

УДК 550.384

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИЧИН СХОДСТВА СПЕКТРОВ БЛОКИРУЮЩИХ ТЕМПЕРАТУР ХИМИЧЕСКОЙ И ТЕРМООСТАТОЧНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТЕЙ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

© 2019 г. В. П. Щербаков\*, Н. К. Сычева

ГО «Борок» ИФЗ им. О.Ю. Шмидта РАН, п. Борок, Ярославская область, Россия

\*E-mail: shcherbakovv@list.ru

Поступила в редакцию 27.12.2018 г.

Принята в печать 25.03.2019 г.

Выполнено численное моделирование методом Монте–Карло образования химической остаточной намагниченности (CRM) по механизму роста объемов от суперпарамагнитных (СПМ) до однодоменных (ОД) в ансамблях магнитостатически взаимодействующих частиц, термоостаточной намагниченности (TRM) и экспериментов определения палеонапряженности по методам Телье–Коэ и Вилсона–Буракова. Полученные результаты согласуются с гипотезой [Smirnov, Tarduno, 2005], о том, что подобие спектров блокирующих температур  $T_b$  CRM и TRM может быть обусловлено узостью интервала блокирующих температур  $T_b$  TRM и CRM, с поправкой, что подобие может наблюдаться лишь на части полного интервала спектра  $T_b$  при условии сосредоточения там значительной части полной интенсивности CRM. Аналитический разбор случая невзаимодействующих частиц (очень малая концентрация зерен) показал, что (квази)линейность диаграмм Арай–Нагата в этом случае объясняется наличием плато на кривых производной  $dCRM/dpTRM$  ( $pTRM$  – парциальная термоостаточная намагниченность), возникающей при узком спектре блокирующих температур. По результатам численных экспериментов можно предположить, что при концентрации частиц, превышающей 0.2%, магнитостатическое взаимодействие приводит к практически полной линейности диаграммы Арай–Нагата на значительном интервале полного спектра блокирующих температур CRM. Вместе с тем, на остальном температурном интервале как диаграммы Арай–Нагата, так и кривые зависимости CRM (TRM) оказываются существенно вогнутыми, что говорит об отсутствии подобия спектров блокирующих температур CRM и TRM. Анализ экспериментальных данных показал определенное их сходство с результатами моделирования, но вместе с тем ясно продемонстрировал и их заметное отличие ввиду значительных различий в условиях численных и лабораторных экспериментов.

*Ключевые слова:* Метод Монте–Карло, метод Телье–Коэ, метод Вилсона–Буракова, магнитостатическое взаимодействие, химическая остаточная намагниченность.

DOI: <https://doi.org/10.31857/S0002-33372019587-103>

### ВВЕДЕНИЕ

Задачи палеомагнетизма решаются путем расшифровки информации о характеристиках геомагнитного поля, содержащейся в векторе естественной остаточной намагниченности образцов (NRM), такая расшифровка возможна лишь при условии сохранности первичной намагниченности образцов исследуемых горных пород. По этой причине при интерпретации палеомагнитных данных всегда возникает проблема их достоверности. При этом для целей надежного определения на вулканических породах

палеонапряженности и палеонаправлений, кроме хорошей сохранности остаточной намагниченности и первичности выделяемого сигнала, требуется доказать еще и термоостаточную природу (TRM) естественной остаточной намагниченности пород (NRM). В то же время хорошо известно, что в природных условиях стабильная и значительная по величине остаточная намагниченность может возникать в горных породах и в результате физико-химических изменений магнитных минералов – носителей остаточной намагниченности.

Химической остаточной намагниченностью (CRM) принято называть остаточную намагниченность, возникающую при длительной выдержке образца во внешнем поле  $\mathbf{B}$  при некоторой постоянной температуре  $T_{\text{CRM}}$  вследствие минералогических изменений [Draeger et al., 2006]. Другое ее название – кристаллизационная намагниченность [Doell, 1957]. Возможны два физических механизма возникновения CRM: а) в результате роста размера ферри (ферро)-магнитных суперпарамагнитных (СПМ) зерен, когда при выдержке при некоторой температуре  $T_{\text{CRM}}$  и в присутствии внешнего поля  $\mathbf{B}$  их объем вырастает до блокирующего объема  $v_b$  (модель Хайга [Хайг, 1962]); б) в результате роста температуры Кюри  $T_c$  вследствие окисления титаномагнетитовых зерен.

В работе [Smirnov, Tarduno, 2005] авторы предположили, что термоостаточная намагниченность TRM и CRM могут иметь схожую температурную стабильность, если обе намагниченности имеют узкий интервал блокирующих температур  $T_b$ . Если это так, то они будут обладать похожими спектрами  $T_b$ , и тем самым будут плохо различимы с точки зрения экспериментов по методикам Телье–Коэ или Вилсона–Буракова, давая в итоге ложные определения палеонапряженности. Однако с теоретической точки зрения эта гипотеза встречает возражения. Действительно, еще в книге [Stacey, Vanerjee, 1974], в рамках модели [Хайг, 1962] была показана справедливость соотношения:

$$\frac{\text{CRM}}{\text{TRM}} = \frac{K(T_b) M_s(T_{\text{CRM}})}{K(T_{\text{CRM}}) M_s(T_b)},$$

где:  $M_s$  – спонтанная намагниченность;  $T_b$  – блокирующая температура частиц ансамбля при образовании TRM;  $K$  – константа анизотропии;  $T_{\text{CRM}}$  – температура кристаллизации. Принимая для простоты, что константа анизотропии определяется, главным образом, анизотропией формы  $K = N_d M_s^2 / 2$ , где  $N_d$  – параметр анизотропии, получим:

$$\text{CRM/TRM} = M_s(T_b) / M_s(T_{\text{CRM}}) < 1, \quad (1)$$

поскольку, очевидно, что  $T_{\text{CRM}} < T_b$  и, стало быть,  $M_s(T_b) < M_s(T_{\text{CRM}})$ . (На самом деле, неравенство (1) справедливо и в общем случае [Stacey, Vanerjee, 1974]). Из соотношения (1) следует, что отношение CRM/TRM падает с ростом  $T_b$ , то есть с ростом коэрцитивности и/или объема, а это означает, что теоретически спектры  $T_b$  для TRM и CRM, приобретенной по первому механизму, неидентичны [Shcherbakova et al., 2014].

Однако необходимо отметить, что соотношение (1) получено для невзаимодействующих однодоменных (ОД) частиц, а как показали теоретические расчеты [Афремов, Харитонский, 1988; Shcherbakov et al., 1996], интенсивность CRM существенно определяется магнитостатическим взаимодействием между зернами, средняя величина которого пропорциональна  $M_s$  и относительной объемной концентрации ферромагнетика  $c$  ( $\approx 5 M_s c$ ). В результате взаимодействие приводит к заметному снижению интенсивности как CRM, так и TRM. Эти выводы были подтверждены и результатами численного моделирования процессов образования CRM (по первому механизму) и TRM (на уже выросших до конечного объема зернах), выполненного уже с учетом магнитостатического взаимодействия [Shcherbakov et al., 1996; Щербаков и др., 2017].

В работе [Щербаков и др., 2017] было выполнено численное моделирование экспериментов определения палеонапряженности по методу Телье на ансамбле взаимодействующих ОД частиц, приобретших CRM за счет роста их размера от СПМ до ОД. Результаты моделирования показали, что практически на всех диаграммах Араи–Нагата, построенных по результатам такого моделирования, можно выделить протяженный, очень близкий к линейному, участок, по которому можно определить «палеонапряженность»  $B_{\text{anc}}$ . Немаловажно отметить, что такой участок можно выделить и при моделировании экспериментов определения палеонапряженности по методу Телье на невзаимодействующих ОД зернах, что видимым образом находится в противоречии с соотношением (1). Подчеркнем, что линейность диаграммы Араи–Нагата в том или ином температурном интервале как раз и означает подобие в нем спектров  $T_b$ . Иными словами, данные компьютерного моделирования говорят в пользу справедливости гипотезы [Smirnov, Tarduno, 2005].

Такой же вывод о наличии квазилинейного участка на диаграммах Араи–Нагата был сделан и по ряду экспериментальных работ [Draeger et al., 2006; Грибов, 2015; 2016; 2017; Щербаков и др., 2017; Gribov et al., 2018]. Все эти эксперименты проводились на образцах, содержащих титаномагнетитовые (ТМ) зерна с  $T_c \approx 200$  °С при длительной выдержке при  $T_{\text{CRM}} \approx (350–530)$  °С. В настоящей работе мы предприняли новый цикл компьютерного моделирования образования CRM- и TRM-экспериментов определения палеонапряженности по методам Телье

и Вилсона–Буракова в системе взаимодействующих СПМ и ОД частиц с целью сравнения температурных интервалов, на которых наблюдается подобие спектров  $T_b$  при работе тем или иным методом, и выяснения возможных причин их возникновения.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ

Подробно методика моделирования приобретения TRM и CRM описана в статье [Щербаков и др., 2017]. Ниже для удобства читателя кратко излагаются необходимые для дальнейшего изложения сведения.

