СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р17 - 10644

Г.М.Гавриленко, С.К.Морозова, В.К.Федянин

ЭВОЛЮЦИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ВАКАНСИЙ В ИЗИНГОВСКОМ МАГНЕТИКЕ.

I.ПРИБЛИЖЕНИЕ РАСЩЕПЛЕНИЯ КОРРЕЛЯЦИЙ

1977

P17 - 10644

Г.М.Гавриленко, С.К.Морозова, В.К.Федянин

ЭВОЛЮЦИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ВАКАНСИЙ В ИЗИНГОВСКОМ МАГНЕТИКЕ.

I.ПРИБЛИЖЕНИЕ РАСЩЕПЛЕНИЯ КОРРЕЛЯЦИЙ

Гавриленко Г.М., Морозова С.К., Федянин В.К. P17 - 10644

Эволюция концентрации вакансий в изинговском магнетике.
1. Приближение расщепления корреляций

На основе магнитного варианта модели Изинга исследована концентрация вакансий при фазовом переходе ферромагнетик-парамагнетик. Была использована техника, позволяющая учесть примесные эффекты в модели Изинга через корреляционные функции идеальной системы. Расчеты велись в квазихимическом приближении расщепления корреляций. Сделан вывод о "подавлении" концентрации вакансий при изменении спонтанной намагниченности от ее асимптотического значения в критической области $\sigma \sim \tau^{\beta_0}$ до ее асимптотического значения при насыщении $\sigma \sim 1$.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

P17 - 10644

Gavrilenko G.M., Morosova S.K., Fedyanin V.K.

Evolution of the Vacancy Concentration in Ising Magnetics. I. Quasichemical Approximation

On the bases of the magnetic type Ising model a vacancy concentration was studied when the phase-transitions of the ferromagnetic-paramagnetic system took place. An approach was used that allows one to calculate the admixture effects in the Ising model using the correlation functions of the ideal (pure) system. The calculations were obtained in the framework of the quasichemical approximation. It was shown that the "depression" of vacancy concentration took place when the spontaneous magnetization changed from its assymptotic value in the critical region $\sigma \sim \tau^{\beta_0}$ to its assymptotic value at saturation $\sigma \sim 1$.

The investigation have been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

I. Общий подход к примесным аспектам магнитного варианта модели Изинга был развит в свое время в работе /I/ С.В.Тябликова и одного из авторов данной заметки. Под примесью подразумевался точечный дефект структуры (типа замещения или внедрения), характеристики которой и взаимодействие с ближайшими соседями модифицировались сравнительно с соответствующими параметрами идеальной системы следующим образом:

$$\delta S = S' - S, \quad \delta\mu = \mu' - \mu, \quad \delta I = I' - I, \quad \delta z = z' - z, \tag{I}$$

S, μ, z – спин, матричный момент и число ближайших соседей частицы матрицы("идеальной" системы),находящейся в узле f; S', μ', I', z' – соответствующие характеристики примесной частицы (мы для определенности пользуемся магнитным вариантом модели Изинга). Было показано, что и свободная энергия одноприместной задачи, и корреляционные функции (различные равновесные средние) выражаются через простые функции δS, $\delta\mu$, δI, δz (см. ниже) и свободную энергию и корреляционные функции идеальной системы. В этом смысле одноприместная задача в модели Изинга решается точно. Так, в частности, для примесей типа замещения с эквивалентными спинами ($\delta S = 0$, $S' = S = \frac{1}{2}$, $\delta z = 0$)[x] свободная энергия одноприместного случая F' следующим образом выражается через свободную энергию идеальной системы F:

$$\begin{aligned} &F' = F + \delta E - \beta^{-1} \ln v(f), \quad \delta E = -H\frac{\delta\mu}{2} - z\frac{\delta I}{4}, \quad \beta = (\kappa T)^{-1}, \\ &F = -\frac{N}{2}\left(\mu H + \frac{zI}{4}\right) - \beta^{-1}\ln Q_0, \quad Q_0 = Sp\left(\exp[-\beta H_0]\right), \\ &v(f) = \langle \hat{v}(f) \rangle_0 = Sp\left[\hat{v}(f)\exp(-\beta H_0)\right] / Sp\exp(-\beta H_0), \end{aligned} \tag{2}$$

