

УДК 548:537.611.44

## Способ определения по экспериментальной кривой намагничивания энергетических вкладов одноосной и кубической анизотропии в полную энергию магнитной анизотропии наночастиц

**Сергей В. Комогорцев\***

Институт физики СО РАН,  
Академгородок, 50/38, Красноярск, 660036,  
Россия  
Сибирский государственный технологический университет,  
Мира, 82, Красноярск, 660049,  
Россия

**Сергей И. Смирнов†**

Красноярский государственный педагогический университет,  
Лебедевой, 89, Красноярск, 660049,  
Россия

**Надежда А. Момот‡**

Сибирский федеральный университет,  
Свободный, 79, Красноярск, 660041,  
Россия

**Рауф С. Исхаков§**

Институт физики СО РАН,  
Академгородок, 50/38, Красноярск, 660036,  
Россия

---

Получена 18.08.2010, окончательный вариант 05.09.2010, принята к печати 25.09.2010

*На основе результатов численного моделирования в рамках композиционной модели Стонера–Вольфарта предложены способы определения по экспериментальной кривой намагничивания энергетических вкладов одноосной и кубической анизотропии в полную энергию магнитной анизотропии частиц. Предложенные способы апробированы на примере экспериментальных кривых намагничивания наночастиц Co-Ni.*

*Ключевые слова: численное моделирование, ферромагнитные наночастицы, магнитная анизотропия, модель Стонера-Вольфарта.*

---

Кривые намагничивания ансамблей наночастиц с размерами, близкими к критическому размеру однодоменности, характеризуются наибольшими значениями величины коэрцитивной силы и остаточной намагниченности, а также временной и температурной стабильностью этих параметров. Перемагничивание однодоменных частиц осуществляется посредством процессов вращения намагниченности и описывается на основе модели Стонера-Вольфарта [1]. Задача данной работы — интерпретация экспериментальных кривых намагничивания наночастиц Ni-Co, капсулированных в углеродных нанотрубках с помощью

---

\*komogor@iph.krasn.ru

†SmiSI@mail.ru

‡alexanam@yandex.ru

§rauf@iph.krasn.ru

численного моделирования этой системы на основе модели Стонера-Вольфарта. Наночастицы Ni-Co, капсулированные в углеродных нанотрубках, предварительно были исследованы в работе [2]. Здесь установлены особенности морфологии, структурного состояния, а также определены величины константы обменного взаимодействия данных частиц. Было показано, что размеры исследуемых систем близки к критическому размеру однодоменности, а величины коэрцитивной силы и остаточной намагниченности незначительно меняются в области температур ( $78 \div 300$  К). Эти данные указывают на возможность интерпретации основных параметров кривых намагничивания исследуемых наночастиц Ni-Co в рамках модели Стонера-Вольфарта. Методом рентгеновской дифракции установлено, что магнитные наночастицы  $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x$  характеризуются ГЦК структурой. По величине уширения дифракционных рефлексов на рентгенограммах выполнена оценка размеров наночастиц  $D$ , результаты которой представлены в табл. 1.

Таблица 1. Магнитные параметры наночастиц  $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x$ 

|                                | $D$ , nm | $H_c$ , Oe |      | $M_r/M_s$ |      | $k_u$ |      | $K_{eff}$ , $10^5$ erg/cm <sup>3</sup> |      |
|--------------------------------|----------|------------|------|-----------|------|-------|------|--|------|
|                                |          | 300 К      | 77 К | 300 К     | 77 К | 300 К | 77 К | 300 К                                  | 77 К |
| Co                             | 15       | 630        | 680  | 0.62      | 0.62 | 0.26  | 0.26 | 36.1                                   | 38.4 |
| $\text{Co}_{80}\text{Ni}_{20}$ | 22       | 600        | 670  | 0.69      | 0.76 | 0.23  | 0.20 | 27.1                                   | 28.1 |
| $\text{Co}_{50}\text{Ni}_{50}$ | 29       | 480        | 620  | 0.66      | 0.66 | 0.25  | 0.25 | 24.3                                   | 27.4 |
| $\text{Co}_{20}\text{Ni}_{80}$ | 37       | 300        | 390  | 0.64      | 0.67 | 0.25  | 0.24 | 15.2                                   | 16.1 |
| Ni                             | 31       | 140        | 290  | 0.59      | 0.73 | 0.28  | 0.21 | 8.5                                    | 10.5 |

