



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

Препринты ИПМ • Препринт № 107 за 2021 г.



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

А.В. Иванов

Уравнения корреляционной
магнитодинамики с учетом
одноосной квадратичной
поправки в аппроксимации
одночастичной функции
распределения

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Иванов А.В. Уравнения корреляционной магнитодинамики с учетом одноосной квадратичной поправки в аппроксимации одночастичной функции распределения // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 107. 16 с.
<https://doi.org/10.20948/prepr-2021-107>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-107>

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

А.В. Иванов

**Уравнения корреляционной
магнитодинамики с учетом одноосной
квадратичной поправки в аппроксимации
одночастичной функции распределения**

Москва — 2021

Иванов А.В.

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Уравнения корреляционной магнитодинамики с учетом одноосной квадратичной поправки в аппроксимации одночастичной функции распределения

Система уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD) строится на основе цепочки Боголюбова и аппроксимации двухчастичной функции распределения, учитывающей корреляции между ближайшими соседями. CMD обеспечивает хорошее согласие с результатами моделирования «атом-в-атом» (которые рассматриваются как первопринципные), но наблюдается некоторое расхождение в области фазового перехода. Для решения этой проблемы построена новая система уравнений CMD, учитывающая квадратичную поправку в аппроксимации одночастичной функции распределения. Система может быть упрощена в одноосном случае.

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

Anton Valeryevich Ivanov

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Correlation magnetodynamics equations taking into account the uniaxial quadratic correction in the approximation of the one-particle distribution function

The system of equations for correlation magnetodynamics (CMD) is based on the Bogolyubov chain and approximation of the two-particle distribution function taking into account the correlations between the nearest neighbors. CMD provides good agreement with atom-for-atom simulation results (which are considered ab initio), but there is some discrepancy in the phase transition region. To solve this problem, a new system of CMD equations is constructed, which takes into account the quadratic correction in the approximation of the one-particle distribution function. The system can be simplified in a uniaxial case.

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	Уравнение Ландау–Лифшица–Блоха	3
3	Уравнения корреляционной магнетодинамики	6
4	Аппроксимация одночастичной функции распределения	7
5	Учет квадратичной поправки в уравнениях СМД	10
6	Одноосный случай	11
7	Заключение	14
	Список литературы	15

1. Введение

Переход от атомистической модели магнетика к моделям сплошной среды представляет большой интерес как с фундаментальной, так и с практической точки зрения. В настоящий момент общепринятой моделью сплошной среды является уравнение Ландау–Лифшица–Блоха (УЛЛБ) [1, 2], построенное на основе приближения среднего поля. При этом не учитываются корреляции между ближайшими соседями, обусловленные сильным локальным обменным взаимодействием, что приводит к неверным значениям обменной энергии и заниженным временам релаксации. Эти проблемы могут быть решены за счет новой аппроксимации двухчастичной функции распределения, учитывающей корреляции между ближайшими соседями, что приводит к системе уравнений корреляционной магнетодинамики (СМД) [3, 4].

СМД является полностью самосогласованной теорией, не имеющей подгоночных параметров. СМД состоит из уравнения типа УЛЛБ, дополненного уравнением на уровень парных корреляций. По сравнению с УЛЛБ, СМД обеспечивает гораздо лучшее согласие с результатами моделирования «атом-в-атом» во всем диапазоне температур, кроме области фазового перехода. Это расхождение может быть обусловлено различными факторами, так как при выводе СМД делается множество предположений о виде многочастичных функций распределения. Однако на результаты влияет так же предположение о линеаризованном виде одночастичной функции распределения, применяющееся в том числе и в УЛЛБ. Результаты моделирования «атом-в-атом» показывают, что такое предположение является слишком грубым. Целью данной работы является построение варианта СМД с учетом квадратичной поправки в аппроксимации одночастичной функции распределения.

2. Уравнение Ландау–Лифшица–Блоха

В качестве исходной модели магнетика мы будем рассматривать атомистическую модель — систему стохастических уравнений Ландау–Лифшица, описывающую эволюцию N магнитных моментов $\mathbf{m}_i(t)$, $|\mathbf{m}_i(t)| = 1$, располо-

женных в неподвижных узлах кристаллической решетки с координатами \mathbf{r}_i :

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

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

Система (1) решается численно методом Рунге–Кутты четвертого порядка для образца размерами 64^3 периода кристаллической решетки. Межатомные связи могут отвечать различным кристаллическим решеткам, связи на границах обеспечивают периодические граничные условия. Вклад температурных флуктуаций учитывается за счет случайного источника специального вида [5]. Результаты такого моделирования рассматриваются как первопринципные и применяются для проверки построенных приближений сплошной среды.

Введем обозначение

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

где

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

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) [6]

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

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

После ряда преобразований [3, 4, 7] можно перейти к системе из N одночастичных УФП с интегральными коэффициентами

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

$$\mathbf{H}_i^{\text{exch}} = \sum_j J_{ij} \int_{S_2} \mathbf{m}_j f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j, \quad (3)$$

$$\mathbf{H}_i^{\text{dip}} = \sum_j \int_{S_2} \frac{3(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{m}_j r_{ij}^2}{r_{ij}^5} f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j, \quad (4)$$

где f_i и $f^{(2)}$ одно- и двухчастичная функции распределения. Такая система является первым звеном цепочки Боголюбова.

