Уравнения корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков[1)]

А. В. Иванов[2)], *Е. В. Зипунова, С. А. Хилков*

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 125047 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 декабря 2021 г.
После переработки 18 декабря 2021 г.
Принята к публикации 19 декабря 2021 г.

На основе цепочки Боголюбова и новой аппроксимации многочастичных функций распределения, учитывающей корреляции между ближайшими соседями в магнетиках, получена новая система уравнений корреляционной магнитодинамики. Система состоит из уравнения типа Ландау–Лифшица–Блоха и уравнения на парные корреляции. Результаты расчетов в рамках корреляционной магнитодинамики гораздо лучше согласуются с результатами моделирования в рамках атомистической модели, чем результаты традиционного уравнения Ландау–Лифшица–Блоха.

DOI: 10.31857/S1234567822030077

1. Современные исследования магнитных материалов требуют моделей, адекватно учитывающих влияние температурных флуктуаций. Требования обусловлены прогрессом нанотехнологий (поскольку наноструктуры особенно подвержены термическим эффектам) и новыми возможностями по контролю процессов в магнитных наноструктурах на малых временных масштабах. Кроме внешнего поля, переключение намагниченности может проводиться различными способами – при помощи спин-поляризованного тока [1], с применением лазера [2], или даже термически [3].

Полномасштабное численное моделирование неравновесных процессов в магнетиках с учетом температуры необходимо при создании термоассистированных ячеек магниторезистивной памяти, переключаемых в импульсном режиме комбинацией разогрева запоминающего слоя и спин-поляризованного тока или магнитного поля [4].

Модели магнетиков сильно различаются по масштабу. С одной стороны, спин – это квантовое явление, с другой стороны, в ряде случаев предпочтительны модели, оперирующие макропараметрами. Исследуемое явление может зависеть как от дефектов кристаллической решетки, так и от формы и размера образца. Характерные времена разнятся от аттосекунд до лет. В таких условиях обойтись одной моделью невозможно. Для исследования стационарных состояний применяются методы Монте-Карло [5, 6]. Наиболее популярными являются микромагнитные модели сплошной среды на основе уравнения Ландау–Лифшица–Гильберта [7–13]. В настоящий момент наиболее полной общепринятой микромагнитной моделью, учитывающей динамику изменения модуля средней намагниченности, является уравнение Ландау–Лифшица–Блоха (УЛЛБ) [14–19].

Корректный переход от атомистической модели к моделям сплошной среды в магнетиках является сложной задачей за счет сильного локального обменного взаимодействия и необходимости учета температурных флуктуаций. Такой переход представляет большой интерес с фундаментальной точки зрения. Приближение среднего поля, использованное при выводе УЛЛБ, приводит к ряду артефактов из-за потери корреляций между магнитными моментами ближайших атомов. Основными недостатками такого подхода являются нулевая обменная энергия в парамагнитной фазе и заниженные времена релаксации системы [20]. Это может быть серьезным ограничением при моделировании устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники, работающих в импульсном режиме.

Аппроксимация многочастичных функций распределения, учитывающая корреляции между ближайшими соседями, позволяет получить модифицированное УЛЛБ. Дополнительно вводится уравнение на парные корреляции (обменную энергию), аналогичное уравнению на плотность энергии в гидродинамике.

2. В качестве исходной атомистической модели магнетика мы будем рассматривать систему стохастических уравнений Ландау–Лифшица, описы-

[1)]См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

[2)]e-mail: aiv.racs@gmail.com

вающую эволюцию N магнитных моментов $\mathbf{m}_i(t)$, $|\mathbf{m}_i(t)| = 1$. Магнитные моменты расположены в узлах кристаллической решетки с координатами $\mathbf{r}_i$. Система имеет вид

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

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

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

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

где γ – гиромагнитное соотношение; α – параметр затухания; $\mathbf{H}^{\text{eff}}$ – эффективное магнитное поле, W – полная энергия системы; 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 $\mathbf{m}_i$; $\mathbf{H}^{\text{ex}}$ – 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. Здесь и далее мы будем использовать безразмерную систему единиц.

Система уравнений (1) позволяет корректно учитывать температурные флуктуации, дефекты кристаллической решетки и ряд других тонких физических эффектов. Однако она оказывается слишком сложна с вычислительной точки зрения для моделирования реальных устройств. Для упрощения задачи необходимо перейти к уравнениям сплошной среды. При этом основную сложность вызывает корректный учет сильного обменного взаимодействия между ближайшими соседями. Мы будем рассматривать результаты численного интегрирования (1) как "первопринципные" результаты моделирования "атом-в-атом". На их основе будет проводиться верификация построенной системы уравнений сплошной среды.

3. Введем обозначение

$$\left[\!\bullet\, \mathbf{H}_i,\, D \,\bullet\!\right]_i f \equiv \nabla_{\circ i}\Big[\gamma\mathbf{m}_i \times \Big(\mathbf{H}_i + \alpha\big[\mathbf{m}_i \times \big(\mathbf{H}_i - D\nabla_{\circ i}\big)\big]\Big) f\Big],$$

где $\nabla_{\circ i} = \nabla_{\mathbf{m}_i} - \mathbf{m}_i\big(\mathbf{m}_i \cdot \nabla_{\mathbf{m}_i}\big)/\mathbf{m}_i^2$ — градиент вдоль поверхности сферы, $\mathbf{H}_i$ – некоторое эффективное поле, D – коэффициент диффузии в пространстве магнитных моментов, $f = f(..., \mathbf{m}_i, ...)$ – некоторая функция распределения магнитных моментов. В дальнейшем мы будем много работать с уравнениями типа Фоккера–Планка (УФП) [21]

$$\dot f = \nabla_{\circ i}\Big[\gamma\mathbf{m}_i \times \Big(\mathbf{H}_i + \alpha\big[\mathbf{m}_i \times \big(\mathbf{H}_i - D\nabla_{\circ i}\big)\big]\Big) f\Big],$$

и обозначение $\left[\!\bullet\, \mathbf{H}_i, D \,\bullet\!\right]_i f$ значительно упростит запись.

