

# Численное моделирование свойств плотных кластеров магнитных наночастиц

## I. Введение

Одна из нерешенных задач физики ансамблей магнитных наночастиц – это учет магнито-дипольного взаимодействия наночастиц в плотных ансамблях. Ансамбли магнитных частиц являются сложной физической системой и могут быть охарактеризованы целым набором различных параметров, таких как

- 1) Значение феноменологических магнитных параметров магнитного материала частиц (намагниченность насыщения  $M_s$ , константа магнитной анизотропии  $K$ , константа магнитного затухания  $\kappa$ , пр.)
- 2) Распределение наночастиц ансамбля по размерам и форме
- 3) Ориентация легких осей анизотропии наночастиц (ориентированный, либо неориентированный ансамбль)
- 4) Распределение центров наночастиц в пространстве (среднее расстояние между частицами, наличие корреляции в расположении частиц – решетка, либо случайные расположенные центры)
- 4) Наличие или отсутствие обменного взаимодействия между частицами ансамбля.
- 5) Среда, в которой находятся частицы – вязкая жидкость, либо твердая матрица, в которой частицы зафиксированы и не могут поворачиваться и двигаться, как целое.

К настоящему моменту достаточно подробно изучены ансамбли невзаимодействующих однодоменных наночастиц с различным типом магнитной анизотропии (одноосная, кубическая, комбинированная анизотропия). Кроме того, изучено влияние температурных флуктуаций магнитных моментов наночастиц на свойства ансамбля невзаимодействующих частиц. Большая часть теоретических исследований касается поведения ансамбля наночастиц, заторможенных в твердой матрице, либо в среде с большой вязкостью, где вращение наночастицы как целого невозможно. Но часть теоретических результатов получена также для ансамблей наночастиц, распределенных в вязкой жидкости. В этих работах проводится учет конечной вязкости среды и наличия тепловых флуктуаций магнитных моментов наночастиц достаточно малых размеров. Свойства таких ансамблей важны для развития био- медицинских исследований.

Заметим, что в реальном эксперименте исследуются, как правило, достаточно плотные ансамбли частиц, на свойства которых существенное влияние оказывает магнито- дипольное взаимодействие между частицами. Исследованию влияния магнито-дипольного взаимодействия на свойства ансамблей магнитных наночастиц посвящена обширная журнальная литература, но эта проблема все еще далека от решения. Во-первых, вычисления затруднены далекодействующим характером магнито- дипольного взаимодействия. Необходимо принимать во внимание парное взаимодействие наночастиц, расположенных на больших расстояниях друг от друга. Если в ансамбле имеется  $N_p$  частиц, то тем самым имеется  $N_p^2$  парных взаимодействий частиц, так что сложность вычислений быстро возрастает с ростом числа частиц в ансамбле. Во-вторых, нужно принимать во внимание граничные условия. Наконец, в силу отмеченного выше многообразия различных типов ансамблей наночастиц необходимо исследовать поведение ансамбля наночастиц в твердой матрице и вязкой жидкости, при умеренных и высоких температурах, под действием квазистатического и низко-частотного внешнего магнитного поля. Все эти задачи требуют, как правило, отдельного рассмотрения.

В данной работе с помощью численного моделирования изучаются свойства ансамбля магнитных наночастиц, заторможенных в твердой матрице, при следующих предположениях: 1) частицы ансамбля предполагаются квазисферическими, однодоменными, фиксированного радиуса  $R$ ; 2) температура ансамбля предполагается низкой (комнатной), так что можно тепловыми флуктуациями магнитных моментов частиц 3) предполагается далее, что частицы ансамбля собраны в квази- сферические кластеры с характерным размером  $R_{cl}$ . Каждый кластер содержит приблизительно одинаковое число наночастиц  $N_p$ . Кластеры наночастиц предполагаются редкими, взаимодействием кластеров мы в данной работе пренебрегаем.

