

УДК 51–72:519.677:537.9

doi 10.26089/NumMet.v17r444

КОРРЕЛЯТОР СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ И ЕГО ФУРЬЕ-ОБРАЗ В ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ

Г. В. Парадеженко¹, Н. Б. Мельников², Б. И. Резер³

Выведена формула, связывающая магнитный вклад в сечение рассеяния поляризованных нейтронов с фурье-образом коррелятора спиновой плотности. Описан метод расчета коррелятора спиновой плотности и его фурье-образа в динамической теории спиновых флуктуаций. Приведены расчетные формулы и программные модули на языке Фортран. На примере железа показано, что численные результаты для фурье-образа коррелятора хорошо согласуются с экспериментом.

Ключевые слова: функция рассеяния, спиновые флуктуации, динамическая восприимчивость, магнитное рассеяние нейтронов.

1. Введение. Коррелятор спиновой плотности представляет интерес в связи с исследованием магнитного ближнего порядка в металлах (см., например, [1]). Фурье-образ коррелятора спиновой плотности связан с магнитным вкладом в сечение рассеяния поляризованных нейтронов (см., например, [2]), который непосредственно измеряется в эксперименте [3]. Вывод формулы для магнитного вклада в рассеяние дан в нашей работе [4]. В настоящей статье рассматривается более простой вывод этой формулы, не использующий общего выражения для сечения рассеяния с произвольным направлением поляризации.

Непосредственное восстановление спинового коррелятора на основе одних лишь данных эксперимента является некорректной задачей. Действительно, восстановление исходной функции в равномерной метрике неустойчиво по отношению к ошибкам измерений коэффициентов Фурье (см., например, [5]). Для построения регуляризирующего алгоритма необходимо знать величину погрешности измерений (см., например, [6]). В эксперименте по рассеянию нейтронов погрешность измерений известна не для всех коэффициентов Фурье спинового коррелятора, поскольку их измерение при малых значениях волнового вектора невозможно [7]. В связи с этим применение методов регуляризации для вычисления спинового коррелятора по данным эксперимента затруднительно.

Интерпретация эксперимента по поляризованному магнитному рассеянию нейтронов в рамках теории спиновых волн дает большую (примерно 15–20 Å) область ближнего порядка в ферромагнитных металлах в парамагнитной области [7]. Однако такая интерпретация является спорной (см., например, [8]). В рамках динамической теории спиновых флуктуаций (ДТСФ) [9] коррелятор спиновой плотности и его фурье-образ удастся вычислить явно при различных температурах [4, 10, 11]. Исходными данными являются плотность электронных состояний рассматриваемого металла и значение его намагниченности при $T = 0$. Показано, что расчеты хорошо согласуются с экспериментом по поляризованному рассеянию нейтронов в парамагнитной области [7, 12].

В настоящей работе выполнен расчет фурье-образа спинового коррелятора ОЦК-железа в оптимальном гауссовом приближении ДТСФ и проведено сравнение с экспериментом при большем, чем в работе [11], наборе температур.

Изложение построено следующим образом. В разделе 2 дан вывод формулы, связывающей магнитный вклад в сечение рассеяния нейтронов с фурье-образом коррелятора спиновой плотности. В разделе 3 представлены основные расчетные формулы для фурье-образа коррелятора спиновой плотности в ДТСФ. В разделе 4 дано сравнение численных результатов с экспериментом по поляризованному магнитному рассеянию. В приложении А приведены программные модули для расчета коррелятора спиновой плотности и его фурье-образа в ДТСФ, реализованные на языке Фортран. Описанные программные модули были использованы для расчетов в наших работах [4, 11] и в настоящей работе.

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Ленинские горы, д. 1, стр. 52, 119991, Москва; аспирант, e-mail: gparadezhenko@cs.msu.ru

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Ленинские горы, д. 1, стр. 52, 119991, Москва; доцент, e-mail: melnikov@cs.msu.ru

³ Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, 620990, Екатеринбург; ст. науч. сотр., e-mail: reser@imp.uran.ru

2. Магнитное рассеяние нейтронов. Эксперимент по рассеянию нейтронов состоит в следующем. Коллимированный пучок монохроматических нейтронов посылается на образец, в нашем случае — кристалл. В результате взаимодействия с образцом нейтроны отклоняются от направления пучка (рассеиваются) с некоторой вероятностью в каждом направлении. Количественной характеристикой для описания этого процесса является сечение рассеяния (см., например, [13, 14]).

2.1. Дифференциальное сечение рассеяния. Дважды дифференциальное сечение рассеяния определяется как отношение

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega'dE_{k'}} = \left(\begin{array}{c} \text{число нейтронов, рассеянных в единицу времени} \\ \text{в телесный угол } d\Omega', \text{ с энергией} \\ \text{в конечном состоянии между } E_{k'} \text{ и } E_{k'} + dE_{k'} \end{array} \right) / \Phi d\Omega'dE_{k'}, \quad (1)$$

где Φ — плотность потока падающих нейтронов, которая определяется как число нейтронов через единицу площади в единицу времени (здесь и далее штрихом обозначаем величины после рассеяния). В борновском приближении дифференциальное сечение (1) задается формулой (см., например, [14, 15])

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega'dE_{k'}} = \frac{k'}{k} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \sum_{\sigma\lambda} P_{\sigma\lambda} \sum_{\sigma'\lambda'} \left| \langle \sigma'\lambda' | V_{-\kappa} | \sigma\lambda \rangle \right|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + E_k - E_{k'}). \quad (2)$$

Здесь \mathbf{k} и $E_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$ — волновой вектор и энергия нейтрона (m — масса нейтрона), σ — спиновое квантовое число нейтрона ($\sigma = \downarrow, \uparrow$ или ± 1), λ и E_λ — состояние и энергия кристалла, P — вероятность соответствующего состояния, дельта-функция отвечает закону сохранения энергии и $V_{-\kappa} = \int V(\mathbf{r}) e^{i\kappa\mathbf{r}} d\mathbf{r}$ — фурье-образ потенциала взаимодействия $V(\mathbf{r})$, где $\kappa = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ — вектор рассеяния.

2.2. Неполяризованное магнитное рассеяние. Нас интересует магнитное рассеяние, возникающее в результате взаимодействия между спином нейтрона и спинами электронов в кристалле. В случае *неполяризованного* магнитного рассеяния формула (2) принимает вид (см., например, [15]; подробный вывод см. в [4])

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega'dE_{k'}} = N \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{\kappa}^\alpha \hat{\kappa}^\beta) S^{\alpha\beta}(\kappa, \omega), \quad (3)$$

где N — число узлов кристаллической решетки, m_e и $-e$ — масса и заряд электрона, c — скорость света, $\gamma \approx 1.913$, $\hat{\kappa} = \kappa / \kappa$ — единичный вектор,

$$S^{\alpha\beta}(\kappa, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar N} \int \langle s_{\kappa}^\alpha(t) s_{-\kappa}^\beta \rangle e^{i\omega t} dt, \quad \alpha, \beta = x, y, z, \quad (4)$$

— *функция рассеяния*. Здесь $s_{\kappa}^\alpha(t) = e^{iHt/\hbar} s_{\kappa}^\alpha e^{-iHt/\hbar}$ — фурье-образ α -компоненты оператора спиновой плотности в представлении Гейзенберга, а угловые скобки означают каноническое среднее: $\langle \dots \rangle = Z^{-1} \text{Tr} (\dots e^{-H/T})$, где $Z = \text{Tr} e^{-H/T}$ — статсумма, H — гамильтониан системы взаимодействующих электронов, T — температура (в энергетических единицах).

