

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 105 за 2019 г.</u>

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

А.В. Иванов

Аппроксимация коэффициентов уравнения Ландау–Лифшица–Блоха при микромагнитном моделировании

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Иванов А. В. Аппроксимация коэффициентов уравнения Ландау–Лифшица–Блоха при микромагнитном моделировании // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 105. 16 с. <u>https://doi.org/10.20948/prepr-2019-105</u> <u>https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-105</u>

ОрденаЛенина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.КЕЛДЫША Российской академии наук

А.В. Иванов

Аппроксимация коэффициентов уравнения Ландау–Лифшица–Блоха при микромагнитном моделировании

Иванов А.В.

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Аппроксимация коэффициентов уравнения Ландау–Лифшица–Блоха при микромагнитном моделировании

Уравнение Ландау–Лифшица–Блоха в настоящий момент является основным инструментом для описания эволюции намагниченности с учетом температурных флуктуаций при создании устройств спинтроники и магнитной микроэлектроники. Коэффициенты уравнения зависят от средней намагниченности в данной точке пространства и вычисляются как старшие моменты модельной функции распределения.

Вычисление коэффициентов требует предварительно решения трансцендентного уравнения для определения параметров функции распределения, кроме того, как правило используется достаточно грубая аппроксимация, не учитывающая существенного отличия в структуре поля анизотропии и остальных полей.

В данной работе представлена аналитическая аппроксимация коэффициентов уравнения Ландау–Лифшица–Блоха, обеспечивающая точность до третьего знака, позволяющая повысить адекватность микромагнитного моделирования и увеличить темп вычислений.

Ключевые слова: уравнение Ландау–Лифшица–Блоха, микромагнитное моделирование

Anton Valeryevich Ivanov

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Approximating Landau–Lifshitz–Bloch Coefficients in Micromagnetic Simulation

At this time, the Landau–Lifshitz–Bloch equation is the principal tool used to describe the evolution of magnetization and to account for temperature fluctuations when creating spintronics and magnetism-based microelectronics. These equation coefficients depend on average magnetization at a given point in space, and are calculated as the higher moments of a model distribution function.

For the coefficients to be computed, a transcendental equation must first be solved to determine the parameters of the distribution function. In addition, a rather crude approximation is used as a rule that does not account for the significant differences in the structure of the anisotropy field versus that of the other fields.

This paper presents an analytic approximation of the Landau–Lifshitz–Bloch coefficients assuring an accuracy up to the third significant digit and helping increase the adequacy of micromagnetic simulation and computation speed.

Keywords: Landau–Lifshitz–Bloch equation, micromagnetic simulation

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

Содержание

1	Введение	3
2	Уравнение Ландау–Лифшица–Блоха	4
3	Коэффициенты, связанные с внешним и линейными полями	7
4	Коэффициенты, связанные с анизотропией	9
5	Заключение	14
Спи	сок литературы	14

1. Введение

Создание устройств спинтроники и микроэлектроники с использованием магнитных эффектов требует проведения больших объемов численного моделирования [1–3]. При этом оптимальным с точки зрения соотношения адекватность/вычислительная сложность является уравнение Ландау–Лифшица–Блоха [4], описывающее эволюцию непрерывного распределения средней намагниченности по пространству. Коэффициенты этого уравнения исходно записываются как некоторые старшие моменты модельной функции распределения и, хотя могут быть выражены в аналитических функциях, но в общем случае имеют слишком громоздкий вид. Ситуация усугубляется тем, что для расчета коэффициентов на основе вектора средней намагниченности каждый раз необходимо предварительно решать трансцендентное алгебраическое уравнение. В целом при проведении численного моделирования такой подход имеет неприемлемо высокую вычислительную сложность, поэтому, как правило, для вычисления коэффициентов используется достаточно грубая аналитическая аппроксимация, негативно влияющая на адекватность результатов.

В частности, основным недостатком традиционно использующейся аппроксимации коэффициентов уравнения Ландау–Лифшица–Блоха является единообразная работа с внешним полем, обменным полем, полем диполь–дипольного взаимодействия и полем анизотропии [5,6]. Между тем, в отличие от остальных полей, поле анизотропии за счет исходной нелинейности зависит от старших моментов модельной функции распределения, что в итоге приводит к совершенно другим эффективным зависимостям от средней намагниченности.

