СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 8953

О.О.Сушкова, В.К.Федянин

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ В ТЕОРИИ БИНАРНЫХ СИСТЕМ.

II. Системы упорядочивающегося типа

1975

P4 - 8953

О.О.Сушкова, В.К.Федянин

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ В ТЕОРИИ БИНАРНЫХ СИСТЕМ.

II. Системы упорядочивающегося типа

Подход, предложенный в нашей предыдущей заметке /I/, оказывается весьма эффективным при изучении бинарных сплавов, в которых возможен переход типа порядок–беспорядок. В них при $T < T_c$ (см.ниже) налицо тенденция к образованию сверхструктуры: атомы сорта A имеют в качестве ближайших соседей атомы сорта B и наоборот. Предложенный в /I/ подход позволяет рассмотреть как эффекты дальнего порядка, так и – что особенно существенно – эффекты ближнего порядка при неравных концентрациях x_A и x_B ($x_A + x_B = 1$).

I. Дальний порядок в системах упорядочивающегося типа

Разобьем узлы кристаллической решетки на два типа: α и β, $\{f\} = (\{\alpha\}, \{\beta\})$, и будем считать, что ближайшими соседями α-узлов являются только β-узлы и наоборот, $N_\alpha = N_\beta = \frac{N}{2}$. Предположим для определенности, что $x_A < x_B$, и постулируем, что в состоянии полного порядка (T=0) все атомы A находятся в узлах α. При этом все соседи атомов A суть атомы B и $(x_B - x_A)$ – часть узлов α-типа занята атомами сорта B. Гамильтониан бинарной системы, полученный в /I/ (формула (2) в /I/), при таком разбиении на две подрешетки можно записать в виде

$$\hat{H} = E_0 - \ell \sum_{\alpha} \hat{n}_\alpha - \ell \sum_{\beta} \hat{n}_\beta + v \sum_{\alpha\beta} \hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta + v \sum_{\beta\alpha} \hat{n}_\beta \hat{n}_\alpha \qquad (I)$$

(все обозначения по /I/, $v > 0$.).

Если интересоваться переходами типа порядок–беспорядок, то равновесные средние физических величин можно получать с помощью оператора плотности $\hat{\rho} = \exp\beta(F_m - \hat{H})$, причем

$$-\beta F_m = \ln Sp \exp(-\beta\hat{H}) = \frac{zNv_{BB}}{2\theta} + N\ln g_\beta(\theta) + \ln Sp \exp(-\beta\hat{H}_0),$$

$$\hat{H}_0 = -\bar{\mathcal{L}}\sum_\alpha \hat{n}_\alpha - \bar{\mathcal{L}}\sum_\beta \hat{n}_\beta + v\sum_{\alpha\beta}\hat{n}_\alpha\hat{n}_\beta + v\sum_{\beta\alpha}\hat{n}_\beta\hat{n}_\alpha .$$

С учетом разбиения на α,β -подсистемы имеем для различных "считающих" операторов, введенных в /I/ ,

$$\hat{N}_A(\alpha) = \sum_{p\in\alpha}\hat{n}_p, \quad \hat{N}_A(\beta) = \sum_{q\in\beta}\hat{n}_q, \quad \hat{N}_A = \sum_f \hat{n}_f \equiv \sum_{f\in\alpha}\hat{n}_f + \sum_{f\in\beta}\hat{n}_f, \quad (2)$$

$$\hat{N}_{AA} = \frac{1}{2}\sum_\alpha \hat{n}_\alpha \sum_{\beta_\alpha}\hat{n}_\beta + \frac{1}{2}\sum_\beta \hat{n}_\beta \sum_{\alpha_\beta}\hat{n}_\alpha \quad \text{и т.д.}$$

Степень упорядоченности в распределении атомов по узлам решетки характеризуется с помощью некоторых параметров порядка, которые можно определить разными способами. Параметр дальнего порядка S , введенный впервые Никсом и Шокли /2/, в нашем случае целесообразно определить следующим образом :

$$S = \frac{\langle\hat{N}_A(\alpha)\rangle - \langle\hat{N}_A(\beta)\rangle}{N_A} = \frac{\bar{n}_\alpha - \bar{n}_\beta}{\bar{n}_\alpha + \bar{n}_\beta} = \frac{\bar{n}_\alpha - \bar{n}_\beta}{2x_A} . \quad (3)$$

