

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ КИСЛОРОДА НА КИНЕТИКУ ОКИСЛЕНИЯ МАГНЕТИКОВ ВБЛИЗИ ТОЧКИ КЮРИ

Ю. Н. Девятко, В. Н. Тронин, В. И. Троян

Проведен самосогласованный учет влияния взаимодействия адатомов на поверхности на вероятность выхода частицы из ямы (задача Крамерса). Показано, что вблизи точки Кюри взаимодействие между адатомами осуществляется через магнитную подсистему и носит дальнедействующий характер. Такое взаимодействие приводит к возникновению аномалий в частоте релаксации адатомов на поверхности, а следовательно, и в вероятности выхода частицы из потенциальной ямы. Проведено сравнение теоретических расчетов с результатами экспериментов по начальному окислению никеля.

При исследовании таких явлений, как сублимация Со [1, 2], десорбция водорода с поверхности Ni [3], начальный рост окисной пленки Fe [4] и Со [5], восстановление окисной пленки никеля [6], происходящих вблизи точки Кюри (Нееля) T_k магнетика, было установлено, что их скорость K не может быть описана законом Аррениуса ($K = K \exp(-E/T)$, K_0 — слабо зависящий от температуры T предэкспоненциальный множитель, E — энергия активации). В окрестности T_k были обнаружены аномалии в зависимости этих процессов от температуры $\ln k = f(T^{-1})$: наличие точки возврата при $T = \bar{T}_k$, существование минимума в парамагнитной области, различие в энергии активации по разные стороны от точки фазового перехода (ФП).

В теории активированных процессов (сублимация, десорбция, окисление), для которых характерен переход частицы из одного устойчивого состояния в другое, обычно используется модель случайных блужданий [7, 8]. Под этим следует понимать выход частицы из потенциальной ямы под действием случайных сил, обусловленных флуктуациями термостата.

Наблюдаемые экспериментально аномалии температурной зависимости скорости были объяснены в [9, 10] на примере начального роста пленки оксидов Fe [4] и Со [5] и сублимации Со [1]. В силу обменного взаимодействия рассматриваемых частиц лишь с окружающими атомами магнетика они оказываются вовлеченными в коллективные флуктуации спиновой подсистемы магнетика. С другой стороны, выход частиц из потенциальной ямы, который определяет скорость соответствующих активированных процессов, обусловлен действием случайных сил, связанных с флуктуациями магнетика. Таким образом, решаемая авторами [10] задача свелась к совместному описанию динамики флуктуаций спиновой подсистемы магнетика и неравновесного выхода частицы из ямы. Для вычисления вероятности выхода частицы из ямы в интервале температур, включающих точку Кюри, было получено квазиклассическое кинетическое уравнение для функции распределения типа Фоккера—Планка для имеющей место иерархии характерных времен задачи ($\tau_a \ll \tau_{сп} \ll \tau_p$, где τ_a — период движения частицы в потенциальной яме, $\tau_{сп}$ — время релаксации спиновой подсистемы магнетика, τ_p — время релаксации частиц по энергии). Показано, что вероятность выхода частицы из потен-

циальной ямы линейно зависит от частоты релаксации частиц по энергии, которая определяется динамическим коррелятором случайных сил, действующих на частицу, и экспоненциально зависит от высоты потенциального барьера Q .

Рассмотренная в [10] теория справедлива лишь при малых степенях заполнения поверхности θ , когда взаимодействием между адатомами можно пренебречь. Между тем при увеличении величины θ взаимодействие между адатомами играет существенную роль.

Цель настоящей работы — исследование влияния взаимодействия адатомов на аномалии в зависимости от скорости активированных процессов на поверхности магнетика в окрестности его точки Кюри.

1. Вероятность выхода из ямы взаимодействующих друг с другом адатомов

Активированные процессы на поверхности магнетика описываются обычно [10] уравнением типа Фоккера—Планка для одночастичной функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + F_0 \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \eta \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(mT \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{p}f \right), \quad (1)$$

где m — масса частицы, T — температура термостата, $F_0 = -\nabla U_0$, U_0 — потенциальная энергия взаимодействия адчастицы с термостатом.

