

# Визуализация формы плотности энергии магнитной анизотропии однодоменных наночастиц

Р.А. Рытов<sup>1,А,В</sup>, Н.А. Усов<sup>2,А</sup>

<sup>А</sup> Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"

<sup>В</sup> Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

<sup>1</sup> ORCID: 0000-0002-7963-3673, [ruslan.rytov2017@yandex.ru](mailto:ruslan.rytov2017@yandex.ru)

<sup>2</sup> ORCID: 0000-0002-2061-3467, [usov@obninsk.ru](mailto:usov@obninsk.ru)

## Аннотация

Ключевым физическим параметром, определяющим стационарные направления магнитного момента однодоменной ферромагнитной наночастицы, является тип ее эффективной магнитной анизотропии. Стационарные направления магнитного момента частицы меняются под влиянием внешнего магнитного поля. Для лучшего понимания поведения магнитного момента наночастицы во внешнем магнитном поле, в данной работе предложен простой способ визуализации плотности энергии магнитной анизотропии, и плотности полной энергии однодоменной магнитной наночастицы. В сферической системе координат плотность энергии магнитной анизотропии представляется в виде некоторой поверхности, что позволяет наглядно продемонстрировать наличие минимумов энергии, которые определяют равновесные направления единичного вектора намагниченности наночастицы в пространстве. Подробно рассмотрены случаи одноосной, кубической и комбинированной магнитной анизотропии. Продемонстрировано изменение полной энергии магнитной наночастицы в случаях одноосной, кубической и комбинированной магнитной анизотропии под влиянием внешнего однородного магнитного поля.

**Ключевые слова:** магнитная анизотропия, магнитные наночастицы, визуализация, плотность энергии, магнитное поле.

## 1. Введение

Магнитные наночастицы находят весьма широкое применение в современных технологиях, в технике магнитной записи информации высокой плотности, при изготовлении постоянных магнитов и магнитных жидкостей, в микроэлектронике, пр. [1, 2]. В последнее время ансамбли магнитных наночастиц с большим успехом применяются в биомедицине, в магниторезонансной томографии, для адресной доставки лекарств, очищения биосред от токсинов, в магнитной гипертермии, для борьбы со злокачественными новообразованиями, и во многих других областях [3-6].

Между тем, физика ансамблей магнитных наночастиц весьма сложна [7-11]. Физические свойства ансамбля определяются большой совокупностью геометрических и магнитных параметров, таких как размер и форма частиц, намагниченность насыщения, тип магнитной анизотропии, значение констант магнитной анизотропии. Большое значение имеют также плотность ансамбля, вязкость и температура среды, в которой распределены магнитные наночастицы. Для лучшего понимания сложного поведения ансамбля магнитных наночастиц в различных условиях, полезно сначала изучить эволюцию магнитного момента изолированной однодоменной магнитной наночастицы при изменении внешнего магнитного поля. Это поведение существенно зависит от типа эффективной магнитной анизотропии наночастицы [7-9].

Визуализация сложных физических процессов часто используется как один из способов изучения явлений, протекающих на атомном уровне [12, 13]. Например, в работе [12] подробно обсуждается применение метода визуальной аналитики к исследованиям физических процессов, протекающих в наноструктурах. Визуализация сложных, многомерных числовых данных позволяет понять процессы, протекающие в изучаемых объектах. Поэтому наглядное графическое представление различных типов магнитной анизотропии, существующих в магнитных наночастицах, позволяет студенту и молодому исследователю легче понять суть протекающих сложных физических процессов.

Данная статья посвящена разработке графического представления плотности энергии магнитной анизотропии однодоменных магнитных наночастиц. Рассмотрено также изменение полной энергии магнитной наночастицы под влиянием внешнего однородного магнитного поля. Все изображения, приведенные в этой статье, были получены с применением пакета для визуализации данных Matplotlib на языке программирования Python.

## 2. Свойства магнитных наночастиц

Как известно [7-9], в ферромагнитном образце модуль вектора локальной намагниченности  $\vec{M}(\vec{r})$  постоянен и равен намагниченности насыщения ферромагнетика,  $|\vec{M}(\vec{r})| = M_s$ . Направление же этого вектора описывается единичным вектором намагниченности,  $\vec{\alpha}(\vec{r}) = \vec{M}(\vec{r})/M_s$ ,  $|\vec{\alpha}(\vec{r})| = 1$ . В большинстве случаев, для приложений наиболее интересны однодоменные магнитные наночастицы, размер которых меньше диаметра однодоменности частицы,  $D < D_c$ . Однодоменная наночастица в нижайшем энергетическом состоянии однородно намагничена. Такая частица является маленьким постоянным магнитом, который создает в окружающем пространстве достаточно сильное неоднородное магнитное поле. Плотность магнитной энергии однородно намагниченной частицы велика, поскольку она пропорциональна [7-9] квадрату намагниченности насыщения,  $w_m \sim M_s^2$ . Однако, для однодоменной наночастицы сферической формы плотность магнитной энергии не зависит от направления единичного вектора намагниченности в силу симметрии в распределении магнитных зарядов на поверхности сферы. В то же время опыт показывает, что в равновесии, в отсутствие внешнего магнитного поля, единичный вектор намагниченности однодоменной сферической наночастицы ориентируется в строго определенных направлениях по отношению к осям симметрии кристаллической решетки частицы. Эти выделенные пространственные направления называются осями легкого намагничивания наночастицы (также, легкими осями анизотропии частицы). Поскольку обменная энергия однородно намагниченной частицы равна нулю, а магнитная энергия сферической наночастицы не зависит от направления единичного вектора намагниченности, то направления легких осей анизотропии определяются видом плотности энергии магнитной кристаллографической анизотропии,  $w_a = w_a(\vec{\alpha})$  [7-11].

Для кристаллов с единственной выделенной осью симметрии из общих соображений следует [7-11], что плотность энергии магнитной кристаллографической анизотропии может быть представлена в виде разложения по степеням единичного вектора намагниченности

$$w_a(\vec{\alpha}) = K_1(\alpha_x^2 + \alpha_y^2) + K_2(\alpha_x^2 + \alpha_y^2)^2 + \dots, \quad (1)$$

где для простоты предположено, что выделенная ось симметрии кристалла параллельна оси  $z$  декартовой системы координат. В уравнении (1)  $K_1$ ,  $K_2$ , и т.д. есть константы одноосной магнитной анизотропии, которые обычно убывают по абсолютной величине,  $|K_1| > |K_2|$ . Из уравнения (1) следует, что в случае  $K_1, K_2 > 0$  плотность энергии одноосной магнитной анизотропии имеет наименьшее значение,  $w_a = 0$ , если единичный вектор намагниченности параллелен оси  $z$ , то есть  $\vec{\alpha} = (0,0,1)$ , либо  $\vec{\alpha} = (0,0,-1)$ . Тем

самым, для частицы с плотностью энергии анизотропии (1) эти направления единичного вектора оказываются предпочтительными.