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

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

Такое замыкание приводит в итоге к УЛЛБ

$$\begin{aligned} \langle \dot{\mathbf{m}} \rangle = & -\gamma \left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\text{L}} \right] - 2\gamma K \left(\Phi + \alpha \Theta \right) - \\ & - \alpha \gamma \hat{\Xi} \cdot \left(\mathbf{H}^{\text{L}} + n_b \varepsilon_G J \langle \mathbf{m} \rangle \right) - 2\alpha \gamma T \langle \mathbf{m} \rangle, \quad (5) \end{aligned}$$

$$\mathbf{H}^{\text{L}} = \mathbf{H}^{\text{ext}} + a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \mathbf{H}^{\text{dip}}, \quad \hat{\Xi} = \langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \hat{I} \rangle,$$

$$\Phi = \langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_K (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle, \quad \Theta = \langle \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{n}_K] (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle,$$

где \hat{I} — единичная матрица 3×3 , \otimes — символ тензорного произведения, \mathbf{H}^{L} — вклад в обменное поле на масштабах больше физически бесконечно малого объема, n_b — число ближайших соседей атома, $\varepsilon_G < 1$ — множитель, введенный Гараниным для учета флуктуаций среднего поля и обеспечивающий получение правильной критической температуры [8].

3. Уравнения корреляционной магнитодинамики

Для учета корреляций между ближайшими соседями аппроксимируем двухчастичную функцию распределения как

$$f_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, t) \approx \frac{1}{Z_{ij}^{(2)}} \left[f_i(\mathbf{m}_i, t) f_j(\mathbf{m}_j, t) \right]^\rho e^{\lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}, \quad (6)$$

$$Z_{ij}^{(2)} = \iint_{S_2} \left[f_i(\mathbf{m}_i, t) f_j(\mathbf{m}_j, t) \right]^\rho e^{\lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j,$$

где $\lambda \geq 0$ — параметр, описывающий корреляции (включая косвенные) между ближайшими магнитными моментами \mathbf{m}_i и \mathbf{m}_j , $\frac{1}{2} \leq \rho \leq 1$ — степень, необходимая для выполнения условия $f_i \approx \int_{S_2} f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j$. Такая аппроксимация применима

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

При $\lambda \ll 1$ аппроксимация (6) переходит в приближение среднего поля и $\rho \rightarrow 1$. При $\lambda \gg 1$ экспонента в аппроксимации (6) фактически переходит в δ -функцию $\delta(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)$ и $\rho \rightarrow \frac{1}{2}$. Несмотря на степень ρ , за счет $Z^{(2)}$ размерность аппроксимации (6) отвечает правильной размерности двухчастичной функции распределения.

Замыкание цепочки Боголюбова (2) при помощи (6) приводит к УФП

$$\frac{\partial f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[\mathbf{H}^L + \mathbf{H}^{\text{anis}}, T - n_b J \Upsilon \right] f, \quad \Upsilon = \frac{1 - \rho}{\lambda}, \quad (7)$$

коэффициент Υ удобно рассматривать как функцию модуля средней намагниченности $\langle m \rangle = |\langle \mathbf{m} \rangle|$ и уровня парных корреляций $\langle \eta \rangle = \iint_{S_2} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j$. В этом случае обменное поле внутри физически бесконечно малого объема проявляет себя как антидиффузия в пространстве направлений магнитных моментов.

Умножение (7) на \mathbf{m} и интегрирование по сфере дает УЛЛБ вида

$$\langle \dot{\mathbf{m}} \rangle = -\gamma \left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^L \right] - 2\gamma K \left(\Phi + \alpha \Theta \right) - \alpha \gamma \hat{\Xi} \cdot \mathbf{H}^L - 2\alpha \gamma (T - n_b J \Upsilon) \langle \mathbf{m} \rangle. \quad (8)$$

Для определения уровня парных корреляций $\langle \eta \rangle$ выпишем второе звено цепочки Боголюбова

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

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

$$\begin{aligned} \frac{\langle \dot{\eta} \rangle}{4\alpha\gamma} &= \mathbf{H}^L \cdot \langle \mathbf{m} \rangle \Upsilon - K\Psi - \frac{J}{2} \left[\langle \eta^2 \rangle - 1 + \sum_k Q_k \right] - T\langle \eta \rangle, \\ \Psi &= \left\langle \mathbf{m}_i \cdot \left[\mathbf{m}_j \times \left[\mathbf{m}_j \times \mathbf{n}_K \right] \right] \left(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{n}_K \right) \right\rangle, \quad Q_k = \left\langle \mathbf{m}_i \cdot \left[\mathbf{m}_j \times \left[\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k \right] \right] \right\rangle, \end{aligned} \quad (9)$$

суммирование ведется по всем соседям атома j , кроме атома i . Уравнения (8) и (9) образуют систему уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD).

