

Численный метод решения уравнения Ландау–Лившица–Гильберта в приближении среднего поля

Н.А. Иванов¹, П.В. Харитонский^{1,2}, К.Г. Гареев^{1,2}

¹Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

²Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

Аннотация: в данной работе рассматривается численный метод решения уравнения Ландау–Лившица–Гильберта (ЛЛГ) для ансамбля магнитных наночастиц в приближении среднего поля. Для интегрирования уравнения ЛЛГ применён классический метод Рунге–Кутты четвертого порядка. Выполнено численное моделирование ансамбля монодисперсных одноосных наночастиц под действием постоянного внешнего поля. Показано, что предложенный подход правильно воспроизводит динамику намагниченности: компоненты в плоскости, перпендикулярной полю затухают, а продольная компонента релаксирует к стационарному значению. Результаты качественно согласуются с данными моделирования в специализированном симуляторе Vinamax.

Ключевые слова: уравнение Ландау–Лившица–Гильберта; макроспиновая модель; приближение среднего поля; диполь-дипольное взаимодействие; метод Рунге–Кутты; динамика намагниченности

1. Введение

Магнитные наноматериалы и ансамбли наночастиц привлекают значительное внимание благодаря перспективам их использования в спинтронике, запоминающих устройствах и биомедицине. Динамика намагниченности таких систем описывается уравнением Ландау–Лившица–Гильберта – фундаментальным уравнением микромагнетизма, учитывающим прецессию магнитного момента во внешнем поле и диссипативное затухание Гильберта. Для малых однодоменных частиц справедливо макроспиновое приближение, при котором каждая частица рассматривается как единый магнитный момент (вектор намагниченности) с постоянной величиной намагниченности насыщения [1]. В этом случае уравнение ЛЛГ применяется к каждой частице, описывая изменение её намагниченности под влиянием эффективного поля. Эффективное поле включает внешнее магнитное поле, магнитную анизотропию частицы и межчастичное (диполь-дипольное) взаимодействие. Каждая из этих составляющих может существенно влиять на эволюцию системы: например, диполь-дипольные взаимодействия в плотных ансамблях приводят к коллективным эффектам и усложняют динамику намагниченности [2].

Прямое численное моделирование системы из N взаимодействующих частиц требует учёта сил взаимодействия «каждой с каждой», что масштабирует вычислительную сложность задачи как $O(N^2)$ [3]. При большом числе частиц прямой расчёт дипольных полей становится вычислительно затратным. Существуют подходы для оптимизации этой задачи, включая методы укрупнения сетки, быстрые алгоритмы суммирования полей и приближение сплошной среды. Одним из эффективных упрощений является метод среднего поля, в котором влияние всех остальных частиц на данную аппроксимируется средним (эффективным) полем, пропорциональным средней намагниченности системы [4]. Это открывает возможность существенно снизить вычислительные затраты при моделировании динамики намагниченности большого числа наночастиц, хотя и за счёт некоторого упрощения реальных

межчастичных взаимодействий.

В данной работе предлагается численный метод, сочетающий решение уравнения ЛЛГ с приближением среднего поля для диполь-дипольных взаимодействий, реализованный посредством явного алгоритма Рунге–Кутты 4-го порядка. Рассматривается монодисперсный ансамбль неподвижных суперпарамагнитных частиц с одноосной магнитной анизотропией, хаотически ориентированной в пространстве.

2. Уравнение Ландау–Лившица–Гильберта

Для малых однодоменных частиц, где намагниченность можно считать пространственно-однородной, применяется макроспиновое приближение. Динамика намагниченности для i -ой частицы описывается уравнением ЛЛГ, которое с учетом нормировки вектора намагниченности $\mathbf{m} = \mathbf{M}/I_s$ (I_s – спонтанная намагниченность) имеет вид [2]:

$$\frac{\partial \mathbf{m}^{(i)}}{\partial t} = -\gamma \mathbf{m}^{(i)} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}^{(i)} + \alpha \mathbf{m}^{(i)} \times \frac{\partial \mathbf{m}^{(i)}}{\partial t}, \quad (1)$$

где γ – гиромагнитное отношение, α – безразмерный параметр затухания Гильберта, $\mathbf{H}_{\text{эфф}}$ – эффективное поле, действующее на намагниченность i -ой частицы. Эффективное поле определяется как:

$$\mathbf{H}_{\text{eff}}^{(i)} = -\frac{1}{I_s} \frac{\partial U^{(i)}}{\partial \mathbf{m}^{(i)}}, \quad (2)$$

где $U^{(i)}$ – плотность энергии i -ой частицы.

