

УДК 538.955; 537.62; 537.621

О РЕСТАВРАЦИИ МАГНИТНОЙ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ СУПЕРПАРАМАГНЕТИКА

В. И. Николаев, О. П. Третьякова

(кафедра общей физики)

E-mail: tretyakova_op@mail.ru

Обсуждаются результаты применения метода редукции измерений для реставрации магнитной фазовой диаграммы для системы суперпарамагнитных частиц различной дисперсности. Показано, что применение этого метода позволяет существенно уменьшить влияние разброса размеров частиц и установить границы существования различных магнитных фаз на диаграмме.

Необычные физико-химические свойства наночастиц различной дисперсности и состава находят, как известно, широкое практическое применение. Одно из определяющих условий прогресса в разработке нанотехнологий — понимание механизмов формирования свойств наночастиц. Между тем многие вопросы, касающиеся именно понимания физических причин, определяющих особенности свойств наночастиц, до сих пор остаются без ответа. Так, к числу почти не исследованных относятся вопросы о характере температурно-полевых магнитных фазовых переходов в системах наночастиц и даже о самом их существовании. Едва ли не главная причина этого связана с большим разбросом важнейших характеристик всех реальных систем наночастиц, таких как состав наночастиц, их форма и размер.

В такой ситуации весьма эффективными могут оказаться современные математические методы обработки экспериментальных данных, основанные на формализме «реставрации и повышения качества изображений» [1]. С их помощью можно преобразовать исходные экспериментальные данные к такому виду, как если бы они соответствовали существенно лучшим условиям опыта, чем это было в действительности.

Покажем это на конкретном примере задачи реставрации магнитной фазовой диаграммы суперпарамагнитных частиц. Будем считать, как обычно, что в данном случае эта диаграмма представляет собой совокупность областей, разделенных температурно-полевыми границами между различными магнитными фазами. В отсутствие достаточно достоверных экспериментальных данных о магнитных фазовых переходах в каких-либо реальных системах суперпарамагнитных частиц воспользуемся возможностью описания температурно-полевых зависимостей намагниченности ансамбля суперпарамагнитных частиц в рамках достаточно реалистичной модели — модели Ланжевена, дополненной теорией молекулярного поля [2]. Для дальнейшего важно заметить, что применение этой модели дало

возможность предсказать существование полевого перехода «парамагнетизм — индуцированный суперпарамагнетизм» [3] и температурного перехода «парамагнетизм — возвратный суперпарамагнетизм» [4].

На рис. 1 и 2 показаны рассчитанные в рамках упомянутой модели полевые и температурные зависимости удельной намагниченности $\sigma(T, H)$, иллюстрирующие эти два магнитных фазовых перехода (M_0 — удельная намагниченность частиц при абсолютном насыщении). Штриховыми линиями показаны на рисунках зависимости, соответствующие случаю одинаковых частиц с «номинальным» магнитным моментом $N_0\mu_B$ при $N_0 = 500$ (μ_B — магнетон Бора). «Экспериментальные» же зависимости (они показаны точками) соответствуют логарифмически-нормальному закону распределения наночастиц $f(N)$ со средним «размером» $\langle N \rangle = 500$ и дисперсией $\Delta = 0.5$. Уровень шума выбран равным 5%. В расчетах были учтены два механизма влияния размера частиц на их точку Кюри [4]: первый механизм основан на обрыве обменных связей у поверхностных атомов [5], второй — на ангармонизме их колебаний (и связанной с ним аномалией теплового расширения [6]). Как и в [4], для расчета температурной зависимости точки Кюри наночастиц использовалась известная кривая Бете–Слетера [7], описывающая зависимость обменного интеграла от межатомных расстояний. «Профиль» температурной зависимости коэффициента теплового расширения частиц $\alpha(T)$ был взят таким же, как у обычных частиц железа, причем значение $\alpha(300 \text{ К})$ принималось равным $5 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$. При этих условиях температура Кюри наночастиц, соответствующая 0 К, оказывается равной примерно 100 К. (Сплошные линии на рис. 1 и рис. 2 соответствуют результатам реставрации, о которых речь пойдет ниже.)

