К расчету коэффициентов в моментной системе уравнений, описывающей кинетику намагниченности суперпарамагнитных частиц

© Ю.П. Калмыков, С.В. Титов*

Centre d'Etudes Fondamentales, Université de Perpignan,
52 Avenue de Villeneuve, 66860, France
* Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,
141120 Фрязино, Московская обл., Россия
E-mail: kalmykov@univ-perp.fr
svt245@ire216.msk.su

(Поступила в Редакцию 10 марта 1999 г.)

Выведена система уравнений для моментов [усредненных сферических гармоник $\langle Y_{l,m}\rangle(t)$], описывающая динамику намагниченности $\mathbf{M}$ суперпарамагнитных частиц. Вывод основан на представлении уравнения Гильберта с флуктуирующим полем и соответствующего уравнения Фоккера–Планка для функции распределения $\mathbf{M}$ через операторы углового момента, что в свою очередь позволяет выразить коэффициенты моментной системы уравнений через коэффициенты Клебша–Гордана.

Однодоменные ферромагнитные частицы характеризуются внутренним потенциалом анизотропии, который может иметь несколько локальных положений равновесия с потенциальными барьерами между ними. Если частицы малы ($\sim 100\,\text{Å}$) и, следовательно, потенциальные барьеры низки, вектор намагниченности $\mathbf{M}(t)$ из-за тепловых флуктуаций может переориентироваться через барьеры из одного положения равновесия в другое [1]. Тепловая неустойчивость намагниченности приводит к суперпарамагнетизму [2]. Исследование тепловых флуктуаций и релаксации намагниченности однодоменных частиц в настоящее время привлекает внимание в контексте улучшения характеристик магнитных носителей записи [3].

Динамика намагниченности $\mathbf{M}(t)$ однодоменной ферромагнитной частицы описывается уравнением Гильберта с флуктуирующим полем [4,5]

$$\frac{d}{dt}\mathbf{M}(t) = \gamma\Big[\mathbf{M}(t)\times\big[\mathbf{H}(t)+\mathbf{h}(t)-\eta\dot{\mathbf{M}}(t)\big]\Big], \tag{1}$$

где γ — гиромагнитное отношение, η — коэффициент трения, $\mathbf{H}$ — суммарное магнитное поле, которое складывается из внешних приложенных полей и поля магнитной анизотропии, $\mathbf{h}(t)$ — случайное поле, обладающее свойствами белого шума

$$\overline{h_i(t)} = 0,$$

$$\overline{h_i(t_1)h_j(t_2)} = 2\eta\beta^{-1}\delta_{ij}\delta(t_1-t_2), (i,\, j = X, Y, Z). \tag{2}$$

Здесь черта сверху означает статистическое среднее по ансамблю частиц, имеющих в момент времени t одинаковую намагниченность $\mathbf{M}(t)$, $\beta = \nu/k_BT$, ν — объем частицы, k_B — постоянная Больцмана, T — температура. Случайное поле $\mathbf{h}(t)$ обусловлено тепловыми флуктуациями. По порядку величины амплитуду $\mathbf{h}(t)$ можно оценить как $kT/\nu M_s$ (M_s — намагниченность материала частицы), что дает при комнатной температуре величину $\geq 100\,\text{Oe}$, и, таким образом, случайное поле соизмеримо с полем магнитной анизотропии [6].

Исходя из (1), Браун получил уравнение Фоккера–Планка для функции распределения $\mathbf{M}$ по направлениям $W(\{\mathbf{M}\},t)$ [7]

$$\frac{\partial W}{\partial t} = L_{FP}W$$

$$= b\left[\frac{1}{\beta}\Delta W + W\Delta V + \left(\frac{\partial V}{\partial\theta}\frac{\partial W}{\partial\theta} - \frac{\partial V}{\partial\varphi}\frac{\partial W}{\partial\varphi}\right)\right.$$

$$\left.+\frac{1}{\alpha\sin\theta}\left(\frac{\partial V}{\partial\theta}\frac{\partial W}{\partial\varphi} - \frac{\partial V}{\partial\varphi}\frac{\partial W}{\partial\theta}\right)\right], \tag{3}$$

где L_{FP} — оператор Фоккера–Планка, Δ — оператор Лапласа, V — функция свободной энергии единицы объема, θ, φ — полярный и азимутальный углы в система сферических координат, $b = \beta/2\tau_N$,

$$\tau_N = \frac{\nu M_s(1+\alpha^2)}{2k_BT\gamma\alpha} \quad — \tag{4}$$

характерное время тепловых флуктуаций намагниченности, $\alpha = \gamma\eta M_s$ — безразмерный коэффициент диссипации. Здесь предполагается, что намагниченность однородна по объему частицы и изменяется только ее ориентация, но не величина. Предполагается также, что частицы не взаимодействуют между собой [8]. (Обсуждение допущений, использованных при выводе уравнений Гильберта и Фоккера–Планка, можно найти, например, в работах [6,7,9]).

Решение уравнения Фоккера–Планка (3) можно искать в виде разложения по сферическим гармоникам $Y_{l,m}$. В результате получается бесконечная система рекуррентных дифференциальных уравнений для моментов $\langle Y_{l,m}\rangle(t)$ [10]

$$\frac{d}{dt}\langle Y_{l,m}\rangle(t) = \sum_{l',m'} d_{l',m',l,m}\langle Y_{l',m'}\rangle(t), \tag{5}$$

где $d_{l',m',l,m}$ — матричные элементы оператора Фоккера–Планка [10], которые зависят от параметров, характеризующих энергию анизотропии, внешнее поле и диссипацию. Вывод и решение уравнения (5) для частных задач даны, например, в [6,10–16]. Решение уравнения Гильберта (1) также можно свести к решению моментной системы (5) [17–20].

