

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

Амбаров Александр Васильевич

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

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 — 2022

# Оглавление

<b>Введение</b>	<b>5</b>
<b>1 Обзор современных исследований мягких магнитоактивных материалов</b>	<b>12</b>
1.1 Особенности микроструктуры . . . . .	12
1.2 Основные виды взаимодействия . . . . .	14
1.3 Динамические магнитные и релаксационные свойства . . . . .	17
1.4 Численные методы моделирования . . . . .	20
1.5 Основные результаты главы . . . . .	21
<b>2 Моделирование динамических свойств ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц</b>	<b>23</b>
2.1 Модель и основные свойства . . . . .	23
2.2 Аналитическое решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна в линейном приближении по амплитуде переменного поля . . . . .	27
2.2.1 Случай сонаправленных ориентаций оси легкого намагничивания и направления переменного поля . . . . .	27
2.2.2 Случай перпендикулярной ориентации оси легкого намагничивания и направления переменного магнитного поля . . . . .	32
2.2.3 Случай положения внешнего поля под углом к оси легкого намагничивания . . . . .	36
2.2.4 Сходимость аналитического решения . . . . .	39
2.3 Численное решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна для произвольной амплитуды переменного магнитного поля . . . . .	43
2.3.1 Случай сонаправленной ориентации оси легкого намагничивания и направления переменного магнитного поля . . . . .	43

2.3.2	Случай перпендикулярной ориентации оси легкого намагничивания и направления переменного магнитного поля . . . . .	50
2.3.3	Оценка погрешности численного решения . . . . .	55
2.4	Сравнение аналитических и численных результатов . . . . .	57
2.5	Расчет характерных релаксационных времен . . . . .	59
2.6	Основные результаты главы . . . . .	65
<b>3</b>	<b>Влияние статического поля на динамические свойства ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц</b>	<b>67</b>
3.1	Аналитическое решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна для малой амплитуды переменного магнитного поля . . . . .	68
3.1.1	Параллельная конфигурация магнитных полей . . . . .	68
3.1.2	Перпендикулярная конфигурация магнитных полей . . . . .	72
3.1.3	Случай ориентации переменного магнитного поля под произвольным углом к статическому полю . . . . .	74
3.1.4	Сходимость аналитического решения . . . . .	75
3.2	Тестирование аналитических результатов на данных компьютерного моделирования . . . . .	77
3.3	Численное решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна: случай произвольной амплитуды переменного поля . . . . .	79
3.4	Сравнение теоретических и численных результатов . . . . .	86
3.5	Расчет характерных времен релаксации магнитного момента . . . . .	88
3.6	Основные результаты главы . . . . .	89
<b>4</b>	<b>Разработанные программные комплексы</b>	<b>91</b>
4.1	Расчет динамического отклика системы частиц, находящейся в переменном магнитном поле, параллельном осям легкого намагничивания . . . . .	92
4.1.1	Входные и выходные данные программного комплекса . . . . .	92
4.1.2	Основные функции программного комплекса . . . . .	93
4.2	Расчет динамического отклика системы частиц, находящейся в переменном магнитном поле, перпендикулярном осям легкого намагничивания . . . . .	98
4.2.1	Входные и выходные данные программного комплекса . . . . .	98

4.2.2	Основные функции программного комплекса . . . . .	98
4.3	Основные результаты главы . . . . .	103
	<b>Заключение</b>	<b>105</b>
	<b>Литература</b>	<b>108</b>
	<b>Приложение А. Расчет диполь-дипольных взаимодействий</b>	<b>119</b>
	<b>Приложение Б. Свидетельство о регистрации программы ЭВМ №2022615351</b>	<b>121</b>
	<b>Приложение В. Свидетельство о регистрации программы ЭВМ №2022616085</b>	<b>122</b>

# Введение

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

Для теоретического описания свойств феррокомпозита широко используется модель обездвиженных дипольных твердых сфер [9–11]. Реакция на магнитное поле в таких системах возникает за счет суперпарамагнитного вращения магнитных моментов внутри частиц. Известные теории, моделирующие динамический отклик феррокомпозита, как правило, ограничиваются слабоконцентрированными системами, в которых межчастичными взаимодействиями пренебрегают [12, 13]. Однако экспериментальные данные свидетельствуют о том, что межчастичные диполь-дипольные взаимодействия значительно влияют на статические и динамические свойства ансамблей дипольных частиц [14–17].

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

в статическом магнитном поле, причем в момент полимеризации намагниченность феррожидкости достигала насыщения.

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

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

1. Разработать математическую модель, которая описывает динамические магнитные свойства феррокомпозита и учитывает диполь-дипольные взаимодействия между частицами магнитного наполнителя.

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

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

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

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

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

**Научная новизна** диссертации заключается в следующем:

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

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

3. Безусловно устойчивая численная схема решения уравнения конвекции-диффузии адаптирована для решения уравнения Фоккера-Планка-Брауна, в котором отсутствуют граничные и начальные условия.

4. Теоретически показано, что в случае параллельной конфигурации переменного и статического магнитных полей, учет подмагничивающего статического магнитного поля приводит к немонотонным эффектам зависимости динамической восприимчивости от магнитной анизотропии и амплитуды переменного магнитного поля в системе обездвиженных взаимодействующих магнитных частиц.

**Положения, выносимые на защиту:**

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

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

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

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

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

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

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

**Апробация результатов.** Основные положения и результаты диссертации докладывались и обсуждались на 14 представительных международных и всероссийских научных форумах: 20-й, 21-й и 22-й Зимней школе по механике сплошных сред (2017, 2019, 2021); 14-й и 15-й Международной конференции по магнитным жидкостям (2016, 2019); 4-й Международной летней школе-семинаре «Комплексные и магнитные системы из мягкой материи: физико-механические и структурные свойства» (2021); Международном вебинаре по

нанотехнологиям и наноматериалам (2020); 21-й Всероссийской школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества (2021); 7-м и 8-м Евро-Азиатском симпозиуме «Тенденции в магнетизме» (2019, 2022); 3-й Российской конференции по магнитной гидродинамике (2018); Научном семинаре «Математическое и компьютерное моделирование свойств мягких магнитных материалов» (2021); 20-й Плесской конференции по нанодисперсным магнитным жидкостям (2022); VI Международная молодежная научная конференция «Физика. Технологии. Инновации ФТИ-2019» (2019).

**Публикации.** По теме диссертации изложены в 16 работах, среди которых 4 статьи [18–21] в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ и входящих в базы данных Web of Science и Scopus, 2 статьи [22, 23] в сборнике научных трудов, 2 комплекса программ, зарегистрированных в Федеральной службе по интеллектуальной собственности (Роспатент), а также 8 тезисов докладов на всероссийских и международных конференциях.

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

**Первая глава «Обзор современных исследований мягких магнитоактивных материалов»** позволяет оценить текущее состояние исследований об ансамбле суперпарамагнитных взаимодействующих обездвиженных частиц. Обсуждается история развития науки о таких ансамблях, привлекающих интерес исследователей своими уникальными физическими свойствами. В главе рассмотрены особенности микроструктуры мягких магнитоактивных материалов. Обзор литературы показал, что физические свойства и поведение этих материалов определяются внутренними структурными превращениями, происходящими в ансамблях внедренных частиц под действием внешнего магнитного поля. Фундаментальные особенности таких превращений в феррокомпозитах,

имеющие ряд принципиальных отличий от таковых в жидких и газовых средах, практически не изучены. В первой главе обсуждается также современное состояние развития изучаемой области науки и отмечены основные нерешенные вопросы в исследовании ансамбля суперпарамагнитных частиц, решение которых представлено в последующих главах диссертации.

**Вторая глава «Моделирование динамических свойств ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц»** посвящена изучению влияния межчастичных диполь-дипольных взаимодействий, ориентации и амплитуды внешнего переменного магнитного поля и величины магнитной анизотропии на динамические свойства системы суперпарамагнитных обездвиженных частиц. В данной главе получены динамические свойства такие как динамическая намагниченность, динамическая восприимчивость и характерное время релаксации системы суперпарамагнитных обездвиженных частиц, когда переменное магнитное поле направлено под произвольным углом к осям магнитной анизотропии. Для малых амплитуд переменного магнитного поля динамические свойства исследовались аналитически. Численное моделирование систем суперпарамагнитных обездвиженных частиц проведено для любых амплитуд переменного магнитного поля.

**В третьей главе «Влияние статического поля на динамические свойства ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц»** изучается влияние статического магнитного поля, дополнительно приложенного к системе случайно распределенных обездвиженных суперпарамагнитных частиц, на динамический отклик. Статическое магнитное поле направлено вдоль оси  $Oz$ . Переменное магнитное поле направлено под произвольным углом к статическому магнитному полю.

**В четвертой главе «Разработанные программные комплексы»** содержится детальное описание программных комплексов, разработанных для численного моделирования динамических магнитных свойств ансамбля суперпарамагнитных обездвиженных взаимодействующих частиц во внешнем магнитном поле. Численные решения, представленные в диссертации, получены с помощью описанных в данной главе комплексов программ. Также в главе показана логика работы программных комплексов, описаны типы входных и выходных данных.

В **заключении** приведены основные результаты и выводы работы, указываются рекомендации и возможные направления дальнейших исследований.

Общий объем диссертации составляет 122 страницы машинописного текста. Диссертация содержит 50 рисунков, 97 ссылок на литературные источники и 3 приложения.

# Глава 1. Обзор современных исследований мягких магнитоактивных материалов

## 1.1. Особенности микроструктуры

Мягкие магнитоактивные материалы представляют собой искусственно синтезируемые среды, состоящие из магнитных наночастиц, взвешанных в немагнитном жидком носителе или внедренных в полимерную матрицу. Такие гибридные системы, являющиеся многофункциональными материалами нового поколения, сочетают богатый набор физических, механических и физико-химических свойств полимерных материалов и жидких сред с сильным откликом на умеренные внешние магнитные поля, легко достижимые в лабораторных и практических условиях. Многие способы применения этих материалов запатентованы и вышли на рынок высоких технологий. Так, например, мягкие магнитоактивные материалы используются при создании магнитополимерных пломб и пленок в регенеративной медицине, искусственных мышц в манипуляторах и робототехнике, матриц для выращивания биологических тканей с магнитоуправляемой внутренней архитектурой в трансплантологии, в качестве магнитоуправляемых герметизаторов, усилителей механического напряжения в химической, горной и космической промышленности [7, 24–28].

Магнитоактивные материалы, в которых в качестве матрицы-носителя используются жидкие среды, называются феррожидкостями (ФЖ). ФЖ представляют собой устойчивые суспензии наноразмерных магнитных частиц (железа, магнетита, кобальта и пр.) в жидких немагнитных носителях (воде, ке-

росине, толуоле и др.) [1, 29, 30]. Характерный диаметр магнитных частиц составляет  $\sim 10$  нм, что меньше границы однодоменности. При таких размерах частицы остаются однородно намагниченными, а ориентационные флуктуации магнитных моментов частиц и перемагничивание всего ансамбля определяются неелевским и броуновским механизмами [29]. Агрегативная стабилизация достигается либо за счет нанесения полимерных слоев на поверхности частиц (стерическая стабилизация), либо за счет классического механизма возникновения двойных электрических слоев в ФЖ на электролитических основах (ионная стабилизация).

На основе ФЖ синтезируют многокомпонентные магнитоактивные среды, которые получили название магнитные эмульсии. Для получения прямых магнитных эмульсий ФЖ на углеводородных основах диспергируются в воде. В обратной эмульсии дисперсная фаза образована водой, а дисперсионная среда – углеводородной ФЖ. Главной особенностью данных сред является одновременное наличие выраженных диэлектрических и магнитных свойств. Микроструктурные изменения и динамические процессы в таких средах возникают при воздействии внешних магнитных полей достаточно малой интенсивности [31–35]. Это позволяет эффективно управлять поведением данных материалов.

Современные экспериментальные методы синтеза магнитоактивных материалов на полимерной основе предлагают различные механизмы для встраивания магнитных частиц в полимерную матрицу, получения частиц различных форм. В качестве примеров новых форм магнитных частиц можно привести магнитные кубы [36–40], эллипсоиды или стержни [41–43], однако традиционным наполнителем являются магнитные частицы, имеющие сферическую форму. Различные механизмы встраивания магнитных частиц в полимерную матрицу определяют степени ориентационной и трансляционной свободы магнитного наполнителя в полимере: магнитные частицы могут быть физически захвачены в полые карманы полимерной матрицы, испытывая при этом ограничения в пространственном перемещении, но сохраняя высокую ориентационную свободу [44]; функционализированная поверхность магнитной частицы может сформировать химическую связь с полимерами, тогда сдвиги и вращения частиц будут ограничены механической связью с полимерной матрицей [45–47]; магнитные частицы могут быть жестко внедрены в полимер так, что сдви-

ги, и вращения частиц станут очень затруднительны, а частицы практически полностью обездвижены [48]. Использование статического магнитного поля на этапе полимеризации ФЖ [28, 49, 50] позволяет создать образцы с анизотропными магнитными, оптическими, механическими свойствами. Анизотропные свойства можно эффективно использовать в качестве управляющего параметра для настройки необходимых сценариев термодинамического, магнитного, реологического, механического поведения мягких магнитоактивных композитов. Пространственное расположение частиц магнитного наполнителя и их ориентационное текстурирование, созданные в процессе синтеза образца, главным образом определяют свойства и поведение композита, особенности его реакции на магнитные поля [11, 51–55].

Таким образом, с одной стороны, большое разнообразие магнитных наполнителей, полимерных и жидких сред, различные технологии внедрения магнитных частиц в матрицу-носитель позволяют синтезировать магнитоактивные материалы с широким спектром свойств и функциональных возможностей. С другой стороны, использование этих материалов в высокоточных технологиях диктует необходимость прогнозирования и контроля их отклика на внешние магнитные поля.

В диссертационной работе будет исследована система обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, оси легкого намагничивания которых направлены параллельно друг другу. В реальности такие композиты могут быть получены из ФЖ, помещенной в сильное статическое магнитное поле, с последующей полимеризацией или заморозкой жидкости-носителя [28, 49, 50]. После полимеризации частицы теряют трансляционные степени свободы, и их реакция на внешние магнитные поля происходит по неелевскому механизму, когда магнитный момент частицы отклоняется от оси легкого намагничивания внутри тела частицы.

## 1.2. Основные виды взаимодействия

Магнитные частицы взаимодействуют между собой через матрицу-носитель (гидродинамические или упругие взаимодействия), через микроскопические магнитные поля (магнитодипольные взаимодействия), через защит-

ные оболочки (стерические взаимодействия) и за счет Ван-дер-Ваальсовых сил. Кроме того, в системе присутствуют одночастичные взаимодействия между магнитным моментом и внешним полем, а также энергия, связанная с внутренней магнитной анизотропией частиц. Учет всех этих взаимодействий сразу является достаточно сложной задачей. Поэтому при построении теоретических моделей всегда выделяют главные факторы, определяющие поведения системы в конкретном исследуемом случае.

Взаимодействие между двумя однородно намагниченными сферическими частицами описывается классическим дальнедействующим, анизотропным магнитным диполь-дипольным взаимодействием. Для пары частиц с дипольными моментами  $\mathbf{m}_i$ ,  $|\mathbf{m}_i| = m$ , положения которых описываются векторами  $\mathbf{r}_i$ , его можно записать в виде [56]:

$$U_d(i, j) = \frac{-\mu_0}{4\pi k_B T} \left[ 3 \frac{(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} - \frac{(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)}{r_{ij}^3} \right]. \quad (1.2.1)$$

Этот потенциал зависит не только от межчастичного расстояния  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ , но и от взаимной ориентации магнитных моментов частицы.

В случае, если на систему действует внешнее магнитное поле  $|\mathbf{H}| = H$ , для каждого диполя потенциал взаимодействия может быть записан в форме скалярного произведения [56]:

$$U_H(i) = -\mu_0(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{H}). \quad (1.2.2)$$

Энергия Зеемана (1.2.2) показывает, что во внешнем магнитном поле все магнитные моменты стремятся развернуться параллельно вектору  $\mathbf{H}$ . Однако ориентация магнитного момента каждой частицы зависит не только от внешнего магнитного поля, но и от магнитных полей, создаваемых другими магнитными диполями. При этом магнитная частица оказывается окруженной энергетически выгодными и невыгодными соседями, число которых определяется направлением  $\mathbf{H}$  и формой образца. Это приводит к размагничивающему эффекту [57].

Вращению магнитного момента внутри тела суперпарамагнитной частицы препятствует энергия Нееля  $U_N$  магнитной анизотропии [56]:

$$U_N(i) = -Kv_m (\hat{\mathbf{m}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}})^2, \quad v_m = \pi d^3/6, \quad (1.2.3)$$

где  $K$  – константа кристаллографической магнитной анизотропии. Энергия Нееля (1.2.3) характеризует взаимодействие магнитного момента  $\hat{\mathbf{m}}$  с осью легкого намагничивания  $\hat{\mathbf{n}}$ ,  $\hat{\mathbf{m}}$  и  $\hat{\mathbf{n}}$  – единичные вектора. Энергия Нееля (1.2.3) показывает, насколько магнитному моменту  $\hat{\mathbf{m}}$  энергетически выгодно развернуться в направлении оси легкого намагничивания  $\hat{\mathbf{n}}$ .

Для описания стерических взаимодействий частиц используются короткодействующие потенциалы мягких или твердых сфер. В первом случае предполагается, что при контакте двух частиц их оболочки упруго взаимодействуют между собой, то они есть могут деформироваться, допуская дальнейшее сближение на некоторое расстояние и вызывая затем отталкивание частиц. Вид потенциала может быть представлен следующим образом [56]:

$$U_{SS}(i, j) = 4\epsilon \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12}, \quad (1.2.4)$$

где  $\epsilon$  и  $r_0$  являются характеристиками стабилизирующих оболочек частиц. Во втором случае стерическое взаимодействие двух частиц ограничивается лишь условием непроникновения друг в друга и определяется следующим образом [56]:

$$U_{HS}(i, j) = \begin{cases} \infty, & r_{ij} < d_{ij} \\ 0, & r_{ij} \geq d_{ij} \end{cases}, \quad (1.2.5)$$

где  $d_{ij} = (d_i + d_j)/2$  – это полусумма эффективных диаметров частиц  $i$  и  $j$  с учетом толщины немагнитного слоя.

Потенциал Леннарда-Джонса [58] позволяет учесть Ван-дер-Ваальсово притяжение между частицами на больших расстояниях с помощью дополнительного отрицательного слагаемого в потенциале мягких сфер [59]:

$$U_{LG}(i, j) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1.2.6)$$

в этом случае параметр  $\epsilon$  имеет смысл глубины потенциальной ямы, а  $r_0$  означает расстояние, на котором энергия взаимодействия обращается в нуль.

Потенциал FENE обеспечивает дополнительное взаимодействие между ближайшими соседями [60]:

$$U_{FENE}(i, j) = -\frac{1}{2}Kr_{max}^2 \ln \left[ 1 - \left( \frac{r_{ij}}{r_{max}} \right)^2 \right], \quad (1.2.7)$$

здесь  $K$  определяет упругую прочность связи, а  $r_{max}$  – максимальное расширение этой связи.

В диссертационной работе для моделирования свойств ансамбля суперпарамагнитных частиц будут учтены взаимодействия магнитных моментов друг с другом (1.2.1), с внешним магнитным полем (1.2.2) и осью легкого намагничивания (1.2.3). Эти потенциалы являются определяющими для поведения исследуемой системы. Так как в рассматриваемой системе поступательные, так и вращательные степени свободы частиц «заморожены», то потенциалы (1.2.4), (1.2.5), (1.2.6), (1.2.7) не являются определяющими.

### 1.3. Динамические магнитные и релаксационные свойства

Большинство известных теоретических моделей динамического магнитного отклика дипольных частиц относятся к невзаимодействующим образцам [61–66]. Например, зависимость динамической восприимчивости невзаимодействующих частиц от слабого переменного магнитного поля с угловой частотой  $\omega$  обычно описывается с помощью модели Дебая [67–69]:

$$\chi_D = \frac{\chi_L}{1 - i\omega\tau}, \quad (1.3.1)$$

где  $\chi_D$  – динамическая восприимчивость в рамках модели Дебая,  $\chi_L$  – восприимчивость Ланжевена, а  $\tau$  – характерное время релаксации магнитного момен-

та,  $i$  – мнимая единица.

Влияние амплитуды на динамическую восприимчивость невзаимодействующих магнитных частиц в переменном поле было изучено в работах [65, 70, 71]. Показано, что увеличение амплитуды переменного поля приводит к уменьшению динамической восприимчивости системы. В работе [72] была предложена аппроксимационная формула, описывающая зависимость динамической восприимчивости подвижных магнитных частиц от амплитуды магнитного поля. Эта аппроксимация была получена на основе решения уравнения Фоккера-Планка-Брауна и представляет собой модификацию формулы Дебая.

Накопленные экспериментальные и теоретические данные свидетельствуют о том, что диполь-дипольные взаимодействия оказывают большое влияние на динамические свойства магнитных частиц [10, 15, 17, 73–76]. Сильные диполь-дипольные взаимодействия между частицами в образце, где частицы обладают некоторой степенью подвижности, могут даже привести к образованию агрегатов феррочастиц [77–80]. Недавние работы показали, что диполь-дипольное взаимодействие оказывает значительное влияние на выделение тепла при лечении магнитной гипертермией [81, 82]. В работах [73, 75, 83] были теоретически изучены ансамбли магнитных частиц с броуновским или неелевским механизмами релаксации в слабом переменном магнитном поле, чтобы прояснить влияние дипольных взаимодействий на спектр восприимчивости. Сильные корреляции между частицами способствуют появлению скоррелированных структур, отклик на переменное магнитное поле которых происходит медленнее, чем для одиночной частицы. Такие эффекты были также обнаружены в экспериментах [16, 84–86].

Процессы намагничивания, происходящие в системе магнитных частиц под действием внешнего поля, характеризуются временами релаксации магнитных моментов. В переменном поле малой амплитуды время релаксации магнитного момента обездвиженных магнитных частиц с одноосной магнитной анизотропией определяется хорошо известными формулами. Для низкого потенциального барьера, когда параметр магнитной анизотропии частиц  $\sigma \ll 1$ , время релаксации близко к  $\tau = \tau_D = \sigma\tau_0$  ( $\tau_D$  – характерное время релаксации идеальной системы), но оно резко возрастает с  $\sigma$ , а при  $\sigma \gg 1$  оно очень близко к асимптотическому выражению

$\tau = \tau_N = \tau_0 \exp(\sigma)$ , [62, 87] где  $\tau_0 = m/2a\gamma E_A$ ,  $m$  – магнитный момент частицы,  $a$  – параметр релаксации спин-решетки,  $\gamma$  – гиромагнитное отношение. Параметр  $\sigma = E_A/k_B T$  имеет значение энергетического барьера магнитной кристаллографической анизотропии  $E_A$ , измеряемого в единицах тепловой энергии  $k_B T$ . В работе [88] была предложена приближенная формула времени продольной релаксации однодоменной ферромагнитной частицы с одноосной анизотропией, которая справедлива для всех значений энергетического барьера магнитной анизотропии  $\sigma$ :

$$\tau = \tau_D \frac{e^\sigma - 1}{2\sigma} \left[ \frac{\sigma}{\sigma + 1} \sqrt{\frac{\sigma}{\pi}} + 2^{-\sigma-1} \right]^{-1}. \quad (1.3.2)$$

Влияние амплитуды поля на характерные времена релаксации в системе магнитных частиц исследовались в работах [65, 70, 71]. По результатам этих работ можно сделать следующий вывод о влиянии амплитуды на релаксационные процессы, протекающие в системе. Когда характерное время релаксации магнитных моментов больше, чем временной масштаб изменяющегося во времени переменного магнитного поля, система не успевает достичь состояния равновесия при изменении магнитного поля. В этом случае можно было бы ожидать слабого магнитного отклика системы. Однако для переменного поля с достаточно высокой амплитудой все еще может быть получен сильный магнитный отклик из-за уменьшения времени релаксации магнитных моментов одиночных частиц.

Как показывают исследования, увеличение амплитуды переменного поля ускоряет релаксационные процессы в системе обездвиженных суперпарамагнитных частиц, в то время как межчастичные корреляции замедляют эти процессы. Проблема заключается в том, что нет исследований, которые бы одновременно учитывали влияние межчастичных взаимодействий, направления и интенсивности внешних полей, внутренней магнитной анизотропии на динамическую восприимчивость. Важно понимать эти эффекты, чтобы успешно использовать такие системы в различных приложениях и правильно прогнозировать свойства ансамбля суперпарамагнитных взаимодействующих обездвиженных частиц.

## 1.4. Численные методы моделирования

Дипольные системы являются сложными системами взаимодействующих между собой частиц, при описании которых приходится неизбежно использовать приближенные аналитические и численные методы.

Один из способов математического описания динамических свойств ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц с анизотропной ориентационной архитектурой основывается на решении уравнения Фоккера-Планка-Брауна (ФПБ) для плотности вероятности ориентации магнитных моментов частиц. Полученные решения уравнения ФПБ используются для определения динамической магнитной восприимчивости системы, ее намагниченности, анализа времен релаксации магнитных моментов частиц. Для решения уравнения ФПБ обычно используются аппроксимационные методы, поскольку точное решение может быть получено только для ряда частных случаев. Как правило, решение уравнения ФПБ представляется в виде неизвестной функции, разложенной по собственным функциям дифференциального оператора [70,89]. С практической точки зрения, аналитически или численно может быть рассчитано только конечное число членов разложения. Это число зависит от параметров уравнения. Это означает, что погрешность аппроксимации может быть недооценена.

Второй способ изучения динамических свойств ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц основан на численном решении соответствующей системы стохастических уравнений. Движение и вращение каждой частицы в системе, изменение ориентации ее магнитного момента задается стохастическим уравнением движения Ланжевена [90]. Преимуществом данного метода является возможность учесть взаимодействия каждой частицы с каждой в рассматриваемой системе, однако решение такой задачи очень затратно по времени. Определение динамических магнитных свойств системы подвижных и обездвиженных частиц на базе решения стохастических уравнений было рассмотрено в работах [74,91,92].

В диссертационной работе изучение динамических свойств ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц было проведено на базе решения уравнения ФПБ. Для его численного решения использовалась прямая конечно-разностная схема, предложенная в [93]. Это быстрый способ построения аппрок-

симации. Численная схема [93], разработанная для решения задач конвекции-диффузии, была адаптирована для решения уравнения ФПБ, потому что в уравнении ФПБ можно выделить слагаемые конвективного и диффузионного типа. Критерии сходимости численного приближения к решению были доказаны в [93]:

«Теорема 2. Разностная схема с весами (1.4.1) безусловно устойчива в гильбертовом пространстве при  $\kappa \geq 0.5$ ».

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} + (C_0^n + D)(\kappa y^{n+1} + (1 - \kappa)y^n) = 0, \quad t_n \in \omega_\tau, \quad (1.4.1)$$

$$y_0 = u_0.$$

Преимуществом метода является численная стабильность даже в случае преобладания конвективного члена в уравнении ФПБ.

## 1.5. Основные результаты главы

Стремительное развитие экспериментальных методик синтеза мягких магнитоактивных материалов, наблюдающееся в последнее десятилетие, связано с перспективами их применения во многих наукоемких промышленных и медико-биологических технологиях. В основе этого лежит возможность управления при помощи внешнего поля свойствами этих материалов. Поведение мягких магнитоактивных материалов очень сильно зависит от внутренней структуры, которая создается во время их синтеза. Из-за большого разнообразия магнитных наполнителей, жидких и полимерных сред, различных технологий внедрения магнитных частиц в матрицу-носитель, достаточно широкий класс материалов со специфической внутренней структурой до сих пор остается плохо изученным. Одним из примеров является магнитополимерный композит, получаемый из ФЖ, помещенной в сильное статическое магнитное поле, в котором при достижении намагниченности насыщения проводится полимеризация или заморозка жидкости-носителя. В таких образцах частицы теряют трансляционные степени свободы, оси легкого намагничивания выравниваются, и реакция этих композитов на внешние магнитные поля происходит по неелевскому механизму,

когда магнитный момент частицы отклоняется от оси легкого намагничивания внутри тела частицы. Именно такие системы будут исследоваться в диссертационной работе. Другая проблема, возникающая при изучении свойств мягких магнитных материалов, связана с учетом межчастичных диполь-дипольных взаимодействий. Известные математические модели, как правило, построены в одночастичном приближении, а значит применимы лишь к системам с малой концентрацией магнитной фазы, поскольку не содержат учета многочастичных эффектов. Главный акцент в диссертационной работе будет сделан на учете межчастичных диполь-дипольных взаимодействий. Для изучения динамических магнитных свойств исследуемой системы будут использоваться современные методы и подходы математического моделирования мягких магнитных материалов, обзор которых проведен в этой главе.

# Глава 2. Моделирование динамических свойств ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц

## 2.1. Модель и основные свойства

В данной работе будем рассматривать монодисперсный ансамбль суперпарамагнитных дипольных твердых сфер (например магнетитовые  $Fe_3O_4$  частицы размером  $\sim 10$  нм), обездвиженных в немагнитной матрице. Образец содержится в длинной цилиндрической трубке, ориентированной вдоль оси  $Oz$ . Эскиз образца показан на рисунке 2.1.1.

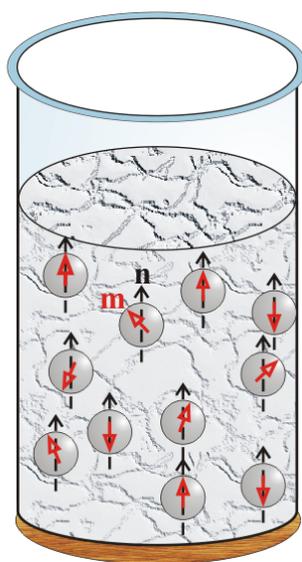


Рис. 2.1.1 – Эскиз системы случайно распределенных суперпарамагнитных частиц с осями легкого намагничивания, выровненными вдоль оси  $Oz$ .

Магнитный момент отдельной частицы равен произведению намагниченности насыщения  $M_s$  магнитного материала и объема ее магнитного ядра  $V_m$ :  $m = M_s V_m$ . Радиус-вектор положения центра массы  $j$ -ой частицы обозначается как  $\mathbf{r}_j = r_j \hat{\mathbf{r}}_j = (\sin \psi_j \cos \xi_j; \sin \psi_j \sin \xi_j; \cos \psi_j)$ , а вектор, описывающий ориентацию ее магнитного момента, равен  $\mathbf{m}_j = m_j \hat{\mathbf{m}}_j = (\sin \theta_j \cos \varphi_j; \sin \theta_j \sin \varphi_j; \cos \theta_j)$ , где  $\hat{\mathbf{r}}_j$  и  $\hat{\mathbf{m}}_j$  – единичные вектора,  $\psi_j$  и  $\theta_j$  – полярные углы,  $\xi_j$  и  $\varphi_j$  – азимутальные углы.

Так как в данной работе рассматриваются сферические магнетитовые частицы небольшого размера, то принято считать, что магнитная анизотропия одноосная, а направление осей легкого намагничивания определяется единичным вектором  $\hat{\mathbf{n}}_j = (0, 0, 1)$ . К образцу прикладывается линейно-поляризованное переменное поле  $\mathbf{h} = h_{ac} e^{i\omega t} \hat{\mathbf{h}}$ , где  $h_{ac}$  – амплитуда переменного магнитного поля,  $\omega$  – частота колебаний,  $t$  – время, а  $\hat{\mathbf{h}}$  обозначает единичный вектор.

Частицы равномерно распределены и зафиксированы в некоторой нежидкой матрице, поэтому как поступательные, так и вращательные степени свободы тел частиц “заморожены”. Из-за фиксации частиц, броуновской релаксации (описывает вращательное движение магнитной наночастицы в носителе, при этом магнитный момент зафиксирован в кристаллографических осях) в рассматриваемой системе нет, поэтому релаксация магнитного момента  $m$  магнитной частицы проходит только по неелевскому механизму (вращение самой частицы заблокировано, вращается лишь магнитный момент внутри этой частицы). Неелевская релаксация вызвана тепловыми флуктуациями (колебаниями) энергии магнитной кристаллографической анизотропии и магнитными полями, действующими на частицу. Магнитная анизотропия характеризуется параметром магнитной анизотропии  $\sigma$  [1] (энергетический барьер магнитной кристаллографической анизотропии). Чем больше этот параметр, тем сложнее магнитному моменту частицы отклоняться от оси легкого намагничивания. Для малых параметров анизотропии  $\sigma \ll 1$  время релаксации магнитных моментов  $\tau_D = \sigma \tau_0$ , для  $\sigma \gg 1$  время релаксации  $\tau_D = \tau_0 e^\sigma$ ,  $\tau_0 = 10^{-9}$  с [62, 87].

Ориентация магнитного момента случайно выбранной частицы (например, с номером 1) определяется полярным  $\vartheta_1$  и азимутальным  $\varphi_1$  углами и может быть описана плотностью вероятности  $W(1) = W(t, x_1, \varphi_1)$ ,  $x_1 = \cos \vartheta_1$ , которая в свою очередь находится из уравнения Фоккера-Планка-Брауна (ФПБ),

в котором пренебрегали гиромангнитным слагаемым в силу того, что на рассматриваемом диапазоне частот этот эффект незначителен:

$$2\tau_D \frac{\partial W(1)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ (1-x^2) \left( \frac{\partial W(1)}{\partial x} + W(1) \frac{\partial U(1)}{\partial x} \right) \right] + \quad (2.1.1)$$

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

где  $U(1)$  – магнитная энергия частицы с номером 1.  $W(1)$  удовлетворяет условию нормализации:

$$\int_{-1}^1 W(t, x) dx = 1. \quad (2.1.2)$$

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

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

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

Для того, чтобы учесть диполь-дипольные взаимодействия в уравнении ФПБ (2.1.1), обратимся к работе [73], где одночастичная энергия  $U_N(1) + U_h(1)$  была расширена за счет включения диполь-дипольных взаимодействий на основе модифицированной модели среднего поля первого порядка (MMF1):

$$U(1) = U_N(1) + U_h(1) + \rho \langle -U_d(1, 2) W^{id}(2) \Theta(1, 2) \rangle_2, \quad (2.1.3)$$

$$U_d(1, 2) = \frac{\mu_0}{4\pi k_B T} \left[ 3 \frac{(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^5} - \frac{(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2)}{r^3} \right]. \quad (2.1.4)$$

В формуле (2.1.3)  $\rho$  – объемная концентрация частиц,  $U_d(1, 2)$  – энергия диполь-дипольного взаимодействия между магнитными моментами частиц 1 и 2,  $W^{id}(2)$  – плотность вероятности ориентации магнитного момента частицы 2, функция Хевисайда  $\Theta(1, 2)$  описывает непроницаемость частиц,  $\langle \dots \rangle_2$  – означает усреднение по всем возможным ориентациям магнитного момента частицы 2. Расчет данного усреднения приведен в Приложении А данной диссертации. Последнее слагаемое (2.1.3) имеет значение общего магнитного поля, создаваемого всеми другими магнитными частицами, и это дипольное поле влияет на ориентацию магнитного момента частицы 1 в зависимости от внешнего магнитного поля. В формуле (2.1.4)  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор, соединяющий центры частиц 1 и 2,  $|\mathbf{r}| = r$ .