Пусть  $x_i$  – вероятность того, что магнитный момент  $i$ -й частицы  $\mathbf{m}_i = M_s v_i \boldsymbol{\mu}_i$  ориентирован параллельно ее легкой оси  $\mathbf{l}$ , направление которой выбрано так, чтобы произведение  $\mathbf{l} \cdot \mathbf{B}$  было  $\geq 0$ . Здесь:  $v_i$  – объем частицы;  $\boldsymbol{\mu}_i$  – единичный вектор, параллельный  $\mathbf{m}_i$ , т. е.  $\mathbf{m}_i = m_i \boldsymbol{\mu}_i$ ,  $m_i = M_s v_i$ . Тогда функция  $x(t)$  подчиняется известному кинетическому уравнению:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{x}{\tau_1} + \frac{1-x}{\tau_2}, \quad \tau_{1,2} \approx \tau_0 \exp(E_{b1,b2} / kT), \quad (2)$$

где:  $\tau_0 \approx 10^{-9}$  с – характерный период попыток преодоления потенциального барьера;  $\tau_1$  и  $\tau_2$  – времена релаксации для достижения равновесия в состояниях  $\mathbf{m} \uparrow \uparrow \mathbf{l}$  и  $\mathbf{m} \downarrow \downarrow \mathbf{l}$ , соответственно;  $t$  – время;  $k$  – постоянная Больцмана. В предположении доминирующей анизотропии формы и дипольного характера поля взаимодействия  $\mathbf{B}_{\text{int}}$ , действующего на частицу с магнитным моментом  $\mathbf{m}_i$ , имеем:

$$\left. \begin{aligned} E_{b1} \\ E_{b2} \end{aligned} \right\} = \mu_0 \frac{N_d M_s^2 v}{2} + \mu_0 \mathbf{m} \cdot (\mathbf{B} + \mathbf{B}_{\text{int}}),$$

$$\mathbf{B}_{\text{int}}(i) = \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N_p} \left( \frac{\mathbf{m}_j}{R_{ij}^3} - \frac{3\mathbf{R}_{ij} \cdot (\mathbf{m}_j \mathbf{R}_{ij})}{R_{ij}^5} \right), \quad (3)$$

где:  $M_s$  – спонтанная намагниченность;  $\mathbf{R}_{ij}$  – расстояние между  $i$ -й и  $j$ -й частицами. Всюду в дальнейших расчетах принималось  $M_s(T) = M_s(0)j_s(T)$ . Здесь  $j_s(T) = (1 - T/T_c)^d$  – относительная спонтанная намагниченность. Для магнетита  $d = 0.42$  [Dunlop, Özdemir, 1997]. Из (2) следует, что равновесное значение  $x = \tau_1 / (\tau_1 + \tau_2)$ , откуда равновесное значение намагниченности частицы есть  $2x - 1 = (\tau_1 - \tau_2) / (\tau_1 + \tau_2) = \tanh[\mathbf{m}_i (\mathbf{B} + \mathbf{B}_{\text{int}}) / kT]$ , в соответствии с общеизвестным выражением, получаемым из больцмановской статистики.

Если к системе дифференциальных и алгебраических уравнений (2) и (3) для совокупности  $N_p$  взаимодействующих частиц добавить еще и законы роста объема каждой индивидуальной частицы  $v_i = v_i(t)$ , то эта система решает, в принципе, задачу нахождения намагниченности ансамбля СПМ зерен:

$$M(t) = M_s(T) \sum_{i=1}^{N_p} v_i (2x_i - 1) \frac{\left( \mathbf{l} \cdot \frac{\mathbf{B}}{B} \right)}{L^3} =$$

$$= M_s(T) c \sum_{i=1}^{N_p} v_i (2x_i - 1) \frac{\left( \mathbf{l} \cdot \frac{\mathbf{B}}{B} \right)}{\sum_{i=1}^{N_p} v_i}, \quad (4)$$

где  $c$  – относительная объемная концентрация ферритмагнетика. Отметим, что величина  $M(t)$  является полной намагниченностью, то есть она включает в себя вклад как СПМ, так и уже заблокированных зерен с  $\tau_1$  и  $\tau_2 > t$ .

На практике, однако, для  $N_p \gg 1$  магнитостатически взаимодействующих частиц, такой подход представляется невозможной задачей даже для мощных вычислительных машин. По этой причине, как это часто происходит в таких сложных случаях, для моделирования процессов приобретения TRM и CRM в системе взаимодействующих одноосных ОД зерен был использован метод численного статистического моделирования Монте–Карло, в основе которого лежит использование случайных чисел для имитации различных вероятностных распределений.

При расчете рассматривался ансамбль  $N_p$  взаимодействующих зерен. Число  $N_p$  принималось максимально возможным при доступных вычислительных мощностях, конкретно,  $N_p = 5000$  для взаимодействующих и  $N_p = 50000$  для невзаимодействующих частиц. Пространственные координаты частиц для каждой конфигурации задавались посредством случайного их выбора (с процедурой исключения объема) в кубе размера  $L$ , выбранного таким образом, чтобы

выполнялось равенство  $\sum_{i=1}^{N_p} v_i = cL^3$ . Для каждой

частицы случайным образом задавались пространственная ориентация легкой оси и направление магнитного момента вдоль этой оси. При  $c \rightarrow 0$  магнитостатическим взаимодействием, очевидно, можно пренебречь, и в этом варианте численные расчеты намного упрощаются просто принятием условия  $c = 0$ .

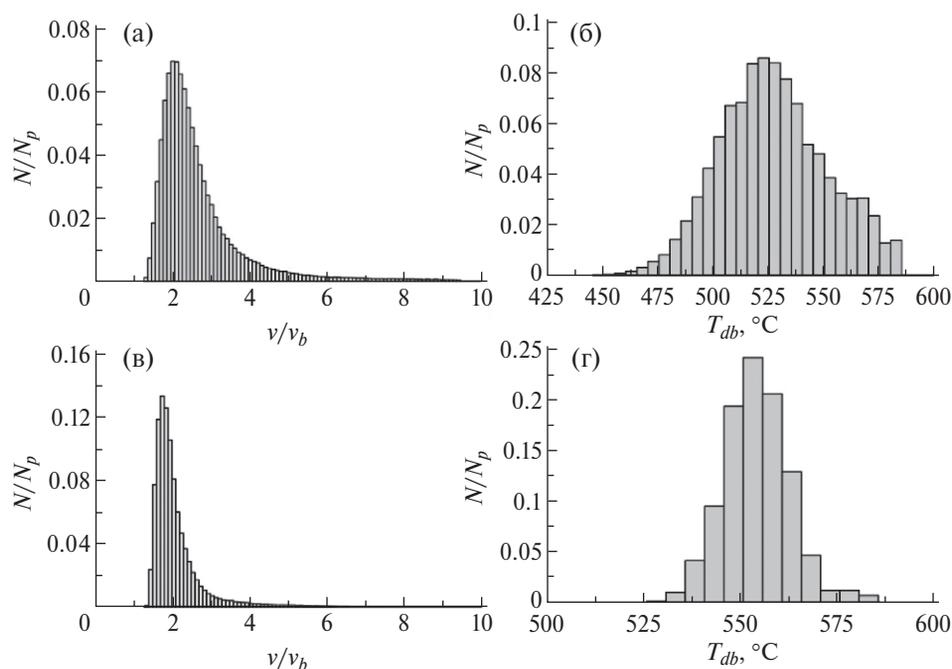
Моделирование методом Монте–Карло стохастических процессов, описываемых вероятностными формулами типа (2), заключается

в генерации последовательности случайных событий, рассматриваемых начиная с  $t=0$  с некоторым временным интервалом  $\Delta t$ . Для этого сначала заметим, что на коротком интервале времени можно пренебречь изменением объема частицы. Тогда, полагая  $\tau_1$  и  $\tau_2$  постоянными величинами и решая (2) при условии  $x(0) = 1$ , получаем:

$$x(t) = \exp\left(-\frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2}\right) + \frac{\tau_1}{\tau_1 + \tau_2} \left(1 - \exp\left(-\frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2}\right)\right). \quad (5)$$

Затем программным генератором псевдослучайных чисел вырабатывается число  $r$  в интервале  $(0,1)$ . Если  $r < x_i(\Delta t)$ , момент не изменяется, но если  $r > x_i(\Delta t)$ ,  $\mathbf{m}$  переворачивается. Продолжительность временного интервала  $\Delta t$  согласно оригинальной версии метода Монте–Карло (схема Метрополиса) должна быть меньше времен релаксации  $\tau_1$  и  $\tau_2$ . Следуя этому, при каждом следующем испытании Монте–Карло полагалось  $\Delta t = \tau_{\min}/2$ , где  $\tau_{\min}$  – минимальное время релаксации, рассчитанное по всем частицам. Для сокращения времени счета процедура Монте–Карло выполнялась для частиц ансамбля, времена релаксации которых превышали минимальное  $\tau_{\min}$  не более, чем в 100 раз, в противном случае частица считалась заблокированной,

и ее магнитный момент не изменялся. Расчеты проводились при температуре кристаллизации  $T_{\text{CRM}} = 400$  °С с начальным размером частиц 34–37 нм и  $T_{\text{CRM}} = 500$  °С с начальным размером частиц 44–47 нм. Такой спектр размеров частиц был выбран для того, чтобы на лабораторных масштабах времени частицы были суперпарамагнитными с временем релаксации (0.1–10) секунд, при этом время релаксации рассчитывалось согласно (2), (3), где для простоты расчета принималось  $\mathbf{V}_{\text{int}} = 0$  (поскольку в нашем приближении  $mB/kT < 1$ , и в этом случае слагаемыми с  $B$  в формулах (2), (3) можно пренебречь). По ходу численного эксперимента размер каждой частицы случайно изменялся от цикла к циклу согласно соотношению  $d = (\Delta d_0/t_0) \cdot \Delta t \cdot \text{random}$ , где  $\text{random}$  – случайное число от 0 до 1,  $t_0 = 86\,400$  с,  $\Delta d_0 = 15$  нм. Таким образом, максимально возможный прирост размера частицы за одни сутки составлял 15 нм при «длительности» всего «эксперимента»  $t_1$  от 3 до 10 суток, с тем, чтобы на конечном этапе время релаксации было не менее одного года. Заметим, что при  $T_{\text{CRM}} = 400$  °С и  $N_d = 1$  время релаксации 1 год имеет частица размером 43 нм, т. е. при начальных размерах 34–37 нм частице достаточно вырасти всего на 6–9 нм, чтобы стать надежно заблокированной на интервале времени в несколько суток. На рис. 1 представлены спектры



**Рис. 1.** Спектры объемов частиц после образования CRM (а), (в) и спектры деблокирующих температур (б), (г): (а), (б) – для температуры кристаллизации  $T_{\text{CRM}} = 400$  °С; (в), (г) – для  $T_{\text{CRM}} = 500$  °С. За единицу объема принят объем частицы с  $T_b = T_{\text{CRM}}$ . Статистика приведена для случая не взаимодействующих частиц для 50 Монте–Карло-экспериментов (т. е. общее число частиц в данном случае  $N_p = 2\,500\,000$ ).

объемов частиц после образования CRM и спектры деблокирующих температур.

