



**Разделение ядерной и магнитной составляющих в малоугловом
рассеянии поляризованных нейтронов
на суперпарамагнитных наночастицах: влияние полидисперсности частиц.**

**Докладчик:
Коршунов А. Н.**



V Школа по физике поляризованных нейтронов «ФПН–2016»

Гатчина, 16 декабря 2016

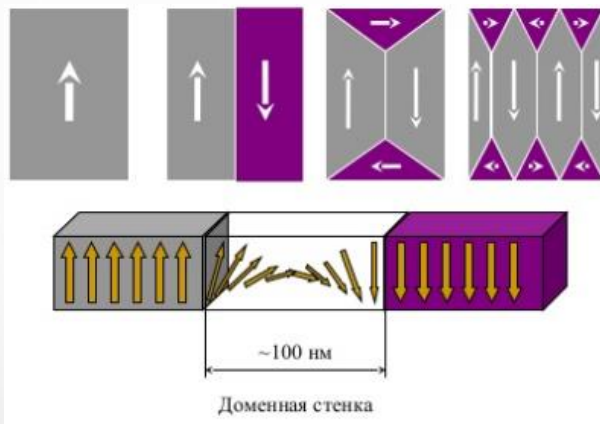
План доклада

1. Введение
2. Методика изучения
3. Модель, используемые приближения
4. Результаты
5. Заключение

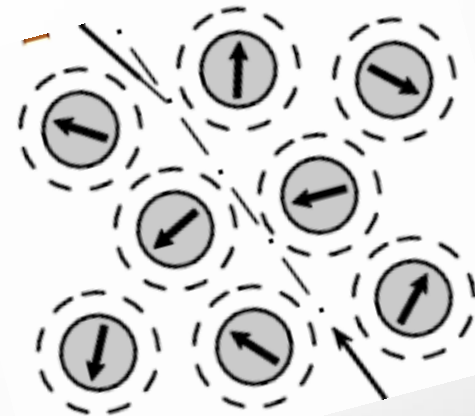


Введение

Массивные ферромагнетики вне магнитного поля разбиты на множество однородно намагниченных областей – доменов. Направление вектора намагниченности меняется от домена к домену. Причиной образования доменов является стремление ферромагнетика уменьшить энергию магнитного поля

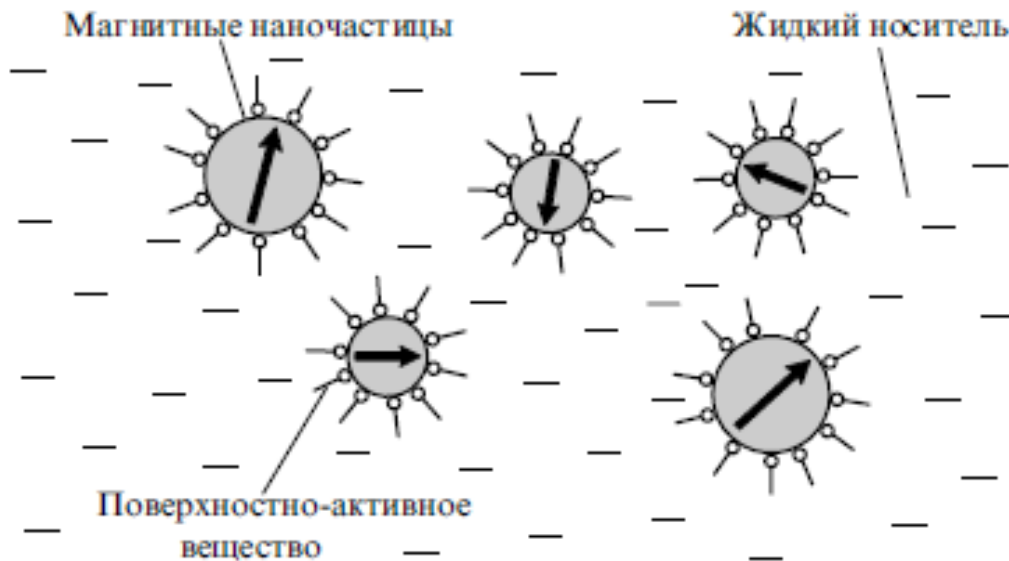


При уменьшении объема ферромагнетика, он переходит в **однодоменное состояние**, то есть возникают наночастицы, равномерно намагниченными по всему объёму. **Суперпарамагнетизм** – это форма магнетизма, которая возникает у ферромагнитных (ферримагнитных) наночастиц. Магнитный момент одной наночастицы складывается из индивидуальных магнитных моментов составляющих ее атомов.



Магнитные жидкости

В действительности, мы имеем ферромагнитную жидкость, т.е. коллоидную систему частиц нанометрового размера, которые находятся во взвешенном состоянии в несущей жидкости.



Диаметр частиц 3 – 50 нм

Ядро:

- магнетит Fe_3O_4 (магнитный железняк)
- гематит Fe_2O_3 (красный железняк)
- другие соединения железа.

ПАВ:

- олеиновая кислота
- лауриновая кислота
- другие кислоты

*М.В. Авдеев, В.Л. Аксенов. УФН 180, 1009 (2010)

Уникальное сочетание магнитных свойств и текучести.

Обширное применение на практике.

