



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

Препринты ИПМ • Препринт № 85 за 2022 г.



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

А.В. Иванов, С.А. Хилков

Приближение среднего поля
и проблема множества
реализаций в цепочке
Боголюбова на примере
ферромагнетика

Статья доступна по лицензии
[Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Иванов А.В., Хилков С.А. Приближение среднего поля и проблема множества реализаций в цепочке Боголюбова на примере ферромагнетика // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 85. 12 с.
<https://doi.org/10.20948/prepr-2022-85>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-85>

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

А.В. Иванов, С.А. Хилков

**Приближение среднего поля и проблема
множества реализаций в цепочке
Боголюбова на примере ферромагнетика**

Москва — 2022

Иванов А.В., Хилков С.А.

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Приближение среднего поля и проблема множества реализаций в цепочке Боголюбова на примере ферромагнетика

В работе рассматривается модель ферромагнетика, построенная на основе приближения среднего поля. Такая модель полностью описывается теорией Кюри–Вейсса в рамках одной реализации (образца).

Введено понятие проблемы множества реализаций (ПМР), возникающей при замыкании цепочки Боголюбова — неявный переход от описания ансамбля невзаимодействующих образцов к описанию одного образца.

Показано, что к ПМР приводит замыкание цепочки Боголюбова через приближение среднего поля. В то же время приближение корреляционной магнетодинамики позволяет избежать ПМР и приводит к корректному описанию всего ансамбля на уровне одно–двухчастичных функций распределения.

Ключевые слова: Приближение среднего поля, цепочка Боголюбова, корреляционная магнетодинамика

Anton Valeryevich Ivanov, Sergey Andreevich Khilkov

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Mean field approximation and the problem of multiple realizations in the BBGKY hierarchy on the example of a ferromagnet

The paper considers a model of a ferromagnet constructed on the basis of the mean field approximation. This model is fully described Curie-Weiss theory within a single implementation (sample).

The concept of the problem of the set of realizations (PMR) is introduced, which arises when the BBGKY hierarchy is closed — an implicit transition from the description ensemble of non interaction samples to the description of one sample.

It is shown that the closure of the BBGKY hierarchy through the mean field approximation leads to TMR. At the same time, the approximation of correlation magnetodynamics makes it possible to avoid PMR and leads to a correct description of the entire ensemble at the level of one-two-particle distribution functions.

Keywords: Mean field approximation, BBGKY hierarchy, correlation magnetodynamics

Содержание

| | | |
|---|--|----|
| 1 | Введение | 3 |
| 2 | Исходная атомистическая модель ферромагнетика | 4 |
| 3 | Цепочка Боголюбова и приближение среднего поля | 5 |
| 4 | Проблема множества реализаций | 6 |
| 5 | Уравнения корреляционной магнитодинамики | 8 |
| 6 | Равновесное решение в приближении корреляционной магнитодинамики | 9 |
| 7 | Заключение | 11 |
| | Список литературы | 12 |

1. Введение

Цепочка Боголюбова является одним из важнейших методов статистической физики. Основная сложность, возникающая при замыкании цепочки Боголюбова, — аппроксимация многочастичных функций распределения — как правило, решается в рамках приближения среднего поля:

$$f_{ij}^{(2)} \approx f_i f_j,$$

где $f_{ij}^{(2)}$ — двухчастичная функция распределения, f_i и f_j — одночастичные функции распределения.

В приближении среднего поля производится замена локальных взаимодействий некоторым коллективным взаимодействием, при этом теряются корреляции между ближайшими соседями. В случае дальнегодействующего электрического поля это дает замечательные результаты, например, систему уравнений Власова–Максвелла, хорошо описывающую сильно неравновесные процессы в плазме. В случае магнетиков с сильным локальным обменным взаимодействием это приводит к ряду отклонений от исходной атомистической модели [1].

