9. *Словарь терминов разведочной геофизики* / В.Н. Боганик [и др.]; Под ред. А.И. Богданова. − М.: Недра, 1989. − 183 с.

ТЕМПЕРАТУРА ФЕРРОМАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ И ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СПОНТАННОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ В ФЕРРОМАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦАХ

В.П. Щербаков, Н.К. Сычева

ГО «Борок» ИФЗ РАН, пос. Борок, Ярославская обл.

За последние два десятилетия в науке существенно возрос интерес к наноразмерным объектам вследствие уникальности их физических свойств, отличных от свойств макровещества. Под нанообъектом понимают объект, линейный размер которого хотя бы в одном направлении составляет порядка 1-100 нм. В данной работе проведено изучение зависимости температуры ферромагнитного упорядочения и пространственного распределения спонтанной намагниченности в ферромагнитных наночастицах на основе теории Гинзбурга-Ландау.

В рамках теории Гинзбурга-Ландау плотность свободной энергии ферромагнетика вблизи температуры Кюри можно написать в виде [**1**]:

$$F(\mathbf{r},t) = \frac{A}{2} grad^2 \mathbf{m} - \frac{at}{2} m^2 + \frac{b}{4} m^4 + E_{an}(\mathbf{m}), \tag{1}$$

где **m**(t) нормированный вектор спонтанной намагниченности, $m(1) = 1$, A – обменная константа, $E_{\text{an}}(\mathbf{m})$ – магнитокристаллическая анизотропия, a и b – коэффициенты, $t = (T_c - T)/T_c$ – приведенная температура, определяющая дистанцию от температуры Кюри T_c. В направлении вектора **m** изменение по объему незначительно, поэтому (1) можно разбить на два уравнения:

$$F_{Landau} = -\frac{at}{2} m^2 + \frac{b}{4} m^4, \tag{2a}$$

$$F_{dw} = \frac{A}{2} grad^2 \mathbf{m} + E_{an}(\mathbf{m}). \tag{2b}$$

Уравнение (2a) представляет собой выражение для свободной энергии из хорошо известной теории Ландау фазовых переходов второго рода. В результате минимизация F_{Landau} получаем классическое выражение для намагниченности объемного материала

$$m_0(t) = \sqrt{\frac{at}{b}}. \tag{3}$$

Уравнение (2b) обычно используется при анализе структур доменных стенок (ДС). Как следует из (2b), пространственное изменение **m** имеет место на характерном расстоянии $d_{dw} = \sqrt{A/K}$ (ширина ДС). Булаевский и Гинзбург

[2] первые заметили, что вблизи T_c иерархия членов уравнения (1) может отличаться от того, что отражается в уравнениях 2a и 2b, если энергия магнитокристаллической анизотропии E_{an} падает медленнее, чем F_{Landau} для $T \to T_c$. Они показали, что в этом случае структура ДС может отличаться от структуры стенки Блоха. В частности, для так называемого линейного решения отсутствует вращение **m** в ДС, но вместо этого абсолютное изменение величины **m** достигает нуля в середине ДС, где направление вектора **m** изменяется на противоположное.

<u>Плоские объекты</u>

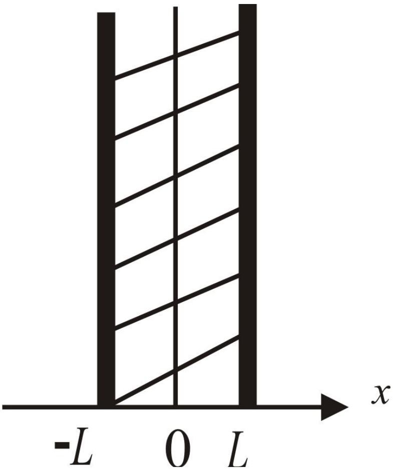

Рис. 1.

Пространственные изменения величины **m** могут быть значимыми и в случае, когда расстояние в направлении изменения вектора **m** ничтожно мало, к примеру, когда рассматривается очень тонкая магнитная пленка или наночастица. Поверхностные ионы в этом случае имеют только половину межатомных взаимодействий в сравнении с ионами, расположенными внутри зерна. Исходя из этого, при повышении температуры величина намагниченности в поверхностных слоях может быть существенно ниже в сравнении с величиной намагниченности объемного материала, которая в центре зерна может быть близка к m_0.

