

О МЕТАСТАБИЛЬНЫХ СОСТОЯНИЯХ КВАЗИОДНОДОМЕННОГО ФЕРРИМАГНИТНОГО ЗЕРНА

© 1998 г. Л. Л. Афремов, Б. Е. Ламаш, А. В. Панов

Дальневосточный государственный университет, г. Владивосток

Поступила в редакцию 25.06.96 г.

В рамках разработанной авторами модели проведен анализ основных и метастабильных состояний зерен магнетита размером близким к однодоменному. Показано, что в зависимости от размеров и вытянутости зерно может находиться в одном из трех магнитных состояний: с однородной намагниченностью, с малой (квазиоднодоменном) и с большой неоднородностью магнитного момента (двухдоменном). Рассчитаны размер однодоменности a_0 , предельный размер однородно намагниченного зерна a_{0m} , a_1 и a_{1m} – минимальный и максимальный размеры устойчивого квазиоднодоменного состояния. Существенным отличием от результатов подобных исследований является немонотонность поведения критических размеров a_0 , a_{0m} , a_1 и a_{1m} с увеличением вытянутости частицы.

Требование надежности палеомагнитных данных ограничивает выбор объектов исследования. Более приемлемыми принято считать породы, содержащие магнитные минералы, представленные мелкими частицами размером близким к однодоменному. Остаточная намагниченность таких пород обладает высокой стабильностью по отношению к температурным, химическим и другим воздействиям. Однако, наличие метастабильности магнитных состояний рассматриваемых частиц может существенно повлиять на сохранность остаточной намагниченности, что играет немаловажную роль при диагностике ее вида.

Изучению магнитных свойств таких частиц посвящено достаточно много (в основном теоретических) работ [1–10], в которых авторы исходили из того или иного предположения о внутренней магнитной структуре. Общим для всех моделей является вариационный поиск минимума полной энергии. Причем, в зависимости от выбранной модели, варьировались такие величины как размер доменов и доменных стенок, угол разворота вектора спонтанной намагниченности \mathbf{I}_s в различных областях зерна и др. Развитие вычислительной техники позволило перейти от простой модели [11], представляющей домены и доменные стенки в виде однородно намагниченных параллелепипедов, к моделям с трехмерным распределением \mathbf{I}_s [8, 12].

Однако, ни одно из этих исследований не может претендовать на полноту рассмотрения и каждое из них преследовало решение конкретно поставленной задачи. Используемые в перечисленных работах упрощающие предположения (предположение об антипараллельной ориентации магнитных моментов доменов [11], об одно-

сности магнетита [16]), ограничили возможность исследования влияния внешнего поля, либо анизотропии формы на распределение намагниченности в зерне. Поэтому нами предпринята попытка анализа магнитных состояний в рамках описанной ниже модели, которая является развитием модели [16].

1. МОДЕЛЬ ДВУХДОМЕННОЙ ЧАСТИЦЫ

Рассмотрим зерно, кристаллическая структура которого представлена минералом кубической симметрии. Пусть оно имеет форму прямоугольного параллелепипеда с площадью основания a^2 и высотой qa (ребра куба совпадают с кристаллографическими осями). Ограничимся случаем, когда магнитный момент распределен в плоскости yoz (рис. 1) по закону:

$$\theta(x) = \begin{cases} \theta_1, & 0 \leq x \leq p_1, \\ \theta_1 + \frac{(\theta_2 - \theta_1)}{p_2}(x - p_1), & p_1 \leq x \leq p_1 + p_2, \\ \theta_2, & p_1 + p_2 \leq x \leq 1, \end{cases} \quad (1)$$

где θ_1, θ_2 – углы между магнитным моментом и осью oz в первом и во втором доменах, p_1, p_2 – ширина домена и доменной границы, соответственно; переменные x, y, z нормированы на a .

Исследование равновесных состояний магнитного момента зерна проведем, минимизируя полную энергию E по четырем параметрам $\theta_1, \theta_2, p_1, p_2$. (В дальнейшем будем использовать выраже-

ние для приведенной энергии $\epsilon = \frac{E}{qa^3 I_s^2}$.)

