

УДК 550.838

## О ВОЗМОЖНОМ ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДА СЛУЧАЙНЫХ ПОЛЕЙ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ГОРНЫХ ПОРОД

© 2015 г. В. И. Белоконь<sup>1</sup>, О. И. Дьяченко<sup>2</sup>, В. Ю. Капитан<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Дальневосточный федеральный университет, школа естественных наук,  
кафедра теоретической и экспериментальной физики, г. Владивосток

<sup>2</sup>Дальневосточный федеральный университет, школа естественных наук,  
кафедра общей физики, г. Владивосток

<sup>3</sup>Дальневосточный федеральный университет, школа естественных наук,  
кафедра компьютерных систем, г. Владивосток

E-mail: belokon.vi@dvfu.ru, dyachenko.oi@dvfu.ru, kapitan.vyu@dvfu.ru

Поступила в редакцию 27.03.2015 г.

В данной работе рассматривается метод случайных полей обменного взаимодействия в сочетании с подходом Бетте–Пайерлса и исследуется возможность его применения к изучению магнитных свойств горных пород. В частности, обсуждаются концентрационные магнитные фазовые переходы и в качестве примера изучаются концентрационные зависимости точки Кюри титаномагнетита – одного из типичных природных ферромагнетиков.

DOI: 10.7868/S0002333715050026

### ВВЕДЕНИЕ

Исследование магнетизма горных пород всегда было направлено на повышение достоверности палеомагнитных данных. При этом горная порода как ферромагнитный материал представляла из себя сложную систему взаимодействующих ферромагнитных (ферри-) частиц, рассеянных в немагнитной матрице и подверженных дополнительным по отношению к слабому геомагнитному полю воздействиям, существенно влияющим на формирование магнитного состояния породы (температура, давление, время, химические превращения).

Резкое отличие горной породы как ферромагнетика от изучаемых физиками систем послужило толчком к теоретическому и экспериментальному изучению магнетизма горных пород в рамках геофизического направления, возглавляемого Г.Н. Петровой.

Среди теоретических моделей, позволяющих оценить взаимные соотношения различных видов остаточной намагниченности горных пород, была модель однодоменных взаимодействующих частиц, широко использующая функцию распределения случайных полей диполь-дипольного взаимодействия [Шербаков, Шербакова, 1975; 1978; Белоконь, 1985; Белоконь, Харитонский, 1985; Белоконь и др., 1988].

В последние годы активное изучение наноструктурных материалов позволило привлечь идеи, развитые в рамках магнетизма горных пород, к описанию магнитных свойств таких систем [Бело-

конь, Семкин, 1992; Белоконь, Нефедов, 2001; Белоконь и др., 2006; Belokon et al., 2013; Belokon, 2014].

Оказалось, что метод построения функции случайных полей взаимодействия в применении к обменному взаимодействию позволяет в рамках идеи молекулярного поля получать новые результаты по сравнению с теми, которые вытекают из методов Бетте–Пайерлса, Брэга–Вильямса, Онзагера и Кикуччи:

1. Этот метод можно применять к любым видам обменных взаимодействий [Белоконь, Семкин, 1992; Белоконь, Нефедов, 2001].

2. Он позволяет описывать концентрационные магнитные фазовые переходы [Белоконь, Нефедов, 2001; Afremov, Pyushin, 2013; Afremov, Petrov, 2014].

3. Существует возможность учета изменения точки Кюри в результате диффузионного упорядочения [Belokon et al., 2013].

В данной работе мы показываем, как можно обобщить этот метод на двухподрешеточный магнетик и в качестве примера рассматриваем концентрационные зависимости точки Кюри титаномагнетита – одного из типичных природных ферромагнетиков.

### МЕТОД СЛУЧАЙНЫХ ПОЛЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Как известно, точное решение задачи о фазовом переходе в рамках модели Изинга можно получить только в случае цепочки спинов. Для пря-

мого обмена получены также точные решения Онзагера на плоской решетке и Сяофэн Цяна [Xiaofeng, Henk, 2004] на треугольной решетке. Из решения Онзагера следует температура Кюри  $T_c = 2.27$  в безразмерных переменных (магнитный момент  $\mu$ , обменный интеграл  $J$  и постоянная Больцмана  $k_B$  равны единице). Для объемных решеток часто используется метод молекулярного поля, которое предполагается равным  $\mu J$ . В безразмерных переменных в этом случае точка Кюри  $T_c = z$ , где  $z$  – число ближайших соседей. Для плоской решетки  $z = T_c = 4$  (метод Брэга–Вильямса [Bragg, Williams, 1934]), что значительно превышает точное значение  $T_c$ . Разработанный в наших работах метод случайных полей взаимодействия позволяет вычислить плотность распределения молекулярного поля  $W(H)$ , которая в некотором приближении имеет вид

$$W(H) = \frac{1}{\sqrt{\pi B}} \exp \left[ -\frac{(H - MH_0)^2}{B^2} \right], \quad (1)$$

где

$$H_0 = p \sum_k \varphi_k, \quad B^2 = 2p[1 - M^2 p] \sum_k \varphi_k^2, \quad (2)$$

$\varphi_k$  – молекулярное поле, образованное на выбранном атоме, помещенном в начало координат, магнитным моментом с номером  $k$ ,  $p$  – концентрация атомов, способных к обменному взаимодействию (“ферромагнитных” атомов),  $M$  – относительный магнитный момент, приходящийся на один атом после термодинамического и конфигурационного усреднения.

