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

Препринты ИПМ • Препринт № 47 за 2024 г.

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

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

Простейшая аппроксимация интегральных коэффициентов в уравнениях корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Иванов А.В., Лукьянов А.В., Замятин С.В. Простейшая аппроксимация интегральных коэффициентов в уравнениях корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2024. № 47. 22 с.
https://doi.org/10.20948/prepr-2024-47
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2024-47

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. КЕЛДЫША
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

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

Простейшая аппроксимация интегральных коэффициентов в уравнениях корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков

Москва — 2024

Иванов А.В., Лукьянов А.В., Замятин С.В.
e-mail: aiv.racs@gmail.com

Простейшая аппроксимация интегральных коэффициентов в уравнениях корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков

Уравнения корреляционной магнитодинамики (CMD) описывают магнетик в приближении сплошной среды. Основной проблемой при построении CMD является расчет интегральных коэффициентов, в особенности коэффициента, описывающего производство ближнего порядка, зависящего от трехчастичных функций распределения и структуры кристаллической решетки.

В работе приводятся простейшие аппроксимации для интегральных коэффициентов CMD, основанные на значении парных корреляций в точке фазового перехода. Для обеспечения равновесного решения коэффициенты доопределяются в верхней части фазовой плоскости из предположения о геликоидальной структуре намагниченности. Полученная аппроксимация обеспечивает качественное согласие с результатами моделирования в рамках исходной атомистической модели магнетика и в то же время оказывается достаточно простой для дальнейшего анализа.

Ключевые слова: уравнения Ландау–Лифшица, уравнения Ландау–Лифшица–Блоха, уравнения корреляционной магнитодинамики

Anton Valeryevich Ivanov, Andrei Vladimirovich Lukianov, Sergei Vladimirovich Zamiatin
e-mail: aiv.racs@gmail.com

The simplest approximation of integral coefficients in the equations of correlational magnetodynamics for ferromagnets

The equations of correlational magnetodynamics (CMD) describe a magnet in the continuum approximation. The main problem in constructing CMD is the calculation of integral coefficients, in particular, the coefficient describing the production of short-range order, depending on the three-particle distribution functions and the structure of the crystal lattice.

The work provides the simplest approximations for the integral coefficients of CMD based on the value of pair correlations at the phase transition point. To ensure an equilibrium solution, the coefficients are additionally determined in the upper part of the phase plane according to the assumption of a helical magnetization structure. The resulting approximation provides qualitative agreement with the simulation results within the framework of the original atomistic model of the magnet, and at the same time it turns out to be simple enough for further analysis.

Keywords: Landau–Lifshitz equations, Landau–Lifshitz–Bloch equations, correlational magnetodynamics

Содержание

1. Введение

Классический магнетик Гейзенберга может быть описан как 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-в-атом» позволяет численно изучать множество физических эффектов, включая магнитные фазовые переходы в различных типах кристаллических решеток с учетом дефектов [2].

Для разработки устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники 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.

До недавних пор наиболее полной моделью сплошной среды для магнетика являлось уравнение Ландау–Лифшица–Блоха (УЛЛБ) [3–5], полученное из атомистической модели магнетика при помощи цепочки Боголюбова в приближении среднего поля. Однако в магнетиках основную роль играет сильное локальное обменное взаимодействие, которое априори не может быть описано в рамках приближения среднего поля, 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 CMD дают значительно лучшее согласие с результатами моделирования «атом-в-атом», чем УЛЛБ.

Основным недостатком CMD является сложность вычисления интегральных коэффициентов, особенно коэффициента $\mathcal{Q}$, зависящего от трехчастичных функций распределения. В данной работе приведены простейшие аппроксимации интегральных коэффициентов CMD, сохраняющие качественное поведение решения, но при этом достаточно простые для дальнейшего анализа. Показано, что УЛЛБ отвечает частному равновесному случаю CMD в отсутствие внешнего поля и анизотропии. Важным дополнением является аппроксимация коэффициентов в верхней неравновесной области фазового пространства, основанные на предположении о геликоидальной структуре намагниченности.

2. Основные уравнения

Эволюция магнитных моментов отдельных атомов в модели классического магнетика Гейзенберга описывается системой стохастических уравнений Ландау–Лифшица [1]:

$$\dot{\mathbf{m}}_i = \gamma\big[\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\mathrm{eff}}\big] - \alpha\gamma\Big[\mathbf{m}_i \times \big[\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\mathrm{eff}}\big]\Big] + \sqrt{2\alpha\gamma T}\big[\mathbf{m}_i \times \boldsymbol{\xi}_i(t)\big]; \tag{1}$$

$$\mathbf{H}_i^{\mathrm{eff}} = -\nabla_{\mathbf{m}_i}\Big(W^{\mathrm{exch}} + W^{\mathrm{an}} + W^{\mathrm{ext}}\Big) = \mathbf{H}_i^{\mathrm{exch}} + \mathbf{H}_i^{\mathrm{an}} + \mathbf{H}^{\mathrm{ext}};$$

$$W^{\mathrm{exch}} = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\big(\mathbf{m}_i{\cdot}\mathbf{m}_j\big), \quad W^{\mathrm{an}} = -K\sum_i \big(\mathbf{n}_K{\cdot}\mathbf{m}_i\big)^2, \quad W^{\mathrm{ext}} = -\sum_i \mathbf{m}_i{\cdot}\mathbf{H}^{\mathrm{ext}};$$

$$\mathbf{H}_i^{\mathrm{exch}} = \sum_j J_{ij}\mathbf{m}_j, \qquad \mathbf{H}_i^{\mathrm{an}} = 2K\mathbf{n}_K\big(\mathbf{n}_K\cdot\mathbf{m}_i\big),$$

где γ — гиромагнитное соотношение; α — параметр затухания; $\mathbf{H}^{\mathrm{eff}}$ — 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 $\mathbf{m}_i$; $\mathbf{H}^{\mathrm{exch}}$ — поле обменного взаимодействия, J_{ij} — обменный интеграл (как правило, отличен от нуля только для ближайших соседей); $\mathbf{H}^{\mathrm{an}}$ — поле анизотропии типа легкая ось или легкая плоскость, K — параметр анизотропии, $\mathbf{n}_K$ — направление оси анизотропии, $|\mathbf{n}_K| = 1$. Здесь не учитывается диполь–дипольное (магнитостатическое) взаимодействие.

Все выражения записаны в безразмерной системе единиц: $T = \dfrac{T^* k_B}{J}$, $\quad \mathbf{m}_i =$

$= \dfrac{\mathbf{m}_i^*}{\mu}$, $\quad J_{ij} = \dfrac{J_{ij}^*}{J}$, $\quad \gamma = \dfrac{m_e}{e}\gamma^*$, $\quad t = \dfrac{\mu m_e}{eJ}t^*$, $\quad \mathbf{H} = \dfrac{\mu}{J}\mathbf{H}^*$, где размерные величины помечены знаком *, J — значение обменного интеграла, μ — магнитный момент атома, e — заряд электрона, m_e — масса электрона, k_B — постоянная Больцмана.

Система (1) может быть решена численно модифицированным методом Рунге–Кутты четвертого порядка [8], полученные таким образом решения мы будем рассматривать как эталонные для верификации построенной далее модели CMD.

От (1) можно строго перейти к N–частичному уравнению Фоккера–Планка. Замыкая цепочку Боголюбова в приближении среднего поля $f_{ij}^{(2)} \approx f_i^{(1)} f_j^{(1)}$ (где $f^{(2)}$ — двухчастичная, $f^{(1)}$ — одночастичная функции распределения) и интегрируя полученное уравнение Фоккера–Планка с множителем $\mathbf{m}$ можно получить* УЛЛБ на среднюю намагниченность $\langle \mathbf{m} \rangle(\mathbf{r}, t)$ [3]:

$$
\begin{aligned}
&\langle \dot{\mathbf{m}} \rangle = -\gamma \langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\mathrm{L}} - 2\gamma K(\mathbf{\Phi} - \alpha \mathbf{\Theta}) + \gamma\alpha \widehat{\Xi} \cdot \big(\mathbf{H}^{\mathrm{L}} + \varepsilon_G n_b J \langle \mathbf{m} \rangle\big) - 2\gamma\alpha T \langle \mathbf{m} \rangle, \\
&\mathbf{H}^{\mathrm{L}} = a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \mathbf{H}^{\mathrm{ext}}, \qquad \widehat{\Xi} = \Big\langle \widehat{I} - \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \Big\rangle, \qquad \Xi_{ii} \geq 0, \\
&\mathbf{\Phi} = \big\langle \mathbf{m} \times \mathbf{n}_K \big(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K\big)\big\rangle, \qquad \mathbf{\Theta} = -\big\langle \mathbf{m} \times \big[\mathbf{m} \times \mathbf{n}_K\big]\big(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_K\big)\big\rangle,
\end{aligned}
\tag{2}
$$

где n_b — число ближайших соседей атома; a — расстояние между атомами; $\varepsilon_G \sim 0.8$ — зависящий от типа кристаллической решетки множитель, обусловленный флуктуациями среднего поля [9]; $\widehat{I}$ — единичная матрица; $\otimes$ — символ тензорного произведения. В $\mathbf{H}^{\mathrm{L}}$ включены члены, отвечающие за взаимодействие на масштабах больших или равных размеру физически бесконечно малого обьема. В отличии от уравнения сплошной среды Ландау–Лифшица, УЛЛБ дополнительно описывает изменение модуля средней намагниченности $\langle m \rangle$ за счет температуры и различных полей, включая фазовый переход ферромагнетик–парамагнетик.

