

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 20 за 2024 г.</u>



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Замятин С.В., Лукьянов А.В., Иванов А.В. О точности аппроксимации двухчастичной функции распределения для ферромагнетика // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2024. № 20. 31 с. <u>https://doi.org/10.20948/prepr-2024-20</u> <u>https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2024-20</u> Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.КЕЛДЫША Российской академии наук

С.В. Замятин, А.В. Лукьянов, А.В. Иванов

О точности аппроксимации двухчастичной функции распределения для ферромагнетика

Замятин С.В., Лукьянов А.В., Иванов А.В.

e-mail: aiv.racs@gmail.com

О точности аппроксимации двухчастичной функции распределения для ферромагнетика

При построении системы уравнений корреляционной магнитодинамики (модели сплошной среды ферромагнетика) применяется цепочка Боголюбова. Вместо традиционного приближения среднего поля, цепочка Боголюбова замыкается при помощи аппроксимации двухчастичной функции распределения, учитывающей корреляции между ближайшими соседями. Одной из задач данной работы является проверка качества такой аппроксимации, за эталон принято моделирование «атом-в-атом» с помощью уравнений Ландау–Лифшица. Показано, что аппроксимация имеет в среднем абсолютную ошибку порядка 0.001 для моментов функции распределения. Построенная аппроксимация позволяет получать значение спонтанной намагниченности отдельной реализации на основе нелинейности двухчастичной функции распределения для ансамбля реализаций.

Ключевые слова: уравнения Ландау–Лифшица, моделирование «атом-ватом», аппроксимация функций распределения

Sergei Vladimirovich Zamiatin, Andrei Vladimirovich Lukianov, Anton Valeryevich Ivanov

e-mail: aiv.racs@gmail.com

On the accuracy of approximation of the two-particle distribution function for a ferromagnet

When constructing a system of equations of correlation magnetodynamics (a model of a continuous medium of a ferromagnet), the BBGKY hierarchy is used. To close the BBGKY hierarchy, instead of the traditional mean field approximation, an approximation of the two-particle distribution function is used, taking into account correlations between nearest neighbors. One of the goals of this work is to check the quality of this approximation, where «atom-to-atom» modeling using the Landau–Lifshitz equations is taken as a standard. It is shown that the approximation has an average absolute error of the order of 0.001 for the moments of the distribution function. The constructed approximation allows us to obtain the value of the spontaneous magnetization of a separate implementation based on the nonlinearity of the two-particle distribution function for an ensemble of implementations.

Keywords: Landau–Livshitz equations, «atom-to-atom» simulation, approximation of distribution functions

Содержание

1	Введение	3
2	Моделирование «атом-в-атом»	4
3	Функции распределения, получаемые из моделирования «атом-в-атом»	5
4	Аппроксимация двухчастичной функции распределения	9
5	Численные методы для проверки аппроксимации	12
6	Результаты аппроксимации двухчастичной функции распределения	13
7	Заключение	17
Список литературы		17
Α	Выражения для средних величин в приближении среднего поля	19
В	Выражение для статистической суммы двухчастичной функции рас-	
	пределения через комплексную функцию ошибки	21
C	Соотношение для скалярных произведений трех единичных векторов	22
D	Результаты для других типов кристаллических решеток	23

1. Введение

Модель классического магнетика Гейзенберга представляет собой совокупность магнитных моментов, локализованных в узлах кристаллической решетки. Модули магнитных моментов считаются постоянными, а ориентация может быть произвольной. Магнитные моменты связаны обменным взаимодействием и находятся под влиянием внешнего магнитного поля и температурных флуктуаций. Эволюция магнитных моментов описывается системой стохастических дифференциальных уравнений Ландау–Лифшица [1]. Такой подход «атом-ватом» позволяет численно изучать множество физических эффектов, включая магнитные фазовые переходы в различных типах кристаллических решеток с учетом дефектов [2].

Для решения практических задач (разработки устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники) описание «атом-в-атом» имеет слишком высокую вычислительную сложность. Необходима модель магнетика в приближении сплошной среды, работающая в широком диапазоне внешних полей и температур. Кроме того, корректный переход от описания «атом-в-атом» к описанию на уровне сплошной среды для системы с сильным локальным обменным взаимодействием представляет большой интерес с фундаментальной точки зрения.

Традиционно наиболее полной моделью сплошной среды для магнетика считается уравнение Ландау–Лифшица–Блоха (УЛЛБ) [3–5]. Основным недостатком УЛЛБ является приближение среднего поля (MFA). При описании магнетиков приближение среднего поля не учитывает корреляции между ближайшими соседями, обусловленные сильным локальным взаимодействием, что приводит к сдвигу критической температуры, неверным значениям энергии системы и заниженным временам релаксации. Для решения этих проблем была построена новая аппроксимация двухчастичной функции распределения, учитывающая корреляции между ближайшими соседями, что привело в итоге к системе уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD), состоящей из модифицированного УЛЛБ и уравнения на эволюцию парных корреляций [6,7]. Уравнения СМD дают значительно лучшее согласие с результатами моделирования «атом-в-атом», чем УЛЛБ.

Корректность системы уравнений СМD существенно зависит от точности аппроксимации двухчастичной функции распределения. Данная работа посвящена проверке точности аппроксимации. Входными данными являются два средних значения, найденных из моделирования «атом-в-атом». Исходя из этих данных находятся параметры аппроксимации, знание которых позволяет найти любые другие средние значения. Качество аппроксимации двухчастичной функции распределеения оценивается на основе сравнения других средних величин, полученных при моделировании «атом-в-атом», и средних величин, полученных из аппроксимации.