Обратимая часть кривой намагничивания в области приближения намагниченности к насыщению для всех образцов изучаемых частиц  $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x$  следует степенной зависимости  $M \sim H^{-2}$  (закон Акулова, см.[7]):

$$M(H)/M_s = 1 - (2aK_{eff}/M_s H)^2, \quad (1)$$

где  $M_s$  — намагниченность насыщения,  $K_{eff}$  — константа эффективной анизотропии,  $a$  — симметричный коэффициент. Выполнение этой зависимости (рис. 1) свидетельствует как об отсутствии обменных взаимодействий между исследуемыми частицами, так и о ведущей роли процессов неоднородного вращения намагниченности при намагничивании системы частиц [4].

Форма экспериментальных кривых намагничивания не соответствует по отдельности форме петель с одноосной либо с кубической магнитной анизотропией, рассчитанных в стандартной модели Стонера-Вольфарта. Величины остаточной намагниченности  $m_r = M_r/M_s$  для всех образцов наночастиц  $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x$  (табл. 1, пример на рис. 2) оказываются большими, чем  $m_r = 0,5$  (положительная одноосная магнитная анизотропия) и меньшими, чем  $m_r = 0,86$  (отрицательная кубическая магнитная анизотропия), характерными для монокристаллов  $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x$  [5]. Экспериментальные значения величин остаточной намагниченности для наночастиц могут быть получены в рамках комбинированной модели Стонера-Вольфарта, в которой полная энергия магнитной анизотропии однодоменной частицы имеет одновременно и кубическую, и одноосную составляющие [6]. Необходимость использования данной модификации модели Стонера-Вольфарта при интерпретации экспериментальных кривых намагничивания исследуемых наночастиц становится очевидной в связи с установленными ранее особенностями морфологии и структуры наночастиц Co-Ni, а именно: несферичность формы частиц, а также наличие дефектов упаковки, вблизи которых атомы характеризуются ГПУ ближайшим окружением.

В композиционном варианте модели Стонера-Вольфарта, рассмотренном в [6], энергия магнитной анизотропии каждой наночастицы складывается как из энергии случайно ориен-

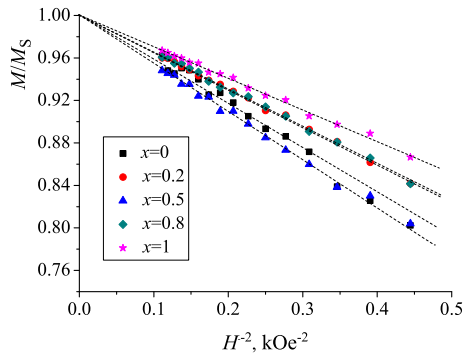


Рис. 1. Экспериментальные кривые приближения намагниченности к насыщению наночастиц  $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x$  при температуре 77 К

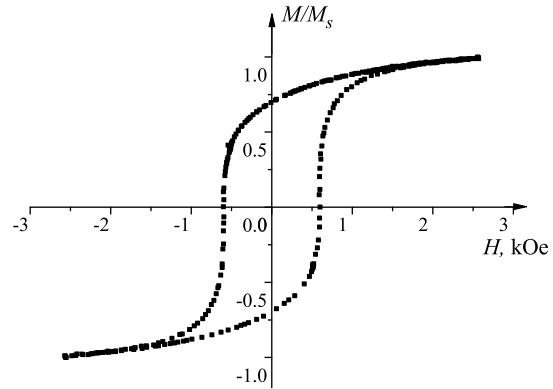


Рис. 2. Типичная петля гистерезиса, поправленная на размагничивающее поле, на примере наночастиц  $\text{Co}_{80}\text{Ni}_{20}$  при температуре 300 К

