Письма в ЭЧАЯ. А. 2011. Т. 8, № 10. С. 33–37

СТРУКТУРНЫЙ ФАКТОР ФЕРРОЖИДКОСТЕЙ С ЦЕПОЧЕЧНЫМИ АГРЕГАТАМИ: ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Е. С. Пьянзина [1], *С. С. Канторович*

Уральский государственный университет им. А. М. Горького, Екатеринбург, Россия

В настоящей работе рассматривается структурный фактор феррожидкости с цепочечными агрегатами под влиянием внешнего магнитного поля. На основании равновесного распределения цепочек по размерам был вычислен структурный фактор как фурье-образ радиальной функции распределения. Проведенное сравнение предсказаний построенной теоретической модели с результатами компьютерных экспериментов показало качественное согласие данных. Наличие цепочек приводит к сильной анизотропии параллельной и перпендикулярной компонент структурного фактора.

In this paper we present the structure factor of ferrofluid with chain aggregates under the influence of an externally applied magnetic field. On the basis of the equilibrium chains distribution the structure factor is calculated as Fourier transform of the radial distribution function. An extensive comparison of the theoretical model to the results of computer simulations showed a qualitative agreement of the data. The existence of the chains leads to strong anisotropy of the structure factor for the cases parallel and perpendicular to the external magnetic field.

PACS: 47.65.Cb

Магнитные жидкости — это системы, состоящие из магнитных наночастиц, взвешенных в жидких носителях, обладающие сложной внутренней структурой. В них возможно образование различных микроструктур: цепочек из наночастиц, фрактальных кластеров, микрокапель и т. д. Для изучения микроструктуры феррожидкости существует множество различных методик, одной из которых является малоугловое нейтронное рассеяние (см., например, [1, 2]). Эти эксперименты позволяют изучить атомную и магнитную структуры магнитных дисперсных наночастиц и характер их взаимодействия, который, в свою очередь, определяет микроструктуру системы (более подробно см. в работе [1]). В рамках этой методики можно получить и так называемый структурный фактор, который представляет собой отношение интенсивности рассеяния нейтронов на образце $I(\mathbf{q})$ к интенсивности рассеяния на «идеальном» образце (без межчастичных корреляций) $I_0(\mathbf{q})$:

$$S(\mathbf{q}) = \frac{I(\mathbf{q})}{I_0(\mathbf{q})}, \tag{1}$$

где $\mathbf{q}$ — это волновой вектор. Величина $S(\mathbf{q})$ может быть получена также и в теоретическом исследовании как фурье-образ радиальной функции распределения $g(\mathbf{r})$ [3]:

$$S(\mathbf{q}) = 1 + \rho \int (g(\mathbf{r}) - 1)\, \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})\, d\mathbf{r}. \tag{2}$$

[1] E-mail: Elena.pyanzina@gmail.com

Здесь ρ — это числовая плотность магнитных частиц, а i — комплексная единица. Зная радиальную функцию распределения, можно вычислить структурный фактор. Таким образом, основной задачей в теории является вычисление функции $g(\mathbf{r})$ в зависимости от того, какие микроструктуры являются преобладающими в системе. Кроме того, наличие внешнего магнитного поля будет вносить анизотропию в систему, тем самым усложняя вычисление радиальной функции распределения.

Для умеренно концентрированных феррожидкостей с сильным магнитным диполь-дипольным взаимодействием (λ — интенсивность данного взаимодействия) преобладающими микроструктурами являются цепочки из магнитных частиц. Для таких систем было исследовано поведение структурного фактора для моно- и бидисперсных случаев в отсутствии внешнего магнитного поля [4]. Естественным продолжением этой работы является попытка учета влияния внешнего магнитного поля. Таким образом, целью данной работы было вычисление радиальной функции распределения и структурного фактора феррожидкости с цепочечными агрегатами в магнитном поле.

1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассматривается монодисперсная феррожидкость (все частицы имеют одинаковый размер), в которой могут образовываться цепочки различной длины. Для поиска распределения цепочек по размерам в термодинамическом равновесии используется метод минимизации функционала плотности свободной энергии системы. Данный функционал имеет следующий вид:

$$F(H) = F(H) + kT \sum_{n=1}^{\infty} g_n(H) \left[\ln \frac{g_n(H) v}{e} - \ln Q_n(H) \right], \tag{3}$$

где k — это константа Больцмана; T — температура; $g_n(H)$ — концентрация цепочек, состоящих из n частиц; $Q_n(H)$ — конфигурационный интеграл цепочки; v — объем частицы; H — внешнее магнитное поле. Основной сложностью здесь является вычисление конфигурационного интеграла, однако в [5] был представлен алгоритм для его вычисления. Первое слагаемое, входящее в функцию $F(H)$, представляет собой свободную энергию идеального парамагнитного газа частиц, второе слагаемое — свободную энергию смеси цепочек разной длины. Взаимодействие между цепочками не рассматривается, а в цепочке оно учитывается только между ближайшими соседями. Общее число частиц в системе остается постоянным:

$$\rho = \sum_{n=1}^{\infty} g_n(H) n. \tag{4}$$

Минимизируя функционал (3) при балансовом ограничении (4), можно получить выражение для равновесного распределения цепочек по размерам в зависимости от внешнего магнитного поля.

