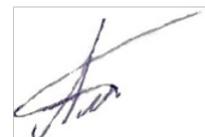


Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Уральский федеральный университет имени
первого Президента России Б.Н. Ельцина»

На правах рукописи



Амбаров Александр Васильевич

**Математическое моделирование динамических
свойств ансамбля взаимодействующих
суперпарамагнитных частиц**

1.2.2 Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург — 2022

Работа выполнена на кафедре теоретической и математической физики ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент
Елфимова Екатерина Александровна

Официальные оппоненты: **Закинян Артур Робертович**, доктор физико-математических наук, доцент, ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет» (г.Ставрополь), заведующий кафедрой теоретической и математической физики

Сесекин Александр Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», заведующий кафедрой прикладной математики и механики

Меркулов Дмитрий Игоревич, кандидат физико-математических наук, ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», старший научный сотрудник лаборатории физико-химической гидродинамики

Защита состоится «14» декабря 2022 года в 11:00 на заседании диссертационного совета УрФУ 1.2.05.22 по адресу: 620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51, к. 248, зал заседаний диссертационного совета.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени Президента России Б.Н. Ельцина», <https://dissovet2.urfu.ru/mod/data/view.php?d=12rid=4038>

Автореферат разослан «__» _____ 2022 года.

Ученый секретарь диссертационного совета, кандидат физ.-мат. наук

Косолобов Д. А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность и степень разработанности темы исследования. Встраивание магнитных наночастиц в жидкую или полимерную матрицу позволяет получить материалы, свойствами которых можно управлять с помощью внешнего магнитного поля [1–5]. Такие мягкие магнитоактивные вещества включают феррожидкости, магнитные эластомеры, феррогели, полимерные феррокомпозиты, в том числе биосовместимые. Эти материалы находят все более широкое применение в высокотехнологичных промышленных и биомедицинских технологиях, поэтому исследование их свойств является актуальной задачей. Примеры включают искусственные мышцы в манипуляторах и робототехнике, герметики, контрастные вещества для магнитного резонанса, матрицы для выращивания биологических тканей с магнитоуправляемой внутренней архитектурой [5–8].

Для теоретического описания свойств феррокомпозита широко используется модель обездвиженных дипольных твердых сфер [9–11]. Реакция на магнитное поле в таких системах возникает за счет суперпарамагнитного вращения магнитных моментов внутри частиц. Известные теории, моделирующие динамический отклик феррокомпозита, как правило, ограничиваются слабоконцентрированными системами, в которых межчастичными взаимодействиями пренебрегают [12, 13]. Однако экспериментальные данные свидетельствуют о том, что межчастичные диполь-дипольные взаимодействия значительно влияют на статические и динамические свойства ансамблей дипольных частиц [14–16].

В данной работе акцент сделан на учете диполь-дипольного взаимодействия при определении динамического магнитного отклика ансамбля взаимодействующих суперпарамагнитных частиц с выровненными осями легкого намагничивания в переменном и статическом магнитных полях. Такая система моделирует феррокомпозит, полученный при полимеризации феррожидкости в статическом магнитном поле, причем в момент полимеризации намагниченность феррожидкости достигала насыщения.

Цель работы заключается в аналитическом и численном моделировании динамических свойств ансамбля суперпарамагнитных обездвиженных взаимодействующих частиц, находящихся под влиянием переменного и статического магнитных полей.

Для достижения цели были поставлены следующие **задачи**:

1. Разработать математическую модель, которая описывает ди-

динамические магнитные свойства феррокомпозита и учитывает диполь-дипольные взаимодействия между частицами магнитного наполнителя.

2. Построить аналитические решения для намагниченности и восприимчивости ансамбля взаимодействующих суперпарамагнитных частиц в слабых переменных магнитных полях и исследовать их сходимость.

3. Определить эффективные алгоритмы численного моделирования магнитных и релаксационных характеристик ансамбля обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц.

4. Исследовать влияние межчастичных диполь-дипольных взаимодействий, направления и интенсивности внешних магнитных полей, внутренней магнитной анизотропии частиц на динамические свойства ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц.

5. Разработать программные комплексы, прогнозирующие динамические свойства ансамбля суперпарамагнитных частиц.

Методология и методы исследования диссертационного исследования. Разработанные в ходе диссертационного исследования теоретические модели основаны на методах статистической физики дипольных систем с учетом особенностей их магнитного взаимодействия. При анализе динамической восприимчивости ансамбля суперпарамагнитных взаимодействующих частиц, находящегося под действием магнитных полей, используется подход, основанный на решении уравнения Фоккера-Планка-Брауна (ФПБ). Аналитическое решение уравнения ФПБ получено с помощью теории возмущений. Для прямого численного решения уравнения ФПБ используется безусловно устойчивая конечно-разностная схема для уравнения конвекции-диффузии.

Научная новизна диссертации заключается в следующем:

1. Разработана и исследована математическая модель, одновременно учитывающая влияние межчастичных диполь-дипольных взаимодействий и амплитуды переменного магнитного поля на динамический магнитный отклик ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц.

2. Впервые определены аналитические выражения, прогнозирующие динамические магнитные характеристики системы суперпарамагнитных обездвиженных взаимодействующих магнитных частиц, находящихся в слабом переменном магнитном поле.

3. Безусловно устойчивая численная схема решения уравнения конвекции-диффузии адаптирована для решения уравнения ФПБ, в котором есть особенности при задании граничных и начальных условий.

4. Теоретически показано, что в случае параллельной конфигурации

переменного и статического магнитных полей, учет подмагничивающего статического магнитного поля приводит к немонотонным эффектам зависимости динамической восприимчивости от магнитной анизотропии и амплитуды переменного магнитного поля в системе обездвиженных взаимодействующих магнитных частиц.

Положения, выносимые на защиту:

1. Математическая модель, позволяющая прогнозировать динамические свойства ансамбля суперпарамагнитных частиц (намагниченность, динамическая восприимчивость, характерные времена релаксации) с учетом межчастичных диполь-дипольных взаимодействий, влияния внешних магнитных полей и величины магнитной анизотропии.

2. Разработанные комплексы программ, вычисляющие динамические магнитные характеристики систем суперпарамагнитных взаимодействующих магнитных частиц во внешних магнитных полях.

3. Результаты сравнения аналитических выражений и численных решений для динамической восприимчивости с данными компьютерного моделирования.

