

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ ПЕРВОГО
ПРЕЗИДЕНТА РОССИИ Б.Н. ЕЛЬЦИНА»
ИНСТИТУТ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК И МАТЕМАТИКИ
КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

На правах рукописи

Сокольский Сергей Александрович

**Моделирование свойств ансамблей обездвиженных
взаимодействующих суперпарамагнитных частиц с
особенностями пространственной и ориентационной
архитектуры**

1.2.2 Математическое моделирование, численные методы и комплексы
программ

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: Елфимова Екатерина Александровна,
доктор физ.-мат. наук, доцент

Екатеринбург — 2025

Оглавление

Введение	5
1 Обзор современных исследований мягких магнитоактивных материалов	14
1.1 Особенности микроструктуры	14
1.2 Основные виды взаимодействия магнитных частиц	19
1.3 Методы компьютерного моделирования	21
1.4 Основные результаты главы	23
2 Свойства ансамблей одиночных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц	24
2.1 Модель	24
2.2 Рассмотренные конфигурации частиц	27
2.3 Общая схема вириального разложения свободной энергии Гельмгольца	29
2.3.1 Система без диполь-дипольных взаимодействий	29
2.3.2 Система с диполь-дипольными взаимодействиями	32
2.4 Распределение магнитных частиц по узлам простой кубической решетки	34
2.4.1 Случай параллельной ориентации осей легкого намагничивания и направления постоянного магнитного поля . . .	34
2.4.2 Случай перпендикулярной ориентации осей легкого намагничивания и направления постоянного магнитного поля . .	41
2.4.3 Случай выравнивания осей легкого намагничивания под произвольным углом к направлению постоянного магнитного поля	46

2.5	Случайное распределение магнитных частиц по объему	50
2.6	Влияние пространственной и ориентационной архитектуры ансамбля суперпарамагнитных частиц на его свойства	53
2.6.1	Вклад диполь-дипольных взаимодействий в свободную энергию Гельмгольца	53
2.6.2	Статическая намагниченность	57
2.6.3	Магнитная восприимчивость	59
2.6.4	Теплоемкость	61
2.7	Сравнение теории с результатами компьютерного моделирования	64
2.8	Основные результаты главы	68
3	Статический магнитный отклик многогранульных частиц (МГЧ) с различным числом гранул	70
3.1	Модель	70
3.2	Рассмотренные конфигурации МГЧ	72
3.2.1	Количество гранул	72
3.2.2	Понижение объемной концентрации	74
3.3	Вычисление статического магнитного отклика МГЧ	76
3.4	Компьютерное моделирование намагниченности МГЧ	78
3.4.1	Оценка точности и область применимости теории	78
3.4.2	Влияние количества гранул на магнитный отклик МГЧ . .	86
3.5	Оценка погрешности вычислений	89
3.5.1	Приведение системы к равновесному состоянию	90
3.5.2	Расширение статистической выборки	91
3.6	Основные результаты главы	93
4	Разработанные программные комплексы	95
4.1	Положение частиц в системе	96
4.2	Расчёт термодинамических свойств системы неподвижных суперпарамагнитных феррочастиц, расположенных в узлах кубической решётки, находящихся под воздействием внешнего магнитного поля, направленного параллельно или перпендикулярно осям лёгкого намагничивания	97
4.2.1	Входные и выходные данные программного комплекса . .	97

4.2.2	Основные функции программного комплекса	98
4.3	Расчёт статической намагниченности многогранульных частиц с ограниченным числом гранул	100
4.3.1	Входные и выходные данные программного комплекса . .	100
4.3.2	Основные функции программного комплекса	101
4.4	Основные результаты главы	103
Заключение		104
Литература		107
Приложение А. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2022662616		124
Приложение Б. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2023682896		125

Введение

Актуальность и степень разработанности темы исследования.

Ансамбли обездвиженных частиц, для которых характерен неелевский механизм релаксации магнитных моментов (суперпарамагнитные частицы), традиционно используются в качестве моделей мягких магнитоактивных композитов. Такие материалы синтезируются путем встраивания в полимерные или другие мягкие немагнитные матрицы магнитных наночастиц [1–8]. Важной особенностью данных материалов является возможность управления их свойствами с помощью внешнего магнитного поля, что делает использование этих материалов перспективным в наукоемких, промышленных и медикобиологических технологиях. Такие композиты успешно применяются в качестве контрастных агентов для магнитно-резонансной томографии, матриц для выращивания биологических тканей с заданной внутренней структурой, искусственных мышц для бионики и робототехники, направленного транспорта лекарственных веществ и лечения онкологических заболеваний методом магнитной гипертермии [6, 9–18]. В зависимости от пространственного расположения наночастиц в матрице и ориентационного распределения их осей магнитной анизотропии композиты демонстрируют различное поведение во внешнем магнитном поле, что создает сложности при прогнозировании их свойств. Поэтому для использования этих материалов в высокоточных технологиях требуется изучение систем с конкретно заданной пространственной и ориентационной архитектурой. Другая сложность при прогнозировании свойств композитов связана с тем, что большинство существующих теорий ограничиваются системами с низкой концентрацией магнитного наполнителя и не учитывают диполь-дипольные взаимодействия [19, 20]. Проведенные в последние годы исследования позволили учесть межчастичные взаимодействия [21–24], однако разработка теории, которая бы одновременно учитывала взаимодействия между суперпарамагнитными

наночастицами и их пространственное распределение в системе, остается нерешенной и актуальной задачей.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния диполь-дипольных взаимодействий и внутренней пространственной и ориентационной архитектуры ансамблей обездвиженных суперпарамагнитных частиц на магнитные и термодинамические свойства этих систем.

Цель работы:

Аналитическое и численное моделирование статических магнитных и термодинамических свойств ансамблей одиночных обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц и их агрегатов (многогранульных частиц) с различной пространственной и ориентационной архитектурой.

Задачи:

1. Создание математической модели, которая описывает статические свойства феррокомпозитов с учетом диполь-дипольных межчастичных взаимодействий, особенностей пространственного расположения частиц магнитного наполнителя и ориентационного распределения их осей легкого намагничивания.

2. Построение аналитических выражений для статической намагниченности, начальной магнитной восприимчивости и теплоемкости ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц для случаев сплошной среды и многогранульной частицы с ограниченным числом гранул. Оценка точности полученных результатов.

3. Исследование влияния особенностей пространственной и ориентационной архитектуры системы на магнитные свойства ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц для случаев сплошной среды и многогранульной частицы. Определение роли дипольных межчастичных взаимодействий в статическом магнитном отклике и термодинамическом поведении исследуемых систем.

4. Разработка программных комплексов, рассчитывающих статические магнитные и термодинамические свойства ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, а также прогнозирующих их с помощью компьютерного моделирования методом Монте-Карло.

Методология и методы диссертационного исследования.

Развитая в диссертации теория базируется на статистико-механических методах исследования ансамблей частиц. Свободная энергия Гельмгольца представлялась в виде классического вириального ряда по степеням концентрации частиц. Для системы обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц был вычислен второй вириальный коэффициент этого ряда с точностью до второго порядка по интенсивности диполь-дипольного межчастичного взаимодействия. Для расширения области применимости вириального разложения на концентрированные системы проводилось обратное кумулянтное преобразование, позволяющее свернуть вириальный ряд в логарифмическую функцию. Различные свойства ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц были определены за счет использования стандартной связи свободной энергии Гельмгольца с термодинамическими характеристиками системы [25–29].

Компьютерное моделирование проводилось методом Монте-Карло. Оценка точности полученных аналитических выражений проводилась путем сравнения их с результатами компьютерного моделирования.

Научная новизна диссертации:

1. Разработана теория, демонстрирующая влияние пространственной и ориентационной архитектуры, а также межчастичных диполь-дипольных взаимодействий на магнитный отклик ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц.

2. Впервые получены аналитические выражения, прогнозирующие статическую намагниченность, магнитную восприимчивость и теплоемкость ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, расположенных случайным образом и в узлах кубической решетки. Аналитические формулы учитывают различную ориентацию осей легкого намагничивания частиц.

3. Полученные аналитические формулы статической намагниченности ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц адаптированы для расчета магнитных свойств многогранульных частиц, содержащих ограниченное число гранул.

4. Разработан комплекс программ, позволяющий проводить численный расчет магнитных характеристик ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, находящихся во внешнем магнитном поле, распределенных по объему произвольным образом либо размещенных в узлах простой кубической решетки.

5. Разработан комплекс программ, визуализирующий многогранульные частицы с конечным количеством гранул и позволяющий моделировать их магнитный отклик.

Положения, выносимые на защиту:

1. Математические модели и аналитические аппроксимации, позволяющие прогнозировать магнитные и термодинамические свойства ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц и многогранульных частиц с различной пространственной и ориентационной архитектурой.

2. Комплекс программ по расчету статических свойств систем взаимодействующих обездвиженных суперпарамагнитных частиц.

3. Комплекс программ, моделирующий магнитный отклик многогранульных частиц с заданным числом гранул и их пространственным расположением.

4. Сравнение аналитических и численных результатов для магнитных характеристик исследуемых систем и определение на этой основе области применимости разработанной теории магнитных и термодинамических свойств ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц и многогранульных частиц с различной пространственной и ориентационной архитектурой.

5. Интерпретация результатов аналитического и численного моделирования для объяснения особенностей статического магнитного отклика реальных образцов феррокомпозитов и многогранульных частиц с различной внутренней структурой.

Теоретическая и практическая значимость работы.

Теоретическая значимость:

Численные решения и аналитические выражения, описывающие влияние пространственной и ориентационной архитектуры на магнитные и термодинамические свойства ансамблей однодоменных обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц для случаев сплошной среды и многогрануль-

ной частицы, содержащей ограниченное число гранул, в зависимости от режимных параметров.

Практическая значимость:

1. Численная оценка магнитных характеристик ансамблей взаимодействующих частиц при помощи разработанного комплекса программ.
2. Возможность использования полученных теоретических данных для синтеза новых магнитоактивных материалов с заданными характеристиками.

Достоверность полученных результатов.

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

Личный вклад автора.

Постановка целей и задач исследования была выполнена совместно с научным руководителем Е.А. Елфимовой. Все результаты, представленные в главах диссертационной работы, описаны в публикациях [30–34]. Подготовка научных публикаций по теме исследования выполнена в соавторстве с А.Ю. Соловьёвой, А.О. Ивановым и научным руководителем Е.А. Елфимовой.

Теоретическое исследование магнитных и термодинамических свойств ансамблей однодоменных обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц во внешнем магнитном поле проведено автором лично.

Создание и оптимизация алгоритмов численных решений уравнений и оценка точности аналитических формул проведены автором лично.

Результаты компьютерного моделирования, использованные для оценки точности аналитических формул были получены совместно с А.Ю.Соловьёвой.

Исследование многогранульных частиц со случайным распределением гранул по объему проводилось соавторами и в диссертационной работе не рассмотрено.

Программный комплекс, позволяющий рассчитывать магнитные характеристики систем взаимодействующих обездвиженных суперпарамагнитных ча-

стиц, разработан в соавторстве А.Ю. Соловьёвой, В.С. Зверевым и научным руководителем Е.А. Елфимовой.

Программный комплекс, визуализирующий многогранульные частицы и моделирующий их магнитный отклик, разработан автором лично.

Апробация результатов.

Ключевые результаты исследований докладывались и обсуждались на семи международных и всероссийских научных форумах:

Международная конференция «Математическое и компьютерное моделирование свойств смарт-материалов» (2020);

XXI Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества СПФКС-21 (2021);

XXII Зимняя школа по механике сплошных сред (2021);

VII Международная Ставропольская конференция по магнитным коллоидам (2021);

VIII Международный Евро-Азиатский симпозиум «Тенденции в магнетизме» EASTMAG-2022 (2022);

XX Всероссийская с международным участием Плесская конференция по нанодисперсным магнитным жидкостям (2022);

VIII Международная Ставропольская конференция по магнитным коллоидам (2023).

Публикации.

Результаты проведенных исследований были изложены в шестнадцати публикациях, среди которых пять статей в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ, Аттестационным советом УрФУ и входящих в базы данных Web of Science и Scopus [30–34], два свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ [35, 36], три статьи в сборниках научных трудов [37–39], а также шесть тезисов докладов на международных и всероссийских научных форумах [40–45].

Благодарности.

Автор благодарен своему научному руководителю, заведующему кафедрой теоретической и математической физики УрФУ, д.ф.-м.н., доценту Елфимовой Е.А. и старшему научному сотруднику лаборатории математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах, к.ф.-м.н.

Соловьевой А.Ю. за помощь в работе. Исследование проведено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ проект «Уральский математический центр УрФУ» No 075-02-2024-1428.

Первая глава «Обзор современных исследований мягких магнитоактивных материалов»

Обзор литературы, посвященной исследованию свойств различных мягких магнитоактивных материалов, рассмотрение особенностей микроструктуры изучаемых композитов, разбор основных методов их моделирования.

По результатам обзора литературы сделан вывод, что физические свойства и поведение подобных материалов определяются внутренней структурой магнитного наполнителя. Влияние диполь-дипольных взаимодействий и особенностей пространственной и ориентационной архитектуры образцов на их магнитные свойства продемонстрировано в последующих главах диссертации.

Вторая глава «Свойства ансамблей одиночных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц»

В данной главе исследованы свойства системы монодисперсных обездвиженных частиц, находящихся под действием внешнего магнитного поля. Рассмотрены различные положения осей легкого намагничивания относительно направления постоянного магнитного поля

Для проведения сравнительного анализа были представлены два варианта распределения частиц по объему: в узлах простой кубической решетки и случайным образом.

При исследовании статических, магнитных и термодинамических свойств системы был использован метод разложения свободной энергии Гельмгольца F в классический вириальный ряд с точностью до второго коэффициента.

Исследовано влияние межчастичных диполь-дипольных взаимодействий, положения осей легкого намагничивания, направления и интенсивности внешнего магнитного поля и особенностей пространственной и ориентационной архитектуры на магнитные свойства системы, такие как начальная магнитная восприимчивость, статическая намагниченность и теплоемкость.

Прослежена зависимость магнитного отклика системы от пространственной и ориентационной структуры, формирующейся в ансамблях частиц за счет межчастичного диполь-дипольного взаимодействия их магнитных моментов.

На примере статической намагниченности и теплоемкости проведено сравнение полученных аналитических выражений и результатов компьютерного моделирования методом Монте-Карло.

Третья глава «Статический магнитный отклик многогранульных частиц (МГЧ) с различным числом гранул»

В данной главе исследованы свойства системы, представляющей собой многогранульную частицу (МГЧ), внутри которой располагаются неподвижные суперпарамагнитные сферические гранулы, размещенные в узлах простой кубической решетки, находящиеся под воздействием постоянного внешнего магнитного поля.

Проведена адаптация теории и аналитических выражений, полученных во второй главе, описывающих статическую намагниченность большого ансамбля неподвижных суперпарамагнитных наночастиц, расположенных в узлах простой кубической решетки, для вычисления магнитного отклика МГЧ с небольшим количеством гранул и схожей архитектурой.

Прослежена зависимость магнитного отклика многогранульной частицы от ориентационной структуры, формирующейся в ансамблях частиц за счет межчастичного диполь-дипольного взаимодействия их магнитных моментов, концентрации и количества гранул в частице.

Описан алгоритм моделирования магнитного момента МГЧ методом Монте Карло, проведена оценка погрешности численного расчета кривой намагничивания МГЧ.

Четвертая глава «Разработанные программные комплексы»

Описание принципов работы комплекса программ, рассчитывающего различные магнитные свойства систем взаимодействующих обездвиженных суперпарамагнитных частиц с учетом интенсивности внешнего магнитного поля, особенностей пространственной и ориентационной архитектуры системы, а также положения осей легкого намагничивания.

Описание принципов работы комплекса программ, визуализирующего многогранульные частицы с конечным количеством гранул и позволяющего моделировать их магнитный отклик.

Для создания программных комплексов были использованы система компьютерной алгебры Mathcad и языки программирования Fortran и C++.

Численные решения, описанные в данном исследовании, были получены с помощью представленного в этой главе комплекса программ.

Заключение

Подведение итогов проделанной работы, обозначены направления дальнейших исследований.

Общий объем диссертации составляет 125 страниц машинописного текста. Диссертация содержит 43 рисунка, 136 ссылок на литературные источники и 2 приложения.

Глава 1. Обзор современных исследований мягких магнитоактивных материалов

1.1. Особенности микроструктуры

Умными материалами называются вещества, обладающие одним или несколькими свойствами, которые могут быть значительно изменены внешним воздействием, например, магнитным полем, такие как феррожидкости, феррогели, магнитные эмульсии, магнитные эластомеры и различные биосовместимые магнитные наполнители. Подобные вещества представляют собой искусственно синтезируемые системы, состоящие из магнитных наночастиц, встроенных в полимерную матрицу или помещенных в немагнитную жидкость-носитель [46–48]. Данные материалы обладают обширным набором химических, физических и механических свойств полимерных и жидких сред с сильным откликом на умеренные внешние магнитные поля, легко достижимые в практических и лабораторных условиях. Многие методы использования подобных веществ уже запатентованы и пользуются высоким спросом на рынке передовых технологий. Так, мягкие магнитоактивные материалы используются для создания искусственных мышц в робототехнике, магнитополимерных пленок и пломб в регенеративной медицине, матриц для выращивания биологических тканей с магнитоуправляемыми внутренними структурами в трансплантологии, в качестве магнитопроводов трансформаторов и электромагнитов, при создании высокоточных измерительных приборов, а также в качестве усилителей механического напряжения и магнитоуправляемых герметизаторов в космической,

химической и горнодобывающей промышленности [6, 9–11, 49–53]. Помимо прочего, данные материалы являются незаменимым инструментом для магнитной гипертермии, в которой микродвижения магнитных наночастиц в переменном магнитном поле приводят к нагреву и разрушению опухолевых клеток [54–58].

Реакция магнитного момента в наноразмерных частицах на приложенное магнитное поле определяется двумя механизмами ориентационной релаксации: броуновским вращением тела частицы вместе с ее магнитным моментом и суперпарамагнитным неелевским вращением магнитного момента внутри частицы за счет тепловых флуктуаций. В ансамблях наночастиц, помещенных в некоторые жидкие носители, известные как феррожидкости, имеют место оба механизма. Внедрение наночастиц в полимерную матрицу или биологические ткани может привести к частичной или полной потере как поступательной, так и вращательной свободы. В этом случае суперпарамагнитная неелевская релаксация становится основным механизмом, определяющим магнитные свойства ансамблей таких неподвижных наночастиц [59–61]. В ходе исследований [62–65] было установлено, что динамика релаксации магнитного момента в наночастицах зависит от целого ряда факторов, таких как размер частиц, влияющий на процесс релаксации магнитного момента, а так же интенсивность магнитного поля, определяющего время, необходимое частицам для достижения равновесного состояния. Полученные результаты подчеркивают важность учета широкого спектра характеристик при анализе и моделировании процессов релаксации в магнитных наночастицах.

Сегодня существует множество устоявшихся методов синтеза, позволяющих изготавливать магнитные композиты с разнообразными нано- и микроскопическими текстурами [66–68]. Различное распределение магнитных наночастиц внутри образца приводит к значительному изменению его объемных свойств. Кроме того, межчастичные диполь-дипольные взаимодействия оказывают сильное влияние на макросвойства системы, что по-разному проявляется в композитах на жидкой или полимерной основе: сильные межчастичные диполь-дипольные взаимодействия в феррожидкости приводят к агрегации [69–72], тогда как в системе неподвижных магнитных наночастиц межчастичные взаимодействия могут быть причиной только для структурирования магнитных моментов наночастиц, поскольку сами частицы остаются неподвижными [73–75].

Влияние диполь-дипольных взаимодействий на магнитные свойства феррожидкостей хорошо изучено теоретически [76–80] и экспериментально [81–83], а также с помощью методов компьютерного моделирования [72, 77–80, 84]. В частности, установлено, что подобные взаимодействия влияют на ориентацию феррочастиц, магнитную восприимчивость и вязкость, а также фазовые переходы и структурную организацию феррожидкостей. Однако, несмотря на обширное количество исследований, посвященных данной тематике, разработка теории, учитывающей диполь-дипольные взаимодействия в системе неподвижных суперпарамагнитных наночастиц, все еще остается сложной задачей. Благодаря современным экспериментальным методам синтеза магнитоактивных материалов был разработан широкий спектр механизмов по встраиванию магнитных частиц в полимерную матрицу и созданию магнитных частиц разнообразных форм. Среди примеров подобных магнитных частиц можно выделить эллипсоиды и стержни [85–87], а также магнитные кубы [88–92], хотя классическим наполнителем по-прежнему остаются магнитные частицы, имеющие сферическую форму [93, 94]. Различные способы внедрения магнитных частиц в полимерную матрицу обуславливают степени трансляционной и ориентационной свободы магнитного наполнителя внутри полимера: функционализированная поверхность частицы может образовать химическую связь с полимерами. В таком случае вращения и сдвиги частиц будут ограничены механической связью с полимерной матрицей [95–97]; частицы могут быть физически захвачены в полые карманы полимерной матрицы, сохраняя высокую ориентационную свободу, но испытывая при этом ограничения в пространственном перемещении [98]; частицы могут быть жестко внедрены в полимер так, что сдвиги и вращения частиц станут очень затруднительны, а частицы будут практически полностью обездвижены [99]. Использование статического магнитного поля во время полимеризации феррожидкости позволяет получать образцы с анизотропными магнитными, механическими и оптическими свойствами [53, 100, 101].

Анизотропные свойства эффективно применяются в качестве регулирующего параметра для получения необходимых сценариев магнитного, термодинамического, механического, реологического поведения мягких магнитоактивных композитов. Ориентационное текстурирование и пространственное расположение частиц магнитного наполнителя, образованные в процессе синтеза образца,

главным образом определяют поведение и свойства композита, а также особенности его реакции на магнитные поля [102–107].

Невзирая на большое разнообразие магнитных наполнителей, полимерных и жидких сред, и внушительный набор методов внедрения магнитных частиц в матрицу-носитель [108–110], позволяющих создавать магнитоактивные материалы с широким спектром качественных особенностей и функциональных возможностей, использование подобных материалов в высокоточных технологиях на постоянной основе требует контроля и четкого прогнозирования их отклика на приложенные внешние магнитные поля.

В последних исследованиях, посвященных данной проблеме, с использованием статистико-механической теории и компьютерного моделирования был рассмотрен магнитный отклик систем неподвижных взаимодействующих однодоменных наночастиц, распределенных случайным образом или размещенных в узлах простой кубической решетки внутри неявной твердой матрицы [75, 111]. В работе [111] были рассмотрены суперпарамагнитные частицы с одноосной магнитной анизотропией и неелевским механизмом релаксации магнитных моментов частиц. Оси легкого намагничивания были расположены в соответствии с определенными текстурами: выровнены параллельно или перпендикулярно внешнему магнитному полю. В результате изучения данных моделей было установлено, что начальная магнитная восприимчивость магнитных материалов с различной текстурой сильно зависит от энергии кристаллографической магнитной анизотропии. Все случаи взаимодействия между наночастицами приводили к росту начальной восприимчивости, но у параллельной текстуры она увеличивалась гораздо сильнее, чем у перпендикулярной. В работе [75] предполагалось, что наночастицы внедряются в узлы простой кубической решетки и релаксация магнитных моментов наночастиц происходит по броуновскому механизму. Частицы не обладали собственной магнитной анизотропией, но могли вращаться в узлах решетки под действием внешнего магнитного поля и в результате межчастичных дипольных взаимодействий. Магнитные свойства простой кубической решетки сравнивались с магнитными свойствами феррожидкости, моделируемой системой подвижных дипольных твердых сфер. Установлено, что при слабых диполь-дипольных взаимодействиях намагниченность подвижных дипольных твердых сфер и простой кубической решетки одинакова. Однако

при сильной и умеренной дипольной связи и слабом магнитном поле система подвижных дипольных твердых сфер намагничивается выше, чем система простой кубической решетки, тогда как при более сильных полях наблюдается противоположная тенденция. Данные исследования наглядно демонстрируют, как различные распределения магнитных наночастиц внутри образца могут изменять его макросвойства. Тем не менее теория диполь-дипольных взаимодействий в системе неподвижных суперпарамагнитных частиц остается незавершенной, так как рассмотренные модели требуют исследования в более общих случаях, а полученные теоретические данные нуждаются в расширении области применимости.

Находясь внутри живого организма, наночастицы могут поглощаться клетками. Механизмы и особенности этого процесса подробно описаны в [112]. В результате наночастицы, находясь в ограниченном объеме ячейки, частично или полностью теряют свои поступательные и ориентационные степени свободы и образуют конгломерат, который можно рассматривать как многогранульную частицу (МГЧ). Различное пространственное распределение гранул внутри МГЧ и их количество в частице приводит к изменениям ее реакции на приложенное магнитное поле. Анализ подобных особенностей чрезвычайно важен при разработке современных методов биоинженерии и биомедицины.

Процессы формирования МГЧ, биосовместимость и реакция частицы на магнитные поля были подробно изучены теоретически [113], экспериментально [114–119], а также с помощью методов компьютерного моделирования [120–123]. В теоретических исследованиях предполагалось, что МГЧ содержит большое количество гранул. Для учета межчастичных взаимодействий при аналитическом описании магнитных свойств МГЧ в работе [122] был предложен метод, основанный на приближении сплошной среды, учитывающий размагничивающие эффекты, связанные с ограниченным объемом МГЧ. В случае небольшого числа гранул в частице подобное приближение становится невозможным, поскольку нельзя применять статистические методы к небольшим ансамблям частиц. Данная особенность приводит к необходимости проведения прямого анализа мелкомасштабной структуры МГЧ.

В диссертационной работе исследуется влияние диполь-дипольных взаимодействий, особенностей внутренней структуры и магнитной анизотропии на

магнитные свойства однодоменных обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, с неелевским механизмом релаксации магнитных моментов, находящихся во внешнем магнитном поле, распределенных по объему произвольным образом либо размещенных в узлах простой кубической решетки. В ходе исследования были рассмотрены системы, представляющие собой сплошные среды и МГЧ, содержащие различное число гранул.

Влияние количества гранул и особенностей их пространственного расположения на статическое намагничивание МГЧ исследуется с помощью статистико-механической теории и компьютерного моделирования методом Монте-Карло.

1.2. Основные виды взаимодействия магнитных частиц

В настоящее время хорошо изучен и описан целый ряд различных видов взаимодействия магнитных частиц [124]:

1. Зеймановские взаимодействия. Частицы, обладающие магнитным моментом, могут взаимодействовать с внешним магнитным полем, что является основной причиной влияния магнитных полей на поведение и свойства материалов. Например, под воздействием внешнего магнитного поля магнитные частицы могут ориентироваться или выстраиваться в определенном порядке.

2. Неелевские взаимодействия. Как правило, кристаллическая структура магнитного материала наночастицы моделируется при помощи одноосной магнитной анизотропии. Энергия Нееля характеризует взаимодействие магнитного момента с осью легкого намагничивания.

3. Парные межчастичные взаимодействия. Магнитные частицы способны оказывать влияние друг на друга посредством магнитных полей, которое называется диполь-дипольным взаимодействием и определяются классическим дальнедействующим, анизотропным диполь-дипольным потенциалом.

4. Гидродинамические и упругие взаимодействия. В определенных системах магнитные частицы могут перемещаться в жидких или твердых матрицах. Взаимодействие магнитных частиц в магнитной жидкости может быть определено гидродинамическими силами, а взаимодействие наночастиц в твердой матрице может быть связано с упругими деформациями матрицы-носителя.

5. Стерические взаимодействия через защитные оболочки. Во многих случаях магнитные частицы могут быть покрыты защитными оболочками, которые могут значительно повлиять на особенности их поведения. Стерические взаимодействия включают в себя эффекты, связанные с размерами, формами и химической природой оболочки частиц. Защитные оболочки могут модифицировать магнитные свойства и взаимодействия магнитных частиц, а также обеспечивать их стабильность и дисперсию в различных средах.

6. Взаимодействия, возникающие за счет Ван-дер-Ваальсовых сил. Ван-дер-Ваальсовы силы играют важную роль в различных физико-химических процессах, таких как адсорбция, коагуляция, и конденсация. Это межмолекулярные взаимодействия, которые возникают вследствие появления моментальных дипольных моментов, вызванных кратковременным неравномерным распределением электронов в атомах и молекулах.

Кроме перечисленных взаимодействий, в системах с магнитными частицами также могут присутствовать другие виды энергий и сил. Исследование и понимание различных видов взаимодействий магнитных частиц позволяет создавать новые материалы с определенными магнитными свойствами, разрабатывать магнитные и магнитоэлектрические устройства, а также применять полученные результаты в медицине, инженерии и других отраслях.

Единоразовый учет всех видов взаимодействий является крайне сложной задачей, в связи с чем при построении теоретических моделей всегда выделяют основные факторы, которые определяют поведение системы в конкретном исследуемом случае.

В диссертационной работе при моделировании свойств ансамблей суперпарамагнитных частиц учитываются взаимодействия магнитных моментов друг с другом, с внешним магнитным полем и осями легкого намагничивания. Данные потенциалы являются определяющими в поведении рассматриваемых систем.

Поскольку поступательные и вращательные степени свободы частиц в исследуемых образцах полагаются «замороженными», остальные потенциалы не являются определяющими и не учитываются.

1.3. Методы компьютерного моделирования

Компьютерное моделирование является одним из наиболее качественных способов оценки точности любой математической модели. Данный метод позволяет проводить статистические оценки и получать численные результаты для ранее недоступных задач, использовать хаотическую природу системы для получения информации о ее свойствах. Кроме того, компьютерное моделирование позволяет проводить эксперименты для систем, свойства которых не могут быть описаны строгими математическими выражениями.

В диссертационной работе при оценке теории, описывающей магнитные свойства ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, было использовано классическое для подобных задач компьютерное моделирование методом Монте-Карло [78, 120–123, 125].

Метод Монте-Карло для канонического NVT -ансамбля является оптимальным подходом при моделировании систем с фиксированным числом частиц (N), фиксированным объемом (V) и постоянной температурой (T). Он основан на генерации большого числа случайных конфигураций системы и демонстрирует высокую эффективность при оценке статистических свойств исследуемых образцов.

Полный цикл Монте-Карло для канонического NVT -ансамбля включает в себя следующие шаги:

1. Инициализация системы. Начальная конфигурация системы устанавливается с учетом заданных параметров, таких как положение и типы частиц.

2. Генерация случайной конфигурации. На каждом шаге Монте-Карло произвольно выбирается одна из частиц системы, а ее характеристики изменяются случайным образом. Это может быть смещение центра частицы на случайное расстояние или вращение магнитного момента вокруг случайной оси. Подобное изменение конфигурации выполняется с учетом энергетической функции системы и значения потенциалов взаимодействия между частицами.

3. Вычисление энергии системы. После изменения конфигурации вычисляется новая энергия системы с учетом изменения характеристик частиц. Данный этап включает в себя вычисление изменения энергии системы на основе соответствующей функции потенциальной энергии.

4. Принятие или отклонение новой конфигурации. Сравнение новой энергии системы с предыдущей энергией. Если новая энергия ниже предыдущей, то новая конфигурация принимается. Если новая энергия выше предыдущей, то конфигурация принимается с некоторой вероятностью, которая определяется алгоритмом Метрополиса [126–130], что позволяет системе избежать застревания в локальных минимумах энергии.

5. Повторение. Шаги 2-4 повторяются определенное число итераций или до достижения энергетического равновесия системы. Путем многократного повторения этих шагов можно получить статистические оценки различных термодинамических величин, таких как средняя энергия, температура, намагниченность, восприимчивость, а также анализировать другие свойства системы.

Метод Монте-Карло для канонического NVT -ансамбля является мощным инструментом в компьютерном моделировании и позволяет исследовать различные термодинамические свойства системы при заданных параметрах.

1.4. Основные результаты главы

Магниточувствительные вещества представляют собой искусственно синтезируемые системы, состоящие из магнитных наночастиц, встроенных в полимерную матрицу или помещенных в немагнитную жидкость-носитель. Данные гибридные системы, являющиеся современными многофункциональными материалами, обладают обширным набором химических, физических и механических свойств полимерных и жидких сред с сильным откликом на умеренные внешние магнитные поля, легко достижимые в практических и лабораторных условиях. Подобная практичность и вариативность позволяет активно использовать феррожидкости, феррогели и прочие магниточувствительные вещества в медицине, робототехнике, инженерии и других не менее важных отраслях.

Несмотря на востребованность данной тематики и обширное количество экспериментальных и теоретических исследований, разработка теории, посвященной влиянию диполь-дипольных взаимодействий на объемные свойства феррожидкостей, по-прежнему остается достаточно сложной задачей.

Данная диссертационная работа посвящена исследованию влияния диполь-дипольных взаимодействий, пространственной и ориентационной архитектуры на магнитные свойства ансамблей неподвижных суперпарамагнитных частиц, находящихся в постоянном внешнем магнитном поле.

Глава 2. Свойства ансамблей одинокных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц

2.1. Модель

Исследуемый образец представляет собой монодисперсную систему из N неподвижных суперпарамагнитных сферических частиц, на которые воздействует постоянное магнитное поле. Реакция системы на магнитное поле происходит по неелевскому механизму.

Все частицы имеют одинаковый диаметр магнитного ядра x и магнитный момент $m = v_m M_s$, где M_s - намагниченность насыщения магнитного материала, а $v_m = \pi x^3/6$ - объем магнитного ядра. Радиус-вектор и магнитный момент i -ой частицы задаются соответственно $\mathbf{r}_i = r_i \hat{\mathbf{r}}_i$ и $\mathbf{m}_i = m_i \hat{\mathbf{m}}_i$, где $\hat{\mathbf{r}}_i = (\sin \varsigma_i \cos \vartheta_i, \sin \varsigma_i \sin \vartheta_i, \cos \varsigma_i)$ и $\hat{\mathbf{m}}_i = (\sin \omega_i \cos \varepsilon_i, \sin \omega_i \sin \varepsilon_i, \cos \omega_i)$ являются единичными векторами.

Направление постоянного магнитного поля $\mathbf{H}$ параллельно оси Oz , то есть $\mathbf{H} = H(0, 0, 1)$.

Для описания направления осей легкого намагничивания будем использовать вектор $\mathbf{n}$, который определяется углами ϕ и θ , где ϕ - полярный угол в плоскости Oxy , а θ - угол между векторами $\mathbf{H}$ и $\mathbf{n}$: $\theta = \angle(\mathbf{H}, \mathbf{n})$.

Каждый магнитный момент стремится занять энергетически наиболее выгодное расположение вдоль оси легкого намагничивания, которая обуславливает две основных конфигурации системы: параллельную и антипараллельную.

