

05,08

Атомистическое моделирование размерных эффектов в изолированных ферромагнитных и антиферромагнитных наночастицах

© А.А. Быкова¹, М.Е. Москалев¹, В.О. Васьковский^{1,2}

¹ Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

² Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

E-mail: nastyabykova@gmail.com

Поступила в Редакцию 6 марта 2026 г.

В окончательной редакции 9 марта 2026 г.

Принята к публикации 13 марта 2026 г.

Исследовано влияние размерного фактора и температуры на магнетизм ферромагнитных (Fe) и антиферромагнитных (KNiF_3 , $\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$) наночастиц с применением атомистического моделирования в пакете VAMPIRE. Определены зависимости температур Кюри и Нееля от размера частиц, и показано, что его уменьшение ведет к „размытию“ температурных магнитных фазовых переходов. Для сплава $\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$, в модели которого учтены обменные взаимодействия в нескольких координационных сферах, неопределенность в реализации перехода в парамагнитное состояние выражено слабее по сравнению с материалами с короткодействующим обменом. Проведена оценка эффективных температур магнитного упорядочения поверхностного слоя (оболочки) на основе модели „ядро–оболочка“. Полученные результаты согласуются с экспериментальными и теоретическими данными, демонстрируя тем самым эффективность атомистического подхода для анализа магнитных свойств отдельных наночастиц.

Ключевые слова: ферромагнетик, железо, антиферромагнетик, хром-алюминий, спин-флуп.

DOI: 10.61011/FTT.2026.07.63646.2HH

1. Введение

Прогресс в области технического применения наноразмерных магнитных систем и их элементов, используемых, в частности, для высокоплотной записи данных, требует понимания особенностей формирования их магнитных свойств. Важнейшим фактором, оказывающим влияние на эти свойства, является поверхность, роль которой увеличивается с уменьшением размеров пленок, нанопроволок или частиц. Нарушение симметрии кристаллической структуры, понижение координационного числа и нарушение обменных связей поверхностных атомов приводит к уменьшению температур и размытию магнитных фазовых переходов [1–3], снижению спонтанной намагниченности [4], изменению коэрцитивной силы [5,6], константы и энергии анизотропии [3,7]. Наряду с этим в объектах нанометрового масштаба происходит модификация магнитной структуры, ведущая к реализации однодоменного [8,9] и суперпарамагнитного [2,10] состояний. Экспериментальное изучение роли размерного фактора в формировании магнитных свойств низкоразмерных объектов, особенно наночастиц, осложнено, по крайней мере, двумя обстоятельствами. Во-первых, ансамбли синтезированных наночастиц, как правило, характеризуются значительной дисперсией размеров и формы. Во-вторых, наночастицы покрыты окисной пленкой, объем которой трудно оценить. В этой связи важное

значение приобретает анализ свойств изолированных наночастиц методами компьютерного моделирования. Такой подход, с одной стороны, позволяет выделить вклад размерного фактора, отделяя его от влияния межчастичных взаимодействий и разброса частиц по размерам и форме. А, с другой стороны, адекватная информация об индивидуальных частицах является необходимой основой для построения реалистичных моделей магнитных свойств ансамблей взаимодействующих частиц или тонкопленочных структур. Исследование индивидуальных магнитных свойств наночастиц экспериментальными методами затруднено из-за влияния вероятного окисления и межчастичных взаимодействий, когда отдельные частицы находятся в составе ансамбля. Таким образом, компьютерное моделирование становится важным инструментом, позволяющим интерпретировать экспериментальные данные и, на основе создания цифровых двойников изучаемых объектов, предсказывать макроскопические свойства магнитных систем.

В последние годы значительную роль в изучении магнитных малоразмерных объектов приобретает атомистическое моделирование, под которым понимается компьютерное моделирование их свойств как суперпозиции свойств отдельных атомов, обладающих локальным магнитным моментом [11]. Среди специализированных программных пакетов для атомистического моделирования магнитных материалов выделяется открытый па-

кет VAMPIRE, разработанный в Йоркском университете [11]. Важным преимуществом данного пакета является возможность моделирования антиферромагнитных структур, что невозможно в пакетах микромагнитного моделирования. В микромагнитных подходах намагниченность рассматривается как непрерывное поле, а начальные направления магнитных моментов присваиваются элементам дискретизации случайным образом, что не позволяет корректно воспроизвести антиферромагнитное упорядочение. Помимо этого, с помощью VAMPIRE можно моделировать межфазное перемешивание, поверхностную анизотропию и шероховатость, свойства систем типа „ядро–оболочка“, гранулированных сред и литографических структур [11].

