

01;05

Физический статистический анализ термодинамических свойств ферромагнетика с учетом МФВ (на примере никеля)

© В.Ю. Бодряков, А.Н. Башкатов

Уральский государственный технический университет — УПИ,
620002 Екатеринбург, Россия
e-mail: Bodryakov_VY@uzps.mh.ru

(Поступило в Редакцию 10 января 2006 г. В окончательной редакции 7 июня 2006 г.)

На примере статистического анализа термодинамических магнитных свойств ферромагнитного никеля с учетом магнитофононного взаимодействия (МФВ) магнитной подсистемы с кристаллической решеткой, а именно анализа температурных зависимостей термодинамических коэффициентов (коэффициентов Ландау) $\alpha(T)$ и $\beta(T)$, обратной начальной парамагнитной восприимчивости $\chi_0^{-1}(T)$, спонтанной намагниченности $M_s(T)$, намагниченности во внешнем поле $M(T, H)$, магнитной части молярной теплоемкости $C_m(T)$ ставится проблема разработки основ размерной (физической) статистики. Под размерной статистикой понимается статистический анализ различных по физической природе и размерности величин в рамках единых физических представлений с целью статистически оптимального описания одновременно всего комплекса изучаемых величин.

PACS: 05.10.-a, 75.30.-m

Введение

Имеется (см. работы [1–10] и ссылки в них) довольно представительный набор результатов исследований различных практически востребованных термодинамических свойств ферромагнитного Ni, часто рассматриваемого в качестве модельного ферромагнетика и составляющего наряду с другими 3d-ферромагнетиками основу всей современной прецизионной и качественной металлургии [11–13]. Однако убедительный и общепринятый подход к статистически обоснованному термодинамическому анализу его свойств в рамках единых модельных представлений, обеспечивающий количественно адекватное описание наблюдаемого комплекса свойств, выработан так и не был (см., в частности, работы [14–18] и др.). Ясно, что эти единые представления должны обеспечить одновременно описание сразу целого комплекса термодинамических функций ферромагнетика, в частности температурных и полевых зависимостей термодинамических коэффициентов Ландау $\alpha(T)$ и $\beta(T)$, обратной парамагнитной восприимчивости $\chi_0^{-1}(T)$, спонтанной намагниченности $M_s(T)$, намагниченности в поле $M(T, H)$, магнитной части молярной теплоемкости $C_m(T, H)$ и др. Очевидно, описание должно быть статистическим и учитывать то обстоятельство, что имеются экспериментальные данные авторов различной степени надежности, охватывающие различные диапазоны температур и полей, полученные на разных образцах. При проведении подобного статистического анализа потребуется, очевидно, варьирование некоторого числа параметров выбранной теоретической модели с целью достижения оптимального описания одновременно всего комплекса изучаемых функций, т.е. достижения минимального значения определенной величины, обобщенно характеризующей среднеквадратичные отклонения (СКО) экспериментальных значений от соответствующих расчетных

зависимостей. Принципиальная трудность реализации этой программы состоит в том, что нужно одновременно обеспечить наилучшее описание физически различных термодинамических функций, имеющих разные размерности, порядки величины и характер поведения. Нет нужды показывать, что налицо почти полная неразработанность данной проблематики [19] при всей ее бесспорной актуальности.

Настоящая работа на примере ферромагнитного (ФМ) никеля, выбранного в качестве модельного объекта, посвящена иллюстрации проблем, возникающих при проведении размерного статистического анализа термодинамических свойств магнетика, а также предложению возможных путей решения возникающих при этом затруднений. В качестве модели выбрана термодинамическая модель, обобщающая теорию фазовых переходов второго рода (ТФПВР) Ландау [20] учетом магнитофононного взаимодействия (МФВ) магнитной и фононной подсистем ферромагнетика. Основные физические результаты по Ni в рамках подхода уже неоднократно обсуждались ранее (см., в частности, работы [8–10] и др.). Мы же намерены сосредоточиться здесь именно на технической стороне вопроса, которая ранее подробно не обсуждалась.

1. Теория

1.1. Постановка проблемы и пути ее решения

Пусть в рамках некоторой физической модели, параметрами которой являются параметры x_1, x_2, \dots, x_n , может быть описан одновременно комплекс измеряемых физических свойств (термодинамических функций) $f_1(x_1, x_2, \dots, x_n)$, $f_2(x_1, x_2, \dots, x_n)$, \dots , $f_m(x_1, x_2, \dots, x_n)$. При этом следует учитывать, что

измерения функций f_1, f_2, \dots, f_m в общем случае проводятся в разное время, разными авторами, на образцах разной степени совершенства, с разной точностью. И все эти обстоятельства должны быть учтены при проведении статистического анализа экспериментальных данных в рамках модели.