В полную энергию магнитного момента зерна включены: **обменная энергия**

$$\epsilon_{об} = A \frac{(\theta_2 - \theta_1)^2}{p_2 a^2 I_s^2}, \quad (2)$$

энергия кристаллографической анизотропии

$$\epsilon_{ан} = \frac{K}{8I_s^2} \left\{ 1 - p_1 \cos 4\theta_1 - (1 - p_1 - p_2) \cos 4\theta_2 - \frac{p_2 (\sin 4\theta_2 - \sin 4\theta_1)}{4(\theta_2 - \theta_1)} \right\}, \quad (3)$$

магнитостатическая энергия

$$\begin{aligned} \epsilon_m &= \frac{1}{2qa^3 I_s^2} \iint_{S,S'} \frac{(\mathbf{I}_s(\mathbf{r}), ds)(\mathbf{I}_s(\mathbf{r}'), ds')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \\ &= \frac{1}{q} \int_0^1 dx \int_0^1 dx' \{ f_1(x-x') \cos \theta(x) \cos \theta(x') + \\ &\quad + f_2(x-x') \sin \theta(x) \sin \theta(x') \} \end{aligned} \quad (4)$$

и энергия магнитного момента во внешнем поле Н

$$\epsilon_H = -\frac{1}{qa^3 I_s^2} \int_V (\mathbf{H}, \mathbf{I}_s) dV = -\frac{Hm(\theta_1, \theta_2, p_1, p_2, \varphi)}{I_s}. \quad (5)$$

Здесь приняты следующие обозначения: A – обменная константа, \mathbf{I}_s – вектор спонтанной намагниченности, модуль которого однороден по объему V зерна, K – константа кристаллографической анизотропии, ds – элемент поверхности, φ – угол между вектором \mathbf{H} и осью Oz ,

$$\begin{aligned} f_1(\tau) &= q \ln \left\{ \frac{(\sqrt{q^2 + \tau^2} + q) \sqrt{1 + \tau^2}}{(\sqrt{1 + q^2 + \tau^2} + q) |\tau|} \right\} - \\ &- \sqrt{q^2 + \tau^2} + \sqrt{1 + q^2 + \tau^2} - \sqrt{1 + \tau^2} + |\tau|, \\ f_2(\tau) &= \ln \left\{ \frac{(\sqrt{1 + \tau^2} + 1) \sqrt{q^2 + \tau^2}}{(\sqrt{1 + q^2 + \tau^2} + 1) |\tau|} \right\} - \\ &- \sqrt{1 + \tau^2} + \sqrt{1 + q^2 + \tau^2} - \sqrt{q^2 + \tau^2} + |\tau|, \\ m(\theta_1, \theta_2, p_1, p_2, \varphi) &= \left\{ p_1 \cos(\theta_1 - \varphi) + \right. \\ &\quad + (1 - p_1 - p_2) \cos(\theta_2 - \varphi) + \\ &\quad \left. + \frac{p_2 [\sin(\theta_2 - \varphi) - \sin(\theta_1 - \varphi)]}{\theta_2 - \theta_1} \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

(7)

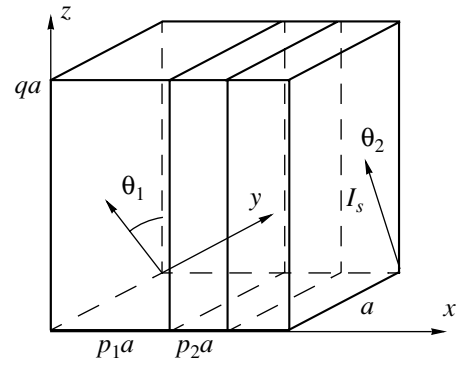


Рис. 1. Иллюстрация описываемой модели.