4. Аппроксимация одночастичной функции распределения

Для вычисления интегральных коэффициентов УЛЛБ Φ , Θ , $\hat{\Xi}$, зависящих от старших моментов одночастичной функции распределения, необходимо аппроксимировать ее как

$$f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t) \approx \frac{e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}}}{\mathcal{Z}(p)}, \quad \mathcal{Z}(p) = \int_{S_2} e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}} d\mathbf{m} = 4\pi \frac{\text{sh } p}{p}, \quad (10)$$

где $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$ — параметр аппроксимации, $\langle \mathbf{m} \rangle = \mathbf{n}_p(\text{cth } p - 1/p) \equiv \mathbf{n}_p \mathcal{L}(p)$, $\mathbf{n}_p = \mathbf{p}/p$, \mathcal{L} — функция Ланжевена. При этом коэффициенты Φ , Θ , $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \rangle$ могут быть посчитаны численно и аппроксимированы аналитически [9]. Аппроксимация (6) двухчастичной функции распределения $f^{(2)}$ в CMD также требует аналогичной аппроксимации одночастичной функции распределения f . Аналогично гидродинамике, задание аппроксимации некоторой одночастичной функции распределения означает задание уравнения состояния для магнетика.

Анализ результатов моделирования «атом-в-атом» показывает, что аппроксимация (10) работает далеко не всегда. Введем в (10) квадратичную поправку как

$$f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t) \sim e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m} + \hat{q} \cdot (\mathbf{m} \otimes \mathbf{m})},$$

где $\hat{q} = \hat{q}(\mathbf{r}, t)$ — симметричный тензор. Для определения компонент \hat{q} необходимо умножить (7) на $\mathbf{m} \otimes \mathbf{m}$ и проинтегрировать по сфере, что даст еще шесть уравнений на эволюцию компонент тензора $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \rangle$. В общем виде получаемое тензорное уравнение оказывается чересчур громоздким, поэтому рассмотрим дополнительно одноосный случай.

Полагая, что $f(\mathbf{m})$ имеет осевую симметрию вдоль \mathbf{p} и $|q| \ll 1$, можно записать

$$f(\mathbf{m}) \sim e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m} + q(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_p)^2} \approx [1 + q(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_p)^2] e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}}. \quad (11)$$

Введем обозначение

$$E_n = \int_{S_2} m_z^n e^{pm_z} d\mathbf{m} = 2\pi \int_0^\pi \cos^n \theta e^{p \cos \theta} \sin \theta d\theta = 2\pi \int_{-1}^1 x^n e^{px} dx = \frac{dE_{n+1}}{dp},$$

или

$$\begin{aligned}
 E_0 &= 4\pi \frac{\text{sh } p}{p} = \mathcal{Z}(p), \\
 E_1 &= 4\pi \frac{p \text{ ch } p - \text{sh } p}{p^2} = \mathcal{L}(p) \mathcal{Z}(p), \\
 E_2 &= 4\pi \frac{(p^2 + 2) \text{ sh } p - 2p \text{ ch } p}{p^3}, \\
 E_3 &= 4\pi \frac{p(p^2 + 6) \text{ ch } p - 3(p^2 + 2) \text{ sh } p}{p^4}, \\
 E_4 &= 4\pi \frac{(p^4 + 12p^2 + 24) \text{ sh } p - 4p(p^2 + 6) \text{ ch } p}{p^5}.
 \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{cases} \langle m \rangle \approx \frac{E_1 + qE_3}{E_0 + qE_2} \approx \frac{E_1}{E_0} + q \frac{E_0 E_3 - E_1 E_2}{E_0^2}, \\ \langle m_z^2 \rangle \approx \frac{E_2 + qE_4}{E_0 + qE_2} \approx \frac{E_2}{E_0} + q \frac{E_0 E_4 - E_2^2}{E_0^2}, \end{cases} \quad (12)$$

в случае известных значений $\langle m \rangle$, $\langle m_z^2 \rangle$ эти два уравнения можно трактовать как систему нелинейных уравнений на p и q .

При моделировании «атом-в-атом» [4] рассматривались примитивная (sc), объемноцентрированная (bcc) и гранецентрированная (fcc) кристаллические решетки при различных значения внешнего поля H^{ext} и анизотропии K , рис. 1–3. Из сравнения зависимостей $\langle m \rangle(T)$ в рамках моделирования «атом-в-атом» (LL), CMD и УЛЛБ (MFA) видно, что результаты CMD отличаются от результатов «атом-в-атом» в окрестностях фазового перехода. Это различие умеренно при $H^{\text{ext}} = 0$, $K = 0$, (рис. 1); усиливается при $H^{\text{ext}} = 0$, $K = J/2$ (рис. 2); становится исчезающе малым при $H^{\text{ext}} = J$, $K = 0$ (рис. 3).

Приведенные на тех же рисунках зависимости q/p , полученные из результатов моделирования «атом-в-атом» на основе $\langle m_z \rangle$, $\langle m_z^2 \rangle$ и решения (12), объясняют эти закономерности. При $H^{\text{ext}} = 0$, $K = 0$ для решеток bcc и fcc квадратичная поправка q на порядок меньше p , что еще можно считать удовлетворительным — расхождения присутствуют, но незначительные. Для примитивной решетки sc отношение q/p увеличивается в полтора раза, что приводит к увеличению расхождения CMD с результатами моделирования «атом-в-атом». При ненулевой анизотропии $K = J/2$ отношение q/p ожидаемо возрастает в разы по сравнению со случаем $K = 0$, особенно при приближении к точке фазового перехода, что, в свою очередь, усиливает расхождение CMD с результатами моделирования «атом-в-атом». При сильном внешнем поле $H^{\text{ext}} = J$ отношение q/p ожидаемо уменьшается в разы, а в области фазового перехода становится

