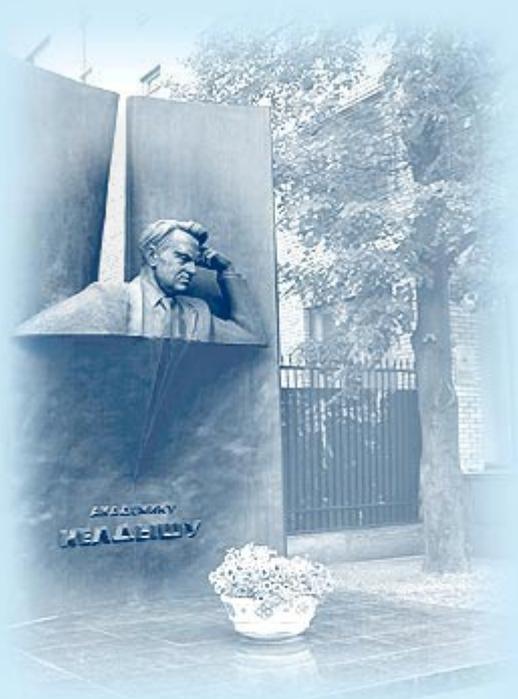




ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 106 за 2021 г.



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

**А.В. Иванов**

Уравнения корреляционной  
магнитодинамики для  
антиферро- и  
ферримагнетиков

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Иванов А.В. Уравнения корреляционной магнитодинамики для антиферро- и ферримагнетиков // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 106. 13 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-106>  
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-106>

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

**А.В. Иванов**

**Уравнения корреляционной  
магнитодинамики для антиферро- и  
ферримагнетиков**

**Москва — 2021**

**Иванов А.В.**

e-mail: aiv.racs@gmail.com

**Уравнения корреляционной магнитодинамики для антиферро- и ферримагнетиков**

На основе цепочки Боголюбова и новой аппроксимации двухчастичной функции распределения получена новая система уравнений корреляционной магнитодинамики для антиферро- и ферримагнетиков. Рассмотрены объемно-центрированная и гранецентрированная кристаллические решетки. Система содержит по одному микромагнитному уравнению типа Ландау–Лифшица–Блоха для каждой подрешетки и несколько уравнений на парные корреляции между подрешетками. При этом основной сложностью является расчет интегральных коэффициентов полученной системы уравнений.

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

**Anton Valeryevich Ivanov**

e-mail: aiv.racs@gmail.com

**Correlation magnetodynamics equations for antiferro- and ferrimagnets**

Based on the Bogolyubov chain and a new approximation of the two-particle distribution function a new system of equations of correlation magnetodynamics is obtained for antiferro- and ferrimagnets. Body-centered and face-centered crystal lattices are considered. The system contains one world-magnetic equation of the Landau–Lifshitz–Bloch type for each sublattice and several equations for pairwise correlations between sublattices. In this case, the main difficulty is the calculation of the integral coefficients of the resulting system of equations.

**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	Цепочка Боголюбова	3
3	Уравнения Ландау–Лифшица–Блоха	5
4	Уравнения СМД на среднюю намагниченность	8
5	Уравнения СМД на парные корреляции	10
6	Интегральные коэффициенты СМД	11
7	Заключение	11
	Список литературы	12

### 1. Введение

При создании устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники большую роль играет численное моделирование [1–3]. Оптимальными, с точки зрения соотношения «адекватность/вычислительная сложность», являются микромагнитные модели сплошной среды, описывающие эволюцию непрерывного пространственного распределения средней намагниченности [4].

При построении таких моделей ключевым вопросом является корректный переход от атомистической модели магнетика к уравнениям сплошной среды. Общепринятым в настоящий момент является уравнение Ландау–Лифшица–Блоха (УЛЛБ) [5, 6], построенное на основе приближении среднего поля. При этом корреляции между ближайшими соседями полагаются равными нулю, что неверно для магнетиков с сильным локальным обменным взаимодействием. Такое приближение приводит к неверным значениям обменной энергии и заниженным времена релаксации системы.

Система уравнений корреляционной магнитодинамики (СМД) [7–10] строится на основе цепочки Боголюбова и аппроксимации двухчастичной функции распределения, учитывающей корреляции между ближайшими соседями. Для ферромагнетиков с различными кристаллическими решетками СМД дает удовлетворительное согласие с результатами моделирования в рамках атомистической модели [10]. Данная работа посвящена построению СМД для антиферро- и ферримагнетиков. В литературе известны аналогичные УЛЛБ [11].

