

МАГНИТНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В СЛУЧАЙНОЙ СИСТЕМЕ ТОЧЕЧНЫХ ИЗИНГОВСКИХ ДИПОЛЕЙ

*Е. З. Мейлихов**

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 30 декабря 2002 г.

Для простой модели случайной системы изинговских магнитных диполей найдено точное выражение для функции распределения случайных магнитных полей. В рамках теории случайного среднего поля определена магнитная фазовая диаграмма такой системы и описаны магнитные характеристики ее отдельных фаз.

PACS: 75.10.-b, 75.50.Lk

1. ВВЕДЕНИЕ

Магнитное состояние случайной системы взаимодействующих магнитных диполей не может быть описано в рамках традиционной теории среднего поля, поскольку последняя применима лишь для однородных систем, в которых локальные поля одинаковы для всех взаимодействующих магнитных полей. В отличие от тепловых флуктуаций существующие в случайной системе пространственные флуктуации локального поля препятствуют установлению магнитного порядка даже при нулевой температуре. Поэтому адекватное описание таких магнитных систем требует более общего подхода.

Один из возможных способов соответствующего обобщения теории среднего поля использован в работе [1] для рассмотрения случайной системы изинговских сферических диполей конечного диаметра¹⁾. В ней показано, что основное состояние такой системы становится ферромагнитным только в случае, когда среднее расстояние между сферическими диполями сравнимо с их размером, в противном случае (значительно удаленные диполи) система является парамагнитной даже при $T = 0$. Иными словами, ферромагнитное состояние возможно лишь в системе, концентрация диполей в которой превышает некоторую критическую величину, что, в принципе, согла-

суется с тенденциями поведения дипольных систем с конфигурационным беспорядком [3].

Однако указанный результат получен в двух предположениях, оба из которых сомнительны. Во-первых, как это практически всегда предполагается при рассмотрении случайных систем, проведена факторизация функции пространственного распределения диполей. Последняя представлена в виде произведения одинаковых одночастичных функций распределения $g(r)$, каждая из которых зависит только от одной пространственной переменной — расстояния r данной частицы (диполя) от другой (помещенной в начало координат): $g(r) \propto r^2$, если $r > a$ (a — диаметр частиц), $g(r) = 0$, если $r < a$. Для системы точечных частиц ($a = 0$) это законно, но в данном случае неверно, так как возможность размещения частицы конечного размера зависит от положения не одной, а многих соседних частиц даже в отсутствие магнитных корреляций. Можно было бы надеяться, что использованное приближение не приведет к большим ошибкам в случае сильно разреженных систем, когда вероятность близкого соседства более чем двух частиц мала ($na^3 \ll 1$, n — концентрация частиц), однако в [1] оно применяется при $na^3 \sim 1$. Во-вторых, использовано приближение, эквивалентное предположению о большой (по сравнению с диаметром диполей) длине корреляции пространственных флуктуаций направления магнитных моментов диполей, что также может быть оправдано только для сильно разреженных систем.

*E-mail: meilikhov@imp.kiae.ru

¹⁾ Энергия взаимодействия однородно намагниченных сферических диполей (одномоментных сферических гранул) совпадает с энергией взаимодействия двух эквивалентных точечных диполей [2].

Сделанные допущения существенно ограничивают применимость полученных выводов. В настоящей работе предложен иной подход, позволяющий получить точный результат для точечных изинговских диполей и проследить, как он модифицируется для диполей конечных размеров. В рамках этого подхода найдена магнитная фазовая диаграмма случайной системы изинговских диполей и определены магнитные характеристики ее отдельных фаз.