В данной работе построена аппроксимация коэффициентов уравнения Ландау–Лифшица–Блоха в виде аналитических функций от компонент вектора средней намагниченности. Построенная аппроксимация обеспечивает точность до третьего знака и может использоваться для высокопроизводительных микромагнитных расчетов при решении широкого круга задач [7].

2. Уравнение Ландау–Лифшица–Блоха

Наиболее достоверной моделью магнетика является система уравнений Ландау-Лифшица, описывающая эволюцию N магнитных моментов $\mathbf{m}_i(t)$, $|\mathbf{m}_i(t)| = 1$, расположенных в узлах кристаллической решетки с координатами \mathbf{r}_i :

$$\frac{d\mathbf{m}_{i}}{dt} = -\gamma \left[\mathbf{m}_{i} \times \mathbf{H}_{i}^{\text{eff}}\right] - \alpha \gamma \left[\mathbf{m}_{i} \times \left[\mathbf{m}_{i} \times \mathbf{H}_{i}^{\text{eff}}\right]\right] + 2\sqrt{\alpha \gamma T} \boldsymbol{\xi}(\mathbf{m}_{i}, t); \quad (1)$$

$$\mathbf{H}_{i}^{\text{eff}} = -\nabla_{\mathbf{m}_{i}} W = \mathbf{H}_{i}^{\text{exch}} + \mathbf{H}_{i}^{\text{anis}} + \mathbf{H}_{i}^{\text{dip}} + \mathbf{H}^{\text{ext}};$$

$$W^{\text{exch}} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{m}_{j}), \qquad \mathbf{H}_{i}^{\text{exch}} = \sum_{j} J_{ij} \mathbf{m}_{j};$$

$$W^{\text{anis}} = -K \sum_{i} (\mathbf{n}_{K} \cdot \mathbf{m}_{i})^{2}, \qquad \mathbf{H}_{i}^{\text{anis}} = 2K \sum_{i} \mathbf{n}_{K} (\mathbf{n}_{K} \cdot \mathbf{m}_{i});$$

$$\mathbf{H}_{i}^{\text{dip}} = \sum_{j} \frac{3(\mathbf{m}_{j} \cdot \mathbf{r}_{ij})\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{m}_{j}r_{ij}^{2}}{r_{ij}^{5}}, \qquad \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j};$$

$$W^{\text{ext}} = -\sum_{i} \mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{H}^{\text{ext}};$$

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 [8], $\nabla_{\mathbf{m}i}$ — 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}^{dip} — поле диполь-дипольного (магнитостатического) взаимодействия. Здесь и далее мы будем использовать безразмерную систему единиц.

Исходной точкой для вывода непосредственно уравнения Ландау–Лифшица– Блоха является уравнение Фоккера–Планка [10], описывающее эволюцию непрерывной в конфигурационном пространстве **r** функции распределения $f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)$ по направлениям магнитных моментов **m**, $|\mathbf{m}| = 1$, которое может быть получено при помощи цепочки Боголюбова в приближении среднего поля [8, 11]:

$$\frac{\partial f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} - \gamma \nabla_{\circ} \left[\mathbf{m} \times \mathbf{H}^{\text{eff}} \right] f = \gamma \alpha \nabla_{\circ} \left[\mathbf{m} \times \left[\mathbf{m} \times \left(\mathbf{H}^{\text{eff}} - T \nabla_{\circ} \right) f \right] \right], \quad (2)$$

$$\mathbf{H}^{\text{eff}} = \mathbf{H}^{\text{exch}} + \mathbf{H}^{\text{dip}} + 2K \mathbf{n}_{K} (\mathbf{n}_{K} \cdot \mathbf{m}) + \mathbf{H}^{\text{ext}},$$

$$\mathbf{H}^{\text{exch}} = J \left[a^{2} \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \varepsilon_{G} n_{b} \langle \mathbf{m} \rangle \right],$$

