## Про критичний розмір переходу феромагнетика в однодоменний стан

Ю.О. Тихоненко-Поліщук, О.І. Товстолиткін

Інститут магнетизму НАН України та МОН України, бул. Вернадського 36-б, 03680 Київ, Україна

(Одержано 14.03.2017, у відредагованій формі – 26.04.2017, опубліковано online 28.04.2017)

Виконано аналіз підходів для визначення критичного розміру переходу феромагнетика в однодоменний стан ( $d_{cr}$ ), зроблено узагальнення для випадків магнітних матеріалів з різними видами анізотропії та для частинок еліптичної форми. Уточнено критерії застосовності кожного з проаналізованих підходів. Виокремлено типові помилки, які зустрічаються в науковій літературі для оцінки  $d_{cr}$ . Розраховано  $d_{cr}$  для найбільш поширених феромагнітних матеріалів, виконано порівняння з наявними експериментальними даними. Впорядковано та систематизовано дані щодо магнітних параметрів найбільш поширених феромагнітних матеріалів.

Ключові слова: Феромагнетик, Критичний розмір однодоменності, Однодоменний стан, Вортексний стан, Багатодоменний стан, Обмінна довжина, Параметр магнітної жорсткості, Магнітом'який магнетик, Магнітожорсткий магнетик.

DOI: 10.21272/jnep.9(2).02028

PACS numbers: 75.30.Gw, 75.75. - c, 81.07.Bc

### 1. ВСТУП

Магнітні наночастинки (МНЧ) знаходять все ширше застосування в інформаційних технологіях, НВЧ електроніці, біології, медицині [1, 2, 3, 4]. Із медичних застосувань слід відмітити використання МНЧ в якості контрастних речовин у магнітно-резонансній томографії [5], агентів цілеспрямованої доставки ліків [4, 6], а також використання магнітних рідин на основі МНЧ у магнітній гіпертермії ракових пухлин [7, 8, 9, 10].

Серед жорстких вимог, яким мають задовольняти МНЧ, часто зустрічається вимога перебування наночастинок в магнітно-однодоменному стані [3, 4, 9, 10, 11, 12]. Для детального розроблення та прогнозування напрямів діяльності з магнітними наночастинками бажано мати відносно прості критерії, які дадуть змогу оцінити критичний розмір dcr, нижче якого МНЧ буде перебувати в однодоменному стані. У літературі можна знайти різні підходи до визначення *d*<sub>cr</sub>, при цьому кожен з них має чітко окреслену область застостосовності. Тому при використанні кожного підходу слід обов'язково контролювати виконання критерію застосовності. Насправді ж у багатьох роботах ця вимога або повністю ігнорується, або застосовується некоректно. Також нерідко зустрічається використання неточних формул або формул, отриманих із помилкових припущень.

У роботах [11, 12, 13, 14, 15] робляться оцінки критичного розміру однодоменності низки феромагнітних матеріалів, однак критерій застосовності формул не перевіряється. Роботи [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17] містять багато розрахункових неточностей у формулах, а також у коефіціентах при переході із системи СІ в СГС, хоча отримання формул в цих роботах ґрунтусться на одному й тому ж записі енергетичного балансу. У випадках, коли феромагнетик є магнітом'яким чи магнітожорстким, оцінка  $d_{cr}$  вимагає різних підходів, однак у роботах [11, 13, 14, 17, 18] цей аспект ігнорується.

Для низки практичних застосувань виникає необхідність проаналізувати, як зміниться формула для визначення *d*<sub>cr</sub>, якщо форма МНЧ буде відрізнятися від ідеальної сферичної (така ситуація важлива для розуміння результатів робіт [13, 19, 20, 21, 22, 23]). Також слід врахувати можливість реалізації як одноосної [10, 11, 13, 24], так і кубічної ефективної анізотропії магнетиків [13, 18, 21, 22, 25]. Тому встановлення прозорості у питаннях, пов'язаних з оцінкою параметра  $d_{cr}$ , є актуальною задачею в наш час.

У даній роботі ми детально зупинимось на з'ясуванні того, що однозначно слід розуміти під критичним розміром однодоменності  $d_{cr}$ , уточнимо критерії застосовності тих чи інших підходів до визначення  $d_{cr}$ , а також впорядкуємо та систематизуємо дані щодо магнітних параметрів найбільш поширених феромагнітних матеріалів.

### 2. ВИЗНАЧЕННЯ ДОПОМІЖНИХ МАГНІТОС-ТАТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ: ОБМІННОЇ ДО-ВЖИНИ *lex* ТА ПАРАМЕТРА МАГНІТНОЇ ЖОРСТКОСТІ *к*

Відомо, що при зменшенні розмірів магнетика нижче  $d_{cr}$  він не обов'язково переходить із багатодоменного у однодоменний стан, а за певних умов у ньому може реалізуватися перехідний «*вортексний*» стан (із замкнутим магнітним потоком) [13, 14, 18, 19]. Ключову роль у послідовності таких магнітних переходів відіграє енергетичний баланс між взаємодіями, притаманними феромагнетику (магнітостатичною, обмінною, зееманівською та ін.). Для характеристики співвідношення відповідних енергій доцільно ввести такі допоміжні магнітні параметри, як параметр магнітної жорсткості к та обмінну довжину  $l_{ex}$ .

Параметр магнітної жорсткості показує наскільки сильним чи слабким є вклад від енергії анізотропії у порівнянні зі вкладом від магнітостатичної енергії [13]:

$$\kappa = \frac{2K_1}{\mu_0 M_S^2}$$
, (СІ) та  $\kappa = \frac{2K_1}{4\pi M_S^2}$ , (СГС) (1.1)

де  $K_1$  – константа ефективної анізотропії (одноосної [13, 17] або коефціцієнт при першому члені у розкладі кубічної анізотропії [13, 16, 17]),  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$  Гн/м – магнітна постійна,  $M_S$  – намагніченість насичення. Важливо пам'ятати, що при розрахунках параметра  $\kappa$  константа К1 завжди береться по модулю.

Обмінна довжина *l*<sub>ex</sub> показує наскільки сильним чи слабким є вклад від обмінної енергії у порівнянні зі вкладом від магнітостатичної енергії [13]:

$$l_{ex} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}}$$
, (CI) ta  $l_{ex} = \sqrt{\frac{2A}{4\pi M_S^2}}$ , (CIC) (1.2)

де A – константа обмінної жорсткості, яка визначає густину обмінної енергії магнетика  $\omega_{ex}$ :  $\omega_{ex} = A(\nabla \mathbf{m})^2$ , де  $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M_S$ ,  $\mathbf{M}$  – вектор намагніченості [26]. Для кубічної кристалічної ґратки з n магнітними атомами в елементарній комірці  $A = (n \Im S^2)/a$  (тут,  $\Im$  – обмінний інтеграл, S – спін, a – постійна ґратки).

Детальна інформація про те, як можна отримати формули для параметрів  $\kappa$  та  $l_{ex}$  і відповідні переходи із системи СІ в СГС, міститься в Додатку А.



**Рис.** 1.1 – Можливі магнітні конфігурації в залежності від розмірів сферичних МНЧ у випадку (а) магнітом'яких та (б) магнітожорстких матеріалів. Враховуючи можливість реалізації як одноосної, так і кубічної магнітної анізотропії, при переході через критичний розмір  $d_{cr1}$  (або  $d_{cr2}$ ) показані відповідні моделі дводоменного та чотиридоменного станів

У літературі можна знайти наступну класифікацію матеріалів за величиною параметра магнітної жорсткості к: к << 1 – для магнітом'яких та  $\kappa \ge 1 - для$  магнітожорстких матеріалів [13]. У магнітом'яких магнітожорстких матеріалах та послідовність магнітних конфігурацій реалізується по-різному. У першому випадку зі збільшенням розміру вище певного критичного значення d<sub>cr0</sub> магнетик спочатку переходить у «вортексний» стан і лише при подальшому збільшенні розміру вище dcr1 (dcr1 > dcr0) він переходить у багатодоменний стан (рис. 1.1, a). У випадку магнітожорстких матеріалів перехідний «вортексний» стан не прослідковується (рис. 1.1, б), тобто зі збільшенням розміру вище критичного *d*<sub>cr2</sub> магнетик відразу переходить у багатодоменний стан [13, 27].

Для коректного застосування різних підходів необхідно також враховувати, що ефективна магнітна анізотропія може бути як одноосною [10, 11, 13, 24], так і кубічною [13, 18, 21, 22, 25]. Як наслідок, можливі дві моделі реалізації багатодоменного стану – дводоменний стан (одноосна анізотропія) та чотиридомениий стан (кубічна), як показано на рис. 1.1.

### 3. КРИТИЧНИЙ РОЗМІР ОДНОДОМЕННОГО СТАНУ

#### 3.1 Оціночні підходи

Вперше на можливість переходу магнетиків у однодоменний стан звернули увагу Френкель та Дорфман [28]. За їхніми підрахунками величина  $d_{cr}$ для магнетиків середніх розмірів (близько 1 см) складала приблизно 10<sup>-2</sup> см, що насправді на декілька порядків перевищує правильне значення для  $d_{cr}$ .

Один із найпростіших оціночних підходів до встановлення величини d<sub>cr</sub>, який базується на складанні енергетичного балансу для станів з однорідним (однодоменним) і неоднорідним розподілом магнітних моментів («вортексним» або дводоменним/ чотиридоменним), був викладений Кіттелем [18, 25]. Кіттель проводив розрахунки для частинок сферичної форми та проаналізував окремо випадки магнітом'яких та магнітожорстких матеріалів. Iз співвідношення енергій для МНЧ сферичної форми можна отримати, що критерієм застосовності такого підходу буде виконання одної з двох нерівностей:  $\kappa < 0,3334$  – для магнітом'яких аб<br/>о $\kappa \ge 0,3334$  – для магнітожорстких матеріалів. Надалі розглядається випадок одноосної магнітної анізотропії, а відповідні деталі до такої оцінки розглянуті у Додатку Б. Також у випадках, де це буде можливо зробити, стисло будуть проаналізовані узагальнення на випадки магнітних матеріалів з кубічною анізотропією та МНЧ еліптичної форми.

Для сферичних частинок з магнітожорсткого матеріалу, знаходячи зазначений вище баланс між енергією в однодоменному та дводоменному станах, можна отримати такі вирази для критичного розміру однодоменності  $d_{cr2}$ :

$$d_{cr2} = \frac{72(AK_1)^{1/2}}{\mu_0 M_S^2}$$
, (CI) та  $d_{cr2} = \frac{72(AK_1)^{1/2}}{4\pi M_S^2}$ , (СГС) (1.3)

або, перепозначивши через параметри обмінної довжини  $l_{ex}$  та магнітної жорсткості  $\kappa$ , взяті у відповідних системах одиниць, як:

$$d_{cr2} = 36l_{ex} \cdot \sqrt{\kappa}.$$
 ( $\kappa \ge 0,3334$ ). (1.4)

У літературі замість коефіцієнта 72 в формулах (1.3) часто можна зустріти коефіцієнт 18 (див., наприклад, [11, 12, 14, 15]). Це зумовлює низку розходжень між експериментальними та розрахованими критичними розмірами [12, 13, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35]. Послідовне виведення на основі енергетичного балансу, яке можна знайти у розділі Б.1 Додатку Б, приво-

дить до результатів (1.3) та (1.4), які ми будемо використовувати надалі як правильні формули для критичного розміру однодоменності  $d_{cr2}$  магнітожорсткого матеріалу, отримані у наведеному оціночному підході.

Для сферичних частинок з магнітом'якого матеріалу, знаходячи по аналогії баланс між енергією у однодоменному та «вортексному» станах, можна отримати для критичного розміру однодоменності  $d_{cr0}$ трансцендентне рівняння:

$$d_{cr0} = \sqrt{\frac{72A}{\mu_0 M_S^2} \cdot \left[ \ln \frac{d_{cr0}}{a} - 1 \right]}, \quad (\text{CI})$$
(1.5)

$$d_{cr0} = \sqrt{\frac{72A}{4\pi M_S^2} \cdot \left[ \ln \frac{d_{cr0}}{a} - 1 \right]}, \ (C\Gamma C)$$
 (1.5)

або, перепозначивши через параметр обмінної довжини *l*<sub>ex</sub>, взятий у відповідних системах одиниць, як:

$$d_{cr0} = \sqrt{36l_{ex}^2 \cdot \left[\ln\frac{d_{cr0}}{a} - 1\right]}. \quad (\kappa < 0,3334). \quad (1.6)$$

У літературі можна зустріти коефіцієнт 18 замість 72 (або, що теж саме, 9 замість 36) у формулах для критичного діаметру (радіусу) однодоменності для магнітом'яких матеріалів [14]. Послідовне виведення на основі енергетичного балансу у цьому випадку, показане у розділі Б.2 Додатку 2, приводить до результатів (1.5) – (1.5') та (1.6), які ми будемо використовувати надалі в якості правильних формул для критичного розміру однодоменності  $d_{cr0}$  магнітом'якого матеріалу, отриманих у такому підході.

Із експериментів відомо, що у більшості випадків ефективна магнітна анізотропія МНЧ є одноосною з енергією  $E_a = K_1 \cdot \sin^2 \theta$  (де  $\theta$  – кут між напрямком магнітного моменту і легкою віссю) незалежно від того, якими є симетрія кристалічної ґратки та внески від анізотропії форми, деформацій та поверхні [10, 11, 12, 24]. Однак, наведені вище розрахунки для критичних розмірів der можна узагальнити і на випадок кубічної анізотропії з енергією типу  $E_a = K_1$ .  $(a_{1^2} a_{2^2} + a_{2^2} a_{3^2} + a_{3^2} a_{1^2}) + K_2 \cdot a_{1^2} a_{2^2} a_{3^2} + \dots$  (тут,  $a_1, a_2, a_2, a_3 + a_3 +$ *a*<sub>3</sub> – направляючі косинуси намагніченості МНЧ) [17]. Згідно з розрахунками Кіттеля [18] та оцінками, аналогічними до оцінок розділу Б.1 у Додатку Б, для сферичної частинки з кубічною анізотропією, вважаючи, що при переході у чотиридоменний стан магнітостатична енергія майже не вносить свого вкладу у енергетичний баланс, а енергія доменних стінок збільшується вдвічі, розрахунки приводять до такого ж виразу для критичного розміру однодоменності, що і (1.3) – (1.4).

