ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 7820

А.Л.Куземский

ТЕОРИЯ НЕУПРУГОГО ПОПЕРЕЧНОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ В ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ

1974

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 7820

А.Л.Куземский

ТЕОРИЯ НЕУПРУГОГО ПОПЕРЕЧНОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ В ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ

Направлено в Phys. Kondens. Materie

1. Введение

В последнее время широкий интерес привлекает изучение неупругого рассеяния медленных нейтронов в переходных s – d металлах [1–7]. В значительной мере интерес этот обусловливается возможностью прямого наблюдения в области низких температур акустической ветви возбуждений спин-волнового типа, поскольку в отличие от брэгговского рассеяния нейтронов, дающего информацию о статических магнитных свойствах кристалла, неупругое сечение рассеяния содержит информацию о динамических свойствах системы, таких, как спин-волновые возбуждения и критические флюктуации. В настоящей работе мы не будем обсуждать вопросов, связанных с критическим и парамагнитным рассеянием, поскольку это требует отдельного рассмотрения, и ограничимся только изучением поперечной части сечения нейтронов при низких температурах. Поперечное сечение рассеяния нейтронов выражается через мнимую часть обобщенной восприимчивости от поперечных спиновых компонент, полюса которой определяют спектр возможных возбуждений в системе, связанных с переворотом спина. Структура же обобщенной спиновой восприимчивости и вид ее полюсов определяются выбором модельного гамильтониана системы электронов в металле и характером сделанных при ее вычислении приближений [1,2,8]. С другой стороны, имеющиеся экспериментальные результаты [2–7] не всегда достаточно хорошо интерпретируются в рамках используемых моделей, таких, как модель Изуяма, Кима и Кубо [1], основанная на гамильтониане Хаббарда [1] для единичной зоны d -электронов с кулоновской корреляцией в одном узле. Поэтому в ряде теоретических работ [8–13] для вычисления обобщенной спиновой восприимчивости и спектра магнитных возбуждений использовались более реалистические модели системы d -электронов в металле с учетом существования нескольких зон и вырождения по проекциям орбитального момента электронов [8–9], взаимодействия d-электронов с колебаниями решетки [10], гибридизации электронов из s - и d - зон [11], с учетом перекрытия волновых функций d - электронов на соседних узлах [12] и комбинированных эффектов [13].

В настоящей работе рассматривается вычисление поперечного сечения рассеяния нейтронов в рамках модели d -электронов в металле с учетом их гибридизации с электронами из широкой s -зоны. Одночастичные свойства различных вариантов этой модели и ее подробное описание рассматривалось в [14–16]. В работе [11] была предпринята попытка вычислить для этой модели спектр спиновых волн в атомном пределе для d -электронов и в пределе бесконечно большой s – d -гибридизации. Последнее приближение представляется неоправданным. Для простоты в настоящей работе для системы d -электронов в металле используется приближение хаотических фаз [1]. В рамках этого приближения вычисляется спектр индивидуальных возбуждений стонеровского типа, связанных с переворотом спина. Показано, что в пределе $q \to 0$ среди полюсов обобщенной восприимчивости содержится полюс типа акустических спиновых волн, т.е. обращающийся в нуль при $q \to 0$.

2. *Гамильтониан системы и общие соотношения*

Следуя работам [14–16], будем описывать подсистему s - и d -электронов в переходных металлах гамильтонианом следующего вида:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_d + \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_{s-d} , \qquad /2.1/$$

где

$$\mathcal{H}_d = \sum_{k\sigma} E(k) d^+_{k\sigma} d_{k\sigma} + U/2N \sum_{\sigma} \sum_{k,k',q} d^+_{k+q,\sigma} d_{k,\sigma} \times$$

$$\times\ d^+_{k'-q,-\sigma}\, d_{k',-\sigma} - \qquad /2.2/$$

гамильтониан Хаббарда /1/ электронов в d -зоне, коррелирующих в одном узле с энергией, равной U.

$$\mathcal{H}_s = \sum_{k\sigma} \epsilon_k a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} - \qquad /2.3/$$

гамильтониан широкой s -зоны электронов проводимости.

$$\mathcal{H}_{s-d} = \sum_{k\sigma} (V_k a^+_{k\sigma} d_{k\sigma} + V^*_k d^+_{k\sigma} a_{k\sigma}) - \qquad /2.4/$$

одночастичный оператор, описывающий гибридизацию электронов из s - и d -зон вследствие прямого рассеяния s - и d -электронов.

