



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 33 за 2023 г.

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

А.В. Лукьянов, А.В. Иванов

Численное моделирование магнетиков «атом-в-атом», закон Блоха $3/2$ и третье начало термодинамики

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Лукьянов А.В., Иванов А.В. Численное моделирование магнетиков «атом-в-атом», закон Блоха $3/2$ и третье начало термодинамики // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2023. № 33. 14 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2023-33>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2023-33>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.КЕЛДЫША
Российской академии наук**

А.В. Лукьянов, А.В. Иванов

**Численное моделирование магнетиков
«атом-в-атом», закон Блоха $3/2$
и третье начало термодинамики**

Москва — 2023

Лукьянов А.В., Иванов А.В.

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Численное моделирование магнетиков «атом-в-атом», закон Блоха 3/2 и третье начало термодинамики

Традиционная модель магнетика «атом-в-атом» рассматривает магнитные моменты отдельных атомов, связанных обменным взаимодействием. Эволюция магнитных моментов описывается на основе уравнения Ландау–Лифшица, в которое вводится случайный ланжевеновский источник, обусловленный конечной температурой системы. При этом одной из основных проблем является нарушение закона Блоха 3/2 и третьего начала термодинамики. Проведенный Вуу с соавторами перерасчет интенсивности случайного источника с учетом магнонов обеспечивает правильную асимптотику 5/2 для энергии, но не дает правильной асимптотики для намагниченности. Для решения этой проблемы мы добавляем к источнику Ланжевена случайный дельта–коррелированный по времени, но скоррелированный по пространству источник. Этот подход в связке с подходом Вуу обеспечивает выполнение третьего начала термодинамики и закона Блоха 3/2.

Ключевые слова: уравнение Ландау-Лифшица, закон Блоха 3/2, третье начало термодинамики, моделирование атом-в-атом

Andrei Vladimirovich Lukianov, Anton Valeryevich Ivanov

e-mail: aiv.racs@gmail.com

Numerical atom-to atom simulation of magnets, Bloch's 3/2 law and the third law of thermodynamics

The traditional model of a magnet «atom-to-atom» considers the magnetic moments of individual atoms connected by an exchange interaction. The evolution of magnetic moments is described on the basis of the Landau-Lifshitz equation, in which a random Langevin source is introduced, determined by the final temperature of the system. In this case, one of the main problems is the violation of the Bloch 3/2 law and the third law of thermodynamics. The recalculation of the intensity of a random source, carried out by Wu et al., taking into account magnons provides the correct 5/2 asymptotics for the energy, but does not give the correct asymptotics for the magnetization. To solve this problem, we add a random delta-correlated in time but correlated in space source to the Langevin source. This approach, in conjunction with the Wu approach, ensures the fulfillment of the third law of thermodynamics and Bloch's 3/2 law.

Keywords: Landau-Livshitz equation, Bloch 3/2 law, third law of thermodynamics, atom-to atom simulation

Содержание

1	Введение	3
2	Уравнение Ландау–Лифшица	4
3	Переопределение температуры	6
4	Новый случайный источник в уравнении Ландау–Лифшица	9
5	Заключение	12
	Список литературы	13

1. Введение

В настоящее время изучение спиновой динамики магнетиков при конечных температурах имеет важное значение для развития устройств спинтроники, а также для множества других практических приложений. Эта динамика может быть описана в рамках модели «атом-в-атом» и уравнении Ландау-Лифшица (УЛЛ) с источником Ланжевена. УЛЛ решаются численно для широкого класса прикладных задач.

При этом одной из основных проблем является нарушение закона Блоха $3/2$ и третьего начала термодинамики — энергия и намагниченность при малых температурах отвечают выражению $A + BT$, что приводит к расходимости энтропии при $T \rightarrow 0$. Для решения этой проблемы общепринятым является переопределение температуры, основанное на квантовом рассмотрении магнонов, предложенном Вуу с соавторами [1].

Баркер и Бауэр демонстрируют, что моделирование железо–иттриевого граната с помощью классической статистики для магнонов, в отличие от квантовой, не соответствует эксперименту [2]. Бергквист и Бергман отмечают, что моделирование атомной спиновой динамики с помощью статистики Бозе-Эйнштейна значительно улучшается при низких температурах по сравнению с классической (больцмановской) статистикой, обычно используемой в такого рода симуляциях, в то время как при более высоких температурах восстанавливается классическая статистика [3]. Вийрена и другие показывают, что использование квантовой статистики обостряет поведение системы возле температуры фазового перехода, получая аналогичные результаты, что и у Вуу [4]. Вен и Вуу использовали квантовую статистику для рассмотрения образования и миграции моновакансий в ОЦК-железе в широком диапазоне температур от 10 до 1400 К через границу раздела ферро/парамагнитных фаз, поскольку пренебрежение квантовыми эффектами приводит к неправильной динамике решетки и спина, а также к ошибочным активационным характеристикам, что иногда приводит к неверным результатам [5]. Лай и др. изучали эффекты квантовой статистики как фононов, так и магнонов в ОЦК-железе и пришли к выводу, что эти эффекты приводят к нелинейной зависимости тепловой энергии от температуры и к сильному неаррениусовскому поведению в области аррениусовской диффузионной моды [6]. Вуу и Вен с помощью квантовой флуктуационно–диссипационной теоремы (ФТД)

