

УДК 537.624  
УКПП  
№ держреєстрації 0116U002622  
Інв. №

Міністерство освіти і науки України  
Сумський державний університет  
(СумДУ)

40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2;  
тел. (0542) 33 41 08, факс (0542) 33 40 49

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Проректор з наукової роботи  
д-р фіз.-мат. наук, проф.  
\_\_\_\_\_ А. М. Черноус

ЗВІТ  
ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ  
**МАГНІТНІ, ТЕПЛОВІ ТА ТРАНСПОРТНІ ВЛАСТИВОСТІ  
ПЕРІОДИЧНО ЗБУДЖЕНИХ СИСТЕМ ФЕРОМАГНІТНИХ  
НАНОЧАСТИНОК**  
(остаточний)

Начальник НДЧ  
канд. фіз.-мат. наук,  
старш. наук. співроб.

Д. І. Курбатов

Керівник НДР  
д-р фіз.-мат. наук, проф.

С. І. Денисов

(27.12.2018)

2018

Рукопис завершено 27 грудня 2018 р.

Результати роботи розглянуті на засідання наукової ради СумДУ,  
протокол від 27 грудня 2018 р. № 7

## СПИСОК АВТОРІВ

Керівник НДР, голов. наук. співроб. д-р фіз.-мат. наук, проф.	27.12.2018	С. І. Денисов (реферат, вступ, розділи 1, 4, висновки)
Зав. лаб. канд. фіз. -мат. наук, доцент	27.12.2018	Т. В. Лютий (реферат, розділи 1, 2, 3)
Мол. наук. співроб.	27.12.2018	Ю. С. Бистрик (підрозділи 1.4 1.2, 2.2)
Старш. наук. співроб. канд. фіз. - мат. наук, доцент	27.12.2018	О. С. Денисова (підрозділи 3.1, 3.2, 3.3)
Мол. наук. співроб., аспірант	27.12.2018	В. В. Рева (підрозділи 1.2, 1.3, 1.4)
Лаборант, аспірант	27.12.2018	Б. О. Педченко (підрозділи 2.2, 2.3, 4.2)
Лаборант, аспірант	27.12.2018	О. М. Гришко (підрозділи 2.2, 3.3)

## РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 213 с., 66 рис., 172 джерела.

ФЕРОМАГНІТНА НАНОЧАСТИНКА, РІВНЯННЯ ФОККЕРА-ПЛАНКА, ПОТУЖНІСТЬ ВТРАТ, МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ, МАГНІТНА ТА МЕХАНІЧНА ДИНАМІКА, ДРЕЙФОВИЙ РУХ, ЕФЕКТ МАГНУСА.

Об'єкт дослідження – динаміка намагніченості наночастинок та їх поступальний і обертальний рухи в детермінованих і випадкових (теплових) магнітних полях.

Предмет дослідження – магнітні, теплові та транспортні властивості періодично збуджених систем феромагнітних наночастинок.

Мета дослідження – визначення оптимальних параметрів відгуку періодично збуджених систем феромагнітних наночастинок.

Методи дослідження – методи мікромагнетизму, статистичної фізики та стохастичних рівнянь, чисельні методи.

Побудовано теорію відгуку ансамблю наночастинок зважених у рідині на зовнішнє періодичне поле. Отримано низку аналітичних результатів для детерміністичного одночастинкового наближення. Досліджено вплив теплових флуктуацій та дипольної взаємодії на потужність втрат. Вивчені магнітні та дисипативні властивості систем феромагнітних частинок, напрямки легких осей яких рівномірно розподілені в просторі, а самі вони знаходяться в еліптично поляризованому магнітному полі. Для цього класу систем побудована загальна теорія збурень. Вивчено ефекти скінченності анізотропії в динаміці намагніченості і обертальній динаміці наночастинок. Аналітично і чисельно показаний та досліджений взаємний вплив на потужність втрат сумісного механічного руху та магнітної динаміки у детерміністичному наближенні. Теоретично передбачено та чисельно підтверджено існування принципово нового механізму дрейфового руху феромагнітних наночастинок у в'язкій рідині, який виникає внаслідок дії на них сили Магнуса. Запропоновано точно розв'язувану детерміністичну модель дрейфу наночастинок, в рамках якої знайдено точні вирази для швидкості дрейфу.

Результати НДР можуть бути використані для підбору оптимальних параметрів у методі магнітної гіпертермії для терапії онко-захворювань а також для нового методу сепарації феромагнітних наночастинок в суспензіях, що базується на ефекті Магнуса.