Поскольку мы рассматриваем рассеяние в *парамагнитной* области, формула (3) упрощается. В парамагнитном случае $S^{\alpha\beta}(\kappa, \omega) = S^z(\kappa, \omega) \delta_{\alpha\beta}$. Обозначая $S(\kappa, \omega) = 3S^z(\kappa, \omega)$, с учетом $N = \mathcal{V} / \Omega_{\text{WS}}$ (\mathcal{V} — объем кристалла, Ω_{WS} — элементарная ячейка Вигнера–Зейтца) записываем формулу (3) в виде

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega'dE_{k'}} = 2 \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{1}{3} \frac{\mathcal{V}}{\Omega_{\text{WS}}} \frac{k'}{k} S(\kappa, \omega). \quad (5)$$

Непосредственное применение формулы (5) затруднительно, поскольку в эксперименте необходимо выделить магнитный вклад в рассеяние.

2.3. Поляризованное магнитное рассеяние. *Поляризованное* нейтронное рассеяние позволяет получить магнитный вклад в сечение рассеяния. Рассмотрим эксперимент по одноосному поляризационному анализу, в котором спин пучка нейтронов после рассеяния меняется на противоположный. В этом случае формула для сечения (2) для магнитного рассеяния принимает вид (подробнее см. [4])

$$\frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega'dE_{k'}} = 4 \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\lambda\lambda'} P_\lambda \left| \langle \downarrow \lambda' | \mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} | \uparrow \lambda \rangle \right|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + E_k - E_{k'}), \quad (6)$$

где \mathbf{S} — оператор спина нейтрона, а $\tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} = \mathbf{s}_{-\kappa} - (\hat{\kappa} \cdot \mathbf{s}_{-\kappa})\hat{\kappa}$ — составляющая вектора $\mathbf{s}_{-\kappa}$, перпендикулярная направлению κ . Получим формулу для магнитного вклада в рассеяние нейтронов, используя два направления поляризации \mathbf{P} : вдоль вектора рассеяния κ и перпендикулярно вектору κ .

Систему координат выбираем так, чтобы ось x была направлена вдоль вектора рассеяния κ , т.е. $\hat{\kappa} = \kappa/\kappa = (1, 0, 0)$. Сначала рассмотрим пучок, поляризованный *вдоль вектора κ* ($\mathbf{P} \parallel \kappa$). Это означает, что все нейтроны в налетающем пучке имеют состояние со спином “вверх”, а в рассеянном пучке — со спином “вниз” *относительно оси x* . Соответствующие спиновые функции имеют вид (см., например, [16])

$$|\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Вычисляем матричный элемент в выражении (6) по спиновым состояниям (7). Используя выражение для оператора спина нейтрона $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$, где $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — вектор матриц Паули, имеем $\mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \tilde{s}_{-\kappa}^{\alpha}$. Следовательно, с учетом (7) получаем

$$\langle \downarrow_x | \mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} | \uparrow_x \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \langle \downarrow_x | \sigma_{\alpha} | \uparrow_x \rangle \tilde{s}_{-\kappa}^{\alpha} = \frac{1}{2} (\tilde{s}_{-\kappa}^z - i\tilde{s}_{-\kappa}^y).$$

В результате формула (6) принимает вид

$$\left(\frac{d^2 \sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE_{k'}} \right)_{\parallel} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\lambda\lambda'} P_{\lambda} \langle \lambda | \tilde{s}_{\kappa}^z + i\tilde{s}_{\kappa}^y | \lambda' \rangle \langle \lambda' | \tilde{s}_{-\kappa}^z - i\tilde{s}_{-\kappa}^y | \lambda \rangle \delta(E_{\lambda} - E_{\lambda'} + E - E').$$

Далее, вычисляя среднее и сумму по состояниям λ и λ' (подробнее см. [4]), приходим к формуле

$$\left(\frac{d^2 \sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE_{k'}} \right)_{\parallel} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \left[\langle \tilde{s}_{\kappa}^z(t) \tilde{s}_{-\kappa}^z \rangle + \langle \tilde{s}_{\kappa}^y(t) \tilde{s}_{-\kappa}^y \rangle - i \left(\langle \tilde{s}_{\kappa}^z(t) \tilde{s}_{-\kappa}^y \rangle - \langle \tilde{s}_{\kappa}^y(t) \tilde{s}_{-\kappa}^z \rangle \right) \right] e^{i\omega t} dt. \quad (8)$$

Теперь рассмотрим пучок, поляризованный *вдоль оси z* , т.е. перпендикулярно κ ($\mathbf{P} \perp \kappa$). В этом случае спиновые функции имеют вид

$$|\uparrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Используя (9), получаем $\langle \downarrow_z | \mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} | \uparrow_z \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \langle \downarrow_z | \sigma_{\alpha} | \uparrow_z \rangle \tilde{s}_{-\kappa}^{\alpha} = \frac{1}{2} (\tilde{s}_{-\kappa}^x + i\tilde{s}_{-\kappa}^y)$. После вычисления среднего и суммы по состояниям λ и λ' , при такой поляризации мы приходим к формуле

$$\left(\frac{d^2 \sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE_{k'}} \right)_{\perp} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \left[\langle \tilde{s}_{\kappa}^x(t) \tilde{s}_{-\kappa}^x \rangle + \langle \tilde{s}_{\kappa}^y(t) \tilde{s}_{-\kappa}^y \rangle + i \left(\langle \tilde{s}_{\kappa}^x(t) \tilde{s}_{-\kappa}^y \rangle - \langle \tilde{s}_{\kappa}^y(t) \tilde{s}_{-\kappa}^x \rangle \right) \right] e^{i\omega t} dt. \quad (10)$$

С учетом $\hat{\kappa} = (1, 0, 0)$ имеем $\tilde{\mathbf{s}}_{\kappa} = (0, s_{\kappa}^y, s_{\kappa}^z)$. Тогда сечение (8) принимает вид

$$\left(\frac{d^2 \sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE_{k'}} \right)_{\parallel} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \left[\langle s_{\kappa}^z(t) s_{-\kappa}^z \rangle + \langle s_{\kappa}^y(t) s_{-\kappa}^y \rangle - i \left(\langle s_{\kappa}^z(t) s_{-\kappa}^y \rangle - \langle s_{\kappa}^y(t) s_{-\kappa}^z \rangle \right) \right] e^{i\omega t} dt, \quad (11)$$

а сечение (10) принимает вид

$$\left(\frac{d^2 \sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE_{k'}} \right)_{\perp} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \langle s_{\kappa}^y(t) s_{-\kappa}^y \rangle e^{i\omega t} dt. \quad (12)$$

В парамагнитной области для изотропного кристалла при $\alpha \neq \beta$ имеем $\langle s_{\kappa}^{\alpha}(t) s_{-\kappa}^{\beta} \rangle = 0$ (см. [4]). В результате сечение (11) записывается в виде

$$\left(\frac{d^2 \sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE_{k'}} \right)_{\parallel} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \left[\langle s_{\kappa}^y(t) s_{-\kappa}^y \rangle + \langle s_{\kappa}^z(t) s_{-\kappa}^z \rangle \right] e^{i\omega t} dt. \quad (13)$$