Отдельным вопросом, представляющим большой интерес с фундаментальной точки зрения, является переход от описания на уровне ансамбля реализаций при использовании *N*-частичного уравнения Фоккера–Планка к описанию на уровне одной реализации при использовании модели CMD [8]. Под реализацией понимается конкретное состояние системы, обычно равновесное. Распределение по реализации — это распределение величины по атомам системы. Ансамбль реализаций — это все возможные реализации при определенных параметрах. Распределением по ансамблю реализаций является, например, распределение Гиббса.

В работе исследуется возможность вычисления спонтанной намагниченности, отвечающей одной реализации, на основе двухчастичной функции распределения, зависящей только от скалярного произведения магнитных моментов ближайших соседей. Такая функция распределения в отсутствие внешнего поля и анизотропии не имеет выделенного направления и должна быть одинаковой для всех реализаций, т.е. может рассматриваться как двухчастичная функция распределения для ансамбля.

2. Моделирование «атом-в-атом»

Одной из основных моделей магнетика является модель Ландау–Лифшица [1]:

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

$$\mathbf{H}_{i}^{\text{eff}} = \sum_{j} J_{ij} \mathbf{m}_{j} + \mathbf{H}^{\text{ext}},$$

где \mathbf{m}_i — магнитные моменты атомов, $\mathbf{H}_i^{\text{eff}}$ — эффективные поля действующие на магнитные моменты атомов, γ — гиромагнитное соотношение, α — безраз-

мерный параметр затухания ($\alpha \ll 1$), T — температура, $\xi_i(t)$ — случайный δ -коррелированный по времени 3D-вектор с нулевым средним и единичной дисперсией по каждой из компонент, J_{ij} — обменные интегралы, обеспечивающие взаимодействие ближайших магнитных моментов i, j в решётке, \mathbf{H}^{ext} — внешнее магнитное поле.

Здесь введена следующая система единиц: $T = \frac{T^*k_B}{J}$, $\mathbf{m}_i = \frac{\mathbf{m}_i^*}{\mu}$, $J_{ij} = \frac{J_{ij}^*}{J}$, $\gamma = \frac{m_e}{e}\gamma^*$, $t = \frac{\mu m_e}{eJ}t^*$, $\mathbf{H} = \frac{\mu}{J}\mathbf{H}^*$, где размерные величины помечены знаком *, J — значение обменного интеграла, μ — магнитный момент атома, e — заряд электрона, m_e — масса электрона, k_B — постоянная Больцмана. Все величины имеют размерности в системе СИ.





В работе рассматриваются примитивная (SC), объёмоцентрированная (VCC) и гранецентрированная (FCC) кубические кристаллические решетки, рис. 1.

Система (1) решается численно методом Рунге–Кутта 4 порядка (с небольшим отличием, состоящим в учёте случайного источника) [9, 10]. Из моделирования «атом-в-атом» рассчитываются следующие величины в состоянии равновесия: $|\langle \mathbf{m}_i \rangle| \equiv \langle m \rangle, \langle (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)^n \rangle \equiv \langle \eta^n \rangle, n = 1, 2, 3, 4,$ рис. 2.

3. Функции распределения, получаемые из моделирования «атом-в-атом»

С помощью моделирования «атом-в-атом» также могут быть численно найдены функции распределения энергии W и η_{ij} по атомам в системе, то есть по реализации. В этом разделе мы будем рассматривать две постановки: H-постановка ($H_z = 1$ и J = 0) и J-постановка ($H_z = 0$ и J = 1).

Как известно, нахождение равновесной системы в состоянии с определенной энергией подчиняется распределению Гиббса:

$$\mathfrak{f}(W) = \frac{1}{Z}e^{-\frac{W}{T}} = \frac{1}{Z}\prod_{i}e^{-\frac{W_{i}}{T}} = \prod_{i}f(W_{i}), \tag{2}$$

где *Т* — температура, *W* — энергия системы, *W_i* — энергия *i*-го атома.



Рис. 2. Зависимости средних величин от температуры и внешнего магнитного поля для SC решётки, J = 1

Принципиальным является тот факт, что распределение Гиббса f(W) — это распределение энергии системы по ансамблю реализаций, но никак не по одной реализации. Распределение $f(W_i)$ — это частное распределение *i*-го атома по ансамблю реализаций. Проще говоря, это распределение всех возможных значений энергии *i*-го атома по всем возможным реализациям системы. Рассчитать такое распределение технически очень сложно, но оно и не нужно, поскольку больший интерес представляет распределение по реализации.

Распределение энергии атома по ансамблю реализаций будет совпадать с распределением энергии атома по одной реализации только тогда, когда атомы не взаимодействуют между собой, то есть когда атомы будут независимы друг от друга [8].

Это утверждение подтверждается результатами расчёта для H-постановки на рис. 3 слева. Здесь и далее распределение энергии атома по одной реализации мы будем обозначать как f(W). В этой постановке распределение энергии атома с хорошей точностью совпадает с распределением Гиббса. В J-постановке на

-6-



Рис. 3. Распределение энергии атома по реализации для решётки SC при разных температурах для *H*-постановки. С повышением температуры распределение стремится к равномерному (левый рисунок). Для *J*-постановки с повышением температуры максимум распределения двигается вправо (правый рисунок)



Рис. 4. Распределение η_{ij} по реализации при разных температурах для *J*-постановки для решётки SC. При повышении температуры распределение стремится к равномерному (левый рисунок). Средняя ошибка аппроксимации функции экспонентой с линейным слагаемым для разных решеток (правый рисунок)

рис. 3 справа, напротив, распределение энергии атома даже не имеет формы экспоненты, что совершенно ожидаемо, поскольку в этой постановке атомы взаимодействуют между собой.

