

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 11 за 2021 г.</u>

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

А.В. Иванов

Аппроксимация многочастичных функций распределения для ферромагнетиков с различными кристаллическими решетками

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Иванов А.В. Аппроксимация многочастичных функций распределения для ферромагнетиков с различными кристаллическими решетками || Препринты ИПМ ИМ. М.В.Келдыша. N⁰ 11. 22 2021. C. https://doi.org/10.20948/prepr-2021-11 https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-11

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

А.В. Иванов

Аппроксимация многочастичных функций распределения для ферромагнетиков с различными кристаллическими решетками

Иванов А.В.

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Аппроксимация многочастичных функций распределения для ферромагнетиков с различными кристаллическими решетками

На основе цепочки Боголюбова получена новая система уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD), состоящая из уравнения типа Ландау– Лифшица–Блоха и уравнения на парные корреляции. При этом ключевым вопросом является аппроксимация многочастичных функций распределения, учитывающая корреляции между ближайшими соседями для различных (примитивной, объемоцентрированной и гранецентрированной) кристаллических решеток. Результаты расчетов в рамках CMD гораздо лучше согласуются с результатами атомистического моделирования, чем результаты традиционного уравнения Ландау–Лифшица–Блоха.

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

Anton Valeryevich Ivanov

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Approximation of many-particle distribution functions for ferromagnetics with different crystal lattices

We propose the new system of equations for magnetodynamics. Thus we call the new system of equations correlational magnetodynamics system (CMD). It consists of well known Landau–Lifshitz–Bloch(LLB) equation complemented with an equation for two-particles correlations. It is based on BBGKY hierarchy, the key issue is the approximation of the many-particle distribution functions taking into account the correlations between the nearest neighbors for different (primitive, body-centered and face-centered) crystal lattices. Compared to traditional LLB equation, numerical simulations with CMD produces results that are closer to atomistic simulations.

Keywords: The Landau–Lifshitz–Bloch equation, the BBGKY hierarhy, twoparticle correlations

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

Содержание

1	Введение	3
2	Уравнение Ландау–Лифшица–Блоха	4
3	Система уравнений корреляционной магнитодинамики	6
4	Аппроксимация многочастичных функций распределения	9
5	Результаты моделирования	14
6	Заключение	20
Спи	сок литературы	21

1. Введение

При создании устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники большую роль играет численное моделирование [1–3]. Поскольку решение инженерных задач требует проведения большого числа расчетов для полноразмерных систем, большую роль играет выбор физико–математичекой модели, обеспечивающей адекватные результаты при минимальной вычислительной сложности. С этой точки зрения практически безальтернативным является микромагнитный подход [4], описывающий эволюцию распределения намагниченности в образце в приближении сплошной среды. Необходимость учета температурных флуктуаций требует некоторого усложнения модели до уравнения Ландау–Лифшица– Блоха (УЛЛБ, [5, 6]).

УЛЛБ было получено Гараниным в 1997 году в приближении среднего поля, при котором для замыкания цепочки Боголюбова двухчастичная функция распределения $f_{ij}^{(2)}$ соседних магнитных моментов \mathbf{m}_i , \mathbf{m}_j аппроксимируется как

$$f_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j) \approx f_i(\mathbf{m}_i) f_j(\mathbf{m}_j), \qquad (1)$$

где f_i , f_j — одночастичные функции распределения. При такой аппроксимации не учитываются корреляции между намагниченностями ближайших соседей. Такая аппроксимация является в настоящий момент общепринятой (в равновесном случае для магнетиков приближение среднего поля дает теорию Кюри–Вейсса) и хорошо работает для разреженных газов и плазмы, но для жидкостей и магнетиков такая аппроксимация мало применима — атомистическое моделирование показывает [7], что за счет сильного обменного взаимодействия даже в парамагнитной фазе намагниченности ближайших атомов оказываются скоррелированы, следствием чего является ненулевая обменная энергия.

В итоге, приближение среднего поля приводит к ряду артефактов, присущих в том числе и решениям УЛЛБ, — сдвигу температуры Кюри в сторону больших значений, нулевой энергии системы в парамагнитной фазе и заниженным по сравнению с атомистическим моделированием временам релаксации. Сдвиг температуры Кюри может быть скомпенсирован за счет введения поправки, учитывающей флуктуации среднего поля [8], неверные значения энергии, как правило, не являются критичными, но заниженные времена релаксации могут приводить к качественно неверным результатам при моделировании устройств, работающих в импульсном режиме.

