

Вычисление поля решетки точечных магнитных диполей

© Е.В. Розенфельд

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

E-mail: rosenfeld@imp.uran.ru

(Поступила в окончательном виде 16 февраля 2000 г.)

Проведено разложение магнитного поля \mathbf{H} , создаваемого пространственно-периодическим распределением точечных магнитных диполей, в ряд Фурье. При этом из-за быстрого (экспоненциального) спада амплитуд гармоник поле \mathbf{H} в произвольной точке оказывается суммой полей всего нескольких ближайших плоскостей или цепочек диполей. Метод применен для вычисления магнитных полей в междоузлиях Sm, находящегося в различных антиферромагнитных состояниях.

Задача вычисления магнитного поля в различных точках внутри элементарной ячейки кристаллического магнетика довольно часто возникает в физике твердого тела. В частности, эта проблема является центральной при интерпретации результатов, получаемых в экспериментах с мюонами, позволяющими измерять локальные магнитные поля в междоузлиях. Имеется несколько вкладов в локальное поле в кристалле — размагничивающее поле, поле Лоренца, поле Ферми и поле решетки точечных магнитных диполей. Обсуждение способов вычисления первых трех вкладов в некоторых возникающих при этом проблем можно найти в [1–3]. Последний же вклад, т.е. поле, создаваемое в произвольной точке \mathbf{r} системой диполей \mathbf{m}_ν , локализованных в точках \mathbf{R}_ν , определяется выражением

$$\mathbf{H}_{\text{dip}}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} \frac{3\mathcal{R}_{\nu}(\mathcal{R}_{\nu}\mathbf{m}_{\nu}) - \mathbf{m}_{\nu}\mathcal{R}_{\nu}^2}{\mathcal{R}_{\nu}^5}, \quad \mathcal{R}_{\nu} = \mathbf{r} - \mathbf{R}_{\nu}, \quad (1)$$

и никаких проблем при его вычислении обычно не возникает. Единственным осложнением здесь является то, что из-за очень медленного уменьшения с ростом \mathcal{R} вкладов в сумму (1) при суммировании приходится принимать в расчет очень большое число координационных сфер.

Ситуация однако становится гораздо менее определенной, если мы попытаемся не просто вычислить поле решетки точечных диполей (1) в некоторой точке, а проанализировать вклады в это поле от различных групп диполей. Поскольку вклады ближайших диполей лишь по счастливой случайности могут оказаться преобладающими над вкладами диполей из далеких координационных сфер, такой анализ, особенно для сложных магнитных структур, оказывается практически невозможным. Весьма показательна в этом смысле картина, наблюдавшаяся авторами [4]; при переходе образца из ферро- в антиферромагнитное состояние измерявшееся ими поле на мюоне практически не менялось. Насколько нам известно, результат этот так и остался необъясненным. Вообще, вполне ясной ситуация при анализе дипольных полей оказывается лишь в точках с высокой (кубической и выше) симметрией; в соответствии с известной теоремой поле в этих точках равно нулю.

Таким образом, на наш взгляд, могла бы представлять интерес возможность выделить в решетке небольшое число неких элементов, вносящих основные вклады в поле в данной точке. Конечно, множество слагаемых в сумме (1) можно группировать практически бесконечным числом способов, добиваясь того чтобы поля атомов из некоторых групп скомпенсировали друг друга. Однако чисто интуитивно представляется наиболее естественным, чтобы объекты, вносящие основные вклады в поле, имели достаточно простую геометрическую форму и были бы максимально близко (по сравнению с прочими подобными объектами) расположены к точке наблюдения поля.

Цель настоящей работы — построение такой методики, позволяющей свести вычисление дипольного поля в произвольной точке к вычислению поля, создаваемого в этой точке лишь несколькими ближайшими к ней атомными плоскостями или цепочками атомов. Вклады всех остальных атомов решетки с произвольной точностью учитываются в приближении сплошной среды. Существенно, что и при вычислении поля атомных плоскостей или цепочек атомов не приходится вычислять суммы с большим количеством членов. Для достижения заданной точности вычисления $\mathbf{H}_{\text{dip}}(\mathbf{r})$ оказывается достаточно учесть лишь несколько (точное число определяется положением точки \mathbf{r}) Фурье-гармоник поля плоскости или цепочки.

Существование столь удобного представления для дипольного поля связано с тем, что поле одномерной (цепочка) и двумерной (атомная плоскость) периодических решеток диполей очень быстро (экспоненциально) падает при удалении от них. В результате при удалении всего на 3–4 периода решетки поле атомной плоскости практически исчезает, а поле цепочки совпадает с полем однородно намагниченной нити. Соответствующие формулы и оценки их точности приведены в первом разделе работы.

В стандартных расчетах вычисление $\mathbf{H}_{\text{dip}}(\mathbf{r})$ (1) проводится внутри некоторого конечного объема, обычно сферы. Вне этого объема распределение намагниченности считается сплошным, что приводит к возникновению дополнительного вклада — поля Лоренца. Отли-

чие предлагаемой методики состоит в том, что объем, внутри которого дискретная структура решетки учитывается явно, оказывается бесконечным в одном или двух направлениях. Вопросы, возникающие в связи с этим при вычислении поля Лоренца, обсуждаются во втором разделе работы. Наконец, в третьем разделе полученные результаты иллюстрируются на примере вычисления магнитного поля в различного типа междоузлиях самария в двух его разных антиферромагнитных состояниях.

1. Преобразование Фурье для полей простейших решеток

Разложение в ряд Фурье проводится по стандартным формулам

$$f(x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ A_k \cos\left(2\pi k \frac{x}{a}\right) + B_k \sin\left(2\pi k \frac{x}{a}\right) \right\},$$

$$A_k = \frac{2}{a} \int_0^a f(x) \cos\left(2\pi k \frac{x}{a}\right) dx,$$

$$B_k = \frac{2}{a} \int_0^a f(x) \sin\left(2\pi k \frac{x}{a}\right) dx. \quad (2)$$

В случае, если функция периодична по двум и более переменным, эти формулы применяются к каждому аргументу в отдельности.