4. Интерпретация результатов аналитического и численного моделирования магнитных свойств с целью понимания физических процессов, происходящих в реальных образцах феррокомпозитов.

Теоретическая и практическая значимость работы. Теоретическая значимость работы заключается в следующем: получены аналитические выражения и численные данные, прогнозирующие магнитные динамические свойства ансамбля суперпарамагнитных взаимодействующих частиц, в зависимости от режимных параметров. Практическая значимость состоит в возможности применения построенной теории для проектирования новых магнитоактивных материалов с заданными свойствами. Практическую ценность также представляют разработанные комплексы программ, позволяющие численно описывать магнитные характеристики системы взаимодействующих частиц.

Достоверность полученных результатов. Достоверность результатов диссертационной работы подтверждается использованием апробированных статистико-термодинамических методов исследования, математической строгостью получения аналитических выражений, согласованностью теоретических результатов с данными компьютерных экспериментов. Достоверность результатов численного моделирования подтверждается успешным тестированием разработанных программных комплексов на модельных задачах, исследуемых в более ранних работах других

авторов.

Личный вклад автора. Основные результаты работы, а именно детальное теоретическое исследование ансамбля суперпарамагнитных взаимодействующих частиц во внешнем магнитном поле, адаптация разностной схемы уравнения конвекции-диффузии к уравнению ФПБ и программные комплексы, получены автором лично. Проведение выводов всех аналитических формул, разработка и отладка алгоритмов численных решений уравнений, возникающих в ходе моделирования, принадлежат автору лично. Формулирование цели, постановка задач диссертационной работы, выбор общих методик исследований, подготовка публикаций выполнены совместно с научным руководителем. Соавторы основных публикаций помогали в формулировании целей, в выборе общих методик исследований и в подготовке публикаций.

Апробация результатов. Основные положения и результаты диссертации докладывались и обсуждались на 14 представительных международных и всероссийских научных форумах: 20-й, 21-й и 22-й Зимней школе по механике сплошных сред (2017, 2019, 2021); 14-й и 15-й Международной конференции по магнитным жидкостям (2016, 2019); 4-й Международной летней школе-семинаре «Комплексные и магнитные системы из мягкой материи: физико-механические и структурные свойства» (2021); Международном вебинаре по нанотехнологиям и наноматериалам (2020); 21-й Всероссийской школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества (2021); 7-м и 8-м Евро-Азиатском симпозиуме «Тенденции в магнетизме» (2019, 2022); 3-й Российской конференции по магнитной гидродинамике (2018); Научном семинаре «Математическое и компьютерное моделирование свойств мягких магнитных материалов» (2021); 20-й Плесской конференции по нанодисперсным магнитным жидкостям (2022); VI Международной молодежной научной конференции «Физика. Технологии. Инновации ФТИ-2019» (2019).

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 16 работах, среди которых 4 статьи в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ, Аттестационным советом УрФУ и входящих в базы данных Web of Science и Scopus, 2 статьи в сборнике научных трудов, 2 комплекса программ, зарегистрированных в Федеральной службе по интеллектуальной собственности (Роспатент), а также 8 тезисов докладов на всероссийских и международных конференциях.

Благодарности. Автор благодарит научного руководителя, заведующего кафедрой теоретической и математической физики УрФУ, д.ф.-

м.н. Елфимову Е. А., а также доцента кафедры теоретической и математической физики УрФУ, к.ф.-м.н. Зверева В.С. за помощь в работе. Исследование проведено при поддержке гранта No 20-32-90209 Аспиранты Российского фонда фундаментальных исследований «Математическое моделирование динамики ансамбля взаимодействующих суперпарамагнитных частиц», 2020-2022 годы; проекта No 075-02-2022-877 Министерства науки и высшего образования РФ «Уральский математический центр».

Структура и объем работы Диссертация состоит из введения, четырех глав основного содержания, заключения и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации составляет 122 страницы машинописного текста. Диссертация содержит 50 рисунков, 97 ссылок на литературные источники и 3 приложения.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** описана актуальность работы, сформулированы цель и задачи исследования, показаны научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, сформулированы основные положения и результаты, выносимые на защиту, представлены сведения о достоверности и апробации результатов диссертационного исследования.

Первая глава «Обзор современных исследований мягких магнитоактивных материалов» позволяет оценить текущее состояние исследований свойств мягких магнитоактивных материалов. В главе рассмотрены особенности микроструктуры этих композитов, обсуждаются основные методы и подходы их моделирования. Обзор литературы показал, что физические свойства и поведение этих материалов определяются внутренней структурой магнитного наполнителя, отмечены основные нерешенные вопросы в исследовании свойств магнитоактивных композитов, решение которых представлено в последующих главах диссертации.

Вторая глава «Моделирование динамических свойств ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц» посвящена изучению влияния на магнитный отклик межчастичных диполь-дипольных взаимодействий, ориентации и амплитуды внешнего переменного магнитного поля и величины магнитной анизотропии. В данной главе изучены динамические магнитные и релаксационные свойства системы обездвиженных частиц, когда переменное магнитное поле направлено под произвольным углом к осям магнитной анизотропии. Для малых амплитуд переменного магнитного поля магнитные характеристики исследу-

довались аналитически. С помощью численного решения система суперпарамагнитных обездвиженных частиц исследована для любых амплитуд переменного магнитного поля.

В работе рассматривался монодисперсный ансамбль суперпарамагнитных обездвиженных дипольных твердых сфер размером ~ 10 нм, обездвиженных в немагнитной матрице. Эскиз образца показан на рисунке 1. Магнитный момент отдельной частицы равен произведению намагниченности насыщения M_s магнитного материала и объема ее магнитного ядра V_m : $m = M_s V_m$. Радиус-вектор положения центра массы i -ой частицы обозначается как $\mathbf{r}_i = r_i \hat{\mathbf{r}}_i = (\sin \psi_i \cos \xi_i; \sin \psi_i \sin \xi_i; \cos \psi_i)$, а вектор, описывающий ориентацию ее магнитного момента, равен $\mathbf{m}_i = m_i \hat{\mathbf{m}}_i = (\sin \theta_i \cos \varphi_i; \sin \theta_i \sin \varphi_i; \cos \theta_i)$, где $\hat{\mathbf{r}}_i$ и $\hat{\mathbf{m}}_i$ – единичные вектора. Предполагается, что внутренняя магнитная анизотропия частиц одноосная, направления осей легкого намагничивания всех частиц коллинеарны и определяется единичным вектором $\hat{\mathbf{n}}_i = (0, 0, 1)$. К образцу под произвольным углом прикладывается линейно-поляризованное переменное поле $\mathbf{h} = h_{ac} e^{i\omega t} \hat{\mathbf{h}}_{ac}$, где h_{ac} – амплитуда переменного магнитного поля, ω – частота колебаний, t – время, а $\hat{\mathbf{h}}_{ac}$ обозначает единичный вектор.