С другой стороны, из соображений симметрии следует [7-11], что для кристаллов с кубической симметрией кристаллической решетки, плотность энергии магнитной кристаллографической анизотропии может быть задана в виде

$$w_a(\vec{\alpha}) = K_{1c}(\alpha_x^2\alpha_y^2 + \alpha_x^2\alpha_z^2 + \alpha_y^2\alpha_z^2) + K_{2c}\alpha_x^2\alpha_y^2\alpha_z^2 + \dots, \quad (2)$$

В случае  $K_{1c} > 0$ ,  $K_{2c} \approx 0$  направления легкого намагничивания частицы с кубической анизотропией параллельны осям декартовой системы координат, поскольку энергия магнитной анизотропии (2) минимальна,  $w_a = 0$ , когда единичный вектор намагниченности параллелен осям  $x$ ,  $y$  или  $z$ , то есть  $\vec{\alpha} = (\pm 1, 0, 0)$ , пр. Таким образом, в этом случае частица имеет 6 направлений легкого намагничивания. Если же константа  $K_{1c} < 0$ , то направления легкого намагничивания параллельны диагоналям куба, поскольку плотность энергии магнитной анизотропии (2) в этом случае имеет минимум для векторов вида  $\vec{\alpha} = (\pm 1/\sqrt{3}, \pm 1/\sqrt{3}, \pm 1/\sqrt{3})$ .

Следует заметить, однако, что выражения (1), (2) являются лишь простейшими энергетическими вкладками, которые определяют направление осей легкого намагничивания наночастицы в пространстве. Еще один важный вклад в эффективную магнитную анизотропию связан с отличием формы частицы от сферической. Это вклад называется энергией анизотропии формы [7-9]. Он особенно важен для наночастиц магнито-мягкого типа, с достаточно большой намагниченностью насыщения. Знаменитая теорема Брауна-Морриша [12] утверждает, что магнитостатическая энергия однородно намагниченной частицы произвольной формы в первом приближении совпадает с магнитостатической энергией некоторого эквивалентного эллипсоида. Если оси декартовой системы координат выбрать вдоль осей симметрии эквивалентного эллипсоида, то плотность магнитной энергии наночастицы примет вид [14]

$$w_m(\vec{\alpha}) = \frac{1}{2}M_s^2(N_x\alpha_x^2 + N_y\alpha_y^2 + N_z\alpha_z^2), \quad (3)$$

где  $N_x$ ,  $N_y$ ,  $N_z$  есть размагничивающие факторы эквивалентного эллипсоида в указанной системе координат.

Очевидно, что размагничивающие факторы частицы в форме куба равны друг другу в силу симметрии,  $N_x = N_y = N_z = 4\pi/3$ . Учитывая, что  $\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2 = 1$ , легко видеть, что магнитная энергия однородно намагниченного куба, как и магнитная энергия сферической наночастицы, не зависит от направления единичного вектора намагниченности и не дает вклада в магнитную анизотропию частицы. С другой стороны, для типичного случая вытянутого сфероида, у которого равны поперечные размагничивающие факторы,  $N_x = N_y > N_z$ , магнитную энергию частицы (3) можно записать в виде

$$w_m(\vec{\alpha}) = \frac{1}{2}M_s^2(N_x - N_z)(\alpha_x^2 + \alpha_y^2) + const, \quad (4)$$

Заметим здесь, что добавление произвольной константы к плотности энергии магнитной анизотропии, очевидно, не сказывается на направлении легких осей анизотропии частицы, и не влияет на динамику единичного вектора намагниченности [7-9]. Эта ситуация аналогична случаю классической механики, где потенциальная энергия частицы задана с точностью до произвольной константы, потому что сила, действующая на частицу, определяется градиентом потенциальной энергии.

Сравнивая уравнения (1) и (4) можно заключить, что вытянутый эквивалентный сфероид можно характеризовать эффективной константой анизотропии формы,  $K_{ef} = M_s^2(N_x - N_z)/2$ . При этом, как направление легкой оси анизотропии, так и значения эффективных размагничивающих факторов  $N_x$  и  $N_z$  определяются [14] действительной формой не-эллипсоидальной наночастицы. Полная энергия магнитной анизотропии частицы в общем случае есть сумма энергии магнито-кристаллографической

анизотропии и энергии анизотропии формы. В этом случае говорят [15] об эффективной комбинированной магнитной анизотропии наночастицы,  $w_{ef}(\vec{\alpha})$ .

При наличии однородного внешнего магнитного поля  $\mathbf{H}$  однодоменная наночастица остается однородно намагниченной. При этом стационарные, не зависящие от времени, направления единичного вектора намагниченности определяются минимумами полной энергии частицы во внешнем магнитном поле

$$w_i(\vec{\alpha}) = w_{ef}(\vec{\alpha}) - M_s \mathbf{H} \vec{\alpha}, \quad (5)$$

Естественно, что положение минимумов и максимумов полной энергии однодоменной наночастицы и их количество меняется при изменении величины и направления внешнего магнитного поля по отношению к направлению легких осей анизотропии частицы.

### 3. Визуализация плотности энергии анизотропии частицы

#### 3.1. Одноосный и кубический типы магнитной анизотропии

Чтобы наглядно продемонстрировать расположение минимумов и максимумов плотности энергии магнитной анизотропии, удобно задать эту энергию в сферической системе координат [7],  $w_a = w_a(\theta, \varphi)$ , выражая в уравнениях (1) – (5) компоненты единичного вектора намагниченности через сферические углы  $(\theta, \varphi)$ , так что  $\alpha_x = \sin \theta \cos \varphi$ ,  $\alpha_y = \sin \theta \sin \varphi$ ,  $\alpha_z = \cos \theta$ . Тогда в сферической системе координат можно построить некоторую поверхность вида  $r(\theta, \varphi) = w_a(\theta, \varphi)$ .