---

[x] По поводу примесей с неэквивалентными спинами $(S' > S = \frac{1}{2})$ и примесей типа внедрения ($\delta S \neq 0$, $\delta z \neq 0$) см. /I,2/.

$$\hat{v}(f) \equiv \exp\left[-\beta(\hat{H}-H_0)\right] \equiv \sum \frac{1}{k!}\left\{(\tau_1+1)\tau^k - \tau_2^k\right\}\hat{\mathcal{F}}_k + \sum \frac{\tau_2^k}{k!}\hat{F}_k ,$$

$$\tau = \exp\left(\beta\frac{\delta I}{2}\right) - 1, \quad \tau_1 = \exp\left(-\beta H\delta\mu - \beta\frac{z}{2}\delta I\right) - 1 ,$$

$$\tau_2 = \exp\left(-\beta\frac{\delta I}{2}\right) - 1 .$$

Здесь H_0 - гамильтониан модели Изинга /2,3/, $\hat{F}_k(f)$ и $\hat{\mathcal{F}}_z(f)$-операторы, описывающие корреляцию состояния в узле f решетки (мы полагаем его "занятым" примесью) с z ближайшими соседями /2,3/:

$$\hat{F}_k(f) = 1_f \sum_{<1\ldots k>} \hat{n}_{g_1} \cdots \hat{n}_{g_k} , \qquad \hat{\mathcal{F}}_k(f) = \hat{n}_f \hat{F}_k(f). \tag{3}$$

Таким образом, $v(f)$ дается формулой

$$v(f) = \langle \hat{v}(f) \rangle_0 = \sum_{k=0}^{z} \frac{1}{k!}\left\{(\tau_1+1)\tau^k - \tau_2^k\right\}\mathcal{F}_k + \sum_{k=0}^{z} \frac{\tau_2^k}{k!} F_k, \tag{4}$$

т.е. $v(f)$, а следовательно, и F' выражается через корреляционные функции в модели Изинга /I,2,3/, $\mathcal{F}_k$, F_k и параметры примеси τ_i $(i=1,2)$, τ, выписанные в (I). Если нас интересует какое-нибудь равновесное среднее неидеальной системы от оператора $\hat{A}$, то несложно показать, что

$$\bar{A} = Sp\left(\hat{A}\exp(-\beta H)\right) / Sp\exp(-\beta H) = \frac{\langle \hat{A}\,\hat{v}(f)\rangle_0}{\langle \hat{v}(f)\rangle_0}, \tag{5}$$

где усреднение в правой части (5) ведется уже по гамильтониану H_0. Поскольку любой физически содержательный оператор $\hat{A}$ (намагниченность, оператор числа частиц определенного сорта и т.п.) строится из операторов $\hat{n}_h$, то вычисление $\bar{A}$ по (5) сводится к нахождению $\langle \hat{A}\,\mathcal{F}_k\rangle_0$, $\langle \hat{A}\,F_k\rangle_0$ - вычислению корреляторов идеальной системы.

Интерес, естественно, представляет случай, когда имеется N_1-примесь. Если предположить, что примеси не занимают соседние узлы -

предположение, от которого можно отказаться, но это усложнит вид оператора $\hat{v}(f)$ в (2), - то соответствующие характеристики неидеальной системы даются формулами:

$$F' = F + N_1\delta E - \beta^{-1}\ln v , \qquad v = \left\langle \prod_{i=1}^{N_1} \hat{v}(f_i) \right\rangle ;$$
$$\bar{A} = \left[\left\langle \hat{A}\prod_{i=1}^{N_1} \hat{v}(f_i)\right\rangle\right] \Big/ \left\langle \prod_{i=1}^{N_1} v(f_i)\right\rangle . \tag{6}$$

