

Поиск стационарного состояния системы магнитных моментов в дискретном пространстве направлений

Н.В. Семин¹, А.В. Иванов²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Данная работа посвящена поиску стационарных состояний системы магнитных моментов. Каждый магнитный момент задается вектором единичной длины, между магнитными моментами существует обменное взаимодействие. Обменный интеграл не равен нулю только для ближайших соседей атома.

Можно выделить две различных постановки - поиск стационарного состояния без учета температурных флуктуаций, основанный на минимизации энергии, и поиск стационарного состояния с учетом температурных флуктуаций, при котором стационарными являются лишь макропараметры системы.

В отличие от аналогичных работ мы будем рассматривать дискретное пространство направлений магнитных моментов, задаваемое узлами сетки на единичной сфере, полученной при рекурсивном разбиении додекаэдра [1, 2].

Начальное распределение магнитных моментов задается либо произвольно, либо вдоль определенного направления. Граничные условия могут быть свободными или периодическими.

Построены (и реализованы на языках C++ и Python) алгоритмы для минимизации энергии с учетом обменного взаимодействия, а также алгоритм, учитывающий температурные флуктуации на основе метода Монте-Карло. Основным преимуществом построенных алгоритмов является экономия памяти – для кодирования намагниченности одного атома с точностью до одного градуса достаточно двух байт вместо двенадцати байт при использовании традиционных трехмерных векторов, что позволяет эффективно решать задачи большого размера (до миллиарда магнитных моментов) на персональных компьютерах. Дискретное пространство направлений позволяет однозначно определять момент установления равновесия, а возможность последующего измельчения сетки обеспечивает нахождение решения с приемлемой точностью и ускоряет сходимость алгоритма.

При отсутствии температуры с учетом лишь обменного взаимодействия для цепочки атомов и кубиков небольших размеров со свободными граничными условиями система от неупорядоченных начальных условий релаксирует к однородной намагниченности.

Результаты расчетов с учетом температурных флуктуаций при отсутствии анизотропии и обменного взаимодействия с периодическими граничными условиями, учитывая внешнее поле, совпадают с известными аналитическими формулами (рис.1). При учете обменного взаимодействия наблюдается фазовый переход ферромагнетик-парамагнетик, результаты совпадают с результатами моделирования системы уравнений Ландау-Лифшица "атом-в-атом".

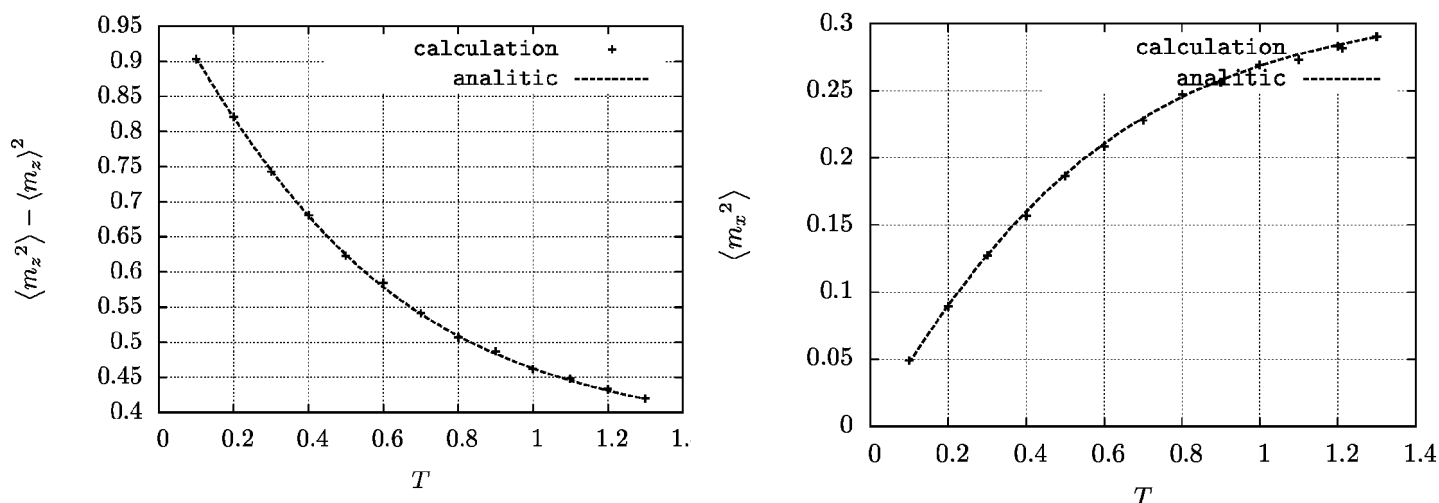


Рис. 1. Зависимости среднего значения квадрата x-компоненты и z-компоненты магнитного момента от температуры.

Была проведена серия расчётов без учёта температурных флуктуаций и внешнего поля, с различными видами анизотропии типа случайное поле (одноосное распределение, по кольцу, по трём осям и однородное распределение) для кубического образца размерами 400x400x400 периодов ОЦК решетки. Результаты расчетов качественно совпадают с предсказаниями теории [3].

Литература

1. *Иванов А. В.*, Кинетическое моделирование динамики магнетиков. //Математическое моделирование, Т.19 №10 (2007), 89-104
2. *Khilkov S. A., Ivanov A. V.*, Numerical simulation of the magnetic moment distribution evolution for superparamagnetic materials. Keldysh Institute Preprint, 2014, 001, 16 pp
3. *Берзин А.А., Морозов А.И.* O(n)-модели с дефектами типа "случайное локальное поле" и "случайная локальная анизотропия": дальний порядок возможен //Физика твердого тела, 2015, Т.57 №11, С. 2155.