Рассмотрим распределение η_{ij} по реализации для *J*-постановки, которое представлено на рис. 4. Распределение $f(\eta_{ij})$ можно аппроксимировать следующей функцией:

$$f(\eta_{ij}) = \frac{1}{Z} \exp\{a(T)\eta_{ij} + b(T)\eta_{ij}^2 + \dots\},$$
(3)

где a(T) и b(T) — коэффициенты, зависящие от температуры. Из рисунка 4 видно, что при $T \ge T_c$, где T_c — критическая температура, $a(T) \gg b(T)$, но



Рис. 5. Распределение η_{ij} по реализации при разных температурах для *H*-постановки для решетки SC. При повышении температуры распределение стремится к равномерному

 $a(T) \neq \frac{1}{T}$. При $T < T_c$ вклад b(T) становится значимым. Такое поведение вызвано отсутствием дальнего порядка, поэтому η_{ij} для двух далеких друг от друга пар ближайших соседей слабо скоррелированы между собой, но поскольку ближний порядок все еще существует, коэффициент в экспоненте не совпадает с обратной температурой. При $T < T_c$, напротив, появляется нелинейность, связанная с появлением дальнего порядка в системе.

Такая аппроксимация представляет интерес с фундаментальной точки зрения. Аппроксимация не имеет выделенного направления вектора намагниченности, поэтому может рассматриваться как аппроксимация функции распределения по ансамблю реализаций. Спонтанная намагниченность, то есть выделенное направление вектора намагниченности, появляется при $T < T_c$. Интерес представляет вычисление модуля спонтанной намагниченности на основе нелинейности в функции распределения по ансамблю реализация. Результаты таких расчетов будут приведены ниже.

Теперь рассмотрим распределение $f(\eta_{ij})$ по реализации для *H*-постановки, то есть в случае отсутствия обменного взаимодействия (рис. 5). Распределение не является равномерным, поскольку атомы скоррелированы между собой из-за внешнего поля. Можно видеть, что поведение распределения $f(\eta_{ij})$ при отсутствии обменного взаимодействия похоже на поведение при наличии обменного взаимодействия. Это объясняется тем, что случайные процессы, происходящие в системе, на языке функций распределения похожи между собой для этих двух постановок.

На рис. 6 представлены функции распределения $f(\eta_{ik})$ по реализации для разных координационных сфер. Они отличаются от $f(\eta_{ij})$ только в абсолютных значениях, но не в общем поведении.

На рис. 7 представлены функции распределения $f(\eta_{ik}, \frac{\eta_{ij}+\eta_{jk}}{2})$ по реализации для разных температур. В приложении С показано, что форма параболы



Рис. 6. Распределение $f(\eta_{ik})$ при разных температурах для *J*-постановки для решетки SC второй (слева) и третьей (справа) координационных сфер. При повышении температуры распределение стремится к равномерному

является следствием соотношения между скалярными произведениями трех единичных векторов. Рассмотрим физический смысл некоторых точек на этом графике. В точке (1,1) наблюдается ферромагнитная фаза, поскольку векторы магнитного момента преимущественно направлены в одну сторону; точка (0,-1) отвечает парамагнитной фазе, векторы магнитного момента ориентированы полностью случайно; точка (-1,1) отвечает антиферромагнитной фазе.

При малой температуре можно видеть пик в точке ферромагнитной фазы (1,1), то есть при малых температурах векторы магнитного момента преимущественно ориентированы в одном направлении. При увеличении температуры область определения функции распределения растет. Вблизи фазового перехода (T = 1.5) видно, что в точке парамагнитной фазы (0, -1) появляется пик, значение в котором оказывается порядка значения в точке ферромагнитной фазы. При дальнейшем повышении температуры значения в точке парамагнитной фазы становится значительно выше значения в точке ферромагнитной фазы. Можно считать, что фазовый переход происходит, когда значение в точке парамагнитной фазы.

4. Аппроксимация двухчастичной функции распределения

Из модели (1) можно получить систему уравнений Фоккера–Планка [11]:

$$\dot{f}_{i}(\mathbf{m}_{i},t) = \operatorname{div}_{\circ i} \Big[\gamma \mathbf{m}_{i} \times (\mathbf{H}_{i} + \alpha [\mathbf{m}_{i} \times (\mathbf{H}_{i} - T\operatorname{grad}_{\circ i})]) f_{i} \Big],$$
(4)

где введены операторы:

$$\operatorname{div}_{\circ i} \mathbf{g} = \operatorname{div}_i \left(\mathbf{g} - \mathbf{m}_i(\mathbf{m}_i \mathbf{g}) / \mathbf{m}_i^2 \right), \quad \operatorname{grad}_{\circ i} = \nabla_i - \frac{\mathbf{m}_i(\mathbf{m}_i \nabla_i)}{\mathbf{m}_i^2},$$



Рис. 7. Функции распределения $f(\frac{\eta_{ij}+\eta_{jk}}{2},\eta_{ik})$ по реализации при разных температурах в *J*-постановке для решетки SC для первой координационной сферы

где $\nabla_i = \frac{\partial}{\partial m_{ix}} \mathbf{e}_x + \frac{\partial}{\partial m_{iy}} \mathbf{e}_y + \frac{\partial}{\partial m_{iz}} \mathbf{e}_z.$ Выражение для магнитного поля:

$$\mathbf{H}_{i} = \frac{J}{f_{i}} \int_{S_{2}} \mathbf{m}_{j} f_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_{i}, \mathbf{m}_{j}, t) \mathbf{d}\mathbf{m}_{j} + \mathbf{H}^{\text{ext}},$$

где $f_i(\mathbf{m}_i, t)$ и $f_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, t)$ — одночастичная и двухчастичная функции распределения соответственно.

