

На правах рукописи

ИВАНОВ Антон Валерьевич

Многомасштабное математическое моделирование магнетиков

Специальность 1.2.2 — «Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ»

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва 2026

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук».

Официальные оппоненты:

Сухинов Александр Иванович, доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАН, ФГБОУ ВО «Донской государственный технический университет», заведующий кафедрой «Математика и информатика»;

Боголюбов Александр Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий отделением прикладной математики кафедры математики Физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова;

Джепаров Фридрих Саламонович, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией нейтронной физики комплекса фундаментальных исследований НИЦ «Курчатовский институт».

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский университет науки и технологий», кафедра теоретической физики.

Защита состоится 12 ноября 2026 г. в 11:00 часов на заседании диссертационного совета 24.1.237.01 при Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» по адресу: 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Автореферат разослан «____» _____ 2026 года.

Учёный секретарь
диссертационного совета
24.1.237.01,
канд. физ.-мат. наук

Корнилина Марина Андреевна

1 Общая характеристика работы

Актуальность работы и современное состояние работ по тематике исследования

Устройства спинтроники и магнитной наноэлектроники рассматриваются как один из вариантов новой элементной базы, способной лечь в основу нового поколения систем для получения (различные виды детекторов), хранения и обработки информации, включая аппаратные решения для комбинаторной оптимизации, создания нейросетей и квантовых компьютеров¹. В настоящий момент до промышленного применения доведена магниторезистивная память, обладающая исключительно высокой надежностью хранения информации.

Еще одним важным потенциальным применением устройств спинтроники является создание компактных источников и детекторов терагерцового излучения^{2,3}.

Устройства спинтроники, как правило, представляют из себя массивы многослойных столбиков, состоящих из различных, как магнитных, так и немагнитных, материалов. Создание таких устройств требует проведения колоссального объема расчетов для выбора конструкционных материалов, оптимизации геометрии и режимов работы устройства. Особенностью таких устройств является работа в импульсном режиме, сопровождаемая резкими изменениями внешнего поля и (в случае термоассистированной магниторезистивной памяти) температуры, что требует разработки специальных математических моделей.

Существуют различные модели магнетиков.

Квантомеханические модели магнетизма можно разделить на две группы. Одним предельным случаем является модель Гейзенберга, рассматривающая магнитные моменты электронов локализованных на атомах, в узлах кристаллической решетки диэлектриков. Такие модели могут служить основой для вывода уравнений сплошной среды⁴. Другим предельным случаем является модель Стонера, рассматривающая магнетизм коллективизированных электронов в зоне проводимости металлов. Модель спиновых флуктуаций объединяет эти подходы и позволяет получить ряд важных численных результатов⁵. Интересно, что модели Гейзенберга и зонного магнетизма приводят в итоге к одним и тем же макроскопическим законам магнетизма Кюри–Вейсса.

¹M. Schneider, T. Brächer, D. Breitbach, and et al. Bose–Einstein Condensation of Quasiparticles by Rapid Cooling. *Nat. Nanotechnol.*, 15:457–461, 2020.

²Лахно В.Д. Усиление спиновых волн в магнитных кристаллах. *УФН*, 166(7):717–742, 1996.

³Диэлектрическая магноника — от гигагерцев к терагерцам / С.А. Никитов, А.Р. Сафин, Д.В. Калябин и др. *УФН*, 190(10):1009–1040, 2020.

⁴P.A. Andreev and M.I. Trukhanova. Quantum Hydrodynamic Representation of the Exchange Interaction in the Theory of Description of Magnetically Ordered Media. *Moscow Univ. Phys.*, 78:445–452, 2023.

⁵Melnikov Nikolai B., Reser Boris I. *Dynamic Spin Fluctuation Theory of Metallic Magnetism*. Springer, 2018. P.287.

Квантомеханические модели, как правило, обладают неприемлемо высокой вычислительной сложностью и испытывают трудности с учетом влияния температуры и диссипации при описании нестационарных процессов (эволюции системы). Распределение Гиббса позволяет описать **стационарное** состояние системы с учетом влияния температуры и диссипации, но не позволяет однозначно получить уравнения эволюции системы и описать **нестационарный** процесс в результате которого такое состояние может быть достигнуто.

Модель атомистической спиновой динамики (ASD, или атомистическая модель классического магнетика Гейзенберга)⁶ описывает магнетик как совокупность классических магнитных моментов атомов (трехмерных векторов единичной длины), расположенных в узлах кристаллической решетки, связанных обменным взаимодействием и находящихся под влиянием температурных флуктуаций. В некоторых случаях такое описание считается применимым даже для сравнительно коротких атомных цепочек⁷. ASD является аналогом классической молекулярной динамики (но для намагниченности) и представляет большой интерес с точки зрения статистической физики, в том числе как основа для построения моделей сплошной среды. ASD является наиболее общей **динамической** моделью, допускающей проведение некоторых прикладных расчетов, поскольку явно учитывает различные магнитные взаимодействия, влияние температуры, тип и дефекты кристаллической решетки. Основным недостатком, ограничивающим применение ASD, является высокая вычислительная сложность⁸ — 10^6 атомов отвечает кубу со стороной порядка 30 нм, в то время как характерный поперечный размер одной ячейки магниторезистивной памяти составляет более 100 нм. Определенные физические недостатки этой модели, связанные главным образом с рассмотрением квантовых явлений магнетизма с классической точки зрения, удастся отчасти преодолеть при помощи подхода предложенного Woo с соавторами⁹.

Модели физической кинетики, основанные на уравнениях Фоккера–Планка (УФП)¹⁰, за счет высокой вычислительной сложности непосредственно применяются достаточно ограниченно (как правило, для описания суперпарамагнетиков — систем невзаимодействующих монодоменных ферромагнитных микрочастиц), но являются ключевым промежуточным шагом для перехода к микромагнитным моделям сплошной среды. Переход от ASD к УФП, а не к уравнению Лиувилля, обусловлен тем, что ASD исходно содержит диссипацию и источник Ланжевена. Надо отметить, что при построении кинети-

⁶Olle Eriksson, Anders Bergman, Lars Bergqvist, and Johan Hellsvik. Atomistic Spin Dynamics: Foundations and Applications. Oxford University Press, 2017.

⁷Формирование и свойства металлических атомных цепочек и проводов / А.Г. Сыромятников, С.В. Колесников, А.М. Салецкий, А.Л. Клавсюк. УФН, 191:705–737, 2021.

⁸Richard F.L. Evans, Weijia J. Fan, Phanwadee Chureemart, Thomas A. Ostler, Matthew O.A. Ellis, and Roy W. Chantrell. Atomistic Spin Model Simulations of Magnetic Nanomaterials. Journal of Physics: Condensed Matter, 26(10):103202, 2014.

⁹Quantum heat bath for spin–lattice dynamics / C.H. Woo, Haohua Wen, A.A. Semenov et al. Phys. Rev. B., 91:104306, 2015.

¹⁰W. Brown. Thermal Fluctuations of a Single-Domain Particle. Phys. Rev., 130(5):1677–1686, 1963.

ческих моделей зачастую неявно используется предположение о релаксации системы к равновесному распределению Гиббса. Для магнетиков в общем случае это не доказано, более того, есть постановки, где тип итогового равновесного распределения задается начальными условиями¹¹, но для рассматриваемой системы таких ситуаций не наблюдалось.

Самыми распространенными математическими моделями для описания магнетиков являются микромагнитные модели, основанные на уравнении Ландау–Лифшица (Гильберта) и построенные в приближении сплошной среды¹². В рамках таких моделей намагниченность образца рассматривается как непрерывное, гладко меняющееся векторное поле $\langle \mathbf{m} \rangle(\mathbf{r}, t)$, зависящее от координат и времени. Исходно уравнение Ландау–Лифшица было получено из общих соображений без обращения к ASD и не учитывало изменение модуля плотности намагниченности за счет температуры и внешних полей. Такой подход вполне применим для решения широкого ряда прикладных задач, но тем не менее создание новых устройств спинтроники требует учета влияния температуры и внешних полей на модуль плотности намагниченности.

Наиболее общей традиционной микромагнитной моделью, учитывающей изменение модуля плотности намагниченности под влиянием меняющихся температуры и внешних полей, является модель, основанная на уравнении Ландау–Лифшица–Блоха (LLB)^{13,14,15}. LLB выведено из ASD через УФП и цепочку Боголюбова в приближении среднего поля. Приближение среднего поля было впервые введено Кюри и Вейссом для описания ферромагнетизма и хорошо работает для описания коллективных (например кулоновских) взаимодействий. Главным недостатком приближения среднего поля является отбрасывание парных корреляций. В антиферро-, ферри- и ферромагнетиках основной вклад в энергию связан с сильным локальным (порядка межатомного расстояния) обменным взаимодействием, что приводит к возникновению сильных корреляций (ближнего упорядочения) между ближайшими соседями даже в парамагнитной фазе при высоких температурах. Таким образом, для магнетиков приближение среднего поля приводит к возникновению ряда серьезных проблем — сдвигу критической температуры, неверным значениям обменной энергии и неверному описанию процессов релаксации. Все эти недостатки присущи и уравнению LLB.

Следует особо отметить, что приближение среднего поля лежит в основе многих современных физико-математических моделей. Возможность замены

¹¹Ф.С. Джепаров. Эргодическая теорема для подсистемы примесных спинов в парамагнетике. ЖЭТФ, 116(4):1398–1418, 1999.

¹²Jonas J. Joos, Pedram Bassirian, Pieter Gypens, Jeroen Mulkers, Kai Litzius, Bartel Van Waeyenberge, and Jonathan Leliaert. Tutorial: Simulating Modern Magnetic Material Systems in MuMax3. Journal of Applied Physics, 134(17), 2023.

¹³D.A. Garanin. Fokker–Planck and Landau–Lifshitz–Bloch Equations for Classical Ferromagnets. Phys. Rev. B, 55:3050, 1997.

¹⁴U. Atxitia, D. Hinzke, and U. Nowak. Fundamentals and Applications of the Landau–Lifshitz–Bloch equation. Journal of Physics D: Applied Physics, 50(3):033003, 2017.

¹⁵O. Chubykalo–Fesenko and P. Nieves. Landau–Lifshitz–Bloch Approach for Magnetization Dynamics Close to Phase Transition. Springer, 2018.

приближения среднего поля на приближение, корректно учитывающее парные корреляции, представляет большой интерес с фундаментальной точки зрения, но построение такого приближения в каждом конкретном случае является крайне сложной задачей.

Таким образом, в настоящий момент не существует общепринятой математической модели, способной корректно, с приемлемой (для проектирования устройств спинтроники) вычислительной сложностью описывать динамику магнетика с учетом влияния быстро изменяющихся температуры и внешних полей. Подобное описание требует учета корреляций между ближайшими соседями, что легко обеспечивается в рамках атомистического подхода — но при этом вычислительная сложность оказывается слишком высокой. Приемлемую вычислительную сложность обеспечивают микромагнитные модели, но лежащее в их основе приближение среднего поля не позволяет учитывать корреляции, что в свою очередь приводит ко множеству артефактов.

Научная проблема

Научной проблемой, на решение которой направлена работа, является разработка математических моделей, вычислительных методов и комплексов программ для описания магнетиков с учетом влияния температуры и быстро изменяющихся внешних полей. Задача рассматривается комплексно — на атомистическом, кинетическом и микромагнитном уровнях описания, при этом на каждом уровне описания особое внимание уделяется учету корреляций между ближайшими соседями.

В исходной постановке учитываются основные виды магнитных взаимодействий — обменное, диполь-дипольное, кристаллическая анизотропия и внешнее поле. На атомистическом уровне описания явно задается вид кристаллической решетки. Непосредственно рассмотрены примитивная, объемноцентрированная и гранецентрированная решетки, но результаты могут быть обобщены и на другие виды решеток. Основной упор сделан на описание ферромагнетиков, для антиферро- и ферримагнетиков намечен только общий вид математической модели.