Магнитное поле вносит анизотропию в систему, поэтому естественным образом возникает два направления: параллельно и перпендикулярно полю. Как волновой вектор, так и радиус-вектор можно разложить на две проекции вдоль указанных направлений.

И структурный фактор теперь выглядит следующим образом:

$$S(q_{||}, q_{\perp}) = 1 + 2\pi\rho \int dr_{||} \int r_{\perp} dr_{\perp} [g(r_{||}, r_{\perp}) - 1] J_0(q_{\perp} r_{\perp}) \exp(-iq_{||} r_{||}). \qquad (5)$$

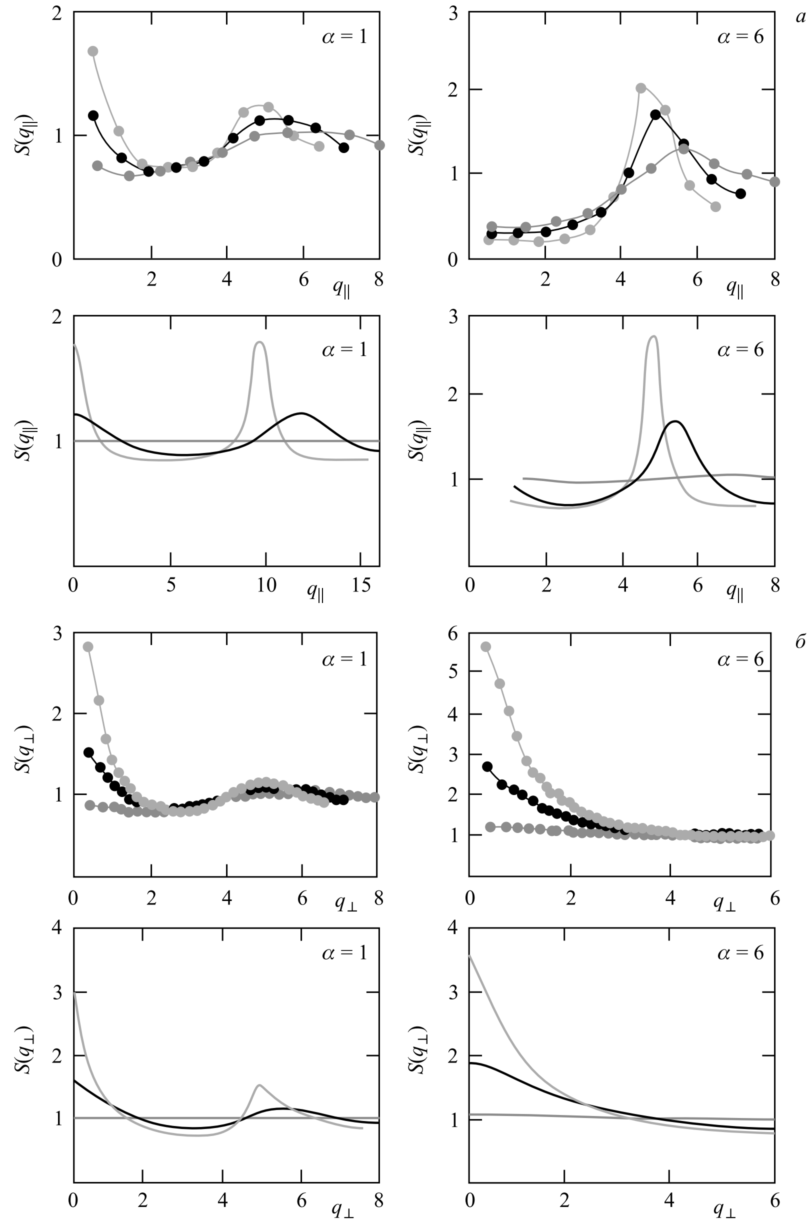
Основная сложность — это построение радиальной функции распределения. Попробуем сначала самый простой метод: будем считать, что радиальная функция представляет собой произведение двух функций, каждая из которых зависит только от одной переменной (радиус-векторы параллельны или перпендикулярны полю). Таким образом, построив две радиальные функции распределения, мы сможем получить два структурных фактора.

