ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИВОЙ НАМАГНИЧИВАНИЯ ИЗОТРОПНОГО АНСАМБЛЯ ОДНОДОМЕННЫХ ЗЕРЕН С ПРЕОБЛАДАНИЕМ КУБИЧЕСКОЙ МАГНИТОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИИ.

Сафрошкин В.Ю.
Ф-т Почвоведения МГУ.

Рассчитаны зависимости остаточной намагниченности от магнитного поля при намагничивании из нулевого состояния ансамбля однодоменных однородных ферримагнитных зерен с кубической анизотропией для случаев $K_1 > 0$ и $K_1 < 0$.

Краткое изложение результатов.

Достаточно давно известен вид кривых нормального намагничивания для некоторых простейших систем. На рис.1 приведены кривые $J_r(H)$ и первой ее производной для ОД зерен с одноосной анизотропией /2/. А на рис.2 приведены кривые для МД зерен со смещением 180 границ - /1/.

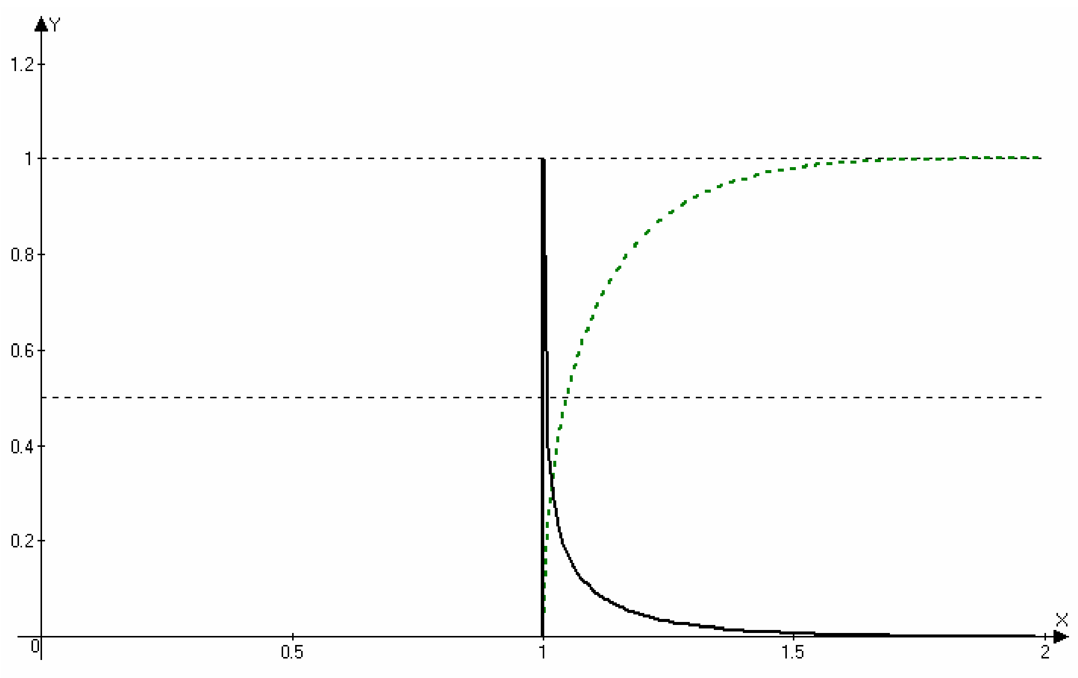

Рис.1

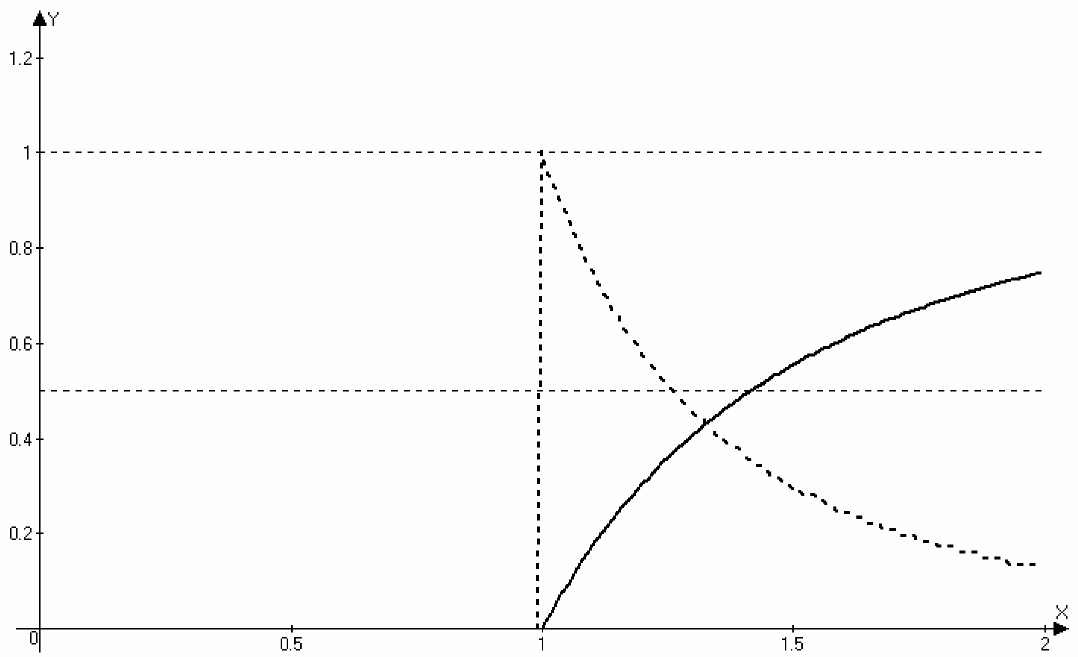

Рис.2