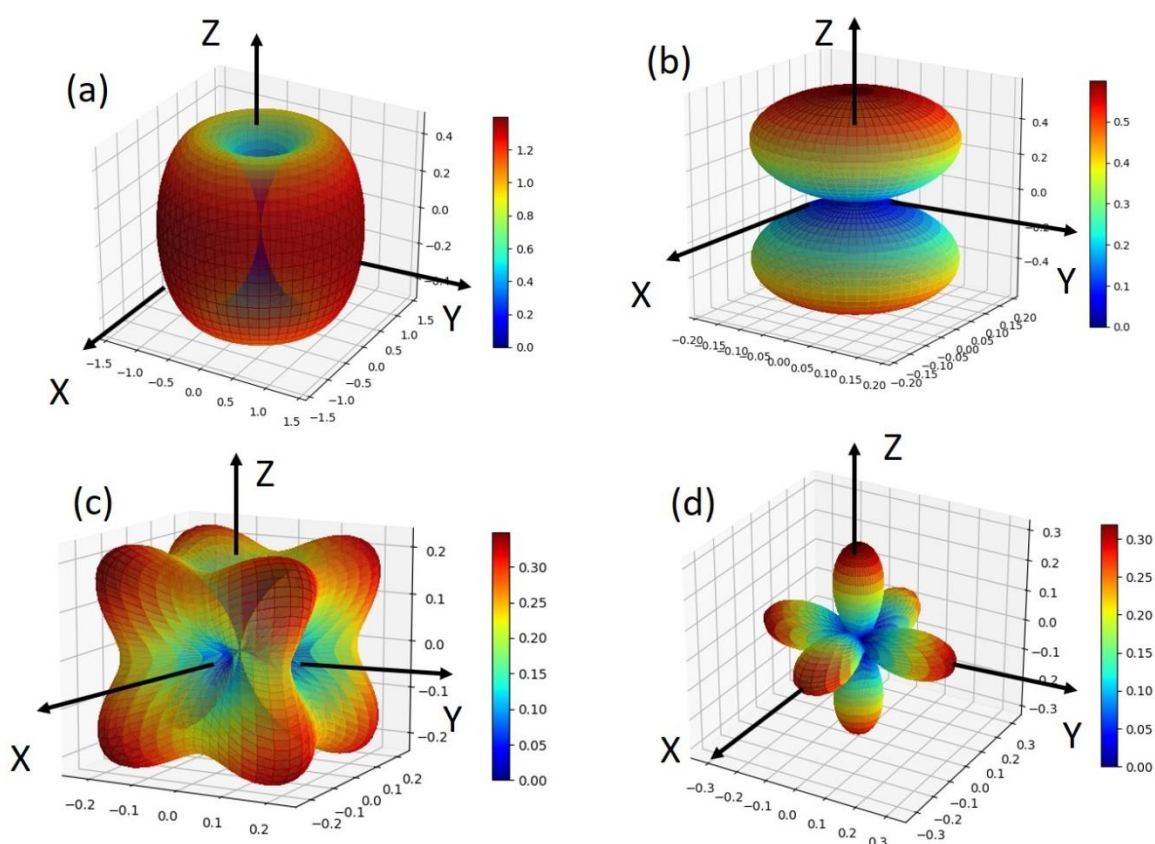


Рис. 1. Плотность энергии магнитной анизотропии для одноосного и кубического типов магнитной анизотропии наночастицы.

На Рис. 1а показана приведенная плотность энергии одноосной магнитной анизотропии,  $w_a(\theta, \varphi)/K_1$ , уравнение (1), для случая  $K_1 > 0$ ,  $K_2 = 0$ . Очевидно, что плотность энергии магнитной анизотропии имеет глубокие минимумы для направлений единичного вектора намагниченности, близких к углам  $\theta = 0, \pi$ . В этом случае говорят, что у частицы имеется две глубоких потенциальных ямы, разделенные высоким симметричным потенциальным барьером, максимум которого соответствует углу  $\theta = \pi/2$ .

На Рис. 1б показана приведенная плотность энергии одноосной магнитной анизотропии (1) для случая  $K_1 < 0$ ,  $K_2 = 0$ . Чтобы исключить отрицательные значения радиуса в зависимости  $r = w_a(\theta, \varphi)$ , к уравнению (1) добавлена соответствующая положительная константа. Как показывает Рис. 1б, в рассматриваемом случае минимум энергии соответствует направлениям, лежащим в плоскости  $\theta = \pi/2$ . Этот тип анизотропии называется «легкая плоскость», потому что энергия анизотропии остается минимальной, равной нулю, для всех направлений, лежащих в этой плоскости. У реальных частиц могут существовать дополнительные слабые вклады в энергию магнитной анизотропии, которые выделяют некоторые направления в указанной плоскости, разделенные, вообще говоря, небольшими энергетическими барьерами.

На Рис. 1с показана приведенная плотность энергии кубической магнитной анизотропии,  $w_a(\theta, \varphi)/K_{1c}$ , уравнение (2), для случая  $K_{1c} > 0$ ,  $K_{2c} = 0$ . В этом случае минимумы энергии анизотропии соответствуют направлениям, параллельным осям декартовой системы координат. Всего имеется, таким образом, 6 энергетических минимумов, иными словами, глубоких потенциальных ям, разделенных энергетическими барьерами. В идеальном случае сферической наночастицы все эти потенциальные ямы полностью эквивалентны, так что в равновесии магнитный момент частицы может быть направлен в любом из указанных направлений легкого намагничивания. В то же время, для случая  $K_{1c} < 0$ ,  $K_{2c} = 0$ , показанного на Рис. 1д, минимальной энергии соответствуют направления, параллельные диагоналям куба. Следовательно, в этом случае имеется 8 эквивалентных направлений, для которых энергия магнитной анизотропии частицы имеет минимум.

### 3.2. Комбинированный тип магнитной анизотропии

Энергетические поверхности, показанные на Рис. 1а – 1д, соответствуют идеальному случаю магнитной наночастицы сферической формы. Если форма частицы отклоняется от сферической, то к энергии магнито - кристаллической анизотропии, уравнения (1) – (3), добавляется энергия анизотропии формы, уравнение (4), которая может давать существенный вклад в полную энергию анизотропии для частиц с большой намагниченностью насыщения.

