ЖЭТФ, 2014, том 146, вып. 3 (9), стр. 574–585

ВЛИЯНИЕ МАГНИТОУПРУГОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ТЕРМОДИНАМИКУ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ: МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ СПИН-РЕШЕТОЧНОЙ ДИНАМИКИ

А. К. Журавлев[a]*, ***Ю. Н. Горностырев***[a,b]

[a] *Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук*
620990, Екатеринбург, Россия

[b] *Институт квантового материаловедения*
620075, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 3 марта 2014 г.

Термодинамические свойства систем со связанными магнитными и решеточными степенями свободы исследованы численно методом спин-решеточной динамики (СРД). Разработана схема численного интегрирования уравнений СРД в термостате, которая следует ранее сформулированным подходам и модифицирована для описания систем с реалистичными межатомными взаимодействиями. Предложенный метод позволил рассчитать в рамках одной схемы спектральную плотность колебаний, теплоемкость, намагниченность и коэффициент теплового расширения. Установлено, что даже в парамагнитном состоянии взаимодействие магнитных и решеточных степеней свободы дает вклад в термодинамические свойства системы благодаря наличию ближнего магнитного порядка. Показано, что существуют два механизма влияния спин-решеточного взаимодействия на термодинамические свойства: «статический» и «динамический», первый определяется его вкладом в тепловое расширение решетки, а второй — динамическим взаимодействием магнитных моментов с колебаниями кристаллической решетки.

DOI: 10.7868/S004445101409017X

1. ВВЕДЕНИЕ

Роль магнетизма в фазовой стабильности переходных металлов и их сплавов интенсивно обсуждается многие годы, начиная с классической работы Зинера [1]. Наблюдение инварного поведения теплового расширения в сплавах Fe–Ni [2] и антиинварного поведения в γ-Fe [3] указывает на сильную связь решеточных и магнитных степеней свободы в этих соединениях, которая сохраняется даже в области температур выше точки Кюри T_C (см. обсуждение в работах [3, 4]). Ее наличие подтверждается также и результатами расчетов *ab initio* обменного взаимодействия в зависимости от деформаций [5–7]. Как обращено внимание в работе [8], в системах с сильным взаимодействием решеточных и магнитных степеней свободы возможно формирование неоднородных магнитных состояний. В то же время, для последовательного теоретического рассмотрения указанных проблем необходимо учитывать взаимодействие спиновых и решеточных степеней свободы [9].

Несмотря на значительный интерес исследователей, вопрос о вкладе спин-решеточной динамики (СРД) в термодинамические свойства остается предметом дискуссий. В рамках подходов, предложенных в работах [9–11], пренебрегается взаимодействием спиновых и решеточных степеней свободы. Однако это взаимодействие отнюдь не всегда является пренебрежимо малым, о чем свидетельствуют, например, инварный эффект [2] и магнитоструктурные переходы [12]. Имеющиеся же в литературе аналитические исследования систем со спин-решеточным взаимодействием [13–15] фактически ограничены приближениями, применимость которых утрачивается при разрушении магнитного порядка с ростом температуры. В то же время именно область высоких температур ($T \sim T_C$) характерна, например, для магнито-структурных переходов [12]. При этом спектральные характеристики спин-решеточных систем при $T \sim T_C$, знание которых необходимо для последовательного описания их

*E-mail: zhuravlev@imp.uran.ru

термодинамических свойств, остаются недоступными в рамках таких подходов.

В связи с этим возникает необходимость развития численных методов для исследования спин-решеточных систем. Попытка учета решеточных степеней свободы предпринята в работе [16], где моделирование спиновой подсистемы проводилось с использованием метода Монте-Карло и предполагалось, что ионы являются неподвижными и смещенными из положения равновесия в соответствии с температурой. Более последовательным способом описания таких систем является решение совместных уравнений движения для ионов и спинов. При этом нетривиальной проблемой является формулировка уравнений движения для системы в контакте с термостатом [17].

Существуют два принципиально различных способа введения термостата в моделирование динамических систем. В первом вводятся случайные силы и решаются стохастические дифференциальные уравнения типа уравнения Ланжевена. Таким способом моделировалась как динамика решетки [18], так и динамика спинов [11, 19]. Однако сама по себе задача численного решения стохастических дифференциальных уравнений является весьма нетривиальной [20] и, вероятно, по этой причине до сих пор не было проведено такое моделирование совместной динамики связанных спиновой и решеточной подсистем. Имеются лишь работы [21, 22], в которых стохастическая СРД моделировалась с помощью специального приема, при котором только спиновая подсистема находилась в контакте с термостатом. При этом отсутствовали флуктуации полной энергии, чего не должно быть для системы, находящейся в контакте с термостатом.

Второе семейство методов моделирования динамики при конечной температуре основано на использовании детерминистских уравнений движения, в которые введены дополнительные степени свободы, учитывающие контакт системы с термостатом. Важным преимуществом этих методов является то, что при их использовании нужно решать обыкновенные дифференциальные уравнения, а не стохастические. Первой реализацией такого метода является термостат Нозе–Хувера [17], активно применяющийся при моделировании решеточных систем [23]. В работах Булгака и Кузнецова [24, 25] было дано обобщение этого подхода, позволяющее моделировать и динамику спиновых систем при конечных температурах. Однако СРД этими методами до сих пор не исследовалась.

В настоящей работе разработана схема численного моделирования СРД частиц в термостате, основанная на подходе, предложенном в работах [24, 25]. С ее помощью исследована система, в которой взаимодействие частиц описывается центральным парным потенциалом, а магнитный вклад имеет гейзенберговскую форму с параметром обменного взаимодействия, зависящим от расстояния. Показано, что спин-решеточное взаимодействие может давать существенный вклад в термодинамические свойства системы, особенно выраженный вблизи температуры Кюри.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД РАСЧЕТА

Мы рассматриваем систему классических частиц, обладающих магнитным моментом, описываемую гамильтонианом

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i\neq j} U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) - \\ - \sum_{i\neq j} J(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j), \quad (1)$$

где $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{p}_i$ и $\mathbf{e}_i$ — соответственно координата, импульс и единичный вектор в направлении магнитного момента i-й частицы. Каждая частица имеет массу m и магнитный момент M_0, величина которого предполагается постоянной. При записи выражения (1) принимается, что взаимодействие частиц описывается центральным парным потенциалом $U(r)$, а магнитный вклад в энергию имеет гейзенберговскую форму с параметром обменного взаимодействия $J = J(r)$, зависящим от расстояния. При этом величина магнитного момента M_0 включена в определение обменного взаимодействия.

Уравнения движения для такой системы имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \\ \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i}, \\ \frac{d\mathbf{e}_i}{dt} &= \gamma \left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{e}_i} \times \mathbf{e}_i\right], \end{aligned} \quad (2)$$

где $\gamma = g\mu_B/\hbar M_0$, μ_B — магнетон Бора, g — фактор Ланде, $\hbar$ — постоянная Планка. Последнее уравнение описывает прецессию вектора $\mathbf{e}_i$ в магнитном поле $-\partial H/\partial(M_0\mathbf{e}_i)$ [26]. Аналогичная система уравнений для СРД использовалась, например, в работах [9, 21].

Мы вводим термостат, следуя предложенному в работах [24, 25] подходу, модифицируя его для описания спин-решеточной системы с реалистичными межатомными взаимодействиями. При этом термодинамически равновесное состояние системы при заданной температуре T обеспечивается введением нескольких дополнительных степеней свободы $\{\eta_n, \xi_n, \zeta_n\}$, взаимодействующих определенным образом с переменными $\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, \mathbf{e}_i\}$ и подчиняющихся дополнительным уравнениям эволюции.