Есть один важный аспект, на который, как правило, не обращают внимания. Исходная система уравнений (гамильтоновой динамики или стохастических дифференциальных) описывает эволюцию одного образца (одной реализации случайного процесса). Переход к уравнению на N -частичную функцию распределения (например при помощи теоремы Лиувилля) означает переход к описанию эволюции ансамбля Гиббса, состоящего из невзаимодействующих образцов. Такой переход на первый взгляд является необратимым — из суммы, после ее вычисления, невозможно вычленить одно слагаемое. Тем не менее, при замыкании цепочки Боголюбова в приближении среднего поля, итоговое уравнение на одночастичную функцию распределения эффективно описывает поведение одного образца, а не всего ансамбля. Этот переход мы будем называть проблемой множества реализаций (ПМР).

ПМР не всегда действительно является проблемой — вывод уравнения, описывающего одну реализацию, как правило, и является конечной целью исследования. В некоторых случаях, например при расчете вероятности ошибки записи ячейки магниторезистивной памяти [2], все же желательно получить уравнение, описывающее поведение всего ансамбля в целом. Но во всех случаях желательно четко понимать, к каким неявным последствиям приводят те или иные преобразования.

В данной работе ПМР проиллюстрирована на примере простейшей модели ферромагнетика с взаимодействием типа среднее поле. В такой модели равновесное решение в точности отвечает теории Кюри–Вейсса, и, на первый взгляд, замыкание цепочки Боголюбова на основе приближения среднего поля не должно приводить ни к каким сюрпризам. Тем не менее в такой модели ПМР и причины его возникновения проявляются особенно наглядно.

Попытка решить проблемы приближения среднего поля для ферромагнетиков с различными кристаллическими решетками привела к созданию новой аппроксимации двухчастичной функции распределения, учитывающей корреляции между ближайшими соседями и основанной на ней системе уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD) [1, 3–7]. При выводе уравнений CMD для кристаллических ферромагнетиков возникает ПМР. Но для рассмотренного в данной работе ферромагнетика с взаимодействием типа среднее поле CMD позволяет оставаться в рамках описания всего ансамбля, во всяком случае для равновесного решения.

2. Исходная атомистическая модель ферромагнетика

В качестве исходной модели рассмотрим ферромагнетик, состоящий из N магнитных моментов \mathbf{m}_i , $|\mathbf{m}_i| = 1$, связанных коллективным взаимодействием типа среднее поле:

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

$$W = -\frac{NJ}{2}\bar{\mathbf{m}}^2, \quad \bar{\mathbf{m}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i, \quad \mathbf{H} = -\nabla_{\mathbf{m}_i}W = J\bar{\mathbf{m}};$$

где γ — гиромагнитное соотношение; α — параметр затухания; \mathbf{H} — эффективное магнитное поле, W — полная энергия системы; T — температура системы в единицах энергии, $\boldsymbol{\xi}_i(t)$ — попарно независимые случайные вектора, составленные из δ -коррелированных случайных источников с нормальным распределением, единичной дисперсией и нулевым математическим ожиданием; $\nabla_{\mathbf{m}_i}$ — оператор ∇ по магнитному моменту \mathbf{m}_i ; J — обменный интеграл; $\bar{\mathbf{m}}$ — средняя намагниченность. Здесь и далее мы будем использовать безразмерную систему единиц.

Равновесным распределением для такой системы будет являться распределение Больцмана

$$f_{\text{eq}}(\mathbf{m}) = \frac{1}{Z} \exp \left[J \frac{\mathbf{m} \cdot \bar{\mathbf{m}}}{T} \right], \quad Z = \int_{S_2} \exp \left[J \frac{\mathbf{m} \cdot \bar{\mathbf{m}}}{T} \right] d\mathbf{m}, \quad (2)$$

здесь под $\int_{S_2} d\mathbf{m}$ понимается интегрирование по сфере единичного радиуса. В итоге равновесная намагниченность будет описываться теорией Кюри–Вейсса

$$|\bar{\mathbf{m}}| = \left| \int_{S_2} \mathbf{m} f_{\text{eq}} d\mathbf{m} \right| = \mathcal{L}(J|\bar{\mathbf{m}}|/T), \quad \mathcal{L}(x) = \text{cth } x - \frac{1}{x}, \quad (3)$$

где \mathcal{L} — функция Ланжевена. Фазовый переход парамагнетик–ферромагнетик возникает при критической температуре $T_c = J/3$.

