Національна академія наук України

ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ICMP–98–31U

І.М.Мриглод, Ю.К.Рудавський, С.О.Дубик, М.В.Токарчук

ДО СТАТИСТИЧНОЇ ГІДРОДИНАМІКИ ГАЙЗЕНБЕРГІВСЬКОЇ МОДЕЛІ ФЕРОФЛЮЇДУ

ЛЬВІВ

УДК: 530.1; 538.0;

PACS: 05.60.+w, 05.70.Ln, 05.20-y

До статистичної гідродинаміки гайзенбергівської моделі ферофлюїду

І.М.Мриглод, Ю.К.Рудавський, С.О.Дубик, М.В.Токарчук

Анотація. В межах точного статистичного підходу розглядається динаміка гайзенбергівської моделі ферофлюїду в гідродинамічній границі. Отримані аналітичні вирази для усіх гідродинамічних часових кореляційних функцій, побудованих на консервативних змінних. Проаналізовані вирази для динамічних структурних факторів "густина-густина" і "спінова густина-спінова густина". Показано, що для випадку ненульового магнітного поля звукові збудження проявляються у магнітному динамічному структурному факторі як брілюенівські піки. Для нульового зовнішнього магнітного поля отримані результати порівнюються з випадком простої рідини.

On the statistical hydrodynamics of a Heisenberg model ferrofluid

I.M.Mryglod, Yu.K.Rudavskii, S.O.Dubyk, M.V.Tokarchyk

Abstract. Within rigorous statistical approach the dynamics of Heisenberg model ferrofluid in the hydrodynamic limit is considered. Explicit expressions for the hydrodynamic time correlation functions, constructed on the conserved variables, are derived. The results for dynamic structure factors of "density-density" and "spin density-spin density" are analyzed. It is shown that for the case of nonzero external magnetic field the sound excitations are observed in the magnetic dynamic structure factor as Brillouin-like peaks. For zero value of an external magnetic field the obtained results are compared with the results known for simple liquids.

Подається в Physica A
Submitted to Physica A

1. Вступ

Моделі магнітної рідини, де поряд із трансляційними ступенями вільності (рідинна підсистема) приймаються до розгляду також спінові або ж орієнтаційні ступені вільності (магнітна підсистема), викликають як чисто теоретичний так і прикладний інтерес. З теоретичної точки зору ці моделі цікаві до вивчення як приклад багаточастинкових систем у яких в силу взаємодії підсистем виникає цілий ряд нових властивостей, що відсутні у простих рідинах або ж твердотільних магнетиках і які знаходять свій прояв як у рівноважній теорії, так і при дослідженні динаміки. Прикладами таких властивосей є: можливість існування фазового феромагнітного переходу у рідкому стані [1,2]; можливість впливу на фазову діаграму рідини та її термодинамічні властивості через зовнішнє магнітне поле [3–6]; прояв в окремих випадках анізотропних властивостей у термодинаміці [7]; особливості гідродинамічної поведінки, знайдені у феноменологічних підходах [8–10]. Прикладний інтерес до вивчення магнітних рідин стимулювали на початку 80-х років повідомлення про експериментальну можливість переходу у магнітовпорядкований стан у металічних розплавах [11–14]. Недавні експерименти підтвердили ці ранні повідомлення [15] для рідкого сплаву $Co_{80}Pd_{20}$. Вкажемо також на те, що вивчення властивостей простих моделей магнітних рідин має важливе значення і для розвитку теорії фероколоїдних систем [16,17], широкого класу фізичних об'єктів в рідкому стані, для яких суттєвим є врахування явища магнітної релаксації [18].

Дослідження часових кореляційних функцій флюктуацій маси, імпульсу, енергії, узагальнених коефіцієнтів в'язкості, теплопровідності, магнітної дифузії у рідких магнетиках є надзвичайно цікавими і важливими. Особливий інтерес становить вивчення спектрів колективних збуджень та розрахунок динамічних структурних факторів, що описують флюктуації густини числа частинок та спінового моменту. Ці величини відображають процеси переносу тепла, поширення звуку, зміну флюктуацій маси з врахуванням магнітострикційних, дифузійних процесів а також перехресних кореляцій між тепловими та в'язкими процесами.

Ця робота продовжує цикл досліджень, що започаткований в роботах [19,20] і має на меті послідовний розрахунок гідродинамічних часових кореляційних функцій гайзенбергивської моделі ферофлюїду у довгохвильовій границі. Ми приводимо асимптотично точні аналітичні результати для часових кореляційних функцій “густина–густина”, “імпульс–імпульс”, “енергія–енергія”, “спінова густина–спінова густина”, а також їх недіагональних комбінацій, що отримані у гідродинамічній границі.

2. Загальні співвідношення

Будемо розглядати гайзенбергівску модель ферофлюїду як систему з N магнітних атомів зі спіном S_i у постійному неоднорідному магнітному полі h. Ця система описується гамільтоніаном [3,19,20]

$$\hat{H} = H_L + \hat{H}_S, \tag{1}$$

де

$$H_L = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N} V(|\mathbf{r}_{ij}|), \tag{2}$$

$$\hat{H}_S = -\frac{1}{2}\sum_{i\neq k}^{N} J(|\mathbf{r}_{ik}|)\,\mathsf{S}_i\mathsf{S}_k - h\sum_{i=1}^{N}\mathsf{S}_i^z. \tag{3}$$

Перший доданок в гамільтоніані (1) описує “рідинну підсистему” як просту класичну рідину, тобто описує класичні трансляційні ступені вільності частинок. Для подальших розрахунків потенціал парної взаємодії $V(|\mathbf{r}_{ij}|)$ можна вибрати як потенціал Ленарда-Джонса, потенціал м’яких чи твердих сфер, тощо. Другий доданок - частина гамільтоніану (класична чи квантова), що відповідає “магнітній підсистемі” і описує спінові ступені вільності (або ж орієнтаційні рухи) і складається з гамільтоніану обмінної взаємодії магнітних атомів та гамільтоніану спінової взаємодії з зовнішнім магнітним полем. Величина $J(|\mathbf{r}_{ik}|)$ - це потенціал обмінної взаємодії. У загальному випадку спінова взаємодія може бути вибрана (залежно від системи, що досліджується) як ізотропна або ж дипольна.