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

$$M = \rho m \int d\hat{\mathbf{m}}_1 (\hat{\mathbf{m}}_1 \cdot \hat{\mathbf{h}}) W(1). \quad (2.1.5)$$

Динамическая восприимчивость определяется как производная намагниченности  $M$  (2.1.5) по переменному магнитному полю:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial (h_{ac} e^{i\omega t})}. \quad (2.1.6)$$

Частотно-зависимая магнитная восприимчивость характеризует связь между вектором намагниченности и магнитным полем внутри образца. Из-за размагничивающих эффектов, которые присутствуют для взаимодействующих частиц, приложенное к образцу поле  $\mathbf{h}$ , не совпадает с полем внутри образца, поэтому для взаимодействующих частиц мы рассмотрим только продольную  $\chi_{||}$  и поперечную  $\chi_{\perp}$  восприимчивость, правильно исключая размагничивающие эффекты.

## 2.2. Аналитическое решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна в линейном приближении по амплитуде переменного поля

### 2.2.1. Случай сонаправленных ориентаций оси легкого намагничивания и направления переменного поля

Направления осей легкого намагничивания всех частиц параллельно оси  $Oz$  и определяются вектором  $\hat{\mathbf{n}}_i = (0, 0, 1)$ . В этом разделе рассматривается случай, когда оси легкого намагничивания и приложенное переменное магнитное поле параллельны, поэтому вектор  $\mathbf{h} = h_{ac} e^{i\omega t} (0, 0, 1)$ .

Магнитная энергия  $U(1)$  в этом случае по формуле (2.1.3) будет равна:

$$U(1) = -\sigma x^2 - \alpha_{ac||}^{eff} e^{i\omega t} x, \quad (2.2.1)$$

где  $\alpha_{ac||}^{eff} = \alpha_{ac} \left(1 + \frac{\chi_L A_1^{id}}{3}\right)$  – параметр Ланжевена «эффективного» параллельного магнитного поля,  $\chi_L = \mu_0 \rho m^2 / 3k_B T$  – восприимчивость Ланжевена,  $A_1^{id} = \int_{-1}^1 W^{id}(x) P_n(x) dx$  – коэффициент ряда по полиномам Лежандра, найденный для случая, когда диполь-дипольные взаимодействия между частицами не учитываются. Рассматриваемая система обладает цилиндрической симметрией, поэтому плотность вероятности ориентации магнитного момента  $W(1)$  не зависит от угла  $\varphi$ , и в уравнении (2.1.1) производные по  $\varphi$  равны нулю. Тогда уравнение (2.1.1) принимает вид:

$$2\tau_D \frac{\partial W(1)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ (1 - x^2) \left( \frac{\partial W(1)}{\partial x} + W(1) \frac{\partial U(1)}{\partial x} \right) \right]. \quad (2.2.2)$$

Уравнение ФПБ (2.2.2) параболического типа в частных производных. Решение такого уравнения находится в виде разложения по собственным функциям (полиномам Лежандра) и может быть записано в следующей форме:

$$W(1) = W_0(x) + \alpha_{ac} e^{i\omega t} \sum_{n=1}^{\infty} A_n P_n(x), \quad (2.2.3)$$

где

$$W_0(x) = e^{\sigma x^2} \left( \frac{1}{2} \int_{-1}^1 e^{\sigma x^2} dx \right)^{-1},$$

здесь  $W_0(x)$  – решение уравнения ФПБ (2.2.4) в стационарном случае  $\left(\frac{\partial W(1)}{\partial t} = 0\right)$ :

$$\frac{\partial W(1)}{\partial x} + W(1) \frac{\partial U(1)}{\partial x} = 0. \quad (2.2.4)$$

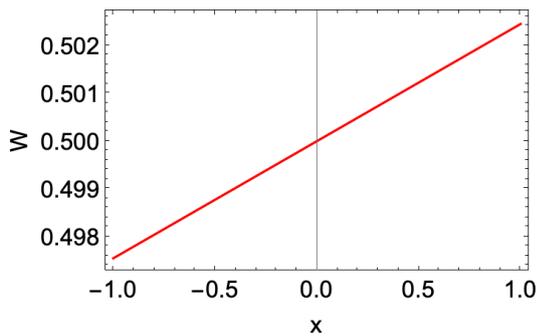
Второе слагаемое (2.2.3) описывает возмущение, создаваемое переменным магнитным полем.

Подставив выбранный вид решения (2.2.3) и магнитную энергию (2.2.1) в уравнение ФПБ (2.2.2), используя свойство ортогональности полиномов Лежандра и линеаризуя слагаемые по  $\alpha_{ac}$ , получим рекуррентные соотношения, связывающие коэффициенты  $A_n, A_{n+2}, A_{n-2}$ :

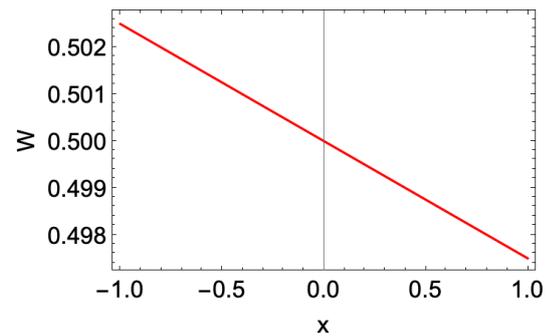
$$\begin{aligned} & \left[ 2i\tau_D \omega + n(n+1) - 2\sigma \frac{n(n+1)}{(2n+3)(2n-1)} \right] A_n - \\ & - 2\sigma \frac{(n-1)n(n+1)}{(2n-3)(2n-1)} A_{n-2} + 2\sigma \frac{n(n+1)(n+2)}{(2n+3)(2n+5)} A_{n+2} = \\ & = -\frac{2n+1}{2} \left( 1 + \frac{\chi_L A_1^{id}}{3} \right) \int_{-1}^1 \frac{\partial}{\partial x} \left[ (1-x^2) W_0(x) \right] P_n(x) dx, \quad (2.2.5) \end{aligned}$$

где  $A_{n \leq 0} = 0$ . Явные выражения для  $A_1$  могут быть определены путем усечения этих соотношений в некотором произвольном порядке  $n = k$ , установки  $A_{n > k} = 0$  и решения системы из  $k$  алгебраических уравнений. В данной работе результаты были получены для этих рекуррентных соотношений и последующих при  $k = 10$  (решалась СЛАУ, состоящая из 10-и уравнений). Полученная система решалась в системе Wolfram Mathematica с помощью метода Гаусса.

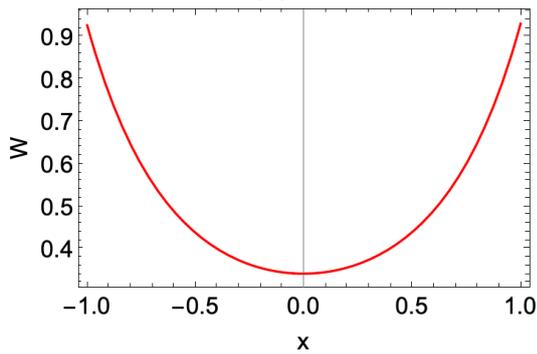
Приведем графики плотности вероятности ориентации магнитного момента  $W(x)$  на рисунке 2.2.1 при различных параметрах магнитной анизотропии  $\sigma$  и в различные моменты времени. Если параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 0$  (рисунок 2.2.1 (а) и (б)), то плотность вероятности незначительно возрастает в момент времени  $t = 0.1$  и убывает в момент времени  $t = 1.6$ , так как переменное магнитное поле в первом случае направлено вверх по оси  $Oz$  ( $\theta = 0 \Rightarrow x = \cos \theta = 1$  более вероятная ориентация магнитного момента), а во втором случае переменное магнитное поле направлено вниз по оси  $Oz$ , и более вероятно, что магнитные моменты такой системы будут сонаправлены ему. Так как переменное магнитное поле слабое, то разница небольшая. В случае включения магнитной анизотропии (рисунок 2.2.1 (в) и (г)), вероятности крайних положений значительно больше остальных, и чем больше параметр магнитной анизотропии  $\sigma$ , тем эта разница выше.



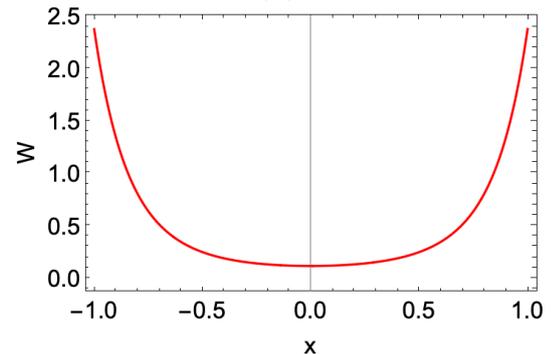
(а)



(б)



(в)



(г)

Рис. 2.2.1 – Аналитический вид плотности вероятности ориентации магнитного момента при малой амплитуде  $\alpha_{ac} = 0.01$  и фиксированной частоте переменного магнитного поля  $\omega\tau_D = 1$ . Система без учета диполь-дипольных взаимодействий. Переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания. (а)  $\sigma = 0$ ,  $t = 0.1$ , (б)  $\sigma = 0$ ,  $t = 1.6$ , (в)  $\sigma = 1$ ,  $t = 0.1$ , (г)  $\sigma = 3$ ,  $t = 0.1$ .

Учитывая что вектор приложенного поля  $\mathbf{h} = h_{ac}e^{i\omega t}(0, 0, 1)$ , получим намагниченность из формулы (2.1.5),

$$M_{\parallel} = \frac{\rho m}{4\pi} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} W(1)x d\varphi dx = \chi_L h_{ac} e^{i\omega t} A_1. \quad (2.2.6)$$

Здесь мы использовали свойство ортогональности полиномов Лежандра:

$$\int_{-1}^1 P_n(x)x dx = \begin{cases} 2/3, n = 1 \\ 0, n \neq 1 \end{cases}. \quad (2.2.7)$$

Для расчета и построения графиков намагниченности выразим  $M_{\parallel}$  через параметр Ланжевена  $\alpha_{ac}$ :

$$M_{\parallel} = \chi_L h_{ac} e^{i\omega t} A_1 = \frac{\mu_0 \rho m^2}{3k_B T} h_{ac} e^{i\omega t} A_1 = \rho m \frac{\alpha_{ac}}{3} e^{i\omega t} A_1. \quad (2.2.8)$$

На рисунке 2.2.2 показаны кривые намагниченности как функции времени для системы обездвиженных частиц с  $\alpha_{ac} = 0.01$  при частоте переменного поля  $\omega\tau_D = 1$ . На рисунке 2.2.2 есть два набора линий: синие пунктирные линии соответствуют системам с невзаимодействующими частицами, а красные описывают системы с взаимодействующими частицами. Увеличение восприимчивости Ланжевена  $\chi_L$  приводит к росту модуля намагниченности. Изменение параметра магнитной анизотропии  $\sigma$  приводит к смещению экстремумов кривых намагничивания, что указывает на трансформацию релаксационных процессов в системе.

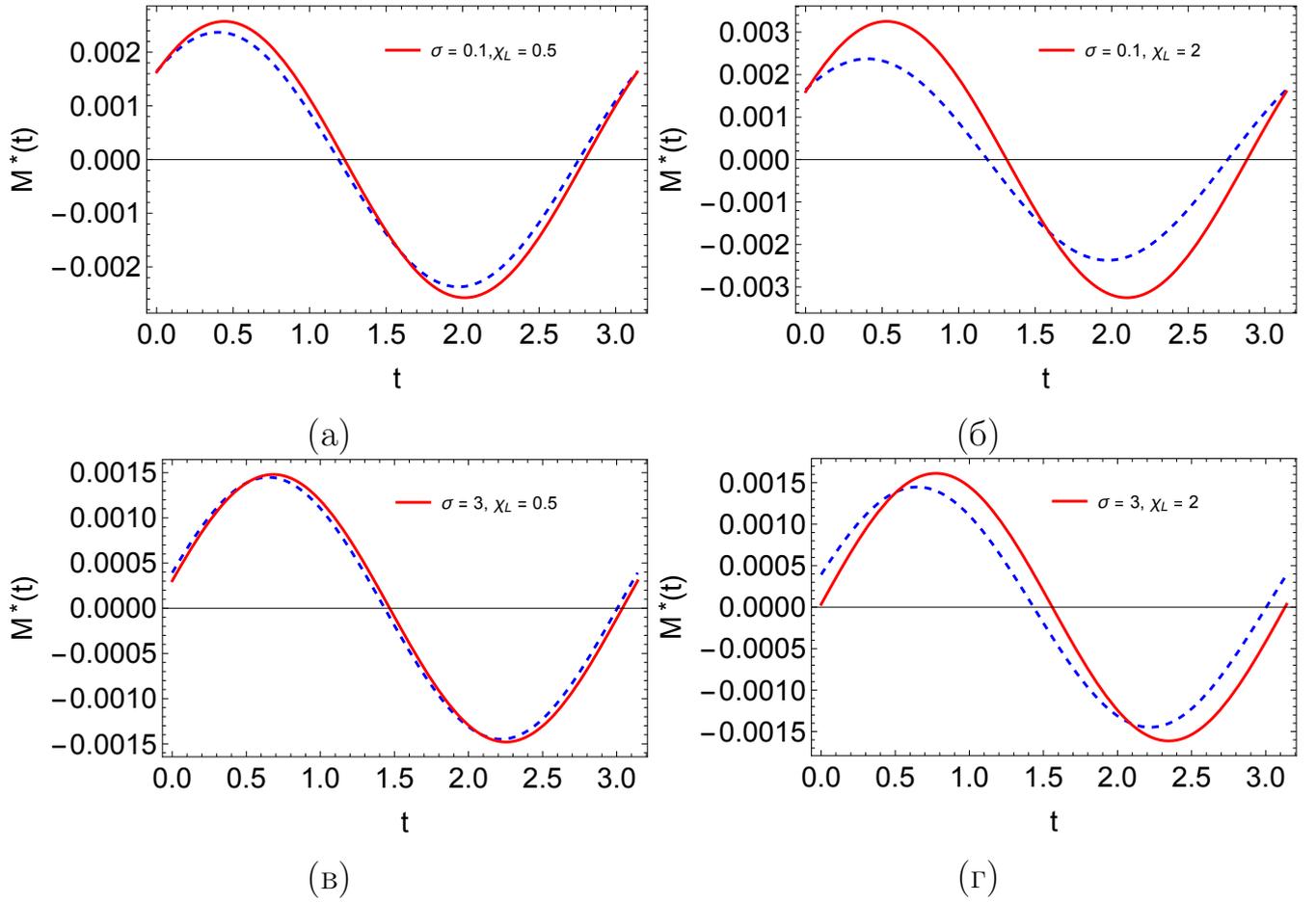


Рис. 2.2.2 – Нормированная намагниченность  $M^*(t) = M(t)/\rho m$  не взаимодействующих (синие пунктирные линии) и взаимодействующих (красные линии) частиц при малой амплитуде  $\alpha_{ac} = 0.01$  и фиксированной частоте  $\omega\tau_D = 1$  переменного магнитного поля. Переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания. Аналитическое решение. (а)  $\sigma = 0.1, \chi_L = 0.5$ , (б)  $\sigma = 0.1, \chi_L = 2$ , (в)  $\sigma = 3, \chi_L = 0.5$ , (г)  $\sigma = 3, \chi_L = 2$ .

Поскольку внешнее переменное магнитное поле параллельно длинной оси трубки, то размагничивающие эффекты отсутствуют и динамическая восприимчивость равна:

$$\chi_{||} = \frac{\partial M_{||}}{\partial (h_{ac} e^{i\omega t})} = \chi_L A_1. \quad (2.2.9)$$

На рисунке 2.2.3 представлен спектр динамической восприимчивости (действительная (а) и мнимая (б) часть) в зависимости от частоты переменного магнитного поля при различных параметрах Ланжевена  $\chi_L = 0.5, 1, 1.5, 2$  (характеризует величину диполь-дипольного взаимодействия и концентрацию частиц). Параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . Сплошные линии – реше-

ние с учетом диполь-дипольных взаимодействий, пунктирные – одночастичное приближение.

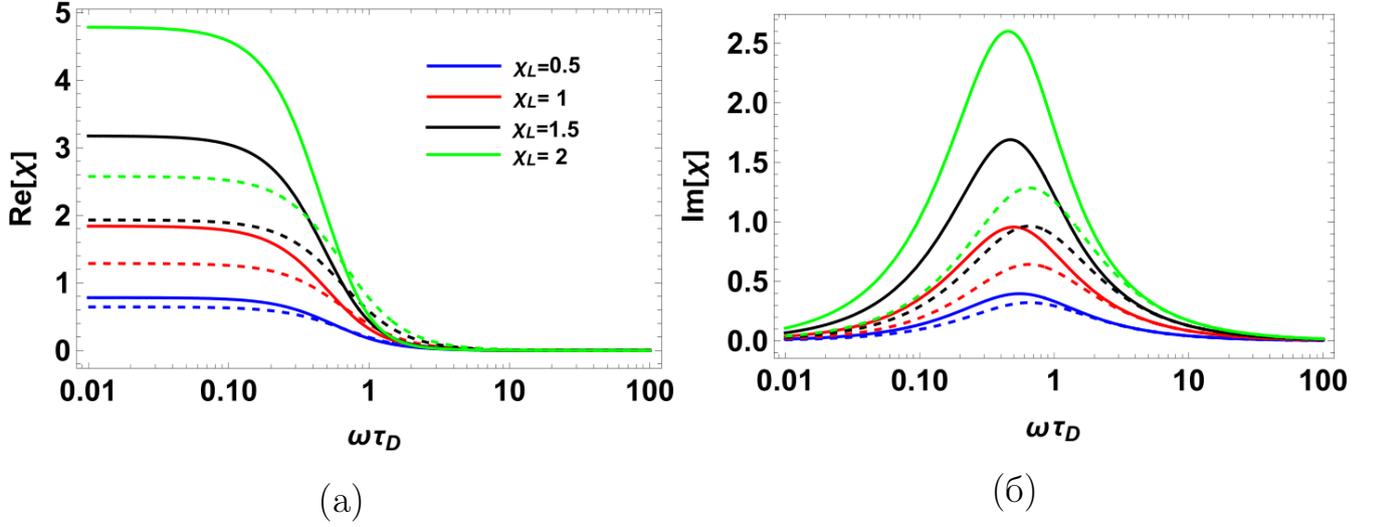


Рис. 2.2.3 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений  $\chi_L = 0.5, 1, 1.5, 2$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . Случай параллельности переменного магнитного поля и осей легкого намагничивания. Сплошные линии – с учетом взаимодействий, пунктирные линии – одночастичное приближение. Аналитическое решение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

Одновременное увеличение концентрации частиц и величины диполь-дипольных взаимодействий увеличивает магнитный отклик (значения действительной и мнимой части увеличиваются). Однако, при изменении  $\chi_L$  значения частот, при которых достигается максимальное значение мнимой части, не изменяются. Это свидетельствует о том, что усиление диполь-дипольного взаимодействия и увеличение концентрации не влияют на характерное время релаксации магнитного момента. А вот учет взаимодействий (сплошные и пунктирные линии) увеличивает время релаксации магнитного момента.

## 2.2.2. Случай перпендикулярной ориентации оси легкого намагничивания и направления переменного магнитного поля

В этом разделе рассматривается случай перпендикулярности оси легкого намагничивания и приложенного переменного магнитного поля, поэтому вектор  $\mathbf{h} = h_{ac} e^{i\omega t} (0, 1, 0)$ , то есть переменного магнитное поле лежит в плоскости  $Oyz$

на оси  $Oy$ . Магнитная энергия  $U(1)$  в этом случае по формуле (2.1.3) будет равна:

$$U = -\sigma x^2 - \alpha_{ac\perp}^{eff} e^{i\omega t} \sqrt{1-x^2} \sin \phi, \quad (2.2.10)$$

где  $\alpha_{ac\perp}^{eff} = \alpha_{ac} \left(1 - \frac{\chi_L B_1^{id}}{6}\right)$  – параметр Ланжевена «эффективного» перпендикулярного поля,  $B_1^{id}$  – коэффициент ряда по присоединенным полиномам Лежандра, найденный в одночастичном приближении.

Магнитная энергия (2.2.10) зависит от азимутального угла  $\phi$ , поэтому в данном случае будет решаться полное уравнение ФПБ (2.1.1). Решение будем искать в виде разложения по присоединенным полиномам Лежандра:

$$W(1) = W_0(x) + \alpha_{ac} e^{i\omega t} \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin \phi P_n^1(x), \quad (2.2.11)$$

где  $W_0(x)$  имеет такой же вид (2.2.3), как и в случае параллельности переменного магнитного с осями легкого намагничивания.

Подставив выбранный вид решения (2.2.11) и магнитную энергию (2.2.10) в уравнение ФПБ (2.1.1), используя свойство ортогональности присоединенных полиномов Лежандра и линеаризуя слагаемые по  $\alpha_{ac}$ , получим рекуррентные соотношения, связывающие коэффициенты  $B_n, B_{n+2}, B_{n-2}$ :

$$\begin{aligned} & \left[ 2\tau_D i\omega + n(n+1) - 2\sigma \frac{n^2 + n - 3}{(2n-1)(2n+3)} \right] B_n - \\ & - 2\sigma \frac{(n-2)(n-1)(n+1)}{(2n-3)(2n-1)} B_{n-2} + 2\sigma \frac{n(n+2)(n+3)}{(2n+3)(2n+5)} B_{n+2} = \\ & = \frac{(2n+1)(n-1)!}{2(n+1)!} \left( 1 - \frac{\chi_L B_1^{id}}{6} \right) \int_{-1}^1 \left[ \frac{W_0}{\sqrt{1-x^2}} + \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial x} \left( W_0 x \sqrt{1-x^2} \right) \right] P_n^1(x) dx, \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

здесь  $B_{n \leq 0} = 0$ . Явные выражения для  $B_1$  могут быть определены путем усечения этих соотношений в некотором произвольном порядке  $n = k$ , установки  $B_{n > k} = 0$  и решения системы из  $k$  алгебраических уравнений.

Приведем графики плотности вероятности ориентации магнитного момента  $W(x)$  на рисунке 2.2.4 при различных параметра магнитной анизотропии  $\sigma$  и в различные моменты времени. Увеличение параметра магнитной анизотропии  $\sigma$  увеличивает вероятность ориентации магнитного момента под углом  $\varphi = \pi/2$  и уменьшает вероятность ориентации магнитного момента под углом  $\varphi = 3\pi/2$  в момент времени (а)  $t = 0.1$ , когда переменное магнитное поле сонаправлено оси  $Oy$ . Обратная ситуация наблюдается в момент времени (б)  $t = 1.6$ . Из графиков видно, что плотность вероятности ориентации магнитного момента периодична по азимутальному углу  $\varphi$ .

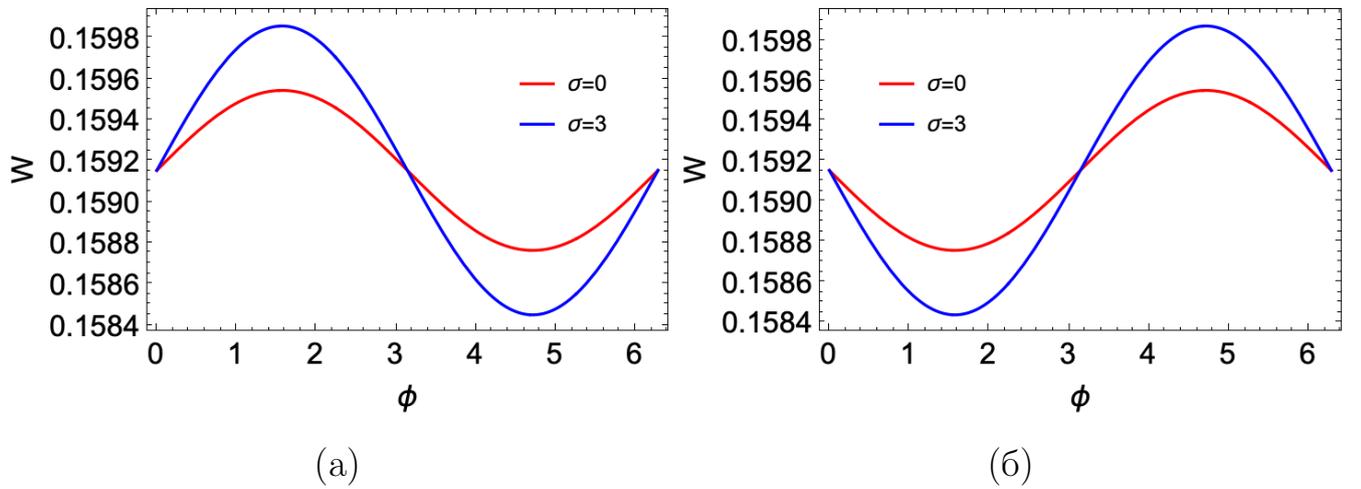


Рис. 2.2.4 – Плотность вероятности ориентации магнитного момента при малой амплитуде  $\alpha_{ac} = 0.01$  и фиксированной частоте  $\omega\tau_D = 1$  переменного магнитного поля, параметре магнитной анизотропии  $\sigma = 0$  (красная линия) и  $\sigma = 3$  (синяя линия). Фиксированный полярный угол  $x = 0.5$ . Система без учета диполь-дипольных взаимодействий. Переменное магнитное поле перпендикулярно осям легкого намагничивания. Аналитическое решение. (а)  $t = 0.1$  (б)  $t = 1.6$ .

Расчет восприимчивости для данного случая  $\hat{\mathbf{n}} \perp \hat{\mathbf{h}}$  несколько сложнее, поскольку внешнее переменное магнитное поле перпендикулярно длинной оси трубки и оси  $Oz$ . Поэтому внешнее переменное магнитное поле и внутреннее макроскопическое поле внутри образца различаются из-за эффектов размагничивания. В этом случае амплитуда внешнего поля  $h_{ac}e^{i\omega t}$  может быть выражена внутренним полем ( $h_{int}e^{i\omega t}$ ) с использованием коэффициента размагничивания, равного  $1/2$  [94], для перпендикулярной оси трубки:

$$M_{\perp} = \chi_L B_1 h_{int} \left( 1 + \frac{1}{2} \chi_{\perp} \right) e^{i\omega t}. \quad (2.2.13)$$

Следовательно, перпендикулярная восприимчивость равна:

$$\chi_{\perp} = \frac{\partial M_{\perp}}{\partial h_{int} e^{i\omega t}} = \chi_L B_1 \left( 1 + \frac{1}{2} \chi_{\perp} \right). \quad (2.2.14)$$

Выражение  $\chi_{\perp}$  из формулы (2.2.14) на основе модифицированной модели среднего поля первого порядка приводит к решению:

$$\begin{aligned} \chi_{\perp} &= \chi_L B_1 \left( 1 - \frac{\chi_L B_1}{2} \right)^{-1} \approx \chi_L B_1 \left( 1 + \frac{\chi_L B_1}{2} \right) = \\ &= \chi_L B_1^{id} \left( 1 - \frac{\chi_L B_1^{id}}{6} \right) \left( 1 + \frac{\chi_L}{2} B_1^{id} \left( 1 - \frac{\chi_L B_1^{id}}{6} \right) \right) = \\ &= \chi_L B_1^{id} \left( 1 + \frac{\chi_L B_1^{id}}{3} \right) + o((\chi_L)^2). \end{aligned} \quad (2.2.15)$$

На рисунке 2.2.5 представлен спектр динамической восприимчивости (действительная (а) и мнимая (б) часть) в зависимости от частоты переменного магнитного поля при различных параметрах Ланжевена  $\chi_L = 0.5, 1, 1.5, 2$  (характеризует величину диполь-дипольного взаимодействия и концентрацию частиц). Параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . Сплошные линии – решение с учетом диполь-дипольных взаимодействий, пунктирные – одночастичное приближение.

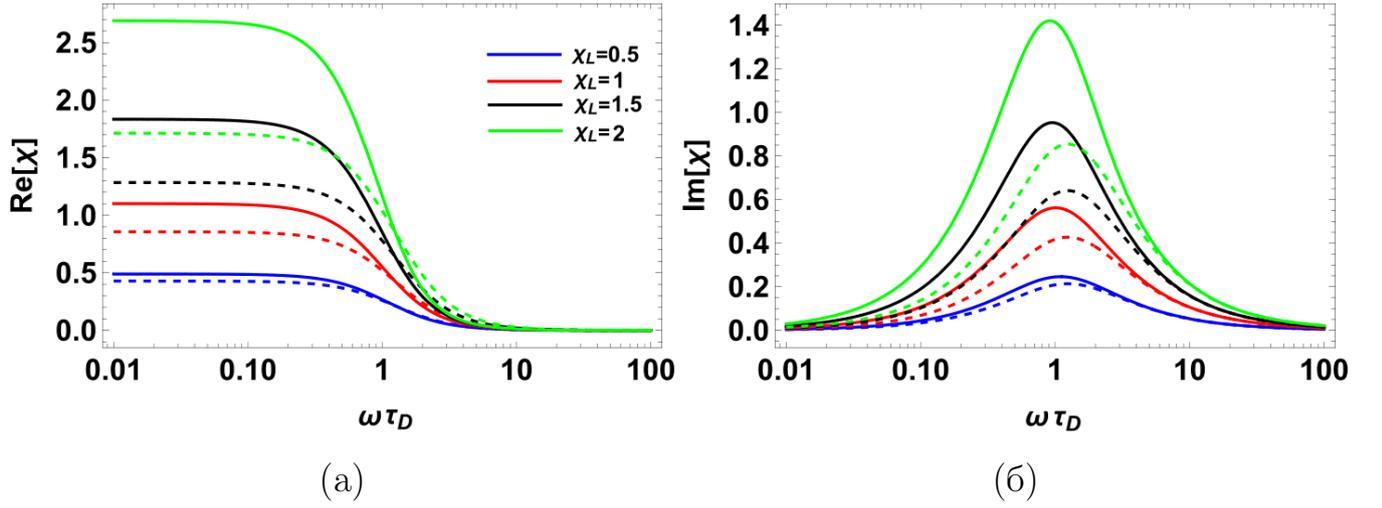


Рис. 2.2.5 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений  $\chi_L = 0.5, 1, 1.5, 2$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . Случай перпендикулярности переменного магнитного поля и осей легкого намагничивания. Сплошные линии – с учетом взаимодействий, пунктирные линии – одночастичное приближение. Аналитическое решение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

Учет и увеличение диполь-дипольных взаимодействий, увеличение концентрации частиц  $\chi_L$  влияют на динамический отклик аналогично случаю параллельности переменного магнитного поля и осей легкого намагничивания. Однако в перпендикулярной конфигурации магнитный отклик на переменное магнитное поле значительно слабей.

### 2.2.3. Случай положения внешнего поля под углом к оси легкого намагничивания

Введем полярный угол  $\xi$  между направлением осей легкого намагничивания и внешним приложенным полем. Вектор переменного магнитного поля лежит в плоскости  $Oyz$ ,  $\mathbf{h} = h_{ac} e^{i\omega t} (0, \sin \xi, \cos \xi)$ . Равенство  $\xi = 0$  соответствует параллельному случаю ориентации переменного магнитного поля по отношению к оси легкого намагничивания,  $\xi = \frac{\pi}{2}$  – перпендикулярному случаю.

Магнитная энергия  $U(1)$  в этом случае по формуле (2.1.3) будет равна:

$$U(1) = -\sigma x^2 - \alpha_{ac\perp}^{eff} \sin \varphi \sqrt{1 - x^2} \sin \xi - \alpha_{ac\parallel}^{eff} x \cos \xi. \quad (2.2.16)$$

Поиск решения уравнения ФПБ (2.1.1) велся в виде разложения по сферическим функциям:

$$W(1) = W_0(x) + \alpha_{ac} e^{i\omega t} \sum_{n=1}^{\infty} [A_n P_n(x) \cos \xi + B_n P_n^1(x) \sin \varphi \sin \xi]. \quad (2.2.17)$$

Коэффициенты  $A_n$  и  $B_n$  находятся из соотношений (2.2.5) и (2.2.12) соответственно.

Намагниченность системы определяется из формулы (2.1.5) с учетом того, что внешнее магнитное поле прикладывается под углом  $\xi$  к осям легкого намагничивания:

$$\begin{aligned} M &= \frac{\rho m}{4\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} (\sin \theta \sin \varphi \sin \xi + \cos \theta \cos \xi) W(1) \sin \theta d\varphi d\theta = \quad (2.2.18) \\ &= \chi_L h_{ac} e^{i\omega t} (A_1 \cos^2 \xi + B_1 \sin^2 \xi) = M_{\parallel} \cos^2 \xi + M_{\perp} \sin^2 \xi. \end{aligned}$$

Динамическая восприимчивость по определению:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h_{ac} e^{i\omega t}} = \chi_{\parallel} \cos^2 \xi + \chi_{\perp} \sin^2 \xi. \quad (2.2.19)$$

На рисунке 2.2.6 представлена частотная зависимость динамической восприимчивости (действительная (а) и мнимая (б) часть) при различных углах между переменным магнитным полем и осями легкого намагничивания ( $\xi = 0, \pi/4$  и  $\pi/2$ ). Параметр магнитной анизотропии постоянен и равен  $\sigma = 1$ . Результаты представлены для двух значений параметра Ланжевена  $\chi_L = 0.2$  и  $\chi_L = 0.05$ . Пунктирными линиями построена динамическая восприимчивость для системы, в которой межчастичные взаимодействия не учитываются. Сплошные линии – аналитическое решение с учетом диполь-дипольных взаимодействий.

Для обоих случаев  $\chi_L = 0,05$  и  $\chi_L = 0,2$  сдвиг вниз действительной части восприимчивости при малых частотах указывает на то, что система меньше

реагирует на переменное магнитное поле с увеличением  $\xi$ ; максимум мнимой части восприимчивости уменьшается и смещается к более высоким частотам с увеличением  $\xi$ . Сдвиг положения максимума в область более высоких частот означает уменьшение характерного времени релаксации. Это поведение более выражено для системы с  $\chi_L = 0.2$ , что соответствует более концентрированной системе.

