

Учреждение образования
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАТИКИ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 531.3-047.58+533.9-022.532+537.621

ДОРОШЕВИЧ
Ирина Леонидовна

**КИНЕТИКА ФОРМИРОВАНИЯ
НАНОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА В КОМПРЕССИОННОЙ
ПЛАЗМЕ, ИХ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА
И РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ**

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

по специальности 05.16.08 – Нанотехнологии и наноматериалы

Минск 2014

Работа выполнена в учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

Научный руководитель

Квасов Николай Трофимович, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник НИЧ Белорусского государственного университета

Официальные оппоненты:

Наркевич Иван Иванович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики учреждения образования «Белорусский государственный технологический университет»

Лукашевич Михаил Григорьевич, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры полупроводников и наноэлектроники Белорусского государственного университета

Оппонирующая организация

Государственное научно-производственное объединение «Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению»

Защита состоится 20 ноября 2014 г. в 14.00 на заседании совета по защите диссертаций Д 02.15.07 при учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» по адресу: 220013, г. Минск, ул. П. Бровки, 6, корп. 1, ауд. 232, тел. (017) 293-89-89, e-mail: dissovet@bsuir.by.

КРАТКОЕ ВВЕДЕНИЕ

Одним из основных направлений дальнейшего развития научно-технического прогресса первой половины XXI века является развитие нанотехнологий, задача которых состоит в создании и использовании материалов, устройств и систем, которые благодаря малому (от 1 до 100 нм) размеру элементов их структуры обладают новыми свойствами и функциональными возможностями.

Уникальные свойства наночастиц являются основанием для их широкого практического использования: создание нового поколения изделий микро- и нанoeлектроники, устройств для записи и хранения информации со сверхвысокой плотностью, новых сверхмощных постоянных магнитов, элементов «спиновой» электроники, систем магнитного охлаждения, магнитных сенсоров, применение в медицине и бионанотехнологии и т. д. Несмотря на большое число разработанных на настоящий момент методов формирования магнитных нанобъектов и способов их стабилизации, активный поиск относительно простых и воспроизводимых методик синтеза наночастиц и содержащих их материалов продолжается. Перспективным способом получения наноструктур, применяемых в микро-, нано- и оптоэлектронике, являются методы с использованием компрессионной плазмы. Решению проблем синтеза наночастиц с узким распределением их по размерам должно способствовать построение соответствующих теоретических моделей нуклеации и роста, выявление механизмов этих процессов, а также их математическое описание. Исключительно важным в настоящее время является исследование магнитной структуры наноразмерных частиц, т. к. принцип действия приборов устройств на их основе в большинстве случаев базируется на тонкой перестройке распределения намагниченности в них под воздействием внешнего магнитного поля. Исследование радиационной стойкости наноструктур представляет особый интерес, поскольку для данных систем наблюдается эффект повышенной радиационной стойкости. Использование новых наноматериалов и приборов на основе наномасштабных элементов предполагает ряд очевидных преимуществ не только для космических приложений и атомной промышленности, но и для многих других областей современной индустрии и технологии будущего.

Таким образом, описание процессов формирования магнитных наночастиц из металлического пара в плотной компрессионной плазме, изучение их магнитной структуры и ее эволюции во внешнем магнитном поле, а также исследование их радиационной стойкости является актуальным как с фундаментальной, так и с практической точки зрения, поскольку открывает широкие перспективы использования этих наночастиц во многих отраслях современной науки и техники. Поскольку железо является самым распространенным в природе ферромагнитным веществом, то исследование свойств магнитных наночастиц из этого материала обладает большой значимостью.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с крупными научными программами и темами

Тема диссертационной работы утверждена Советом факультета компьютерных систем и сетей учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» (протокол № 6 от 28.12.2009) и соответствует следующим подразделам перечня приоритетных направлений научных исследований Республики Беларусь на 2011–2015 гг., утвержденного Постановлением Совета Министров Республики Беларусь 19 апреля 2010 г. № 585: 6.2 новые оптические, волоконно-оптические и нелинейно-оптические компоненты, материалы и покрытия, новые материалы для приборов функциональной микро-, опто-, нано- и СВЧ-электроники; 6.7 научные основы создания и функционирования оптико-электронных микросистем, устройств молекулярной электроники и кремниевой фотоники, электронных и оптических систем обработки информации на спиновых эффектах; нанотехнологии, наноструктуры и наноматериалы в электронике, оптике, оптоэлектронике; 8.1 структура и физические свойства конденсированных сред, новые магнитные, сегнетоэлектрические, полупроводниковые, сверхпроводящие, радиационно стойкие и сверхтвердые материалы и композиты, фотонные и нелинейно-оптические кристаллы; 8.4 новые композиционные материалы на основе металлов, керамики и углерода, нано- и микроструктурированные материалы и способы их синтеза, нанотехнологии, моделирование и создание адаптивных материалов; 12.2 физика фундаментальных взаимодействий, высоких энергий и экстремальных состояний вещества, плазма и ее применение, плазменно-пучковые технологии.

Диссертационная работа выполнена в учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» на кафедре физики в рамках ГКПНИ «Наноматериалы и нанотехнологии» задания «Нанотех 4.07» «Исследование процессов получения кремниевых нанотрубок и наноструктурированных металлических покрытий в компрессионной плазме с целью создания устройств обработки и отображения информации» (2006–2010 гг., № ГР 20063725), ГБЦ 11-3105 «Исследовать радиационные и фотоэлектрические явления в облученных компрессионной плазмой полупроводниках с целью создания радиационностойких фотовольтаических структур» (2011–2013 гг., № ГР 2012170976).

Цель и задачи исследования

Цель работы – установление закономерностей процессов формирования сферических наночастиц железа в плотной компрессионной плазме азота, ис-

следование их радиационной стойкости и изучение магнитных свойств изолированных наночастиц железа в зависимости от их размера.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. Провести анализ физических принципов получения наночастиц, методов изучения их магнитных свойств и выбрать соответствующую методику их моделирования, исследовать специфику влияния ионизирующих излучений на свойства наноразмерных объектов, определить перспективы применения магнитных наночастиц в современных системах записи и хранения информации, в биомедицинских приложениях.

2. Исследовать закономерности процессов формирования сферических наночастиц из металлического пара в плотной компрессионной плазме. Разработать соответствующую модель фазового перехода и физико-математический формализм описания процессов формирования наночастиц железа в плотной компрессионной плазме.

3. Исследовать характер распределения намагниченности в изолированных ферромагнитных наночастицах железа, их магнитный момент и собственное внешнее магнитное поле в зависимости от размера частиц.

4. Исследовать радиационно-стимулированные процессы в сферических наночастицах железа при их облучении.

Объект исследования – наночастицы железа сферической формы, сформированные из металлического пара в компрессионной плазме. *Предмет исследования* – закономерности процессов формирования наночастиц железа из металлического пара в компрессионной плазме, их магнитные свойства и радиационная стойкость.

Положения, выносимые на защиту

1. Кинетическая модель формирования сферических наночастиц железа из металлического пара в плотной компрессионной плазме, которая учитывает не только диффузию, связанную со свободным движением атомов, но и испарение атомов с поверхности частицы, а также их силовое взаимодействие; при начальных концентрациях пара атомов железа $n_0 \sim 10^{27} \text{ м}^{-3}$ основным вкладом в рост частиц является силовое взаимодействие, а при $n_0 < 10^{25} \text{ м}^{-3}$ – диффузия, вклад испарения возрастает с уменьшением начальной концентрации и понижением температуры; к уменьшению размеров образующейся наночастицы приводит увеличение температуры при $n_0 > 10^{27} \text{ м}^{-3}$ и уменьшение температуры при $n_0 < 10^{27} \text{ м}^{-3}$.