Оператор Ліувілля системи можна записати як суму наступних доданків:

$$\hat{L}_N = \hat{L}^L + \hat{L}^S + \hat{L}^{LS}, \tag{4}$$

де $\hat{L}^L$ - класичний оператор Ліувілля “рідинної” підсистеми

$$i\hat{L}^L = \sum_{i=1}^{N}\frac{p_i}{m}\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_i} - \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N}\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_i}V(|\mathbf{r}_{ij}|)\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_i} - \frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_j}\right),$$

а оператор $\hat{L}_S$ у випадку квантового опису магнітної підсистеми може бути означений через комутатор спінових змінних

$$i\hat{L}^S\mathcal{F} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_S\mathcal{F} - \mathcal{F}\hat{H}_S\right].$$

Останній доданок $\hat{L}^{LS}$ в (4) описує взаємодію між "рідинною" і "магнітною" підсистемами і має наступний вигляд

$$i\hat{L}^{LS} = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N}\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_i}J(|\mathbf{r}_{ij}|)\,\mathsf{S}_i\mathsf{S}_j\left(\frac{\partial}{\partial p_i} - \frac{\partial}{\partial p_j}\right).$$

Нерівноважний стан системи описується нерівноважним статистичним оператором $\varrho(x^N,t)$. Для його знаходження використаємо метод нерівноважного статистичного оператора Зубарєва [21,22]. У цьому методі $\varrho(x^N,t)$ отримується як розв'язок мікроскопічного рівняння Ліувілля з граничною умовою

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho(x^N,t) + i\hat{L}_N\varrho(x^N,t) = -\varepsilon\left(\varrho(x^N,t) - \varrho_q(x^N,t)\right), \tag{5}$$

де границя $\varepsilon \to +0$ обчислюється після термодинамічного переходу. Квазірівноважний статистичний оператор $\varrho_q(x^N,t)$ знаходимо стандартним чином з умови екстремуму інформаційної ентропії при додаткових умовах, що значення динамічних змінних фіксовані та виконується умова нормуванння

$$\mathrm{Sp}\ \varrho(x^N,t) = 1.$$

Для коректного опису гідродинамічної границі набір динамічних змінних $\hat{P}$ повинен включати усі консервативні величини [19,20], тобто у нашому випадку

$$\hat{P}(\mathbf{r}) = \{\hat{n}(\mathbf{r}), \hat{p}^{\alpha}(\mathbf{r}), \hat{\varepsilon}(\mathbf{r}), \hat{m}(\mathbf{r})\}.$$

Для наступного розгляду зручно перейти в $\mathbf{k}$-простір, застосувавши перетворення Фур'є

$$\mathcal{F}(\mathbf{k}) = \int e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\mathcal{F}(\mathbf{r})d\mathbf{r}.$$

Тоді отримаємо $\hat{P}(\mathbf{k}) = \{\hat{n}_{\mathbf{k}}, \hat{p}^{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}}, \hat{m}_{\mathbf{k}}\}$, де

$$\hat{n}_{\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^{N} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \tag{6}$$

- густина числа частинок,

$$\hat{p}^{\alpha}_{\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^{N} p^{\alpha}_i \, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \tag{7}$$

- густина імпульсу,

$$\hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} - \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} J(|\mathbf{r}_{ij}|)\, \mathsf{S}_i \mathsf{S}_j \, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V(|\mathbf{r}_{ij}|)\, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \tag{8}$$

- густина енергії,

$$\hat{m}_{\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^{N} \mathsf{S}_i \, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \tag{9}$$

- густина магнітного моменту.

Формальний розв'язок рівняння (5) для нерівноважного статистичного оператора $\rho(x^N, t)$ може бути записаний наступним чином

$$\varrho(t) = \varrho_q(t) + \sum_{\delta} \int_{-\infty}^{t} e^{-\varepsilon(t-t')} F_{\delta}(t') dt' \int_0^1 \varrho_q^{\tau}(t') T(t,t') \hat{I}_{\delta}(t') \varrho_q^{1-\tau} d\tau,$$

де $\delta = \{n, p, \varepsilon, m\}$; $F_{\delta}(t)$ - множники Лагранжа, що отримуються з умови самоузгодження $\langle \hat{P}_{\delta} \rangle^t = \langle \hat{P}_{\delta} \rangle^t_q$;

$$\hat{I}_{\delta}(t) = (1 - \mathcal{P}(t)) \; i\hat{L}_N \hat{P}_{\delta}$$

- узагальнені потоки;

$$T(t,t') = \exp\left\{ -\int_{t'}^{t} (1 - \mathcal{P}(\tau))\, i\hat{L}_N(\tau) d\tau \right\}$$

-оператор еволюції з проекційним оператором Морі, дія якого означена співвідношенням

$$\mathcal{P}(t) \; \mathcal{F} = \langle \mathcal{F} \rangle^t_q + \sum_{\delta} \frac{\delta \langle \mathcal{F} \rangle^t_q}{\delta \langle \hat{P}_{\delta} \rangle^t} \{ \hat{P}_{\delta} - \langle \hat{P}_{\delta} \rangle^t \}.$$

Використовуючи розв'язок рівняння (5) для випадку малих відхилень від рівноваги в роботі [19] отримані лінеаризовані рівняння переносу і рівняння для рівноважних часових кореляційних функцій (ЧКФ). Зокрема, рівняння для часових кореляційних функцій після перетворення Лапласа матимуть вигляд:

$$\{ zI - i\Omega_0(k) + \tilde{\phi}(k,z) \} \, \tilde{F}(k,z) = F(k), \tag{10}$$

де

$$\tilde{F}(k,z) = \Big(\hat{P}(\mathbf{k}), \hat{P}(-\mathbf{k})\Big)^{z} = \Big(\hat{P}(\mathbf{k}), \frac{1}{z+i\hat{L}_N}\hat{P}(-\mathbf{k})\Big) \qquad (11)$$