Из условия

$$M = \int \text{th} \frac{\mu H}{kT} W(H) dH \quad (3)$$

можно получить приближенное условие возникновения спонтанного магнитного момента [Белоконь, Нефедев, 2001]:

$$\frac{H_0}{B} \text{th} \frac{\mu B}{kT_c} = 1, \quad (4)$$

где  $T_c$  – точка Кюри. Следовательно, отличное от нуля значение  $T_c$  возможно при условии  $H_0/B > 1$ . Для прямого обмена, когда  $\varphi_k = J$  для ближайших соседей и обращается в нуль для остальных,  $H_0/B > 1$  приводит к условию  $p > 2/z = p_c$ . Таким образом,  $p_c$  является критической минимальной концентрацией, при которой возможно возникновение спонтанного магнитного момента.

Иная картина получается, если допустить возможность диффузии [Belokon et al., 2013]. Графики зависимости точки Кюри от концентрации “ферромагнитных” атомов для кубической ре-

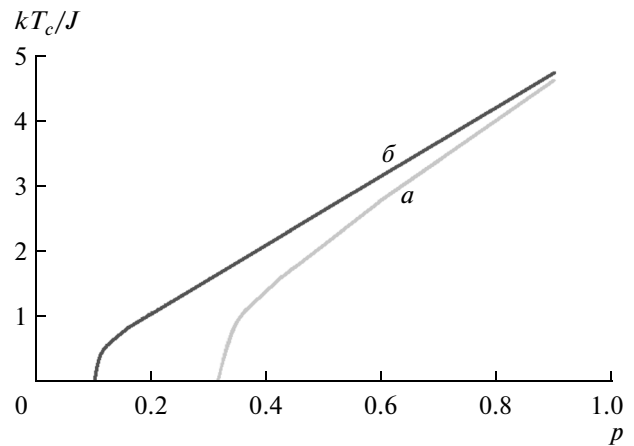


Рис. 1. График зависимости  $kT_c/J$  от  $p$ . Кривая  $a$  – отсутствие диффузии, кривая  $b$  – диффузия присутствует.

шетки ( $z = 6$ ) приведены на рис. 1. Кривая  $a$  – отсутствие диффузии, кривая  $b$  – диффузия присутствует.

Наличие (см. кривую  $a$ ) критической концентрации  $p_c = 2/z$  означает, что для замороженных примесей при  $p < p_c$  отсутствует “протекающий кластер” и при понижении температуры возможно лишь состояние спинового (точнее, макроспинового) стекла. Если же магнитная примесь может приходиться в термодинамическое равновесие с системой, диффузия может способствовать возникновению протекающего кластера и при  $p < p_c$ . Поскольку этот процесс развивается во времени, температура Кюри может расти, что в присутствии внешнего магнитного поля может привести к возникновению стабильной остаточной намагниченности, механизм возникновения которой связан с прохождением точки Кюри от  $T_c < T$  до  $T_c > T$ . Аналогичный переход, как известно, приводит к образованию так называемой термоостаточной намагниченности, с той только разницей, что при этом  $T_c$  статична, а температура понижается от  $T > T_c$  до  $T < T_c$ . Очевидно также, что диффузия в данном случае приводит к возникновению областей с повышенной концентрацией ферромагнитных атомов на фоне областей с их низким содержанием.

При косвенном обмене, который осуществляется через электроны проводимости, могут наблюдаться различные типы упорядочения: ферромагнетизм ( $H_0/B > 1$ ), антиферромагнетизм ( $H_0/B < -1$ ) и спиновое стекло ( $H_0/B < 1$ ) [Belokon et al., 2013a].

Отметим, что из соотношения (4) для прямого обмена следует  $T_c = 3.2$ , это также существенно превышает точное значение. Причина этого – в отсутствие учета корреляции между магнитными моментами. В первом приближении метод учета корреляции предложен Бете и Пайерлсом, суть метода состоит в “погружении” магнитного момента и его ближайших соседей, корреляция для

Сравнение точек Кюри, полученных численно и аналитически

Число ближайших соседей	Точка Кюри (аналитическое решение)	Точка Кюри (численное решение)
4	2.31	2.27
6	4.33	4.35
8	6.33	5.9
12	10.33	9.4