Пусть $f^{(N)}(\mathbf{m}_1, ..., \mathbf{m}_N, t)$ – N-частичная функция распределения магнитных моментов, тогда от (1) с учетом температурных флуктуаций можно достаточно строго [22] перейти к N-частичному УФП

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} = \sum_{i=1}^{N} \left[\!\bullet\, \mathbf{H}_i^{\text{eff}}, T \,\bullet\!\right]_i f^{(N)}. \qquad (2)$$

Введем одночастичную функцию распределения f_i:

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

(здесь под $\int\limits_{S_2} d\mathbf{m}$ понимается интегрирование по сфере единичного радиуса) и проинтегрируем (2) по $N-1$ магнитному моменту (см. дополнительный материал), что даст нам систему из N одночастичных УФП с интегральными коэффициентами

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \left[\!\bullet\, \frac{\mathbf{H}_i^{\overset{(2)}{\text{ex}}} + \mathbf{H}_i^{\overset{(2)}{\text{dip}}}}{f_i} + \mathbf{H}_i^{\text{an}} + \mathbf{H}^{\text{ext}}, T \,\bullet\!\right]_i f_i, \qquad (3)$$

$$\mathbf{H}_i^{\overset{(2)}{\text{ex}}} = \sum_j J_{ij} \int\limits_{S_2} \mathbf{m}_j\, f_{ij}^{(2)}\, d\mathbf{m}_j, \qquad (4)$$

$$\mathbf{H}_i^{\overset{(2)}{\text{dip}}} = \sum_j \int\limits_{S_2} \frac{3\big(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij}\big)\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{m}_j r_{ij}^2}{r_{ij}^5}\, f_{ij}^{(2)}\, d\mathbf{m}_j, \qquad (5)$$

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

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

4. Для замыкания цепочки Боголюбова необходимо аппроксимировать $f_{ij}^{(2)}$ на основе f_i и f_j. В рамках общепринятого приближения среднего поля предполагается, что $f_{ij}^{(2)} \approx f_i f_j$. Тогда (3) принимает вид

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \left[\!\bullet\, \overline{\mathbf{H}}_i^{\text{ex}} + \overline{\mathbf{H}}_i^{\text{dip}} + \mathbf{H}_i^{\text{an}} + \mathbf{H}^{\text{ext}}, T \,\bullet\!\right]_i f_i, \qquad (6)$$

$$\overline{\mathbf{H}}_i^{\text{ex}} = \sum_j J_{ij} \left\langle \mathbf{m}_j \right\rangle, \qquad (7)$$

$$\overline{\mathbf{H}}_i^{\text{dip}} = \sum_j \frac{3\big(\langle \mathbf{m}_j \rangle \cdot \mathbf{r}_{ij}\big)\mathbf{r}_{ij} - \langle \mathbf{m}_j \rangle\, \mathbf{r}_{ij}^2}{r_{ij}^5}. \qquad (8)$$

Предположим, что существует гладкая (на масштабах много больших, чем расстояние между атомами) шестимерная функция распределения $f(\mathbf{m},\mathbf{r},t)$, совпадающая с $f_i(\mathbf{m},t)$ в узлах кристаллической решетки $\mathbf{r}_i$. Обозначим отвечающее ей распределение средней намагниченности $\langle\mathbf{m}\rangle(\mathbf{r},t)$. Тогда в случае, если $J_{ij}=J$ только для ближайших соседей, обменное поле (7) можно аппроксимировать как

$$\overline{\mathbf{H}}_i^{\mathrm{ex}} \approx a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle\mathbf{m}\rangle|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_i} + n_b J \langle\mathbf{m}\rangle|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_i},$$

где a – длина обменной связи, $\Delta_{\mathbf{r}}$ – оператор Лапласа по конфигурационному пространству, n_b — число ближайших соседей.

Слагаемые в $\overline{\mathbf{H}}_i^{\mathrm{ex}}$ имеют вполне прозрачный физический смысл. Слагаемое с $\Delta_{\mathbf{r}}$ отвечает за взаимодействие на масштабах больше физически бесконечного малого объема в случае пространственно-неоднородного распределения $\langle\mathbf{m}\rangle(\mathbf{r})$ и приводит к возникновению спиновых волн. Слагаемое $n_bJ\langle\mathbf{m}\rangle$ отвечает за взаимодействие внутри физически бесконечно малого объема, возникновение спонтанной намагниченности и фазовый переход ферромагнетик–парамагнетик.

Поле диполь-дипольного взаимодействия (8) выражается через интеграл по объему, линейно зависит от $\langle\mathbf{m}\rangle$, и методы его расчета хорошо известны [23, 24].

Тогда (6) принимает вид

$$\frac{\partial f(\mathbf{m},\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left\{\mathbf{H}^{\mathrm{L}} + n_b J\langle\mathbf{m}\rangle + \mathbf{H}^{\mathrm{an}}, T\right\} f, \qquad (9)$$
$$\mathbf{H}^{\mathrm{L}} = a^2 J \Delta_{\mathbf{r}}\langle\mathbf{m}\rangle + \overline{\mathbf{H}}^{\mathrm{dip}} + \mathbf{H}^{\mathrm{ext}},$$

где в $\mathbf{H}^{\mathrm{L}}$ сгруппированы члены, обеспечивающие взаимодействие на масштабах больших размера физически бесконечно малого объема.

