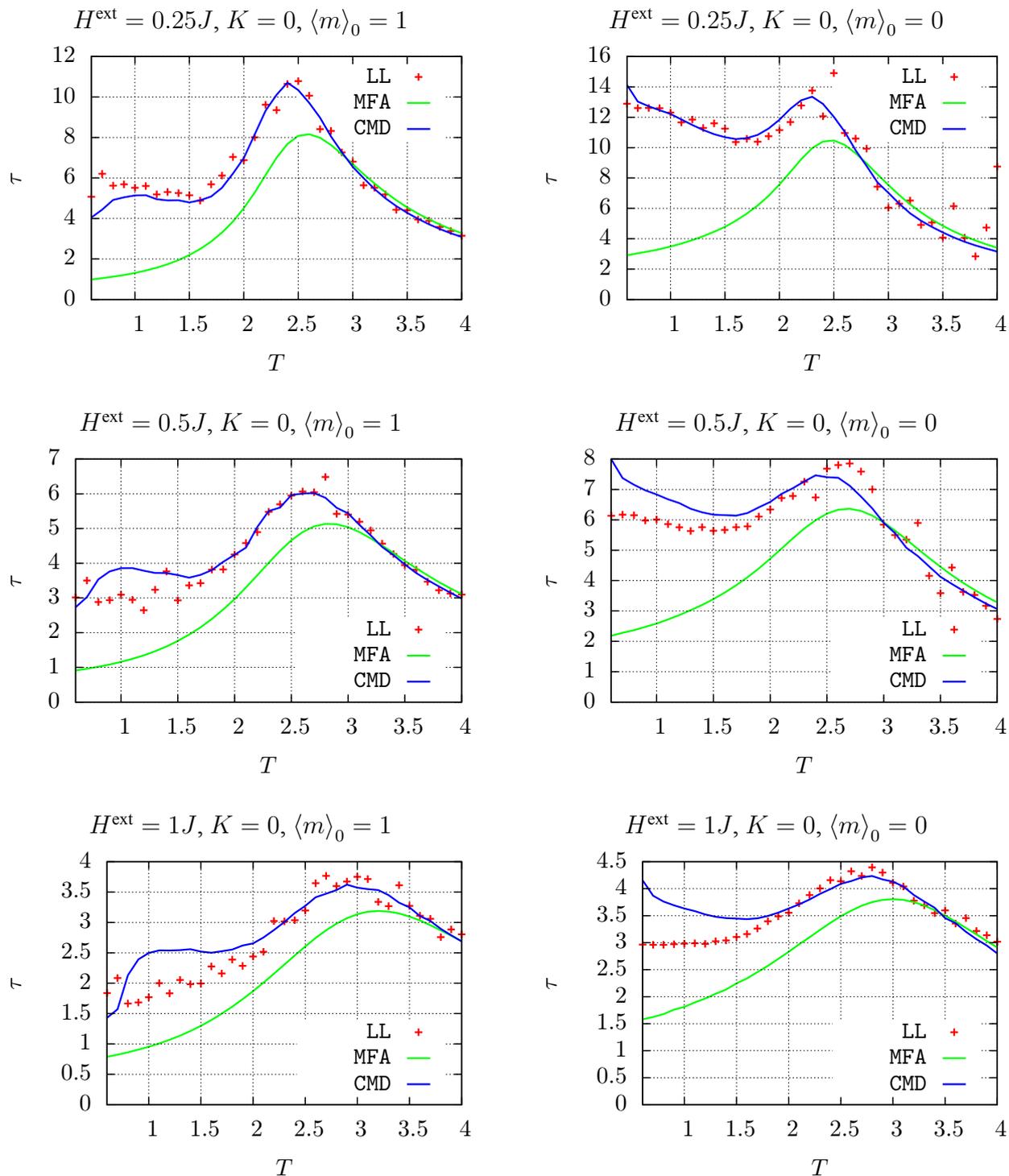


Рис. 13. Зависимости времени релаксации τ от температуры T при различных значениях внешнего поля H^{ext} и различных начальных условиях $\langle m \rangle_0$ в различных приближениях: LL — моделирование «атом-в-атом», MFA — УЛЛБ (приближение среднего поля, фактически теория Кюри–Вейсса), CMD — уравнения корреляционной магнитодинамики