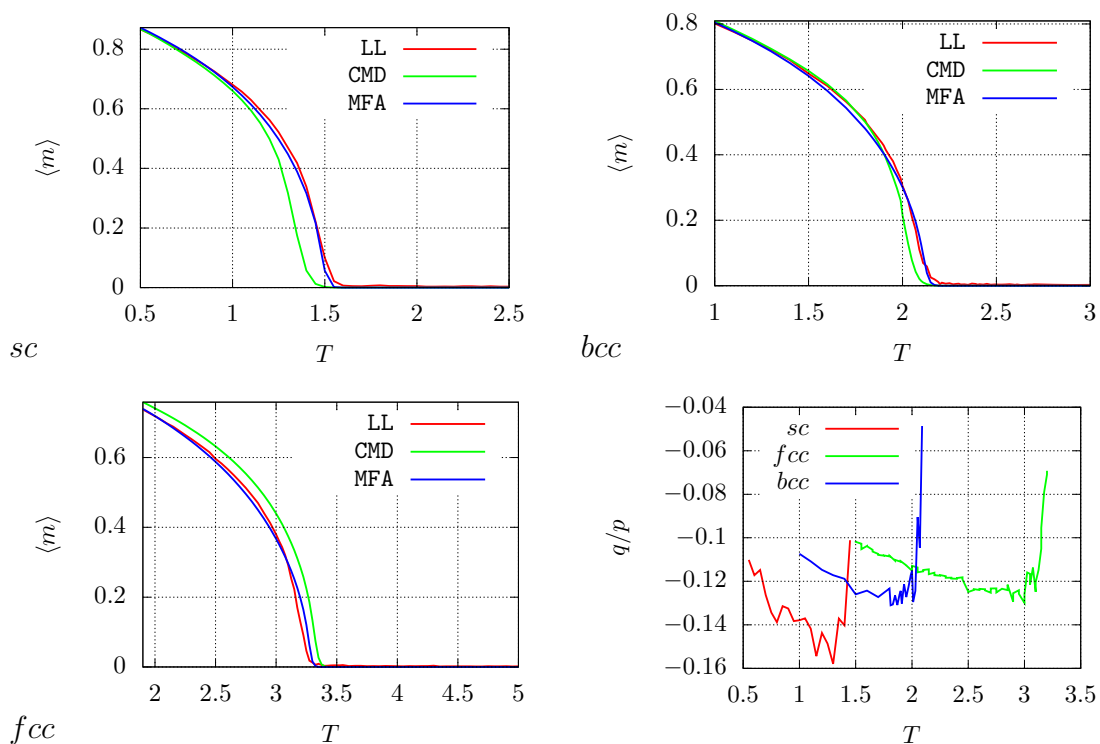


Рис. 1. Зависимости $\langle m \rangle$ и q/p (при моделировании «атом-в-атом») от температуры T для различных кристаллических решеток при $H^{\text{ext}} = 0$, $K = 0$

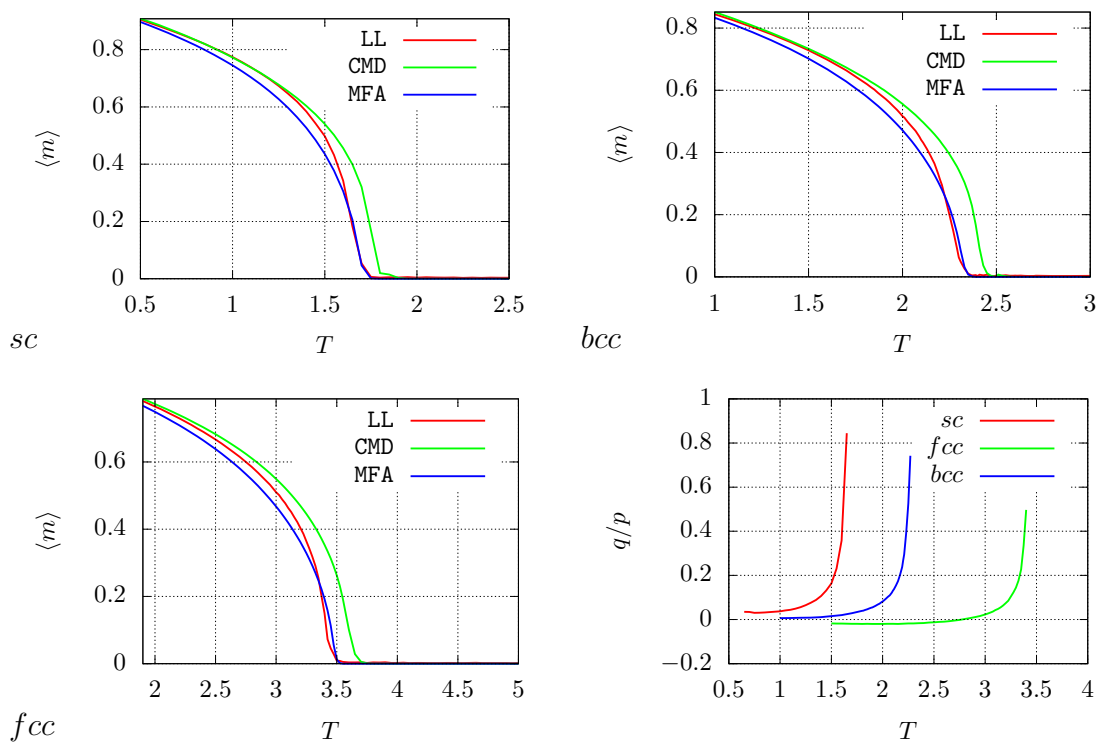


Рис. 2. Зависимости $\langle m \rangle$ и q/p (при моделировании «атом-в-атом») от температуры T для различных кристаллических решеток при $H^{\text{ext}} = 0$, $K = J/2$