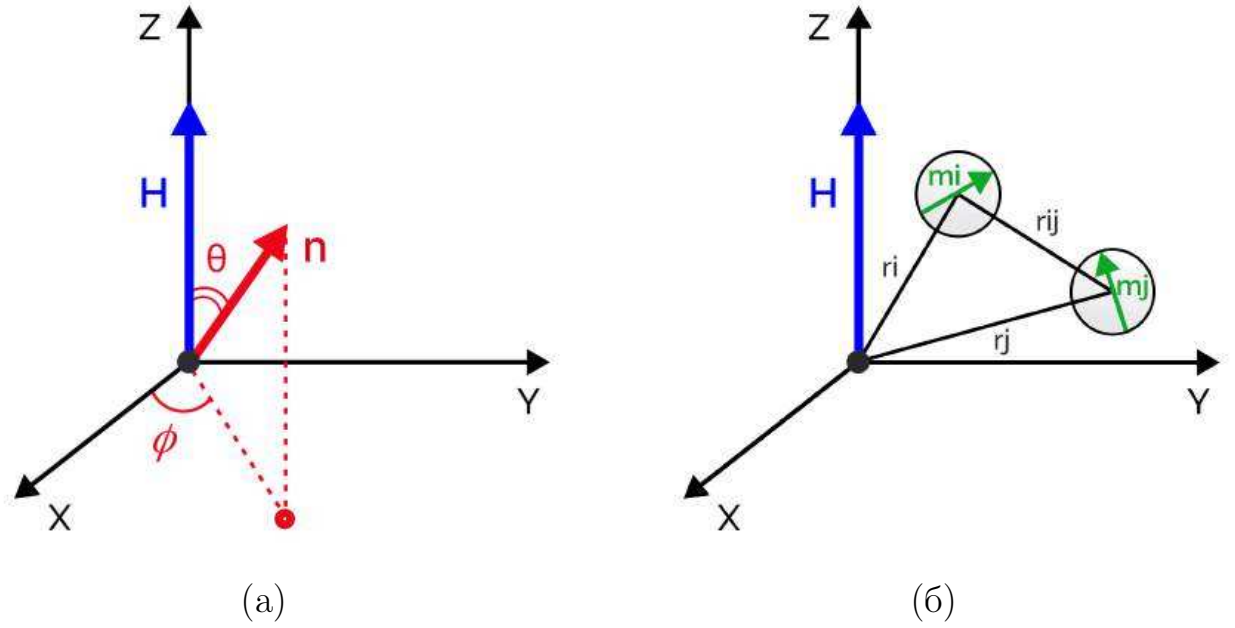


Рис. 2.1.1 – Система координат. Ось Oz параллельна направлению постоянного внешнего магнитного поля $\mathbf{H}$. Ось легкого намагничивания $\mathbf{n}$ (а), радиус-вектора $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{r}_j$ и магнитные моменты $\mathbf{m}_i$, $\mathbf{m}_j$ для i -ой и j -ой частиц (б).

Энергия Нееля U_N задается в виде функции, зависящей от угла между магнитным моментом $\mathbf{m}_i$ и вектором $\mathbf{n}$:

$$U_N(i) = -K v_m (\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}})^2, \quad (2.1.1)$$

где $\hat{\mathbf{n}}$ - единичный вектор, а K - константа магнитной кристаллографической анизотропии, являющаяся характеристикой материала.

Энергия Зеемана описывает взаимодействие между магнитным моментом $\mathbf{m}_i$ и однородным внешним магнитным полем $\mathbf{H}$:

$$U_m(i) = -\mu_0 (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{H}) = -\mu_0 m H (\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{h}}), \quad (2.1.2)$$

где μ_0 - магнитная проницаемость среды, $\hat{\mathbf{h}}$ - единичный вектор.

Парное диполь-дипольное взаимодействие i -ой и j -ой частиц определяется с помощью анизотропного потенциала U_d :

$$U_d(ij) = \frac{\mu_0 m^2}{4\pi r_{ij}^3} \left[(\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{m}}_j) - 3(\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{m}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \right], \quad (2.1.3)$$

где $\mathbf{r}_{ij} = r_{ij} \hat{\mathbf{r}}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ означает вектор длиной $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$, соединяющий центры i -ой и j -ой частиц.

Полная потенциальная энергия, нормированная на тепловую энергию $k_B T = \beta^{-1}$ определяется в следующем виде:

$$\beta U = \beta \sum_{j>i=1}^N U_d(ij) - \alpha \sum_{i=1}^N (\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{h}}) - \sigma \sum_{i=1}^N (\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}})^2, \quad (2.1.4)$$

где $\alpha = \beta \mu_0 t H$ - параметр Ланжевена, а $\sigma = \beta v_m K$ - безразмерный параметр анизотропии.

Положение частицы в той или иной точке объема описывается с помощью функции вероятности распределения, определенной через дельта-функцию Дирака, центрированную в точке $\mathbf{r}_k^{(0)}$, где $\mathbf{r}_k^{(0)}$ - положение k -ой частицы в неподвижной системе:

$$p(\mathbf{r}_k) = \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_k^0), \quad (2.1.5)$$

Для описания интенсивности магнитного взаимодействия двух частиц, расположенных в узлах простой кубической решетки, в единицах тепловой энергии воспользуемся безразмерным параметром λ_e :

$$\lambda_e = \frac{\mu_0 m^2 \beta}{4\pi d^3}, \quad (2.1.6)$$

при определении которого учитывается тот факт, что две наночастицы не могут находиться ближе, чем период решетки $d \geq x$.

Для случая произвольного распределения частиц по объему будем использовать аналогичный параметр λ :

$$\lambda = \frac{\mu_0 m^2 \beta}{4\pi x^3}. \quad (2.1.7)$$

Для более детального описания модели и ее магнитной восприимчивости воспользуемся стандартным параметром – начальной восприимчивостью Ланжевена:

$$\chi_L = \frac{1}{3} \mu_0 m^2 \beta \rho, \quad (2.1.8)$$

где ρ – числовая концентрация феррочастиц в образце. Для случая простой кубической решетки $\rho = 1/d^3$.

2.2. Рассмотренные конфигурации частиц

Образец имеет форму цилиндра, сильно вытянутого вдоль оси Oz для того, чтобы избежать возникновения размагничивающих полей.

В рамках данной диссертационной работы было рассмотрено несколько вариантов распределения частиц по объему:

1. Распределение частиц по узлам простой кубической решетки.

а) Параллельная конфигурация: оси легкого намагничивания параллельны направлению магнитного поля (рисунок 2.2.1).

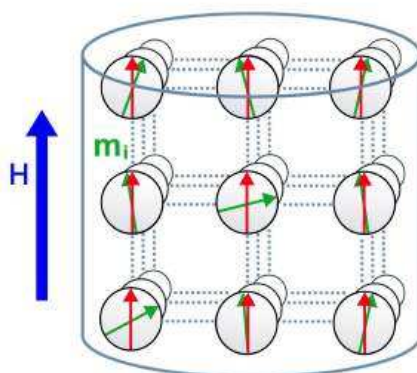


Рис. 2.2.1 – Эскиз системы суперпарамагнитных частиц, распределенных по узлам простой кубической решетки с осями легкого намагничивания (красные стрелки), выровненными параллельно направлению магнитного поля (синяя стрелка).

б) Перпендикулярная конфигурация: оси легкого намагничивания перпендикулярны направлению магнитного поля (рисунок 2.2.2).

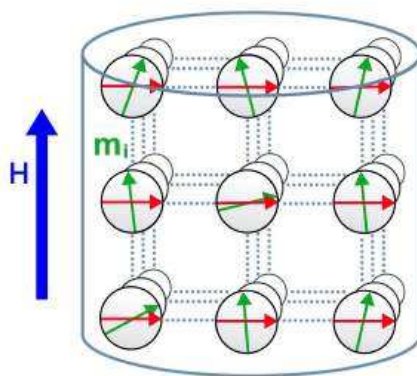


Рис. 2.2.2 – Эскиз системы суперпарамагнитных частиц, распределенных по узлам простой кубической решетки с осями легкого намагничивания (красные стрелки), выровненными перпендикулярно направлению магнитного поля (синяя стрелка).

в) Оси легкого намагничивания выровненными под произвольным углом к направлению магнитного поля (рисунок 2.2.3).

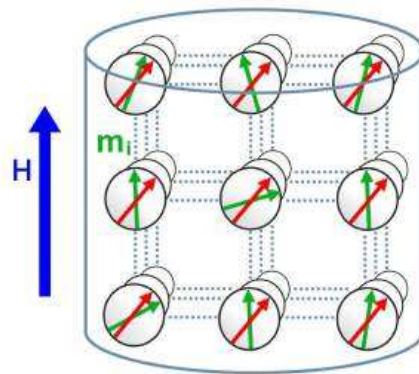


Рис. 2.2.3 – Эскиз системы суперпарамагнитных частиц, распределенных по узлам простой кубической решетки с осями легкого намагничивания (красные стрелки), выровненными под углом к направлению магнитного поля (синяя стрелка).

2. Случайное распределение частиц по объему, оси легкого намагничивания выровненными под произвольным углом к направлению магнитного поля (рисунок 2.2.4).

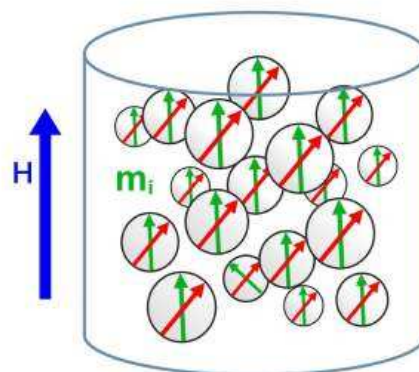


Рис. 2.2.4 – Эскиз системы суперпарамагнитных частиц, распределенных по объему случайным образом с осями легкого намагничивания (красные стрелки), выровненными под углом к направлению магнитного поля (синяя стрелка).

2.3. Общая схема вириального разложения свободной энергии Гельмгольца

Для исследования магнитных и термодинамических свойств системы будем использовать классический метод разложения свободной энергии Гельмгольца F в вириальный ряд [25–29].

Запишем определение F через конфигурационный интеграл Z , который описывает все отклонения системы от идеального состояния:

$$\beta F = -\ln(Z). \quad (2.3.1)$$

Для того чтобы установить вклад диполь-дипольных взаимодействий в конфигурационный интеграл, представим F в виде двух слагаемых:

$$F = F_{\text{id}} + \Delta F. \quad (2.3.2)$$

Первое слагаемое F_{id} соответствует идеальной системе невзаимодействующих суперпарамагнитных наночастиц в приложенном магнитном поле. Второе слагаемое ΔF показывает вклад межчастичных диполь-дипольных взаимодействий в свободную энергию Гельмгольца.

Введем следующие обозначения: ΔF^{SCLF} и ΔF^{RANDOM} - вклад в свободную энергию Гельмгольца диполь-дипольных взаимодействий при расположении частиц в узлах кубической решетки и их случайном распределении, соответственно.

2.3.1. Система без диполь-дипольных взаимодействий

Свободная энергия Гельмгольца для идеальной системы суперпарамагнитных невзаимодействующих частиц в постоянном магнитном поле F_{id} , имеет следующий вид:

$$\beta F_{\text{id}} = -\ln(Z_{\text{id}}), \quad (2.3.3)$$

$$\begin{aligned}
Z_{\text{id}} &= \prod_{k=1}^N \int p(\mathbf{r}_k) d\mathbf{r}_k d\hat{\mathbf{m}}_k \times \\
&\times \exp \left(\sum_{i=1}^N [\alpha(\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{h}}) + \sigma(\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}})^2] \right). \quad (2.3.4)
\end{aligned}$$

Здесь $d\mathbf{r}_k$ и $d\hat{\mathbf{m}}_k$ означают усреднения по всем возможным местоположениям k -ой частицы и направлениям ее магнитного момента:

$$d\mathbf{r}_k = r_k^2 \sin \varsigma_k dr_k d\varsigma_k d\vartheta_k, \quad (2.3.5)$$

$$d\hat{\mathbf{m}}_k = \frac{1}{4\pi} \sin \omega_k d\omega_k d\varepsilon_k. \quad (2.3.6)$$

Как видно из определения (2.3.4), Z_{id} зависит только от одночастичных типов взаимодействия: магнитный момент – магнитное поле и магнитный момент – ось легкого намагничивания. Идеальный случай полностью пренебрегает межчастичными диполь-дипольными взаимодействиями, которые определяются расположением частиц в объеме образца, и, как следствие, не зависит от структуры пространственного расположения частиц.

Для представления распределения вероятностей воспользуемся правилом нормализации:

$$\int p(\mathbf{r}_k) d\mathbf{r}_k = 1. \quad (2.3.7)$$

Принимая во внимание тот факт, что все частицы эквивалентны друг другу при осуществлении интегрирования, перепишем выражение для Z_{id} следующим образом:

$$Z_{\text{id}} = \left(\int d\hat{\mathbf{m}}_1 \exp [\alpha(\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{h}}) + \sigma(\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}})^2] \right)^N, \quad (2.3.8)$$

откуда получим итоговый вид для F_{id} :

$$\frac{\beta F_{\text{id}}}{N} = -\ln \left(\int d\hat{\mathbf{m}}_1 \exp [\alpha(\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{h}}) + \sigma(\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}})^2] \right). \quad (2.3.9)$$

Результат может быть найден численно для фиксированного направления вектора $\hat{\mathbf{n}}$ и каждого набора параметров α и σ . Заметим также, что конфигурационный интеграл в свободной энергии Гельмгольца для идеальной системы не зависит от концентрации и расположения частиц.

На рисунке 2.3.1 представлена зависимость F_{id} от угла θ между направлением осей легкого намагничивания $\mathbf{n}$ и внешним полем $\mathbf{H}$. Можно заметить, что при увеличении напряженности внешнего магнитного поля появляется минимум в точке $\pi/2$. Параллельные конфигурации кривых энергии, при которых ось анизотропии расположена вдоль вектора магнитного поля ($\theta = 0$ и $\theta = \pi$), показывают более быстрый рост свободной энергии, чем при перпендикулярной конфигурации ($\theta = \pi/2$). Для идеального случая в нулевом магнитном поле отсутствует зависимость интеграла от угла θ . Также при любых параметрах системы он не связан с углом ϕ . Система полностью изотропна при вращении в плоскости Oxy .

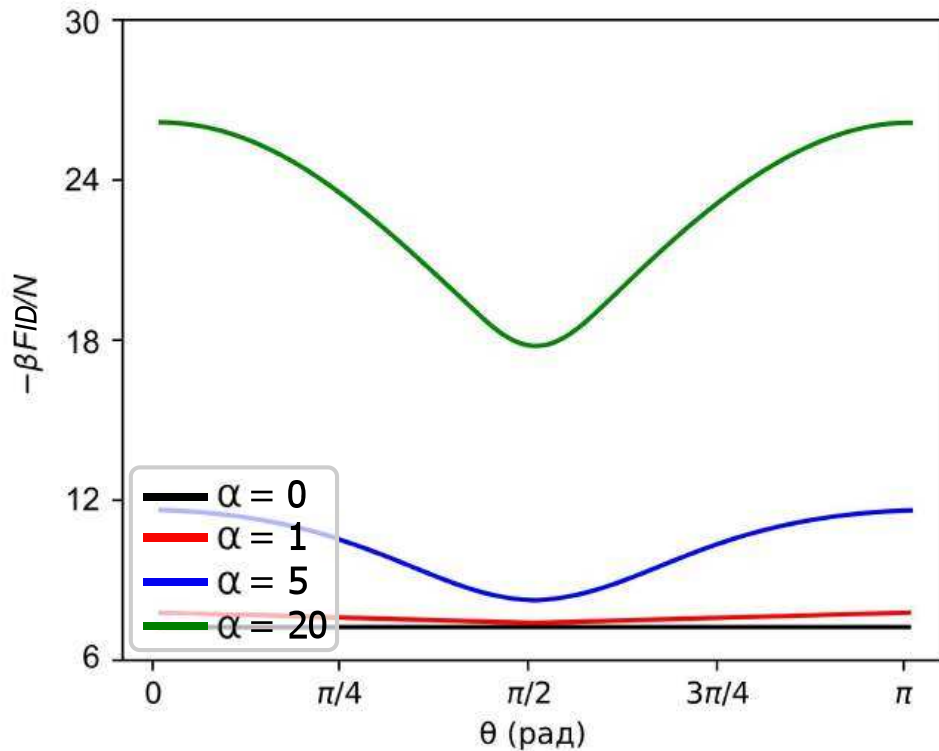


Рис. 2.3.1 – Свободная энергия Гельмгольца F_{id} как функция, зависящая от угла $\theta = \angle(\mathbf{H}, \mathbf{n})$, для идеальной системы суперпарамагнитных частиц при $\sigma = 10$ для различных значений интенсивности внешнего магнитного поля $\alpha = 0, 1, 5$ и 20 .

2.3.2. Система с диполь-дипольными взаимодействиями

Рассмотрим второе слагаемое ΔF из (2.3.2), которое описывает вклад диполь-дипольных взаимодействий в свободную энергию Гельмгольца:

$$\beta\Delta F = -\ln\left(\frac{Z}{Z_{\text{id}}}\right), \quad (2.3.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{Z}{Z_{\text{id}}} &= \frac{1}{Z_{\text{id}}} \prod_{k=1}^N \int p(\mathbf{r}_k) d\mathbf{r}_k d\hat{\mathbf{m}}_k \times \\ &\times \exp\left(\sum_{i=1}^N [\alpha(\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{h}}) + \sigma(\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}})^2] - \sum_{j>i=1}^N \beta U_d(ij)\right). \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

Воспользовавшись усреднением интеграла с весовыми коэффициентами распределения Больцмана по ориентации магнитного момента k -ой наночастицы $d\Psi_k$:

$$d\Psi_k = \frac{d\hat{\mathbf{m}}_k \exp\left[\alpha(\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{h}}) + \sigma(\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}})^2\right]}{\int d\hat{\mathbf{m}}_1 \exp\left[\alpha(\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{h}}) + \sigma(\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}})^2\right]}, \quad (2.3.12)$$

а так же функцией Майера:

$$f_{ij} = \exp(-\beta U_d(ij)) - 1, \quad (2.3.13)$$

перепишем выражение (2.3.11) в более компактном виде:

$$\begin{aligned} \frac{Z}{Z_{\text{id}}} &= \prod_{k=1}^N \int p(\mathbf{r}_k) d\mathbf{r}_k d\Psi_k \prod_{j>i=1}^N (f_{ij} + 1) \approx \\ &\approx \prod_{k=1}^N \int p(\mathbf{r}_k) d\mathbf{r}_k d\Psi_k \left(\sum_{j>i=1}^N f_{ij} + 1 \right) = \\ &= \sum_{j>i=1}^N f_{ij} \int p(\mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_i d\Psi_i \int p(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j d\Psi_j + 1. \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

Используя определение (2.1.5), перепишем выражение (2.3.14) в более короткой форме:

$$\frac{Z}{Z_{\text{id}}} = \sum_{j>i=1}^N f_{ij}^{(0)} \int d\mathbf{\Psi}_i d\mathbf{\Psi}_j + 1 = \sum_{j>i=1}^N \langle f_{ij}^{(0)} \rangle + 1, \quad (2.3.15)$$

$$f_{ij}^{(0)} = \int p(\mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_i \int p(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j f_{ij}, \quad (2.3.16)$$

$$\langle f_{ij}^{(0)} \rangle = \int f_{ij}^{(0)} d\mathbf{\Psi}_1 d\mathbf{\Psi}_j, \quad (2.3.17)$$

где $f_{ij}^{(0)}$ является усреднением функции Майера по степеням свободы i -ой и j -ой наночастиц, расположенных в решетке, а $\langle f_{ij}^{(0)} \rangle$ — усреднение с весовыми коэффициентами распределения Больцмана по ориентации магнитного момента i -ой и j -ой наночастиц.

Обобщив выражения (2.3.10) и (2.3.15) можно получить окончательный вид конфигурационной части свободной энергии Гельмгольца в ограничении вторым вириальным коэффициентом и записать итоговое выражение для исследуемой системы:

$$\frac{\beta \Delta F}{N} \approx -\frac{1}{2} \sum_{j=2}^N \langle f_{1j}^{(0)} \rangle. \quad (2.3.18)$$

В основе данного подхода лежит метод из работы [125], применяемый для $\sigma \equiv 0$. Основное отличие данной работы заключается в ином определении усреднения $d\mathbf{\Psi}_k$ (2.3.12), которое в нашем случае также зависит от параметра анизотропии $\sigma \geq 0$ и совпадает с определением из [125] для случая $\sigma = 0$, что демонстрирует согласованность теории.

Заметим, что приближение (2.3.18) достигается за счет логарифмического разложения (2.3.10) в классический вириальный ряд с точностью до второго вириального коэффициента, что означает учет только парных межчастичных взаимодействий.

2.4. Распределение магнитных частиц по узлам простой кубической решетки

Рассмотрим подробнее случай простой кубической решетки. Разложим усреднение функции Майера (2.3.16) в ряд до третьего порядка по дипольной энергии частиц U_d :

$$f_{1j}^{(0)} = -\beta U_d(1j) + \frac{[-\beta U_d(1j)]^2}{2!} + \frac{[-\beta U_d(1j)]^3}{3!} + O(U_d^4). \quad (2.4.1)$$

Применяя усреднение с весовыми коэффициентами распределения Больцмана по ориентации магнитных моментов $\mathbf{m}_1$ и $\mathbf{m}_j$, можно представить значение $\beta\Delta F$ в следующем виде:

$$\frac{\beta\Delta F}{N} = -\frac{1}{2} (b_1\lambda_e + b_2\lambda_e^2 + b_3\lambda_e^3), \quad (2.4.2)$$

$$b_1 = \sum_{j=2}^N \left\langle \frac{-\beta U_d(1j)}{\lambda_e} \right\rangle, \quad (2.4.3)$$

$$b_2 = \sum_{j=2}^N \left\langle \frac{1}{2!} \left(\frac{-\beta U_d(1j)}{\lambda_e} \right)^2 \right\rangle, \quad (2.4.4)$$

$$b_3 = \sum_{j=2}^N \left\langle \frac{1}{3!} \left(\frac{-\beta U_d(1j)}{\lambda_e} \right)^3 \right\rangle. \quad (2.4.5)$$

Коэффициенты b_1 , b_2 and b_3 различны для параллельной и перпендикулярной конфигураций и будут рассмотрены отдельно.

2.4.1. Случай параллельной ориентации осей легкого намагничивания и направления постоянного магнитного поля

Параллельное расположение осей легкого намагничивания $\mathbf{n}$ и направления постоянного внешнего магнитного поля $\mathbf{H}$ означает что:

$$\begin{aligned}
\mathbf{n} &= n(0, 0, 1), \\
(\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{h}}) &= \cos \omega_i, \\
(\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_i) &= \cos \omega_i.
\end{aligned} \tag{2.4.6}$$

Для этого случая F_{id} в формуле (2.3.9) примет следующий вид:

$$\frac{\beta F_{id}^{\parallel}}{N} = -\ln [Q_0(\alpha, \sigma)], \tag{2.4.7}$$

где $Q_0(\alpha, \sigma)$ - вспомогательная функция:

$$\begin{aligned}
Q_0(\alpha, \sigma) &= \int dm_1 \exp(\alpha \cos \omega_1 + \sigma \cos^2 \omega_1) \\
&= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \exp(\alpha t + \sigma t^2) dt,
\end{aligned} \tag{2.4.8}$$

$$Q_0(\alpha, 0) = \frac{\sinh \alpha}{\alpha}. \tag{2.4.9}$$

Усреднение с весовыми коэффициентами распределения Больцмана по ориентации магнитного момента k -ой наночастицы для параллельной конфигурации $d\Psi_k^{\parallel}$ выглядит следующим образом:

$$d\Psi_k^{\parallel} = \frac{d\hat{\mathbf{m}}_k \exp(\alpha \cos \omega_k + \sigma \cos^2 \omega_k)}{Q_0(\alpha, \sigma)}. \tag{2.4.10}$$

Для данного случая результат усреднения коэффициентов $b_1^{\parallel}$, $b_2^{\parallel}$, $b_3^{\parallel}$ по ориентации магнитного момента примет следующий вид:

$$b_1^{\parallel} = 2Q_1^2(\alpha, \sigma)\gamma_{12}, \tag{2.4.11}$$

$$\begin{aligned}
b_2^{\parallel} &= \frac{36}{35}Q_2^2(\alpha, \sigma)\gamma_{24} + \frac{2}{3}Q_2(\alpha, \sigma) \left(1 - \frac{Q_2(\alpha, \sigma)}{7}\right) \gamma_{22} \\
&+ \frac{1}{3} \left(1 + \frac{Q_2^2(\alpha, \sigma)}{5}\right) \gamma_{20},
\end{aligned} \tag{2.4.12}$$

$$\begin{aligned}
b_3^{\parallel} &= \frac{6}{77} (3Q_1(\alpha, \sigma) - 5Q_3(\alpha, \sigma))^2 \gamma_{36} \\
&+ \frac{18}{11} \left(\frac{4Q_1(\alpha, \sigma)Q_3(\alpha, \sigma)}{5} - \frac{3Q_1^2(\alpha, \sigma)}{7} - \frac{Q_3^2(\alpha, \sigma)}{7} \right) \gamma_{34} \\
&+ \frac{1}{7} (3Q_1^2(\alpha, \sigma) + Q_3^2(\alpha, \sigma)) \gamma_{32} \\
&+ \frac{1}{42} \left(\frac{6Q_1(\alpha, \sigma)Q_3(\alpha, \sigma)}{5} + 3Q_1^2(\alpha, \sigma) - Q_3^2(\alpha, \sigma) \right) \gamma_{30}, \quad (2.4.13)
\end{aligned}$$

где для упрощения итоговой формы записи были использованы вспомогательные функции $Q_1^{\parallel}$, $Q_2^{\parallel}$, $Q_3^{\parallel}$:

$$Q_1^{\parallel}(\alpha, \sigma) = \frac{1}{2Q_0(\alpha, \sigma)} \int_{-1}^1 \exp(\alpha t + \sigma t^2) t \, dt, \quad (2.4.14)$$

$$Q_1^{\parallel}(\alpha, 0) = L(\alpha),$$

$$Q_2^{\parallel}(\alpha, \sigma) = \frac{3}{4Q_0(\alpha, \sigma)} \int_{-1}^1 \exp(\alpha t + \sigma t^2) t^2 \, dt - \frac{1}{2}, \quad (2.4.15)$$

$$Q_2^{\parallel}(\alpha, 0) = L_3(\alpha),$$

$$Q_3^{\parallel}(\alpha, \sigma) = \frac{1}{2Q_0(\alpha, \sigma)} \int_{-1}^1 \exp(\alpha t + \sigma t^2) t^3 \, dt, \quad (2.4.16)$$

$$Q_3^{\parallel}(\alpha, 0) = L(\alpha) - \frac{2}{\alpha} L_3(\alpha),$$

где:

$$\begin{aligned}
L(\alpha) &= \coth \alpha - \frac{1}{\alpha}, \\
L_3(\alpha) &= 1 - 3 \frac{L(\alpha)}{\alpha}. \quad (2.4.17)
\end{aligned}$$

Коэффициенты γ_{pq} включают в себя сумму выражений зависящих от положения частиц, распределенных в цилиндре:

$$\gamma_{pq} = \sum_{j=2}^N \frac{1}{\tilde{r}_{1j}^{3p}} P_q \left(\frac{\tilde{z}_{1j}}{\tilde{r}_{1j}} \right), \quad (2.4.18)$$

где P_q обозначает полиномы Лежандра q -го порядка.

Определение (2.4.18) включает в себя вектор межчастичного распределения $\tilde{\mathbf{r}}_{1j} = \mathbf{r}_{1j}/d$, где $\tilde{z}_{1j}$ является z -ой компонентой вектора $\tilde{\mathbf{r}}_{1j}$. Предполагается, что наночастица, которой присвоен 1-ый номер, закреплена в начальной точке системы координат исследуемой модели:

$$(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, \tilde{z}_1) \equiv (0, 0, 0). \quad (2.4.19)$$

Координаты j -ой наночастицы в этом случае могут располагаться во всех остальных узлах кубической решетки, ограниченных размером цилиндра:

$$\begin{aligned} -R &\leq \tilde{x}_j \leq R, \\ -R &\leq \tilde{y}_j \leq R, \\ -hR &\leq \tilde{z}_j \leq hR, \\ (\tilde{x}_j)^2 + (\tilde{y}_j)^2 &\leq R^2, \\ (\tilde{x}_j)^2 + (\tilde{y}_j)^2 + (\tilde{z}_j)^2 &> 0, \end{aligned} \quad (2.4.20)$$

где R — безразмерный радиус цилиндра, а h — множитель, описывающий вытянутость цилиндра.

Покажем сходимость числовых рядов в γ_{pq} . Каждый элемент γ_{pq} содержит полином Лежандра P_q , аргумент которого ограничен:

$$\left| \frac{\tilde{z}_{1j}}{\tilde{r}_{1j}} \right| \leq 1, \quad (2.4.21)$$

а значит и сам полином Лежандра P_q будет ограничен:

$$\left| P_q \left(\frac{\tilde{z}_{1j}}{\tilde{r}_{1j}} \right) \right| \leq 1, \quad (2.4.22)$$

что позволяет получить следующую цепочку оценок:

$$|\gamma_{pq}| \leq \sum_{j=2}^N \frac{1}{\tilde{r}_{1j}^{3p}} \leq \sum_{j=2}^N \frac{1}{|\tilde{z}_j|^{3p}} \leq 2R^2 \sum_{n=1}^{hR} \frac{1}{n^{3p}}. \quad (2.4.23)$$

Термодинамический предел в данной модели означает, что при постоянном радиусе цилиндра R его удлинение $h \rightarrow \infty$, следовательно, в этом случае можно получить:

$$|\gamma_{pq}| \leq 2R^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{3p}} = 2R^2 \zeta(3p), \quad (2.4.24)$$

где $\zeta(x)$ - дзета-функция Римана, сходящаяся абсолютно и равномерно при $x \leq 1 + \epsilon$ для любого $\epsilon > 0$.

В модельной системе с $N \simeq 25 \times 10^6$ наночастицами были получены следующие результаты для γ_{pq} :

$$\begin{aligned} \gamma_{12} &= 2.0944, \\ \gamma_{24} &= 3.2257, \\ \gamma_{22} &= 0.0000, \\ \gamma_{20} &= 8.4016, \\ \gamma_{36} &= 0.6553, \\ \gamma_{34} &= 3.4081, \\ \gamma_{32} &= 0.0000, \\ \gamma_{30} &= 6.6289. \end{aligned} \quad (2.4.25)$$

В таблице (2.1) представлены результаты вычисления параметров γ_{pq} для систем с различным числом наночастиц N , расположенных в узлах простой кубической решетки. Поскольку полученные значения γ_{pq} для систем с большим количеством наночастиц очень близки, предполагается, что наибольшая система с $N = 25141257$ наночастицами является достаточной для численного расчета γ_{pq} .

γ_{pq}	N = 63 717	N = 504 057	N = 3 170 317	N = 25 141 257
γ_{12}	2.0632	2.0634	2.0944	2.0944
γ_{24}	3.2257	3.2257	3.2257	3.2257
γ_{22}	0.0006	0.0001	0.0000	0.0000
γ_{20}	8.3995	8.4016	8.4016	8.4016
γ_{36}	0.6553	0.6553	0.6553	0.6553
γ_{34}	3.4081	3.4081	3.4081	3.4081
γ_{32}	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
γ_{30}	6.6289	6.6289	6.6289	6.6289

Таблица 2.1 – Результаты вычисления параметров γ_{pq} с различным количеством наночастиц N , расположенных в узлах простой кубической решетки.

С учетом вышеописанных вычислений аналитическое выражение для $\Delta F^{\parallel}$ можно записать в итоговом виде как:

$$\begin{aligned}
\frac{\beta \Delta F^{\parallel}}{N} = & -2.0944 Q_1^2(\alpha, \sigma) \lambda_e \\
& - [1.9390 Q_2^2(\alpha, \sigma) + 1.4003] \lambda_e^2 \\
& - [0.1611 Q_3^2(\alpha, \sigma) + 1.5595 Q_1(\alpha, \sigma) Q_3(\alpha, \sigma) \\
& - 0.7285 Q_1^2(\alpha, \sigma)] \lambda_e^3.
\end{aligned} \tag{2.4.26}$$

Хорошо известно, что вириальное разложение для системы с диполь-дипольными взаимодействиями представляет собой знакочередующийся ряд [131, 132], вследствие чего оно крайне чувствительно к любому уменьшению числа слагаемых. Следовательно, будет более эффективно преобразовать вириальное разложение свободной энергии Гельмгольца (2.4.26) обратно к логарифмическому виду (2.3.10):

$$\begin{aligned}
\frac{\beta \Delta F^{\parallel}}{N} = & -\ln \left\{ 1 + 2.0944 Q_1^2(\alpha, \sigma) \lambda_e \right. \\
& + [1.9390 Q_2^2(\alpha, \sigma) + 1.4003] \lambda_e^2 \\
& + [0.1611 Q_3^2(\alpha, \sigma) + 1.5595 Q_1(\alpha, \sigma) Q_3(\alpha, \sigma) \\
& \left. - 0.7285 Q_1^2(\alpha, \sigma)] \lambda_e^3 \right\},
\end{aligned} \tag{2.4.27}$$

где правая часть выражения (2.4.26) является первыми членами разложения в ряд Маклорена логарифма из выражения (2.4.27). Преимущество логарифмической формы состоит в том, что логарифм полинома менее чувствителен к уменьшению количества членов степенного ряда чем вириальное разложение по λ_e . Этот метод впервые был предложен в [133] и позволил расширить применимость теории как по объемной концентрации наночастиц, так и по параметру диполь-дипольных взаимодействий [125, 134, 135].

Влияние диполь-дипольного взаимодействия на свободную энергию Гельмгольца ΔF как функции параметра анизотропии σ показано на рисунке 2.4.1 для значений $\alpha = 0, 1, 2$, и 5 , интенсивности диполь-дипольных взаимодействий $\lambda_e = 0.5$ и $\chi_L = 2.1$. В параллельной конфигурации оси анизотропии являются дополнительным стимулом к выравниванию магнитных моментов вдоль внешнего магнитного поля, что приводит к увеличению свободной энергии Гельмгольца с ростом параметра анизотропии σ . Кроме того, увеличение интенсивности магнитного поля ведет к росту ΔF .

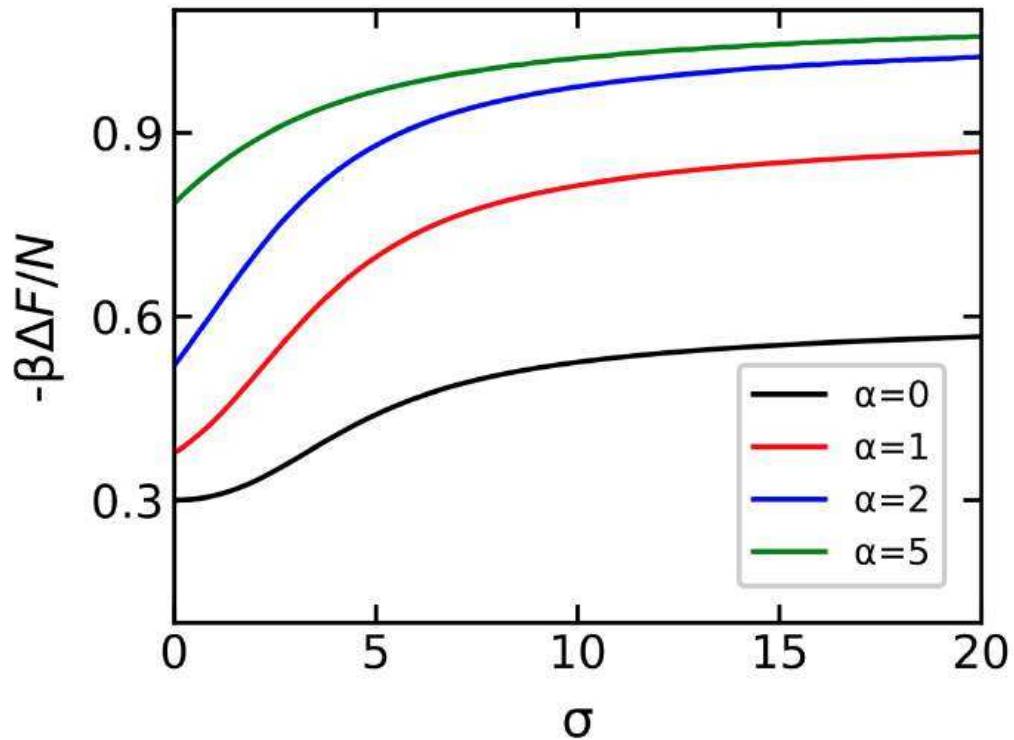


Рис. 2.4.1 – Вклад диполь-дипольных взаимодействий ΔF в свободную энергию для параллельной конфигурации как функция параметра анизотропии σ для системы с $\lambda_e = 0.5$, $\chi_L = 2.1$ и различными значениями параметра $\alpha = 0, 1, 2$ и 5 .

