

ФЕРРОМАГНИТНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В СИСТЕМЕ НЕСФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ

С.И.Денисов, проф.; В.Ф.Нефедченко, асп.

Совсем недавно в работах [1,2] экспериментально было доказано существование ферромагнитного упорядочения в ансамблях магнитных моментов наночастиц, распределенных случайным образом в немагнитной матрице. Существуют численные [3] и аналитические [4,5] результаты, которые показывают, что причиной ферромагнитного упорядочения может служить магнитное дипольное взаимодействие между наночастицами. Увеличенное значение остаточной намагниченности и коэрцитивности системы наночастиц, распределенных в простой кубической решетке с концентрацией, близкой к порогу перколяции, также свидетельствует о ферромагнитном упорядочении в таких системах [6]. В теории ферромагнитного упорядочения магнитных моментов наночастиц [7], построенной в приближении среднего локального поля, учтено влияние как анизотропии распределения наночастиц в пространстве, так и их размера. Однако форма наночастиц предполагалась сферической, что ограничивает применимость этой теории для интерпретации экспериментальных данных. Цель данной работы – обобщить развитую в [7] теорию на случай несферических наночастиц.

Рассмотрим ансамбль одноосных ферромагнитных наночастиц, центры которых случайным образом распределены по узлам тетрагональной решетки. Будем предполагать, что периоды решетки в плоскости xy и вдоль тетрагональной оси (ось z) соответственно равны d_1 и d_2 ; каждый узел решетки занят наночастицей с вероятностью p ; частицы имеют форму эллипсоидов с полуосями R (в плоскости xy) и $R + \delta$ (вдоль оси z); оси легкого намагничивания наночастиц параллельны оси z , а поле анизотропии H_a существенно превышает среднее локальное поле, действующее на каждую частицу со стороны остальных. Согласно [7] в этом случае среднее локальное поле имеет только z -компоненту, которую, поместив начало координат в центр произвольно выбранной частицы, представим в виде

$$H = \left\langle \sum_i \frac{m_{iz}}{V^2} \iint_V \frac{3(r_{iz} + \rho_z - \rho'_z)^2 - |\mathbf{r}_i + \mathbf{e} - \mathbf{e}'|^2}{|\mathbf{r}_i + \mathbf{e} - \mathbf{e}'|^5} d\mathbf{e} d\mathbf{e}' \right\rangle. \quad (1)$$

Здесь $V = 4\pi R^3(1 + \varepsilon)/3$ – объем наночастицы; $\varepsilon = \delta/R$; m_{iz} – z -компонента i -го магнитного момента \mathbf{m}_i ; \mathbf{r}_i ($\neq 0$) – радиус-вектор центра i -й наночастицы, интегрирование ведется по объему наночастиц, а черта и угловые скобки обозначают термодинамическое усреднение и усреднение по допустимым размещениям наночастиц соответственно.

При $|\varepsilon| \ll 1$ в выражении (1) двойной интеграл (деленный на V^2) с точностью до членов первого порядка малости по ε равен

$$\frac{3r_i^2 - |r_i|^2}{|r_i|^5} \left[1 + \varepsilon \frac{24R^2}{5|r_i|^2} \right], \quad (2)$$

поэтому выражение для среднего локального поля, действующего на произвольную наночастицу, принимает вид

$$H = n m_z \xi S(\gamma, \xi), \quad (3)$$

где $n = p/d_1^2 d_2$ - концентрация наночастиц; $m_z = \langle m_{iz} \rangle$ - среднее значение z -й компоненты магнитного момента эллипсоидальной частицы; $\xi = d_2/d_1$ - параметр, характеризующий анизотропию распределения частиц (случай $\xi = 1$ соответствует изотропному распределению); $\gamma = 24\varepsilon R^2/5d_1^2$,

$$S(\gamma, \xi) = S_{5/2}(\xi) + \gamma S_{7/2}(\xi),$$

$$S_r(\xi) = \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{2\xi^2 n_3^2 - n_1^2 - n_2^2}{(n_1^2 + n_2^2 + \xi^2 n_3^2)^r}, \quad (4)$$

и n_1, n_2, n_3 - целые числа, одновременно не равные нулю.