Уравнение (1) получено в одночастичном приближении, когда взаимодействием адатомов можно пренебречь. Между тем наличие взаимодействия между адатомами может оказаться существенным при температурах, близких к температуре точки Кюри [11]. Учет этого взаимодействия в приближении самосогласованного поля приводит к появлению дополнительной силы F_1 , действующей на адчастицу со стороны других

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + (F_0 + F_1) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \eta \left(mT \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{p}f \right). \quad (2)$$

Здесь $F_1 = -\nabla \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f(\mathbf{r}', \mathbf{p}, t) d\mathbf{r}' d\mathbf{p}$, $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ — потенциал взаимодействия адчастиц друг с другом.

Наличие взаимодействия адатомов приводит к изменению потенциала взаимодействия адчастицы с термостатом и частоты релаксации частицы в яме η_1 .

Вычислим изменение потенциальной ямы, обусловленное влиянием других адатомов. Для этого получим равновесное стационарное решение уравнения (2)

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = n(\mathbf{r}) (2\pi mT)^{-3/2} e^{-\mathbf{p}^2/2mT}, \quad (3)$$

где

$$n(\mathbf{r}) = n_0 \exp \left[-\frac{U_0}{T} - \frac{1}{T} \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right]. \quad (4)$$

Выражение (4) определяет концентрацию частиц, находящихся в потенциальной яме $U_0(\mathbf{r})$ (7) с учетом их взаимодействия $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. В первом приближении по взаимодействию адатомов изменение взаимодействия частицы с термостатом, согласно (4), имеет вид

$$U = U_0 + \delta U, \quad \delta U = n_0 \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-U_0/T} d\mathbf{r}'. \quad (5)$$

Таким образом, учет взаимодействия адатомов приводит к изменению параметров потенциальной ямы, в которой находятся адатомы. Причем в рассматриваемом приближении эта зависимость линейна по степени заполнения n_0 .

Вычислим изменение частоты релаксации η_1 частицы в яме с учетом взаимодействия. Для этого изучим спектр уравнения (2), линеаризованного вблизи равновесной функции распределения (3). Из (2) имеем

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{r}} + \left(\delta F \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{p}} \right) = -\eta_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(mT \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{p} \chi \right),$$

$$\delta F = -\nabla \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \chi(\mathbf{r}', \mathbf{p}, t) d\mathbf{r}',$$

$$f(r, p, t) = f^{(0)} + \chi, \quad \chi \ll |f^{(0)}|. \quad (6)$$

Для определения спектра перейдем к Фурье-представлению для отклонения χ от равновесной функции распределения. Как будет отмечено ниже, основной вклад в частоту релаксации η_1 будут давать волновые векторы $\mathbf{k} \rightarrow 0$. В этом случае при $\mathbf{kR} \ll 1$ (\mathbf{R} — размер потенциальной ямы) плотность n в (3) можно считать не зависящей от \mathbf{r} . Тогда из (6) находим

$$i(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) \tilde{\chi} + \left(\delta F \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{p}} \right) = \eta_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(mT \frac{\partial \tilde{\chi}}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{p} \tilde{\chi} \right),$$

$$\tilde{\chi} = \int \chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) e^{i\omega t} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} dt,$$

$$\delta F(\mathbf{k}, \omega) = -i\mathbf{k}\varphi(\mathbf{k}) \int \tilde{\chi}(\mathbf{k}, \tilde{\mathbf{g}}, \omega) d\mathbf{g},$$

$$\varphi(\mathbf{k}) = \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (7)$$

Спектр, соответствующий этому уравнению, может быть найден из соотношения

$$1 + \tilde{U} \Delta(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\omega}) = 0, \quad (8)$$

