СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р17 - 9359

О.О.Сушкова, В.К.Федянин

ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ В БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ

1975

P17 - 9359

О.О.Сушкова, В.К.Федянин

ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ В БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ

Метод корреляционных функций, предложенный в [1,2] для описания свойств идеальных бинарных систем упорядочивающегося и расслаивающегося типа, дает возможность достаточно просто и стандартно описывать неидеальные бинарные системы, неидеальность которых обусловлена наличием точечных дефектов структуры кристаллической решетки. Таким образом, под дефектом (примесью) мы будем далее понимать любой точечный дефект (вакансия, атом замещения, атом внедрения), характер взаимодействия которого с его ближайшим окружением отличается от взаимодействия ближайших соседей в идеальной структуре. Такой подход к учету влияния примесей типа замещения и внедрения аналогичен предложенному в [3,4] подходу к примесным задачам в магнитной модели Изинга.

Будем считать, как и в [3,4], что примесь следующим образом модифицирует основные параметры, характеризующие бинарную систему: $v_{ij} \to v'_{ij}$, $z \to z'$ (последнее имеет место в случае примесей внедрения).

Для получения термодинамических величин такой системы необходимо прибегнуть к процедуре типа " расцепления корреляций" между примесными областями, что можно считать достаточно обоснованным лишь при малой концентрации дефектов $(c = \frac{N_1}{N} \ll 1)$ и для области температур T, достаточно далеких от Tc, $|1 - T/T_c| \gtrsim \frac{1}{z}$.

Предположим далее, что все примеси хаотически расположены по узлам (в случае примесей замещения) или в междоузлиях (в случае примесей внедрения) структуры, достаточно далеко друг от друга, так, что можно не учитывать корреляцию между ними, и каждый примесный атом находится в "центре" некоторой части структуры $\mathcal{G}_f$, причем $N_1 \mathcal{G}_f = N$. Усреднение по $\mathcal{G}_f$ будем полагать эквивалентным усреднению по N, т.е. считать, что области $\mathcal{G}_f$ имеют макроскопическое размеры.

I. Примеси типа замещения

Пусть структура идеальной решетки бинарной системы обладает точечным дефектом замещения, локализованным на узле решетки. Рассмотрим сначала случай, когда имеется один примесный атом сорта С, расположенный в узле f_1. Тогда гамильтониан системы, если воспользоваться представлениями работы /1/, выглядит следующим образом (для простоты мы считаем, что $j_A(\theta) \approx j_B(\theta)$):

$$\hat{H}' = -\frac{v_{AA}}{2}\sum_{f\neq f_1}\hat{n}_f \sum_{g_f \neq f_1}\hat{n}_g - \frac{v_{BB}}{2}\sum_{f\neq f_1}(1-\hat{n}_f)\sum_{g_f\neq f_1}(1-\hat{n}_g) - \frac{v_{AB}}{2}\sum_{f\neq f_1}\hat{n}_f\sum_{g_f\neq f_1}(1-\hat{n}_g) - \frac{v_{BA}}{2}\sum_{f\neq f_1}(1-\hat{n}_f)\sum_{g_f\neq f_1}\hat{n}_g - v_{CA}\sum_{g\in f_1}\hat{n}_g - v_{CB}\sum_{g\in f_1}(1-\hat{n}_g). \tag{I}$$

Добавим и вычтем вклад "пропущенного" в суммировании (I) узла f_1 :

$$\hat{H}' = \hat{H}_0 + z\,(v_{BB}-v_{BC}) + z\,\hat{n}_{f_1}(v_{AB}-v_{BB}) + (v_{BC}-v_{AC}+v_{AB}-v_{BB})\sum_{g_{f_1}}\hat{n}_{g_{f_1}} + (v_{AA}+v_{BB}-2v_{AB})\,\hat{n}_{f_1}\sum_{g_{f_1}}\hat{n}_{g_{f_1}} \equiv \hat{H}_0 + \Delta E_0 + \hat{H}_f, \tag{2}$$

$\hat{H}_0$ - гамильтониан системы в отсутствие примеси /1/,

$$\Delta E_0 = z\,(v_{BB}-v_{BC}),$$
$$\hat{H}_f = \mathcal{L}_1\hat{n}_f + \mathcal{L}_2\hat{F}_1(g) + \mathcal{L}_3\hat{\Phi}_1(f,g), \tag{3}$$
$$\mathcal{L}_1 = z\,(v_{AB}-v_{BB}),\quad \mathcal{L}_2 = v_{BC}-v_{AC}+v_{AB}-v_{BB},\quad \mathcal{L}_3 = -2v,$$

$\hat{F}_1(g)$, $\hat{\Phi}_1(f,g)$ - корреляционные функции, вычисляемые с гамильтонианом идеальной системы $\hat{H}_0$, определенные в /4/.