Для решения этих проблем была выведена система уравнений корреляционной магнитодинамики [9,10], состоящая из уравнения типа УЛЛБ на распределение средней намагниченности по образцу и уравнения на парные корреляции, аналогично системе уравнений гидродинамики. При этом оказывается возможным явно учитывать структуру кристаллической решетки ферромагнетика исходно, в УЛЛБ, кристаллическая решетка учитывается только через число ближайших соседей.

Данная работа посвящена аппроксимации многочастичных функций распределения и соответствующих расчетов коэффициентов уравнений СМD для ферромагнетиков с примитивной, объемоцентрированной (ОЦК) и гранецентрированной (ГЦК) кубическими кристаллическими решетками.

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

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

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

$$\mathbf{H}_{i}^{\text{exch}} = \sum_{j} J_{ij}\mathbf{m}_{j}, \qquad \mathbf{H}_{i}^{\text{anis}} = 2K\mathbf{n}_{K}(\mathbf{n}_{K} \cdot \mathbf{m}_{i}),$$

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

где γ — гиромагнитное соотношение, α — параметр затухания, \mathbf{H}^{eff} — эффективное магнитное поле, W — полная энергия системы, T — температура системы в единицах энергии, $\boldsymbol{\xi}_i(t)$ — 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 — 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.

Система (2) решается численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка

для образца размерами 64³ 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 [11]. Результаты такого атомистического моделирования рассматриваются как первопринципные и применяются для проверки построенных приближений сплошной среды.

От системы (2) можно достаточно строго перейти к уравнению Фоккера– Планка на N-частичную функцию распределения. Затем при помощи цепочки Боголюбова и ряда преобразований можно перейти к уравнению на эволюцию непрерывной по конфигурационному пространству функции распределения намагниченности $f(\mathbf{m}, \mathbf{r})$. После умножения на \mathbf{m} и интегрирования по $d\mathbf{m}$ (единичной сфере направлений магнитных моментов) можно перейти к УЛЛБ, описывающему эволюцию распределения средней намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle (t)$.

При этом возможны различные варианты замыкания цепочки Боголюбова. Приближение среднего поля (1) дает УЛЛБ вида

$$\begin{split} \dot{\langle \mathbf{m} \rangle} &= -\gamma \Big[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\mathrm{L}} \Big] - 2\gamma K \Big(\mathbf{\Phi} + \alpha \mathbf{\Theta} \Big) - \\ &- \alpha \gamma \Big\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \widehat{I} \Big\rangle \cdot \Big(\mathbf{H}^{\mathrm{L}} + n_b \varepsilon_G J \langle \mathbf{m} \rangle \Big) - 2\alpha \gamma T \langle \mathbf{m} \rangle, \end{split}$$
(3)
$$\begin{aligned} &\mathbf{H}^{\mathrm{L}} = \mathbf{H}^{\mathrm{ext}} + a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \mathbf{H}^{\mathrm{dip}}, \\ &\mathbf{\Phi} = -\mathbf{m} \times \mathbf{n}_K \big(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K \big) \Big\rangle, \qquad \mathbf{\Theta} = -\mathbf{m} \times \big[\mathbf{m} \times \mathbf{n}_K \big] \big(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K \big) \Big\rangle, \end{split}$$

где \hat{I} — единичная матрица 3×3 , \otimes — символ тензорного произведения, \mathbf{H}^{L} — поля не зависящие и линейно зависящие от $\langle \mathbf{m} \rangle$, $\varepsilon_G < 1$ — множитель, введенный Гараниным для учета флуктуаций среднего поля и обеспечивающий получение правильной критической температуры [8]. Для вычисления интегральных ко-эффициентов Φ , Θ , $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \rangle$, зависящих от старших моментов одночастичной функции распределения, необходимо аппроксимировать ее как

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

где $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$ — параметр аппроксимации, $\mathbf{p} \parallel \langle \mathbf{m} \rangle$, $|\langle \mathbf{m} \rangle| = \operatorname{cth} p - 1/p \equiv \mathcal{L}(p)$, \mathcal{L} — функция Ланжевена. Коэффииценты Φ , Θ , $\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \rangle$ могут быть посчитаны численно и аппроксимированы аналитически [12].

