

На правах рукописи



Родионов Валентин Анатольевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ НАНОРАЗМЕРНЫХ
ЧАСТИЦ ОКСИДНЫХ ФЕРРИМАГНЕТИКОВ С КУБИЧЕСКОЙ
КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ
ТЕМПЕРАТУРЫ И НАМАГНИЧИВАЮЩЕГО ПОЛЯ**

Специальность: 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Барнаул – 2018

Работа выполнена в ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Найден Евгений Петрович

Научный консультант: кандидат физико-математических наук, доцент
Журавлёв Виктор Алексеевич

Официальные оппоненты: **Костишин Владимир Григорьевич**, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»», заведующий кафедрой Технологии материалов электроники

Гынгазов Сергей Анатольевич, доктор технических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», ведущий научный сотрудник Проблемной научно-исследовательской лаборатории электроники, диэлектриков и полупроводников

Ведущая организация: **ФГБУН «Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН»**, г. Красноярск

Защита состоится _____ 2018 г. в ____ часов на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете им. И.И. Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

<https://www.altstu.ru/structure/unit/odia/scienceevent/3668>

Автореферат разослан «____» _____ 2018 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук,
доцент



Романенко В.В.

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организаций, просим присылать в 2-х экз. на адрес университета и e-mail: veronika_65@mail.ru

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. В настоящее время магнитные материалы имеют широкое практическое применение. Такие материалы, как оксидные ферритмагнетики (ферриты), используются в различных технических устройствах: системах хранения информации, взаимных и невзаимных устройствах СВЧ техники, радиопоглощающих материалах и покрытиях, а также в области медицины, где они используются для транспорта лекарственных средств, при локальной гипертермии злокачественных новообразований и как контрастное вещество при ЯМР томографии [1, 2].

Важной особенностью магнитных материалов является то, что при переходе в наноразмерное состояние их магнитные свойства: величина намагниченности насыщения, ее температурная зависимость и температура Кюри могут существенно изменяться. Изменение магнитных свойств наночастиц обусловлено существенным ростом влияния дефектного поверхностного слоя при уменьшении размеров. Это открывает возможность управления магнитными свойствами наночастиц путем изменения ее размеров [3].

Исследование влияния размерных эффектов на магнитные свойства наночастиц можно проводить двумя путями. Первый включает в себя синтез наночастиц тем или иным способом и экспериментальное исследование их свойств различными методиками.

Второй способ, активно разрабатываемый в последние десятилетия, это применение различных методов моделирования. Моделирование свойств наноразмерных частиц магнетиков дает возможность изучить закономерности, возникающие при изменении одного или нескольких внешних факторов без изготовления и изучения свойств реальных образцов. Этот способ является более предпочтительным по нескольким причинам. Во-первых, он позволяет избежать временных и энергетических затрат, использования оборудования и реактивов для изготовления образцов наноматериалов и проведения экспериментальных исследований их физических свойств с целью получения продукта с требуемыми свойствами. Во-вторых, как правило, синтезированные наночастицы имеют довольно широкое распределение по размерам, что затрудняет интерпретацию влияния размерных эффектов на их свойства.

Моделирование магнитных свойств оксидных ферритмагнетиков с кубической кристаллической структурой необходимо проводить с учетом конкурирующих внутри и между подрешеточных обменных взаимодействий. Нахождение для таких частиц спиновой конфигурации, соответствующей минимальной энергии аналитическим способом является чрезвычайно сложной задачей. В связи с этим используется математическое моделирование на основе методов Монте-Карло.

Таким образом, исследование магнитных свойств и спиновой конфигурации наночастиц оксидных двухподрешеточных ферримагнитных материалов с кубической кристаллической структурой путем создания их математических моделей и программных реализаций является актуальной задачей. Она перспективна с точки зрения прогнозирования магнитных свойств данных материалов в зависимости от их состава, размеров, а также внешних факторов, таких как температура и приложенное внешнее магнитное поле.

Как правило, программные реализации для моделирования трехмерных систем разработаны для расчетов на кластерах, что делает моделирование достаточно затратным. В связи с этим актуальной также является задача по оптимизации вычислительного процесса для обеспечения возможности моделирования изменения структуры и свойств наноразмерных частиц за приемлемое время, не более 3-4 часов на точку, средствами настольного персонального компьютера (ПК).

Степень разработанности: В литературе рассматривается достаточно большое количество моделей, описывающих поведение наноразмерных магнетиков. Модели построены на основе гамильтонианов Изинга или Гайзенберга и учитывают наличие как ферромагнитных, так и антиферромагнитных взаимодействий в невозмущенном объеме и дефектном поверхностном слое наночастиц. Некоторые из них учитывают наличие магнито-кристаллической анизотропии, а также влияние температуры и внешнего магнитного поля на магнитные свойства наночастицы.

Однако важно отметить, что эти модели являются теоретическими и не привязаны к каким-либо реально существующим материалам. Принятый в них вид обменных взаимодействий и толщина дефектного поверхностного слоя не обосновываются с точки зрения исследования влияния размерных эффектов на магнитные свойства реальных оксидных ферримагнитных материалов. Необходимо отметить также, что моделирование изменения магнитных свойств наноразмерной ферримагнитной частицы при замещении части магнитных ионов немагнитными ранее не проводилось.

Цель работы: Исследовать магнитные свойства и спиновые конфигурации наноразмерных частиц двухподрешеточных оксидных ферримагнетиков с кубической кристаллической структурой с учетом междоузельных и внутримолекулярных обменных взаимодействий в зависимости от размеров частиц, температуры и приложенного внешнего магнитного поля при помощи моделирования методом Монте-Карло.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

- 1) Провести анализ современных моделей, методов и программ, применяемых в настоящее время для исследования изменения магнитной структуры и свойств магнитных материалов при переходе в наноразмерное состояние.
- 2) Разработать физико-математическую модель, описывающую процесс изменения спиновой конфигурации и магнитных свойств наноразмерных частиц двухподрешеточных оксидных феррошпинелей с дефектным поверхностным слоем в зависимости от температуры, внешнего магнитного поля и состава вещества.
- 3) Исследовать влияние размерных эффектов и дефектного поверхностного слоя на спиновую конфигурацию и магнитные свойства наночастиц феррошпинелей MnFe_2O_4 и Fe_3O_4 при изменении температуры. Провести сравнение результатов расчетов с поведением квазимассивных частиц без учета дефектного поверхностного слоя и с экспериментальными данными.
- 4) Изучить полевые зависимости проекций магнитного момента наночастиц MnFe_2O_4 и Fe_3O_4 на направление намагничивающего поля. Оценить влияние размерных эффектов и дефектной поверхности наночастиц на эти зависимости.
- 5) Исследовать влияние немагнитного замещения на намагниченность насыщения и температуру Кюри феррошпинелей состава $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ в диапазоне замещений $0 \leq x \leq 0.8$. Провести сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными.

Объект исследований: Магнитные свойства наноразмерных двухподрешеточных оксидных ферримагнетиков с кубической кристаллической структурой и модели их описывающие.

Предмет исследований: Закономерности трансформации магнитных свойств и спиновых конфигураций при переходе ферримагнетиков $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($0 \leq x \leq 0.8$) и Fe_3O_4 в наноразмерное состояние в зависимости от размеров частиц, температуры и величины приложенного внешнего магнитного поля.

Методы исследований: В работе используется математическое моделирование изменения магнитных свойств наноразмерных частиц на базе методов статистической физики: Метод Монте-Карло, алгоритм Метрополиса. Проводится сравнение результатов моделирования с известными экспериментальными результатами.

