

PACS: 75.30.Gw

А.Л. Шишмаков, И.Л. Любчанский

АНАЛИЗ ЭНЕРГИИ МАГНИТОКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ
АНИЗОТРОПИИ КУБИЧЕСКИХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ БАЗИСОВ ГРЕБНЕРА

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

Статья поступила в редакцию 30 марта 2007 года

Проведен анализ энергии магнитокристаллической анизотропии (МА) кубического ферромагнетика с использованием представления базисов Гребнера при учете первой и второй констант МА. Найдены и проанализированы все возможные стационарные точки на поверхности энергии МА, определяющиеся комбинациями этих констант. Приведены примеры веществ, в которых возможно существование стационарных точек различных типов.

Введение

Известно, что энергия магнитокристаллической анизотропии F_{ma} определяет ориентацию вектора намагниченности \mathbf{M} в магнитоупорядоченных кристаллах [1–7]. При отсутствии внешних воздействий вектор \mathbf{M} в магнитном веществе ориентирован вдоль строго определенных направлений, называемых легкими осями намагничивания. Для нахождения ориентации легких осей рассматривают энергию МА, выражение для которой в случае магнетика кубической симметрии имеет вид [1–4]:

$$F_{ma} = k_1 (m_x^2 m_y^2 + m_x^2 m_z^2 + m_y^2 m_z^2) + k_2 m_x^2 m_y^2 m_z^2, \quad (1)$$

где k_1 и k_2 – первая и вторая константы МА; $m_i = M_i(M_0)^{-1}$ – проекции единичного вектора намагниченности \mathbf{m} на оси декартовой системы координат ($i = x, y, z$) (M_0 – намагниченность насыщения);

$$m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 = 1. \quad (2)$$

Наборы точек $\{m_x, m_y, m_z\}$, в которых функция F_{ma} имеет минимумы, определяют ориентацию осей легкого намагничивания в пространстве, а точки, в которых F_{ma} принимает максимальные значения, называют трудными осями [1–7]. Если вектор \mathbf{M} ориентирован вдоль легкой оси, то такая ориентация

будет равновесной и устойчивой. Ориентация его вдоль трудной оси также будет равновесной, однако это равновесие неустойчиво [1–7]. Может оказаться, что точка, подозрительная на экстремум, окажется седловой. Это говорит о том, что перемагнитить образец вдоль одного направления трудно, а вдоль другого – легко. Возможен также случай, когда экстремумы функции F_{ma} достигаются не в определенных точках, а на какой-либо кривой, т.е. экстремальные значения F_{ma} определяются наборами не из трех чисел $\{m_x, m_y, m_z\}$, а всего из двух, при произвольном значении третьей координаты. В таком случае имеет место вырождение, и говорят, что магнетик характеризуется анизотропией типа «легкая плоскость» [1–7].

Легкие и трудные оси, легкие плоскости и седловые точки на поверхности энергии МА многократно исследовались, а соответствующие результаты отражены в широко известных монографиях и учебниках [1–7]. Однако традиционно используемые алгебраические методы не всегда дают всестороннее описание многообразия стационарных магнитных состояний, которые могут реализоваться в магнитоупорядоченных кристаллах. Для решения подобного рода алгебраических задач в последнее время широко используют технику базисов Гребнера (БГ) [8]. Она находит широкое применение для анализа поведения сложных структур [9] и отыскания глобальных минимумов в квантовой теории поля [10]. Несмотря на некоторую «тяжеловесность» и большие объемы вычислений, метод БГ является современным высокоэффективным методом вычислений в приложениях, связанных с применением систем компьютерной алгебры. Произвольный БГ – это набор полиномов, множество корней которых совпадает с множеством корней исходной системы уравнений, а соответствующие коэффициенты многочленов базиса образуют верхнюю треугольную матрицу [8]. Другими словами, техника БГ позволяет от системы нелинейных алгебраических уравнений перейти к эквивалентной системе, где переменные последовательно исключаются. В этом смысле алгоритм построения БГ (алгоритм Бухбергера) аналогичен алгоритму исключения Гаусса для задач линейной алгебры [8].

Следует отметить, что БГ для системы алгебраических уравнений определяется неоднозначно, однако множество корней любого БГ всегда совпадает с множеством решений исходной системы уравнений [8]. Как и в задаче о приведении матрицы к треугольному виду, техника БГ требует введения отношения порядка на множестве переменных. Говоря менее формально, необходимо указать, в какой последовательности из системы алгебраических уравнений будут исключаться переменные. В настоящей работе использован лексикографический порядок [8]. Поскольку при построении БГ переменные последовательно исключаются, можно использовать технику вычисления корней полиномов от одной переменной, а затем подставлять найденные корни в другие уравнения системы и решать их относительно других переменных. Отметим, что алгоритмы построения БГ реализованы во многих системах компьютерных вычислений, таких как Mapl, Mathematica, AXIOM, REDUCE и др.

Целью настоящей работы является детальное исследование энергии МА кубического ферромагнетика с использованием метода БГ, отыскание и анализ стационарных точек на поверхности энергии МА, соответствующих особенностям направлений вектора намагниченности в кубическом ферромагнетике.