Статистический оператор системы с примесью имеет вид

$$\hat{\rho}' = \exp\beta\,[F_m' - \hat{H}'] = \exp\beta\,[F_m' - F_m - \Delta E_0)\,\hat{U}(f)\,\hat{\rho}, \tag{4}$$

где $\hat{\rho} = \exp\beta\,(F_m - \hat{H}_0)$ - статистический оператор идеальной системы, а оператор

$$\hat{U}(f) = \exp(-\beta\hat{H}_f) = \exp\beta\,(-\mathcal{L}_1\hat{n}_f - \mathcal{L}_2\hat{F}_1(g) - \mathcal{L}_3\hat{\Phi}_1(f,g)) \tag{5}$$

всецело определяется наличием примеси в узле f и при $\mathcal{L}_i = 0$ $\hat{U}(f) = 1$. Заметим, что форма записи (4) определяется условием $[\hat{H}_0, \hat{H}_f] = 0$.

Т.к. для любого оператора $\hat{q}$, коммутирующего с ферми-оператором заполнения узла f $\hat{n}_f$, имеет место формула /3/

$$\exp \hat{q}\,\hat{n}_f = 1 + \hat{n}_f\,(\exp \hat{q} - 1), \tag{6}$$

то для сомножителей, входящих в $\hat{V}(f)$, получим

$$\begin{aligned}
&\exp(-\beta Z_1 \hat{n}_f) = 1 + \tau_1 \hat{n}_f, \\
&\exp(-\beta Z_2 \hat{F}_1(g)) = \sum_{k=0}^{z} \frac{\tau_2^k}{k!} \hat{F}_k(g), \\
&\exp(-\beta Z_3 \hat{\varphi}_1(f,g)) = 1 + \sum_{k=1}^{z} \frac{\tau_3^k \hat{\varphi}_k(f,g)}{k!}, \\
&\tau_i = e^{-\beta Z_i} - 1, \qquad i = 1,2,3,
\end{aligned} \tag{7}$$

откуда следует

$$\hat{V}(f) = \sum_{k=0}^{z} \frac{\tau_2^k}{k!} \hat{F}_k(g) + \sum_{k=0}^{z} \frac{1}{k!} \left[(\tau_1+1)\tau^k - \tau_2^k\right] \hat{\varphi}_k(f,g), \qquad \tau = e^{-\beta(Z_2+Z_3)} - 1. \tag{8}$$

Если в системе имеется N_1 атомов замещения, то в полной аналогии с только что рассмотренным случаем одного примесного атома получим

$$\begin{aligned}
&\hat{H}' = \hat{H}_0 + \sum_{i=1}^{N_1} \Delta E_{0i} + \sum_{i=1}^{N_1} \hat{H}_1(f_i), \\
&\hat{\rho}' = \exp\beta\,(F_m' - \hat{H}') = \exp\,(F_m' - \sum_i \Delta E_{0i}) \exp(-\beta \hat{H}_0) \prod_{i=1}^{N_1} \hat{V}(f_i),
\end{aligned} \tag{9}$$

где $\hat{V}(f_i)$ определяется формулой (8). Отсюда, принимая во внимание предположение об отсутствии корреляций между примесными атомами, для свободной энергии системы $\left(\langle \prod_i \hat{V}(f_i)\rangle \to \prod_i \langle \hat{V}(f_i)\rangle = (\langle \hat{V}(f)\rangle)^{N_1}\right)$ имеем

$$-\beta F_m' = -\beta N_1 \Delta E_0 + \ln Q_0 + N_1 \ln \langle \hat{V}(f)\rangle, \qquad Q_0 = \mathrm{Sp}\,\exp(-\beta \hat{H}_0) \tag{10}$$

Таким образом, вклад примесей в свободную энергию, помимо аддитивной величины ΔE_0, определяется средним $\langle \hat{V}(f)\rangle$, т.е., в конечном итоге, корреляционными функциями идеальной системы. Следовательно, располагая конкретными выражениями для корреляционных функций, мы можем вычислить $\langle \hat{\tau}(f)\rangle$, а также свободную энергию, а затем и другие термодинамические характеристики системы.

