

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЇ ФІЗИКИ**

**Рева Владислав Валерійович**



**537.624, 531.4,  
519.677, 519.21**

**СТАТИСТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СИСТЕМ  
ФЕРОМАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК З ВМОРОЖЕНИМИ  
МАГНІТНИМИ МОМЕНТАМИ**

**01.04.02 — теоретична фізика**

**АВТОРЕФЕРАТ**

**дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико–математичних наук**

**Суми — 2021**

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Сумському державному університеті МОН України.

**Науковий керівник:** кандидат фізико-математичних наук, доцент  
**Лютий Тарас Володимирович**  
Сумський державний університет,  
доцент кафедри електроніки,  
загальної та прикладної фізики.

**Офіційні опоненти:** доктор фізико-математичних наук  
**Косогор Анна Олексіївна**  
Інституту магнетизму НАН України,  
старший науковий співробітник відділу  
теорії магнітних явищ та магнітної  
динаміки конденсованих середовищ;

доктор фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник  
**Харченко Василь Олегович**  
Інститут прикладної фізики НАН України,  
в.о. провідного наукового співробітника  
відділу моделювання радіаційних ефектів  
та мікроструктурних перетворень у  
конструкційних матеріалах.

**Захист відбудеться** “4” березня 2021 р. о 15 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради К 55.250.01 при Інституті прикладної фізики НАН України за адресою: 40000, м. Суми, вул. Петропавлівська 58.

Із дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту прикладної фізики НАН України за адресою: 40000, м. Суми, вул. Петропавлівська 58.

Автореферат розісланий “23” січня 2021 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради  
кандидат фізико-математичних наук



В.М. Недорешта

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Невпинний розвиток нанотехнологій та впровадження нових матеріалів на базі феромагнітних наночастинок вимагають ґрунтовного аналізу фізичних процесів, що протікають в системах, які вони утворюють. З аналізу поведінки наночастинок, зафіксованих у твердій матриці відомо, що існують якісно різні режими магнітної та обертової динаміки наночастинок, які можуть змінювати один одного при зміні того чи іншого керуючого параметра. Так, наприклад, зміна динамічних режимів, яка відбувається при зміні амплітуди або частоти зовнішнього магнітного поля, може спричинити як різке зменшення, так і збільшення енергії цього поля, що поглинається системою наночастинок у одиницю часу. Деякі результати, отримані іншими дослідниками для наночастинок у рідкому середовищі вказують, що подібних ефектів слід очікувати й у випадку вимушеного обертового руху наночастинок з в замороженим магнітним моментом. Дане дисертаційне дослідження присвячене мікроскопічному аналізу поведінки феромагнітних наночастинок у в'язкій рідині під дією змінних зовнішніх магнітних полів, оскільки детальне вивчення магнітної та обертової динаміки наночастинок має першорядне значення для визначення теплових і магнітних характеристик сильно збуджених систем таких наночастинок.

У багатьох випадках результати, які раніше були отримані в рамках тих чи інших наближень, не дають вичерпних відповідей на важливі питання. Так, наприклад, квазірівноважне наближення, яке зазвичай використовується для визначення потужності втрат енергії змінного магнітного поля, у випадку високоанізотропних наночастинок перестає працювати. Далі, використання лінійного наближення не дозволяє дослідити ефекти, пов'язані з нелінійним характером магнітної і механічної динаміки феромагнітних наночастинок. Спроби ж врахування статистичного характеру обертового руху феромагнітних наночастинок за допомогою рівняння Фоккера-Планка не були успішними у повній мірі як з точки зору визначення потужності втрат, так і з точки зору статистичних характеристик обертового руху. Саме тому є затребуваним опис як детерміністичних обертових траєкторій наночастинок, що збуджуються періодичними полями, так і впливу на них теплових флуктуацій. Особливий інтерес має також знаходження ефективних рівнянь Ланжевена для кутових координат, які б дозволяли трактувати білий шум, що моделює дію термостату, у численні Іто для максимальної простоти подальшого чисельного моделювання. Важливість цього зумовлена тим, що аналітичні результати можуть бути отримані лише для окремих випадків, а для довільних амплітуд та частот зовнішнього поля опис можливий лише на базі чисельного моделювання. Інтерпретація шуму за Іто дозволить зробити чисельну процедуру максимально простою.

Дослідження впливу диполь-дипольної взаємодії є актуальним через те, що колективні ефекти в загальному випадку будуть вносити визначний вплив на відгук ансамблів наночастинок на зовнішні періодичні поля. Реальні експерименти показують, що агломерація наночастинок у кластери здатна суттєво зменшувати величину енергії, яка поглинається. Однак, цей вплив суттєво різниться залежно від параметрів як самого ансамблю, так і зовнішнього поля. Для розуміння зазначеного феномена необхідно класифікувати всі можливі види руху та вивчити мікроскопічну природу поглинання енергії для кожного з них. Задача багатьох тіл, яку потрібно вирішити в даному випадку, потребує підходів, що вимагають нетривіальних знань та навичок щодо апаратної частини і програмної реалізації чисельних експериментів. Незважаючи на те, що моделювання подібних систем активно здійснюється вже десятки років, комплексне дослідження впливу колективних ефектів на поглинання енергії здійснене не було. Крім того, будь-яка оптимізація процедури моделювання поведінки великих ансамблів об'єктів, що взаємодіють між собою, за допомогою стандартних апаратних засобів, без залучення кластерів та суперкомп'ютерів, є дуже важливою з точки зору розповсюдження досвіду. Подібний клас задач є досить широким та включає в себе задачі з різних галузей природничих, технічних та соціальних наук.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота виконана на кафедрі електроніки, загальної та прикладної фізики Сумського державного університету. Результати роботи отримано під час виконання держбюджетних науково-дослідних робіт: “Аномальні дифузійні та релаксаційні властивості класичних та квантових блукань з неперервним часом”, за підтримки МОН (№ 0112U001383, 2012 – 2014 рр.); “Магнітні, теплові та транспортні властивості періодично збуджених систем ферромагнітних наночастинок”, за підтримки МОН (№ 0116U002622, 2016 – 2018 рр.); “Спрямований транспорт та дисипація енергії в системах ферромагнітних наночастинок і магнітних скірміонів”, за підтримки МОН (№ 0119U100772, 2019 – 2021 рр.), “Properties of the systems of ferromagnetic fine particles with frozen magnetic moments”, Індивідуальний грант програми Eminence II, Erasmus Mundus, Університет Адама Міцкевича, м. Познань, Польща.

**Мета і завдання дослідження.** Метою дисертаційної роботи є послідовне теоретичне і чисельне дослідження відгуку ансамблів ферромагнітних наночастинок, завислих у рідині, на зовнішні періодичні поля з врахуванням дипольної взаємодії та термостату.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити такі завдання:

- побудова базової системи рівнянь для опису регулярної і стохастичної динаміки намагніченості наночастинок та їх обертового і трансляційного руху;

- визначення потужності втрат енергії змінного магнітного поля в системах наночастинок, розподілених у рідкій матриці;
- чисельне дослідження транспорту наночастинок в феромагнітних рідинах, що базується на ефекті Магнуса;
- чисельне моделювання магнітних та структурних властивостей періодично збуджених систем наночастинок з урахуванням їх диполь-дипольної взаємодії.

*Об'єкт досліджень.* Динаміка намагніченості наночастинок, їх механічний рух в детермінованих і випадкових (теплових) магнітних полях.

*Предмет досліджень.* Залежність відгуку на зовнішнє поле магнітної енергії, що поглинається системами феромагнітних наночастинок, намагніченості таких систем та швидкості індукованого транспорту наночастинок від характеру вимушеної динаміки наночастинок, параметрів системи, параметрів зовнішнього поля і температури.

*Методи досліджень.* У дисертаційній роботі проведено дослідження регулярної та стохастичної вимушеної динаміки феромагнітних наночастинок, завислих у рідині, за допомогою методів статистичної та математичної фізики, методів числового моделювання, та технік паралельних обчислень.

Перелік основних методів, що були застосовані:

- Метод рівнянь Ланжевена для опису динаміки феромагнітної наночастинки з урахуванням дії випадкових (теплових) магнітних полів та, зокрема, метод ефективних рівнянь Ланжевена. Основна перевага останніх над базовими рівняннями Ланжевена полягає в тому, що вони дозволяють здійснювати чисельний аналіз відчутно ефективніше.