Рассмотрим теперь разность между сечениями рассеяния $\mathbf{P} \parallel \boldsymbol{\kappa}$ и $\mathbf{P} \perp \boldsymbol{\kappa}$. Поскольку ядерное рассеяние не зависит от поляризации, остается только разность магнитных вкладов (13) и (12):

$$\left(\frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE_{k'}}\right)_{\parallel} - \left(\frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE_{k'}}\right)_{\perp} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right)^2 \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \langle s_{\boldsymbol{\kappa}}^z(t) s_{-\boldsymbol{\kappa}}^z \rangle e^{i\omega t} dt.$$

Переходя к функции рассеяния (4), с учетом $S(\boldsymbol{\kappa}, \omega) = 3S^z(\boldsymbol{\kappa}, \omega)$ и $N = \mathcal{V}/\Omega_{\text{WS}}$ получаем

$$\left(\frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE_{k'}}\right)_{\parallel} - \left(\frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE_{k'}}\right)_{\perp} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right)^2 \frac{1}{3} \frac{\mathcal{V}}{\Omega_{\text{WS}}} \frac{k'}{k} S(\boldsymbol{\kappa}, \omega). \quad (14)$$

В эксперименте по нейтронному рассеянию [3, 7] измеряется суммарное рассеяние по всем энергиям. Интегрируя (14) по энергии $E_{k'} = E_k - \hbar\omega$, получаем

$$\left(\frac{d\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega'}\right)_{\parallel} - \left(\frac{d\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega'}\right)_{\perp} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right)^2 \frac{\hbar}{3} \frac{\mathcal{V}}{\Omega_{\text{WS}}} \frac{k'}{k} \int S(\boldsymbol{\kappa}, \omega) d\omega. \quad (15)$$

Обращая преобразование Фурье (4), имеем $\frac{1}{\hbar N} \langle s_{\boldsymbol{\kappa}}^{\alpha}(t) s_{-\boldsymbol{\kappa}}^{\alpha} \rangle = \int S^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega$. Используя это выражение при $t = 0$, записываем формулу (15) в виде

$$\left(\frac{d\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega'}\right)_{\parallel} - \left(\frac{d\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega'}\right)_{\perp} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right)^2 \frac{1}{3g^2\mu_{\text{B}}^2} \frac{\mathcal{V}}{\Omega_{\text{WS}}} \frac{k'}{k} M^2(\boldsymbol{\kappa}), \quad (16)$$

где $g \approx 2$ — электронный g -фактор, μ_{B} — магнетон Бора и

$$M^2(\boldsymbol{\kappa}) = \left(\hbar \int S(\boldsymbol{\kappa}, \omega) d\omega\right) g^2 \mu_{\text{B}}^2 = \frac{1}{N} \langle s_{\boldsymbol{\kappa}} s_{-\boldsymbol{\kappa}} \rangle g^2 \mu_{\text{B}}^2 \quad (17)$$

является квадратом эффективного магнитного момента.

3. Расчет фурье-образа коррелятора спиновой плотности в ДТСФ. Формула (16) устанавливает связь между экспериментальной величиной (магнитным вкладом в сечение рассеяния) и квадратом эффективного момента $M^2(\boldsymbol{\kappa})$. Квадрат эффективного момента $M^2(\boldsymbol{\kappa})$ связан формулой (17) с фурье-образом коррелятора спиновой плотности $\langle s_{\boldsymbol{\kappa}} s_{-\boldsymbol{\kappa}} \rangle$, который может быть вычислен в рамках ДТСФ.

Фурье-образ коррелятора спиновой плотности $\langle s_{\mathbf{q}}^{\alpha} s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle$ выражается через мнимую часть магнитной восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\varepsilon)$ с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы (см., например, [15]):

$$\langle s_{\mathbf{q}}^{\alpha} s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int B(\varepsilon) \text{Im} \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (18)$$

где $B(\varepsilon) = (e^{\varepsilon/T} - 1)^{-1}$ — функция Бозе ($\hbar = 1$, а восприимчивость выражена в единицах $\frac{1}{2} g^2 \mu_{\text{B}}^2$). В ДТСФ формула (18) принимает вид

$$\langle s_{\mathbf{q}}^{\alpha} s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle = \frac{NT}{2u\lambda_{\text{L}}^{\alpha}} \frac{1}{a_{\alpha}^2 + b_{\alpha}^2(q/q_{\text{B}})^2} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{c_{\alpha}}{a_{\alpha}^2 + b_{\alpha}^2(q/q_{\text{B}})^2}, \quad (19)$$

а в высокотемпературном приближении ДТСФ принимает вид [4, 10]

$$\langle s_{\mathbf{q}}^{\alpha} s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle = \frac{NT}{2u\lambda_{\text{L}}^{\alpha}} \frac{1}{a_{\alpha}^2 + b_{\alpha}^2(q/q_{\text{B}})^2}. \quad (20)$$

В формулах (19) и (20) u — константа межэлектронного взаимодействия, q_{B} — радиус сферы равновеликой зоне Бриллюэна, а $\lambda_{\text{L}}^{\alpha}$, a_{α}^2 , b_{α}^2 и c_{α} — параметры, которые вычисляются самосогласованно при каждой температуре T .

В ДТСФ при каждой температуре T решается система четырех нелинейных уравнений относительно химического потенциала μ , среднего спинового момента \bar{s}^z , средних квадратов спиновых флуктуаций ζ^x и ζ^z (подробнее о численных методах решения системы уравнений ДТСФ см. [17]):

$$n_{\text{e}} = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}, \quad \bar{s}^z = \frac{1}{2} (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}), \quad \zeta^{\alpha} = \frac{uT}{2\lambda_{\text{L}}^{\alpha}} I^{\alpha}, \quad \alpha = x, z,$$

где n_e — полное число d-электронов (на атом),

$$n_\sigma = \frac{N_d}{\pi} \int \text{Im } g_\sigma(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (21)$$

— число d-электронов с проекцией спина σ (N_d — число вырожденных d-полос) и

$$I^\alpha = \int_0^1 \frac{1}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{c_\alpha}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} 3k^2 dk.$$

В формуле (21) $f(\varepsilon) = (e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1)^{-1}$ — функция Ферми,

$$g_\sigma(\varepsilon) = \int \frac{\nu(\varepsilon')}{\varepsilon - \sigma \langle V^z \rangle - \Delta \Sigma_\sigma(\varepsilon) - \varepsilon'} d\varepsilon'$$

— средняя одноузловая функция Грина, где $\nu(\varepsilon)$ — немагнитная плотность электронных состояний, $\langle V^z \rangle = -u\bar{s}z$ — среднее обменное поле, а

$$\Delta \Sigma_\sigma(\varepsilon) = \frac{g_\sigma(\varepsilon)\zeta^z}{1 + 2\sigma \langle V^z \rangle g_\sigma(\varepsilon)} + 2g_{\bar{\sigma}}(\varepsilon)\zeta^x, \quad \bar{\sigma} = -\sigma,$$