На рисунке 1 показаны зависимости функций $S_{5/2}(\xi)$ (кривая а), $S_{7/2}(\xi)$ (кривая б) и $f(\xi) = -S_{5/2}(\xi)/S_{7/2}(\xi)$ (кривая с) от параметра анизотропии ξ .

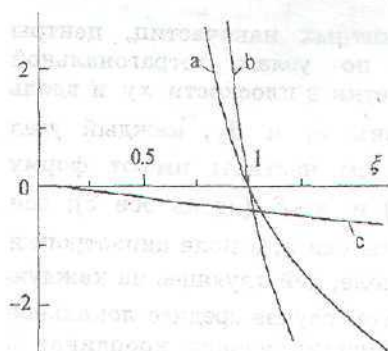


Рисунок 1

Согласно (3) ферромагнитное упорядочение в ансамбле магнитных моментов эллипсоидальных наночастиц может происходить, если $S(\gamma, \xi) > 0$, или, что эквивалентно, $\gamma > f(\xi)$ для $0 < \xi < 1$ и $\gamma < f(\xi)$ для $\xi > 1$. Параметры γ и ξ должны удовлетворять также условиям $d_1 \geq 2R$ и $d_2 \geq 2R(1 + \varepsilon)$, обеспечивающим непересекаемость наночастиц. Это означает, что при фиксированных ε и ξ параметр γ может изменяться в интервале $(0, \varphi(\varepsilon, \xi))$, если $\varepsilon > 0$, и в интервале $(\varphi(\varepsilon, \xi), 0)$, если $\varepsilon < 0$, где

$$\varphi(\varepsilon, \xi) = \begin{cases} \frac{6}{5} \frac{\varepsilon}{(1 + \varepsilon)^2} \xi^2 & (0 < \xi < 1 + \varepsilon), \\ 6\varepsilon/5 & (\xi \geq 1 + \varepsilon). \end{cases} \quad (5)$$

Таким образом, можно утверждать, что в ансамблях вытянутых ($\varepsilon > 0$) наночастиц ферромагнитное упорядочение может существовать, если параметры γ и ξ попадают в область, определяемую условиями $0 < \gamma \leq \varphi(\varepsilon, \xi)$ и $0 < \xi < 1$ (на рис.2 такая область для $\varepsilon = 0.2$ обозначена I). С уменьшением

ε эта область уменьшается, и в предельном случае ($\varepsilon = 0$) наночастиц вырождается в отрезок $0 < \xi < 1$. Отметим, что отсутствие ферромагнитного упорядочения в случае $\xi = 1$ согласуется с известным результатом Латтинжера и Тиссы [8], согласно которому диполи (магнитные или электрические), помещенные в узлах простой кубической решетки, ориентированы антипараллельно.

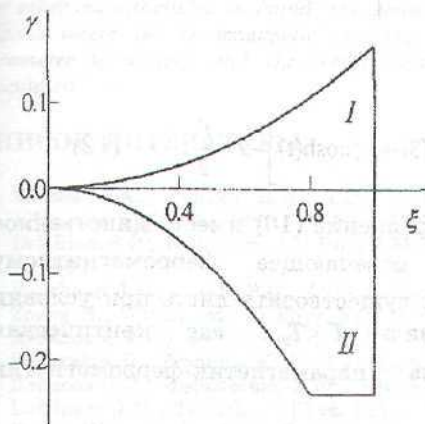


Рисунок 2

В случае сплюснутых ($\varepsilon < 0$) наночастиц ферромагнитное упорядочение формально может существовать в двух областях плоскости $\gamma\xi$. Первая область определяется условиями $\max(f(\xi), \varphi(\varepsilon, \xi)) < \gamma < 0$ и $0 < \xi < 1$ и существует при любом значении величины ε (на рис.2 такая область для $\varepsilon = -0.2$ обозначена II). Вторая область определяется условиями $\varphi(\varepsilon, \xi) \leq \gamma < f(\xi)$ и $\xi > 1$ и появляется только при $\varepsilon < 5f(1)/6 \approx -0.34$. При получении выражения (2) использовалось условие $|\varepsilon| \ll 1$,

поэтому вопрос о существовании второй области требует специального рассмотрения.