1.1. Линейная цепочка. Рассмотрим цепочку одинаковых диполей $\mathbf{m}(m_{\parallel}, 0, m_{\perp})$, расположенных вдоль оси x на одинаковых расстояниях a друг от друга (рис. 1). Поле такой цепочки, определяемое формулой

$$\mathbf{H}^{\text{line}}(\mathbf{r}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{3\mathcal{R}_n(\mathcal{R}_n \mathbf{m}) - \mathbf{m}\mathcal{R}_n^2}{\mathcal{R}_n^5},$$

$$\mathcal{R}_n = (x - na, y, z), \quad (3)$$

является периодической функцией x с периодом a и может быть разложено в ряд Фурье (2). При этом комбинация интеграла по периоду в (2) и суммирования

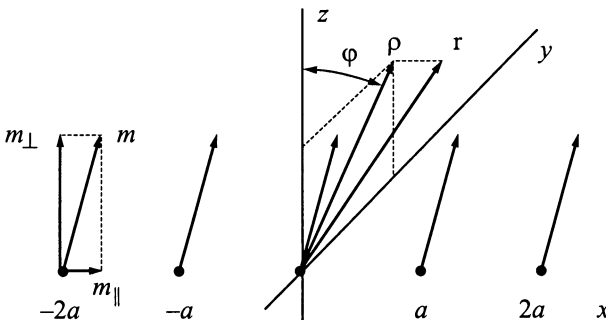


Рис. 1. Цепочка магнитных диполей $\mathbf{m}(m_{\parallel}, 0, m_{\perp})$. Проекция ρ радиус-вектора \mathbf{r} на плоскость yz составляет с осью z угол φ .

по узлам в (3) дает просто интеграл по x в бесконечных пределах, который легко сводится к функциям Макдональда. В результате для компонент поля (3) получаем

$$H_x^{\text{line}} = h_x^{\text{line}} + \frac{2q^3}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left\{ -m_{\parallel} K_0(qk\rho) \cos(qkx) + m_{\perp} K_1(qk\rho) \cos(\varphi) \sin(qkx) \right\},$$

$$H_y^{\text{line}} = h_y^{\text{line}} + \frac{2q^3}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left\{ m_{\perp} K_2(qk\rho) \cos(\varphi) \cos(qkx) + m_{\parallel} K_1(qk\rho) \sin(qkx) \right\} \sin(\varphi),$$

$$H_z^{\text{line}} = h_z^{\text{line}} + \frac{q^3}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left\{ m_{\perp} [K_0(qk\rho) + K_2(qk\rho) \cos(2\varphi)] \cos(qkx) + 2m_{\parallel} K_1(qk\rho) \cos(\varphi) \sin(qkx) \right\}. \quad (4)$$

Здесь $q = 2\pi/a$, \mathbf{m}_{\parallel} и \mathbf{m}_{\perp} — компоненты \mathbf{m} , параллельные оси x и плоскости yz соответственно, ρ — проекция \mathbf{r} на эту плоскость, φ — угол между \mathbf{m}_{\perp} и ρ . В (4) и на иллюстрирующем эти обозначения рис. 1 считается, что вектор \mathbf{m}_{\perp} параллелен оси z .

В теории функций Бесселя известно асимптотическое представление для функций Макдональда при больших u

$$K_{\mu}(u) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2u}} \exp(-u) [1 + O(1/u)]. \quad (5)$$

В частности, при $\mu = 0, 1$ и 2 "большими" можно считать значения $u > 10$: в этом случае $K_{\mu}(2\pi) \approx 10^{-3}$, $K_{\mu}(4\pi) \approx 10^{-6}$, $K_{\mu}(8\pi) \approx 10^{-12}$. Поэтому, если расстояние от точки \mathbf{r} до оси цепочки $\rho > 3-4a$, вклады высших гармоник практически исчезают, и поле цепочки совпадает с полем однородно намагниченной нити, имеющей линейную плотность магнитного момента \mathbf{m}/a ,

$$h_x^{\text{line}} = 0,$$

$$h_y^{\text{line}} = \frac{2m_{\perp}}{a\rho^2} \sin(2\varphi), \quad h_z^{\text{line}} = \frac{2m_{\perp}}{a\rho^2} \cos(2\varphi). \quad (6)$$

Следовательно, цепочка, намагниченная вдоль оси, практически не создает вокруг себя поля уже на расстояниях, превышающих 2-3 ее периода. Из (6) также ясно, что равно нулю и поле, создаваемое на оси цилиндра равномерно распределенными по его поверхности цепочками.

При малых ρ , однако, высшие гармоники начинают играть все более существенную роль. Причина этого становится вполне ясной при рассмотрении зависимости от x напряженности поля цепочки на расстоянии $\rho \approx a$ от ее оси. Вблизи любого узла в соответствии с (3) поле в основном определяется локализованным на нем моментом. Поэтому ясно, что такая зависимость представляет собой набор локализованных вблизи каждого узла пиков,

тем более узких и высоких, чем меньше ρ . Форма этих пиков хорошо описывается функцией $((x-na)^2 + \rho^2)^{-3/2}$, так что ширина их порядка ρ , а высота пропорциональна ρ^{-3} . Для того чтобы разложение Фурье с конечным числом членов правильно воспроизводило такую "гребенку", длина волны гармоники с максимальным номером k_{\max} должна быть достаточно мала по сравнению с шириной пика. Практически вполне достаточную относительную погрешность $\delta < 10^{-5}$ обеспечивает в области $\rho > a/1000$ выбор $k_{\max} = 5a/\rho$.

