

01;05

Инварное и коварное поведение ферромагнетиков с магнитофононным взаимодействием: термодинамическое моделирование

© В.Ю. Бодряков

e-mail: matan@uspu.ru

(Поступило в Редакцию 11 ноября 2006 г. В окончательной редакции 11 мая 2007 г.)

На основе теории фазовых переходов второго рода Ландау, дополненной учетом магнитофононного взаимодействия (МФВ) магнитной подсистемы с кристаллической решеткой, построена последовательная термодинамическая модель инварного и коварного поведения ферромагнетиков с МФВ. В реальном масштабе температур проведены термодинамические модельные расчеты показавшие, что реализация в ферромагнетиках инварного (коварного) поведения является продуктом определенного оптимального соотношения термодинамических параметров, характеризующих ферромагнитную фазу. Подтверждена принципиально важная роль МФВ в формировании инварного и коварного эффектов. Предсказано существование ферромагнетиков при надлежащем соотношении термодинамических параметров, имеющих инварное поведение теплового расширения в гораздо более широком температурном диапазоне, чем для известных инваров.

PACS: 75.40.Cx, 75.40.Mg, 75.20.-y

Введение

Настоящая работа является прямым продолжением и развитием идей, заложенных в предыдущей работе [1], посвященной рассмотрению вопроса о возможности реализации инварного (коварного) поведения простых ферромагнетиков, которые могут быть описаны в традиционных рамках теории фазовых переходов второго рода (ТФПВР) Ландау [2]. В работе [1] было показано, что, с одной стороны, инварный (коварный) эффекты могут быть качественно поняты даже в простом приближении Ландау; с другой — налицо принципиальная ограниченность традиционной ТФПВР по Ландау, не учитывающей магнитофононное взаимодействие (МФВ) магнитной подсистемы с кристаллической решеткой ферромагнетика. Модельные расчеты [1] показали, что в инварах велики барические производные термодинамических параметров и, прежде всего, температуры Кюри, велика объемная магнитострикция и др. Это, по сути, эквивалентно признанию значительной величины МФВ в инварах и необходимости явного учета МФВ при построении последовательной модели инварного поведения ферромагнетиков. Уместно указать, что хотя ранее проблема учета МФВ в ферромагнетиках неоднократно рассматривалась разными авторами в рамках различных модельных представлений (см., например, работы [3–15]), „выйти“ на полноценный, количественно точный, расчет кривых температурных зависимостей коэффициента теплового расширения инварных, тем более коварных, ферромагнетиков так и не удалось.

Далее в работе, как и в [1], для краткости используется более общее понятие „ковар“ (коэффициент теплового расширения в климатическом диапазоне температур ΔT_{clim} близок к постоянной, не обязательно нулевой, величине); при необходимости проводится конкретиза-

ция результатов для инваров (коэффициент расширения в диапазоне ΔT_{clim} близок к нулю). В настоящей работе показано, что коварное поведение ферромагнетиков является, по сути, результатом определенного оптимального соотношения их термодинамических параметров. Основы этого явления могут быть последовательно рассмотрены и поняты в рамках феноменологического подхода Ландау, но с явным учетом магнитофононного взаимодействия магнитной подсистемы с кристаллической решеткой ферромагнетика, находящего свое отражение в появлении явной зависимости температуры Дебая θ ферромагнетика от намагниченности M [16,17].

1. Теория

Впишем основные термодинамические соотношения, необходимые при проведении модельных расчетов для коварного ферромагнетика с учетом МФВ. Частично проведенные ниже термодинамические расчеты в целях связности изложения повторяют сделанные в работе [1]. Для того чтобы модельные расчеты были реалистичными, необходимо, как и в [1], помимо вычисления целевой величины, в данном случае объемного коэффициента теплового расширения (ОКТР) $\alpha(T)$, контролировать также и другие сопряженные измеряемые теплофизические величины, определяемые в рамках тех же термодинамических представлений, что и $\alpha(T)$. Такими величинами могут быть, в частности, удельная намагниченность $M(T, H)$, объемная магнитострикция $\omega(T, H)$, магнитострикционная восприимчивость $h(T, H)$ и др.

1.1. Температура Дебая и термодинамический потенциал ферромагнетика с учетом МФВ

Используемый далее для построения системы термодинамических соотношений, описывающих коварные свойства ферромагнетика с МФВ, полный молярный термодинамический потенциал (ТДП) в функции температуры T , давления P и магнитного поля $\mu_0 H$ в дифференциальном виде имеет традиционный вид [2]:

$$d\Phi = -SdT + VdP - \mu\mu_0 M dH, \quad (1)$$

где S — молярная энтропия, V — молярный объем, μ — молярная масса; $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}$ — магнитная постоянная, M — удельная намагниченность.

Пренебрежем несущественным с точки зрения целей настоящей работы тепловым ангармонизмом фононов, приводящим к температурной зависимости температуры Дебая ферромагнетика в парамагнитной (ПМ) области $\theta_{\text{para}}(T)$, и в ПМ-диапазоне положим $\theta = \theta_{\text{para}} \approx \theta_0$; $\theta_0(P)$ не зависит от температуры, но является функцией давления. Вместе с тем при последовательном построении самосогласованной термодинамической модели ферромагнетика неизбежно появляется магнитная зависимость его температуры Дебая в ферромагнитной (ФМ) области как отражение и следствие МФВ [16–18].