На рис.3 и 4 приведены полученные нами результаты для ОД зерен при положительном значении первой константы кубической анизотропии и отрицательном ее значении, соответственно.

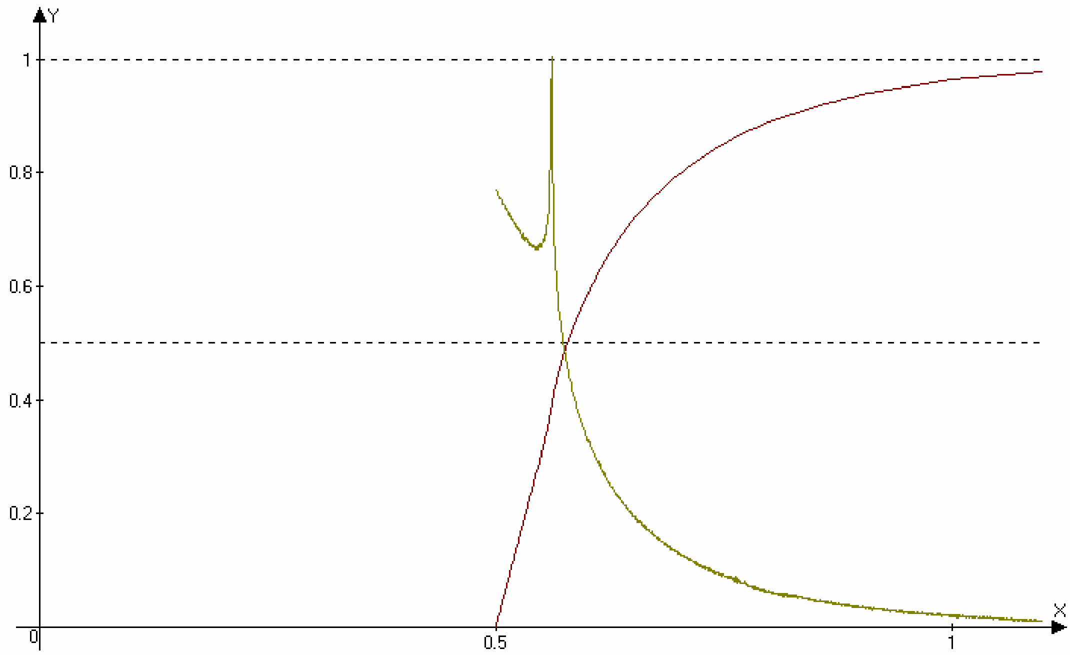

Рис.3, случай $K_1 > 0$.

Что отложено по осям на рис.1 – рис.4 ? По вертикальной - $J_r(H) / J_{rs}$, т.е. нормированная кривая намагничивания из нулевого состояния и $(dJ_r(H)/dH) / (dJ_r(H)/dH)_{max}$ – первая от нее производная, нормированная на единицу. По горизонтальной оси: рис.1 – $2K_u/J_s$, т.е. H/H_c для однодоменных зерен с одноосной анизотропией, рис.2 - H/H_c для однородных многодоменных зерен, изменение намагниченности в которых вызвано смещением 180^o границ, рис.3 и рис.4 – $H/(2|K_1|/J_s)$, где K_1 – первая константа кубической анизотропии. В отличие от одноосных ОД зерен, $2K_1/J_s$ уже не совпадает с H_c, но имеет тот же порядок величины.