которых учтена точно, в эффективное поле, создаваемое остальными атомами решетки. Статистическая сумма  $S$  для  $z + 1$  моментов будет суммой двух слагаемых:  $S_+$  и  $S_-$ , соответствующих направлению центрального спина “вверх” и “вниз”. Эффективное поле  $h$  считается направленным вверх. Тогда

$$\begin{aligned} S_+ &= \left( \alpha \exp\left[\frac{1}{T}\right] + \frac{1}{\alpha} \exp\left[-\frac{1}{T}\right] \right)^z, \\ S_- &= \left( \alpha \exp\left[1\frac{1}{T}\right] + \frac{1}{\alpha} \exp\left[\frac{1}{T}\right] \right)^z, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\alpha = \exp[h/T]$ . Обменный интеграл, магнитный момент и постоянная Больцмана равны единице. Относительный магнитный момент центрального атома

$$\mu_0 = \frac{S_+ - S_-}{S}. \quad (6)$$

В то же время для “периферийного атома”

$$\mu_1 = \frac{1}{S} \frac{\partial}{\partial \alpha} (S_+ + S_-). \quad (7)$$

Равенство  $\mu_0 = \mu_1$  определяет зависимость эффективного поля  $h$  от температуры. Легко показать, что если  $h \rightarrow 0$ , это равенство приводит к уравнению для определения температуры  $T_c \ll 1$ , ниже которой возможно  $h \neq 0$ :

$$(z-1)x^2 + 1 = zx,$$

где  $x = \text{th}\left[\frac{1}{T_c}\right]$ , откуда

$$\text{th}\left(\frac{1}{T_c}\right) = \frac{1}{z-1}. \quad (8)$$

Этот результат легко преобразовать к виду, полученному в рамках “квазихимического метода”, приведенному в [Belokon et al., 2013]. Для  $z = 4$  отсу-

да следует  $T_c = 3$ . Оказалось, что при  $T \rightarrow 0, h \rightarrow z - 1$ , что дает основание предположить, что корреляция приводит у эффективному уменьшению обменного интеграла приблизительно в  $(z - 1)/z$  раз.

С учетом этого соответствующие безразмерные точки Кюри, вычисленные с помощью формулы (4), для стандартных решеток ( $z = 4, 6, 8, 12$ ) равны (2.31; 4.33; 6.33; 10.33) (см. таблицу). В частности, результат для  $z = 4$  ближе к точному решению, чем в методе Кикучи, который считается самым точным в рамках теории молекулярного поля и требует большой вычислительной работы ( $T_c = 2.42$ ).

## ДВУХПОДРЕШЕТОЧНЫЕ МАГНЕТИКИ

Если есть две подрешетки, то в соответствии с результатами, представленными в [Займан, 1974], запишем функцию распределения случайных полей взаимодействия на атоме первой подрешетки, как:

$$W(H_1) = \frac{1}{\sqrt{\pi} B_1} \exp\left[-\frac{\{H_1 - M_1 H_{011} - M_2 H_{012}\}^2}{B_1^2}\right], \quad (9)$$

где

$$B_1^2 = 2p_1(1 - M_1^2 p_1) \sum_k \Phi_{11k}^2 + 2p_2(1 - M_2^2 p_2) \sum_l \Phi_{12l}^2,$$

$$H_{011} = p_1 \sum_k \Phi_{11k}, \quad H_{012} = p_2 \sum_l \Phi_{12l}.$$

Функция распределения случайных полей взаимодействия на выбранном атоме второй подрешетки, как

$$\begin{aligned} W(H_2) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi} B_2} \exp\left[-\frac{\{H_2 - M_2 H_{022} - M_1 H_{021}\}^2}{B_2^2}\right], \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} B_2^2 &= 2p_2(1 - M_2^2 p_2) \sum_l \Phi_{22l}^2 + \\ &+ 2p_1(1 - M_1^2 p_1) \sum_k \Phi_{21k}^2, \end{aligned} \quad (11)$$

$$H_{022} = p_2 \sum_l \Phi_{22l}, \quad H_{021} = p_1 \sum_k \Phi_{21k}, \quad (12)$$

индекс  $k$  нумерует атомы первого типа,  $l$  – второго типа.

Здесь  $\Phi_{11} = m_1 J_1$ ,  $m_1$  – магнитный момент на одном атоме в первой подрешетке,  $J_1$  – обменный интеграл для атомов первой подрешетки.  $\Phi_{12} = m_2 J_{21}$ ,

$m_2$  – магнитный момент на одном атоме во второй подрешетке,  $J_{21} = J_{12}$  – обменные интегралы для атомов из разных подрешеток. Для  $\varphi_{21} = m_1 J_{12}$ ,  $\varphi_{22} = m_2 J_2$  – обозначения аналогичны.

$$\alpha_1 - \beta_1 = M_1, \quad (13)$$

$$\alpha_2 - \beta_2 = M_2, \quad (14)$$

$\varphi_{12k}$  – обменное “поле”, созданное атомом с номером  $k$  из второй подрешетки на выбранном атоме первой подрешетки и помещенном в начало координат,  $\alpha$  – вероятность обнаружения этого атома ориентированным “вверх”,  $\beta$  – вероятность обнаружения этого атома ориентированным “вниз”,  $p$  – концентрация ферромагнитных частиц,  $M_1$  – относительный магнитный момент для атомов первой подрешетки,  $M_1 m_1 = \langle m_1 \rangle$  – средний магнитный момент атома первой подрешетки. Для  $M_2$  аналогично. Тогда средний момент на один атом в системе  $\bar{m} = \frac{\langle m_1 \rangle + \langle m_2 \rangle}{2}$ .