5. Умножая (9) на $\mathbf{m}$ и интегрируя по $d\mathbf{m}$ (см. дополнительный материал), получаем УЛЛБ [14], описывающее эволюцию $\langle\mathbf{m}\rangle(\mathbf{r})$:

$$\begin{gathered}\langle\dot{\mathbf{m}}\rangle = -\gamma\Big[\langle\mathbf{m}\rangle\times\mathbf{H}^{\mathrm{L}}\Big] - 2\gamma K\Big(\mathbf{\Phi}+\alpha\mathbf{\Theta}\Big) - \qquad (10)\\ -\alpha\gamma\,\widehat{\Xi}\cdot\Big(\mathbf{H}^{\mathrm{L}} + n_b\varepsilon_G J\langle\mathbf{m}\rangle\Big) - 2\alpha\gamma T\langle\mathbf{m}\rangle,\\ \mathbf{\Phi} = \Big\langle \mathbf{m}\times\mathbf{n}_K(\mathbf{m}\cdot\mathbf{n}_K)\Big\rangle, \quad \widehat{\Xi} = \Big\langle \mathbf{m}\otimes\mathbf{m} - \widehat{I}\Big\rangle,\\ \mathbf{\Theta} = \Big\langle \mathbf{m}\times\big[\mathbf{m}\times\mathbf{n}_K\big](\mathbf{m}\cdot\mathbf{n}_K)\Big\rangle,\end{gathered}$$

где $\otimes$ – символ тензорного произведения, $\widehat{I}$ – единичная матрица, $\varepsilon_G \sim 0.8$ – множитель, введенный Гараниным для учета флуктуаций среднего поля и обеспечивающий получение правильной критической температуры [25]. Для вычисления интегральных коэффициентов $\mathbf{\Phi}$, $\mathbf{\Theta}$, $\widehat{\Xi}$, зависящих от старших моментов одночастичной функции распределения, необходимо аппроксимировать $f(\mathbf{m},\mathbf{r},t)$, например, как[3)]

$$f \approx \frac{e^{\mathbf{p}\cdot\mathbf{m}}}{\mathcal{Z}(p)}, \quad \mathcal{Z}(p) = \int\limits_{S_2} e^{\mathbf{p}\cdot\mathbf{m}}\,d\mathbf{m} = 4\pi\frac{\operatorname{sh}p}{p}, \qquad (11)$$

где $\mathbf{p}=\mathbf{p}(\mathbf{r},t)$ – параметр аппроксимации, $\mathbf{p}\parallel\langle\mathbf{m}\rangle$, $|\langle\mathbf{m}\rangle| = \operatorname{cth}p - 1/p \equiv \mathcal{L}(p)$, $\mathcal{L}$ – функция Ланжевена. Коэффициенты $\mathbf{\Phi}$, $\mathbf{\Theta}$, $\widehat{\Xi}$ могут быть посчитаны численно и аппроксимированы аналитически [26] и см. дополнительный материал. В равновесном случае УЛЛБ (10) эквивалентно теории Кюри–Вейсса с точностью до аппроксимации (11).

6. Для учета корреляций между ближайшими соседями аппроксимируем двухчастичную функцию распределения как

$$f_{ij}^{(2)} \approx \frac{1}{Z_{ij}^{(2)}}\Big[f_i(\mathbf{m}_i,t)\,f_j(\mathbf{m}_j,t)\Big]^{\rho} e^{\lambda\mathbf{m}_i\cdot\mathbf{m}_j}, \qquad (12)$$

$$Z_{ij}^{(2)} = \iint\limits_{S_2S_2}\Big[f_i(\mathbf{m}_i,t)\,f_j(\mathbf{m}_j,t)\Big]^{\rho} e^{\lambda\mathbf{m}_i\cdot\mathbf{m}_j}\,d\mathbf{m}_i\,d\mathbf{m}_j,$$

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 $f_i \approx \approx \int\limits_{S_2} f_{ij}^{(2)}\,d\mathbf{m}_j$. Проще всего получить ρ из уравнения $\langle\mathbf{m}\rangle = \iint\limits_{S_2S_2}\mathbf{m}_i f_{ij}^{(2)}\,d\mathbf{m}_i\,d\mathbf{m}_j$. Такая аппроксимация применима для любой двухчастичной функции распределения, но нас будут интересовать функции для ближайших соседей.

При $\lambda\ll 1$ аппроксимация (12) переходит в приближение среднего поля и $\rho\to 1$. При $\lambda\gg 1$ экспонента в аппроксимации (12) 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 (12) имеет размерность двухчастичной функции распределения.

Уровень парных корреляций задается величиной

$$\langle\eta\rangle = \langle\mathbf{m}_i\cdot\mathbf{m}_j\rangle = \iint\limits_{S_2S_2}\mathbf{m}_i\cdot\mathbf{m}_j\,f_{ij}^{(2)}\,d\mathbf{m}_i\,d\mathbf{m}_j,$$

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

Рассмотрим некоторый физически бесконечно малый объем. При фиксированной средней намагниченности $\langle\mathbf{m}\rangle$ возможны различные значения

3) Что позволяет получить качественные результаты, но оказывается недостаточным в ряде случаев.

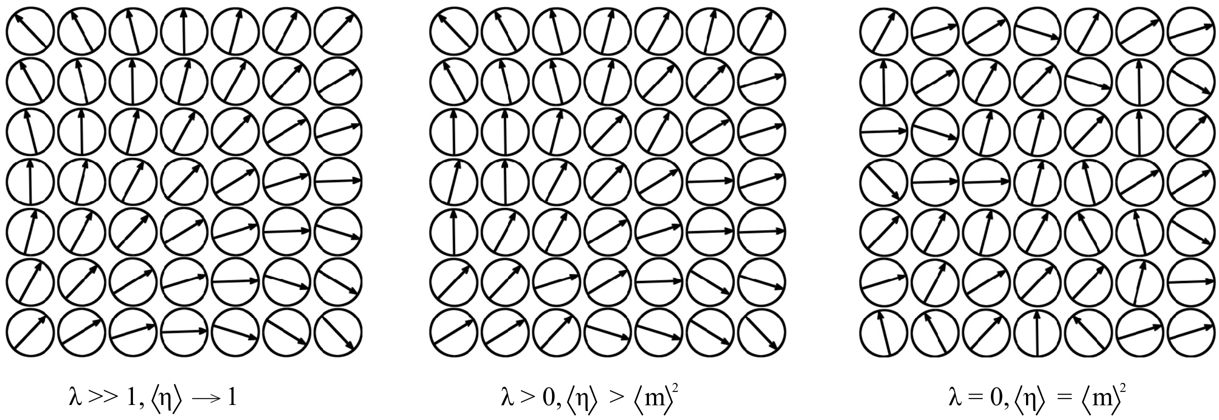

Рис. 1. Варианты взаимного расположения магнитных моментов при одинаковой средней намагниченности физически бесконечно малого объема