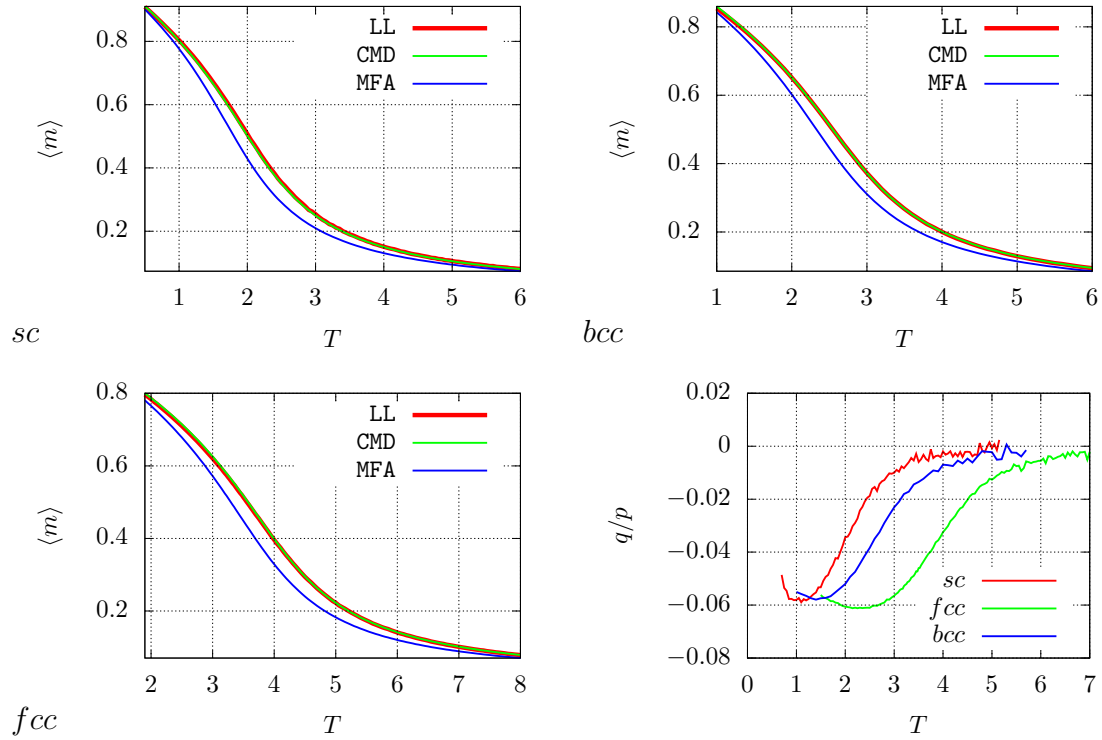


Рис. 3. Зависимости $\langle m \rangle$ и q/p (при моделировании «атом-в-атом») от температуры T для различных кристаллических решеток при $H^{\text{ext}} = J, K = 0$

порядка 10^{-2} , что обеспечивает почти идеальное согласие CMD с результатами моделирования «атом-в-атом» во всем диапазоне температур.

5. Учет квадратичной поправки в уравнениях CMD

При введении квадратичной поправки уравнения CMD (8) и (9) остаются неизменными, но все интегральные коэффициенты начинают дополнительно зависеть в общем случае от значения \hat{q} , что требует введения дополнительных уравнений на компоненты тензора $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \rangle$.

Согласно теореме Гаусса

$$\int_{S_2} m_z^2 \nabla_{\circ} [\mathbf{m} \times \mathbf{H} f] d\mathbf{m} = -2 \langle m_z (m_y H_x - m_x H_y) \rangle,$$

$$\int_{S_2} m_z^2 \nabla_{\circ} [\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{H}] f] d\mathbf{m} = -2 \langle m_z^2 (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}) - m_z H_z \rangle,$$

$$\int_{S_2} m_z^2 \nabla_{\circ} [\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \nabla_{\circ} f]] d\mathbf{m} = 2 \langle 3m_z^2 - 1 \rangle.$$

Умножая (7) на m_z^2 и интегрируя по сфере, получаем

$$\begin{aligned}
 -\frac{\langle \dot{m}_z^2 \rangle}{2\gamma} &= \langle m_z(m_y H_x^L - m_x H_y^L) \rangle + \alpha \langle m_z^2(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}^L) - m_z H_z^L \rangle + \\
 + 2K &\left[\langle m_z(\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{m})(m_y n_{Kx} - m_x n_{Ky}) \rangle + \alpha \langle m_z^2(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K)^2 - m_z(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K)n_{Kz} \rangle \right] + \\
 &+ \alpha(T - n_b J \Upsilon) \langle 3m_z^2 - 1 \rangle. \quad (13)
 \end{aligned}$$