Созданные вычислительные алгоритмы и комплексы программ, кроме традиционного внимания к производительности, ориентированы на диагностику, выявляющую последствия учета корреляций между ближайшими соседями и нахождение соответствующих закономерностей в большом массиве результатов вычислительных экспериментов.

Цели и задачи исследования

Целью работы является развитие иерархии математических моделей, разработка вычислительных методов и комплексов программ для описания магнетиков с различными кристаллическими решетками, находящихся под влиянием быстро меняющихся температуры и внешнего поля.

Достижение поставленной цели должно позволить корректно описывать неравновесные процессы в магнетиках и вывести моделирование устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники на качественно новый уровень.

Для достижения поставленной цели в работе решены следующие задачи.

1. На основе вычислительного эксперимента построена новая аппроксимация двухчастичной функции распределения, учитывающая корреляции между ближайшими соседями, и разработана новая математическая модель корреляционной магнитодинамики (CMD).
2. Получены определяющие соотношения для CMD на основе анализа большого объема результатов вычислительных экспериментов в рамках атомистической и кинетической моделей.
3. Разработан комплекс вычислительных методов и алгоритмов для проведения вычислительных экспериментов на атомистическом, кинетическом и микромагнитном уровнях описания магнетика.
4. Разработанные методы и алгоритмы реализованы в виде программных комплексов, проведены расчеты по валидации построенной модели CMD путем сравнения ее результатов с результатами атомистического моделирования.

Научная новизна

Следующие результаты работы обладают существенной научной новизной:

- построена аппроксимация двухчастичной функции распределения, учитывающая корреляции между ближайшими соседями;
- построена новая микромагнитная математическая модель корреляционной магнитодинамики (CMD), состоящая из уравнения типа Ландау–Лифшица–Блоха на плотность намагниченности (параметр дальнего порядка) и уравнения на уровень парных корреляций (параметр ближнего порядка);
- построены аналитические аппроксимации интегральных коэффициентов CMD для примитивной, объемноцентрированной и гранецентрированной кристаллических решеток, что эквивалентно заданию определяющих соотношений для магнетика;
- разработан алгоритм прямого расчета статической суммы магнетика, основанный на аналитической аппроксимации интеграла по одному из магнитных моментов, что сводит задачу к исключению узлов из взвешенного графа связей в кристаллической решетке с перестройкой связей между оставшимися узлами;
- разработан алгоритм расчета энтропии магнетика, основанный на линейной комбинации энтропий одно- и двухчастичной функций распределения;
- разработан модифицированный термодинамически обусловленный метод Рунге–Кутты четвертого порядка для атомистической модели магнетика;

- созданы комплексы программ для моделирования магнетика в атомистическом приближении и для расчета интегральных коэффициентов CMD.

Теоретическая и практическая значимость работы

Разработан комплекс средств математического моделирования (математические модели, вычислительные методы, алгоритмы и программы) для решения крупной научно-прикладной проблемы — описания магнетиков с учетом влияния быстро меняющихся температуры и внешних полей. Результаты работы дают основу для разработки новых средств моделирования, предназначенных для создания новых устройств спинтроники и магнитной наноэлектроники, способных выступать в качестве элементной базы для вычислительной техники нового поколения, а также для создания источников и приемников терагерцового излучения.

С теоретической точки зрения построена новая аппроксимация двухчастичной функции распределения, учитывающая корреляции между ближайшими соседями (что позволило отказаться от приближения среднего поля), и создана новая микромагнитная математическая модель магнетика, оперирующая дальним и ближним параметрами порядка; построен новый алгоритм вычисления энтропии магнетика. Эти теоретические результаты получены на основе анализа большого объема вычислительных экспериментов и не имеют вполне строгого обоснования, но тем не менее являются достаточно точными, имеют большое значение для статистической физики и могут быть обобщены на другие физические системы.

Методология и методы исследования

Для решения поставленных в работе задач использованы методы вычислительной математики (в частности методы решения обыкновенных и стохастических дифференциальных уравнений, методы интерполяции, оптимизации и численного интегрирования), статистической физики (цепочка Боголюбова) и термодинамики.

Достоверность результатов

Достоверность результатов исследования обеспечена применением современных обоснованных представлений магнетизма, статистической физики и методов вычислительной математики.

Особое внимание уделялось валидации новой построенной микромагнитной модели путем всестороннего сравнения с общепринятой атомистической моделью классического магнетика Гейзенберга. Корректность расчетов в рамках атомистической модели классического магнетика Гейзенберга проверялась путем сравнения с аналитическими решениями на широком наборе тестовых задач.

Положения, выносимые на защиту

На защиту выносятся следующие положения.

1. Построена новая математическая модель магнетика на основе системы уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD), учитывающая парные корреляции.
2. Модель CMD оперирует с расширенным фазовым пространством, явно учитывает параметр ближнего порядка и тип кристаллической решетки, обеспечивает хорошее согласие с результатами атомистического моделирования в широком диапазоне параметров в различных постановках, устраняет недостатки моделей в приближении среднего поля.
3. Разработана термодинамически обусловленная модификация метода Рунге–Кутты 4-го порядка для решения системы из $10^{5\div 9}$ уравнений атомной спиновой динамики (ASD).
4. Разработаны новые методы расчета коэффициентов CMD (определяющих соотношений) на основе вида многочастичных функций распределения и на основе анализа результатов вычислительных экспериментов в рамках ASD модели. Для трех кристаллических решеток получены компактные аналитические выражения для коэффициентов CMD, пригодные для решения прикладных задач.
5. Разработаны новые численные методы расчета статистической суммы и энтропии классического магнетика Гейзенберга.
6. Созданы программные комплексы StatASD и CMDlib для моделирования магнетиков в атомистическом и микромагнитном приближениях.

Соответствие работы паспорту специальности

Целью диссертационной работы являются разработка математических моделей, вычислительных алгоритмов и их программная реализация, что вносит вклад в следующие области исследований, перечисленные в паспорте специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»:

- разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений;
- реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента;
- комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

Апробация работы

Результаты диссертационного исследования докладывались на следующих мероприятиях.

- Заседание секции «Магнетизм» Научного Совета РАН по физике конденсированных сред — 4–5 декабря 2025.
- Семинары ИПМ им. М.В. Келдыша:
 - «Математическая физика» им. М.В. Масленникова — 2024;
 - «Будущее прикладной математики» — 2025;
 - «Вычислительные методы и мат. моделирование» им. Ю.П. Попова — 17.03.2025 и 19.05.2025.
- Семинар «Новые спинтронные технологии» (Сколково) — 2025.
- Семинар Курчатовского института «Физика твердого тела и радиационное материаловедение» (2025).
- Семинар лаборатории нейтронной физики ИТЭФ — 2023, 2024, 2025.
- Семинар ИРЭ им. Котельникова «Проблемы магнитного резонанса» — 2022, 2024.
- Семинар кафедры квантовой статистики и теории поля Физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова — 2024.
- Конференция Russian Supercomputing Days — 2021.
- Конференция Computer Simulations in Physics and beyond CSP — 2020.
- International conference on metamaterials and nanophotonics METANANO — 2020.
- Spin Waves International Symposium — 2018.
- Конференция «Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем» MES — 2016.

Публикации

Всего по теме диссертации опубликовано 35 работ и получено 4 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ. Из них в изданиях, входящих в список ВАК по специальности 1.2.2 — 26, без соавторов — 12, в том числе:

- статей в журналах:
 - «Письма в ЖЭТФ» — 1 [1],
 - Lobachevskii J. Math. — 1 [2],
 - «Математическое моделирование» — 6 [3–8],
 - «Российские нанотехнологии» — 2 [9, 10],
 - «Научная визуализация» — 1 [11],
 - специальных выпусков по итогам конференций — 5 [12–16],
- Препринтов ИПМ — 19 [17–35],
- свидетельств о государственной регистрации программы для ЭВМ — 4 [36–39].

Личный вклад соискателя

Все представленные в работе и выносимые на защиту результаты получены лично автором, под его руководством или при его непосредственном участии. Общая концепция работы, ее структура, уровень понимания рассматриваемых в ней проблем, основные результаты и выводы работы, положения, выносимые на защиту, отражают творческий вклад автора.

Переход от ASD модели к УФП (в том числе для xu модели), а так же введение дифференциальных операторов на поверхности сферы, проведены С.А. Хилковым в его диссертационной работе защищенной под руководством автора.

В совместных публикациях по теме диссертации [9, 36] вклад автора состоит в создании магнитной части вычислительного ядра программного комплекса «Macrospin» и проведении серий расчетов для устройств термоассистированной магниторезистивной памяти (TMRAM). В публикациях [10, 37] вклад автора состоит в создании значительного фрагмента магнитной части вычислительного ядра программного комплекса «Automagic» и расчете фазовых диаграмм переключения TMRAM. Остальные совместные публикации по теме диссертации сделаны в соавторстве с дипломниками и аспирантами автора, личный вклад автора состоит в определении направления исследования, постановке и решении конкретных задач, включая построение математических моделей и разработку вычислительных алгоритмов, программную реализацию, постановку и определение целей вычислительных экспериментов, проведение расчетов и анализ результатов. Во всех случаях когда некоторая часть выкладок или программная реализация были выполнены дипломником или аспирантом самостоятельно, это отдельно отмечено в тексте диссертации.

Благодарности

Автор искренне благодарен своим Учителям, в том числе Ю.С. Сигову, Ю.Л. Климонтовичу, А.В. Дмитриеву, Г.И. Змиевской и В.Д. Левченко за привитую страсть к физической кинетике, статистической физике и прикладной математике; А.И. Морозову и А.Ф. Попкову за знакомство с миром магнетизма. Основная идея данной работы о необходимости учета парных корреляций возникла в активных дискуссиях с Г.И. Змиевской в конце 2000-х годов. Далее эта идея была развита в работах со студентами, ставшими в итоге аспирантами и коллегами, С.А. Хилковым, Е.В. Зипуновой, А.В. Лукьяновым и С.В. Замятиным. Отдельно хотелось бы поблагодарить коллег В.Д. Левченко, Е.Б. Савенкова и Ф.С. Джепарова за поддержку и многочисленные обсуждения различных аспектов данной работы.

2 Содержание работы

Работа состоит из введения, шести глав и заключения.

Во введении описывается общая проблематика работы с прикладной и теоретической точек зрения, обосновывается актуальность работы, излагается актуальное состояние работ по тематике. Формулируются цели и задачи исследования, выносимые на защиту положения, обосновывается их научная новизна и значимость. Указываются сведения об апробации работы и публикации результатов исследования.

В первой главе описаны математические модели классического магнетика Гейзенберга в атомистическом (ASD), кинетическом и микромагнитном приближениях. Приведен вывод уравнений Ландау–Лифшица–Блоха (LLB) и корреляционной магнитодинамики (CMD) на основе цепочки Боголюбова.

Модель ASD описывает эволюцию магнитных моментов отдельных атомов при помощи системы стохастических дифференциальных уравнений Ландау–Лифшица:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{m}}_i = & \underbrace{-\gamma [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]}_{\text{прецессия}} - \underbrace{\alpha \gamma [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]]}_{\text{диссипация}} + \underbrace{\sqrt{2\alpha\gamma T} [\mathbf{m}_i \times \boldsymbol{\xi}_i(t)]}_{\text{случайный источник}}, \\ \mathbf{H}_i^{\text{eff}} = & -\nabla_{\mathbf{m}_i} W = \mathbf{H}_i^{\text{exch}} + \mathbf{H}_i^{\text{an}} + \mathbf{H}^{\text{ext}} + \mathbf{H}_i^{\text{dip}}, \\ W^{\text{exch}} = & -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j), \quad \mathbf{H}_i^{\text{exch}} = \sum_j J_{ij} \mathbf{m}_j, \\ W^{\text{an}} = & -K \sum_i (\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{m}_i)^2, \quad \mathbf{H}_i^{\text{an}} = 2K \mathbf{n}_K (\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{m}_i), \\ \mathbf{H}_i^{\text{dip}} = & \sum_j \frac{3(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij}) \mathbf{r}_{ij} - \mathbf{m}_j r_{ij}^2}{r_{ij}^5}, \quad \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \end{aligned} \quad (1)$$

где γ — гиромагнитное соотношение; $\alpha \ll 1$ — параметр затухания; $\mathbf{H}^{\text{eff}}$ — эффективное магнитное поле, W — полная энергия системы, состоящая из обменной энергии W^{exch} , энергии анизотропии W^{an} и энергии взаимодействия с внешним полем W^{ext} ; 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, $\mathbf{r}_i$ — координаты атомов.