Зависимость ΔF от напряженности внешнего магнитного поля показана на рисунке 2.4.2 для значений $\sigma = 0, 2, 5$, и 10 , и $\lambda_e = 0.5$. Вклад ΔF более чувствителен к изменению параметра анизотропии в магнитных полях средней интенсивности $1 \leq \alpha \leq 5$, тогда как при $\alpha \simeq 10$ изменение значения ΔF при росте параметра σ не столь значительно.

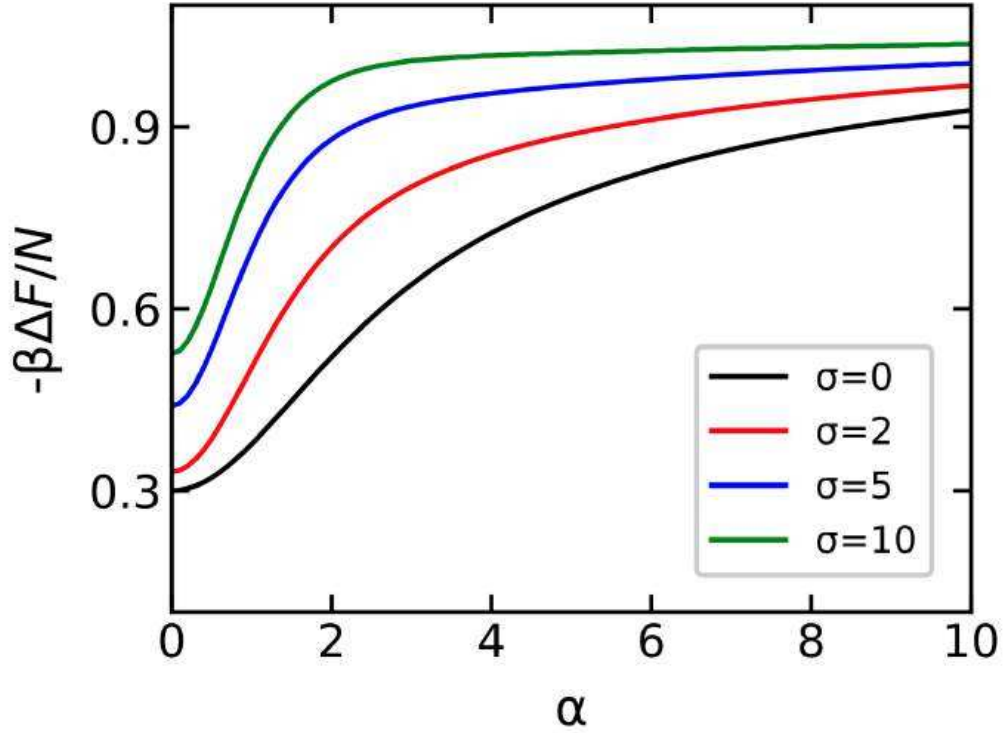


Рис. 2.4.2 – Вклад диполь-дипольных взаимодействий ΔF в свободную энергию для параллельной конфигурации как функция параметра Ланжевена α для системы с $\lambda_e = 0.5$, $\chi_L = 2.1$ и различными значениями параметра $\sigma = 0, 2, 5$ и 10 .

2.4.2. Случай перпендикулярной ориентации осей легкого намагничивания и направления постоянного магнитного поля

Перпендикулярное расположение осей легкого намагничивания $\mathbf{n}$ относительно направления постоянного внешнего магнитного поля $\mathbf{H}$ означает, что:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{n} &= n(1, 0, 0), \\
 (\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{h}}) &= \cos \omega_i, \\
 (\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_i) &= \sin \omega_i \cos \varepsilon_i.
 \end{aligned} \tag{2.4.28}$$

Для этого случая F_{id} в формуле (2.3.9) примет следующий вид:

$$\frac{\beta F_{id}^{\perp}}{N} = -\ln [R_0(\alpha, \sigma)], \quad (2.4.29)$$

где $R_0(\alpha, \sigma)$ - вспомогательная функция:

$$\begin{aligned} R_0(\alpha, \sigma) &= \int dm_1 \exp(\alpha \cos \omega_1 + \sigma \sin^2 \omega_1 \cos^2 \varepsilon_1) \\ &= \int_0^1 \exp(\sigma t^2) I_0(\alpha \sqrt{1-t^2}) dt \end{aligned} \quad (2.4.30)$$

$$R_0(\alpha, 0) = \frac{\sinh \alpha}{\alpha}. \quad (2.4.31)$$

Здесь $I_0(x)$ является модифицированной функцией Бесселя нулевого порядка.

Усреднение интеграла с весовыми коэффициентами распределения Больцмана по ориентации магнитного момента k -ой наночастицы для перпендикулярной конфигурации $d\Psi_k^{\perp}$ выглядит следующим образом:

$$d\Psi_k^{\perp} = \frac{d\hat{\mathbf{m}}_k \exp(\alpha \cos \omega_k + \sigma \sin^2 \omega_k \cos^2 \varepsilon_k)}{R_0(\alpha, \sigma)}. \quad (2.4.32)$$

Для данного случая результат усреднения коэффициентов $b_1^{\perp}$, $b_2^{\perp}$, $b_3^{\perp}$ по ориентации магнитного момента примет следующий вид:

$$b_1^{\perp} = 2R_1^2(\alpha, \sigma)\epsilon_1, \quad (2.4.33)$$

$$\begin{aligned} b_2^{\perp} &= (R_2^2(\alpha, \sigma) + 3R_3^2(\alpha, \sigma) - 2R_3(\alpha, \sigma) + 1) \epsilon_2 \\ &+ \frac{9}{4} (2R_3(\alpha, \sigma) - 3R_3^2(\alpha, \sigma) - R_2^2(\alpha, \sigma) + 1) \epsilon_3 + \frac{9}{4} \epsilon_3, \end{aligned} \quad (2.4.34)$$

$$\begin{aligned} b_3^{\perp} &= \frac{4}{3} R_5^2(\alpha, \sigma) \epsilon_4 + 4 [(R_4(\alpha, \sigma) - R_5(\alpha, \sigma))^2 + R_6^2(\alpha, \sigma)] \epsilon_5 \\ &+ 18 [R_4^2(\alpha, \sigma) + R_6^2(\alpha, \sigma) + R_5(\alpha, \sigma) R_6(\alpha, \sigma) - R_4(\alpha, \sigma) R_5(\alpha, \sigma)] \epsilon_6 \\ &+ 9 (R_4(\alpha, \sigma) - R_5(\alpha, \sigma)) R_6(\alpha, \sigma) \epsilon_7, \end{aligned} \quad (2.4.35)$$

где для упрощения итоговой формы записи были использованы вспомогательные функции $R_1^\perp, R_2^\perp, R_3^\perp, R_4^\perp, R_5^\perp, R_6^\perp$:

$$R_1^\perp(\alpha, \sigma) = \frac{1}{R_0(\alpha, \sigma)} \int_0^1 \exp(\sigma t^2) I_0(\alpha \sqrt{1-t^2}) \sqrt{1-t^2} dt, \quad (2.4.36)$$

$$R_1^\perp(\alpha, 0) = L(\alpha),$$

$$R_2^\perp(\alpha, \sigma) = \frac{1}{R_0(\alpha, \sigma)} \int_0^1 \exp(\sigma t^2) I_2(\alpha \sqrt{1-t^2}) (1-t^2) dt, \quad (2.4.37)$$

$$R_2^\perp(\alpha, 0) = L_3(\alpha),$$

$$R_3^\perp(\alpha, \sigma) = \frac{1}{R_0(\alpha, \sigma)} \int_0^1 \exp(\sigma t^2) I_0(\alpha \sqrt{1-t^2}) t^2 dt, \quad (2.4.38)$$

$$R_3^\perp(\alpha, 0) = \frac{L(\alpha)}{\alpha},$$

$$R_4^\perp(\alpha, \sigma) = \frac{1}{R_0(\alpha, \sigma)} \int_0^1 \exp(\sigma t^2) I_1(\alpha \sqrt{1-t^2}) \sqrt{1-t^2}^3 dt, \quad (2.4.39)$$

$$R_4^\perp(\alpha, 0) = L(\alpha) - \frac{L_3(\alpha)}{\alpha},$$

$$R_5^\perp(\alpha, \sigma) = \frac{1}{R_0(\alpha, \sigma)} \int_0^1 \exp(\sigma t^2) I_3(\alpha \sqrt{1-t^2}) \sqrt{1-t^2}^3 dt, \quad (2.4.40)$$

$$R_5^\perp(\alpha, 0) = L(\alpha) - 2 \frac{L_3(\alpha)}{\alpha},$$

$$R_6^\perp(\alpha, \sigma) = \frac{1}{R_0(\alpha, \sigma)} \int_0^1 \exp(\sigma t^2) I_1(\alpha \sqrt{1-t^2}) \sqrt{1-t^2} t^2 dt, \quad (2.4.41)$$

$$R_6^\perp(\alpha, 0) = \frac{L_3(\alpha)}{\alpha}.$$

В данной записи $I_k(x)$ – это модифицированная функция Бесселя k -го порядка. Значения ϵ_k включают в себя сумму выражений, зависящих от положения частиц по узлам кубической решетки, ограниченной размером цилиндра:

$$\epsilon_1 = \sum_{j=2}^N \frac{1}{\tilde{r}_{1j}^3} P_2 \left(\frac{\tilde{x}_{1j}}{\tilde{r}_{1j}} \right) \simeq 2.0944, \quad (2.4.42)$$

$$\epsilon_2 = \sum_{j=2}^N \frac{1}{\tilde{r}_{1j}^6} P_2^2 \left(\frac{\tilde{x}_{1j}}{\tilde{r}_{1j}} \right) \simeq 3.3393, \quad (2.4.43)$$

$$\epsilon_3 = \sum_{j=2}^N \frac{\tilde{x}_{1j}^2 \tilde{z}_{1j}^2}{\tilde{r}_{1j}^{10}} \simeq 0.1915, \quad (2.4.44)$$

$$\epsilon_4 = \sum_{j=2}^N \frac{1}{\tilde{r}_{1j}^9} P_2^3 \left(\frac{\tilde{x}_{1j}}{\tilde{r}_{1j}} \right) \simeq 1.4880, \quad (2.4.45)$$

$$\epsilon_5 = \sum_{j=2}^N \frac{1}{\tilde{r}_{1j}^9} P_2 \left(\frac{\tilde{x}_{1j}}{\tilde{r}_{1j}} \right) P_2^2 \left(\frac{\tilde{z}_{1j}}{\tilde{r}_{1j}} \right) \simeq -0.7440, \quad (2.4.46)$$

$$\epsilon_6 = \sum_{j=2}^N \frac{\tilde{x}_{1j}^2 \tilde{z}_{1j}^2}{\tilde{r}_{1j}^{13}} P_2 \left(\frac{\tilde{z}_{1j}}{\tilde{r}_{1j}} \right) \simeq 0.0114, \quad (2.4.47)$$

$$\epsilon_7 = \sum_{j=2}^N \frac{\tilde{y}_{1j}^2 \tilde{z}_{1j}^2 (8\tilde{x}_{1j}^2 - \tilde{y}_{1j}^2 - \tilde{z}_{1j}^2)}{\tilde{r}_{1j}^{15}} \simeq -0.0318. \quad (2.4.48)$$

С учетом вышеописанных вычислений аналитическое выражение для $\Delta F^\perp$ можно записать в итоговом виде как:

$$\begin{aligned} \frac{\beta \Delta F^\perp}{N} = & -\ln \left\{ 1 + 2.0944 R_1^2(\alpha, \sigma) \lambda_e \right. \\ & + [1.4542 R_2^2(\alpha, \sigma) + 4.3627 R_3^2(\alpha, \sigma) \\ & - 2.9085 R_3(\alpha, \sigma) + 1.8851] \lambda_e^2 \\ & + [2.8736 R_4(\alpha, \sigma) R_5(\alpha, \sigma) - 0.1429 R_4(\alpha, \sigma) R_6(\alpha, \sigma) \\ & + 0.2454 R_5(\alpha, \sigma) R_6(\alpha, \sigma) - 1.3856 R_4^2(\alpha, \sigma) \\ & \left. - 0.4960 R_5^2(\alpha, \sigma) - 1.3856 R_6^2(\alpha, \sigma)] \lambda_e^3 \right\}. \end{aligned} \quad (2.4.49)$$

Влияние диполь-дипольного взаимодействия ΔF на свободную энергию Гельмгольца как функции параметра анизотропии σ показано на рисунке 2.4.3 для значений $\alpha = 0, 1, 2$, и 5 , интенсивности диполь-дипольных взаимодействий $\lambda_e = 0.5$ и $\chi_L = 2.1$. Следует отметить, что зависимости не являются монотонными, за исключением случая $\alpha = 0$.

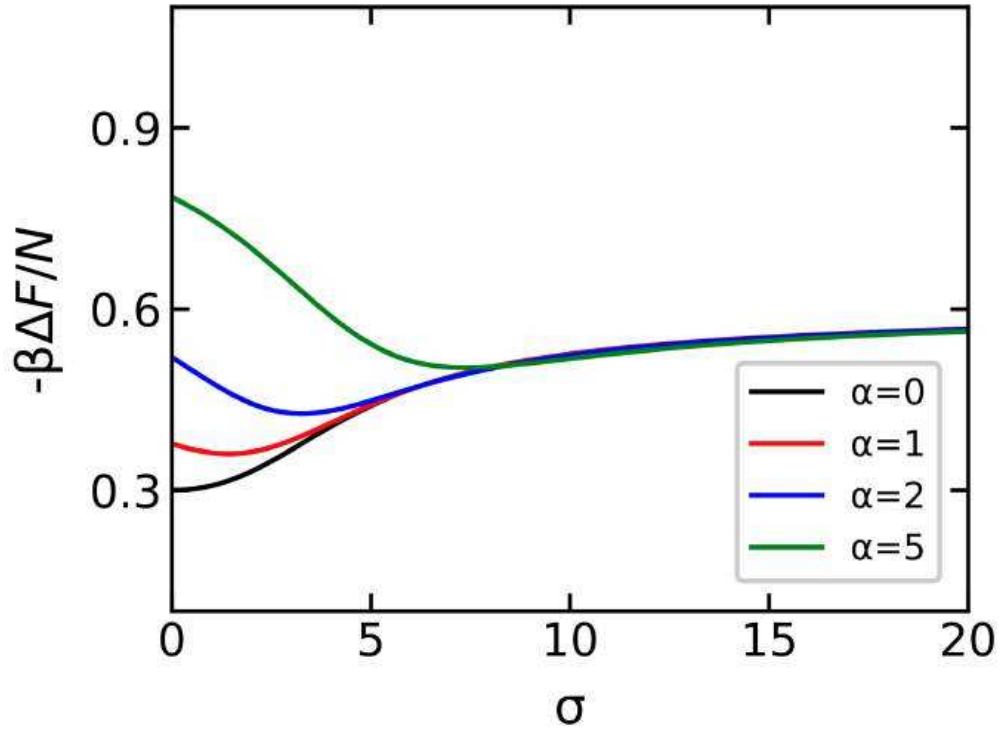


Рис. 2.4.3 – Вклад диполь-дипольных взаимодействий ΔF в свободную энергию для перпендикулярной конфигурации как функция параметра анизотропии σ для системы с $\lambda_e = 0.5$, $\chi_L = 2.1$ и различными значениями параметра $\alpha = 0, 1, 2$ и 5 .

При малых значениях параметра анизотропии увеличение напряженности магнитного поля приводит к увеличению вклада диполь-дипольного взаимодействия в свободную энергию Гельмгольца, но при этом все кривые совпадают друг с другом и показывают постоянное значение при $\sigma \geq 8$. Это означает, что для перпендикулярной конфигурации чувствительная к диполь-дипольным взаимодействиям часть свободной энергии Гельмгольца ΔF для системы с $\sigma \gg 0$ практически не зависит от α и σ . Этот факт также виден на рисунке 2.4.4, где ΔF показана как функция, зависящая от α . При $\sigma = 10$ поведение ΔF не очень чувствительно к увеличению параметра Ланжевена.

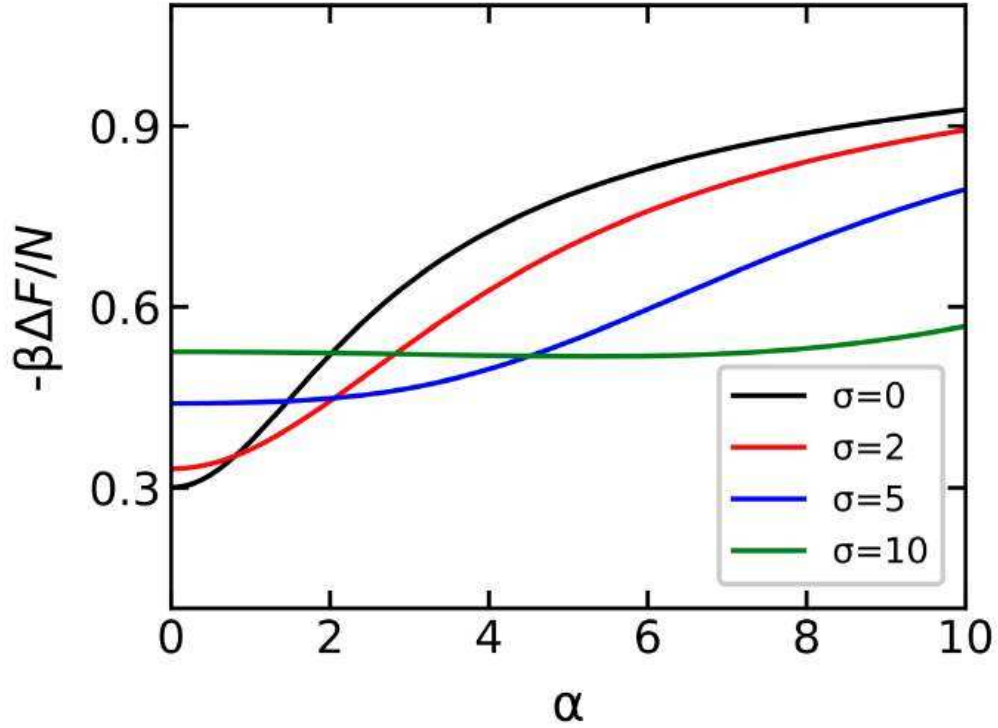


Рис. 2.4.4 – Вклад диполь-дипольных взаимодействий ΔF в свободную энергию для перпендикулярной конфигурации как функция параметра Ланжевена α для системы с $\lambda_e = 0.5$, $\chi_L = 2.1$ и различными значениями параметра $\sigma = 0, 2, 5$ и 10 .

2.4.3. Случай выравнивания осей легкого намагничивания под произвольным углом к направлению постоянного магнитного поля

От частных (параллельный и перпендикулярный) случаев перейдем к более общему: предположим, что оси легкого намагничивания, как и прежде, параллельны друг другу, но теперь выровнены под произвольным углом к статическому магнитному полю.

В общем случае для кубической решетки конфигурационную часть свободной энергии Гельмгольца ΔF можно записать в следующем виде, ограничившись двумя слагаемыми:

$$\begin{aligned} \frac{\beta\Delta F}{N} &= -\frac{1}{2} (b_1^{SCLF} + b_2^{SCLF}) \\ &\simeq -\ln \left[1 + \frac{1}{2} (b_1^{SCLF} + b_2^{SCLF}) \right], \end{aligned} \quad (2.4.50)$$

$$b_1^{SCLF} = \sum_{j=2}^N \left\langle -\beta U_d(1j) \right\rangle, \quad (2.4.51)$$

$$b_2^{SCLF} = \sum_{j=2}^N \left\langle \frac{1}{2!} (-\beta U_d(1j))^2 \right\rangle. \quad (2.4.52)$$

Результат усреднения коэффициента b_1^{SCLF} по ориентации магнитного момента принимает вид:

$$\begin{aligned} b_1^{SCLF} &= \frac{\mu_0 m^2 \beta}{2\pi} \left[Q_x^2 \gamma_x + Q_y^2 \gamma_y + Q_z^2 \gamma_z \right] \\ &+ \frac{3\mu_0 m^2 \beta}{2\pi} \left[Q_x Q_y \gamma_{xy} + Q_x Q_z \gamma_{xz} + Q_y Q_z \gamma_{yz} \right]. \end{aligned} \quad (2.4.53)$$

Функции Q_x, Q_y, Q_z зависят от интенсивности внешнего магнитного поля, параметра анизотропии и направления осей легкого намагничивания:

$$Q_x(\alpha, \sigma, \hat{\mathbf{n}}) = \int d\Psi_1 \sin \omega_1 \cos \varepsilon_1, \quad (2.4.54)$$

$$Q_y(\alpha, \sigma, \hat{\mathbf{n}}) = \int d\Psi_1 \sin \omega_1 \sin \varepsilon_1, \quad (2.4.55)$$

$$Q_z(\alpha, \sigma, \hat{\mathbf{n}}) = \int d\Psi_1 \cos \omega_1, \quad (2.4.56)$$

а значения $\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z, \gamma_{xy}, \gamma_{xz}$ и γ_{yz} рассчитываются с использованием $r_{1j} = (x_{1j}, y_{1j}, z_{1j})$:

$$\gamma_x = \sum_{j=2}^N \frac{1}{r_{1j}^3} P_2 \left(\frac{x_{1j}}{r_{1j}} \right), \quad (2.4.57)$$

$$\gamma_y = \sum_{j=2}^N \frac{1}{r_{1j}^3} P_2 \left(\frac{y_{1j}}{r_{1j}} \right), \quad (2.4.58)$$

$$\gamma_z = \sum_{j=2}^N \frac{1}{r_{1j}^3} P_2 \left(\frac{z_{1j}}{r_{1j}} \right), \quad (2.4.59)$$

$$\gamma_{xy} = \sum_{j=2}^N \frac{x_{1j}y_{1j}}{r_{1j}^5}, \quad (2.4.60)$$

$$\gamma_{xz} = \sum_{j=2}^N \frac{x_{1j}z_{1j}}{r_{1j}^5}, \quad (2.4.61)$$

$$\gamma_{yz} = \sum_{j=2}^N \frac{y_{1j}z_{1j}}{r_{1j}^5} \quad (2.4.62)$$

и равны соответственно:

$$\gamma_x = \gamma_y = -\frac{\pi}{3d^3}, \quad (2.4.63)$$

$$\gamma_z = \frac{2\pi}{3d^3}, \quad (2.4.64)$$

$$\gamma_{xy} = \gamma_{xz} = \gamma_{yz} = 0. \quad (2.4.65)$$

Принимая во внимание итоговые значения (2.4.63)-(2.4.65), выражение (2.4.53) для b_1^{SCLF} может быть записано как:

$$b_1^{SCLF} = \chi_L \left[Q_z^2 - 0.5Q_x^2 - 0.5Q_y^2 \right], \quad (2.4.66)$$

Итоговое выражение для b_2^{SCLF} было получено аналогичным образом путем разложения в ряд дипольной энергии:

$$b_2^{SCLF} = \chi_L^2 \left[\begin{aligned} & 0.381 (Q_{xx}^2 + Q_{yy}^2 + Q_{zz}^2) \\ & + 0.098 (Q_{xx}Q_{yy} + Q_{xx}Q_{zz} + Q_{yy}Q_{zz}) \\ & - 0.282 (Q_{xy}^2 + Q_{xz}^2 + Q_{yz}^2) \end{aligned} \right], \quad (2.4.67)$$

где для упрощения итоговой формы записи были использованы вспомогательные функции Q_{xx} , Q_{yy} , Q_{zz} , Q_{xy} , Q_{xz} , Q_{yz} :

$$Q_{xx}(\alpha, \sigma, \hat{\mathbf{n}}) = \int d\Psi_1 \sin^2 \omega_1 \cos^2 \varepsilon_1, \quad (2.4.68)$$

$$Q_{yy}(\alpha, \sigma, \hat{\mathbf{n}}) = \int d\Psi_1 \sin^2 \omega_1 \sin^2 \varepsilon_1, \quad (2.4.69)$$

$$Q_{zz}(\alpha, \sigma, \hat{\mathbf{n}}) = \int d\Psi_1 \cos^2 \omega_1, \quad (2.4.70)$$

$$Q_{xy}(\alpha, \sigma, \hat{\mathbf{n}}) = \int d\Psi_1 \sin^2 \omega_1 \sin \varepsilon_1 \cos \varepsilon_1, \quad (2.4.71)$$

$$Q_{xz}(\alpha, \sigma, \hat{\mathbf{n}}) = \int d\Psi_1 \sin \omega_1 \cos \omega_1 \cos \varepsilon_1, \quad (2.4.72)$$

$$Q_{yz}(\alpha, \sigma, \hat{\mathbf{n}}) = \int d\Psi_1 \sin \omega_1 \cos \omega_1 \sin \varepsilon_1. \quad (2.4.73)$$

Применяя логарифмическое преобразование к рассмотренным слагаемым b_1^{SCLF} из (2.4.66) и b_2^{SCLF} из (2.4.67) с учетом (2.4.50), получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\beta \Delta F^{SCLF}}{N} = -\ln \left\{ 1 + 0.5 \chi_L \left[Q_z^2 - 0.5 Q_x^2 - 0.5 Q_y^2 \right] \right. \\ + 0.5 \chi_L^2 \left[0.381 (Q_{xx}^2 + Q_{yy}^2 + Q_{zz}^2) \right. \\ + 0.098 (Q_{xx} Q_{yy} + Q_{xx} Q_{zz} + Q_{yy} Q_{zz}) \\ \left. \left. - 0.282 (Q_{xy}^2 + Q_{xz}^2 + Q_{yz}^2) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.4.74)$$

Заметим, что подстановка условий (2.4.6) и (2.4.28) в итоговую формулу (2.4.74) позволяет прийти к тому же виду, который был получен в выражениях (2.4.27) и (2.4.49) соответственно. Согласованность результатов для случая выравнивания осей легкого намагничивания под произвольным углом относительно направления постоянного магнитного поля с результатами, полученными для параллельной и перпендикулярной конфигураций, подтверждает точность и общность полученных выражений.

2.5. Случайное распределение магнитных частиц по объему

Рассмотрим модель случайного распределение частиц по объему с осями легкого намагничивания, выровненными под произвольным углом к направлению магнитного поля.

Определение ΔF из (2.3.18) справедливо для дискретных типов распределения наночастиц в объеме системы, таких, например, как кубическая решетка. Для случайного размещения магнитных наночастиц в объеме образца необходимо усреднить (2.3.18) по всем возможным случайным конфигурациям. Это означает, что в пределе каждая j -ая частица в сумме (2.3.18) может занимать любое положение в объеме образца, за исключением положения 1-ой частицы:

$$\begin{aligned} \frac{\beta \Delta F^{RANDOM}}{N} &= -\frac{1}{2} \sum_{j=2}^N \int \frac{dr_{1j}}{V} \langle f_{1j} \rangle \\ &= -\frac{N}{2V} \int dr_{12} \langle f_{12} \rangle = -\frac{\rho}{2} \int d\mathbf{r}_{12} \langle f_{12} \rangle, \end{aligned} \quad (2.5.1)$$

Разложим функцию Майера (2.3.13) в ряд до второго порядка дипольной энергии U_d :

$$f_{12} = -\beta U_d(12) + \frac{1}{2!} [-\beta U_d(12)]^2 + O(U_d^3), \quad (2.5.2)$$

В ограничении вторым вириальным коэффициентом и второй степенью по дипольным взаимодействиям, с учетом (2.5.2), для случайного распределения конфигурационную часть свободной энергии Гельмгольца ΔF можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\beta \Delta F^{RANDOM}}{N} &= -\frac{\rho}{2} (b_1^{RANDOM} + b_2^{RANDOM}) \\ &\simeq -\ln \left[1 + \frac{\rho}{2} (b_1^{RANDOM} + b_2^{RANDOM}) \right], \end{aligned} \quad (2.5.3)$$

где:

$$b_1^{RANDOM} = \int d\mathbf{r}_{12} \left\langle -\beta U_d(12) \right\rangle, \quad (2.5.4)$$

$$b_2^{RANDOM} = \frac{1}{2!} \int d\mathbf{r}_{12} \left\langle [-\beta U_d(12)]^2 \right\rangle. \quad (2.5.5)$$

Результат усреднения коэффициента b_1^{RANDOM} по ориентации магнитного момента принимает вид:

$$\begin{aligned} b_1^{RANDOM} &= \frac{\mu_0 m^2 \beta}{2\pi} \left[Q_x^2 \gamma_x + Q_y^2 \gamma_y + Q_z^2 \gamma_z \right] \\ &+ \frac{3\mu_0 m^2 \beta}{2\pi} \left[Q_x Q_y \gamma_{xy} + Q_x Q_z \gamma_{xz} + Q_y Q_z \gamma_{yz} \right], \end{aligned} \quad (2.5.6)$$

где используются функции Q_x, Q_y, Q_z , определенные в (2.4.54)-(2.4.56). Значения $\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z, \gamma_{xy}, \gamma_{xz}$ и γ_{yz} могут быть представлены в интегральной форме:

$$\gamma_x = \int d\mathbf{r}_{12} \frac{1}{r_{12}^3} P_2(\sin \varsigma \cos \vartheta), \quad (2.5.7)$$

$$\gamma_y = \int d\mathbf{r}_{12} \frac{1}{r_{12}^3} P_2(\sin \varsigma \sin \vartheta), \quad (2.5.8)$$

$$\gamma_z = \int d\mathbf{r}_{12} \frac{1}{r_{12}^3} P_2(\cos \varsigma), \quad (2.5.9)$$

$$\gamma_{xy} = \int d\mathbf{r}_{12} \frac{1}{r_{12}^3} \sin^2 \varsigma \sin \vartheta \cos \vartheta, \quad (2.5.10)$$

$$\gamma_{xz} = \int d\mathbf{r}_{12} \frac{1}{r_{12}^3} \sin \varsigma \cos \varsigma \cos \vartheta, \quad (2.5.11)$$

$$\gamma_{yz} = \int d\mathbf{r}_{12} \frac{1}{r_{12}^3} \sin \varsigma \cos \varsigma \sin \vartheta, \quad (2.5.12)$$

где $\mathbf{r}_{12} = r_{12}(\sin \varsigma \cos \vartheta, \sin \varsigma \sin \vartheta, \cos \varsigma)$, значения $\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z, \gamma_{xy}, \gamma_{xz}, \gamma_{yz}$ равны соответственно:

$$\gamma_x = \gamma_y = -\frac{\pi}{3}, \quad (2.5.13)$$

$$\gamma_z = \frac{2\pi}{3}, \quad (2.5.14)$$

$$\gamma_{xy} = \gamma_{xz} = \gamma_{yz} = 0. \quad (2.5.15)$$

Принимая во внимание значения (2.5.13)-(2.5.15), итоговый результат для b_1^{RANDOM} может быть записан как:

$$b_1^{RANDOM} = 8v_m\lambda \left[Q_z^2 - 0.5Q_x^2 - 0.5Q_y^2 \right], \quad (2.5.16)$$

Итоговое выражение для b_2^{RANDOM} было получено аналогичным образом путем вычисления разложенной в ряд дипольной энергии до второго порядка:

$$b_2^{RANDOM} = \frac{8}{5}v_m\lambda^2 \left[\begin{aligned} & 2(Q_{xx}^2 + Q_{yy}^2 + Q_{zz}^2) + Q_{xy}^2 + Q_{xz}^2 + Q_{yz}^2 \\ & + 3(Q_{xx}Q_{yy} + Q_{xx}Q_{zz} + Q_{yy}Q_{zz}) \end{aligned} \right], \quad (2.5.17)$$

где вспомогательные функции Q_{xx} , Q_{yy} , Q_{zz} , Q_{xy} , Q_{xz} , Q_{yz} были определены в (2.4.68)-(2.4.73). Применяя логарифмическое преобразование к рассмотренным слагаемым b_1^{RANDOM} из (2.5.16) и b_2^{RANDOM} из (2.5.17), с учетом (2.5.3), получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\beta\Delta F^{RANDOM}}{N} = -\ln \left\{ 1 + 0.5\chi_L [Q_z^2 - 0.5Q_x^2 - 0.5Q_y^2] \right. \\ + 0.1\chi_L\lambda [2(Q_{xx}^2 + Q_{yy}^2 + Q_{zz}^2) \\ + 3(Q_{xx}Q_{yy} + Q_{xx}Q_{zz} + Q_{yy}Q_{zz})] \\ \left. + Q_{xy}^2 + Q_{xz}^2 + Q_{yz}^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.5.18)$$

Численный расчет значений Q и R , использованных для определения $\Delta F^{\parallel}$, $\Delta F^{\perp}$, ΔF^{SCLF} и ΔF^{RANDOM} проводился в программном комплексе [35], описанном в четвертой главе.

2.6. Влияние пространственной и ориентационной архитектуры ансамбля суперпарамагнитных частиц на его свойства

2.6.1. Вклад диполь-дипольных взаимодействий в свободную энергию Гельмгольца

Заметим, что слагаемые порядка χ_L выражений (2.4.74) и (2.5.18) совпадают. Теоретический учет отличий в структурах пространственного расположения частиц возможен только в слагаемых порядка $\chi_L \lambda$, χ_L^2 . Для того чтобы на конкретном примере сравнить два различных выражения свободной энергии, отвечающих двум моделям размещения частиц в образце, необходимо задать значения восприимчивости Ланжевена χ_L и параметра λ таким образом, чтобы сомножители $\chi_L \lambda$ и χ_L^2 из вышеупомянутых формул являлись сопоставимыми. Рассмотрим системы с фиксированной объемной концентрацией частиц $\rho v_m = 0.125$, что соответствует образцу с умеренной концентрацией и не должно приводить к каким-либо неожиданным эффектам. Отследим поведение ΔF для кубической решетки и случайного распределения частиц, зафиксировав $\lambda = 1.25$ и $\chi_L = 1.25$.

Рассмотрим графики ΔF для кубической решетки при $\sigma = 10$. В случае нулевого магнитного поля на рисунке 2.6.1(а) при $\phi = 0$ у функции наблюдается три максимума и два минимума, расположенных на одинаковых уровнях, соответственно. Физическая причина возникновения двух минимумов в точках $\theta = \pi/4$ и $\theta = 3\pi/4$ заключается в том, что при этих значениях угла диполи, находящиеся в ориентации «голова–хвост», оказываются расположенными по диагонали пространственной решетки, а значит расстояние между диполями будет максимальным, что приводит к уменьшению энергии их взаимодействия. При увеличении угла ϕ от 0 до $\pi/4$ диполи удаляются друг от друга, и, как следствие, средний максимум смещается вниз относительно правого и левого максимумов. На рисунке 2.6.1(б) видно, что появление внешнего магнитного поля малой напряженности заметно увеличивает силу диполь-дипольных взаимодействий только для параллельных конфигураций при $\theta = 0$ и $\theta = \pi$, а максимум в

точке $\theta = \pi/2$ практически не движется вверх. Все особенности, отмеченные в предыдущем случае, проявляются отчетливее с увеличением внешнего магнитного поля на рисунке 2.6.1(в). Для сильных магнитных полей, показанных на рисунке 2.6.1(г), соответствующих состоянию магнитного насыщения системы, чувствительность к величине угла ϕ исчезает, а также имеет место вертикальный сдвиг среднего локального максимума и двух минимумов вверх, чего не наблюдалось в предыдущих случаях.

