

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 537.622

ВЛИЯНИЕ МЕЖФАЗНОГО ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА МЕТАСТАБИЛЬНОСТЬ МАГНИТНЫХ СОСТОЯНИЙ НАНОЧАСТИЦ ЯДРО/ОБОЛОЧКА

© 2023 г. И. Г. Ильюшин^{а, *}, Л. Л. Афремов^а, В. Н. Харитонов^б

^аДепартамент теоретической физики и интеллектуальных технологий, Института наукоемких технологий и передовых материалов, ДВФУ, п. Аякс, 10, о. Русский, Владивосток, 690922 Россия

^бЛаборатория моделирования физических процессов, Института наукоемких технологий и передовых материалов, ДВФУ, п. Аякс, 10, о. Русский, Владивосток, 690922 Россия

*e-mail: iliushin.ig@dyfu.ru

Поступила в редакцию 04.10.2022 г.

После доработки 14.11.2022 г.

Принята к публикации 28.11.2022 г.

В рамках модели двухфазных (ядро/оболочка) эллипсоидальных наночастиц проведено моделирование влияния межфазного обменного взаимодействия, размера, вытянутости и ориентации длинных осей ядра и оболочки на метастабильность магнитных состояний. На примере наночастиц $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Fe}_{2.44}\text{Ti}_{0.56}\text{O}_4$ показано, что метастабильность магнитных состояний реализуется в ограниченном диапазоне значений константы межфазного обменного взаимодействия между ядром и оболочкой A_{in} и геометрических параметров. С ростом модуля константы межфазного обменного взаимодействия $|A_{\text{in}}|$ от $A_{\text{in}} = 0$ до некоторого конечного значения, метастабильность магнитных состояний монотонно уменьшается от максимальной до нуля, независимо от угла между длинными осями ядра и оболочки.

Ключевые слова: метастабильность, межфазное обменное взаимодействие, наночастицы ядро/оболочка

DOI: 10.31857/S0015323022601544, **EDN:** KYSHCA

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к исследованию двухфазных магнитных наночастиц, состоящих из ядра и покрывающей его оболочки (наночастиц ядро/оболочка), во многом обусловлен возможностью их использования, например, при создании и конструировании электронных устройств [1, 2] или при реализации биомедицинских технологий (доставка лекарств [3], магнитной гипотермии [4] и др.). Общей особенностью систем как суперпарамагнитных, так и заблокированных магнитных наночастиц ядро/оболочка является зависимость их магнитных характеристик от геометрических и магнитных параметров фаз. Естественно, что размеры, форма и ориентация длинных осей ядра и оболочки существенно влияют на магнитные состояния наночастиц ядро/оболочка, которые, в свою очередь, через процессы намагничивания определяют их магнитные свойства. Наличие интерфейса в наночастицах ядро/оболочка может оказать существенное влияние на их гистерезисные характеристики и температуру блокировки (см., напр., обзор [5]).

В данной работе на примере наночастиц $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Fe}_{2.44}\text{Ti}_{0.56}\text{O}_4$ проведено моделирование влияния геометрических параметров (размер фаз, их вытянутость и ориентация длинных осей) и межфазного обменного взаимодействия на метастабильность магнитных состояний частиц ядро/оболочка.

МОДЕЛЬ НАНОЧАСТИЦЫ ЯДРО/ОБОЛОЧКА

Обобщим модель наночастицы ядро/оболочка, которая подробно описана в работе [6].

1. Однородно намагниченная наночастица (фаза (1)) объемом V , имеющая форму эллипсоида вращения с вытянутостью Q и малой полуосью B , содержит однородно намагниченное эллипсоидальное ядро (фаза (2)) с объемом $v = \varepsilon V$ вытянутостью q , и малой полуосью b , длинная ось которого составляет угол α с длиной осью наночастицы, ориентированной вдоль оси Oz (см. рис. 1).

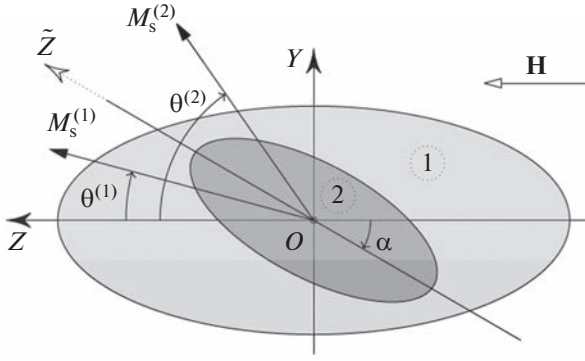


Рис. 1. Иллюстрация к модели наночастицы ядро/оболочка.

2. Считается, что оси кристаллографической анизотропии ферромагнетиков параллельны длинным осям наночастицы и ядра соответственно.