Сечение поперечного неупругого рассеяния медленных нейтронов системой d -электронов металла, характеризующихся плотностью магнитного момента $s^\alpha(r) = N^{-1} \sum_q \exp(iqr)\, s^\alpha(q)$, $\alpha = x, y, z$, в пренебрежении орбитальным вкладом, записывается в форме /1/

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{tr.} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right)^2 |F(q)|^2 \frac{k'}{k} (1 + \tilde{q}_z^2)\left(-\frac{1}{2h}\right) \times$$

$$\times \frac{e^{h\omega\beta}}{e^{h\omega\beta} - 1} \{ \mathrm{Im}\, G^+_q(\omega) + \mathrm{Im}\, G^-_{-q}(\omega) \}, \qquad /2.5/$$

где

$$G^\nu_q(t) = -i\theta(t) < [\tilde{s}^\nu(q,t), \tilde{s}^{-\nu}(q,0)] >, \quad \nu = \pm \ - \qquad /2.6/$$

двухвременные запаздывающие температурные функции Грина, связанные с обобщенной спиновой восприимчивостью системы следующим образом /1/:

$$N/(g\mu_b)^2\,\chi(q,\omega)=-\frac{2\pi}{h}G_q(\omega)=\left(-\frac{2\pi}{h}\right)\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dt\,e^{i\omega t}\,G_q(t). \qquad /2.7/$$

Вводя обозначение $n(\omega)=[\exp(\beta h\omega)-1]^{-1}$, перепишем /2.5/ в виде [1]

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE'}\right)_{tr.}=\left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right)^2|F(q)|^2\frac{k'}{k}(1+\tilde{q}_z^2)\left(-\frac{1}{2h}\right)\times \qquad /2.8/$$

$$\times\{(n(\omega)+1)\,\mathrm{Im}\,G^{-}_{-q}(\omega)+n(-\omega)\,\mathrm{Im}\,G^{-}_{q}(-\omega)\}.$$

Таким образом, для полного описания поперечной части сечения неупругого рассеяния нам необходимо вычислить функцию Грина $G^{-}_{q}(\omega)$.

3. Вычисление гриновских функций

Для вычисления обобщенной поперечной восприимчивости системы запишем систему уравнений движения для функции Грина $\langle\langle\theta_k(q)=d^{+}_{k+q\downarrow}d_{k\uparrow}|B\rangle\rangle_\omega$ и зацепляющихся функций, используя приближение хаотических фаз [1] для получения замкнутой системы уравнений. Тогда будем иметь

$$1)\ (h\omega+\tilde{E}^{\uparrow}(k+q)-\tilde{E}^{\downarrow}(k))\langle\langle\theta_k(q)|B\rangle\rangle_\omega=\frac{h}{2\pi}(n_{k+q\downarrow}-n_{k\uparrow})A(q,\omega)$$

$$-V_{k+q}\langle\langle a^{+}_{k+q\downarrow}d_{k\uparrow}|B\rangle\rangle_\omega+V^{*}_{k}\langle\langle d^{+}_{k+q\downarrow}a_{k\uparrow}|B\rangle\rangle_\omega\ ; \qquad /3.1/$$

$$2)\ (h\omega-\tilde{E}^{\downarrow}(k)+\epsilon_{k+q})\langle\langle a^{+}_{k+q\downarrow}d_{k\uparrow}|B\rangle\rangle_\omega=\frac{h}{2\pi}\langle a^{+}_{k+q\downarrow}d_{k+q\downarrow}\rangle A(q,\omega)$$

$$-V^{*}_{k+q}\langle\langle\theta_k(q)|B\rangle\rangle_\omega+V^{*}_{k}\langle\langle a^{+}_{k+q\downarrow}a_{k\uparrow}|B\rangle\rangle_\omega\ ; \qquad /3.2/$$