Правая часть (1) состоит из прецессии (консервативная часть, не меняющая энергии системы), диссипации и случайного источника, описывающего влияние температурных флуктуаций со стороны кристаллической решетки. Надо отметить, что (1) сохраняют модули магнитных моментов $\|\mathbf{m}_i\|$. Общее число уравнений при моделировании зависит от конкретной постановки задачи и составляет, как правило, $10^{5 \div 7}$, в отдельных случаях до 10^9 .

Следующим уровнем описания является кинетические модели.

Введем обозначение

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{H}_i, D \right]_i f &\equiv \gamma \operatorname{div}_{\circ i} \left[\mathbf{m}_i \times \left(\mathbf{H}_i + \alpha \left[\mathbf{m}_i \times (\mathbf{H}_i - D \operatorname{grad}_{\circ i}) \right] \right) f \right], \\ \operatorname{div}_{\circ} \mathbf{g} &= \nabla_{\mathbf{m}} \left[\mathbf{g} - \frac{\mathbf{m}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{g})}{\mathbf{m}^2} \right], \quad \operatorname{grad}_{\circ} = \nabla_{\mathbf{m}} - \frac{\mathbf{m}(\mathbf{m} \cdot \nabla_{\mathbf{m}})}{\mathbf{m}^2}, \end{aligned}$$

где $\operatorname{div}_{\circ}$ — дивергенция на поверхности сферы, $\operatorname{grad}_{\circ}$ — градиент вдоль поверхности сферы, $\mathbf{H}_i$ — некоторое эффективное поле, D — коэффициент диффузии в пространстве магнитных моментов, $f = f(\dots, \mathbf{m}_i, \dots)$ — функция распределения магнитных моментов.

Пусть $f^{(N)}(\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_N, t)$ — N -частичная функция распределения магнитных моментов, тогда от (1) с учетом температурных флуктуаций можно достаточно строго перейти к N -частичному уравнению Фоккера–Планка (УФП):

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

Переход к УФП вместо традиционного уравнения Лиувилля обусловлен тем, что исходная система (1) уже содержит диссипацию и случайные источники.

Вводя одно- и двухчастичные функции распределения $f_i, f_{ij}^{(2)}$

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

(здесь под $\int_{S_2} d\mathbf{m}$ понимается интегрирование по сфере единичного радиуса) и

замыкая цепочку Боголюбова приближением среднего поля $f_{ij}^{(2)} \approx f_i f_j$, после ряда преобразований приходим к УФП в приближении сплошной среды:

$$\frac{\partial f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[\mathbf{H}^L + n_b J \langle \mathbf{m} \rangle + \mathbf{H}^{\text{an}}, T \right] f, \quad (3)$$

$$\mathbf{H}^L = a^2 J \Delta_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{m} \rangle + \overline{\mathbf{H}}^{\text{dip}} + \mathbf{H}^{\text{ext}},$$

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

с $\Delta_{\mathbf{r}}$ отвечает за обменное 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 $n_b J \langle \mathbf{m} \rangle$ отвечает за обменное взаимодействие внутри физически бесконечно малого объема, возникновение спонтанной намагниченности и фазовый переход ферромагнетик–парамагнетик. Усредненное поле диполь-дипольного взаимодействия $\bar{\mathbf{H}}_i^{\text{dip}}$ выражается через интеграл по объему и линейно зависит от $\langle \mathbf{m} \rangle$.

На микромагнитном уровне описания рассматривается эволюция плотности намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle(\mathbf{r})$. Умножая (3) на $\mathbf{m}$ и интегрируя по $d\mathbf{m}$, получаем уравнение Ландау–Лифшица–Блоха (LLB):

$$\begin{aligned} \dot{\langle \mathbf{m} \rangle} = & -\gamma \left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\text{L}} \right] + 2\gamma K \left(\Phi + \alpha \Theta \right) + \\ & + \alpha \gamma \hat{\Xi} \cdot \left(\mathbf{H}^{\text{L}} + n_b \varepsilon_G J \langle \mathbf{m} \rangle \right) - 2\alpha \gamma T \langle \mathbf{m} \rangle, \quad (4) \end{aligned}$$

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

где $\otimes$ — символ тензорного произведения, $\hat{I}$ — единичная матрица, $\varepsilon_G \approx 0.8$ — множитель, введенный для учета флуктуаций среднего поля и обеспечивающий получение правильной критической температуры. Для вычисления интегральных коэффициентов Φ , Θ , $\hat{\Xi}$, зависящих от старших моментов одночастичной функции распределения, необходимо аппроксимировать $f(\mathbf{m}, \mathbf{r}, t)$, например как

$$f \approx \frac{e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}}}{\mathcal{Z}(p)}, \quad \mathcal{Z}(p) = \int_{S_2} e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}} d\mathbf{m} = 4\pi \frac{\text{sh } p}{p}, \quad (5)$$

где $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$ — параметр аппроксимации, $\mathbf{p} \parallel \langle \mathbf{m} \rangle$, $\|\langle \mathbf{m} \rangle\| = \langle m \rangle$, $\langle m \rangle = \text{cth } p - 1/p \equiv \mathcal{L}(p)$, $\mathcal{L}$ — функция Ланжевена. В равновесном случае уравнение LLB (4) эквивалентно теории Кюри–Вейсса с точностью до ошибок аппроксимации (5).

После ряда преобразований и некоторых дополнительных предположений уравнение (4) может быть приведено к общепринятому виду¹⁶:

$$\gamma^{-1} \dot{\langle \mathbf{m} \rangle}(\mathbf{r}, t) = - \left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\text{LLB}} \right] + \alpha_{\parallel} \frac{(\langle \mathbf{m} \rangle \cdot \mathbf{H}^{\text{LLB}}) \langle \mathbf{m} \rangle}{\langle m \rangle^2} - \alpha_{\perp} \frac{\left[\langle \mathbf{m} \rangle \times [\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^{\text{LLB}}] \right]}{\langle m \rangle^2},$$

где $\alpha_{\parallel}$ и $\alpha_{\perp}$ — продольный и поперечный коэффициенты релаксации, $\mathbf{H}^{\text{LLB}}$ —

¹⁶Atxitia U., Hinzke D., Nowak U. Fundamentals and Applications of the Landau–Lifshitz–Bloch Equation // Journal of Physics D: Applied Physics, Vol.50, no.3, P.033003, 2017.

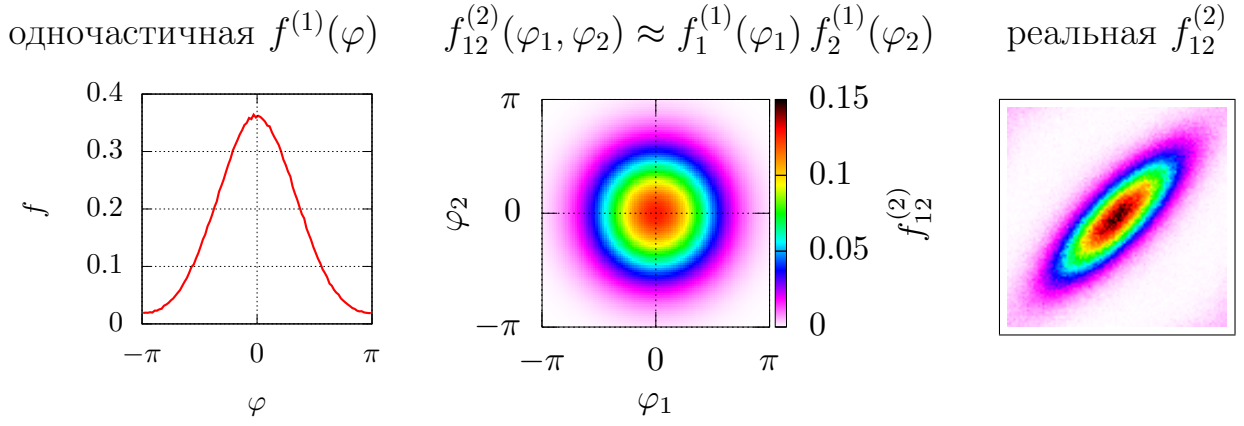


Рис. 1. Сравнение двухчастичных функций распределения $f^{(2)}(\varphi_1, \varphi_2)$ для т.н. ХУ модели, полученных в рамках приближения среднего поля и в рамках прямого численного моделирования для одномерной цепочки магнитных моментов

модельное эффективное поле.

Как уже отмечалось выше, в магнетиках определяющим является сильное локальное обменное взаимодействие, которое приводит к сильным корреляциям между ближайшими соседями. На рис. 1 приводится сравнение двухчастичной функции распределения, полученной в рамках приближения среднего поля, с двухчастичной функцией распределения, полученной при прямом численном моделировании одномерной цепочки магнитных моментов. Здесь рассматривалась т.н. ХУ-модель, в которой все магнитные моменты лежат в плоскости и могут быть описаны одним углом φ . Из рисунка видно, что полученная в рамках прямого моделирования двухчастичная функция распределения вытянута вдоль главной диагонали фазового пространства и качественно отличается от результатов приближения среднего поля. Эти отличия приводят к сдвигу критической температуры, неверным значениям энергии и неверному описанию процессов релаксации.

Для учета корреляций между ближайшими соседями аппроксимируем двухчастичную функцию распределения как

$$f_{ij}^{(2)} \approx \frac{1}{Z_{ij}^{(2)}} \left[f_i(\mathbf{m}_i, t) f_j(\mathbf{m}_j, t) \right]^\rho e^{\lambda \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}, \quad \frac{1}{2} \leq \rho \leq 1, \quad (6)$$

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

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

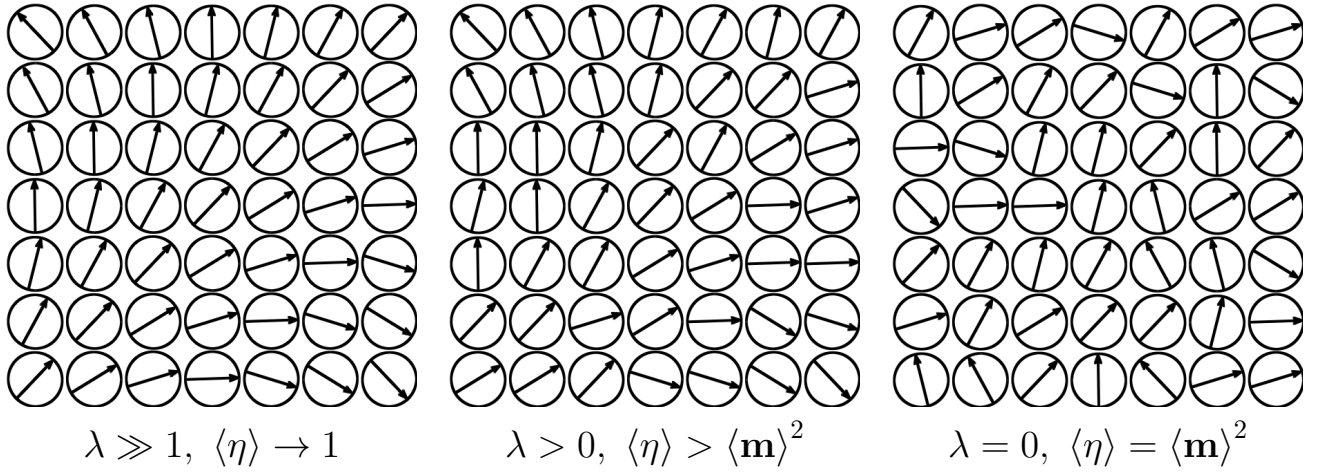


Рис. 2. Варианты взаимного расположения магнитных моментов при одинаковой средней намагниченности физически бесконечно малого объема

При $\lambda \ll 1$ аппроксимация (6) переходит в приближение среднего поля и $\rho \rightarrow 1$. При $\lambda \gg 1$ экспонента в аппроксимации (6) фактически переходит в δ -функцию $\delta(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j)$ и $\rho \rightarrow 1/2$. Несмотря на член $\left[f_i(\mathbf{m}_i, t) f_j(\mathbf{m}_j, t) \right]^\rho$, за счет $Z^{(2)}$ аппроксимация (6) имеет размерность двухчастичной функции распределения.