3. Векторы спонтанной намагниченности фаз $M_s^{(1)}$ и $M_s^{(2)}$ (как и длинные оси магнитных фаз) расположены в плоскости YOZ и составляют углы $\vartheta^{(1)}$ и $\vartheta^{(2)}$ с осью OZ соответственно.

4. Внешнее магнитное поле H приложено вдоль оси OZ .

ЭНЕРГИЯ НАНОЧАСТИЦ ЯДРО/ОБОЛОЧКА

Одноосные наночастицы. Энергию наночастицы E , находящейся во внешнем поле H , можно представить в виде суммы энергий:

• энергии кристаллографической анизотропии:

$$E_A = -\frac{1}{4} \left\{ \left(M_s^{(1)} \right)^2 k_A^{(1)} (1 - \varepsilon) \cos 2\vartheta^{(1)} + \left(M_s^{(2)} \right)^2 k_A^{(2)} \varepsilon \cos 2(\vartheta^{(2)} - \alpha) \right\} V; \quad (1)$$

• энергии магнитостатического взаимодействия между ядром и оболочкой, которую, в соответствии с [7], можно представить в виде:

$$E_m = \left\{ -\frac{\left(M_s^{(1)} \right)^2}{4} \left[\left((1 - 2\varepsilon) k_N^{(1)} + \varepsilon k_N^{(2)} \cos 2\alpha \right) \cos 2\vartheta^{(1)} - \varepsilon k_N^{(2)} \sin 2\alpha \sin 2\vartheta^{(1)} \right] - \frac{\left(M_s^{(2)} \right)^2}{4} \varepsilon k_N^{(2)} \cos 2(\vartheta^{(2)} + \alpha) + \frac{\varepsilon M_s^{(1)} M_s^{(2)}}{3} \times \left[\frac{3}{2} k_N^{(2)} \sin 2\alpha \sin (\vartheta^{(1)} + \vartheta^{(2)}) + \left(k_N^{(2)} - k_N^{(1)} \right) \left(\sin \vartheta^{(1)} \sin \vartheta^{(2)} - 2 \cos \vartheta^{(1)} \cos \vartheta^{(2)} \right) \right] \right\} V, \quad (2)$$

• энергии обменного взаимодействия через границу, которая согласно [8] может быть представлена следующим образом:

$$E_{ex} = -\frac{2A_{in}}{\delta} \cos(\vartheta^{(1)} - \vartheta^{(2)}) S, \quad (3)$$

• энергии Зеемана:

$$E_H = -H \left[(1 - \varepsilon) M_s^{(1)} \cos \vartheta^{(1)} + \varepsilon M_s^{(2)} \cos \vartheta^{(2)} \right]. \quad (4)$$

Полная энергия частицы может быть представлена:

$$E = \left\{ -\frac{\left(M_s^{(1)} \right)^2}{4} \mathcal{K}^{(1)} \cos 2(\vartheta^{(1)} - \delta^{(1)}) - \frac{\left(M_s^{(2)} \right)^2}{4} \mathcal{K}^{(2)} \cos 2(\vartheta^{(2)} - \delta^{(2)}) + M_s^{(1)} M_s^{(2)} \times \left[-\mathcal{U}_1 \sin \vartheta^{(1)} \sin \vartheta^{(2)} + \mathcal{U}_2 \cos \vartheta^{(1)} \cos \vartheta^{(2)} + \frac{1}{2} \varepsilon k_N^{(2)} \sin 2\alpha \sin (\vartheta^{(1)} + \vartheta^{(2)}) - H \left[(1 - \varepsilon) M_s^{(1)} \cos \vartheta^{(1)} + \varepsilon M_s^{(2)} \cos \vartheta^{(2)} \right] \right\} V, \quad (5)$$

где эффективные константы анизотропии $\mathcal{K}^{(1,2)}$ и положение эффективных осей $\delta^{(1,2)}$ фаз определяются следующими выражениями:

$$\mathcal{K}^{(1)} = \left(\left((1 - \varepsilon) k_A^{(1)} + (1 - 2\varepsilon) k_N^{(1)} + \varepsilon k_N^{(2)} \cos 2\alpha \right)^2 + \left(\varepsilon k_N^{(2)} \sin 2\alpha \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (6)$$

$$\operatorname{tg}(2\delta^{(1)}) = -\frac{\varepsilon k_N^{(2)} \sin 2\alpha}{(1 - \varepsilon) k_A^{(1)} + (1 - 2\varepsilon) k_N^{(1)} + \varepsilon k_N^{(2)} \cos 2\alpha}, \quad (7)$$

$$\mathcal{K}^{(2)} = \varepsilon \sqrt{\left(k_A^{(2)} \right)^2 + \left(k_N^{(2)} \right)^2 + 2k_A^{(2)} k_N^{(2)} \cos 4\alpha}, \quad (8)$$

$$\operatorname{tg}(2\delta^{(2)}) = -\frac{k_N^{(2)} - k_A^{(2)}}{k_N^{(2)} + k_A^{(2)}} \operatorname{tg} 2\alpha. \quad (9)$$