Зависимость $\theta(T, H)$ нельзя не учитывать при рассмотрении коварных ферромагнетиков. В итоге принято следующее выражение для температуры Дебая в ФМ области:

$$\theta = \theta_{\text{para}} + \theta_m \approx \theta_0 + \frac{1}{2} \theta_{10} M^2 + \frac{1}{2} \theta_{11} M^2 t + \frac{1}{4} \theta_{20} M^4. \quad (2)$$

В (2) $\theta_{ij}(P)$ — коэффициенты МФВ, $(i, j) = (1, 0), (1, 1), (2, 0)$; $t = T - T_C$ — температурное расстояние до точки Кюри $T_C(P)$. Обычно даже в случае сильного влияния МФВ с приемлемой для практических целей точностью выполняется условие $\theta_m \ll \theta_{\text{para}}$.

Перенормированный с учетом МФВ молярный ТДП ферромагнетика Φ в интегральном виде может быть представлен как сумма постоянной (не зависящей от T) части Φ_0 , решеточной (фононной) Φ_p , электронной Φ_e и магнитной частей Φ_m . Последняя содержит в себе как обменный магнитный (ландауский) вклад, так и вклад, отвечающий МФВ (см., например, [16–18]):

$$\Phi = \Phi_0 + \Phi_p + \Phi_e + \Phi_m = \Phi_{\text{para}} + \Phi_m. \quad (3)$$

Выражения для Φ_p и Φ_e имеют обычный вид [2] и далее не обсуждаются. Перенормированная МФВ магнитная часть ТДП Φ_m может быть представлена в виде, аналогичном обменному ТДП ландауского ферромагнетика [2]

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

но с перенормированными термодинамическими коэффициентами [16–18]:

$$\alpha = \mu^{-1} [\Phi_{10}(T) - \Phi_{10}(T_C)] + [a_0 + \mu^{-1} \Phi_{11}(T)] t, \quad (5)$$

$$\beta = \beta_0 + \mu^{-1} \Phi_{20}(T). \quad (6)$$

В (5), (6) a_0, β_0 — обменные термодинамические коэффициенты Ландау [2]. Коэффициенты Φ_{ij} , описывающие вклад МФВ в Φ_m , приближенно равны

$$\Phi_{ij} = 3R\theta_{ij} \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z_{\text{para}})}{z_{\text{para}}} \right], \quad (7)$$

где $z_{\text{para}} = \theta_{\text{para}}/T$, $D(z)$ — табулированная функция Дебая [2]. Величины Φ_{ij} являются функциями давления вследствие барических зависимостей θ_{ij} и θ_{para} . МФВ способно заметно трансформировать ход температурных зависимостей коэффициентов $\alpha(T)$ и $\beta(T)$, а вслед за ними — всех термодинамических функций ферромагнетика. Выражения для температурных, барических и смешанных температурно-барических термодинамических производных величин $\Phi_{ij}(T, P)$, $\alpha(T, P)$ и $\beta(T, P)$, необходимые далее, приведены в Приложении.

1.2. Первые термодинамические производные

В рамках ТФПВР [2] уравнение магнитного состояния ферромагнетика с МФВ получается путем минимизации полной магнитной части ТДП с учетом МФВ

$$\left(\frac{\partial \Phi_m}{\partial M} \right)_{TPH} = 0 = \mu [\alpha M + \beta M^3 - \mu_0 H M], \quad (8)$$

т. е. формально сохраняет тот же вид, что и в отсутствие МФВ, но содержит перенормированные термодинамические коэффициенты α и β . Так, для спонтанной намагниченности теперь имеем (см., например, [17–19]):

$$M_s^2 = -\frac{\alpha}{\beta} = -\frac{[\Phi_{10}(T) - \Phi_{10}(T_C)] + [\mu a_0 + \Phi_{11}(T)] t}{\mu \beta_0 + \Phi_{20}(T)}. \quad (9)$$

Для сравнения, по Ландау,

$$M_{sL}^2 = \frac{-a_0 t}{\beta_0}.$$

Парамагнитный ход молярного объема ферромагнетика

$$V_{\text{para}}(T) = \left(\frac{\partial \Phi_{\text{para}}}{\partial P} \right)_T$$

определяется обычным соотношением (ξ — молярный коэффициент электронной теплоемкости) [17]

$$\begin{aligned} V_{\text{para}} &= V_0 + V_p + V_e \\ &= V_0 + 3R \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z_{\text{para}})}{z_{\text{para}}} \right] \left(\frac{\partial \theta_{\text{para}}}{\partial P} \right)_T - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \xi}{\partial P} \right)_T T^2. \end{aligned} \quad (10)$$

Для магнитной части

$$V_m(T, H) = \left(\frac{\partial \Phi_m}{\partial P} \right)_{TH}$$

молярного объема ферромагнетика имеем [17]

$$V_m = \mu \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial P} \right)_{TH} M^2 + \frac{1}{4} \left(\frac{\partial \beta}{\partial P} \right)_{TH} M^4 \right]. \quad (11)$$