Научная новизна:

- 1) Впервые исследовано влияние размерных эффектов, дефектного поверхностного слоя, температуры и магнитного поля на магнитные свойства двухподрешеточных оксидных ферримагнетиков со структурой шпинели с учетом конкурирующих обменных взаи-

модействий при помощи разработанной модели, базирующейся на гамильтониане Гейзенберга и алгоритме Метрополиса.

2) Впервые применён и проверен на достоверность подход с феноменологическим учётом в гамильтониане системы температурных зависимостей намагниченностей подрешеток в рамках теории молекулярного поля, что позволило существенно повысить сходимость алгоритма Метрополиса.

3) Впервые методом Монте-Карло исследовано влияния размерных эффектов на магнитные свойства наноразмерных оксидных ферромагнетиков MnFe_2O_4 и Fe_3O_4 . Показано, что наличие дефектного поверхностного слоя существенно влияет на спиновую конфигурацию, величину намагниченности насыщения и ее температурные и полевые зависимости.

4) Впервые показано, что дефектный поверхностный слой наночастиц ферромагнетиков MnFe_2O_4 и Fe_3O_4 приводит к существенному уменьшению величины первого критического поля, при котором нарушается коллинеарность векторов намагниченностей подрешеток, по сравнению с массивными образцами.

5) Впервые исследованы температурные зависимости удельной намагниченности наночастиц ферромагнетиков $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($0 \leq x \leq 0.8$). Анализ проведен при помощи модифицированной для учёта немагнитного замещения модели.

Теоретическая и практическая значимость: Результаты работы развивают и уточняют представления о наноразмерных ферромагнетиках с кубической кристаллической структурой. Предложена новая модель, позволяющая описывать и прогнозировать изменение спиновой структуры и магнитных свойств наноразмерных ферромагнетиков в зависимости от размеров частицы, приложенного магнитного поля, температуры и состава ферромагнетика. Разработана программа, реализующая представленную модель и позволяющая исследовать изменение структуры наноразмерных ферромагнетиков со структурой шпинели размерами от 4 нм до 10 нм в зависимости от состава и внешних параметров на обычном ПК. Результаты имеют значение для целенаправленного синтеза наноразмерных частиц феррошпинелей с заданными свойствами, а также вносят вклад в развитие модельных представлений о наноразмерных магнитных материалах.

Внедрение результатов работы:

Результаты работы были использованы при выполнении:

1) НИР «Научно-технические основы высокоэффективной радиационно-термической обработки синтезированных в режиме горения ферритовых материалов, активно взаимодействующих с электромагнитным излучением СВЧ диапазона». Государственный контракт от 20 марта 2013 г. № 14.513.11.0055.

- 2) ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технического комплекса России на 2007-2013 годы». № Госрегистрации 0120135802.
- 3) Программа повышения конкурентоспособности Томского Государственного Университета «Развитие и разработка электромагнитных методов исследования фундаментальных характеристик композитов на основе наноразмерных материалов в терагерцовом и гигагерцовом диапазонах». Регистрационный номер 8.1.23.2015.

Положения, выносимые на защиту:

- 1) Феноменологический учет температурных зависимостей магнитных моментов в рамках теории молекулярного поля в предлагаемой модели спинового гамильтониана адекватно описывает магнитные свойства наноразмерных двухподрешеточных оксидных ферримагнетиков $Mn_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ и Fe_3O_4 в диапазоне температур от 0 К до температуры Кюри.
- 2) Переход дефектного поверхностного слоя в парамагнитное состояние при повышении температуры существенно влияет на величину намагниченности насыщения и спиновую конфигурацию внутреннего объема частицы. Область резкого падения намагниченности насыщения смещается в диапазон более низких температур.
- 3) При приложении сильного внешнего магнитного поля вдоль направления суммарной намагниченности наночастиц с дефектным поверхностным слоем величина первого критического обменного поля, при котором нарушается коллинеарность магнитных моментов подрешеток, приблизительно вдвое меньше, чем у квазимассивной частицы без поверхностного слоя. Величина второго критического поля, при котором происходит схлопывание магнитных моментов подрешеток, одинакова в случаях продольной и поперечной ориентации намагничивающего поля относительно направления суммарной намагниченности и не зависит от наличия дефектного поверхностного слоя у наночастиц.

Достоверность полученных результатов обеспечивается тем, что разработанная модель базируется на классической модели Гейзенберга, а также выбором в качестве опорного алгоритма Метрополиса, широко используемого при исследовании свойств наноразмерных магнитных частиц. Результаты моделирования соответствуют экспериментальным данным других авторов, а также согласуются с основными теоретическими принципами.

Личный вклад автора состоит в участии в постановке задачи исследования, разработке и реализации алгоритмов и моделирующей программы, проведении расчётов и анализе полученных результатов, а также в обсуждении и формулировке основных положений и выводов диссертации.

Апробация результатов диссертации: Результаты диссертации доложены на VI “Сибирской конференции по параллельным и высокопроизводительным вычислениям” (2012 г., г. Томск), III Международной научной конференции “НАНОСТРУКТУРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ – 2012: РОССИЯ – УКРАИНА – БЕЛАРУСЬ” (2012 г., г. Санкт-Петербург), на IV международной научно-практической конференции “Актуальные проблемы радиофизики” (2013 г., г. Томск), на V международной научно-практической конференции “Актуальные проблемы радиофизики” (2014 г., г. Томск), на VI международной научно-практической конференции “Актуальные проблемы радиофизики” (2015 г., г. Томск), XII Международной научной конференции «Радиационно-термические эффекты и процессы в неорганических материалах» (2016 г., г. Ялта), Symposium and Summer School «Nano and Giga Challenges in Electronics, Photonics and Renewable Energy» (2017, Tomsk)

Публикации: Основное содержание диссертационной работы опубликовано в 9 научных трудах, в том числе, в 7 статьях в рецензируемых журналах, включенных в перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ, четыре из них индексируются в Web of Science и Scopus, 1 программа зарегистрирована в реестре программ для ЭВМ.

Структура диссертации: Диссертация изложена на 127 страницах и состоит из введения, 4 глав, библиографического списка из 151 наименований, содержит 48 иллюстраций и 6 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении отражена актуальность темы исследования, сформулирована цель диссертационной работы, описана научная новизна и практическая значимость, приведены защищаемые положения. Дана краткая характеристика работы по главам.

В первой главе диссертации проведён литературный обзор по теоретическим и экспериментальным исследованиям наноразмерных магнитных веществ. Рассмотрено применение моделей Изинга и Гейзенберга для исследования свойств наноразмерных магнитных материалов, в которых по-разному учитывается наличие дефектного поверхностного слоя. Рассмотрена эволюция модельных представлений, использованных различными авторами для анализа свойств наноразмерных частиц магнетиков, в том числе ферритмагнетиков. Также рассмотрены способы описания состояния и магнитные свойства массивных и наноразмерных двухподрешеточных оксидных ферритмагнетиков со структурой шпинели, в частности марганец-цинковой феррошпинели $Mn_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ и магнетита Fe_3O_4 .

В данной главе приводится общее описание методов Монте-Карло и алгоритма Метрополиса, которые используются в качестве опорных алгоритмов при моделировании свойств наноразмерных магнитных материалов в подавляющем большинстве источников.

Показано, что проблема создания адекватных моделей и технических средств исследования свойств наноразмерных магнетиков является в настоящее время актуальной, по причине нарастающего использования данных материалов в различных областях науки, техники и медицины. Имеются нерешенные задачи: по созданию моделей и средств моделирования, позволяющих с достаточной точностью описывать поведение наноразмерных двухподрешеточных оксидных ферритмагнетиков и по созданию программных реализаций, позволяющих производить моделирование в относительно небольшие сроки и с использованием стандартной вычислительной техники.