1.2. Плоские прямоугольная и гексагональная решетки. Рассмотрим плоскость xy , равномерно заполненную такими цепочками, лежащими на расстояниях b друг от друга. Если сдвиг цепочек вдоль x отсутствует, с одинаковым основанием можно рассматривать такую систему и как набор параллельных оси y цепочек с периодом b , лежащих на расстояниях a друг от друга. Разложение (2) по x и y дает¹

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{\text{plain}}(\mathbf{r}) = & \frac{8\pi^2}{ab} \sum_{k,l=0}^{\infty} \left\{ \mathbf{A}_{l,k} \cos\left(\frac{2\pi}{a}kx\right) \cos\left(\frac{2\pi}{b}ly\right) \right. \\ & + \mathbf{B}_{l,k} \cos\left(\frac{2\pi}{a}kx\right) \sin\left(\frac{2\pi}{b}ly\right) \\ & + \mathbf{C}_{l,k} \sin\left(\frac{2\pi}{a}kx\right) \cos\left(\frac{2\pi}{b}ly\right) \\ & \left. + \mathbf{D}_{l,k} \sin\left(\frac{2\pi}{a}kx\right) \sin\left(\frac{2\pi}{b}ly\right) \right\} \\ & \times \exp\{-2\pi Q_{l,k}|z|\}, \end{aligned} \quad (7)$$

где слагаемое с $k = l = 0$ отсутствует, и

$$\begin{aligned} Q_{l,k} = & \sqrt{\left(\frac{k}{a}\right)^2 + \left(\frac{l}{b}\right)^2}, \\ \begin{Bmatrix} A_{l,k}^{(x)} \\ A_{l,k}^{(y)} \\ A_{l,k}^{(z)} \end{Bmatrix} = & \frac{2 - \delta_{l,k,0}}{Q_{l,k}} \begin{Bmatrix} -Q_{0,k}^2 m_x \\ -Q_{l,0}^2 m_y \\ +Q_{l,k}^2 m_z \end{Bmatrix}, \\ \begin{Bmatrix} D_{l,k}^{(x)} \\ D_{l,k}^{(y)} \\ D_{l,k}^{(z)} \end{Bmatrix} = & \frac{2Q_{l,0}Q_{0,k}}{Q_{l,k}} \begin{Bmatrix} m_y \\ m_x \\ 0 \end{Bmatrix}, \\ \begin{Bmatrix} B_{l,k}^{(x)} \\ B_{l,k}^{(y)} \\ B_{l,k}^{(z)} \end{Bmatrix} = & \text{sign}(z)(2 - \delta_{k,0})Q_{l,0} \begin{Bmatrix} 0 \\ m_z \\ m_y \end{Bmatrix}, \\ \begin{Bmatrix} C_{l,k}^{(x)} \\ C_{l,k}^{(y)} \\ C_{l,k}^{(z)} \end{Bmatrix} = & \text{sign}(z)(2 - \delta_{l,0})Q_{0,k} \begin{Bmatrix} m_z \\ 0 \\ m_x \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (8)$$

¹ На первый взгляд, может показаться, что антисимметричная по z часть (7) не обращается в нуль при $z \rightarrow 0$. Однако, используя тождества типа $\lim_{a \rightarrow 0} \sum_{\nu=1}^{\infty} \nu e^{-\nu a} \sin(\nu t) = 0$, $\lim_{a \rightarrow 0} \left\{ \sum_{\nu=1}^{\infty} e^{-\nu a} \cos(\nu t) \right\} = -1/2$, нетрудно убедиться, что это не так.

Видно, что при удалении от плоскости напряженность поля падает экспоненциально. Фактически это означает, что сколько-нибудь заметные вклады в поле в любой точке могут вносить лишь две-три ближайших к ней атомных плоскости, а вкладом остальных плоскостей можно пренебречь.

При малых $|z|$ зависимость поля (7) от x и y , как и в случае поля цепочки, имеет локализованные на узлах пики с шириной порядка $|z|$. Поэтому снова максимальные номера используемых в расчете гармоник k_{\max} и l_{\max} определяются значением $|z|$ и требуемой точностью.

Используя (7), (8), очень просто вычислить и поле плоской гексагональной решетки. Такая решетка с межатомным расстоянием a может рассматриваться как комбинация двух плоских прямоугольных решеток с параметрами ячейки a и $a\sqrt{3}$ вдоль осей x и y соответственно. Подрешетки сдвинуты друг относительно друга так, что узлы одной оказываются в центрах ячеек другой. Поэтому координаты x и y произвольной точки относительно центральных узлов подрешеток отличаются в точности на половины периодов вдоль этих осей. В результате при сложении вкладов с любыми индексами l, k от этих двух подрешеток возникает множитель $[1 + (-1)^{k+l}]$, и мы получаем те же формулы (7), (8) с двумя изменениями: а) необходимо провести замену $b \rightarrow a\sqrt{3}$, б) в сумме (7) остаются лишь слагаемые с четными значениями $l + k$, а вся сумма умножается на два.

1.3. Трехмерные решетки. Использование результатов предыдущих пунктов весьма удобно и при вычислениях, и при анализе вкладов. Если однако необходимо получить полностью трансляционно-инвариантное выражение для \mathbf{H} (скажем, при расчете электронного спектра), (7) должно быть разложено еще и по z . Такое разложение не составляет труда провести, используя известные тождества

$$\int_0^{\infty} e^{-px} \begin{Bmatrix} \sin(Qx) \\ \cos(Qx) \end{Bmatrix} dx = \frac{1}{Q^2 + p^2} \begin{Bmatrix} Q \\ p \end{Bmatrix}. \quad (9)$$

Если все перпендикулярные к оси z плоскости одинаковы и расположены вдоль z с периодом c , (9) можно применять к (7) непосредственно, положив $Q = 2\pi/c$. В более сложных решетках всегда могут быть выделены простейшие подрешетки, суперпозиция полей которых и дает полное поле.

В целях экономии места мы не приводим здесь получающиеся в результате простые, но довольно громоздкие формулы. Заметим лишь, что эти выражения не выглядят симметричными относительно x, y, z и a, b, c , хотя такая симметрия в действительности существует. Причина, естественно, в очередности проведения разложений Фурье по x, y и z , и соответствующая симметризация легко может быть проведена (см. также сноску 1).