При анализе графиков ΔF для кубической решетки как функции азимутального угла θ можно заметить, что при всех параметрах всегда существует два минимума. Также просматривается четкая зависимость от угла ϕ . При этом график для $\phi = \pi/3$ совпадает с графиком для $\phi = \pi/6$, а график $\phi = \pi/2$ — с графиком для $\phi = 0$. Вследствие этого дополнительные случаи $\phi = \pi/3$ и $\phi = \pi/2$ на рисунке не представлены.

Рассмотрим графики ΔF для произвольного распределения частиц при $\sigma = 10$ как функции азимутального угла θ (рисунок 2.6.2). Отметим, что зависимость ΔF от угла ϕ отсутствует при любых параметрах системы, она полностью изотропна при вращении в плоскости Oxy . Как и в идеальном случае, отсутствует зависимость от угла θ в нулевом магнитном поле. С увеличением напряженности внешнего магнитного поля появляются два минимума, которые приближаются к $\theta = \pi/2$ с ростом параметра α . Параллельные конфигурации, при которых ось анизотропии расположена вдоль вектора магнитного поля, то есть $\theta = 0$ и $\theta = \pi$, показывают более быстрый рост ΔF , чем перпендикулярная конфигурация $\theta = \pi/2$. С усилением поля наблюдается не только вертикальное движение графика вверх, но и увеличение высоты его прогиба. В сильном магнитном поле $\alpha = 20$, в состоянии магнитного насыщения системы, происходит вертикальный сдвиг среднего локального максимума и двух минимумов вверх, чего не наблюдается для $\alpha = 1$ и $\alpha = 5$, при этом вклад диполь-дипольных взаимодействий в свободную энергию для параллельных конфигураций практически не изменяется по сравнению с состоянием в поле $\alpha = 5$.

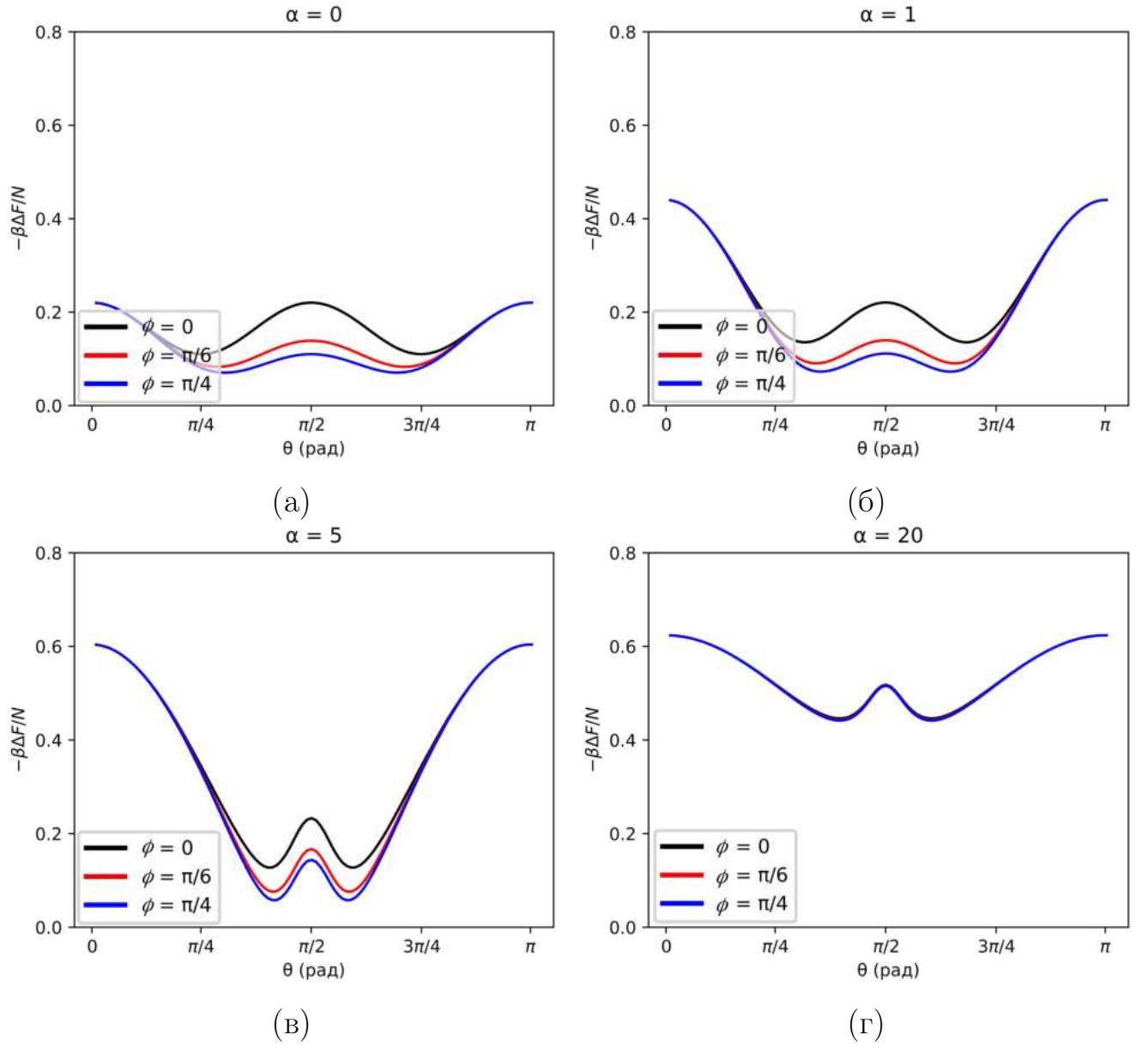


Рис. 2.6.1 – Вклад диполь-дипольных взаимодействий ΔF в свободную энергию для кубической решетки при $\chi_L = \lambda = 1.25$, $\sigma = 10$ как функция, зависящая от угла $\theta = \angle(\mathbf{H}, \mathbf{n})$, для различных значений интенсивности внешнего магнитного поля $\alpha = 0$ (а), 1 (б), 5 (в) и 20 (г).

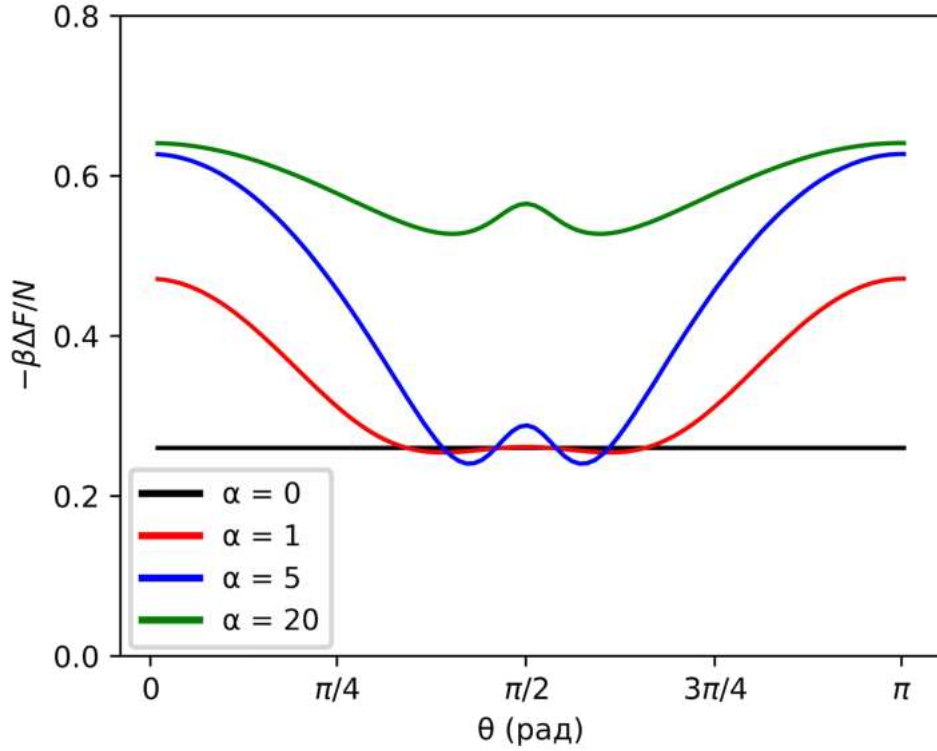


Рис. 2.6.2 – Вклад диполь-дипольных взаимодействий ΔF в свободную энергию для случайного распределения при $\chi_L = \lambda = 1.25$, $\sigma = 10$ как функция, зависящая от угла $\theta = \angle(\mathbf{H}, \mathbf{n})$, для различных значений интенсивности внешнего магнитного поля $\alpha = 0, 1, 5$ и 20 .

Обобщая результаты, полученные для кубической решетки и случайного распределения частиц, можно сделать следующие выводы:

- различие между двумя способами размещения частиц внутри образца заключается в следующем: в кубической решетке ΔF зависит от угла ϕ во всех случаях, кроме состояния магнитного насыщения; случайное распределение полностью изотропно при вращении в плоскости Oxy ;
- в нулевом магнитном поле ΔF для простой кубической решетки зависит от угла θ , в то время как для случайного распределения такой зависимости нет;
- для каждого способа распределения частиц внутри образца графики имеют похожий характер с двумя минимумами и тремя максимумами при параллельной ($\theta = 0$ и $\theta = \pi$) и перпендикулярной ($\theta = \pi/2$) направленности векторов.

2.6.2. Статическая намагниченность

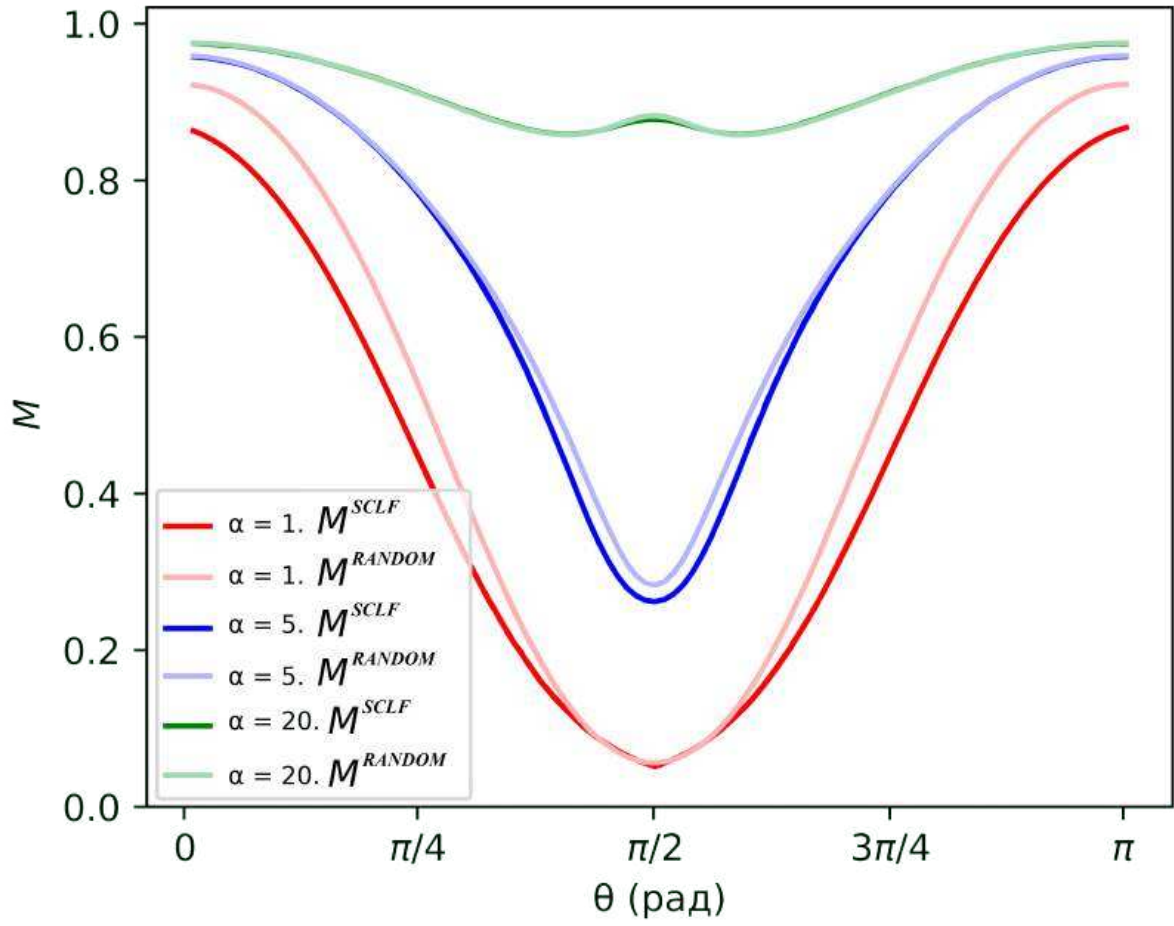
Аналитический вид статической намагниченности может быть рассчитан с использованием аналитического выражения свободной энергии Гельмгольца:

$$M = M_{\text{id}} - \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{\beta \Delta F}{N} \right), \quad (2.6.1)$$

где M_{id} означает статическую намагниченность идеальной системы без диполь-дипольного взаимодействия:

$$M_{\text{id}} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{\beta F_{\text{id}}}{N} \right). \quad (2.6.2)$$

На рисунке 2.6.3 представлены графики статической намагниченности при $\phi = 0$ (для кубической решетки), $\chi_L = \lambda = 1.25$, $\sigma = 10$ как функции, зависящей от угла θ , для кубической решетки - M^{SCLF} ((2.4.74) и (2.6.1), яркие линии) и произвольного распределения - M^{RANDOM} ((2.5.18) и (2.6.1), бледные линии), соответственно. Как видно из графиков, в слабом поле $\alpha = 1$ вклад диполь-дипольных взаимодействий особенно заметен. С увеличением напряженности поля, $\alpha = 5$ и 20 , магнитные моменты выравниваются вдоль поля и уже не демонстрируют столь выраженного влияния друг на друга. Это связано с тем, что энергия Зеймана в этой системе преобладает над энергией диполь-дипольного взаимодействия. Отличие графиков намагниченности для кубической решетки и произвольного распределения особенно заметно в слабых полях ($\alpha = 1$), когда диполь-дипольные взаимодействия сильно влияют на поведение системы. Наибольшие различия наблюдаются при $\theta = 0$ и $\theta = \pi$. Это происходит потому, что намагничивание правильной структуры кубической решетки затруднено появлением энергетически невыгодных конфигураций типа «бок о бок» соседних частиц, которые с меньшей вероятностью реализуются в системе с произвольным распределением частиц. В сильных полях поведение системы обуславливается энергией Зеймана, определяющей направление магнитных моментов частиц независимо от типа их распределения, в связи с чем при $\alpha = 20$ полностью отсутствуют отличия между кубической решеткой и произвольным распределением.



(a)

Рис. 2.6.3 – Статическая намагниченность для кубической решетки M^{SCLF} ((2.4.74) и (2.6.1), яркие линии) и произвольного распределения частиц M^{RANDOM} ((2.5.18) и (2.6.1), бледные линии), при $\phi = 0$ (для кубической решетки), $\chi_L = \lambda = 1.25$, $\sigma = 10$ как функция, зависящая от угла $\theta = \angle(\mathbf{H}, \mathbf{n})$, для различных значений параметра $\alpha = 1, 5$ и 20 .

2.6.3. Магнитная восприимчивость

Начальную магнитную восприимчивость аналогично получим через свободную энергию Гельмгольца:

$$\chi = \chi_{\text{id}} - \frac{1}{V} \frac{\partial^2 \Delta F}{\partial H^2} \bigg|_{H=0}, \quad (2.6.3)$$

где χ_{id} означает начальную магнитную восприимчивость идеальной системы без диполь-дипольного взаимодействия:

$$\chi_{\text{id}} = - \frac{1}{V} \frac{\partial^2 F_{\text{id}}}{\partial H^2} \bigg|_{H=0}. \quad (2.6.4)$$

На рисунке 2.6.4 изображены графики начальной магнитной восприимчивости при $\phi = 0$ (для кубической решетки), $\chi_L = \lambda = 1.25$ как функции, зависящей от угла θ , для кубической решетки — χ^{SCLF} ((2.4.74) и (2.6.3), яркие линии) и произвольного распределения — χ^{RANDOM} ((2.5.18) и (2.6.3), бледные линии), соответственно. Как видно из графиков, восприимчивость достигает своего минимума в случае перпендикулярного положения осей легкого намагничивания относительно внешнего магнитного поля, то есть когда $\theta = \pi/2$. Такое поведение наблюдается как для кубической решетки, так и для случайного распределения феррочастиц в образце. При этом при малом значении параметра анизотропии $\sigma = 2$ значение восприимчивости выше, чем при $\sigma = 5$ и 10 , поскольку рост энергии анизотропии затрудняет отклонение частиц от направления осей легкого намагничивания, что негативно сказывается на восприимчивости частиц. При смене положения из перпендикулярного к параллельному становятся заметными различия в поведении графиков: для случайного распределения рост начальной магнитной восприимчивости происходит резко, в то время как для кубической решетки он носит более плавный характер. Данная особенность связана с тем, что магнитные моменты частиц, расположенных в узлах кубической решетки изначально занимают более выгодное положение, продиктованное особенностями внутренней архитектуры и оказываются менее восприимчивыми, чем случайно распределенные частицы.

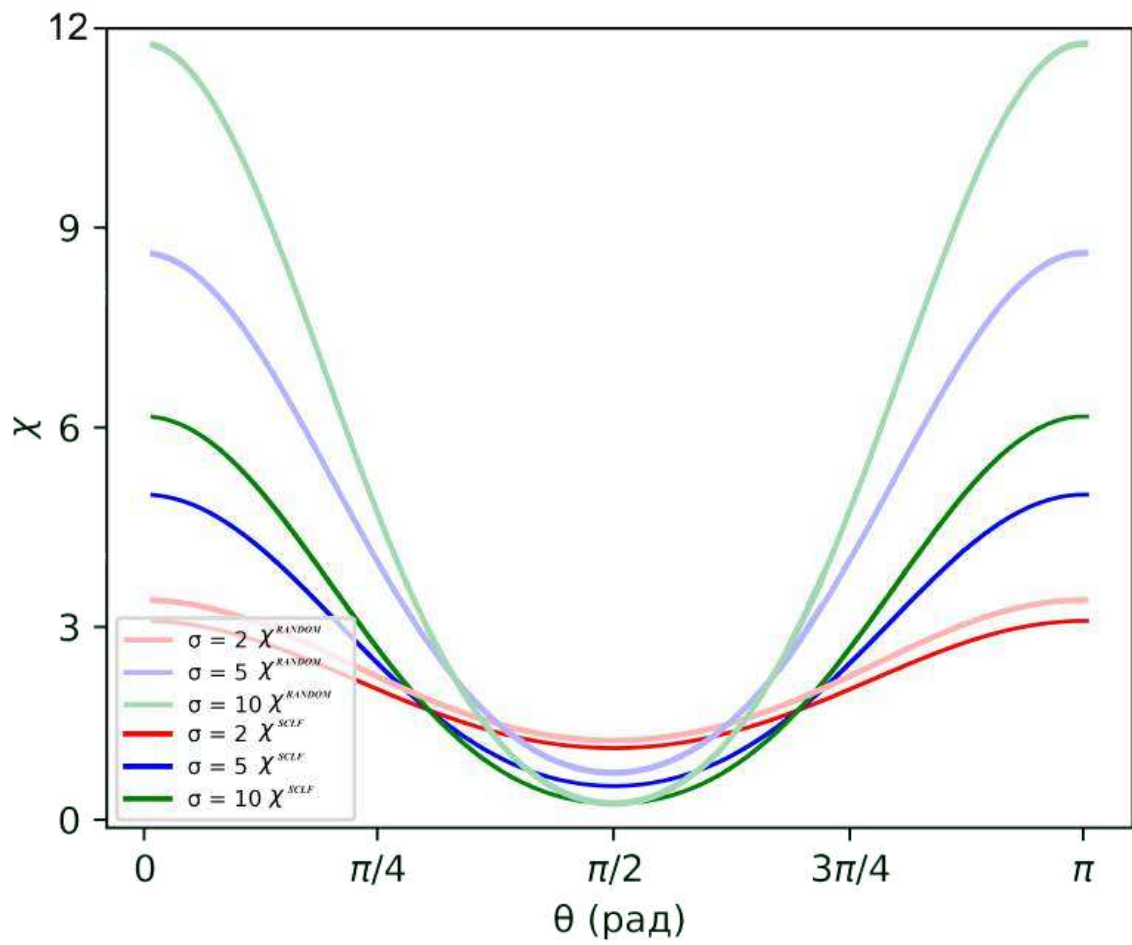


Рис. 2.6.4 – Начальная магнитная восприимчивость при $\phi = 0$ (для кубической решетки), $\chi_L = \lambda = 1.25$ как функция, зависящая от угла $\theta = \angle(\mathbf{H}, \mathbf{n})$, для кубической решетки χ^{SCLF} ((2.4.74) и (2.6.3), яркие линии) и произвольного распределения частиц χ^{RANDOM} ((2.5.18) и (2.6.3), бледные линии), для различных значений параметра анизотропии $\sigma = 2, 5$ и 10 .

2.6.4. Теплоемкость

Формула для теплоемкости, выраженная через конфигурационный интеграл, выглядит следующим образом:

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \left(k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right). \quad (2.6.5)$$

Запишем ее как:

$$\begin{aligned} C_V = & k_B \left[\chi_L^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \chi_L^2} + \alpha^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \alpha^2} + \sigma^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \sigma^2} \right. \\ & + 2\chi_L \alpha \frac{\partial}{\partial \chi_L} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \alpha} \right) + 2\chi_L \sigma \frac{\partial}{\partial \chi_L} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \sigma} \right) \\ & \left. + 2\alpha \sigma \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \sigma} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.6.6)$$

На рисунках 2.6.5 и 2.6.6 показано сравнение графиков теплоемкости при $\phi = 0$ (для кубической решетки), $\chi_L = \lambda = 1.25$ как функции параметра анизотропии σ для кубической решетки – C^{SCLF} ((2.4.74) и (2.6.5), синие линии) и случайного распределения частиц – C^{RANDOM} ((2.5.18) и (2.6.5), красные линии) при различных значениях внешнего магнитного поля α , а также при параллельном ($\theta = 0$) и перпендикулярном ($\theta = \pi/2$) положении осей легкого намагничивания относительно внешнего магнитного поля. Теплоемкость представлена в нормированном виде C_V/Nk_B . Множитель k_B присутствует в формуле 2.6.6 в явном виде, а множитель N скрыт внутри функции $\ln Z$. Как видно из графиков для параллельного случая ($\theta = 0$), небольшие отличия в поведении теплоемкости систем наблюдаются при $\sigma \leq 8$, в то время как при более высоких значениях параметра различия становятся значительно менее заметными. На рисунке 2.6.6 видно, что для перпендикулярного случая ($\theta = \pi/2$) усиление параметра анизотропии σ приводит к тем же результатам, что наблюдались в параллельном случае ($\theta = 0$).

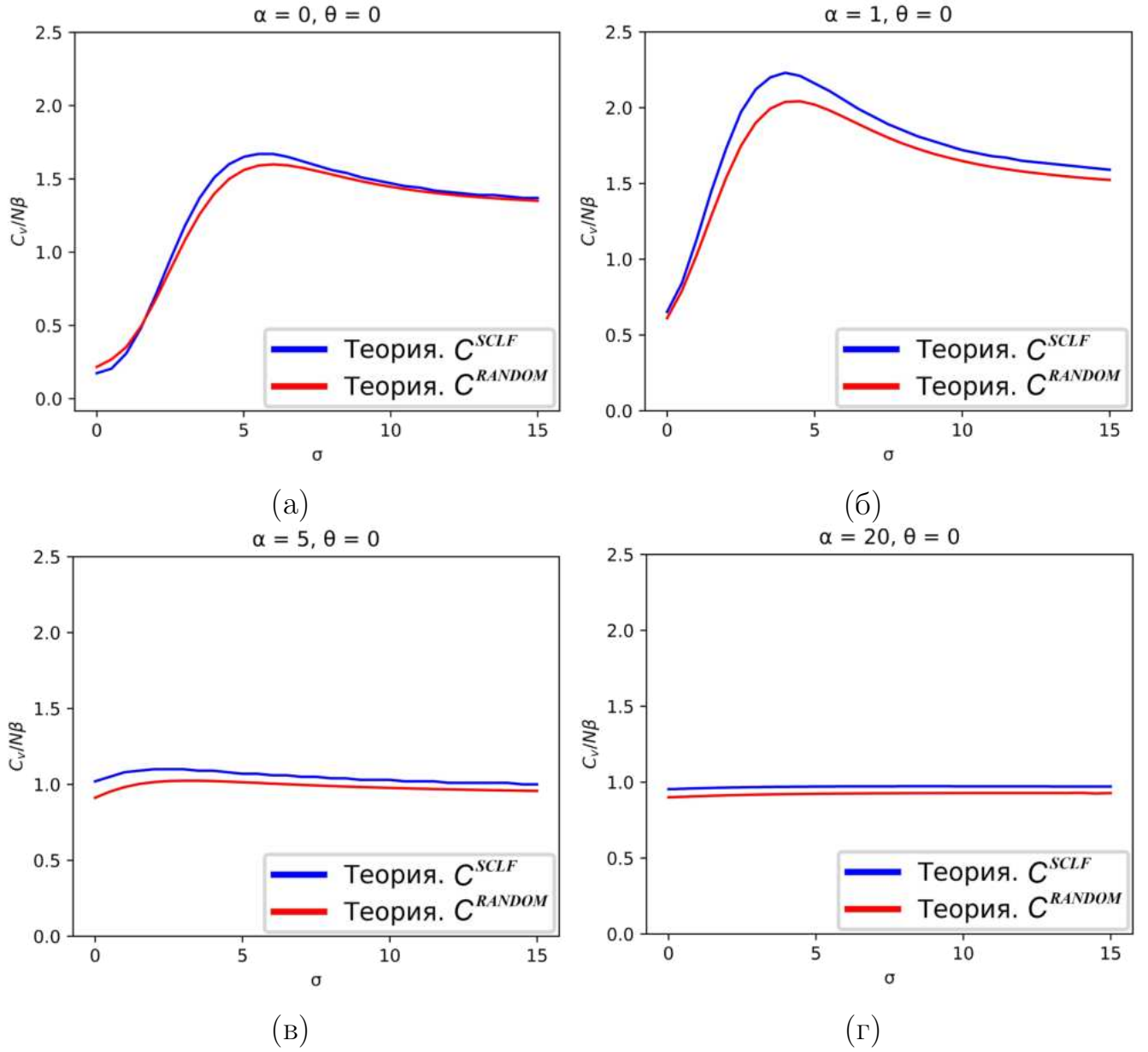


Рис. 2.6.5 – Теплоемкость для кубической решетки C^{SCLF} ((2.4.74) и (2.6.6), синие линии) и случайного распределения частиц C^{RANDOM} ((2.5.18) и (2.6.6), красные линии) при $\phi = 0$ (для кубической решетки), $\chi_L = \lambda = 1.25$, $\sigma = 10$, $\theta = 0$ как функция, зависящая от параметра анизотропии σ , для различных значений параметра α : 0 (а), 1 (б), 5 (в) и 20 (г).

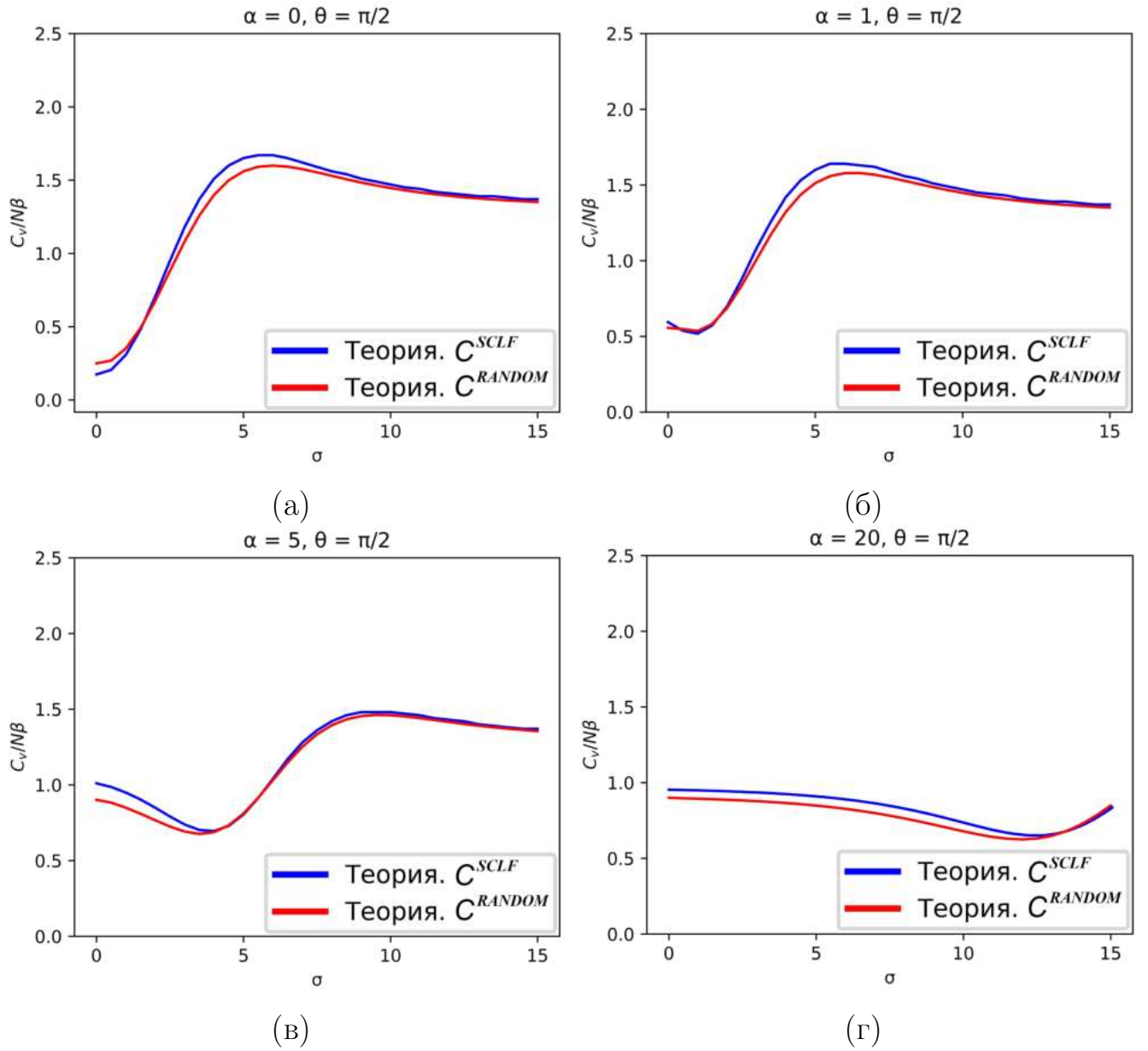


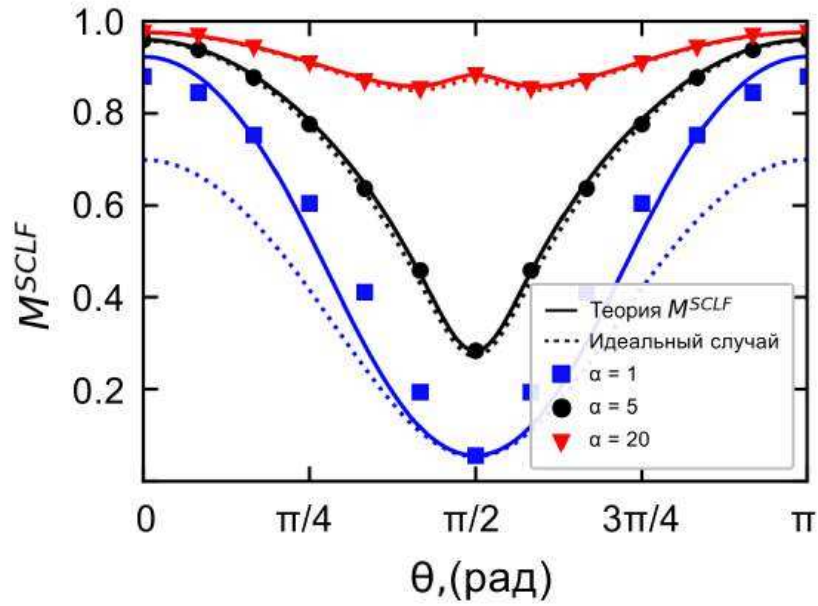
Рис. 2.6.6 – Теплоемкость для кубической решетки C^{SCLF} ((2.4.74) и (2.6.6), синие линии) и случайного распределения частиц C^{RANDOM} ((2.5.18) и (2.6.6), красные линии), при $\chi_L = \lambda = 1.25$, $\sigma = 10$, $\theta = \pi/2$ как функция, зависящая от параметра анизотропии σ , для различных значений параметра α : 0 (а), 1 (б), 5 (в) и 20 (г).

2.7. Сравнение теории с результатами компьютерного моделирования

Для оценки точности полученных аналитических выражений проводилось их сравнение с результатами компьютерного моделирования, представленного в работе [31].

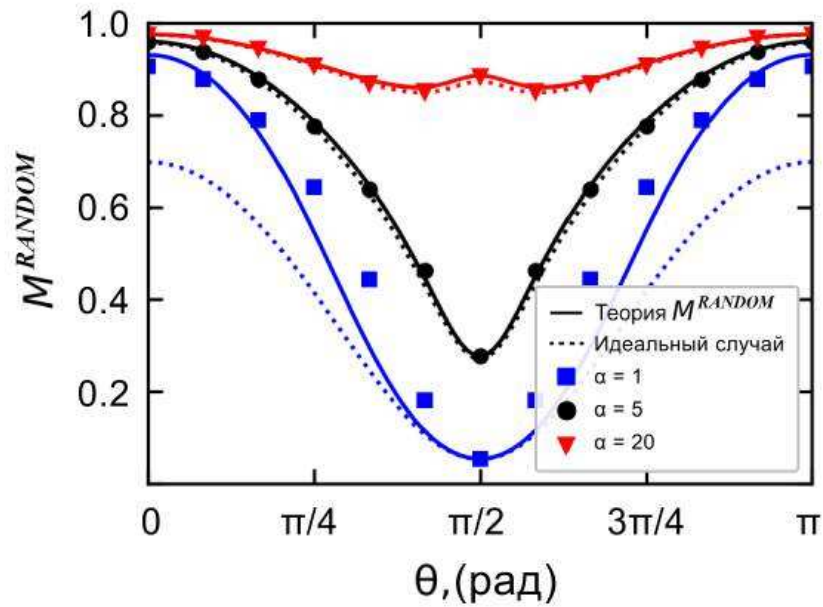
На рисунках 2.7.1-2.7.4 представлено сравнение аналитических графиков статической намагниченности и теплоемкости с результатами компьютерного моделирования для решетки и случайного распределения соответственно.

На рисунках 2.7.1 и 2.7.2 показаны графики статической намагниченности при $\phi = 0$ (для кубической решетки), $\chi_L = \lambda = 1.25$, $\sigma = 10$ как функции, зависящие от угла $\theta = \angle(\mathbf{H}, \mathbf{n})$. Сплошные линии, соответствующие теории M^{SCLF} и M^{RANDOM} , сравниваются с символами, полученными с помощью компьютерного моделирования методом Монте-Карло [31]. В целом полученная теория хорошо согласуется с результатами компьютерного моделирования и для кубической решетки, и для случайного распределения, и может быть применена для прогнозирования поведения умеренно концентрированных систем. Незначительное расхождение с данными компьютерного моделирования, наблюдается только в слабом поле $\alpha = 1$ (синий цвет) при $\theta \approx \pi/4$ и $3\pi/4$.