В [6, 7] вводится аппроксимация функций распределения, отличная от приближения среднего поля:

$$\mathfrak{f}_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j, t) \sim (\mathfrak{f}_i \mathfrak{f}_j)^{\rho} \exp\left[\lambda(t) \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j\right], \quad \mathfrak{f}_i^{(1)}(\mathbf{m}_i, t) \sim e^{\mathbf{p}(t) \cdot \mathbf{m}_i}, \tag{5}$$

где $\lambda, \rho, \mathbf{p}$ — параметры аппроксимации, определяющиеся из условий:

$$\int_{S_2} \int_{S_2} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j \mathbf{m}_i \mathfrak{f}_{ij}^{(2)} = \int_{S_2} d\mathbf{m}_i \mathbf{m}_i \mathfrak{f}_i^{(1)} = \langle \mathbf{m} \rangle,$$
$$\int_{S_2} \int_{S_2} \int_{S_2} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j \mathfrak{f}_{ij}^{(2)} = \langle \eta \rangle.$$

Аппроксимация (5) позволяет замкнуть цепочку Боголюбова (в (4) представлено только первое уравнение для этой цепочки) и перейти к уравнениям сплошной среды.

При $T > T_c$ равновесная средняя намагниченность равна нулю, следовательно, **р** = **0**, то есть

$$\mathfrak{f}_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_i,\mathbf{m}_j)\sim \exp\left[\lambda\mathbf{m}_i\mathbf{m}_j
ight],$$

что подтверждается аппроксимацией численно найденной функции распределения η_{ij} по реализации (3).

При $T < T_c$ в аппроксимации (3) добавляются старшие моменты η_{ij} , а в (5) добавляются первые степени **m**. Это говорит о том, что возможно определить параметры аппроксимации не из среднего значения намагниченности, а из моментов η_{ij}^n , n = 1, 2. Качество аппроксимации (5) проверяется исходя из двух наборов входных данных: ($\langle \mathbf{m} \rangle, \langle \eta \rangle$) или ($\langle \eta \rangle, \langle \eta^2 \rangle$). С помощью двух величин находятся параметры аппроксимации, после чего рассчитываются другие средние и сравниваются с результатами моделирования «атом-в-атом».

Из (5) получаем статистическую сумму:

$$\mathfrak{Z}_{ij}^{(2)}(\rho p,\lambda) = \int_{S_2} \int_{S_2} \exp\left[\rho \mathbf{p}(\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_j) + \lambda \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j\right] d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j = \\ = 4\pi \int_{S_2} d\mathbf{m}_i \exp[\rho \mathbf{p} \mathbf{m}_i] \frac{\mathrm{sh}(|\rho \mathbf{p} + \lambda \mathbf{m}_i|)}{|\rho \mathbf{p} + \lambda \mathbf{m}_i|} = 8\pi^2 \int_{-1}^{1} dx \, e^{\rho px} \frac{\mathrm{sh}\left(\sqrt{\rho^2 p^2 + \lambda^2 + 2\rho p \lambda x}\right)}{\sqrt{\rho^2 p^2 + \lambda^2 + 2\rho p \lambda x}}.$$
(6)

Также можно получить средние:

$$\langle m \rangle(\rho p, \lambda) = \frac{8\pi^2}{\mathfrak{Z}_2(\rho p, \lambda)} \int_{-1}^1 dx \, x \, e^{\rho p x} \frac{\operatorname{sh}\left(\sqrt{\rho^2 p^2 + \lambda^2 + 2\rho p \lambda x}\right)}{\sqrt{\rho^2 p^2 + \lambda^2 + 2\rho p \lambda x}},\tag{7}$$

 $\langle \alpha \rangle$

$$\langle \eta^n \rangle = \frac{1}{\mathfrak{Z}_{ij}^{(2)}} \frac{\partial^n \mathfrak{Z}_{ij}^{(2)}(\rho p, \lambda)}{\partial \lambda^n}.$$
(8)

Таким образом, для вычисления средних на основе аппроксимации необходимо знать только 2 вида интегралов: (6) и (7), поскольку выражения $\langle \eta^n \rangle (\rho p, \lambda)$ находятся из численного дифференцирования (8).

Можно поступить иначе: вместо численного взятия интеграла (6), его можно привести к комбинации комплексных функций ошибки. Данный вывод представлен в приложении **B**.

5. Численные методы для проверки аппроксимации

Для численного дифференцирования требуется высокая точность вычисления интеграла (6). Для этого используются рекуррентное уточнение по Эйткену на сгущающихся сетках и формула трапеций. Уточнение состоит в следующем. Пусть исходный шаг сетки равен h. На n-й итерации имеем интегралы: $I_0, I_1, ..., I_n$, где I_i — интеграл на сетке с шагом $h \cdot 2^{-i}$. Далее используются рекуррентные формулы экстраполяции по Эйткену [12]:

$$P_{00} = I_0, P_{11} = I_1, \dots P_{nn} = I_n; P_{ik} = \frac{P_{i+1,k}(h^2 - h_i^2) + P_{i,k-1}(h_k^2 - h^2)}{h_k^2 - h_i^2}, \quad (9)$$

где k = 1, 2, ..., n, i = 0, 1, ..., k - 1.

В формуле фигурируют h^2 , а не h, поскольку формула трапеций имеет остаточный член, состоящий только из четных степеней h. В данную формулу подставляется значение h = 0. Итерации останавливаются при условии $|P_{0,n} - P_{0,n+1}| < \epsilon$, где для $\langle m \rangle$: $\epsilon = 10^{-8}$ и для $\mathfrak{Z}_{ij}^{(2)}$: $\epsilon = 10^{-12}$. Далее происходит численное дифференцирование этих величин по формуле (8).

