

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ФАЗОВОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПРИРОДНЫХ ФЕРРИМАГНЕТИКОВ

Губайдуллин Р.Р.<sup>1</sup>, Гареева М.Я.<sup>1</sup>, Максимочкин В.И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ФГБОУ ВПО «Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета», Стерлитамак, Россия (453103, г. Стерлитамак, пр. Ленина, 47а), web.renald@gmail.com

<sup>2</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики Земли (119991, г. Москва, Россия, Ленинские горы, д. 1, стр. 2).

---

Большинство естественных минералов содержат дефекты структуры, вакансии, примесные атомы и прочие включения, присутствие которых влияет на магнитные характеристики систем. В работе представлено теоретическое исследование влияния неоднородности состава на магнитные свойства естественных ферримагнетиков. Предложена модель магнетика, как аналог минерала магнетита, примесные включения в которой размещались равномерно или по нормальному распределению, создавая тем самым однородную и неоднородную по составу конфигурацию. Гетерогенность, как показано в работе, расширяет диапазон составов с аномальными кривыми термонамагниченности. Установлено, что неоднородность состава увеличивает значение намагниченности и температуры Кюри, что находит подтверждение в экспериментальных работах с горными породами. В частности, окисление приводит к нарушению стехиометрии, что вызвано диффузией ионов металлов в неподвижном кислородном каркасе. Возможно также и применение модели к восстановительным процессам с магнетиками, находящимся в природной углеводородной среде.

---

Ключевые слова: ферримагнитные минералы, термонамагничивание, модель Изинга.

## RESEARCH OF INFLUENCE OF PHASE INHOMOGENEITY ON THE MAGNETIC PROPERTIES OF NATURAL FERRIMAGNETS

Gubajdullin R.R.<sup>1</sup>, Gareeva M.Ja.<sup>1</sup>, Maksimochkin V.I.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> BashSU, Sterlitamak Branch, Sterlitamak, Russia (47a, Lenin Street, Sterlitamak, 453103)  
e-mail: web.renald@gmail.com

<sup>2</sup> Department of Physics of the Earth, Faculty of Physics, M.V. Lomonosov Moscow State University. Moscow, 119991, Russia.

---

Defects of structure contain the majority of natural minerals, vacancy defect, impurity atoms, and other inclusions, which presence influences magnetic characteristics of systems. In the work it is presented theoretical research of influence of heterogeneity of structure on the magnetic properties natural ferrimagnetics. The model of magnetic is offered, as analog of a mineral of magnetite, impurity inclusions in which took place evenly or on normal distribution, creating that the most homogeneous and non-uniform configurations on structure. Heterogeneity, as shown in work, expands a range of structures with abnormal curves of thermomagnetization. It is established that heterogeneity of structure increases value of magnetization and Curie temperatures that finds confirmation in the experimental works with rocks. In particular, oxidation brings to the stoichiometry violation, caused by diffusion of ions of metals in motionless oxygen framework. Probably as well model application to regenerative processes with magnetics, being in the natural to the hydrocarbonic environment.

---

Keywords: ferrimagnetic minerals, thermomagnetization, Ising model.

### Введение

Неоднородность по составу, наличие примесей и различных дефектов являются характерными особенностями естественных минералов и горных пород различной природы. Эти особенности могут серьезно влиять на магнитные свойства минералов и создавать различные аномалии в процессах намагничивания.

В природе наиболее распространены железосодержащие ферримагнетики, которые также могут содержать примеси магния, титана и другие. В большинстве случаев замещение железа

немагнитными катионами в этих ферритах происходит только в одной из подрешеток, уменьшая тем самым ее магнитное действие и увеличивая действие другой подрешетки.

В настоящей работе представлено исследование влияния неоднородности состава магнитных минералов на примере трехмерной модели Изинга. Была создана модель двух-подрешеточного ферритмагнетика, как аналог минерала магнетита, в которой примесные включения занимали места в одной из подрешеток.