В настоящей работе мы демонстрируем, что атомистическое моделирование с применением пакета VAMPIRE является эффективным инструментом для изучения свойств отдельно взятых ферромагнитных и антиферромагнитных наночастиц. Оно позволило выполнить анализ размерных эффектов и влияния температуры на магнитные характеристики сферических частиц, на основе которого даны оценки эффективной температуры Кюри и Нееля оболочек изолированных частиц. Важно отметить, что в ходе моделирования оболочка выделяется естественным образом: VAMPIRE вычленяет ее как область с пониженным координационным числом атомов без искусственного задания геометрии и изменения магнитных параметров в этом слое. Результаты, полученные с помощью данного подхода, хорошо согласуются с экспериментальными и теоретическими данными, в которых рассматриваются ансамбли наночастиц с дисперсией по размеру [11–16]. Индикатором корректности выборов параметров моделирования является также хорошая корреляция между рассчитанными свойствами псевдомассивных модельных образцов с макроскопическими магнитными свойствами реальных материалов.

2. Численный эксперимент

Для исследования размерных и температурных эффектов в магнитных наночастицах в данной работе был использован метод атомистического „спинового“ моделирования (atomistic spin model). Данный подход позволяет преодолеть ограничения континуального микромагнетизма, который не способен описывать физику на атомарных масштабах, особенно в области высоких температур, на поверхностях, границах раздела и в системах со сложным магнитным упорядочением, например, антиферромагнетиков. Атомистическая модель рассматривает каждый атом как носитель локализованного магнитного момента (спина) [11]. Энергия системы взаимодействующих атомных моментов описывается расширенным спиновым гамильтонианом Гейзенберга, который в общем виде включает четыре основных

вклада:

$$H = H_{\text{exc}} + H_{\text{ani}} + H_{\text{app}} + H_{\text{term}}, \quad (1)$$

где H_{exc} — энергия обменного взаимодействия, H_{ani} — энергия магнитной анизотропии, H_{app} — энергия взаимодействия с внешним магнитным полем, H_{term} — термическое поле, которое представляет собой пространственно-некоррелированный белый шум (броуновская динамика). Амплитуда этого поля определяется в соответствии с флуктуационно-диссипационной теоремой и зависит от атомного магнитного момента, параметра затухания и временного шага интегрирования. Временной шаг был выбран равным 0.1 fs. Кроме того, термодинамически равновесными состояниями при каждой температуре, включая начальное состояние, считались спиновые конфигурации, реализующиеся после 100000 итерационных шагов (sim:equilibration-time-steps, sim:loop-time-steps). Для остальных составляющих спинового гамильтониана (1) используются стандартные формы записи [11]. Отметим также, что в выражении (1) отсутствует член, характеризующий магнитостатическое взаимодействие. В пакете VAMPIRE оно по умолчанию не включается из-за вычислительных сложностей при моделировании свойств больших ансамблей. Для малых же частиц диполь-дипольное взаимодействие часто считается пренебрежимо малым по сравнению с обменным и спин-решеточным вкладами [2,11]. Задаваемые для моделирования значения параметров гамильтониана (μ_s , J_{ij} , константы анизотропии k_u) могут быть получены двумя путями: 1) на основе расчетов из первых принципов (*ab initio*); 2) экспериментальными методами [11]. В настоящей работе для ферромагнитного Fe и антиферромагнитных KNiF_3 , $\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$ веществ использовался второй подход. Для железа данные взяты из [11], для антиферромагнетиков определялись самостоятельно с помощью соотношений, приведенных в работе [11].

Расчеты температурных зависимостей магнитных моментов выполнялись путем численного решения уравнения Ландау–Лифшица–Гильберта с параметром затухания, равным 1, для уменьшения времени счета и обеспечения быстрой сходимости. Несмотря на широкое применение классического уравнения Ландау–Лифшица–Гильберта в рамках атомистической спиновой динамики, оно обладает фундаментальными ограничениями при описании поведения квантовых (низкоразмерных) систем в области низких температур. В последнее время определенные шаги на пути к решению этой проблемы сделаны разработчиками пакета VAMPIRE. В частности, в работе [17] предложен метод учета квантовых эффектов в атомной спиновой динамике путем перехода от классического термостата (белый шум) к использованию квантового цветного шума. Данный подход учитывает частотную зависимость спектральной плотности флуктуаций и эффекты памяти (немарковость), что обеспечивает корректное описание температурной зависимости намагниченности в области низких температур. Однако в области относительно высоких температур эти поправки

сходятся к классическому ланжевеновскому пределу. Иными словами, они не влияют на основные выводы данной работы, ориентированной на изучение магнитных свойств наночастиц вблизи температур фазовых переходов.

Для моделирования были выбраны следующие вещества: антиферромагнитный перовскит KNiF_3 , хорошо изученный экспериментально в прошлом столетии в массивном состоянии, железо как типичный ферромагнетик и твердый раствор $\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$, для моделирования свойств которого привлечены оригинальные экспериментальные данные. Следует заметить, что, несмотря на запросы современной антиферромагнитной спинтроники, влияние размерного фактора и температуры на свойства антиферромагнитных материалов мало изучены; это объясняется экспериментальной сложностью соответствующих измерений, поэтому реализация количественного описания свойств антиферромагнетиков, выполненная на примере конкретных веществ, представляется весьма важной.