3. Система уравнений корреляционной магнитодинамики

Для учета корреляций между ближайшими соседями аппроксимируем двухчастичную функцию распределения как

$$f_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_{i},\mathbf{m}_{j},t) \approx \frac{1}{Z_{ij}^{(2)}} \Big[f_{i}(\mathbf{m}_{i},t) f_{j}(\mathbf{m}_{j},t) \Big]^{\rho} e^{\lambda \mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{m}_{j}},$$

$$Z_{ij}^{(2)} = \iint_{S_{2}} \Big[f_{i}(\mathbf{m}_{i},t) f_{j}(\mathbf{m}_{j},t) \Big]^{\rho} e^{\lambda \mathbf{m}_{i} \cdot \mathbf{m}_{j}} d\mathbf{m}_{i} d\mathbf{m}_{j},$$
(5)

где $\lambda \ge 0$ — параметр, описывающий корреляции (включая косвенные) между ближайшими магнитными моментами \mathbf{m}_i и \mathbf{m}_j , $\frac{1}{2} \le \rho \le 1$ — степень, необходимая для выполнения условия $f_i \approx \int_{S_2} f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j$, откуда следует, что

$$\frac{1}{Z^{(2)}} \int_{S_2} \left[f_j(\mathbf{m}_j, t) \right]^{\rho} e^{\lambda \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j} \, d\mathbf{m}_j \approx \left[f_i(\mathbf{m}_i, t) \right]^{1-\rho}.$$
(6)

Такая аппроксимация применима для любой двухчастичной функции распределения, но нас будут интересовать функции для ближайших соседей. При $\lambda \ll 1$ аппроксимация (5) переходит в приближение среднего поля и $\rho \to 1$. При $\lambda \gg 1$ экспонента в аппроксимации (5) фактически переходит в δ -функцию $\delta(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)$ и $\rho \to \frac{1}{2}$. Несмотря на степень ρ , за счет $Z^{(2)}$ размерность аппроксимации (5) отвечает правильной размерности двухчастичной функции распределения.

С учетом (5) и (6) обменное поле принимает вид

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{\mathrm{exch}(1)} &\approx a^{2} J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \frac{n_{b} J}{f(\mathbf{m}, t)} \int_{S_{2}} \mathbf{m}' f^{(2)}(\mathbf{m}, \mathbf{m}', t) \, d\mathbf{m}' \approx \\ &\approx a^{2} J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \frac{n_{b} J}{\lambda} f^{\rho - 1} \nabla_{\mathbf{m}} \int_{S_{2}} \left[f(\mathbf{m}', t) \right]^{\rho} e^{\lambda \mathbf{m} \cdot \mathbf{m}'} \, d\mathbf{m}' \approx \\ &\approx a^{2} J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \frac{n_{b} J}{\lambda} f^{\rho - 1} \nabla_{\mathbf{m}} f^{1 - \rho} = a^{2} J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + n_{b} J \Upsilon \frac{\nabla_{\mathbf{m}} f}{f}, \end{aligned}$$
(7)

где коэффициент $\Upsilon = (1 - \rho)/\lambda$, то есть обменное поле эффективно отвечает антидиффузии в пространстве магнитных моментов с коэффициентом $n_b J \Upsilon$. В итоге мы получаем УЛЛБ вида

$$\dot{\langle \mathbf{m} \rangle} = -\gamma \Big[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\mathrm{L}} \Big] - 2\gamma K \Big(\mathbf{\Phi} + \alpha \mathbf{\Theta} \Big) - \alpha \gamma \Big\langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} - \widehat{I} \Big\rangle \cdot \mathbf{H}^{\mathrm{L}} - 2\alpha \gamma \big(T - n_b J \Upsilon \big) \langle \mathbf{m} \rangle.$$
 (8)