### Описание модели

Модель представляет собой кубическую решетку размером  $L \times L \times L$ , содержащую  $N=L^3$  узлов. Все узлы разделены на два типа  $A$  и  $B$  таким образом, что ближайшими соседями узлов одного типа являлись узлы другого типа. Магнитные спины  $S_A$  и  $S_B$ , принимающие значения  $\pm 1$  для  $S_A$  и  $\pm 2$  для  $S_B$ , занимают соответственно места  $A$  и  $B$  в решетке. Примесные включения  $C$ , не имеющие магнитного спина, занимают места  $B$  и заменяют, таким образом, спины  $S_B$ . Общая «молекулярная формула» для модели выглядит следующим образом:

$$S_A \cdot S_{B(1-x)} \cdot C_x,$$

где  $x$  – задает концентрацию примесных включений в подрешетке  $B$ .

Для задания однородной и неоднородной по составу конфигурации в модели применяются два вида распределения примесей по решетке – равномерное и нормальное.

Полная магнитная энергия системы определяется гамильтонианом:

$$H = -J_{AB} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j,$$

где суммирование происходит для различных пар ближайших соседей,  $J_{AB}$  – константа обменного взаимодействия между магнитными спинами, которую можно также назвать обменным интегралом между подрешетками  $A$  и  $B$ . Взаимодействия с константами  $J_{AA}$  и  $J_{BB}$  отсутствуют ввиду отсутствия ближайшего соседства спинов одного типа, а дальний порядок в моделировании не принимался во внимание. Для устранения влияния поверхностных эффектов на систему накладывались периодические граничные условия.

Суммарная намагниченность определяется:

$$M = \mu \sum_{i=1,N} S_i = \mu N S$$

где  $S$  – среднее значение магнитного момента на спин,  $\mu$  – магнетон Бора.

Для достижения термодинамического равновесия системы при заданной температуре  $T$  применялся следующий алгоритм (алгоритм Метрополиса).

1. Формируется начальная конфигурация с заданными значениями  $L$ ,  $x$  и  $T$ , а также видом распределения примесей.
2. Производится случайное пробное изменение в начальной конфигурации путем

переворота какого-нибудь спина.

3. Вычисляется изменение энергии системы, обусловленное произведенным изменением конфигурации.

4. Если  $\Delta E \leq 0$ , то конфигурация принимается. Если  $\Delta E \geq 0$ , то конфигурация принимается с вероятностью  $\exp(-\Delta E/kT)$ .

Шагом моделирования методом Монте-Карло (МК) называется последовательность пунктов 2-4 алгоритма. Равновесное состояние начальной конфигурации достигалось путем повторения 1000 раз на спин шага МК. После чего определялось среднее значение модуля магнитного момента на спин по 10 шагам МК.

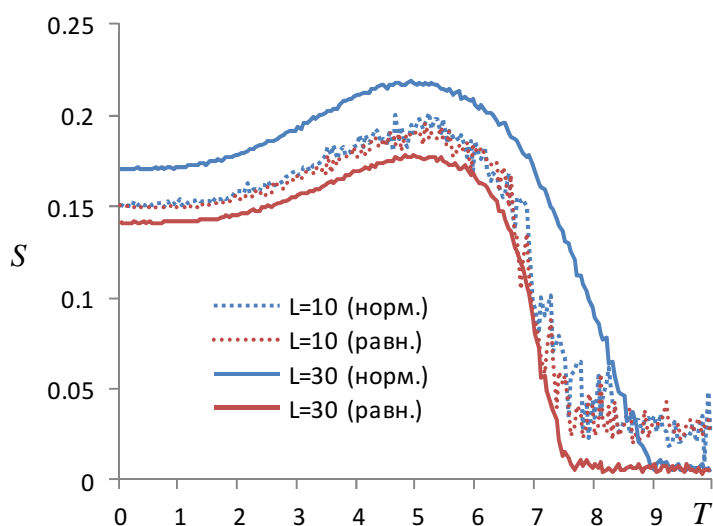
Конечное абсолютное значение магнитного момента на спин ( $S=M/\mu N$ ) для заданных  $L$ ,  $x, T$  и вида распределения примесей определялось как среднее по 10 случайно сформированным конфигурациям.