- Метод рівняння Фоккера-Планка для сумісної щільності ймовірності намагніченості та кутової швидкості феромагнітної наночастинки. Необхідність використання саме цього рівняння зумовлена тим фактом, що у відповідності з базовими рівняннями Ланжевена динаміка намагніченості наночастинок залежить від їх механічного руху (і навпаки). У випадку, коли зовнішнє магнітне поле є обертовим, лінійно поляризованим або прецесійним, були адаптивно застосовані асимптотичні методи наближеного розв'язання цього рівняння.

- Метод молекулярної динаміки, що базується на ефективних рівняннях Ланжевена, для кращої алгоритмізації чисельних досліджень руху наночастинок. Інтерпретація за Іто білого шуму, яким апроксимується дія термостату, дозволяє мінімізувати час однієї ітерації, що дозволяє здійснювати моделювання ансамблів з досить великою кількістю елементів.

- Іншими факторами оптимізації та забезпечення високопродуктивних обчислень є: 1) Алгоритм Барнса-Хата для зменшення часу розрахунків локальних дипольних полів з мінімальною втратою точності. Алгоритм точно розраховує внесок від найближчих наночастинок, а до віддалених

застосовує метод середнього поля. 2) Використання технології CUDA та графічних процесорів бюджетних відеоадаптерів. У такий спосіб отримано техніку паралельних обчислень, продуктивність якої стрімко збільшується з ростом класу обчислювальних потужностей, ціна яких зростає більш помірно.

#### **Наукова новизна одержаних результатів:**

- У детерміністичному наближенні вперше отримано: аналітичні вирази для обертових траєкторій наночастинки, що збуджується лінійно-поляризованим полем в усьому спектрі амплітуд і частот; аналітичні вирази для обертових траєкторій під час дії полів усіх типів у високочастотному наближенні; аналітичні вирази для енергії зовнішнього поля, що поглинається наночастинкою.

- Вперше отримані асимптотичні вирази для полярного кута та чисельні дані для середньої швидкості обертання під час вимушеного руху наночастинки, що збуджується циркулярно-поляризованим полем. Вперше проаналізовано температурні залежності потужності втрат для різних амплітуд і частот поля.

- Вперше досліджено конкуруючий вплив теплового шуму та дипольної взаємодії на енергію змінного поля, яку поглинає ферорідина. Показано, що різниця між детерміністичним та стохастичним випадком є суттєвою для малих частот, однак з ростом частоти стає незначною. Вперше доведено, що даний ефект має детерміністичне походження та пов'язаний з тим, що з ростом частоти відгук наночастинки на зовнішнє поле формується незначним коливальним рухом намагніченості наночастинок навколо власних рівноважних положень.

- Вперше встановлено існування умов, за яких у досліджуваній системі спостерігається конструктивна роль шуму, що полягає у збільшенні енергії, що поглинається зі зростанням температури внаслідок руйнування впорядкування у кластерах наночастинок та перехід окремих наночастинок з одного квазірівноважного стану до іншого.

- Вперше отримані залежності середньої швидкості дрейфу феромагнітних наночастинок під дією ефекту Магнуса від розміру наночастинок, початкової фази змінного поля, що діє на наночастинку, та температури. Встановлені умови, при яких зміна температури призводить до зміни напрямку дрейфу наночастинок на протилежний.

**Практичне значення одержаних результатів.** Отримані результати дозволять вдосконалювати та формулювати конкретні технічні рекомендації стосовно застосування збуджених систем феромагнітних наночастинок у

- Магнітній гіпертермії – сучасному і перспективному методі терапії раку з мінімальними побічними ефектами. Очікувані результати спрямовані на підвищення керованості процесу нагрівання та пошук оптималь-

ного балансу з точки зору ефективність-безпека.

- Нових композитних матеріалах для антирадарних покриттів безпілотних літальних апаратів, броньованої техніки, тактичних ракет тощо. Результати дослідження дозволять сформулювати вимоги до феромагнітних наночастинок як складових надійних та ефективних поглинальних матеріалів.

- Приладах та методах для прецизійної сепарації наночастинок за їх розміром.

**Особистий внесок дисертанта** полягає у пошуку та аналізі літературних джерел, а також проведенні наукового дослідження за темою дисертації. Результати дисертації базуються на дослідженнях, здійснених як у співпраці з науковим керівником – канд. фіз.-мат. наук, доцентом Т. В. Лютим, так і особисто автором. Постановка мети дисертаційної роботи, наукових завдань, методів їх вирішення та аналізу, а також обговорення отриманих результатів проводилися разом із науковим керівником. Здобувач брав участь на всіх етапах наукового дослідження: у проведенні аналітичних розрахунків та числового моделювання, аналізі одержаних результатів, оформленні та опублікуванні наукових праць.

У роботі [1] автор здійснив розрахунок явного вигляду сили, що діє на кожен наночастинку залежно від величини дипольного поля, що діє на неї; здійснював тестування написаної програми та аналіз оптимальності програмного коду; здійснював візуалізацію результатів чисельного експерименту у реальному часі.

У роботі [2] автор організував чисельний експеримент: задавав набори параметрів системи та параметри чисельних процедур, модифікував код основної програми та написав автоматизовані скрипти для запусків, перевіряв коректність та зберіг дані, обробив їх та запропонував попередні висновки.

У роботі [3] автор здійснив контрольні обчислення та записав параметризовані ефективні рівняння Ланжевена, придатні до чисельного моделювання, розпланував та організував чисельний експеримент: розробив алгоритм та реалізував програму мовою C++, забезпечив паралелізацію обчислень за допомогою технології CUDA, зберіг та обробив чисельні дані, підготував графічний матеріал та його опис.

У роботі [4] автор здійснив аналіз температурної залежності потужності втрат для різних амплітуд і частот зовнішнього лінійно-поляризованого поля шляхом розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь відносно коефіцієнтів у поліномі Лежандра. Автор повністю реалізував чисельний експеримент та збір даних як для стохастичного одночастинкового наближення, так і для ансамблю взаємодіючих наночастинок.

Нарешті, у роботі [5] автором дисертації здійснено постановку чисельного експерименту, проведено аналіз даних, розроблений відповідний гра-

фічний матеріал та його змістова інтерпретація у тексті.

Основна частина наукових результатів особисто презентувалась дисертантом на національних і міжнародних наукових конференціях і школах [7–21]. Усі наукові положення та висновки, винесені на захист, належать автору дисертації.

**Апробація результатів дисертації.** Основні наукові результати дисертаційної роботи оприлюднено та обговорено на наступних конференціях і семінарах: Науково-технічній конференції “Фізика, електроніка, електротехніка” (Суми, 2011, 2014, 2015, 2016, 2017, 2020 рр.); Міжнародній науковій конференції “The 3rd International Conference “Nanomaterials: Applications and Properties” (Lviv, 2014 р.); Міжнародній науковій конференції “6th International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems – PLMMP-2014” (Kyiv, 2014 р.); Школі-семінарі “Багатомасштабне моделювання фізичних процесів у конденсованих середовищах”, (Суми, 2014 р.); Міжнародній науковій конференції “9th International Conference New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation”, (Zakorpane, 2015 р.); Міжнародній науковій конференції “International Conference Dynamical Systems and Their Applications” (Kyiv, 2015 р.); Міжнародній науковій конференції “IEEE International Young Scientists Forum on Applied Physics (YSF)” (Kharkiv, 2016 р.; Lviv, 2017 р.); Міжнародній школі-конференції “International School and Conference on Nanoscience and Quantum Transport” (Kyiv, 2016 р.); Міжнародній науковій конференції “VIII International Conference for Professional and Young Scientists Low Temperature Physics ICPYS-LTP” (Kharkiv, 2017 р.), VI Всеукраїнській науково-практичній конференції “Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методика навчання фізики” (Суми, 2020 р.).

**Публікації.** Результати дисертаційної роботи опубліковані у 21 науковій праці, із них: 4 статті у провідних фахових журналах, що індексуються наукометричними базами Scopus та Web of Science; 1 стаття у провідному фаховому журналі, що індексується наукометричною базою Scopus; 15 тез доповідей конференцій та дві праці конференції, що індексуються Scopus та Web of Science.

