

Вычисление дипольных полей в междоузлиях редкоземельных металлов

© М.З. Урицкий, В.Ю. Ирхин

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
620219 Екатеринбург, Россия

Институт электрохимии Уральского отделения Российской академии наук,
Екатеринбург, Россия

E-mail: Valentin.Irkhin@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 22 июня 1999 г.)

Разработан эффективный метод вычисления суммы дипольных магнитных полей узлов решетки, основанный на использовании осевой симметрии третьего порядка и переходе к суммированию по гексагональным плоскостям. Найдены значения полей в октаэдрических и тетраэдрических междоузлиях ГПУ решетки в случае спиральных структур тяжелых РЗ металлов и для самария. Показано, что отсутствие экспериментально наблюдаемого скачка дипольного поля в точке ферро-антиферромагнитного перехода в диспрозии объясняется малым углом поворота спиральной магнитной структуры. На основе вычисления микроскопических полей в однородной сплошной среде обсуждается проблема интерпретации макроскопического поля Лоренца.

Традиционно (см., например, [1–3]) локальное поле в магнетике представляется в виде суммы дипольного, лоренцева, размагничивающего и контактного (фермиевского) полей

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_{\text{dip}} + \mathbf{B}_{\text{Lor}} + \mathbf{B}_{\text{dmg}} + \mathbf{B}_{\text{F}}. \quad (1)$$

Как известно, это ведет к ряду трудностей как вычислительного, так и физического характера. Вычисление дипольного поля является нетривиальной задачей из-за медленной сходимости суммы ряда полей точечных диполей. Далее трудности возникают при обсуждении экспериментальных данных, поскольку проблема интерпретации поля Лоренца в микромасштабах, когда проявляется дискретность структуры, еще окончательно не решена (см. [2]). Наиболее удобным инструментом исследования локального магнитного поля в междоузлиях является мюонная спектроскопия [2–7]. μSR -измерения локального магнитного поля в диспрозии [3] демонстрируют слабое изменение магнитного поля в октаэдрическом междоузлии при переходе из ферро- в антиферромагнитное состояние. Этот эффект противоречит тому, что поле Лоренца в АФМ фазе по определению равно нулю, а в ФМ состоянии его значение сравнимо с экспериментально измеренным в [3]. Причина кажущегося противоречия кроется в методологии. В указанном представлении (1) используются поля разного типа: два первых — микроскопические поля в реальной точке кристалла, остальные — усредненные поля или индукции. При точном суммировании дипольных полей от всех ионов должен появиться член, который компенсирует лоренцево поле. По-видимому, об этом свидетельствуют результаты компьютерных вычислений дипольного поля в [3]. Авторы этой работы приходят к выводу о малости контактного поля по сравнению с остальными членами. Следуя этому предположению, ограничимся рассмотрением первых трех членов в (1); проблемы, возникающие при вычислении контактного поля, обсуждаются в [6].

Таким образом, в настоящей работе детально анализируется формирование макроскопических полей индукции из соответствующих микроскопических составляющих. При этом предлагается не разделять при вычислении полного поля размагничивающее, дипольное и лоренцево поля, а, учитывая гексагональную симметрию, перегруппировать ряд для полного поля диполей ионов решетки таким образом, чтобы радикально упростить процедуру суммирования.

1. Магнитное поле в симметричных точках сплошных тел

Рассмотрим вначале имеющий методологическое значение вопрос о соотношении точных микроскопических полей и индукций или усредненных полей. Для этого запишем поле системы элементарных замкнутых токов, распределенных в пространстве. На расстоянии, намного превышающем их линейные размеры, это поле можно представить как сумму полей эквивалентных точечных диполей

$$\mathbf{B}_{\text{dip}} = \sum_i \frac{M}{r_i^3} \{3(\mathbf{m}\mathbf{n}_i)\mathbf{n}_i - \mathbf{m}\}, \quad (2)$$

где \mathbf{m} — единичный вектор в направлении намагниченности, \mathbf{n}_i — единичный вектор, направленный в точку наблюдения. Рассматривая случай цилиндрической симметрии и переходя в (2) от суммы к интегралу, можно найти дипольное поле в точках на оси симметрии

$$\mathbf{B}_{\text{dip}} = (3(\mathbf{m}\mathbf{z})\mathbf{z} - \mathbf{m}) \frac{3}{2} \int \frac{1}{r^3} (\cos^2 \theta - 1/3) d\mu, \\ d\mu = \mu_V dV, \quad d\mu = \mu_S dS, \quad (3)$$