В частности, новейшие исследования в области медицины.

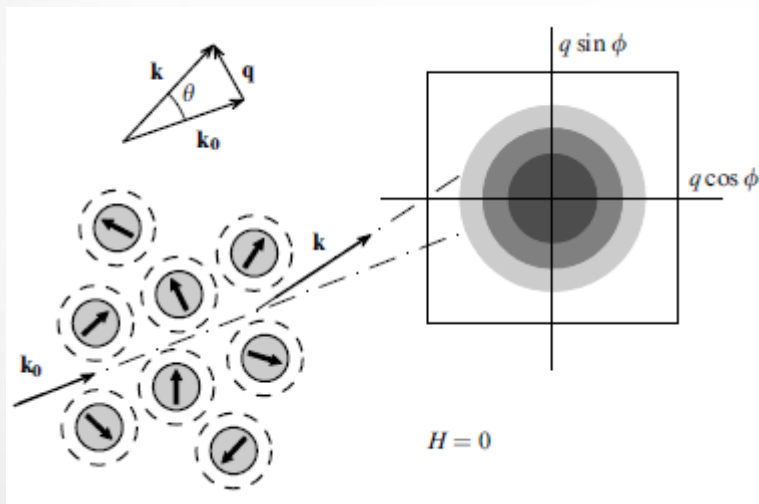


Методика

Рассеяния рентгеновских лучей или нейтронов.

Преимущества малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН):

- оценка характерных размеров на **наноскопическом** масштабе
- **возможность контрастирования** на основе изотопного замещения водород – дейтерий
- **магнитное взаимодействие** нейтронов с веществом

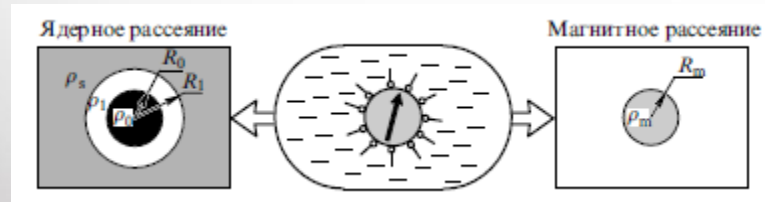


Длина волны – 0.1 – 1 нм
Диаметр частиц 3 – 50 нм

В отсутствии магнитного поля, все направления спинов равновероятны и рассеяние полностью изотропно:

$$I(q) \approx F_N^2(q) + \frac{2}{3} F_M^2(q),$$

, где $F_N^2(q)$ и $F_M^2(q)$ – амплитуды ядерного и магнитного рассеяния



*М.В. Авдеев, В.Л. Аксенов. УФН 180, 1009 (2010)



МУРН на магнитной жидкости в магнитном поле

Если во время эксперимента МУРН к МЖ прикладывается магнитное поле, то магнитное рассеяние становится частично анизотропным по отношению к радиальному углу φ в плоскости детектора:

$$I(q, \varphi) \sim F_N^2(q) + F_M^2(q) \sin^2(\varphi)$$

Анализируя двумерные экспериментальные карты рассеяния с учётом анизотропии $\sin^2(\varphi)$ можно разделить вклады ядерного и магнитного рассеяния.

Методика SANS POL (Small Angle Neutrons Scattering with POLarization). С помощью поляризатора магнитные моменты нейтронов падающего пучка ориентируют в одном направлении, коллинеарном с магнитным полем \vec{H} на образце. Спин-флиппер регулирует ориентацию спина нейтрона относительно направления \vec{H}

Двум относительным ориентациям спина нейтрона «против поля» и «вдоль поля» соответствуют различные интенсивности рассеяния, соответственно:

$$I^-(q, \varphi) \sim F_N^2(q) + \{F_M^2(q) - 2F_N(q)F_M(q)\} \sin^2(\varphi),$$

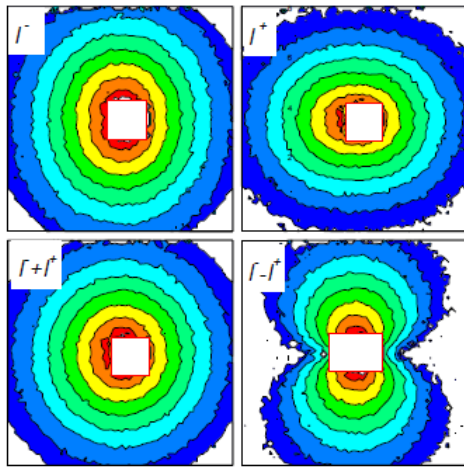
$$I^+(q, \varphi) \sim F_N^2(q) + \{F_M^2(q) + 2F_N(q)F_M(q)\} \sin^2(\varphi)$$