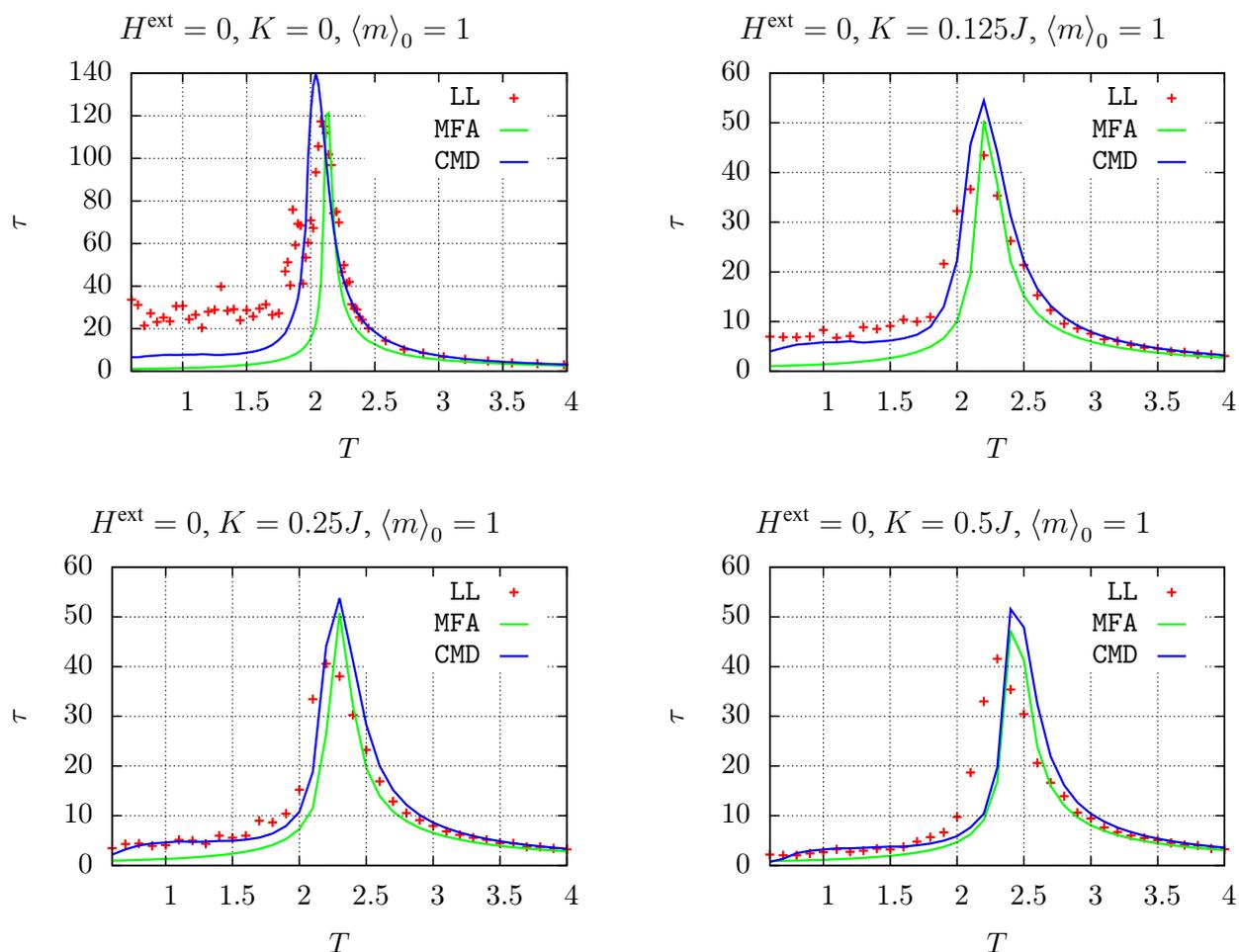


Рис. 14. Зависимости времени релаксации τ от температуры T при различных значениях анизотропии K в различных приближениях: LL — моделирование «атом-в-атом», MFA — УЛЛБ (приближение среднего поля, фактически теория Кюри–Вейсса), CMD — уравнения корреляционной магнитодинамики