Константы межфазного взаимодействия $\mathcal{U}_1$ и $\mathcal{U}_2$ выражаются через константы магнитостатического и обменного взаимодействия фаз:

$$\mathcal{U}_1 = \varepsilon \left(\frac{\left(k_N^{(1)} - k_N^{(2)} \right)}{3} + \frac{2sA_{in}}{v \delta M_s^{(1)} M_s^{(2)}} \right), \quad (10)$$

$$\mathcal{U}_2 = \varepsilon \left(\frac{2\left(k_N^{(1)} - k_N^{(2)} \right)}{3} - \frac{2sA_{in}}{v \delta M_s^{(1)} M_s^{(2)}} \right).$$

В соотношениях (1)–(10) $k_A^{(1,2)} = K_1^{(1,2)} / (\mathcal{M}_s^{(1,2)})^2$, $k_N^{(1,2)}$ – безразмерные константы кристаллографической анизотропии и анизотропии формы 1-й и 2-й фаз соответственно, $K_1^{(1,2)}$ – первые константы анизотропии фаз, s – площадь поверхности разделяющей фазы, A_{in} – константа межфазного обменного взаимодействия, δ – ширина переходной области, имеющая порядок постоянной решетки. Отметим, что константа анизотропии формы $k_N = 2\pi(1 - 3N_z)$ выражается через размагничивающий коэффициент вдоль длинной оси $N_z = \left[q \ln(q + \sqrt{q^2 - 1}) - \sqrt{q^2 - 1} \right] / (q^2 - 1)^{3/2}$, зависящий только от вытянутости эллипсоида q .

Отметим, что магнитные состояния могут зависеть от поверхностной анизотропии. Как было показано в работе [9], добавка к перечисленным выше энергии поверхностной анизотропии эквивалентно замене $k_N^{(1,2)}$ на $k_N^{(1,2)} + 2\pi k_s^{(1,2)} b_{(1,2)}^2 \xi(q_{(1,2)})$ (обозначения описаны в [9]).

Многоосные наночастицы. Пусть магнитные фазы наночастицы (1 – оболочка, 2 – ядро) представлены кристаллами кубической симметрии с константами кристаллографической анизотропии первого $K_1^{(1,2)}$ и второго $K_2^{(1,2)}$ порядка соответственно. Проведем решение задачи о магнитных состояниях двухфазной многоосной частицы в рамках следующих предположений:

1) если первые константы кристаллографической анизотропии фаз $K_1^{(1,2)}$ положительны, то “легкие оси” фаз (кристаллографические направления типа [100]) совпадают с длинными осями оболочки и ядра соответственно (рис. 1). В противном случае ($K_1^{(1,2)} < 0$) совместим “легкие оси” (направления [111]) с длинными осями фаз;

2) воспользуемся условием магнитной одноосности зерна многоосного кристалла, суть которого состоит в том, что при некоторой вытянутости его анизотропия формы превалирует над кристаллографической анизотропией. Процесс намагничивания таких частиц подобен намагничиванию одноосных частиц с некоторой эффективной константой, которая определяется полной свободной энергией [10].

В зависимости от знака константы анизотропии энергия кристаллографической анизотропии имеет следующий вид [10]:

$$E_A = \begin{cases} \frac{1}{4} k_{A1}^{(1)} (\mathcal{M}_s^{(1)})^2 (1 - \epsilon) \sin^2 2\vartheta^{(1)} + \\ + \frac{1}{4} k_{A1}^{(2)} (\mathcal{M}_s^{(2)})^2 \epsilon \sin^2 2\vartheta^{(2)}; \\ k_{A1}^{(1)} > 0, \quad k_{A1}^{(2)} > 0; \\ \frac{1}{54} k_{A2}^{(1)} (\mathcal{M}_s^{(1)})^2 (1 - \epsilon) \sin^2 \vartheta^{(1)} \times \\ \times (1 + 2 \cos 2\vartheta^{(1)})^2 + \\ + \frac{1}{54} k_{A2}^{(2)} (\mathcal{M}_s^{(2)})^2 \epsilon \sin^2 \vartheta^{(2)} \times \\ \times (1 + 2 \cos 2\vartheta^{(2)})^2; \\ k_{A1}^{(1)} < 0, \quad k_{A1}^{(2)} < 0, \\ \frac{1}{4} k_{A1}^{(1)} (\mathcal{M}_s^{(1)})^2 (1 - \epsilon) \sin^2 2\vartheta^{(1)} + \\ + \frac{1}{54} k_{A2}^{(2)} (\mathcal{M}_s^{(2)})^2 \epsilon \sin^2 \vartheta^{(2)} \times \\ \times (1 + 2 \cos 2\vartheta^{(2)})^2, \quad k_{A1}^{(1)} > 0, \quad k_{A1}^{(2)} < 0; \\ \frac{1}{54} k_{A2}^{(1)} (\mathcal{M}_s^{(1)})^2 (1 - \epsilon) \times \\ \times \sin^2 \vartheta^{(1)} (1 + 2 \cos 2\vartheta^{(1)})^2 + \\ + \frac{1}{4} k_{A1}^{(2)} (\mathcal{M}_s^{(2)})^2 \epsilon \sin^2 2\vartheta^{(2)}; \\ k_{A1}^{(1)} < 0, \quad k_{A1}^{(2)} > 0. \end{cases} \quad (11)$$