2. Поле Лоренца

При расчетах локальных полей в кристаллах обычно используется метод Лоренца. Вокруг точки, в которой вычисляется поле, выделяется некий достаточно большой объем \mathcal{V} , внутри которого дискретная структура решетки учитывается явно. Вне этого объема используется приближение сплошной среды, и магнитные диполи считаются не локализованными на узлах, а однородно "размазанными" в пределах своей элементарной ячейки. Вклад такого непрерывного распределения диполей в поле в точке \mathbf{r} равен [1]

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{cont}}(\mathbf{r}) &= \mathbf{H}_L(\mathbf{r}) + \mathbf{H}'(\mathbf{r}), & \mathbf{H}_L(\mathbf{r}) &= \int_{S(\mathcal{V})} \frac{\bar{\mathcal{R}}}{\mathcal{R}^3} (\mathbf{I}(\mathbf{r}') ds), \\ \mathbf{H}'(\mathbf{r}) &= - \int_{\mathbf{r}' \notin \mathcal{V}} \frac{\bar{\mathcal{R}}}{\mathcal{R}^3} \rho_m(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \int_S \frac{\bar{\mathcal{R}}}{\mathcal{R}^3} (\delta \mathbf{I}(\mathbf{r}') ds), \\ \rho_m(\mathbf{r}) &= -\text{div}(\mathbf{I}(\mathbf{r})), & \delta \mathbf{I}(\mathbf{r}) &= \mathbf{I}_2(\mathbf{r}) - \mathbf{I}_1(\mathbf{r}), \\ & & \bar{\mathcal{R}} &= \mathbf{r}' - \mathbf{r}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $\mathbf{I}(\mathbf{r})$ — намагниченность (суммарная плотность всех магнитных моментов) в точке \mathbf{r} , $\delta \mathbf{I}(\mathbf{r})$ — разрыв намагниченности в точке \mathbf{r} на поверхности раздела S различных магнитных сред I и 2 , в частности на поверхности тела. Вклады в поле вносят как неоднородности намагниченности внутри тела (это вклады, пропорциональные плотности "объемных магнитных зарядов" ρ_m), так и ее разрывы $\delta \mathbf{I}$, которым считается пропорциональной плотность "поверхностных магнитных зарядов".

Вклад, связанный с разрывом намагниченности на поверхности $S(\mathcal{V})$ объема \mathcal{V} , — это поле Лоренца \mathbf{H}_L . Полагая намагниченность на всей этой поверхности постоянной и равной $\mathbf{I}(\mathbf{r})$, получаем, что поле Лоренца пропорционально $\mathbf{I}(\mathbf{r})$, а коэффициент пропорциональности зависит только от формы $S(\mathcal{V})$

$$\mathbf{H}_L = 4\pi \mathcal{N} \mathbf{I}(\mathbf{r}), \quad \mathcal{N} = \frac{1}{4\pi} \int_{S(\mathcal{V})} \frac{\bar{\mathcal{R}}}{\mathcal{R}^3} (\mathbf{n} dS). \quad (11)$$

Здесь \mathbf{n} — единичный вектор в направлении $\mathbf{I}(\mathbf{r})$, а \mathcal{N} — размагничивающий фактор объема \mathcal{V} . В частности, если $S(\mathcal{V})$ — сфера, то $\mathcal{N} = 1/3$, и мы получаем стандартное выражение $\mathbf{H}_L = 4\pi \mathbf{I}(\mathbf{r})/3$. Вклад от остальных неоднородностей и разрывов намагниченности \mathbf{H}' обычно называется размагничивающим полем.

Формулы (10) немедленно получаются из (1) после замены суммирования на интегрирование (более подробное обсуждение этого вопроса можно найти в [2,3]). Поверхностные интегралы здесь возникают в результате применения к интегралу по объему вне \mathcal{V} стандартных преобразований векторного анализа, в частности, использования теоремы Остроградского–Гаусса. Поэтому такого типа поверхностные вклады, пропорциональные

нормальной компоненте намагниченности, никакого особого физического смысла не имеют. В этом, собственно, и заключается ответ на вопрос, почему после перехода к приближению сплошной среды поверхности разрыва намагниченности начинают вносить дополнительные вклады, отсутствующие при суммировании полей точечных диполей.

Используя обсуждавшиеся в предыдущем разделе разложения Фурье, для поля в произвольной точке кристалла получаем теперь

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}^{(F)}(\mathbf{r}) + \mathbf{H}_{\text{cont}}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}^{(F)}(\mathbf{r}) + \mathbf{H}_L(\mathbf{r}) + \mathbf{H}'(\mathbf{r}). \quad (12)$$

Здесь $\mathbf{H}^{(F)}$ — вклад в поле от диполей, учтенных в разложении Фурье, а \mathbf{H}_{cont} — вклад оставшейся части решетки диполей, распределение намагниченности в которой мы считаем непрерывным. Остается выяснить только, почему не все узлы решетки удается учесть в $\mathbf{H}^{(F)}$ и как вычислять поле Лоренца в случае, когда объем \mathcal{V} оказывается бесконечным в одном и двух направлениях.

Проще всего начать выяснение этих вопросов со случая, когда $\mathbf{H}^{(F)}$ представляется в виде суммы полей нескольких ближайших атомных плоскостей (7). В эту сумму можно включить и более удаленные плоскости, что практически не изменит результата из-за экспоненциального спада поля плоскости с удалением от нее. Однако экспоненциально спадает лишь полное поле всей бесконечной плоскости, что связано с практически полной компенсацией вкладов "центральной" (ближайшей к точке наблюдения) и "периферийной" ее частей. Представив себе тело произвольной формы разбитым на плоские параллельные слои, легко видеть, что "полными" можно считать только ближайшие к точке наблюдения слои. С удалением от этой точки периферийные части слоев уменьшаются и вклад этих слоев в поле в точке наблюдения становится ненулевым.

