

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



23/11-76

P17 - 9360

C-917

614/2-76

О.О.Сушкова, В.С.Федянин

МЕТОД КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ  
В ТЕОРИИ КВАЗИБИНАРНЫХ СИСТЕМ

**1975**

P17 - 9360

О.О.Сушкова, В.С.Федянин

МЕТОД КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ  
В ТЕОРИИ КВАЗИБИНАРНЫХ СИСТЕМ

Направлено в "physica status solidi"



## 1. Модельный гамильтониан квазибинарной системы

Развитый в<sup>1/</sup> подход к теории упорядочивающихся бинарных систем, основанный на применении метода функций Грина и корреляционных функций, позволяет стандартно рассмотреть и практически важный случай наличия в структуре точечных дефектов /внедрения и замещения/ малой концентрации ( $c \ll 1$ ). Это может быть сделано простой переформулировкой результатов примесной задачи в модели Изинга<sup>2,3/</sup>. Результаты такой переформулировки даны в нашей работе<sup>4/</sup>. Однако практическое использование полученных формул сопряжено с большим объемом вычислений и в достаточной степени трудоемко /см. <sup>2,3,5/</sup> /.

В этой связи уместно отметить, что метод корреляционных функций дает возможность обсудить конкретные свойства практически важного класса так называемых квазибинарных сплавов состава  $AB_{1-x}C_x$ <sup>6/</sup>. В этой модели принимается, что атомы А занимают  $N_A = x_A N$  узлов решетки, а эффективный атом, построенный с вероятностью  $(1-x)$  и  $x$  из В и С /квазиатом ВС /, произвольно занимает оставшиеся  $(1-x_A)N$  узлов решетки пропорционально концентрациям атомов В и С. Если концентрацию атомов А считать фиксированной ( $x_A = \text{const}$ ), то концентрации В и С определяются по формулам

$$x_B = (1-x)(1-x_A); \quad x_C = x(1-x_A); \quad x_A + x_B + x_C = 1. \quad /1/$$

В<sup>1/6/</sup> на базе этой модели определен сдвиг критической температуры в приближении Брэгга-Вильямса. Метод корреляционных функций позволяет не только получить простым путем соответствующие формулы для сдвига  $T_c$ , но также рассмотреть и менее тривиальные вопросы о поведении параметра дальнего порядка в упорядочивающемся сплаве, влиянии колебаний решетки на параметр порядка и т.п.

Рассмотрим квазибинарный сплав состава  $AB_{1-x}C_x$ , концентрации компонент в котором определяются соотношениями /1/. Будем, как и в /1/, считать, что оператор  $\hat{n}_f$  описывает частицы сорта А в узле  $f$ . Тогда  $(1-x)(1-\hat{n}_f)$  соответствует частицам сорта В, а  $x(1-\hat{n}_f)$  - частицам сорта С. Гамильтониан взаимодействия, если воспользоваться представлениями работы /1/, можно записать в виде

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{v_{AA}}{2} \sum_f \hat{n}_f \sum_g \hat{n}_g - \frac{v_{BB}}{2} (1-x)^2 \sum_f (1-\hat{n}_f) \sum_g (1-\hat{n}_g) - \\ & - \frac{v_{CC}}{2} x^2 \sum_f (1-\hat{n}_f) \sum_g (1-\hat{n}_g) - \\ & - v_{AB} (1-x) \sum_f \hat{n}_f \sum_g (1-\hat{n}_g) - v_{AC} x \sum_f \hat{n}_f \sum_g (1-\hat{n}_g) - \\ & - v_{BC} x(1-x) \sum_f (1-\hat{n}_f) \sum_g (1-\hat{n}_g), \end{aligned} \quad /2/$$

где  $v_{ij}$  - энергии взаимодействия соответствующих пар атомов /мы полагаем, что индекс  $g$  нумерует ближайших соседей узла  $f$ /. Гамильтониан /2/ несложно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \hat{H} = & E_0 - z v \sum_f \hat{n}_f + v_1 \sum_{fg} \hat{n}_f \hat{n}_g, \\ E_0 = & -\frac{zN}{2} (v_{CC} x^2 + v_{BB} (1-x)^2 + 2v_{BC} x(1-x)), \end{aligned}$$

4

$$v = -v_{CC} x^2 - v_{BB} (1-x)^2 - 2v_{BC} x(1-x) + v_{AC} x + v_{AB} (1-x),$$

$$v_1 = x^2 w_{BC} + w_{AB} - x(w_{BC} + w_{AB} - w_{AC}),$$

$$w_{\alpha\beta} = v_{\alpha\beta} - \frac{v_{\alpha\alpha} + v_{\beta\beta}}{2}. \quad /3/$$