МУРН на магнитной жидкости в магнитном поле

$$I^-(q, \varphi) \sim F_N^2(q) + \{F_M^2(q) - 2F_N(q)F_M(q)\}\sin^2(\varphi),$$

$$I^+(q, \varphi) \sim F_N^2(q) + \{F_M^2(q) + 2F_N(q)F_M(q)\}\sin^2(\varphi)$$



На основе 2D экспериментальных данных рассеяния часто анализируют параметр $\gamma(q) = \frac{F_N(q)}{F_M(q)}$, которое может быть получено из соотношения интенсивностей перпендикулярно полю:

$$\frac{I^+(q, \pi/2)}{I^-(q, \pi/2)} = \frac{(1 + \gamma^2)}{(1 - \gamma^2)}$$

На практике, однако, частым является случай полидисперсных частиц с некоторым распределением по размеру, что затрудняет прямой анализ амплитуд рассеяния в терминах параметра γ . При усреднении форм-факторов $F_N^2(q)$, $F_M^2(q)$ и интерференционного члена $F_N(q)F_M(q)$ по радиусу частиц получаем:

$$I^-(q, \varphi) \sim \langle F_N^2(q) \rangle + \{\langle F_M^2(q) \rangle - 2 \langle F_N(q)F_M(q) \rangle\}\sin^2(\varphi),$$

$$I^+(q, \varphi) \sim \langle F_N^2(q) \rangle + \{\langle F_M^2(q) \rangle + 2 \langle F_N(q)F_M(q) \rangle\}\sin^2(\varphi)$$

И, строго говоря, выражение для γ больше не верно!

Постановка задачи

Целью настоящей работы ставится численное изучение вопроса, насколько анализ параметра γ в монодисперсном приближении может быть применен к полидисперсным системам.

Данные для моделирования приближены к реальным системам: изучалось рассеяние поляризованного пучка нейтронов при прохождении через систему магнитных наночастиц (Fe_2O_3) в растворе тяжелой воды (D_2O). При этом изучалось влияние:

- Распределения частиц по размерам (монодисперсное, нормальное, лог-нормальное)
- Среднего размера частиц
- Наличия или отсутствия немагнитной оболочки у частиц



Монодисперсное распределение частиц

В первую очередь было проведено изучение интенсивности рассеяния при прохождении поляризованного пучка нейтронов через систему **монодисперсных** магнитных частиц.

Интенсивность рассеяния в данном случае имеет вид:

$$I^{\pm}(q) = \varphi V (\rho_{\text{яд}} \pm \rho_{\text{м}} - \rho_{\text{с}})^2 F^2(qR),$$

где $I^+(q)$, $I^-(q)$ – интенсивности, соответствующие двум различным направлениям спина нейтрона относительно поля на образце,

φ - объемная доля наночастиц в системе ($\varphi=1\%$),

R – радиус частиц

$V = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R^3$ – объем одной частицы,

$\rho_{\text{яд}} = 7 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ – ядерная часть плотности длины рассеяния (ПДР) частицы,

$\rho_{\text{м}} = 1.49 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ – магнитная часть ПДР частицы,

$\rho_{\text{с}} = 6.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ - ПДР растворителя,

$F(x) = 3 \frac{\sin(x) - x \cos(x)}{x^3}$ – формфактор однородной сферы,



Монодисперсное распределение частиц

Без учета немагнитной оболочки

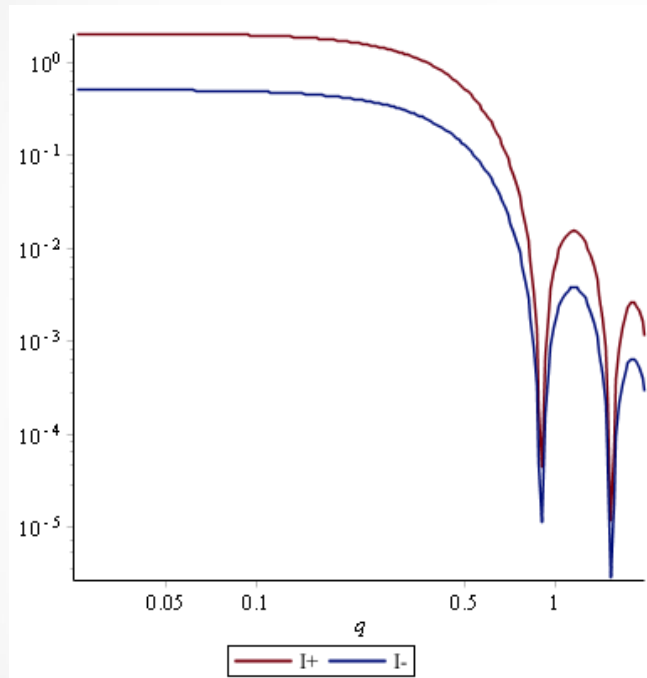


Рис. 1 Интенсивности $I^+(q)$, $I^-(q)$ рассеяния поляризованных нейтронов в монодисперсном приближении с $R = 5$ нм

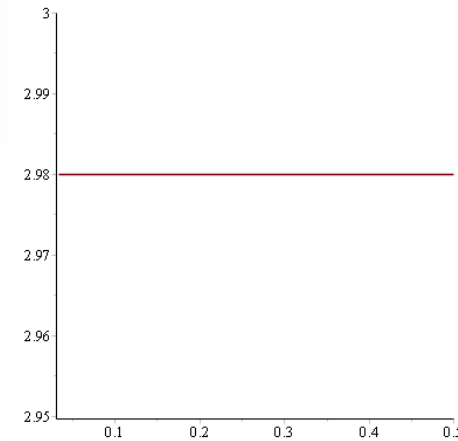


Рис. 2 Зависимость отношения γ от q в монодисперсном приближении

Отношение $I^+(q, \pi/2) / I^-(q, \pi/2)$ в монодисперсном приближении не зависит от q ($I^+(q, \pi/2) / I^-(q, \pi/2) = 4.04$), и как следствие находим отношение $\gamma(q) = \frac{F_N(q)}{F_M(q)} = 2.98$ которое так же не зависит от q