Хотя метод моментов используется в теории суперпарамагнетизма в течение долгого времени, его применение при решении конкретных задач кинетики однодоменных частиц со сложными потенциалами анизотропии V сталкивается со значительными трудностями. Это обусловлено тем, что для каждого конкретного потенциала анизотропии V при расчетах $d_{l',m',l,m}$ требуется выполнять сложные преобразования уравнения Гильберта или соответствующего ему уравнения Фоккера–Планка (см., например, [10]). До настоящего времени не были известны общие соотношения для $d_{l',m',l,m}$, справедливые для любого потенциала анизотропии частицы. Цель данной работы — вывод таких соотношений для $d_{l',m',l,m}$.

1. Метод уравнения Ланжевена

Уравнение (1) можно преобразовать [9] к виду уравнения Ландау–Лифшица [21]

$$\frac{d}{dt}\mathbf{M}(t) = \frac{bM_s}{\alpha}\mathbf{M}(t)\big[\mathbf{H}(t)+\mathbf{h}(t)\big] - b\mathbf{M}(t) \times \Big[\mathbf{M}(t)\times\big[\mathbf{H}(t)+\mathbf{h}(t)\big]\Big]. \quad (6)$$

если V — свободная энергия единицы объема, то в базисе сферических координат $\{\mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_r\}$ поле $\mathbf{H}$ определяется как [9,10]

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{M_s}\left(\mathbf{e}_\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathbf{e}_\varphi\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)V, \quad (7)$$

а компоненты векторов представляются в виде

$$\mathbf{M} = \{0, 0, M\}, \qquad \dot{\mathbf{M}} = \{M\dot\theta, M\sin\theta\dot\varphi, 0\},$$

$$\mathbf{h} = \{h_\theta, h_\varphi, 0\} \quad (8)$$

(здесь, как обычно, предполагается, что $\dot M = 0$, т.е. $M = M_s$). Компоненты случайного поля $h_\theta(t)$, $h_\varphi(t)$ в сферических координатах выражаются через $h_X(t)$, $h_Y(t)$, $h_Z(t)$ в декартовой системе координат следующим образом:

$$h_\theta(t) = h_X(t)\cos\theta(t)\cos\varphi(t) + h_Y(t)\cos\theta(t)\sin\varphi(t) - h_Z(t)\sin\theta(t), \quad (9)$$

$$h_\varphi(t) = -h_X(t)\sin\varphi(t) + h_Y(t)\cos\varphi(t). \quad (10)$$

Раскрывая векторные произведения в (6) с учетом (7)–(10), получаем систему стохастических дифференциальных уравнений в сферических координатах

$$\dot\theta(t) = -b\left(\frac{\partial V\big(\theta(t),\varphi(t),t\big)}{\partial\theta} - \frac{1}{\alpha\sin\theta(t)}\frac{\partial V\big(\theta(t),\varphi(t),t\big)}{\partial\varphi}\right) + g_{\theta X}h_X(t) + g_{\theta Y}h_Y(t) + g_{\theta Z}h_Z(t), \quad (11)$$

$$\dot\varphi(t) = -\frac{b}{\sin\theta(t)}\left(\frac{1}{\alpha}\frac{\partial V\big(\theta(t),\varphi(t),t\big)}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin\theta(t)}\frac{\partial V\big(\theta(t),\varphi(t),t\big)}{\partial\varphi}\right) + g_{\varphi X}h_X(t) + g_{\varphi Y}h_Y(t) + g_{\varphi Z}h_Z(t), \quad (12)$$

где

$$g_{\theta X} = bM_s\left(\cos\theta\cos\varphi + \frac{1}{\alpha}\sin\varphi\right),$$

$$g_{\theta Y} = bM_s\left(\cos\theta\sin\varphi - \frac{1}{\alpha}\cos\varphi\right), \quad g_{\theta Z} = -bM_s\sin\theta,$$

$$g_{\varphi X} = \frac{bM_s}{\sin\theta}\left(-\sin\varphi + \frac{1}{\alpha}\cos\theta\cos\varphi\right),$$

$$g_{\varphi Y} = \frac{bM_s}{\sin\theta}\left(\cos\varphi + \frac{1}{\alpha}\cos\theta\sin\varphi\right),$$

$$g_{\varphi Z} = -\frac{bM_s}{\alpha}. \quad (13)$$

При усреднении и преобразованиях стохастических дифференциальных уравнений (11) и (12) с мультипликативным шумом следует использовать подход Стратоновича [22], так как с физической точки зрения рассматриваемые процессы магнитной релаксации удобнее всего моделировать в рамках этого подхода. В частности, в этом случае не требуется предварительного преобразования уравнений (11), (12) в эквивалентную форму уравнений Ито [23]. Принимая во внимание, что при преобразованиях стохастических дифференциальных уравнений в рамках подхода Стратоновича применимы правила обычного анализа, нетрудно получить стохастическое дифференциальное уравнение для сферических гармоник $Y_{l,m}$

$$\frac{d}{dt}Y_{l,m}\big(\theta(t),\varphi(t)\big) = \dot\theta(t)\frac{\partial}{\partial\theta}Y_{l,m}\big(\theta(t),\varphi(t)\big) + \dot\varphi(t)\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{l,m}\big(\theta(t),\varphi(t)\big), \quad (14)$$

где

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = (-1)^m\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}e^{im\varphi}(1-\cos^2\vartheta)^{m/2} \times \frac{d^mP_l(\cos\theta)}{d\cos^m\theta}, \quad Y_{l,-m} = (-1)^mY^*_{l,m}, \quad m>0,$$

$P_l(x)$ — полиномы Лежандра [24], а $\dot\theta(t)$, $\dot\varphi(t)$ определяются уравнениями (11), (12).