Поведение $V_m(T, H)$ определяется не только термодинамическими обменными параметрами ТФПВР Ландау a_0, β_0, T_C и их производными, но и параметрами МФВ θ_{ij} и их термодинамическими производными (см. Приложение). Выражение для полного молярного объема ферромагнетика с МФВ есть

$$V = V_{\text{para}} + V_m. \quad (12)$$

Заметим, что выражения (10)–(12) позволяют дополнительно вычислить плотность вещества $\rho = \mu/V$, а также объемную магнитострикцию

$$\omega = \frac{V_m}{V}. \quad (13)$$

1.3. Вторые термодинамические производные

Ход ОКТР ферромагнетика

$$o_{\text{para}}(T) = V^{-1} \left(\frac{\partial V_{\text{para}}}{\partial P} \right)_T = V^{-1} \left(\frac{\partial^2 \Phi_{\text{para}}}{\partial T \partial P} \right)$$

в ПМ-области определяется обычным соотношением [17,20]

$$o_{\text{para}} = o_p + o_e = \frac{3R}{V} C_{VR}(z_{\text{para}}) \theta_{\text{para}} \left(\frac{\partial \theta_{\text{para}}}{\partial P} \right)_T - \frac{1}{V} \left(\frac{\partial \xi}{\partial P} \right)_T. \quad (14)$$

Напомним, температурной зависимостью $\theta_{\text{para}}(T)$ в работе пренебрегается. Для магнитного вклада

$$o_m(T, H) = V^{-1} \left(\frac{\partial V_m}{\partial P} \right)_{TH} = V^{-1} \left(\frac{\partial^2 \Phi_m}{\partial T \partial P} \right)_H$$

в ОКТР ферромагнетика имеем

$$o_m = \frac{\mu}{V} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \alpha}{\partial T \partial P} \right)_H M^2 + \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 \beta}{\partial T \partial P} \right)_H M^4 - \frac{\xi}{2\beta} \left[\left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_{PH} + \left(\frac{\partial \beta}{\partial P} \right)_{PH} M^2 \right] \times \left[\left(\frac{\partial \alpha}{\partial P} \right)_{TH} + \left(\frac{\partial \beta}{\partial P} \right)_{TH} M^2 \right] \right\}, \quad (15)$$

где

$$\xi = \frac{2\beta M^2}{\alpha + 3\beta M^2}. \quad (16)$$

В итоге полная величина ОКТР ферромагнетика определяется выражением

$$o = o_{\text{para}} + o_m. \quad (17)$$

В точке Кюри ОКТР в отсутствие поля скачком изменяется на величину (см. Приложение)

$$\begin{aligned} \Delta o_m &= -\frac{\mu}{V} \frac{1}{2\beta_0} \left(\frac{\partial \alpha(T_C)}{\partial T} \right)_{PH} \left(\frac{\partial \alpha(T_C)}{\partial P} \right)_{TH} \\ &= \frac{1}{2V\mu\beta_0} [\mu a_0 + \Phi_{11}(T_C)] \left[\mu a_0 + \left(\frac{\partial \Phi_{10}(T_C)}{\partial T} \right)_{PH} + \Phi_{11}(T_C) \right] \left(\frac{\partial T_C}{\partial P} \right)_{TH}. \end{aligned} \quad (18)$$

Для сравнения, по Ландау,

$$\Delta o_{mL} = \frac{\mu a_0^2}{2V\beta_0} \left(\frac{\partial T_C}{\partial P} \right)_{TH}.$$

В отличие от скачка теплоемкости, который всегда положителен при переходе в ФМ состояние [2], скачок ОКТР при магнитном упорядочении ферромагнетика в зависимости, главным образом, от знака барической производной температуры Кюри $(\partial T_C / \partial P)_{TH}$, может быть как положительным, так и отрицательным [2,17]. А именно при $(\partial T_C / \partial P)_{TH} > 0$, как например в Ni, $\Delta o_m(T_C) > 0$; напротив, при $(\partial T_C / \partial P)_{TH} < 0$, как например в Fe, $\Delta o_m(T_C) < 0$. В инварных ферромагнетиках $\Delta o_m(T_C) < 0$. МФВ также может оказывать весьма существенное влияние на характер температурной зависимости $o_m(T)$, особенно вблизи T_C [9]. Даже для простого ферромагнетика аналитическое рассмотрение (15) для o_m затруднено ввиду громоздкости, однако возможен анализ результатов модельных расчетов (см. далее). В коварах и инварах (см., например, [13]) существенное значение может иметь также величина магнитострикционной восприимчивости h (вынужденная объемная магнитострикция)

$$h = \left(\frac{\partial \omega}{\partial H} \right)_{TP} \approx V^{-1} \left(\frac{\partial V_m}{\partial H} \right)_{TP}.$$

1.4. Физические статистические принципы модельных расчетов

Перед тем как перейти к обсуждению результатов модельных вычислений, полезно обсудить физические статистические принципы, лежащие в основе построенной выше термодинамической модели (см. также [17,19]).