Выбор такой модели обусловлен ее простотой, в реальных магнетиках обменное взаимодействие локально (связывает только ближайших соседей по кристаллической решетке), что создает ряд сложностей для применения теории среднего поля. Тем не менее даже такая простая модель позволяет проиллюстрировать особенности применения приближения среднего поля в цепочке Боголюбова.

3. Цепочка Боголюбова и приближение среднего поля

Введем обозначение

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

где $\nabla_{oi} = \nabla_{\mathbf{m}_i} - \mathbf{m}_i (\mathbf{m}_i \cdot \nabla_{\mathbf{m}_i}) / m_i^2$ — 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) [8]

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

и обозначение $\bullet \mathbf{H}_i, D \bullet_i f$ 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 [9] перейти к N -частичному УФП

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \bullet \mathbf{H}_i, T \bullet_i f^{(N)} \quad (4)$$

с равновесным решением

$$f_{\text{eq}}^{(N)} = \frac{1}{Z^{(N)}} \exp \left[\frac{NJ}{2T} \bar{\mathbf{m}}^2 \right].$$

Введем одночастичную функцию распределения f_i :

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

и проинтегрируем (4) по $N - 1$ магнитному моменту, что даст нам систему из N тождественных одночастичных УФП с интегральными коэффициентами

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \left[\frac{J}{f_i} \int_{S_2} \mathbf{m}_j f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j, T \right]_i f_i, \quad (5)$$

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

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

Полагая, что в приближении среднего поля $f_{ij}^{(2)} \approx f_i f_j$, получаем замкнутое УФП

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[J \langle \mathbf{m} \rangle, T \right] f, \quad \langle \mathbf{m} \rangle = \int_{S_2} \mathbf{m} f d\mathbf{m}, \quad (6)$$

которое снова дает в равновесии теорию Кюри–Вейсса (3).

4. Проблема множества реализаций

Между функциями распределения \mathfrak{f} (3) и f есть существенное различие. Функция \mathfrak{f} построена по **одной** реализации (одному образцу ферромагнетика). Напротив, УФП (4) описывает **ансамбль** реализаций (множество независимых образцов ферромагнетика, находящихся в одинаковых внешних условиях), и функция f должна описывать распределение по **ансамблю**.

Аналогично $\bar{\mathbf{m}}$ является средней намагниченностью одной реализации, $\langle \mathbf{m} \rangle$ является средней намагниченностью по ансамблю. За счет того, что все направления намагниченности в ансамбле равновероятны, в состоянии равновесия должно выполняться $\langle \mathbf{m} \rangle_{\text{eq}} = 0 \forall T$. Таким образом, УФП (6) описывает не ансамбль реализаций, а лишь часть ансамбля, содержащую реализации с одинаковым направлением намагниченности. Такой переход от описания всего

ансамбля к описанию части ансамбля мы будем называть проблемой множества реализаций (ПМР).

Пусть в ансамбле есть $R \gg 1$ реализаций и $\mathbf{m}_i^r(t)$ описывает эволюцию i -го магнитного момента в r -й реализации. Одно- и двухчастичные функции распределения для одной реализации r можно записать в виде микроскопической фазовой плотности [10]

$$\mathbf{f}(\mathbf{m}, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{m} - \mathbf{m}_i^r(t)), \quad \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{m}, \mathbf{m}', t) = \mathbf{f}(\mathbf{m}, t) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{m}', t).$$