Среднее от любого оператора $\hat{A}$ находится, очевидно, по формуле

$$\langle \hat{A}\rangle = \frac{Sp\,(\hat{A}e^{-\beta \hat{H}'})}{Sp\,(e^{-\beta \hat{H}'})} = \frac{\langle \hat{A}\,\hat{v}(f)\rangle}{\langle \hat{v}(f)\rangle}\,. \tag{II}$$

Здесь $\hat{v}(f) = \prod_{i=1}^{N_1} \hat{v}(f_i)$.

Полученные формулы справедливы как для расслаивающихся бинарных смесей, так и для бинарных сплавов при $T > Tc$, когда теряет смысл разделение совокупности узлов на α- и β-подрешетки /I,2/. Если $T < Tc$, то, как было показано в /2/, кристаллическую решетку упорядочивающегося сплава удобно подразделить на две подрешетки. При этом узел f_1, в котором находится примесный атом, может быть либо α-, либо β-узлом, вместо оператора $\hat{v}(f)$ мы получаем $\hat{v}(\alpha)$ или $\hat{v}(\beta)$ соответственно, которые выражаются по формуле (8):

$$\begin{aligned} \hat{v}(\alpha) &= \sum_{k=0}^{z} \frac{\tau_2^k}{k!}\hat{F}_k(\beta) + \sum_{k=0}^{z}\frac{1}{k!}\left[(1+\tau_1)\tau^k - \tau_2^k\right]\hat{\varphi}_k(\alpha,\beta), \\ \hat{v}(\beta) &= \sum_{k=0}^{z} \frac{\tau_2^k}{k!}\hat{F}_k(\alpha) + \sum_{k=0}^{z}\frac{1}{k!}\left[(1+\tau_1)\tau^k - \tau_2^k\right]\hat{\varphi}_k(\beta,\alpha). \end{aligned} \tag{I2}$$

Если $N_{1\alpha}$ примесных атомов находится в узлах α, а $N_{1\beta}$-в узлах β, $N_{1\alpha} + N_{1\beta} = N_1$, то, обозначив $\theta = \kappa T$, имеем

$$F_m' = N_{1\alpha}\,\Delta E_0(\alpha) + N_{1\beta}\,\Delta E_0(\beta) - \theta \ln Q_0 - N_{1\alpha}\theta\ln\langle \hat{v}(\alpha_1)\rangle - N_{1\beta}\theta\ln\langle \hat{v}(\beta_1)\rangle. \tag{I3}$$

Здесь также же использовали предположение об отсутствии корреляций между примесными атомами. Формула (II) для среднего от оператора $\hat{A}$, если он определен на узлах обеих подрешеток, принимает теперь вид

$$\langle \hat{A}\rangle = \frac{Sp\,(\hat{A}e^{-\beta \hat{H}'})}{Sp\,(e^{-\beta \hat{H}'})} = \frac{\langle \hat{A}\,\hat{v}(\alpha)\,\hat{v}(\beta)\rangle}{\langle \hat{v}(\alpha)\,\hat{v}(\beta)\rangle}, \quad \text{где}$$

$$\hat{v}(\alpha) = \prod_{i=1}^{N_{1\alpha}} \hat{v}(\alpha_i), \qquad \hat{v}(\beta) = \prod_{i=1}^{N_{1\beta}} \hat{v}(\beta_i). \tag{I4}$$

