

*Е. К. Хеннер, И. Г. Шапошников*

## ОБ ОДНОМ ЧИСЛЕННОМ МЕТОДЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

*1. Введение.* Статистический подход к изучению спин-спиновых взаимодействий в магнитном резонансе (МР) магниторазведенных кристаллов, предложенных Андерсоном [1], был развит Грантом и Стрэндбергом [2]. Ими, в частности, показано, что применяемый в таких исследованиях метод моментов неудовлетворительно описывает форму линии МР в кристаллах с относительно малым числом случайным образом расположенных парамагнитных центров. Попытка интерпретировать в соответствии с этим методом экспериментальные данные нередко приводила к неудовлетворительным результатам [3—5].

Учет парных взаимодействий с последующим усреднением по распределению пар, предложенный в [2], позволил выйти за рамки метода моментов для систем с очень малой концентрацией ( $C$ ) слабо взаимодействующих парамагнитных центров. Ясно, однако, что с ростом  $C$  недостаточно учитывать лишь парные взаимодействия. В работе [6] рассчитаны вероятности образования групп ближайших соседей в кристалле с тригональной симметрией магнитной подрешетки. Оказалось, что если относительное число магнитных ионов (к максимально возможному) 10%, то сумма вероятностей образования кластеров из 1, 2, 3 ближайших соседей всего  $\sim 0,5$ , т. е. уже при столь небольшой концентрации заведомо необходим учет 3, 4 и т. д. частичных взаимодействий.

Кристаллы с очень сильными спин-спиновыми взаимодействиями, такие как, например, соединения типа  $MnO$ , являются магнитоупорядоченными при температурах  $\sim 10^2$  °К. При внедрении некоторого количества ионов  $Mn$  в изоморфный  $MnO$  диамагнитный кристалл  $MgO$  получается парамагнетик, в котором во внешних полях  $\sim 10^3$  Гс обменное взаимодействие ближайших соседей на два порядка выше, а диполь-дипольное того же порядка, что и зеемановская энергия. Экспериментальное изучение концентрационной зависимости полуширины,

формы и интенсивности линии электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) [7] дало нетривиальные результаты: к примеру, на кривой указанной зависимости полуширины имеется несколько максимумов и минимумов.

В данной работе используется численный метод точного учета многочастичных взаимодействий (без привлечения для этого теории возмущений) между близко расположенными магнитными ионами, дополненный статистическим усреднением по случайной выборке из полной совокупности возможных для данной концентрации распределений магнитных ионов по решетке.

2. *Общее описание метода.* Обычный в теории спин-спиновых взаимодействий системы  $N$  магнитных частиц гамильтониан запишем в виде (наиболее удобном для наших целей):

$$\begin{aligned} \hat{H} = & g\beta H_0 \sum_{i=1}^N (\hat{1}^{(1)} \times \dots \times \hat{1}^{(i-1)} \times \hat{S}_z^{(i)} \times \hat{1}^{(i+1)} \times \dots \times \hat{1}^{(N)}) + \\ & + \sum_{i,k=1}^N \sum_{\alpha,\gamma} (U_{ik}^{\alpha\gamma} \hat{1}^{(1)} \times \dots \times \hat{1}^{(i-1)} \times \hat{S}_\alpha^{(i)} \times \hat{1}^{(i+1)} \times \dots \times \\ & \times \hat{1}^{(k-1)} \times \hat{S}_\gamma^{(k)} \times \hat{1}^{(k+1)} \times \dots \times \hat{1}^{(N)}), \end{aligned} \quad (1)$$

где направление магнитного поля  $H_0$  выбрано за ось  $z$  (вообще говоря, не совпадающую с какой-либо осью симметрии кристалла). Индексы  $i, k$  нумеруют магнитные частицы; индексы  $\alpha, \gamma$  принимают значения  $x, y, z$ ; символ  $\times$  означает прямое произведение соответствующих односпиновых операторов (матриц). В любом фиксированном представлении гамильтониан (1) изображается эрмитовой (комплексной) матрицей ранга  $(2S+1)^N$ .