Таким образом, в этом случае "объемом Лоренца" оказывается бесконечно тонкий (с макроскопической точки зрения) плоский слой, параллельный выбранной атомной плоскости. Обозначим перпендикулярную к этой плоскости компоненту намагниченности в точке \mathbf{r} через $\mathbf{I}_\perp(\mathbf{r})$. Тогда, поскольку размагничивающий фактор плоского диска в направлении поперек его плоскости равен единице, получаем для поля Лоренца $\mathbf{H}_L(\mathbf{r}) = 4\pi \mathbf{I}_\perp(\mathbf{r})$.

Совершенно аналогично может быть рассмотрен случай, когда $\mathbf{H}^{(F)}$ является суммой полей нескольких параллельных атомных цепочек (4). Удобно рассматривать цепочки, лежащие внутри цилиндра некоторого радиуса R , ось которого проходит через точку \mathbf{r} . Как уже отмечалось, суммарное поле цепочек, равномерно распределенных по поверхности такого цилиндра, обращается на его оси в нуль (см. (4), (6)). Поскольку равномерность распределения цепочек по поверхности цилиндра быстро возрастает с ростом его радиуса, достаточно учесть лишь цепочки внутри бесконечно тонкого с макроскопической точки зрения цилиндра. Снова, однако, это верно лишь для бесконечно длинных цепочек, в которых вклады

центральных и удаленных областей компенсируются. Поэтому поле Лоренца совпадает с полем цилиндра, и мы получаем $\mathbf{H}_L(\mathbf{r}) = 2\pi\mathbf{I}_\perp(\mathbf{r})$. На этот раз $\mathbf{I}_\perp(\mathbf{r})$ — это проекция $\mathbf{I}(\mathbf{r})$ на плоскость, перпендикулярную направлению выбранных цепочек.

В обоих этих случаях в соответствии с (12) к полю Лоренца должно быть добавлено размагничивающее поле. В результате, скажем, для образца в виде тонкого плоского диска \mathbf{H}_L и \mathbf{H}' точно скомпенсируют друг друга, если для вычисления $\mathbf{H}^{(F)}$ выбрать плоскости, параллельные плоскости диска. В тонком цилиндрическом образце для получения $\mathbf{H}_{\text{cont}} = 0$ нужно вычислять $\mathbf{H}^{(F)}$ как сумму полей цепочек, параллельных его оси. Таким образом, возможно перераспределение вкладов между различными слагаемыми в (12), хотя конечный результат от способа вычисления $\mathbf{H}^{(F)}$, естественно, не зависит.

3. Локальные поля в самарии

Ромбоэдрическую решетку самария образуют девять периодически повторяющихся плотно упакованных гексагональных слоев $ABABCBCAC\dots$ (рис. 2 из работы [5]). Внутри периода пары слоев, у атомов которых симметрия ближайшего окружения такая же, как в ГПУ решетке, разделены слоями атомов с кубической симметрией ближайшего окружения. На рис. 2, *a* эти слои помечены индексами *h* и *c* соответственно. Параметры решетки имеют значения $a = 3.631$, $c = 26.035 \text{ \AA}$, так что расстояние между гексагональными слоями, которое мы обозначим через d , составляет 2.893 \AA .

Исследования Sm различными методами (см. [5,6] и приведенные там ссылки) позволили установить наличие двух антиферромагнитных фазовых переходов при температурах $T_1 \approx 106$ и $T_2 \approx 14 \text{ K}$. При высокотемпературном переходе происходит ферромагнитное упорядочение моментов внутри *h*-слоев вдоль оси *z*. При этом внутри пар *h*-слоев упорядочение ферромагнитное, а пары *h*-слоев, разделенные *c*-слоем, упорядочиваются антиферромагнитно (рис. 2, *a*). Упорядочение моментов внутри *c*-слоев при высоких температурах $T_2 < T < T_1$ не происходит. Лишь при $T < T_2$ в этих слоях цепочки атомных диполей, параллельные оси *a*, ферромагнитно упорядочиваются вдоль оси *z*. При упорядочении цепочки, как и слои, разбиваются на пары, внутри которых все моменты параллельны друг другу. Моменты в соседних парах цепочек, так же как в парах *h*-слоев, упорядочены антипараллельно, но немагнитная прослойка между ними отсутствует (рис. 2, *b*). Величина магнитного момента любого узла считается равной $m = (5/7)\mu_B$ [5].

При проведении мюонных исследований авторами [6] было установлено, что в области температур $T_2 < T < T_1$ магнитное поле, действующее на мюон в кристалле Sm, может иметь два различных значения. Температурные зависимости индукции этих полей, B_1 и B_2 , приведены на рис. 3, взятом из [6]. Наличие лишь двух неэквивалентных в магнитном отношении