2. Резонансно-волновой формализм описания фазового перехода «пар – жидкость», в рамках которого образование новой фазы связано с резонансным возрастанием параметра порядка. Критические характеристики фазового перехода «пар – жидкость», полученные в рамках разработанного резонансно-волнового подхода: минимальный радиус устойчивого зародыша-капли в процессе формиро-

вания железных наночастиц сферической формы из металлического пара в компрессионной плазме равен $R_{\text{кр}} = 1,23 \pm 0,02$ нм, соответствующая ему величина волнового вектора $q_{\text{кр}} = (3,02 \pm 0,12) \cdot 10^8 \text{ м}^{-1}$ и линейный размер области, занимаемой устойчивым состоянием новой фазы (жидкой каплей), составляет $20,80 \pm 0,83$ нм.

3. Минимальное расстояние h_{min} между двумя одинаковыми сферическими наночастицами железа, на котором энергия одной из них в собственном размагничивающем поле превосходит более чем в 10 раз величину энергии этой частицы в магнитном поле другой, для однородно намагниченных частиц радиусом $R = 5 \div 12$ нм составляет $h_{\text{min}} \approx 1,75R$, а для частиц с вихревой намагниченностью с увеличением их радиуса от 13 до 30 нм уменьшается с $1,53R$ до $1,10R$, что может служить физической основой создания устройств магнитной записи и хранения информации сверхвысокой плотности и биофункциональных наноматериалов.

4. Наноразмерные частицы железа обладают повышенной радиационной стойкостью, обусловленной радиационно-стимулированными процессами, приводящими к уменьшению дефектности объема (до 80 % в частицах радиусом $R < 75$ нм за время 10^{-11} с) и происходящими по ударным, термоупругим и диффузионным механизмам, что позволяет создавать наноструктурированные радиационно стойкие материалы.

Личный вклад соискателя

В диссертации представлены результаты работ, выполненных соискателем лично и в соавторстве. Определение структуры, целей и задач работы, обсуждение и обобщение полученных научных результатов исследований проводились совместно с научным руководителем доктором физико-математических наук, профессором Н.Т. Квасовым. Расчет магнитной структуры проводился совместно с П.В. Вашкелем (БГУИР). Соавторы работ д-р физ.-мат. наук В.В. Углов (БГУ) и Ю.А. Петухов (БГУИР) принимали участие в обсуждении результатов работы.

Построение моделей, их математическое описание, численные оценки и компьютерное моделирование выполнены соискателем лично. Соискатель принимала непосредственное участие в подготовке докладов и публикаций. Диссертационная работа выполнена во время обучения в заочной аспирантуре учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

Апробация результатов диссертации

Основные результаты исследований по теме диссертации были представлены на следующих международных конференциях: VI International Conference

«Plasma Physics and Plasma Technology» (PPPT-6) (Minsk, Belarus, 2009); XL, XLI и XLII Международные конференции «Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами» (Москва, Россия, 2010, 2011, 2012); XXI Международная конференция «Радиационная физика твердого тела» (Севастополь, Украина, 2011); 1st International Conference «Nanomaterials: Applications and Properties» (Alushta, Crimea, Ukraine, 2011); 9-я и 10-я Международные конференции «Взаимодействие излучений с твердым телом» (ВИТТ) (Минск, Беларусь, 2011, 2013).

Опубликованность результатов диссертации

Основные результаты диссертации опубликованы в 16 научных работах, в том числе 6 статей в рецензируемых научных журналах, 6 статей в сборниках материалов научных конференций и 4 работы в сборниках тезисов докладов на конференциях.

Общий объем публикаций по теме диссертации, соответствующих пункту 18 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий в Республике Беларусь, составляет 5,5 авторского листа, из которых 3,2 авторского листа – статьи в рецензируемых журналах.

Структура и объем диссертации

Диссертационная работа состоит из перечня условных обозначений, введения, общей характеристики работы, пяти глав с выводами по каждой главе (включая литературный обзор, описание экспериментальных и расчетных методов исследования и три главы, в которых представлены результаты исследований), заключения, библиографического списка.

Полный объем диссертации составляет 147 страниц, из которых 104 страницы основного текста, перечень условных обозначений на 2 страницах, 63 рисунка на 26 страницах, 2 таблицы на 1 странице, библиографический список из 176 наименований, включая 16 публикаций автора, на 14 страницах.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении и общей характеристике работы** обоснована актуальность темы диссертационной работы, определены основные направления исследований, сформулированы цель и задачи исследования, изложены основные положения, выносимые на защиту.

В **первой главе** проведен обзор научных публикаций по теме диссертации. Анализ литературных данных показал, что ферромагнитные наночастицы имеют большие перспективы в области создания устройств магнитной записи и

хранения информации сверхвысокой плотности, биофункциональных наноматериалов и др. Показано, что в настоящее время существуют разнообразные методы получения наночастиц, среди которых наиболее перспективными являются плазменные методы. Отмечено, что воздействие компрессионного плазменного потока на кремний с введением в плазму железного порошка приводит к формированию практически по всей поверхности мишени наноструктурированного покрытия, представляющего собой слой сферических металлических частиц размерами от 10 до 300 нм. Процессы нуклеации и образования металлических кластеров в магнетронной плазме на основе кинетического подхода в рамках модели жидкой капли рассматриваются многими авторами, но формирование металлических наночастиц из газофазной среды в компрессионной плазме практически не рассматривается. Несмотря на достаточно интенсивное изучение специфических магнитных свойств нанообъектов и наноматериалов, в литературе не обнаружено работ, посвященных детальному исследованию магнитной структуры сферических частиц железа в зависимости от их размера, а также ее эволюции под действием внешнего магнитного поля. Проведенный анализ научных публикаций свидетельствует о большом числе появившихся в последнее время работ по изучению радиационной стойкости наноструктур, однако вопросы о радиационно-стимулированных процессах диффузии и массопереноса, деформации и релаксации, образования и взаимодействия радиационных дефектов в нанообъектах (в том числе и в ферромагнитных наночастицах железа сферической формы) и их радиационной стойкости нуждаются в дальнейших детальном исследовании.

Во второй главе описаны экспериментальные и теоретические методы исследования. Отмечено, что при рассмотрении процесса формирования сферических наночастиц из металлического пара в плотной компрессионной плазме на основе кинетического подхода в рамках модели жидкой капли необходимо учитывать не только диффузию, но и испарение атомов с поверхности частицы, а также силовое взаимодействие объединяющихся атомов. Новым в предлагаемом подходе является введение в рассмотрение силы взаимодействия $\vec{F} = -\vec{\nabla}U$ атомов при нуклеации. В диссертационной работе потенциальная энергия U была выбрана в форме Леннард-Джонса.

Теоретическую основу исследований магнитных свойств изолированных сферических наночастиц составляли принципы и методы микромагнетизма – феноменологической теории, базирующейся на континуальном подходе. Нахождение пространственного распределения намагниченности в наночастице проводилось путем минимизации ее свободной энергии Гиббса, включающей обменную энергию, магнитостатическую энергию, энергию одноосной магнитной анизотропии и энергию во внешнем магнитном поле. Минимизация свободной энергии осуществлялась интегрированием уравнения Ландау – Лифши-

где с учетом диссипации и релаксационным слагаемым в форме Гильберта (уравнения Ландау – Лифшица – Гильберта) с помощью пакета микромагнитного моделирования Nmag с гибким методом конечных элементов с пользовательским интерфейсом на основе языка программирования Python.

