

05

## Новый метод оценки параметра порядка на примере никеля и бета-латуни

© Ж.Х. Мурлиева, Д.К. Палчаев, К.К. Казбеков, М.Э. Исхаков

Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия  
E-mail: dairpalchaev@mail.ru

Поступило в Редакцию 22 февраля 2006 г.

На основе экспериментальных данных по электросопротивлению и коэффициенту теплового расширения никеля и бета-латуни показано, что существует простая связь параметра порядка с термической деформацией этих объектов. Приведены выражения для оценки температурной зависимости параметров порядка ферромагнетиков и упорядочивающихся сплавов по данным коэффициента теплового расширения.

PACS: 65.90.+i, 44.90.+c

Большинство фазовых переходов характеризуются появлением отличных от нуля значений некоторой величины в упорядоченной фазе — параметра порядка. В ферромагнетиках это относительная спонтанная намагниченность, в сегнетоэлектриках — относительная спонтанная электрическая поляризация. Определение параметра порядка для объектов с иными магнитными или электрическими структурами, а также систем, претерпевающих переход атомный порядок—беспорядок, в том числе упорядочивающихся сплавов, сверхпроводников и т.д., не столь однозначно [1–3]. Например, в [1] наглядно показано, что концепция параметра порядка чрезвычайно удобна для описания физических свойств веществ, хотя идентификация этого параметра не всегда очевидна. Эта проблема возникает всегда, за исключением указанных выше классических случаев. Неоднозначность методов определения параметра порядка обусловлена отсутствием некой универсальной физической характеристики (силы), ответственной за природу переходов типа порядок—беспорядок [1,2].

В настоящей работе приведены некоторые факты, свидетельствующие о возможности оценок параметра порядка по данным изобарной

термической деформации

$$\beta T = (\partial V / \partial T)_P (T/V) = [(\partial \ln V) / (\partial \ln T)]_P, \quad (1)$$

для систем, претерпевающих фазовые переходы: атомный и магнитный порядок—беспорядок, когда в качестве параметра порядка выбрано относительное электросопротивление. Изобарная термическая деформация является интегральной характеристикой изменения всевозможных сил, в том числе способствующих упорядочению (см., например, [3]), тепловыми возбуждениями.

Известно [1–5], что наряду с основными экспериментальными методами наблюдения нарастания беспорядка — дифракция соответствующего излучения и термодинамические изменения, эффективно используется метод измерения удельного электрического сопротивления.

Эмпирически установлено [2,3,5], что электросопротивление ( $\rho$ ) ферромагнетиков и сплавов в упорядоченной фазе убывает с увеличением дальнего порядка ( $\eta$ ) в расположении атомов как

$$\rho \sim 1 - \eta^2. \quad (2)$$

В ферромагнетиках ниже температуры Кюри ( $T_C$ ) электросопротивление формируется за счет рассеяния электронов на фононах и магнонах. Зависимость (2) справедлива для магнонной составляющей электросопротивления, которая непосредственно определяется изменением параметра порядка. Усиление металлической связи с возрастанием намагниченности (и увеличением спонтанной стрикции) в ферромагнетиках приводит к снижению потенциала рассеяния электронов при прочих равных условиях [5]. Связь (2) для сплавов объясняется тем, что рост атомного порядка с понижением температуры приводит к возрастанию плотности упаковки, в то же время уменьшение межатомного расстояния благоприятствует дальнейшему упорядочению твердого раствора. Появление в сплаве дальнего порядка уменьшает степень отклонения потенциала, создаваемого решеткой, от периодичности, что снижает вероятность рассеяния [3].