Включение термостата изменяет динамику частиц в кластере, что может быть учтено путем модификации уравнений движения (2) следующим образом [24, 25]:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} - \sum_n \lambda^r(\eta_n)\mathbf{V}_n, \\ \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} - \sum_n \lambda^p(\xi_n)\mathbf{F}_n, \\ \frac{d\mathbf{e}_i}{dt} &= \left[\left(\gamma\frac{\partial H}{\partial \mathbf{e}_i} + \sum_n \lambda^e(\zeta_n)\mathbf{G}_n\right) \times \mathbf{e}_i\right], \end{aligned} \tag{3}$$

где вспомогательные функции $\mathbf{V}_n$, $\mathbf{F}_n$, $\mathbf{G}_n$ зависят от переменных кластера $\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, \mathbf{e}_i\}$, а $\lambda^r(\eta_n)$, $\lambda^p(\xi_n)$, $\lambda^e(\zeta_n)$ — от переменных термостата. Произведения $\lambda^r(\eta_n)\mathbf{V}_n$, $\lambda^p(\xi_n)\mathbf{F}_n$, $\lambda^e(\zeta_n)\mathbf{G}_n$ описывают воздействие дополнительных степеней свободы η_n, ξ_n, ζ_n на частицы кластера. В выборе вспомогательных функций имеется произвол, что обсуждалось в работах [24, 25] (в частности, при выборе $\lambda^r(\eta) = 0$, $\mathbf{V} = 0$, $\lambda^p(\xi) = \xi$, $\mathbf{F} = \mathbf{p}_i$ реализуется схема термостата Нозе–Хувера для решеточной подсистемы).

Уравнения эволюции для η_n, ξ_n, ζ_n должны быть записаны так, чтобы функция распределения по переменным кластера удовлетворяла условию термодинамического равновесия, т.е. $f(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, \mathbf{e}_i\}) \propto \exp(-H/T)$ (здесь предполагается, что система является эргодичной, т. е. усреднение по времени эквивалентно усреднению по каноническому ансамблю Гиббса). Для этого мы постулируем, что для расширенной системы, включающей кластер и дополнительные степени свободы, функция распределения имеет вид

$$f(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, \mathbf{e}_i, \eta_n, \xi_n, \zeta_n\}) = \exp\left[-\frac{1}{T} \times \right. \\ \left. \times \left(H + \sum_n \frac{\Lambda^r(\eta_n)}{A_n^r} + \frac{\Lambda^p(\xi_n)}{A_n^p} + \frac{\Lambda^e(\zeta_n)}{A_n^e}\right)\right], \tag{4}$$

где A_n^r, A_n^p, A_n^e — некоторые постоянные. В выборе функций $\Lambda^r(\eta_n)$, $\Lambda^p(\xi_n)$, $\Lambda^e(\zeta_n)$ имеется произвол и для простоты мы полагаем, что выполняются соотношения

$$\lambda^r(\eta_n) = \frac{d\Lambda^r(\eta_n)}{d\eta_n}, \quad \lambda^p(\xi_n) = \frac{d\Lambda^p(\xi_n)}{d\xi_n}, \\ \lambda^e(\zeta_n) = \frac{d\Lambda^e(\zeta_n)}{d\zeta_n}. \tag{5}$$

Используя уравнение Лиувилля для фазового подпространства, в котором сохраняются длины векторов $\mathbf{e}_i$ [25]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial(f\dot{\mathbf{r}}_i)}{\partial \mathbf{r}_i} + \frac{\partial(f\dot{\mathbf{p}}_i)}{\partial \mathbf{p}_i} + \frac{\mathcal{D}(f\dot{\mathbf{e}}_i)}{\mathcal{D}\mathbf{e}_i}\right) + \\ + \sum_n \left(\frac{\partial(f\dot{\eta}_n)}{\partial \eta_n} + \frac{\partial(f\dot{\xi}_n)}{\partial \xi_n} + \frac{\partial(f\dot{\zeta}_n)}{\partial \zeta_n}\right) = 0, \tag{6}$$

где

$$\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}\mathbf{e}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{e}} - \mathbf{e}\left(\mathbf{e} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{e}}\right),$$

и подставив в него (3) и (4) с учетом, что в термодинамическом равновесии $\partial f/\partial t = 0$, приходим (аналогично [24, 25]) к следующей системе уравнений для дополнительных степеней свободы η_n, ξ_n, ζ_n:

$$\begin{aligned} \frac{d\eta_n}{dt} &= A_n^r \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i}\mathbf{V}_n - T\frac{\partial \mathbf{V}_n}{\partial \mathbf{r}_i}\right), \\ \frac{d\xi_n}{dt} &= A_n^p \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}\mathbf{F}_n - T\frac{\partial \mathbf{F}_n}{\partial \mathbf{p}_i}\right), \\ \frac{d\zeta_n}{dt} &= \\ &= A_n^e \sum_i \mathbf{e}_i \cdot \left(\left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{e}_i} \times \mathbf{G}_n\right] - T\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{e}_i} \times \mathbf{G}_n\right]\right). \end{aligned} \tag{7}$$

Таким образом, СРД при заданной температуре T описывается замкнутой системой уравнений (3) и (7), в которой сохраняется произвол при выборе функций λ^r, λ^p, λ^e, $\mathbf{V}_n$, $\mathbf{F}_n$, $\mathbf{G}_n$. Выбор этих функций должен обеспечивать устойчивость численной схемы и обсуждается в Приложении, где показано, в частности, что для быстро убывающих с расстоянием потенциалов (типа Леннарда–Джонса) устойчивость обеспечивается условиями $\lambda^r(\eta_n) = 0, \mathbf{V}_n = 0$.

Кроме того, в отличие от традиционной реализации схемы Нозе–Хувера [17], мы подключали термостат только к узкому (порядка радиуса межатомного взаимодействия) слою вблизи границы кластера (см. Приложение). Хотя для достижения теплового равновесия с термостатом в этом случае требовалось большее время моделирования, такое включение термостата не искажало динамику частиц в центре кластера. Постоянство давления в процессе моделирования обеспечивалось в рамках схемы Паринелло – Рамана [27].

Парный межатомный потенциал в (1) выбран в простой форме, предложенной Морзе [28]:

$$U(r) = \varepsilon(e^{-2\kappa(r-\sigma)} - 2e^{-\kappa(r-\sigma)}). \tag{8}$$

Хотя модель центральных парных взаимодействий не является вполне адекватной для металлов, потенциал Морзе позволяет получить качественно правильное описание решеточной динамики при подходящем выборе параметров ε, σ, κ [29].

Чтобы исследовать влияние формы кривой $J(r)$ на поведение системы, мы будем использовать зависимость $J(r)$ в виде разложения около точки $r = d_C$:

$$J(r) = J_0 + J'(r - d_C) + \frac{1}{2}J''(r - d_C)^2, \tag{9}$$

где d_C — расстояние до ближайших соседей при $T = T_C$. Конкретное значение J_0 будем выбирать так, чтобы обеспечить правильную величину температуры Кюри для рассматриваемого материала. При выборе параметров J' и J'' будем полагать, что обменное взаимодействие быстро убывает с расстоянием, обращаясь в нуль между первыми и вторыми ближайшими соседями. Поскольку в нашем моделировании амплитуда решеточных колебаний остается малой, разложение (9) должно быть достаточным для описания вклада магнитной подсистемы в СРД.