В рамках приближения среднего локального поля стационарная функция распределения $P(\theta)$ для полярного угла θ магнитного момента эллипсоидальной наночастицы, записанная с точностью до членов первого порядка малости по ε , имеет вид

$$P(\theta) = P_0(\theta) + \varepsilon a P_0(\theta) [\cos^2 \theta + 3t \cos \theta + t' \cos \theta - I(a, t, t') / C(a, t)]. \quad (6)$$

Здесь $P_0(\theta) = \sin \theta \exp(a \cos^2 \theta + t \cos \theta) / C(a, t) \quad (7)$

– стационарная функция распределения в случае сферических наночастиц [9],

$$I(a, t, t') = \int_{-1}^1 (x^2 + 3tx + t'x) \exp(ax^2 + tx) dx, \\ C(a, t) = \int_{-1}^1 \exp(ax^2 + tx) dx, \quad (8)$$

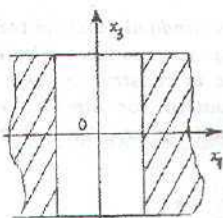
$a = H_a m_0 / 2kT$, $t = 3T_0 \mu_0 / T$, $t' = 3T'_0 \mu_0 / T$, $T_0 = nm_0^2 \xi S_{7/2}(\xi) / 3k$, $T'_0 = nm_0^2 \xi \alpha S_{7/2}(\xi) / 3k$, $\alpha = 24R^2 / 5d_1^2$, $\mu_0 = m_{0z} / m_0$, а m_0 и m_{0z} – модули магнитного момента и z -компоненты магнитного момента сферической наночастицы (при $\varepsilon = 0$) соответственно; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура. Параметр порядка рассматриваемого ансамбля эллипсоидальных наночастиц определим как $\mu = m_z / m$. Полагая, что

$$\mu = \mu_0 + \varepsilon \mu_1, \quad (9)$$

используя определение

функции $X_n \in H$ на L , [3], и, кроме того, X_n раскладываются в ряды Фурье по координате x_3 на $[-h, h]$. Граничные условия на основаниях заданы в виде

$$\sigma_{13} = \sigma_{23} = 0, \quad u_3 = 0 \quad (x_3 = \pm h). \quad (1)$$



Краевые условия на L представим следующим образом:

$$\begin{aligned} (\sigma_{11} + \sigma_{22})^{\pm} - e^{2i\psi} (\sigma_{22} - \sigma_{11} + 2i\sigma_{12})^{\pm} &= \\ &= 2(N - iT)^{\pm}, \\ \operatorname{Re}[e^{-i\psi} (\sigma_{13} + i\sigma_{23})^{\pm}] &= \pm Z_n^{\pm}, \end{aligned} \quad (2)$$

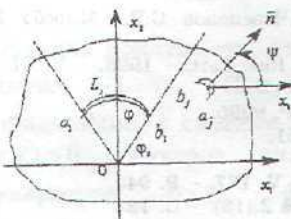


Рисунок 1

где ψ – угол между положительной нормалью к левому берегу разреза (при движении от его начала a_1 к концу b_1) и осью $0x_1$, верхний знак относится к левому берегу.

Для этого случая привлечем интегральные представления, полученные в [2], корректные в том смысле, что они обеспечивают непрерывность вектора напряжения и существование скачка вектора перемещения на L , ($j=1,2,\dots,k$) и

исключают появление расходящихся интегралов для вектора напряжения:

$$\begin{aligned} \theta_k(z) &= \int_L p_k^{(0)}(\zeta) K_0(\gamma_k r) dS + \frac{2}{\gamma_k} \operatorname{Re} \int_L q_k^{(0)}(\zeta) \frac{\partial}{\partial \zeta} K_0(\gamma_k r) d\zeta, \\ i\varphi_k(z) - \psi_k(z) &= \int_L (ip_k^{(3)}(\zeta) - p_k^{(2)}(\zeta)) K_0(\gamma_k r) dS + \frac{2i}{\gamma_k} \int_L \bar{q}_k^{(2)}(\zeta) \frac{\partial}{\partial \zeta} K_0(\gamma_k r) d\bar{\zeta} + \\ &+ \frac{1}{2\gamma_k} \int_L p_k^{(1)}(\zeta) r K_1(\gamma_k r) dS + \frac{1}{\gamma_k^2} \operatorname{Re} \int_L q_k^{(1)}(\zeta) \frac{\partial}{\partial \zeta} (r K_1) d\zeta, \quad r = |\zeta - z|, \end{aligned} \quad (3)$$