$$3)\left(h\omega-\tilde{E}_{\uparrow}(k+q)-\epsilon_k\right)\langle\langle d^+_{k+q\downarrow}a_{k\uparrow}|B\rangle\rangle_\omega=-\frac{h}{2\pi}\langle d^+_{k\uparrow}a_{k\uparrow}\rangle A(q,\omega)$$

$$-V_{k+q}\langle\langle a^+_{k+q\downarrow}a_{k\uparrow}|B\rangle\rangle_\omega+V_k\langle\langle\theta_k(q)|B\rangle\rangle_\omega\;; \qquad /3.3/$$

$$4)\left(h\omega+\epsilon_{k+q}-\epsilon_k\right)\langle\langle a^+_{k+q\downarrow}a_{k\uparrow}|B\rangle\rangle_\omega=V_k\langle\langle a^+_{k+q\downarrow}d_{k\uparrow}|B\rangle\rangle_\omega-$$

$$-V^*_{k+q}\langle\langle d^+_{k+q\downarrow}a_{k\uparrow}|B\rangle\rangle_\omega\;. \qquad /3.4/$$

Здесь использовались обозначения:

$$B=\sum_k d^+_{k\uparrow}d_{k+q\downarrow}=\tilde{s}^+(q), \qquad \Delta=U/N\sum_p(n_{p\downarrow}-n_{p\uparrow}).$$

$$\tilde{E}_\sigma(k)=E(k)+U\,1/N\sum_p n_{p\sigma},$$

$$A(q,\omega)=1-\frac{2\pi}{h}U/N\cdot G^-_q(\omega), \qquad /3.5/$$

Для получения замкнутой системы алгебраических уравнений /3.1/-/3.4/ были применены следующие приближения:

$$[\theta_k(q),H_d]_-\simeq(E(k)-E(k+q))\theta_k(q)+\Delta\theta_k(q)- \qquad /3.6/$$

$$-U\,1/N\sum_p(n_{k+q\downarrow}-n_{k\uparrow})\theta_p(q),$$

$$[d^+_{k+q\downarrow}a_{k\uparrow},H_d]_-\simeq-E(k+q)d_{k+q\downarrow}a_{k\uparrow}-U/N\sum_p n_{p\uparrow}\times$$

$$\times d^+_{k+q\downarrow}a_{k\uparrow}+U\,1/N\langle d^+_{k\uparrow}a_{k\uparrow}\rangle\sum_p d^+_{p+q\downarrow}d_{p\uparrow}.$$

В уравнениях /3.1/-/3.7/ мы удерживаем смешанные корреляционные функции $\langle d^+_{k\uparrow}a_{k\uparrow}\rangle$ и $\langle a^+_{k+q\downarrow}d_{k+q\downarrow}\rangle$, поскольку, как показано в работе [16], они пропорциональны V_k и не могут быть отброшены. Более того, они аномально возрастают в точке пересечения спектров d - и s -электронов.

Учитывая теперь, что $\sum_k \langle\langle \theta_k(q) \mid B \rangle\rangle_\omega = G_q^-(\omega)$, и определение /2.7/ из /3.1/-/3.4/, найдем, что

$$\chi^-(q,\omega) = \chi^{HF}(q,\omega)\{1 - U/(g\mu_B)^2 \chi^{HF}(q,\omega)\}^{-1}, \qquad /3.8/$$

где

$$\chi^{HF}(q,\omega) = -(g\mu_B)^2/N \sum_k \{(n_{k+q\downarrow} - n_{k\uparrow})[-|V_k|^2((h\omega + \tilde{E}_\downarrow(k) + \epsilon_{k+q}) + (h\omega + \tilde{E}_\uparrow(k+q) - \epsilon_k)) +$$

$$+ (h\omega + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k)(h\omega + \tilde{E}_\uparrow(k+q) - \epsilon_k)(h\omega - \tilde{E}_\downarrow(k) + \epsilon_{k+q})] -$$

