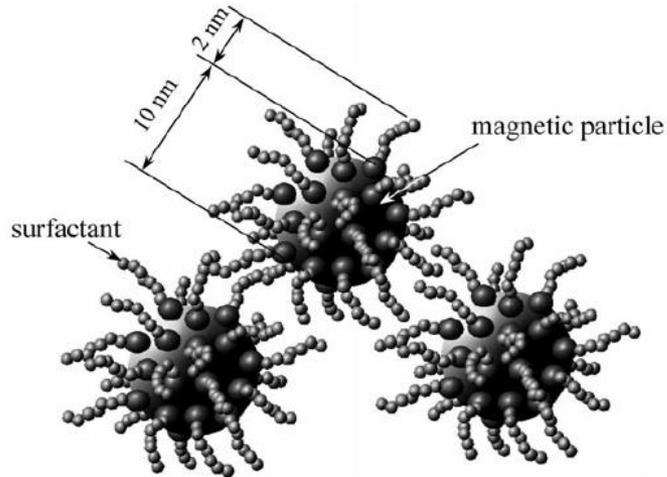


Колончатая фаза в модели Штокмаера

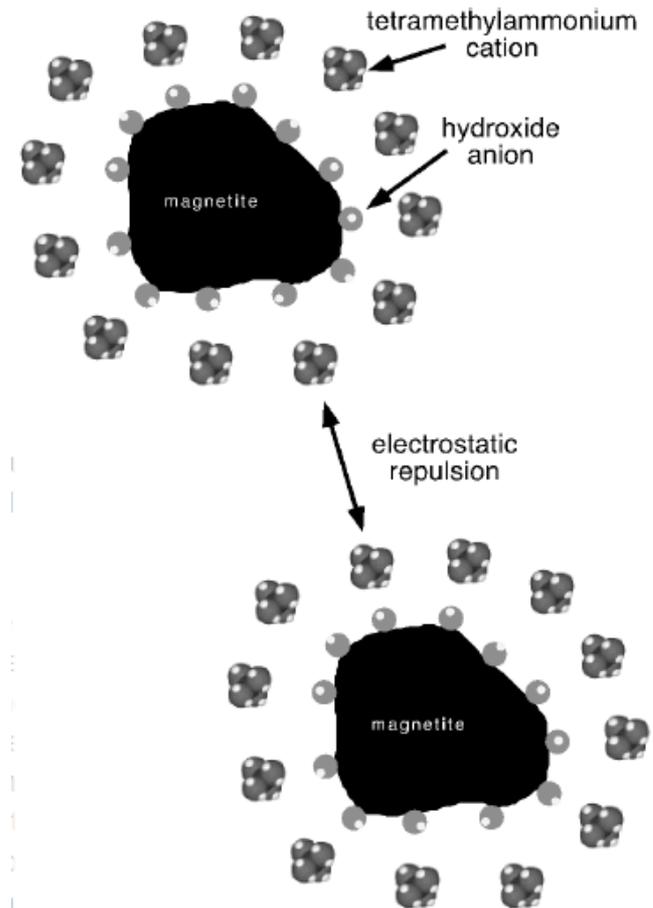
Вениамин Блинов

Дни Ландау '13

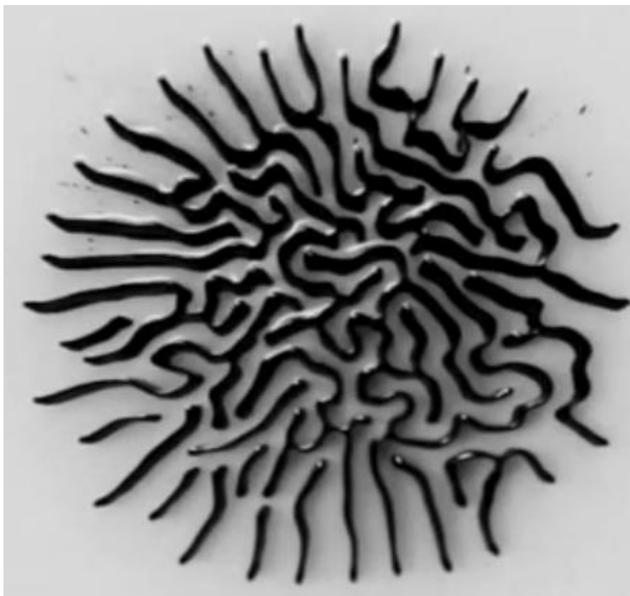
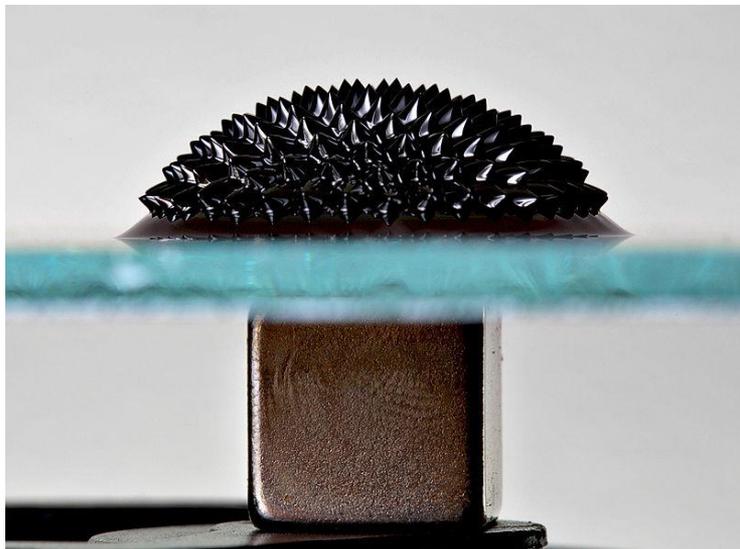
Ферромагнитные жидкости