1. Метод базисов Гребнера

Проиллюстрируем применение метода БГ на примере отыскания экстремума энергии МА (1). Вначале определим стационарные точки. Для этого составим функцию Лагранжа F , которая, применительно к нашей задаче, определяется следующим образом [8]:

$$F = k_1 (m_x^2 m_y^2 + m_x^2 m_z^2 + m_y^2 m_z^2) + k_2 m_x^2 m_y^2 m_z^2 + \lambda (m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 - 1). \quad (3)$$

Дифференцируя выражение (3) и присоединяя условие связи (2), получаем систему алгебраических уравнений пятой степени:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial m_x} = 2k_1 (m_x m_y^2 + m_x m_z^2) + 2k_2 m_x m_y^2 m_z^2 + 2\lambda m_x, \\ \frac{\partial F}{\partial m_y} = 2k_1 (m_x^2 m_y + m_z^2 m_y) + 2k_2 m_x^2 m_z^2 m_y + 2\lambda m_y, \\ \frac{\partial F}{\partial m_z} = 2k_1 (m_x^2 m_z + m_y^2 m_z) + 2k_2 m_x^2 m_y^2 m_z + 2\lambda m_z, \\ f = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 - 1. \end{cases} \quad (4)$$

Для решения (4) найдем БГ идеала, порожденного четырьмя уравнениями этой системы. Такой идеал принадлежит множеству $R[x, y, z, \lambda]$. При построении БГ было использовано лексико-графическое упорядочение мономов $\lambda > m_x > m_y > m_z$ [8]. Соответствующий БГ состоит из тринадцати компонент, явный вид которых ввиду громоздкости приведен в приложении. Из уравнений (П.1)–(П.13) видно, что первый многочлен g_1 в БГ зависит только от m_z , тогда как другие компоненты вектора \mathbf{m} (m_x и m_y) появляются лишь с ростом номера компонент базиса. Используя методы компьютерной алгебры для решения системы уравнений (4), получаем набор решений, которые определяют стационарные направления вектора намагниченности \mathbf{M} .

Полный список стационарных точек функции F может быть представлен в виде следующих четырех групп решений:

$$\begin{cases} m_x = \pm 1, & m_y = 0, & m_z = 0, & \lambda = 0, \\ m_x = 0, & m_y = \pm 1, & m_z = 0, & \lambda = 0, \\ m_x = 0, & m_y = 0, & m_z = \pm 1, & \lambda = 0; \end{cases} \quad (5)$$

$$m_x = \pm \frac{\sqrt{3}}{3}, \quad m_y = \pm \frac{\sqrt{3}}{3}, \quad m_z = \pm \frac{\sqrt{3}}{3}, \quad \lambda = -\frac{2}{3}k_1 - \frac{1}{9}k_2; \quad (6)$$

$$\begin{cases} m_x = 0, & m_y = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & m_z = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & \lambda = -\frac{1}{2}k_1, \\ m_x = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & m_y = 0, & m_z = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & \lambda = -\frac{1}{2}k_1, \\ m_x = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & m_y = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & m_z = 0, & \lambda = -\frac{1}{2}k_1; \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} m_x = \pm \sqrt{\frac{2k_1 + k_2}{k_2}}, & m_y = \pm \sqrt{-\frac{k_1}{k_2}}, & m_z = \pm \sqrt{-\frac{k_1}{k_2}}, & \lambda = \frac{k_1^2}{k_2}, \\ m_x = \pm \sqrt{-\frac{k_1}{k_2}}, & m_y = \pm \sqrt{\frac{2k_1 + k_2}{k_2}}, & m_z = \pm \sqrt{-\frac{k_1}{k_2}}, & \lambda = \frac{k_1^2}{k_2}, \\ m_x = \pm \sqrt{-\frac{k_1}{k_2}}, & m_y = \pm \sqrt{-\frac{k_1}{k_2}}, & m_z = \pm \sqrt{\frac{2k_1 + k_2}{k_2}}, & \lambda = \frac{k_1^2}{k_2}. \end{cases} \quad (8)$$

Группа решений (5) содержит $2 + 2 + 2 = 6$ корней, группа (6) – $2^3 = 8$, (7) – $2^2 + 2^2 + 2^2 = 12$, а группа (8) – $2^3 + 2^3 + 2^3 = 24$ корня. Таким образом, общее количество стационарных точек для кубического магнетика, при учете слагаемых четвертой и шестой степеней в выражении для энергии МА, составляет $6 + 8 + 12 + 24 = 50$. Это означает, что возможна ситуация, когда кристалл может иметь 50 особых направлений.

Отметим, что решения групп (5)–(7) не зависят от констант МА, тогда как решения группы (8) определяются алгебраическими комбинациями k_1 и k_2 . Возможность существования подобного вида решений обсуждалась в [3]. Обратим внимание на корни группы (8). Поскольку $\{m_x, m_y, m_z\}$ суть декартовы координаты вектора \mathbf{m} , они с необходимостью вещественные числа. Из этого можно сделать вывод, что 24 корня из этой группы возможны только тогда, когда подкоренные выражения неотрицательны. В частности, из (8) видно, что эти 24 корня не существуют, если знаки k_1 и k_2 одинаковы.