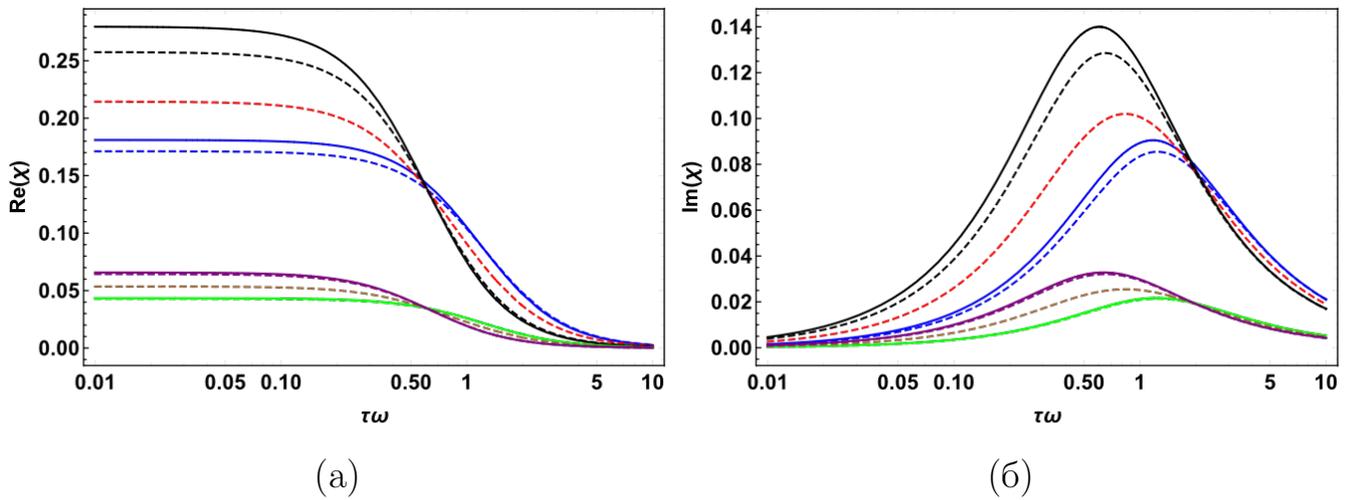


Рис. 2.2.6 – Спектр динамической восприимчивости при  $\chi_L = 0.2$  ( $\xi = 0$  (черная линия),  $\xi = \pi/4$  (красная линия),  $\xi = \pi/2$  (синяя линия)) и  $\chi_L = 0.05$  ( $\xi = 0$  (фиолетовая линия),  $\xi = \pi/4$  (коричневая линия),  $\xi = \pi/2$  (зеленая линия)),  $\sigma = 1$ . Пунктирные линии соответствуют системе без взаимодействий, сплошные линии – система с учетом диполь-дипольных взаимодействий. Аналитическое решение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

Статическая начальная магнитная восприимчивость взаимодействующих обездвиженных частиц приведена на рисунке 2.2.7 в зависимости от  $\sigma$  для системы с параметром Ланжевена  $\chi_L = 0.2$  для случаев, когда направление поля параллельно ( $\xi = 0$ ) и перпендикулярно ( $\xi = \pi/2$ ) осям легкого намагничивания. Более сильная магнитная анизотропия в случае  $\xi = \pi/2$  делает ансамбль более магнитно обездвиженным, а увеличение  $\sigma$  приводит к уменьшению начальной восприимчивости. При  $\xi = 0$  восприимчивость монотонно возрастает с ростом энергии магнитной кристаллографической анизотропии  $\sigma$ .

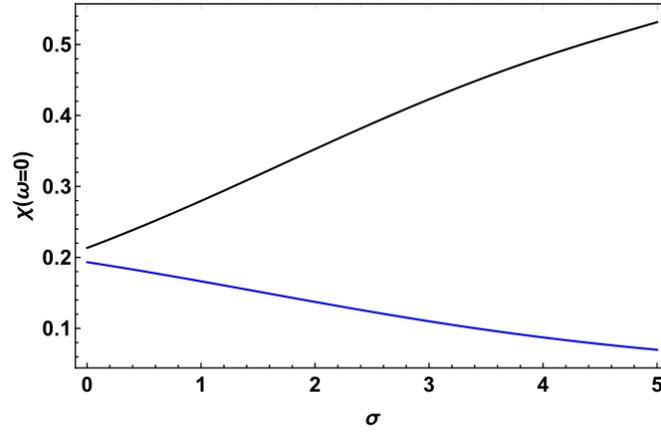


Рис. 2.2.7 – Начальная статическая магнитная восприимчивость взаимодействующих бездвиженных частиц с  $\chi_L = 0.2$  в зависимости от  $\sigma$  при  $\xi = 0$  (черный) и  $\xi = \pi/2$  (синий). Аналитическое решение.

### 2.2.4. Сходимость аналитического решения

Многочленные скалярные рекуррентные соотношения (2.2.5), (2.2.12) могут быть преобразованы в трехчленное матричное соотношение. Такое матричное трехчленное рекуррентное соотношение может быть записано как:

$$\tau_D \frac{d}{dt} c_n(t) = Q_n^- c_{n-1}(t) + Q_n c_n(t) + Q_n^+ c_{n+1}(t), n = 1, 2, 3... \quad (2.2.20)$$

где  $c_n(t)$  – это вектор-столбец моментов,  $Q_n^-$ ,  $Q_n$ ,  $Q_n^+$  – некоммутативные матрицы размерности  $2 \times 2$ , которые не зависят от времени.

Общий метод, используемый для решения уравнения (2.2.20) в терминах матричных непрерывных дробей, был описан в [89] и позже расширен в [69]. Подействовав преобразованием Лапласа на (2.2.20), приходим к уравнению:

$$\tau_D (C_n(s) - c_n(0)) = Q_n^- C_{n-1}(s) + Q_n C_n(s) + Q_n^+ C_{n+1}(s), n = 1, 2, 3... \quad (2.2.21)$$

Согласно [69], точное решение уравнения (2.2.21) с  $C_0(t) = 0$  задается формулой:

$$\tilde{C}_1(s) = \tau_D \Delta_1(s) \left( C_1(0) + \sum_{n=2}^{\infty} \left[ \prod_{k=2}^n Q_{k-1}^+ \Delta_k(s) \right] C_n(0) \right), \quad (2.2.22)$$

где бесконечная непрерывная дробь  $\Delta_k(s)$  определяется как:

$$\Delta_n(s) = \frac{E}{\tau_D s E - Q_n - Q_n^+ \frac{E}{\tau_D s E - Q_{n+1} - Q_{n+1}^+ \frac{E}{\tau_D s E - Q_{n+2} - \dots} Q_{n+2}^-} Q_{n+1}^-}, \quad (2.2.23)$$

где  $E$  – единичная матрица.

В статье [95] доказывається сходимость бесконечной непрерывной дроби (2.2.23) на основе теоремы сходимости, доказанной в [96]. Эта теорема гарантирует сходимость непрерывной дроби (2.2.23) до некоторого предела, если выполняются два условия:

$$\det[Q_{n+1}^+(Q_{n+1})^{-1}] \det[Q_{n+1}^-(-Q_n)^{-1}] \leq \frac{1}{4}, n > 1 \quad (2.2.24)$$

и

$$\lim_{n \rightarrow \infty} 4^N \prod_{n=1}^N \det[Q_{n+1}^+(Q_{n+1})^{-1}] \det[Q_{n+1}^-(-Q_n)^{-1}] = 0. \quad (2.2.25)$$

Для получения матриц  $Q_n^-, Q_n, Q_n^+$  рассматриваемой нами модели необходимо рекуррентные соотношения (2.2.5), (2.2.12) привести к виду (2.2.20).

Для параллельного случая (подраздел 2.2.1) матрицы  $Q_n^-, Q_n, Q_n^+$  имеют вид:

$$Q_n = \begin{pmatrix} \frac{2\sigma n(2n-1)}{(4n-3)(4n+1)} - n(2n-1) & 0 \\ 0 & \frac{2\sigma n(2n+1)}{(4n-1)(4n+3)} - n(2n+1) \end{pmatrix}, \quad (2.2.26)$$

$$Q_n^+ = \begin{pmatrix} \frac{-2\sigma n(4n^2-1)}{16n^2-1} & 0 \\ 0 & \frac{-4\sigma n(n+1)(2n+1)}{(4n+1)(4n+3)} \end{pmatrix}, \quad (2.2.27)$$

$$Q_n^- = \begin{pmatrix} \frac{4\sigma n(n-1)(2n-1)}{(4n-1)(4n-3)} & 0 \\ 0 & \frac{2\sigma n(4n^2-1)}{16n^2-1} \end{pmatrix}. \quad (2.2.28)$$

На рисунке 2.2.8 построена зависимость  $\det[Q_{n+1}^+(Q_{n+1})^{-1}]\det[Q_{n+1}^-(-Q_n)^{-1}]$  от  $n$  для различных параметров магнитной анизотропии ( $\sigma = 1, \sigma = 5, \sigma = 10, \sigma = 20$ ). Условие (2.2.24) выполняется для всех  $n > 1$  при  $\sigma = 1, \sigma = 5$ , а вот для  $\sigma = 10, \sigma = 20$  условие (2.2.24) выполняется при  $n > 4$  и  $n > 8$  соответственно. Условие (2.2.25) выполняется для любых параметров магнитной анизотропии  $\sigma$ .

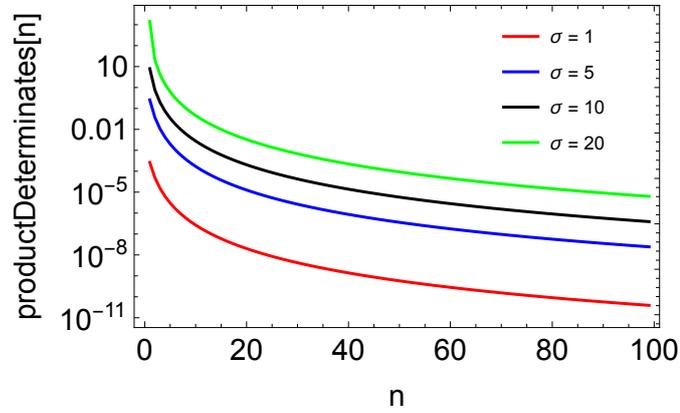


Рис. 2.2.8 – Значение  $\det[Q_{n+1}^+(Q_{n+1})^{-1}]\det[Q_{n+1}^-(-Q_n)^{-1}]$  для  $\sigma = 1, \sigma = 5, \sigma = 10, \sigma = 20$  в параллельном случае ориентации переменного магнитного поля и осей легкого намагничивания.

Ясно, что при больших значениях параметра магнитной анизотропии для сходимости бесконечной непрерывной дроби (2.2.23) необходимо выбирать определенное количество членов ряда  $N = n$ , при котором выполняются оба условия сходимости. На рисунке 2.2.9 построена зависимость количества членов ряда, необходимого для выполнения условий теоремы о сходимости, от параметра магнитной анизотропии.

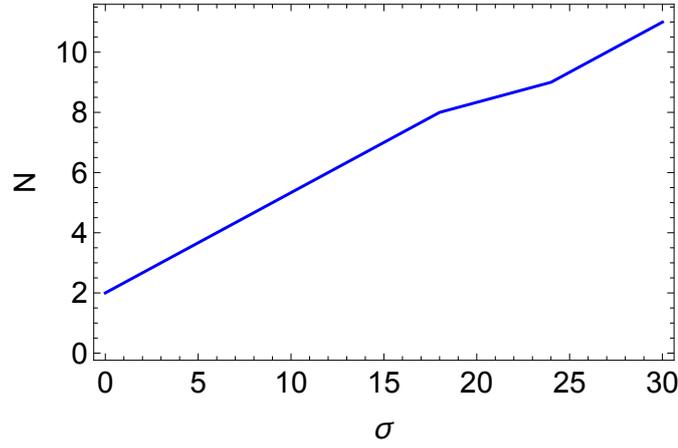


Рис. 2.2.9 – Зависимость количества членов ряда от параметра магнитной анизотропии в параллельном случае ориентации переменного магнитного поля и осей легкого намагничивания.

Для перпендикулярного случая (подраздел 2.2.3) матрицы  $Q_n^-$ ,  $Q_n$ ,  $Q_n^+$  имеют вид:

$$Q_n = \begin{pmatrix} n(1 - 2n) - \frac{\sigma(-4n^2 + 2n + 3)}{(4n+1)(4n-3)} & 0 \\ 0 & -n(2n + 1) - \frac{\sigma(-4n^2 - 2n + 3)}{(4n+3)(4n-1)} \end{pmatrix}, \quad (2.2.29)$$

$$Q_n^+ = \begin{pmatrix} -\frac{2\sigma(n+1)(2n-1)(2n+1)}{(4n-1)(4n+1)} & 0 \\ 0 & -\frac{4\sigma n(n+1)(2n+3)}{(4n+1)(4n+3)} \end{pmatrix}, \quad (2.2.30)$$

$$Q_n^- = \begin{pmatrix} \frac{4\sigma n(n-1)(2n-3)}{(4n-3)(4n-1)} & 0 \\ 0 & \frac{2\sigma(n-1)(2n-1)(2n+1)}{(4n-1)(4n+1)} \end{pmatrix}. \quad (2.2.31)$$

На рисунке 2.2.10 построена зависимость  $\det[Q_{n+1}^+(Q_{n+1})^{-1}]\det[Q_{n+1}^-(-Q_n)^{-1}]$  от  $n$  для различных параметров магнитной анизотропии ( $\sigma = 1, \sigma = 5, \sigma = 10, \sigma = 20$ ). В перпендикулярном случае выводы о сходимости аналогичны параллельному случаю.

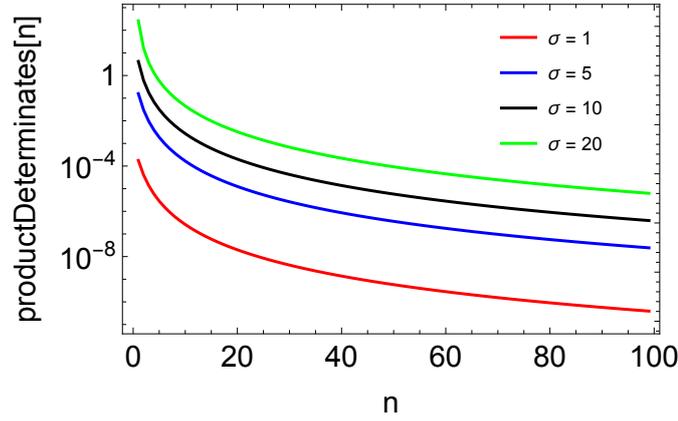


Рис. 2.2.10 – Значение  $\det[Q_{n+1}^+(Q_{n+1})^{-1}]\det[Q_{n+1}^-(-Q_n)^{-1}]$  для  $\sigma = 1, \sigma = 5, \sigma = 10, \sigma = 20$  в перпендикулярном случае ориентации переменного магнитного поля и осей легкого намагничивания.

## 2.3. Численное решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна для произвольной амплитуды переменного магнитного поля

Аналитическое решение уравнения ФПБ (2.1.1) позволяет моделировать систему только для малых амплитуд переменного магнитного поля ( $\alpha_{ac} \ll 1$ ). Это связано с тем, что в разложении плотности вероятности магнитного момента  $W(t, x, \varphi)$  (2.2.17) параметр Ланжевена  $\alpha_{ac}$  входит линейно. Для исследования магнитных свойств систем с произвольной амплитудой переменного магнитного поля уравнение ФПБ решено численно.

### 2.3.1. Случай сонаправленной ориентации оси легкого намагничивания и направления переменного магнитного поля

Для численного решения уравнения ФПБ (2.2.2) обезразмерим время  $t_{und} = \frac{t}{2\tau_D}$ . Введем новое обозначение частоты переменного магнитного поля  $r = 2\omega\tau_D$ . Вектор переменного магнитного поля в новых обозначениях равен  $\mathbf{h} = h_{ac} \cos(rt)\hat{\mathbf{h}}$ .

Для уравнения конвекции-диффузии:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} (v_{\alpha}(x, t)u) - \sum_{\alpha=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left( k(x) \frac{\partial u}{\partial x_{\alpha}} \right) = f(x, t). \quad (2.3.1)$$

в статье [93] была доказана сходимость и безусловная устойчивость конечно-разностной схемы:

$$\frac{\exp(-\delta h_t) u^{n+1} - u^n}{h_t} + (C_2 + D + \delta E)(\exp(-\delta h_t) u^{n+1}) = 0, \quad (2.3.2)$$

где  $C_2$  – дискретный оператор конвекции,  $D$  – разностный оператор диффузионного переноса,  $h_t$  – шаг по времени. Эта схема была использована для решения уравнения ФПБ (2.2.2). Первое слагаемое в правой части уравнения можно интерпретировать как диффузионное, а второе – конвекционное. Для уравнения ФПБ (2.2.2) численная схема (2.3.2) имеет вид:

$$\frac{\exp(-\delta h_t) W_i^k - W_i^{k-1}}{h_t} + (C_2 + D + \delta)[\exp(-\delta h_t) W^k(x)] = 0, \quad (2.3.3)$$

$$i = 0 \dots N_x, k = 0 \dots N_t.$$

Для разностного оператора диффузионного переноса  $D$  используется центральная конечная разность 2-го порядка.

$$DW^k(x) = \frac{1}{h_x^2} \left[ -k \left( x_i + \frac{h_x}{2} \right) (W_{i+1}^k - W_i^k) + k \left( x_i - \frac{h_x}{2} \right) (W_i^k - W_{i-1}^k) \right], \quad (2.3.4)$$

где  $k(x) = (1 - x^2)$ .

Дискретный оператор  $C_2$  построен таким образом, чтобы удовлетворять критериям устойчивости численного решения, и определяется как:

$$C_2 W^k(x) = \frac{1}{2h_x} v(t^*, x + 0.5h_x) (W_{i+1}^k + W_i^k) - \quad (2.3.5)$$

$$-\frac{1}{2h_x}v(t^*, x - 0.5h_x)(W_i^k + W_{i-1}^k),$$

$$t^* = 0.5(t_{n+1} + t_n), v(t, x) = k(x) \frac{\partial U(1)}{\partial x} = (2\sigma x + \alpha_{ac} \cos rt) (1 - x^2).$$

В разностной схеме (2.3.2)  $\delta$  это параметр регуляризации, который используется для безусловной устойчивости численной схемы и равен:

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{1}{2} \max \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right| = \frac{1}{2} \max |2\sigma (1 - x^2) - 2x (2\sigma x + \alpha_{ac} \cos rt)| \leq \\ &\leq |2\sigma (1 - x^2)| + |4\sigma x^4| + |2x\alpha_{ac} \cos rt| \leq 2\sigma + 4\sigma + 2\alpha_{ac} = \\ &= 6\sigma + 2\alpha_{ac}. \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

Дискретное уравнение (2.3.2) представляется линейной алгебраической системой с неизвестными  $W_0^k, W_1^k, \dots, W_N^k$ :

$$A_x W_{i-1}^k + B_x W_i^k + C_x W_{i+1}^k = h_x^2 W_i^{k-1}, \quad (2.3.7)$$

где коэффициенты  $A_x, B_x, C_x$  равны:

$$\begin{aligned} A_x &= e^{-\delta h_t} h_t \left[ -k \left( x_i - \frac{h_x}{2} \right) - \frac{h_x}{2} v \left( t^*, x_i - \frac{h_x}{2} \right) \right], \\ B_x &= e^{-\delta h_t} \left[ h_x^2 (1 + \delta h_t) + h_t \left( k \left( x_i + \frac{h_x}{2} \right) + k \left( x_i - \frac{h_x}{2} \right) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{h_x}{2} v \left( t^*, x_i + \frac{h_x}{2} \right) - \frac{h_x}{2} v \left( t^*, x_i - \frac{h_x}{2} \right) \right) \right], \\ C_x &= e^{-\delta h_t} h_t \left[ -k \left( x_i + \frac{h_x}{2} \right) + \frac{h_x}{2} v \left( t^*, x_i + \frac{h_x}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

Уравнение (2.3.7) является системой алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей и поэтому решается методом прогонки.

Для выполнения условия нормализации (2.1.2) выполняется нормировка найденного  $W_i^k$  на каждом шаге по времени:

$$W_i^{k,norm} = \frac{W_i^k}{h_x \sum_{i=0}^{N_x-1} W_i^k},$$

следовательно:

$$h_x \sum_{i=0}^{N-1} W_i^{k,norm} = 1.$$

Последнее уравнение представляет условие нормализации (2.1.2) в дискретной форме, определяемое с помощью метода прямоугольников.

Намагниченность  $M$  вычисляется по формуле:

$$M_{||}(t_k) = \rho m \int_{-1}^1 W^{norm}(t_k, x) x dx, \quad x \in \{x_i\}. \quad (2.3.9)$$

На рисунке 2.3.1 представлена намагниченность в зависимости от времени для различных амплитуд переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$ , параметров магнитной анизотропии  $\sigma$  при фиксированной частоте переменного магнитного поля  $\omega\tau_D = 1$  и восприимчивости Ланжевена  $\chi_L = 1$ . Сплошные линии соответствуют системам, которые не учитывают взаимодействия между частицами. Пунктирные линии – в системе учитываются диполь-дипольные взаимодействия. Увеличение безразмерной амплитуды переменного поля  $\alpha_{ac}$  приводит к росту модуля намагниченности. Эта тенденция является результатом растущих ориентационных взаимодействий между магнитным моментом и переменным полем. Изменение параметра магнитной анизотропии  $\sigma$  приводит к смещению экстремумов кривых намагничивания, что указывает на трансформацию релаксационных процессов в системе.

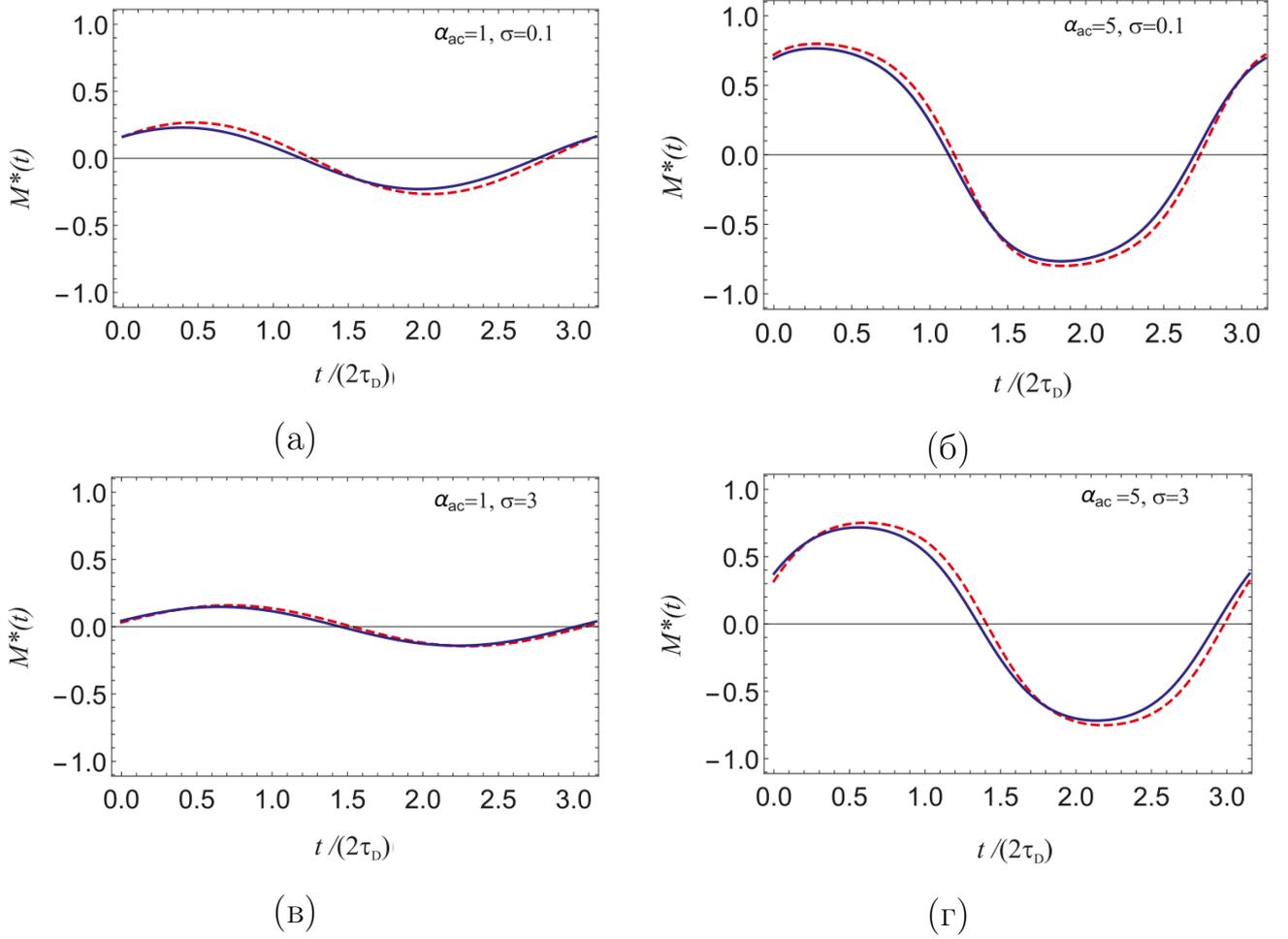


Рис. 2.3.1 – Нормированная намагниченность  $M^*(t) = M(t)/\rho m$  не взаимодействующих (синяя сплошная линия) и взаимодействующих (красная пунктирная линия) между собой частиц. Восприимчивость Ланжевена равна  $\chi_L = 1$ , фиксированная частота переменного магнитного поля равна  $\omega\tau_D = 1$ . Параметры Ланжевена  $\alpha_{ac}$  и параметры магнитной анизотропии  $\sigma$  равны (а)  $\alpha_{ac} = 1$ ,  $\sigma = 0.1$ , (б)  $\alpha_{ac} = 5$ ,  $\sigma = 0.1$ , (в)  $\alpha_{ac} = 1$ ,  $\sigma = 3$ , (г)  $\alpha_{ac} = 5$ ,  $\sigma = 3$ . Переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания. Численное решение.

Действительная  $Re(\chi)$  и мнимая  $Im(\chi)$  часть восприимчивости могут быть вычислены интегрированием по времени  $\{t_k\}$ :

$$Re(\chi) = \frac{\omega}{H\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} M(t) \cos(\omega t) dt, \quad Im(\chi) = \frac{\omega}{H\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} M(t) \sin(\omega t) dt, \quad (2.3.10)$$

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

Численное интегрирование для расчета намагниченности (2.3.9) и динамической восприимчивости (2.3.10) проводится методом трапеций.

На рисунке 2.3.2 показаны спектры восприимчивости для системы с  $\chi_L = 0.5$  и  $\sigma = 1$  при различных значениях амплитуды переменного поля  $\alpha_{ac} = 0.1, 1$  и  $5$ . На низких и умеренных частотах как действительная, так и мнимая части восприимчивости уменьшаются с увеличением напряженности поля. Это показывает, что в сильном поле существует дополнительное ориентационное ограничение, возникающее из-за дипольных корреляций типа «голова-хвост», что снижает восприимчивость. По мере увеличения напряженности поля пик в мнимой части восприимчивости смещается в сторону более высоких частот. Для  $\alpha_{ac} = 5$  мнимая часть достигает максимума при частоте  $\omega\tau_D > 1$ . Это означает, что в сильном переменном поле релаксационные процессы протекают быстрее, чем в идеальной системе обездвиженных магнитных частиц. На высоких частотах магнитный отклик обездвиженных суперпарамагнитных частиц практически не зависит от амплитуды переменного поля. Уменьшение восприимчивости с увеличением внешнего поля наблюдается и в статическом случае. Более того, такое поведение вполне естественно с математической точки зрения: статическую магнитную восприимчивость можно определить как производную от намагниченности  $dM/dH$ . Неотъемлемым свойством кривой статического намагничивания  $M(H)$  является ее восходящая выпуклость. Следовательно,  $d^2M/dH^2 < 0$ , тогда  $dM/dH$  является убывающей функцией от  $H$ . Таким образом, вогнутое свойство кривой статического намагничивания гарантирует, что статическая восприимчивость уменьшается с увеличением поля.

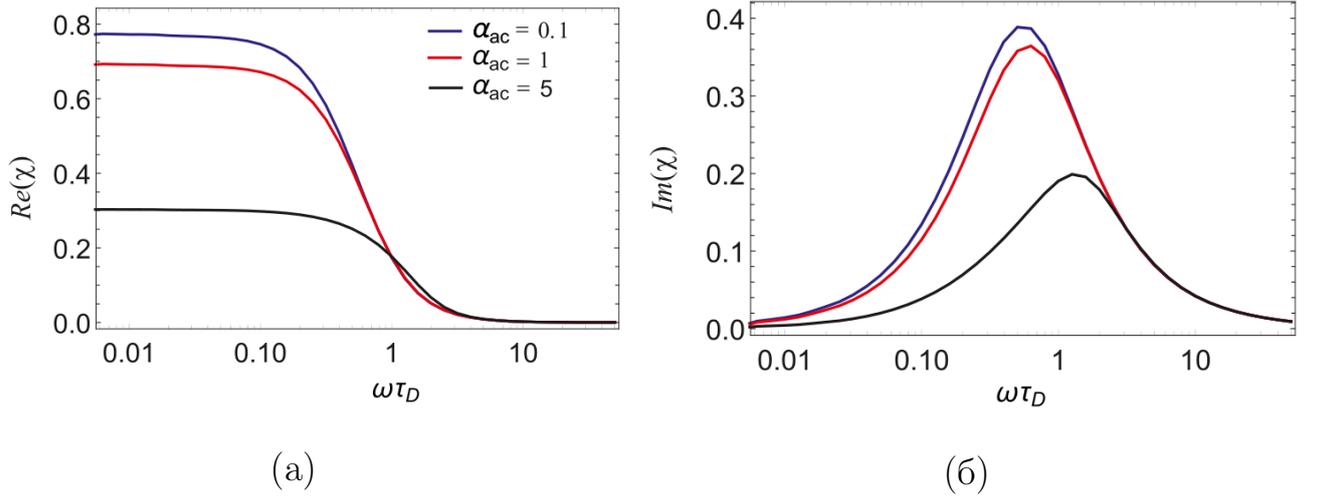


Рис. 2.3.2 – Динамическая восприимчивость ансамбля суперпарамагнитных взаимодействующих обездвиженных частиц с восприимчивостью Ланжевена  $\chi_L = 0.5$  и параметром магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . Переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания. Амплитуда переменного магнитного поля различна:  $\alpha_{ac} = 0.1$  (синяя линия),  $\alpha_{ac} = 1$  (красная линия),  $\alpha_{ac} = 5$  (черная линия).

Спектры восприимчивости для трех систем с  $\chi_L = 0.1, 1$  и  $1.5$  и  $\sigma = 1$  при  $\alpha_{ac} = 3$  показаны на рисунке 2.3.3. Пунктирные линии соответствуют системе невзаимодействующих частиц, сплошные линии – взаимодействующим ферро-частицам. Для образца с низкой концентрацией и малым значением восприимчивости Ланжевена  $\chi_L = 0.1$ , сплошные линии совпадают с пунктирными, что указывает на незначительную роль межчастичных взаимодействий в системе. В умеренно концентрированных образцах с восприимчивостью Ланжевена  $\chi_L = 1$  и  $1.5$  диполь-дипольные взаимодействия оказывают значительное влияние на динамическую восприимчивость. По мере увеличения параметра Ланжевена  $\chi_L$  восприимчивость смещается вверх как для взаимодействующих, так и для невзаимодействующих частиц, отражая рост магнитного отклика образца. Положение максимума мнимой части для невзаимодействующих частиц остается неизменным с увеличением  $\chi_L$ , в то время как для взаимодействующих частиц наблюдается небольшой сдвиг максимума влево. Это связано с тем, что дипольные корреляции «голова-хвост» приводят к увеличению характерного времени вращения, тогда как время релаксации магнитного момента невзаимодействующих частиц не зависит от  $\chi_L$ .

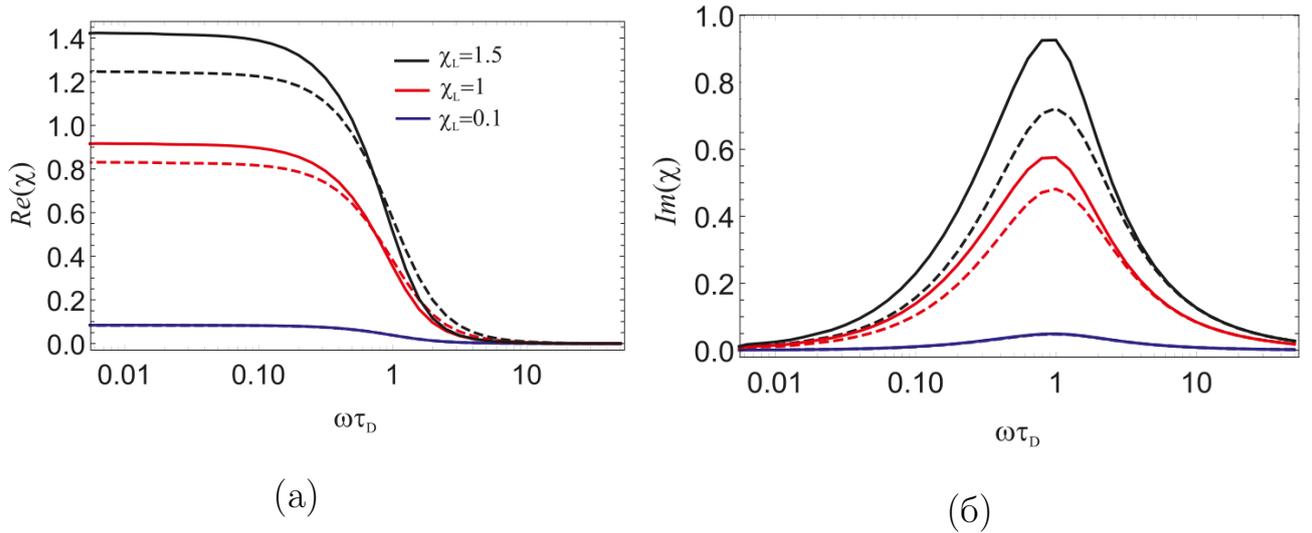


Рис. 2.3.3 – Спектры восприимчивости невзаимодействующих (пунктирные линии) и взаимодействующих (сплошные линии) частиц с  $\sigma = 1$  при  $\alpha_{ac} = 3$ . Параметры Ланжевена  $\chi_L = 1.5$  (черная линия),  $\chi_L = 1$  (красная линия),  $\chi_L = 0.1$  (синяя линия). Переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания. Численное решение.

### 2.3.2. Случай перпендикулярной ориентации оси легкого намагничивания и направления переменного магнитного поля

В случае перпендикулярной конфигурации переменного магнитного поля и осей легкого намагничивания, плотность вероятности ориентации магнитного момента также зависит от азимутального угла  $\varphi$ . В этом случае сведем дифференциальное уравнение к системе двух разностных уравнений. Разностные схемы метода переменных направлений основываются на представлении оператора по пространственным переменным  $A$  в виде суммы двух операторов  $A_1$  и  $A_2$ , каждый из которых является одномерным.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Au = 0, \quad A = A_1 + A_2, \quad (2.3.11)$$

где  $A$ ,  $A_1$ ,  $A_2$  – линейные дифференциальные операторы.  $A_1$  – дифференциальный оператор по пространственной переменной  $x$ ,  $A_2$  – дифференциальный оператор по  $\varphi$ :

$$\begin{aligned}
A_1 u &= \frac{\partial}{\partial x} (v_1(t, x, \varphi) u) + \frac{\partial}{\partial x} (k_1(x) u_x) + \delta u, \\
A_2 u &= \frac{\partial}{\partial \varphi} (v_2(t, x, \varphi) u) + \frac{\partial}{\partial \varphi} (k_2(x) u_\varphi) + \delta u,
\end{aligned} \tag{2.3.12}$$

где параметр регуляризации  $\delta = 0.5 \max |(v_1)'_x + (v_2)'_\varphi|$ , С помощью классической разностной схемы переменных направлений (схема Писмена-Рэкфорда) [97] уравнение (2.3.11) сводится к системе дискретных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - u^k}{0.5h_t} + \Lambda_1 u^{k+\frac{1}{2}} + \Lambda_2 u^k = 0, \\ \frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{1}{2}}}{0.5h_t} + \Lambda_1 u^{k+\frac{1}{2}} + \Lambda_2 u^{k+1} = 0. \end{cases} \tag{2.3.13}$$

здесь  $\Lambda_1$  и  $\Lambda_2$  – разностные операторы, аппроксимирующие дифференциальные операторы  $A_1$  и  $A_2$ .