2. ОБОБЩЕННАЯ ТЕОРИЯ СРЕДНЕГО ПОЛЯ ДЛЯ ТОЧЕЧНЫХ (СФЕРИЧЕСКИХ) ДИПОЛЕЙ

Магнитный момент \mathbf{m}_i изинговских диполей может принимать лишь два значения: $\mathbf{m}_i = \pm m\mathbf{e}_0$, где \mathbf{e}_0 — единичный вектор, параллельный направлению диполей. В традиционной теории принимается, что на каждый диполь действует одно и то же локальное поле \mathbf{H}_0 , которое и определяет среднее значение $\langle \mathbf{m}_i \rangle_T$ момента любого магнитного диполя (угловые скобки соответствуют усреднению по ансамблю, индекс « T » — термодинамическому усреднению). Для изинговских диполей $\mathbf{H}_0 \parallel \mathbf{e}_0$ и получаем

$$\langle \mathbf{m}_i \rangle_T = \frac{\sum_{\mathbf{m}=\pm m\mathbf{e}_0} \mathbf{m} \exp(\mathbf{m}\mathbf{H}_0/kT)}{\sum_{\mathbf{m}=\pm m\mathbf{e}_0} \exp(\mathbf{m}\mathbf{H}_0/kT)} = m\mathbf{e}_0 \operatorname{th} \left(\frac{mH_0}{kT} \right), \quad \mathbf{I} = n \langle \mathbf{m}_i \rangle_T, \quad (1)$$

где \mathbf{I} — намагниченность системы, n — концентрация диполей. Для образца в виде длинного цилиндра, ось которого параллельна направлению магнитных диполей, локальное поле \mathbf{H}_0 также параллельно его оси и пропорционально намагниченности:

$$H_0 = \frac{4\pi}{3} I + H_3. \quad (2)$$

Здесь

$$H_3 = m \sum_{ikl} \frac{3 \cos^2 \alpha_{ikl} - 1}{\rho_{ikl}^3} \quad (3)$$

— проекция локального магнитного поля, создаваемого всеми диполями сферы Лоренца (Lorentz), на направление \mathbf{e}_0 , ρ_{ikl} — расстояние между выбранным диполем, помещенным в центре этой сферы (начале координат), и диполем в позиции (ikl) , α_{ikl} — угол, который составляет соединяющая их линия с направлением \mathbf{e}_0 .

Пусть система со случайным расположением диполей находится в ферромагнитном состоянии, характеризуемом средней намагниченностью $\mathbf{I} \parallel \mathbf{e}_0$. Локальные магнитные поля H_3 различны для разных диполей и могут быть охарактеризованы функцией распределения $F(j; H_3)$, которая, вообще говоря, зависит от относительной намагниченности $j \equiv I/mn$ системы, определяемой долей $\eta = (1/2)(1 + j)$ диполей, чьи средние моменты направлены вдоль намагниченности \mathbf{I} системы ($F(1; H_3)$ — функция распределения для случая, когда все диполи внутри сферы Лоренца параллельны друг другу).

Предложенная в [1] обобщенная теория среднего поля для случайной системы сферических диполей основана на приближенном и не вполне корректном (см. Введение) вычислении функции $F(1; H_3)$ распределения локальных магнитных полей. Между тем, в рамках простой, но вполне разумной модели эта функция может быть найдена точно. Применим для этого метод Маркова определения вероятности суммы большого числа случайных величин [4], согласно которому

$$F(1; H_3) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(s) \exp(-isH_3) ds, \quad (4)$$

$$A(s) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\int_{\alpha}^{\rho_{max}} \int_{\rho=0}^{\rho_{max}} \exp[ish(\rho, \alpha)] \tau(\rho, \alpha) d\alpha d\rho \right]^N,$$

где $h(\rho, \alpha) = m(3 \cos^2 \alpha - 1)/\rho^3$ — эффективное магнитное поле, которое создается точечным диполем с координатами ρ, α в начале координат (в рассматриваемом случае это — проекция поля диполя на его направление), $\tau(\rho, \alpha)$ — функция распределения этих координат, N — число диполей в сфере радиуса ρ_{max} , по которой проводится интегрирование. Если далее предположить, что 1) случайный характер расположения диполей не изменяет их средней концентрации n (то есть $N \rightarrow 4\pi\rho_{max}^3 n/3$ при $\rho_{max} \rightarrow \infty$), 2) распределение углов α равномерно и 3) координаты ρ, α не коррелированы, то

$$\tau(\rho, \alpha) d\rho d\alpha = \frac{\rho^2 d\rho \cdot 2\pi \sin \alpha d\alpha}{4\pi\rho_{max}^3/3}. \quad (5)$$