Как видно из рис. 1 и 2, разброс частиц по «размерам» лишает возможности идентифицировать оба обсуждаемых магнитных фазовых перехода

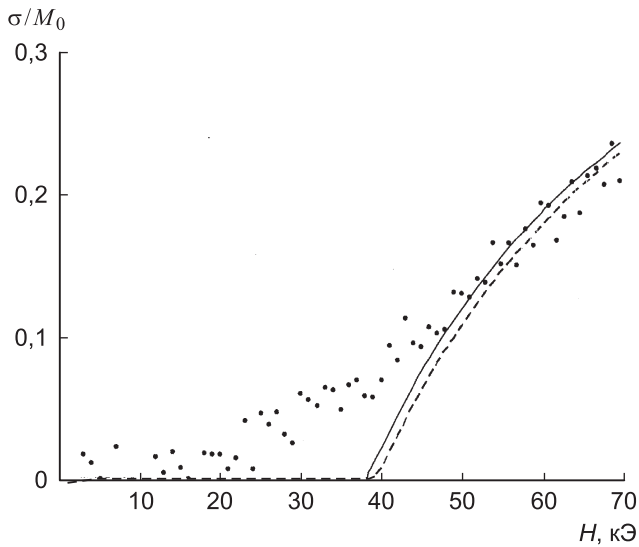


Рис. 1. Зависимость намагниченности σ/M_0 системы наночастиц от напряженности магнитного поля H при $T = 160$ К

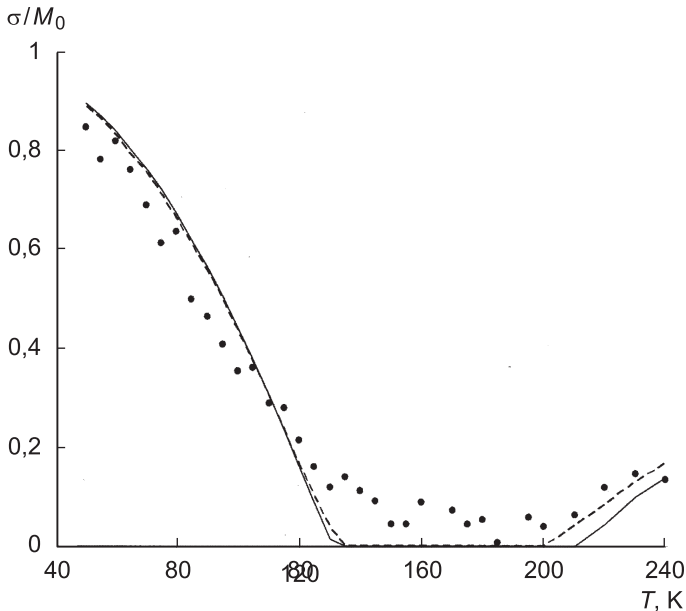


Рис. 2. Температурная зависимость намагниченности σ/M_0 системы наночастиц в поле $H = 20$ кЭ

в системе наночастиц. Более того, даже температурный переход «суперпарамагнетизм — парамагнетизм» настолько «размыт», что теряет смысл само понятие точки Кюри для этого перехода. Налицо, таким образом, необходимость либо существенно улучшения «условий опыта», либо достаточно корректной математической обработки имеющихся «экспериментальных» данных.

Выбирая вторую из этих возможностей, воспользуемся методом редукции измерений [8], в рамках которого удельную намагниченность σ системы наночастиц можно представить в виде

$$\xi = A\sigma + \nu,$$

где ξ — искаженный шумом ν выходной сигнал «магнитометра» A , на который поступает сигнал σ от исследуемой системы наночастиц. В данном случае прибору A соответствует линейный оператор, определяемый функцией распределения $f(N)$. Следовательно, мы приходим к необходимости решения двух вариационных задач, в которых в роли весовой функции выступает логарифмически-нормальное распределение $f(N, \langle N \rangle, \Delta)$, а величины $\xi(H_i)$ и $\xi(T_j)$ — «экспериментальные» значения намагниченности системы частиц в i -м магнитном поле H_i и при температуре T_j . Результатом решения этих двух задач должны быть каждый раз значения $\langle N \rangle$ и Δ , соответствующие условиям «эксперимента», а значит, и возможность внесения в «экспериментальные» данные поправок, связанных с устранением влияния разброса размеров частиц.