Интерпретируя  $u^{k+\frac{1}{2}}$  как решение на момент времени  $t^{k+\frac{1}{2}} = t^k + \frac{h_t}{2}$ , можно заметить, что первое уравнение системы (2.3.13) соответствует определению решения по неявной схеме по переменной  $x$  (оператор  $\Lambda_1$ ) и по явной схеме по переменной  $\varphi$  (оператор  $\Lambda_2$ ). Тем самым, второе уравнение системы (2.3.13) соответствует использованию явной схемы по  $x$  и чисто неявной – по  $\varphi$ . Неявные слагаемые оставим в левых частях уравнений, явные перенесем в правую часть:

$$\begin{cases} \left(1 + \frac{h_t}{2} \Lambda_1\right) u^{k+\frac{1}{2}} = \left(1 - \frac{h_t}{2} \Lambda_2\right) u^k, \\ \left(1 + \frac{h_t}{2} \Lambda_2\right) u^{k+1} = \left(1 - \frac{h_t}{2} \Lambda_1\right) u^{k+\frac{1}{2}}. \end{cases} \tag{2.3.14}$$

Проведем обратную замену  $u^k = e^{\delta h_t} W^k$ :

$$\begin{cases} e^{-\frac{\delta h_t}{2}} \left(1 + \frac{h_t}{2} \Lambda_1\right) W^{k+\frac{1}{2}} = \left(1 - \frac{h_t}{2} \Lambda_2\right) W^k, \\ e^{-\frac{\delta h_t}{2}} \left(1 + \frac{h_t}{2} \Lambda_2\right) W^{k+1} = \left(1 - \frac{h_t}{2} \Lambda_1\right) W^{k+\frac{1}{2}}. \end{cases} \tag{2.3.15}$$

Дискретизируя (2.3.15) на равномерной сетке:

$$\begin{aligned}
t_0 &= 0, \quad t_k = t_{k-1} + h_t, \quad k = 0 \dots N_t, \quad N_t = \frac{T}{h_t}, \\
x_0 &= -1 + \frac{h_x}{2}, \quad x_i = x_{i-1} + h_x = -1 + \left(\frac{1}{2} + i\right) h_x, \quad i = 0 \dots N_x, \quad N_x = \frac{2}{h_x},
\end{aligned}$$

$$\varphi_0 = \frac{h_\varphi}{2}, \quad \varphi = \varphi_{j-1} + h_\varphi = \left(\frac{1}{2} + j\right) h_\varphi, \quad j = 0 \dots N_\varphi, \quad N_\varphi = \frac{2\pi}{h_\varphi},$$

получим разностную схему для решения уравнения ФПБ в перпендикулярной конфигурации полей:

$$\begin{cases} -e^{-\frac{\delta h_t}{2}} h_\varphi^2 \left( A_x W_{i-1,j}^{k+\frac{1}{2}} + B_x W_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} + C_x W_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} \right) = \\ \quad = h_x^2 \left( A_\varphi W_{i,j-1}^k + B_\varphi W_{i,j}^k + C_\varphi W_{i,j+1}^k \right), \\ -e^{-\frac{\delta h_t}{2}} h_x^2 \left( A_\varphi W_{i,j-1}^{k+1} + B_\varphi W_{i,j}^{k+1} + C_\varphi W_{i,j+1}^{k+1} \right) = \\ \quad = h_\varphi^2 \left( A_x W_{i,j-1}^{k+\frac{1}{2}} + B_x W_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} + C_x W_{i,j+1}^{k+\frac{1}{2}} \right). \end{cases} \quad (2.3.16)$$

Коэффициенты  $A_x$ ,  $B_x$ ,  $C_x$ ,  $A_\varphi$ ,  $B_\varphi$ ,  $C_\varphi$  равны:

$$\begin{aligned} A_x &= -h_t \left[ k_1 \left( x_i - \frac{h_x}{2} \right) + \frac{h_x}{2} v_1 \left( t^*, x_i - \frac{h_x}{2}, \varphi_j \right) \right], \\ B_x &= 2(1 + \delta h_t) + h_t \left[ k_1 \left( x_i + \frac{h_x}{2} \right) + k_1 \left( x_i - \frac{h_x}{2} \right) \right] + \\ &\quad + \frac{h_t h_x}{2} \left[ v_1 \left( t^*, x_i + \frac{h_x}{2}, \varphi_j \right) - v_1 \left( t^*, x_i - \frac{h_x}{2}, \varphi_j \right) \right], \\ C_x &= h_t \left[ -k_1 \left( x_i + \frac{h_x}{2} \right) + \frac{h_x}{2} v_1 \left( t^*, x_i + \frac{h_x}{2}, \varphi_j \right) \right], \\ A_\varphi &= -h_t \left[ k_2(x_i) + \frac{h_\varphi}{2} v_2 \left( t^*, x_i, \varphi_j - \frac{h_\varphi}{2} \right) \right], \\ B_\varphi &= 2(1 + \delta h_t) + 2h_t k_2(x_i) + \\ &\quad + \frac{h_t h_\varphi}{2} \left[ v_2 \left( t^*, x_i, \varphi_j + \frac{h_\varphi}{2} \right) - v_2 \left( t^*, x_i, \varphi_j - \frac{h_\varphi}{2} \right) \right], \\ C_\varphi &= h_t \left[ -k_2(x_i) + \frac{h_\varphi}{2} v_2 \left( t^*, x_i, \varphi_j + \frac{h_\varphi}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.3.17)$$

где функции  $k_1(x)$ ,  $k_2(x)$ ,  $v_1(t, x, \varphi)$ ,  $v_2(t, x, \varphi)$  равны:

$$\begin{aligned}
k_1(x) &= 1 - x^2, \\
k_2(x) &= \frac{1}{1 - x^2}, \\
v_1(t, x, \varphi) &= \left( 2\sigma x - \frac{\alpha_{ac} x \cos rt \sin \varphi}{\sqrt{1 - x^2}} \right) (1 - x^2), \\
v_2(t, x, \varphi) &= \frac{\alpha_{ac} \cos rt \cos \varphi}{\sqrt{1 - x^2}}.
\end{aligned} \tag{2.3.18}$$

Оба разностных уравнения системы представляют систему алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей.

Для выполнения условия нормализации (2.1.2) производится нормировка найденного  $W_{i,j}^k$  на каждом шаге по времени:

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

следовательно:

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

Последнее уравнение представляет условие нормализации (2.1.2) в дискретной форме, определяемое с помощью метода прямоугольников.

Намагниченность  $M$  вычисляется по формуле:

$$\begin{aligned}
M_\perp(t_k) &= \rho m \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 W^{norm}(t_k, x, \varphi) \sqrt{1 - x^2} \sin \varphi \, dx d\varphi, \\
x &\in \{x_i\}, \quad \varphi \in \{\varphi_j\},
\end{aligned} \tag{2.3.19}$$

На рисунке 2.3.4 представлена намагниченность в зависимости от переменного магнитного поля ( $H = \alpha_{ac} \cos(2\omega\tau_D t)$ ) с различными амплитудами  $\alpha_{ac}$  и фиксированной частотой переменного магнитного поля  $\omega\tau_D = 0.1$ , параметр

магнитной анизотропии  $\sigma = 1$  и восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 1$ . Увеличение безразмерной амплитуды переменного поля  $\alpha_{ac}$  приводит к расширению петли гистерезиса.

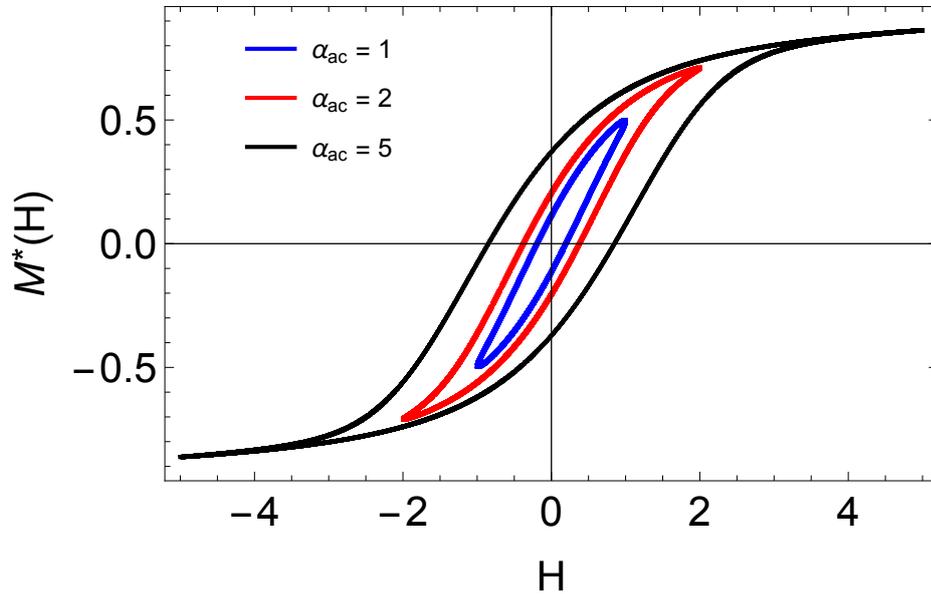


Рис. 2.3.4 – Нормированная намагниченность  $M^*(H) = M(H)/\rho t$  взаимодействующих между собой частиц при различных амплитудах переменного магнитного поля  $\alpha_{ac} = 1$  (синяя линия),  $\alpha_{ac} = 2$  (красная линия),  $\alpha_{ac} = 5$  (черная линия). Восприимчивость Ланжевена равна  $\chi_L = 1$ , фиксированная частота переменного магнитного поля равна  $\omega\tau_D = 0.1$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . Переменное магнитное поле перпендикулярно осям легкого намагничивания. Численное решение.

Действительная  $Re(\chi)$  и мнимая  $Im(\chi)$  части восприимчивости вычисляются по формулам (2.3.10) с использованием (2.3.19).

На рисунке 2.3.5 показаны спектры восприимчивости для системы с  $\chi_L = 1$  и  $\sigma = 1$  при различных значениях амплитуды переменного поля  $\alpha_{ac} = 0.1$ , 1 и 5. На низких и умеренных частотах как действительная, так и мнимая части восприимчивости уменьшаются с увеличением напряженности поля.

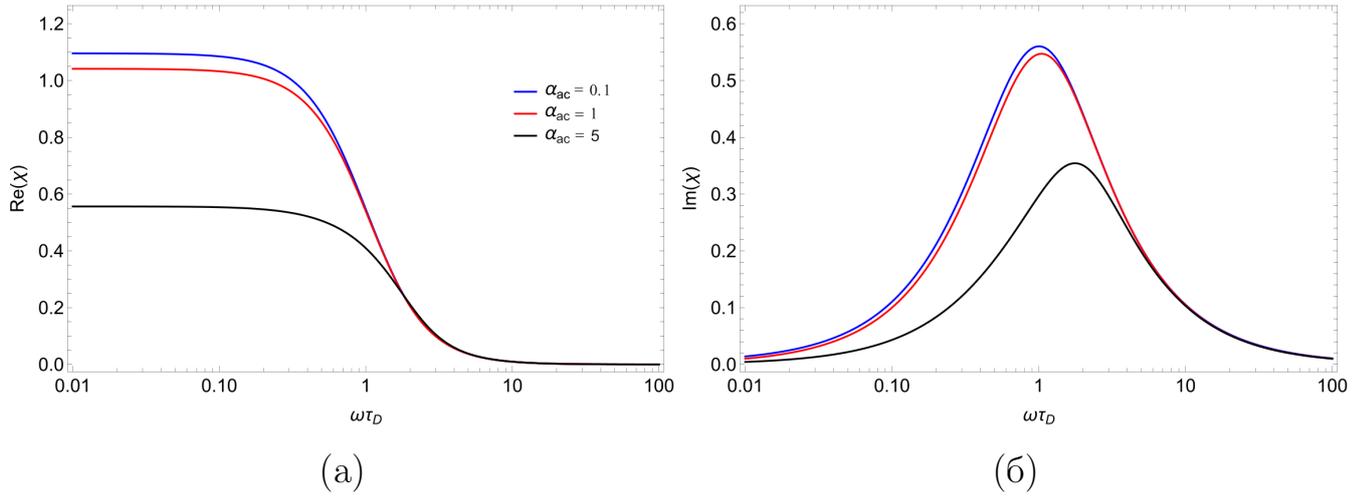


Рис. 2.3.5 – Динамическая восприимчивость ансамбля суперпарамагнитных взаимодействующих обездвиженных частиц с восприимчивостью Ланжевена  $\chi_L = 1$  и параметром магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . Амплитуда переменного магнитного поля различна  $\alpha_{ac} = 0.1, 1$  и  $5$ . Переменное магнитное поле перпендикулярно осям легкого намагничивания. Численное решение.

### 2.3.3. Оценка погрешности численного решения

В ходе работы был произведен «замер» погрешности решения. При оценке погрешности решения от увеличения или уменьшения шагов  $h_x$  и  $h_t$  возникает неоднозначность выбора метода. По-видимому, самый простой способ из известных заключается в том, чтобы вычислить, насколько отличаются левые и правые части решаемого нами уравнения в случае параллельной ориентации переменного магнитного момента и осей легкого намагничивания:

$$\begin{aligned} \Delta W_{\parallel}^k = \sup_{0 < i < N_x} & \left| h_t h_x^2 \left( \frac{W_i^k - W_i^{k-1}}{h_t} + \frac{1}{2h_x} v(t^*, x_i + 0.5h_x)(W_{i+1}^k + W_i^k) - \right. \right. \\ & - \frac{1}{2h_x} v(t^*, x_i - 0.5h_x)(W_i^k + W_{i-1}^k) - \frac{1}{h_x^2} k \left( x_i + \frac{h_x}{2} \right) (W_{i+1}^k - W_i^k) + \\ & \left. \left. + \frac{1}{h_x^2} k \left( x_i - \frac{h_x}{2} \right) (W_i^k - W_{i-1}^k) \right) \right|, \end{aligned} \quad (2.3.20)$$

и в случае перпендикулярной ориентации:

$$\begin{aligned}
\Delta W_{\perp}^k = & \sup_{0 < i < N_x, 0 < j < N_{\varphi}} \left| h_t h_x^2 h_{\varphi}^2 \left[ \frac{W_{i,j}^k - W_{i,j}^{k-1}}{h_t} + \frac{1}{2h_x} v_1(t^*, x_i + 0.5h_x, \varphi) (W_{i+1,j}^k + \right. \right. \\
& + W_{i,j}^k) - \frac{1}{2h_x} v_1(t^*, x_i - 0.5h_x, \varphi) (W_{i,j}^k + W_{i-1,j}^k) - \frac{1}{h_x^2} k_1 \left( x_i + \frac{h_x}{2} \right) (W_{i+1,j}^k - \\
& - W_{i,j}^k) + \frac{1}{h_x^2} k_1 \left( x_i - \frac{h_x}{2} \right) (W_{i,j}^k - W_{i-1,j}^k) + \frac{1}{2h_{\varphi}} v_2(t^*, x_i, \varphi_j + 0.5h_{\varphi}) (W_{i,j+1}^k + \\
& + W_{i,j}^k) - \frac{1}{2h_{\varphi}} v_2(t^*, x_i, \varphi_j - 0.5h_{\varphi}) (W_{i,j}^k + W_{i,j-1}^k) - \frac{1}{h_{\varphi}^2} k_2(x_i) (W_{i,j}^k - W_{i,j+1}^k) + \\
& \left. \left. + \frac{1}{h_{\varphi}^2} k_2(x_i) (W_{i,j}^k - W_{i,j-1}^k) \right] \right|.
\end{aligned} \tag{2.3.21}$$

Погрешности, приведенные в формулах (2.3.20) и (2.3.21), были посчитаны для каждого момента времени и выбраны наибольшие из них. Результаты приведены на рисунках 2.3.6 и 2.3.7. В перпендикулярной ориентации шаги по пространственным переменным равны ( $h_x = h_{\varphi}$ ). Увеличение шага по времени  $h_t$  и пространственным переменным  $h_x$  и  $h_{\varphi}$  приводит к увеличению погрешности, что косвенно свидетельствует о сходимости численных схем.

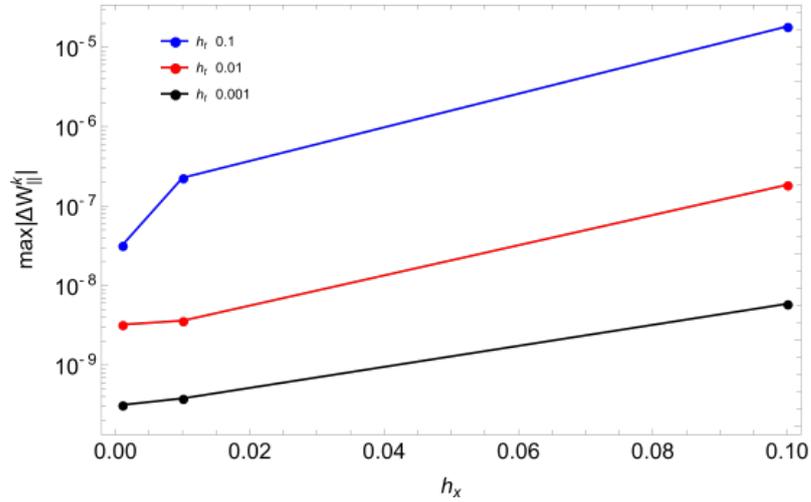


Рис. 2.3.6 – График величины  $\max_k \Delta W_{||}^k$  при  $h_t = 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001$

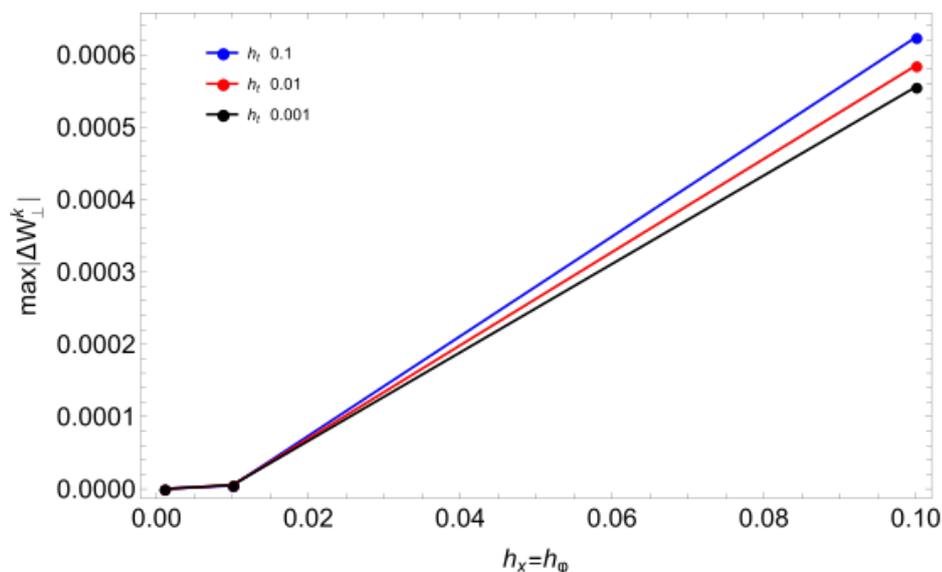


Рис. 2.3.7 – График величины  $\max_k \Delta W_{\perp}^k$  при  $h_t = 0.1, 0.01, 0.001$

## 2.4. Сравнение аналитических и численных результатов

Аналитическое решение уравнения ФПБ (2.1.1) было получено с помощью теории возмущения. Оно справедливо только для систем со слабым переменным полем. Для верификации численной схемы были проведены расчеты динамической восприимчивости при  $\alpha_{ac} = 0.01$ . Результаты представлены на рисунке 2.4.1 (направление переменного магнитного поля параллельно осям легкого намагничивания) и рисунке 2.4.2 (переменное магнитное поле перпендикулярно осям легкого намагничивания) для восприимчивости Ланжевена  $\chi_L = 1$ . Сплошными линиями обозначены системы с учетом взаимодействий, пунктирными линиями – одночастичное приближение.

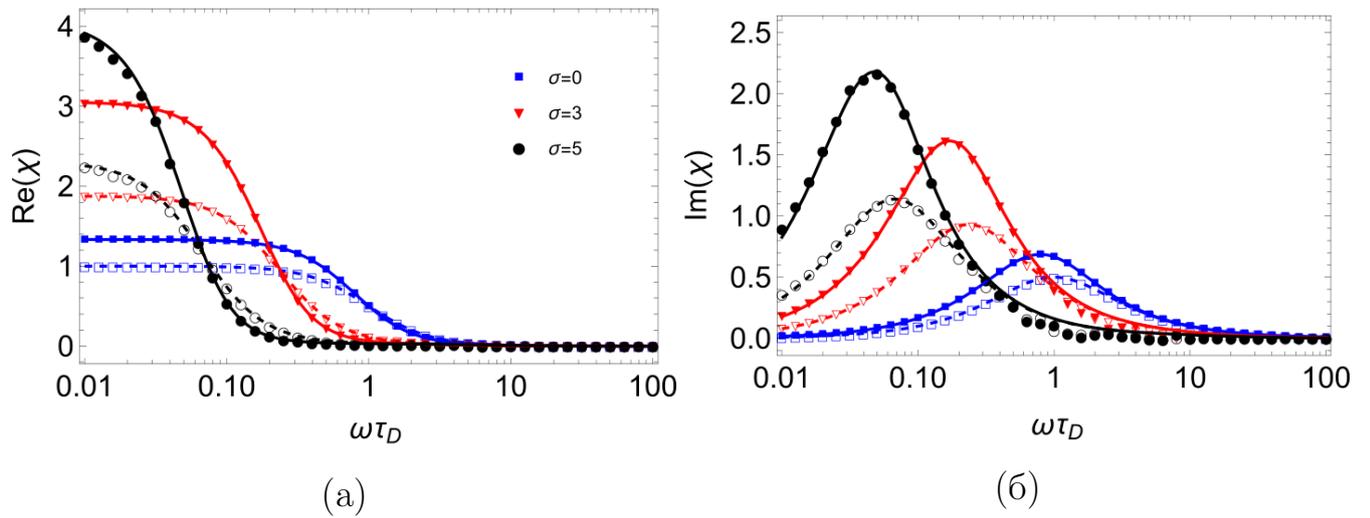


Рис. 2.4.1 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений  $\sigma = 0, 3, 5$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 1$ . Случай параллельности переменного магнитного поля и осей легкого намагничивания. Линии – аналитическое решение, символы – численное решение. Сплошные линии и закрашенные символы – с учетом взаимодействий, пунктирные линии и не закрашенные символы – одночастичное приближение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

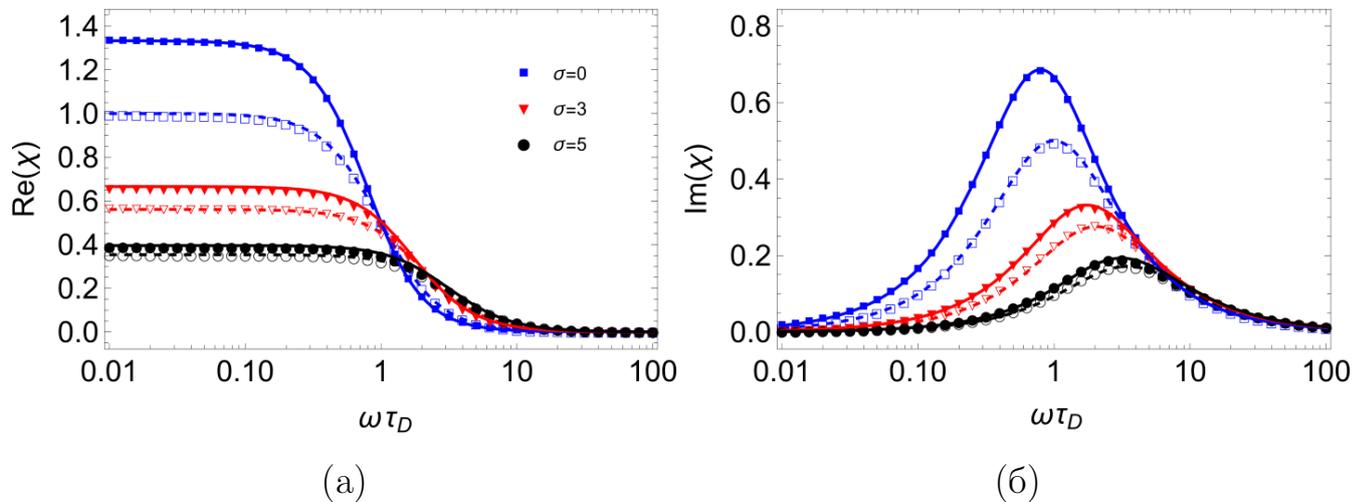


Рис. 2.4.2 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений  $\sigma = 0, 3, 5$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 1$ . Перпендикулярная взаимная ориентация переменного магнитного поля и осей легкого намагничивания. Линии – аналитическое решение, символы – численное решение. Сплошные линии и закрашенные символы – с учетом взаимодействий, пунктирные линии и не закрашенные символы – одночастичное приближение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

В случае, когда поле и оси легкого намагничивания параллельны, увеличение параметра магнитной анизотропии  $\sigma$  приводит к увеличению магнитного отклика на малых частотах переменного магнитного поля. Сдвиг пика мнимой

части в область низких частот свидетельствует об увеличении характерного времени релаксации. В перпендикулярном случае наблюдается обратная ситуация: увеличение магнитной анизотропии приводит к уменьшению восприимчивости на малых частотах. Учет межчастичных диполь-дипольных взаимодействий увеличивает магнитный отклик независимо от направления переменного магнитного поля.

Результаты аналитического и численного решения уравнения ФПБ хорошо согласуются между собой.

## 2.5. Расчет характерных релаксационных времен

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

Положение максимума мнимой части восприимчивости в зависимости от амплитуды поля  $\alpha_{ac}$  и магнитной анизотропии  $\sigma$  показано на рисунке 2.5.1. На левой панели показана система невзаимодействующих частиц, на правой диполь-дипольные взаимодействия учитываются с  $\chi_L = 0.5$ . Переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания.

Увеличение  $\alpha_{ac}$  уменьшает характерное время релаксации магнитного момента частицы, в то время как увеличение  $\sigma$  приводит к увеличению времени релаксации. Это поведение может быть качественно объяснено путем анализа потенциальной энергии частиц. Энергетически выгодно, чтобы магнитные моменты ориентировались так, чтобы достигался минимум потенциальной энер-

гии; эта ориентация совпадает с направлением поля  $\cos \theta_i = 1$  для невзаимодействующих частиц. Следовательно, в динамической системе магнитные моменты, которые направлены противоположно приложенному полю  $\cos \theta_i = -1$ , имеют наибольшее время релаксации. В термодинамическом равновесии и когда  $\cos \theta_i = -1$  энергия частицы (2.1.3) определяется  $U(i) = -\sigma + \alpha_{ac}$ . С увеличением  $\alpha_{ac}$  энергия увеличивается, в то время как увеличение  $\sigma$  приводит к уменьшению энергии. Следовательно, с увеличением  $\alpha_{ac}$  ориентация магнитного момента  $\cos \theta_i = -1$  становится все более невыгодной с точки зрения энергии. Итак, чем больше  $\alpha_{ac}$ , тем быстрее магнитный момент отклоняется от ориентации  $\cos \theta_i = -1$ , следовательно, процессы релаксации ускоряются. Увеличение  $\sigma$  имеет противоположный эффект, замедляя процессы релаксации.

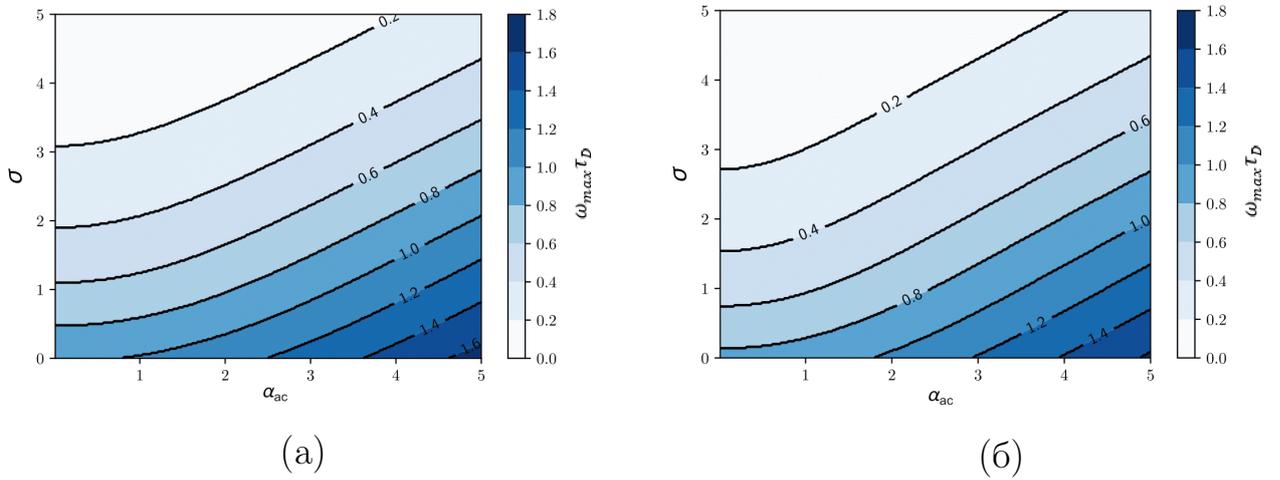


Рис. 2.5.1 – Контурные графики положения максимума мнимой части восприимчивости в зависимости от амплитуды переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$  и параметра магнитной анизотропии  $\sigma$ . (а) Идеальная система (взаимодействия между частицами не учитываются), (б) учитываются диполь-дипольные взаимодействия ( $\chi_L = 0.5$ ). Переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания. Значения были посчитаны численно с шагами  $h_t = h_x = 0.01$  для каждого  $\alpha_{ac}$  и  $\sigma$  из  $\{(\alpha_p, \sigma_q): \alpha_p = 0.02p, \sigma_q = 0.02q, p = 0 \dots 250, q = 0 \dots 250\}$ .

На рисунке 2.5.2 показана зависимость отношения характерных времен релаксации  $\tau/\tau_D$  при  $\alpha_{ac} = 0.01, 1.5, 3$  и  $5$  для системы невзаимодействующих частиц. Пунктирная линия соответствует теоретическому выражению (1.3.2), сплошные линии посчитаны численно. Теоретическое выражение (1.3.2) хорошо согласуется с численным результатом, рассчитанным для  $\alpha_{ac} = 0.01$ . В нем подчеркивалось, что формула (1.3.2) является надежным для системы невзаимодействующих частиц в слабом переменном поле. С увеличением амплитуды

ды магнитного поля  $\alpha_{ac}$ , характерное время релаксации магнитного момента уменьшается, и в области параметров  $\alpha_{ac} \gtrsim 3$  и  $0 \leq \sigma \lesssim 1.5$  (взятых отдельно во вставке) соотношение  $\tau < \tau_D$  является действительным, т.е. релаксация магнитного момента в рассматриваемой системе происходит быстрее, чем в идеальной системе обездвиженных суперпарамагнитных частиц без внутричастичного энергетического барьера. Диполь-дипольные взаимодействия между частицами приводят к значительному увеличению времени релаксации при малых амплитудах поля ( $\alpha_{ac} \lesssim 3$ ) и почти не влияют на релаксационные процессы при больших амплитудах поля ( $\alpha_{ac} \gtrsim 3$ ) (рисунок 2.5.3).

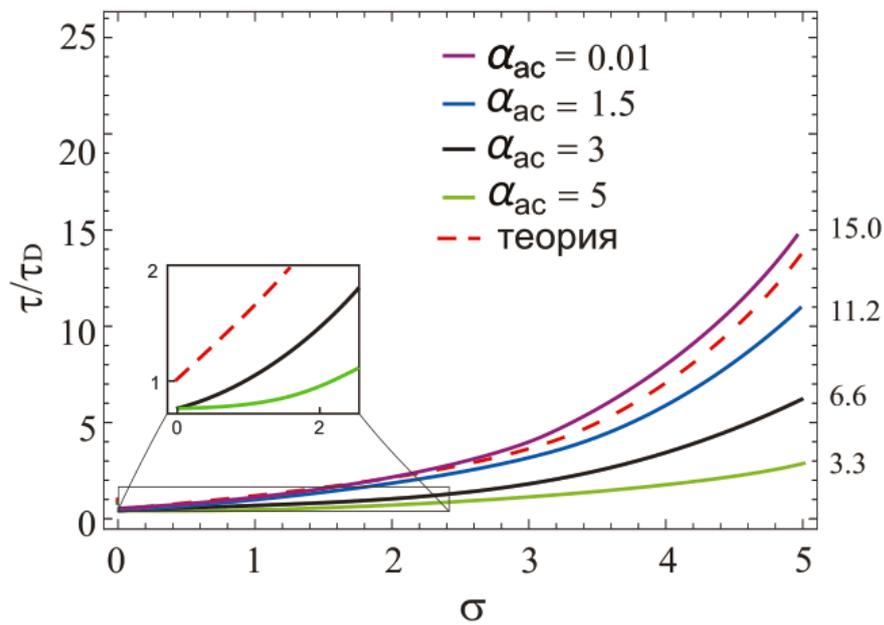


Рис. 2.5.2 – Отношение  $\tau/\tau_D$  для невзаимодействующих частиц в зависимости от параметра магнитной анизотропии при амплитудах переменного магнитного поля  $\alpha_{ac} = 0.01$  (фиолетовая линия), 1.5 (синяя линия), 3 (черная линия) и 5 (зеленая линия). Сплошные линии – численное решение, пунктирные линии – аналитическое выражение (1.3.2) из [88]. Переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания. Численное решение.

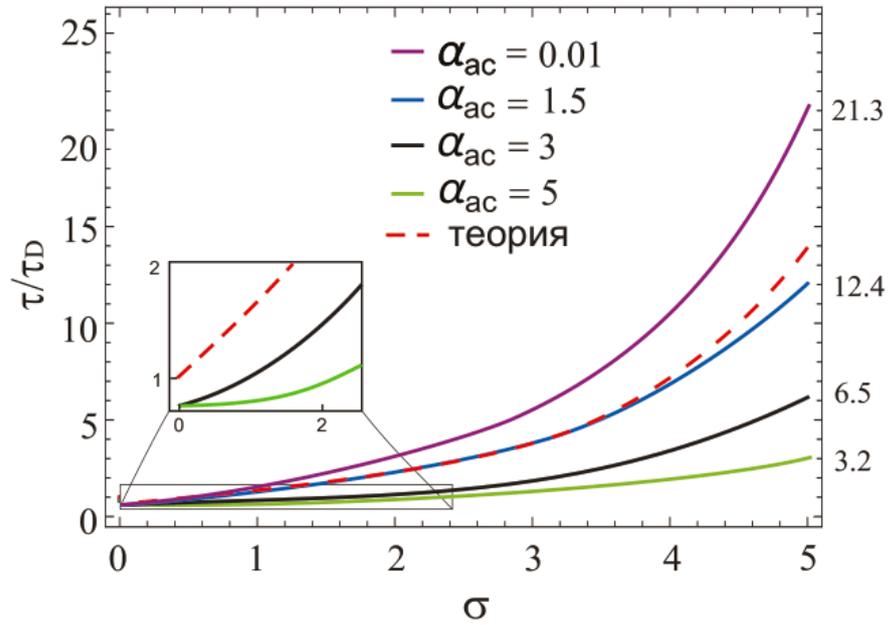


Рис. 2.5.3 – Отношение  $\tau/\tau_D$  для взаимодействующих частиц в зависимости от параметра магнитной анизотропии при амплитудах переменного магнитного поля  $\alpha_{ac} = 0.01$  (фиолетовая линия), 1.5 (синяя линия), 3 (черная линия) и 5 (зеленая линия). Сплошные линии – численное решение, пунктирные линии – аналитическое выражение (1.3.2) из [88]. Переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания.