$\hat{v}(f_i)$ по-прежнему дается (2), где операторы $F_k(f_i)$ и $\mathcal{F}_k(f_i)$ определяются (3) и описывают корреляцию состояния в примесном узле f_i с состояниями в z соседних узлах. Таким образом, в N_1 - примесной задаче возникают корреляторы идеальной системы, описывающие корреляцию между узлами $\{f_i\}$, $i=1,\ldots N_1$ типа $\langle \prod_{i=1}^{N_1} \mathcal{F}_k(f_i)\rangle_0$. В одномерном случае $(d=1)$ можно получить замкнутые формулы для любого коррелятора через унарный коррелятор: $\phi = \langle \hat{n}_f \rangle$ /2,3/, который, в свою очередь, выражается через $\beta, \mu H, I$ /2/. Есть надежда для $d=1$ получить на базе (6) соответствующие характеристики неидеальной системы, не прибегая к аппроксимации. Для $d \geq 2$ необходимо использовать тот или иной вариант приближения типа "расщепления корреляций" /I,3-5/. В частности, постулируя отсутствие корреляции между "примесными областями", что как-то оправдано при $c \ll 1$, при $\tau = |1 - \frac{\beta_c}{\beta}| \gtrsim \frac{1}{z}$ имеем

$$F' = F + N_1\delta E - \beta^{-1}N_1 \ln v(f) , \quad \left\langle \prod \hat{v}(f_i)\right\rangle \to \prod \langle \hat{v}(f_i)\rangle = v(f)^{N_1}. \tag{7}$$

Для $\bar{A}$ расщепление проводится с учетом конкретного вида оператора $\hat{A}$. Так, если оператор $\hat{A}$ есть оператор намагниченности $\hat{M}$, то

$$\hat{M} = \mu' \sum_f S_f + \mu \sum_{h \neq f} S_h = \sum_f \left(\mu' S_f + \mu \sum_h S_h\right), \; h \in G_f, \; h \neq f, \tag{8}$$

где G_f – подобласть решетки, в "центре" которой в узле f находится примесь $N = N_1 \cdot G_f$. В таком случае (8) и (7) дают для $\bar{M}$:

$$\bar{M} = \Big\{ \sum_f < [\mu' S_f + \mu \sum_{h \neq f} S_h] \hat{v}(f) \hat{\prod_{f' \neq f}} \hat{v}(f') > \Big\} \Big/ \left(< \hat{v}(f) > \right)^{N_1} \to$$

$$\to \Big\{ \sum_f < [\mu' S_f + \mu \sum S_h] \hat{v}(f) > \prod_{f' \neq f} < \hat{v}(f') > \Big/ v^{N_1} = \frac{[< \hat{M} \hat{v}(f) >]}{< \hat{v}(f) >} . \quad (9)$$

В (7), (9) мы использовали трансляционную инвариантность идеальной системы. При учете корреляции между примесными подобластями в (7) вошла бы первая корреляционная функция $< \hat{n}_f \hat{n}_{f'} >$, а в (9) – корреляционные функции более высокого порядка (см. /5/).

2. Отметим, что если предполагается отсутствие корреляции между примесными атомами, как это сделано в (7), (9), то результаты справедливы, когда среднее расстояние между примесными атомами $\ell \sim 1/\sqrt[d]{c}$ много больше радиуса корреляции $R_c \sim \tau^{\nu}$, $\tau = [1 - \frac{\beta}{\beta_c}|$, определяющего, как известно, асимптотику парной корреляционной функции в параобласти ($\beta_c > \beta$, $\beta \to \beta_c$). В настоящее время проведенные оценки для $d \geq 2$ позволяют заключить, что $\nu d \simeq 2$. Таким образом, выводы о поведении термодинамических величин, полученные в предположении расщепления корреляций, законны в температурном интервале

$$\left| \beta_c / \beta - 1 \right| > \sqrt[\nu d]{c} \simeq \sqrt{c} \ . \quad (10)$$