Серьезных проблем бы не возникло, если бы функции f_1, f_2, \dots, f_m были безразмерны. В этом случае существующий развитый аппарат математической статистики (см., например, [19]) предписывает вполне конкретную программу действий. Вычисляются отклонения экспериментальных точек $f_1^{\text{exp}}, f_2^{\text{exp}}, \dots, f_m^{\text{exp}}$ от существующих расчетных значений $f_1^{\text{calc}}, f_2^{\text{calc}}, \dots, f_m^{\text{calc}}$: $\Delta f_1 = f_1^{\text{exp}} - f_1^{\text{calc}}$, $\Delta f_2 = f_2^{\text{exp}} - f_2^{\text{calc}}$, \dots , $\Delta f_m = f_m^{\text{exp}} - f_m^{\text{calc}}$. Далее по обычным правилам статистики вычисляются соответствующие среднеквадратичные отклонения S_1, S_2, \dots, S_m . Затем вычисляется „общее“ взвешенное СКО $S(x_1, x_2, \dots, x_n)$ по всему комплексу термодинамических функций, например:

$$S = [(p_1 S_1^2 + p_2 S_2^2 + \dots + p_m S_m^2) / (p_1 + p_2 + \dots + p_m)]^{1/2}. \quad (1)$$

Приписываемые веса p_1, p_2, \dots, p_m могут учитывать разную степень достоверности данных различных источников и разную степень „значимости“ данной конкретной функции $f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ ($i = 1, 2, \dots, m$) в наборе функций f_1, f_2, \dots, f_m . Например, функциям, которые могут быть непосредственно измерены, резонно приписать больший вес, чем тем, которые определяются косвенно. Возможны и альтернативные способы вычисления общего СКО, например, такой:

$$S = \max\{p_1 S_1, p_2 S_2, \dots, p_m S_m\}. \quad (2)$$

Модельные параметры x_1, x_2, \dots, x_n варьируются численно до достижения наименьшего взвешенного СКО S экспериментальных точек от расчетных кривых одновременно по всему комплексу безразмерных функций модели $f_1(x_1, x_2, \dots, x_n)$, $f_2(x_1, x_2, \dots, x_n)$, \dots , $f_m(x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Дело обстоит гораздо сложнее в реальной физической ситуации, когда физические функции f_1, f_2, \dots, f_m имеют различные физические размерности и значения и прямое сопоставление среднеквадратичных отклонений S_1, S_2, \dots, S_m невозможно.

Говоря о термодинамических свойствах реальных твердых тел, которые в первом приближении можно описать в рамках модели Дебая–Грюнейзена [20], укажем в качестве примера, что при комнатных температурах теплоемкость C составляет $\sim 25 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$; объемный коэффициент теплового расширения $\alpha \sim 50 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$; модуль всестороннего сжатия $K \sim 100 \cdot 10^9 \text{ Pa}$, плотность $\rho \sim 5 \cdot 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ и т.д. Добавив к этому списку свойства ферромагнетиков, описание которых можно произвести в рамках ТФПВР Ландау [20], укажем в качестве примера, что для Ni при комнатной температуре намагниченность M

составляет $\sim 50 \text{ A} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$; спонтанная объемная магнитострикция $\omega_s \sim -100 \cdot 10^{-6}$ и т.д. Вряд ли нужно доказывать, что традиционная статистическая математика [19] в этой ситуации оказывается совершенно неработоспособной.

Как представляется авторами, в данном случае следует действовать описанным ниже образом. Как и ранее, вычисляются отклонения экспериментальных точек $f_1^{\text{exp}}, f_2^{\text{exp}}, \dots, f_m^{\text{exp}}$ от соответствующих расчетных значений $f_1^{\text{calc}}, f_2^{\text{calc}}, \dots, f_m^{\text{calc}}$: $\Delta f_1 = f_1^{\text{exp}} - f_1^{\text{calc}}$, $\Delta f_2 = f_2^{\text{exp}} - f_2^{\text{calc}}$, \dots , $\Delta f_m = f_m^{\text{exp}} - f_m^{\text{calc}}$. Далее по обычным правилам математической статистики вычисляются соответствующие СКО S_1, S_2, \dots, S_m для каждой размерной физической функции f_1, f_2, \dots, f_m . СКО, найденные для каждой функции f_1, f_2, \dots, f_m , имеют, разумеется, размерности соответствующих функций. Затем, и это есть принципиальный шаг, отклоняющий развиваемый здесь подход от традиционной математической статистики, вычисляются приведенные СКО, нормированные на соответствующие характеристические (нормирующие) значения $f_1^{\text{norm}}, f_2^{\text{norm}}, \dots, f_m^{\text{norm}}$. Возможные нормирующие значения для некоторых термодинамических функций приведены выше. В результате получаем нормированные (приведенные) СКО $S_1^{\text{norm}} = S_1 / f_1^{\text{norm}}$, $S_2^{\text{norm}} = S_2 / f_2^{\text{norm}}$, \dots , $S_m^{\text{norm}} = S_m / f_m^{\text{norm}}$. Далее процедура определения оптимальных параметров модели x_1, x_2, \dots, x_n аналогична описанной ранее для безразмерных функций f_i .