Перейдем с помощью унитарного преобразования

$$U^{-1} \hat{H} U = \hat{H} \quad (2)$$

в «энергетическое» представление, в котором матрица оператора  $\hat{H}$  диагональна. Осуществляя то же преобразование над оператором взаимодействий спиновой системы с внешним магнитным высокочастотным полем (рассматриваемого как возмущение), получим его в энергетическом представлении; при этом квадраты внедиагональных матричных элементов, по обычным правилам квантовой механики, определяют вероятности переходов между соответствующими уровнями энергии. Суммируя эти вероятности в пределах некоторых полос частот, ширины которых определяются разрешающей способностью данного численного эксперимента, получаем полную гистограмму спектра МР.

Параметры  $U_{ik}^{\alpha\gamma}$ , характеризующие парные взаимодействия, являются в каждом конкретном случае известными функциями от координат  $i$ -ой и  $k$ -ой частиц:  $U_{ik}^{\alpha\gamma}(r_i, r_k)$ . Каждый из  $r_i, r_k$  представим в виде

$$r_j = n_{j1}l_1 + n_{j2}l_2 + n_{j3}l_3, \quad (3)$$

где  $l_1, l_2, l_3$  — вектора трансляций магнитной подрешетки, определяемые ее симметрией, а  $n_{j1}, n_{j2}, n_{j3}$  — целые числа. При данной концентрации  $C$  и полном числе магнитных ионов  $N$  общий объем кристалла  $\sim \frac{N}{C}$ . Пусть  $\pm N_1, \pm N_2, \pm N_3$  — максимально возможные значения параметров  $n_{j1}, n_{j2}, n_{j3}$ , определяемые требованиями, чтобы частица не выходила за пределы указанного объема. Выбирая случайным образом числа  $n_{j1}, n_{j2}, n_{j3}$  в указанных пределах  $N$  раз, получим случайное распределение  $N$  частиц по доступному объему. Для каждого такого распределения описанным выше образом получаем свою частичную гистограмму спектра по-

глощения МР. Сложив эти гистограммы для достаточно большого числа независимых случайных выборок, количество которых определяется непосредственно в ходе работы по дисперсии отдельных выборок, получаем (в пределах выбранной разрешающей способности) весь спектр поглощения МР и всю возможную информацию о линиях поглощения при данных  $C$  и ориентации постоянного и высокочастотного магнитных полей.

3. *Схема реализации метода.* С целью реализации описанного метода нами была составлена универсальная программа для ЭВМ (на языке АЛГОЛ-60), блок-схема которой приводится на рис. 1.