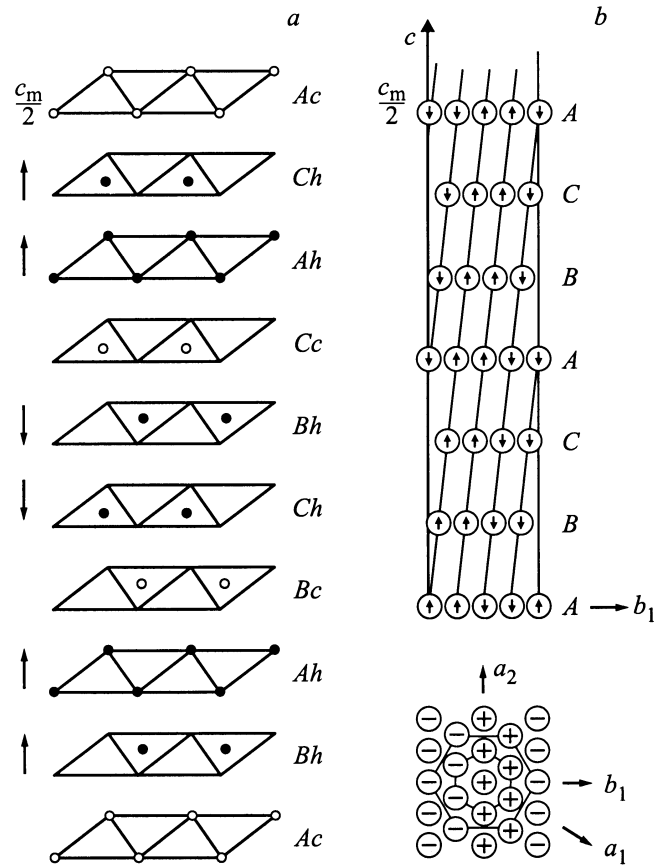


Рис. 2. Упорядочение магнитных моментов внутри гексагональных слоев в самарии (рисунок скопирован из [5]). *a* — в области высоких температур $T_2 < T < T_1$ моменты в *h*-слоях, узлы которых имеют гексагональную симметрию ближайшего окружения, упорядочены в направлениях, показанных стрелками. В обладающих кубической локальной симметрией *c*-слоях моменты не упорядочены. *b* — при низких температурах $T < T_2$ упорядочиваются моменты в *c*-слоях (только эти слои показаны в верхней части рисунка). В нижней части рисунка показано распределение моментов по атомам внутри *c*-слоя.

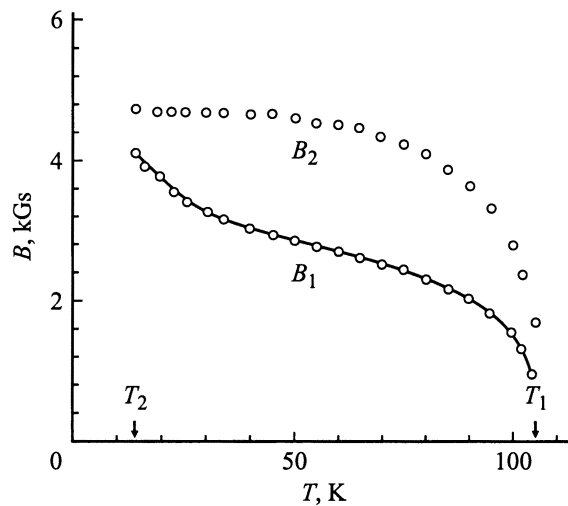


Рис. 3. Экспериментальные значения полей, действующих на мюон в самарии (рисунок скопирован из [6]). Плавная кривая — функция (13).

позиций в [6] трактуется как наличие лишь двух кристаллографических позиций. На этом основании в [6] сделан вывод, что мюоны занимают только октаэдрические, но не тетраэдрические междуузлия. Косвенно этот вывод, по мнению авторов [6], подтверждается и соотношением величин полей, действующих на мюоны в этих двух неэквивалентных позициях. Рассчитанные в [6] напряженности поля в октаэдрических порах между двумя h -слоями и между h - и c -слоями (hh - и hc -междуузлия) составляют 1.75 и 88 кОе соответственно, т.е. различаются в 2 раза. Примерно вдвое при температурах в окрестности T_1 отличаются и величины наблюдаемых экспериментально полей. Необходимо заметить, однако, что в насыщении экспериментальное значение B_2 почти втрое больше расчетного (рис. 3).

Рост поля B_1 при понижении температуры авторы [6] объяснили наличием сильной температурной зависимости намагниченности коллективизированных электронов в области между h - и c -слоями. Полагая, что действующее на эти электроны поле пропорционально B_2 , а температурная зависимость их парамагнитной восприимчивости описывается законом Кюри–Вейсса, авторы [6] смогли подобрать формулу

$$B_1(T) = 47 \left(1 + \frac{18}{T + 6.7} \right) B_2(T), \quad (13)$$

практически идеально описывающую экспериментальные данные (рис. 3). Однако такое объяснение предполагает наличие некоего антиферромагнитного обменного взаимодействия с температурой Нееля порядка фигурирующей в (13) парамагнитной температуры — 6.7 К. Такое взаимодействие с $T_N = T_2$ действительно существует внутри c -слоев (на это указывается и в [6]), но не ясно, какой смысл оно могло бы иметь для коллективизированных электронов. В то же время суммарное поле (магнитное или молекулярное — неважно), действующее со стороны h -слоев на c -слой, очевидно, равно нулю. Поэтому в [6] возможность какого-либо упорядочения моментов узлов внутри c -слоев при $T > T_2$ не рассматривается.

Таким образом, нам представляется, что при обсуждении экспериментальных результатов в [6] не получены ответы на три важных вопроса. а) Почему найденные экспериментально и теоретически отношения полей в hh - и hc -междуузлиях совпадают, хотя абсолютные значения резко различаются? б) Означает ли наличие только двух экспериментально наблюдаемых полей на мюоне, что он действительно не может занимать тетраэдрические междуузлия? с) Упорядочение каких именно магнитных моментов вызывает резкий рост B_1 при понижении температуры?

В попытке найти ответы на эти вопросы мы, используя полученные в предыдущих разделах формулы, провели расчеты полей в различного типа междуузлиях Sm. Полагая в диапазоне температур $T_2 < T < T_1$ моменты узлов в c -слоях неупорядоченными, можно найти эти поля, суммируя приведенные в таблице напряженности $\mathbf{H}_{\text{ferro}}$

Поля, создаваемые ферромагнитно упорядоченным h -слоем, $\mathbf{H}_{\text{ferro}}$, и упорядоченным в соответствии с рис. 2, b c -слоем, $\mathbf{H}_{\text{antiferro}}$, в окта- и тетраэдрических междуузлиях, (x, y, z) — координаты которых указаны в первом столбце