По всему набору обезразмеренных СКО S_i^{norm} вычисляется „общее“ взвешенное СКО $S^{\text{norm}}(x_1, x_2, \dots, x_n)$:

$$S^{\text{norm}} = \max\{p_1 S_1^{\text{norm}}, p_2 S_2^{\text{norm}}, \dots, p_m S_m^{\text{norm}}\} \quad (3)$$

для всего комплекса размерных термодинамических функций f_1, f_2, \dots, f_m . Далее модельные параметры x_1, x_2, \dots, x_n варьируются численно до достижения наименьшего взвешенного „общего“ нормированного СКО S^{norm} экспериментальных точек от расчетных кривых одновременно по всему комплексу функций $f_1(x_1, x_2, \dots, x_n)$, $f_2(x_1, x_2, \dots, x_n)$, \dots , $f_m(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Основное предположение развиваемого подхода в этом случае состоит в том, что найденные путем минимизации S^{norm} оптимальные модельные параметры x_1, x_2, \dots, x_n будут также оптимальными и для исходных размерных исходных физических функций $f_1(x_1, x_2, \dots, x_n)$, $f_2(x_1, x_2, \dots, x_n)$, \dots , $f_m(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Это предположение правдоподобно, однако математически строгое доказательство его справедливости и общности требует серьезной работы специалистов в области математической статистики.

Итерационный счет в рамках описанной выше процедуры ведется до тех пор, пока относительное изменение величины S^{norm} в двух последовательных итерационных вычислительных шагах $k-1$ и k $\delta S^{\text{norm}} = (S^{\text{norm}[k]} - S^{\text{norm}[k-1]}) / S^{\text{norm}[k]}$ не станет меньше, например, величины $\varepsilon = 10^{-6}$. Полученные при этом значения параметров модели x_1, x_2, \dots, x_n можно считать наилучшими. Далее проиллюстрируем применение

развитого подхода, выполнив статистический анализ термодинамических функций реального физического объекта, в качестве которого выбран простой ферромагнетик — никель.

1.2. Анализ термодинамических функций ферромагнетика

Имея в виду цели настоящего исследования, мы не будем углубляться в тонкости термодинамического анализа магнитных свойств ферромагнетика и приведем лишь минимально необходимый объем теоретических фактов, используемых в дальнейшем. Эти факты известны; различные аспекты их конкретных приложений к термодинамическому анализу магнитных свойств практически важных ферромагнетиков уже обсуждались ранее [8–10].

В основе анализа термодинамических свойств ферромагнетика в окрестности точки Кюри T_C лежит выражение для магнитной части термодинамического потенциала (ТДП), представляющее собой разложение ТДП по степеням намагниченности M [20]. В системе СИ в расчете на один моль вещества это разложение (разложение Ландау) может быть записано в системе СИ (в $J \cdot mol^{-1}$) в виде

$$\Phi_m = \mu \left[1/2 \alpha M^2 + 1/4 \beta M^4 - \mu_0 H M \right], \quad (4)$$

где μ — молярная масса; $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}$ — магнитная постоянная.

Для являющихся в общем случае функциями температуры термодинамических коэффициентов α и β в традиционной интерпретации теории Ландау [20] считаются адекватными априорные представления

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha_0(T - T_C); & \alpha_0 &= \text{const} > 0; \\ \beta &= \beta_0 = \text{const} > 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Как, однако, было показано в [1,2,8,10], фактические температурные зависимости термодинамических коэффициентов $\alpha(T)$ и $\beta(T)$ могут существенно отличаться от (5) и в общем случае должны быть установлены из экспериментальных данных. Причины отклонения фактического хода зависимостей $\alpha(T)$ и $\beta(T)$ от постулируемых теорией Ландау можно видеть, в частности, во взаимодействии магнитной подсистемы ферромагнетика с кристаллической решеткой (см., например, [8–10,16,17,21] и др.). Следует учитывать также, что область применимости теории Ландау физически ограничена [22–25] как со стороны низких температур, так и в области, непосредственно примыкающей к точке Кюри. В области низких температур (ниже $\sim 0.3-0.4T_C$) следует применять спин-волновую теорию [2]. В самой непосредственной окрестности точки Кюри, в интервале приведенных температур $10^{-4} < |(T - T_C)/T_C| < 10^{-2}$, следует применять флуктуационную теорию фазовых переходов (теорию ренорм-групп) [20,22,24].