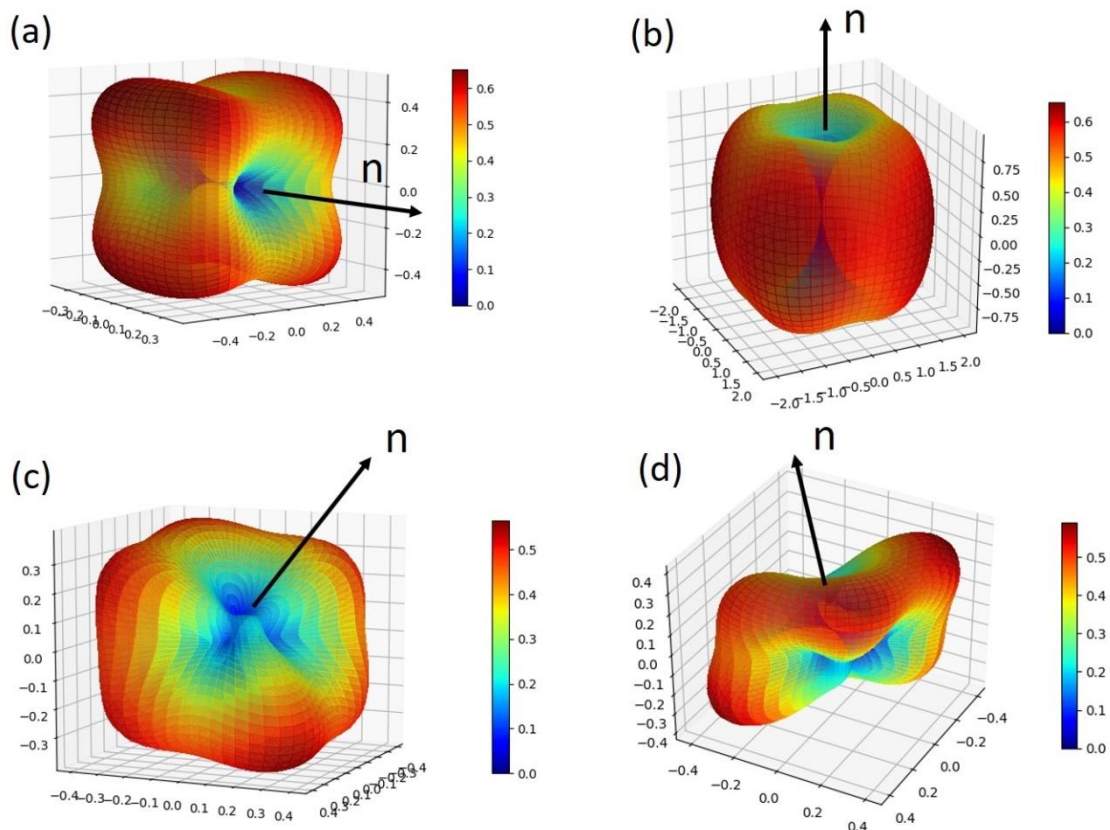


Рис.2. Плотность энергии для комбинированного типа магнитной анизотропии частицы (кубическая анизотропия + одноосная анизотропия формы).

В качестве примера, на Рис. 2 показан случай комбинированной магнитной анизотропии. Здесь к плотности энергии кубической анизотропии,  $w_a(\theta, \varphi)/K_{1c}$ , показанной на Рис. 1с, добавляется приведенная плотность энергии анизотропии формы  $K_{ef}(1 - (\vec{\alpha}\vec{n})^2)/K_{1c}$ . Единичный вектор  $\mathbf{n}$  показывает направление легкой оси анизотропии формы.

Рассмотрим сначала простой случай, когда ось энергии анизотропии формы совпадает с одной из осей кубической анизотропии (см. Рис. 2а, 2б). На Рис. 2а отношение констант анизотропии выбрано небольшим,  $K_{ef}/K_{1c} = 0.1$ . Однако, как показано на Рис. 2а, за счет влияния энергии анизотропии формы, уже для небольших значений отношения  $K_{ef}/K_{1c}$  поверхность энергии комбинированной анизотропии становится, фактически, двух – ямной, причем две основные, глубокие потенциальные ямы, располагаются в направлениях, параллельных вектору  $\mathbf{n}$ . При этом боковые минимумы энергии, легко различимые на Рис. 2а, исчезают лишь при значениях  $K_{ef}/K_{1c} \geq 1.0$ . Так, на Рис. 2б показан случай  $K_{ef}/K_{1c} = 2.0$ , когда остаются лишь два энергетических минимума в направлениях, параллельных вектору  $\mathbf{n}$ .

Если же вектор  $\mathbf{n}$  ориентирован произвольно по отношению к кубическим осям анизотропии (см. Рис. 2с, 2д), то соответствующая энергетическая поверхность становится весьма сложной при достаточно малых значениях отношения  $K_{ef}/K_{1c}$ . Однако, с увеличением этого отношения,  $K_{ef}/K_{1c} = 0.1$ , глобальная энергетическая поверхность также становится двух- ямной, как это показывают Рис. 2с, 2д для направлений вектора  $\mathbf{n}$ , заданных углами  $(\theta = \pi/4, \varphi = \pi/4)$  и  $(\theta = -\pi/4, \varphi = \pi/4)$ , соответственно. Заметим, что барьер, разделяющий потенциальные ямы, имеет при этом весьма сложную форму. Форма энергетического барьера между потенциальными ямами чрезвычайно важна, поскольку она определяет положение энергетических седел, или перевалов, соединяю-



щих соседние потенциальные ямы. При конечных температурах, за счет тепловых флуктуаций, магнитный момент наночастицы может перескакивать между различными потенциальными ямами, и такие перескоки магнитного момента с наибольшей вероятностью происходят через седловые области энергетического барьера.

### 3.3 Влияние внешнего магнитного поля

Как обсуждалось выше, с учетом энергии магнитной анизотропии, вектор магнитного момента наночастицы обладает несколькими устойчивыми направлениями в пространстве, для которых полная энергия наночастицы имеет локальный минимум. В отсутствие внешнего магнитного поля, в пренебрежении тепловыми флуктуациями, магнитный момент однодоменной наночастицы находится в одном из минимумов энергии. В приложенном внешнем магнитном поле минимумы энергии потенциальных ям сдвигаются по отношению друг к другу, некоторые минимумы исчезают, другие появляются. Поэтому при изменении внешнего магнитного поля магнитный момент частицы может перескакивать из одной потенциальной ямы в другую. На Рис. 3а-3д приведен пример изменения плотности полной энергии одноосной наночастицы,

$$\frac{w_t(\vec{\alpha})}{K_1} = \alpha_x^2 + \alpha_y^2 - 2\vec{h}\vec{\alpha}, \quad (6)$$

под воздействием внешнего магнитного поля, где величина магнитного поля нормирована на поле анизотропии частицы,  $\vec{h} = \vec{H}/H_a$ ,  $H_a = 2K_1/M_s$ .

Величина магнитного поля на Рис. 3а-3д равна  $H = 0, 300, 700, 4000$  Э, соответственно. Константа одноосной магнитной анизотропии и намагниченность насыщения равны  $K_1 = 0.4 \cdot 10^5$  эрг/см<sup>3</sup>, и  $M_s = 400$  ед/см<sup>3</sup>, соответственно. Направление магнитного поля определяется углами ( $\theta_H = \pi/2$ ,  $\varphi_H = 0$ ). На Рис. 3 это направление показано стрелкой.

