Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Н. Б. Мельников, Г. В. Парадеженко, Б. И. Резер,
Корреляции спиновой плотности и магнитное нейтрон-
ное рассеяние в ферромагнитных металлах, *ТМФ*, 2017,
том 191, номер 1, 151–171

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9152>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru под-
разумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.197.130.99

26 апреля 2023 г., 17:53:22

© 2017 г. Н. Б. Мельников*, Г. В. Парадеженко*, Б. И. Резер†

КОРРЕЛЯЦИИ СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ И МАГНИТНОЕ НЕЙТРОННОЕ РАССЕЯНИЕ В ФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛАХ

Получены выражения для пространственного коррелятора спиновой плотности, эффективного и локального магнитных моментов в динамической теории спиновых флуктуаций. Выведены формулы для сечения магнитного рассеяния в теории магнетиков с коллективизированными электронами. Рассчитаны магнитные характеристики ОЦК-железа в парамагнитном состоянии и проведено сравнение численных результатов с экспериментом по поляризованному рассеянию нейтронов. Показано, что ближний порядок в ОЦК-железе сохраняется при температурах значительно выше температуры Кюри, но лишь на небольших расстояниях (не более $5 \text{ \AA}$).

Ключевые слова: корреляция спиновой плотности, спиновые флуктуации, динамическая восприимчивость, поляризованное рассеяние нейтронов, ближний порядок, ферромагнитные металлы.

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9152>

1. ВВЕДЕНИЕ

Пространственный спиновый коррелятор описывает магнитный ближний порядок в металлах, а его фурье-образ (эффективный момент) можно измерить в эксперименте по нейтронному рассеянию (см., например, работы [1]–[4]). Интерпретация эксперимента по поляризованному рассеянию нейтронов в рамках теории спиновых волн дает большую (примерно $15\text{--}20 \text{ \AA}$) область ближнего порядка в ферромагнитных металлах выше температуры Кюри T_C [5], [6]. Однако такая интерпретация является спорной (см., например, дискуссию [7]). В рамках динамической теории спиновых флуктуаций (ДТСФ) [8] показано, что область ближнего порядка сравнительно мала (порядка нескольких $\text{\AA}$) и ближний порядок сохраняется при температурах значительно выше T_C [9]. Для подтверждения этих результатов в настоящей

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема “Электрон” № 01201463326) при частичной поддержке УрО РАН (проект № 15-8-2-10).

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия.
E-mail: melnikov@cs.msu.su, gparadezhenko@cs.msu.su

†Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия. E-mail: reser@imp.uran.ru

работе мы вычисляем эффективный и локальный магнитные моменты в парамагнитном состоянии и сравниваем их с результатами эксперимента [5], [10].

Спиновые корреляции в магнитном нейтронном рассеянии рассматривались в работах [11]–[17]. Результаты расчетов эффективного магнитного момента в статическом [11] и динамическом [12], [13] приближениях ТСФ находятся в качественном согласии с экспериментом по железу. Расчеты локального момента железа в статьях [15], [17] выполнены с помощью классических гамильтонианов. Динамические теории [14], [16] построены на основе одноузельного приближения и не дают возможности количественно оценить ближний порядок. В настоящей работе мы используем расширенную ДТСФ [8], которая учитывает как одноузельные, так и нелокальные спиновые флуктуации и позволяет сделать правильные выводы о величине области ближнего порядка.

Соотношение между спиновым коррелятором и сечением неполяризованного нейтронного рассеяния для магнетиков с локализованными спинами было получено в работе [18]. Для магнетиков с коллективизированными электронами нейтронное рассеяние рассматривалось в статье [19] на основе стонеровской теории среднего поля. Спиновые корреляции в магнетиках с коллективизированными электронами были учтены в работе [20], однако в ней сечение неполяризованного нейтронного рассеяния вычислялось по формуле для магнетиков с локализованными спинами. Кроме того, результаты работы [20] получены в рамках приближения случайных фаз и лишь несущественно отличаются от результатов гейзенберговской теории. В настоящей работе формулы для сечения магнитного рассеяния выведены в теории магнетиков с коллективизированными электронами.

Изложение построено следующим образом. В разделе 2 получены явные формулы для пространственного спинового коррелятора и его фурье-образа в ДТСФ. В п. 3.2 выведена формула для сечения магнитного рассеяния в теории *неполяризованного* нейтронного рассеяния. В п. 3.3 получена формула для дифференциального сечения *поляризованного* магнитного рассеяния. В разделе 4 выполнены расчеты эффективного и локального магнитных моментов в ДТСФ для ОЦК-железа и дано сравнение с экспериментом по поляризованному магнитному рассеянию. В приложении А дан вывод выражения для магнитного формфактора. В приложении Б получена формула для фактора Дебая–Валлера.

2. СПИНОВЫЙ КОРРЕЛЯТОР ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

2.1. Спиновый коррелятор в теории линейного отклика. Рассмотрим *пространственный* коррелятор спиновой плотности $\mathbf{s}(\mathbf{r})$ в металле:

$$\langle \Delta \mathbf{s}(\mathbf{r}, t) \Delta \mathbf{s}(\mathbf{r}') \rangle|_{t=0} = \langle \Delta \mathbf{s}(\mathbf{r}) \Delta \mathbf{s}(\mathbf{r}') \rangle.$$

Здесь угловые скобки обозначают каноническое среднее: $\langle \bullet \rangle = Z^{-1} \text{Tr}(\bullet e^{-H/T})$, где $Z = \text{Tr} e^{-H/T}$ – статистическая сумма, H – гамильтониан системы, а T – температура (в энергетических единицах). Зависимость от времени означает запись оператора $\Delta \mathbf{s}(\mathbf{r}) = \mathbf{s}(\mathbf{r}) - \langle \mathbf{s} \rangle$ в представлении Гейзенберга: $\Delta \mathbf{s}(\mathbf{r}, t) = e^{iHt/\hbar} \Delta \mathbf{s}(\mathbf{r}) e^{-iHt/\hbar}$.

Пространственный коррелятор в кристалле трансляционно-инвариантен, поэтому в импульсном представлении получаем, что

$$\langle \Delta s^\alpha(\mathbf{r}) \Delta s^\alpha(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{q}} \langle \Delta s_{\mathbf{q}}^\alpha \Delta s_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}, \quad \alpha = x, y, z. \quad (1)$$

Здесь преобразование Фурье определено формулами

$$\mathbf{s}_{\mathbf{q}} = \int \mathbf{s}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad \mathbf{s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{s}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (2)$$

где интеграл берется по всему кристаллу объема $\mathcal{V} = N\Omega_{\text{WS}}$ (N – число узлов и Ω_{WS} – объем ячейки Вигнера–Зейтца), а волновой вектор $\mathbf{q}$ изменяется в пределах зоны Бриллюэна. Переходя в (1) от суммы к интегралу по зоне Бриллюэна и заменяя последнюю сферой равного объема с радиусом q_{B} , при $\mathbf{r}' = 0$ имеем соотношение

$$\langle \Delta s^\alpha(\mathbf{r}) \Delta s^\alpha(0) \rangle = \frac{1}{2\pi^2 N\Omega_{\text{WS}}} \int_0^{q_{\text{B}}} \langle \Delta s_{\mathbf{q}}^\alpha \Delta s_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle \frac{q \sin(qr)}{r} dq. \quad (3)$$

Локальный спиновый момент s_{L} вычисляется по формуле

$$s_{\text{L}}^2 = \iint_{\text{WS}} \langle \mathbf{s}(\mathbf{r}) \mathbf{s}(\mathbf{r}') \rangle d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (4)$$

где оба интеграла берутся по элементарной ячейке Вигнера–Зейтца одного и того же узла. Заменяя интеграл значением подынтегральной функции на узле, умноженным на объем элементарной ячейки, записываем формулу (4) в виде

$$s_{\text{L}}^2 = \Omega_{\text{WS}}^2 \langle \mathbf{s}(\mathbf{R}_j) \mathbf{s}(\mathbf{R}_j) \rangle = \Omega_{\text{WS}}^2 \langle \mathbf{s}(0) \mathbf{s}(0) \rangle. \quad (5)$$

Переходя в выражении (3) к пределу при $r \rightarrow 0$, в парамагнитной области имеем

$$\langle s^\alpha(0) s^\alpha(0) \rangle = \frac{1}{2\pi^2 N\Omega_{\text{WS}}} \int_0^{q_{\text{B}}} \langle s_{\mathbf{q}}^\alpha s_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle q^2 dq. \quad (6)$$

Подставляя последнее выражение в формулу (5) и используя равенство $\Omega_{\text{WS}} = (2\pi)^3/\Omega_{\text{BZ}}$, для квадрата локального момента получаем, что

$$s_{\text{L}}^2 = \frac{4\pi}{N\Omega_{\text{BZ}}} \int_0^{q_{\text{B}}} \langle \mathbf{s}_{\mathbf{q}} \mathbf{s}_{-\mathbf{q}} \rangle q^2 dq. \quad (7)$$

Итак, для вычисления пространственного коррелятора и локального момента необходимо найти фурье-образ $\langle s_{\mathbf{q}}^\alpha s_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle$.