Аналогично для ансамбля функции распределения имеют вид

$$\begin{aligned} f^{(N)} &= \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \prod_{i=1}^N \delta(\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_i^r(t)), \\ f^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, t) &= \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \delta(\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_i^r(t)) \delta(\mathbf{m}_j - \mathbf{m}_j^r(t)), \\ f_i(\mathbf{m}, t) &= \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \delta(\mathbf{m} - \mathbf{m}_i^r(t)). \end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что в $f^{(N)}$, $f^{(2)}$ и f различные реализации не взаимодействуют (их δ -функции не перемножаются). В то же время в случае приближения среднего поля в $f^{(2)}$ возникают произведения δ -функций различных реализаций, то есть реализации начинают влиять друг на друга. В итоге средняя намагниченность по ансамблю таких взаимодействующих реализаций оказывается ненулевой (подчиняется теории Кюри–Вейсса), и мы эффективно переходим к описанию одной единственной реализации.

$$f_i f_j \neq f_{ij}^{(2)}, \quad f_i f_j = \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{m}, \mathbf{m}', t).$$

Таким образом, переход от описания всего ансамбля к одной реализации происходит при аппроксимации двухчастичной функции распределения $f_{ij}^{(2)} \approx f_i f_j$ на основе приближения среднего поля. Надо отметить, что этот эффект возникает даже в модели вида (1), исходно построенной в приближении среднего поля, то есть в ситуации, когда замыкание цепочки Боголюбова на основе приближения среднего поля не должно приводить ни к каким сюрпризам.

В большинстве случаев тот факт, что итоговое уравнение на одночастичную функцию распределения описывает одну реализацию (один образец), можно рассматривать как достоинство — как правило, конечной целью является получение уравнения для описания именно одного образца. В некоторых случаях,

например при расчете вероятности ошибки записи ячейки магниторезистивной памяти, желательно получить уравнение, описывающее поведение всего ансамбля. В любом случае при работе с цепочкой Боголюбова следует четко осознавать, что применение приближения среднего поля может приводить к неявной подмене понятий и качественному изменению поведения всей системы уравнений.

5. Уравнения корреляционной магнитодинамики

Система уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD) основана на аппроксимации двухчастичной функции распределения [3] вида

$$f_{ij}^{(2)} \approx \frac{1}{Z_{ij}^{(2)}} \left[f_i(\mathbf{m}_i, t) f_j(\mathbf{m}_j, t) \right]^\rho e^{\lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}, \quad (7)$$

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

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 $f_i \approx \int_{S_2} f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j$. Проще всего получить ρ из

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

При $\lambda \ll 1$ аппроксимация (7) переходит в приближение среднего поля и $\rho \rightarrow 1$. При $\lambda \gg 1$ экспонента в аппроксимации (7) 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 $Z^{(2)}$ аппроксимация (7) имеет размерность двухчастичной функции распределения.

Уровень парных корреляций задается величиной

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

обменная энергия в расчете на одну частицу равна $-J\langle \eta \rangle/2$.

После подстановки (7) в (5) мы получаем одночастичное УФП [3]

$$\frac{\partial f(\mathbf{m}, t)}{\partial t} = \left[0, T - n_b J \Upsilon \right] f, \quad \Upsilon = \frac{1 - \rho}{\lambda}, \quad (8)$$

при этом обменное поле входит в уравнение как антидиффузия с коэффициентом $J\Upsilon$ в пространстве магнитных моментов.

Умножая (8) на \mathbf{m} и интегрируя, получаем уравнение типа Ландау–Лифшица–Блоха на среднюю намагниченность ансамбля:

$$\dot{\langle \mathbf{m} \rangle} = 2\alpha\gamma(J\Upsilon - T)\langle \mathbf{m} \rangle. \quad (9)$$