На рисунке 2.5.4 показано соотношение характерных времен релаксации  $\tau/\tau_D$  систем с различными значениями  $\chi_L = 0.5, 1$  при  $\alpha_{ac} = 0.01, 3$  и  $0 \leq \sigma \leq 5$ . Для сильного магнитного поля взаимодействия между магнитными моментами и полем доминируют над взаимодействиями между частицами, поэтому времена релаксации не зависят от  $\chi_L$ ; только величина магнитного поля и внутренняя магнитная анизотропия влияют на процессы релаксации в системе (рисунок 2.5.4 (б)). В слабом поле увеличение  $\chi_L$  приводит к увеличению времени релаксации (рисунок 2.5.4 (а)).

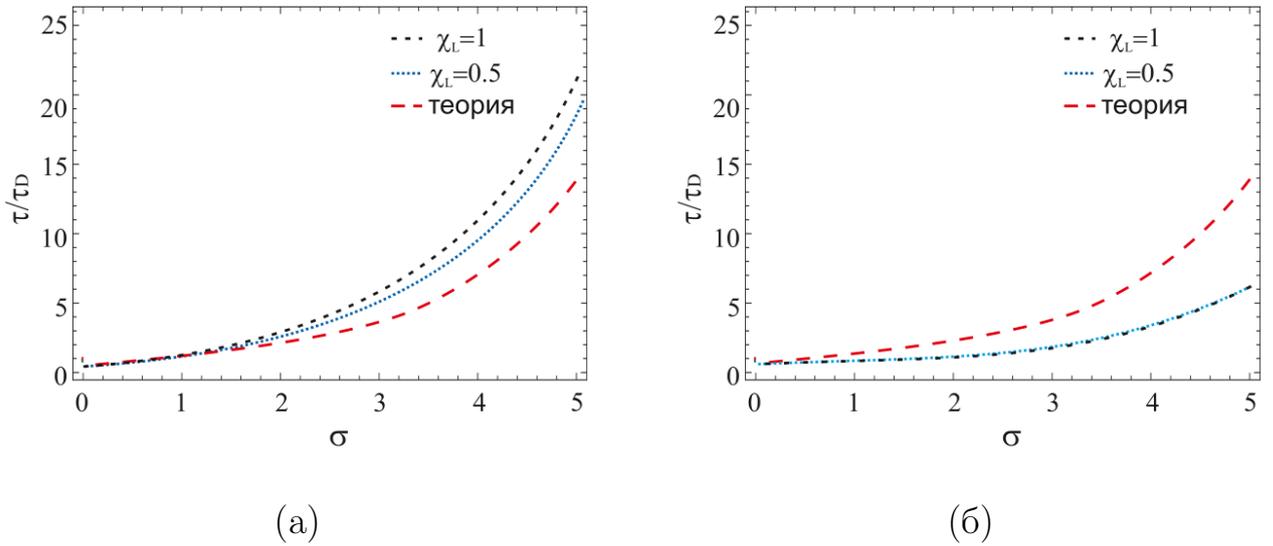


Рис. 2.5.4 – Отношение  $\tau/\tau_D$  в зависимости от параметра магнитной анизотропии  $\sigma$  при восприимчивости Ланжевена  $\chi_L = 0,5, 1$  для невзаимодействующих частиц. Переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания. Численное решение. Амплитуды переменного магнитного поля равны (а)  $\alpha_{ac} = 0.01$ , (б)  $\alpha_{ac} = 3$ .

Положение максимума мнимой части восприимчивости в зависимости от амплитуды поля  $\alpha_{ac}$  и магнитной анизотропии  $\sigma$  показано на рисунке 2.5.5. Диполь-дипольные взаимодействия учитываются с  $\chi_L = 1.5$ . Переменное магнитное поле перпендикулярно осям легкого намагничивания. При увеличении амплитуды переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$  и параметра магнитной анизотропии  $\sigma$  происходит уменьшение характерного времени релаксации магнитного момента.

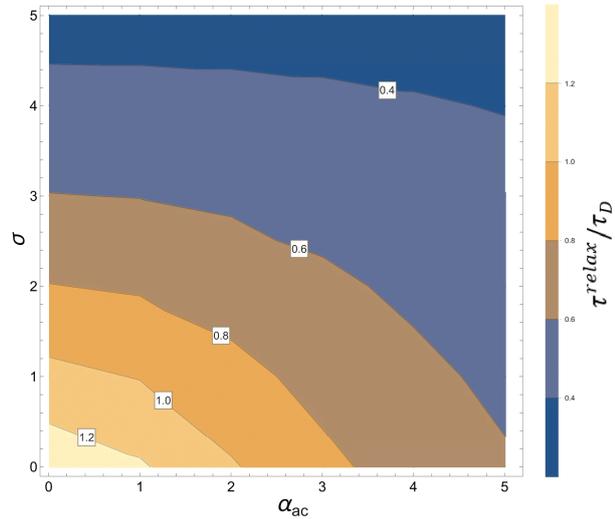


Рис. 2.5.5 – Контурный график  $1/\omega_{max}\tau_D = \tau_{relax}/\tau_D$  в зависимости от амплитуды переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$  и параметра магнитной анизотропии  $\sigma$  при  $\chi_L = 1.5$ . Переменное магнитное поле перпендикулярно осям легкого намагничивания. Расчеты проведены численно с шагами  $h_x = h_\varphi = 0.01$  и  $N_T = 10000$  (количество узлов сетки по времени,  $h_t = T(r)/N_T$ ,  $T(r) = 2\pi/r$ ,  $r = 2\omega\tau_D$ ).

На рисунке 2.5.6 показано соотношение характерных времен релаксации  $\tau/\tau_D$  систем с различными значениями  $\sigma = 0.1, 1, 5$  при  $\chi_L = 1$  в случае, когда переменное магнитное поле перпендикулярно осям легкого намагничивания. При больших значениях магнитной анизотропии  $\sigma = 5$  увеличение амплитуды переменного магнитного поля никак не влияет на релаксационные процессы. При средних значениях  $\sigma = 0.1, 1$  увеличение амплитуды переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$  уменьшает характерное время релаксации.

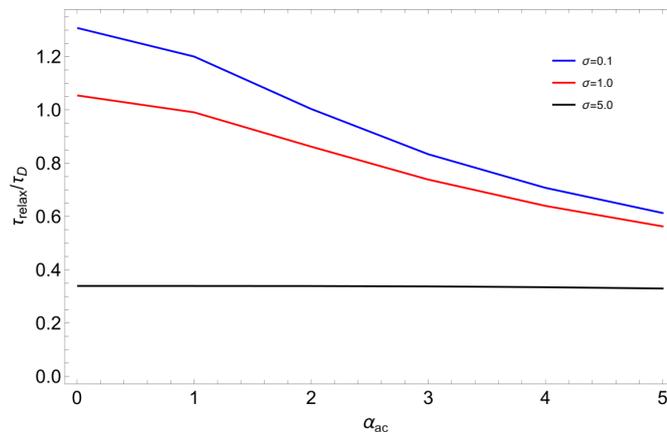


Рис. 2.5.6 – Отношение  $\tau/\tau_D$  в зависимости от амплитуды переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$  при различных параметрах магнитной анизотропии  $\sigma = 0.1, 1, 5$ .  $\chi_L = 1$ . Перпендикулярная ориентация переменного магнитного поля. Численное решение.

## 2.6. Основные результаты главы

В разделе 2.1 представлена модель ансамбля суперпарамагнитных бездвиженных взаимодействующих частиц, находящихся под действием переменного магнитного поля. Рассмотрено уравнение ФПБ (2.1.1), с помощью которого проводится моделирование магнитных свойств ансамбля. Заданы потенциалы взаимодействия и даны определения магнитным характеристикам исследуемой модели.

В разделе 2.2 аналитически решено уравнение ФПБ для случая малых амплитуд переменного поля. Полученное решение представляется в виде ряда по полиномам Лежандра и присоединенным полиномам Лежандра. Доказана сходимость этого ряда. На основе решения уравнения ФПБ определены динамические намагниченность и восприимчивость системы. Проанализировано влияние на намагниченность и динамическую восприимчивость диполь-дипольных взаимодействий, магнитной анизотропии, ориентации переменного магнитного поля. Показано, что учет и увеличение диполь-дипольных взаимодействий, которые характеризуются параметром  $\chi_L$ , усиливают магнитный отклик для любой ориентации переменного магнитного поля. В случае, когда поле направлено параллельно осям легкого намагничивания ( $\xi = 0$ ), магнитный отклик достигает максимума. С увеличением угла  $\xi$  система меньше реагирует на переменное магнитное поле. Показано, что увеличение магнитной анизотропии приводит к увеличению магнитного отклика в параллельном случае и уменьшению в перпендикулярном.

В разделе 2.3 магнитные свойства системы определены численно для произвольной амплитуды переменного магнитного поля. В численном моделировании конечно-разностная схема для уравнения конвекции-диффузии была адаптирована для решения уравнения ФПБ. Проведена оценка погрешности численного решения: уменьшение шагов по пространственным координатам и уменьшение шага по времени уменьшают погрешность. Это свидетельствует о сходимости численной схемы. Показано, что увеличение безразмерной амплитуды переменного поля  $\alpha_{ac}$  приводит к росту модуля намагниченности, уменьшению магнитной восприимчивости, расширению петли магнитного гистерезиса и ускорению релаксационных процессов, происходящих в системе. В случае про-

извольной амплитуды переменного поля характерные зависимости магнитных свойств ансамбля обездвиженных частиц от направления поля, магнитной анизотропии и интенсивности диполь-дипольных взаимодействий остаются теми же, что и для малых амплитуд переменного поля.

В разделе 2.4 проведено сравнение расчетов динамической восприимчивости, проведенных аналитически и численно для малой амплитуды переменного магнитного поля ( $\alpha_{ac} = 0.01$ ). Получено хорошее согласование результатов.

В разделе 2.5 проведен расчет характерных времен релаксации магнитных моментов. В случае, когда магнитное поле направлено параллельно осям легкого намагничивания увеличение амплитуды поля уменьшает характерное время релаксации, в то время как увеличение магнитной анизотропии приводит к его увеличению. В перпендикулярной конфигурации увеличение амплитуды переменного магнитного поля и магнитной анизотропии приводит к уменьшению характерного времени релаксации магнитного момента. Для сильного магнитного поля взаимодействия между магнитными моментами и полем доминируют над взаимодействиями между частицами, поэтому времена релаксации не зависят от  $\chi_L$ ; только величина магнитного поля и внутренняя магнитная анизотропия влияют на процессы релаксации в системе. В слабом поле увеличение  $\chi_L$  приводит к увеличению времени релаксации.

Основное содержание главы опубликовано в работах [19, 20]. В этих статьях Зверев В.С. помогал в формулировании целей, в выборе общих методик исследований и в подготовке публикаций.

# Глава 3. Влияние статического поля на динамические свойства ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц

В данной главе изучается влияние статического магнитного поля, дополнительно приложенного к образцу случайно распределенных обездвиженных суперпарамагнитных частиц, на динамический отклик. Статическое магнитное поле направлено вдоль оси  $Oz$ . В данной работе рассматриваются две взаимных ориентации статического и переменного магнитных полей.

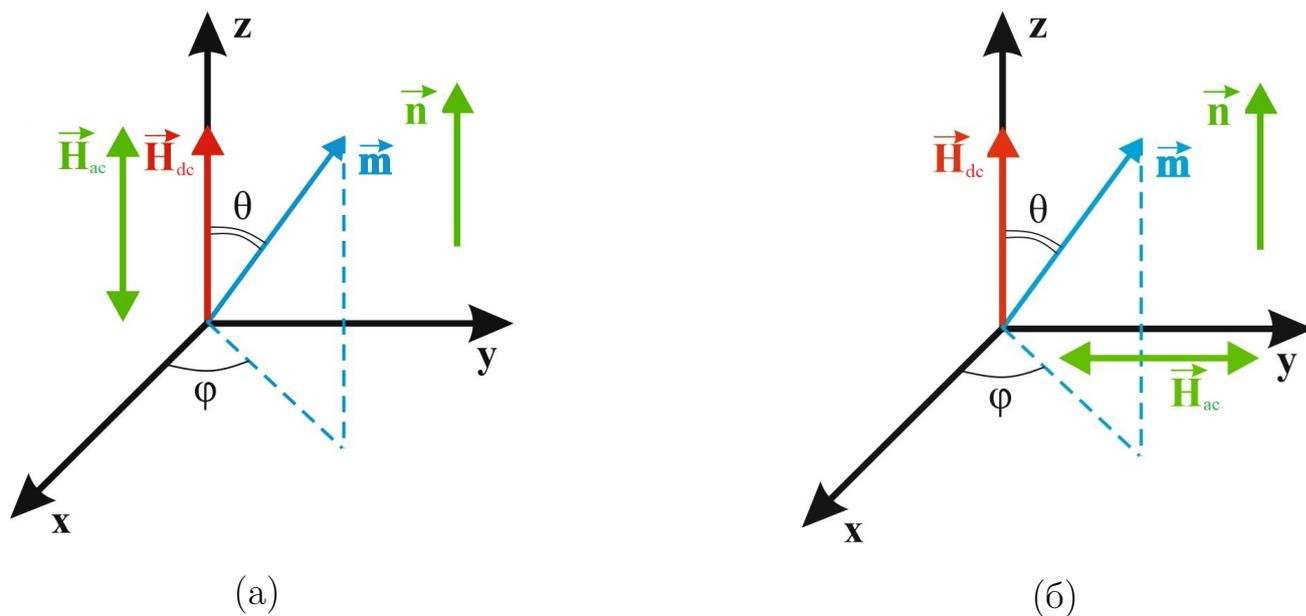


Рис. 3.0.1 – Взаимная ориентация магнитных полей. (а) Параллельная ориентация магнитных полей, (б) перпендикулярная ориентация магнитных полей.

В параллельной ориентации (рисунок 3.0.1 а) магнитных полей вектор

результатирующего поля описывается  $\mathbf{H}_{\parallel} = (0, 0, h_{ac}e^{i\omega t} + h_{dc})$ , а в перпендикулярной ориентации (рисунок 3.0.1 б)  $\mathbf{H}_{\perp} = (0, h_{ac}e^{i\omega t}, h_{dc})$ , где  $h_{ac}$  – амплитуда переменного магнитного поля,  $h_{dc}$  – напряженность статического магнитного поля.

### 3.1. Аналитическое решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна для малой амплитуды переменного магнитного поля

Дополнительный учет статического подмагничивающего поля уточняет энергию  $U(1)$  (2.1.3) рассматриваемой системы и решение уравнения ФПБ в стационарном случае  $W_0(x)$ .

Для любой ориентации переменного и статического магнитных полей решение уравнения ФПБ (2.2.4) в стационарном случае имеет вид:

$$W_0(x) = \frac{e^{\alpha_{dc}x + \sigma x^2}}{\frac{1}{2} \int_{-1}^1 e^{\alpha_{dc}x + \sigma x^2} dx}. \quad (3.1.1)$$

#### 3.1.1. Параллельная конфигурация магнитных полей

В параллельном случае ориентации переменного и статического магнитных полей энергия  $U(1)$  системы имеет вид:

$$U(1) = -\sigma x^2 - \alpha_{ac\parallel}^{eff} e^{i\omega t} x - \alpha_{dc}^{eff} x, \quad (3.1.2)$$

где  $\alpha_{dc}^{eff} = \alpha_{dc} + C(\alpha_{dc}, \sigma)$ ,  $C(\alpha_{dc}, \sigma) = \int_{-1}^1 x e^{\alpha_{dc}x + \sigma x^2} dx \left( \frac{1}{2} \int_{-1}^1 e^{\alpha_{dc}x + \sigma x^2} dx \right)^{-1}$ .

Решение уравнения ФПБ (2.2.2) приближается рядом по полиномам Лежандра (2.2.3). Проведя аналогичные операции, описанные в Главе 2, мы получили рекуррентные соотношения, связывающие коэффициенты  $A_{n-2}$ ,  $A_{n-1}$ ,  $A_n$ ,  $A_{n+1}$ ,  $A_{n+2}$ :

$$\begin{aligned}
& \left[ 2i\omega\tau_D + n(n+1) - 2\sigma \frac{n(n+1)}{(2n+3)(2n-1)} \right] A_n - \\
& - 2\sigma \frac{(n-1)n(n+1)}{(2n-3)(2n-1)} A_{n-2} + 2\sigma \frac{n(n+1)(n+2)}{(2n+3)(2n+5)} A_{n+2} + \\
& + \alpha_{dc}^{eff} \frac{n(n+1)}{2n+3} A_{n+1} - \alpha_{dc}^{eff} \frac{n(n+1)}{2n-1} A_{n-1} = \\
& = -\frac{2n+1}{2} \left( 1 + \frac{\chi_L A_1^{id}}{3} \right) \int_{-1}^1 \frac{\partial}{\partial x} [(1-x^2)W_0(x)] P_n(x) dx,
\end{aligned} \tag{3.1.3}$$

где  $A_{n \leq 0} = 0$ . Явные выражения для  $A_1$  могут быть определены путем усечения этих соотношений в некотором произвольном порядке  $n = k$ , установки  $A_{n > k} = 0$  и решения системы из  $k$  алгебраических уравнений.

Приведем графики плотности вероятности ориентации магнитного момента  $W(x)$  невзаимодействующих частиц на рисунке 3.1.1 при различных параметрах магнитной анизотропии  $\sigma$ , напряженность статического магнитного поля  $\alpha_{dc} = 1$ , фиксированный момент времени  $t = 0.1$ . В случае, когда  $\sigma = 0$ , вероятность того, что магнитный момент будет сонаправлен направлению статического магнитного поля значительно выше остальных вариантов. При увеличении параметра магнитной анизотропии ( $\sigma = 1$ ) вероятность ориентации магнитного момента в направлении статического магнитного поля увеличивается, но одновременно и увеличивается вероятность ориентации магнитного момента диаметрально противоположно направлению статического магнитного поля.

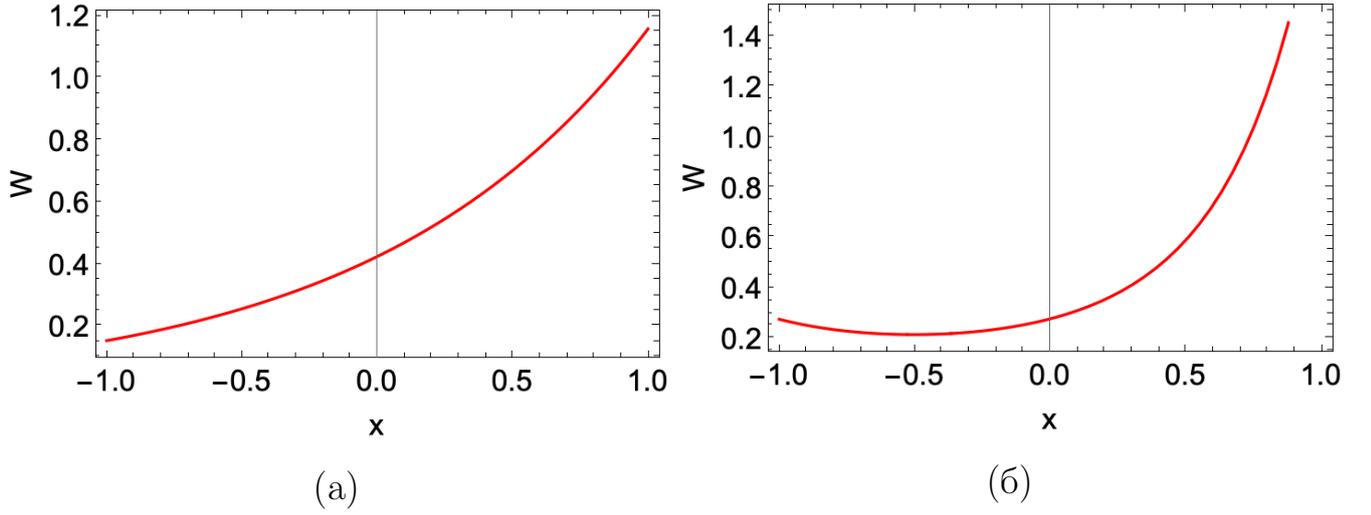


Рис. 3.1.1 – Плотность вероятности ориентации магнитного момента при малой амплитуде  $\alpha_{ac} = 0.01$  и фиксированной частоте  $\omega\tau_D = 1$  переменного магнитного поля, напряженность статического магнитного поля  $\alpha_{dc} = 1$ . Фиксированный момент времени  $t = 0.1$ . Система без учета диполь-дипольных взаимодействий. Аналитическое решение. Параметры магнитной анизотропии: (а)  $\sigma = 0$ , (б)  $\sigma = 1$ .

Намагниченность системы определяется по формуле (2.1.5):

$$M_{\parallel} = \frac{\rho m}{4\pi} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} W(x) x d\varphi dx = \chi_L h_{ac} e^{i\omega t} A_1 + \frac{\rho m}{2} \int_{-1}^1 W_0(x) x dx. \quad (3.1.4)$$

На рисунке 3.1.2 показаны кривые намагниченности как функции времени для системы обездвиженных частиц под действием малого переменного магнитного поля  $\alpha_{ac} = 0.01$  с фиксированной частотой  $\omega\tau_D = 1$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . На рисунке 3.1.2 есть два набора линий: синие линии соответствуют системам с невзаимодействующими частицами, а красные описывают системы с взаимодействующими частицами. Учет диполь-дипольных взаимодействий, увеличение восприимчивости Ланжевена  $\chi_L$  и напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$  приводит к росту модуля намагниченности.

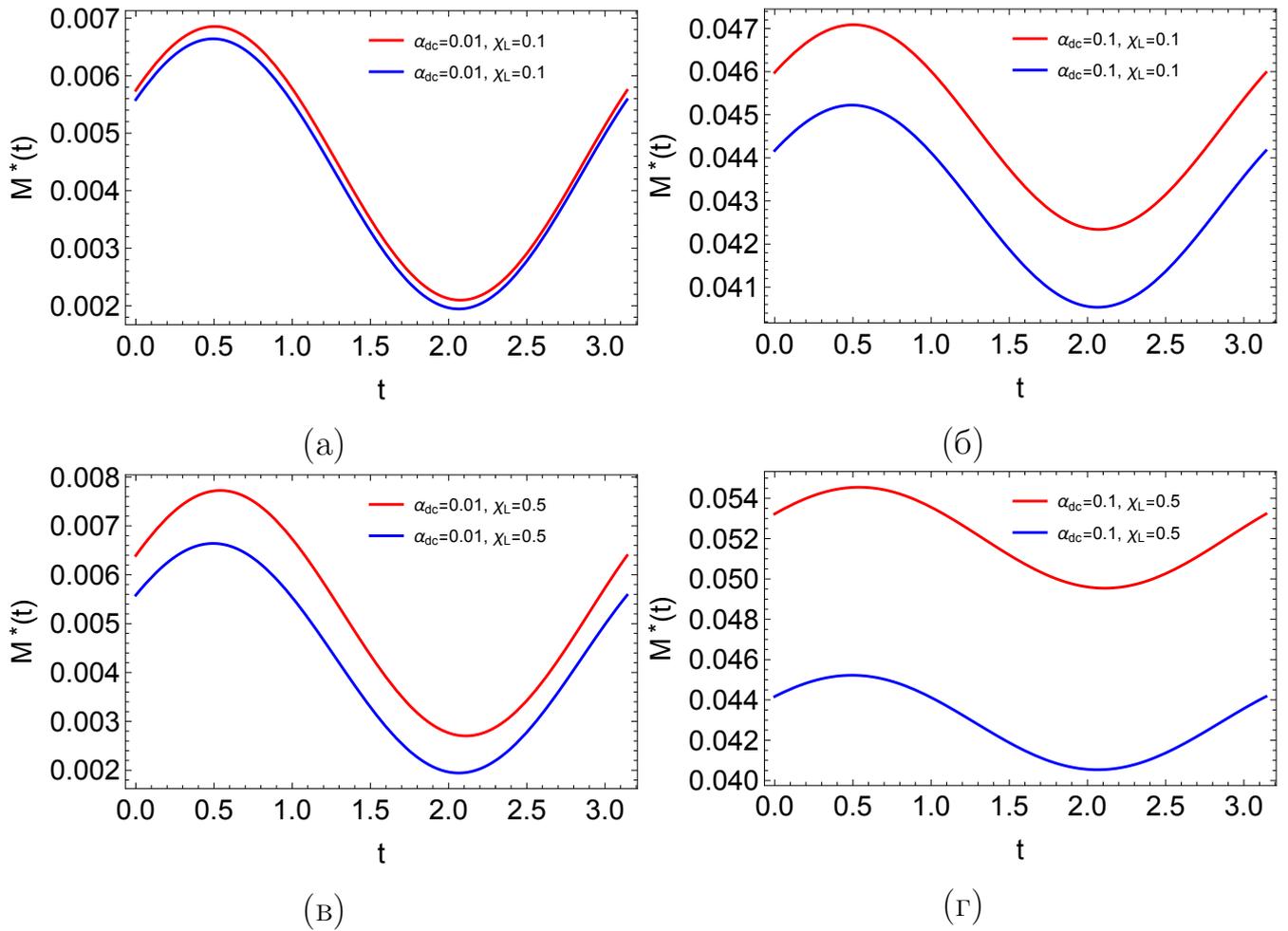


Рис. 3.1.2 – Нормированная намагниченность  $M^*(t) = M(t)/\rho m$  не взаимодействующих (синие линии) и взаимодействующих (красные линии) частиц при малой амплитуде  $\alpha_{ac} = 0.01$ , фиксированной частоте  $\omega\tau_D = 1$  переменного магнитного поля и параметре магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . Аналитическое решение. (а)  $\alpha_{dc} = 0.01, \chi_L = 0.1$ , (б)  $\alpha_{dc} = 0.1, \chi_L = 0.1$  (в)  $\alpha_{dc} = 0.01, \chi_L = 0.5$ , (г)  $\alpha_{dc} = 0.1, \chi_L = 0.5$ .

Формула динамической восприимчивости в случае учета подмагничивающего статического поля не изменяется и рассчитывается по формуле (2.2.9).

Спектры динамической восприимчивости (действительная (а) и мнимая (б) части) в зависимости от частоты переменного магнитного поля для систем с различными параметрами Ланжевена статического магнитного поля  $\alpha_{dc} = 0, 1, 2, 3$  и параметром магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ , восприимчивостью Ланжевена  $\chi_L = 0.419$  в случае параллельной ориентации магнитных полей приведены на рисунке 3.1.3.

При увеличении параметра Ланжевена  $\alpha_{dc}$  магнитный отклик системы на переменное поле уменьшается, сдвиг мнимой части в область более высоких частот означает уменьшение времени релаксации.

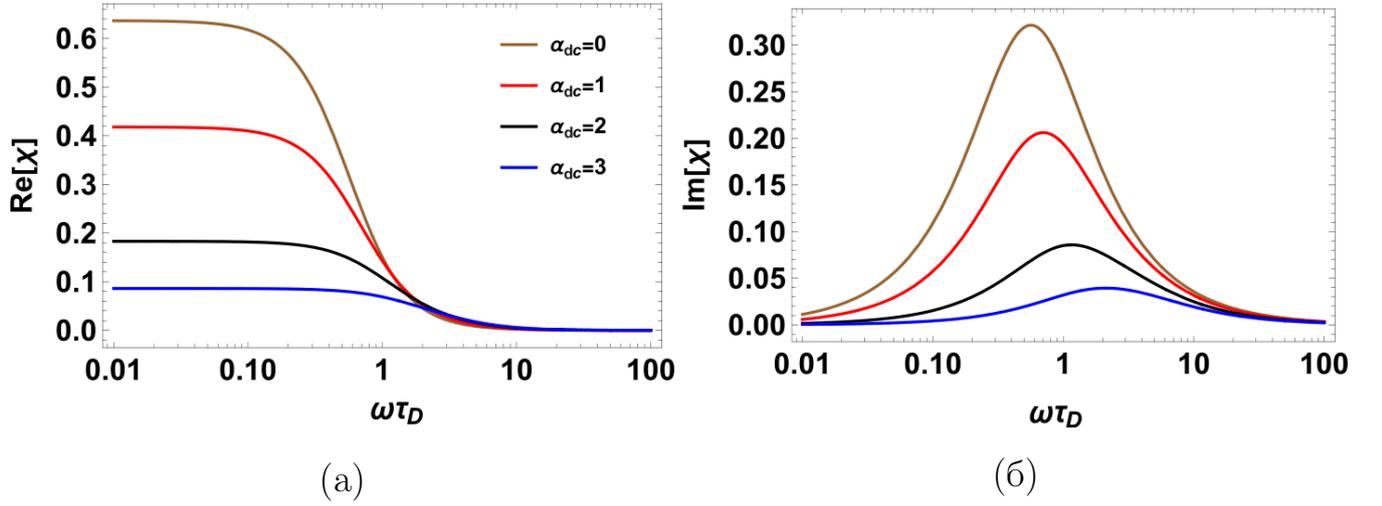


Рис. 3.1.3 – Спектр динамической восприимчивости ансамбля взаимодействующих ферро-частиц для различных значений  $\alpha_{dc}$  в случае, когда оси легкого намагничивания, статическое и переменное магнитные поля направлены параллельно друг другу. Параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 0.419$ . Аналитическое решение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

### 3.1.2. Перпендикулярная конфигурация магнитных полей

В перпендикулярном случае ориентации переменного и статического магнитных полей энергия  $U(1)$  системы имеет вид:

$$U(1) = -\sigma x^2 - \alpha_{ac\perp}^{eff} e^{i\omega t} \sqrt{1-x^2} \sin \varphi - \alpha_{dc}^{eff} x. \quad (3.1.5)$$

Для нахождения коэффициента  $B_1$  из формулы (2.2.11) мы использовали рекуррентные соотношения (3.1.6):

$$\begin{aligned} & \left[ 2\tau_D i\omega + n(n+1) - 2\sigma \frac{n^2 + n - 3}{(2n-1)(2n+3)} \right] B_n - \\ & - 2\sigma \frac{(n-2)(n-1)(n+1)}{(2n-3)(2n-1)} B_{n-2} + 2\sigma \frac{n(n+2)(n+3)}{(2n+3)(2n+5)} B_{n+2} + \\ & + \alpha_{dc}^{eff} \frac{n(n+2)}{2n+3} B_{n+1} - \alpha_{dc}^{eff} \frac{(n-1)(n+1)}{2n-1} B_{n-1} = \\ & = \frac{(2n+1)(n-1)!}{2(n+1)!} \left( 1 - \frac{\chi_L B_1^{id}}{6} \right) \int_{-1}^1 \left[ \frac{W_0}{\sqrt{1-x^2}} + \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial x} \left( W_0 x \sqrt{1-x^2} \right) \right] P_n^1(x) dx. \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

Намагниченность системы определяется по формуле (2.1.5):

$$M_{\perp} = \frac{\rho m}{4\pi} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} W(1)x d\varphi dx = \chi_L h_{ac} e^{i\omega t} B_1 + \frac{\rho m}{2} \int_{-1}^1 W_0(x)x dx. \quad (3.1.7)$$

Формула динамической восприимчивости в случае учета подмагничивающего статического поля не изменяется и динамическая восприимчивость рассчитывается по формуле (2.2.15).

На рисунке 3.1.4 представлены графики динамической восприимчивости для системы, находящейся под влиянием магнитных полей с перпендикулярной взаимной ориентацией, при различных значениях  $\alpha_{dc}$ ,  $\sigma = 1$ ;  $\chi_L = 0.419$ . В сравнении с параллельным случаем (рисунок 3.1.3) можно сделать вывод, что в перпендикулярной конфигурации полей магнитный отклик меньше, но при увеличении напряженности статического поля магнитный отклик уменьшается не настолько значительно, как в параллельном случае (рисунок 3.1.3). Время релаксации с увеличением напряженности статического поля уменьшается.

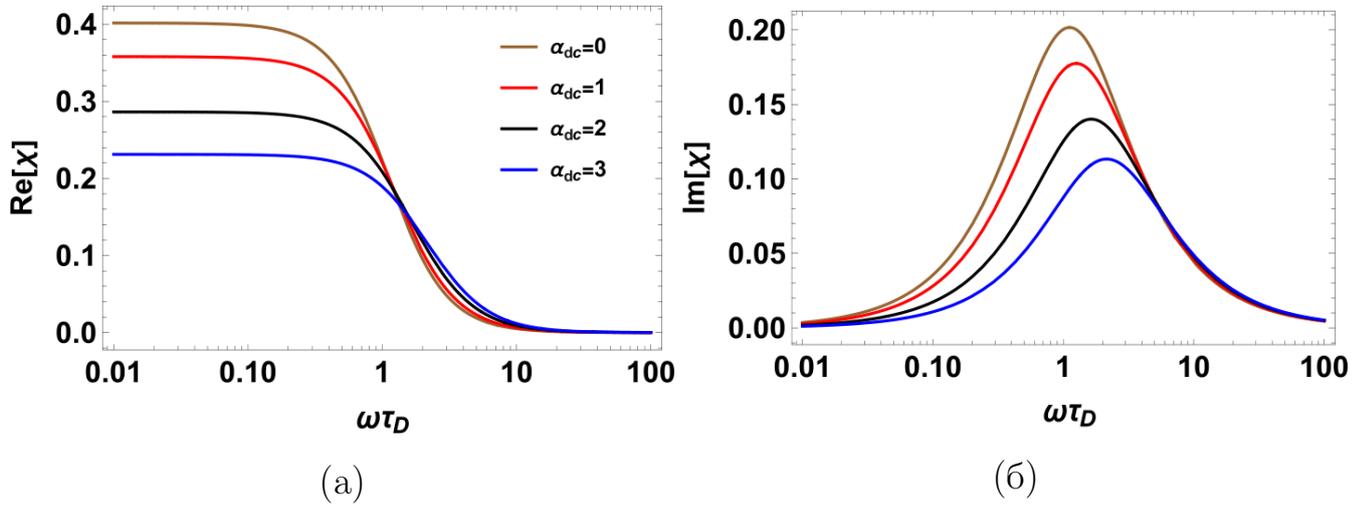


Рис. 3.1.4 – Спектр динамической восприимчивости ансамбля взаимодействующих ферро-частиц для различных значений  $\alpha_{dc}$  в случае, когда статическое и переменное магнитные поля перпендикулярны друг другу. Параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ ;  $\chi_L = 0.419$ . Аналитическое решение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

### 3.1.3. Случай ориентации переменного магнитного поля под произвольным углом к статическому полю

Введем полярный угол  $\xi$  между направлением статического и переменного магнитных полей. Вектор переменного магнитного поля лежит в плоскости  $Oyz$ ,  $\mathbf{h}_{ac} = h_{ac}e^{i\omega t}(0, \sin \xi, \cos \xi)$ . Равенство  $\xi = 0$  соответствует параллельному случаю ориентации переменного магнитного поля по отношению к оси легкого намагничивания (подраздел 3.1.1),  $\xi = \frac{\pi}{2}$  – перпендикулярному случаю (подраздел 3.1.2). Магнитная энергия  $U(1)$  в этом случае по формуле (2.1.3) будет равна:

$$U(1) = -\sigma x^2 - \alpha_{ac\perp}^{eff} \sin \varphi \sqrt{1 - x^2} \sin \xi - \alpha_{ac\parallel}^{eff} x \cos \xi - \alpha_{dc}^{eff} x. \quad (3.1.8)$$

Решение уравнения ФПБ (2.1.1) искалось в виде разложения по сферическим функциям аналогично формуле (2.2.17) с учетом новой функции  $W_0(x)$  (3.1.1).