В теории линейного отклика спиновый коррелятор $\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^\alpha \Delta s_{-\mathbf{q}}^\beta \rangle$ выражается через компоненты тензора магнитной восприимчивости

$$\chi_{\mathbf{q}}^{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \langle [\Delta s_{\mathbf{q}}^\alpha(t), \Delta s_{-\mathbf{q}}^\beta] \rangle e^{i\omega t} dt \quad (8)$$

при помощи флуктуационно-диссипационной теоремы (см., например, книгу [21]):

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^\alpha \Delta s_{-\mathbf{q}}^\beta \rangle = \frac{1}{2\pi} \int \frac{i\hbar}{e^{-\hbar\omega/T} - 1} (\chi_{\mathbf{q}}^{\alpha\beta}(\omega) - (\chi_{\mathbf{q}}^{\beta\alpha}(\omega))^*) d\omega. \quad (9)$$

В формуле (8) прямые скобки обозначают коммутатор, а восприимчивость выражена в единицах $g^2 \mu_B^2$, где $g \approx 2$ – электронный g -фактор и μ_B – магнетон Бора. Используя нечетность мнимой части восприимчивости: $\text{Im } \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\omega) = -\text{Im } \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(-\omega)$, при $\alpha = \beta$ получаем формулу

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^{\alpha} \Delta s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle = \frac{1}{\pi} \int \frac{\hbar}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \text{Im } \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\omega) d\omega. \quad (10)$$

В частности, при $T \gg T_C$ с учетом того, что $e^{\hbar\omega/T} \approx 1 + \hbar\omega/T$, имеем равенство

$$\langle s_{\mathbf{q}}^{\alpha} s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle = \frac{T}{\pi} \int \frac{\text{Im } \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\omega)}{\omega} d\omega.$$

Используя соотношение Крамерса–Кронига (см., например, книгу [22])

$$\text{Re } \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(0) = \frac{1}{\pi} \int \frac{\text{Im } \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\omega)}{\omega} d\omega$$

и учитывая нечетность мнимой части восприимчивости, получаем формулу для коррелятора в *высокотемпературном* приближении:

$$\langle s_{\mathbf{q}}^{\alpha} s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle = T \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(0). \quad (11)$$

При конечных температурах вместо динамической восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\omega)$ удобнее вычислять *термодинамическую* восприимчивость $\chi_{\mathbf{q}m}^{\alpha} = \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(i\omega_m)$, которая связана со спиновым коррелятором в импульсно–“частотном” представлении соотношением [23]

$$\chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(i\omega_m) = \frac{\hbar}{T} \langle \Delta s_{\mathbf{q}m}^{\alpha} \Delta s_{-\mathbf{q}-m}^{\alpha} \rangle. \quad (12)$$

Здесь $\omega_m = 2\pi mT/\hbar$ – четные термодинамические “частоты”, а спиновый коррелятор имеет вид

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}m}^{\alpha} \Delta s_{-\mathbf{q}-m}^{\alpha} \rangle = \frac{T}{\hbar} \int_0^{\hbar/T} \langle \Delta s_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\tau) \Delta s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle e^{i\omega_m \tau} d\tau, \quad (13)$$

где зависимости от “времени” $\tau \in [0, \hbar/T]$ соответствует “гейзенберговское” представление $\Delta s_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\tau) = e^{H\tau/\hbar} \Delta s_{\mathbf{q}}^{\alpha} e^{-H\tau/\hbar}$. Суммируя (12) по “частотам” с учетом (13), получаем выражение

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^{\alpha} \Delta s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle = \frac{T}{\hbar} \sum_m \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(i\omega_m). \quad (14)$$

Сравнивая (10) и (14), получаем связь динамической и термодинамической восприимчивостей:

$$\frac{T}{\hbar} \sum_m \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(i\omega_m) = \frac{1}{\pi} \int \frac{\hbar}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \text{Im } \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\omega) d\omega. \quad (15)$$

2.2. Спиновый коррелятор в ДТСФ. В ДТСФ d -электроны в металле описываются гамильтонианом $H = H_0 + H_1$, состоящим из одноэлектронной части H_0 и члена взаимодействия H_1 . Основное предположение относительно члена H_1 состоит в том, что электроны взаимодействуют, если находятся на одном узле. В представлении Ванье при учете только кулоновского U и обменного J взаимодействий

член H_I выражается через операторы заряда n_j и спина $\mathbf{s}_j$ на узле (суммарные по пяти вырожденным полосам, $N_d = 5$) по формуле

$$H_I = \sum_j \left(u_0 \left(\frac{n_j}{2} \right)^2 - u s_j^2 \right),$$

где $u_0 = ((2N_d - 1)U - (N_d - 1)J)/N_d$ и $u = (U + (N_d - 1)J)/3N_d$. При помощи преобразования Стратоновича–Хаббарда статистическая сумма $Z = \text{Tr} e^{-H/T}$ записывается в виде функционального интеграла по обменному и зарядовому полям. Поскольку зарядовые флуктуации обладают большими энергиями по сравнению со спиновыми флуктуациями, интегралы по зарядовой компоненте вычисляются методом седловой точки. Для вычисления интегралов по обменному полю используется оптимальное гауссово приближение в импульсно–“частотном” представлении, основанное на принципе минимума свободной энергии (подробности см. в статье [8]).

В диагональном приближении ДТСФ $\chi_{\mathbf{q}m}^{\alpha\beta} = \chi_{\mathbf{q}m}^{\alpha} \delta_{\alpha\beta}$, усиленная восприимчивость $\chi_{\mathbf{q}m}^{\alpha}$ выражается через неусиленную $\chi_{\mathbf{q}m}^{0\alpha}$ по формуле

$$\chi_{\mathbf{q}m}^{\alpha} = \frac{\chi_{\mathbf{q}m}^{0\alpha}}{1 - \tilde{u} \chi_{\mathbf{q}m}^{0\alpha}}, \quad (16)$$

где $\tilde{u} = u/N$ – фурье-образ константы межэлектронного взаимодействия u (в ДСФТ восприимчивость выражается в единицах $g^2 \mu_B^2/2$). Подставляя (16) в (15) и используя (14), получаем, что

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^{\alpha} \Delta s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle = \frac{1}{2\pi\tilde{u}} \int B(\varepsilon) \text{Im} \frac{1}{1 - \tilde{u} \chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(\varepsilon)} d\varepsilon,$$

где $B(\varepsilon) = (e^{\varepsilon/T} - 1)^{-1}$ – функция Бозе (в ДСФТ полагается $\hbar = 1$). С учетом нечетности $\text{Im} \chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(\varepsilon)$ и тождества $B(\varepsilon) - B(-\varepsilon) = 2B(\varepsilon) + 1$ записываем равенство

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^{\alpha} \Delta s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle = \frac{1}{\pi\tilde{u}} \int_0^{\infty} \left(B(\varepsilon) + \frac{1}{2} \right) \text{Im} \frac{1}{1 - \tilde{u} \chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(\varepsilon)} d\varepsilon. \quad (17)$$

Далее в подынтегральном выражении пренебрегаем вторым слагаемым, которое приводит к несущественному сдвигу собственно-энергетической части (подробнее см. статью [8]).

Дальнейшие вычисления требуют аппроксимаций неусиленной восприимчивости. Разлагая $\chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(\varepsilon)$ в ряд Тейлора, с учетом нечетности $\text{Im} \chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(\varepsilon)$ и четности $\text{Re} \chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(\varepsilon)$ получаем выражение

$$\chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(\varepsilon) = \chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(0) + i \frac{d\chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(0)}{d\varepsilon} \varepsilon \equiv \chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(0) + i\varphi_{\mathbf{q}}^{\alpha} \varepsilon.$$

Подставляя это разложение в формулу (17), имеем

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^{\alpha} \Delta s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} B(\varepsilon) \frac{\varphi_{\mathbf{q}}^{\alpha} \varepsilon}{(\lambda_{\mathbf{q}}^{\alpha})^2 + (\tilde{u} \varphi_{\mathbf{q}}^{\alpha})^2 \varepsilon^2} d\varepsilon.$$

Функция $\lambda_{\mathbf{q}}^{\alpha} = 1 - \tilde{u} \chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(0)$ в нелокальном приближении вычисляется по формуле [24]

$$\lambda_{\mathbf{q}}^{\alpha} = \lambda_0^{\alpha} + \frac{(\lambda_L^{\alpha} - \lambda_0^{\alpha}) q^2}{q^2}, \quad (18)$$

где $\overline{q^2} = 0.6q_B^2$ – среднее по зоне Бриллюэна, для упрощения замененной сферой равного объема с радиусом q_B . Здесь $\lambda_L^\alpha = 1 - u\chi_L^{0\alpha}(0)$, где локальная неусиленная восприимчивость определена соотношением

$$\chi_L^{0\alpha}(0) = \frac{1}{N} \sum_j \chi_j^{0\alpha}(0) = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q}} \chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(0).$$