Усреднение стохастического дифференциального уравнения (14) проводится аналогично тому, как это делалось, например, в работах [17–19]. Напомним, что стохастические дифференциальные уравнения для N переменных $\{\boldsymbol{\xi}(t)\} = \{\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N\}$ вида [25,26]

$$\frac{d\xi_i(t)}{dt} = H_i\Big(\{\xi(t)\}, t\Big) + g_{ij}\Big(\{\xi(t)\}, t\Big)h_j(t) \qquad (15)$$

с

$$\overline{h_i(t)} = 0, \quad \overline{h_i(t_1)h_j(t_2)} = 2D\delta_{ij}\delta(t_1 - t_2),$$

усредненные по правилу Стратоновича [22] в момент времени t, имеют вид

$$\frac{dx_i}{dt} = \lim_{\tau\to 0}\frac{\overline{\xi_i(t+\tau) - x_i}}{\tau}$$

$$= H_i\big(\{\mathbf{x}\}, t\big) + Dg_{kj}\big(\{\mathbf{x}\}, t\big)\frac{\partial}{\partial x_k}g_{ij}\big(\{\mathbf{x}\}, t\big), \qquad (16)$$

где $\xi_i(t+\tau)$ $(\tau > 0)$ — решения уравнений (15) с начальными условиями $\xi_i(t) = x_i$ [в (15) и (16), как и везде далее, подразумевается суммирование по повторяющимся индексам j и k]. Доказательство приведено, например, в [25]. Тем же путем доказывается, что усредненное уравнение для произвольной дифференцируемой функции $f(\{\boldsymbol{\xi}\})$ имеет вид [17]

$$\frac{d}{dt}f(\{\mathbf{x}\}) = H_i(\{\mathbf{x}\}, t)\frac{\partial}{\partial x_i}f(\{\mathbf{x}\})$$

$$+ Dg_{kj}(\{\mathbf{x}\}, t)\frac{\partial}{\partial x_k}\left[g_{ij}(\{\mathbf{x}\}, t)\frac{\partial}{\partial x_i}f(\{\mathbf{x}\})\right]. \qquad (17)$$

В рассматриваемом случае роль функции f играет $Y_{l,m}$. Таким образом, проводя усреднение (14), получим

$$2\tau_N\frac{d}{dt}Y_{l,m} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y_{l,m}}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y_{l,m}}{\partial\varphi^2}$$

$$- \beta\left[\frac{\partial V}{\partial\theta}\frac{\partial Y_{l,m}}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial V}{\partial\varphi}\frac{\partial Y_{l,m}}{\partial\varphi}\right]$$

$$+ \frac{\beta}{\alpha\sin\theta}\left[\frac{\partial V}{\partial\varphi}\frac{\partial Y_{l,m}}{\partial\theta} - \frac{\partial V}{\partial\theta}\frac{\partial Y_{l,m}}{\partial\varphi}\right]. \qquad (18)$$

Следует заметить, что θ и φ в (18) и $\theta(t)$ и $\varphi(t)$ в (11), (12), (14) имеют различный смысл, а именно: $\theta(t)$ и $\varphi(t)$ являются стахастическими переменными (случайными процессами), тогда как θ и φ в (18) — это значения этих переменных в момент времени t. Вместо использования различных символов для этих переменных мы, следуя работам [25,26], убираем временной аргумент у значений стохастических переменных в момент времени t.

Далее удобно выразить правую часть уравнения (18) через операторы углового момента L_Z, $L_\pm$, L^2, которые определяются как [24]

$$L^2 = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right],$$

$$L_Z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad L_\pm = e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \qquad (19)$$

Таким образом, можно преобразовать (18) к виду

$$\tau_N\dot{Y}_{l,m} = \frac{\beta}{4}\Big(L^2(VY_{l,m}) - VL^2Y_{l,m} - Y_{l,m}L^2V\Big) - \frac{1}{2}L^2Y_{l,m}$$

$$- \frac{i\beta}{4\alpha}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\Big\{Y_{1,1}^{-1}\Big[(L_ZV_+)(L_+Y_{l,m}) - (L_+V_+)(L_ZY_{l,m})\Big]$$

$$+ Y_{1,-1}^{-1}\Big[(L_ZV_-)(L_-Y_{l,m}) - (L_-V_-)(L_ZY_{l,m})\Big]\Big\}, \qquad (20)$$

где для V использовано следующее разложение по сферическим гармоникам:

$$V = V_+ + V_-,$$

$$V_+ = \sum_{R=1}^{\infty}\sum_{S=0}^{R}\nu_{R,S}Y_{R,S}, \quad V_- = \sum_{R=1}^{\infty}\sum_{S=-R}^{-1}\nu_{R,S}Y_{R,S}. \qquad (21)$$

Удобство такого представления связано с тем, что действие операторов L_Z, $L_\pm$, L^2 на сферические гармоники определяется известными соотношениями [24]

$$L_ZY_{l,m} = mY_{l,m}, \qquad (22)$$

$$L_\pm Y_{l,m} = \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\,Y_{l,m\pm 1}, \qquad (23)$$

$$L^2Y_{l,m} = l(l+1)Y_{l,m}. \qquad (24)$$

Кроме того, функции $Y_{1,1}^{-1}$ и $Y_{1,-1}^{-1}$ можно также рассматривать как операторы, действующие на $Y_{l,m}$ по правилу

$$Y_{1,\pm 1}^{-1}Y_{l,\pm m} = \sqrt{\frac{8\pi(2l+1)(l-m)!}{3(l+m)!}}$$

$$\times \sum_{\substack{L=m-\varepsilon_{l,m}\\ \Delta L=2}}^{l-1}\sqrt{\frac{(2L+1)(L+m-1)!}{(L-m+1)!}}\,Y_{L,\pm(m-1)},$$

$$(m > 0), \qquad (25)$$

где $\varepsilon_{l,m} = 1$, если индексы l и m имеют одинаковую четность, $\varepsilon_{l,m} = 0$, если индексы имеют разную четность. Формула (25) является следствием известного соотношения [24]

$$\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,\pm 1}Y_{l,m} = \sqrt{\frac{(l\pm m+1)(l\pm m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}\,Y_{l+1,m\pm 1}$$

$$- \sqrt{\frac{(l\mp m-1)(l\mp m)}{(2l-1)(2l+1)}}\,Y_{l-1,m\pm 1}, \qquad (26)$$