Антиферро- и ферримагнетики играют важную роль при создании устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники. В отличие от ферромагнетиков, кристаллические решетки антиферро- и ферримагнетиков состоят из нескольких подрешеток, имеющих различную намагниченность. Такое различие приводит к усложнению системы уравнений СМД.

### 2. Цепочка Боголюбова

В качестве исходной модели магнетика мы будем рассматривать атомистическую модель — систему стохастических уравнений Ландау–Лифшица,

описывающую эволюцию  $N$  магнитных моментов  $\mathbf{m}_i(t)$ ,  $|\mathbf{m}_i(t)| = 1$ , расположенных в неподвижных узлах кристаллической решетки с координатами  $\mathbf{r}_i$ :

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

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_i^{\text{eff}} &= -\nabla_{\mathbf{m}_i} W = \mathbf{H}_i^{\text{exch}} + \mathbf{H}_i^{\text{anis}} + \mathbf{H}_i^{\text{dip}} + \mathbf{H}^{\text{ext}}, \\ \mathbf{H}_i^{\text{exch}} &= \sum_j J_{ij} \mathbf{m}_j, \quad \mathbf{H}_i^{\text{anis}} = 2K_i \mathbf{n}_{Ki} (\mathbf{n}_{Ki} \cdot \mathbf{m}_i), \\ \mathbf{H}_i^{\text{dip}} &= \sum_j \frac{3(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij}) \mathbf{r}_{ij} - \mathbf{m}_j r_{ij}^2}{r_{ij}^5}, \quad \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \end{aligned}$$

где  $\gamma$  — гиромагнитное соотношение,  $\alpha$  — параметр затухания,  $\mathbf{H}^{\text{eff}}$  — эффективное магнитное поле,  $W$  — полная энергия системы,  $T$  — температура системы в единицах энергии,  $\boldsymbol{\xi}_i(t)$  — случайный  $\delta$ -коррелированный источник с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией,  $\nabla_{\mathbf{m}_i}$  — векторный оператор дифференцирования по магнитному моменту  $\mathbf{m}_i$ ,  $\mathbf{H}^{\text{exch}}$  — поле обменного взаимодействия,  $J_{ij}$  — обменный интеграл (как правило, отличен от нуля только для ближайших соседей),  $\mathbf{H}^{\text{anis}}$  — поле линейной анизотропии,  $K_i$  — параметр анизотропии,  $\mathbf{n}_{Ki}$  — направление оси анизотропии (могут различаться для разных атомов),  $|\mathbf{n}_K| = 1$ ,  $\mathbf{H}^{\text{dip}}$  — поле диполь-дипольного (магнитостатического) взаимодействия. Здесь и далее мы будем использовать безразмерную систему единиц.

Введем обозначение

$$\bullet[\mathbf{H}_i, D]_i f \equiv \nabla_{oi} \left[ \gamma \mathbf{m}_i \times \left( \mathbf{H}_i + \alpha [\mathbf{m}_i \times (\mathbf{H}_i - D \nabla_{oi})] \right) f \right],$$

где  $\nabla_{oi} = \nabla_{\mathbf{m}_i} - \mathbf{m}_i (\mathbf{m}_i \cdot \nabla_{\mathbf{m}_i}) / \mathbf{m}_i^2$  — градиент вдоль поверхности сферы,  $\mathbf{H}_i$  — некоторое эффективное поле,  $D$  — коэффициент диффузии в пространстве магнитных моментов,  $f = f(\dots, \mathbf{m}_i, \dots)$  — некоторая функция распределения магнитных моментов. В дальнейшем мы будем много работать с уравнениями типа Фоккера–Планка (УФП) [12]

$$\dot{f} = \nabla_{oi} \left[ \gamma \mathbf{m}_i \times \left( \mathbf{H}_i + \alpha [\mathbf{m}_i \times (\mathbf{H}_i - D \nabla_{oi})] \right) f \right] \equiv \bullet[\mathbf{H}_i, D]_i f,$$

и обозначение  $\bullet[\mathbf{H}_i, D]_i f$  значительно упростит запись.