На практике выводы теории Ландау используются для первичного анализа хода кривых намагничивания ферромагнетика в виде уравнения магнитного состояния, являющегося результатом минимизации ТДП (4) по намагниченности (в условиях постоянства температуры, давления и магнитного поля):

$$\left(\frac{\partial \Phi_m}{\partial M} \right)_{TPH} = \alpha M + \beta M^3 - \mu_0 H = 0. \quad (6)$$

Аппроксимируя методом наименьших квадратов (МНК) „экспериментальные“ изотермы H/M от M^2 линейными зависимостями (зависимостями Белова–Арротта [1,2]):

$$\mu_0 H/M = \alpha + \beta M^2, \quad (7)$$

можно, в принципе, определить величину термодинамических коэффициентов $\alpha(T)$ и $\beta(T)$, спонтанную намагниченность $M_s(T) = (-\alpha/\beta)^{1/2}$, температуру Кюри T_C (по обращению в нуль M_s), намагниченность в поле $M(T, H)$ и др. Отметим, что построение изотерм Белова–Арротта не является обязательной процедурой, так как существует математически точное решение кубического уравнения (6) относительно намагниченности $M(T, H)$ [10,14,19].

Помимо намагниченности ферромагнетика $M(H, T)$ непосредственно может быть измерена также удельная магнитная восприимчивость $\chi(H, T)$. С учетом уравнения (6) выражение для удельной молярной магнитной восприимчивости ферромагнетика в системе СИ есть

$$\chi(H, T) = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_{TP} = \frac{\mu \mu_0}{\alpha + 3\beta M^2}. \quad (8)$$

На практике наиболее удобным и информативным оказывается измерение начальной парамагнитной восприимчивости

$$\chi_0(T) = \chi_0(H \rightarrow 0, T > T_C) = \frac{\mu \mu_0}{\alpha}. \quad (9)$$

Таким образом, температурная зависимость обратной начальной магнитной восприимчивости $\chi_0^{-1}(T)$ в парамагнитной области ферромагнетика непосредственно определяет ход температурной зависимости термодинамического коэффициента $\alpha(T)$ в области высоких температур.

Весьма информативными являются также измерения теплоемкости ферромагнетика. Для магнитной части молярной теплоемкости $C_m(T, H)$, которая может быть выделена по разности экспериментально измеренной величины полной теплоемкости $C(T, H)$ и экстраполированной из парамагнитной (ПМ) области дебаевской кривой $C_{\text{para}}(T)$: $C_m(T, H) = C(T, H) - C_{\text{para}}(T)$, в пределах применимости термодинамической теории в системе СИ можно записать

$$\begin{aligned} C_m = -T \left(\frac{\partial^2 \Phi_m}{\partial T^2} \right)_{PH} &= \mu T \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \alpha}{\partial T^2} \right)_{PH} M^2 \right. \\ &\left. - \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 \beta}{\partial T^2} \right)_{PH} M^4 + \frac{\xi}{2\beta} \left[\left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_{PH} + \left(\frac{\partial \beta}{\partial T} \right)_{PH} M^2 \right]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

Часто с вполне приемлемой для практики точностью в области применимости термодинамической теории ТФПВР для температурной зависимости „парамагнитной“ теплоемкости ферромагнетика можно принять $C_{\text{para}}(T) = 3R + \xi T$, где $R = 8.31441 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$; ξ — молярный коэффициент удельной теплоемкости (для никеля $\xi = 7.04 \text{ mJ} \cdot \text{K}^{-2} \cdot \text{mol}^{-1}$ [7]). В (10) для безразмерной функции — параметра $\xi(\alpha, \beta, M^2)$ — использовано обозначение

$$\xi = \frac{2\beta M^2}{\alpha + 3\beta M^2}. \quad (11)$$

Как легко убедиться, с учетом (6), в отсутствие внешнего магнитного поля $\xi = 1$ в ФМ-области и $\xi = 0$ в ПМ-области. Наложение поля приводит к сглаживанию ступенчатой температурной зависимости $\xi(T, H)$, которая изменяется от величины $\xi < 1$ при $T < T_C$ к $\xi \rightarrow 0$ при $T > T_C$.

