



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

Препринты ИПМ • Препринт № 39 за 2025 г.



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

А.В. Иванов

Аппроксимация и валидация
интегральных
коэффициентов
корреляционной
магнитодинамики на основе
расчетов «атом-в-атом»

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



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Иванов А.В. Аппроксимация и валидация интегральных коэффициентов корреляционной магнитодинамики на основе расчетов «атом-в-атом» // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2025. № 39. 36 с. EDN: [JTHIBH](https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2025-39)
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2025-39>

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

А.В. Иванов

**Аппроксимация и валидация
интегральных коэффициентов
корреляционной магнитодинамики
на основе расчетов «атом-в-атом»**

Москва — 2025

Иванов А.В.

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Аппроксимация и валидация интегральных коэффициентов корреляционной магнитодинамики на основе расчетов «атом-в-атом»

Уравнения корреляционной магнитодинамики (CMD) выводятся из атомистической модели классического ферромагнетика Гейзенберга с учетом корреляций между ближайшими соседями и описывают магнетик в приближении сплошной среды. В работе построены аналитические аппроксимации интегральных коэффициентов CMD на основе результатов моделирования «атом-в-атом». Полученные аппроксимации протестированы для примитивной, объемноцентрированной и гранецентрированной кубических кристаллических решеток на большом числе модельных задач в широком диапазоне температур.

Приводится обоснование нового алгоритма расчета энтропии магнетика на основе одно- и двухчастичных функций распределения. Показано, что традиционное уравнение Ландау–Лифшица–Блоха (LLB) является частным случаем CMD, что позволяет уточнить расчет обменной энергии для LLB.

Построенная аппроксимация интегральных коэффициентов CMD делает CMD пригодной для решения широкого круга инженерных задач.

Ключевые слова: уравнение Ландау–Лифшица–Блоха, корреляционная магнитодинамика, атомистическая спиновая динамика, энтропия

Anton Valeryevich Ivanov

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Approximation and Validation of Integral Coefficients in Correlation Magnetodynamics Based on Atomistic Spin Dynamics

The equations of correlation magnetodynamics (CMD) are derived from the atomistic model of a classical Heisenberg ferromagnet, taking into account correlations between nearest neighbors, and describe the magnet in the approximation of a continuous medium. In this paper, analytical approximations of the integral coefficients of CMD are constructed based on the results of "atom-in-atom" modeling. The obtained approximations are tested for primitive, body-centered and face-centered cubic crystal lattices on a large number of model problems in a wide temperature range.

A new algorithm for calculating the entropy of a magnet based on one- and two-particle distribution functions is substantiated. It is shown that the traditional Landau–Lifshitz–Bloch (LLB) equation is a special case of CMD, which allows to refine the calculation of the exchange energy for LLB.

The constructed approximation of the integral coefficients of CMD makes CMD suitable for solving a wide range of engineering problems.

Keywords: Landau–Lifshitz–Bloch Equation, Correlation MagnetoDynamics, Atomistic Spin Dynamics, Entropy

Содержание

1	Введение	3
2	Основные уравнения	4
3	Расчет энтропии магнетика	7
4	Аппроксимация интегральных коэффициентов CMD	11
5	Равновесные зависимости	21
6	Восприимчивость магнетика	25
7	Расчет критических индексов	26
8	Времена релаксации	28
9	Перемагничивание образца	29
10	Заключение	33
	Список литературы	34

1. Введение

Создание устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники требует проведения расчетов с учетом быстропротекающих процессов, вызванных резкими изменениями внешнего магнитного поля и температуры [1]. Большой объем таких расчетов требует применения моделей сплошной среды. В ферромагнетике основным является сильное локальное обменное взаимодействие, приводящее к возникновению корреляций между ближайшими соседями. Традиционное уравнение Ландау–Лифшица–Блоха построено на основе приближения среднего поля [2, 3] и не учитывает корреляций между ближайшими соседями, что приводит к ряду артефактов. Уравнения корреляционной магнитодинамики (CMD) построены на основе аппроксимации двухчастичной функции распределения, учитывающей корреляции между ближайшими соседями [4], и являются развитием уравнения Ландау–Лифшица–Блоха. Основной сложностью при построении CMD является аппроксимация интегральных коэффициентов, входящих в уравнения.

Работа посвящена аппроксимации интегральных коэффициентов CMD на основе первопринципных (с точки зрения CMD) расчетов в атомистическом приближении. Приводится обоснование полученного ранее алгоритма для расчета энтропии магнетика на основе одно- и двухчастичной функций распределения [5], что является еще одним аргументом в пользу CMD. Проведено сравнение результатов, полученных в различных приближениях для примитивной, объемно-центрированной и гранецентрированной кубических кристаллических решеток на большом числе модельных задач (включая расчет времен релаксации и неравновесных процессов перемагничивания) в широком диапазоне температур.

2. Основные уравнения

Эволюция магнитных моментов отдельных атомов в модели классического магнетика Гейзенберга описывается системой стохастических дифференциальных уравнений Ландау–Лифшица (ASD — Atomistic Spin Dynamics, [6]):

$$\dot{\mathbf{m}}_i = - \underbrace{\gamma [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]}_{\text{прецессия}} - \underbrace{\alpha \gamma [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]]}_{\text{диссипация}} + \underbrace{\sqrt{2\alpha\gamma T} [\mathbf{m}_i \times \boldsymbol{\xi}_i(t)]}_{\text{случайный источник}}, \quad (1)$$

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

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

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

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

где γ — гиромагнитное соотношение; α — параметр затухания; $\mathbf{H}^{\text{eff}}$ — эффективное магнитное поле, W — полная энергия системы, состоящая из обменной энергии W^{exch} , энергии анизотропии W^{an} , энергии взаимодействия с внешним полем W^{ext} и энергии диполь–дипольного взаимодействия W^{dip} ; T — температура системы в единицах энергии, $\boldsymbol{\xi}_i(t)$ — попарно независимые случайные векторы, составленные из δ -коррелированных случайных источников с нормальным распределением, единичной дисперсией и нулевым математическим ожиданием; $\nabla_{\mathbf{m}_i}$ — оператор ∇ по магнитному моменту $\mathbf{m}_i$; $\mathbf{H}^{\text{exch}}$ — поле обменного взаимодействия, J_{ij} — обменный интеграл (как правило, отличен от нуля только для ближайших соседей); $\mathbf{H}^{\text{an}}$ — поле анизотропии типа легкая ось или легкая плоскость, K — параметр анизотропии, $\mathbf{n}_K$ — направление оси анизотропии, $|\mathbf{n}_K| = 1$; $\mathbf{H}^{\text{dip}}$ — поле диполь–дипольного (магнитостатического) взаимодействия.

При помощи N -частичного уравнения Фоккера–Планка и цепочки Боголюбова в приближении среднего поля от (1) можно перейти к уравнению Ландау–Лифшица–Блоха (LLB) [2] на эволюцию распределения средней намагниченности:

$$\gamma^{-1} \langle \dot{\mathbf{m}} \rangle(\mathbf{r}, t) = -\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\text{L}} + 2K(\Phi + \alpha\Theta) + \alpha\hat{\Xi} \cdot (\mathbf{H}^{\text{L}} + \varepsilon_G n_b J \langle \mathbf{m} \rangle) - 2\alpha T \langle \mathbf{m} \rangle, \quad (2)$$

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

где $\hat{I}$ — единичная матрица, $\otimes$ — символ тензорного произведения, $\varepsilon_G \sim 0.8$ — множитель, учитывающий флуктуации среднего поля и зависящий от типа кристаллической решетки.

Для замыкания полученного уравнения (вычисления зависимости старших моментов функции распределения на основе $\langle \mathbf{m} \rangle$) необходимо задать вид функции распределения, что аналогично введению уравнения состояния при выводе уравнений газовой динамики из уравнения Больцмана. Хорошей аппроксимацией является

$$f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t) = \frac{e^{\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{m}}}{\mathcal{Z}(p)}, \quad \mathcal{Z}(p) = \int_{S_2} e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}} d\mathbf{m} = \frac{4\pi}{p} \text{sh } p, \quad (3)$$

$$\langle \mathbf{m} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}(p)} \int_{S_2} \mathbf{m} e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}} d\mathbf{m} = \mathbf{n}_p \mathcal{L}(p), \quad \mathcal{L}(p) = \text{cth } p - \frac{1}{p}, \quad \mathbf{n}_p = \frac{\mathbf{p}}{p},$$

где $\mathbf{p}$ — некоторый вектор, являющийся параметром модельной функции распределения $\mathbf{p} \parallel \langle \mathbf{m} \rangle$, $\mathcal{L}$ — функция Ланжевена.

Приближение среднего поля, или приближение мультипликативности, основано на аппроксимации двухчастичной функции распределения по магнитным моментам соседних атомов $\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j$ в виде $f_{ij}^{(2)}(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j) \approx f_i(\mathbf{m}_i) f_j(\mathbf{m}_j)$. Такой подход не учитывает корреляции между ближайшими магнитными моментами, обусловленные сильным локальным обменным взаимодействием, что приводит к ряду артефактов. Для решения этой проблемы была построена аппроксимация двухчастичной функции распределения с учетом корреляций между ближайшими соседями

$$f_{ij}^{(2)} \approx \frac{1}{Z_{ij}^{(2)}} \left[f_i(\mathbf{m}_i, t) f_j(\mathbf{m}_j, t) \right]^\rho e^{\lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}, \quad (4)$$

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

где $\lambda \geq 0$ — параметр, описывающий корреляции (включая косвенные) между ближайшими магнитными моментами $\mathbf{m}_i$ и $\mathbf{m}_j$, $1/2 \leq \rho \leq 1$ — показатель степени, необходимой для выполнения условия $f_i \approx \int_{S_2} f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j$. Проще всего

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

При $\lambda \ll 1$ аппроксимация (4) переходит в приближение среднего поля и $\rho \rightarrow 1$. При $\lambda \gg 1$ экспонента в аппроксимации (4) фактически переходит в

δ -функцию $\delta(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)$ и $\rho \rightarrow 1/2$. Несмотря на показатель степени ρ , за счет $Z^{(2)}$ аппроксимация (4) 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 $\langle W^{\text{exch}} \rangle = -n_b J \langle \eta \rangle / 2$. В приближении среднего поля $\langle \eta \rangle_{\text{MFA}} = \langle m \rangle^2$. Как будет показано далее, LLB является частным случаем CMD и для LLB $\langle \eta \rangle_{\text{LLB}} \approx 1 - \varepsilon_G + \varepsilon_G \langle m \rangle^2$.

Параметры ρ , λ взаимно однозначно связаны с моментами $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$. Средняя намагниченность $\langle \mathbf{m} \rangle$ является параметром дальнего порядка на масштабах порядка размера физически бесконечно малого объема, уровень парных корреляций $\langle \eta \rangle$ является параметром ближнего порядка на масштабах порядка межатомного расстояния.

Впервые аппроксимация (4) была введена для цепочки фазовых осцилляторов (т.н. xy модель магнетика, в которой $m_{iz} = 0 \forall i$ и состояние каждого магнитного момента $\mathbf{m}_i$ задается углом φ_i), [7]. Обоснованием аппроксимации (4) может считаться промежуточный функциональный вид статистической суммы магнетика [8, 9]. Несмотря на отсутствие строгого обоснования, аппроксимация (4) имеет достаточно высокую точность в широком диапазоне параметров [10]. В пользу аппроксимации (4) говорят и приведенные в следующих разделах результаты, имеющие хорошее согласие с ASD расчетами.

Аппроксимация (4) приводит к системе уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD) [4, 11]:

$$\gamma^{-1} \langle \dot{\mathbf{m}} \rangle(\mathbf{r}, t) = -\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^L + 2K(\Phi + \alpha \Theta) + \alpha \hat{\Xi} \cdot \mathbf{H}^L + 2\alpha(n_b J \Upsilon - T) \langle \mathbf{m} \rangle, \quad (5)$$

$$\frac{\langle \dot{\eta} \rangle(\mathbf{r}, t)}{4\alpha\gamma} = \mathbf{H}^L \cdot \langle \mathbf{m} \rangle \Upsilon + K\Psi + J\mathcal{Q} - T\langle \eta \rangle, \quad \Upsilon = \frac{\langle m \rangle - |\langle \mathbf{m} \eta \rangle|}{2\langle m \rangle} \approx \frac{1 - \rho}{\lambda}, \quad (6)$$

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

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

суммирование ведется по всем соседям атома j , кроме атома i . Угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение не только по направлениям $\mathbf{m}$, но и по атомам или парам ближайших атомов физически бесконечно малого объема, поэтому индексы i, j опускаются. Уравнения (5) и (6) описывают эволюцию распределения параметров дальнего $\langle \mathbf{m} \rangle(\mathbf{r}, t)$ и ближнего $\langle \eta \rangle(\mathbf{r}, t)$ порядка. Член Υ описывает

«производство» дальнего порядка за счет обменного поля внутри физически бесконечно малого объема. Член $\mathcal{Q}$ описывает «производство» ближнего порядка за счет обменного поля внутри физически бесконечно малого объема и зависит от неизвестной трехчастичной функции распределения $f_{ijk}^{(3)}$.

В отличие от традиционного LLB (2) CMD оперирует расширенным фазовым пространством — в дополнение к средней намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle$ вводится средний уровень парных корреляций $\langle \eta \rangle$. Коэффициенты Υ , Ψ , $\mathcal{Q}$ удобно рассматривать как функции переменных $\langle m \rangle = |\langle \mathbf{m} \rangle|$ и $\langle \eta \rangle$. CMD является точной системой уравнений на моменты одно-, двух- и трехчастичных функций распределения, все ошибки в CMD связаны с ошибками аппроксимации функций распределения или, по аналогии с гидродинамикой, с ошибками в задании уравнений состояния.

3. Расчет энтропии магнетика

Расчет энтропии системы сильно взаимодействующих частиц непосредственно связан с расчетом статистической суммы, что является одной из центральных проблем статистической физики. Здесь на примере классического магнетика Гейзенберга мы покажем, что для системы с парными взаимодействиями знание двухчастичной функции распределения, учитывающей парные корреляции, позволяет оценить энтропию с достаточно высокой точностью.

Мы будем говорить об энтропии, энергии и прочих термодинамических потенциалах в расчете на одну частицу.

Сразу заметим, что существует как минимум два независимых варианта введения энтропии. С точки зрения статистической физики энтропия $S^{(N)}$ вводится через N -частичную функцию распределения как

$$S^{(N)} = -\frac{\langle \ln f^{(N)} \rangle}{N} = \frac{\ln Z^{(N)}}{N} + \frac{\langle W \rangle}{T}, \quad \lim_{T \rightarrow \infty} f^{(N)} = (4\pi)^N,$$

и ее прямой расчет упирается в расчет статистической суммы $Z^{(N)}$.

С точки зрения второго начала термодинамики энтропия S_T определена с точностью до константы

$$dS_T = \frac{d\langle W \rangle}{T}, \quad \frac{dS_T}{dT} = \frac{dS^{(N)}}{dT}.$$

Из дополнительного условия при $T \rightarrow \infty$ следует

$$\lim_{T \rightarrow \infty} S_T = \lim_{T \rightarrow \infty} S^{(N)} \Rightarrow S_T = \ln 4\pi + \int_{\infty}^T \frac{d\langle W \rangle}{dT'} \frac{dT'}{T'},$$

что дает возможность расчета энтропии на основе серии равновесных ASD расчетов с плавно изменяющейся температурой.