Начнем со случая параллельной компоненты. Цепочки выстраиваются вдоль направления поля, поэтому система, спроектированная на это направление, также является системой цепочек. Значит, можно подсчитать количество различных расстояний, встречающихся в цепочках. Характерное расстояние $\tilde{\sigma}$ будет зависеть не только от сил притяжения и отталкивания, но и от величины магнитного поля. Для его нахождения нужно вычислить среднюю проекцию радиус-вектора, соединяющего две частицы, на направление магнитного поля с усреднением положения магнитного момента второй частицы относительно первой и усреднением по всевозможным направлениям цепочки относительно внешнего магнитного поля. Зная данную проекцию (элементарный «кирпичик» цепочки) и распределение частиц по размерам, можно вычислить радиальную функцию распределения и структурный фактор. Для этого используется алгоритм, подобный тому, который рассматривается в [6]. Однако, в отличие от изотропного случая, свернуть суммы, входящие в $S(q)$, в единую формулу (см. [4]) не удается и приходится считать их напрямую. В случае перпендикулярной компоненты ситуация похожа на предыдущую, только характерное расстояние, которое встречается внутри цепочек, будет другим. Также предполагается, что цепочки при проектировании на плоскость, перпендикулярную полю, распределены равномерно.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ

Для описания магнитного поля используется параметр Ланжевена $\alpha = mH/kT$, являющийся отношением энергии взаимодействия магнитного момента частицы с полем к тепловой энергии. На рисунке приведены параллельная (*а*) и перпендикулярная (*б*) компоненты структурного фактора. Верхние графики — данные компьютерных экспериментов, нижние — теоретические данные.

Разные цвета линий и символов соответствуют разным значениям параметра магнитного диполь-дипольного взаимодействия (темно-серый — $\lambda = 2$, черный — $\lambda = 3$, светло-серый — $\lambda = 4$). Видно, что качественное согласие данных хорошее, однако количественного совпадения нет. И с увеличением поля совпадение данных улучшается. Это говорит о том, что выдвинутое предположение, что радиальную функцию распределения можно представить как произведение двух $g(r_{||}, r_{\perp}) = g(r_{||})g(r_{\perp})$, работает лишь в сильных полях. Однако уже на основе анализа данных компьютерных экспериментов можно сделать некоторые выводы о поведении структурного фактора феррожидкости с цепочками. Наличие цепочек приводит к анизотропии структурного фактора по полю и перпендикулярно полю. С увеличением интенсивности внешнего поля наблюдается рост



Параллельная (*а*) и перпендикулярная (*б*) компоненты структурного фактора. Верхние графики — данные компьютерных экспериментов, нижние — теоретические данные

пика структурного фактора для волновых векторов, параллельных полю, а для волновых векторов, перпендикулярных полю, — исчезновение пика. Это можно объяснить следующим образом. При усилении интенсивности поля цепочки удлиняются и количество пар частиц увеличивается, что приводит к росту пика. В то же время цепочка «вытягивается» вдоль поля и при проектировании ее на плоскость, перпендикулярную полю, характерное расстояние в цепочке стремится к нулю. Степенное поведение в области малых q может служить индикатором того, какие структуры преобладают в системе.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ДАЛЬНЕЙШИЕ ПЛАНЫ

В данной работе был представлен начальный этап исследования структурного фактора феррожидкости с цепочечными агрегатами в магнитном поле. Структурный фактор вычислялся как фурье-образ радиальной функции распределения. Если рассмотреть данную функцию как произведение двух функций, зависящих от параллельной и перпендикулярной (относительно направления поля) компонент радиус-вектора соответственно, то можно вычислить два структурных фактора. Однако проведенное сравнение полученных данных с результатами компьютерных экспериментов показало, что такое теоретическое приближение работает только для сильных полей. Поэтому в настоящее время разрабатывается алгоритм вычисления радиальной функции распределения, учитывающей перекрестные связи.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 08-02-00647-а), гранта АВЦП № 2.1.1/1535, ФАНИ г/к 02.740.11.0202, гранта CRDF № PG07-005-02, гранта Президента для молодых кандидатов наук (МК-6415.2010.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Авдеев М. В., Аксенов В. Л.* // УФН. 2010. Т. 180, № 10. С. 1009.
2. *Bica D. et al.* // J. Magn. Magn. Mater. 2007. V. 311, No. 1. P. 17.
3. *Балеску Р.* Равновесная и неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1987.
4. *Pyanzina E. et al.* // Mol. Phys. 2009. V. 107, No. 4–6. P. 571.
5. *Mendelev V. S., Ivanov A. O.* // Phys. Rev. E. 2004. No. 70. P. 051502.
6. *Allen M. P., Tildesley D. J.* // Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon, 1987.