Уровень парных корреляций задается величиной

$$\langle \eta \rangle = \langle \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \rangle = \iint_{S_2 S_2} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j f_{ij}^{(2)} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j, \quad \langle \eta \rangle|_{\lambda=0} = \langle m \rangle^2,$$

обменная энергия в расчете на одну частицу $\langle W^{\text{exch}} \rangle = -n_b J \langle \eta \rangle / 2$.

Параметры λ, ρ взаимно однозначно связаны с моментами двухчастичной функции распределения $\langle m \rangle, \langle \eta \rangle$.

Рассмотрим некоторый физически бесконечно малый объем. При фиксированной средней намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle$ возможны различные значения парных корреляций $\langle \eta \rangle$, что отвечает различному взаимному расположению магнитных моментов (рис. 2). При $\lambda \rightarrow \infty$ парные корреляции $\langle \eta \rangle \rightarrow 1$ (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, но такая конфигурация не физична.

Как уже отмечалось выше, приближение среднего поля удовлетворительно описывает коллективные взаимодействия на больших масштабах. Аппроксимацию (6) необходимо учитывать при расчете вклада обменного взаимодей-

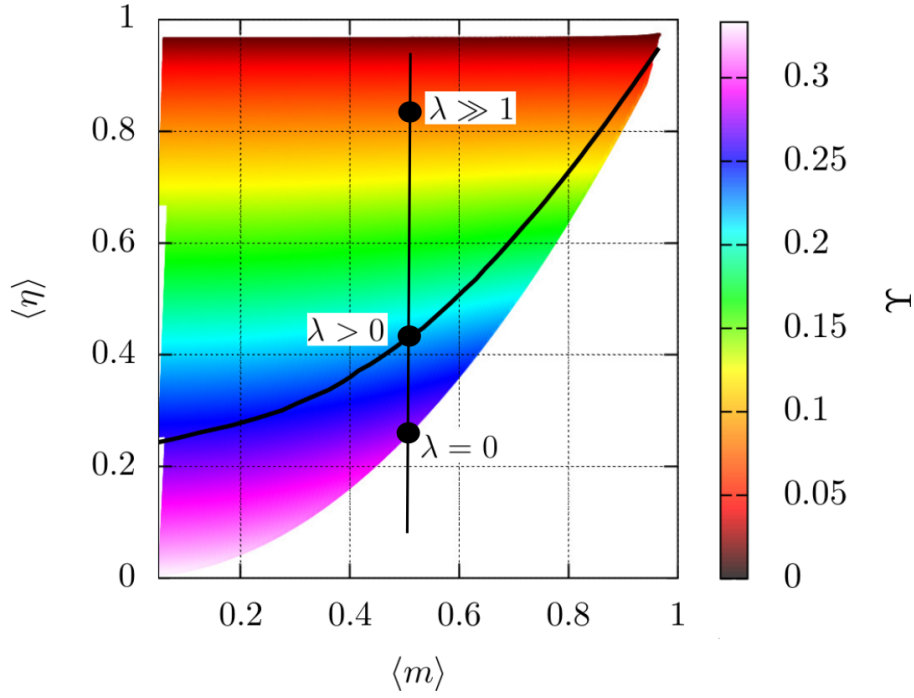


Рис. 3. Зависимость $\Upsilon(\langle m \rangle, \langle \eta \rangle)$, черной линией показан пример равновесной зависимости $\langle \eta \rangle(\langle m \rangle)$, полученной из моделирования «атом-в-атом» для объемноцентрированной кристаллической решетки

ствия внутри физически бесконечно малого объема. Тогда (3) принимает вид

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

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

В итоге применение (6) приводит вместо (4) к модифицированному уравнению LLB:

$$\begin{aligned} \langle \dot{\mathbf{m}} \rangle = & -\gamma \left[\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{H}^L \right] + 2\gamma K \left(\Phi + \alpha \Theta \right) + \\ & + \alpha \gamma \hat{\Xi} \cdot \mathbf{H}^L + 2\alpha \gamma (n_b J \Upsilon - T) \langle \mathbf{m} \rangle, \quad (7) \end{aligned}$$

при этом коэффициент Υ удобно рассматривать как функцию параметров $\langle m \rangle = \|\langle \mathbf{m} \rangle\|$ и $\langle \eta \rangle$ (рис. 3).

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

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

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

Умножая его на $\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j$ и интегрируя по $d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j$, получаем

$$\frac{\langle \dot{\eta} \rangle}{4\alpha\gamma} = \mathbf{H}^L \cdot \langle \mathbf{m} \rangle \Upsilon + K\Psi + J\mathcal{Q} - T \langle \eta \rangle, \quad (8)$$

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

$$\mathcal{Q} = \frac{1}{2} \left[1 - \langle \eta^2 \rangle - \sum_k Q_k \right], \quad Q_k = \left\langle \mathbf{m}_i \cdot \left[\mathbf{m}_j \times [\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k] \right] \right\rangle,$$

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 (7) и (8) образуют систему уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD), описывающую эволюцию распределения параметров дальнего $\langle \mathbf{m} \rangle(\mathbf{r}, t)$ и ближнего $\langle \eta \rangle(\mathbf{r}, t)$ порядка. CMD является точной системой уравнений на моменты одно-, двух- и трех-частичных функций распределения; все ошибки в CMD связаны с ошибками аппроксимации функций распределения или, по аналогии с гидродинамикой, с ошибками в задании уравнений состояния.

Полученная для ферромагнетика система уравнений CMD обобщена на случай антиферро- и ферримагнетиков с разными намагниченностями подрешеток.

Во второй главе рассматривается несколько численных методов для решения системы уравнений типа Ландау–Лифшица, включая как ASD так и микромагнитные LLB и CMD модели. Наибольшую сложность представляют уравнения ASD, как за счет большого числа уравнений (вплоть до 10^9), так и за счет наличия источника Ланжевена. Хотя уравнения ASD и LLB/CMD описывают поведение системы на совершенно разных пространственных масштабах, по форме они очень похожи. Уравнения LLB и CMD являются уравнениями в частных производных, но после дискретизации по пространству (конечно-разностной аппроксимации лапласиана) можно считать, что задача сводится к ASD уравнениям на примитивной кристаллической решетке с некоторыми дополнительными членами.

Поскольку коэффициент диссипации $\alpha \ll 1$, основные сложности при построении численной схемы связаны с аппроксимацией первого члена описывающего прецессию. В этом смысле задача является жесткой, поскольку с прикладной точки зрения основной интерес представляют процессы диссипации — но для адекватного описания системы необходимо разрешать прецессию, которая в α^{-1} раз быстрее диссипации. Аналитическое исследование жесткости системы не проводилось ввиду его высокой сложности.

В начале главы вводится оператор поворота и описывается несколько точных аналитических решений для частных случаев уравнения Ландау–Лифшица. Эти решения применяются как для создания новых численных схем, так и для тестирования реализации численных схем в программных комплексах.

В работе приводятся два новых численных метода — метод в поворотах 2-го порядка и модифицированный термодинамически обусловленный метод Рунге–Кутты 4-го порядка. Ошибки аппроксимации прецессии имеют систематический характер и влияют на термодинамику системы искажая решение, по аналогии с дополнительным источником шума. Это требует повышения порядка аппроксимации схемы, уменьшения шага по времени либо разработки новых, термодинамически обусловленных численных схем. В связи с этим был разработан модифицированный термодинамически обусловленный метод Рунге–Кутты 4-го порядка.

Введем оператор поворота вектора $\mathbf{m}$ вокруг оси, задаваемой вектором $\mathbf{b}$ на угол $b = \|\mathbf{b}\|$ (частный случай операции над кватернионом):

$$\mathbf{m} \odot \mathbf{b} \equiv \mathbf{m} \cos b - [\mathbf{m} \times \mathbf{b}] \frac{\sin b}{b} + \mathbf{b}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{b}) \frac{1 - \cos b}{b^2},$$

тогда аналитическое решение для бездиссипативного ОДУ Ландау–Лифшица с постоянным магнитным полем $\mathbf{H}$

$$\dot{\mathbf{m}} = -\gamma[\mathbf{m} \times \mathbf{H}], \quad \mathbf{m}|_{t=0} = \mathbf{m}_0, \quad \mathbf{m}(t) = \mathbf{m}_0 \odot \mathbf{H}\gamma t.$$

Модифицированный численный метод строится на основе расщепления по физическим процессам. В начале шага, для аппроксимации прецессии и диссипации в (1), применяется традиционный метод Рунге–Кутты 4-го порядка, что дает набор магнитных моментов $\{\mathbf{m}'_i\}$. Затем, поскольку (1) сохраняет модули $\mathbf{m}_i$, магнитные моменты перенормируются на единицу и аппроксимируется влияние случайного источника, что дает набор магнитных моментов $\{\hat{\mathbf{m}}_i\}$ на следующем временном слое:

$$\hat{\mathbf{m}}_i = \frac{\mathbf{m}'_i}{\|\mathbf{m}'_i\|} \odot \sqrt{2\delta t \alpha \gamma T} \boldsymbol{\xi}_i, \quad (9)$$

где δt — шаг по времени, $\boldsymbol{\xi}_i$ — случайный источник с нормальным распределением, единичной дисперсией и нулевым математическим ожиданием.

Во всех вычислительных экспериментах рассматривается кубический образец с периодическими граничными условиями, т.е. магнитные моменты на гранях куба связаны обменным взаимодействием с соответствующими магнитными моментами на противоположащих гранях. Размеры куба по каждому из ребер $2^{5 \div 8}$. В такой постановке вклад диполь-дипольного взаимодействия $\mathbf{H}^{\text{dip}}$ несущественен и полагается равным нулю, для учета размагничивающего фактора, обусловленного конечными размерами и формой реального

образца, можно использовать анизотропию.

Частота прецессии магнитного момента $\gamma H^{\text{eff}} \approx \gamma n_b J$. Для рассматриваемых кристаллических решеток безразмерный период прецессии составляет порядка $1/2 \div 1$, и можно было бы ожидать, что шага $\delta t \approx 0.05 \div 0.1$ достаточно для получения адекватных результатов. Между тем, как правило, приходится вести расчеты с шагом $\delta t \leq 10^{-2}$ — при больших шагах систематическая ошибка аппроксимации членов с прецессией вносит ощутимые искажения.

В рассматриваемой системе при больших шагах по времени потеря устойчивости не приводит к появлению значений **Inf** или **Nan** — этому препятствует перенормировка (9) модулей магнитных моментов на каждом шаге. Большие шаги проявляются как разрушение дальнего порядка (средней намагниченности) и переход ферромагнетика в парамагнитную фазу при температурах ниже критической. При не столь больших шагах систематическая ошибка аппроксимации приводит к уменьшению средней намагниченности $\langle m \rangle$ и увеличению энергии $\langle W \rangle$ системы, то есть ошибка проявляется как некоторая эффективная добавка к температуре T .