где $K_n(\gamma_k r)$ – функции Макдональда порядка n ; dS – элемент дуги контура L ; плотности $p_k^{(i)}(\zeta)$, $q_k^{(i)}(\zeta)$ выражаются через скачки перемещений u_k ($i=1,2,3$).

В этих представлениях плотности выражаются через физические величины – скачки "перемещений" на L по формулам:

$$\begin{aligned} p_k^{(1)} &= \frac{\gamma_k^2}{\pi(1+\sigma)} [U_k^{(1)}], \quad p_k^{(2)} - ip_k^{(3)} = -\frac{1}{2\pi\sigma} [U_k^{(2)} - iU_k^{(3)}], \\ \pi(1+\sigma)q_k^{(1)} &= i\gamma_k^2 [U_{3k}] + \gamma_k e^{-i\psi} \frac{d}{ds} \bar{q}_k, \\ \pi\sigma q_k^{(2)} &= -\frac{1}{2} [U_{3k}] + \frac{ie^{-i\psi}}{\gamma_k} \frac{d}{ds} \bar{q}_k, \quad q_k = [U_{1k} - iU_{2k}]. \end{aligned} \quad (4)$$

Перемещение представляем в виде рядов Фурье:

$$\varphi(1) = \frac{1}{n} \sum_{\nu=1}^n (-1)^{\nu+1} \varphi(\beta_{\nu}) \operatorname{ctg} \frac{2\nu-1}{4n} \pi, \quad (9)$$

$$\varphi(-1) = \frac{1}{n} \sum_{\nu=1}^n (-1)^{\nu} \varphi(\beta_{\nu}) \operatorname{tg} \frac{2\nu-1}{4n} \pi.$$

Целью расчета являются относительные коэффициенты интенсивности напряжений K , в вершинах трещины, которые можно определить по формулам [1]:

$$K_I - iK_{II} = -\frac{\mu\sigma}{\sigma+1} \sqrt{\frac{\pi}{s'(\mp 1)}} \sum_{k=0}^{\infty} (\varphi_1^{(k)}(\mp 1) - i\varphi_2^{(k)}(\mp 1)) \cos \frac{\pi k x_3}{h},$$

$$K_{III} = -\frac{\mu h}{2} \sqrt{\frac{\pi}{s'(\mp 1)}} \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_3^{(k)}(\mp 1) \sin \frac{\pi k x_3}{h}, \quad (10)$$

$$K_I = \sqrt{2\pi r} \sigma_n, \quad K_{II} = \sqrt{2\pi r} \sigma_m, \quad K_{III} = \sqrt{2\pi r} \sigma_{\alpha}, \quad (r \rightarrow 0),$$

$$\langle K_I \rangle = \frac{K_I}{\sqrt{\pi l} |\alpha + \alpha_0|}, \quad \langle K_{II} \rangle = \frac{K_{II}}{\sqrt{\pi l} |\alpha + \alpha_0|},$$

где $\sigma_n, \sigma_m, \sigma_{\alpha}$ - нормальное и касательные напряжения на площадке за вершиной трещины, верхний знак относится к $\beta = -1$.

Результаты расчетов коэффициентов интенсивности для различных типов нагружения представлены на рис. 2-3. Эпюры распределения относительного коэффициента $\langle K_I \rangle$ по толщинной координате при действии нормальной нагрузки $N = \alpha \left(\frac{x_3}{h} \right)^2 + \alpha_0$ показаны на рис.2. Здесь сплошные кривые соответствуют значениям $\alpha = -1, \alpha_0 = -1$, штриховые - $\alpha = -1, \alpha_0 = 0$. Кривые 1, 2, 3 соответствуют вариантам $\varphi = \pi/6, \varphi_0 = \pi/3$; $\varphi = \pi/4, \varphi_0 = \pi/4$; $\varphi = \pi/3, \varphi_0 = \pi/6$.