— флуктуационный вклад в собственно-энергетическую часть. Параметры λ_L^α , a_α^2 , b_α^2 и c_α вычисляются по формулам

$$\lambda_L^\alpha = 1 - u\chi_L^{0\alpha}(0), \quad a_\alpha^2 = \frac{\lambda_0^\alpha}{\lambda_L^\alpha}, \quad b_\alpha^2 = \frac{1 - a_\alpha^2}{0.6}, \quad c_\alpha = \frac{u\varphi_L^\alpha \pi^2 T}{6\lambda_L^\alpha},$$

где $\chi_L^{0\alpha}(0)$ — локальная неусиленная восприимчивость, φ_L^α — ее производная по энергии, $\lambda_0^\alpha = 1 - u\chi_0^{0\alpha}(0)$, а $\chi_0^{0\alpha}(0)$ — однородная неусиленная восприимчивость. Величины $\chi_L^{0\alpha}(0)$ и φ_L^α вычисляются по формулам:

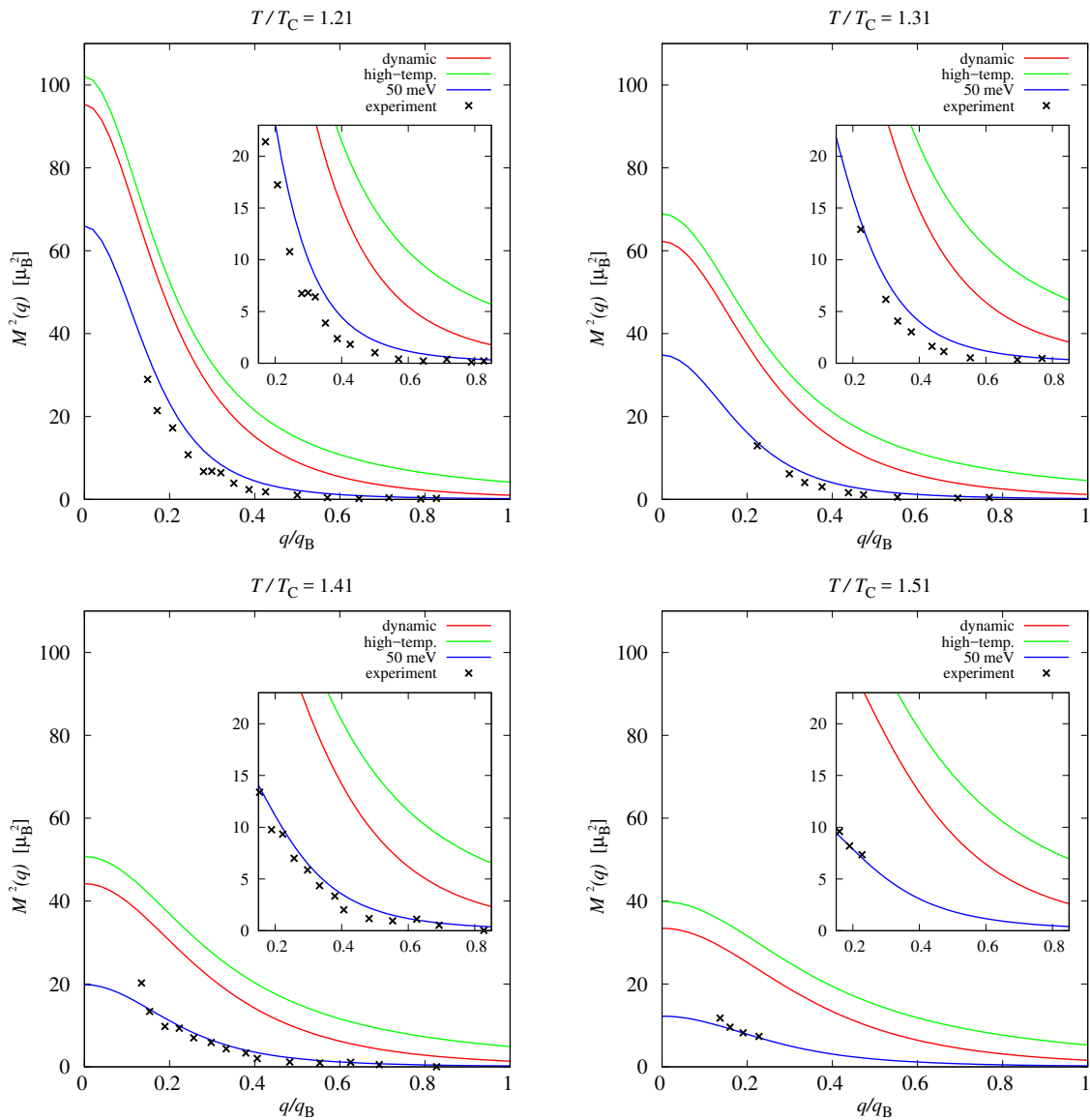
$$\begin{aligned} \chi_L^{0x}(0) &= -\frac{N_d}{\pi} \int \text{Im } (g_\uparrow g_\downarrow) f d\varepsilon, & \varphi_L^x &= \frac{N_d}{\pi} \int \text{Im } g_\uparrow \text{Im } g_\downarrow \left(-\frac{df}{d\varepsilon} \right) d\varepsilon, \\ \chi_L^{0z}(0) &= -\frac{N_d}{2\pi} \int (\text{Im } g_\uparrow^2 + \text{Im } g_\downarrow^2) f d\varepsilon, & \varphi_L^z &= \frac{N_d}{2\pi} \int [(\text{Im } g_\uparrow)^2 + (\text{Im } g_\downarrow)^2] \left(-\frac{df}{d\varepsilon} \right) d\varepsilon \end{aligned}$$

(методы вычисления интегралов с функцией Ферми и ее производной см. в [18, 19]).

4. Численные результаты и сравнение с экспериментом. Сравним результаты расчета квадрата эффективного момента (17) в ДТСФ с экспериментом по поляризованному магнитному рассеянию [3] на примере ОЦК-железа. Исходными данными расчета в ДТСФ для ОЦК-железа являются значение магнитного момента $m(0) = 2.217 \mu_B$ [20] и плотность электронных состояний $\nu(\varepsilon)$ при $T = 0$, которая рассчитана методом Корринги–Кона–Ростокера с самосогласованным потенциалом, взятым из [21]. Далее плотность состояний сглаживается с функцией Лоренца полуширины $\delta = 0.001$ для того, чтобы учесть затухание одноэлектронных состояний (см., например, [19]). Константа межэлектронного взаимодействия u , определяемая из уравнений ДТСФ при $T = 0$, получилась равной 1.06 eV. Радиус сферы, равновеликой зоне Бриллюэна, есть $q_B = \left(\frac{3\Omega_{BZ}}{4\pi} \right)^{1/3} = 1.71 \text{ \AA}^{-1}$. Все расчеты выполнены в гауссовом приближении ДТСФ (подробности см. в [9, 22]).