Подчеркнем, что формула (3) получается с учетом трансляционной инвариантности (с удвоенной постоянной решетки) в α- и β -подсистемах

$$\langle O_\alpha O_{\alpha+2n}\rangle = f_\alpha(\ldots|2n), \quad \langle O_\beta O_{\beta+2k}\rangle = f_\beta(\ldots|2k) \quad (4)$$

и того обстоятельства, что по (2) $\langle\hat{N}_A\rangle = \langle\hat{N}_A(\alpha)\rangle + \langle\hat{N}_A(\beta)\rangle =$

$$= \frac{N}{2}(\bar{n}_\alpha + \bar{n}_\beta), \quad N\bar{n}_f \equiv N\bar{n} . \quad (5)$$

Естественно рассматривать $\bar{n}_\alpha \equiv \langle\hat{n}_f\rangle|_{f\in\alpha}$ и $\bar{n}_\beta \equiv \langle\hat{n}_f\rangle|_{f\in\beta}$ как условные вероятности заполнения узлов α- и β -подсистем атомами сорта А. При Т=0 $\bar{n}_\beta = 0$, $\bar{n}_\alpha = 2x_A$ и S =I, при $T=T_c$ $\bar{n}_\alpha = \bar{n}_\beta$ и $S=0$. Теперь нетрудно выразить $\bar{n}_\alpha$ и $\bar{n}_\beta$ через S :

$$\bar{n}_\alpha = x_A(1+S), \quad \bar{n}_\beta = x_A(1-S). \quad (6)$$

Для функций Грина и корреляционных функций α- и β -подрешеток мы можем получить цепочки уравнений аналогично тому, как это сделано в /3,4/. Определяя из них $\bar{n}_\alpha$ и $\bar{n}_\beta$, можно найти соответствующие уравнения для параметра дальнего порядка S , а знание корреляционных функций более высокого порядка дает возможность рассматривать различные корреляционные эффекты.

Система уравнений /3,4/ для функций Грина α и β -подрешеток имеет вид

$$G_{m\alpha}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{n=0}^{z-m}(-1)^n F_{m+n}(\beta)\sum_{k=0}^{n}\frac{(-1)^k}{k!(n-k)!}\frac{1}{\omega - E_{k+m}},$$

$$G_{m\beta}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_{n=0}^{z-m}(-1)^n F_{m+n}(\alpha)\sum_{k=0}^{n}\frac{(-1)^k}{k!(n-k)!}\frac{1}{\omega - E_{k+m}}, \quad (7)$$

где $m=0,1,\ldots,z$, $G_{mf} = \langle\langle \hat{a}_f \hat{F}_k(g) | \hat{a}_f^+ \rangle\rangle_\omega$, $E_k = -\bar{\mathcal{L}} + 2kv$,

$v>0$, $\hat{F}_k(f) = \langle \frac{1}{k!}\sum_{g_1 \ldots g_k} \prod \hat{n}_{g_i} \rangle$, $f = \alpha,\beta$, g_i -ближайшие соседи узла f .

Для симметризованных корреляционных функций получим систему

$$\varphi_m(\alpha,\beta) \equiv \langle\hat{n}_\alpha \hat{F}_m(\beta)\rangle = \sum_{n=0}^{z-m}(-1)^n F_{n+m}(\beta)\sum_{k=0}^{n}\frac{(-1)^k N_{k+m}}{k!(n-k)!},$$

$$\varphi_m(\beta,\alpha) \equiv \langle\hat{n}_\beta \hat{F}_m(\alpha)\rangle = \sum_{n=0}^{z-m}(-1)^n F_{n+m}(\alpha)\sum_{k=0}^{n}\frac{(-1)^k N_{k+m}}{k!(n-k)!}, \quad (8)$$

$m=0,1,\ldots,z$, $N_k = (1+\exp\beta E_k)^{-1}$

Остановимся кратко на получении уравнений для параметра порядка S в аппроксимациях Брэгга-Вильямса, квазихимической и полиномиальной. В двух последних аппроксимациях удается учесть корреляционные эффекты, а цепочки уравнений для корреляционных функций позволяют стандартно и однозначно найти выражения для любых высших корреляторов /4,5/.