Монодисперсное распределение частиц

При увеличении радиуса частиц с 5 нм до 20 нм изменяется картина рассеяния:

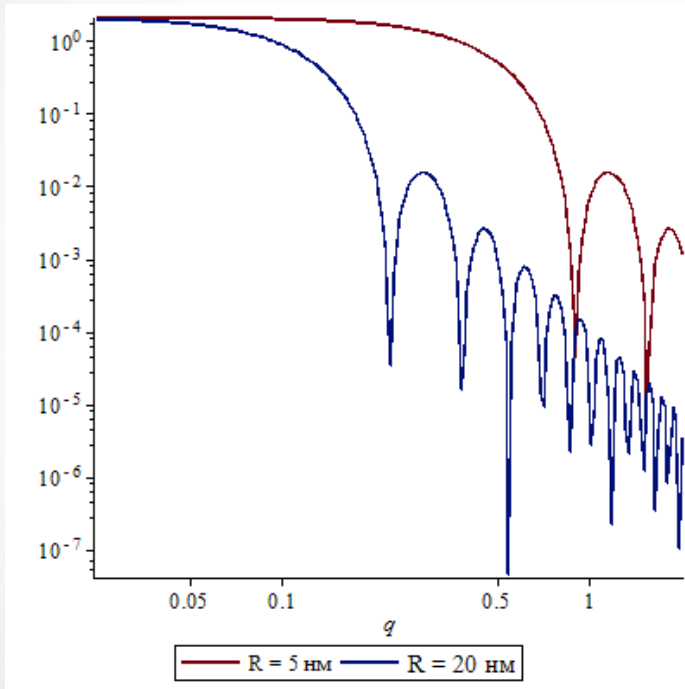


Рис. 3 Сравнение интенсивностей $I^+(q)$ в монодисперсном приближении с $R = 5$ нм и 20 нм

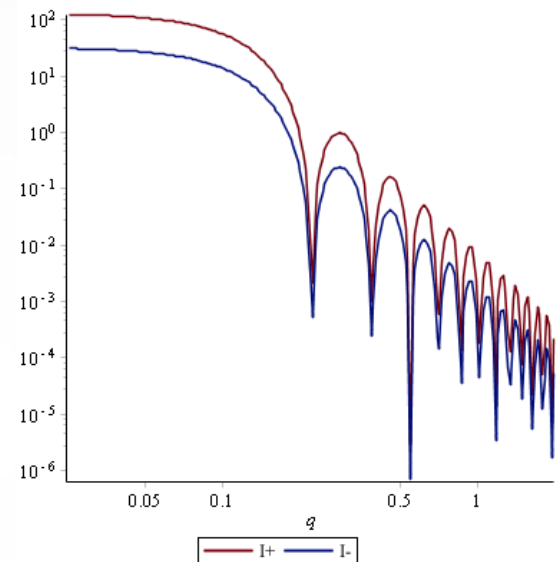


Рис. 4 Интенсивности $I^+(q)$, $I^-(q)$ рассеяния поляризованных нейтронов в монодисперсном приближении с $R = 20$ нм

При этом, значение γ получается таким же как и в предыдущем случае.

Отсюда можно сделать вывод, что параметр γ , не меняется с q и не зависит от размера частиц.

Монодисперсное распределение частиц

Далее будем рассматривать систему модельных частиц с магнитным ядром, покрытым слоем немагнитной оболочки толщиной $d \sim 0.5$ нм. Интенсивность рассеяния в этом приближении принимает вид:

$$I^{\pm}(q) = \varphi V [(\rho_{\text{яд}} \pm \rho_{\text{м}}) F(q(R-d)) - \rho_{\text{с}} F(qR)]^2$$

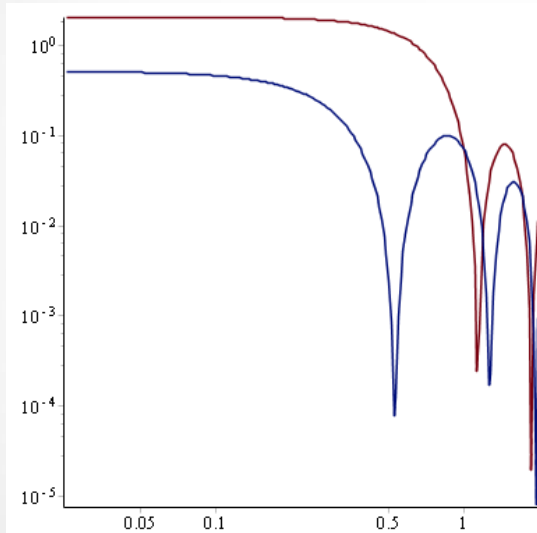


Рис. 5 Интенсивности $I^{+}(q)$, $I^{-}(q)$ в монодисперсном приближении с учетом наличия магнитного ядра и немагнитной оболочки с $R = 5$ нм.