На основе модельного  $s-d$  — обменного гамильтониана Вонсовского—Турова для металлических ферромагнетиков А.А. Юдиным [6,7] выражение (2) было последовательно получено в виде

$$\rho_{mag} = \text{const} |D|^2 (1 - \eta^2). \quad (3)$$

Несмотря на последовательность общего вывода (3), А.А. Юдиным при нахождении окончательного выражения использовано существенное упрощение, когда в качестве парамагнитной энергии  $s-d$  обменного взаимодействия  $D$  выбрана константа. Однако, согласно Зинеру [8], энергия  $s-d$  обменного взаимодействия зависит от температуры и возрастает в кристалле примерно в три раза вследствие увеличивающегося перекрытия волновых функций  $s$ - и  $d$ -электронов. Ранее мы показали [9,10], что магنونная составляющая электросопротивления ферромагнетиков, так же как и фононная составляющая, линейно связана с изобарной термической деформацией:

$$\rho_{mag} = \rho^* \beta T, \quad (4)$$

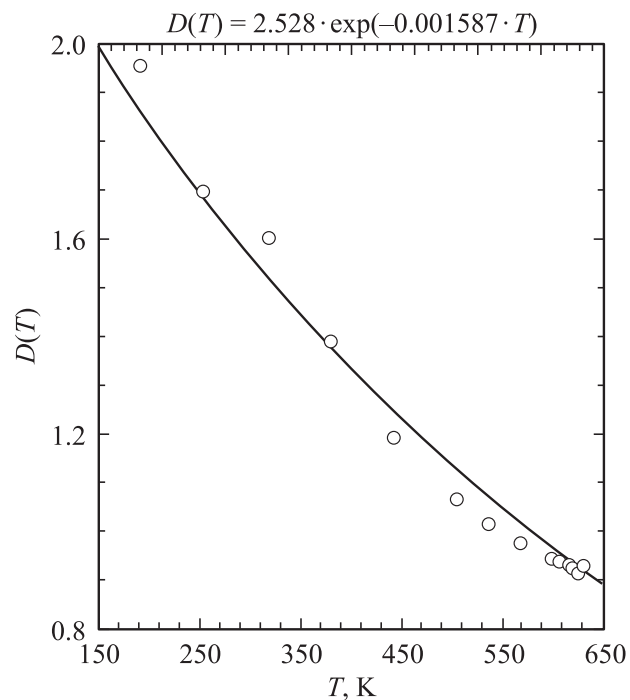
где  $\rho^*$  — характеристическое электросопротивление (для никеля, в частности,  $\rho^* = 6.1 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot m$ ). Если в (3) допустить, что парамагнитная энергия  $s-d$  обменного взаимодействия зависит от температуры, то из сведений, приведенных в [7,11], а также экспериментальных данных по  $\rho_{mag}$  (4) и спонтанной намагниченности [12], можно получить зависимость  $D$  от  $T$ . На рис. 1 представлена полученная таким образом зависимость  $D(T)$  от температуры, причем она хорошо аппроксимируется выражением

$$D(T) = D_0 \exp(-T/T_C). \quad (5)$$

Таким образом, из (5) имеем —  $D(T_C) = D_0/e$ , что согласуется с утверждением автора [8]. Согласно (3), (4) и (5), параметр порядка для ферромагнетиков можно определить по данным изобарной термической деформации:

$$\eta_\beta = \sqrt{1 - \frac{\beta T}{\beta_C T_C \exp[2(T_C - T)/T_C]}}. \quad (6)$$

На рис. 2 приведены зависимости параметра порядка от приведенной температуры для никеля, полученные по формуле (6) и по данным спонтанной намагниченности. Как видно, они хорошо согласуются. Из (6) следует, что параметр порядка зависит не только от  $\beta T$ , но и от соответствующего значения, учитывающего перекрытие волновых функций  $s$ - и  $d$ -электронов. Очевидно, что степень перекрытия волновых функций определяется также изменением объема с температурой и, в принципе, может быть выражена через  $\beta T$ , но аппроксимация в виде (5) удобна для соответствующих оценок. В отличие от ферромагнетиков,