В третьей главе приведены результаты исследования процессов зарождения и роста сферических наночастиц из металлического пара в плотной компрессионной плазме. Исходя из общих термодинамических соображений, было получено следующее кинетическое уравнение для числа N атомов в сферической наночастице:

$$\frac{dN}{dt} = \alpha \left(1 - \frac{n_n}{n(t)} \right) N^{1/3} - \beta \left(1 - \frac{n_n}{n(t)} \right) + \delta n^2(t) N^{2/3}, \quad (1)$$

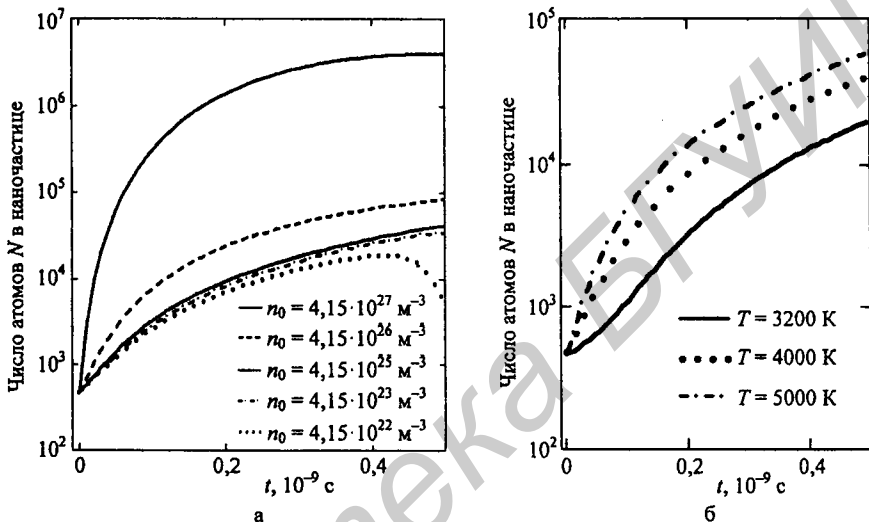
где $\alpha = \frac{3d_{12}}{n_k} \left(\frac{4\pi n_k}{3} \right)^{2/3}$; $\beta = \frac{8\pi\sigma_n d_{12}}{kT n_k}$; $\delta = \frac{27\pi d_{12} A_L}{80kT n_k} \left(\frac{4\pi n_k}{3} \right)^{5/3}$; $d_{12} = n(t) \cdot D_{12}$.

В полученных выражениях n_n – концентрация насыщенного металлического пара; $n(t)$ – концентрация атомов металлического пара; n_k – концентрация атомов в наночастице; σ_n – коэффициент поверхностного натяжения; k – постоянная Больцмана; T – температура; A_L – параметр Леннард-Джонса; D_{12} – коэффициент диффузии бинарной смеси «металлический пар – буферный газ».

Первое слагаемое в уравнении (1) описывает процесс диффузии, второе учитывает испарение атомов с поверхности формирующейся частицы, третье обусловлено силовым взаимодействием атомов. Проведен расчет параметров потенциальной энергии Леннард-Джонса для железа и коэффициента диффузии бинарной смеси «пар атомов железа – азот». Моделирование процесса роста наночастиц железа проводилось для начальных концентраций n_0 металлического пара $(4,15 \cdot 10^{27} \div 4,15 \cdot 10^{22}) \text{ м}^{-3}$ и температур 3200 К, 4000 К и 5000 К (рисунок 1).

Показано, что при $T = 4000 \text{ К}$ снижение начальной концентрации приводит к уменьшению размера наночастицы от $3,94 \cdot 10^6$ атомов (радиус $\sim 23,2 \text{ нм}$) при $n_0 = 4,15 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ до $5,12 \cdot 10^3$ атомов (радиус $\sim 2,5 \text{ нм}$) при $n_0 = 4,15 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$. Установлено, что при $n_0 > 1,00 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ увеличение температуры приводит к уменьшению размера частицы, при $n_0 < 1,00 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ – к его возрастанию, а при $n_0 = 1,00 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ изменение температуры не оказывает заметного влияния на формирование наночастицы. Анализ вклада отдельных процессов (диффузии, испарения и силового взаимодействия) при формировании наночастиц железа в компрессионной плазме при различных термодинамических условиях показал, что при начальной концентрации $n_0 = 4,15 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ определяющую роль в формировании

наночастиц играет силовое взаимодействие объединяющихся атомов, которое с понижением начальной концентрации уменьшается. При концентрациях $n_0 < 10^{25} \text{ м}^{-3}$ вклад диффузионных процессов в рост наночастиц железа в компрессионной плазме является основным. Уменьшение начальной концентрации атомов металлического пара и (или) понижение температуры приводит к увеличению удельного вклада процесса испарения в формирование наночастиц железа.



а – при температуре $T = 4000 \text{ K}$; б – при начальной концентрации пара атомов железа $n_0 = 4,15 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$

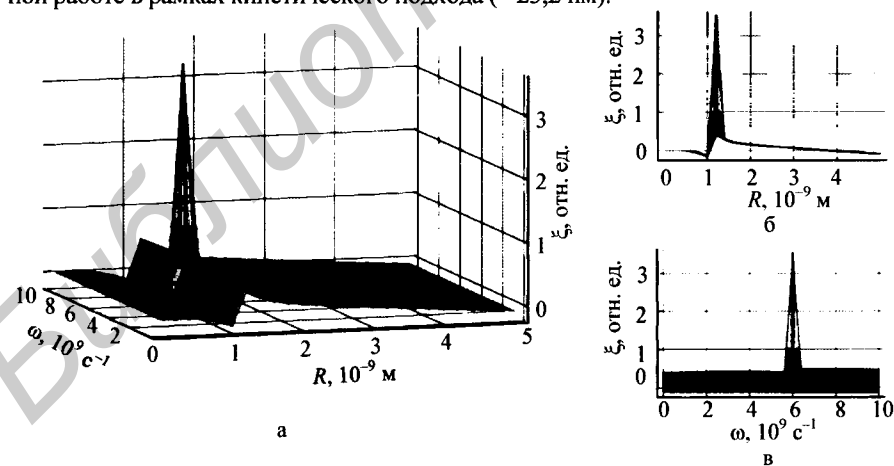
Рисунок 1 – Временная эволюция числа атомов наночастицы железа в компрессионной плазме

Разработан физико-математический формализм, в рамках которого фазовый переход представляется в виде резонансного отклика системы взаимодействующих элементов на соответствующие термодинамические условия (волновой подход описания фазовых переходов на языке параметра порядка). Показано, что каждая термодинамическая система обладает собственной резонансной частотой, соответствующей критической точке фазового перехода, а переход системы в новое состояние – фазовый переход – можно представить в виде распространения волны новой фазы. В случае фазового перехода в жидкое состояние системы молекул пара на основании закона сохранения массы для характеризующей концентрации величины ξ (параметра порядка) получено следующее уравнение:

$$\xi(\vec{R}, \omega) = 2 \sum_m C(\vec{q}_m) \frac{\Gamma(\vec{q}_m)}{[\omega - \Omega(\vec{q}_m)]^2 + \Gamma^2(\vec{q}_m)} \cos(\vec{q}_m \cdot \vec{R}), \quad (2)$$

где R – текущий радиус зародыша новой фазы (зародыша наночастицы); ω – текущая частота волны новой фазы; $C(\vec{q}_m)$ – амплитуда волны новой фазы с волновым вектором \vec{q}_m ; $\Gamma(\vec{q}_m)$ – величина, характеризующая связанное с неустойчивостью зародыша затухание; $\Omega(\vec{q}_m)$ – характеристическая (резонансная) частота волны новой фазы. Формирование новой фазы начинается с образования устойчивого зародыша наночастицы радиусом $R_{кр}$, определяющего волновой вектор $\vec{q}_{кр}$ (значение $q_{кр}$ определяется из условия $\Gamma(\vec{q}_{кр}) \rightarrow 0$) и соответственно характеристическую частоту $\Omega(\vec{q}_{кр})$. Это явление выражается в резонансном возрастании параметра порядка $\xi(\vec{R}, \omega)$. На основе данного формализма описан фазовый переход «пар – жидкость», проведен расчет параметра порядка $\xi(\vec{R}, \omega)$ в процессе образования наночастиц железа в компрессионной плазме при различных температурах и концентрациях пара атомов железа (рисунок 2).