где $\mu_{V,S}$ — удельная намагниченность среды (поверхности). Записав (3) в цилиндрической системе координат,

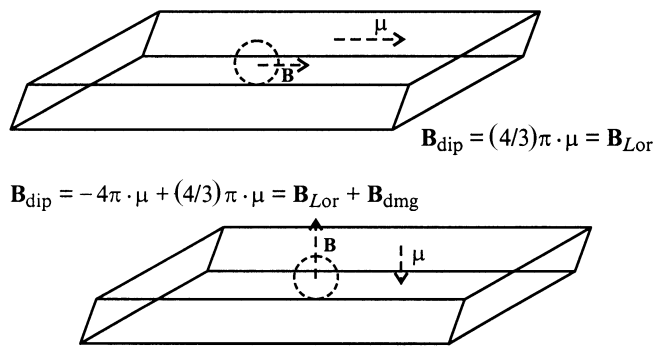


Рис. 1. Магнитное поле сферической полости в плоской пластине.

нетрудно рассчитать поле бесконечной непрерывно намагниченной плоскости с круговым отверстием, центр которого лежит на рассматриваемой оси

$$\mathbf{B}_{\text{dip}} = (3(\mathbf{mz})\mathbf{z} - \mathbf{m}) \frac{\pi \mu_S}{\rho} \left(\frac{h^2}{\rho^2} - 1 \right), \quad (4)$$

где h — расстояние от точки наблюдения до плоскости, ρ — расстояние до окружности отверстия. Как видно из (4), поле бесконечной непрерывно намагниченной плоскости ($h = \rho$) при любой ориентации магнитного момента равно нулю. Это же справедливо внутри равномерно намагниченной сферы или шарового слоя со сферически симметричным распределением намагниченности, на оси однородно намагниченной бесконечной цилиндрической поверхности и даже в точке пересечения торца полубесконечного цилиндра с его осью, в чем нетрудно убедиться, вычислив интеграл (3) для этих случаев. Объясняется это компенсацией вкладов при интегрировании областей внутри и вне конуса с углом раствора $2 \arccos(\sqrt{1/3})$ в выражении (3).

Роль векторного коэффициента в выражении (3) можно понять на простом примере: вычислим поле на оси симметрии внутри вырезанной в плоскопараллельной однородно намагниченной пластине сферической полости при ориентации намагниченности вдоль и поперек пластины (рис. 1). Это можно сделать, проинтегрировав (4) вдоль общей оси симметрии по переменной h . В первом случае $\mathbf{B}_{\text{dip}} = (4/3)\pi\boldsymbol{\mu} = \mathbf{B}_{\text{Lor}}$, поскольку размагничивающее поле равняется нулю; во втором случае

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{\text{dip}} &= -(8/3)\pi\boldsymbol{\mu} = -4\pi\boldsymbol{\mu} + (4/3)\pi\boldsymbol{\mu} \\ &= \mathbf{B}_{\text{Lor}} + \mathbf{B}_{\text{dmg}}. \end{aligned} \quad (5)$$

Понятно, что в этих простых случаях поле \mathbf{B}_{dip} (3), которое является полным микроскопическим полем, совпадает в силу однородности с макроскопической индукцией и равняется сумме так называемых полей разрыва намагниченности на поверхностях: поля Лоренца от сферической внутренней и размагничивающего поля от внешней поверхности.

Возникает вопрос, как значение поля, полученное с помощью (3), интерпретировать в терминах электродинамики сплошных сред. В каких случаях в нем содержится значение индукции внутри намагниченной среды, а в каких — поле Лоренца. Используемое в (2) выражение для поля точечного диполя получается как первый член мультипольного разложения поля замкнутого тока (см. [8]) и, следовательно, оно не должно быть справедливым вблизи точки расположения диполя. Однако если рассматривать "выколотую" точку в математическом континууме, то всегда можно определить ее малую окрестность, в которой разложение будет выполняться. Выясним, существует ли предельный переход величины поля при переходе к выколотой точке, т.е. зависит ли оно от формы окрестности. Вычисляя (3), например, для вырезанной цилиндрической области, получим

$$\mathbf{B}_{\text{dip}} = -(3(\mathbf{mz})\mathbf{z} - \mathbf{m})\pi(\sin\theta_1 + \sin\theta_2). \quad (6)$$

Как видно из (6), указанного предельного перехода не существует: значение поля в точке явно зависит от формы устремляемой к нулю области, от местоположения точки внутри области (см. рис. 2); возможна форма области, когда поле стремится к нулю — "плоский блин". Кроме того, выражение (6) отличается от значения поля Лоренца в (5), которое принято считать справедливым в этом случае.