где a — расстояние между атомами кристаллической решетки, $\Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle$ — оператор Лапласа по пространству от средней намагниченности $\langle {\bf m} \rangle$ (по компонентам $\langle {\bf m} \rangle$), ε_G — фактор Гаранина для учета флуктуаций среднего поля [12] (для объемно-центрированной кристаллической решетки $\varepsilon_G \approx 0.795$), n_b — число ближайших соседей атома, ∇_{0} — сферический градиент по намагниченности:

$$abla_\circ =
abla_\mathbf{m} - rac{\mathbf{m}ig(\mathbf{m}\cdot
abla_\mathbf{m}ig)}{\mathbf{m}^2}.$$

С учетом теоремы Гаусса, после домножения (2) на т и интегрирования по сфере получаем

$$-\frac{1}{\gamma}\frac{\partial \langle \mathbf{m} \rangle}{\partial t} = \langle \mathbf{m} \rangle \times \left(\mathbf{H}^{\text{ext}} + \mathbf{H}^{\text{exch}} + \mathbf{H}^{\text{dip}} \right) + 2K \langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_{K} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_{K}) \rangle + + \alpha \left\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \widehat{I} \right\rangle \left(\mathbf{H}^{\text{ext}} + \mathbf{H}^{\text{exch}} + \mathbf{H}^{\text{dip}} \right) + + 2\alpha K \left\langle \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{n}_{K}] (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_{K}) \right\rangle + 2\alpha T \langle \mathbf{m} \rangle, \quad (3)$$

где \widehat{I} — единичная матрица, уголковыми скобками обозначено усреднение

$$\langle A \rangle \equiv \int_{\text{sph}} Af(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t) \, d\mathbf{m},$$

под $\int_{\text{sph}} ...d\mathbf{m}$ понимается интегрирование по сфере единичного радиуса. 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

$$f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t) = \frac{e^{\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{m}}}{Z}, \quad Z = \int_{\text{sph}} e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}} d\mathbf{m} = 2\pi \int_{0}^{\pi} e^{p \cos \theta} \sin \theta \, d\theta = \frac{4\pi}{p} \operatorname{sh} p, \quad (4)$$
$$\langle \mathbf{m} \rangle = \frac{1}{Z} \int_{\text{sph}} \mathbf{m} \, e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}} \, d\mathbf{m} = \mathbf{n}_{p} L(p), \qquad L(p) = \operatorname{cth} p - \frac{1}{p}, \qquad \mathbf{n}_{p} = \frac{\mathbf{p}}{p},$$

где р — некоторый вектор, являющийся параметром модельной функции распределения р || (m), *L* — функция Ланжевена. Многочисленные сравнения с результатами прямого численного моделирования «атом-в-атом» [13,14] показывают, что ошибка такой аппроксимации одночастичной функции распределения при актуальных значениях параметров находится на уровне второго знака, что является вполне удовлетворительным результатом.

Традиционно после ряда преобразований и дополнительных предположений уравнение Ландау–Лифшица–Блоха записывается в следующем виде [4,5]:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{\partial \langle \mathbf{m} \rangle}{\partial t} = -\left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\text{LLB}} \right] + \alpha_{\parallel} \left(\langle \mathbf{m} \rangle \cdot \mathbf{H}^{\text{LLB}} \right) \cdot \langle \mathbf{m} \rangle - \\
- \alpha_{\perp} \left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\text{LLB}} \right] \right], \quad (5)$$

$$\alpha_{\parallel} = \frac{2\alpha T}{3T_c}, \quad \alpha_{\perp} = \begin{cases} \alpha \left[1 - T/3T_c \right], & \text{при} \quad T \leq T_c, \\ \alpha_{\parallel}, & \text{при} \quad T > T_c, \end{cases}$$

$$\mathbf{H}^{\text{LLB}} = \mathbf{H}^{\text{dip}} + 2K \mathbf{n}_K (\mathbf{n}_K \cdot \langle \mathbf{m} \rangle) + \mathbf{H}^{\text{ext}} + Ja^2 \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \\
+ \begin{cases} \frac{1}{2\chi} \left(1 - \frac{\langle \mathbf{m} \rangle^2}{\langle \mathbf{m} \rangle_{\text{eq}}^2} \right) \langle \mathbf{m} \rangle, & \text{при} \quad T \leq T_c, \\ -\frac{1}{\chi} \left(1 + \frac{3}{5} \frac{T_c \langle \mathbf{m} \rangle^2}{T - T_c} \right) \langle \mathbf{m} \rangle, & \text{при} \quad T > T_c, \end{cases}$$