Естественно, τ берется вне критической области $\tau \gtrsim \frac{1}{z}$. Нам представляется, что верно следующее утверждение; для выводов о свойствах неидеального магнетика в области $\sqrt{c} \lesssim \tau \leq z^{-1}$ необходимо использовать такие аппроксимации, в которых учитывалась бы корреляция между примесями. Ниже мы используем корреляционные

функции идеальной системы с $R_c \simeq 1$ (аппроксимация Брэгге-Вильямса, полиномиальное расщепление, квазихимическое приближение и т.п.) /3-5/, что принципиально не позволяет решить вопрос о таких модификациях свойств магнетика, обусловленных примесями, которые связаны с наличием дальних корреляций: точный ход спонтанной намагниченности при $\beta \simeq \beta_c$, сдвиг температуры Кюри и т.п.

Когда температура попадает в область (11), можно использовать аппроксимацию типа "статического скейлинга". Ясно, что при достаточно малой τ и фиксированной (или слабо меняющейся с температурой) концентрации примесей всегда возникает ситуация, когда

$$\tau < \sqrt[\nu d]{c} \ . \quad (11)$$

В этом случае поведение системы определяется многопримесными корреляциями, количественные обсуждения свойств системы усложняются, возможен срыв фазового перехода II-го рода в фазовый переход I-го рода /3/ и т.п. Этот случай мы анализировать пока не будем.

3. При фазовом переходе ферромагнетик-парамегнетик в пренебрежении корреляционными эффектами наблюдается эволюция концентрации вакансий. Поскольку в интервале температур от комнатной до температуры плавления концентрация вакансий меняется в интервале $10^{-15} \lesssim c_v \lesssim 10^{-4}$,
$c_v = \frac{N_v}{N}$, то, везде, кроме области температр $\left| \beta_c / \beta - 1 \right| \simeq 10^{-2}$ (см. (11)), можно пользоваться расщеплением корреляций. Добавляя к F' (6) свободную энергию N_v невзаимодействующих вакансий F_v :

$$F_v = \varepsilon_v N_v - \beta^{-1} \ln \frac{N!}{N_v! (N - N_v)!} \ , \qquad \varepsilon_v \simeq 1 \text{ эВ}, \quad (12)$$

и минимизируя $F' + F_v$ по N_v, получаем для $\xi = \frac{C_v}{C_v^0}$:

$$\xi = \mathcal{V}_v(t)\, e^{-\beta\delta E_v}, \quad \delta E_v = \frac{\mu H}{2} + \frac{z\bar{I}}{4}, \tag{I3}$$

$$\mathcal{V}_v(t) = \sum_{k=0}^{z}\left(F_k - \mathcal{F}_k\right)\frac{\Sigma_2^k}{k!} + \left(\Sigma_1 + 1\right)\sum_0^{z}\frac{\Sigma^k}{k!}\mathcal{F}_k ,$$

$$\Sigma_1 = xy^{z} - 1, \quad \Sigma_2 = y - 1, \quad \Sigma = y^{-1} - 1,$$

где при получении $\mathcal{V}_v(t)$ из общей формулы (4) мы воспользовались тем, что $\mu' = I' = 0$. Мы видим, что налицо как перенормировка предэкспоненты за счет $\mathcal{V}_v(t)$, так и обычной экспоненциальной формулы для концентрации вакансий в идеальном кристалле $C_0 = exp(-\beta E_v)$ за счет $exp(-\beta\delta E_v)$. Чтобы получить выражение ξ через параметры μ, I, z, β, H, необходимо воспользоваться конкретными формулами для F_k и $\mathcal{F}_k$ /3,5/. Поскольку все аппроксимации с $R_c \sim 1$ (расщепление Брэгге-Вильямса, квазихимическое, полиномиальное и др.), приводят примерно к одинаковым выводам, мы детально обсудим поведение $\xi(x,z)$ в квазихимическом приближении. В нем /3,5/

$$\mathcal{F}_k = A_z^k \mathcal{F}_0 t^k, \quad F_k = A_z^k \mathcal{F}_0 t^k\left\{1 + xy^{-z}\left[y^2 - y^2 t + t\right]^{z-k}\right\}, \tag{I4}$$

