

05,11,12

## Фазовый переход в цилиндрических изинговых нанопроволоках и нанотрубках: приближение теории молекулярного поля

© В.А. Танрывердиев, В.С. Тагиев, М.Н. Абдуллаев, Г.Г. Керимова

Институт физики НАНА,  
Баку, Азербайджан

E-mail: vahid\_tanriverdi@yahoo.com

(Поступила в Редакцию 13 августа 2018 г.  
В окончательной редакции 7 ноября 2018 г.  
Принята к публикации 7 ноября 2018 г.)

В рамках приближения теории молекулярного поля было изучено критическое поведение цилиндрических Изинговых нанопроволок и нанотрубок. Рассматриваемая, в данной работе, модель состоит из ферромагнитных спинов  $S_c$ , находящихся в сердцевине системы и ферромагнитных спинов  $S_s$ , находящихся на поверхностной стенке, которые связаны между собой обменной связью  $J_1$ . Температура перехода  $T_c$  для таких систем вычислена, как функция параметров обменного взаимодействия. Исследовано влияние поверхностного обменного взаимодействия и поверхностной связи на магнитодинамическое поведение системы. Некоторые характеристические свойства, полученные на фазовой диаграмме, связаны с отношением характерных физических параметров на поверхности и сердцевине вышеприведенных наноструктур.

DOI: 10.21883/FTT.2019.04.47414.233

### 1. Введение

Сравнительно с недавнего времени значительное внимание стало уделяться изучению магнитных свойств наноструктурных материалов, таких как нанотрубки, нанопроволока, наноконусы, нанокольца и т.д. [1–3]. Их магнитные, так и электрические свойства сильно отличаются от подобных им объемных материалов, а их физические свойства очень сильно подвержены влиянию размерных эффектов и геометрической конфигурации материала [4–6]. Эти факты дают сильную мотивацию для дальнейших активных исследований наноманитных структур. С другой стороны, магнитные наноструктуры являются объектами большого исследовательского интереса, как в экспериментальном, так и в теоретическом аспекте благодаря их возможному применению в нанобиологии и медицине, для получения магниторезонансной картины микробиологических изучаемых объектов, и как средство доставки лекарственных препаратов до клетки, избирательного теплового и электрического воздействия на них [7,8]. Важную роль, данные наносистемы, также играют в создании сверхчувствительных датчиков [9–12].

Недавние достижения в микропроцессорной технологии представили возможность получить магнитные материалы с различными типами структур и размеров в нанометровом диапазоне. Экспериментально, магнитные свойства магнитных наноматериалов были охарактеризованы мессбауровскими измерениями, измерениями температурной и полевой зависимости намагниченности, ферромагнитным резонансом и ЭПР [13,14]. Наряду с этим активно разрабатываются технологии получения качественных магнитных нанопроволок таких, как Fe–Co [15], Co–Pt [16], Ni–Fe [17], Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> [18],

Fe–Pt [19]. С другой стороны также успешно были изготовлены и исследованы, различными способами, такие магнитные нанотрубки, как Fe–Pt и Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> [20].

Современные теорфизические методы, такие как гриновские функции (ФГ), теория среднего поля, метод эффективного поля, с учетом корреляций (МЭП), метод Монте-Карло (МК), трансферматричный формализм, техника рекуррентных соотношений, широко используются в изучении таких нестандартных систем [21–24].

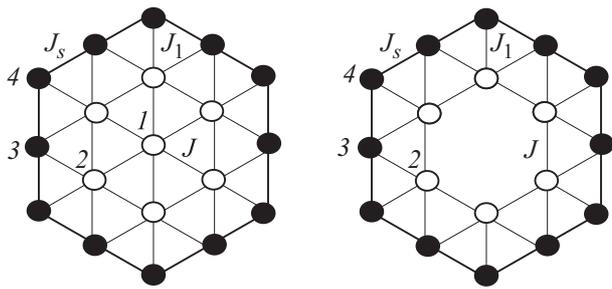
В этой статье, методом приближения молекулярного поля, исследуется фазовый переход в цилиндрической нанопроволоке и нанотрубке, состоящих из двух магнитных стенок (внутренней — сердцевинной и внешней — поверхностной), описываемые моделью Изинга.