Полученные результаты свидетельствуют о том, что при определенных условиях имеет место резонансное поведение параметра порядка, указывающее на качественное изменение физического состояния системы, т. е. фазовый переход из газообразного состояния в жидкое. При $T = 4000$ К и $n = 4,15 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ определен минимальный радиус устойчивого зародыша-капли в процессе формирования железных наночастиц из пара в компрессионной плазме $R_{кр} = 1,23 \pm 0,2$ нм, соответствующая ему величина волнового вектора $q_{кр} = (3,02 \pm 0,12) \cdot 10^8 \text{ м}^{-1}$ и размер занимаемой устойчивым состоянием новой фазы (жидкой каплей) области $20,80 \pm 0,83$ нм, что практически полностью совпадает с результатами, полученными в диссертационной работе в рамках кинетического подхода ($\sim 23,2$ нм).



а – трехмерное изображение; б – вид в плоскости (R, ξ) ; в – вид в плоскости (ξ, ω)

Рисунок 2 – Зависимость параметра порядка $\xi(R, \omega)$ при $T = 4000$ К и $n = 4,15 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$

В четвертой главе представлены результаты микромагнитного моделирования магнитных свойств изолированных сферических ферромагнитных наночастиц железа радиусами $R = 5 \div 30$ нм, полученные на основании данных петель гистерезиса (рисунок 3). Составлена диаграмма состояний магнитной структуры сферических наночастиц железа в зависимости от их радиуса R и напряженности H_{ext} внешнего магнитного поля (рисунок 4). Выявлено, что частицы $R = 5 \div 12$ нм сохраняют однородную магнитную структуру; при выключении внешнего магнитного поля в частицах $R = 13 \div 15$ нм формируется продольный вихрь (ось вихря сонаправлена с осью легкого намагничивания Ox), а с радиусами $R = 16 \div 30$ нм – поперечный вихрь (рисунок 5).

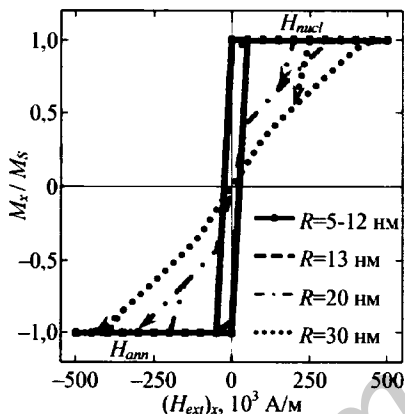
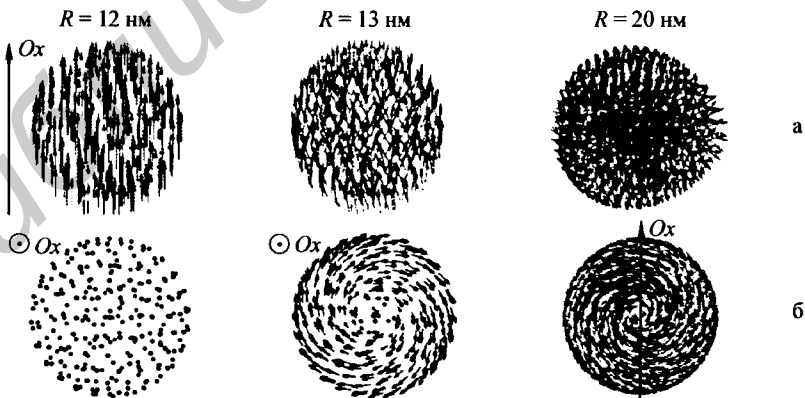


Рисунок 3 – Петли гистерезиса ферромагнитных наночастиц железа сферической формы



Рисунок 4 – Диаграмма состояний магнитной структуры сферической наночастицы железа



а – трехмерное изображение; б – вид в направлении оси

Рисунок 5 – Магнитная структура наночастиц железа при $H_{ext} = 0$

Проведен расчет модуля магнитного момента p и магнитного момента p_a в расчете на один атом наночастиц железа различных радиусов при $H_{ext} = 0$. Установлено, что зависимость магнитного момента частиц от их радиуса в области $5 \text{ нм} \leq R \leq 12 \text{ нм}$, соответствующей состоянию однородной намагниченности, описывается кубической функцией, а на участках $13 \text{ нм} \leq R \leq 15 \text{ нм}$ и $16 \text{ нм} \leq R \leq 30 \text{ нм}$, соответствующих состоянию с вихревой магнитной структурой, хорошо аппроксимируется линейными функциями (рисунок 6):

$$p(R) = \begin{cases} 7 \cdot 10^6 \cdot R^3 \quad (\text{А} \cdot \text{м}^2) & \text{при } 5 \cdot 10^{-9} \text{ м} \leq R \leq 12 \cdot 10^{-9} \text{ м}, \\ 4 \cdot 10^{-10} \cdot R + 9 \cdot 10^{-18} \quad (\text{А} \cdot \text{м}^2) & \text{при } 13 \cdot 10^{-9} \text{ м} \leq R \leq 15 \cdot 10^{-9} \text{ м}, \\ 7 \cdot 10^{-10} \cdot R + 3 \cdot 10^{-18} \quad (\text{А} \cdot \text{м}^2) & \text{при } 16 \cdot 10^{-9} \text{ м} \leq R \leq 30 \cdot 10^{-9} \text{ м}. \end{cases}$$

Выявлено, что при $5 \text{ нм} \leq R \leq 12 \text{ нм}$ значение $p_a = 2,16 \cdot \mu_B$ (μ_B – магнетон Бора), при $12 \text{ нм} \leq R \leq 16 \text{ нм}$ магнитный момент в расчете на атом достаточно резко падает, а для $R \geq 16 \text{ нм}$ его уменьшение становится более плавным. Это снижение связано с тем, что с увеличением радиуса частицы углы между векторами намагниченности отдельных ее малых элементов и осью вихря возрастают, что в свою очередь приводит к уменьшению проекций векторов \vec{M} на направление этой оси.

Получена зависимость магнитного момента сферических наночастиц железа от напряженности внешнего магнитного поля (рисунок 7), отслеживающая эволюцию их магнитной структуры во внешнем поле. Показано, что процесс образования вихревой структуры (от зарождения при H_{nuc1} до установления при $H_{ext} = 0$) менее «продолжителен» по сравнению с ее разрушением (от $H_{ext} = 0$ до H_{ann}), т. е.