величины \tilde{U} и $\Delta(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\omega})$ определены в Приложении. Отметим, что в отсутствие взаимодействия между атомами ($V=0$) спектр имеет вид

$$\omega_N^{(0)} = i(Dk^2 + \eta_1 N),$$

$$D = T/m\eta_1, \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (9)$$

Спектр (9) отвечает диффузионной релаксации распределения частиц к равновесию с коэффициентом диффузии D . В случае взаимодействующих атомов релаксационный спектр $\omega_N(\mathbf{k})$ вычислим при $N=0$. В этом случае для величины $\Delta(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\omega})$ находим [11]

$$\Delta(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\omega}) = \frac{1}{8} \frac{\tilde{k}^2 (2\pi)^{3/2}}{\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_0} e^{-\tilde{k}^2/8}. \quad (10)$$

Перейдя к размерным переменным из уравнения (8), получим

$$\omega(\mathbf{k}) = -iDk^2 \left[1 + \frac{n\varphi(\mathbf{k})}{T} e^{\frac{D}{3\eta_1 m T} k^2} \right]. \quad (11)$$

Первое слагаемое в (11) представляет собой обычную моду, отвечающую диффузионной релаксации к равновесию исследуемого распределения атомов. Второе слагаемое отвечает эволюции, зависящей от их взаимодействия. Вблизи точки Кюри для описания активированных процессов достаточно ограничиться случаем длинноволновых ($\mathbf{k} \rightarrow 0$) флуктуаций [12]. В этом случае из соотношения (11) находим, что

$$\omega(\mathbf{k} \rightarrow 0) = -i\tilde{D}k^2, \quad (12)$$

где

$$\bar{D} = D \left[1 + \frac{n\varphi(0)}{T} \right].$$

Используя соотношение (9) для частоты релаксации из (12), получим

$$\bar{\eta} = \eta \left[1 + \frac{n\varphi(0)}{T} \right]^{-1}. \quad (13)$$

Таким образом, учет влияния взаимодействия адатомов на активированные процессы сводится к решению задачи Крамерса [7] с параметрами потенциальной ямы \bar{U} и частотой релаксации адчастицы в яме $\bar{\eta}$, определяемыми согласно (5) и (13). Тогда вероятность выхода частицы из потенциальной ямы в приближении так называемого слабого трения ($\bar{\eta} < \omega(T/\bar{U}_0)$; ω — характерная частота движения частицы в яме) имеет вид [7]

$$P = \bar{\eta} \frac{\bar{U}_0}{T} e^{-\bar{U}/T}. \quad (14)$$

2. Взаимодействие атомов кислорода

Вычислим эффективное взаимодействие атомов кислорода вблизи T_k . Описание магнитного фазового перехода будем проводить в приближении Гинзбурга—Ландау. Взаимодействие атомов со спином s с магнетиком $\sigma(\mathbf{r})$ запишем в виде [13]

$$H_{\text{вз}} = -\lambda \int \sigma(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (15)$$

где $n(\mathbf{r})$ — плотность адатомов, λ — константа взаимодействия. Запишем полный гамильтониан рассматриваемой системы в виде

$$H = H_0 + H_1 + H_{\text{вз}}. \quad (16)$$

Здесь H_0 — гамильтониан Гинзбурга—Ландау, H_1 — энергия непосредственного взаимодействия адатомов друг с другом (без учета взаимодействия через магнетик). Статистическая сумма, соответствующая гамильтониану (16), представляется в виде функционального интеграла по полям σ и $n(\mathbf{r})$

$$Z = \int D\sigma Dn e^{-H/T}. \quad (17)$$

Интересуясь взаимодействием адатомов друг с другом, выполним интегрирование в (17) по спиновым переменным. Ограничиваясь при интегрировании в (17) гауссовым приближением, получим

$$H_{\text{эфф}} = H_0 + \int n(\mathbf{r}) V_{\text{эфф}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (18)$$

где

$$V_{\text{эфф}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{\lambda^2 S(S+1)}{T} K(\mathbf{r}, \mathbf{r}').$$

Корреляционная функция $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ в (18) для гамильтониана Гинзбурга—Ландау (H_0) имеет вид [14]

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \langle \sigma(\mathbf{r}) \sigma(\mathbf{r}') \rangle = T \int \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{a + ck^2} d\mathbf{k},$$

$$a = \alpha(T - T_k), \quad \alpha, c > 0. \quad (19)$$

Таким образом, из соотношений (18) и (19) видно, что вследствие взаимодействия адатомов через магнетик между ними возникает «косвенное» магнитное взаимодействие, носящее характер притяжения. При $T \rightarrow T_k$ это взаимодействие становится дальнедействующим, что приво-

дит к возникновению аномалий в поведении частоты релаксации активированных процессов $\tilde{\eta}$ вблизи T_k от температуры.