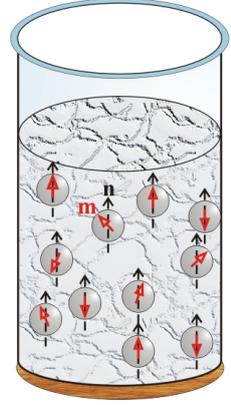


Рис. 1 – Эскиз образца.

Частицы равномерно распределены и зафиксированы в некоторой нежидкой матрице, поэтому как поступательные, так и вращательные степени свободы частиц «заморожены». В рассматриваемой системе нет броуновской релаксации из-за фиксации частиц, поэтому релаксация магнитного момента $\hat{\mathbf{m}}$ проходит только по Неелевскому механизму (магнитный момент вращается внутри тела частицы). Неелевская релаксация вызвана тепловыми флуктуациями и магнитными полями, действующими на частицу. Магнитная анизотропия частицы характеризуется параметром магнитной анизотропии σ (отношение энергии магнитной кристаллографической анизотропии к тепловой). Чем больше этот параметр, тем сложнее магнитному моменту частицы отклоняться от оси легкого намагничивания.

Ориентация магнитного момента случайно выбранной частицы (например, с номером 1) может быть описана плотностью вероятности $W(1) = W(t, x_1, \varphi_1)$, $x_1 = \cos \vartheta_1$, которая в свою очередь находится из уравнения Фоккера-Планка-Брауна (ФПБ), в котором пренебрегли гиромагнитным слагаемым в силу того, что на рассматриваемом диапазоне

частот этот эффект незначителен:

$$2\tau_D \frac{\partial W(1)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(1-x^2) \left(\frac{\partial W(1)}{\partial x} + W(1) \frac{\partial U(1)}{\partial x} \right) \right] + \quad (1)$$

$$+ \frac{1}{1-x^2} \left[\frac{\partial^2 W(1)}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(W(1) \frac{\partial U(1)}{\partial \varphi} \right) \right],$$

где $U(1)$ – энергия частицы с номером 1.

Намагниченность M ансамбля феррочастиц определяется как проекция случайно выбранного магнитного момента частицы 1 на направление магнитного поля с весовой функцией $W(1)$, усредненной по всем возможным ориентациям магнитного момента частицы 1:

$$M = \rho m \int d\hat{\mathbf{m}}_1 (\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{h}}_{ac}) W(1). \quad (2)$$

Динамическая восприимчивость вычислялась как производная намагниченности (2) по переменному магнитному полю:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial (h_{ac} e^{i\omega t})}.$$

В одночастичном приближении (диполь-дипольное взаимодействие между частицами не учитывается) энергия $U(1)$ включает в себя Неелевскую энергию магнитной анизотропии $U_N(1)$ и энергию Зеемана $U_h(1)$, характеризующую взаимодействия между магнитным моментом частицы и внешним магнитным полем:

$$U_N(1) = -\sigma (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \hat{\mathbf{m}}_1)^2, \quad U_h(1) = -\alpha_{ac} e^{i\omega t} (\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{h}}_{ac}),$$

где $\alpha_{ac} = (\mu_0 m h_{ac}) / (k_B T)$ – параметр Ланжевена переменного магнитного поля (характеризует амплитуду переменного магнитного поля), μ_0 – магнитная постоянная.

В работе одночастичная энергия $U(1) = U_N(1) + U_h(1)$ в уравнении ФПБ (1) была расширена за счет включения диполь-дипольных взаимодействий на основе модифицированной модели среднего поля первого порядка (ММФ1) [17]:

$$U(1) = U_N(1) + U_h(1) + \rho \langle -U_d(1, 2) W^{id}(2) \Theta(1, 2) \rangle_2, \quad (3)$$

где ρ – объемная концентрация частиц, $U_d(1, 2)$ – энергия диполь-дипольного взаимодействия между магнитными моментами частиц 1 и

2, $W^{id}(2)$ – плотность вероятности ориентации магнитного момента частицы 2, функция Хевисайда $\Theta(1, 2)$ описывает непроницаемость частиц, $\langle \dots \rangle_2$ – означает усреднение по всем возможным ориентациям магнитного момента частицы 2. Последнее слагаемое (3) имеет значение общего магнитного поля, создаваемого всеми другими магнитными частицами, и это дипольное поле влияет на ориентацию магнитного момента частицы 1 в зависимости от внешнего магнитного поля.

Аналитическое решение уравнения ФПБ (1) было получено с помощью теории возмущения. Решение представлялось в виде ряда по полиномам Лежандра и присоединенным полиномам Лежандра. В работе исследована сходимость этого ряда.

Для прямого численного решения уравнения ФПБ (1) в работе была адаптирована безусловно устойчивая конечно-разностная схема [18], применяемая к уравнению конвекции-диффузии. В параллельной ориентации переменного магнитного поля к осям легкого намагничивания плотность вероятности $W(1)$ не зависит от азимутального угла φ , поэтому после дискретизации уравнения ФПБ (1) конечными разностями, полученное дискретное уравнение на каждом шаге по времени представляется линейной алгебраической системой с неизвестными (W^k , $k = 0 \dots N_t$), которые находятся методом прогонки. В перпендикулярном случае для сведения многомерной задачи к цепочке одномерных задач дополнительно применялась классическая разностная схема переменных направлений (схема Писмена-Рэкфорда). Для численной схемы проведена оценка погрешности. Одной из особенностей уравнения ФПБ является отсутствие граничных условий, они были заменены нормировкой решения. На каждом шаге по времени выполняется нормировка найденного $W_{i,j}^k$:

$$W_{i,j}^{k,norm} = \frac{W_{i,j}^k}{h_x h_\varphi \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_\varphi-1} W_{i,j}^k},$$

следовательно:

$$h_x h_\varphi \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_\varphi-1} W_{i,j}^{k,norm} = 1.$$