Рассмотрим изолированную тонкую ферромагнитную пленку (**Рис. 1**), размер которой меньше ширины ДС. Т.к. ДС содержит обычно около 100 слоев, это требование означает, что $L \leq 50$ слоев. Очевидно, что по причине симметрии достаточно рассмотреть только интервал $x \in (0, L)$. Уравнение Эйлера в случае тонкой ФМ пленки имеет вид:

$$\frac{d^2u}{dy^2} + u - u^3 = 0, \tag{4}$$

где $u = m / m_0$, поэтому интервал изменения u для любой температуры [0,1], и $x = y\xi$, где ξ – интервал корреляции $\xi = \sqrt{\frac{A}{2at}}$ [3]. Для отдельной тонкой пленки граничные условия выбраны таким образом, что в центре пленки намагниченность имеет максимальное значение

$$\left.\frac{du}{dy}\right|_{y=0} = 0\,, \qquad \lambda\left.\frac{du}{dy}\right|_{y=Y} = -u\ . \tag{5}$$

Здесь $\lambda = a_0 / \xi = \sqrt{\dfrac{2at}{Aa_0^2}}$ – обратная длина корреляции, $Y = L\lambda / a_0 = N\lambda$ есть координаты граничного слоя, a_0 – параметр решетки. Проинтегрируем (1), перемножив на *du*/*dy*. Как результат, мы получим потенциал

$$E = (\frac{du}{dy})^2 + u^2 - \frac{1}{2}u^4 + C\,, \tag{6}$$

где C – постоянная интегрирования. Принимая во внимание граничные условия (5), мы найдем

$$C = \gamma^2 - \frac{\gamma^4}{2}, \tag{7}$$

$$(1+\lambda^{-2})\beta^2 - \frac{\beta^4}{2} = \gamma^2 - \frac{\gamma^4}{2}\,, \tag{8}$$

где $\gamma = u(0)$, $\beta = u(Y)$. Решение уравнения (6) есть

$$y(u) = \int_u^{\gamma} \frac{d\tilde{u}}{\sqrt{\gamma^2 - \dfrac{\gamma^4}{2} - \tilde{u}^2 + \dfrac{\tilde{u}^4}{2}}} =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{2-\gamma^2}}\{K(\frac{\gamma}{\sqrt{2-\gamma^2}}) - F[\arcsin(u/\gamma), \frac{\gamma}{\sqrt{2-\gamma^2}}]\}. \tag{9}$$

Здесь $K(k)$, $F(\varphi, k)$, есть полный и неполный эллиптические интегралы 1 рода, соответственно. Из (8), (5) и (9) мы найдем следующую зависимость между числом слоев N, величиной намагниченности γ в центре и величиной намагниченности β на границе:

$$\beta = \sqrt{\frac{1+\lambda^2 - \sqrt{1+2\lambda^2 + (\gamma^2-1)^2\lambda^4]}}{\lambda^2}}\,, \tag{10}$$

$$N\lambda = \sqrt{\frac{2}{2-\gamma^2}}\{K(\frac{\gamma}{\sqrt{2-\gamma^2}}) - F[\arcsin\frac{\beta}{\gamma}, \frac{\gamma}{\sqrt{2-\gamma^2}}]\}\cdot \tag{11}$$

Чтобы рассчитать температуру перехода t_0, заметим, что для точки перехода $\gamma \to 0$. Тогда из (10) мы имеем $\beta \approx \lambda\gamma$, и уравнение (9) приводится к виду:

$$N\lambda = arcctg\,\lambda\,. \tag{12}$$

В дальнейших расчетах будем использовать обычные приближения $a = kT_c$, $A = kT_c a_0^2$, тогда $\lambda = \sqrt{2t}$, и из (12) для $t << 1$ мы найдем $N\lambda \approx \frac{\pi}{2} - \lambda$ или $t_0 \approx \frac{\pi^2}{8(N+1)^2}$. Кривая, соответствующая этому упрощению (**Рис. 2**, сплошная линия), находится в хорошем согласии с рассчитанной по уравнению (12) (**Рис. 2**, пунктирная линия). Как видно из **Рис. 2** с уменьшением числа атомных слоев в нанопленке с 30 до3, увеличивается дистанция до температуры Кюри с 1 до 30% (т.е. наблюдается существенное уменьшение температуры перехода).

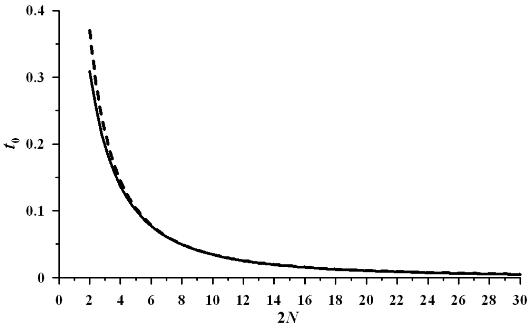

Рис. 2. Приведенная температура t_0 в зависимости от нормализованной ширины ламели (или пленки) $2N = 2L/a_0$.