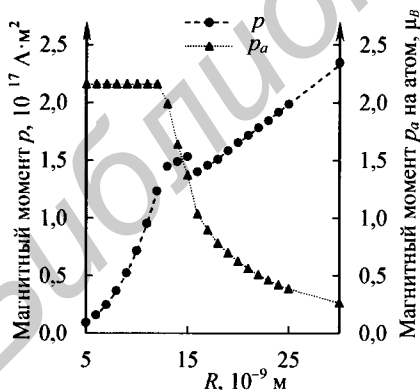


Рисунок 6 – Размерная зависимость магнитного момента p и p_a в расчете на один атом сферических наночастиц железа при $H_{ext} = 0$

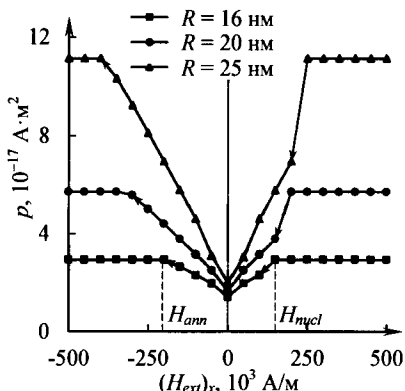


Рисунок 7 – Зависимость магнитного момента сферических наночастиц железа от напряженности внешнего магнитного поля

переходом к состоянию с однородной намагниченностью. Таким образом, можно сделать вывод, что состояние с вихревой магнитной структурой сферической наночастицы железа с $R > 15$ нм при $H_{ext} = 0$ является устойчивым равновесием.

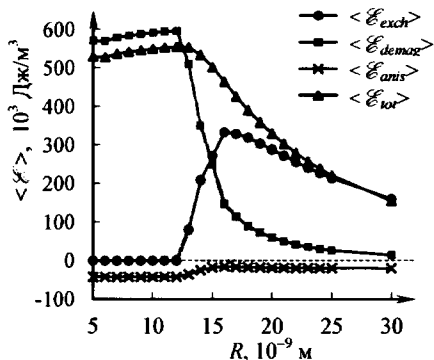


Рисунок 8 – Зависимость среднего значения объемной плотности свободной энергии и ее компонент сферической наночастицы железа от ее радиуса при $H_{ext} = 0$

железа при $H_{ext} = 0$ (рисунок 8). Выявлено, что с возрастанием R в области от 5 до 12 нм значения $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$ и $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$ практически не изменяются, а $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$ с ростом радиуса увеличивается и при $R = 12$ нм достигает своего максимального значения; в области $R = 16 \div 30$ нм компоненты $\langle \mathcal{E}_{exch} \rangle$, $\langle \mathcal{E}_{demag} \rangle$ и $\langle \mathcal{E}_{anis} \rangle$ уменьшаются.

Учитывая внутреннюю магнитную структуру сферических наночастиц железа, проведено исследование их собственных внешних магнитных полей и определена зависимость от радиуса минимального расстояния h_{min} между двумя одинаковыми наночастицами, на котором энергия одной из них в собственном размагничивающем поле превосходит более чем в 10 раз величину энергии этой частицы в магнитном поле другой (рисунок 9). Установлено, что для однородно намагниченных частиц радиусом $R = 5 \div 12$ нм минимальное расстояние составляет $h_{min} \approx 1,75R$, а

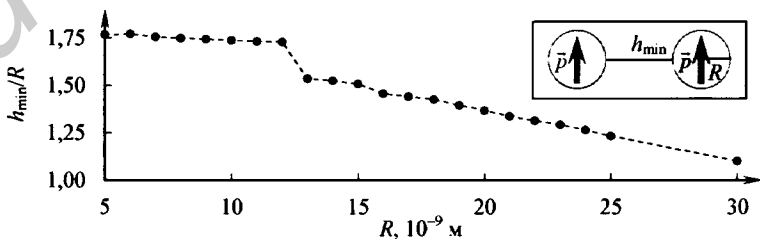


Рисунок 9 – Зависимость расстояния h_{min} от радиуса

для частиц с вихревой намагниченностью с увеличением их радиуса от 13 до 30 нм уменьшается с $1,53R$ до $1,10R$.

В пятой главе приведены результаты исследования радиационно-стимулированных процессов в сферических наночастицах железа при их облучении. На основе теории торможения ускоренных ионов проведен расчет полных потерь энергии, скорости, длины пробега и времени пробега иона железа при его торможении в железе в случае надпорогового движения (когда энергия W , сообщаемая иону в узле кристаллической решетки налетающей частицей, больше пороговой энергии смещения E_d). Подпороговое движение выбитого из узла решетки иона (атома) (когда $W \leq E_d$) описывалось динамическим уравнением, учитывающим кулоновское взаимодействие атома с собственной вакансией и квазинепрерывную диссипацию кинетической энергии в решетке:

$$\frac{d^2r}{dt^2} + \tilde{\xi} \frac{dr}{dt} + \frac{1}{m} F(r) \cdot \Theta \left(F(r) - \frac{2U_m}{a} \right) = 0, \quad (3)$$

где r – удаление атома от узла решетки; $\tilde{\xi}$ – эффективный коэффициент диссипации энергии движущегося в веществе атома; m – масса атома; U_m – энергия миграции;

a – постоянная решетки; $F(r) = -\frac{d}{dr} \left(\sum_{i,j} \frac{ij e^2 \varphi_{ij}}{4\pi \epsilon \epsilon_0 r} \right)$, где φ_{ij} – вероятность найти си-

стему «вакансия – междоузельный атом» в конфигурации, характеризующейся зарядовыми состояниями i и j соответственно; e – элементарный заряд; ϵ – коэффициент ослабления кулоновского взаимодействия; ϵ_0 – электрическая постоянная; Θ – функция Хевисайда.

При этом впервые предложена структура пороговой энергии смещения:

$$E_d = |E_{св}| + |A_{кул}| + m \tilde{\xi} \bar{v} R_{зн},$$

где $E_{св}$ – энергия связи кристалла в расчете на один атом; $A_{кул}$ – работа кулоновских сил при движении выбитого из узла решетки атома массой m до границы зоны неустойчивости радиусом $R_{зн}$; \bar{v} – средняя скорость атома.

В результате численного интегрирования уравнения (3) получено, что максимальное удаление выбитого атома железа от узла решетки с последующей его гомогенной аннигиляцией (радиус зоны неустойчивости) равно $R_{зн} \sim 2$ нм, а время жизни такого динамического дефекта (неустойчивой пары Френкеля) составляет $\tau_{нф} \sim 10^{-11}$ с (рисунок 10). Показано, что взаимодействие обусловленного каскадом смещений возмущения среды с междоузельным атомом приво-

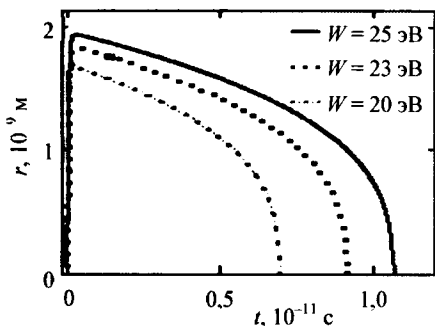


Рисунок 10 – Временная зависимость удаления выбитого атома железа от узла решетки для различных значений полученной им энергии W

дит к недиффузионному перемещению последнего в объеме наночастицы железа.

Проведен расчет ионизационных потерь энергии электронов и их максимальных пробегов, а также концентрации радиационных дефектов, образующихся в железе при облучении электронами в зависимости от их энергии и дозы облучения. Считая каскад смещений в железной наночастице мгновенным источником тепловой энергии, проведен расчет пространственно-временного распределения температу-

ры точечного источника, возникающих при этом термоупругих радиальных напряжений и их градиентов. Дана оценка величины плотности потока радиационных дефектов, обусловленного градиентом термоупругих напряжений, на основании которой показано, что дефектность объема сферических наночастиц железа, радиус которых составляет менее 75 нм, за время 10^{-11} с уменьшается на 80 %. Такие процессы могут приводить к самоочищению наночастиц от дефектов и являться причиной их повышенной радиационной стойкости.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

На основании полученных результатов исследования процессов формирования наночастиц железа в компрессионной плазме, их магнитных свойств и радиационной стойкости можно сделать следующие основные выводы:

1. Методом компьютерного моделирования определена пространственная конфигурация магнитного и электрического полей между электродами магнитоплазменного компрессора и построена модель процесса формирования потока плазмы. Проведенный статистический анализ распределения по размерам наночастиц железа, сформированных из металлического пара в компрессионной плазме, показал, что большинство наночастиц имеют радиусы от 10 до 30 нм включительно /1, 13/.