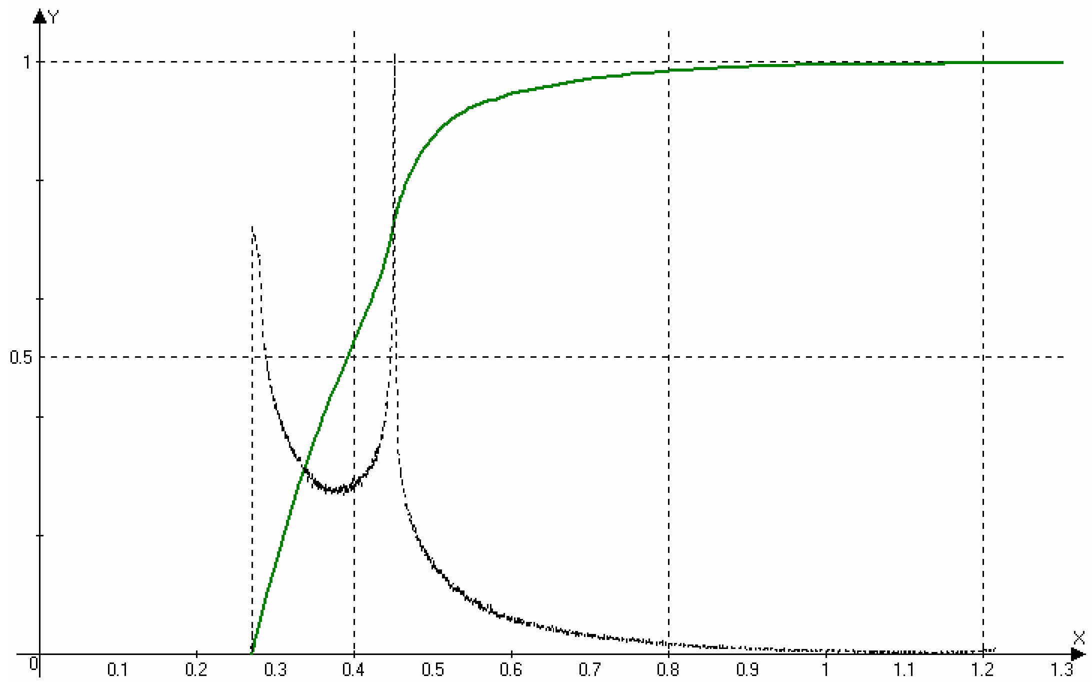

Рис.4.

Точность полученных данных определяется числом ОД зерен в моделируемой системе. Расчеты проводились в 93 г, N составило 10^6 , что обеспечивает относительную погрешность вычисления $J_r(H)$ около 10^{-4}, а относительная погрешность вычисления первой производной – около 10^{-2}. В настоящее время, при времени счета около 4 мин. легко можно смоделировать ансамбль с N = 10^7, что на порядок улучшит точность определения $J_r(H)$. Табличные данные, с числом строк = 10^3 хранятся у автора и могут быть высланы желающим по электронной почте, заявку можно отправить на персональной станичке автора на сервере www.rockmagnetism.ru .

Для проверки отсутствия грубых ошибок в алгоритме, при суммировании данных по перемагничиванию единичных зерен входящих в ансамбль, одновременно вычислялось отношение J_{rs}/J_s в предположении изотропной ориентации осей легкого намагничения в пространстве для всех зерен в целом и $K_1 > 0$. Полученное нами значение J_{rs}/J_s = 0.83119 является уточнением более раннего расчета J_{rs}/J_s = 0.83 /Неель , 3/.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Актуальность.