(а)

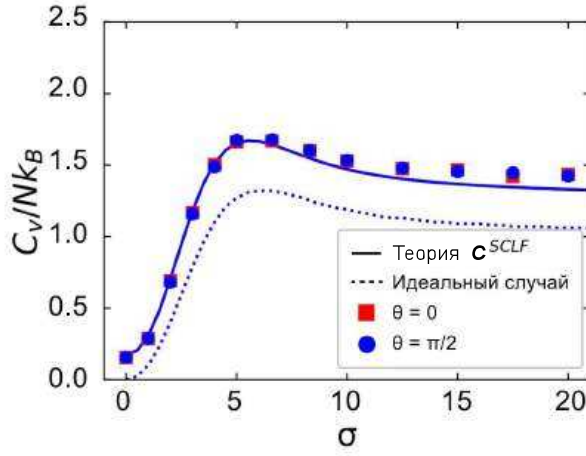
Рис. 2.7.1 – Статическая намагниченность M^{SCLF} как функция, зависящая от угла $\theta = \angle(\mathbf{H}, \mathbf{n})$, для кубической решетки с $\phi = 0$, $\chi_L = \lambda = 1.25$, $\sigma = 10$. Сплошные линии соответствуют теории M^{SCLF} , символами обозначены результаты компьютерного моделирования [31]. Результаты показаны для различных значений $\alpha = 1, 5$ и 20 .



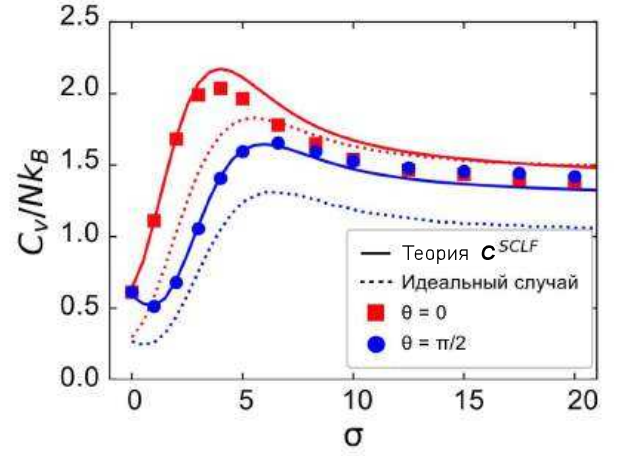
(б)

Рис. 2.7.2 – Статическая намагниченность M^{RANDOM} как функция, зависящая от угла $\theta = \angle(\mathbf{H}, \mathbf{n})$, для случайного распределения частиц в объеме с $\chi_L = \lambda = 1.25$, $\sigma = 10$. Сплошные линии соответствуют теории M^{RANDOM} , символами обозначены результаты компьютерного моделирования [31]. Результаты показаны для различных значений $\alpha = 1, 5$ и 20 .

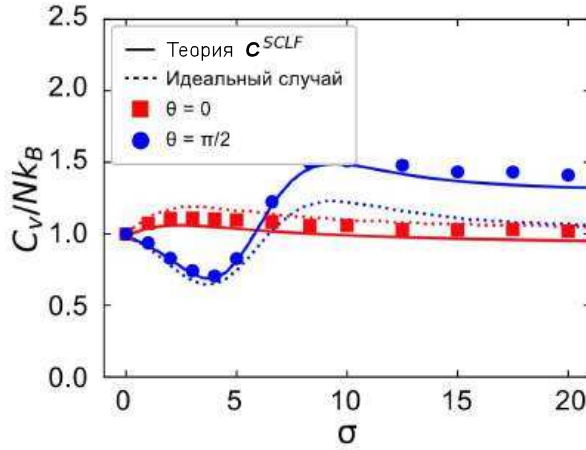
На рисунках 2.7.3 и 2.7.4 показана теплоемкость C_v при $\phi = 0$ (для кубической решетки), $\chi_L = \lambda = 1.25$ как функция параметра анизотропии σ для кубической решетки и случайного распределения соответственно с различными значениями внешнего магнитного поля. Сплошные линии, соответствующие теории C^{SCLF} и C^{RANDOM} , сравниваются с символами, полученными с помощью компьютерного моделирования методом Монте-Карло [31].



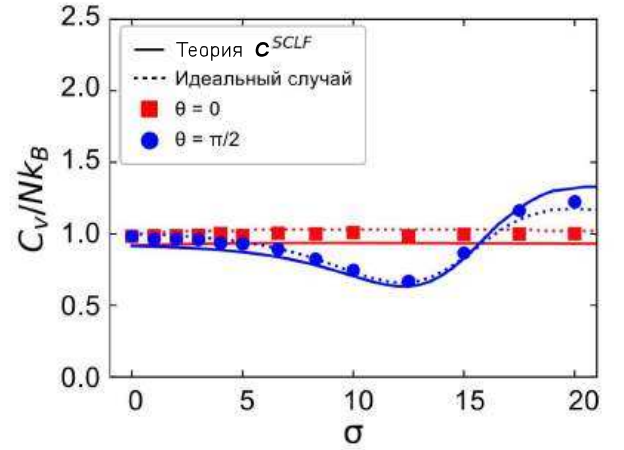
(a)



(б)

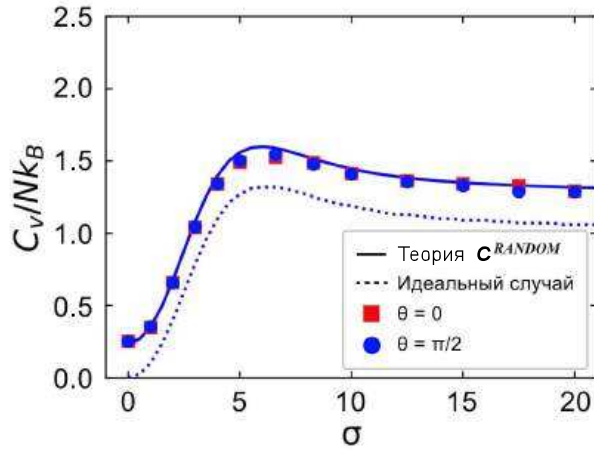


(в)

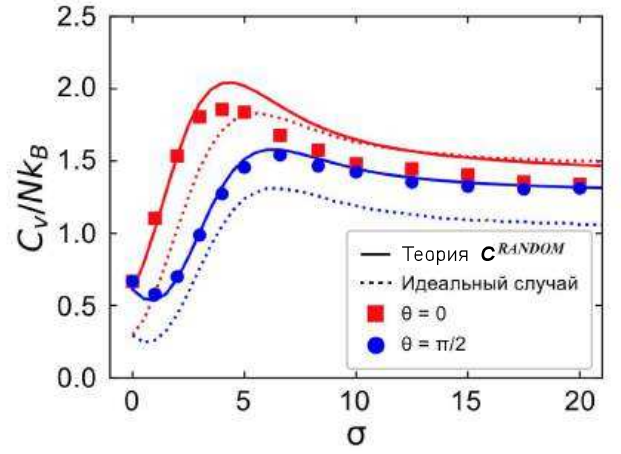


(г)

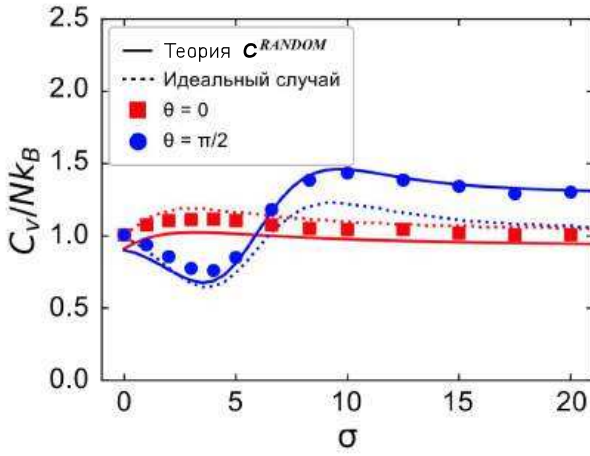
Рис. 2.7.3 – Теплоемкость C_v как функция, зависящая от параметра анизотропии σ , для кубической решетки при $\phi = 0$, $\chi_L = \lambda = 1.25$ и различных значений внешнего магнитного поля: $\alpha = 0$ (а), 1 (б), 5 (в) и 20 (г). Сплошные линии соответствуют теории C^{SCLF} , символами обозначены результаты компьютерного моделирования [31]. Результаты показаны для $\theta = 0$ (красный цвет) и $\pi/2$ (синий цвет).



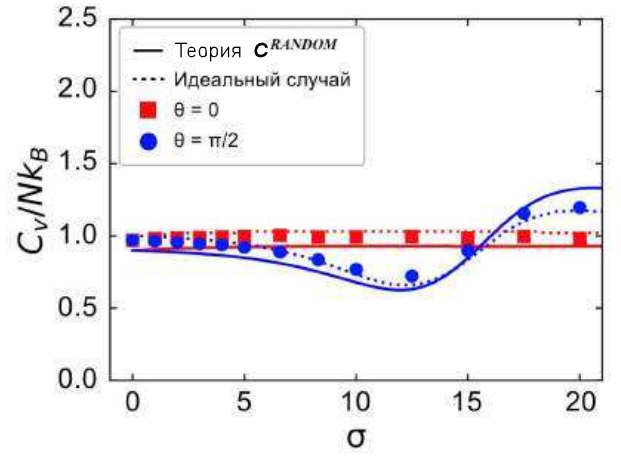
(а)



(б)



(в)



(г)

Рис. 2.7.4 – Теплоемкость C_v как функция, зависящая от параметра анизотропии σ , для случайного распределения при $\chi_L = \lambda = 1.25$ и различных значений внешнего магнитного поля: $\alpha = 0$ (а), 1 (б), 5 (в) и 20 (г). Сплошные линии соответствуют теории C^{RANDOM} , символами обозначены результаты компьютерного моделирования [31]. Результаты показаны для $\theta = 0$ (красный цвет) и $\pi/2$ (синий цвет).

Для случая кубической решетки представленная теория и результаты компьютерного моделирования демонстрируют хорошую согласованность независимо от интенсивности приложенного поля (рисунок 2.7.3). Сравнение теории с данными компьютерного моделирования для случайного распределения приводит к аналогичным результатам (рисунок 2.7.4).

2.8. Основные результаты главы

В разделе 2.1 Представлена модель, на основе которой изучаются свойства магнитоактивных композитов. Введены потенциалы и безразмерные параметры использующиеся при моделировании свойств композитов.

В разделе 2.2 представлены два варианта распределения частиц по объему: в узлах простой кубической решетки и случайным образом. Рассмотрены различные положения осей легкого намагничивания относительно направления постоянного магнитного поля $\mathbf{H}$. Подобная вариативность позволяет провести сравнительный анализ магнитных характеристик систем с различной пространственной и ориентационной архитектурой и выявить их отличительные особенности.

В разделе 2.3 описана общая схема вириального разложения свободной энергии Гельмгольца. Проведен анализ поведения энергии Гельмгольца для системы не учитывающей межчастичные диполь-дипольных взаимодействий. Установлено, что энергия Гельмгольца в системе без взаимодействий не зависит от пространственного расположения частиц, но чувствительна к ориентационному текстурированию осей легкого намагничивания и внешнему полю.

В разделе 2.4 выведены аналитические выражения для расчета вклада диполь-дипольных взаимодействий ΔF в свободную энергию Гельмгольца системы, частицы в которой расположены в узлах простой кубической решетки. Формулы получены для случаев параллельной и перпендикулярной конфигураций осей легкого намагничивания с точностью до U_d^3 , а также в общем случае, когда оси легкого намагничивания выровнены и направлены к полю под произвольным углом θ с точностью до U_d^2 .

Установлено, что для параллельной конфигурации оси легкого намагничивания являются дополнительным стимулом к выравниванию магнитных моментов вдоль внешнего магнитного поля, что приводит к увеличению свободной энергии Гельмгольца с ростом параметра анизотропии. Для перпендикулярной конфигурации вклад диполь-дипольных взаимодействий ΔF в свободную энергию в системах с высоким параметром анизотропии преимущественно определяется интенсивностью дипольного взаимодействия и практически не зависит остальных параметров.

Случаи параллельной и перпендикулярной ориентации легких осей относительно направления постоянного магнитного поля совпадают со случаем ориентации осей легкого намагничивания под произвольным углом при $\theta = 0$ и $\theta = \pi/2$ соответственно. Согласованность полученных результатов подтверждает общность представленных аналитических выражений.

В разделе 2.5 выведено аналитическое выражение для вклада дипольных взаимодействий ΔF в свободную энергию Гельмгольца для системы с произвольным распределением магнитных частиц по объему исследуемого образца с точностью до U_d^2 .

В разделе 2.6 проведен сравнительный анализ магнитных и термодинамических характеристик для различных способов распределения частиц по объему. На основе аналитических выражений, описывающих вклад диполь-дипольных взаимодействий в свободную энергию Гельмгольца, были определены и исследованы начальная магнитная восприимчивость, статическая намагниченность и теплоемкость.

Для намагниченности и теплоемкости наблюдалась общая тенденция: в слабом поле $\alpha = 1$ вклад диполь-дипольных взаимодействий был особенно заметен, но увеличение напряженности поля до $\alpha = 5$ и 20 приводило к преобладанию энергии Зеймана над энергией диполь-дипольного взаимодействия и нивелировало отличия от идеальной системы.

В разделе 2.7 на примере статической намагниченности и теплоемкости проведено сравнение полученных аналитических выражений и результатов компьютерного моделирования методом Монте-Карло [31]. Полученная теория показывает хорошее согласование с данными компьютерного моделирования и подтверждает значимость учета влияния межчастичных взаимодействий на магнитные характеристики системы, особенно в слабых полях.

Основное содержание главы было опубликовано в работах [30–32].

Глава 3. Статический магнитный отклик многогранульных частиц (МГЧ) с различным числом гранул

3.1. Модель

Исследуемая система представляет собой МГЧ, внутри которой располагается N неподвижных суперпарамагнитных сферических частиц, на которые воздействует внешнее магнитное поле. Гранулы моделируем как равномерно намагниченные наносферы с одинаковыми диаметром магнитного ядра x и магнитным моментом m . Энергия магнитной анизотропии гранул сравнима с тепловой энергией, вследствие чего, магнитный момент может свободно вращаться внутри каждой гранулы (параметр анизотропии $\sigma = 0$).

Формирование моделей осуществляется путем совмещения простой кубической решетки с ребром, состоящим из n гранул, находящихся в плотном контакте, и внешней сферы диаметром $D = nx$, центр которой совпадет с центром выбранной решетки. Все гранулы, не вошедшие целиком внутрь сферы, отсекаются. В случае, когда число гранул является нечетным, центр кубической решетки совпадает с центром гранулы. Подобное формирование частицы приводит к тому, что внутри сферы остается нечетное количество гранул, симметрично распределенных относительно центра. Если же число гранул n является четным, центр кубической решетки совпадает только с центром частицы, а количество гранул оставшихся в системе будет четным. Для краткости, си-

стемы с подобной архитектурой в дальнейшем будут называться нечетными и четными соответственно. Процесс формирования моделей пошагово показан на рисунках 3.1.1 и 3.1.2.

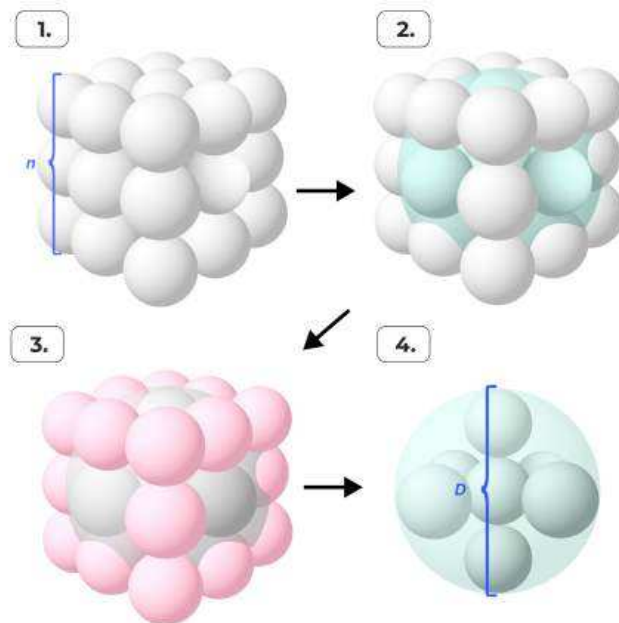


Рис. 3.1.1 – Процесс формирования МГЧ путем наложения сферы на кубическую решетку для нечетной системы.

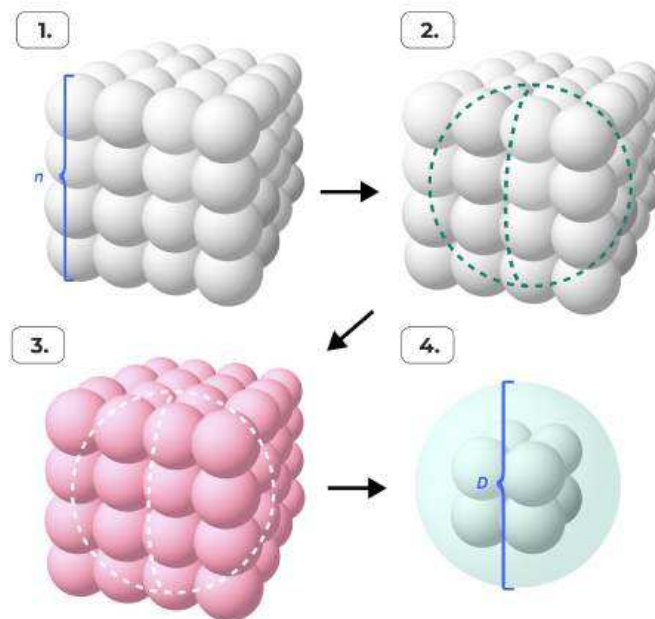


Рис. 3.1.2 – Процесс формирования МГЧ путем наложения сферы на кубическую решетку для четной системы.

Приложенное магнитное поле $\mathbf{H}$ направлено параллельно оси Oz , то есть $\mathbf{H} = H(0, 0, 1)$. Поскольку все гранулы обездвижены, полная потенциальная энергия системы характеризуется двумя слагаемыми:

$$U = U_m(i) + U_d(ij), \quad (3.1.1)$$

первое из которых описывает взаимодействие магнитного момента гранулы с внешним магнитным полем (2.1.2), а второе – диполь-дипольные взаимодействия между i -ой и j -ой частицами (2.1.3).

Интенсивность внешнего магнитного поля характеризуется параметром Ланжевена $\alpha = \beta\mu_0 tH$, где μ_0 – магнитная проницаемость среды, β – тепловая энергия, а интенсивность дипольных взаимодействий параметром λ_e (2.1.6).

Для случая неплотного контакта гранул внутри частицы введем параметр l , характеризующий кратчайшее расстояние между соседними гранулами, нормированное на их диаметр x .

3.2. Рассмотренные конфигурации МГЧ

3.2.1. Количество гранул

В данном исследовании были рассмотрены следующие варианты распределения гранул по объему частицы:

1. Нечетные системы.

а) Случай 7 гранул, расположенных в узлах простой кубической решетки, помещенной в частицу (рисунок 3.2.1(а)).

б) Случай 33 гранул, расположенных в узлах простой кубической решетки, помещенной в частицу (рисунок 3.2.1(б)).

в) Случай 123 гранул, расположенных в узлах простой кубической решетки, помещенной в частицу (рисунок 3.2.1(в)).

2. Четные системы.

а) Случай 8 гранул, расположенных в узлах простой кубической решетки, помещенной в частицу (рисунок 3.2.2(а)).

б) Случай 32 гранул, расположенных в узлах простой кубической решетки, помещенной в частицу (рисунок 3.2.2(б)).

в) Случай 136 гранул, расположенных в узлах простой кубической решетки, помещенной в частицу (рисунок 3.2.2(в)).

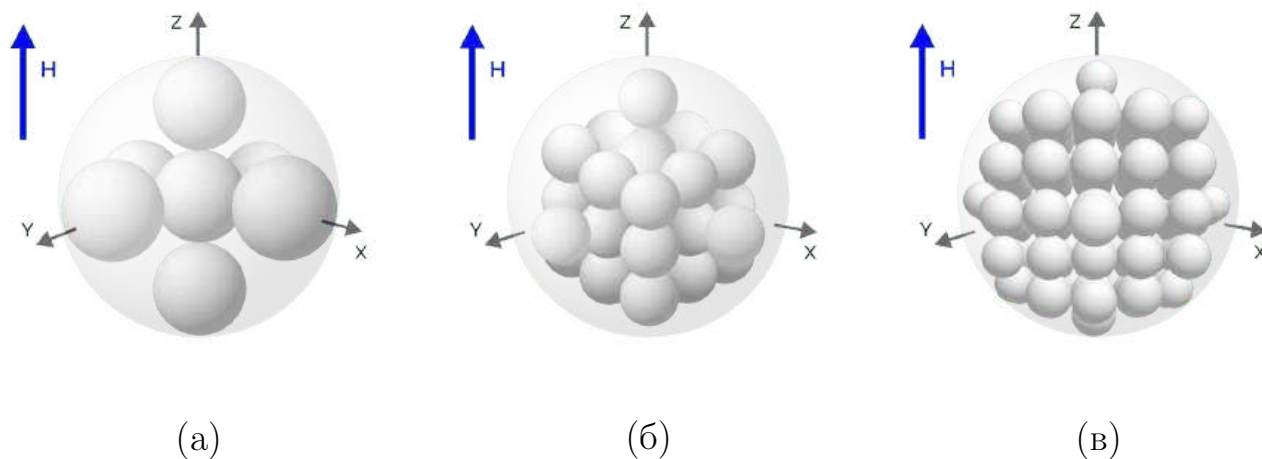


Рис. 3.2.1 – Внутренняя структура исследуемых МГЧ. Нечетные системы. Случаи 7(а), 33(б), 123(в) гранул, размещенных в узлах кубической решетки, с гранулой, размещенной в центре частицы. Во всех случаях внешнее магнитное поле $\mathbf{H}$ приложено вдоль оси Oz .

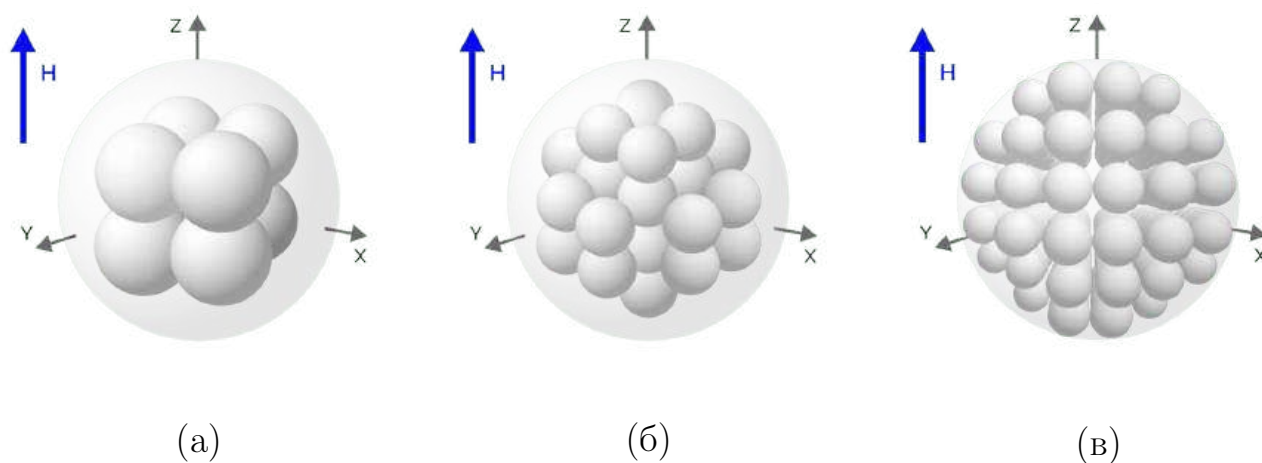


Рис. 3.2.2 – Внутренняя структура исследуемых МГЧ. Четные системы. Случаи 8(а), 32(б), 136(в) гранул, размещенных в узлах кубической решетки, с центром кубической решетки, размещенным в центре частицы. Во всех случаях внешнее магнитное поле $\mathbf{H}$ приложено вдоль оси Oz .

3.2.2. Понижение объемной концентрации

Изначально в исследовании были использованы системы с частицами, находящимися в плотном контакте. Объемная концентрация рассчитывалась по объему, ограниченному сферой, которая использовалась при построении МГЧ. Значения объемной концентрации $\varphi = \rho v_m$ для данных образцов представлены в таблице (3.1).

N (нечетные)	7	33	123
φ	0.259	0.264	0.358
N (четные)	8	32	136
φ	0.125	0.148	0.265

Таблица 3.1 – Параметры МГЧ для случая плотного контакта гранул. Объемная концентрация гранул внутри частицы φ в зависимости от числа гранул N .

Как видно из данных, приведенных в таблице, описанный ранее алгоритм построения моделей приводит к формированию систем с высокой объемной концентрацией φ , которая продолжает расти с увеличением количества гранул, расположенных в МГЧ. Изменения объемной концентрации в различных образцах делают сравнительный анализ менее объективным, чем сопоставление систем с одинаковой концентрацией.

Простейшим способом понижения объемной концентрации и «выравнивания» МГЧ по концентрации является увеличение расстояния между гранулами и переход от плотного контакта к случаю равноудаленных гранул. Процесс преобразования моделей наглядно показан на рисунке 3.2.3.

Объемная концентрация гранул в частицах для случая неплотного контакта вычисляется по формуле:

$$\varphi = \frac{N}{(n + (n - 1)l)^3} . \quad (3.2.1)$$

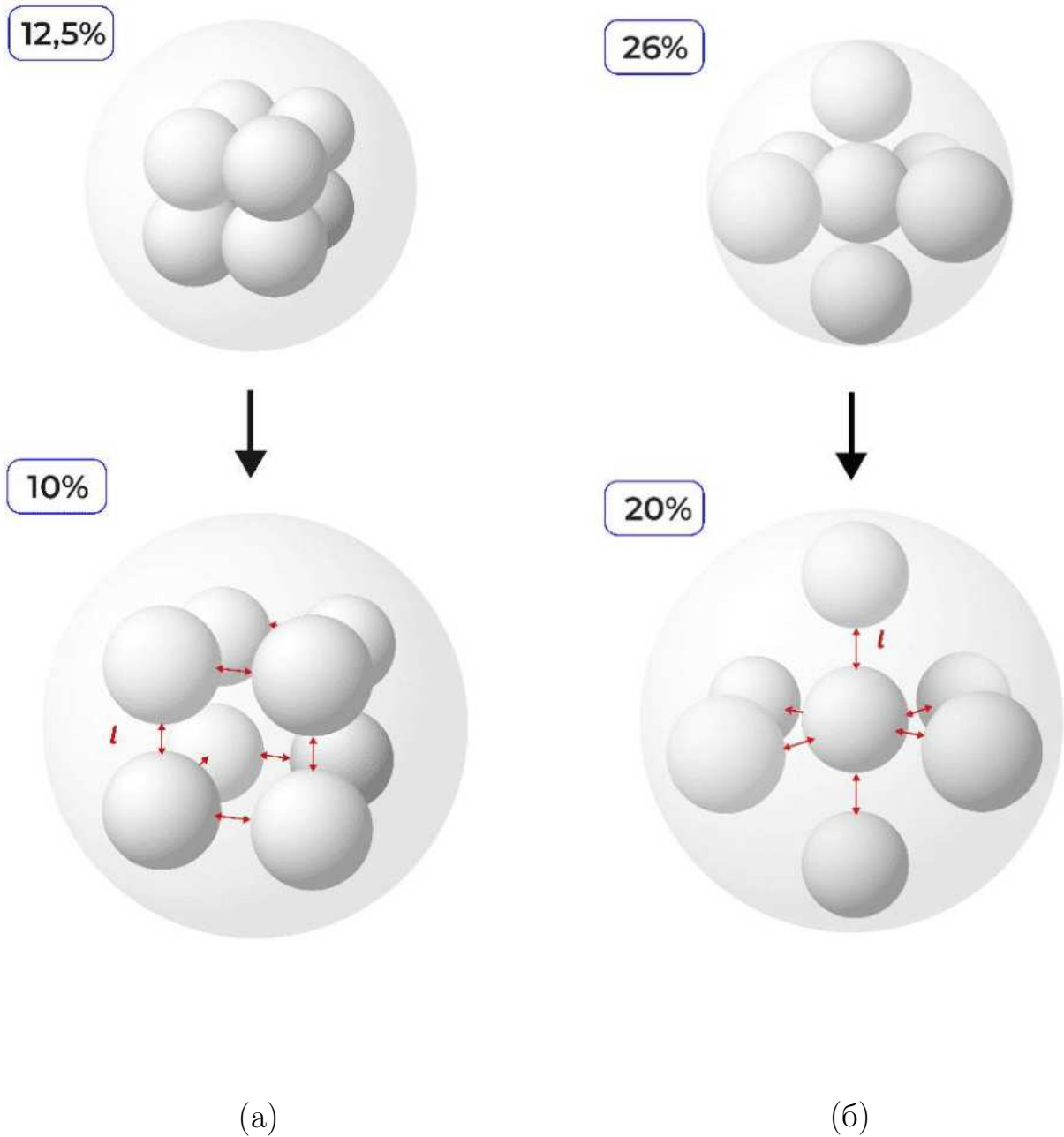


Рис. 3.2.3 – Процесс понижения объемной концентрации φ путем увеличения расстояния l между соседними гранулами для четных (а) и нечетных (б) систем.

В настоящей работе будут рассмотрены результаты для четных МГЧ с концентрацией гранул $\varphi = 0.10$ и $\varphi = 0.05$, и нечетных МГЧ с концентрацией гранул $\varphi = 0.20$, $\varphi = 0.15$, $\varphi = 0.10$ и $\varphi = 0.05$ соответственно.

3.3. Вычисление статического магнитного отклика МГЧ

Основой для теории, описывающей магнитный отклик МГЧ, служит математическая аппроксимация статической намагниченности большого ансамбля неподвижных суперпарамагнитных наночастиц, расположенных в узлах простой кубической решетки, описанная в предыдущей главе.

Важным этапом является адаптация методов статистической механики к анализу систем с малым количеством гранул. Статическая намагниченность модели, вычисляется по формуле:

$$M = M_L - \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{\beta \Delta F}{N} \right), \quad (3.3.1)$$

где:

$$M_L(\alpha) = L(\alpha) \equiv \coth(\alpha) - \frac{1}{\alpha} \quad (3.3.2)$$

является намагниченностью Ланжевена, а функция ΔF обозначает вклад диполь-дипольных взаимодействий в свободную энергию Гельмгольца рассматриваемого образца.

Аналитическое выражение для ΔF содержит второй вириальный коэффициент, определенный с точностью до третьей степени по параметру диполь-дипольного взаимодействия:

$$\frac{\beta \Delta F}{N} = -\frac{1}{2} (b_1 \lambda_e + b_2 \lambda_e^2 + b_3 \lambda_e^3), \quad (3.3.3)$$

где:

$$b_1 = \frac{(x)^3}{(x+l)^3} 2L^2(\alpha) \gamma_{12}, \quad (3.3.4)$$

$$b_2 = \frac{(x)^6}{(x+l)^6} \left(\frac{36}{35} L_3^2(\alpha) \gamma_{24} + \frac{2}{3} L_3(\alpha) \left(1 - \frac{L_3(\alpha)}{7} \right) \gamma_{22} + \frac{1}{3} \left(1 + \frac{L_3^2(\alpha)}{5} \right) \gamma_{20} \right), \quad (3.3.5)$$

$$\begin{aligned}
b_3 = & \frac{(x)^9}{(x+l)^9} \left(\frac{24}{77} \left(L^2(\alpha) - 10 \frac{L(\alpha)L_3(\alpha)}{\alpha} + 25 \frac{L_3^2(\alpha)}{(\alpha)^2} \right) \gamma_{36} \right. \\
& + \frac{72}{385} \left(2L^2(\alpha) - 9 \frac{L(\alpha)L_3(\alpha)}{\alpha} - 5 \frac{L_3^2(\alpha)}{(\alpha)^2} \right) \gamma_{34} \\
& + \frac{4}{7} \left(L^2(\alpha) - \frac{L(\alpha)L_3(\alpha)}{\alpha} + \frac{L_3^2(\alpha)}{(\alpha)^2} \right) \gamma_{32} \\
& \left. + \frac{2}{105} \left(4L^2(\alpha) + 2 \frac{L(\alpha)L_3(\alpha)}{\alpha} - 5 \frac{L_3^2(\alpha)}{(\alpha)^2} \right) \gamma_{30} \right). \quad (3.3.6)
\end{aligned}$$

Основой данного выражения являются описанные ранее вспомогательные Q -функции, рассчитанные для $\sigma = 0$ (2.4.14)-(2.4.16), и γ -коэффициенты (2.4.18). При вычислении коэффициентов γ_{pq} суммирование проводилось по большому ансамблю суперпарамагнитных наночастиц ($N > 10^3$). В этом случае значения γ_{pq} были не чувствительны к увеличению количества суперпарамагнитных наночастиц в системе. Для определения значений $\tilde{r}_{1j}$ и $\tilde{z}_{1j}$ в (2.4.18) выбиралась произвольная суперпарамагнитная наночастица с номером 1, она фиксировалась в центре системы координат, после чего, $\tilde{r}_{1j}$ и $\tilde{z}_{1j}$ находились для всех частиц с номерами j , расположенных в узлах кубической решетки, расположенной внутри цилиндра. Поскольку рассмотренный в предыдущей главе ансамбль суперпарамагнитных частиц содержал большое количество наночастиц, то значение γ_{pq} не зависело от выбора частицы, размещенной в центре системы координат. Для МГЧ, рассматриваемых в данной главе, значения коэффициентов γ_{pq} сильно чувствительны как к количеству гранул N , так и к выбору гранулы с номером 1 при определении $\tilde{r}_{1j}$ и $\tilde{z}_{1j}$, поэтому формула (2.4.18) была модифицирована следующим образом:

$$\gamma_{pq} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{i \neq j, i=1}^N \frac{1}{\tilde{r}_{ji}^{3p}} P_q \left(\frac{\tilde{z}_{ji}}{\tilde{r}_{ji}} \right). \quad (3.3.7)$$

На этапе формирования МГЧ определялись координаты каждой гранулы, в связи с чем значения r_{ji} и z_{ji} являются известными величинами для любой из рассмотренных систем.

3.4. Компьютерное моделирование намагниченности МГЧ

3.4.1. Оценка точности и область применимости теории

Оценка точности полученной теории осуществлялась с помощью компьютерного моделирования систем методом Монте-Карло. В качестве начального распределения магнитных моментов выбирались произвольные направления единичных векторов, после чего рассчитывалась полная потенциальная энергия системы. Далее магнитный момент каждой из частиц поочередно изменялся; состояние системы принималось согласно алгоритму Метрополиса. На каждом двадцатом шаге сохранялись текущие параметры системы. Программа завершала работу после сохранения 250000 измерений. В ходе моделирования исследовалась зависимость магнитного отклика МГЧ от таких параметров, как количество гранул N , расположенных внутри МГЧ, объемная концентрация системы φ , интенсивность диполь-дипольных взаимодействий λ_e и параметр Ланжевена α .