Для численных расчетов интенсивность намагниченности ансамбля удобно записать в виде:

$$M(t) = M_s(T) c j, \quad j = \left( \sum_{i=1}^{i=N_p} (\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{V}) \cdot v_i / B \right) / \sum_{i=1}^{i=N_p} v_i, \quad (6)$$

где  $j$  – относительная намагниченность, вычисляемая как сумма по  $i$  произведений косинуса угла между вектором магнитного момента  $i$ -й частицы  $\mathbf{m}_i = M_s v_i \boldsymbol{\mu}_i$  и вектором внешнего поля  $\mathbf{V}$  на объем  $i$ -й частицы  $v_i$ , деленная на сумму объемов всех частиц ансамбля. Нетрудно видеть, что запись (4) есть дискретный аналог формулы (3), поскольку для ансамбля, содержащего бесконечное число частиц с легкой осью  $I_i$  (направленной параллельно либо антипараллельно  $\boldsymbol{\mu}_i$ ) и объемом  $v_i$ , средняя величина случайной

переменной  $(\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{V})/B$  как раз и есть функция  $(2x_i - 1) (I \cdot \mathbf{V}/B)$ .

Результаты численного моделирования процесса образования CRM представлены на рис. 2 и рис. 3 для  $T_{CRM} = 400$  и  $500$  °С, соответственно, и различных значений  $c$ . Усреднение проведено по числу вариантов от 50 (для не взаимодействующих частиц) до 70–100 (при учете взаимодействия). Для определения среднего по всем экспериментам применялась интерполяция рядов данных  $B$ -сплайнами с использованием процедур математической библиотеки IMSL для Фортрана. Как уже подчеркивалось выше,  $M(t)$  включает в себя вклад СПМ зерен, что проиллюстрировано на рис. 2 и рис. 3 тонкими линиями, представляющими кривые относительного числа переворотов частиц в единицу времени. Отметим, что частота переворотов ведет себя зеркально по отношению к поведению

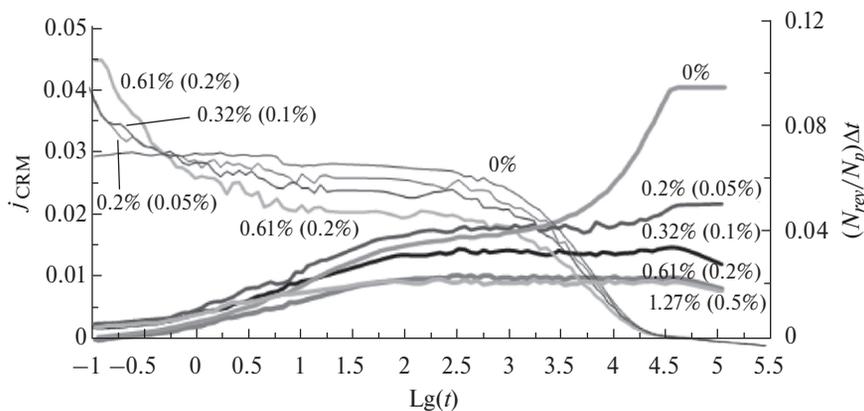


Рис. 2. Результаты численного моделирования методом Монте–Карло. Кинетика приобретения  $j[\lg(t)]$  в ансамбле ОД зерен в поле  $B = 80$  А/м при различных значениях относительной объемной концентрации ферримagnetика  $c$  для температуры кристаллизации  $T_{CRM} = 400$  °С. Тонкими линиями нарисованы графики отношения числа переворотов частиц в секунду к общему числу частиц в зависимости от времени (правая ось ординат). Цифры при кривых дают объемную концентрация частиц после завершения их роста, в скобках приводится начальная концентрация.

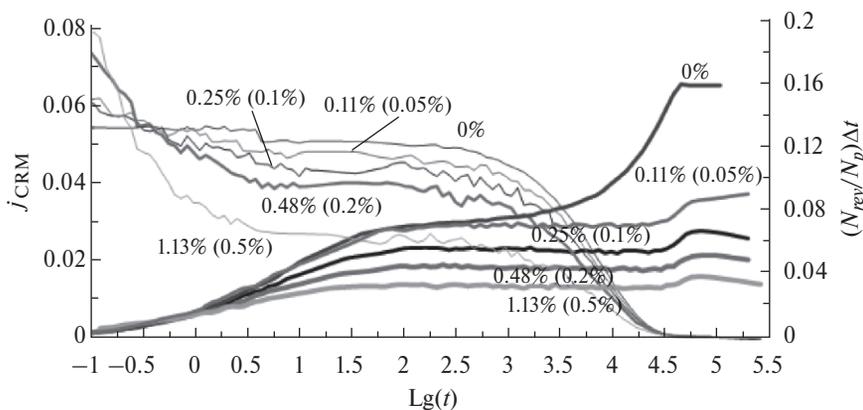
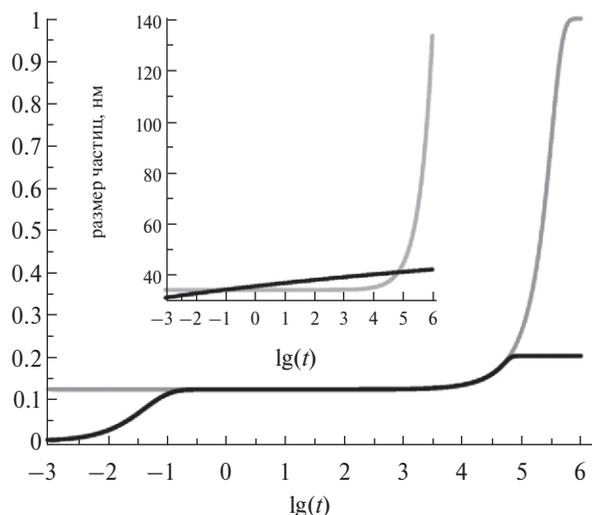


Рис. 3. То же самое, что и на рис. 2, но для температуры кристаллизации  $T_{CRM} = 500$  °С.

$j(t)$  и на финальном этапе расчетов, когда частицы блокируются, число переворотов, естественно, падает до нуля.

При взгляде на кривые намагничивания  $j(t)$  бросается в глаза их неожиданно немонокотное поведение со временем, хорошо наблюдаемое для невзаимодействующих частиц ( $c = 0\%$ ) и в какой-то мере проявляющее себя при начальной концентрации  $0.05\%$  (рис. 2 и рис. 3). Действительно, вначале мы видим их быстрый рост на интервале от 0 до  $\approx 100$  сек., затем стагнацию (медленный рост), продолжающуюся до (3–4) тыс с. Этот этап сменяется новым ростом  $j$ , совпадающим с падением числа переворотов частиц вплоть до их полной блокировки и заканчивающимся, вследствие этого, окончательной стабилизацией  $j$  на конечном этапе моделирования, что соответствует стадии формирования CRM.

Для понимания физических причин такого поведения нормированной намагниченности мы проанализировали численное решение уравнения (2) для  $x(t)$  для невзаимодействующих частиц ( $B_{int} = 0$ ) при начальном условии  $x(0) = 1/2$ , предполагая, что рост размера частиц  $d$  со временем происходит по закону  $d = a_0 + bt$ . Пример такого расчета приведен на рис. 4, на котором ясно видны те же 4 стадии эволюции величины намагниченности со временем.



**Рис. 4.** Серая линия – зависимость намагниченности  $j(t)$ , рассчитанной при следующих параметрах:  $b = 10^{-4}$  нм/сек,  $a_0 = 34$  нм. Черная линия маркирует величину CRM после блокировки магнитного момента частиц. На врезке показана зависимость размера образца (серая линия) и блокирующего размера (черная линия) от времени  $t$ . Пересечение этих кривых соответствует моменту блокировки магнитного момента частиц.

Очевидно, быстрый первоначальный рост  $j(t)$  обусловлен тем, что в начале расчета частицы полагались суперпарамагнитными ( $v \ll v_b$ , рис. 3) с нулевой суммарной исходной намагниченностью ( $x = 0.5$ ), поэтому в присутствии ненулевого внешнего поля  $\mathbf{B}$  намагниченность ансамбля  $2x - 1$  быстро достигла равновесной величины  $(\tau_1 - \tau_2) / (\tau_1 + \tau_2)$ . Заметим, однако, что длительность этого процесса (время релаксации) зависит от первоначального размера частицы и, как показывает расчет, если при  $a_0 = 38$  нм  $\tau_1$  (и  $\tau_2$ )  $\approx 100$  с, то уже при  $a_0 = 34$  нм этот процесс занимает всего 0.1 с. Дальнейшая стагнация  $j(t)$  вплоть до  $t \approx 10^4$  с обусловлена медленным ростом размеров зерен на этом интервале времени (врезка к рис. 4), так что равновесное значение намагниченности ансамбля (серая линия) практически не меняется со временем. Но при  $t \approx 10^4$  с начинается значительный рост объема частиц, что отражается в росте равновесного значения намагниченности  $j$  (серая линия на рис. 4). Однако рост размера частиц, естественно, приводит к тому, что их объем сначала сравнивается (при  $t \approx 10^{4.75}$  с), а затем и превышает блокирующий объем  $v_b$  (врезка к рис. 4), в результате чего происходит фиксация CRM (черная линия на рис. 4). Выражение для блокирующего объема здесь было получено согласно известному выражению [Dunlop, Özdemir, 1997]:

$$v_b = \frac{2 \ln(t / \tau_0) k T}{\mu_0 N_d M_s^2}. \quad (7)$$

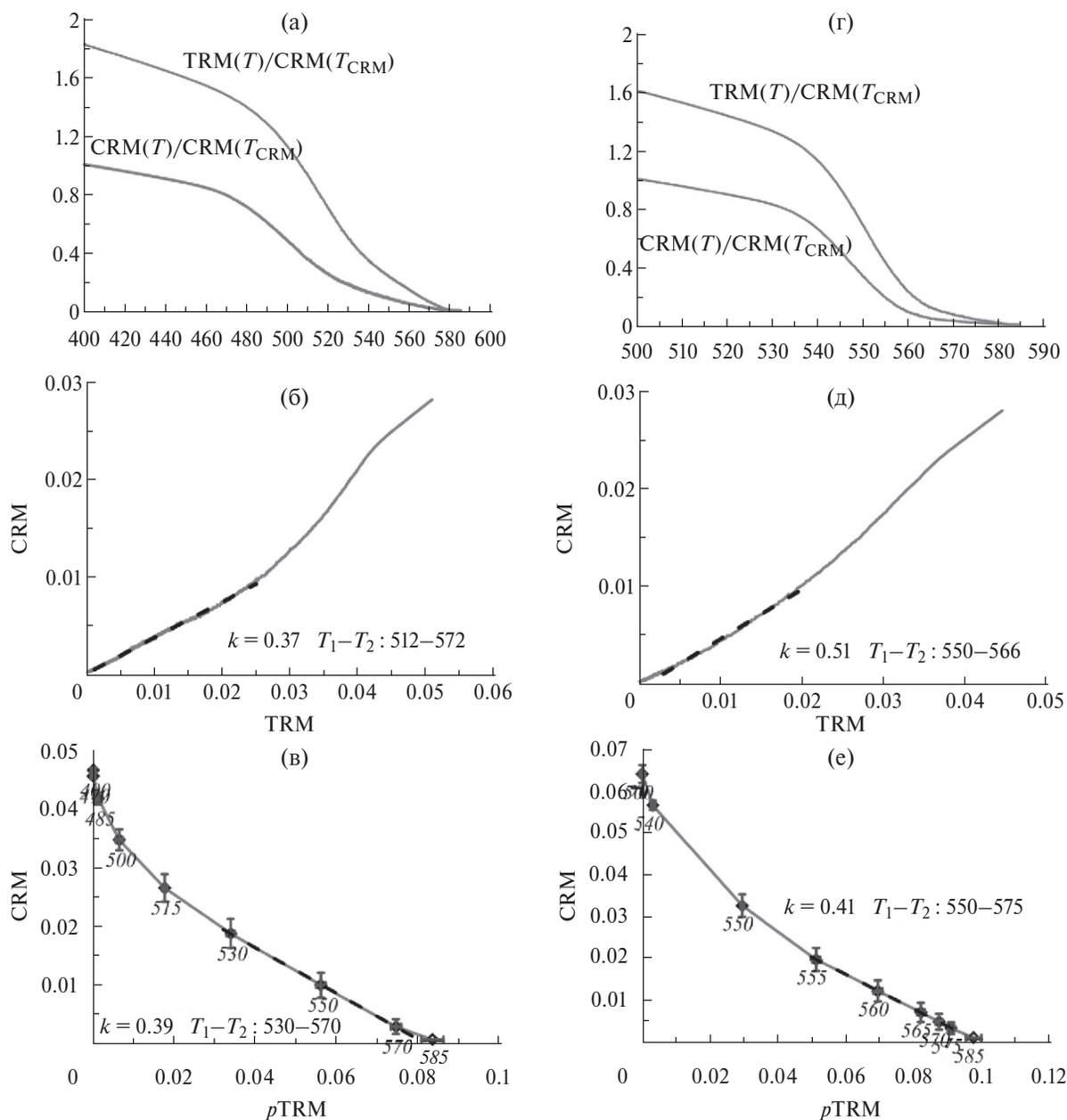
#### ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАЛЕОНАПРЯЖЕННОСТИ ПО МЕТОДАМ ТЕЛЬЕ–КОЭ И ВИЛСОНА–БУРАКОВА

Для оценки степени сходства температурной стабильности CRM и TRM в ансамблях взаимодействующих частиц нами проведено сравнение их спектров блокирующих температур путем численного моделирования экспериментов определения палеонапряженности методами Вилсона–Буракова и Телье–Коэ. Для этого вначале моделировалось приобретение CRM на ансамбле ОД частиц с последующим его «охлаждением» в поле 100 мТ от  $T_{CRM}$  до комнатной температуры  $T_r$  (образование  $pTRM$ ). Затем полученная остаточная намагниченность CRM +  $pTRM$  «терморазмагничивалась» при «нагреве» ансамбля до температуры Кюри магнетита  $T_c = 585$  °С.

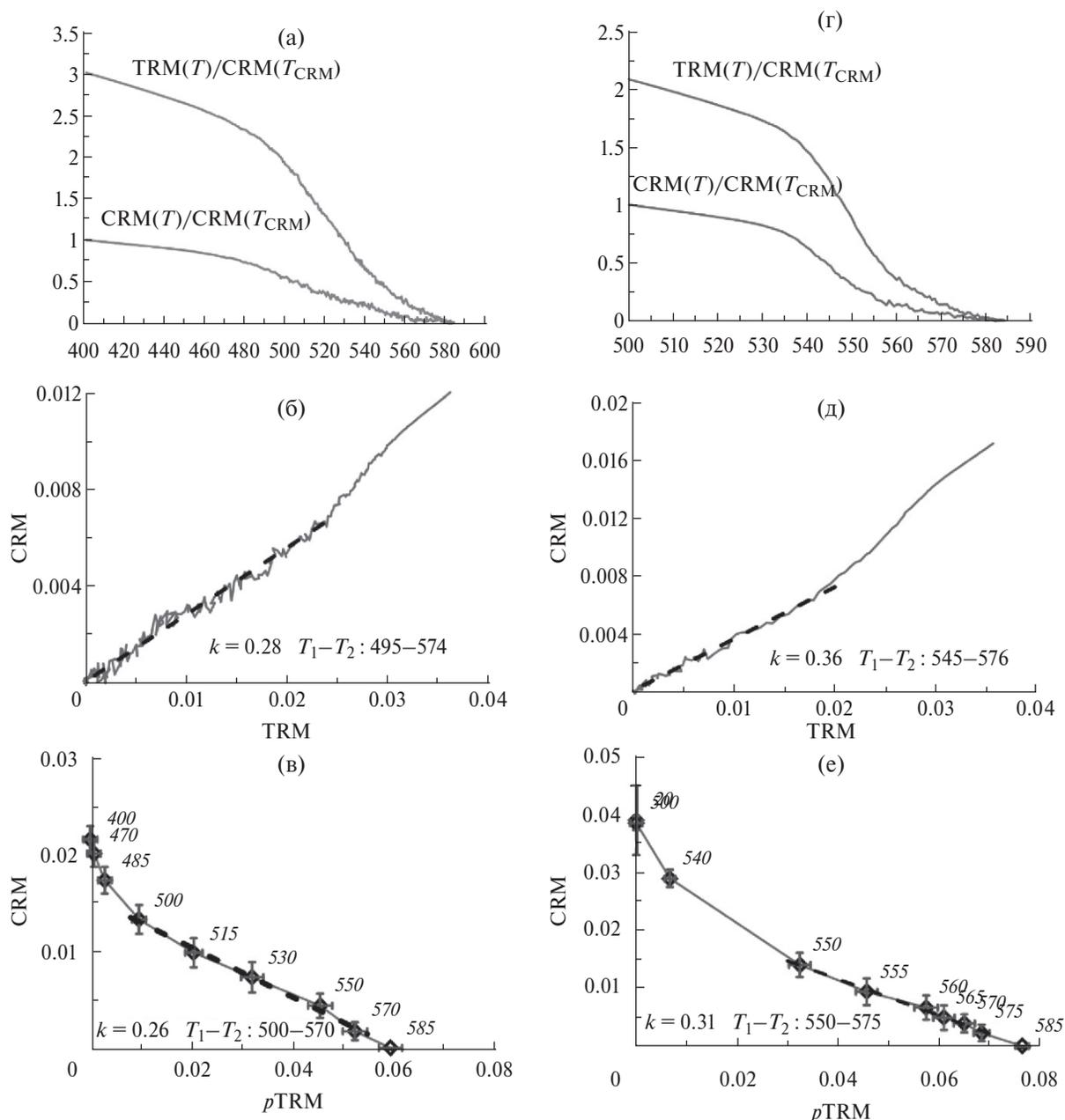
Образование и «терморазмагничивание» TRM имитировалось путем «охлаждения» ансамбля в поле 100 мТ от  $T_c$  до  $T_r$  с последующим «нагревом» до  $T_c$ . Сравнение этих термокривых и составляет суть метода Вилсона–Буракова.

Моделирование экспериментов определения палеонапряженности по методу Телье–Коз

на TRM и CRM +  $p$ TRM проводилось по схеме, описанной в работе [Щербаков и др., 2017]. Каждый численный эксперимент включал в себя 9 парных «нагревов–охлаждений», по результатам которых строились диаграммы Арай–Нагата. Результаты численных экспериментов показаны на рис. 5–рис. 9 при значениях



**Рис. 5.** Результаты численного моделирования для не взаимодействующих частиц ( $c=0\%$ ): (а), (б), (в) –  $T_{CRM} = 400\text{ }^{\circ}\text{C}$ ; (г), (д), (е) –  $T_{CRM} = 500\text{ }^{\circ}\text{C}$ ; (а) и (д) – кривые терморазмагничивания CRM (нижняя кривая) и TRM (верхняя кривая); (б) и (д) – метод Вилсона; (в) и (е) – метод Телье. Для построения графиков использованы усредненные данные по 50 Монте–Карло–экспериментам. Все графики приведены только на интервале от температур выше  $T_{CRM}$  до  $T_c$ , поскольку ниже  $T_{CRM}$  как CRM, так и TRM не изменяются по величине. Величина  $k$ , приведенная на графиках, есть  $k = B_{anc}/B$ . Ошибки расчета величин CRM и TRM на диаграмме Арай–Нагата укладываются в размер квадрата, представляющего соответствующую точку.



**Рис. 6.** То же, что и на рис. 5, но для взаимодействующих частиц ( $c = 0.2$  (0.05)%,  $T_{CRM} = 400$  °C и  $c = 0.11$  (0.05)%,  $T_{CRM} = 500$  °C). Отрезки прямых вокруг точек на диаграмме Арай–Нагата представляют собой ошибки расчета соответствующих точек.

