**Вычисление интегральных коэффициентов уравнений корреляционной магнитодинамики для ферромагнетика**

***Лукьянов А.В.***

*Студент.*

*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,   
физический факультет, Москва, Россия  
E–mail*: *andrey.luk10@gmail.com*

Модель классического магнетика Гейзенберга представляет собой систему магнитных моментов фиксированной длины, расположенных в узлах кристаллической решетки. Динамика модели описывается стохастическими дифференциальными уравнениями Ландау–Лифшица на каждый магнитный момент [1]. С точки зрения как инженерных потребностей, так и фундаментальной науки, интересен переход от атомистической модели к модели сплошной среды. Традиционно моделью сплошной среды считается уравнение Ландау–Лифшица–Блоха (УЛЛБ), вывод которого основывается на приближении среднего поля для двухчастичной функции распределения [2]. Такое приближение приводит к ряду проблем, таких как сдвиг критической температуры, неверные значения энергии системы и заниженные времени релаксации. Для решение этих проблем была построена аппроксимация двухчастичной функции распределения, учитывающая корреляции между ближайшими соседями [3]. Такая аппроксимация приводит к системе уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD) [4], состоящей из модифицированного УЛЛБ и уравнения на эволюцию парных корреляций.

Главной сложностью в CMD является расчет интегральных коэффициентов [5], – старших моментов двухчастичной функции распределения

и трехчастичной функции распределения

.

Эти функции описывают систему двух или трех магнитных моментов классического магнетика Гейзенберг. Таким образом расчет интегральных коэффициентов CMD в первую очередь связан с расчетом статистической суммы классического магнетика Гейзенберга из двух или трех магнитных моментов.

Поскольку в CMD заданы первые моменты, для расчета старших моментов необходимо восстановить коэффициенты функций распределения, решая обратную задачу. Для этого необходимо с требуемой точностью знать значение статистической суммы. Подавляющее большинство работ, рассчитывающих статистическую сумму, концентрируется на термодинамическом пределе, что не подходит для расчета интегральных коэффициентов CMD.

Новые аналитические выражения для статистической суммы для двух- и трехчастичных функций распределения классического ферромагнетика Гейзенберга могут быть получены на основе интеграл Доусона

и введенном аналоге интеграла Доусона

Использование данных функции позволяет не только получать аналитические выражения для моментов и связи между этими моментами, но и дает возможность эффективно с высокой точностью решать обратную задачу: нахождение коэффициентов аппроксимации функций распределения в зависимости от заданных значений первых моментов.

Для интеграла Доусона существует численный метод [6,7], позволяющий рассчитывать значение двухчастичной статистической суммы со сложностью при любых значениях параметров. На основе этого предложен новый численный метод для расчета , который позволяет рассчитывать значение статистической суммы трехчастичной функции распределения со сложностью при любых значениях параметров.

Полученные аналитические выражения для статистических сумм совместно с предложенными численными методами дает возможность не только эффективно находить все интегральные коэффициенты CMD с требуемой точностью, но также и исследовать связи между ними. В частности, это дает лучшее понимание, насколько точно являются исходные аппроксимации функций распределения. Также можно получить выражения для моментов двухчастичной функции распределения в приближении среднего поля и в парамагнитной фазе как пределы от общего случая.

Возможность рассчитать статистическую сумму при любых значениях параметров позволяет исследовать низкотемпературный предел для интегральных коэффициентов CMD и, как следствие, позволяет найти низкотемпературное решение CMD.

Большинство аналитических расчетов проводилось с помощью системы компьютерной алгебры sympy версии 1.13.3 на языке программирования python версии 3.11.2. Код можно найти в репозитории на github [8].

**Литература**

1. Atomistic spin dynamics: foundations and applications / Olle Eriksson, Anders Bergman, Lars Bergqvist, Johan Hellsvik. — Oxford university press, 2017.
2. Garanin D.A. Fokker–Planck and Landau–Lifshitz–Bloch equations for classical ferromagnets // Phys. Rev. B. — 1997. — Vol. 55. — P. 3050.
3. Замятин С.В., Лукьянов А.В., Иванов А.В. О точности аппроксимации двухчастичной функции распределения для ферромагнетика // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2024. — № 20. — С. 31.
4. Иванов А.В., Зипунова Е.В., Хилков С.А. Уравнения корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков // Письма в ЖЭТФ. — 2022. — Т. 115, № 3. — С. 176–183.
5. Иванов А.В., Лукьянов А. В., Замятин С.В. Простейшая аппроксимация интегральных коэффициентов в уравнениях корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2024. — № 47. — С. 2.
6. Rybicki George B. Dawson’s integral and the sampling theorem // Computers in Physics. — 1989. — Vol. 3, no. 2. — P. 85–87.
7. Cody WJ, Paciorek Kathleen A, Thacher Henry C. Chebyshev approximations for Dawson’s integral // Mathematics of Computation. — 1970. — Vol. 24, no. 109. — P. 171–178.
8. Иванов А.В., Лукьянов А.В. Библиотека CMDlib // URL: https://github.com/aivn/CMDlib.