

УДК 537.61.612

МУЛЬТИПОЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ, СОЗДАВАЕМОГО ВЫСОКОСИММЕТРИЧНОЙ МОЛЕКУЛОЙ Fe₃₀

А. С. Мищенко¹, А. С. Чернышов¹, А. К. Звездин

Показано, что в магнитной молекуле Fe₃₀ в основном состоянии все мультипольные моменты ниже октупольного равны нулю. Вычислен октупольный момент и предложена наглядная модель элементарного октуполя.

Разложение электрических полей, создаваемых системой зарядов, по мультиполям широко используется в теоретической физике. Менее известны мультипольные разложения для магнитных полей, создаваемых системой стационарных токов. Для этого вводится разложение векторного потенциала магнитного поля

$$A = \frac{1}{c} \sum_i \frac{e_i \vec{v}_i}{|\vec{R} - \vec{r}_i|}, \quad (1)$$

где e_i , v_i – заряд и скорость i -го заряда. Если интересующая нас точка \vec{R} значительно удалена от системы зарядов, т.е. $\frac{|\vec{r}_i|}{|\vec{R}|} \ll 1$, то векторный потенциал \vec{A} можно разложить в ряд по степеням этого отношения. Первый член разложения $\vec{A}' = \frac{[\vec{M}\vec{R}]}{R^3}$, где $\vec{M} = \frac{1}{2c} \sum_i e_i [\vec{r}_i \vec{v}_i]$ – дипольный магнитный момент системы. Характерной особенностью мультипольного разложения магнитных полей в отличие от электрических является то, что разложение потенциала (1) подразделяется на два семейства: магнитных и тороидных моментов. Простейшим представителем тороидного семейства является анаполь [1] – тороид с токами, текущими строго по его меридианам. Магнитные мультипольные моменты определяются поперечными токами (например, в случае тора, токами, текущими по его параллелям). Необходимость такого разделения становится очевидной, если

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физический факультет.

представить плотность тока согласно известной теореме векторного анализа [2] в виде $\vec{j}(\vec{r}) = \text{grad}\eta + \text{rot}\vec{f}$, где первое слагаемое соответствует тороидным моментам, а второе – ”обычным” магнитным мультиполям. Естественным объектом для приложения мультипольных разложений системы токов являются пространственно ограниченные спиновые системы, в частности магнитные молекулы ($Mn_{12}Ac$, V_{15} , Fe_8 , Fe_{10} , Fe_{30} и т.д.), которые в последнее время привлекают к себе большое внимание исследователей как объекты для изучения фундаментальных вопросов квантовой механики и теории магнетизма [3], а также с точки зрения возможности их использования в нанотехнологии и нанoeлектронике (например, как модельных систем для квантовой информатики) [3 – 7]. Они представляют собой большие квазиорганические молекулярные комплексы с атомным весом порядка 10^3 атомных единиц. Своим интересным магнитным свойствам эти объекты обязаны магнитным атомам, входящим в химический состав молекулы – Mn , Fe , V и других. Следует отметить, что эти ионы в молекуле связаны между собой сильным обменным взаимодействием (порядка 10^6 Э). Наинизшие магнитные мультипольные моменты спиновых систем – дипольный M_1 , квадрупольный M_2 , октупольный M_3 и тороидный T_1 определяются следующим образом [8 – 10]:

$$\vec{M}_1 = \mu_B \sum_i g_i \vec{s}_i,$$

$$(M_2)_{\alpha\beta} = \mu_B \sum_i g_i (r_{i\beta} s_{i\alpha} + s_{i\beta} r_{i\alpha}),$$

$$(M_3)_{\alpha\beta\gamma} = \frac{3}{2} \mu_B \sum_i g_i (r_{i\beta} r_{i\gamma} s_{i\alpha} + s_{i\alpha} r_{i\beta} r_{i\gamma}), \quad (2)$$

$$M_{n,m} = -g\mu_B \sum_i [\vec{\nabla}_i (r_i^n C_n^m(\theta_i, \varphi_i)) \times \vec{s}_i],$$

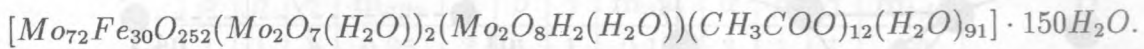
$$\vec{T}_1 = g\mu_B \sum_i [\vec{s}_i \vec{r}_i].$$

Здесь $M_{n,m}$ – компоненты магнитных мультипольных моментов в сферической системе координат (индекс n определяет порядок момента: $n = 1$ – дипольный, $n = 2$ – квадрупольный и т.д., m пробегает значения от $-n$ до n через единицу).

Тороидный момент T_1 обнаружен недавно в [11]. В работе [12] изучались теоретически молекулярные комплексы, в которых может быть реализовано распределение спиновой плотности, характеризуемое тороидным моментом T_1 , однако нам неизвестна

экспериментальная реализация этой идеи. Квадрупольным моментом M_2 характеризуются такие антиферромагнитные нанокластеры, как Fe_{10} , Fe_6 и т.д. В работе [13] исследовались квадрупольные магнитные поля, создаваемые антиферромагнитными кристаллами.