Функцию $\varphi_{\mathbf{q}}^\alpha$ для упрощения заменяем средним значением $\varphi_{\mathbf{q}}^\alpha \approx N\varphi_L^\alpha$, где

$$\varphi_L^\alpha = \frac{1}{N} \sum_j \frac{d\chi_j^{0\alpha}(0)}{d\varepsilon} = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{d\chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(0)}{d\varepsilon}.$$

Для функции Бозе используется приближение

$$\frac{1}{e^{\varepsilon/T} - 1} \approx \begin{cases} \frac{T}{\varepsilon}, & \varepsilon < \varepsilon_0, \\ 0, & \varepsilon > \varepsilon_0, \end{cases}$$

где $\varepsilon_0 = \pi^2 T/6$ выбирается из условия равенства первых моментов. Тогда коррелятор принимает вид

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^\alpha \Delta s_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle = \frac{NT\varphi_L^\alpha}{\pi(\lambda_L^\alpha)^2} \int_0^{\varepsilon_0} \frac{d\varepsilon}{(a_\alpha^2 + b_\alpha^2(q/q_B)^2)^2 + \tilde{c}_\alpha^2 \varepsilon^2}, \quad (19)$$

где $a_\alpha^2 = \lambda_0^\alpha/\lambda_L^\alpha$, $b_\alpha^2 = (1 - a_\alpha^2)/0.6$ и $\tilde{c}_\alpha^2 = (u\varphi_L^\alpha/\lambda_L^\alpha)^2$. Интегрируя, получаем формулу

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^\alpha \Delta s_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle = \frac{NT}{2u\lambda_L^\alpha} \frac{1}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2(q/q_B)^2} \frac{2}{\pi} \arctg \frac{c_\alpha}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2(q/q_B)^2}, \quad (20)$$

в которой $c_\alpha = u\varphi_L^\alpha \pi^2 T/6\lambda_L^\alpha$.

2.3. Спиновый коррелятор при высоких температурах. В высокотемпературном приближении ДТСФ, выражая статическую усиленную восприимчивость $\chi_{\mathbf{q}}^\alpha(0)$ через неусиленную по формуле (16), записываем равенство (11) в виде

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^\alpha \Delta s_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle = \frac{T}{2} \frac{\chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(0)}{1 - \tilde{u}\chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(0)} = \frac{T}{2\tilde{u}} \frac{1}{1 - \tilde{u}\chi_{\mathbf{q}}^{0\alpha}(0)} - \frac{T}{2\tilde{u}}.$$

Отбрасывая не зависящее от $\mathbf{q}$ слагаемое $T/2\tilde{u}$, которое отвечает собственным флуктуациям поля в ДТСФ (см. статью [8]), и подставляя выражение (18) для функции $\lambda_{\mathbf{q}}^\alpha$, получаем равенство

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^\alpha \Delta s_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle = \frac{NT}{2u\lambda_L^\alpha} \frac{1}{a_\alpha^2 + b_\alpha^2(q/q_B)^2}. \quad (21)$$

Таким образом, в металлах при *высоких* температурах спиновый коррелятор задается лоренцевой функцией (21) и отличается от (20) лишь отсутствием множителя с арктангенсом.

На расстояниях, удовлетворяющих неравенству $q_B r > \pi$, коррелятор (3) определяется малыми q , поэтому интеграл в выражении (3) можно распространить на

всю полупрямую. Подставляя выражение (21) в (3) и интегрируя по полупрямой, получаем формулу Орнштейна–Цернике

$$\langle \Delta s^\alpha(\mathbf{r}) \Delta s^\alpha(0) \rangle = \frac{B_\alpha}{q_B r} e^{-r/r_c^\alpha}, \quad (22)$$

которая имеет место для магнетиков с *локализованными* спинами в классической теории (для модели Изинга см., например, книгу [22]). Здесь $r_c^\alpha = |b_\alpha|/(|a_\alpha|q_B)$ – корреляционный радиус и $B_\alpha = 3\pi T/(4u\Omega_{\text{WS}}^2\lambda_L^\alpha b_\alpha^2)$. В нашей работе [9] теоретически показано, что корреляционный радиус r_c^α в ДТСФ стремится к бесконечности при $T = T_C$ и убывает обратно пропорционально температуре при $T \gg T_C$. Однако численные расчеты (см. раздел 4) показывают, что в ОЦК-железе линейная зависимость $1/r_c^\alpha$ от температуры наблюдается уже при $T > 1.05T_C^{\text{cal}}$.

3. МАГНИТНОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ

3.1. Дифференциальное сечение рассеяния. Количественной характеристикой для описания процесса рассеяния нейтронов при прохождении сквозь кристалл является дифференциальное сечение рассеяния, которое в борновском приближении задается формулой (см., например, работы [22], [25])

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega' dE'} = \frac{k'}{k} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \sum_{\sigma,\lambda} P_{\sigma\lambda} \sum_{\sigma',\lambda'} |\langle \sigma'\lambda' | V_{-\kappa} | \sigma\lambda \rangle|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + E - E'). \quad (23)$$

Здесь $(\mathbf{k}, \sigma)$ и $E = \hbar^2 k^2/2m$ – состояние и энергия нейтрона (m – масса нейтрона), λ и E_λ – состояние и энергия кристалла, P – вероятность соответствующего состояния и Ω – телесный угол (штрихом обозначены величины после рассеяния), дельта-функция отвечает закону сохранения энергии,

$$V_{-\kappa} = \int V(\mathbf{r}) e^{i\kappa\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (24)$$

– фурье-образ потенциала взаимодействия $V(\mathbf{r})$, где $\kappa = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ – вектор рассеяния. Формула (23) имеет общий характер и не зависит от типа взаимодействия.

3.2. Неполяризованное магнитное рассеяние. Нас интересует *магнитное* рассеяние, возникающее в результате взаимодействия между магнитным моментом нейтрона и магнитными моментами электронов в кристалле. В ферромагнитных металлах взаимодействие нейтрона с орбитальным током дает малый вклад в сечение рассеяния (см., например, статью [19]). Потенциал взаимодействия спинового магнитного момента электрона $\boldsymbol{\mu}_i = -g\mu_B \mathbf{s}_i$ в точке $\mathbf{r}_i$ и магнитного момента нейтрона $\boldsymbol{\mu}$ в точке $\mathbf{r}$ равен

$$V_i(\mathbf{x}_i) = -\frac{e\hbar}{m_e c} \mathbf{s}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}_i} \times \mathbf{A}(\mathbf{x}_i). \quad (25)$$

Здесь m_e и $-e$ суть масса и заряд электрона, c – скорость света, а $\mathbf{A} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{x}_i/|\mathbf{x}_i|^3$ – вектор-потенциал, где $\mathbf{x}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}$.

Вычисляем фурье-образ потенциала (24). Интегрируя (25) по нейтронной координате $\mathbf{r}$, получаем выражение

$$V_{-\kappa}^i = -\frac{e\hbar}{m_e c} e^{i\kappa \mathbf{r}_i} \mathbf{s}_i \cdot \int \nabla_{\mathbf{x}_i} \times \mathbf{A}(\mathbf{x}_i) e^{-i\kappa \mathbf{x}_i} d\mathbf{x}_i.$$

Потенциал взаимодействия $V(\mathbf{r})$ определяется как сумма потенциалов (25) по всем электронам в кристалле: $V(\mathbf{r}) = \sum_i V_i(\mathbf{r}_i - \mathbf{r})$. Используя соотношение (см., например, книгу [25], приложение Б)

$$\int \nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{A}(\mathbf{x}) e^{-i\kappa \mathbf{x}} d\mathbf{x} = \frac{4\pi}{\kappa^2} (\kappa \times (\boldsymbol{\mu} \times \kappa)) = 4\pi(\boldsymbol{\mu} - (\hat{\kappa} \cdot \boldsymbol{\mu}) \hat{\kappa}),$$

где $\hat{\kappa} = \kappa/\kappa$, имеем выражение

$$V_{-\kappa} = \sum_i V_{-\kappa}^i = -\frac{4\pi e\hbar}{m_e c} \sum_i \mathbf{s}_i e^{i\kappa \mathbf{r}_i} \cdot (\boldsymbol{\mu} - (\hat{\kappa} \cdot \boldsymbol{\mu}) \hat{\kappa}).$$

Сомножитель $\sum_i \mathbf{s}_i e^{i\kappa \mathbf{r}_i}$ в скалярном произведении равен фурье-образу $\mathbf{s}_{-\kappa}$ спиновой плотности $\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \sum_i \mathbf{s}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$. Следовательно,

$$V_{-\kappa} = -\frac{4\pi e\hbar}{m_e c} \mathbf{s}_{-\kappa} \cdot (\boldsymbol{\mu} - (\hat{\kappa} \cdot \boldsymbol{\mu}) \hat{\kappa}) \equiv -\frac{4\pi e\hbar}{m_e c} \boldsymbol{\mu} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa}, \quad (26)$$