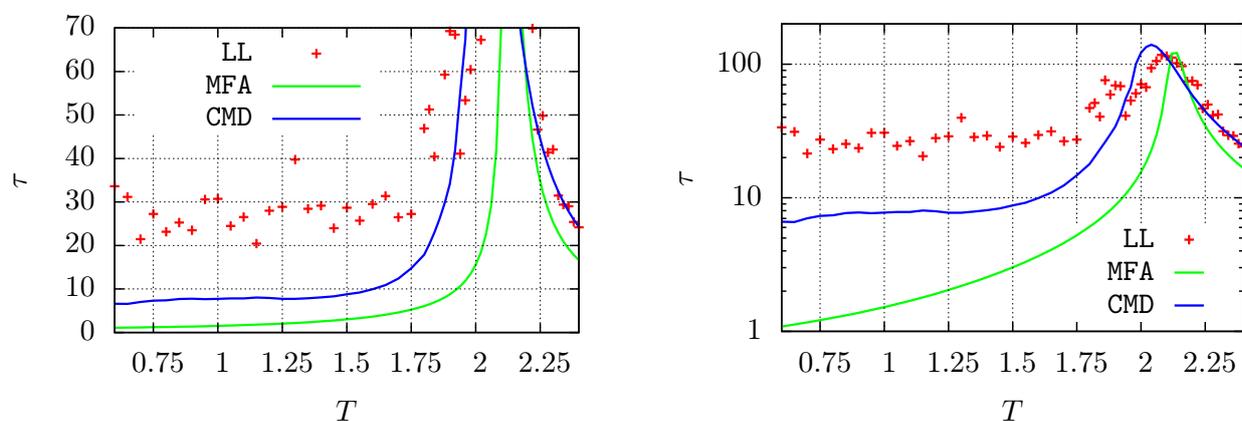


Рис. 15. Зависимости времени релаксации τ от температуры T в отсутствие внешнего поля и анизотропии в ферромагнитной фазе

Все расчеты по моделированию «атом-в-атом» были выполнены на кластере К60 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, серийный запуск расчетов и обработка результатов проводились при помощи системы RACS [16].

Заключение

Построенная в данной работе система уравнений корреляционной магнитодинамики, даже в рамках довольно грубых приближений, сделанных относительно вида трехчастичной функции распределения, дает гораздо лучшее согласие с исходной атомистической моделью, чем традиционное уравнение Ландау–Лифшица–Блоха. Особенно важным является хорошее согласие динамики и времен релаксации системы — многие устройства спинтроники и магнитной микроэлектроники, например ячейки магнеторезистивной памяти, работают в нестационарном, импульсном режиме.

Введение дополнительного уравнения на обменную энергию является вполне логичным шагом и в некотором смысле делает построенную систему уравнений похожей на систему уравнений гидродинамики, конечно с поправкой на такой весьма специфичный объект описания, как магнетик.

Построенная теория дает верные значения намагниченности и температуры фазового перехода без учета флуктуаций среднего поля (множителя ε_G).

Недостатком построенной теории является необходимость использования табулированных функций Q . Возможно, со временем удастся подобрать аналитическую аппроксимацию для этих функций, к тому же, например, применение табулированных уравнений состояния в газодинамике при моделировании течения реальных газов не является чем-то экстраординарным.

Обобщение построенной теории на случай нескольких подрешеток может вызывать сложности, поскольку многочастичные функции распределения утрачат симметрии относительно перестановок атомов и функции Λ , Ψ , Q будут зависеть от намагниченностей сразу нескольких подрешеток — тем не менее такое обобщение и построение замкнутой работоспособной системы уравнений представляется вполне возможным.