Вид петли по остаточному гистерезису (и кривая нормального намагничивания, как частный случай намагничивания из нулевого состояния) не интересовал исследователей, работающих с техническими ферримагнетиками, иначе был бы давно рассчитан и опубликован. Из имеющихся работ, поэтому, можно сослаться только на /Акулов, 2/ где приводится кривая полного гистерезиса для кубического монокристалла в плоскости (1, 0, 0). Вместе с тем, знать как ведут себя при приобретении изотермической намагниченности основные компоненты ферримагнитной фракции горных пород полезно, чтобы не заниматься ложной интерпретацией наблюдаемых артефактов там, где они могут быть объяснены более простым образом. В состав фракции могут входить в любом сочетании – ОД зерна с одноосной анизотропией, ОД зерна с кубической анизотропией, ПОД зерна, как близкие к ОД, так и почти МД, МД зерна, в которых определяющим является смещение 180° границ, и они же, с преобладающим влиянием 90° границ (можно упомянуть парамагнитную часть фракции, антиферромагнитную, и много еще чего). В процессе дискуссии, при обсуждении актуальности данной работы, проф.Трухин В.И. высказал замечание, что в природе влияние кубической анизотропии ничтожно, так как даже при небольших отклонениях формы зерен от изометричной, анизотропия формы начинает преобладать и ее роль становится решающей. Отвечаю на это замечание: если взять чистый магнетит, то расчет показывает, что энергия связанная с анизотропией формы преобладает в его зернах с формой эллипсоида при соотношении длинной оси к короткой свыше 1.3. Но возьмем морской базальт, не очень старый. Самый лучший пример - драгированные образцы из Красного моря, по которым имеется более десятка публикаций. У них отношение J_{rs}/J_s от 0.6 до 0.7 – это типовое значение, единственным объяснением которого может быть наличие во

фракции значительной доли зерен с преобладанием кубической анизотропией, так как для ОД зерен с одноосной анизотропией предельное значение $J_{rs}/J_s = 0.5$ / 2 /. А снижение влияния анизотропии формы у подобных базальтов объясняется тремя факторами – большим значением K_1 в титаномагнетите по сравнению с магнетитом; меньшим значением спонтанной намагниченности насыщения J_s; влиянием однофазного окисления, в начале которого значение K_1 возрастает по сравнению с неокисленным титаномагнетитом.

МЕТОД РАСЧЕТА и МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ.

Зависимость энергии ОД зерна с кубической анизотропией от вектора намагниченности имеет достаточно сложный вид, в котором имеются члены высокого порядка зависящие от K_2, K_3 и т.д. Мы ограничимся первым членом. В отсутствие внешнего магнитного поля энергия будет описываться выражением

$$E = K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2) \qquad (1)$$

где $K_1 > 0$ или $K_1 < 0$. В присутствие поля H она уменьшается на величину $J_s H\cos(\theta)$, где θ - угол между направлениями магнитного момента зерна и внешнего магнитного поля. Перейдем к сферической системе координат θ и φ, в которой направляющие косинусы декартовой системы равны:

$$\alpha_1 = \sin(\theta)\cos(\varphi)$$
$$\alpha_2 = \sin(\theta)\sin(\varphi)$$
$$\alpha_3 = \cos(\theta) \quad .$$

Уравнение (1) примет вид:

$$E = K_1\left(\sin^2(2\theta) + \sin^4\theta * \sin^2(2\varphi)\right) \qquad (2)$$

заметим, что при $K_1 > 0$ оси легкого намагничивания совпадают с декартовыми.

Для построения модели мы допустим, что все N зерен абсолютно одинаковы, магнитостатическое взаимодействие между ними пренебрежимо мало, все различия состоят в их различной ориентации в пространстве. Пусть в размагниченном состоянии магнитные моменты зерен направлены в пространстве случайным образом и компенсируют друг друга. При большом N это даст изотропное распределение по сфере, которое означает, что вероятность попадания в некоторую область будет пропорциональна телесному углу $dW = \sin\Theta d\Theta d\varphi = d(-\cos\Theta)d\varphi$. Так как Θ и φ в сферической системе координат независимы, то можно использовать два генератора случайных чисел с равномерной плотностью для φ на интервале $[0, 2\pi]$ и для $\cos\Theta$ на интервале [1,-1].

Для каждого зерна с номером "i" выберем локальную систему координат, ось z в которой совпадает с его магнитным моментом в отсутствие поля. При воздействии магнитного поля H, направление которого в локальной системе координат задается углами Θ_{0i} и φ_{0i} равновесное направление намагниченности зерна должно удовлетворять уравнениям:

$$\frac{\partial E_i}{\partial \theta_i} = 0 = \frac{1}{2} K_1 \left[\sin(4\theta_i) + \sin^2 \theta_i \sin(2\theta_i) \sin^2(2\varphi_i) \right] + HJ_s \left(\sin\theta_i \cos\theta_{0i} - \cos\theta_i \sin\theta_{0i} \right) \cos(\varphi_i - \varphi_{0i})$$

$$\frac{\partial E_i}{\partial \varphi_i} = 0 = 4K_1 \sin^4 \theta_i \sin(2\varphi_i) \cos(2\varphi_i) + HJ_s \sin\theta_i \sin\theta_{0i} \sin(\varphi_i - \varphi_{0i}) \qquad (3a)$$