В разделе 2 схематически представлена рассматриваемая модель и описывающий ее гамильтониан и получены уравнения, которые определяют температуру переходов. Полученные уравнения носят общий характер для произвольных обменных взаимодействий. Численные результаты и обсуждение даются в разделе 3.

### 2. Модель и формализм

На рис. 1 представлена нанопроволока и нанотрубка, которые состоят из поверхностной и внутренней (сердцевинной) атомных стенок. Сердцевина окружена поверхностной стенкой.

Магнитные атомы, находящиеся на поверхностной стенке, связаны обменной связью  $J_1$  с атомами находящимися в сердцевине. Белые и черные точки на рис. 1 есть магнитные атомы образующие сердцевину и поверхностную стенку соответственно. Линии, соединяю-



**Рис. 1.** Схематическое представление цилиндрических нанопроволок (а) и нанотрубок (б). Белыми и черными кружками отмечены магнитные атомы образующие сердцевину и поверхностную стенку соответственно.

щие их, представляют собой, схематично, ближайшее соседнее обменное взаимодействие. С другой стороны, каждый Изинговский спин связан с ближайшими спинами соседних слоев вдоль нанотрубки.

Гамильтониан системы может быть записан в следующей форме:

$$H = -J_s \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - J \sum_{\langle m,n \rangle} S_m^z S_n^z - J_1 \sum_{\langle i,m \rangle} S_i^z S_m^z, \quad (1)$$

$\langle i, j \rangle$ ,  $\langle m, n \rangle$  и  $\langle i, m \rangle$  отмечена сумма по всем парам соседних спинов на поверхности и сердцевине, а также совместно на поверхности и сердцевине соответственно.  $J_s$  есть обменное взаимодействие между двумя атомами, находящимся на поверхностной стенке, а  $J$  — обменное взаимодействие в самой сердцевине. Для того чтобы выяснить влияние поверхностных эффектов на физические свойства системы, введем поверхностное обменное взаимодействие в следующем виде  $J_s = J(1 + \Delta_s)$ . Для простоты вычислений, здесь мы пренебрегаем внешним магнитным полем. Ось  $z$ -координатной системы направлена вдоль основной оси рассматриваемых нанобъектов. В расчет также принимается симметрия нанопроволоки, где различают спины четырех типов рис. 1, а и спины трех типов для нанотрубки рис. 1, б, так два спина принадлежащих сердцевине (отмеченные, как 1 и 2) и два поверхностных спина (отмеченные, как 3 и 4).

Согласно модели молекулярного поля средний спин  $m_\tau = \langle S_\tau^z \rangle$  ( $\tau = 1, 2, 3, 4$  для нанопроволоки и  $\tau = 2, 3, 4$  для нанотрубки) определяется из следующих установленных уравнений [14]

$$\begin{cases} m_1 = B_S[(6Jm_2 + 2Jm_1)/kT] \\ m_2 = B_S[(Jm_1 + 4Jm_2 + 2J_1m_3 + J_1m_4)/kT] \\ m_3 = B_S[(2J_1m_2 + 2J_s m_3 + 2J_s m_4)/kT] \\ m_4 = B_S[(J_1m_2 + 2J_s m_3 + 2J_s m_4)/kT] \end{cases} \quad (2)$$

для нанопроволоки и

$$\begin{cases} m_2 = B_S[(4Jm_2 + 2J_1m_3 + J_1m_4)/kT] \\ m_3 = B_S[(2J_1m_2 + 2J_s m_3 + 2J_s m_4)/kT] \\ m_4 = B_S[(J_1m_2 + 2J_s m_3 + 2J_s m_4)/kT] \end{cases} \quad (3)$$