Подчеркнем, что вблизи точки Кюри определяющим является именно «косвенное» магнитное взаимодействие адатомов. В этом случае непосредственный расчет частоты релаксаций $\tilde{\eta}$ дает

$$\tilde{\eta} = \eta \left[1 - \frac{n_0}{2T} \frac{\lambda^2 S(S+1)}{\alpha(T-T_k)} \right]^{-1}. \quad (20)$$

Из соотношений (14) и (20) следует, что температурная зависимость вероятности выхода частицы из потенциальной ямы в условиях критического замедления магнетика определяется частотой релаксации $\tilde{\eta}$ и величиной потенциального барьера с учетом обменного взаимодействия между частицей и магнетиком. Вклад магнитного взаимодействия изолированной частицы с термостатом в частоту ее релаксации на спиновой подсистеме, описываемую в форме Ландау—Гинзбурга, вычислен в [10]

$$\eta = A |T - T_k|^{-\rho/2}, \quad (21)$$

где $\rho=3$ или 1 и определяется сохранением или несохранением спина магнетика, величина A положительна, определяется материалом магнетика, зависит от обменного взаимодействия ξ между твердым телом и частицей со спином и не имеет особенности вблизи T_k . В соответствии с (21) частота релаксации на спиновой подсистеме возрастает при приближении к T_k , что обусловлено, как следует из [10], возрастанием как амплитуды флуктуаций спиновой плотности, так и времени их жизни.

С учетом (21) частота релаксации $\tilde{\eta}$ частицы, взаимодействующей через спиновую подсистему с другой, имеет вид

$$\tilde{\eta} = A |T - T_k|^{-\rho/2-1} \left(1 \pm \frac{\beta\theta}{T - T_k} \right)^{-1}, \quad (22)$$

где $\beta > 0$, $\theta \sim n_0$ — степень заполнения поверхности адатомами. Знак «+», если $T > T_k$, и знак «-», если $T < T_k$.

Анализ (22) показывает, что с увеличением θ вблизи T_k , когда существенный вклад дает «косвенное» магнитное взаимодействие, происходят сдвиг точки Кюри и уширение области аномалий. Частота релаксации $\tilde{\eta}$ с увеличением θ уменьшается как $\tilde{\eta} \sim \theta^{-1}$. Вклад магнитного взаимодействия в величину потенциального барьера U_0 вычислен в [10] и равен

$$\tilde{U}_0 = U_0(\theta) + d[x(x-1)\vartheta(x-1)]^{1/2}, \quad (23)$$

где $x = T_k/T$; d зависит от свойств магнетика и величины. В соответствии с (5) глубина потенциальной ямы при $T > T_k$ ($x < 1$) есть

$$U_0(\theta) = U_0 + \delta U \simeq U_0 + \gamma\theta, \quad \gamma > 0, \quad \theta \sim n_0. \quad (24)$$

Таким образом, в результате взаимодействия адатомов происходит углубление потенциальной ямы и, следовательно, увеличивается энергия активации.