- матриця лаплас-зображень ЧКФ $F(k,t)$;

$$F(k,t) = \int_0^1 d\tau \langle \Delta\hat{P}(\mathbf{k})\, e^{-i\hat{L}_N t}\, \rho_0^{\tau}\, \Delta\hat{P}^{+}(\mathbf{k})\, \rho_0^{-\tau}\rangle \equiv$$

$$\equiv \Big(\hat{P}(\mathbf{k}), e^{-i\hat{L}_N t}\, \hat{P}^{+}(\mathbf{k})\Big)\,; \qquad (12)$$

- матриця часових кореляційних функцій;

$$F(k) = F(k,t=0) = \Big(\hat{P}(\mathbf{k}), \hat{P}(-\mathbf{k})\Big) \qquad (13)$$

- матриця статичних кореляційних функцій;

$$i\Omega_0(k) = (i\hat{L}_N\hat{P}(\mathbf{k}), \hat{P}(-\mathbf{k}))\ (\hat{P}(\mathbf{k}), \hat{P}(-\mathbf{k}))^{-1} \qquad (14)$$

- частотна матриця, а

$$\tilde{\phi}(k,z) = \Big((1-\mathcal{P}_H)\, i\hat{L}_N\hat{P}, \frac{1}{z+(1-\mathcal{P}_H)\, i\hat{L}_N}\,(1-\mathcal{P}_H)\, i\hat{L}_N\hat{P}\Big)$$

$$\times\Big(\hat{P}(\mathbf{k}), \hat{P}(-\mathbf{k})\Big)^{-1} \qquad (15)$$

- матриця функцій пам'яті[1]. Зауважимо, що матричне рівняння (10) є формально точним. Оператор $\mathcal{P}_H$ - це лінеаризований проекційний оператор Мори, який діє за правилом [19]

$$\mathcal{P}_H\,\mathcal{F} = \Big(\mathcal{F}, \hat{P}(-\mathbf{k})\Big)\ \Big(\hat{P}(\mathbf{k}), \hat{P}(-\mathbf{k})\Big)^{-1}\ \hat{P}(\mathbf{k}).$$

Для виконання конкретних розрахунків зручніше працювати з ортогоналізованим набором динамічних змінних $\hat{Y}_{\mathbf{k}}$ означеним наступним чином [20]

$$\hat{Y}_{\mathbf{k}} = \{\hat{n}_{\mathbf{k}}, \hat{p}^{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{h}_{\mathbf{k}}, \hat{s}_{\mathbf{k}}\},$$

де $\hat{s}_{\mathbf{k}} = (1-\mathcal{P}_n)\,\hat{m}_{\mathbf{k}}$ та $\hat{h}_{\mathbf{k}} = (1-\mathcal{P}_s-\mathcal{P}_n)\,\hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}}$ - оператори густини узагальненого спінового моменту та ентальпії, а $\mathcal{P}_n$ і $\mathcal{P}_s$ - проекційні оператори Мори, побудовані на змінних $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ і $\hat{s}_{\mathbf{k}}$, відповідно.

[1] У виразах (10)-(15) враховано те, що кореляційні функції просторово ізотропної системи залежать лише від модуля хвильового вектора $\mathbf{k}$.

3. Гідродинамічна область

В роботі [20] показано, що для змінних $\hat{Y}_{\mathbf{k}}$ матриця $F(k)$ є діагональною з елементами, які в гідродинамічній границі матимуть наступний вигляд

$$F_{nn}(k) = NS(k)|_{k\to 0} \approx NTk_B n\kappa_{T,h}, \tag{16}$$

$$F_{pp}^{\alpha\beta}(k) = \delta_{\alpha\beta}NTk_B\mathrm{m}, \tag{17}$$

$$F_{hh}(k) = k_B T^2 C_{n,m}(k)|_{k\to 0} \approx Nk_B T^2 c_{n,m}, \tag{18}$$

$$F_{ss}(k) = k_B T\chi_{T,n}(k)|_{k\to 0} \approx Nk_B T\bar{\chi}_{T,n}, \tag{19}$$

де

$$\kappa_{T,h} = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{T,h}$$

- ізотермічна стисливість при постійному h в ансамблі (N,V,T,h),

$$\bar{\chi}_{T,n} = \frac{1}{nV}\left(\frac{\partial M}{\partial h}\right)_{T,N}$$

- магнітна сприйнятливість системи, і

$$C_{n,m} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{m,N}$$

- питома теплоємність системи при постійному об'ємі в ансамблі (N,V,T,M). Формули (16)-(19) є стандартними флюктуаційними формулами, які в границі $k\to 0$ пов'язують між собою флюктуації фізичних величин з термодинамічними характеристиками.

Елементи частотної матриці

$$i\Omega_0(k) = \left(i\hat{L}_N\hat{Y}(\mathbf{k}),\, \hat{Y}^+(\mathbf{k})\right)\left(\hat{Y}(\mathbf{k}),\hat{Y}^+(\mathbf{k})\right)^{-1}$$

у гідродинамічній границі можуть бути також записані [20] через термодинамічні величини, а саме

$$i\Omega_0^H = ik\begin{pmatrix} 0 & \dfrac{1}{\mathrm{m}} & 0 & 0 \\ \dfrac{1}{n\kappa_{T,h}} & 0 & \dfrac{1}{c_{n,m}}\dfrac{\beta_{P,m}}{n\kappa_{T,m}} & \dfrac{1}{\bar{\chi}_{T,n}}\dfrac{\pi_{T,P}}{n\kappa_{T,h}} \\ 0 & \dfrac{T}{m}\dfrac{\beta_{P,m}}{n\kappa_{T,m}} & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{m}\dfrac{\pi_{T,P}}{n\kappa_{T,h}} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{20}$$

де P - тиск системи, а символи

$$\beta_{P,m} = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{P,m}, \quad \pi_{T,P} = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial h}\right)_{T,P},$$

позначають відповідно коефіцієнти об'ємного розширення і магнітострикції.