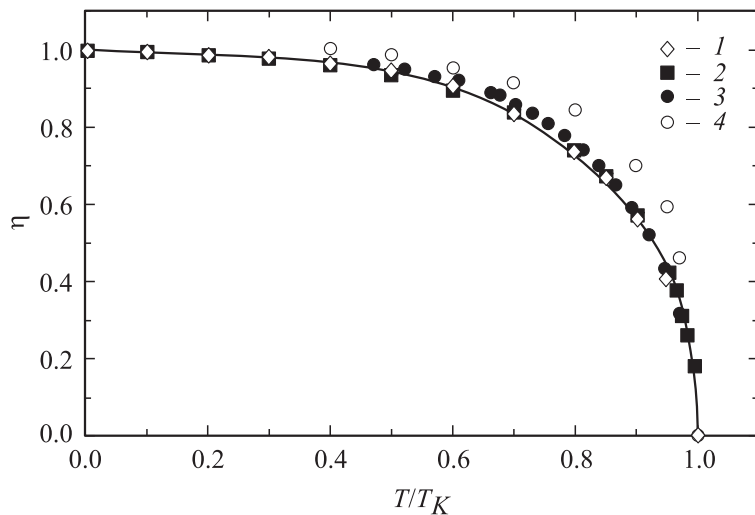


**Рис. 1.** Температурная зависимость энергии  $s-d$  обменного взаимодействия:  $\circ$  — значения, полученные из экспериментальных данных; линия — расчет по (5).

температурная зависимость  $\rho$  в упорядоченной фазе сплава определяется особенностями рассеяния электронов только акустическими фононами и его возрастанием при уменьшении порядка. Поэтому здесь следует ожидать более простую связь  $\eta$  с  $\beta T$ .

Исследования  $\rho$  и коэффициента теплового расширения бета-латуни состава 51%Cu + 49%Zn в интервале температур 300 ÷ 900 К, так же как и для чистого никеля [9], нами проводились на одном и том же образце, в одних и тех же условиях.

Корреляционный анализ наших экспериментальных данных по  $\rho$  и коэффициента теплового расширения бета-латуни приводит к сле-



**Рис. 2.** Зависимость параметра порядка от приведенной температуры для никеля: 1 — расчет по (6), линия — расчет по данным спонтанной намагниченности [8,9]; для бета-латуни: 2 — теория Кирквуда [3], 3 — расчет по (13), 4 — данные, полученные из анализа структуры [3].

дующим линейным уравнениям до и после температуры Курнакова ( $T_K = 740$  К):

$$\rho = 5.705 + 0.855 \cdot 10^{-6} \cdot \beta T, \quad r = 0.9994 \quad (300 \div 740 \text{ К}), \quad (7)$$

$$\rho = 24.697 - 2.320 \cdot 10^{-6} \cdot \beta T, \quad r = -0.9982 \quad (740 \div 930 \text{ К}), \quad (8)$$

$$\rho = 5.628 + 2.783 \cdot 10^{-6} \cdot \beta T, \quad r = 0.9986 \quad (930 \div 1000 \text{ К}). \quad (9)$$

Угловые коэффициенты в (7)–(9) представляют характеристические электросопротивления  $\rho^*$  в каждой из фаз. Уравнение (8) представляет корреляцию  $\rho$  с  $\beta T$  в области температур, где коэффициент теплового расширения падает сразу после  $T_K$ . В этой области для всех объектов зависимость  $\beta$  от  $T$  имеет особенность, связанную с постепенным (в некотором интервале температур) исчезновением остаточного ближнего порядка. Корреляционный анализ в этой области температур имеет смысл только при одновременном измерении рассматриваемых свойств