Подводя итог вышесказанному, отметим, что изменяя термодинамические параметры модели (в данном случае это термодинамические коэффициенты Ландау a_0 и β_0), можно одновременно описать поведение непосредственно измеряемых термодинамических функций $\chi_0^{-1}(T)$, спонтанной намагниченности $M_s(T)$, намагниченности во внешнем поле $M(T, H)$, магнитной части молярной теплоемкости $C_m(T, H)$. К названному перечню функций можно добавить магнитную часть изменения энтальпии ферромагнетика

$$\Delta H_m = \Phi_m - T \left(\frac{\partial \Phi_m}{\partial T} \right)_{PH} = \mu \left\{ \frac{1}{2} \left[\alpha - T \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_{PH} \right] M^2 + \frac{1}{4} \left[\beta - T \left(\frac{\partial \beta}{\partial T} \right)_{PH} \right] M^4 - \mu_0 H M \right\}, \quad (12)$$

которую можно выделить, подобно выделению магнитной части теплоемкости, а также величину магнетокалорического эффекта (МКЭ):

$$\Delta T_{ad} = - \frac{\mu_0 T}{C(T, H)} \int_0^{\mu_0 H} \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_{PH} dH. \quad (13)$$

Известно, что модель Ландау в традиционном изложении даже для простого ферромагнетика дает лишь качественное описание поведения термодинамических функций, а в количественном отношении, к сожалению, весьма несовершенна. Вместе с тем известно, что учет МФВ магнитной подсистемы с кристаллической решеткой обеспечивает гораздо более реалистичное описание ферромагнетика, хотя и усложняет его [8–10,16,17]. Существуют, впрочем, также и альтернативные подходы [26].

В целом учет МФВ не изменяет принципиально логики изложенного выше подхода. С термодинамической точки зрения учет МФВ может быть сведен к учету магнитной зависимости температуры Дебая ($t = T - T_C$) [10,21]:

$$\theta_m(t, M^2) = 1/2\theta_{10}M^2 + 1/2\theta_{11}M^2t + 1/4\theta_{02}M^4, \quad (14)$$

что приводит к перенормировке магнитной части молярного ТДП, и вместо (5) температурные зависимости коэффициентов Ландау приобретают вид

$$\alpha(T) = \mu^{-1}[\Phi_{10}(T) - \Phi_{10}(T_C)] + [a_0 + \mu^{-1}\Phi_{11}(T)]t; \quad (15)$$

$$\beta = \beta_0 + \mu^{-1}\Phi_{20}(T). \quad (16)$$

В (15), (16) введены обозначения

$$\Phi_{ij} \approx 3R\theta_{ij} \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z_{\text{para}})}{z_{\text{para}}} \right], \quad (17)$$

где индексы (i, j) пробегает пары значений $(i, j) = \{(1, 0); (1, 1); (2, 0)\}$; $z_{\text{para}} = \theta_{\text{para}}/T$, а $\theta_{\text{para}} = \theta_{\text{para}}(T)$ — парамагнитная температура Дебая. Коэффициенты θ_{ij} резонно интерпретировать как коэффициенты (параметры) МФВ.

С учетом МФВ, изменяя термодинамические параметры модели (помимо термодинамических коэффициентов Ландау a_0 и β_0 , это также коэффициенты МФВ θ_{10} , θ_{11} и θ_{20}), можно одновременно, и притом вполне реалистично, описать поведение $\chi_0^{-1}(T)$, $M_s(T)$, $M(T, H)$, $C_m(T, H)$, $\Delta H_m(T, H)$, $\Delta T_{ad}(T, H)$ и др.

2. Результаты и обсуждение

В соответствии с развитым выше теоретическим подходом в качестве свободных величин варьировались термодинамические коэффициенты $x_i = \{a_0, \beta_0, \theta_{10}, \theta_{11}, \theta_{20}\}$ $i = 1, 2, \dots, 5$ до достижения наименьшего приведенного взвешенного СКО, найденного по формуле (3) по всему комплексу проанализированных термодинамических функций никеля. А именно температурных зависимостей термодинамических функций $f_1(x_i) = \alpha(T)$; $f_2(x_i) = \beta(T)$; $f_3(x_i) = M_s(T)$; $f_4(x_i) = M(T, \mu_0 H = 0.8T)$; $f_5(x_i) = M(T, \mu_0 H = 1.2T)$; $f_6(x_i) = M(T, \mu_0 H = 1.8T)$; $f_7(x_i) = \chi_0^{-1}(T)$; $f_8(x_i) = C_m(T)$ ферромагнетика. Некоторые результаты расчетов в сопоставлении с экспериментальными (справочными) данными представлены на рис. 1–5, табл. 1 и 2. Точка Кюри никеля принята равной $T_C = 630 \text{ K}$ [5,6].