2. Примеси типа внедрения

При рассмотрении вопроса о примесях внедрения нам удобнее получить сначала основные формулы для сплава при $T < T_c$. Будем полагать, что какое-либо междоузлие f занято атомом C, взаимодействующим со своими ближайшими соседями, из которых z_1 узлов являются узлами типа α, а z_2 - узлами типа β. В таком случае полный гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H}' = \hat{H}_0 - v_{AC}\hat{n}_f \sum_{i=1}^{z_1}\hat{n}_{\alpha i} - v_{AC}'\hat{n}_f \sum_{i=1}^{z_2}\hat{n}_{\beta i} - v_{BC}\hat{n}_f \sum_{i=1}^{z_1}(1-\hat{n}_{\alpha i}) - \tag{15}$$
$$- v_{BC}'\hat{n}_f \sum_{i=1}^{z_2}(1-\hat{n}_{\beta i}) \equiv \hat{H}_0 + \hat{H}_f + \hat{H}_{f\alpha} + \hat{H}_{f\beta},$$

где $\hat{H}_0$ - гамильтониан идеальной системы;

$$\hat{H}_f = -v_{BC} z_1 \hat{n}_f - v_{BC}' z_2 \hat{n}_f ,$$
$$\hat{H}_{f\alpha} = (v_{BC} - v_{AC})\hat{n}_f \sum_{i=1}^{z_1}\hat{n}_{\alpha i},$$
$$\hat{H}_{f\beta} = (v_{BC}' - v_{AC}')\hat{n}_f \sum_{i=1}^{z_2}\hat{n}_{\beta i}.$$

Заметим, что суммирование по i проводится здесь по координатам узлов решетки, ближайших к междоузлию f, и их взаимное расположение определяется геометрией системы и типом междоузлия.

Статистический оператор запишем следующим образом:

$$\hat{\rho}' = \exp\beta\,[F_0' - \hat{H}_0']\,\hat{U}_f(\alpha)\,\hat{U}_f(\beta),$$
$$\hat{H}_0' = \hat{H}_0 + \hat{H}_f , \tag{16}$$
$$\hat{U}_f(\alpha) = \exp(-\beta\hat{H}_{f\alpha}) = \sum_{\ell=0}^{z_1}\frac{\hat{U}_1^{\ell}}{\ell!}\hat{F}_\ell'(\alpha),$$
$$\hat{U}_f(\beta) = \exp(-\beta\hat{H}_{f\beta}) = \sum_{\ell=0}^{z_2}\frac{\hat{U}_2^{\ell}}{\ell!}\hat{F}_\ell'(\beta),$$
$$\hat{U}_1 = e^{-\beta v_1\hat{n}_f} - 1;\quad \hat{U}_2 = e^{-\beta v_2\hat{n}_f} - 1;\quad v_1 = v_{BC} - v_{AC},$$
$$v_2 = v_{BC}' - v_{AC}',\qquad \hat{F}_\ell'(g) = \sum_{(g_1\ldots g_\ell)}\hat{n}_{g_1}\ldots\hat{n}_{g_\ell}.$$

За "нулевой" (невозмущенный) гамильтониан системы $\hat{H}o$ из соображений удобства дальнейших вычислений здесь выбран $\hat{H}o + \hat{H}_f$, а не $\hat{H}o$ /3,4/, что не влияет на окончательные результаты. Таким образом, такой выбор невозмущенного гамильтониана приводит к тому, что при определении различного рода средних необходимо выполнить усреднение как по $\{n_\alpha, n_\beta\}$, так и по $\{n_f\}$ (последнее мы будем обозначать волнистой линией). Свободная энергия системы

$$F_0' = -\theta \ln Q_0 - \theta \ln q_0 - \theta \ln \langle \widetilde{\hat{V}_f} \rangle, \tag{17}$$

$$q_0 = Sp_{(n_f)} \exp \beta [(v_{BC} z_1 + v_{BC}' z_2) \hat{n}_f] = 1 + e^{\beta (v_{BC} z_1 + v_{BC}' z_2)},$$

$$\langle \widetilde{\hat{V}_f} \rangle \equiv \langle \widetilde{\hat{V}_f(\alpha) \hat{V}_f(\beta)} \rangle = \frac{1}{q_0} e^{\beta (v_{BC} z_1 + v_{BC}' z_2)} \sum_{k=0}^{z_1} \sum_{m=0}^{z_2} \frac{V_1^k V_2^m}{k!\, m!} F_k'(\alpha_i) F_m''(\beta_i),$$

$$V_1 = e^{-\beta v_1} - 1, \quad V_2 = e^{-\beta v_2} - 1. \tag{18}$$

Подчеркем еще раз, что вид корреляторов F_k' определяется структурой решетки и типом междоузлия f, поэтому среди них могут фигурировать как F_ℓ, так и Φ_ℓ, и даже $F_\ell^{(k)}$ и $\Phi_\ell^{(k)}$ /2,3,4/, причем в общем случае $F_k'(\alpha_i)$ и $F_m'(\beta_i)$ различны.