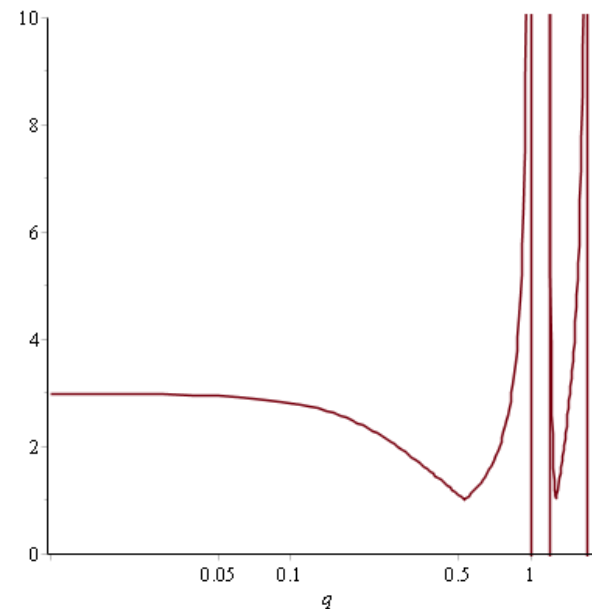


Рис. 6 Параметр γ в зависимости от q

Оценка при малых q :
 $\gamma = 2.91$

Полидисперсное распределение частиц

Распределение частиц по размерам задается с помощью функции распределения, которая может быть представлена в гауссовом (нормальном) или в логнормальном виде:

$$D_{\text{Гаусс}}(r) = \frac{1}{S\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-R)^2}{2S^2}},$$

$$D_{\text{Логн}}(r) = \frac{1}{xS\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\ln(\frac{x}{R}))^2}{2S^2}},$$

где R – наиболее вероятный радиус, а S - стандартное отклонение распределения.