При сравнении квадрата эффективного момента (17) с экспериментом [7, 12] следует учитывать три обстоятельства. Во-первых, в рамках ДТСФ рассматривается исключительно *приближенная* спиновая плотность, которая отличается от *точной* магнитным форм-фактором $F(q)$ (подробности см. в [4]). В работе [7] приводятся значения квадрата точного эффективного момента $M^2(q) |F(q)|^2$, где для железа используется значение $|F(q)|^2 \approx 0.81$ (см. [12]). Во-вторых, учет колебаний кристаллической решетки дает фактор Дебая–Валлера e^{-2W} в формуле для сечения рассеяния (подробнее см. [4]). Для ОЦК-железа множитель e^{-2W} близок к единице. Поэтому, как и в работе [7], мы им пренебрегаем. В-третьих, в эксперименте по нейтронному рассеянию [7, 12] полоса пропускания ограничена величиной $\varepsilon_{\max} = 50 \text{ meV}$. Поэтому интеграл в формуле (18) тоже необходимо брать до ε_{\max} , и окончательная расчетная формула для фурье-образа коррелятора в ДТСФ принимает вид

$$\langle s_{\mathbf{q}}^\alpha s_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\varepsilon_{\max}} B(\varepsilon) \text{Im } \chi_{\mathbf{q}}^\alpha(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{NT}{2u\lambda_L^\alpha} \frac{1}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 (q/q_B)^2} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{\varepsilon_{\max} \tilde{c}_\alpha}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 (q/q_B)^2}. \quad (22)$$



Квадрат эффективного момента $M^2(q)$ ОЦК-железа, вычисленный в гауссовом приближении ДТСФ с использованием точной формулы (19), высокотемпературной формулы (20) и формулы (22) с полосой пропускания $\varepsilon_{\max} = 50$ meV, в сравнении с экспериментальными значениями [7] при различных температурах. На врезках воспроизведены в большем масштабе фрагменты, содержащие экспериментальные точки

На рисунке приведено сравнение значений $M^2(q)$, рассчитанных при T/T_C^{cal} , с экспериментальными [7], полученными при тех же значениях T/T_C^{exp} . Температура дана в единицах расчетной температуры Кюри $T_C^{\text{cal}} = 1.65 T_C^{\text{exp}}$, где $T_C^{\text{exp}} = 1044$ К — температура Кюри для железа [20]. Как видно из рисунка, расчет квадрата эффективного момента (17) с использованием формулы с полосой пропускания (22) дает хорошее количественное согласие с экспериментом. Кривая $M^2(q)$, рассчитанная с использованием точной формулы (19), проходит выше экспериментальных значений, поскольку интервал энергии ε в данном приближении шире, чем на эксперименте (подробнее см. [4]). Высокотемпературная формула (20) в целом дает хорошее согласие с точной формулой (19) при всех температурах в парамагнитной области. Полученные результаты подтверждают сделанный нами вывод о том, что ближний порядок сохраняется на расстояниях, равных нескольким Å [4, 10, 11].

5. Заключение. Коррелятор спиновой плотности и его фурье-образ вычислены в рамках ДТСФ при различных температурах. Проведено сравнение численных результатов с результатами эксперимента по поляризованному магнитному рассеянию нейтронов. Для этого дан простой вывод формулы, связывающей магнитный вклад в сечение рассеяния с фурье-образом коррелятора спиновой плотности, приведены

основные расчетные формулы для спинового коррелятора и его фурье-образа в различных приближениях ДТСФ, представлены программные модули, реализующие эти формулы на языке Фортран. Теоретические результаты проиллюстрированы на примере ОЦК-железа. Показано, что результаты расчета фурье-образа в ДТСФ находятся в хорошем согласии с экспериментом.

6. Благодарности. Мы благодарны рецензенту за полезные замечания. Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема “Электрон” № 01201463326) при частичной поддержке УРО РАН (проект № 15–8–2–10).

Приложение А. Программные модули. Расчет магнитных свойств в ДТСФ реализован в программе MAGPROP на языке Фортран [23]. Для расчета коррелятора и его фурье-образа в работах [4, 11] и в настоящей работе использован программный модуль MSRO, дополняющий программу MAGPROP. Здесь приводятся основные расчетные формулы и код части модуля MSRO, отвечающей варианту расчета с полосой пропускания.

В программе MAGPROP используются величины для одной d-полосы:

$$U = uN_d, \quad \chi_0^{0\alpha(1)}(0) = \frac{\chi_0^{0\alpha}(0)}{N_d}, \quad \chi_L^{0\alpha(1)}(0) = \frac{\chi_L^{0\alpha}(0)}{N_d}, \quad \varphi_L^{\alpha(1)} = \frac{\varphi_L^\alpha}{N_d}, \quad s^{\alpha(1)} = \frac{s^\alpha}{N_d}.$$

В программном модуле MSRO вычисляются квадрат *спинового* эффективного момента на одну полосу $(S^{(1)}(q))^2$, *нормированная* корреляционная функция $C(r, T)$, ее полуширина $r_{1/2}(T)$ и локальный *спиновый* момент на одну полосу $s_L^{(1)}$.

Квадрат *спинового* эффективного момента на одну полосу $(S^{(1)}(q))^2$ связан с квадратом *магнитного* эффективного момента $M^2(q)$ соотношением $M^2(q) = g^2\mu_B^2 N_d^2 (S^{(1)}(q))^2$ и вычисляется в программе по *точной* формуле

$$(S^{(1)}(q))_{\text{DNA}}^2 = \frac{3T}{2UN_d\lambda_L^\alpha} \frac{1}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2(q/q_B)^2} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{c_\alpha}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2(q/q_B)^2}, \quad (\text{A.1})$$

по приближенной *высокотемпературной* формуле

$$(S^{(1)}(q))_{\text{SNA}}^2 = \frac{3T}{2UN_d\lambda_L^\alpha} \frac{1}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2(q/q_B)^2} \quad (\text{A.2})$$

и по формуле с *учетом* полосы пропускания

$$(S^{(1)}(q))_{\text{EMAX}}^2 = \frac{3T}{2UN_d\lambda_L^\alpha} \frac{1}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2(q/q_B)^2} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{\varepsilon_{\max}\tilde{c}_\alpha}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2(q/q_B)^2}. \quad (\text{A.3})$$

Параметры a_α^2 , b_α^2 , c_α , \tilde{c}_α вычисляются самосогласованно при каждой температуре T по формулам

$$a_\alpha^2 = \frac{\lambda_0^\alpha}{\lambda_L^\alpha}, \quad b_\alpha^2 = \frac{1 - a_\alpha^2}{0.6}, \quad c_\alpha = \frac{U\varphi_L^{\alpha(1)}\pi^2 T}{6\lambda_L^\alpha}, \quad \tilde{c}_\alpha = \frac{U\varphi_L^{\alpha(1)}}{\lambda_L^\alpha},$$