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 [13] перейти к  $N$ -частичному УФП

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \bullet[\mathbf{H}_i^{\text{eff}}, T]_i f^{(N)}. \quad (2)$$

Введем одночастичную функцию распределения  $f_i$ :

$$f_i(\mathbf{m}_i, t) = \int_{S_2} \cdots \int_{S_2} f^{(N)} d\mathbf{m}_{1, \dots, i-1, i+1, \dots, N},$$

(здесь под  $\int_{S_2} d\mathbf{m}$  понимается интегрирование по сфере единичного радиуса) и проинтегрируем\* (2) по  $N - 1$  магнитному моменту, что даст нам систему из  $N$  одночастичных УФП с интегральными коэффициентами

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \left[ \frac{\mathbf{H}_i^{\text{exch}(2)} + \mathbf{H}_i^{\text{dip}(2)}}{f_i} + \mathbf{H}_i^{\text{anis}} + \mathbf{H}^{\text{ext}}, T \right]_i f_i, \quad (3)$$

$$\mathbf{H}_i^{\text{exch}(2)} = \sum_j J_{ij} \int_{S_2} \mathbf{m}_j f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j, \quad (4)$$

$$\mathbf{H}_i^{\text{dip}(2)} = \sum_j \int_{S_2} \frac{3(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{m}_j r_{ij}^2}{r_{ij}^5} f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j, \quad (5)$$

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

$$f_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, t) = \int_{S_2} \cdots \int_{S_2} f^{(N)} d\mathbf{m}_{\dots, i-1, i+1, \dots, j-1, j+1, \dots}$$

Такая система является первым звеном цепочки Боголюбова.

### 3. Уравнения Ландау–Лифшица–Блоха

Для замыкания (3) необходимо аппроксимировать  $f_{ij}^{(2)}$  на основе  $f_i, f_j$ . Простейшей аппроксимацией является приближение среднего поля или мультипликативное приближение:

$$f_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j) \approx f_i(\mathbf{m}_i) f_j(\mathbf{m}_j).$$

Это приближение не учитывает корреляции между  $\mathbf{m}_i$  и  $\mathbf{m}_j$ , что для магнетиков неверно — за счет сильной обменной связи такие корреляции сохраняются для ближайших соседей даже в парамагнитной фазе, когда дальний порядок отсутствует. Тем не менее такое приближение позволяет получить ряд полезных результатов.

\*с учетом теоремы Гаусса  $\int_{S_2} \nabla_{\circ} A(\mathbf{m}) d\mathbf{m} = 0 \forall A$

В приближении среднего поля система (3) принимает вид

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \left[ \mathbf{H}_i^{\text{exch}(1)} + \mathbf{H}_i^{\text{dip}(1)} + \mathbf{H}_i^{\text{anis}} + \mathbf{H}^{\text{ext}}, T \right]_i f_i, \quad (6)$$

$$\mathbf{H}_i^{\text{exch}(1)} = \sum_j J_{ij} \langle \mathbf{m}_j \rangle, \quad (7)$$

$$\mathbf{H}_i^{\text{dip}(1)} = \sum_j \frac{3(\langle \mathbf{m}_j \rangle \cdot \mathbf{r}_{ij}) \mathbf{r}_{ij} - \langle \mathbf{m}_j \rangle r_{ij}^2}{r_{ij}^5}, \quad (8)$$

где

$$\langle \mathbf{m}_j \rangle = \int_{S_2} \mathbf{m}_j f_j(\mathbf{m}_j) d\mathbf{m}_j.$$

Каждая кристаллическая решетка состоит из нескольких подрешеток. Можно считать, что подрешетка — это множество атомов, занимающих одно и то же положение в элементарных ячейках кристаллической решетки. Предположим, что для каждой подрешетки  $X$  существует своя, достаточно гладкая одночастичная функция распределения  $f_X(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)$ , совпадающая с одночастичными функциями  $f_i(\mathbf{m})$  в точках  $\mathbf{r}_i$  при условии, что  $i \in X$ . В отличие от ферромагнетика, для антиферро- и ферримагнетиков, в точках  $\mathbf{r}_j$ , отвечающих атомам другой подрешетки,  $f_X(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)$  может не совпадать с  $f_j(\mathbf{m})$ .

Тогда, для каждой подрешетки можно ввести непрерывное пространственное распределение средней намагниченности  $\langle \mathbf{m} \rangle_X(\mathbf{r}, t)$ . В такой постановке расчет полей магнитостатического взаимодействия сводится к интегралу по объему, линейно зависит от  $\langle \mathbf{m} \rangle$  и методы его расчета хорошо известны [14, 15]. Для антиферромагнетика магнитостатическим взаимодействием, как правило, можно пренебречь.