Как и в молекулярной динамике, в системе ASD (1) эволюция магнитных моментов отдельных атомов не представляет интереса — основной целью моделирования является получение средних намагниченности, энергии и т.д. Хотя систематическая ошибка аппроксимации и температурные флуктуации, задаваемые термостатом (кристаллической решеткой) температуры T , имеют совершенно различную природу, можно попытаться скомпенсировать влияние систематической ошибки на средние значения за счет изменения интенсивности температурных флуктуаций. Выразим температуру из (8) на временном шаге l :

$$T_l = \frac{1}{\langle \eta \rangle_l} \left[\mathbf{H}_l^L \cdot \langle \mathbf{m} \rangle_l \Upsilon_l + K \Psi_l + J \mathcal{Q}_l - \frac{\langle \dot{\eta} \rangle_l}{4\alpha\gamma} \right].$$

Все входящие в правую часть величины могут быть экономно вычислены из текущей конфигурации магнитных моментов, производная $\langle \dot{\eta} \rangle_l$ аппроксимируется односторонними конечными разностями:

$$\langle \dot{\eta} \rangle_l \approx \frac{\langle \eta \rangle_l - \langle \eta \rangle_{l-1}}{\delta t}.$$

В итоге интенсивность случайного источника T в (9) аппроксимируется взвешенным образом как

$$T_l^* = (1 - w)T_{l-1}^* + w(2T - T_l), \quad T_0^* = T,$$

где $0 < w \leq 1/2$ — параметр.

При моделировании процессов релаксации построенная численная схема позволяет поднять временной шаг почти на порядок при сохранении заданно-

го уровня ошибки вычисления средних величин. При накоплении статистики после достижения состояния равновесия вместо компенсации систематической ошибки численной схемы производится уменьшение временного шага.

В третьей главе приводится аппроксимация интегральных коэффициентов CMD. Интегральные коэффициенты являются моментами одно-, двух- и трехчастичных функций распределения.

Коэффициенты Φ , Θ и $\hat{\Xi}$ являются моментами одночастичной функции распределения, зависят от $\langle \mathbf{m} \rangle$ и могут быть получены дифференцированием по параметру. Для их компактной записи удобно ввести функции $\mathcal{M}$ и $\mathcal{V}$:

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

которые, в свою очередь, аппроксимируются полиномами.

Коэффициенты Υ , Ψ являются моментами двухчастичной функции распределения (6) и зависят от параметров $\langle \mathbf{m} \rangle$, $\langle \eta \rangle$. Поскольку система координат $\langle m \rangle \in [0, 1]$, $\langle \eta \rangle \in [0, 1]$ является криволинейной (значения $\langle \eta \rangle < \langle m \rangle^2$ нефизичны, см. рис. 3), удобно вместо $\langle \eta \rangle$ ввести параметр $\zeta = (\langle \eta \rangle - \langle m \rangle^2)/(1 - \langle m \rangle^2)$, который вместе с $\langle m \rangle$ образует прямолинейную систему координат. В каждой точке этого пространства коэффициенты Υ , Ψ рассчитываются численно и затем аппроксимируются аналитически. Двойные интегралы по сфере $\int_{S_2} d\mathbf{m}_i d\mathbf{m}_j$ частично берутся аналитически и затем численно, либо полностью берутся численно на сферической сетке, полученной при рекурсивном разбиении пентакисдодекаэдра. Такая сетка не имеет сильных особенностей на полюсах и обеспечивает выигрыш по числу узлов в 1.5 раза по сравнению с традиционными сферическими координатами при той же точности. Аналогичным образом аппроксимируются величины ρ , λ и $Z^{(2)}$. Для Υ строятся асимптотики при $\langle m \rangle = 0$, $\zeta = 0$, что в итоге дает хорошую аппроксимацию:

$$\Upsilon|_{\langle m \rangle=0} = \frac{\mathcal{M}(\langle \zeta \rangle)}{1 + \zeta}, \quad \Upsilon_{\zeta=0} = \mathcal{M}(\langle m \rangle), \quad \Upsilon \approx \frac{3\mathcal{M}(\langle m \rangle)\mathcal{M}(\zeta)}{1 + \zeta}.$$

Наибольшие сложности возникают с аппроксимацией коэффициента $\mathcal{Q}$, поскольку хотя для трехчастичной функции распределения можно построить аппроксимацию, аналогичную (6), но в этой аппроксимации будет не определен один из параметров — требуется замкнуть цепочку Боголюбова для трехчастичной функции распределения. В работе рассмотрено два подхода к аппроксимации коэффициента $\mathcal{Q}$ для примитивной (SC), объемноцентрированной (BCC) и гранецентрированной (FCC) кубических кристаллических решеток.

Первый подход основан на ряде априорных предположений о виде многочастичных функций распределения с их последующим численным интегрированием. В зависимости от типа кристаллической решетки можно выделить различные трех-, четырех- и шестичастичные функции распределения, ко-

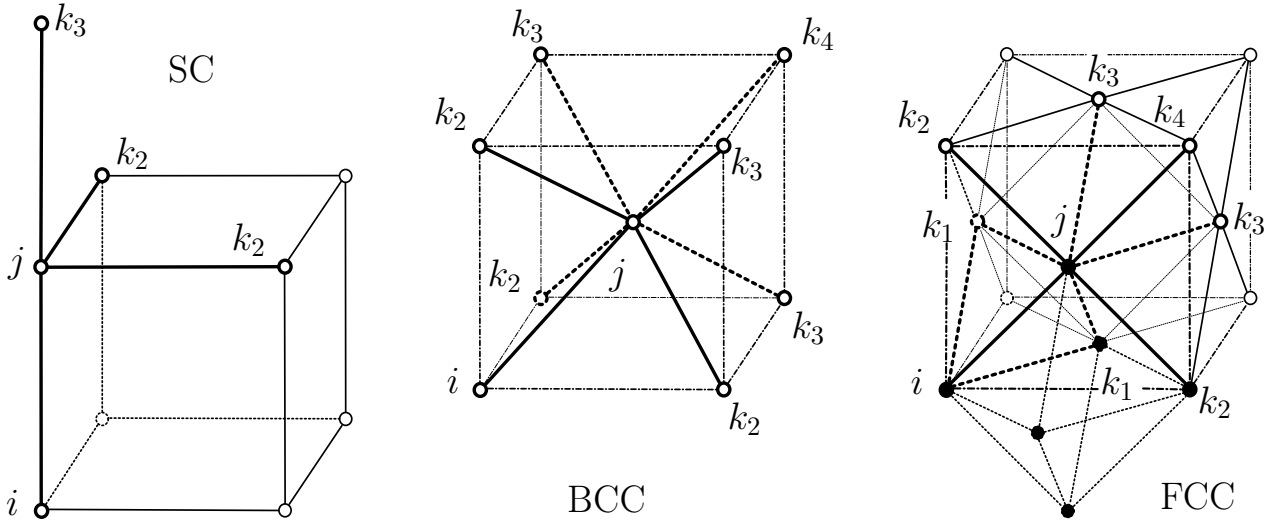


Рис. 4. Кристаллические решетки и различные варианты трехчастичных функций распределения. Атомы i и j зафиксированы, атом k может занимать различные положения

которые могут быть полностью определены из параметров $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$ и температуры T . Например, для SC решетки атомы ijk_3 отвечают трехчастичной функции $f_{\angle}^{(3)}$, у которой можно пренебречь косвенными корреляциями между атомами i и k_3 ; для FCC решетки атомы ijk_1 образуют полностью симметричную $f_{\Delta}^{(3)}$ (рис. 4):

$$f_{\angle}^{(3)} \approx \frac{f_{ij}^{(2)} f_{jk}^{(2)}}{f_j^{(1)}}, \quad f_{\Delta}^{(3)} \sim e^{\rho' \mathbf{p} \cdot (\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_k) + \lambda' (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_k + \mathbf{m}_k \cdot \mathbf{m}_i)}. \quad (10)$$

Численное интегрирование таких функций распределения и табулирование соответствующих зависимостей $Q(\langle m \rangle, \langle \eta \rangle)$ потребовало применения кластера К60 ИПМ им. М.В. Келдыша. Полученные в итоге зависимости не имеют подгоночных параметров и дают удовлетворительные результаты. К недостаткам такого подхода можно отнести необходимость работы с табулированными функциями при решении CMD и не вполне точное совпадение результатов CMD и ASD.

Второй подход основан на анализе большого объема вычислительных экспериментов ASD в различных постановках. Показано, что фазовое пространство CMD $\langle m \rangle$, ζ разбивается на две области линией $\zeta^*(\langle m \rangle) \approx \text{const}$ зависящей от кристаллической решетки. При явном задании $\zeta = \text{const}$ уравнения CMD отвечают традиционному уравнению LLB (4). Ниже этой линии находится устойчивая область — каждой точке отвечает равновесное состояние образца при некоторых T , H^{ext} . Выше находится неустойчивая область, которая может быть пройдена в динамике, например при переманчивании образца.

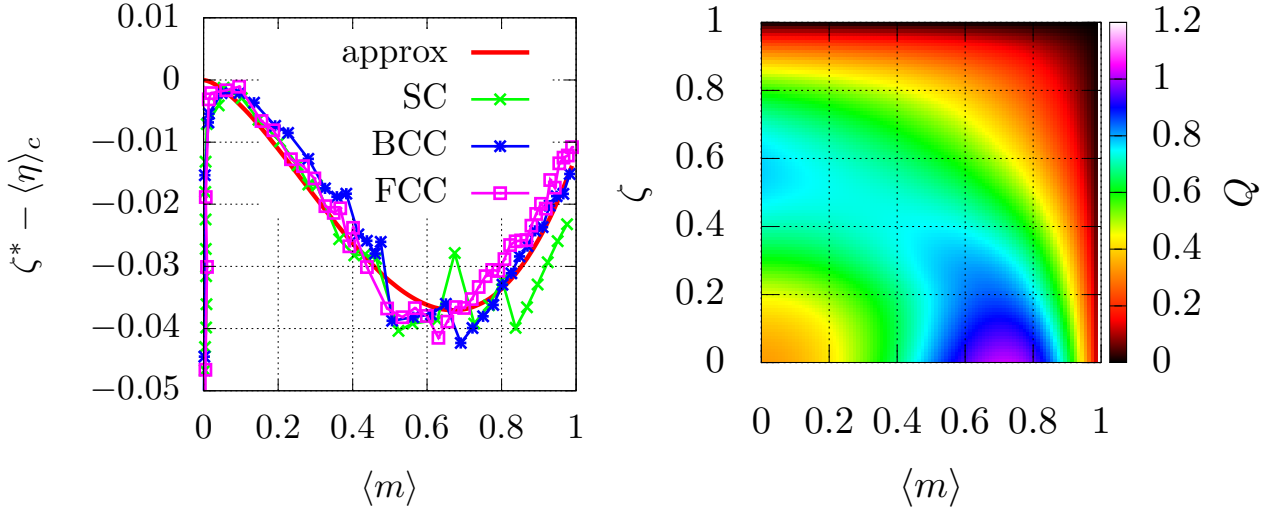


Рис. 5. Зависимости $\zeta^*(\langle m \rangle)$ для всех решеток и $Q(\langle m \rangle, \zeta)$ для BCC решетки

В приближении среднего поля для Q можно получить

$$Q_{\text{MFA}} = \mathcal{M}(\langle m \rangle) \left[2 + (n_b - 1) \langle m \rangle^2 - 3\mathcal{M}(\langle m \rangle) \right].$$

Для всех решеток полученные из ASD зависимости $\zeta^*(\langle m \rangle)$ могут быть аппроксимированы как

$$\zeta^* \approx \langle \eta \rangle_c - 0.135 \langle m \rangle^{\frac{3}{2}} + 0.0123 \langle m \rangle^3,$$

где $\langle \eta \rangle_c$ — значение $\langle \eta \rangle$ в точке фазового перехода (рис 5). На линии $\zeta^*(\langle m \rangle)$ должно выполняться соотношение $Q^* = n_b \langle \eta \rangle^* \Upsilon^*$, что в итоге дает простую аналитическую аппроксимацию для Q :

$$Q \approx \begin{cases} Q_{\text{MFA}} + A\zeta + B\zeta^2 & \text{при } \zeta \leq \zeta^*, \\ n_b \langle \eta \rangle \Upsilon & \text{при } \zeta > \zeta^*, \end{cases}$$

где коэффициенты $A(\langle m \rangle)$ и $B(\langle m \rangle)$ находятся из условия гладкости и непрерывности Q на линии ζ^* . Получаемые в итоге результаты расчетов CMD хорошо совпадают с результатами ASD.