Для прямого обмена:

$$B_1^2 = 2p_1(1 - M_1^2 p_1) z_1 m_1^2 J_1^2 + 2p_2(1 - M_2^2 p_2) z_2 m_2^2 J_2^2, \quad (15)$$

$z_1$  – число ближайших соседей у атома первой подрешетки,  $z_2$  – число ближайших соседей у атома второй подрешетки,  $H_{011} = p_1 z_1 J_1$ ,  $H_{012} = p_2 z_2 J_2$ .

$$B_2^2 = 2p_2(1 - M_2^2 p_2) z_2 m_2^2 J_2^2 + 2p_1(1 - M_1^2 p_1) z_1 m_1^2 J_1^2, \quad (16)$$

где  $H_{022} = p_2 z_2 J_2$ ,  $H_{021} = p_1 z_1 J_1$ .

Существенное упрощение уравнений может быть достигнуто путем замены функции распределения случайных полей взаимодействия на “прямоугольную функцию” [Белоконь, Нефедев, 2001]. Тогда

$$M_1 = \frac{1}{2B_1} \times \int_{-B_1}^{B_1} \text{th} \left[ \frac{m_1}{kT} (H_1 + M_1 H_{011} + M_2 H_{012}) \right] dH_1, \quad (17)$$

$$M_2 = \frac{1}{2B_2} \times \int_{-B_2}^{B_2} \text{th} \left[ \frac{m_2}{kT} (H_2 + M_2 H_{022} + M_1 H_{021}) \right] dH_2. \quad (18)$$

Введем замену переменных:  $\frac{m_1}{kT} H_1 = x_1$ ,  $\frac{m_1}{kT} H_{011} = h_{011}$ ,  $\frac{m_1}{kT} H_{012} = h_{012}$ ,  $\frac{m_1 B_1}{kT} = b_1$  и  $\frac{m_2}{kT} H_2 = x_2$ ,  $\frac{m_2}{kT} H_{022} = h_{022}$ ,  $\frac{m_2}{kT} H_{021} = h_{021}$ ,  $\frac{m_2 B_2}{kT} = b_2$ . Тогда выражение для намагниченности примет вид:

$$M_1 = \frac{1}{2b_1} \int_{-b_1}^{b_1} \text{th} [(x_1 + M_1 h_{011} + M_2 h_{012})] dx_1. \quad (19)$$

При высоких температурах и  $M_1 \ll 1$ ,  $M_2 \ll 1$ :

$$M_1 = \frac{\text{th} b_1}{b_1} (h_{011} M_1 + h_{012} M_2) - \frac{1}{3} \frac{\text{th} b_1}{b_1 \text{ch}^2 b_1} (h_{011} M_1 + h_{012} M_2)^3, \quad (20)$$

$$M_2 = \frac{\text{th} b_2}{b_2} (h_{022} M_2 + h_{021} M_1) - \frac{1}{3} \frac{\text{th} b_2}{b_2 \text{ch}^2 b_2} (h_{022} M_2 + h_{021} M_1)^3. \quad (21)$$

Из формул (18), (19) путем интегрирования получаем:

$$\begin{cases} M_1 = \frac{kT}{2B_1 m_1} \ln \frac{\text{ch} \left[ \frac{m_1}{kT} (M_1 H_{011} + M_2 H_{012} + B_1) \right]}{\text{ch} \left[ \frac{m_1}{kT} (M_1 H_{011} + M_2 H_{012} - B_1) \right]} \\ M_2 = \frac{kT}{2B_2 m_2} \ln \frac{\text{ch} \left[ \frac{m_2}{kT} (M_2 H_{022} + M_1 H_{021} + B_2) \right]}{\text{ch} \left[ \frac{m_2}{kT} (M_2 H_{022} + M_1 H_{021} - B_2) \right]} \end{cases} \quad (22)$$

Асимптотическое поведение  $M_1$  и  $M_2$  при  $M_1, M_2 \rightarrow 0$  выражается формулами (20) и (21), при этом в выражениях для  $B_1$  (9) и  $B_2$  (10) можно опустить  $M_1^2$  и  $M_2^2$ . В противоположном случае, при  $M_1, M_2 \rightarrow 1$ ,  $T \rightarrow 0$  функция распределения случайных полей взаимодействия  $W(H)$  стремится к  $\delta$ -функции, так что уравнения (17) и (18) переходят в

$$\begin{cases} M_1 = \text{th} \left[ \frac{m_1}{kT} (H_{011} M_1 + H_{012} M_2) \right] \\ M_2 = \text{th} \left[ \frac{m_2}{kT} (H_{022} M_1 + H_{021} M_2) \right] \end{cases} \quad (23)$$

Необходимо отметить, что в случае эквивалентных подрешеток и отрицательном значении  $H_{012}$ ,