Подставляя (5) в (4), получаем

$$\begin{aligned}
 A(s) &= \exp[-nC(s)], \\
 C(s) &= \\
 &= 2\pi \int_{\alpha} \sin \alpha d\alpha \int_0^{\infty} \{1 - \exp[ish(\rho, \alpha)]\} \rho^2 d\rho.
 \end{aligned} \tag{6}$$

При интегрировании по ρ нужно использовать приведенное выше выражение для $h(\rho, \alpha)$ и учесть, что

$$\int_0^{\infty} \frac{1 - e^{iu}}{u^2} du = \frac{\pi}{2}.$$

Тогда находим

$$nC(s) = 2 \frac{\pi^2 mns}{3} \int_0^{\pi/2} \sin \alpha |3 \cos^2 \alpha - 1| d\alpha = sh_0, \tag{7}$$

где $h_0 = 8\pi^2 mn/9\sqrt{3}$ — характерное поле, приблизительно равное полю диполя, удаленного от начала координат на расстояние порядка среднего расстояния $n^{-1/3}$ между диполями; множитель 2 учитывает наличие двух областей, эквивалентных интервалу углов $0 < \alpha < \pi/2$.

Для функции распределения $F(1; H_3)$ окончательно находим

$$\begin{aligned}
 F(1; H_3) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \cos(|H_3|s) \exp(-|s|h_0) ds = \\
 &= \frac{1}{\pi} \left(\frac{h_0}{h_0^2 + H_3^2} \right). \tag{8}
 \end{aligned}$$

Это — лоренцевское распределение²⁾ шириной h_0 , центрированное на среднее поле $\langle H_3 \rangle = 0$. Полученный результат, который принципиально отличается от гауссовского распределения, предсказанного (в рамках приближенной модели) для аналогичной системы в работе [1], легко понять, полагая, что сильные поля H создаются в основном ближайшими соседями. Закон $w_\rho(\rho)$ распределения расстояний ρ до ближайшего соседа дается выражением [4]

$$w_\rho(\rho) = 4\pi\rho^2 n \exp(-4\pi\rho^3 n/3) \propto \rho^2,$$

2) Тот факт, что распределение (8) предсказывает, что $\langle H_3^2 \rangle = \infty$, связан, очевидно, с предположением о возможности сколь угодно малого расстояния между диполями. Отклонений от этого распределения следует ожидать при полях $H_3 > m/\rho_{min}^3$, где ρ_{min} — минимально возможное расстояние между диполями (например, их характерный размер).

в то время как создаваемое им поле $H \propto 1/\rho^3$. Отсюда следует

$$F(H) = w_\rho[\rho(H)] |d\rho/dH| \propto 1/H^2,$$

что правильно описывает «крылья» лоренцевского распределения в области сильных полей.

Замечательное и заранее не очевидное свойство полученного распределения состоит в том, что оно предсказывает одинаковые вероятности полей H_3 разного знака³⁾. Как показано ниже, подобный симметричный разброс лоренцевских полей «мешает» появлению магнитного упорядочения в рассматриваемой системе. Дело в том, что хотя распределение (8) получено для случайной системы, в которой направления магнитных моментов всех диполей совпадают, очевидно, что отмеченное свойство сохраняется и при любом случайном распределении этих направлений. Иными словами, появление магнитного порядка в случайной системе диполей никак не отражается на виде функции распределения лоренцевского поля, т. е. $F(j; H_3) \equiv F(1; H_3)$.

Покажем теперь, что в рассматриваемой случайной системе точечных изинговских магнитных моментов не может быть магнитного упорядочения. Намагниченность системы есть $I = n\langle \mathbf{m}_i \rangle_T$, где средний магнитный момент $\langle \mathbf{m}_i \rangle_T$ должен вычисляться с учетом разброса лоренцевских полей H_3 путем очевидного обобщения соотношения (3), относящегося к регулярной системе:

$$\begin{aligned}
 I &= n\langle m_i \rangle_T = \\
 &= mn \int_{-\infty}^{\infty} \text{th} \left[\frac{m(4\pi I/3 + H_3)}{kT} \right] F(j; H_3) dH_3. \tag{9}
 \end{aligned}$$