2. Исследование стационарных точек

Для анализа характера стационарных точек необходимо исследовать второй дифференциал функции F (3), который в общем виде может быть представлен стандартным образом [11]:

$$\begin{aligned} d^2F &= \frac{\partial^2 F}{\partial m_x^2} dm_x^2 + \frac{\partial^2 F}{\partial m_y^2} dm_y^2 + \frac{\partial^2 F}{\partial m_z^2} dm_z^2 + \\ &+ 2 \frac{\partial^2 F}{\partial m_x \partial m_y} dm_x dm_y + 2 \frac{\partial^2 F}{\partial m_x \partial m_z} dm_x dm_z + 2 \frac{\partial^2 F}{\partial m_y \partial m_z} dm_y dm_z, \end{aligned} \quad (9)$$

и условие, вытекающее из условия нормировки для \mathbf{m} (2):

$$m_x dm_x + m_y dm_y + m_z dm_z = 0. \quad (10)$$

Рассмотрим точку, соответствующую значениям $m_x = 0, m_y = 0, m_z = 1, \lambda = 0$. В этом случае из уравнения (10) следует, что $dm_z = 0$. Подставляя данное значение dm_z в (9), получаем, что $d^2F = 2k_1(dm_x^2 + dm_y^2)$. Из этого выражения видно, что знак второго дифференциала d^2F полностью определяется знаком константы k_1 , т.е., если $k_1 > 0$, то точка с координатами $m_x = 0, m_y = 0, m_z = 1$ определяет минимум функции F . Это свидетельствует о том, что вектор \mathbf{m} направлен в точку, соответствующую легкой оси. Если $k_1 < 0$, то мы имеем максимум энергии МА и соответственно трудную ось.

Пусть $m_x = \frac{\sqrt{3}}{3}, m_y = \frac{\sqrt{3}}{3}, m_z = \frac{\sqrt{3}}{3}, \lambda = -\frac{2}{3}k_1 - \frac{1}{9}k_2$. В этом случае формулы (10) и (9) принимают вид: $dm_z = -dm_x - dm_y$ и $d^2F = -\frac{8}{9}(3k_1 + k_2) \times (dm_x^2 + dm_x dm_y + dm_y^2)$ соответственно. Преобразуем последнее выражение: $d^2F = -\frac{2}{9}(3k_1 + k_2) \left[(2dm_x + dm_y)^2 + 3dm_y^2 \right]$, откуда следует, что «легкость» или «трудность» соответствующего направления зависит от знака линейной комбинации констант МА $\left(k_1 + \frac{1}{3}k_2 \right)$.

Рассмотрим решение из группы (7), например $m_x = \frac{\sqrt{2}}{2}, m_y = 0, m_z = \frac{\sqrt{2}}{2}, \lambda = -\frac{1}{2}k_1$. Отсюда следует, что $dm_z = -dm_x$. Возможные направления вектора \mathbf{m} полностью зависят от знака формы $d^2F = \left(k_1 + \frac{1}{2}k_2 \right) dm_y - 4k_1 dm_x^2$.

Пусть $m_x = \sqrt{\frac{k_1}{k_2}}, m_y = \sqrt{-\frac{k_1}{k_2}}, m_z = \sqrt{\frac{2k_1 + k_2}{k_2}}, \lambda = \frac{k_1^2}{k_2}$. Тогда формула (9) с учетом (10) принимает вид: $d^2F = -\frac{8k_1(k_1 + k_2)}{k_2} dm_x dm_y$. Как показано

в [11], такая квадратичная форма не является знакоопределенной, поэтому направление, отвечающее таким координатам, не является ни легким, ни трудным. Это седловая точка, в которой энергия МА имеет минимум при изменении одной переменной и максимум – при изменении другой. Отметим, что в полученных выражениях нельзя формально полагать k_1 или k_2 равными нулю. Поэтому проведем анализ частного случая при $k_2 = 0$ отдельно.

В качестве примера рассмотрим кубический кристалл железиттриевого граната $Y_3Fe_5O_{12}$, для которого при температуре $T = 295$ К константы МА отличаются друг от друга на два порядка по абсолютной величине:

$k_1 = -0.06 \cdot 10^4 \text{ J/m}^3$, $k_2 = -0.0005 \cdot 10^4 \text{ J/m}^3$ [4]. Поэтому при анализе энергии МА в $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ можно полагать, что $k_2 = 0$, $k_1 \neq 0$. Тогда формула (1) для энергии МА принимает вид $F_{ma} = k_1 (m_x^2 m_y^2 + m_x^2 m_z^2 + m_y^2 m_z^2)$. При этом основная система уравнений (4) может быть представлена в следующей форме:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial m_x} = 2k_1 (m_x m_y^2 + m_x m_z^2) + 2\lambda m_x, \\ \frac{\partial F}{\partial m_y} = 2k_1 (m_x^2 m_y + m_z^2 m_y) + 2\lambda m_y, \\ \frac{\partial F}{\partial m_z} = 2k_1 (m_x^2 m_z + m_y^2 m_z) + 2\lambda m_z, \\ f = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 - 1, \end{cases} \quad (11)$$