## ЗМІСТ

ВСТУП .....	8
1 ДИНАМІКА ТА ДИСИПАЦІЯ ЕНЕРГІЇ ЖОРСТКОГО ДИПОЛЯ, ЗВАЖЕНОГО У В'ЯЗКІЙ РІДИНІ ТА ЗБУДЖУВАНОВОГО ЗМІННИМ ПОЛЕМ.....	9
1.1 Вступ до розділу 1 .....	9
1.2 Модель жорсткого диполя та рівняння обертального руху наночастинки .....	13
1.2.1 Детерміністичне наближення: базові рівняння .....	13
1.2.2 Умови застосування детерміністичного наближення для моделі жорсткого диполя .....	15
1.2.3 Детерміністичне наближення: основне рівняння руху в сферичних координатах .....	17
1.2.4 Детерміністичне наближення: рівняння першого порядку для чисельного моделювання .....	18
1.2.5 Стохастичне наближення: основні рівняння.....	21
1.2.6 Стохастичне наближення: рівняння Фокера-Планка .....	22
1.2.7 Стохастичне наближення: ефективні рівняння Ланжевена	27
1.2.8 Моделювання ансамблю взаємодіючих частинок.....	30
1.2.9 Втрати потужності: визначення та методика розрахунку..	34
1.3 Детерміністичний обертальний рух та потужність втрат наночастинки у періодичному зовнішньому полі.....	37
1.3.1 Аналітичні результати детерміністичного наближення: дія циркулярно-поляризованого поля .....	37
1.3.2 Аналітичні результати детерміністичного наближення: дія лінійно-поляризованого поля .....	42
1.3.3 Аналітичні результати детерміністичного наближення: межа великих частот та лінійне наближення.....	44
1.3.4 Чисельні результати детерміністичного наближення: загальний випадок.....	48

1.4	Вплив термостату на обертальну динаміку наночастинки.....	57
1.4.1	Аналітичні і чисельні результати стохастичного наближення: дія циркулярно-поляризованого поля.....	58
1.4.2	Аналітичні і чисельні результати стохастичного наближення: дія лінійно-поляризованого поля.....	68
1.5	Вплив взаємодії між частинками на потужність втрат: чисельне моделювання ансамблю.....	72
1.6	Висновки до розділу 1.....	79
2	ІНДУКОВАНА НАМАГНІЧЕНІСТЬ, ПОТУЖНІСТЬ ВТРАТ В СИСТЕМІ ФЕРОМАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК ФІКСОВАНИХ У ТВЕРДІЙ МАТРИЦІ.....	84
2.1	Вступ до розділу 2.....	84
2.2	Модель наночастинки в твердій матриці та рівняння внутрішньої магнітної динаміки.....	86
2.2.1	Базові рівняння.....	86
2.2.2	Умови застосування детерміністичного наближення для моделі фіксованої наночастинки.....	89
2.2.3	Вплив спін-поляризованого струму.....	91
2.3	Внутрішня динаміка намагніченості наночастинки в твердій матриці: результати.....	92
2.3.1	Теорія збурень та дробові резонанси у поведінці намагніченості.....	92
2.3.2	Наближення першого порядку.....	96
2.3.3	Наближення другого порядку.....	98
2.3.4	Середня намагніченість наночастинок.....	100
2.3.5	Потужність втрат.....	107
2.3.6	Прецесійний режим руху магнітного моменту з врахуванням спін-поляризованого струму.....	111
2.3.7	Коливальний режим руху магнітного моменту з врахуванням спін-поляризованого струму.....	114

2.3.8	Режим малих коливань магнітного моменту з врахуванням спін-поляризованого струму.....	116
2.4	Висновки до розділу 2 .....	118
3	ВПЛИВ СКІНЧЕННОСТІ АНІЗОТРОПІЇ НА ОБЕРТАЛЬНУ ДИНАМІКУ ФЕРОМАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК.....	124
3.1	Вступ до розділу 3 .....	124
3.2	Рівняння руху у випадку сумісної динаміки.....	126
3.3	Результати опису сумісної магнітної динаміки та обертання наночастинки як цілого .....	129
3.3.1	Режим малих коливань наночастинки та її магнітного моменту.....	129
3.3.2	Режим малих коливань намагніченості у нерухомій наночастинці.....	133
3.3.3	Режим малих коливань усієї наночастинки із зафіксованим магнітним моментом.....	135
3.3.4	Порівняльний аналіз результатів .....	137
3.3.5	Сумісна прецесія наночастинки та її магнітного моменту..	143
3.4	Висновки до розділу 3 .....	147
4	СПРЯМОВАНИЙ ТРАНСПОРТ ПЕРІОДИЧНО ЗБУДЖЕНИХ ФЕРОМАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК, ІНДУКОВАНИЙ СИЛОЮ МАГНУСА В РІДКІЙ МАТРИЦІ.....	152
4.1	Вступ до розділу 4 .....	152
4.2	Мінімальна система рівнянь руху в детерміністичному випадку ..	153
4.3	Траєкторія частинок і швидкість дрейфу в детерміністичному випадку .....	156
4.4	Точні аналітичні результати в детерміністичному випадку.....	157
4.4.1	Дрейф при $\kappa < 1$ .....	159
4.4.2	Дрейф при $\kappa = 1$ .....	163
4.4.3	Дрейф при $\kappa > 1$ .....	164