Звичайно форму реальних МНЧ лише з певним наближенням можна розглядати як ідеальну сферичну. Як було вказано вище, частинки у більшості випадків характеризуються одноосною анізотропією, тому, де це можливо, доцільно розглянути узагальнення на випадок МНЧ еліптичної форми.

Аналогічні міркування до розрахунків, приведених у розділі Б.1 Додатку Б, дозволяють оцінити критичний розмір однодоменності *d*<sub>cr2</sub> для еліптичної частинки з магнітожорсткого матеріалу [13]: Ж. нано- електрон. ФІЗ. 9, 02028 (2017)

$$d_{cr2} = \frac{12(AK_1)^{1/2}}{(1-\alpha) \cdot N_b \cdot \mu_0 M_S^2}, \text{ (CI)}$$
(1.7)

$$d_{cr2} = \frac{12(AK_1)^{1/2}}{(1-\alpha) \cdot N_b \cdot 4\pi M_S^2}, \text{ (CFC)}$$
(1.7)

де  $N_b$  – фактор розмагнічування вздовж довгої осі еліпсоїда b, а  $\alpha$  – так званий «понижуючий» параметр (див. [18, 25]; зазвичай  $\alpha = 1/2$ ). Із виразів (1.7) та (1.7) для сферичної частинки з фактором розмагнічування 1/3 (СІ) або  $4\pi/3$  (СГС) легко отримати вирази (1.3) та (1.4).

Узагальнення на випадок частинок еліптичної форми з магнітом'якого матеріалу на основі викладок, аналогічних до розділу Б.2 Додатку Б, дає наступну оцінку для критичного розміру  $r_{cr0}$  (r – коротка піввісь еліпсоїда,  $d = 2r_{cr0}$ ) [20]:

$$\begin{aligned} r_{cr0} &= \sqrt{\frac{6A}{N_b \cdot \mu_0 M_S^2} \cdot \left[ \ln \frac{2r_{cr0}}{a} - 1 \right]}, \ \text{(CI)} \quad (1.8) \\ r_{cr0} &= \sqrt{\frac{6A}{N_b \cdot 4\pi M_S^2} \cdot \left[ \ln \frac{2r_{cr0}}{a} - 1 \right]}. \ \text{(CFC)} \quad (1.8) \end{aligned}$$

Підставляючи у формули (1.8) та (1.8') значення фактору розмагнічувааня  $N_b$  для сферичної частинки 1/3 (СІ) або 4 $\pi$ /3 (СГС), отримуємо граничні вирази (1.5) – (1.5') та (1.6).

### 3.2 Строгий підхід Брауна

Зазвичай, враховуючи простоту та зрозумілість наведеного оціночного підходу, у літературі часто використовують його для оцінки значення  $d_{cr}$  [11, 12, 13]. Однак, нерідко виявляється, що отримані таким чином теоретичні та експериментальні значення критичних розмірів відрізняються на порядки (див. табл. 1.1, а також [12, 13, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35]). Тому у даній роботі ми розглядаємо ще один підхід, який прийнято називати строгим методом Брауна [19, 21, 22], та у розділі 3.3 аналізуємо результати обох зазначених підходів для знаходження  $d_{cr}$ , порівнявши їх з отриманими на експерименті значеннями.

Останній метод вважають строгим, оскільки, на відміну від наведеного вище оціночного підходу, в ньому точно розраховуються внески від взаємодій у магнетику до енергетичного балансу. Так, наприклад, замість «понижуючого» параметра  $\alpha = 1/2$ , який вводиться Кіттелем для розрахунку магнітостатичної енергії при переході у стан з неоднорідним розподілом магнітних моментів (див. Додаток Б), у підході Брауна приводиться розрахунок точного коефіцієнту [22]. Далі будуть наведені формули для характерних розмірів  $d_{cr0}$  та  $d_{cr1}$  (для магнітом'яких матеріалів), а також для dcr2 (для магнітожорстких), отримані з використанням підходу Брауна у мікромагнітному наближенні для випадку, коли магнетик характеризується одноосною анізотропією з константою  $K_1$ . У випадку кубічної анізотропії згідно з розрахунками Брауна [22] відповідні формули для  $d_{cr0}$ ,  $d_{cr1}$  та  $d_{cr2}$ не зміняться, якщо замість константи К<sub>1</sub> просто взяти константу, яка відповідає першому члену у розкладі енергії анізотропії для магнетиків з кубічною анізотропією [17], як найбільш значиму.

Слід зазначити, що під критерієм застосовності такого підходу розуміється виконання одної з двох умов:  $\kappa < 0.3253 - для$  магнітом'яких або  $\kappa \ge 0.3253$ для магнітожорстких матеріалів. Умова, за якої  $\kappa = 0.3253$ , згідно з Брауном, задає критичне значення параметра магнітної жорсткості, яке відповідає умові переходу від магнітом'яких до магнітожорстких матеріалів. Отримати вказану величину можна, використовуючи наведені нижче формули для dcr0,  $d_{cr1}$  та  $d_{cr2}$  та умову, що при критичному  $\kappa$ :  $d_{cr1}/d_{cr0} = d_{cr2}/d_{cr0}$  (див. розділ В.З Додатку В). Однак, наведений числовий критерій  $\kappa = 0.3253$  дещо відрізняється від значення, яке приводить Браун у своїх роботах [21, 22], а саме  $\kappa = 0.3536$  або  $K_1 </ \ge$ 0,1768 µ0Ms<sup>2</sup>. Деталі оцінок критерію застосовності даного підходу та виразів для *d*<sub>cr0</sub>, *d*<sub>cr1</sub> та *d*<sub>cr2</sub> показані у Додатку В.

Для випадку сферичних частинок з магнітом'якого матеріалу можна отримати наступний вираз для критичного розміру однодоменності  $d_{cr0}$ [21, 22]:

$$d_{cr0} = 7,211 \cdot \left(\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}\right)^{1/2}$$
, (CI) (1.9)

$$d_{cr0} = 7,211 \cdot \left(\frac{2A}{4\pi M_S^2}\right)^{1/2}$$
. (CFC) (1.9)

Критичний розмір переходу з «вортексного» стану у багатодоменний *d*<sub>cr1</sub> становить [21, 22]:

$$d_{cr1} = \frac{9,0584 \cdot \left(\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}\right)^{1/2}}{1 - 2,8075 \cdot \frac{2K_1}{\mu_0 M_S^2}}, \quad \text{(CI)} \quad (1.10)$$

$$d_{cr1} = \frac{9,0584 \cdot \left(\frac{2A}{4\pi M_S^2}\right)^{1/2}}{1 - 2,8075 \cdot \frac{2K_1}{4\pi M_S^2}}.$$
 (CFC) (1.10')

Для магнітожорстких матеріалів, критичний розмір  $d_{cr2}$  переходу сферичної частинки з однодоменного у багатодоменний стан складає [21, 22]:

$$\begin{split} d_{cr2} &= \frac{9\pi \cdot \left(2A \cdot \{K_1 + 2\sigma\mu_0 M_S^2\}\right)^{1/2}}{\mu_0 M_S^2 \cdot (3\sigma - 2)}, \ \text{(CI)} \ (1.11) \\ d_{cr2} &= \frac{9\pi \cdot \left(2A \cdot \{K_1 + 2\sigma \cdot 4\pi M_S^2\}\right)^{1/2}}{4\pi M_S^2 \cdot (3\sigma - 2)}, \ \text{(CIC)}(1.11) \end{split}$$

де вводиться чисельний коефіцієн<br/>т $\sigma$ , рівний  $\sigma = 0,785398$  [22].

Перепозначивши через параметри обмінної довжини  $l_{ex}$  та магнітної жорсткості  $\kappa$ , взяті у відповідних системах одиниць, відповідні критичні розміри  $d_{cr0}$ ,  $d_{cr1}$ ,  $d_{cr2}$  можна записати як:

$$d_{cr0} = 7,211 \cdot l_{ex}, \ (\kappa < 0,3253) \tag{1.12}$$

$$d_{cr1} = \frac{9,0584}{1 - 2,8075 \cdot \kappa} l_{ex}, \ (\kappa < 0,3253)$$
(1.13)

$$d_{cr2} = \frac{9\pi \cdot (\kappa + 4\sigma)^{1/2}}{\sqrt{2} \cdot (3\sigma - 2)} l_{ex}. \ (\kappa \ge 0.3253) \quad (1.14)$$

Аналогічно до попередніх міркувань, наведених при розгляді оціночного підходу Кіттеля, та розрахунків у розділі В.1 Додатку В можна узагальнити вираз для критичного розміру однодоменності  $d_{cr0}$  на випадок еліптичних МНЧ з магнітом'якого матеріалу. У загальному випадку частинки, яка має форму витягнутого сфероїда (теж саме, що еліпсоїд з обертальною симетрією, у якого r – коротка піввісь, b – довга піввісь,  $N_r$  – фактор розмагнічування вздовж короткої осі), для критичного розміру  $r_{cr0}$  ( $d = 2r_{cr0}$ ), нижче якого однодоменна конфігурація магнітних моментів відповідає мінімуму енергії частинки, аналіз дає наступний вираз [19, 22]:

$$\begin{split} r_{cr0} &= q_1 \cdot \left(\frac{2A}{N_r \cdot \mu_0 M_S^2}\right)^{1/2}, \, d_{cr0} = 2r_{cr0} \; (\kappa < 0.3253) \; (1.15) \\ r_{cr0} &= q_1 \cdot \left(\frac{2A}{N_r \cdot 4\pi M_S^2}\right)^{1/2}, \, d_{cr0} = 2r_{cr0} \; (\kappa < 0.3253) \; (1.15') \end{split}$$

де коефіцієнт  $q_1$  пробігає значення від 1,84 (для випадку нескінченно витягнутого циліндра) до 2,08 (випадок сферичної частинки) [19, 23], а також у випадку витягнутого сфероїда задовольняє наступному рівнянню [23]:

$$\begin{split} q_1 = & 1,84120 + 0,48694 / m - 0,11381 / m^2 - \\ & - & 0,50149 / m^3 + 0,54072 / m^4 - 0,172 / m^5, \ (1.16) \end{split}$$

де m — відношення геометричних розмірів (осей) сфероїда. Наприклад, для нескінченно витягнутого циліндра  $m = \infty$ , звідки з (1.16) отримуємо  $q_1 = 1,84$ . Аналогічний розрахунок для сферичної частинки з m = 1 дає  $q_1 = 2,08$  [23]. Тоді, для граничного випадку сферичної частинки ( $N_r = 1/3$  (CI) або  $4\pi/3$  (СГС)) можна отримати вирази (1.9) — (1.9) та (1.12) для критичного розміру однодоменності  $d_{cr0}$  [16, 21, 22].

Для частинок у формі сплюснутого сфероїда з похибкою всього у 1 % можна користуватись значенням аналогічного коефіціента  $q_2 \approx 2,1$  замість  $q_1$  у формулі (1.15) [23]. Використовуючи формули (1.15) та (1.15'), для граничного випадку сферичної частинки  $(N_r = 1/3 \text{ (CI) або } 4\pi/3 \text{ (СГС)})$  можна отримати вирази (1.9) – (1.9') та (1.12) для критичного розміру однодоменності  $d_{cr0}$  [16, 21, 22].