Чем же объяснить предпочтение, отдаваемое в этом предельном переходе сфере Лоренца? Дело в том, что, как видно из (3) и (4), поле на оси симметричной структуры эквивалентно полю некоего диполя, лежащего на этой же оси. Поэтому поле центрально-симметричных тел можно заменить полем эквивалентного диполя, помещенного в центр симметрии. Непосредственным вычислением (3) или (4) можно убедиться, что поле снаружи сферически симметричного тела равно

$$\mathbf{B} = \frac{M}{R^3}(3(\mathbf{mr})\mathbf{r} - \mathbf{m}), \quad (7)$$

где M — полный магнитный момент. Из [1] известно, что (7) остается справедливым и в случае эллиптической

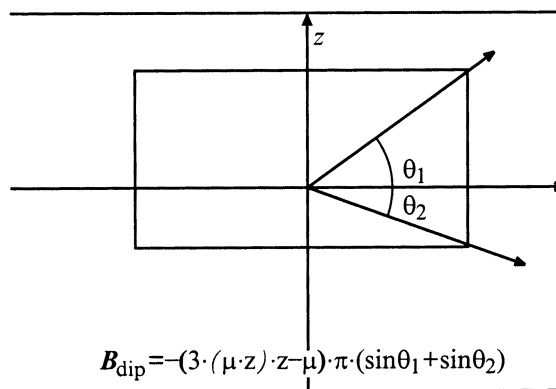


Рис. 2. Магнитное поле внутри цилиндрической полости.

симметрии тела. Поэтому, задаваясь целью выяснить, какое поле действует на точечный диполь внутри сплошной среды, и "выкалывая" его из среды, как это принято делать в традиционном подходе, мы тем самым выбираем сходящуюся последовательность эллиптических окрестностей точки положения диполя, т. е. форма поверхности в данном случае существенна. Поле, создаваемое разрывом намагнитченности на получающейся поверхности, и будет полем Лоренца.

Покажем, как получить значение индукции в точке среды. В этом случае необходимо рассматривать другую топологию — непрерывное множество, включающее в себя предельную точку. Соответственно для самой этой точки не существует окрестности и параметра малости для элементов прилегающей среды. Однако можно воспользоваться тем фактом, что поле внутри шарового слоя равно нулю, и поэтому не важен размер шара вокруг точки, который нужно взять для вычисления локального поля. Тогда из (2) получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \int_V \frac{\mu}{R^3} (3(\mathbf{m}\mathbf{r})\mathbf{r} - \mathbf{m}) d\mathbf{R} = \int_V \text{rot} \frac{[\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{R}]}{R^3} d\mathbf{R} \\ &= \int_S \frac{[d\mathbf{S} \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{R}]}{R^3} = \boldsymbol{\mu} \int_S \frac{(\mathbf{n}\mathbf{R})}{R^3} dS - \int_S \frac{\mathbf{R}}{R^3} (\mathbf{n}\boldsymbol{\mu}) dS \\ &= 4\pi\boldsymbol{\mu} - \frac{4\pi}{3}\boldsymbol{\mu}. \end{aligned} \quad (8)$$

Подынтегральная функция в (8) имеет дельта-функционную особенность в нулевой точке, поэтому интеграл следует понимать как интеграл от обобщенной функции. Существенным является тот факт, что вклад в интеграл от поверхности, создаваемой сегментами разбиения интегрируемой области вокруг особенности, компенсируется вкладом поверхности окрестности самой этой точки, и неоднозначность в пределе последовательности интегральных сумм по сегментам разбиения пропадает. Первый интеграл в (8) есть поток вокруг кулоновского единичного заряда; он равен локальному полю в точке или индукции поля; второй дает поле сферической поверхности, равное полю Лоренца с обратным знаком. Чем можно объяснить тот факт, что, пользуясь приближенным выражением для точечного поля диполя, мы тем не менее получили точное значение макроскопической индукции поля? При макроскопическом усреднении уравнений Максвелла берутся области, содержащие большое количество локальных замкнутых токов, и затем проводится усреднение их магнитных моментов; токи же при этом не складываются. Интегрирование в (8) ведется по сплошной среде, и результат заставляет заключить, что складываются или усредняются, как и в случае макроскопической индукции, именно токи, составляя единый поверхностный ток. Подчеркнем, что речь идет об абстрактной математической модели непрерывной намагнитченной среды, которую принято брать в рассмотрении в широком ряде случаев. Разумеется, в случае

макроскопических образцов необходимо рассматривать также уравнение для свободной энергии, что приведет к разбиению на домены и появлению более сложной конфигурации. В нашем же случае маленького шара эти соображения оправдывают справедливость используемого дипольного разложения, поскольку точка измерения и пространство, создающее магнитный момент, оказываются разделенными.