Елементи матриці функцій пам'яті безпосередньо зв'язані з коефіцієнтами переносу гайзенбергівської магнітної рідини. У гідродинамічній границі можемо скористатися з марківського наближення для функцій пам'яті $\tilde{\phi}(k,z) \approx \tilde{\phi}(k,0) = \phi_H(k)$, яке є асимптотично точним при $k \to 0$. При цьому отримаємо

$$\phi_H(k) = k^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{\eta_l}{nm} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{\lambda}{nc_{n,m}} & \dfrac{L_{sh}}{n\bar{\chi}_{T,n}} \\ 0 & 0 & \dfrac{L_{sh}}{nc_{n,m}T} & \dfrac{L_{ss}}{n\bar{\chi}_{T,n}} \end{pmatrix}, \tag{21}$$

де коефіцієнти переносу $L_{\delta\delta'}$ у виразі (21) мають наступний зміст:

(i) $L_{pp} = \eta_l = \frac{4}{3}\eta + \zeta$ - повздовжня в'язкість, де літери η і ζ позначають об'ємну і зсувну в'язкості, відповідно;

(ii) $L_{hh} = T\lambda$ описує процеси переносу тепла, де λ - коефіцієнт теплопровідності;

(iii) L_{sh} і L_{hs} - перехресні коефіцієнти термомагнітної дифузії[2];

(iv) L_{ss} - коефіцієнт спінової дифузії.

У роботі [20] для цих коефіцієнтів виведені відповідні мікроскопічні формули типу Ґріна-Кубо. Відмітимо, що коефіцієнти переносу залежать від величини магнітного поля h і володіють такими властивостями симетрії

$$L_{ii}(h) = L_{ii}(-h) \text{ і } L_{sh}(h) = -L_{hs}(-h).$$

Як слідує з (10) спектр гідродинамічних колективних збуджень знаходиться як розв'язок секулярної задачі (або ж задачі на власні значення) для узагальненого гідродинамічного оператора

$$T_H(k) = \|T_{ij}(k)\| = -i\Omega_0^H(k) + \phi_H(k).$$

[2] При цьому $L_{hs} = L_{sh}$.

Подібним чином розв'язок для гідродинамічних часових кореляційних функцій може бути записаний у формі [26]

$$F_{ij}(k,t) = \sum_{\delta} G^{\delta}_{ij}(k)\ e^{-z_\delta(k)t}, \tag{22}$$

де $G^{\delta}_{ij}(k)$ - вагові коефіцієнти, що характеризують вклад у функцію $F_{ij}(k,t)$ гідродинамічного збудження з дисперсією $z_\delta(k)$. Коефіцієнти $G^{\delta}_{ij}(k)$ можна виразити через елементи матриці власних векторів $\hat{X} = \|\hat{X}_{i,\delta}(k)\|$ гідродинамічного оператора $T_H(k)$, а саме для випадку ортогонального набору динамічних змінних отримаємо

$$G^{\delta}_{ij}(k) = \hat{X}_{i,\delta}\hat{X}^{-1}_{\delta,j}\ F_{jj}(k). \tag{23}$$

Матриця $\hat{X}^{-1}$ є оберненою до $\hat{X} = \|\hat{X}_\delta\|$. Для аналітичних розрахунків коефіцієнтів $G^{\delta}_{ij}(\mathbf{k})$ можна також використати еквівалентні до (23) вирази у формі

$$G^{\delta}_{ij}(k) = -\frac{\partial z_\delta}{\partial T^{ji}_H} F_{jj}(k),$$

або ж

$$G^{\delta}(k) = \frac{\prod\limits_{f\neq\delta} (T_H(k) - z_f(k))}{\prod\limits_{f\neq\delta} (z_\delta(k) - z_f(k))}\ F(k),$$

останній з яких слідує з теореми Сільвестра. У гідродинамічній границі вагові коефіцієнти та спектр колективних мод можна шукати у вигляді розвинень за малим параметром, яким є модуль хвильового вектора $\mathbf{k}$.

4. Спектр колективних збуджень та динамічні структурні фактори

Власні значення гідродинамічної матриці $T_H(k)$ дають спектр гідродинамічних колективних збуджень [20]. При цьому отримуємо:

(i) дві комплексно-спряжені звукові моди

$$z_{s_\pm} = \pm ikv_s + D_s k^2;$$

(ii) гідродинамічну теплову моду

$$z_h = D_h k^2,$$

(iii) гідродинамічну спін-дифузійну моду

$$z_m = D_m k^2,$$

де

$$v_s = \frac{\gamma_m}{\rho \kappa_{T,m}} = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{s,m}$$

- адіабатична швидкість звуку при постійному магнітному моменті m, а коефіцієнти згасання мають наступний вигляд

$$D_s = \frac{1}{2}\frac{\eta_l}{n\mathrm{m}} + \frac{1}{2}\frac{(\gamma_m - 1)\lambda}{n c_{P,m}} + \frac{1}{2}\frac{(1-\delta_T)L_{ss}}{n\gamma_m \bar{\chi}_{T,n}} + \frac{\beta_{P,m}\pi_{T,P}L_{sh}}{n^2\kappa_{T,h}\bar{\chi}_{T,n}c_{P,m}},$$

$$D_m = \beta - \sqrt{\beta^2 + \zeta},$$

$$D_h = \beta + \sqrt{\beta^2 + \zeta}.$$

Параметри β і ζ означені виразами

$$\beta = \frac{1}{2}\frac{\lambda}{n c_{P,m}} + \frac{1}{2}\frac{L_{ss}}{n\gamma_m \bar{\chi}_{T,n}}(\gamma_m + \delta_T - 1) + \frac{\beta_{P,m}\pi_{T,P}L_{sh}}{n^2\kappa_{T,h}\bar{\chi}_{T,n}c_{P,m}},$$

$$\zeta = \frac{\lambda L_{ss}T - L_{sh}^2}{n^2 c_{P,m} T \bar{\chi}_{T,h}}\delta_T.$$

де $\delta_T = \kappa_{T,m}/\kappa_{T,h}$ та $\gamma_m = C_{P,m}/C_{n,m}$ - відношення ізотермічних стисливостей і питомих теплоємностей, відповідно.