для нанотрубок. Здесь  $k$  — есть Больцмановская константа.  $B_S$  — есть брюльеновская функция:

$$B_S(x) = \frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{2S+1}{2S}x\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{1}{2S}x\right). \quad (4)$$

Когда температура системы становится выше критической  $T_c$ , вся система становится размагниченной и средняя атомная намагниченность приближается к нулю. Около критической температуры  $T_c$  средний спин  $m_\tau$  становится малым. Для малых аргументов всеми членами порядка выше, чем линейные, можно пренебречь и выражение (4) можно записать в следующем виде:

$$B_S(x) \approx \frac{S+1}{3S}x. \quad (5)$$

Для получения критической температуры, мы рассмотрим только линейные члены намагниченности и получим уравнение в матричном виде:

— для нанопроволок

$$Am \equiv \begin{pmatrix} \frac{3S_c kT}{(S_c+1)-2J} & -6J & 0 & 0 \\ -J & \frac{3S_c kT}{(S_c+1)-4J} & -2J_1 & -J_1 \\ 0 & -2J_1 & \frac{3S_s kT}{(S_s+1)-2J_s} & -2J_s \\ 0 & -J_1 & -2J_s & \frac{3S_s kT}{(S_s+1)-2J_s} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ m_4 \end{pmatrix} = 0 \quad (6)$$

— для нанотрубок

$$Am \equiv \begin{pmatrix} \frac{3S_c kT}{(S_c+1)-4J} & -2J_1 & -J_1 \\ -2J_1 & \frac{3S_s kT}{(S_s+1)-2J_s} & -2J_s \\ -J_1 & -2J_s & \frac{3S_s kT}{(S_s+1)-2J_s} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} m_2 \\ m_3 \\ m_4 \end{pmatrix} = 0. \quad (7)$$

Температура перехода для каждой системы определяется из соотношения  $\text{Det} A = 0$ .

### 3. Обсуждение полученных результатов

В этом разделе рассмотрим некоторые типичные фазовые диаграммы в рассматриваемых двух наносистемах, используя формулировку, приведенную в разделе 2. Приведенный здесь формализм температуры перехода является универсальным и может быть использован в получении различных параметров, характеризующих систему. Также наши вычисления применимы, как для ферромагнитного, так и для антиферромагнитного случаев.

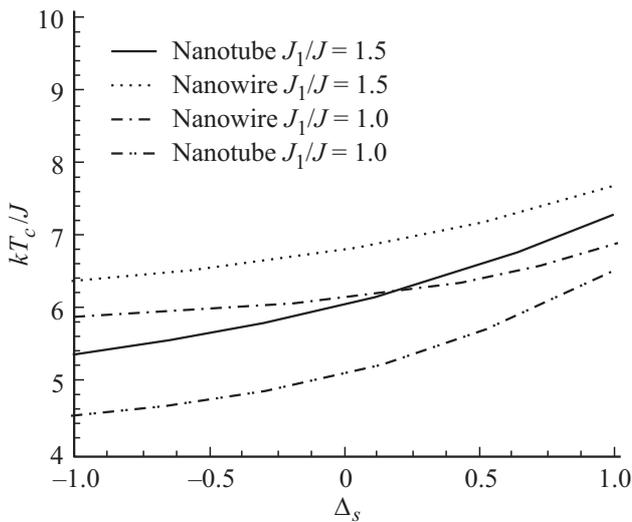


Рис. 2. Критическая температура, как функция от  $\Delta_s$  для спинов  $S_c = \frac{1}{2}$  и  $S_s = 1$ .