Таким образом, мы получаем гамильтониан, вполне аналогичный по своей операторной структуре гамильтониану бинарной смеси работы /7/, с тем отличием, что теперь параметры  $E_0$ ,  $v$ ,  $v_1$  зависят не только от параметров взаимодействия ( $v_{ij}$ ), но и от концентрации примеси С, а также взаимодействия С с А и В. Если постулировать  $v_1 < 0$ , то /3/ можно использовать для описания расслаивающихся квазибинарных смесей /идеальные бинарные смеси рассмотрены в /7/ /. Отметим одну возможность использования гамильтониана /3/. При изменении концентрации  $x$  и определенном выборе параметров  $w_{ij}$  параметр  $v_1$  может менять знак, что переводит систему из области, где налицо поведение, характерное для расслаивающихся смесей, в область, где она обнаруживает свойства упорядочивающихся систем: примесь "С" в разной области концентраций может действовать упорядочивающим и разупорядочивающим образом. Здесь мы остановимся на применении гамильтониана /3/ к теории упорядочивающихся сплавов.

Как и в /1/, разбивая кристаллическую решетку на две подрешетки,  $\alpha$  и  $\beta$ , получим гамильтониан

$$\hat{H} = E_0 - z v \sum_a \hat{n}_a - z v \sum_\beta \hat{n}_\beta + v_1 \sum_{\alpha\beta} \hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta + v_1 \sum_{\beta\alpha} \hat{n}_\beta \hat{n}_\alpha; \quad \begin{matrix} v > 0, \\ v_1 > 0, \end{matrix} \quad /4/$$

совпадающий по виду с гамильтонианом, используемым в /1/. Заметим, что в данном случае мы, так же как и в /1/, рассматриваем сплавы с равным числом  $\alpha$ - и  $\beta$ -узлов. Практически обычно концентрация атомов невелика, поэтому это требование означает, что такой кристаллической решеткой обладал сплав АВ.

5

## 2. Уравнение для параметра дальнего порядка

Если считать, что концентрация компоненты С мала по сравнению с  $x_A$  и  $x_B$ , то параметр дальнего порядка, очевидно, можно ввести по отношению к атомам А и В аналогично тому, как это сделано в /1/:

$$\text{при } x_A < x_B \quad S = \frac{\langle \hat{N}_A(\alpha) \rangle - \langle \hat{N}_A(\beta) \rangle}{N_A} = \frac{\bar{n}_\alpha - \bar{n}_\beta}{2x_A}, \quad /5/$$

$$\text{при } x_A > x_B \quad S = \frac{\langle \hat{N}_B(\beta) \rangle - \langle \hat{N}_B(\alpha) \rangle}{N_B} = \frac{\bar{n}_\alpha - \bar{n}_\beta}{2(1-x_A)}. \quad /6/$$

причем в последнем равенстве использовано соотношение /1/. В первом случае все формулы, полученные в /1/, остаются по форме записи прежними, надо лишь сделать в них замену  $L \rightarrow v, v \rightarrow v_1, x_B \rightarrow x_B + x_C$ . Так, в приближении Брэгга-Вильямса уравнение для параметра дальнего порядка выглядит следующим образом:

$$4x_A S = \frac{\theta}{zv_1} \ln \frac{(1+S)(x_B + x_C + x_A S)}{(1-S)(x_B + x_C - x_A S)}, \quad \theta = kT, \quad /7/$$

а критическая температура определяется из соотношения

$$kT_C = 2zv_1 x_A (x_B + x_C). \quad /8/$$

В квазихимическом приближении для критической температуры получим уравнение

$$y_C^2 = e^{2v_1 \beta_C} = \frac{x_A (x_B + x_C) z^2}{(x_A z - 1) [(x_B + x_C) z - 1]}.$$

Проводя указанную замену в уравнении для  $T_C$  в полиномиальном расщеплении /оно рассмотрено в /1'/, мы получим аналог соответствующего уравнения для квазибинарного сплава. Так же получаются уравнения, кото-

рые мы здесь не приводим, для параметров порядка в квазихимическом приближении и полиномиальном расщеплении. Однако, поскольку сама аппроксимация неидеальной системы  $AB_{1-x}C_x$  квазибинарной системой имеет своей подосновой введение некоего усредненного влияния квазиатома ВС на атом А, то использование этих приближений, учитывающих ближнюю корреляцию, для описания свойств конкретных соединений требует дополнительного обсуждения, и мы ограничимся здесь использованием приближения Брэгга-Вильямса.