относительной объемной концентрации  $c = 0, 0.2, 0.32, 0.61, 1.27\%$  ( $T_{CRM} = 400$  °C) и  $0\%, 0.11\%, 0.25\%, 0.48\%, 1.13\%$  ( $T_{CRM} = 500$  °C). Диаграммы (а) и (г) на всех этих рисунках дают стандартное представление метода Вилсона–Буракова путем сопоставления кривых терморазмагничивания CRM ( $T$ ) (нижняя кривая) и TRM ( $T$ ) (верхняя кривая), в то время как диаграмма {CRM, TRM} на рис. 6а, 6б и 6д построена по аналогии с методикой Телье путем построения непрерывной

зависимости CRM (TRM), где величины CRM и TRM отвечают текущей температуре  $T$ . Такая методика представления результатов метода Вилсона–Буракова была недавно предложена в работе [Muxworthy et al., 2011], и она имеет то преимущество, что на ней наглядно видны участки с подобными спектрами  $T_b$ , отвечающие прямой зависимости CRM (TRM). Поскольку одной из задач данного исследования является как раз выяснение степени подобия спектров

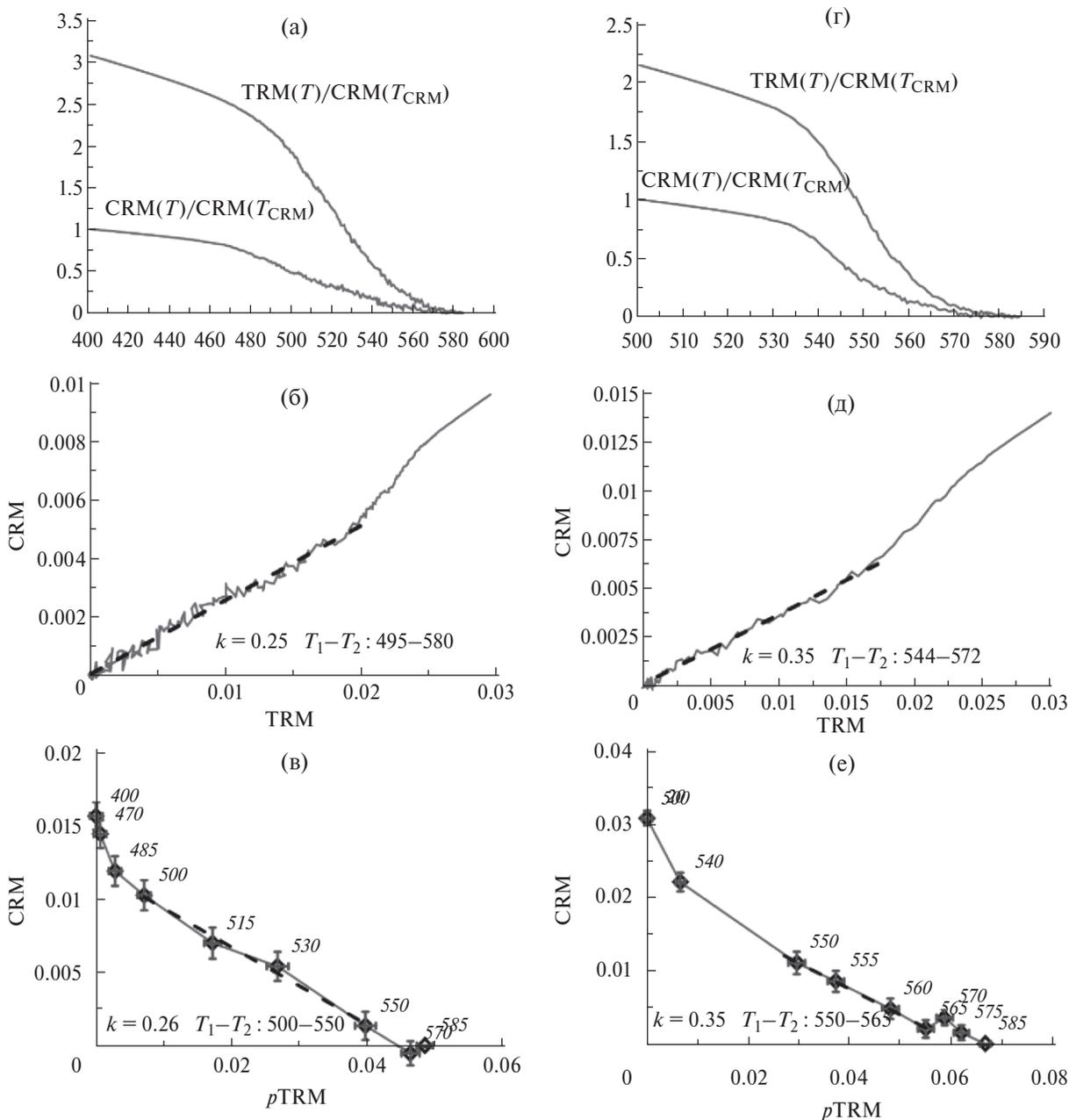


Рис. 7. То же, что и на рис. 6, но при  $c = 0.32$  (0.1)%,  $T_{CRM} = 400^\circ\text{C}$  и  $c = 0.25$  (0.1)%,  $T_{CRM} = 500^\circ\text{C}$ .

CRM и TRM, такие диаграммы были построены для всех просчитанных случаев с целью обнаружения и фиксации таких прямолинейных участков.

Как видно из рис. 5–рис. 9, на всех диаграммах {CRM, TRM}, действительно, присутствуют прямолинейные участки (обозначены пунктирными линиями) в области температур, нижняя граница которой лежит заметно выше температуры образования CRM, так что область подобия спектров сдвинута в сторону  $T_c$  и занимает достаточно узкий температурный интервал ( $T_1, T_2$ ) шириной

от 12 до 60 °C. На диаграмме {CRM, TRM} это составляет примерно половину ее полной длины, что позволяет выполнить формальное определение величины древнего поля (соответствующие величины приведены на диаграммах). Вместе с тем, на всем остальном температурном интервале кривая CRM (TRM) оказывается существенно выгнутой, что говорит об отсутствии здесь подобия спектров.

На рисунках (в) и (е) представлены расчетные диаграммы Арай–Нагата {CRM,  $p\text{TRM}$ } и выполнено определение  $B_{anc}$  на том же

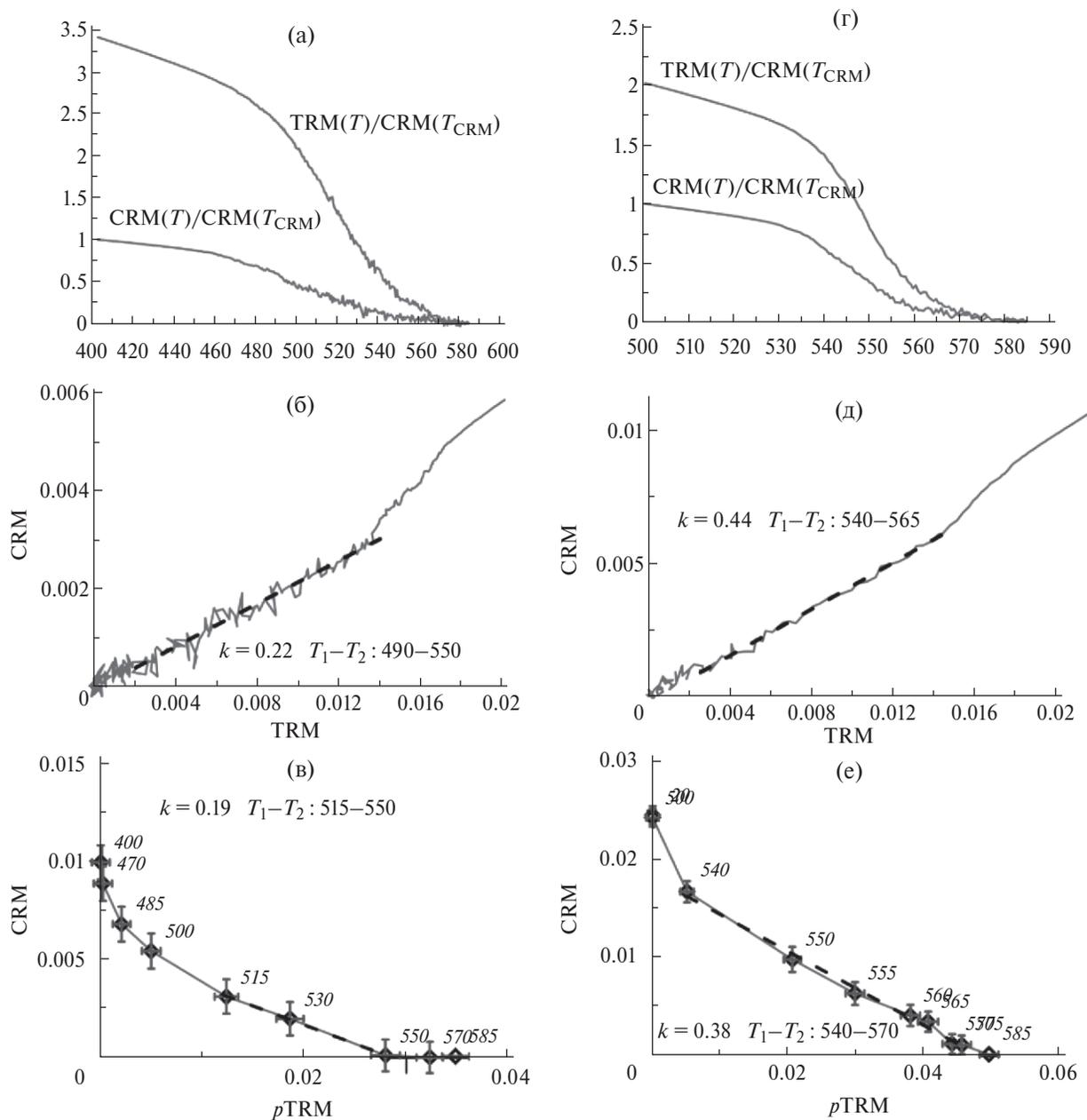


Рис. 8. То же, что и на рис. 6, но при  $c = 0.61$  (0.2)%,  $T_{CRM} = 400$  °C и  $c = 0.48$  (0.2)%,  $T_{CRM} = 500$  °C.

интервале ( $T_1, T_2$ ), где диаграммы Вилсона–Буракова демонстрируют подобие спектров. Как видно, во всех случаях наблюдается хорошее соответствие между этими методами как по величине коэффициента  $k$ , так и по интервалу прямолинейности диаграмм ( $T_1, T_2$ ).