Для учета корреляций между ближайшими соседями, вместо приближения среднего поля, двухчастичная функция распределения с достаточно высокой точностью [10] аппроксимируется как

$$
\begin{aligned}
f_{ij}^{(2)} &\approx \frac{1}{Z_{ij}^{(2)}} \Big[f_i(\mathbf{m}_i, t)\, f_j(\mathbf{m}_j, t)\Big]^{\rho} e^{\lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}, \\
Z_{ij}^{(2)} &= \iint\limits_{S_2} \Big[f_i(\mathbf{m}_i, t)\, f_j(\mathbf{m}_j, t)\Big]^{\rho} e^{\lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}\, d\mathbf{m}_i\, d\mathbf{m}_j,
\end{aligned}
\tag{3}
$$

*Здесь мы сменили знаки перед $\widehat{\Xi}$ и $\mathbf{\Theta}$ по сравнению с теми обозначениями, что были введены в предыдущих работах.

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 $f_i \approx \int\limits_{S_2} f_{ij}^{(2)}\, d\mathbf{m}_j$. Проще всего получить ρ из уравнения $\langle \mathbf{m} \rangle = \iint\limits_{S_2} \mathbf{m}_i\, f_{ij}^{(2)}\, d\mathbf{m}_i\, d\mathbf{m}_j$. Такая аппроксимация применима для любой двухчастичной функции распределения, но нас будут интересовать функции для ближайших соседей.

При $\lambda \ll 1$ аппроксимация (3) переходит в приближение среднего поля и $\rho \to 1$. При $\lambda \gg 1$ экспонента в аппроксимации (3) 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 $Z^{(2)}$ аппроксимация (3) имеет размерность двухчастичной функции распределения.

Уровень парных корреляций задается величиной

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

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

Замыкая цепочку Боголюбова аппроксимацией (3) получаем систему уравнений CMD [6, 7][†]:

$$\dot{\langle \mathbf{m} \rangle} = -\gamma \langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\mathrm{L}} - 2\gamma K(\mathbf{\Phi} - \alpha \mathbf{\Theta}) + \gamma\alpha \widehat{\Xi} \cdot \mathbf{H}^{\mathrm{L}} + 2\gamma\alpha \big(n_b J \Upsilon - T\big) \langle \mathbf{m} \rangle, \quad (4)$$

$$\frac{\dot{\langle \eta \rangle}}{4\alpha\gamma} = \mathbf{H}^{\mathrm{L}} \cdot \langle \mathbf{m} \rangle \Upsilon + K\Psi + J\mathcal{Q} - T\langle \eta \rangle, \qquad \Upsilon = \frac{1-\rho}{\lambda}, \quad (5)$$

$$\Psi = -\Big\langle \mathbf{m}_i \cdot \big[\mathbf{m}_j \times [\mathbf{m}_j \times \mathbf{n}_K]\big] (\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{n}_K) \Big\rangle \approx$$
$$\approx \Big[1.3836 \cdot \big(\mathbf{n}_K \cdot \langle \mathbf{m} \rangle\big)^2 - 0.46134 \cdot \langle m \rangle^2\Big] \big(1 - \langle \eta \rangle\big) \langle m \rangle,$$

$$\mathcal{Q} = -\frac{1}{2} \left[\langle \eta^2 \rangle - 1 + \sum_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{n_b} \Big\langle \mathbf{m}_i \cdot \big[\mathbf{m}_j \times [\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k]\big] \Big\rangle \right], \qquad \mathcal{Q} \geq 0,$$

суммирование ведется по всем соседям атома j, кроме атома i. Коэффициенты Υ, Ψ, $\mathcal{Q}$ удобно рассматривать как функции переменных $\langle m \rangle$ и $\langle \eta \rangle$. Уравнения (2) и (4) отличаются членами $\varepsilon_G \widehat{\Xi} \cdot \langle \mathbf{m} \rangle$ и $\Upsilon \langle \mathbf{m} \rangle$. Кроме того, по сравнению с традиционным УЛЛБ (2), CMD оперирует расширенным фазовым пространством — в дополнение к средней намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle$ вводится средний уровень парных корреляций $\langle \eta \rangle$.

[†]Здесь мы сменили знаки перед коэффициентами Ψ и $\mathcal{Q}$ по сравнению с тем, что было в предыдущих работах.

Средняя намагниченность $\langle \mathbf{m} \rangle$ играет роль параметра дальнего, на масштабах размера физически бесконечно малого обьема, порядка. Уровень парных корреляций $\langle \eta \rangle$ играет роль параметра ближнего, на масштабах межатомного расстояния, порядка. В (4) обменное поле внутри бесконечно малого объема проявляется как антидиффузия с коэффициентом $n_b J \Upsilon$ отвечающая за производство дальнего порядка в пространстве направлений магнитного момента, в то время как температурные флуктуации создают диффузию с коэффициентом T. Конкуренция этих процессов приводит к установлению равновесного значения средней намагниченности $\langle m \rangle$, в том числе и к фазовому переходу. Член $\mathcal{Q}$ зависит от техчастичных функций распределения и описывает производство ближнего порядка за счет обменного поля внутри физически бесконечно малого объема.

3. Моменты одночастичной функции распределения

Величины $\mathbf{\Phi}$, $\mathbf{\Theta}$ и $\widehat{\Xi}$ являются старшими моментами одночастичной функции распределения f, и для их выражения через известную величину $\mathbf{m}$ необходимо ввести аппроксимацию f:

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

где $\mathbf{p}$ — параметр аппроксимации. Для вычисления старших моментов f удобно ввести функцию

$$\mu_p\big(\langle m \rangle\big) \equiv \frac{\langle m \rangle}{p}, \qquad \lim_{p\to 0} \mu_p = \frac{1}{3}, \qquad \mu_p \approx \frac{1}{p} \approx 1 - \langle m \rangle \quad \text{при} \quad p \gg 1,$$

$$\left\langle m_p^2 \right\rangle = 1 - 2\mu_p, \qquad \left\langle m_{\perp p}^2 \right\rangle = \mu_p, \qquad \left\langle m_p^3 \right\rangle = \frac{\langle m \rangle^2 - 2\mu_p + 6\mu_p^2}{\langle m \rangle},$$

где $\left\langle m_p^n \right\rangle = \langle (\mathbf{m}\cdot\mathbf{p})^n \rangle / p^n$, $\left\langle m_{\perp p}^2 \right\rangle$ компонента второго момента $\mathbf{m} \perp \mathbf{p}$. В практических целях функция μ_p может быть аппроксимирована с точностью 10^{-5}:

$$\mu_p \approx \frac{1}{3}\Bigg[1 - \Big(0.775383 \cdot \langle m \rangle + 0.109185 \cdot \langle m \rangle^3 + 0.289114 \cdot \langle m \rangle^5 - \\ - 0.871214 \cdot \langle m \rangle^7 + 1.85968 \cdot \langle m \rangle^9 - 1.71306 \cdot \langle m \rangle^{11} + 0.550912 \cdot \langle m \rangle^{13}\Big)^2\Bigg].$$

Кроме того, удобно ввести функцию ν_p и аппроксимировать ее с точностью не хуже $5 \cdot 10^{-5}$ (применение аппроксимации μ_p для вычисления ν_p приводит к

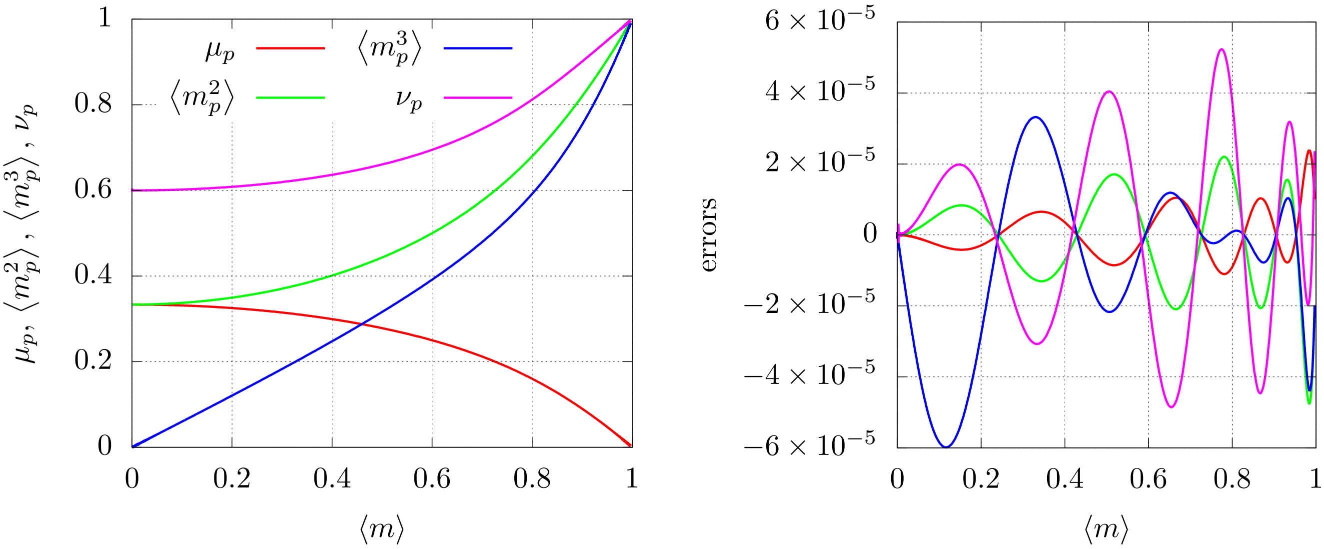

Рис. 1. Зависимости μ_p, $\langle m_p^{2,3}\rangle$ и ν_p от $\langle m\rangle$ и ошибки их аппроксимации

большим ошибкам при малых $\langle m\rangle$):

$$\nu_p(\langle m\rangle) \equiv \frac{1-3\mu_p}{\langle m\rangle^2} \approx \frac{3}{5} + 0.207788\cdot\langle m\rangle^2 + 0.0567754\cdot\langle m\rangle^4 + \\ + 0.754031\cdot\langle m\rangle^6 - 2.99459\cdot\langle m\rangle^8 + 7.017465\cdot\langle m\rangle^{10} - \\ - 8.202352\cdot\langle m\rangle^{12} + 4.461292\cdot\langle m\rangle^{14} - 0.90036\cdot\langle m\rangle^{16},$$

см. рис. 1.