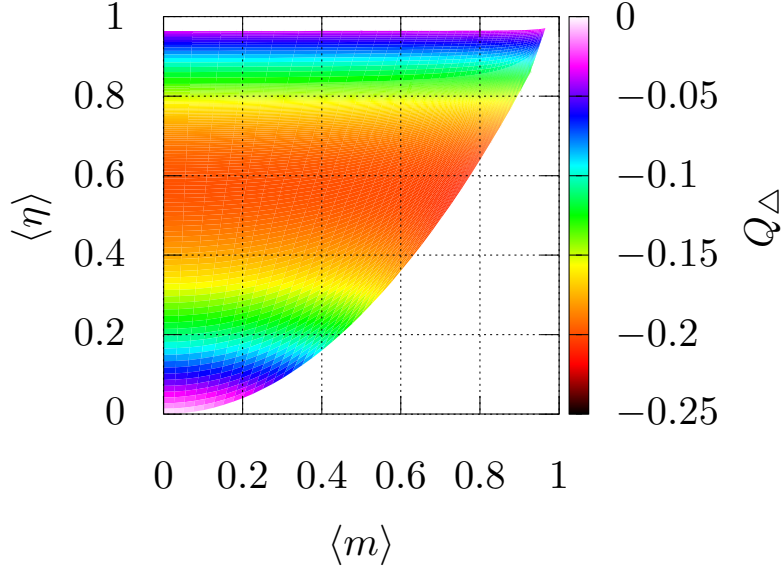


Рис. 1. Зависимость $Q_\Delta(\langle m \rangle, \langle \eta^2 \rangle)$

Для замены нижнего предела интегрирования на конечный построим асимптотику энергии и энтропии при больших температурах при помощи второго уравнения CMD (6).

Получим высокотемпературную асимптотику для $\langle \eta^2 \rangle$. Поскольку в парамагнитной фазе $f_{ij}^{(2)} \sim e^{\lambda \eta_{ij}}$, то

$$\langle \eta^2 \rangle \Big|_{\langle m \rangle=0} = 1 - 2 \frac{T}{J} \mathcal{L} \left(\frac{J}{T} \right) \approx \frac{1}{3} + \frac{2J}{45T}. \quad (7)$$

Введем трехчастичные функции распределения вида

$$f_{ijk\angle}^{(3)} = \frac{f_{ij}^{(2)} f_{jk}^{(2)}}{f_j^{(1)}}, \quad f_{ijk\Delta}^{(3)} = \frac{1}{Z_\Delta^{(3)}} \exp \left[\mathbf{p}_\Delta \cdot (\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_k) + \lambda_\Delta (\eta_{ij} + \eta_{jk} + \eta_{ki}) \right],$$

где $\mathbf{p}_\Delta$ и λ_Δ — параметры аппроксимации, которые могут быть найдены из условия

$$\langle \mathbf{m} \rangle = \iiint_{S_2} f_{ijk\Delta}^{(3)} \mathbf{m}_i d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j d\mathbf{m}_k, \quad \langle \eta \rangle = \iiint_{S_2} f_{ijk\Delta}^{(3)} \eta_{ij} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j d\mathbf{m}_k.$$

Функция $f_{ijk\angle}^{(3)}$ отвечает обобщению приближения среднего поля на случай многочастичных функций распределения, когда косвенными корреляциями между $\mathbf{m}_i$ и $\mathbf{m}_k$ можно пренебречь. Функция $f_{ijk\Delta}^{(3)}$ является полностью симметричной трехчастичной функцией распределения, такие функции объединяют соседей первой координационной сферы в FCC решетке.

Для $f_{ijk\angle}^{(3)}$ и $f_{ijk\Delta}^{(3)}$ можно явно выписать соответствующие вклады в производство ближнего порядка $\mathcal{Q}$. В парамагнитной фазе $\langle m \rangle = 0$ и $f_{ijk\angle}^{(3)} \sim e^{\lambda(\eta_{ij} + \eta_{jk})}$.

Тогда после аналитического интегрирования в сферических координатах по $d\mathbf{m}_i, d\mathbf{m}_k$ получаем

$$Q_{\angle}|_{\langle m \rangle=0} \sim \int \int \int_{S_2} \left(\mathbf{m}_i \cdot \left[\mathbf{m}_j \times [\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k] \right] \right) e^{\lambda(\eta_{ij} + \eta_{jk})} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j d\mathbf{m}_k = 0.$$

Из результатов численного интегрирования [4, 12, 13] известно, что на всей фазовой плоскости $\partial Q_{\Delta} / \partial \langle m \rangle \approx 0$, рис. 1. Поскольку в приближении среднего поля при $\lambda = 0$, $\forall Q$ выполняется соотношение

$$Q|_{\lambda=0} = 2\langle m \rangle^2 \mathcal{M}(\langle m \rangle) \Rightarrow Q_{\Delta} = 2\langle \eta \rangle \mathcal{M}(\sqrt{\langle \eta \rangle}),$$

где $\mathcal{M}(x) = x / \mathcal{L}^{-1}(x)$.

При $T \gg J$ можно считать, что все $f_{ijk}^{(3)}$ без явной обменной связи между атомами $\mathbf{m}_i$ и $\mathbf{m}_k$ отвечают функции $f_{ijk\angle}^{(3)}$. Тогда для SC и BCC решеток

$$Q \approx \frac{1 - \langle \eta^2 \rangle - (n_b - 1)Q_{\angle}}{2}.$$

Из второго уравнения CMD (6) следует, что в равновесии, при $\mathbf{H}^{\text{ext}} = 0$ и $K = 0$, выполняется $\langle \eta \rangle T = JQ$, откуда при $T \gg J$

$$\langle \eta \rangle \approx \frac{J}{3T}, \quad S^{(N)} = \ln 4\pi - \frac{n_b J}{2} \int_{\infty}^T \frac{d\langle \eta \rangle}{dT'} \frac{dT'}{T'} = \ln 4\pi - \frac{n_b J^2}{12T^2}.$$

Для FCC решетки ситуация значительно отличается. За счет наличия полностью симметричных трехчастичных функций распределения $f_{\Delta}^{(3)}$, сохраняющих свой вид даже при $T \gg J$, производство ближнего порядка выражается как

$$Q_{\text{FCC}} \approx \frac{1 - \langle \eta^2 \rangle - 7Q_{\angle} - 4Q_{\Delta}}{2} \approx \frac{1 + 4\langle \eta \rangle}{3}, \quad \langle \eta \rangle \approx \frac{J}{3T - 4J},$$

что в итоге дает при $T \gg J$

$$S_{\text{FCC}}^{(N)} \approx \ln 4\pi + \frac{9 \ln 3}{8} - \frac{9}{8} \ln \frac{3T - 4J}{T} - \frac{3J}{2T} - \frac{6J^2}{(3T - 4J)T}.$$

Введем энтропию для младших, одно- и двухчастичных функций распределения

$$S^{(1)} = -\langle \ln f^{(1)} \rangle = \ln \mathcal{Z}(p) - p\langle m \rangle, \quad S^{(2)} = \frac{\ln Z^{(2)}}{2} - \rho p\langle m \rangle - \frac{\lambda\langle \eta \rangle}{2}.$$

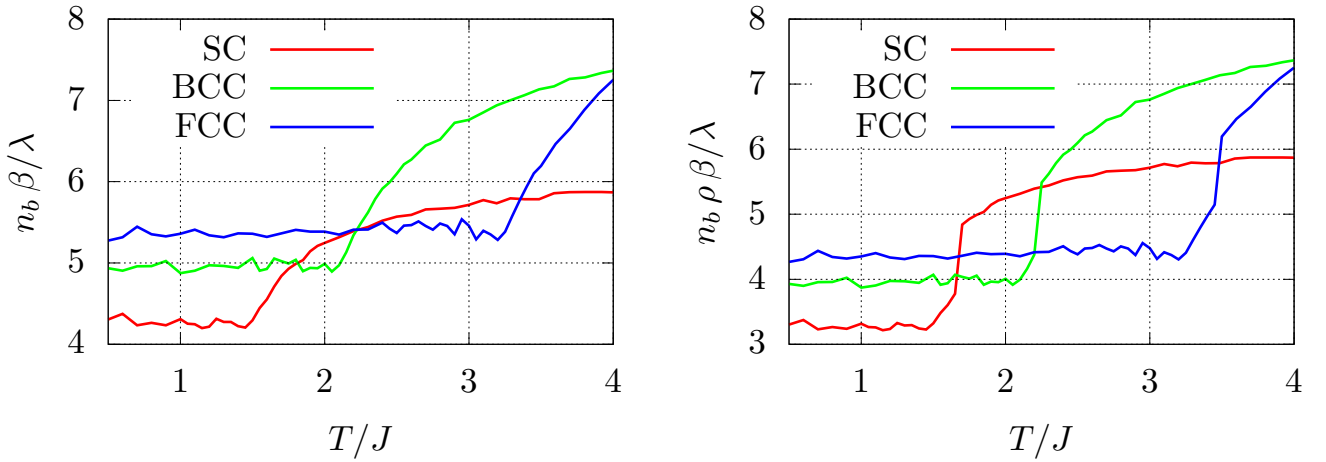


Рис. 2. Зависимости выражений $n_b \beta / \lambda$ и $n_b \rho \beta / \lambda$ от температуры T для разных решеток

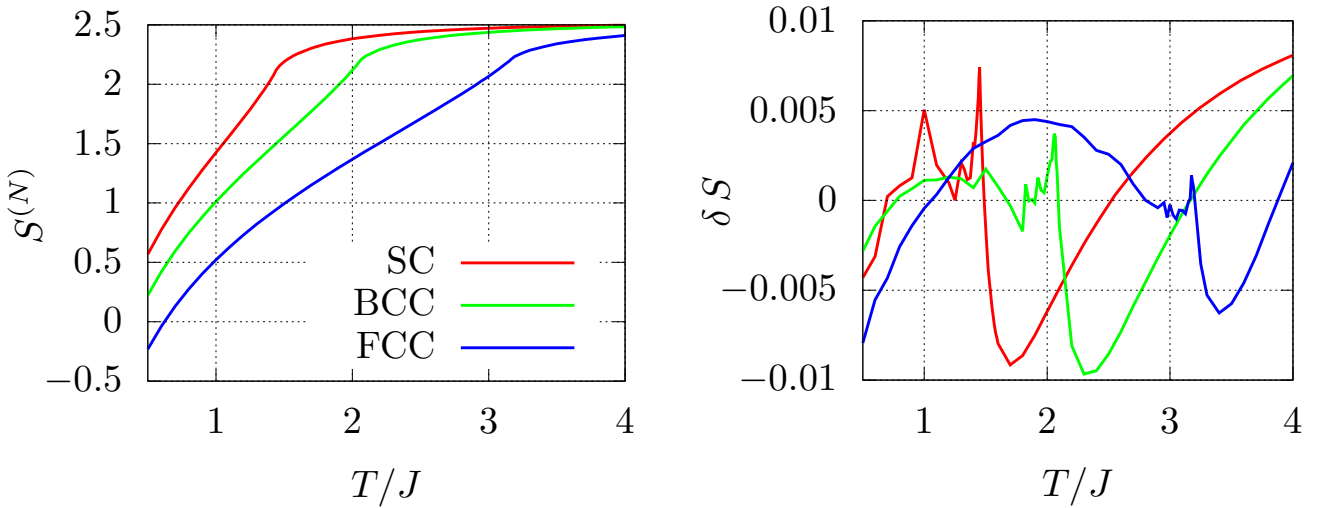


Рис. 3. Зависимости энтропии $S^{(N)}$ и абсолютной ошибки аппроксимации (8) для разных решеток

Рассмотрим выражение для энергии в отсутствие внешнего поля и анизотропии

$$\langle W \rangle = -\frac{n_b J}{2} \langle \eta \rangle \quad \Rightarrow \quad \frac{d\langle W \rangle}{d\beta} = -\frac{n_b J}{2} \frac{d\langle \eta \rangle}{d\beta},$$

где $\beta = T^{-1}$. После ряда несложных преобразований можно получить

$$\frac{dS^{(N)}}{d\beta} = \frac{n_b J \beta}{\lambda} \left[\frac{dS^{(2)}}{d\beta} - \rho \frac{dS^{(1)}}{d\beta} \right].$$

Из ASD расчетов известно, что в ферромагнитной фазе $\beta/\lambda \approx \text{const}$ и $\rho \approx \text{const}$, а в широком диапазоне температур β/λ и ρ являются медленно меняющимися функциями температуры (рис. 2), что приводит к простой аппроксимации

$$S^{(N)} \approx a_S + b_S S^{(2)} + c_S S^{(1)}, \quad (8)$$

где a_S , b_S , c_S — некоторые константы, зависящие только от типа кристаллической решетки и выбираемые с точки зрения минимизации ошибки вычисления $S^{(N)}$ при помощи метода наименьших квадратов:

решетка	a_S	b_S	c_S
SC	-0.009	-3.839	4.837
BCC	-0.020	-4.720	5.721
FCC	-0.038	-4.937	5.937

Видно, что для всех решеток $a_S \approx 0$. Для SC и BCC решеток $b_S \approx -(n_b - 3)$, $c_S \approx n_b - 2$. Для FCC решетки за счет четырех функций $f_{\Delta}^{(3)}$, вносящих вклад в производство ближнего порядка $\mathcal{Q}$, коэффициенты $b_s \approx -5$, $c_s \approx 6$, что примерно отвечает BCC решетке.

В актуальном диапазоне температур $[0.5J, 4J]$ такая аппроксимация $S^{(N)}$ дает относительную ошибку не более 0.5%, рис. 3.

4. Аппроксимация интегральных коэффициентов CMD

Все интегральные коэффициенты CMD являются моментами функций распределения $f^{(1\div 3)}$: $f^{(1)}$ дает Φ , Θ и $\hat{\Xi}$; $f^{(2)}$ дает Υ и Ψ ; набор $f^{(3)}$ дает $\mathcal{Q}$. Ошибки CMD связаны с ошибками аппроксимации $f^{(1\div 3)}$ и ошибками вычисления их моментов. Основная сложность связана с тем, что трехчастичные $f^{(3)}$ неизвестны, и для замыкания цепочки Боголюбова требуется делать некоторые дополнительные предположения.

Первое успешное замыкание системы уравнений CMD, дающее удовлетворительные результаты, было получено на основе предположений о виде $f^{(3)}$ [4, 11, 12]. Основным достоинством этого подхода было построение полностью самосогласованной теории без подгоночных параметров. К недостаткам можно отнести низкую точность (количественное расхождение с результатами исходной ASD модели) и сложность задания коэффициента $\mathcal{Q}$ в виде табулированных зависимостей от трех аргументов T , $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$.

Следующая попытка построить полностью аналитическую аппроксимацию коэффициентов CMD была предпринята в [14], при этом активно использовались данные ASD расчетов. Несмотря на относительно простые аналитически выражения, полученная система уравнений оказалась неустойчивой, что потребовало введения поправок специального вида, обусловленных возникновением геликоидальной структуры намагниченности в верхней части фазового пространства $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$. Важным результатом этой работы было установление связи CMD с традиционным LLB (2). Здесь мы разовьем и доведем до логического завершения подход, основанный на получении коэффициентов CMD из ASD расчетов.