В соотношениях (11) $k_{A1}^{(1,2)} = K_1^{(1,2)} / (\mathcal{M}_s^{(1,2)})^2$ и $k_{A2}^{(1,2)} = K_2^{(1,2)} / (\mathcal{M}_s^{(1,2)})^2$ – безразмерные константы кристаллографической анизотропии первого или второго порядка оболочки либо ядра соответственно.

В соответствии со вторым положением, сформулированным выше, полная энергия определяется соотношением (5), в котором эффективные константы анизотропии $\tilde{\mathcal{H}}^{(1,2)}$ и положение эффективных осей $\tilde{\delta}^{(1,2)}$ имеют вид:

$$\tilde{\mathcal{H}}^{(1)} = \begin{cases} \left\{ \left[(1 - \epsilon) \tilde{k}_A^{(1)} + (1 - 2\epsilon) k_N^{(1)} + \epsilon k_N^{(2)} \cos 2\alpha \right]^2 + \right. \\ \left. + \left(\epsilon k_N^{(2)} \sin 2\alpha \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \\ k_{A1}^{(1)} > 0, \\ \left\{ \left[(1 - \epsilon) k_{A2}^{(1)} / 3 + (1 - 2\epsilon) k_N^{(1)} + \epsilon k_N^{(2)} \cos 2\alpha \right]^2 + \right. \\ \left. + \left(\epsilon k_N^{(2)} \sin 2\alpha \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \\ k_{A1}^{(1)} < 0, \end{cases} \quad (12)$$

Таблица 1. Экспериментальные значения спонтанной намагниченности $\mathcal{M}_s$, первых и вторых констант кристаллографической анизотропии $K_{1,2}$ магнетита (Fe_3O_4) и титаномагнетита ($\text{Fe}_{2.44}\text{Ti}_{0.56}\text{O}_4$) [11]

Параметры	Fe_3O_4	$\text{Fe}_{2.44}\text{Ti}_{0.56}\text{O}_4$
$\mathcal{M}_s$, Гс	480	151
K_1 , 10^5 эрг/см ³	–1.06	–0.7
K_2 , 10^5 эрг/см ³	2.8	–0.15

$$\text{tg}(2\delta^{(1)}) = \begin{cases} \frac{-\varepsilon k_N^{(2)} \sin 2\alpha}{(1-\varepsilon)k_A^{(1)} + (1-2\varepsilon)k_N^{(1)} + \varepsilon k_N^{(2)} \cos 2\alpha}, \\ k_{A1}^{(1)} > 0, \\ \frac{-\varepsilon k_N^{(2)} \sin 2\alpha}{(1-\varepsilon)k_{A2}^{(1)}/3 + (1-2\varepsilon)k_N^{(1)} + \varepsilon k_N^{(2)} \cos 2\alpha}, \\ k_{A1}^{(1)} < 0, \end{cases} \quad (13)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}^{(2)} = \begin{cases} \varepsilon \sqrt{(k_{A1}^{(2)})^2 + (k_N^{(2)})^2 + 2k_{A1}^{(2)}k_N^{(2)} \cos 4\alpha}, \\ k_{A1}^{(1)} > 0, \\ \varepsilon \sqrt{(k_{A2}^{(2)}/3)^2 + (k_N^{(2)})^2 + 2k_{A2}^{(2)}k_N^{(2)} \cos 4\alpha/3}, \\ k_{A1}^{(1)} < 0, \end{cases} \quad (14)$$

$$\text{tg}(2\tilde{\delta}^{(2)}) = - \begin{cases} \frac{k_N^{(2)} - k_{A1}^{(2)}}{k_N^{(2)} + k_{A1}^{(2)}} \text{tg} 2\alpha, \\ k_{A1}^{(1)} > 0, \\ \frac{k_N^{(2)} - k_{A2}^{(2)}/3}{k_N^{(2)} + k_{A2}^{(2)}/3} \text{tg} 2\alpha, \\ k_{A1}^{(1)} < 0. \end{cases} \quad (15)$$

Таким образом, магнитные состояния многоосной наночастицы ядро/оболочка могут быть определены с помощью соотношения (5), в котором эффективные константы анизотропии и положение эффективных осей задаются соотношениями (12)–(15).