Табличные данные по температурной зависимости спонтанной (в отсутствие поля) намагниченности $M_s(T)$ [7] (рис. 1), намагниченности в магнитном поле [5] (рис. 2) хорошо описываются расчетными кривыми с учетом МФВ (сплошные линии). В то же время традиционный расчет по Ландау (без учета МФВ) является неприемлемо грубым приближением.

Экспериментальные данные [7] по обратной начальной молярной парамагнитной восприимчивости в весьма широком температурном диапазоне от точки Кюри до $\sim 1400 \text{ K}$ хорошо описываются с учетом МФВ расчетной термодинамической кривой $\chi_0^{-1}(T)$ (рис. 3). Следует отметить нелинейность, а именно отрицательную кривизну, экспериментальной и расчетной зависимостей $\chi_0^{-1}(T)$, интерпретируемую нами как отражение МФВ.

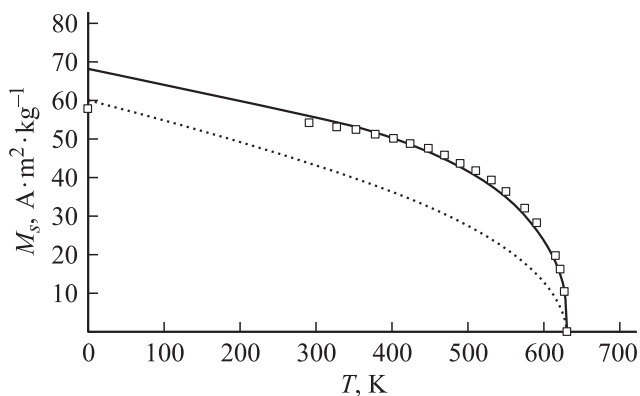


Рис. 1. Температурная зависимость спонтанной намагниченности никеля $M_s(T)$. \square — табличные значения [7]; сплошная кривая — термодинамический расчет в рамках модели; пунктир — расчет по Ландау.

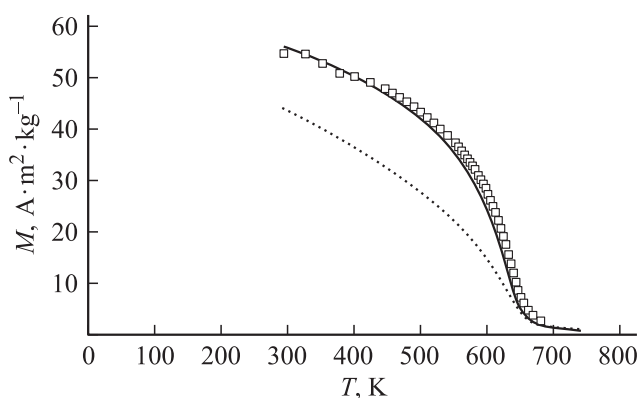


Рис. 2. Температурная зависимость намагниченности никеля $M(T, H)$ в магнитном поле $\mu_0 H = 1.8T$. \square — табличные значения [5].

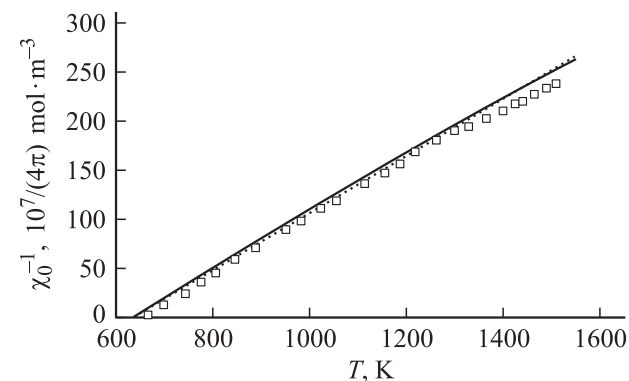


Рис. 3. Температурная зависимость обратной парамагнитной восприимчивости никеля $\chi_0^{-1}(T)$. \square — табличные значения [7].

Формально расчетная пунктирная прямая Кюри–Вейсса (расчет по Ландау) также дает неплохое количественное описание данных $\chi_0^{-1}(T)$. Однако, как видно из рис. 4, представляющего температурные зависимости

разностей $\Delta(\chi_0^{-1}(T))$ между табличными значениями $\chi_0^{-1}(T)$ [7] и расчетом в рамках развитой модели и прямой Кюри–Вейсса, именно учет МФВ позволяет дать качественно верное описание данных [7] с учетом наблюдающегося отклонения $\chi_0^{-1}(T)$ от линейности.