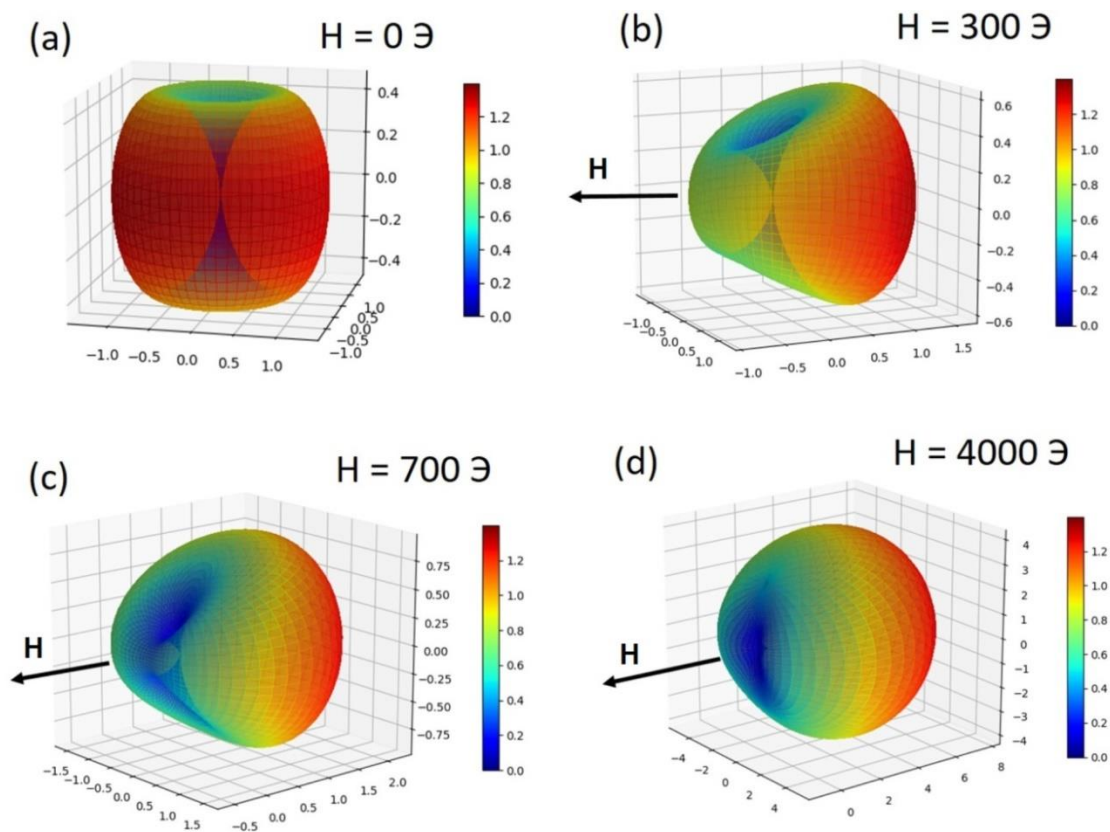


Рис. 3. Изменение плотности полной энергии одноосной наночастицы под влиянием внешнего магнитного поля, направленного перпендикулярно легкой оси анизотропии.

Как демонстрируют Рис. 3а – 3д, при увеличении внешнего магнитного поля  $\mathbf{H}$  потенциальные ямы частицы постепенно сливаются, и в полях  $\mathbf{H} \geq 2000$  Э остается только одна потенциальная яма. Отметим, что при построении энергетических поверхностей, показанных на Рис. 3б – 3д, мы добавляем к уравнению (6) соответствующую положительную константу, чтобы сделать значения радиуса положительными. Как указывалось во введении, добавление произвольной константы к полной энергии частицы не влияет на физику процессов, но приводит к соответствующему изменению относительных масштабов фигур.

Похожую картину преобразования энергетических поверхностей для наночастиц с разными типами магнитной анизотропии. Для простоты, рассмотрены только симметричные направления внешнего магнитного поля по отношению к осям магнитной анизотропии наночастицы. На Рис. 4 – 7 показано преобразование плотности полной энергии в зависимости от типа анизотропии частицы и величины приложенного внешнего магнитного поля. В каждом случае, направление магнитного поля указано стрелкой.

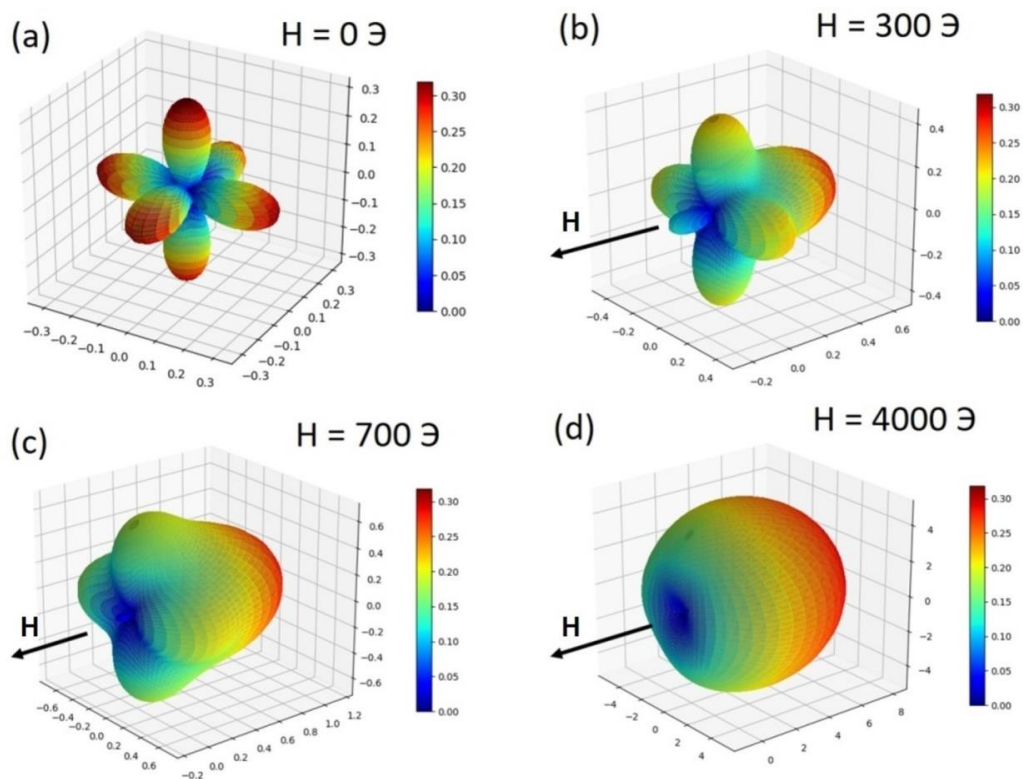


Рис. 4. Влияние внешнего магнитного поля на форму поверхности плотности полной энергии наночастицы в случае кубической магнитной анизотропии при  $K_{1c} < 0$ ,  $K_{2c} = 0$ . (Направление поля  $\theta_H = \pi/2$ ,  $\varphi_H = 0$ )

На Рис. 4 показано влияние внешнего поля на форму поверхности плотности полной энергии наночастицы в случае кубической анизотропии, плотность энергии анизотропии данного типа описывается формулой (2). Здесь, константы магнитной анизотропии и намагниченность насыщения равны  $K_{1c} = -0.4 \cdot 10^5$  erg/cm<sup>3</sup>,  $K_{2c} = 0$ ,  $M_s = 400$  emu/cm<sup>3</sup>.