Для определенности мы будем рассматривать металл с ГЦК-решеткой, который в основном состоянии является ферромагнитным. Таким металлом является Ni, для которого отношение $M_0/\mu_B = 0.61$, фактор Ланде $g = 1.86$, а параметры потенциала Морзе: $\varepsilon = 0.4205$ эВ, $\kappa = 1.4199$ Å^{-1}, $\sigma = 2.78$ Å [29]. Для дальнейшего удобно принять систему единиц, в которой $\varepsilon = 1$, $\sigma = 1$ и $m = 1$; при этом единицей времени будет служить величина $\sigma\sqrt{m/\varepsilon} = 3.3\cdot 10^{-13}$ с. Величина J_0 выбрана равной 0.03675, а $J' = -0.3$, что дает для ГЦК-решетки с расстоянием до ближайших соседей $d_0 = 0.892$ в модели Гейзенберга значение $T_C = 0.125$ [30], близкое к температуре Кюри Ni, $T_C = 0.129$ (величина d_0 определена при $T = 0$ решением задачи на статическое равновесие в ферромагнитном состоянии при $J'' = 0$). Заметим, что вследствие теплового расширения величина d_C, фигурирующая в уравнении (9) больше d_0 и при $T \approx T_C$ составляет $d_C = 0.9$.

При моделировании использовались три зависимости $J(r)$, показанные на рис. 1. Расчеты проведены при значениях $J'' = 0, \pm 3.25$ (для случая $J'' = 3.25$ вводилось обрезание $J(r > 1) = 0$), для того чтобы понять роль второй производной $J(r)$ в

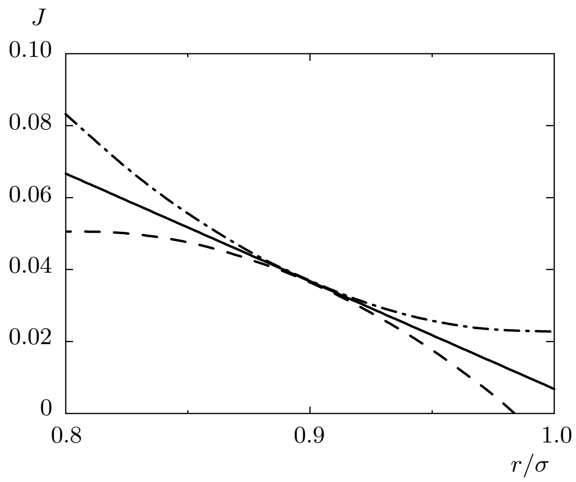

Рис. 1. Зависимости обменного взаимодействия от расстояния. Сплошная кривая соответствует $J'' = 0$, штрихпунктирная — $J'' = 3.25$, штриховая — $J'' = -3.25$

спин-решеточном взаимодействии (см. обсуждение в работе [15]). Использовался кристаллит $13 \times 13 \times 13$, представляющий фрагмент ГЦК-решетки, построенной на базисных векторах $\mathbf{b}_1 = d(1, 0, 0)$, $\mathbf{b}_2 = d\left(1/2, \sqrt{3}/2, 0\right)$, $\mathbf{b}_3 = d\left(1/2, 1/\left(2\sqrt{3}\right), \sqrt{2/3}\right)$ с периодическими граничными условиями. Расчеты проводились для постоянного внешнего давления, равного нулю; в особо оговоренных случаях — для постоянного объема.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

3.1. Динамическое поведение спин-решеточной системы

Изменение со временем энергии спиновой и решеточной подсистемы при $J'' = 0$ показано на рис. 2 для температуры $T < T_C$ (для случая $J'' \neq 0$ картина практически не отличается). Поскольку значения кинетической и магнитной энергий лежат гораздо выше потенциальной, для удобства представления результатов значения потенциальной и полной энергий увеличены на 10.0. Стартуя из неравновесного состояния (которое было выбрано почти ферромагнитным), система быстро приходит к термодинамическому равновесию, в котором присутствуют флуктуации кинетической, магнитной, потенциальной и полной энергий около их средних значений, сохраняющихся в течение всего времени моделирования; это свидетельствует об устойчивости используемой численной схемы. Флуктуации полной энергии являют-

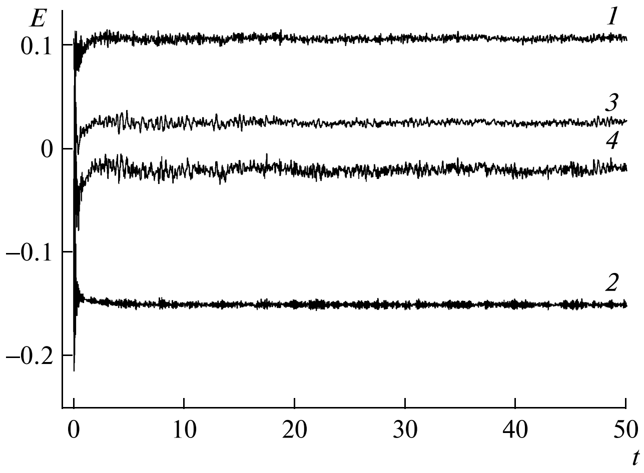

Рис. 2. Зависимости кинетической (1), магнитной (2), потенциальной (3) и полной (4) энергий в расчете на атом от времени при $T = 0.07$

ся естественной особенностью системы, находящейся в контакте с термостатом. Заметим однако, что такие флуктуации отсутствуют в работе [21] вследствие особенностей использованного там метода моделирования СРД.

На рис. 3 приведены спектральные плотности [31]

$$P(\nu_k) = (P_x(\nu_k) + P_y(\nu_k) + P_z(\nu_k))/3,$$
$$P_\alpha(\nu_k) = \sqrt{\frac{\delta t}{K}}\left|\sum_{n=0}^{K-1} f_\alpha(t_n) e^{-i2\pi\nu_k t_n}\right| \tag{10}$$

колебаний атома ($f_\alpha = p_\alpha/m$) и магнитного момента ($f_\alpha = e_\alpha$) в центре кластера ($\alpha \in \{x, y, z\}$, $\nu_k = k/K\delta t$, $t_n = n\delta t$, $k = 0, \ldots, K-1$; K и δt — число шагов и длина шага разностной схемы, применяемой при решении уравнения (2)) при $J'' = 0$.

Видно, что спектр решеточных колебаний локализован в узкой частотной области и не меняется качественно с повышением температуры (увеличение их спектральной плотности в этом случае вызвано ростом амплитуды колебаний с температурой). При низких температурах, $T < T_C$, центр тяжести плотности спектра колебаний магнитного момента расположен на частотах, примерно на порядок выше фононных (рис. 3*а*). При этом форма плотности спектра подобна плотности состояний магнонного спектра [32] в модели Гейзенберга на ГЦК-решетке, а пики в низкочастотной области обусловлены конечным размером кластера.

При увеличении температуры до значений $T \geq T_C$ магноны разрушаются, что приводит к качественному изменению спектра колебаний магнитного момента (рис. 3*б*). В этом случае в спектре колебаний магнитного момента преобладают низкие частоты, так что характерные времена колебаний в магнитной подсистеме становятся сопоставимы с фононными. Подобное явление наблюдалось при исследовании магнитной динамики в отсутствие решеточной подсистемы [10]. Снижение характерной частоты колебаний магнитного момента обусловлено переходом в парамагнитное состояние, что сопровождается падением величины эффективного локального магнитного поля, определяющего скорость прецессии магнитного момента.