которое можно представить в виде рекуррентного уравнения

$$Y_{l,\pm 1}^{-1}Y_{l,m} = \sqrt{\frac{8\pi}{3}}\sqrt{\frac{(2l-1)(2l+1)}{(l\pm m)(l\pm m-1)}}\,Y_{l-1,m\mp 1}$$

$$+ \sqrt{\frac{(2l+1)(l\mp m)(l\mp m-1)}{(2l-3)(l\pm m)(l\pm m-1)}}\,Y_{l,\pm 1}^{-1}Y_{l-2,m},$$

$$(|m\mp 1| \le l-1), \qquad (27)$$

имеющего решение (25).

Принимая во внимание свойство произведения сферических гармоник [24]

$$Y_{l,m}Y_{l_1,m_1} = \sqrt{\frac{(2l+1)(2l_1+1)}{4\pi}} \times \sum_{\substack{l_2=|l-l_1| \\ \Delta l_2=2}}^{l+l_1} \frac{\langle l,0,l_1,0|l_2,0\rangle\langle l,m,l_1,m_1|l_2,m+m_1\rangle}{\sqrt{2l_2+1}} Y_{l_2,m+m_1} \tag{28}$$

($\langle l_1,m_1,l_2,m_2|l,m\rangle$ — коэффициенты Клебша–Гордана [24]) и соотношения (22)–(25), уравнение (20) можно преобразовать к виду

$$\tau_N \dot{Y}_{l,m} = \sum_{l',s} e_{l,m,l',m\pm s} Y_{l',m\pm s}, \tag{29}$$

где

$$\begin{aligned} e_{l,m,l',m\pm s} = &-\frac{1}{2}l(l+1)\delta_{l,l'}\delta_{s,0} \\ &+ (-1)^m \frac{\beta}{4}\sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)}{\pi}} \\ &\times \sum_{r=s}^{\infty} \nu_{r,\pm s}\Bigg\{ \frac{[l'(l'+1)-r(r+1)-l(l+1)]}{2\sqrt{2r+1}} \\ &\times \langle l,0,l',0|r,0\rangle\langle l,m,l',-m\mp s|r,\mp s\rangle \\ &+ \frac{i}{\alpha}\sqrt{\frac{(2r+1)(r-s)!}{(r+s)!}} \\ &\times \sum_{\substack{L=s-\varepsilon_{r,s} \\ \Delta L=2}}^{r-1} \sqrt{\frac{(L+s-1)!}{(L-s+1)!}}\langle l,0,l',0|L,0\rangle \\ &\times \Big(m\sqrt{(L+s)(L-s+1)}\langle l,m,l',-m\mp s|L,\mp s\rangle \\ &\pm s\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)} \\ &\times \langle l,m\pm 1,l',-m\mp s|L,\mp s\pm 1\rangle \Big)\Bigg\}. \end{aligned} \tag{30}$$

Здесь $s \geq 0$, а суммирование выполняется по всем индексам, для которых коэффициенты Клебша–Гордана имеют смысл. Соотношение (30) позволяет рассчитать коэффициенты $e_{l,m,l',m'}$ для любого конкретного потенциала анизотропии. Пример расчета для кубической анизотропии дан в Приложении.

Величины $Y_{l,m}$ в (29) — это функции θ и φ, которые являются случайными величинами с соответствующей плотностью распределения W. Поэтому также необходимо выполнить усреднение (29) по W [26]. Таким образом, получается система уравнений для моментов (усредненных сферических гармоник)

$$\tau_N \frac{d}{dt}\langle Y_{l,m}\rangle(t) = \sum_{l',m'} e_{l,m,l',m'}\langle Y_{l',m'}\rangle(t), \tag{31}$$

где угловые скобки $\langle\ \rangle$ обозначают усреднение по W, а коэффициенты $e_{l,m,l',m'}$ задаются (30).

2. Метод уравнения Фоккера–Планка

В предыдущем разделе коэффициенты $e_{l,m,l',m'}$, входящие в систему уравнений для усредненных сферических гармоник, были получены методом уравнения Ланжевена. Аналогичный результат может быть также получен методом уравнения Фоккера–Планка.

Как известно, уравнение Фоккера–Планка для функции распределения $W(\{\mathbf{x}\},t)$ в случае N переменных $\{x_1,\ldots,x_N\} = \{\mathbf{x}\}$ выводится из соответствующих уравнений Ланжевена (15) и записывается как [25]

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[-D_i(\{\mathbf{x}\})W + \frac{\partial}{\partial x_j}\Big(D_{ij}(\{\mathbf{x}\})W\Big)\right], \tag{32}$$

где

$$D_i(\{\mathbf{x}\}) = H_i(\{\mathbf{x}\},t) + Dg_{jk}(\{\mathbf{x}\},t) \times \frac{\partial}{\partial x_j}g_{ik}(\{\mathbf{x}\},t) \quad — \tag{33}$$

вектор сдвига,

$$D_{ij}(\{\mathbf{x}\}) = Dg_{ik}(\{\mathbf{x}\},t)g_{jk}(\{\mathbf{x}\},t) \quad — \tag{34}$$

тензор диффузии.