парных корреляций $\langle\eta\rangle$, что отвечает различному взаимному расположению магнитных моментов (рис. 1). При $\lambda \to \infty$ парные корреляции $\langle\eta\rangle \to 1$ (принимают максимально возможное значение). Другим предельным случаем является приближение среднего поля, при котором $\lambda = 0$ и парные корреляции принимают минимально возможные значения $\langle\eta\rangle = \langle\mathbf{m}\rangle^2$. В реальности система находится между этими двумя состояниями. Гипотетически для ферромагнетика возможна ситуация, при которой $\lambda < 0$ и $\langle\eta\rangle < \langle\mathbf{m}\rangle^2$, что отвечает преимущественно антипараллельной ориентации ближайших соседей.

7. Как уже отмечалось выше, приближение среднего поля удовлетворительно описывает коллективные взаимодействия на больших масштабах. Аппроксимацию (12) необходимо учитывать при расчете вклада обменного взаимодействия внутри физически бесконечно малого объема. Тогда (3) вместо (9) принимает вид (см. дополнительный материал)

$$\frac{\partial f(\mathbf{m},\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[\mathbf{H}^{\mathrm{L}} + \mathbf{H}^{\mathrm{an}},\, T - n_b J\Upsilon\right] f, \quad \Upsilon = \frac{1-\rho}{\lambda},$$

при этом обменное поле внутри физически бесконечного малого объема начинает проявлять себя как антидиффузия с коэффициентом $n_bJ\Upsilon$ в пространстве магнитных моментов. Конкуренция этого процесса с диффузией, обусловленной температурными флуктуациями, задает величину спонтанной намагниченности и приводит к фазовому переходу.

В итоге использование (12) вместо (10) приводит к УЛЛБ вида

$$\langle\dot{\mathbf{m}}\rangle = -\gamma\left[\langle\mathbf{m}\rangle \times \mathbf{H}^{\mathrm{L}}\right] - 2\gamma K\left(\mathbf{\Phi} + \alpha\mathbf{\Theta}\right) - $$
$$- \alpha\gamma\,\widehat{\Xi}\cdot\mathbf{H}^{\mathrm{L}} - 2\alpha\gamma\left(T - n_bJ\Upsilon\right)\langle\mathbf{m}\rangle\,, \qquad (13)$$

при этом коэффициент Υ удобно рассматривать как функцию параметров $\langle m\rangle = |\langle\mathbf{m}\rangle|$ и $\langle\eta\rangle$, рис. 2.

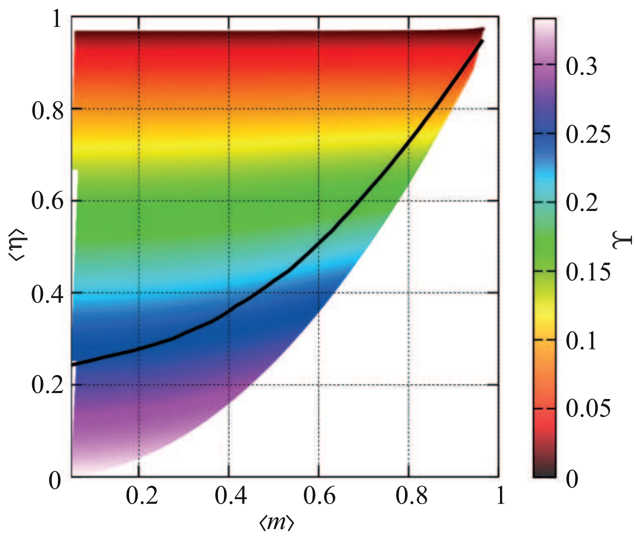

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость $\Upsilon(\langle m\rangle, \langle\eta\rangle)$, черной линией показан пример равновесной зависимости $\langle\eta\rangle(\langle m\rangle)$, полученной из моделирования “атом-в-атом”

В приближении среднего поля $\langle\eta\rangle = \langle m\rangle^2$ и на этой кривой $\Upsilon = \langle m\rangle/p$. Равновесие наступает при условии $T = n_bJ\langle m\rangle/p$, откуда $\langle m\rangle = \mathcal{L}(n_bJ\langle m\rangle/T)$, что отвечает теории Кюри–Вейсса. При этом критическая температура $T_c = n_bJ/3$ оказывается больше (рис. 3), чем критическая температура, получаемая из результатов моделирования “атом-в-атом” (1). Это фактически связано с заниженными значениями $\langle\eta\rangle$ и завышенными значениями функции Υ. В приближении среднего поля для решения этой проблемы приходится вводить фактор $\varepsilon_G < 1$. Однако, если учитывать парные корреляции и допустить, что $\langle\eta\rangle \geq \langle m\rangle^2$, то значение функции Υ при заданном $\langle m\rangle$