2. Процесс формирования сферических наночастиц из металлического пара в плотной компрессионной плазме рассмотрен на основе кинетического подхода в рамках модели жидкой капли с учетом не только диффузии, но и испарения атомов с поверхности частицы, а также их силового взаимодействия. Численное ин-

тегрирование соответствующего кинетического уравнения для числа N атомов железа в сферической наночастице показало, что при температуре $T = 4000$ К снижение начальной концентрации пара с $4,15 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ до $4,15 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ приводит к уменьшению размера наночастицы от $3,94 \cdot 10^6$ атомов (радиус $\sim 23,2$ нм) до $5,12 \cdot 10^3$ атомов (радиус $\sim 2,5$ нм). Увеличение температуры с 3200 до 5000 К при начальной концентрации $n_0 > 1,00 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ приводит к уменьшению размера образующейся частицы, при $n_0 < 1,00 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ – к его возрастанию. Проанализирован вклад отдельных процессов (диффузии, испарения и силового взаимодействия) в формирование наночастиц железа в компрессионной плазме при различных термодинамических условиях /3, 7/.

3. Разработан физико-математический формализм, в рамках которого фазовый переход представлен в виде резонансного отклика системы взаимодействующих элементов на соответствующие термодинамические условия (волновой подход к описанию фазовых переходов на языке параметра порядка). Показано, что каждая термодинамическая система обладает собственной резонансной частотой, соответствующей критической точке фазового перехода. На основе данного формализма описан фазовый переход «пар – жидкость», проведен расчет параметра порядка $\xi(R, \omega)$ в процессе образования наночастиц железа в компрессионной плазме при различных температурах и концентрациях пара атомов железа. Полученные результаты свидетельствуют о том, что при определенных условиях имеет место резонансное поведение параметра порядка, указывающее на качественное изменение физического состояния системы, т. е. фазовый переход из газообразного состояния в жидкое /2, 8, 9, 10/.

4. Расчет магнитной структуры и петель гистерезиса наночастиц железа сферической формы (радиусом $R = 5 \div 30$ нм), проведенный с помощью программного пакета микромагнитного моделирования Nmag, показал, что для частиц с радиусами $5 \div 12$ нм петли имеют одинаковую прямоугольную форму, а начиная с радиуса 13 нм, вид кривой намагничивания меняется и с увеличением размера частицы принимает форму, характерную для процессов зарождения и эволюции вихревой магнитной структуры. Составлена диаграмма состояний магнитной структуры сферических наночастиц железа в зависимости от их радиуса и напряженности внешнего магнитного поля. Приведено детальное описание вихревой структуры, наблюдаемой в наночастицах железа радиусами $R = 13 \div 30$ нм. Расчет магнитного момента сферических наночастиц железа, показал, что зависимость $p(R)$ имеет вид $p(R) = 7,00 \cdot 10^6 \cdot R^3$ ($\text{А} \cdot \text{м}^2$) при $R = 5 \div 12$ нм, $p(R) = 4,24 \cdot 10^{-10} \cdot R + 8,91 \cdot 10^{-18}$ ($\text{А} \cdot \text{м}^2$) при $R = 13 \div 15$ нм, $p(R) = 6,76 \cdot 10^{-10} \cdot R + 2,97 \cdot 10^{-18}$ ($\text{А} \cdot \text{м}^2$) при $R = 16 \div 30$ нм. На основании проведенных расчетов компонент полной энергии и собственных внешних магнитных полей сферических наночастиц железа определено минимальное расстояние h_{min} между двумя одинаковыми частицами, на котором

энергия одной из них в собственном размагничивающем поле (E_{demag}) превосходит более чем в 10 раз величину энергии этой частицы в магнитном поле другой (E_{ex}): для однородно намагниченных частиц радиусом $R = 5 \div 12$ нм h_{min} составляет $\sim 1,75R$, а для частиц с вихревой намагниченностью с увеличением их радиуса от 13 до 30 нм h_{min} уменьшается с $1,53R$ до $1,10R/6, 12, 16'$.

5. Разработана модель подпорогового движения выбитого из узла решетки атома, обусловленного его кулоновским взаимодействием с собственной вакансией и квазинепрерывной диссипацией энергии, в рамках которой для железа определен радиус зоны неустойчивости $R_{3n} \sim 2$ нм и время жизни неустойчивой пары Френкеля $\sim 10^{-11}$ с. Предложена структура пороговой энергии смещения $E_d = |E_{св}| + |A_{кул}| + m\tilde{\xi}\bar{v}R_{3n}$, где $E_{св}$ – энергия связи кристалла в расчете на один атом, $A_{кул}$ – работа кулоновских сил при движении выбитого из узла решетки атома массой m до границы зоны неустойчивости радиусом R_{3n} , $\tilde{\xi}$ – эффективный коэффициент диссипации энергии движущегося в веществе атома, \bar{v} – его средняя скорость. Установлено, что взаимодействие обусловленного каскадом смещений возмущения среды с междоузельным атомом приводит к недиффузионному перемещению последнего в объеме наночастицы железа. Проведен расчет ионизационных потерь энергии электронов и их максимальных пробегов, пространственно-временного распределения температуры точечного источника (считая каскад смещений мгновенным источником тепловой энергии), термоупругих радиальных напряжений и их градиентов в наночастице железа. Дана оценка величины плотности потока радиационных дефектов, обусловленного градиентом термоупругих напряжений, на основе которой определено, что за время 10^{-11} с дефектность сферических наночастиц железа радиусом менее 75 нм уменьшается на 80 % за счет потока через их поверхность дефектов, вызванного градиентом радиальных термоупругих напряжений. Установлено, что такие процессы приводят к самоочищению сферических наночастиц железа от дефектов и являются причиной их повышенной радиационной стойкости /4, 5, 11, 14, 15/.

Рекомендации по практическому использованию результатов

Разработанная физико-математическая модель процесса формирования сферических наночастиц из металлического пара в плотной компрессионной плазме, основанная на кинетическом подходе и дополнительно учитывающая испарение атомов с поверхности частицы и их силовое взаимодействие, а также резонансно-волновой формализм описания фазового перехода «пар – жидкость» могут найти применение в разработках и совершенствовании относительно простых, недорогостоящих и воспроизводимых практических методик синтеза наночастиц и содержащих их материалов.

Установленные закономерности поведения магнитной структуры сферических наночастиц железа радиусом $R = 5\div 30$ нм могут служить физической основой создания битовых ячеек памяти в устройствах магнитной записи и хранения информации сверхвысокой плотности, биофункциональных наноматериалов, применяемых в диагностике, адресной терапии, регенерации биотканей и т. п.

Научные результаты выполненных исследований используются в учебном процессе на кафедре физики учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» в качестве материалов лекционного курса по дисциплине «Физика» для студентов второго курса специальностей «Информационные технологии и управление в технических системах» и «Промышленная электроника», а также дисциплине «Физические основы записи, хранения и передачи информации» для магистрантов специальности «Вычислительные машины и системы».