Из **Рис. 3**, **4** видно, что намагниченность на границе существенно ниже, чем в центре пленки, поскольку поверхностные ионы имеют только половину межатомных взаимодействий по сравнению с ионами в центре.

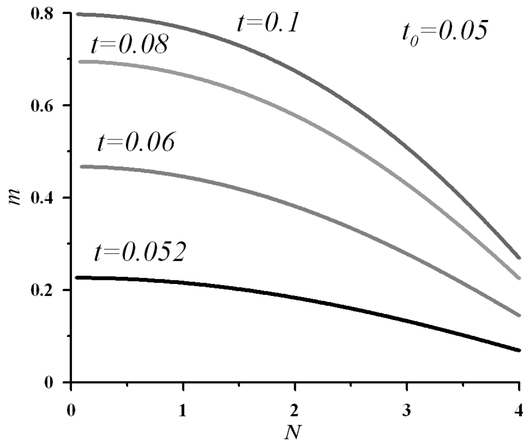

Рис. 3. зависимость величины спонтанной намагниченности $m = u(y)m_0$ от числа слоев для $N = 4$ (9 слоев в целом). Для намагниченности объемного материала m_0 была учтена модель Изинга, когда $a = 2(T_c - T)$, $b = (2/3)T_c$ [**4**], т.е.

$$m_0 = \sqrt{a/b} = \sqrt{3(T_c - T)/T_c}$$
.

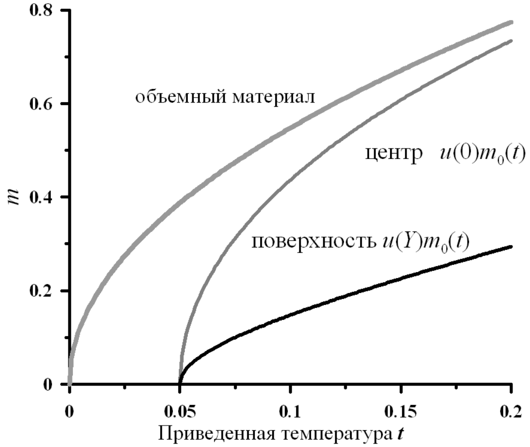

Рис. 4. Спонтанная намагниченность в объемном материале, в центре $u(0)m_0(t)$ и на поверхности $u(Y)m_0(t)$ для $N = 4$ в зависимости от приведенной температуры t.

Сферические наночастицы

Для сферы зависимость приведенной температуры перехода от числа слоев получена численным решением уравнения

$$\frac{d^2u}{dy^2} + \frac{2}{y}\frac{du}{dy} + u - u^3 = 0. \qquad (13)$$

Температура перехода для сферической частицы

$$t_0 = \frac{\pi^2 (N-1)^2}{2N^4}, \qquad (14)$$

зависимость числа слоев от температуры

$$\tan N\sqrt{2t} = -\frac{N\sqrt{2t}}{N-1}, \qquad (15)$$

где $N = \dfrac{R}{a_0}$ – число концентрических слоев (с центром $r = 0$), R – радиус сферы.

Зависимость t_0 от приведенного диаметра $2N$, рассчитанная из (14) и (15), показана на **Рис. 5**.

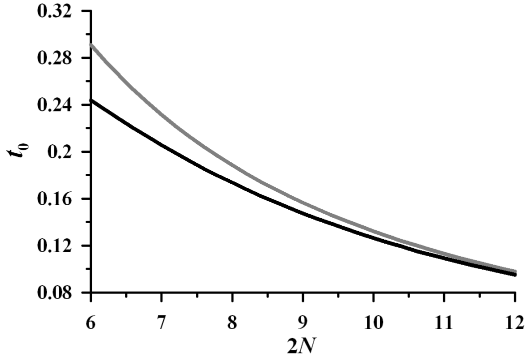

Рис. 5. Зависимость приведенной температуры t_0 точки перехода от приведенного диаметра $2N$. Верхняя кривая представляет точное численное решение (15), приближенное решение (14) представляет нижняя кривая.

Как и предполагалось, в этом случае фаза перехода начинается при значительно более низких температурах в сравнении со случаем пленки толщиной $2N$ слоев, диапазон точек Кюри в трехмерном случае (сфера) примерно в 3 раза меньше, чем для одномерного объекта (пленка). Объяснение этого очевидно – относительная доля поверхностных атомов для сферы существенно выше, чем для пленки.