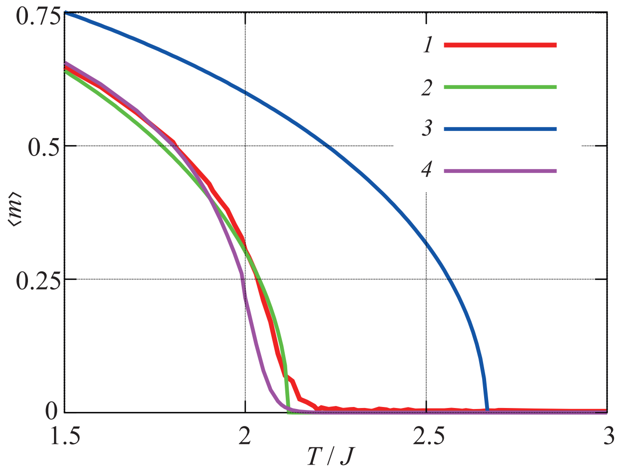

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости $\langle m \rangle (T/J)$ для объемноцентрированной кристаллической решетки ($n_b = 8$) в различных приближениях – "атом-в-атом" (*1*), УЛЛБ с $\varepsilon_G = 0.795$ (*2*), УЛЛБ с $\varepsilon_G = 1$ (*3*), CMD (*4*)

уменьшается и зависимость $\langle m \rangle (T)$ соответствует результатам моделирования "атом-в-атом" (1).

Для определения параметра $\langle \eta \rangle$ необходимо ввести еще одно уравнение на парные корреляции. Выпишем второе уравнение цепочки Боголюбова

$$\frac{\partial f_{ij}^{(2)}}{\partial t} = \left[\mathbf{H}^{\mathrm{L}} + \mathbf{H}_i^{(3)}, T\right]_i f_{ij}^{(2)} + \left[\mathbf{H}^{\mathrm{L}} + \mathbf{H}_j^{(3)}, T\right]_j f_{ij}^{(2)},$$

$$\mathbf{H}_i^{(3)} = 2K(\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{m}_i)\mathbf{n}_K + J\mathbf{m}_j + \\ + \sum_{k,\, k\neq j}^{N} \frac{J_{ik}}{f_{ij}^{(2)}} \int_{S_2} \mathbf{m}_k f_{ijk}^{(3)}\, d\mathbf{m}_k.$$

Умножая его на $\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j$ и интегрируя по $d\mathbf{m}_i\, d\mathbf{m}_j$, получаем (см. дополнительный материал)

$$\frac{\dot{\langle \eta \rangle}}{4\alpha\gamma} = \mathbf{H}^{\mathrm{L}} \cdot \langle \mathbf{m} \rangle \Upsilon - K\Psi - \\ - \frac{J}{2}\left[\left\langle \eta^2 \right\rangle - 1 + \sum_k Q_k\right] - T\langle \eta \rangle, \qquad (14)$$

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

$$Q_k = \Big\langle \mathbf{m}_i \cdot \left[\mathbf{m}_j \times \left[\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k\right]\right] \Big\rangle,$$

суммирование ведется по всем соседям атома j, кроме атома i. Уравнения (13) и (14) образуют систему уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD).

8. Для вычисления интегральных коэффициентов Q_k требуются трехчастичные функции распределения $f_{ijk}^{(3)}$, зависящие от кристаллической решетки. Мы рассмотрим ферромагнетики с примитивной,

Таблица 1. Характеристики рассматриваемых кристаллических решеток: n_b – число ближайших соседей, $n_{\mathrm{f.t.}}$ – число типов функций распределения (ф. р.) $f_{ijk}^{(3)}$, k – номера координационных сфер, R_k – радиусы координационных сфер в периодах решетки, n_{fk} – количество ф. р. $f_{ijk}^{(3)}$, у которых третий атом относится к соответствующей координационной сфере, $\angle_{ijk}$ – угол при втором атоме ф. р. $f_{ijk}^{(3)}$

	sc		ОЦК (bcc)			ГЦК (fcc)			
n_b	6		8			12			
$n_{\mathrm{f.t.}}$	**2**		**3**			**4**			
k	2	3	2	3	4	1	2	3	4
R_k	$\sqrt{2}$	2	1	$\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	1	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\sqrt{2}$
$\angle_{ijk}$	$\frac{\pi}{2}$	π	$\frac{2\pi}{5}$	$\frac{\pi}{2}$	π	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	π
n_{fk}	**4**	**1**	**3**	**3**	**1**	**4**	**2**	**4**	**1**

объемноцентрированной (ОЦК) и гранецентрированной (ГЦК) кубическими кристаллическими решетками, см. таблицу 1 и рис. 4.

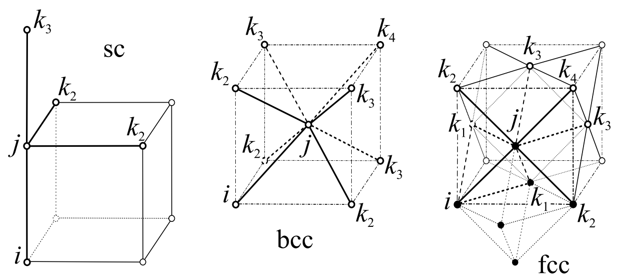

Рис. 4. Примитивная, ОЦК и ГЦК решетки и варианты трехчастичных функций $f_{ijk}^{(3)}$, индексами $k_{1\ldots4}$ показана принадлежность третьего атома к различным координационным сферам

Будем обозначать как $f_{k=s}^{xcc}$ трехчастичные функции распределения для решетки $x$cc, у которых атом k относится к координационной сфере s. Для начала рассмотрим $f_{ijk}^{(3)}$, у которых все три атома расположены на одной прямой, это $f_{k=3}^{\mathrm{sc}}$, $f_{k=4}^{\mathrm{bcc}}$ и $f_{k=4}^{\mathrm{fcc}}$. Если пренебречь косвенными корреляциями между атомами i и k, то такую функцию распределения можно записать как $f_{\angle}^{(3)} \approx f_{ij}^{(2)} f_{jk}^{(2)}/f_j$, что является обобщением приближения среднего поля на трехчастичные функции распределения. Отвечающий ей коэффициент $Q_{\angle}$ (см. дополнительный материал)