исследуют влияние квантовой статистики на динамику многих тел кристаллического твердого тела при конечных температурах, содержащих внедренный растворенный атом, показывая, что квантовая статистика значительно влияет на транспортные свойства, что приводит к серьезным отклонениям как от закона диффузии Аррениуса, так и от соотношения Эйнштейна–Смолуховского между подвижностью и диффузией [7]. Есть несколько работ, которые изучают образование комплекса гелий–вакансия в ОЦК-металлах с помощью моделирования на основе квантовой ФТД [8, 9]. Также есть несколько работ, которые используют квантовую статистику для спинов для правильного предсказания магнитной энтропии при низких температурах при моделировании атомной диффузии в сплавах железа [10, 11]. Вен и Вуу комбинируют квантовую статистику и ангармонизм спиновых колебаний для изучения спиновых волн в ферромагнетиках [12]. Моок и др. используют квантовую статистику магнонов для коррекции низкотемпературного предела [13]. Несколько статей отмечают, что спин–фононную динамику можно дополнительно включить в модели для достижения дополнительных эффектов [14, 15]. При этом Уолш и др. критикуют данный подход, утверждая, что эффективное моделирование магнетизма с конечной температурой остается нерешенной проблемой в вычислительном материаловедении [16].

Подход, предложенный Вуу, дает правильную асимптотику для теплоемкости ($3/2$), но не нулевую энтропию при $T = 0$ и неверную асимптотику для намагниченности ($5/2$ вместо $3/2$). Подобрать температуру Дебая, удастся получить нулевую энтропию при $T = 0$. Вопрос о нахождении температуры Дебая из первых принципов остается открытым — приведенное в работе [1] значение $20T_c$, где T_c — критическая температура, представляется завышенным на порядок.

Никакое переопределение температуры не позволяет одновременно получить правильные асимптотики для намагниченности и энергии. Для решения этой проблемы мы заменяем источник Ланжевена на линейную комбинацию источника Ланжевена и случайного дельта-коррелированного по времени, но скоррелированного по пространству источника. При высоких температурах такая комбинация переходит в источник Ланжевена. Этот подход в связке с подходом Вуу обеспечивает выполнение третьего начала термодинамики и закона Блоха $3/2$.

2. Уравнение Ландау–Лифшица

При моделировании магнетика атом-в-атом считается, что магнитный момент каждого атома задается вектором постоянной длины, подчиняющимся

уравнению Ландау–Лифшица:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{m}}_i(t) &= -\gamma [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] - \alpha\gamma [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]] + \sqrt{2\alpha\gamma T} [\mathbf{m}_i \times \boldsymbol{\xi}_i], \\ W &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j), \quad \mathbf{H}_i^{\text{eff}} = -\nabla_{\mathbf{m}_i} W = \sum_j J_{ij} \mathbf{m}_j, \end{aligned} \quad (1)$$

где \mathbf{m}_i — намагниченность i -атома, γ — гиромагнитное соотношение, α — параметр диссипации, $\mathbf{H}_i^{\text{eff}}$ — эффективное магнитное поле, $\boldsymbol{\xi}$ — источник Ландау с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией каждой из компонент, J_{ij} — обменный интеграл между соседями i и j , T — температура системы.

Здесь мы ограничиваемся рассмотрением ОЦК решетки с обменным взаимодействием только между ближайшими соседями, полагая его равным J . В энергию системы и в эффективное поле могут входить внешнее поле, анизотропия, диполь–дипольное взаимодействие и т.д.

Уравнение (1) выписано в безразмерной системе единиц, в которой $|\mathbf{m}_i| = 1$, $\gamma = 1$, константа Больцмана $k_B = 1$ и температура T задается в единицах энергии J , при этом также можно положить $J = 1$. Коэффициент диссипации $\alpha \ll 1$.

Магнетон Бора $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$. Для железа магнитный момент атома $4\mu_B$, таким образом, в нашей системе единиц $\mu_B = 1/4$. Гиромагнитное отношение $\gamma = g\mu_B/\hbar$, для чистого железа гиромагнитное отношение $\gamma \approx 2\mu_B/\hbar$, и поскольку в нашей системе единиц $\gamma = 1$, то $\hbar = 1/2$.

Первое слагаемое в правой части (1) отвечает за прецессию магнитного момента в эффективном поле, второе — за диссипацию. Из-за третьего слагаемого УЛЛ переходит из класса системы обыкновенных дифференциальных уравнений в класс стохастических дифференциальных уравнений. Согласно Вуу, необходимо заменить температуру T на температуру $T_Q(T)$, определяемую квантовой ФДТ. Если известны зависимости равновесной средней намагниченности $M(T)$ и энергии $W(T)$, то достаточно заменить в них температуру T на значения обратной функции T_Q^{-1} .

Найти аналитическое решение УЛЛ можно только при наличии прецессирующего слагаемого. Решением будет так называемая спинова волна. При наличии всех слагаемых аналитическое решение не представляется возможным. По этой причине необходимо использовать численные методы для решения УУЛ [17], например, метод Рунге-Кутты 4-ого порядка, который используется в этой работе.