Как видно из рис. 10, коэффициент определения  $k$  изменяется в пределах от 0.19 до 0.51 для различных методов и температур реакции, при этом не обнаруживается какой-либо однозначной зависимости  $k$  от концентрации  $c$ . В то время как при  $c < 0.4$  %

видна тенденция к уменьшению  $k$  при росте  $c$ , при больших  $c$  мы видим даже увеличение  $k$ , которое, скорее всего, следует связать с ошибками расчета, поскольку величина полей взаимодействия при таких концентрациях становится слишком большой и метод Монте–Карло начинает работать неустойчиво, результаты от цикла к циклу могут различаться очень сильно, так что в этом случае необходимо использование очень мощных вычислительных устройств, чего не было в нашем распоряжении.

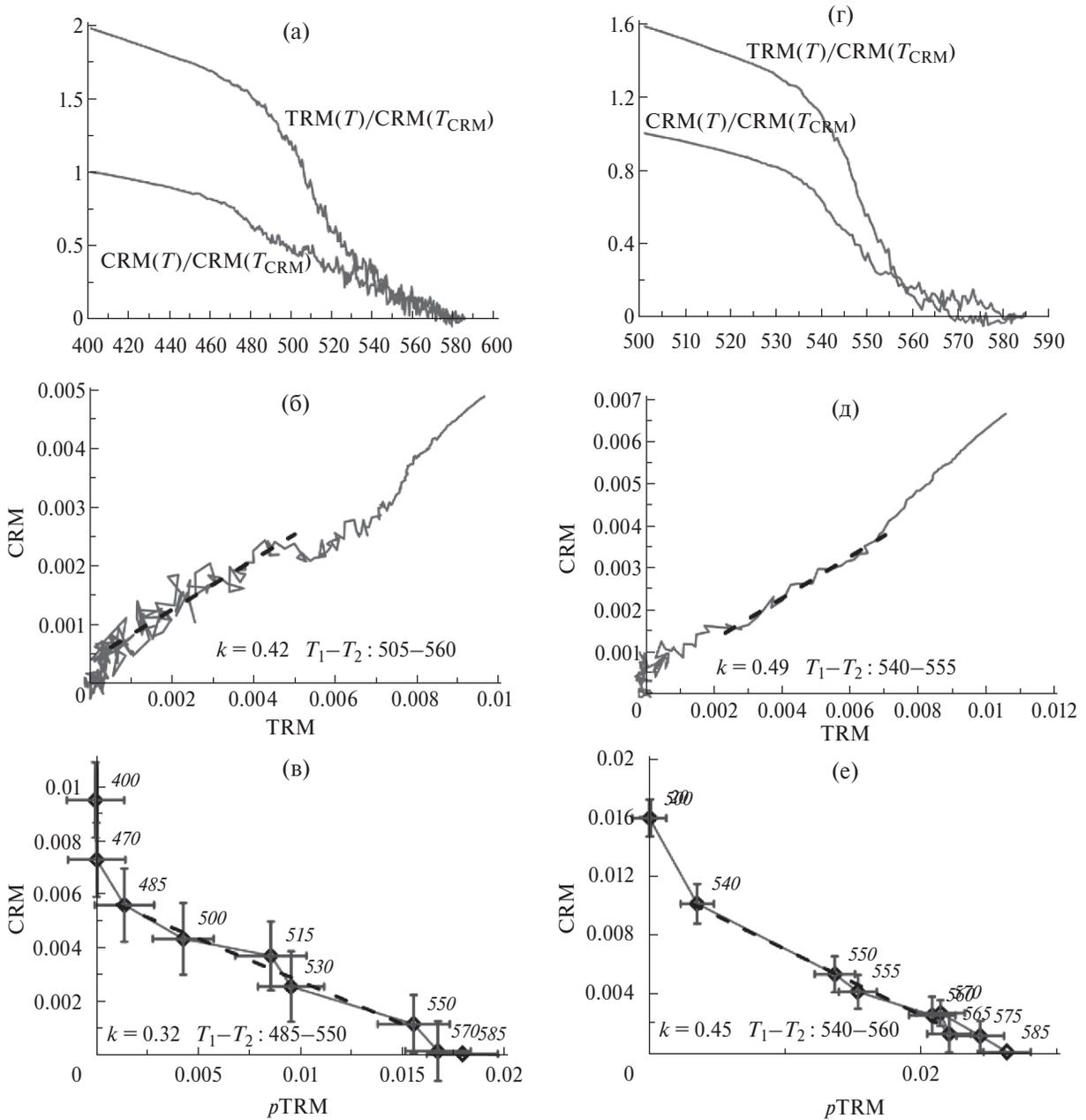


Рис. 9. То же, что и на рис. 6, но при  $c = 1.27$  (0.5)%,  $T_{CRM} = 400$  °C и  $c = 1.13$  (0.5)%,  $T_{CRM} = 500$  °C.

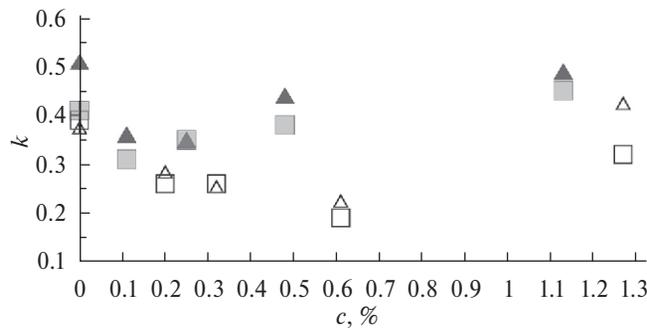


Рис. 10. Зависимость коэффициента линейной аппроксимации  $k$ , рассчитанный по диаграммам Арай–Нагата (квадраты) и Вилсона–Буракова, (треугольники). Пóлые фигуры –  $T_{CRM} = 400$  °C, заштрихованные –  $T_{CRM} = 500$  °C.

## ДИСКУССИЯ

Как видно из рис. 5–рис. 9, на всех диаграммах Араи–Нагата и Вилсона–Буракова есть область подобия спектров, по которой можно выполнить формальное определение  $B_{anc}$ , при этом его величина оказывается в 2–5 раз меньше реальной величины поля, используемого при моделировании (рис. 10). Этот вывод соответствует как имеющимся экспериментальным данным [Draeger et al., 2006; Грибов и др., 2015; 2016; 2017; Щербаков и др., 2017; Gribov et al., 2018], так и нашим предыдущим расчетам. Новизна представленных расчетов заключается в определении области подобия спектров, которая, как оказалось, занимает далеко не весь интервал  $(T_{CRM}, T_c)$ , а лишь достаточно узкий температурный интервал  $(T_1, T_2)$  шириной от 12 до 60 °C в окрестности  $T_c$ . На остальном же интервале CRM разрушается быстрее, чем TRM, что приводит к заметной вогнутости диаграмм Араи–Нагата и Вилсона–Буракова.

Из диаграмм, приведенных на рис. 5–рис. 9, можно также сделать вывод о том, что результаты, полученные для различных концентраций частиц (отражающих степень их магнитостатического взаимодействия), показывают их большое сходство, в смысле общего поведения, диаграмм Араи–Нагата и Вилсона–Буракова: на всех этих диаграммах отмечаются заметная их кривизна в начале этих диаграмм на интервале  $(T_{CRM}, T_1)$  и близкое к линейному поведение при увеличении температур нагрева до  $T_1$  и выше. При этом следует отметить, что на диаграммах для невзаимодействующих частиц некоторая кривизна заметна даже и на условно линейном интервале  $(T_1, T_2)$ .

Таким образом, наши расчеты согласуются с гипотезой [Smirnov, Tarduno, 2005] о том, что подобие спектров может быть обусловлено узостью интервала блокирующих температур TRM и CRM, но с той поправкой, что оно наблюдается лишь на части полного интервала спектра  $T_b$  CRM. Вопрос состоит в том, что же именно обеспечивает это подобие и какова его реальная степень, учитывая, что на интервале  $(T_1, T_2)$  сосредоточена все же значительная часть полной интенсивности CRM.

Для расчета кривизны диаграмм Араи–Нагата и Вилсона–Буракова хотя бы в случае невзаимодействующих частиц, когда вычисления можно провести в аналитическом виде, нами была рассчитана термокривая CRM  $(T)$ , созданная по механизму Хайга роста зерен с последующим расчетом термокривой TRM  $(T)$ , созданной на этом же ансамбле частиц, по следующей

схеме. Восприимчивость ансамбля неориентированных невзаимодействующих ОД СПМ частиц с объемом  $v$  есть:

$$\chi(T) = \frac{[m(T)]^2 n}{3kT} = \frac{[M_s(T)]^2 v c}{3kT}. \quad (8)$$

Принимая в (7) для определенности характерное время опыта  $t \approx 100$  с, получим стандартную оценку  $\ln(2t/t_0) = 50$ . Заменяя теперь в (8)  $v$  на  $v_b$  из (7) и учитывая рост  $M_s$  при охлаждении до  $T_0$ , найдем TRM =  $\frac{50cBj_s(T_0)}{N_d j_s(T_b)}$  [Shcherbakov

et al., 1996], где  $j_s(T) = M_s(T)/M_s(T_0)$  – приведенная спонтанная намагниченность. Распространяя это выражение на ансамбль частиц с функцией распределения по объемам  $f(v)$ , найдем для кривой терморазмагничивания:

$$\text{TRM}(T) = \frac{50cBj_s(T_0)}{3N_d} \int_{v_b(T)}^{\infty} \frac{f(v)}{j_s(T_b)} dv. \quad (9)$$

Заменяя здесь  $T_b$  на  $T_{CRM}$ , получим аналогичное выражение для кривой терморазмагничивания CRM  $(T)$ :