KNiF_3 — классический гейзенберговский антиферромагнетик, в котором магнитные ионы Ni^{2+} ($1.73 \mu_B$ [18]) образуют простую кубическую решетку с параметром 0.4 nm [19]. При моделировании материала для простоты описывалось расположение только атомов никеля, влияние немагнитных ионов K^+ и F^- на магнитные свойства учитывалось опосредованно — через эффективные значения обменного интеграла J , константы анизотропии k_u и магнитного момента μ атомов никеля. Это приближение мы считаем корректным, поскольку магнитное упорядочение в KNiF_3 осуществляется по механизму сверхобмена через ионы фтора [19]. Параметры J и k_u оценены из данных антиферромагнитного резонанса [20] и составляют $J = -2.35 \cdot 10^{-21} \text{ J/link}$, $k_u = 1.7 \cdot 10^{-25} \text{ J/atom}$. Выбранные параметры обеспечивают адекватное описание известных экспериментальных результатов в пределе большого числа частиц. Магнитная структура атомов никеля в данном соединении относится к G-типу: соседние спины Ni ориентированы антипараллельно вдоль оси (001) [19], а температура упорядочения (температура Нееля) составляет $T_N = 246 \text{ K}$. Выбор этого соединения как объекта моделирования свойств обусловлен простой и хорошо установленной магнитной структурой, определенной методами нейтронографии, а также наличием надежных макроскопических параметров, что позволяет верифицировать нашу модель по теоретическим и экспериментальным данным.

Железо моделировалось как вещество с объемноцентрированной кубической (ОЦК, ВСС) решеткой, параметром элементарной ячейки 0.28 nm , магнитным моментом $2.22 \mu_B$, обменным интегралом $6.9 \cdot 10^{-21} \text{ J/link}$ и константой кубической анизотропии $5.65 \cdot 10^{-25} \text{ J/atom}$ [11]. Железо — хорошо изученный ферромагнетик. Наш интерес к моделированию свойств его частиц во многом обусловлен оценкой возможности использовать модель локализованного магнетизма для описания свойств зонного ферромагнетика и тем самым

Таблица 1. Структурные и магнитные параметры модели для KNiF_3 , $\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$, Fe

	KNiF_3	$\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$	Fe
T_N или T_C , K	246 [18]	900	1040
J , J/link	$-2.35 \cdot 10^{-21}$ [20]	$-2.2 \cdot 10^{-21}$	$6.9 \cdot 10^{-21}$ [11]
k_u , J/atom	$1.7 \cdot 10^{-25}$ [20]	$1 \cdot 10^{-24}$	$5.65 \cdot 10^{-25}$ [11]
m , μ_B	1.73 [18]	1 [22]	2.2 [11]
a , nm	0.4 [19]	0.29	0.28
Тип крист. решетки	Простая кубическая	ОЦК	ОЦК

получить методическую основу для моделирования зонных антиферромагнетиков.

Твердый раствор $\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$ моделировался как сплав с ОЦК-структурой, характеризующейся параметром решетки 0.29 nm , определенным рентгенографически в рамках наших экспериментов. Для данного состава характерна соизмеримая волна спиновой плотности, подробно изученная и визуализированная в работе [21]. Именно эта конфигурация и была воспроизведена при моделировании. Эффективный магнитный момент на атоме Cr для данной концентрации в литературе не приводится. Однако, опираясь на экспериментальные данные — известную для объемного случая зависимость магнитного момента от содержания алюминия вблизи 25 % — мы выбрали значение момента, равное $1 \mu_B$ [22]. Для твердого раствора $\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$ оценка обменного параметра J и макроскопической константы анизотропии K затруднены из-за отсутствия прямых экспериментальных данных для указанного состава. Однако для разбавленных твердых растворов Cr–Al в объемном состоянии в литературе приведены зависимости $T_N(x)$, где x — концентрация алюминия [23]. Это позволяет оценить J через $T_N(x)$ [11], а k_u положена равной константе магнитокристаллической анизотропии чистого Cr. В таблице 1 сведены структурные и магнитные параметры, использовавшиеся в моделировании (файлы .mat и .ucf пакета VAMPIRE).