Результаты численного решения (1) показаны на рис. 1. Хорошо видно, что асимптотики для энергии и намагниченности равны единице, что противоречит

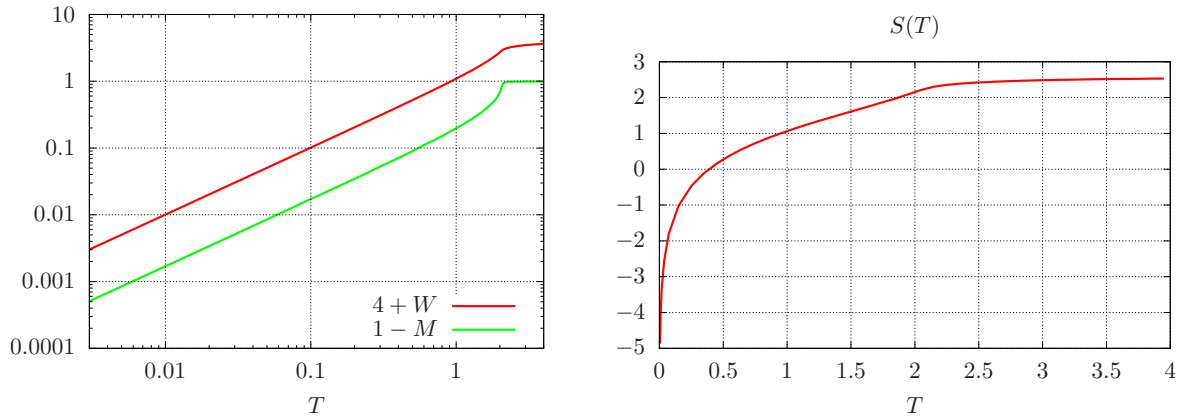


Рис. 1. Зависимости намагниченности, удельных энергии и энтропии (в расчете на один атом) от температуры

закону Блоха 3/2:

$$W = \tilde{B}(1 - BT^{\frac{5}{2}}),$$

$$M = \tilde{A}(1 - AT^{\frac{3}{2}}),$$

где \tilde{A} , A , \tilde{B} и B — некоторые константы.

При больших температурах $T \gg T_c$ можно полагать, что многочастичная функция распределения равна константе

$$\lim_{T \rightarrow \infty} f^{(N)} = \frac{1}{(4\pi)^N}, \quad \lim_{T \rightarrow \infty} S = \ln 4\pi,$$

откуда

$$S(T) = \ln(4\pi) - \int_T^{\infty} \frac{dW}{dT'} \frac{dT'}{T'}.$$

Производная считается в середине между двумя точками. Видно, что энтропия расходится при $T = 0$.

3. Переопределение температуры

При чисто квантовом рассмотрении прецессии можно получить квантовый аналог спиновой волны (рис. 5) — магнон, квазичастицу переноса спина. При высоких температурах само понятие магнона теряет смысл, поскольку энергия взаимодействия магнонов между собой имеет тот же порядок, что и энергия каждого магнона. При низких температурах взаимодействие магнонов несущественно, но сама энергия магнонов существенным образом влияет на итоговую теплоемкость. Для учёта этого можно переопределить температуру с помощью