Аналогично

$$\begin{aligned}
 \int_{S_2} m_x m_y \nabla_{\circ}[\mathbf{m} \times \mathbf{H}f] d\mathbf{m} &= -\langle m_z(m_y H_y - m_x H_x) + (m_x^2 - m_y^2)H_z \rangle, \\
 \int_{S_2} m_x m_y \nabla_{\circ}[\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{H}]f] d\mathbf{m} &= -\langle 2m_y m_x(\mathbf{m}\mathbf{H}) - (m_y H_x + m_x H_y) \rangle, \\
 \int_{S_2} m_x m_y \nabla_{\circ}[\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \nabla_{\circ}f]] d\mathbf{m} &= \langle 6m_x m_y \rangle,
 \end{aligned}$$

откуда

$$\begin{aligned}
 -\frac{\langle \dot{m}_x \dot{m}_y \rangle}{\gamma} &= \langle m_z(m_y H_y^L - m_x H_x^L) + (m_x^2 - m_y^2)H_z^L \rangle + \\
 &+ \alpha \langle 2m_y m_x(\mathbf{m}\mathbf{H}^L) - (m_y H_x^L + m_x H_y^L) \rangle + \\
 + 2K &\langle [m_z(m_y n_{Ky} - m_x n_{Kx}) + (m_x^2 - m_y^2)n_{Kz}](\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle + \\
 + 2\alpha K &\langle [2m_y m_x(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) - (m_y n_{Kx} + m_x n_{Ky})](\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K) \rangle + \\
 &+ 6\alpha(T - n_b J \Upsilon) \langle m_x m_y \rangle. \quad (14)
 \end{aligned}$$

Остальные четыре уравнения на компоненты $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \rangle$ могут быть получены на основе (13) и (14) при помощи циклической перестановки индексов. В совокупности с (8) и (9) это образует систему уравнений CMD с квадратичной поправкой.

6. Одноосный случай

В общем виде уравнения для компонент $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \rangle$ оказываются слишком громоздкими. Рассмотрим более подробно пространственно-однородный одноосный случай. Пусть $\mathbf{n}_K = (0,0,1)$, $\mathbf{H}^{\text{ext}} = (0,0,H^{\text{ext}})$ и $\mathbf{p} = (0,0,p)$, тогда достаточно одного уравнения типа (13), которое принимает вид

$$-\frac{\langle \dot{m}_z^2 \rangle}{2\alpha\gamma} = \langle m_z^3 - m_z \rangle H^{\text{ext}} + 2K \langle m_z^4 - m_z^2 \rangle + (T - n_b J \Upsilon) \langle 3m_z^2 - 1 \rangle. \quad (15)$$

Коэффициенты в (8) принимают вид $\Phi = 0$, $\Theta = (0, 0, -\langle m_z \rangle)$, $\Xi_{zz} = \langle m_z^2 \rangle - 1$, что дает

$$\frac{\dot{\langle m_z \rangle}}{2\gamma\alpha} = K\langle m_z \rangle - \frac{\langle m_z^2 \rangle - 1}{2} H^{\text{ext}} - (T - n_b J\Upsilon)\langle m_z \rangle. \quad (16)$$

Все рассуждения о расчете интегральных коэффициентов из [4] остаются в силе, но при этом интегральные коэффициенты и старшие моменты функции распределения дополнительно начинают неявно зависеть от $\langle m_z^2 \rangle$. Такая зависимость оказывается крайне неудобной с вычислительной точки зрения, поскольку область $|q| \ll 1$ на фазовой плоскости $\langle m_z \rangle$, $\langle m_z^2 \rangle$ имеет вид узкой изогнутой полосы, рис. 4. Желательно явно выписать уравнение на эволюцию q вместо (15). При этом от (8) желательно перейти к уравнению на эволюцию p .

Согласно (11) любой момент $\langle m_z^n \rangle$ можно представить как

$$\langle m_z^n \rangle \approx \frac{E_n}{E_0} + q \frac{E_0 E_{n+2} - E_n E_2}{E_0^2} \equiv \langle \tilde{m}_z^n \rangle + q B_n, \quad (17)$$

где $\langle \tilde{m}_z^n \rangle$ — значение $\langle m_z^n \rangle$ при $q = 0$. Величины $\langle \tilde{m}_z^n \rangle$ и B_n и

$$B'_n = \frac{dB_n}{dp} = \langle \tilde{m}_z \rangle \langle \tilde{m}_z^{n+2} \rangle - \langle \tilde{m}_z^3 \rangle \langle \tilde{m}_z^n \rangle + B_{n+1} - 2\langle \tilde{m}_z \rangle B_n,$$

можно рассматривать как функции параметра p , рис. 5. Тогда согласно (17)

$$\langle \dot{m}_z^n \rangle \approx \langle \dot{\tilde{m}}_z^n \rangle + \dot{q} B_n + q B'_n \dot{p} = [\langle \tilde{m}_z^n \rangle' + q B'_n] \dot{p} + \dot{q} B_n.$$