Наконец, экспериментальные данные по температурной зависимости спонтанной магнитной части молярной теплоемкости находятся в хорошем согласии со сплошной расчетной кривой $C_m(T)$ (рис. 5) в диапазоне от ~ 200 К почти до точки Кюри. Пунктиром здесь же показана расчетная зависимость $C_m(T)$, найденная, согласно традиционным представлениям теории Ландау, для термодинамических коэффициентов (5). Как известно, ландауская магнитная часть теплоемкости является линейной функцией температуры в ФМ-области ферромагнетика. Очевидно, это ни в какой степени не соответствует фактически наблюдаемой зависимости $C_m(T)$ для никеля. Как уже отмечалось, низкотемпературные (ниже ~ 200 К) расхождения экспериментальных данных по магнитной части молярной теплоемкости Ni с нашим

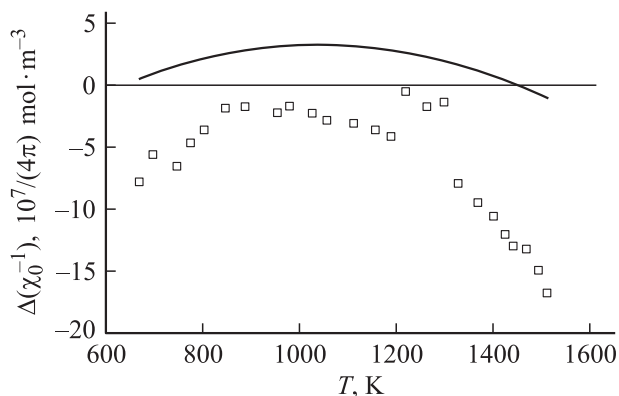


Рис. 4. Температурные зависимости разностей $\Delta(\chi_0^{-1}(T))$ между табличными значениями и прямой Кюри–Вейсса (\square) и между расчетной кривой в рамках модели и прямой Кюри–Вейсса (сплошная линия).

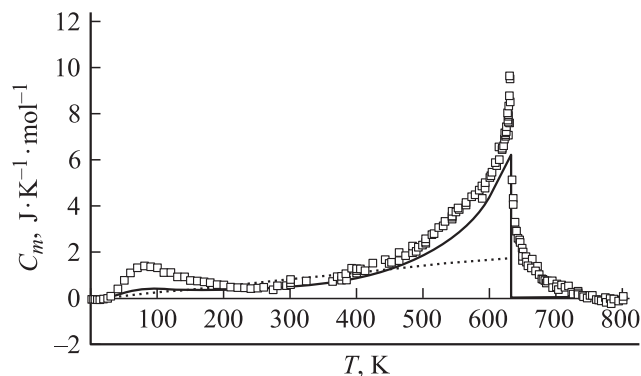


Рис. 5. Температурная зависимость магнитной части теплоемкости никеля $C_m(T)$. \square — табличные значения [1,2,4–10]; сплошная линия — термодинамический расчет в рамках модели; пунктир — расчет по Ландау.

Таблица 1. Описываемые функции модели f_i , нормирующие константы f_i^{norm} , весовые множители p_i и среднеквадратичные отклонения S_i экспериментальных значений f_i^{exp} от расчетных зависимостей f_i^{calc} для никеля

f_i	Размерность $f_i, f_i^{\text{norm}}, S_i$	Нормировка f_i^{norm}	Вес p_i	СКО S_i
$\alpha(T)$	unit SI $_{\alpha}$	$a_0 T_C$	0.5	0.522
$\beta(T)$	unit SI $_{\beta}$	β_0	0.1	$0.571 \cdot 10^{-3}$
$M_s(T)$	$\text{A} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$	$M_s(0)$	1	1.71
$M(T, \mu_0 H = 0.8T)$	$\text{A} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$	$M_s(0)$	0.9	2.26
$M(T, \mu_0 H = 1.2T)$	$\text{A} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$	$M_s(0)$	0.8	2.45
$M(T, \mu_0 H = 1.8T)$	$\text{A} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$	$M_s(0)$	0.7	2.63
$\chi_0^{-1}(T)$	$\frac{10^7}{4\pi} \text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$	$\mu^{-1} a_0 T_C$	1000	8.84
$C_m(T)$	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$	$3R$	4	0.587

Таблица 2. Расчетные значения ($\pm 5\%$) термодинамических параметров модели для никеля

Модельный параметр x_i	Размерность	Значение x_i
a_0	unit SI $_a$	$16.89 \cdot 10^{-3}$
β_0	unit SI $_{\beta}$	$2.93 \cdot 10^{-3}$
θ_{10}	unit SI $_{\theta_{10}}$	$1.65 \cdot 10^{-3}$
θ_{11}	unit SI $_{\theta_{11}}$	$-1.12 \cdot 10^{-6}$
θ_{20}	unit SI $_{\theta_{20}}$	$-3.04 \cdot 10^{-6}$

расчетом требуют привлечения спин-волновых представлений и не могут быть описаны в рамках развитого термодинамического подхода.