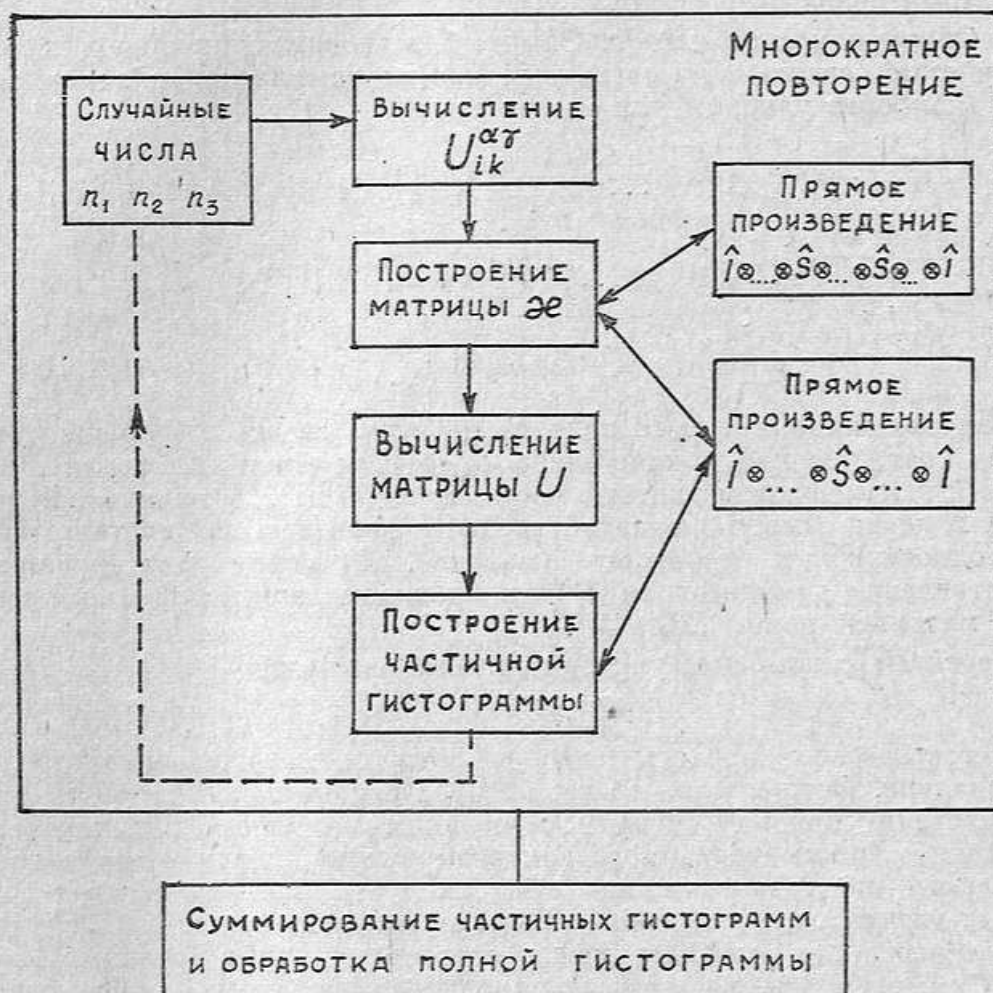


Рис. 1. Блок-схема программы для ЭВМ.

Исходная информация для программы:

- 1) тип решетки (т. е. вектора  $l_1, l_2, l_3$ );
- 2) число магнитных ионов  $N$ ;
- 3) концентрация  $C$  (в виде предельных значений  $N_1, N_2, N_3$ );
- 4) величина и ориентация внешнего поля (постоянного и высокочастотного);
- 5) параметры спин-спиновых взаимодействий.

Вся указанная информация закладывается в блок вычисления  $U_{ik}^{\alpha\gamma}$ .

Для вычисления матрицы  $U$  нами использован модифицированный метод вращений: последовательно аннулируются наибольшие по модулю внедиагональные элементы в строке с наибольшей суммой их квадратов [8]. Принятый метод, как показывает наш опыт, устойчив и сходится быстрее стандартного метода вращений независимо от наличия кратных или близких собственных значений.

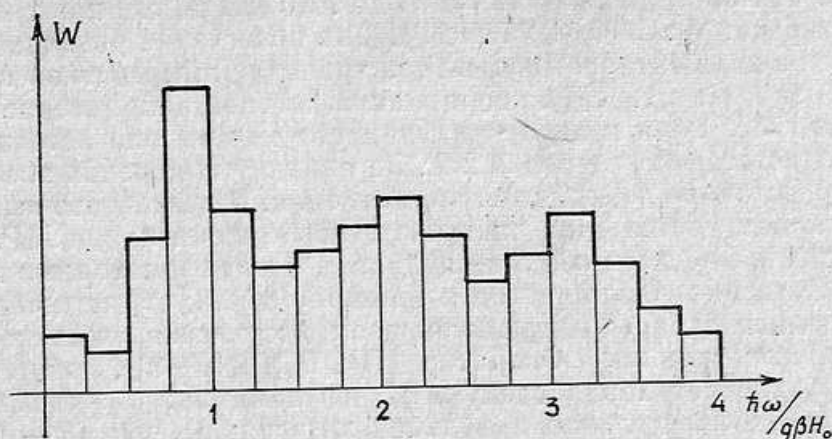


Рис. 2. Типичная гистограмма поглощения МР. Разрешающая способность 0,25. (Видна основная линия и два сателлита).