что после подстановки в (I3) и проведения несложного суммирования по „k" дает

$$\mathcal{V}_v(t) = x(1-\sigma)\left[y + (1-y)t\right]^{z}. \tag{I5}$$

Здесь
$$x = exp\,\beta\mu H, \quad y = exp\,\frac{\beta I}{2}. \tag{16}$$

$$x = \left[\frac{\tau+\sigma}{\tau-\sigma}\right]^{z/2}\left[\frac{1-\sigma}{1+\sigma}\right]^{\frac{z-2}{2}}, \quad \tau = \sqrt{\sigma^2 + y^2(1-\sigma^2)}, \quad t = \frac{\tau-\sigma}{\tau+1}, \tag{I7}$$

а $\mathcal{F}_0 = \frac{1-\sigma}{2}$ и t определяются из уравнений (I7). Если интересоваться эволюцией концентрации вакансии при исчезновении или возникновении спонтанной намагниченности $(H=0)$, то $\mathcal{V}_v(H=0,\beta,z)$ и σ находятся по формулам

$$\mathcal{V}(x',z) = (1-\sigma)\left[y + (1-y)t\right]^{z}, \quad 1 = \left(\frac{z+\sigma}{z-\sigma}\right)^{\frac{z}{2}}\left(\frac{1-\sigma}{1+\sigma}\right)^{\frac{z-2}{2}} \tag{I8}$$

и относительная концентрация вакансий в магнетике $\xi(x',z)$ определяется выражением

$$\xi(x',z) = \mathcal{V}(x',z)\left(\frac{z}{z-2}\right)^{-\frac{zx'}{2}}, \quad x' = \beta/\beta_c, \quad \beta_c = 2\ln\frac{z}{z-2}. \tag{I9}$$

Несложно показать, что

$$(1)\quad \mathcal{V}(0,z) = 1, \quad \mathcal{V}(1,z) = \left(\frac{z}{z-1}\right)^{z}, \quad e \le \mathcal{V}(1,z) \le 4{,}1 \ (z\in(\infty,2));$$

$$(2)\quad \mathcal{V}(\infty,z) = 2, \quad \frac{\delta\mathcal{V}}{\delta x'} = z\ln\frac{z}{z-2}\,\frac{\mathcal{V}}{y+1} = \frac{2\mathcal{V}}{y+1}\,\frac{\partial\mathcal{V}(0,z)}{\partial x'}; \tag{20}$$

$$\frac{\partial\mathcal{V}(0,z)}{\partial x'} = \frac{z}{2}\ln\frac{z}{z-2}\ (0 \le x' \le 1); \quad (3)\ -\infty < \frac{\partial\mathcal{V}}{\partial x'} < 0 \quad (1 \le x' < \infty).$$

Свойства (20) суммируются рисунком I. Поскольку $\xi(x')$ характеризуется следующими свойствами:

$$\xi(0,z) = 1; \quad \xi(\infty,z) = 0; \quad \frac{\partial\xi}{\partial x'} < 0 \quad (x' \in 0,\infty), \tag{2I}$$

и в области $0 < x' < 1$, где $\sigma(x',z) \equiv 0$ – поведение спонтанной намагниченности схематично представлено на рис. I (при этом мы считаем, что T_k не сдвигается: $\beta_\sigma \bar{I} = 2\ln\frac{z}{z-2}$), – возрастание $\sigma(x',z)$ с x' практически компенсируется убыванием второго сомножителя y η в (I9), то мы и приходим к поведению $\eta(x',z)$, даваемому рисунком 2. Сплошная линия отвечает на рисунках $z=6$, пунктирная – $z=4$.