Несмотря на принятые ограничения, в задаче имеется 5 независимых параметров. Именно, магнитные параметры частиц, то есть намагниченность насыщения  $M_s$ , и значение константы одноосной магнитной анизотропии  $K$ , и геометрические параметры - радиусы  $R$  и  $R_{cl}$ , и число частиц в кластере  $N_p$ . Ансамбль наночастиц в кластере предполагается полностью случайным, так что легкие оси анизотропии частиц ориентированы случайно. Центры наночастиц в кластере также занимают случайные положения, но при этом частицы не касаются друг друга, так что обменное взаимодействие между соседними наночастицами отсутствует. В предельном случае магнито- мягких наночастиц,  $K/M_s^2 \ll 1$ , для сравнения со случайными кластерами, мы рассматриваем также кластеры наночастиц, центры которых расположены в узлах простой кубической решетки.

В данной работе мы ставим задачу описания квазистатических петель гистерезиса ансамбля плотных кластеров взаимодействующих наночастиц в зависимости от перечисленных выше магнитных и геометрических параметров. Петли гистерезиса ансамбля кластеров усредняются по достаточному количеству случайных реализаций кластеров ( $\sim 10 - 20$ ). При этом полное число частиц в ансамбле достигает нескольких тысяч. Этого оказывается достаточным для получения статистически достоверных результатов.

Основная задача этого исследования – выяснить, от каких безразмерных комбинаций исходных параметров задачи ( $M_s$ ,  $K$ ,  $R$ ,  $R_{cl}$ , и  $N_p$ ) зависят на самом деле свойства кластеров наночастиц. На основе физических соображений высказывается гипотеза, что магнитные свойства системы кластеров определяются, на самом деле, только двумя безразмерными параметрами: 1) безразмерным отношением  $K/M_s^2$ , которое определяет соотношение анизотропных и магнито- дипольных взаимодействий, и

геометрического параметра  $\eta = \frac{VN_p}{R_{cl}^3} \sim \frac{VN_p}{V_{cl}}$ , ( $V_{cl}$  есть объем кластера), который характеризует степень заполнения объема кластера наночастицами. Для проверки этой гипотезы нужно провести достаточно представительное число численных расчетов кластеров с различными значениями исходных параметров ( $M_s$ ,  $K$ ,  $R$ ,  $R_{cl}$ ,  $N_p$ ).

## II. Basic equations.

Dynamics of the unit magnetization vector  $\alpha_i$  of the  $i$ -th nanoparticle of the cluster is described by the LLG equation

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} = -\gamma [\alpha_i, H_{ef,i}] + \kappa \left[ \alpha_i, \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} \right], \quad i = 1, 2 \dots, N_p, \quad (1)$$

where  $\kappa$  is the phenomenological damping constant and  $\gamma$  is the gyromagnetic ratio. The effective magnetic field acting on a separate nanoparticle can be calculated as a derivative of the total cluster energy

$$H_{ef,i} = -\frac{\partial W}{V_i M_s \partial \alpha_i} \quad (2)$$

Here  $V_i$  is the volume of the  $i$ -th nanoparticle. The total magnetic energy of the cluster  $W = W_a + W_z + W_m$  is a sum of the magneto-crystalline anisotropy energy  $W_a$ , Zeeman energy  $W_z$  of the particles in the external uniform magnetic field  $H_0$ , and the energy of mutual magneto-dipole interaction of the particles  $W_m$ .

We consider the particles of nearly spherical shape with uniaxial type of the magneto-crystalline anisotropy

$$W_a = K \sum_{i=1}^{N_p} V_i (1 - (\alpha_i e_i)^2) \quad (3)$$

where  $e_i$  is the orientation of the easy anisotropy axis of  $i$ -th particle of the cluster. Zeeman energy  $W_z$  of the cluster in the external uniform magnetic field is given by

$$W_z = -\sum_{i=1}^{N_p} V_i M_s (\alpha_i H_0) \quad (4)$$

Next, for spherical uniformly magnetized nanoparticles the magnetostatic energy of the cluster can be represented as the energy of the point interacting dipoles. Let  $r_i$  be the coordinates of the particle centers within the cluster. Then the magneto-dipole interacting energy reads

$$W_m = \frac{M_s^2}{2} \sum_{i \neq j} V_i V_j \frac{\alpha_i \alpha_j - 3(\alpha_i n_{ij})(\alpha_j n_{ij})}{|r_i - r_j|^3} \quad (5)$$

where  $n_{ij}$  is the unit vector along the line connecting the centers of  $i$ -th and  $j$ -th particles, respectively.