а БГ относительно лексико-графического порядка $\lambda > m_x > m_y > m_z$ запишется следующим образом:

$$\begin{cases} g_1 = 6m_z^7 - 11m_z^5 + 6m_z^3 - m_z, \\ g_2 = 6m_y m_z^5 - 5m_y m_z^3 + m_y m_z, \\ g_3 = 4m_y^2 m_z^3 - 2m_y^2 m_z + 2m_z^5 - 3m_z^3 + m_z, \\ g_4 = m_y^3 m_z - m_y m_z^3, \\ g_5 = 2m_y^5 - 3m_y^3 + 4m_y m_z^4 - 2m_y m_z^2 + m_y, \\ g_6 = 6m_x m_z^5 - 5m_x m_z^3 + m_x m_z, \\ g_7 = 3m_x m_y m_z^3 - m_x m_y m_z, \\ g_8 = m_x m_z^3 + m_x m_y^2 m_z - m_x m_z, \\ g_9 = 2m_x m_y^3 + m_x m_y m_z^2 - m_y m_z, \\ g_{10} = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 - 1, \\ g_{11} = \lambda - 2k_1 m_y^4 - 2k_1 m_y^2 m_z^2 + 2k_1 m_y^2 + 2k_1 m_z^2. \end{cases} \quad (12)$$

Полагая все $g_i = 0$ в (12) ($i = 1, \dots, 11$) и решая получившуюся систему уравнений, находим такие наборы корней:

$$\begin{cases} m_x = \pm 1, & m_y = 0, & m_z = 0, & \lambda = 0, \\ m_x = 0, & m_y = \pm 1, & m_z = 0, & \lambda = 0, \\ m_x = 0, & m_y = 0, & m_z = \pm 1, & \lambda = 0; \end{cases} \quad (13)$$

$$m_x = \pm \frac{\sqrt{3}}{3}, \quad m_y = \pm \frac{\sqrt{3}}{3}, \quad m_z = \pm \frac{\sqrt{3}}{3}, \quad \lambda = -\frac{2}{3} k_1; \quad (14)$$

$$\begin{cases} m_x = 0, & m_y = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & m_z = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & \lambda = -\frac{1}{2}k_1, \\ m_x = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & m_y = 0, & m_z = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & \lambda = -\frac{1}{2}k_1, \\ m_x = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & m_y = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, & m_z = 0, & \lambda = -\frac{1}{2}k_1. \end{cases} \quad (15)$$

Таким образом, общее количество стационарных точек для кубического магнетика, при учете слагаемых только четвертой степени в выражении для энергии МА, равно 26.

Рассмотрим слагаемые из группы (13). Для точки $m_x = 1, m_y = 0, m_z = 0, \lambda = 0$ получаем $dm_x = 0$ и $d^2F = 2k_1(dm_y^2 + dm_z^2)$. Если $k_1 > 0$, то $d^2F > 0$ и точка с координатами $m_x = 1, m_y = 0, m_z = 0$ определяет минимум функции F . Это свидетельствует о том, что вектор намагниченности направлен в точку, соответствующую легкой оси. Если $k_1 < 0$, то мы имеем максимум энергии анизотропии и соответственно трудную ось. Для членов группы (14)

получим, что при $m_x = \frac{\sqrt{3}}{3}, m_y = \frac{\sqrt{3}}{3}, m_z = \frac{\sqrt{3}}{3}, \lambda = -\frac{2}{3}k_1 - \frac{1}{9}k_2, dm_z = -dm_x - dm_y, d^2F = -\frac{2}{3}k_1 \left[(2dm_x + dm_y)^2 + 3dm_y^2 \right]$, а характер направления, определяемого данной точкой, также зависит от знака k_1 . Если $k_1 > 0$ – это трудная ось, а если $k_1 < 0$ – это легкая ось. Аналогичным образом определяется «трудность» («легкость») оставшихся точек из (14) в зависимости от знака k_1 .

Группа решений (15) представляет наибольший интерес. Пусть, например, $m_x = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, m_y = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, m_z = 0, \lambda = -\frac{1}{2}k_1$. В этом случае необходимо исследовать знакоопределенность второго дифференциала: $d^2F = k_1(dm_x^2 - 4dm_y^2)$. Для этого воспользуемся критерием Сильвестра [10].

Пусть $k_1 > 0$, тогда детерминант матрицы для $d^2F \det \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -4 \end{pmatrix} = -4$, т.е. отрицателен. В этой точке функция F имеет седло. Напротив, пусть $k_1 < 0$, тогда $\det \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} = -4$, т.е. опять отрицателен. Отсюда следует, что и в этом случае экстремум отсутствует. Тот факт, что все точки из набора решений (15) являются седловыми, доказывается аналогичным образом.