При возникновении спонтанной намагниченности $\eta(x',z)$ падает:

$$\eta(2{,}17;4) = \eta(2{,}47;6) \simeq 0{,}1 \,, \tag{2I'}$$

но падение происходит в сравнительно широком интервале температур. Таким образом, изменение температуры в 2÷2,5 раза (считая от температуры возникновения спонтанной намагниченности) имеет результатом уменьшение C_v на порядок сравнительно с той концентрацией вакансий C_v^0, которая должна была бы иметь место при такой температуре, $C_v^0 = \exp(-\beta\varepsilon_v)$. Численные оценки могут слегка изменяться, если для F_k, $\mathcal{F}_k$ воспользоваться другими аппроксимациями (так, в частности, в полиномиальном расщеплении /4,5/ интервал резкого изменения η от $\eta\sim1$ до $\eta\sim0{,}1$ сужается). Однако сам вывод о "подавлении" концентрации вакансий при изменении спонтанной намагниченности от ее асимптотического значения в критической области $\sigma\sim\tau^{\beta_0}$ до ее асимптотического значения при насыщении $\sigma\sim1$ представляется нам разумным. Наблюдению такого эффекта, как нам представляется, способствовали бы высокие температры Кюри T_k и низкие энергии вакансиеобразования ε_v. Естественно, сходные аномалии должны обнаружить физические характеристики магнетика, так или иначе связанные с C_v (например, коэффициент самодиффузии).

Поведение C_v с β в интервале (II) необходимо анализировать уже с учетом корреляций между примесями, что и сделано в /6/.

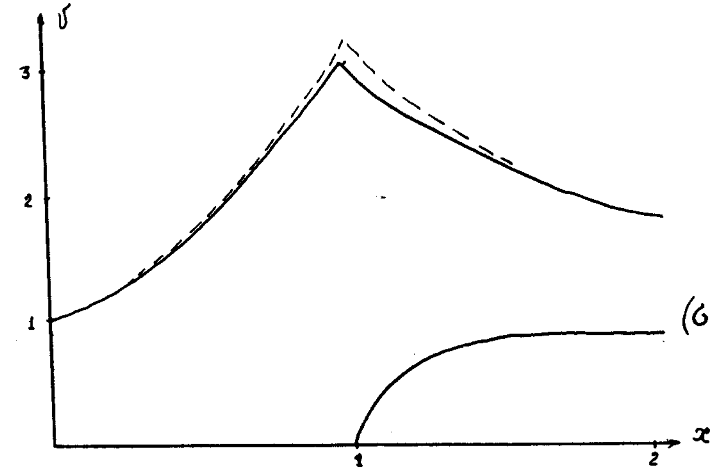

Рис.I

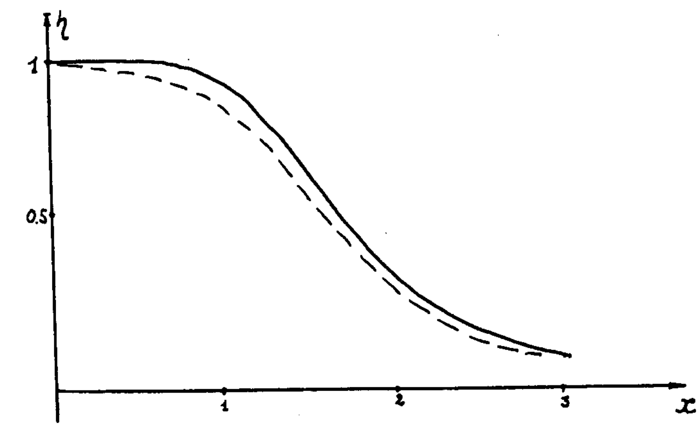

Рис.2

Литература

I. С.В.Тябликов, В.К.Федянин. ФММ, 26, 6, I967.

2. С.В.Тябликов, В.К.Федянин. ФММ, 23, 2, I967.

3. В.К.Федянин.В сб. "Статистическая физика и квантовая теория поля", ФММ, Москва,I973.

4. В.К.Федянин. ФММ, 26,6,I968.

5. В.К.Федянин. В кн:Труды Международной конференции по магнетизму,М.,I973.Наука,I974,т.I,стрI48.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 мая 1977 года