Симуляция производилась при размерах стороны кубических решеток  $L=10, 20, 30$ , в интервале температур  $T$  от 0 до 10. Концентрация  $x$  принимала значения 5, 10, 15 ... 75.

Модель реализована в программе на языке C++ с использованием компилятора g++ в среде Linux. Приводимые данные обезразмерены.

### Результаты исследования и их обсуждение

На рисунке 1 показано сравнение результатов моделирования температурных зависимостей магнитного момента на спин для нормального и равномерного распределения примесей при  $L=10$  и  $L=30$ .



**Рис. 1. Результаты моделирования при  $x = 0.35$  для решеток с  $L=30$  и  $L=10$  при нормальном и равномерном распределениях примесных включений.**

Видно, что кривые  $L=10$  (норм.) и  $L=10$  (равн.) практически совпадают, в то время как кривые  $L=30$  (норм.) и  $L=30$  (равн.) различны. Кроме того, кривые при  $L=30$  имеют гораздо

большую точность. Другими словами, на решетках малых размеров нельзя создать различия в нормальном и равномерном распределении, что говорит о предпочтении моделирования на решетке с  $L=30$ . Поэтому дальнейшие результаты показаны для решеток размером  $30 \times 30 \times 30$ .

Результаты моделирования для двух распределений и различных концентраций примесей показаны в таблице 1, на рисунках 2 и 3.

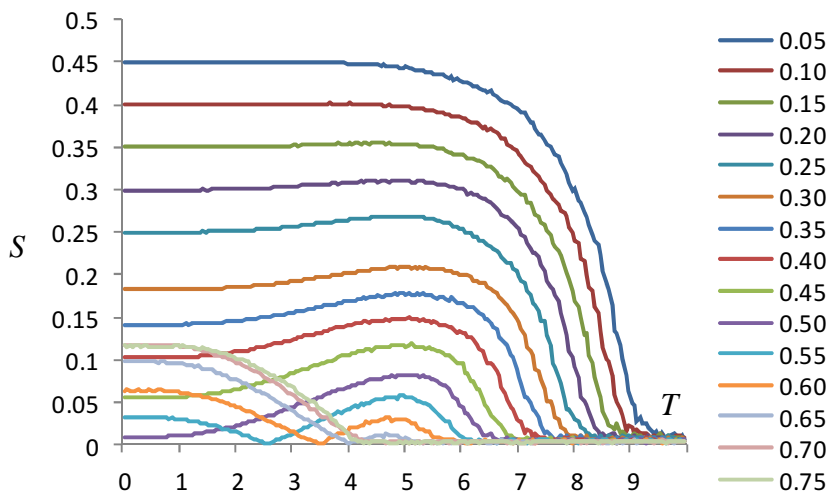
**Таблица 1 – Результаты моделирования для решетки  $L=30$  при равномерном (Равн.) и нормальном (Норм.) распределении примесей (в скобках значения температур соответствующих  $S_{max}$ )**

$x$	$S_0(T=0)$		$T_c$		$T_k$		$S_{max}$	
	Равн.	Норм.	Равн.	Норм.	Равн.	Норм.	Равн.	Норм.
0.05	0.449	0.412	9,15	9,25	-	-	0.450(3.15)	0.412 (3.85)
0.10	0.399	0.400	8,95	9,25	-	-	0.401(3.70)	0.404 (3.95)
0.15	0.349	0.351	8,65	9,20	-	-	0.355(4.45)	0.362 (4.30)
0.20	0.299	0.304	8,45	9,15	-	-	<b>0.311(4.70)</b>	<b>0.324(4.95)</b>
0.25	0.250	0.258	8,15	9,15	-	-	<b>0.269(5.00)</b>	<b>0.287(4.85)</b>
0.30	0.182	0.214	7,90	9,10	-	-	<b>0.209(5.05)</b>	<b>0.252(5.05)</b>
0.35	0.141	0.171	7,55	9,05	-	-	<b>0.177(5.00)</b>	<b>0.218(4.95)</b>
0.40	0.102	0.128	7,25	8,95	-	-	<b>0.149(5.10)</b>	<b>0.187(5.05)</b>
0.45	0.055	0.087	6,85	8,85	-	-	<b>0.118(5.15)</b>	<b>0.156(4.85)</b>
0.50	0.009	0.047	6,50	8,75	-	-	<b>0.082(5.35)</b>	<b>0.125 (5.40)</b>
0.55	0.031	0.008	6,10	8,50	<b>2.60</b>	-	<b>0.057(5.00)</b>	<b>0.095(4.90)</b>
0.60	0.063	0.028	5,80	8,35	<b>3,50</b>	<b>2.55</b>	0.064(0.65)	<b>0.068(5.05)</b>
0.65	0.098	0.064	5,25	8,20	<b>4,05</b>	<b>3.45</b>	0.098(0.30)	0.065(0.35)
0.70	0.116	0.097	4,35	7,80	-	<b>3,95</b>	0.118(0.60)	0.098(0.15)
0.75	0.116	0.124	4,15	4,25	-	-	0.116(0.40)	0.126(0.75)