Дальнейшие рассуждения зависят от типа кристаллической решетки. В данной работе мы ограничимся рассмотрением объемноцентрированной (ОЦК, две подрешетки  $A, B$ ) и гранецентрированной (ГЦК, четыре подрешетки  $A, B, C, D$ ) решеток. Результаты для ГЦК решетки могут быть обобщены на случай более сложных решеток.

Будем полагать, что  $J_{ij} = J_{X_i X_j}$  только для ближайших соседей и в остальных случаях равен нулю. Тогда для ОЦК решетки обменное поле (7) можно записать как

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_A^{\text{exch}} &\approx \mathbf{H}_A^{\text{ex}, S} + \mathbf{H}_A^{\text{ex}, L}, & \mathbf{H}_A^{\text{ex}, S} &= 8J \langle \mathbf{m} \rangle_B, & \mathbf{H}_A^{\text{ex}, L} &= a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle_B, \\ \mathbf{H}_B^{\text{exch}} &\approx \mathbf{H}_B^{\text{ex}, S} + \mathbf{H}_B^{\text{ex}, L}, & \mathbf{H}_B^{\text{ex}, S} &= 8J \langle \mathbf{m} \rangle_A, & \mathbf{H}_B^{\text{ex}, L} &= a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle_A, \end{aligned}$$

где  $J = J_{AB}$ ,  $a$  — длина обменной связи,  $\Delta_{\mathbf{r}}$  — оператор Лапласа по конфигурационному пространству, 8 — число ближайших соседей для ОЦК решетки,

$\mathbf{H}^{\text{ex},S}$  — вклад в обменное поле обусловленный взаимодействием на масштабах, меньших размера физически бесконечно малого объема,  $\mathbf{H}^{\text{ex},L}$  — вклад в обменное поле, обусловленный взаимодействием на масштабах больших размера физически бесконечно малого объема. Слагаемое  $\mathbf{H}^{\text{ex},L}$  приводит к появлению спиновых волн в пространственно-неоднородном случае, слагаемое  $\mathbf{H}^{\text{ex},S}$  приводит к возникновению фазового перехода.

Для ГЦК решетки ситуация оказывается значительно сложнее. Во-первых, в общем случае существует шесть значений обменного интеграла  $J_{AB}, J_{AC}, J_{AD}, J_{BC}, J_{BD}, J_{CD}$ , и для некоторых веществ они могут не совпадать друг с другом. Во-вторых, ближайшими соседями каждого из атомов оказываются по четыре атома трех остальных подрешеток. Соседние атомы каждой подрешетки лежат в одной плоскости и образуют шаблон «крест», что приводит к появлению двумерных операторов Лапласа по конфигурационному пространству в обменном поле:

$$\begin{aligned}\mathbf{H}_A^{\text{ex},S} &= 4 \left[ J_{AB} \langle \mathbf{m} \rangle_B + J_{AC} \langle \mathbf{m} \rangle_C + J_{AD} \langle \mathbf{m} \rangle_D \right], \\ \mathbf{H}_B^{\text{ex},S} &= 4 \left[ J_{AB} \langle \mathbf{m} \rangle_A + J_{BC} \langle \mathbf{m} \rangle_C + J_{BD} \langle \mathbf{m} \rangle_D \right], \\ \mathbf{H}_C^{\text{ex},S} &= 4 \left[ J_{AC} \langle \mathbf{m} \rangle_A + J_{BC} \langle \mathbf{m} \rangle_B + J_{CD} \langle \mathbf{m} \rangle_D \right], \\ \mathbf{H}_D^{\text{ex},S} &= 4 \left[ J_{AD} \langle \mathbf{m} \rangle_A + J_{BD} \langle \mathbf{m} \rangle_B + J_{CD} \langle \mathbf{m} \rangle_C \right], \\ \mathbf{H}_A^{\text{ex},L} &= a^2 \left[ J_{AB} \Delta_{yz} \langle \mathbf{m} \rangle_B + J_{AC} \Delta_{xz} \langle \mathbf{m} \rangle_C + J_{AD} \Delta_{xy} \langle \mathbf{m} \rangle_D \right], \\ \mathbf{H}_B^{\text{ex},L} &= a^2 \left[ J_{AB} \Delta_{yz} \langle \mathbf{m} \rangle_A + J_{BC} \Delta_{xy} \langle \mathbf{m} \rangle_C + J_{BD} \Delta_{xz} \langle \mathbf{m} \rangle_D \right], \\ \mathbf{H}_C^{\text{ex},L} &= a^2 \left[ J_{AC} \Delta_{xz} \langle \mathbf{m} \rangle_A + J_{BC} \Delta_{xy} \langle \mathbf{m} \rangle_B + J_{CD} \Delta_{yz} \langle \mathbf{m} \rangle_D \right], \\ \mathbf{H}_D^{\text{ex},L} &= a^2 \left[ J_{AD} \Delta_{xy} \langle \mathbf{m} \rangle_A + J_{BD} \Delta_{xz} \langle \mathbf{m} \rangle_B + J_{CD} \Delta_{yz} \langle \mathbf{m} \rangle_C \right].\end{aligned}$$