Полная плотность энергии i -ой частицы может быть записана как:

$$U^{(i)} = U_{\text{ext}}^{(i)} + U_{\text{anis}}^{(i)} + U_{\text{d}}^{(i)} + \dots, \quad (3)$$

где U_{ext} – плотность энергии взаимодействия намагниченности с внешним полем; U_{anis} – плотность энергии магнитной анизотропии; U_{d} – плотность энергии диполь-дипольного взаимодействия. В рамках данной работы ограничимся только взаимодействиями в (3).

Уравнение (1) для i -ой частицы в декартовой системе координат записывается как:

$$\begin{cases} \frac{\partial m_x}{\partial t} = -\frac{\gamma}{1+\alpha^2} [(m_y + \alpha m_x m_z) H_{ez} - (m_z - \alpha m_y m_x) H_{ey} - \alpha(m_y^2 + m_z^2) H_{ex}] \\ \frac{\partial m_y}{\partial t} = -\frac{\gamma}{1+\alpha^2} [(m_z + \alpha m_y m_x) H_{ex} - (m_x - \alpha m_z m_y) H_{ez} - \alpha(m_z^2 + m_x^2) H_{ey}] \\ \frac{\partial m_z}{\partial t} = -\frac{\gamma}{1+\alpha^2} [(m_x + \alpha m_z m_y) H_{ey} - (m_y - \alpha m_x m_z) H_{ex} - \alpha(m_x^2 + m_y^2) H_{ez}] \end{cases} \quad (4)$$

В данной работе магнетик рассматривается как ансамбль монодисперсных суперпарамагнитных дипольных твердых сфер с одноосной анизотропией, обездвиженных в немагнитной матрице. Внешнее магнитное поле $\mathbf{H}_{\text{ext}}$ приложено вдоль оси Oz . Эскиз модели магнетика показан на рисунке 1.

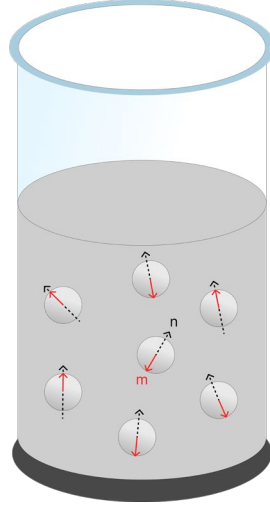


Рисунок 1. Эскиз системы случайно распределенных суперпарамагнитных частиц

В рамках данной модели магнетика эффективное поле для i -ой частицы в декартовой системе координат определялось следующим образом:

Поле анизотропии:

$$H_{anis,x}^{(i)} = \frac{2 \cdot K}{I_s} (m_x^{(i)} \cdot n_x^{(i)} + m_y^{(i)} \cdot n_y^{(i)} + m_z^{(i)} \cdot n_z^{(i)}) n_x^i, \quad (5)$$

$$H_{anis,y}^{(i)} = \frac{2 \cdot K}{I_s} (m_x^{(i)} \cdot n_x^{(i)} + m_y^{(i)} \cdot n_y^{(i)} + m_z^{(i)} \cdot n_z^{(i)}) n_y^i, \quad (6)$$

$$H_{anis,z}^{(i)} = \frac{2 \cdot K}{I_s} (m_x^{(i)} \cdot n_x^{(i)} + m_y^{(i)} \cdot n_y^{(i)} + m_z^{(i)} \cdot n_z^{(i)}) n_z^i, \quad (7)$$

где K – константа анизотропии, n_x , n_y , n_z – компоненты единичного вектора направления одноосной анизотропии.

