05,10

Гистерезис в кривых намагничивания „идеальных“ антиферромагнитных наночастиц

© А.В. Лобачев, М.А. Чуев

Национальный исследовательский центр „Курчатовский институт“ —
Отделение физико-технологических исследований имени К.А. Валиева,
Москва, Россия

E-mail: andrew_lv_91@mail.ru

Поступила в Редакцию 11 октября 2025 г.
В окончательной редакции 7 ноября 2025 г.
Принята к публикации 10 ноября 2025 г.

Выполнен теоретический анализ формы кривых намагничивания „идеальных“ антиферромагнитных частиц для произвольной ориентации направления магнитного поля относительно оси аксиальной магнитной анизотропии. Установлено, что хорошо известные из литературы значения критических магнитных полей для продольной ориентации вектора магнитного поля плавно меняются с увеличением угла между направлением поля и осью легкого намагничивания таким образом, что ширина петли гистерезиса в кривых намагничивания сужается и исчезает при некотором критическом значении этого угла. Показано также, что ширина петли гистерезиса и сам критический угол растут с увеличением отношения константы магнитной анизотропии к обменной константе.

Ключевые слова: антиферромагнетизм, наночастицы, антиферромагнитный гистерезис, кривые намагничивания.

DOI: 10.61011/FTT.2025.11.62136.274-25

1. Введение

В процессе многолетних фундаментальных исследований структурных, магнитных и термодинамических характеристик магнитных частиц малых размеров (порядка нескольких нанометров) был обнаружен целый ряд специфических свойств этих материалов. Это предопределило широкую область их применения в современной нанотехнологии. Однако один из наиболее принципиальных вопросов о влиянии природы магнетизма материалов, из которых состоят сами наночастицы, на их фундаментальные характеристики до сих пор остается в значительной степени открытым. Например, несколько моделей антиферромагнитных (АФМ) наночастиц для описания их кривых намагничивания реально основаны на представлении о нескомпенсированном спине в двух магнитных подрешетках, введенного Неелем еще в начале 60-х прошлого века [1]. При этом с термодинамической точки зрения эти модели сводятся либо к поправкам функции Ланжевена на наличие анизотропии [2,3], либо к модели „ядро-оболочка“ для описания намагниченности наночастиц [4], либо к учету зависимости магнитного момента и антиферромагнитной восприимчивости от температуры [5], либо к модели Гейзенберга с учетом анизотропии отдельных ионов и с использованием функции Грина [6].

Понятие нескомпенсированного спина также активно используется в качественном анализе экспериментальных кривых намагничивания АФМ-наночастиц [7–10]. Отдельно отметим, что для численного описания магнитного гистерезиса в экспериментальных кривых намагничивания наночастиц бората железа использовался подход, основанный на обобщенной модели Стонера–Вольфарта [11–13], а антиферромагнитный характер исследуемого материала учитывался в виде дополнительного вклада в магнитную восприимчивость Нееля [14–16].

Несмотря на общую справедливость самой физической идеи Нееля [1], она сыграла и свою отрицательную роль: вопрос о форме кривых намагничивания идеальных (скомпенсированных) АФМ-наночастиц с тех пор серьезно так и не рассматривался, что, в свою очередь, сдерживало развитие общей теории. Следует отметить, что недавно был предложен и реализован формализм для описания специфической трансформации мессбауэровских спектров поглощения идеальных АФМ-наночастиц в зависимости от температуры. Нетривиальная форма энергетического спектра возбуждений таких частиц позволила не только описать форму спектров поглощения, но и дать феноменологическое объяснение макроскопических квантовых эффектов, наблюдаемых в экспериментах [17]. При этом показано, что наличие нескомпенсированного спина не меняет качественного характера эволюции формы спектров „идеальных“ антиферромагнитных частиц с температурой, а приводит лишь к небольшим количественным поправкам [18].

В то же время гистерезис в идеальном антиферромагнетике был ранее предсказан также в отсутствие нескомпенсированного спина еще в начале 60-х годов прошлого века [19,20]. В частности, были получены аналитические выражения для кривых намагничивания двухподрешеточного антиферромагнетика со слабой магнитной анизотропией типа „легкая ось“ для двух взаимно

перпендикулярных ориентаций вектора напряженности внешнего магнитного поля **H** вдоль и перпендикулярно оси анизотропии (см. рис. 1). Плотность энергии такого антиферромагнетика выражается следующим образом:

$$E = J\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2 - \frac{K}{2}(\cos^2\theta_1 + \cos^2\theta_2) - \mathbf{H}(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2), \quad (1)$$

где J — константа обменного взаимодействия ($J > 0$ для АФМ-частиц), $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ — намагниченности подрешеток ($M_1 = M_2 = M_0$), K — константа аксиальной магнитной анизотропии, θ_1 и θ_2 — углы между векторами $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ и осью легкого намагничивания.