При $J'' = 0$ взаимное влияние решеточной и магнитной подсистем слабо проявляется в спектральных свойствах. В частности, спектр магнитных колебаний при фиксированных положениях атомов практически не отличается от представленного на рис. 3. В случае $J'' \neq 0$ учет решеточных колебаний приводит к смещению спектральной плотности магнитных колебаний в область более низких (при $J'' < 0$) или высоких (при $J'' > 0$) частот. При этом не происходит качественного изменения ее вида, что свидетельствует об отсутствии резонанса между спиновыми и решеточными колебаниями [33]. Более ярко влияние спин-решеточной связи проявляется в термодинамических свойствах, а именно, в температурных зависимостях намагниченности, теплоемкости и теплового расширения (см. ниже).

3.2. Магнитные свойства

Величины, характеризующие равновесные свойства системы, были определены путем усреднения по времени для достаточно протяженной траектории движения $\{\mathbf{r}_i(t), \mathbf{e}_i(t)\}$. В частности, для удельной намагниченности кластера из N атомов справедливо выражение

$$M = \frac{1}{N}\left\langle\left|\sum_i^N \mathbf{e}_i\right|\right\rangle, \tag{11}$$

где угловые скобки означают усреднение по времени наблюдения после достижения системой состояния термодинамического равновесия. Однако при использовании формулы (11) для кластера с не очень большим N величина M остается существенно положительной практически при сколь угодно больших температурах [19]. Поэтому в расчетах мы использовали другое определение,

$$M = \sqrt{\left\langle\frac{1}{N_{ij}}\sum_{ij}\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{e}_j\right\rangle}, \tag{12}$$

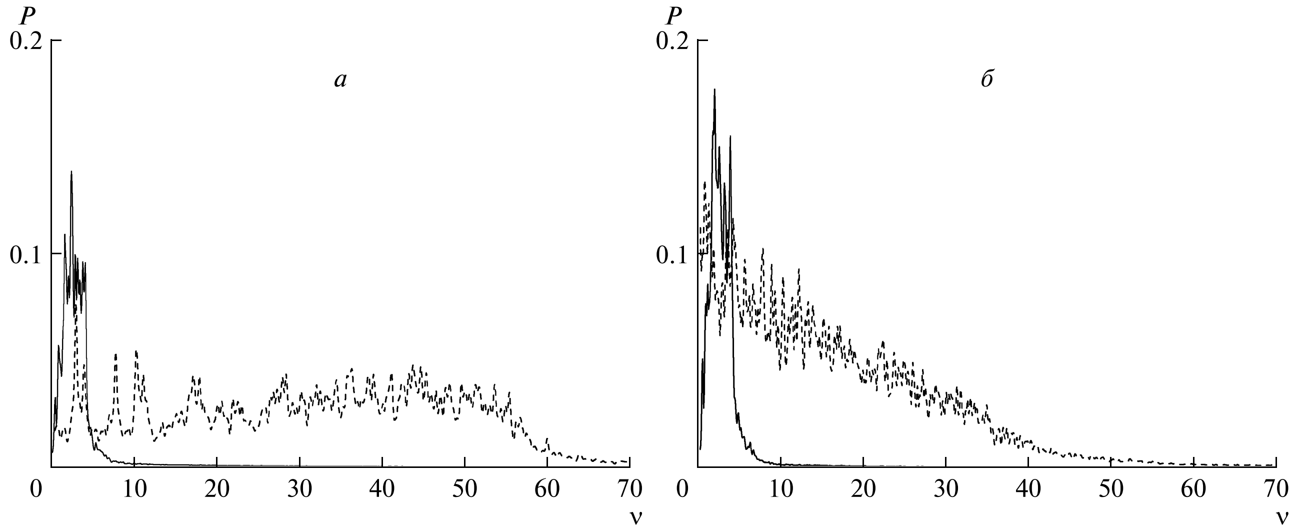

Рис. 3. Спектральная плотность для колебаний атома (сплошная линия) и магнитного момента (штрихи) при $T = 0.07$ (*а*) и при $T = 0.13$ (*б*) для обменного взаимодействия $J'' = 0$

где узлы i и j выбираются на максимально возможном для данного кластера расстоянии друг от друга, N_{ij} — число выбранных пар. Для бесконечно большой системы формулы (11) и (12) дают одинаковые результаты, но в случае конечного кластера второй способ более надежен (в частности, обеспечивает обращение в нуль величины M в высокотемпературной парамагнитной фазе).

На рис. 4*а,в* приведена намагниченность $M(T)$ как функция температуры, рассчитанная методом СРД (темные кружки) для различных значений параметра J''. Полученные кривые являются типичными для поведения намагниченности в модели Гейзенберга (см., например, [21]). Вследствие конечного размера модельного кристаллита на кривых $M(T)$ при $T = T_C$ отсутствует особенность, типичная для фазового перехода второго рода в бесконечной системе.

Фиксирование атомов в положениях, соответствующих параметру решетки a при данной температуре T, приводит к увеличению намагниченности M (светлые кружки) и температуры Кюри T_C для $J'' < 0$ (рис. 4*в*), к их уменьшению для $J'' > 0$ (рис. 4*а*) и не изменяет $M(T)$ при $J'' = 0$. Если дополнительно пренебречь тепловым расширением (т.е. положить $a = a(T = 0)$), это приведет к увеличению $M(T)$ и T_C (светлые треугольники на рис. 4*а,в*).

Таким образом, как видно из представленных результатов, существуют два механизма влияния решеточных колебаний на поведение $M(T)$: «статический» и «динамический». Первый определяется тепловым расширением кристаллита, сопровождающимся уменьшением обменной энергии вследствие того, что $J' < 0$, а второй — динамическим взаимодействием магнитных моментов с колебаниями кристаллической решетки, которое существенно зависит от величины и знака J''.

Зависимость корреляционной функции магнитных моментов для ближайших соседей $\langle \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_1 \rangle$ от температуры представлена на рис. 4*б,г* для тех же режимов, что и $M(T)$. Видно, что в рассматриваемой системе ближний магнитный порядок сохраняется для температур, существенно превышающих температуру Кюри. Замораживание решеточных колебаний приводит к увеличению ближнего порядка при $J'' < 0$ (рис. 4*г*) и его уменьшению при $J'' > 0$ (рис. 4*б*) для температур $T < T_C$; при $T > T_C$ пренебрежение решеточными колебаниями приводит к увеличению ближнего порядка независимо от знака J''. Дополнительное пренебрежение тепловым расширением увеличивает значение коррелятора $\langle \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_1 \rangle$ во всем диапазоне температур.

3.3. Теплоемкость

Мы полагаем, что внешнее давление $P = 0$. В этом случае теплоемкость $C_P = C_V = \partial E/\partial T$ и может быть вычислена через флуктуации энергии в равновесной системе [34]