Полученные данные можно наглядно проиллюстрировать графиком функции $F = F(m_x, m_y, m_z)$ в декартовых координатах. При этом целесообразно воспользоваться следующей параметризацией:

$$m_x = \cos u \sin v, \quad m_y = \sin u \sin v, \quad m_z = \cos v, \quad 0 \leq u \leq \pi, \quad -\frac{\pi}{2} \leq v \leq \frac{\pi}{2}.$$

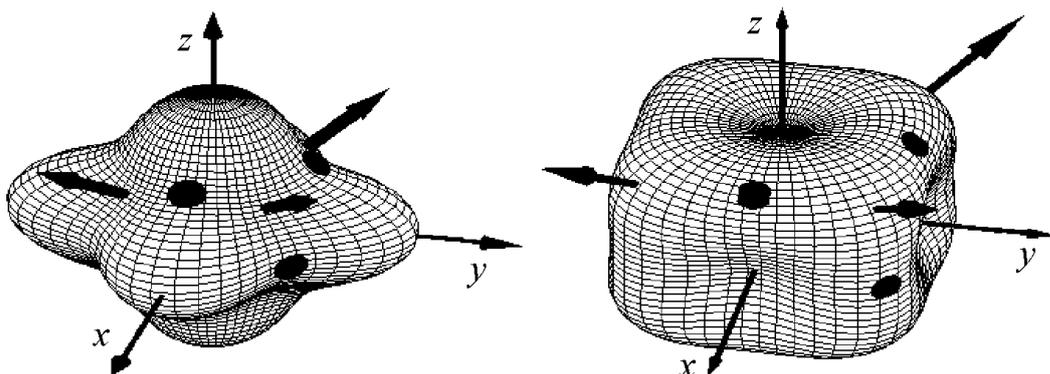


Рис. 1. Поверхность МА для $Y_3Fe_5O_{12}$ при $T = 295$ К, $k_1 < 0$, $k_2 = 0$. Координатные оси x , y , z соответствуют трудным направлениям. Стрелками показаны некоторые легкие оси. Седловые точки отмечены черными кругами

Рис. 2. Поверхность МА для FeSi (Fe – 97%, Si – 3%) при $T = 300$ К, $k_1 > 0$, $k_2 = 0$ [10]. Координатные оси x , y , z соответствуют легким направлениям. Стрелками показаны некоторые трудные оси. Седловые точки отмечены черными кругами

Соответствующая поверхность для $Y_3Fe_5O_{12}$ представлена на рис. 1. График поверхности МА для FeSi с процентным содержанием Fe – 97 и Si – 3 при $T = 300$ К изображен на рис. 2. Для этого вещества, в отличие от $Y_3Fe_5O_{12}$, первая константа МА положительна: $k_1 \approx 48 \cdot 10^4$ Дж/м³, $k_2 \approx 0$ [12]. На приведенных графиках отчетливо видны максимумы, минимумы и седловые точки функции F .

3. Анализ стационарных решений

Как было отмечено выше, для появления решений из группы (8) необходимо выполнение определенных соотношений между константами МА k_1 и k_2 , а именно подкоренные выражения в $\sqrt{\frac{2k_1 + k_2}{k_2}}$ и $\sqrt{-\frac{k_1}{k_2}}$ в решениях (8) должны быть неотрицательными. Для этого необходимо, чтобы выполнялись следующие неравенства:

$$\begin{aligned} k_1 > 0, \quad k_2 < 0 \quad \text{или} \quad k_1 < 0, \quad k_2 > 0, \\ 2k_1 + k_2 > 0, \quad k_2 > 0 \quad \text{или} \quad 2k_1 + k_2 < 0, \quad k_2 < 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Только в таком случае появляются дополнительные оси, ориентация которых зависит от абсолютных значений k_1 и k_2 . В качестве примера подобного вещества рассмотрим сплав FeCoNi со следующим процентным содержанием каждой из компонент: Fe – 25, Co – 25, Ni – 50. В этом веществе константы МА определяются значениями: $k_1 = -3 \cdot 10^2$ Дж/м³ и $k_2 = 22 \cdot 10^2$ Дж/м³ при $T = 598$ К [12], т.е. удовлетворяют неравенствам (16). Воспользовавшись формулами (8), находим координаты стационарных направлений:

$$\begin{aligned}
 m_x &= \pm 0,85279, m_y = \pm 0,36929, m_z = \pm 0,36929; \\
 m_x &= \pm 0,36929, m_y = \pm 0,85279, m_z = \pm 0,36929; \\
 m_x &= \pm 0,36929, m_y = \pm 0,36929, m_z = \pm 0,85279.
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

Все эти направления соответствуют седлам на поверхности МА. На рис. 3 изображена поверхность анизотропии для данного случая и показана ориентация некоторых из найденных стационарных направлений, обозначенных стрелками.