Для определения коэффициента Υ необходимо ввести дополнительное уравнение на парные корреляции (с точностью до множителя $-n_b J/2$ обменную энергию) между ближайшими соседями $\langle \eta \rangle = \langle \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \rangle$, для этого второе звено цепочки Боголюбова (уравнение на двухчастичную функцию распределения) умножается на $\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j$ и интегрируется, что дает

$$-\frac{\langle \eta \rangle}{2\alpha\gamma} = -2\mathbf{H}^{\mathrm{L}} \cdot \langle \mathbf{m} \rangle \Upsilon + 2K\Psi + J\mathcal{Q} + 2T\langle \eta \rangle, \quad \mathcal{Q} = \eta^2 \rangle - 1 + \sum_{\substack{k \in \mathrm{nb.}\, j \\ k \neq i}} Q_k, \quad (9)$$

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

суммирование ведется по всем соседям атома j, кроме атома i.

Коэффициенты Υ , Ψ и Q_k можно рассматривать как функции переменных $|\langle \mathbf{m} \rangle|, \langle \eta \rangle$, что дает в итоге систему уравнений корреляционной магнитодинамики (СМD). Подробно вывод системы СМD изложен в [9].

Остановимся чуть подробнее на свойствах аппроксимации (5). Пусть известны два момента $\langle m \rangle$ и $\langle \eta \rangle$

$$\langle m \rangle = \left| \iint_{S_2} \mathbf{m}_i f_{ij}^{(2)} \, d\mathbf{m}_i \, d\mathbf{m}_j \right|, \qquad \langle \eta \rangle = \iint_{S_2} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) f_{ij}^{(2)} \, d\mathbf{m}_i \, d\mathbf{m}_j, \qquad (10)$$

нам необходимо вычислить на их основе параметры ρ и λ . В некоторых частных случаях для моментов $\langle m \rangle$ и $\langle \eta \rangle$ можно получить аналитические выражения

$$\begin{aligned} \langle m \rangle(\lambda)|_{\rho p=0} &= 0, \quad \langle m \rangle(\rho p)|_{\lambda=0} = \langle m \rangle(p)|_{\lambda=0} = \mathcal{L}(p), \\ \langle \eta \rangle(\lambda)|_{\rho p=0} &= \mathcal{L}(\lambda), \quad \langle \eta \rangle(\rho p)|_{\lambda=0} = \langle \eta \rangle(p)|_{\lambda=0} = \mathcal{L}^2(p), \end{aligned} \qquad \mathcal{L}(x) = \frac{1}{\operatorname{th} x} - \frac{1}{x}, \end{aligned}$$

где \mathcal{L} — функция Ланжевена, широко применяющаяся при описании магнетиков в приближении среднего поля. Выражение (10) расширяет на случай $\lambda \neq 0$ функции $\mathcal{L}(p)$ и $\mathcal{L}^2(p)$ как $\langle m \rangle (\rho p, \lambda)$ и $\langle \eta \rangle (\rho p, \lambda)$.

Получение аналитических выражений для функций $\langle m \rangle (\rho p, \lambda)$ и $\langle \eta \rangle (\rho p, \lambda)$ в общем случае достаточно трудоемко, а результаты будут иметь очень громоздкий вид и состоять из экспонент и интегралов ошибок. Гораздо проще рассчитать соответствующие интегралы численно в узлах сетки $(\rho p, \lambda)$ и далее получить зависимости интересующих величин (например Υ) от параметров $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$ как неявных функций, рис. 1. С физической точки зрения, при заданном модуле магнитного момента $\langle m \rangle$ для некоторого физически бесконечного малого объема возможны различные значения парных корреляций $\langle \eta \rangle$ отвечающие различному взаимному расположению магнитных моментов. При $\lambda \to \infty$ парные корреляции $\langle \eta \rangle \to 1$ (или принимают максимально возможное значение), рис. 2 (*a*). Другим предельным случаем является приближение среднего поля, при котором $\lambda = 0$ и парные корреляции принимают минимально возможные значения



Рис. 1. Зависимости моментов $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$ от параметров аппроксимации ρp , λ двух-частичной функции распределения $f^{(2)}$ и задаваемая ими криволинейная система координат $\langle m \rangle = \text{const}$, $\langle \eta \rangle = \text{const}$ для расчета интегральных коэффициентов



Рис. 2. Различные варианты взаимного расположения магнитных моментов при одинаковой средней намагниченности физически бесконечно малого объема

- 8 -

 $\langle \eta \rangle = \langle m \rangle^2$, рис. 2 (в). В реальности система находится где-то между этими двумя состояниями, рис. 2 (б). Гипотетически для ферромагнетика возможна ситуация, при которой $\lambda < 0$ и $\langle \eta \rangle < \langle m \rangle^2$, но такая конфигурация является сильно неравновесной и нефизичной — трудно представить способ создать такое расположение магнитных моментов даже в начальный момент времени.