$$- (h\omega + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k)[V_k^*(h\omega - E_\downarrow(k) - \epsilon_{k+q}) < d^+_{k\uparrow} a_{k\uparrow} > +$$

$$+ V_k < a^+_{k+q\downarrow} d_{k+q\downarrow} > (h\omega + \tilde{E}_\uparrow(k+q) - \epsilon_k)]\} \times \qquad /3.9/$$

$$\times \{-|V_k|^2 [(h\omega + \tilde{E}_\uparrow(k+q) - \tilde{E}_\downarrow(k))(h\omega + \tilde{E}_\uparrow(k+q) - \epsilon_k) +$$

$$+ (h\omega - \tilde{E}_\downarrow(k) - \epsilon_{k+q})(h\omega + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k) +$$

$$+ (h\omega + \tilde{E}_\uparrow(k+q) - \tilde{E}_\downarrow(k))(h\omega - \tilde{E}_\downarrow(k) + \epsilon_{k+q}) +$$

$$+ (h\omega + \tilde{E}_\uparrow(k+q) - \epsilon_k)(h\omega + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k)] +$$

$$+ (h\omega + \tilde{E}_\uparrow(k+q) - \tilde{E}_\downarrow(k))(h\omega - \tilde{E}_\downarrow(k) + \epsilon_{k+q}) \times$$

$$(h\omega + \tilde{E}_\uparrow(k+q) - \epsilon_k)(h\omega + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k)\}^{-1} -$$

восприимчивость системы d-электронов в приближении Хартри-Фока. Если в /3.9/ положить $V_k = 0$, то для $\chi^{HF}(q,\omega)$ получим выражение

$$\chi^{HF}(q,\omega) = (g\mu_B)^2/N \sum_k \frac{n_{k\uparrow} - n_{k+q\downarrow}}{h\omega + \tilde{E}_\uparrow(k+q) - \tilde{\tilde{E}}_\downarrow(k)}, \quad /3.10/$$

обобщением которого для случая гибридизированных d - электронов является восприимчивость /3.9/. При выводе /3.9/ было использовано следующее приближение:

$$V_{k+q} \approx V_k, \quad /3.11/$$

справедливое по крайней мере в пределе $q \to 0$. Полюса полной восприимчивости /3.8/ содержат все полюса хартри-фоковской восприимчивости /3.9/, соответствующие индивидуальным возбуждениям, связанным с переворотом спина, или стонеровским возбуждениям. Нахождение этих полюсов мы обсудим в следующем разделе, а здесь остановимся на вопросе о существовании акустической ветви возбуждений среди полюсов полной восприимчивости /3.8/. Для этого, следуя /1/, покажем, что при $q=0$ значение $h\omega_0=0$ удовлетворяет уравнению

$$1 = U/N \sum_k \{(n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow})[-|V_k|^2(2h\omega-\Delta) + h\omega(h\omega+\bar{E}_\uparrow(k)-\epsilon_k)\times$$

$$\times(h\omega-\tilde{E}_\downarrow(k)+\epsilon_k)] - h\omega[V_k^*(h\omega-\tilde{E}_\downarrow(k)+\epsilon_k)\langle d^+_{k\uparrow} a_{k\uparrow}\rangle +$$

$$+V_k\langle a^+_{k\downarrow} d_{k\uparrow}\rangle(h\omega+\tilde{\tilde{E}}_\uparrow(k)-\epsilon_k)]\}\times\{-|V_k|^2(2h\omega+\Delta)^2+$$

$$+h\omega\,(h\omega+\tilde{E}_\uparrow(k)-\tilde{E}_\downarrow(k))(h\omega-\tilde{E}_\downarrow(k)+\epsilon_k)(h\omega+\bar{E}_\uparrow(k)-\epsilon_k)\}^{-1}. \quad /3.12/$$