В [5] были получены приближенные аппроксимации для $\mathbf{\Phi}$, $\mathbf{\Theta}$ и $\widehat{\Xi}$, здесь мы приводим точные аналитические выражения, которые могут быть найдены дифференцированием:

$$\mathbf{\Phi} = \left[\frac{\mathbf{n}_K}{\mathcal{Z}(p)} \times \nabla_{\mathbf{p}} \frac{\partial \mathcal{Z}(|\mathbf{p}+\epsilon\mathbf{n}_K|)}{\partial\epsilon}\bigg|_{\epsilon=0}\right] = \left[\langle\mathbf{m}\rangle \times \mathbf{n}_K\right]\left(\langle\mathbf{m}\rangle\cdot\mathbf{n}_K\right)\nu_p,$$

$$\mathbf{\Theta} = (\langle\mathbf{m}\rangle\cdot\mathbf{n}_K)\mathbf{n}_K - \left\langle(\mathbf{m}\cdot\mathbf{n}_K)^2\mathbf{m}\right\rangle = (\langle\mathbf{m}\rangle\cdot\mathbf{n}_K)\mathbf{n}_K - \nabla_{\mathbf{p}}\frac{\partial^2\mathcal{Z}(|\mathbf{p}+\epsilon\mathbf{n}_K|)}{\partial\epsilon^2}\bigg|_{\epsilon=0} = \\ = \mu_p\nu_p\left\{5\langle\mathbf{m}\rangle\frac{(\langle\mathbf{m}\rangle\cdot\mathbf{n}_K)^2}{\langle m\rangle^2} - \langle\mathbf{m}\rangle - 2\mathbf{n}_K\left(\langle\mathbf{m}\rangle\cdot\mathbf{n}_K\right)\right\} - \\ - \left[\langle\mathbf{m}\rangle \times \left[\langle\mathbf{m}\rangle\times\mathbf{n}_K\right]\right]\frac{\langle\mathbf{m}\rangle\cdot\mathbf{n}_K}{\langle m\rangle^2},$$

$$\Xi_{ij} = \delta_{ij} - \langle m_i m_j\rangle = \delta_{ij} - \frac{1}{\mathcal{Z}(p)}\frac{\partial^2\mathcal{Z}(|\mathbf{p}|)}{\partial p_i\partial p_j} = \delta_{ij}(1-\mu_p) - \langle m\rangle_i\langle m\rangle_j\nu_p.$$

В одноосном случае, при $\langle\mathbf{m}\rangle = (0{,}0{,}\langle m\rangle)$ и $\langle\mathbf{m}\rangle \parallel \mathbf{H}^{\mathrm{L}} \parallel \mathbf{n}_K$, выражения значительно упрощаются:

$$\boldsymbol{\Phi} = 0, \quad \boldsymbol{\Theta} = \Big(0, 0, 2\langle m\rangle\mu_p\nu_p\Big), \quad \lim_{\langle m\rangle\to 0}\Theta_z = 0, \quad \widehat{\Xi}\cdot\mathbf{H}^{\mathrm{L}} = \Big(0, 0, 2\mu_p H^{\mathrm{L}}\Big). \quad (6)$$

4. Моменты двухчастичной функции распределения и вклад в производство параметра дальнего порядка

В приближении среднего поля $\lambda = 0$ и $\langle\eta\rangle = \langle\mathbf{m}\rangle^2$, ниже этой параболы находится нефизичная область фазового пространства, то есть все двухчастичные интегральные коэффициенты оказываются заданы в криволинейной системе координат $\langle m\rangle \in [0{,}1]$, $\langle\eta\rangle \in [\langle\mathbf{m}\rangle^2{,}1]$. В некоторых случаях оказывается удобно вместо $\langle\eta\rangle$ ввести переменную ζ:

$$\zeta = \frac{\langle\eta\rangle - \langle m\rangle^2}{1 - \langle m\rangle^2}, \qquad 1 - \zeta = \frac{1 - \langle\eta\rangle}{1 - \langle m\rangle^2}, \qquad \langle\eta\rangle = \zeta + (1-\zeta)\langle m\rangle^2,$$

изолинии $\zeta = \mathrm{const}$ отвечают параболам.

Для проведения расчетов необходима аппроксимация выражения $\langle m\rangle\Upsilon$ как функции параметров $\langle m\rangle$, $\langle\eta\rangle$ [11]. Поскольку известны асимптотики

$$\langle m\rangle\Upsilon\Big|_{\langle m\rangle=0} = 0, \qquad \Upsilon\Big|_{\langle\eta\rangle=1} = 0, \qquad \langle\eta\rangle\Big|_{\lambda=0} = \langle m\rangle^2, \qquad \langle m\rangle\Upsilon\Big|_{\lambda=0} = \mu_p\langle m\rangle,$$

то базовой аппроксимацией для $\langle m\rangle\Upsilon$ является выражение

$$\langle m\rangle\Upsilon_0 \approx \frac{1 - \langle\eta\rangle}{1 - \langle m\rangle^2}\mu_p\langle m\rangle = \langle m\rangle(1-\zeta)\mu_p, \quad (7)$$

что обеспечивает максимальный уровень абсолютной ошибки порядка 10^{-2}, рис. 2.

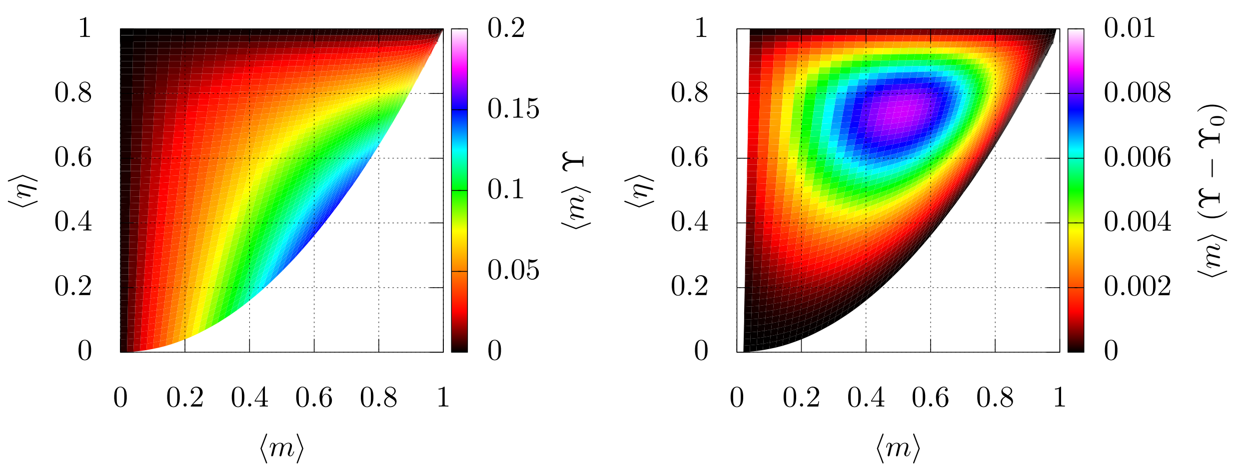

Рис. 2. Вид зависимости $\langle m\rangle\Upsilon(\langle m\rangle, \langle\eta\rangle)$ и ошибка аппроксимации $\langle m\rangle\Upsilon_0$

Если предположить, что в отсутствие внешнего поля и анизотропии равновесное значение $\zeta \approx \langle\eta\rangle_c = \text{const}$, то из первого уравнения CMD (4) следует

$$T = n_b J \Upsilon \approx n_b J \Big(1 - \langle\eta\rangle_c\Big)\mu_p, \qquad \varepsilon_G \approx 1 - \langle\eta\rangle_c, \tag{8}$$

что в точности отвечает равновесному решению УЛЛБ (2). Это выражение объясняет возникновение флуктуаций среднего поля [9] и появление множителя ε_G в УЛЛБ, а также связывает значение температуры, обменного интеграла и уровень парных корреляций $\langle\eta\rangle_c$ в области фазового перехода, что может представлять интерес для определения обменной энергии в эксперименте.

5. Моменты трехчастичной функции распределения и вклад в производство параметра ближнего порядка

Наибольшую сложность представляет расчет интегрального коэффициента $\mathcal{Q}$, описывающего производство параметра ближнего порядка за счет обменного поля внутри физически бесконечно малого обьема. Коэффициент $\mathcal{Q}$ содержит информацию о кристаллической решетке и зависит от трехчастичных функций распределения, которые могут быть оценены на основе различных предположений [7, 11].