Если нас интересует сплав при $T > T_c$ или расслаивающаяся смесь, то расчет несколько упрощается. Считая, что атом C, находящийся в междоузлии f, взаимодействует с z' ближайшими соседями, получим

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \hat{H}_0' + \hat{H}_f, \\ \hat{H}_0' &= \hat{H}_0 - v_{BC} z' \hat{n}_f, \\ \hat{H}_f &= (v_{BC} - v_{AC}) \hat{n}_f \sum_{i=1}^{z'} \hat{n}_{g_i}. \end{aligned} \tag{19}$$

Тогда

$$\hat{\rho}' = \exp \beta [F_0' - \hat{H}_0'] \hat{V}(f), \qquad \text{причем}$$

$$\hat{V}(f) = \sum_{k=0}^{z'} \frac{\hat{V}^k}{k!} \hat{F}_k'(g),$$

$$\hat{V} = e^{-\beta v_1 \hat{n}_f} - 1, \quad v_1 = v_{BC} - v_{AC}.$$

Свободная энергия системы вычисляется по формуле (I7), в которой

$$q_0 = 1 + e^{\beta v_{BC} x'},$$

$$\widetilde{\langle \hat{v}_f \rangle} \equiv \widetilde{\langle \hat{v}(f) \rangle} = \frac{1}{q_0} e^{\beta v_{BC} x' z'} \sum_{k=0}^{z'} \frac{v^k}{k!} F_k, \, q_i), \tag{20}$$

$$v = e^{-\beta v_1} - 1.$$

3. Влияние примесей на параметр дальнего порядка бинарного сплава

Полученные формулы дают возможность рассмотреть влияние примесей на различные физические характеристики системы, в частности на такую важную величину, как параметр дальнего порядка упорядочивающегося сплава S.

Будем считать, что каждый атом примеси замещения, находящийся в узле типа α, расположен в центре некоторой области σ_α, а атом примеси, находящийся в узле β, – в центре области σ_β, причем $N_{I\alpha}\sigma_\alpha + N_{I\beta}\sigma_\beta = N$. Оператор $\hat{S}$, среднее от которого есть параметр дальнего порядка, согласно работе /2/ имеет вид

$$\hat{S} = \frac{\sum_\alpha \hat{n}_\alpha - \sum_\beta \hat{n}_\beta}{N_A},$$

следовательно, по формуле (I4)

$$\langle \hat{S}(c) \rangle = \frac{\langle \hat{S} \prod_{i=1}^{N_{I\alpha}} \hat{v}(\alpha_i) \prod_{j=1}^{N_{I\beta}} \hat{v}(\beta_j) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha) \hat{v}(\beta) \rangle}. \tag{21}$$

Разбивая теперь оператор $\hat{S}$ на части $\hat{S}(\alpha_i, \beta_j)$, заданные на операторах узлов примесных областей $\sigma_{\alpha_i}, \sigma_{\beta_j}$, и пренебрегая корреляциями между примесными областями, будем иметь

$$S(c) = \frac{N_{I\alpha}}{N_A} \frac{\langle \hat{n}_{\alpha_1} \hat{v}(\alpha_1) \prod_{j\neq 1} \hat{v}(\alpha_j) \prod_i \hat{v}(\beta_i) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha) \hat{v}(\beta) \rangle} - \frac{N_{I\beta}}{N_A} \frac{\langle \hat{n}_{\beta_1} \hat{v}(\beta_1) \prod_j \hat{v}(\alpha_j) \prod_{i\neq 1} \hat{v}(\beta_i) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha) \hat{v}(\beta) \rangle} +$$