где $\tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} = \mathbf{s}_{-\kappa} - (\hat{\kappa} \cdot \mathbf{s}_{-\kappa}) \hat{\kappa}$ – составляющая вектора $\mathbf{s}_{-\kappa}$, перпендикулярная направлению κ . Магнитный момент нейтрона $\boldsymbol{\mu}$ связан со своим спиновым моментом $\mathbf{S}$ соотношением $\boldsymbol{\mu} = -(\gamma e\hbar/mc)\mathbf{S}$, где $\gamma \approx 1.913$. Подставляя (26) в (23), получаем выражение

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega' dE'} = 4 \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\sigma, \lambda} P_{\sigma\lambda} \sum_{\sigma', \lambda'} |\langle \sigma' \lambda' | \mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} | \sigma \lambda \rangle|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + E - E'). \quad (27)$$

В произведении $\mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} = S^x \tilde{s}_{-\kappa}^x + S^y \tilde{s}_{-\kappa}^y + S^z \tilde{s}_{-\kappa}^z$ оператор S^α действует только на состояние нейтрона, а $\tilde{s}_{-\kappa}^\alpha$ – только на состояние электрона. Состояния нейтрона и электрона независимы, поэтому $\langle \sigma' \lambda' | S^\alpha \tilde{s}_{-\kappa}^\alpha | \sigma \lambda \rangle = \langle \sigma' | S^\alpha | \sigma \rangle \langle \lambda' | \tilde{s}_{-\kappa}^\alpha | \lambda \rangle$. Перемножая матричные элементы и их сопряженные в формуле (27), получаем слабые виды

$$\langle \sigma | S^\alpha | \sigma' \rangle \langle \sigma' | S^\beta | \sigma \rangle \langle \lambda | \tilde{s}_{-\kappa}^\alpha | \lambda' \rangle \langle \lambda' | \tilde{s}_{-\kappa}^\beta | \lambda \rangle.$$

Поскольку состояния σ и λ независимы, справедливо равенство $P_{\sigma\lambda} = P_\sigma P_\lambda$. Для пучка неполяризованных нейтронов $P_\uparrow = P_\downarrow = 1/2$. Вычисляя сумму по спиновым состояниям σ и σ' в формуле (27), получаем, что

$$\sum_{\sigma} P_{\sigma} \sum_{\sigma'} \langle \sigma | S^\alpha | \sigma' \rangle \langle \sigma' | S^\beta | \sigma \rangle = \sum_{\sigma} P_{\sigma} \langle \sigma | S^\alpha S^\beta | \sigma \rangle = \frac{1}{4} \delta_{\alpha\beta}.$$

Следовательно, соотношение (27) принимает вид

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega' dE'} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\alpha} \sum_{\lambda, \lambda'} P_{\lambda} \langle \lambda | \tilde{s}_{-\kappa}^\alpha | \lambda' \rangle \langle \lambda' | \tilde{s}_{-\kappa}^\alpha | \lambda \rangle \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + E - E').$$

Переходя от $\tilde{\mathbf{s}}_{\mathbf{\kappa}}$ к $\mathbf{s}_{\mathbf{\kappa}}$ по формуле

$$\tilde{\mathbf{s}}_{\mathbf{\kappa}} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\mathbf{\kappa}} = \sum_{\alpha, \beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{\kappa}^{\alpha} \hat{\kappa}^{\beta}) s_{\mathbf{\kappa}}^{\alpha} s_{-\mathbf{\kappa}}^{\beta},$$

приходим к равенству

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega' dE'} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\alpha, \beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{\kappa}^{\alpha} \hat{\kappa}^{\beta}) \sum_{\lambda, \lambda'} P_{\lambda} \langle \lambda | s_{\mathbf{\kappa}}^{\alpha} | \lambda' \rangle \langle \lambda' | s_{-\mathbf{\kappa}}^{\beta} | \lambda \rangle \delta(E_{\lambda} - E_{\lambda'} + E - E'). \quad (28)$$

Наконец вычисляем сумму по состояниям электронной подсистемы λ и λ' в формуле (28). Используя соотношение

$$\delta(E_{\lambda} - E_{\lambda'} + \hbar\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i(E_{\lambda} - E_{\lambda'})t/\hbar} e^{i\omega t} dt,$$

где $\hbar\omega = E - E'$, записываем выражение для сечения (28) в виде

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega' dE'} &= \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\alpha, \beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{\kappa}^{\alpha} \hat{\kappa}^{\beta}) \times \\ &\times \frac{1}{2\pi\hbar} \int \sum_{\lambda, \lambda'} P_{\lambda} \langle \lambda | s_{\mathbf{\kappa}}^{\alpha} e^{-iE_{\lambda'}t/\hbar} | \lambda' \rangle \langle \lambda' | s_{-\mathbf{\kappa}}^{\beta} e^{iE_{\lambda}t/\hbar} | \lambda \rangle e^{i\omega t} dt. \end{aligned}$$

Выбирая в качестве состояний λ собственные функции гамильтониана H с собственными значениями E_{λ} и используя равенство $e^{-iE_{\lambda'}t/\hbar} |\lambda\rangle = e^{-iE_{\lambda}t/\hbar} |\lambda\rangle$, получаем формулу

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega' dE'} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\alpha, \beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{\kappa}^{\alpha} \hat{\kappa}^{\beta}) \frac{1}{2\pi\hbar} \int \sum_{\lambda} P_{\lambda} \langle \lambda | e^{iHt/\hbar} s_{\mathbf{\kappa}}^{\alpha} e^{-iHt/\hbar} s_{-\mathbf{\kappa}}^{\beta} | \lambda \rangle e^{i\omega t} dt.$$

Сумма по λ есть не что иное, как среднее в каноническом ансамбле для системы взаимодействующих электронов:

$$\sum_{\lambda} P_{\lambda} \langle \lambda | \bullet | \lambda \rangle = Z^{-1} \text{Tr}(\bullet e^{-H/T}) \equiv \langle \bullet \rangle.$$

Используя представление Гейзенберга $s_{\mathbf{\kappa}}^{\alpha}(t) = e^{iHt/\hbar} s_{\mathbf{\kappa}}^{\alpha} e^{-iHt/\hbar}$, получаем, что

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega' dE'} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\alpha, \beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{\kappa}^{\alpha} \hat{\kappa}^{\beta}) \frac{1}{2\pi\hbar} \int \langle s_{\mathbf{\kappa}}^{\alpha}(t) s_{-\mathbf{\kappa}}^{\beta} \rangle e^{i\omega t} dt. \quad (29)$$

Вводя функцию рассеяния

$$S^{\alpha\beta}(\mathbf{\kappa}, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar N} \int \langle s_{\mathbf{\kappa}}^{\alpha}(t) s_{-\mathbf{\kappa}}^{\beta} \rangle e^{i\omega t} dt, \quad (30)$$

записываем формулу (29) в виде

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

где $(\gamma e^2/(m_e c^2))^2 = 0.29 \times 10^{-24} \text{ см}^2$. В *парамагнитном* случае, когда $S^{\alpha\beta}(\kappa, \omega) = S^z(\kappa, \omega) \delta_{\alpha\beta}$, обозначая $S(\kappa, \omega) = 3S^z(\kappa, \omega)$, с учетом равенства $N = \mathcal{V}/\Omega_{\text{WS}}$ окончательно получаем соотношение

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega' dE'} = 2 \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{1}{3} \frac{\mathcal{V}}{\Omega_{\text{WS}}} \frac{k'}{k} S(\kappa, \omega). \quad (31)$$

В эксперименте непосредственное применение формулы (31) затруднительно, поскольку необходимо выделить магнитный вклад в рассеяние.