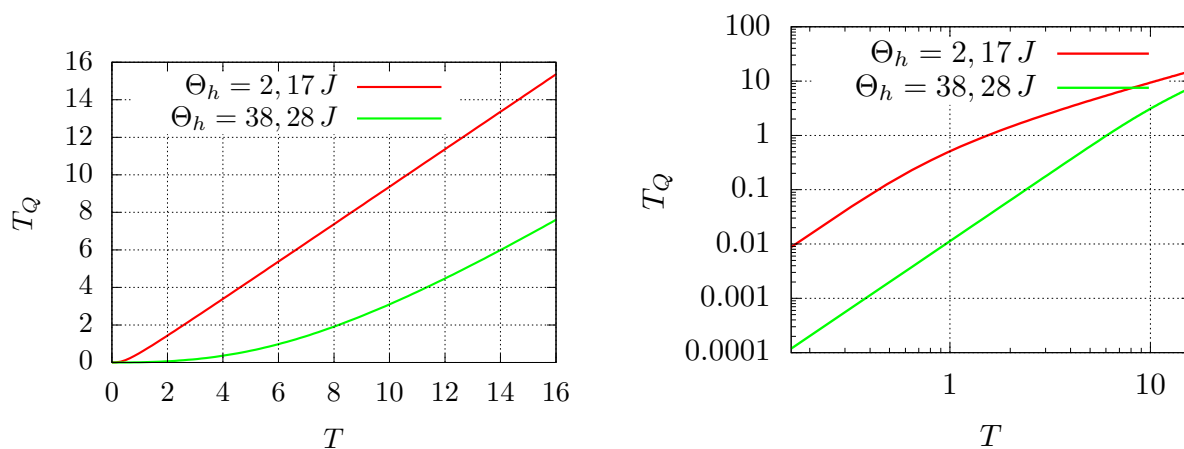


Рис. 2. Зависимости $T_Q(T)$ при температуре Дебая $\Theta_h = 2.17J$ и $38.28J$

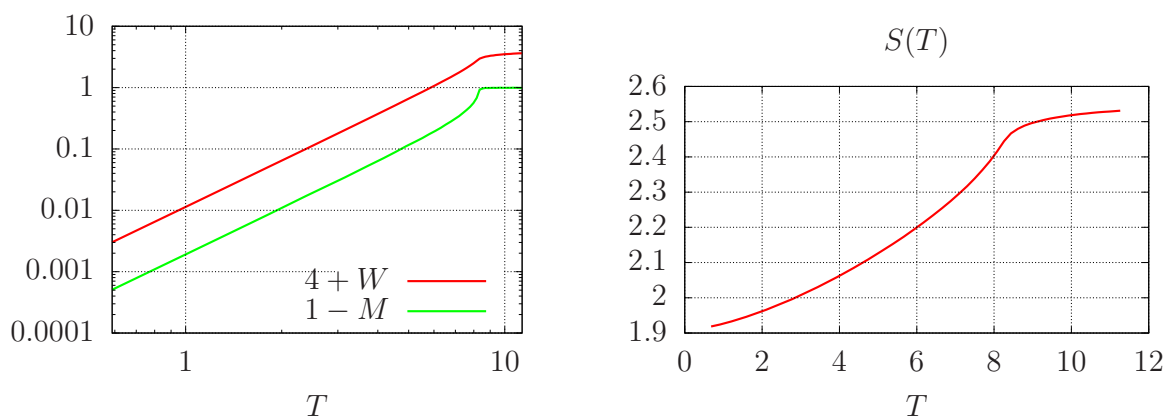


Рис. 3. Зависимость намагниченности, энергии и энтропии от температуры Вуу при $\Theta_h = 38.28$

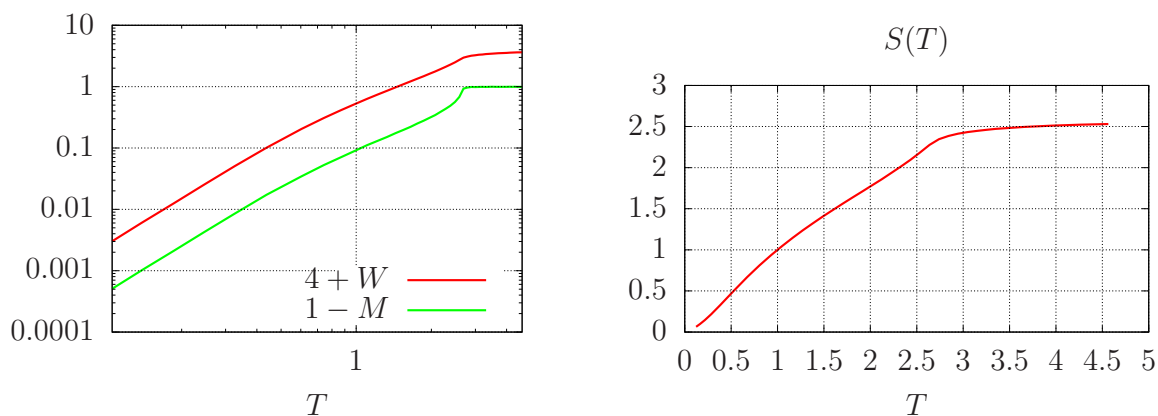


Рис. 4. Зависимость намагниченности, энергии и энтропии от температуры Вуу при $\Theta_h = 2.17$

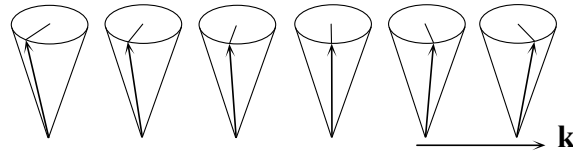


Рис. 5. Спиновая волна с волновым вектором \mathbf{k}

квантовой флуктационно-диссипативной теоремы [1]:

$$T_Q(T) = \int_0^{\infty} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1} g(\omega, T) d\omega,$$

где \hbar — постоянная Планка, $g(\omega, T)$ — плотность состояния магнонов.

В общем случае выражение плотности состояния магнонов может учитывать совершенно различные эффекты. Мы ограничимся моделью Дебая:

$$g(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{16\pi^2} \left(\frac{\hbar}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\omega} & \text{для } \omega \leq \omega_h, \\ 0 & \text{для } \omega \geq \omega_h \end{cases},$$

где a — период решетки, равный 1, ω_h — частота Дебая, которая может быть найдена из условия $\int_0^{\infty} g(\omega) d\omega = 1$. Соответствующая температура Дебая $\Theta_h = \hbar\omega_h$:

$$\Theta_h = 4(3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \approx 38.28.$$

Новая температура, которую мы назовем температурой Вуу, будет определяться как

$$T_Q(T) = \frac{3}{2} \Theta_h \left(\frac{T}{\Theta_h}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\frac{\Theta_h}{T}} \frac{x^{\frac{3}{2}}}{e^x - 1} dx.$$

Функцию $T_Q(T)$ можно посчитать с помощью метода Ромберга для расчета интеграла (рис. 2), а T_Q^{-1} с помощью метода бисекций.