тированной кубической магнитокристаллической анизотропии, так и из энергии случайно ориентированной одноосной магнитной анизотропии. Полная магнитная энергия одной частицы в композиционном варианте модели Стонера-Вольфарта запишется в виде

$$E = (K_1 + K_u) [k_u \alpha_{u3}^2 + (1 - k_u)(\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) - h(\alpha_1 \beta_1 + \alpha_2 \beta_2 + \alpha_3 \beta_3)] \quad (2)$$

где  $k_u = K_u / (K_1 + K_u)$  и  $h = M_s H / (K_1 + K_u)$ ;  $M_s$  — намагниченность насыщения одной частицы;  $H$  — внешнее магнитное поле;  $K_u$  и  $K_1$  — константы одноосной и кубической магнитной анизотропии частицы;  $\alpha_{u3}$  — направляющий косинус орта намагниченности по отношению к легкой оси одноосной анизотропии;  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  — направляющие косинусы орта локальной намагниченности по отношению к одной из осей выбранной системы координат, жестко связанной с одной из осей кубической анизотропии;  $\beta_1, \beta_2, \beta_3$  — направляющие косинусы вектора внешнего магнитного поля.

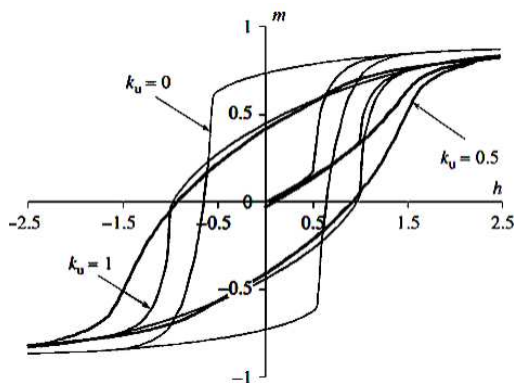


Рис. 3. Изменение формы петли гистерезиса в модели с комбинированной симметрией магнитной анизотропии

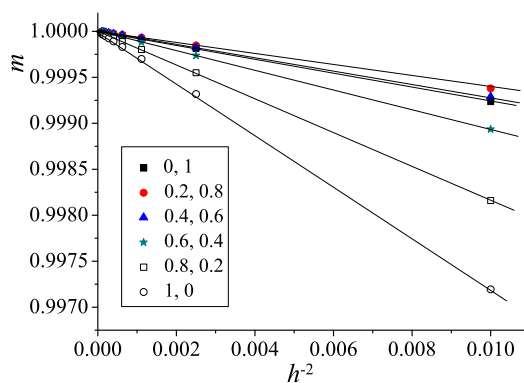


Рис. 4. Приближение намагниченности к насыщению в композиционном варианте модели Стонера-Вольфарта

Пример расчетных кривых намагничивания, полученных с использованием энергии в

форме (2), приведен на рис. 3. При  $k_u = 0$  либо 1 получаются классические кривые модели Стонера-Вольфарта, характеризующиеся хорошо известными параметрами. В композиционном варианте модели Стонера-Вольфарта ( $k_u = 0,5$ ) видна модификация формы кривой намагничивания, а также основных параметров петли гистерезиса. В работе [6], посвященной численному моделированию, были рассчитаны кривые намагничивания для случая  $K_u > 0, K_1 < 0$ , адекватного нашей экспериментальной ситуации. Расчетные графики приближения намагниченности к насыщению в композиционном варианте модели Стонера-Вольфарта для различных вкладов одноосной и кубической анизотропии в осях  $(m, h^{-2})$ , где  $m = M/M_s$  соответствуют закону Акулова (рис. 4):

$$m(h) = 1 - \left[ \frac{aH_a}{H} \right]^2 = 1 - \left[ \frac{2aK_{eff}}{(K_u + K_1)h} \right]^2 = 1 - \left[ \frac{a_0}{h} \right]^2. \quad (3)$$