На Рис. 5 показано влияние внешнего поля на форму поверхности плотности полной энергии наночастицы в случае комбинированной анизотропии. Здесь, комбинированная анизотропия есть сумма кристаллической анизотропии,  $w_a(\theta, \varphi)/K_{1c}$ , с анизотропией формы,  $K_{ef}(1 - (\bar{\alpha}\bar{n})^2)/K_{1c}$ . Константа одноосной магнитной анизотропии и намагниченность насыщения равны  $K_{1c} = -0.4 \cdot 10^5$  erg/cm<sup>3</sup>,  $K_{2c} = 0$ ,  $M_s = 400$  emu/cm<sup>3</sup>,



отношение константы анизотропии формы к константе кристаллической анизотропии,  $K_{ef}/K_{1c} = 0.1$ . Направление вектора легкой анизотропии формы,  $\mathbf{n}$ , показано стрелкой.

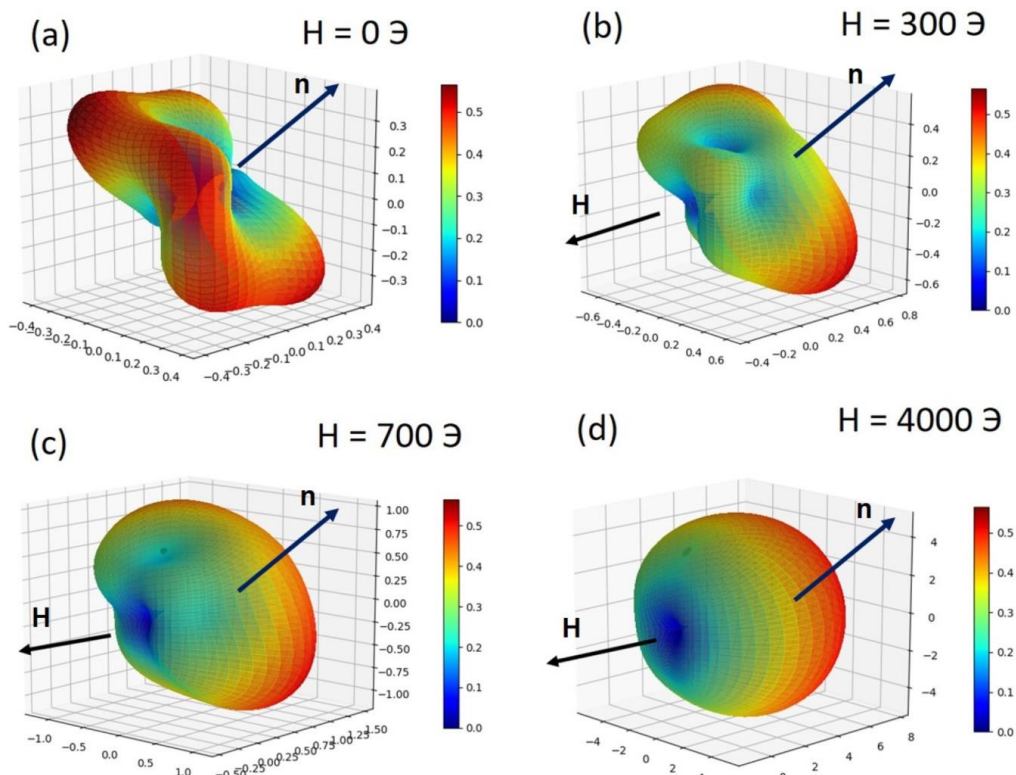


Рис. 5. Влияние внешнего магнитного поля на форму поверхности плотности полной энергии наночастицы в случае комбинированной анизотропии (кубическая анизотропия + одноосная анизотропия формы) при  $K_{1c} < 0$ ,  $K_{2c} = 0$ . (Направление поля  $\theta_H = \pi/2$ ,  $\varphi_H = 0$ )

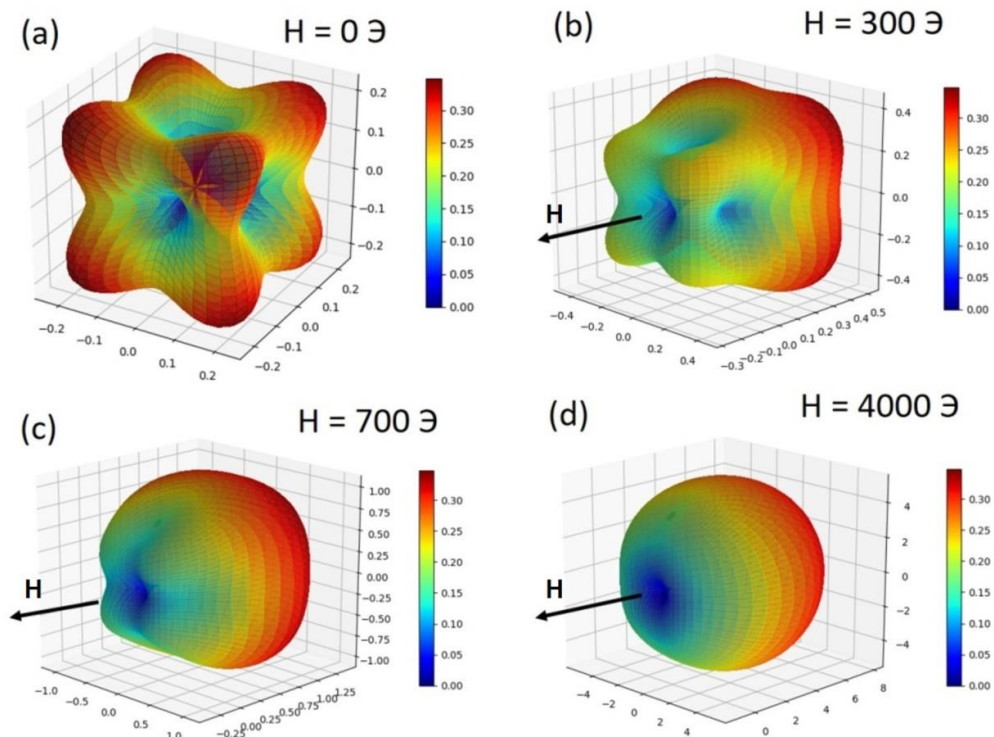


Рис. 6. Влияние внешнего магнитного поля на форму поверхности плотности полной энергии наночастицы в случае кубической анизотропии при  $K_{1c} > 0$ ,  $K_{2c} = 0$ . (Направление поля  $\theta_H = \pi/2$ ,  $\varphi_H = 0$ )

На Рис. 6 показана форма приведенной плотности энергии кубической магнитной анизотропии,  $w_a(\theta, \varphi)/K_{1c}$ , уравнение (2), в зависимости от величины внешнего поля, для случая  $K_{1c} > 0$ ,  $K_{2c} = 0$ . Константы магнитной анизотропии и намагниченность насыщения равны  $K_{1c} = 0.4 \cdot 10^5$  erg/cm<sup>3</sup>,  $K_{2c} = 0$ ,  $M_s = 400$  emu/cm<sup>3</sup>.