Как становится ясным из приведенных выше выкладок, для описания и анализа магнитной части ОКТР ферромагнетика с МФВ необходимо в общем случае задать ряд „магнитных“ термодинамических параметров. А именно помимо традиционных обменных параметров Ландау a_0, β_0, T_C и их первых изотермических барических производных $(\partial a_0 / \partial P)_{TH}, (\partial \beta_0 / \partial P)_{TH}, (\partial T_C / \partial P)_{TH}$, необходимо задать также параметры МФВ $\theta_{10}, \theta_{11}, \theta_{20}$ и их первые изотермические барические производные

$(\partial\theta_{10}/\partial P)_{TH}$, $(\partial\theta_{11}/\partial P)_{TH}$, $(\partial\theta_{20}/\partial P)_{TH}$. Таким образом, для полноценного и термодинамически точного в пределах развитой модели описания поведения $o_m(T, H)$ ферромагнетика с МФВ необходимо указать 12 параметров модели.

Однако степень влияния на целевую функцию (в данном случае ОКТР $o_m(T)$) каждого из этих 12 параметров различна; влиянием некоторых можно пренебречь, что сокращает число значимых варьируемых параметров. Количественная оценка влияния каждого из параметров возможна [17,19] с применением статистических методов [21], однако обсуждение результатов такого анализа далеко выходит за рамки настоящей работы и требует отдельного рассмотрения. Варьируемые параметры могут быть определены в рамках развитой модели при обработке экспериментальных данных по намагниченности $M(T, H)$, магнитострикции $\omega(T, H)$, магнитной части теплоемкости $C_m(T, H)$, $o_m(T, H)$, магнитной восприимчивости $\chi(T, H)$, магнитострикционной восприимчивости $h(T, H)$ и др. Принципы такого анализа разработаны в [17,19]. Для более точного определения барических производных параметров модели важны также данные барических экспериментов, подобных описанным в работах [22–25].

2. Результаты модельных расчетов и обсуждение

При проведении модельных вычислений, как и в [1], было принято следующее определение: коваром (инваром) считался ферромагнетик, изменение объемного коэффициента теплового расширения которого в заданном (расчетном) температурном диапазоне $200 \leq \Delta T_{\text{calc}} \leq 400$ К минимально и не выходит за заданные рамки: $\Delta o_{\text{calc}} = \pm 1 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ от средней, приблизительно постоянной величины ОКТР. Для определения значений модельных параметров, обеспечивающих реализацию коварного (инварного) поведения ферромагнетика в МФВ, в рамках развитой модели было проведено шесть модельных расчетных циклов Ц1–Ц6 в температурном диапазоне ΔT_{calc} .

При расчетах в диапазоне ΔT_{calc} минимизировалось максимальное абсолютное отклонение величины ОКТР от полусуммы заданных границ желаемого диапазона изменения полной величины $o(T)$. Одновременно требовалось выполнение условий „привязки“ вычисленных в рамках представлений ТФПВР значений комплекса термодинамических величин к фактически наблюдаемым для реальных сплавов инварного типа (см. таблицу из [1]). Следует подчеркнуть, что ТФПВР, даже с учетом МФВ, может быть использована как инструмент термодинамического описания ферромагнетика в ограниченном температурном диапазоне ФМ-области [2–4]. В частности, для описания низкотемпературного поведения ферромагнетика следует применять спин-волновую теорию. Самая низкотемпературная область (ниже 80 К)

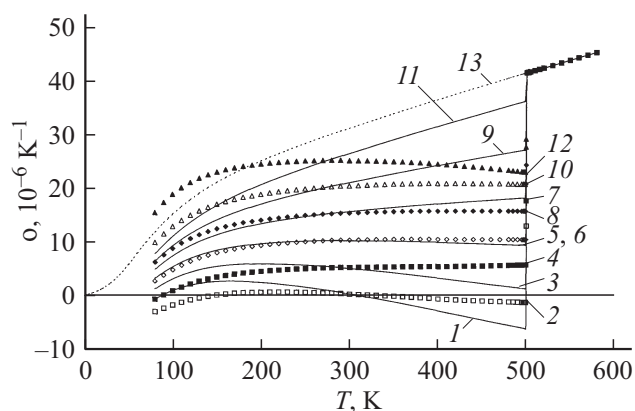


Рис. 1. Расчетные температурные зависимости ОКТР $o(T)$ ферромагнетика в циклах Ц1–Ц6. Символы — расчет с учетом МФВ, сплошные линии — без учета МФВ; 1, 2 — Ц1; 3, 4 — Ц2; 5, 6 — Ц3; 7, 8 — Ц4; 9, 10 — Ц5; 11, 12 — Ц6; 13 — парамагнитная часть ОКТР $o_{\text{para}}(T)$.

в расчетных кривых на представленных рисунках исключена.