Поскольку при рассмотрении динамики намагниченности частицы обычно свойства (2) случайного поля $\mathbf{h}(t)$ задаются для декартовых компонент (т.е. $i,j = X,Y,Z$), а уравнения движения для компонент вектора намагниченности $\mathbf{M}$ удобно записывать в сферических координатах [см. (11), (12)], то будет справедлива следующая замена [25]:

$$D_i = \frac{\partial x_i}{\partial x_{i'}}D_{i'} + \frac{\partial^2 x_i}{\partial x_{i'}\partial x_{j'}}D_{i'j'}, \tag{35}$$

$$D_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x_{i'}}\frac{\partial x_j}{\partial x_{j'}}D_{i'j'}, \tag{36}$$

где $i',j' = \theta,\varphi$, $i,j,k = X,Y,Z$, $D_{i'}$, $D_{i'j'}$ — коэффициенты, заданные в сферических координатах по формулам (33), (34), в которых коэффициенты $g_{i'k}(\{\mathbf{x}\},t)$, $g_{j'k}(\{\mathbf{x}\},t)$ берутся из (13). После всех подстановок получается уравнение (3) [5].

Решение уравнения (3) будем искать в виде

$$W(\theta,\varphi,t) = \Psi(\theta,\varphi,t)\Psi^*(\theta,\varphi,t), \tag{37}$$

где $\Psi(\theta,\varphi,t)$ задается как

$$\Psi(\theta,\varphi,t) = \sum_{l,m} f_{l,m}(t)Y_{l,m}(\theta,\varphi). \tag{38}$$

Условие нормировки для функции $W(\theta,\varphi,t)$ имеет вид

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, W(\theta,\varphi,t) = \sum_{l,m} \left| f_{l,m}(t) \right|^2 = 1.$$

Предлагаемый способ решения уравнения Фоккера–Планка отличается от используемого в работах [10–15], где сама функция $W(\theta,\varphi,t)$ искалась в виде (38). Представление функции $W(\theta,\varphi,t)$ в виде (37) имеет несколько очевидных преимуществ. Прежде всего, не требуется накладывать дополнительных условий положительности и действительности функции $W(\theta,\varphi,t)$ (что следует из ее физического смысла). Кроме того, имеется прямая квантово-механическая аналогия. В данном случае функция $W(\theta,\varphi,t)$ подобна плотности вероятности $|\Psi|^2$ (Ψ — волновая функция), для которой справедливо уравнение непрерывности [27]

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j} = 0,$$

где $\mathbf{j}$ — плотность потока вероятности.

Выражая оператор Фоккера–Планка L_{FP} в (3) через операторы угловых моментов L_Z, $L_\pm$, L^2 (19), получаем [ср. с (28)]

$$L_{FP} Y^*_{l',m'} = \frac{\beta}{4\tau_N}\Big(V L^2 Y^*_{l',m'} - Y^*_{l',m'} L^2 V - L^2 (Y^*_{l',m'} V) \Big)$$
$$- \frac{1}{2\tau_N} L^2 Y^*_{l',m'} + \frac{i\beta}{4\tau_N \alpha}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}$$
$$\times \Big\{ Y^{-1}_{1,1} \big[(L_Z V_+)(L_+ Y^*_{l',m'}) - (L_+ V_+)(L_Z Y^*_{l',m'}) \big]$$
$$+ Y^{-1}_{1,-1} \big[(L_Z V_-)(L_- Y^*_{l',m'}) - (L_- V_-)(L_Z Y^*_{l',m'}) \big] \Big\}, \quad (39)$$

где $V_\pm$ задаются соотношениями (21).

Выполнив преобразование

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{l,m} \frac{dW}{dt} = \sum_{\substack{l',l'' \\ m',m''}} f_{l',m'}(t) f^*_{l'',m''}(t)$$
$$\times \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{l,m} L_{FP} (Y_{l',m'} Y^*_{l'',m''})$$
$$= \sum_{\substack{l',l'',l''' \\ m',m'',m'''}} (-1)^{m'} \sqrt{\frac{(2l'+1)(2l''+1)}{4\pi(2l'''+1)}}$$
$$\times \langle l',0,l'',0|l''',0\rangle \langle l',-m',l'',m''|l''',m'''\rangle$$
$$\times f_{l',m'}(t) f^*_{l'',m''}(t) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{l,m} L_{FP} Y^*_{l''',m'''}, \quad (40)$$

получаем моментную систему (5), где

$$\langle Y_{l,m}\rangle(t) = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_{l,m}(\theta,\varphi) W(\theta,\varphi,t) \sin\theta d\theta d\varphi$$
$$= \sum_{\substack{l',l'' \\ m',m''}} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)}{4\pi(2l''+1)}} \langle l,0,l',0|l'',0\rangle$$
$$\times \langle l,m,l',m'|l'',m''\rangle f_{l',m'}(t) f^*_{l'',m''}(t), \quad (41)$$

$$d_{l',m\pm s,l,m} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{l,m} L_{FP} Y^*_{l',m\pm s}$$
$$= -\frac{l(l+1)\delta_{l,l'}\delta_{s,0}}{2\tau_N} + (-1)^m \frac{\beta}{4\tau_N}\sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)}{\pi}}$$
$$\times \sum_{r=s}^{\infty} \nu_{r,\pm s} \Big\{ \frac{\big[l'(l'+1) - r(r+1) - l(l+1) \big]}{2\sqrt{2r+1}}$$
$$\times \langle l,0,l',0|r,0\rangle \langle l,m,l',-m\mp s|r,\pm s\rangle$$
$$+ \frac{i}{\alpha}\sqrt{\frac{(2r+1)(r-s)!}{(r+s)!}} \sum_{\substack{L=s-\varepsilon_{r,s} \\ \Delta L=2}}^{r-1} \sqrt{\frac{(L+s-1)!}{(L-s+1)!}} \langle l,0,l',0|L,0\rangle$$
$$\times \Big((m\pm s)\sqrt{(L+s)(L-s+1)} \langle l,m,l',-m\mp s|L,\mp s\rangle$$
$$\mp s\sqrt{(l'\pm m+s)(l'\mp m-s+1)}$$
$$\times \langle l,m,l',-m\mp s\pm 1|L,\mp s\pm 1\rangle \Big) \Big\} \text{ — } \quad (42)$$