Координаты	$\mathbf{H}_{\text{ferro}}$	$\mathbf{H}_{\text{antiferro}}$
oct $\left(\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{6}, \frac{d}{2} \right)$	(0, 0, −.88)	(0, −.12, .02)
oct $\left(\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{6}, \frac{3d}{2} \right)$	(0, 0, 0)	(0, −.07, .27)
oct $\left(\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{6}, \frac{5d}{2} \right)$	(0, 0, 0)	(0, −.02, .07)
oct $\left(\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{6}, \frac{7d}{2} \right)$	(0, 0, 0)	(0, 0, .02)
oct $\left(\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{6}, -\frac{d}{2} \right)$	(0, 0, −.88)	(0, 1.34, .02)
oct $\left(\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{6}, -\frac{3d}{2} \right)$	(0, 0, 0)	(0, .29, .08)
oct $\left(\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{6}, -\frac{5d}{2} \right)$	(0, 0, 0)	(0, .07, .02)
oct $\left(\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{6}, -\frac{7d}{2} \right)$	(0, 0, 0)	(0, .02, 0)
tet $\left(\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{6}, \frac{d}{4} \right)$	(0, 0, −2.23)	(0, −.11, −1.11)
tet $\left(\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{6}, \frac{7d}{4} \right)$	(0, 0, 0)	(0, −.05, .2)
tet $\left(\frac{a}{2}, -\frac{a\sqrt{3}}{6}, \frac{d}{4} \right)$	(0, 0, −2.23)	(0, −1.28, −.44)
tet $\left(\frac{a}{2}, -\frac{a\sqrt{3}}{6}, \frac{7d}{4} \right)$	(0, 0, 0)	(0, −.2, .05)
tet $\left(\frac{a}{2}, \pm \frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{3d}{4} \right)$	(0, 0, .63)	(0, ±.42, ±1.32)
tet $\left(\frac{a}{2}, \pm \frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{5d}{4} \right)$	(0, 0, .03)	(0, ±.27, ±.34)

Примечание. Начало координат совпадает с центром шестиугольника в нижней части рис. 2, b , ось y — с осью b_1 на том же рисунке, ось z перпендикулярна плоскости слоя. (x, y, z) — компоненты напряженности (индукции) поля выражены в кОе (kGs).

полей ферромагнитных h -слоев.² Из таблицы видно, что поле h -слоя чрезвычайно резко убывает при удалении от него, так что при вычислении поля в hc -междуузлиях достаточно учесть лишь один ближайших h -слой, а в hh -междуузлиях — два. Именно по этой причине поля в октаэдрических междуузлиях и отличаются вдвое. Видно также, что в параллельной h -слою плоскости $z = \text{const} \approx d$ поле этого слоя весьма резко осциллирует и по величине, и по направлению. Над узлами в точках с (x, y) координатами $(0, 0)$, $(a/2, \pm(a\sqrt{3})/2)$ и т.д. направление поля совпадает с направлением магнитных моментов узлов, а между узлами в точках $(a/2, \pm(a\sqrt{3})/6)$ и т.д. направление поля обратное.

Как ясно из таблицы, в октаэдрических междуузлиях определенные нами величины напряженности полей совпадают с найденными в [6]. Однако в тетраэдрических междуузлиях вычисленные нами напряженности полей довольно сильно отличаются от полученных в [6]. Для любого из двух hh -междуузлий получаем поле −1.60 кОе, а для двух hc -междуузлий — поля −2.23

² При этом начало координат считается совпадающим с любым атомом слоя.

и $+0.63 \text{ кОе}$.³ Все три поля параллельны оси z , а знак указывает на их ориентацию по отношению к намагниченности ближайших h -слоев.

В такой ситуации оказывается невозможным без дополнительных экспериментальных данных получить однозначные ответы на первые два из поставленных выше вопросов. Действительно, естественно ожидать, что в интервале $T_2 < T < T_1$ намагниченность коллективизированных электронов обращается в нуль на c -слоях, достигая максимумов и минимумов посередине между h -слоями. Примерно такой же характер должно тогда иметь и поле, действующее на мюон в различных позициях со стороны коллективизированных электронов.⁴ Предположим для простоты эту зависимость синусоидальной

$$H(z) = H_0 \sin\left(\frac{\pi z}{3d}\right), \quad (14)$$

где плоскость $z = 0$ совпадает с c -слоем. Тогда, выбрав для амплитуды значение $H_0 = 6.5 \text{ кОе}$, получим в обоих тетраэдрических hc -междоузлиях суммарное поле $H_{hc} \approx 2.4 \text{ кОе}$, а в тетраэдрических hh -междоузлиях $H_{hh} \approx 4.7 \text{ кОе}$ (рис. 3). Мы ни в коем случае не хотим утверждать, что такое объяснение существования двух полей на мюоне в Sm предпочтительнее, чем приведенное в [6]. Действительно, выбрав в (14) значение $H_0 = -2.9 \text{ кОе}$, получим в октаэдрических hc - и hh -междоузлиях те же близкие к экспериментальным значения напряженностей $H_{hc} \approx -2.4$ и $H_{hh} \approx -4.7 \text{ кОе}$. Подчеркнем, однако, что теперь поля \mathbf{H}_{hc} и \mathbf{H}_{hh} вместе с \mathbf{H}_0 имеют противоположное по отношению к намагниченностям ближайших h -слоев направление.

Ситуация, таким образом, достаточно сложна и в основном определяется функцией распределения внутри ячейки спиновой плотности коллективизированных электронов $\mu_s(\mathbf{r})$. Более того, необходимо учитывать возможность перераспределения зарядовой, а с ней и спиновой плотности этих электронов в присутствии мюона [7] и возможность искажения вблизи него исходной магнитной решетки [8]. Поэтому вполне вероятно, что верной не окажется ни одна из рассмотренных выше трактовок.