Наконец, обсудим вопрос, какое значение поля $-(4/3)\pi\boldsymbol{\mu}$ или $4\pi\boldsymbol{\mu}$ — и в каких случаях следует брать при рассмотрении точечного диполя в сплошной среде. Очевидно, если диполь "вытесняет" среду, в которую он помещен (как, например, классическая частица), на него будет действовать поле Лоренца; если же объекты способны сосуществовать в одной точке пространства (классический пример — ядро в сферической облаке s -электрона), необходимо рассматривать индукцию поля, и в результате, с учетом размагничивающего фактора, как это видно из (8), получается значение $(8/3)\pi\boldsymbol{\mu}$ -контактное поле Ферми. Подробнее этот вопрос рассмотрен в [6].

2. Поле системы точечных диполей на оси третьего порядка

Рассмотрим теперь дипольное поле в симметричных точках гексагонального кристалла (например, редкоземельного металла). Для упрощения процедуры вычислений обратим внимание на два факта.

1) В точках узлов и междоузлий ГПУ структуры относительно главной оси реализуется симметрия третьего порядка.

2) Точка междоузлия находится посередине интервала между двумя периодически повторяющимися кристаллическими гексагональными плоскостями.

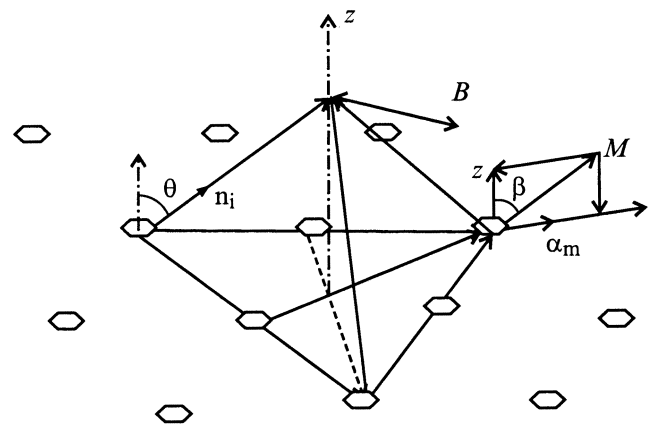


Рис. 3. Магнитное поле дискретной гексагональной структуры. \mathbf{z} — единичный вектор в направлении оси симметрии, $\boldsymbol{\alpha}_m$ — единичный вектор в направлении проекции намагнитченности на плоскость α , перпендикулярную оси z ; β — угол между \mathbf{z} и \mathbf{m} ; θ — угол между \mathbf{z} и \mathbf{n}_i .

Если в структуре имеется ось симметрии третьего порядка, можно сгруппировать члены суммы (2) по симметричным относительно оси Z (C_3) тройкам, как это показано на рис. 3. При этом выражение для поля в точках на оси принимает вид

$$\mathbf{V}_{\text{dip}} = (\boldsymbol{\alpha}_m \sin \beta - 2\mathbf{z} \cos \beta) \sum_i \frac{M}{r_i^3} \frac{3}{2} \left\{ \frac{1}{3} - \cos^2 \theta_i \right\}, \quad (9)$$

или, записав $\mathbf{m} = \boldsymbol{\alpha}_m \sin \beta + \mathbf{z} \cos \beta$,

$$\mathbf{V}_{\text{dip}} = (3(\mathbf{mz})\mathbf{z} - \mathbf{m}) \sum_i \frac{M}{r_i^3} \frac{3}{2} \{ \cos^2 \theta_i - 1/3 \}. \quad (10)$$

Направление поля совпадает с направлением намагниченности, если последняя перпендикулярна кристаллической плоскости или лежит в ней. При этом знаки вкладов в поле от симметричных элементов, лежащих внутри и вне конуса с углом раствора $2 \arccos(\sqrt{1/3})$ и вершиной в точке наблюдения, противоположны, и при суммировании эти вклады должны компенсировать друг друга.