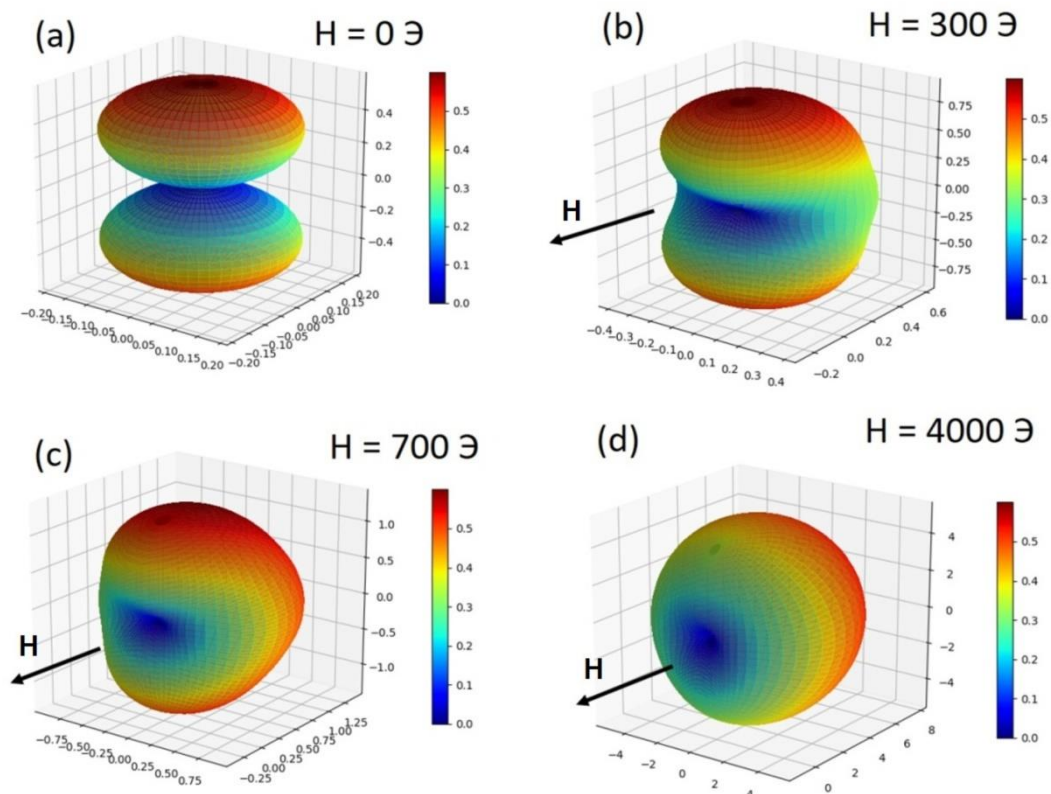


Рис. 7. Влияние внешнего магнитного поля на форму поверхности плотности полной энергии наночастицы в случае одноосной анизотропии при  $K_1 < 0$ ,  $K_2 = 0$  (Направление поля  $\theta_H = \rho/2$ ,  $\varphi_H = 0$ )

На Рис. 7 показана приведенная плотность энергии одноосной магнитной анизотропии (1) в зависимости от величины внешнего поля для случая  $K_1 < 0$ ,  $K_2 = 0$ . Константы магнитной анизотропии и намагниченность насыщения равны  $K_1 = -0.4 \cdot 10^5$  erg/cm<sup>3</sup>,  $K_2 = 0$ ,  $M_s = 400$  emu/cm<sup>3</sup>.

На Рис. 4 – 7 видно, что при больших значениях приложенного внешнего поля,  $H > 4000$  Э, сложная геометрия плотности энергии наночастицы, вызванная вкладом анизотропии, полностью исчезает. Появляется единственный минимум энергии, расположенный вдоль направления магнитного поля.

## 4. Заключение

Таким образом, мы видим, что свойства магнитных наночастиц определяются целой совокупностью геометрических и магнитных параметров, а именно, внешней формой частиц, распределением легких осей магнито- кристаллической анизотропии, значением констант магнитной анизотропии, намагниченностью насыщения. Для приложений весьма важно также, является ли частица монокристаллической, либо состоит из отдельных кристаллитов разной пространственной ориентации, связанных обменным взаимодействием. В реальных экспериментальных ансамблях обычно имеется существенный разброс наночастиц по размерам и форме. Зачастую частицы являются поликристаллическими. В поликристаллических наночастицах происходит существенное усреднение анизотропных взаимодействий, что влияет на характерный размер одно-

доменности и коэрцитивную силу наночастиц [16]. Следовательно, магнитные свойства таких ансамблей наночастиц весьма сложно контролировать.

## Благодарности

Авторы выражают благодарность Министерству образования и науки Российской Федерации за финансовую поддержку в рамках Программы повышения конкурентоспособности НИТУ «МИСиС», контракт №К2А-2019-034.