Используя выражение (8) для функции распределения $F(1; H_3) \equiv F(j; H_3)$, получаем уравнение, обобщающее стандартное уравнение среднего поля:

$$\begin{aligned}
 j &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{th} \left[\frac{1}{\Theta} \left(Au + \frac{4\pi j}{3} \right) \right] \frac{du}{1+u^2} \equiv \\
 &\equiv -\frac{A}{\pi\Theta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{arctg} u du}{\text{ch}^2 \left[\frac{1}{\Theta} \left(Au + \frac{4\pi j}{3} \right) \right]}, \tag{10}
 \end{aligned}$$

3) Формально это связано с конкретным видом угловой зависимости поля точечного диполя, $h(\rho, \alpha) \propto (3 \cos^2 \alpha - 1)$, которая вкупе с угловой частью распределения $\tau(\rho, \alpha) \propto \sin \alpha$ обеспечивает равенство «угловых факторов» для областей $3 \cos^2 \alpha - 1 < 0$ и $3 \cos^2 \alpha - 1 > 0$, соответствующих отрицательным и положительным значениям поля H_3 .

где $j = I/I_s$ ($I_s = nm$) — приведенная намагниченность системы, $\Theta = kT/m^2n$ — приведенная температура (равная отношению тепловой энергии к характерной энергии магнитного взаимодействия диполей), $A = 8\pi^2/9\sqrt{3} \approx 5.065$. Парамагнитное состояние $j = 0$, очевидно, является решением этого уравнения. Других решений, как показывает исследование, оно не имеет⁴⁾, что отвечает отсутствию ферромагнитного упорядочения в случайной системе точечных изинговских диполей. Этот вывод совпадает с результатом работы [4], согласно которому система могла бы стать ферромагнитной лишь при достаточ-

но высокой концентрации диполей $n\rho_{min}^3 > 0.300$, где ρ_{min} — минимальное расстояние между сферическими диполями⁵⁾. В нашей модели принято $\rho_{min} = 0$ (точечные, а не сферические диполи), поэтому концентрация диполей всегда «мала».

Невозможность неограниченного сближения диполей приводит к «обрезанию» значений магнитного поля сверху величиной $H_{max} \sim m/\rho_{min}^3$. Поэтому простой способ перехода к сферическим диполям в рамках нашей модели состоит в обрезании «крыльев» функции распределения (8), соответствующих полям $|H_3| > H_{max} = m/\rho_{min}^3$:

$$F(1; H_3) = \begin{cases} \left[2 \operatorname{arctg} \left(\frac{H_{max}}{h_0} \right) \right]^{-1} \left(\frac{h_0}{h_0^2 + H_3^2} \right), & |H_3| \leq H_{max}, \\ 0, & |H_3| > H_{max}. \end{cases} \quad (11)$$

В этом случае вместо (10) получаем следующее уравнение среднего поля:

$$j = \left[2 \operatorname{arctg} \left(\frac{H_{max}}{h_0} \right) \right]^{-1} \times \int_{-H_{max}/h_0}^{H_{max}/h_0} \operatorname{th} \left[\frac{1}{\Theta} \left(Au + \frac{4\pi}{3} j \right) \right] \frac{du}{1 + u^2}. \quad (12)$$

Исследование показывает, что у этого уравнения появляется второй (ненулевой) корень, соответствующий спонтанной намагниченности системы, если $H_{max}/h_0 < 1.08$ (при нулевой температуре). Найденное условие можно записать в виде критерия для (необходимой для возникновения спонтанной намагниченности) концентрации сферических диполей: $n\rho_{min}^3 > 0.183$, который существенно отличается от полученного в [4] ($n\rho_{min}^3 > 0.300$). Для обеспечения ферромагнитного упорядочения при $T > 0$ обрезание функции распределения $F(1; H_3)$ при повышении температуры должно быть более радикальным, что при постоянной концентрации диполей можно обеспечить лишь увеличением минимального расстояния между ними. (Параметр ρ_{min} ограничен сверху естественным «геометрическим» услови-

ем $n\rho_{min} \lesssim 1$.) Однако при достаточно высокой температуре ($\Theta \gtrsim 4.2$) система остается парамагнитной даже при $\rho_{min} \rightarrow \infty$. Соответствующие температурные зависимости спонтанной намагниченности и пороговых значений $n\rho_{min}^3$ и H_{max} приведены соответственно на рис. 1 и 2.