Для замыкания системы CMD необходимо построить аппроксимации трехчастичных функций распределения $f_{ijk}^{(3)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, \mathbf{m}_k)$, необходимых для расчета коэффициентов Q_k , такая аппроксимация зависит от вида кристаллической решетки.

4. Аппроксимация многочастичных функций распределения

Существует множество ферромагнетиков с различными кристаллическими решетками. В данной работе мы ограничимся рассмотрением трех вариантов кубических кристаллических решеток — примитивной (атомы расположены в вершинах куба), объемоцентрированной (ОЦК, атомы расположены в вершинах куба и его центре) и гранецентрированной (ГЦК, атомы расположены в вершинах куба и центрах его граней), см. таблицу 1 и рисунок 3.

Из соображений симметрии трехчастичная функция распределения $f_{ijk}^{(3)}$ имееет вид

$$f_{ijk}^{(3)} \approx \frac{1}{Z^{(3)}} \exp\left[\sigma \mathbf{p} \cdot (\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_k) + \sigma' \mathbf{m}_j + \lambda^{\text{near}} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_k) + \lambda^{\text{far}} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_k\right], \qquad (11)$$
$$Z^{(3)} = \iiint_{S_2} \exp\left[\dots\right] d\mathbf{m}_i \, d\mathbf{m}_j \, d\mathbf{m}_k,$$

где $\sigma \ge 0, \sigma' \ge 0$ и $\lambda^{\text{near, far}} \ge 0$ — некоторые параметры, которые должны обеспечивать выполнение условий

$$\langle m_i \rangle = \langle m_j \rangle = \langle m_k \rangle = \langle m \rangle, \quad \langle \eta_{ij} \rangle = \langle \eta_{jk} \rangle = \langle \eta \rangle.$$

Функция $f_{ijk}^{(3)}$ зависит от четырех параметров σ , σ' и $\lambda_{n,f}$. Условия на среднюю намагниченность $\langle m \rangle$ дают два уравнения, на парные корреляции $\langle \eta \rangle$ — одно уравнение. Для определения всех параметров необходимо либо знание корреляции между магнитными моментами \mathbf{m}_i и \mathbf{m}_k

$$\langle \eta_k \rangle = \iiint_{S_2} \left(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_k \right) f_{ijk}^{(3)} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j d\mathbf{m}_k,$$

либо привлечечние дополнительных физических соображений, устанавливающих, например, связь между параметрами λ^{near} и λ^{far} . Далее мы будем парные

кристаллическая решетка		PCC		ОЦК (VCC)		ГЦК (FCC)				
число подрешеток		1		2		4				
число ближайших соседей		6		8			12			
число типов ф. р. $f_{ijk}^{(3)}$		2		3			4			
номера координационных сфер	2	3	2	3	4	1	2	3	4	
радиусы координационных сфер в пе- риолах решетки	$\sqrt{2}$	2	1	$\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	1	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\sqrt{2}$	
угол при втором атоме ф. р. $f_{ijk}^{(3)}$	$\frac{\pi}{2}$	π	$\frac{2\pi}{5}$	$\frac{\pi}{2}$	π	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	π	
количество ф. р. <i>J_{ijk}</i> у которых третии атом относится к соответствующей ко- ординационной сфере	4	1	3	3	1	4	2	4	1	

Таблица 1. Характеристики рассматриваемых кристаллических решеток



Рис. 3. Примитивная, ОЦК и ГЦК решетки и варианты трехчастичных функций $f_{ijk}^{(3)}$, индексами $k_{1...4}$ показана принадлежность третьего атома к различным координационным сферам

корреляции между магнитными моментами, не являющимися ближайшими соседями, обозначать через $\langle \eta_{2...4} \rangle$, где нижний индекс будет указывать на номер координационной сферы, в которой расположен атом k относительно атома i. Значения таких парных корреляций могут быть рассчитаны при прямом численном моделировании ферромагнетика «атом–в–атом».