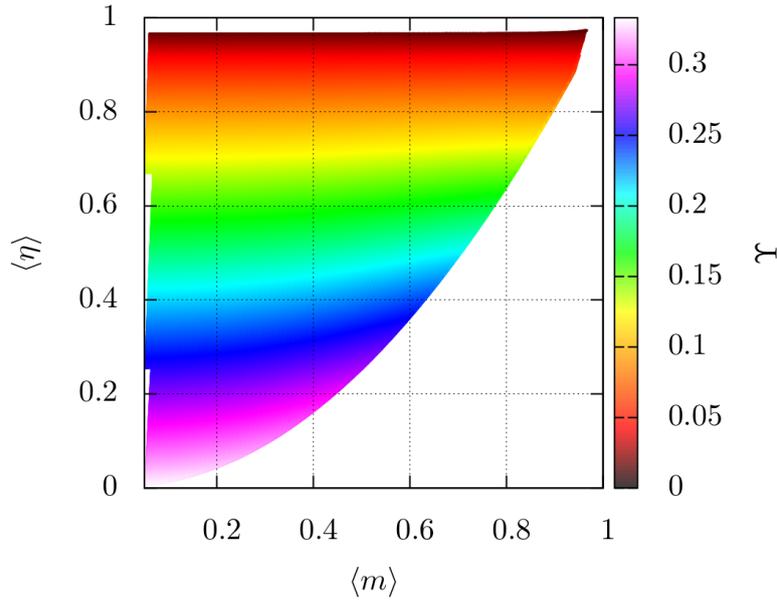


Рис. 1. Зависимость коэффициента $\Upsilon(\langle m \rangle, \langle \eta \rangle)$

Коэффициент Υ удобно рассматривать как функцию переменных $\langle m \rangle = |\langle \mathbf{m} \rangle|$, $\langle \eta \rangle$, рис. 1.

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

$$\frac{\partial f_{ij}^{(2)}}{\partial t} = \left[\mathbf{H}^{(2)}, T \right]_i f_{ij}^{(2)} + \left[\mathbf{H}^{(2)}, T \right]_j f_{ij}^{(2)}, \quad \mathbf{H}^{(2)} = \frac{J}{f_{ij}^{(2)}} \int_{S_2} \mathbf{m}_k f_{ijk}^{(3)} d\mathbf{m}_k,$$

умножим его на $\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j$ и проинтегрируем [6]

$$\frac{\dot{\langle \eta \rangle}}{2\alpha\gamma} = -JQ_\Delta - 2T\langle \eta \rangle, \quad Q_\Delta = \left\langle \mathbf{m}_i \cdot \left[\mathbf{m}_j \times \left[\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k \right] \right] \right\rangle. \quad (10)$$

6. Равновесное решение в приближении корреляционной магнитодинамики

Интегральный коэффициент Q_Δ рассчитывается [6] на основе симметричной трехчастичной функции распределения

$$f_\Delta^{(3)} = \frac{1}{Z^{(3)}} \exp \left[\sigma \mathbf{p} \cdot (\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_k) + \varsigma (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_k + \mathbf{m}_k \cdot \mathbf{m}_i) \right],$$

где параметры σ , ς могут быть определены из условий

$$\iiint_{S_2} \mathbf{m}_i f_\Delta^{(3)} d\mathbf{m}_{i,j,k} = \langle \mathbf{m} \rangle, \quad \iiint_{S_2} \eta f_\Delta^{(3)} d\mathbf{m}_{i,j,k} = \langle \eta \rangle,$$