Статический магнитный отклик всей МГЧ описывался суммарным магнитным моментом M , нормированным на число гранул N , вычисляемым по формуле:

$$M = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \cos \omega_i \right\rangle_t, \quad (3.4.1)$$

где $\langle \dots \rangle_t$ означает усреднение по всем шагам моделирования, а $\omega_i = \angle(\mathbf{m}_i, \mathbf{H})$ является углом между магнитным моментом i -ой частицы и внешним магнитным полем $\mathbf{H}$.

Сравнение теории M^{MCP} (3.3.1), (3.3.3) - (3.3.7) (красная линия) с данными компьютерного моделирования (3.4.1) (черные точки) проводилось для случаев слабых ($\lambda_e = 1$), умеренных ($\lambda_e = 2$) и сильных ($\lambda_e = 3$) дипольных взаимодействий и различных значений объемной концентрации образцов с четным и нечетным количеством гранул; синяя линия соответствует одночастичной теории Ланжевена: $M_L(\alpha) = L(\alpha)$. Результаты сравнения теоретических данных и компьютерного моделирования приведены на рисунках 3.4.1 - 3.4.6.

$$\varphi=0.05$$

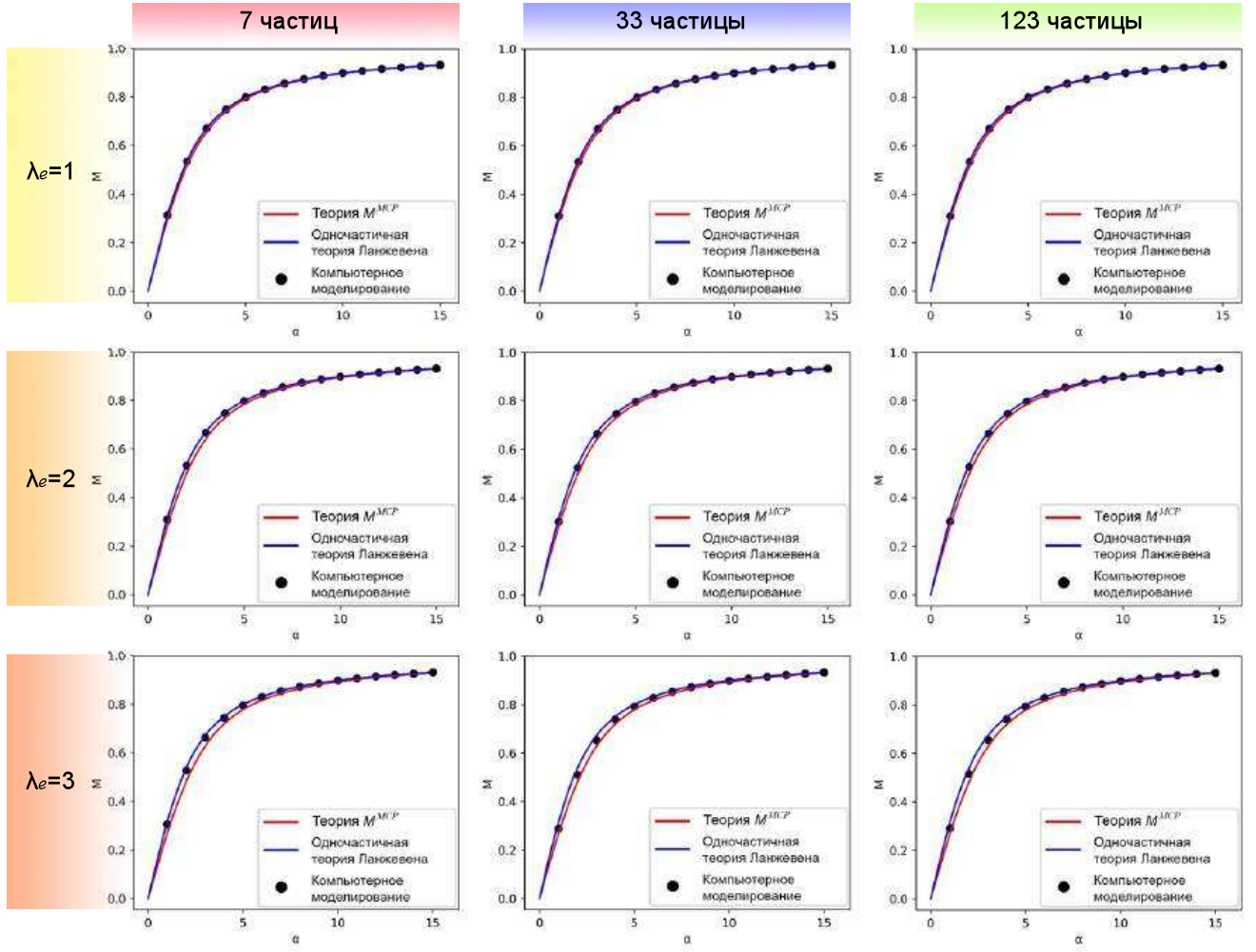


Рис. 3.4.1 – Магнитный отклик системы как функция, зависящая от величины внешнего магнитного поля α , при $\varphi = 0.05$ для нечетных систем с различным количеством гранул. Точками обозначены результаты компьютерного моделирования. Красная линия соответствует теоретическим данным M^{MCP} (выражения (3.3.1), (3.3.3) - (3.3.7)), синяя линия соответствует одночастичной теории Ланжевена $M_L(\alpha) = L(\alpha)$. Вертикаль демонстрирует изменение намагниченности с усилением межчастичного взаимодействия λ_e , горизонталь - изменение намагниченности с ростом числа гранул N .

На рисунке 3.4.1 видно, что при низкой концентрации $\varphi = 0.05$ нечетные системы не чувствительны к количеству частиц, а вклад диполь-дипольных взаимодействий в намагниченность системы оказывается незначительным даже для случаев сильных межчастичных взаимодействий.

$$\varphi=0.1$$

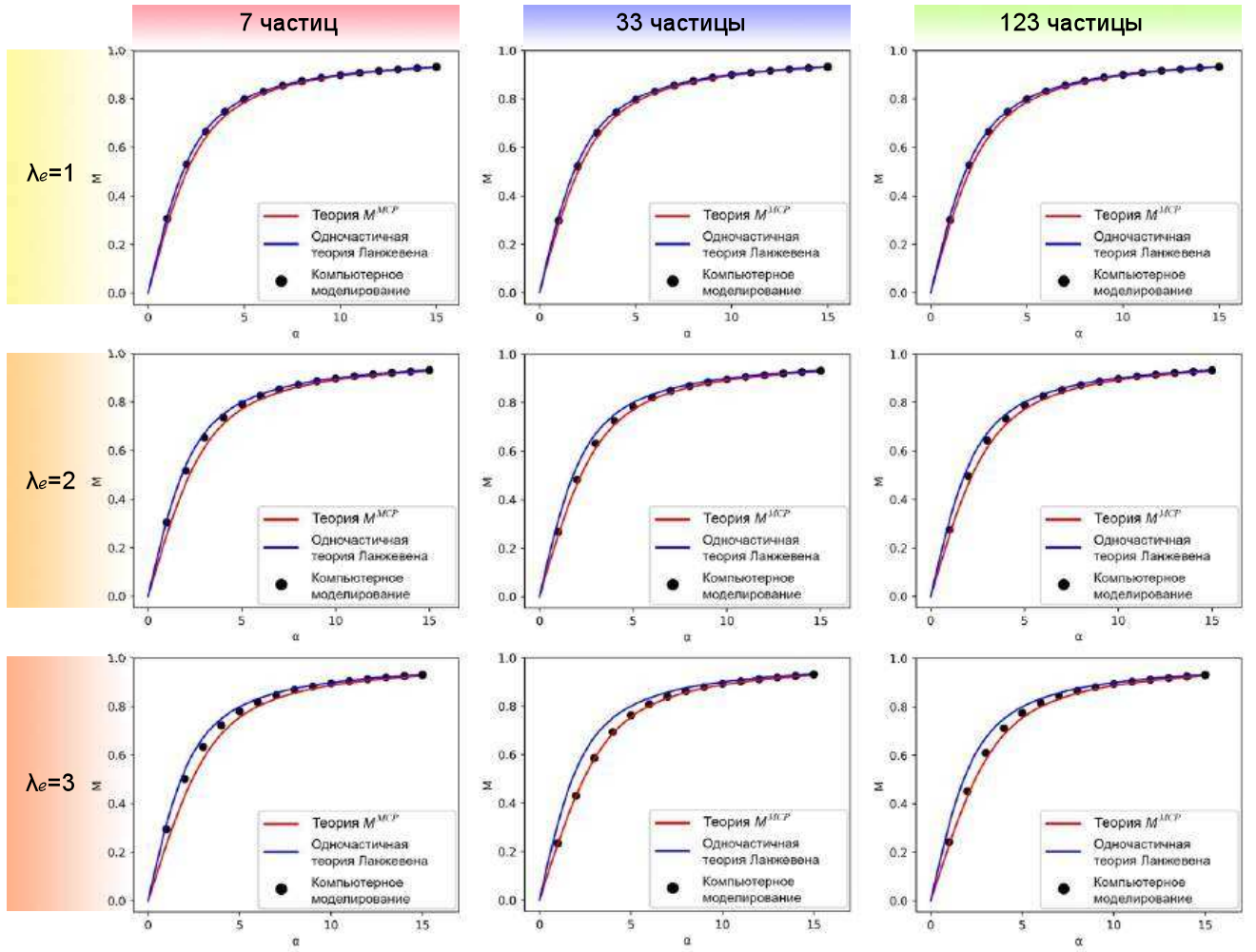


Рис. 3.4.2 – Магнитный отклик системы как функция, зависящая от величины внешнего магнитного поля α , при $\varphi = 0.10$ для нечетных систем с различным количеством гранул. Точками обозначены результаты компьютерного моделирования. Красная линия соответствует теоретическим данным M^{MCP} (выражения (3.3.1), (3.3.3) - (3.3.7)), синяя линия соответствует одночастичной теории Ланжевена $M_L(\alpha) = L(\alpha)$. Вертикаль демонстрирует изменение намагниченности с усилением межчастичного взаимодействия λ_e , горизонталь - изменение намагниченности с ростом числа гранул N .

На рисунке 3.4.2 видно, что при повышении концентрации до $\varphi = 0.10$ влияние диполь-дипольных взаимодействий на общую намагниченность нечетных систем становится более существенным, при этом теория все еще демонстрирует хорошее согласование с моделированием.

$$\varphi=0.15$$

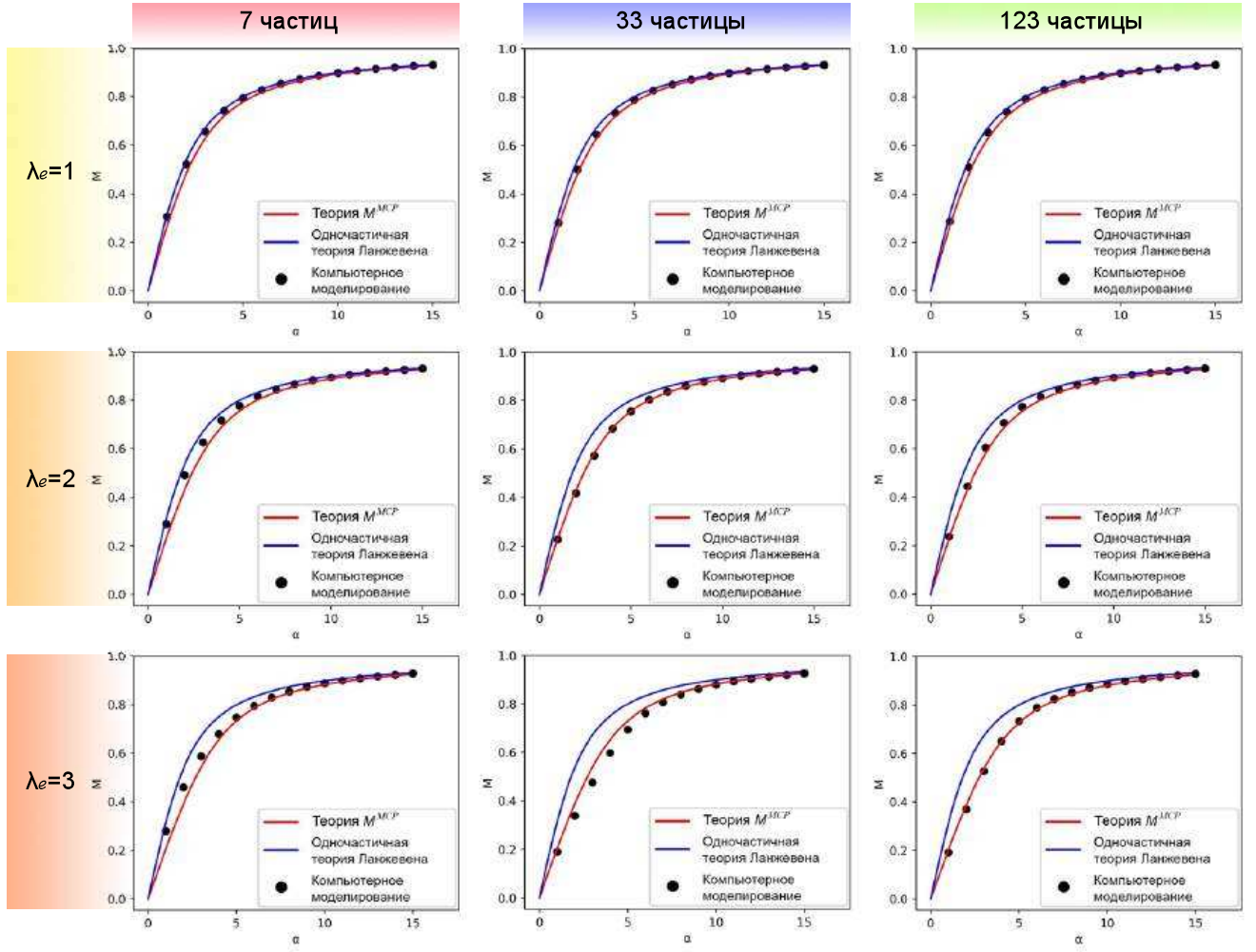


Рис. 3.4.3 – Магнитный отклик системы как функция, зависящая от величины внешнего магнитного поля α , при $\varphi = 0.15$ для нечетных систем с различным количеством гранул. Точками обозначены результаты компьютерного моделирования. Красная линия соответствует теоретическим данным M^{MCP} (выражения (3.3.1), (3.3.3) - (3.3.7)), синяя линия соответствует одночастичной теории Ланжевена $M_L(\alpha) = L(\alpha)$. Вертикаль демонстрирует изменение намагниченности с усилением межчастичного взаимодействия λ_e , горизонталь - изменение намагниченности с ростом числа гранул N .

На рисунке 3.4.3 видно, что для концентрации $\varphi = 0.15$ начинают наблюдаться небольшие отклонения теории от результатов моделирования при $N = 7$ и 33 , что означает, что область применимости теории для МГЧ с малым числом гранул составляет $\varphi \leq 0.15$. Тем не менее при сильных межчастичных взаимодействиях, результаты дают хорошее согласование для случая МГЧ, содержащей более 100 гранул.

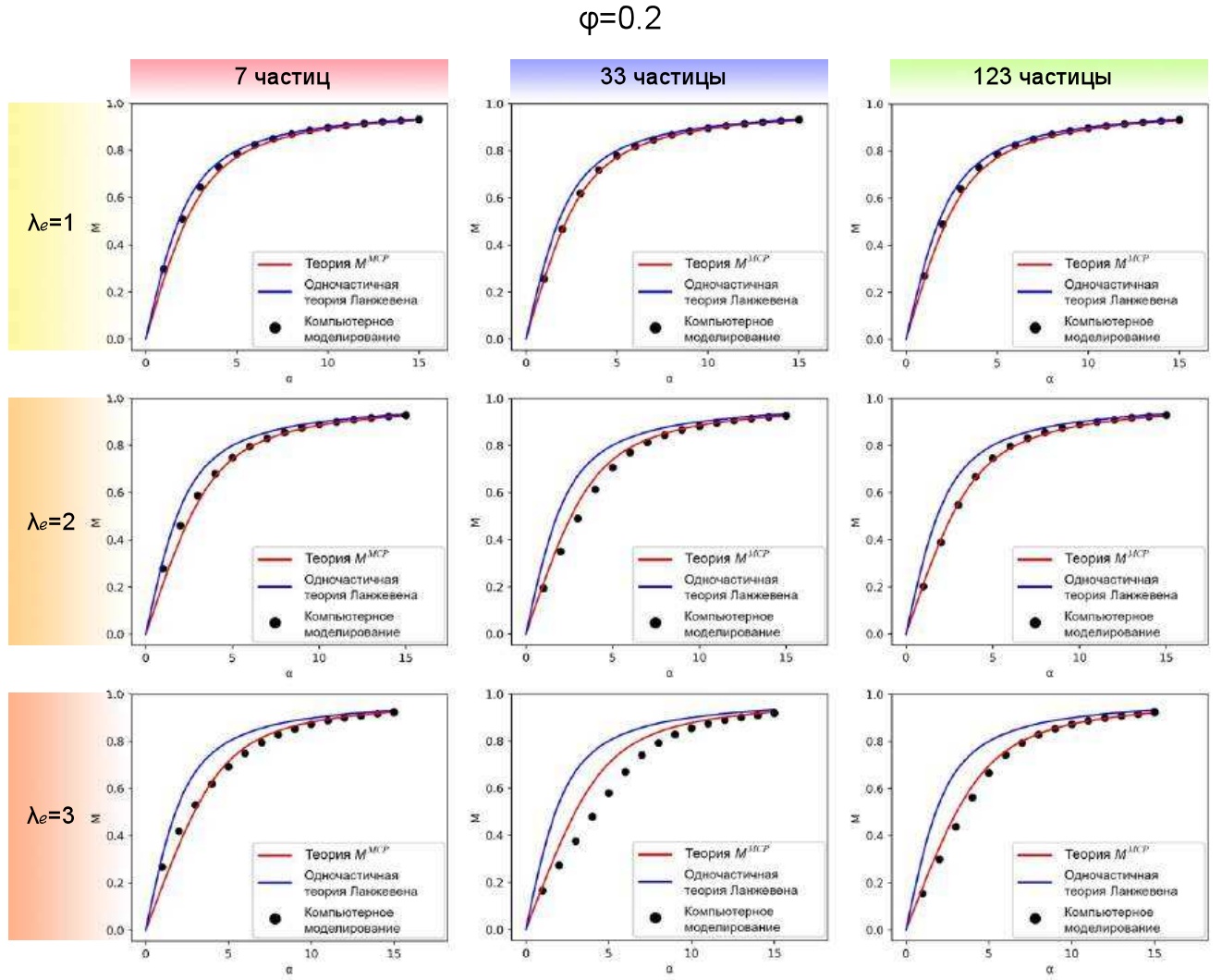


Рис. 3.4.4 – Магнитный отклик системы как функция, зависящая от величины внешнего магнитного поля α , при $\varphi = 0.20$ для нечетных систем с различным количеством гранул. Точками обозначены результаты компьютерного моделирования. Красная линия соответствует теоретическим данным M^{MCP} (выражения (3.3.1), (3.3.3) - (3.3.7)), синяя линия соответствует одночастичной теории Ланжевена $M_L(\alpha) = L(\alpha)$. Вертикаль демонстрирует изменение намагниченности с усилением межчастичного взаимодействия λ_e , горизонталь - изменение намагниченности с ростом числа гранул N .

На рисунке 3.4.4 видно, что при повышении концентрации до $\varphi = 0.2$ наблюдается усиление всех тенденций, намеченных для концентрации $\varphi = 0.15$.

$$\varphi=0.05$$

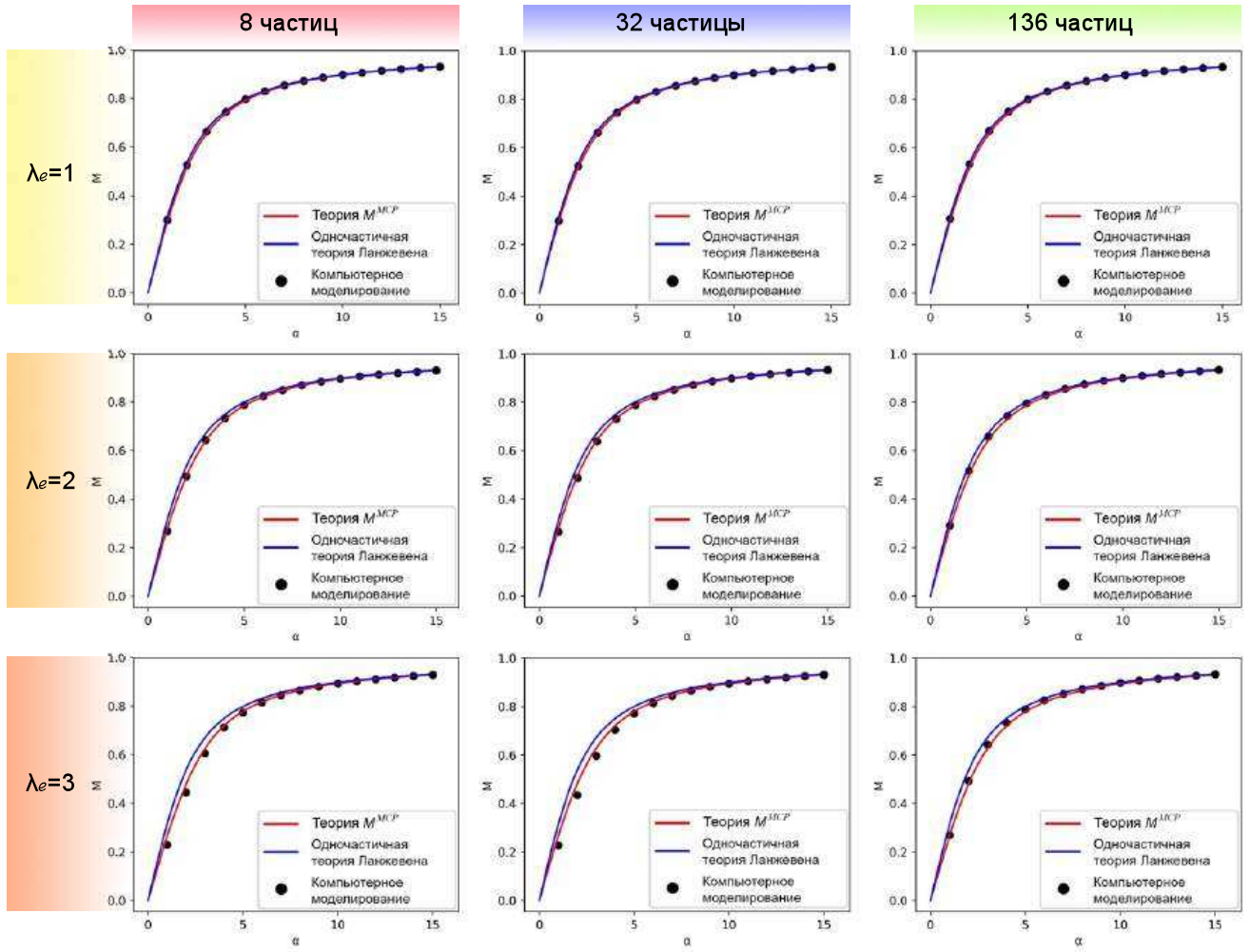


Рис. 3.4.5 – Магнитный отклик системы как функция, зависящая от величины внешнего магнитного поля α , при $\varphi = 0.05$ для четных систем с различным количеством гранул. Точками обозначены результаты компьютерного моделирования. Красная линия соответствует теоретическим данным M^{MCP} (выражения (3.3.1), (3.3.3) - (3.3.7)), синяя линия соответствует одночастичной теории Ланжевена $M_L(\alpha) = L(\alpha)$. Вертикаль демонстрирует изменение намагниченности с усилением межчастичного взаимодействия λ_e , горизонталь - изменение намагниченности с ростом числа гранул N .

На рисунке 3.4.5 видно, что при низкой концентрации $\varphi = 0.05$ четные системы, как и нечетные, не чувствительны к количеству частиц, а вклад диполь-дипольных взаимодействий в намагниченность системы оказывается незначительным даже для случаев сильных межчастичных взаимодействий.

$$\varphi=0.1$$

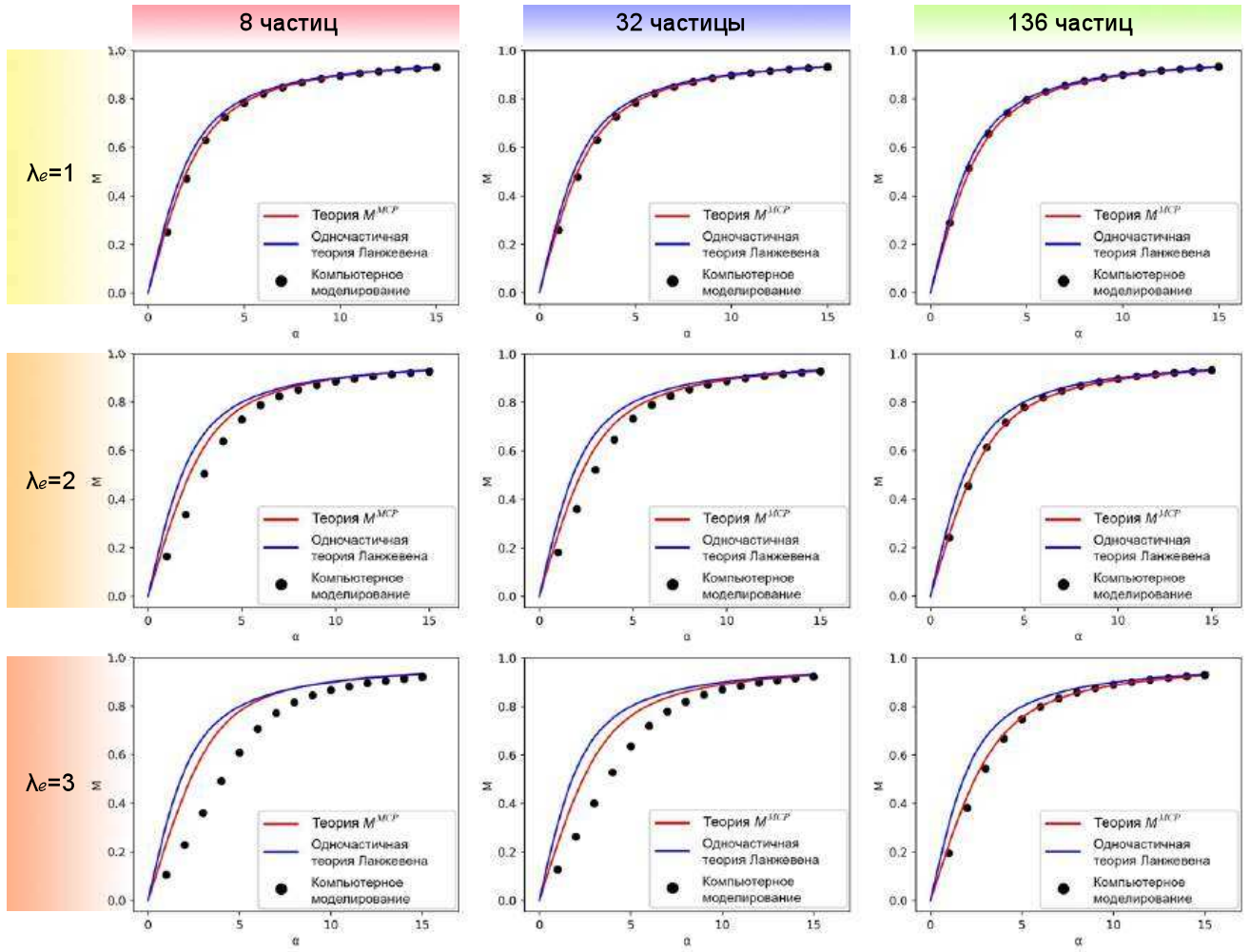


Рис. 3.4.6 – Магнитный отклик системы как функция, зависящая от величины внешнего магнитного поля α , при $\varphi = 0.10$ для четных систем с различным количеством гранул. Точками обозначены результаты компьютерного моделирования. Красная линия соответствует теоретическим данным M^{MCP} (выражения (3.3.1), (3.3.3) - (3.3.7)), синяя линия соответствует одночастичной теории Ланжевена $M_L(\alpha) = L(\alpha)$. Вертикаль демонстрирует изменение намагниченности с усилением межчастичного взаимодействия λ_e , горизонталь - изменение намагниченности с ростом числа гранул N .

На рисунке 3.4.6 видно, что для четной системы с концентрацией $\varphi = 0.1$ согласование теории и моделирования для случаев $\lambda_e = 2$ и 3 ухудшается. При этом теория дает хороший результат для случая МГЧ, содержащей более 100 гранул при всех значениях λ_e .

Таким образом, для всех представленных случаев намагниченность МГЧ лежит ниже кривой Ланжевена. Это может быть объяснено формированием компенсирующих ориентационных структур магнитных моментов гранул, происходящим под влиянием диполь-дипольных взаимодействий. Ориентационные структуры со скомпенсированным магнитным моментом слабо реагируют на магнитное поле, что приводит к уменьшению намагниченности МГЧ. Рост числа гранул в частице приводит к повышению точности теории. Наилучшее согласование теории и моделирования наблюдается для случаев 123 гранул и 136 гранул. Теоретические подходы, развитые во второй главе и адаптированные для небольшого числа наночастиц, могут точно описывать свойства МГЧ с малым числом гранул при $\varphi \leq 0.10$ и $\lambda_e \leq 1$, а для МГЧ, содержащих более 100 гранул, эти подходы могут успешно применяться для количественного прогнозирования свойств МГЧ даже для сильных межчастичных взаимодействий при $\lambda_e = 3$. Хорошее согласование результатов при низких значениях объемной концентрации МГЧ обусловлено тем, что для достижения столь малых значений параметра φ необходимо значительно увеличить расстояния между соседними гранулами, что максимально ослабляет межчастичные взаимодействия и почти полностью нивелирует их вклад в намагниченность МГЧ.

3.4.2. Влияние количества гранул на магнитный отклик МГЧ

На рисунках 3.4.7 - 3.4.8 приведены результаты компьютерного моделирования намагниченности МГЧ, демонстрирующие зависимость кривых намагничивания M от напряженности приложенного магнитного поля α для межчастичных взаимодействий различной силы, характеризуемых параметром λ_e и различной объемной концентрации φ .

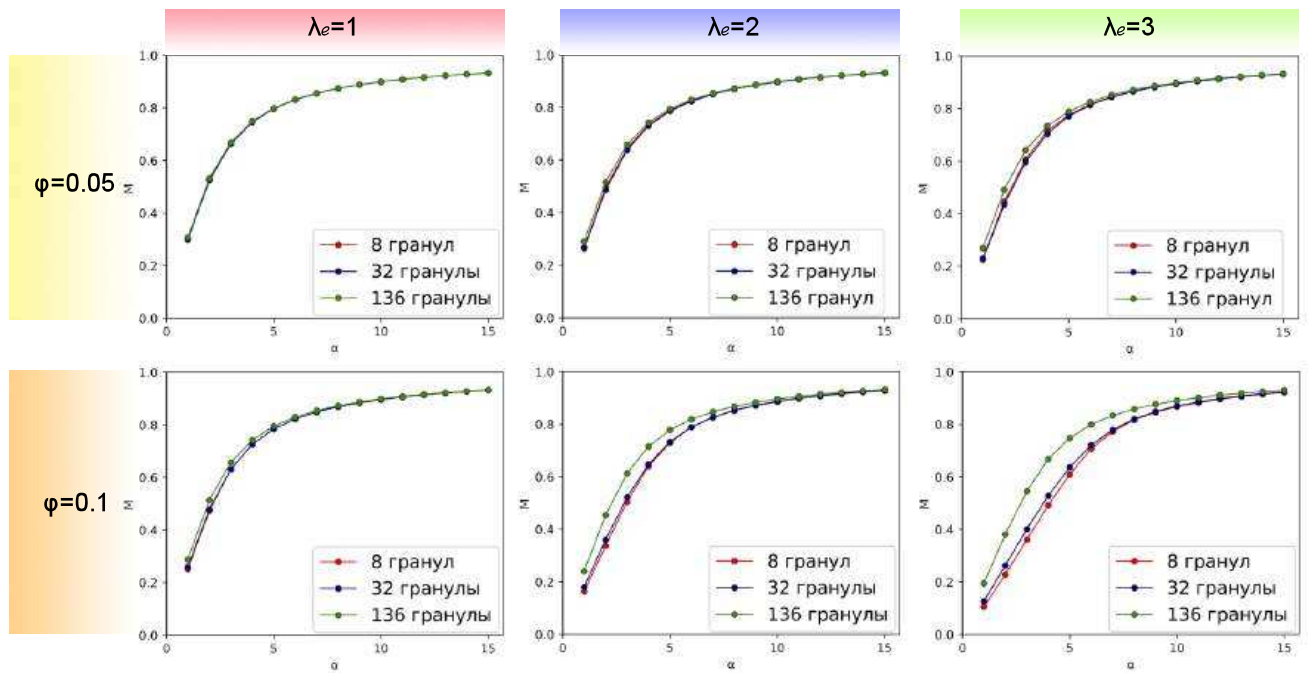


Рис. 3.4.7 – Четное количество гранул. Кривые намагничивания МГЧ как функция зависящая от величины внешнего магнитного поля α с различным количеством гранул для различных значений параметра φ и λ_e .

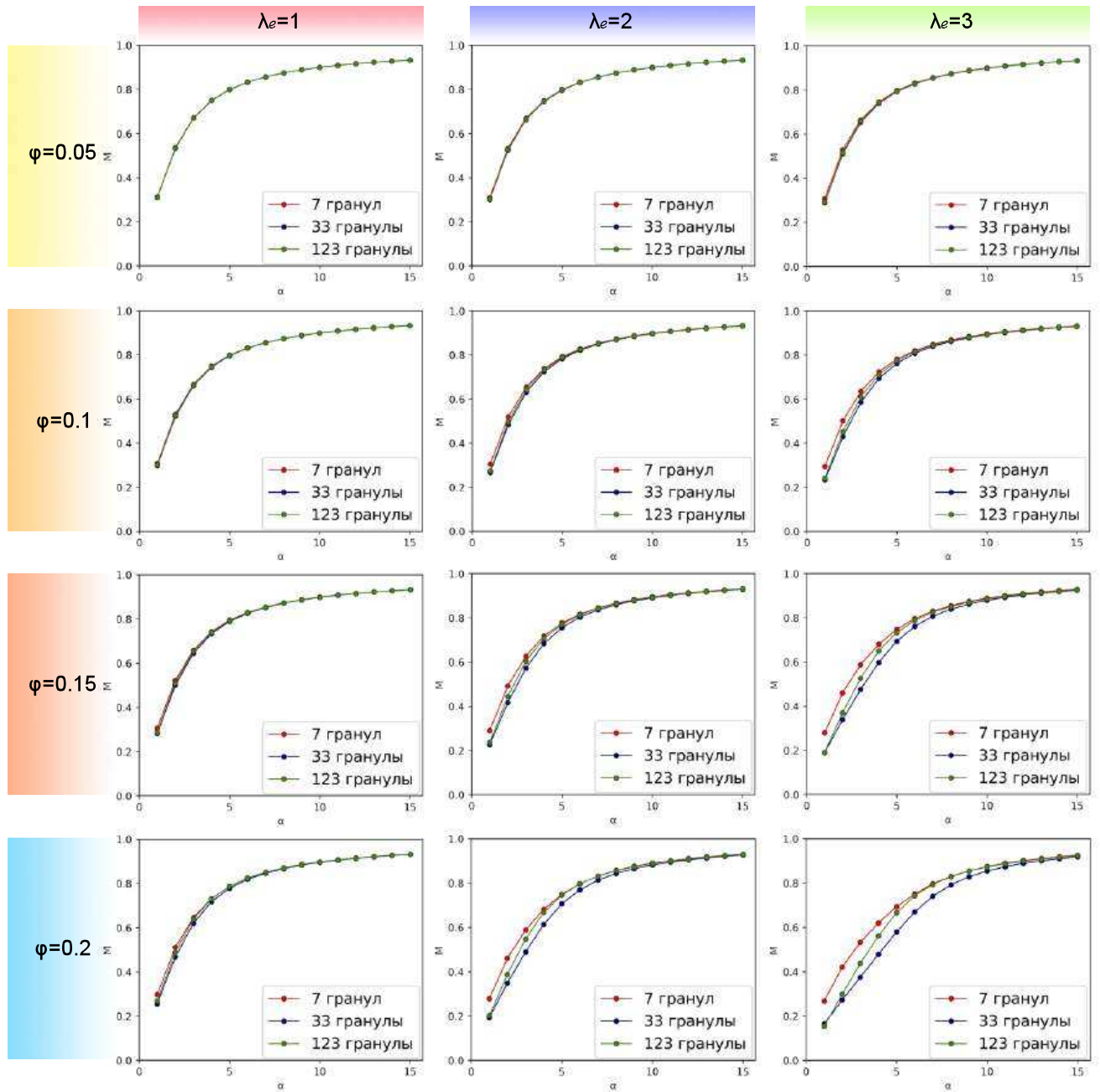


Рис. 3.4.8 – Нечетное количество гранул. Кривые намагничивания МГЧ как функция зависящая от величины внешнего магнитного поля α с различным количеством гранул для различных значений параметра φ и λ_e .