Однако до недавнего времени не были известны магнитные объекты, характеризующиеся октупольным моментом. В настоящей работе показано, что таковым является магнитный нанокластер Fe_{30} с химической формулой



На данный момент это наиболее крупная магнитная молекула по числу входящих в нее магнитных ионов (Fe^{3+}). Молекула Fe_{30} , так же как и упомянутые выше другие нанокластеры, занимает промежуточное положение между "обычными" макроскопическими материалами и индивидуальными магнитными ионами, поэтому их называют также мезоскопическими магнитами. Очевидно, что такие понятия как вектор намагниченности или антиферромагнитный вектор не вполне применимы к ним. У этой молекулы тороидный момент T_1 , а также дипольный M_1 и квадрупольный M_2 моменты равны нулю, т.е. мультипольное разложение спиновой плотности начинается с октупольного момента. Можно сказать, что магнитная молекула Fe_{30} , обладая высокой степенью спиновой упорядоченности и большим значением магнитных моментов составляющих ее атомов железа, является, вероятно, наиболее высокосимметричным из известных к настоящему времени магнитных тел.

Магнитный остов исследуемой молекулы составляют 30 ионов Fe^{3+} (спин каждого $s = 5/2$). Ионы железа находятся в вершинах икосидодекаэдра – одного из правильных Архимедовых многогранников (рис. 1). Данный многогранник имеет $\nu = 30$ вершин, $g = 32$ грани и $r = 60$ ребер. Отметим, что для икосидодекаэдра выполняется теорема Эйлера, связывающая количество вершин (ν), ребер (r) и граней (g) правильных многогранников ($\nu + g - r = 2$) [1]. Грани икосидодекаэдра представлены 20 треугольниками и 12 пятиугольниками. Ближайшие ионы железа взаимодействуют друг с другом антиферромагнитно посредством косвенного обмена, приводящего к отсутствию у молекулы результирующего спина ($S = 0$) в основном состоянии без внешнего магнитного поля [7]. В нашей работе были вычислены координаты вершин икосидодекаэдра и каждой вершине был поставлен в соответствие спин определенного (одного из трех возможных, лежащих в одной плоскости под углом 120° друг к другу) направления. При этом

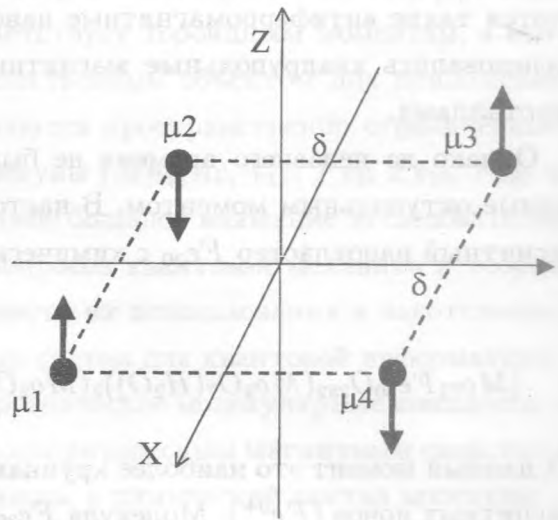
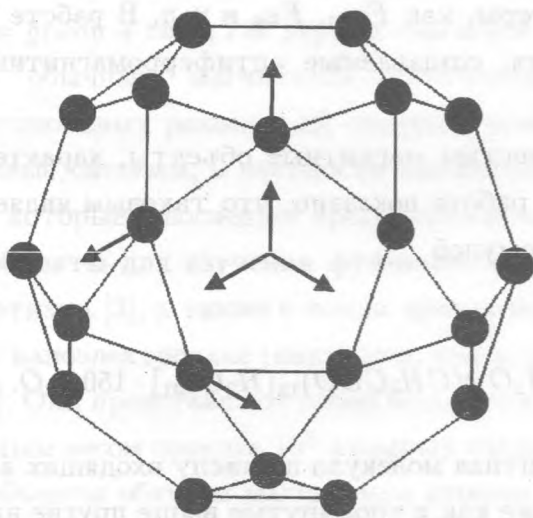


Рис. 1. Схематичное изображение молекулы Fe_{30} . В каждой из вершин икосидодекаэдра находится один ион Fe^{3+} . Рисунок выполнен на математическом пакете Maple V. Ось Oz перпендикулярна плоскости рисунка и направлена на нас.

Рис. 2. Модель элементарного магнитного октуполя – четыре магнитных момента равной величины ($\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = \mu_4 = \mu$), находящиеся в вершинах квадрата стороной δ . Имеются две отличные от нуля компоненты октупольного момента $M_{123} = M_{132} = 4\delta^2\mu$.

использовалось особое геометрическое симметричное свойство икосидодекаэдра – его "трехцветность" [7]. Многогранник называют трехцветным, если его вершины можно покрасить тремя разными цветами при условии, что цвета соседствующих вершин разные. Направления спинов были выбраны в плоскости, содержащей одну из пятиугольных граней икосидодекаэдра. Ось Oz декартовой (сферической) системы координат была выбрана перпендикулярно плоскости, содержащей спины.