Намагниченность M системы вычислялась методом трапеции:

$$M(t_k) = \rho m \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 W^{norm}(t_k, x, \varphi) (\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{h}}_{ac}) dx d\varphi,$$

$$x \in \{x_i\}, \quad \varphi \in \{\varphi_j\}.$$

Действительная $Re(\chi)$ и мнимая $Im(\chi)$ части восприимчивости вычислялись интегрированием по времени $\{t_k\}$:

$$Re(\chi) = \frac{\omega}{h_{ac}\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} M(t) \cos(\omega t) dt, \quad Im(\chi) = \frac{\omega}{h_{ac}\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} M(t) \sin(\omega t) dt,$$

$$t \in \{t_k\}.$$

Аналитическое решение справедливо только для систем со слабым переменным полем. Для верификации численной схемы были проведены расчеты при $\alpha_{ac} = 0.01$ с шагами $h_x = h_\varphi = 0.01$ и $h_t = 0.001$. В случае, когда поле и оси легкого намагничивания параллельны (рисунок 2), увеличение магнитной анизотропии приводит к уменьшению магнитного отклика на малых частотах переменного магнитного поля. Сдвиг максимума мнимой части в область более высоких частот свидетельствует об уменьшении характерного времени релаксации магнитных моментов. Получено хорошее согласование результатов численных и аналитических расчетов.

В работе также показано, что в перпендикулярном случае наблюдается обратная ситуация: увеличение магнитной анизотропии приводит к увеличению восприимчивости на малых частотах и увеличению характерного времени релаксации. Учет межчастичных диполь-дипольных взаимодействий увеличивает магнитный отклик для любой ориентации магнитного поля и осей легкого намагничивания.

Численное решение позволяет исследовать влияние амплитуды поля на динамические свойства. На рисунке 3 представлена динамическая восприимчивость для различных значений $\alpha_{ac} = 0.1, 1, 5$ в зависимости от частоты колебаний переменного магнитного поля. Увеличение амплитуды переменного магнитного поля приводит к уменьшению магнитного отклика и уменьшению характерного времени релаксации как в параллельной, так и в перпендикулярной ориентации магнитного поля и осей легкого намагничивания.

В последнем разделе главы проведен расчет характерных времен релаксации магнитных моментов. В случае, когда магнитное поле направлено параллельно осям легкого намагничивания, увеличение амплитуды поля уменьшает характерное время релаксации, в то время как увеличение магнитной анизотропии приводит к его увеличению. В перпенди-

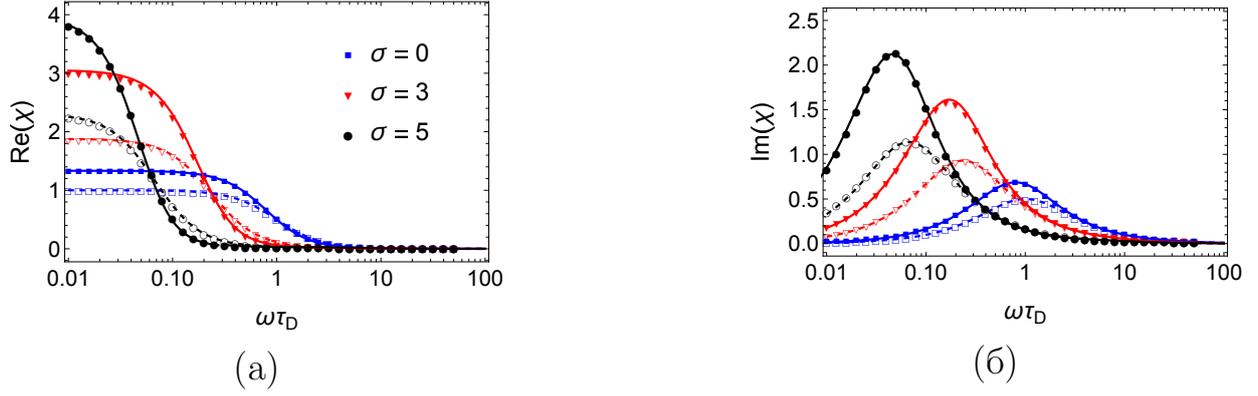


Рис. 2 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений параметра магнитной анизотропии $\sigma = 0, 3, 5$, восприимчивость Ланжевена $\chi_L = 1$. Случай параллельности переменного магнитного поля и осей легкого намагничивания. Линии – аналитическое решение, символы – численное решение. Сплошные линии и закрашенные символы – с учетом взаимодействий, пунктирные линии и не закрашенные символы – одночастичное приближение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

кулярной конфигурации увеличение амплитуды переменного магнитного поля и магнитной анизотропии приводит к уменьшению характерного времени релаксации магнитного момента. Для сильного магнитного поля взаимодействия между магнитными моментами и полем доминируют над взаимодействиями между частицами, поэтому времена релаксации не зависят от χ_L ; только величина магнитного поля и внутренняя магнитная анизотропия влияют на процессы релаксации в системе. В слабом поле увеличение χ_L приводит к увеличению времени релаксации.

В третьей главе «Влияние статического поля на динамические свойства ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц» изучается влияние статического магнитного поля, дополнительно приложенного к образцу случайно распределенных обездвиженных суперпарамагнитных частиц, на динамический отклик. Статическое магнитное поле направлено вдоль оси Oz .

Учет статического поля влияет на энергию $U(1)$ в уравнении ФПБ (1), а именно изменяется энергия Зеемана:

$$U_h(1) = -\alpha_{ac} e^{i\omega t} (\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{h}}_{ac}) - \alpha_{dc} (\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{h}}_{dc}),$$

где α_{dc} – параметр Ланжевена статического поля (характеризует напряженность статического поля).

Аналитическое и численное решение проводилось аналогично Главе 2.