**Структура та обсяг роботи.** Дисертаційна робота складається із вступу, п’яти розділів, висновків, переліку використаних джерел та додатків. Зміст дисертації викладено на 173 сторінках друкованого тексту, з яких 126 сторінок основного тексту, що містить 34 рисунка та одну таблицю. Список використаних джерел складається із 194 найменування, розміщеного на 26 сторінках.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовується актуальність теми дисертаційної роботи, її зв’язок з науковими програмами, планами та темами, поставлена мета та завдання наукової праці, окреслені об’єкт, предмет та методи досліджен-



ня. Вказана наукова новизна та практичне значення одержаних результатів, наведено особистий внесок дисертанта у наукову роботу, а також дані стосовно опублікованих матеріалів, структури та змісту наукової праці.

У розділі “**Феромагнітні наночастинки та феромагнітні рідини: властивості, застосування та модельний опис**” окреслюється коло важливих результатів, що стосуються провідних досліджень властивостей систем феромагнітних наночастинок, що взаємодіють із зовнішнім періодичним полем, з термостатом та поміж собою завдяки диполь-дипольній взаємодії, яка має далекодіючий характер. Зокрема, розглянуто застосування класичної теорії лінійного відгуку магнітних систем до періодичної зовнішньої дії, що ґрунтується на концепції магнітної сприйнятливості. Розглянуто умови застосування такого підходу та наведено експериментальні підтвердження його обмеженості. Далі, розглянуто результати застосування мікроскопічного підходу, що базується на класичних рівняннях обертової динаміки жорсткого твердого тіла як у детерміністичному, так і у стохастичному наближеннях. Зазначено брак отриманих результатів стосовно залежності енергії магнітного поля, що поглинається наночастинками під час вимушеного обертання, від параметрів системи.

Окрему увагу приділено аналізу впливу дипольної взаємодії та методологіям його визначення. Показано, що стандартні аналітичні підходи на кшталт теорії середнього поля не здатні забезпечити належної загальності та точності результатів. Проаналізовані можливості методу Монте-Карло та методу молекулярної динаміки для моделювання ансамблів магнітних частинок, зважених у рідині. Обговорюються технічні обмеження, що не дозволяють масштабувати чисельне моделювання та зазначаються напрямки їх вирішення. На підставі проведеного аналізу зазначається низка проблем, вирішенню яких присвячена дисертаційна робота.

У розділі “**Модель наночастинки з вмороженням магнітним моментом: основні рівняння**” будується методологія дослідження. Розглядається модельна сферична наночастинка радіусом  $R$  і намагніченістю  $M$ , яка зважена у рідині з в'язкістю  $\eta$ . Якщо знехтувати обертанням рідини, що оточує частинку, то динаміка частинок регулюється системою рівнянь у кутових координатах:

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= \frac{1}{\tau_1} (h_x \sin \theta \cos \phi + h_y \sin \theta \sin \phi + h_z \cos \theta) \cot \theta \\ &\quad - \frac{1}{\tau_1} \frac{h_z}{\sin \theta} + \sqrt{\frac{2}{\tau_2}} (\zeta_y \cos \phi - \zeta_x \sin \phi), \end{aligned} \quad (1a)$$

$$\begin{aligned} \dot{\phi} &= \frac{1}{\tau_1 \sin^2 \theta} (h_y \cos \phi - h_x \sin \phi) \\ &\quad - \sqrt{\frac{2}{\tau_2}} [(\zeta_x \cos \phi + \zeta_y \sin \phi) \cot \theta - \zeta_z]. \end{aligned} \quad (16)$$

Тут  $\zeta = (12\eta V k_B T)^{-1/2} \xi$  – перемасштабований випадковий момент сили,  $k_B$  – константа Больцмана,  $T$  – абсолютна температура,  $V$  – об’єм наночастинки,  $\tau_1 = 6\eta/M^2$  та  $\tau_2 = 6\eta V/(k_B T)$  – характерні часи обертання частинок, індукованого зовнішнім магнітним полем і тепловим випадковим моментом сили, відповідно. Декартові компоненти  $\zeta_\nu$  ( $\nu = x, y, z$ ) являють собою незалежні Гаусівські білі шуми з нульовим середнім значенням,  $\langle \zeta_\nu \rangle = 0$ , і кореляційними функціями  $\langle \zeta_\nu(t) \zeta_\nu(t') \rangle = \Delta \delta(t - t')$ , де  $\langle \cdot \rangle$  означає осереднення за всіма реалізаціями Вінеровських процесів  $W_\nu(t)$ , які й продукують шуми  $\zeta_\nu$ ,  $\Delta$  – безрозмірна інтенсивність шуму, та  $\delta(t)$  – дельта-функція Дірака.

Вектор безрозмірного магнітного поля  $\mathbf{h} = \mathbf{H}(t)/M$ , який подається у (1) через декартові компоненти,  $h_x, h_y, h_z$ , у загальному випадку має зовнішню та дипольну складову  $\mathbf{h} = \mathbf{h}^{ext} + \mathbf{h}^{dip}$ . Припускається, що частинка збуджується зовнішнім циркулярно-поляризованим ( $\mathbf{h}^{ext} = h_m [\mathbf{e}_x \cos(\Omega t) + \mathbf{e}_y \varrho \sin(\Omega t)] + \mathbf{e}_z h_{0z}$ ), або лінійно-поляризованим ( $\mathbf{h}^{ext} = \mathbf{e}_z h_m \cos(\Omega t)$ ) полем. Тут  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$  є одиничними векторами декартових координат,  $h_m$  – амплітуда поля,  $\Omega$  – частота поля,  $h_{0z}$  – статичне поле прикладене вздовж осі  $z$ , та  $\varrho$  – множник, який визначає тип поляризації ( $\varrho = \pm 1$ ).

Відповідне рівняння Фоккера-Планка відносно функції густини ймовірності  $P = P(\theta, \phi, t)$  обертових станів наночастинки для системи (1) має вигляд

$$\begin{aligned} & \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{\tau_1} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left[ (h_x \cos \Phi + h_y \sin \Phi) \cos \Theta - h_z \sin \Theta \frac{\cot \Theta}{\kappa} \right] P \\ & - \frac{1}{\tau_1 \sin^2 \Theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} (h_y \cos \Phi - h_x \sin \Phi) P \frac{1}{\tau_2} \frac{\partial^2 P}{\partial \Theta^2} - \frac{1}{\tau_2} \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 P}{\partial \Phi^2} = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Тут  $\kappa = mH/k_B T$  – відношення магнітної та теплової енергій, або величина, що визначає відносну інтенсивність теплових флуктуацій,  $m$  – величина магнітного моменту наночастинки ( $m = MV$ ).

Замість рівнянь (1) зручно використовувати систему ефективних рівнянь Ланжевена, що задовольняють наступним вимогам. По-перше, статистичні властивості розв’язків базових і ефективних рівнянь повинні бути однаковими, а по-друге, ефективні рівняння повинні інтерпретуватися в сенсі Іто та містити два, а не три незалежні гаусові білі шуми. Відповідна система ефективних рівнянь Ланжевена записується як

$$\frac{d\theta}{dt} = (h_x \cos \phi + h_y \sin \phi) \cos \theta - h_z \sin \theta + \frac{1}{\kappa} \cot \theta + \sqrt{\frac{2}{\kappa}} \tilde{\mu}_1, \quad (3a)$$

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{1}{\sin \theta} (h_y \cos \phi - h_x \sin \phi) - \sqrt{\frac{2}{\kappa}} \frac{1}{\sin \theta} \tilde{\mu}_2, \quad (3б)$$

де  $\tilde{\mu}_i = \tilde{\mu}_i(\tilde{t}) = \sqrt{\tau_1} \mu_i(\tilde{t}\tau_1)$  ( $i = 1, 2$ ) безрозмірні Гауссові білі шуми  $\langle \tilde{\mu}_i(\tilde{t}) \rangle = 0$  і  $\langle \tilde{\mu}_i(\tilde{t}) \tilde{\mu}_i(\tilde{t}') \rangle = \delta(\tilde{t} - \tilde{t}')$ . Саме така система рівнянь є най-

більш зручною для аналітичних та чисельних розрахунків, особливо для моделювання великих ансамблів.