В конце главы формулируются цель и задачи диссертационной работы.

Во второй главе диссертации рассматриваются модифицированный нами гамильтониан и доработанный алгоритм Метрополиса, а также алгоритм для учета замещения части магнитных атомов немагнитными, а также технические особенности реализации моделирующей программы, и обосновывается применение выбранных технологий.

Исследуемыми материалами являются наночастицы двухподрешеточных оксидных ферритмагнетиков с кубической кристаллической структурой. Как правило, они имеют форму, близкую к сферической. Поэтому для частиц была выбрана модель сферы, вписанной в куб, состоящий из заданного числа элементарных кубических ячеек шпинели. Для сферы задается толщина внешнего сферического слоя, которая моделирует наличие дефектного поверхностного слоя. В расчетах используется гамильтониан, учитывающий межподрешеточные обменные взаимодействия типа AB и внутривподрешеточные обменные взаимодействия типа BB . В гамильтониан включены члены, описывающие кубическую магнитокристаллическую анизотропию невозмущенного ядра частицы и одноосную анизотропию поверхностного слоя. Также учтено влияние внешнего магнитного поля и температуры. Данный гамильтониан имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 H / k_B = & -J_{ab}^c m_a^c(T) m_b^c(T) \sum_{i \neq j \in c} \vec{S}_i \vec{S}_j - J_{bb}^c (m_b^c(T))^2 \sum_{i \neq j \in c} \vec{S}_i \vec{S}_j - J_{ab}^s m_a^s(T) m_b^s(T) \sum_{i \neq j \in s} \vec{S}_i \vec{S}_j - \\
 & J_{bb}^s (m_b^s(T))^2 \sum_{i \neq j \in s} \vec{S}_i \vec{S}_j - K_c (m_a^c(T))^2 (m_b^c(T))^2 \sum_i (S_{ix}^2 S_{iy}^2 + S_{iy}^2 S_{iz}^2 + S_{iz}^2 S_{ix}^2) \\
 & - K_s m_a^s(T) m_b^s(T) \sum_k (S_k \vec{e}_k)^2 - g \mu_B (\vec{H}_0 / k_B) m(T) \sum_i \vec{S}_i,
 \end{aligned} \tag{1}$$

где индекс c относится к атомам внутреннего невозмущенного объема частицы, s – к атомам поверхностного слоя, $J_{ij}^{c(s)}$ – интеграл обмена для атомов соответствующих подрешеток, K_c – константа анизотропии для невозмущенного объема частицы, K_s – константа анизотропии поверхностного слоя частицы, H_0 – величина внешнего магнитного поля, g – g -фактор, μ_B – магнетон Бора, T – температура. Единичный вектор $\vec{e}_k$ определяет взаимное

расположение спинов в рамках первой координационной сферы рассматриваемого атома в поверхностном слое и задаётся по следующей формуле:

$$\vec{e}_k = \sum_i (\vec{p}_k - \vec{p}_i) / \left| \sum_i (\vec{p}_k - \vec{p}_i) \right| \quad (2)$$

Здесь вектор $\vec{p}_k$ – единичный радиус-вектор пространственной ориентации выбранного магнитного иона, а $\vec{p}_i$ – единичный радиус вектор ориентации для его ближайших соседей.

Для описания температурных зависимостей магнитных свойств двухподрешеточных оксидных ферромагнетиков хорошо зарекомендовала себя теория молекулярного поля. Поэтому для вычисления равновесных состояний спиновой системы при разных температурах в модельный гамильтониан были введены нормированные намагниченности тетраэдрической и октаэдрической подрешеток внутреннего объёма и поверхностного слоя частицы $m_{a,b}^c$ и $m_{a,b}^s$, которые вычислялись по формулам:

$$m_a^i(T) = B\left(\frac{g\mu_b S_a H_0 + \left(\frac{S_a + S_b}{2}\right)^2 z_{ab} J_{ab}^i + S_a^2 z_{aa} J_{aa}^i}{kT}\right) \quad (3)$$

$$m_b^i(T) = B\left(\frac{g\mu_b S_b H_0 + \left(\frac{S_a + S_b}{2}\right)^2 z_{ba} J_{ab}^i + S_b^2 z_{bb} J_{bb}^i}{kT}\right) \quad (4)$$

Здесь k – постоянная Больцмана, $B(x)$ – функция Бриллюэна, S_a и S_b – спиновые моменты магнитных атомов соответствующих подрешёток, z_{aa} , z_{ab} , z_{ba} и z_{bb} – количество соседей для выбранного магнитного атома металла. Первый индекс показывает тип подрешётки выбранного атома металла, а второй – ближайших соседей из соответствующей подрешётки. J_{aa}^i , J_{ab}^i и J_{bb}^i – интегралы обменного взаимодействия между атомами металлов соответствующих подрешёток. Индекс i указывает на принадлежность граничному слою (s) или внутреннему невозмущённому объёму (c). При формировании аргументов функции Бриллюэна учитывается взаимодействие атомов внутри подрешетки A , оно даёт несущественный вклад в суммарную энергию частицы, но заметно влияет на температурные зависимости нормированных намагниченностей.

Для учёта влияния немагнитного замещения был разработан алгоритм, который на первом шаге определяет среднее количество замещаемых магнитных ионов, в зависимости от заданного процента замещения. После чего проводится замещение полученного на первом шаге количества случайно выбранных атомов для каждой элементарной ячейки.

Вероятностные переходы, при изменении энергии $\Delta\epsilon$, для алгоритма Метрополиса рассчитывались по формулам:

$$P = \begin{cases} 1, \Delta\varepsilon < 0 \\ C \exp(-\Delta\varepsilon / kT), \Delta\varepsilon \geq 0. \end{cases} \quad (6)$$

$$C = \left\{ 0.02 + 0.48 \left[1 - \left(m_a^c(T) + m_b^c(T) \right) / 2 \right] \right\}. \quad (7)$$

Здесь коэффициент C отличается от классического случая, когда он равен 1, поскольку предложенный вид данного коэффициента позволяет увеличить точность вычислений вблизи температуры Кюри.

Для оптимизации вычислений были введены ограничения на величины углов поворота. Количество промежуточных вычислений было минимизировано за счёт хранения некоторых промежуточных результатов вычисления в оперативной памяти. Вычисление отдельных составляющих гамильтониана энергии частицы было распараллелено. Данные действия позволили ускорить процесс моделирования приблизительно в 40 раз.

В третьей главе диссертации рассмотрено влияние размерных эффектов на спиновую структуру и намагниченность наноразмерных частиц марганец-цинковой феррошпинели $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($0 \leq x \leq 0.8$) при изменении температуры, приложении магнитного поля, а также при замещении части ионов марганца немагнитными ионами цинка. Выбор этих материалов обусловлен следующими причинами:

- Эти ферримагнетики находят широкое практическое применение.
- В литературе имеется достаточно большой объем экспериментальных данных по концентрационным зависимостям параметров кристаллической структуры, магнитным свойствам и температурам Кюри феррошпинелей $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$.
- Для этих материалов известны необходимые для моделирования значения обменных интегралов [4].