Когда внешнее поле параллелльно оси легкого намагничивания ($\Theta = 0^\circ$), кривые намагничивания характеризуются тремя значениями критических полей:

$$h_\perp = \frac{2-k}{2+k}\, h_\parallel, \quad (2)$$

$$h_\parallel = \sqrt{k(2+k)}, \quad (3)$$

$$h_E(0) = 2 - k. \quad (4)$$

Здесь $k = K/(JM_0^2)$, и в рамках общепринятого (проверенного на опыте для массивных АФМ-материалов [21]) предположения о малости энергии анизотропии по сравнению с обменной $k \ll 1$. Сами же выражения (2)–(4) относятся к приведенному безразмерному магнитному полю $h = H/(JM_0)$.

В слабом магнитном поле (при $h \le h_\perp$) есть только один минимум энергии, когда векторы намагниченностей подрешеток $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ параллельны оси легкого намагничивания и антипараллельны друг другу, а результирующая намагниченность равна нулю. В интервале полей $h_\perp \le h \le h_\parallel$ появляется второй минимум энергии, причем первому минимуму по-прежнему соответствует $M = 0$, тогда как второму соответствует

$$M = 2M_0 h/h_E. \quad (5)$$

В этом интервале при сканировании напряженности магнитного поля сначала по возрастанию, а затем по убыванию (или наоборот) должен наблюдаться гистерезис в кривых намагничивания, если релаксационные процессы (переходы между локальными минимумами энергии) достаточно медленные. Физический смысл индексов $\parallel$ и $\perp$ заключается в том, что ось антиферромагнетизма перпендикулярна оси анизотропии при $h \ge h_\perp$, а ситуация, когда ось антиферромагнетизма параллельна оси легкого намагничивания, реализуется при $h \le h_\parallel$. Отметим, что во втором случае существует два эквивалентных решения, соответствующих перестановке направлений векторов $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ вдоль легкой оси, тогда как в первом случае решение одно, и оно соответствует самосогласованной прецессии векторов $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ вокруг легкой оси.

При $h > h_\parallel$ минимум энергии, соответствующий $M = 0$, пропадает, и остается лишь второй минимум энергии, для которого с ростом напряженности магнитного поля намагниченность линейно возрастает по закону (5) до значения $M = 2M_0$ при $h = h_E$. При дальнейшем увеличении поля намагниченность уже не

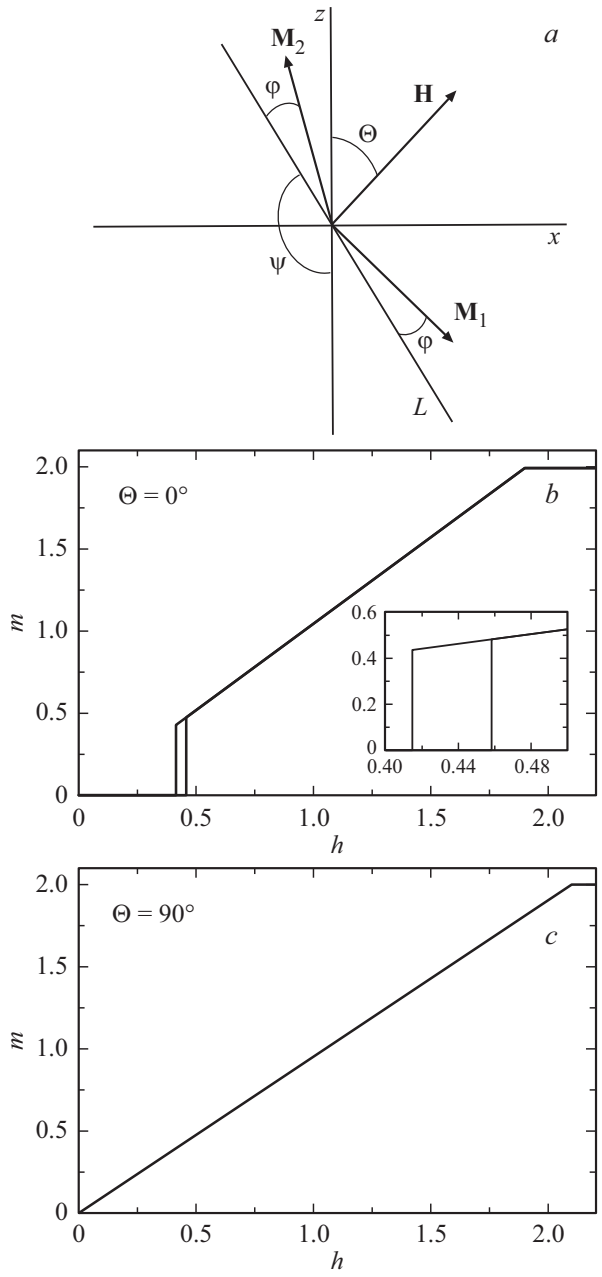


Рис. 1. Система координат: ось z — ось легкого намагничивания, L — ось антиферромагнетизма (a). Кривые намагничивания при $\Theta = 0^\circ$ (b) и $\Theta = 90^\circ$ (c) при $k = 0.1$. Здесь и далее $m = M/M_0$, на вставках показаны кривые в увеличенном масштабе.

меняется, так как уже достигнуто ее максимальное значение, соответствующее ориентации векторов $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ вдоль направления поля.