Подставляя $h\omega_0=0$ в /3.12/, непосредственно видны, что это значение ему удовлетворяет. Предел $q\to 0$, $h\omega\to 0$ является гидродинамическим пределом, и соответствующий этому пределу полюс обобщенной восприимчивости описывает колебания плотности магнитного момента, распространяющиеся в магнитоупорядоченном кристалле. Из общих соображений следует, что в пределе длинных волн энергия $\hbar\omega$ должна быть связана с волновым числом q соотношением $\hbar\omega = Dq^2$. Точное выражение для D, справедливое для любого металлического или неметаллического ферромагнетика или неферромагнетика, в статическом магнитном поле имеет вид [17]

$$Dq^2 = \frac{1}{2\langle S^z\rangle}\{\hbar q\langle[J^-_q, S^+_{-q}]\rangle - \hbar^2 q^2 \lim_{\omega\to 0}\lim_{q\to 0}\chi_J\}. \qquad /3.13/$$

/Определения см. в [17] /. Таким образом, показано, что существует решение уравнения

$$1 = U/(g\mu_B)^2\chi^{HF}(q,\omega), \qquad /3.14/$$

которое обладает свойством $\hbar\omega_{q\to 0} = 0$, и это решение соответствует спин-волновым возбуждениям в модели с $s-d$ гибридизацией.

Следовательно, удалось показать, что для данной модели выражение для динамической восприимчивости $\chi^-(q,\omega)$ в приближении случайных фаз выражается через $\chi^{HF}(q,\omega)$ в виде, аналогичном найденному в работе Изюяма и др. [1]

4. Хартри-фоковская восприимчивость

Вычислить полюса хартри-фоковской восприимчивости /3.9/, соответствующие стонеровским индивидуальным возбуждениям, можно, не прибегая к нахождению полюсов $\chi^{HF}(q,\omega)$ /3.9/. Для этого заметим, что $\chi^{HF}(q,\omega)$ является восприимчивостью системы, описываемой гамильтонианом вида

$$\mathcal{H}^{HF} = \sum_{k\sigma}\tilde{E}_\sigma(k)d^+_{k\sigma}d_{k\sigma} + \sum_{k\sigma}\epsilon_k a^+_{k\sigma}a_{k\sigma} +$$

$$+ \sum_{k\sigma}(V_k a^+_{k\sigma}d_{k\sigma} + V^*_k d^+_{k\sigma}a_{k\sigma}). \qquad /4.1/$$

Гамильтониан /4.1/ является одночастичным оператором и может быть точно диагонализирован с помощью канонического u, v -преобразования. Результат диагонализации имеет вид [11,16]:

$$\mathcal{H}^{HF} = \sum_{k\sigma} \{ \omega_{1k\sigma}\, \alpha^{+}_{k\sigma} \alpha_{k\sigma} + \omega_{2k\sigma} \beta^{+}_{k\sigma} \beta_{k\sigma} \}, \qquad /4.2/$$

$$\omega^{1}_{2\,k\sigma} = 1/2 \{ (\tilde{E}_{\sigma}(k) + \epsilon_{k}) \pm \sqrt{(\tilde{E}_{\sigma}(k) - \epsilon_{k})^2 + 4|V_k|^2} \}, \qquad /4.3/$$

$$\left.\begin{matrix} u^2_{k\sigma} \\ v^2_{k\sigma} \end{matrix}\right\} = [\, 1 + \frac{(\omega^{1}_{2\,k\sigma} - \tilde{E}_{\sigma}(k))^2}{(V^*_k)^2} \,]^{-1}. \qquad /4.4/$$

Восприимчивость $\chi^{HF}(q,\omega)$ принимает следующую форму:

$$\chi^{HF}(q,\omega) = (g\mu_B)^2 / N \sum_{k} \{ u^2_{k+q\downarrow}\, u^2_{k\uparrow} \frac{n^{\alpha}_{k\uparrow} - n^{\alpha}_{k+q\downarrow}}{h\omega + \omega_{1k+q\downarrow} - \omega_{1k\uparrow}} +$$

$$+ v^2_{k+q\downarrow}\, v^2_{k\uparrow} \frac{n^{\beta}_{k\uparrow} - n^{\beta}_{k+q\downarrow}}{h\omega + \omega_{2k+q\downarrow} - \omega_{2k\uparrow}} + u^2_{k+q\downarrow}\, v^2_{k\uparrow} \times \qquad /4.5/$$

$$\times \frac{n^{\beta}_{k\uparrow} - n^{\alpha}_{k+q\downarrow}}{h\omega + \omega_{1k+q\downarrow} - \omega_{2k\uparrow}} + v^2_{k+q\downarrow}\, u^2_{k\uparrow} \frac{n^{\alpha}_{k\uparrow} - n^{\beta}_{k+q\downarrow}}{h\omega + \omega_{2k+q\downarrow} - \omega_{1k\uparrow}} \}.$$