В парамагнітному випадку, коли зовнішнє магнітне поле $h = 0$, із виразів приведених вище отримуємо результати, відомі в теорії простих рідин та твердотільних магнетиків:

$$z_s^0 = \pm ik\sqrt{\frac{\gamma}{\rho\kappa_T}} + \Gamma k^2,$$

$$z_h^0 = k^2\frac{\lambda}{n c_P}, \qquad z_s^0 = k^2\frac{L_{ss}}{n\bar{\chi}_{T,n}},$$

де

$$\Gamma = \frac{1}{2}\left(\lambda\frac{\gamma - 1}{n c_P} + \frac{\eta_l}{\rho}\right).$$

Найбільш цікавими з гідродинамічних часових кореляційних функцій є функції “густина - густина” та “спінова густина - спінова густина”, які можуть бути отримані з експериментів по розсіюванні. Їхні фур’є-образи дають відповідно динамічний структурний фактор $S(k,\omega)$ і магнітний динамічний структурний фактор $S_m(k,\omega)$.

Використовуючи формулу (22), після певних розрахунків ці функції можна записати наступним чином

$$\frac{S(k,\omega)}{S(k)} = \frac{\delta_T}{2\pi\gamma_m}\sum_{\sigma=+,-}\frac{D_s k^2 - \sigma k\left(\omega/v_s + \sigma k\right) b_n}{(\omega+\sigma k v_s)^2 + (D_s k^2)^2} + \frac{1}{\pi}\sum_{\sigma=h,m}\frac{\mathcal{G}_\sigma^n D_\sigma k^2}{\omega^2 + (D_\sigma k^2)^2}, \tag{24}$$

$$\frac{S_m(k,\omega)}{S_m(k)} = \frac{1-\delta_T}{2\pi\gamma_m}\sum_{\sigma=+,-}\frac{D_s k^2 - \sigma k\left(\omega/v_s + \sigma k\right) b_m}{(\omega+\sigma k v_s)^2 + (D_s k^2)^2} + \frac{1}{\pi}\sum_{\sigma=h,m}\frac{\mathcal{G}_\sigma^m D_\sigma k^2}{\omega^2 + (D_\sigma k^2)^2}, \tag{25}$$

де

$$b_n = \frac{\eta_l}{n\mathrm{m}} - 3D_s, \quad b_m = b_n + 2\frac{L_{ss}}{n\bar{\chi}_{T,n}} + 2\frac{L_{sh}\beta_{P,m}}{\pi_{T,P}\delta_T n c_{n,m}},$$

$$\mathcal{G}_h^n = \frac{\delta_T}{\gamma_m(D_m - D_h)}\left(\frac{\eta_l}{\mathrm{m}n} - 2D_s - (1-\frac{\gamma_m}{\delta_T})D_m\right),$$

$$\mathcal{G}_m^n = \frac{\delta_T}{\gamma_m(D_h - D_m)}\left(\frac{\eta_l}{\mathrm{m}n} - 2D_s - (1-\frac{\gamma_m}{\delta_T})D_h\right),$$

$$\mathcal{G}_h^m = \frac{1}{\gamma_m(D_m - D_h)}\left(\frac{\lambda\delta_T}{n c_{n,m}} - (\delta_T + \gamma_m - 1)D_h\right),$$

$$\mathcal{G}_m^m = \frac{1}{\gamma_m(D_h - D_m)}\left(\frac{\lambda\delta_T}{n c_{n,m}} - (\delta_T + \gamma_m - 1)D_m\right).$$

У випадку $h = 0$ вираз для динамічного структурного фактора $S(k,\omega)$ зводиться до відомої у літературі формули Ландау-Плачека [23,24]

$$\frac{S(k,\omega)}{S(k)} = \frac{1}{2\pi\gamma}\sum_{\sigma=+,-}\frac{\Gamma k^2 - \sigma\ k(\omega/v_s + \sigma k)\left(\eta_l/\rho - 3\Gamma\right)}{(\omega+\sigma v_s k)^2 + (\Gamma k^2)^2} + \frac{1}{\pi}\frac{\gamma-1}{\gamma}\frac{k^2\lambda/nc_P}{\omega^2 + (k^2\lambda/nc_P)^2}. \tag{26}$$

Магнітний динамічний структурний фактор $S_m(k,\omega)$ у цьому випадку міститиме лише вклад від дифузійної спінової моди [25]

$$\frac{S_m(k,\omega)}{S_m(k)} = \frac{1}{\pi}\frac{k^2 L_{ss}/n\bar{\chi}_{T,n}}{\omega^2 + (k^2 L_{ss}/n\bar{\chi}_{T,n})^2}. \tag{27}$$

Суттєво відмітити при цьому, що при наявності зовнішнього магнітного поля, динамічний структурний фактор $S_m(k,\omega)$ міститеме вклад від звукових збуджень (бріллюенівські піки).

5. Часові кореляційні функції

За схемою описаною вище (див. (23)) були виконані також розрахунки усіх інших часових кореляційних функцій, які формують матрицю $F(k,t)$, і знайдені для них аналітичні вирази в гідродинамічній границі.