$$+ \frac{N_{I\alpha}}{N_A} \frac{\langle \hat{F}_1(\alpha) \hat{v}(\beta_1) \prod_j \hat{v}(\alpha_j) \prod_{i\neq 1} \hat{v}(\beta_i) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha) \hat{v}(\beta) \rangle} - \frac{N_{I\beta}}{N_A} \frac{\langle \hat{F}_1(\beta) \hat{v}(\alpha_1) \prod_{j\neq 1} \hat{v}(\alpha_j) \prod_i \hat{v}(\beta_i) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha) \hat{v}(\beta) \rangle} +$$

$$+ \frac{N_{I\alpha}}{N_A} \frac{\langle \sum_{\alpha\neq\alpha_1, \alpha\neq\alpha_{\beta_1}} \hat{n}_\alpha \prod_j \hat{v}(\alpha_j) \prod_i \hat{v}(\beta_i) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha) \hat{v}(\beta) \rangle} - \frac{N_{I\beta}}{N_A} \frac{\langle \sum_{\beta\neq\beta_1, \beta\neq\beta_{\alpha_1}} \hat{n}_\beta \prod_j \hat{v}(\alpha_j) \prod_i \hat{v}(\beta_i) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha) \hat{v}(\beta) \rangle}. \tag{22}$$

В двух последних членах исключено суммирование по узлам α_1 и β_1 и узлам, являющимся их ближайшими соседями. В любой аппроксимации, постулирующей расщепление корреляций узлов, начиная со второй координационной сферы (приближение Брэгга-Вильямса, полиномиальное расщепление) /3,4/, они имеют вид

$$\Big\langle \sum_{\substack{\alpha\neq\alpha_1\\ \alpha\neq\alpha_\beta}} \hat{n}_\alpha \prod_i \hat{v}(\alpha_i) \prod_j \hat{v}(\beta_j) \Big\rangle = \bar{n}_\alpha (6_\alpha - 1 + 6_\beta - z) \Big\langle \prod_i \hat{v}(\alpha_i) \prod_j \hat{v}(\beta_j) \Big\rangle,$$

$$\Big\langle \sum_{\substack{\beta\neq\beta_1\\ \beta\neq\beta_\alpha}} \hat{n}_\beta \prod_i \hat{v}(\alpha_i) \prod_j \hat{v}(\beta_j) \Big\rangle = \bar{n}_\beta (6_\beta - 1 + 6_\alpha - z) \Big\langle \prod_i \hat{v}(\alpha_i) \prod_j \hat{v}(\beta_j) \Big\rangle. \quad (23)$$

Для первых членов (22) получим /3,4/

$$\frac{\langle \hat{n}_{\alpha_1}, \hat{v}(\alpha_1) \prod_{j\neq 1} \hat{v}(\alpha_j) \prod_i \hat{v}(\beta_i) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha) \hat{v}(\beta) \rangle} = \frac{\langle \hat{n}_{\alpha_1}, \hat{v}(\alpha_1) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha_1) \rangle},$$

$$\frac{\langle \hat{n}_{\beta_1}, \hat{v}(\beta_1) \prod_j \hat{v}(\alpha_j) \prod_{i\neq 1} \hat{v}(\beta_i) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha) \hat{v}(\beta) \rangle} = \frac{\langle \hat{n}_{\beta_1}, \hat{v}(\beta_1) \rangle}{\langle \hat{v}(\beta_1) \rangle}, \quad (24)$$

$$\frac{\langle \hat{F}_1(\alpha) \hat{v}(\beta_1) \prod_j \hat{v}(\alpha_j) \prod_{i\neq 1} \hat{v}(\beta_i) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha) \hat{v}(\beta) \rangle} = \frac{\langle \hat{F}_1(\alpha) \hat{v}(\beta_1) \rangle}{\langle \hat{v}(\beta_1) \rangle},$$

$$\frac{\langle \hat{F}_1(\beta) \hat{v}(\alpha_1) \prod_{j\neq 1} \hat{v}(\alpha_j) \prod_i \hat{v}(\beta_i) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha) \hat{v}(\beta) \rangle} = \frac{\langle \hat{F}_1(\beta) \hat{v}(\alpha_1) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha_1) \rangle}.$$