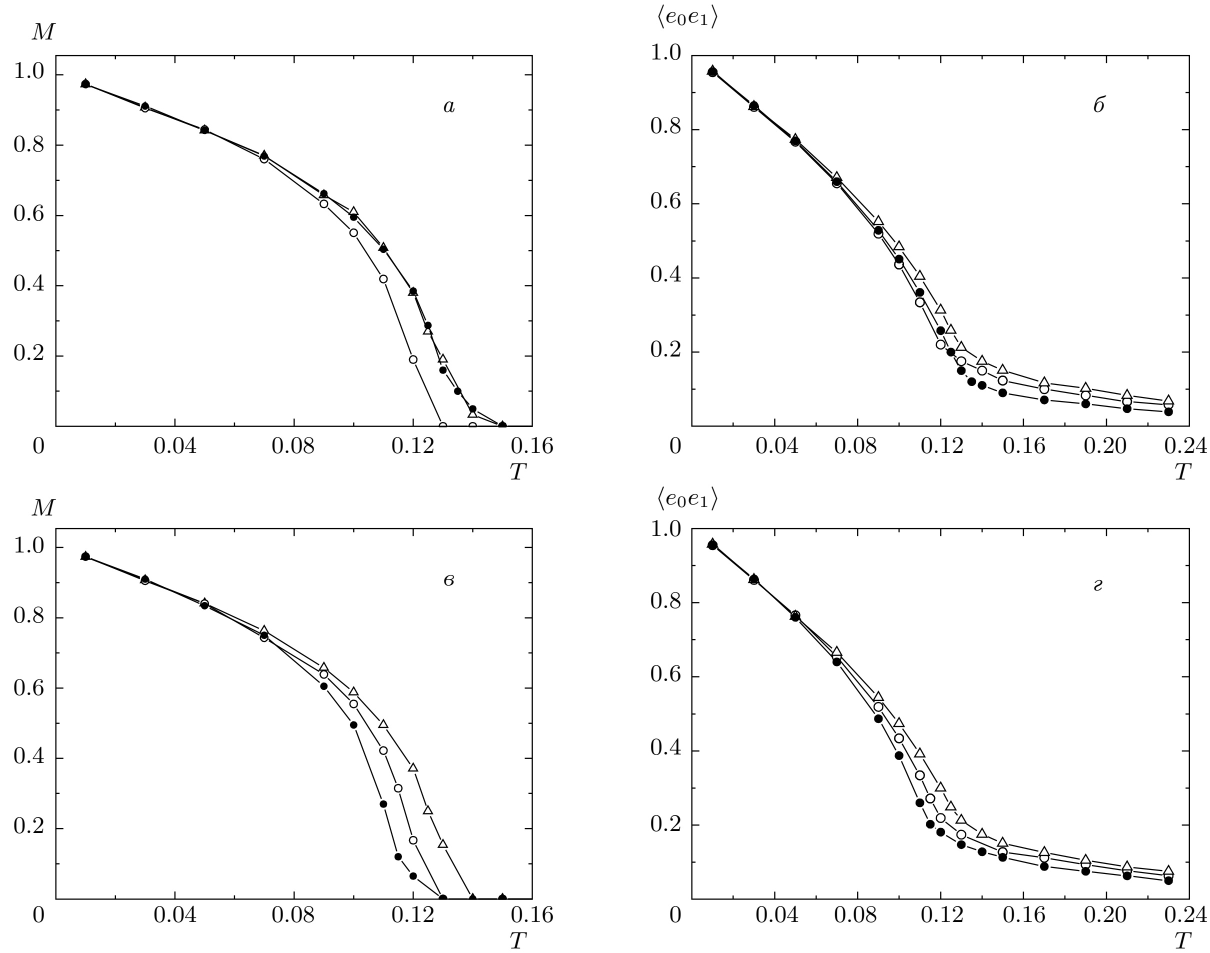

Рис. 4. Относительная намагниченность M (a,$в$) и спиновая корреляционная функция $\langle \mathbf{e}_0\mathbf{e}_1 \rangle$ ближайших соседей ($б$,$г$) в зависимости от температуры при наличии (•) и отсутствии (△, ○) колебаний атомов при параметре решетки a, соответствующем данной температуре, $a = a(T)$ (○) и температуре $T = 0$ (△) для обменного взаимодействия $J'' > 0$ (a,$б$) и $J'' < 0$ ($в$,$г$)

$$C(T) = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2}, \tag{13}$$

где усреднение по каноническому ансамблю Гиббса мы заменили на среднее по времени наблюдения. Результаты расчета $C(T)$ для рассматриваемой системы приведены на рис. 5. Пик на зависимости $C(T)$ при температуре Кюри является типичным для систем, испытывающих фазовый переход второго рода [34] (расходимость при $T = T_C$ отсутствует по причине конечного размера кластера). Как видно на рис. 5, в отсутствие колебаний решетки при $a = a(T = 0)$ наши расчеты дают температуру Кюри $T_C = 0.125$, что совпадает с известным результатом для модели Гейзенберга [30].

В пределе низких температур решеточный вклад в теплоемкость (рассчитанный при $J = 0$) стремится к постоянному значению $C = 3R$ (R — газовая постоянная). Такое поведение соответствует закону Дюлонга и Пти [34], описывающему фононный вклад в теплоемкость при температурах выше дебаевской. Поскольку в нашем рассмотрении не учитываются квантовые эффекты, такое поведение теплоемкости распространяется вплоть до 0 K.

Теплоемкость магнитной подсистемы в пределе низких температур стремится к значению $C = R$. Такое поведение соответствует системе из частиц с двумя степенями свободы (каковыми для сохраняющего свою длину вектора магнитного момента являются два угла сферической системы координат), на каждую из которых приходится энергия $k_BT/2$ [34]. Совпадение рассчитанных решеточной и магнитной теплоемкостей при низких температурах с извест-

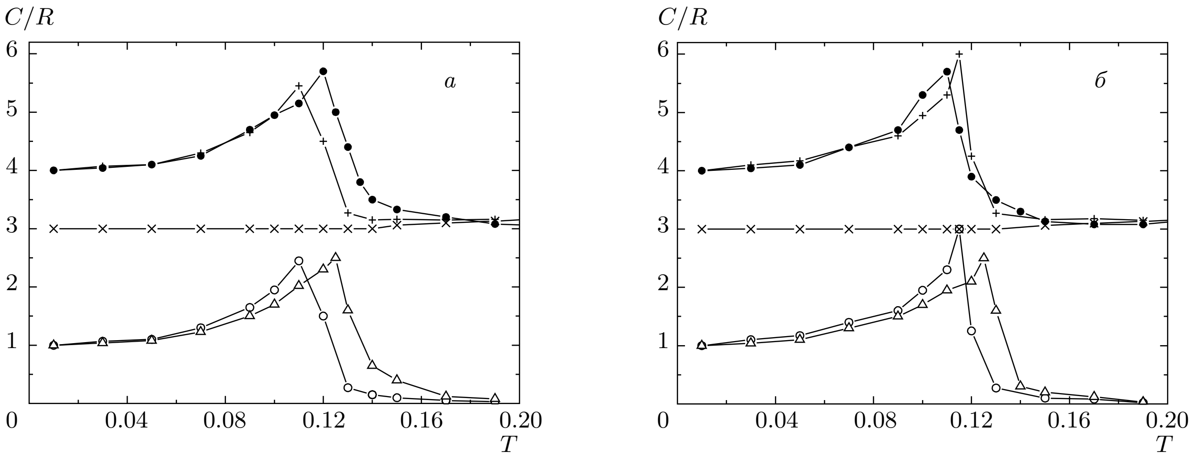

Рис. 5. Молярная теплоемкость в зависимости от температуры при наличии (•) и отсутствии (○, △) колебаний атомов при $a = a(T)$ (○) и $a = a(T = 0)$ (△) для обменного взаимодействия $J'' > 0$ (*а*) и $J'' < 0$ (*б*). Решеточный вклад в теплоемкость ($J = 0$) показан символами "×". Сумма решеточного (×) и магнитного (○) вкладов обозначена символом "+"

ными теоретическими значениями свидетельствует о корректности алгоритма моделирования термостата.

Как видно из сравнения кривых, описывающих магнитный вклад в теплоемкость (светлые кружки и треугольники на рис. 5), наличие теплового расширения приводит к снижению температуры Кюри. Полная теплоемкость спин-решеточной системы (темные кружки) для обменного взаимодействия с $J'' \neq 0$ не совпадает с величиной, получаемой суммированием независимых решеточного и магнитного вкладов, а взаимное расположение максимумов этих кривых зависит от знака J'' (ср. кривые, обозначенные "•" и "+" на рис. 5). Наблюдаемое нарушение аддитивности вкладов в теплоемкость является следствием наличия спин-решеточного взаимодействия в системе.