В случае перпендикулярной ориентации вектора напряженности магнитного поля относительно легкой оси ($\Theta = 90^\circ$) существует лишь одно критическое поле

$$h_E(90^\circ) = 2 + k, \quad (6)$$

ниже которого намагниченность линейно возрастает от 0 до $2M_0$ (векторы намагниченности подрешеток при уве-

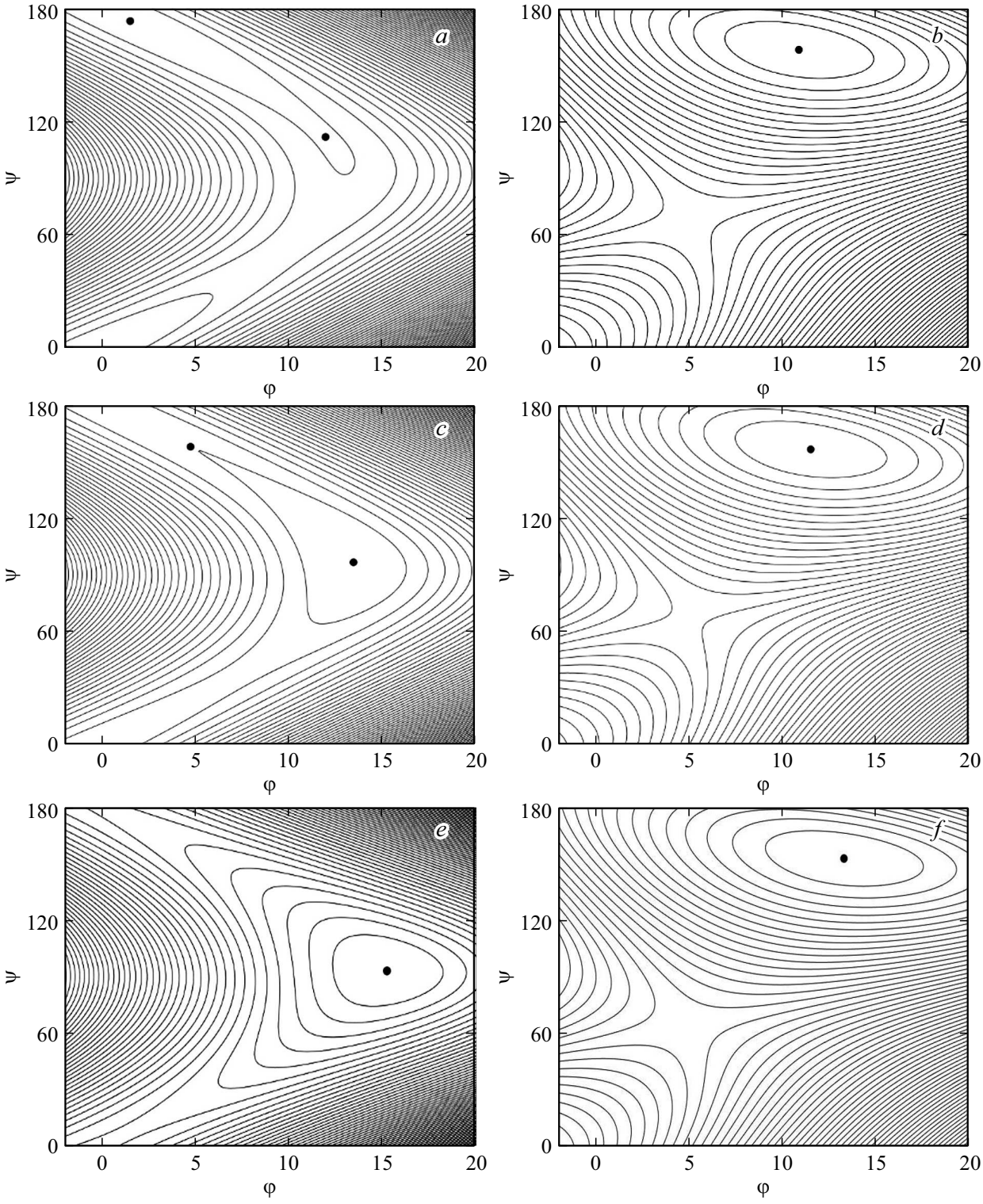


Рис. 2. Линии уровней постоянной энергии в переменных φ и ψ для $\Theta = 1^\circ$ (a, c, e) и $\Theta = 45^\circ$ (b, d, f), рассчитанные при $h = h_1(1^\circ)$ (a, b), $h_2(1^\circ)$ (c, d), 0.5 (e, f); $k = 0.1$. Точками отмечены положения локальных минимумов энергии.

личении поля от нуля сразу начинают поворачиваться к направлению поля), а выше которого сохраняется постоянное значение намагниченности, равное $2M_0$.