Необратимое вращение намагниченности происходит в точке неустойчивого равновесия (срыва), когда кривизна поверхности эллипсоида энегии становится равной нулю. Это достигается в случае равенства нулю квадратичной формы:

$$\frac{\partial^2 E_i}{\partial \theta_i^2} \frac{\partial^2 E_i}{\partial \varphi_i^2} + \left(\frac{\partial^2 E_i}{\partial \theta_i \, \partial \varphi_i} \right)^2 = 0 \qquad (3b)$$

это приводит к системе из трех уравнений в частных производных относительно Θ, φ и H которую можно решить методом Ньютона. Графический анализ выражений *dE_i* / dΘ и *dE_i* / dφ показал, что система уравнений (3), за исключением крайне узкой области значений Θ_{0i}, при которых переход через потенциальный барьер происходит за счет обратимого вращения, имеет единственное решение. Следовательно, возможно численное решение системы (3) для каждого зерна в отдельности, так как в этом случае параметры Θ_{0i} и φ_{0i} являются константами.

При $K_1>0$ задача симметрична относительно поворота по φ на $\pi/2$ поэтому переход к углам φ_{0i} и Θ_{0i} осуществлялся по формулам: $\varphi_{0i}=a_i\pi/4$, $\Theta_{0i}=\arccos(b_i)$. Выберем общую систему координат для ОД зерна таким образом, чтобы ось z была направлена вдоль магнитного поля, а оси x и y - некоторым произвольным образом. В отсутствие магнитного поля направление остаточной намагниченности ферримагнитного зерна с порядковым номером i, будет совпадать с одной из его осей легкого намагничивания и задаваться углами Θ_{0i} и φ_{0i} в системе координат связанной с (отсутствующим пока) полем. Решение задачи о необратимом вращении намагниченности этого зерна мы в каждом случае будем проводить в локальной системе координат с тем же порядковым номером жестко связанной с данным зерном.

Ось z направим вдоль направления остаточной намагниченности в отсутствие поля. Начало отсчета выберем таким образом, чтобы координаты направления внешнего магнитного поля в данной локальной системе задавались теми же значениями Θ_{0i} и φ_{0i} . Благодаря такому выбору системы координат зависимость вращения вектора намагниченности зерна от поля H будет описываться уравнениями (3a) и (3б). Добавив к ним уравнение (3c), мы получаем систему, решением которой является значение поля H и углов Θ_i и φ_i при которых происходит срыв обратимого вращения намагниченности зерна с порядковым номером i в необратимое. При этом данное ОД зерно вносит вклад в изменение общего магнитного момента системы: delta(J_r) = 0, если данное зерно не испытало перемагничивания при заданном значении внешнего магнитного поля H.

delta(J_r) = $\sin\Theta_{0i}\cos\varphi_{0i} - \cos\Theta_{0i}$, если после включения и выключения поля H произошел переброс остаточной намагниченности на угол $\pi/2$.

delta(J_r) = $-2\cos\Theta_{0i}$, если после включения и выключения поля H произошел переброс остаточной намагниченности на угол π. Все вышесказанное относилось к отдельно взятому зерну.

Для расчета зависимости J_r(H) возьмем большое N (для рис.3 и 4 N = 10^6) и распределим направления их собственной намагниченности (совпадающей с одной из осей легкого намагничения) в пространстве случайным образом. Для этого используем генератор случайных чисел, но не стандартный, сходимость определенного интеграла для которого составляет $N^{-0.5}$, а генератор псевдослучайных чисел Ляпунова /6/ в пространстве двух измерений, обеспечивающий сходимость lnN/N. Решив N уравнений для заданных N начальных значений teta$_{0i}$ и fi$_{0i}$ мы получим информацию о N элементарных актов перемагничивания, каждый из которых характеризуется своим вкладом в изменение магнитного момента системы и наблюдается при значении поля H_i. Интегрируя вклад от элементарных актов в диапазоне значений поля от 0 до H мы получаем зависимость J_r(H).