При $\lambda^{\mathrm{far}} = 0$ функция $f^{(3)}_{ijk}$ принимает вид

$$f_{\angle}^{(3)} = \frac{f_{ij}^{(2)} f_{jk}^{(2)}}{f_j},$$

что отвечает обобщению приближения среднего поля на многочастичные функции распределения, в этом случае коэффициент Q может быть вычислен анали-



Puc. 4. Зависимости коэффициентов Q_{\angle} и Q_{\triangle} от параметров $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$

тически [9] как функция параметров $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$ и λ из $f^{(2)}$ (рис. 4 *a*):

$$Q_{\perp} = \frac{1-\rho}{\rho} \left[1 - \frac{2}{\lambda} \langle \eta \rangle - \eta^2 \rangle \right].$$

Этот вариант применим для аппроксимации $f_{ijk}^{(3)}$, у которой три атома расположены на одной прямой (атом k максимально удален от атома i). Сравнение с моделированием «атом-в-атом» (рис. 5) показывает, что такая аппроксимация удовлетворительно работает для примитивной решетки, несколько хуже для ОЦК решетки и значительно хуже для ГЦК решетки — но других разумных вариантов аппроксимации для $f_{ijk}^{(3)}$ такого типа пока построить не удалось.

При $\lambda^{\text{far}} = \lambda^{\text{near}} = \lambda_{\triangle}$ и $\sigma = \sigma' = \sigma_{\triangle}$ функция $f_{ijk}^{(3)}$ принимает полностью симметричный вид, такие трехчастичные функции распределения встречаются в ГЦК решетке, при этом атомы j и k принадлежат к первой координационной сфере атома i. В этом случае коэффициент Q_{\triangle} может быть рассчитан численно как функция параметров $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$, рис. 4 δ .

Рассмотрим парамагнитную фазу, в которой $\langle m \rangle = 0$ и $\sigma = \sigma' = 0$. В этом случае при $\lambda^{\text{far}} = 0$, переходя в систему сферических координат связанную с магнитным моментом **m**_j, нетрудно получить

$$\langle \eta_k \rangle = \mathcal{L}^2(\lambda) = \langle \eta \rangle^2.$$

В случае приближения среднего поля, при $\lambda^{\text{near}} = \lambda^{\text{far}} = 0$, по-прежнему выполняется соотношение $\langle \eta_k \rangle = \langle m \rangle^2$ для всех координационных сфер. Остальные случаи комбинаций параметров трехчастичной функции распределения оказываются слишком сложны для аналитических преобразований.

Для аппроксимации $f_{ijk}^{(3)}$ второй координационной сферы примитивной

- 11 -



Рис. 5. Зависимости равновесных значений параметров $\lambda_{k=2...4}^{\text{far}}$ (отнесенные к параметру λ из аппроксимации $f^{(2)}$) от температуры T для различных координационных сфер и кристаллических решеток, полученные из моделирования «атом–в–атом» при двух значениях внешнего поля H^{ext} . Чем больше номер координационной сферы, тем меньше λ^{far} для одной и той же кристаллической решетки



Рис. 6. Зависимость коэффициентов $Q_{k=2}^{\text{FCC}}$ и $Q_{k=3}^{\text{FCC}}$ от параметров $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$

решетки рассмотрим симметричную четырехчастичную функцию вида

$$f_{\boxtimes}^{(4)} = \frac{1}{Z_{\boxtimes}} \exp \left[\sigma \mathbf{p} \cdot (\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_k + \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_l) + \varsigma (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_k + \mathbf{m}_k \cdot \mathbf{m}_l + \mathbf{m}_l \cdot \mathbf{m}_l) + \epsilon \varsigma (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_k + \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_l) \right],$$

где атомы расположены в углах квадрата, а параметр $0 \leq \epsilon \leq 1.$ Тогда искомая трехчастичная функция распределения

$$f_{\boxtimes}^{(3)} = \int\limits_{S_2} f_{\boxtimes}^{(4)} \, d\mathbf{m}_l.$$

Для определения параметра ϵ предположим, что связи на сторонах квадрата (обусловленные согласно [13] суммой косвенных и прямых корреляций) отличаются от связей на диагоналях (обусловленных только косвенными корреляциями) на величину прямых корреляций J/T, то есть

$$\epsilon = \frac{1}{\varsigma} \left[\varsigma - \frac{J}{T}\right],$$

в итоге коэффициент Q_{\boxtimes} может быть рассчитан численно как функция параметров $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$, T.