**Таблиця 1.1** – Магнітостатичні параметри  $l_{ex}$  і  $\kappa$ , а також критичні розміри однодоменності  $d_{cr0}$  (для магнітом'яких матеріалів) для сферичних МНЧ найбільш поширених феромагнетиків. Приведені значення  $M_S$ ,  $K_1$ , A та деяких інших мікромагнітних параметрів, отримані при 300 К. Параметри  $l_{ex}$ ,  $\kappa$  і  $\delta_0$  були розраховані за формулами (1.1), (1.2) та  $\delta_0 = \pi (A/K_1)^{1/2}$  (для стінки Блоха). Критичні розміри  $d_{cr0}$  та  $d_{cr2}$  були розраховані згідно з (1.4), (1.6), (1.12) та (1.14) за допомогою даних, взятих із літератури, а також власних теоретичних оцінок для матеріалів, які є найкращими кандидатами у магнітній гіпертермії [4, 9, 10, 36], а саме: лантан-заміщених манганітів ((La,Sr)MnO<sub>3</sub>) та феритових шпінелей (AFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) (див. Додаток Г). У випадку останніх феромагнетиків для того, щоб отримати  $M_S$  в емо·см<sup>-3</sup>, було враховано густину  $\rho_{(La,Sr)MnO3} \approx 6,4$  г·см<sup>-3</sup> [10] та  $\rho_{AFe_2O4} \approx 5,2$  г·см<sup>-3</sup> [37, 38, 39]. Для деяких матеріалів також наведені порівняння результатів розрахунків  $d_{cr0}$  та  $d_{cr2}$  з відповідними значеннями, отриманими на експерименті. Використані позначення: \* – магнітом'який та \*\* – магнітожорсткий матеріали

Магн. мате- ріал	<i>М</i> <sub>S</sub> , (емо∙см <sup>-3</sup> )	<i>K</i> 1, (ерг∙см <sup>-3</sup> )	А, (ерг∙см <sup>-1</sup> )	Поси- лання	к	<i>l</i> <sub>ex</sub> , (нм)	δ <sub>0</sub> , (нм)	<i>d</i> <sub>cr0</sub> , (нм)	<i>d</i> <sub>cr2</sub> , (нм)	<i>d</i> <sub>cr0</sub> , (нм)	d <sub>cr2</sub> , (нм)	<i>d</i> <sub>cr</sub> , (нм)
								Підхід Кіт- теля		Підхід Брауна		Експ.
bcc Fe*	1700	$0,481 \cdot 10^{6}$	0,3.10-6	[40], [41]	0,0265	1,29	24,8	15,5		9,3		27,5
	1710	$0,48 \cdot 10^{6}$	2,1.10-6	[42]	0,0261	3,38	65,7	45,9		24,4		[31]
hcp Co**	1400	$5.10^{6}$	1,8.10-6	[43]	0,4062	3,82	18,8		87,7		404	
	1440	$4,1.10^{6}$	$3,1.10^{-6}$	[42]	0,3147	4,88	27,3		98,5		509	
fcc Ni*	482	$-3,4.10^{4}$	$1 \cdot 10^{-6}$	[44]	0,0233	8,28	170,4	122,8		59,7		
	488	$-5.10^{4}$	$0,8 \cdot 10^{-6}$	[42]	0,0334	7,31	126	107		52,7		
CoPt**	810	$49 \cdot 10^{6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	[42]	11,892	4,93	4,49		612		1072	
Ni <sub>0,8</sub> Fe <sub>0,2</sub> (Py)*	800	$0,027 \cdot 10^{6}$	$1,3 \cdot 10^{-6}$	[45], [46]	0,0007	5,69	689	81,5		41		
	840	$0,015 \cdot 10^5$	$1 \cdot 10^{-6}$	[42]	0,0003	4,75	811	66,9		34,2		
MnBi**	598	$9.10^{6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	[13]	4,0076	6,67	10,5		481		1001	
	580	$9.10^{6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	[42]	4,2602	6,88	10,5		511		1050	
$Nd_2Fe_{14}B^{\ast\ast}$	1280	$49 \cdot 10^{6}$	0,8.10-6	[42]	4,7623	2,79	4		219		440	
SmCo5**	860	$172 \cdot 10^{6}$	$1,2 \cdot 10^{-6}$	[42]	37,032	5,08	2,62		1113		1807	
BaFe12O19**	380	$3, 3.10^{6}$	$0,6 \cdot 10^{-6}$	[42]	3,6372	8,13	13,4		558		1188	
Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> *	460	$-1,1.10^{5}$	1,53.10-6	[47]	0,0827	10,7	117	163		77,4		60
	480	$-1,3.10^{2}$	$0,7 \cdot 10^{-6}$	[42]	0,0898	6,95	72,9	102		50,1		[32], 128 [33]
	504,5	$-1,2.10^{2}$	6,64 · 10 - 7	дод. Г	0,0751	6,44	73,9	93,4		46,5		
NiFe2O4*	249,3	$0,68 \cdot 10^5$	5,03.10-7	дод. Г	0,1742	11,4	85,4	173		81,8		100 [33], 30 [34], 41,6 [35]
CoFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> **	377,1	$18.10^{5}$	5,55.10-7	дод. Г	2,0146	7,88	17,4		403		1005	70 [33, 34]
$MnFe_2O_4^*$	561,8	$-0,25 \cdot 10^{5}$	0,76.10-7	дод. Г	0,0126	1,96	54,8	25		14,1		128 [33]
$\begin{array}{c} La_{0,7} Sr_{0,3} \\ Mn O_{3}{}^{*} \end{array}$	374,1	$0,54 \cdot 10^{5}$	$1 \cdot 10^{-6}$	[12]	0,0614	10,7	135	162		76,9		70 [29],
	583,3	$0,54 \cdot 10^5$	4,28.10-7	дод. Г	0,0468	4,28	62,2	59,7		30,8		26,6 [30]
$\frac{La_{0,75}Sr_{0,25}M}{nO_{3}^{*}}$	584,6	$1.10^{2}$	3,92.10-7	дод. Г	0,0466	4,27	62,2	59,5		30,8		

Слід зауважити, що у магнетизмі існує ще один підхід до встановлення величини критичних розмірів. Так, у першому наближенні, критичний розмір однодоменності  $d_{cr0}$  або  $d_{cr2}$  можна порівняти з товщиною доменної стінки Блоха  $\delta_0 = \pi(A/K_1)^{1/2}$  (тут,  $K_1$  – константа ефективної анізотропії, аналогічна до міркувань, використаних при розгляді (1.1)) [13, 14, 16, 17]. Як наслідок, параметри магнітом'яких та магнітожорстких магнетиків мають задовольняти відповідним вимогам:  $d_{cr0} \ll \delta_0$  або  $d_{cr2} >> \delta_0$  [13, 16].

# 3.4 Розрахунки *d*<sub>cr</sub> для найбільш поширених феромагнітних матеріалів

Використовуючи формули (1.1), (1.2), (1.4), (1.6), (1.12) та (1.14), для найбільш поширених феромагнетиків нами були розраховані параметри  $l_{ex}$ ,  $\kappa$ ,  $d_{cr0}$  та  $d_{cr2}$  (див. табл. 1.1), останні два з яких можна порівняти з приведеними величинами  $\delta_0$  у кожному випадку.

Перше, на що слід звернути увагу, – з даних, наведених у табл. 1.1 випливає, що результати оціночного та строгого підходів до знаходження критичних розмірів можуть сильно відрізнятися (в деяких випадках – на порядок величини). Порівняння з експериментальними даними для деяких матеріалів, зокрема Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, La<sub>0,7</sub>Sr<sub>0,3</sub>MnO<sub>3</sub> та NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (див. табл. 1.1), в свою чергу, свідчить про те, що для знаходження критичних розмірів слід застосовувати саме строгий підхід Брауна. Можливі відмінності у результатах для Fe, наприклад, пов'язані з тим, що для теоретичних розрахунків були використані параметри об'ємних зразків. На користь використання строгого підходу Брауна вказує і те, що дані, отримані за цим методом, добре узгоджуються з результатами альтернативного підходу (порівняння з  $\delta_0$ ), тоді як результати оціночного підходу нерідко відрізняються від бо, зокрема для Lao, 7Sro.3MnO3, Fe3O4 та NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>.

Крім того, аналізуючи дані з табл. 1.1, бачимо, що *підхід на основі порівняння з*  $\delta_0$ , залишається справе *дливим* не тільки для магнетиків, які характеризуються одноосною ефективною магнітною анізотропією, але й, наприклад, для випадку кубічної анізотропії він також дає правильний результат. Застосування підходу, в якому критичний розмір порівнюється з товщиною доменної стінки, для випадку матеріалів з кубічною анізотропією (наприклад, заліза) вперше показав Кіттель у своїй роботі [18]. Проте, він отримав неправильний результат, оскільки не оцінював величину анізотропії за критерієм  $\kappa </\geq 0,3334$ , наведеним вище для такого підходу.

Таким чином, для правильного розрахунку критичних розмірів  $d_{cr0}$ ,  $d_{cr1}$  та  $d_{cr2}$  можна використовувати як строгий підхід Брауна (формули (1.9) – (1.11)) з обов'язковою перевіркою критерію його застосовності до відповідного класу матеріалів, так і альтернативний підхід, якщо відомі параметри  $K_1$  та A, необхідні для розрахунку товщини доменної стінки.

Результати для магнітостатичних параметрів  $l_{ex}$  та к, критичних розмірів  $d_{cr0}$  та  $d_{cr2}$  та основні формули для переходу між системами СІ та СГС для цих параметрів стисло показані у табл. 1.2.

Слід пам'ятати, що при розрахунках всіх магніто-

Ж. нано- електрон. ФІЗ. 9, 02028 (2017)

статичних параметрів та критичних розмірів, у які входить константа анізотропії  $K_1$ , її значення завжди береться по модулю.

**Таблиця 1.2** – Вирази для магнітостатичних параметрів  $l_{ex}$  і <br/>  $\kappa$ та критичних розмірів  $d_{c0}$  <br/>і $d_{cr2}$ у системах СІ та СГС

Параметр	CI	СГС				
Обмінна довжина	$l_{ex} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}}$	$l_{ex} = \sqrt{\frac{2A}{4\pi M_S^2}}$				
Параметр магнітної жорсткості	$\kappa = \frac{2K_1}{\mu_0 M_S^2}$	$\kappa \!=\! \frac{2K_1}{4\pi M_S^2}$				
Результати за строгим підходом Брауна						
Критичний діаметр $d_{cr0}$ (магні- том'який матеріал, $\kappa$ < 0,3253)	$d_{cr0} = 7,211 \cdot l_{ex}$					
Критичний діаметр $d_{cr2}$ (магні- тожорст- кий мате- ріал, $\kappa \ge 0,3253$ )	$d_{cr2} = \frac{9\pi}{\sqrt{2}}$ $\sigma = 0,$	$\frac{\left(\kappa+4\sigma\right)^{1/2}}{\overline{2}\cdot(3\sigma-2)}l_{ex},$ 785398				

### 4. ВИСНОВКИ

У даній роботі детально проаналізовано декілька підходів (Кіттеля, Брауна та альтернативний) до розрахунку величини критичного розміру однодоменності МНЧ, які на сьогодні використовуються найчастіше, а також уточнено їх критерії застосовності. При розрахунках  $d_{cr}$  розглянуто випадки відхилення форми наночастинки від ідеальної сферичної та реалізації як одноосної, так і кубічної магнітної анізотропії. Показано, що всі підходи та формули залишаються справедливими для кубічної анізотропії, якщо використати замість константи одноосної анізотропії  $K_1$  коефіцієнт при першому члені у виразі енергії кубічної анізотропії.

Для розрахунку критичних розмірів були введені допоміжні магнітостатичні параметри — обмінна довжина  $l_{ex}$  та константа магнітної жорсткості к. На основі значення параметра к для підходів Кіттеля та Брауна детально проаналізовані можливі магнітні переходи в наночастинках при зміні їхнього розміру. Зокрема, показано, що у випадку магнітом'яких матеріалів реалізуються три магнітні стани — (1) при розмірах МНЧ d $< d_{cr0}$  вигідним є однодоменний стан, (2) при  $d_{cr0} < d < d_{cr1}$  відбувається перехід у «вортексний» і лише (3) при  $d > d_{cr1}$  — багатодоменний. У випадку магнітожорстких матеріалів «вортексний» стан не реалізується взагалі, тобто зі збільшенням їх розмірів вище критичного  $d_{cr2}$  $(d_{cr2} \neq d_{cr0})$ , магнетик одразу переходить у багатодоменний стан.

На основі порівняння результатів теоретичного розрахунку для критичних розмірів однодоменності  $d_{cr0}$  та  $d_{cr2}$  з експериментальними значеннями, був зроблений висновок про справедливість застосування саме строгого підходу Брауна з критерієм  $\kappa < a fo \geq 0,3253$  (магнітом'який/ магнітожорсткий магнетик) та альтер-

нативного підходу на основі порівняння величин  $d_{cr0}$  та  $d_{cr2}$  з товщиною доменної стінки Блоха  $\delta_0$  ( $d_{cr0} \ll \delta_0$  або  $d_{cr2} >> \delta_0$ ). Тоді як результати оціночного підходу Кіттеля можуть відрізнятися на порядок величини, порівняно зі строгим підходом Брауна.

Ми сподіваємося, що дана робота слугуватиме надійним провідником для однозначного розуміння поняття критичного розміру однодоменності і допоможе виявити неточності, що часто зустрічаються при наведенні відповідних розрахункових формул у літературі та при переходах із системи СІ у СГС.

### подяка

Автори висловлюють подяку головному редактору Журналу нано- та електронної фізики Проценку Івану Юхимовичу за плідну дискусію та цінні зауваження.

### ДОДАТОК А ВИЗНАЧЕННЯ МАГНІТОСТАТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ОБМІННОЇ ДОВЖИНИ *lex* ТА МАГНІТНОЇ ЖОРСТКОСТІ *к* У СИСТЕМАХ СІ ТА СГС

Повну вільну енергію феромагнетика, яка складається з обмінної, енергії анізотропії, магнітостатичної та зееманівської енергій, у одиницях приведеної намагніченості **m** = **M**/*M*s можна представити у вигляді:

$$\begin{split} E_{tot} &= \int_{V} \left\{ A(\nabla \mathbf{m})^{2} + K_{1} \cdot e_{a}(\theta) - \frac{\mu_{0}}{2} M_{S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_{d} - \right. \\ &- \mu_{0} M_{S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{H} \right\} \cdot \mathrm{d}V, \quad \text{(CI)} \end{split}$$
(A.1)

та

$$\begin{split} E_{tot} &= \int_{V} \left\{ A(\nabla \mathbf{m})^{2} + K_{1} \cdot e_{a}(\theta) - \frac{1}{2}M_{S}\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_{d} - \right. \\ &- M_{S}\mathbf{m} \cdot \mathbf{H} \right\} \cdot \mathrm{d}V, \quad (\mathrm{C}\Gamma\mathrm{C}) \end{split} \tag{A.1'}$$

де  $M_S$  – намагніченість насичення, **М** – вектор намагніченості,  $K_1$  – константа ефективної анізотропії,  $\theta$  – кут між намагніченістю і заданою віссю, **H**<sub>d</sub> – поле розмагнічування, **H** – зовнішне магнітне поле та A – константа обмінної жорсткості, яка визначає густину обмінної енергії магнетика  $\omega_{ex}$  ( $\omega_{ex} = A(\nabla \mathbf{m})^2$ ). Для кубічної кристалічної ґратки з n магнітними атомами в елементарній комірці, обмінним інтегралом  $\mathfrak{I}$ , спіном S та постійною ґратки  $a: A = (n \mathfrak{I} S^2)/a$ .