В результате имеются сеточные значения на двумерной сетке для величин: $\langle m \rangle (\rho p, \lambda), \langle \eta^n \rangle (\rho p, \lambda)$. Далее для краткости обозначим $\langle m \rangle \equiv m, \langle \eta \rangle \equiv \eta, \rho p = x, \lambda = y$. На вход подаются значения m^* и η^* , вычисленные из моделирования «атом-в-атом» (аналогично для $\langle \eta \rangle$ и $\langle \eta^2 \rangle$). Далее осуществляется обход двумерной области и решение в каждой ячейке (с индексами r, s) линейной системы:

$$\begin{cases} \frac{\partial m}{\partial x}\Big|_{x=x_r, y=y_s} \Delta x + \frac{\partial m}{\partial y}\Big|_{x=x_r, y=y_s} \Delta y = m^* - m(x_r, y_s), \\ \frac{\partial \eta}{\partial x}\Big|_{x=x_r, y=y_s} \Delta x + \frac{\partial \eta}{\partial y}\Big|_{x=x_r, y=y_s} \Delta y = \eta^* - \eta(x_r, y_s). \end{cases}$$
(10)

Если выполнены условия $0 < \Delta x < \Delta h_x$ и $0 < \Delta y < \Delta h_y$, то решение найдено: $x^* = x_r + \Delta x, y^* = y_s + \Delta y$. Если же, по каким-либо причинам, нигде не удалось удовлетворить этому условию, то далее происходит поиск минимума функции $F(x, y) = |m(x, y) - m^*| + |\eta(x, y) - \eta^*|$ простым обходом всех сеточных значений.

Последнее замечание состоит в том, что в случае задания $\langle \eta \rangle^*$ и $\langle \eta^2 \rangle^*$ в качестве входных данных решается задача: $\langle \eta \rangle (\rho p, \lambda) = \langle \eta \rangle^*$ и $\nu(\rho p, \lambda) = \nu^*$,

где введена величина:

$$\nu(\rho p, \lambda) \equiv \langle \eta^2 \rangle(\rho p, \lambda) - \langle \eta^2 \rangle_{\mathrm{MFA}}(\tilde{p}(\rho p, \lambda)); \ \tilde{p}(\rho p, \lambda) = \mathcal{L}^{-1}\Big(\sqrt{\langle \eta \rangle(\rho p, \lambda)}\Big),$$

где \mathcal{L}^{-1} — обратная функция Ланжевена. В приближении среднего поля $\nu = 0$ и $\langle \eta^2 \rangle$ имеет вид:

$$\langle \eta^2 \rangle_{\mathrm{MFA}} = 1 - \frac{4}{p} \mathcal{L}(p) + \frac{6}{p^2} \mathcal{L}^2(p).$$

Вывод данного выражения приведен в приложении А.

Итак, имеются две постановки задачи:

$$\begin{cases} \langle m \rangle (\rho p, \lambda) = \langle m \rangle^* \quad \Rightarrow |\langle \eta^n \rangle (\rho p, \lambda) - \langle \eta^n \rangle^*|, n = 2, 3, 4, \\ \langle \eta \rangle (\rho p, \lambda) = \langle \eta \rangle^*. \end{cases}$$
(11)

$$\begin{cases} \langle \eta \rangle (\rho p, \lambda) = \langle \eta \rangle^*, \Rightarrow |\langle m \rangle (\rho p, \lambda) - \langle m \rangle^*|, |\langle \eta^n \rangle (\rho p, \lambda) - \langle \eta^n \rangle^*|, \\ \nu (\rho p, \lambda) = \nu^*. \end{cases}$$
(12)

6. Результаты аппроксимации двухчастичной функции распределения

На рисунках далее будут строиться зависимости величин либо от $\langle \eta \rangle, \nu$, либо от $\langle m \rangle, \langle \eta \rangle$. Предполагается взаимно-однозначное соответствие (которое, как будет видно далее, хорошо выполняется для первой пары параметров, а для второй выполняется только в некоторой области) между этими парами параметров и парой $\rho p, \lambda$. Отсюда следует, что можно строить зависимости средних величин либо от $\langle \eta \rangle, \nu$, либо от $\langle m \rangle, \langle \eta \rangle$. В таких координатах, в отличие от координат H_z, T , область определения имеет сложный вид.

На рис. 8 представлены результаты для точности аппроксимации, из которых можно сделать вывод, что аппроксимация работает хорошо (с абсолютной погрешностью, не превышающей порядка 0.01 во всей области, но в достаточно широкой области даже 0.001) в постановке (11). В области низких $T \approx 0.1$ погрешность обусловлена тем, что для таких температур требуются большие максимальные значения на численно построенных сетках в переменных ($\rho p, \lambda$).

Линии, ограничивающие область определения на рис. 8, имеют следующий смысл. Нижняя линия представляет собой зависимость $\langle \eta \rangle (\langle m \rangle) = \langle m \rangle^2$, что отвечает приближению среднего поля. Линия, соответствующая верхней границе, отвечает случаю $H_z = 0$.

В случае же постановки (12) ситуация хуже (рис. 12), но тем не менее выделяется область высоких полей $H_z \approx 1$ (рис. 10 г), для которой абсолютная ошибка составляет порядка 0.01 (для $\langle m \rangle$).



Рис. 8. Точность аппроксимации для равновесных величин в постановке (11) для SC решётки, J = 1 в координатах ($\langle m \rangle, \langle \eta \rangle$)



Рис. 9. Точность аппроксимации в неравновесном случае в постановке (11) для SC решётки. Параметры модели: $T = 3, H_z = 3.1, J = 1$

На рис. 10 представлены результаты аппроксимации в переменных (T, H_z) , откуда видно, что в постановке (12) довольно сложно определить значение $\langle m \rangle$ по $\langle \eta \rangle$, $\langle \eta^2 \rangle$ при низких H_z .