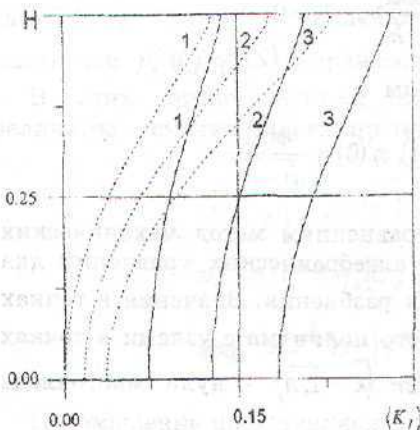


Рисунок 2

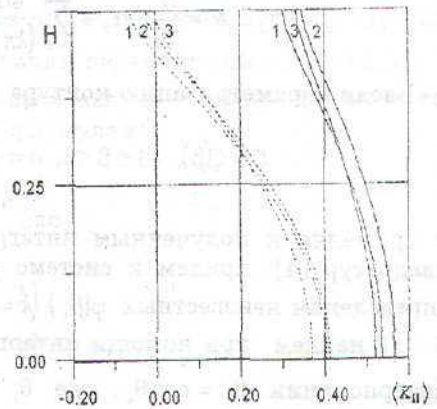


Рисунок 3

На рис.3 представлены кривые относительного коэффициента $\langle K_{11} \rangle$ при действии сдвигающих усилий $T = \alpha \left(\frac{x_3}{h} \right)^2 + \alpha_0$, при том же соответствии и тех же значениях, что и выше.

Таким образом, построенные выше процедуры дают возможность оценивать напряженное состояние в теле с трещиной и параметры его разрушения.

SUMMARY

A boundary problem of theory of elasticity for the layer with through-the-thickness is reduced to the infinite system of one-dimensional singular-differential equations which is solved numerically. As an example of calculation, stress intensity factor (the functionals which are characterizing the measure of singularity of stresses in the top of cut) is defined.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фильштинский Л.А. Растяжение слоя, ослабленного туннельными разрезами //ПММ, 1995.- Т. 59.- №5. -С. 827-835.
2. Фильштинский Л.А. Периодические решения теории упругости и электроупругости для цилиндра в R^3 / В кн.: Теоретическая и прикладная механика. - Вып. 21. - Киев - Донецк: Вища школа, 1990.- С. 13-20.
3. Мухелишвили Н.И. Сингулярные интегральные уравнения. Граничные задачи теории функции и некоторые их приложения к математической физике.- М.: Наука, 1968.- 511 с.
4. Белоцерковский С.М., Лифанов И.К. Численные методы в сингулярных интегральных уравнениях и их применение в аэродинамике, теории упругости, электродинамике.- М.: Наука, 1985.- 253 с.

Поступила в редакцию 25 июня 1999 г.

УДК 517

О ПОВЕДЕНИИ ГАРМОНИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ОСОБЫХ ТОЧКАХ ГРАНИЦЫ ОБЛАСТИ

Л.А.Фильштинский, проф.; А.Ибеда, асп.

При исследовании физических полей в составных областях с нерегулярной границей возникает необходимость в определении характера и порядка особенностей полевых величин в окрестности особой точки. В данной статье на примере задачи магнитостатики для составного ферромагнитного клина дается простая аналитическая процедура анализа локальных свойств магнитного поля в угловой точке области.

В цилиндрической системе координат (ρ, θ, x_3) рассмотрим кусочно-однородную призму, составленную из двух непрерывно скрепленных между собой вдоль плоскости $\theta = 0$, $0 \leq \rho < \infty$, $-\infty < x_3 < \infty$ ферромагнитных призм (рис.1). Будем считать, что составная призма вдоль внешних граней OA_1 и OA_2 сопрягается с вакуумом. При некоторых сочетаниях углов α_1 и α_2 и относительных магнитных проницаемостей материалов составляющих призм $\mu_1^{(1)}$ и $\mu_2^{(2)}$ возможна сильная концентрация магнитных полей в окрестности