Симметричный коэффициент  $a$  в законе Акулова для системы однодоменных частиц со случайной одноосной анизотропией равен  $\sqrt{1/15}$ , а для частиц с кубической анизотропией  $-\sqrt{2/105}$ . При наличии комбинированной симметрии магнитной анизотропии коэффициент  $a_0$  должен зависеть от относительной доли вклада энергии одноосной анизотропии в результирующую энергию анизотропии. Как оказалось, зависимость  $a_0^2(k_u)$  имеет нелинейный характер и может быть хорошо аппроксимирована квадратичным полиномом [6]:

$$a_0^2(k_u) = 0,37k_u^2 - 0,17k_u + 0,08. \quad (4)$$

Для предельных случаев одноосной и кубической анизотропии симметричный коэффициент  $a_0^2$  принимает значения  $4/15$  и  $8/105$ , впервые вычисленные для одноосных и кубических кристаллов в [3]. Используя результаты численного моделирования в рамках композиционной модели Стонера-Вольфарта, по экспериментальной кривой намагничивания, предварительно поправленной на размагничивающее поле (рис. 2), можно определить как полную энергию магнитной анизотропии исследуемых частиц Ni-Co, так и энергетические вклады одноосной и кубической анизотропии в полную энергию магнитной анизотропии частиц. Сопоставляя экспериментальные значения остаточной намагниченности частиц (табл. 1) с величинами остаточной намагниченности, рассчитанной в рамках композиционной модели Стонера-Вольфарта, мы определили величину  $k_u = K_u/(K_1 + K_u)$  — вклад энергии одноосной магнитной анизотропии в полную энергию магнитной анизотропии (табл. 1). Далее, используя полученное значение  $k_u$ , мы вычислили величину симметричного коэффициента  $a$  в законе Акулова для каждого исследуемого образца. По тангенсам наклона прямолинейных участков экспериментальных кривых приближения намагниченности к насыщению (рис. 1) определили произведение величины полной энергии анизотропии на симметричный коэффициент, т.е. величину  $aK_{eff}$ . Мы использовали вычисленную величину коэффициента  $a$  для определения величины  $K_{eff}$  (табл. 1).

Зависимость коэрцитивной силы (приведенной к полю анизотропии  $H_c/H_a$ ) от размера частицы (приведенного к величине критического размера однодоменности  $D/R_0$ ) в двойных логарифмических координатах характеризуется максимумом (вблизи  $D/R_0 = 1,3$  — критический размер однодоменности). Величина критического размера однодоменности для каждого образца вычислялась по формуле  $R_0 = 1,44\sqrt{\frac{A}{M_s^2}}$  для сферической частицы [7], с использованием величин магнитных констант, определенных из магнитометрических измерений [2]. Величина поля магнитной анизотропии частицы рассчитана как  $H_a = 2K_{eff}/M_s$ . На рис. 5 также дано сопоставление наших данных с результатами работы [8] по магнитным наночастицам  $Co_{80}Ni_{20}$ . Наблюдаемое смещение позиции максимума зависимости  $H_c/H_a$  от 1 ( $D = R_0$ ) на рис. 5, на наш взгляд, обусловлено несферической формой исследуемых частиц.