Выражение (2) для ансамбля с $K_1 < 0$ не применимо, так как оси легкого намагничения будут размещены в вершинах куба и не будут совпадать с декартовыми осями. Проведем замену переменных и перейдем в такую сферическую систему координат, чтобы ее ось z совпала с одной из осей легкого намагничения. В подобной системе координат уравнение (2) примет вид:

$$E = K_1\left(\frac{1}{3}\cos^4(\theta) + \frac{1}{4}\sin^4(\theta) - \frac{\sqrt{2}}{3}\sin^3\theta\cos\theta\cos 3\varphi\right)$$

Требование на равенство нулю частных производных и упомянутой квадратичной формы приводят к выражениям:

$$\frac{\partial E_i}{\partial \theta_i} = 0 = K_1\left[\frac{1}{4}\sin(4\theta) + \frac{1}{3}\cos(3\theta)\sin\theta + \frac{\sqrt{2}}{3}\sin(3\theta_i)\sin(\theta_i)\cos(2\varphi_i)\right] + HJ_s\left(\sin\theta_i\cos\theta_{0i} - \cos\theta_i\sin\theta_{0i}\right)\cos(\varphi_i - \varphi_{0i})$$

$$\frac{\partial E_i}{\partial \varphi_i} = 0 = 4K_1\sin^4\theta_i\sin(2\varphi_i)\cos(2\varphi_i) + HJ_s\sin\theta_i\sin\theta_{0i}\sin(\varphi_i - \varphi_{0i})$$

$$\frac{\partial^2 E_i}{\partial \theta_i^2}\frac{\partial^2 E_i}{\partial \varphi_i^2} + \left(\frac{\partial^2 E_i}{\partial \theta_i\,\partial \varphi_i}\right)^2 = 0$$

Начальные значения будут вычисляться как $\varphi_{0i} = a_i\pi/3$; $\Theta_{0i} = \arccos(b_i)$.

Анализ результатов

На каждой из рассчитанных нами зависимостях производной от J_r(H) (рис.3 и рис.4) присутствует второй максимум в середине кривой, что является достаточно неожиданным результатом и

ранее в литературе не отмечалось. Вместе с тем, проявления его на экспериментальных зависимостях $J_r(H)$ тех же самых Красноморских базальтов вряд ли следует ожидать, так как естественная в природных условиях дисперсия (логнормальное распределение) по H_c скроет острый и небольшой по величине максимум в интегральной кривой образца породы.

Приведем также результат расчета $J_{rs}/ J_s = 0.85587$ для $K_1 < 0$, явившееся побочным результатом контроля правильности работы алгоритма.

Полезный эффект от данной работы появится, если пойти дальше и рассчитать интегральную кривую, заложив в нее дисперсию по H_c с характеристиками логнормального распределения (два коэффициента) близкими к реально измеренным для тех же базальтов, например. Но несмотря на то, что о применимости данного распределения к рудным минералам кристаллизующимся из расплава посвящено достаточное количество работ, сошлемся на /7/, мне неизвестны публикации, где приводились бы конкретные коэффициенты для пород интересных в плане палеомагнитных исследований.

Примечание:

Кривые на рис.1 рассчитывались согласно выражению (4) из /2/.

$$G(H/H_c) = \sqrt{\frac{1}{3}\left(\frac{H^2}{H_c^2} - 1\right)} * \left(\frac{1}{3} + \frac{8}{3} * \frac{H_c^2}{H^2}\right) \quad (4)$$

Список литературы.

1. Кочегура В.В., Розенталь И.В. Коэрцитивные спектры различных видов остаточной намагниченности // Магнетизм горных пород и палеомагнетизм 1968 г. Москва: Ин-т физики Земли АН СССР, 1969.
2. Тикадзуми С. Физика ферромагнетизма. Магнитные характеристики и практические применения. М., Мир, 1987.
3. Akulov N. The theory of hysteresis losses in rotating magnetic fields. 1934, Ученые записки МГУ, вып.2, с.137-142.
4. Неель Л. Магнитные свойства ферритов, ферромагнетизм и антиферромагнетизм. Антиферромагнетизм. М. 1956. с. 56-84.
5. Syono Yasuhiko, Ishikawa Yoshikazu, Magnetostriction constants of xFe2TiO4*(1-x)Fe3O4. // J. Phys. Soc. Japan, 1964, v.18, p.1231-1232.
6. Соболь И.М., Статников Р.Б. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. 1981, М., Наука, 110 с.
7. Lasham A.G., Harding KL., Lapointe P.,Morris W.A. On the lognormal distribution of oxides in igneous rocks, using magnetic susceptibility as a proxy for oxide mineral concentration // Geophys. J. 1989. V. 96. p. 179 -184.