4.5	Система стохастичних рівнянь руху частинок.....	169
4.6	Середня швидкість дрейфу частинок.....	173
4.7	Рівняння Фоккера-Планка.....	174
4.8	Система ефективних стохастичних рівнянь.....	175
4.9	Аналітичні результати: Сильні теплові флуктуації.....	176
4.9.1	Модель плоского ротатора.....	177
4.9.2	Загальна модель.....	179
4.10	Температурні ефекти в дрейфовому русі: Чисельні результати ...	181
4.11	Висновки до розділу 4.....	186
	ВИСНОВКИ.....	190
	ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ.....	194

## ВСТУП

В даній НДР досліджено широке коло магнітних, теплових та транспортних властивостей періодично збуджених систем феромагнітних наночастинок. В багатьох випадках теоретичні методи, що використані для їх опису, суттєво відрізняються, а отримані результати характеризують різні фізичні системи. Тому звіт побудовано таким чином, що кожний розділ має свою вступну та заключну частини. У відповідності з цим в даному розділі ми даємо лише перелік проблем, розв'язаних в рамках проекту.

Перший розділ присвячений вивченню обертальної динаміки феромагнітних наночастинок та її впливу на енергетичні втрати в системах таких частинок розподілених у в'язкій рідині. Використовуючи наближення, в якому намагніченість вважається в замороженою в частинку (модель жорсткого диполя), ці проблеми вирішуються як в детерміністичному підході, так і в стохастичному, коли враховуються теплові флуктуації обертального руху частинок. У другому розділі вивчаються особливості динаміки намагніченості наночастинок в твердій матриці, що виникають під дією еліптично поляризованого магнітного поля, і їх вплив на потужність енергетичних втрат. Розглядаються системи однодомених частинок, напрямом осей легкого намагнічування яких рівномірно розподілений у просторі. При цьому основна увага приділяється резонансним ефектам в таких системах. Третій розділ присвячений дослідженню сумісної магнітної і обертальної динаміки наночастинок в циркулярно-поляризованому магнітному полі і вивченню ефектів, що виникають внаслідок відмови від наближення жорстких диполей. Нарешті, четвертий розділ присвячено побудові як детерміністичної теорії дрейфу зважених феромагнітних частинок під дією сили Магнуса, так і статистичної теорії, в рамках якої враховується вплив теплових флуктуацій.

Результати НДР опубліковані у роботах [1–14].



# 1 ДИНАМІКА ТА ДИСИПАЦІЯ ЕНЕРГІЇ ЖОРСТКОГО ДИПОЛЯ, ЗВАЖЕНОГО У В'ЯЗКІЙ РІДИНІ ТА ЗБУДЖУВАНОВОГО ЗМІННИМ ПОЛЕМ

## 1.1 Вступ до розділу 1

Відгук ферорідин [15, 16] на зовнішні поля є ключовим фактором їх подальшого застосування. По-перше, у зв'язку з цим, слід звернути увагу на високопродуктивні мікрохвильові поглиначі, з комплексною композитною структурою, які зараз інтенсивно досліджуються [17–21]. По-друге, тут варто згадати метод магінтної гіпертермії для терапії онкологічних захворювань [22–24]. В обох згаданих вище прикладах енергія періодичного зовнішнього поля перетворюється в теплову за рахунок в'язкого обертання частинок ферорідини і загасаючої прецесії намагніченості в кристалічній решітці частинки. Процес нагрівання часто описується в рамках квазірівноважного припущення і теорії лінійного відгуку на змінне поле [25]. Незважаючи на простоту і очевидність цієї концепції, її область застосування вузька. Як свідчать численні експерименти [24], в тому числі, проведені нещодавно, [26–31, 31–33], виникають сильні відхилення від таких аналітичних прогнозів. У широкому сенсі ці відмінності впливають з особливостей індивідуальної динаміки, що виникає як наслідок пов'язаних механічних і магнітних рухів кожної частинки, а структура ферорідини виникає внаслідок взаємодії між частинками.

У зв'язку з цим виникає потреба розгляду двох вищезгаданих типів динаміки, що відбуваються одночасно та мають взаємний вплив один на одного: обертання наночастинки як цілого та внутрішній рух її намагніченості. За великим рахунком обидва з них є стохастичними та потребують статистичного опису. Однак на сьогодні можна стверджувати, що істотного прогресу у описанні вимушеної сумісної динаміки під дією зовнішніх полів радіочастоти було досягнуто лише у детерміністичному наближенні, і, значною мірою авторами даної НДР в рамках її виконання [4, 9, 34–36]. Врахування же теплових флуктуацій для сумісної динаміки

наразі знаходиться лише на початковій стадії [35, 37, 38]. Саме тому ще на етапі постановки задачі досліджень за даною НДР було заплановано приділити увагу як кожному з означених типів динаміки окремо, так і їх одночасному описанню на рівні реалістичності моделей, що є найвищим серед усіх відомих з літератури світових аналогів.