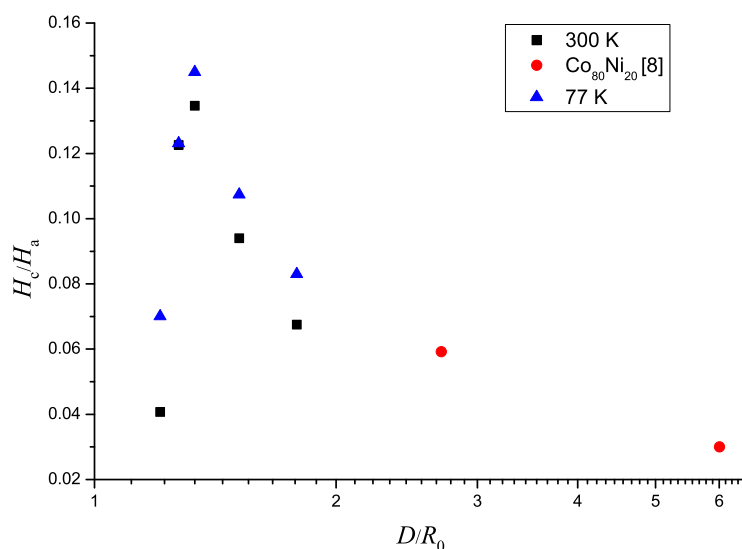


Рис. 5. Зависимость коэрцитивной силы (приведенной к полю анизотропии) от размера частиц (приведенного к величине критического размера однодоменности)

Таким образом, предложен новый способ определения энергетических вкладов одноосной и кубической анизотропии в полную энергию магнитной анизотропии частиц на основе результатов численного моделирования экспериментальной кривой намагничивания. Применимость метода продемонстрирована на примере набора наночастиц Ni-Co переменного состава.

*Работа выполнена в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.*

## Список литературы

- [1] E.C.Stoner, E.P.Wholfarth, A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys, *Phil. Trans. Roy. Soc. A*, **240**(1948), 559–564.
- [2] S.V.Komogortsev, R.S.Iskhakov, K.A.Shayhutdinov, et.al., Magnetic properties of Ni<sub>x</sub>Co<sub>1-x</sub> Nanoparticles in Carbon Nanotubes, *The Phys. Met. Met.*, **102**(2006), Suppl. 1, S67–S70.
- [3] Н.С.Акулов, Л.В.Киренский, Магнитный метод исследования внутренних напряжений в ферромагнитных металлах, *ЖТФ*, **9**(1939), №13, 1145–1150.
- [4] С.В.Комогорцев, Р.С.Исхаков, А.Д.Балаев и др., Магнитные свойства ферромагнитных наночастиц Fe<sub>3</sub>C, капсулированных в углеродных нанотрубках, *ФТТ*, **49**(2007), вып.49, 700–703.
- [5] Magnetic properties of metals, Edited by H.P.J.Wijn, Springer-Verland Berlin Heidelberg, 1991.
- [6] S.I.Smirnov, S.V.Komogortsev, Magnetization curves of randomly oriented ferromagnetic singledomain nanoparticles with combined symmetry of magnetic anisotropy, *J. Magn. Magn. Mat.*, **320**(2008), 1123–1127.

- [7] С.В.Вонсовский, Магнетизм, Наука, Москва, 1971.
- [8] G.V.Kurlyandskaya, S.M.Bhagat, C.Luna, M.Vazquez, Microwave absorption of nanoscale CoNi powders, *Jour. Appl. Phys.*, **99**(2006), 104308.

## **Technique for Determination the Energy of Uniaxial and Cubic Magnetic Anisotropy in Magnetic Nanoparticles from Experimental Magnetization Curve**

**Sergey V. Komogortsev**  
**Sergey I. Smirnov**  
**Nadezhda A. Momot**  
**Rauf S. Iskhakov**

---

*Technique for determination the energy of uniaxial and cubic magnetic anisotropy in magnetic nanoparticles from experimental magnetization curve is proposed. The technique is based on the numerical simulation of experimental magnetization curve in the terms of the composite mode of the Stoner-Wolfarth model. Investigation of magnetic anisotropy for Co-Ni nanoparticles is carried out by proposed technique.*

*Keywords: numerical modeling, ferromagnetic nanoparticles, magnetic anisotropy, Stoner-Wolfarth model.*