Намагниченность рассматриваемой системы в парамагнитном состоянии зависит от величины внешнего магнитного поля H_e . Для того чтобы найти ее, достаточно в уравнении (9) провести замену $4\pi I/3 \rightarrow 4\pi I/3 + H_e$, после чего аргумент гиперболического тангенса в уравнении (10) дополняется слагаемым $(H_e/h_0)\Theta^{-1}$. Решение получаемого таким образом уравнения описывает температурную зависимость намагниченности системы во внешнем магнитном поле. Серия таких зависимостей для разных магнитных полей представлена на рис. 3. Как и следовало ожидать, эти зависимости весьма далеки от ланжевеновской, согласно которой в насыщении (т. е. при низких температурах) намагниченность $I = I_s$, т. е. $j = 1$. Как видно из рис. 3, насыщению намагниченности случайной системы всегда отвечает значение⁶⁾ $j = j_0 < 1$. Полевая зависимость низкотемпературной намагниченности $j_0(H_e)$ приведена на вставке к рис. 3.

⁴⁾ При $\Theta \rightarrow 0$ правая часть уравнения (10) асимптотически приближается к $(2/\pi) \operatorname{arctg}(4\pi j/3A) < 8j/3A = 0.526j < j$.

⁵⁾ В [4] критерий появления спонтанной намагниченности в случайной системе жестких изинговских сферических диполей диаметра a записан в виде $(\pi/6)na^3 > 0.157$. Минимальное расстояние между центрами диполей в этой системе $\rho_{min} = a$, что и дает приведенное в тексте условие $n\rho_{min}^3 > 0.300$.

⁶⁾ При $\Theta \rightarrow 0$ уравнение (10) приобретает вид $j = (2/\pi) \operatorname{arctg}(4\pi/3A + H_e/Ah_0)$, откуда при $j \ll 1$ следует $j_0 = (2/\pi)(A - 8/3)^{-1}H_e = 0.265H_e$.

3. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ — СРАВНЕНИЕ С ТЕОРИЕЙ

Характер магнитного «поведения» случайных систем точечных изинговских диполей, как видно, в значительной мере определяется функцией распределения $F(1; H_3)$ локальных магнитных полей. В связи с этим желательно получить дополнительное подтверждение правильности той теоретической схемы, которая была использована для ее определения. Поэтому кроме вывода аналитического выражения (8) для функции $F(1; H_3)$ был проведен ее расчет путем численного моделирования случайной системы изинговских диполей.

Система «создавалась» путем равномерного случайного размещения диполей в сфере (общее число диполей $5 \cdot 10^3$ или $4 \cdot 10^4$), после чего рассчитывалось магнитное поле H_3 в центре этой сферы.

Функция $F(1; H_3)$ находилась путем перебора большого числа (около 10^4) реализаций такой системы. Найденная таким образом функция распределения приведена на рис. 4. Видно, что ее форма действительно близка к лоренцевской (сплошная кривая), особенно на крыльях функции, где она остается таковой вплоть до очень больших значений поля $H_3 \approx 100m$ (см. вставку к рис. 4). В то же время

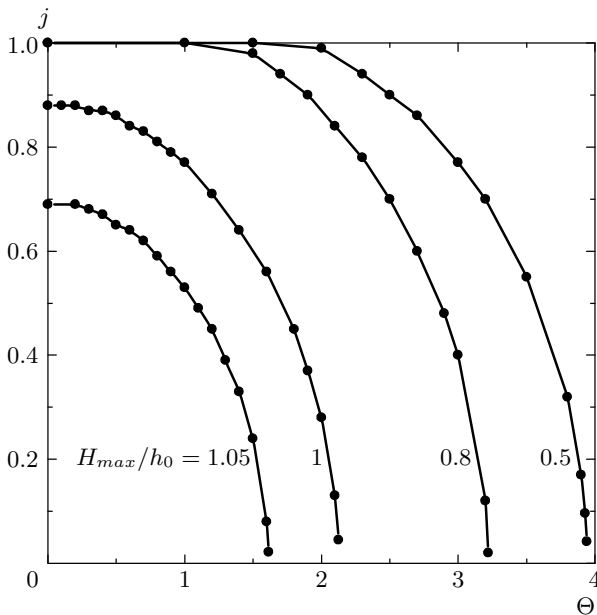


Рис. 1. Температурные зависимости спонтанной намагниченности j системы в системе с обрезанным сверху распределением случайных полей при различных значениях параметра обрезания (внешнее поле $H_e = 0$)