3. Дипольное поле в междоузлиях гексагональной решетки

Просуммировав (4) по векторам $(\boldsymbol{\alpha}; \boldsymbol{\beta})$ в плоскости ГПУ решетке (рис. 4) и выбрав за начало отсчета точку октаэдрического междоузлия, получим следующее выражение:

$$\mathbf{V}_{\text{окт}} = (3(\mathbf{mz})\mathbf{z} - \mathbf{m}) \frac{9M}{a^3} \sum_{m,n,k=0}^{+\infty} \frac{1}{\rho^3} \left\{ \frac{\delta^2}{\rho^2} - \frac{1}{3} \right\}, \quad (11)$$

где a — межатомное расстояние,

$$\rho = \sqrt{(m-n)^2 + n(m+1) + 1/3 + \delta^2},$$

$$\delta = (2k+1)/\sqrt{6}.$$

Результат суммирования по индексам (m, n) в выражении (11) вносит вклад в поле от двух симметрично удаленных от точки междоузлия кристаллических плоскостей. Соответствующая оценка погрешности дана в Приложении. Индекс k при такой последовательности вычисления будет нумеровать различные пары симметричных плоскостей.

Выполненный расчет справедлив в случае однородного ферромагнитного упорядочения, которое имеет место во многих редкоземельных элементах ниже точки ФМ–АФМ перехода, в частности в обсуждаемом в [3] диспрозии в низкотемпературной фазе. При АФМ геликоидальном упорядочении каждый член суммы по k необходимо умножить на косинус половины угла поворота намагниченностей соответствующей симметричной пары плоскостей

$$\Delta_k = \Delta_0(k + 1/2),$$

где Δ_0 — угол поворота намагниченности между ближайшими плоскостями.

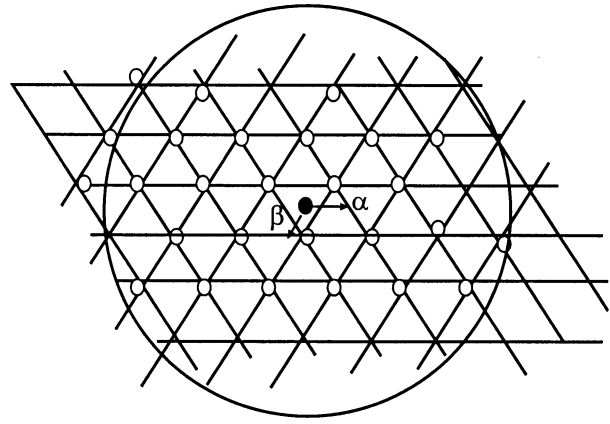


Рис. 4. Вычисление суммы по плоской гексагональной решетке.

Необходимо заметить, что при описанном порядке суммирования мы неявно задаем форму образца в виде бесконечной плоской пластины с диаметром, много большим ее толщины ($D \gg h$; это соответствует условиям эксперимента [3]), и тем самым определяем размагничивающее поле; в рассчитанном варианте оно равняется нулю. Для образца другой формы в (11) в сумме по k нельзя ограничиться ближайшим окружением, поскольку из-за слабой сходимости суммы полей плоских намагниченных сегментов необходимо учитывать вклад всех отличных от нуля членов, и результат будет отличаться на величину, которую принято называть размагничивающим полем. Несмотря на то что поле (11) в рассматриваемом случае с хорошей точностью равняется сумме полей ближайших соседей, его ни в коем случае нельзя отождествлять с локальным полем, обсуждавшимся ранее. Это результирующее поле, в котором важен вклад всех его слагаемых; тот же факт, что оно определяется ближайшим окружением, где существенна дискретность структуры, связан лишь с удачным выбором порядка суммирования. Размагничивающее поле, создаваемое телом произвольной формы, можно учесть обычным образом, "вырезав" из него тонкую плоскопараллельную, ориентированную вдоль кристаллических плоскостей пластинку, содержащую точку измерения.