где $\lambda_0^\alpha = 1 - U\chi_0^{0\alpha(1)}(0)$ и $\lambda_L^\alpha = 1 - U\chi_L^{0\alpha(1)}(0)$. Расчетные формулы (A.1)–(A.3) реализованы в виде процедур FCQ, FCQS и FCQE соответственно. В качестве примера приводим код на языке Фортран для процедуры FCQE (листинг 1). Результаты расчета с использованием этой процедуры сравниваются с экспериментом.

```

1  SUBROUTINE FCQE(NQ,CFQ)
2  ! ВХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
3  ! NQ      – ЧИСЛО ИНТЕРВАЛОВ ПО Q (Q В ЕДИНИЦАХ (АНГСТРЕМ)^{-1})
4  ! EPSMAX – ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ ОКНО (В ЕДИНИЦАХ ШИРИНЫ ПОЛОСЫ W)
5  !
6  ! ВЫХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
7  ! CFQ(1) – МАССИВ ЗНАЧЕНИЙ КВАДРАТА ЭФФЕКТИВНОГО СПИНОВОГО МОМЕНТА (НА ОДНУ ПОЛОСУ)
8  !
9  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
10 DIMENSION CFQ(100)
11 COMMON
12 /PI/PI/SN/SN,CHINV/U/U/T/T
13 /BL4/ALZ,ALX,AZS,AXS,FIZ
14 /DS/VOLBZ,QB/BN/N
15 /ENERGY/EPSMAX
16 A2=CHINV/(CHINV+U)/ALZ
17 B2=(1.0D0-A2)/0.6D0
18 CTILD=U*FIZ/ALZ
19 COEFF=3.0D0*T/(2.0D0*U*N*ALZ)
20 HQ=QB/NQ
21 DO 140 I=1,NQ+1
22 QI=(I-1)*HQ
23 ABQ2=A2+B2*(QI/QB)**2
24 CFQ(I)=COEFF*(1.0D0/ABQ2)*2.0D0/PI*DATAN(EPSMAX*CTILD/ABQ2)
25 140 CONTINUE
26 RETURN
27 END
    
```

Процедура FCQE.

Нормированная корреляционная функция $C(r, T)$ имеет вид [4]

$$C(r, T) = \left(\int_0^{q_B} q^2 \langle s_q^\alpha s_{-q}^\alpha \rangle dq \right)^{-1} \int_0^{q_B} q^2 \langle s_q^\alpha s_{-q}^\alpha \rangle \frac{\sin(qr)}{qr} dq. \quad (A.4)$$

Используя соотношение

$$S^2(q) = N_d^2 (S^{(1)}(q))^2 = \frac{1}{N} \langle s_q s_{-q} \rangle = \frac{3}{N} \langle s_q^\alpha s_{-q}^\alpha \rangle, \quad (A.5)$$

записываем формулу (A.4) в виде

$$C(r, T) = \left(\int_0^{q_B} q^2 (S^{(1)}(q))^2 dq \right)^{-1} \int_0^{q_B} q^2 (S^{(1)}(q))^2 \frac{\sin(qr)}{qr} dq. \quad (A.6)$$

Подставляя (A.1)–(A.3) в формулу (A.6) и переходя к безразмерной переменной $k = q/q_B$ в интегралах, получаем расчетные формулы для функции $C(r, T)$. Таким образом, нормированная корреляционная функция в программе вычисляется по *точной* формуле

$$C_{DNA}(r, T) = \frac{1}{I_{DNA}^0} \int_0^1 \frac{k \sin(q_B r k)}{q_B r (a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2)} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{c_\alpha}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} dk, \quad (A.7)$$

где

$$I_{DNA}^0 = \int_0^1 \frac{k^2}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{c_\alpha}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} dk,$$

по приближенной *высокотемпературной* формуле

$$C_{SNA}(r, T) = \frac{1}{I_{SNA}^0} \int_0^1 \frac{k \sin(q_B r k)}{q_B r (a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2)} dk, \quad (A.8)$$

где

$$I_{SNA}^0 = \int_0^1 \frac{k^2}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} dk,$$

и по формуле с учетом полосы пропускания

$$C_{\text{EMAX}}(r, T) = \frac{1}{I_{\text{EMAX}}^0} \int_0^1 \frac{k \sin(q_B r k)}{q_B r (a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2)} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{\varepsilon_{\max} \tilde{c}_\alpha}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} dk, \quad (\text{A.9})$$

где

$$I_{\text{EMAX}}^0 = \int_0^1 \frac{k^2}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{\varepsilon_{\max} \tilde{c}_\alpha}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} dk.$$

Квадрат локального спинового момента s_L^2 вычисляется по формуле [4]

$$s_L^2 = \frac{4\pi}{N\Omega_{\text{BZ}}} \int_0^{q_B} \langle s_q s_{-q} \rangle q^2 dq. \quad (\text{A.10})$$

Используя (A.5) и переходя к величинам на одну полосу, записываем формулу (A.10) в виде

$$(s_L^{(1)})^2 = \frac{4\pi}{\Omega_{\text{BZ}}} \int_0^{q_B} (S^{(1)}(q))^2 q^2 dq. \quad (\text{A.11})$$

Подставляя (A.1)–(A.3) в формулу (A.11) и переходя к безразмерной переменной $k = q/q_B$ в интеграле, с учетом $\Omega_{\text{BZ}} = 4\pi q_B^3/3$ получаем расчетные формулы для величины $(s_L^{(1)})^2$. Локальный спиновый момент на одну полосу вычисляется в программе по *точной* формуле

$$(s_L^{(1)})_{\text{DNA}}^2 = \frac{9T}{2UN_d\lambda_L^\alpha} \int_0^1 \frac{k^2}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{c_\alpha}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} dk, \quad (\text{A.12})$$

по приближенной *высокотемпературной* формуле

$$(s_L^{(1)})_{\text{SNA}}^2 = \frac{9T}{2UN_d\lambda_L^\alpha} \int_0^1 \frac{k^2}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} dk \quad (\text{A.13})$$

и по формуле с учетом полосы пропускания

$$(s_L^{(1)})_{\text{EMAX}}^2 = \frac{9T}{2UN_d\lambda_L^\alpha} \int_0^1 \frac{k^2}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{\varepsilon_{\max} \tilde{c}_\alpha}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2 k^2} dk. \quad (\text{A.14})$$

Расчетные формулы для пар величин (A.7) и (A.12), (A.8) и (A.13), (A.9) и (A.14) реализованы в виде процедур FCR, FCRS, FCRE соответственно. Для нормированной корреляционной функции в каждом из приближений (A.7)–(A.9) вычисляется ее полуширина $r_{1/2}(T)$, которая была предложена в качестве меры ближнего магнитного порядка (подробнее см. [4, 10]). Численное интегрирование происходит с помощью процедур QDAGS и QDAWO библиотеки IMSL, использующих глобальную адаптивную квадратуру Гаусса–Кронрода (см., например, [24]). На вход указанным процедурам передаются функции FIK0 и FIKR, FIKS0 и FIKRS, FIKЕ0 и FIKER, моделирующие подынтегральные выражения в знаменателях и числителях расчетных формул (A.7)–(A.9) соответственно. В качестве примера приводим код на языке Фортран для процедуры FCRE и функций FIKЕ0 и FIKER (листинги 2–4).