а) Приближению Брэгга-Вильямса соответствует полное распадение корреляций и расцепление функции $G_1(\omega)$ по формулам /4/

$$\langle\langle \hat a_\alpha \sum_{g_1\in\alpha} \hat n_{g_1} | \hat a_\alpha^+ \rangle\rangle_\omega \to z\bar n_\beta G_{0\alpha}(\omega),$$

$$\langle\langle \hat a_\beta \sum_{g_1\in\beta} \hat n_{g_1} | a_\beta^+ \rangle\rangle_\omega \to z\bar n_\alpha G_{0\beta}(\omega)$$

, что приводит к уравнениям для $\bar n_\alpha$ и $\bar n_\beta$ вида

$$\bar n_\alpha = [1+\exp\beta(-\zeta+2zv\bar n_\beta)]^{-1}, \quad \bar n_\beta = [1+\exp\beta(-\zeta+2zv\bar n_\alpha)]^{-1}. \quad (9)$$

Использовав эти уравнения наряду с (3) и (6), приходим к уравнению для параметра порядка

$$\frac{S}{x_B + x_A S^2} = \text{th}\left(2x_A S\,\frac{zv}{kT}\right). \quad (10)$$

При $S\to 0$ из (10) находим критическую температуру

$$kT_c = 2zvx_Ax_B. \quad (11)$$

б) Квазихимическому приближению отвечает следующее расцепление корреляторов /4,5/:

$$\Phi_k(\beta,\alpha)\to A_z^k \bar n_\beta\left(\frac{t_2(\beta,\alpha)}{\bar n_\beta}\right)^k = A_z^k\bar n_\beta t_1^k, \quad (12)$$

$$\Phi_k(\alpha,\beta)\to A_z^k\bar n_\alpha\left(\frac{t_2(\alpha,\beta)}{\bar n_\alpha}\right)^k = A_z^k \bar n_\alpha t_2^k.$$

Решение системы уравнений для корреляционных функций приводит к уравнениям

$$z\bar n_\alpha = z\bar n_\beta\left(t_1 + xy_1^{-z}t_1A_1^{z-1}\right), \quad (13а)$$

$$1 - z\bar n_\alpha = \bar n_\beta\left(1 - t_1z + xy_1^{-z}A_1^{z-1}B_1\right),$$

$$z\bar n_\beta = z\bar n_\alpha\left(t_2 + xy_1^{-z}t_2A_2^{z-1}\right), \quad (13в)$$

$$1 - z\bar n_\beta = \bar n_\alpha\left(1 - t_2z + xy_1^{-z}A_2^{z-1}B_2\right),$$

где

$$x = a\exp\tfrac{1}{2}z\beta(v_{BB}-v_{AA}), \quad a = \exp\left(-\ln\frac{j_A}{j_B}\right), \quad y_1 = e^{-\beta v},$$

$$A_i = y_1^2 - y_1^2t_i + t_i, \quad B_i = A_i - zt_i, \quad i=1,2.$$

Выражая отсюда $\bar n_\alpha$ и $\bar n_\beta$ и принимая во внимание, что

$$y^2 = y_1^{-2} = \frac{(1-t_1)(\bar n_\alpha - \bar n_\beta t_1)}{t_1(1+t_1\bar n_\beta - \bar n_\alpha - \bar n_\beta)} = \frac{(1-t_2)(\bar n_\beta - \bar n_\alpha t_2)}{t_2(1+t_2\bar n_\alpha - \bar n_\alpha - \bar n_\beta)}, \quad (14)$$