3. Результаты и комментарии

На рис. 1–3 показаны температурные зависимости приведенного спонтанного момента ферромагнитных наночастиц Fe и приведенных подрешеточных магнитных моментов антиферромагнитных наночастиц KNiF_3 , $\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$ разного диаметра. Результаты моделирования показывают, что с уменьшением размера частиц возрастает разброс рассчитанных значений магнитного момента вблизи T_C и T_N , то есть наблюдается „размытие“ кривых $m/m_s(T)$, что усложняет непосредственное нахождение температур магнитных переходов. Чтобы

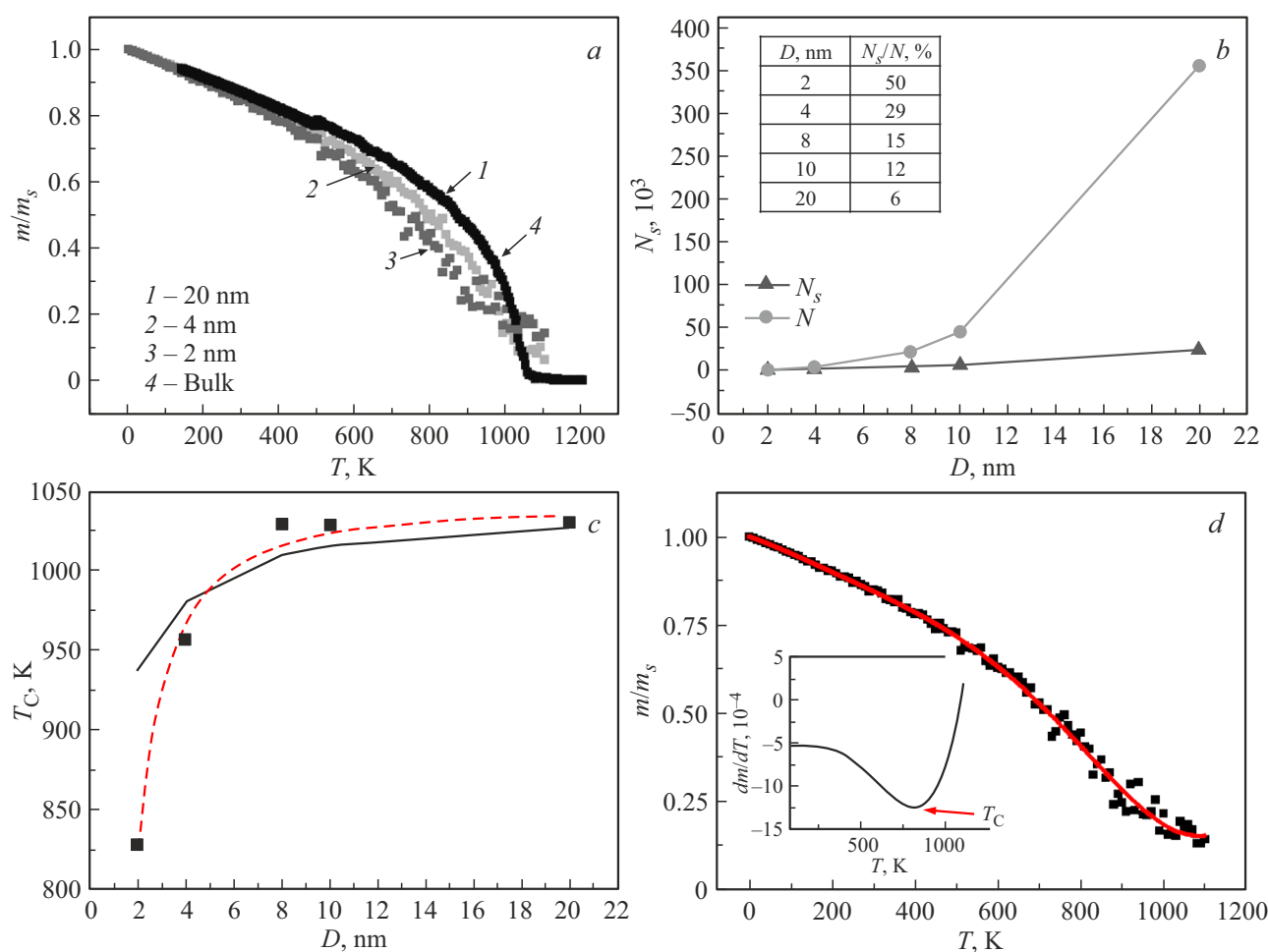


Рис. 1. Результаты атомистического моделирования свойств наночастиц железа различного диаметра D : а) температурная зависимость магнитного момента наночастиц, нормированного на магнитный момент основного состояния; б) количество поверхностных N_s и общее количество N атомов в наночастицах разного диаметра; в) зависимости температуры Кюри от диаметра наночастиц (точки — результат моделирования, сплошная кривая — оценка по (2), пунктирная кривая — оценка по (3) с использованием данных компьютерного моделирования величины T_C); д) детализация зависимости $m/m_s(T)$ для $D = 2$ nm.