При проведении модельных расчетов были заданы следующие неизменяемые в процессе вычислений термодинамические параметры, близкие к таковым для реальных инваров Fe–Ni: молярная масса $\mu = 5 \cdot 10^{-2} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$, начальный молярный объем $V_0 = 6 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, температура Дебая и ее первая барическая производная: $\theta = \theta_0 = 350 \text{ K}$, $(\partial\theta/\partial P)_{TH} = 1.5 \cdot 10^{-9} \text{ K} \cdot \text{Pa}^{-1}$; молярный коэффициент электронной теплоемкости и его первая барическая производная: $\xi = 8 \cdot 10^{-3} \text{ J} \cdot \text{K}^{-2} \cdot \text{mol}^{-1}$, $(\partial\xi/\partial P)_{TH} = -3 \cdot 10^{-13} \text{ J} \cdot \text{K}^{-2} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{Pa}$; температура Кюри $T_C = 500 \text{ K}$ (см. [1,17,20,22–31]). При вычислениях учтена только барическая производная $(\partial\theta_{10}/\partial P)_{TH}$. Как показали предварительные расчеты, барическими производными параметров МФВ θ_{11} и θ_{20} можно пренебречь.

Расчетные значения основных модельных параметров приведены в таблице. Часть результатов вычислений в циклах Ц1–Ц6, соответствующих „движению“ от инвара к коварам с увеличивающимся приблизительно постоянным уровнем ОКТР в интервале ΔT_{calc} , представлена на рис. 1, 2.

На рис. 1 в расчетных циклах Ц1–Ц6 приведены температурные зависимости ОКТР $o(T)$ ферромагнетика (символы — расчетные кривые $o(T)$ с учетом МФВ, сплошные кривые — без учета МФВ, пунктир — парамагнитный ход $o_{\text{para}}(T)$). В целом, ясно, что, говоря термодинамическим языком, коварное (инварное) поведение ферромагнетика является результатом определенного оптимального соотношения термодинамических параметров и с хорошей точностью может быть описано в рамках развитой модели. Также ясно что термодинамическая природа коварного и инварного эффекта одна и та же: оба эффекта в ферромагнетиках могут и должны быть рассмотрены в рамках одних и тех

Модельные параметры в расчетных циклах Ц1–Ц6 при моделировании коварного (инварного) поведения ферромагнетика с МФВ в температурном диапазоне $200 \leq \Delta T_{\text{calc}} \leq 400$ К

Параметр	Ц1	Ц2	Ц3	Ц4	Ц5	Ц6
Δo_{calc}^* , 10^{-6} K^{-1}	$-1 \leq o \leq 1$	$4 \leq o \leq 6$	$9 \leq o \leq 11$	$14 \leq o \leq 16$	$19 \leq o \leq 21$	$24 \leq o \leq 26$
o_{min}^* , 10^{-6} K^{-1}	-0.640	4.561	9.445	14.175	19.004	24.647
o_{max}^* , 10^{-6} K^{-1}	0.640	5.439	10.555	15.826	20.996	25.353
a_0 , 10^{-2} unit SI_a	7.608	8.032	8.630	15.044	13.134	12.292
β_0 , 10^{-4} unit SI_β	9.991	10.328	10.830	18.625	15.947	14.306
$(\partial a_0 / \partial P)_{TH}$, 10^{-13} unit $SI_a \cdot \text{Pa}^{-1}$	0.298	0.2736	0.2394	0.1709	0.1518	0.0488
$(\partial \beta_0 / \partial P)_{TH}$, 10^{-13} unit $SI_\beta \cdot \text{Pa}^{-1}$	-2.766	-2.161	-1.563	-1.044	-0.4071	0.0141
$(\partial T_C / \partial P)_{TH}$, $10^{-9} \text{ K} \cdot \text{Pa}^{-1}$	-2.023	-1.582	-1.147	-0.471	-0.327	-0.123
θ_{10} , 10^{-3} unit $SI_{\theta_{10}}$	3.400	2.310	0.491	-1.205	-3.399	-7.763
θ_{11} , 10^{-6} unit $SI_{\theta_{11}}$	-0.650	-0.590	-0.530	0.251	0.272	0.277
θ_{20} , 10^{-9} unit $SI_{\theta_{20}}$	-5.277	-5.325	-5.488	-8.461	-9.410	-9.680
$(\partial \theta_{10} / \partial P)_{TH}$, 10^{-12} unit $SI_{\theta_{10}} \cdot \text{Pa}^{-1}$	-0.0174	-0.0148	-0.0028	0.0060	0.0148	0.0266
ω_{s0}^{**} , 10^{-2}	1.340	1.140	0.916	0.686	0.459	0.231

Примечание. * В расчетном температурном диапазоне ΔT_{calc} , ** при $T \rightarrow 0$.

же термодинамических представлений. Видно, что в отсутствие МФВ удастся описать коварное поведение лишь в некотором диапазоне постоянных величин ОКТР, причем качество описания ухудшается при меньших и больших величинах ОКТР. Безусловно, явный учет МФВ является определяющим фактором при описании коварных и особенно инварных ферромагнетиков.