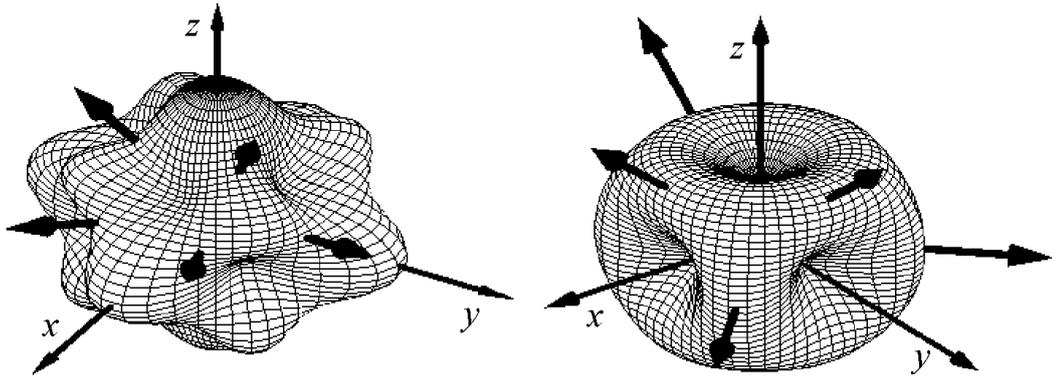


Рис. 3. Поверхность МА для FeCoNi (Fe – 25%, Co – 25%, Ni – 50%) при $T = 598$ К, $k_1 < 0$, $k_2 > 0$. Координатные оси x , y , z соответствуют трудным направлениям. Некоторые из стационарных направлений, соответствующих седлам на поверхности МА, показаны стрелками

Рис. 4. Поверхность МА для FeNi (Fe – 30%, Ni – 70%) при $T = 473$ К, $k_1 > 0$, $2k_1 + k_2 = 0$. Координатные оси x , y , z соответствуют легким направлениям. Некоторые из стационарных направлений, соответствующих максимумам на поверхности МА, показаны стрелками. Эти направления определяют трудные оси

Рассмотрим случай, когда выполняется условие $2k_1 + k_2 = 0$, т.е. одна из координат в решениях (8) обращается в нуль. Ферромагнитный сплав FeNi с процентным содержанием компонент: Fe – 30, Ni – 70 характеризуется такой комбинацией констант МА: $k_1 = 2 \cdot 10^2$ J/m³ и $k_2 = -4 \cdot 10^2$ J/m³ при $T = 473$ К [12]. В этом случае наблюдается вырождение стационарных направлений, отвечающих седлам (8), и соотношения (8) полностью совпадают с выражениями (7). Видно, что при $k_1 > 0$, $2k_1 + k_2 = 0$ точкам (8) соответствует трудная ось, а при $k_1 < 0$, $2k_1 + k_2 = 0$ – легкая. Поверхность анизотропии для рассмотренного случая представлена на рис. 4.

Заключение

В настоящей работе мы применили технику БГ для определения экстремальных значений выражения для энергии МА и показали эффективность этого метода. Получены и проанализированы все решения для точек, подозрительных на экстремум. Путем детального анализа знака второго диф-

ференциала в каждой такой точке получены условия для констант анизотропии, определяющие характер направления вектора намагниченности к этой точке.

Показано, что если в выражение для энергии анизотропии входят слагаемые четвертой и шестой степеней, то появляются дополнительные 24 корня, которые, в частности, возможны, если первая и вторая константы МА имеют разные знаки. Эти стационарные направления определяются как знаками, так и абсолютными величинами констант МА. В случае, если значащими являются слагаемые только четвертой степени, экстремальные направления неизменны, а их характер зависит только от знаков констант анизотропии.

Следует отметить, что константы МА определяются температурой, т.е. величины и знаки k_1 и k_2 могут претерпевать существенные изменения с ростом или понижением T [3,7]. Соответственно ориентация стационарных направлений также будет меняться с изменением температуры. Отличия в температурной зависимости стационарных направлений при k_1 и k_2 , не равных нулю, заключаются в том, что для изменения их ориентации в пространстве не требуется, чтобы константы МА меняли знак, достаточно их непрерывного изменения по величине в указанных выше пределах.

Исследования проведены только для веществ с кубической симметрией, однако высокая степень алгоритмизации данного метода позволяет надеяться, что техника БГ может быть с успехом применена и для других сингоний. Также отметим, что описанный выше подход является, на наш взгляд, весьма перспективным и многообещающим для описания влияния внешних воздействий (механических напряжений, электрического и магнитного полей) на ориентацию вектора намагниченности в магнетике.

Авторы признательны А.С. Жеданову, И.Б. Краснюку, К.Л. Метлову и С.В. Тарасенко за полезные обсуждения и критические замечания.

1. *С.В. Вонсовский*, Магнетизм, Наука, Москва (1971).
2. *R.R. Birss*, Symmetry and magnetism, North-Holland Publishing Company, Amsterdam (1966).
3. *К.П. Белов, А.К. Звездин, А.П. Кадомцева, Р.З. Левитин*, Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках, Наука, Москва (1979).
4. *С. Тикадзуми*, Физика ферромагнетизма. Магнитные характеристики и практические применения, Мир, Москва (1987).
5. *Magnetism. Fundamentals*, E. du Tremolet de Lacheisserie, D. Gignoux, M. Schlenker (eds.), Springer, Boston (2005).
6. *Г.С. Кринчик*, Физика магнитных явлений, Изд-во МГУ, Москва (1985).
7. *Е.С. Боровик, В.В. Еременко, А.С. Мильнер*, Лекции по магнетизму, Физматлит, Москва (2005).
8. *Д. Кокс, Дж. Литтл, Д. О'Ши*, Идеалы, многообразия и алгоритмы, Мир, Москва (2000).