В результате расчета по этой схеме получаем гистограммы всех линий МР. Типичная гистограмма при уширении линий дипольными взаимодействиями в перпендикулярных постоянном и высокочастотном полях приводится на рис. 2.

Обработка получаемых таким образом гистограмм ведется в двух направлениях. Во-первых, должен быть решен вопрос, достаточно ли вариантов расчета для данной разрешающей способности и заранее заданной степени надежности. Это определяется вычислением средней дисперсии составляющих гистограмм и стандартной обработкой с использованием распределения Стьюдента [9]. Во-вторых, аппроксимируется полная гистограмма (в пределах одной линии) какой-либо функцией формы  $f(\omega)$  из условия минимизации величины

$$\Phi = \sum_i \left[ \int_{\omega_i}^{\omega_i + \Delta\omega} f(\omega) d\omega - A_i \right]^2, \quad (4)$$

где  $A_i$  — площади отдельных участков гистограммы, а суммирование осуществляется в пределах избранной линии поглощения. В частности, в случае симметричной линии обычно оказывается удачным выбор смешанной лоренц-гауссовой функции

$$f(\omega) = \frac{B \exp\{-C(\omega - \omega_0)^2\}}{1 + A(\omega - \omega_0)^2}. \quad (5)$$

Эта функция имеет 4 свободных параметра:  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $\omega_0$ , по которым и минимизируется выражение (4). Параметры  $B$  и  $\omega_0$  в (5) — соответственно амплитуда и центр линии, а параметры  $A$  и  $C$  определяют степень «лоренцовости» и «гауссовости» линии, ее полуширину, моменты и т. д.

4. Программа для ЭВМ. В приведенной ниже программе в качестве спин-спиновых взаимодействий берутся диполь-дипольное и обменное. Для диполь-дипольного

$$U_{ik}^{\alpha\gamma} = \frac{(g\beta)^2}{r_{ik}^3} \left( \delta_{\alpha\gamma} - \frac{3a_{ik} \gamma_{ik}}{r_{ik}^2} \right), \quad (6)$$

где  $\delta_{\alpha\gamma}$  — символ Кронекера; изотропное обменное взаимодействие считается экспоненциально убывающим с расстоянием:

$$U_{ik}^{\alpha\gamma} = A \delta_{\alpha\gamma} \exp(-Br_{ik}). \quad (7)$$

В программе использован ряд стандартных процедур транслятора TA-2M: ввод информации INOUT('R10-2'), вывод INOUT('P2-10'), датчик случайных чисел COD('STOCH'); COD('ZBZ', L, M), прорабаты-

вающий кусок программы от метки L до того места, где стоит метка M с кодом возврата: M: COD('RETURN'). Для облегчения разбора программа снабжена комментариями. Вектора трансляции магнитной подрешетки  $l_1, l_2, l_3$  заданы в системе координат, в которой направление постоянного магнитного поля и перпендикулярного ему высокочастотного поля взяты, соответственно, за оси Z и X. За единицу измерения энергии взято  $g\beta H_0$ ; расстояния измеряются в ангстремах. В результате выполнения программы получается одна частичная гистограмма линии МР.