We start the calculation of a quasistatic hysteresis loop of a cluster at a sufficiently high value of the external uniform magnetic field, typically at  $H_0 = 1000 - 1500$  Oe. In the initial state the unit magnetization vectors of all particles are set in the direction parallel to the applied magnetic field. At the next step the magnetic field decreases by a small value,  $dH_0 = 1 - 2$  Oe, and evolution of the initial magnetization state is calculated according to Eqs. (1) – (5). For a cluster consisting of several tens of nanoparticles it is necessary to make usually  $10^4 - 10^5$  iterations with a sufficiently small time increment to find stable magnetization state of a cluster at a given value of the external magnetic field. In accordance with the Eq. (1), the final magnetization state is assumed to be stable under the condition

$$\max_{(1 \leq i \leq N_p)} |\alpha_i, H_{ef,i}| < 10^{-8} \quad (6)$$

**Замечание:** в нашей задаче мы для простоты будем считать, что все частицы кластера имеют одинаковый объем  $V$

Таким образом, эффективное магнитное поле, действующее на отдельную частицу, есть

$$H_{ef,i} = \frac{2K}{M_s} (\alpha_i e_i) e_i + H_0 + M_s V \sum_{j \neq i} \frac{\alpha_j - 3(\alpha_j n_{ij}) n_{ij}}{|r_i - r_j|^3} \quad (7)$$

Среднее значение эффективного поля, по порядку величины, есть

$$\langle H_{ef} \rangle = H_a \left\langle \frac{\partial w_a}{\partial \alpha_i} \right\rangle + H_0 + M_s \eta \left\langle \frac{\partial w_m}{\partial \alpha_i} \right\rangle$$

где  $\eta \leq 1$  есть введенный выше геометрический параметр, характеризующий степень заполнения кластера наночастицами, а  $H_a = 2K/M_s$  есть так называемое поле анизотропии частицы.

Если нормировать эффективное магнитное поле на значение поля анизотропии, то получим

$$\frac{\langle H_{ef} \rangle}{H_a} = \left\langle \frac{\partial w_a}{\partial \alpha} \right\rangle + \frac{H_0}{H_a} + \frac{M_s \eta}{H_a} \left\langle \frac{\partial w_m}{\partial \alpha} \right\rangle \approx \left\langle \frac{\partial w_a}{\partial \alpha} \right\rangle + \frac{H_0}{H_a},$$

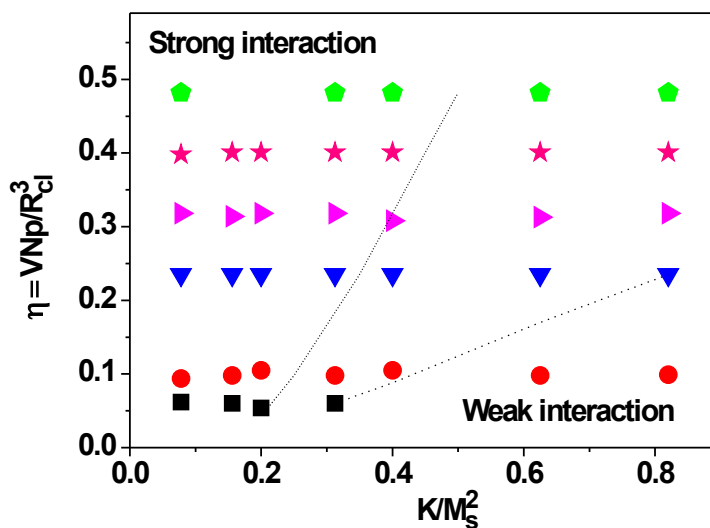
Влияние магнито-дипольного взаимодействия частиц зависит от произведения безразмерного отношения  $M_s/H_a = M_s^2/2K$  и геометрического параметра  $\eta < 1$ . Взаимодействие слабо в пределе  $M_s \eta / H_a \ll 1$ , при этом все случайные ансамбли описываются универсальной петлей гистерезиса Стонера – Вольфарта. Петля гистерезиса Стонера – Вольфарта соответствует ансамблю частиц без взаимодействия. Единственный вопрос здесь, насколько петли отличаются от предельной петли Стонера – Вольфарта для разных значений параметра  $M_s \eta / H_a \ll 1$ .