Аналогичный подход работает для второй и третьей координационных сфер ОЦК решетки. Хотя при этом атомы четырехчастичных функций распределения расположены в в вершинах неправильного тетраэдра (рис. 3), но в среднем такая аппроксимация дает удовлетворительные результаты.

Для аппроксимации $f_{ijk}^{(3)}$ второй координационной сферы ГЦК решетки рассмотрим симметричную шестичастичную функцию, атомы которой расположены в узлах правильного октаэдра, рис. 3 (вершины октаэдра выделены черным

цветом). Если пренебречь косвенными корреляциями между противолежащими вершинами октаэдра, то за счет симметрии такая функция распределения зависит только от двух параметров. Интегралы по двум магнитным моментам в противолежащих вершинах могут быть взяты аналитически, оставшаяся четырехчастичная функция распределения интегрируется численно, в итоге соответствующий коэффициент $Q_{k=2}^{\text{FCC}}$ может быть посчитан численно как функция параметров $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$ (общее время счета составило 24 узло–часа на кластере К60 ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, рис. 6).

Надо заметить, что для второй и третьей координационных сфер ОЦК решетки более последовательным подходом было бы выделить неправильный октаэдр и интегрировать соответствующие шестичастичные функции распределения, но за счет явной зависимости от температуры такой подход требует слишком больших вычислительных затрат.

Для аппроксимации $f_{ijk}^{(3)}$ третьей координационной сферы ГЦК решетки рассмотрим четырехчастичную функцию распределения $f_{ijkl}^{(4)}$, атомы которой расположены в вершинах ромба, рис. 3. Обобщая приближение среднего поля на многочастичные функции распределения и пренебрегая косвенными связями между атомами *i* и *k*, получаем

$$f_{k=3}^{\text{FCC}} \approx \int_{S_2} \frac{f_{\triangle ijl}^{(3)} f_{\triangle jkl}^{(3)}}{f_{jl}^{(2)}} \, d\mathbf{m}_l.$$

В итоге суммарный коэффициент *Q* во втором уравнении CMD (9) принимает следующий вид для рассмотренных кристаллических решеток:

 $Q_{PCC} = \Lambda + 4JQ_{\boxtimes}, \quad Q_{VCC} = \Lambda + 6JQ_{\boxtimes}, \quad Q_{FCC} = \Lambda + 4JQ_{\triangle} + 2JQ_{k=2}^{FCC} + 4JQ_{k=3}^{FCC},$ где

$$\Lambda = \eta^2 \rangle - 1 + Q_{\angle} = \frac{1 - 2\rho}{\rho} \left(1 - \eta^2 \right) - 2 \frac{1 - \rho}{\rho \lambda} \langle \eta \rangle, \qquad \lim_{\langle m \rangle \to 0} \Lambda = \eta^2 \rangle - 1.$$

5. Результаты моделирования

Результаты моделирования «атом–в–атом» (2) сравнивались с результатами расчетов на основе классического УЛЛБ и системы СМD для различных значений температуры T, внешнего поля H^{ext} и анизотропии K.

В качестве начальных условий для расчетов «атом–в–атом» выбиралось состояние с однородной намагниченностью $\mathbf{m}_i|_{t=0} = \mathbf{m}_{\text{start}} \forall i$, при этом зависимости $\langle m \rangle(t)$ имеют достаточно сложный вид (рис. 7), для которого в общем случае трудно подобрать аналитическую аппроксимацию. Для оценки времени релаксации во всех случая использовалось выражение

$$\tau \approx \left(1 - \langle m \rangle_{\rm eq}^{\rm LL}\right) / \left. \frac{d\langle m \rangle}{dt} \right|_{t=1}$$



Рис. 7. Зависимость $\langle m \rangle(t)$, посчитанная в различных приближениях при параметрах T = 1, $H^{\text{ext}} = 0$, K = 0 для объемоцентрированной кристаллической решетки

где $\langle m \rangle_{eq}^{LL}$ — равновесное значение намагниченности, полученное из моделирования «атом–в–атом». Для УЛЛБ и СМD рассматривалась эволюция намагниченности в пространственно–однородном случае.