Для випадку взаємодіючого ансамблю система (3) доповнюються стандартним рівнянням поступального руху для безінерційного випадку

$$\frac{d\boldsymbol{\rho}_k}{dt} = \frac{16\pi}{9} (\mathbf{f}_k^{dip} + \mathbf{f}_k^{sr}) + \sqrt{\frac{8}{3\kappa}} \tilde{\mu}_{kz}, \quad (4)$$

де  $\boldsymbol{\rho}_k$  – це вектор, що визначає безрозмірні (коли за одиницю вимірювання відстані береться радіус частинки  $R$ ) координати заданої частинки,  $k$  – номер індексу заданої частинки в ансамблі. Сили, що діють на частинку визначаються як

$$\mathbf{f}_k^{dip} = \sum_{j=1, j \neq k}^N \left[ 3 \frac{\boldsymbol{\rho}_{kj}(\mathbf{u}_j \mathbf{u}_k) + \mathbf{u}_k(\mathbf{u}_j \boldsymbol{\rho}_{kj}) + \mathbf{u}_j(\mathbf{u}_k \boldsymbol{\rho}_{kj})}{\rho_{kj}^5} - 15 \frac{\boldsymbol{\rho}_{kj}(\mathbf{u}_k \boldsymbol{\rho}_{kj})(\mathbf{u}_j \boldsymbol{\rho}_{kj})}{\rho_{kj}^7} \right], \quad (5a)$$

$$\mathbf{f}_k^{sr} = 24\epsilon \sum_{j=1, j \neq k}^N \frac{\boldsymbol{\rho}_{kj}}{\rho_{kj}^2} \left[ \left( \frac{\sigma}{\rho_{kj}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{\rho_{kj}} \right)^6 \right], \quad (5b)$$

де  $\boldsymbol{\rho}_{kj} = \boldsymbol{\rho}_k - \boldsymbol{\rho}_j$ ,  $\mathbf{u}_j = \mathbf{M}_j/M$  – безрозмірний магнітний момент  $j$ -ї частинки;  $N$  – загальна кількість частинок  $\epsilon$  – стала, що визначає величину енергетичного бар'єру,  $\sigma$  – стала, що визначає рівноважну відстань між частинками. Точний прямий розрахунок дипольних полів, індукованих усіма частинками, характеризується квадратичною залежністю між часом моделювання та розміром ансамблю ( $\mathcal{T}_{sim} \sim N^2$ ). У даній роботі застосовується алгоритм Барнса-Хата, що забезпечує продуктивність на рівні співвідношення  $\mathcal{T}_{sim} \sim N \log N$ . Її головною ідеєю полягає в усередненні полів, що збуджуються частинками, які досить віддалені від заданої, тоді коли поля, що збуджуються найближчими частинками, розраховуються, навпаки, точно. Це дозволяє враховувати дії усіх елементів ансамблю та не нехтувати кореляціями напрямків найближчих сусідів.

Чисельна процедура реалізується за допомогою технології паралельних обчислень CUDA на базі графічних процесорів, що дозволяє моделювати досить великі ансамблі (на десятки тисяч частинок) послуговуючись звичайними персональними комп'ютерами з ординарними графічними адаптерами. Також підхід дозволяє адаптацію до використання хмарних безкоштовних ресурсів, що базуються на графічних процесорах.

Динаміка частинки у в'язкій рідині супроводжується дисипацією енергії  $Q$ . Потужності втрат у безрозмірному вигляді  $q = Q/(M^2\tau_1^{-1})$ , може

бути подані як

$$q = \lim_{\tilde{\tau} \rightarrow \infty} \frac{1}{\tilde{\tau}} \int_0^{\tilde{\tau}} \mathbf{h}^{ext} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \tilde{d}t, \quad (6)$$

У розділі “Взаємодія наночастинки з вмероженим моментом із зовнішнім періодичним полем: аналітичні результати” для розуміння мікроскопічної природи процесів спочатку досліджується детерміністичний випадок вимушеного обертового руху. Відкидаючи доданки, що відповідають за взаємодію з термостатом, та у припущенні існування прецесійного режиму руху під дією циркулярно-поляризованого поля (розв’язок рівнянь руху (3) подається у вигляді  $\phi = \varrho \tilde{\Omega} \tilde{t} - \Phi$  і  $\theta = \Theta$ ), одержується система алгебраїчних рівнянь  $h_m \cos \Theta \cos \Phi - h_{0z} \sin \Theta = 0$  та  $\Omega \sin \Theta - h_m \sin \Phi = 0$ , де  $\Omega = \Omega \tau_1$ . Потужність втрат у перцесійному режимі отримується у вигляді  $\tilde{Q} = \tilde{\Omega}^2 \sin^2 \Theta$ . Результуючу кутову швидкість частинки шукається при цьому у вигляді  $\varpi = (1/\tilde{\Omega}) \lim_{\tilde{t} \rightarrow \infty} \phi(\tilde{t})/\tilde{t}$ . З наведеного означення середньої швидкості можна отримати  $\varpi = 1$  ( $\tilde{\Omega}/h_m < 1$ ),  $\varpi = 1 - \sqrt{1 - (\tilde{\Omega}/h_m)^2}$  ( $\tilde{\Omega}/h_m \geq 1$ ).

Для випадку дії лінійно-поляризованого поля середнє значення потужності втрат можна записати у вигляді

$$q = \frac{\tilde{\Omega}^2 h_m}{2\pi} \int_0^{\tilde{\mathcal{T}}} \tilde{d}t \tanh \left[ \frac{h_m}{\tilde{\Omega}} \sin(\tilde{\Omega} \tilde{t}) - \frac{x_0}{2} \right] \sin(\tilde{\Omega} \tilde{t}), \quad (7)$$

де  $x_0 = \ln(\tan^2(\theta_0/2))$  – константа, визначена початковим станом вектора  $\mathbf{u}$ ,  $\tilde{\mathcal{T}}$  – безрозмірний період поля,  $\tilde{t} = t/\tau_1$ . У наближенні високих частот середнє значення потужності втрат було одержано у вигляді

$$q = \frac{1}{2} h_m^2 [\cos^2 \theta_0 (\cos^2 \phi_0 + \varrho^2 \sin^2 \phi_0) + \varrho^2 \cos^2 \phi_0 + \sin^2 \phi_0], \quad (8)$$

де  $\theta_0, \phi_0$  – початкові значення полярного та азимутального кута відповідно.

Для стохастичного випадку для випадку дії циркулярно-поляризованого поля з рівняння Фоккера-Планка (2) знаходиться вираз для стаціонарної щільності ймовірностей обертових станів

$$\begin{aligned} P_{st} &= \frac{\sin \theta}{4\pi} \left[ 1 + \kappa h_m \sin \theta \cos \psi - \frac{\kappa^2 h_m^2}{6} (1 - 3 \sin^2 \theta \cos^2 \psi) \right] \\ &+ \frac{1}{8\pi} \kappa^2 h_m \tilde{\Omega} \sin^2 \theta \sin \psi, \end{aligned} \quad (9)$$

де  $\psi = \phi - \tilde{\Omega} \tilde{t}$ . З використанням виразу (9) втрати потужності  $q$  отримуються прямими обчисленнями, в результаті яких можна записати

$$q = \frac{1}{6} h_m^2 \tilde{\Omega}^2 \kappa^2. \quad (10)$$

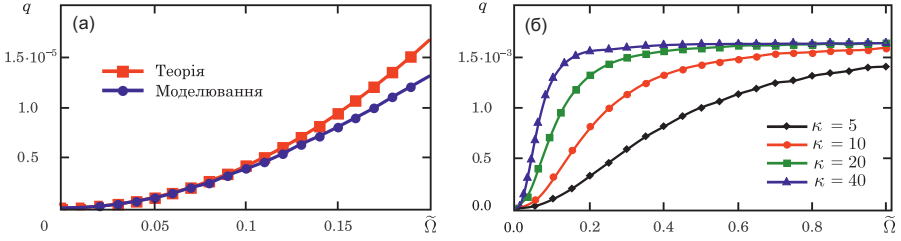


Рис. 1. (а) Порівняння аналітичних та чисельних результатів у випадку дії циркулярно поляризованого поля. Співвідношення між магнітною та тепловою енергією має значення  $\kappa = 5$ , амплітуда поля має значення  $h_m = 0.01$ . (б) Частотні залежності втрати потужності для різних значень співвідношення між магнітною та тепловою енергіями при дії циркулярно поляризованого поля. Амплітуда поля має значення  $h_m = 0.05$ .