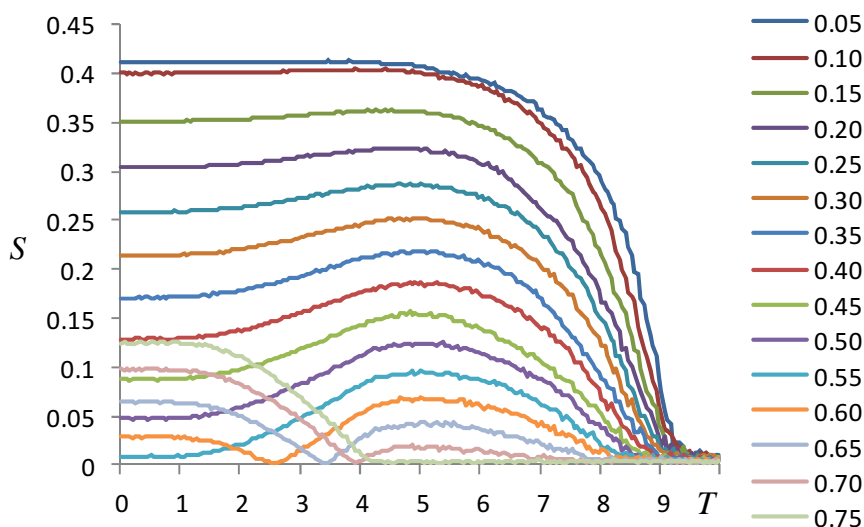
Температурные зависимости магнитного момента принимают различные типы, описанные в теории ферромагнетизма Нееля [3]. Максимальные значения магнитный момент для кривых Р-типа и N-типа достигает практически при одной и той же температуре ( $T=5$ ) для обоих распределений, что характеризует  $S_{max}$  как универсальный индекс, практически не зависящий от  $x$ . Наличие точки компенсации  $T_k$ , напротив, зависит как от степени разбавления примесями, так и от вида распределения немагнитных включений. Таким образом, самообращение намагниченности минерала может присутствовать и в более широком диапазоне составов в зависимости от вида беспорядка немагнитных атомов.

При увеличении  $x$  наблюдается уменьшение температуры Кюри и начального магнитного момента. Для равномерного распределения примесных включений стоит отметить

стабильное уменьшение точки Кюри, в то время как при нормальном распределении температура Кюри изменяется незначительно, а также начальный магнитный момент  $S_0(T=0)$  имеет более высокие значения в сравнении с равномерным порядком примесей.



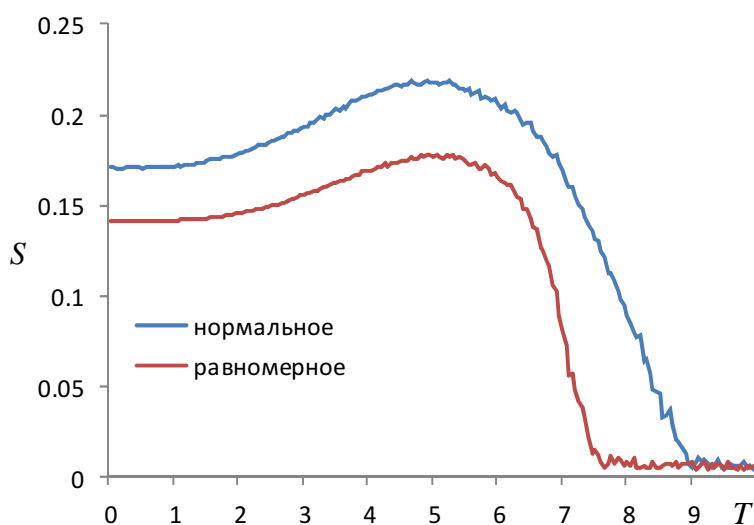
**Рис. 2. Результаты моделирования для решетки  $L=30$  при равномерном распределении примесей для различных значений концентрации  $x$ .**