Перепишем (8) и (15) как

$$\langle \dot{m}_z \rangle = R_1(p, q), \quad \langle \dot{m}_z^2 \rangle = R_2(p, q),$$

где $R_{1,2}$ — соответствующие правые части. Тогда согласно (17)

$$\begin{aligned} [\langle \tilde{m}_z \rangle' + q B'_1] \dot{p} + \dot{q} B_1 &= R_1, \\ [\langle \tilde{m}_z^2 \rangle' + q B'_2] \dot{p} + \dot{q} B_2 &= R_2, \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \dot{p} &= \frac{R_1 B_2 - R_2 B_1}{\phi + q\psi}, \\ \dot{q} &= \frac{R_1 [\langle \tilde{m}_z^2 \rangle' + q B'_2] - R_2 [\langle \tilde{m}_z \rangle' + q B'_1]}{-\phi + q\psi}, \\ \phi &= \langle \tilde{m}_z \rangle' B_2 - \langle \tilde{m}_z^2 \rangle' B_1, \quad \psi = B'_1 B_2 - B'_2 B_1, \end{aligned}$$

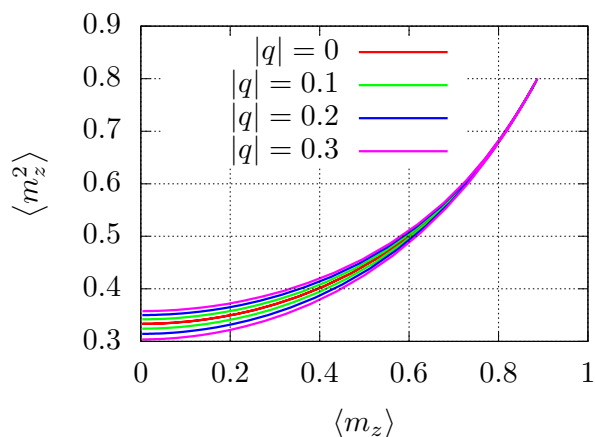


Рис. 4. Зависимости $\langle m_z^2 \rangle$ ($\langle m_z \rangle$) при различных $|q|$, нижние кривые отвечают значениям $q < 0$