З огляду на обчислювальні труднощі, з описом сумісної динаміки наночастинки як цілого та її магнітного моменту, широко використовуються спрощені підходи. Перший підхід - це модель фіксованих частинок [39, 40], в межах якої передбачається блокування всієї частки в твердій матриці. Другий - модель жорсткого диполя, в межах якого передбачається, що намагніченість частинок буде закріплена в кристалічній решітці сильним полем анізотропії. Останній підхід дуже плідний, добре відповідає реальним кейсам. Наприклад, для наночастинок радіуса більше 20 нм і не дуже високих частот ( $10^3 - 10^6$  Гц) поля [24]. Цікаво відзначити, що в нещодавніх дослідженнях зв'язаної динаміки [37] було отримано велику кількість результатів саме для граничного випадку жорсткого диполя.

До моделі жорсткого диполя, як до найменш розробленої у науковій літературі ми застосуємо підхід, що засновано на трьох етапах розгляду. Спочатку ми досліджуємо детерміністичний випадок, коли тепловим шумом нехтують, а наночастинки розглядають як дуже віддалені одна від одної щоб знехтувати і впливом їх взаємодії. Опис спочатку всіх можливих детерміністичних ефектів, яким, насправді, приділено мало уваги в літературі, має, в першу чергу методологічну цінність. По перше, точні аналітичні результати детерміністичного наближення важливі для калібрування подальших чисельних досліджень у стохастичному та/або багаточастинковому наближеннях. По друге, детерміністичні траєкторії є відправною точкою аналізу складних кейсів поведінки у стохастичному та/або багаточастинковому наближеннях, без чого неможливе глибинне розуміння динаміки та оптимізація параметрів системи для отримання бажаного відгуку на зовнішні впливи. Нарешті, як зазначалося вище, за певних умов вже детерміністичне наближення дає реалістичні результати, а також встановлює максимум таких характеристик як потужність

поглинання.

Завдяки малим розмірам (кілька десятків нанометрів) частинок, що містяться в феррідині, термостат є першим фактором, який буде визначати відмінності поведінки наночастинок у зовнішньому полі від результатів детерміністичного наближення. Отже, опис руху окремих частинок має бути стохастичним. Для цього використовуються добре відомі та розроблені формалізми Ланжевена і Фоккера-Планка. Оскільки основна концепція обговорювалася у роботах [16, 41], в даній НДР ми зосереджуємося на чисельних дослідженнях відгуку жорсткого диполя на зовнішні, в першу чергу, змінні поля. Незважаючи на те, що в рамках концепції комплексної магнітної сприйнятливості [25] зазначена проблема вже розглядалась раніше [42–47], такий відгук в може суттєво різнитися від прогнозу у згаданій вище квазірівноважній лінійній моделі [25]. Також було приділено увагу важливій проблемі дисипації енергії, яка характеризується середньою втратою потужності. Незважаючи на наукову актуальність результатів отриманих раніше, вони є розпорошеними і не дозволяють оцінити з уніфікованих позицій вплив всіх параметрів системи на процес нагріву.

Внаслідок далекодіючого характеру міжчастинкової дипольної взаємодії, дипольні поля є другим фактором, що визначає відповідь феррідини на зовнішні поля. Отже, ми стикаємося з необхідністю вирішення проблеми багатьох тіл. З цією метою використовуються кілька наближених підходів, а загального рішення не існує. Переважна більшість аналітичних методів ґрунтуються на різних модифікаціях методу середнього поля [48–52], див. більше результатів у огляді [53]. Нажаль, цей підхід не враховує кореляції напрямків магнітних моментів найближчих сусідніх частинок і можливе формування структури, що обговорюється в [54–56]. Крім того, під час дії періодичного зовнішнього поля важко застосувати підхід середнього поля. Спостережуване зростання квазістатичної сприйнятливості, зумовлене взаємодією, не означає збільшення уявної частини комплексної сприйнятливості, що підтверджується численними експериментами з визначення питомого поглинання [26–31, 31–33]. Нарешті, для правильного обчислення

розподілу локальних дипольних полів вимагається чисельне моделювання.

Існують дві чисельні методики, а саме: метод Монте-Карло і метод молекулярної динаміки [57–59]. Незважаючи на легку реалізацію та низьке споживання обчислювальних ресурсів, метод Монте-Карло є незастосованим у випадку наявності залежних від часу зовнішніх дій. Таким чином, ця методика застосовується для дослідження рівноважних і структурних властивостей: [56, 60–63]. Метод молекулярної динаміки заснований на інтегруванні зв'язаних рівнянь Ланжевена для кожного елемента ансамблю. Цей метод має більш високі вимоги як до обчислювального обладнання, так і до програмного коду, але він не містить обмежень, які властиві методу Монте-Карло. Тому метод молекулярної динаміки широко використовується для опису властивостей ферорідин. Так, структура ферорідини та первинна сприйнятливість вивчалися в роботах [64, 65]; у роботі [66] повідомляється про чисельні результати самоорганізації та фазових переходів в агрегованих структурах; вплив розподілу розмірів, динамічні та структурні ефекти вивчалися в [67, 68]; нарешті, спектри магнітної сприйнятливості та релаксаційні властивості були досліджені чисельно в [69, 70]. В той же час вплив дипольної взаємодії на втрати потужності досліджувався за допомогою моделі, заснованої на рівнянні Ландау-Ліфшица, де враховується лише внутрішня загасаюча прецесія магнітного моменту [71–74]. Цей підхід справедливий при деяких обставинах, але він використовується в першу чергу через більш прості рівняння руху. Тому роль дипольної взаємодії в дисипації енергії для наночастинок, хважених у в'язкій рідині, залишається неясною навіть у спрощених модельних розглядах.

