



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 98 за 2017 г.](#)



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

Зипунова Е.В., [Иванов А.В.](#)

К вопросу о тестировании
программных комплексов
для моделирования
магнетиков

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Зипунова Е.В., Иванов А.В. К вопросу о тестировании программных комплексов для моделирования магнетиков // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 98. 30 с. doi:[10.20948/prepr-2017-98](https://doi.org/10.20948/prepr-2017-98)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-98>

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

Е.В. Зипунова, А.В. Иванов

**К вопросу о тестировании
программных комплексов
для моделирования магнетиков**

Москва — 2017

Зипунова Е.В., Иванов А.В.

e-mail: e.zipunova@gmail.com, aivanov@keldysh.ru

**К вопросу о тестировании
программных комплексов
для моделирования магнетиков**

В настоящий момент численное моделирование является одним из важнейших инструментов по изучению физических процессов, протекающих в магнитных материалах, и широко востребовано при решении инженерных задач по созданию новых устройств спинтроники. При этом, несмотря на множество существующих программных комплексов, регулярно возникает необходимость в создании новых вычислительных кодов для моделирования магнетиков с учетом новых физических постановок, алгоритмов распараллеливания и т.д. В данной работе описан ряд базовых тестов, необходимых для отладки таких кодов и тестирования численных схем.

Ключевые слова: уравнение Ландау-Лифшица, спинтроника, численное моделирование

Elizaveta Vyacheslavovna Zipunova, Anton Valeryevich Ivanov

e-mail: e.zipunova@gmail.com, aivanov@keldysh.ru

The problem of testing program complex for magnetic numerical simulation

At the moment, numerical simulation is one of the most useful tools for studying physical phenomenas in magnetic materials and also widely used in solving engineering problems occuring during creating spintronic device. In spite of existence of numerous program complexes, need of creating new numerical simulations for modeling magnetics taking into account new statements of the problems and new parallelization algorithms, occurs regularly. In this work series of basic tests, needed for code debugging and numerical schemes testing, are described.

Keywords: Landau-Lifshitz equation, spintronics, numerical simulation

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 15-01-05052.

Содержание

1	Введение	3
2	Физико-математическая модель	4
3	Выбор безразмерной системы единиц	5
4	Моделирование эволюции системы в постоянном однородном внешнем поле	6
5	Моделирование эволюции системы с учетом анизотропии	7
6	Моделирование эволюции системы с учетом обменного взаимодействия	8
7	Пример тестирования численной модели	14
8	Моделирование спин-флип и спин-флоп переходов	20
9	Моделирование эволюции энергии системы с учетом температурных флуктуаций	23
10	Моделирование стационарных состояний систем и сравнение с приближением среднего поля	25
11	Заключение	29
	Список литературы	30

1. Введение

Изучение магнитных материалов представляет большой интерес как с точки зрения фундаментальной науки, так и с точки зрения различных практических приложений — создания новых типов сенсоров, устройств для хранения и обработки информации. Для теоретического описания магнетиков существует, по крайней мере, три актуальных подхода: наиболее детальное описание «атом–в–атом», когда отдельно описывается эволюция магнитного момента каждого атома; микромагнитное описание, при котором описывается эволюция намагниченности отдельных фрагментов сплошной среды; макромагнитное описание, при котором намагниченность отдельных слоев (фрагментов) моделируемого магнитного устройства считается однородной. При этом с точки зрения численных схем микромагнитное описание отличается от описания «атом–в–атом» лишь типом кристаллической решетки и некоторыми множителями, но с точки зрения физики описание «атом–в–атом» является наиболее адекватным, особенно при учете температурных флуктуаций [1, 2].

Бурное развитие численного моделирования магнетиков привело к появлению большого количества различных программных комплексов [3, 4]. Тем не менее, новые физические постановки, развитие численных схем, вычислительной техники и алгоритмов зачастую приводят к необходимости разработки новых программных комплексов. В частности, развитие графических ускорителей сделало возможным проведение расчетов «атом–в–атом» для магнитных материалов со сложными кристаллическими решетками при создании устройств

спинтроники. Тестирование и отладка таких вновь создаваемых комплексов является отдельной достаточно специфической задачей.

За последние годы нами был накоплен большой опыт по разработке новых магнитных кодов для решения как фундаментальных [2], так и прикладных [4] задач. В данной работе приводится описание серии тестов, позволяющих оценить качество реализации выбранной численной схемы.

Тесты основаны на сравнении результатов расчетов с известными аналитическими решениями и позволяют оценивать как работоспособность фрагментов кода, отвечающих за отдельные физические процессы и члены в эффективном поле, так и порядок аппроксимации численной схемы. После проведения такого тестирования можно переходить к тестированию при более сложных постановках задачи, в частности к тестированию на стандартных задачах μ MAG [5]. Сообщество μ MAG (Micromagnetic Modeling Activity Group) создано для решения фундаментальных проблем микромагнитного моделирования. Одна из основных задач — создание стандартных постановок задач для сравнения расчетных техник, выявления проблем и отладки программного кода. На данный момент на сайте опубликовано описание пяти задач, каждая из которых требует адекватного моделирования множества физических процессов, влияющих на эволюцию системы.

2. Физико-математическая модель

При моделировании магнитного материала «атом–в–атом» считается, что магнитный момент отдельного атома задаётся вектором постоянной длины, который может ориентироваться произвольным образом. Эволюция магнитного момента описывается уравнением Ландау-Лифшица. Уравнение Ландау-Лифшица для i -го атома:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{M}_i}{dt} &= -\gamma [\mathbf{M}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] - \frac{\alpha\gamma}{\mu_s} [\mathbf{M}_i \times [\mathbf{M}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]] + 2\tilde{\mathbf{S}} \sqrt{\frac{\alpha T k_B}{\mu_s}}, \\ \mathbf{H}_i^{\text{eff}} &= -\nabla_{\mathbf{M}_i} W, \quad W = W^{\text{exch}} + W^{\text{anis}} + W^{\text{ext}} + W^{\text{dip}}, \\ W^{\text{exch}} &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j), \quad \mathbf{H}_i^{\text{exch}} = \sum_j J_{ij} \mathbf{m}_j / \mu_s, \\ W^{\text{anis}} &= -\sum_i K (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{a})^2, \quad \mathbf{H}_i^{\text{anis}} = 2K / \mu_s (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{a}) \mathbf{a}, \\ W^{\text{ext}} &= -\sum_i (\mathbf{M}_i \cdot \mathbf{H}^{\text{ext}}), \\ W^{\text{dip}} &= -\frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{3(\mathbf{M}_j \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i))(\mathbf{M}_i \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i))}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i|^5} - \frac{\mathbf{M}_i \mathbf{M}_j}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i|^3} \right), \end{aligned}$$

где \mathbf{M}_i — намагниченность i -го атома, \mathbf{m}_i — единичный вектор направления намагниченности i -го атома, μ_s — величина магнитного момента ($\mathbf{M}_i = \mu_s \mathbf{m}_i$), γ — гиромагнитное отношение, α — безразмерный параметр затухания, \mathbf{H}^{eff} — эффективное магнитное поле, $\tilde{\mathbf{S}}$ — случайный источник единичной интенсивности с нормальным распределением, сохраняющий модуль \mathbf{M}_i и обеспечивающий в равновесном случае бoльцмановское распределение в ансамбле магнитных моментов, W^{exch} — энергия обменного взаимодействия, W^{anis} — энергия анизотропии, W^{ext} — энергия от взаимодействия с внешним однородным полем, W^{dip} — энергия диполь–дипольного взаимодействия, J_{ij} — обменный интеграл между частицами i и j , K — коэффициент анизотропии, \mathbf{a} — направление анизотропии, \mathbf{R}_i — координата i -го атома, $k_b T$ — температура системы, измеряемая в единицах энергии.

Обменное взаимодействие обусловлено наложением электронных облаков между двумя соседними магнитными атомами. Соответственно, при подсчете обменного поля суммирование ведется только по ближайшим атомам. Анизотропию вводят в уравнение для учета формы частиц и кристаллической решетки. Наиболее часто используются одноосная [6] (линейная анизотропия типа «легкая ось») и кубическая [7] формы анизотропии. В данной работе рассматривается линейная анизотропия типа «легкая ось» и не учитывается диполь-дипольное взаимодействие.

3. Выбор безразмерной системы единиц

За единицу магнитного момента принята величина магнитного момента атома $\Delta_M = \mu_s$. За единицу энергии принят модуль обменного интеграла между ближайшими соседями $\Delta_W = J$. Соответственно, за единицу поля принято отношение единицы энергии к модулю намагниченности атома $\Delta_H = \Delta_W / \Delta_M = J / \mu_s$. За единицу времени принимается обратная частота прецессии магнитного момента в единичном поле $\Delta_t = \frac{1}{\gamma \Delta_H}$.

Уравнение Ландау-Лифшица в выбранной безразмерной системе единиц имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{m}_i}{dt} &= -\gamma^* [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] - \alpha [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]] + 2\tilde{\mathbf{S}}\sqrt{\alpha T^*}, \\ \mathbf{H}_i^{\text{eff}} &= \mathbf{H}_i^{\text{exch}} + \mathbf{H}_i^{\text{anis}} + \mathbf{H}^{\text{ext}}, \\ \mathbf{H}_i^{\text{exch}} &= \sum_j J_{ij}^* \mathbf{m}_j, \quad \mathbf{H}_i^{\text{anis}} = 2K^* (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{a}), \end{aligned}$$

где $J_{ij}^* = J_{ij} / J$, $K^* = K / J$, $T^* = k_b T / J \mu_s$, $\gamma^* = 1$ для учета прецессии и $\gamma^* = 0$, когда прецессия не моделируется. Далее все уравнения и выкладки будут приводиться в выбранной системе единиц.

4. Моделирование эволюции системы

в постоянном однородном внешнем поле

Рассмотрим образец магнитного материала произвольной формы и с произвольной кристаллической решеткой. Анизотропия и обмен между атомами отсутствуют, нет температурных флуктуаций. На атомы действует только постоянное однородное внешнее поле.

Без потери общности рассуждений предположим, что внешнее поле направлено по оси OZ и по модулю равно H :

$$\mathbf{H}^{\text{ext}} = H(0, 0, 1)^T.$$

Направление магнитного момента одного атома \mathbf{m} выразим в сферических координатах:

$$\mathbf{m} = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, \sin \theta)^T,$$

тогда уравнение Ландау-Лифшица записывается [1] как система уравнений для всех компонент вектора \mathbf{m} :

$$\begin{cases} \frac{d \cos \theta \cos \varphi}{dt} = -\gamma H \cos \theta \sin \varphi - \alpha H \sin \theta \cos \theta \cos \varphi, \\ \frac{d \cos \theta \sin \varphi}{dt} = \gamma H \cos \theta \cos \varphi - \alpha H \sin \theta \cos \theta \sin \varphi, \\ \frac{d \sin \theta}{dt} = \alpha H \cos^2 \theta. \end{cases}$$

Проинтегрировав уравнение для z компоненты, получим:

$$\text{tg} \left(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4} \right) = \text{tg} \left(\frac{\theta_0}{2} + \frac{\pi}{4} \right) e^{\alpha H t}$$

или

$$\theta = 2 \arctg \left[\text{tg} \left(\frac{\theta_0}{2} + \frac{\pi}{4} \right) e^{\alpha H t} \right] - \frac{\pi}{2}.$$

Проинтегрировав уравнение для y компоненты, получим:

$$\varphi = \gamma H t + \varphi_0.$$

Этот простой тест позволяет оценивать работоспособность численной схемы в целом и по отдельности проверять реализацию членов уравнения Ландау–Лифшица, описывающих прецессию и диссипацию.

5. Моделирование эволюции системы с учетом анизотропии

Рассмотрим образец магнитного материала произвольной формы и с любой кристаллической решеткой. Внешнее поле, обмен между атомами и температурные флуктуации отсутствуют, но есть ненулевая анизотропия — в этом случае можно ограничиться рассмотрением одного магнитного момента.