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ

Статьи в рецензируемых научных журналах

1. Формирование наноразмерных кластеров в плотной компрессионной плазме / Н.Т. Квасов, А.В. Пунько, С.С. Каравай, И.Л. Дорошевич, Ю.Г. Шедко, Ю.А. Петухов, В.В. Углов, В.М. Асташинский, А.М. Кузьмицкий // Доклады БГУИР. – 2010. – № 2 (48). – С. 59–64.
2. О формировании магнитных однодоменных частиц в плазме / В.М. Асташинский, И.Л. Дорошевич, Н.Т. Квасов, Ю.А. Петухов, А.В. Пунько, В.В. Углов // Доклады БГУИР. – 2011. – № 4 (58). – С. 49–54.
3. Динамика мелкодисперсных включений, массоперенос и формирование новых фаз в компрессионной плазме / Н.Т. Квасов, А.В. Пунько, И.Л. Дорошевич, Ю.А. Петухов, В.В. Углов, М.С. Чибирай, В.М. Асташинский // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2012. – № 2. – С. 52–55.
4. Радиационная стойкость наноразмерных ферромагнитных элементов памяти / В.М. Асташинский, И.Л. Дорошевич, Н.Т. Квасов, Ю.А. Петухов, А.В. Пунько, В.В. Углов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2013. – № 1. – С. 89–93.
5. Радиационная стойкость кремниевых наноструктурированных фотовольтаических элементов, полученных в компрессионной плазме / В.В. Углов, Н.Т. Квасов, В.М. Асташинский, Ю.А. Петухов, А.М. Кузьмицкий, И.Л. Дорошевич, С.В. Ластовский // Доклады БГУИР. – 2013. – № 2 (72). – С. 21–25.

6. Об особенностях магнитной структуры сферических наночастиц железа / В.В. Углов, В.М. Асташинский, Н.Т. Квасов, И.Л. Дорошевич // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2014. – № 8. – С. 95–101.

Статьи в сборниках материалов конференций

7. Formation of nanosize clusters in dense compression plasma / V.M. Astashynski, V.V. Uglov, N.T. Kvasov, A.V. Punko, I.L. Doroshevich, Yu.G. Shedko, Yu.A. Petukhou // Plasma Physics and Plasma Technology (PPPT-6) : Contributed Papers of VI International Conference, Minsk, Belarus, September 28 – October 2, 2009 : in 2 vol. / B.I. Stepanov Institute of physics, National Academy of Sciences of Belarus. – Minsk, 2009. – Vol. 1. – P. 406–409.

8. Фазовые переходы в компрессионной плазме и формирование кластеров различных уровней / В.М. Асташинский, И.Л. Дорошевич, Н.Т. Квасов, Ю.А. Петухов, А.В. Пунько, В.В. Углов // Радиационная физика твердого тела : труды XXI Междунар. конф., Севастополь, 22–27 авг. 2011 г. : в 2 т. / ФГБНУ «НИИ ПИМТ» ; под ред. Г.Г. Бондаренко. – М., 2011. – Т. 2. – С. 475–483.

9. Дорошевич, И.Л. Фазовые переходы в плазме при формировании наноструктурированных покрытий / И.Л. Дорошевич, Н.Т. Квасов // Взаимодействие излучений с твердым телом : материалы 9-й Междунар. конф., Минск, 20–22 сент. 2011 г. / Белорус. гос. ун-т ; редкол. : В.М. Анищик (отв. ред.) [и др.]. – Минск, 2011. – С. 303–305.

10. Formation of silicon-based nanostructures by compression plasma flows / Y.A. Petukhou, V.V. Uglov, N.T. Kvasov, A.V. Punko, I.L. Doroshevich, V.M. Astashynski, A.M. Kuzmitski // Nanomaterials: Applications & Properties : 1st International Conference Proceedings, Alushta, Crimea, Ukraine, Sept. 27–30, 2011 : in 2 vol. / Sumy State University ; ed. A. Pogrebnyak [at al.]. – Sumy, 2011. – Vol. 1, Part II. – P. 440–447.

11. Radiation effects in nanosized clusters / V.M. Astashynski, I.L. Doroshevich, N.T. Kvasov, A.V. Punko, Y.A. Petukhou, V.V. Uglov // Nanomaterials: Applications & Properties : 1st International Conference Proceedings, Alushta, Crimea, Ukraine, Sept. 27–30, 2011 : in 2 vol. / Sumy State University ; ed. A. Pogrebnyak [at al.]. – Sumy, 2011. – Vol. 2, Part II. – P. 408–413.

12. Квасов, Н.Т. Формирование ферромагнитных наноструктур в компрессионной плазме и их физические свойства / Н.Т. Квасов, И.Л. Дорошевич // Взаимодействие излучений с твердым телом : материалы 10-й Междунар. конф., Минск, 24–27 сент. 2013 г. / Белорус. гос. ун-т ; редкол. : В.М. Анищик (отв. ред.) [и др.]. – Минск, 2013. – С. 254–256.

Тезисы докладов на научных конференциях

13. Динамика мелкодисперсных включений, массоперенос и формирование новых фаз в компрессионной плазме / Н.Т. Квасов, А.В. Пунько, И.Л. Дорошевич, Ю.А. Петухов, В.В. Углов, М.С. Чибирай, В.М. Асташинский // Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами : тезисы докладов XI Междунар. конф., Москва, Россия, 25 – 27 мая 2010 г. / Моск. гос. ун-т ; под ред. А. Ф. Тулинова. – М., 2010. – С. 170.

14. Радиационная стойкость наноразмерных ферромагнитных элементов памяти / В.М. Асташинский, И.Л. Дорошевич, Н.Т. Квасов, Ю.А. Петухов, В.В. Углов // Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами : тезисы докладов XII Междунар. конф., Москва, 31 мая – 2 июня 2011 г. / Моск. гос. ун-т, Науч.-исслед. ин-т ядер. физики ; под ред. проф. М.И. Панасюка. – М., 2011. – С. 130.

15. Радиационная стойкость кремниевых наноструктурированных фотовольтаических элементов, полученных в компрессионной плазме / В.В. Углов, Н.Т. Квасов, В.М. Асташинский, Ю.А. Петухов, А.М. Кузьмицкий, И.Л. Дорошевич, С.В. Ластовский // Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами : тезисы докладов XII Междунар. конф., Москва, 29–31 мая 2012 г. / Моск. гос. ун-т, Науч.-исслед. ин-т ядер. физики ; под ред. проф. М.И. Панасюка. – М., 2012. – С. 130.

16. Углов, В.В. О магнитной структуре ферромагнитных наночастиц железа / В.В. Углов, Н.Т. Квасов, И.Л. Дорошевич // Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами : тезисы докладов XII Междунар. конф., Москва, 29–31 мая 2012 г. / Моск. гос. ун-т, Науч.-исслед. ин-т ядер. физики ; под ред. проф. М.И. Панасюка. – М., 2012. – С. 180.



РЭЗЬЮМЭ

Дарашэвіч Ірына Леанідаўна

КІНЕТЫКА ФАРМАВАННЯ НАНАЧАСЦІЦ ЖАЛЕЗА Ў КАМПРЭСІОННАЙ ПЛАЗМЕ, ІХ МАГНІТНЫЯ ЎЛАСЦІВАСЦІ І РАДЫЯЦЫЙНАЯ ЎСТОЙЛІВАСЦЬ

Ключавыя словы: наначасціцы, кампрэсіонная плазма, фазавы пераход, параметр парадку, магнітныя ўласцівасці, магнітная структура, радыяцыйная ўстойлівасць, радыяцыйныя дэфекты.