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

Другим предельным случаем является полностью симметричная функция распределения

$$f^{\rm fcc}_{k=1} \equiv f^{(3)}_{\triangle} \approx \frac{1}{Z^{(3)}} \exp\Big[\sigma \mathbf{p}\cdot\big(\mathbf{m}_i+\mathbf{m}_j+\mathbf{m}_k\big) + \\ + \varsigma\big(\mathbf{m}_i\cdot\mathbf{m}_j+\mathbf{m}_j\cdot\mathbf{m}_k+\mathbf{m}_k\cdot\mathbf{m}_i\big)\Big],$$

где параметры σ, ς могут быть определены из

$$\iiint\limits_{S_2 S_2 S_2} \mathbf{m}_i f^{(3)}_{\triangle}\, d\mathbf{m}_{i,j,k} = \langle \mathbf{m}\rangle\,, \quad \iiint\limits_{S_2 S_2 S_2} \eta f^{(3)}_{\triangle}\, d\mathbf{m}_{i,j,k} = \langle \eta\rangle\,.$$

Аналогично, $f^{\rm fcc}_{k=2} \equiv f^{(3)}_{\diamondplus}$ может быть получена путем интегрирования симметричной шестичастичной функции распределения, отвечающей правильному октаэдру (рис. 4, вершины октаэдра выделены черным цветом), если пренебречь косвенными корреляциями между противолежащими вершинами октаэдра.

Обобщение приближения среднего поля на $f^{(4)}_{ijkl}$ дает

$$f^{\rm fcc}_{k=3} \equiv f^{(3)}_{\diamond ijk} \approx \int\limits_{S_2} \frac{f^{(3)}_{\triangle ijl}\, f^{(3)}_{\triangle jkl}}{f^{(2)}_{jl}}\, d\mathbf{m}_l.$$

Для примитивной решетки при $k = 2$ рассмотрим симметричную функцию с атомами в вершинах квадрата

$$f^{(4)}_{ijkl} \sim \exp\Big[\sigma\mathbf{p}\cdot\big(\mathbf{m}_i+\mathbf{m}_j+\mathbf{m}_k+\mathbf{m}_l\big) + \\ + \varsigma\big(\mathbf{m}_i\cdot\mathbf{m}_j+\mathbf{m}_j\cdot\mathbf{m}_k+\mathbf{m}_k\cdot\mathbf{m}_l+\mathbf{m}_l\cdot\mathbf{m}_i\big) + \\ + \epsilon\varsigma\big(\mathbf{m}_i\cdot\mathbf{m}_k+\mathbf{m}_j\cdot\mathbf{m}_l\big)\Big], \quad \epsilon<1,$$

на ее основе может быть определена

$$f^{\rm sc}_{k=2} \equiv f^{(3)}_{\boxtimes} = \int\limits_{S_2} f^{(4)}_{ijkl}\, d\mathbf{m}_l,$$

зависящая от трех независимых параметров σp, ς, ϵ. Есть только два условия на $\langle m\rangle$, $\langle\eta\rangle$. Для получения третьего условия предположим, что связи $\epsilon\varsigma$ на диагональных членах в $f^{(4)}_{ijkl}$, обусловленные косвенными корреляциями, отличаются от связей ς на внешних ребрах на величину J/T, т.е. $\epsilon = 1 - J/T\varsigma$.

Наибольшие сложности возникают с функциями $f^{\rm bcc}_{k=2,3}$. Атомы этих функций расположены в узлах неправильного октаэдра, что исключает подход, примененный для аппроксимации $f^{\rm fcc}_{k=2}$. Сравнение с результатами моделирования "атом-в-атом" (1) показывает, что приемлемые результаты дает аппроксимация $f^{\rm bcc}_{k=2} + f^{\rm bcc}_{k=3} \approx 2 f^{(3)}_{\boxtimes}$.

В итоге (14) принимает следующий вид:

$$\frac{\dot{\langle\eta\rangle}}{4\alpha\gamma} = \mathbf{H}^{\rm L}\cdot\langle\mathbf{m}\rangle\,\Upsilon - K\Psi - \frac{J}{2}\Big[\Lambda + \mathcal{Q}\Big] - T\,\langle\eta\rangle\,, \quad (15)$$

$$\Lambda = \langle\eta^2\rangle - 1 + Q_{\angle}, \qquad \mathcal{Q}_{\rm sc} = 4Q_{\boxtimes},$$

$$\mathcal{Q}_{\rm fcc} = 4Q_{\triangle} + 2Q_{\diamondplus} + 4Q_{\diamond}, \quad \mathcal{Q}_{\rm bcc} = 6Q_{\boxtimes}.$$

Интегральные коэффициенты Ψ, Λ, $Q_{\triangle}$, $Q_{\diamondplus}$, $Q_{\diamond}$, как и Υ, являются функциями параметров $\langle m\rangle$, $\langle\eta\rangle$. Коэффициент $Q_{\boxtimes} = Q_{\boxtimes}\big(\langle m\rangle\,,\langle\eta\rangle\,,T\big)$. Все эти коэффициенты рассчитаны численно на кластере К60 ИПМ им. М. В. Келдыша РАН [27]. Для коэффициентов Υ, Ψ, Λ, $Q_{\triangle}$ построены аналитические аппроксимации[4)] (см. дополнительный материал), коэффициенты $Q_{\diamondplus}$, $Q_{\diamond}$ и $Q_{\boxtimes}$ задаются как сеточные функции[5)]. Все коэффициенты доступны в библиотеке aiwlib [28].

9. Результаты численного моделирования "атом-в-атом" (1) сравнивались с результатами расчетов на основе традиционного УЛЛБ (10) и системы CMD (13) для различных значений температуры T, внешнего поля $H^{\rm ext}$ и анизотропии K [27]. Некоторые из результатов приведены на рис. 5.