приходим, используя соотношения (3) и (6), к уравнению для S:

$$\frac{z-1}{z}\ln\frac{(x_B+x_AS)(1+S)}{(x_B-x_AS)(1-S)} = \ln\frac{y^2+2Sx_A(y^2-1)-R}{y^2-2Sx_A(y^2-1)-R}, \quad (15)$$

$$R = \sqrt{y^4(x_B-x_A)^2+4x_Ax_By^2-4x_A^2S^2(y^2-1)}. \quad (16)$$

При $S\to 0$

$$y_c^2 = e^{2v\beta_c} = \frac{x_Ax_Bz^2}{(x_Az-1)(x_Bz-1)}. \quad (17)$$

в) Полиномиальное расцепление соответствует расцеплению корреляторов $F_k(f)$, $f=\alpha,\beta$ /4,5/,

$$F_k(\alpha)\to A_z^k(\bar n_\alpha)^k,$$

$$F_k(\beta)\to A_z^k(\bar n_\beta)^k. \quad (18)$$

При таком расцеплении для Φ_m получаем следующие уравнения:

$$\Phi_m(\alpha,\beta) = \sum_{k=m}^{z} C_z^k A_k^m(\bar n_\beta)^k(1-\bar n_\beta)^{z-k}N_k,$$

$$\Phi_m(\beta,\alpha) = \sum_{k=m}^{z} C_z^k A_k^m(\bar n_\alpha)^k(1-\bar n_\alpha)^{z-k}N_k, \quad (19)$$

$$N_k = [1+\exp\beta(-\zeta+2kv)]^{-1}.$$

При $m=0$ из (19) имеем уравнения для определения $\bar n_\alpha$ и $\bar n_\beta$:

$$\bar n_\alpha = \sum_{k=0}^{z} C_z^k(\bar n_\beta)^k(1-\bar n_\beta)^{z-k}N_k,$$

$$\bar n_\beta = \sum_{k=0}^{z} C_z^k(\bar n_\alpha)^k(1-\bar n_\alpha)^{z-k}N_k. \quad (20)$$

Выражая $\bar n_\alpha$ и $\bar n_\beta$ через S, получим с учетом (3)

$$2x_AS = \sum_{k=0}^{z} C_z^k N_k x_A^k\left[(1-S)^k(x_B+x_AS)^{z-k}-(1+S)^k(x_B-x_AS)^{z-k}\right]. \quad (21)$$

При $s \to 0$, разлагая многочлены по степеням s, найдем уравнение для определения T_c:

$$x_A = \sum_{k=0}^{z} C_z^k N_k(T_c)\, x_A^k\, x_B^{z-k-1} (x_A z - k), \qquad (22)$$

которое надо анализировать с помощью ЭВМ.

Если уравнения (I0) и (I5) получаются и в обычном подходе, при котором по s минимизируется свободная энергия, определяемая в аппроксимациях (а) и (б) /6/, то аппарат корреляционных функций совершенно необходим для получения высших корреляторов типа $\langle \hat n_f\, \hat O_k(h) \rangle$, $f=\alpha,\beta$, $\hat O_k(h)$ -некоторый оператор, определенный на "к" узлах h, при этом h-узлы не являются ближайшими соседями узла f: скажем, $\hat O_k(h) = \prod_{i=1}^{k} \hat n_{h_i}$, $h_i \in \beta$, определен на к узлах β-совокупности, находящихся на расстоянии $|h_i - f|$ от узла f. В приближении Брэгга-Вильямса вопрос решается простым расщеплением и использованием (6):

$$\langle \hat n_f \prod_{1}^{k} \hat n_{h_i} \rangle \to \langle \hat n_f \rangle \bar n_\beta^k = \langle \hat n_f \rangle x_A^k (1-s)^k, \quad f=\alpha,\beta \qquad (23)$$

В полиномиальном расщеплении имеем аналогичную ситуацию, однако для корреляторов, построенных на операторах $\hat n_g$ (g нумерует ближайших соседей узла f) нужно использовать формулы, приведенные в /4,5/, в которых необходимо учитывать, к какой совокупности принадлежат g-узлы (см.также ниже).

Как было показано в /4,5/, квазихимическое приближение является решеточным аналогом расщепления Кирквуда: высшие корреляторы расщепляются через парные. Если воспользоваться цепочкой уравнений для высших корреляционных функций /4/, то после довольно громоздких алгебраических вычислений получаем для парных корреляторов следующие формулы:

$$\begin{aligned}
&\langle \hat n_\alpha \hat n_{\alpha+2k+1} \rangle = \langle \hat n_\beta \hat n_{\beta+2k+1} \rangle = \bar n_\alpha \bar n_\beta + \bar n_\beta (t_1 - \bar n_\alpha) \lambda_0^{2k},\\
&\langle \hat n_\alpha \hat n_{\alpha+2k} \rangle = \bar n_\alpha^2 + \bar n_\alpha (1-\bar n_\alpha) \lambda_0^{2k},\\
&\langle \hat n_\beta \hat n_{\beta+2k} \rangle = \bar n_\beta^2 + \bar n_\beta (1-\bar n_\beta) \lambda_0^{2k},\\
&t_1 = \frac{2x_A (y^2-1) - y^2 + R}{2x_A (1-s)(y^2-1)},\\
&\lambda_0 = \frac{y^2 - 2x_A x_B (y^2-1) - R - 2x_A^2 s^2 (y^2-1)}{2x_A (y^2-1)\sqrt{(1-s^2)(x_B^2 - x_A^2 s^2)}},
\end{aligned} \qquad (24)$$

R определяется из (I6).

В первом равенстве мы "исходили"либо из α-узла, либо из β-узла и рассматривали узел, находящийся на нечетном числе шагов от него (β-узел и α-узел, соответственно), во втором и третьем равенствах узлы брались из одной и той же совокупности. Любой высший коррелятор вполне определяется (24) и указанием, к какой подрешетке принадлежат узлы, нумерующие входящие в него операторы. Так, например,

$$\langle \hat n_\alpha \hat n_{\alpha+2k} \hat n_{\alpha+2k+2m+1} \rangle \to \frac{\langle \hat n_\alpha \hat n_{\alpha+2k} \rangle \langle \hat n_{\alpha+2k} \hat n_{\alpha+2k+2m+1} \rangle}{\langle \hat n_{\alpha+2k} \rangle} =$$

$$= \frac{\{\bar n_\alpha^2 + \bar n_\alpha (1-\bar n_\alpha)\lambda_0^{2k}\}\{\bar n_\alpha \bar n_\beta + \bar n_\beta (t_1 - \bar n_\alpha)\lambda_0^{2k+2m}\}}{\bar n_\alpha} = \underset{(\bar n_\alpha t_2 = \bar n_\beta t_1)}{\left(\bar n_\alpha + (1-\bar n_\alpha)\lambda_0^{2k}\right)\left(\bar n_\beta + (t_2 - \bar n_\beta)\lambda_0^{2(k+m)}\right)}.$$

Высшие корреляторы для бинарных расслаивающихся смесей, рассмотренных в /I/, даются формулами, приведенными в /4,5/ (здесь, естественно, не нужно учитывать разбиение узлов системы на α- и β-подрешетки).

2. Ближний порядок в упорядочивающихся сплавах

Формулы, приведенные выше, позволяют разобрать вопрос о возможных корреляционных эффектах между двумя атомами в упорядочивающейся системе. Если мы рассматриваем α-подрешетку и нас интересует корреляция между атомами сорта А, то корреляторы могут быть двух типов, $\langle \hat{n}_\alpha \hat{n}_{\alpha+2k} \rangle \equiv \langle \hat{n}_\alpha \hat{n}_{\alpha_{2k}} \rangle$ и $\langle \hat{n}_\alpha \hat{n}_{\alpha+2k+1} \rangle \equiv \langle \hat{n}_\alpha \hat{n}_{\beta_{2k}} \rangle$, т.к., начиная отсчет от α-узла, через четное число шагов мы попадаем снова в узел α, а через нечетное число шагов - в узел β. При этом соответствующие парные корреляторы имеют четко выраженный смысл условных вероятностей. Например, $\langle \hat{n}_\alpha \hat{n}_{\alpha+2k} \rangle$ есть условная вероятность того, что, находясь в α-подсистеме и считая, что в исходном α-узле находится атом А, мы обнаружим атом того же сорта в узле, отстоящем от исходного на 2к шагов (α-узле). Аналогично, для β-подрешетки возможны парные корреляторы типа $\langle \hat{n}_\beta \hat{n}_{\beta+2k} \rangle$ и $\langle \hat{n}_\beta \hat{n}_{\beta+2k+1} \rangle$. Нетрудно убедиться в том, что все остальные корреляторы между парами атомов (АВ, ВА и ВВ) выражаются через только что рассмотренные и через средние $\bar{n}_\alpha$ и $\bar{n}_\beta$.