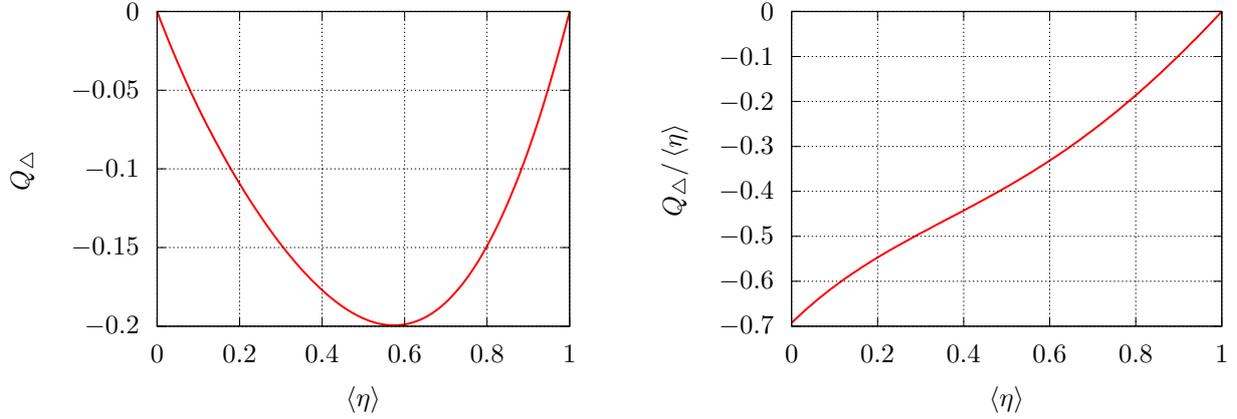


Рис. 2. Зависимости Q_Δ и $Q_\Delta/\langle \eta \rangle$ от $\langle \eta \rangle$

и могут быть аппроксимированы как

$$Q_\Delta \approx -\langle \eta \rangle(1 - \langle \eta \rangle) \left[0.69279 - 0.24455 \cdot \langle \eta \rangle + 1.1055 \cdot \langle \eta \rangle^2 - 0.53462 \cdot \langle \eta \rangle^3 \right],$$

то есть Q_Δ не зависит от $\langle m \rangle$ (рис. 2) и уравнение (10) можно решать отдельно от (9).

В равновесном случае (10) принимает вид

$$JQ_\Delta + 2T\langle \eta \rangle = 0. \quad (11)$$

С учетом аппроксимации Q_Δ сразу можно найти один тривиальный корень $\langle \eta \rangle = 0$, что отвечает парамагнитной фазе. Для ферромагнитной фазы, при $T < T_c$, как и в теории Кюри–Вейсса, это решение должно стать неустойчивым.

Второй корень может быть найден из

$$\frac{T}{J} = -\frac{Q_\Delta}{2\langle \eta \rangle},$$

рис. (3). Из рисунка видно, что зависимость $\langle \eta \rangle_{\text{CMD}}(T)$, полученная из CMD при $\langle m \rangle = 0$, достаточно близка к зависимости $\langle \eta \rangle_{\text{MFA}}(T) = \bar{m}^2$, полученной из приближения среднего поля (теории Кюри–Вейсса). Расхождение в области фазового перехода может быть связано с ошибками аппроксимации двухчастичной функции распределения $f^{(2)}$.

Для коэффициента Υ существует аппроксимация

$$\begin{aligned} \Upsilon \approx \frac{1 - \langle \eta \rangle}{1 - \langle m \rangle^2} \cdot \frac{\langle m \rangle}{p} \cdot \left[1 + 0.3684 \cdot \langle \eta \rangle^2 + 0.1873 \cdot \langle \eta \rangle^3 - \right. \\ \left. - 0.3236 \cdot \langle \eta \rangle \langle m \rangle^2 - 0.2523 \cdot \langle \eta \rangle^2 \langle m \rangle^2 \right], \quad \langle m \rangle = \mathcal{L}(p). \end{aligned}$$