Другой путь получения $\mathcal{Q}$ — это анализ результатов прямых расчетов в рамках модели «атом-в-атом» (1) в отсутствие анизотропии. Пусть в результате таких расчетов получены равновесные значения $\langle m\rangle^*$, $\langle\eta\rangle^*$ как функции T, H^{ext}. Подставляя их в уравнения CMD нетрудно получить

$$\Upsilon^* = \frac{1}{n_b J}\left[T - \frac{H^{\text{ext}}\mu_p^*}{\langle m\rangle^*}\right], \qquad \mathcal{Q}^* = \frac{\langle\eta\rangle^* T - \langle m\rangle^*\Upsilon^* H^{\text{ext}}}{J}. \tag{9}$$

Мы будем рассматривать три типа кубических кристаллических решеток — примитивную (SC), объемоцентрированную (VCC) и гранецентрированную (FCC). Нетрудно видеть (рис. 3), что при $H^{\text{ext}} = 0$ зависимости $\langle\eta\rangle^*\big(\langle m\rangle^*\big)$ для разных решеток действительно близки к параболам с различными уровнями парных корреляций $\langle\eta\rangle_c$ в области фазового перехода. По мере увеличения внешнего поля H^{ext} зависимость $\langle\eta\rangle^*\big(\langle m\rangle^*\big)$ становится ближе к параболе $\langle m\rangle^2$, отвечающей приближению среднего поля — если внешнее поле превышает обменное поле $n_b J$, то обменным полем можно пренебречь и система начинает вести себя как парамагнетик. На практике такие поля недостижимы, актуальными являются значения поля $H^{\text{ext}} \ll J$.

Получение $\mathcal{Q}$ на основе результатов моделирования «атом-в-атом» является сложной задачей, требующей проведения большого объема расчетов с последующей нетривиальной обработкой. Получаемая в итоге сеточная функция может быть аналитически аппроксимирована полиномом от $\langle m\rangle$, $\langle\eta\rangle$ для

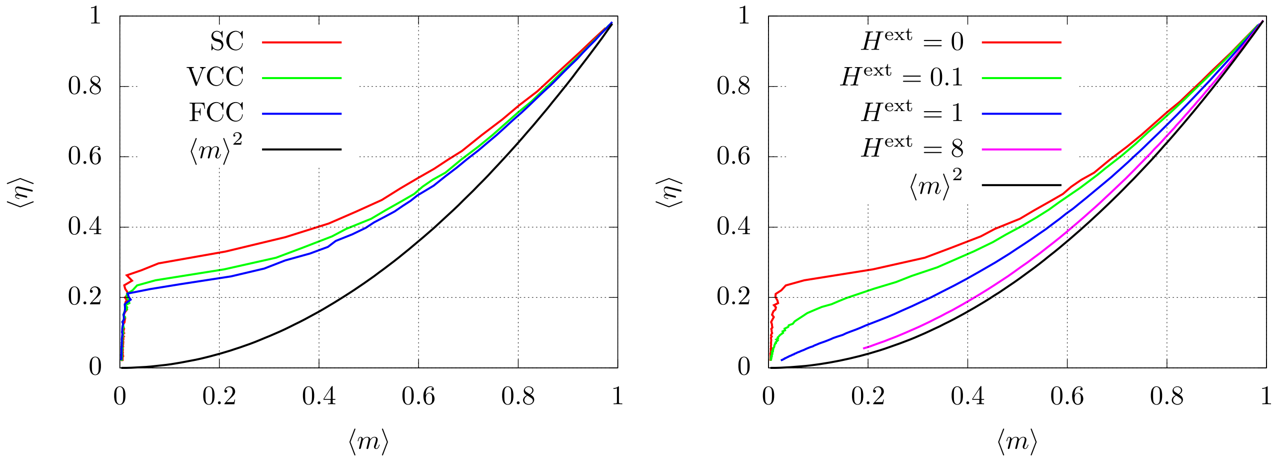

Рис. 3. Зависимости $\langle\eta\rangle^*(\langle m\rangle^*)$ для различных типов кристаллических решеток при $H^{\text{ext}} = 0$ (слева) и аналогичные зависимости для VCC решетки при различных значениях H^{ext} (справа)

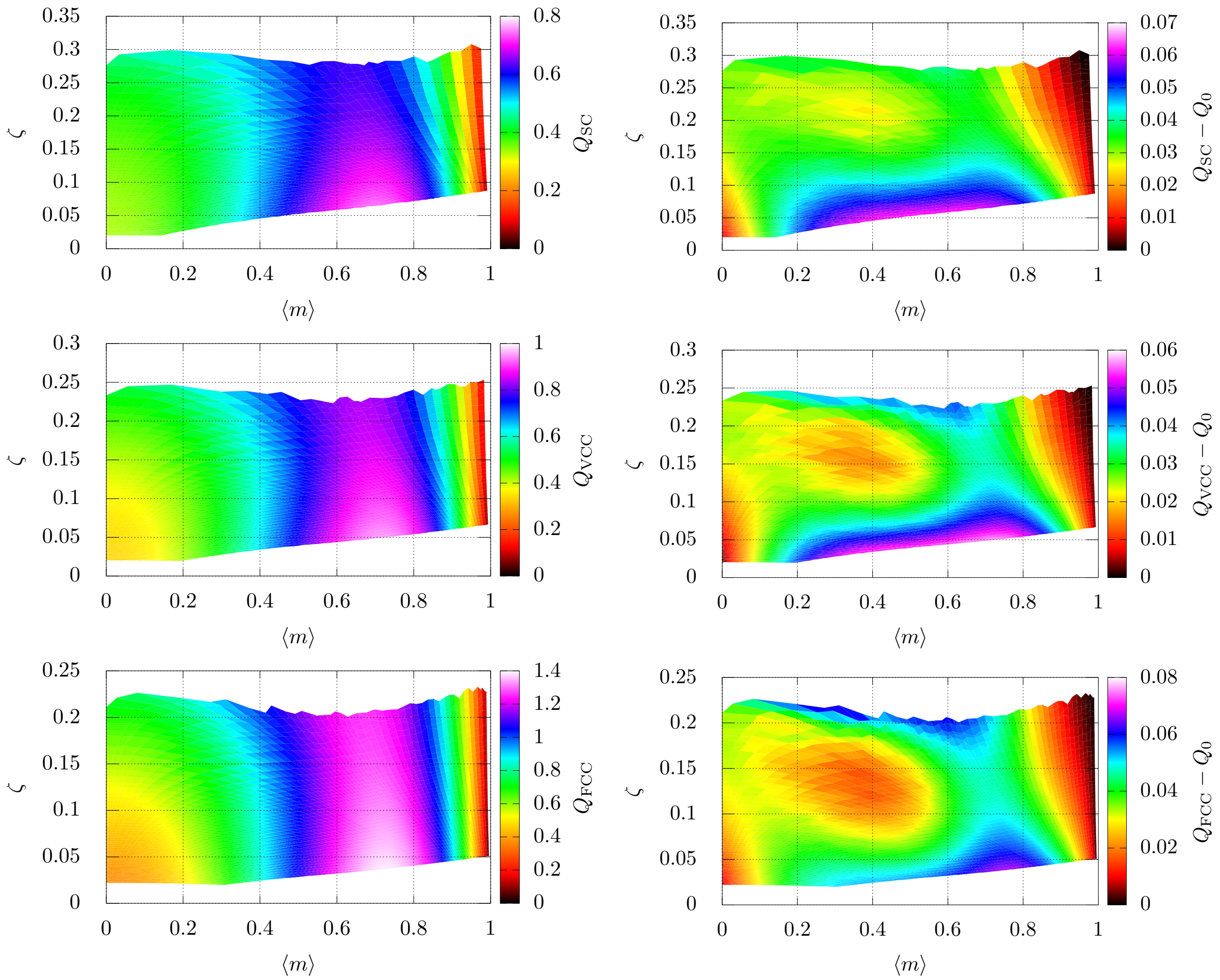

Рис. 4. Полученные на основе моделирования «атом-в-атом» зависимости $\mathcal{Q}(\langle m\rangle, \zeta)$ и ошибки базовой аппроксимации $\mathcal{Q}_0$ для различных кристаллических решеток

практического использования. Детальное описание таких расчетов выходит за рамки данной работы, здесь мы приведем только итоговый вид $\mathcal{Q}(\langle m\rangle, \zeta)$ для трех кристаллических решеток и ошибку их простейшей аппроксимации.

В приближении среднего поля

$$\mathcal{Q}_{\lambda=0} = -\mu_p\left[3\mu_p - (n_b-1)\langle m\rangle^2 - 2\right], \qquad \lim_{\langle m\rangle\to 0}\mathcal{Q}_{\lambda=0} = \frac{1}{3},$$

т.е. согласно второму уравнению CMD (5) $\lim\limits_{T\to\infty}\langle\eta\rangle T = \dfrac{1}{3}$.

Поскольку при $\langle m\rangle = 1$ производство ближнего порядка равно нулю, очевидной асимптотикой является $\lim\limits_{\langle m\rangle\to 1}\mathcal{Q} = 0$.