Деякі важливі магнітні параметри можна виокремити безпосередньо із виразів (А.1) та (А.1'). Для цього домножимо та поділимо всі члени у (А.1) на  $2/(\mu_0 M_S^2)$  або у (А.1') на  $2/(4\pi M_S^2)$ :

$$E_{tot} = \frac{\mu_0 M_S^2}{2} \int_V \left\{ \frac{2A}{\mu_0 M_S^2} (\nabla \mathbf{m})^2 + \frac{2K_1}{\mu_0 M_S^2} \cdot e_a(\theta) - \frac{1}{M_S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_d + \frac{2}{M_S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{H} \right\} \cdot \mathrm{d}V, \quad (\text{CI}) \quad (A.2)$$

та

$$E_{tot} = \frac{4\pi M_S^2}{2} \int_V \left\{ \frac{2A}{4\pi M_S^2} (\nabla \mathbf{m})^2 + \frac{2K_1}{4\pi M_S^2} \cdot e_a(\theta) - \frac{1}{4\pi M_S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_d - \frac{2}{4\pi M_S} \mathbf{m} \cdot \mathbf{H} \right\} \cdot \mathrm{d}V. \quad (C\Gamma C) (A.2')$$

Таким чином, з коефіцієнтів при перших та других членах у виразах (А.2) та (А.2) ми можемо знайти наведені раніше вирази (1.2) та (1.1) для обмінної довжини  $l_{ex}$  та параметра магнітної жорсткості  $\kappa$  відповідно, які дозволяють оцінити відносні внески від обмінної або енергії анізотропії порівняно з магнітостатичною енергією для феромагнетиків.

### ДОДАТОК Б ВИЗНАЧЕННЯ КРИТИЧНОГО РОЗМІРУ ОДНОДОМЕННОСТІ ЗА МЕТОДОМ КІТТЕЛЯ

Оціночний підхід Кіттеля базується на складанні енергетичного балансу для станів з однорідним і неоднорідним розподілом магнітних моментів. Критерієм застосовності такого підходу є виконання однієї із двох нерівностей:  $\kappa < 0,3334$  — магнітом'який або  $\kappa \ge 0,3334$ — магнітожорсткий матеріали. Цю оцінку можна отримати, враховуючи, що параметр  $\kappa$  (1.1) показує співвідношення від внесків енергії анізотропії та магнітостатичної енергії, помножене на 2. Тоді, оскільки для сферичної частинки  $E_a = K_1 V$  та  $E_{ms} = (1/6) \cdot \mu 0 M s^2 V$ ,  $\kappa = 2E_a/E_{ms} = 2/6 = 0,3334$ .

Нижче буде показано розрахунок  $d_{cr}$  для частинок сферичної форми діаметром d, які характеризуються одноосною анізотропією  $K_1$ .

# Б.1 Випадок магнітожорсткого матеріалу ( $\kappa \ge 0,3334$ )

Критичний розмір однодоменності  $d_{cr2}$  (переходу з дводоменного у однодоменний стан) знаходиться з енергетичного балансу між магнітостатичною енергією у однодоменному стані:

$$E_{ms}(1) = \frac{1}{6} \mu_0 M_S^2 \cdot \frac{4}{3} \pi \frac{d^3}{8}, \qquad (B.1.1)$$

та енергією у дводоменному стані, яка складається з магнітостатичної та енергії доменних стінок:

$$E_{ms}(2) + E_{dw} = \alpha \cdot \frac{1}{6} \mu_0 M_S^2 \cdot \frac{4}{3} \pi \frac{d^3}{8} + \sigma_0 \cdot \pi \frac{d^2}{4},$$
(B.1.2)

де  $\sigma_0 = 4(AK_1)^{1/2}$  – поверхнева енергія стінки Блоха [13, 14, 17] та  $\alpha$  – «понижуючий» параметр, який показує, у скільки разів зменшилась магнітостатична енергія при переході з однодоменного стану в дводоменний.

Враховуючи, що у підході Кіттеля  $\alpha$  приймається рівним 1/2 [18, 25], з енергетичного балансу між (Б.1.1) та (Б.1.2) можна отримати результати (1.3) для критичного розміру однодоменності  $d_{cr2}$  у випадку сферичної МНЧ.

У літературі можна знайти більш точне значення для понижуючого параметра  $\alpha$  у випадку сферичних частинок  $\alpha = 0,472$  [27].

### Б.2 Випадок магнітом'якого матеріалу (к < 0,3334)</p>

Якщо діаметр частинки  $d_{cr0} < d < d_{cr1}$ , її магнітні моменти мають тенденцію до переходу у так званий «вортексний» стан із замкнутим магнітним потоком [18, 25]. Це означає, що тепер необхідно складати баланс між енергією у однодоменному стані, аналогічною до (Б.1.1) та вортексною (обмінною) енергією  $E_{\rm v}$ .

Для розрахунку енергії  $E_v$  сферичну частинку радіусом R (d = 2R) умовно розділяють на циліндри радіусом r, у кожному з яких магнітні моменти мають однакову проекцію на вісь симетрії (рис. Б.2.1, a). Аналогічно, можна кожен з таких циліндрів представити у вигляді (2/a)·( $R^2 - r^2$ )<sup>1/2</sup> круглих кілець радіусом r (рис. Б.2.1,  $\delta$ ).



**Рисунок Б.2.1** – (а) та (б) – допоміжні побудови для розрахунку густини обмінної енергії  $\omega_v$  частинки у вортексному стані

Тоді, у кожному такому кільці буде  $2\pi r/a$  магнітних моментів. Оскільки при повному проходженні одного кільця відбувається поворот моментів на  $2\pi$ , кут  $\varphi_{ij}$  між сусідніми моментами складає  $\varphi_{ij} = a/r$ . З врахуванням малості кутів  $\varphi_{ij}$  та S = 1, отримуємо обмінну енергію для кільця  $\omega_{ring} = 2\pi \Im a/r$  та для циліндра  $\omega_{cyl} = 4\pi \Im \cdot (R^2 - r^2)^{1/2}/r$ . Таким чином, для густини енергії  $\omega_v$  сферичної частинки у вортексному стані отримуємо:

$$\omega_{\rm v} = \frac{4\pi \mathfrak{I}}{a} \cdot \int_{a}^{R} \frac{(R^2 - r^2)^{1/2}}{r} \cdot dr,$$
 (B.2.1)

де інтегрування проводиться не від 0, а від найменшого можливого розміру кілець розбиття – постійної кристалічної ґратки *а*.

Позначивши у нашому припущенні константу обмінної жорсткості A як  $\Im/a$  та виконуючи прості математичні перетворення:

$$\int_{a}^{R} \frac{(R^{2} - r^{2})^{1/2}}{r} \cdot dr =$$
  
=  $-\sqrt{R^{2} - a^{2}} + R \cdot \ln \frac{R + \sqrt{R^{2} - a^{2}}}{a} \Big|_{a \to 0} =$ 

Ж. нано- електрон. ФІЗ. 9, 02028 (2017)

$$= -R + R \cdot \ln \frac{2R}{a},\tag{B.2.2}$$

можна отримати для густини енергії  $\omega_v$ :

$$\omega_{\rm v} = \frac{3A}{R^2} \cdot \{\ln \frac{2R}{a} - 1\}.$$
 (5.2.3)

Таким чином, виходячи з енергетичного балансу між (Б.1.1) та (Б.2.3), для критичного розміру однодоменності  $d_{cr0}$  сферичної МНЧ отримуємо результати (1.5) та (1.5').

### ДОДАТОК В ВИЗНАЧЕННЯ КРИТИЧНОГО РОЗМІРУ ОДНОДОМЕННОСТІ ЗА МЕТОДОМ БРАУНА

У основі строгого метода Брауна лежить той самий енергетичний баланс, що і у підході Кіттеля. Проте, на відміну від останнього, Браун приводить точний розрахунок внесків від обмінної, магнітостатичної та енергії анізотропії МНЧ у кожному стані, не вводячи жодних понижуючих параметрів [19, 21, 22].

Критерієм застосовності такого методу є виконання одної із двох нерівностей:  $\kappa < 0,3253$  — магнітом'який або  $\kappa \ge 0,3253$  — магнітожорсткий матеріали. Умова, за якої  $\kappa = 0,3253$  відповідає критичній умові переходу між ними. Однак, слід зауважити, що наведений числовий критерій  $\kappa = 0,3253$  дещо відрізняється від значення, яке приводить Браун у своїх роботах [21, 22], а саме  $\kappa = 0,3536$  або  $K_1 <\!\!/ \ge 0,1768 \mu Ms^2$ . Оцінка величини  $\kappa$ , яка була отримана у даній роботі, та відповідні міркування приведені у розділі В.3 Додатку В.

Нижче будуть обговорені деталі розрахунку характерних розмірів  $d_{cr0}$  та  $d_{cr1}$  (магнітом'який магнетик), а також  $d_{cr2}$  (магнітожорсткий магнетик) для частинок сферичної форми радіусом a (діаметр d = 2a), які характеризуються одноосною анізотропією  $K_1$ . Прості міркування, які можна знайти у розділі 8 роботи [22], вказують на справедливість застосування всіх зазначених у Додатку В формул для  $d_{cr}$  у випадку кубічної анізотропії МНЧ. Для цього лише необхідно замість константи  $K_1$  взяти першу константу у виразі для енергії кубічної анізотропії [17], як найбільш значиму.

У методі Брауна для розрахунку  $d_{cr}$  необхідно спочатку знайти оптимальний розподіл магнітних моментів **М** сферичної МНЧ у кожному стані (однодоменному, вортексному та дводоменному):

$$\mathbf{M}(x, y, z) = M_S \mathbf{v}(x, y, z) = M_S [\mathbf{i}\alpha_1(x, y, z) + \mathbf{j}\alpha_2(x, y, z) + \mathbf{k}\alpha_3(x, y, z)],$$
(B.1)

де  $\mathbf{v}(x, y, z)$  – одиничний вектор, напрямлений вздовж  $\mathbf{M}$ , а  $a_1 = \sin\theta\cos\varphi$ ,  $a_2 = \sin\theta\cos\varphi$  та  $a_3 = \cos\theta$  (тут,  $\theta$  та  $\varphi$ – полярний та азимутальний кути у сферичній системі координат) – напрямні косинуси вектора  $\mathbf{M}$ .

Розподіл **M** (В.1) буде рівноважним тільки, якщо він мінімізує повну енергію такого магнетика  $F = E_{ex}$ +  $E_a + E_{ms}$ :

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_i(x, y, z)} = 0, \tag{B.2}$$

за умови, що виконується умова нормування:

$$\mathbf{M}^2 = M_S^2 \Rightarrow \mathbf{v}^2 = 1 \Rightarrow \alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 = 1.$$
(B.3)

Обмінну енергію  $E_{ex}$ , енергію одноосної анізотропії  $E_a$  (випадок, коли легка ось направлена вздовж *OZ*) та магнітостатичну енергію  $E_{ms}$  у виразі (В.2) можна задати наступним чином:

$$E_{ex} = \frac{1}{2} C \int \left[ (\nabla \alpha_1)^2 + (\nabla \alpha_2)^2 + (\nabla \alpha_3)^2 \right] dV, \quad (B.4)$$

$$E_a = K_1 \int (\alpha_1^2 + \alpha_2^2) \mathrm{d}V, \tag{B.5}$$

$$\begin{split} E_{ms} = -\frac{1}{2} \int \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}' \mathrm{d}V = -\frac{1}{2} M_S \int \left( H'_x \alpha_1 + H'_y \alpha_2 + H'_z \alpha_3 \right) \mathrm{d}V, \end{split} \tag{B.6}$$

де C – константа обмінної жорсткості у підході Брауна [19, 21, 22]. Згідно з позначеннями, прийнятими у даній роботі, C/2 = A. Поле розмагнічування **H**' за рахунок полюсів об'ємної  $\rho_m$  та поверхневої густини  $\sigma_m$  можна записати через деякий потенціал  $\Phi$  як

$$\mathbf{H}' = -\nabla \boldsymbol{\Phi}.\tag{B.7}$$

Наступним кроком для розрахунку  $d_{cr}$  є порівняння повної енергії F, отриманої у кожному із можливих станів, із енергією так званого референсного стану. Згідно з Брауном [22], це і є однодоменний стан, у якому сферична частинка намагнічена однорідно вздовж своєї легкої осі, з енергією відповідно до (В.4) – (В.6):

$$F_0 = (E_{ms})_0 = \frac{1}{6}\gamma M_S^2 V, \qquad (B.8)$$

де  $\gamma$  – коефіцієнт, який визначається як  $\gamma = 4\pi$  у СГС системі або  $\gamma = 1$  у системі СІ. При переході до системи СІ у виразі (В.8) також необхідно замінити  $M_{S^2}$  на  $\mu_0 M_{S^2}$ .