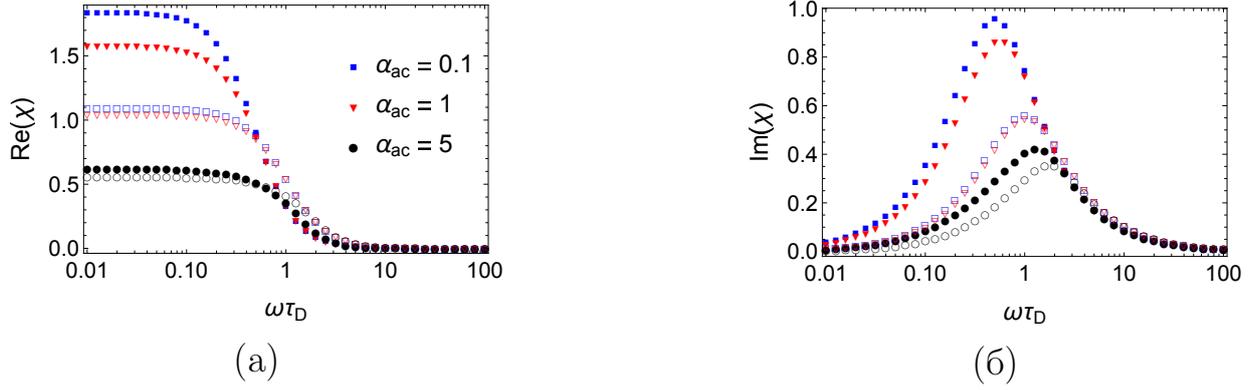


Рис. 3 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений $\alpha_{ac} = 0.1, 1, 5$, восприимчивость Ланжевена $\chi_L = 1$, параметр магнитной анизотропии $\sigma = 1$. Закрашенные символы – параллельная ориентация, не закрашенные символы – перпендикулярная ориентация. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть. Численное решение.

Показано, что увеличение напряженности статического магнитного поля α_{dc} при любой ориентационной конфигурации магнитных полей уменьшает магнитный отклик рассматриваемой системы. Учет и увеличение диполь-дипольных взаимодействий усиливают магнитный отклик для любой взаимной ориентации переменного и статического магнитных полей. В главе проведено сравнение аналитических расчетов динамической восприимчивости с известными из литературы результатами компьютерного моделирования. Получено хорошее согласование данных. Также проведено сравнение аналитических расчетов динамической восприимчивости с численными результатами, полученными для малой амплитуды переменного магнитного поля ($\alpha_{ac} = 0.01$). Наблюдается хорошее согласование численных и аналитических данных.

С помощью численного решения исследовалось влияние амплитуды переменного магнитного поля α_{ac} на магнитный отклик при статическом подмагничивающем поле \mathbf{H}_{dc} . На рисунке 4 представлена динамическая восприимчивость для различных значений $\alpha_{ac} = 0.1, 1, 5$ в зависимости от частоты колебаний переменного магнитного поля при $\alpha_{dc} = 1$ в параллельной конфигурации магнитных полей. Увеличение амплитуды переменного магнитного поля α_{ac} с 0.1 до 1 увеличивает магнитный отклик, а при значительном увеличении амплитуды поля магнитный отклик уменьшается. Это связано с тем, что взаимодействия «диполь-диполь», «диполь-поле», «диполь-легкая ось намагничивания» конкурируют друг с другом и дают различные вклады в динамическую восприимчивость.

Влияние диполь-дипольных взаимодействий продемонстрировано

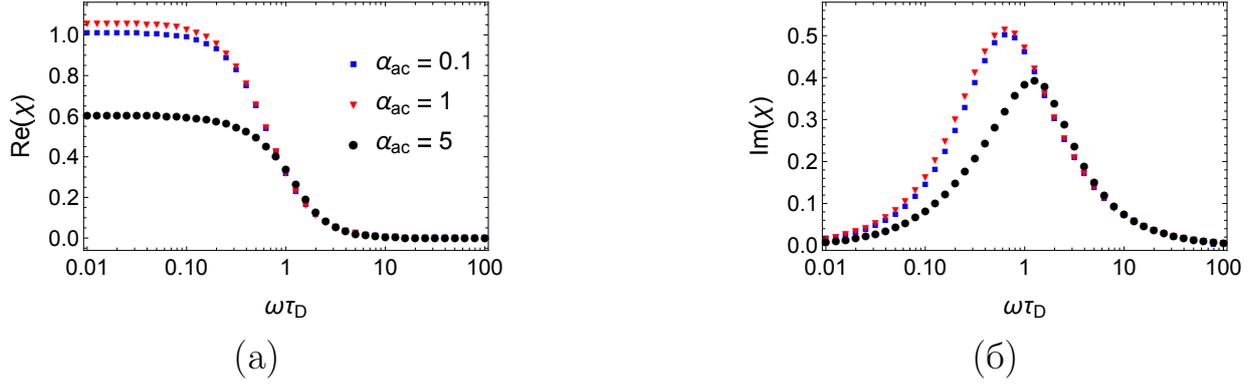


Рис. 4 – Спектр динамической восприимчивости ансамбля взаимодействующих феррочастиц для различных значений $\alpha_{ac} = 0.1, 1, 5$, восприимчивость Ланжевена $\chi_L = 1$, параметр магнитной анизотропии $\sigma = 1$, параметр Ланжевена статического поля $\alpha_{dc} = 1$. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть. Численное решение.

на рисунке 5 для случая параллельной ориентации статического и переменного магнитных полей. Графики динамической восприимчивости построены при параметре Ланжевена статического поля $\alpha_{dc} = 1$ и восприимчивости Ланжевена $\chi_L = 0.4$. Увеличение магнитной анизотропии приводит к увеличению магнитного отклика и времени релаксации. Учет диполь-дипольных взаимодействий при малых параметрах анизотропии ($\sigma = 0, \sigma = 1$) приводит к увеличению магнитного отклика, а при достаточно больших параметрах ($\sigma = 2, \sigma = 3$) в системе без учета взаимодействий магнитный отклик выше. Это объясняется появлением корреляции типа «голова-хвост» в системе с сильной внутренней магнитной анизотропией. Образовавшиеся корреляционные структуры препятствуют магнитному отклику системы.

Положение максимума $\omega_{max}\tau_D$ мнимой части динамической восприимчивости определяет характерное время релаксации τ магнитного момента частицы в переменном магнитном поле. Для идеальной системы обездвиженных суперпарамагнитных частиц в слабом переменном магнитном поле, когда отсутствует внутрочастичный энергетический барьер, характерное время релаксации магнитного момента равно $\tau = 1/\omega_{max}$. Увеличение амплитуды поля, интенсивности межчастичных взаимодействий и внутренней магнитной анизотропии частиц приводит к замедлению или ускорению релаксационных процессов: значение положения максимума мнимой части восприимчивости определяет следующее соотношение характерных времен релаксации: $\omega_{max}\tau_D = \tau_D/\tau$.