Выражения (5)–(10), (12)–(15) позволяют исследовать влияние геометрических (q и ε) и магнитных ($\mathcal{M}_s^{(1,2)}$, $k_{A1,2}^{(1,2)}$, A_{in}) характеристик на магнитные состояния как одноосных, так и кристаллографически многоосных наночастиц ядро/оболочка.

МАГНИТНЫЕ СОСТОЯНИЯ НАНОЧАСТИЦ ЯДРО/ОБОЛОЧКА

Минимизация энергии (5) по $\vartheta^{(1)}$ и $\vartheta^{(2)}$ совместно с условиями минимума:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \vartheta^{(1)}} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \vartheta^{(2)}} = 0; \quad \frac{\partial^2 E}{\partial \vartheta^{(1)2}} > 0, \\ \frac{\partial^2 E}{\partial \vartheta^{(1)2}} \frac{\partial^2 E}{\partial \vartheta^{(2)2}} - \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \vartheta^{(1)} \partial \vartheta^{(2)}} \right)^2 > 0 \end{aligned} \quad (16)$$

приводит к системе уравнений, которая позволяет определить основные и метастабильные состояния магнитных моментов фаз наночастицы.

Выбор параметров моделирования. Расчет магнитных состояний проведем на примере почти сферических ($Q = 1.05$) наночастиц $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Fe}_{2.44}\text{Ti}_{0.56}\text{O}_4$ размером $2B = 20$ нм, магнитные характеристики которых представлены в табл. 1.

Результаты моделирования влияния размеров b , вытянутости q и ориентации длинной оси α магнетитового ядра на распределение основных и метастабильных состояний наночастиц $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Fe}_{2.44}\text{Ti}_{0.56}\text{O}_4$ показали, что при $Q \geq 1$ и $q \geq 1$ возможны два или четыре состояния, которые различаются взаимной ориентацией магнитных моментов фаз. Так, в отличие от наночастиц с $\alpha = 0$, в которых магнитные моменты ядра и оболочки ориентируются параллельно ($\uparrow\uparrow$, $\downarrow\downarrow$), либо антипараллельно ($\uparrow\downarrow$, $\downarrow\uparrow$) друг другу, рост α приводит к увеличению отклонения магнитных моментов фаз от оси Oz в каждом из четырех состояний (см. рис. 2).

Если магнитостатическое взаимодействие между фазами преобладает над обменным ($\mathcal{U}_2 > 0$), то второе и четвертое состояния устойчивы. В то же время первое и третье метастабильны, так как свободная энергия частицы в этих состояниях меньше, нежели в первом и третьем. В противном случае ($\mathcal{U}_2 < 0$) устойчивы первое и третье состояния.

Зависимость числа магнитных состояний наночастицы с заданными значениями размера малой полуоси B и вытянутости Q от геометрических характеристик ядра (размера малой полуоси b и вытянутости q) удобно представить с помощью диаграммы $\{b, q\}$ (см. рис. 3).

Каждой точке диаграммы $\{b, q\}$ сопоставляется наночастица, ядро которой имеет размер b и вытянутость q . Точкам темной области диаграммы $\{b, q\}$ сопоставляются частицы, которые могут находиться в одном из четырех перечисленных выше основных или метастабильных состояний. Точки, попавшие в светлую область, соответству-

ют наночастицам, находящимся в одном из двух равновесных состояний.

При построении диаграмм $\{b, q\}$ нами использовано соотношение между малыми полуосями эллипсоидов ядра b и наночастицы B — ($b \leq B$) и ограничение $qb \leq R(\alpha)$ на длинную ось ядра qb , обусловленное размером наночастицы $R(\alpha) = QB / \sqrt{\cos^2 \alpha + Q^2 \sin^2 \alpha}$ вдоль прямой совпадающей с длинной осью ядра. Перечисленные выше соотношения определяют ограничения на выбор q и b :

$$\frac{b}{B} \leq 1, \quad q \frac{b}{B} \leq \frac{Q}{\sqrt{\cos^2 \alpha + Q^2 \sin^2 \alpha}}. \quad (17)$$

Заметим, что максимальное число равновесных состояний двухфазной наночастицы ядро/оболочка равно удвоенному числу “легких осей”. Поэтому не удовлетворяющие условию магнитной одноосности [10] сферические наночастицы ядро/оболочка со сферическим ядром, магнитные фазы которых представлены материалами кубической симметрии, могут находиться в шести или восьми состояниях.