Для всех графиков можно отметить общую тенденцию: в слабых и умеренных полях увеличение числа гранул приводит к увеличению намагниченности МГЧ. Исключением из правила является случай МГЧ с 7 гранулами. На рисунке 3.4.8 видно, что данная конфигурация демонстрирует самые высокие значения намагниченности, особенно в слабых полях. Эта особенность объясняется поведением верхней и нижней гранулы МГЧ (рисунок 3.2.1(а)), которые очень чувствительны к внешнему магнитному полю. Даже при небольшом внешнем поле направление магнитных моментов этих гранул полностью совпадает с направлением поля, максимизируя магнитный момент всей системы. Остальные гранулы слабо реагируют на внешнее поле и почти не влияют на начальный наклон кривой намагниченности.

При достижении высоких значений напряженности приложенного магнитного поля ($\alpha > 10$) все системы приходят к состоянию магнитного насыщения и не демонстрируют существенных отличий.

3.5. Оценка погрешности вычислений

При вычислении статической намагниченности МГЧ, находящейся в постоянном магнитном поле, продолжительность компьютерного моделирования составляет 5000 тысяч МК-шагов, из которых в итоговую выборку попадает 250 тысяч значений (каждый двадцатый шаг).

В соответствии с описанной в [136] процедурой оценки средних по блокам был проведен анализ погрешности статистических расчетов. Этот метод позволяет принимать во внимание корреляцию между статистическими данными в выборке и обеспечивает надежную оценку среднеквадратичного отклонения. Для этого результаты компьютерного моделирования, вошедшие в итоговую выборку, обозначенные как $M_1, \dots, M_i, \dots, M_L$, где $L = 250$ тысяч, были преобразованы в новый набор данных вдвое меньшего размера, следующим образом:

$$M_{new_i} = 0.5 (M_{2i-1} + M_{2i}),$$

$$L_{new} = 0.5L.$$

При этом среднее значение M_{avg} исходного множества будет совпадать со средним значением нового множества на каждом последующем шаге:

$$M_{avg} = \frac{1}{L} \left(\sum_{i=1}^L M_i \right) = \frac{1}{L_{new}} \left(\sum_{i=1}^{L_{new}} M_{new_i} \right). \quad (3.5.1)$$

Необходимо выполнить повторные группировки в блоки несколько раз и вычислить новые значения M_{new_i} для каждого блока. Корреляции между такими значениями, полученными из последовательных блоков, будут снижаться по мере увеличения размера блока. Если компьютерное моделирование было проведено в течение достаточно продолжительного времени, то после нескольких повторных группировок значения M_{new_i} станут полностью некоррелированными. Это приведет к установлению постоянного значения среднеквадратичного отклонения S :

$$S = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{L_{new}} (M_{new_i} - M_{avg})^2}}{L_{new}} \approx const. \quad (3.5.2)$$

Для небольшого значения числа операций объединения в блоки K , вычисленные данные оказываются коррелированными, что приводит к увеличению значений среднеквадратичного отклонения S при выполнении операций объединения в блоки. При высоких значениях K , выборка становится крайне маленькой, что приводит к нестабильной статистической погрешности в оценке S . Плато, возникающее в середине процесса, определяет искомое значение S , позволяющее оценить величину среднеквадратичного отклонения.

Оценка точности компьютерного моделирования представлена на примере МГЧ, состоящей из 7 гранул, находящейся в магнитном поле $\alpha = 5$ при высоком значении объемной концентрации $\varphi = 0.20$ и сильных межчастичных взаимодействиях $\lambda_e = 3$.

3.5.1. Приведение системы к равновесному состоянию

В начале моделирования магнитный момент каждой гранулы определялся произвольно направленным единичным вектором, в результате чего система находится в неравновесном состоянии, а процесс достижения равновесия занимает некоторое время. Первичные конфигурации, полученные сразу после начала моделирования, не могут отражать истинное состояние системы. Отбрасывание начальных итераций значительно уменьшает погрешность вычислений и делает анализ поведения МГЧ и оценку ее характеристик более объективными.

На рисунке 3.5.1 представлена зависимость оценки среднеквадратичного отклонения S как функции, зависящей от размера блока для 100 тысяч измерений. Можно отметить, что исключение начальных данных (первые 50 тысяч итераций) позволяет уменьшить величину среднеквадратичного отклонения для рассмотренной системы на 19% (с 82% до 63%).

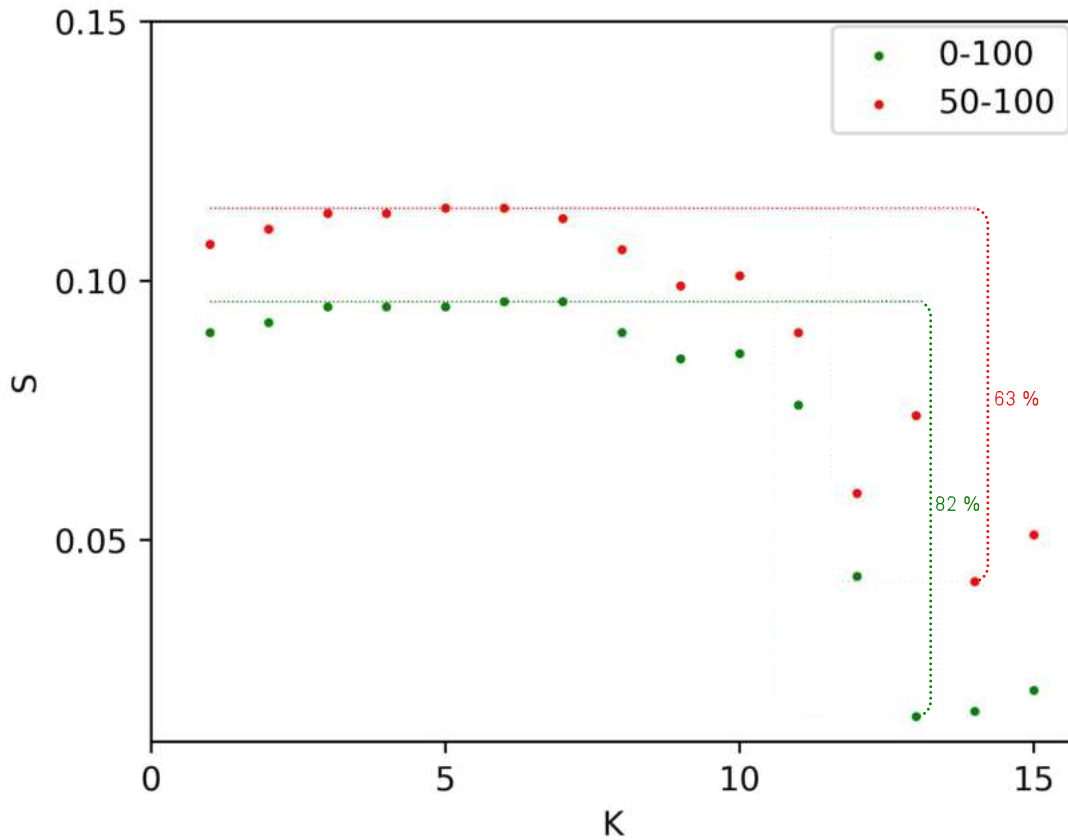


Рис. 3.5.1 – среднеквадратичное отклонение S статической намагниченности МГЧ (система из семи гранул, $\alpha = 5$, $\varphi = 0.20$, $\lambda_e = 3$) как функция числа операций объединения в блоки K для компьютерного моделирования учитывающего начальные итерации (зеленый цвет) и отбрасывающий начальные итерации (красный цвет).

3.5.2. Расширение статистической выборки

Увеличение количества измерений позволяет существенно повысить статистическую точность результата. Более длительное выполнение моделирования дает возможность усреднить результаты с меньшими флуктуациями и достичь более точных оценок намагниченности.

На рисунке 3.5.2 представлена зависимость оценки среднеквадратичного отклонения S как функции, зависящей от размера блока для 100 тысяч и 250 тысяч измерений (с учетом исключения начальных данных). Можно отметить, что увеличение количества итераций уменьшает величину среднеквадратичного отклонения для рассмотренной системы еще на 42% (с 63% до 21%).

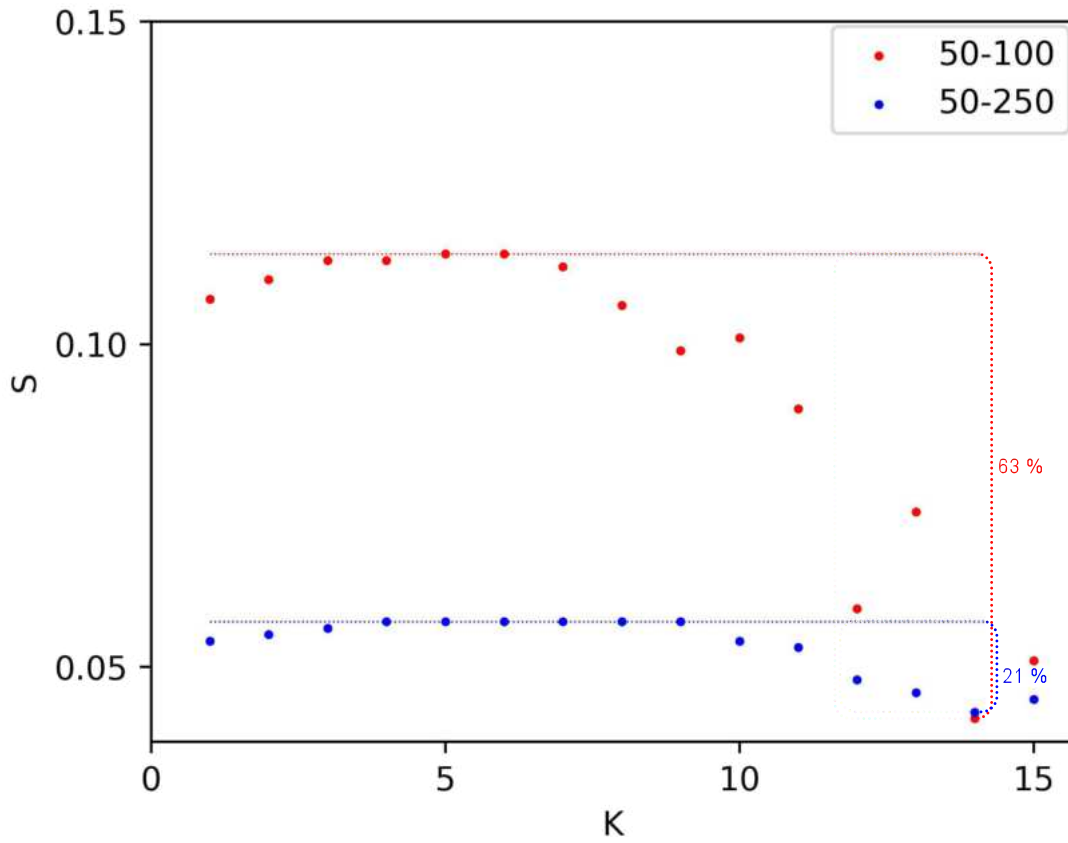


Рис. 3.5.2 – среднеквадратичное отклонение S статической намагниченности МГЧ (система из семи гранул, $\alpha = 5$, $\varphi = 0.20$, $\lambda_e = 3$) как функция числа операций объединения в блоки K для компьютерного моделирования длиной 100 тысяч измерений, отбрасывающего начальные итерации (красный цвет) и компьютерного моделирования длиной 250 тысяч измерений, отбрасывающего начальные итерации (синий цвет).

Таким образом, приемы, описанные в данном разделе, позволили существенно повысить точность вычислений и уменьшить итоговую погрешность до значения $\approx 5\%$.

3.6. Основные результаты главы

В разделе 3.1 описана исследуемая модель, представляющая собой МГЧ, внутри которой располагаются неподвижные суперпарамагнитные сферические гранулы, находящиеся под воздействием постоянного внешнего магнитного поля, и определены ее основные магнитные характеристики. Показан алгоритм формирования МГЧ для четного и нечетного случая.

В разделе 3.2 определены структуры МГЧ, исследования которых проводится в работе. Показан алгоритм изменения значения объемной концентрации φ путем увеличения расстояния l между соседними гранулами МГЧ.

В разделе 3.3 проведена адаптация теории, развитой в главе 2, описывающей статическую намагниченность большого ансамбля неподвижных суперпарамагнитных наночастиц, расположенных в узлах простой кубической решетки, для вычисления магнитного отклика МГЧ со схожей архитектурой.

В разделе 3.4 описан алгоритм моделирования магнитного момента МГЧ методом Монте Карло и проведен сравнительный анализ систем с разным количеством гранул, различной объемной концентрацией и силой межчастичных взаимодействий.

Установлено, что намагниченность МГЧ чувствительна к числу гранул и не превосходит намагниченности, предсказанной одночастичной моделью Ланжевена. Данная особенность объясняется формированием компенсирующих ориентационных структур магнитных моментов гранул, происходящим под влиянием диполь-дипольных взаимодействий. Увеличение числа гранул в частице приводит к повышению точности теории, системы содержащие более 100 гранул могут успешно описываться полученной теорией даже при сильном межчастичном взаимодействии $\lambda_e = 3$ и высоких объемных концентрациях образцов $\varphi = 0.1$ и 0.2 . для четного и нечетного случаев соответственно.

Установлено, что в слабых и умеренных полях увеличение числа гранул приводит к увеличению намагниченности МГЧ. Исключением является случай семи гранул, демонстрирующий высокую чувствительность к внешнему магнитному полю из-за особенностей своей архитектуры.

В разделе 3.5 описан метод оценки погрешности численного расчета кривой намагничивания. Учет особенностей системы при работе со статистическими данными позволил уменьшить величину среднеквадратичного отклонения на 61% и, достигнув погрешности $\approx 5\%$, добиться высокой точности метода при работе с рассматриваемыми системами.

Основное содержание главы опубликовано в работах [33, 34].

Глава 4. Разработанные программные комплексы

В данной главе приведены основные характеристики двух разработанных программных комплексов. Первый позволяет рассчитывать магнитные характеристики однодоменных обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, находящихся во внешнем магнитном поле, распределенных по объему произвольным образом либо размещенных в узлах простой кубической решетки для систем, представляющих собой сплошные среды. Второй позволяет моделировать МГЧ с фиксированным количеством и расположением гранул.

Первый программный комплекс был написан с помощью системы компьютерной алгебры Mathcad (версия: Mathcad 15), а второй с использованием языков программирования C++ (версия стандарта: ISO/IEC 14882:2011) и Fortran (версия стандарта: ISO/IEC 1539:1997). При написании кода второго комплекса использовалось процедурное программирование, характеризующийся линейным нисходящим подходом и отдельным рассмотрением данных и процедур как различных объектов. Процедурное программирование, основываясь на концепции вызова процедур, структурирует программу путем разделения ее на процедуры, содержащие последовательность шагов для выполнения определенных задач.

Работоспособность программных комплексов проверена в операционных системах Windows (10, 11) и Unix-системах (MacOS 12.6, 13.3).

4.1. Положение частиц в системе

На начальном этапе необходимо собрать информацию о положении всех рассматриваемых частиц. Данные вычисления осуществляет специальная подготовительная программа, в результате исполнения которой в текстовый файл записываются числовые значения координат всех частиц (для кубической решетки и случайного распределения). Пример работы алгоритма для кубической решётки представлен на рисунке 4.1.1.

```

1  PROGRAM
2  NX=10
3  N=NX*NX*NX
4  step = 1.0/NX
5  i=0
6  do x = 1 , NX
7      do y = 1 , NX
8          do z = 1 , NX
9              rx(i+1) = -0.5 + real(x-1)*step
10             ry(i+1) = -0.5 + real(y-1)*step
11             rz(i+1) = -0.5 + real(z-1)*step
12             i = i + 1
13         enddo
14     enddo
15 enddo

```

Рис. 4.1.1 – Алгоритм программы, записывающей данные о положении частиц.

На выходе генерируется файл формата *.txt* с данными о *X*-ой, *Y*-ой, *Z*-ой координатах частицы. Пример файла с выходными данными представлен на рисунке 4.1.2.

Input_Position.txt			
1	RX	RY	RZ
2	-5.000000	0.000000	0.000000
3	-0.507549	-0.838910	-0.196530
4	-4.000000	-3.000000	0.000000
5	0.773058	-0.612269	0.165852
6	-4.000000	-2.000000	-2.000000
7	0.200323	0.227985	0.952835
8	-4.000000	-2.000000	-1.000000
9	-0.941348	0.335528	-0.035842
10	-4.000000	-2.000000	0.000000

Рис. 4.1.2 – Пример файла содержащего выходные данные о положении частиц.

4.2. Расчёт термодинамических свойств системы неподвижных суперпарамагнитных феррочастиц, расположенных в узлах кубической решётки, находящихся под воздействием внешнего магнитного поля, направленного параллельно или перпендикулярно осям лёгкого намагничивания

4.2.1. Входные и выходные данные программного комплекса

На вход программе необходимо подать файл с набором данных, таких как параметр λ (lambda), описывающий интенсивность диполь-дипольных взаимодействий, параметр Ланжевена α (alpha), характеризующий величину статического магнитного поля, параметр магнитной анизотропии σ (sigma), восприимчивость Ланжевена χ_L (chi_l) и объемная концентрация φ (phi).

Пример файла «*Input_1.txt*», содержащего входные данные для первого комплекса представлен на рисунке 4.2.1.



1	2.000	lambda
2	1.000	alpha
3	5.000	sigma
4	1.250	chi_l
5	0.125	Phi

Рис. 4.2.1 – Пример файла содержащего входные данные для первого комплекса.

На выходе генерируется три файла формата *.txt* со статической намагниченностью M , магнитной восприимчивостью χ и теплоемкостью C_V . Примеры файлов с выходными данными для всех трех параметров представлены на рисунке (4.2.2).

Mq_Result.txt					CHI_Result.txt					Cv_Result.txt		
1	theta	Mx	My	Mz	1	theta	CHIx	CHIy	CHIz	1	sigma	Cv
2	0.0315	0.9666	0.9666	0.9666	2	0.0315	2.042	2.916	3.359	2	0	0.901
3	0.063	0.9665	0.9665	0.9665	3	0.063	2.038	2.907	3.346	3	0.5	0.8827
4	0.0945	0.9662	0.9662	0.9662	4	0.0945	2.031	2.891	3.325	4	1	0.8489
5	0.126	0.9658	0.9658	0.9658	5	0.126	2.022	2.869	3.295	5	1.5	0.8093
6	0.1575	0.9654	0.9654	0.9653	6	0.1575	2.009	2.841	3.257	6	2	0.7663
7	0.189	0.9648	0.9648	0.9648	7	0.189	1.995	2.807	3.211	7	2.5	0.7245
8	0.2205	0.9641	0.9641	0.9641	8	0.2205	1.978	2.767	3.158	8	3	0.6913
9	0.252	0.9633	0.9633	0.9633	9	0.252	1.958	2.722	3.097	9	3.5	0.6759
10	0.2835	0.9625	0.9624	0.9624	10	0.2835	1.937	2.671	3.029	10	4	0.6876
11	0.315	0.9615	0.9615	0.9614	11	0.315	1.913	2.615	2.954	11	4.5	0.7325
12	0.3465	0.9605	0.9604	0.9604	12	0.3465	1.887	2.555	2.873	12	5	0.8104
13	0.378	0.9593	0.9593	0.9592	13	0.378	1.859	2.49	2.786	13	5.5	0.9143
14	0.4095	0.9581	0.9581	0.958	14	0.4095	1.829	2.421	2.693	14	6	1.031
15	0.441	0.9569	0.9568	0.9567	15	0.441	1.798	2.348	2.597	15	6.5	1.147
16	0.4725	0.9555	0.9555	0.9554	16	0.4725	1.766	2.273	2.496	16	7	1.251
17	0.504	0.9541	0.9541	0.954	17	0.504	1.732	2.194	2.391	17	7.5	1.334
18	0.5355	0.9527	0.9526	0.9525	18	0.5355	1.696	2.113	2.284	18	8	1.394
19	0.567	0.9512	0.9511	0.951	19	0.567	1.66	2.031	2.175	19	8.5	1.433
20	0.5985	0.9497	0.9496	0.9495	20	0.5985	1.623	1.947	2.065	20	9	1.454

(а)
(б)
(в)

Рис. 4.2.2 – Примеры файлов содержащих выходные данные первого комплекса о статической намагниченности M (а), магнитной восприимчивости χ (б) и теплоемкости C_V (в).

4.2.2. Основные функции программного комплекса

Данный программный комплекс создан для расчета значений статической намагниченности, магнитной восприимчивости и теплоемкости с помощью разложения свободной энергии Гельмгольца в классический вириальный ряд с точностью до второго коэффициента и вычисления. Программа позволяет сравнивать результаты компьютерного и численного моделирования для систем неподвижных феррочастиц, помещенных во внешнее магнитное поле, направленное параллельно, перпендикулярно осям легкого намагничивания или выровненное.

На рисунке (4.2.3) изображена блок-схема алгоритма первого программного комплекса.

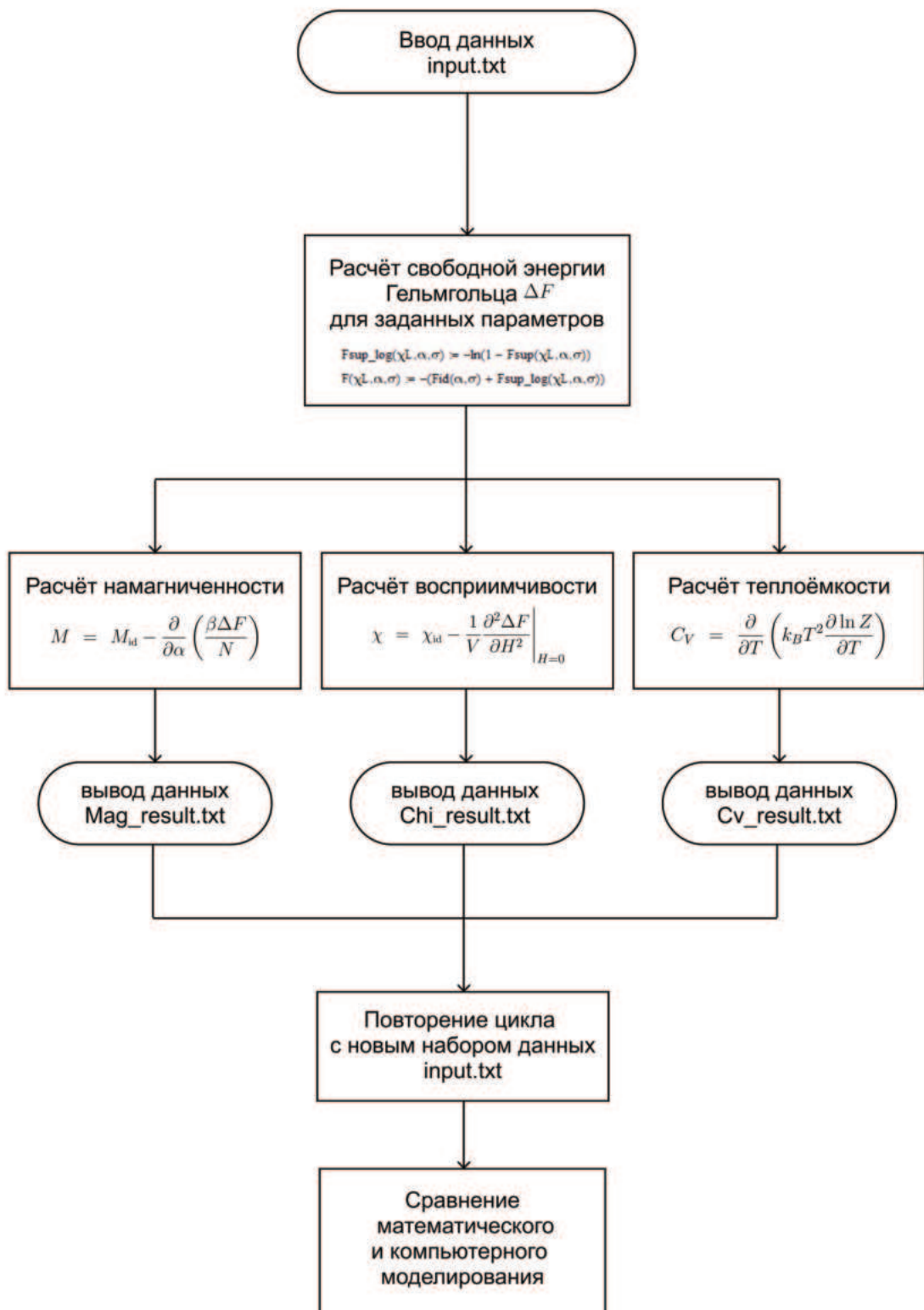


Рис. 4.2.3 – Блок-схема алгоритма первого программного комплекса.

4.3. Расчёт статической намагниченности многогранульных частиц с ограниченным числом гранул

4.3.1. Входные и выходные данные программного комплекса

На вход программе необходимо подать файл с набором данных, таких как параметр λ (lambda), описывающий интенсивность диполь-дипольных взаимодействий, параметр Ланжевена α (alpha), характеризующий величину статического магнитного поля, кратчайшее расстояние между соседними гранулами l , нормированное на их диаметр x (period grid), определяющее объемную концентрацию образца φ и ряд параметров определяющих особенности компьютерного моделирования (alphabox, nblock, nstep, ncalc, dphimax, seed1, seed2).

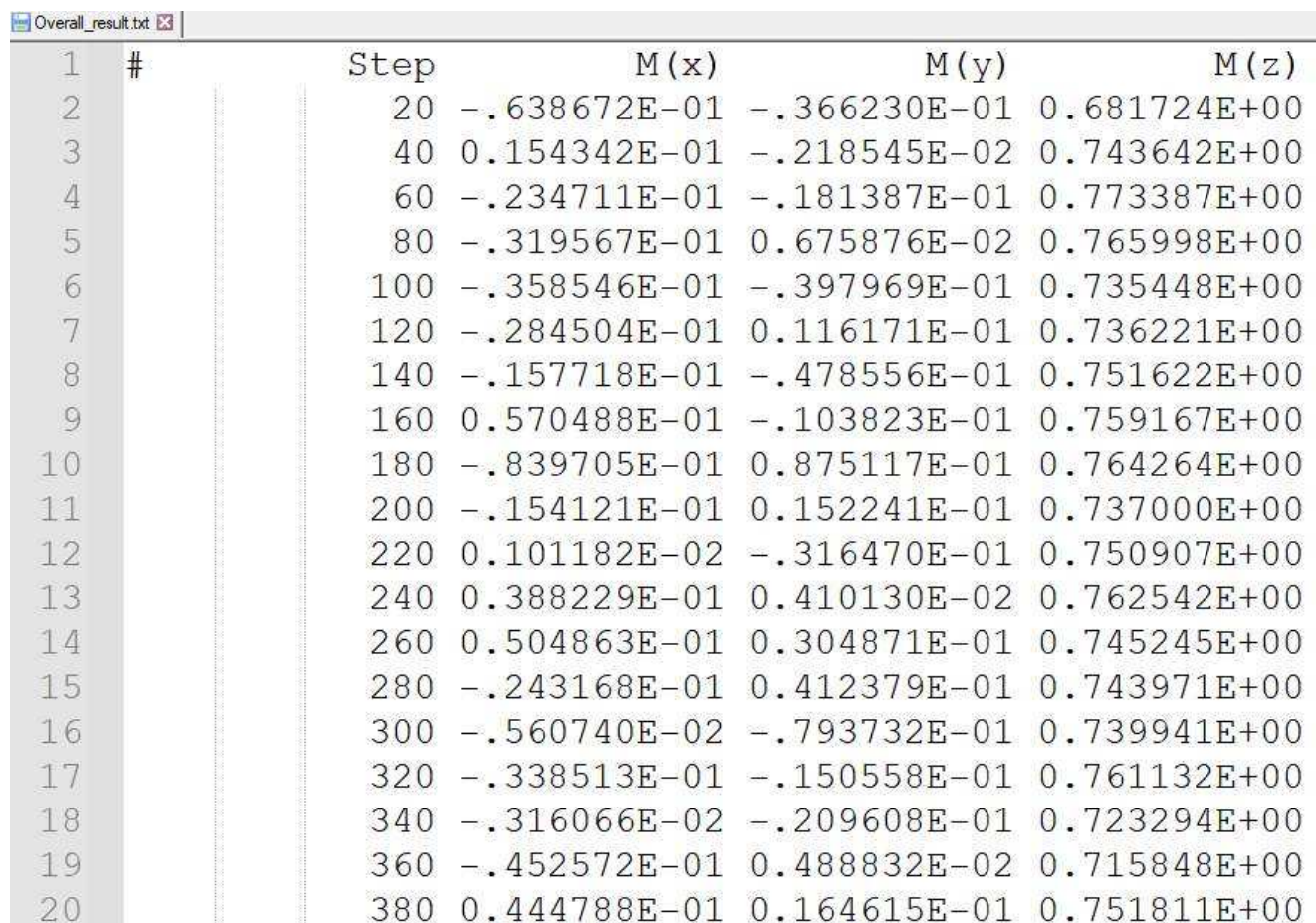
Пример файла «*Input_2.txt*», содержащего входные данные для второго комплекса представлен на рисунке (4.3.1).



1	1.00	lambda
2	2.00	field
3	2.1	period_grid
4	5.6	alphabox
5	5000	nblock
6	1000	nstep
7	20	ncalc
8	1.50	dphimax
9	8900	seed1
10	7200	seed2

Рис. 4.3.1 – Пример файла содержащего входные данные для второго комплекса.

На выходе генерируется файл формата *.txt* со статической намагниченностью M . Пример файла с выходными данными представлен на рисунке (4.3.2).



1	#	Step	M(x)	M(y)	M(z)
2		20	-.638672E-01	-.366230E-01	0.681724E+00
3		40	0.154342E-01	-.218545E-02	0.743642E+00
4		60	-.234711E-01	-.181387E-01	0.773387E+00
5		80	-.319567E-01	0.675876E-02	0.765998E+00
6		100	-.358546E-01	-.397969E-01	0.735448E+00
7		120	-.284504E-01	0.116171E-01	0.736221E+00
8		140	-.157718E-01	-.478556E-01	0.751622E+00
9		160	0.570488E-01	-.103823E-01	0.759167E+00
10		180	-.839705E-01	0.875117E-01	0.764264E+00
11		200	-.154121E-01	0.152241E-01	0.737000E+00
12		220	0.101182E-02	-.316470E-01	0.750907E+00
13		240	0.388229E-01	0.410130E-02	0.762542E+00
14		260	0.504863E-01	0.304871E-01	0.745245E+00
15		280	-.243168E-01	0.412379E-01	0.743971E+00
16		300	-.560740E-02	-.793732E-01	0.739941E+00
17		320	-.338513E-01	-.150558E-01	0.761132E+00
18		340	-.316066E-02	-.209608E-01	0.723294E+00
19		360	-.452572E-01	0.488832E-02	0.715848E+00
20		380	0.444788E-01	0.164615E-01	0.751811E+00

Рис. 4.3.2 – Пример файла содержащего выходные данные второго комплекса о статической намагниченности M .

4.3.2. Основные функции программного комплекса

Данный программный комплекс создан для моделирования многогранульных частиц с фиксированным количеством и расположением гранул, а также фиксированной объемной концентрацией образца. Информация о точном количестве гранул и их положении позволяет визуализировать внешний вид частицы. Комплекс позволяет сравнивать намагниченность многогранульных частиц, полученную с помощью компьютерного моделирования и аналитических выражений при различных параметрах системы.

На рисунке (4.3.3) изображена блок-схема алгоритма второго программного комплекса.



Рис. 4.3.3 – Блок-схема алгоритма второго программного комплекса.

4.4. Основные результаты главы

Программные комплексы были созданы для расчета магнитных характеристик однодоменных обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, находящихся во внешнем магнитном поле, распределенных по объему произвольным образом либо размещенных в узлах простой кубической решетки для систем, представляющих собой сплошные среды и моделирования МГЧ содержащих ограниченное количество гранул.

В данной главе описаны входные и выходные данных программных комплексов и способы работы с ними. Продемонстрирована логика функционирования программных комплексов и обозначены типы данных, применяемые в них. Программные комплексы реализованы в системе компьютерной алгебры Mathcad и на языках программирования C++ и Fortran. Оптимизация программного кода позволила достаточно быстро получать результаты для систем с любыми параметрами.

Численные решения, представленные в диссертации, получены с помощью описанных в данной главе комплексов программ.

Представленные в главе программные комплексы были зарегистрированы в Федеральной службе по интеллектуальной собственности Роспатент [35, 36]. Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ приведены в Приложениях А и Б.

Заключение

Основные результаты диссертации могут быть сформулированы следующим образом:

- Проведено математическое моделирование магнитных и термодинамических свойств магнитоактивных композитов, которое основывается на изучении ансамблей однодоменных неподвижных суперпарамагнитных частиц. В модели предполагается, что частицы имеют магнитную анизотропию, а оси легкого намагничивания выровнены и направлены под произвольным углом к статическому магнитному полю. Модель учитывает межчастичные диполь-дипольные взаимодействия и различное расположение частиц в объеме: произвольное и в узлах простой кубической решетки.
- Выведены аналитические выражения свободной энергии Гельмгольца для случайного распределения частиц по объему и кубической решетки с точностью до U_d^2 для случая, когда оси легкого намагничивания направлены под углом θ к внешнему магнитному полю. Исследована сходимость рядов, определяющих свободную энергию Гельмгольца. Преобразование свободной энергии к логарифмическому виду позволило сделать функцию менее чувствительной к ограничению числа членов ряда и расширить область применимости развиваемой теории до умеренных плотностей наночастиц в образце.