где T_c — температура Кюри, $\langle m \rangle_{\rm eq} = \langle m \rangle_{\rm eq} \, (T)$ — равновесная намагниченность, $\chi = \chi(T)$ — продольная восприимчивость

$$\chi = \frac{L'}{T - \varepsilon_G n_b J L'}, \qquad L' = \frac{dL}{dp} \left(\frac{\varepsilon_G n_b J \langle m \rangle_{eq}}{T} \right), \qquad \langle m \rangle_{eq} = L \left(\frac{\varepsilon_G n_b J \langle m \rangle_{eq}}{T} \right).$$

Здесь и далее используется обозначение

$$\langle m \rangle \equiv |\langle \mathbf{m} \rangle|.$$

Уравнение Ландау–Лифшица–Блоха в форме (5) не имеет с вычислительной точки зрения серьезных преимуществ перед исходным видом (3), поскольку требует нахождения вектора $\mathbf{p}(\langle \mathbf{m} \rangle) = L^{-1}(|\langle \mathbf{m} \rangle|) \langle \mathbf{m} \rangle / |\langle \mathbf{m} \rangle|$ в каждой точке на основе решения трансцендентного алгебраического уравнения. Между тем в (5) сделан переход вида

$$\langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_K (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle \sim [\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{n}_K] (\langle \mathbf{m} \rangle \cdot \mathbf{n}_K), \langle \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{n}_K] (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle \sim [\langle \mathbf{m} \rangle \times [\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{n}_K]] (\langle \mathbf{m} \rangle \cdot \mathbf{n}_K),$$

что может приводить к неверному соотношению поля анизотропии и других полей и отрицательно влиять на адекватность результатов численного моделирования.

Входящий в (3) тензор $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \widehat{I} \rangle$ зависит лишь от средней намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle$, а старшие моменты $\langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_K (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle$ и $\langle \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{n}_K] (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle$ зависят от модуля средней намагниченности $\langle m \rangle$ и взаимной ориентации средней намагниченности и направления оси анизотропии \mathbf{n}_K . Таким образом, для проведения расчетов необходимо построить аналитическую аппроксимацию этих величин от $\langle \mathbf{m} \rangle$, причем точность аппроксимации может быть ограничена, поскольку для учета температурных флуктуаций в уравнение Ландау–Лифшица– Блоха добавляют случайный источник специального вида.

Надо отметить, что исходное уравнение Фоккера–Планка (2), полученное в приближении среднего поля, обладает существенным недостатком — приближение среднего поля плохо применимо для ферромагнетиков, поскольку не учитывает корреляций между ближайшими соседями. Между тем в магнетиках сильное обменное взаимодействие носит локальный характер и приводит к возникновению сильных корреляций между ближайшими соседями даже в парамагнитной фазе [11, 15]. За счет этого приближение среднего поля дает неверные критическую температуру T_c (что может быть скомпенсировано за счет множителя ε_G [12]), обменную энергию и времена релаксации, причем отличие во временах релаксации для некоторых постановок может доходить до одного порядка. Обсуждение и учет этих эффектов далеко выходит за рамки данной работы, здесь мы сосредоточимся на построении аппроксимации коэффициентов исходного уравнения Ландау–Лифшица–Блоха (3).

3. Коэффициенты, связанные с внешним и линейными полями

Под линейными полями здесь мы будем понимать поля \mathbf{H}^{exch} и \mathbf{H}^{dip} , зависящие линейно от средней намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle$.