ВЛИЯНИЕ МЕЖФАЗНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА МЕТАСТАБИЛЬНОСТЬ

Будем считать, что количественной характеристикой метастабильности состояний магнитных моментов наночастиц ядро/оболочка является вероятность P обнаружения наночастицы в метастабильном состоянии. Вероятность P можно определить как отношение числа точек на диаграмме $\{b, q\}$, соответствующих частицам, находящимся в одном из четырех состояний (попавших в темную область S_T) к полному числу всевозможных состояний (попавших в темную S_T и светлую области S_C): $P = S_T / (S_C + S_T)$.

Влияние межфазного обменного взаимодействия на метастабильность магнитных состояний наночастиц ядро/оболочка $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Fe}_{2.44}\text{Ti}_{0.56}\text{O}_4$ различающихся углом α представлено в табл. 2.

Расчет вероятности P позволяет утверждать, что рост константы межфазного обменного взаимодействия приводит к уменьшению метастабильности наночастиц $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Fe}_{2.44}\text{Ti}_{0.56}\text{O}_4$. При этом для частиц с $\alpha = 0$ метастабильность исчезает при $|A_{\text{in}}|_{\text{min}} = 0.3 \times 10^{-8}$ Эрг/см, магнитные моменты наночастиц переходят в одно из двух основных состояний. Указанная выше зависимость метастабильности магнитных состояний от межфазного обменного взаимодействия качественно выполняется для частиц ядро/оболочка с различ-

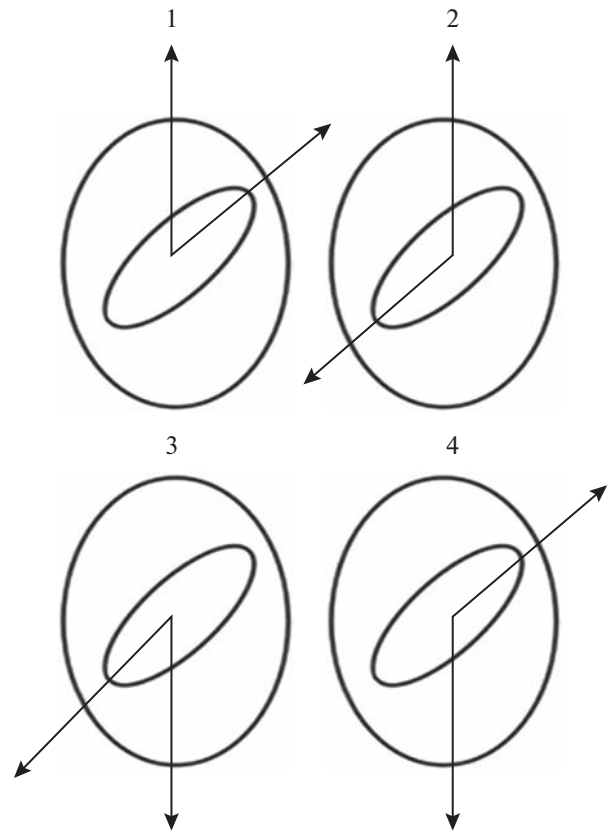


Рис. 2. Иллюстрация равновесных состояний наночастиц ядро/оболочка: в первом “ $\nearrow \nearrow$ ”-состоянии магнитные моменты обеих фаз составляют острые углы $(-\pi/2 < \vartheta^{(1)} < \pi/2, -\pi/2 < \vartheta^{(2)} < \pi/2)$ с осью Oz ; во втором “ $\nearrow \searrow$ ”-состоянии магнитные моменты ядра и оболочки составляют углы $-\pi/2 < \vartheta^{(1)} < \pi/2, -3\pi/2 < \vartheta^{(2)} < -\pi/2$; третье “ $\swarrow \searrow$ ” и четвертое “ $\swarrow \nearrow$ ” состояния являются инверсией первого и второго соответственно.

ными значениями угла между длинными осями наночастицы и ядра α . С увеличением α минимальное значение $|A_{\text{in}}|_{\text{min}}$, при котором исчезает метастабильность магнитных состояний наночастиц $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Fe}_{2.44}\text{Ti}_{0.56}\text{O}_4$, меняется немонотонно. Отмеченное изменение $|A_{\text{in}}|_{\text{min}}$ определяется немонотонной зависимостью эффективных констант магнитной анизотропии от угла α (см. соотношения (12), (14)).

РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

Получены выражения полной энергии наночастицы ядро/оболочка с произвольной ориентацией осей анизотропии магнитных фаз. В полную

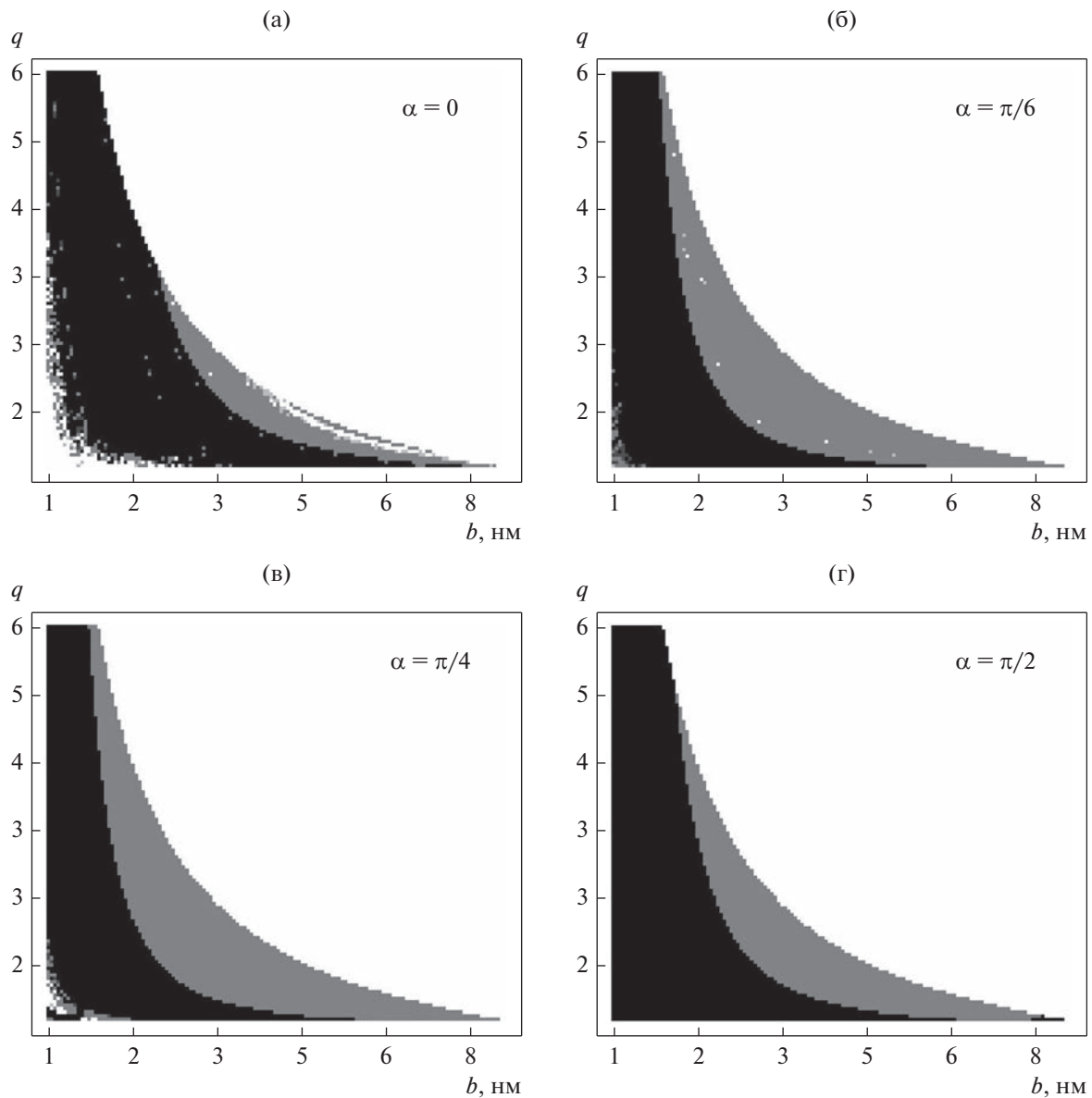


Рис. 3. Диаграммы $\{b, q\}$ магнитных состояний наночастиц $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Fe}_{2.44}\text{Ti}_{0.56}\text{O}_4$ с константой межфазного обменного взаимодействия $A_{\text{in}} = 0$, рассчитанные для различных значений угла α .

энергию включены: энергии кристаллографической и поверхностной анизотропии, энергия магнитостатического взаимодействия ядра и оболочки, энергия межфазного обменного взаимодействия и энергия Зеемана.

Полученное выражение полной энергии позволило исследовать влияние геометрических параметров (размер ядра и оболочки, их вытянутость, ориентация длинных осей) и межфазного обменного взаимодействия на метастабильность магнитных состояний наночастиц ядро/оболочка.

Показано, что наночастицы могут находиться в одном из четырех состояний, в которых с увеличением угла между длинными осями наночасти-

цы и ядра α , направления магнитных моментов фаз могут меняться от параллельных ($\uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow$), либо антипараллельных ($\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow$) ориентаций при $\alpha = 0$ до “скошенных” – ($\nearrow\swarrow, \nwarrow\searrow$), либо ($\nearrow\nwarrow, \nwarrow\searrow$) при $\alpha \neq 0$.