При исследовании размерных зависимостей магнитных параметров наночастицы MnFe_2O_4 значения интегралов обмена $J_{aa}^c = -2$ К, $J_{bb}^c = -4$ К и $J_{ab}^c = -14$ К для невозмущенного объема были взяты из [4]. Значения интегралов обмена для дефектного поверхностного слоя выбраны вдвое меньшими: $J_{aa}^s = -1$ К, $J_{bb}^s = -2$ К и $J_{ab}^s = -7$ К. Поверхностный слой не является однородным и в нём отсутствуют некоторые атомы. Это ведёт к обрыву обменных связей и ослаблению обменных взаимодействий между атомами граничного слоя. Поэтому в расчетах считали поверхностный слой однородным, аналогично внутреннему объёму, но значения интегралов обмена для него уменьшили в два раза. Спиновые моменты подрешеток в единицах $\hbar/2\pi$ равны $S_a = 5/2$ и $S_b = 5/2$. Величины констант анизотропии поверхностного слоя K_s и невозмущенного объема K_c взяты равными -0.12 К. Известно, что у марганцевого феррита константа анизотропии мала [5] и не

вносит заметного вклада в изменение состояния частицы. Толщина граничного слоя была выбрана равной $1a$, где $a = 0.85$ нм – размер элементарной ячейки ферритмагнетика MnFe_2O_4 [5].

На рисунке 1 представлены зависимости удельной намагниченности насыщения наночастиц при изменении температуры в диапазоне от 10 К до 575 К.

Расчеты проведены для размеров частиц от 9 до 6 постоянных решетки. Ромбы на рисунке – экспериментальные данные для массивных образцов. Пунктирная кривая – расчет без дефектного поверхностного слоя. Видно, что при $T = 10$ К результаты моделирования близки к эксперименту на массивном образце. Отличие обусловлено тем, что при моделировании магнитный момент брался равным теоретическому значению, равному 5 μ_B , тогда как экспериментально измеренная величина для массивного образца марганцевого феррита составляет 4.6 μ_B .

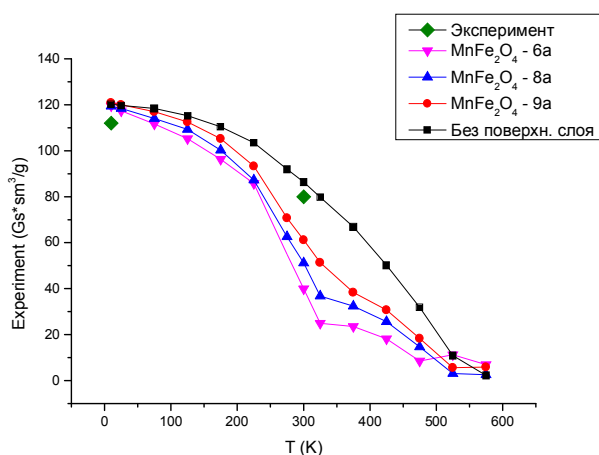


Рис. 1. – Температурная зависимость удельной намагниченности насыщения марганцевого феррита для наночастиц марганцевой феррошпинели размерами от 6 до 9 элементарных ячеек. Ромбы – экспериментальные данные. Пунктирная кривая – моделирование без учета дефектного поверхностного слоя.

При повышении температуры удельная намагниченность насыщения для наноразмерных частиц уменьшается быстрее, чем у массивных образцов. Быстрое уменьшение намагниченности начинается при температуре ~ 250 К. Это происходит из-за того, что поверхностный слой переходит в парамагнитное состояние быстрее и в результате взаимодействия с внутренним слоем начинает его разупорядочивать. Удельная намагниченность насыщения частиц меньшего размера убывает быстрее. Это обусловлено тем, что у частиц малого размера отношение количества атомов поверхностного слоя к количеству атомов невозмущенного ядра заметно выше, чем для частиц большего размера.

На рисунках 2 и 3 приведены спиновые конфигурации частицы марганцевой феррошпинели диаметром $9a$ при 10 К и 300 К, соответственно. Спины, отмеченные стрелками без заливки, принадлежат октаэдрической подрешётке, а спины с чёрной заливкой – тетраэдрической. Как видно из рисунка 2, при температурах, близких к 0 К, наночастица MnFe_2O_4 имеет ферритмагнитный порядок как во внутреннем, так и в поверхностном слое.

При комнатных температурах поверхностный слой переходит в парамагнитное состояние, а во внутреннем объёме ферромагнитный порядок сохраняется, несмотря на наличие некоторого разупорядочения, вносимого за счёт обменных взаимодействий с атомами парамагнитного внешнего слоя и за счёт вклада тепловой энергии.

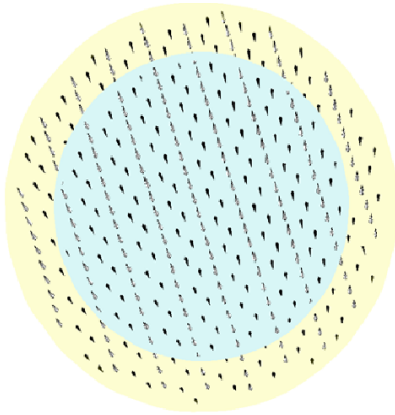


Рис. 2. – Спиновая конфигурация частицы марганцевой феррошпинели диаметром $9a$ в плоскости $z = 0$ при температуре 10 К.

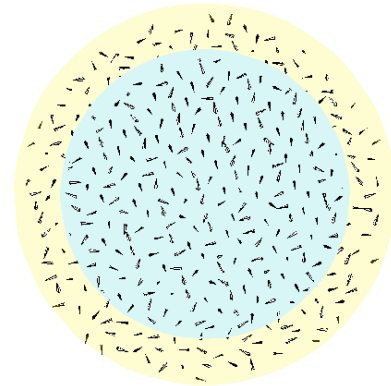


Рис. 3. – Спиновая конфигурация частицы марганцевой феррошпинели диаметром $9a$ в плоскости $z = 0$ при температуре 300 К.

Полевые зависимости суммарной проекции всех спинов частицы размером $8a$ на направление поля в магнетонах Бора представлены на рисунках 4 и 5.

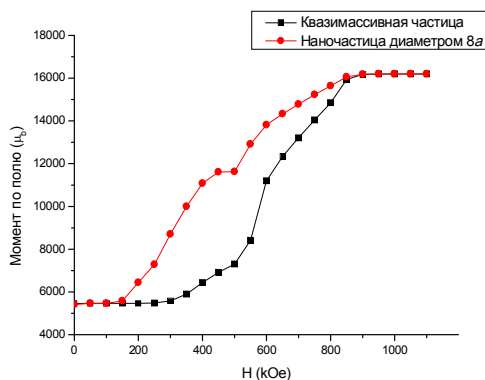


Рис. 4. – Полевая зависимость квазимассивной частицы и наночастицы MnFe_2O_4 диаметром $8a$. Температура 10 К. Поле параллельно начальному суммарному моменту частицы.

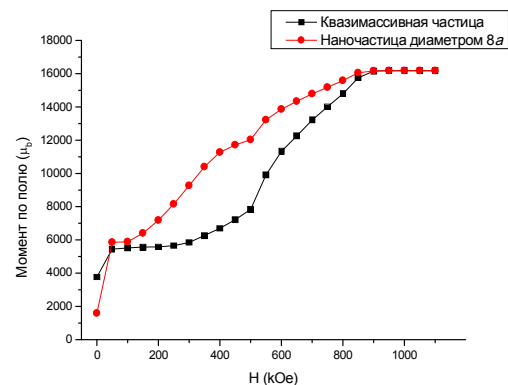


Рис. 5. – Полевая зависимость квазимассивной частицы и наночастицы MnFe_2O_4 диаметром $8a$. Температура 300 К. Поле параллельно начальному суммарному моменту частицы.