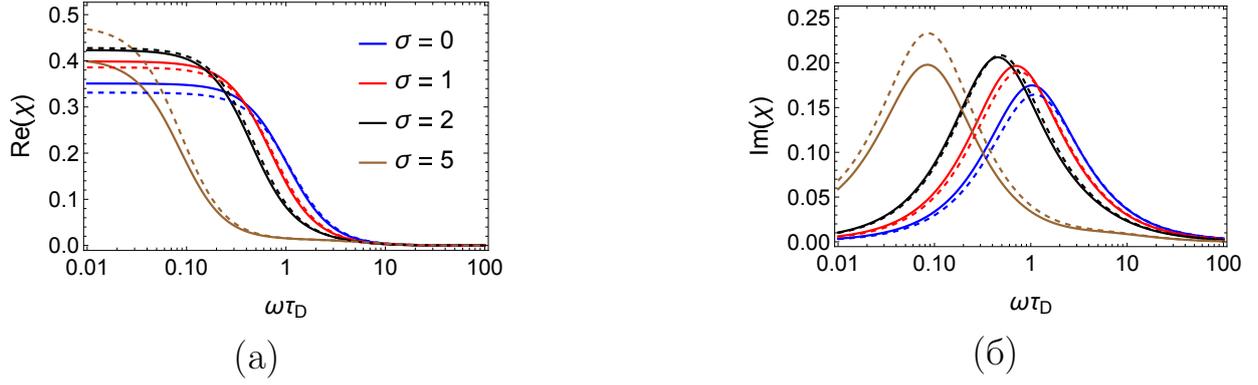


Рис. 5 – Спектр динамической восприимчивости ансамбля взаимодействующих феррочастиц для различных значений σ в случае, когда оси легкого намагничивания, статическое и переменное магнитные поля направлены параллельно друг другу. Параметр Ланжевена статического поля $\alpha_{dc} = 1$, восприимчивость Ланжевена $\chi_L = 0.4$. Сплошные линии – с учетом взаимодействия, пунктирная линия – без взаимодействия. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть. Аналитическое решение.

Таким образом, сдвиг положения максимума относительно 1 демонстрирует изменения в релаксационных процессах по сравнению с идеальной системой. Положение максимума мнимой части восприимчивости в зависимости от амплитуды переменного α_{ac} и напряженности статического α_{dc} магнитных полей показано на рисунке 6. Диполь-дипольные взаимодействия учитываются с $\chi_L = 1$, параметр магнитной анизотропии $\sigma = 1$. Переменное магнитное поле параллельно статическому магнитному полю. При малых амплитудах поля ($\alpha_{ac} < 1$) увеличение напряженности статического магнитного поля α_{dc} приводит к уменьшению характерного времени релаксации магнитного момента. Для достаточно больших значений амплитуды переменного магнитного поля ($\alpha_{ac} > 1$) время релаксации имеет немонотонную зависимость от напряженности статического магнитного поля α_{dc} .

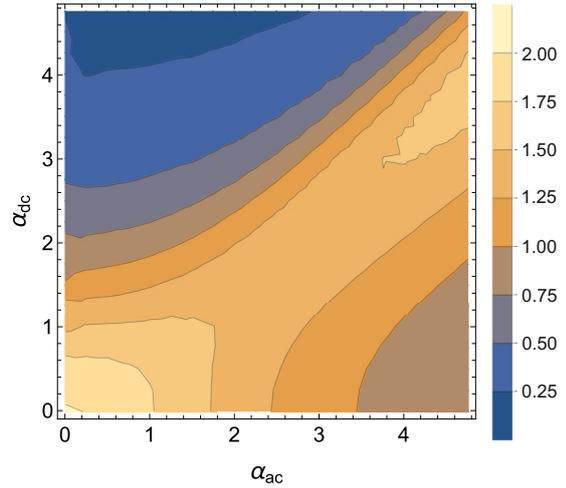


Рис. 6 – Контурный график $1/(\omega_{max}\tau_D) = \tau_{relax}/\tau_D$ в зависимости от амплитуды переменного магнитного поля α_{ac} и напряженности статического магнитного поля α_{dc} при $\chi_L = 1$ и $\sigma = 1$. Параллельная конфигурация полей. Расчеты проведены численно с шагами $h_x = 0.01$ и $N_T = 30000$ (количество узлов сетки по времени, $h_t = T/N_T$).

В четвертой главе «Разработанные программные комплексы» приведены основные характеристики двух разработанных программных комплексов, позволяющих моделировать динамическую восприимчивость ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных взаимодействующих магнитных частиц, оси легкого намагничивания которых коллинеарны друг другу. В представленных комплексах реализованы представленные в предыдущих главах алгоритмы численного решения уравнения ФПБ. В данной главе рассказано о входных и выходных данных программных комплексов и о способе работы с ними. Показана логика работы комплексов и типы данных, используемые в них. Программные комплексы реализованы на языке программирования C++. Оптимизация программного кода позволила достаточно быстро получать результаты даже в случаях малых шагов, использованных в численных схемах. Численные решения, которые представлены в данной диссертации, получены с помощью описанных в данной главе комплексов программ.

В **заключении** подведены итоги проделанной работы, указываются возможные направления дальнейших исследований.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В диссертационной работе разработана и исследована математическая модель, описывающая динамические свойства ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц с выровненными осями легкого намагничивания, находящегося во внешнем магнитном поле. Новизна работы заключается в учете межчастичных диполь-дипольных взаимодействий. Полученные аналитические аппроксимации и разработанные комплексы программ позволили изучить механизмы поведения исследуемой системы со сложными внутренними конкурирующими взаимодействиями.

Основные результаты диссертации могут быть сформулированы следующим образом.

- Построена математическая модель динамического отклика ансамбля обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц с выровненными осями легкого намагничивания. Модель основана на уравнении ФПБ, в которое введено дополнительное слагаемое, учитывающее диполь-дипольные взаимодействия. Это слагаемое получено из строгих законов статистической механики и рассчитано в работе для различных конфигураций внешних полей. Рассмотрены следующие конфигурации полей: на систему действует

только переменное поле, расположенное под углом к осям легкого намагничивания частиц; одновременно с действием переменного поля, направленного параллельно осям легкого намагничивания, присутствует подмагничивающее статическое поле, сонаправленное или перпендикулярно-направленное переменному полю.