Кубические наночастицы

На основе теории среднего поля проведены численные расчеты величины спонтанной намагниченности в кубических наночастицах для всего температурного интервала. Согласно теории среднего поля намагниченность спинов определяется уравнением Гамильтона для взаимодействующих магнитных ионов в классическом приближении Гейзенберга $\mathrm{H} = -\dfrac{1}{2}\sum\limits_{i \neq j} J_{ij}\vec{S}_i\vec{S}_j$, где J_{ij} – обменный интеграл, $\vec{S}_i, \vec{S}_j$ - спины атомов *i, j*. Пусть $\left\langle \vec{S}_i \right\rangle$ – усредненный по времени спин S_i. Приближение среднего поля означает, что мы пренебрегаем временно́й связью между спинами, тогда для статистической суммы можно записать (суммирование должно вестись по всем возможным конфигурациям):

$$Z = \exp\left(\frac{\sum\limits_{i \neq j} J_{i,j}\left\langle \vec{S}_i \right\rangle\left\langle \vec{S}_j \right\rangle}{2kT}\right)\prod_{i=1}^{N}\sum_{m=-S_{ii}}^{S_i}\exp\frac{m\sum\limits_{j} J_{i,j}\left\langle \vec{S}_j \right\rangle}{kT}, \qquad (16)$$

откуда выражение для свободной энергии

$$F = -kT\ln Z = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} J_{i,j}\left\langle \vec{S}_i\right\rangle\left\langle \vec{S}_j\right\rangle - kT\prod_{i=1}^{N}\ln\Big(\sum_{m=-S_i}^{S_i}\exp\frac{m\sum_j J_{i,j}\left\langle \vec{S}_j\right\rangle}{kT}\Big) =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i,j,i\neq j} J_{i,j}\left\langle \vec{S}_i\right\rangle\left\langle \vec{S}_j\right\rangle - kT\sum_{i\neq j}\ln\frac{sh\{(2S_i+1)\sum_j J_{i,j}\left\langle \vec{S}_j\right\rangle/2kT\}}{sh\{\sum_j J_{i,j}\left\langle \vec{S}_j\right\rangle/2kT\}}. \qquad (17)$$

Усредненные спины ионов могут быть найдены из условия минимума свободной энергии. Тогда мы получим следующий ряд уравнений

$$\frac{\partial F}{\partial\left\langle \vec{S}_j\right\rangle} = \sum_{i,i\neq j} J_{i,j}\{\left\langle \vec{S}_i\right\rangle - (2S_i+1)cth[(2S_i+1)\sum_j\frac{J_{i,j}\left\langle S_j\right\rangle}{kT}] -$$

$$- cth(\sum_j\frac{J_{i,j}\left\langle S_j\right\rangle}{kT})\} = 0, \qquad (18)$$

или

$$\left\langle S_i\right\rangle = \frac{2S_i+1}{2}cth[(2S_i+1)\sum_j J_{i,j}\left\langle S_j\right\rangle/2kT] - \frac{1}{2}cth(\sum_j J_{i,j}\left\langle S_j\right\rangle/2kT)\}. \qquad (19)$$

Используя определение функции Бриллюена

$B(x) = \frac{2S+1}{2S}cth(\frac{2S+1}{2S}x) - \frac{1}{2S}cth(\frac{x}{2S})$ и введя нормированный средний спин $\sigma_i = \left\langle \vec{S}_i\right\rangle/S$, мы получим отсюда $\sigma_i = B_{S_i}(x_i)$, где

$$x_i = \sum_j\frac{J_{i,j}\sigma_i S_i^2}{kT}.$$

Для ферромагнетика при учете взаимодействия только ближайших соседних ионов и в приближении молекулярного поля температура Кюри и обменный интеграл связаны соотношением $J = \frac{3kT_c}{2zS(S+1)}$, в результате мы получаем систему нелинейных уравнений

$$\sigma_i = \frac{2S+1}{2S} cth\left(\frac{2S+1}{2S} \cdot \frac{3}{2z} \cdot \frac{S}{S+1} \cdot \frac{T_c}{T} \sum_i \sigma_i \right) - \\ - \frac{1}{2S} cth\left(\frac{1}{2S} \cdot \frac{3}{2z} \cdot \frac{S}{S+1} \cdot \frac{T_c}{T} \sum_i \sigma_i \right), \qquad (20)$$

которые можно решить только численными методами. Численные расчеты проведены для случаев простой (ПКР), объемноцентрированной (ОЦК) и гранецентрированной (ГЦК) кубических решеток.