Отметим, что анализ формы кривых намагничивания для произвольной ориентации направления магнитного поля относительно оси анизотропии с тех пор так и не проводился. В такой ситуации возникают как минимум два вопроса: 1) насколько существенным является учет наличия гистерезиса, предсказанного для идеальных АФМ-наночастиц, в кривых намагничивания реальных

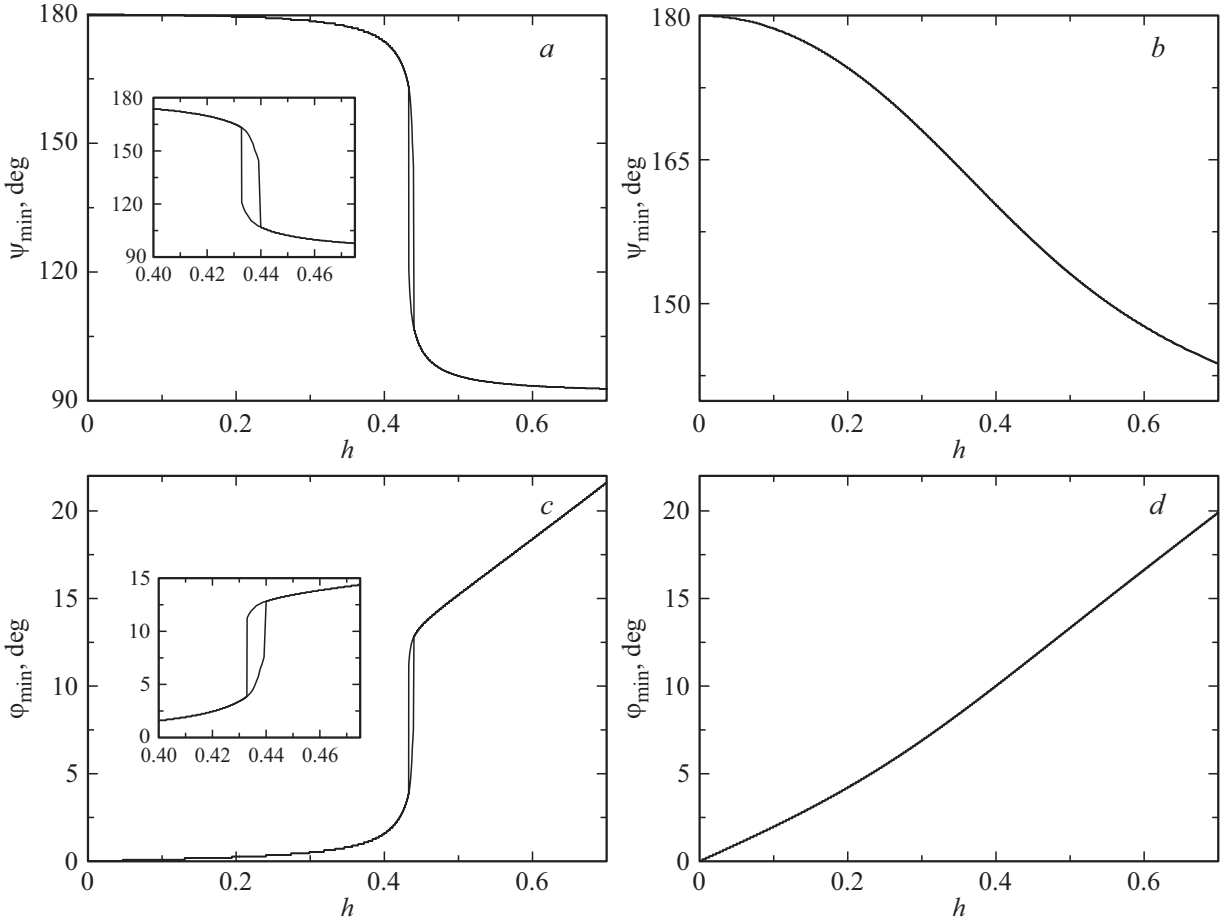


Рис. 3. Зависимости координат локальных минимумов энергии $\varphi_{\min}$ и $\psi_{\min}$ от напряженности магнитного поля h для $\Theta = 2^\circ$ (a, c) и 45° (b, d), рассчитанные при $k = 0.1$.

наночастиц; 2) какое влияние оказывает ориентация направления магнитного поля на величину и форму гистерезиса для идеальных АФМ-наночастиц. Решению соответствующих задач и посвящена настоящая статья, что позволит помимо прояснения чисто фундаментальных проблем существенно расширить теоретический базис для разработки адекватных моделей для анализа многочисленных экспериментальных данных на современных антиферромагнитных наноматериалах.

Для решения задачи нахождения минимума энергии (1) удобно перейти к новым переменным, углам φ и ψ (см. рис. 1), и вместо энергии (1) перейти к ее нормированному выражению за вычетом несущественных постоянных слагаемых [19,20]:

$$\widetilde{E} = 2\sin^2\varphi - k(2\sin^2\varphi\sin^2\psi - \sin^2\varphi - \sin^2\psi) - 2(h_z\sin\psi - h_x\cos\psi)\sin\varphi. \quad (7)$$

Здесь $\widetilde{E} = E/(JM_0^2) + 1 + k$, $h_z = h\cos\Theta$, $h_x = h\sin\Theta$. Аналогично ранее рассмотренному случаю $\Theta = 0^\circ$, равновесному состоянию системы должны соответствовать минимумы потенциальной энергии (7). На рис. 2 мы построили типичные контурные карты уровней постоянной энергии в переменных φ и ψ при $\Theta = 1^\circ$ и $\Theta = 45^\circ$ для разных значений модуля напряженности магнитного поля, положения локальных минимумов показаны точками. На рис. 3 представлены характерные зависимости положений энергетических минимумов в переменных φ и ψ от напряженности магнитного поля для $\Theta = 2^\circ$ и $\Theta = 45^\circ$.