Елементи матриці часових кореляційних функцій $F(k,t)$, які побудовані на змінних $\{\hat{n},\hat{h},\hat{s}\}$, залишаються незмінними при перестановці індексів, тобто для них маємо

$$F_{ij}(k,\omega) = F_{ji}(k,\omega).$$

Відповідно фур'є-зображення часових кореляційних функцій (або ж спектральні функції) з індексами $ij = \{nh, ns, sn, hn, hh, sh, hs\}$ можна записати у такому загальному вигляді

$$\frac{F_{ij}(k,\omega)}{F_{jj}(k)} = \frac{1}{2\pi\gamma_m}\sum_{\sigma=+,-}\frac{D_s\mathcal{G}^s_{ij}k^2 - \sigma k\left(\omega/v_s + \sigma k\right)b_{ij}}{(\omega+\sigma k v_s)^2 + (D_s k^2)^2} + \frac{1}{\pi\gamma_m}\sum_{\sigma=h,m}\frac{D_\sigma\mathcal{G}^\sigma_{ij}k^2}{\omega^2 + (D_\sigma k^2)^2} \tag{28}$$

Для функції $F_{hh}(k,\omega)$ коефіцієнти b_{hh}, $\mathcal{G}^s_{hh}$, $\mathcal{G}^\sigma_{hh}$ мають наступний вигляд

$$\mathcal{G}^s_{hh} \equiv \mathcal{G}^s_h = \gamma_m - 1,$$

$$b_{hh} \equiv b_h = \mathcal{G}^s_h\left[b_n + 2\frac{\lambda}{nc_{n,m}} + 2\frac{\delta_T\pi_{T,P}L_{sh}}{nT\beta_{P,m}\bar{\chi}_{T,n}}\right],$$

$$\mathcal{G}^h_{hh} \equiv \mathcal{G}^h_h = \mathcal{G}^h_h(D_h,D_m) = \frac{1}{(D_m - D_h)}\left(-D_h + \frac{\delta_T L_{ss}}{n\bar{\chi}_{T,n}}\right),$$

$$\mathcal{G}^m_{hh} \equiv \mathcal{G}^m_h = \mathcal{G}^h_h(D_m,D_h) = \frac{1}{(D_h - D_m)}\left(-D_m + \frac{\delta_T L_{ss}}{n\bar{\chi}_{T,n}}\right).$$

Для коефіцієнтів b_{nh}, $\mathcal{G}^s_{nh}$, $\mathcal{G}^\sigma_{nh}$ часової корреляційної функції $F_{nh}(k,\omega)$ знаходимо

$$\mathcal{G}^s_{nh} = \mathcal{G}^s_{hn} = \frac{\beta_{P,m}}{c_{n,m}},\quad b_{nh} = \mathcal{G}^s_{nh}\left[b_n + \frac{\lambda}{nc_{n,m}} + \frac{\delta_T\pi_{T,P}L_{sh}}{nT\beta_{P,m}\bar{\chi}_{T,n}}\right],$$

$$\mathcal{G}^h_{nh} = \mathcal{G}^h_{nh}(D_m, D_h) = \frac{\mathcal{G}^s_{nh}}{(D_m - D_h)}\left[D_h - \frac{L_{ss}}{n\bar{\chi}_{T,n}} + \frac{\delta_T \pi_{T,P} L_{sh}}{nT\beta_{P,m}\bar{\chi}_{T,n}}\right],$$

$$\mathcal{G}^m_{nh} = \mathcal{G}^h_{nh}(D_h, D_m) = \frac{\mathcal{G}^s_{nh}}{(D_h - D_m)}\left[D_m - \frac{L_{ss}}{n\bar{\chi}_{T,n}} + \frac{\delta_T \pi_{T,P} L_{sh}}{nT\beta_{P,m}\bar{\chi}_{T,n}}\right].$$

Коефіцієнти b_{ns}, $\mathcal{G}^s_{ns}$, $\mathcal{G}^\sigma_{ns}$ для функції $F_{ns}(k,\omega)$ такі

$$\mathcal{G}^s_{ns} = \mathcal{G}^s_{sn} = \frac{\delta_T \pi_{T,P}}{\bar{\chi}_{T,n}}, \quad b_{ns} = \mathcal{G}^s_{ns}\left[b_n + \frac{L_{ss}}{n\bar{\chi}_{T,n}} + \frac{\beta_{P,m} L_{sh}}{\delta_T n c_{n,m} \pi_{T,P}}\right],$$

$$\mathcal{G}^h_{ns} = \mathcal{G}^h_{ns}(D_m, D_h) = \frac{\mathcal{G}^s_{ns}}{(D_m - D_h)}\left[D_h - \frac{\lambda}{nc_{n,m}} + \frac{\beta_{P,m} L_{sh}}{\delta_T \pi_{T,P} n c_{n,m}}\right],$$

$$\mathcal{G}^m_{ns} = \mathcal{G}^h_{ns}(D_h, D_m) = \frac{\mathcal{G}^s_{ns}}{(D_h - D_m)}\left[D_m - \frac{\lambda}{nc_{n,m}} + \frac{\beta_{P,m} L_{sh}}{\delta_T \pi_{T,P} n c_{n,m}}\right].$$

Для кореляційної функції $F_{sh}(k,\omega)$ коефіцієнти b_{sh}, $\mathcal{G}^s_{sh}$, $\mathcal{G}^\sigma_{sh}$ мають наступний вигляд

$$\mathcal{G}^s_{sh} = \mathcal{G}^s_{hs} = \frac{\beta_{P,m}\pi_{T,P}}{\kappa_{T,h} n c_{n,m}},$$

$$b_{sh} = \mathcal{G}^s_{sh}\left[b_n + \frac{\lambda}{nc_{n,m}} + \frac{L_{ss}}{n\bar{\chi}_{T,n}} - \frac{\kappa_{T,h} L_{sh}}{T\beta_{P,m}\pi_{T,P}}(\delta_T - \gamma_m)\right],$$

$$\mathcal{G}^h_{sh} == \mathcal{G}^h_{sh}(D_m, D_h) = \frac{\mathcal{G}^s_{sh}}{(D_m - D_h)}\left(D_h - \frac{\delta_T \kappa_{T,h} L_{sh}}{T\beta_{P,m}\pi_{T,P}}\right),$$

$$\mathcal{G}^m_{sh} == \mathcal{G}^h_{sh}(D_h, D_m) = \frac{\mathcal{G}^s_{sh}}{(D_h - D_m)}\left(D_m - \frac{\delta_T \kappa_{T,h} L_{sh}}{T\beta_{P,m}\pi_{T,P}}\right).$$