Корреляции такого рода лежат в основе введения различного рода параметров, характеризующих ближний порядок в сплавах. Наиболее общепринятыми являются параметр Бете σ /6/, параметры корреляции $\varepsilon_{ZZ'}^{jj'}$ /7/, а также параметры α_i, которые вводятся при $T > T_c$ /8/.

Выразим эти параметры через корреляционные функции.

а) Параметр Бете σ определяется соотношением

$$\sigma = \frac{q - q_{min}}{q_{max} - q_{min}}, \qquad \text{где} \qquad (25)$$

$q = \frac{Q_{AB}}{Q}$, Q - общее число пар в решетке, равное $\frac{ZN}{2}$.

Q_{AB} - число пар АВ, $q_{max} = q|_{T=0}$, $q_{min} = q|_{T=T_c}$, Q_{AB} выражается по формулам (2):

$$Q_{AB} = \langle \hat{N}_{AB} \rangle = \frac{1}{2} \Big[\langle \sum_\alpha \hat{n}_\alpha \sum_{\beta_\alpha} (1-\hat{n}_\beta) \rangle + \langle \sum_\alpha (1-\hat{n}_\alpha) \sum_{\beta_\alpha} \hat{n}_\beta \rangle +$$
$$+ \langle \sum_\beta \hat{n}_\beta \sum_{\alpha_\beta} (1-\hat{n}_\alpha) \rangle + \langle \sum_\beta (1-\hat{n}_\beta) \sum_{\alpha_\beta} \hat{n}_\alpha \rangle \Big] = \frac{ZN}{2} (2x_A - \langle \hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta \rangle - \langle \hat{n}_\beta \hat{n}_\alpha \rangle)$$

Следовательно,

$$q = 2x_A - \langle \hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta \rangle - \langle \hat{n}_\beta \hat{n}_\alpha \rangle. \qquad (26)$$

В приближении Брэгга-Вильямса $\langle \hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta \rangle = \langle \hat{n}_\beta \hat{n}_\alpha \rangle = \bar{n}_\alpha \bar{n}_\beta$, $q = 2x_A x_B + 2x_A^2 S^2$, $q_{min} = 2x_A x_B$, $q_{max} = 2x_A$ и $\sigma = S^2$, т.е. ближний порядок всецело определяется дальним порядком, и при $T \geqslant T_c$ $\sigma = 0$.

В квазихимическом приближении $\langle \hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta \rangle = \langle \hat{n}_\beta \hat{n}_\alpha \rangle = \frac{2x_A(y^2-1) - y^2 + R}{2(y^2-1)}$,

$$q = 2x_A - \frac{2x_A(y^2-1) - y^2 + R}{y^2-1}, \quad q_{max} = 2x_A, \quad q_{min} = 2x_A - \frac{2x_A(Zx_A-1)}{Z-1},$$

$$\sigma = \frac{2x_A(Zx_A-1) - [2x_A(y^2-1) - y^2 + R](Z-1)/y^2-1}{2x_A(Zx_A-1)} \qquad (27)$$

(R определяется соотношением (I6)).

И, наконец, в полиномиальном расцеплении по формулам (I9) имеем

$$\langle \hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta \rangle = \sum_{k=0}^{Z} \frac{k}{Z} C_Z^k (\bar{n}_\beta)^k (1-\bar{n}_\beta)^{Z-k} N_k,$$

$$\langle \hat{n}_\beta \hat{n}_\alpha \rangle = \sum_{k=0}^{Z} \frac{k}{Z} C_Z^k (\bar{n}_\alpha)^k (1-\bar{n}_\alpha)^{Z-k} N_k,$$

откуда следует, что $q_{max} = 2x_A$, $q_{min} = 2x_A - \frac{2x_A(Zx_A - x_B)}{Z}$ и

$$\sigma = \frac{2x_A(Zx_A - x_B) - \sum_{k=0}^{Z} k C_Z^k N_k [(\bar{n}_\beta)^k (1-\bar{n}_\beta)^{Z-k} + (\bar{n}_\alpha)^k (1-\bar{n}_\alpha)^{Z-k}]}{2x_A(Zx_A - x_B)}. \qquad (28)$$

Из полученных для σ выражений (27) и (28) видно, что и при $T>T_c$, где $S=0$, σ отлично от нуля.