Численное моделирование диполь-дипольных взаимодействий в системах с большим числом частиц требует значительных вычислительных ресурсов. Основная сложность связана с расчетом локального магнитного поля для всех N магнитных моментов, который требует при прямом методе расчета выполнения $O(N^2)$ операций, так как необходимо учитывать взаимодействие «всех со всеми» [3]. В данной работе предлагается использовать метод среднего поля, разработанный в [5] для описания диполь-дипольных взаимодействий:

$$H_{d,z} = -\frac{8\pi}{3} c I_s \frac{\Delta N_z}{N} \left(1 - \frac{3}{2} \cos \theta_0\right), \quad (8)$$

$$H_{d,x,z} = \frac{4\pi}{3} c I_s \frac{\Delta N_{x,y}}{N} \left(1 - \frac{3}{2} \cos \theta_0\right), \quad (9)$$

где c – объемная концентрация; $\Delta N/N_{x,y,z}$ – эффективная намагниченность вдоль Ox , Oy , Oz ; θ_0 – максимальное значение угла, описанного в [5]. Использование данного метода позволяет сократить сложность вычислений до $O(N)$.

Для интегрирования полученной системы уравнений ($3N$ обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка для N частиц) использован классический явный метод Рунге–Кутты 4-го порядка [6] с шагом по времени 10^{-10} с, удовлетворяющий критерию устойчивости. После каждого шага интегрирования проводилась перенормировка вектора $\mathbf{m}_i$, что гарантирует соблюдение условия $|\mathbf{m}_i| = 1$.

В численных экспериментах использовались параметры, соответствующие магнетику из [7] со следующими характеристиками: $I_s = 480$ эме/см³; $K = 135000$ эрг/см³; $c = 0,3\%$; $\cos \theta_0 = 0,707$; $\alpha = 0,1$. Легкие оси магнитной анизотропии всех частиц были соориентированы случайным образом. В качестве начального состояния бралась ориентация намагниченности частиц вдоль легкой оси намагниченности, после чего решалась система уравнений ЛЛГ до достижения

стационарного состояния. Результат численного моделирование динамики намагниченности i -ой частицы в ансамбле суперпарамагнитных частиц представлен на рисунке 2.