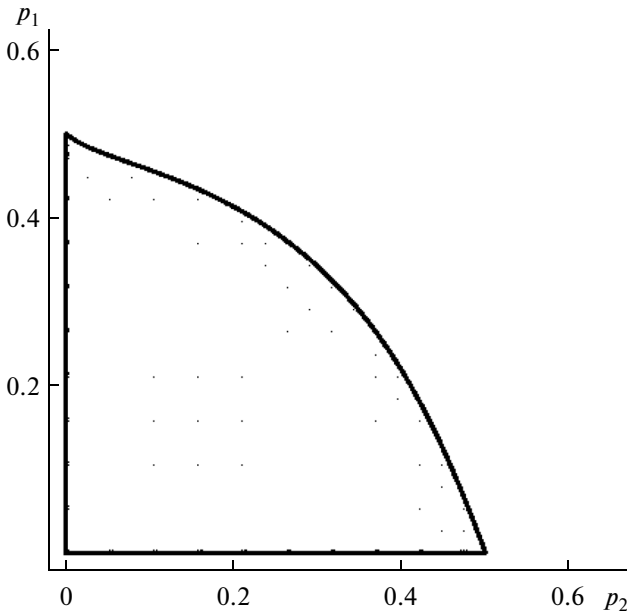


Рис. 2. Фазовая диаграмма, определяющая область концентраций  $p_1$  и  $p_2$  возникновения упорядочения в двухподрешеточном магнетике с заданными параметрами  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = 1.2$ ,  $J_1 = 1$ ,  $J_2 = 2$ ,  $J_{12} = -0.5$ .

решением этой системы является  $M_1 = -M_2$  – антиферромагнетик.

Решая уравнения (20) и (21), в нулевом приближении получим:

$$\begin{cases} M_1 = \frac{\text{th} b_1}{b_1} (h_{011} M_1 + h_{012} M_2) \\ M_2 = \frac{\text{th} b_2}{b_2} (h_{022} M_2 + h_{021} M_1) \end{cases} \quad (24)$$

Эти однородные уравнения разрешимы при обращении в нуль определителя:

$$\left( \frac{\text{th} b_1}{b_1} h_{011} - 1 \right) \left( \frac{\text{th} b_2}{b_2} h_{022} - 1 \right) - h_{012} h_{021} \frac{\text{th} b_1}{b_1} \frac{\text{th} b_2}{b_2} = 0. \quad (25)$$

Выражая  $M_2$  через  $M_1$  из (21) (в нулевом приближении) получим уравнение для определения  $M_1$ , которое имеет отличное от нуля решение при условии смены знака определителя с “+” на “-” и с “-” на “+”. Первая смена знака соответствует появлению отличного от нуля магнитного момента в подрешетке с большим обменным взаимодействием (в нашем случае  $M_1$ ). Вторая смена знака, в случае отсутствия взаимодействия между подрешетками, означала бы появление  $M_2$ . При наличии слабого взаимодействия между подрешетками магнитный момент  $M_2$  возникает одновременно

с  $M_1$ , и вторая смена знака соответствует резкому росту вектора  $M_2$  за счет взаимодействия  $J_{22}$ . При относительно сильном межподрешеточном взаимодействии  $J_{22}$  проявляется слабо и уравнение (25) имеет только одно решение для температуры фазового перехода  $T_c$ , соответствующее появлению вектора  $M_1$ .

Подставляя значения для  $h_{011}$ ,  $h_{012}$  и  $h_{022}$ , получим следующее выражение для определителя

$$\left( \frac{H_{011} \tanh\left(\frac{m_1 B_1}{k T_c}\right)}{B_1} - 1 \right) \left( \frac{H_{022} \tanh\left(\frac{m_2 B_2}{k T_c}\right)}{B_2} - 1 \right) - \frac{H_{012} H_{021}}{B_1 B_2} \tanh\left(\frac{m_1 B_1}{k T_c}\right) \tanh\left(\frac{m_2 B_2}{k T_c}\right) = 0. \quad (26)$$

При уменьшении концентрации “ферромагнитных” атомов в первой  $p_1$  и второй  $p_2$  подрешетках температура фазового перехода  $T_c$  понижается. При  $T_c \rightarrow 0$  получим следующее выражение:

$$\left( \frac{H_{011}}{B_1} - 1 \right) \left( \frac{H_{022}}{B_2} - 1 \right) - \frac{H_{012} H_{021}}{B_1 B_2} = 0. \quad (27)$$