3.4. Тепловое расширение

На рис. 6*а*,*б* приведены результаты расчета расстояния до ближайших соседей d и коэффициента теплового расширения $\alpha = da/dT$ в зависимости от температуры (для ГЦК-решетки параметр $a = \sqrt{2}d$). При $J = 0$ (отсутствие магнитной подсистемы) параметр решетки линейно растет с температурой вследствие увеличения амплитуды колебаний решетки. Видно, что учет магнитной подсистемы оказывает существенное влияние на поведение $d(T)$ и $\alpha(T)$, приводя к уменьшению параметра решетки (особенно выраженному при $T < T_C$) и λ-пику на зависимости $\alpha(T)$. Это обусловлено наличием дополнительного (магнитного) вклада во внутреннее давление системы P_m, величину которого можно оценить, дифференцируя магнитную часть энергии (1) по объему и применяя теорему Геллмана–Фейнмана:

$$P_m \approx \frac{1}{N}\sum_{i\neq j}\frac{\partial J(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)}{\partial\Omega}\langle\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{e}_j\rangle, \qquad (14)$$

где $\Omega = a^3/4$ — объем, приходящийся на атом. Хорошо известен эффект магнитострикции, который заключается в том, что изменение намагниченности кристалла вызывает его деформацию. Заметим однако, что P_m определяется не намагниченностью всего образца, а ближним магнитным порядком, характеризуемым корреляционной функцией $\langle\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{e}_j\rangle$. Поэтому, в принципе, магнитный вклад в изменение объема может иметь место и при равной нулю полной намагниченности M.

При низких температурах ($T \ll T_C$) спины упорядочены ферромагнитно, так что $\langle\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{e}_j\rangle \sim 1$. При нашем выборе зависимости обменного интеграла от расстояния производная $\partial J/\partial\Omega < 0$ и поэтому магнитный вклад в давление P_m способствует сжатию решетки. Заметим, что разность между магнитной и немагнитной кривыми на рис. 4*а* пропорциональна величине спонтанной объемной магнитострикции [35]. С повышением температуры давление P_m уменьшается вследствие термического разупорядочения магнитных моментов, и параметр решетки приближается к значению, определяемому решеточ-

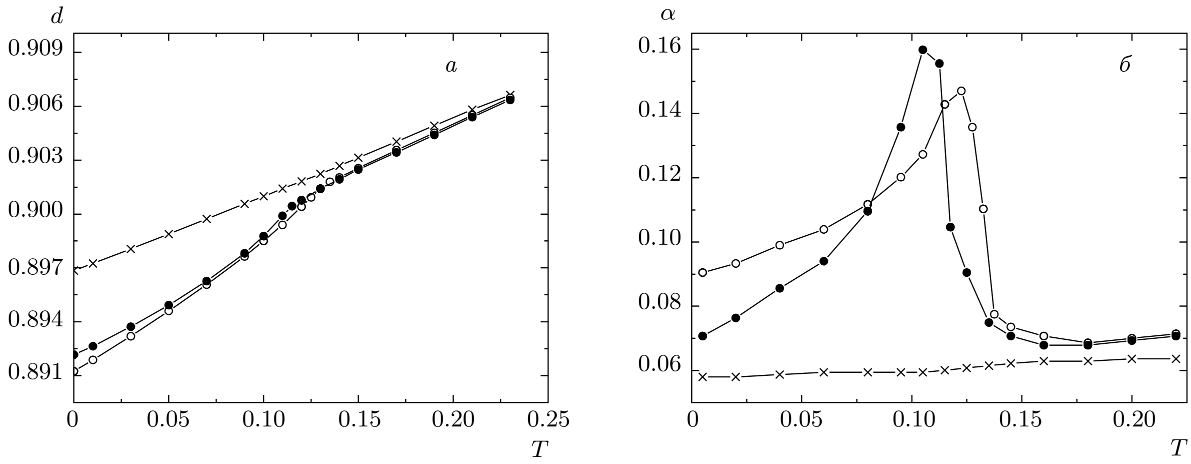

Рис. 6. Расстояние до ближайших соседей (a) и линейный коэффициент теплового расширения ($б$) в зависимости от температуры при $J'' > 0$ (○), $J'' < 0$ (●) и в отсутствие магнитной подсистемы (×)

ным вкладом в тепловое расширение. При температурах $T \sim T_C$ наклон зависимости $d(T)$ увеличивается, следуя поведению корреляционной функции $\langle \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_1 \rangle$ на рис. 4*б,г*. Это приводит к максимуму коэффициента теплового расширения α (рис. 6*б*) вблизи температуры Кюри (которая зависит от величины и знака J''), что качественно согласуется с зависимостью $\alpha(T)$, наблюдаемой для чистого никеля [26].

Выше температуры Кюри дальний магнитный порядок исчезает (рис. 4*a*), но сохраняется ближний магнитный порядок, так что $\langle \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_1 \rangle > 0$ (см. рис. 4*б*) и, следовательно, $P_m < 0$. Поэтому даже в парамагнитном состоянии величина $d(T)$ остается меньше, а $\alpha(T)$ — больше своих немагнитных аналогов. Как видно на рис. 6, поведение теплового расширения выше температуры Кюри практически не зависит от величины и знака J'', что объясняется слабой зависимостью коррелятора $\langle \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_1 \rangle$ в уравнении (14) от J'' при $T > T_C$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Путем обобщения схемы Нозе – Хувера на основе предложенного в работе [24] подхода разработан метод численного моделирования динамики спин-решеточной системы, находящейся в контакте с термостатом. Этот метод позволяет корректно исследовать динамическое поведение системы и рассчитывать ее термодинамические свойства, в частности — температурную зависимость теплоемкости, что до сих пор не было сделано в рамках СРД-подхода.

Предложенный метод применен к исследованию поведения связанных спиновой и решеточной подсистем при конечных температурах в ГЦК-никеле в рамках простой модели (1), включающей парное взаимодействие между атомами и магнитное взаимодействие в гейзенберговской форме с обменным интегралом $J(r)$. Показано, что средняя энергия сохраняется как в спиновой, так и в решеточной подсистемах в течение всего времени моделирования, что свидетельствует об устойчивости численной схемы. Установлено, что при повышении температуры выше точки Кюри магноны разрушаются, и в спектре магнитных возбуждений доминируют низкочастотные моды. При этом взаимное влияние решеточной и магнитной подсистем не приводит к качественному изменению спектра магнитных колебаний, вызывая лишь его смещение при $J'' \neq 0$.

Полученное поведение намагниченности в зависимости от температуры является типичным для ферромагнетиков, а ближний магнитный порядок сохраняется до температур, существенно больших, чем температура Кюри T_C. Наши результаты показывают, что существуют два механизма («статический» и «динамический») влияния решеточных колебаний на намагниченность, температуру Кюри и ближний магнитный порядок. Первый определяется тепловым расширением решетки и приводит, в частности, к уменьшению T_C при $J' < 0$. Второй механизм обусловлен взаимодействием колеблющихся магнитных моментов с колебаниями кристаллической решетки и приводит к сдвигу T_C, зависящему от величины и знака второй производной обменного интеграла $J(r)$.