Часова кореляційна функція “імпульс-імпульс” містить лише вклади від звукових мод

$$\frac{F_{pp}(k,\omega)}{F_{pp}(k)} = \frac{1}{2\pi}\sum_{\sigma=+,-}\frac{D_s k^2 - \sigma k\,(\omega/v_s + \sigma k)\,(\eta_l/n\mathrm{m} - D_s)}{(\omega + \sigma k)^2 + (D_s k^2)^2}. \qquad (29)$$

Часові кореляційні функції з індексами $ij = \{pn, ph, ps\}$ в загальному вигляді записуються наступним чином

$$\frac{F_{ij}(k,t)}{F_{jj}(k)} = \sum_{\sigma=+,-,h,m} G^\sigma_{ij}\exp\{-z_\alpha t\}. \qquad (30)$$

Для дійсних та уявних частин вагових коефіцієнтів G^σ_{ij} функції $F_{pn}(k,t)$ маємо

$$\mathrm{Re}\ G^h_{pn} = \mathrm{Re}\ G^m_{pn} = 0, \quad \mathrm{Re}\ G^+_{pn} = -\mathrm{Re}\ G^-_{pn} = -\frac{1}{2nv_s\kappa_{T,h}},$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\,G^h_{pn} &= \mathrm{Im}\,G^h_{pn}(D_m,D_h)\\ &= k\,\frac{\delta_T \mathrm{m}}{\gamma_m}\frac{D_h}{D_m-D_h}\left[(\frac{\gamma_m}{\delta_T}-1)D_m-2D_s+\frac{\eta_l}{n\mathrm{m}}\right],\end{aligned}$$

$$\mathrm{Im}\,G^m_{pn}=\mathrm{Im}\,G^h_{pn}(D_h,D_m),\quad \mathrm{Im}\,G^+_{pn}=\mathrm{Im}\,G^-_{pn}=k\,\frac{\delta_T\mathrm{m}}{2\gamma_m}\left[\frac{\eta_l}{n\mathrm{m}}-2D_s\right].$$

Вагові коефіцієнти функції $F_{ph}(k,t)$ мають наступний вигляд

$$\mathrm{Re}\,G^h_{ph}=\mathrm{Re}\,G^m_{ph}=0,\quad \mathrm{Re}\,G^+_{ph}=-\mathrm{Re}\,G^-_{ph}=-\frac{\beta_{P,m}}{2nv_s\kappa_{T,h}\delta_T c_{n,m}},$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\,G^h_{ph} &= \mathrm{Im}\,G^h_{ph}(D_m,D_h)\\ &= k\,\frac{\beta_{P,m}\mathrm{m}}{\gamma_m c_{n,m}}\frac{D_h}{D_m-D_h}\left[D_h-\frac{L_{ss}}{n\bar{\chi}_{T,n}}+\frac{\delta_T\pi_{T,P}L_{sh}}{Tn\beta_{P,m}\bar{\chi}_{T,n}}\right],\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\,G^m_{ph} &= \mathrm{Im}\,G^h_{ph}(D_h,D_m),\quad \mathrm{Im}\,G^+_{ph}=\mathrm{Im}\,G^-_{ph}\\ &= k\,\frac{\beta_{P,m}\mathrm{m}}{2\gamma_m c_{n,m}}\left[\frac{\eta_l}{n\mathrm{m}}-2D_s+\frac{\lambda}{nc_{n,m}}+\frac{\delta_T\pi_{T,P}L_{sh}}{Tn\beta_{P,m}\bar{\chi}_{T,n}}\right].\end{aligned}$$

І накінець для часової кореляційної функції $F_{ps}(k,t)$ знаходимо

$$\mathrm{Re}\,G^h_{ps}=\mathrm{Re}\,G^m_{ps}=0,\quad \mathrm{Re}\,G^+_{ps}=-\mathrm{Re}\,G^-_{ps}=-\frac{\pi_{T,P}}{2nv_s\kappa_{T,h}\bar{\chi}_{T,n}},$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\,G^h_{ps} &= \mathrm{Im}\,G^h_{ps}(D_m,D_h)\\ &= k\,\frac{\delta_T\pi_{T,P}\mathrm{m}}{\gamma_m\bar{\chi}_{T,n}}\frac{D_h}{D_m-D_h}\left[D_h-\frac{\lambda}{nc_{n,m}}+\frac{\beta_{P,m}L_{sh}}{nc_{n,m}\delta_T\pi_{T,P}}\right],\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\,G^m_{ps} &= \mathrm{Im}\,G^h_{ps}(D_h,D_m),\quad \mathrm{Im}\,G^+_{ps}=\mathrm{Im}\,G^-_{ps}\\ &= k\,\frac{\pi_{T,P}\delta_T\mathrm{m}}{2\gamma_m\bar{\chi}_{T,m}}\left[\frac{\eta_l}{n\mathrm{m}}-2D_s+\frac{L_{ss}}{n\bar{\chi}_{T,n}}+\frac{\beta_{P,m}L_{sh}}{nc_{n,m}\delta_T\pi_{T,P}}\right].\end{aligned}$$

Зауважимо, що як неважко переконатися, для усіх часових кореляційних функцій у формі приведеній вище виконується нульове правило моментів. В граничному випадку $h=0$ отримані результати для гідродинамічних часових кореляційних функцій формально співпадають з виразами відомими для простих рідин [23,24].

6. Висновки

На підставі проведеного дослідження можна зробити наступні висновки:

(i) швидкість звуку гайзенбергівської моделі ферофлюїду є ізотропною і виражається через адіабатичну стисливість системи при постійному магнітному моменті;

(ii) усі термодинамічні величини та коефіцієнти переносу у виразах, поданих вище, залежать від величини магнітного поля h. Для випадку, коли зовнішнє магнітне поле відсутнє ($h \to 0$) і система перебуває у парамагнітному стані динамічні структурні фактори (24) і (25) мають найбільш просту структуру. Наприклад, у цьому випадку лише спін-дифузійна мода буде давати ненульовий вклад до магнітного структурного фактора $S_m(k,\omega)$. З іншого боку вклад від цієї моди буде відсутній у виразі для структурного фактора $S_n(k,\omega)$;