Подставляя (8) во второе уравнение CMD (5) получаем в равновесном случае при отсутствии внешнего поля и анизотропии выражение для $\mathcal{Q}$:

$$\mathcal{Q}|_{\zeta=\langle\eta\rangle_c} \approx n_b J\Upsilon\langle\eta\rangle \approx n_b J(1-\zeta)\mu_p\langle\eta\rangle.$$

Это выражение должно быть дополнено слагаемым, гладко походящим к значению $\mathcal{Q}|_{\zeta=\langle\eta\rangle_c}$ и отвечающим пределам $\lim\limits_{\langle m\rangle\to 0}\mathcal{Q}_{\lambda=0} = \dfrac{1}{3}$, $\lim\limits_{\langle m\rangle\to 1}\mathcal{Q} = 0$, что дает в итоге простейшую аппроксимацию

$$\mathcal{Q}_0 \approx n_b(1-\zeta)\mu_p\langle\eta\rangle + \left(1-\frac{\zeta}{\langle\eta\rangle_c}\right)^2\frac{1-\langle m\rangle}{3}, \tag{10}$$

с уровнями абсолютной и относительной ошибки не хуже $5\cdot 10^{-2}$ в актуальном диапазоне параметров, рис. 4. Примечательно, что для построения такой аппроксимации $\mathcal{Q}$ требуется только предположение о $\zeta = \mathrm{const}$ при $H^{\mathrm{ext}} = 0$ и знание уровня парных корреляций $\langle\eta\rangle_c$ (или флуктуаций среднего поля) в области фазового перехода. Мы использовали следующие значения $\langle\eta\rangle_c$:

решетка	SC	VCC	FCC
$\langle\eta\rangle_c$	0.29	0.242	0.22
$1-\langle\eta\rangle_c$	0.71	0.758	0.78
ε_G	0.75	0.787	0.8

Несовпадение величин $1-\langle\eta\rangle_c$ и ε_G обусловлено тем, что величина ε_G определяется по критической температуре и отвечает значению $1-\langle\eta\rangle^*$ в точке фазового перехода, в то время как для наилучшего совпадения с результатами моделирования «атом-в-атом» величина $\langle\eta\rangle_c$ определяется на всей области $\langle m\rangle \in [0,1]$ как

$$\langle\eta\rangle_c \approx \int_0^1 \zeta^*(\langle m\rangle)\, d\langle m\rangle.$$

6. Влияние геликоидальной структуры намагниченности в неравновесной области фазового пространства

Постановка задачи позволяющая рассчитывать коэффициенты Υ^*, $\mathcal{Q}^*$ (9) хорошо раскрывает неявные предположения, в которых была получена CMD. Есть два управляющих параметра — температура T^* и внешнее поле H^*, которым взаимно однозначно, в состоянии равновесия, отвечают внутренние параметры дальнего порядка $\langle m\rangle = |\langle \mathbf{m}\rangle|$ и ближнего порядка $\langle\eta\rangle$. Поскольку при переходе к сплошной среде вводится физически бесконечно малый объем, то параметры $\langle \mathbf{m}\rangle(\mathbf{r},t)$, $\langle\eta\rangle(\mathbf{r},t)$ описывают состояние такого объема в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t. Очевидно, что в физически бесконечно малом объеме существует множество различных конфигураций магнитных моментов атомов отвечающих значениям заданным $\langle \mathbf{m}\rangle$, $\langle\eta\rangle$. Описывая систему в рамках CMD из всего этого множества конфигураций мы выбираем только те конфигурации, которые отвечают равновесным конфигурациям при температуре T^* и поле H^*, такие конфигурации мы будем называть *термодинамически достижимыми*. Речь не идет о том, что система всегда находится в состоянии равновесия, отвечающем текущим значениям температуры и поля — напротив, система может быть сколь угодно далека от такого равновесия. Речь идет об интерпретации значений $\langle \mathbf{m}\rangle$, $\langle\eta\rangle$ и определении сооответствующих термодинамически достижимых конфигураций магнитных моментов атомов в физически бесконечно малом обьеме.

Состояние физически бесконечно малого объема ферромагнетика описывается комбинацией внутренних параметров $\langle m\rangle$, $\langle\eta\rangle$. Темодинамически достижимым является состояние с такими же значениями $\langle m\rangle$, $\langle\eta\rangle$, равновесное для некоторой комбинации внешних управляющих параметров T^*, H^*.

Поскольку (с точностью до направления вектора $\langle \mathbf{m}\rangle$) в отсутствие анизотропии состояние равновесия единственно для каждой пары T^*, H^*, то и термодинамически достижимое состояние для пары $\langle m\rangle$, $\langle\eta\rangle$ является единственным — при условии, что существует отвечающая им пара значений T^*, H^*.

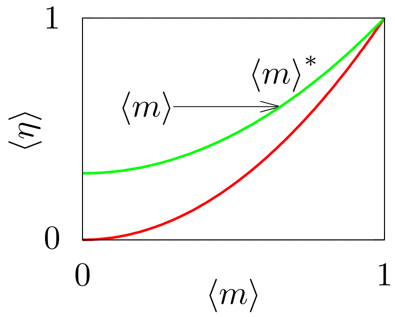

Рис. 5. Нахождение значения коэффициента $\mathcal{Q}(\langle m\rangle,\langle\eta\rangle)$ при $\langle\eta\rangle > \langle\eta\rangle^*$

Из рисунков 3, 4 видно, что термодинамически достижимые состояния находятся в области $0 \le \zeta \le \le \zeta^* \approx \langle\eta\rangle_c$, $\langle\eta\rangle^* \approx \langle\eta\rangle_c + (1-\langle\eta\rangle_c)\langle m\rangle^{*2}$. Термодинамически недостижимые состояния, расположенные ниже $\zeta = 0$ (ниже параболы $\langle m\rangle^2$), мы здесь рассматривать не будем, так как они нефизичны, отвечают заниженным, по сравнению с приближением среднего поля, значениям параметра ближнего порядка $\langle\eta\rangle$, и недостижимы на практике. Термодинамически недостижимые состояния, расположенные выше

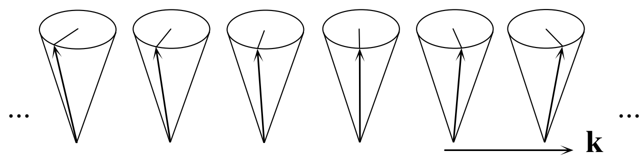

Рис. 6. Спиновая волна с волновым вектором $\mathbf{k}$

кривой $\langle\eta\rangle^*(\langle m\rangle^*)$, играют большую роль, так как непосредственно влияют на устойчивость равновесного решения CMD при $H^{\text{ext}} = 0$. Кроме того, в неравновесных случаях система вполне может оказаться в области $\zeta > \zeta^*$, при этом средняя намагниченность $\langle m\rangle < \langle m\rangle^*$. Поскольку ближний порядок устанавливается значительно быстрее дальнего, в первом приближении можно предположить, что при $\zeta > \zeta^*$ (при $\langle\eta\rangle > \langle\eta\rangle^*$) коэффициент $\mathcal{Q}(\langle m\rangle, \langle\eta\rangle) \approx \mathcal{Q}\Big(\langle m\rangle^*\big(\langle\eta\rangle\big), \langle\eta\rangle\Big)$, рис. 5.

Предположим, что такие состояния обусловлены возникновением геликоидальной структуры намагниченности в физически бесконечно малом объеме. Здесь геликоидальная структура намагниченности — это спиновая волна большой амплитуды с длиной равной размеру физически бесконечно малого объема L, рис. 6. Это неравновесное, но сравнительно долгоживущее состояние, так как распад геликоидальной структуры может занимать довольно много времени. Такие состояния выходят за рамки построенной теории, поскольку размер физически бесконечно малого объема оказывается больше характерного размера неоднорости средней намагниченности, что требует доработки CMD.

Предположим, что физически бесконечно малый объем $\Omega \approx L^3$ достаточно велик для того, чтобы в его отдельных частях намагниченность была пространственно-однородной и выполнялись уравнения CMD (4, 5).

Допустим, $\langle\mathbf{m}\rangle = (0{,}0{,}\langle m\rangle)$ и в геликоидальной структуре внутри физически бесконечно малого обьема мгновенное распределение средней намагниченности $\langle\mathbf{m}\rangle_\odot$, $|\langle\mathbf{m}\rangle_\odot| = \langle m\rangle^*$ описывается выражением

$$\langle\mathbf{m}\rangle_\odot(\mathbf{r}) = \langle m\rangle^* \begin{pmatrix} A\cos\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \\ A\sin\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \\ \sqrt{1-A^2} \end{pmatrix}, \qquad \Delta_{\mathbf{r}}\langle\mathbf{m}\rangle_\odot = -A\mathbf{k}^2\langle m\rangle^* \begin{pmatrix} \cos\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \\ \sin\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \\ 0 \end{pmatrix},$$

где $A = \sqrt{\big(\langle m\rangle^{*2} - \langle m\rangle^2\big)/\langle m\rangle^{*2}}$ — амплитуда спиновой волны, $\mathbf{k}$ — волновой вектор спиновой волны, $|\mathbf{k}| = 2\pi/L$, $\langle m\rangle = \langle m\rangle^*\sqrt{1-A^2}$. Некоторая величина $X(\langle\mathbf{m}\rangle_\odot)$ может быть усреднена по Ω как

$$\langle X\rangle_\Omega = \frac{1}{\Omega}\int\limits_\Omega X\big(\langle\mathbf{m}\rangle_\odot(\mathbf{r})\big)\,d\mathbf{r} = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^{2\pi} X\begin{pmatrix} \langle m\rangle^* A\cos\varphi \\ \langle m\rangle^* A\sin\varphi \\ \langle m\rangle^*\sqrt{1-A^2} \end{pmatrix} d\varphi.$$