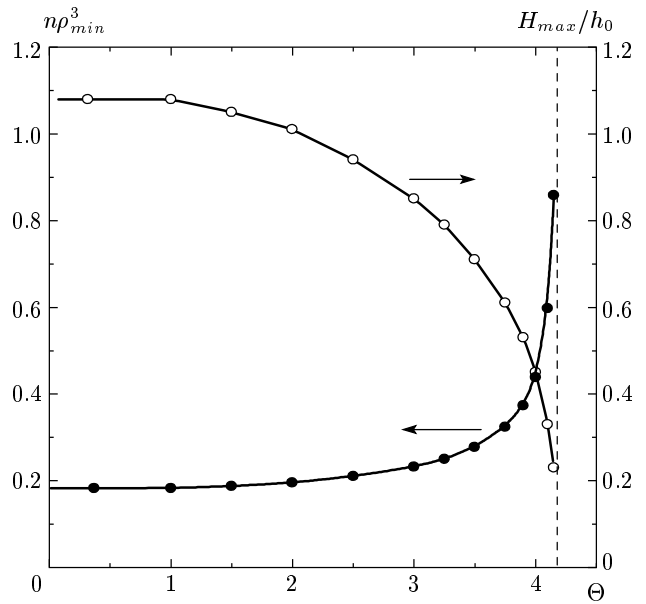


Рис. 2. Температурные зависимости порогового значения параметра $n\rho_{min}^3$, при котором в системе случайных изинговских диполей возникает спонтанный магнитный момент, и соответствующего ему максимального значения $H_{max} = m/\rho_{min}^3$ случайного поля H_3 ($H_e = 0$)

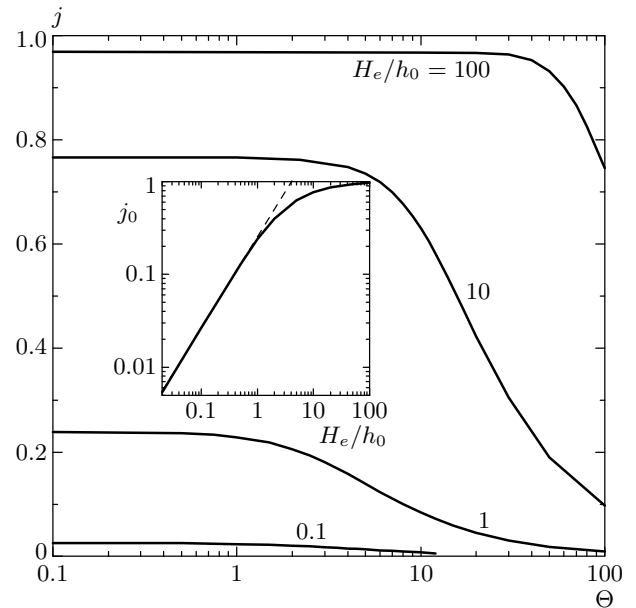


Рис. 3. Температурные зависимости намагниченности j системы в парамагнитном состоянии при различных значениях внешнего магнитного поля H_e . На вставке — полевая зависимость намагниченности при температуре $T = 0$ (штриховая прямая — линейная зависимость $j_0 = 0.265 H_e$)