3. Сравнение теории с экспериментом

Экспериментальное исследование взаимодействия кислорода с поверхностью никеля проводилось на электронном спектрометре XSAM-800 с использованием рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) по методике, подробно описанной в [15]. Разрешение прибора с источником $K_\alpha \text{Mg}$ ($h\nu = 1253.6$ эВ) составляло 0.9 эВ. Образец представлял собой пластину поликристаллического никеля чистотой не хуже 99.95 %, с преимущественной ориентацией зерен (110) и очищался стандартным образом. Эксперименты проводились при давлении кислорода (чистота не хуже 99.95 %) $p = 10^{-6} \div 10^{-8}$ Тор в интервале температур поверхности

никеля 300—743 К, включающем точку Кюри никеля ($T_k=631$ К). Снимались фотоэлектронные спектры кислорода O_{1s} ($E_{cb}=530.5$ эВ) и никеля $Ni_{2p_{3/2}}$ ($E_{cb}=854.3$ эВ), интенсивности линий которых пропорциональны числу атомов кислорода и никеля, находящихся в составе оксида NiO. Кинетика образования оксида на поверхности Ni исследовалась с помощью измерения при фиксированной температуре зависимости интенсивности линии пика O_{1s} (530.5 эВ) от времени экспозиции поверхности Ni в кислороде. С ростом времени величина I стремится к предельному значению насыщения $I_{нас}$. Установлено, что при степени заполнения $\theta=0.5 \div 1$ ($\theta=I/I_{нас}$) с ростом температуры происходит уменьшение скорости образования оксидной фазы $K=(dI/dT)_T$.

На рис. 1 представлена зависимость величины K от температуры образца при степенях заполнения $\theta=0.25$ и 0.9 . При $\theta=0.25$ наблюдаются максимум вблизи T_k и минимум в ферромагнитной области. При увеличении θ до 0.9 указанные особенности исчезают и точка Кюри никеля уменьшается на $\Delta T \simeq 30$ К при переходе из ферромагнитной фазы в парамагнитную. Вдали от T_k в пределах ошибки опыта наблюдается экспоненциальная зависимость скорости образования оксидной фазы K от температуры с энергией активации $E_a (<0)$, различной по разные стороны от точки Кюри. Зависимости величины E_a от степени заполнения поверхности оксидной фазой в ферромагнитном и в парамагнитном состояниях магнетика представлены на рис. 2. Величина E_a увеличивается с ростом θ , разность энергий $\Delta E=E_a^f-E_a^p$ не зависит от величины θ и равна 0.22 эВ.

В соответствии с механизмом начального окисления, предложенным в [15], хемосорбированный атом кислорода, занимая вакансию в решетке никеля, переходит в промежуточное состояние (ПС) под первый слой атомов Ni, время жизни в котором определяется возможной диффузией кислорода в глубь образца с энергией активации диффузии $E_a \simeq 0.6$ эВ. За это время находящийся в ПС атом кислорода может приводить к выходу ближайшего к нему поверхностного атома никеля из состояния в узле решетки ($E_v \simeq 0.3$ эВ). Полученная таким образом вакансия заполняется атомом кислорода из ПС, а вышедший из узла решетки атом Ni связывается с оставшимся на поверхности атомом кислорода. Полученная в результате такого «обмена местами» структура соответствует структуре оксида никеля типа NaCl. Согласно этому механизму с учетом взаимодействия атомов кислорода между собой, скорость образования оксидной фазы представляется в виде

$$\ln K = \ln C + \ln \left[1 + A \frac{\xi^p}{T} \frac{1}{(T - T_k) \pm \beta \theta} \right] + \ln \frac{E_v}{T} - \frac{E_a}{T}. \quad (25)$$

Здесь $\xi \sim |T - T_k|^{-1/2}$ — корреляционная длина магнетика; $p=1$ или 3 для магнетика в несохраняющемся или сохраняющемся спином соответственно; A — константа, не зависящая от температуры. Энергия активации окисления в соответствии с предложенным механизмом и (23) есть

$$E_a = \bar{U}_0 = E_v - E_a = E_v^{(0)} - \gamma\theta + d[x(x-1)\vartheta(x-1)]^{1/2}. \quad (26)$$

Поскольку, как уже отмечалось, величины $E_a \simeq 0.6$, а $E_v \simeq 0.3$ эВ, то энергия активации $E_a \simeq -0.3$ эВ и близка к наблюдаемой в эксперименте величине E_a . Увеличение энергии активации E_a от степени заполнения θ (рис. 2) удовлетворительно описывается зависимостью (26) как в парамагнитной, так и ферромагнитной областях, что определяется одинаковостью изменения глубины потенциальной ямы, обусловленной взаимодействием атомов кислорода, в обоих случаях. При этом коэффициент пропорциональности в зависимости $E_a(\theta)$ оказался равным $\gamma \simeq \simeq 0.16$ эВ.