В слабых магнитных полях $h \le h_1(\Theta)$ реализуется один минимум энергии, когда векторы намагниченностей подрешеток $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ немного отклоняются от направления легкой оси к направлению магнитного поля, оставаясь почти антипараллельными друг другу (рис. 3). Вектор антиферромагнетизма также немного отклоняется от направления легкой оси, и возникает результирующая намагниченность, отличная от нуля. При выполнении условия $k \ll 1$ для малых углов Θ появляется второй минимум энергии в интервале полей $h_1(\Theta) \le h \le h_2(\Theta)$ (рис. 2 и 3). При этом первому минимуму по-прежнему соответствуют почти антипараллельные векторы намагниченностей подрешеток $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$, немного отклоненные от оси анизотропии и результирующая намагниченность мала. А второй минимум характеризуется вектором антиферромагнетизма, практически перпендикулярным оси анизотропии, и векторами $\mathbf{M}_1$

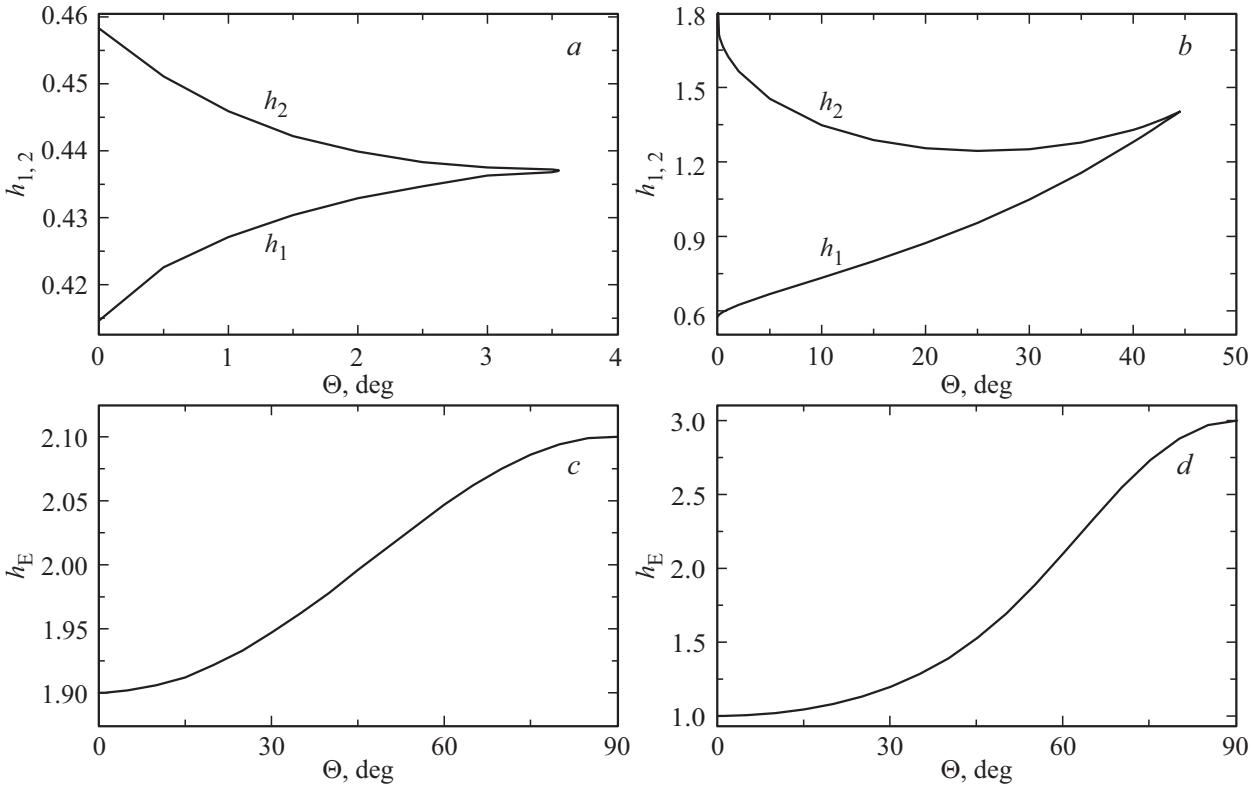


Рис. 4. Зависимость критических магнитных полей от угла Θ для $k = 0.1$ (a, c) и 1 (b, d).

и $\mathbf{M}_2$, почти антипараллельными друг другу, но ориентированными почти перпендикулярно легкой оси, так что результирующая намагниченность приблизительно соответствует выражению (5). При $h \geq h_2(\Theta)$ остается лишь второй минимум энергии. Такое поведение продемонстрировано графически на рис. 2 и 3 слева.