Однако, в обратном пределе сильного взаимодействия,  $M_s \eta / H_a > 1$ , разумно нормировать эффективное магнитное поле на намагниченность насыщения частиц, которая тоже имеет размерность магнитного поля. Тогда получим

$$\frac{\langle H_{ef} \rangle}{M_s} = \frac{H_a}{M_s} \left\langle \frac{\partial w_a}{\partial \alpha} \right\rangle + \frac{H_0}{M_s} + \eta \left\langle \frac{\partial w_m}{\partial \alpha} \right\rangle \approx \frac{H_0}{M_s} + \eta \left\langle \frac{\partial w_m}{\partial \alpha} \right\rangle$$

Следовательно, можно высказать гипотезу, что в пределе сильного взаимодействия петли гистерезиса ансамбля зависят только от параметра  $\eta$ .

Но это нужно доказать, проведя достоверное количество расчетов. То, что предварительно сосчитано на сегодня, имеет вид



Точки показывают значения безразмерных параметров, при которых часть расчетов проведена.

## Дополнительная информация по уравнению Ландау-Лифшица

### 2. Описание свойств ансамблей магнитных наночастиц на основе численного решения Ландау-Лифшица.

#### 2.1 Функционал энергии магнитной наночастицы

Рассмотрим однодоменную сферическую наночастицу, состояние которой характеризуется полным магнитным моментом  $\mathbf{M}$ . Так называемое обменное взаимодействие, которое имеет квантово-механическую природу, выстраивает спины электронов в частице параллельно друг другу. В результате, сильное обменное взаимодействие фиксирует модуль вектора  $\mathbf{M}$  [8]. Это обстоятельство можно учесть, записав магнитный момент частицы с помощью единичного вектора намагниченности  $\boldsymbol{\alpha}$

$$\mathbf{M} = M_s V \boldsymbol{\alpha}, \quad (2.1)$$

где  $V$  есть объем частицы,  $M_s$  - намагниченность насыщения единицы объема частицы. Поскольку вектор  $\boldsymbol{\alpha}$  единичный, то он нормирован условием

$$|\boldsymbol{\alpha}| = \sqrt{\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2} = 1. \quad (2.2)$$

Направление же вектора  $\mathbf{M}$  (а значит и вектора  $\boldsymbol{\alpha}$ ) обменным взаимодействием не фиксируется, и в отсутствие прочих взаимодействий может быть произвольным. В действительности, в природе существуют более слабые, релятивистские взаимодействия, которые, в свою очередь, определяют направление вектора  $\boldsymbol{\alpha}$  в пространстве. Один из этих энергетических вкладов называют энергией магнитной анизотропии. Этот энергетический вклад оказывается наиболее важным для однодоменных магнитных наночастиц сферической формы, рассматриваемых далее.

Для частицы объема  $V$  с одноосной магнитной анизотропией плотность энергии магнитной анизотропии можно задать в виде

$$w_a = \frac{W_a}{V} = K_1 [1 - (\boldsymbol{\alpha} \mathbf{n})^2] \quad (2.3)$$

Здесь  $K_1$  есть константа одноосной магнитной анизотропии, а единичный вектор  $\mathbf{n}$  показывает направление легкой оси анизотропии частицы. Из выражения (2.3) легко заключить, что плотность энергии магнитной анизотропии имеет минимум,  $w_a = 0$ , если единичный вектор намагниченности направлен параллельно, либо противоположно вектору  $\mathbf{n}$ , что и объясняет смысл понятия «легкая ось» анизотропии. Действительно, в отсутствие внешнего магнитного поля, за счет влияния магнитной анизотропии вектор  $\boldsymbol{\alpha}$  самопроизвольно ориентируется параллельно, или антипараллельно вектору  $\mathbf{n}$ , даже если он изначально был отклонен от «легкого» направления. Таким образом, однодоменная магнитная наночастица является маленьким постоянным магнитом, направление намагничивания которого параллельно легкой оси анизотропии. В свою очередь, направление легкой оси анизотропии определяется ориентацией в пространстве кристаллографических осей частицы.

Если частица находится в однородном внешнем магнитном поле  $\mathbf{H}_0$ , то кроме энергии магнитной анизотропии, необходимо учитывать энергию частицы во внешнем магнитном поле, которая называется энергией Зеемана. Плотность энергии Зеемана есть

$$w_Z = \frac{W_Z}{V} = -M_s H_0 \alpha h = -M_s H_0 (\alpha_x h_x + \alpha_y h_y + \alpha_z h_z), \quad (2.4)$$

где мы ввели единичный вектор  $\mathbf{h}$ , параллельный направлению внешнего магнитного поля.