матричные элементы оператора Фоккера–Планка в системе сферических гармоник. При выводе выражения (42) использовалось известное соотношение [24]

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{l,m} Y_{l',m'} Y^*_{l'',m''}$$
$$= \sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)}{4\pi(2l''+1)}} \langle l,0,l',0|l'',0\rangle \langle l,m,l',m'|l'',m''\rangle.$$

Применяя равенство

$$\sqrt{(l_3\pm m_3)(l_3\mp m_3+1)} \langle l_1,m_1,l_2,m_2|l_3,m_3\mp 1\rangle$$
$$= \sqrt{(l_1\mp m_1)(l_1\pm m_1+1)} \langle l_1,m_1\pm 1,l_2,m_2|l_3,m_3\rangle$$
$$+ \sqrt{(l_2\mp m_2)(l_2\pm m_2+1)} \langle l_1,m_1,l_2,m_2\pm 1|l_3,m_3\rangle$$

и сравнивая (30) и (42), можно показать, что

$$d_{l',m',l,m} = e_{l,m,l',m'}/\tau_N.$$

Это соотношение свидетельствует о полном соответствии систем уравнений (5) и (31). Это также подтверждает эквивалентность метода уравнения Ланжевена и метода уравнения Фоккера–Планка.

Таким образом, в данной работе получены аналитические выражения (соотношения (30), (42)) для коэффициентов моментной системы уравнений, описывающих динамику намагниченности суперпарамагнитных частиц для произвольного потенциала анизотропии V. Вывод (30), (42) дан независимо двумя методами (уравнения Ланжевена и уравнения Фоккера–Планка), что доказывает эквивалентность этих методов при решении задач магнитной релаксации в системах суперпарамагнитных частиц. При этом однако использование метода уравнения Ланжевена позволяет получить решение задачи более просто, путем непосредственного усреднения уравнения Гильберта с флуктуирующим полем, не прибегая к уравнению Фоккера–Планка.

При расчете физических величин (восприимчивости, времени релаксации намагниченности и т.п.) решение моментной системы уравнений (5) можно получить стандартными численными методами (прогонки и т.п.) путем ограничения числа уравнений, достаточного для достижения сходимости. Однако при малой диссипации[1] (что соответствует условиям эксперимента) необходимо учитывать огромное число уравнений ($\sim 10^4$ и больше) и становится весьма затруднительно получить устойчивое решение [16]. Поэтому при решении конкретных задач предпочтительнее использовать метод матричных непрерывных дробей [25,26]. Суть данного метода состоит в преобразовании моментной системы (5) в матричное трехчленное уравнение вида [25,26]

$$\tau_N \frac{d}{dt}\mathbf{C}_n(t) = \mathbf{Q}_n^{-}\mathbf{C}_{n-1}(t) + \mathbf{Q}_n\mathbf{C}_n(t) + \mathbf{Q}_n^{+}\mathbf{C}_{n+1}(t), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \tag{43}$$

где $\mathbf{C}_n(t)$ — вектор-столбец, соответствующим образом сформированный из моментов $\langle Y_{l,m}\rangle(t)$, $\mathbf{C}_0(t) = 0$, а $\mathbf{Q}_n^{-}$, $\mathbf{Q}_n$, $\mathbf{Q}_n^{+}$ — матрицы соответствующей размерности, состоящие из $d_{l',m',l,m}$. Точное решение уравнения (43) для образа Лапласа $\mathbf{C}_1(t)$ имеет вид [26]

$$\tilde{\mathbf{C}}_1(s) = \tau_N\Big[\tau_N s\mathbf{I} - \mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_1^{+}\mathbf{S}_2(s)\Big]^{-1} \times \left\{\mathbf{C}_1(0) + \sum_{n=2}^{\infty}\left[\prod_{k=2}^{n}\mathbf{Q}_{k-1}^{+}\mathbf{S}_k(s)(\mathbf{Q}_k^{-})^{-1}\right]\mathbf{C}_n(0)\right\}, \tag{44}$$

где $\mathbf{I}$ — единичная матрица, а бесконечная матричная непрерывная дробь $\mathbf{S}_n(s)$ определяется соотношением

$$\mathbf{S}_n(s) = \cfrac{\mathbf{I}}{\tau_N s\mathbf{I} - \mathbf{O}_n - \mathbf{Q}_n^{+}\cfrac{\mathbf{I}}{\tau_N s\mathbf{I} - \mathbf{Q}_{n+1} - \mathbf{Q}_{n+1}^{+}\cfrac{\mathbf{I}}{\tau_N s\mathbf{I} - \mathbf{Q}_{n+2} - \dots}\mathbf{Q}_{n+2}^{-}}\mathbf{Q}_{n+1}^{-}}\mathbf{Q}_n^{-}.$$

Вычисление векторов начальных значений $\mathbf{C}_n(0)$ также выполняется с помощью матричных непрерывных дробей $\mathbf{S}_n(0)$ [25,26]. Как показано на многих примерах [25,26], метод матричных непрерывных дробей решения бесконечных систем линейных уравнений значительно более удобен для расчетов, чем стандартные численные методы. Для расчета характеристик суперпарамагнетиков метод матричных непрерывных дробей использовался в [17–20,29].