Видно, что по мере „движения“ ферромагнетика от коварного к инварному параметры a_0 и β_0 вначале возрастают в циклах Ц6–Ц4, а затем убывают в Ц3–Ц1. Барические производные $(\partial a_0 / \partial P)_{TH}$ в расчетных циклах Ц6–Ц1 положительны и последовательно возрастают, барические производные $(\partial \beta_0 / \partial P)_{TH}$ убывают. Наиболее выраженным является возрастание по абсолютной величине отрицательной барической производной температуры Кюри $(\partial T_C / \partial P)_{TH}$. Модельные значения $(\partial T_C / \partial P)_{TH}$ в Ц1–Ц6 по порядку величины согласуются с реально наблюдаемыми [1]. В циклах Ц6–Ц1 коэффициент МФВ θ_{10} возрастает, изменяя знак с отрицательного на положительный; коэффициент θ_{11} убывает, изменяя знак с положительного на отрицательный; коэффициент θ_{20} всюду отрицателен, убывая по абсолютной величине; барическая производная $(\partial \theta_{10} / \partial P)_{TH}$ всюду убывает, изменяя знак с положительного на отрицательный. Инварный ферромагнетик (цикл Ц1) отличается наибольшей величиной вклада МФВ и имеет наибольшие параметры $(\partial a_0 / \partial P)_{TH}$, $|(\partial \beta_0 / \partial P)_{TH}|$, $|(\partial T_C / \partial P)_{TH}|$, θ_{10} , $|\theta_{11}|$ и т.д.

На рис. 2 показаны температурные зависимости полной величины ОКТР $o(T)$ и магнитного вклада $o_m(T)$ для инварного ферромагнетика в расчетном цикле Ц1 (белые квадраты и ромбы — расчетные зависимости, полученные с учетом МФВ; сплошные линии — без учета МФВ; пунктир — парамагнитный ход $o_{\text{para}}(T)$). Для сопоставления на рис. 2 белыми и черными кружками показаны экспериментальные температурные зависимости $o(T)$ для двух образцов инварного сплава 36Н

(или $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{35}$), по данным Новиковой [20]. Здесь же символами (белые и черные треугольники, маленькие черные кружки) представлены температурные зависимости $o(T)$ для нескольких коммерческих инварных сплавов [13,26–31], а также, крестиками, — для уже упоминавшегося сплава $\text{Fe}_{72}\text{Pt}_{28}$, близкого по ряду физических свойств к инварным сплавам. Из рис. 2 видно, что развитая модель позволяет дать вполне адекватное термодинамическое описание инварного поведения ферромагнетиков с выраженным влиянием МФВ. Более того, модельные расчеты демонстрируют, что при подходящем наборе термодинамических параметров инварное поведение возможно в гораздо более широком температурном диапазоне, чем это наблюдается для известных инварных сплавов, т.е. возможен и необходим поиск

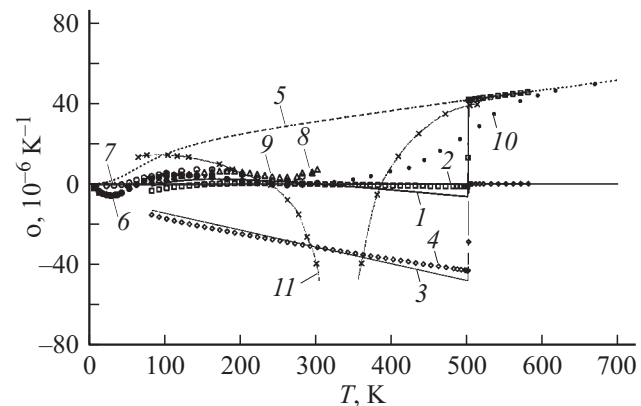


Рис. 2. Расчетные и экспериментальные температурные зависимости ОКТР $o(T)$ ферромагнитного инвара в цикле Ц1: 1 — полная величина $o(T)$ без учета МФВ, 2 — с учетом МФВ; 3 — магнитная часть ОКТР $o(T)$ без учета МФВ; 4 — с учетом МФВ; 5 — парамагнитная часть ОКТР $o_{\text{para}}(T)$; 6, 7 — сплав $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{35}$ [20] (два образца); 8 — сплав 36HX [28,31]; 9 — сплав Инвар-36 [27]; 10 — промышленный сплав $\text{Fe}+36\%\text{Ni}$ [30]; 11 — сплав $\text{Fe}_{72}\text{Pt}_{28}$ [13].

новых ферромагнетиков, обладающих установленным здесь требуемым набором термодинамических параметров, обеспечивающим „лучшее“ инварианное поведение. Сказанное относится и к коварам.

Что же касается сплава Fe₇₂Pt₂₈, то, как это видно из рис. 2, поведение его коэффициента теплового расширения не является инвариантным. Можно лишь указать, что, говоря термодинамическим языком, набор термодинамических параметров таков, что сплав имеет очень большой отрицательный магнитный вклад в ОКТР, так что в широком температурном диапазоне ниже точки Кюри T_C ~ 380 К полная величина ОКТР сплава Fe₇₂Pt₂₈ отрицательна. Минимум температурной зависимости o(T) приходится на область точки Кюри, где влияние МФВ наиболее выражено. Развита в статье термодинамическая модель позволяет количественно адекватно описать тип поведения ОКТР, характерный для сплава Fe₇₂Pt₂₈, однако этот вопрос требует отдельного обсуждения.

Заключение

В заключение сформулируем основные результаты и выводы работы.