При моделировании "атом-в-атом" во всех случаях рассматривался образец 64^3 ячеек с периодическими граничными условиями. Для УЛЛБ и CMD рассматривалась эволюция намагниченности в пространственно однородном случае.

В качестве начальных условий для расчетов "атом-в-атом" выбиралось состояние с однородной намагниченностью $\mathbf{m}_i|_{t=0} = \mathbf{m}_{\rm start}\forall i$. Методика оценки времени релаксации описана в дополнительном материале.

Во всех случаях зависимости равновесной намагниченности и восприимчивости в разных приближениях близки. В отсутствие внешнего поля приближение CMD дает несколько сдвинутую точку фазового перехода. Согласно предварительным оценкам это расхождение связано с ошибками аппроксимации одночастичной функции распределения (11). Это предположение косвенно подтверждается практически идеальным согласием приближения CMD с результатами моделирования "атом-в-атом" в случае сильных внешних полей (см. дополнительный материал, рис. S3) для зависимостей $\langle m\rangle\,(T)$ и $\langle W\rangle\,(T)$. При усилении внешнего поля ошибка аппроксимации одночастичной функции распределения (11) должна уменьшаться за счет того, что в более сложных аппроксимациях будет увеличиваться вклад линейного члена.

4) https://github.com/aivn/aiwlib/blob/master/include/aiwlib/llbe.

5) https://github.com/aivn/aiwlib/tree/master/dat/llbe.

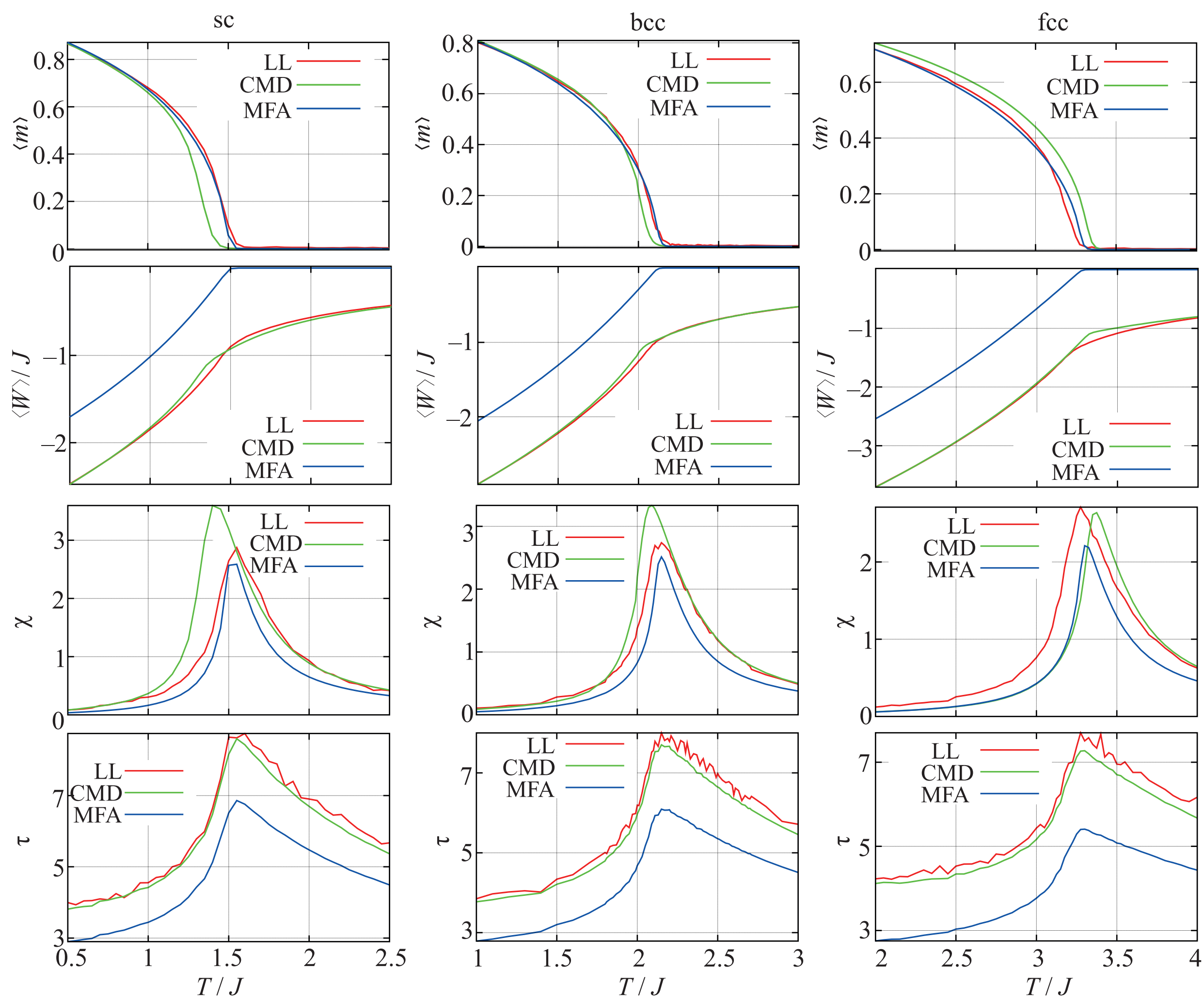

Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимости равновесной намагниченности $\langle m \rangle$, энергии $\langle W \rangle$, восприимчивости χ и времени релаксации τ от температуры T, полученные в приближениях "атом-в-атом" (LL), корреляционной магнитодинамики (CMD) и среднего поля (MFA) для примитивной (sc), ОЦК (bcc) и ГЦК (fcc) кубических решеток при $H^{\text{ext}} = 0$, $K = 0$

Зависимости энергии и времени релаксации в приближении CMD совпадают с результатами моделирования "атом-в-атом" гораздо лучше, чем в приближении среднего поля. Совпадение зависимости энергии говорит о правильном выборе аппроксимации двухчастичной функции распределения (12). Ошибка времени релаксации в приближении среднего поля может доходить до 50 %, что может играть большую роль при создании устройств, работающих в импульсном режиме. Ошибка времени релаксации в приближении CMD обусловлена в первую очередь сдвинутой точкой фазового перехода.