Нетрудно понять, что критические поля $h_1(\Theta)$ и $h_2(\Theta)$ играют роль $h_\perp$ и $h_\parallel$ для случаев $\Theta > 0$, а в интервале $h_1(\Theta) \leq h \leq h_2(\Theta)$ должны наблюдаться петли гистерезиса в кривых намагничивания.

Как видно на правых частях на рис. 2 и 3, при $\Theta = 45^\circ$ на контурных картах энергии всегда присутствует только один энергетический минимум. Это свидетельствует о том, что существует некий критический угол, выше которого гистерезис не наблюдается. И действительно, слева на рис. 4 приведены графики зависимости критических магнитных полей $h_1(\Theta)$ и $h_2(\Theta)$ от угла Θ, рассчитанные при $k = 0.1$. Область между $h_1(\Theta)$ и $h_2(\Theta)$ как раз и является областью наличия петель гистерезиса. Из верхнего графика видно, что при возрастании Θ область гистерезиса становится все более и более узкой и при $\Theta_C = 3.55^\circ$ гистерезис исчезает полностью. По аналогии со случаем $\Theta = 0^\circ$ должно существовать также еще одно критическое поле $h_E(\Theta)$, выше которого векторы $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ становятся параллельными, так что при $h \geq h_E(\Theta)$ сохраняется постоянное значение результирующей намагниченности, равное $2M_0$. На нижнем графике на рис. 4 показана зависимость третьего критического поля h_E от угла Θ. Из этого графика видно, что при возрастании Θ от 0 до 90° величина h_E плавно возрастает от значения $2 - k$ до значения $2 + k$. При этом для $k \ll 1$ эта зависимость описывается выражением

$$h_E(\Theta) \approx 2 - k \cos 2\Theta. \tag{8}$$

Полученные в рамках проведенных расчетов положения локальных минимумов энергии в координатах φ и ψ можно использовать для расчета кривых намагничивания ансамблей идеальных АФМ-частиц с заданным углом Θ:

$$m(\Theta, h) = 2 \sin \varphi_{\min} (\sin \Psi_{\min} \cos \theta - \cos \Psi_{\min} \sin \theta). \tag{9}$$

Вместе с тем кривые намагничивания ансамбля хаотически ориентированных АФМ- частиц описываются стандартной формулой

$$m(h) = \int_0^{\pi/2} m(\Theta, h) \sin \Theta \, d\Theta. \tag{10}$$

На рис. 5 слева представлены кривые намагничивания для групп АФМ-частиц с заданными значениями $\Theta = 2$, 45, 80° и для ансамбля хаотически ориентированных АФМ-наночастиц, рассчитанные при $k = 0.1$. Петля гистерезиса наблюдается только в кривой намагничивания при малом значении угла $\Theta = 2^\circ$ и отсутствует в остальных кривых. Это обстоятельство приводит к тому что в интегральной кривой для ансамбля хаотически