Результаты замены температуры показаны на рис. 3. Асимптотика у энергии $5/2$, что верно, но у намагниченности асимптотика тоже $5/2$, а должно быть $3/2$. Энтропия перестала расходиться, но стремится к ненулевому значению. Проблемы с энтропией можно решить, подобрав значение $\Theta_h \approx 2.17$, при такой температуре Дебая энтропия стремится к 0 при $T = 0$, что показано на рис. 4.

Замена температуры неизбежно приводит к смещению критической температуры T_c , выражаемой в нашем случае в обменных интегралах. Для ОЦК решетки теория Кюри–Вейсса дает значение $T_c = 8J/3 \approx 2.666J$. Моделирование атом-в-атом в классическом случае дает $T_c \approx 2.05J$, расхождение с

теорией Кюри–Вейсса объясняется флуктуациями среднего поля [18] или влиянием корреляций между ближайшими соседями [19]. Но на практике ситуация обратная — прямое экспериментальное измерение обменного интеграла для кристалла является достаточно сложной задачей. Как правило, обменный интеграл оценивается по критической температуре и теории Кюри–Вейсса либо рассчитывается численно методами функционала плотности (DFT)*, эти подходы дают достаточно близкие результаты. Результаты, получаемые в подходе Вуу с $\Theta_h \approx 40J$, приводят к смещению критической температуры до $T_c \sim 8J$, что эквивалентно уменьшению обменного интеграла вчетверо. Кроме того, принято считать, что квантовые эффекты (магноны) влияют на поведение магнетика при температурах вплоть до $T_c/2$, что очевидно не будет выполняться при температуре Дебая $\Theta_h \approx 40J \approx 5T_c$.

Нет никакого смысла искать такую модель $g(w)$, при которой асимптотика намагниченности будет равна $3/2$, поскольку изначально асимптотики энергии и намагниченности равны и никакое переопределение температуры не сможет сделать так, чтобы асимптотики энергии и намагниченности были разные. Поэтому никакая модель $g(w)$ не сможет обеспечить выполнение закона Блоха $3/2$.

4. Новый случайный источник в уравнении Ландау–Лифшица

Магноны с большой длиной волны слабо влияют на энергию системы (ближайшие магнитные моменты почти параллельны), но могут сильно влиять на намагниченность, что объясняет разницу в асимптотиках энергии и намагниченности. Для генерации магнонов с большой длиной волны случайный источник в УЛЛ должен иметь соответствующий радиус корреляции по пространству. При больших температурах, когда магноны с маленькой длиной волны преобладают, этот источник должен переходить в традиционный источник Ланжевена.

В данной работе мы ограничимся рассмотрением линейной комбинации двух случайных источников — источника Ланжевена ξ и источника спиновых волн $\tilde{\xi}$. УЛЛ (1) примет вид

$$\dot{\mathbf{m}}_i(t) = -\gamma [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] - \alpha\gamma [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]] + \sqrt{2\alpha\gamma T} \left[\mathbf{m}_i \times \left(\zeta \tilde{\xi}_i + (1 - \zeta) \xi_i \right) \right], \quad (2)$$

где $\zeta = \zeta(T)$ — некоторый коэффициент в диапазоне $[0,1]$, $\zeta|_{T=0} = 1$, $\zeta|_{T \geq T_c/2} = 0$.

Введем операцию поворота \odot вектора \mathbf{a} вокруг вектора $\delta\mathbf{b}$ на угол δ , $|\mathbf{b}| = 1$ (частный случай алгебры кватернионов)

$$\mathbf{a} \odot \delta\mathbf{b} = \mathbf{a} \cos \delta - \mathbf{a} \times \mathbf{b} \sin \delta + \mathbf{b} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) (1 - \cos \delta).$$

*Простейшая оценка $J \approx 0.1e^2/a$, где 0.1 — перекрытие волновых функций, e — заряд электрона, a — расстояние между атомами

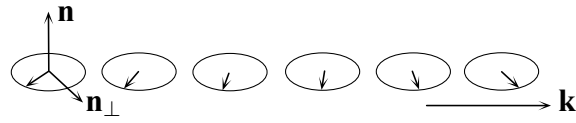


Рис. 6. Случайное поле $\tilde{\xi}$, порождающее магنون с поляризацией \mathbf{n} и волновым вектором \mathbf{k}