Заключение

В заключение сформулируем основные итоги работы. Предложен подход к построению размерной (физической) статистики, предназначенной для статистического анализа и описания одновременно целого комплекса различных физических характеристик (функций) изучаемого объекта в рамках общих модельных представлений. Перспективность подхода проиллюстрирована статистическим анализом комплекса термодинамических функций ферромагнитного никеля с учетом влияния МФВ, а именно анализом температурных зависимостей термодинамических коэффициентов Ландау $\alpha(T)$ и $\beta(T)$, спонтанной намагниченности $M_s(T)$ и намагниченности в магнитном поле $M(T, H)$, обратной начальной парамагнитной восприимчивости $\chi_0^{-1}(T)$ и магнитной части молярной теплоемкости $C_m(T)$. Предложенный в работе подход к комплексному размерному статистическому анализу параметров (функций), отражающих физическое состояние объекта, в их взаимосвязи, может быть с успехом применен при решении других подобных задач.

Список литературы

- [1] Белов К.П. Магнитные превращения. М.: ГИФМЛ, 1959. 259 с.
- [2] Вонсовский С.В. Магнетизм. М.: Наука, 1971. 1032 с.
- [3] Crangle J., Goodman G.M. // Proc. Roy. Soc. London. 1971. Vol. A321. N 1547. P. 477–491.
- [4] Новицкий Л.А., Кожевников И.Г. Теплофизические свойства металлов при низких температурах. Справ. изд. М.: Машиностроение, 1975. 216 с.
- [5] Таблицы физических величин. Справ. изд. / Под ред. И.К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1006 с.
- [6] Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Справ. изд. М.: Металлургия, 1989. 384 с.
- [7] Физические величины. Справ. изд. / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
- [8] Бодряков В.Ю., Повзнер А.А. Самосогласованная термодинамическая модель кристаллической решетки твердого тела. Ч. 3. Ферромагнитные металлы. Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ–УПИ, 2004. 277 с.
- [9] Бодряков В.Ю., Повзнер А.А., Сафонов И.В. // ФММ. 2005. Т. 100. № 1. С. 4–12.
- [10] Бодряков В.Ю. Комплексное исследование влияния решеточного магнитного ангармонизма на термодинамические свойства твердых тел / Автореф. докт. дисс. Екатеринбург: УГТУ–УПИ, 2005. 500 с.
- [11] Прецизионные сплавы. Справ. изд. / Под ред. Б.В. Молотилова. М.: Металлургия, 1983. 439 с.
- [12] Захаров А.И. Физика прецизионных сплавов с особыми тепловыми свойствами. М.: Металлургия, 1986. 239 с.
- [13] Молотилов Б.В., Маторин В.И. // Сталь. 2004. № 8. С. 92–94.
- [14] Вакс В.Г., Ларкин А.И., Пикин С.А. // ЖЭТФ. 1967. Т. 53. № 1 (7). С. 281–299.
- [15] Hubbard J. // J. Appl. Phys. 1981. Vol. 52. N 3. P. 1654–1657.
- [16] Валиев Э.З. // УФН. 1991. Т. 161. № 8. С. 87–128.
- [17] Зверев В.М., Силин В.П. // Письма в ЖЭТФ. 1996. Т. 64. № 1. С. 33–37.
- [18] Weimert B., Fritsche L. // J. Appl. Phys. 1997. Vol. 81. N 8. P. 3865.
- [19] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. Определения, теоремы, формулы. М.: Наука, 1970. 720 с.
- [20] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. I. 4-е изд., испр. М.: Наука, 1995. 608 с.
- [21] Бодряков В.Ю., Повзнер А.А., Сафонов И.В. // ТВТ. 2005. Т. 43. № 3. С. 396–400.
- [22] Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. М.: Мир, 1973. 254 с.
- [23] Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975. 528 с.
- [24] Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1975. 256 с.
- [25] Абрикосов А.А. Основы теории металлов. М.: Наука, 1987. 520 с.
- [26] Бодряков В.Ю., Башкатов А.Н. // Металлы. 2005. № 5. С. 99–109.