Без потери общности рассуждений предположим, что ось анизотропии направлена по оси OZ :

$$\mathbf{a} = (0, 0, 1)^T.$$

Подставив \mathbf{m} в сферических координатах, получаем эффективное поле:

$$\mathbf{H}^{\text{eff}} = 2\mathbf{a}K(\mathbf{m} \cdot \mathbf{a}) = 2K \sin \theta (0, 0, 1)^T.$$

Уравнение Ландау-Лифшица для этого атома записывается покомпонентно как:

$$\begin{cases} \frac{d \cos \theta \cos \varphi}{dt} = -2\gamma K \sin \theta \cos \theta \sin \varphi - 2\alpha K \sin^2 \theta \cos \theta \cos \varphi, \\ \frac{d \cos \theta \sin \varphi}{dt} = 2\gamma K \sin \theta \cos \theta \cos \varphi - 2\alpha K \sin^2 \theta \cos \theta \sin \varphi, \\ \frac{d \sin \theta}{dt} = 2\alpha K \sin \theta \cos^2 \theta. \end{cases}$$

Проинтегрировав уравнение для z компоненты, получим:

$$\text{tg } \theta = \text{tg } \theta_0 e^{2\alpha K t}.$$

Аналогично, для x компоненты:

$$\varphi - \varphi_0 = 2\gamma K \int_0^t \sin \theta dt.$$

При $\alpha \neq 0$:

$$\varphi = \varphi_0 + \frac{\gamma}{\alpha} \ln \left| \text{tg } \theta_0 e^{2\alpha K t} + \sqrt{1 + (\text{tg } \theta_0 e^{2\alpha K t})^2} \right| - \frac{\gamma}{\alpha} \ln \left| \text{tg } \theta_0 + \sqrt{1 + (\text{tg } \theta_0)^2} \right|.$$

При $\alpha = 0$:

$$\varphi = \varphi_0 + 2\gamma K \int_0^t \frac{\text{tg } \theta_0}{\sqrt{1 + (\text{tg } \theta_0)^2}} dt = \varphi_0 + 2\gamma K t \sin \theta_0.$$

Этот тест позволяет оценить реализацию анизотропии, а также реализацию прецессии и диссипации в более сложном, чем постоянное внешнее магнитное поле, случае.

6. Моделирование эволюции системы с учетом обменного взаимодействия

При моделировании магнетиков с учетом обменного взаимодействия большую роль играют форма образца и структура кристаллической решетки. Аналитические решения легче всего найти для постановки задачи с периодическими границами. Кристаллическая решетка разбивается на подрешетки по числу магнитных атомов в кристаллической ячейке. Для всех магнитных моментов одной подрешетки начальные условия считаются одинаковыми. В итоге, эволюция намагниченности одной подрешетки описывается одним уравнением. В данной работе рассматривалась постановка с периодическими границами по осям OX и OY . Толщина образца и периодичность границ по оси OZ зависят от кристаллической решетки. Из кристаллических решеток в данной работе рассматривались объемно–центрированная (ОЦК) и неполная гранецентрированная (ГЦК) решетки.

Анизотропия, внешнее поле и температурные флуктуации отсутствуют, учитывается обменное взаимодействие между атомами: J — интеграл обмена между ближайшими соседями.

6.1. ОЦК решетка. Периодичность и толщина образца по оси OZ выбирается так, чтобы можно было выделить группы эквивалентных атомов. Такие группы будут образовывать подрешетки. Для ОЦК решетки возможны следующие случаи по оси OZ : одна ячейка (рис. 1 а), полторы ячейки (рис. 1 б) или периодические границы (рис. 1 в). В случае ОЦК решетки ячейка состоит из двух атомов: в центре ячейки и в узле ячейки. Соответственно, решетка состоит из двух подрешеток. На рисунке 1 атомы, принадлежащие одной подрешетке, изображены одним цветом. Число соседей n_i одинаково для атомов одной подрешетки. Для толщины в одну ячейку по OZ : $n_1 = n_2 = 4$; полторы ячейки: $n_1 = 4, n_2 = 8$; для периодических границ по OZ : $n_1 = n_2 = 8$.

Рассмотрим случай $n_1 = n_2$ (рис. 1 а, в.). Чтобы эволюцию магнитных моментов атомов одной подрешетки описывать одним уравнением, выберем начальные направления намагниченности атомов одной подрешетки одинаковыми. Для удобства выберем начальные намагниченности подрешеток симметричными относительно оси OZ . Тогда во время всего движения, в силу эквивалентности подрешеток и эквивалентности атомов в подрешетках, симметрия направлений намагниченности подрешеток сохраняется:

$$\mathbf{m}_1 = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, \sin \theta)^T, \quad \mathbf{m}_2 = (-\cos \theta \cos \varphi, -\cos \theta \sin \varphi, \sin \theta)^T,$$

где \mathbf{m}_1 и \mathbf{m}_2 — направление намагниченности атомов первой и второй подрешеток.

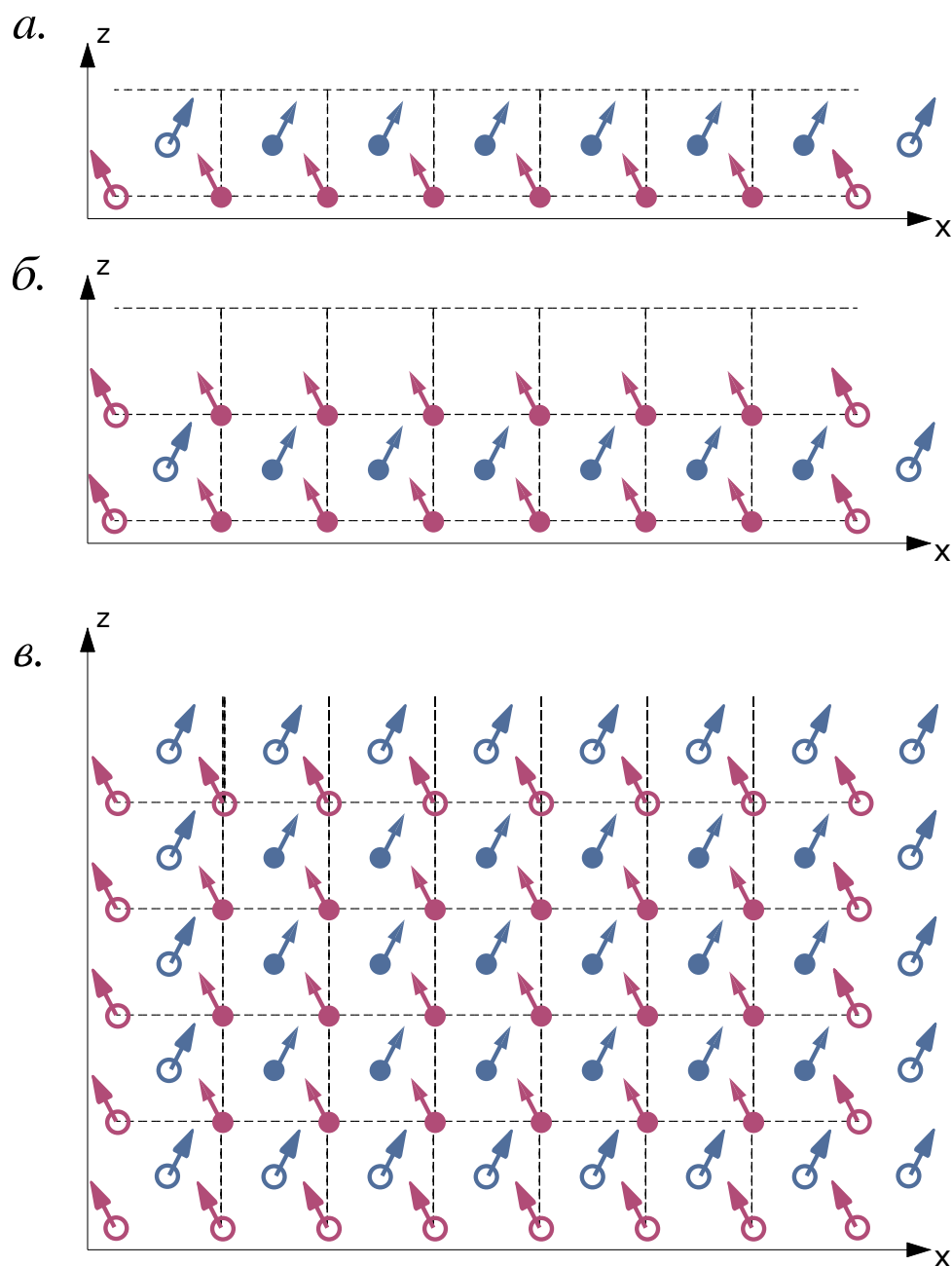


Рис. 1. Форма объекта и периодичность границ для ОЦК решетки: *а* — периодичность по осям OX и OY , одна ячейка по OZ ; *б* — периодичность по осям OX и OY , полторы ячейки по OZ ; *в* — периодичность по всем осям.

Уравнение Ландау-Лифшица для атомов первой подрешетки имеет вид:

$$\frac{d\mathbf{m}_1}{dt} = -\gamma[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{H}_1] - \alpha[\mathbf{m}_1 \times [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{H}_1]],$$

$$\mathbf{H}_1 = Jn_1\mathbf{m}_2 = Jn_1(-\cos\theta\cos\varphi, -\cos\theta\sin\varphi, \sin\theta)^T,$$

или как система уравнений для компонент в сферических координатах:

$$\begin{cases} \frac{d \cos \theta \cos \varphi}{dt} = -2\gamma J n_1 \sin \theta \cos \theta \sin \varphi - 2\alpha n_1 \sin^2 \theta \cos \theta \cos \varphi, \\ \frac{d \cos \theta \sin \varphi}{dt} = 2\gamma J n_1 \sin \theta \cos \theta \cos \varphi - 2\alpha n_1 \sin^2 \theta \cos \theta \sin \varphi, \\ \frac{d \sin \theta}{dt} = 2\alpha J n_1 \sin \theta \cos^2 \theta. \end{cases}$$

Похожая система уравнений решалась для анизотропии (см. раздел 5). Проинтегрировав, получим зависимости углов от времени:

$$\operatorname{tg} \theta = \operatorname{tg} \theta_0 e^{2\alpha J n_1 t},$$

при $\alpha \neq 0$:

$$\varphi = \varphi_0 + \frac{\gamma}{\alpha} \ln \left| \operatorname{tg} \theta_0 e^{2\alpha J n_1 t} + \sqrt{1 + (\operatorname{tg} \theta_0 e^{2\alpha J n_1 t})^2} \right| - \frac{\gamma}{\alpha} \ln \left| \operatorname{tg} \theta_0 + \sqrt{1 + (\operatorname{tg} \theta_0)^2} \right|,$$

при $\alpha = 0$:

$$\varphi = \varphi_0 + 2\gamma J n_1 t \sin \theta_0.$$

То же самое для прецессии без диссипации ($\gamma = 1, \alpha = 0$) можно вывести для более общего случая $n_1 \neq n_2$ [8]. Система уравнений Ландау-Лифшица:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{m}_1}{dt} = -\gamma[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{H}_1], \mathbf{H}_1 = J n_1 \mathbf{m}_2, \\ \frac{d\mathbf{m}_2}{dt} = -\gamma[\mathbf{m}_2 \times \mathbf{H}_2], \mathbf{H}_2 = J n_2 \mathbf{m}_1. \end{cases}$$

Домножая 1-е и 2-е уравнения на n_2 и n_1 соответственно и складывая, получаем:

$$n_2 \frac{d\mathbf{m}_1}{dt} + n_1 \frac{d\mathbf{m}_2}{dt} = 0.$$

При этом система уравнений Ландау-Лифшица для намагниченности подрешеток равноценна следующей:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{m}_1}{dt} = -\gamma[\mathbf{m}_1 \times J(n_2 \mathbf{m}_1 + n_1 \mathbf{m}_2)], \\ \frac{d\mathbf{m}_2}{dt} = -\gamma[\mathbf{m}_2 \times J(n_2 \mathbf{m}_1 + n_1 \mathbf{m}_2)]. \end{cases}$$

Следовательно, система уравнений описывает вращение магнитных моментов вокруг постоянной оси $n_2 \mathbf{m}_1 + n_1 \mathbf{m}_2$ с угловой скоростью $\gamma J(n_2 \mathbf{m}_1 + n_1 \mathbf{m}_2)$, что дает семейство сходных постановок с известным аналитическим решением.