минимизировать влияние численного шума, исходные массивы точек были аппроксимированы непрерывной функцией (сплошная линия на вставке к рис. 1, д), и за значения температур магнитного фазового перехода принимался минимум производной. Полученные при этом данные свидетельствуют о снижении температур Нееля и Кюри с уменьшением размеров частиц, что согласуется с результатами других расчетов и экспериментальных работ [11–16, 24, 25]. Такая естественная закономерность обусловлена увеличением относительного числа поверхностных атомов (N_s/N), что приводит к ослаблению их обменных связей из-за потери ближайших соседей и развитию магнитного беспорядка, затрагивающего не только поверхность, но и объем частицы. В работе [24], в частности, предполагается, что возникающее снижение ΔT_C пропорционально числу разорванных поверхностных связей. Отметим также, что „размытие“ зависимостей $m/m_s(T)$ вблизи T_N для частиц $\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$ проявляется слабее, чем для частиц Fe

и KFeF_3 . Данное различие можно объяснить тем, что в Fe и KFeF_3 обменное взаимодействие ограничивается рамками ближайших соседей, тогда как в $\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$ вклад в обмен дают несколько координационных сфер. Учет взаимодействий за пределами первой координационной сферы усиливает пространственную протяженность обменных связей, что снижает восприимчивость системы к поверхностным эффектам и обеспечивает сохранение дальнего магнитного порядка.

Корректность выбранных параметров моделирования была протестирована для каждого вещества путем перехода от наночастиц к псевдомассивному материалу. Технически это было выполнено за счет сохранения для поверхностных атомов частиц всех обменных связей, которыми обладают внутренние атомы. На рис. 1, а (кривая 4), 2, а (кривая 5), 3, а (кривая 1) представлены соответствующие зависимости $m/m_s(T)$. Они предсказуемо характеризуются более выпуклой формой и отсутствием

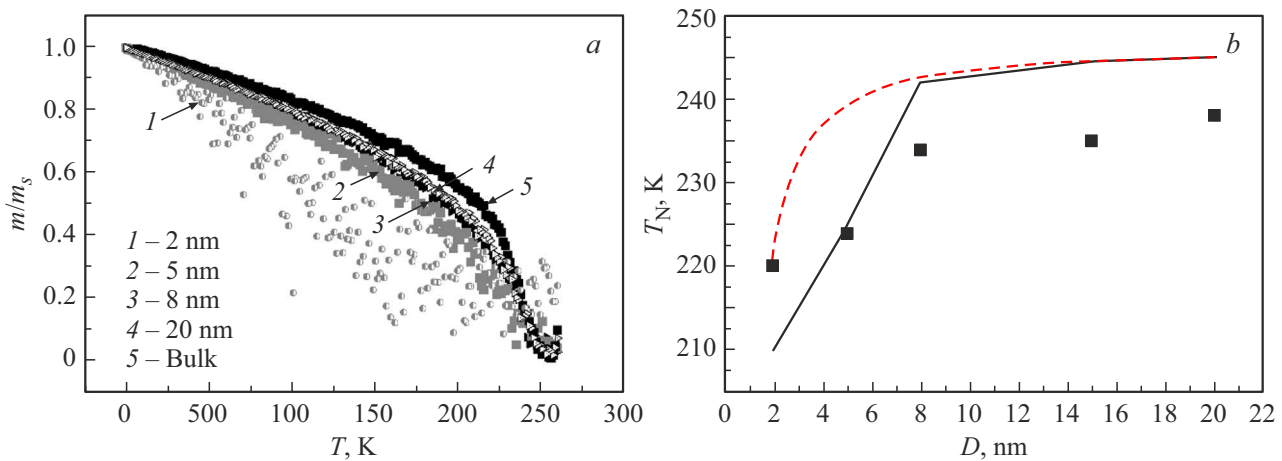


Рис. 2. Результаты атомистического моделирования свойств наночастиц KNiF_3 различного диаметра D : *a*) температурные зависимости подрешеточного магнитного момента наночастиц, нормированного на его значение в основном состоянии; *b*) зависимости температуры Нееля для наночастиц различного размера (точки — результат моделирования, кривая — оценка по (2), пунктирная кривая — оценка по (3) с использованием данных компьютерного моделирования величины T_N).