Таким образом, полная удельная энергия одноосной магнитной наночастицы во внешнем магнитном поле определяется суммой двух вкладов

$$w = w_a + w_Z = K_1 [1 - (\alpha n)^2] - M_s H_0 \alpha h. \quad (2.5)$$

Устойчивые направления вектора  $\alpha$  в пространстве соответствуют минимумам полной энергии (2.5) как функции вектора  $\alpha$ .

Заметим, что полную энергию частицы (2.5) можно записать в различной форме. Из трех векторов  $(\alpha, \mathbf{n}, \mathbf{h})$  направление одного вектора можно выбрать произвольно. Направим вектор  $\mathbf{n}$  вдоль оси  $z$ , полагая  $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ . Тогда уравнение (2.5) принимает вид

$$w = w_a + w_Z = K_1 (\alpha_x^2 + \alpha_y^2) - M_s H_0 (\alpha_x h_x + \alpha_y h_y + \alpha_z h_z). \quad (2.6)$$

Введем сферическую систему координат  $(r, \theta, \varphi)$  с полярной осью вдоль оси  $z$ , полагая

$$\alpha_x = \sin \theta \cos \varphi, \quad \alpha_y = \sin \theta \sin \varphi, \quad \alpha_z = \cos \theta,$$

$$\mathbf{h} = (h_x, 0, h_z) = (\sin \theta_H, 0, \cos \theta_H),$$

где  $\theta_H$  есть угол между векторами  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{h}$  и предполагается, что внешнее магнитное поле лежит в плоскости  $XZ$ . Тогда скалярное произведение

$$\alpha h = \alpha_x h_x + \alpha_z h_z = \sin \theta \cos \varphi \sin \theta_H + \cos \theta \cos \theta_H \rightarrow \cos(\theta - \theta_H),$$

поскольку можно показать, что равновесное направление вектора  $\alpha$  также будет лежать в плоскости  $XZ$ , так что азимутальный угол  $\varphi = 0$ . В результате, приведенная полная энергия (2.6) является лишь функцией угла  $\theta$ , что упрощает дальнейшее исследование

$$\mathcal{W} = \frac{w}{K_1} = \sin^2 \theta - 2h_0 \cos(\theta - \theta_H) \quad (2.7)$$

В уравнении (2.7) мы обезразмерили внешнее магнитное поле на так называемое поле анизотропии,  $h_0 = H_0/H_a$ , где  $H_a = 2K_1/M_s$ .

Экстремумы функции (2.7) находятся из необходимого условия

$$\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \theta} = 0; \quad \text{или} \quad \sin \theta \cos \theta + h_0 \sin(\theta - \theta_H) = 0 \quad (2.8)$$

Можно показать, что в общем случае это уравнение имеет три решения, два минимума  $\theta_{\min}^{(1)}$ ,  $\theta_{\min}^{(2)}$  и один максимум,  $\theta_{\max}$ . Это можно доказать, исследуя знак второй производной функции (2.7)

$$\frac{\partial^2 \tilde{w}}{\partial \theta^2} = [\sin(2\theta) + 2h_0 \sin(\theta - \theta_H)]' = 2 \cos(2\theta) + 2h_0 \cos(\theta - \theta_H) \quad (2.9)$$

Важно, что при каждом фиксированном значении угла  $\theta_H$  в интервале  $0 < \theta_H < \pi/2$  существует критическое значение приведенного магнитного поля,  $h_0 = h_c$ , при котором метастабильный минимум  $\theta_{\min}^{(2)}$  сливается с максимумом  $\theta_{\max}$ , и оба этих экстремума пропадают. Критическая точка  $h_0 = h_c$  называется коэрцитивной силой магнитной наночастицы. В этой точке равновесное направление вектора  $\alpha$  меняется скачком. Это есть причина появления магнитного гистерезиса и наличия петли гистерезиса частицы. Вообще, гистерезисом называется зависимость состояния физической системы от ее предыстории, а не только от конкретных значений внешних параметров системы. Действительно, в случае магнитной наночастицы, в промежуточном интервале полей,  $|h_0| < h_c$ , имеется два возможных равновесных состояния с различными значениями магнитного момента частицы. В каком из двух возможных состояний находится частица в данный момент зависит от ее предыстории, то есть от значений внешнего магнитного поля в предыдущие моменты времени.