В четвертой главе приводятся два метода расчета статистической суммы и энтропии магнетика.

Первый полуаналитический метод прямого интегрирования N -частичной функции распределения основан на линейной аппроксимации функции $\ln \mathcal{Z}$. Рассмотрим выражение для статистической суммы:

$$Z^{(N)} = \int \cdots \int_{S_2 \dots S_2} \exp \left[\beta \mathbf{H} \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i + \frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{ij} \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j \right] d\mathbf{m}_1 \dots d\mathbf{m}_N,$$

где $\mathbf{H}$ — внешнее поле, $\beta = 1/T$ — обратная температура. Поскольку один из

интегралов может быть взят аналитически в сферических координатах

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

то

$$\begin{aligned} Z^{(N)} = \int_{S_2} \cdots \int_{S_2} \exp \left[\beta \mathbf{H} \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{m}_i + \frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} J_{ij} \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j \right] \times \\ \times \mathcal{Z} \left(\left\| \beta \mathbf{H} + \beta \sum_{i=1}^{N-1} J_{iN} \mathbf{m}_i \right\| \right) d\mathbf{m}_1 \dots d\mathbf{m}_{N-1}, \end{aligned}$$

аргумент последнего сомножителя можно преобразовать как

$$\left\| \beta \mathbf{H} + \beta \sum_{i=1}^{N-1} J_{iN} \mathbf{m}_i \right\| = \sqrt{\sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} a_{iN} a_{jN} x_{ij}},$$

где $\mathbf{m}_0 = \mathbf{H}/H$, $x_{ij} = \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \in [-1, 1]$, $x_{ii} = 1$, $a_{iN} = \beta J_{iN}$ при $i \geq 1$ и $a_{0i} = \beta H$. Логарифмируя и раскладывая в многокомпонентный ряд Тейлора до линейных членов в окрестностях некоторой точки $x_{ij} = x_{ij}^*$, получаем:

$$\begin{aligned} \ln \mathcal{Z}(\sqrt{\dots}) \approx \ln \mathcal{Z}(A_N^*) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=0}^{i-1} \frac{x_{ij} - x_{ij}^*}{\mathcal{Z}(A_N^*)} \cdot \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial x_{ij}} = \\ = \ln \mathcal{Z}(A_N^*) - \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=0}^{i-1} b_{ij}^N x_{ij}^* + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=0}^{i-1} b_{ij}^N x_{ij}, \end{aligned}$$

$$A_N^* = \sqrt{\sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} a_{iN} a_{jN} x_{ij}^*}, \quad b_{ij}^N = \mathcal{L}(A_N^*) \frac{a_{iN} a_{jN}}{A_N^*},$$

где $\mathcal{L}(x) = \text{cth } x - 1/x$ — функция Ланжевена.

Таким образом, исходная статистическая сумма может быть представлена в виде

$$Z^{(N)} = \int_{S_2} \cdots \int_{S_2} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N a_{ij} x_{ij} \right] d\mathbf{m}_1 \dots d\mathbf{m}_N,$$

и интегрирование по каждому магнитному моменту $\mathbf{m}_k$ сводится к домножению на константу, исключению k -х строки и столбца из матрицы a_{ij} и прибавлению элементов матрицы b_{ij}^k к оставшимся элементам матрицы a_{ij} , что сводит задачу к предыдущей. Интеграл по нескольким последним элементам

может считаться численно.

Исходная матрица a_{ij} является симметричной и разреженной, симметричная матрица b_{ij}^k содержит ненулевые члены, отвечающие ненулевым членам (связям между магнитными моментами) a_{ij} на k -х строке и столбце матрицы a_{ij} , и приводит к появлению дополнительных ненулевых элементов (связей) в сокращенной матрице a_{ij} . Такой подход отвечает перестроению взвешенного графа, задаваемого матрицей a_{ij} и описывающего обменные связи в кристаллической решетке.

Алгоритм может быть легко обобщен на случай произвольного кристалла, в том числе с нарушением связей, дефектами типа «случайное поле» и т.д.

Точка x_{ij}^* выбирается на главной диагонали гиперкуба $\{x_{ij}\}$, т.е. $x_{ij}^* = x^* \forall i \neq j$.

Построенный алгоритм реализован на языке C++, имеет вычислительную сложность $O(N^{7/3})$ и демонстрирует хорошую работоспособность при высоких температурах. Ниже критической температуры возможно подобрать точку разложения x^* , дающую удовлетворительные значения энергии и намагниченности, но эти значения оказываются несогласованными со значением $Z^{(N)}$. Тем не менее, построенный алгоритм объясняет вид аппроксимации двухчастичной функции распределения (6) и происхождение параметров ρ , λ .

Второй алгоритм прямого расчета энтропии основан на энтропии младших функций распределения $f^{(1)}$, $f^{(2)}$. 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, из дополнительного условия при $T \rightarrow \infty$ следует:

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

что дает возможность расчета энтропии на основе серии равновесных ASD расчетов с плавно увеличивающейся температурой. Для замены нижнего предела интегрирования на конечный из второго уравнения CMD (8) построены асимптотики энергии и энтропии при больших температурах. Для SC и BCC решеток

$$Q \approx \frac{1 - \langle \eta^2 \rangle - (n_b - 1)Q_{\angle}}{2}, \quad S^{(N)} \approx \ln 4\pi - \frac{n_b J^2}{12T^2}.$$

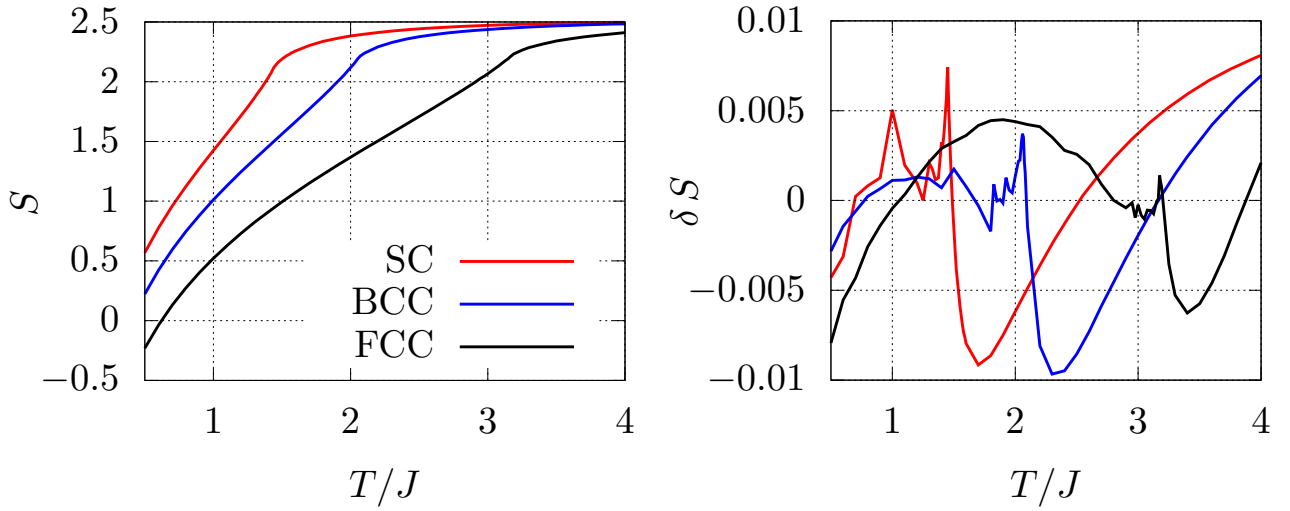


Рис. 6. Зависимости энтропии $S^{(N)}$ и абсолютной ошибки аппроксимации (11) для разных решеток

Для FCC решетки за счет наличия полностью симметричных трехчастичных функций распределения $f_{\Delta}^{(3)}$ (10) коэффициент $\mathcal{Q}$ принимает вид

$$\mathcal{Q} \approx \frac{1 - \langle \eta^2 \rangle - 7Q_{\angle} - 4Q_{\Delta}}{2},$$

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

Введем энтропию для младших, одно- и двухчастичных функций распределения:

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

Рассмотрим выражение для энергии в отсутствие внешнего поля и анизотропии:

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

что после ряда преобразований приводит к

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

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, что приводит к простой аппроксимации:

$$S^{(N)} \approx A + BS^{(2)} + CS^{(1)}, \quad (11)$$

где A, B, C — некоторые константы, зависящие только от типа кристаллической решетки. В актуальном диапазоне температур $[1/2, 4]J$ такая аппроксимация $S^{(N)}$ дает относительную ошибку не более 0.5% (рис. 6).

В пятой главе проведено сравнение результатов расчетов для ASD, традиционного уравнения Ландау–Лифшица–Блоха (LLB) и CMD в различных постановках для трех типов кристаллических решеток. Рассмотрены равновесные зависимости намагниченности, энергии, теплоемкости C и восприимчивости $\chi = \partial \langle m \rangle / \partial H^{\text{ext}}$ от температуры (рис. 7). Каждая точка отвечает одному расчету, для каждого расчета 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.

В окрестностях фазового перехода времена релаксации весьма велики, что требует увеличения времени ASD расчетов на два порядка. 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 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. Как уже отмечалось ранее, LLB занижает времена релаксации на порядок (см. рис. 7), что является критически важным недостатком при моделировании устройств спинтроники.

Важной для спинтроники постановкой является задача о перемагничивании образца внешним полем. В начальный момент времени образец находится в состоянии равновесия, $\langle \mathbf{m} \rangle|_{t=0} = (0, 0, \langle m \rangle_{\text{eq}})$. Затем включается внешнее поле антиколлинеарное $\langle m \rangle|_{t=0}$, анизотропия $K > 0$. Интерес представляют зависимость $\langle m \rangle(t)$ и время перемагничивания τ_r , за которое $\langle m_z \rangle$ станет меньше нуля. Такая постановка является сильно неравновесной, в ASD расчетах за счет периодических граничных условий модуль намагниченности проходит через ноль, при этом значения ближнего порядка $\langle \eta \rangle$ практически не изменяются. В LLB такое поведение возможно только в очень сильных внешних полях или при температурах, близких к критической, когда $|H^{\text{ext}}| \geq n_b \varepsilon_G J \langle m \rangle$, см. (4).