## Список литературы

1. S. Sun, C. B. Murray, D. Weller, L. Folks, A. Moser, Monodisperse FePt Nanoparticles and Ferromagnetic FePt Nanocrystal Superlattices // *Science*, Vol. 287, 2000, pp. 1989-1992.
2. López-Ortega, A., Lottini, E., Fernández, C. D. J., Sangregorio, C. Exploring the Magnetic Properties of Cobalt-Ferrite Nanoparticles for the Development of a Rare-Earth-Free Permanent Magnet // *Chemistry of Materials*, Vol. 27, 2015, pp. 4048-4056.
3. Q.A. Pankhurst, N.K.T. Thanh, S.K. Jones, J. Dobson, Progress in applications of magnetic nanoparticles in biomedicine // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, Vol. 42, 2009, p. 224001
4. Dutz S., Hergt R., Magnetic nanoparticle heating and heat transfer on a microscale: Basic principles, realities and physical limitations of hyperthermia for tumour therapy // *Int. J. Hyperthermia*, Vol. 29, 2013, pp. 790-800.
5. Ortega D., Pankhurst Q.A., Magnetic hyperthermia // In O'Brien P editor *Nanoscience: Nanostructures through Chemistry Royal Society of Chemistry: Cambridge*, Vol. 1, 2013, pp. 60–88.
6. Périgo E.A., Hemery G., Sandre O., Ortega D., Garaio E., Plazaola F., Teran F.J., Fundamentals and advances in magnetic hyperthermia // *Appl. Phys. Rev.*, Vol. 2, 2015, p. 041302.
7. S. Chikazumi, *Physics of Magnetism*. New York: Wiley, 1964.
8. W.F. Brown, Jr., *Micromagnetics*. New York – London: Wiley-Interscience, 1963.
9. A. Aharoni, *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*. Oxford: Clarendon Press, 1996
10. L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*. New York: Pergamon, New York, 1984.
11. A. I. Akhiezer, V. G. Baryakhtar, and S. V. Peletminskii, *Spin Waves*. Amsterdam: North-Holland, 1968.
12. В.В. Пилюгин, И. Мильман. Визуальная аналитика и её использование в деятельности лаборатории «Научная визуализация» НИЯУ МИФИ (2019). *Научная визуализация* 11.5: 46 - 55, DOI: [10.26583/sv.11.5.05](https://doi.org/10.26583/sv.11.5.05)
13. Ю. С. Лагутин, А. А. Лагутина, Ф. В. Григорьев, В. Б. Сулимов, А. В. Тихонравов (2018) Визуализация наноразмерных пор в атомистической структуре тонких пленок. *Научная визуализация* 10.1: 128 - 134, DOI: [10.26583/sv.10.1.10](https://doi.org/10.26583/sv.10.1.10)
14. W. F. Brown, Jr. and A. H. Morrish, Effect of a Cavity on a Single-Domain Magnetic Particle // *Phys. Rev.*, Vol. 105, 1957, p. 1198.
15. N.A. Usov, J.M. Barandiarán, Magnetic nanoparticles with combined anisotropy // *J. Appl. Phys.*, Vol. 112, 2012, p. 053915.
16. V. A. Bautin, A. G. Seferyan, M. S. Nesmeyanov, N. A. Usov, Properties of polycrystalline nanoparticles with uniaxial and cubic types of magnetic anisotropy of individual grains // *J. Magn. Magn. Mater.*, Vol. 460, 2018, p. 278.

# A shape visualization of a magnetic anisotropy energy density of single-domain magnetic nanoparticles

R.A Rytov<sup>1,A,B</sup>, N.A. Usov<sup>2,A</sup>

<sup>A</sup> National Research Nuclear University "MEPhI"

<sup>B</sup> National Research Technological University "MISIS"

<sup>1</sup> ORCID: 0000-0002-7963-3673, [ruslan.rytov2017@yandex.ru](mailto:ruslan.rytov2017@yandex.ru)

<sup>2</sup> ORCID: 0000-0002-2061-3467, [usov@obninsk.ru](mailto:usov@obninsk.ru)

## **Abstract**

A key physical parameter determining stationary directions of a magnetic moment of a single-domain ferromagnetic nanoparticle is a type of its effective magnetic anisotropy. Stationary directions of a magnetic moment of a particle change under an influence of an external magnetic field. For better understanding of a behavior of a magnetic moment of a nanoparticle in an external magnetic field, we proposed a simple method for visualization of an energy density of magnetic anisotropy of a single-domain magnetic nanoparticle. In a spherical coordinate system, an energy density of magnetic anisotropy is represented as a certain surface, which makes it possible to clearly demonstrate the presence of energy minima that determine the equilibrium directions of a single vector of magnetization of a nanoparticle in space. The cases of uniaxial, cubic, and combined magnetic anisotropy are considered in detail. The change in the total energy of a magnetic nanoparticle under the influence of an external uniform magnetic field is demonstrated.

**Keywords:** magnetic anisotropy, magnetic nanoparticles, visualization, energy density, magnetic field.

## **References**

1. S. Sun, C. B. Murray, D. Weller, L. Folks, A. Moser, Monodisperse FePt Nanoparticles and Ferromagnetic FePt Nanocrystal Superlattices // *Science*, Vol. 287, 2000, pp. 1989-1992.
2. López-Ortega, A., Lottini, E., Fernández, C. D. J., Sangregorio, C. Exploring the Magnetic Properties of Cobalt-Ferrite Nanoparticles for the Development of a Rare-Earth-Free Permanent Magnet // *Chemistry of Materials*, Vol. 27, 2015, pp. 4048-4056.
3. Q.A. Pankhurst, N.K.T. Thanh, S.K. Jones, J. Dobson, Progress in applications of magnetic nanoparticles in biomedicine // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, Vol. 42, 2009, p. 224001
4. Dutz S., Hergt R., Magnetic nanoparticle heating and heat transfer on a microscale: Basic principles, realities and physical limitations of hyperthermia for tumour therapy // *Int. J. Hyperthermia*, Vol. 29, 2013, pp. 790-800.
5. Ortega D., Pankhurst Q.A., Magnetic hyperthermia // In O'Brien P editor *Nanoscience: Nanostructures through Chemistry* Royal Society of Chemistry: Cambridge, Vol. 1, 2013, pp. 60-88.
6. Périgo E.A., Hemery G., Sandre O., Ortega D., Garaio E., Plazaola F., Teran F.J., Fundamentals and advances in magnetic hyperthermia // *Appl. Phys. Rev.*, Vol. 2, 2015, p. 041302.
7. S. Chikazumi, *Physics of Magnetism*. New York: Wiley, 1964.
8. W.F. Brown, Jr., *Micromagnetics*. New York – London: Wiley-Interscience, 1963.
9. A. Aharoni, *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*. Oxford: Clarendon Press, 1996

10. L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*. New York: Pergamon, New York, 1984.
11. A. I. Akhiezer, V. G. Baryakhtar, and S. V. Peletminskii, *Spin Waves*. Amsterdam: North-Holland, 1968.
12. V.V. Pilyugin, I. Millman. Visual Analytics and its Application in the Activities of the Laboratory "Scientific Visualization" MEPhI (2019). *Scientific Visualization* 11.5: 46 - 55, DOI: 10.26583/sv.11.5.05
13. Yu. S. Lagutin, A. A. Lagutina, F. V. Grigoriev, V. B. Sulimov, A. V. Tikhonravov (2018) Visualization of nanosize pores in the atomistic structure of thin films. *Scientific Visualization* 10.1: 128 - 134, DOI: 10.26583/sv.10.1.10
14. Translated with [www.DeepL.com/Translator](http://www.DeepL.com/Translator) (free version)14. W. F. Brown, Jr. and A. H. Morrish, Effect of a Cavity on a Single-Domain Magnetic Particle // *Phys. Rev.*, Vol. 105, 1957, p. 1198.
15. N.A. Usov, J.M. Barandiarán, Magnetic nanoparticles with combined anisotropy // *J. Appl. Phys.*, Vol. 112, 2012, p. 053915.
16. V. A. Bautin, A. G. Seferyan, M. S. Nesmeyanov, N. A. Usov, Properties of polycrystalline nanoparticles with uniaxial and cubic types of magnetic anisotropy of individual grains // *J. Magn. Magn. Mater.*, Vol. 460, 2018, p. 278.