Сплошными линиями на рис. 1 представлена вычисленная по формуле (25) зависимость скорости окисления K от температуры при $\theta=0.25$ и 0.9 .

Расчетная зависимость совпадает в пределах ошибки опыта с экспериментальными данными. Максимум зависимости $\ln K = f(T^{-1})$ при $T \rightarrow T_k$ и минимум при $T < T_k$ обусловлены, согласно (14), (22) и (25), увеличением частот релаксации $\bar{\eta}$ атомов никеля и кислорода при приближении к точке Кюри, что вызвано возрастанием случайной силы, действующей на атом никеля и кислорода со стороны спиновой подсистемы.

Различные углы наклона прямых вдали от T_k зависимости $\ln K = f(T^{-1})$, как уже отмечалось, вызваны различием энергии активации при температурах, больших и меньших точки Кюри, обусловленным, согласно (26), влиянием обменного взаимодействия при $T \rightarrow T_k$. Наблюдаемый экспериментально сдвиг T_k на $\Delta T \approx 30$ К и уменьшение аномалий с увеличением θ от 0.25 до 0.9, как следует из (25), удалось объяснить

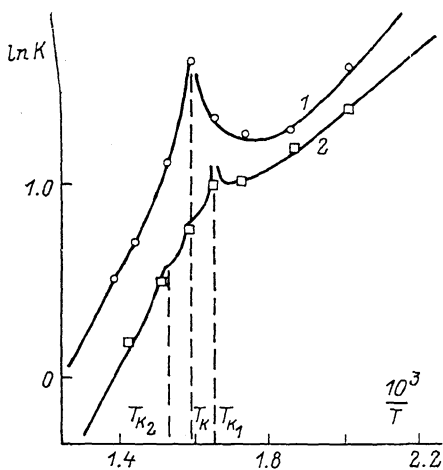


Рис. 1. Зависимость скорости окисления никеля от температуры.

Точки — эксперимент. 1 — $\theta = 0.25$, 2 — 0.9. Сплошные кривые построены согласно зависимостям (25).

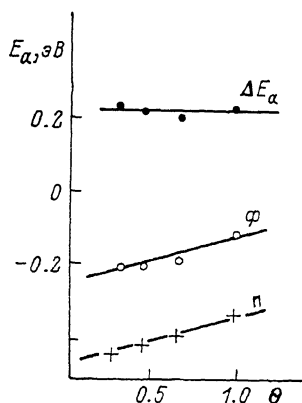


Рис. 2. Зависимость энергии активации окисления никеля E_a от степени заполнения поверхности кислородом θ .

Точки — эксперимент, сплошные линии соответствуют зависимостям (26).

возрастанием взаимодействия между атомами кислорода при увеличении степени заполнения θ . Из (25) следует, что вследствие взаимодействия атомов кислорода друг с другом через магнитную подсистему точка Кюри магнетика оказывается сдвинутой на $T_k \approx T_k \mp \beta\theta$ (при $T < T_k$ знак «-», а при $T > T_k$ знак «+»). Следовательно, существенным здесь является то, с какой стороны по температуре происходит переход через точку Кюри. Другими словами, в такой системе возможно явление гистерезиса.

На рис. 1 (кривая 2) представлена зависимость $\ln K = f(T^{-1})$ при $\theta = 0.9$ при увеличении температуры начиная с $T < T_k$. В этом случае изгиб в зависимости наблюдается при $T_{k1} < T_k$ и параметр β равен $\beta = 33$ К. В случае подхода к точке Кюри из парамагнитной области изгиб должен наблюдаться при $T_{k2} > T_k$. Наличие гистерезиса позволяет сделать вывод о том, что в приповерхностной области никеля, в которой растворены атомы кислорода, взаимодействующие между собой, возникает неустойчивость в фазовом переходе II рода, т. е. в такой магнитной подсистеме происходит фазовый переход первого рода, близкий ко второму.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Будем искать решение уравнения (7) в виде поправки к равновесному распределению Максвелла

$$\chi(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \omega) = e^{-\alpha p^2} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \omega), \quad (\text{II.1})$$