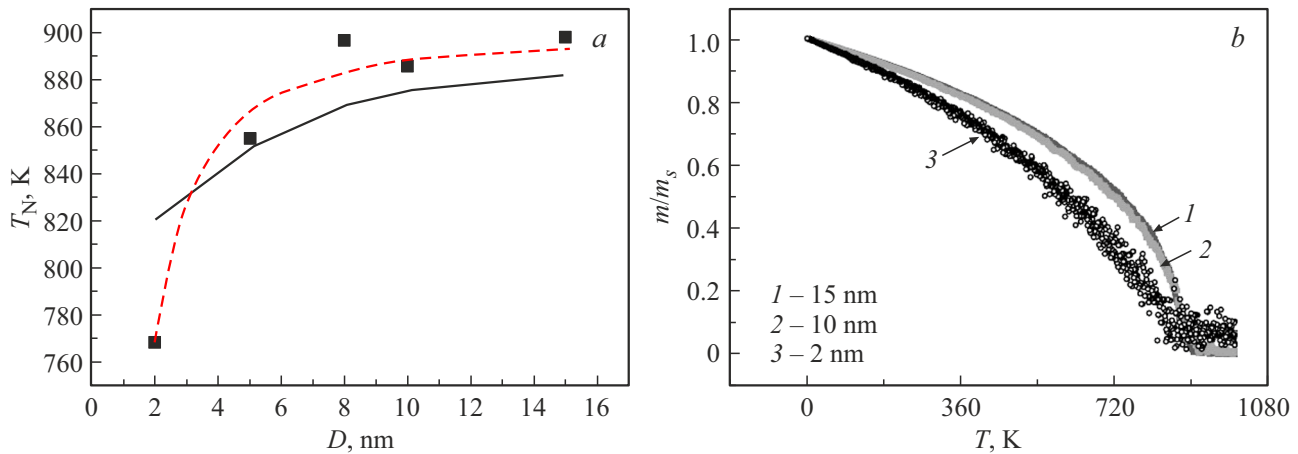


Рис. 3. Результаты атомистического моделирования свойств частиц $\text{Cr}_{75}\text{Al}_{25}$: *a*) зависимости температуры Нееля от размера наночастиц (точки — результат моделирования, кривая — оценка по (2), пунктирная кривая — оценка по (3) с использованием данных компьютерного моделирования величины T_N); *b*) температурные зависимости приведенного магнитного момента для наночастиц различного диаметра.

значительного температурного размытия вблизи точек фазового перехода.

Для детализации влияния поверхности на магнитные фазовые переходы была проанализирована упрощенная модель наночастиц типа „ядро–оболочка“ [2]. В данном подходе эффективная температура магнитного упорядочения (температура Кюри для ферромагнетиков и температура Нееля для антиферромагнетиков) рассчитывается как взвешенное среднее вкладов атомов объема и поверхности:

$$T_C = T_C^{\text{bulk}} - \frac{N_s}{N} \Delta T_C^{\text{surf}}, \quad (2)$$

где T_C^{bulk} — температура Кюри массивного объекта, T_C^{surf} — температура Кюри оболочки, а их разница

$\Delta T_C^{\text{surf}} = T_C^{\text{bulk}} - T_C^{\text{surf}}$ — рассматривается как параметр, характеризующий снижение температуры Кюри. Решая систему уравнений с использованием значений T_C , полученных при моделировании, можно оценить ΔT_C^{surf} для частиц различного диаметра. Усреднение этих оценок по всем рассмотренным размерам наночастиц железа дало значение $T_C^{\text{surf}} = 227$ К, что соответствует эффективной температуре Кюри поверхностного слоя $T_C^{\text{surf}} \approx 827$ К. Различия в значениях ΔT_C^{surf} для разных пар диаметров частицы и ее ядра говорит о нелинейности эффекта, однако усреднение позволяет установить эффективную меру поверхностного беспорядка. При этом полученная по (2) зависимость температуры Кюри от диаметра наночастиц не имеет выбросов, и сама величина согласуется с оценками, приведенными в работах [21,14]. Анало-

Таблица 2. Температурные характеристики фазовых переходов в наночастицах Fe, KNiF₃, Cr₇₅Al₂₅ при сравнении с температурами Кюри и Нееля этих веществ в массивном состоянии

	Fe	KNiF ₃	Cr ₇₅ Al ₂₅
$T_C^{\text{surf}}/T_C^{\text{bulk}}$	835/1040	—	—
$T_N^{\text{surf}}/T_N^{\text{bulk}}$	—	191/246	672/900
$T_C^{\text{surf}}/T_C^{\text{bulk}}, \%$	20	—	—
$T_N^{\text{surf}}/T_N^{\text{bulk}}, \%$	—	28	25

Таблица 3. Значения корреляционной длины ξ_0 , полученные для частиц разных веществ путем аппроксимации данных компьютерного моделирования формулой (3)

	ν	ξ_0, nm
Fe	0.64	0.65
KNiF ₃	0.71	0.38
Cr ₇₅ Al ₂₅	0.67	0.55

гичным образом была определена величина T_N^{surf} для частиц KNiF₃, Cr₇₅Al₂₅. Численные значения полученных температурных характеристик приведены в таблице 2; они показывают, что у оболочки наночастиц температура магнитного упорядочения падает на 20–30 %, что согласуется с результатами других работ [14,24,25].

Одним из вариантов часто используемого аналитического описания особенностей магнитного упорядочения в малых частицах является скейлинговое соотношение, полученное в [26]. В соответствии с ним изменение температуры Кюри или Нееля ($T_{C,N}$) в зависимости от диаметра частицы D описывается соотношением:

$$T_{C,N}(D) = T_{C,N}^{\text{bulk}} - A \cdot D^{-1/\nu}, \quad (3)$$

где ν — критический индекс корреляционной длины ξ_0 , принимающий значения 0.63–0.71 для трехмерной модели Гейзенберга [26], A — масштабный коэффициент, связанный с корреляционной длиной при $T = 0 \text{ K}$ соотношением $A = T_{C,N}^{\text{bulk}} \xi_0^{(1/\nu)}$. Мы использовали аппроксимацию данных компьютерного моделирования для оценки параметров, входящих в формулу (3). Соответствующие результаты для частиц исследуемых веществ приведены в таблице 3.