Сразу отметим, что полученные ранее из вида $f^{(1)} \sim e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}}$ (3) коэффициенты Φ , Θ и $\hat{\Xi}$ остаются без изменений. Исходя из (3) можно получить выражение для

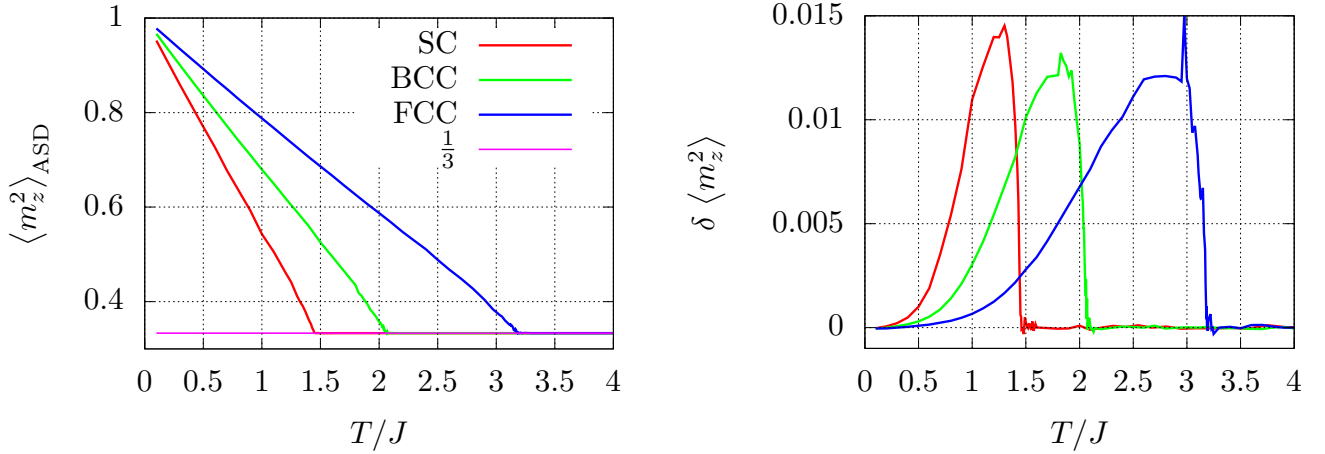


Рис. 4. Равновесные зависимости $\langle m_z^2 \rangle_{\text{ASD}}(T)$, полученные из ASD расчетов, и ошибки их вычисления $\delta \langle m_z^2 \rangle = \langle m_z^2 \rangle_{\text{theor}} - \langle m_z^2 \rangle_{\text{ASD}}$ для различных решеток

среднего квадрата намагниченности вдоль оси, задаваемой параметром $\mathbf{p}$ [15], допустим $\mathbf{p} = (0,0,p)$:

$$\langle m_z^2 \rangle_{\text{theor}} = 1 - \frac{2\langle m \rangle}{p}. \quad (9)$$

На рис. 4 приведены равновесные зависимости¹ $\langle m_z^2 \rangle_{\text{ASD}}(T)$, полученные из ASD расчетов, и ошибки их вычисления $\delta \langle m_z^2 \rangle = \langle m_z^2 \rangle_{\text{theor}} - \langle m_z^2 \rangle_{\text{ASD}}$ на основе выражения (9) при $\mathbf{H}^{\text{ext}} = 0$, $K = 0$. В парамагнитной фазе $\langle m \rangle = 0$ и с хорошей точностью $\langle m_z^2 \rangle = 1/3$, т.е. $f^{(1)} = 1/4\pi$ полностью изотропна. Видно, что ошибка выражения (9) максимальна в области перед критической точкой и может достигать до 5%. При этом $\langle m_z^2 \rangle_{\text{theor}} \geq \langle m_z^2 \rangle_{\text{ASD}}$, т.е. $f^{(1)}$ несколько более «прижата» к оси z , чем это описывается выражением (3). Учет квадратичных поправок в $f^{(1)}$, безусловно, представляет интерес с точки зрения повышения точности микромагнитных расчетов, но это приведет к значительному усложнению CMD [16].

Функция $\mathcal{M}$ уже была введена ранее, введем дополнительно функцию $\mathcal{V}$:

$$\mathcal{M}(x) = \frac{x}{\mathcal{L}^{-1}(x)}, \quad \mathcal{V}(x) = \frac{1 - 3\mathcal{M}(x)}{x^2}, \quad x \in [0,1],$$

в частности $\mathcal{M}(\langle m \rangle) = \langle m \rangle/p$, что упрощает вычисление (9). В практических целях функции $\mathcal{M}$ и $\mathcal{V}$ могут быть аппроксимированы с точностью 10^{-5} (применение аппроксимации $\mathcal{M}$ для вычисления $\mathcal{V}$ приводит к большим ошибкам при

¹Здесь и далее под равновесными зависимостями мы будем понимать результаты расчетов на установление. Каждой точке в такой зависимости отвечает один расчет — для каждого значения температуры проводится независимый расчет в течение длительного времени, достаточного для того, чтобы система пришла к равновесному состоянию, после чего изучаются макропараметры, описывающие это равновесное состояние.

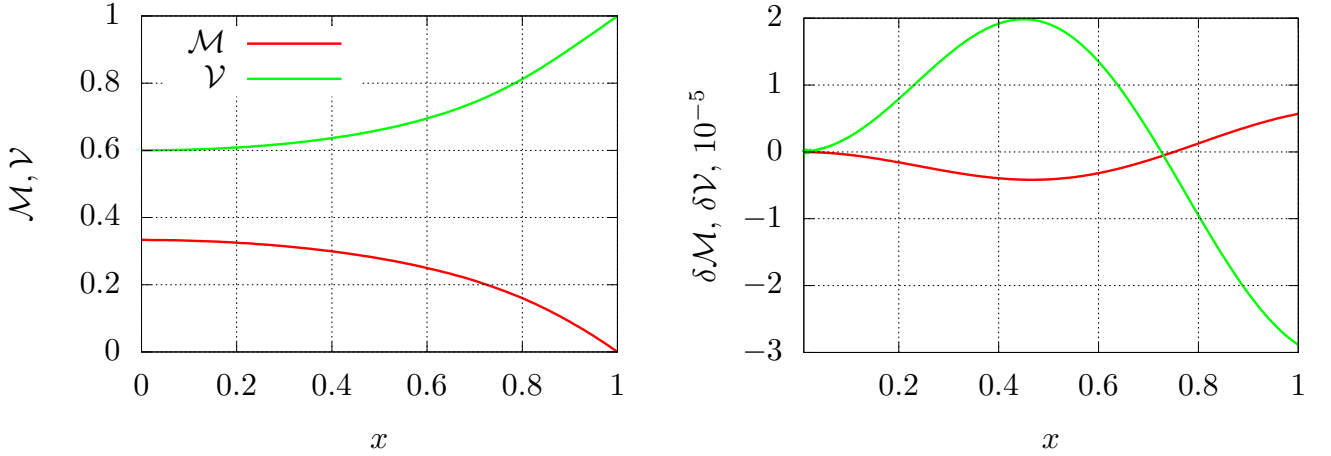


Рис. 5. Функции $\mathcal{M}$, $\mathcal{V}$ и ошибки их аппроксимации $\delta\mathcal{M} = \widetilde{\mathcal{M}} - \mathcal{M}$, $\delta\mathcal{V} = \widetilde{\mathcal{V}} - \mathcal{V}$ малых x):

$$\mathcal{M}(x) \approx \frac{1}{3} \left[1 - \left(0.775383 \cdot x + 0.109185 \cdot x^3 + 0.289114 \cdot x^5 - \right. \right. \\ \left. \left. - 0.871214 \cdot x^7 + 1.85968 \cdot x^9 - 1.71306 \cdot x^{11} + 0.550912 \cdot x^{13} \right)^2 \right],$$

$$\mathcal{V}(x) \approx \frac{3}{5} + 0.207788 \cdot x^2 + 0.0567754 \cdot x^4 + 0.754031 \cdot x^6 - 2.99459 \cdot x^8 + \\ + 7.017465 \cdot x^{10} - 8.202352 \cdot x^{12} + 4.461292 \cdot x^{14} - 0.90036 \cdot x^{16},$$

см. рис. 5.

Исходя из (3) коэффициенты Φ , Θ и Ξ могут быть получены дифференцированием по параметру [14]:

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

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

$$\Xi_{ij} = \delta_{ij} - \langle m_i m_j \rangle = \delta_{ij} - \frac{1}{\mathcal{Z}(p)} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}(|\mathbf{p}|)}{\partial p_i \partial p_j} = \delta_{ij} \left[1 - \mathcal{M}(\langle m \rangle) \right] - \langle m \rangle_i \langle m \rangle_j \mathcal{V}(\langle m \rangle).$$

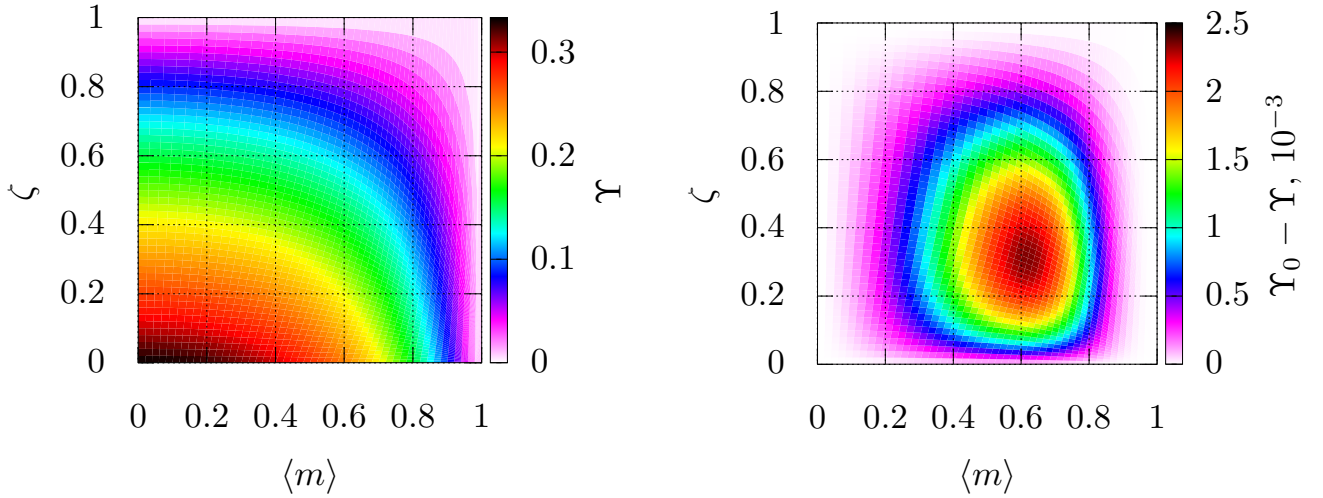


Рис. 6. Функция $\Upsilon(\langle m \rangle, \zeta)$ и абсолютная ошибка ее исходной аппроксимации $\Upsilon_0 \approx (1 - \rho)/\lambda$

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

$$\Phi = 0, \quad \Theta = \left(0, 0, 2\langle m \rangle \mathcal{M}(\langle m \rangle) \mathcal{V}(\langle m \rangle)\right), \quad \hat{\Xi} \cdot \mathbf{H}^L = \left(0, 0, 2\mathcal{M}(\langle m \rangle) H^L\right).$$

Моменты двухчастичной функции распределения $f^{(2)}$ рассчитываются численно, в каждом узле прямоугольной сетки параметров ρ, λ , а затем пересчитываются как функции параметров $\langle m \rangle, \langle \eta \rangle$.

Для Ψ в [11] была получена аппроксимация

$$\Psi \approx \left[1.3836 \cdot (\mathbf{n}_K \cdot \langle \mathbf{m} \rangle)^2 - 0.46134 \cdot \langle m \rangle^2\right] (1 - \langle \eta \rangle) \langle m \rangle.$$

Основные сложности связаны с аппроксимацией коэффициентов Υ и $\mathcal{Q}$. Переменные $\langle m \rangle \in [0, 1]$, $\langle \eta \rangle \in [0, 1]$ образуют криволинейную систему координат, поскольку в приближении среднего поля $\langle \eta \rangle = \langle m \rangle^2$ и область фазового пространства $\langle \eta \rangle < \langle m \rangle^2$ нефизична. Вместо $\langle \eta \rangle$ удобно ввести переменную $\zeta = (\langle \eta \rangle - \langle m \rangle^2) / (1 - \langle m \rangle^2) \in [0, 1]$, переменные $\langle m \rangle, \zeta$ образуют прямоугольную систему координат, приближение среднего поля отвечает линии $\zeta = 0$.

Коэффициент Υ описывает производство дальнего порядка за счет обменного поля внутри физически бесконечно малого объема. Сразу отметим, что введенная в предыдущих работах аппроксимация $\Upsilon_0 \approx (1 - \rho)/\lambda$, являющаяся прямым следствием требования $f_i^{(1)} = \int_{S_2} f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_j$, хотя и имеет весьма привлекательный вид, но неконструктивна (отсутствуют простые метода расчета ρ и λ), а ее максимальная погрешность $2.5 \cdot 10^{-3}$ (рис. 6) в некоторых случаях оказывается слишком большой.

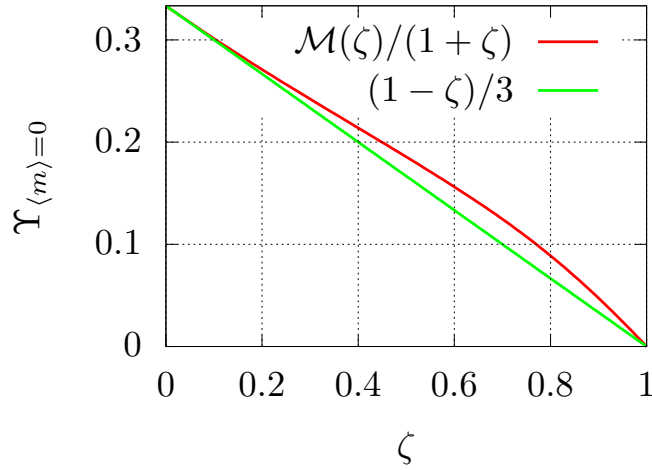


Рис. 7. Зависимость $\Upsilon(\zeta)$ при $\langle m \rangle = 0$

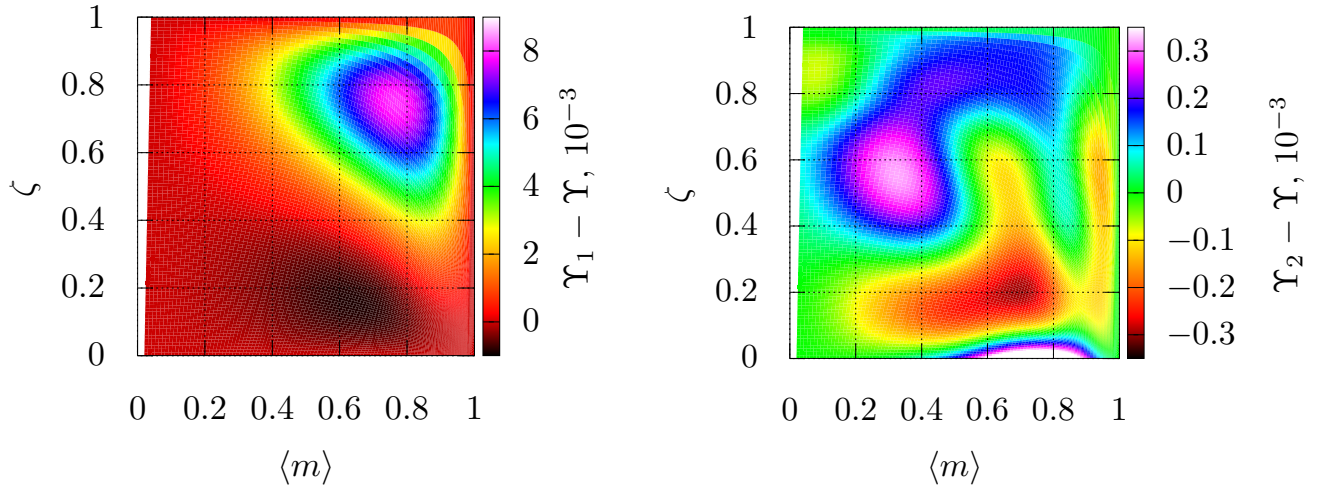


Рис. 8. Абсолютные ошибки аппроксимаций Υ_1 и Υ_2

Значения Υ достоверно известны в трех случаях²:

$$\Upsilon|_{\zeta=1} = 0, \quad \Upsilon|_{\zeta=0} = \mathcal{M}(\langle m \rangle), \quad \Upsilon|_{\langle m \rangle=0} = \frac{\mathcal{M}(\zeta)}{1+\zeta},$$

(рис. 7) что дает простейшую аппроксимацию

$$\Upsilon_1(\langle m \rangle, \zeta) \approx \frac{3\mathcal{M}(\langle m \rangle) \mathcal{M}(\zeta)}{1+\zeta}, \quad (10)$$

абсолютная ошибка которой составляет не более $8 \cdot 10^{-3}$, рис 8. Для повышения точности расчетов в настоящий момент оптимальной является аппроксимация

$$\begin{aligned} \Upsilon_2 \approx \Upsilon_1 \Big[& 1 + 0.1223 \cdot (\langle m \rangle + \zeta)^6 (1 - 1.6 \cdot \langle m \rangle - 2.49 \cdot \zeta + 0.71 \cdot \langle m \rangle^2 + 1.71 \cdot \zeta^2 + \\ & + 2.47 \cdot \langle m \rangle \zeta - 0.12 \cdot \langle m \rangle^3 - 0.21 \cdot \zeta^3 - 0.34 \cdot \langle m \rangle^2 \zeta - 1.17 \cdot \langle m \rangle \zeta^2) \Big], \quad (11) \end{aligned}$$

²Выражение при $\langle m \rangle = 0$ легко получается из $f^{(2)}$ разложением в ряд Тейлора по p с последующим предельным переходом.