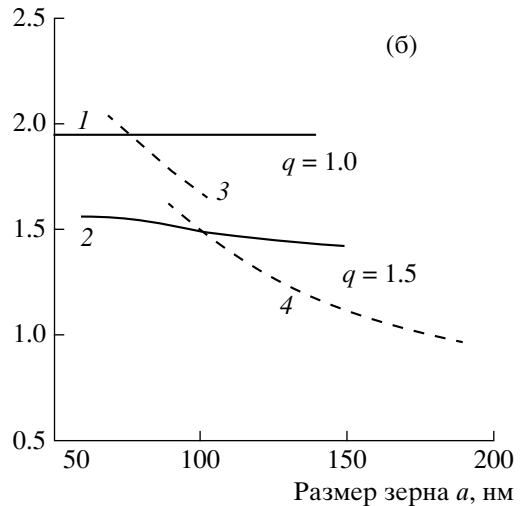
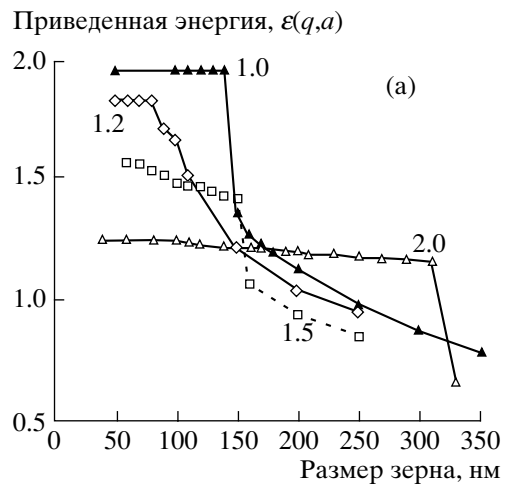


Рис. 2. Зависимость энергии зерна ϵ от его размера a и вытянутости q при различных исходных состояниях: а – с однородным распределением магнитного момента; б – с однородным (кривые 1, 2) и с неоднородным распределением магнитного момента (кривые 3, 4).

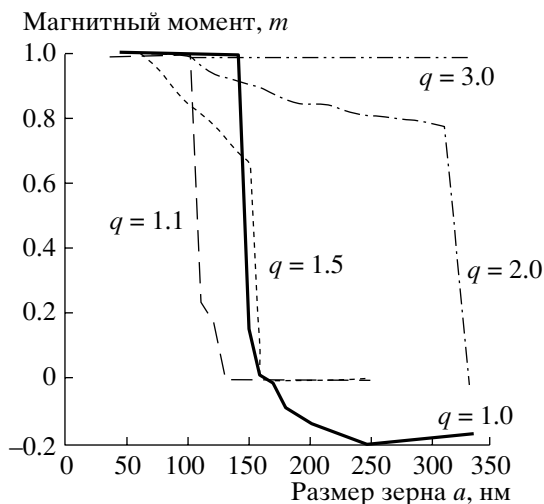


Рис. 3. Зависимость магнитного момента зерна от размера a и вытянутости q .

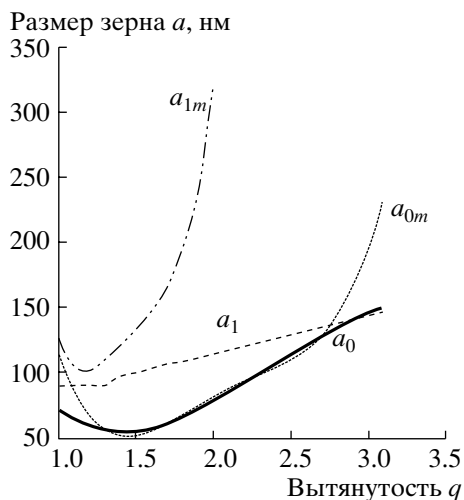


Рис. 4. Зависимость размера однодоменности a_0 , максимального размера с однородным распределением намагниченности a_{0m} , размера квазиоднодоменного a_1 и максимального размера квазиоднодоменного состояния a_{1m} от вытянутости зерна q .

$m(\theta_1, \theta_2, p_1, p_2, \varphi)$ – проекция магнитного момента зерна на направление выделяемое вектором \mathbf{H} , отнесенная к qa^3I_s .