Отметим, что эти оценки соответствуют уровню значений ξ_0 . В частности, в работе [26] указан диапазон 0.2–0.6 nm, в котором находится корреляционная длина пленок Cr₂O₃.

При сравнении размерных зависимостей температуры Кюри, полученных из прямого моделирования, учитывающего наличие поверхностных атомов, и с применением формулы (3) наблюдается качественное согласие. В то

же время имеют место отклонения расчетных точек от аналитической кривой. Это может быть связано как с погрешностями численного счета, так и с ограниченностью физической модели, использованной при выводе (3). Модель не учитывает атомарную дискретность среды — обстоятельство, играющее важную роль для наночастиц малого диаметра — а также размерную вариацию координационного числа и возможных температурных изменений корреляционной длины.

Отметим также сохранение ненулевого магнитного момента в малых наночастицах выше температуры Кюри, определенной стандартным методом. Это происходит, когда размер частицы становится сравнимым с длиной спиновой корреляции, и во всей частице поддерживается ближний магнитный порядок. В объемном материале тепловые флуктуации полностью разрушают магнитный порядок на макроскопическом масштабе, и средний магнитный момент выше T_C обращается в нуль [24]. Аналогичные свойства проявляет и подрешеточный магнитный момент антиферромагнетика вблизи T_N .

Дополнительно в целях верификации выбранных параметров для антиферромагнетика KNiF₃ было исследовано поведение вектора Нееля при приложении поля вдоль оси антиферромагнитного упорядочения и определены характеристики так называемого спин-флоп-перехода. Экспериментальные исследования антиферромагнитных наночастиц (например, α -Fe₂O₃ [27] и Cr₂O₃ [28]) однозначно свидетельствуют о снижении поля спин-флопа H_{sf} с уменьшением размера частицы. Этот тренд успешно объясняется в рамках моделей, учитывающих рост поверхностного беспорядка и уменьшение средней энергии анизотропии и обмена. Спин-флоп был воспроизведен и в рамках нашей модели. Поле спин-флопа определялось по появлению результирующего магнитного момента и резкому изменению ориентации подрешеточных магнитных моментов по отношению к ОЛН. Полученные результаты свидетельствуют о том, что в относительно крупных частицах ($D > 15 \text{ nm}$) поле спин-флопа приближается к значениям, свойственным массивным образцам (4.5 T [29]). Но с уменьшением D имеет место резкое понижение H_{sf} , а сам переход теряет пороговый характер.

4. Заключение

Представлены результаты атомистического моделирования магнитных свойств изолированных сферических наночастиц Fe, KNiF₃ и Cr₇₅Al₂₅, выполненного в программном пакете VAMPIRE. Исследованы зависимости спонтанного и подрешеточных магнитных моментов ферромагнетика и антиферромагнетиков от температуры и магнитного поля для частиц разного диаметра. Установлено, что уменьшение размера наночастиц приводит к снижению температур Кюри (T_C) и Нееля (T_N), а также к размытию температурных и полевых магнитных