Метастабильность магнитных состояний, во многом определяющая процессы намагничивания наночастиц ядро/оболочка, реализуется в ограниченном диапазоне значений геометрических характеристик (размеров и вытянутости) и констант межфазного обменного взаимодействия между ядром и оболочкой $0 \leq |A_{\text{in}}| \leq |A_{\text{in}}|_{\text{min}}$. При

Таблица 2. Зависимость числа метостабильных состояний от константы межфазного обменного взаимодействия

		$\alpha = 0$					
$A_{in}, \times 10^{-8}$ эрг/см		0	± 0.1	± 0.2	± 0.3	± 0.5	± 0.6
P		0.75	0.08	0.012	0	0	0
		$\alpha = \frac{\pi}{2}$					
$A_{in}, \times 10^{-8}$ эрг/см		0	± 0.1	± 0.2	± 0.3	± 0.5	± 0.6
P		0.7	0.48	0.42	0.09	0.7	0
		$\alpha = \frac{\pi}{3}$					
$A_{in}, \times 10^{-8}$ эрг/см		0	± 0.1	± 0.2	± 0.3	± 0.5	± 0.6
P		0.47	0.06	0.02	0.02	0	0
		$\alpha = \frac{\pi}{4}$					
$A_{in}, \times 10^{-8}$ эрг/см		0	± 0.1	± 0.2	± 0.3	± 0.5	± 0.6
P		0.50	0.09	0.0	0	0	0
		$\alpha = \frac{\pi}{6}$					
$A_{in}, \times 10^{-8}$ эрг/см		0	± 0.1	± 0.2	± 0.3	± 0.5	± 0.6
P		0.50	0.25	0.014	0	0	0

этом предельное значение $|A_{in}|_{min}$ немонотонно меняется с ростом угла между длинными осями наночастицы и ядра α .

Знания о возможных магнитных состояниях наночастиц ядро/оболочка, позволят понять процессы намагничивания систем таких частиц. А также оценить влияние их геометрических (размеры, форма и угол между длинными осями наночастицы и ядра) и магнитных параметров на гистерезисные характеристики и температуру блокирования, которые являются важными характеристиками для практического применения в различных областях — при конструировании новых магнитных материалов, при разработке биомедицинских технологий, а также при изучении палеонапряженности.

Работа выполнена при поддержке гранта Правительства Российской Федерации на государ-

ственную поддержку научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых в российских образовательных организациях высшего образования, научных учреждениях и государственных научных центрах Российской Федерации (проект № 075-15-2021-607).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Frederix F., Friedt J.M., Choi K.H., Laureyn W., Campitelli A., Mondelaers D., Borghs G.* Biosensing based on light absorption of nanoscaled gold and silver particles // *Analytical Chemis.* 2003. V. 75. P. 6894–6900.
2. *Andersson P., Forchheimer R., Tehrani P., Berggren M.* Printable All-Organic Electrochromic Active-Matrix Displays // *Adv. Functional Mater.* 2007. V. 17. P. 3074–3082.
3. *Cahill D.G., Braun P.V., Chen G., Clarke D.R., Fan S., Goodson K.E., Shi L.* Nanoscale thermal transport. II. 2003–2012 // *Appl. Phys. Rev.* 2014. V. 1. P. 011305.
4. *Saykova D., Saikova S., Mikhlin Y., Panteleeva M., Ivantsov R., Belova E* Synthesis and Characterization of Core–Shell Magnetic Nanoparticles $NiFe_2O_4@Au$ // *Metals.* 2020. V. 10. P. 1075.
5. *Nogués J., Sort J., Langlais V., Skumryev V., Suriñach S., Muñoz J.S., Baró M.D* Exchange bias in nanostructures // *Phys. Reports* 2005. V. 422. P. 65–117.
6. *Afremov L., Anisimov S., Iliushin I.* Size effect on the hysteresis characteristics of a system of interacting core/shell nanoparticles // *J. Magn. Magn. Mater.* 2018. V. 447. P. 88–95.
7. *Stavn M., Morrish A.* Magnetization of a two-component Stoner-Wohlfarth particle // *IEEE Transactions on Magnetism.* 1979. V. 15. P. 1235–1240.
8. *Yang J.-S., Chang C.-R.* The influence of interfacial on the coercivity of acicular coated particle // *J. Appl. Phys.* 1991. V. 69. P. 7756–7761.
9. *Anisimov S., Afremov L., Petrov A.* Modeling the effect of temperature and size of core/shell nanoparticles on the exchange bias of a hysteresis loop // *J. Magn. Magn. Mater.* 2020. V. 500. P. 166366.
10. *Афремов Л.Л., Панов А.В.* Влияние механических напряжений на остаточную намагниченность насыщения системы наночастиц // *ФММ.* 2008. Т. 106. № 3. С. 248–256.
11. *Syono Y.* Magnetocrystalline anisotropy and magnetostriction of $Fe_3O_4-Fe_2TiO_4$ series with special application to rock magnetism // *Japan. J. Geophys.* 1965. V. 4(1). P. 71–143.