В духе феноменологического подхода Ландау, но с явным учетом магнитофонного взаимодействия магнитной подсистемы с кристаллической решеткой ферромагнетика, находящего отражение в явной магнитной зависимости температуры Дебая в магнитоупорядоченной области, построена термодинамическая модель, позволяющая дать количественное объяснение коварному (инвариантному) поведению ферромагнетиков.

Для выяснения возможности описания коварного (инвариантного) поведения теплового расширения ферромагнетика с учетом МФВ в рамках развитого подхода проведена серия отдельных термодинамических расчетов.

Показано, что развитая модель позволяет при определенном соотношении термодинамических параметров обеспечить весьма удовлетворительное количественное согласие результатов расчета коэффициента теплового расширения с экспериментальными данными для инвариантных ферромагнетиков. Более того, предсказано существование ферромагнетиков с инвариантным поведением теплового расширения, наблюдающимся в гораздо более широком температурном диапазоне, чем для известных инваров.

Показано, что „движение“ по свойствам от коварного к инвариантному поведению с уменьшением средней, приблизительно постоянной, величины ОКТР ферромагнетика o(T) в расчетном температурном диапазоне 200 ≤ ΔT_{calc} ≤ 400 К сопровождается закономерным изменением термодинамических параметров модели и их барических производных. В частности, возрастают спонтанная объемная магнитострикция ω_s, абсолютная величина отрицательной первой барической производной температуры Кюри (∂T_C/∂P)_{ТН} и т.д.

Термодинамически обоснован вывод о необходимости явного учета магнитофонного взаимодействия для обеспечения количественного согласия модельных вычислений с экспериментальными данными для реальных коварных (инвариантных) ферромагнетиков.

Полученные результаты позволяют сформулировать условия (вплоть до указания конкретных значений термодинамических параметров), которым должен отвечать коварный (инвариантный) ферромагнетик с заранее установленными техническими требованиями по поведению коэффициента теплового расширения в заданном температурном диапазоне.

Приложение

Ниже выписаны выражения для температурных, барических и смешанных температурно-барических производных функций Φ_{ij}(T, P), α(T, P), β(T, P).

Приближенные выражения для первых температурных производных (∂Φ_{ij}/∂T)_{PH} в пренебрежении членами высших порядков имеют вид

$$\left(\frac{\partial\Phi_{ij}}{\partial T}\right)_{PH} \approx 3RC_{VR}(z_{para})\frac{\theta_{ij}}{\theta_{para}}. \quad (П.1)$$

В (П.1) C_{VR}(z) — нормированная на единицу дебаевская теплоемкость [2].

Первые барические производные (∂Φ_{ij}/∂P)_{ТН} есть

$$\left(\frac{\partial\Phi_{ij}}{\partial P}\right)_{ТН} = 3R\theta_{ij}\left\{\left[\frac{3}{8} + \frac{D(z_{para})}{z_{para}}\right]\pi'_{ij} - \frac{C_{VR}(z_{para})}{z_{para}}\pi'_{para}\right\}. \quad (П.2)$$

В (П.2) использованы сокращенные обозначения

$$\pi'_{ij} = \frac{1}{\theta_{ij}}\left(\frac{\partial\theta_{ij}}{\partial P}\right)_{ТН},$$

$$\pi'_{para} = \frac{1}{\theta_{para}}\left(\frac{\partial\theta_{para}}{\partial P}\right)_{ТН}.$$

Наконец, приближенные выражения для вторых температурно-барических производных (∂²Φ_{ij}/∂T∂P)_Н приближенно имеют вид

$$\left(\frac{\partial^2\Phi_{ij}}{\partial T\partial P}\right)_H \approx 3R\frac{\theta_{ij}}{\theta_{para}}\{C_{VR}(z_{para})(\pi'_{ij} + \pi'_{para}) - U(z_{para})\pi'_{para}\}, \quad (П.3)$$

где

$$U(x) = 2C_{VR}(x) - xC'_{VR}(x),$$

штрих означает производную по аргументу.

Первые температурные производные термодинамических коэффициентов $\alpha(T, P)$ и $\beta(T, P)$ при $P, H = \text{const}$ равны

$$\left(\frac{\partial\alpha}{\partial T}\right)_{PH} = a_0 + \frac{1}{\mu} \left[\left(\frac{\partial\Phi_{10}}{\partial T}\right)_{PH} + \Phi_{11} + \left(\frac{\partial\Phi_{11}}{\partial T}\right)_{PH} t \right], \quad (\text{II.4})$$

$$\left(\frac{\partial\beta}{\partial T}\right)_{PH} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial\Phi_{20}}{\partial T}\right)_{PH}. \quad (\text{II.5})$$

Первые барические производные термодинамических коэффициентов $\alpha(T, P)$ и $\beta(T, P)$ в условиях $T, H = \text{const}$ есть