6.2. Неполная ГЦК решетка. Антиферромагнетик IrMn_3 имеет гранецентрированную кристаллическую решетку, причем немагнитные атомы Ir находятся в узлах сетки, магнитные атомы Mn — в центре граней (рис. 2), три магнитных атома Mn на ячейку. Немагнитные атомы не участвуют в расчетах, поэтому далее не будут учитываться в кристаллической структуре. Такую кристаллическую структуру, с атомами только на гранях, будем называть неполной упорядоченной ГЦК решеткой. Задание такой решетки развернутой по направлению 111, является нетривиальной задачей и требует отдельной проверки.

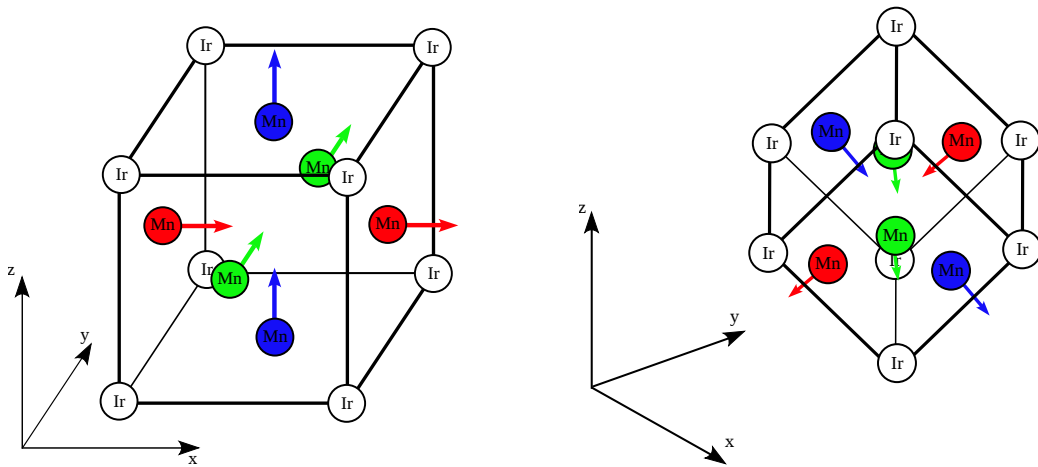


Рис. 2. ГЦК решетка на примере IrMn_3 , повернутая по 100 и 111.

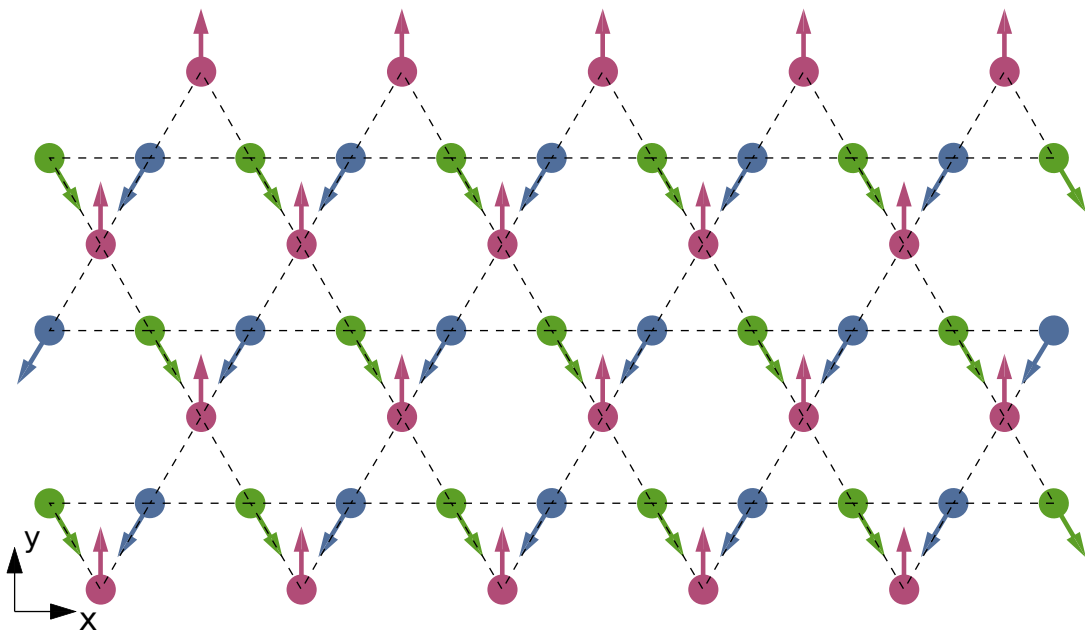


Рис. 3. Неполная упорядоченная ГЦК решетка, повернутая по 111, вид сверху на один слой.

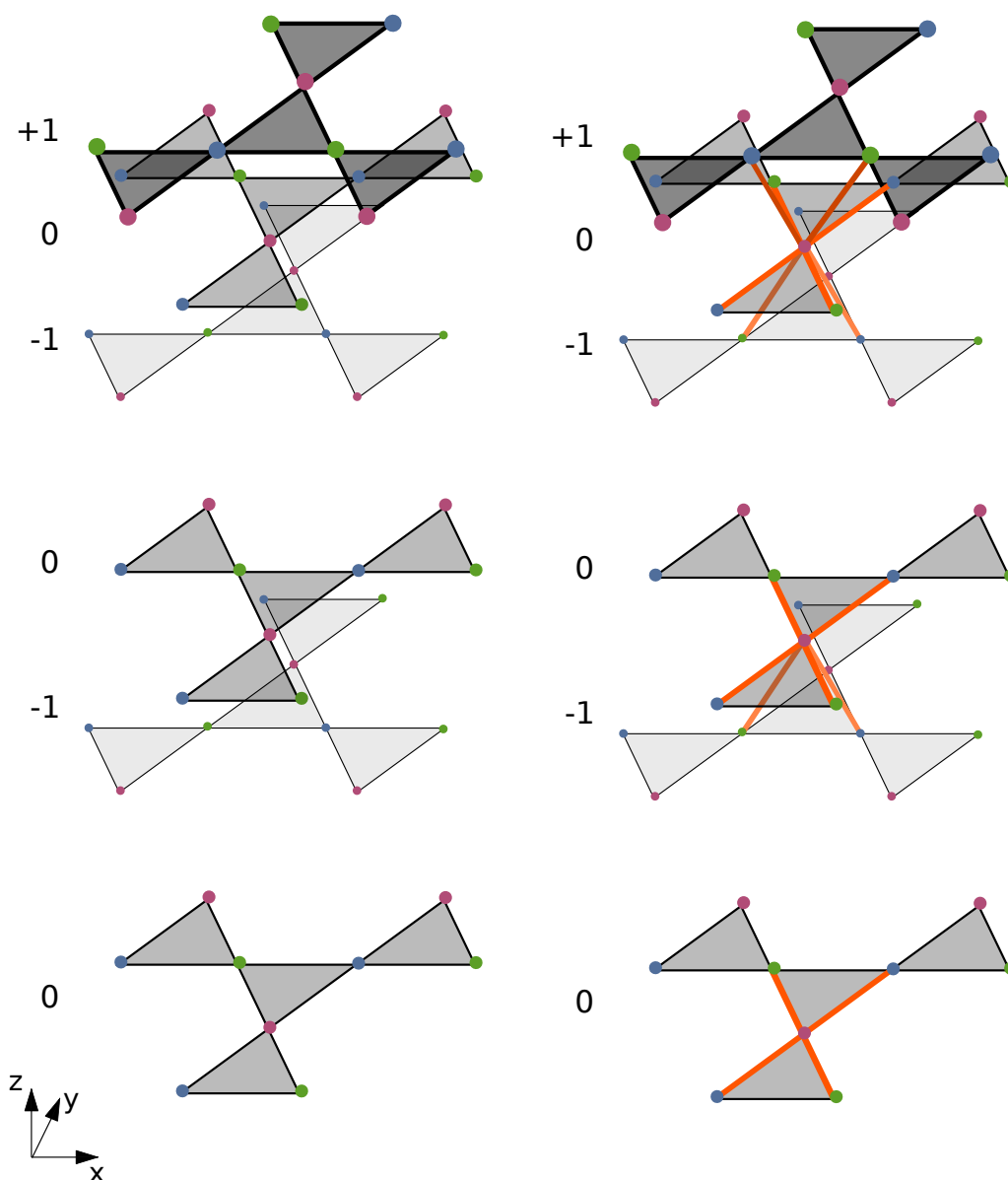


Рис. 4. Неполная упорядоченная ГЦК решетка, повернутая по 111 , от одного до трёх слоёв. Красным цветом обозначены атомы первой подрешетки, зелёным — второй, синим — третьей. Оранжевым отмечены все обменные связи одного из атомов.

Как и для ОЦК решетки, на границы образца по осям OX , OY наложено условие периодичности. По оси OZ : один или два слоя без периодичности или любая значительная толщина с условием периодичности. Атомы, лежащие на параллельных гранях, принадлежат одной подрешетке. Всего в неполной ГЦК решетке три подрешетки. У каждого атома есть n соседей из одной подрешетки и n из другой. На рисунке 3 изображен горизонтальный слой магнитных атомов,

получающийся в результате разворота неполной ГЦК решетки по направлению 111. На рисунке 4 изображено взаиморасположение атомов одного, двух и трех слоев и также ближайшие связи для одного из атомов. Как видно из рисунка, для одного слоя $n = 2$, для двух — $n = 3$, в случае периодических границ $n = 4$.

Начальные условия — однородные по подрешеткам. Ввиду симметрии подрешеток и начальных условий симметрия сохраняется в течение всего времени расчета:

$$\begin{aligned}\mathbf{m}_1 &= (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, \sin \theta)^T, \\ \mathbf{m}_2 &= \left(-\frac{1}{2} \cos \theta \cos \varphi, \frac{\sqrt{3}}{2} \cos \theta \sin \varphi, \sin \theta \right)^T, \\ \mathbf{m}_3 &= \left(-\frac{1}{2} \cos \theta \cos \varphi, -\frac{\sqrt{3}}{2} \cos \theta \sin \varphi, \sin \theta \right)^T.\end{aligned}$$

Тогда уравнение Ландау-Лифшица для атомов первой подрешетки имеет вид:

$$\frac{d\mathbf{m}_1}{dt} = -\gamma[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{H}_1] - \alpha[\mathbf{m}_1 \times [\mathbf{m}_1 \times \mathbf{H}_1]].$$

Эффективное поле, действующее на атомы первой подрешетки, выражается через намагнитченности двух других подрешеток:

$$\mathbf{H}_1 = Jn(\mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3) = Jn(-\cos \theta \cos \varphi, 0, 2 \sin \theta)^T.$$

При этом в векторном произведении к полю можно прибавить \mathbf{m}_1 с любым коэффициентом:

$$[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{H}_1] = [\mathbf{m}_1 \times (\mathbf{H}_1 + Jn\mathbf{m}_1)].$$