с абсолютной ошибкой в целевой области³ не более $0.3 \cdot 10^{-3}$, рис 8.

Аппроксимация (10) наглядно показывает связь традиционного уравнения LLB с уравнениями CMD. Рассмотрим одноосный случай $\mathbf{n}_K = (0, 0, 1)$, $\mathbf{H}^L = (0, 0, H^L)$, $\langle \mathbf{m} \rangle = (0, 0, \langle m_z \rangle)$. Тогда традиционное уравнение LLB (2) принимает вид

$$\frac{\langle \dot{m}_z \rangle}{2\gamma\alpha} = K\Theta_z + \mathcal{M}(\langle m_z \rangle)H^L + n_b J \varepsilon_G \mathcal{M}(\langle m_z \rangle) \langle m_z \rangle - T \langle m_z \rangle,$$

а первое уравнение CMD (5) принимает вид

$$\frac{\langle \dot{m}_z \rangle}{2\gamma\alpha} = K\Theta_z + \mathcal{M}(\langle m_z \rangle)H^L + n_b J \Upsilon \langle m_z \rangle - T \langle m_z \rangle,$$

т.е. LLB совпадает с CMD при условии, что $\varepsilon_G = 3\mathcal{M}(\zeta)/(1 + \zeta) \approx 1 - \zeta$, рис. 7. Таким образом, LLB является частным случаем CMD при $\zeta \approx 1 - \varepsilon_G$, при этом необходимый для вычисления обменной энергии уровень парных корреляций

$$\langle \eta \rangle_{\text{LLB}} \neq \langle m \rangle^2, \quad \langle \eta \rangle_{\text{LLB}} \approx 1 - \varepsilon_G + \varepsilon_G \langle m \rangle^2.$$

Это выражение оказывается гораздо точнее, чем получаемое из приближения среднего поля $\langle \eta \rangle_{\text{MFA}} = \langle m \rangle^2$.

Рассмотрим получаемые из ASD расчетов равновесные зависимости $\zeta^*(\langle m \rangle)$ при $K = 0$, $\mathbf{H}^{\text{ext}} = 0$, рис. 9. Для каждой решетки эти зависимости имеют Г-образный вид, излом отвечает точке фазового перехода. Соответствующие зависимости $\langle \eta \rangle^*(\langle m \rangle)$ в ферромагнитной фазе (при $\langle m \rangle > 0$) близки к параболам. Интересно, что для трех рассмотренных кристаллических решеток зависимости $\zeta^*(\langle m \rangle)$ отличаются друг от друга только вертикальным смещением, задаваемым величиной $\langle \eta \rangle_c$ — значением уровня парных корреляций в точке фазового перехода. Для всех кристаллических решеток хорошо работает аппроксимация

$$\zeta^* \approx \langle \eta \rangle_c - 0.135 \cdot \langle m \rangle^{\frac{3}{2}} + 0.123 \cdot \langle m \rangle^3. \quad (12)$$

Кривая ζ^* замечательна тем, что, согласно уравнениям CMD (5), (6) в состоянии равновесия, в ферромагнитной фазе (при $\langle m \rangle > 0$) на этой кривой должны точно выполняться соотношения

$$n_b J \Upsilon = T, \quad J \mathcal{Q} = \langle \eta \rangle T \quad \Rightarrow \quad \mathcal{Q} = n_b \Upsilon \langle \eta \rangle.$$

В парамагнитной фазе (при $\langle m \rangle = 0$) первое уравнение CMD на $\langle m \rangle$ выполняется автоматически при любом Υ , но соотношение $\mathcal{Q} = \langle \eta \rangle T$ остается в силе во всем диапазоне температур.

³Большая ошибка в области $\zeta \ll 1$ не представляет проблемы, так как для попадания в эту область требуются недостижимые внешние поля, многократно превышающие обменное поле.

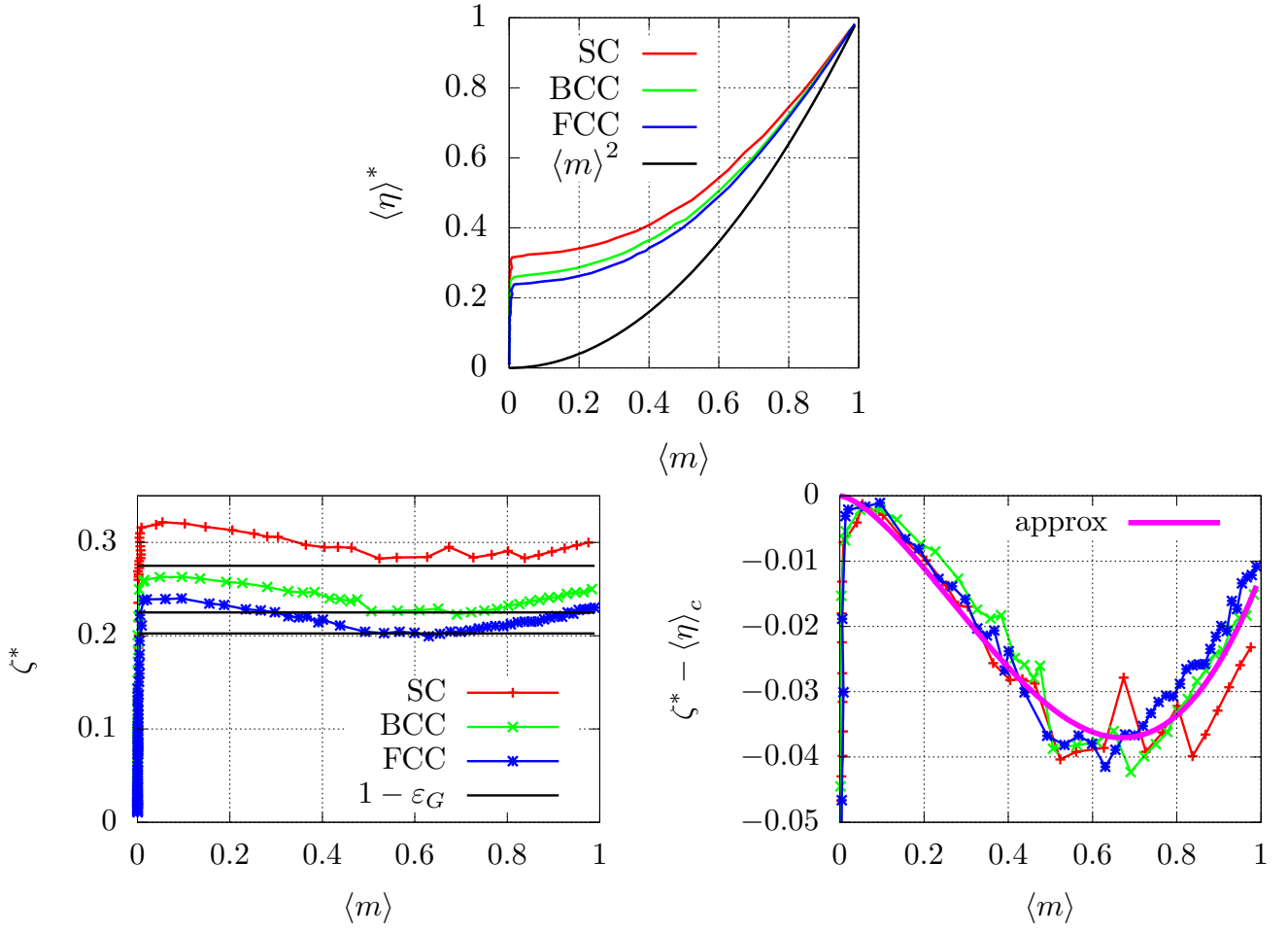


Рис. 9. Полученные из ASD расчетов равновесные зависимости $\langle \eta \rangle^*(\langle m \rangle)$, $\zeta^*(\langle m \rangle)$ для различных решеток и их аппроксимация. Черным цветом показаны соответствующие аппроксимации, отвечающие приближению среднего поля и LLB

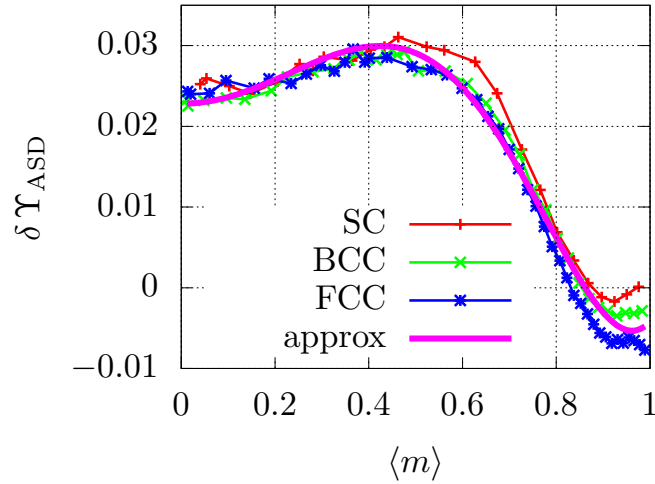


Рис. 10. Вид поправок $\delta \Upsilon_{\text{ASD}} = T \langle \eta \rangle^* / n_b \Upsilon_2 - 1$ для различных кристаллических решеток и их аппроксимация

Поскольку температура T известна, а моменты $\langle m \rangle$ и $\langle \eta \rangle$ получаются из ASD расчетов с достаточно высокой точностью, то на линии ζ^* можно легко рассчитать значения коэффициентов CMD Υ и $\mathcal{Q}$. Выражение (11) для Υ основано на аппроксимации $f^{(2)}$ (4), которая сама по себе является некоторым приближением. Результаты ASD расчетов на линии ζ^* позволяют ввести в аппроксимацию Υ (11) дополнительную поправку $\delta\Upsilon_{\text{ASD}}$ и улучшить совпадение результатов CMD и ASD. Для рассмотренных кристаллических решеток поправки $\delta\Upsilon_{\text{ASD}}$ совпадают, рис. 10:

$$\delta\Upsilon_{\text{ASD}} = \frac{T\langle\eta\rangle^*}{n_b\Upsilon_1} - 1 \approx 0.0228 + 0.0851 \cdot \langle m \rangle^2 - 0.2826 \cdot \langle m \rangle^4 + 0.1705 \cdot \langle m \rangle^6.$$

Поправка известна только на кривой ζ^* , чтобы учесть ее во всей области, применяется квадратичная интерполяция, дополнительным требованием является нулевой вклад поправки на границах области, при $\zeta = 0, 1$:

$$\Upsilon_3 = \Upsilon_2 \left[1 + \frac{\zeta(1-\zeta)}{\zeta^*(1-\zeta^*)} \delta\Upsilon_{\text{ASD}} \right], \quad (13)$$

т.е. при учете поправки ASD Υ_3 начинает зависеть от типа кристаллической решетки за счет значения $\langle \eta \rangle_c$, входящего в выражение для ζ^* . Из рис. 10 видно, что максимальное расхождение Υ_2 , получаемого непосредственно из $f^{(2)}$ (4), по сравнению с прямыми ASD расчетами составляет 3%.

Значения $\mathcal{Q}$ достоверно известны в трех случаях:

$$\mathcal{Q}|_{\zeta=1} = 0, \quad \mathcal{Q}|_{\zeta=\zeta^*} = n_b\Upsilon\langle\eta\rangle, \quad \mathcal{Q}|_{\zeta=0} = \mathcal{M}(\langle m \rangle) \left[2 + (n_b - 1)\langle m \rangle^2 - 3\mathcal{M}(\langle m \rangle) \right].$$

Область при $\zeta < \zeta^*$ отвечает равновесным состояниям магнетика, т.е. для каждой точки $(\langle m \rangle_q, \zeta_q)$ этой области можно подобрать такие T_q и H_q^{ext} , что $(\langle m \rangle_q, \zeta_q)$ будет равновесным решением. В этой области наибольший интерес представляют окрестности $\langle m \rangle \ll 1$, $\zeta \leq \zeta^*$ — именно этот участок отвечает за описание парамагнитной фазы и фазовый переход при $T > T_c$. Область фазового пространства при $\zeta > \zeta^*$ отвечает неравновесным состояниям системы, эту область можно пересечь, например, при перемагничивании образца, см. раздел 9.

Рассмотрим зависимости $\mathcal{Q}(\langle \eta \rangle)$, полученные из ASD расчетов при помощи выражения $\mathcal{Q} = \langle \eta \rangle T$ в парамагнитной фазе, рис. 11. Видно, что, несмотря на фазовый переход, зависимости $\mathcal{Q}(\langle \eta \rangle)$ являются гладкими функциями, точка фазового перехода находится в окрестностях перегиба. При малых температурах (больших значениях $\langle \eta \rangle$) для всех решеток $\mathcal{Q}/n_b$ совпадают, расхождение начинается при $\langle \eta \rangle < 0.6$ и становится значительным при $\langle \eta \rangle < \langle \eta \rangle_c$. В парамагнитной фазе $n_b\Upsilon\langle\eta\rangle < \mathcal{Q}$ вплоть до точки фазового перехода ($\mathcal{Q}|_{\langle\eta\rangle=0} = 1/3$), в точке фазового перехода кривые $n_b\Upsilon\langle\eta\rangle$ и $\mathcal{Q}$ касаются, т.е.

$$\left. \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \zeta} \right|_{\langle m \rangle=0, \langle \eta \rangle=\langle \eta \rangle_c} = n_b \left. \frac{\partial \Upsilon\langle \eta \rangle}{\partial \zeta} \right|_{\langle m \rangle=0, \langle \eta \rangle=\langle \eta \rangle_c}.$$