## 2.2. Динамическое уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта

Равновесные направления единичного вектора намагниченности в зависимости от направления и величины внешнего магнитного поля удобно находить численно, решая динамическое уравнение движения Ландау-Лифшица-Гильберта, которое имеет вид [8,9]

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = -\gamma [\alpha, H_{ef}] + \kappa \left[ \alpha, \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right], \quad (2.10)$$

где  $\gamma = 1.76 \cdot 10^7$  1/Э\*сек есть константа гиромагнитного отношения,  $\kappa$  есть феноменологическая константа магнитного затухания, а  $H_{ef}$  есть вектор эффективного магнитного поля, который равен вариационной производная полной энергии частицы (2.6) по вектору  $\alpha$

$$H_{ef} = - \frac{\partial w}{M_s \partial \alpha} \quad (2.11)$$

Здесь производная по вектору понимается как градиент

$$\frac{\partial w}{\partial \alpha} = \nabla w = i \frac{\partial w}{\partial \alpha_x} + j \frac{\partial w}{\partial \alpha_y} + k \frac{\partial w}{\partial \alpha_z}.$$

Очевидно, что в равновесии должно выполняться условие стационарности

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = 0.$$

Как видно из уравнения (2.10), для этого необходимо, чтобы вектора  $\alpha$  и  $H_{ef}$  были параллельными друг другу, что означает равенство нулю векторного произведения

$$[\alpha, H_{ef}] = 0 \quad (2.12)$$

Уравнение (2.12) называется, поэтому, стационарным уравнением Ландау-Лифшица. Можно доказать, что уравнение (2.12) эквивалентно необходимому условию (2.8) существования экстремума полной энергии наночастицы.

Вектор эффективного магнитного поля имеет два вклада. Первый вклад связан с наличием энергии магнитной анизотропии

$$H_a^{ef} = -\frac{1}{M_s} \left\{ \frac{\partial w_a}{\partial \alpha_x}, \frac{\partial w_a}{\partial \alpha_y}, \frac{\partial w_a}{\partial \alpha_z} \right\},$$

где

$$\frac{\partial w_a}{\partial \alpha_x} = \frac{\partial}{\partial \alpha_x} [K_1(\alpha_x^2 + \alpha_y^2)] = 2K_1\alpha_x; \quad \frac{\partial w_a}{\partial \alpha_y} = 2K_1\alpha_y; \quad \frac{\partial w_a}{\partial \alpha_z} = 0.$$

Таким образом,

$$H_a^{ef} = \left\{ -\frac{2K_1}{M_s}\alpha_x, -\frac{2K_1}{M_s}\alpha_y, 0 \right\}.$$

Второй вклад связан с наличием энергии Зеемана

$$H_z^{ef} = -\frac{1}{M_s} \frac{\partial}{\partial \alpha} \{ -M_s H_0 \alpha h \} = H_0 \frac{\partial}{\partial \alpha} (\alpha h) = H_0 h = H_0$$

В результате, получаем  $H_{ef} = H_a^{ef} + H_0$ , так что уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта принимает вид

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = -\gamma [\alpha, H_a^{ef} + H_0] + \kappa \left[ \alpha, \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right] \quad (2.13)$$

Это уравнение нужно решать с начальным условием, заданным в некоторый момент времени  $t_0$

$$\alpha|_{t=t_0} = \alpha_0. \quad (2.14)$$

Эволюция системы, описываемая динамическим уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта (2.10), при отличном от нуля затухании ( $\kappa > 0$ ) автоматически приводит к понижению полной энергии системы. Поэтому, получаемое в результате итерационного процесса решение уравнения (2.13), удовлетворяющее начальному условию (2.14), на достаточно больших временах заведомо приводит к одному из устойчивых минимумов исходного функционала (2.5). Это дает эффективный алгоритм численного нахождения минимумов энергии не только для простейшего случая функционала (2.5), но и для более сложных случаев.