Следовательно, можно упростить вид вектора для дальнейших арифметических вычислений:

$$\mathbf{H}_1 + Jn\mathbf{m}_1 = Jn(0, 0, 3 \sin \theta)^T.$$

Задача сводится к ранее решенной (см. пункт 5):

$$\operatorname{tg} \theta = \operatorname{tg} \theta_0 e^{3\alpha Jnt},$$

при $\alpha \neq 0$:

$$\varphi = \varphi_0 + \frac{\gamma}{\alpha} \ln \left| \operatorname{tg} \theta_0 e^{3\alpha Jnt} + \sqrt{1 + (\operatorname{tg} \theta_0 e^{3\alpha Jnt})^2} \right| - \frac{\gamma}{\alpha} \ln \left| \operatorname{tg} \theta_0 + \sqrt{1 + (\operatorname{tg} \theta_0)^2} \right|,$$

при $\alpha = 0$:

$$\varphi = 3\gamma Jnt \sin \theta_0 + \varphi_0.$$

То же самое для прецессии без диссипации ($\gamma = 1, \alpha = 0$) можно вывести для любых начальных условий:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{m}_1}{dt} = -\gamma[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{H}_1], \mathbf{H}_1 = Jn(\mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3), \\ \frac{d\mathbf{m}_2}{dt} = -\gamma[\mathbf{m}_2 \times \mathbf{H}_2], \mathbf{H}_2 = Jn(\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_3), \\ \frac{d\mathbf{m}_3}{dt} = -\gamma[\mathbf{m}_3 \times \mathbf{H}_3], \mathbf{H}_3 = Jn(\mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_1). \end{cases}$$

Сложив все три уравнения, найдем один из интегралов движения:

$$\begin{aligned} \frac{d(\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3)}{dt} &= -\gamma Jn[\mathbf{m}_1 \times (\mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3)] - \gamma Jn[\mathbf{m}_2 \times (\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_3)] - \\ &\quad - \gamma Jn[\mathbf{m}_3 \times (\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2)] = 0. \end{aligned}$$

Из этого следует, что уравнение:

$$\frac{d\mathbf{m}_i}{dt} = -\gamma Jn[\mathbf{m}_i \times (\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3)]$$

описывает вращение \mathbf{m}_i вокруг неподвижной оси $(\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3)$ с угловой скоростью $\gamma Jn(\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3)$.

Таким образом, получаем семейство сходных постановок с известным аналитическим решением, позволяющих протестировать корректность задания обменных связей в кристаллической решетке и оценить порядок аппроксимации численной схемы.

7. Пример тестирования численной модели

Для тестирования программного кода следует сравнить полученные аналитически и численно зависимости компонент намагниченности от времени. Для легкой локализации ошибки отдельно рассматриваются результаты численного моделирования с прецессией и с диссипацией.

Для сравнения с аналитическими результатами результатов моделирования прецессии следует рассчитать хотя бы один период прецессии, для проверки диссипации следует вести расчет до установления стационарного состояния системы.

Если численные результаты недостаточно точно совпадают с аналитическими, то для повышения точности необходимо уменьшить шаг по времени. Выбор значения шага по времени (h) зависит от постановки и величины допустимой ошибки. В случае качественных различий необходимо найти и устранить ошибку в программном коде.

Далее приводится пример тестирования программного кода с численной схемой Рунге-Кутты четвертого порядка (RK4). Численная схема была реализована на языках C++-11 и Python для OS Linux при помощи библиотеки aiwlib.

Для всех приведенных постановок задач для проверки моделирования процесса диссипации достаточно сравнить численные результаты и аналитическое решение для z компоненты намагниченности любого атома, процесса прецессии — x компоненты, одновременной прецессии и диссипации — x и z .

Ниже описаны параметры для разных постановок задач, для которых были получены численные результаты, приведенные на рисунках 5-8. Как видно из графиков сравнения аналитических и численных расчетов, влияние всех моделируемых эффектов в программном коде учтено адекватно.

7.1. Пример тестирования модели системы в постоянном однородном внешнем поле. Приведены результаты для значений параметров:

а) $h = 1, \gamma = 0, \alpha = 0.1,$

б) $h = 0.1, \gamma = 1, \alpha = 0.$

Внешнее поле $\mathbf{H}^{\text{ext}} = (0, 0, 1)^T$, начальные условия однородные по всем атомам: $\mathbf{m} = (1, 0, 0)^T$.

Выпишем зависимость компонент намагниченности \mathbf{m} от времени для приведенных параметров.

а) $\gamma = 0, \alpha = 0.1,$ (рис. 5а).

$$\mathbf{m}_x = \cos\left(2 \arctg(e^{0.1t}) - \frac{\pi}{2}\right), \quad \mathbf{m}_y = 0, \quad \mathbf{m}_z = \sin\left(2 \arctg(e^{0.1t}) - \frac{\pi}{2}\right).$$

б) $\gamma = 1, \alpha = 0,$ (рис. 5б).

$$\mathbf{m}_x = \cos(t), \quad \mathbf{m}_y = \sin(t), \quad \mathbf{m}_z = 0.$$

7.2. Пример тестирования модели системы с учетом анизотропии. Приведены результаты для значений параметров:

а) $h = 1, \gamma = 0, \alpha = 0.1,$

б) $h = 0.1, \gamma = 1, \alpha = 0,$

в) $h = 1, \gamma = 1, \alpha = 0.1.$

Коэффициент анизотропии $K = 0.05$, ось анизотропии $\mathbf{a} = (0, 0, 1)^T$, начальные условия: $\mathbf{m} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)^T$.

а) $\gamma = 0, \alpha = 0.1,$ (рис. 6а).

$$\mathbf{m}_x = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{3 + e^{0.02t}}}, \quad \mathbf{m}_y = 0, \quad \mathbf{m}_z = \frac{e^{0.01t}}{\sqrt{3 + e^{0.02t}}}.$$

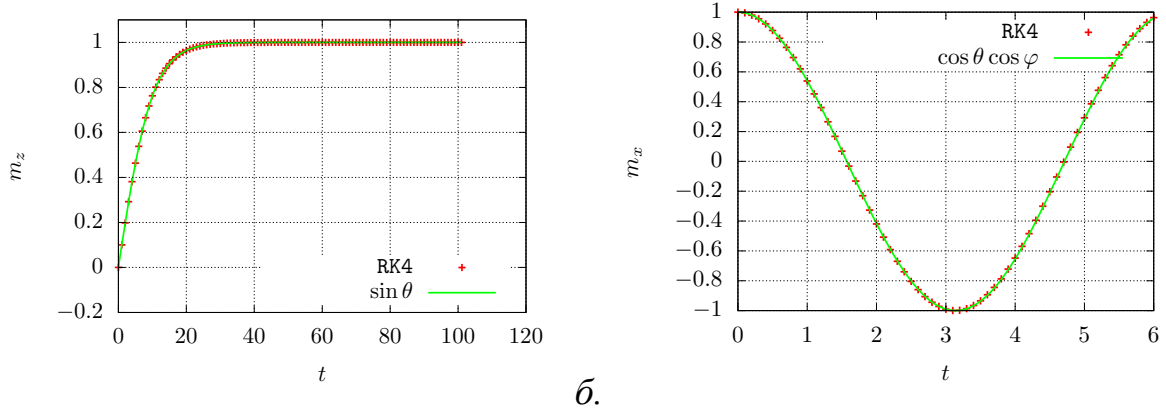


Рис. 5. Зависимость компонент магнитного момента от времени под воздействием постоянного внешнего поля для разных параметров: *а.* $h = 0.1$ с учетом диссипации ($\alpha = 0.1$) без прецессии ($\gamma = 0$). *б.* $h = 1$ с учетом прецессии ($\gamma = 1$) без диссипации ($\alpha = 0$).

б) $\gamma = 1, \alpha = 0$, (рис. 6б).

$$\mathbf{m}_x = \frac{\sqrt{3}}{2} \cos(0.05t), \quad \mathbf{m}_y = \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(0.05t), \quad \mathbf{m}_z = \frac{1}{2}.$$

в) $\gamma = 1, \alpha = 0.1$, (рис. 6в).

$$\mathbf{m}_x = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{1 + e^{0.02t}}} \cos \left(10 \ln \left| \frac{1}{\sqrt{3}} e^{0.01t} + \sqrt{1 + \frac{1}{3} e^{0.02t}} \right| - 10 \ln |\sqrt{3}| \right),$$

$$\mathbf{m}_y = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{1 + e^{0.02t}}} \sin \left(10 \ln \left| \frac{1}{\sqrt{3}} e^{0.01t} + \sqrt{1 + \frac{1}{3} e^{0.02t}} \right| - 10 \ln |\sqrt{3}| \right),$$

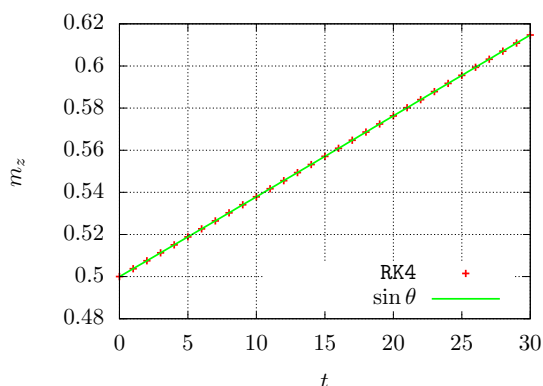
$$\mathbf{m}_z = \frac{e^{0.01t}}{\sqrt{3 + e^{0.02t}}}.$$

7.3. Пример тестирования модели системы с учетом обменного взаимодействия, ОЦК решетка.

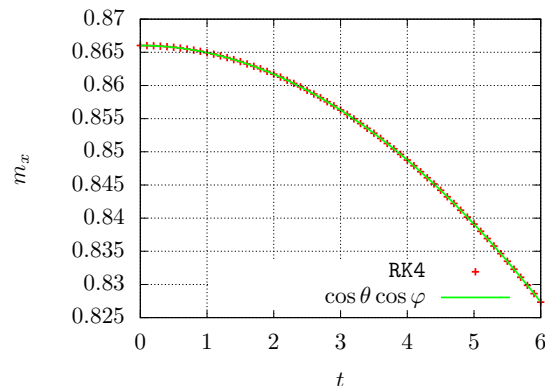
- Приведены результаты для значений параметров:
- а) $h = 0.1, \gamma = 0, \alpha = 0.1$,
 - б) $h = 0.01, \gamma = 1, \alpha = 0$,
 - в) $h = 0.1, \gamma = 1, \alpha = 0.1$.

Интеграл обмена $J = 1$, геометрическая форма — куб $10 \times 10 \times 10$ ячеек с периодическими границами по всем осям. У каждого атома $n_1 = n_2 = 8$ соседей, начальные условия: $\mathbf{m}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, \frac{1}{2} \right)^T$, $\mathbf{m}_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, \frac{1}{2} \right)^T$.

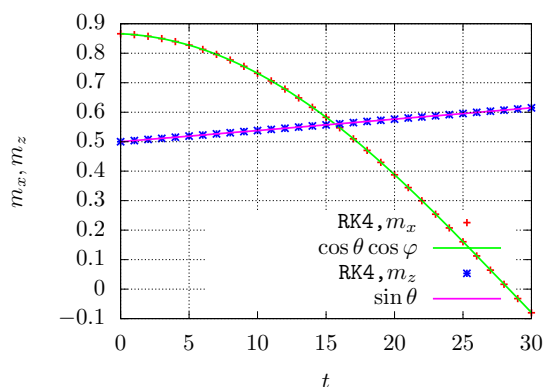
Выпишем зависимость компонент намагниченности первой подрешетки от времени для приведенных параметров.



a.



б.



в.