Выпишем систему уравнений CMD внутри физически бесконечно малого объема:

$$\langle\dot{\mathbf{m}}\rangle_\odot = -\gamma\Big[\langle\mathbf{m}\rangle_\odot\times\mathbf{H}^{\mathrm{L}}_\odot\Big] - 2\gamma K\Big(\mathbf{\Phi}_\odot - \alpha\mathbf{\Theta}_\odot\Big) + \\ + \alpha\gamma\,\widehat{\Xi}_\odot\cdot\mathbf{H}^{\mathrm{L}}_\odot + 2\alpha\gamma\big(n_b J\Upsilon_\odot - T\big)\langle\mathbf{m}\rangle_\odot,$$

$$\frac{\langle\dot{\eta}\rangle}{4\alpha\gamma} = \mathbf{H}^{\mathrm{L}}_\odot\cdot\langle\mathbf{m}\rangle_\odot\Upsilon_\odot + K\Psi_\odot + \mathcal{Q}_\odot - T\langle\eta\rangle, \qquad \mathbf{H}^{\mathrm{L}}_\odot = \mathbf{H}^{\mathrm{L}} + Ja^2\Delta_{\mathbf{r}}\langle\mathbf{m}\rangle_\odot,$$

$$\mathbf{\Phi}_\odot = \mathbf{\Phi}(\langle\mathbf{m}\rangle_\odot), \qquad \mathbf{\Theta}_\odot = \mathbf{\Theta}(\langle\mathbf{m}\rangle_\odot), \qquad \widehat{\Xi}_\odot = \widehat{\Xi}(\langle\mathbf{m}\rangle_\odot),$$
$$\Upsilon_\odot = \Upsilon\big(\langle m\rangle^*,\langle\eta\rangle\big), \qquad \mathcal{Q}_\odot = \mathcal{Q}\big(\langle m\rangle^*,\langle\eta\rangle\big), \qquad \Psi_\odot = \Psi(\langle\mathbf{m}\rangle_\odot,\langle\eta\rangle).$$

После усреднения по Ω система CMD принимает вид

$$\langle\dot{\mathbf{m}}\rangle = -\gamma\langle\mathbf{m}\rangle\times\mathbf{H}^{\mathrm{L}} - 2\gamma K\langle\mathbf{\Phi}_\odot - \alpha\mathbf{\Theta}_\odot\rangle_\Omega + \\ + \alpha\gamma\left\langle\widehat{\Xi}_\odot\cdot\mathbf{H}^{\mathrm{L}}_\odot\right\rangle_\Omega + 2\alpha\gamma\big(n_b J\Upsilon_\odot - T\big)\langle\mathbf{m}\rangle,$$
$$\frac{\langle\dot{\eta}\rangle}{4\alpha\gamma} = \langle\mathbf{H}^{\mathrm{L}}_\odot\cdot\langle\mathbf{m}\rangle_\odot\rangle_\Omega\Upsilon_\odot + K\langle\Psi_\odot\rangle_\Omega + \mathcal{Q}_\odot - T\langle\eta\rangle.$$

В этой работе мы ограничимся рассмотрением одноосного случая (6), тогда

$$\langle\mathbf{\Theta}_\odot\rangle_\Omega = \mu_p^*\nu_p^*\left\langle\langle\mathbf{m}\rangle_\odot\frac{(\langle\mathbf{m}\rangle_\odot\cdot\mathbf{n}_K)^2}{\langle m\rangle^{*2}} - \langle\mathbf{m}\rangle_\odot + 2\mathbf{n}_K\big(\langle\mathbf{m}\rangle_\odot\cdot\mathbf{n}_K\big)\right\rangle_\Omega - \\ - \left\langle\Big[\langle\mathbf{m}\rangle_\odot\times\big[\langle\mathbf{m}\rangle_\odot\times\mathbf{n}_K\big]\Big]\frac{\langle\mathbf{m}\rangle_\odot\cdot\mathbf{n}_K}{\langle m\rangle^{*2}}\right\rangle_\Omega = \\ = \left(\mu_p^*\nu_p^*\cdot\frac{\langle m\rangle^{*2}+\langle m\rangle^2}{\langle m\rangle^{*2}} - \sqrt{\frac{\langle m\rangle^{*2}-\langle m\rangle^2}{\langle m\rangle^{*2}}}\right)\langle\mathbf{m}\rangle,$$

$$\langle\Psi_\odot\rangle_\Omega \approx \left\langle\Big[1.3836\cdot\big(\mathbf{n}_K\cdot\langle\mathbf{m}\rangle_\odot\big)^2 - 0.46134\cdot\langle m\rangle_\odot^2\Big]\big(1-\langle\eta\rangle\big)\langle m\rangle_\odot\right\rangle_\Omega = \\ = \Big[1.3836\cdot\langle m\rangle^2 - 0.46134\cdot\langle m\rangle^{*2}\Big]\big(1-\langle\eta\rangle\big)\langle m\rangle^*.$$

Нижняя строка тензора $\widehat{\Xi}_\odot$:

$$\Xi_{\odot z} = \Big(n_{px}n_{pz}(3\mu_p^*-1),\; n_{py}n_{pz}(3\mu_p^*-1), n_{pz}^2(3\mu_p^*-1)+1-\mu_p^*\Big) = \\ = \Big(A\sqrt{1-A^2}(3\mu_p^*-1)\cos\varphi, A\sqrt{1-A^2}(3\mu_p^*-1)\sin\varphi, (1-A^2)(3\mu_p^*-1)+1-\mu_p^*\Big),$$

откуда

$$\left\langle \widehat{\Xi}_{\odot} \cdot \mathbf{H}^{\mathrm{L}}_{\odot} \right\rangle_{\Omega z} = \Big[(1-A^2)(3\mu_p^*-1)+1-\mu_p^*\Big] H^{\mathrm{L}} - Ja^2 A^2 \mathbf{k}^2 \langle m\rangle^* \sqrt{1-A^2}(3\mu_p^*-1) =$$

$$= \Big[1-\mu_p^*-\nu_p^*\langle m\rangle^2\Big] H^{\mathrm{L}} + 4\pi^2 J\langle m\rangle \frac{\langle m\rangle^{*2}-\langle m\rangle^2}{n_L^2}\nu_p^*,$$

$$\left\langle \mathbf{H}^{\mathrm{L}}_{\odot} \cdot \langle\mathbf{m}\rangle_{\odot} \right\rangle_{\Omega} = \left\langle \mathbf{H}^{\mathrm{L}} \cdot \langle\mathbf{m}\rangle_{\odot} \right\rangle_{\Omega} + Ja^2 \Big\langle \langle\mathbf{m}\rangle_{\odot} \cdot \Delta_{\mathbf{r}} \langle\mathbf{m}\rangle_{\odot} \Big\rangle_{\Omega} =$$

$$= \mathbf{H}^{\mathrm{L}} \cdot \langle\mathbf{m}\rangle - Ja^2 A^2 \mathbf{k}^2 \langle m\rangle^{*2} = H^{\mathrm{L}}\langle m\rangle - 4\pi^2 J \frac{\langle m\rangle^{*2}-\langle m\rangle^2}{n_L^2},$$

где n_L — характерный размер физически бесконечно малого объема в межатомных расстояниях. В итоге в одноосном случае система CMD принимает вид

$$\frac{\dot{\langle m\rangle}}{2\alpha\gamma} = K\Theta^{\oplus} + \frac{\Xi^{\oplus} H^{\mathrm{L}}}{2} + \big(n_b J \Upsilon^{\oplus} - T\big)\langle m\rangle, \tag{11}$$

$$\frac{\dot{\langle \eta\rangle}}{4\alpha\gamma} = H^{\mathrm{L}}\Upsilon^{H}\langle m\rangle + K\Psi^{\oplus} + \mathcal{Q}^{\oplus} - T\langle\eta\rangle, \tag{12}$$

где при $\langle\eta\rangle \le \langle\eta\rangle_c + (1-\langle\eta\rangle_c)\langle m\rangle^2$ коэффициенты выглядят как

$$\Theta^{\oplus} = 2\langle m\rangle \mu_p \nu_p, \qquad \Xi^{\oplus} = 2\mu_p, \qquad \Upsilon^{\oplus} = \Upsilon^{H} \approx (1-\zeta)\mu_p,$$

$$\Psi^{\oplus} \approx 0.9226 \cdot \big(1-\langle\eta\rangle\big)\langle m\rangle^3, \quad \mathcal{Q}^{\oplus} \approx n_b \Upsilon^{H}\langle\eta\rangle + \left(1 - \frac{\zeta}{\langle\eta\rangle_c}\right)^2 \frac{1-\langle m\rangle}{3}.$$

При $\langle\eta\rangle > \langle\eta\rangle_c + (1-\langle\eta\rangle_c)\langle m\rangle^2$ появляется параметр $\langle m\rangle^* = \sqrt{\dfrac{\langle\eta\rangle - \langle\eta\rangle_c}{1-\langle\eta\rangle_c}}$, и коэффициенты принимают вид

$$\Theta^{\oplus} = \left(\langle m\rangle^* \mu_p^* \nu_p^* \frac{\langle m\rangle^{*2}+\langle m\rangle^2}{\langle m\rangle^{*2}} - \sqrt{\frac{\langle m\rangle^{*2}-\langle m\rangle^2}{\langle m\rangle^{*2}}} \right) \langle m\rangle,$$

$$\Upsilon^{H} \approx \Big(1-\langle\eta\rangle_c\Big)\mu_p^*, \quad \Upsilon^{\oplus} \approx \Upsilon^{H} + \delta\Upsilon, \quad \delta\Upsilon = \frac{4\pi^2}{n_b} \cdot \frac{\langle m\rangle^{*2}-\langle m\rangle^2}{n_L^2}\,\nu_p^* \ge 0,$$

$$\Xi^{\oplus} = 1-\mu_p^*-\nu_p^*\langle m\rangle^2, \quad \Psi^{\oplus} \approx \Big[1.3836 \cdot \langle m\rangle^2 - 0.46134 \cdot \langle m\rangle^{*2}\Big]\big(1-\langle\eta\rangle\big)\langle m\rangle^*,$$

$$\mathcal{Q}^{\oplus} \approx n_b \Upsilon^{H}\langle\eta\rangle + \delta\mathcal{Q}, \qquad \delta\mathcal{Q} = -4\pi^2 \frac{\langle m\rangle^{*2}-\langle m\rangle^2}{n_L^2}\Upsilon^{H} \le 0,$$

где $\mu_p^* = \mu_p\big(\langle m\rangle^*\big)$, $\nu_p^* = \nu_p\big(\langle m\rangle^*\big)$.