Коэффициенты  $A_n$  и  $B_n$  находятся из соотношений (3.1.3) и (3.1.6) соответственно.

Намагниченность системы определяется из формулы (2.1.5) с учетом того, что переменное магнитное поле прикладывается под углом  $\xi$  к статическому магнитному полю:

$$M = M_{\parallel} \cos^2 \xi + M_{\perp} \sin^2 \xi + \frac{\rho m}{2} \int_{-1}^1 W_0(x) x dx. \quad (3.1.9)$$

Динамическая восприимчивость рассчитывается аналогично формуле (2.2.19).

На рисунке 3.1.5 представлена частотная зависимость динамической восприимчивости (действительная (а) и мнимая (б) часть) при различных углах между переменным и статическим магнитными полями ( $\xi = 0, \pi/4$  и  $\pi/2$ ). Параметр магнитной анизотропии постоянен и равен  $\sigma = 1$ , параметр Ланжевена статического магнитного поля  $\alpha_{dc} = 1$ . Результаты представлены при двух

значения параметра Ланжевена  $\chi_L = 0.2$  и  $\chi_L = 0.05$ . Пунктирными линиями построена динамическая восприимчивость для системы, в которой межчастичные взаимодействия не учитываются. Сплошные линии – диполь-дипольные взаимодействия учитываются.

Для обоих случаев  $\chi_L = 0.05$  и  $\chi_L = 0.2$  сдвиг вниз действительной части восприимчивости при малых частотах указывает на то, что система меньше реагирует на переменное магнитное поле с увеличением  $\xi$ ; максимум мнимой части восприимчивости уменьшается и смещается к более высоким частотам с увеличением  $\xi$ . Сдвиг положения максимума в область более высоких частот означает уменьшение характерного времени релаксации. Это поведение более выражено для системы с  $\chi_L = 0.2$ , что соответствует более концентрированной выборке. В сравнении с моделью, где нет статического подмагничивающего поля, система со статическим магнитным полем слабее реагирует на переменное магнитное поле.

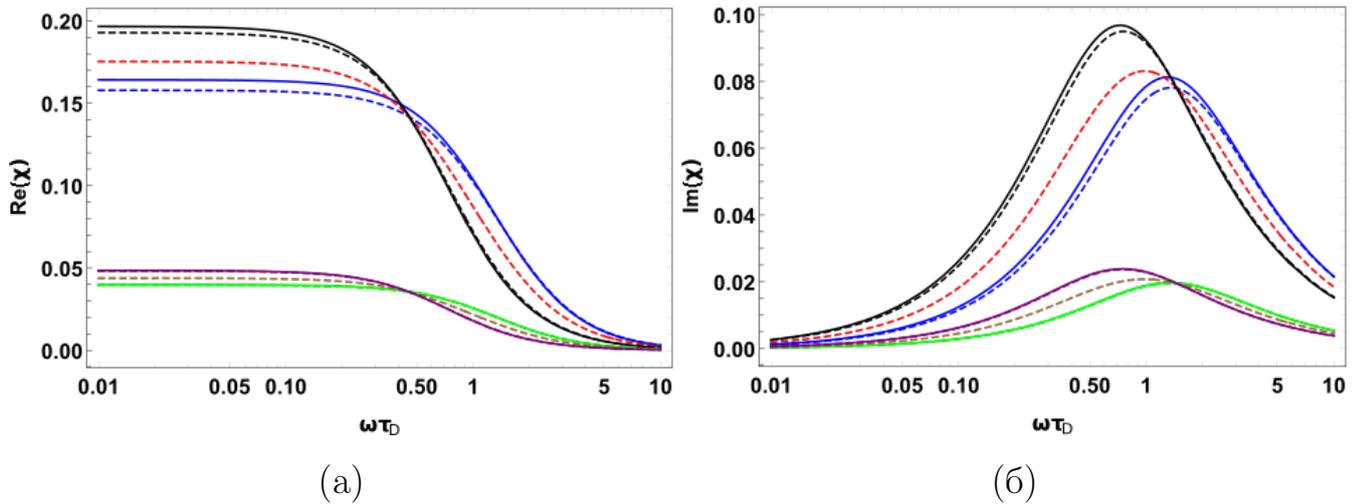


Рис. 3.1.5 – Спектр динамической восприимчивости при  $\chi_L = 0.2$  ( $\xi = 0$  (черный),  $\xi = \pi/4$  (красный),  $\xi = \pi/2$  (синий)) и  $\chi_L = 0.05$  ( $\xi = 0$  (фиолетовый),  $\xi = \pi/4$  (коричневый),  $\xi = \pi/2$  (зеленый)), параметр Ланжевена статического магнитного поля  $\alpha_{dc} = 1$ ,  $\sigma = 1$ . Пунктирные линии соответствуют системе без взаимодействий, сплошные линии – система с учетом диполь-дипольных взаимодействий. Аналитическое решение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

### 3.1.4. Сходимость аналитического решения

Сходимость аналитического решения исследуется аналогично подразделу 2.2.4. Проверим условия теоремы сходимости (2.2.24), (2.2.25). Для проверки

необходимо определить матрицы  $Q_n^-, Q_n, Q_n^+$ . Для параллельного случая (подраздел 3.1.1) матрицы  $Q_n^-, Q_n, Q_n^+$  имеют вид:

$$Q_n = \begin{pmatrix} \frac{2n(2n-1)\sigma}{(4n-3)(4n+1)} - n(2n-1) & \frac{-\alpha_{dc}n(2n-1)}{4n-1} \\ \frac{\alpha_{dc}n(2n+1)}{4n+1} & \frac{2\sigma n(2n+1)}{(4n-1)(4n+3)} - n(2n+1) \end{pmatrix}, \quad (3.1.10)$$

$$Q_n^+ = \begin{pmatrix} -\frac{2\sigma n(4n^2-1)}{16n^2-1} & 0 \\ \frac{-\alpha_{dc}n(2n+1)}{4n+1} & -\frac{4\sigma n(n+1)(2n+1)}{(4n+1)(4n+3)} \end{pmatrix}, \quad (3.1.11)$$

$$Q_n^- = \begin{pmatrix} \frac{4\sigma n(n-1)(2n-1)}{(4n-3)(4n-1)} & \frac{\alpha_{dc}n(2n-1)}{4n-1} \\ 0 & \frac{2\sigma n(4n^2-1)}{16n^2-1} \end{pmatrix}. \quad (3.1.12)$$

На рисунке 3.1.6 построена зависимость  $\det[Q_{n+1}^+(Q_{n+1})^{-1}]\det[Q_{n+1}^-(-Q_n)^{-1}]$  от  $n$  для различных параметров Ланжевена ( $\alpha_{dc} = 1, \alpha_{dc} = 5, \alpha_{dc} = 10$ ) и параметра магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . Условие (2.2.24) выполняется для всех  $n > 1$ . Условие (2.2.25) выполняется для любых параметров магнитной анизотропии  $\sigma$  и параметров Ланжевена статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$ .

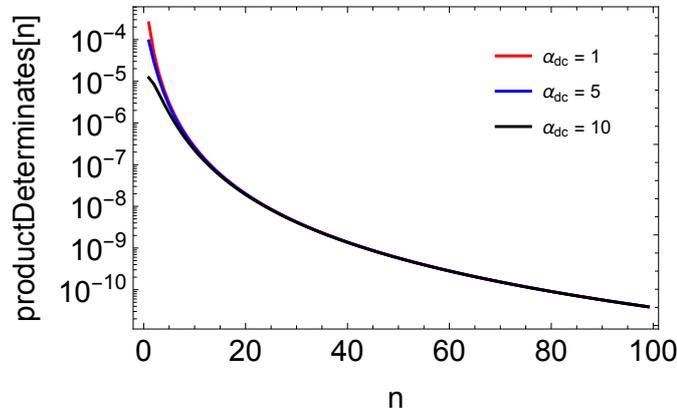


Рис. 3.1.6 – Значение  $\det[Q_{n+1}^+(Q_{n+1})^{-1}]\det[Q_{n+1}^-(-Q_n)^{-1}]$  для  $\alpha_{dc} = 1, \alpha_{dc} = 5, \alpha_{dc} = 10$  и параметра магнитной анизотропии  $\sigma = 1$  в параллельной конфигурации магнитных полей.

Ясно, что при больших  $\sigma$  и  $\alpha_{dc}$  для сходимости бесконечной непрерывной дроби (2.2.23) необходимо выбирать определенное количество членов ряда  $N = n$ , при котором выполняются оба условия сходимости. На рисунке 3.1.7 построена зависимость количества членов ряда, необходимого для выполнения условий теоремы о сходимости, от параметра магнитной анизотропии.

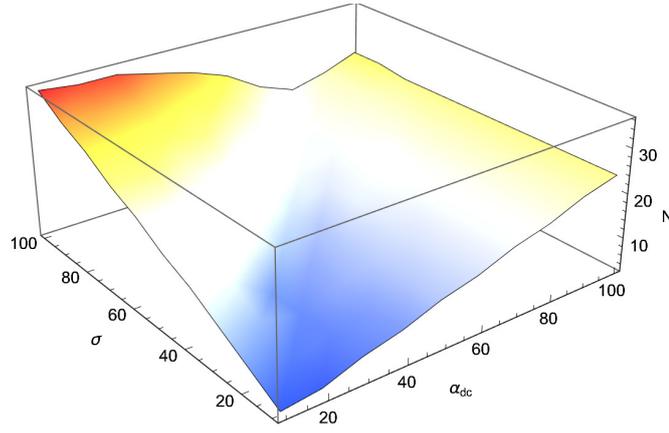


Рис. 3.1.7 – Зависимость количества членов ряда от параметра магнитной анизотропии и параметра Ланжевена статического магнитного поля в параллельном случае ориентации переменного магнитного поля и осей легкого намагничивания. Цветами от красного к синему обозначено изменение количества членов ряда: красный – наибольшее количество, синий – наименьшее.

Для перпендикулярного случая (подраздел 3.1.2) матрицы  $Q_n^-, Q_n, Q_n^+$  имеют вид:

$$Q_n = \begin{pmatrix} n(1 - 2n) - \frac{\sigma(-4n^2 + 2n + 3)}{(4n+1)(4n-3)} & -\frac{\alpha_{dc}(2n-1)(2n+1)}{2(2(2n-1)+1)} \\ \frac{\alpha_{dc}(2n-1)(2n+1)}{2(4n+1)} & -n(2n+1) - \frac{(-4n^2 - 2n + 3)\sigma}{(4n+3)(4n-1)} \end{pmatrix}, \quad (3.1.13)$$

$$Q_n^+ = \begin{pmatrix} -\frac{2\sigma(n+1)(2n-1)(2n+1)}{(4n-1)(4n+1)} & 0 \\ -\frac{2\alpha_{dc}n(n+1)}{4n+1} & -\frac{4\sigma n(n+1)(2n+3)}{(4n+1)(4n+3)} \end{pmatrix}, \quad (3.1.14)$$

$$Q_n^- = \begin{pmatrix} \frac{4\sigma(n-1)n(2n-3)}{(4n-3)(4n-1)} & \frac{2\alpha_{dc}n(n-1)}{4n-1} \\ 0 & \frac{2\sigma(n-1)(2n-1)(2n+1)}{(4n-1)(4n+1)} \end{pmatrix}. \quad (3.1.15)$$

В перпендикулярной конфигурации магнитных полей выводы о сходимости решения уравнения ФПБ (2.1.1) аналогичны случаю параллельной конфигурации.

## 3.2. Тестирование аналитических результатов на данных компьютерного моделирования

Теоретические результаты проверяются путем сравнения с моделированием ланжевеновской динамики [75]. Оправданием этого является то, что суще-

ствуют усложняющие факторы, связанные с экспериментальными измерениями, включая полидисперсность частиц, которые могут скрыть влияние диполь-дипольных взаимодействий на магнитный отклик. Эти факторы очень трудно изолировать в экспериментальных измерениях, и поэтому моделирование ланжевеновской динамики предлагает «идеальный» вычислительный эксперимент, с помощью которого можно проверить математические приближения, сделанные в теории.

Динамическая восприимчивость при различных напряженностях статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$  представлена на рисунке 3.2.1 (параллельная конфигурация полей) и рисунке 3.2.2 (перпендикулярная конфигурация полей) при восприимчивости Ланжевена  $\chi_L = 1$  и параметре магнитной анизотропии  $\sigma = 0$ .

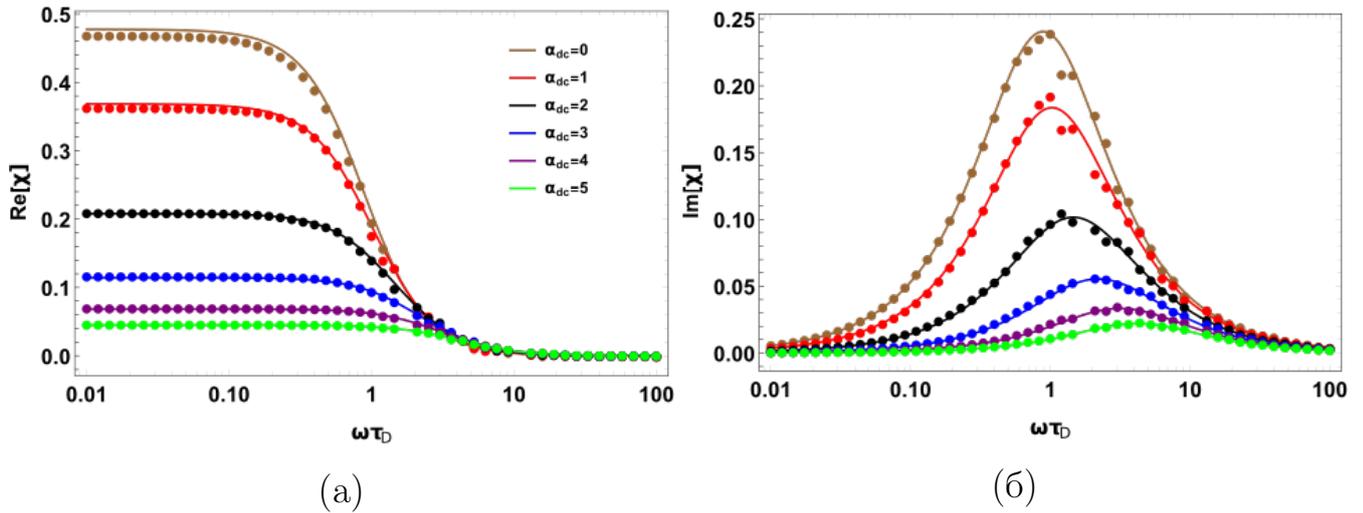


Рис. 3.2.1 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений напряженности статического поля  $\alpha_{dc} = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 0.419$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 0$ . Случай параллельности переменного и статического магнитных полей. Линии – аналитическое решение, символы – компьютерное моделирование. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

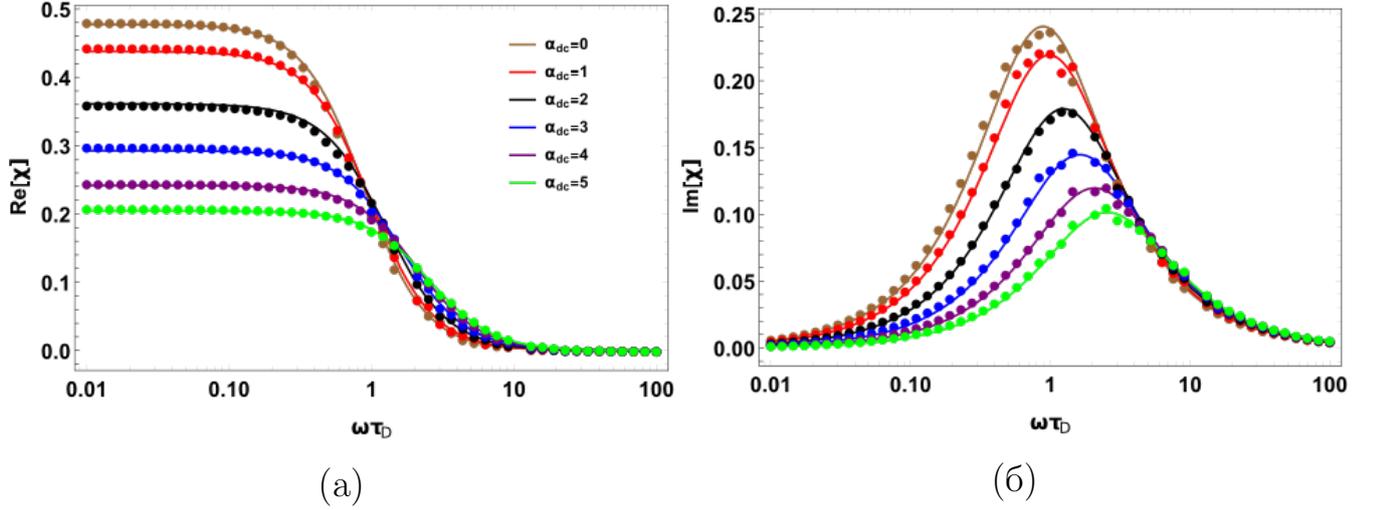


Рис. 3.2.2 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений напряженности статического поля  $\alpha_{dc} = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 0.419$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 0$ . Случай перпендикулярности переменного и статического магнитных полей. Линии – аналитическое решение, символы – компьютерное моделирование. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

Вне зависимости от взаимной ориентации магнитных полей увеличение напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$  приводит к уменьшению магнитного отклика на малых частотах переменного магнитного поля. Сдвиг пика мнимой части в область высоких частот свидетельствует об уменьшении характерного времени релаксации.

Теория хорошо согласуется с результатами компьютерного моделирования для параметров:  $\alpha_{dc} = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ ,  $\chi_L = 0.419$  и  $\sigma = 0$ .

### 3.3. Численное решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна: случай произвольной амплитуды переменного поля

Для учета подмагничивающего статического поля используются численные схемы, описанные в Главе 2. Учитываются изменения в энергии системы  $U(1)$  и решении уравнения ФПБ в статическом случае  $W_0(x)$ .

В параллельной конфигурации полей для численной схемы изменяется функция  $v(t, x)$ :

$$v(t, x) = k(x) \frac{\partial U(1)}{\partial x} = (2\sigma x + \alpha_{dc} + \alpha_{ac} \cos rt) (1 - x^2). \quad (3.3.1)$$

Для перпендикулярной конфигурации функции  $v_1(t, x, \varphi)$ ,  $v_2(t, x, \varphi)$  равны:

$$\begin{aligned} v_1(t, x, \varphi) &= (2\sigma x + \alpha_{dc} - \frac{\alpha_{ac} x \cos rt}{\sqrt{1-x^2}} \sin \varphi)(1 - x^2), \\ v_2(t, x, \varphi) &= \frac{\alpha_{ac} \cos rt \sqrt{1-x^2} \cos \varphi}{1-x^2}. \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

На рисунке 3.3.1 представлена намагниченность в зависимости от переменного магнитного поля ( $H = \alpha_{ac} \cos(2\omega\tau_D t)$ ) с фиксированной частотой переменного магнитного поля  $\omega\tau_D = 0.1$ . Увеличение безразмерной амплитуды переменного поля  $\alpha_{ac}$  и величины магнитной анизотропии  $\sigma$  приводит к расширению петли гистерезиса. Увеличение напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$  и восприимчивости Ланжевена  $\chi_L$  приводит к увеличению намагниченности насыщения.

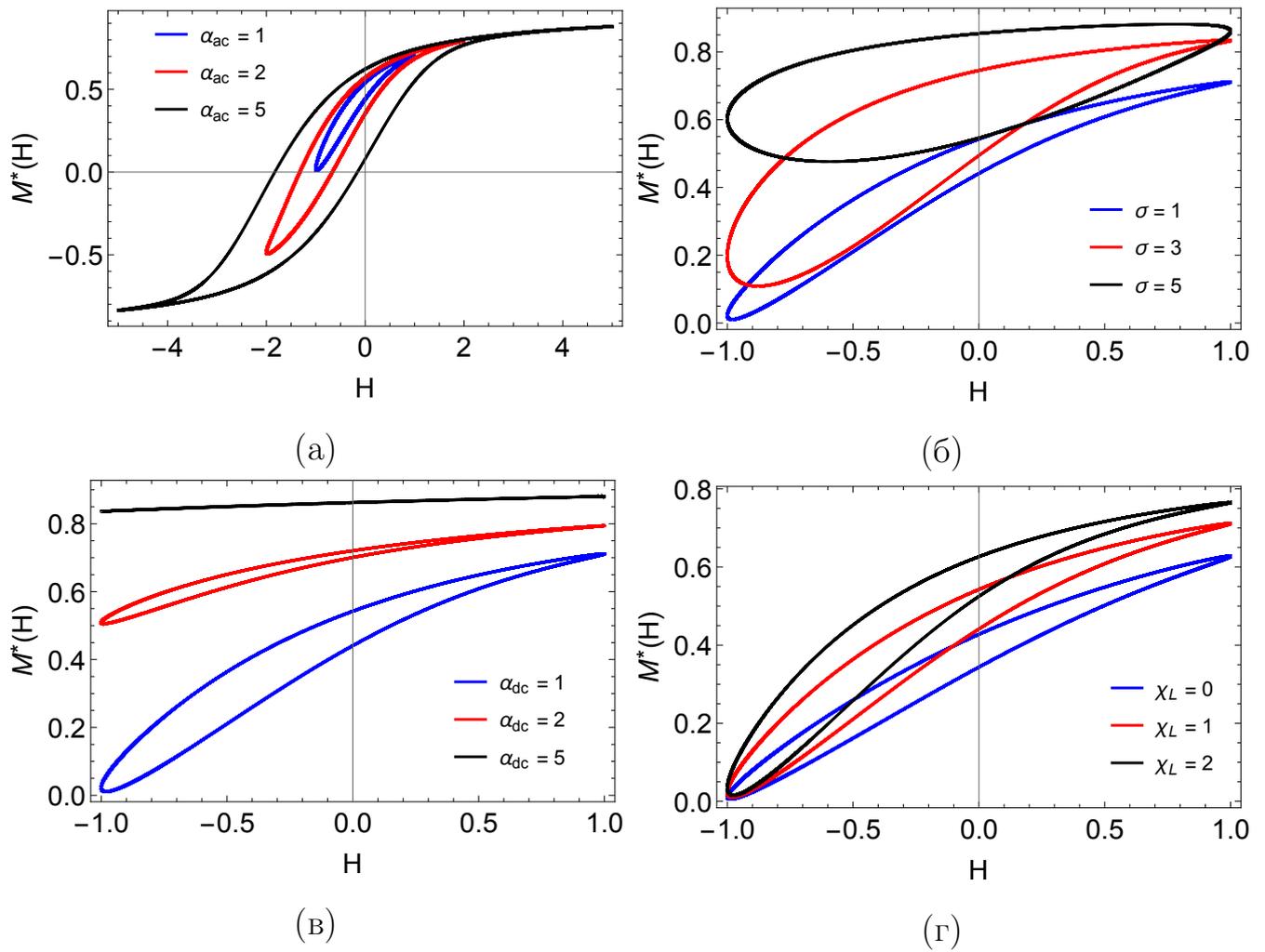


Рис. 3.3.1 – Нормированная намагниченность  $M^*(H) = M(H)/\rho m$  взаимодействующих между собой частиц (а)  $\sigma = 1$ ,  $\chi_L = 1$ ,  $\alpha_{dc} = 1$ , (б)  $\sigma = 1$ ,  $\chi_L = 1$ ,  $\alpha_{ac} = 1$ , (в)  $\chi_L = 1$ ,  $\alpha_{dc} = 1$ ,  $\alpha_{ac} = 1$ , (г)  $\sigma = 1$ ,  $\alpha_{dc} = 1$ ,  $\alpha_{ac} = 1$ . Переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания. Численное решение.

С помощью численного решения исследуется влияние амплитуды переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$  на магнитный отклик при статическом подмагничивающем поле  $\alpha_{dc}$ . На рисунке 3.3.2 представлена динамическая восприимчивость для различных значений  $\alpha_{ac} = 0.1, 1, 5$  в зависимости от частоты колебаний переменного магнитного поля при  $\alpha_{dc} = 1$  в случае, когда переменное магнитное поле параллельно статическому магнитному полю и осям легкого намагничивания.

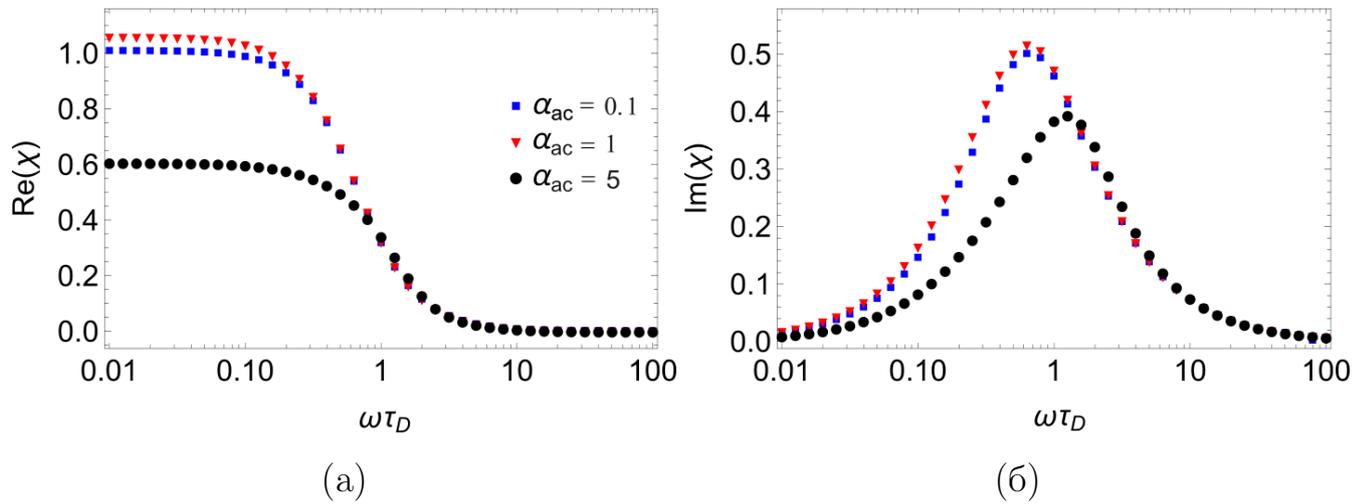


Рис. 3.3.2 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений амплитуд переменного магнитного поля  $\alpha_{ac} = 0.1, 1, 5$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 1$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ , параметр Ланжевена статического поля  $\alpha_{dc} = 1$ . Параллельная конфигурация магнитных полей. Численное решение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

Увеличение амплитуды переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$  с 0.1 до 1 увеличивает магнитный отклик. Это связано с тем, что система с достаточно сильным энергетическим барьером магнитной анизотропии и действующим статическим магнитным полем хорошо реагирует на переменное магнитное поле.

Подтвердим выводы, сделанные выше, увеличив параметр магнитной анизотропии и напряженность статического магнитного поля. На рисунке 3.3.3 представлена динамическая восприимчивость для различных значений  $\alpha_{ac} = 0.1, 1, 3, 5, 10$  в зависимости от частоты колебаний переменного магнитного поля при  $\alpha_{dc} = 3$  в случае, когда переменное магнитное поле параллельно статическому магнитному полю и осям легкого намагничивания.

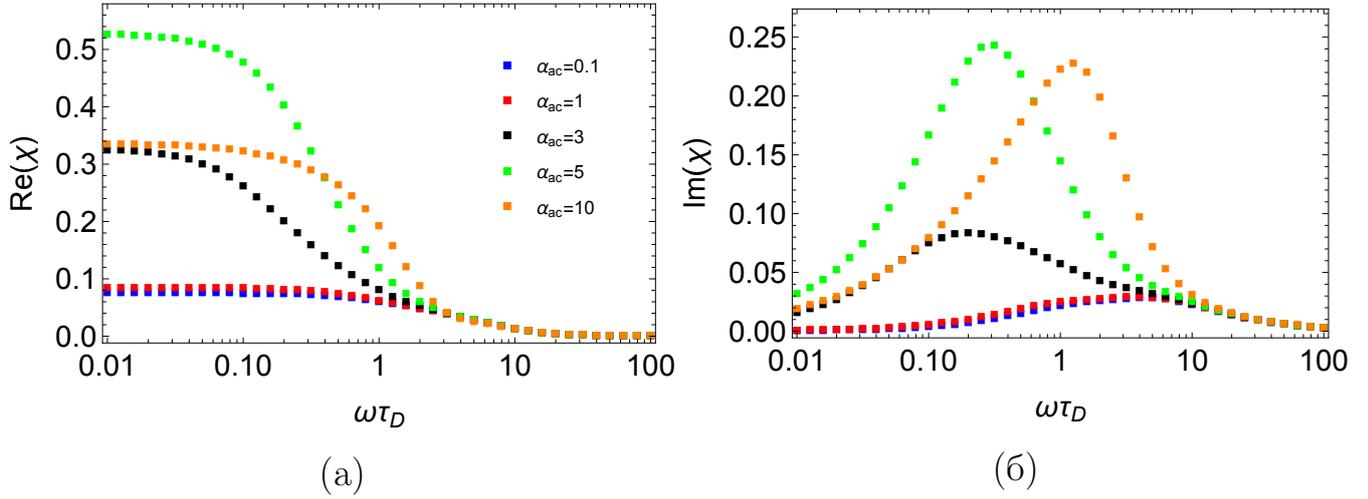


Рис. 3.3.3 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений амплитуд переменного магнитного поля  $\alpha_{ac} = 0.1, 1, 3, 5, 10$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 1$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 3$ , параметр Ланжевена статического поля  $\alpha_{dc} = 3$ . Параллельная конфигурация магнитных полей. Численное решение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

При достаточно больших значениях параметра магнитной анизотропии  $\sigma = 3$  и напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$  увеличение амплитуды переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$  с 0.1 до 5 увеличивает магнитный отклик. Дальнейшее увеличение амплитуды переменного магнитного поля уменьшает магнитный отклик. Сдвиги максимума мнимой части то в область более низких частот, то в область более высоких частот означает немонотонную зависимость характерного времени релаксации магнитного момента от амплитуды переменного магнитного поля.

В перпендикулярной конфигурации полей представлена динамическая восприимчивость для различных значений  $\alpha_{ac} = 0.1, 1, 5$  в зависимости от частоты колебаний переменного магнитного поля при  $\alpha_{dc} = 1$  на рисунке 3.3.4.

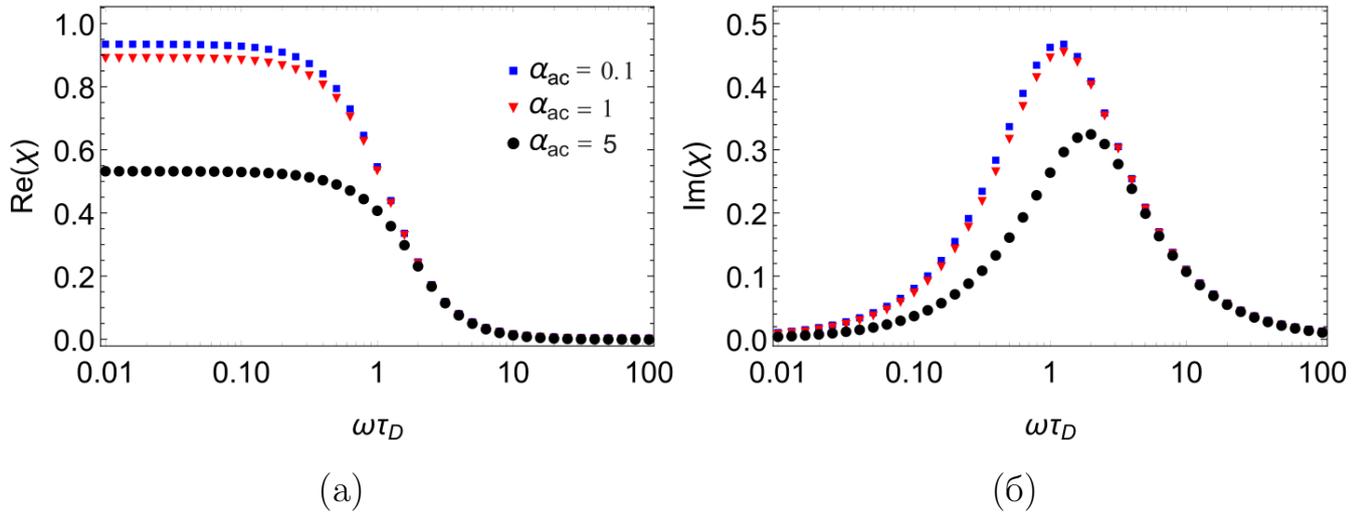


Рис. 3.3.4 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений амплитуд переменного магнитного поля  $\alpha_{ac} = 0.1, 1, 5$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 1$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ , параметр Ланжевена статического поля  $\alpha_{dc} = 1$ . Перпендикулярная конфигурация магнитных полей. Численное решение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

На низких и умеренных частотах переменного магнитного поля как действительная, так и мнимая части восприимчивости уменьшаются с увеличением амплитуды  $\alpha_{ac}$  переменного магнитного поля.

На рисунке 3.3.5 представлена динамическая восприимчивость для различных значений  $\sigma = 0, 1, 2, 5$  в зависимости от частоты колебаний переменного магнитного поля при напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc} = 1$ , амплитуде переменного магнитного поля  $\alpha_{ac} = 0.01$  и восприимчивости Ланжевена  $\chi_L = 0.4$  в случае, когда переменное магнитное поле параллельно статическому магнитному полю и осям легкого намагничивания. Сплошные линии – система с учетом диполь-дипольных взаимодействий, пунктирные – одночастичное приближение. Для одночастичного приближения увеличение магнитной анизотропии  $\sigma$  увеличивает магнитный отклик на малых частотах переменного магнитного поля и характерное время релаксации магнитных моментов увеличивается. В системе, учитывающей межчастичные взаимодействия, с ростом параметра магнитной анизотропии  $\sigma$  диполь – дипольные взаимодействия все меньше и меньше увеличивают магнитный отклик, а при  $\sigma = 5$  учет диполь-дипольных взаимодействий уменьшает магнитный отклик. Это связано с образованием корреляционных структур в системе. При больших значениях параметра магнитной анизотропии  $\sigma$  в системе, учитывающей межчастичные

взаимодействия, увеличение параметра магнитной анизотропии уменьшает магнитный отклик и характерное время релаксации магнитного момента увеличивается.