В описании массивов  $n$  и  $S$  не являются идентификаторами и означают, соответственно, число частиц и величину спина; эти величины должны быть заданы заранее и, таким образом, все массивы в описании имеют постоянные границы. Оператор INOUT('R10-2'), открывающий программу, требует ввода следующей информации:  $p$  — число частиц;  $f=2S+1$ ;  $e$  — относительная дипольная энергия;  $p_1, p_2, p_3$  — числа  $N_1, N_2, N_3$  (см. п. 3); ALPHA и BETA — параметры A и B в (7);  $e_4, e_5, e_6$  — вектора  $l_1, l_2, l_3$ ; M2 — целое число для настройки датчика псевдослучайных чисел, изменяемое с шагом  $>3n$  от одной частичной выборки к другой; SX, SY, SZ — матрицы  $S_x, -iS_y, S_z$ ;  $S_4$  — единичная матрица (ранга  $2S+1$ ); число res — разрешающая способность.

```
begin integer i, j, p, l, t, k, r, il, i2, i3, n, s, k1, j1, m1, m2, m3, m4;
real b1, e, m, eps, d, c, alpha, beta, s1, s2, c1, c2, p1, p2, p3, h, res;
array d1[1:(2s+1), 1:(2s+1)], d2[1:(2s+1)↑2, 1:(2s+1)↑2], .....
dn[1:(2s+1)↑n, 1:(2s+1)↑n], a, g, q, b, q2[1:(2s+1)↑n, 1:(2s+1)↑n],
sx, sy, sz, s4, o, v, w[1:(2s+1), 1:(2s+1)], r, io, f1, f2, f3, x, y, z, u,
f4, f5, f6[1:n, 1:n], a1[1:n, 1:(2s+1), 1:(2s+1)], k3, k4, k5, k7, k8
[1:(2s+1)↑n], x1, y1, z1[1:n], e4, e5, e6[1:3], k6[1:32], k2[1:3n];
inout('r10-2', p, f, e, p1, p2, p3, alpha, beta, e4, e5, e6, m2, sx, sy, sz,
s4, res); eps:=0.0001; cod('stoch', h); for i:=1 step 1 until m2 do
cod('stoch', h, d); q10: for i:=1 step 1 until p do
begin cod('stoch', h, d); d:=d×p2; k2[i]:=entier(d) end;
for i:=p+1 step 1 until 2×p do
begin cod('stoch', h, d); d:=d×p2; k2[i]:=entier(d) end;
for i:=2×p+1 step 1 until 3×p do
begin cod('stoch', h, d); d:=d×p3; k2[i]:=entier(d) end;
for i:=1 step 1 until p do
begin j:=i+p; k:=i×2+p; x1[i]:=e4[1]×k2[i]+e5[1]×k2[j]+
e6[1]×
k2[k]; y1[i]:=e4[2]×k2[i]+e5[2]×k2[j]+e6[2]×k2[k];
z1[i]:=e4[3]×
k2[i]+e5[3]×k2[j]+e6[3]×k2[k] end;
for i:=1 step 1 until p do for j:=1 step 1 until p do
begin if i≠j then
begin x[i, j]:=x1[i] - x1[j]; y[i, j]:=y1[i] - y1[j]; z[i, j]=z1[i] -
z1[j]; r1[i, j]:=sqrt(x[i, j]↑2+y[i, j]↑2+z[i, j]↑2); io[i, j]:=
alpha×exp(-beta×r1[i, j]); if r1[i, j]<eps then go to q10;
f1[i, j]:=io[i, j]+e×(1-3×(x[i, j]↑2)/(r1[i, j]↑2));
f2[i, j]:=io[i, j]+e×(1-3×(y[i, j]↑2)/(r1[i, j]↑2));
f3[i, j]:=io[i, j]+e×(1-3×(z[i, j]↑2)/(r1[i, j]↑2));
f4[i, j]:=-3×e×x[i, j]×y[i, j]/(r1[i, j]↑2);
f5[i, j]:=-3×e×x[i, j]×z[i, j]/(r1[i, j]↑2);
f6[i, j]:=-3×e×y[i, j]×z[i, j]/(r1[i, j]↑2); end; end;
comment вычислены параметры спин-спиновых взаимодействий;
for i:=1 step 1 until f do for j:=1 step 1 until f do
o[i, j]:=sz[i, j]; cod('zbx', l7, l8); m4:=f↑p;
for i:=1 step 1 until m4 do for j:=1 step 1 until m4 do
a[i, j]:=b[i, j]; for i:=1 step 1 until p do for j:=1 step 1
until p do u[i, j]:=f1[i, j]; for l:=1 step 1 until f do
```

```

for t:=1 step 1 until f do
begin v[l, t]:=sx[l, t]; w[l, t]:=sx[l, t] end; cod('zbx', l5, l6);