3.3. Поляризованное магнитное рассеяние. Эксперимент по *поляризованному* нейтронному рассеянию позволяет выделить магнитный вклад в сечение рассеяния. Рассмотрим сначала эксперимент по одноосному поляризационному анализу, в котором спин пучка нейтронов после рассеяния меняется на противоположный (см., например, работу [3]). Пусть все нейтроны в налетающем пучке имеют состояние со спином “вверх”, а в рассеянном пучке – со спином “вниз”. Учитывая равенство $P_{\sigma\lambda} = P_{\sigma} P_{\lambda}$ и подставляя в формулу для сечения (27) значения $P_{\uparrow} = 1$ и $P_{\downarrow} = 0$, при $|\sigma\rangle = |\uparrow\rangle$ и $|\sigma'\rangle = |\downarrow\rangle$ получаем выражение

$$\frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE'} = 4 \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\lambda, \lambda'} P_{\lambda} |\langle \downarrow \lambda' | \mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} | \uparrow \lambda \rangle|^2 \delta(E_{\lambda} - E_{\lambda'} + E - E'). \quad (32)$$

С учетом того, что $\mathbf{S} = (1/2)\boldsymbol{\sigma}$, где $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – вектор матриц Паули, имеем равенство $\mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} = (1/2) \sum_{\mu} \sigma_{\mu} \tilde{s}_{-\kappa}^{\mu}$. Следовательно,

$$\langle \downarrow | \mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} | \uparrow \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \langle \downarrow | \sigma_{\mu} | \uparrow \rangle \tilde{s}_{-\kappa}^{\mu} = \frac{1}{2} (\tilde{s}_{-\kappa}^x + i \tilde{s}_{-\kappa}^y).$$

В результате формула (32) принимает вид

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

Далее, вычисляя сумму по состояниям λ и λ' как в случае неполяризованного рассеяния, приходим к выражению

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE'} &= \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \times \\ &\times \frac{1}{2\pi\hbar} \int [\langle \tilde{s}_{-\kappa}^x(t) \tilde{s}_{-\kappa}^x \rangle + \langle \tilde{s}_{-\kappa}^y(t) \tilde{s}_{-\kappa}^y \rangle + i(\langle \tilde{s}_{-\kappa}^x(t) \tilde{s}_{-\kappa}^y \rangle - \langle \tilde{s}_{-\kappa}^y(t) \tilde{s}_{-\kappa}^x \rangle)] e^{i\omega t} dt. \end{aligned} \quad (33)$$

Поскольку все нейтроны до рассеяния имеют состояние со спином “вверх”, вектор поляризации налетающего пучка равен $\mathbf{P} = (0, 0, 1)$. Тогда легко проверить, что формулу для *магнитного* сечения рассеяния (33) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE'} &= \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \int [\langle \tilde{\mathbf{s}}_{\kappa}(t) \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa} \rangle - \\ &- \langle (\mathbf{P} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{\kappa}(t)) (\mathbf{P} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa}) \rangle + i \langle \mathbf{P} \cdot (\tilde{\mathbf{s}}_{\kappa}(t) \times \tilde{\mathbf{s}}_{-\kappa}) \rangle] e^{i\omega t} dt. \end{aligned} \quad (34)$$

С помощью магнитного поля вектор поляризации пучка $\mathbf{P}$ можно повернуть так, чтобы он имел произвольное направление относительно осей выбранной системы координат. При этом формула (34) остается верной, поскольку момент является аксиальным вектором.

Рассмотрим теперь два направления поляризации: вдоль вектора рассеяния $\boldsymbol{\kappa}$ и перпендикулярно ему. Выбираем систему координат так, чтобы ось x была направлена вдоль вектора рассеяния $\boldsymbol{\kappa}$, т. е. $\hat{\boldsymbol{\kappa}} = \boldsymbol{\kappa}/\kappa = (1, 0, 0)$. Рассматриваем сначала пучок, поляризованный вдоль $\boldsymbol{\kappa}$ ($\mathbf{P} \parallel \boldsymbol{\kappa}$). Для $\mathbf{P} = (1, 0, 0)$ с учетом равенства $\tilde{\mathbf{s}}_{\boldsymbol{\kappa}} = (0, s_{\boldsymbol{\kappa}}^y, s_{\boldsymbol{\kappa}}^z)$ по формуле (34) получаем выражение

$$\left(\frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE'} \right)_{\parallel} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \int [\langle s_{\boldsymbol{\kappa}}^y(t) s_{-\boldsymbol{\kappa}}^y \rangle + \langle s_{\boldsymbol{\kappa}}^z(t) s_{-\boldsymbol{\kappa}}^z \rangle + i(\langle s_{\boldsymbol{\kappa}}^y(t) s_{-\boldsymbol{\kappa}}^z \rangle - \langle s_{\boldsymbol{\kappa}}^z(t) s_{-\boldsymbol{\kappa}}^y \rangle)] e^{i\omega t} dt. \quad (35)$$

Рассматриваем теперь пучок, поляризованный вдоль оси z ($\mathbf{P} \perp \boldsymbol{\kappa}$). Для $\mathbf{P} = (0, 0, 1)$ по формуле (34) получаем, что

$$\left(\frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE'} \right)_{\perp} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \langle s_{\boldsymbol{\kappa}}^y(t) s_{-\boldsymbol{\kappa}}^y \rangle e^{i\omega t} dt. \quad (36)$$

В парамагнитной области для изотропного кристалла имеем равенство $\chi_{\boldsymbol{\kappa}}^{\alpha\beta}(\omega) = 0$ при $\alpha \neq \beta$. Из флуктуационно-диссипационной теоремы (9) при $\alpha \neq \beta$ следует равенство $\langle s_{\boldsymbol{\kappa}}^{\alpha}(t) s_{-\boldsymbol{\kappa}}^{\beta} \rangle = 0$, и сечение (35) принимает вид

$$\left(\frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE'} \right)_{\parallel} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \int [\langle s_{\boldsymbol{\kappa}}^y(t) s_{-\boldsymbol{\kappa}}^y \rangle + \langle s_{\boldsymbol{\kappa}}^z(t) s_{-\boldsymbol{\kappa}}^z \rangle] e^{i\omega t} dt \quad (37)$$

в полном соответствии с тем, что третье слагаемое в подынтегральном выражении (34) отвечает за киральное магнитное рассеяние (см., например, статью [2]), которое в изотропном кристалле отсутствует. 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 (37) и (36):

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

Переходя к функции рассеяния (30), с учетом равенств $S(\kappa, \omega) = 3S^z(\kappa, \omega)$ и $N = \mathcal{V}/\Omega_{\text{WS}}$ получаем выражение

$$\left(\frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE'} \right)_{\parallel} - \left(\frac{d^2\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega' dE'} \right)_{\perp} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{1}{3} \frac{\mathcal{V}}{\Omega_{\text{WS}}} \frac{k'}{k} S(\kappa, \omega). \quad (38)$$

В эксперименте по нейтронному рассеянию [5], [26] измеряется суммарное рассеяние по всем энергиям. Интегрируя (38) по энергии $E' = E - \hbar\omega$, записываем формулу

$$\left(\frac{d\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega'} \right)_{\parallel} - \left(\frac{d\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega'} \right)_{\perp} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{\hbar}{3} \frac{\mathcal{V}}{\Omega_{\text{WS}}} \frac{k'}{k} \int S(\kappa, \omega) d\omega. \quad (39)$$

Обращая преобразование Фурье (30), получаем равенство

$$\frac{1}{\hbar N} \langle s_{\kappa}^{\alpha}(t) s_{-\kappa}^{\alpha} \rangle = \int S^{\alpha}(\kappa, \omega) e^{-i\omega t} d\omega.$$

Используя это выражение при $t = 0$, записываем формулу (39) в виде

$$\left(\frac{d\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega'} \right)_{\parallel} - \left(\frac{d\sigma^{\uparrow\downarrow}}{d\Omega'} \right)_{\perp} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{1}{3g^2 \mu_B^2} \frac{\mathcal{V}}{\Omega_{WS}} \frac{k'}{k} M^2(\kappa), \quad (40)$$

где

$$M^2(\kappa) = \left(\hbar \int S(\kappa, \omega) d\omega \right) g^2 \mu_B^2 = \frac{1}{N} \langle \mathbf{s}_{\kappa} \mathbf{s}_{-\kappa} \rangle g^2 \mu_B^2 \quad (41)$$

– квадрат эффективного магнитного момента.

При высоких температурах эффективный момент в нуле $M(0)$ равен эффективному моменту m_{eff} в законе Кюри–Вейсса

$$\chi_{\text{exp}} = \frac{m_{\text{eff}}^2}{3(T - \Theta_C)}, \quad T > \Theta_C, \quad (42)$$

где Θ_C – парамагнитная температура Кюри. Действительно, по формуле (11) с учетом (41) имеем равенство

$$\frac{1}{N} \chi_0^{\alpha}(0) g^2 \mu_B^2 = \frac{M^2(0)}{3T}. \quad (43)$$

Сравнивая (42) и (43), получаем, что $\chi_{\text{exp}} = N^{-1} \chi_0^{\alpha}(0) g^2 \mu_B^2$ и $M(0) = m_{\text{eff}}$ при $T \gg \Theta_C$.

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Проиллюстрируем теоретические результаты на примере ОЦК-железа. Исходными данными расчета в ДТСФ являются значение магнитного момента $m(0) = 2.217 \mu_B$ (см. статью [27]) и полученная из “первых принципов” плотность электронных состояний при $T = 0$. Плотность состояний d -полосы немагнитного железа рассчитана методом Корринги–Кона–Ростокера с самосогласованным потенциалом, взятым из книги [28]. Далее плотность состояний сглаживается с функцией Лоренца полуширины $\delta = 0.001$, для того чтобы учесть затухание одноэлектронных состояний (см., например, статью [29]). Константа эффективного взаимодействия u , определенная из уравнений ДТСФ при $T = 0$, получилась равной 1.06 эВ^1 . Радиус сферы, равновеликой зоне Бриллюэна, есть $q_B = (3\Omega_{BZ}/(4\pi))^{1/3} = 1.71 \text{ \AA}^{-1}$. Все расчеты выполнены в расширенной теории ДТСФ [8], использующей перенормированное гауссово приближение (ППГ) и однородные флуктуации (ОФ).