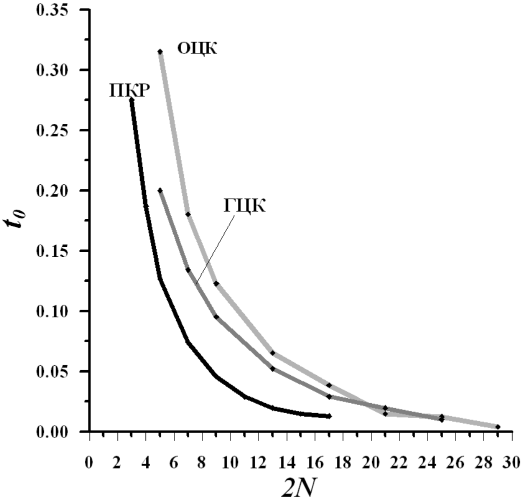

Рис. 6. Приведенная температура $t'_0 = Tc/T$ в зависимости от размера частицы (числа слоев $2N$) для разных типов кубических решеток (ПКР, ОЦК, ГЦК).

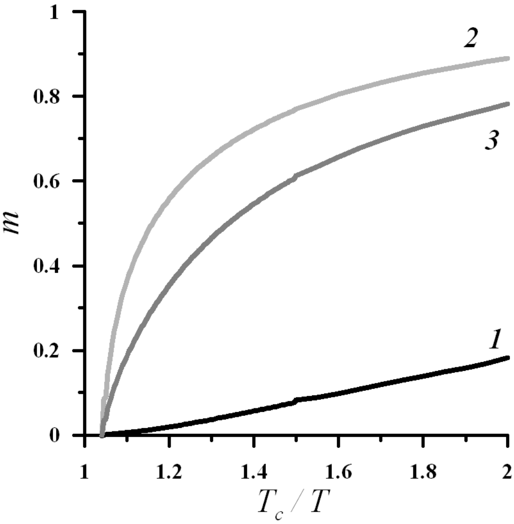

Рис. 7. Зависимость спонтанной намагниченности от температуры для ОЦК решетки (число слоев 17): 1 – вершина частицы, 2 – в центре частицы, 3 – суммарная намагниченность.

По результатам численных расчетов для объемно-центрированной кубической решетки дистанция от температуры Кюри при равном числе слоев в три раза больше, чем для одномерного случая (**Рис. 6**). Для типов решеток ГЦК и ПКР по сравнению со случаем ОЦК дистанция от температуры Кюри меньше, поскольку для ОЦК решетки доля оборванных обменных связей для поверхностных ионов гораздо выше, чем для ПКР и ГЦК решеток. Как и для одномерного случая, намагниченность на границе существенно ниже, чем в центре частицы (**Рис. 7**).

Выводы

- Результаты аналитических расчетов для нанопленок и численных расчетов для сферических и кубических наночастиц показали значительное уменьшение температуры Кюри (до 200°C для зерен размером до 1 нм).
- При повышении температуры величина намагниченности на поверхности зерна существенно ниже по сравнению с намагниченностью объемного материала m_0, в то время как намагниченность в центре зерна может быть близка к m_0.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 09-05-00878.

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. VIII. Электродинамика сплошных сред. – 4-е изд., стереот.- М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001.- 656с.
2. *Булаевский Л.Н., Гинзбург В.Л.* О температурной зависимости формы переходного слоя между доменами в ферромагнетиках и сегнетоэлектриках. ЖЭТФ. 1963. Т. 45. Вып. 3(9). С. 772-779.
3. *Wang R.W., Mils D.L.* Onset of long-range order in superlattices: Mean-field theory. Phys. Rev. B. 1992. V. 46. N 18. P. 11681-11687.
4. *Nishimory H.* Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing : An Introduction, Oxford Univ. Press (Oxford, 2001).

ПАЛЕОНАПРЯЖЁННОСТЬ ГЕОМАГНИТНОГО ПОЛЯ В МЕЛУ (ПО МЕЛОВЫМ ПОРОДАМ МОНГОЛИИ)

В.В. Щербакова[1], *Д.В. Коваленко*[2],
В.П. Щербаков[1], *Г.В. Жидков*[1] *(grigor@borok.yar.ru)*

[1]*ГО «Борок» ИФЗ РАН, пос. Борок, Ярославская обл.;*
[2]*ИГЕМ РАН, Москва*

Введение В связи с существованием суперхронов в современных моделях геодинамо и компиляциях данных по палеонапряжённости часто обсуждается возможность существования корреляции между величиной палеонапряжённости $H_{\text{др}}$ и частотой инверсий. Однако, недостаточно высокая плотность и особенно большой разброс имеющихся на сегодняшний день определений VDM не дают возможности однозначно установить эту корреляцию [**1**].