for i:=1 step 1 until p do for j:=1 step 1 until p do u[i, j]:=
f2[i, j]; for l:=1 step 1 until f do for t:=1 step 1 until f do
begin v[l, t]:=sy[l, t]; w[l, t]:=-sy[l, t] end; cod('zbx', l5, l6);
for i:=1 step 1 until p do for j:=1 step 1 until p do u[i, j]:=
f3[i, j]; for l:=1 step 1 until f do for t:=1 step 1 until f do
begin v[l, t]:=sz[l, t]; w[l, t]:=sz[l, t] end; cod('zbx', l5, l6);
for i:=1 step 1 until p do for j:=1 step 1 until p do u[i, j]:=
f5[i, j]; for l:=1 step 1 until f do for t:=1 step 1 until f do
begin v[l, t]:=sx[l, t]; w[l, t]:=sz[l, t] end; cod('zbx', l5, l6);
for i:=1 step 1 until m4 do for j:=1 step 1 until m4 do
begin q[i, j]:=a[i, j]; a[i, j]:=0 end;
comment сформирована действительная часть матрицы энергии;
for i:=1 step 1 until p do for j:=1 step 1 until p do u[i, j]:=
f4[i, j]; for l:=1 step 1 until f do for t:=1 step 1 until f do
begin v[l, t]:=sx[l, t]; w[l, t]:=sy[l, t] end; cod('zbx', l5, l6);
for i:=1 step 1 until p do for j:=1 step 1 until p do u[i, j]:=
f6[i, j]; for l:=1 step 1 until f do for t:=1 step 1 until f do
begin v[l, t]:=-sy[l, t]; w[l, t]:=sz[l, t] end; cod('zbx', l5, l6);
for i:=1 step 1 until m4 do for j:=1 step 1 until m4 do
begin g[i, j]:=a[i, j]; a[i, j]:=q[i, j] end;
comment сформирована мнимая часть матрицы энергии;
t:=0; for i:=1 step 1 until m4 do for j:=1 step 1 until m4 do
begin if i=j then q[i, j]:=1 else q[i, j]:=0; q2[i, j]:=0 end;
for i:=1 step 1 until m4 do
begin k7[i]:=0; for j:=1 step 1 until m4 do k7[i]:=k7[i]+
a[i, j]2+g[i, j]2; k7[i]:=k7[i]-a[i, i]2-g[i, i]2 end;
l1:m:=0; for i:=1 step 1 until m4 do
begin e:=k7[i]; if e>=m then
begin m:=e; il:=i end; end; m:=0; for j:=1 step 1 until m4 do*
begin e:=(a[il, j]2+g[il, j]2); if e>=m^j≠il then
begin m:=e; k1:=j end; end; for j:=1 step 1 until m4 do if j≠ilV
j≠k then k7[j]:=k7[j]-a[j, il]2-g[j, il]2;
if m<eps then go to l2 else
begin i:=il; k:=k1; e:=abs(a[i, i]-a[k, k])/sqrt((a[i, i]-
a[k, k])2
+4×(a[i, k]2+g[i, k]2)); s1:=sqrt((1-e)/2); if a[i, i]≠a[k, k]
then s1:=s1×sign(a[i, i]-a[k, k]); if a[i, k]≠0 then s1:=s1×sign
(a[i, k]); c1:=sqrt((1+e)/2); s2:=g[i, k]/sqrt(a[i, k]2+g[i, k]2);
if a[i, k]≠0 then s2:=s2×sign(a[i, k]); c2:=abs(a[i, k])/sqrt
(a[i, k]2+g[i, k]2); c2:=c2×s1; s1:=s1×s2; for j:=1 step 1 until
m4 do
begin k8[j]:=q[j, i]×c1+q[j, k]×c2+q2[j, k]×s1; k3[j]:=-
q[j, i]×c2+
q[j, k]×c1+q2[j, i]×s1; k4[j]:=-q[j, k]×s1+q2[j, i]×c1+
+q2[j, k]×c2;
k5[j]:=-q[j, i]×s1-q2[j, i]×c2+q2[j, k]×c1 end;
for j:=1 step 1 until m4 do
begin q[j, i]:=k8[j]; q[j, k]:=k3[j]; q2[j, i]:=k4[j]; q2[j, k]:=k5[j]
end; for j:=1 step 1 until m4 do
begin k8[j]:=a[j, i]×c1+a[j, k]×c2+g[j, k]×s1; k3[j]:=-a[j, i]×
c2+
a[j, k]×c1+g[j, i]×s1; k4[j]:=-a[j, k]×s1+g[j, i]×c1+g[j, k]×c2;
k5[j]:=-a[j, i]×s1-g[j, i]×c2+g[j, k]×c1 end;
for j:=1 step 1 until m4 do
begin a[j, i]:=k8[j]; a[j, k]:=k3[j]; g[j, i]:=k4[j]; g[j, k]:=k5[j]