Листинг 2

```

1  SUBROUTINE FCRE(NR, RB, QB, CHW, CFR, SLCFE)
2  ! ВХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
3  ! NR      – ЧИСЛО ИНТЕРВАЛОВ ПО R
4  ! RB      – ДЛИНА ОТРЕЗКА ПО R
5  ! QB      – РАДИУС СФЕРЫ БРИЛЛЮЭНА
6  !
7  ! ВЫХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
8  ! CHW     – ПОЛУШИРИНА КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ
9  ! CFR(I)  – МАССИВ ЗНАЧЕНИЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ
10 ! SLCFE   – ЛОКАЛЬНЫЙ СПИНОВЫЙ МОМЕНТ
11 !
12 ! IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
13 ! ДЛЯ ПЕРЕДАЧИ ЗНАЧЕНИЯ R1 В ПРОЦЕДУРУ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПО K
14 ! COMMON /R/R1
15 ! DIMENSION CFR(100)
16 ! EXTERNAL FIKEO, FIKER, SLCOEF, DQDAGS, DQDAWO
17 ! ЛЕВАЯ ГРАНИЦА ОТРЕЗКА ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПО K
18 ! AINT=0.0D0
19 ! ПРАВАЯ ГРАНИЦА ОТРЕЗКА ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПО K
20 ! BINT=1.0D0
21 ! АБСОЛЮТНАЯ ОШИБКА
22 ! ERRABS = 1.0D-8
23 ! ОТНОСИТЕЛЬНАЯ ОШИБКА
24 ! ERRREL = 1.0D-8
25 ! ВЫЧИСЛЕНИЕ ЗНАМЕНАТЕЛЯ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ
26 ! CALL DQDAGS(FIKEO, AINT, BINT, ERRABS, ERRREL, RESULT, ERREST)
27 ! CFDEN=RESULT
28 ! ШАГ ПО R
29 ! HR=RB/NR
30 ! ТИП ВЕСОВОЙ ФУНКЦИИ ДЛЯ ПРОЦЕДУРЫ DQDAWO: 1 – COS(OMEGA*K); 2 – SIN(OMEGA*K)
31 ! IWEIGH=2
32 ! ВЫЧИСЛЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ В ТОЧКАХ ОТ НУЛЯ ДО RB С ШАГОМ HR
33 ! DO 140 I=1,NR+1
34 ! R1=(I-1)*HR
35 ! ПАРАМЕТР ВЕСОВОЙ ФУНКЦИИ ДЛЯ ПРОЦЕДУРЫ DQDAWO
36 ! OMEGA=QB*R1
37 ! ВЫЧИСЛЕНИЕ ЧИСЛИТЕЛЯ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ
38 ! IF (OMEGA .EQ. 0) THEN
39 ! CALL DQDAGS(FIKEO, AINT, BINT, ERRABS, ERRREL, RESULT, ERREST)
40 ! ELSE
41 ! CALL DQDAWO(FIKER, AINT, BINT, IWEIGH, OMEGA, ERRABS, ERRREL, RESULT, ERREST)
42 ! ENDIF
43 ! CFNUM=RESULT
44 ! ВЫЧИСЛЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ
45 ! CFR(I)=CFNUM/CFDEN
46 140 CONTINUE
47 ! ВЫЧИСЛЕНИЕ ПОЛУШИРИНЫ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ
48 ! CHW=RB
49 ! I=1
50 150 IF (CFR(I) .GE. 0.5D0) THEN
51 ! I=I+1
52 ! GOTO 150
53 ! ENDIF
54 ! CHW=HR/(CFR(I)-CFR(I-1))*(0.5D0-CFR(I-1))+(I-1)*HR
55 ! ВЫЧИСЛЕНИЕ ЛОКАЛЬНОГО СПИНОВОГО МОМЕНТА
56 ! SLCFE=DSQRT(SLCOEF()*CFDEN)
57 ! RETURN
58 ! END

```

Процедура FCRE.

Листинг 3

```

1  REAL*8 FUNCTION FIKEO(K)
2  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
3  REAL*8 K, K2
4  COMMON
5  /P1/P1/SN/SN, CHINV/U/U/T/T
6  /BL4/ALZ, ALX, AZS, AXS, FIZ
7  /ENERGY/EPSMAX
8  A2=CHINV/(CHINV+U)/ALZ
9  B2=(1.0D0-A2)/0.6D0
10 ! CTILDE=U*FIZ/ALZ
11 ! K2=K**2
12 ! ABK2=A2+B2*K2
13 ! FIKEO=K2/ABK2*2.0D0/P1*DATAN(EPSMAX*CTILDE/ABK2)
14 ! RETURN
15 ! END

```

Функция FIKEO.

```

1  REAL*8 FUNCTION FIKER(K)
2  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
3  REAL*8 K, K2
4  COMMON
5  /PI/PI/SN/SN, CHINV/U/U/T/T
6  /BL4/ALZ, ALX, AZS, AXS, FIZ
7  /DS/VOLBZ, QB
8  /R/R1
9  /ENERGY/EPSSMAX
10 A2=CHINV/(CHINV+U)/ALZ
11 B2=(1.0D0-A2)/0.6D0
12 CTILDE=U*FIZ/ALZ
13 K2=K**2
14 QBR=QB*R1
15 ABK2=A2+B2*K2
16 FIKER=K/QBR*(1.0D0/ABK2)*2.0D0/PI*DATAN(EPSSMAX*CTILDE/ABK2)
17 RETURN
18 END

```

Функция FIKER.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мория Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. М.: Мир, 1988.
2. Schweizer J. Polarized neutrons and polarization analysis // Neutron Scattering from Magnetic Materials / Ed. by T. Chatterji. Amsterdam: Elsevier, 2006. 153–213.
3. Ziebeck K.R.A., Brown P.J. Measurement of the paramagnetic response function in the weak itinerant magnetic compound MnSi using polarised neutron scattering // J. Phys. F: Metal Phys. 1980. **10**, N 9. 2015–2024.
4. Мельников Н.Б., Парадеженко Г.В., Резер Б.И. Корреляции спиновой плотности и магнитное нейтронное рассеяние в ферромагнитных металлах // Теоретическая и математическая физика. 2017. **191** (в печати).
5. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
6. Optimization and regularization for computational inverse problems and applications / Ed. by Y. Wang, A. Yagola, C. Yang. Berlin: Springer, 2010.
7. Brown P.J., Capellmann H., Deportes J., et al. Observations of ferromagnetic correlations at high temperatures in paramagnetic iron // J. Magn. Magn. Mater. 1982. **30**, N 2. 243–248.
8. Hubbard J. Panel Discussion on Itinerant Electron Magnetism // Inst. Phys. Conf. Ser. 1981. **55**. 669–687.
9. Melnikov N.B., Reser B.I., Grebennikov V.I. Extended dynamic spin-fluctuation theory of metallic magnetism // J. Phys.: Condens. Matter. 2011. **23**. doi: 10.1088/0953-8984/23/27/276003.
10. Melnikov N.B., Reser B.I. Short-range order above the Curie temperature in the dynamic spin-fluctuation theory // J. Magn. Magn. Mater. 2016. **397**. 347–351.
11. Melnikov N.B., Reser B.I., Paradezhenko G.V. Spin-density correlations in the dynamic spin-fluctuation theory: Comparison with polarized neutron scattering experiments // J. Magn. Magn. Mater. 2016. **411**. 133–139.
12. Shirane G., Böni P., Wicksted J.P. Paramagnetic scattering from Fe(3.5 at. % Si): neutron measurements up to the zone boundary // Phys. Rev. B. 1986. **33**, N 3. 1881–1885.
13. Шифф Л. Квантовая механика. М.: Иностранная литература, 1959.
14. Squires G.L. Introduction to the theory of thermal neutron scattering. New York: Dover, 1996.
15. Уайт Р. Квантовая теория магнетизма. М.: Мир, 1985.
16. Блум К. Теория матрицы плотности и ее приложения. М.: Мир, 1983.
17. Reser B.I., Melnikov N.B. Problem of temperature dependence in the dynamic spin-fluctuation theory for strong ferromagnets // J. Phys.: Condens. Matter. 2008. **20**. doi: 10.1088/0953-8984/20/28/285205
18. Reser B.I. Numerical method for calculation of the Fermi integrals // J. Phys.: Condens. Matter. 1996. **8**, N 18. 3151–3160.
19. Reser B.I. Calculation of the magnetic properties of Fe, Co and Ni with account taken of the real band structure and spin fluctuations // J. Phys.: Condens. Matter. 1999. **11**, N 25. 4871–4885.
20. Crangle J., Goodman G.M. The magnetization of pure iron and nickel // Proc. Roy. Soc. London Ser. A. 1971. **321**. 477–491.
21. Moruzzi V.L., Janak J.F., Williams A.R. Calculated electronic properties of metals. New York: Pergamon, 1978.
22. Резер Б.И., Гребенников В.И. Температурная зависимость магнитных свойств ферромагнитных металлов с учетом динамики и нелокальности спиновых флуктуаций // Физика металлов и металловедение. 1998. **85**, № 1. 30–42.
23. Резер Б.И., Мельников Н.Б. Программный комплекс “MAGPROP” для расчета магнитных свойств переходных металлов и сплавов в рамках теории спиновых флуктуаций. Отраслевой фонд электронных ресурсов науки и образования. Свидетельство об отраслевой регистрации электронного ресурса № 17257 от 12.07.2011 г.