Мета поданого у даному розділі дослідження полягає в наступному. З одного боку, необхідно розкласти вплив регулярної складової, термічного збудження і колективної поведінки на відгук ферорідини на періодичне поле. З іншого боку, необхідно простежити синергію цих факторів під час нагрівання ферорідини, щоб отримати уявлення про можливість контролю та вибору оптимальних параметрів. Кінцева мета визначає методологію нашого аналізу та структуру подання матеріалу. По-перше, ми використовуємо суто динамічний підхід і з'ясуємо можливі

аналітичні розв'язки рівнянь вимушеного оберտального руху для однієї наночастинки у в'язкій рідині користуючись моделлю жорсткого диполя. По-друге, ми досліджуємо статистичні властивості одного жорсткого диполя, що взаємодіє із зовнішнім періодичним полем і термостатом. Нарешті, ми застосуємо метод молекулярної динаміки для опису спільного руху ансамблю частинок. У цьому контексті успішно використовуються алгоритм Барнса-Хата [75] і технологію CUDA [76] для спрощення обчислення локальних дипольних полів.

## 1.2 Модель жорсткого диполя та рівняння оберտального руху наночастинки

### 1.2.1 Детерміністичне наближення: базові рівняння

Розглянемо наночастинку радіусом  $R$ , однорідною густиною  $\rho$  і намагніченістю  $M$ , яка зважена у рідині з в'язкістю  $\eta$ . Ця частинка обертається в рідині під дією магнітного поля  $\mathbf{H} = \mathbf{H}(t)$ , яке у загальному випадку має зовнішню та дипольну складову  $\mathbf{H} = \mathbf{H}^{ext} + \mathbf{H}^{dip}$ . Далі використовуються наступні припущення. По-перше, обмінна взаємодія між атомними магнітними моментами вважається домінуючою. Тому модуль намагніченості  $|\mathbf{M}| = M$  наночастинки можна розглядати як постійний параметр. По-друге, вважається, що радіус частинки досить малий (менше декількох десятків нанометрів), тому неоднорідний розподіл намагніченості є енергетично несприятливим. Отже, має місце однодомений стан, який і характеризується заданою намагніченістю  $\mathbf{M} = \mathbf{M}(t)$ . І, по-третє, одноосьове магнітне поле анізотропії вважається достатньо сильним, щоб намагніченість частинки спрямована практично вздовж цього поля. Тому намагніченість  $\mathbf{M}$  вважається жорстко зафіксованою у кристалічній решітці частинки. Наведені припущення складають основу моделі жорсткого диполя. Найпростішим видом руху є обертальна динаміка, рівняння для якої вперше згадуються в роботах [77, 78]. Якщо знехтувати обертанням рідини, що оточує частинку, то

динаміка частинок регулюється системою рівнянь:

$$\dot{\mathbf{M}} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{M}, \quad (1.1a)$$

$$J\dot{\boldsymbol{\omega}} = V\mathbf{M} \times \mathbf{H} - 6\eta V\boldsymbol{\omega}. \quad (1.1b)$$

Тут,  $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}(t)$  – кутова швидкість частинки, крапка зверху означає похідну за часом,  $J = (2/5)\rho VR^2$  – момент інерції частинки,  $V = (4/3)\pi R^3$  – об'єм частинки (ми пов'язуємо гідродинамічний об'єм частинки з власним об'ємом), а  $\times$  позначає векторний добуток. У безрозмірному вигляді рівняння (1.1) можна подати як

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{m}} &= \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{m}, \\ \dot{\boldsymbol{\omega}} &= \frac{1}{\tau_0^2} \mathbf{m} \times \mathbf{h} - \frac{1}{\tau_r} \boldsymbol{\omega}, \end{aligned} \quad (1.2)$$

де  $\boldsymbol{\omega}$  є кутова швидкість наночастинки,  $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M$  – одиничний вектор магнітного моменту наночастинки,  $\mathbf{h} = \mathbf{H}/M$  – безрозмірний модуль поля, що діє на частинку,  $\tau_0 = \sqrt{I/VM^2}$  – характерний час відгуку наночастинки на зовнішнє поле, та  $\tau_r = I/6\eta V$  характерний час, що показує швидкість загасання обертання, якщо зняти зовнішню дію. Треба відзначити, що для достатньо великих часів  $t \gg \tau_r$  спостереження виконується умова  $\boldsymbol{\omega} \perp \mathbf{m}$ , оскільки  $\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{m} \sim \exp(-t/\tau_r)$ .