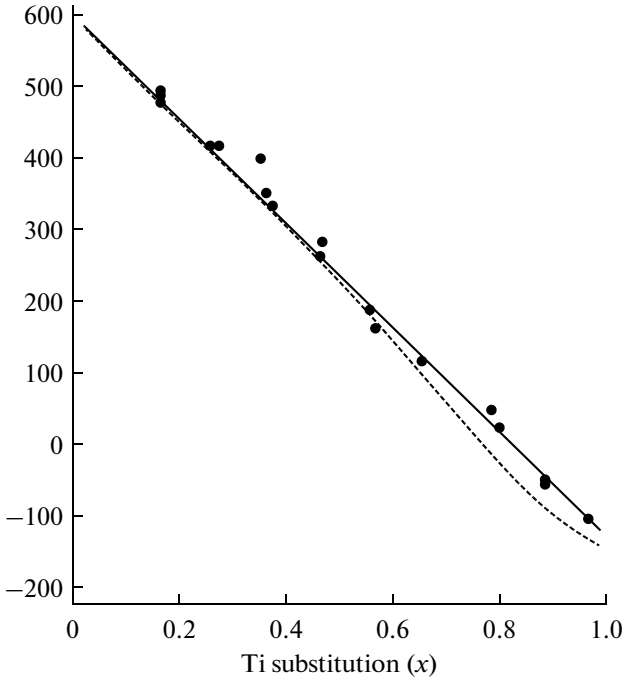
Уравнение (27) позволяет оценить критические концентрации  $p_1$  и  $p_2$ , ниже которых упорядочение в подрешетках и системе в целом невозможно ( $T_c = 0$ ). Во всех расчетах число соседей следует брать с учетом поправки Бете–Пайерлса.

На рис. 2 представлена полученная из соотношения (27) фазовая диаграмма, определяющая область концентраций  $p_1$  и  $p_2$  возникновения упорядочения в двухподрешеточном магнетике с заданными параметрами  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = 1.2$ ,  $J_1 = 1$ ,  $J_2 = 2$ ,  $J_{12} = -0.5$ .

## ТИТАНОМАГНЕТИТ

Сформированный выше подход может быть применен к титаномagnetиту. Magnetит имеет кристаллическую структуру обращенной шпинели:  $(\text{Fe}^{3+}) [\text{Fe}^{2+} \text{Fe}^{3+}] \text{O}_4$ . В октаэдрических позициях –  $(\text{Fe}^{3+})$  имеются катионы только с валентностью +3, а в тетраэдрических позициях –  $[\text{Fe}^{2+} \text{Fe}^{3+}]$  катионов получается в два раза больше и они имеют валентность как 2+, так и 3+.

Ms катиона  $\text{Fe}^{3+}(3d^5)$  равен  $5 \mu_B$ , а катиона  $\text{Fe}^{2+}(3d^6) - 4 \mu_B$  (по числу не скомпенсированных электронов в 3d-электронной оболочке). Ионы титана замещают  $\text{Fe}^{3+}$  в тетраэдрических позициях, одновременно осуществляя переход  $\text{Fe}^{3+}$  в  $\text{Fe}^{2+}$  в октаэдрических позициях. Таким образом, фактически имеют место 3 подрешетки:  $\text{Fe}^{3+}$  в октаэдрических позициях и  $\text{Fe}^{3+}$  с  $\text{Fe}^{2+}$  в тетраэдрических позициях. Отрицательное обменное взаимодействие осуществляется только между подрешетками 1-2 и 1-3.



**Рис. 3.** График зависимости температуры Кюри от концентрации в титаномagnetите. Сплошная кривая получена экспериментальным путем [O'Reilly, 1984], пунктирная кривая – методом случайных полей обменного взаимодействия.

Вследствие того, что отсутствует внутриподрешеточное взаимодействие, система уравнений типа (23) и (24) легко решается

$$\begin{cases} M_1 = \frac{\text{th} b_1}{b_1} (h_{012} M_2 + h_{013} M_3) \\ M_2 = \frac{\text{th} b_2}{b_2} h_{021} M_1 \\ M_3 = \frac{\text{th} b_3}{b_3} h_{031} M_1 \end{cases} \quad (28)$$

и можно прийти к выражению для вычисления точки Кюри:

$$\begin{aligned} & \frac{H_{012} H_{021}}{B_1 B_2} \text{th} \left[ \frac{m_1 B_1}{k T_c} \right] \text{th} \left[ \frac{m_2 B_2}{k T_c} \right] + \\ & + \frac{H_{013} H_{031}}{B_1 B_3} \text{th} \left[ \frac{m_1 B_1}{k T_c} \right] \text{th} \left[ \frac{m_3 B_3}{k T_c} \right] = 1, \end{aligned} \quad (29)$$

где  $H_{012} = p_2 z_2 m_2 J_{12}$ ,  $H_{021} = p_1 z_1 m_1 J_{12}$ ,  $H_{013} = p_3 z_3 m_3 J_{13}$ ,  $H_{031} = p_1 z_1 m_1 J_{13}$ ,  $B_1 = \sqrt{2p_2 z_2 (m_2 J_{12})^2 + 2p_3 z_3 (m_3 J_{13})^2}$ ,  $B_2 = \sqrt{2p_1 z_1 (m_1 J_{12})^2}$ ,  $B_3 = \sqrt{2p_1 z_1 (m_1 J_{13})^2}$ .

Для нахождения обменного интеграла  $J_{13}$  рассматривается крайний случай, когда полностью

отсутствуют атомы железа в подрешетке 2, а в подрешетках 1 и 3 только ионы  $\text{Fe}^{2+}$  – это ульвошпинель. Используя температуру Кюри ульвошпинели ( $-150^\circ\text{C}$ ) и формулу (4), получим  $J_{13} = 3.85 \times 10^{24}$ . При известном значении  $J_{13}$  по точке Кюри магнетита ( $580^\circ\text{C}$ ) вычисляется  $J_{12} = 1.66 \times 10^{25}$ .