Считалось, что намагничивающее поле направлено параллельно начальной ориентации спинов. Видно, что кривые намагничивания при температурах 10 К и 300 К схожи, но при комнатной температуре наблюдается скачок намагниченности в малых полях до 50 кОе, с последующим выходом на плато, до достижения первого критического обменного поля H_{cl} [6]. Данный скачок заметно больше для наночастицы с наличием поверхностного слоя.

Из представленных графиков (Рис. 4 и 5) видно, что значение первого критического поля наночастицы $H_{c1} \approx 150 - 200$ кОе, при $T = 10$ К и $H_{c1} \approx 150$ кОе, при 300 К, тогда как для квазимассивной частицы его величина $H_{c1} \approx 300$ кОе, для обоих случаев. Данные различия обусловлены тем, что из-за меньших величин обменной энергии в поверхностном слое переориентация спинов в поверхностном слое вдоль поля начинает происходить при полях меньшей величины. Также видно, что намагничивание вдоль поля частиц с поверхностным слоем происходит быстрее. В интервале полей 450 – 500 кОе наблюдается эффект замедления роста намагниченности частицы вдоль поля. По нашему мнению, это обусловлено тем, что магнитные моменты в поверхностном слое уже выстроены по направлению поля и для дальнейшего намагничивания требуется переориентация моментов внутреннего объема. Величина второго критического обменного поля не зависит от наличия поверхностного слоя и для обеих температур равна $H_{c2} \approx 900$ кОе.

Оценка отношения намагниченностей подрешёток для наночастицы MnFe_2O_4 по величинам критических полей показывает, что $M_1 = 2M_2$, где M_1 и M_2 величины намагниченностей насыщения подрешеток. Эта оценка практически совпадает с соотношением количества атомов в соответствующих подрешётках. $\text{Cnt}_B = 2.02\text{Cnt}_A$, где Cnt_A и Cnt_B количество магнитоактивных атомов в подрешётках.

При перпендикулярном направлении поля относительно начального суммарного момента частицы, увеличение момента вдоль направления поля становится заметным при приложении поля величиной 50 кОе и плавно увеличивается до достижения насыщения вдоль поля при $H_0 \approx 900$ кОе. При этом, намагничивание наночастицы с дефектным поверхностным слоем происходит быстрее, чем намагничивание квазимассивной частицы без поверхностного слоя.

Вычислительные эксперименты для марганец-цинковой феррошпинели $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ проводились для замещений $x = 0.2; 0.4; 0.6; 0.8$. Выбор этих составов обусловлен тем, что для этих концентраций известны величины обменных интегралов [4]. Значения интегралов обмена для внешнего слоя, как и ранее, приняты вдвое меньшими, чем для внутреннего объема. Считалось, что немагнитные атомы располагаются в тетраэдрической подрешётке (Рис. 6). Отметим, что в реальных образцах марганец-цинковых феррошпинелей 80% немагнитных атомов приходится на тетраэдрическую подрешётку, а 20 % на октаэдрическую.

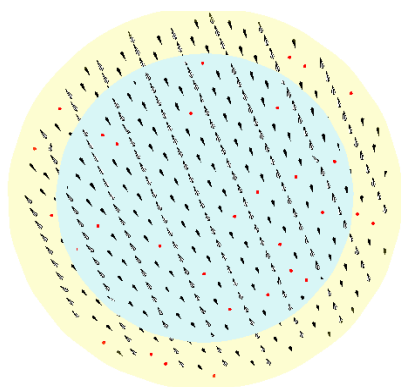


Рис. 6. – Спиновая конфигурация частицы феррошпинели $Mn_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ ($x = 0.2$) размером $9a$ в плоскости $z = 0$. Красные точки – ионы Zn^{2+} . Температура 10 К.

Для экспериментальной проверки предлагаемой модели были рассчитаны температурные зависимости намагниченностей насыщения наночастиц размерами от $5a$ до $9a$ феррошпинелей $Mn_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ без дефектного поверхностного слоя. По этим данным были оценены величины температуры Кюри. Модель наночастицы без поверхностного слоя аналогична по своим свойствам массивному материалу. Результаты расчета и экспериментальные данные для массивных частиц феррошпинелей $Mn_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ из работы [4] представлены в таблице 1. Видно, что для всех материалов температура Кюри, полученная при моделировании, близка к экспериментальным данным.

Таблица 1. Экспериментальные и рассчитанные величины температуры Кюри феррошпинелей $Mn_{1-x}Zn_xFe_2O_4$.

Вещество	T_C , К [3]	T_C , К моделирование
$MnFe_2O_4$	573	569
$Mn_{0.8}Zn_{0.2}Fe_2O_4$	510	500
$Mn_{0.6}Zn_{0.4}Fe_2O_4$	425	423
$Mn_{0.4}Zn_{0.6}Fe_2O_4$	320	327
$Mn_{0.2}Zn_{0.8}Fe_2O_4$	220	238

Результаты расчетов температурных зависимостей удельной намагниченности насыщения наноразмерных частиц марганец-цинковой феррошпинели с учетом дефектного поверхностного слоя толщиной $1a$ представлены на рисунках 7, 8 (составы с $x = 0.2$ и $x = 0.4$) и 9, 10 (составы с $x = 0.6$ и $x = 0.8$). Из сравнения с данными для незамещенного материала (см. Рис. 1) видно, что немагнитное замещение существенно влияет на температуры, при которых происходит быстрое уменьшение намагниченности.

Согласно рисункам 7 – 10, уменьшение размера частиц материалов с немагнитным замещением, как и в случае без замещения, приводит к уменьшению величины удельной намагниченности насыщения и к снижению температуры быстрого спада намагниченности. Имеющиеся на графиках случайные всплески намагниченности обусловлены полным переходом поверхностного слоя в парамагнитное состояние, в результате чего атомы по-

верхностного слоя могут упорядочиться случайным образом и влиять на атомы внутреннего объема, что имеет большее значение при расчетах $\sigma(T)$ частиц малого размера.

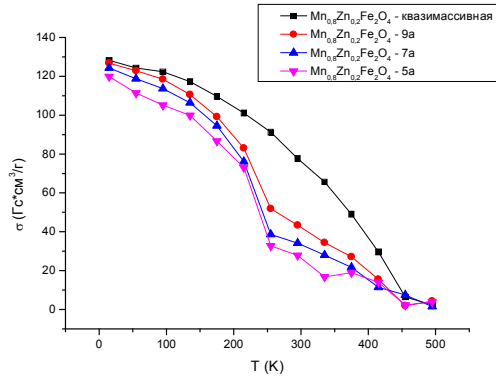


Рис. 7. – Температурная зависимость удельной намагниченности насыщения для частиц $\text{Mn}_{0.8}\text{Zn}_{0.2}\text{Fe}_2\text{O}_4$, размерами 5, 7 и 9 элементарных ячеек.

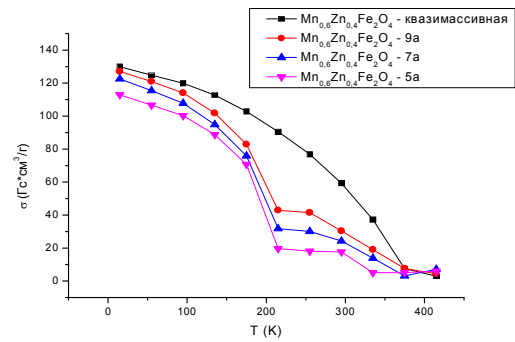


Рис. 8. – Температурная зависимость удельной намагниченности насыщения частиц $\text{Mn}_{0.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Fe}_2\text{O}_4$ размерами 5, 7 и 9 элементарных ячеек.