У нашому дослідженні ми нехтуємо гідродинамічною взаємодією. Модель жорсткого диполя широко використовується, незважаючи на те, що вона на думку багатьох дослідників є надмірним спрощенням і не враховує низку ефектів. Проте низка результатів свідчить, що гідродинамічна взаємодія часто є не суттєвою. Так, наприклад порівняння результатів чисельного моделювання з використанням низки моделей різного ступеня складності та деталізації [79] вказують на те, що рух рідини може бути некритичним для структурних властивостей ансамблів феромагнітних частинок. Іншим аргументом на користь використання простої моделі жорсткого диполя є наш намір використовувати доступні, прості і дешеві апаратні засоби для подальшого моделювання.

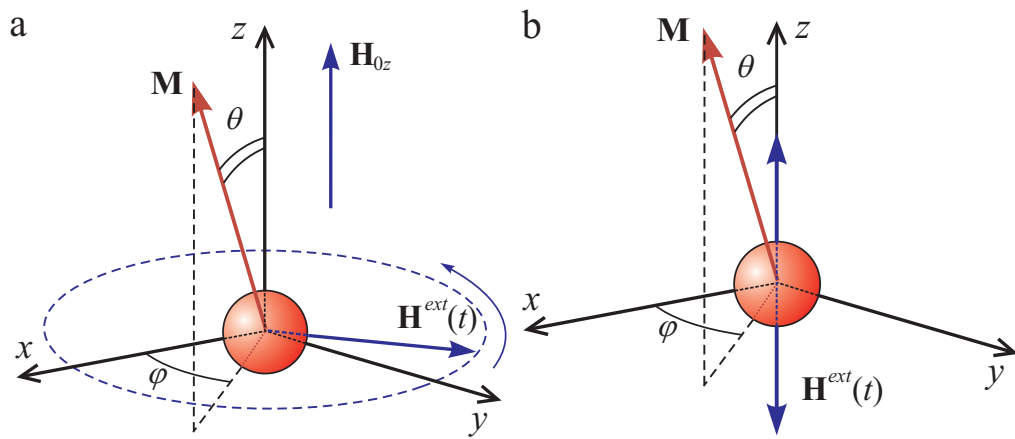


Рисунок 1.1 – Схематичне зображення використаної моделі для випадку однієї частинки. Зображено сферичний жорсткий диполь, його магнітний момент, сферичні та декартові координатні системи, а також зовнішні поля, що діють на систему. а – діє циркулярно поляризоване поле (1.3a). б – діє лінійно-поляризоване поле (1.3b).

Далі ми припустимо, що частинка збуджується зовнішніми періодичними магнітними полями наступних типів:

$$\mathbf{H}^{ext} = H_m [\mathbf{e}_x \cos(\Omega t) + \mathbf{e}_y \varrho \sin(\Omega t)] + \mathbf{e}_z H_{0z}, \quad (1.3a)$$

$$\mathbf{H}^{ext} = \mathbf{e}_z H_m \cos(\Omega t), \quad (1.3b)$$

де  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$ ,  $\mathbf{e}_z$  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 ( $-1 \leq \varrho \leq 1$ ). Основна концепція моделі схематично зображена на Рис. 1.1a для циркулярно поляризованого поля (рівняння (1.3a)) і на Рис. 1.1б для лінійно поляризованого поля ( $\varrho = 1$ , рівняння (1.3b)).

### 1.2.2 Умови застосування детерміністичного наближення для моделі жорсткого диполя

Використана система рівнянь є справедливою у випадку, коли магнітний момент розглядається як "вморожений" в кристалічну решітку. Дане припущення має місце за виконання таких умов:  $H_a \gg H_m$  та  $\kappa = VM^2/k_B T \gg 1$ , тут  $k_B = 1.3807 \cdot 10^{-16}$  см<sup>2</sup> · г · с<sup>-2</sup> · К<sup>-1</sup> – константа

Больцмана,  $T$  – термодинамічна температура). У відповідності до першої умови, магнітний момент практично не відхиляється від осі анізотропії під час дії зовнішнього поля. В той самий час, остання умова дозволяє розглядати обертові траєкторії наночастинки як практично регулярні, та разом з першою умовою, виключає істотні відхилення магнітного моменту від осі анізотропії завдяки тепловим активаціям. Дані умови можуть бути справедливими для еральных умов. Так, наприклад, для наночастинок магхеміту [80] з наступними параметрами: середній радіус  $R = 20\text{nm}$ , поле анізотропії  $H_a = 910\text{ E}$ , намагніченість  $M = 4.25 \cdot 10^3\text{ Гс}$ , та амплітуди зовнішнього поля  $H_m = 0.05H_a$ , відношення магнітної та теплової енергії складає  $\kappa \approx 12$ . Тобто, ймовірність істотних відхилень від детерміністичної траєкторії буде дуже мала, а, значить, результати детерміністичного наближення здатні давати вірні результати.