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект № 96-02-16762-а) и ИНТАС (проект № 96-0663).

Приложение

Коэффициенты для кубической анизотропии. В качестве примера рассмотрим частицы с кубической анизотропией. Прямой расчет матричных элементов методом уравнения Фоккера–Планка дан, например, в [10]. Покажем, как коэффициенты $e_{l',m',l,m}$ следуют из (30) [$d_{l',m',l,m}$ могут быть легко получены из (42)]. Функция свободной энергии единицы объема частиц с кубическим потенциалом задается в виде [9,10]

$$V = \frac{K}{4}(\sin^4\theta\sin^2 2\varphi + \sin^2 2\theta) = -\frac{2K}{15}\sqrt{\pi}Y_{4,0} - \frac{K}{15}\sqrt{\frac{10\pi}{7}}[Y_{4,4} + Y_{4,-4}] + \frac{K}{5}, \tag{П1}$$

где K — константа анизотропии. Введем безразмерный параметр анизотропии

$$\sigma = \beta K/4.$$

Тогда из (30) и (П1) получаем 27 отличных от нуля коэффициентов

$$e_{l,m,l,m} = (-1)^m\frac{4\sigma}{9}(2l+1)\langle l,0,l,0|4,0\rangle \times \langle l,m,l,-m|4,0\rangle - \frac{1}{2}l(l+1) = \sigma\frac{9(l^2-1)[(l+1)^2-1]-15m^2[6l(l+1)-5-7m^2]}{[4l^2-9][4(l+1)^2-9]} - \frac{l(l+1)}{2},$$

$$e_{l,m,l,m\pm4} = (-1)^m 4\sqrt{\frac{5}{14}} \times \frac{\sigma}{9}(2l+1)\langle l,0,l,0|4,0\rangle\langle l,m,l,-m\mp4|4,\mp4\rangle = \frac{15\sigma\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+4)[l^2-(m\pm1)^2][l^2-(m\pm2)^2][l^2-(m\pm3)^2]}}{2(4l^2-9)[4(l+1)^2-9]},$$

[1] Методы экспериментальных и теоретических оценок параметра диссипации α обсуждались, например, в [6,9,28]. Эти оценки дают значения α порядка $0.01-0.1$.

$$e_{l,m,l-2,m} = (-1)^m \frac{2\sigma}{45} \sqrt{(2l+1)(2l-3)}$$
$$\times (2l+9)\langle l,0,l-2,0|4,0\rangle\langle l,m,l-2,-m|4,0\rangle$$
$$= \frac{\sigma(2l+9)(l^2-l-2-7m^2)}{(2l-5)(2l-1)(2l+3)}$$
$$\times \sqrt{\frac{(l^2-m^2)[(l-1)^2-m^2]}{(2l-3)(2l+1)}},$$

$$e_{l,m,l-2,m\pm4} = (-1)^m 2\sqrt{\frac{5}{14}}\frac{\sigma}{45}\sqrt{(2l+1)(2l-3)}$$
$$\times (2l+9)\langle l,0,l-2,0|4,0\rangle\langle l,m,l-2,-m\mp4|4,\mp4\rangle$$
$$= -\frac{\sigma(2l+9)}{2(2l-5)(2l-1)(2l+3)}$$
$$\times \sqrt{\frac{(l\mp m-5)(l\mp m-4)(l\mp m-3)(l\mp m)[l^2-(m\pm2)^2][l^2-(m\pm1)^2]}{(2l-3)(2l+1)}},$$

$$e_{l,m,l-4,m} = (-1)^m \frac{8\sigma}{45}\sqrt{(2l+1)(2l-7)}$$
$$\times (l+1)\langle l,0,l-4,0|4,0\rangle\langle l,m,l-4,-m|4,0\rangle$$
$$= \frac{7\sigma(l+1)}{(2l-5)(2l-3)(2l-1)}$$
$$\times \sqrt{\frac{[(l-3)^2-m^2][(l-2)^2-m^2][(l-1)^2-m^2][l^2-m^2]}{(2l-7)(2l+1)}},$$

$$e_{l,m,l-4,m\pm4} = (-1)^m \sqrt{\frac{5}{14}}\frac{8\sigma}{45}\sqrt{(2l+1)(2l-7)}$$
$$\times (l+1)\langle l,0,l-4,0|4,0\rangle\langle l,m,l-4,-m\mp4|4,\mp4\rangle$$
$$= \frac{\sigma(l+1)}{2(2l-5)(2l-3)(2l-1)}$$
$$\times \sqrt{\frac{(l\mp m-7)(l\mp m-6)\ldots(l\mp m-1)(l\mp m)}{(2l-7)(2l+1)}},$$

$$e_{l,m,l-1,m} = (-1)^{m+1}\frac{2i\sigma m}{5\alpha}\sqrt{4l^2-1}$$
$$\times \Big[\langle l,0,l-1,0|1,0\rangle\langle l,m,l-1,-m|1,0\rangle$$
$$+ \langle l,0,l-1,0|3,0\rangle\langle l,m,l-1,-m|3,0\rangle\Big]$$
$$= -\frac{3i\sigma m(3l^2-5-7m^2)}{\alpha(4l^2-9)}\sqrt{\frac{l^2-m^2}{4l^2-1}},$$

$$e_{l,m,l-1,m\pm4} = \pm(-1)^m \frac{2i\sigma}{7\sqrt{5\alpha}}\sqrt{(4l^2-1)(l\pm m+3)(l\mp m-4)}$$
$$\times \langle l,0,l-1,0|3,0\rangle\langle l,m,l-1,-m\mp3|3,\mp3\rangle$$
$$= \pm\frac{3i\sigma}{2\alpha(4l^2-9)}$$
$$\times \sqrt{\frac{(l\mp m)(l\mp m-4)[l^2-(m\pm1)^2][l^2-(m\pm2)^2][l^2-(m\pm3)^2]}{4l^2-1}},$$