- Коллоид однодоменных ферромагнитных частиц размером ~10 нм
- Окружение: керосин, вода, органический растворитель
- Поверхность частиц имеет слой для предотвращения слипания



Ферромагнитные жидкости



Применения

«Ferrofluids behave as magnetizable liquids and are applied e.g. as rotary shaft seals or magnetic carriers for drugs**.»*

*Berkovski B and Bashtovoy V 1996 Magnetic Fluids and Applications Handbook (New York: Begel House)

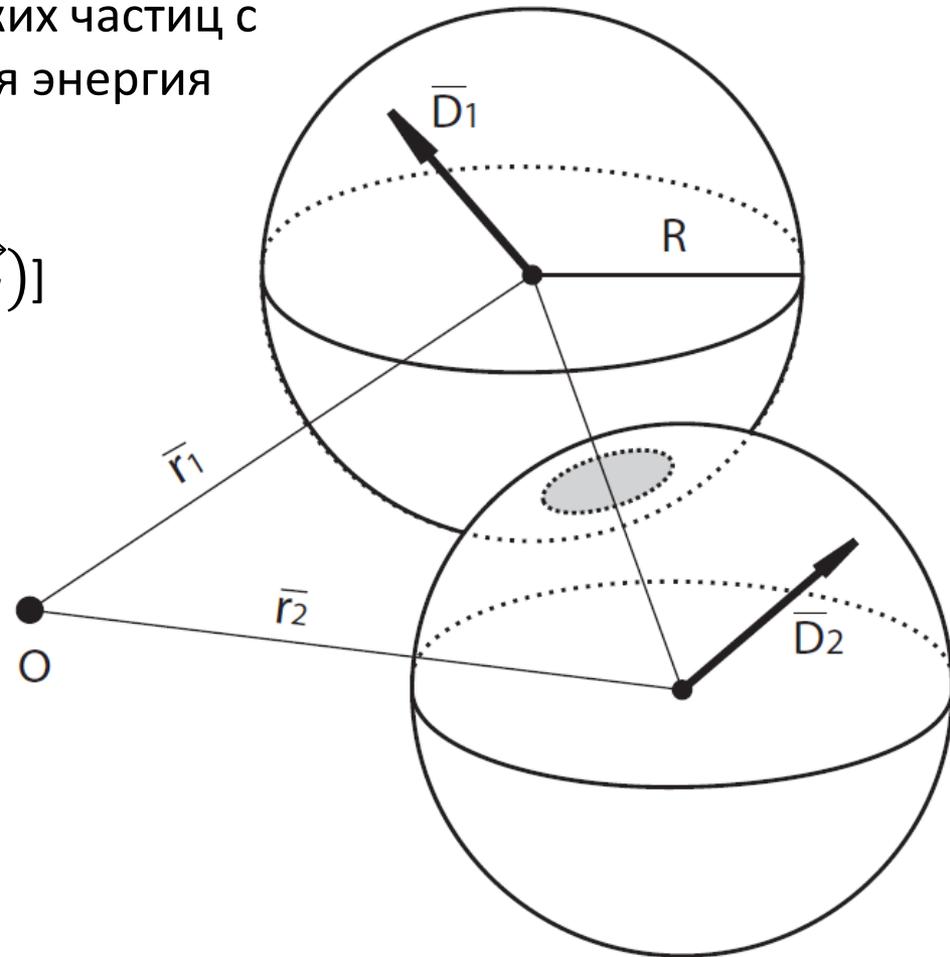
**Lubbe A S, Alexiou C and Bergemann C 2001 J. Surg. Res. 95 200