Кроме того, видно, что даже в неравновесном случае аппроксимация даёт хорошие результаты (рис. 9 и 13). В первом случае на протяжении всего времени абсолютная ошибка составляет не более 0.01, а во втором — порядка 0.01.

На рис. 11 представлена зависимость $\langle m \rangle(T)$, показывающая, что аппроксимация приемлема до момента фазового перехода, при котором $\langle m \rangle = 0$.

Результаты для других типов кристаллических решеток (FCC и VCC) представлены в приложении D.



Рис. 10. Точность аппроксимации для равновесных величин для SC решётки, J = 1 в координатах (T, H_z) . На рисунках (а-в) используется постановка (11), на (г-е) — постановка (12)



Рис. 11. Зависимость $\langle m \rangle(T)$ в постановке (12) при $H_z = 0, J = 1$



Рис. 12. Точность аппроксимации для равновесных величин в постановке (12) для SC решётки, J = 1



Рис. 13. Точность аппроксимации в неравновесном случае в постановке (12) для SC решётки. Параметры модели: $T = 3, H_z = 3.1, J = 1$

7. Заключение

В результате анализа результатов прямого численного моделирования классического магнетика Гейзенберга методом «атом-в-атом» установлено, что построенная аппроксимация двухчастичной функции распределения (5) [6,7] работает с хорошей степенью точности (старшие моменты восстанавливаются с погрешностью 0.01 в постановке (11) во всей области и с погрешностью 0.001 в некоторой широкой области).

Большой интерес представляет вид функций распределения $f(\frac{\eta_{ij}+\eta_{jk}}{2},\eta_{ik})$. Здесь фазовый переход происходит тогда, когда значение в точке парамагнитной фазы начинает преобладать над значением в точке ферромагнитной фазы.

Также важным результатом с фундаментальной точки зрения является тот факт, что построенная аппроксимация позволяет получать значение спонтанной намагниченности отдельной реализации на основе нелинейности двухчастичной функции распределения для ансамбля реализаций.

Список литературы

- Atomistic spin dynamics: foundations and applications / Olle Eriksson, Anders Bergman, Lars Bergqvist, Johan Hellsvik. — Oxford university press, 2017.
- [2] Модель анизотропии на скомпенсированном интерфейсе кубический ферромагнетик–антиферромагнетик со структурой Cu₃ Au (L1₂) / А.В. Иванов, Е.В. Зипунова, А.А. Книжник, А.Ф. Попков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018. № 63. С. 31. https://doi.org/10. 20948/prepr-2018-63.
- [3] Garanin Dmitry A. Fokker–Planck and Landau–Lifshitz–Bloch equations for classical ferromagnets // Physical Review B. — 1997. — Vol. 55, no. 5. — P. 3050.

- [4] Atxitia Unai, Hinzke Denise, Nowak Ulrich. Fundamentals and applications of the Landau–Lifshitz–Bloch equation // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2016. — Vol. 50, no. 3. — P. 033003.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] Иванов Антон Валерьевич, Зипунова Елизавета Вячеславовна, Хилков Сергей Андреевич. Уравнения корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2022. — Vol. 115, no. 3. — Р. 176–183.
- [8] 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. — по. 85. — Р. 12. https://doi.org/10.20948/prepr-2022-85.
- [9] Зипунова Е.В., Иванов А.В. Две новые численные схемы для моделирования магнетиков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2017. — № 140. — С. 18. — https://doi.org/10.20948/prepr-2017-140.
- [10] Ivanov Anton, Zipunova Elizaveta, Khilkov Sergey. Calculation of Integral Coefficients for Correlation Magnetodynamics and Verification of the Theory // 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.
- [11] Coffey William, Kalmykov Yu P. The Langevin equation: with applications to stochastic problems in physics, chemistry and electrical engineering. — World Scientific, 2012. — Vol. 27.
- [12] Бахвалов Николай Сергеевич, Жидков Николай Петрович, Кобельков Георгий Михайлович. Численные методы. — М.: Наука, 1973. — Vol. 632.

А. Выражения для средних величин в приближении среднего поля

В данном приложении приведен вывод для средних величин в приближении среднего поля (то есть при $\lambda = 0, \rho = 1$). Осуществим переход к углам:

$$d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j = d\phi_i d\phi_j d\theta_i d\theta_j \sin(\theta_i) \sin(\theta_j),$$

$$\mathbf{p}(\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_j) = p(\cos(\theta_i) + \cos(\theta_j)),$$

$$\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j = \sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \cos(\phi_i - \phi_j) + \cos(\theta_i) \cos(\theta_j).$$

Теперь стоит задача вычислять моменты вида $\langle g(\phi_i - \phi_j, \theta_i, \theta_j) \rangle$. Переходим к новым переменным $\psi = \phi_i, \chi = \phi_i - \phi_j, \psi \in [0, 2\pi], \chi \in [0, 2\pi]$. Модуль якобиана перехода равен 1. Интеграл по ψ даёт 2π . В итоге получаем:

$$\begin{split} \langle g(\chi,\theta_i,\theta_j) \rangle &= \frac{2\pi}{\mathfrak{Z}_{ij}^{(2)}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} d\chi d\theta_i d\theta_j g(\chi,\theta_i,\theta_j) \sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \times \\ &\times \exp[\rho p(\cos(\theta_i) + \cos(\theta_j)) + \lambda(\sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \cos(\chi) + \cos(\theta_i) \cos(\theta_j))]. \end{split}$$

Теперь все готово для того, чтобы вычислить нужные величины.