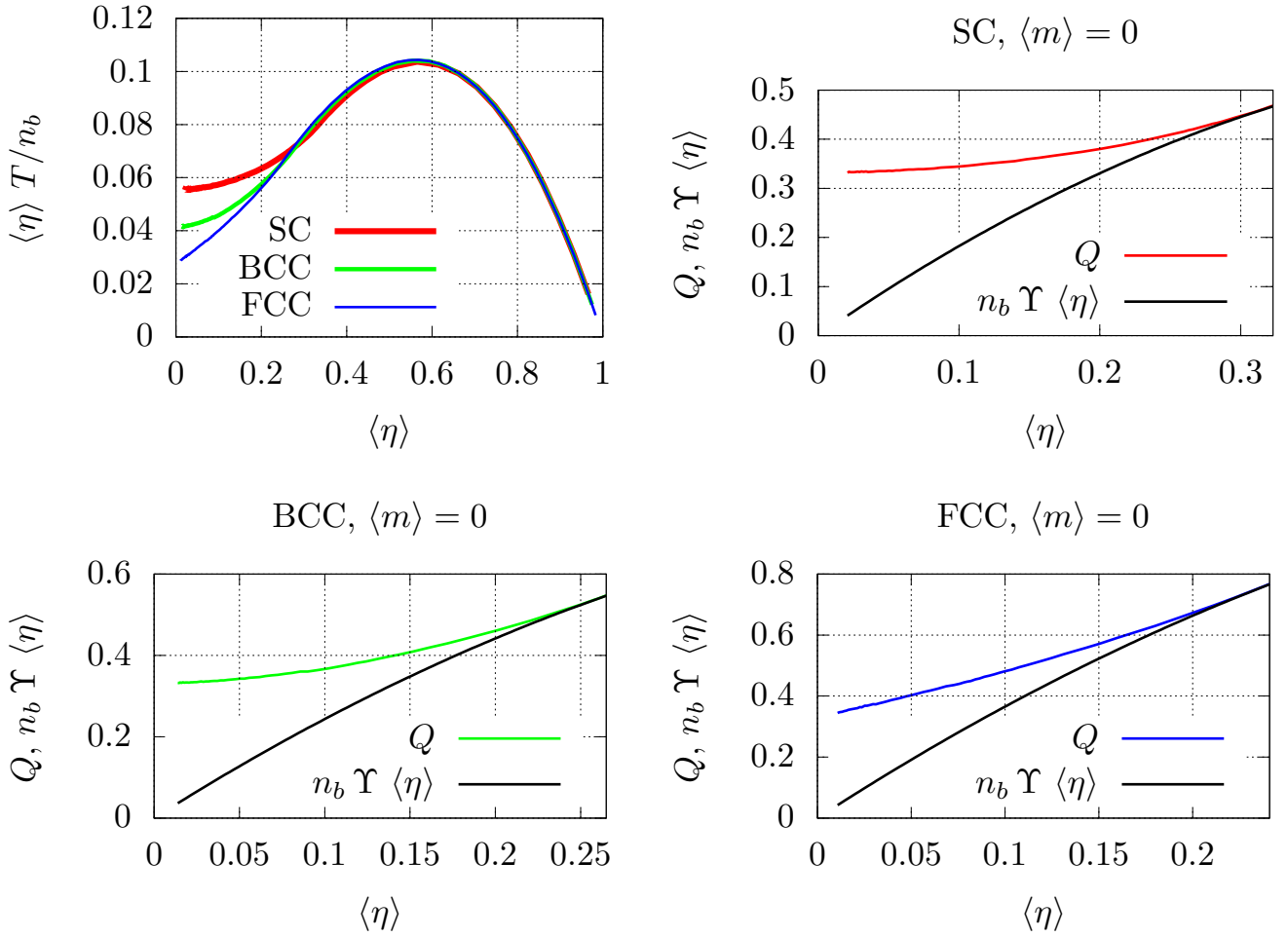


Рис. 11. Полученные из ASD расчетов равновесные зависимости Q и $n_b \Upsilon \langle \eta \rangle$ от $\langle \eta \rangle$ для различных решеток

Предположим, что это соотношение выполняется $\forall \langle m \rangle$. Тогда при $\zeta \leq \zeta^*$ для Q можно построить параболическую аппроксимацию

$$Q|_{\zeta \leq \zeta^*} \approx Q_0 + a_Q(\langle m \rangle)\zeta + b_Q(\langle m \rangle)\zeta^2,$$

где два коэффициента определяются из значений $Q_0 = Q|_{\zeta=0}$ и $Q_1 = Q|_{\zeta=\zeta^*}$, а третий коэффициент определяется из производной Q'_1 :

$$Q'_1 = n_b \left. \frac{\partial \Upsilon \langle \eta \rangle}{\partial \zeta} \right|_{\zeta=\zeta^*}, \quad a_Q = Q'_1 - 2b_Q\zeta^*, \quad b_Q = \frac{Q_0 + Q'_1\zeta^* - Q_1}{\zeta^{*2}},$$

производная $Q'|_{\zeta=\zeta^*}$ рассчитывается численно. При $\zeta > \zeta^*$ удовлетворительно работает простейшая аппроксимация

$$Q_{\zeta > \zeta^*} \approx n_b \Upsilon \langle \eta \rangle.$$

Таким образом, для трех рассмотренных кристаллических решеток построены аналитические аппроксимации интегральных коэффициентов CMD

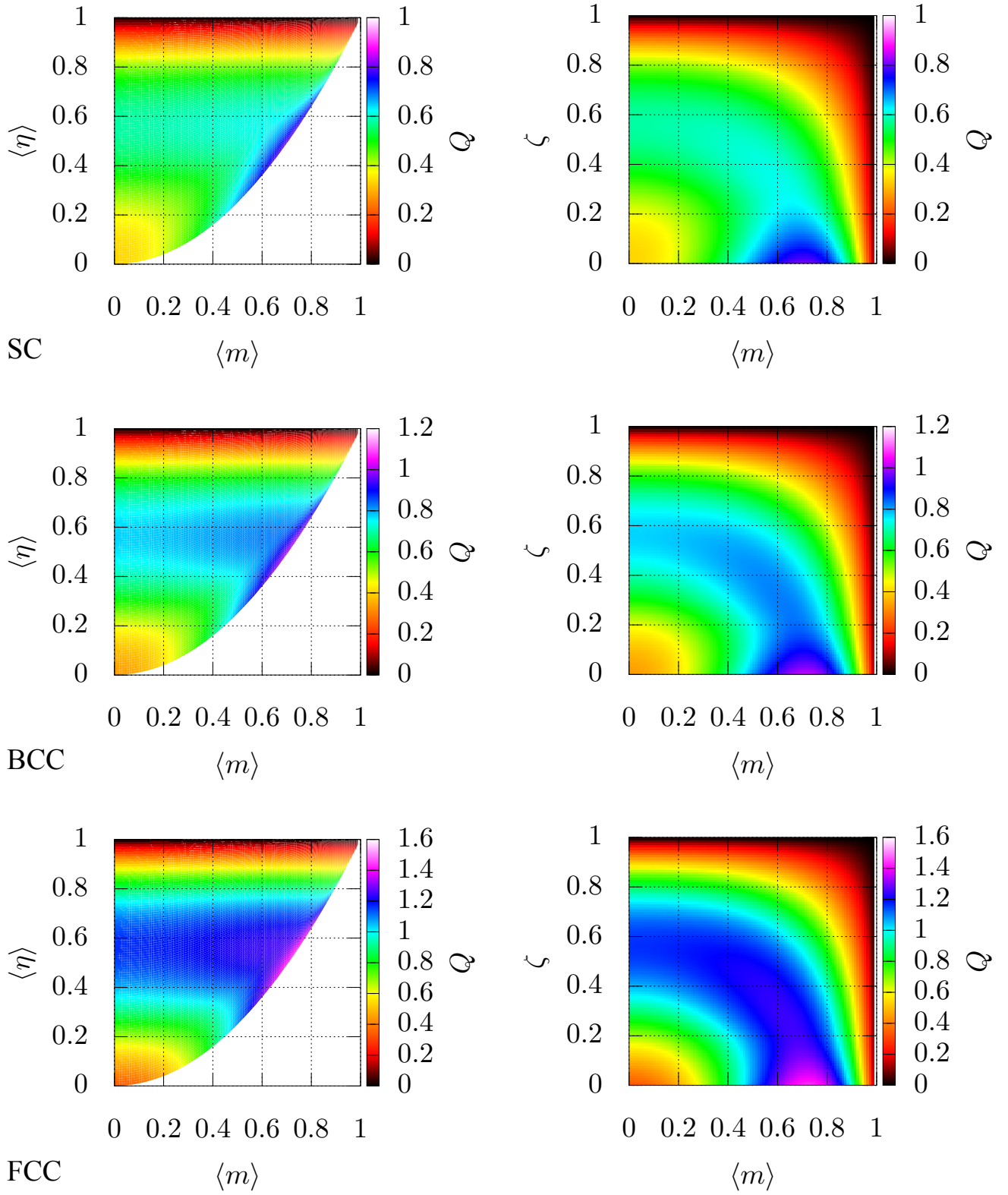


Рис. 12. Итоговые зависимости $Q(\langle m \rangle, \langle \eta \rangle)$ и $Q(\langle m \rangle, \zeta)$ для разных кристаллических решеток

Υ и $\mathcal{Q}$ (рис. 12), при этом для каждой решетки из ASD расчетов необходимо получить только значение уровня парных корреляций $\langle \eta \rangle_c$. Это значение может быть скорректировано до $\langle \eta \rangle_c^*$ с целью наилучшего согласования CMD и ASD расчетов, в первую очередь для согласования критической температуры.

Полученные в ASD расчетах значения критической температуры T_c и параметры ε_G , $\langle \eta \rangle_c$ и $\langle \eta \rangle_c^*$ для разных решеток приведены в таблице:

решетка	T_c/J	ε_G	$1 - \varepsilon_G$	$\langle \eta \rangle_c$	$\langle \eta \rangle_c^*$
SC	1.445	0.725	0.275	0.323	0.33
BCC	2.05	0.775	0.225	0.265	0.27
FCC	3.17	0.7975	0.2025	0.241	0.25

Напомним, что фактор Гаранина ε_G компенсирует завышение критической температуры, обусловленное приближением среднего поля — согласно теории Кюри–Вейсса $T_c^{\text{MFA}} = n_b J/3$, таким образом, $\varepsilon_G = 3T_c/n_b J$, [17].

Все приведенные в этом разделе коэффициенты реализованы в виде C++ кода в файле `cmd_coeff.hpp`⁴ библиотеки CMDlib [18, 19].

5. Равновесные зависимости

В этом разделе приведены равновесные зависимости средней намагниченности $\langle m \rangle(T)$, средней энергии $\langle W \rangle(T)$, фазовой кривой $\zeta(\langle m \rangle)$ и теплоемкости $C = d\langle W \rangle/dT$ от температуры T для примитивной (рис. 13), объемноцентрированной (рис. 14) и гранецентрированной (рис. 15) кристаллических решеток. Все зависимости получены в четырех приближениях — ASD, LLB, CMD и путем минимизации свободной энергии $F = \langle W \rangle - T\tilde{S}$, расчет энтропии $\tilde{S}$ описан в разделе 3.

Поскольку ASD модель являлась базовой для построения моделей LLB и CMD, мы будем рассматривать ASD расчеты как эталонные. Поскольку одним из равновесных решений для ASD модели является распределение Гиббса (из которого, в свою очередь, следует выражение для энтропии), то ASD расчеты являются эталоном и для результатов, получаемых при минимизации свободной энергии.

Все расчеты в рамках ASD, LLB и CMD выполнялись по одной и той же методике: в качестве начальных условий выбиралась однородная намагниченность $\langle \mathbf{m} \rangle_0 = (0,0,1)$, затем велся расчет до установления, т.е. каждая точка на графике отвечает одному расчету. Для ASD расчетов рассматривался куб с периодическими граничными условиями с размерами в периодах решетки 2^7 для SC и BCC, 2^6 для FCC решеток, что отвечает $2 \cdot 10^6$, $4 \cdot 10^6$ и 10^6 атомов соответственно. Результаты усреднялись по последним 10^3 временным шагам. Параметры расчетов $\gamma = 1$, $\alpha = 0.1$, $\mathbf{H}^{\text{ext}} = 0$, $K = 0$, шаг по времени 10^{-2} .

⁴https://github.com/aivn/CMDlib/blob/main/include/cmd_coeff.hpp

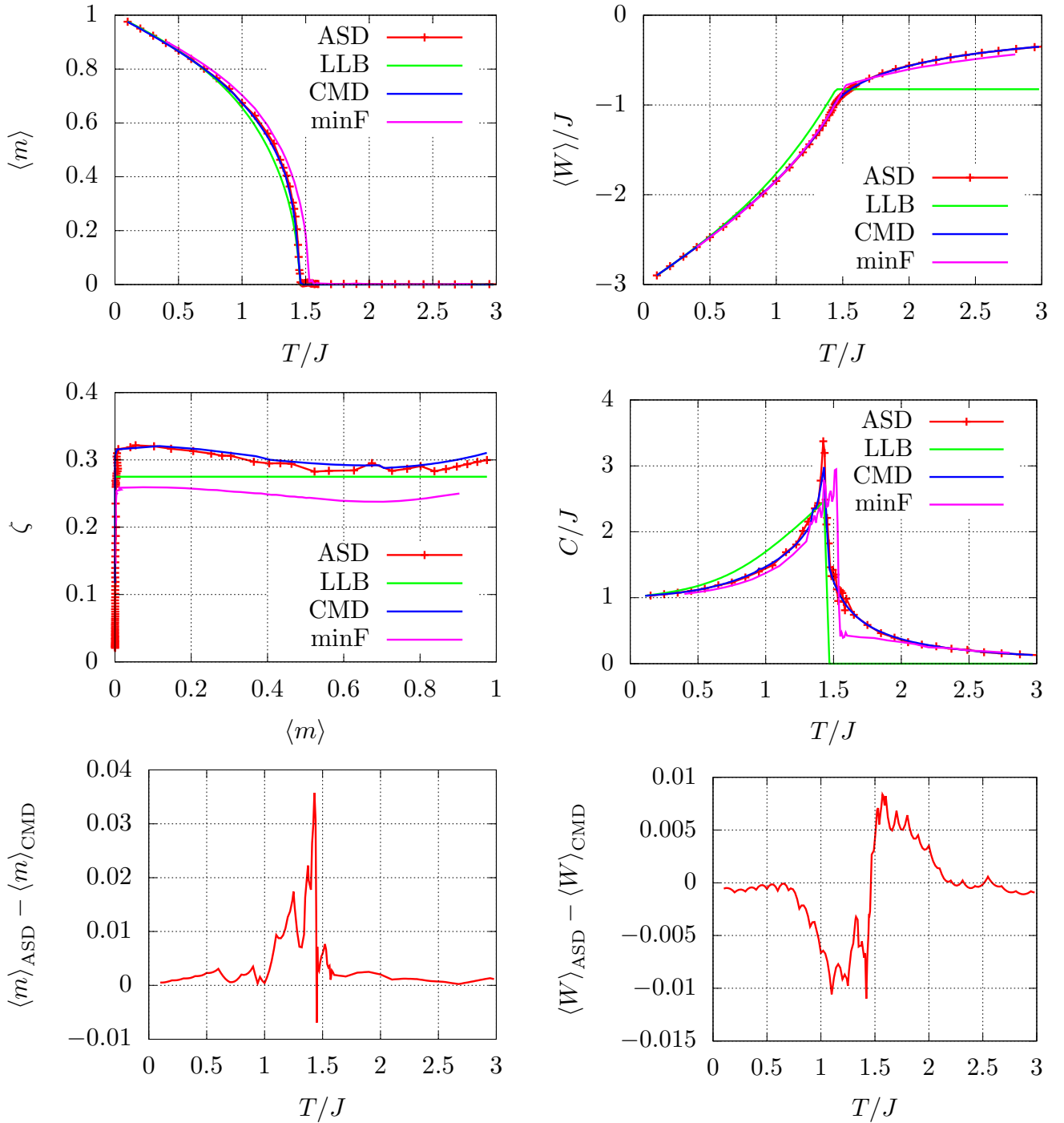


Рис. 13. Равновесные зависимости средней намагниченности $\langle m \rangle(T)$, средней энергии $\langle W \rangle(T)$, фазовой кривой $\zeta(\langle m \rangle)$ и теплоемкости $C = d\langle W \rangle/dT$ для примитивной кристаллической решетки, полученные в различных приближениях

ASD расчеты велись с помощью кода StatASD [20, 21] на кластере K60 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Для расчета коэффициентов в моделях LLB и CMD, а также вычисления энтропии применялась библиотека CMDlib [18, 19]. В LLB и CMD расчетах рассматривалась пространственно-однородная система.