Модель дипольных сфер

Рассматривается ансамбль сферических частиц с диполем в центре. Полная внутренняя энергия имеет вид

$$U = \sum_{i \neq j} [U_{sr}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + U_{dd}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{D}_i, \vec{D}_j)]$$



- Потенциал Штокмаера*

$$U_{sr} \rightarrow U_{lj}^{ij} = 4\epsilon \left[\left(\frac{2R}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right)^{12} - \left(\frac{2R}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right)^6 \right]$$

$$U_{dd} \rightarrow U_{dd}^{ij} = \frac{\vec{D}_i \cdot \vec{D}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} - 3 \frac{(\vec{D}_i \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j))(\vec{D}_j \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j))}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^5}.$$

- Потенциал Кеезома

$$U_{sr} \rightarrow U_{hs}^{ij} = \begin{cases} 0, & \text{if } r_{ij} \geq R, \\ \infty, & \text{if } r_{ij} < R. \end{cases}$$

* W. H. Stockmayer, *J. Chem. Phys.* 9, 398 (1941).

Параметры модели

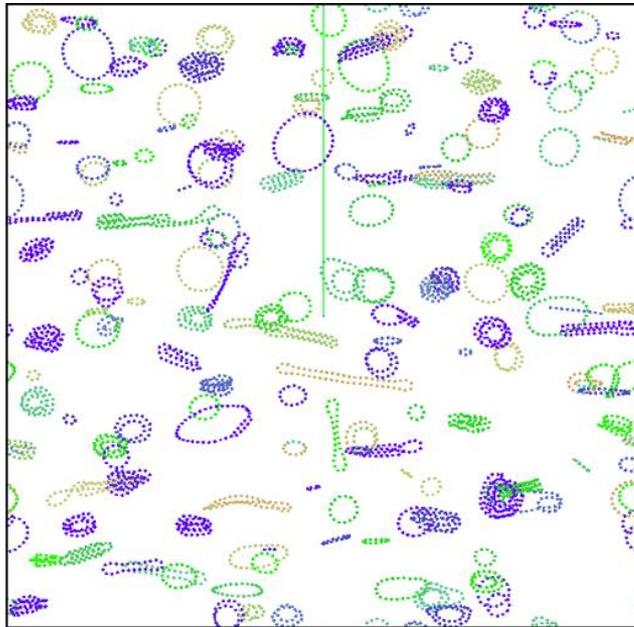
- Можно избавиться от одного энергетического масштаба, а именно, от Леннарда-Джонса ($\sim \epsilon$). Для этого примем
- $\mu^* = \frac{D}{\sqrt{d^3 \epsilon}}, d = 2R$
- $kT^* = \frac{kT}{\epsilon}$
- Концентрация ρ – обычная объёмная доля частиц

Нас в основном будет интересовать случай, когда решающую роль играют диполь-дипольные взаимодействия ($\mu^* \geq 2$)

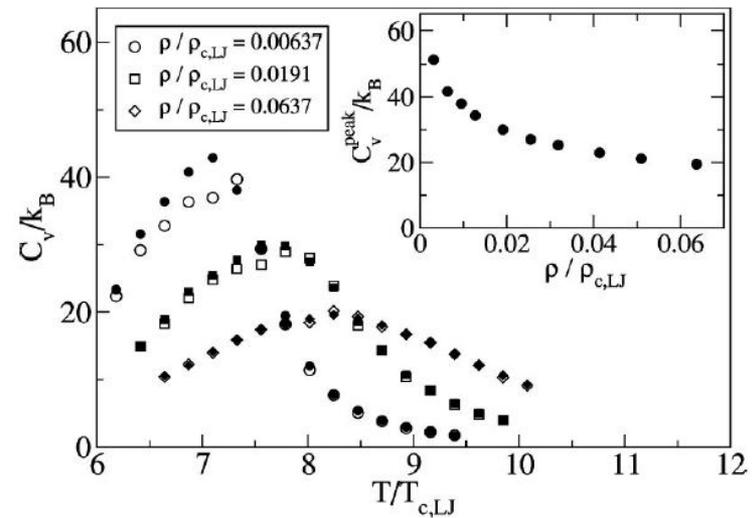
Малые концентрации ($\rho < 0.001$)

Достаточно хорошо исследован, имеется большое число численных и теоретических работ (Dietrich, Зубарев)

Полимеризационный переход *газ* -> *цепочечная жидкость*.