Рис. 6. Зависимость компонент магнитного момента m_x, m_z под воздействием анизотропии от времени для разных параметров: а. $h = 1$ с учетом диссипации ($\alpha = 0.1$) без прецессии ($\gamma = 0$) б. $h = 0.1$ с учетом прецессии ($\gamma = 1$) и без диссипации ($\alpha = 0.$) в. $h = 1$ с учетом прецессии ($\gamma = 1$) и диссипации ($\alpha = 0.1$)

а) $\gamma = 0, \alpha = 0.1$, (рис. 7а).

$$\mathbf{m}_{1x} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{3 + e^{0.32t}}}, \quad \mathbf{m}_{1y} = 0, \quad \mathbf{m}_{1z} = \frac{e^{0.16t}}{\sqrt{3 + e^{0.32t}}}.$$

б) $\gamma = 1, \alpha = 0$, (рис. 7б).

$$\mathbf{m}_{1x} = \frac{\sqrt{3}}{2} \cos(8t), \quad \mathbf{m}_{1y} = \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(8t), \quad \mathbf{m}_{1z} = \frac{1}{2}.$$

в) $\gamma = 1, \alpha = 0.1$, (рис. 7в).

$$\mathbf{m}_{1x} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{1 + e^{0.32t}}} \cos \left(10 \ln \left| \frac{1}{\sqrt{3}} e^{0.16t} + \sqrt{1 + \frac{1}{3} e^{0.32t}} \right| - 10 \ln |\sqrt{3}| \right),$$

$$\mathbf{m}_{1y} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{1 + e^{0.32t}}} \sin \left(10 \ln \left| \frac{1}{\sqrt{3}} e^{0.16t} + \sqrt{1 + \frac{1}{3} e^{0.32t}} \right| - 10 \ln |\sqrt{3}| \right),$$

$$\mathbf{m}_{1z} = \frac{e^{0.16t}}{\sqrt{3 + e^{0.32t}}}.$$

7.4. Пример тестирования модели системы с учетом обменного взаимодействия для неполной упорядоченной ГЦК решетки. Приведены результаты для значений параметров:

- а) $h = 1, \gamma = 0, \alpha = 0.1,$
- б) $h = 0.1, \gamma = 1, \alpha = 0,$
- в) $h = 0.1, \gamma = 1, \alpha = 0.1.$

Интеграл обмена $J = 1$, геометрическая форма — куб $10 \times 10 \times 10$ ячеек с периодическими границами по всем осям, соседей каждого типа $n = 4$, начальные условия: $\mathbf{m}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)^T$, $\mathbf{m}_2 = \left(-\frac{1}{2}\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}\right)^T$, $\mathbf{m}_3 = \left(-\frac{1}{2}\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{3}{4}, \frac{1}{2}\right)^T$.

Выпишем зависимость компонент намагниченности первой подрешетки от времени для приведенных параметров.

- а) $\gamma = 0, \alpha = 0.1,$ (рис. 8а).

$$\mathbf{m}_{1x} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{3 + e^{0.24t}}}, \quad \mathbf{m}_{1y} = 0, \quad \mathbf{m}_{1z} = \frac{e^{0.12t}}{\sqrt{3 + e^{0.24t}}}.$$

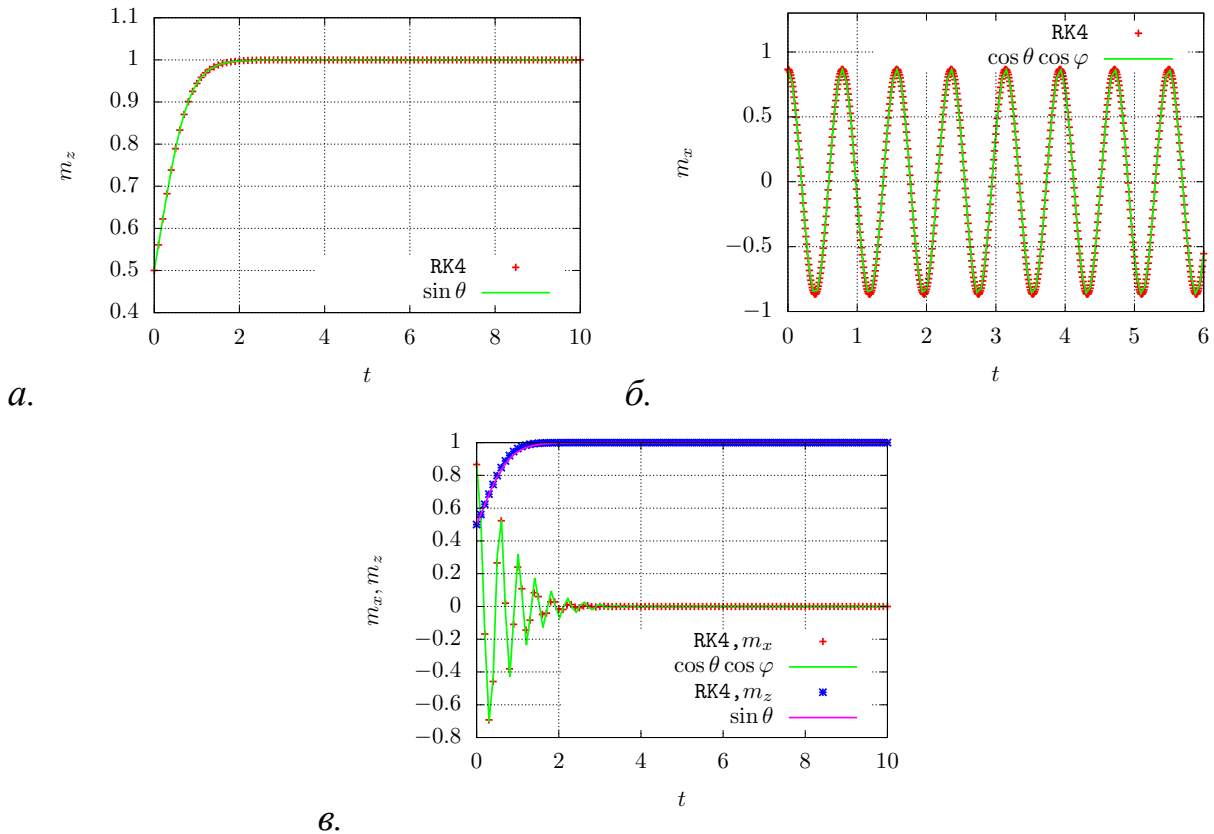


Рис. 7. Зависимость компонент магнитного момента m_x, m_z от времени для ОЦК решетки с учетом обменного взаимодействия при значениях параметров: а. $h = 0.1$ с учетом диссипации ($\alpha = 0.1$) без прецессии ($\gamma = 0$) б. $h = 0.01$ с учетом прецессии ($\gamma = 1$) без диссипации ($\alpha = 0$) в. $h = 0.1$ с учетом прецессии ($\gamma = 1$) и диссипации ($\alpha = 0.1$).

б) $\gamma = 1, \alpha = 0$, (рис. 8б).

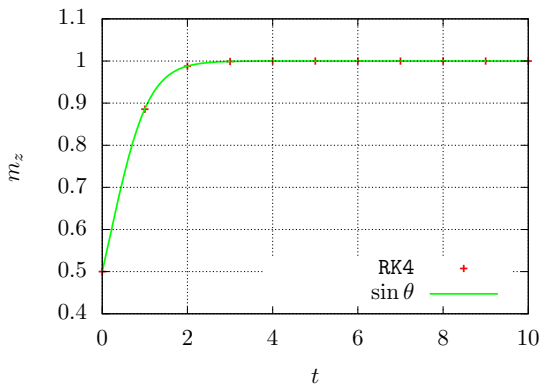
$$\mathbf{m}_{1x} = \frac{\sqrt{3}}{2} \cos(8t), \quad \mathbf{m}_{1y} = \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(8t), \quad \mathbf{m}_{1z} = \frac{1}{2}.$$

в) $\gamma = 1, \alpha = 0.1$, (рис. 8в).

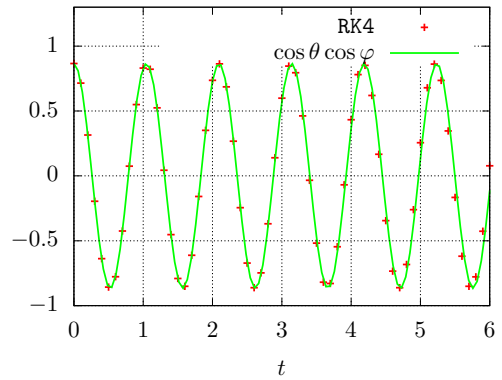
$$\mathbf{m}_{1x} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{1 + e^{0.24t}}} \cos \left(10 \ln \left| \frac{1}{\sqrt{3}} e^{0.12t} + \sqrt{1 + \frac{1}{3} e^{0.24t}} \right| - 10 \ln |\sqrt{3}| \right),$$

$$\mathbf{m}_{1y} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{1 + e^{0.32t}}} \sin \left(10 \ln \left| \frac{1}{\sqrt{3}} e^{0.16t} + \sqrt{1 + \frac{1}{3} e^{0.32t}} \right| - 10 \ln |\sqrt{3}| \right),$$

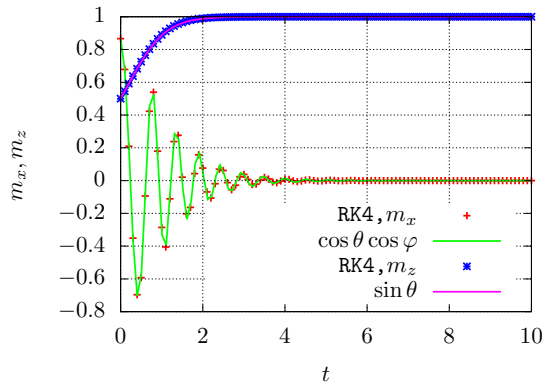
$$\mathbf{m}_{1z} = \frac{e^{0.16t}}{\sqrt{3 + e^{0.32t}}}.$$



а.



б.



в.

Рис. 8. Зависимость компонент магнитного момента m_x, m_z от времени для неполной ГЦК решетки с учетом обменного взаимодействия при значениях параметров: а. $h = 1$ с учетом диссипации ($\alpha = 0.1$) без прецессии ($\gamma = 0$) б. $h = 0.1$ с учетом прецессии ($\gamma = 1$) и без диссипации ($\alpha = 0.$) в. $h = 0.1$ с учетом прецессии ($\gamma = 1$) и диссипации ($\alpha = 0.1$).

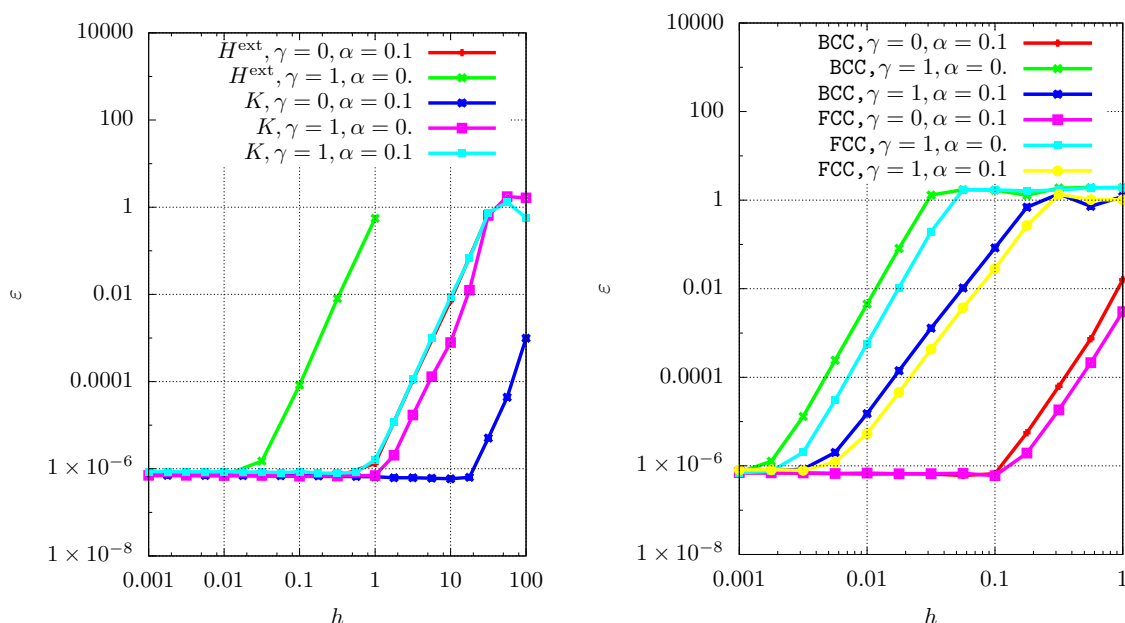


Рис. 9. Зависимость ошибки намагниченности ε для схемы Рунге-Кутты от шага по времени h для разных постановок.