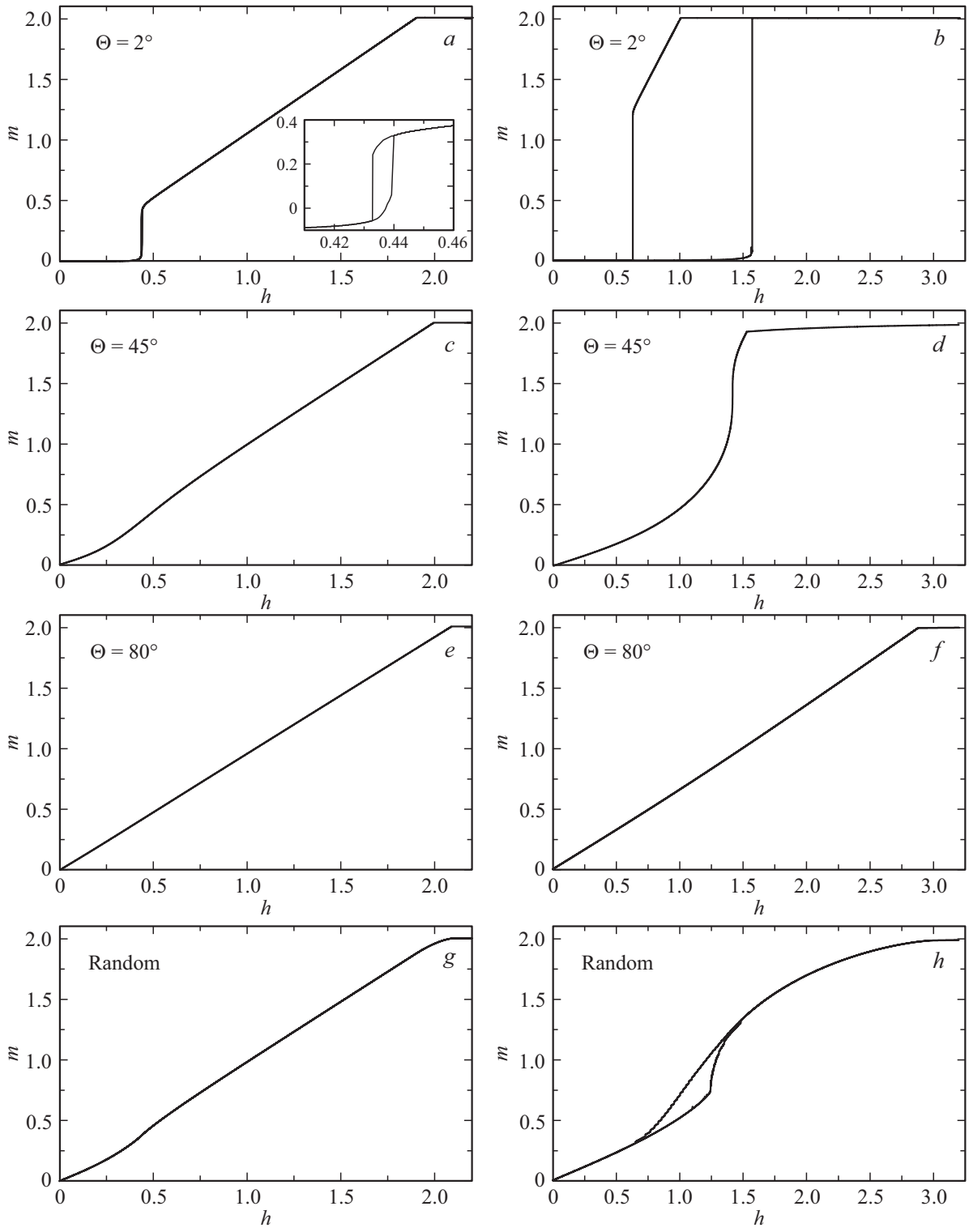


Рис. 5. Кривые намагничивания для групп частиц с разными углами Θ и ансамбля хаотически ориентированных антиферромагнитных наночастиц, рассчитанные при $k = 0.1$ (a, c, e, g) и 1 (b, d, f, h).

ориентированных АФМ-частиц гистерезис практически не заметен. Фактически этот результат свидетельствует о том, что если оставаться в рамках общепринятого предположения о малости энергии анизотропии по сравнению с обменной $(k \ll 1)$, гистерезис в экспериментальных кривых намагничивания АФМ-частиц можно объяснить исключительно наличием нескомпенсированного магнитного момента.

Однако не так давно был успешно проведен численный анализ экспериментальных данных, измеренных на

наночастицах гематита [22–24], в рамках континуальной модели магнитной динамики ансамбля идеальных АФМ-наночастиц в двухподрешеточном приближении [17]. А в основе этого анализа лежало совершенно другое качественное соображение, что решающим фактором для магнитных эффектов в АФМ-наночастицах является не наличие нескомпенсированного спина, а кардинальное увеличение вклада анизотропии формы частиц с уменьшением их размера, что приводит к увеличению k и хаотической ориентации осей результирующей магнитной анизотропии относительно кристаллографических осей. В такой ситуации условие $k \ll 1$ перестает выполняться, а петли гистерезиса в кривых намагничивания АФМ-наночастиц могут принимать совершенно другие формы (см., например, [25]). А общее утверждение таково, что с ростом k петля гистерезиса должна уширяться, и в предельном случае $k \gg 1$, когда обменное взаимодействие становится достаточно слабым, она должна приобретать ферромагнитный характер [11].

Отметим также, что в предельном случае слабых магнитных полей $h \ll 1$ можно получить приближенные выражения для функциональной зависимости намагниченности групп наночастиц с малыми значениями угла $\Theta \ll 1$ с точностью до линейных членов по h

$$m(\Theta, h) \approx \frac{2h \sin^2 \Theta}{2 + k} \tag{11}$$

и соответствующие выражения для групп наночастиц с малыми значениями отклонения угла Θ от 90°, $\pi/2 - \Theta \ll 1$

$$m(\Theta, h) \approx \frac{h \sin 2\Theta}{2 - k}. \tag{12}$$

Подробный анализ формы кривых намагничивания в зависимости от k, в частности, для $k \geq 1$ выходит за рамки настоящей статьи. Однако мы провели расчеты зависимости критических магнитных полей от угла Θ для $k = 1$ (рис. 4, справа) и кривых намагничивания для групп АФМ-частиц с разными углами Θ и ансамбля хаотически ориентированных АФМ-наночастиц для $k = 1$ (рис. 5, справа). Как видно на этих рисунках, интервал углов Θ, при которых наблюдается гистерезис существенно вырос ($\Theta_C = 45°$ для $k = 1$), а ширина петель гистерезиса для разных Θ значительно увеличилась по сравнению со случаем $k = 0.1$. Эти эффекты приводят к тому, что петля гистерезиса в результирующей кривой намагничивания для ансамбля хаотически ориентированных АФМ-частиц с $k = 1$ приобретает вполне отчетливую форму.