2. ОСНОВНЫЕ И МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Моделирование распределения магнитного момента в зернах магнетита ($I_s = 485$ А/м, $A = 0.67 \times 10^{11}$ Дж/м, $|K| = 1.36 \times 10^4$ Дж/м³) различных размеров и вытянутости (см. рис. 2–4), проведенное при $\mathbf{H} = 0$, позволяет выделить три типа магнитных состояний:

– состояния с однородной намагниченностью;

– состояния с малой (квазиоднодоменные) и с большой неоднородностью магнитного момента (двухдоменные).

2.1. Состояния с однородной намагниченностью

Из рисунков 2 и 3, иллюстрирующих зависимость энергии и магнитного момента каждого из состояний от размера и вытянутости зерна, следует, что состояние с однородным вектором \mathbf{I}_s является основным лишь в интервале размеров, ограниченном размером однодоменности a_0 , который ведет себя немонотонным образом с ростом вытянутости зерна: уменьшается от 70 нм для изометрических частиц до 50 нм для частиц с вытянутостью $q = 1.3$ и при $q = 3.0$ достигает 150 нм (см. рис. 4).

При $a > a_0$ энергетически более выгодно двухдоменное либо квазиоднодоменное состояние (см. рис. 2б), однородное же, если оно реализуется, метастабильно вплоть до максимального размера a_{0m} . Зависимость a_{0m} от вытянутости зерна представлена на рис. 4.: при увеличении вытянутости от $q = 1$ до $q = 1.3$ a_{0m} уменьшается в два раза, а затем возрастает и при $q > 3.1$ однородность распределения магнитного момента может быть реализована в частицах всех размеров (см. рис. 3, рис. 4).

2.2. Состояния с неоднородной намагниченностью

Состояния со слабо неоднородным распределением \mathbf{I}_s (см. рис. 2, 3) равновесны лишь в области $a_0 < a < a_1$ (см. рис. 4), при $a_1 < a < a_{1m}$ они метастабильны (здесь a_1 – размер квазиоднодоменности, a_{1m} – предельный размер квазиоднодоменности). Отметим, что при $q > 2.1$ квазиоднодоменное состояние может быть реализовано в частицах любых размеров больших a_0 .

Отметим также, что с увеличением размера зерна область неоднородности магнитного момента (ширина доменной границы) практически не меняется и занимает около 2/3 объема.

3. АНАЛИЗ ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

3.1. Размер однодоменности

Рассчитанные в данной работе размеры однодоменного состояния (см. рис. 4) в целом согласуются с размерами однодоменности, приведенными в работе [13]. Так, например, размер однодоменности кубической частицы, определенный экспериментально, равен 50 нм [14], либо 80 нм [15], теоретические оценки a_0 соответствуют 80 нм [4, 16], 100 нм [8], 116 нм [17], 120 нм [18]. С увеличением вытянутости зерна $1.0 < q < 2.5$, согласно [4, 19] a_0 возрастает в интервале размеров 80–120 нм.

Существенной особенностью полученных нами результатов является немонотонность изменения размера однодоменности от вытянутости зерна (см. рис. 4). Такая зависимость $a_0 = a_0(q)$ связана с немонотонным поведением эффективной константы анизотропии, которая представляет собой результат тензорного сложения констант кристаллографической анизотропии и анизотропии формы [20, 21].

Конкуренция различных видов анизотропий приводит и к изменению положения “легкой оси” [20, 21], что может служить объяснением приведенной на рис. 5 зависимости критических размеров от вытянутости зерна. Отметим, что ориентация “легкой оси” изометрической частицы по диагонали ее грани (а не куба) связана с ограничениями используемой модели (магнитный момент может разворачиваться лишь в плоскости zOy).

3.2. Метастабильное однодоменное состояние

Максимальный размер a_{0m} зерна, находящегося в состоянии с однородным распределением \mathbf{I}_s , в силу немонотонного поведения эффективной константы анизотропии, качественно повторяет ее ход. И если для слабовытянутых частиц полученные значения a_{0m} близки к представленным в работах [2, 4, 16, 17], то при $q > 1.2$, когда энергия анизотропии формы зерна магнетита становится соизмеримой с энергией кристаллографической анизотропии, зависимость $a_{0m} = a_{0m}(q)$, полученная авторами [16], существенно отличается от рассчитанной нами. Вытянутость, при которой предельный размер a_{0m} становится бесконечно большим, перемещается в область несколько больших q (от 2.4, согласно [16], до 3.1), что приводит к значительному понижению a_{0m} в области $1.2 < q < 3.0$.