10. В основе CMD лежит новая аппроксимация многочастичных функций распределения. Эта аппроксимация не имеет строгого обоснования, но тем не менее в итоге дает хорошее совпадение с исходной атомистической моделью ферромагнетика для различных кристаллических решеток в широком диапазоне значений температуры, внешнего поля и анизотропии.

CMD является полностью самосогласованной теорией, не содержащей каких-либо подгоночных параметров. Преимуществом CMD является возможность явного учета специфики строения кристаллической решетки. В отличие от традиционного УЛЛБ, CMD оперирует расширенным фазовым пространством: кроме средней намагниченности, учитывается уровень парных корреляций. За счет этого CMD более адекватно описывает как стационарные, так и неравновесные процессы в магнетиках, что должно поднять качество моделирования устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники.

CMD является новой теорией (первая публикация в конце 2019 г.), чье становление только начинается. Необходимо обобщить CMD на случай антиферро/ферримагнетиков. Расчет интегральных коэффициентов для антиферро/ферримагнетиков значительно более сложен с вычислительной точки зрения, чем для ферромагнетиков.

Необходимо проверить, как повлияет на результаты CMD введение квадратичного члена в аппроксимацию одночастичной функции распределения (11). Такая поправка приведет к усложнению системы уравнений CMD, которую придется дополнить уравнениями на вторые моменты одночастичной функции распределения. С другой стороны, это, возможно, позволит уменьшить расхождения CMD с атомистической моделью ферромагнетика.

---

1. А. В. Ведяев, УФН **172**(12), 1458 (2002).
2. А. К. Звездин, М. Д. Давыдоваand, К. А. Звездин, УФН **188**(11), 1238 (2018).
3. N. I. Polushkin, E. A. Kravtsov, S. N. Vdovichev, D. A. Tatarskiy, M. N. Drozdov, E. Weschke, and A. A. Fraerman, J. Magn. Magn. Mater. **497**, 165930 (2020).
4. A. A. Knizhnik, I. A. Goryachev, G. D. Demin, K. A. Zvezdin, E. V. Zipunova, A. V. Ivanov, I. M. Iskandarova, V. D. Levchenko, A. F. Popkov, S. V. Solov'ev, and B. V. Potapkin, Nanotechnologies in Russia **12**(3–4), 208 (2017).
5. А. К. Муртазаев, Д. Р. Курбанова, М. К. Рамазанов, ЖЭТФ **156**(5), 980 (2019).
6. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаевand, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева, Письма в ЖЭТФ **114**(11), 762 (2021).
7. З. В. Гареева, С. М. Чен, Письма в ЖЭТФ **114**(4), 250 (2021).
8. И. С. Лобанов, М. Н. Поткина, В. М. Уздин, Письма в ЖЭТФ **113**(12), 833 (2021).
9. А. М. Шутый, Д. И. Семенцов, Письма в ЖЭТФ **111**(11), 735 (2020).
10. П. Х. Атанасова, С. А. Панайотова, И. Р. Рахмонов, Ю. М. Шукринов, Е. В. Земляная, М. В. Башашин, Письма в ЖЭТФ **110**(11), 736 (2019).
11. А. А. Мартышкин, С. А. Одинцов, Ю. А. Губанова, Е. Н. Бегинин, С. Е. Шешукова, С. А. Никитов, А. В. Садовников, Письма в ЖЭТФ **110**(8), 526 (2019).
12. Ю. М. Шукринов, М. Нашаат, И. Р. Рахмонов, К. В. Куликов, Письма в ЖЭТФ **110**(3), 149 (2019).
13. С. А. Одинцов, Е. Н. Бегинин, С. Е. Шешукова, А. В. Садовников, Письма в ЖЭТФ **110**(6), 414 (2019).
14. D. A. Garanin, Phys. Rev. B **55**, 3050 (1997).
15. U. Atxitia, D. Hinzke, and U. Nowak, J. Phys. D: Appl. Phys. **50**(3), 033003 (2017).
16. O. Chubykalo-Fesenko and P. Nieves, *Handbook of Materials Modeling*, Springer, Cham (2018), p. 867.
17. E. Y. Vedmedenko, R. K. Kawakami, D. D. Sheka, P. Gambardella, A. Kirilyuk, A. Hirohata, C. Binek, O. Chubykalo-Fesenko, S. Sanvito, B. J. Kirby, J. Grollier, K. Everschor-Sitte, T. Kampfrath, C.-Y. You, and A. Berger, J. Phys. D: Appl. Phys. **53**(45), 453001 (2020).
18. M. Menarini and V. Lomakin, Phys. Rev. B **102**(2), 024428 (2020).
19. В. А. Ацаркин, В. В. Демидов, ЖЭТФ **143**(1), 109 (2013).
20. А. В. Иванов, Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша **118**, 30 (2019).
21. W. F. Brown, Phys. Rev. **130**(5), 1677 (1963).
22. W. T. Coffey, Yu. P. Kalmykov, and J. T. Waldron, *World Scientific Series in Contemporary Chemical Physics*, World Scientific, Singapore (2004).
23. Y. Takahashi, S. Wakao, T. Iwashita, and M. Kanazawa, J. Appl. Phys. **105**, 07D514 (2009).
24. N. Hayashi, K. Saito, and Y. Nakatani, Jpn. J. Appl. Phys. **35**, 6065 (1996).
25. D. A. Garanin, Phys. Rev. B **53**, 11593 (1996).
26. А. В. Иванов, Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, **105**, 16 (2019).
27. А. В. Иванов, Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, **11**, 22 (2021).
28. А. В. Иванов and С. А. Хилков, Научная визуализация **10**(1), 110 (2018).