Как видно из рис. 3, метод редукции измерений действительно позволяет провести реставрацию магнитной фазовой диаграммы системы суперпарамагнитных частиц. Сплошной линией и точками (с соответствующей температурной погрешностью) показаны на рисунке решения задачи реставрации. Обращает внимание устойчивость решения. Так, значения среднего размера $\langle N \rangle$ оказались в пределах от 470 до 550 (с дисперсией Δ от 0.43 до 0.58), что достаточно хорошо согласуется с выбранным для «эксперимента» значением $\langle N \rangle = 500$ (и $\Delta = 0.5$).

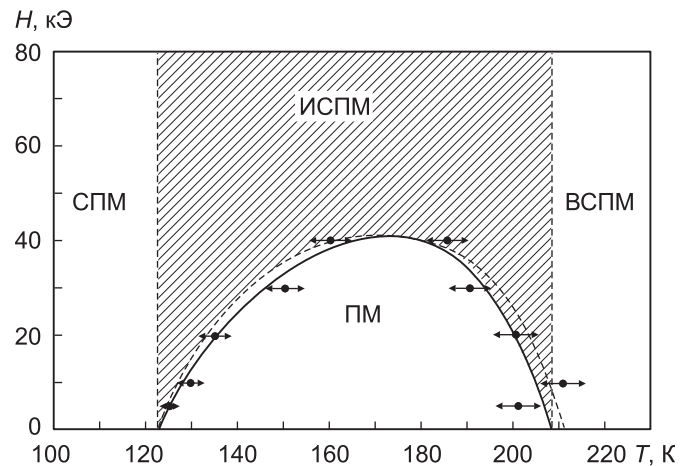


Рис. 3. Температурно-полевая фазовая диаграмма системы суперпарамагнитных частиц. Штриховая линия соответствует случаю одинаковых частиц с $N_0 = 500$. (СПМ, ПМ, ИСПМ и ВСПМ — соответственно области суперпарамагнетизма, парамагнетизма, индуцированного суперпарамагнетизма и возвратного суперпарамагнетизма.)

Изложенные выше результаты исследований магнитной фазовой диаграммы системы суперпарамагнитных частиц дают основание надеяться на то, что с помощью методов магнитометрии в сочетании

с современными методами обработки экспериментальных данных могут быть наконец обнаружены магнитные фазовые переходы «парамагнетизм — индуцированный суперпарамагнетизм» и «парамагнетизм — возвратный суперпарамагнетизм».

Литература

1. Николаев В.И., Третьякова О.П. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2006. № 1. С. 73 (Moscow University Phys. Bull. 2006. No. 1. P. 73).
2. Авраамов Ю.С., Белова В.М., Николаев В.И., Стучебников В.М. // ФТТ. 1974. **16**, № 10. С. 3180.
3. Николаев В.И., Бушина Т.А., Ким Енг Чан // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1996. № 4. С. 107 (Moscow University Phys. Bull. 1996. No. 4. P. 93).
4. Николаев В.И., Род И.А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2006. № 6. С. 63 (Moscow University Phys. Bull. 2006. No. 6. P. 63).
5. Николаев В.И., Шипилин А.М. // ФТТ. 2000. **42**, № 1. С. 109.
6. Николаев В.И., Шипилин А.М. // ФТТ. 2003. **45**, № 6. С. 1029.
7. Бозорт Р. Ферромагнетизм. М., 1956.
8. Кириллов К.В., Чуличков А.И. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1999. № 2. С. 62 (Moscow University Phys. Bull. 1999. No. 2. P. 62).

Поступила в редакцию
17.09.07