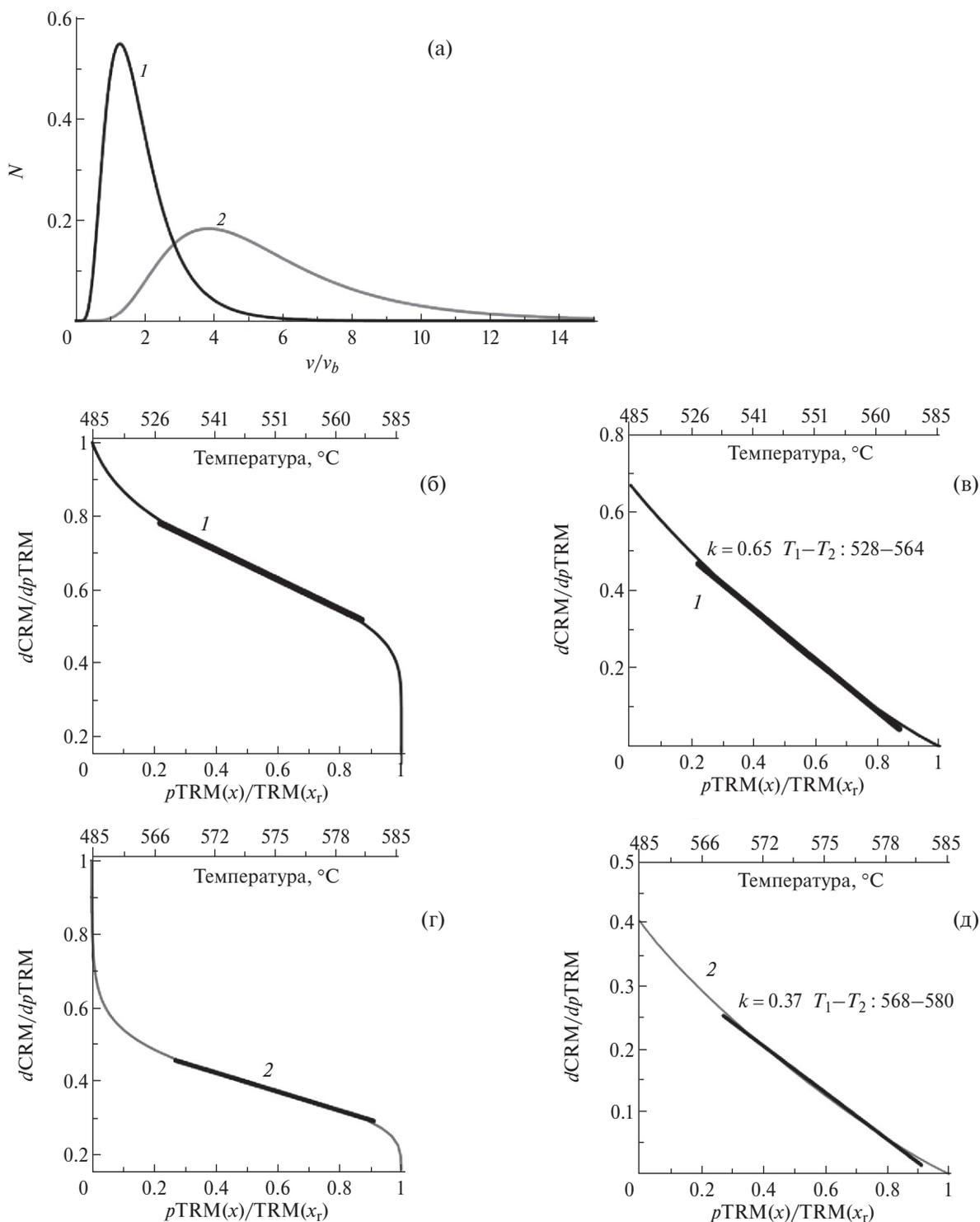
$$\text{CRM}(T) = \frac{50cBj_s(T_0)}{3N_d j_s(T_{CRM})} \int_{v_b(T)}^{\infty} f(v) dv \quad (10)$$

Из (9) и (10) следует, что производная диаграммы Араи–Нагата:

$$\begin{aligned} \frac{d\text{CRM}}{dp\text{TRM}} &= \frac{d\text{CRM}(T)/dT}{-d\text{TRM}(T)/dT} = \\ &= \frac{-j_s(T)}{j_s(T_{CRM})} = \frac{-(1-T/T_c)^d}{(1-T_0/T_c)^d}, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $p\text{TRM}(T) = \text{TRM}(T_b) - \text{TRM}(T)$ . Этот результат, разумеется, находится в полном соответствии с формулой (1), записанной для отдельного зерна с блокирующей температурой  $T_b$ . Любопытно, что производная (11), представленная как функция  $T/T_{CRM}$  имеет универсальную форму, не зависящую от  $T_{CRM}$  и спектра размеров ансамбля. Если же перейти к интересующей нас производной диаграммы Араи–Нагата, то она в параметрическом виде записывается как пара  $\{p\text{TRM}(T), d\text{CRM}(T)/d\text{TRM}(T)\}$  и в этом случае форма этой кривой уже зависит от формы спектра  $T_b$  (рис. 11), но по-прежнему не зависит от  $T_{CRM}$ .

При полном подобии CRM и TRM производная  $d\text{CRM}/dp\text{TRM}$  должна быть константой, что, как видно из формулы (11) и рис. 11, не выполняется нигде. Тем не менее, на всех графиках



**Рис. 11.** (а) – Функции распределения объемов частиц  $f(v)$ , использованные при расчете графиков (б), (в), (г), (д) параметры логнормального распределения: 1 –  $\sigma = 0.5$ ,  $\mu = 0.5$ ; 2 –  $\sigma = 0.5$ ,  $\mu = 1.6$ . За единицу объема принят объем частицы с блокирующей температурой  $T_{CRM} - v_b(T_{CRM})$ ; (б), (г) – производные  $dCRM/dpTRM$  как функции  $pTRM(x)/TRM(x_r)$ ; (в), (д) – диаграммы Арай–Нагата. Жирной черной линией отмечены плато на кривых  $dCRM/dpTRM$  и участки квазилинейного поведения этих диаграмм. Нумерация кривых на рисунках (б)–(д) соответствует их нумерации на рис. (а).

производной на рис. 11 можно выделить температурный интервал, близкий к  $T_c$ , на котором эта производная изменяется не более чем в полтора раза, и соответствующие участки на диаграммах Арай–Нагата и Вилсона–Буракова можно принять за линейные и попытаться определить на них «древнее поле», как это проиллюстрировано на рис. 11. Появление такого квазилинейного участка объясняется достаточно просто: как видно из формулы (11) и рис. 11б, производная  $dCRM/dpTRM$  монотонно изменяется от 1 при  $T = T_{CRM}$  до 0 при  $T = T_c$ , при этом необходимо отметить очевидную тенденцию: чем шире спектр размеров частиц в сторону частиц бóльшего размера (соответственно, бóльших  $T_b$ ), тем резче спад  $dCRM/dpTRM$  при  $T$ , близких к  $T_{CRM}$ , и тем более плоскими и низкими по величине эти кривые становятся при приближении к  $T_{CRM}$ . Именно наличие такого плато на кривых  $dCRM/dpTRM$  и порождает квазилинейные участки на диаграммах Арай–Нагата в случае невзаимодействующих частиц. При этом ясно, что чем ниже значения производной, тем больше занижение величины древнего поля, определяемого по квазилинейному участку. Иными словами, чем больше спектр  $T_b$  удален от  $T_{CRM}$  и сосредоточен вблизи  $T_c$ , тем больше должно быть занижение  $B_{anc}$ .

Переходя теперь к обсуждению результатов численных расчетов, прежде всего заметим, что диаграммы Арай–Нагата и Вилсона–Буракова, приведенные на рис. 5–рис. 9 для различных концентраций частиц (отражающих степень их магнитостатического взаимодействия), указывают на их большое сходство в смысле общего поведения этих диаграмм – на всех диаграммах отмечается заметная кривизна на интервале ( $T_{CRM}$ ,  $T_1$ ) и, близкое к линейному, поведение на интервале ( $T_1$ ,  $T_2$ ). Но при этом, справедливости ради, следует отметить, что на диаграммах для невзаимодействующих частиц некоторая кривизна заметна даже и на условно линейном интервале ( $T_1$ ,  $T_2$ ). Здесь уместно вспомнить о гипотезе о том, что именно взаимодействие приводит к сходству спектров  $T_b$  CRM и TRM [Draeger et al., 2006]. К сожалению, из наших расчетов нельзя сделать определенное заключение о справедливости этой гипотезы, поскольку, с одной стороны, разница в форме диаграмм Арай–Нагата и Вилсона–Буракова для взаимодействующих и невзаимодействующих частиц на рис. 5–рис. 9 невелика, а с другой, точность наших расчетов (ошибки определения) для взаимодействующих частиц не позволяет с уверенностью

оценить степень возможной кривизны этих диаграмм на всем температурном интервале.

Из вышесказанного следует, что предположение [Draeger et al., 2006] о том, что подобие спектров  $T_b$  для TRM и CRM обеспечивается магнитостатическим взаимодействием между ОД-зернами, не вполне верно: достаточная степень подобия может наблюдаться и для ансамбля невзаимодействующих частиц в силу указанных выше причин. Вместе с тем, остается открытым вопрос о том, может ли такое взаимодействие улучшить степень подобия. Исходя из наших расчетов, можно предположить, что дело именно так и обстоит. Действительно, из рис. 5 видно, что диаграммы Арай–Нагата и Вилсона–Буракова для невзаимодействующих частиц демонстрируют хоть и небольшую, но ощутимую кривизну (в соответствии с теоретическими расчетами этого раздела) даже и на тех участках, которые мы принимаем за квазилинейные. В то же время на соответствующих диаграммах для взаимодействующих частиц кривизна на таких участках практически отсутствует. Однако ошибки расчетов, показанные вертикальными и горизонтальными отрезками на этих диаграммах, слишком велики, чтобы с уверенностью говорить об отсутствии этой кривизны, так что утверждать с определенностью, что именно магнитостатическое взаимодействие приводит к линейности диаграммы Арай–Нагата и Вилсона–Буракова, пока нельзя – здесь необходимы длительные и более тщательные расчеты с использованием мощных компьютеров.

Перейдем теперь к сравнению моделированных и экспериментальных данных, насколько это возможно, исходя из имеющегося материала. Наиболее подробно экспериментальный материал по лабораторному созданию и исследованию свойств CRM, включая методику Телле, представлен в работах [Draeger et al., 2006; Грибов, 2015; 2016; 2017; Щербаков и др., 2017; Gribov et al., 2018]. Из этих экспериментов следует, что, как правило, (квази)линейный участок на диаграммах Арай–Нагата для CRM, присутствует всегда и занимает почти весь интервал ( $T_{CRM}$ ,  $T_c$ ) (при  $T$ , близком к  $T_c$  становятся заметными минералогические изменения, искажающие результат). Хотя справедливости ради надо отметить, что в окрестности  $T_{CRM}$  обычно присутствует чуть ощутимая степень кривизны, и строго линейной диаграмма Арай–Нагата становится лишь при  $T \approx (475–500)^\circ\text{C}$  (или позже,

если  $T_{CRM} = 500$  или  $530$  °C). Таким образом, эти данные не согласуются с гипотезой [Smirnov, Tarduno, 2005], поскольку интервал подобия спектров оказывается отнюдь не узким. Но они не согласуются в полной мере и с нашими численными расчетами, поскольку заметной кривизны на экспериментальных диаграммах не наблюдается даже и в самом их начале.