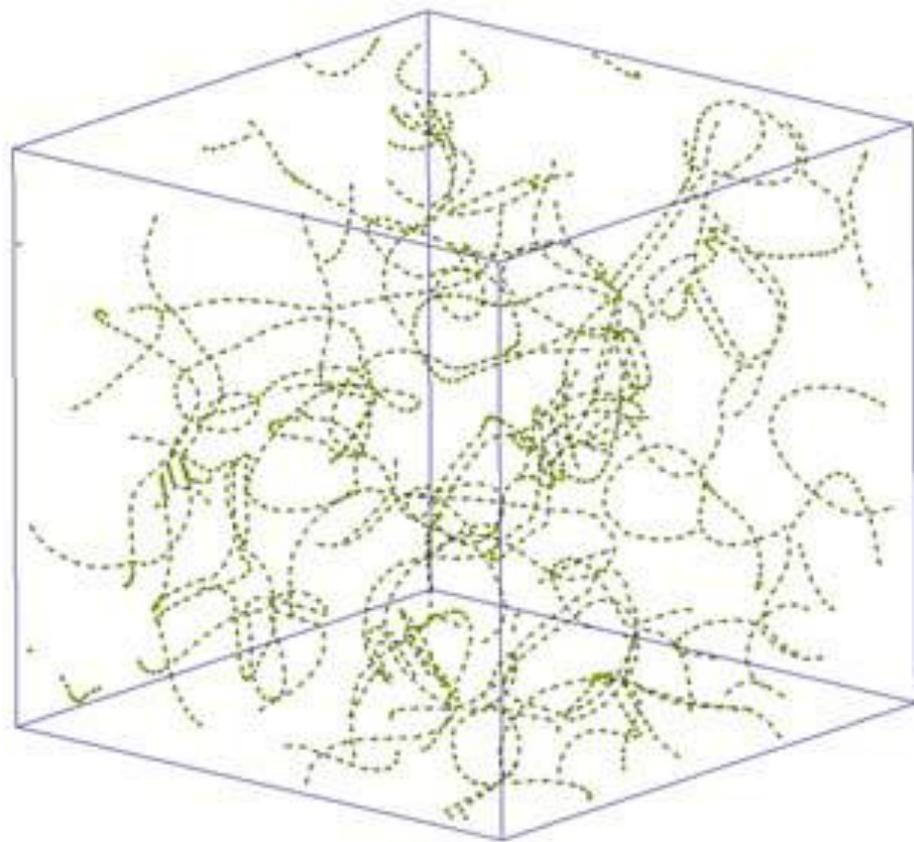
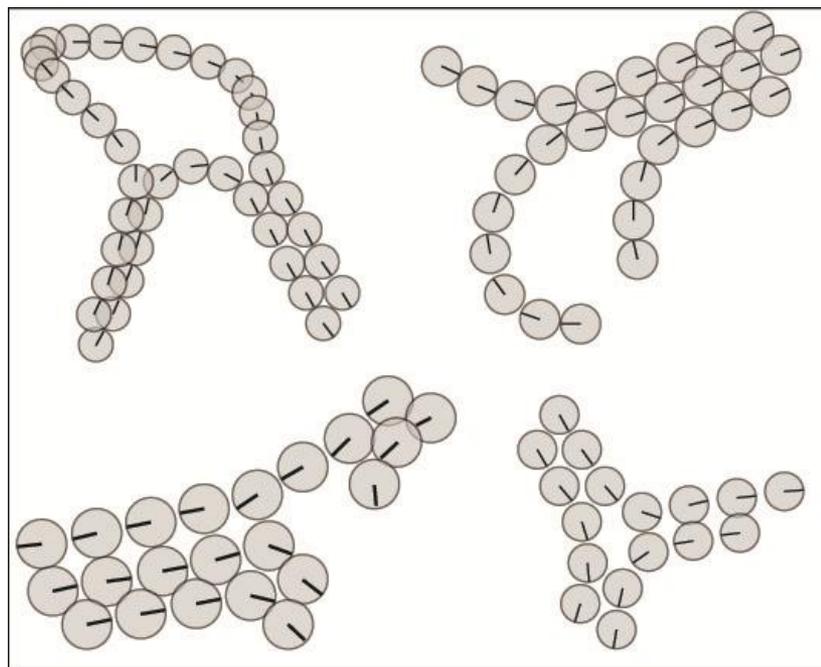


K. VAN WORKUM AND J. F. DOUGLAS



K. Van Workum, J. F. Douglas, *Phys. Rev. E* 71, 031502 (2005)
R. Hentschke et al. *PRE* 75, 011506 (2007)

- Увеличение концентрации приводит к появлению более сложных структур (*сети*), изучение которых крайне интересно и сложно.