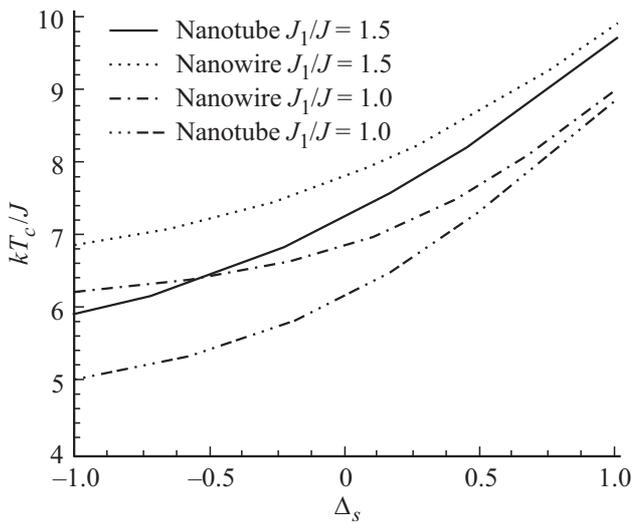


Рис. 3. Критическая температура, как функция от  $\Delta_s$  для спинов  $S_c = \frac{1}{2}$  и  $S_s = \frac{1}{2}$ .

В случае, когда связь между сердцевиной и поверхностной стенкой является ферромагнитной, то  $J_1 > 0$  и наоборот, если  $J_1 < 0$ , то данная связь является антиферромагнитной. Для последующего обсуждения определим безразмерный параметр  $J_1/J$ . В дальнейшем фазовые диаграммы будут строиться для случая  $J_1/J > 0$ . Также необходимо отметить, что эти диаграммы не изменяются, даже когда знак у  $J_1/J$  становится отрицательным. Здесь следует заметить, что значение температуры перехода, полученные из уравнения  $\det A = 0$ , не меняется при изменении знака  $J_1/J$ . В порядке обсуждения влияния поверхностных эффектов на температуру перехода (в единицах  $J/k$ ), показана фазовая диаграмма, как функция  $\Delta_s$ , приведенная на рис. 2 и 3, для двух положи-

тельных значений  $J_1/J$ . Рост  $\Delta_s$  указывает на увеличение значения отношения поверхностного обмена  $J_s$  к обмену во внутренней стенке  $J$ .

На рис. 2 и 3 проиллюстрированы случаи с различными спиновыми моментами ( $S_c = \frac{1}{2}; S_s = 1$ ) и ( $S_c = \frac{1}{2}; S_s = \frac{1}{2}$ ) соответственно. Для этого случая были выбраны величины обменных констант, такие как ( $J_1/J = 1$  и  $J_1/J = 1.5$ ). При этом спины, находящиеся в сердцевине и на поверхностной стенке направлены параллельно друг другу и система проявляет ферромагнитную конфигурацию. Сравнивая эти диаграммы двух рассматриваемых наносистем, можно заметить, что фазовая диаграмма нанотрубки схожа с фазовой диаграммой нанопроволоки. Разница между критическими температурами нанопроволоки по сравнению с нанотрубкой увеличивается с уменьшением относительного параметра  $J_1/J$ .

Анализ показывает, что критическая температура увеличивается с увеличением величины  $\Delta_s$ , то есть роль спинового обмена поверхностных спинов в фазовом переходе является весьма существенной. Благодаря тому, что спины сердцевины нанопроволоки имеют большее магнитное упорядочение, чем те же, что в нанотрубке, температура перехода для нанотрубок ниже, чем в нанопроволоках. С другой стороны, как показано на рис. 3, температура перехода для группы спинов ( $S_c = \frac{1}{2}; S_s = \frac{1}{2}$ ) выше, чем для группы ( $S_c = \frac{1}{2}; S_s = 1$ ), приведенных на рис. 2, что также указывает на определяющую роль поверхностных спинов.