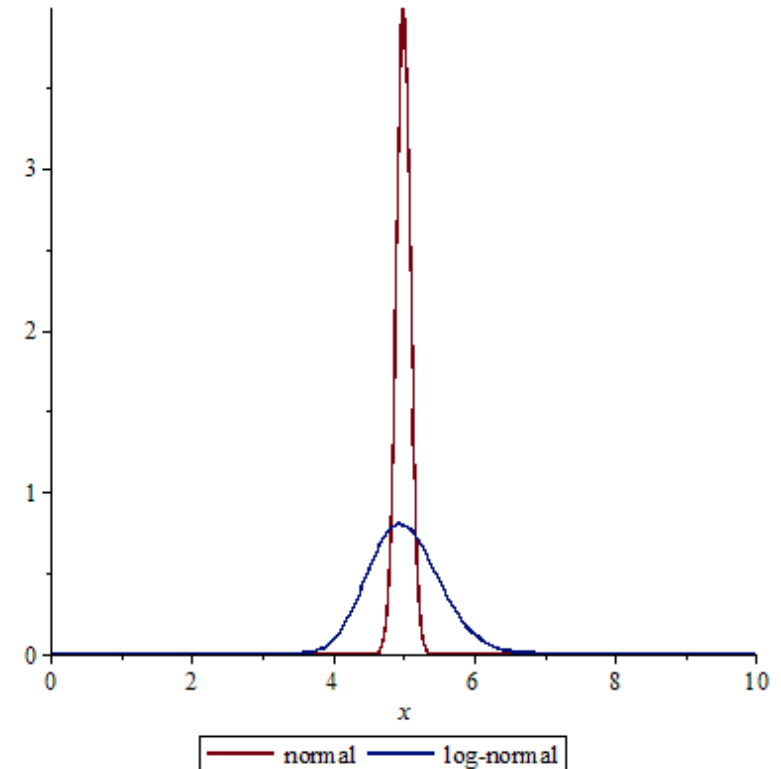


Рис. 7 Форма нормального и логнормального распределения при $S = 0.1$

Нормальное распределение частиц

1. Без учета немагнитного слоя

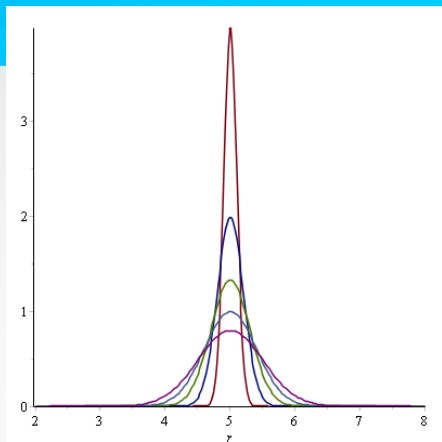


Рис. 7 Вид нормального распределения при различных S

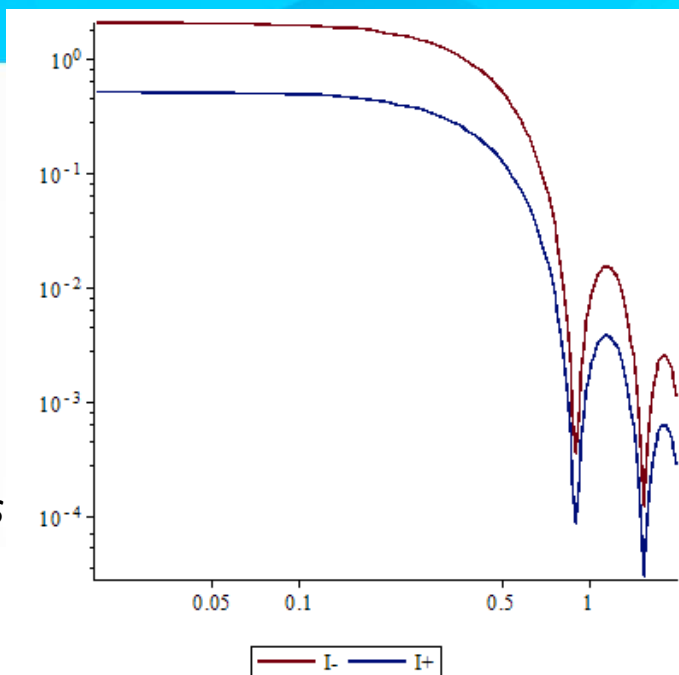


Рис. 9 $I^+(q)$, $I^-(q)$, нормальное распределение частиц по размерам, $S = 0.1$

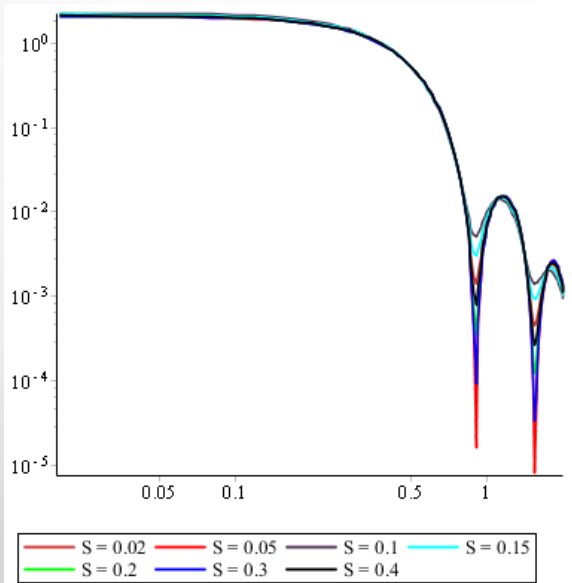


Рис. 8 Поведение $I^+(q)$ в зависимости от параметра полидисперсности S

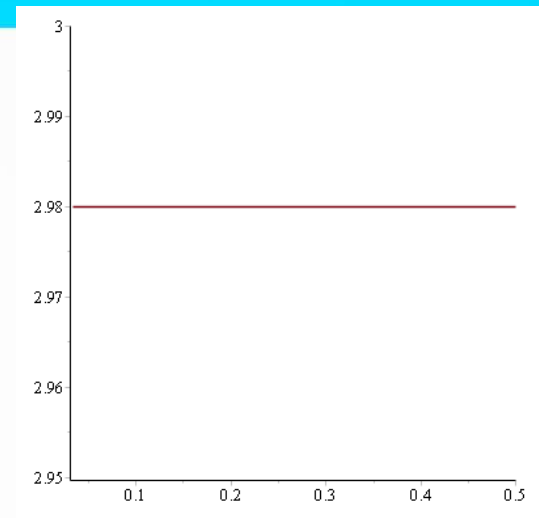


Рис. 10 Усредненное отношение γ в зависимости от параметра полидисперсности S

То есть в случае полидисперсных частиц и без учета немагнитного слоя параметр γ не изменяется с S и принимает значение, равное величине, полученной в монодисперсном приближении. При этом данная картина не зависит от среднего размера частиц.