По-видимому, дело заключается в том, что лабораторные эксперименты имеют дело далеко не с идеализированным случаем образования CRM по механизму Хайга, как это предполагалось в теоретических расчетах. Действительно, на самом деле в этих экспериментах приобретение CRM в образцах происходило еще на стадии однофазного окисления [Gribov et al., 2018], то есть при образовании CRM были задействованы оба механизма, указанные во Введении, и поэтому прямое сравнение теории и эксперимента здесь неправомерно.

## ВЫВОДЫ

Выполнено компьютерное моделирование образования CRM по механизму роста объемов от суперпарамагнитных до однодоменных в ансамблях магнитостатически взаимодействующих частиц.

Результаты моделирования экспериментов определения палеонапряженности по методике Телье показали, что на всех диаграммах Арай–Нагата {CRM, TRM} присутствует область приближенного подобия спектров, нижняя граница которой лежит заметно выше  $T_{CRM}$ , а верхняя граница приближается к  $T_c$ . Эта область занимает довольно узкий температурный интервал ( $T_1$ ,  $T_2$ ) шириной от 12 до 60 °C, составляя при этом примерно половину ее полной длины диаграммы {CRM, TRM}. Аналитический разбор случая невзаимодействующих частиц (очень малая концентрация зерен) показал, что (квази)линейность в этом случае объясняется наличием плато на кривых производной  $dCRM/dpTRM$ , возникающей при узком спектре блокирующих температур.

По результатам численных экспериментов можно предположить, что при концентрации частиц, превышающей 0.2%, магнитостатическое взаимодействие приводит к практически полной линейности диаграммы Арай–Нагата на значительном интервале полного спектра блокирующих температур CRM. Вместе с тем, на остальном температурном интервале как диаграммы Арай–Нагата,

так и кривые зависимости CRM (TRM) оказываются существенно вогнутыми, что говорит об отсутствии подобия спектров.

Анализ экспериментальных данных показал определенное их сходство с результатами моделирования, но вместе с тем ясно продемонстрировал и их заметное отличие ввиду значительных различий в условиях численных и лабораторных экспериментов.

Для дальнейшего прогресса в понимании механизма возникновения CRM и корректного описания ее свойств, необходимо: а) выполнение экспериментов строго по модели Хайга, то есть путем выращивания ферритмагнитных зародышей до ОД состояния в немагнитной матрице; б) проведение численного моделирования с использованием мощных компьютеров; в) развитие теории образования CRM по второму механизму, то есть в результате роста температуры Кюри титаномагнетитовых зерен вследствие их окисления.

## ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках госзадания ИФЗ РАН № 0144-2014-00117 и при поддержке гранта РФФИ № 17-05-00259.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Афремов Л.Л., Харитонский П.В. О магнитостатическом взаимодействии в ансамбле растущих однодоменных зерен // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. 1988. № 2. С. 101–105.
- Грибов С.К. О влиянии термохимической намагниченности титаномагнетитсодержащих базальтов на результаты определения палеонапряженности методом Телье: новые экспериментальные данные. Шестнадцатая международная конференция «Физико-химические и петрофизические исследования в науках о Земле». Москва, 28–30 сентября, Борок, 2 октября 2015 г. Материалы конференции. М.: ИГЕМ РАН. 2015. С. 82–85.
- Грибов С.К., Долотов А.В. Особенности поведения химической остаточной намагниченности при окислении природного титаномагнетита в изотермических условиях. «Палеомагнетизм и магнетизм горных пород: теория, практика, эксперимент». Всероссийский семинар по проблемам палеомагнетизма и магнетизма горных пород, Санкт-Петербург, 3–7 октября 2016 г.

[материалы] – Ярославль: Филигрань. 2016. С. 35–39. ISBN 978-5-906682-69-7.

Грибов С.К. Оценка влияния процессов однофазного окисления и последующего распада природных титаномагнетитов на результаты определения палеонапряженности методом Телье (по данным лабораторного моделирования). «Палеомагнетизм и магнетизм горных пород: теория, практика, эксперимент». Всероссийская школа-семинар по проблемам палеомагнетизма и магнетизма горных пород, Санкт-Петербург, 3–7 октября 2016 г. [материалы]. Ярославль: Филигрань. 2016. С. 40–47. ISBN 978-5-906682-69-7.

Грибов С.К., Долотов А.В., Щербаков В.П. Экспериментальное моделирование химической остаточной намагниченности и методики Телье на титаномагнетитосодержащих базальтах // Физика Земли. 2017. № 2. С. 109–128. doi: 10.7868/S0002333717010069

Хайз Г. Возникновение остаточной намагниченности при химических изменениях. Палеомагнетизм / Под ред. Г.Н. Петровой. М.: ИЛ. 1962. С. 67–86.

Щербаков В.П., Сычева Н.К., Грибов С.К. Экспериментальное и численное моделирование процесса образования химической остаточной намагниченности и методики Телье // Физика Земли. 2017. № 5. С. 30–43. doi: 10.7868/S0002333717010081

Щербаков В.П., Ламаш Б.Е., Сычева Н.К. Сравнение свойств кристаллизационной и термоостаточной намагниченностей в ансамбле взаимодействующих однодоменных зерен по результатам математического моделирования // Физика Земли. 1998. № 8. С. 79–88.

Doell R.R. Crystallization magnetization // Adv. Phys. 1957. V. 3. № 23. P. 327–332.

Draeger U., Prevot M., Poidras T., Riisager J. Single-domain chemical, thermochemical and thermal remanences in a basaltic rock // Geophys. J. Int. 2006. V. 166. P. 12–32.

Dunlop D.J., Özdemir Ö. Rock Magnetism: Fundamentals and Frontiers. Cambridge Studies in Magnetism. Cambridge University Press. Cambridge. 1997. 573 p.

Gribov S.K., Shcherbakov V.P., Aphinogenova N.A. Magnetic Properties of Artificial CRM Created on Titanomagnetite-Bearing Oceanic Basalts. Recent Advances in Rock Magnetism, Environmental Magnetism and Paleomagnetism. International Conference on Geomagnetism, Paleomagnetism and Rock Magnetism (Kazan, 2017). pringer Geophysics. 2018. P. 173–194. doi.org/10.1007/978-3-319-90437-5

Muxworthy A.R., Ji X., Ridley V., Pan Y., Chang L., Wang L., Roberts A.P. Multi-protocol palaeointensity determination from middle Brunhes Chron volcanics, Datong Volcanic Province, China // Phys. Earth Planet. Int. 2011. 187. P. 188–198. doi: 10.1016/j.pepi.2011.06.005

Smirnov A.V., Tarduno J.A. Thermochemical remanent magnetization in Precambria rocks Are we sure the geomagnetic field was weak? // J. Geophys. Res. 2005. 110. B06103. doi:10.1029/2004 JB003445

Stacey F.D., Banerjee S.K. The physical principles of the rock magnetism. Elsevier. Amsterdam. 1974. 195 p.

Shcherbakova V.V., Shcherbakov V.P., Zhidkov G.V., Lubnina N.V. Palaeointensity determinations on rocks from Palaeoproterozoic dykes from the Kaapvaal Craton (South Africa) // Geophysical Journal International. 2014. V. 197. № 3. С. 1371–1381.

Shcherbakov V.P., Sycheva N.K., Lamash B.E. Monte Carlo modelling of TRM and CRM acquisition and comparison of their properties in an ensemble of interacting SD grains // Geophys. Res. Lett. 1996. V. 26. № 20. P. 2827–2830.

## Studying the Causes of Similarity between Blocking Temperature Spectra of Chemical and Thermoremanent Magnetization by Computer Simulation

V. P. Shcherbakov<sup>a,\*</sup> and N. K. Sycheva<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Borok Geophysical Observatory, Schmidt Institute of Physics of the Earth, Russian Academy of Sciences, Borok, Yaroslavl oblast, 152742 Russia

\*e-mail: shcherbakovv@list.ru

Received December 27, 2018

Monte Carlo numerical simulation of the formation of chemical remanent magnetization (CRM) by the mechanism of the growth of volumes from superparamagnetic (SPM) to single-domain (SD) in the ensembles of magnetostatically interacting particles, thermoremanent magnetization (TRM) and the experiments on paleointensity determination by the Thellier–Coe and Wilson–Burakov methods are carried out. The obtained results agree with the Smirnov–Tarduno hypothesis (Smirnov and Tarduno, 2005) that the similarity of the spectra of blocking temperatures  $T_b$  of CRM and TRM can be due to the narrowness of the interval of the blocking temperatures  $T_b$  of CRM and TRM with a reserve that the similarity can be observed on a part of the total interval of the  $T_b$  spectrum provided that this interval accommodates a significant fraction of total CRM intensity. The analytical examination of the case of non-interacting particles (sparse concentration of grains) has shown that in this case, (quasi)linearity of the Arai–Nagata diagrams is due to the presence of a plateau on

the curves of the derivative  $dCRM/dpTRM$  ( $pTRM$  is partial thermoremanent magnetization) which emerges at narrow spectrum of blocking temperatures. The results of the numerical experiments suggest that at particle concentration above 0.2% magnetostatic interaction leads to the practically full linearity of the Arai–Nagata diagram over a significant interval of the total spectrum of blocking temperatures for CRM. At the same time, on the remaining temperature interval, both the Arai–Nagata diagrams and the CRM(TRM) curves are substantially concave indicating the lack of similarity between the spectra of blocking temperatures for CRM and TRM. The analysis of the empirical data revealed their certain resemblance to the results of simulation but at the same time clearly demonstrated their noticeable distinction associated with the significant differences in the conditions of the numerical and laboratory experiments.

*Keywords:* Monte Carlo method, Thellier–Coe method, Wilson–Burakov method, magnetostatic interaction, chemical remanent magnetization