

01;05

## Влияние типа пространственной структуры наночастиц никеля на их техническое намагничивание

© А.П. Шпак, А.Б. Шевченко,<sup>1</sup> А.Б. МельникИнститут металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины,  
03680 Киев, Украина<sup>1</sup>e-mail: mail:abs@imp.kiev.ua

(Поступило в Редакцию 11 августа 2003 г.)

Исследован процесс намагничивания наночастиц никеля с различными типами пространственных структур. Показано, что частицы никеля с гранецентрированной кубической структурой являются более магнито-жесткими материалами, чем частицы со структурой икосаэдра. Определены оси легкого намагничивания частиц.

Исследование физических свойств наночастиц с характерными размерами 10–50 Å актуально как с фундаментальной, так и прикладной точек зрения. Последнее обусловлено широкими перспективами из практического применения (см., например, обзор [1] и приведенную там библиографию). Среди этих частиц следует особо выделить малые ферромагнитные частицы, представляющие собой нанобъекты с различными типами пространственных структур. Многочисленные эксперименты и численные расчеты показывают, что для металлических ферромагнитных кластеров наиболее характерны следующие типы структур: объемно центрированная кубическая (ОЦК), гранецентрированная кубическая (ГЦК) и икосаэдрическая, с осью симметрии пятого порядка, запрещенной трансляционной симметрией в объемном теле. Понятно, что магнитные свойства наночастиц зависят не только от размеров самих частиц, но и от особенностей пространственных конфигураций их атомных структур. В этой связи актуальным становится изучение влияния вышеназванного фактора на магнитные свойства наночастиц. Такое исследование для наночастиц Ni мы и провели в предлагаемой работе. Рассмотрим, в частности, влияние особенностей строения частиц на их техническое намагничивание.

Известно [2], что атомная конфигурация малых частиц Ni характеризуется икосаэдрической и ГЦК структурами, пространственными субъединицами первых координационных сфер, которые являются икосаэдр и ромбический додекаэдр соответственно. Определим области существования устойчивых состояний наночастиц. Для этого, следуя [3], найдем  $E_{\text{coh}}/E_{\text{bulk}}$  — удельную энергию когезии частиц (рис. 1). Расчеты показывают, что энергетически наиболее предпочтительны икосаэдрические частицы с количеством атомов  $N_1 = 13, 55, 147, 309, 561 \dots$  (характерные размеры 5–25 Å) и ГЦК частицы с  $N_2 = 19(7 \text{ Å}), 79(11.1 \text{ Å}), 135(13.1 \text{ Å}), 201(15.6 \text{ Å}), 675(23 \text{ Å}), \dots$ . Заметим, что полученные значения  $N$  для устойчивых состояний частиц соответствуют конфигурациям с полностью заполненными координационными сферами.

При исследовании магнитных свойств определенных выше частиц учтем, что, согласно результатам [4], для кластеров Ni с  $N = 55.79$  атомный магнитный момент  $m \approx 0.8\mu_B$ , где  $\mu_B$  — магнетон Бора. Для кластеров с  $N = 135m \approx 0.7\mu_B$ ,  $N \geq 147m \approx 0.6\mu_B$ .

Таким образом, значения атомных магнитных моментов наиболее устойчивых атомных конфигураций малых частиц Ni близки к значению магнитного момента объемного Ni. Учитывая далее, что зарядовая плотность объемного Ni практически совпадает с плотностью спиновых состояний [5], запишем в итоге следующее феноменологическое выражение для энергии магнитной

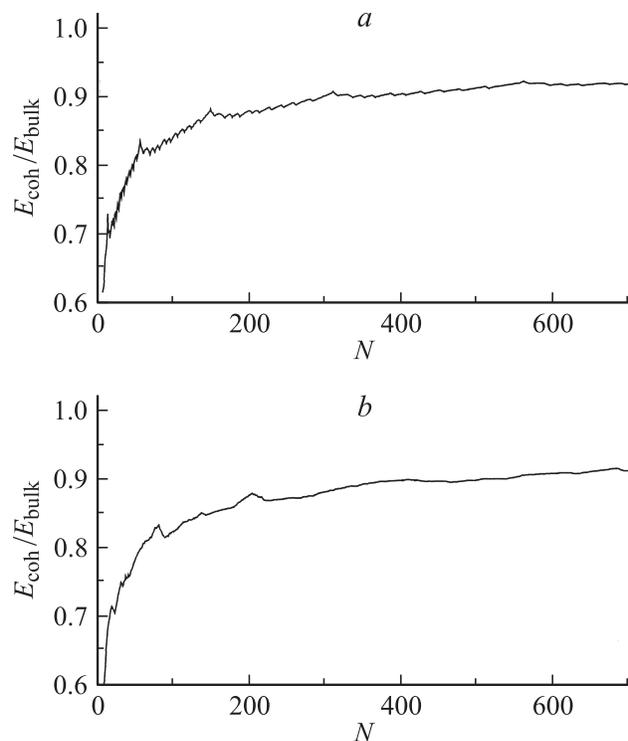
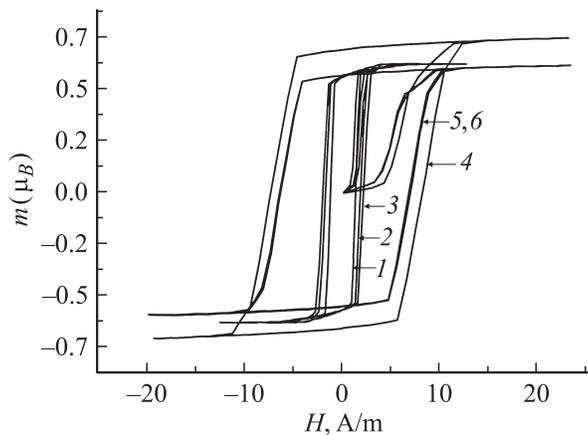


Рис. 1. Зависимость удельной энергии когезии наночастиц Ni от количества атомов  $N$  их образующих:  $a$  — частицы со структурой икосаэдра;  $b$  — частицы со структурой ГЦК.