Нормальное распределение частиц

2. Учет наличия немагнитного слоя

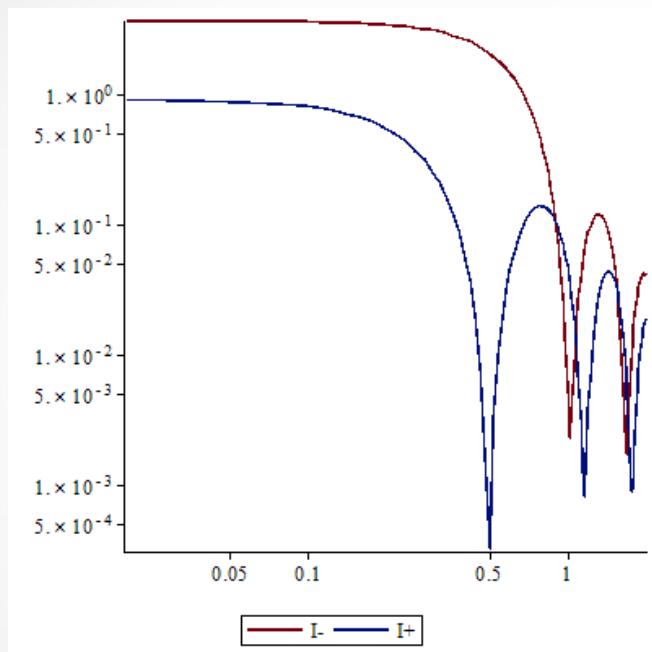


Рис. 11 $I^+(q)$, $I'(q)$ с учетом наличия немагнитного слоя

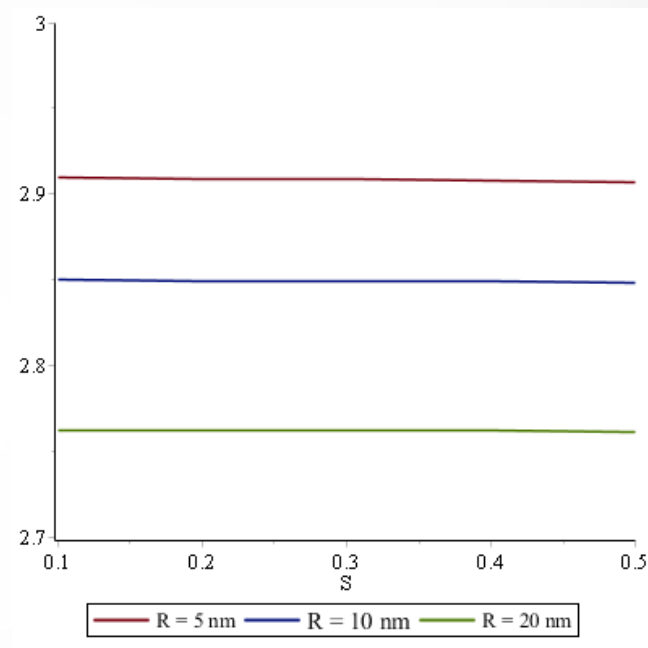


Рис. 12 Усредненное отношение γ в зависимости от параметра полидисперсности. Каждой линии соответствует свой средний размер частиц

Лог-нормальное распределение частиц

1. Без учета немагнитного слоя

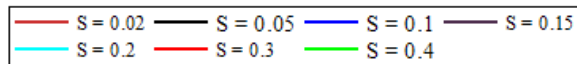
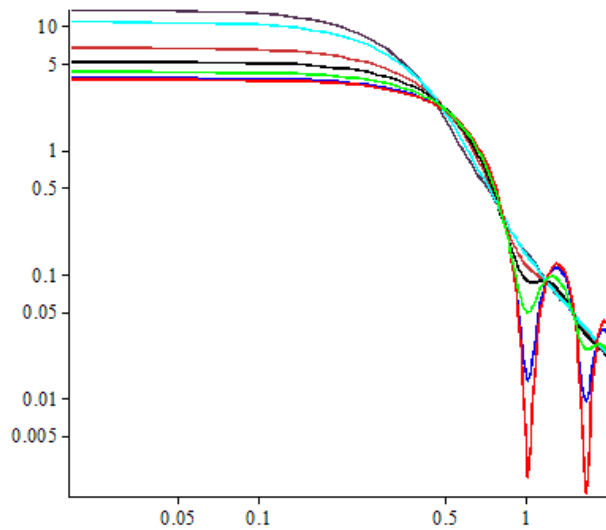
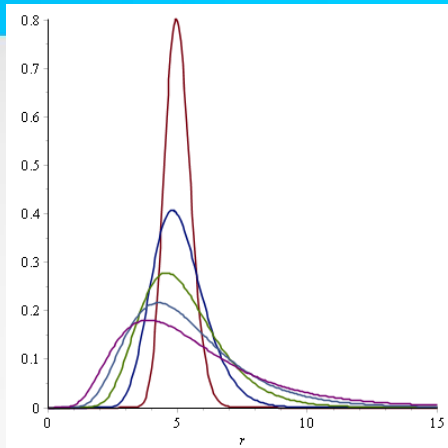


Рис. 13 Поведение $I^+(q)$ в зависимости от параметра полидисперсности S

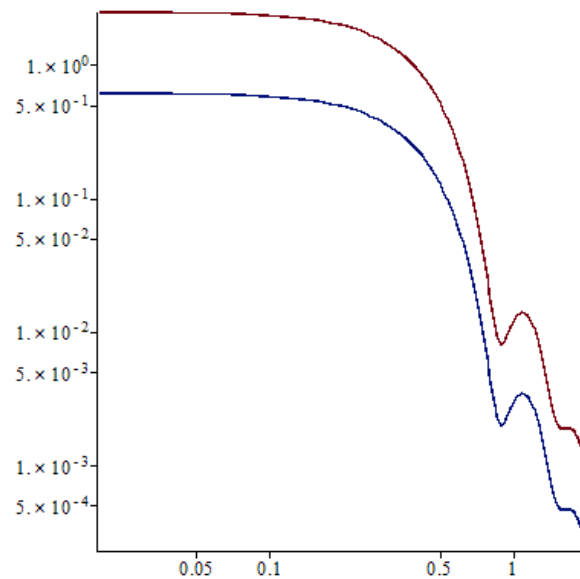


Рис. 14 $I^+(q)$, $I(q)$, лог-нормальное распределение частиц по размерам, $S = 0.1$