$$e_{l,m,l-3,m} = (-1)^{m+1}\frac{2i\sigma m}{5\alpha}\sqrt{4(l-1)^2-9}$$
$$\times \langle l,0,l-3,0|3,0\rangle\langle l,m,l-3,-m|3,0\rangle$$
$$= -\frac{7i\sigma m}{\alpha[4(l-1)^2-1]}$$
$$\times \sqrt{\frac{(l^2-m^2)[(l-1)^2-m^2][(l-2)^2-m^2]}{4(l-1)^2-9}},$$

$$e_{l,m,l-3,m\pm4} = \pm(-1)^m \frac{2i\sigma}{7\sqrt{5\alpha}}\sqrt{[4(l-1)^2-9](l\pm m+1)(l\mp m-6)}$$
$$\times \langle l,0,l-3,0|3,0\rangle\langle l,m,l-3,-m\mp3|3,\mp3\rangle$$
$$= \mp\frac{i\sigma}{2\alpha[4(l-1)^2-1]}$$
$$\times \sqrt{\frac{(l\mp m-6)(l\mp m-5)\ldots(l\mp m-1)(l\mp m)(l\pm m+1)}{4(l-1)^2-9}}.$$

Остальные элементы находятся из соотношений:

$$e_{l,m,l+2,m} = -\frac{2l-7}{2l+13}\,e_{l+2,m,l,m},$$
$$e_{l,m,l+2,m\pm4} = -\frac{2l-7}{2l+13}\,e_{l+2,m\pm4,l,m},$$
$$e_{l,m,l+4,m} = -\frac{l}{l+5}\,e_{l+4,m,l,m},$$
$$e_{l,m,l+4,m} = -\frac{l}{l+5}\,e_{l+4,m\pm4,l,m}.$$
$$e_{l,m,l+1,m} = e_{l+1,m,l,m},\quad e_{l,m,l+1,m\pm4} = e_{l+1,m\pm4,l,m},$$
$$e_{l,m,l+3,m} = e_{l+3,m,l,m},\quad e_{l,m,l+3,m\pm4} = e_{l+3,m\pm4,l,m}.$$

Коэффициенты $e_{l',m'l,m,}$ в точности согласуются с выражениями, полученными в [10,18,20].

Список литературы

[1] L. Néel. Ann. Géophys. **5**, 99 (1949).
[2] C.P. Bean, J.D. Livingston. Suppl. J. Appl. Phys. **30**, 1205 (1959).
[3] H.B. Braun, H.N. Bertram. J. Appl. Phys. **75**, 4609 (1994).
[4] T.L. Gilbert. Phys. Rev. **100**, 1243 (1956).
[5] W.F. Brown, jr. Phys. Rev. **130**, 1677 (1963).
[6] Yu.L. Raikher, M.I. Shliomis. Adv. Chem. Phys. **87**, 595 (1994).
[7] W.F. Brown, jr. IEEE Trans. Mag. **15**, 1196 (1979).

[8] I. Klik, L. Gunther. J. Appl. Phys. **67**, 4505 (1990).
[9] I. Klik, L. Gunther. J. Stat. Phys. **60**, 473 (1990).
[10] L.J. Geoghegan, W.T. Coffey, B. Mulligan. Adv. Chem. Phys. **100**, 475 (1997).
[11] A. Aharoni. Phys. Rev. **177**, 763 (1969).
[12] Ю.Л. Райхер, М.И. Шлиомис. ЖЭТФ **67**, 1060 (1974).
[13] I. Eisenstein, A. Aharoni. Phys. Rev. **B16**, 1278 (1977).
[14] Э.К. Садыков, А.Г. Исавнин. ФТТ **38**, 2104 (1996).
[15] Yu.L. Raikher, V.I. Stepanov. Phys. Rev. **B55**, 15 005 (1997).
[16] W.T. Coffey, D.S.F. Crothers, J.L. Dormann, L.J. Geoghegan, E.C. Kennedy. Phys. Rev. **B58**, *6*, 3249 (1998).
[17] Yu.P. Kalmykov, W.T. Coffey. Phys. Rev. **B56**, 3325 (1997).
[18] Yu.P. Kalmykov, S.V. Titov, W.T. Coffey. Phys. Rev. **B58**, 3267 (1998).
[19] Ю.П. Калмыков, С.В. Титов. ФТТ **40**, 1642 (1998).
[20] Ю.П. Калмыков, С.В. Титов. ЖЭТФ **115**, 101 (1999).
[21] L.D. Landau, E.M. Lifshitz. Phys. Z. Sowjetunion. **8**, 153 (1935).
[22] Р.Л. Стратонович. Условные марковские процессы и их применение в теории оптимального управления МГУ. М. (1968).
[23] К.В. Гардинер. Стохастические методы в естественных науках. Мир, М. (1986).
[24] Р. Зар. Теория углового момента. О пространственных эффектах в физике и химии. Мир, М. (1993).
[25] H. Risken. The Fokker-Planck Equation. Springer, Berlin (1989).
[26] W.T. Coffey, Yu.P. Kalmykov, J.T. Waldron. The Langevin Equation. World Scientific, Singapore (1996).
[27] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М. (1989).
[28] W.T. Coffey, D.S.F. Crothers, J.L. Dormann, Yu.P. Kalmykov, E.C. Kennedy, W. Wernsdorfer. Phys. Rev. Letts. **80**, 5655 (1998).
[29] Ю.П. Калмыков, С.В. Титов. ФТТ **40**, 1898 (1998).