Для начала рассмотрим старшие моменты функции $f(\langle \mathbf{m} \rangle)$, они могут быть получены при взятии аналитически соответствующих интегралов в сферических координатах

$$\left\langle m_{\parallel p}^2 \right\rangle = 1 - \frac{2 \left\langle m \right\rangle}{p}, \qquad \lim_{\langle m \rangle \to 0} \left\langle m_{\parallel p}^2 \right\rangle = \frac{1}{3}, \qquad \left\langle m_{\perp p}^2 \right\rangle = \frac{1 - \left\langle m_{\parallel p}^2 \right\rangle}{2}, \\ \left\langle m_{\parallel p}^3 \right\rangle = \left[1 + \frac{6}{p^2} \right] \left\langle m \right\rangle - \frac{2}{p}, \qquad \left\langle m_{\parallel p}^3 \right\rangle \approx \frac{3}{5} \left\langle m \right\rangle \text{ при } \left\langle m \right\rangle \ll 1, \quad \left\langle m_{\perp p}^3 \right\rangle = 0,$$

здесь $\left\langle m_{\parallel p}^{2,3} \right\rangle$ — компоненты старших моментов, параллельные вектору **р**, $\left\langle m_{\perp p}^{2,3} \right\rangle$ — компоненты, перпендикулярные вектору **р**. Поскольку **n**_p является главной осью симметричного тензора $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \rangle$, то

Поскольку \mathbf{n}_p является главной осью симметричного тензора $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \rangle$, то компоненты тензора $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \widehat{I} \rangle$ могут быть выражены как

$$\langle m_i m_j \rangle - \delta_{ij} = \left\langle m_{\parallel p}^2 \right\rangle \frac{3n_{pi} n_{pj} - \delta_{ij}}{2} - \frac{\delta_{ij} + n_{pi} n_{pj}}{2}, \qquad \lim_{\langle m \rangle \to 0} \left\langle m_i m_j \right\rangle - \delta_{ij} = -\frac{2}{3} \delta_{ij},$$

где δ_{ij} — символ Кронекера.



Рис. 1. Вид функций $\left\langle m_{\parallel p}^{2,3} \right\rangle \left(\left\langle m \right\rangle \right)$ и ошибки их аппроксимации



Рис. 2. Эволюция компоненты $\langle m_z \rangle$ для исходной модели «атом-в-атом» (LL), уравнения Ландау–Лифшица–Блоха с построенной аппроксимацией тензора $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \widehat{I} \rangle$ (LLB1) и традиционной аппроксимацией (LLB2)

Зависимости $\left\langle m_{\parallel p}^{2,3} \right\rangle (\langle m \rangle)$ могут быть аппроксимированы в диапазоне $\langle m \rangle \in [0, 0.98]$ с абсолютной ошибкой не более чем 10^{-3} (рис. 1) как

$$\left\langle m_{\parallel p}^2 \right\rangle \approx \frac{1}{3} + 0.4115 \cdot \left\langle m \right\rangle^2 + 0.0303 \cdot \left\langle m \right\rangle^4 + 0.3523 \cdot \left\langle m \right\rangle^6 - 0.1261 \cdot \left\langle m \right\rangle^8, \\ \left\langle m_{\parallel p}^3 \right\rangle \approx 0.6026 \cdot \left\langle m \right\rangle \left[1 + 0.00669 \cdot \operatorname{ch} \left(5.288 \left\langle m \right\rangle \right) \right].$$

Построенная аппроксимация тензора $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \hat{I} \rangle$ оказывается гораздо более компактной, чем традиционная (5), и полностью отвечает исходному уравнению (3). Сравним результаты, полученные в рамках построенной аппроксимации, с традиционной аппроксимацией и результатами непосредственного моделирования «атом-в-атом» магнетика с объемно–центрированной кристаллической решеткой при начальной намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle_0 = (\langle m \rangle_{eq}, 0, 0)$,



Рис. 3. Сферическая сетка, построенная на основе рекурсивного разбиения пентакисдодекаэдра: без разбиения (a), однократное разбиение (б), двукратное разбиение (b)

внешнем поле $\mathbf{H}^{\text{ext}} = (0,0,0.1)$ для температур T = J и T = 1.5J. Обменный интеграл J = 1, тогда температура Кюри $T_c = 2.12J$, диполь–дипольное взаимодействие и анизотропия отсутствуют, распределение намагниченности по пространству будем считать однородным. Из рисунка 2 видно, что в рамках такой постановки построенная аппроксимация тензора $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \hat{I} \rangle$ оказывается значительно ближе к исходной модели «атом-в-атом», чем традиционная аппроксимация.