Еще более сложной оказывается ситуация в области низких температур $T < T_2$, когда упорядочиваются моменты c -слоев. Поля $\mathbf{H}_{\text{antiferro}}$, создаваемые намагниченным c -слоем в различных точках, приведены в последнем столбце таблицы. При этом в начале координат считается расположенным диполь с $m > 0$. В точках $(\pm a/2, (a\sqrt{3})/2, 0)$ также расположены диполи с $m > 0$, а в точках $(\pm a/2, -(a\sqrt{3})/2, 0)$ — диполи с $m < 0$. Видно, что поле, создаваемое c -слоем в октаэдрическом междоузлии, невелико, если три ближайших к нему атома c -слоя намагничены в одну сторону. Если, однако, междоузлие лежит между цепочками с противоположными направлениями магнитных моментов, поле резко воз-

растает, и его u -компонента достигает величины 1.34 кОе . После сложения с параллельным оси z полем 0.88 кОе , создаваемым в hc -междоузлии ближайшим h -слоем, мы получаем 1.6 кОе — значение, не слишком сильно отличающееся от значения 1.75 кОе , которое имеет поле в октаэдрическом hh -междоузлии.

Ясно, что попадание мюона в hc -междоузлие приводит к некоторой раскомпенсации полей, действующих на c -слои со стороны соседних h -слоев. Если возникающее при этом поле (скорее всего, обменное) достаточно велико, оно может привести к частичному упорядочению внутри c -слоя в соответствии с (13). Полного упорядочения на больших расстояниях ждать при $T > T_2$, естественно, не приходится. Однако уже упорядочение всего лишь трех ближайших к hc -междоузлию атомов (два "вверх", один "вниз") дает перпендикулярную к оси z компоненту поля 1.13 кОе . Это означает, что суммарное поле в октаэдрическом hc -междоузлии составит 1.43 кОе (сравни с 1.75 кОе в hh -междоузлии). Такое объяснение причины роста B_1 с понижением температуры, однако, вовсе не безупречно. Оно может быть справедливо, если вблизи мюона атомы c -слоя упорядочиваются антиферромагнитно, т. е. если обменный интеграл между ближайшими соседями отрицателен. Это, однако, противоречит полученному в [5] выводу о его положительности, и совершенно не ясно, в какой степени присутствие мюона может повлиять на величины и знаки обменных интегралов.

Как видно из таблицы, поля, создаваемые упорядоченными моментами c -слоя в тетраэдрических междоузлиях, еще более разнообразны по величине и направлению, чем в октаэдрических. Это предоставляет достаточно богатые возможности для построения аналогичной схемы, объясняющей температурную зависимость B_1 в предположении, что мюоны занимают только тетраэдрические междоузлия. Однако появление намагниченности c -слоя вызывает, естественно, изменение поляризации коллективизированных электронов. Поскольку последняя в этом случае играет принципиально важную роль (см. (14)), возможности для спекуляций здесь становятся совершенно неограниченными. Поэтому оценки на основе простейших качественных соображений, аналогичные проведенным выше, здесь уже неприменимы. Фактически для решения проблемы двух полей на мюоне в Sm необходимы, видимо, расчеты $\mu_s(\mathbf{r})$ в исходной решетке, и ее искажений, вызванных присутствием мюона. Значительный интерес представляют и дополнительные экспериментальные исследования величин, и особенно направлений локальных полей при низких температурах.

Полученные в первом разделе работы формулы показывают, что гармоники Фурье поля цепочки или атомной плоскости, состоящей из одинаковых диполей, очень быстро (экспоненциально) спадают с удалением от них. Поэтому поле в любой точке магнетика создается, по сути дела, лишь двумя-тремя ближайшими к ней атомными плоскостями. Именно этим, в частности, объясняется

³ В [6] получены значения 2.27 и 1.72 и $.60 \text{ кОе}$ соответственно.

⁴ Мы не отождествляем это поле с полем Ферми по причинам, изложенным в [2,3].

отсутствие изменения поля на мюоне при переходе ферромагнетик–спиральный антиферромагнетик [4].

Это же обстоятельство позволяет резко упростить анализ вкладов в поля в междоузлиях магнетиков. На основе такого анализа полей в междоузлиях самария в работе получены следующие выводы.

1) При учете поля, действующего на мюон со стороны коллективизированных электронов, поля в двух из трех неэквивалентных тетраэдрических междоузлий могут оказаться близкими. Поэтому не исключено, что мюон в Sm может занимать тетраэдрические, а не октаэдрические междоузлия.

2) Наличие мюона в любом из hc -междоузлий меняет распределение электронной плотности, а с ним и обменные интегралы между h - и c -слоями. В результате суммарное, действующее на c -слой обменное поле, становится отличным от нуля. Поэтому рост одного из двух действующих на мюон полей [6] может быть связан с локальным упорядочением моментов в c -слое.

Автор благодарен Ю.П. Ирхину за постановку задачи вычисления локальных полей в сложных магнитных решетках и за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] И.Е. Тамм. Основы теории электричества. Наука, М. (1976).
- [2] Е.В. Розенфельд, Ю.П. Ирхин. ФММ **86**, 4, 35 (1998).
- [3] Е.В. Розенфельд, Ю.П. Ирхин. Изв. РАН, в печати.
- [4] W. Hofmann, W. Kundig, P.F. Meier, B.D. Patterson, K. Rugg. Phys. Lett. **A65**, 4, 343 (1978).
- [5] W.C. Koehler, R.M. Moon. Phys. Rev. Lett. **29**, 21, 1468 (1972).
- [6] И.И. Гуревич, И.Г. Ивантер, Б.Ф. Кириллов, Б.А. Никольский, А.В. Пирогов, А.Н. Пономарев, В.А. Суетин, В.Г. Гребенник, В.Н. Дугинов, В.А. Жуков, А.В. Лазарев, В.Г. Ольшевский, В.Ю. Помякушин, С.Н. Шилов. ЖЭТФ **100**, 4, 1353 (1991).
- [7] V.Yu. Irkhin, Yu.P. Irkhin. Phys. Rev. **B57**, 3, 2697 (1998).
- [8] Ю.П. Ирхин, В.Ю. Ирхин. ФТТ **40**, 7, 1298 (1998).