При сравнении эффективного момента с экспериментом [5], [10] следует учитывать три обстоятельства. Во-первых, в рамках ДТСФ рассматривается исключительно приближенная спиновая плотность, которая отличается от *точной* магнитным формфактором $F(q)$ (подробности см. в приложении А). В работе [5] приводятся значения квадрата точного эффективного момента $M^2(q)|F(q)|^2$, где для железа

¹⁾ Тепловые спиновые флуктуации равны нулю при $T = 0$, и в системе уравнений ДТСФ остаются два уравнения: уравнение среднего поля и условие сохранения числа электронов. Эти уравнения решаются относительно константы взаимодействия u и химического потенциала μ при заданном экспериментальном значении магнитного момента $m(0)$ (подробности см. в работе [8]).

Рис. 1. Квадрат эффективного момента (41) ОЦК-железа, вычисленный в рамках ПГП+ОФ с использованием точной формулы (20) (сплошная линия), высокотемпературной формулы (21) (пунктирная линия) и формулы (44) с полосой пропускания $\varepsilon_{\max} = 50$ мэВ (штрихпунктирная линия) в сравнении с экспериментальными значениями [5] (крестики) при различных температурах: $T/T_C = 1.21$ (а) и $T/T_C = 1.41$ (б). На врезках воспроизведены в большем масштабе фрагменты, содержащие экспериментальные точки.

используется значение $|F(q)|^2 \approx 0.81$ (см. статью [10]). Второе обстоятельство состоит в том, что учет колебания атомов дает фактор Дебая–Валлера e^{-2W} в формуле для сечения рассеяния. Для железа множитель e^{-2W} близок к единице (подробности см. в приложении Б). Поэтому, как и в работах [5], [10], фактор Дебая–Валлера мы не учитываем. В-третьих, в эксперименте по нейтронному рассеянию [5], [10] полоса пропускания ограничена величиной $\varepsilon_{\max} = 50$ мэВ. Поэтому интеграл в формуле (17) также необходимо брать до $\varepsilon_{\max}$. В случае железа справедлива оценка $\varepsilon_{\max} < \varepsilon_0$ (величина $\varepsilon_0 = \pi^2 T/6$ примерно равна 150 мэВ при температуре Кюри $T_C^{\text{exp}} = 1044$ К [27]). Поэтому в формуле (19) ε_0 заменяется на $\varepsilon_{\max}$, и окончательная расчетная формула для спинового коррелятора с учетом полосы пропускания принимает вид

$$\langle \Delta s_{\mathbf{q}}^{\alpha} \Delta s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle = \frac{NT}{2u\lambda_L^{\alpha}} \frac{1}{a_{\alpha}^2 + b_{\alpha}^2 (q/q_B)^2} \frac{2}{\pi} \arctg \frac{\varepsilon_{\max} \tilde{c}_{\alpha}}{a_{\alpha}^2 + b_{\alpha}^2 (q/q_B)^2}. \quad (44)$$

На рис. 1 приведено сравнение значений $M^2(q)$, рассчитанных при T/T_C^{cal} , с экспериментальными [5], полученными при тех же значениях T/T_C^{exp} . Температура дана в единицах расчетной температуры Кюри $T_C^{\text{cal}} = 1.56 T_C^{\text{exp}}$. Как видно из рис. 1, расчет квадрата эффективного момента (41) с применением формулы с полосой пропускания (44) дает хорошее количественное согласие с экспериментом. Кривая $M^2(q)$, рассчитанная посредством точной формулы (20), проходит выше экспериментальных значений, поскольку интервал энергии ε в данном приближении шире, чем

Рис. 2. Пространственная корреляционная функция $C(r, T)$ ОЦК-железа, рассчитанная в ПГП+ОФ с использованием точной формулы (20) (поверхность 1), высокотемпературной формулы (21) (поверхность 2) и формулы (44) с полосой пропускания $\varepsilon_{\max} = 50$ мЭВ (поверхность 3).

в эксперименте. Высокотемпературная формула (21) в целом дает хорошее согласие с точной формулой (20) при всех температурах в парамагнитной области. Значения эффективного момента в нуле $M(0)$, полученные с использованием точной (20) и высокотемпературной (21) формул, убывают с ростом температуры и стремятся к значению эффективного момента в законе Кюри–Вейсса $m_{\text{eff}}^{\text{exp}} = 3.13\mu_B$ [30] в полном согласии с нашими теоретическими результатами. При $T = 1.8T_C^{\text{cal}}$ с помощью точной формулы (20) имеем $M(0) = 5.0\mu_B$.

Значение локального магнитного момента $m_L = g\mu_B s_L = 2.1\mu_B$, вычисленное с помощью точной формулы (20) выше температуры Кюри, примерно равно экспериментальному значению $m_0 = 2.2\mu_B$ при $T = 0$ [27]²⁾. При вычислении посредством формулы с полосой пропускания (44) при $T = 1.2T_C^{\text{cal}}$ получаем значение $m_L = 1.2\mu_B$, которое находится в хорошем согласии с экспериментальным значением $1.3\mu_B$ [5].

Ближний порядок в парамагнитной области можно оценить, рассмотрев нормированную корреляционную функцию $C(r, T) = \langle \mathbf{s}(\mathbf{r})\mathbf{s}(0) \rangle / \langle \mathbf{s}(0)\mathbf{s}(0) \rangle$ как функцию расстояния r и температуры T . С учетом (3) и (6) получаем выражение

$$C(r, T) = \left(\int_0^{q_B} q^2 \langle s_{\mathbf{q}}^{\alpha} s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle dq \right)^{-1} \int_0^{q_B} q^2 \langle s_{\mathbf{q}}^{\alpha} s_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle \frac{\sin(qr)}{qr} dq. \quad (45)$$

Как видно из рис. 2, с ростом температуры результаты расчетов $C(r, T)$ с использованием формул (20) и (21) находятся в лучшем согласии друг с другом в полном соответствии с теорией. Результаты вычислений $\langle \mathbf{s}(\mathbf{r})\mathbf{s}(0) \rangle$ по формуле Орнштейна–

²⁾ В приближении ПГП+ОФ значения квадрата локального спинового момента s_L^2 вычисляются по формуле (41) работы [8], которая отличается от формулы (7) множителем 2.

Рис. 3. Полуширина $r_{1/2}(T)$ корреляционной функции (45) ОЦК-железа, рассчитанной в ПГП+ОФ с использованием точной формулы (20) (сплошная линия), высокотемпературной формулы (21) (пунктирная линия) и формулы (44) с полосой пропускания $\varepsilon_{\max} = 50$ мэВ (штрихпунктирная линия). На врезке изображена обратная полуширина $r_{1/2}^{-1}(T)$.

Цернике (22) мало отличаются от результатов по высокотемпературной формуле (21), начиная с расстояний 1–2 Å, и здесь не приводятся. Кроме того, корреляционный радиус в формуле Орнштейна–Цернике (22) позволяет судить лишь о корреляциях на достаточно больших расстояниях [9], которые имеют универсальный характер. Для определения расстояний, на которых проявляется ближний порядок в конкретных металлах, необходимо использовать другие характеристики. В статье [9] предложено использовать полуширину корреляционной функции $r_{1/2}(T)$.

На рис. 3 приведена полуширина корреляционной функции $r_{1/2}(T)$, вычисленная в различных приближениях. Как видно из рис. 3, область ближнего порядка мала, даже если учитывать лишь энергии до $\varepsilon_{\max} = 50$ мэВ. Полуширина корреляционной функции находится в диапазоне 2–5 Å при $T/T_C^{\text{cal}} = 1.1$ и около 1.8–2.5 Å при $T/T_C^{\text{cal}} = 1.6$. Как показано в работе [9], обратный корреляционный радиус $r_c^{-1}(T)$ линейно меняется с температурой. Зависимость обратной полуширины $r_{1/2}^{-1}(T)$ от температуры также близка к линейной (см. врезку на рис. 3).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены выражения для эффективного $M(q)$ и локального m_L магнитных моментов и пространственного коррелятора спиновой плотности $\langle \mathbf{s}(\mathbf{r})\mathbf{s}(0) \rangle$ в ДТСФ. Показано, что при высоких температурах эффективный момент $M(q)$ задается лоренцевой функцией, спиновый коррелятор – формулой Орнштейна–Цернике, а $M(0)$ стремится к эффективному моменту m_{eff} в законе Кюри–Вейсса. В теории магнетиков с коллективизированными электронами выведено соотношение между эффективным моментом и сечением нейтронного рассеяния. Теоретические результаты

проиллюстрированы на примере ОЦК-железа. Рассчитанные эффективный и локальный моменты находятся в хорошем согласии с экспериментом. Расчет пространственного коррелятора позволяет утверждать, что ближний порядок в ОЦК-железе выше температуры Кюри сохраняется, но лишь на небольших расстояниях (не более 5 Å).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Магнитный формфактор