```

```

end; for j:=1 step 1 until m4 do
begin k8[j]:=a[i, j]×c1+a[k, j]×c2 - g[k, j]×s1; k3[j]:=-
  a[i, j]×c2+
a[k, j]×c1 - g[i, j]×s1; k4[j]:=g[i, j]×c1+g[k, j]×c2+a[k, j]×s1;
k5[j]:=- g[i, j]×c2+g[k, j]×c1+a[i, j]×s1 end;
for j:=1 step 1 until m4 do
begin a[i, j]:=k8[j]; a[k, j]:=k3[j]; g[i, j]:=k4[j]; g[k, j]:=k5[j]
end; end; t:=t+1; for j:=1 step 1 until m4 do if j≠i1∨j≠k1
then k7[j]:=k7[j]+a[j, i1]↑2+g[j, i1]↑2+a[j, k1]↑2+g[j, k1]↑2;
k7[i1]:=0; k7[k1]:=0; for j:=1 step 1 until m4 do
begin k7[i1]:=k7[i1]+a[i1, j]↑2+g[i1, j]↑2; k7[k1]:=k7[k1]+
a[k1, j]↑2+g[k1, j]↑2 end; k7[i1]:=k7[i1] - a[i1, i1]↑2 - g[i1, i1]↑2;
k7[k1]:=k7[k1] - a[k1, k1]↑2 - g[k1, k1]↑2; go to l1;
l2: for i:=1 step 1 until m4 do k8[i]:=a[i, i]; inout('p2-10',
k8, t);
comment выполнена диагонализация, печатаются собственные значе-
ния, найдена диагонализующая унитарная матрица;
for j:=1 step 1 until 32 do k6[j]:=0; for i:=1 step 1 until f do
for j:=1 step 1 until f do o[i, j]:=sx[i, j]; cod ('zbz', l7, l8);
for i:=1 step 1 until m4 do for j:=1 step 1 until m4 do
begin dn[i, j]:=0; a[i, j]:=0; g[i, j]:=0; for k:=1 step 1 until m4
do begin a[i, j]:=a[i, j]+b[i, k]×q[k, j]; g[i, j]:=g[i, j]+b[i, k]×
q2[k, j] end; end; for i:=1 step 1 until m4 do for j:=1 step 1
until m4 do
begin dn[i, j]:=q[j, i]; b[i, j]:=q2[j, i] end;
for i:=1 step 1 until m4 do for j:=1 step 1 until m4 do
begin q[i, j]:=0; q2[i, j]:=0; for k:=1 step 1 until m4 do
begin q[i, j]:=q[i, j]+dn[i, k]×a[k, j]+b[i, k]×g[k, j]; q2[i, j]:=
q2[i, j]+dn[i, k]×g[k, j] - b[i, k]×a[k, j]; end; end;
for i:=1 step 1 until m4 do for j:=1 step 1 until m4 do
begin c:=q[i, j]↑2+q2[i, j]↑2; d:=abs(k8[i] - k8[j])/res; d:=d+1;
k:=entier(d); if k≤32 then k6[k]:=k6[k]+c end; inout('p2-10', k6);
comment вычислены вероятности переходов, отсуммированы в полосы,
печатаются амплитуды участков гистограммы;
l3: for i:=1 step 1 until f do for j:=1 step 1 until f do
d1[i, j]:=a1[1, i, j]; for m3:=2 step 1 until p do
begin n:=f↑(m3 - 1); for i:=1 step 1 until n do for j:=1 step 1
until n do for s:=1 step 1 until f do for l:=1 step 1 until f
do begin r:=(i - 1)×f+s; i1:=(j - 1)×f+l; if m3=2 then d2[r, i1]:=
d1[i, j]×a1[2, s, l] else if m3=3 then d3[r, i1]:=d2[i, j]×
a1[3, s, l] else if . . . . . else if m3=p then
dn[r, i1]:=d(n - 1)[i, j]×a1[n, s, l] end; end; l4: cod('return');
comment между метками l3 и l4 формируется прямое произведение
p матриц;
l5: for k:=1 step 1 until p do for t:=1 step 1 until p do
begin if k≠t then
begin for i:=1 step 1 until f do for j:=1 step 1 until f do
begin a1[k, i, j]:=v[i, j]; a1[t, i, j]:=w[i, j] end; cod('zbz', l3, l4);
for i:=1 step 1 until f do for j:=1 step 1 until f do
begin a1[k, i, j]:=s4[i, j]; a1[t, i, j]:=s4[i, j] end;
for i:=1 step 1 until m4 do for j:=1 step 1 until m4 do
a[i, j]:=a[i, j]+u[k, t]×dn[i, j]; end; end; l6: cod('return');
comment между метками l5 и l6 формируется прямое произведение
двух спиновых и (p-2) единичных матриц;
l7: for i:=1 step 1 until m4 do for j:=1 step 1 until m4 do
b[i, j]:=0; for k:=1 step 1 until p do for i:=1 step 1 until f do
for j:=1 step 1 until f do a1[k, i, j]:=s4[i, j];