- На основе полученных формул для свободной энергии Гельмгольца исследованы магнитная восприимчивость, статическая намагниченность и теплоемкость рассматриваемых систем. Отличительной особенностью кубической решётки стала зависимость свойств от угла ϕ . Для намагниченности и теплоёмкости системы с произвольным расположением частиц и кубической решетки наблюдалась общая тенденция: в слабом поле $\alpha = 1$ вклад диполь-дипольных взаимодействий был особенно заметен, но увеличение напряженности поля до $\alpha = 5$ и 20 приводило к преобладанию энергии Зеймана над энергией диполь-дипольного взаимодействия и нивелировало отличия от идеальной системы.
- Аналитические выражения, описывающие статическую намагниченность крупных ансамблей обездвиженных суперпарамагнитных наночастиц адаптированы для вычисления магнитного отклика частиц с ограниченным количеством гранул, расположенных в узлах простой кубической решётки (МГЧ).
- Проведено компьютерное моделирование (метод Монте-Карло) магнитных свойств МГЧ с кубической структурой. Установлено, что намагниченность МГЧ чувствительна к числу гранул и не превосходит намагниченности, предсказанной одночастичной моделью Ланжевена. Данная особенность объясняется формированием компенсирующих ориентационных структур магнитных моментов гранул, происходящим под влиянием диполь-дипольных взаимодействий. Тем не менее в слабых и умеренных полях увеличение числа гранул приводит к увеличению намагниченности МГЧ. Исключением является случай семи гранул, демонстрирующий высокую чувствительность к внешнему магнитному полю из-за особенностей своей архитектуры.
- Проведена оценка погрешности результатов компьютерного моделирования. Учет особенностей системы при работе со статистическими данными позволил уменьшить величину среднеквадратичного отклонения на 61% и, достигнув погрешности $\approx 5.6\%$, добиться высокой точности метода при работе с намагниченностью МГЧ с кубической структурой.

- Результаты компьютерного моделирования использовались при тестировании адаптированной теории для намагниченности МГЧ. Теоретические подходы, развитые во второй главе и адаптированные для небольшого числа наночастиц, могут точно описывать свойства МГЧ с малым числом гранул при $\varphi \leq 0.10$ и $\lambda_e \leq 1$. Увеличение числа гранул в частице приводит к повышению точности теории, и системы содержащие более 100 гранул могут успешно описываться полученной теорией даже при сильном межчастичном взаимодействии $\lambda_e = 3$ и высоких объемных концентрациях образцов $\varphi = 0.1$ и 0.2 . для четного и нечетного случаев соответственно.
- Разработаны программные комплексы, позволяющие численно моделировать магнитные и термодинамические характеристики ансамбля суперпарамагнитных взаимодействующих обездвиженных частиц, находящихся под действием статического магнитного поля.

Рекомендации и дальнейшие перспективы разработки темы.

Разработанные теоретические подходы, позволяющие описывать магнитные и термодинамические 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-дипольных взаимодействий могут быть включены теории более высокого порядка, что даст возможность увеличить область применимости и позволит описать свойства высококонцентрированных систем.

Литература

1. Kreissl, P. Frequency-dependent magnetic susceptibility of magnetic nanoparticles in a polymer solution: a simulation study / P. Kreissl, C. Holm, R. Weeber // *Soft Matter*. — 2021. — V. 17. — P. 174–183.
2. Jun, Y.-W. Nanoparticles of Magnetite in Polymer Matrices: Synthesis and Properties / Y.-W. Jun, J.-W. Seo, J. Cheon // *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials*. — 2008. — V. 41, N. 2. — P. 125–130.
3. Р., Розенцвейг. Феррогидродинамика / Розенцвейг Р. — Мир, 1989. — 357 с.
4. 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.
5. 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.
6. 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.
7. Borin, D. Magneto-mechanical properties of elastic hybrid composites / D. Borin, G. Stepanov. — 2021. — 369-390 P.
8. Multifunctional Magnetic Elastomers with Tunable Properties for Smart Applications / T. S. H. Ng, M. S. K. Dhillon, H. Wang, Y. Yang // *Advanced Functional Materials*. — 2023. — V. 33, N. 15. — P. 2210191.

9. 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.
10. 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.
11. The damping device based on magnetoactive elastomer / D. Borin, G. Stepanov, V. Mikhailov, A. Gorbunov // Magnetohydrodynamics. — 2007. — V. 43, N. 4. — P. 437–443.
12. Wang, Y. Magnetic Nanoparticles for MRI Contrast Agents / Y. Wang, H. Yang // Advanced Functional Materials. — 2012. — V. 22, N. 18. — P. 3692–3701.
13. Ma, P. X. Scaffolding in Tissue Engineering / P. X. Ma, J. H. Elisseeff // Journal of Biomedical Materials Research. — 2006. — V. 78A, N. 1. — P. 1–5.
14. Kim, K. J. Magnetically Actuated Soft Artificial Muscles / K. J. Kim, S. H. Lee // Soft Robotics. — 2013. — V. 1, N. 1. — P. 56–63.
15. Maffei, A. Magnetic Nanoparticles for Targeted Drug Delivery in Cancer Therapy / A. Maffei, V. Pani // Nano Today. — 2019. — V. 30. — P. 100820.
16. Doe, John. Multicore Particles for Targeted Drug Delivery: Challenges and Opportunities / John Doe, Jane Smith // Journal of Nanomedicine. — 2023. — V. 15, N. 2. — P. 123–134.
17. Smith, Jane. Magnetic Multicore Nanoparticles in Therapeutic Applications: A Comprehensive Review / Jane Smith, Alex Brown // International Journal of Biomedical Engineering. — 2023. — V. 12, N. 1. — P. 56–78.
18. Brown, Alex. Multicore Particle-Based Biosensors: Design and Applications in Biomedical Diagnostics / Alex Brown, Emily Johnson // Sensors and Actuators B: Chemical. — 2023. — V. 200. — P. 901–910.

19. 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.
20. Coffey, W.T. On the theory of Debye and Néel relaxation of single domain ferromagnetic particles / W.T. Coffey, P.J. Clegg, Y.P. Kalmykov // *Advances in Chemical Physics*. — 1993. — V. 83. — P. 263–464.
21. 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.
22. 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, N. 3. — P. 032605.
23. Weakening of magnetic response experimentally observed for ferrofluids with strongly interacting magnetic nanoparticles / A.V. Lebedev, S.S. Kantorovich, A.O. Ivanov et al. // *Journal of Molecular Liquids*. — 2019. — V. 277. — P. 762–768.
24. Temperature-dependent dynamic correlations in suspensions of magnetic nanoparticles in a broad range of concentrations: A combined experimental and theoretical study / A. Ivanov, S. Kantorovich, V. Zverev et al. // *Phys. Chem. Chem. Phys.* — 2016. — V. 18.
25. Hajdu, J. R. Balescu: *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, Chichester, New York, Sydney, Toronto 1975, 742 Seiten, Preis: £ 16.20. / J. Hajdu // *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*. — 1977. — V. 81, N. 2. — P. 240–241. — Mode of access <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/bbpc.19770810244>.
26. Joslin, C.G. The third dielectric and pressure virial coefficients of dipolar hard sphere fluids / C.G. Joslin // *Molecular Physics*. — 1981. — V. 42, N. 6. — P. 1507–1518. — Mode of access <https://doi.org/10.1080/00268978100101111>.

27. Wertheim, M. S. Exact Solution of the Mean Spherical Model for Fluids of Hard Spheres with Permanent Electric Dipole Moments / M. S. Wertheim // The Journal of Chemical Physics. — 1971. — V. 55, N. 9. — P. 4291–4298. — Mode of access <https://doi.org/10.1063/1.1676751>.
28. Kalikmanov, Vitaly I. Statistical thermodynamics of ferrofluids / Vitaly I. Kalikmanov // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 1992. — V. 183, N. 1. — P. 25–50. — Mode of access <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037843719290176Q>.
29. Buyevich, Yu.A. Statistical thermodynamics of ferrocolloids / Yu.A. Buyevich, A.O. Ivanov, A.Yu. Zubarev // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 1990. — V. 85, N. 1. — P. 33–36. — Mode of access <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/030488539090011E>.
30. The thermodynamic properties of soft magnetic materials containing superparamagnetic nanoparticles frozen in the nodes of the regular cubic lattice / Anna Solovyova, Sergey Sokolsky, Ekaterina Elfimova, Alexey Ivanov // Journal of Nanoparticle Research. — 2021. — 07. — V. 23.
31. Anna Solovyova, Sergey Sokolsky. The ensemble of immobilized superparamagnetic nanoparticles: the role of the spatial distribution in the sample / Sergey Sokolsky Anna Solovyova, Ekaterina Elfimova // Soft Materials. — 2022. — V. 20, N. sup1. — P. S1–S9. — Mode of access <https://doi.org/10.1080/1539445X.2021.1957933>.
32. Sokolsky, Sergey. Influence of the interparticle interaction of the ensemble of immobilized superparamagnetic ferroparticles on the static, magnetic and thermodynamic properties of the system / Sergey Sokolsky // Computational Continuum Mechanics. — 2021. — sep. — V. 14, N. 3. — P. 264–277. — Mode of access <https://journal.permsc.ru/index.php/ccm/article/view/CCMv14n3a22>.
33. Orientation texturing and static magnetic response of multi-core particle containing limited number of superparamagnetic nanocores / A Yu Solovyova, S A Sokolsky, A O Ivanov, E A Elfimova // Smart Materials and Struc-

- tures. — 2023. — sep. — V. 32, N. 11. — P. 115005. — Mode of access <https://dx.doi.org/10.1088/1361-665X/acf9d1>.
34. Effect of the number of grains on the magnetization of multi-core particle / S. A. Sokolsky, A. Yu. Solovyova, E. A. Elfimova, A. O. Ivanov // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. — 2024. — V. 88, N. 10. — P. 1573–1578.
 35. Расчёт термодинамических свойств системы неподвижных суперпарамагнитных феррочастиц, расположенных в узлах кубической решётки, находящихся под воздействием внешнего магнитного поля, направленного параллельно или перпендикулярно осям лёгкого намагничивания: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2022662616 / Владимир Сергеевич Зверев, Анна Юрьевна Соловьева, Сергей Александрович Сокольский, Екатерина Александровна Елфимова // Федеральный институт промышленной собственности. — 2022.
 36. Сокольский, Сергей Александрович. Расчёт статической намагниченности многогранульных частиц с ограниченным числом гранул: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2023682896 / Сергей Александрович Сокольский // Федеральный институт промышленной собственности. — 2023.
 37. Сокольский, С.А. Моделирование систем неподвижных феррочастиц, помещённых во внешнее магнитное поле / С.А. Сокольский, А.Ю. Соловьева, Е.А. Елфимова // XX Плесская конференция по нанодисперсным магнитным жидкостям. — Плес, Россия, 2022. — сентябрь 13–16. — P. 57–61.
 38. Статический магнитный отклик многогранульной частицы с различным числом гранул / С.А. Сокольский, А.Ю. Соловьева, Е.А. Елфимова, Иванов А.О. // VIII Международная Ставропольская конференция по магнитным коллоидам. — Ставрополь, Россия, 2023. — сентябрь 10–14. — P. 111–117.

39. Сокольский, С.А. Ансамбль неподвижных суперпарамагнитных феррочастиц: роль пространственного расположения / С.А. Сокольский, А.Ю. Соловьева, Е.А. Елфимова // VII Международная Ставропольская конференция по магнитным коллоидам. — Ставрополь, Россия, 2021. — сентябрь 5–9. — Р. 165–171.
40. Sokolsky, S. Mathematical and computer modeling of the systems of the immobilized particles located in the nodes of the simple cubic lattice or distributed randomly / S. Sokolsky, A. Solovyova, E. Elfimova // VIII Euro-Asian Symposium: Trends in MAGnetism. — Kazan, Russia, 2022. — August 22–26. — Р. 411–413.
41. Сокольский, С.А. Межчастичное взаимодействие в ансамбле неподвижных суперпарамагнитных феррочастиц / С.А. Сокольский, А.Ю. Соловьева, Е.А. Елфимова // XXII Зимняя школа по механике сплошных сред. — Пермь, Россия, 2021. — март 22–26. — Р. 305.
42. Сокольский, С.А. Термодинамические и магнитные свойства ансамбля неподвижных суперпарамагнитных феррочастиц / С.А. Сокольский, А.Ю. Соловьева, Е.А. Елфимова // XXI Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества. — Екатеринбург, Россия, 2021. — март 18–25. — Р. 104.
43. Сокольский, С.А. Математическое и компьютерное моделирование системы обездвиженных феррочастиц, расположенных в узлах правильной кубической решетки / С.А. Сокольский, А.Ю. Соловьева, Е.А. Елфимова // Математическое и компьютерное моделирование свойств смарт-материалов с международным участием. — Екатеринбург, Россия, 2020. — ноябрь 19–21. — Р. 5.
44. Анализ микроструктуры феррожидкости по магнитным измерениям / Соловьева А.Ю., Сокольский С.А., Елфимова Е.А., Хесс М. // Математическое моделирование свойств магнитных нанокмпозитов с международным участием. — Екатеринбург, Россия, 2020. — октябрь 29–31. — Р. 9.

45. Sokolsky, S. Theoretical study of the immobilized superparamagnetic ferroparticles / S. Sokolsky, A. Solovyova, E. Elfimova // Nanotechnology & Nanomaterials - Coalesce Research Group. — 2020. — July 29–30. — P. 25.
46. Borin, D. Hybrid magnetoactive elastomer with a soft matrix and mixed powder / D. Borin, G. Stepanov, E. Dohmen // Archive of Applied Mechanics. — 2019. — V. 89, N. 1. — P. 105–117.
47. Magnetically tunable transparency for magnetorheological elastomer films consisting of polydimethylsiloxane and Fe₃O₄ nanoparticles / Qiushu Zhang, Bei Peng, Hui Li, Jiangtao Sun // Soft Materials. — 2018. — 7. — V. 16. — P. 220–227.
48. Effect of PAA-coated magnetic nanoparticles on the performance of PVA-based hydrogels developed to be used as environmental remediation devices / Laura M. Sanchez, Daniel G. Actis, Jimena S. Gonzalez et al. // Journal of Nanoparticle Research. — 2019. — 3. — V. 21.
49. Giant magnetoelastic effect in soft systems for bioelectronics / Y. Zhou, X. Zhao, J. Xu et al. // Nature Materials. — 2021. — V. 20, N. 12. — P. 1670–1676.
50. A bioinspired multilegged soft millirobot that functions in both dry and wet conditions / H. Lu, M. Zhang, Y. Yang et al. // Nature Communications. — 2018. — V. 9, N. 1. — P. 3944.
51. Magnetoactive elastomer as an element of a magnetic retina fixator / L.A. Makarova, T.A. Nadzharyan, Yu.A. Alekhina et al. // Smart Materials and Structures. — 2017. — V. 26, N. 9. — P. 095054.
52. Magnetic-field-controlled mechanical behavior of magneto-sensitive elastomers in applications for actuator and sensor systems / T.I. Becker, V. Böhm, J. Chavez Vega et al. // Archive of Applied Mechanics. — 2019. — V. 89, N. 1. — P. 133–152.
53. Novel highly elastic magnetic materials for dampers and seals: Part I. Preparation and characterization of the elastic materials / S. Abramchuk, E. Kra-

- marenko, G. Stepanov et al. // *Polymers for Advanced Technologies*. — 2007. — V. 18, N. 11. — P. 883–890.
54. Dutz, Silvio. Magnetic nanoparticle heating and heat transfer on a microscale: Basic principles, realities and physical limitations of hyperthermia for tumour therapy / Silvio Dutz, Rudolf Hergt // *International Journal of Hyperthermia*. — 2013. — V. 29, N. 8. — P. 790–800. — Mode of access <https://doi.org/10.3109/02656736.2013.822993>. PMID: 23968194.
 55. Zubarev, A. Yu. Magnetic hyperthermia in a system of ferromagnetic particles, frozen in a carrier medium: Effect of interparticle interactions / A. Yu. Zubarev // *Phys. Rev. E*. — 2018. — Sep. — V. 98. — P. 032610. — Mode of access <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.98.032610>.
 56. Zubarev, A. Yu. Magnetic hyperthermia in a system of immobilized magnetically interacting particles / A. Yu. Zubarev // *Phys. Rev. E*. — 2019. — Jun. — V. 99. — P. 062609. — Mode of access <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.99.062609>.
 57. Increase of magnetic hyperthermia efficiency due to optimal size of particles: theoretical and experimental results / L. H. Nguyen, V. T.K. Oanh, P. H. Nam et al. // *Journal of Nanoparticle Research*. — 2020. — 9. — V. 22.
 58. Biogenic synthesis enhanced structural, morphological, magnetic and optical properties of zinc ferrite nanoparticles for moderate hyperthermia applications / Samson O. Aisida, Awais Ali, Oluwole E. Oyewande et al. // *Journal of Nanoparticle Research*. — 2021. — 2. — V. 23.
 59. Dormann, J.L. Superparamagnetic Relaxation in Magnetic Nanoparticles / J.L. Dormann, D. Fiorani, E. Tronc // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 1999.
 60. Ruta, S. Understanding Superparamagnetic Relaxation Mechanisms in Magnetic Nanoparticles / S. Ruta, A. Cervellino, P.M. Derlet // *Scientific Reports*. — 2014.

61. Goya, G.F. Superparamagnetic Nanoparticles: From Capping to Relaxation / G.F. Goya, T.S. Berquo, F.C. Fonseca // Journal of Applied Physics. — 1999.
62. Dodd, A.C. Magnetic relaxation in nanoparticles: a review / A.C. Dodd et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2020. — V. 32, N. 21. — P. 213001.
63. Zhi, N. L. Size-dependent magnetic relaxation of iron oxide nanoparticles / N. L. Zhi et al. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2018. — V. 460. — P. 170–176.
64. Toledano, M. E. The role of magnetic field in the relaxation of ferromagnetic nanoparticles / M. E. Toledano et al. // Applied Physics Letters. — 2019. — V. 114, N. 15. — P. 152401.
65. Zhang, H. Magnetic relaxation dynamics of nanoparticles: Effects of temperature and applied magnetic field / H. Zhang et al. // Nano Letters. — 2021. — V. 21, N. 3. — P. 1200–1207.
66. Ahmad, Z. Recent Advances in the Synthesis of Magnetic Nanocomposites and Their Environmental Applications / Z. Ahmad, M.A. Siddiqui // Nanoscale Research Letters. — 2018.
67. Jiao, H. Tailoring the Microstructure and Magnetic Properties of Nanocomposites / H. Jiao, J. Yu // Materials Today. — 2020.
68. Gupta, A. Magnetic Nanocomposites: Synthesis, Characterization, and Applications / A. Gupta, A. Gupta // Journal of Nanoscience and Nanotechnology. — 2019.
69. Socoliuc, V. Determination of the statistics of magnetically induced particle chains in concentrated ferrofluids / V. Socoliuc, L.B. Popescu // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2020. — V. 502. — P. 166532. — Mode of access <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885319327027>.
70. Elkady, A.S. On the self-assembly of net-like nanostructures in ferrofluids / A.S. Elkady, L. Iskakova, A. Zubarev // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2015. — V. 428. — P. 257–265.

71. Pshenichnikov, A. F. Magnetophoresis of particles and aggregates in concentrated magnetic fluids / A. F. Pshenichnikov, A. S. Ivanov // *Phys. Rev. E*. — 2012. — Nov. — V. 86. — P. 051401. — Mode of access <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.86.051401>.
72. Bad neighbour, good neighbour: how magnetic dipole interactions between soft and hard ferrimagnetic nanoparticles affect macroscopic magnetic properties in ferrofluids / Niéli Daffé, Jovana Zečević, Kalliopi N. Trohidou et al. // *Nanoscale*. — 2020. — V. 12. — P. 11222–11231. — Mode of access <http://dx.doi.org/10.1039/D0NR02023K>.
73. Ilg, Patrick. Equilibrium magnetization and magnetization relaxation of multicore magnetic nanoparticles / Patrick Ilg // *Phys. Rev. B*. — 2017. — Jun. — V. 95. — P. 214427. — Mode of access <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.214427>.
74. Pshenichnikov, Alexander F. Self-organization of magnetic moments in dipolar chains with restricted degrees of freedom / Alexander F. Pshenichnikov, Andrey A. Kuznetsov // *Phys. Rev. E*. — 2015. — Oct. — V. 92. — P. 042303. — Mode of access <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.92.042303>.
75. Solovyova, Anna Yu. Interparticle correlations in the simple cubic lattice of ferroparticles: Theory and computer simulations / Anna Yu. Solovyova, Andrey A. Kuznetsov, Ekaterina A. Elfimova // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. — 2020. — V. 558. — P. 124923. — Mode of access <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437120304775>.
76. Transverse magneto-optical anisotropy in bidisperse ferrofluids with long range particle correlations / E.A. Elfimova, A.O. Ivanov, L.B. Popescu, V. Socoliuc // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2017. — V. 431. — P. 54–58.
77. Ivanov, A.O. Theory of the dynamic magnetic susceptibility of ferrofluids / A.O. Ivanov, P.J. Camp // *Physical Review E*. — 2018. — V. 98, N. 5. — P. 050602.

78. Modified mean-field theory of the magnetic properties of concentrated, high-susceptibility, polydisperse ferrofluids / Anna Yu. Solovyova, Ekaterina A. Elfimova, Alexey O. Ivanov, Philip J. Camp // Phys. Rev. E. — 2017. — Nov. — V. 96. — P. 052609. — Mode of access <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.96.052609>.
79. Minina, Elena S. Pressure and compressibility factor of bidisperse magnetic fluids / Elena S Minina, Ronald Blaak, Sofia S Kantorovich // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2018. — mar. — V. 30, N. 14. — P. 145101. — Mode of access <https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/aab137>.
80. Szalai, I. Comparison between theory and simulations for the magnetization and the susceptibility of polydisperse ferrofluids / I Szalai, S Nagy, S Dietrich // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2013. — oct. — V. 25, N. 46. — P. 465108. — Mode of access <https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/25/46/465108>.
81. Structural characterization of concentrated aqueous ferrofluids / A.V. Nagorny, V. Socoliuc, V.I. Petrenko et al. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2020. — V. 501. — P. 166445. — Mode of access <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885319327726>.
82. Dynamic susceptibility of a concentrated ferrofluid: The role of interparticle interactions / Alexander V. Lebedev, Victor I. Stepanov, Andrey A. Kuznetsov et al. // Phys. Rev. E. — 2019. — Sep. — V. 100. — P. 032605. — Mode of access <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.100.032605>.
83. Linke, J M. Anisotropy of the magnetoviscous effect in a ferrofluid with weakly interacting magnetite nanoparticles / J M Linke, S Odenbach // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2015. — apr. — V. 27, N. 17. — P. 176001. — Mode of access <https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/27/17/176001>.
84. Pousaneh, Faezeh. Kinetic Theory and Shear Viscosity of Dense Dipolar Hard Sphere Liquids / Faezeh Pousaneh, Astrid S. de Wijn // Phys. Rev. Lett. — 2020. — May. — V. 124. — P. 218004. — Mode of access <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.124.218004>.

85. Yan, M. Growth mechanism of nanostructured superparamagnetic rods obtained by electrostatic co-assembly / M. Yan, J. Fresnais, J.-F. Berret // *Soft Matter*. — 2010. — V. 6. — P. 1997–2005.
86. Rotational diffusion of magnetic nickel nanorods in colloidal dispersions / A Günther, P Bender, A Tschöpe, R Birringer // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2011. — V. 23, N. 32. — P. 325103.
87. Nakade, M. Synthesis and properties of ellipsoidal hematite/silicone core-shell particles / M. Nakade, T. Ikeda, M. Ogawa // *Journal of Materials Science*. — 2007. — V. 42, N. 13. — P. 4815–4823.
88. Self-assembly of charged colloidal cubes / M. Rosenberg, F. Dekker, J. G. Donaldson et al. // *Soft Matter*. — 2020. — V. 16. — P. 4451–4461.
89. Perovskite-type superlattices from lead halide perovskite nanocubes / I. Cherniukh, G. Rainò, T. Stöferle et al. // *Nature*. — 2021. — V. 593, N. 7860. — P. 535–542.
90. Structural diversity in iron oxide nanoparticle assemblies as directed by particle morphology and orientation / S. Disch, E. Wetterskog, R. P. Hermann et al. // *Nanoscale*. — 2013. — V. 5. — P. 3969–3975.
91. Fatty Acid Salts as Stabilizers in Size- and Shape-Controlled Nanocrystal Synthesis: The Case of Inverse Spinel Iron Oxide / M. V. Kovalenko, M. I. Bodnarchuk, R. T. Lechner et al. // *Journal of the American Chemical Society*. — 2007. — V. 129, N. 20. — P. 6352–6353.
92. Ahniyaz, A. Magnetic field-induced assembly of oriented superlattices from maghemite nanocubes / A. Ahniyaz, Y. Sakamoto, L. Bergström // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. — 2007. — V. 104, N. 45. — P. 17570–17574.
93. Gupta, A. Magnetic nanoparticles in polymer nanocomposites: fabrication, characterization and applications / A. Gupta, S. Singh, R.K. Kotnala // *Materials Chemistry and Physics*. — 2017.

94. The preparation of magnetic nanoparticles for applications in biomedicine / Pedro Tartaj, Maria del Puerto Morales, Sabino Veintemillas-Verdaguer et al. // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2003. — 07. — V. 36. — P. R182–R197.
95. Frickel, N. Magneto-mechanical coupling in $CoFe_2O_4$ -linked PAAm ferrohydrogels / N. Frickel, R. Messing, A. M. Schmidt // J. Mater. Chem. — 2011. — V. 21. — P. 8466–8474.
96. Cobalt Ferrite Nanoparticles as Multifunctional Cross-Linkers in PAAm Ferrohydrogels / R. Messing, N. Frickel, L. Belkoura et al. // Macromolecules. — 2011. — V. 44, N. 8. — P. 2990–2999.
97. Ilg, P. Stimuli-responsive hydrogels cross-linked by magnetic nanoparticles / P. Ilg // Soft Matter. — 2013. — V. 9. — P. 3465–3468.
98. Magnetic Field-Responsive Smart Polymer Composites / G. Filipcsei, I. Csetneki, A. Szilágyi, M. Zrínyi // Advances in Polymer Science. — 2007. — V. 206. — P. 137–189.
99. Boczkowska, A. Microstructure and Properties of Magnetorheological Elastomers / A. Boczkowska, S. Awietjan // Advanced Elastomers. — 2012.
100. Effect of alignment of easy axes on dynamic magnetization of immobilized magnetic nanoparticles / T. Yoshida, Y. Matsugi, N. Tsujimura et al. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2017. — V. 427, N. 7. — P. 162–167.
101. Size and doping effects on the improvement of the low-temperature magnetic properties of magnetically aligned cobalt ferrite nanoparticles / P. Tancredi, P.C. Rivas-Rojas, O. Moscoso-Londoño et al. // Journal of Alloys and Compounds. — 2022. — V. 894. — P. 162432.
102. Yoshida, T. (Invited) Biological Applications of Magnetic Nanoparticles for Magnetic Immunoassay and Magnetic Particle Imaging / T. Yoshida, T. Sasayama, K. Enpuku // ECS Transactions. — 2016. — V. 75, N. 2. — P. 39–47.

103. Theory of static magnetization of magnetopolymer composites: The second virial approximation / E. A. Elfimova, L. Yu. Iskakova, A. Yu. Solovyova, A. Yu. Zubarev // *Physical Review E*. — 2021. — V. 104, N. 5. — P. 1–8.
104. 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, N. 7. — P. 139.
105. Magnetoactive elastomers based on ferromagnetic and ferroelectric particles: A FORC approach / V.G. Kolesnikova, L.A. Makarova, A.S. Omelyanchik et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2022. — V. 558. — P. 169506.
106. Boosting Magnetoelectric Effect in Polymer-Based Nanocomposites / A. Omelyanchik, V. Antipova, C. Gritsenko et al. // *Nanomaterials*. — 2021. — V. 11, N. 5.
107. The influence of an applied magnetic field on the clusters formed by Stockmayer supracolloidal magnetic polymers / V.S. Zverev, M.A. Gupalo, N.J. Mauser et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2021. — V. 521. — P. 167445.
108. Hyeon, T. Magnetic Nanoparticles: Synthesis, Characterization, and Applications / T. Hyeon, S. Lee, J.H. Park // *Annual Review of Physical Chemistry*. — 2001.
109. Mann, A. Magnetic Susceptibility: A Review of Potential Applications in Petroleum Exploration / A. Mann, S. Austad // *Geophysics*. — 2005.
110. Pecoraro, B.V. Control of Magnetic Properties by Nanofabrication of Multilayers / B.V. Pecoraro, M. Gajewska, D.D. Awschalom // *Science*. — 2016.
111. Elfimova, Ekaterina A. Static magnetization of immobilized, weakly interacting, superparamagnetic nanoparticles / Ekaterina A. Elfimova, Alexey O. Ivanov, Philip J. Camp // *Nanoscale*. — 2019. — V. 11. — P. 21834–21846. — Mode of access <http://dx.doi.org/10.1039/C9NR07425B>.

112. Nowak-Jary, Julia. Pharmacokinetics of magnetic iron oxide nanoparticles for medical applications / Julia Nowak-Jary, Beata Machnicka // Journal of Nanobiotechnology. — 2022. — V. 20, N. 1. — P. 305.
113. Ivanov, Alexey O. Static magnetic response of multicore particles / Alexey O. Ivanov, Frank Ludwig // Physical Review E. — 2020. — V. 102, N. 3. — P. 32603.
114. Tailored magnetic multicore nanoparticles for use as blood pool MPI tracers / Harald Kratz, Azadeh Mohtashamdolatshahi, Dietmar Eberbeck et al. // Nanomaterials. — 2021. — V. 11, N. 6. — P. 1532.
115. Ferrofluids of magnetic multicore nanoparticles for biomedical applications / Silvio Dutz, Joachim H. Clement, Dietmar Eberbeck et al. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2009. — V. 321, N. 10. — P. 1501–1504.
116. Insights into the Magnetic Properties of Single-Core and Multicore Magnetite and Manganese-Doped Magnetite Nanoparticles / Álvaro Delgado, Álvaro Gallo-Córdova, Carlos Díaz-Ufano et al. // Journal of Physical Chemistry C. — 2023. — V. 127, N. 9. — P. 4714–4723.
117. Trisnanto, Suko Bagus. Effective Néel relaxation time constant and intrinsic dipolar magnetism in a multicore magnetic nanoparticle system / Suko Bagus Trisnanto, Yasushi Takemura // Journal of Applied Physics. — 2021. — V. 130, N. 6. — P. 064302.
118. Laherisheth, Zarana. The effect of magnetic field on the structure formation in an oil-based magnetic fluid with multicore iron oxide nanoparticles / Zarana Laherisheth, Kinnari Parekh, R. V. Upadhyay // Journal of Nanofluids. — 2018. — V. 7, N. 2. — P. 292–299.
119. Multicore magnetic FePt nanoparticles: Controlled formation and properties / Luke A.W. Green, Trinh T. Thuy, Derrick M. Mott et al. // RSC Advances. — 2014. — V. 4, N. 3. — P. 1039–1044.
120. Effective magnetic moment of magnetic multicore nanoparticles / Vincent Schaller, Göran Wahnström, Anke Sanz-Velasco et al. // Physical Review

- B - Condensed Matter and Materials Physics. — 2009. — V. 80, N. 9. — P. 092406.
121. Monte Carlo simulation of magnetic multi-core nanoparticles / Vincent Schaller, Göran Wahnström, Anke Sanz-Velasco et al. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2009. — V. 321, N. 10. — P. 1400–1403.
 122. Kuznetsov, A. A. Equilibrium magnetization of a quasispherical cluster of single-domain particles / A. A. Kuznetsov // Physical Review B. — 2018. — V. 98, N. 14. — P. 1–12.
 123. Structural and magnetic equilibrium properties of a semi-dilute suspension of magnetic multicore nanoparticles / Andrey A. Kuznetsov, Ekaterina V. Novak, Elena S. Pyanzina, Sofia S. Kantorovich // Journal of Molecular Liquids. — 2022. — V. 359. — P. 119373.
 124. Hirschfelder, J.O. Molecular Theory of Gases and Liquids / J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, R.B. Bird. — Wiley, 1954.
 125. Solovyova, A.Yu. Correlations in the Simple Cubic Lattice of Ferroparticles: Theory and Computer Simulations / A.Yu. Solovyova, A.A. Kuznetsov, E.A. Elfimova // Physica A. — 2020. — V. 558. — P. 124923.
 126. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines / N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth et al. // The Journal of Chemical Physics. — 1953. — V. 21. — P. 1087–1092.
 127. Gunton, J. D. Phase Transition and Critical Phenomena / J. D. Gunton, M. San Miguel, P. S. Sahni // Phase Transitions and Critical Phenomena. — 1983. — V. 8. — P. 1–134.
 128. Peterman, E. J. G. Introduction to Computational Physics / E. J. G. Peterman, D. D. L. Collins, R. E. L. Collins // AIP Conference Proceedings. — V. 879. — 2007. — P. 159–162.
 129. Binder, K. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction / K. Binder, D. W. Heermann. — Springer, 2010.

130. Newman, M. E. J. Monte Carlo Methods in Statistical Physics / M. E. J. Newman, R. Barkley // Scientific American. — 2015. — V. 312, N. 3. — P. 62–67.
131. Henderson, D. Some simple results for the properties of polar fluids / D. Henderson // Condensed Matter Physics. — 2011. — V. 14, N. 3. — P. 33001.
132. Joslin, C.G. The third dielectric and pressure virial coefficients of dipolar hard sphere fluids / C.G. Joslin // Molecular Physics. — 1981. — V. 42, N. 6. — P. 1507–1518.
133. Elfimova, E.A. Thermodynamics of dipolar hard spheres with low-to-intermediate coupling constant / E.A. Elfimova, A.O. Ivanov, P.J. Camp // Physical Review E. — 2012. — V. 86, N. 2. — P. 021126.
134. Elfimova, E.A. Thermodynamics of ferrofluids in applied magnetic fields / E.A. Elfimova, A.O. Ivanov, P.J. Camp // Physical Review E. — 2013. — V. 88, N. 4. — P. 042310.
135. Solovyova, A.Yu. The initial magnetic susceptibility of high-concentrated, polydisperse ferrofluids: universal theoretical expression / A.Yu. Solovyova, E.A. Elfimova // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2020. — V. 495, N. 2. — P. 165846.
136. Allen, M. P. Computer Simulation of Liquids / M. P. Allen, D. J. Tildesley. — Oxford University Press, 1989.

Приложение А. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2022662616

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО
о государственной регистрации программы для ЭВМ
№ 2022662616

**Расчёт термодинамических свойств системы неподвижных
суперпарамагнитных феррочастиц, расположенных в узлах
кубической решётки, находящихся под воздействием внешнего
магнитного поля, направленного параллельно или
перпендикулярно осям лёгкого намагничивания**

Правообладатель: *Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования «Уральский
федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н.Ельцина» (RU)*

Авторы: *Зверев Владимир Сергеевич (RU), Соловьева Анна Юрьевна
(RU), Сокольский Сергей Александрович (RU), Елфимова Екатерина
Александровна (RU)*

Заявка № **2022662039**
Дата поступления **29 июня 2022 г.**
Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ **05 июля 2022 г.**

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности



Ю.С. Зубов

Документ подписан электронной подписью
Сертификат 06280077-1-46-110344edbd24145dc7
Владимир Зубов Юрий Сергеевич
Действителен с 2012.05.22 по 26.05.2023

Приложение Б. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2023682896

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО
о государственной регистрации программы для ЭВМ
№ 2023682896

**Расчёт статической намагниченности многогранульных
частиц с ограниченным числом гранул.**

Правообладатель: **Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н.Ельцина» (RU)**

Автор(ы): **Сокольский Сергей Александрович (RU)**

Заявка № **2023681430**
Дата поступления **18 октября 2023 г.**
Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ **01 ноября 2023 г.**

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности



Ю.С. Зубов

документ подписан электронной подписью
Сертификат 429b6a01e1351154b89683e73b1aa7
Владимир Зубов Юрий Сергеевич
Действителен с 20.08.2023 по 02.08.2024