б) Параметры корреляции $\varepsilon_{ZZ'}^{jj'} = P_{ZZ'}^{jj'} - P_Z^{j} P_{Z'}^{j'}$, где $P_{ZZ'}^{jj'}$ – вероятность того, что в узле типа j находится атом сорта Z, а в узле типа j' – атом сорта Z', $P_Z^{j}(P_{Z'}^{j'})$ – вероятность замещения узла типа $j(j')$ атомом $Z(Z')$. В терминах парных корреляционных функций получим

$$\varepsilon_{AB}^{f_1 f_2}(\rho_i) = -\varepsilon_{AA}^{f_1 f_2}(\rho_i) = -\varepsilon_{BB}^{f_1 f_2}(\rho_i) = \bar{n}_{f_1}\bar{n}_{f_2} - \langle \hat{n}_{f_1} \hat{n}_{f_2} \rangle, \quad (29)$$

$f_1, f_2 = \alpha, \beta$, ρ_i – расстояние между соответствующими узлами. Для $\bar{n}_{f_1}$ и $\bar{n}_{f_2}$ имеем в разных приближениях выражения через параметр порядка S, $\langle \hat{n}_{f_1} \hat{n}_{f_2} \rangle$ в квазихимическом приближении приведены выше. В приближении Брэгга-Вильямса все параметры корреляции равны нулю, а в полиномиальном расщеплении они равны нулю для узлов, не являющихся ближайшими соседями.

в) При температурах выше критической различие между подрешетками пропадает и ближний порядок в сплавах можно характеризовать с помощью параметров

$$\alpha_i = 1 - \frac{P_{AB}(\rho_i)}{x_A x_B}, \quad (30)$$

где $P_{AB}(\rho_i)$ – вероятность того, что атомы A и B находятся на расстоянии ρ_i друг от друга. Очевидно, что

$$P_{AB}(\rho_i) = \langle \hat{n}_f (1-\hat{n}_{f+i}) \rangle = \bar{n}_f - \langle \hat{n}_f \hat{n}_{f+i} \rangle = x_A - \langle \hat{n}_f \hat{n}_{f+i} \rangle$$ и

$$\alpha_i = -\frac{x_A^2 - \langle \hat{n}_f \hat{n}_{f+i} \rangle}{x_A x_B}. \quad (31)$$

В приближении Брэгга-Вильямса $\alpha_i = 0$ для всех i, в полиномиальном расщеплении

$$\alpha_1 = -\frac{1}{x_A x_B}\left[x_A^2 - \sum_{k=0}^{z} \frac{k}{z} C_z^k N_k x_A^k x_B^{z-k}\right] \text{ и } \alpha_i = 0 \text{ для } i \geq 2.$$

В квазихимическом приближении, используя выражение для парного коррелятора $\langle \hat{n}_f \hat{n}_{f+i} \rangle$, получим

$$\alpha_i = (-1)^i \left(\frac{x_A - t}{x_B}\right)^i, \text{ где} \quad (32)$$

t определяется соотношением (24) при $S=0$.

Мы признательны В.Б.Приезжеву за обсуждение результатов и ценные замечания.

Литература

1. О.О.Сушкова, В.К.Федянин, Дубна, Р4- 8952, ОИЯИ, 1975.
2. F.C.Nix, W.Schockley. Rev.Mod.Phys., 10, 1, 1938.
3. С.В.Тябликов, В.К.Федянин. ФММ, 23, 2, 1967.
4. В.К.Федянин, в сб."Статистическая физика и квантовая теория поля", ФМ, Москва, 1973.
5. В.К.Федянин. Труды Международного конгресса по магнетизму, т. 2, Наука, 1974.
6. Т.Муто, Ю.Токаги. Теория явления упорядочения в сплавах, ИЛ, Москва, 1959.
7. М.А.Кривоглаз, А.А.Смирнов. Теория упорядочивающихся сплавов, ФМ, Москва, 1958.
8. J.M.Cowley. Phys.Rev., 77, 667, 1950; Phys.Rev., 120, 1648, 1960; Adv. High Temp. Chem., 3, 35, 1971.

Рукопись поступила в издательский отдел
9 июня 1975 года.