**Рис. 2.** Кривые технического намагничивания наночастиц Ni:  $N = 147$  (1); 309 (2); 561 (3); 135 (4); 201, 675 (5, 6).

анизотропии наночастицы:

$$E_a = \frac{\mu_0 q^2}{8\pi N} \sum_{i \neq j}^N \left[ \frac{2}{r_{ij}} - \frac{1}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{r}|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}|} \right], \quad (1)$$

где  $\mu_0$  — магнитная постоянная,  $q = m/r$ ,  $\mathbf{r} = \mathbf{e}_m r$ ,  $\mathbf{e} = \mathbf{m}/m$ ,  $\mathbf{m}$  — атомный магнитный момент,  $m = 0.8\mu_B$  для  $N = 55.79$ ,  $m = 0.7\mu_B$  при  $N = 135$ ,  $m = 0.6\mu_B$  для  $N > 135$ ,  $r$  — атомный радиус,  $\mathbf{r}_{ij}$  — радиус-вектор между  $i$  и  $j$  атомами (атомы рассматриваем как жесткие сферы).

Отметим, что наночастицы с  $N < 55$  ( $N = 13.19$ ) мы не рассматриваем, так как их характерный размер  $5 \text{ \AA} < 10 \text{ \AA}$  — минимального размера ферромагнитной частицы [5].

В дальнейшем нам понадобится знание направлений осей легкого намагничивания (ОЛН) наночастиц, которые мы определим посредством минимизации (1). Осуществив вышеуказанную процедуру с помощью метода Монте-Карло с шагом по углу между ОЛН и осями декартовой системы координат  $\Delta\varphi = 1.7 \cdot 10^{-6} \text{ rad}$ , получим, что ОЛН для икосаэдрических частиц есть поворотная ось пятого порядка, проходящая через центр и противоположные вершины икосаэдра. В то же время поворотная ось второго порядка, которая проходит через центральные вершины ромбического додекаэдра, есть ОЛН для частиц со структурой ГЦК.

Также с помощью метода Монте-Карло был исследован процесс технического намагничивания наночастиц (рис. 2). Гистерезис определялся путем усреднения гистерезисов с различными направлениями ОЛН и внешнего магнитного поля  $\mathbf{H}$ . При этом шаг по углу между ОЛН и  $\mathbf{H}$  составлял  $1.7 \cdot 10^{-6} \text{ rad}$ , шаг по полю  $1.26 \cdot 10^{-4} \text{ A/m}$ . Отметим, что в силу малого изменения  $E_a$  с увеличением  $N$  кривые намагничивания соответствующих частиц на рис. 2 накладываются. Данный факт определяет актуальную область исследования наночастиц. Из представленного графика также

видно, что наночастицы со структурой икосаэдра являются более магнитомягкими материалами, чем наночастицы со структурой ГЦК. Так, отношение коэрцитивных полей для частиц с  $N_2 = 147$  и  $N_1 = 135.201$  составляет  $H_{c135}/H_{c147} \approx 6.2$ ,  $H_{c201}/H_{c147} \approx 5.4$ . Отношение соответствующих начальных дифференциальных восприимчивостей  $\chi_a = (dm/dH)|_{H \rightarrow 0}$ :  $\chi_{a135}/\chi_{a147} \approx 0.2$ ,  $\chi_{a201}/\chi_{a147} \approx 0.24$ . Другими словами, тип пространственной структуры (симметрия икосаэдрических частиц „выше“ симметрии ГЦК частиц) влияет на относительный характер магнитных свойств наночастиц и, как следствие, на различные свойства получаемых из частиц материалов.

Характерные значения коэрцитивных полей для частиц со структурой икосаэдра  $\sim 1.3\text{--}2.3 \text{ A/m}$  для частиц со структурой ГЦК  $\sim 7\text{--}8 \text{ A/m}$ . Такие величины полей являются достаточно высокими, поэтому выше рассмотренные наночастицы следует отнести к магнитомягким материалам. Особо следует указать на наличие скачка в значениях коэрцитивных полей при переходе от икосаэдрических частиц с  $N = 147$  и 561 к ГЦК частицам с  $N = 201$  и 675 соответственно. При этом размеры частицы близки к 15 и 15.6  $\text{ \AA}$  в первом случае и к 25 и 23  $\text{ \AA}$  во втором.

## Список литературы

- [1] Суздаев И.П., Суздаев П.И. // Успехи химии. 1999. Т. 70. С. 203–240.
- [2] Петров Ю.И. Кластеры и малые частицы. М.: Наука, 1986. 367 с.
- [3] Tomanek D., Mukherjee S., Bennemann K.H. // Phys. Rev. B. 1983. Vol. 28. N 2. P. 665–673.
- [4] Billas L., Chatelian A., Heer W. // Science. 1994. Vol. 265. P. 1682–1684.
- [5] Вонсовский С.В. Магнетизм. М.: Наука, 1971. 1032 с.