#### 4. Заключение

Используемый в настоящей работе метод можно считать довольно простым, но удобным для теоретического исследования различного рода магнитных нанобъектов, сверхрешеток и других нестандартных магнитных структур. В настоящей работе была рассчитана температура перехода в зависимости от различного типа обменных констант и спиновых моментов. Было показано, что с ростом поверхностного обмена температура перехода значительно возрастает и сравнительно выше в нанопроволоках чем в нанотрубках. Полученные результаты позволяют произвести качественную и количественную оценку поведения температуры фазового перехода в широком интервале спиновых и обменных параметров. Подобная модель нанопроволок и нанотрубок может быть применена и к вышеуказанным, во введении, нанобъектам с учетом их специфических структурных и физических особенностей.

#### Список литературы

- [1] S. Castillo-Sepulveda, R.M. Corona, D. Altbir, J. Escrig. J. Magn. Magn. Mater. **416**, 325 (2016).
- [2] D. Neumaier, D. Vogl, J. Eroms, D. Weiss. Phys. Rev. B **78**, 174424 (2008).

- [3] N. Gao, H.J. Wang, E.H. Yang. *Nanotechnology* **21**, 105107 (2010).
- [4] V.S. Tkachenko, V.V. Kruglyak, A.N. Kuchko. *Phys. Rev. B* **81**, 024425 (2010).
- [5] E.A. Rando, S. Allende. *J. Appl.Phys.* **118**, 013905 (2015).
- [6] A.L. Gonzalez, P. Landeros, A.S. Nunez. *J. Magn. Magn. Mater.* **322**, 530 (2010).
- [7] Q.A. Pankhurst, J. Connolly, S.K. Jones, J. Dobson. *J. Phys. D* **36**, R167–R181 (2003).
- [8] Pedro Tartaj, Maria del Puerto Morales, Sabino Veintemillas-Verdaguer, Teresita Gonzalez-Carreno, Carlos J Serna. *J. Phys. D* **36**, R182 (2003).
- [9] Z.K. Wang, M.H. Kuok, S.C. Ng, D.J. Lockwood, M.G. Cottam, K. Nielsch, R.B. Wehrspohn, U. Gösele. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 2, 027201 (2002).
- [10] O.A. Tretiakov, Ar. Abanov. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 157201 (2010).
- [11] A. Ghaddar, F. Gloaguen, J. Gieraltowski. *J. Phys. Conf. Ser.* **200**, 072032 (2010).
- [12] E.L. Bizdioca, M. Spasova, M. Farle, M. Hilgendorff, F.J. Caruso. *J. Magn. Magn. Mater.* **240**, 44 (2002).
- [13] M. Droz, A. Maritan, A.L. Stella. *Phys. Lett. A* **92**, 287 (1982).
- [14] T. Kaneyoshi. *Phys. Status Solidi B* **248** 1, 250 (2011).
- [15] X. Lin, G. Ju, T. Gao, X.Chang, Y. Liu, H. Zhang, Y. Du. *Solid State Commun.* **151**, 1708 (2011).
- [16] W. Chen, Z.Li, G. B.Ji, S.L. Tang, M. Lu, Y.W. Du. *Solid State Commun.* **133**, 235 (2005).
- [17] C. Rousse, P. Fricoteaux. *J. Mater. Sci.* **46**, 6046 (2011).
- [18] L. Zhang, Y. Zhang. *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, L15 (2009).
- [19] J.P. Xu, Z.Z. Zhang, B. Ma, Q.Y. Jin. *J. Appl. Phys.* **109**, 07B704.
- [20] Y.C. Su, R. Scomski, K.D. Sorge, D.J. Sellmyer. *Appl. Phys. Lett.* **84**, 1525 (2004).
- [21] F. Michael, C. Gonzales, V. Mujica, M. Marques, M.A. Ratner. *Phys. Rev. B* **76** 224409 (2007).
- [22] V.A. Tanriverdiyev. *J. Magn. Magn. Mater.* **393**, 188 (2015).
- [23] M. Keskin, N. Sarli, B. Deviren. *Solid State Commun.* **151**, 1025 (2011).
- [24] M. Vasilakaki, K.N. Trohidou. *Phys. Rev. B* **79**, 144402 (2009).

*Редактор Д.В. Жуманов*