Если  $x_A > x_B$  и параметр дальнего порядка определяется соотношением /6/, то, в принципе, надо повторить все выкладки, проделанные в /1'/, с учетом новых соотношений, определяющих  $\bar{n}_\alpha$  и  $\bar{n}_\beta$  через S. Однако, как нетрудно видеть, формула /6/ отличается от формулы /5/ лишь тем, что вместо  $x_A$  в нее входит  $1-x_A$ . Поэтому мы можем во всех соответствующих формулах, полученных для случая  $x_A < x_B$ , просто заменить  $x_A$  на  $1-x_A$  и наоборот, т.е. вместо /7/ будем иметь

$$4(1-x_A)S = \frac{\theta}{zv_1} \ln \frac{(1+S)(x_A + (x_B + x_C)S)}{(1-S)(x_A - (x_B + x_C)S)}. \quad /10/$$

Уравнения же, определяющие критическую температуру, остаются, очевидно, прежними.

В качестве иллюстрации рассмотрим применение полученных формул к конкретной системе  $Zn_{1/2}Ag_{1/2-x}Au_x$ , экспериментально изученной в /8/. Согласно /8/ имеем  $w_{AC} = 0,029 \text{ эВ}$ ,  $w_{AB} = 0,0135 \text{ эВ}$ ,  $w_{BC} = 0,008 \text{ эВ}$ ,  $z = 8$ . Для сдвига критической температуры, используя формулу /8/ и формулу, определяющую  $T_C^{(0)}$  в сплаве  $Zn_{1/2}Ag_{1/2}$ , найдем

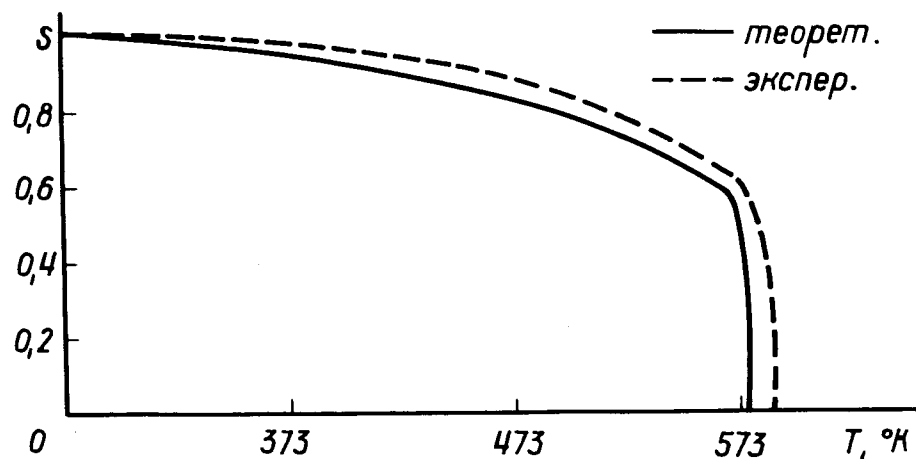
$$\frac{T_C}{T_C^{(0)}} = \frac{v_1}{w_{AB}}. \quad /13/$$

Значения  $T_C$ , полученные для разных концентраций атомов золота при  $T_C^{(0)} = 550^\circ \text{К}$ , приведены в таблице.

Таблица

$x_A$	$T_C$	$T_C$
0,02	561°	568°
0,03	570°	585°
0,04	574°	608°

На рисунке представлена кривая зависимости параметра дальнего порядка  $S$  от температуры, полученная экспериментально и найденная из уравнения /7/ для  $x_A = 3 \cdot 0,03$ .



## Литература

1. О.Р.Сушкова, В.К.Федянин. ОИЯИ, Р4-8953, Дубна, 1975.
2. С.В.Тябликов, В.К.Федянин. ФММ, 23, 6 /1967/.

3. В.К.Федянин. Метод корреляционных функций в модели Изинга. В сб. "Статистическая физика и квантовая теория поля". М., "Наука", 1973.
4. О.О.Сушкова, В.К.Федянин. ОИЯИ, Р17-9359, Дубна, 1975.
5. В.К.Федянин. ДАН СССР, 191, 6 /1971/.
6. G.V.Taggart. J.Phys. and Chem.Solids, 33, 2287 /1972/.
7. О.О.Сушкова, В.К.Федянин. ОИЯИ, Р4-8952, Дубна, 1975.
8. L.Muldawer. J.Appl.Phys., 22, 663 /1951/.
9. М.А.Кривоглаз, А.А.Смирнов. Теория упорядочивающихся сплавов, ФМ, Москва, 1958.

Рукопись поступила в издательский отдел  
2 декабря 1975 года.