# В.1 Розрахунок критичного розміру *d*<sub>cr0</sub> переходу із однодоменного у вортексний стан у випадку магнітом'яких магнетиків (*к* < 0,3253)

Для знаходження нижнього критичного радіуса  $a_{cr0}$  ( $d_{cr0} = 2a_{cr0}$ ), необхідно показати, що при будь-яких розмірах МНЧ  $a < a_{cr0}$ , енергія  $F_0$  (В.8) буде меншою за енергію F будь-якого неоднорідного стану і при цьому не порушується умова (В.3). Оскільки аналітичний розрахунок повної енергії F є досить складним у даному випадку, Браун пропонує замінити його на відшукання нижньої межі  $F_l = E_{ex} + E_a + E_{ms,l}$  [22]. Отже, фактично необхідно знайти лише нижню межу  $E_{ms,l}$ , для розрахунку якої у довільному стані з неоднорідним розподілом магнітних моментів зручно використати наступну теорему [38]:

$$E_{MH} = -\int \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}'' \mathrm{d}V + \frac{1}{2\gamma} \int_{space} \mathbf{H}''^2 \mathrm{d}V, \quad (B.1.1)$$

#### Ж. нано- електрон. ФІЗ. 9, 02028 (2017)

де інтегрування проводиться у двох областях, а саме: МНЧ та простору без магнітних моментів. Вектор **H**" обирається так, щоб він дорівнював полю **H**' сферичної МНЧ, якщо  $E_{MH} = E_{ms}$ , тоді як у всіх інших випадках  $E_{MH} < E_{ms}$ . Якщо **H**" = **H**', другий член у (В.1.1) складатиме половину першого та буде від'ємним, як наслідок, приводячи до того, що  $E_{ms} < 0$ . Тому, для визначення нижньої межі  $E_{ms,l}$  та  $F_l$ , необхідно максимізувати величину  $E_{MH}$ , результат чого згідно з Брауном [22] дає:

де

$$\bar{\mathbf{M}}^2 = M_S^2(\bar{\alpha}_1^2 + \bar{\alpha}_2^2 + \bar{\alpha}_3^2), \ \bar{\alpha}_i \equiv V^{-1} \int \alpha_i \mathrm{d}V. \ (B.1.3)$$

(B.1.2)

Таким чином, нижню межу повної енергії частинки *Fl* можна записати як:

 $E_{msl} = \frac{1}{c} \gamma \bar{\mathbf{M}}^2 V,$ 

$$F_{l} = \frac{1}{2}C\int \left[ (\nabla \alpha_{1})^{2} + (\nabla \alpha_{2})^{2} + (\nabla \alpha_{3})^{2} \right] dV + K_{1}\int (\alpha_{1}^{2} + \alpha_{2}^{2}) dV + \frac{1}{6}\gamma M_{S}^{2}(\bar{\alpha}_{1}^{2} + \bar{\alpha}_{2}^{2} + \bar{\alpha}_{3}^{2})V.$$
(B.1.4)

Для знаходження мінімуму енергії  $F_l$  (В.1.4) по відношенню до змінних  $a_1$ ,  $a_2$  та  $a_3$ , за умови виконання рівності (В.3) можна використати метод Лагранжа [48], згідно з яким отримуємо систему диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} -C\nabla^{2}\alpha_{1} + (2K_{1} - \lambda)\alpha_{1} + \frac{1}{3}\gamma M_{S}^{2}\bar{\alpha}_{1} = 0, \\ -C\nabla^{2}\alpha_{2} + (2K_{1} - \lambda)\alpha_{2} + \frac{1}{3}\gamma M_{S}^{2}\bar{\alpha}_{2} = 0, \\ -C\nabla^{2}\alpha_{3} - \lambda\alpha_{3} + \frac{1}{3}\gamma M_{S}^{2}\bar{\alpha}_{3} = 0, \end{cases}$$
(B.1.5)

та граничних умов:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial n} = \frac{\partial \alpha_2}{\partial n} = \frac{\partial \alpha_3}{\partial n} = 0.$$
 (B.1.6)

де  $\lambda$  – множник Лагранжа, незалежний від змінних (*x*, *y*, *z*).

Власне значення мінімуму повної енергії  $F_l$ (В.1.4), яке відповідає будь-якому розв'язку системи рівнянь (В.1.5), може бути представлене через відповідне власне значення параметру  $\lambda$  як:

$$F_l = \frac{1}{2}\lambda V. \tag{B.1.7}$$

Для розв'язання системи (В.1.5), треба розглянути три важливі випадки: (a) якщо  $\bar{\alpha}_1 = \bar{\alpha}_2 = \bar{\alpha}_3 = 0$ , (б) якщо  $\bar{\alpha}_1 \neq 0$  або/ та  $\bar{\alpha}_2 \neq 0$ , а також (в) якщо  $\bar{\alpha}_3 \neq 0$ . Одразу слід зауважити, що послідовний аналіз випадків (б) та (в) приводить до висновку, що єдиний можливий розв'язок системи (В.1.5) забезпечується лише у випадку (a).

Розглянемо умову (*a*) та знайдемо нетривіальні розв'язки першого рівняння системи (В.1.5), яке перепозначимо наступним чином:

Ю.О. Тихоненко-Полицук, О.І. Товстолиткін

$$\nabla^2 \alpha_1 + k^2 \alpha_1 = 0, \ k^2 = \frac{2K_1 - \lambda}{-C}.$$
 (B.1.8)

Використавши представлення оператора Лапласа у сферичній системі координат [49] та стандартну процедуру розділення змінних, можна перейти від рівняння (В.1.8) до системи рівнянь:

$$\begin{cases} 2r\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} + r^2\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}r^2} + k^2r^2R = \beta R, \\ -\frac{1}{\sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} = \beta Y. \end{cases}$$
(B.1.9)

де  $\beta = l \cdot (l+1)$ , де l = 0, 1, 2... [49] - довільний параметр,який зазвичай визначають з другого рівняння системи (В.1.9). Вказане рівняння є рівнянням Лежандра, $загальний розв'язок якого <math>Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  можна знайти у роботі [50]. Виконавши заміну змінних  $R = \rho / \sqrt{r}$ , перше рівняння системи (В.1.9) зводять до сферичного рівняння Бесселя порядку n = l + 1/2, якщо взяти за змінну x = kr [49]. Тоді, загальний розв'язок (В.1.9) прийнято шукати у вигляді добутку двох незалежних функцій [50]:

$$\alpha_1(r,\theta,\varphi) = A \cdot j_n(x_{n\nu} \cdot \frac{r}{a}) \cdot Y_{l,m}(\theta,\varphi), \quad (B.1.10)$$

де  $j_n(x)$  – сферична функція Бесселя,  $x_{nv} - v$ -тий корінь рівняння  $j_n'(x) = 0$ , а A – константа нормування.

Послідовний аналіз функцій  $j_n(x)$  [49] приводить до висновку, що мінімальним нетривіальним розв'язком  $x_{nv}$  у (В.1.10), який відповідає нижній межі енергії  $F_l$ , буде корінь першої сферичної функції Бесселя  $j_1(x)$ :

$$\dot{j}_1'(x) \cdot x^3 = 0 \implies \operatorname{tg} x + \frac{2x}{x^2 - 2} = 0.$$
 (B.1.11)

Розв'язання рівняння (В.1.11) графічним методом за допомогою програмного пакету software "Wolfram Mathematica 11.0" дає результат  $x_{11} \approx 2,0816$  (рис. В.1.1).

Як наслідок, використовуючи позначення у виразі (В.1.8), власні значення параметру Лагранжа  $\lambda$  та мінімуму повної енергії  $F_l$  складають:

$$\lambda = 2K_1 + C \cdot \frac{x_{11}^2}{a^2}, \qquad (B.1.12)$$

$$F_l = \frac{1}{2}V \left[ 2K_1 + C \cdot \frac{x_{11}^2}{a^2} \right].$$
(B.1.13)

Таким чином, достатньою для того, щоб енергія  $F_l$  сферичної МНЧ (В.1.13) перевищувала  $F_0$  (В.8) для довільного неоднорідного розподілу магнітних моментів, буде умова:

$$F_0 - F_l < 0 \implies 2K_1 + C \cdot \frac{x_{11}^2}{a^2} > \frac{1}{3} \gamma M_S^2.$$
(B.1.14)

Аналогічним чином можна побачити, що розв'язання другого рівняння (В.1.5) знову приводить до умови (В.1.14), тоді як третього – дає ще простішу умову: Ж. нано- електрон. ФІЗ. 9, 02028 (2017)

$$C \cdot \frac{x_{11}^2}{a^2} > \frac{1}{3}\gamma M_S^2,$$
 (B.1.15)

виконання якої приводить до автоматичного виконання (В.1.14), враховуючи модуль *K*<sub>1</sub>.



**Рисунок В. 1.1** – Графічний розв'язок рівняння (В.1.11) для першої сферичної функції Бесселя

Отже, умова (В.1.15) і буде критичною для того, щоб енергетично вигідним був саме однодоменний стан. З іншого боку, дана нерівність дозволяє визначити критичний радіус однодоменності  $a_{cr0}$  як:

$$a < a_{cr0} \Rightarrow a_{cr0} = \frac{x_{11}}{M_S} \left(\frac{3C}{\gamma}\right)^{1/2} \equiv \frac{3,6055}{M_S} \left(\frac{C}{\gamma}\right)^{1/2}$$
. (B.1.16)

Використання основних позначень, прийнятих у даній роботі та перехід до систем СІ або СГС дозволяють знайти вирази (1.9) та (1.9') для критичного діаметру *d*<sub>cr0</sub> однодоменності.

# В.2 Розрахунок критичного розміру *d*<sub>cr1</sub> переходу із вортексного у дводоменний стан у випадку магнітом'яких магнетиків (*к* < 0,3253)

Для знаходження верхнього критичного радіуса  $a_{cr1}$  ( $d_{cr1} = 2a_{cr1}$ ), необхідно показати, що при будь-яких розмірах МНЧ  $a > a_{cr1}$ , енергія  $F_0$  (В.8) перевищуватиме енергію F вортексного стану і при цьому не порушується умова (В.3). У цьому випадку аналітичний розрахунок повної енергії F є достатньо простим, якщо перейти до циліндричної системи координат (z,  $\rho$ ,  $\varphi$ ) та ввести показаний на рис. В.2.1, a розподіл магнітних моментів **М**(x, y, z):

$$\begin{split} M_{z} &= M_{S} \Big[ 1 - (\rho^{2}/a^{2}) \Big], \\ M_{\rho} &= 0, \end{split} \tag{B.2.1} \\ M_{\varphi} &= (M_{S}^{2} - M_{z}^{2})^{1/2}. \end{split}$$

Оцінимо величини енергій  $E_{ex}$ ,  $E_a$  та  $E_{ms}$  для вортексного стану, користуючись виразами (В.4) – (В.6) та введеним розподілом (В.2.1). Також слід врахувати, що розглядається випадок сферичної МНЧ, а тому для правильних розрахунків у циліндричній системі ( $z, \rho, \varphi$ ), необхідно параметризувати сферу, зображену на рис. В.2.1, a. З цією метою сферичну МНЧ радіусом a можна умовно розділити на диски радіусом  $\rho$  та

товщиною dz, які знаходяться на відстані z від точки симетрії 0, у кожному з яких магнітні моменти мають однакову проекцію на вісь симетрії (див. рис. В.2.1, б). Тоді ми отримаємо наступні інтервали існування для змінних z,  $\rho$  та  $\varphi$ :  $-a \le z \le a$ ,  $0 \le \varphi \le 2\pi$  та  $0 \le \rho \le (a^2 - z^2)^{1/2}$ . Параметризований елемент об'єму dV при переході до циліндричної системи координат можна записати як  $dV = \zeta d\rho d\varphi dz = \rho d\rho d\varphi dz$ , оскільки Якобіан  $\zeta = \rho$ .

Тоді, для обмінної енергії  $E_{ex}$  (В.4) отримуємо наступну оцінку:

$$\begin{split} E_{ex} &= \frac{1}{2} \frac{C}{M_S^2} \int \left[ \left( \frac{\partial M_{\varphi}}{\partial \rho} \right)^2 + \frac{M_{\varphi}^2}{\rho^2} + \left( \frac{\partial M_z}{\partial \rho} \right)^2 \right] \cdot \mathrm{d}V = \\ &= 2\pi \cdot \frac{1}{2} \frac{C}{a^2} \cdot 2 \int_0^a \sqrt{a^2 - z^2} \left[ 4 \left( 2 - \frac{\rho^2}{a^2} \right)^{-1} + \left( 2 - \frac{\rho^2}{a^2} \right) \right] \cdot \rho \cdot \mathrm{d}\rho \mathrm{d}z = \end{split}$$

$$\equiv 8\pi Ca \left(\frac{17}{15} - \frac{\pi}{4}\right). \tag{B.2.2}$$

де у розрахунках враховано, що інтеграл по змінній z, зважаючи на межі  $-a \leq z \leq a$ , можна замінити на два інтеграли від 0 до a, а інтеграл по змінній  $\varphi$  просто дає результат  $2\pi$ .

Аналогічна оцінка для енергії анізотропії  $E_a$  (В.5) вортексного стану дає:

$$\begin{split} E_{a} &= (K_{1}/M_{S}^{2}) \cdot \int (M_{S}^{2} - M_{z}^{2}) \cdot \mathrm{d}V = \\ &= 2\pi \cdot K_{1} \cdot 2 \int_{0}^{a} \int_{0}^{\sqrt{a^{2} - z^{2}}} \left( 2 \frac{\rho^{2}}{a^{2}} - \frac{\rho^{4}}{a^{4}} \right) \cdot \rho \cdot \mathrm{d}\rho \mathrm{d}z \equiv \\ &\equiv \frac{16}{21} \pi K_{1} a^{3}. \end{split} \tag{B.2.3}$$

З розподілу моментів (В.2.1) випливає, що  $\nabla \cdot \mathbf{M} = 0$ , тоді для потенціалу  $\Phi$  (В.7) задовольняється рівняння Лапласа всередині та ззовні поверхні сферичної МНЧ. Як наслідок, магнітостатична енергія  $E_{ms}$  (В.6) може бути записана як:

$$E_{ms} = -\frac{1}{2} \int \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}' \mathrm{d}V = \frac{1}{2} \int \sigma_m \boldsymbol{\Phi} \mathrm{d}S, \qquad (B.2.4)$$

де поверхню інтегрування МНЧ dS при переході до сферичної системи координат (r,  $\theta$ ,  $\varphi$ ) з полярною віссю вздовжі осі OZ можна представити наступним чином:

$$dS|_{r=a} = \delta(r \cdot a) \cdot r^2 \sin\theta d\theta d\varphi = a^2 \sin\theta d\theta d\varphi, \quad (B.2.5)$$

або враховуючи межі  $0 \le \varphi \le 2\pi$ ,  $dS = 2\pi a^2 \cdot \sin\theta d\theta$ .