В итоге (6) принимает вид системы из нескольких одночастичных УФП

$$\frac{\partial f_X(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[ \mathbf{H}_X^L + \mathbf{H}_X^{\text{ex},S} + \mathbf{H}_X^{\text{anis}}, T \right] f_X, \quad X = A, B, \dots, \quad (9)$$

где в  $\mathbf{H}^L$  сгруппированы вклады в эффективное поле, описывающие взаимодействие на масштабах больше физически бесконечно малого объема

$$\mathbf{H}_X^L = \mathbf{H}^{\text{ext}} + \mathbf{H}_X^{\text{anis}} + \mathbf{H}_X^{\text{dip}} + \mathbf{H}_X^{\text{ex},L}.$$

Умножая каждое из уравнений (9) на  $\mathbf{m}$  и интегрируя по поверхности сферы по частям, получаем систему уравнений Ландау–Лифшица–Блоха на средние

намагниченности отдельных подрешеток:

$$\begin{aligned} \langle \dot{\mathbf{m}} \rangle_X &= -\gamma \left[ \langle \mathbf{m} \rangle_X \times \mathbf{H}_X^L \right] - 2\gamma K_X \left( \Phi_X + \alpha \Theta_X \right) - \\ &\quad - \alpha\gamma \widehat{\Xi}_X \cdot \left( \mathbf{H}_X^L + \mathbf{H}_X^{\text{ex}, S} \right) - 2\alpha\gamma T \langle \mathbf{m} \rangle_X, \\ \Phi_X &= \langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_{KX} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_{KX}) \rangle_X, \quad \widehat{\Xi}_X = \langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \widehat{I} \rangle_X, \\ \Theta_X &= \langle \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{n}_{KX}] (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_{KX}) \rangle_X, \end{aligned} \quad (10)$$

где  $\otimes$  — символ тензорного произведения,  $\widehat{I}$  — единичная матрица,  $\varepsilon_G \sim 0.8$  — множитель, введенный Гараниным для учета флуктуаций среднего поля и обеспечивающий получение правильной критической температуры [16]. Для вычисления интегральных коэффициентов  $\Phi$ ,  $\Theta$ ,  $\widehat{\Xi}$ , зависящих от старших моментов одночастичной функции распределения, необходимо аппроксимировать  $f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)$ , например, как<sup>†</sup>

$$f \approx \frac{e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}}}{\mathcal{Z}(p)}, \quad \mathcal{Z}(p) = \int_{S_2} e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}} d\mathbf{m} = 4\pi \frac{\text{sh } p}{p}, \quad (11)$$

где  $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$  — параметр аппроксимации,  $\mathbf{p} \parallel \langle \mathbf{m} \rangle$ ,

$$|\langle \mathbf{m} \rangle| = \text{cth } p - \frac{1}{p} \equiv \mathcal{L}(p),$$

$\mathcal{L}$  — функция Ланжевена. Коэффициенты  $\Phi$ ,  $\Theta$ ,  $\widehat{\Xi}$  могут быть посчитаны численно и аппроксимированы аналитически [17]. В равновесном случае (10) эквивалентно теории Кюри–Вейсса с точностью до аппроксимации (11).