(как в нашем случае), поскольку сразу выше  $T_K$  состояние системы в различных экспериментах по определению  $\rho$  и  $\beta$  будет разное. Анализ значений  $\rho^*$  в каждой из фаз бета-латуни, а также  $\rho^*$  для чистых меди и цинка ( $\rho_{Cu}^* = 1.2 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot m$  и  $\rho_{Zn}^* = 2.16 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot m$ ) показывает, что в упорядоченной фазе

$$\rho_{dis}^* \approx \rho_{Cu}^* + \rho_{Zn}^* = 3.36 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot m. \quad (10)$$

Это согласуется с представлениями [4] о „последовательном“ включении соответствующих подрешеток при произвольном расположении атомов. В упорядоченной фазе

$$\rho_{ord}^* \approx \rho_{Cu}^* \cdot \rho_{Zn}^* / (\rho_{Cu}^* + \rho_{Zn}^*) = 0.77 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot m, \quad (11)$$

т. е. характеристическое электросопротивление примерно равно результирующему характеристическим сопротивлениям решеток меди и цинка при их как бы „параллельном“ включении, в полном соответствии с особенностями объемно-центрированной кубической структуры бета-латуни (атомные плоскости из меди и цинка образуют слоистую систему). Расхождение данных по  $\rho^*$ , полученных из (10) и (11), не превышает значений из (9) и (7) на 10 и 20% соответственно, что укладывается в коридор погрешностей определения и корреляционного анализа экспериментальных данных. Зависящий от температуры вклад в электросопротивление сплава ниже  $T_K$  описывается выражением

$$\rho_{ord} = 0.855 \cdot 10^{-6} \cdot \beta T. \quad (12)$$

Тогда из (2) и (12) следует, что параметр порядка в бета-латуни можно также определить через относительную изобарную термическую деформацию. На рис. 2 приведена температурная зависимость параметра порядка, рассчитанная по формуле

$$\eta_\beta = \sqrt{1 - \beta T / \beta_K T_K}, \quad (13)$$

где  $\beta_K$  — коэффициент теплового расширения при температуре  $T_K$ . Как видно, она совпадает с теоретической кривой [3]. Данные из экспериментов по анализу структуры для бета-латуни [3] ложатся выше всех приведенных на рисунке. В работе [2] обращается внимание на существование проблемы выбора частоты рентгеновского излучения при оценках упорядочения в случае бета-латуни, в связи с чем для

этого сплава переход порядок–беспорядок рекомендуется определять по данным электросопротивления.

Связь параметра порядка с термической деформацией имеет не только практическое значение, но и может быть использована как эффективный способ идентификации этого параметра для других объектов.

## Список литературы

- [1] *Уайт Р., Джебелл Т.* Дальний порядок в твердых телах. М., 1982. 447 с.
- [2] *Парсонидж Н., Стейвли Л.* Беспорядок в кристаллах. М., 1982. Ч. 1, 2. 434 с., 335 с.
- [3] *Кривоглаз М.А., Смирнов А.А.* Теория упорядочивающихся сплавов. М., 1958.
- [4] *Займан Дж.* Модели беспорядка. М., 1982. 591 с.
- [5] *Вонсовский С.В.* Магнетизм. М., 1871. 1032 с.
- [6] *Юдин А.А.* // Вестник московского ун-та. 1958. № 3. С. 81–92.
- [7] *Юдин А.А.* // Вестник московского ун-та. 1958. № 4. С. 89–95.
- [8] *Zener C.* // Phys. Rev. 1051. V. 81. P. 440–451.
- [9] *Мурлиева Ж.Х., Палчаев Д.К., Борзов Е.Д.* // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. В. 48. С. 48–53.
- [10] *Казбеков К.К., Мурлиева Ж.Х., Палчаев Д.К.* // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. В. 13. С. 19–25.
- [11] *Вонсовский С.В., Изюмов Ю.А.* // УФН. 1962. Т. 77. В. 3. С. 377–443.
- [12] *Шматко О.А., Усов Ю.В.* Электрические и магнитные свойства металлов и сплавов. Справочник. Киев, 1987. 582 с.