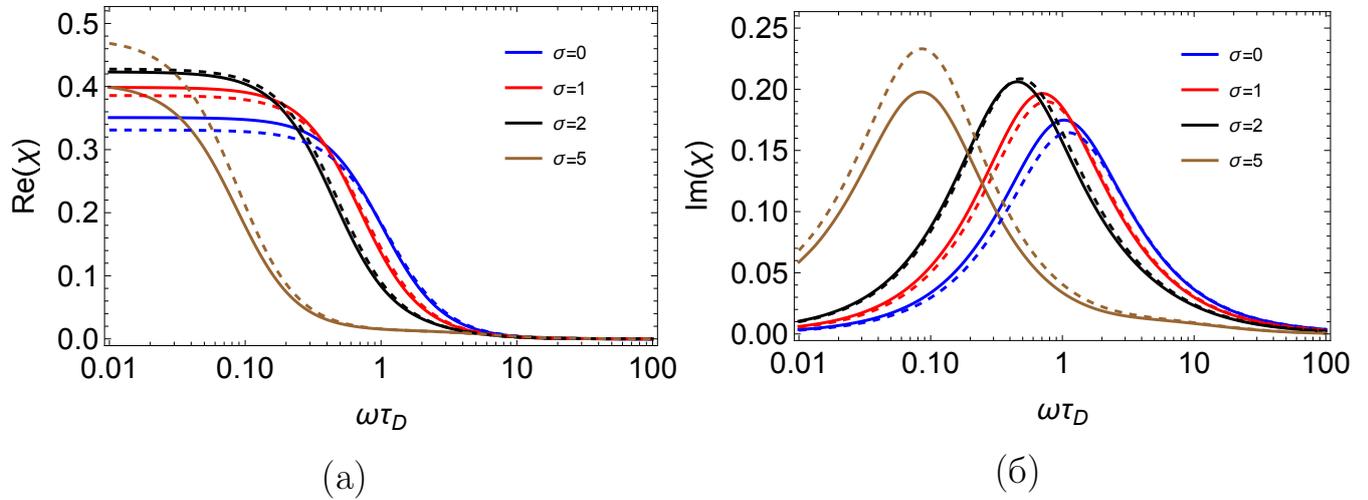


Рис. 3.3.5 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений параметра магнитной анизотропии  $\sigma = 0, 1, 2, 5$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 0.4$ , амплитуда переменного магнитного поля  $\alpha_{ac} = 0.01$ , параметр Ланжевена статического поля  $\alpha_{dc} = 1$ . Параллельная конфигурация магнитных полей. Численное решение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

На рисунке 3.3.6 представлена динамическая восприимчивость взаимодействующих частиц для различных значений напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc} = 0.1, 2, 3, 4, 5$  при достаточно большой амплитуде переменного магнитного поля  $\alpha_{ac} = 4$ , восприимчивости Ланжевена  $\chi_L = 1$ , параметре магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . При увеличении напряженности  $\alpha_{dc}$  статического магнитного поля магнитный отклик уменьшается, но характерное время релаксации имеет немонотонную зависимость (максимум мнимой части сначала сдвигается в область малых частот, а затем в область более высоких).

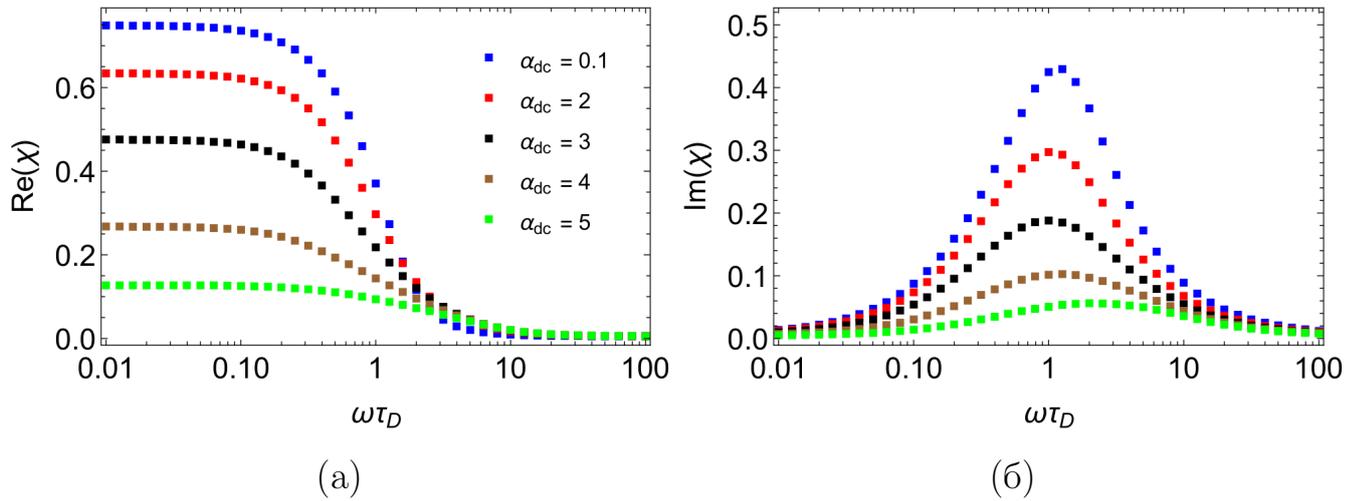


Рис. 3.3.6 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc} = 0.1, 2, 3, 4, 5$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 1$ , амплитуда переменного магнитного поля  $\alpha_{ac} = 4$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . Параллельная конфигурация магнитных полей. Численное решение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

### 3.4. Сравнение теоретических и численных результатов

Аналитическое решение уравнения ФПБ (2.1.1) было получено с помощью теории возмущения. Оно справедливо только для систем со слабым переменным полем. Для верификации численной схемы были проведены расчеты при  $\alpha_{ac} = 0.01$ . Результаты представлены на рисунке 3.4.1 (параллельная конфигурация полей) и рисунке 3.4.2 (перпендикулярная конфигурация полей) для восприимчивости Ланжевена  $\chi_L = 1$  и параметра магнитной анизотропии  $\sigma = 0.1$ . Сплошными линиями обозначены системы с учетом взаимодействий, пунктирными линиями – одночастичное приближение.

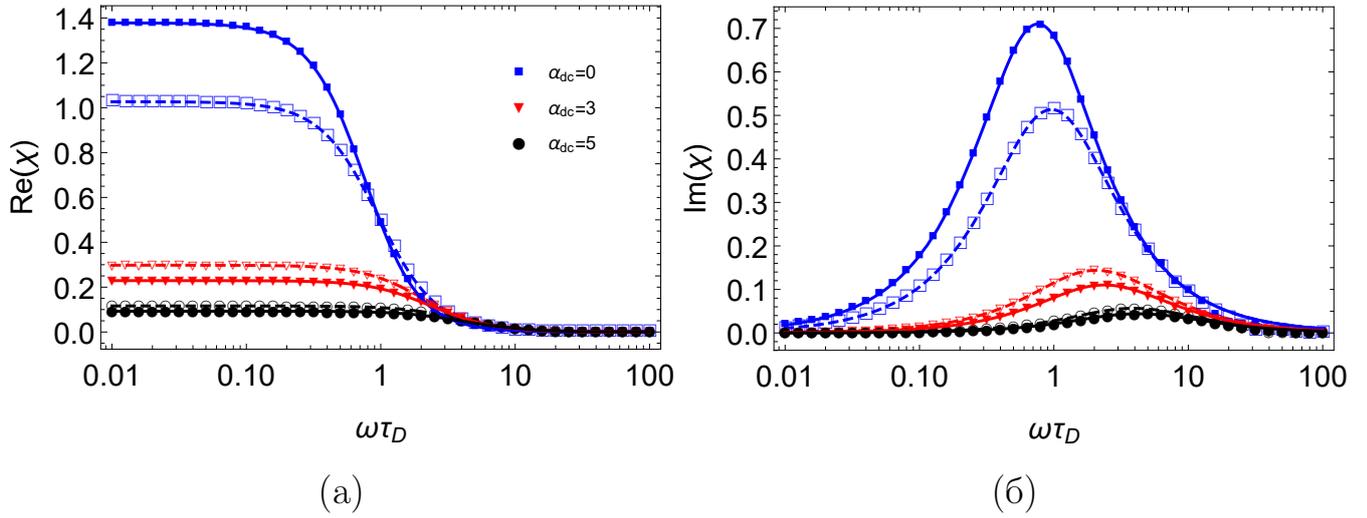


Рис. 3.4.1 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений напряженности статического поля  $\alpha_{dc} = 0, 3, 5$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 1$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 0.1$ . Случай параллельности переменного и статического магнитных полей. Линии – аналитическое решение, символы – численное решение. Сплошные линии и закрашенные символы – с учетом взаимодействий, пунктирные линии и неокрашенные символы – одночастичное приближение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

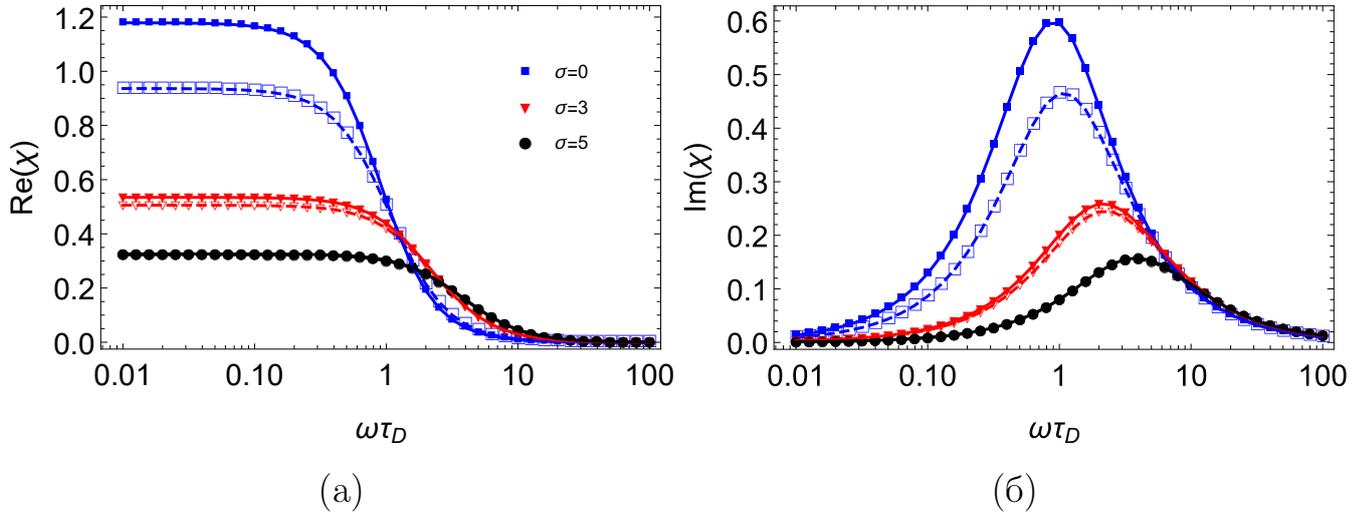


Рис. 3.4.2 – Действительная и мнимая части восприимчивости для различных значений параметра магнитной анизотропии  $\sigma = 0, 3, 5$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L = 1$ , напряженность статического магнитного поля  $\alpha_{dc} = 1$ . Случай перпендикулярности переменного и статического магнитных полей. Линии – аналитическое решение, символы – численное решение. Сплошные линии и закрашенные символы – с учетом взаимодействий, пунктирные линии и неокрашенные символы – одночастичное приближение. (а) Действительная часть, (б) мнимая часть.

В параллельной конфигурации магнитных полей увеличение напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$  приводит к уменьшению магнитного

отклика на малых частотах переменного магнитного поля. Сдвиг пика мнимой части в область высоких частот свидетельствует об уменьшении характерного времени релаксации. Аналогичные результаты были получены в [21], но только для частиц с броуновским механизмом релаксации магнитного момента ( $\sigma = 0$ ). Учет межчастичных взаимодействий уменьшает магнитный отклик при больших значениях напряженности статического магнитного поля ( $\alpha_{dc} = 3, 5$ ).

В перпендикулярной конфигурации магнитных полей увеличение параметра магнитной анизотропии  $\sigma$  приводит к уменьшению магнитного отклика на малых частотах переменного магнитного поля. Сдвиг пика мнимой части в область высоких частот свидетельствует об уменьшении характерного времени релаксации. Учет межчастичных взаимодействий при достаточно больших значениях параметра магнитной анизотропии  $\sigma = 3$  и  $\sigma = 5$  незначительно увеличивает магнитный отклик системы.

Результаты аналитического и численного решения уравнения ФПБ хорошо согласуются между собой.

### 3.5. Расчет характерных времен релаксации магнитного момента

Характерное время релаксации определялось аналогично подразделу 2.5.

Положение максимума мнимой части восприимчивости в зависимости от амплитуды переменного  $\alpha_{ac}$  и напряженности статического  $\alpha_{dc}$  магнитных полей показано на рисунке 3.5.1. Диполь-дипольные взаимодействия учитываются с  $\chi_L = 1$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma = 1$ . Переменное магнитное поле параллельно статическому магнитному полю.

При малых амплитудах поля ( $\alpha_{ac} < 1$ ) увеличение напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$  приводит к уменьшению характерного времени релаксации магнитного момента. Для достаточно больших значений амплитуды переменного магнитного поля ( $\alpha_{ac} > 1$ ) время релаксации имеет немонотонную зависимость от напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$ .

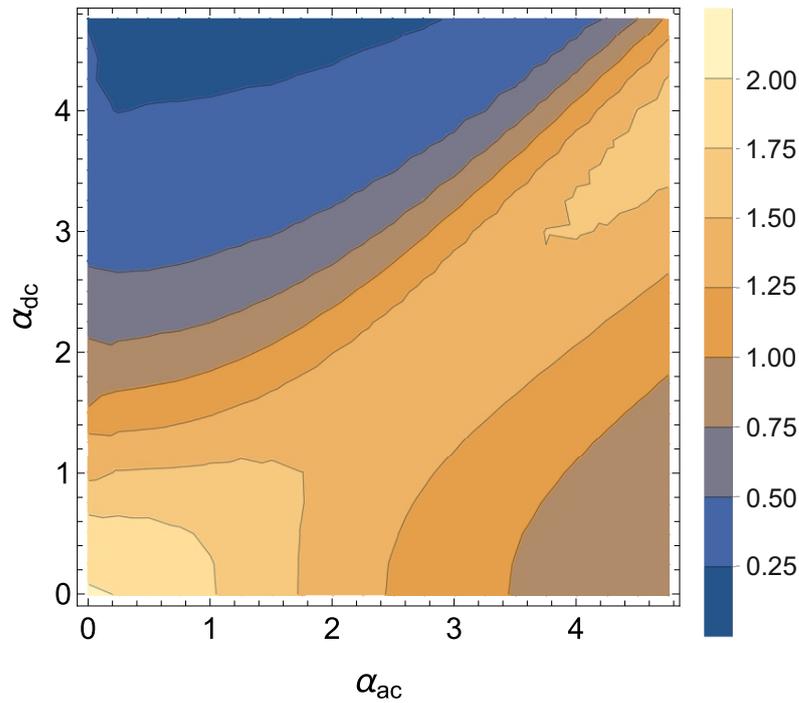


Рис. 3.5.1 – Контурный график  $1/\omega_{max}\tau_D = \tau_{relax}/\tau_D$  в зависимости от амплитуды переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$  и напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$  при  $\chi_L = 1$  и  $\sigma = 1$ . Параллельная конфигурация полей. Расчеты проведены численно с шагами  $h_x = 0.01$  и  $N_T = 30000$  (количество узлов сетки по времени,  $h_t = T/N_T$ ).

### 3.6. Основные результаты главы

В разделе 3.1 аналитически решено уравнение ФПБ и представлены зависимости динамической намагниченности, динамической восприимчивости от диполь-дипольных взаимодействий, взаимной ориентации переменного и статического магнитных полей. Проанализировано влияние статического магнитного поля на динамическую намагниченность, динамическую восприимчивость. Показано, что увеличение напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$  при любой ориентационной конфигурации магнитных полей уменьшает магнитный отклик рассматриваемой системы. Учет и увеличение диполь-дипольных взаимодействий усиливают магнитный отклик для любой взаимной ориентации переменного и статического магнитных полей. В предельном положении переменного магнитного поля ( $\xi = 0$ , параллельно оси легкого намагничивания) магнитный отклик достигает максимума. С увеличением угла  $\xi$  между переменным магнитным полем система меньше реагирует на переменное магнитное поле. Полученное в разделе аналитическое решение уравнения ФПБ представ-

ляется в виде ряда, сходимость которого доказана с помощью метода бесконечных дробей.

В разделе 3.2 проведено сравнение аналитических расчетов динамической восприимчивости с известными из литературы результатами компьютерного моделирования. Получено хорошее согласование данных.

В разделе 3.3 магнитные свойства системы промоделированы численно для произвольной амплитуды переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$ . Обнаружен эффект немонотонного поведения динамической восприимчивости в зависимости от амплитуды переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$  и параметра магнитной анизотропии  $\sigma$ . Взаимодействия «диполь-диполь», «диполь-поле», «диполь-легкая ось намагничивания» конкурируют друг с другом и дают различные вклады в динамическую восприимчивость. Также показано, что имеет место быть немонотонной зависимости характерного времени релаксации от напряженности статического поля.

В разделе 3.4 проведено сравнение аналитических расчетов динамической восприимчивости с численными результатами, полученными для малой амплитуды переменного магнитного поля ( $\alpha_{ac} = 0.01$ ). Наблюдается хорошее согласование численных и аналитических данных.

В разделе 3.5 проведен расчет характерных релаксационных времен. В параллельной конфигурации магнитных полей при малых амплитудах поля ( $\alpha_{ac} < 1$ ) увеличение напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$  приводит к уменьшению характерного времени релаксации магнитного момента. Для достаточно больших значений амплитуды переменного магнитного поля ( $\alpha_{ac} > 1$ ) время релаксации имеет немонотонную зависимость от напряженности статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$ .

Основное содержание главы опубликовано в статьях [18, 22]. В статье [22] Зверев В.С. помогал в формулировании целей, в выборе общих методик исследований и в подготовке публикаций.

## Глава 4. Разработанные программные комплексы

В данной главе приведены основные характеристики двух разработанных программных комплексов, позволяющих моделировать динамическую восприимчивость ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных взаимодействующих магнитных частиц, оси легкого намагничивания которых коллинеарны друг другу.

Теоретической основой комплексов являются численные методы и алгоритмы, разработанные для решения уравнения ФПБ (2.1.1). Данные численные методы приведены в Главах 2 и 3.

Программные комплексы были написаны на языке программирования C++ (версия стандарта: C++11), достаточно производительным для численных методов. Первый программный комплекс позволяет рассчитать динамическую восприимчивость системы частиц, находящейся в переменном и статическом магнитных полях, параллельных между собой. Вторым комплексом рассчитывается перпендикулярную динамическую восприимчивость. При написании использовался процедурный подход программирования. Эта парадигма использует линейный нисходящий подход и рассматривает данные и процедуры как два разных объекта. Основываясь на концепции вызова процедуры, процедурное программирование делит программу на процедуры просто содержащие последовательность шагов, которые необходимо выполнить.

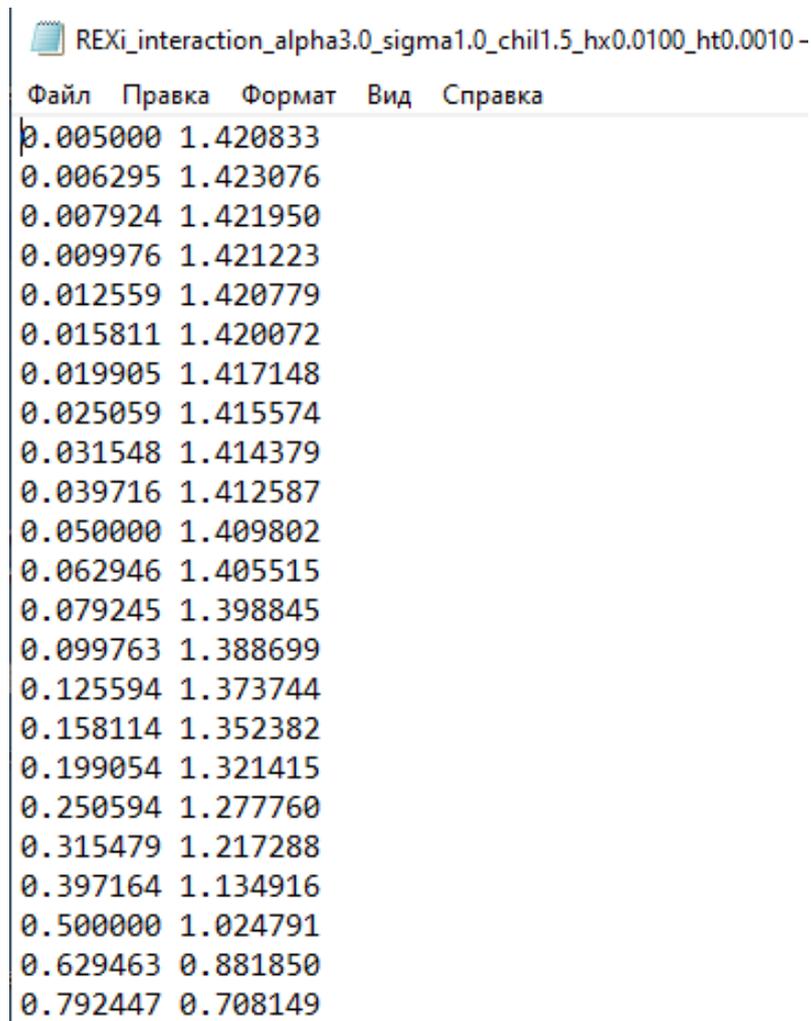
Работоспособность программных комплексов проверена в операционных системах Windows (10) и Unix-системах (Ubuntu 20.04, Mac OS 12.2). Компиляция проводилась с параметром «-O2», который оптимизирует компилируемый код. С параметром «-O2», компилятор попытается увеличить производительность кода без нарушения размера и без затрачивания большого количества

времени компиляции. Для запуска в ОС Windows необходимо в командной строке (в папке с программой) ввести «a.exe» и через пробел входные параметры. Для запуска в Unix-системах в командной строке необходимо ввести «./a.exe» и входные параметры через пробел.

## 4.1. Расчет динамического отклика системы частиц, находящейся в переменном магнитном поле, параллельном осям легкого намагничивания

### 4.1.1. Входные и выходные данные программного комплекса

На вход программе необходимо подать набор параметров, таких как параметр Ланжевена переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$ , параметр Ланжевена статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L$ , интервал частот  $\omega\tau_D$ . На выходе генерируется четыре файла формата *.txt* с рассчитанной динамической восприимчивостью  $\chi$  (действительная и мнимая части, с учетом взаимодействия и одночастичное приближение), зависимой от частоты переменного магнитного поля  $\omega\tau_D$ . В файлах формируется два столбца данных: частота переменного магнитного поля  $\omega\tau_D$ , динамическая восприимчивость ( $Re[\chi(\omega\tau_D)]$  или  $Im[\chi(\omega\tau_D)]$ ) (рисунок 4.1.1).



Файл	Правка	Формат	Вид	Справка
0.005000	1.420833			
0.006295	1.423076			
0.007924	1.421950			
0.009976	1.421223			
0.012559	1.420779			
0.015811	1.420072			
0.019905	1.417148			
0.025059	1.415574			
0.031548	1.414379			
0.039716	1.412587			
0.050000	1.409802			
0.062946	1.405515			
0.079245	1.398845			
0.099763	1.388699			
0.125594	1.373744			
0.158114	1.352382			
0.199054	1.321415			
0.250594	1.277760			
0.315479	1.217288			
0.397164	1.134916			
0.500000	1.024791			
0.629463	0.881850			
0.792447	0.708149			

Рис. 4.1.1 – Пример выходного файла. Первый столбец данных – частота  $\omega\tau_D$  переменного магнитного поля, второй столбец – динамическая восприимчивость.

## 4.1.2. Основные функции программного комплекса

Главное назначение программного комплекса есть расчет динамической восприимчивости ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных взаимодействующих магнитных частиц, оси легкого намагничивания которых коллинеарны друг другу. Также программный комплекс позволяет рассчитать плотность вероятности, динамическую намагниченность и характерное время релаксации.

На рисунке 4.1.2 изображена блок-схема основной функции ( $Xi\_calc(Params\ params)$ ) программного комплекса, которая рассчитывает динамическую восприимчивость. Структура  $Params$  включает в себя входные параметры программы:  $\alpha_{ac}$ ,  $\alpha_{dc}$ ,  $\sigma$ ,  $\chi_L$ ,  $N_T$ ,  $h_x$ ,  $\omega\tau_0$ ,  $\omega\tau_N$ . Динамическая восприимчивость  $\chi(\omega\tau_D)$  рассчитывается в зависимости от частоты переменного магнитного поля  $\omega\tau_D = r/2$ . Для каждой частоты переменного магнитного

поля рассчитывается шаг по времени  $h_t = (2\pi)/(rN_T)$ . Сначала идет расчет динамической восприимчивости для системы одночастичного приближения (диполь-дипольные взаимодействия не учитываются). Затем, используя найденную намагниченность, считается потенциал  $mst$  по формуле (4.3.4) (считается только первый интеграл, так как плотность вероятности не зависит от азимутального угла  $\varphi$ , второй и третий интеграл равны нулю) и рассчитывается динамическая восприимчивость для системы, учитывающей диполь-дипольные взаимодействия. Результаты записываются в файлы для обоих случаев. Как видно из блок-схемы функция *find\_last\_W\_and\_M* повторяется два раза в каждом случае. В первом проходе функции *find\_last\_W\_and\_M* рассчитывается начальная плотность вероятности, так как  $W_0$  задаваемая нами не соответствует действительности. Начальная плотность в первом проходе уточняется для заданных параметров. Во втором проходе функции *find\_last\_W\_and\_M* уже с рассчитанным начальным условием ведется расчет намагниченности системы.

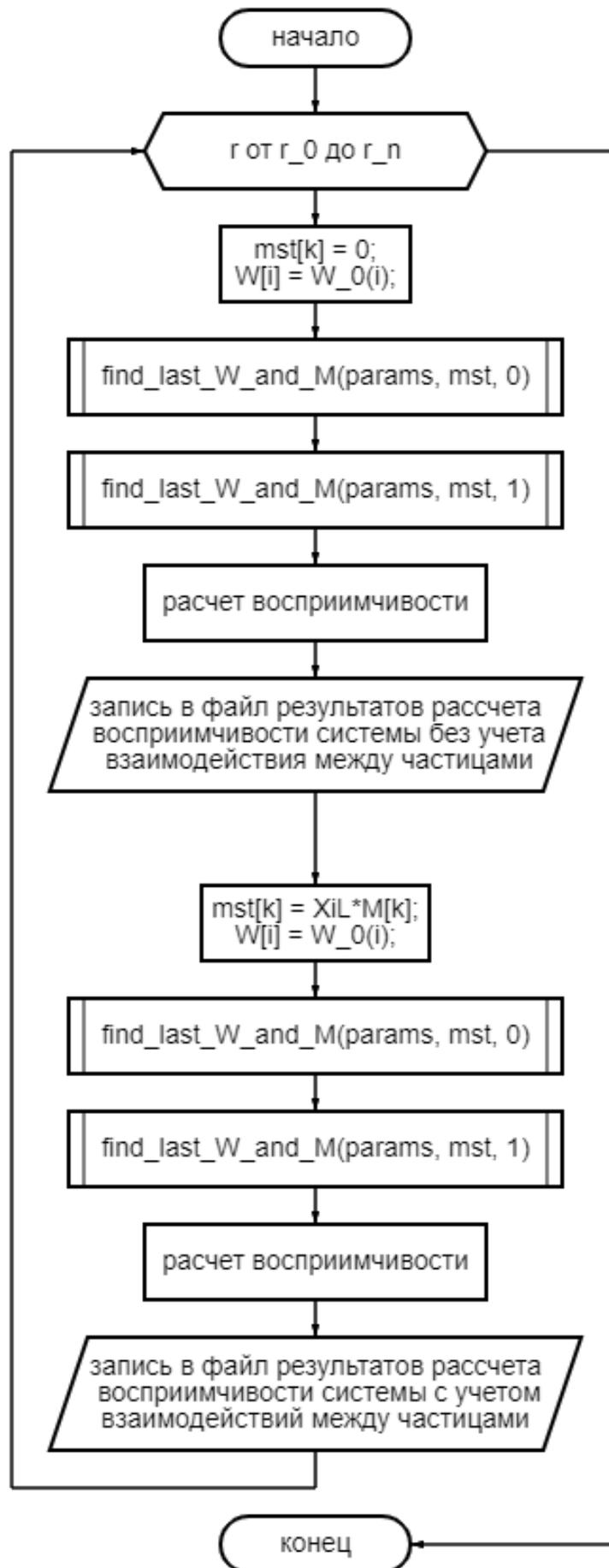


Рис. 4.1.2 – Блок-схема функции  $Xi\_calc(Params\ params)$  в параллельной ориентации магнитных полей.

На рисунке 4.1.3 изображена блок-схема функции  $find\_last\_W\_and\_M(Params\ params, double * mst, bool calc\_M)$ . Входные данные функции состоят из: структуры  $Params$ , описанной выше; массива  $mst$ , который содержит значения потенциала диполь-дипольных взаимодействий; булевой переменной  $calc\_M$ , которая говорит функции нужно ли считать намагниченность. В первых проходах данной функции она используется для нахождения начальной плотности вероятности и считать намагниченность не имеет смысла. Если же функция используется для нахождения намагниченности, то в ней сначала считается намагниченность для начального момента времени (плотность вероятности  $W_0(x)$  уже известна). Затем для каждого момента времени рассчитываются коэффициенты  $A_x, B_x, C_x$  по формулам (2.3.8), методом прогонки (функция  $Progonka(A_x, B_x, C_x)$ ) ведется расчет плотности вероятности, решение нормируется (функция  $W\_normirovka(W)$ ) и рассчитывается намагниченность системы (функция  $M\_calc(k)$ ).

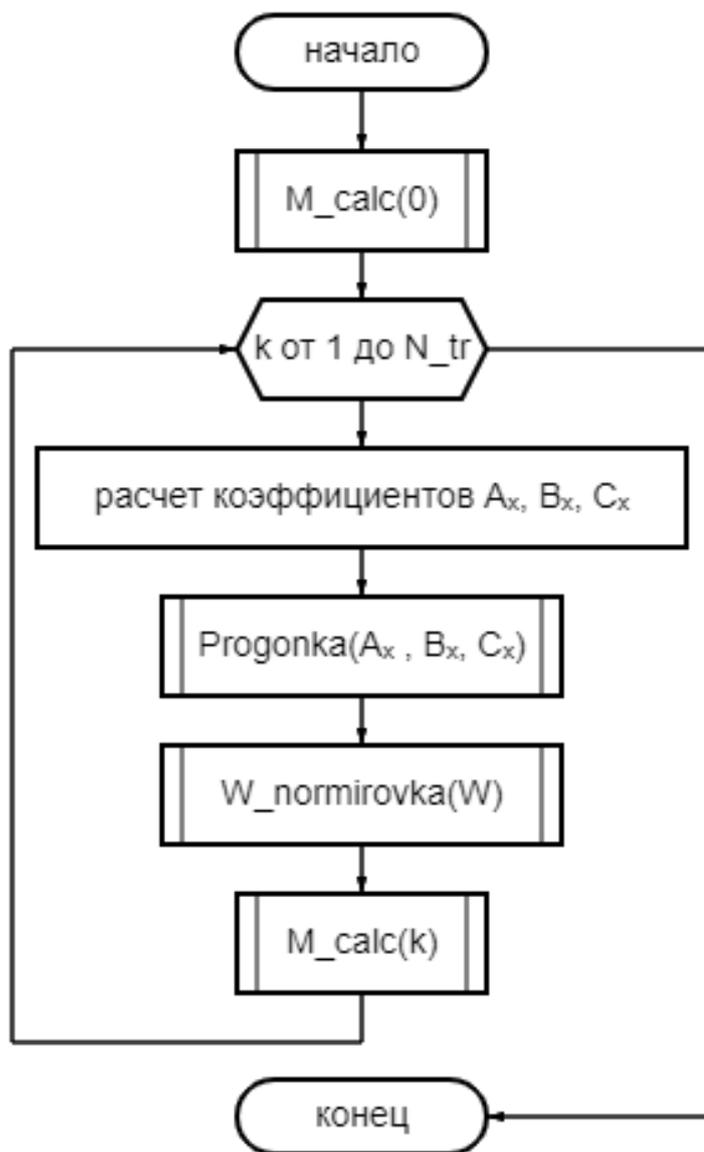


Рис. 4.1.3 – Блок-схема функции  $find\_last\_W\_and\_M(Params\ params, double * mst, bool\ calc\_M)$  в параллельной ориентации магнитных полей.

Далее приведен список остальных функций, используемых в программном комплексе с их входными, выходными данными и кратким описанием:

1.  $double\ Integrate\_Trapeze(int\ finish, double\ h, double * function)$  – интегрирует функцию ( $function$ ) методом трапеции с заданным шагом ( $h$ ) и количеством шагов ( $finish$ ).
2.  $void\ M\_calc(Params\ params, int\ k, double * W, double * M)$  – рассчитывает намагниченность системы в момент времени  $t[k]$ .

3. *void W\_normirovka(Params params, double \*W)* – проводит нормировку плотности вероятности ориентации магнитного момента по формуле (2.1.2).
4. *double W\_0(Params params, double x)* – возвращает значение «стартовой» плотности вероятности  $W$  по формуле  $W_{start} = e^{\alpha_{dc}x + \sigma x^2}$ .
5. Семейство функций  $A$ ,  $B$ ,  $C$  рассчитывает коэффициенты по формулам (2.3.8).

## 4.2. Расчет динамического отклика системы частиц, находящейся в переменном магнитном поле, перпендикулярном осям легкого намагничивания

### 4.2.1. Входные и выходные данные программного комплекса

На вход программе необходимо подать набор параметров, таких как параметр Ланжевена переменного магнитного поля  $\alpha_{ac}$ , параметр Ланжевена статического магнитного поля  $\alpha_{dc}$ , параметр магнитной анизотропии  $\sigma$ , восприимчивость Ланжевена  $\chi_L$ , интервал частот  $\omega\tau_D$ . На выходе генерируется четыре файла формата *.txt* с рассчитанной динамической восприимчивостью  $\chi$  (действительная и мнимая части, с учетом взаимодействия и одночастичное приближение), зависимой от частоты переменного магнитного поля  $\omega\tau_D$ . В файлах формируется два столбца данных: частота переменного магнитного поля  $\omega\tau_D$ , динамическая восприимчивость ( $Re[\chi(\omega\tau_D)]$  или  $Im[\chi(\omega\tau_D)]$ ).

### 4.2.2. Основные функции программного комплекса

На рисунке 4.2.1 изображена блок-схема основной функции ( $Xi\_calc(Params params)$ ) программного комплекса. Структура *Params* включает в себя входные параметры программы:  $\alpha_{ac}$ ,  $\alpha_{dc}$ ,  $\sigma$ ,  $\chi_L$ ,  $N_T$ ,  $h_x$ ,  $h_\varphi$ ,

$\omega\tau_0, \omega\tau_N$ . Для каждой частоты переменного магнитного поля рассчитывается шаг по времени  $h_t = (2\pi)/(rN_T)$ . Динамическая восприимчивость  $\chi(\omega\tau_D)$  рассчитывается аналогично алгоритму предыдущего программного комплекса, за исключением того, что рассчитывается три интеграла  $mst1, mst2, mst3$  (по формуле (4.3.4) из Приложения А) вместо одного  $mst$ . Плотность вероятности ориентации магнитного момента характеризуется уже не только полярным углом ( $\theta, \cos\theta = x$ ), но и азимутальным углом ( $\varphi$ ). Следовательно, плотность вероятности задается двумерным массивом.