В заключение отметим, что в настоящей работе проведен численный анализ формы кривых намагничивания „идеальных" антиферромагнитных наночастиц в двухподрешеточном приближении для произвольной ориентации направления магнитного поля относительно оси аксиальной магнитной анизотропии. Впервые построены зависимости напряженности критических магнитных полей от ориентации вектора магнитного поля, которые плавно меняются с увеличением угла между направлением поля и легкой осью. Обнаружено, что ширина петель гистерезиса в кривых намагничивания сужается с ростом этого угла и исчезает при его некотором критическом значении. Показано также, что ширина петли гистерезиса и сам критический угол растут с увеличением отношения константы магнитной анизотропии к обменной константе. Фундаментальный характер этих результатов позволяет качественно объяснить наблюдавшиеся в экспериментальных кривых намагничивания особенности, а также являются базисом для развития более адекватных теоретических моделей для описания экспериментальных данных.

Полученные в настоящей работе результаты несложно обобщить также на случай наличия нескомпенсированного спина в АФМ-частицах, что позволит включить в модель для описания кривых намагничивания два взаимно конкурирующих механизма формирования петель гистерезиса, и тем самым существенно расширить теоретический базис для разработки методик анализа экспериментальных данных.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках Государственного задания НИЦ „Курчатовский институт".

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

[1] L. Néel. C.R. Acad. Sci. Paris **252**, 4075 (1961); **253**, 9 (1961); **253**, 203 (1961); **253**, 1286 (1961).
[2] C. Gilles, P. Bonville, K.K.W. Wong, S. Mann. Eur. Phys. J. B **17**, 417 (2000).
[3] Ю.Л. Райхер, В.И. Степанов, С.В. Столяр, В.П. Ладыгина, Д.А. Балаев, Л.А. Ищенко, М. Балашою. ФТТ **52**, *2*, 277 (2010).
[4] R. Bhowmik, R. Nagarajan, R. Ranganathan. Phys. Rev. B **69**, 054430 (2004).
[5] D.E. Madsen, S. Mørup, M.F. Hansen. J. Magn. Magn. Mater. **305**, 95 (2006).
[6] J.M. Wesselinowa. J. Magn. Magn. Mater. **322**, 234 (2010).
[7] F. Bødker, M.F. Hansen, C.B. Koch, K. Lefmann, S. Mørup. Phys. Rev. B **61**, 6826 (2000).
[8] O. Ozdemir, D.J. Dunlop, T.S. Berquo. Geochem. Geophys. Geosyst. **9**, 10 (2008).
[9] A.H. Hill, F. Jiao, P.G. Bruce, A. Harrison, W. Kockelmann, C. Ritter. Chem. Mater. **20**, 4891 (2008).
[10] G.C. Papaefthymiou. Biochim. Biophys. Acta **1800**, 886 (2010).
[11] M.A. Chuev, J. Hesse, J. Phys. Condens. Matter **19**, 506201 (2007).
[12] Д.Л. Загорский, К.В. Фролов, С.А. Бедин, И.В. Перунов, А.А. Ломов, М.А. Чуев, И.М. Долуденко. ФТТ **60**, *11*, 2075 (2018).
[13] Д.Л. Загорский, И.М. Долуденко, К.В. Фролов, И.В. Перунов, М.А. Чуев, Н.К. Чумаков, И.В. Калачикова, В.В. Артёмов, Т.В. Цыганова, С.С. Кругликов. ФТТ **65**, *6*, 973 (2023).

[14] Н.И. Снегирёв, И.С. Любутин, С.В. Ягупов, М.А. Чуев, Н.К. Чумаков, О.М. Жигалина, Д.Н. Хмеленин, М.Б. Стругацкий. ЖНХ **66**, *8*, 1114 (2021).
[15] M.A. Chuev. Proc. SPIE **12157**, 121571C (2022).
[16] А.П. Носов, И.А. Субботин, М.А. Чуев, А.О. Беляева, О.А. Кондратьев, Е.А. Ганьшина, И.М. Припеченков, С.С. Дубинин, А.О. Шориков, В.В. Изюров, К.А. Меренцова, М.С. Артемьев, Э.М. Пашаев. ФММ **126**, *5*, 520 (2025).
[17] М.А. Чуев. Письма в ЖЭТФ **95**, *6*, 323 (2012); **103**, *3*, 194 (2016).
[18] М.А. Чуев. ДАН **447**, *1*, 22 (2012).
[19] Е.А. Туров. В сб.: Ферромагнитный резонанс / Под ред. С.В. Вонсовского. Физматлит, М. (1961). С. 98.
[20] С.В. Вонсовский. Магнетизм. Наука, М. (1971). 1032 с.
[21] И.Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **32**, *6*, 1547 (1957).
[22] I. Mischenko, M. Chuev. Hyperfine Interact. **237**, 21 (2016).
[23] М.А. Чуев, И.Н. Мищенко, С.П. Кубрин, Т.А. Ластовина. Письма в ЖЭТФ **105**, *11*, 668 (2017).
[24] I. Mishchenko, M. Chuev, S. Kubrin, T. Lastovina,V. Polyakov, A. Soldatov. J. Nanoparticle Res. **20**, 141 (2018).
[25] А.К. Звездин, М.А. Колюшенков, А.П. Пятаков. Письма в ЖЭТФ **121**, *7*, 605 (2025).

Редактор Е.Ю. Флегонтова