- Получено аналитическое решение уравнения ФПБ для плотности вероятности ориентации магнитного момента частиц в случае малых амплитуд переменного поля. Определены основные закономерности поведения плотности вероятности ориентации магнитного момента в зависимости от направления переменного магнитного поля, напряженности подмагничивающего статического поля и магнитной анизотропии.
- Исследована сходимость теоретических аппроксимаций, полученных при решении уравнения ФПБ. Проведен анализ количества членов ряда в аппроксимации, необходимых для получения решения, сходящегося к точному.
- Получены аналитические аппроксимации для динамической намагниченности и восприимчивости в случае малых амплитуд переменного поля. Установлено, что учет и усиление диполь-дипольных взаимодействий приводит к росту модуля намагниченности и увеличение динамической восприимчивости, увеличение магнитной анизотропии приводит к увеличению динамической восприимчивости в параллельной конфигурации полей и уменьшению в перпендикулярной, увеличение напряженности статического магнитного поля приводит к росту модуля намагниченности и уменьшению динамической восприимчивости.
- Определены эффективные алгоритмы численного моделирования динамических свойств ансамбля суперпарамагнитных взаимодействующих обездвиженных частиц в переменных полях произвольной амплитуды. Исследована погрешность решений уравнения ФПБ, полученных численными методами в зависимости от пространственных и временного шагов.
- Разработаны программные комплексы, позволяющие численно моделировать динамические характеристики ансамбля суперпарамаг-

нитных взаимодействующих обездвиженных частиц, находящегося под действием переменного и статического магнитных полей.

- Установлены закономерности изменения динамического отклика системы от амплитуды переменного поля, направления и напряженности подмагничивающего статического поля. Показано, что диполь-дипольные взаимодействия, взаимодействия типа «магнитный момент» – «легкая ось» и «магнитный момент» – «внешнее поле» конкурируют между собой, и дают вклады разного знака в магнитные и релаксационные характеристики системы. Впервые обнаружено, что динамическая восприимчивость имеет немонотонную зависимость от магнитной анизотропии и амплитуды переменного магнитного поля в системе где действует два поля: переменное параллельное осям легкого намагничивания и статическое магнитные поля, а также учитываются диполь-дипольные взаимодействия.
- Проведено сравнение аналитических аппроксимаций с результатами численных расчетов в области малых амплитуд переменного поля. Аналитические аппроксимации протестированы на результатах компьютерного моделирования, известных из литературы. Полученные аналитические и численные результаты согласуются между собой, а также с данными компьютерного моделирования.

Рекомендации и дальнейшие перспективы разработки темы. Разработанные теоретические подходы, позволяющие описывать динамические магнитные свойства ансамбля взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, могут быть расширены на полидисперсный случай. Эта задача очень актуальна для прогнозирования свойств реальных магнитоактивных композитов, в которых частицы магнитного наполнителя, как правило, различаются по размерам. Кроме того, в представленную в диссертационной работе модель диполь-дипольные взаимодействия могут быть включены на основе теорий более высокого порядка, чем ММФ1, что даст возможность увеличить область применимости теории и позволит описать свойства высококонцентрированных систем.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

По теме диссертации опубликовано 16 работ, в числе которых 2 комплекса программ и 4 статьи в ведущих рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК РФ, Аттестационным советом УрФУ и входящих в базы данных Web of Science и Scopus.

Статьи, опубликованные в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ

1. Амбаров А.В. Динамическая восприимчивость взаимодействующих суперпарамагнитных частиц в постоянном магнитном поле // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2022. Т. 22, вып. 2. С. 131–140. (0.625 п.л./ 0.625 п.л.) (Scopus)

2. Ambarov A.V., Elfimova E.A., Zverev V.S. Numerical modeling of the magnetic response of interacting superparamagnetic particles to an ac field with arbitrary amplitude // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2020. Vol. 28. P. 085009-01-15. (0.9375 п.л./ 0.5 п.л.) (Scopus, WoS)

3. Ambarov A.V., Elfimova E.A., Zverev V.S. Dynamic response of interacting superparamagnetic particles with aligned easy magnetization axes // Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2020. V. 497. P. 166010-01-04. (0.25 п.л./ 0.125 п.л.) (Scopus, WoS)

4. Batrudinov T.M., Ambarov A.V., Elfimova E.A., Zverev V.S., Ivanov A.O. Theoretical study of the dynamic magnetic response of ferrofluid to static and alternating magnetic fields // Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2017. Vol. 431 P. 180-183. (0.1874 п.л./ 0.1 п.л.) (Scopus, WoS)

Патенты и программы:

5. Амбаров А.В., Елфимова Е.А., Зверев В.С. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022615351 «Расчет динамического отклика системы частиц, находящейся в переменном магнитном поле, параллельном осям легкого намагничивания». Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). Зарегистрировано 30 марта 2022 г.

6. Амбаров А.В. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022616085 «Расчет динамического отклика системы частиц, находящейся в переменном магнитном поле, перпендикулярном осям легкого намагничивания». Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). Зарегистрировано 05 апреля 2022 г.

Другие публикации:

7. Амбаров А.В., Елфимова Е.А., Зверев В.С. Моделирование динамического магнитного отклика взаимодействующих обездвиженных суперпарамагнитных частиц с выравненными осями легкого намагничивания // статья в сборнике научных трудов конференции «20-я Плесская конференция по нанодисперсным магнитным жидкостям», 13-16 сентября 2022 г., г.Плётс, С. 121-125 (0.3125 п.л./ 0.15 п.л.)

8. Зверев В.С., Амбаров А.В., Елфимова Е.А. Динамическая восприимчивость неподвижного кластера магнитных наночастиц // статья в сборнике научных трудов конференции «20-я Плесская конференция по нанодисперсным магнитным жидкостям», 13-16 сентября 2022 г., г.Плѣс, С. 131-135 (0.3125 п.л./ 0.15 п.л.)

9. Ambarov A.V., Elfimova E.A., Zverev V.S. The dynamic magnetic response of immobilized superparamagnetic nanoparticles to an ac field with arbitrary amplitude // тезисы конференции «VIII Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism», 22-26 августа 2022 г., г.Казань, С. 378-379 (0.125 п.л./ 0.1 п.л.)

10. Kuznetsova A.A., Elfimova E.A., Ambarov A.V. The specific loss power in the systems of mobile and immobilized magnetic particles in applied AC magnetic field // тезисы конференции «VIII Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism», 22-26 августа 2022 г., г.Казань, С. 392-393 (0.125 п.л./ 0.1 п.л.)