24. Казанер Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение. М.: Мир, 1998.

Поступила в редакцию
9.11.2016

Spin-Density Correlator and Its Fourier Transform in the Dynamic Spin-Fluctuation Theory

G. V. Paradezhenko¹, N. B. Melnikov², and B. I. Reser³

¹ *Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia; Graduate Student, e-mail: gparadezhenko@cs.msu.ru*

² *Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia; Dr. Sci., Associate Professor, e-mail: melnikov@cs.msu.ru*

³ *Mikhreev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences; ulitsa S. Kovalevskoy, 18, Ekaterinburg, 620990, Russia; Ph.D., Senior Scientist, e-mail: reser@imp.uran.ru*

Received November 9, 2016

Abstract: A formula relating the magnetic contribution to a polarized neutron scattering cross-section with the Fourier transform of the spin-density correlator is derived. A method of calculating the spin-density correlator and its Fourier transform in the dynamic spin-fluctuation theory is described. Calculation formulas and Fortran program modules are presented. By the example of iron, it is shown that the numerical results obtained for the Fourier transform of the spin-density correlator are in good agreement with experimental data.

Keywords: scattering function, spin fluctuations, dynamic susceptibility, magnetic neutron scattering.

References

1. T. Moriya, *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism* (Springer, Heidelberg, 1985; Mir, Moscow, 1988).
2. J. Schweizer, "Polarized Neutrons and Polarization Analysis," in *Neutron Scattering from Magnetic Materials*, Ed. by T. Chatterji (Elsevier, Amsterdam, 2006), pp. 153–213.
3. K. R. A. Ziebeck and P. J. Brown, "Measurement of the Paramagnetic Response Function in the Weak Itinerant Magnetic Compound MnSi Using Polarised Neutron Scattering," *J. Phys. F: Metal Phys.* **10** (9), 2015–2024 (1980).
4. N. B. Melnikov, G. V. Paradezhenko, and B. I. Reser, "Correlations of Spin Density and Magnetic Neutron Scattering in Ferromagnetic Metals," *Theor. Math. Phys.* **191** (2017) (in press).
5. A. N. Tikhonov and V. Ya. Arsenin, *Solution of Ill-Posed Problems* (Nauka, Moscow, 1979; Wiley, New York, 1977).
6. Y. Wang, A. G. Yagola, and C. Yang (Eds.), *Optimization and Regularization for Computational Inverse Problems and Applications* (Springer, Berlin, 2010).
7. P. J. Brown, H. Capellmann, J. Déportes, et al., "Observations of Ferromagnetic Correlations at High Temperatures in Paramagnetic Iron," *J. Magn. Magn. Mater.* **30** (2), 243–248 (1982).
8. J. Hubbard, "Panel Discussion on Itinerant Electron Magnetism," *Inst. Phys. Conf. Ser.* **55**, 669–687 (1981).
9. N. B. Melnikov, B. I. Reser, and V. I. Grebennikov, "Extended Dynamic Spin-Fluctuation Theory of Metallic Magnetism," *J. Phys.: Condens. Matter* **23** (2011). doi: 10.1088/0953-8984/23/27/276003
10. N. B. Melnikov and B. I. Reser, "Short-Range Order above the Curie Temperature in the Dynamic Spin-Fluctuation Theory," *J. Magn. Magn. Mater.* **397**, 347–351 (2016).
11. N. B. Melnikov, B. I. Reser, and G. V. Paradezhenko, "Spin-Density Correlations in the Dynamic Spin-Fluctuation Theory: Comparison with Polarized Neutron Scattering Experiments," *J. Magn. Magn. Mater.* **411**, 133–139 (2016).
12. G. Shirane, P. Böni, and J. P. Wicksted, "Paramagnetic Scattering from Fe(3.5 at. % Si): Neutron Measurements up to the Zone Boundary," *Phys. Rev. B* **33** (3), 1881–1885 (1986).

13. L. I. Schiff, *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1955; Inostrannaya Literatura, Moscow, 1959).
14. G. L. Squires, *Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering* (Dover, New York, 1996).
15. R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism* (Springer, Heidelberg, 1983; Mir, Moscow, 1985).
16. K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications* (Plenum, New York, 1981; Mir, Moscow, 1983).
17. B. I. Reser and N. B. Melnikov, "Problem of Temperature Dependence in the Dynamic Spin-Fluctuation Theory for Strong Ferromagnets," *J. Phys.: Condens. Matter* **20** (2008). doi: 10.1088/0953-8984/20/28/285205
18. B. I. Reser, "Numerical Method for Calculation of the Fermi Integrals," *J. Phys.: Condens. Matter* **8** (18), 3151–3160 (1996).
19. B. I. Reser, "Calculation of the Magnetic Properties of Fe, Co and Ni with Account Taken of the Real Band Structure and Spin Fluctuations," *J. Phys.: Condens. Matter* **11** (25), 4871–4885 (1999).
20. J. Crangle and G. M. Goodman, "The Magnetization of Pure Iron and Nickel," *Proc. Roy. Soc. London Ser. A* **321** (1547), 477–491 (1971).
21. V. L. Moruzzi, J. F. Janak, and A. R. Williams, *Calculated Electronic Properties of Metals* (Pergamon, New York, 1978).
22. B. I. Reser and V. I. Grebennikov, "Temperature Dependence of Magnetic Properties of Ferromagnetic Metals with Account Taken of the Dynamics and Nonlocality of Spin Fluctuations," *Fiz. Met. Metalloved.* **85** (1), 30–42 (1998).
23. B. I. Reser and N. B. Melnikov, *Software Package MAGPROP: Calculation of the Magnetic Properties of Transition Metals and Alloys within the Theory of Spin Fluctuations* (Scientific and Educational Collection of Electronic Resources, Moscow, 2011), Certificate No. 17257.
24. D. Kahaner, C. Moler, and S. Nash, *Numerical Methods and Software* (Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1989; Mir, Moscow, 1998).