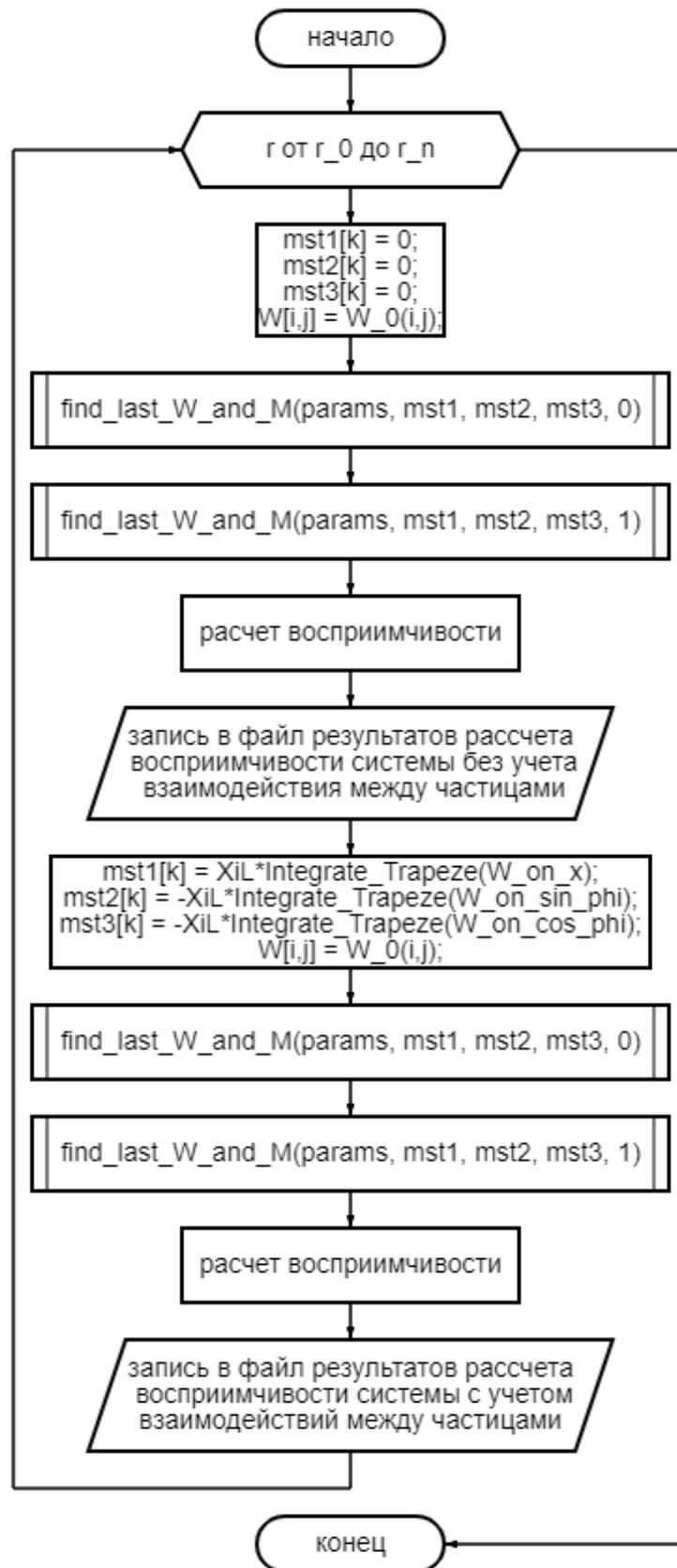


Рис. 4.2.1 – Блок-схема функции  $Xi\_calc(Params\ params)$  в перпендикулярной ориентации магнитных полей.

На рисунке 4.2.2 изображена блок-схема функции  $find\_last\_W\_and\_M(Params\ params, double *mst1, double *mst2, double *mst3, bool\ calc\_M)$ . Входные данные функции состоят из: структуры  $Params$ , описанной выше; массивов  $mst1$ ,  $mst2$ ,  $mst3$ , которые содержат значения потенциала диполь-дипольных взаимодействий; булевой переменной  $calc\_M$ , которая говорит функции, нужно ли считать намагниченность. В первых проходах данной функции она используется для нахождения начальной плотности вероятности и считать намагниченность не имеет смысла. Если же функция используется для нахождения намагниченности, то в ней сначала считается намагниченность для начального момента времени (плотность вероятности  $W_0(x, \varphi)$  уже известна). Затем для каждого момента времени рассчитываются коэффициенты  $A_x, B_x, C_x$  по формулам (2.3.17), методом прогонки (функция  $Progonka\_x(A_x, B_x, C_x)$ ) ведется расчет плотности вероятности, рассчитываются коэффициенты  $A_\varphi, B_\varphi, C_\varphi$  по формулам (2.3.17), методом прогонки (функция  $Progonka\_y(A_y, B_y, C_y)$ ) ведется расчет плотности вероятности, решение нормируется (функция  $W\_normirovka(W)$ ) и рассчитывается намагниченность системы (функция  $M\_calc(k)$ ).

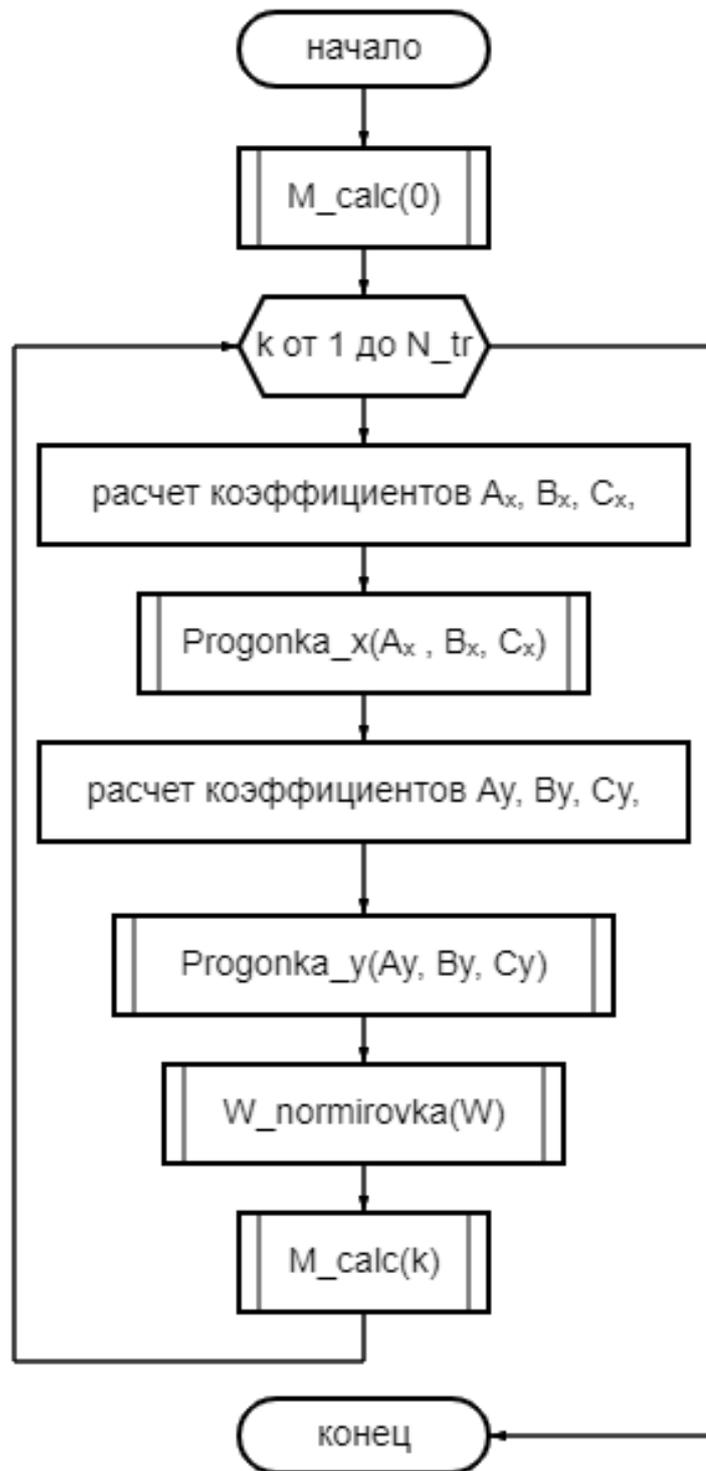


Рис. 4.2.2 – Блок-схема функции  $find\_last\_W\_and\_M(Params\ params, double *mst1, double *mst2, double *mst3, bool\ calc\_M)$  в перпендикулярной ориентации магнитных полей.

Далее приведен список остальных функций, используемых в программном комплексе с их входными, выходными данными и кратким описанием:

1. *double Integrate\_Trapeze(int finish, double h, const std :: vector < double > &function)* – интегрирует функцию (*function*) методом трапеции с заданным шагом (*h*) и количеством шагов (*finish*).
2. *double Integrate\_Trapeze\_2(int finish1, double h1, int finish2, double h2, double \*\*function)* – интегрирует двумерную функцию (*function*) методом трапеции с заданными шагами (*h<sub>1</sub>* и *h<sub>2</sub>*) и количеством шагов (*finish1* и *finish2*).
3. *void M\_calc(Params params, int k, double \*\*W, const std :: vector < double > &M)* – рассчитывает намагниченность системы в момент времени  $t[k]$
4. *void W\_normirovka(Params params, double \*\*W)* – проводит нормировку плотности вероятности ориентации магнитного момента по формуле (2.1.2).
5. *double W\_0(Params params, double x)* – возвращает значение «стартовой» плотности вероятности  $W_{start}$  по формуле  $W_{start} = e^{\alpha_{dc}x + \sigma x^2}$ .
6. Семейство функций  $A_x, B_x, C_x, A_y, B_y, C_y$  рассчитывает коэффициенты по формулам (2.3.17).

### 4.3. Основные результаты главы

Программные комплексы были созданы для изучения динамических свойств ансамбля суперпарамагнитных взаимодействующих обездвиженных частиц, находящихся под действием переменного и статического магнитных полей. В представленных комплексах реализованы алгоритмы численного решения уравнения ФПБ, описанные в предыдущих главах.

В данной главе рассказано о входных и выходных данных программных комплексов и о способе работы с ними. Показана логика работы комплексов и типы данных, используемые в них. Программные комплексы реализованы на языке программирования C++. Оптимизация программного кода позволила достаточно быстро получать результаты даже в случаях малых шагов, использованных в численных схемах.

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

Представленные в главе программные комплексы были зарегистрированы в Федеральной службе по интеллектуальной собственности (Роспатент). Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ приведены в Приложениях Б и В.

## Заключение

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

Основные результаты диссертации могут быть сформулированы следующим образом:

- Построена математическая модель динамического отклика ансамбля обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц с выровненными осями легкого намагничивания. Модель основана на уравнении ФПБ, в которое введено дополнительное слагаемое, учитывающее диполь-дипольные взаимодействия. Это слагаемое получено из строгих законов статистической механики и рассчитано в работе для различных конфигураций внешних полей. Рассмотрены следующие конфигурации полей: на систему действует только переменное поле, расположенное под углом к осям легкого намагничивания частиц; одновременно с действием переменного поля, направленного параллельно осям легкого намагничивания, присутствует подмагничивающее статическое поле, сонаправленное или перпендикулярно-направленное переменному полю.
- Получено аналитическое решение уравнения ФПБ для плотности вероятности ориентации магнитного момента частиц в случае малых амплитуд переменного поля. Определены основные закономерности поведения

плотности вероятности ориентации магнитного момента в зависимости от направления переменного магнитного поля, напряженности подмагничивающего статического поля и магнитной анизотропии.

- Исследована сходимость теоретических аппроксимаций, полученных при решении уравнения ФПБ. Проведен анализ количества членов ряда в аппроксимации, необходимого для получения решения, сходящегося к точному.
- Получены аналитические аппроксимации для динамической намагниченности и восприимчивости в случае малых амплитуд переменного поля. Установлено, что учет и усиление диполь-дипольных взаимодействий приводят к росту модуля намагниченности и увеличению динамической восприимчивости, увеличение магнитной анизотропии приводит к увеличению динамической восприимчивости в параллельной конфигурации полей и уменьшению в перпендикулярной, увеличение напряженности статического магнитного поля приводит к росту модуля намагниченности и уменьшению динамической восприимчивости.
- Определены эффективные алгоритмы численного моделирования динамических свойств ансамбля суперпарамагнитных взаимодействующих обездвиженных частиц в переменных полях произвольной амплитуды. Исследована погрешность решений уравнения ФПБ, полученных численными методами в зависимости от пространственных и временного шагов.
- Разработаны программные комплексы, позволяющие численно моделировать динамические характеристики ансамбля суперпарамагнитных взаимодействующих обездвиженных частиц, находящегося под действием переменного и статического магнитных полей.
- Установлены закономерности изменения динамического отклика системы от амплитуды переменного поля, направления и напряженности подмагничивающего статического поля. Показано, что диполь-дипольные взаимодействия, взаимодействия типа «магнитный момент» – «легкая ось» и «магнитный момент» – «внешнее поле» конкурируют между собой и дают вклады разного знака в магнитные и релаксационные характеристики

системы. Впервые обнаружено, что динамическая восприимчивость имеет немонотонную зависимость от магнитной анизотропии и амплитуды переменного магнитного поля в системе, где: переменное магнитное поле параллельно осям легкого намагничивания, действует статическое подмагничивающее магнитное поле и учитываются диполь-дипольные взаимодействия.

- Проведено сравнение аналитических аппроксимаций с результатами численных расчетов в области малых амплитуд переменного поля. Аналитические аппроксимации протестированы на результатах компьютерного моделирования, известных из литературы. Полученные аналитические и численные результаты согласуются между собой, а также с данными компьютерного моделирования.

#### **Рекомендации и дальнейшие перспективы разработки темы.**

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

## Литература

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

9. Zubarev, A.Yu. Magnetic hyperthermia in a system of immobilized magnetically interacting particles / A.Yu. Zubarev // *Physical Review E*. — 2019. — V. 99, N. 6. — P. 062609.
10. Elfimova, E.A. Static magnetization of immobilized, weakly interacting, superparamagnetic nanoparticles / E.A. Elfimova, A.O. Ivanov, Ph.J. Camp // *Nanoscale*. — 2019. — V. 11. — P. 21834–21846.
11. The thermodynamic properties of soft magnetic materials containing superparamagnetic nanoparticles frozen in the nodes of the regular cubic lattice / A. Solovyova, S. Sokolsky, E. Elfimova, A. Ivanov // *Journal of Nanoparticle Research*. — 2021. — V. 23, N. 7. — P. 139.
12. Raikher, Y.L. Nonlinear dynamic susceptibilities and field-induced birefringence in magnetic particle assemblies / Y.L. Raikher, V.I. Stepanov // *Advances in Chemical Physics*. — 2004. — V. 129. — P. 419–588.
13. Coffey, W.T. On the theory of Debye and Néel relaxation of single domain ferromagnetic particles / W.T. Coffey, P.J. Cregg, Y.P. Kalmykov // *Advances in Chemical Physics*. — 1993. — V. 83. — P. 263–464.
14. AC susceptibility as a tool to probe the dipolar interaction in magnetic nanoparticles / G. T. Landi, F. R. Arantes, D. R. Cornejo et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2017. — V. 421. — P. 138–151.
15. Dynamic susceptibility of a concentrated ferrofluid: The role of interparticle interactions / A. V. Lebedev, V. I. Stepanov, A. A. Kuznetsov et al. // *Physical Review E*. — 2019. — V. 100. — P. 032605.
16. 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.
17. 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.
18. Амбаров, А.В. Динамическая восприимчивость взаимодействующих суперпарамагнитных частиц в постоянном магнитном поле / А.В. Амбаров // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика.* — 2022. — Т. 22, N. 2. — С. 131–140.
  19. Ambarov, A. V. Numerical modeling of the magnetic response of interacting superparamagnetic particles to an ac field with arbitrary amplitude / A. V. Ambarov, V. S. Zverev, E. A. Elfimova // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering.* — 2020. — V. 28, N. 8. — P. 085009.
  20. Ambarov, A. V. Dynamic response of interacting superparamagnetic particles with aligned easy magnetization axes / A. V. Ambarov, V. S. Zverev, E. A. Elfimova // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 2020. — V. 497. — P. 166010.
  21. Theoretical study of the dynamic magnetic response of ferrofluid to static and alternating magnetic fields / Т. М. Batrudinov, A. V. Ambarov, E.A. Elfimova et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 2017. — V. 431. — P. 180–183.
  22. Амбаров, А.В. Моделирование динамического магнитного отклика взаимодействующих обездвиженных суперпарамагнитных частиц с выравненными осями легкого намагничивания / А.В. Амбаров, Е.А. Елфимова, В.С. Зверев // 20-ая Международная Плесская научная конференция по нанодисперсным магнитным жидкостям: сборник научных трудов. ИГЭУ, Плес. — 2022. — С. 121–125.
  23. Зверев, В.С. Динамическая восприимчивость неподвижного кластера магнитных наночастиц / В.С. Зверев, А.В. Амбаров, Е.А. Елфимова // 20-ая Международная Плесская научная конференция по нанодисперсным магнитным жидкостям: сборник научных трудов. ИГЭУ, Плес. — 2022. — С. 131–135.

24. 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.
25. 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.
26. 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.
27. 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.
28. Novel highly elastic magnetic materials for dampers and seals: Part I. Preparation and characterization of the elastic materials / S. Abramchuk, E. Kramarenko, G. Stepanov et al. // *Polymers for Advanced Technologies*. — 2007. — V. 18, N. 11. — P. 883–890.
29. Шлиомис, М. И. Магнитные жидкости / М. И. Шлиомис // *Усп. физ. наук*. — 1974. — Т. 112, N. 3. — С. 427–458.
30. Блум, Э. Я. Магнитные жидкости / Э. Я. Блум, М. М. Майоров, А. О. Цеберс. — Зинатне, 1989. — 386 с.
31. Zakinyan, A. Thermal conductivity of emulsion with anisotropic microstructure induced by external field / A. Zakinyan, I. Arefyev // *Colloid and Polymer Science*. — 2020. — V. 298, N. 8. — P. 1063–1076.
32. Kolesnikova, A. Microstructure formation and macroscopic dynamics of ferrofluid emulsion in rotating magnetic field / A. Kolesnikova, A. Zakinyan, Y. Dikansky // *EPJ Web of Conferences*. — 2018. — V. 185. — P. 09004.
33. Field-Induced Structures in Ferrofluid Emulsions / Jing Liu, E. M. Lawrence, A. Wu et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — V. 74. — P. 2828–2831.

34. Morimoto, Y. Dispersion state of protein-stabilized magnetic emulsions / Y. Morimoto, M. Akimoto, Y. Yotsumoto // *Chemical & Pharmaceutical Bulletin*. — 1982. — V. 30. — P. 3024–3027.
35. Wu, K. Dynamic structure study of  $Fe_3O_4$  ferrofluid emulsion in magnetic field / K. Wu, Y. Yao // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 1999. — V. 201. — P. 186–190.
36. Self-assembly of charged colloidal cubes / M. Rosenberg, F. Dekker, J. G. Donaldson et al. // *Soft Matter*. — 2020. — V. 16. — P. 4451–4461.
37. 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.
38. 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.
39. 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.
40. 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.
41. 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.
42. 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.

43. 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.
44. Magnetic Field-Responsive Smart Polymer Composites / G. Filipcsei, I. Csetneki, A. Szilágyi, M. Zrínyi // Advances in Polymer Science. — 2007. — V. 206. — P. 137–189.
45. 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.
46. 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.
47. Ilg, P. Stimuli-responsive hydrogels cross-linked by magnetic nanoparticles / P. Ilg // Soft Matter. — 2013. — V. 9. — P. 3465–3468.
48. Boczkowska, A. Microstructure and Properties of Magnetorheological Elastomers / A. Boczkowska, S. Awietjan // Advanced Elastomers. — 2012.
49. 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.
50. 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.
51. 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.
52. 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.
53. 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.
54. Boosting Magnetoelectric Effect in Polymer-Based Nanocomposites / A. Omelyanchik, V. Antipova, C. Gritsenko et al. // *Nanomaterials*. — 2021. — V. 11, N. 5.
55. 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.
56. Гиршфельдер, Д. Молекулярная теория газов и жидкостей / Д. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд. — Москва : Иностранная литература, 1961. — Т. 929.
57. Gennes, P.G. Pair correlations in a ferromagnetic colloid / P.G. Gennes, P.A. Pincus // *Physik der kondensierten Materie*. — 1970. — V. 11. — P. 189–198.
58. Jones, J.E. On the determination of molecular fields. —II. From the equation of state of a gas / J.E. Jones // *Proceedings of The Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. — V. 106. — P. 463–477.
59. Матвеев, А.Н. Молекулярная физика / А.Н. Матвеев. — Лань, 2010. — Т. 4. — 368 с.
60. Structural transitions and magnetic response of supramolecular magnetic polymerlike structures with bidisperse monomers / E. Novak, E. Pyanzina, M. Gupalo et al. // *Physical Review E*. — 2022. — V. 105.

61. Raikher, Yu. L. Theory of dispersion of the magnetic susceptibility of fine ferromagnetic particles / Yu. L. Raikher, M. I. Shliomis // *Sov. Phys. - JETP*. — 1974. — V. 40, N. 3. — P. 526–532.
62. Shliomis, M.I. Theory of the dynamic susceptibility of magnetic fluids / M.I. Shliomis, V.I. Stepanov. // *Advances in Chemical Physics: Relaxation Phenomena in Condensed Matter*. — 1994. — V. 87. — P. 1–30.
63. Nonlinear frequency-dependent effects in the dc magnetization of uniaxial magnetic nanoparticles in superimposed strong alternating current and direct current fields / N. Wei, D. Byrne, W. T. Coffey et al. // *Journal of Applied Physics*. — 2014. — V. 116, N. 17. — P. 173903.
64. Coffey, W. T. Nonlinear normal and anomalous response of non-interacting electric and magnetic dipoles subjected to strong AC and DC bias fields / W. T. Coffey, Y. P. Kalmykov, N. Wei // *Nonlinear Dynamics*. — 2015. — V. 80, N. 4. — P. 1861–1867.
65. Deissler, R. J. Dependence of Brownian and Néel relaxation times on magnetic field strength / R. J. Deissler, Y. Wu, M. A. Martens // *Medical physics*. — 2014. — V. 41, N. 1. — P. 012301.
66. Raikher, Y. L. Physical aspects of magnetic hyperthermia: Low-frequency ac field absorption in a magnetic colloid / Y. L. Raikher, V. I. Stepanov // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2014. — V. 368. — P. 421–427.
67. Debye, P. Polar molecules / P. Debye. — Chemical Catalog Company, New York, 1929. — 172 P.
68. Fröhlich, H. Theory of dielectrics: Dielectric constant and dielectric loss, 2nd ed. / H. Fröhlich. — Clarendon Press, Oxford, 1958. — 192 P.
69. Coffey, W. T. The Langevin Equation / W. T. Coffey, Yu. P. Kalmykov, J. T. Waldron // *World Scientific*. — 1996.
70. Magnetic fluid dynamics in a rotating magnetic field / T. Yoshida, K. Enpuku, J. Dieckhoff et al. // *Journal of Applied Physics*. — 2012. — V. 111, N. 5. — P. 053901.

71. Magnetic-field dependence of Brownian and Néel relaxation times / J. Dieckhoff, D. Eberbeck, M. Schilling, F. Ludwig // *Journal of Applied Physics*. — 2016. — V. 119, N. 4. — P. 043903–1–9.
72. Yoshida, T. Simulation and quantitative clarification of AC susceptibility of magnetic fluid in nonlinear Brownian relaxation region / T. Yoshida, K. Enpuku // *Japanese Journal of Applied Physics*. — 2009. — V. 48, N. 12R. — P. 127002.
73. Ivanov, A. O. Revealing the signature of dipolar interactions in dynamic spectra of polydisperse magnetic nanoparticles / A. O. Ivanov, V. S. Zverev, S. S. Kantorovich // *Soft Matter*. — 2016. — V. 12. — P. 3507–3513.
74. Influence of dipolar interactions on the magnetic susceptibility spectra of ferrofluids / J. O. Sindt, P. J. Camp, S. S. Kantorovich et al. // *Physical Review E*. — 2016. — V. 93, N. 6. — P. 063117.
75. 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.
76. Ivanov, A. Effects of interactions, structure formation, and polydispersity on the dynamic magnetic susceptibility and magnetic relaxation of ferrofluids / A. Ivanov, P. Camp // *Journal of Molecular Liquids*. — 2022. — V. 356. — P. 119034.
77. Sinyagin, A. Monte Carlo simulation of linear aggregate formation from CdTe nanoparticles / A. Sinyagin, A. Belov, N. Kotov // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. — 2005. — V. 13, N. 3. — P. 389–399.
78. Kinetics of doublet formation in bicomponent magnetic suspensions: The role of the magnetic permeability anisotropy / M.T. Lopez-Lopez, F. Nogueras-Lara, L. Rodriguez-Arco et al. // *Physical Review E*. — 2017. — V. 96, N. 6. — P. 062604.
79. Zubarev, A.Yu. Towards a theory of mechanical properties of ferrogels: Effect of chain-like aggregates / A.Yu. Zubarev, L.Yu. Iskakova, M.T. Lopez-Lopez //

- Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2016. — V. 455. — P. 98–103.
80. Aoshima, M. Two-dimensional Monte Carlo simulations of a colloidal dispersion composed of rod-like ferromagnetic particles in an applied magnetic field / M. Aoshima, A. Satoh // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. — 2007. — V. 16, N. 1. — P. 015004.
81. Zubarev, A. Yu. Magnetic hyperthermia in solid magnetic colloids / A. Yu Zubarev, L. Yu Iskakova, A. F. Abu-Bakr // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2017. — V. 467. — P. 59–66.
82. Zubarev, A.Yu. Magnetic hyperthermia in a system of ferromagnetic particles, frozen in a carrier medium: Effect of interparticle interactions / A.Yu. Zubarev // Physical Review E. — 2018. — V. 98, N. 3. — P. 032610.
83. Dynamic magnetic response of a ferrofluid in a static uniform magnetic field / T. M. Batrudinov, Y. E. Nekhoroshkova, E. I. Paramonov et al. // Physical Review E. — 2018. — V. 052602, N. 98. — P. 052602–1–14.
84. Magnetic hyperthermia investigation of cobalt ferrite nanoparticles: Comparison between experiment, linear response theory, and dynamic hysteresis simulations / E. L. Verde, G. T. Landi, J. A. Gomes et al. // Journal of Applied Physics. — 2012. — V. 111, N. 12. — P. 123902.
85. Modeling the Brownian relaxation of nanoparticle ferrofluids: Comparison with experiment / M. A. Martens, R. J. Deissler, Y. Wu et al. // Medical Physics. — 2013. — V. 40, N. 2. — P. 022303.
86. Landi, G. T. Role of dipolar interaction in magnetic hyperthermia / G. T. Landi // Phys. Rev. B. — 2014. — V. 89. — P. 014403.
87. Brown, W. F. Thermal fluctuations of a single-domain particle / Brown, W. F. // Physical Review. — 1963. — V. 130, N. 5. — P. 1677–1686.
88. Simple approximate formulae for the magnetic relaxation time of single domain ferromagnetic particles with uniaxial anisotropy / W. T. Coffey, P. J. Cregg,

- D. S. F. Crothers et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 1994. — V. 131, N. 3. — P. 301–303.
89. Risken, H. *The Fokker-Planck equation: Methods of solution and applications*. Second edition / H. Risken, H. Haken. — Springer, 1989. — 454 P.
90. Allen, M. P. *Computer simulation of liquids* / M. P. Allen, D. J. Tildesley. — Clarendon Press, Oxford, 1987.
91. *Computer Simulations of Dynamic Response of Ferrofluids on an Alternating Magnetic Field with High Amplitude* / V. Zverev, A. Dobroserdova, A. Kuznetsov et al. // *Mathematics*. — 2021. — V. 9. — P. 2581.
92. 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.
93. Afanas'eva, N.M. Unconditionally stable schemes for convection-diffusion problems / N.M. Afanas'eva, P. N. Vabishchevich, M. V. Vasil'eva // *Russian Mathematics*. — 2013. — V. 57, N. 3. — P. 1–11.
94. Heer, C.V. *Statistical Mechanics, Kinetic Theory, and Stochastic Processes, (Section 7.10)* / C.V. Heer. — Academic Press, 1972. — 618 P.
95. Kalmykov, Yu. P. Evaluation of the smallest nonvanishing eigenvalue of the Fokker-Planck equation for the Brownian motion in a potential. II. The matrix continued fraction approach / Yu. P. Kalmykov // *Phys. Rev. E*. — 2000. — V. 62. — P. 227–236.
96. Denk, H. A generalization of a theorem of Pringsheim / H. Denk, M. Riederle // *Journal of Approximation Theory*. — 1982. — V. 35, N. 4. — P. 355–363.
97. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. *Вычислительная теплопередача* / Вабищевич П. Н. Самарский А. А. — Едиториал УРСС, 2003. — 784 с.

## Приложение А. Расчет диполь-дипольных взаимодействий

В данной работе используется модифицированная теория среднего поля первого порядка (MMF1) [73]. Согласно этой теории, рассчитывается взаимодействие магнитных моментов двух случайно выбранных магнитных частиц с номерами 1 и 2, и усредняется по всем возможным ориентациям магнитного момента и положениям частицы с номером 2. Пусть  $U_d(1, 2) = U_d(r_1, m_1, r_2, m_2)$  – функция, определяющая диполь-дипольные взаимодействия двух частиц, определяемая по формуле (2.1.4),  $W^{id}(2) = W^{id}(t, \vartheta_2, \varphi_2)$  – функция, определяющая плотность вероятности ориентации магнитного момента частицы с номером 2,  $\Theta(1, 2) = \Theta(r_1, r_2)$  – функция, обеспечивающая непроницаемость двух частиц. Тогда для учета диполь-дипольных взаимодействий проведем усреднение по всем возможным ориентациям и положениям магнитного момента частицы с номером 2 по формуле (2.1.3). Усреднения задаются в виде интегралов:

$$\rho \langle -U_d(1, 2)W^{id}(2)\Theta(1, 2) \rangle_2 = \frac{\rho}{4\pi} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\Phi \int_0^\pi \sin \Psi d\Psi \int_0^\pi \sin \vartheta_2 d\vartheta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \left[ W^{id}(\vartheta_2, \varphi_2) \frac{\mu_0 m^2}{kTr^3} (3(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2)) \right], \quad (4.3.1)$$

где  $\langle \dots \rangle_2$  – усреднения по всем возможным ориентациям магнитного момента частицы с номером 2,  $\rho$  – объемная концентрация частиц. Выпишем скалярные произведения в энергии диполь-дипольных взаимодействий  $U_d(1, 2)$ :

$$\begin{aligned} (\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{r}) &= \sin \vartheta_1 \cos \varphi_1 \sin \Psi \cos \Phi + \sin \vartheta_1 \sin \varphi_1 \sin \Psi \sin \Phi + \cos \vartheta_1 \cos \Psi, \\ (\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{r}) &= \sin \vartheta_2 \cos \varphi_2 \sin \Psi \cos \Phi + \sin \vartheta_2 \sin \varphi_2 \sin \Psi \sin \Phi + \cos \vartheta_2 \cos \Psi, \\ (\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2) &= \sin \vartheta_1 \cos \varphi_1 \sin \vartheta_2 \cos \varphi_2 + \sin \vartheta_1 \sin \varphi_1 \sin \vartheta_2 \sin \varphi_2 + \cos \vartheta_1 \cos \vartheta_2. \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

Учитывая (4.3.2) первое слагаемое энергии диполь-дипольного взаимодействия равняется:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} 3(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{r})d\Phi = 3 \int_0^{2\pi} [(\dots) \cos^2 \Phi + (\dots) \sin \Phi \cos \Phi + \\ + (\dots) \cos \Phi + (\dots) \sin^2 \Phi + (\dots) \sin \Phi + (\dots) \cos^2 \Psi] = 3\pi[\sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2(\cos \varphi_1 \cos \phi_2 + \\ + \sin \phi_1 \sin \phi_2) \sin^2 \Psi + \cos \vartheta_1 \cos \vartheta_2 \cos^2 \Psi] \end{aligned} \quad (4.3.3)$$

Учитывая выражение для первого слагаемого энергии диполь-дипольного взаимодействия (4.3.3) усредненная энергия диполь-дипольных взаимодействий будет равна:

$$\begin{aligned} \frac{\rho\mu_0 m^2}{(4\pi)^2 kT} \int_0^\infty \frac{1}{r} dr \int_{-1}^1 d \cos \Psi \int_{-1}^1 dx_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 [W^{id}(x_2, \varphi_2)(\cos \vartheta_1 \cos \vartheta_2 - \\ - \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2(\cos \varphi_1 \cos \varphi_2 + \sin \varphi_1 \sin \varphi_2))(3 \cos^2 \Psi - 1)] = \frac{2\pi\rho\mu_0 m^2}{3(4\pi)^2 kT} \int_{-1}^1 dx_2 \\ \int_0^{2\pi} d\varphi_2 [W^{id}(x_2, \varphi_2)(\cos \vartheta_1 \cos \vartheta_2 - \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2(\cos \varphi_1 \cos \varphi_2 + \sin \varphi_1 \sin \varphi_2))] = \\ = \frac{\chi L}{8\pi} \left[ 2x \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} x_2 W^{id}(x_2, \varphi_2) d\varphi_2 dx_2 - \right. \\ \left. - \sqrt{1-x^2} \cos \varphi \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \sqrt{1-x^2} \cos \varphi_2 W^{id}(x_2, \varphi_2) d\varphi_2 dx_2 - \right. \\ \left. - \sqrt{1-x^2} \sin \varphi \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \sqrt{1-x^2} \sin \varphi_2 W^{id}(x_2, \varphi_2) d\varphi_2 dx_2 \right] \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

здесь  $x_2 = \cos \vartheta_2$ . Мы усреднили диполь-дипольные взаимодействия двух частиц по всем возможным положениям второй частицы. Усреднение по всем возможным ориентациям проводится после того как станет найдена  $W^{id}(x_2, \varphi_2)$  в одночастичном приближении. В аналитическом решении уравнения ФПБ вид  $W$  зависит от ориентации переменного магнитного поля и наличия статического подмагничивающего поля. В численном решении усреднение по ориентациям проводится методом трапеции.

# Приложение Б. Свидетельство о регистрации программы ЭВМ №2022615351

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



## СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2022615351

**Расчет динамического отклика системы частиц,  
находящейся в переменном магнитном поле,  
параллельном осям легкого намагничивания.**

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

Авторы: *Амбаров Александр Васильевич (RU), Елфимова  
Екатерина Александровна (RU), Зверев Владимир Сергеевич  
(RU)*

Заявка № 2022614312

Дата поступления 24 марта 2022 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 30 марта 2022 г.

*Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности*

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ  
Сертификат 68b80077e14e4f00a94e0bd24145d5c7  
Владелец: **Зубов Юрий Сергеевич**  
Действителен с 20.05.2022 по 26.05.2023

*Ю.С. Зубов*



# Приложение В. Свидетельство о регистрации программы ЭВМ №2022616085

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



## СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2022616085

**Расчет динамического отклика системы частиц,  
находящейся в переменном магнитном поле,  
перпендикулярном осям легкого намагничивания**

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

Автор(ы): **Амбаров Александр Васильевич (RU)**

Заявка № **2022615290**

Дата поступления **24 марта 2022 г.**

Дата государственной регистрации  
в Реестре программ для ЭВМ **05 апреля 2022 г.**

*Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности*

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ  
Сертификат 68b80077e14e4f00a94e6bd24145d5c7  
Владелец **Зубов Юрий Сергеевич**  
Действителен с 2016-01-01 по 26.05.2023

*Ю.С. Зубов*