Для того, щоб спростити подальше інтегрування (В.2.4), можна представити густину магнітних зарядів  $\sigma_m$  та потенціал  $\Phi$  (В.7) на поверхні r = a сферичної МНЧ, використавши математичне представлення через перший та третій поліноми Лежандра  $P_n(\cos\theta)$ , де n = 1 і n = 3 [49] та теорію потенціалів [51] як: Ж. нано- електрон. ФІЗ. 9, 02028 (2017)

$$\sigma_m = M_S \left[ \frac{3}{5} \mathbf{P}_1(\cos\theta) + \frac{2}{5} \mathbf{P}_3(\cos\theta) \right], \quad (B.2.6)$$

$$\Phi_n = \gamma \alpha (2n+1)^{-1} \mathbf{P}_n(\cos\theta). \tag{B.2.7}$$



**Рисунок В. 2.1** – (а) Розподіл магнітних моментів  $\mathbf{M}(x, y, z)$ , який відповідає вортексному стану (В.2.1) та (б) допоміжна побудова, яка дозволяє параметризувати сферу (*a*) у циліндричній системі координат (*z*,  $\rho$ ,  $\varphi$ )

Як наслідок, користуючись простими правилами нормування поліномів Лежандра [49], оцінка для *E*<sub>ms</sub> згідно з (В.2.4) та (В.2.5) дає:

$$\begin{split} E_{ms} &= 2\pi \cdot \frac{1}{2} \int_{0}^{\pi} \gamma a M_{S}^{2} \cdot \left( \frac{3}{5} \mathbf{P}_{1}(\cos\theta) + \frac{2}{5} \mathbf{P}_{3}(\cos\theta) \right) \times \\ &\times \left( \frac{3}{5} \cdot \frac{1}{3} \mathbf{P}_{1}(\cos\theta) + \frac{2}{5} \cdot \frac{1}{7} \mathbf{P}_{3}(\cos\theta) \right) \cdot a^{2} \sin\theta \mathrm{d}\theta \equiv \quad (\mathrm{B.2.8}) \\ &\equiv \frac{106}{1225} \pi \gamma a^{3} M_{S}^{2}. \end{split}$$

Додавши вирази (В.2.2), (В.2.3) та (В.2.8) для повної енергії вортексного стану сферичної МНЧ можна отримати:

$$F = 8\pi Ca \left(\frac{17}{15} - \frac{\pi}{4}\right) + \frac{16}{21}\pi K_1 a^3 + \frac{106}{1225}\pi \gamma a^3 M_S^2.$$
(B.2.9)

Таким чином, достатньою для того, щоб енергія F (В.2.9) не перевищувала енергію  $F_0$  (В.8), буде умова:

$$8\pi Ca \left(\frac{17}{15} - \frac{\pi}{4}\right) + \frac{16}{21}\pi K_1 a^3 - \frac{1496}{11025}\pi \gamma a^3 M_S^2 < 0 \implies$$

Ю.О. Тихоненко-Полицук, О.І. Товстолиткін

$$\Rightarrow K_1 < \frac{187}{1050} \gamma M_S^2. \tag{B.2.10}$$

З іншого боку, умова (В.2.10) дозволяє визначити критичний радіус *a*<sub>cr1</sub> як:

$$a > a_{cr1} \Rightarrow a_{cr1} = \frac{4,5292}{M_S} \left(\frac{C}{\gamma}\right)^{1/2} \left(1-5,6150\frac{K_1}{\gamma M_S^2}\right)^{-1}$$
. (B.2.11)

Використання основних позначень, прийнятих у даній роботі та перехід до систем СІ або СГС дозволяють знайти вирази (1.10) та (1.10') для критичного діаметру  $d_{cr1}$ .

### В.3 Розрахунок критичного розміру *d*<sub>cr2</sub> переходу із однодоменного у дводоменний стан у випадку магнітожорстких магнетиків (κ ≥ 0,3253)

Для знаходження верхнього критичного радіуса  $a_{cr2}$  ( $d_{cr2} = 2a_{cr2}$ ), необхідно показати, що при будь-яких розмірах МНЧ  $a > a_{cr2}$ , енергія  $F_0$  (В.8) перевищуватиме енергію F дводоменного стану, і при цьому не порушується умова (В.3). У випадку магнітожорстких матеріалів для магнітних моментів у більшій частці об'єму МНЧ енергетично більш вигідною стає орієнтація вздовж легкої осі, тоді як лише маленька частка моментів буде мати тенденцію до закручування. Саме з таких міркувань розподіл (В.2.1), розглянутий у розділі В.2 Додатку В, не реалізується у даному випадку, а верхній критичний розмір  $d_{cr2} \neq d_{cr1}$ . На рис. В.3.1, a показаний дводоменний стан із стінкою Блоха, який надалі буде розглядатися як єдиний можливий при  $\kappa \geq 0,3253$ .

Оскільки аналітичний розрахунок повної енергії F є досить складним, аналогічно до міркувань у розділі В.1 Додатку В, його можна замінити на відшукання верхньої межі  $F_u = E_{ex,u} + E_{a,u} + E_{ms,u}$  [22], ввівши додатковий параметр h (див. рис. В.3.1, a). Для спрощення оцінок також перепозначимо легку вісь через OX, в результаті чого врахуємо зміни у виразі для енергії анізотропії (В.5):

$$E_a = K_1 [(\alpha_2^2 + \alpha_3^2) dV.$$
 (B.3.1)

Тоді, рівноважний розподіл магнітних моментів сферичної МНЧ можна записати як:

$$\mathbf{M} = \begin{cases} M_S \mathbf{i}, & z > h, \\ -M_S \mathbf{i}, & z < -h, \\ \mathbf{i}M_S \sin \tau + \mathbf{j}M_S \cos \tau, & -h < z < h, \end{cases}$$
(B.3.2)

де  $\tau = \pi z/2h$  (-  $\pi/2 \le \tau \le \pi/2$  та -  $h \le z \le h$ ) - кут між напрямком намагніченості та віссю *OY*.

Використавши (В.3.2) та вибравши у якості об'ємного елементу dV елемент диску (рис. В.3.1, б), товщиною dz та радіусом  $(a^2 - z^2)^{1/2}$ , оцінимо верхню межу для обмінної енергії  $E_{ex,u}$  (В.4):

$$E_{ex,u} = \frac{1}{2}C \cdot \left(\frac{\pi}{2h}\right)^2 \int_{-h}^{h} \pi (a^2 - z^2) dz \equiv \frac{\pi^3 C a^2}{4h}.$$
 (B.3.3)

Слід зауважити, що при знаходженні Еех, и у (В.З.З)

були опущені члени високого порядку по параметру h, оскільки вони завжди від'ємні, а нам необхідно знайти верхню межу енергії. Такі міркування будуть також використані надалі при оцінці  $E_{a,u}$  та  $E_{ms,u}$ .



Рисунок В.3.1 – (а) Розподіл магнітних моментів  $\mathbf{M}(x, y, z)$ , який відповідає дводоменному стану (В.3.2) та (б) допоміжна побудова, яка дозволяє в якості об'ємного елементу dV використати елемент диску товщиною dz та радіусом  $\rho$ 

Аналогічним чином можна оцінити верхню межу для енергії анізотропії  $E_{a,u}$ :

$$E_{a,u} = K_1 \int_{-h}^{h} \pi \cos^2 \tau \cdot (a^2 - z^2) dz \equiv \pi K_1 a^2 \cdot h, (B.3.4)$$

Для того, щоб оцінити верхню межу для магнітостатичної енергії  $E_{ms,u}$ , перейдемо від розгляду поля розмагнічування **H**' частинки до магнітної індукції **B**' = **H**' +  $\gamma$ **M**:

$$E'_{ms} = -\frac{1}{2} \int \mathbf{M} \cdot \mathbf{B}' \mathrm{d}V \equiv E_{ms} - \frac{1}{2} \gamma M_S^2 V. \quad (B.3.5)$$

Тоді для знаходження енергії  $E_{ms,u}$  можна застосувати аналогічну теорему [38], що і у розділі В.1, перейшовши від змінної **Н**" до **В**":

$$E_{MB} = -\int \mathbf{M} \cdot \mathbf{B}'' \mathrm{d}V + \frac{1}{2\gamma} \int_{space} \mathbf{B}''^2 \mathrm{d}V, \quad (B.3.6)$$

де вектор **В**" вибирається абсолютно так само, як і **Н**". Проте, у даному випадку, оскільки при **В**" = **В**' величина  $E'_{ms} < 0$ , для визначення верхньої межі  $F_u$  необхідно

буде шукати мінімальне значення  $E_{MB}$  (В.З.6). Для цього Браун у своїй роботі [22] пропонує вибрати вектор **В**" особливим чином у трьох областях: у середині МНЧ (r < a, див. рис. В.З.1, a), на поверхні МНЧ (r = a) та у просторі навколо неї (r > a). Надалі всі позначення будуть відноситись до сферичної ситсеми координат (r,  $\theta$ ,  $\varphi$ ):

$$\mathbf{B}''_{r 0, \\ -\mathbf{i}\mathbf{B}, & z < 0; \end{cases}$$
(B.3.7)

$$B_r''_{r=a} = B\cos\varphi \cdot \begin{cases} +(1-\cos^2\theta)^{1/2}, \ 0<\cos\theta<1, \\ -(1-\cos^2\theta)^{1/2}, -1<\cos\theta<0; \end{cases}$$
(B.3.8)

$$\mathbf{B}''\Big|_{r>a} = -\nabla \Phi_{\mathbf{B}}.\tag{B.3.9}$$

де для знаходження потенціалу  $\Phi_{\rm B}$  можна використати рівняння Лапласа та умови регулярності і соленоїдльності на нескінченності:

$$\nabla^2 \boldsymbol{\Phi}_{\rm B} = 0, \tag{B.3.10}$$

$$\Phi_{\rm B} \propto \frac{1}{r} \rightarrow 0$$
 ta  $|\nabla \Phi_{\rm B}| \propto \frac{1}{r^2} \rightarrow 0, r \rightarrow \infty$ , (B.3.11)

$$-\frac{\partial \Phi_{\rm B}}{\partial r} = B_r'', \quad r = a. \tag{B.3.12}$$

Основні етапи отримання розв'язку даної задачі потенціалів можна знайти у роботах [22, 51] та прийти до результату:

$$\Phi_{\rm B} = \sum_{n=1}^{\infty} \Phi_{\rm Bn} \cdot \left(\frac{a}{r}\right)^{n+1} \cdot {\rm P}_n^1(\cos\theta)\cos\varphi, \quad ({\rm B}.3.13)$$

$$\Phi_{\rm Bn} = Ba \frac{(-1)^{(n/2)+1}}{n+1} \cdot \frac{2n+1}{n^2-1} \cdot \frac{1,3\cdots(n+1)}{2,4\cdots(n+2)}, \quad n = 2m, \ ({\rm B}.3.14)$$

де враховано перший приєднаний поліном Лежандра  $P^{1}_{n}(\cos\theta)$  [49] та парність числа n.

Таким чином, для оцінки верхньої межі  $E_{MB,u}$ , а значить і  $E_{ms,u}$ , залишається тільки визначити внески від першого та другого інтегралів у виразі (В.3.6) в областях r > a та r < a. Відповідний послідовний розрахунок яких дає результат:

$$\begin{split} E_{MB,u} &= -\frac{4}{3} \pi B M_S \cdot a^3 \bigg[ 1 - \frac{3}{2} \cdot \frac{h}{a} \bigg] + \frac{2\pi}{3\gamma} \cdot a^3 B^2 \cdot \bigg( 1 + \frac{3}{2} k \bigg) \\ k_n &= n(2n+1) \cdot \bigg[ \frac{1, 3 \cdots (n-3)}{2, 4 \cdots (n+2)} \bigg]^2, \ n > 2. \end{split} \tag{B.3.15}$$

Виходячи із міркувань до теореми (В.3.6), для знаходження верхньої межі магнітостатичної енергії  $E_{ms,u}$ , необхідно мінімізувати вираз (В.3.15) по відношенню до параметра магнітної індукції В МНЧ та використати співвідношення (В.3.5). Як наслідок, для  $E_{ms,u}$  отримуємо:

$$E_{ms,u} = \frac{2}{3}\pi a^{3}\gamma M_{S}^{2} \cdot [1 - \sigma] + 2\pi a^{2}\gamma M_{S}^{2} \cdot \sigma h,$$
  
$$\sigma = \left(1 + \frac{3}{2}k\right)^{-1} = 0,785398.$$
(B.3.16)

### Ж. нано- електрон. ФІЗ. 9, 02028 (2017)

Додавши вирази (В.3.3), (В.3.4) і (В.3.16) та мінімізуючи отриману величину по параметру h, можна оцінити верхню межу повної енергії  $F_u$  сферичної МНЧ як:

$$F_{u} = \pi^{2} a^{2} \cdot \left[ C(K_{1} + 2\gamma M_{S}^{2} \sigma) \right]^{1/2} + \frac{2}{3} \pi a^{3} \gamma M_{S}^{2} \cdot \left[ 1 - \sigma \right].$$
(B.3.17)

Таким чином, достатньою для того, щоб енергія  $F_u$ (В.3.17) МНЧ у дводоменному стані не перевищувала енергію  $F_0$  (3.8), буде умова:

$$a \cdot \frac{2}{3} \pi \gamma M_S^2 \left(\frac{2}{3} - \sigma\right) < -\pi^2 \cdot \left[C(K_1 + 2\gamma M_S^2 \sigma)\right]^{1/2}, (B.3.18)$$

яка, в свою чергу, дозволяє визначити критичний радіус *a*<sub>cr2</sub> як:

$$a > a_{cr2} \Rightarrow a_{cr2} = \frac{3\pi}{2} \cdot \frac{\left[C(K_1 + 2\gamma M_S^2 \sigma)\right]^{1/2}}{\gamma M_S^2 \cdot \left(\sigma - \frac{2}{3}\right)}.$$
 (B.3.19)

Використання основних позначень, прийнятих у даній роботі та перехід до систем СІ або СГС дозволяють знайти вирази (1.11) та (1.11') для критичного діаметру  $d_{cr2}$ .