С учетом (23) и (24) для $S(C)$ будем иметь

$$S(c) = \frac{N_{1\alpha}}{N_A} \left[\frac{\langle \hat{n}_{\alpha_1}, \hat{v}(\alpha_1) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha_1) \rangle} + \frac{\langle \hat{F}_1(\alpha) \hat{v}(\beta_1) \rangle}{\langle \hat{v}(\beta_1) \rangle} \right] - \frac{N_{1\beta}}{N_A} \left[\frac{\langle \hat{n}_{\beta_1}, \hat{v}(\beta_1) \rangle}{\langle \hat{v}(\beta_1) \rangle} + \right.$$

$$\left. + \frac{\langle \hat{F}_1(\beta) \hat{v}(\alpha_1) \rangle}{\langle \hat{v}(\alpha_1) \rangle} \right] + \frac{N_{1\alpha}}{N_A} (6_\alpha + 6_\beta - z - 1) \bar{n}_\alpha - \frac{N_{1\beta}}{N_A} (6_\alpha + 6_\beta - z - 1) \bar{n}_\beta. \quad (25)$$

Запишем входящие в (25) средние, используя формулы (12), определяющие $\hat{v}(\alpha_1)$ и $\hat{v}(\beta_1)$:

$$\langle \hat{n}_{\alpha_1}, \hat{v}(\alpha_1) \rangle = (1 + \tau_1) \sum_{k=0}^{z} \frac{\tau^k}{k!} \langle \hat{\varphi}_k \rangle (\alpha_1, \beta),$$

$$\langle \hat n_{\beta_1} \hat v(\beta_1)\rangle = (1+\tau_1)\sum_{k=0}^{z} \frac{\tau^k}{k!}\langle \hat\varphi_k\rangle(\beta_1,\alpha),$$

$$\langle \hat F_1(\alpha)\hat v(\beta_1)\rangle = \sum_{k=0}^{z}\frac{\tau_2^k}{k!}\left[k F_k(\alpha)+F_{k+1}(\alpha)\right]+\sum_{k=0}^{z}\frac{1}{k!}\left[(1+\tau_1)\tau^k-\tau_2^k\right]\cdot$$

$$\times\left[k\varphi_k(\beta_1,\alpha)+\varphi_{k+1}(\beta_1,\alpha)\right],$$

$$\langle \hat F_1(\beta)\hat v(\alpha_1)\rangle = \sum_{k=0}^{z}\frac{\tau_2^k}{k!}\left[k F_k(\beta)+F_{k+1}(\beta)\right]+ \tag{26}$$

$$+\sum_{k=0}^{z}\frac{1}{k!}\left[(1+\tau_1)\tau^k-\tau_2^k\right]\left[k\varphi_k(\alpha_1,\beta)+\varphi_{k+1}(\alpha_1,\beta)\right].$$

Используя теперь то или иное расцепление для корреляционных функций в модели Изинга /5,6/ (для бинарных систем они обсуждались в /2/), можно найти входящие в (25) средние, что приведет в итоге к формуле для параметра дальнего порядка при наличии N_1 примесей замещения. Например, в приближении Брэгга-Вильямса будем иметь

$$\langle \hat v(f)\rangle = (1+\tau_2\bar n_g)^z+\bar n_f\left[(1+\tau_1)(1+\tau\bar n_g)^z-(1+\tau_2\bar n_g)^z\right],$$

$$\langle \hat n_f\hat v(f)\rangle = \bar n_f(1+\tau_1)(1+\tau\bar n_g)^z,$$

$$\langle \hat F_1(g)\hat v(f)\rangle = z\bar n_g(1+\tau_2)(1+\tau_2\bar n_g)^{z-1}+z\bar n_f\bar n_g\left[(1+\tau_1)(1+\tau)(1+\tau\bar n_f)^{z-1}-\right.$$
$$\left.-(1+\tau_2)(1+\tau_2\bar n_f)^{z-1}\right],$$

$\{f,g\}=\{\alpha,\beta\}$, g обозначает ближайшего соседа узла f.