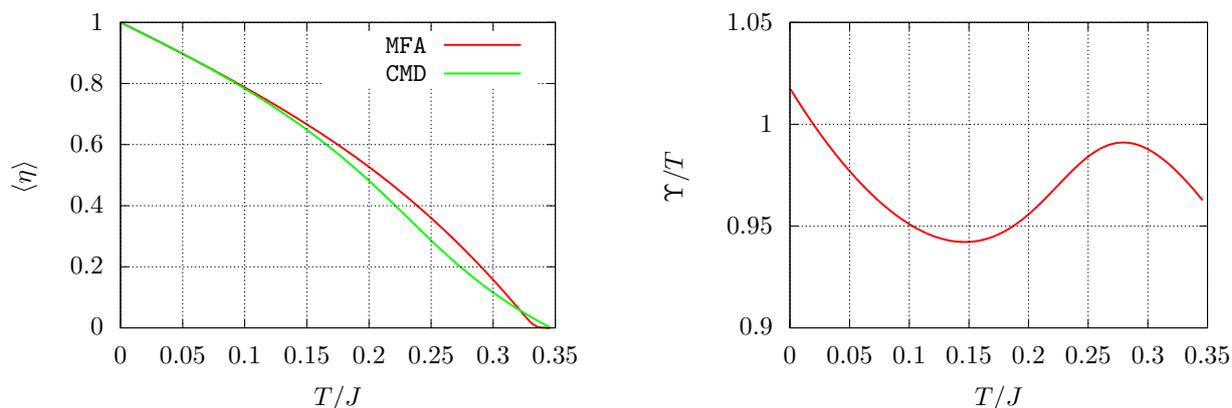


Рис. 3. Зависимости $\langle \eta \rangle(T/J)$, посчитанные из приближения среднего поля (MFA) и системы уравнений корреляционной магнетодинамики при $\langle m \rangle = 0$ (CMD), а также отношение Υ/T при $\langle m \rangle = 0$, полученное из CMD

Нетрудно видеть, что Υ монотонно растет по мере уменьшения $\langle m \rangle$, η и достигает максимального значения $\Upsilon_{\max} = 1/3$ при $\langle m \rangle = 0$, $\langle \eta \rangle = 0$.

Из рис. 3 видно, что в равновесном случае $J\Upsilon < T$ при $T > 0.025 \cdot J$, то есть решение $\langle m \rangle_{\text{eq}} = 0$ является устойчивым во всем актуальном диапазоне температур. При малых температурах $\langle \eta \rangle \rightarrow 1$ и точность аппроксимации Υ оказывается недостаточной.

Таким образом, для исходной модели (1) CMD позволяет решить проблему множества реализаций и получить равновесное решение, отвечающее ансамблю Гиббса — с нулевой намагниченностью и средней энергией, согласующейся с теорией Кюри–Вейсса.

7. Заключение

Замыкание цепочки Боголюбова при помощи приближения среднего поля приводит к проблеме множества реализаций, даже если исходная модель была построена в рамках приближения среднего поля. При этом производится подмена понятий: вместо описания ансамбля совершается неявный переход к описанию одной реализации. В ряде случаев такой эффект может быть даже желательным, но в любом случае его надо иметь в виду.

Для исходной модели, построенной в приближении среднего поля, замыкание цепочки Боголюбова при помощи CMD решает проблему множества реализаций и позволяет по-прежнему описывать ансамбль (во всяком случае, для равновесного решения ферромагнетика).

Для сравнения эволюции средней намагниченности и энергии необходимо учитывать в CMD число частиц. Рассмотренная задача может быть хорошим тестом для построения мезомасштабных моделей CMD.

Список литературы

- [1] Иванов А.В., Зипунова Е.В., Хилков С.А. Уравнения корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков // Письма в ЖЭТФ. — 2022. — Т. 115, № 3. — С. 176–183. — <https://doi.org/10.31857/S1234567822030077>.
- [2] 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.
- [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] 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>.
- [5] 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>.
- [6] 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>.
- [7] Ivanov A.V., Zipunova E.V., Khilkov S.A. Calculation of Integral Coefficients for Correlation Magnetodynamics and Verification of the Theory // In: Voevodin, V., Sobolev, S. (eds) Supercomputing. RuSCDays 2021. Communications in Computer and Information Science. — 2021. — Vol. 1510. — P. 29–43. — https://doi.org/10.1007/978-3-030-92864-3_3.
- [8] 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>.
- [9] 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.
- [10] Климонтович Ю.Л. Статистическая теория открытых систем. — 1995.