При переходе к приближению сплошной среды предполагается, что число атомов в физически бесконечно малом объеме весьма велико и отвечает термодинамическому пределу. В этом случае в задаче о перемагничивании система должна сохранять осевую симметрию, т.е. $\langle m \rangle_x = \langle m \rangle_y = 0 \forall t$, что отвечает одноосному случаю и значительно упрощает расчеты. Но для LLB в одноосном случае при рассмотренных параметрах перемагничивания вообще не происходит, поскольку поле анизотропии оказывается больше внешнего поля. Учет конечного числа атомов приводит к необходимости введения случайного источника, учитывающего дробовой шум, и проведения полно-

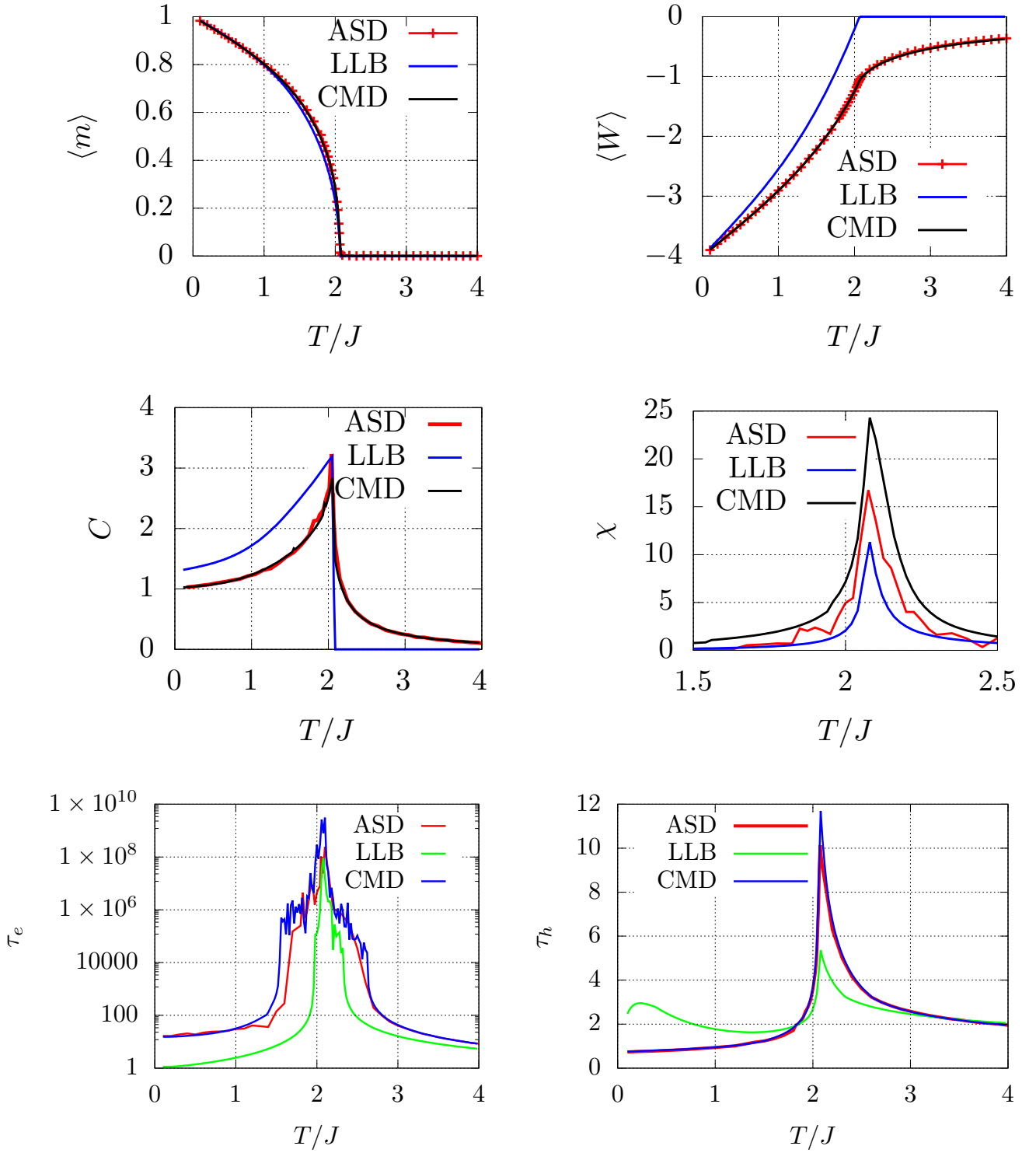


Рис. 7. Равновесные зависимости намагниченности $\langle m \rangle$, энергии $\langle W \rangle$, теплоемкости C , восприимчивости χ и времен релаксации τ_e , τ_h для ВСС решетки, полученные на основе различных моделей

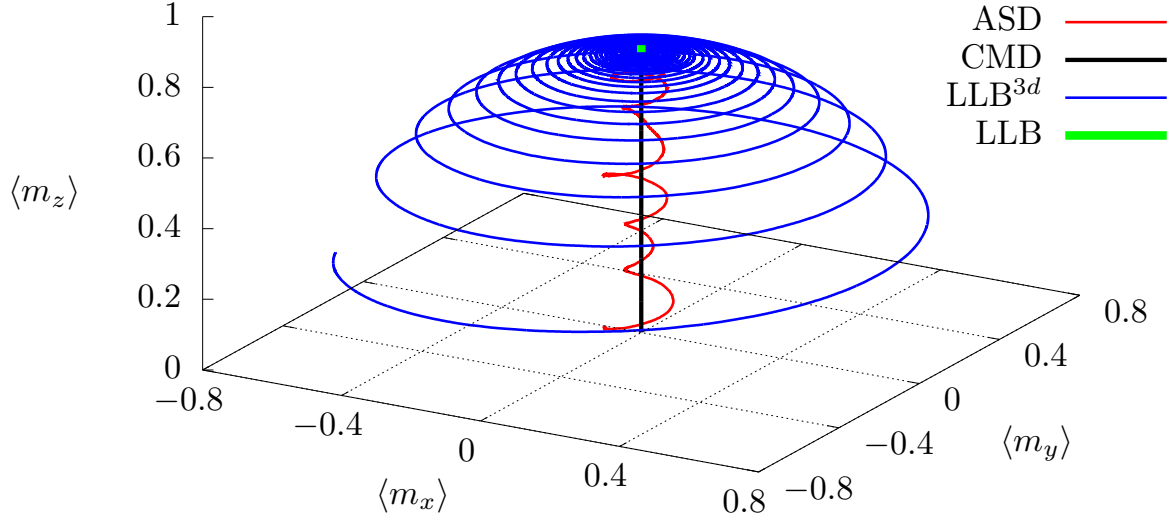


Рис. 8. Эволюция средней намагниченности $\langle \mathbf{m} \rangle(t)$ при перемагничивании образца в различных приближениях с ВСС решеткой, $K = 0.1J$, $H^{\text{ext}} = -0.2J$, $T = J$ (для железа это примерно 500°K)

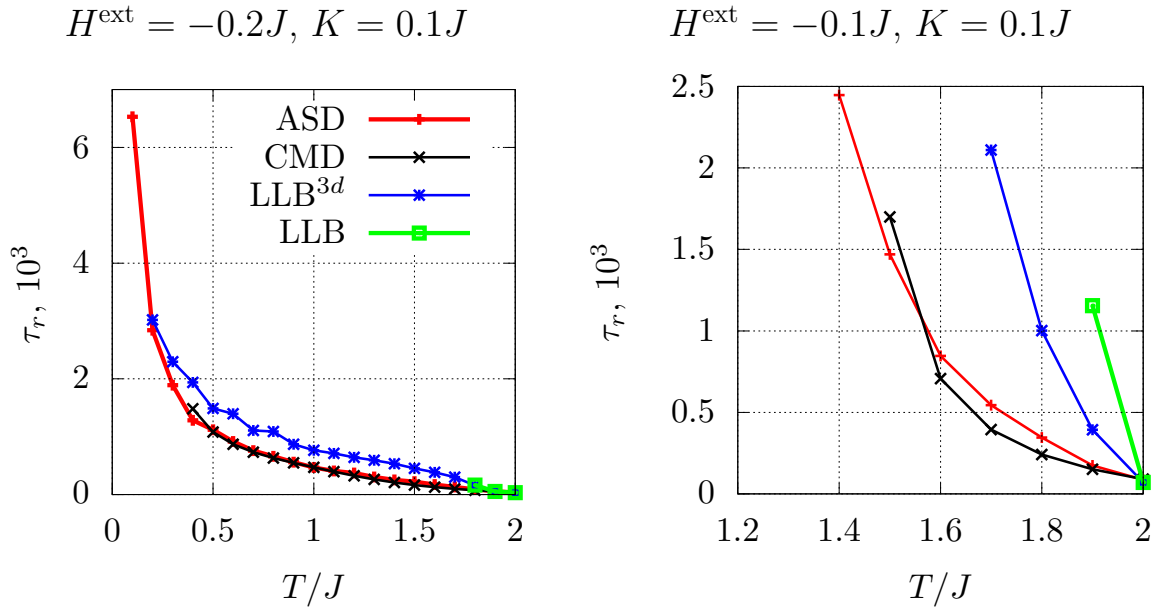


Рис. 9. Времена перемагничивания образца τ_r с ВСС решеткой и анизотропией $K = 0.1J$ при внешнем поле $H_z = -0.1J$ и $H_z = -0.2J$ в различных приближениях

ценных расчетов, учитывающих три компоненты средней намагниченности. В простейшем случае источник вводится как

$$\langle \dot{\mathbf{m}} \rangle = \dots + \sqrt{2\gamma\alpha T/n_c} \langle \mathbf{m} \rangle \times \boldsymbol{\xi},$$

где n_c — число атомов в ячейке расчетной сетки. Такие расчеты проводились как в приближении LLB, так и в приближении CMD, их результаты далее обозначены верхним индексом ^{3d}.

На рис. 8 приведены результаты для перемагничивания образца полученные в различных приближениях. Приближение LLB^{3d} отвечает LLB расчетам со случайным источником, обусловленным дробовым шумом. Рассматривались разбиения счетной области на 1, 2³, 4³ и 8³ ячеек, все они дали близкие результаты. Для CMD расчетов разбиение области и учет дробового шума картину не меняли.

Из рис. 9 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. (4). 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.

В пятой главе показано, что энергия, теплоемкость и времена релаксации, полученные из CMD, гораздо лучше согласуются количественно с ASD, чем LLB. Восприимчивость CMD оказывается завышенной. В задаче о перемагничивании образца LLB дает качественно неверные результаты во всем диапазоне температур, кроме окрестностей фазового перехода, в то время как CMD обеспечивает приемлемое количественное совпадение при температурах выше комнатной.

В шестой главе описаны разработанные в ходе работы программные комплексы StatASD и CMDlib, реализующие описанные в предыдущих главах вычислительные алгоритмы.

Kod StatASD предназначен для проведения статистических расчетов в рамках атомистической модели классического магнетика Гейзенберга. StatASD состоит из вычислительного ядра, написанного на C++, и набора скриптов запуска, написанных на Python, общий размер исходного кода составляет порядка 50 КБ. Скрипты запуска достаточно просты и могут создаваться пользователем по необходимости. Выбор типа кристаллической решетки и сложность подключаемой диагностики задаются макросами (директивами условной компиляции) при сборке вычислительного ядра.

По умолчанию доступно три типа кристаллических решеток — примитивная (SC), объемноцентрированная (BCC) и гранецентрированная (FCC).

Решетка описывается числом атомов в элементарной ячейке (числом подрешеток), координатами атомов в элементарной ячейке и набором обменных связей для каждой из подрешеток. Фрагменты C++ кода, задающие кристаллические решетки, генерируются автоматически при помощи скрипта на языке Python, выбор кристаллической решетки производится при помощи директив условной компиляции.

Распараллеливание вычислений производится при помощи библиотеки OpenMP, обход данных осуществляется по трехмерной Z-кривой Мортонa. В зависимости от постановки, размера задачи, типа кристаллической решетки и физических параметров время одного расчета на одной рабочей станции может составлять от нескольких минут до десятков часов. По сравнению с ближайшим аналогом, шведским кодом UppASD, StatASD демонстрирует на порядок большую производительность. Эффективность распараллеливания StatASD доходит до 40% на 24x потоках, UppASD эффективно распараллеливается на 4x потоках максимум.