9. A. Thionnet, Ch. Martin, Int. J. of Solids and Structures **43**, 325 (2006).
10. M. Maniatis, A. von Manteuffe, O. Nachtmann, Eur. Phys. J. **C49**, 1067 (2007).
11. Л.Д. Кудрявцев, Краткий курс математического анализа, Т. 2, ALFA, Москва (1998).
12. Таблицы физических величин. Справочник, И.К. Кикоин (ред.), Атомиздат, Москва (1976).

Приложение

Явный вид тринадцати компонент БГ, выраженных через компоненты вектора \mathbf{m} и константы МА:

$$g_1 = 17k_2^2 m_z^7 - 7k_2^2 m_z^5 + 6k_2^2 m_z^{11} - 17k_2^2 m_z^9 + k_2^2 m_z^3 - 5k_2 m_z^3 + k_1 k_2 m_z + 5k_1 k_2 m_z^5 + 5k_1 k_2 m_z^7 - 6k_1 k_2 m_z^9 + 2k_1^2 m_z + 22k_1^2 m_z^5 - 12k_1^2 m_z^3 - 12k_1^2 m_z^7, \quad (\text{П.1})$$

$$g_2 = -2k_1^2 m_y m_z + 10k_1^2 m_y m_z^3 - 12k_1^2 m_y m_z^5 - k_1 k_2 m_y m_z^5 + 4k_1 k_2 m_y m_z^3 - k_1 k_2 m_y m_z - 6k_1 k_2 m_y m_z^7 + 6k_2^2 m_y m_z^9 + 6k_2^2 m_y m_z^5 - k_2^2 m_y m_z^3 - 11k_2^2 m_y m_z^7, \quad (\text{П.2})$$

$$g_3 = 4k_1 m_y^2 m_z^3 + 2k_1 m_z^5 - 3k_1 m_z^3 - 2k_1 m_y^2 m_z + k_1 m_z + 2k_2 m_z^7 + 4k_2 m_y^2 m_z^5 - 3k_2 m_z^5 - 2k_2 m_y^2 m_z^3 + k_2 m_z^3, \quad (\text{П.3})$$

$$g_4 = 8k_1 k_2 m_y^3 m_z^3 + 2k_2^2 m_y^3 m_z^3 + 8k_1^2 m_y^3 m_z + 2k_1 k_2 m_y^3 m_z + 6k_2^2 m_y m_z^7 - 2k_1 k_2 m_y m_z^5 - 7k_2^2 m_y m_z^5 - 7k_1 k_2 m_y m_z^3 + k_2^2 m_y m_z^3 - 8k_1^2 m_y m_z^3 + k_1 k_2 m_y m_z, \quad (\text{П.4})$$

$$g_5 = 16k_1^2 m_y^4 m_z + 20k_1 k_2 m_y^4 m_z + 4k_2^2 m_y^4 m_z + 4k_2^2 m_y^2 m_z^3 + 16k_1^2 m_y^2 m_z^3 + 20k_1 k_2 m_y^2 m_z^3 - 4k_2^2 m_y^2 m_z - 16k_1^2 m_y^2 m_z - 20k_1 k_2 m_y^2 m_z - 18k_2^2 m_z^9 + 45k_2^2 m_z^7 + 30k_1 k_2 m_z^7 - 35k_1 k_2 m_z^5 - 36k_2^2 m_z^5 + 16k_1^2 m_z^5 + 9k_2^2 m_z^3 - 24k_1^2 m_z^3 + 5k_1 k_2 m_z + 8k_1^2 m_z, \quad (\text{П.5})$$

$$g_6 = 16k_1^2 m_y^5 + 4k_1 k_2 m_y^5 + 16k_1^2 m_y^3 m_z^2 - 2k_2^2 m_y^3 m_z^2 - 4k_1 k_2 m_y^3 m_z^2 - 24k_1^2 m_y^3 - 6k_1 k_2 m_y^3 - 18k_2^2 m_y m_z^8 + 27k_2^2 m_y m_z^6 + 30k_1 k_2 m_y m_z^6 + 16k_1^2 m_y m_z^4 - 13k_1 k_2 m_y m_z^4 - 11k_2^2 m_y m_z^4 - 16k_1^2 m_y m_z^2 + 2k_2^2 m_y m_z^2 + k_1 k_2 m_y m_z^2 + 8k_1^2 m_y + 2k_1 k_2 m_y, \quad (\text{П.6})$$

$$g_7 = -12k_1^2 m_x m_z^5 + 10k_1^2 m_x m_z^3 - 2k_1^2 m_x m_z - k_1 k_2 m_x m_z^5 - k_1 k_2 m_x m_z - 6k_1 k_2 m_x m_z^7 + 4k_1 k_2 m_x m_z^3 + 6k_2^2 m_x m_z^9 - 11k_2^2 m_x m_z^7 + 6k_2^2 m_x m_z^5 - k_2^2 m_x m_z^3, \quad (\text{П.7})$$

