

Ф и г. 109

Это означает, что $x(T)$, а следовательно, и $X(T) = M_s(T)/M_\infty$ можно определить, находя точку пересечения графиков двух функций, а именно

$$X = \operatorname{th} x, \quad X = \frac{kT}{zJ} x = \frac{T}{T_c} x \quad \left(T_c = \frac{zJ}{k} \right), \quad (5.40)$$

как это показано на фиг. 109. Величину M_s называют также намагниченностью насыщения, а M_∞ является ее значением при 0°K .

§ 2. Приближение Бротта — Вильямса

В предыдущем параграфе мы ввели приближение молекулярного поля, основываясь лишь на физической интуиции, однако оно может быть получено также методами статистической механики. Пусть N — полное число атомов, а N_+ и N_- — соответственно числа атомов со спинами, направленными вверх и вниз. Если эти положительные и отрицательные спины образуют идеальную смесь, то число конфигураций распределения спинов в решетке, очевидно, равно

$$W = \binom{N}{N_+} = \frac{N!}{N_+! N_-!} \quad (N = N_+ + N_-).$$

Следовательно, для энтропии можно получить следующее выражение:

$$S = k \ln W = -k \left\{ N_+ \ln \frac{N_+}{N} + N_- \ln \frac{N_-}{N} \right\} = -kN \left\{ \frac{1}{2}(1+X) \ln \frac{1}{2}(1+X) + \frac{1}{2}(1-X) \ln \frac{1}{2}(1-X) \right\}, \quad (5.41)$$

где мы использовали формулу Стирлинга. Здесь X определяется соотношениями

$$\frac{N_+}{N} = \frac{1}{2}(1+X), \quad \frac{N_-}{N} = \frac{1}{2}(1-X). \quad (5.42)$$

Всего в кристалле имеется $\frac{1}{2}zN$ пар соседних спинов, среди которых N_{++} пар типа «++», N_{--} пар типа «--» и N_{+-} пар типа «+-». Тогда энергию взаимодействия (5.1) можно записать следующим образом:

$$E = -J(N_{++} + N_{--} - N_{+-}). \quad (5.13)$$

Задание чисел N_+ и N_- не определяет числа N_{++} и N_{--} однозначно — они могут принимать различные значения. Если считать, что они просто равны средним значениям (см. замечание в конце настоящего параграфа), то

$$\begin{aligned} \bar{N}_{++} &= \frac{1}{2}zN_+p_+ = \frac{1}{2}zN_+\frac{N_+}{N} = \frac{1}{8}zN(1+X)^2, \\ \bar{N}_{+-} &= zN_+p_- = zN_+\frac{N_-}{N} = \frac{1}{4}zN(1-X^2), \\ \bar{N}_{--} &= \frac{1}{2}zN_-p_- = \frac{1}{2}zN_-\frac{N_-}{N} = \frac{1}{8}zN(1-X)^2; \end{aligned} \quad (5.14)$$

здесь $p_+ = N_+/N$ и $p_- = N_-/N$ суть соответственно вероятности того, что данный узел решетки занят положительным или отрицательным спином. Множитель $\frac{1}{2}$ в выражениях для N_{++} и N_{--} учитывает тот факт, что каждая пара «++» или «--» дважды входит в выражение zN_+p_+ . Если заменить в (5.13) N_{++} , N_{+-} и N_{--} их средними значениями (5.14), то в этом приближении полная энергия становится равной

$$E = -\frac{1}{2}zJNX^2. \quad (5.15)$$

С учетом (5.11) имеем

$$\begin{aligned} F &= E - TS = \\ &= -\frac{1}{2}zNJX^2 + NkT \left\{ \frac{1}{2}(1+X) \ln \frac{1}{2}(1+X) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}(1-X) \ln \frac{1}{2}(1-X) \right\}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Равновесная (наиболее вероятная) величина X определяется из условия $\partial F / \partial X = 0$, откуда

$$zNJX = \frac{1}{2}NkT \ln \frac{1+X}{1-X}, \quad \frac{zJ}{kT}X = \frac{1}{2} \ln \frac{1+X}{1-X}, \quad (5.17)$$

или

$$\operatorname{th} \left(\frac{zJ}{kT}X \right) = X. \quad (5.18)$$

Последнее уравнение совпадает с (5.9). Следовательно, мы можем утверждать, что приближение молекулярного поля эквивалентно

такому приближению, в котором энтропия принимается равной энтропии смешения идеальной смеси, а энергия — равной средней энергии, получаемой простым усреднением по всем возможным конфигурациям. Такие предположения относительно энергии и энтропии впервые были использованы в теории сплавов. Описанный метод называется приближением Брагга—Вильямса [3]. Подобные допущения используются также в теории регулярных растворов (см. задачу 6).

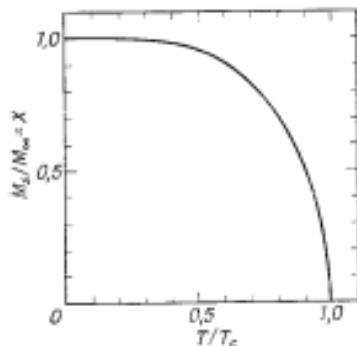
З а м е ч а н и е. Усреднение, с помощью которого получены соотношения (5.14), является простым усреднением по всем возможным конфигурациям положительных и отрицательных спинов в решетке, причем веса всех конфигураций предполагаются одинаковыми. Последнее допущение в действительности неверно. Если значение J положительно, то пары типа «+ +» и «— —» имеют меньшую энергию, чем пары «+ —», поэтому соседями положительного спина скорее будут положительные, чем отрицательные спины. Эта тенденция к скоплению спинов одного знака не учитывается в (5.14).

§ 3. Кооперативные явления

Ферромагнетизм, рассмотренный в предыдущем параграфе, представляет собой типичный пример так называемых кооперативных явлений, которые соответствуют, вообще говоря, наличию в системе определенного упорядочения, обусловленного взаимодействием частиц. Спонтанная намагниченность является следствием упорядоченности, поддерживаемой взаимодействием атомов.

Она максимальна при $T = 0^\circ\text{K}$, уменьшается с повышением температуры и обращается в нуль при критической температуре T_c , называемой температурой Кюри (фиг. 110). Выше критической температуры система становится парамагнитной, так как упорядочение разрушается тепловым движением и уже не обладает

свойством самоподдерживания. На языке термодинамики это означает, что при высоких температурах в выражении для свободной энергии доминирует член, зависящий от энтропии. При этом более вероятной будет неупорядоченная конфигурация, соответствующая более высокой энтропии. При низких темпера-



Ф и г. 110