#### 4. Уравнения СМД на среднюю намагниченность

Для учета корреляций между ближайшими соседями аппроксимируем двухчастичную функцию распределения как [7]

$$\begin{aligned} f_{ij}^{(2)} &\approx \frac{1}{Z_{ij}^{(2)}} f_i^{\rho_i} f_j^{\rho_j} e^{\lambda_{ij} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}, \\ Z_{ij}^{(2)} &= \iint_{S_2} f_i^{\rho_i} f_j^{\rho_j} e^{\lambda_{ij} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j, \end{aligned} \quad (12)$$

где  $\lambda_{ij} \geq 0$  — параметр, описывающий корреляции (включая косвенные) между ближайшими магнитными моментами  $\mathbf{m}_i$  и  $\mathbf{m}_j$ ,  $\frac{1}{2} \leq \rho_{i,j} \leq 1$  — степени,

<sup>†</sup>Что позволяет получить качественные результаты но оказывается недостаточным в ряде случаев. Введение квадратичной поправки в аргумент экспоненты значительно усложняет модель и выходит за рамки данной работы.

необходимые для выполнения условий

$$f_i \approx \int_{S_2} f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j, \quad f_j \approx \int_{S_2} f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_i, \quad (13)$$

Проще всего получить  $\rho_{i,j}$  из уравнений

$$\langle \mathbf{m}_i \rangle = \iint_{S_2} \mathbf{m}_i f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j, \quad \langle \mathbf{m}_j \rangle = \iint_{S_2} \mathbf{m}_j f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j.$$

Такая аппроксимация применима для любой двухчастичной функции распределения, но нас будут интересовать функции для ближайших соседей.

При  $\lambda_{ij} \ll 1$  аппроксимация (12) переходит в приближение среднего поля и  $\rho \rightarrow 1$ . При  $\lambda_{ij} \gg 1$  экспонента в аппроксимации (12) фактически переходит в  $\delta$ -функцию  $\delta(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)$  и  $\rho \rightarrow \frac{1}{2}$ . Несмотря на степени  $\rho$ , за счет  $Z^{(2)}$  аппроксимация (12) имеет размерность двухчастичной функции распределения.

Из (13) следует

$$\frac{1}{Z^{(2)}} \int_{S_2} f_j^{\rho_j} e^{\lambda_{ij} \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j} d\mathbf{m}_j \approx f_i^{1-\rho_i},$$

тогда слагаемые обменного поля внутри физически бесконечно малого объема примут вид

$$\begin{aligned} J_{ij} \int_{S_2} \mathbf{m}_j f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j &\approx \frac{J_{ij}}{Z^{(2)}} \int_{S_2} \mathbf{m}_j f_i^{\rho_i} f_j^{\rho_j} e^{\lambda_{ij} \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j} d\mathbf{m}_j = \\ &= \frac{J_{ij}}{Z^{(2)}} \frac{f_i^{\rho_i}}{\lambda_{ij}} \nabla_{\mathbf{m}_i} \int_{S_2} f_j^{\rho_j} e^{\lambda_{ij} \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j} d\mathbf{m}_j \approx \\ &\approx J_{ij} \frac{f_i^{\rho_i}}{\lambda_{ij}} \nabla_{\mathbf{m}_i} f_i^{1-\rho_i} = J_{ij} \Upsilon_{ij} \nabla_{\mathbf{m}_i} f_i, \quad \Upsilon_{ij} = \frac{1-\rho_i}{\lambda_{ij}}. \end{aligned}$$

Поскольку этот член домножается векторно на  $\mathbf{m}_i$ , то  $\nabla_{\mathbf{m}_i}$  может быть заменен на  $\nabla_{\circ i}$ , что приводит к появлению антидиффузии в пространстве  $\mathbf{m}_i$  с некоторым коэффициентом  $T_i$ ,

$$T_i = \sum_j J_{ij} \Upsilon_{ij}.$$

В итоге (6) принимает вид системы из нескольких одночастичных УФП

$$\frac{\partial f_X(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[ \mathbf{H}_X^L + \mathbf{H}_X^{\text{anis}}, T - T_X \right] f_X, \quad X = A, B, \dots \quad (14)$$

где для ОЦК решетки

$$T_X = 8J\Upsilon_{AB},$$

для ГЦК решетки

$$\begin{aligned} T_A &= 4 \left[ J_{AB}\Upsilon_{AB} + J_{AC}\Upsilon_{AC} + J_{AD}\Upsilon_{AD} \right], \\ T_B &= 4 \left[ J_{AB}\Upsilon_{AB} + J_{BC}\Upsilon_{BC} + J_{BD}\Upsilon_{BD} \right], \\ T_C &= 4 \left[ J_{AC}\Upsilon_{AC} + J_{BC}\Upsilon_{BC} + J_{CD}\Upsilon_{CD} \right], \\ T_D &= 4 \left[ J_{AD}\Upsilon_{AD} + J_{BD}\Upsilon_{BD} + J_{CD}\Upsilon_{CD} \right]. \end{aligned}$$