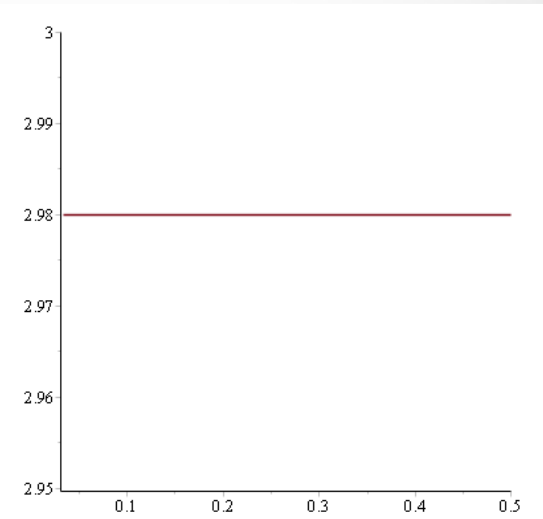


Рис. 15 Усредненное отношение γ в зависимости от параметра полидисперсности

Лог-нормальное распределение частиц

2. Учет наличия немагнитного слоя

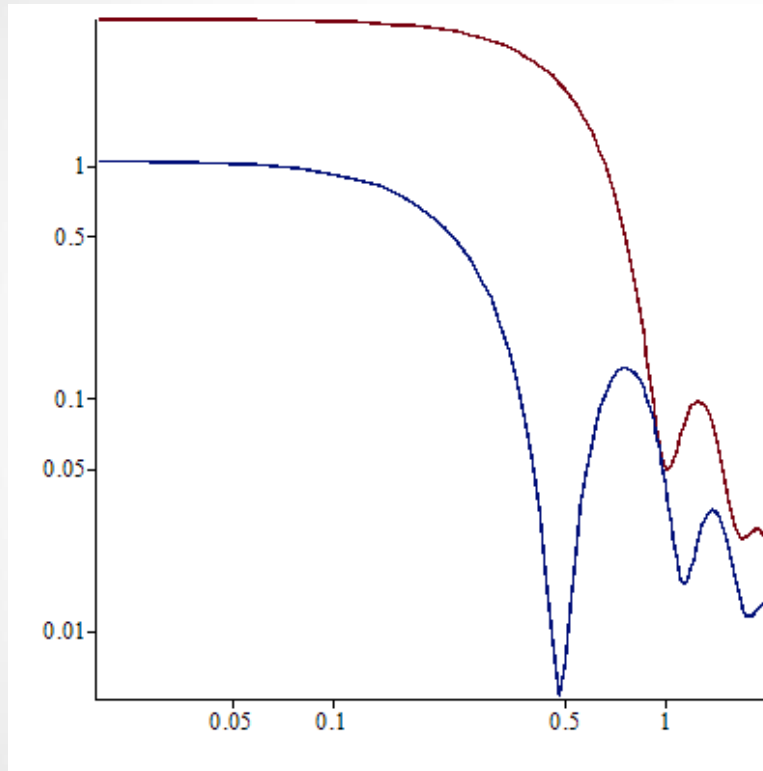


Рис. 16 $I(q)$, $I(q)$ с учетом наличия немагнитного слоя

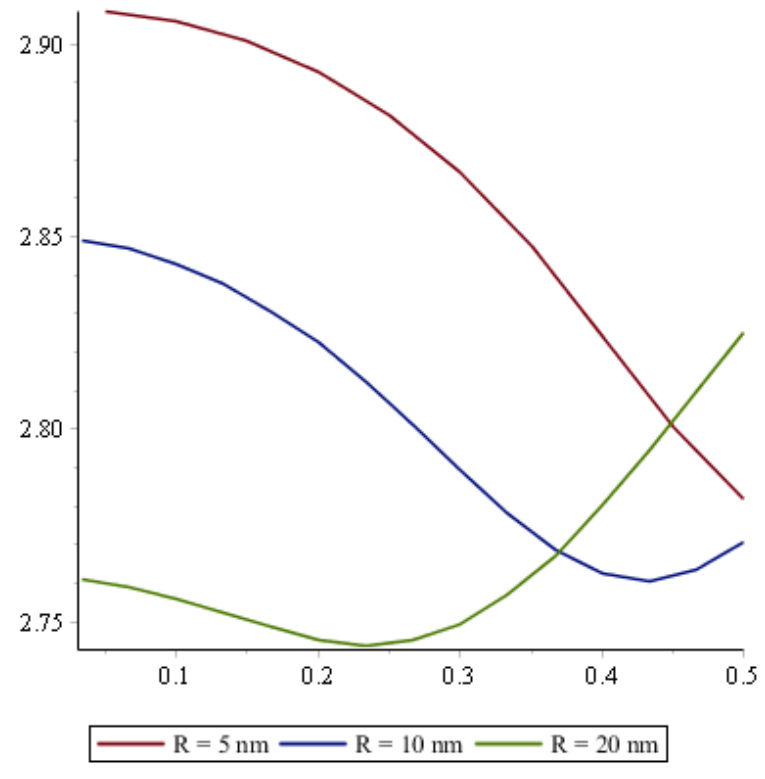


Рис. 17 Усредненное отношение γ в зависимости от параметра полидисперсности. Каждой кривой соответствует свой средний размер частиц

Заключение

1. Проведено численное моделирование законов рассеяния при прохождении пучка поляризованных нейтронов через систему магнитных наночастиц. При этом последовательно был применен ряд предположений об исследуемых объектах.
2. Проведен анализ отношения $\gamma = \frac{F_N}{F_M}$ в случае монодисперсных систем, который в дальнейшем был применен к случаю полидисперсных систем
3. Установлено, что данная методика работает в диапазоне полидисперсности $S = 0.1 \div 0.5$ и дает приемлемый результат для разделения магнитной и ядерной составляющих



СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!