

СТРУКТУРНЫЙ ФАКТОР РАССЕЯНИЯ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Е. В. Крутикова¹, Е. А. Елфимова

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

Данная работа посвящена разработке теоретической модели, позволяющей определить парную функцию распределения и структурный фактор магнитных жидкостей при учете полидисперсности частиц. Магнитная жидкость моделировалась системой бидисперсных твердых дипольных сфер. Проведено сравнение результатов, полученных на основе монодисперсной и бидисперсной моделей. Учет полидисперсности частиц сказывается на поведении структурного фактора рассеяния: величина первого пика уменьшается в сравнении с монодисперсным случаем, график становится более размытым.

This work is devoted to the development of the theoretical model, permitting one to find the pair correlation function and the structure factor of magnetic fluids taking into account the polydispersity of magnetic particles. The magnetic fluid was modeled as a system of bidisperse dipolar hard spheres. We compared the results obtained on the basis of monodisperse and bidisperse models. The consideration of the particle polydispersity affects the behavior of the structure factor: the value of the first peak decreases and becomes broader in comparison to the monodisperse case.

PACS: 47.65.Cb

Магнитные жидкости — это системы, представляющие собой устойчивые коллоидные взвеси частиц ферро- и ферритмагнитных материалов в жидких носителях. Характерные значения диаметров магнитных частиц порядка ~ 10 нм. Магнитные жидкости используются в технических изделиях для герметизации вводов вращательного и более сложных видов движения; в технологических процессах, где требуется поддержание глубокого вакуума; в производстве полупроводников, при напылении, металлизации; в рентген-аппаратах, электронных микроскопах, вакуумных печах, маховичных двигателях, масс-спектрометрах и т. п. Актуальным в настоящее время является внедрение магнитных жидкостей в медицинскую сферу. Разрабатываются нетрадиционные методы магнитоуправляемой транспортировки лекарств, новые способы медицинской диагностики и лечения — раннее определение опухолевых, инфекционных и кардиологических заболеваний при помощи визуализации патогенных областей, в которых происходит накопление вводимых в организм феррочастиц; магнитная очистка биотканей от загрязнений и токсинов; терапия раковых и ряда других заболеваний при помощи создаваемой магнитным полем локальной гипертермии. Благодаря своему широкому применению магнитные жидкости сейчас активно синтезируются и изучаются во многих странах мира.

Информацию о внутренней структуре магнитных жидкостей можно получить методами электронного, электромагнитного и нейтронного рассеяний. Измеряя интенсивность

¹E-mail: Ekaterina.Krutikova@usu.ru

рассеяния при различных углах, можно определить величину, называемую структурным фактором рассеяния [1, 2]. Структурный фактор является фурье-образом парной корреляционной функции, описывающей межчастичные корреляции. Присутствие многочастичных корреляций оказывает существенное влияние на важнейшие макроскопические характеристики, например осмотическое давление, сжимаемость, внутреннюю и свободную энергию и им подобные. Поэтому возникает необходимость создания теоретической основы, которая позволит определить взаимосвязь между межчастичными корреляциями в магнитных жидкостях и экспериментально наблюдаемым рассеянием. Данная работа посвящена разработке такой теоретической модели при учете полидисперсности частиц.

Исследование многокомпонентных систем является весьма тяжелой численной задачей. Однако вносимые полидисперсностью особенности поведения магнитных жидкостей могут быть отслежены уже на бинарной системе. В рамках разработанной модели был осуществлен переход от непрерывного распределения феррочастиц по размерам в реальных магнитных жидкостях к модельной бидисперсной системе. Магнитная жидкость моделировалась системой бидисперсных твердых дипольных сфер с диаметрами частиц d_s и d_l и соответствующими магнитными моментами \mathbf{m}_s и \mathbf{m}_l . Взаимодействия между частицами i и j описывались следующими потенциалами:

— потенциалом взаимодействия твердых сфер

$$U_{hs}(r) = \begin{cases} \infty, & r < d, \\ 0, & r > d, \end{cases}$$

— потенциалом диполь-дипольного взаимодействия

$$U_d(ij) = - \left[3 \frac{(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r})}{r^5} - \frac{(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)}{r^3} \right],$$

где r — расстояние между центрами частиц i и j .

Межчастичные корреляции в магнитных жидкостях описываются парной функцией распределения $g(\mathbf{r}, \lambda)$, выражающей плотность вероятности нахождения двух случайно выбранных частиц на заданном расстоянии. В общем случае $g(\mathbf{r}, \lambda)$ зависит от вектора расстояния между центрами первой и второй частиц \mathbf{r} и от параметра диполь-дипольного взаимодействия λ , отношения магнитной энергии пары контактирующих частиц к тепловой. В отсутствие внешнего магнитного поля моделируемая система является изотропной, следовательно, парная функция распределения не зависит от направления вектора \mathbf{r} , а определяется только расстоянием между центрами двух частиц. В рамках бидисперсной модели, где все частицы формально делятся на два класса (частицы с разными диаметрами, условно «мелкие» и «крупные»), необходимо отдельно рассматривать характерные расстояния между центрами частиц — r_{ss} («мелкая»–«мелкая»), r_{ll} («крупная»–«крупная») и r_{sl} («мелкая»–«крупная») — и строить соответствующие им три различных составляющих парной функции распределения: $g(r_{ss}, \lambda_{ss})$ определяет парные взаимодействия между «мелкими» частицами, $g(r_{ll}, \lambda_{ll})$ характеризует парные взаимодействия между «крупными» частицами, $g(r_{sl}, \lambda_{sl})$ описывает парные взаимодействия между «крупной» и «мелкой» частицами. Просуммировав эти три компоненты с весовыми коэффициентами, зависящими от доли частиц каждого класса в общем объеме феррочастиц, получим парную функцию распределения для бидисперсной