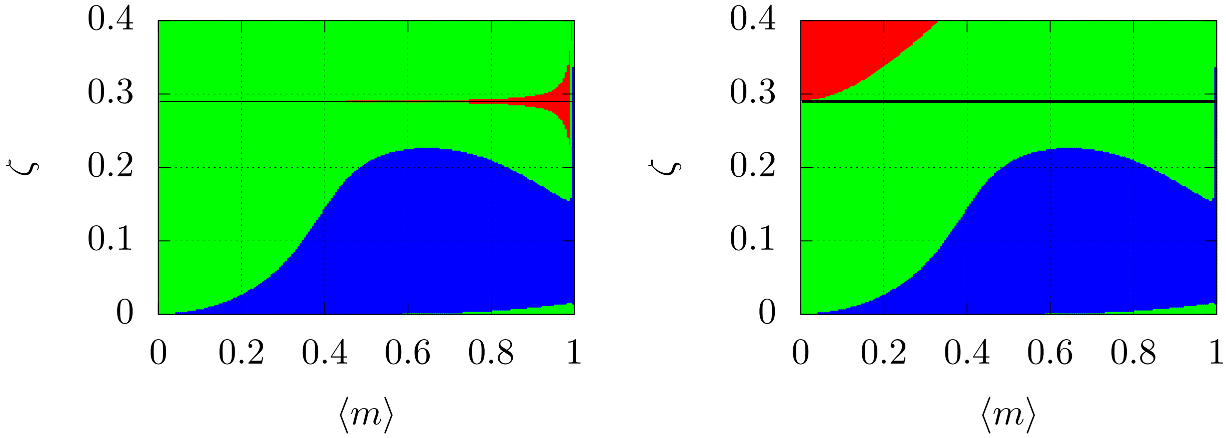

Рис. 7. Области устойчивости решения системы уравнений CMD для примитивной кристаллической решетки без учета (слева) и с учетом (справа) влияния геликоидальной структуры намагниченности — седло (красный), устойчивый узел (зеленый), устойчивая спиральная точка (синий). Черным цветом показана линия $\langle\eta\rangle_c$

Знаки у поправок $\delta\Upsilon$ и $\delta\mathcal{Q}$ имеют большое значение, именно такие знаки обеспечивают устойчивость равновесного решения CMD при $\zeta = 1 - \langle\eta\rangle_c$, т.е. при $H^{\rm ext} = K = 0$. Без учета геликоидальной структуры намагниченности и поправок $\delta\Upsilon$ и $\delta\mathcal{Q}$ решения CMD на линии $\zeta = 1 - \langle\eta\rangle_c$ оказываются неустойчивыми, и система релаксирует к состоянию $\langle m\rangle = 0$, $\langle\eta\rangle \approx \langle\eta\rangle_c$, рис. 7.

7. Результаты расчетов

На рисунках 8, 9, 10 приведено сравнение равновесных зависмостей $\langle m\rangle(T)$, $\langle W\rangle(T)$ полученных на основе моделирования «атом-в-атом» (1), из решения системы CMD (11), (12) и из УЛЛБ (2) для различных кристалличеких решеток, значений внешнего поля и анизотропии. Во всех случаях, несмотря на грубость аппроксимации коэффициентов CMD, результаты CMD оказываются достаточно близки к результатам моделирования «атом-в-атом». Для УЛЛБ зависимости намагниченности в случае ненулевого внешнего поля и зависимости энергии во всех случаях гораздо хуже согласуются с результатам моделирования «атом-в-атом».

8. Заключение

Построенная аппроксимация коэффициентов CMD, несмотря на некоторую примитивность, дает удовлетворительные результаты для равновесных значений намагниченности и энергии при различных значениях внешнего поля и температуры. Возможно, точность полученных результатов окажется недостаточной для решения инженерных задач.

Важной частью построенной аппроксимации является доопределение коэффициентов в термодинамически недостижимой области на основе предпо-

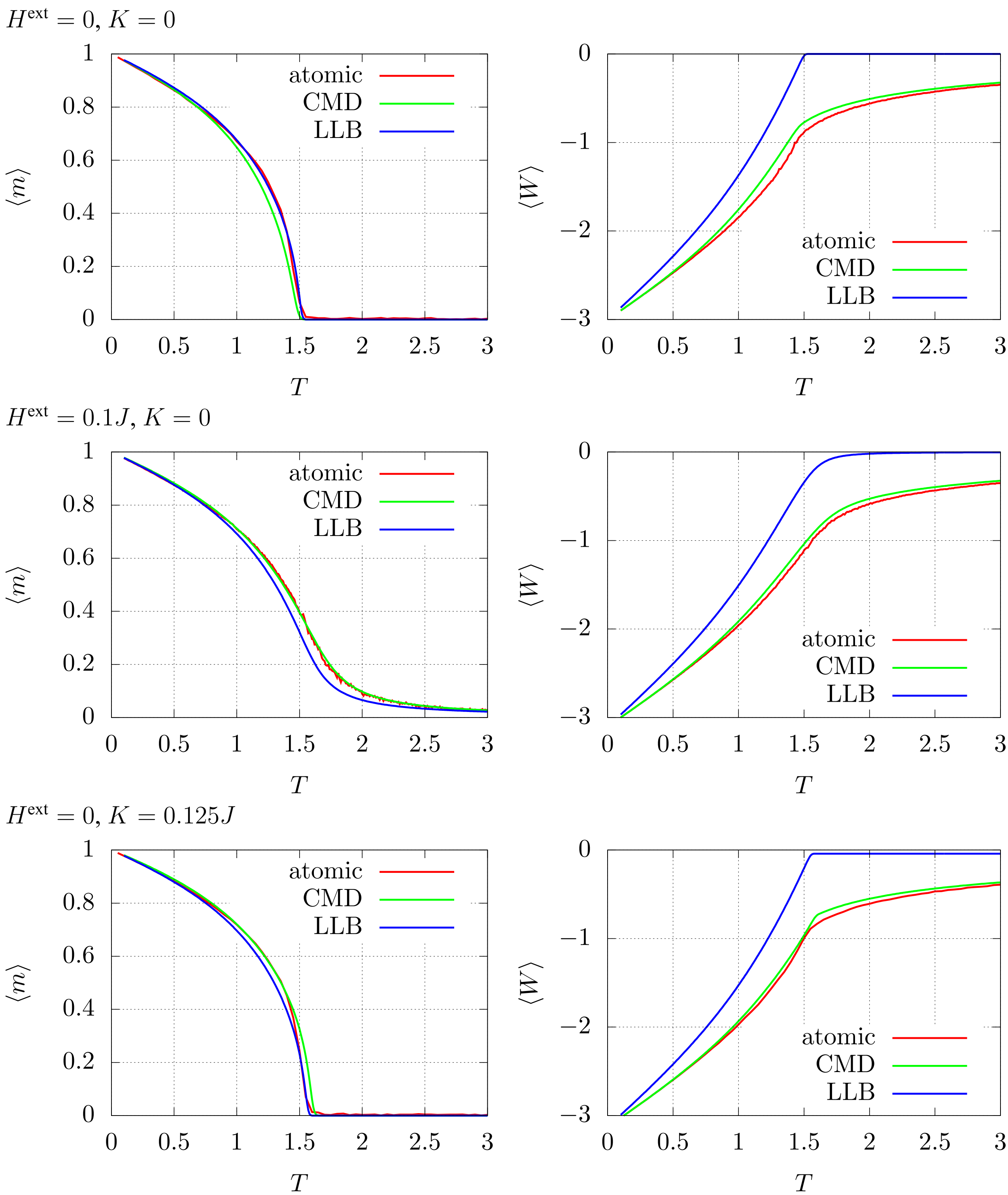

Рис. 8. Равновесные зависимости $\langle m \rangle(T)$, $\langle W \rangle(T)$ для примитивной кристаллической решетки, полученные при различных значениях H^{ext}, K на основе моделирования «атом-в-атом», из решения системы уравнений CMD и из УЛЛБ