7.5. Проверка порядка сходимости. Приведенные выше постановки были использованы для проверки порядка сходимости реализованной схемы. Расчеты велись с помощью классической схемы Рунге-Кутты, с заявленным четвертым порядком сходимости. Для каждой постановки проводился ряд расчетов с разными шагами по времени. Для каждого расчета вычислена максимальная ошибка намагниченности для схемы:

$$\varepsilon = \max_n \max_i |\mathbf{m}_i|_{t=hn} - \mathbf{m}_i^*|_{t=hn}|,$$

где i — номер атома, n — номер шага по времени, \mathbf{m}_i^* — аналитическое значение магнитного момента i -го атома.

Если заявленный порядок аппроксимации схемы не наблюдается в расчетах, то стоит проверить реализацию схемы на ошибки. Если порядок не наблюдается только в одном из тестов, ошибку легче локализовать благодаря выбранным постановкам. На рисунке 9 изображен пример, как может выглядеть результат работы отлаженной программной реализации схемы Рунге-Кутты четвертого порядка. Для всех постановок наблюдается четвертый порядок сходимости.

8. Моделирование спин-флип и спин-флоп переходов

8.1. Описание спин-флип и спин-флоп переходов. Рассмотрим антиферромагнитный образец в форме куба или прямоугольного параллелепипеда с ОЦК решеткой. Границы периодические по осям OX , OY . По оси OZ : для толщины в одну ячейку без периодичности границ по оси OZ ($n = 4$) или для любой

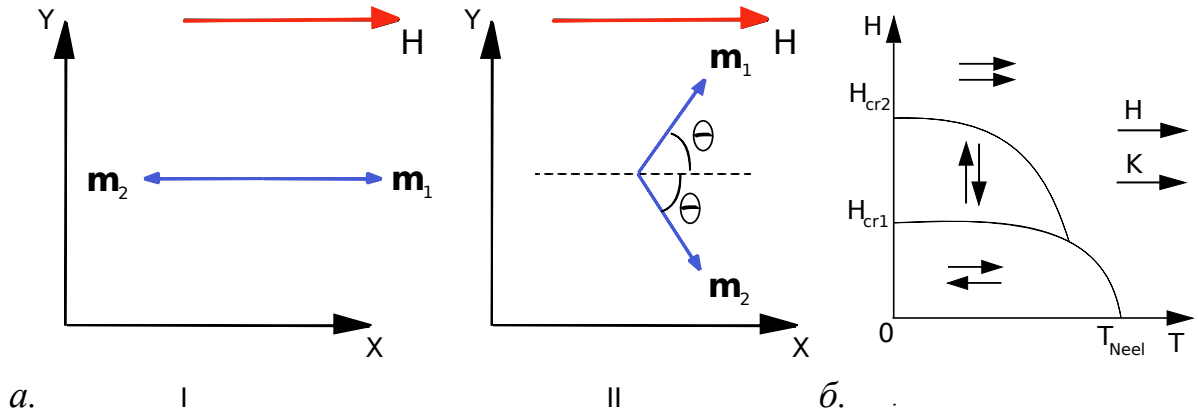


Рис. 10. а. Конфигурация (I) — до спин-флоп перехода, (II) — после спин-флоп перехода, до спин-флип перехода. б. Фазовая диаграмма флип-флоп переходов.

толщины с периодичностью границ по оси OZ ($n = 8$). Число соседей n каждого типа одинаково для атомов одной подрешетки. На эволюцию магнитных моментов атомов влияют постоянное внешнее поле $\mathbf{H}^{ext} = H(1, 0, 0)^T$ и линейная анизотропия с осью $\mathbf{a} = (1, 0, 0)^T$ и коэффициентом K . Пусть J — модуль интегрального обмена. Температурных флуктуаций нет, или они достаточно малы, $T \ll J$. Пренебрежем вкладом температурных флуктуаций в полную энергию системы. Тогда энергия системы выражается как:

$$W = -H(m_{1x} + m_{2x}) + nJ(m_{1x}m_{2x} - m_{1y}m_{2y}) - K(M_{1x}^2 + M_{2x}^2).$$

Рассмотрим стационарные состояния для разных значений H . На рисунке 10 изображены магнитные моменты двух подрешеток до спин-флоп перехода (I) и после (II) [9, 10]. Как видно из рисунка, до спин-флопа $m_{1x} = 1, m_{2x} = -1$, после спин-флопа $m_{1x} = \cos \theta, m_{1y} = \sin \theta, m_{2x} = \cos \theta, m_{2y} = -\sin \theta$, где угол θ определяется из минимума энергии. После спин-флип перехода минимум энергии достигается при $m_{1x} = m_{2x} = 1$. Тогда можно записать энергию для состояний (I) и (II):

$$W_I = -nJ - 2K,$$

$$W_{II} = -2H \cos \theta + nJ \cos 2\theta - 2K \cos^2 \theta.$$

Приравнявая производную W_{II} по $\cos \theta$, с помощью несложных арифметических вычислений определим значение $\cos \theta$:

$$\cos \theta = \frac{H}{2nJ - 2K}.$$

Существует такое критическое значение поля H_{cr1} , что при $H > H_{cr1}$ верно: $\min_{\theta} W_{II} < W_I$. Определим значение H_{cr1} .

$$\min_{\cos \theta} W_{II} = -2H \frac{H}{2nJ - 2K} + (2nJ - 2K) \frac{H^2}{(2nJ - 2K)^2} - nJ = -\frac{H^2}{2nJ - 2K} - nJ.$$

Равенство $\min_{\cos \theta} W_{II} = W_I$ выполняется при $H_{cr1} = \sqrt{2K(2nJ - 2K)}$.

Определим значение m_x после спин-флоп перехода, то есть при поле H_{cr1} :

$$\cos \theta_{\min} = \frac{H_{cr1}}{2nJ - 2K} = \sqrt{\frac{2K}{2nJ - 2K}}.$$

При H_{cr2} оптимальное значение $\cos \theta = 1$:

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{H_{cr2}}{2nJ - 2K}, \\ H_{cr2} &= 2nJ - 2K. \end{aligned} \quad (1)$$

Из выкладок можно заключить, что зависимость модуля суммарной намагниченности $|\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2|$ от модуля внешнего поля H будет соответствовать графику, изображенному на рисунке 11а.

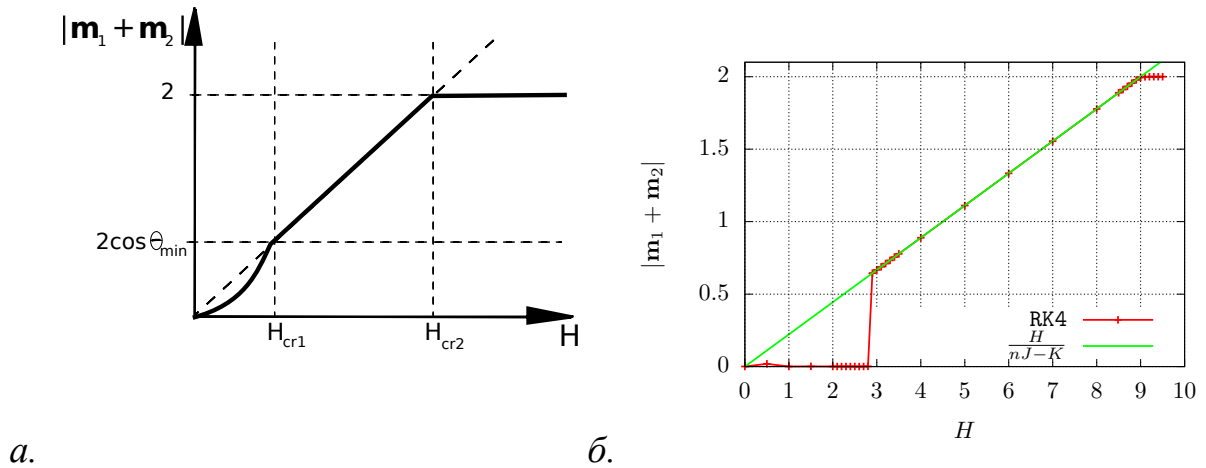


Рис. 11. Зависимость модуля суммы магнитных моментов подрешеток $|\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2|$ от модуля внешнего поля H : а. результат аналитических расчетов; б. результат численного моделирования.

8.2. Пример параметров и результатов численного моделирования. Для тестирования программного кода рассмотрим зависимость модуля суммы установившихся значений магнитных моментов подрешеток $|\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2|$ от модуля постоянного внешнего поля H . Начальные условия:

$$\mathbf{m}_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right)^T, \quad \mathbf{m}_2 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right)^T.$$

Приведены результаты для значений параметров: модуль интеграла обменного взаимодействия $J = \frac{3}{8}$, коэффициент анизотропии $K = 0.5$, коэффициент

диссипации $\alpha = 0.1$, коэффициент прецессии $\gamma = 1$, шаг по времени $h = 0.01$, температура $T = 0.001$. Результаты получены с помощью классической схемы Рунге-Кутты (RK4) с шагом по времени $h = 0.01$ (рис. 11б).

Для приведенных параметров

$$H_{\text{cr1}} = 3, \quad H_{\text{cr2}} = 9, \quad |\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2|_{(H=H_{\text{cr1}})} = 2 \cos \theta_{\text{min}} = \frac{2}{3}.$$

Необходимо отметить, что время релаксации системы к стационарному состоянию значительно больше при переходах, то есть при $H \sim H_{\text{cr1,2}}$.

Этот тест позволяет в целом оценить корректность моделирования антиферромагнетика с ОЦК решеткой с учетом анизотропии, обменного поля и диссипации. В случае неполной ГЦК решетки можно провести аналогичные выкладки, но для полной ГЦК решетки ситуация оказывается значительно более сложной.