Приведенный метод расчета справедлив в случае других типов междоузлий и магнитного порядка; единственное условие — наличие оси третьего (или выше третьего) порядка. В качестве примера приведем расчет дипольного поля в тетраэдрическом междоузлии. В этом случае необходимо просуммировать поля от двух рядов плоскостей, несимметрично расположенных относительно точки междоузлия — плоскостей, узлы которых проецируются на основание тетраэдра и на его вершину. Эти типы плоскостей вносят в ближайшем окружении вклады различных знаков. Вклад "плоскостей

основания” равен

$$\mathbf{B}_{\text{tet}}^i = (3(\mathbf{mz})\mathbf{z} - \mathbf{m}) \frac{9M}{2a^3} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{m,n=0}^{+\infty} \frac{1}{\rho_1^3} \left\{ \frac{\delta_1^2}{\rho_1^2} - \frac{1}{3} \right\},$$

$$\rho_1 = \sqrt{(m-n)^2 + n(m+1) + 1/3 + \delta_1^2},$$

$$\delta_1 = (8k+1)/\sqrt{24}. \quad (12)$$

Вклад ”плоскостей вершин” имеет вид

$$\mathbf{B}_{\text{tet}}^s = (3(\mathbf{mz})\mathbf{z} - \mathbf{m}) \frac{M}{a^3} \times \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \left[9 \sum_{m=1}^{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{N-m} \frac{1}{\rho_2^3} \left\{ \frac{\delta_2^2}{\rho_2^2} - \frac{1}{3} \right\} - \frac{1}{\delta_2^3} \right],$$

$$\rho_2 = \sqrt{m^2 + n^2 + 1/3 + \delta_2^2},$$

$$\delta_2 = (8k+3)/\sqrt{24}. \quad (13)$$

Погрешность значения, полученного в результате суммирования (m, n) по конечному числу узлов, учитывается аналогично случаю октаэдрического междоузлия. Чтобы рассчитать поле при антиферромагнитном геликоидальном упорядочении, необходимо при суммировании вкладов плоскостей (сумма по k) учитывать поворот вектора намагниченности.

4. Обсуждение результатов для редкоземельных металлов

Формулы (11)–(13) приведены для параметров идеальной ГПУ решетки ($c/a = 1.633$). Чтобы рассчитать поле в реальной структуре, необходимо в выражениях для величины δ (11)–(13) учесть реальное значение c/a . В таблице приводятся значения вычисленных полей гексагональных плоскостей в зависимости от их расстояния до тетраэдрических и октаэдрических междоузлий (индекс k в (11)–(13)), рассчитанные для различных значений c/a (намагниченность считается лежащей в плоскости).

Как видно из таблицы, значение поля в октаэдрическом междоузлии идеальной ГПУ решетки составляет $B = 5.99 \text{ (M/a}^3) = 1.18p \text{ kG}$, где p — момент РЗ иона, выраженный в магнетонах Бора. Для реальных параметров решетки диспрозия ($c/a = 1.57$, $a = 3.59 \text{ \AA}$, $p = 10.6$) имеем $B = 6.56 \text{ (M/a}^3) = 1.3p \text{ kG} = 13.2 \text{ kG}$, что согласуется с результатом вычисления методом Эвальда [3]. На 99% эти значения определяются полями ионов двух ближайших смежных кристаллических плоскостей, лежащих в радиусе 0.001 nm от точки междоузлия, и в большинстве случаев достаточно ограничиться их учетом. Исходящая из этого приближения физическая картина позволяет объяснить нечувствительность поля к переходу из ферромагнитного к геликоидальному антиферромагнитному упорядочению (см. [3]). Поле в антиферромагнитной фазе будет отличаться на множитель,

Дипольные поля ближайших гексагональных плоскостей в тетраэдрических и октаэдрических междоузлиях для различных значений c/a

c/a	1.57 (Dy, Ho)	1.595 (Sm)	1.62	$(8/3)^{1/2} = 1.633$
$B_{\text{окт}}$				
$k = 0$	3.26	3.15	3.04	2.98
$k = 1$	0.016	0.013	0.012	0.011
$k = 2$	< 0.0007	< 0.0007	< 0.0007	< 0.0007
$B_{\text{тетр}}^i$				
$k = 0$	8.13	8.05	7.96	7.91
$k = -1$	0.004	0.003	0.003	0.003
$k = 1$	< 0.0009	< 0.0008	< 0.0008	< 0.0008
$B_{\text{тетр}}^s$				
$k = 0$	-2.45	-2.27	-2.12	-2.04
$k = -1$	-0.13	-0.116	-0.106	-0.097
$k = 1$	< 0.001	< 0.001	< 0.001	< 0.001

Примечание. Поля рассчитаны для случая намагниченности, параллельной гексагональной плоскости (значения сумм по индексам m, n в (11)–(13)). Индексы i и s соответствуют двум возможным положениям проекции точки данного тетраэдрического междоузлия на плоскость — между узлами или в узел решетки. Значения полей приведены в единицах M/a^3 .