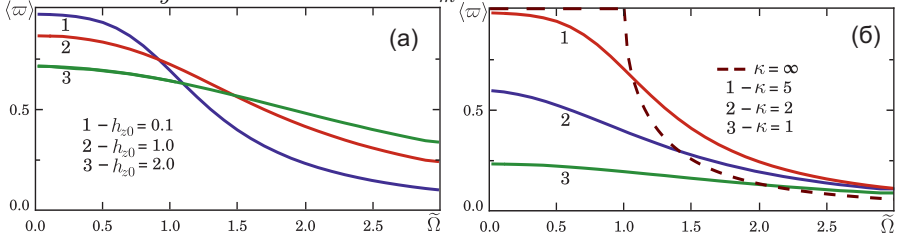


Рис. 2. (а) Середнє значення безрозмірної кутової швидкості обертання наночастинки як функція безрозмірної частоти  $\tilde{\Omega}$  для  $h_m = 1$ ,  $\kappa = 5$  та різних значеннях параметру  $h_{z0}$ . (б) Середнє значення безрозмірної кутової швидкості обертання наночастинки як функція безрозмірної частоти  $\tilde{\Omega}$  при  $h_{z0} = 0$ ,  $h_m = 1$  та різних значень інтенсивності теплового шуму  $\kappa$ .

Результати теоретичних та чисельних розрахунків продемонстровано на рисунку (1).

Шляхом чисельного розв'язання системи рівнянь (3) та з використанням означення  $\varpi = (1/\tilde{\Omega}) \lim_{\tilde{t} \rightarrow \infty} \phi(\tilde{t})/\tilde{t}$  знаходиться середня швидкість обертання. Аналізується залежність  $\varpi$  від параметрів систем, зокрема від додаткового постійного поля. Показується, що тепловий шум може збільшувати швидкість обертання, а залежності цієї швидкості від прикладеного постійного поля, перпендикулярного площині поляризації, бувають двох типів залежно від частоти, див. рисунок (2).

Для випадку дії лінійно-поляризованого поля знаходиться формалізований запис щільності ймовірності для полярного кута потужності втрат у вигляді системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Потужність втрат у цьому випадку залежить лінійного коефіцієнту  $B_{11}$  згаданої системи, що позначається як  $B_{11}$

$$q = \frac{1}{3} h_m \tilde{\Omega} B_{11}, \quad (11)$$

Принципове значення має температурна залежність величини  $B_{11}$ , що ана-

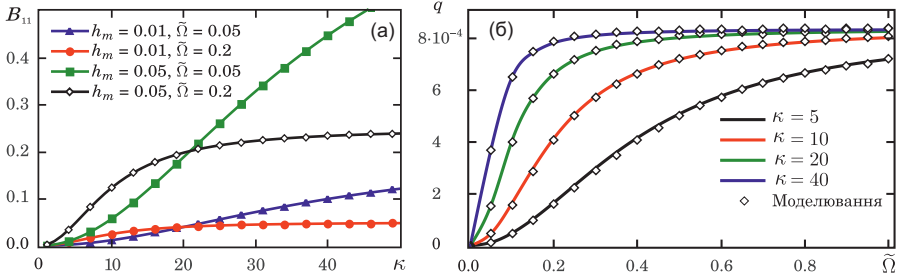


Рис. 3. (а) Чисельно отримані залежності коефіцієнта  $B_{11}$  від параметра  $\kappa$ , який представляє собою відношення між магнітною і тепловою енергією. (б) Частотні залежності втрат потужності при різних значеннях відношення між магнітною та тепловою енергіями під час дії лінійно поляризованого поля. Амплітуди поля має значення  $h_m = 0.05$ .

лізується чисельно. Результати зображені на рисунку (3) (а). Демонструється, що залежність потужності втрат від частоти та амплітуди має складний характер і збільшення частоти може призводити до зменшення потужності втрат для малих інтенсивностей шуму. Характерні залежності потужності втрат від частоти, див. рисунок (1) (б), при цьому аналогічні до випадку дії циркулярно-поляризованого поля, див. рисунок (3) (б).

**Розділ “Ансамбль наночастинок з вмороженим моментом: результати моделювання з урахуванням взаємодії”** присвячений впливу колективних ефектів, вивчення яких починається з аналізу рівноважних властивостей ансамблів феромагнітних наночастинок. Зокрема, використовуючи розроблену процедуру чисельного моделювання, розраховується магнітна сприйнятливості та первинне намагнічування ансамблю залежно як від параметрів системи, так і від граничних умов, або від форми посудини, де знаходяться наночастинок. Демонструється, що властивості ферорідини значною мірою визначаються характером кластерів, що утворюються внаслідок дипольної взаємодії. За невеликих концентрацій частинок вони шикуються в ланцюжки і дипольне поле підсилює зовнішнє, що призводить до зростання сприйнятливості. З подальшим зростанням концентрації відбувається утворення кільцеподібних кластерів або антиферомагнітного упорядкування ланцюжків, які розташовані поруч, що зменшує відгук середовища на зовнішнє поле. Тенденції істотно посилюються за рахунок форми посудини, яка впливає на форму кластерів.

Досліджується вплив взаємодії на сприйнятливості ансамблів до зовнішніх періодичних полів залежно від параметрів поля та середовища. Для низьочастотних полів підтверджуються експериментальні дані, що взаємодія зменшує потужність втрат. У той самий час навіть невеликі зміни параметрів поля призводять до істотної структурної перебудови середовища, що є причиною значних відхилень кількісної величини потужності втрат у порівнянні з результатами, отриманими у випадку однієї

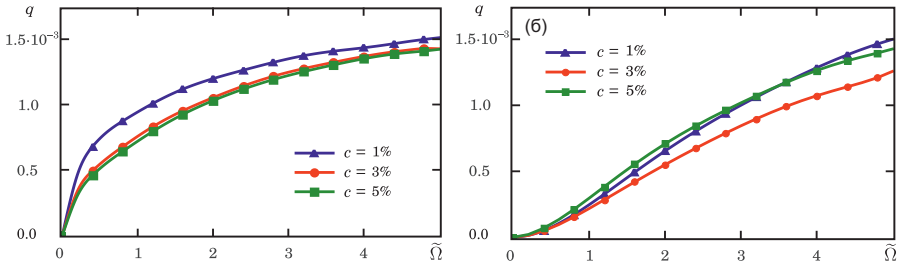


Рис. 4. Частотні залежності втрат потужності для різних значень об'ємної концентрації частинок при дії циркулярно-поляризованого поля. Амплітуда поля має значення  $h_m = 0.05$ , значення глибини потенціального бар'єру обрано  $\varepsilon = 0.04$ , безрозмірна рівноважна відстань між двома частинками має значення  $\sigma = 2.25$ . Співвідношення між магнітною та тепловою енергіями має значення  $\kappa = 10$  (а) та  $\kappa = 25$  (б)

частинки. Ця різниця зменшується з частотою поля, оскільки для високих частот кожна частинка виконує коливання навколо свого початкового положення без повної інверсії намагніченості. Встановлюється, що завдяки кластеризації зі зростанням об'ємної концентрації зміни величини потужності поглинання стають все менш вираженими, див. рисунок (4) (а). Але є деякі винятки з цих тенденцій, чому можуть бути такі причини. По-перше, сформовані скупчення для різних об'ємних концентрацій мають схожу структуру і залишаються стабільними незалежно від концентрації. По-друге, втрата потужності може збільшуватися з об'ємною концентрацією. Якщо взаємодія між частинками в кластерах сильна, для перемагнічування всього кластера потрібне сильне поле, і, як наслідок, петля гістерезису розширюється див. рисунок (4) (б).

Описується ефект, коли взаємодія між частинками та тепловий шум є конкуруючими факторами, та конструктивна роль шуму, яка полягає у збільшенні енергії поглинання за рахунок теплових флуктуацій. По-перше, за великої інтенсивності шуму кластери руйнуються, що призводить до вивільнення окремих частинок. По-друге, коли інтенсивність шуму не надто велика, теплові коливання частково розмивають порядок частинок у кластері. Це дає умови переорієнтаціям частинок у кластері між квазірівноважними станами, які утворені дипольними полями. Процес такого перемикавання здійснюється через вкрай збуджені стани, що характеризуються високою енергією і є причиною збільшення потужності втрат. Походження незвичайної поведінки кривої для  $\kappa = 25$  на рисунку (5) (а) полягає в перемиканнях частинок між квазірівноважними станами, які виникають внаслідок дії локальних дипольних полів. Позиції кривих на рисунку (5) (б) показують, що кластери руйнуються повністю при збільшенні інтенсивності шуму.