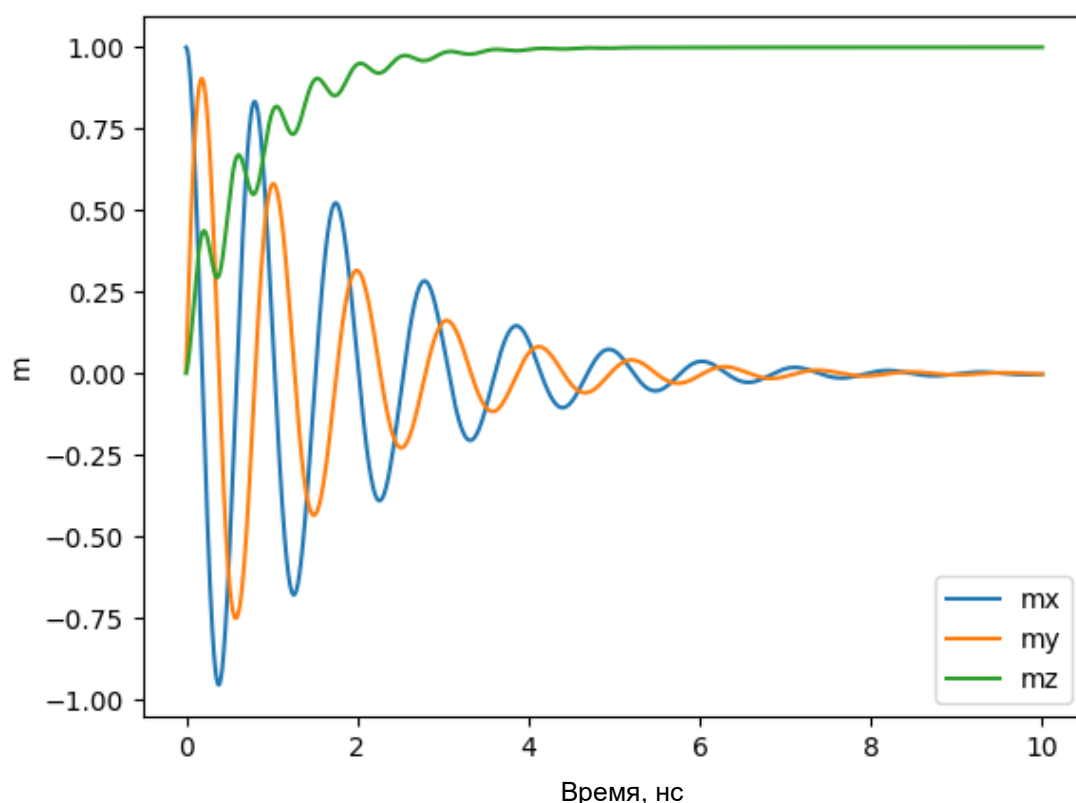


Рисунок 2. Зависимость компонент нормированного вектора намагниченности i -ой частиц от времени при направлении оси анизотропии $n(1,0,0)$

Полученные результаты (рис. 2) демонстрируют релаксацию m_z к равновесному состоянию и постепенное затухание m_x и m_y . Такое поведение иллюстрирует механизм затухания Гильберта и говорит о корректной реализации анизотропного и дипольного полей в приближении среднего поля. Для верификации модели результаты были сопоставлены с [8], макроспиновым симулятором Vinamax, в котором учитываются аналогичные эффекты. Результаты показали качественное соответствие, что подтверждает физическую достоверность и применимость предлагаемого метода.

3. Заключение

В работе разработан и исследован численный метод решения уравнения Ландау–Лившица–Гильберта для системы взаимодействующих магнитных наночастиц в приближении среднего поля. Предложенный подход основан на макроспиновой модели, в которой динамика каждой частицы описывается уравнением ЛЛГ, а дипольное взаимодействие между частицами заменено эффективным полем, пропорциональным средней намагниченности ансамбля. Реализация метода с использованием явного схемы Рунге–Кутты 4-го порядка позволила проследить эволюцию намагниченности во времени с соблюдением устойчивости расчёта (шаг времени 10^{-10} с). Численные эксперименты для разреженного ансамбля ($c = 0,3$ %) одноосных наночастиц показали, что магнитные моменты частиц со случайной ориентацией анизотропии постепенно переориентируются вдоль внешнего поля за счёт механизма затухания. Сравнение полученных временных зависимостей с результатами моделирования в программе Vinamax, учитывающей аналогичные

эффекты, продемонстрировало их качественное совпадение. Это подтверждает корректность реализованных приближений для анизотропного и дипольного полей и потенциальную пригодность метода среднего поля для описания коллективной динамики в разреженных ансамблях наночастиц.

Список литературы

1. Coey J. M. D. *Magnetism and Magnetic Materials*. – Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
2. Шавров В. Г., Щеглов В. И. Ферромагнитный резонанс в условиях ориентационного перехода. – М.: Физматлит, 2018.
3. Изотов А. В., Беляев Б. А., Валиханов М. М., Поленга С. В., Стефанюк А. В. Алгоритм расчета равновесного состояния ферромагнетика на основе метода множителей лагранжа.
4. Draaisma H. J. G., de Jonge W. J. M. Surface and volume anisotropy from dipole-dipole interactions in ultrathin ferromagnetic films // *Journal of Applied Physics*. – 1988. – Т. 64. – № 7. – С. 3610-3613.
5. Kharitonskii P. V., Setrov E. A., Ralin A. Yu. Modeling of hysteresis characteristics of a dilute magnetic with dipole-dipole interaction of particles // *Materials Physics and Mechanics*. – 2024. – Vol. 52. – Iss. 2. – P. 142-150.
6. Горелов Ю. Н., Курганская Л. В. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений (метод Рунге-Кутты): учебное пособие. – Самара: Издательство Самарского университета, 2023.
7. Kharitonskii P. et al. Magnetic granulometry, frequency-dependent susceptibility and magnetic states of particles of magnetite ore from the Kovdor deposit // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2022. – Vol. 553. – Article 169279.
8. Leliaert J. et al. Vinamax: a macrospin simulation tool for magnetic nanoparticles // *Medical & Biological Engineering & Computing*. – 2015. – Vol. 53. – P. 309-317.