равный косинусу половины угла поворота намагниченности между плоскостями, что для диспрозия в точке Нееля составляет $\cos 10^\circ = 0.98$ (см. [9]), т. е. изменение лежит вне чувствительности эксперимента.

Вблизи точки перехода зависимость поля в антиферромагнитной области от угла поворота намагниченности между соседними плоскостями в случае геликоидального упорядочения с точностью около 1% выглядит следующим образом:

$$B_{\text{AFM}} = B_{\text{FM}} \cos(\Delta/2),$$

где Δ — угол между магнитными моментами соседних плоскостей (здесь не учтена более слабая температурная зависимость среднего момента и параметров решетки). Значение вычисленного дипольного поля согласуется с экспериментально измеренным полем на мюоне [3]. Следующий отсюда вывод о малости контактного поля в диспрозии требует дополнительного исследования.

Вычисление поля в тетраэдрическом междоузлии идеальной ГПУ решетки в ферромагнитной фазе, согласно формулам (12), (13), дает

$$B = 5.78 \text{ (M/a}^3) = 1.14p \text{ kG}.$$

Для параметров решетки диспрозия

$$B = 5.55 \text{ (M/a}^3) = 1.10p \text{ kG} = 11.6 \text{ kG}.$$

Поскольку поля ближайших плоскостей имеют противоположные знаки, при повороте магнитных моментов в АФМ фазе поле в противоположность случаю октаэдрического междоузлия увеличивается по закону

$$B_{\text{AFM}} = \sqrt{B_i^2 + B_s^2 - 2B_i B_s \cos \Delta}.$$

С точностью до 2% поле дается суммой полей пары ближайших плоскостей. Величина изменения поля при ферро-, антиферропереходе в Du порядка 1%, что также практически не наблюдаемо.

Наше значение поля в октаэдрическом междоузлии для гольмия ($a = 3.58 \text{ \AA}$, $c/a = 1.57$, $p = 10.3$) в точке антиферромагнитного перехода равно $B = 1.13p \text{ kG} = 11.7 \text{ kG}$, что грубо согласуется с результатом компьютерных расчетов [10]. Однако в случае тетраэдрического междоузлия имеются существенные отличия — наш расчет дает 12.3 kG , в то время как в [10] приведена заметно большая величина $B = 14 \text{ kG}$. По-видимому, это отличие связано с другим выбором порядка суммирования в [10], который не позволяет учесть компенсирующий вклад полей далеких ионов, важный из-за слабой сходимости ряда.

В случае самария магнитная структура является весьма сложной [11–12]. Ограничимся практически более интересным случаем не слишком низких температур, когда упорядочены только "гексагональные" h -слои, а моменты в "кубических" c -узлах неупорядочены ($14 < T < 106 \text{ K}$). Тогда в отличие от ГПУ решетки имеется пять типов кристаллографически неэквивалентных междоузлий. Кристаллографическая структура самария является девятиослойной и описывается формулой $A^c B^h A^h B^c C^h B^h C^c A^h C^h$, причем междоузлия располагаются как между двумя h -слоями, так и между плоскостями c и h . Ограничиваясь вкладом двух ближайших пар плоскостей (11), (12) или (13) соответственно (это ведет к погрешности в пределах 1%), находим пять значений поля.

В октаэдрических междоузлиях:

$$B^{hh} = 12.6 \text{ (M/a}^3\text{)} = 2.41p \text{ (kG)} = 1.72 \text{ kG,}$$

$$B^{ch} = 6.30 \text{ (M/a}^3\text{)} = 1.21p \text{ (kG)} = 0.86 \text{ kG;}$$

в тетраэдрических междоузлиях:

$$B^{hh} = 15.86 \text{ (M/a}^3\text{)} = 3.04p \text{ (kG)} = 2.17 \text{ kG,}$$

$$B^{ch} = 11.55 \text{ (M/a}^3\text{)} = 2.21p \text{ (kG)} = 1.58 \text{ kG,}$$

$$B^{hc} = 4.64 \text{ (M/a}^3\text{)} = 0.88p \text{ (kG)} = 0.63 \text{ kG.}$$

(мы использовали те же параметры решетки, что и в работе [12], $c = 26.03 \text{ \AA}$, $a = 3.63 \text{ \AA}$). Магнитный момент ионов самария мал и в настоящее время надежно неизвестен, см. [11]. Для численной оценки мы взяли завышенное значение момента, соответствующее основному состоянию иона самария ($p = 5/7$). Полученные таким путем значения грубо согласуются с результатом численного расчета [12]. В то же время ошибка расчета [12] оказывается существенно больше нашего (разница полученных значений достигает 10%). Вероятно, это также связано с неоптимальным выбором области суммирования, использованным в [12]. Представляло бы интерес детальное исследование спектра значений дипольного поля в самарии. Экспериментально

измеренное локальное поле [12] сильно отличается от рассчитанного дипольного поля даже для $p = 5/7$, что говорит о важности остальных вкладов в (1).