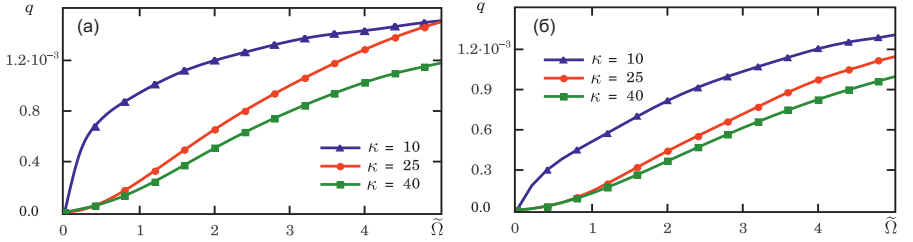


Рис. 5. Частотні залежності втрат потужності для різних значень відношення магнітної та теплової енергій при дії циркулярно-поляризованого поля. Амплітуда поля має значення  $h_m = 0.05$ , безрозмірна рівноважна відстань між двома частинками має значення  $\sigma = 2.25$ . Глибина потенціального бар'єру  $\varepsilon$  та об'ємна концентрація частинок  $c$  складають відповідно  $\varepsilon = 0.04$   $c = 1\%$  (а) та  $\varepsilon = 0.02$   $c = 2\%$  (б)

У розділі “Спрямований транспорт періодично збуджених ферромагнітних наночастинок, індукований силою Магнуса в рідкій матриці” розроблена в даному дослідженні методологія моделювання застосовується до дещо відмінної задачі, а саме для чисельного опису дрейфу ферромагнітних наночастинок під дією сили Магнуса. Така сила виникає за умови сумісної синхронізованої дії періодичної зовнішньої сили  $\mathbf{f}_d = f_m \sin(2\pi\tilde{t} - \varphi_0)$ , та зовнішнього магнітного поля  $\mathbf{h} = \cos\psi_h(\tilde{t})\mathbf{e}_x + \sin\psi_h(\tilde{t})\mathbf{e}_y$ , що коливається. Тут  $\varphi_0$  – початкова фаза періодичної сили,  $f_m$  – її амплітуда,  $\psi_h$  – азимутальний кут магнітного поля, який задано періодичною функцією безрозмірного часу  $\tilde{t}$ , що задовольняє умові  $\psi_h(1/2 + \tilde{t}) = -\psi(\tilde{t})$ . Різна швидкість обтікання наночастинок з різних сторін призводить до наявності тиску у виділеному напрямку, який і пояснює природу сили Магнуса. Відповідний підбір параметрів дозволяє досягти ситуації, коли середнє значення різниці гідродинамічного тиску за період не буде нульовим, що матиме результатом спрямований дрейф наночастинок. Ефект становить інтерес, оскільки зазначені вище періодичні дії мають нульове середнє значення.

Система ефективних рівнянь Ланжевена для подальшого чисельного аналізу записується як

$$\frac{d\theta}{d\tilde{t}} = \cos\theta \cos\psi_\phi + \frac{1}{\kappa} \cot\theta + \sqrt{\frac{2}{\kappa}} \tilde{\mu}_1, \quad (12a)$$

$$\frac{d\psi_\phi}{d\tilde{t}} = \frac{d\psi_h}{d\tilde{t}} - \frac{\sin\psi_\phi}{\sin\theta} - \sqrt{\frac{2}{\kappa}} \frac{1}{\sin\theta} \tilde{\mu}_2, \quad (12б)$$

де  $\psi_\phi = \psi_h - \phi$ , і вводиться середня швидкість дрейфу  $\langle \mathbf{s} \rangle$  у вигляді

$$\langle \mathbf{s} \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_n^{n+1} \langle \mathbf{v}(\tilde{t}) \rangle d\tilde{t}. \quad (13)$$

Тут  $n \in \mathbb{Z}$ , тобто інтегрування здійснюється на одному періоді



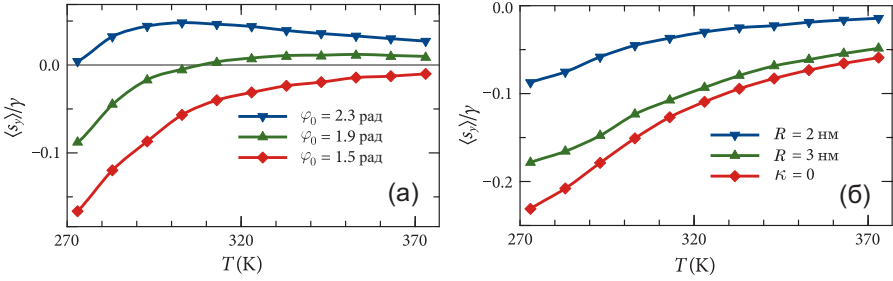


Рис. 6. Приведена швидкість дрейфу наночастинки кобальту як функція температури для різних значень початкової фази  $\varphi_0$ . Радіус частинки становить  $R = 3$  нм,  $n = 50$  і  $N = 10^5$ ,  $H_m = 10^2$  Е,  $\psi_m = 1$  рад,  $\Omega = 10^6$  рад/с,  $\varphi_0 = 0$  (а). Температурна залежність приведеної швидкості дрейфу наночастинок кобальту з різним радіусом, зважених у воді для тих самих параметрів моделювання. Випадок  $\kappa = 0$ , відповідає більшому радіусу (б)

зовнішнього поля. Із виразу (13) одержуємо  $\langle \mathbf{s} \rangle = \langle s_y \rangle \mathbf{e}_y$  та

$$\langle s_y \rangle = \gamma \int_0^1 \langle \sin \theta_{st}(v) \sin \psi_{\phi st}(v) \rangle \sin(2\pi v - \varphi_0) dv. \quad (14)$$

Якщо зовнішнє поле задається виразом

$$\mathbf{h} = \cos \psi_m \cos(2\pi \tilde{t}) \mathbf{e}_x + \sin \psi_m \cos(2\pi \tilde{t}) \mathbf{e}_y, \quad (15)$$

тоді загальна формула (14) дає

$$\langle s_y \rangle = \frac{1}{6} \pi \psi_m \gamma \kappa^2 \tau_1 \cos \varphi_0. \quad (16)$$

Тут  $\gamma = \text{Re}_r \tau_1^{-1} \Omega / 12\pi \omega_m = \rho_l R^2 M H_m / 36\eta^2$  – параметр, що характеризує внесок ефекту Магнуса у рух наночастинки,  $\text{Re}_r = \rho_l R^2 \omega_m / \eta$  – обертове число Рейнольдса,  $\rho_l$  – густина рідини,  $\omega_m = \max |\boldsymbol{\omega}|$ .

Для перевірки аналітичного результату (16) було проведено чисельне моделювання з використанням рівнянь (12). Розв'язок шукався у вигляді  $\psi_\phi^{(i)}(n+v)$  та  $\theta^{(i)}(n+v)$  в кожному  $i$ -у запуску. У такий спосіб чисельно верифікується статистична теорія дрейфу зважених феромагнітних наночастинок, в якій враховується як температурна залежність динамічної в'язкості рідини, так і теплові флуктуації. Аналізуються залежності середньої швидкості дрейфу для різних значень параметрів системи. Передбачається досить неочікуваний ефект, за якого зміна температури призводить до зміни напрямку дрейфу наночастинок на протилежний, див. рисунок (6) (а). Обговорюється можливість застосування досліджуваних явищ для прецезійної сепарації феромагнітних наночастинок за розміром, див. рисунок (6) (б).

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі, використовуючи модель модель з вмероженим магнітним моментом вивчено відгук феромагнітної рідини на зовнішнє періодичне поле. За допомогою методів статистичної та математичної фізики, методів чисельного моделювання, та технік паралельних обчислень описано низку магнітних, теплових та транспортних періодично збуджених систем феромагнітних наночастинок, розподілених у в'язкій рідині. На захист виносяться наступні основні наукові результати.

1. Розвинено теорію відгуку наночастинок з вмероженим магнітним моментом на зовнішнє змінне поле. В її рамках з єдиних позицій описано низку динамічних та стохастичних ефектів з метою виявлення механізму контролю швидкості нагрівання середовища у методі магнітної гіпертермії. Вперше отримано низку аналітичних виразів, зокрема для обертових траєкторій наночастинок та потужності втрат. Встановлено умови застосовності детерміністичного підходу та залежний від частоти характер впливу теплових флуктуацій на нагрівання ферорідин змінним зовнішнім полем. Розроблено теоретичну базу для методів перцевійного контролю процесу нагрівання.

