

理论基础：

LLG:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{-\gamma}{1+\alpha} [S \times B + \alpha S \times (S \times B)]$$

S : 原子磁矩的归一化矢量

H : 有效磁场，按我们的习惯，应该写成 B ，已经改了

γ : 旋磁比（常数=1.76e11）

α : 阻尼系统

dt : 积分步长（在原子级别，为保证积分的稳定性，通常设置为 0.5e-15 s, 即 0.5fs）

磁矩在场中的能量表达式：

$$E = -m \cdot B \quad \text{所以有效场的表达式为:} \quad B = -\frac{1}{\mu_s} \frac{\partial E}{\partial S}$$

vampire 作者在论文中也提到，作者认为有效场的单位是 Tesla，所以公式中也应该写为 B ，这样更合理！

从下图可以看出，作者 applied field H 的单位写的是 T (Tesla)，而通常我们习惯于 H 的单位是 A/m，所以作者的公式实际上应该写成 B （当然这是相对于我们的习惯）。

where μ_s is the local spin moment. The inclusion of the spin

moment within the effective field is significant, in that the

field is then expressed in units of Tesla

Table 1. Table of key variables and their units.

Variable	Symbol	Unit
Atomic magnetic moment	μ_s	Joules/Tesla (J T^{-1})
Unit cell size	a	Angstroms (\AA)
Exchange energy	J_{ij}	Joules/link (J)
Anisotropy energy	k_u	Joules/atom (J)
Applied field	\mathbf{H}	Tesla (T)
Temperature	T	Kelvin (K)
Time	t	Seconds (s)
Parameter	Symbol	Value
Bohr magneton	μ_B	$9.2740 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$
Gyromagnetic ratio	γ	$1.76 \times 10^{11} \text{ T}^{-1} \text{ s}^{-1}$
Permeability of free space	μ_0	$4\pi \times 10^{-7} \text{ T}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^3$
Boltzmann constant	k_B	$1.3807 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

$$1: H_{exec} = - \sum J_{ij} S_i \cdot S_j$$

当 J_{ij} 是正数时, 相邻自旋磁矩平行时, exchange interaction energy 最小, 所以这种材料是铁磁性材料, 反之 J_{ij} 为负数时, exchange interaction energy 最小, 这种材料是反铁磁性 coupling

$$2: H_{ani}^{uni} = -k_u \sum (S_i \cdot e)^2$$

这里 k_u 的值只能为正数, 当后面的平方和为 1 时, 单轴各向异性性能最小

$$3: H_{ani}^{cub} = \frac{k_c}{2} \sum_i (S_x^4 + S_y^4 + S_z^4)$$

这里的 k_c 只能为负数, 这样才能让三轴各向异性性能最小,

$$4: H_{app} = - \sum_i \mu_s S_i \cdot B_{app}$$

当磁矩与外加场平行时, 能量最小

Hamilton 量为能量总和:

$$H = H_{exec} + H_{ani} + H_{app} + H_{th} + H_{dipole}, \text{ 各种其它导入方式}$$

从 Hamilton 能量式得到总的场的公式:

$$B_{effective} = - \frac{1}{\mu_s} \frac{\partial H}{\partial S}, \text{ 有效场的单位为 Tesla}$$

关键问题:

1: 原子磁矩有效场的表达分类和计算

2: LLG 的数值计算方法

3: 材料的形状问题

```
=====
vout::zLogTsInit(std::string(argv[0])) :
=====
```

1 : 从 argv[0]得到 program name : 最后一个/后面的内容

2 : 使用 int GHS=gethostname(loghostname, 80); 得到主机名
GHS 为 0,函数正常

3 : pid_t zLogPid = getpid();//得到进程 id

4 : 如果为单机版 , log 文件名为"log",多 pc 并行版本,log 文件为"log.n" (n 为每台机器上的 my_rank 号

```
std::stringstream logfn;
if(vmpi::num_processors==1)
    logfn << "log";
else
    logfn << "log."<<vmppi::my_rank;
```

```
std::string log_file = logfn.str();          // stringstream 类型转化为 string 类型
const char* log_filec = log_file.c_str();    //string 类型到 char *类型
```

```
std::ofstream zlog;
zlog.open(log_filec);
zLogInitialised=true;    //log 文件已经初始化标志 (表明 zLog 变量已经初使化了)
向文件中写信息 :
zlog<<zTs()<<"logfile opened"<<std::endl;
```

zTs()函数返回 字符串 string:

会判断 zLogInitialised 变量是否为 true , 只有 zlog 变量被初始化了 , 才能向 zlog<<写入数据
时间 程序名 [主机名 : 进程名 : my_rank]
2016-03-24 15:17:48 vampire [ubuntu-ht:11473:0]

```
=====
std::string zTs()
=====
```

```
    std::ostringstream Ts;
    time_t seconds;
    // get current time
    seconds = time (NULL);
    struct tm * timeinfo;
    char logtime [80];
    timeinfo = localtime ( &seconds );
    // Format time string
    strftime (logtime,80,"%Y-%m-%d %X ",timeinfo);
    Ts << logtime ;
    cout<<Ts.str();
=====
```

```
=====
mp::initialise(infile);
=====
```

```
    mp::default_system();
    int iostat=vin::read(input);
    if(iostat==EXIT_FAILURE) exit(1); //程序读取 input 文件内容解析失败
    //方便调试打印信息
    for (int i=0;i<mp::num_materials;i++)
        mp::material[i].print();
    //
    if(cs::single_spin==true){ //如果 input 文件中指定了只生成一个 spin
        mp::single_spin_system();
    }
    mp::set_derived_parameters(); //基于刚才从 input 读取出来的信息，设置需要计算的
变量
```