**Рис. 3. Результаты моделирования для решетки  $L=30$  при нормальном распределении примесей для различных значений концентрации  $x$ .**

На рисунке 4 показаны термозависимости абсолютного значения магнитного момента при  $x=35$  для нормального и равномерного распределений примесей. Для нормального распределения наблюдается более высокая точка Кюри и больший магнитный момент по сравнению с равномерным порядком. Такие результаты можно наблюдать в экспериментальных работах на магнитных минералах [4–6], где при окислении образцов в процессе нагрева происходит увеличение температуры Кюри и увеличение удельной

намагниченности. Окисление осуществляется путем диффузии и только диффузии катионов в неподвижном анионном каркасе [1], анионы кислорода в образованной ими плотнейшей упаковке диффундировать не могут. Как следствие, в процессе таких превращений должен существовать градиент степени окисления и нарушение стехиометрии. Чаще всего окисление железосодержащих природных магнетиков приводит к образованию магнетитовой фазы, и можно говорить о неоднородности состава минерала после окисления. То есть применительно к рисунку 4 кривая равномерного размещения примесей – есть кривая нагрева минерала, а кривая нормального распределения – кривая охлаждения после окисления.



**Рис. 4. Результаты моделирования для  $\alpha = 0.35$  решетки  $L=30$  при нормальном и равномерном распределениях примесных включений.**

Помимо окислительных процессов возможно и восстановление, также с выделением магнетитовой фазы [2], что тоже приведет к неоднородности и изменениям свойств минерала, описание которых возможно с помощью приведенной модели.

#### **Заключение**

В настоящей работе рассмотрены особенности влияния фазовой неоднородности минералов на магнитные свойства на примере построенной модели. Приведенные теоретические исследования могут найти применения для объяснения процессов термонамагничивания в экспериментах на природных и синтезированных ферромагнетиках. Представленная модель носит описательный характер явлений и не может иметь применимость для оценочных расчетов.

#### **Список литературы**

1. Белов Н.В. Очерки структурной минералогии. – М. : Недра, 1976. – 323 с.
2. Кравченко С.Н., Орлюк М.И., Русаков О.М. Новый подход к интерпретации региональной Западно-Черноморской магнитной аномалии // Геофизический журнал. – 2003. – Т. 25. – № 2. – С. 135-143.
3. Néel L. Propriétés magnétiques des ferrites: ferrimagnétisme et antiferromagnétisme // Ann. Phys. – 1948. – V. 3. – № 2. – P. 137-198.
4. Ozima M., Larson E.E. Study of Self-reversal of TRM in Some Submarine Basalts // Journal of geomagnetism and geoelectricity. – 1968. – V. 20. – № 4. – P. 337–351.
5. Ozima M., Ozima M. Self-reversal of remanent magnetization in some dredged submarine basalts // Earth and Planetary Science Letters. – 1967. – V. 3. – P. 213–215.
6. Uyeda S. Magnetic Interaction between Ferromagnetic Materials Contained in Rocks // Journal of geomagnetism and geoelectricity. – 1955. – V. 7. – № 1-2. – P. 9–36.

#### **Рецензенты**

Мустафина Светлана Анатольевна, доктор физико-математических наук, профессор, заведующая кафедрой математического моделирования Стерлитамакского филиала БашГУ, г. Стерлитамак.

Гималтдинов Ильяс Кадирович, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной математики и механики Стерлитамакского филиала БашГУ, г. Стерлитамак.