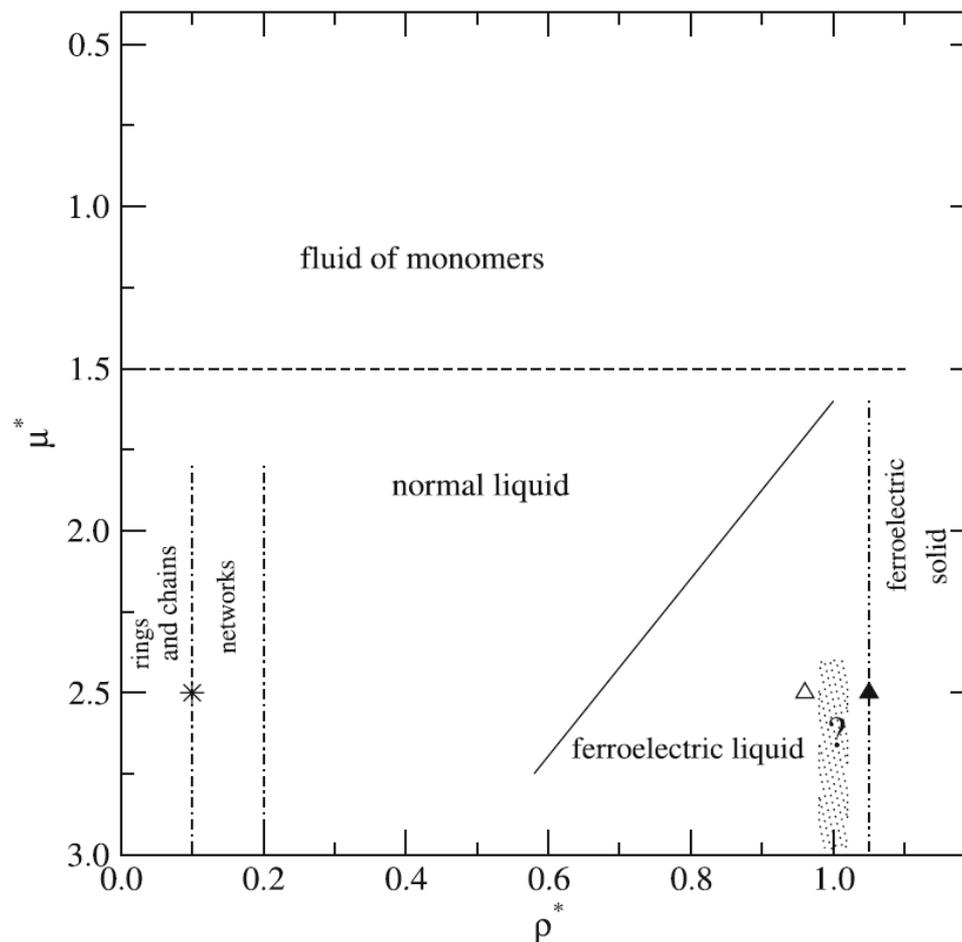


Фазовая диаграмма для твёрдых сфер

J.-J. Weis · D. Levesque

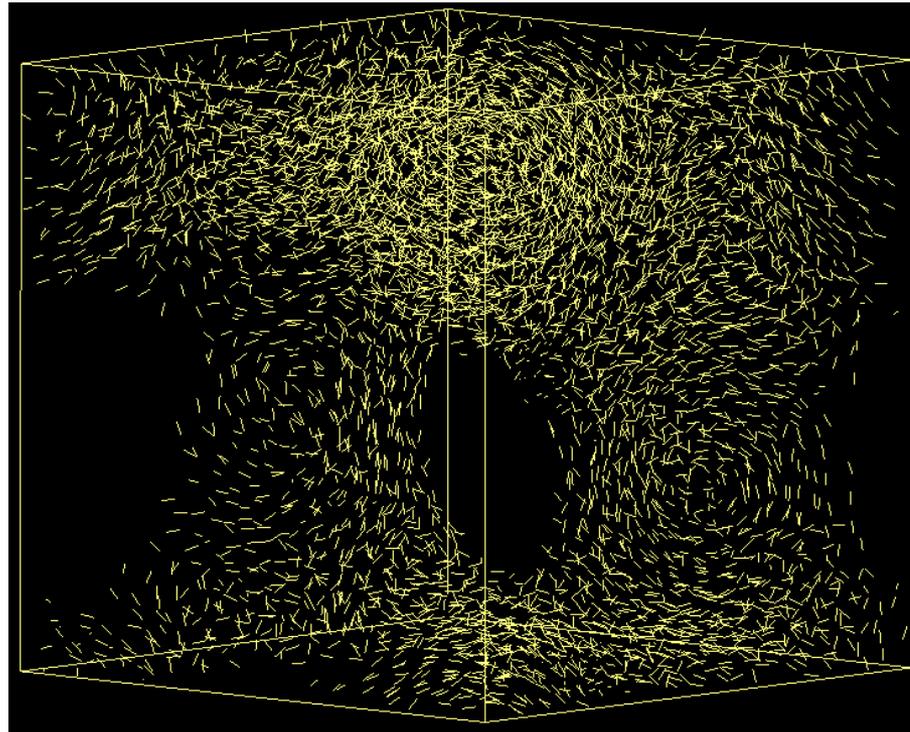
$$T^* = 1/\mu^{*2}$$

$$\rho^* \approx 2\rho$$



Локальный ориентационный порядок

- Анализ мгновенных конфигураций выявил наличие ориентационной упорядоченности на малых расстояниях (несколько размеров частиц) и её отсутствия на больших масштабах.