$$\langle \eta \rangle_{\rm MFA} = \langle m \rangle^2,$$

$$\mathfrak{Z}_{ij}^{(2)} = 4\pi^2 \frac{e^p - e^{-p}}{p} \int_{-1}^1 dx e^{px} = 4\pi^2 \left(\frac{e^p - e^{-p}}{p}\right)^2 = 16\pi^2 \frac{\mathrm{sh}^2(p)}{p^2},$$

$$\langle m \rangle_{\rm MFA} = \frac{p^2}{4 \, \mathrm{sh}^2(p)} \frac{2 \, \mathrm{sh}(p)}{p} \int_{-1}^1 dx x e^{px} = \frac{1}{\mathrm{th}(p)} - \frac{1}{p} := \mathcal{L}(p).$$

$$\begin{split} \langle \eta^2 \rangle_{\text{MFA}} &= \frac{2\pi}{\mathbf{3}_{ij}^{(2)}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} d\chi d\theta_i d\theta_j [\cos(\chi) \sin(\theta_i) \sin(\theta_j) + \cos(\theta_i) \cos(\theta_j)]^2 \times \\ &\times \sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \exp[p(\cos(\theta_i) + \cos(\theta_j))] = \\ &= \frac{2\pi^2}{\mathbf{3}_{ij}^{(2)}} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} d\theta_i d\theta_j [\sin^2(\theta_i) \sin^2(\theta_j) + 2\cos^2(\theta_i) \cos^2(\theta_j)] \times \\ &\times \sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \exp[p(\cos(\theta_i) + \cos(\theta_j))] = \\ &= \frac{2\pi^2}{\mathbf{3}_{ij}^{(2)}} \frac{4 \operatorname{sh}^2(p)}{p^2} \Big[\langle m_{\perp}^2 \rangle^2 + 2 \langle m_{\parallel}^2 \rangle^2 \Big] = \frac{1}{2} \Big[\langle m_{\perp}^2 \rangle^2 + 2 \langle m_{\parallel}^2 \rangle^2 \Big], \end{split}$$

где $m_{||}^2=m_z^2, m_{\perp}^2=m_x^2+m_y^2.$ Делая замену $\cos(heta_{i,j})=x_{i,j},$ получим:

$$\begin{split} \langle \eta^2 \rangle_{\rm MFA} &= \frac{2\pi^2}{\mathbf{3}_{ij}^{(2)}} \int\limits_{-1}^{1} \int\limits_{-1}^{1} dx_i dx_j (1 - x_i^2) (1 - x_j^2) \exp(p(x_i + x_j)) + \\ &+ \frac{4\pi^2}{\mathbf{3}_{ij}^{(2)}} \int\limits_{-1}^{1} \int\limits_{-1}^{1} dx_i dx_j x_i^2 x_j^2 \exp(\rho p(x_i + x_j)). \end{split}$$

Далее необходимо вычислять интегралы следующего вида через рекуррентные формулы:

$$I_n(p) = \int_{-1}^1 dx x^n \exp(px) = -\frac{n}{p} I_{n-1}(p) + \frac{2}{p} \begin{cases} ch(p), n = 2m + 1\\ sh(p), n = 2m \end{cases}$$

•

Начальное условие:

$$I_0(p) = \frac{2}{p}\operatorname{sh}(p).$$

Первые два интеграла:

$$I_1(p) = -\frac{2}{p^2}\operatorname{sh}(p) + \frac{2}{p}\operatorname{ch}(p),$$

$$I_2(p) = \frac{-2}{p} \Big(-\frac{2}{p^2} \operatorname{sh}(p) + \frac{2}{p} \operatorname{ch}(p) \Big) + \frac{2}{p} \operatorname{sh}(p) = \frac{2}{p^3} \Big(2 \operatorname{sh}(p) + p^2 \operatorname{sh}(p) - 2p \operatorname{ch}(p) \Big).$$

Средние значения квадратов соответствующих проекций магнитного момента:

$$\begin{split} \langle m_{||}^2 \rangle &= \frac{2\pi}{\mathfrak{Z}_i^{(1)}(p,0)} \frac{\mathrm{sh}(p)}{p} \int_0^\pi d\theta_i \sin(\theta_i) \cos^2(\theta_i) \exp(p \cos(\theta_i)) = \\ &= \frac{p}{2 \operatorname{sh}(p)} I_2(p) = \frac{1}{p^2} \Big[2 + p^2 - 2p \operatorname{cth}(p) \Big] = 1 - \frac{2\langle m \rangle}{p} \end{split}$$

И

$$\begin{split} \langle m_{\perp}^2 \rangle &= \frac{p}{2\operatorname{sh}(p)} \Big[I_0(p) - I_2(p) \Big] = \frac{p}{2\operatorname{sh}(p)} \frac{4\operatorname{sh}(p)}{p^3} \Big[p\operatorname{cth}(p) - 1 \Big] = \\ &= \frac{2}{p} \Big[\operatorname{cth}(p) - \frac{1}{p} \Big] = 1 - \langle m_{||}^2 \rangle. \end{split}$$

Среднее значение квадрата парной корреляции:

$$\begin{split} \langle \eta^2 \rangle_{\rm MFA} &= \frac{1}{2} \langle m_{\perp}^2 \rangle^2 + \langle m_{||}^2 \rangle^2 = \frac{1}{2} \langle m_{\perp}^2 \rangle^2 + \left(1 - \langle m_{\perp}^2 \rangle \right)^2 = \\ &= 1 - 2 \langle m_{\perp}^2 \rangle + \frac{3}{2} \langle m_{\perp}^2 \rangle^2 = 1 - \frac{4}{p} \mathcal{L}(p) + \frac{6}{p^2} \mathcal{L}^2(p) . \end{split}$$

В. Выражение для статистической суммы двухчастичной функции распределения через комплексную функцию ошибки Имеем: 1

$$Z^{(2)} = 8\pi^2 \int_{-1}^{1} e^{hx} \frac{\operatorname{sh}\left(\sqrt{h^2 + \lambda^2 + 2h\lambda x}\right)}{\sqrt{h^2 + \lambda^2 + 2h\lambda x}} \, dx,$$

где $h = \rho p$.