Для всех решеток результаты расчетов в рамках CMD хорошо совпадают

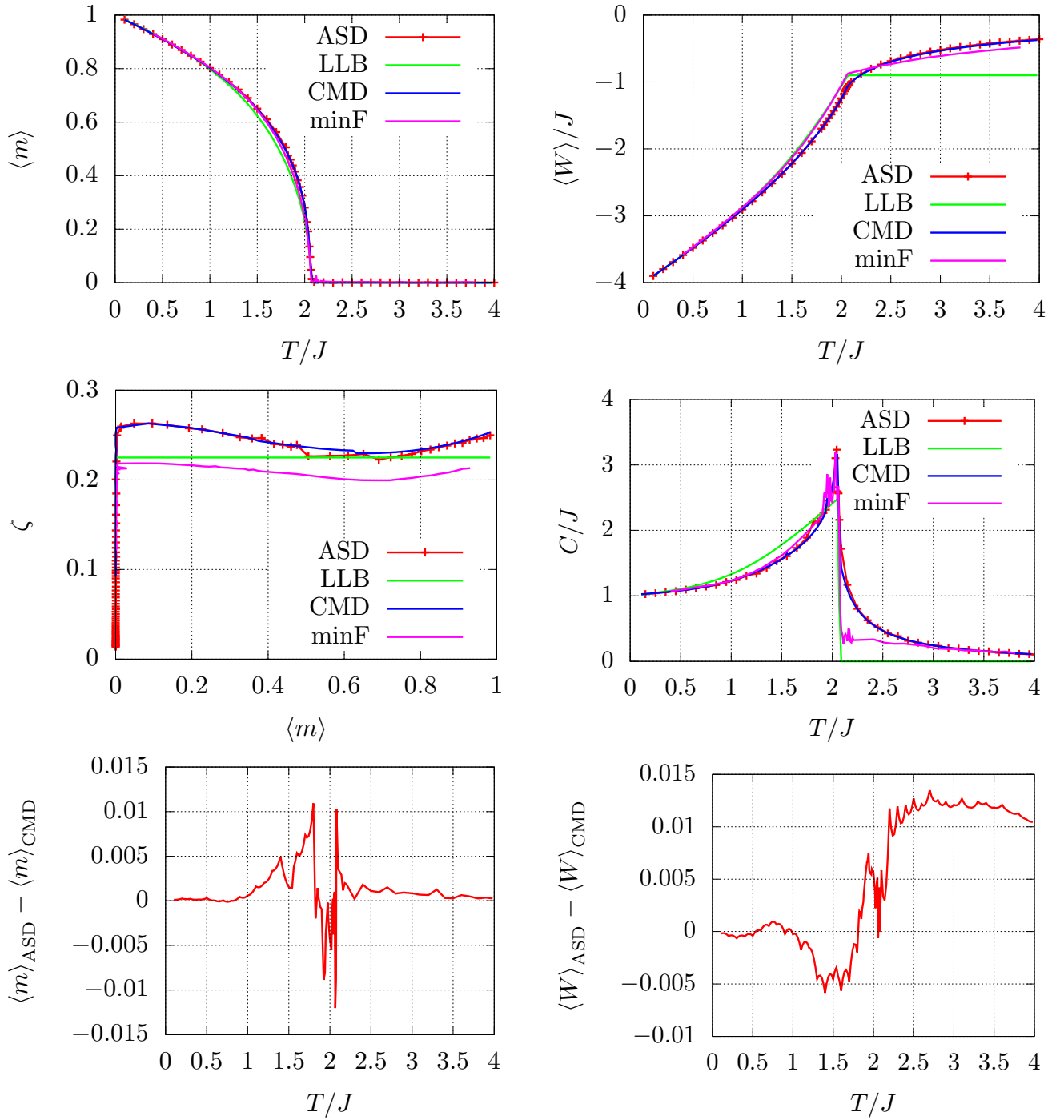


Рис. 14. Равновесные зависимости средней намагниченности $\langle m \rangle(T)$, средней энергии $\langle W \rangle(T)$, фазовой кривой $\zeta(\langle m \rangle)$ и теплоемкости $C = d\langle W \rangle/dT$ для объемноцентрированной кристаллической решетки, полученные в различных приближениях

с результатами расчетов в рамках исходной ASD модели. Абсолютная ошибка не превышает 10^{-2} во всем диапазоне температур, за исключением области фазового перехода. Это расхождение может быть связано как с недостатками CMD, так и с погрешностями ASD расчетов — в окрестности фазового перехода времена релаксации весьма велики, что требует очень длительных расчетов для

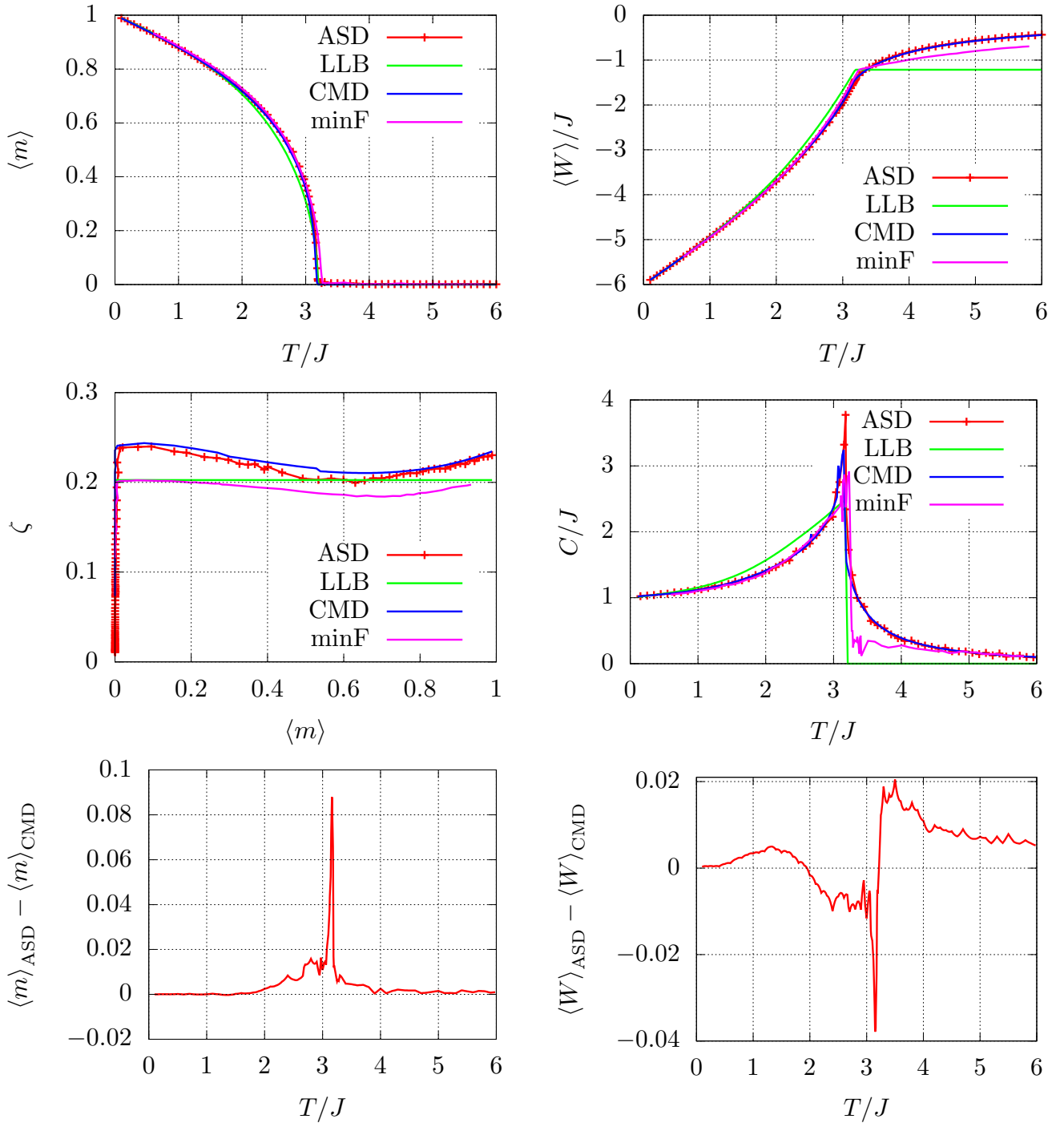


Рис. 15. Равновесные зависимости средней намагниченности $\langle m \rangle(T)$, средней энергии $\langle W \rangle(T)$, фазовой кривой $\zeta(\langle m \rangle)$ и теплоемкости $C = d\langle W \rangle/dT$ для гранецентрированной кристаллической решетки, полученные в различных приближениях

выхода на стационар, рис 16.

В рамках LLB намагниченность совпадает с ASD несколько хуже. Энергия, теплоемкость и ζ ожидаемо совпадают значительно хуже, особенно в парамагнитной фазе, при $T > T_c$.

При минимизации свободной энергии наблюдается небольшой сдвиг крити-

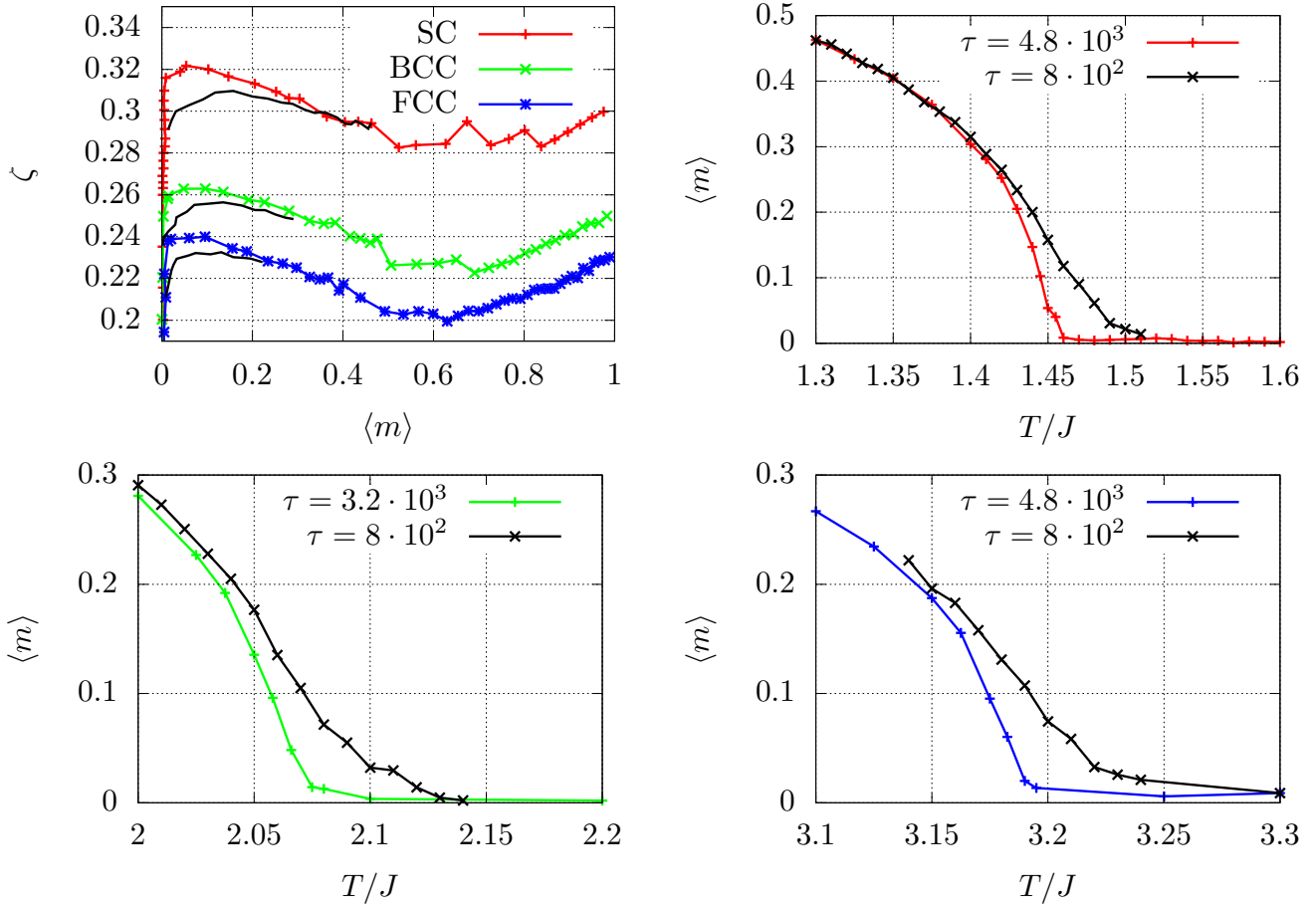


Рис. 16. Равновесные ASD зависимости для разных кристаллических решеток при двух разных временах расчета до установления τ

ческой температуры для примитивной решетки. Для всех решеток наблюдается отличие теплоемкости для парамагнитной фазы. Значения $\zeta(\langle m \rangle)$ оказываются ниже на $10 \div 20\%$.

6. Восприимчивость магнетика

Поскольку внешние поля $H^{\text{ext}} \ll J$, то для валидации CMD модели достаточно проверить результаты расчета восприимчивости $\chi = \partial \langle m_z \rangle / \partial H_z^{\text{ext}}$. ASD расчет восприимчивости является достаточно сложной задачей, здесь можно выделить по крайней мере два подхода.

Первый подход основан на прямом численном дифференцировании $\langle m_z \rangle$ по H^{ext} . Его недостатком является неустойчивость процедуры численного дифференцирования флуктуирующей (за счет большого, но конечного числа атомов) величины $\langle m_z \rangle$, в итоге зависимость $\chi(T)$ оказывается достаточно «зашумленной».

Второй подход основан на свойствах N -частичного распределения Гиббса

$$f^{(N)} = \frac{1}{Z^{(N)}} \exp \left[\frac{N H_z^{\text{ext}} \bar{m}_z}{T} + \frac{1}{2T} \sum_{ij} J_{ij} \eta_{ij} \right], \quad \bar{m}_z = \frac{1}{N} \sum_i m_{zi},$$

$$\langle \bar{m}_z \rangle = \int \dots \int \bar{m}_z f^{(N)} d\mathbf{m}_{1\dots N}, \quad \chi = \left. \frac{\partial \langle \bar{m}_z \rangle}{\partial H^{\text{ext}}} \right|_{H^{\text{ext}}=0} = N \frac{\langle \bar{m}_z^2 \rangle - \langle \bar{m}_z \rangle^2}{T}. \quad (14)$$

Здесь основная сложность состоит в ASD расчете средних $\langle \bar{m}_z^n \rangle$ — до сих пор речь шла о величинах, которые можно было рассчитывать в рамках одной реализации, т.к. они совпадали для всех реализаций в рассматриваемом ансамбле. При расчете χ это уже не так: при работе с одной реализацией в (14) мгновенное значение $\chi = 0$, т.к. в рамках одной реализации $\langle \bar{m}_z^n \rangle = \bar{m}_z^n$, т.е. усреднение $\langle \dots \rangle$ должно проводиться по ансамблю.

Гипотетически, конечно, возможно в рамках ASD работать с ансамблем независимых наборов $\{\mathbf{m}_i\}$, но это радикально увеличит и без того высокую вычислительную сложность. Проще использовать эргодическую гипотезу и вычислять средние $\langle \bar{m}_z^n \rangle$ как

$$\langle \bar{m}_z^n \rangle = \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \bar{m}_z^n(t) dt, \quad t_2 - t_1 \gg \alpha^{-1},$$

здесь t_1 должно быть достаточно велико для того, чтобы система пришла в состояние равновесия.

На рис. 17 представлены зависимости $\chi(T)$, полученные для разных кристаллических решеток в различных приближениях: ASD₁ — прямое численное дифференцирование (изменение $H^{\text{ext}} = 0.01J$), ASD₂ — выражение (14) с усреднением на интервале $t_2 - t_1 = 1000$ (10^5 шагов по времени), кроме того, LLB, CMD и минимизация свободной энергии minF.

Для BCC и FCC решеток ASD₂ дает значительно более узкий и высокий пик, чем ASD₁. Для всех решеток результаты minF близки к LLB с точностью до сдвига критической температуры; CMD дает завышенные значения χ по сравнению с ASD; LLB, напротив, дает заниженные результаты.