```

```

for k:=1 step 1 until p do
begin for i:=1 step 1 until f do for j:=1 step 1 until f do
al[k, i, j] := o[i, j]; cod('zbz', l3, l4); for i:=1 step 1 until f do
for j:=1 step 1 until f do al[k, i, j] := s4[i, j];
for i:=1 step 1 until m4 do for j:=1 step 1 until m4 do
b[i, j] := b[i, j] + dn[i, j]; end; l8: cod('return'); end;
comment между метками l7 и l8 формируется прямое произведение
одной спиновой и (p-1) единичной матриц.

```

#### ЛИТЕРАТУРА

1. P. W. Anderson. Phys. Rev., 76, 647, (1959).
2. W. J. C. Grant, M. W. P. Strandberg. Phys. Rev., 135, A715 (1964).
3. А. А. Маненков, В. Б. Федоров. ЖЭТФ, 38, 1042 (1960).
4. И. Н. Бажина, Г. В. Коробейникова, А. И. Курушин. Сб. Радиоспектроскопия, № 1. Пермь, 1962.
5. C. Kittel, E. Abrahams. Phys. Rev., 90, 238. (1953).
6. R. E. Behringer. J. Chem. Phys., 29, 537, (1958).
7. B. Bonis. These Doct. Sci. Phys. Bordeaux, (1972).
8. В. В. Воеводин. Численные методы алгебры. М., «Наука», 1966.
9. А. Н. Зайдель. Ошибки измерений физических величин. Л., «Наука», 1974.

Пермский государственный педагогический институт

Пермский государственный университет имени А. М. Горького