3.3. Слабо неоднородное состояние

Не вдаваясь в терминологические изыскания, состояние со слабо неоднородным распределением магнитного момента можно отождествить как с квазиоднодоменным, или модой “закрутка” [22–24], так и с состоянием характеризуемым модой “curling” [16, 25]. В отличие от приведенных выше [16, 22, 25] оно может быть реализовано наряду с “однородным”, либо “двухдоменным состояниями”, оставаясь устойчивым лишь в узком интервале размеров $a_0 < a < a_1$. Причем представленные на рис. 4 значения вдвое отличаются от критических размеров моды “curling” $a_c = 40$ нм [25].

3.4. Двухдоменное состояние

Моделируемое нами “двухдоменное” распределение намагниченности не является “классиче-

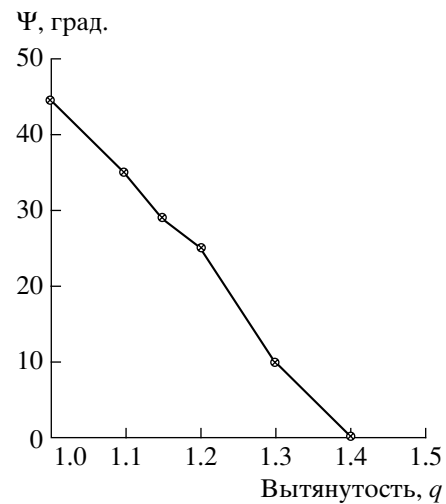


Рис. 5. Зависимость угла ориентации “легкой оси” Ψ относительно удлиненного ребра зерна от его вытянутости q .

ским” (два противоположно намагниченных блока разделенных 180° доменной стенкой). С ростом размера зерна наблюдается отклонение углов θ_1, θ_2 определяющих ориентацию магнитных моментов в первом и втором доменах от 0° до 180° соответственно, что, в конечном счете, приводит к появлению незначительного магнитного момента изометрической частицы при $a > 140$ нм (см. рис. 3). Подобное распределение намагниченности, названное авторами [17] “юбками”, исследовалось на более крупных частицах. Так, например, в изометрических частицах ($q = 1.0$) “юбки” возникали при $a = 180$ нм, а в вытянутых ($q = 1.5$) при $a = 450$ нм.

Как показывают расчеты двухдоменное состояние метастабильно “снизу”, начиная с размеров $a \approx 90$ нм вплоть до $a = a_1$, при $a > a_1$ энергетически выгодно двухдоменное состояние, которое, сосуществуя с однородным (при $a < a_{0m}$) или с квазиоднодоменным (при $a < a_{1m}$), становится единственным в области $a > a_{1m}$. Значения a_{1m} лежат несколько ниже приведенных в работах [4, 16] и в целом не противоречат им.

Разработанная модель и приведенные результаты анализа магнитных состояний могут быть использованы при моделировании процессов намагничивания ансамблей частиц размеры которых соизмеримы с размером однодоменности, что, собственно и является объектом дальнейших исследований.