На рис. 3 представлен график зависимости температуры Кюри от концентрации титана. Сплошная кривая получена экспериментальным путем [Белоконь, Нефедев, 2001], пунктирная – методом случайных полей обменного взаимодействия.

Для нахождения критического индекса  $\beta$  воспользуемся формулой, справедливой вблизи  $T_c$

$$M = \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right)^\beta.$$

Воспользуемся системой уравнений для расчета намагниченности в трех подрешетках [Займан, 1974]:

$$\begin{aligned} M_1 &= \frac{1}{2B_1} \int_{-B_1}^{B_1} \text{th} \left[ \frac{m_1}{kT} (M_2 H_{012} + M_3 H_{013} + H_1) \right] dH_1, \\ M_2 &= \frac{1}{2B_2} \int_{-B_2}^{B_2} \text{th} \left[ \frac{m_2}{kT} (M_1 H_{021} + H_2) \right] dH_2, \\ M_3 &= \frac{1}{2B_3} \int_{-B_3}^{B_3} \text{th} \left[ \frac{m_3}{kT} (M_1 H_{031} + H_3) \right] dH_3. \end{aligned}$$

или

$$\begin{cases} M_1 = \frac{\text{th} \left[ \frac{m_1 B_1}{kT} \right]}{\frac{m_1 B_1}{kT}} (M_2 h_{012} + M_3 h_{013}) - \\ - \frac{1}{3} \frac{\text{th} \left[ \frac{m_1 B_1}{kT} \right]}{\frac{m_1 B_1}{kT} \text{ch}^2 \left[ \frac{m_1 B_1}{kT} \right]} (M_2 h_{012} + M_3 h_{013})^3, \\ M_2 = \frac{\text{th} \left[ \frac{m_2 B_2}{kT} \right]}{\frac{m_2 B_2}{kT}} M_1 h_{021} - \frac{1}{3} \frac{\text{th} \left[ \frac{m_2 B_2}{kT} \right]}{\frac{m_2 B_2}{kT} \text{ch}^2 \left[ \frac{m_2 B_2}{kT} \right]} (M_1 h_{021})^3, \\ M_3 = \frac{\text{th} \left[ \frac{m_3 B_3}{kT} \right]}{\frac{m_3 B_3}{kT}} M_1 h_{031} - \frac{1}{3} \frac{\text{th} \left[ \frac{m_3 B_3}{kT} \right]}{\frac{m_3 B_3}{kT} \text{ch}^2 \left[ \frac{m_3 B_3}{kT} \right]} (M_1 h_{031})^3. \end{cases}$$

В нулевом приближении получим выражение для вычисления температуры Кюри:

$$M_1^2 = \frac{\frac{\operatorname{th}\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]}{\frac{m_1 B_1}{kT}} \left( \frac{\operatorname{th}\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]}{\frac{m_2 B_2}{kT}} H_{021} \frac{m_2}{kT} H_{012} \frac{m_1}{kT} + \frac{\operatorname{th}\left[\frac{m_3 B_3}{kT}\right]}{\frac{m_3 B_3}{kT}} H_{031} \frac{m_3}{kT} H_{013} \frac{m_1}{kT} \right) - 1}{\frac{1}{3} \frac{\operatorname{th}\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right]}{\frac{m_1 B_1}{kT}} \operatorname{ch}^2\left[\frac{m_1 B_1}{kT}\right] \left( \frac{\operatorname{th}\left[\frac{m_2 B_2}{kT}\right]}{\frac{m_2 B_2}{kT}} H_{021} \frac{m_2}{kT} H_{012} \frac{m_1}{kT} + \frac{\operatorname{th}\left[\frac{m_3 B_3}{kT}\right]}{\frac{m_3 B_3}{kT}} H_{031} \frac{m_3}{kT} H_{013} \frac{m_1}{kT} \right)^3}.$$

На рис. 4 приведена зависимость  $M^2$  от  $T/T_c$  для концентрации титана  $p = 1$ . Из данных графика можно рассчитать  $\beta = \frac{\lg[M]}{\lg\left[\frac{T_c - T}{T_c}\right]} = 0.35$ . Получен-

ный критический индекс хорошо согласуется с данными компьютерного моделирования. Однако, если рассмотреть интервал отношений  $T/T_c$  чрезвычайно близкий к единице, критический индекс приближается к 0.5.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы надеемся, что результаты исследования магнитных фазовых переходов в дальнейшем могут быть полезны при изучении различных видов остаточной намагниченности. В данной работе новые результаты состоят в следующем:

1. Получил дальнейшее развитие метод случайных полей обменного взаимодействия: учет корреляции в духе Бете–Пайерлса позволил существенно улучшить оценку температуры Кюри для стандартных решеток. В частности, для плоской

квадратной решетки получен результат  $T_c = 2.31$ , в то время как точное решение Онзагера дает  $T_c = 2.28$ , а наиболее точное, но чрезвычайно громоздкое приближенное решение Кикучи, основанное на методе молекулярного поля  $T_c = 2.42$ .