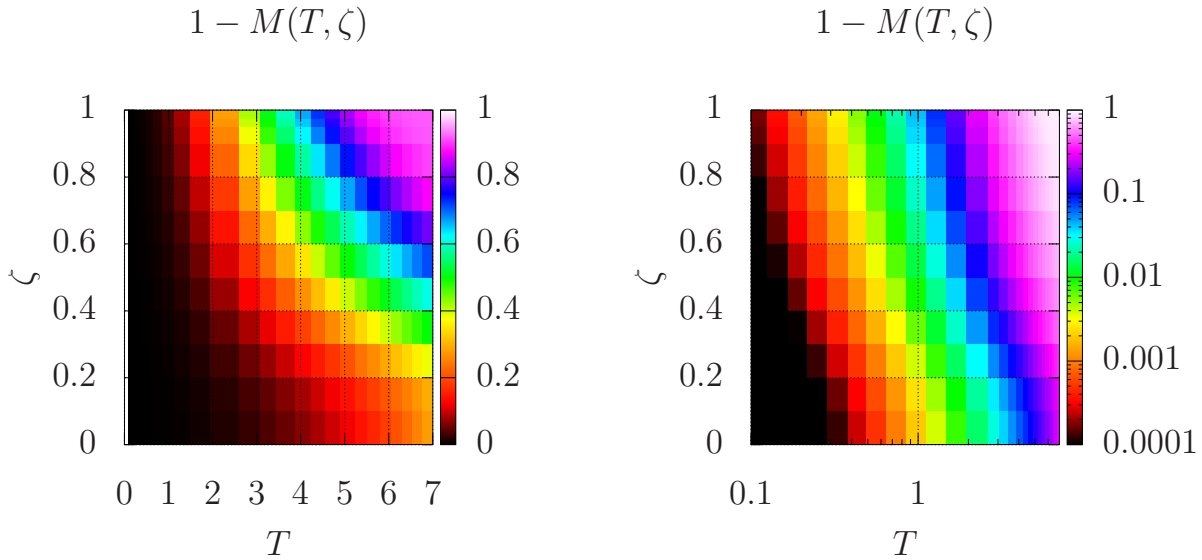


Рис. 7. Зависимость намагниченности от температуры $V_{\text{уу}}$ и параметра ζ

Тогда дельта-коррелированный по времени, но скоррелированный по пространству источник $\tilde{\xi}_i$ можно записать как (рис. 6)

$$\tilde{\xi}_i(t) = \xi(t)\mathbf{n}_{\perp}(t) \odot \left(\varphi(t) + \mathbf{k}(t) \cdot \mathbf{r}_i \right) \mathbf{n}(t),$$

где $\xi(t)$ — случайный источник с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией задающий амплитуду спиновой волны; $\mathbf{n}(t)$ — направление поляризации спиновой волны выбираемое случайным образом, $|\mathbf{n}| = 1$, $\mathbf{n}_{\perp}(t)$ — некоторый единичный вектор, ортогональный $\mathbf{n}(t)$; $\varphi(t)$ — случайная фаза в диапазоне $[0, 2\pi]$; \mathbf{r}_i — координаты i -го атома; $\mathbf{k}(t)$ — ненулевой волновой вектор, составленный случайным образом из чисел 0 и $2\pi/L$, где L — размер образца.

Найдем $\zeta(T)$ численно. Для этого рассчитаем $M(T, \zeta)$, где ζ будет независимым параметром. Результаты показаны на рис. 7 и 8. Пересечение этой поверхности с явным выражением для M будет являться $\zeta(T)$. Запишем

$$M(T) = 1 - AT^{\frac{3}{2}},$$

где A — константа.