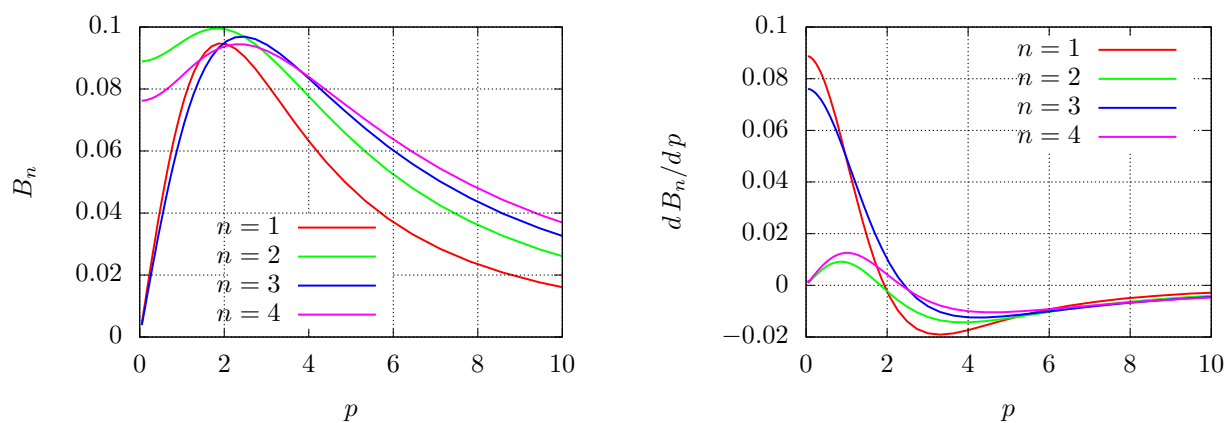


Рис. 5. Зависимости $B_n(p)$ и их производные dB_n/dp

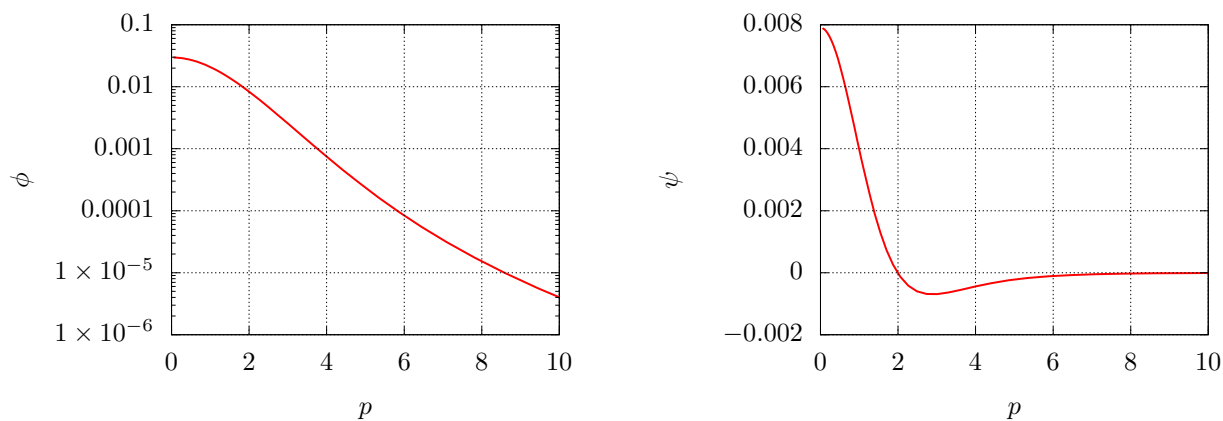


Рис. 6. Зависимости $\phi(p)$ и $\psi(p)$

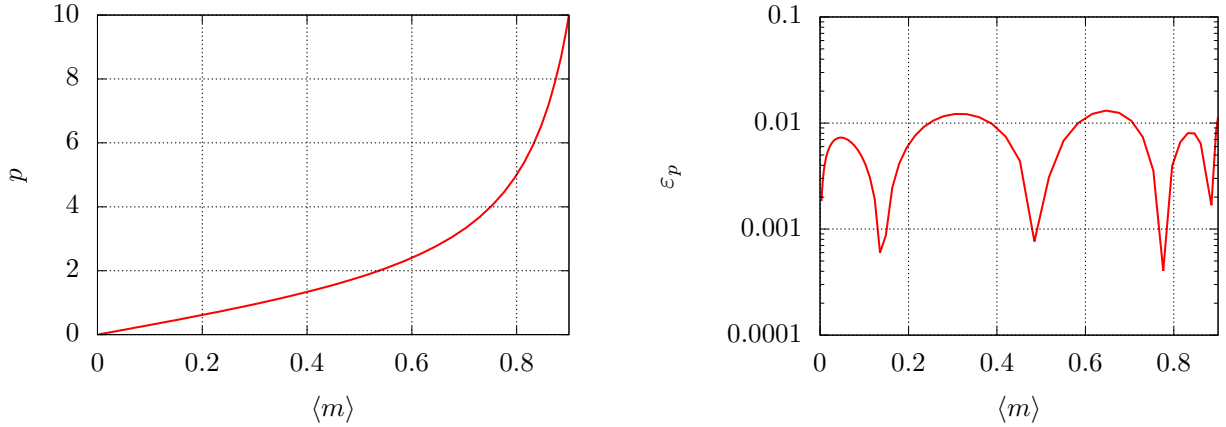


Рис. 7. Обратная функция Ланжевена $p = \mathcal{L}^{-1}(\langle m \rangle)$ и абсолютная ошибка ε_p ее аппроксимации

зависимости $\phi(p)$ и $\psi(p)$ приведены на рис. 6.

Уравнение (9) остается без изменений.

При задании начальных условий на основе $\langle m \rangle$, $\langle m_z^2 \rangle$, в качестве нулевого приближения можно принять что $q = 0$. Для обратной функции Ланжевена \mathcal{L}^{-1} можно построить простую аппроксимацию в актуальном диапазоне $0 \leq \langle \tilde{m}_z \rangle \leq 0.9$ с абсолютной ошибкой $\varepsilon_p \leq 10^{-2}$ (рис. 7):

$$\langle \tilde{m}_z \rangle = \mathcal{L}(p), \quad p(\langle \tilde{m}_z \rangle) = \mathcal{L}^{-1}(\langle \tilde{m}_z \rangle) \approx \frac{3.39078 \cdot \langle \tilde{m}_z \rangle^{1.05695}}{1 - \langle \tilde{m}_z \rangle^{3.43563}}.$$

Далее для уточнения параметров p и q можно использовать метод последовательных итераций или метод Ньютона.

Выражение интегральных коэффициентов через q требует только расчета дополнительных старших моментов от построенных ранее многочастичных функций распределения.

В равновесном случае, при $H^{\text{ext}} = 0$, $K = 0$ и $\langle m \rangle > 0$, уравнения (8) и (15) принимают одинаковый вид

$$T = n_b J \Upsilon,$$

что делает систему недоопределенной. Эту проблему можно решить, включив малое внешнее поле или анизотропию.

7. Заключение

Построенная система уравнений CMD с квадратичной поправкой в аппроксимации одночастичной функции распределения даже в одноосном случае оказывается значительно более сложной, чем исходная система CMD.

Пока что остается открытым вопрос о том, насколько введение квадратичной поправки способно устранить расхождения СМД с результатами моделирования «атом-в-атом». В окрестности фазового перехода при нулевом внешнем поле спонтанная намагниченность невелика, и влияние квадратичной поправки усиливается, особенно при ненулевой анизотропии. Таким образом, квадратичная поправка должна повысить адекватность моделирования устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники в некоторых случаях. Но для решения инженерных задач требуются существенная доработка и упрощение полученной системы уравнений.

Список литературы

- [1] 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>.
- [2] 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>.
- [3] 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>.
- [4] 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>.
- [5] Иванов А.В. Кинетическое моделирование динамики магнетиков // *Математическое моделирование.* — 2007. — Т. 19, № 10. — С. 89–104. — <http://www.mathnet.ru/links/82020fa1add2512759e063c1cb0a7ebf/mm1204.pdf>.
- [6] 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>.
- [7] 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.

- [8] 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>.
- [9] 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>.