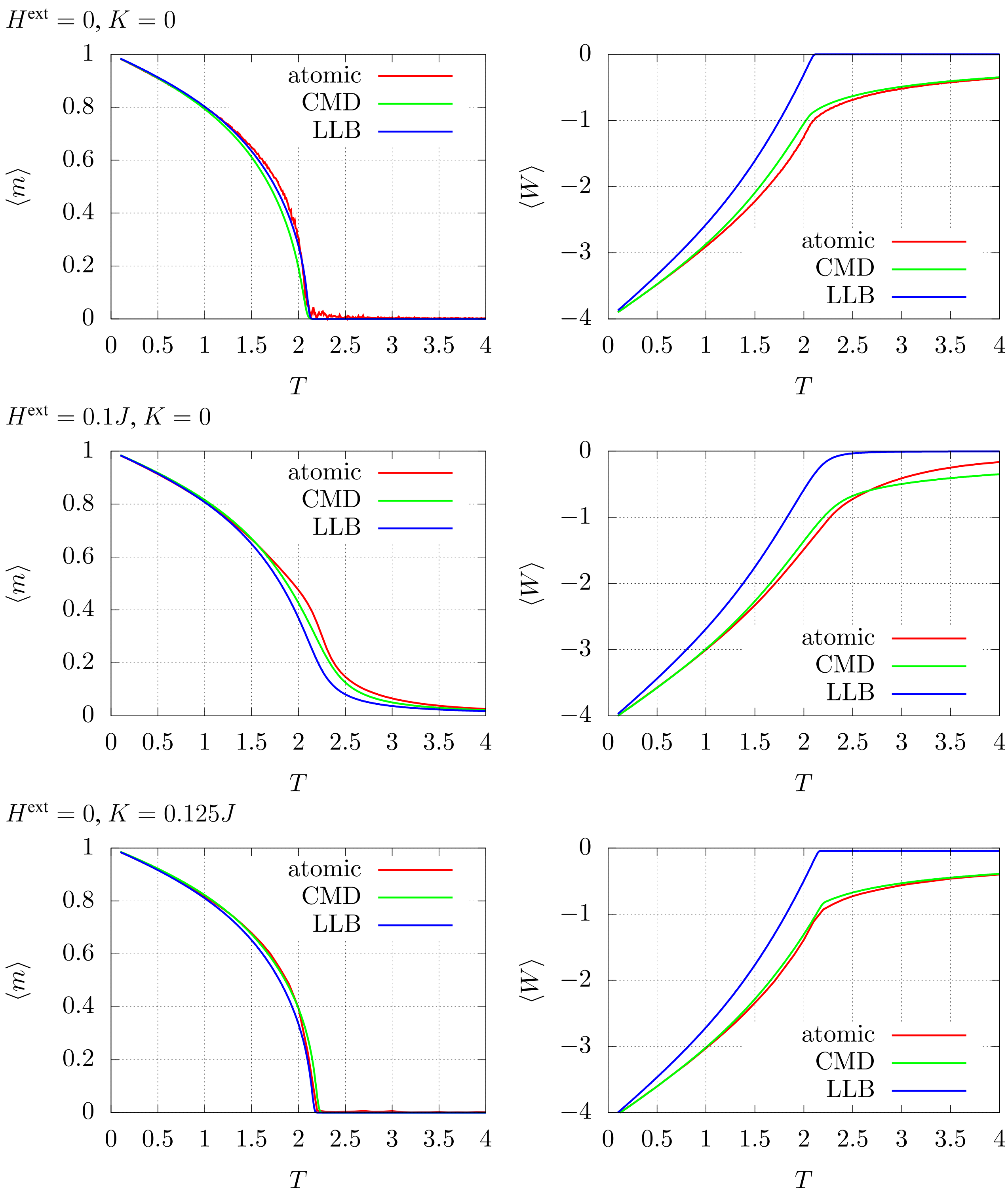

Рис. 9. Равновесные зависимости $\langle m \rangle(T)$, $\langle W \rangle(T)$ для объемоцентрированной кристаллической решетки, полученные при различных значениях H^{ext}, K на основе моделирования «атом-в-атом», из решения системы уравнений CMD и из УЛЛБ

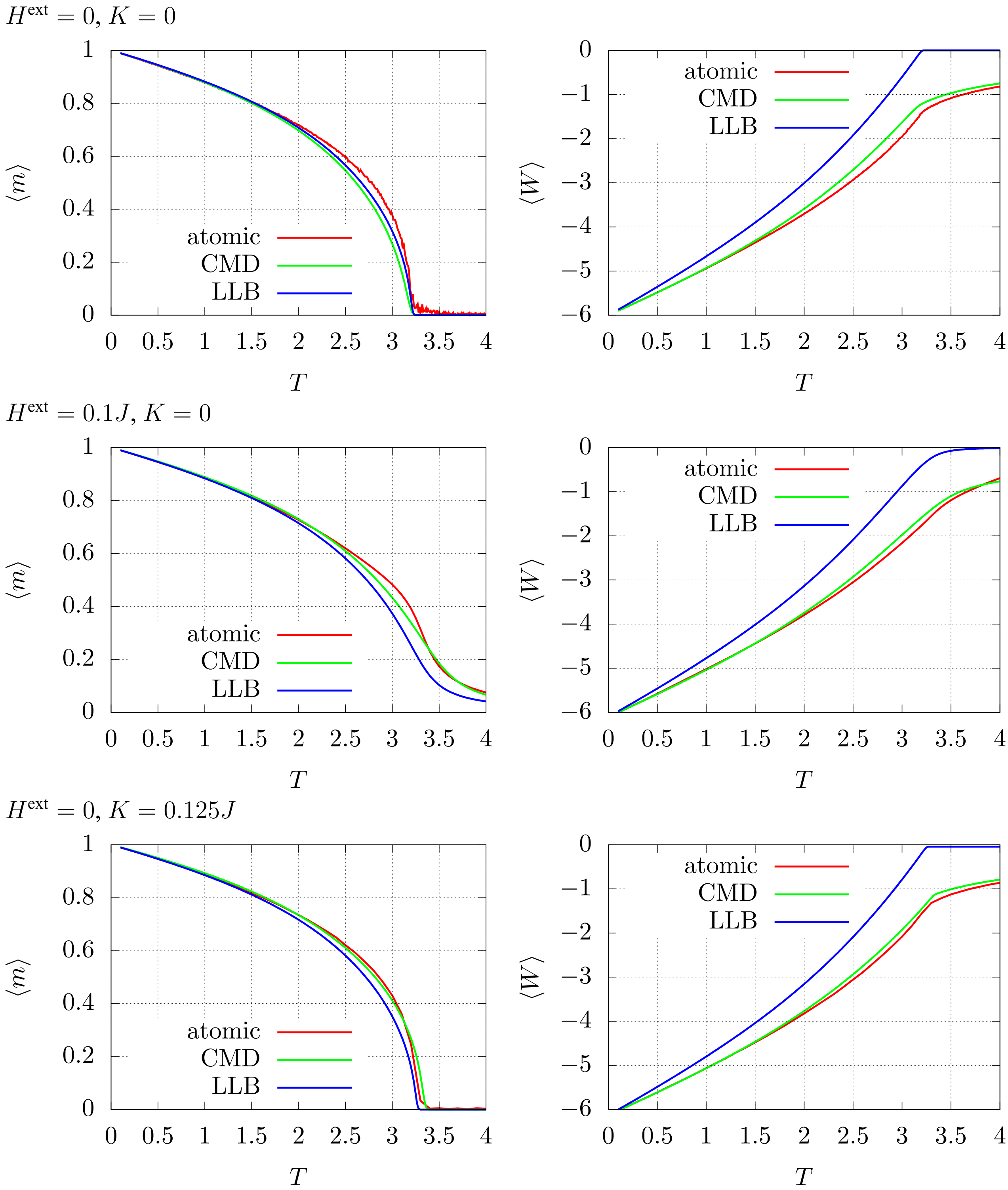

Рис. 10. Равновесные зависимости $\langle m \rangle(T)$, $\langle W \rangle(T)$ для гранецентрированной кристаллической решетки, полученные при различных значениях H^{ext}, K на основе моделирования «атом-в-атом», из решения системы уравнений CMD и из УЛЛБ

ложения о возникновении геликоидальной структуры намагниченнности, что позволяет получить устойчивое равновесное решение. Безусловно, это предположение нуждается в дальнейшем уточнении и проверке на основе сравнения с расчетами «атом-в-атом» в различных неравновесных постановках, в частности в постановке о перемагничивании образца внешним полем. Предварительные расчеты в неравновесной области показывают, что при малых внешних полях и анизотропии одночастичная функция распределения удовлетворительно аппроксимируется выражением $f \sim e^{\mathbf{p}\cdot\mathbf{m}}$, т.е. все моменты одночастичной функции распределения должны оставаться в форме, не учитывающей геликоидальную структуру намагниченности, а полученное доопределение коффициентов в термодинамически недостижимой области является слишком грубым.

Достоинством построенной аппроксимации коэффициентов CMD является минимум дополнительной информации о системе — необходимо только знание уровня парных корреляций $\langle\eta\rangle_c$ в точке фазового перехода и предположение о виде равновесной кривой $\langle\eta\rangle\big(\langle\eta\rangle\big) \approx \langle\eta\rangle_c + \big(1 - \langle\eta\rangle_c\big)\langle m\rangle^2$. Отсюда видно, что традиционное уравнение Ландау–Лифшица–Блоха является частным равновесным случаем CMD в отсутствие внешнего поля и анизотропии, а флукутации среднего поля связаны с уровнем парных корреляций в области фазового перехода как $\varepsilon_G \approx 1 - \langle\eta\rangle_c$. Это выражение может помочь в оценке уровня парных корреляций на основе экспериментальных данных.

Авторы выражают глубокую благодарность А.В. Подлазову за обсуждение вопросов, связанных с устойчивостью решения CMD, и Е.Б. Савенкову за обсуждение данной работы с точки зрения термодинамики.

Список литературы

[1] 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 Cu_3 Au ($L1_2$) / 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 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.

[4] Atxitia U., Hinzke D., Nowak U. Fundamentals and applications of the Landau–Lifshitz–Bloch equation // J. Phys. D Appl. Phys. — 2016. — Vol. 50.

[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 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.

[8] 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.

[9] 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.

[10] 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. — С. 31. — https://doi.org/10.20948/prepr-2024-20.

[11] 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.