2. Были исследованы двухподрешеточные магнетики с двумя типами атомов в подрешетках и различными значениями ферромагнитных внутриподрешеточных обменных взаимодействий и при наличии антиферромагнитного междоузельного взаимодействия. Построена теоретическая магнитная фазовая диаграмма на плоскости  $p_1$ – $p_2$ , где  $p_1$  и  $p_2$  – концентрации обменно взаимодействующих атомов первой и второй подрешеток для двумерного двухподрешеточного магнетика с конкретными значениями параметров в рамках модели Изинга.

3. Исследована зависимость температуры Кюри от концентрации титана в титаномагнетите. Полученный методом случайных полей обменного взаимодействия график находится в количественном и качественном согласии с графиком, полученным экспериментальным путем.

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства образования и науки РФ № 559.2014.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Белоконь В.И. О соотношении некоторых видов остаточной намагниченности ансамбля однодоменных взаимодействующих частиц // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. № 2. 1985.
- Белоконь В.И., Харитонский П.В. Оценка влияния магнитостатического взаимодействия частиц на постседиментационную намагниченность // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. № 9. 1985.
- Белоконь В.И., Харитонский П.В., Афремов Л.Л. Кристаллизационная намагниченность системы однодоменных взаимодействующих частиц // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. № 5. 1988.
- Белоконь В.И., Семкин С.В. Метод случайного поля в модели Изинга разбавленного ферромагнетика // Журн. экспериментальной и теоретической физики. 1992. Т. 102. Вып. 4. № 10. С. 1254–1258.
- Белоконь В.И., Нефедев К.В. Функция распределения случайных полей взаимодействия в неупорядоченных

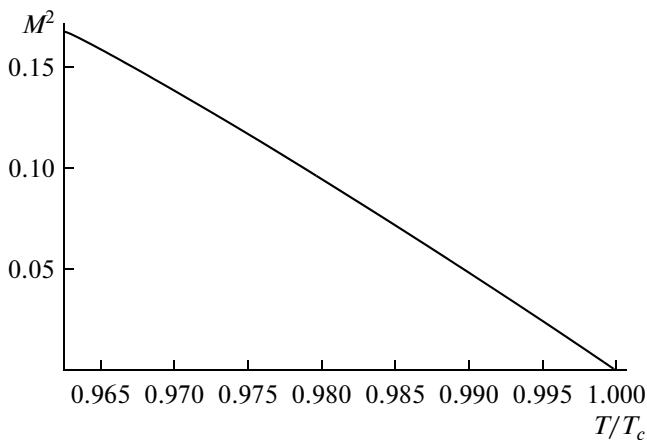


Рис. 4. Зависимость  $M^2$  от  $T/T_c$  для концентрации титана  $p = 1$ .

- магнетиках. Спиновое и макроспиновое стекло // Журн. экспериментальной и теоретической физики. 2001. Т. 120. Вып. 1. № 7. С. 156–164.
- Белоконь В.И., Нефедев К.В., Савунов М.А.* Спиновое стекло с конечным радиусом взаимодействия в модели Изинга // Физика твердого тела. 2006. Т. 48. Вып. 9. С. 1649–1656.
- Займан Дж.* Принципы теории твердого тела. Изд-во: Мир. 1974. С. 472.
- Щербаков В.П., Щербакова В.В.* О восприимчивости взаимодействующих суперпарамагнитных зерен // ФТТ. 1978. № 12. С. 3721–3733.
- Щербаков В.П., Щербакова В.В.* О магнитостатическом взаимодействии в системе однодоменных зерен // Изв. АН ССР. Сер. Физика Земли. 1975. № 9. С. 101–104.
- Afremov L., Pyushin I.* Magnetic Concentration Phase Transitions in Ultrathin Films. *Advanced Materials Research*. 2013. V. 683. P. 69–72.
- Afremov L., Petrov A.* Modelling study of magnetic and concentration phase transition in ultrathin antiferromagnetic films // *J. Physics. Conference Series*. 2014. 490. 012021.
- Belokon V.I., Nefedev K.V., Dyachenko O.I.* Phase transitions in the binary alloys with annealed magnetic impurities. *Applied Mechanics and Materials*. 2013b. 328. P. 789–793.
- Belokon V.I., Nefedev K.V., Kapitan V.Y., Dyachenko O.I.* Magnetic states of nanoparticles with RKKY interaction. *Advanced Materials Research*. 2013a. 774–776. P. 523–527.
- Belokon V.I., Nefedev K.V., Kapitan V.Y., Dyachenko O.I.* Monte Carlo simulation of lattice systems with RKKY interaction // *J. Physics. Conference Series*. 2014. 490(1), 012163.
- O'Reilly W.* *Rock and Mineral Magnetism*. Chapman and Hall. N.Y. 1984.
- Bragg W.L., Williams E.J.* The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*. 1934. V. 145. № 855. P. 699–730.
- Xiaofeng Qian, Henk W.J. Blote.* Triangular Ising model with nearest- and next-nearest-neighbor couplings in a field // *Physical Review E*. 2004. V. 70(3). P. 036112.