Из /4.5/ можно получить обычную форму критерия возникновения ферромагнетизма в системе из условия, что в пределе нулевого поля и при $T = 0°K$ восприимчивость системы становится сингулярной [18]

$$1 = U/(g\mu_B)\ \chi^{HF}(0,0) = U \cdot \rho_{eff}(\epsilon_F).$$

Возвращаясь теперь к вычислению сечения рассеяния /2.5/, представим $\mathrm{Im}\,\chi^{-}(q,\omega)$ в виде [1,19]

$$\mathrm{Im}\,\chi^{-}(q,\omega) = \mathrm{Im}\,\chi^{HF}(q,\omega) \{ [1 - U/(g\mu_B)^2\, \mathrm{Re}\,\chi^{HF}(q,\omega)]^2 +$$

$$+ [U/(g\mu_B)^2\, \mathrm{Im}\,\chi^{HF}(q,\omega)]^2 \}^{-1}. \qquad /4.6/$$

Величина $\mathrm{Im}\,\chi^{HF}(q,\omega)$ согласно /4.5/ равна

$$\mathrm{Im}\,\chi^{HF}(q,\omega) = -\pi (g\mu_B)^2\ 1/N \{ u^2_{k+q\downarrow} u^2_{k\uparrow} (n^{\alpha}_{k\uparrow} - n^{\alpha}_{k+q\downarrow}) \times$$

$$\times \delta(h\omega + \omega_{1k+q\downarrow} - \omega_{1k\uparrow}) + v^2_{k+q\downarrow} v^2_{k\uparrow} (n^{\beta}_{k\uparrow} - n^{\beta}_{k+q\downarrow}) \times$$

$$\times \delta(h\omega + \omega_{2k+q\downarrow} - \omega_{2k\uparrow}) + \qquad /4.7/$$

$$+ u^2_{k+q\downarrow} v^2_{k\uparrow} (n^{\beta}_{k\uparrow} - n^{\alpha}_{k+q\downarrow}) \delta(h\omega + \omega_{1k+q\downarrow} - \omega_{2k\uparrow}) +$$

$$+ v^2_{k+q\downarrow} u^2_{k\uparrow} (n^{\alpha}_{k\uparrow} - n^{\beta}_{k+q\downarrow}) \delta(h\omega + \omega_{2k+q\downarrow} - \omega_{1k\uparrow}) \}.$$

Следовательно, $\mathrm{Im}\,\chi^{HF}(q,\omega)$ не равна нулю только для четырех областей стонеровских континуумов:

$$h\omega_1 = \omega_{1k\uparrow} - \omega_{1\,k+q\downarrow},$$

$$h\omega_2 = \omega_{2k\uparrow} - \omega_{2\,k+q\downarrow}, \qquad /4.8/$$

$$h\omega_3 = \omega_{2k\uparrow} - \omega_{1\,k+q\downarrow},$$

$$h\omega_4 = \omega_{1k\uparrow} - \omega_{2\,k+q\downarrow}.$$

Вклад этих ветвей в сечение рассеяния определяется соответствующими весами в /4.7/. Если не рассматривать точки пересечения стонеровских мод и акустической ветви, то в том случае, когда $\mathrm{Im}\,\chi^{HF}(q,\omega) \to 0$, из /4.6/ следует

$$U/(g\mu_B)^2\ \mathrm{Im}\,\chi^{-}(q,\omega) = -\pi\delta\{1 - U/(g\mu_B)^2\ \mathrm{Re}\,\chi^{HF}(q,\omega)\}. \qquad /4.9/$$