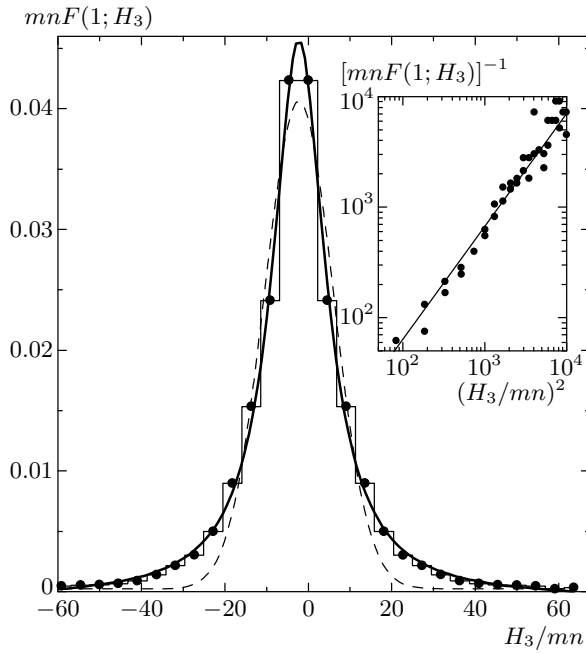


Рис. 4. Функция распределения $F(1; H_3)$ для случайной системы точечных изинговских диполей. Аппроксимации: лоренцевская (сплошная кривая) и гауссовская (штриховая кривая). На вставке — представление функции $F(1; H_3)$, демонстрирующее справедливость лоренцевской аппроксимации в области сильных полей

попытка аппроксимировать функцию $F(1; H_3)$ гауссовской функцией оказывается совершенно неудовлетворительной (штриховая кривая на рис. 4). Поскольку большие поля создаются в основном ближайшими соседями, вид функции распределения в этой области не чувствителен к выбору полного числа учитываемых при расчете диполей. Это, однако, не относится к области слабых магнитных полей ($H \lesssim h_0$), которые создаются более или менее симметричной совокупностью большого числа окрестных диполей. Проверка (увеличение числа учитываемых диполей) показывает корректность результата, представленного на рис. 4.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы показали, что при соответствующем обрезании области сильных случайных полей (что эквивалентно переходу от точечных диполей к диполям конечных размеров) рассматриваемая система может находиться в ферромагнитном состоянии. Для того чтобы понять, является ли такое состояние основ-

ным, заметим, что при $T = 0$ плотность энергии системы есть $W = n\langle w \rangle$, где средняя энергия диполя

$$\langle w \rangle = -\langle \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_0 \rangle = [-\eta m + (1 - \eta)m] \left\langle \frac{4\pi}{3} I + H_3 \right\rangle$$

(усреднение проводится по ансамблю частиц), $I = mn(1 - 2\eta)$, η — доля диполей с магнитными моментами, направленными вдоль намагнитченности. В силу четности функции распределения $F(1; H_3)$ получаем

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{4\pi}{3} I + H_3 \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{4\pi}{3} I + H_3 \right) F(1; H_3) dH_3 = \\ &= \frac{4\pi}{3} I = \frac{4\pi}{3} mn(1 - 2\eta) \end{aligned}$$

и окончательно

$$W = -m^2 n^2 (2\eta - 1)^2 \leq 0.$$

Парамагнитному состоянию ($\eta = 1/2$) отвечает $W = 0$, в ферромагнитном состоянии $W < 0$, поэтому при низких температурах ферромагнитная фаза является основной.

Следует подчеркнуть, что все полученные в настоящей работе результаты относятся исключительно к «жидкой» случайной системе, в которой магнитные диполи могут располагаться в любом месте пространства. Поэтому было бы некорректным использовать их для описания свойств «кристаллических» случайных систем, в которых диполи могут занимать (вероятностным образом) лишь вполне определенные позиции некоторой кристаллической структуры. Примененный метод не пригоден для исследования таких систем, поскольку их случайность не является марковской. В этом случае необходимы разбиение исходного кристалла на неэквивалентные подрешетки и числовой расчет функций распределения случайных полей для каждой из них.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №№ 03-02-17029, 02-02-16974, 01-02-16420).

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Zhang and M. Widom, Phys. Rev. B **51**, 8951 (1995).
2. J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Wiley, New York (1999).
3. B. E. Vugmeister and M. D. Glinchuk, Rev. Mod. Phys. **62**, 993 (1990).
4. S. Chandrasekhar, Rev. Mod. Phys. **15**, 1 (1943).