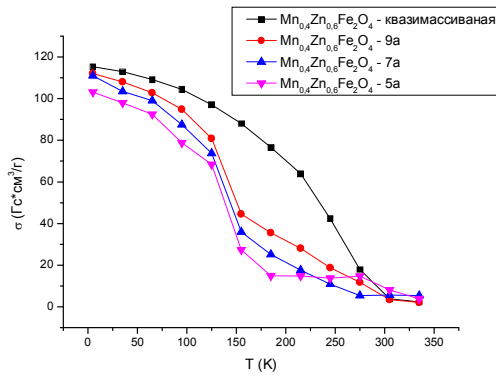


Рис. 9. – Температурная зависимость удельной намагниченности насыщения для частиц $\text{Mn}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{Fe}_2\text{O}_4$, размерами 5, 7 и 9 элементарных ячеек.

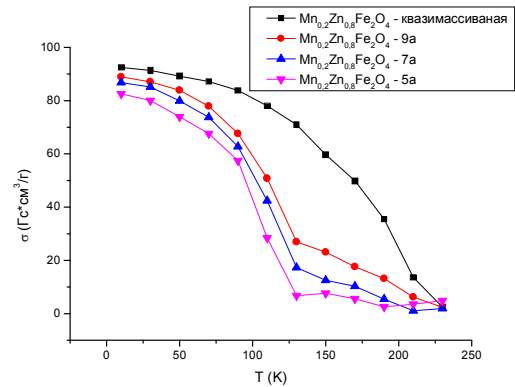


Рис. 10. – Температурная зависимость удельной намагниченности насыщения частиц $\text{Mn}_{0.2}\text{Zn}_{0.8}\text{Fe}_2\text{O}_4$ размерами 5, 7 и 9 элементарных ячеек.

При температуре, близкой к 0 К, удельная намагниченность насыщения состава с $x = 0.2$ выше, чем у образца MnFe_2O_4 . Величина $\sigma \approx 120 \text{ Гс} \cdot \text{см}^3/\text{г}$ для частицы без замещения и $\sigma \approx 130 \text{ Гс} \cdot \text{см}^3/\text{г}$, для частицы с 20% замещения. Рост σ обусловлен тем, что немагнитными ионами заменяются ионы подрешётки с меньшей намагниченностью. Этот эффект наблюдается и у массивных замещенных марганцевых ферритов [5].

При увеличении x до 60% у наноразмерных частиц переход в парамагнитное состояние происходит при температурах ниже комнатной (Рис. 9.). Это отличает данный материал от массивного образца, для которого температура Кюри составляет 320 К.

Результаты сравнения полученных величин намагниченностей насыщения наночастиц $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ диаметром $11a$ при комнатной температуре с экспериментальными данными работ [7 - 9] представлены в Таблице 2. В работах [7 - 9] измерения проводились на частицах с размерами $17 \div 66 \text{ нм}$. Наблюдается хорошее соответствие рассчитанных

величин с экспериментом, до концентраций с $x \leq 0.4$. Расхождение расчета и экспериментальных данных [8] для концентрации $x = 0.6$ обусловлено тем, что у данного состава температура Кюри близка к комнатной температуре и она существенно зависит от размера частиц [3]. В работе [8] исследованы наночастицы большего размера чем те, для которых проводилось моделирование.

Таблица 2. Сравнение расчетных величин намагниченности насыщения феррошпинелей $Mn_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ с экспериментом [7 – 9].

Концентрация, x	0	0.2	0.4	0.6
σ , моделирование, $Гс \cdot см^3/Г$	69.6	59.7	38.2	13.7
σ , эксперимент, $Гс \cdot см^3/Г$	66.4	69	41.6	22.4

Путем многократных расчетов проведены оценки погрешностей вычислений величины удельных намагниченностей для частиц с различными размерами и процентом немагнитного замещения. Расчеты показали, что погрешности возрастают с увеличением доли немагнитного замещения и/или уменьшением размера частицы. Данные по погрешностям для наночастицы $MnFe_2O_4$ размером $8a$ и наночастицы $Mn_{0.6}Zn_{0.4}Fe_2O_4$ размером $6a$ представлены на рисунках 11 и 12:

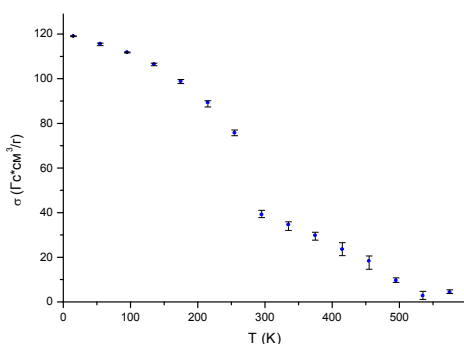


Рис. 11. – Оценка погрешности вычисления зависимости $\sigma(T)$ наночастицы $MnFe_2O_4$ размером $8a$.

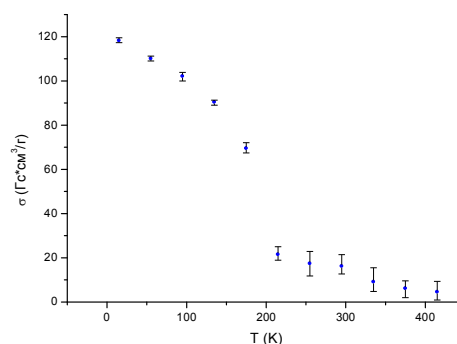


Рис. 12. – Оценка погрешности вычисления зависимости $\sigma(T)$ наночастицы $Mn_{0.6}Zn_{0.4}Fe_2O_4$ размером $6a$.

В четвёртой главе диссертации рассмотрено влияние размерных эффектов на спиновую структуру и магнитные свойства наноразмерных частиц магнетита. Для этого материала, как и для $Mn_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ имеются экспериментальные данные по значениям интегралов обмена, констант анизотропии, температуры Кюри и значений намагниченности насыщения при различных температурах.

При моделировании размерных зависимостей спиновой структуры и магнитных свойств наночастиц магнетита Fe_3O_4 значения интегралов обмена для невозмущенного ядра взяты из работы [10]: $J_{AA} = -2$ К, $J_{BB} = 3$ К и $J_{AB} = -27.5$ К. Величины интегралов

обмена дефектного поверхностного слоя, как и ранее, были взяты вдвое меньшими: $J_{AA} = -1$ К, $J_{BB} = 1.5$ К и $J_{AB} = -13.7$ К. Хотя значение константы анизотропии поверхностного слоя K_s и внутреннего слоя $K_c = -0.47$ К для магнетита заметно больше, чем для марганцевого феррита, оно всё ещё существенно меньше значений интегралов обмена и не вносит значимого вклада в изменение состояния частицы в рассматриваемом нами случае. Толщина граничного слоя выбрана равной $1a$, где $a = 0.839$ нм – постоянная решетки ферритмагнетика Fe_3O_4 [5].

На рисунке 13 представлены температурные зависимости удельной намагниченности насыщения наночастиц магнетита размерами $5a$, $7a$ и $9a$. Пунктирная кривая – расчет без учета дефектного поверхностного слоя. Символами ромб помечены экспериментальные данные для массивного материала из работы [10]. Видно, что до температур ~ 400 К намагниченности наночастиц разного размера с учетом дефектного поверхностного слоя и без него меняются слабо. Величины намагниченности близки к экспериментальным данным.