Проаналізувавши всі можливі стани сферичної МНЧ – однодоменний, вортексний та дводоменний, перейдемо до аналізу того, що слід розуміти під критичною умовою переходу від магнітом'яких до магнітожорстких магнетиків. Зрозуміло, що найбільш енергетично вигідним завжди буде стан із найменшою енергією. І у випадку, якщо це не однодоменний стан, нас завжди буде цікавити стан з найменшим можливим dcr (dcr1 або dcr2). Для оцінки того, який критичний розмір буде найменшим, розглянемо співвідношення отриманих acr1 (B.2.11) та acr2 (B.3.19). Умова, за якої  $a_{cr1}/a_{cr0} = a_{cr2}/a_{cr0}$  і є критичною, що свідчить про перехід від магнітом'якого до магнітожорсткого магнетика. Відповідний числовий розрахунок за допомогою програмного пакету software "Wolfram Mathematica 11.0" дає результат для  $K_1/\gamma M_{s^2} = 0,1627$ (або  $\kappa = 0.3253$ ). Цей результат дещо відрізняється від значення 0,1768, що приводить сам Браун у своїх роботах [21, 22]. Можливе розходження пов'язане з наявністю у нас час більш точних програм для подібних чисельних розрахунків.

Таким чином, можна зробити висновок, що при неоднорідному розподілі магнітних моментів, якщо  $\kappa$ < 0,3253 — найменшим буде критичний розмір  $d_{cr1}$ , тоді як при  $\kappa \ge 0,3253 - d_{cr2}$ . Тому строгою умовою переходу від магнітом'якого магнетика до магнітожорсткого у підході Брауна буде рівність  $\kappa = 0,3253$ .

### ДОДАТОК Г ЧИСЕЛЬНИЙ РОЗРАХУНОК КРИТИЧНОГО РОЗМІРУ ОДНОДОМЕННОСТІ *d*<sub>cr</sub> ДЛЯ СТРУКТУР ЛАНТАН-ЗАМІЩЕНОГО МАНГАНІТУ La0,75Sr0,25MnO3 ТА ФЕРИТОВОЇ ШПІНЕЛІ NiFe2O4

Для правильного розрахунку критичного розміру однодоменності  $d_{cr0}$  (випадок магнітом'якого матеріалу) або  $d_{cr2}$  (магнітожорсткого) використаємо підходи Кіттеля та Брауна з перевіркою виконання відповід-

### Ю.О. Тихоненко-Полицук, О.І. Товстолиткін

них критеріїв застосування даних підходів.

1. Розрахунок критичного розміру  $d_{cr}$  для структури лантан-заміщеного манганіту La<sub>0,75</sub>Sr<sub>0,25</sub>MnO<sub>3</sub>.

Оцінимо спочатку величину параметра магнітної жорсткості  $\kappa$  (1.1) для даної структури, для знаходження якого нам необхідно визначити параметри константи магнітної анізотропії  $K_1$  та намагніченості насичення  $M_S$ .

Намагніченість насичення *M*<sub>S</sub> можна оцінити наступним чином [52]:

$$\begin{split} M_{S} \left[ \frac{\mathrm{emo}}{\mathrm{cm}^{3}} \right] &= M_{x} \left[ \frac{\mu_{\mathrm{B}}}{f.u.} \right] \cdot \frac{N_{\mathrm{A}} [\mathrm{MOTb}^{-1}] \cdot \mu_{\mathrm{B}} [\mathrm{emo}]}{\mu \left[ \frac{\Gamma}{\mathrm{MOJB}} \right]} \cdot \rho \left[ \frac{\Gamma}{\mathrm{cm}^{3}} \right] = \\ &= \frac{5584}{\mu} \cdot M_{x} \left[ \frac{\mu_{\mathrm{B}}}{f.u.} \right] \cdot \rho \left[ \frac{\Gamma}{\mathrm{cm}^{3}} \right], \end{split}$$
(\Gamma.1)

де  $N_{\rm A} = 6,022 \cdot 10^{23}$  моль<sup>-1</sup> – число Авогадро,  $\mu_{\rm B} = 0,9274 \cdot 10^{-20}$  ерг/Гс (або  $0,9274 \cdot 10^{-20}$  емо) – магнетон Бора,  $\mu$  – молярна маса структури та  $\rho$  – її густина. У формулі (Г.1) також використано позначення *f.u.* – (з англ. formula's unit) формульна одиниця. Намагніченість  $M_x$  структури  $x = \text{La}_{0,75}\text{Sr}_{0,25}\text{MnO}_3$  (LSMO), яка припадає на одну формульну одиницю можна розрахувати як:

$$M_{\rm LSMO} = 0,75 \cdot 4\mu_{\rm B} + 0,25 \cdot 3\mu_{\rm B} = 3,75 \frac{\mu_{\rm B}}{f.u.}. \qquad (\Gamma.2)$$

Користуючись таблицею Менделеева, молярну масу  $\mu$  для La<sub>0,75</sub>Sr<sub>0,25</sub>MnO<sub>3</sub> можна визначити наступним чином:

$$\mu = 0,75 \cdot 139 + 0,25 \cdot 88 + 55 + 3 \cdot 16 = 229,25$$
[г/ моль]. (Г.3)

Враховуючи те, що густина лантан-заміщеного манганіту La<sub>0.75</sub>Sr<sub>0.25</sub>MnO<sub>3</sub>  $\rho = 6,4$  г/см<sup>3</sup> [10], а також використовуючи формули (Г.1) – (Г.3) оцінимо намагніченість насичення  $M_S$  даної структури:

$$M_S = \frac{5584}{229,25} \cdot 3,75 \cdot 6,4 = 584,6 \text{ [emo/ cm}^3\text{]}. \quad (\Gamma.4)$$

Значення константи анізотропії  $K_1$  покладемо рівною 10<sup>5</sup> ерг/см<sup>3</sup> по аналогії до роботи [12]. Тоді, використовуючи значення  $K_1$  та  $M_S$  (Г.4), оцінимо параметр магнітної жорсткості  $\kappa$  (1.1):

$$\kappa = \frac{2 \cdot 10^5}{4 \cdot 3,14 \cdot 584,6^2} = 0,0466,\tag{\Gamma.5}$$

тобто  $\kappa = 0,0466 < 0,3334$  (критерій Кіттеля), а також  $\kappa = 0,0466 < 0,3253$  (критерій Брауна). Таким чином, структуру La<sub>0,75</sub>Sr<sub>0,25</sub>MnO<sub>3</sub> можна віднести до *магнітом'яких матеріалів*, а до розрахунку критичного розміру  $d_{cr0}$  необхідно застосувати формули (1.5) – (1.5) (згідно з оціночним підходом Кіттеля) та (1.9) – (1.9) (строгим Брауна). Однак, у зазначені формули входять ще невідомі нам параметри, такі як константа обмінної жорсткості  $A = n \Im S^2/a$  і постійна кристалічної ґратки a. Оцінимо величину обмінного інтегралу  $\mathfrak{I}$ , використовуючи його зв'язок із температурою Кюрі  $T_{\mathbb{C}}[23, 38]$ :

$$T_C = \frac{\Im \cdot q J(J+1)}{3k_B}, \qquad (\Gamma.6)$$

де q – число найближчих сусідів (для кубічної ґратки манганіту q = 6),  $k_{\rm B} = 1,38 \cdot 10^{-16}$  ерг/К – константа Больцмана, а J – квантове число повного моменту імпульсу, яке для даної структури манганіту можна визначити як:

$$J_{\rm LSMO} = S_{\rm LSMO} = 0,75 \cdot 4 \cdot \frac{1}{2}\hbar + 0,25 \cdot 3 \cdot \frac{1}{2}\hbar = 1,875 \frac{\hbar}{f.u.}.$$
 (Γ.7)

Тоді, враховуючи співвідношення (Г.6) та (Г.7), а також величину температури Кюрі для La<sub>0,75</sub>Sr<sub>0,25</sub>MnO<sub>3</sub>  $T_{\rm C}$  = 340 К [53], обмінний інтеграл З можна виразити як:

$$\Im = \frac{3k_B T_C}{qJ(J+1)},\tag{\Gamma.8}$$

$$\mathfrak{I} = \frac{3 \cdot 1, 38 \cdot 10^{-16} \cdot 340}{6 \cdot 1, 875 \cdot (1, 875 + 1)} = 43, 52 \cdot 10^{-16} [\text{epr}], \quad (\Gamma.9)$$

а враховуючи що постійна ґратки a для La<sub>0,75</sub>Sr<sub>0,25</sub>MnO<sub>3</sub> дорівнює  $a = 5,5 \cdot 10^{-8} / \sqrt{2} \approx 3,9 \cdot 10^{-8}$  см [53], константа обмінної жорсткості A дорівнюватиме відповідно:

$$A = \frac{43,52 \cdot 10^{-16} \cdot 1,875^2}{3,9 \cdot 10^{-8}} = 3,92 \cdot 10^{-7} \,[\text{epr/cm}]. \quad (\Gamma.10)$$

Як наслідок, використовуючи знайдені параметри  $M_S$  (Г.4) та A (Г.10), згідно з оціночним підходом Кіттеля та строгим підходом Брауна для  $d_{cr0}$  отримуємо відповідно значення 59,5 нм та 30,8 нм (див. табл. 1.1). По аналогії до приведеного розрахунку можна визначити критичний розмір однодоменності  $d_{cr0}$  і для інших структур лантан-заміщених манганітів, наприклад, La<sub>0,7</sub>Sr<sub>0,3</sub>MnO<sub>3</sub>, відповідні результати для якої показані у табл. 1.1.

2. Розрахунок критичного розміру  $d_{cr}$  для структури оберненої феритової шпінелі NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>.

Аналогічно до попередніх міркувань, для оцінки величини магнітної жорсткості  $\kappa$  (1.1) потрібно визначити параметри  $K_1$  та  $M_s$ .

Намагніченість насичення  $M_S$  можна оцінити за формулами (Г.1) та (Г.2), проте слід врахувати, що, на відміну від La<sub>0,75</sub>Sr<sub>0,25</sub>MnO<sub>3</sub>, феритова шпінель NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> має іншу будову кристалічної ґратки, а тому величина намагніченості  $M_x$  ( $x = NiFe_2O_4$ ) буде розрахована інакше.

У випадку оберненої шпінелі NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> у вузли тетраедричного положення A (8a) йдуть йони Fe<sup>3+</sup> (зі спіном 5· $\mu$ в), а у вузли октаедричного положення B(16d) – йони Fe<sup>3+</sup> (5· $\mu$ в) та Ni<sup>2+</sup> (2· $\mu$ в). Внаслідок від'ємної обмінної взаємодії спіни йонів у вузлах A та B орієнтуються антипаралельно [38], що можна умовно записати у вигляді формульної одиниці:

**Таблиця**  $\Gamma$ .1 – Основні параметри, які використовувались у табл. 1.1 для розрахунку мікромагнітних параметрів та критичних розмірів однодоменності. Значення намагніченості насичення  $M_S$  та константи анізотропії  $K_1$  відповідають 300 К

Магнітний матеріал	$M_{ m S}$ , (емо·г <sup>-1</sup> )	<i>K</i> 1, (ерг∙см <sup>-3</sup> )	ρ, (г·см <sup>- 3</sup> )	<i>Т</i> с, К (°С)	a, Å	
CoFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	53 [експ. 33], 80 – 94 [33, 54]	$18.10^5, 30.10^5$	F 00 [07 00]	790 K [33]	8, 372 [37]	
	71,3 [розраху- нок за (Г.1)]	[33]	ə,29 [ə <i>1</i> , əo]	520 °C [38]	8,38 [38]	
NiFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	31 [експ. 33], 56 [33, 54]	$-0,68 \cdot 10^5$	5,24 [39]	860 – 870 K [33]	8,34 [38, 39]	
	47,6 [розраху- нок за (Г.1)]	[33]	5,38 [38]	580 °C [38, 39]		
Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	90-100 [33, 54]	$-1,2.10^{5}$	5,24	860 K [33]	8,396 [33, 38]	
	96,3 [розраху- нок за (Г.1)]	[33]	[37, 38]	585 °C [38]	8, 407 [37]	
MnFe2O4	80 [33, 54]	$-0,25 \cdot 10^{5}$	5,05 [55]	550 – 620 K [33]	8,442 [33]	
	48 [експ. 33]	[33]	5 [38]	275 °С [експ. 33]	8,477 [56]	

$$(\overline{\text{Fe}}^{3+})O(\overline{\text{Fe}}^{3+}\overline{\text{Ni}}^{2+})O_3,$$
 (Γ.11)

а відповідну намагніченість, яка припадає на одну формульну одиницю, визначити як:

$$M_{\rm NiFe2O4} = \left\{ (5+2) - 5 \right\} \cdot \mu_{\rm B} = 2 \frac{\mu_{\rm B}}{f.u.}. \tag{\Gamma.12}$$

Користуючись таблицею Менделеєва, молярну масу $\mu$ для  $\rm NiFe_2O_4$ можна визначити наступним чином:

$$\mu = 58,7 + 2.56 + 4.16 = 234,7$$
 [г/ моль]. (Г.13)

Враховуючи те, що густина оберненої феритової шпінелі NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>  $\rho$  = 5,24 г/см<sup>3</sup> [39], а також використовуючи формули (Г.1), (Г.12) та (Г.13) оцінимо намагніченість насичення *Ms*:

$$M_S = \frac{5584}{234,7} \cdot 2 \cdot 5,24 = 249,3 \text{[emo/cm^3]}. \quad (\Gamma.14)$$

Значення константи анізотропії  $K_1$  покладемо рівною 0,68·10<sup>5</sup> ерг/см<sup>3</sup> по аналогії до роботи [33]. Як наслідок, використовуючи значення  $K_1$  та  $M_S$  (Г.14), параметр магнітної жорсткості  $\kappa$  (1.1):

$$\kappa = \frac{2 \cdot 0.68 \cdot 10^5}{4 \cdot 3.14 \cdot 249.3^2} = 0.1742, \qquad (\Gamma.15)$$

тоді,  $\kappa = 0,1742 < 0,3334$  (у підході Кіттеля) та  $\kappa = 0,1742 < 0,3253$  (у підході Брауна). Таким чином, структуру NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> можна віднести до *магнітом'яких матеріалів*, а до розрахунку критичного розміру необхідно застосувати формули, аналогічні до оцінки  $d_{cr0}$  для La<sub>0,75</sub>Sr<sub>0,25</sub>MnO<sub>3</sub>. Для цього знайдемо невідомі параметри – A та a.