Параметр локального порядка

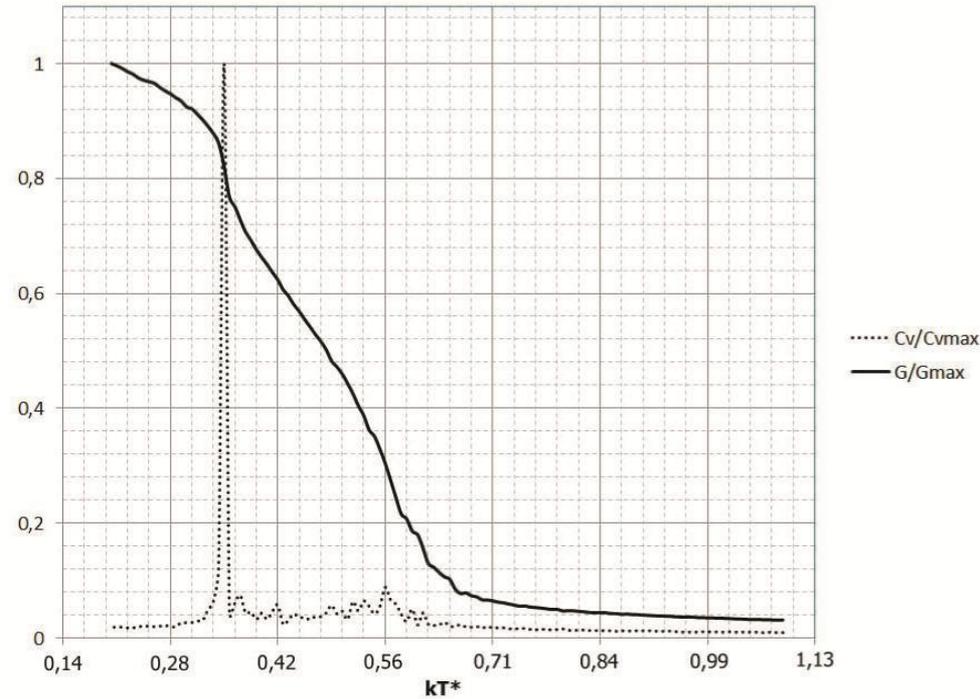
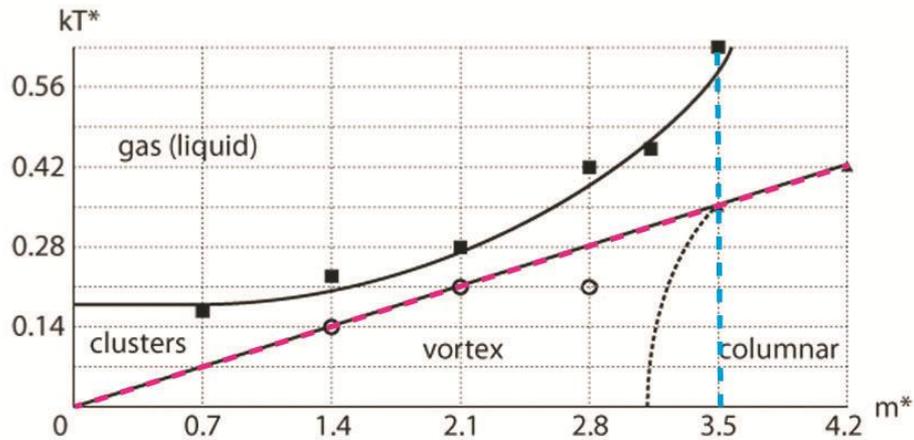
Введём параметр G следующим образом :

$$G = \left\langle \sum_{i=0}^N L(\mathbf{r}_i) \right\rangle, \text{ где } L(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{N} \sum_{0 \leq j \leq N} \frac{d^2}{|\mu_i| |\mu_j|} \frac{\mu_i \cdot \mu_j}{r_{ij}^2}$$