Соотношение, стоящее под знаком δ-функции в /4.9/, равно [1]:

$$1 - U/(g\mu_B)^2 \mathrm{Re}\,\chi^{HF}(q\to 0, \omega\to 0) \sim b^{-1}(h\omega - h\Omega_q), \qquad /4.10/$$

где b - некоторая постоянная, а $h\Omega_q$ - акустическая ветвь $h\Omega_{q\to 0} = 0$. Поэтому [1,19]

$$\operatorname{Im}\chi^{-}(q\to 0, \omega\to 0) = -\pi (g\mu_B)^2 \frac{b}{U}\delta(h\omega - h\Omega_q) \qquad /4.11/$$

и

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE'}\right)_{tr.} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right)^2 \frac{1}{4}|F(q)|^2 \frac{k'}{k}(1+\tilde{q}_z^2)\, N\, b/U \times$$

$$\times \sum_p [n(\Omega_p)\delta(h\omega + h\Omega_p) + (1+n(\Omega_p))\delta(h\omega - h\Omega_p)]. \qquad /4.12/$$

Коэффициент b может быть найден численным образом. Сечение рассеяния /4.12/ не содержит вклада, возникающего от рассеяния нейтронов на стонеровских возбуждениях /4.8/. При больших q и ω, когда электрон в состоянии преодолеть энергетический барьер, связанный с переворотом спина электрона в эффективном поле, возможно диффузное рассеяние нейтронов на стонеровских модах [9,19]. Причем в отличие от модели Хаббарда [1] картина рассеяния сильно модифицируется вследствие того, что вместо одного стонеровского континуума в системе возможно существование четырех оптических стонеровских континуумов /4.8/. В области энергий, когда электрон в состоянии преодолеть энергетический барьер в эффективном поле, U можно считать малым. В этом случае [1,19]

$$\operatorname{Im}\chi^{-}(q,\omega) \simeq \operatorname{Im}\chi^{HF}(q,\omega), \qquad /4.13/$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE'}\right)_{tr.} \sim \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right) \frac{1}{4}|F(q)|^2 \frac{k'}{k}(1+\tilde{q}_z^2)\, N/\pi (g\mu_B)^2 \times \qquad /4.14/$$

$$\times \{(n(\omega)+1)\operatorname{Im}\chi^{HF}(-q,\omega) + n(-\omega)\operatorname{Im}\chi^{HF}(q,-\omega)\}.$$

Сечение рассеяния /4.14/ отчасти похоже на сечение рассеяния в случае двух зон, вычисленное в работе Ямады и Шимицу и Соколова [9]. Хотя для однозонной модели неупругое сечение рассеяния на стонеровских возбуждениях стремится к нулю при $q \to 0$, Соколовым было показано[9] что для многозонной модели сечение рассеяния на стонеровских модах может быть заметным и для не слишком больших $q < q_{max}$.

5. Обсуждение

Проведенный качественный анализ поперечного сечения рассеяния для модели Хаббарда d-электронов, слабо гибридизированных с электронами из широкой s-зоны, показывает, что картина рассеяния существенно изменяется по сравнению с результатом для обычной модели Хаббарда [1]. В гидродинамическом пределе сечение рассеяния на спиновых акустических возбуждениях, по-видимому, модифицируется только количественно. Однако при увеличении $q \to q_{max}$ характер уменьшения сечения рассеяния на спиновых волнах [19] может измениться качественно в связи с ренормировкой q_{max}. Значительно модифицируется сечение рассеяния на оптических спиновых возбуждениях вследствие возникновения четырех квазистонеровских мод вместо одной для обычной модели Хаббарда. Конкретная картина рассеяния сильно зависит от энергетической зонной структуры веществ и должна быть исследована численно.