где постоянная α может быть найдена из условия равенства нулю интеграла столкновений в равновесном состоянии

$$\alpha = \eta/2Q, \quad Q = \eta mT. \quad (\text{П. 2})$$

Уравнение для функции ψ получается из уравнения (7) в результате подстановки (П. 1).

$$-i(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\psi(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \omega) + \delta\mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega)e^{-\alpha p^2} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{p}^2} Q\psi - \eta\mathbf{p} \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{p}},$$

$$\delta\mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) = -i\mathbf{k}U(\mathbf{k}) \int e^{-\alpha p^2} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \omega) d\mathbf{p}. \quad (\text{П. 3})$$

Перейдем к безразмерным переменным и введем обозначения

$$\mathbf{p} = \sqrt{\frac{2Q}{\eta}} \mathbf{g}, \quad \mathbf{k} = \frac{m\eta}{\alpha} \sqrt{\frac{\eta}{\alpha Q}} \tilde{\mathbf{k}}, \quad \tilde{\omega} = \frac{2\omega}{\eta}, \quad \tilde{U} = \frac{n}{2\pi^{3/2}T} U(\mathbf{k}). \quad (\text{П. 4})$$

Тогда вместо уравнения (П.3) получим

$$-i(\tilde{\omega} - \tilde{\mathbf{k}}\mathbf{g})\psi + iU(\mathbf{k})(\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{g}) \int e^{-g^2} \psi d\mathbf{g}_1 = \Delta_g \psi - 2\left(\mathbf{g} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{g}}\right), \quad (\text{П. 5})$$

где учтем явный вид равновесной функции распределения

$$f^{(0)} = \bar{n} \sqrt{\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^3} e^{-\alpha p^2} \equiv \bar{n} \left(\frac{\alpha}{\bar{n}}\right)^{3/2} e^{-g^2},$$

$$\bar{n} = \frac{1}{\Omega} \int n(\mathbf{r}) d\Omega. \quad (\text{П. 6})$$

Здесь \bar{n} — среднее число атомов кислорода на единицу поверхности.

Для получения решения уравнения (П. 5) рассмотрим вспомогательное уравнение

$$-i(\tilde{\omega} - \tilde{\mathbf{k}}\mathbf{g})\varphi = \Delta_g \varphi - 2\left(\mathbf{g} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{g}}\right), \quad (\text{П. 7})$$

отличающееся от уравнения (П. 5) отсутствием интегрального слагаемого. Заменой функции

$$\varphi = \exp\left(-i \frac{\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{g}}{2}\right) \psi \quad (\text{П. 8})$$

уравнение (П. 7) сводится к уравнению для полиномов Эрмита

$$\Delta_g \psi - 2\left(\mathbf{g} + \frac{i\tilde{\mathbf{k}}}{2}\right) \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{g}} + \left(i\tilde{\omega} - \frac{1}{4} \tilde{\mathbf{k}}\right) \psi = 0. \quad (\text{П. 9})$$

Собственные функции этого уравнения и собственные значения есть

$$\psi_\lambda = A H_{N_1}\left(g_x - \frac{i\tilde{k}_x}{2}\right) H_{N_2}\left(g_y + \frac{i\tilde{k}_y}{2}\right) H_{N_3}\left(g_z + \frac{i\tilde{k}_z}{2}\right),$$

$$i\omega_\lambda = \frac{\tilde{k}^2}{4} + 2(N_1 + N_2 + N_3), \quad \lambda = \{N_1, N_2, N_3\}. \quad (\text{П. 10})$$