Установим связь между спиновой плотностью $\mathbf{s}(\mathbf{r})$ и спиновой плотностью, которая возникает в ДТСФ из-за приближения энергии кулоновского взаимодействия многополосным гамильтонианом Хаббарда. В представлении вторичного квантования спиновая плотность имеет вид

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \underline{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \right) \underline{\psi}(\mathbf{r}), \quad \underline{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \left(\psi_\uparrow^*(\mathbf{r}), \psi_\downarrow^*(\mathbf{r}) \right), \quad \underline{\psi}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{r}) \\ \psi_\downarrow(\mathbf{r}) \end{pmatrix},$$

где $\underline{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ и $\underline{\psi}(\mathbf{r})$ – спинорные полевые операторы. В базисе функций Блоха $\varphi_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ справедливы равенства

$$\underline{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\nu', \mathbf{k}'} \underline{a}_{\nu' \mathbf{k}'}^\dagger \varphi_{\nu' \mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}), \quad \underline{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu, \mathbf{k}} \underline{a}_{\nu \mathbf{k}} \varphi_{\nu \mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

где $\underline{a}_{\nu \mathbf{k}}^\dagger$ и $\underline{a}_{\nu \mathbf{k}}$ – спинорные операторы рождения и уничтожения (индекс полосы ν далее для краткости опущен). Тогда

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \underline{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \mathbf{s} \underline{a}_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

Переходя от функций Блоха $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ к функциям Ванье $w_{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{j}})$ по формуле

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j),$$

получаем выражение

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}} \underline{a}_{\mathbf{k}-\boldsymbol{\kappa}}^\dagger \mathbf{s} \underline{a}_{\mathbf{k}} \frac{1}{N} \sum_{j', j''} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{j''}} e^{i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{R}_{j'}} w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j''} + \mathbf{R}_{j'}),$$

где $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ и $\mathbf{R}_{j''} = \mathbf{R}_{j'} - \mathbf{R}_j$. Используя формулу (2) для фурье-образа спиновой плотности и тождество $\sum_{j'} e^{i(\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{q})\mathbf{R}_{j'}} = N\delta_{\boldsymbol{\kappa}\mathbf{q}}$, приходим к выражению

$$\mathbf{s}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} \underline{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \mathbf{s} \underline{a}_{\mathbf{k}} \sum_{j''} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{j''}} \int w^*(\mathbf{r}') w(\mathbf{r}' + \mathbf{R}_{j''}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} d\mathbf{r}',$$

где $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{R}_j$. Окончательно имеем

$$\mathbf{s}_\mathbf{q} = \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{q}, \mathbf{k}) (\mathbf{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \mathbf{s} \mathbf{a}_\mathbf{k}), \quad (\text{A.1})$$

где

$$F(\mathbf{q}, \mathbf{k}) = \sum_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \int w^*(\mathbf{r}) w(\mathbf{r} + \mathbf{R}_j) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

– магнитный формфактор (ср. со статьей [20]). Пренебрегая перекрытием функций Ванны на разных узлах, получаем, что

$$F(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx F(q) = \int |w(\mathbf{r})|^2 e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{r}.$$

Вводя оператор приближенной спиновой плотности $\mathbf{s}'_\mathbf{q} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \mathbf{s} \mathbf{a}_\mathbf{k}$, записываем формулу (A.1) в виде $\mathbf{s}_\mathbf{q} = F(q) \mathbf{s}'_\mathbf{q}$, а для спинового коррелятора получаем соотношение

$$\langle \Delta s_\mathbf{q}^\alpha \Delta s_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle = |F(q)|^2 \langle \Delta s_\mathbf{q}'^\alpha \Delta s_{-\mathbf{q}}'^\alpha \rangle.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Фактор Дебая–Валлера

Получим поправочный коэффициент к формуле (29) для магнитного сечения рассеяния, отвечающий за колебания решетки³⁾ (фактор Дебая–Валлера). Предполагаем, что каждый узел может смещаться на $\mathbf{u}_j$ от неподвижного положения равновесия $\mathbf{R}_j$. Заменяя $\mathbf{R}_j$ на $\mathbf{R}_j + \mathbf{u}_j$, записываем выражение (2) для фурье-образа спиновой плотности в виде

$$s_\kappa^\alpha = \sum_j s_j^\alpha e^{-i\kappa(\mathbf{R}_j + \mathbf{u}_j)}, \quad \mathbf{s}_j = \int_{\Omega_j} \mathbf{s}(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

где Ω_j – ячейка Вигнера–Зейтца с центром $\mathbf{R}_j$. С учетом однородности кристалла спиновый коррелятор принимает вид

$$\langle s_\kappa^\alpha(t) s_{-\kappa}^\beta \rangle = N \sum_j e^{-i\kappa\mathbf{R}_j} \langle s_j^\alpha(t) e^{-i\kappa\mathbf{u}_j(t)} s_0^\beta e^{i\kappa\mathbf{u}_0} \rangle.$$

Пренебрегая взаимодействием спиновых флуктуаций и фононов, заменяем температурное среднее произведением средних:

$$\langle s_j^\alpha(t) e^{-i\kappa\mathbf{u}_j(t)} s_0^\beta e^{i\kappa\mathbf{u}_0} \rangle = \langle s_j^\alpha(t) s_0^\beta \rangle \langle e^{-i\kappa\mathbf{u}_j(t)} e^{i\kappa\mathbf{u}_0} \rangle.$$

Вводя обозначения

$$U = -i\kappa\mathbf{u}_j(t), \quad V = i\kappa\mathbf{u}_0, \quad (\text{B.1})$$

³⁾Здесь мы следуем схеме изложения книги [25].

записываем формулу для неполяризованного сечения рассеяния (29) в виде

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega' dE'} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\alpha, \beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{\kappa}^\alpha \hat{\kappa}^\beta) N \sum_j e^{-i\mathbf{\kappa}\mathbf{R}_j} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \langle s_j^\alpha(t) s_0^\beta \rangle \langle e^U e^V \rangle e^{i\omega t} dt. \quad (\text{Б.2})$$

Преобразуем температурное среднее от произведения экспонент $\langle e^U e^V \rangle$. Оператор смещения $\mathbf{u}_j$ в гейзенберговском представлении записывается следующим образом:

$$\mathbf{u}_j(t) = \left(\frac{\hbar}{2MN} \right)^{1/2} \sum_s \omega_s^{-1/2} \mathbf{e}_s (b_s e^{i(\mathbf{q}\mathbf{R}_j + \omega_s t)} + b_s^\dagger e^{-i(\mathbf{q}\mathbf{R}_j - \omega_s t)}), \quad (\text{Б.3})$$

где $b_s^\dagger$ и b_s – операторы рождения и уничтожения, $\mathbf{e}_s$ – вектор поляризации и ω_s – частота собственных колебаний s -й нормальной моды, M – масса атома (s – двойной индекс $(\mathbf{q}, \alpha)$). Подставляя (Б.3) в (Б.1), получаем равенства

$$U = -i \sum_s h_s(\mathbf{\kappa}) (b_s e^{i(\mathbf{q}\mathbf{R}_j - \omega_s t)} + b_s^\dagger e^{-i(\mathbf{q}\mathbf{R}_j - \omega_s t)}), \quad V = i \sum_s h_s(\mathbf{\kappa}) (b_s e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} + b_s^\dagger e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}), \quad (\text{Б.4})$$

где $h_s(\mathbf{\kappa}) = \hbar^{1/2} (2MN\omega_s)^{-1/2} \mathbf{\kappa} \cdot \mathbf{e}_s$. Непосредственным вычислением проверяется, что коммутатор операторов U и V пропорционален единичному оператору. В этом случае для экспонент справедлива формула

$$e^U e^V = e^{U+V} e^{[U,V]/2}.$$

Смещение $\mathbf{u}_j$ на каждом узле j имеет гауссово распределение, поэтому гауссово распределение имеют и величины U и V . Для экспоненты произвольной гауссовой величины Q справедлива формула $\langle e^Q \rangle = e^{\langle Q^2 \rangle / 2}$. Следовательно,

$$\langle e^U e^V \rangle = e^{\langle (U+V)^2 \rangle / 2} e^{\langle [U,V] \rangle / 2} = e^{\langle U^2 + V^2 \rangle / 2} e^{\langle UV \rangle}.$$

В силу однородности кристалла средние значения $\langle U^2 \rangle$ и $\langle V^2 \rangle$ равны друг другу. В результате получаем, что

$$\langle e^U e^V \rangle = e^{\langle V^2 \rangle} e^{\langle UV \rangle}.$$

Заменяя экспоненту $e^{\langle UV \rangle}$ единицей (упругое рассеяние), имеем $\langle e^U e^V \rangle = e^{\langle V^2 \rangle}$. Возвращаясь к фурье-образам спиновой плотности в формуле для сечения рассеяния (Б.2), находим, что

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega' dE'} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\alpha, \beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{\kappa}^\alpha \hat{\kappa}^\beta) e^{-2W(\mathbf{\kappa})} \frac{1}{2\pi\hbar} \int \langle s_{\mathbf{\kappa}}^\alpha(t) s_{-\mathbf{\kappa}}^\beta \rangle e^{i\omega t} dt,$$

где $2W(\mathbf{\kappa}) = -\langle V^2 \rangle$.