фазовых переходов. Эффект размытия наиболее выражен для веществ с короткодействующим обменным взаимодействием. При этом зависимости $T_C(D)$, $T_N(D)$ получены без геометрического выделения поверхностной области с модифицированными магнитными параметрами, свойственного традиционным подходам к решению подобных задач. В то же время продемонстрировано определенное согласие полученных в работе результатов с аналитическим описанием размерных эффектов в рамках упрощенных моделей магнетизма наночастиц.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (тема № FEUZ-2024-0060).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] J. Restrepo, Y. Labaye, J.M. Greneche. *Physica B: Condens. Matter* **384**, 1–2, 221 (2006). <https://doi.org/10.1016/j.physb.2006.05.267>
- [2] *Magnetic Nanoparticles* / Ed. S.P. Gubin. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co KGaA, Germany (2009). <https://doi.org/10.1002/9783527627561>
- [3] S. Gangopadhyay, G.C. Hadjipanayis, B. Dale, C.M. Sorensen, K.J. Klabunde, V. Papaefthymiou, A. Kostikas. *Phys. Rev. B* **45**, 17, 9778 (1992). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.45.9778>
- [4] J. Mazo-Zuluaga, J. Restrepo, F. Muñoz, J. Mejía-López. *J. Appl. Phys.* **105**, 12, 123907 (2009). <https://doi.org/10.1063/1.3148865>
- [5] E.F. Kneller, F.E. Luborsky. *J. Appl. Phys.* **34**, 3, 656 (1963). <https://doi.org/10.1063/1.1729324>
- [6] C. Luna, M. del Puerto Morales, C.J. Serna, M. Vázquez. *Nanotechnol.* **14**, 2, 268 (2003). <https://doi.org/10.1088/0957-4484/14/2/332>
- [7] C.-R. Lin, R.-K. Chiang, J.-S. Wang, T.-W. Sung. *J. Appl. Phys.* **99**, 8, 08N710 (2006). <https://doi.org/10.1063/1.2172891>
- [8] L. Berger, Y. Labaye, M. Tamine, J.M.D. Coey. *Phys. Rev. B* **77**, 10, 104431 (2008). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.77.104431>
- [9] J. Frenkel, J. Dorfman. *Nature* **126**, 3173, 274 (1930).
- [10] C.P. Bean, J.D. Livingston. *J. Appl. Phys.* **30**, 4, S120 (1959). <https://doi.org/10.1063/1.2185850>
- [11] R.F.L. Evans, W.J. Fan, P. Chureemart, T.A. Ostler, M.O.A. Ellis, R.W. Chantrell. *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 10, 103202 (2014). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/10/103202>
- [12] C. Penny, A.R. Muxworthy, K. Fabian. *Phys. Rev. B* **99**, 17, 174414 (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.174414>
- [13] O. Hovorka, S. Devos, Q. Coopman, W.J. Fan, C.J. Aas, R.F.L. Evans, X. Chen, G. Ju, R.W. Chantrell. *App. Phys. Lett.* **101**, 5, 052406 (2012). <http://dx.doi.org/10.1063/1.4740075>
- [14] I.M.L. Billas, A. Châtelain, W.A. de Heer. *Sci.* **265**, 5179, 1682 (1994). <https://doi.org/10.1126/science.265.5179.1682>
- [15] J. Carvell, E. Ayieta, A. Gavrin, R. Cheng, V.R. Shah, P. Sokol. *J. Appl. Phys.* **107**, 10, 103913 (2010). <http://dx.doi.org/10.1063/1.3428415>
- [16] S. Polesya, O. Šipr, S. Bornemann, J. Minár, H. Ebert. *Europhys. Lett.* **74**, 6, 1074 (2006). <https://doi.org/10.1209/epl/i2006-10053-5>
- [17] F.-C. Weber, F. Hartmann, M. Bargheer, J. Anders, R.F.L. Evans. *Phys. Rev. B* **113**, 6, 064423 (2026). <https://doi.org/10.1103/kl8s-bqlv>
- [18] Hayatullah, G. Murtaza, R. Khenata, S. Muhammad, A.H. Reshak, K.M. Wong, S. Bin Omran, Z.A. Alahmed. *Comput. Mater. Sci.* **85**, 402 (2014). <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.12.054>
- [19] J.M. Ricart, R. Dovesi, C. Roetti, V.R. Saunders. *Phys. Rev. B* **52**, 4, 2381 (1997). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.52.2381>
- [20] H. Yamaguchi, K. Katsumata, M. Hagiwara, M. Tokunaga, H.L. Liu, A. Zibold, D.B. Tanner, Y.J. Wang. *Phys. Rev. B* **59**, 9, 6021 (1999). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.6021>
- [21] Z. Boekelheide, T. Saerbeck, A.P.J. Stampfl, R.A. Robinson, D.A. Stewart, F. Hellman. *Phys. Rev. B* **85**, 9, 094413 (2012). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.094413>
- [22] A. Kallel, F. De Bergevin. *Solid State Commun.* **5**, 12, 955 (1967). [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(67\)90475-9](https://doi.org/10.1016/0038-1098(67)90475-9)
- [23] A.L. Alberts, S.J. Burger. *Solid State Commun.* **28**, 9, 771 (1978). [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(78\)91342-X](https://doi.org/10.1016/0038-1098(78)91342-X)
- [24] R. Evans, U. Nowak, F. Dorfbauer, T. Shrefl, O. Mryasov, R.W. Chantrell, G. Grochola. *J. Appl. Phys.* **99**, 8, 08G703 (2006). <https://doi.org/10.1063/1.2167636>
- [25] G. dos Santos, H.M. Urbassek, E.M. Bringa. *Sci. Rep.* **14**, 1, 22012 (2024). <https://doi.org/10.1038/s41598-024-73129-w>
- [26] S.P. Pati, M. Al-Mahdawi, S. Ye, Y. Shiokawa, T. Nozaki, M. Sahashi. *Phys. Rev. B* **94**, 22, 224417 (2016). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.224417>
- [27] R.D. Zysler, D. Fiorani, A.M. Testa, L. Suber, E. Agostinelli, M. Godinho. *Phys. Rev. B* **68**, 21, 212408 (2003). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.212408>
- [28] D. Tobia, E. Winkler, R.D. Zysler, M. Granada, H.E. Troiani. *Phys. Rev. B* **78**, 10, 104412 (2008). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.104412>
- [29] R.H. Petit, J. Ferré, J. Nouet. *J. de Physique* **36**, 5, 431 (1975). <https://doi.org/10.1051/jphys:01975003605043100>

Редактор Е.В. Толстякова