магнитной жидкости:

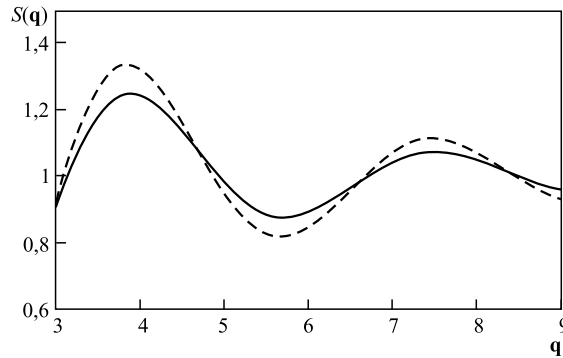
$$g(r, \lambda) = \kappa_{ss}g_{ss}(r_{ss}, \lambda_{ss}) + \kappa_{sl}g_{sl}(r_{sl}, \lambda_{sl}) + \kappa_{ll}g_{ll}(r_{ll}, \lambda_{ll}),$$

где $\kappa_{ss}, \kappa_{sl}, \kappa_{ll}$ — комбинаторные коэффициенты, зависящие от концентраций и молярных долей частиц в системе. Метод расчета парных функций распределения $g_{ss}(r_{ss}, \lambda_{ss})$, $g_{sl}(r_{sl}, \lambda_{sl})$, $g_{ll}(r_{ll}, \lambda_{ll})$ подробно описан в работах [3, 4] для случая моделирования частиц монодисперсными дипольными мягкими/твердыми сферами.

Парная функция распределения содержит в себе полную информацию о межчастичных корреляциях в магнитной жидкости. Применяя преобразование Фурье к парной корреляционной функции $(g(r, \lambda) - 1)$, можно вычислить структурный фактор рассеяния

$$S(\mathbf{q}) = 1 + n \int (g(r, \lambda) - 1) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}},$$

где \mathbf{q} — волновой вектор. В рамках бидисперсной модели структурный фактор рассеяния содержит вклады в парную корреляционную функцию от всех возможных парных взаимодействий частиц.



Структурный фактор рассеяния $S(\mathbf{q})$ для модельных моно- (штриховая кривая) и бидисперсной (сплошная) систем твердых дипольных сфер

На рисунке показан структурный фактор, рассчитанный для двух модельных систем — монодисперсной (штриховая кривая) и бидисперсной (сплошная кривая). В бидисперсной системе основная фракция состояла из частиц с диаметром магнитного ядра $d_s = 7$ нм и молярной долей $\nu_s = 0,9$, вторая фракция состояла из небольшого числа частиц, имеющих диаметр $d_s = 12$ нм и молярную долю $\nu_s = 0,1$. Частицы предполагались магнетитовыми, объемная концентрация магнитной фазы принималась равной 0,05, система рассматривалась при комнатной температуре. В монодисперсной системе все частицы имели размер 12 нм, объемная доля магнетитовой фазы — 0,05, температура, при которой изучалась система, — комнатная.

Учет полидисперсности частиц сказывается на поведении структурного фактора рассеяния: величина первого пика уменьшается в сравнении с монодисперсным случаем, график становится более размытым.

Таким образом, построена теоретическая модель, позволяющая рассчитать парную функцию распределения и структурный фактор рассеяния для полидисперсных магнитных жидкостей в рамках бидисперсного приближения. Проведено сравнение результатов,

полученных на основе монодисперсной и бидисперсной моделей. Следующим шагом работы будет сравнение построенной теоретической бидисперсной модели с результатами физического и компьютерного экспериментов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента МК-2221.2011.2 и МОН г/к 02.740.11.0202.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bica D. et al.* // *J. Magn. Magn. Mater.* 2007. V. 311, No. 1. P. 17.
2. *Авдеев М. В., Аксенов В. Л.* // *УФН.* 2010. Т. 180, № 10. С. 1009.
3. *Елфимова Е. А., Иванов А. О.* Парные корреляции в магнитных нанодисперсных жидкостях // *ЖЭТФ.* 2010. Т. 137, вып. 5. С. 1–13.
4. *Cerda J. et al.* Behavior of Bulky Ferrofluids in the Diluted Low Coupling Regime: Theory and Simulation // *Phys. Rev. E.* 2010. V. 81. P. 011501–011511.