$$g_8 = 3k_2^2 m_x m_y m_z^7 - 3k_1 k_2 m_x m_y m_z^5 - 4k_2^2 m_x m_y m_z^5 - 2k_1 k_2 m_x m_y m_z^3 - 6k_1^2 m_x m_y m_z^3 + k_2^2 m_x m_y m_z^3 + 2k_1^2 m_x m_y m_z + k_1 k_2 m_x m_y m_z, \quad (\text{II.8})$$

$$g_9 = 16k_1^2 m_x m_z^3 + 8k_1^2 m_x m_y^2 m_z - 8k_1^2 m_x m_z + 2k_1 k_2 m_x m_y^2 m_z + 10k_1 k_2 m_x m_z^5 + k_1 k_2 m_x m_z^5 + 8k_1 k_2 m_x m_y^2 m_z^3 - 3k_1 k_2 m_x m_z + 2k_2^2 m_x m_y^2 m_z^3 + 9k_2^2 m_x m_z^5 - 6k_2^2 m_x m_z^7 - 3k_2^2 m_x m_z^3, \quad (\text{II.9})$$

$$g_{10} = 2k_2 m_x m_y^3 m_z^2 + 2k_1 m_x m_y^3 + k_2 m_x m_y m_z^4 - k_2 m_x m_y m_z^2 + k_1 m_x m_y^3 m_z^2 - k_1 m_x m_y, \quad (\text{II.10})$$

$$g_{11} = 16k_1^2 m_x m_y^4 + 16k_1^2 m_x m_z^4 + 16k_1^2 m_x m_y^2 m_z^2 - 8k_1^2 m_x m_z^2 - 8k_1^2 m_x m_y^2 + 30k_1 k_2 m_x m_z^6 - 5k_1 k_2 m_x m_z^2 + 4k_1 k_2 m_x m_y^4 + 12k_1 k_2 m_x m_y^2 m_z^2 - 5k_1 k_2 m_x m_z^4 - 2k_1 k_2 m_x m_y^2 - 9k_2^2 m_x m_z^4 - 18k_2^2 m_x m_z^8 + 27k_2^2 m_x m_z^6 + 2k_2^2 m_x m_y^2 m_z^2, \quad (\text{II.11})$$

$$g_{12} = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 - 1, \quad (\text{II.12})$$

$$g_{13} = -112k_1^2 k_2 m_z^4 + 64k_1^2 k_2 m_z^2 + 90k_1 k_2^2 m_z^8 - 105k_1 k_2^2 m_z^6 + 48k_1^2 k_2 m_z^6 + 20k_1 k_2 \lambda - 32k_1^3 m_y^4 + 32k_1^3 m_y^2 - 32k_1^3 m_z^4 + 32k_1^3 m_z^2 - 54k_2^3 m_z^{10} + 135k_2^3 m_z^8 - 108k_2^3 m_z^6 + 27k_2^3 m_z^4 + 4k_2^2 \lambda + 16k_1^2 \lambda - 8k_1 k_2^2 m_y^2 m_z^2 - 40k_1^2 k_2 m_y^2 m_z^2 - 8k_1 k_2^2 m_y^4 + 8k_1 k_2^2 m_y^2 - 8k_1 k_2^2 m_z^4 + 23k_1 k_2^2 m_z^2 - 32k_1^3 m_y^2 m_z^2 - 40k_1^2 k_2 m_y^4 + 40k_1^2 k_2 m_y^2. \quad (\text{II.13})$$

A.L. Shyshmakov, I.L. Lyubchanskii

ANALYSIS OF MAGNETOCRYSTALLOGRAPHIC ANISOTROPY ENERGY FOR CUBIC FERROMAGNETS BY USING THE GREBNER BASES REPRESENTATION

Analysis of the magnetocrystallographic anisotropy (MA) energy for cubic ferromagnet has been performed by using the Grebner bases representation with the first and second MA constants taken into account. On the surface of MA energy all possible stationary points defined by combinations of the constants have been found and analysed. Examples of substances where stationary points of different types may coexist are given.

Fig. 1. MA surface for $Y_3Fe_5O_{12}$; $T = 295$ K, $k_1 < 0$, $k_2 = 0$. Coordinate axes x , y , z correspond to hard directions. Some easy axes are shown by arrows. Saddle points are marked by black circles

Fig. 2. MA surface for FeSi (Fe – 97%, Si – 3%); $T = 300$ K, $k_1 > 0$, $k_2 = 0$ [10]. Coordinate axes x , y , z correspond to easy directions. Some hard axes are shown by arrows. Saddle points are marked by black circles

Fig. 3. MA surface for FeCoNi (Fe – 25%, Co – 25%, Ni – 50%); $T = 598$ K, $k_1 < 0$, $k_2 > 0$. Coordinate axes x , y , z correspond to hard directions. Arrows show several stationary directions corresponding to saddles on MA surface

Fig. 4. MA surface for FeNi (Fe – 30%, Ni – 70%); $T = 473$ K, $k_1 > 0$, $2k_1 + k_2 = 0$. Coordinate axes x , y , z correspond to easy directions. Arrows show several stationary directions corresponding to maxima on MA surface. These directions relate to hard axes