Проведенный анализ поперечного сечения рассеяния опирался на использование приближения хаотических фаз. Это приближение хорошо применимо при малых значениях параметра кулоновского отталкивания U. В то же время при выводе выражения для сечения рассеяния /2.5/ существенно использовалось предположение [1], что d-зоны достаточно узкие, чтобы можно было пренебречь перекрытием волновых функций d-электронов разных узлов. Следствием этого предположения является то, что фурье-образ спинового момента записывается в удобной факторизованной форме

$$S^{\pm}(q,t) = F(q)\tilde{S}^{\pm}(q,t), \qquad /5.1/$$

где

$$F(q) = \int d^3r\, e^{iqr} \; |\phi_d(r)|^2 - \qquad /5.2/$$

геометрическое распределение плотности спинового магнитного момента. Поэтому описание картины рассеяния нуждается в применении приближения, справедливого в более широкой области значений U. Одним из возможных способов усовершенствования приближения хаотических фаз является t -матричное приближение, справедливое, однако, только в пределе низкой плотности /20/. Более интересный способ вычисления поперечной спиновой восприимчивости при больших значениях U был предложен недавно Сакураи /21/ и применен К.А.Кикоиным /9/ для одного из вариантов модели Хаббарда с учетом вырождения по проекции орбитального момента электронов. Представляется интересным провести обобщение по методу Сакураи рассмотренной здесь модели.Так же интересно провести для этой модели качественный анализ продольного сечения неупругого рассеяния медленных нейтронов. Рассмотрению этих вопросов предполагается посвятить отдельную работу.

Я глубоко благодарен Л.Добжиньскому, привлекшему мое внимание к рассмотренной здесь проблеме, а также профессору Конраду Фишеру, К.Эльку, Н.М.Плакиде, Л.А.Максимову и К.А.Кикоину за ценные обсуждения и Й.Шойому за полезные замечания.

Литература

1. W.Marshall, S.W.Lovesey. Theory of Thermal neutron scattering, 1971, Oxford at the Clarendon Press.
2. R.D.Lowde, C.G.Windsor. Adv.Phys., 19, 813 (1970).
3. S.J.Pickart, H.A.Alperin et al. Phys.Rev., 156, 623 (1967).
4. G.Shirane, V.J.Minkiewicz, R.Nathans, J.Appl.Phys., 39, 383 (1968).
5. H.A.Mook, R.M.Nicklow et al. J.Appl.Phys., 40, 1450 (1969).
6. E.D.Thompson, H.A.Mook. J.Appl.Phys., 41, 1227 (1970).
7. H.A.Mook, R.M.Nicklow. Phys.Rev., B7, 336 (1973).
8. E.D.Thompson. Adv.Phys., 14, 213 (1965).
9. H.Yamada, M.Shimizu. J.Phys.Soc.Japan, 22, 1404 (1967); 25, 1001 (1968); J.B.Sokoloff. Phys.Rev., 180, 613 (1969); К.А.Кикоин. ФТТ, 14, 1329 /1972/.

10. P.K.George. Physica, 49, 278 (1970); J.Schneider, E.Heiner, W.Haubenreisser. phys. stat. sol., 52, K17 (1972);
Н.М.Плакида, Л.С.Смирнов. ОИЯИ, Р4-7371, Дубна, 1973.
11. C.Monohar. Sol.St.Commun., 9, 2025 (1971).
12. R.Kishore, S.K.Joshi. Phys.Rev., B3, 3901 (1971); J.Schneider, E.Heiner, W.Hauberreisser. phys.stat.sol., 54, 577 (1972);
E.Heiner, J.Schneider. phys.stat.sol., 55, 93 (1973).
13. J.F.Cooke. Phys.Rev., B7, 1108 (1973).
14. R.Kirshore, S.K.Joshi. Phys.Rev., B2, 1411 (1970).
15. K.Elk. phys.stat.sol., 48, K93 (1971); JINR, E4-7030, Dubna, 1973.
16. А.Л.Куземский. ОИЯИ, Р4-7749, Дубна, 1974.
17. D.M.Edwards, B.Fisher. J.Physique, 32, C1-697 (1971).
18. K.Fischer. phys.stat.sol., 46, 11 (1971).
19. E.D.Thompson. Phys.Rev.Lett., 19, 635 (1967).
20. W.Young, J.Callaway. J.Phys.Chem.Sol., 31, 865 (1970).
21. A.Sakurai. Progr.Theor.Phys., 39, 312 (1968).

Рукопись поступила в издательский отдел
21 марта 1974 года.