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\alpha}{\partial P}\right)_{TH} = & -a_0 \left(\frac{\partial T_C}{\partial P}\right)_{TH} + \frac{1}{\mu} \left[\left(\frac{\partial\Phi_{10}}{\partial P}\right)_{TH} \right. \\ & \left. - \left(\frac{\partial\Phi_{10}}{\partial P}\right)_{T=T_C, H} - \Phi_{11} \left(\frac{\partial T_C}{\partial P}\right)_{TH} \right] \\ & + \left[\left(\frac{\partial a_0}{\partial P}\right)_{TH} + \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial\Phi_{11}}{\partial P}\right)_{TH} \right] t, \quad (\text{II.6}) \end{aligned}$$

$$\left(\frac{\partial\beta}{\partial P}\right)_{TH} = \left(\frac{\partial\beta_0}{\partial P}\right)_{TH} + \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial\Phi_{20}}{\partial P}\right)_{TH}. \quad (\text{II.7})$$

Вторые температурно-барические производные термодинамических коэффициентов $\alpha(T, P)$ и $\beta(T, P)$ в условиях $H = \text{const}$ есть

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2\alpha}{\partial T\partial P}\right)_H = & \left(\frac{\partial a_0}{\partial P}\right)_{TH} + \frac{1}{\mu} \left[\left(\frac{\partial^2\Phi_{10}}{\partial T\partial P}\right)_H + \left(\frac{\partial\Phi_{11}}{\partial P}\right)_{TH} \right. \\ & \left. - \left(\frac{\partial\Phi_{11}}{\partial T}\right)_{PH} \left(\frac{\partial T_C}{\partial P}\right)_{TH} \right] + \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial^2\Phi_{11}}{\partial T\partial P}\right)_H t, \quad (\text{II.8}) \end{aligned}$$

$$\left(\frac{\partial^2\beta}{\partial T\partial P}\right)_H = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial^2\Phi_{20}}{\partial T\partial P}\right)_H. \quad (\text{II.9})$$

Список литературы

- [1] Бодряков В.Б., Повзнер А.А. // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 2. С. 65–71.
- [2] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. Ч. I. 576 с.
- [3] Rytte E. // Ann. Phys. 1965. Vol. 32. N 3. P. 377–403.
- [4] Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975. 528 с.
- [5] Shimizu M. // J. Magn. Magn. Mater. 1980. Vol. 20. N 1. P. 47–55.
- [6] Валиев Э.З. // ФММ. 1980. Т. 49. Вып. 5. С. 988–993.
- [7] Shiga M. // J. Phys. Soc. Jpn. 1981. Vol. 50. N 2. P. 2573–2580.
- [8] Kim D.J. // Phys. Rev. B. 1982. Vol. 25. N 11. P. 6919–6938.
- [9] Туров Е.А., Шавров В.Г. // УФН. 1983. Т. 140. № 3. С. 429–462.
- [10] Valiev E.Z. and Menshikov A.Z. // J. Magn. Magn. Mater. 1984. Vol. 46. N 1. P. 199–206.
- [11] Зверев В.М., Силин В.П. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. Вып. 2 (8). С. 709–721.
- [12] Валиев Э.З. // ФММ. 1988. Т. 65. Вып. 2. С. 224–229.
- [13] Валиев Э.З. // УФН. 1991. Т. 161. № 8. С. 87–128.
- [14] Зверев В.М., Силин В.П. // Письма ЖЭТФ. 1996. Т. 64. Вып. 1. С. 33–37.
- [15] Зверев В.М. // ЖЭТФ. 1997. Т. 112. Вып. 5 (11). С. 1863–1872.
- [16] Бодряков В.Б., Повзнер А.А., Сафонов И.В. // ТВТ. 2006. Т. 43. № 3. С. 396–400.
- [17] Бодряков В.Б. Комплексное исследование влияния решеточного и магнитного ангармонизма на термодинамические свойства твердых тел. Автореф. докт. дис. Екатеринбург: УГТУ–УПИ, 2005. 500 с.
- [18] Бодряков В.Б., Повзнер А.А. // ФТТ. 2004. Т. 46. Вып. 5. С. 846–850.
- [19] Бодряков В.Б., Башкатов А.Н. // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 3. С. 23–28.
- [20] Новикова С.И. Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974. 294 с.
- [21] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1970. 720 с.
- [22] Белов К.П. Магнитные превращения. М.: ГИФМЛ, 1959. 260 с.
- [23] Oomi G. and Mori N. // J. Phys. Soc. Jpn. 1981. Vol. 50. N 4. P. 1043–1044.
- [24] Oomi G. and Mori N. // J. Phys. Soc. Jpn. 1981. Vol. 50. N 9. P. 2917–2923.
- [25] Oomi G. and Mori N. // J. Phys. Soc. Jpn. 1981. Vol. 50. N 9. P. 2924–2930.
- [26] Physics and applications of Invar alloys. Tokyo: Maruzen Co., 1978. 646 p.
- [27] Новицкий Л.А., Кожевников И.Г. Теплофизические свойства материалов при низких температурах. М.: Машиностроение, 1975. 216 с.
- [28] Прецизионные сплавы / Под ред. Б.В. Молотилова М.: Наука, 1983. 439 с.
- [29] Deryabin A.V., Kazantes, and Shvetsov B.N. // J. Magn. Magn. Mater. 1985. Vol. 51. N 1. P. 98–102.
- [30] Захаров А.И. Физика прецизионных сплавов с особыми тепловыми свойствами. М.: Металлургия, 1986. 239 с.
- [31] Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева и Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.