Безусловно, построенная система уравнений требует доработки (по крайней мере включения источника флуктуаций, обусловленных дробовым шумом) и тщательной проверки в различных постановках.

Автор глубоко благодарен своим коллегам по сектору из ИПМ им. М.В. Келдыша РАН за многочисленные обсуждения и замечания. Продолжительные дискуссии с Галиной Ивановной Змиевской 12 лет назад привели к пониманию необходимости отказа от приближения среднего поля для магнетиков и фактически дали старт работе, итоги которой приведены в данном препринте. Сергей Андреевич Хилков оказал большую помощь при проведении ряда математических выкладок и активно участвовал в обсуждении различных теоретических и методических аспектов данной работы.

Список литературы

- [1] Моделирование фазовых диаграмм переключения для термоассистированных наноприборов MRAM / И.М. Искандарова, А.В. Иванов, А.А. Книжник и др. // Российские нанотехнологии. — 2015. — Т. 10, № 11-12. — С. 112–117.
- [2] Программный пакет для приборно-технологического моделирования спинтронных приборов на основе магнитных туннельных переходов / И.А. Горячев, Г.Д. Демин, К.А. Звездин и др. // Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем (МЭС). — 2016. — № 4. — С. 237–244.
- [3] Программный комплекс для компьютерного дизайна спинтронных наноприборов / А.А. Книжник, И.А. Горячев, Г.Д. Демин и др. // Российские нанотехнологии. — 2017. — Т. 12, № 3-4. — С. 76–83.
- [4] Garanin D. A. Fokker-Planck and Landau-Lifshitz-Bloch equations for classical ferromagnets // Phys. Rev. B. — 1997. — Vol. 55. — P. 3050.
- [5] Atxitia U., Hinzke D., Nowak U. Fundamentals and applications of the Landau–Lifshitz–Bloch equation // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2017. — Vol. 50, no. 3. — P. 033003.
- [6] Garanin D. A. Self-consistent Gaussian approximation for classical spin systems: Thermodynamics // Phys. Rev. B. — 1996. — Vol. 53. — P. 11593.
- [7] Иванов А.В. Кинетическое моделирование динамики магнетиков // Математическое моделирование. — 2007. — Т. 19, № 10. — С. 89–104.
- [8] Зипунова Е.В., Иванов А.В. К вопросу о расчете поля демагнетизации быстрым мультипольным методом // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2018. — № 140. — С. 19.
- [9] Brown W.F. Thermal Fluctuation of a Single–Domain Particle // Phys. Rev. — 1963. — Vol. 130, no. 5. — P. 1677.
- [10] Зипунова Е.В., Иванов А.В. Выбор оптимальной численной схемы для моделирования системы уравнений Ландау–Лифшица с учетом температурных флуктуаций // Математическое моделирование. — 2014. — Т. 26, № 2. — С. 33–49.
- [11] Зипунова Е.В., Иванов А.В. Две новые численные схемы для моделирования магнетиков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2017. — № 140. — С. 18.

- [12] Иванов А.В. Аппроксимация коэффициентов уравнения Ландау–Лифшица–Блоха при микромагнитном моделировании // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2019. — № 105. — С. 16.
- [13] Иванов А.В., Хилков С.А. Бета–аппроксимация двухчастичной функции распределения при описании цепочек фазовых осцилляторов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2017. — № 87. — С. 19.
- [14] Иванов А.В. Расчет статистической суммы и аппроксимация многочастичных функций распределения для магнетиков в модели Гейзенберга // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2019. — № 104. — С. 12.
- [15] Иванов А.В., Хилков С.А. Библиотека aiwlib — инструмент для создания приложений численного моделирования, визуализации и анализа результатов // Научная визуализация. — 2018. — Т. 10, № 1. — С. 110–127.
- [16] Иванов А.В. Использование библиотеки aiwlib на примере численного моделирования стохастического резонанса // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2018. — № 89. — С. 30.