(iii) в силу взаємодії між “рідинною” та “магнітною” підсистемами для випадку ненульового магнітного поля h магнітний структурний фактор $S_m(k,\omega)$ матиме додаткові бокові піки на звуковій частоті. Для слабих полів вклад від звукових мод пропорційний h^2. Це передбачення можна експериментально перевірити в експериментах по розсіянню;

(iv) коефіцієнти Ландау-Плачека [23,24], що характеризують відношенняінтегральних інтенсивностей на нульовій частоті та частоті звукових збуджень, отримуються із виразів отриманих в роботі для функцій $F_{nn}(k,\omega) = S(k,\omega)$, $F_{hh}(k,\omega)$ та $F_{mm}(k,\omega) = S_m(k,\omega)$. Вони рівні, відповідно, $(\gamma_m - \delta_T)/\delta_T$, $1/(\gamma_m - 1)$ і $(\gamma_m - 1 + \delta_T)/(1 - \delta_T)$. Отримані результати можуть бути корисними при інтерпретації експериментальних даних або ж результатів компютерних симуляцій.

Література

1. Lomba E., Weis J.J., Stell G. Phase transition in a continuum model of the classical Heisenberg magnet: The ferromagnetic system. // Phys. Rev. E- 1994.- V.49, No 6.- P.5159-5178.
2. Nijmeijer M.J.P., Weis J.J. Monte Carlo simulation of the ferromagnetic order-disorder transition in a Heisenberg fluid. // Phys. Rev. Lett.- 1995.- V.75, No 15.- P.2887-2890.
3. Vakarchuk I.A., Ponedilok G.V., Rudavskii Yu.K. Theory of liquid magnets. // Teor. Mat. Fiz., 1984, vol. 58, p. 291–302 (in Russian).

4. Vakarchuk I.A., Rudavskii Yu.K., Ponedilok G.V. Free energy of the amorphous ferromagnets with Heisenberg exchange Interaction and liquid-like disorder. // Phys. Stat. Sol. B, 1985, vol. 128, p. 231–242.
5. Tavares J.M., Telo de Gama M.M., Teixeira P.I.C., Weis J.J. and Nijmeijer M.J.P. Phase diagram and critical behavior of the ferromagnetic Heisenber fluid from density-functional theory. // Phys. Rev. E.- 1995.- V.52, No 2.- P.1915-1929.
6. Schinagl F., Folk R., Iro H. Multicritical bahavior in magnetic fluids. // Cond. Matt. Phys.- 1999 (in press).
7. Henjes K. // Ann. Phys.- 1993.- V.223, P.277.
8. Akhiezer I.A., Akhiezer I.T. Oscillations of a ferromagnet liquid. // Sov. Phys. JETP, 1984, vol. 59, No 1, p. 68–70.
9. Hubbard J.B., Stiles P.J. Hydrodynamics of magnetic and dielectric-colloidal systems. // J. Chem. Phys., 1986, vol. 84, No 12, p. 6955–6968.
10. Blums E., Cebers A., Maiorov M.M. Magnetic fluids.- Berlin, New York: Walter de Guyter, 1997, 416 p.
11. Kalaf T.R., Wu T.M. Model calculation for a liquid ferromagnet//Phys. Rev.B- 1978.- V.18, No1.- P.448-452.
12. Muller M., Guntherodt H.-J.// J. Magn. Mater. **15** (1980) 18 P.1345
13. Busch G., Guentherodt H.-J. Ferromagnetic Behavior of liquid alloys. // Phys. Lett. A.- 1968.- V.27, No 2.- P.110-112.
14. Chen H.S., Sherwood R.C., Gyorgy E.M. The influence of composition and aging on the Curie temperature of metallic glasses. // IEEE Trans.Magn. MAG.- 1977.- V.13, No 5.- P.1538-1540.
15. Albrecht T., Bührer C., Fähnle M., Maier K., Platzek D., Reske J. // Appl. Phys. A - 1997.- V.65, p.215.
16. Rubi J.M., Miguel M.C. Transport phenomena in ferrofluids// Physica A- 1993.- V.194.- P.209-217.
17. Felderhof B.U., Jones R.B. Orientational relaxation in a colloidal Heisenberg model// Phys. Rev.E- 1993.- V.48, No2.- P.1142-1153.
18. Coffey W.T., Kalmykov Yu.P., Quinn K.P. On the calculation of field-dependent relaxation times from the noninertial Langevin equation// J.Chem. Phys.- 1992.- V.92, No7.- P.5471-5481.
19. Mryglod I.M., Tokarchuk M.V., Folk R. On the hydrodynamic theory ofa magnetic liquid. I. General description. // Physica A, 1995, vol. 220,No 3-4, p. 325–348.
20. Mryglod I.M., Folk R. On the hydrodynamic theory of a magnetic liquid. II. Hydrodynamic modes in the Heisenberg fluid. // Physica A, 1996, vol. 234, No 1-2, p. 129–150.
21. Zubarev D.N. Nonequilibrium statical thermodynamics. New–York,

Consultant Bureau, 1974.

22. Zubarev D.N. Modern methods of the statistical theory of nonequilibrium processes.- In: Itogi Nauki i Tekhniki, Sovr. Prob. Mat./ VINITI, 1980, vol. 15, p. 131-226 (in Russian).
23. Boon J.P., Yip S. Molecular hydrodynamics. New-York, McGraw-Hill Inc., 1980.
24. Hansen J.P., McDonald I.R. Theory of simple liquids. 2nd ed., London, Academic Press, 1986.
25. Schwable F., Michel K.H. Hydrodynamics of Heisenberg ferromagnets// Phys. Rev.B.- 1970.- V.2, No1.- P.189-205.
26. Mryglod I.M. Generalized statistical hydrodynamics of fluids: Approach of generalized collective modes. // Cond. Matt. Phys.- 1998.- V.1, No 4(16) (in press).

Ігор Миронович Мриглод
Юрій Кирилович Рудавський
Сергій Орестович Дубик
Михайло Васильович Токарчук

До статистичної гідродинаміки гайзенбергівської моделі ферофлюїду.

Роботу отримано 16 листопада 1998 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України