При моделировании «атом–в–атом» во всех случаях рассматривался образец 64³ ячеек с периодическими граничными условиями, для интегрирования использовался модифицированный метод Рунге–Кутты четвертого порядка, дополненный случайным источником специального вида [14].

На рисунках 8–16 показаны зависимости равновесной намагниченности $\langle m \rangle$, энергии $\langle W \rangle$, восприимчивости χ и времени релаксации τ от температуры T, полученные в различных приближениях («атом–в–атом» — LL, корреляционной магнитодинамики — CMD и приближение среднего поля — MFA) для примитивной, объемоцентрированной и гранецентрированной решеток при различных параметрах. Во всех случаях зависимости равновесной намагниченности и восприимчивости в разных приближениях близки. В отсутствие внешнего поля приближение корреляционной магнитодинамики дает несколько сдвинутую точку фазового перехода. Зависимости энергии и времени релаксации в приближении СMD совпадают с результатами атомистического моделирования гораздо лучше, чем в приближении среднего поля, ошибка времени релаксации в приближении среднего поля может доходить до 50%.



Рис. 8. Примитивная решетка, параметры $H^{\text{ext}} = 0$, K = 0



 $\it Puc.$ 9. Примитивная решетка, параметры $H^{\rm ext}=0,\,K=0.5J$



Рис. 10. Объемоцентрированная решетка, параметры $H^{\text{ext}} = 0$, K = 0



Рис. 11. Объемоцентрированная решетка, параметры $H^{\text{ext}} = 0, K = 0.5J$



Рис. 12. Гранецентрированная решетка, параметры $H^{\text{ext}} = 0, K = 0$



Рис. 13. Гранецентрированная решетка, параметры $H^{\text{ext}} = 0, K = 0.5J$



Рис. 14. Примитивная решетка, параметры $H^{\text{ext}} = 1, K = 0$



Рис. 15. Объемоцентрированная решетка, параметры $H^{\text{ext}} = 1, K = 0$



Рис. 16. Гранецентрированная решетка, параметры $H^{\text{ext}} = 1, K = 0$

6. Заключение

Аппроксимация многочастичных функций распределения в ферромагнетике позволяет обобщить на случай примитивной и гранецентрированной кристаллических решеток построенную ранее для объемоцентрированной кристаллической решетки систему уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD). Преимуществами CMD является возможность явного учета специфики строения кристаллической решетки.

Введение уравнения на парные корреляции делает описание системы более полным и физичным, при этом традиционные приближение среднего поля и уравнение Ландау–Лифшица–Блоха оказываются частным случаем CMD.

Тестовые расчеты показывают, что в отличие от традиционного уравнения Ландау–Лифшица–Блоха, полученного в приближении среднего поля, уравнения СМD правильно описывают энергию и процессы релаксации в магнетиках, что должно улучшить адекватность моделирования устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники.

Теория CMD находится в начале своего становления — большой интерес представляет ее обобщение на антиферромагнетики и ферримагнетики, моделирование пространственно–неоднородных образцов с учетом диполь–дипольного взаимодействия и многое другое.

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] 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.
- [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] Хилков С.А., Иванов А.В., Зипунова 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.
- [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. 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.

- [10] 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.
- [11] Иванов А.В. Кинетическое моделирование динамики магнетиков // Математическое моделирование. — 2007. — Т. 19, № 10. — С. 89–104. http://www.mathnet.ru/links/82020fa1add2512759e063c1cb0a7ebf/ mm1204.pdf.
- [12] 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.
- [13] Иванов А.В. Расчет статистической суммы и аппроксимация многочастичных функций распределения для магнетиков в модели Гейзенберга // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2019. — № 104. — С. 12. https://doi.org/10.20948/prepr-2019-104.
- [14] Зипунова Е.В., Иванов А.В. Две новые численные схемы для моделирования магнетиков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2017. — № 140. — C. 18. — https://doi.org/10.20948/prepr-2017-140.