Мэта працы: ўсталяванне заканамернасцяў працэсаў фарміравання сферычных наначасціц жалеза ў шчыльнай кампрэсіоннай плазме, даследаванне іх магнітных уласцівасцей і радыяцыйнай стойкасці.

Атрыманыя вынікі і іх навізна: на аснове кінэтычнага падыходу ў рамках мадэлі вадкай кроплі атрымана ўраўненне, якое апісвае фарміраванне наначасціц з металічнага пару ў шчыльнай кампрэсіоннай плазме з улікам дыфузіі, выпарэння атамаў з паверхні часціцы і іх сілавога ўзаемадзеяння, і праведзена яго колькаснае інтэграванне. Распрацаваны фізіка-матэматычны фармалізм, у рамках якога фазавы пераход уяўляецца ў выглядзе рэзананснага водгуку сістэмы ўзаемадзеяння ачужчэных элементаў на адпаведныя тэрмадынамічныя ўмовы (хвалевы падыход да апісання фазавых пераходаў на мове параметра парадка). На аснове дадзенага фармалізму апісаны фазавы пераход «пар – вадкасць» і праведзены разлік параметра парадка ў працэсе фарміравання наначасціц жалеза ў кампрэсіоннай плазме пры розных тэмпературах і канцэнтрацыях пара атамаў жалеза.

Праведзены разлік магнітнай структуры і пяць гістэрэзісу наначасціц жалеза сферычнай формы (радыусамі $R = 5 \div 30$ нм) з дапамогай праграмага пакета мікрамагнітнага мадэліравання Nmag. Усталяваны размерны эффект у змене сіметрыі намагнічанасці – аналаг фазавога пераходу другога роду. Прыведзена дэталёвае апісанне віхравой структуры, назіраемай у наначасціц жалеза з $R = 13 \div 30$ нм, разлічаны іх магнітныя моманты і прааналізаваны скалярныя палі кампанент аб'ёмнай шчыльнасці энергіі.

Паказана, што для сферычных наначасціц жалеза характэрна іх радыяцыйна-стымуляваная самаарганізацыя, якая адбываецца па розных механізмах і якая прыводзіць да памяншэння дэфектнасці аб'ёму. У аснове гэтых механізмаў ляжаць ударныя, тэрмапругія і дыфузійныя працэсы.

Вобласць выкарыстання: сістэмы запісу і захоўвання інфармацыі звысвысокай шчыльнасці, біямедыцынскі дадатак (адрасная тэрапія, дыягностыка, лакальная гіпертэрмія, тканкавая інжынерія).

РЕЗЮМЕ

Дорошевич Ирина Леонидовна

КИНЕТИКА ФОРМИРОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА В КОМПРЕССИОННОЙ ПЛАЗМЕ, ИХ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ

Ключевые слова: наночастицы, компрессионная плазма, фазовый переход, параметр порядка, магнитные свойства, магнитная структура, радиационная стойкость, радиационные дефекты.

Цель работы: установление закономерностей процессов формирования сферических наночастиц железа в плотной компрессионной плазме, исследование их магнитных свойств и радиационной стойкости.

Полученные результаты и их новизна: на основе кинетического подхода в рамках модели жидкой капли получено уравнение, описывающее формирование наночастиц из металлического пара в плотной компрессионной плазме с учетом диффузии, испарения атомов с поверхности частицы и их силового взаимодействия, и проведено его численное интегрирование. Разработан физико-математический формализм, в рамках которого фазовый переход представляется в виде резонансного отклика системы взаимодействующих элементов на соответствующие термодинамические условия (волновой подход к описанию фазовых переходов на языке параметра порядка). На основе данного формализма описан фазовый переход «пар – жидкость» и проведен расчет параметра порядка в процессе образования наночастиц железа в компрессионной плазме при различных температурах и концентрациях пара атомов железа.

Проведен расчет магнитной структуры и петель гистерезиса наночастиц железа сферической формы (радиусами $R = 5\div 30$ нм) с помощью программного пакета микромагнитного моделирования Nmag. Установлен размерный эффект в изменении симметрии намагниченности – аналог фазового перехода второго рода. Приведено детальное описание вихревой структуры, наблюдаемой в наночастицах железа с $R = 13\div 30$ нм, рассчитаны их магнитные моменты и проанализированы скалярные поля компонент объемной плотности энергии.

Показано, что для сферических наночастиц железа характерна их радиационно-стимулированная самоорганизация, происходящая по различным механизмам и приводящая к уменьшению дефектности объема. В основе этих механизмов лежат ударные, термоупругие и диффузионные процессы.

Область применения: системы записи и хранения информации сверхвысокой плотности, биомедицинские приложения (адресная терапия, диагностика, локальная гипертермия, тканевая инженерия).

SUMMARY

Doroshevich Irina Leonidovna

KINETICS OF FORMATION OF IRON NANOPARTICLE IN COMPRESSION PLASMA, THEIR MAGNETIC PROPERTIES AND RADIATION RESISTANCE

Keywords: nanoparticles, compression plasma, phase transition, order parameter, magnetic properties, magnetic structure, radiation resistance, radiation defects.

Aim of the work: to establish regularities in formation processes of iron spherical nanoparticles in dense compression plasma, and to investigate magnetic properties and radiation resistance of the obtained nanoparticles.

The results obtained and their novelty: on the basis of the kinetic approach within the liquid droplet model to derive an equation describing the formation of metal nanoparticles in dense compression plasma with diffusion, evaporation of atoms from the surface of the particles and their interaction force, and then to carry out its numerical integration. Physical and mathematical formalism is developed where the phase transition is represented as a resonant response of a system of interacting elements under the relevant thermodynamic conditions (a wave approach to the description of phase transitions in the language of the order parameter). On the basis of this formalism the «vapor – liquid» phase transition is described and calculations of the order parameter in the formation of iron nanoparticles in the compression plasma at different temperatures and concentrations of iron atoms vapor are performed.

The magnetic structure and hysteresis loops of iron nanoparticles of spherical shape (radius $R = 5 \div 30$ nm) are modeled by the Nmag micromagnetic software package. The dimensional effect in change of symmetry magnetization – analog of phase transition of the second sort is established. The detailed description of the vortex magnetic structure of iron nanoparticles with radii $R = 13 \div 30$ nm is provided. Magnetic moments of obtained nanoparticles are calculated and scalar fields of energy density components are analyzed.

It is shown that iron spherical nanoparticles are characterized by radiation-stimulated self-organization. This self-organization occurs involving various mechanisms and leads to decrease of defectiveness of volume. Collision, thermo-elastic and diffusion processes are basis of these mechanisms.

Field of application: recording systems and ultra-high storage density, biomedical applications (targeted therapy, diagnostics, local hyperthermia, tissue engineering).

Научное издание

Дорошевич Ирина Леонидовна

**КИНЕТИКА ФОРМИРОВАНИЯ
НАНОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА В КОМПРЕССИОННОЙ
ПЛАЗМЕ, ИХ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА
И РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ**

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

по специальности 05.16.08 – Нанотехнологии и наноматериалы

Подписано в печать 09.10.2014.	Формат 60x84 ¹ / ₁₆ .	Бумага офсетная.
Гарнитура «Таймс».	Отпечатано на ризографе.	Усл. печ. л. 1,63.
Уч.-изд. л. 1,4.	Тираж 60 экз.	Заказ 395.

Издатель и полиграфическое исполнение: учреждение образования
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».
Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,
распространителя печатных изданий №1/238 от 24.03.2014,
№2/113 от 07.04.2014, №3/615 от 07.04.2014
ЛП №02330/264 от 14.04.2014.
220013, Минск, П. Бровки, 6