2. Методом молекулярної динаміки вперше досліджено конкуруючий вплив теплового шуму та дипольної взаємодії на енергію змінного поля, яку поглинає ферорідина. Показано, що різниця між детерміністичним та стохастичним випадком є суттєвою для малих частот, однак з ростом частоти така різниця стає незначною. Даний ефект пояснюється характером вимушеної динаміки наночастинок: за великих частот відбуваються лише незначні коливання навколо власних рівноважних положень. Вперше встановлено існування умов, за яких в досліджуваній системі спостерігається конструктивна роль шуму, що полягає у збільшенні енергії, яка поглинається зі зростанням температури внаслідок руйнування впорядкування у кластерах наночастинок та переходу окремих наночастинок з одного квазі-рівноважного стану до іншого.

3. Розроблено продуктивний та універсальний метод чисельного моделювання взаємодіючих систем із шумом, типовим прикладом яких є система феромагнітних наночастинок, завислих у рідині. Метод ґрунтується на ефективному рівнянні Ланжевена, отриманого за допомогою рівняння Фоккера Планка. Можливість трактувати тепловий шум за Іто суттєво зменшує час чисельного розрахунку на кожній ітерації. Обчислення дипольної взаємодії оптимізувалось за допомогою алгоритма Барнса-Хата, який точно враховує кореляцію напрямків намагніченості найближчих наночастинок. Нарешті, важливим фактором продуктивності є застосування технології паралельних обчислень CUDA для графічних процесорів. Розвинута методологія має великий потенціал адаптації до інших дина-

мічних систем.

4. Вперше отримані залежності середньої швидкості дрейфу ферромагнітних наночастинок, що відбувається завдяки ефекту Магнуса, від розміру наночастинок, початкової фази змінного поля, що діє на наночастинку, та температури. Послугуючись ефективними рівняннями Ланжевена, було верифіковано розроблену раніше теорію дрейфу наночастинок, що виникає внаслідок дії сили Магнуса. Встановлені умови, за яких температурні ефекти стають визначальними для швидкості дрейфу. Зокрема, вперше встановлено умови, за яких зміна температури призводить до зміни напрямку дрейфу наночастинок на протилежний.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

### 1. Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати

1. Lyutyu T. V. Simulation of Ferrofluids Properties in Confined Domains / T. V. Lyutyu, **V. V. Reva**, A. Yu. Polyakov // J. Nano- Electron. Phys. – 2012. – Vol. 4, no. 4. – P. 04027 (9 pp). (Індексується РБД WoS та Scopus, SNIP = 0,461)
2. Polyakov A. Yu. Large-scale ferrofluid simulations on graphics processing units / A. Yu. Polyakov, T. V. Lyutyu, S. Denisov, **V. V. Reva**, P. Hänggi, // Comp. Phys. Comm. – 2013. – Vol. 184, no. 6. – P. 1483-1489. (Індексується РБД WoS, IF = 3,309 та Scopus, SNIP = 1,733)
3. Lyutyu T. V. Rotational properties of ferromagnetic nanoparticles driven by a precessing magnetic field in a viscous fluid / T. V. Lyutyu, S. I. Denisov, **V. V. Reva**, Yu. S. Bystrik, // Phys. Rev. E – 2015. – Vol. 92, no. 4. – P. 042312 (10 pp). (Індексується РБД WoS, IF = 2,353 та Scopus, SNIP = 1,005)
4. Lyutyu T. V. Energy dissipation of rigid dipoles in a viscous fluid under the action of a time-periodic field: The influence of thermal bath and dipole interaction / T. V. Lyutyu, **V. V. Reva** // Phys. Rev. E – 2018. – Vol. 97, no. 5. – P. 052611 (15 pp). (Індексується РБД WoS, IF = 2,353 та Scopus, SNIP = 1,005)
5. Denisov S. I. Temperature effects on drift of suspended single-domain particles induced by the Magnus force / S. I. Denisov, T. V. Lyutyu, **V. V. Reva**, A. S. Yermolenko // Phys. Rev. E – 2018. – Vol. 97, no. 3. – P. 032608 (9 pp). (Індексується РБД WoS, IF = 2,353 та Scopus, SNIP = 1,005)

## 2. Наукові праці апробаційного характеру

6. Лютый Т. В. Динамика ферромагнитных наночастиц в жидкости / Т. В. Лютый, **В. В. Рева** // Фізика, електроніка, електротехніка, ФЕЕ-2011. Матеріали та програма науково-технічної конференції. – 2011. – С. 29.
7. Лютый Т. В. Эффективная система уравнений Ланжевена для вращательного движения однодоменных ферромагнитных частиц / Т. В. Лютый, С. И. Денисов, **В. В. Рева** // Фізика, електроніка, електротехніка, ФЕЕ-2014. Матеріали та програма науково-технічної конференції. – 2014. – С. 71.
8. **Reva V. V.** Brownian Rotational Motion of Ferromagnetic Nanoparticle in Liquid / **V. V. Reva**, T. V. Lyutyu, S. I. Denisov // Proceedings of the 3-rd International Conference Nanomaterials: Applications and Properties, Lviv, 2014. – Vol. 3. – 2014. – P. 01MFPM01.
9. **Reva V. V.** Fokker-Planck Equation for the Spherical Motion of Ferromagnetic Nanoparticles in a Viscous Liquid / **V. V. Reva**, T. V. Lyutyu, S. I. Denisov // 6th International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems – PLMMP-Kyiv 2014. – 2014. – P. 183.
10. Лютый Т. В. Эффективное уравнение Ланжевена для вращательной динамики ферромагнитной наночастицы / Т. В. Лютый, **В. В. Рева** // Збірник тез школи-семінару “Багатомасштабне моделювання фізичних процесів у конденсованих середовищах” (Суми, 21-22 жовтня 2014 р.). – Суми, 2014. – С. 25.
11. **Reva V. V.** High-Performance Simulation of a Ferrofluid in a Circularly-Polarized Field / **V. V. Reva**, T. V. Lyutyu, J. Partyka // 9th International Conference New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation, Zakopane, Poland, June 23–26, 2015. –2015 – P. 142.
12. **Reva V. V.** Forced rotation of a ferromagnetic fine particle in a viscous carrier: the stationary probability density / **V. V. Reva**, T. V. Lyutyu, S. I. Denisov // International Conference Dynamical Systems and Their Applications, Kyiv, Ukraine June 22–26, 2015. –2015 – P. 36.
13. Лютый Т. В. Вынужденное сферическое движение магнитной частицы в жидкости: термические эффекты / Т. В. Лютый, С. И. Денисов, **В. В. Рева** // Фізика, електроніка, електротехніка, ФЕЕ-2015. Матеріали та програма науково-технічної конференції. – 2015. – С. 67.
14. Лютый Т. В. Ферромагнитная наночастица в жидкости: Броуновское вращение и поглощение энергии / Т. В. Лютый, **В. В. Рева** // Фі-

зика, електроніка, електротехніка, ФЕЕ-2016. Матеріали та програма науково-технічної конференції. – 2016. – С. 37.

15. **Reva V. V.** Microwave absorption by a rigid dipole in a viscous fluid / **V. V. Reva**, T. V. Lyutyu // 2016 II International Young Scientists Forum on Applied Physics and Engineering (YSF). – 2016. – Oct. – P. 104-107. (Індексується РБД WoS та Scopus)
16. **Reva V. V.** The Efficiency of RF-Field Energy Absorption by Ferromagnetic Nanoparticle in a Liquid / **V. V. Reva**, T. V. Lyutyu // International School and Conference on Nanoscience and Quantum Transport 8 – 14 October 2016, Kyiv, Ukraine. – 2016 – P. 23.
17. Лютий Т. В. Вплив колективних ефектів на контрольоване нагрівання феррорідини змінним магнітним полем / Т. В. Лютий, **В. В. Рева** // Фізика, електроніка, електротехніка, ФЕЕ-2017. Матеріали та програма науково-технічної конференції. – 2017. – С. 63.
18. **Reva V. V.** Interaction Effects in RF-Fields Energy Absorbtion by a Ferrofluid / **V. V. Reva**, T. V. Lyutyu, // IVIII International Conference for Professional and Young Scientists Low Temperature Physics ICPYS-LTP, May 29 – June 2, 2017, Kharkiv, Ukraine. – 2017. – P. 82.
19. **Reva V. V.** Energy dissipation of interacting rigid dipoles driven by the RF-field in a viscous fluid / **V. V. Reva**, T. V. Lyutyu, A. S. Yermolenko // 2017 IEEE International Young Scientists Forum on Applied Physics and Engineering (YSF). – 2017. – Oct. – P. 303-306. (Індексується РБД WoS та Scopus)
20. **Reva V. V.** Statistical properties of rigid dipole ensemble: analytical and numerical results / **V. V. Reva**, T. V. Lyutyu // VI Всеукраїнська науково-практична конференція “Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методики навчання фізики” – 2020. – С. 75-76).
21. **Рева В. В.** Статистичні властивості систем ферромагнітних наночастинок: модель жорсткого диполя / **В. В. Рева**, А. Т. Лютий, Т. В. Лютий // Фізика, електроніка, електротехніка, ФЕЕ-2020. Матеріали та програма науково-технічної конференції. – 2020. – С. 78.