По нашему мнению этот вывод является наиболее важным в настоящей работе. В литературе имеются разные мнения относительно влияния решеточных колебаний на магнитные свойства ферромагнетиков [15, 16]. В работе [16] при численном исследовании магнитного фазового перехода в железе был сделан вывод о том, что взаимодействие решеточной и магнитной подсистем оказывает слабое влияние на величину T_C. Согласно результатам нашей работы спин-решеточное взаимодействие может приводить к существенному сдвигу T_C, зависящему от величины и знака J''.

В пределе низких температур рассчитанное значение теплоемкости совпадает с известным из закона равнораспределения энергии по степеням свободы, что свидетельствует о корректности включения термостата в систему. Оказалось, что «статический» и «динамический» механизмы взаимодействия магнитной и решеточной подсистем также проявляются и в температурной зависимости теплоемкости. В частности, поведение $C(T)$ в случае $J'' \neq 0$ не определяется простым суммированием магнитного и решеточного вкладов, что часто используется при интерпретации результатов эксперимента.

Результаты расчета теплового расширения в спин-решеточной системе показывают, что влияние магнитной подсистемы на его величину зависит главным образом от первой производной обменного взаимодействия J'. При выбранной нами функциональной зависимости обменного интеграла (9), величина $J' < 0$, что приводит к магнитному сжатию решетки (т. е. к отрицательной спонтанной магнитострикции). Обнаружено, что даже при равной нулю полной намагниченности $M(T)$ выше температуры Кюри наблюдается отклонение от линейной зависимости, описывающей тепловое расширение немагнитной решетки, вследствие сохранения ближнего магнитного порядка при $T > T_C$.

Таким образом, использование предложенного метода СРД позволило изучить влияние взаимодействия между решеточной и магнитной подсистемами на термодинамические свойства ферромагнетиков. Также эта методика может быть полезна при моделировании магнито-структурных переходов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке УрО РАН (проекты №№ 12-П-2-1041, 12-Т-2-1001).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Уравнения метода СРД и выбор функций $\boldsymbol{\lambda}^r$, $\mathbf{V}_n$, $\boldsymbol{\lambda}^p$, $\mathbf{F}_n$, $\boldsymbol{\lambda}^e$, $\mathbf{G}_n$

В работе [24] авторы, рассматривая немагнитную часть системы (3), (7) с гамильтонианом $H(r,p) = \sum_l p_l^2/2 + U(\{r_l\})$ и используя две дополнительные степени свободы (η, ξ), предложили выбрать $\lambda^r(\eta) = \eta$, $V(r,p) = r^3$, $\lambda^p(\xi) = \xi^3$, $F(r,p) = p$, что приводит к уравнениям:

$$\frac{dr_l}{dt} = p_l - \eta r_l^3, \tag{A.1}$$

$$\frac{dp_l}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial r_l} - \xi^3 p_l, \tag{A.2}$$

$$\frac{d\eta}{dt} = A^r \sum_l \left(\frac{\partial U}{\partial r_l} r_l^3 - 3T r_l^2 \right), \tag{A.3}$$

$$\frac{d\xi}{dt} = A^p \sum_l \left(p_l^2 - T \right). \tag{A.4}$$

Этот выбор функций обеспечивает устойчивое поведение системы для потенциала типа «мексиканская шляпа»:

$$U(r) = -r^2 + r^4.$$

Однако проведенные нами тестовые вычисления показали, что для потенциалов $U(r)$, достаточно быстро стремящихся к нулю с ростом r (например, Леннарда–Джонса или Морзе) схема (A.1)–(A.4) может стать неустойчивой. Рассмотрим потенциал, который стремится к нулю как $U(r) \sim -1/r^n$ при больших r, где $n > 0$. Тогда $\partial U/\partial r \sim 1/r^{n+1}$, следовательно, из (A.3) следует

$$d\eta/dt \sim r^2(r^{-n} - 3T) < 0.$$

Таким образом, величина η убывает со временем и как только она станет отрицательной, возникнет положительная обратная связь в (A.1):

$$dr/dt \sim +|\eta| r^3,$$

вследствие чего $r \to +\infty$. Чтобы устранить неустойчивость, мы предлагаем выбрать

$$\lambda^r(\eta_n) = 0, \quad \mathbf{V}_n(r,p) = 0,$$

что фактически ведет к исключению переменных η_n из числа дополнительных степеней свободы и удалению опасного уравнения (A.3). Такой выбор согласуется и с физическими соображениями, согласно которым влияние термостата на i-ю частицу кластера должно приводить к дополнительной механической силе и, следовательно, появлению дополнительного слагаемого лишь в уравнении для $d\mathbf{p}_i/dt$, но не в уравнении для $d\mathbf{r}_i/dt$.

Для дальнейшей конкретизации вида выбираемых функций учтем, что исследуемый кластер является частью макроскопической системы, а термостатом является остальная часть системы. Поскольку межчастичное взаимодействие короткодействующее, термостат оказывает непосредственное влияние только на достаточно узкий слой вблизи границы кластера. Поэтому имеет смысл ввести в функции $\mathbf{F}_n$ и $\mathbf{G}_n$ явную зависимость от пространственной координаты, обеспечивающую убывание этих функций с расстоянием от границы так же быстро, как и силы взаимодействия между частицами.

Для этого мы строим функцию $\mathbf{F}_n$ следующим образом: учтем, что на частицу в точке $\mathbf{r}$ действует как сила со стороны ближайшего окружения, так и сила $\mathbf{f}^b(\mathbf{r})$, существующая благодаря периодическим граничным условиям, и постулируем, что функции

$$\mathbf{F}_n = \boldsymbol{\phi}_n(\mathbf{p}) f^{ext}(\mathbf{r}),$$

где $f^{ext}(\mathbf{r}) = |\mathbf{f}^b(\mathbf{r})| + b^f$, b^f — малое неотрицательное слагаемое, обеспечивающее более быстрое достижение теплового равновесия (заметим, что в традиционной реализации термостата Нозе – Хувера $f^{ext}(\mathbf{r}) = b^f$). При этом остается свобода выбора как числа дополнительных степеней свободы ξ_n, так и конкретного вида $\boldsymbol{\phi}_n(\mathbf{p})$. В данной работе при проведении расчетов мы использовали всего одну дополнительную степень свободы, обеспечивающую влияние термостата на решетку, ξ_1. Вид функции $\lambda^p(\xi_1)$ взят из работы [24]. Окончательный выбор функций таков:

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{p} f^{ext}(\mathbf{r}), \quad \lambda^p(\xi_1) = \xi_1^3. \tag{A.5}$$

Аналогично для спиновой подсистемы мы вводим функцию $h^{ext}(\mathbf{r}) = |\mathbf{h}^b(\mathbf{r})| + b^h$, где $\mathbf{h}^b(\mathbf{r})$ — магнитное поле в точке $\mathbf{r}$ внутри кластера, создаваемое благодаря периодическим граничным условиям, $b^h \geq 0$. Функции $\mathbf{G}_n$ записываем в виде $\mathbf{G}_n = \mathbf{g}_n(\mathbf{e}) h^{ext}(\mathbf{r})$, где первый сомножитель выбран как в работе [25]:

$$\begin{aligned} &\mathbf{g}_1(\mathbf{e}) = (e_z, e_x, e_y), \\ &\mathbf{g}_2(\mathbf{e}) = (e_y, -e_x, 0), \\ &\mathbf{g}_3(\mathbf{e}) = \left(e_x e_y e_z, \sqrt{3} e_y e_z, \sqrt{5} e_x e_y\right). \end{aligned} \tag{A.6}$$

Для спиновой подсистемы мы используем три дополнительные степени свободы ζ_n и выбираем функции $\lambda^e(\zeta_n)$ нечетными:

$$\lambda^e(\zeta_1) = \zeta_1, \quad \lambda^e(\zeta_2) = \zeta_2|\zeta_2|, \quad \lambda^e(\zeta_3) = \zeta_3^3. \tag{A.7}$$