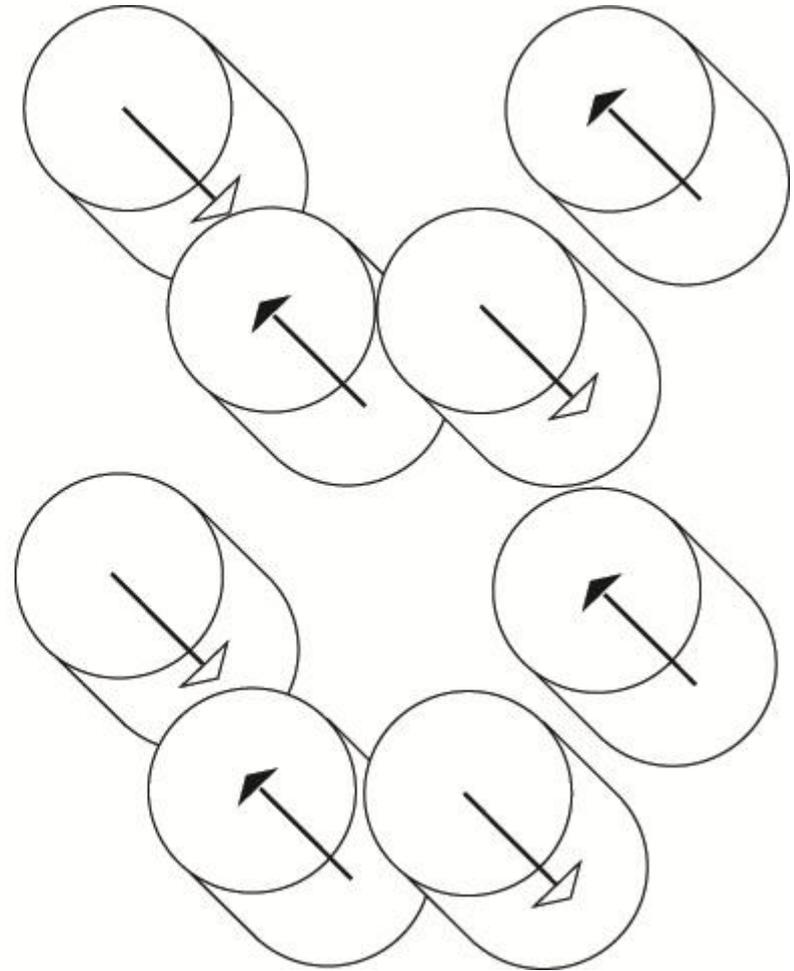
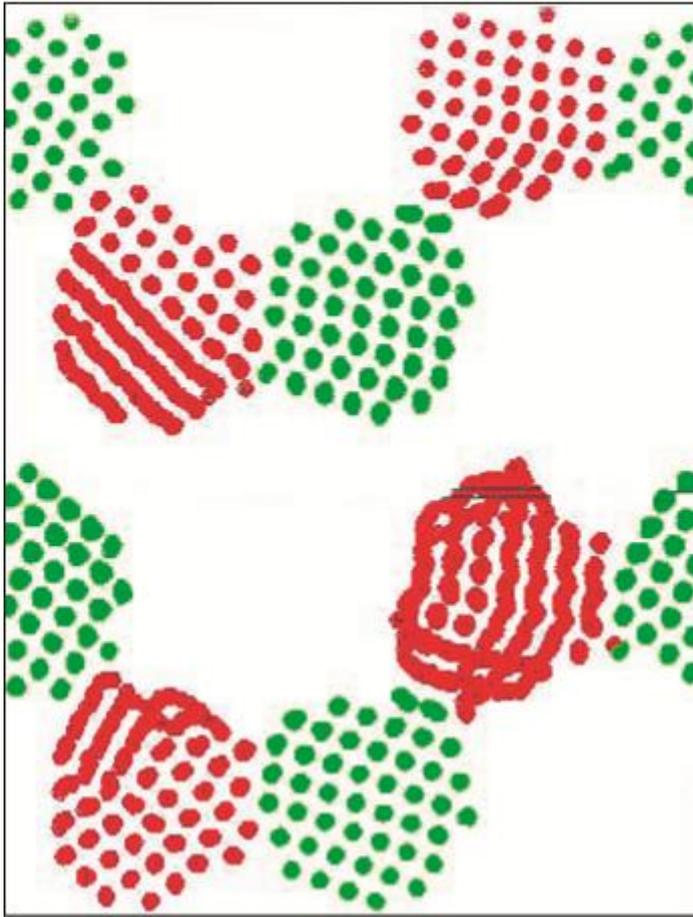
Вычисления показывают, что при заданной концентрации фаза системы определяется параметром локального ориентационного порядка.