Переход к размерным переменным позволяет получить уравнение для определения спектра

$$\omega_N = -i(Dk^2 + \eta N), \quad (\text{П. 11})$$

где $D = T/m\eta$. Нормируем функции φ_λ , определенные соотношением (П. 8)

$$\int \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{g}) \varphi_{\lambda_2}(\mathbf{g}) e^{-g^2} d\mathbf{g} = \delta_{\lambda_1 \lambda_2}. \quad (\text{П. 12})$$

В результате эти функции примут вид

$$\varphi_\lambda = \frac{\exp\left(\frac{\bar{k}^2}{8}\right) \exp\left(-\frac{i(\bar{k}g)}{2}\right) H_{N_1}\left(g_x + \frac{i\bar{k}_x}{2}\right) H_{N_2}\left(g_y + \frac{i\bar{k}_y}{2}\right) H_{N_3}\left(g_z + \frac{i\bar{k}_z}{2}\right)}{\pi^{3/4} \cdot 2^{N_1+N_2+N_3} N_1! N_2! N_3!}. \quad (\text{П. 13})$$

Разложим решение уравнения (П. 5) по полной системе функций

$$\psi = \sum_{\lambda} c_{\lambda} \varphi_{\lambda}. \quad (\text{П. 14})$$

Коэффициенты c_{λ} этого разложения удовлетворяют однородному уравнению

$$c_{\lambda} \left[\frac{\bar{\omega}_{\lambda} - \bar{\omega}}{\bar{U} J_2(\lambda)} + J_1(\lambda) \right] + \sum_{\lambda \neq \lambda_1} c_{\lambda} J_1(\lambda) = 0, \quad (\text{П. 15})$$

где

$$J_1(\lambda) = \int e^{-g^2} \varphi_{\lambda}(g) dg, \quad J_2(\lambda) = \int (\bar{k}g) e^{-g^2} dg. \quad (\text{П. 16})$$

Умножив уравнение (П. 15) на $e^{-g^2} \varphi_{\lambda}(g)$, проинтегрируем его по g и просуммируем по λ . Тогда, введя обозначение

$$\Delta(\bar{k}, \omega) = \sum_{\lambda} \frac{J_1(\lambda, \bar{k}, \omega) J_2(\lambda, \bar{k}, \omega)}{\bar{\omega}_{\lambda} - \bar{\omega}}, \quad (\text{П. 17})$$

получим уравнение для нахождения спектра

$$1 + \bar{U} \Delta(\bar{k}, \bar{\omega}) = 0. \quad (\text{П. 18})$$

Список литературы

- [1] Хандрос О. В., Боголюбов Н. А. // ФТТ. 1972. Т. 14. № 1. С. 18.
- [2] Sales B. C., Turner J. E., Maple M. B. // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 44. N 9. P. 586.
- [3] Shanabargen M. R. // Phys. Rev. Lett. 1979. V. 43. N 26. P. 1964.
- [4] Measor G. C., Afzulpurkar K. K. // Phil. Mag. 1964. V. 10. N 107. P. 817.
- [5] Chatterjee B. // Thin Sol. Films. 1977. V. 41. N 2. P. 227.
- [6] Delmon B., Roman A. // J. Chem. Soc. Far. Trans. 1973. V. 69. N 5. P. 941.
- [7] Kramers H. A. // Physica. 1940. V. 7. N 4. P. 284.
- [8] D'Agliano E. G., Kumar P., Schaich W., Suhl H. // Phys. N. Rev. B. 1975. V. 11. N 4. P. 2122.
- [9] Борман В. Д., Пивоваров А. Н., Троян В. И. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. № 8. С. 458.
- [10] Борман В. Д., Пивоваров А. Н., Троян В. И. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 6. С. 1796.
- [11] Девятко Ю. Н., Тронин В. Н., Троян В. И. // Преприят МИФИ. 1989. 002-89.
- [12] Ма Ш. Современная теория критических явлений. М.; Мир, 1980.
- [13] Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974.
- [14] Поташинский А. З., Покровский В. Л., Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982.
- [15] Борман В. Д., Гусев Е. П., Лебединский Ю. Ю., Попов А. П., Троян В. И. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 5. С. 1378.

Московский
инженерно-физический институт

Поступило в Редакцию
28 ноября 1990 г.