Коэффициент  $\Upsilon_{XY}$  является функцией переменных  $\langle \mathbf{m} \rangle_X$ ,  $\langle \mathbf{m} \rangle_Y$  и уровня парных корреляций между подрешетками

$$\langle \eta \rangle_{XY} = \iint_{S_2} \mathbf{m}_X \mathbf{m}_Y f_{XY}^{(2)} d\mathbf{m}_X d\mathbf{m}_Y.$$

Умножая каждое из уравнений (14) на  $\mathbf{m}$  и интегрируя по поверхности сферы по частям, получаем систему уравнений типа Ландау–Лифшица–Блоха на средние намагниченности отдельных подрешеток:

$$\begin{aligned} \dot{\langle \mathbf{m} \rangle}_X &= -\gamma \left[ \langle \mathbf{m} \rangle_X \times \mathbf{H}_X^L \right] - 2\gamma K_X \left( \Phi_X + \alpha \Theta_X \right) - \\ &\quad - \alpha\gamma \hat{\Xi}_X \cdot \mathbf{H}_X^L - 2\alpha\gamma (T - T_X) \langle \mathbf{m} \rangle_X, \end{aligned} \quad (15)$$

образующих первую половину системы уравнений СМД для антиферро- и ферромагнетиков.

## 5. Уравнения СМД на парные корреляции

Для определения параметра  $\langle \eta \rangle_{XY}$  необходимо ввести уравнения на парные корреляции для каждой пары взаимодействующих подрешеток  $XY$ . Выпишем второе уравнение цепочки Боголюбова

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{ij}^{(2)}}{\partial t} &= \left[ \mathbf{H}_i^L + \mathbf{H}_i^{(2)}, T \right]_i f_{ij}^{(2)} + \left[ \mathbf{H}_j^L + \mathbf{H}_j^{(2)}, T \right]_j f_{ij}^{(2)}, \\ \mathbf{H}_i^{(2)} &= 2K_i (\mathbf{n}_{Ki} \cdot \mathbf{m}_i) \mathbf{n}_{Ki} + J_{ij} \mathbf{m}_j + \sum_{k, k \neq j}^N \frac{J_{ik}}{f_{ij}^{(2)}} \int_{S_2} \mathbf{m}_k f_{ijk}^{(3)} d\mathbf{m}_k. \end{aligned}$$

Умножая его на  $\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j$  интегрируя по  $d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j$ , получаем

$$\begin{aligned} \frac{\langle \dot{\eta} \rangle_{XY}}{2\alpha\gamma} &= \left( \mathbf{H}_X^L \cdot \langle \mathbf{m} \rangle_X + \mathbf{H}_Y^L \cdot \langle \mathbf{m} \rangle_Y \right) \Upsilon_{XY} - K_X \Psi_{XY} - K_Y \Psi_{YX} - \\ &- J_{XY} [\langle \eta^2 \rangle_{XY} - 1] - \frac{1}{2} \sum_k (J_{Yk} Q_{XYk} + J_{Xk} Q_{YXk}) - 2T \langle \eta \rangle_{XY}, \\ \Psi_{XY} &= \left\langle \mathbf{m}_Y \cdot \left[ \mathbf{m}_X \times [\mathbf{m}_X \times \mathbf{n}_{KX}] \right] (\mathbf{m}_Y \cdot \mathbf{n}_{KX}) \right\rangle, \\ Q_{XYk} &= \left\langle \mathbf{m}_X \cdot \left[ \mathbf{m}_Y \times [\mathbf{m}_Y \times \mathbf{m}_k] \right] \right\rangle, \end{aligned} \quad (16)$$

для  $Q_{XYk}$  суммирование ведется по всем соседям атома  $Y$ , кроме атома  $X$ . Уравнения (15) и (16) образуют систему уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD).