Сделаем замену $t = \sqrt{h^2 + \lambda^2 + 2h\lambda x}, \lambda \neq 0, h \neq 0$, тогда

$$x = \frac{t^2}{2h\lambda} - \frac{1}{2}\left(\frac{h}{\lambda} + \frac{\lambda}{h}\right) \to dt = \frac{t}{h\lambda}dt,$$

$$\Rightarrow Z^{(2)} = \frac{8\pi^2}{h\lambda} \int_{|h-\lambda|}^{|h+\lambda|} \operatorname{sh}(t) \exp\left(\frac{t^2}{2\lambda} - \frac{1}{2\lambda} \left(h^2 + \lambda^2\right)\right) dt.$$

Используя

$$\frac{t^2}{2\lambda} \pm t = \frac{1}{2\lambda} \left(t \pm \lambda \right)^2 - \frac{\lambda}{2},$$

получим

$$Z^{(2)} = \frac{4\pi^2}{h\lambda} \exp\left\{-\frac{1}{2\lambda} \left(h^2 + \lambda^2\right) - \frac{\lambda}{2}\right\} (I_1 - I_2),$$

$$I_1 = \int_{|h-\lambda|}^{|h+\lambda|} e^{\frac{1}{2\lambda}(t+\lambda)^2} dt = \int_{|h-\lambda|+\lambda}^{|h+\lambda|+\lambda} e^{\frac{1}{2\lambda}t^2} dt,$$

$$I_2 = \int_{|h-\lambda|}^{|h+\lambda|} e^{\frac{1}{2\lambda}(t-\lambda)^2} dt = \int_{|h-\lambda|-\lambda}^{|h+\lambda|-\lambda} e^{\frac{1}{2\lambda}t^2} dt.$$

Перепишем в терминах комплексной функции ошибки:

$$\int_{t_1}^{t_2} e^{at^2} dt = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left(\operatorname{erfi} \left(\sqrt{a}t_2 \right) - \operatorname{erfi} \left(\sqrt{a}t_1 \right) \right),$$

где $\operatorname{erfi}(x)$ – комплексная функция ошибки.

Тогда

$$Z^{(2)} = \frac{2\pi^2}{h} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}} e^{-\frac{1}{2\lambda}(h^2 + \lambda^2) - \frac{\lambda}{2}} \left(\operatorname{erfi}\left(\frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\left(|h + \lambda| + \lambda\right)\right) - \operatorname{erfi}\left(\frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\left(|h - \lambda| + \lambda\right)\right) - \operatorname{erfi}\left(\frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\left(|h - \lambda| - \lambda\right)\right) - \operatorname{erfi}\left(\frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\left(|h - \lambda| - \lambda\right)\right) \right),$$

Стоит обратить внимание, что $\lambda \neq 0,$ поэтому совпадение с приближением среднего поля достигается в пределе $\lambda \to 0.$

С. Соотношение для скалярных произведений трех единичных векторов

Пусть есть три единичных вектора **a**, **b**, **c**. Тогда верны соотношения:

$$(\mathbf{ab} + \mathbf{cb})^2 = (\mathbf{b}(\mathbf{a} + \mathbf{c}))^2 = |\mathbf{a} + \mathbf{c}|^2 \cos^2(\alpha)$$
$$= \cos^2(\alpha)(2 + 2\mathbf{ac}) < 2 + 2\mathbf{ac}$$
$$\Rightarrow \mathbf{ac} > \frac{(\mathbf{ab} + \mathbf{cb})^2}{2} - 1.$$





Рис. 14. Зависимости средних величин от температуры и внешнего магнитного поля для VCC решётки, J = 1



Рис. 15. Точность аппроксимации для равновесных величин в постановке (11) для VCC решётки, J = 1 в координатах ($\langle m \rangle, \langle \eta \rangle$)



Рис. 16. Точность аппроксимации в неравновесном случае в постановке (11) для VCC решётки. Параметры модели: $T = 3.1, H_z = 1.1, J = 1$



Рис. 17. Точность аппроксимации для равновесных величин для VCC решётки, J = 1 в координатах (T, H_z) . На рисунках а-в используется постановка (11), на г-е — постановка (12)



Puc. 18. Зависимость $\langle m \rangle(T)$ в постановке (12) для VCC решетки при $H_z=0,$ J=1



Рис. 19. Точность аппроксимации для равновесных величин в постановке (12) для VCC решётки, J = 1



Рис. 20. Точность аппроксимации в неравновесном случае в постановке (12) для VCC решётки. Параметры модели: $T = 3.1, H_z = 1.1, J = 1$



Рис. 21. Зависимости средних величин от температуры и внешнего магнитного поля для FCC решётки, J = 1



Рис. 22. Точность аппроксимации для равновесных величин в постановке (11) для FCC решётки, J = 1 в координатах $(\langle m \rangle, \langle \eta \rangle)$



Рис. 23. Точность аппроксимации в неравновесном случае в постановке (11) для FCC решётки. Параметры модели: $T = 3.1, H_z = 1.1, J = 1$



Рис. 24. Точность аппроксимации для равновесных величин для FCC решётки, J = 1 в координатах (T, H_z) . На рисунках а – в используется постановка (11), на г–е — постановка (12)



Puc.25. Зависимость $\langle m \rangle (T)$ в постановке (12) для FCC решетки при $H_z=0,$ J=1



Рис. 26. Точность аппроксимации для равновесных величин в постановке (12) для FCC решётки, J = 1



Рис. 27. Точность аппроксимации в неравновесном случае в постановке (12) для FCC решётки. Параметры модели: $T = 3.1, H_z = 1.1, J = 1$