Авторы благодарят Ю.П. Ирхина и Е.В. Розенфельда за участие в постановке задачи и многократные ценные обсуждения.

Приложение

Погрешность результата суммирования по индексам m, n в (11)–(13), обусловленную отбрасыванием членов свыше заданного числа N , учтем, взяв интеграл по оставшейся непрерывно намагниченной плоскости с вырезанным центральным отверстием (6). Радиусы окружностей, вписанной и описанной вокруг шестиугольника, получающегося при суммировании (5) по $m, n \leq N$, равны соответственно

$$a\sqrt{3}(1/6 + N1/2), \quad a\sqrt{(1/2 + N)^2 + 1/12}.$$

Как уже отмечалось выше, эту оценку погрешности вычисления суммы по индексам (m, n) не следует считать абсолютной и независимой от формы образца; она свидетельствует лишь о влиянии размагничивающих полей торцов пластины и относится к малой макроскопической величине h/D .

Приведем также соображения относительно оценки отброшенных членов приводимых сумм по k . Непосредственный расчет показывает, что первый член ряда составляет менее 1% от нулевого, второй — менее 0.1%. Очевидно, что члены суммы с большими k стремятся к полю непрерывно намагниченной плоскости, т.е. к нулю. Однако общее число членов суммы равняется числу кристаллических плоскостей, которые необходимо учесть при вычислении поля в макроскопическом образце, т.е. практически бесконечному ряду, сумму которого необходимо оценить. Возьмем область на k -й плоскости, вырезанную конусом с углом раствора $2 \arccos(\sqrt{1/3})$ и вершиной в точке наблюдения. Значение выражения $h \cdot B$ в этой области, согласно (4), постоянно для всех плоскостей, однако число диполей решетки или членов суммы (11) внутри области растет пропорционально k . Следовательно, k -й член суммы (11) можно рассматривать как k -е разбиение области интегрирования, а разницу между его точным значением и вычисленным с помощью (4) — как погрешность сходимости суммы к интегралу. Значение этой разницы будет обратно пропорционально масштабу разбиения (или k), и, поскольку само интересующее нас значение поля области обратно пропорционально h или k , сумма ряда по k в выражениях (11), (12), (13) ограничена сверху суммой $\sum 1/k^2$. Это позволяет ограничить вычисления несколькими членами суммы по k в зависимости от требуемой точности. Например, если третий член суммы составляет 0.1% от нулевого, то вся оставшаяся сумма не должна превысить 0.3% от той же величины.

Список литературы

- [1] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. Наука, М. (1982).
- [2] В.П. Смилга, Ю.М. Белоусов. Мюонный метод исследования вещества. Наука, Л. (1991).
- [3] W. Hofmann et al. Phys. Lett. **A65**, 4, 343 (1978).
- [4] M.B. Stearns. Phys. Lett. **47A**, 5, 397 (1974); P.F. Meier. Solid State Commun. **17**, 8, 987 (1975).
- [5] P. Jena. Solid State Commun. **19**, 1, 45 (1976).
- [6] Е.В. Розенфельд, Ю.П. Ирхин. ФММ **86**, 4, 35 (1998).
- [7] Ю.П. Ирхин, В.Ю. Ирхин. ФТТ **40**, 7, 1297 (1998).
- [8] И.Е. Тамм. Основы теории электричества. М. (1976).
- [9] К. Тейлор, М. Дарби. Физика редкоземельных соединений. Мир, М. (1973).
- [10] И.А. Кривошеев, А.А. Неживой, Б.А. Никольский и др. Письма ЖЭТФ **65**, 1, 77 (1997).
- [11] W.C. Kochler, R.M. Moon. Phys. Rev. Lett. **29**, 21, 1468 (1972).
- [12] И.Г. Гуревич, И.Г. Ивантер, Б.Ф. Кириллов и др. ЖЭТФ **100**, 4, 1353 (1991).