4. Коэффициенты, связанные с анизотропией

При расчете анизотропных членов интегрирование по сфере проводилось на сетке, построенной на основе рекурсивного разбиения пентакисдодекаэдра (рис. 3), реализованной в библиотеке aiwlib [16]. В отличие от традиционных сферических координат, такая сетка изотропна, состоит из почти правильных сферических треугольников и вместо двух сильных особенностей на полюсах имеет двенадцать слабых особенностей, отвечающих центрам граней исходного пентакисдодекаэдра. Кроме того, при заданной точности (размере ячейки) такая сетка требует вдвое (а при переходе на дуальную сетку из шестиугольников, вчетверо) меньше узлов, чем традиционная равномерная сетка в сферических координатах.

Введем параметр
 $\beta={\bf n}_p\cdot{\bf n}_K=\langle{\bf m}\rangle\cdot{\bf n}_K/\langle m\rangle.$ Из соображений симметрии следует, что

$$\langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_K (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle \parallel [\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{n}_K] \rightarrow \langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_K (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle = [\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{n}_K] \Phi(p, \beta)$$

и на основе анализа результатов численного интегрирования для различных



Рис. 4. Множитель при члене $\left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{n}_{K} (\langle \mathbf{m} \rangle \cdot \mathbf{n}_{K}) \right]$

 $\langle m \rangle$, β можно построить аппроксимацию с абсолютной ошибкой менее $2 \cdot 10^{-3}$ (рис. 4, 5):

$$\langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_{K} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_{K}) \rangle \approx \left(0.59256 + 0.21515 \cdot \langle m \rangle^{2} + 0.2008 \cdot \langle m \rangle^{4} \right) (\langle \mathbf{m} \rangle \cdot \mathbf{n}_{K}) [\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{n}_{K}].$$

Нетрудно видеть, что традиционная аппроксимация

$$\langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_K (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle \approx \Big[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{n}_K (\langle \mathbf{m} \rangle \cdot \mathbf{n}_K) \Big]$$

отличается множителем $(0.59256 + 0.21515 \cdot \langle m \rangle^2 + 0.2008 \cdot \langle m \rangle^4)$, что может приводить к ошибке до 40% при малых $\langle m \rangle$.

Самым сложным для аппроксимации является член $\langle \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{n}_K] (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle$. Из соображений симметрии

$$\langle \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{n}_K] (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle = \langle \mathbf{m} \rangle \Psi_{\parallel}(\langle \mathbf{m} \rangle) + [\langle \mathbf{m} \rangle \times [\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{n}_K]] \Psi_{\perp}(\langle \mathbf{m} \rangle),$$

и на основе анализа результатов численного интегрирования для различных $\langle \mathbf{m} \rangle$, \mathbf{n}_K (рис. 6, 7) можно построить аппроксимацию с абсолютной ошибкой менее $2 \cdot 10^{-3}$:

$$\begin{split} \left\langle \mathbf{m} \times \left[\mathbf{m} \times \mathbf{n}_{K} \right] \left(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_{K} \right) \right\rangle &\approx \left\langle \mathbf{m} \right\rangle \left[\frac{\left\langle m_{\parallel p}^{3} \right\rangle}{\left\langle m \right\rangle} - 1 \right] \frac{3\beta^{2} - 1}{2} + \\ &+ \left[\left\langle \mathbf{m} \right\rangle \times \left[\left\langle \mathbf{m} \right\rangle \times \mathbf{n}_{K} \right] \right] \frac{\left\langle m_{\parallel p}^{3} \right\rangle}{\left\langle m \right\rangle^{2}} \beta. \end{split}$$

Из рисунка 8 видно, что разница между традиционной аппроксимацией и аппроксимацией, построенной в данной работе, может доходить до 50%.