Оцінимо величину константи А. Для цього знаходимо квантове число повного моменту імпульсу J як:

$$J_{\rm NiFe2O4} = S_{\rm NiFe2O4} = \left\{ (5+2) - 5 \right\} \cdot \frac{1}{2}\hbar = 1 \frac{\hbar}{f.u.}. \quad (\Gamma.16)$$

Таким чином, враховуючи співвідношення (Г.6) та (Г.16), величину температури Кюрі для NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>  $T_{\rm C}$  = 858 К [38, 39], а також число сусідніх атомів q = 6 (оскільки магнетизм створюється тільки атомами Ni<sup>2+</sup>, розташованими у октаедричних позиціях 16d [38]), обмінний інтеграл  $\Im$  дорівнює:

$$\Im = \frac{3 \cdot 1, 38 \cdot 10^{-16} \cdot 858}{6 \cdot 1 \cdot (1+1)} = 296 \cdot 10^{-16} [\text{epr}], \quad (\Gamma.17)$$

а враховуючи, що постійна ґратки a для NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> дорівнює  $a = 8,34 \cdot 10^{-8} / \sqrt{2} \approx 5,88 \cdot 10^{-8}$  см [38, 39], константа A дорівнюватиме:

$$A = \frac{296 \cdot 10^{-16} \cdot 1^2}{5,88 \cdot 10^{-8}} = 5,03 \cdot 10^{-7} \,[\text{epr/cm}]. \quad (\Gamma.18)$$

Тоді, використовуючи знайдені параметри  $M_S$  (Г.14) та A (Г.18), згідно з оціночним підходом Кіттеля та строгим підходом Брауна для  $d_{cr0}$  отримуємо відповідно значення 173 нм та 81,8 нм (див. табл. 1.1).

Аналогічним чином можна визначити критичні розміри і для інших структур феритових шпінелей, наприклад, (Co, Mn, Fe)Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, відповідні результати для яких показані у табл. 1.1. Для зручності перерахунку у порівняльній табл. Г.1 показані основні параметри, які використовувались у відповідних розрахунках.

### О критическом размере перехода ферромагнетика в однодоменное состояние

### Ю.О. Тихоненко-Полищук, А.И. Товстолыткин

Институт магнетизма НАН Украины и МОН Украины, бул. Вернадского 36-б, 03680 Киев, Украина

Выполнен анализ подходов для определения критического размера перехода ферромагнетика в однодоменное состояние (*d<sub>cr</sub>*), сделано обобщение для случаев магнитных материалов с разными видами анизотропии и для частичек эллиптической формы. Уточнены критерии применимости каждого из проанализированных подходов. Выделены типичные ошибки, которые встречаются в научной литературе для оценки *d<sub>cr</sub>*. Рассчитаны *d<sub>cr</sub>* для наиболее распространенных ферромагнитных материалов, сделано сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Упорядочены и систематизированы данные касательно магнитных параметров наиболее распространенных ферромагнитных материалов.

Ключевые слова: Ферромагнетик, Критический размер однодоменности, Однодоменное состояние, Вортексное состояние, Многодоменное состояние, Обменная длина, Параметр магнитной жесткости, Магнитомягкий магнетик, Магнитожесткий магнетик.

### On the Critical Size of the Transition of a Ferromagnet into a Single-Domain State

### Yu.O. Tykhonenko-Polishchuk, A.I. Tovstolytkin

### Institute of Magnetism of the NAS of Ukraine and MES of Ukraine, 36b, Vernadsky Ave., 03680 Kyiv, Ukraine

The analysis of approaches for determining the critical size of the transition of a ferromagnet into a single-domain state  $(d_{cr})$  was performed, and generalizations for the cases of magnetic materials with different types of anisotropy and for particles of elliptical shape were made. The criteria for the applicability of each of the analyzed approaches have been clarified. Typical errors that occur in the scientific literature for estimating  $d_{cr}$  were identified. The  $d_{cr}$  values for the most common ferromagnetic materials have been calculated, and the obtained results have been compared with the available experimental data. Data on the magnetic parameters of the most common ferromagnetic materials have been tized.

**Keywords:** Ferromagnet, Critical single-domain size, Single-domain state, Vortex state, Multidomain state, Exchange length, Magnetic hardness parameter, Soft magnet, Hard magnet.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

- M.M. Rashad, O.A. Fouad, *Mater. Chem. Phys.* 94, 365 (2005).
- L. Satyanarayana, K.M. Reddy, S.V. Manorama, *Mater. Chem. Phys.* 82, 21 (2003).
- S.P. Gubin, Y.A. Koksharov, G.B. Khomutov, G.Y. Yurkov, *Russ. Chem. Rev.* 74 No 6, 489 (2005).
- Q.A. Pankhurst, J. Connolly, S.K. Jones, J. Dobson, J. Phys. D.: Appl. Phys. 36, 167 (2003).
- E.H. Frei, E.Gunders, M. Pajewsky, W.J. Alkan, J. Eshchar, J. Appl. Phys. 39, 999 (1968).
- M.I. Majeed, Q. Lu, W. Yan, Z. Li, I. Hussain, M.N. Tahir, W. Tremel, B. Tan, *J. Mater. Chem. B* 1 No22, 2874 (2013).
- S. Garćia-Jimeno, R. Ortega-Palacios, M.F.J. Cepeda-Rubio, A. Vera, L. Leija, J. Estelrich, *Prog. Electromagn. Res.* 128, 229 (2012).
- 8. G.T. Landi, J. Magn. Magn. Mater. 326, 14 (2013).
- O. Yelenich, S. Solopan, T. Kolodiazhnyi, Yu. Tykhonenko, A. Tovstolytkin, A. Belous, J. Chem. 2015, 532198 (2015).
- V.M. Kalita, A.I. Tovstolytkin, S.M. Ryabchenko, O.V. Yelenich, S.O. Solopan, A.G. Belous, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17, 18087 (2015).
- S. Bedanta, W. Kleemann, J. Phys. D.: Appl. Phys. 42, 013001 (2009).
- D.H. Manh, P.T. Phong, P.H. Nam, D.K. Tung, N.X. Phuc, I.J. Lee, *Phys. B: Condens. Matter* 444, 94 (2014).
- A.P. Guimaraes, Nanoscience and technology. Principles of Nanomagnetism (Springer-Verlag Berlin Heidelberg: Wiley-IEEE Press: 2009).
- 14. R.C. O'Handley, Modern magnetic materials. Principles and

applications (New York: Wiley-IEEE Press: 2000).

- Ch. Binns, Nanomagnetism: fundamentals and applications (Poland: Elsevier Ltd.: 2014).
- С.В. Вонсовский, Магнетизм: магнитные свойства диа-, пара-, ферро-, антиферро- и ферримагнетиков (Москва: Наука: 1971) (S.V. Vonsovskiy, Magnetizm: magnitnyye svoystva dia-, para-, ferro-, antiferro- i ferrimagnetikov (Moskva: Nauka: 1971)).
- С. Тикадзуми, Физика ферромагнетизма. Магнитные характеристики и практические применения (Москва: Мир: 1987) (S. Tikadzumi, Fizika ferromagnetizma. Magnitnyye kharakteristiki i prakticheskiye primeneniya (Moskva: Mir: 1987)).
- 18. Ch. Kittel, Rev. Mod. Phys. 21, 541 (1949).
- 19. W.F. Brown, *Phys. Rev.* 105, 1479 (1957).
- E.H. Frei, S. Shtrikman, D. Treves, *Phys. Rev.* 106, 446 (1957).
- 21. W.F. Brown, J. Appl. Phys. 39, 993 (1968).
- 22. W.F. Brown, Ann. NY Acad. Sci. 147, 463 (1969).
- 23. A. Aharoni, Introduction to the Theory of Ferromagnetism (Oxford: Oxford University Press: 2007).
- 24. J. Carrey, B. Mehdaoui, M. Respaud, J. Appl. Phys. 109, 083921 (2011).
- 25. Ch. Kittel, *Phys. Rev.* **70**, 965 (1946).
- 26. G.S. Abo, Y.-K. Hong, J. Park, J. Lee, W. Lee, B.-C. Choi, *IEEE T. Magn.* 49 No 8, 4937 (2013).
- D. Goll, A.E. Berkowitz, H.N. Bertman, *Phys. Rev. B* 70, 184432 (2004).
- 28. J. Frenkel, J. Dorfman, Nature 126, 274 (1930).

- P. Dey, T.K. Nath, *Appl. Phys. Lett.* 89, 163102 (2006).
   S. Daengsakul, Ch. Thomas, Ch. Mongkolkachit, S. Maensiri, Solid State Sci. 14, 1306 (2012).
- 31. B. Mehdaoui, A. Meffre, J. Carrey, S. Lachaize, L.-M. Lacroix, M. Gougeon, B. Chaudret, M. Respaud, Adv. Funct. Mater. 21, 4573 (2011).
- 32. S. Mørup, M. Hansen, C. Frandsen, Magnetic Nanoparticles (Amsterdam: Academic Press: 2011).
- 33. I. Sharifi, H. Shokrollahi, S. Amiri, J. Magn. Magn. Mater. **324**, 903 (2012).
- 34. A.E. Berkowitz, W.J. Schuele, J. Appl. Phys. 30, S134 (1959).
- 35. J. Jiang, Y.-M. Yang, Mater. Lett. 61, 4276 (2007).
- 36. R. Chen, M.G. Christiansen, P. Anikeeva, J. Am. Chem. Soc. 7 No 10, 8990 (2013).
- 37. M.P. Gonzalez-Sandoval, A.M. Beesley, M.M. Yoshida, L. Fuentes-Cobas, J.A. Matutes-Aquino, J. Alloy. Compd. **369**, 190 (2004).
- 38. С. Тикадзуми, Физика ферромагнетизма. Магнитные свойства вещества (Москва: Мир: 1983) (S. Tikadzumi, Fizika ferromagnetizma. Magnitnyye svoystva veshchestva (Moskva: Mir: 1983)).
- 39. A.S. Fawzi, A.D. Sheikh, V.L. Mathe, J. Alloy. Compd. 502, 231 (2010).
- 40. E.P. Wohlfarth, P. R. Soc. A 232, 208 (1955).
- 41. E.P. Wohlfarth, Ferromagnetic Materials. A handbook on the properties of magnetically ordered substances (Amsterdam: North-Holland: 1980).
- 42. J.M.D. Coey, Magnetism and Magnetic Materials (New York: Cambridge University Press: 2016).
- 43. R. Ferré, Comput. Phys. Commun. 105, 169 (1997).

- 44. Ch. Seberino, H.N. Bertram, IEEE T. Magn. 33 No 5, 3055 (1997).
- 45. K.Yu. Guslienko, V. Novosad, Y. Otani, H. Shima, K. Fukamichi, Phys. Rev. B 65, 024414 (2001).
- 46. I. Hashim, H.S. Joo, H.A. Atwater, Surf. Rev. Lett. 2, 427 (1995)
- 47. J.K. Galt, Phys. Rev. 85, 664 (1952).
- 48. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теоретическая физика. Механика (Москва: Наука: 1988) (L.D. Landau, Ye.M. Lifshits, Teoreticheskaya fizika. Mekhanika (Moskva: Nauka: 1988)).
- 49. А.Н. Тихонов, А.А. Самарский, Уравнения математической физики (Москва: Наука: 1977) (А.N. Tikhonov, А.А. Samarskiy, Uravneniya matematicheskoy fiziki (Moskva: Nauka: 1977)).
- 50. J.A. Stratton, *Electromagnetic Theory* (New York: McGraw-Hill Book Company: 1941).
- 51. W.R. Smythe, Static and Dynamic Electricity (New York: McGraw-Hill Book Company: 1950).
- 52. A.F. Kravets, A.I. Tovstolytkin, Yu.I. Dzhezherya, D.M. Polishchuk, I.M. Kozak, V. Korenivski, J. Phys.: Condens. Matter 27, 446003 (2015).
- 53. A. Urushibara, Y. Moritomo, T. Arima, A. Asamitsu, G. Kido, Y. Tokura, *Phys. Rev. B* 51, 14103 (1995).
- 54. D.S. Mathew, R.-S. Juang, Chem. Eng. J. 129, 51 (2007).
- 55. M. Rozman, M. Drofenik, J. Am. Ceram. Soc. 81 No7, 1757 (1998)
- 56. Ch. Rath, S. Anand, R.P. Das, K.K. Sahu, S.D. Kulkarni, S.K. Date, N.C. Mishra, J. Appl. Phys. 91 No4, 2211 (2002).