При дальнейшем увеличении температуры происходит быстрое уменьшение величин намагниченности наночастиц. Оно более сильное для частиц меньшего размера. При этом нет резкого перехода из ферритмагнитного в парамагнитное состояние вблизи температуры Кюри. Это согласуется с данными работы [3]. Зависимость $\sigma(T)$ наночастиц без учета дефектного поверхностного слоя имеет типичный для массивного ферритмагнетика Fe_3O_4 вид. Оцененная из этой зависимости величина температуры Кюри равна 870 К. Это значение близко к экспериментально полученной на массивных образцах величине $T_C = 858$ К [10].

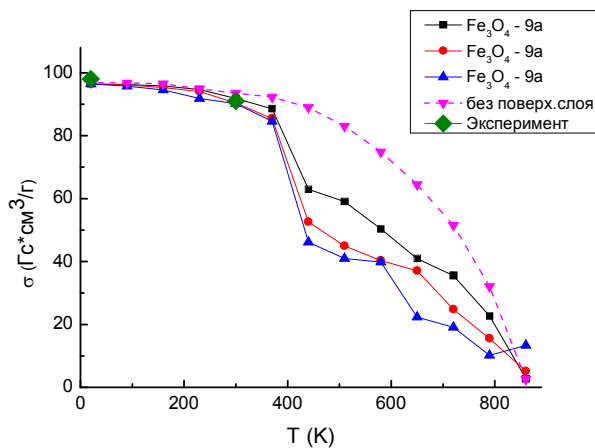


Рис. 13. – Температурная зависимость удельной намагниченности насыщения наночастиц магнетита размеров от 5, 7 и 9 элементарных ячеек. Ромбы – экспериментальные данные [10]. Пунктирная кривая – моделирование без учета дефектного поверхностного слоя.

На рисунке 14 приведена спиновая конфигурация наночастицы размером $9a$ при 300 К. Видно, что она более упорядочена по сравнению со спиновой конфигурацией наночастицы марганцевой феррошпинели с такими же размерами при близкой температуре

(см. рисунок 3). Это обусловлено большей величиной межподрешеточного обменного интеграла у магнетита. Согласно Рис. 10, переход поверхностного слоя в парамагнитное состояние и быстрое уменьшение намагниченности происходит при температурах порядка $420 \div 440$ К.

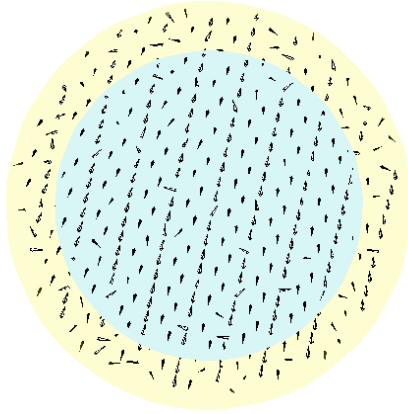


Рис. 14. – Спиновая конфигурация наночастицы магнетита размером 9 элементарных ячеек в плоскости $z = 0$. $T = 300$ К.

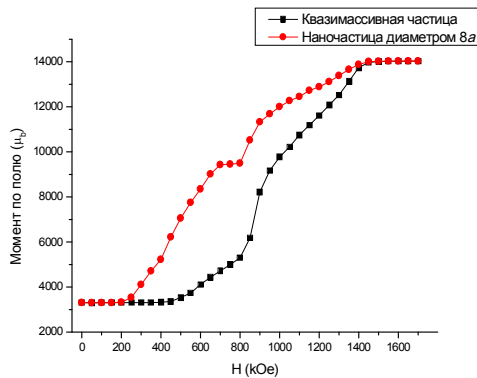


Рис. 15. – Полевая зависимость проекции магнитного момента квазимассивной частицы и наночастицы Fe_3O_4 диаметром $8a$, при температуре 10 К. Поле параллельно начальному суммарному моменту частицы.

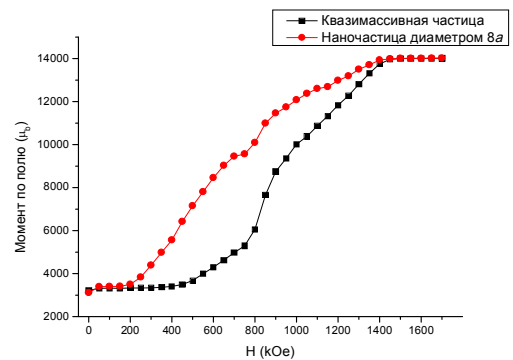


Рис. 16. – Полевая зависимость проекции магнитного момента квазимассивной частицы и наночастицы Fe_3O_4 диаметром $8a$, при температуре 300 К. Поле параллельно начальному суммарному моменту частицы.

Полевые зависимости проекции намагниченности наночастицы магнетита размером $8a$ на направление намагничивающего поля представлены на рисунках 15, 16. Видно, что при такой ориентации намагничивающего поля рост намагниченности вдоль направления поля начинается при $H_{c1} \approx 450$ кОе для квазимассивной частицы для обеих температур. Для наночастицы с поверхностным слоем $H_{c1} \approx 250$ кОе также для обеих температур. У квазимассивной частицы намагничивание вдоль поля происходит медленнее, чем для наночастицы с наличием поверхностного слоя, но состояние насыщения достигается одновременно. Величина второго критического поля $H_{c2} \approx 1400$ кОе при $T = 10$ К и $T = 300$ К. У наночастицы с поверхностным слоем, при величинах поля 650 – 750 кОе на кривой намагничивания наблюдается ступенька. Наличие этой ступеньки, как и в случае с марганцевой феррошпинелью, может быть обусловлено насыщением вдоль поля магнитных

моментов поверхностного слоя. Большие значения критических полей наночастиц магнетита, по сравнению с марганцевой феррошпинелью, обусловлены значительно большим значением межподрешоточного интеграла обмена.

Оценка намагниченностей подрешёток наночастицы Fe_3O_4 по величинам критических полей показывает, что $M_1 = 1.94M_2$, где M_1 и M_2 – величины намагниченностей насыщений подрешёток, что близко к отношению количества атомов в соответствующих подрешётках. $\text{Cnt}_B = 2.02\text{Cnt}_A$, где Cnt_A и Cnt_B – количество магнитоактивных атомов в подрешётках.

При направлении поля перпендикулярно направлению начального суммарного момента частицы, моменты начинают ориентироваться по направлению поля уже при 50 кОе. Намагниченность вдоль поля увеличивается и при величине поля около 1500 кОе достигает насыщения. Для квазимассивной частицы намагничивание вдоль поля происходит медленнее, чем для наночастицы с наличием поверхностного слоя, но состояние насыщения достигается одновременно. Данное поведение аналогично поведению магнитных моментов в частице марганцевого феррита.

Таким образом, особенности на температурных и полевых зависимостях намагниченности, полученные при моделировании изменения спиновой конфигурации наночастицы магнетита аналогичны особенностям, полученным при переходе в наноразмерное состояние марганцевой феррошпинели. Отличия результатов расчетов для данных материалов обусловлены разницей в величинах интегралов межподрешоточного обмена АВ, что влечёт за собой отличия в температуре Кюри, температуре перехода поверхностного слоя в парамагнитное состояние и значениям критических обменных полей данных материалов.

ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

- 1) Рассчитанные для наночастиц $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ и Fe_3O_4 без учета дефектного поверхностного слоя значения температуры Кюри отличаются не более чем на 2% от экспериментально полученных значений температуры Кюри массивных образцов данных соединений, что показывает адекватность выбранной модели.
- 2) Величины удельной намагниченности насыщения при комнатной температуре, рассчитанные для наночастиц $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ при $x \leq 0.4$ и Fe_3O_4 расходятся не более, чем на 3-13% с экспериментальными данными, полученными другими авторами.
- 3) Для всех рассмотренных наноразмерных материалов удельная намагниченность насыщения быстрее уменьшается с ростом температуры по сравнению с массивными материалами. Причём, в отличие от массивных материалов, у наноразмерных частиц резкое падение удельной намагниченности насыщения происходит при более низких температурах. Это обусловлено более ранним переходом поверхностного слоя частицы в парамагнитное состояние.
- 4) Температуры, при которых происходит резкое падение удельной намагниченности насыщения, зависят от состава вещества и размера наночастицы и уменьшаются при уменьшении размера наночастицы. Для наночастиц $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ область резкого падения удельной намагниченности насыщения находится в диапазоне температур ниже комнатных, тогда как для наночастиц Fe_3O_4 она выше диапазона комнатных температур.
- 5) Увеличение доли немагнитного замещения в наночастицах $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$, аналогично массивным материалам, существенно уменьшает удельную намагниченность насыщения и температуру Кюри. При переходе в наноразмерный диапазон температура Кюри для $\text{Mn}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ниже комнатной температуры, в отличие от массивных образцов.
- 6) При приложении сильного внешнего магнитного поля у наночастиц с поверхностным слоем величина первого критического обменного поля приблизительно вдвое меньше, чем у квазимассивной частицы без поверхностного слоя. Однако величина второго критического поля одинакова для обоих случаев и не зависит от наличия поверхностного слоя у частицы.
- 7) Разработаны методы минимизации количества операций при расчёте энергии частицы на каждом шаге алгоритма Метрополиса, а также предложен вариант распараллеливания вычисления модельного гамильтониана, что привело к увеличению скорости моделирования в 15 - 40 раз, в зависимости от размера частицы. Это позволило проводить моделирование изменения магнитных свойств и спиновой конфигурации наноразмерных

частиц диаметром до 10 постоянных решетки на обычном настольном ПК за приемлемое время от 25 минут до 2 часов на точку в зависимости от размера частицы.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

В изданиях, рекомендованных ВАК:

1. Найден, Е.П. Анализ основного состояния наноразмерной ферримагнитной частицы / Е.П. Найден, В.А. Родионов // Изв. вузов Физика, – 2012. – т.55. – №4. – С.48-52.
Перевод: Naiden, E.P. Analysis of the ground state of a nanosized ferrimagnetic particle / E.P. Naiden, V.A. Rodionov // Russian Physics Journal. – 2012. – Т. 55. – № 4. – pp. 394 – 399.
2. Найден, Е.П. Эволюция магнитной структуры наночастицы феррошпинели при изменении температуры / Е.П. Найден, В.А. Родионов // Изв. вузов Физика. – 2012. – №8/2. – с.171-172.
3. Rodionov, V.A. Magnetic Structure of Nanosized Ferrimagnetic Particle Depending on External Parameters / V.A. Rodionov // Изв. вузов Физика. – 2013. – №10/3. – с. 226-229.
4. Rodionov, V.A. Magnetic Structure of Nanosized Ferrimagnetic Particle Depending on External Parameters / V.A. Rodionov, E.P. Naiden // Advanced Materials Research. – 2014. – vol. 1040. – pp. 70-73.
5. Rodionov, V.A. Magnetic structure of nanosized ferrimagnetic particle depending on size effects / V.A. Rodionov, E.P. Naiden // Изв. вузов Физика. – 2015. – №10/3. – с.242-245.
6. Родионов, В.А. Моделирование спиновой конфигурации наноразмерных частиц марганцевого феррита методом Монте-Карло / В.А. Родионов, Е.П. Найден, В.А. Журавлёв // Изв. вузов Физика. – 2016. – Т. 59. – № 6. – с.57–61.
Перевод: Rodionov, V.A. A Monte Carlo Simulation of the Spin Configuration of Manganese Ferrite Nanoparticles / V.A. Rodionov, E.P. Naiden, V.A. Zhuravlev // Russian Physics Journal. – 2016. – V. 59. – No. 6. – p. 818-823.
7. Rodionov, V.A. Study the spin configuration and the saturation magnetization of manganese-zinc ferrite nanoparticles by the Monte Carlo method / V.A. Rodionov, V.A. Zhuravlev // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2017. – V.168. – 012080.

Публикации в других научных изданиях:

8. Родионов, В.А. Преимущества параллельных вычислений при моделировании основного состояния наноразмерных ферримагнетиков / В.А. Родионов // СКПВВ VI Материалы конференции. – Изд. ТГУ. Томск. – 2012. – с. 43-48.

9. Rodionov, V.A. Simulation of spin configuration changes in nano-sized manganese-zinc ferrite and magnetite / V.A. Rodionov, V.A. Zhuravlev // Advanced Russian Conferences. - Red Square Scientific. London – 2018. – p. 16-20.

Программы для ЭВМ:

1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2016614806. Программа моделирования изменения спиновой конфигурации и намагниченности наноразмерных ферритмагнетиков от внешних и внутренних параметров. / Родионов В.А., Журавлёв В.А., Найден Е.П. – Заявка №2016612202. Дата поступления 16 марта 2016 г. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 5 мая 2016 г.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Phong, P.T. $Mn_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$ nanoparticles with high intrinsic loss power for hyperthermia therapy / P.T. Phong, P.H. Nam, D.H. Manh, In-Ja Lee // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. – V.433. – P.76–83.
2. Junpeng, W. Combined use of lightweight magnetic Fe_3O_4 -coated hollow glass spheres and electrically conductive reduced graphene oxide in an epoxy matrix for microwave absorption / W. Junpeng, W. Jun, Z. Bin, S. Yu, C. Wei, W. Tao // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2018. – V.452. – P.55–63.
3. Никифоров, В. Н. Влияние размеров и поверхности на магнетизм наночастиц магнетита и маггемита / В. Н. Никифоров, А. Н. Игнатенко, В.Ю. Ирхин // ЖЭТФ. – 2017. – Т.151, вып.2. – с.356 – 363.
4. Жилияков, С.М. Магнитная структура диамагнитно-разбавленных кубических ферритмагнетиков / С.М. Жилияков, Е.П. Найден. – Томск:Изд.ТГУ., 1990. – 225 с.
5. Смит, Я. Ферриты / Я. Смит, Х. Вейн — М.: Издательство иностранной литературы, 1962. — 504 с.
6. Гуревич, А. Г. Магнитные колебания и волны / А. Г. Гуревич, Г. А. Мелков. – М.: Физматлит, 1994. – 464 с.
7. Pissurlekar, V.J. Synthesis and Magnetic Properties of Mn-Zn Ferrite Obtained by Decomposition of Precursor by Sunlight / V.J. Pissurlekar // IJSR. – 2015. – V.4, Issue 11. - P.660-664.

8. Mirshekari, G.R. Structure and Magnetic Properties of Mn-Zn Ferrite Synthesized by Glycine-Nitrate Auto-Combustion Process / G.R. Mirshekari, S.S. Daei, H. Mohseni, et al // Advanced Materials Research. – 2012. – V.409. – P.520-525.
9. Iranmanesh, P. Modified structural and magnetic properties of nanocrystalline MnFe_2O_4 by pH in capping agent free co-precipitation method / P. Iranmanesh, S. Saeednia, M. Mehran, S. Rashidi Dafeh // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. –V.425. – P.31–36.
10. Wohlfarth, E.P. Handbook of Magnetic Materials / E.P. Wohlfarth. – North-Holland Publishing Company, 1982. – V.3. – 852 p.