9. Моделирование эволюции энергии системы с учетом температурных флуктуаций

Рассмотрим изменение энергии обменного взаимодействия за счет температурных флуктуаций в магнетике с ОЦК решеткой и периодическими границами по всем осям (число соседей у каждого атома $n = 8$). За основу возьмем уравнение Фоккера–Планка для двухчастичной функции распределения, описывающие только вклад температуры:

$$\frac{\partial f(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, t)}{\partial t} = -\alpha T \nabla_{\mathbf{m}_i} \left[\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \nabla_{\mathbf{m}_i} f] \right] - \alpha T \nabla_{\mathbf{m}_j} \left[\mathbf{m}_j \times [\mathbf{m}_j \times \nabla_{\mathbf{m}_j} f] \right].$$

Проинтегрируем его с множителем $W_i = -4J(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)$ по частям на сфере:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle W \rangle}{dt} &= -4\alpha JT \iint_{\text{sph}} \left\{ \left[\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \nabla_{\mathbf{m}_i} f] \right] \cdot \mathbf{m}_j + \right. \\ &\quad \left. + \left[\mathbf{m}_j \times [\mathbf{m}_j \times \nabla_{\mathbf{m}_j} f] \right] \cdot \mathbf{m}_i \right\} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j = \\ &= -4\alpha JT \iint_{\text{sph}} \left\{ (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) (\mathbf{m}_i \cdot \nabla_{\mathbf{m}_i} f) - \mathbf{m}_i^2 (\mathbf{m}_j \cdot \nabla_{\mathbf{m}_i} f) + \right. \\ &\quad \left. + (\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_i) (\mathbf{m}_j \cdot \nabla_{\mathbf{m}_j} f) - \mathbf{m}_j^2 (\mathbf{m}_i \cdot \nabla_{\mathbf{m}_j} f) \right\} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j. \end{aligned}$$

Поскольку

$$\begin{aligned}
 & \iint_{\text{sph}} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) (\mathbf{m}_i \cdot \nabla_{\mathbf{m}_i} f) d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j = \\
 & = \iint_{\text{sph}} (m_{ix}m_{jx} + m_{iy}m_{jy} + m_{iz}m_{jz}) (m_{ix}\partial_{ix}f + m_{iy}\partial_{iy}f + m_{iz}\partial_{iz}f) d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j = \\
 & \quad = -4 \iint_{\text{sph}} (m_{ix}m_{jx} + m_{iy}m_{jy} + m_{iz}m_{jz}) f d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j = -4 \langle \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \rangle
 \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned}
 & \iint_{\text{sph}} \mathbf{m}_i^2 (\mathbf{m}_j \cdot \nabla_{\mathbf{m}_i} f) d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j = \\
 & = \iint_{\text{sph}} (m_{ix}^2 + m_{iy}^2 + m_{iz}^2) (m_{jx}\partial_{ix}f + m_{jy}\partial_{iy}f + m_{jz}\partial_{iz}f) d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j = \\
 & \quad = -2 \iint_{\text{sph}} (m_{ix}m_{jx} + m_{iy}m_{jy} + m_{iz}m_{jz}) f d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j = -2 \langle \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \rangle,
 \end{aligned}$$

то в результате интегрирования получаем ОДУ:

$$\frac{d \langle W \rangle}{dt} = 16\alpha JT \langle \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \rangle$$

или

$$\frac{d \langle W \rangle}{dt} = -4\alpha T \langle W \rangle, \tag{2}$$

откуда:

$$\langle W \rangle = W_0 e^{-4\alpha T t}.$$

В случае одних лишь температурных флуктуаций система релаксирует к парамагнитному (полностью неупорядоченному) состоянию с нулевой средней энергией обменного взаимодействия вне зависимости от начальных условий.

На рис. 12 изображен результат расчетов с значением коэффициента диссипации $\alpha = 0.1$ и разными значениями температуры. На графике можно увидеть достаточно точное совпадение численного моделирования с теорией, расхождения связаны с дробовым шумом, обусловленным сравнительно небольшим числом частиц в моделируемом образце.

Этот тест позволяет проверить правильность задания источника температурных флуктуаций и расчета обменной энергии системы.

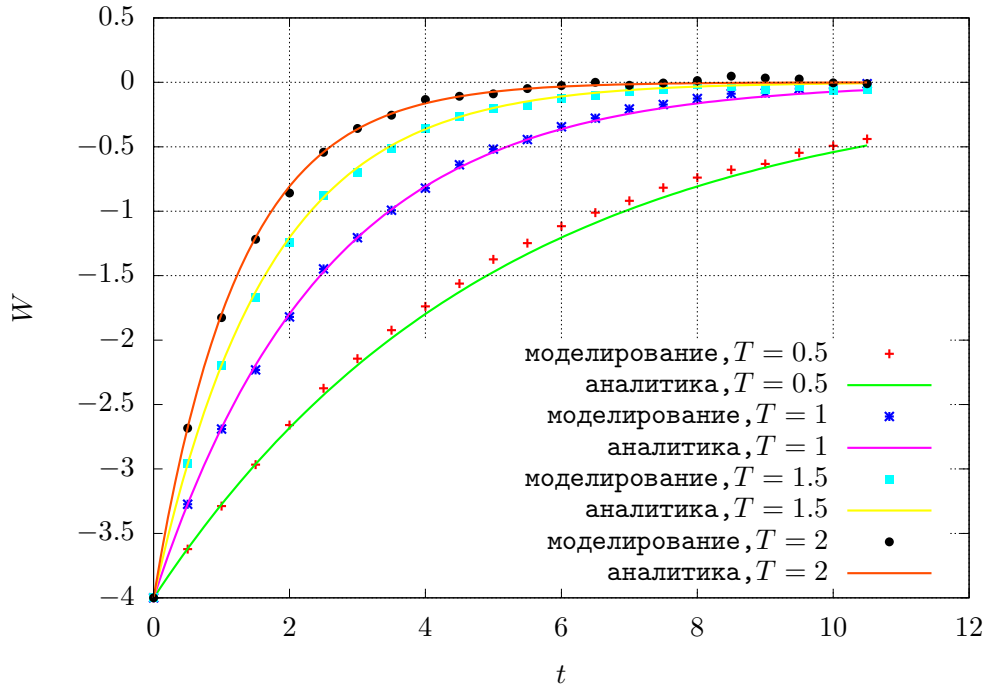


Рис. 12. Зависимость средней по образцу энергии обмена от времени для разных значений температуры.

10. Моделирование стационарных состояний систем и сравнение с приближением среднего поля

10.1. Теория среднего поля. Уравнение Фоккера-Планка в приближении мультипликативности с учетом температурных флуктуаций для одночастичной функции распределения $f_i(\mathbf{m}, t)$ [1, 11] имеет вид:

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{m}, t)}{\partial t} + \gamma \left[\mathbf{m} \times \langle \mathbf{H} \rangle_i^{\text{eff}} \right] \nabla_{\mathbf{m}} f_i = -\alpha \nabla_{\mathbf{m}} \left(\left[\mathbf{m} \times \left[\mathbf{m} \times \langle \mathbf{H} \rangle_i^{\text{eff}} - kT \nabla_{\mathbf{m}} \right] \right] f_i \right),$$

где $\langle \mathbf{H} \rangle_i^{\text{eff}}$ — среднее эффективное поле вычисляется следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{H} \rangle_i^{\text{eff}} &= \langle \mathbf{H} \rangle_i^{\text{exch}} + \langle \mathbf{H} \rangle_i^{\text{anis}} + \mathbf{H}_i^{\text{ext}}, \\ \langle \mathbf{H} \rangle_i^{\text{exch}} &= \sum_j J_{i,j} \langle \mathbf{m}_j \rangle. \end{aligned}$$

Равновесным решением системы будет распределение Больцмана:

$$f_i^{\text{eq}}(\mathbf{m}) = \frac{\exp \frac{\langle W \rangle_i}{kT}}{\oint_{\Omega} \exp \frac{\langle W \rangle_i}{kT} d\mathbf{m}}.$$

Вычислим постоянную нормировки:

$$A = \oint_{\Omega} \exp \frac{\langle W \rangle_i}{kT} d\mathbf{m} = \frac{4\pi kT}{\langle H \rangle_i^{\text{eff}}} \text{sh} \frac{\langle H \rangle_i^{\text{eff}}}{kT}.$$

Тогда модуль средней намагниченности:

$$|\langle \mathbf{m} \rangle| = \text{cth} \frac{\langle H \rangle_i^{\text{eff}}}{kT} - \frac{kT}{\langle H \rangle_i^{\text{eff}}},$$

средняя энергия, приходящаяся на атом:

$$\langle W \rangle = \langle H \rangle_i^{\text{eff}} |\langle \mathbf{m} \rangle|,$$

средний квадрат намагниченности, если поле направлено по OX :

$$\langle m_x^2 \rangle = 1 - \frac{2kT}{\langle H \rangle_i^{\text{eff}}} \text{cth} \frac{\langle H \rangle_i^{\text{eff}}}{kT} + 2 \left(\frac{kT}{\langle H \rangle_i^{\text{eff}}} \right)^2.$$

10.2. Моделирование с учетом постоянного внешнего поля и температуры.

Рассмотрим постановку задачи без анизотропии и обменного взаимодействия между атомами. Учитываются температурные флуктуации и постоянное внешнее поле, направленное по OX . Геометрическая форма и условия на границы не влияют на результаты. Для проведения расчетов был выбран куб $10 \times 10 \times 10$ ячеек кристаллической решетки с периодическими границами. Выбор кристаллической решетки не влияет на результаты, была выбрана ОЦК решетка. Начальные условия влияют только на время релаксации к стационарному состоянию. Тогда

$$|\langle \mathbf{m} \rangle| = \text{cth} \frac{H^{\text{ext}}}{kT} - \frac{kT}{H^{\text{ext}}},$$

$$\langle m_x^2 \rangle = 1 - \frac{2kT}{H^{\text{ext}}} \text{cth} \frac{H^{\text{ext}}}{kT} + 2 \left(\frac{kT}{H^{\text{ext}}} \right)^2.$$

Расчеты проводились с коэффициентом диссипации $\alpha = 0.1$, гиромангнитным соотношением $\gamma = 1$,

- внешнее поле постоянно $H^{\text{ext}} = 1$, температура варьируется $T \in [0.1, 1]$;
- температура постоянна $T = 1$, внешнее поле варьируется $H^{\text{ext}} \in [0, 10]$;
- температура варьируется $T \in [0, 10]$, внешнее поле варьируется $H^{\text{ext}} \in [0, 10]$.

Сравнение моделирования «атом–в–атом» с помощью схемы Рунге-Кутты четвертого порядка (RK4) с приближением среднего поля (MFT) изображено на рисунках 13, 14. На графике можно увидеть достаточно точное совпадение результатов численного моделирования с теоретическими.

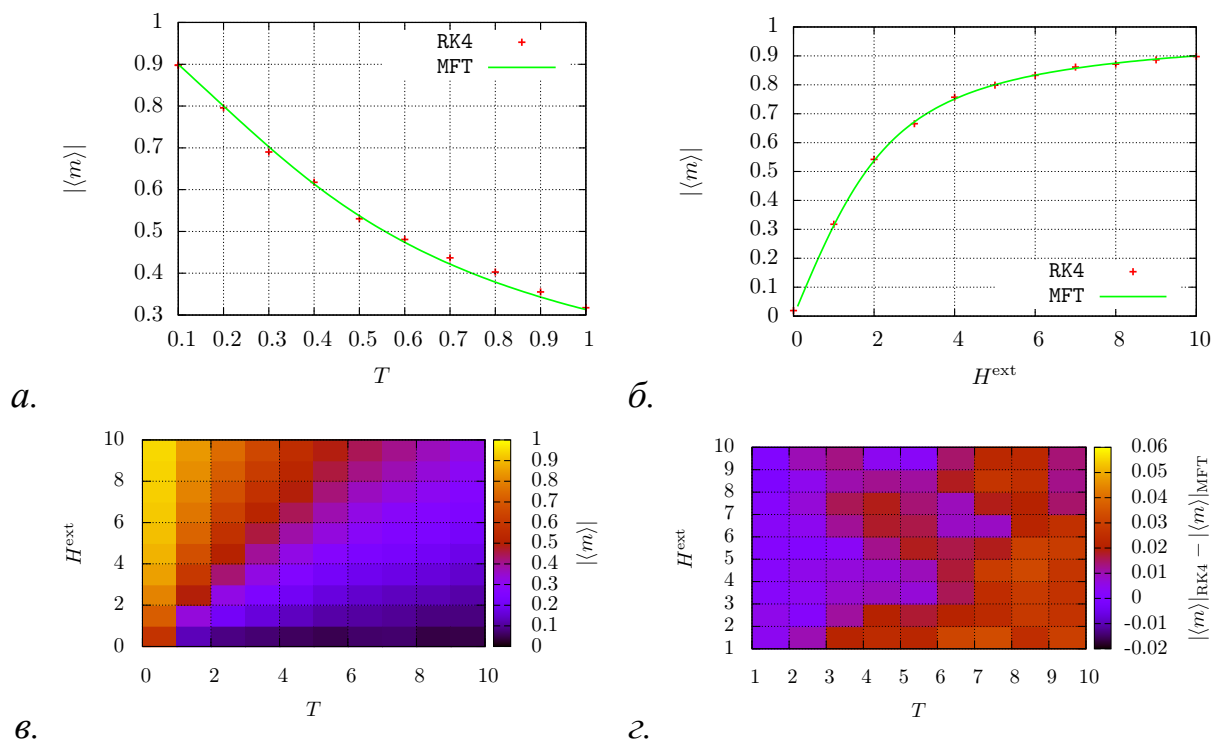


Рис. 13. а. Зависимость модуля средней намагниченности $|\langle \mathbf{m} \rangle|$ от температуры T для численного метода RK4 и приближения среднего поля MFT. б. Зависимость модуля средней намагниченности $|\langle \mathbf{m} \rangle|$ от постоянного внешнего поля H^{ext} для численного метода RK4 и приближения среднего поля MFT. в. Зависимость модуля средней намагниченности $|\langle \mathbf{m} \rangle|$ от постоянного внешнего поля H^{ext} и температуры T для численного метода RK4. г. Зависимость разницы модуля средней намагниченности $|\langle \mathbf{m} \rangle|$, полученного численно методом RK4 и из теории среднего поля MFT, $|\langle \mathbf{m} \rangle|_{\text{RK4}} - |\langle \mathbf{m} \rangle|_{\text{MFT}}$ от постоянного внешнего поля H^{ext} и температуры T .