## АНОТАЦІЯ

**Рева В.В.** Статистичні властивості систем ферромагнітних наночастинок з вмороженими магнітними моментами. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. – Сумський державний університет 2020.

Робота присвячена вивченню відгуку систем ферромагнітних наночастинок зважених у рідині на зовнішнє періодичне магнітне поле. Зокрема, вивчається 1) вплив термостату та міжчастинкової взаємодії на потужність втрат  $a$ , також, 2) вплив термостату на транспортні властивості частинок, що знаходяться під синхронізованою дією періодичної сили та магнітного поля, що здійснює коливання.

В основу дослідження покладено аналітичний апарат, що базується на рівняннях Ланжевена, Фоккера-Планка та концепції ефективних рівнянь Ланжевена, яка дозволяє оптимізувати процедуру подальшого числового моделювання. Техніка ж моделювання ґрунтується на застосуванні графічних процесорів та технології CUDA і на наближеному обчисленні дипольних полів за допомогою алгоритму Барнса-Хата. Для розуміння механізмів впливу теплових флуктуацій та взаємодії на потужність втрат спочатку одержуються аналітичні вирази для детерміністичного випадку, які використовуються для подальшого порівняння. Аналітично і чисельно продемонстровано, що дія термостату призводить до зниження потужності втрат, при цьому для малих частот це зниження є суттєвим, а для великих – практично ні. Моделюванням встановлено, що взаємодія ж завдяки декільком механізмам коригує дію термостату як у сторону збільшення, так і у сторону зменшення потужності втрат.

З використанням розробленої методології чисельно верифікується побудована статистична теорія дрейфу наночастинок, в якій враховується як температурна залежність динамічної в'язкості рідини, так і теплові флуктуації. Описується неочікуваний ефект, за якого зміна температури призводить до зміни напрямку дрейфу наночастинок на протилежний.

**Ключові слова:** ферромагнітна наночастинка, відгук ферорідини, жорсткий диполь, рівняння Фокера-Планка, ефективні рівняння Ланжевена, метод молекулярної динаміки, алгоритм Барнса-Хата, технологія CUDA, сила Магнуса.

## АННОТАЦІЯ

**Рева В.В.** Статистические свойства систем ферромагнитных наночастиц с замороженных магнитными моментами. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. – Сумский государственный университет, Сумы, 2020.

Работа посвящена изучению отклика ансамблей ферромагнитных наночастиц взвешенных в жидкости на внешнее периодическое поле. В частности, изучается 1) влияние термостата и межчастичного взаимодействия на мощность потерь, а, также, 2) влияние термостата на транспортные свойства частиц, находящихся под синхронизированным действием периодической силы и поля, вектор которого совершает колебания.

В основу исследования положен аналитический аппарат, основанный на уравнениях Ланжевена, Фоккера-Планка и концепции эффективного уравнения Ланжевена, которая позволяет оптимизировать процедуру дальнейшего численного моделирования. Техника же моделирования основывается на применении графических процессоров, технологии CUDA и на приближенном вычислении дипольных полей с помощью алгоритма Барнса-Хата. Для понимания механизмов влияния тепловых флуктуаций и взаимодействия на мощность потерь сначала получают аналитические выражения для детерминистического случая, которые используются для последующего сравнения. Аналитически и численно демонстрируется, что действие термостата приводит к снижению мощности потерь, однако для малых частот это снижение является существенным, а для больших – практически нет. Моделированием устанавливается, что взаимодействие же благодаря нескольким механизмам корректирует действие термостата как в сторону увеличения, так и в сторону уменьшения мощности потерь. С использованием разработанной методологии численно верифицируется построенная статистическая теория дрейфа наночастиц, в которой учитывается как температурная зависимость динамической вязкости жидкости, так и тепловые флуктуации. Описывается неожиданный эффект, при котором изменение температуры приводит к изменению направления дрейфа наночастиц на противоположное.

**Ключевые слова:** ферромагнитная наночастица, отклик феррожидкости, жесткий диполь, уравнения Фоккера-Планка, эффективное уравнение Ланжевена, метод молекулярной динамики, алгоритм Барнса-Хата, технология CUDA, сила Магнуса.

## SUMMARY

**Reva V.V. Statistical properties of ferromagnetic nanoparticle systems with frozen magnetic moments. – Manuscript.**

The thesis for the scientific degree of the candidate of physical and mathematical sciences by speciality 01.04.02 – theoretical physics. – Sumy State University, Sumy, 2020.

The research is devoted to the response of ensembles of ferromagnetic nanoparticles suspended in a liquid to an external periodic field. In particular, 1) the effect of the thermal bath and inter-particle interaction on the power loss is studied in detail, and also 2) the effect of the thermal bath on the transport properties of particles under the synchronized action of a periodic force and field, whose vector oscillates.

The approach is based on the Langevin, Fokker-Planck equations and on the concept of the effective Langevin equation, which allows us to optimize the procedure for further numerical simulation. The modeling technique is based on the use of graphic processors, CUDA technology and on the approximate calculation of dipole fields using the Barnes-Hut algorithm. To understand the

influence mechanisms of thermal fluctuations and interactions on the power of losses, analytical expressions for the deterministic case are first obtained. Further they are used for comparison.

Within the stochastic case analysis, the solution of the Fokker-Planck equation for a nanoparticle driven by the circularly polarized external field is found for cases where the field frequencies and thermal noise intensities are not too high. According to the obtained probability densities of the nanoparticle angular states, an expression for the average loss power is derived. For the case of linearly polarized field action, the probability density for the polar angle of loss power is obtained. It is shown that the frequency dependence of the power loss on and amplitude is complex and increasing the frequency can reduce the loss power for low noise intensities. The dependence of the average rotation speed of the nanoparticles on the system parameters is analyzed.

The interaction influence on the power loss is investigated. It is shown that even small changes in the field parameters lead to a significant restructuring of the ensemble. This causes the significant variations in the power loss value compared to the results of the single nanoparticle case. The difference decreases with the field frequency, because for high frequencies, each particle oscillates around its initial position without complete inversion of magnetization. The interaction between particles and thermal noise are competing factors, and the constructive role of noise, which is to increase the absorption energy due to thermal fluctuations, is discussed. First, clusters are destructed at high noise intensity, which results in the release of individual particles and increases the susceptibility. Second, when the noise intensity is not too large, thermal fluctuations partially blur the order of the particles in the cluster. This gives conditions for reorientation of particles in the cluster between quasi-equilibrium states created by dipole fields. The process of such switching is carried out through extremely excited states, which are characterized by high energy and cause an increase in the power loss.

Using the developed methodology, the developed earlier statistical theory of nanoparticle drift is numerically verified, which takes into account both the temperature dependence of the dynamic viscosity of the liquid and thermal fluctuations. An unexpected effect is described in which a change in temperature leads to a change in the direction of drift of the nanoparticles to the backward.

**Keywords:** ferromagnetic nanoparticle, ferrofluid response, rigid dipole, Fokker-Planck equation, effective Langevin equation, molecular dynamics method, Barnes-Hat algorithm, CUDA technology, Magnus force.



Підписано до друку 30.12.2020 р.  
Формат 60 × 84/16. Папір офсетний.  
Ум. друк. арк. 0,9. Наклад 100 прим. Вид. № 16.

Віддруковано у ВВП “Мрія-1”.  
40000, Суми, вул. Кузнечна, 2.

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи:  
серія ДК № 6804 від 12.06.2019.