Как показал расчет по формулам (2) для указанной конфигурации спинов железа в молекуле Fe_{30} первыми ненулевыми компонентами в магнитном мультипольном разложении обладает октупольный магнитный момент.

Результаты вычислений представлены в таблицах 1 и 2. Как видно из табл. 1, третья часть компонент октупольного момента в декартовой системе координат равна нулю. Это связано с удачным выбором системы координат – ось Oz направлена перпендикулярно плоскости спинов. Для выявления влияния осесимметричности молекулы на величину и количество отличных от нуля компонент октупольного магнитного мо-

мента он был рассчитан также и в сферической системе координат. Был найден ряд положений молекулы, при которых наибольшее количество компонент момента равно нулю, однако работа по их интерпретации еще не окончена.

Т а б л и ц а 1

Октупольный магнитный момент F_{e30} в декартовой системе координат
(величины компонент приведены в условных единицах)

α	β	γ	$m_{\alpha\beta\gamma}$	α	β	γ	$m_{\alpha\beta\gamma}$	α	β	γ	$m_{\alpha\beta\gamma}$
1	1	1	0.25	2	1	1	0.10	3	1	1	0.0
		2	0.24			2	0.31			2	0.0
		3	0.15			3	-0.19			3	0.0
	2	1	0.24		2	1	0.31		2	1	0.0
		2	0.09			2	-0.10			2	0.0
		3	-0.20			3	0.26			3	0.0
	3	1	0.15		3	1	-0.19		3	1	0.0
		2	-0.20			2	0.26			2	0.0
		3	-0.34			3	0.0			3	0.0

Т а б л и ц а 2

Октупольный магнитный момент в сферической системе координат
(условные единицы)

[m]	Re($M_{3,m}$)	Im($M_{3,m}$)
-3	0.79	1.16
-2	-0.32	1.10
-1	1.23	-0.12
0	-1.25	0.0
1	1.23	0.12
2	-0.32	-1.10
3	0.79	-1.16

Для более глубокого понимания природы и проявлений магнитного октупольного момента мы предлагаем рассмотреть элементарный магнитный октуполь, составленный из четырех магнитных моментов одинаковой величины, расположенных в вершинах

квадрата (рис. 2). Очевидно, что все компоненты как дипольного, так и магнитного квадрупольного моментов этой системы равны нулю. Как нетрудно увидеть из соотношения (1), отличными от нуля являются только две компоненты октупольного магнитного момента: $M_{123} = M_{213} = 4\delta^2\mu$, где μ – величина магнитного момента в каждой вершине квадрата. Отметим, что все моменты данной системы параллельны одной прямой, как и моменты ионов железа, входящих в состав молекулы Fe_{30} .

В данной работе показано, что в магнитной молекуле Fe_{30} в основном состоянии равны нулю все мультипольные моменты вплоть до октупольного. С этой точки зрения Fe_{30} представляет собой пример, по-видимому, наиболее симметричного распределения спиновой плотности из известных к настоящему времени объектов с сильным обменным взаимодействием между спинами. Вычислен первый отличный от нуля магнитный момент высокосимметричной молекулы Fe_{30} – октупольный магнитный момент, как в декартовой, так и в сферической системах координат. Осуществлен поиск системы координат, в которой от нуля отлично наименьшее количество компонент момента, его результаты в настоящий момент анализируются. Для придания наглядности физическому смыслу магнитного октупольного момента нами предложена модель элементарного магнитного октуполя.

Данная работа частично поддержана грантами РФФИ NN 01-02-17703, 02-02-17389.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Зельдович Я. Б. ЖЭТФ, **33**, 1531 (1957) [JETP, **6**, 1184 (1957)].
- [2] Кочин Н. Е. Векторное исчисление и начала тензорного исчисления. М., Наука, 1965.
- [3] Звездин А. К. Природа, **12**, 11 (2000).
- [4] Mueller A., Sarkar S., Shah S. Q. N., et al. Angew. Chem. Int. Ed. Engl., **38**, 3238 (1999).
- [5] Chiorescu I., Wernsdorfer W., Mueller A., et al. Phys. Rev. Lett., **4**, 3454 (2000).
- [6] Barbara B., Thomas L., Lioni F., et al. J. Magn. Magn. Mater., **200**, 167 (1999).
- [7] Axenovich M., Luban M. Phys. Rev. B., **63**, 100407(R) (2001).
- [8] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М., Наука, 1975.
- [9] Raab R. E. Mol. Phys., **29**, No. 5, 1323 (1975).

- [10] Dubovik V. M., Tugushev V. V. Phys. Reports, **187**, n. 4, 145 (1990).
- [11] Schmid Hans. Ferroelectrics, **252**, 41 (2001).
- [12] Ceulemans A., Chibotaru L. F., Fowler P. W. PRL, **80**, N 9, 1861 (1998).
- [13] Астров Д. Н., Боровик-Романов А. С., Ермаков Н. Б. и др. Письма в ЖЭТФ, **63**, N 9, 713 (1996).

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 11 сентября 2003 г.