Для управления массовыми расчетами в StatASD задействована Results and Algorithms Control System (RACS). RACS является нереляционной СУБД, ориентированной на проведение массовых высокопроизводительных расчетов. За счет интроспекции RACS легко интегрируется в скрипты Python и предоставляет высокоуровневый интерфейс командной строки для запуска расчетов. RACS обеспечивает проведение массовых расчетов на кластере с автоматической балансировкой загрузки вычислительных узлов. После окончания расчетов RACS позволяет проводить комплексные анализ и постобработку результатов.

В общей сложности под управлением RACS для получения интегральных коэффициентов CMD, значений энтропии в различных приближениях и проверки CMD на кластере K60 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН было проведено около 4000 расчетов, потребовавших около 3000 часов.

Библиотека CMDlib создана в соавторстве с Лукьяновым А.В. и Замятиным С.В. Библиотека содержит реализацию расчета интегральных коэффициентов в уравнениях LLB и CMD, а также расчет правых частей для уравнений LLB и CMD. Для всех коэффициентов есть два варианта расчета — быстрый (но менее точный), основанный на различных аналитических аппроксимациях, и медленный (но более точный), основанный на поиске параметров ρ , λ в (6) из значений $\langle m \rangle$, $\langle \eta \rangle$ с последующим численным интегрированием. Аналитические аппроксимации применяются для расчета начальных приближений в методе Ньютона при вычислении параметров ρ , λ , что значительно ускоряет сходимость метода.

Библиотека написана на языках C++ и Python. Для увеличения производительности аналитические аппроксимации оформлены в виде шаблонов, параметризованных по типу аргумента (производительность float выше, чем у double), полиномы по возможности факторизованы. Документация к библиотеке содержит подробные выкладки по поиску различных аппроксимаций и асимптотик.

Публикации автора по теме диссертации

- [1] Иванов А.В., Зипунова Е.В., Хилков С.А. Уравнения корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков // Письма в ЖЭТФ (WoS, Scopus, K1). — 2022. — Т. 115, № 3. — С. 176–183. — <https://doi.org/10.31857/S1234567822030077>.
- [2] Ivanov A.V., Lukianov A.V., Zamiatin S.V. Massive Calculations of Statistical Properties of the Classical Heisenberg Magnet Using the StatASD Code // Lobachevskii J. Math. (WoS, Scopus, K2, перечень ВАК). — 2025. — Vol. 46, no. 8. — P. 3687–3697. — <https://rdcu.be/eYllz>.
- [3] Иванов А.В. Кинетическое моделирование динамики магнетиков // Математическое моделирование (WoS, Scopus, K1, перечень ВАК). — 2007. — Т. 19, № 10. — С. 89–104. — <http://www.mathnet.ru/links/82020fa1add2512759e063c1cb0a7ebf/mm1204.pdf>.
- [4] Хилков С.А., Иванов А.В. Резонансные свойства суперпарамагнетиков при малых амплитудах внешнего периодического поля // Математическое моделирование (WoS, Scopus, K1, перечень ВАК). — 2015. — Т. 27, № 8. — С. 96–110. — <http://www.mathnet.ru/links/88e81895c24ff41f84a18d83a2deb97b/mm3640.pdf>.
- [5] Зипунова Е.В., Иванов А.В. Выбор оптимальной численной схемы для моделирования системы уравнений Ландау–Лифшица с учетом температурных флуктуаций // Математическое моделирование (WoS, Scopus, K1, перечень ВАК). — 2014. — Т. 26, № 2. — С. 33–49. — <http://www.mathnet.ru/links/f80cd33bca6853dfd290a903780e7565/mm3447.pdf>.
- [6] Хилков С.А., Иванов А.В., Зипунова Е.В. Моделирование сильно неравновесных процессов в магнетиках на основе уравнений физической кинетики // Математическое моделирование (WoS, Scopus, K1, перечень ВАК). — 2016. — Т. 5, № 28. — С. 24–31. — <http://www.mathnet.ru/links/cdce0a7282643aa05782702b4e06c7f6/mm3727.pdf>.
- [7] Замятин С.В., Иванов А.В. Вычисление статистической суммы классического магнетика Гейзенберга в линейном приближении // Математическое моделирование (WoS, Scopus, K1, перечень ВАК). — 2025. — Т. 37, № 3. — С. 100–112.
- [8] Лукьянов А.В., Иванов А.В. Вычисление интегральных коэффициентов уравнений корреляционной магнитодинамики для ферромагнетика // Математическое моделирование (WoS, Scopus, K1, перечень ВАК). — 2025. — Т. 37, № 4. — С. 68–88.
- [9] Моделирование фазовых диаграмм переключения для термоассистированных наноприборов MRAM / И.М. Искандарова, А.В. Иванов, А.А. Книжник и др. // Российские нанотехнологии (WoS, Scopus, K1). — 2015. — Т. 10, № 11–12. — С. 112–117.
- [10] Программный комплекс для компьютерного дизайна спинтронных наноприборов / А.А. Книжник, И.А. Горячев, Г.Д. Демин и др. // Российские нанотехнологии (WoS, Scopus, K1). — 2017. — Т. 12, № 3–4. — С. 76–83.

- [11] Иванов А.В., Хилков С.А. Библиотека aiwlib — инструмент для создания приложений численного моделирования, визуализации и анализа результатов // Научная визуализация (Scopus, КЗ, перечень ВАК). — 2018. — Т. 10, № 1. — С. 110–127. — <https://doi.org/10.26583/sv.10.1.09>.
- [12] Программный пакет для приборно-технологического моделирования спинтронных приборов на основе магнитных туннельных переходов / И.А. Горячев, Г.Д. Демин, К.А. Звездин и др. // Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем (МЭС). — 2016. — № 4. — С. 237–244. — https://www.elibrary.ru/download/elibrary_27150152_99870583.pdf.
- [13] The Fouriest: High-Performance Micromagnetic Simulation of Spintronic Materials and Devices / I. Pershin, A. Knizhnik, V. Levchenko et al. // Intelligent Computing-Proceedings of the Computing Conference (Scopus) / Springer. — 2019. — P. 209–231. — https://doi.org/10.1007/978-3-030-22871-2_16.
- [14] Ivanov A.V., Zipunova E.V. Micromagnetic modeling with account for the correlations between closest neighbors // AIP Conference Proceedings (Scopus). — 2020. — Vol. 2300, no. 1. — P. 020050. — <https://doi.org/10.1063/5.0032075>.
- [15] Ivanov Anton, Khilkov Sergey, Zipunova Elizaveta. Approximation of Multiparticle Distribution Function in Micromagnetic Modeling // Journal of Physics: Conference Series (Scopus). — 2021. — Vol. 1740. — P. 012025. — <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1740/1/012025>.
- [16] 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 (Scopus). — 2021. — Vol. 1510. — P. 29–43. — https://doi.org/10.1007/978-3-030-92864-3_3.
- [17] Khilkov S.A., Ivanov A.V. Numerical simulation of the magnetic moment distribution evolution for superparamagnetic materials // Keldysh Institute Preprint (KЗ). — 2014. — no. 29. — P. 1–16. — https://keldysh.ru/papers/2014/prep2014_29_eng.pdf.
- [18] Иванов А.В., Хилков С.А. К вопросу о кинетическом моделировании цепочки фазовых осцилляторов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2016. — № 130. — С. 20. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2016-130>.
- [19] Иванов А.В., Хилков С.А. Бета-аппроксимация двухчастичной функции распределения при описании цепочек фазовых осцилляторов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2017. — № 87. — С. 19. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2017-87>.
- [20] Зипунова Е.В., Иванов А.В. К вопросу о тестировании программных комплексов для моделирования магнетиков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2017. — № 98. — С. 30. —

- <https://doi.org/10.20948/prepr-2017-98>.
- [21] Зипунова Е.В., Иванов А.В. Две новые численные схемы для моделирования магнетиков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2017. — № 140. — С. 18. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2017-140>.
 - [22] Иванов А.В. Использование библиотеки aiwlib на примере численного моделирования стохастического резонанса // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2018. — № 89. — С. 30. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-89>.
 - [23] Модель анизотропии на скомпенсированном интерфейсе кубический ферромагнетик–антиферромагнетик со структурой Cu_3Au ($L1_2$) / А.В. Иванов, Е.В. Зипунова, А.А. Книжник, А.Ф. Попков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2018. — № 63. — С. 31. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-63>.
 - [24] Иванов А.В. Расчет статистической суммы и аппроксимация многочастичных функций распределения для магнетиков в модели Гейзенберга // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2019. — № 104. — С. 12. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2019-104>.
 - [25] Иванов А.В. Аппроксимация коэффициентов уравнения Ландау–Лифшица–Блоха при микромагнитном моделировании // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2019. — № 105. — С. 16. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2019-105>.
 - [26] Иванов А.В. Учет корреляций между ближайшими соседями при микромагнитном моделировании // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2019. — № 118. — С. 30. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2019-118>.
 - [27] Иванов А.В. Аппроксимация многочастичных функций распределения для ферромагнетиков с различными кристаллическими решетками // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2021. — № 11. — С. 22. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-11>.
 - [28] Иванов А.В. Уравнения корреляционной магнитодинамики для антиферро- и ферримагнетиков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2021. — № 106. — С. 13. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-106>.
 - [29] Иванов А.В., Хилков С.А. Приближение среднего поля и проблема множества реализаций в цепочке Боголюбова на примере ферромагнетика // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2022. — № 85. — С. 12. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2022-85>.
 - [30] Замятин С.В., Лукьянов А.В., Иванов А.В. О точности аппроксимации двухчастичной функции распределения для ферромагнетика // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2024. — № 20. — С. 31. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2024-20>.
 - [31] Иванов А.В., Лукьянов А. В., Замятин С.В. Простейшая аппроксимация интегральных коэффициентов в уравнениях корреляционной магнито-

- динамики для ферромагнетиков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2024. — № 47. — С. 22. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2024-47>.
- [32] Иванов А.В. Компенсация шума численной схемы при больших временных шагах за счет температурных флуктуаций в атомистической модели магнетика // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2024. — № 74. — С. 12. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2024-74>.
- [33] Иванов А.В. Расчет энтропии классического ферромагнетика Гейзенберга на основе аппроксимации двухчастичных функций распределения // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2024. — № 81. — С. 23. — <https://doi.org/10.20948/prepr-2024-81>.
- [34] Иванов А.В. Аппроксимация и валидация интегральных коэффициентов корреляционной магнитодинамики на основе расчетов «атом-в-атом» // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2025. — № 39. — С. 36. — https://keldysh.ru/papers/2025/prep2025_39.pdf.
- [35] Иванов А.В. Аппроксимация интегральных коэффициентов корреляционной магнитодинамики в неравновесной области фазового пространства на основе перемагничивания образца // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (КЗ, перечень ВАК). — 2025. — № 51. — С. 22. — https://keldysh.ru/papers/2025/prep2025_51.pdf.
- [36] Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «Macrospin» RU 2016611018 (перечень ВАК) / Б.В. Потапкин, А.В. Иванов, Зипунова Е.В., Книжник А.А. — 2016. — <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=39342592>.
- [37] Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «Atomagic» RU 2017614566 (перечень ВАК) / Б.В. Потапкин, И.А. Горячев, В.Д. Левченко et al. — 2017. — <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=39363427>.
- [38] Иванов А.В. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «StatASD» RU 2025616394 (перечень ВАК). — 2025. — <https://elibrary.ru/item.asp?id=80527215>.
- [39] Иванов А.В., Лукьянов А.В., Замятин С.В. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «CMDlib» RU 2025617563 (перечень ВАК). — 2025. — <https://elibrary.ru/item.asp?id=80653850>.

Иванов Антон Валерьевич

Многомасштабное математическое моделирование магнетиков

Автореф. дисс. на соискание учёной степени д-ра физ.-мат. наук

Подписано в печать 9.06.2026. Заказ № А-6

Формат 60×84/16. Усл. печ. л. 2,2. Тираж 80 экз.

ИПМ им.М.В.Келдыша РАН. 125047, Москва, Миусская пл., 4