Рис. 5. Зависимость модуля вектора $\langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_K(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle$ от параметров $\langle m \rangle$, β и ошибка его аппроксимации



Рис. 6. Зависимости компонент вектора $\langle \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{n}_K] (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle$ от параметров $\langle m \rangle, \beta$



Рис. 7. Зависимости модуля вектора $\langle \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{n}_K] (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle$ от параметров $\langle m \rangle$, β и ошибка его аппроксимации



Рис. 8. Зависимость модуля разницы между $\left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{n}_{K} (\langle \mathbf{m} \rangle \cdot \mathbf{n}_{K}) \right] \right]$ и $\langle \mathbf{m} \times \left[\mathbf{m} \times \mathbf{n}_{K} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_{K}) \right] \rangle$ от параметров $\langle m \rangle$ и β

5. Заключение

Построенные аппроксимации коэффициентов уравнения Ландау–Лифшица– Блоха реализованы в виде заголовочного файла llbe на языке C++ библиотеки aiwlib [16], предоставляющего функции для вычисления коэффициентов с плавающей точкой одинарной точности. С учетом температурных флуктуаций и ограниченной точности построенной аппроксимации до третьего знака этого оказывается достаточно.

По сравнению с традиционными решениями, построенные аппроксимации учитывают различие в структуре внешнего и линейных полей и поля анизотропии, что может быть особенно важно при моделировании переключения ячеек магниторезистивной памяти.

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 разработ-

ки перспективных микро- и наноэлектронных систем (МЭС). — 2016. — № 4. — С. 237–244. — https://www.elibrary.ru/download/elibrary_ 27150152_99870583.pdf.

- [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. – https://arxiv. org/abs/cond-mat/9805054v2.
- [5] The classical two-sublattice Landau-Lifshitz-Bloch equation for all temperatures / P. Nieves, U.R. Atxitia, W. Chantrell, O. Chubykalo-Fesenko // Low Temp. Phys. – 2015. – Vol. 41, no. 9. – P. 739–744. – https://doi.org/10. 1063/1.4930973.
- [6] 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. – https://doi.org/10.1088/1361-6463/50/3/ 033003.
- [7] The Fouriest: High-Performance Micromagnetic Simulation of Spintronic Materials and Devices / I. Pershin, A. Knizhnik, V. Levchenko et al. // Intelligent Computing-Proceedings of the Computing Conference / Springer. 2019. P. 209–231. https://doi.org/10.1007/978-3-030-22871-2_16.
- [8] Иванов А.В. Кинетическое моделирование динамики магнетиков // Математическое моделирование. — 2007. — Т. 19, № 10. — С. 89–104. http://www.mathnet.ru/links/82020fa1add2512759e063c1cb0a7ebf/ mm1204.pdf.
- [9] 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. https://doi.org/10.20948/prepr-2018-140.
- [10] Brown W.F. Thermal Fluctuation of a Single–Domain Particle // Phys. Rev. –
 1963. Vol. 130, no. 5. P. 1677. https://doi.org/10.1103/PhysRev.
 130.1677.
- [11] Хилков С.А., Иванов А.В., Зиупнова Е.В. Моделирование сильно неравновесных процессов в магнетиках на основе уравнений физической кинетики // Математическое моделирование. — 2016. — Т. 5, № 28. — С. 24–31. http://www.mathnet.ru/links/cdce0a7282643aa05782702b4e06c7f6/ mm3727.pdf.

- [12] Garanin D. A. Self-consistent Gaussian approximation for classical spin systems: Thermodynamics // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 53. – P. 11593. – https://arxiv.org/abs/cond-mat/9804040.
- [13] 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. — http://www.mathnet.ru/links/ f80cd33bca6853dfd290a903780e7565/mm3447.pdf.
- [14] Зипунова Е.В., Иванов А.В. Две новые численные схемы для моделирования магнетиков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2017. — № 140. — С. 18. — https://doi.org/10.20948/prepr-2017-140.
- [15] 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. — https://doi.org/10. 20948/prepr-2017-87.
- [16] 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. https://doi.org/10.26583/sv.10.1.09.