11. Амбаров А.В., Елфимова Е.А., Зверев В.С. Численное моделирование динамического отклика обездвиженных взаимодействующих дипольных частиц в переменном линейно-поляризованном поле // тезисы конференции «XXII Зимняя школа по механике сплошных сред», 22-26 марта 2021г., г.Пермь, С. 50 (0.0625 п.л./ 0.05 п.л.)

12. Ambarov A.V., Elfimova E.A., Zverev V.S. Numerical modelling of the dynamic susceptibility of an ensemble of immobilized magnetic particles with aligned easy magnetisation axes // тезисы конференции «4th International Summer School and Workshop «Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure», 19-22 апреля 2021г., Тимишоара, Румыния, С. 106 (0.0625 п.л./ 0.05 п.л.)

13. Амбаров А.В., Елфимова Е.А., Зверев В.С. Численное моделирование динамического отклика обездвиженных взаимодействующих дипольных частиц в переменном линейно-поляризованном поле // тезисы конференции «XXI Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества», 18-25 марта 2021г., г.Екатеринбург, С. 313 (0.0625 п.л./ 0.05 п.л.)

14. Амбаров А.В., Елфимова Е.А., Зверев В.С. Численное моделирование отклика ансамбля взаимодействующих суперпарамагнитных частиц на переменное поле произвольной амплитуды // тезисы конференции «Математическое моделирование свойств магнитных нанокompозитов с международным участием», 29-31 октября 2020г., г.Екатеринбург, С. 22 (0.0625 п.л./ 0.05 п.л.)

15. Elfimova E.A., Ambarov A.V., Zverev V.S. Dynamic susceptibility of interacting superparamagnetic particles under static magnetic field// тезисы конференции «International Conference on Magnetic Fluids», 8-12 июля 2019г., г.Париж, Франция, С. 125 (0.0625 п.л./ 0.05 п.л.)

16. Ambarov A.V., Elfimova E.A., Zverev V.S. The effects of interparticle dipole-dipole interactions on the magnetic susceptibility spectra of superparamagnetic particles// тезисы конференции «Russian Conference on Magnetohydrodynamics», 18-21 июня 2018г., г.Пермь, С. 16 (0.0625 п.л./ 0.05 п.л.)

Литература

1. Р., Розенцвейг. Феррогидродинамика / Розенцвейг Р. — Мир, 1989. — 357 с.
2. Ferrofluids and bio-ferrofluids: looking back and stepping forward / V. Socoliuc, M.V. Avdeev, V. Kuncser et al. // *Nanoscale*. — 2022. — V. 14, N. 13. — P. 4786–4886.
3. Elhajjar, R. Magnetostrictive polymer composites: Recent advances in materials, structures and properties / R. Elhajjar, C.-T. Law, A. Pegoretti // *Progress in Materials Science*. — 2018. — V. 97. — P. 204–229.
4. Borin, D. Magneto-mechanical properties of elastic hybrid composites / D. Borin, G. Stepanov. — 2021. — 369-390 P.
5. Dynamic properties of magneto-sensitive elastomer cantilevers as adaptive sensor elements / T. I. Becker, Y. L. Raikher, O. V. Stolbov et al. // *Smart Materials and Structures*. — 2017. — V. 26, N. 9. — P. 095035.
6. Synthesis, characterization and in vivo evaluation of biocompatible ferrogels / M. T. Lopez-Lopez, I. A. Rodriguez, L. Rodriguez-Arco et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2017. — V. 431. — P. 110–114.
7. Sanchez, L. M. Ferrogels: Smart materials for biomedical and remediation applications / L. M. Sanchez, V. A. Alvarez, J. S. Gonzalez // *Nanocomposites: Advanced Applications*. — John Wiley & Sons, Ltd, 2017. — V. 8, P. 400–430.
8. The damping device based on magnetoactive elastomer / D. Borin, G. Stepanov, V. Mikhailov, A. Gorbunov // *Magneto hydrodynamics*. — 2007. — V. 43, N. 4. — P. 437–443.
9. Zubarev, A.Yu. Magnetic hyperthermia in a system of immobilized magnetically interacting particles / A.Yu. Zubarev // *Physical Review E*. — 2019. — V. 99, N. 6. — P. 062609.

10. Elfimova, E.A. Static magnetization of immobilized, weakly interacting, superparamagnetic nanoparticles / E.A. Elfimova, A.O. Ivanov, Ph.J. Camp // *Nanoscale*. — 2019. — V. 11. — P. 21834–21846.
11. The thermodynamic properties of soft magnetic materials containing superparamagnetic nanoparticles frozen in the nodes of the regular cubic lattice / A. Solovyova, S. Sokolsky, E. Elfimova, A. Ivanov // *Journal of Nanoparticle Research*. — 2021. — V. 23. — P. 139.
12. Raikher, Y. L. Nonlinear dynamic susceptibilities and field-induced birefringence in magnetic particle assemblies / Y. L. Raikher, V. I. Stepanov // *Advances in Chemical Physics*. — 2004. — V. 129. — P. 419–588.
13. Coffey, W.T. On the theory of Debye and Néel relaxation of single domain ferromagnetic particles / W.T. Coffey, P.J. Cregg, Y.P. Kalmykov // *Advances in Chemical Physics*. — 1993. — V. 83. — P. 263–464.
14. AC susceptibility as a tool to probe the dipolar interaction in magnetic nanoparticles / G. T. Landi, F. R. Arantes, D. R. Cornejo et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2017. — V. 421. — P. 138–151.
15. Dynamic susceptibility of a concentrated ferrofluid: The role of interparticle interactions / A. V. Lebedev, V. I. Stepanov, A. A. Kuznetsov et al. // *Physical Review E*. — 2019. — V. 100. — P. 032605.
16. Temperature-dependent dynamic correlations in suspensions of magnetic nanoparticles in a broad range of concentrations: A combined experimental and theoretical study / A.O. Ivanov, S.S. Kantorovich, V.S. Zverev et al. // *Phys. Chem. Chem. Phys.* — 2016. — V. 18.
17. Ivanov, A. O. Revealing the signature of dipolar interactions in dynamic spectra of polydisperse magnetic nanoparticles / A. O. Ivanov, V. S. Zverev, S. S. Kantorovich // *Soft Matter*. — 2016. — V. 12. — P. 3507–3513.
18. Afanas'eva, N.M. Unconditionally stable schemes for convection-diffusion problems / N.M. Afanas'eva, P. N. Vabishchevich, M. V. Vasil'eva // *Russian Mathematics*. — 2013. — V. 57, N. 3. — P. 1–11.