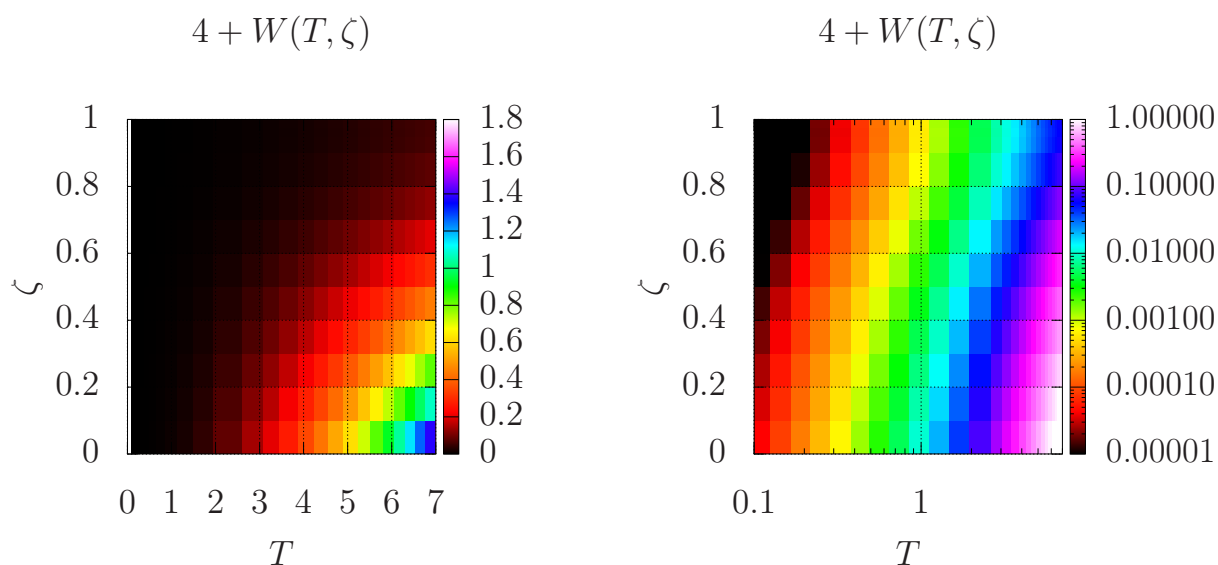


Рис. 8. Зависимость энергии от температуры Вуу и параметра ζ

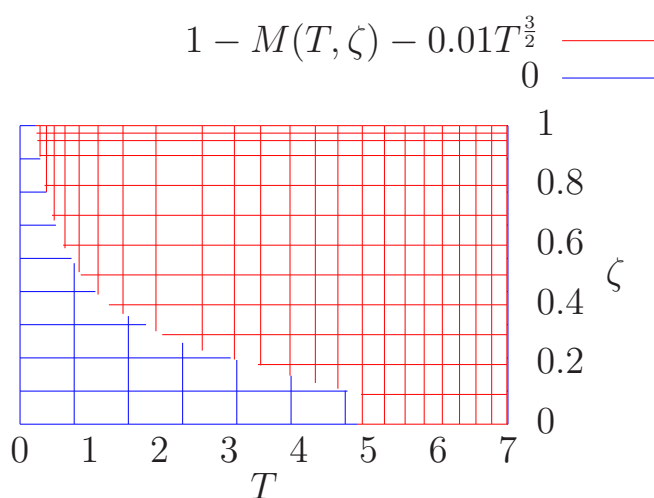


Рис. 9. Разница намагниченности и закона Блоха 3/2 при $A = 0.01$ и пересечение с нулем

Пересечение поверхностей при $A = 0.01$ показано на рис. 9. Выражение $\zeta(T)$ при $A = 0.01$ представлено на рис 10. Зависимость намагниченности и энергии при таком источнике показаны на рис. 11.

Построенный случайный источник обеспечивает правильную асимптотику для намагниченности, но практически никак не влияет на энергию и, следовательно, на энтропию. В результате закон Блоха 3/2 и третье начало термодинамики выполняются.

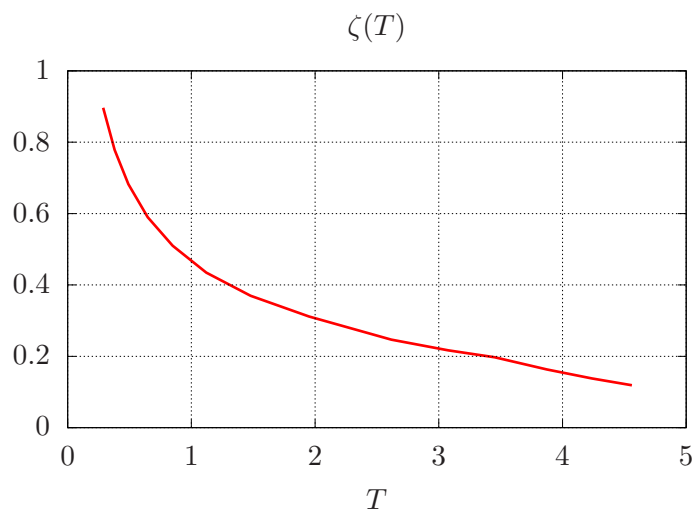


Рис. 10. Зависимость ζ от температуры Вуу при $A = 0.01$

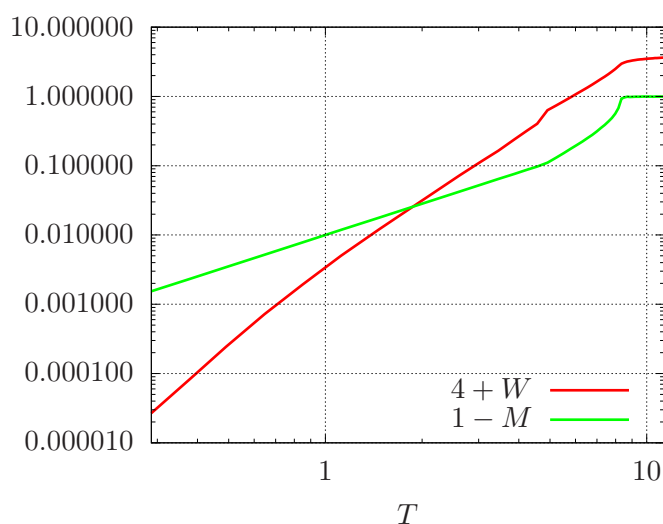


Рис. 11. Зависимость намагниченности и энергии от температуры Вуу при новом источнике

5. Заключение

Уравнение Ландау-Лифшица имеет важное значение для изучения спиновой динамики магнетиков. Одной из проблем уравнения Ландау-Лифшица с обычным источником Ланжевена является нарушение закона Блоха $3/2$ и третьего начала термодинамики. Использование температуры Вуу позволяет получить правильную асимптотику для энергии, но асимптотика намагниченности оказывается неверной. Подобрать температуру Дебая, можно достичь выполнения третьего начала термодинамики, но правильную асимптотику для намагниченности никак нельзя получить из подхода Вуу.

Для решения этой проблемы необходимо создать случайный источник, изменяющий асимптотику намагниченности, но при этом не влияющий на асимптотику для энергии. В общем случае таких источников может быть бесконечное

количество. Один из таких возможных источников был построен в настоящей работе. Безусловно, построенный источник не является окончательным — скорее его можно рассматривать как некоторый «демонстратор технологий». Для выполнения закона Блоха $3/2$ в полном объеме необходимо, чтобы случайный источник в уравнении Ландау–Лифшица при низких температурах генерировал магны с большой длиной волны, то есть был скоррелирован по пространству определенным образом.