Работа поддержана Международным научным фондом (грант NXY000) и Госкомвузом России.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Moon T.S., Merrill R.T.* The magnetic moments of non-uniformly magnetized grains // *Phys. Earth Planet. Inter.* 1984. V. 34. P. 186–194.
2. *Moon T.S., Merrill R.T.* Nucleation theory and domain states in multidomain magnetic material // *Phys. Earth Planet. Inter.* 1985. V. 37. P. 214–222.
3. *Moon T.S., Merrill R.T.* Single-domain theory of remanent magnetization // *J. Geophys. Res.* 1988. V. 93. P. 9202–9210.
4. *Enkin R.J., Dunlop D.J.* A micromagnetic study of pseudo-single-domain remanence in magnetite // *J. Geophys. Res.* 1987. V. 92. P. 12726–12740.
5. *Shcherbakov V.P., Lamash B.E.* Metastability threshold sizes in singledomain magnetite particles // *Geophys. Res. Lett.* 1988. V. 15. P. 526–529.
6. *Worm H.-U., Banerjee S.K.* Evidence for TRM domain wall moments // *Geophys. Res. Lett.* 1990. V. 11. P. 169–172.
7. *Shcherbakov V.P., Tarashchan S.A., Lamash B.E.* Domain structure of PSD- and MD-grains and its temperature dependence // *Phys. Earth Planet. Inter.* 1990. V. 63. P. 23–31.
8. *Williams W., Dunlop D.J.* Three-dimensional micromagnetic modelling of ferromagnetic domain structure // *Nature.* 1989. V. 337. P. 634–637.
9. *Xu S., Merrill R.T.* Thermal variations of domain wall thickness and number of domains in magnetic rectangular grains // *J. Geophys. Res.* 1990. V. 95. N B13. P. 21433–21440.
10. *Ye J., Merrill R.T.* Difference between magnetic domain imaging observations and theory // *Geophys. Res. Lett.* 1991. V. 18. N 4. P. 593–596.
11. *Amar H.* Size dependence of the wall characteristics in a two-domain iron particle // *J. Appl. Phys.* 1958. V. 29. P. 542–543.
12. *Shcherbakov V.P., Schmidt P.W., Sycheva N.K., Lamash B.E.* Micromagnetic formulation for the personal computer // *Phys. Earth Planet. Inter.* 1990. V. 65. P. 15–27.
13. *Dunlop D.J.* Developments in rock magnetism // *Rep. Prog. Phys.* 1990. V. 53. P. 707–792.
14. *Dunlop D.J.* Superparamagnetic and single-domain threshold in magnetite // *J. Geophys. Res.* 1973. V. 78. P. 1780–1793.
15. *Dunlop D.J., Bina M.M.* The coercive force spectrum of magnetite at high temperatures: evidence for thermal activation below the blocking temperature // *Geophys. J. R. Astron. Soc.* 1997. V. 51. P. 121–147.
16. *Щербаков В.П., Ламаш Б.Е., Щербакова В.В.* Физика магнетизма горных пород. М.: Ин-т физики Земли им. О.Ю. Шмидта, 1991. 186 с.
17. *Newell A.J., Dunlop D.J., Enkin R.J.* Temperature dependence of critical sizes, wall widths and moments in two-domain magnetite grains // *Phys. Earth Planet. Inter.* 1990. V. 65. P. 165–176.
18. *Heider F., Williams W.* Note of temperature dependence of exchange constant in magnetite // *Geophys. Res. Lett.* 1988. V. 15. P. 184–187.
19. *Butler R.F., Banerjee S.K.* Theoretical single-domain grain size range in magnetite and titanomagnetite // *J. Geophys. Res.* 1975. V. 80. P. 4049–4058.
20. *Афремов Л.Л., Белоконов В.И.* К расчету критического поля однодоменных зерен горных пород // *Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли.* № 3. 1977. С. 104–108.
21. *Афремов Л.Л., Белоконов В.И.* К расчету остаточной намагниченности системы однодоменных частиц // *Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли.* 1979. № 4. С. 122–128.
22. *Кондорский Е.И.* Однодоменная структура в ферромагнетиках и магнитные свойства мелкодисперсных веществ // *Докл. АН СССР.* 1950. LXX. № 2. С. 215–218.
23. *Кондорский Е.И.* Однодоменная структура в ферромагнетиках и магнитные свойства мелкодисперсных веществ // *Докл. АН СССР.* 1950. LXXIV. № 2. С. 213–216.
24. *Кондорский Е.И.* К теории однодоменных частиц // *Докл. АН СССР.* 1952. LXXXII. № 3. С. 365–368.
25. *Aharoni A.* Magnetization curling // *Phys. Stat. Sol.* 1966. V. 16. № 3. P. 3–42.