### 2.3. Алгоритм численного решения уравнения Ландау-Лифшица - Гильберта

Для численного решения уравнения (2.13), удобно переписать его в эквивалентной форме Ландау-Лифшица. Для этого, уравнение (2.13) векторно умножается на вектор  $\alpha$

$$\left[ \alpha, \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right] = -\gamma [\alpha, [\alpha, H_{ef}]] + \kappa \left[ \alpha, \left[ \alpha, \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right] \right].$$

Далее, расписывая двойное векторное произведение, имеем



$$\left[ \alpha, \left[ \alpha, \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right] \right] = \alpha \left( \alpha \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right) - \frac{\partial \alpha}{\partial t} (\alpha \alpha) = - \frac{\partial \alpha}{\partial t},$$

поэтому

$$\left[ \alpha, \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right] = -\gamma [\alpha, [\alpha, H_{ef}]] - \kappa \frac{\partial \alpha}{\partial t}$$

Тогда из (2.13) получим

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = -\gamma [\alpha, H_{ef}] + \kappa \left( -\gamma [\alpha, [\alpha, H_{ef}]] - \kappa \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right),$$

или

$$(1 + \kappa^2) \frac{\partial \alpha}{\partial t} = -\gamma [\alpha, H_{ef}] - \kappa \gamma [\alpha, [\alpha, H_{ef}]].$$

Последнее соотношение можно записать как

$$(1 + \kappa^2) \frac{\partial \alpha}{\partial t} = -\gamma [\alpha, H_r], \quad H_r = H_{ef} - \kappa [H_{ef}, \alpha]. \quad (2.15)$$

Положим здесь  $H_m = |H_{ef}|$ ,  $h_{ef} = H_{ef}/H_m$ ,  $h_r = H_r/H_m$ . Тогда получим

$$\frac{d\alpha}{dt} = -\frac{\gamma H_m}{1 + \kappa^2} [\alpha, h_r]. \quad (2.16)$$

Вводим приведенное время по формуле

$$dt_e = \frac{\gamma H_m}{1 + \kappa^2} dt.$$

После чего из (2.16) получаем неявную численную схему

$$\alpha_1 - \alpha = -dt_e [\alpha_1, h_r], \quad h_r = h_{ef} - \kappa [h_{ef}, \alpha]. \quad (2.17a)$$

Для выполнения итераций по этой схеме, необходимо разрешить это линейное соотношение и получить явное выражение для вектора  $\alpha_1$ . Положим временно  $\xi = dt_e$  и  $h = h_r$ . Тогда уравнение (2.17a) запишется в виде

$$\alpha_1 - \alpha = -\xi [\alpha_1, h]. \quad (2.17b)$$

Заметим, что отсюда следует соотношение  $h \alpha_1 = h \alpha$ . Умножим обе части уравнения (2.17b) на вектор  $h$

$$[h, \alpha_1] - [h, \alpha] = -\xi [h, [\alpha_1, h]].$$

Расписывая двойное векторное произведение в правой части, получим

$$[h, \alpha_1] = [h, \alpha] - \xi \{ \alpha_1 h^2 - h(h\alpha) \},$$

В результате, уравнение (2.17b) можно записать в виде

$$\alpha_1 - \alpha = -\xi [h, \alpha] - \xi^2 \alpha_1 h^2 + \xi^2 h(h\alpha).$$

Отсюда получаем окончательно, возвращаясь к прежним обозначениям, явное выражение

$$\alpha_1 = \frac{1}{(1 + dt_e^2 h_r^2)} \{ \alpha + dt_e [h_r, \alpha] + dt_e^2 h_r(h_r \alpha) \}. \quad (2.18)$$

Итерации по этой схеме должны проводиться при достаточно малых значениях приведенного времени,  $dt_e = 0.01 - 0.001$ . После каждой итерации по времени полученный вектор  $\alpha_1$  нормируется на единицу и используется в качестве начального состояния для построения следующей итерации. Критерием остановки итераций служит условие

$$|[\alpha_1, h_{ef}]| \leq \varepsilon,$$

где  $\varepsilon \sim 10^{-6} - 10^{-8}$  есть принятая точность вычислений. Очевидно, что параметр  $\varepsilon$  есть угол между нормированными на единицу векторами  $\alpha_1$  и  $h_{ef}$ . Малость этого угла означает параллельность указанных векторов, что и есть условие равновесия единичного вектора намагниченности.