Окрім вимог до амплітуди існують також вимоги до частоти зовнішнього поля. По-перше, частота обмежена знизу. Навіть коли умова  $\kappa \gg 1$  виконується, слід врахувати фактор часу очікування. Якщо останній істотно більший від характерного часу броунівської релаксації [16]  $\tau_B = 3\eta V/(k_B T)$ , то відхилення від детерміністичної траєкторії станеться з великою долею ймовірності. Саме тому буде існувати певна характерна частота  $\Omega_B = 1/\tau_B = k_B T/(3\eta V)$ , що встановлює порядок частот, за яких вже на одному періоді поля теплові флуктуації таки здатні суттєво спотворити картину. Відповідно, поле, яке прикладається, повинно мати частоту, істотно більшу від  $\Omega_B$ . Далі, адекватність до реальності моделі жорсткого диполя може порушуватися протягом так званого часу релаксації Неєля  $\tau_N = (\Upsilon/\pi)^{-1/2} \exp(\Upsilon)(2\alpha\gamma H_a)^{-1}$  (тут  $\alpha \ll 1$  – безрозмірна константа загасання,  $\gamma \approx 1.76 \cdot 10^7\text{ рад} \cdot \text{с}^{-1}$ .  $\text{Гс}^{-1}$  – гіромагнітне відношення) [81, 82],  $\Upsilon = VMH_a/(k_B T)$ . Даний факт зумовлює існування ще однієї характерної частоти  $\Omega_N = 1/\tau_N = 2\alpha\gamma H_a(\Upsilon/\pi)^{1/2} \exp(-\Upsilon)$ , яка обмежує діапазон частот зовнішнього поля зверху. Таким чином, у кінцевому підсумку маємо  $\Omega \gg \max[\Omega_B, \Omega_N]$ . Для вищезгаданих частинок магхеміту [80], та значень  $\alpha = 0.01$  and  $T = 310\text{K}$ ,  $\eta = 5 \cdot 10^{-2}\text{ П}$  (що відповідає людській крові), можна легко підрахувати чисельні значення  $\Omega_B \approx 8.54 \cdot 10^3\text{ Гц}$  та  $\Omega_N \approx 2.08 \cdot 10^{-96}\text{ Гц}$  або, у



кінцевому підсумку,  $\Omega \gg 8.54 \cdot 10^3$  Гц.

В той самий час, частота зовнішнього поля має бути також обмежена знизу. Коли виконується умова  $H_a \gg H$ , відчутні відхилення магнітного моменту  $\mathbf{M}$  від легкої вісі стають ймовірними на частоті, близькій до резонансної [83]  $\Omega_r = \gamma H_a$ ,  $\Omega_r \approx 2.55 \cdot 10^9$  Гц для наночастинок що розглядаються. Таким чином, частотний інтервал, в якому детерміністичне наближення забезпечує адекватні реальності результати складає  $\Omega = (10^4 - 10^8)$  Гц. Дані величини збігаються з частотними параметрами поля, що застосовується у гіпертермії.

### 1.2.3 Детерміністичне наближення: основне рівняння руху в сферичних координатах

Оскільки обертовий момент, що був би паралельний магнітному моменту відсутній, двох кутових координат достатньо для того, щоб вичерпно описати обертальну динаміку наночастинок. Природно та доцільно скористатися для цих цілей полярним та азимутальним кутами сферичної системи координат. Здійснимо підстановку виразів  $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{m} \times \dot{\mathbf{m}}$  та  $\dot{\boldsymbol{\omega}} = \mathbf{m} \times \ddot{\mathbf{m}}$ , який є наслідком з другого рівняння в системі (1.2), в перше рівняння цієї системи. Як результат матимемо

$$\mathbf{m} \times \left( \ddot{\mathbf{m}} - \frac{1}{\tau_0^2} \mathbf{h} + \frac{1}{\tau_r} \dot{\mathbf{m}} \right) = 0 \quad (1.4)$$

або після відповідних перетворень

$$\ddot{\mathbf{m}} - \frac{1}{\tau_0^2} \mathbf{h} + \frac{1}{\tau_r} \dot{\mathbf{m}} = A(t) \mathbf{m}, \quad (1.5)$$

де функція  $A(t)$  задовольняє умовам  $\mathbf{m}^2 = 1$ . Множенням рівняння (1.5) на  $\mathbf{m}$  та з урахуванням умови  $\dot{\mathbf{m}} \mathbf{m} = 0$ , можна одержати

$$\ddot{\mathbf{m}} + \frac{1}{\tau_r} \dot{\mathbf{m}} + \frac{1}{\tau_0^2} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{h}) \mathbf{m} + \dot{\mathbf{m}}^2 \mathbf{m} = \frac{1}{\tau_0^2} \mathbf{h}. \quad (1.6)$$

Використовуючи стандартне подання декартових компонент магнітного моменту  $\mathbf{m}$  в сферичних координатах  $m_x = \sin \theta \cos \phi$ ,  $m_y =$