7. Расчет критических индексов

Критические индексы — это показатели степени, описывающие поведение особенностей макропараметров в окрестностях точки фазового перехода. Здесь мы рассмотрим критические индексы $\alpha, \alpha', \beta, \gamma, \gamma', \delta$:

$$C|_{T < T_c} \sim (T_c - T)^{-\alpha'}, \quad C|_{T > T_c} \sim (T - T_c)^{-\alpha}, \quad \langle m \rangle \approx (1 - T/T_c)^\beta,$$

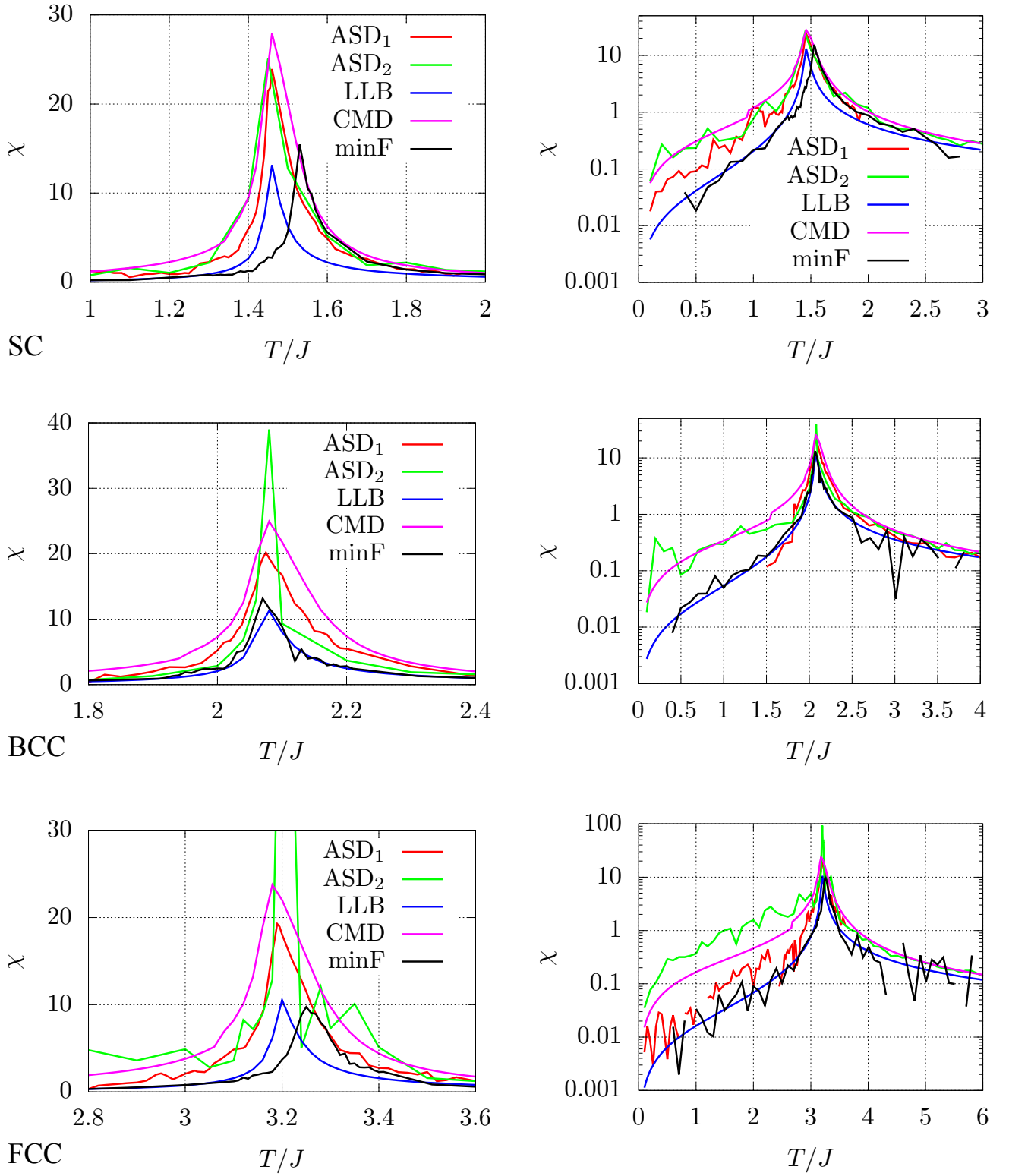


Рис. 17. Зависимости $\chi(T)$, полученные для разных кристаллических решеток в различных приближениях

$$\chi|_{T < T_c} \sim (T_c - T)^{-\gamma'}, \quad \chi|_{T > T_c} \sim (T - T_c)^{-\gamma},$$

см. таблицу 1.

	α	α'	β	γ	γ'
эксперимент [22], Fe	$\lesssim 0.17$	$\lesssim 0.13$	0.34 ± 2	1.33	—
эксперимент [22], Ni	0.10 ± 5	-0.26 ± 6	0.51 ± 4	1.32 ± 2	—
среднее поле	—	—	0.5	1	1
Изинг 3D	0.125	0.063	0.313	1.25	1.31
ASD, SC	0.23	0.027	0.335 ± 6	1.12	1
CMD, SC	0.17	0.028	0.342 ± 1	1.2	0.87
ASD, BCC	0.33	0.02	0.333 ± 6	1.3	0.8
CMD, BCC	0.17	0.04	0.3322 ± 4	1.3	0.8
ASD, FCC	0.3	0.083	0.335 ± 1	1.34	1.13
CMD, FCC	0.11	0.032	0.343 ± 1	1.32	0.87

Таблица 1. Критические индексы, полученные в различных приближениях

Первые две строки — результаты экспериментальных измерений из [22]. Затем идут результаты расчетов в рамках других моделей (трехмерной модели Изинга и модели среднего поля) и результаты настоящей работы. Результаты для LLB не приводятся, т.к. они совпадают с приближением среднего поля. Все критические индексы получены при помощи библиотечной функции `curve_fit` из `scipy.optimize`, реализующей метод наименьших квадратов.

Проще и точнее всего рассчитывается индекс β . Видно, что CMD находится в хорошем количественном согласии с расчетами ASD. Для SC и BCC решеток индекс β совпадает в пределах погрешности, для FCC решетки есть расхождение во втором знаке. Результаты расчетов находятся в количественном согласии с экспериментальными данными для железа, имеющего BCC решетку при н.у. и FCC решетку при приближении к T_c . Надо отметить, что хотя зависимости $\langle m \rangle(T)$ LLB близки к ASD и CMD, но при стремлении к T_c можно аналитически получить асимптотитку $\beta = 1/2$.

Для остальных макропараметров в рамках ASD критические индексы получаются весьма приближенно. Приходится отступать от T_c на $0.05 \div 0.1J$ и выбирать некоторый конечный интервал по T шириной $0.5 \div 1J$. Для CMD расчет проводился в том же интервале. Полученные результаты имеют скорее иллюстративный характер.

8. Времена релаксации

При изучении процессов релаксации в качестве начальных условий выбиралась полностью однородная намагниченность $\mathbf{m}_i|_{t=0} = (0,0,1)\forall i$, затем велся расчет до выхода средних значений на стационар и изучалось поведение $\langle m_z \rangle(t)$. Релаксация системы в рассматриваемой постановке имеет сложный двухвременной характер — сначала устанавливается ближний порядок $\langle \eta \rangle$, затем дальний порядок $\langle m \rangle$. Для описания зависимостей $\langle m \rangle(t)$ эмпирически

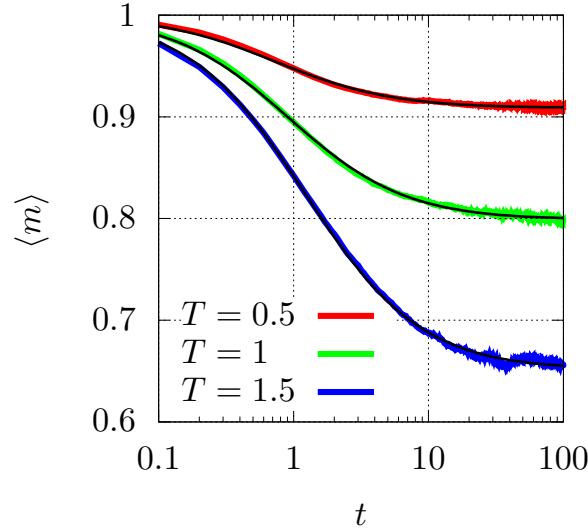


Рис. 18. Полученные из ASD зависимости $\langle m \rangle(t)$ для BCC решетки при различных температурах и их аппроксимация

подобрана функция

$$\langle m \rangle(t) \approx \langle m \rangle_{\text{eq}} + (1 - \langle m \rangle_{\text{eq}}) \frac{e^{-t/\tau_e}}{1 + t/\tau_h},$$

где $\langle m \rangle_{\text{eq}}$ — равновесная намагниченность, τ_e, τ_h — времена релаксации, рис. 18. Параметры τ_e, τ_h вычислялись функцией `minimize` из библиотеки `scipy.optimize`, применялся метод оптимизации Nelder–Mead в норме L_∞ .

На рис. 19 приведены времена релаксации, полученные в рамках ASD, LLB и CMD для различных решеток. Как уже отмечалось ранее, LLB занижает времена релаксации на порядок, что является критически важным недостатком при моделировании устройств спинтроники, в то время как CMD находится в хорошем согласии с ASD.

CMD хорошо объясняет причины возникновения anomalously длительной релаксации вдали от точки фазового перехода. После быстрой релаксации параметра ближнего порядка $\langle \eta \rangle$ наступает этап медленной релаксации параметра дальнего порядка $\langle m \rangle$. Скорость этой релаксации описывается членом $(n_b J \Upsilon - T) \langle m \rangle$ в первом уравнении CMD (5), при этом в соответствующей области $n_b J \Upsilon \lesssim T$ и Υ имеет очень маленький градиент, рис. 20.

9. Перемагничивание образца

Задача о перемагничивании непосредственно относится к разработке магнеторезистивной памяти. В связи с ограниченной производительностью ASD кода рассматривается куб со стороной 64 периода кристаллической решетки, граничные условия периодические. Начальные условия отвечают равновесному состоянию с $\langle \mathbf{m} \rangle|_0 = (0, 0, \langle m \rangle_{\text{eq}})$, $\mathbf{n}_K = (0, 0, 1)$, $K = 0.1J$. В начальный момент времени $t = 0$ включается внешнее поле $\mathbf{H}^{\text{ext}} = (0, 0, -0.2J)$, основными

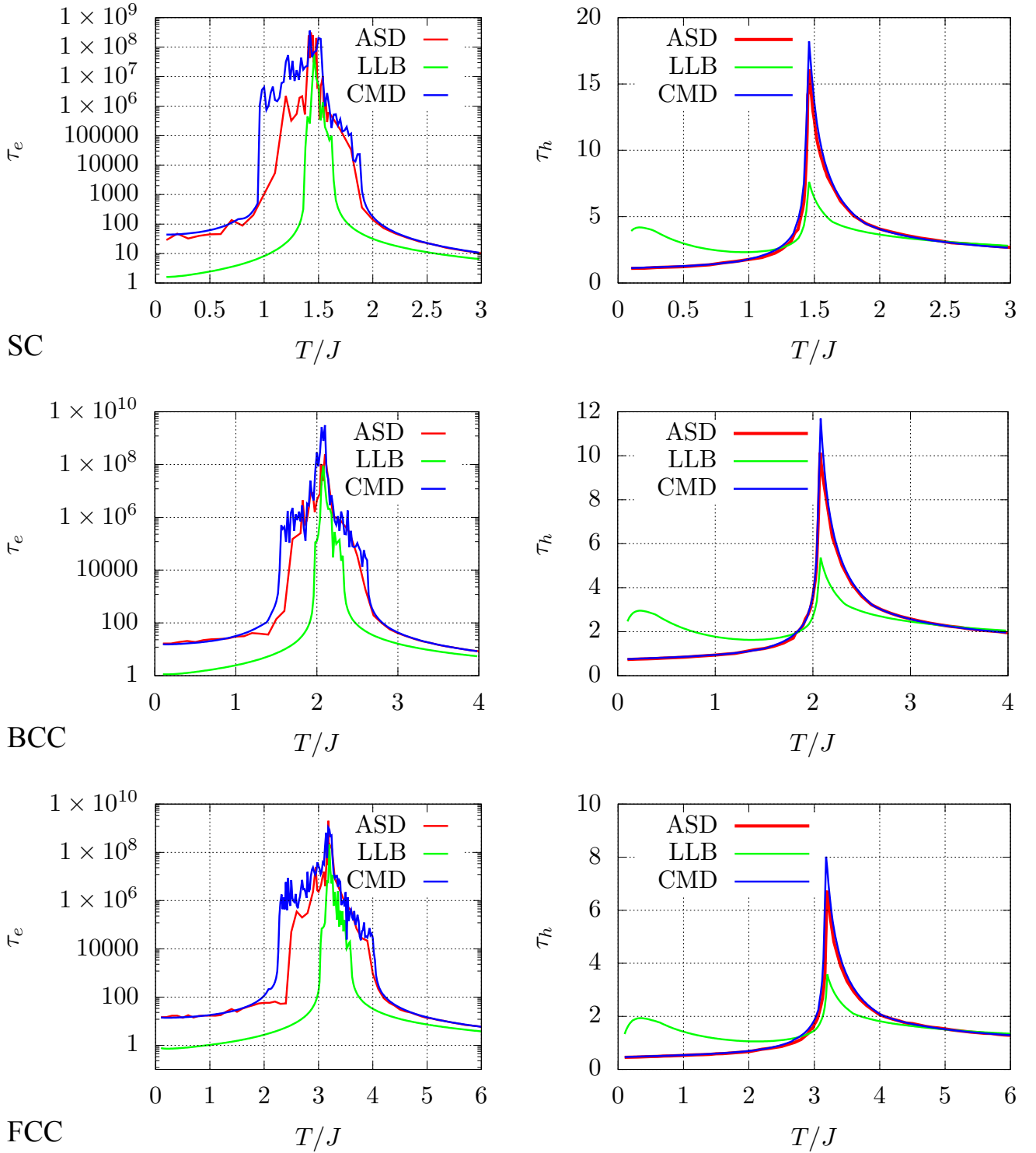


Рис. 19. Зависимости времен релаксации от температуры, полученные в разных приближения для разных кристаллических решеток

характеристиками являются эволюция средней намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle(t)$ и время перемагничивания τ_r , за которое $\langle m_z \rangle$ сменит знак. Время счета ограничено величиной $t_{\max} = 10^3$: если за это время $\langle m_z \rangle$ не успевает сменить знак, то считается, что перемагничивания не произошло. Внешнее поле $0.2J$ весьма велико,

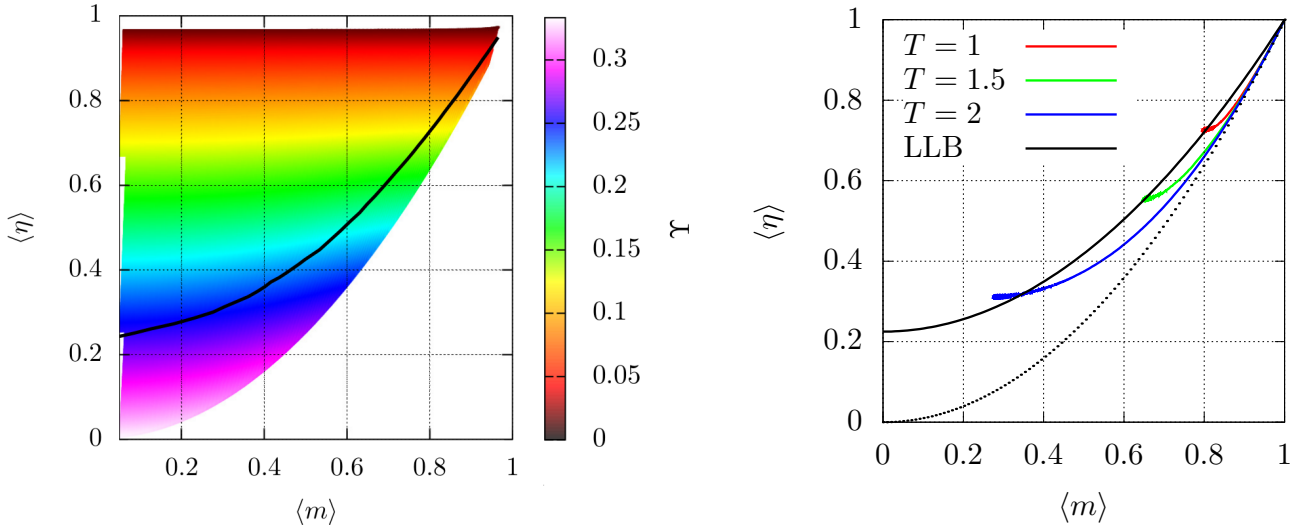


Рис. 20. Зависимость $\Upsilon(\langle m \rangle, \langle \eta \rangle)$ (слева, черной линией показана равновесная кривая $\langle \eta \rangle^*$ для ВСС решетки) и зависимости $\langle \eta \rangle(\langle m \rangle)$ для ВСС решетки при различных температурах (справа, черной линией показана равновесная кривая LLB)

такой выбор параметров обусловлен ограничениями производительности ASD кода — при меньших полях времени перемагничивания были бы существенно выше.