Это приводит к следующей формуле для S(C):

$$S(c)=\frac{N_{1\alpha}}{N_A}\left[\frac{\bar n_\alpha(1+\tau_1)(1+\tau\bar n_\beta)^z}{(1+\tau_2\bar n_\beta)^z+\bar n_\alpha\left[(1+\tau_1)(1+\tau\bar n_\beta)^z-(1+\tau_2\bar n_\beta)^z\right]}+\right.$$

$$\left.+\frac{z\bar n_\alpha(1+\tau_2)(1+\tau_2\bar n_\alpha)^{z-1}+z\bar n_\alpha\bar n_\beta\left[(1+\tau_1)(1+\tau)(1+\tau\bar n_\beta)^{z-1}-(1+\tau_2)(1+\tau_2\bar n_\beta)^{z-1}\right]}{(1+\tau_2\bar n_\alpha)^z+\bar n_\beta\left[(1+\tau_1)(1+\tau\bar n_\alpha)^z-(1+\tau_2\bar n_\alpha)^z\right]}\right]-$$

$$-\frac{N_{1\beta}}{N_A}\left[\frac{\bar n_\beta(1+\tau_1)(1+\tau\bar n_\alpha)^z}{(1+\tau_2\bar n_\alpha)^z+\bar n_\beta\left[(1+\tau_1)(1+\tau\bar n_\alpha)^z-(1+\tau_2\bar n_\alpha)^z\right]}+\right. \tag{27}$$

$$\left.+\frac{z\bar n_\beta(1+\tau_2)(1+\tau_2\bar n_\beta)^{z-1}+z\bar n_\alpha\bar n_\beta\left[(1+\tau_1)(1+\tau)(1+\tau\bar n_\alpha)^{z-1}-(1+\tau_2)(1+\tau_2\bar n_\alpha)^{z-1}\right]}{(1+\tau_2\bar n_\beta)^z+\bar n_\alpha\left[(1+\tau_1)(1+\tau\bar n_\beta)^z-(1+\tau_2\bar n_\beta)^z\right]}\right]$$

$$+\frac{N_{1\alpha}}{N_A}(\sigma_\alpha+\sigma_\beta-z-1)\bar n_\alpha-\frac{N_{1\beta}}{N_A}(\sigma_\alpha+\sigma_\beta-z-1)\bar n_\beta .$$

Аналогичным образом можно рассмотреть влияние примесей внедрения на параметр дальнего порядка, однако вычисление средних там требует отдельного анализа в каждом конкретном случае (см.выше).

В заключение сделаем одно замечание. Во всех наших рассуждениях существенным являлось предположение об отсутствии корреляций между примесными атомами. Поэтому естественно полагать, что полученные результаты будут справедливы лишь при условии, что среднее расстояние между примесями ℓ много больше радиуса корреляции, $\ell \gg R_c$, откуда следует, что все выводы законны лишь для $\left|\frac{\beta_c}{\beta}-1\right| > (c)^{1/d\nu}$, причем $d\nu \simeq 2$ /7,8/. По-видимому, справедливо и обратное утверждение: для выводов о свойствах неидеального сплава в области $(C)^{1/d\nu} \gg \left|\frac{\beta_c}{\beta}-1\right|$ нужно использовать такие аппроксимации, в которых учитывались бы корреляции между примесями. Таким образом, в рассмотренных выше приближениях мы не можем ставить вопроса о сдвиге критической температуры под влиянием примесей. Однако метод корреляционных функций дает возможность рассмотреть этот вопрос в случае квазибинарных сплавов, которые исследованы в нашей работе /9/.

Литература

1. О.О.Сушкова, В.К.Федянин, Дубна, Р4-8952, ОИЯИ, 1975.
2. О.О.Сушкова, В.К.Федянин, Дубна, Р4-8953, ОИЯИ, 1975.
3. С.В.Тябликов, В.К.Федянин. ФММ, 23, 6, 1967.
4. В.К.Федянин, Метод корреляционных функций в модели Изинга, Тарту, 1971.
5. В.К.Федянин, в сб."Статистическая физика и квантовая теория поля," "Наука", Москва, 1973.
6. В.К.Федянин, Труды МКМ, т.II, "Наука", Москва, 1974.
7. M.E.Fischer, J.Math.Phys., 5, 944, 1964; M.E.Fischer, R.J.Bufard; Phys.Rev., 156, 583, 1967.
8. M.A.Moore, D.Jasnow, M.Wortis, Phys.Rev.Lett., 22, 940, 1969.
9. О.О.Сушкова, В.К.Федянин, Дубна, Р17-9360, ОИЯИ, 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 декабря 1975 года.