Список литературы

- [1] [Quantum heat bath for spin-lattice dynamics](#) / C.H. Woo, Haohua Wen, A.A. Semenov et al. // *Physical Review B*. — 2015. — Vol. 91, no. 10. — P. 104306.
- [2] Barker Joseph, Bauer Gerrit EW. [Semiquantum thermodynamics of complex ferrimagnets](#) // *Physical Review B*. — 2019. — Vol. 100, no. 14. — P. 140401.
- [3] Bergqvist Lars, Bergman Anders. [Realistic finite temperature simulations of magnetic systems using quantum statistics](#) // *Physical Review Materials*. — 2018. — Vol. 2, no. 1. — P. 013802.
- [4] [Realistic first-principles calculations of the magnetocaloric effect: applications to hcp Gd](#) / R. Martinho Vieira, Olle Eriksson, T. Björkman et al. // *Materials Research Letters*. — 2022. — Vol. 10, no. 3. — P. 156–162.
- [5] Wen Haohua, Woo C.H. [Quantum statistics in the spin-lattice dynamics simulation of formation and migration of mono-vacancy in BCC iron](#) // *Journal of Nuclear Materials*. — 2016. — Vol. 470. — P. 102–110.
- [6] [Ferromagnetic effects on non-Arrhenius diffusion of single interstitial helium solute in BCC Fe](#) / Kan Lai, Haohua Wen, Jianyi Liu et al. // *Journal of Nuclear Materials*. — 2019. — Vol. 524. — P. 286–295.
- [7] Woo C.H., Wen Haohua. [Quantum statistical effects in the mass transport of interstitial solutes in a crystalline solid](#) // *Physical Review E*. — 2017. — Vol. 96, no. 3. — P. 032133.
- [8] Wen Haohua, Woo C.H. [Quantum statistical vibrational entropy and enthalpy of formation of helium-vacancy complex in BCC W](#) // *Journal of Nuclear Materials*. — 2016. — Vol. 482. — P. 99–104.
- [9] [Ferromagnetic effects on helium-vacancy complex formation in BCC Fe](#) / Haohua Wen, Yifeng Wu, Jianyi Liu, Yue Zheng // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2019. — Vol. 31, no. 12. — P. 125401.

- [10] **Atomic diffusion in α -iron across the curie point: An efficient and transferable ab initio–based modeling approach** / Anton Schneider, Chu-Chun Fu, Frédéric Soisson, Cyrille Barreateau // *Physical Review Letters*. — 2020. — Vol. 124, no. 21. — P. 215901.
- [11] **Impact of magnetic transition on Mn diffusion in α -iron: Correlative state-of-the-art theoretical and experimental study** / Omkar Hegde, Vladislav Kulitckii, Anton Schneider et al. // *Physical Review B*. — 2021. — Vol. 104, no. 18. — P. 184107.
- [12] Wen Haohua, Woo C.H. **Quantum statistics and anharmonicity in the thermodynamics of spin waves in ferromagnetic metals** // *Physical Review E*. — 2016. — Vol. 94, no. 3. — P. 032104.
- [13] Mook Alexander, Henk Jürgen, Mertig Ingrid. **Spin dynamics simulations of topological magnon insulators: From transverse current correlation functions to the family of magnon Hall effects** // *Physical Review B*. — 2016. — Vol. 94, no. 17. — P. 174444.
- [14] **Semi-classical generalized Langevin equation for equilibrium and nonequilibrium molecular dynamics simulation** / Jing-Tao Lü, Bing-Zhong Hu, Per Hede-gard, Mads Brandbyge // *Progress in Surface Science*. — 2019. — Vol. 94, no. 1. — P. 21–40.
- [15] **Data-driven magneto-elastic predictions with scalable classical spin-lattice dynamics** / Svetoslav Nikolov, Mitchell A. Wood, Attila Cangi et al. // *npj Computational Materials*. — 2021. — Vol. 7, no. 1. — P. 153.
- [16] Walsh Flynn, Asta Mark, Wang Lin-Wang. **Realistic magnetic thermodynamics by local quantization of a semiclassical Heisenberg model** // *npj Computational Materials*. — 2022. — Vol. 8, no. 1. — P. 186.
- [17] Зипунова Е.В., Иванов А.В. Две новые численные схемы для моделирования магнетиков // *Препринты Института прикладной математики им. МВ Келдыша РАН*. — 2017. — no. 0. — P. 140–18.
- [18] Garanin D.A. Self-consistent Gaussian approximation for classical spin systems: Thermodynamics // *Phys. Rev. B*. — 1996. — Vol. 53. — P. 11593. — <https://arxiv.org/abs/cond-mat/9804040>.
- [19] Иванов А.В., Зипунова Е.В., Хилков С.А. Уравнения корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков // *Письма в ЖЭТФ*. — 2022. — Т. 115, № 3. — С. 176–183. — <https://doi.org/10.31857/S1234567822030077>.