На рис. 21 приведены результаты для перемагничивания образца с ВСС решеткой при $T = J$ (для железа это примерно 500°K) полученные в различных приближениях. Приближение LLB₂ отвечает LLB расчетам со случайным источником, обусловленным дробовым шумом $\sqrt{2\gamma\alpha T/n_c}\xi$, где n_c — число атомов в ячейке расчетной сетки. Рассматривались разбиения счетной области на $1, 2^3, 4^3$ и 8^3 ячеек, все они дали близкие результаты. Для CMD расчетов разбиение области и учет дробового шума картину не меняли.

Из рис. 21 видно, что при ASD расчете $\langle m \rangle$ проходит через значение около нуля, т.е. в системе образуется геликоидальная структура намагниченности — в процессе эволюции ближний порядок $\langle \eta \rangle$ практически не меняется. С точки зрения макропараметров CMD качественно хорошо воспроизводит такое поведение. Для LLB такое поведение возможно только при очень сильных внешних полях или при температурах вблизи фазового перехода, когда $|H^{\text{ext}}| \geq n_b \varepsilon_G J \langle m \rangle$, см. (2). Вдали от фазового перехода LLB модель обеспечивает перемагничивание с поворотом средней намагниченности при сохранении ее модуля, случайный источник нужен для нарушения начальной симметрии и выхода из положения начального неустойчивого равновесия.

На рис. 22 приведены зависимости $\tau_r(T)$, полученные в различных приближениях для разных кристаллических решеток. Видно, что CMD дает качественное согласие, но количественно занижает τ_r по сравнению с ASD в $1.5 \div 2$ раза. Для обеспечения точного количественного согласия требуется введение

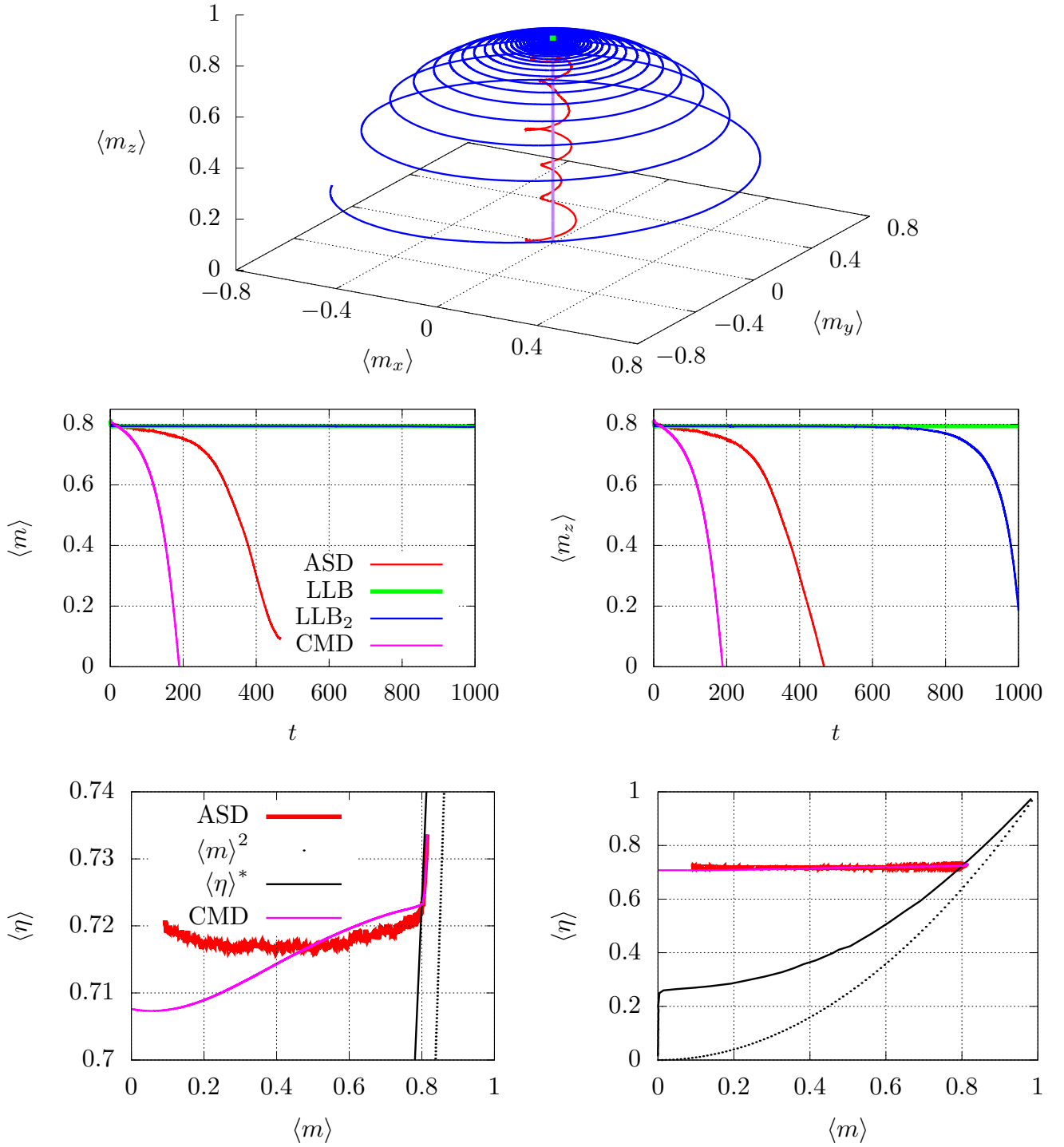


Рис. 21. Эволюция макропараметров для одного расчета по перемагничиванию образца с ВСС решеткой, $K = 0.1J$, $H^{\text{ext}} = -0.2J$, $T = J$

дополнительных поправок в коэффициенты Υ и $\mathcal{Q}$ в неравновесной области, при $\zeta > \zeta^*$.

Уже на небольшом расстоянии от точки фазового перехода в одноосной модели LLB (без случайного источника) перемагничивания не происходит. Модель LLB₂ (со случайным источником) дает τ_r , завышенные до двух раз и более.

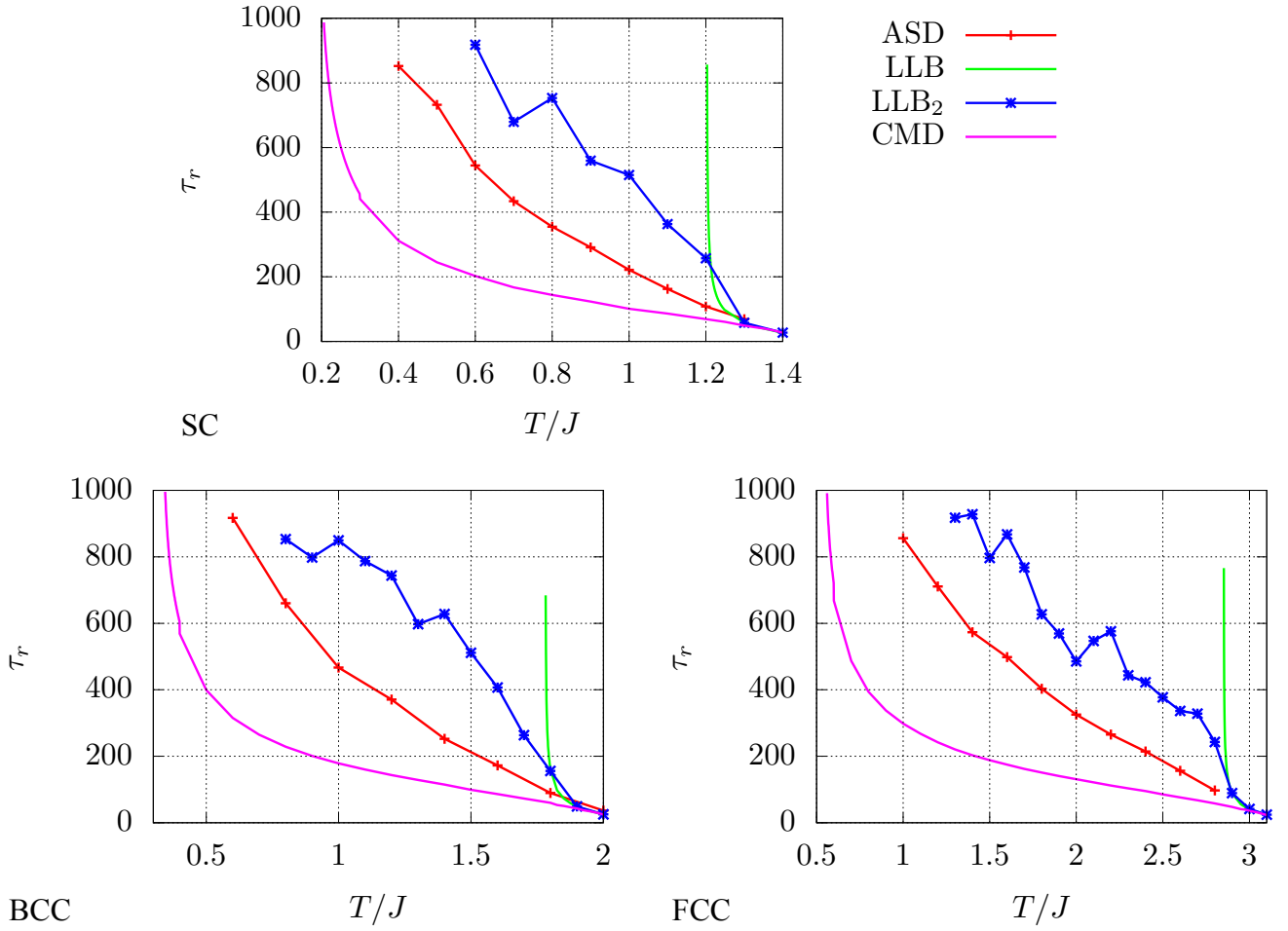


Рис. 22. Зависимости времени перемагничивания $\tau_r(T)$, полученные в различных приближения для разных кристаллических решеток

Важно подчеркнуть, что в этом случае перемагничивание имеет качественно иную, отличную от результатов ASD, природу.

10. Заключение

В работе получены высокотемпературные асимптотики для энергии и приводится обоснование для алгоритма расчета энтропии магнетика на основе одно- и двухчастичной функций распределения. Показано, что гранецентрированная кристаллическая решетка качественно отличается от примитивной и объемноцентрированной решеток за счет полностью симметричных трехчастичных функций распределения. Получаемые в итоге на основе минимизации свободной энергии равновесные зависимости намагниченности, энергии, теплоемкости и восприимчивости находятся в удовлетворительном согласии с результатами исходной атомистической модели.

Получены компактные, пригодные для встраивания в промышленные микромагнитные коды аналитические выражения для всех интегральных коэффи-

циентов системы уравнений корреляционной магнитодинамики. Выражения учитывают как исходные теретические построения, так и поправки, получаемые из атомистического моделирования. Показано, что по крайней мере три рассмотренные кристаллические решетки требуют атомистических расчетов для получения только одного значения — уровня парных корреляций $\langle \eta \rangle_c$ в точке фазового перехода.

Аппроксимация производства параметра дальнего порядка Υ показывает, что традиционное уравнение Ландау–Лифшица–Блоха является частным случаем корреляционной магнитодинамики. Получено новое, существенно более точное, выражение для обменной энергии в приближении среднего поля.

Сравнение равновесных зависимостей намагниченности, энергии и теплоемкости показывает, что расчеты в рамках корреляционной магнитодинамики значительно лучше согласуются с результатами исходной атомистической модели, чем расчеты в рамках традиционного уравнения Ландау–Лифшица–Блоха. Корреляционная магнитодинамика дает завышенные значения восприимчивости, но это расхождение может быть связано в том числе со сложностью расчета восприимчивости в рамках исходной атомистической модели.

Построено аналитическое выражение для аппроксимации сложного двухвременного процесса релаксации. Показано, что традиционное уравнение Ландау–Лифшица–Блоха дает заниженные (вплоть до одного порядка) времена релаксации, в то время как корреляционная магнитодинамика находится в хорошем согласии с исходной атомистической моделью.

Рассмотрена важная с практической точки зрения задача о перемагничивании образца. Показано, что корреляционная магнитодинамика качественно верно описывает процессы перемагничивания, но занижает времена перемагничивания до двух раз. Традиционное уравнение Ландау–Лифшица–Блоха требует для описания перемагничивания введения случайного источника дробового шума, завышает времена перемагничивания и описывает процесс перемагничивания качественно неверно, с сохранением модуля средней намагниченности.

Построенная аппроксимация интегральных коэффициентов корреляционной магнитодинамики делает ее пригодной для решения широкого круга инженерных задач.

Список литературы

- [1] Программный комплекс для компьютерного дизайна спинтронных наноприборов / А.А. Книжник, И.А. Горячев, Г.Д. Демин и др. // Российские нанотехнологии. — 2017. — Т. 12, № 3-4. — С. 76–83.
- [2] 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>.

- [3] Atxitia U., Hinzke D., Nowak U. Fundamentals and applications of the Landau–Lifshitz–Bloch equation // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2017. — Vol. 50, no. 3. — P. 033003. — <https://doi.org/10.1088/1361-6463/50/3/033003>.
- [4] 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>.
- [5] Иванов А.В. Расчет энтропии классического ферромагнетика Гейзенберга на основе аппроксимации двухчастичных функций распределения // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2024. — № 81. — С. 23. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2024-81>.
- [6] Atomistic spin dynamics: foundations and applications / Olle Eriksson, Anders Bergman, Lars Bergqvist, Johan Hellsvik. — Oxford university press, 2017.
- [7] Иванов А.В., Хилков С.А. Бета–аппроксимация двухчастичной функции распределения при описании цепочек фазовых осцилляторов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2017. — № 87. — С. 19. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2017-87>.
- [8] Иванов А.В. Расчет статистической суммы и аппроксимация многочастичных функций распределения для магнетиков в модели Гейзенберга // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2019. — № 104. — С. 12. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2019-104>.
- [9] Замятин С.В., Иванов А.В. Вычисление статистической суммы классического магнетика Гейзенберга в линейном приближении // Математическое моделирование. — 2025. — Т. 37, № 3. — С. 100–112.
- [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. 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>.
- [12] 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>.

- [13] 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.
- [14] 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. — С. 22. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2024-47>.
- [15] 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>.
- [16] Иванов А.В. Уравнения корреляционной магнитодинамики с учетом одноосной квадратичной поправки в аппроксимации одночастичной функции распределения // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2021. — № 107. — С. 16. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-107>.
- [17] 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>.
- [18] Ivanov A.V. StatASD — Modeling Atomistic Spin Dynamics for Statistical Physics. — 2024. — <https://github.com/aivn/CMDlib>.
- [19] Иванов А.В., Лукьянов А.В., Замятин С.В. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «CMDlib» RU 2025617563. — 2025. — <https://elibrary.ru/item.asp?id=80653850>.
- [20] Иванов А.В. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «StatASD» RU 2025616394. — 2025. — <https://elibrary.ru/item.asp?id=80527215>.
- [21] Ivanov A.V. StatASD — Modeling Atomistic Spin Dynamics for Statistical Physics. — 2024. — <https://github.com/aivn/StatASD>.
- [22] Тикадзуми С. Физика ферромагнетизма. Магнитные свойства вещества. — М.: «Мир», 1983. — С. 304.