Выведем теперь расчетную формулу для фактора Дебая–Валлера $e^{-2W(\kappa)}$. Используя (Б.4), получаем равенство

$$2W(\kappa) = \left(\frac{\hbar}{2MN} \right) \sum_s \frac{(\kappa \cdot \mathbf{e}_s)^2}{\omega_s} \langle 2n_s + 1 \rangle,$$

где n_s – квантовое число s -й нормальной моды. Вычисляя среднее в больцмановском распределении, имеем

$$2W(\kappa) = \left(\frac{\hbar}{2MN} \right) \sum_s \frac{(\kappa \cdot \mathbf{e}_s)^2}{\omega_s} \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega_s}{2T} \right). \quad (\text{Б.5})$$

Множитель $(\kappa \cdot \mathbf{e}_s)^2$ заменяем средним значением $(3N)^{-1} \sum_s (\kappa \cdot \mathbf{e}_s)^2$ по зоне Бриллюэна. Переходя от суммы по $\mathbf{q}$ к интегралу по зоне Бриллюэна и заменяя ее сферой равного объема, находим, что

$$\frac{1}{3N} \sum_s (\kappa \cdot \mathbf{e}_s)^2 = \frac{1}{3} \kappa^2.$$

Подставляя это выражение в (Б.5) вместо $(\kappa \cdot \mathbf{e}_s)^2$ и переходя от суммирования по частотам к интегрированию с плотностью состояний фононов $Z(\omega)$, получаем соотношение

$$2W(\kappa) = \frac{\hbar\kappa^2}{2M} \int_0^{\omega_m} \frac{1}{\omega} \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right) Z(\omega) d\omega,$$

где $\int_0^{\omega_m} Z(\omega) d\omega = 1$, а ω_m – максимальная среди всех частот ω_s . Вычисляя плотность состояний фононов в модели Дебая: $Z(\omega) = 3\omega^2/\omega_m^3$, где $\hbar\omega_m = \Theta_D$ и Θ_D – температура Дебая (в энергетических единицах), и используя приближенное равенство $\operatorname{cth} x \approx 1/x$ при $x \ll 1$, приходим к формуле

$$2W(\kappa) = \frac{3\hbar^2\kappa^2}{M} \frac{T}{\Theta_D^2}, \quad T \gg \Theta_D. \quad (\text{Б.6})$$

Оценим величину фактора Дебая–Валлера e^{-2W} для ОЦК-железа. Масса атома железа равна $M = 55.85$ а.е.м., температура Дебая равна $\Theta_D = 464$ К, радиус сферы, равновеликой зоне Бриллюэна, есть $q_B = 1.71 \text{ \AA}^{-1}$. Тогда по формуле (Б.6) при $\kappa = q_B$ и $T = T_C^{\text{exp}}$ получаем оценку $2W \approx 0.037$ и $e^{-2W} \approx 0.96$.

Благодарности. Авторы признательны рецензенту за полезные замечания.

Список литературы

- [1] Т. Мория, *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами*, Мир, М., 1988.
- [2] С.В. Малеев, “Рассеяние поляризованных нейтронов в магнетиках”, *УФН*, **172:6** (2002), 617.
- [3] J. Schweizer, “Polarized neutrons and polarization analysis”, *Neutron Scattering from Magnetic Materials*, ed. T. Chatterji, Elsevier, Amsterdam, 2006, 155–212.
- [4] N. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory, and Applications*, Springer Series in Solid-State Sciences, **166**, Springer, Berlin, 2010.

- [5] P. J. Brown, H. Capellmann, J. Déportes, D. Givord, K. R. A. Ziebeck, “Observations of ferromagnetic correlations at high temperatures in paramagnetic iron”, *J. Magn. Magn. Mater.*, **30**:2 (1982), 243–248.
- [6] P. J. Brown, H. Capellmann, J. Déportes, D. Givord, K. R. A. Ziebeck, “Spatial correlation of magnetisation in the paramagnetic phases of iron and nickel”, *J. Magn. Magn. Mater.*, **31–34**:1 (1983), 295–296.
- [7] J. Hubbard, “Panel discussion on itinerant electron magnetism”, *Physics of Transition Metals* (University of Leeds, 18–22 August, 1980), Conference Series (Institute of Physics), **55**, ed. P. Rhodes, IOP, Bristol, 1981, 669–687.
- [8] N. B. Melnikov, B. I. Reser, V. I. Grebennikov, “Extended dynamic spin-fluctuation theory of metallic magnetism”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **23**:27 (2011), 276003, 11 pp.
- [9] N. B. Melnikov, B. I. Reser, “Short-range order above the Curie temperature in the dynamic spin-fluctuation theory”, *J. Magn. Magn. Mater.*, **397** (2016), 347–351.
- [10] G. Shirane, P. Böni, J. P. Wicksted, “Paramagnetic scattering from Fe(3.5 at. % Si): Neutron measurements up to the zone boundary”, *Phys. Rev. B*, **33**:3 (1986), 1881–1885.
- [11] H. Hasegawa, “Wave vector-dependent spin susceptibility of iron above the Curie temperature”, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **13**:12 (1983), 2655–2675.
- [12] V. I. Grebennikov, “Spin-density correlations in paramagnetic iron”, *J. Magn. Magn. Mater.*, **84**:1–2 (1990), 59–68.
- [13] V. I. Grebennikov, “Dynamical theory of thermal spin fluctuations in metallic ferromagnets”, *Phys. Solid State*, **40**:1 (1998), 79–86.
- [14] A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, G. Kotliar, “Finite-Temperature magnetism of transition metals: an *ab initio* dynamical mean-field theory”, *Phys. Rev. Lett.*, **87**:6 (2001), 067205, 4 pp.
- [15] A. V. Ruban, S. Khmelevskiy, P. Mohn, B. Johansson, “Temperature-induced longitudinal spin fluctuations in Fe and Ni”, *Phys. Rev. B*, **75**:5 (2007), 054402, 7 pp.
- [16] Y. Kakehashi, M. A. R. Patoary, “First-principles dynamical coherent-potential approximation approach to the ferromagnetism of Fe, Co, and Ni”, *J. Phys. Soc. Japan*, **80**:3 (2011), 034706, 10 pp.
- [17] P.-W. Ma, S. L. Dudarev, “Longitudinal magnetic fluctuations in Langevin spin dynamics”, *Phys. Rev. B*, **86**:5 (2012), 054416, 10 pp.
- [18] L. Van Hove, “Time-dependent correlations between spins and neutron scattering in ferromagnetic crystals”, *Phys. Rev.*, **95**:6 (1954), 1374–1384.
- [19] R. J. Elliott, “Theory of neutron scattering by conduction electrons in a metal and on the collective-electron model of a ferromagnet”, *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, **235**:1202 (1956), 289–304.
- [20] T. Izuyama, D.-J. Kim, R. Kubo, “Band theoretical interpretation of neutron diffraction phenomena in ferromagnetic metals”, *J. Phys. Soc. Japan*, **18**:7 (1963), 1025–1042.
- [21] D.-J. Kim, *New Perspectives in Magnetism of Metals*, Kluwer, New York, 1999.
- [22] Р. Уайт, *Квантовая теория магнетизма*, Мир, М., 1985.
- [23] Н. Б. Мельников, Б. И. Резер, “Поперечная восприимчивость и закон $T^{3/2}$ в динамической теории спиновых флуктуаций”, *ТМФ*, **181**:2 (2014), 358–373.
- [24] Б. И. Резер, В. И. Гребенников, “Температурная зависимость магнитных свойств ферромагнитных металлов с учетом динамики и нелокальности спиновых флуктуаций”, *ФММ*, **85**:1 (1998), 30–42.
- [25] G. L. Squires, *Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering*, Dover, New York, 1996.
- [26] K. R. A. Ziebeck, P. J. Brown, “Measurement of the paramagnetic response function in the weak itinerant magnetic compound MnSi using polarised neutron scattering”, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **10**:9 (1980), 2015–2024.

- [27] J. Crangle, G. M. Goodman, “The magnetization of pure iron and nickel”, *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, **321**:1547 (1971), 477–491.
- [28] V. L. Moruzzi, J. F. Janak, A. R. Williams, *Calculated Electronic Properties of Metals*, Pergamon, New York, 1978.
- [29] 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 (1999), 4871–4885.
- [30] E. P. Wohlfarth, “Iron, cobalt, nickel”, *Ferromagnetic Materials. A Handbook on the Properties of Magnetically Ordered Substances*, v.1: *Handbook of Magnetic Materials*, ed. E. P. Wohlfarth, North-Holland, Amsterdam, 1980, 1–70.

Поступила в редакцию 14.01.2016,
после доработки 23.02.2016