## 6. Интегральные коэффициенты CMD

Все рассуждения о вычислениях коэффициентов  $Q_{XYk}$  для различных подрешеток из [10] остаются в силе. Но даже коэффициент  $\Upsilon$  теперь зависит не от двух параметров  $\langle m \rangle$ ,  $\langle \eta \rangle$ , а от четырех  $\langle m \rangle_X$ ,  $\langle m \rangle_Y$ ,  $\langle \mathbf{m} \rangle_X \cdot \langle \mathbf{m} \rangle_Y / (\langle m \rangle_X \langle m \rangle_Y)$ ,  $\langle \eta \rangle_{XY}$ . Для  $\Phi_{XY}$  возникает такая же ситуация. Коэффициент  $Q$  в случае ОЦК решетки аналогично зависит от четырех параметров, но в случае ГЦК решетки в аргументы  $Q$  добавляется еще четыре параметра —  $\langle m \rangle_k$ ,  $\langle \mathbf{m} \rangle_Y \cdot \langle \mathbf{m} \rangle_k / (\langle m \rangle_Y \langle m \rangle_k)$ ,  $\langle \mathbf{m} \rangle_X \cdot \langle \mathbf{m} \rangle_k / (\langle m \rangle_X \langle m \rangle_k)$ ,  $\langle \eta \rangle_{Yk}$ ,  $\langle \eta \rangle_{Xk}$ . Это радикально увеличивает вычислительную сложность расчета интегральных коэффициентов CMD.

Расчет каждого интегрального коэффициента CMD для ферромагнетиков требовал около 12 узло-часов на кластере К60 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Увеличение пространства параметров с двух до четырех–восьми требует развития новых методов полуаналитического интегрирования для вычисления моментов многочастичных функций распределения.

## 7. Заключение

Система уравнения CMD обобщена на случай антиферро- и ферримагнетиков. Для ГЦК решеток взаимодействие на масштабах больше размера физически бесконечно малого объема описывается двумерными операторами Лапласа. Полученная система уравнений ожидаемо оказывается значительно сложнее системы для ферромагнетиков.

Основную сложность вызывает расчет интегральных коэффициентов полученной системы CMD. Такие расчеты требуют большой дополнительной исследовательской работы. Тем не менее, без обобщения CMD на случай антиферро- и ферримагнетиков и расчета соответствующих интегральных коэффициентов применимость CMD для моделирования устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники вызывает вопросы.

## 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 нанoeлектронных систем (МЭС). — 2016. — № 4. — С. 237–244. — [https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_27150152\\_99870583.pdf](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] 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](https://doi.org/10.1007/978-3-030-22871-2_16).
- [5] 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>.
- [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] Иванов А.В. Учет корреляций между ближайшими соседями при микромагнитном моделировании // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2019. — № 118. — С. 30. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2019-118>.
- [8] Ivanov A.V., Zipunova E.V. Micromagnetic modeling with account for the correlations between closest neighbors // AIP Conference Proceedings. — 2020. — Vol. 2300, no. 1. — P. 020050. — <https://doi.org/10.1063/5.0032075>.
- [9] Ivanov Anton, Khilkov Sergey, Zipunova Elizaveta. Approximation of Multiparticle Distribution Function in Micromagnetic Modeling // Journal of Physics: Conference Series. — 2021. — Vol. 1740. — P. 012025. — <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1740/1/012025>.

- [10] Иванов А.В. Аппроксимация многочастичных функций распределения для ферромагнетиков с различными кристаллическими решетками // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2021. — № 11. — С. 22. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-11>.
- [11] Atxitia U., Nieves P., Chubykalo-Fesenko O. The Landau-Lifshitz-Bloch equation for ferrimagnetic materials. — 2016.
- [12] 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>.
- [13] Coffey W.T., Kalmykov Yu.P., Waldron J.T. The Langevin equation: with applications to stochastic problems in physics, chemistry and electrical engineering; 2nd ed. World Scientific Series in Contemporary Chemical Physics. — Singapore : World Scientific, 2004.
- [14] Micromagnetic simulation by using the fast multipole method specialized for uniform brick elements / Y. Takahashi, S. Wakao, T. Iwashita, M. Kanazawa // *J. Appl. Phys.* — 2009. — Vol. 105.
- [15] Hayashi N. Saito K. Nakatani Y. Calculation of Demagnetizing Field Distribution Based on Fast Fourier // *Jpn. J. Appl. Phys.* — 1996. — Vol. 35. — P. 6065–6073.
- [16] 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>.
- [17] Иванов А.В. Аппроксимация коэффициентов уравнения Ландау–Лифшица–Блоха при микромагнитном моделировании // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2019. — № 105. — С. 16. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2019-105>.