Фазовая диаграмма

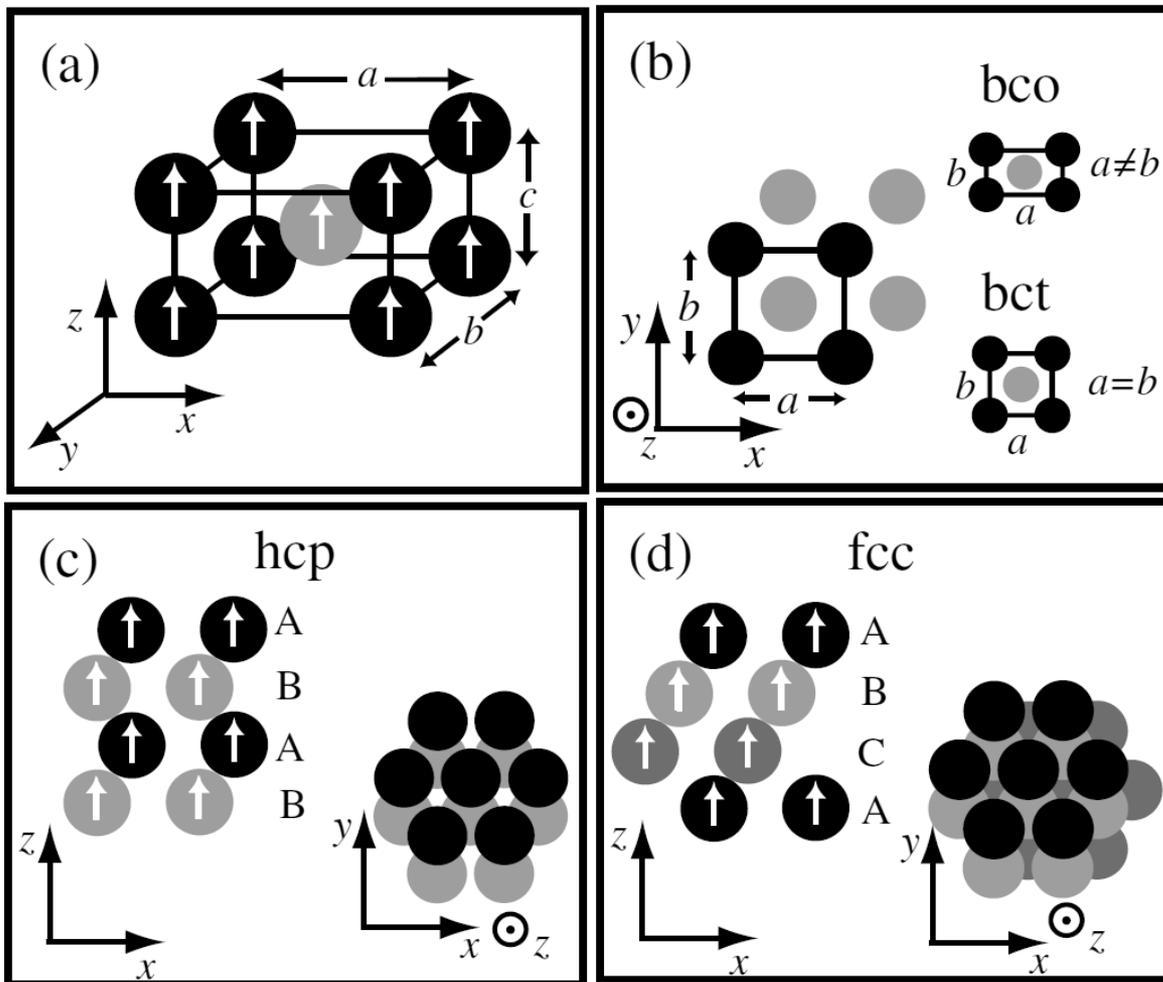
$$\rho = 0.3$$



Колончатая фаза



Типы решёток в дипольных моделях



Колончатая фаза: условия

- Наличие фазы подразумевает достаточно большие концентрации (примерно вдвое больше) по сравнению с имеющимися в литературе.
- Возможна ли подобная фаза в полидисперсных ферромагнитных жидкостях – неясно.
- Влияние условий моделирования на фазу.

Appendix: о моделировании

- метод Монте-Карло, алгоритм Метрополиса, 5000 - 10000 частиц.
- отжиг с очень большим числом шагов (100×10^8)
- replica exchange

Дальнодействующие силы

- обрезание потенциала взаимодействия (наличие только ближнего порядка и быстрое убывание корреляционной функции)
- Суммы Эвальда
- Метод среднего поля