В итоге система уравнений (3) и (7) принимает вид

$$\begin{aligned} &\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \\ &\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} - \xi^3 \mathbf{p}_i f^{ext}(\mathbf{r}_i), \\ &\frac{d\mathbf{e}_i}{dt} = \left[\left(\gamma \frac{\partial H}{\partial \mathbf{e}_i} + \right.\right. \\ &\qquad \left.\left. + \sum_{n=1}^{3} \lambda^e(\zeta_n) \mathbf{g}_n(\mathbf{e}_i) h^{ext}(\mathbf{r}_i)\right) \times \mathbf{e}_i\right], \\ &\frac{d\xi_1}{dt} = A_1^p \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}\mathbf{p}_i - 3T\right) f^{ext}(\mathbf{r}_i), \\ &\frac{d\zeta_n}{dt} = A_n^e \sum_i \mathbf{e}_i \cdot \left(\left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{e}_i} \times \mathbf{g}_n(\mathbf{e}_i)\right] - \right. \\ &\qquad \left. - T\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{e}_i} \times \mathbf{g}_n(\mathbf{e}_i)\right]\right) h^{ext}(\mathbf{r}_i), \end{aligned} \tag{A.8}$$

где, как и в работах [24, 25], константы $A_1^p = \kappa_1^p/NT$, $A_n^e = \kappa_n^e/NT$, N — число частиц в кластере. При выбранных нами параметрах b^f, b^h сила, действующая на частицу в центре кластера со стороны термостата, не превышала 10^{-3} от величины силы, действующей со стороны остальных частиц кластера, т. е. при таком подходе в центре кластера практически отсутствовало искусственное влияние переменных термостата на динамику частиц.

Поскольку при выводе уравнений движения (3) и (7) использовалось условие эргодичности (равенство среднего по каноническому ансамблю и среднего по времени), при проведении расчетов следует выбирать параметры таким образом, чтобы обеспечить его выполнение. Мы контролировали выполнение условий эргодичности, используя явную зависимость (4) функции распределения от дополнительных степеней свободы

$$\begin{aligned} &f(\{\xi_n, \zeta_n\}) \propto \\ &\qquad \propto \exp\left[-\frac{1}{T}\left(\sum_n \frac{\Lambda^p(\xi_n)}{A_n^p} + \frac{\Lambda^e(\zeta_n)}{A_n^e}\right)\right] \end{aligned} \tag{A.9}$$

(где все функции в правой части заданы формулами (5), (A.5) и (A.7)), а также точное соотношение для флуктуации кинетической энергии K имеющее место для канонического распределения [17]:

$$\langle K^2 \rangle - \langle K \rangle^2 = \frac{2}{3N} \langle K^2 \rangle. \tag{A.10}$$

При этом мы вычисляли функцию распределения $f(\{\xi_n, \zeta_n\})$, используя полученные из решения уравнений (А.8) функции $\xi_n(t)$ и $\zeta_n(t)$. Обеспечение условий эргодичности достигалось выбором параметров κ_1^p, κ_n^e, определяющих значения констант A_1^p и A_n^e.

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Zener, *Elasticity and Anelasticity*, University of Chicago Press, Chicago (1952).

2. E. F. Wasserman, in *Ferromagnetic Materials*, ed. by K. H. J. Buschow and E. P. Wohlfarth, North Holland, Amsterdam (1990), Vol. 5, p. 237.

3. M. Acet, H. Zahres, and E. F. Wassermann, Phys. Rev. B **49**, 6012 (1994).

4. H. C. Herper, E. Hoffmann, and P. Entel, Phys. Rev. B **60**, 3839 (1999).

5. M. Marsman and J. Hafner, Phys. Rev. B **66**, 224409 (2002).

6. S. V. Okatov, Yu. N. Gornostyrev, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **84**, 214422 (2011).

7. A. V. Ruban, M. I. Katsnelson, W. Olovsson et al., Phys. Rev. B **71**, 054402 (2005).

8. I. K. Razumov, Yu. N. Gornostyrev, and M. I. Katsnelson, Eur. Phys. Lett. **80**, 66001 (2007).

9. V. P. Antropov, M. I. Katsnelson, B. H. Harmon et al., Phys. Rev. B **54**, 1019 (1996).

10. X. Tao, D. P. Landau, T. C. Schulthess, and G. M. Stocks, Phys. Rev. Lett. **95**, 087207 (2005).

11. B. Skubic, J. Hellsvik, L. Nordström, and O. Eriksson, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 315203 (2008).

12. А. Н. Васильев, В. Д. Бучельников, Т. Такаги и др., УФН **173**, 577 (2003).

13. E. Pytte, Ann. Phys. **32**, 377 (1965).

14. S. V. Tyablikov and H. Konwent, Phys. Lett. **27A**, 130 (1968); H. Konwent, Phys. Lett. **28A**, 236 (1968).

15. Г. Конвент, Н. М. Плакида, ТМФ **3**, 135 (1970); Г. Конвент, Н. М. Плакида, ТМФ **8**, 119 (1971).

16. J. Yin, M. Eisenbach, D. M. Nicholson, and A. Rusanu, Phys. Rev. B **86**, 214423 (2012).

17. S. Nose, Progress of Theoretical Physics Supplement **103**, 1 (1991).

18. Ю. Н. Горностырев, М. И. Кацнельсон, С. В. Третьяков, А. В. Трефилов, *Стохастический подход к моделированию колебаний решетки в сильно ангармонических кристаллах. Возможное нарушение фононной картины колебаний*, Курчатовский институт, Москва (1994).

19. V. P. Antropov, S. V. Tretyakov, and B. N. Harmon, J. Appl. Phys. **81**, 3961 (1997).

20. Д. Ф. Кузнецов, *Численное моделирование стохастических дифференциальных уравнений и стохастических интегралов*, Наука, Санкт-Петербург (1999).

21. Pui-Wai Ma, C. H. Woo, and S. L. Dudarev, Phys. Rev. B **78**, 024434 (2008).

22. Pui-Wai Ma, S. L. Dudarev, and C. H. Woo, Phys. Rev. B **85**, 184301 (2012).

23. K. Aoki, M. Yoneya, and H. Yokoyama, Phys. Rev. E **81**, 021701 (2010).

24. D. Kusnezov, A. Bulgac, and W. Bauer, Ann. Phys. **204**, 155 (1990).

25. D. Kusnezov and A. Bulgac, Ann. Phys. **214**, 180 (1992).

26. С. В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, Москва (1971).

27. M. Parrinello and A. Rahman, Phys. Rev. Lett. **45**, 1196 (1980).

28. P. M. Morse, Phys. Rev. **34**, 57 (1929).

29. L. A. Girifalco and V. G. Weizer, Phys. Rev. **114**, 687 (1959).

30. R. G. Bowers and M. E. Woolf, Phys. Rev. B **177**, 917 (1969); M. Ferer, M. A. Moore, and M. Wortis, Phys. Rev. B **4**, 3954 (1971).

31. С. Л. Марпл-мл, *Цифровой спектральный анализ и его приложения*, Мир, Москва (1990).

32. R. H. Swendsen and H. Callen, Phys. Rev. B **6**, 2860 (1972).

33. *Физика магнитных диэлектриков*, Наука, Ленинград (1974).

34. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика, Т. V, Статистическая физика, часть 1*, Наука, Москва (1976).

35. S. Khmelevskyi and P. Mohn, Phys. Rev. B **69**, 140404(R) (2004).