10.3. Моделирование с учетом температуры и обменного взаимодействия, расчет температуры Кюри. Рассмотрим кубический образец ферромагнетика с ОЦК решеткой и периодическими границами по всем осям ($n = 8$). В данной постановке нет анизотропии, внешнего поля, но есть температурные флуктуации и обменное взаимодействие между атомами, где $J > 0$ — интеграл обмена между ближайшими соседями.

Тогда модуль средней намагниченности:

$$|\langle \mathbf{m} \rangle| = \text{cth} \frac{nJ |\langle \mathbf{m} \rangle|}{kT} - \frac{kT}{nJ |\langle \mathbf{m} \rangle|}.$$

Для сравнения с результатами моделирования «атом–в–атом» был реализован метод простой итерации:

$$y^{n+1} = \text{cth} \frac{nJ y^n}{kT} - \frac{kT}{nJ y^n}.$$

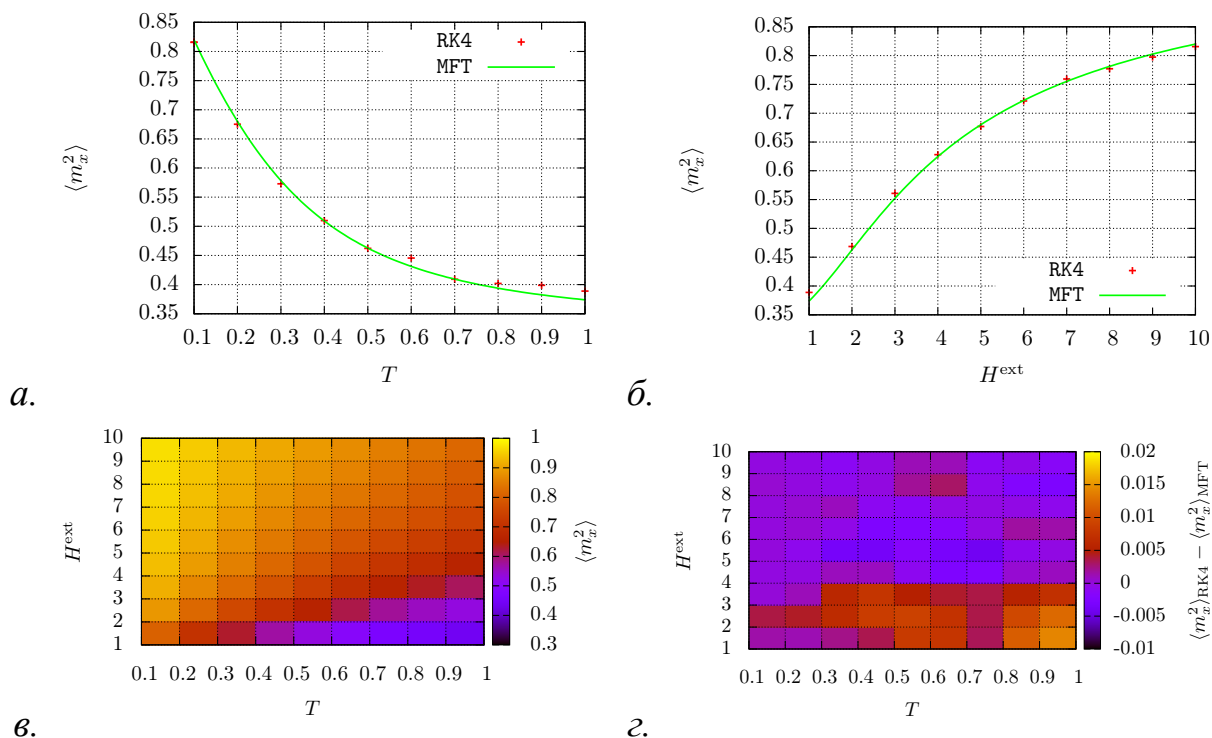


Рис. 14. а. Зависимость квадрата средней намагниченности $\langle m_x^2 \rangle$ от температуры T для численного метода RK4 и приближения среднего поля MFT. б. Зависимость квадрата средней намагниченности $\langle m_x^2 \rangle$ от постоянного внешнего поля H^{ext} для численного метода RK4 и приближения среднего поля MFT. в. Зависимость квадрата средней намагниченности $\langle m_x^2 \rangle$ от постоянного внешнего поля H^{ext} и температуры T для численного метода RK4 и приближения среднего поля MFT. г. Зависимость разницы квадрата средней намагниченности $\langle m_x^2 \rangle$, полученного численно методом RK4 и из теории среднего поля MFT, $\langle m_x^2 \rangle_{\text{RK4}} - \langle m_x^2 \rangle_{\text{MFT}}$ от постоянного внешнего поля H^{ext} и температуры T .

Корректировочный коэффициент $\varepsilon = 0.766$ учитывает флуктуации эффективно-го поля и корреляции между ближайшими соседями и уточняет теорию Кюри-Вейса [2, 12]:

$$|\langle \mathbf{m} \rangle| = \text{cth} \frac{nJ\varepsilon |\langle \mathbf{m} \rangle|}{kT} - \frac{kT}{nJ\varepsilon |\langle \mathbf{m} \rangle|},$$

$$\langle W \rangle = nJ\varepsilon |\langle \mathbf{m} \rangle|^2.$$

Начальные условия влияют только на время релаксации к стационарному состоянию. Рассчитывался образец размером $10 \times 10 \times 10$ ячеек кристаллической решетки. В расчетах интеграл обмена $J = 1$, коэффициент диссипации $\alpha = 0.1$, гиромангнитное соотношение $\gamma = 1$. Сравнение моделирования «атом–в–атом» с помощью схемы Рунге-Кутты четвертого порядка (RK4) с итерационным методом из приближения среднего поля (MFT) приведено на рисунке 15. На графике

можно увидеть достаточно точное совпадение результатов численного моделирования с теоретическими. Расхождение обусловлено ограничениями теории Кюри–Вейсса.

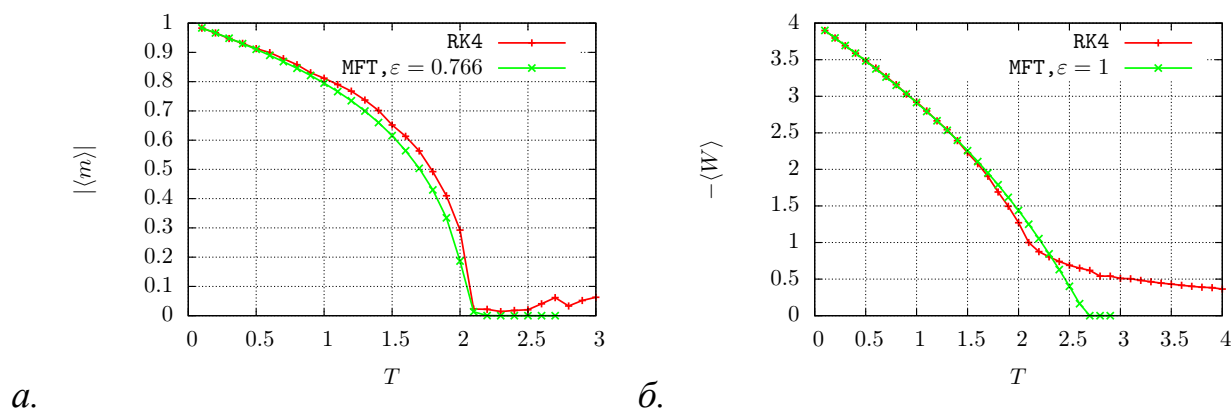


Рис. 15. а. Зависимость модуля средней намагниченности $|\langle \mathbf{m} \rangle|$ от температуры T для численного метода RK4 и из приближения среднего поля MFT с $\varepsilon = 0.766$. б. Зависимость средней энергии $\langle W \rangle$ от температуры T для численного метода RK4 и из приближения среднего поля MFT с $\varepsilon = 1$.

11. Заключение

Приведенные в настоящей работе тесты являются результатом десятилетнего опыта создания различных кодов для моделирования магнетиков. Практика показывает, что проведение такого набора тестов в процессе разработки существенно ускоряет отладку и позволяет до некоторой степени верифицировать код.

Примерное совпадение результатов расчетов с аналитическими решениями не гарантирует отсутствия проблем. При тестировании особое внимание следует уделить определению порядка сходимости выбранной численной схемы к известным аналитическим решениям для нескольких различных вариантов начальных условий — не достижение заявленного порядка аппроксимации означает наличие серьезной скрытой ошибки в численной схеме или ее реализации.

Для итоговой верификации кода желательно использовать тесты, разработанные рабочей группой μMAG , но для отладки кода эти тесты слишком сложны, так как требуют адекватного моделирования множества физических процессов и не позволяют однозначно определить проблемный участок кода.

Список литературы

- [1] Иванов А.В. Кинетическое моделирование динамики магнетиков // Математическое моделирование. — 2007. — Т. 19, № 10. — С. 89–104.
- [2] Хилков С.А., Иванов А.В., Зипунова Е.В. Моделирование сильно неравновесных процессов в магнетиках на основе уравнений физической кинетики // Математическое моделирование. — 2016. — Т. 28, № 5. — С. 24–31.
- [3] Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials / R. F. L. Evans, W. J. Fan, P. Chureemart et al. // J. Phys.: Condens. Matter. — 2014. — Vol. 26.
- [4] Программный пакет для приборно-технологического моделирования спинтронных приборов на основе магнитных туннельных переходов / И. Горячев, Г.Д. Демин, К.А. Звездин и др. // Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем - 2016. Сборник трудов / под общ. ред. академика РАН А.Л. Стемпковского. — 2016. — Т. 4. — С. 237–244.
- [5] *muMAG* — Micromagnetic Modeling Activity Group. — <http://www.ctcms.nist.gov/~rdm/mumag.html>.
- [6] Nonlinear magnetic stochastic resonance: Noise-strengthconstant-force diagrams / Yu.L. Raikher, V.I. Stepanov, A.N. Grigorenko, P.I. Nikitin // Phys. Rev. E. — 1997. — Vol. 56. — P. 6400–6409.
- [7] Стохастический резонанс в однодоменных наночастицах с кубической анизотропией / Ю.П. Калмыков, Ю.Л. Райхер, У.Т. Кофии, С.В. Титов // Физика твердого тела. — 2005. — Т. 47, № 12. — С. 2232–2238.
- [8] Зипунова А.С., 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.
- [9] Морозов А. И., Сигов А.С. Поверхностный спин-флоп-переход в антиферромагнетике // УФН. — 2010. — Т. 180. — С. 709–722.
- [10] Вонсовский С.В. Магнетизм. — М.: Наука, 1971.
- [11] Brown W. F. *Micromagnetic*. — New York: Wiley, 1963.
- [12] Garanin D. A. Self-consistent Gaussian approximation for classical spin systems: Thermodynamics // Phys. Rev. B. — 1996. — Vol. 53. — P. 11593.