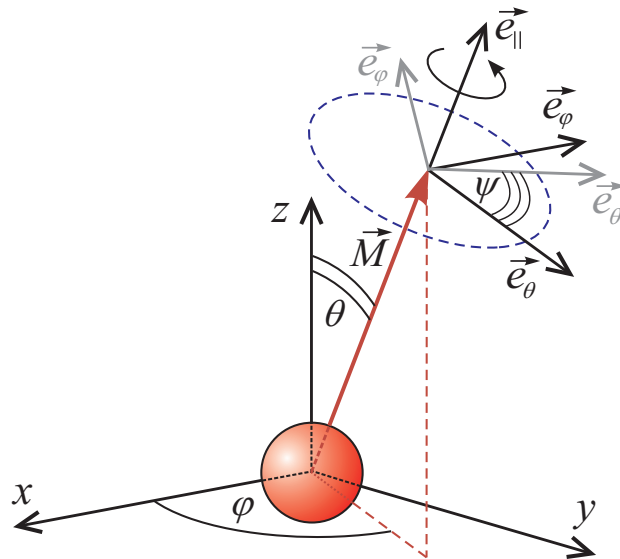


Рисунок 1.2 – Схематичне зображення координатних систем, що використовуються у розгляді.

$\sin \theta \sin \phi, m_z = \cos \theta$ , рівняння (1.6) може бути переписане відносно полярного  $\theta$  та азимутального  $\phi$ , кутів (див. Рисунок 1.2):

$$\begin{cases} \left( \ddot{\theta} + \frac{\dot{\theta}}{\tau_r} \right) \sin \theta - \dot{\phi}^2 \sin^2 \theta \cos \theta = -\frac{h_z + \mathbf{m} \cdot \mathbf{h} \cos \theta}{\tau_0^2}, \\ \left( \ddot{\phi} + \frac{\dot{\phi}}{\tau_r} \right) \sin \theta + 2\dot{\phi}\dot{\theta} \cos \theta = \frac{(h_y \cos \phi - h_x \sin \phi)}{\tau_0^2}, \end{cases} \quad (1.7)$$

де  $h_i (i = x, y, z)$  проєкції зовнішнього поля на декартові вісі координат. Остання система рівнянь є безвідносною до того чи іншого типу зовнішнього поля та зручна для подальшого пошуку аналітичних розв'язків.

#### 1.2.4 Детерміністичне наближення: рівняння першого порядку для чисельного моделювання

Система рівнянь (1.7) добре пасує до теоретичного аналізу, однак її не можна напряму застосовувати у відомих алгоритмах чисельних розрахунків. Саме тому систему рівнянь (1.2) треба переписати у явному вигляді, в якому похідні знаходяться ліворуч від знаку рівності для подальшого перетворення у різнічних схемах для чисельного розв'язку.

Для цієї мети розглянемо координатну систему, пов'язану з одиничними векторами  $\mathbf{e}_\theta$ ,  $\mathbf{e}_\phi$ ,  $\mathbf{e}_\parallel$  як показано на Рисунку 1.2 а також введемо до розгляду кут  $\psi$ , який відповідає за обертання наночастинки навколо її власного магнітного моменту.

Перехід від лабораторної системи координат до нової здійснюється за допомогою добре відомої матриці ортогональних перетворень, що є результатом добутку двох матриць повороту навколо осей  $x$  та  $z$  відповідно.

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & -\sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi & \cos \theta \sin \phi & -\sin \theta \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.8)$$

Відповідно, зворотні перетворення здійснюються за допомогою оберненої матриці

$$\mathbf{C}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi & -\sin \phi & \sin \theta \cos \phi \\ \cos \theta \sin \phi & \cos \phi & \sin \theta \sin \phi \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Далі, слідом за Голдштейном [84] пов'яжемо часові похідні кутових координат  $\theta$ ,  $\phi$  та  $\psi$  з відповідними одиничними векторами

$$\boldsymbol{\omega}_\theta = \mathbf{e}_\phi \dot{\theta}, \quad \boldsymbol{\omega}_\phi = \mathbf{e}_z \dot{\phi}, \quad \boldsymbol{\omega}_\psi = \mathbf{e}_\parallel \dot{\psi}. \quad (1.10)$$

Скористаємося ортогональними перетвореннями, очевидними з рисунка 1.2, та запишемо повні проекції кутової швидкості  $\boldsymbol{\omega} = (\omega_\theta, \omega_\phi, \omega_\psi)$  на

напрямки  $\mathbf{e}_\theta$ ,  $\mathbf{e}_\phi$ ,  $\mathbf{e}_\parallel$  у такому вигляді

$$\begin{pmatrix} \omega_\theta \\ \omega_\phi \\ \omega_\parallel \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\dot{\phi} \sin \theta \\ \dot{\theta} \\ \dot{\psi} + \dot{\phi} \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (1.11)$$

Нарешті, приймаючи до уваги відомий вираз

$$\begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{pmatrix} = \mathbf{C}^{-1} \begin{pmatrix} \omega_\theta \\ \omega_\phi \\ \omega_\parallel \end{pmatrix}, \quad (1.12)$$

можна виконати перехід до лабораторної системи координат

$$\begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\dot{\theta} \sin \phi + \dot{\psi} \sin \theta \cos \phi \\ \dot{\theta} \cos \phi + \dot{\psi} \sin \theta \sin \phi \\ \dot{\phi} + \dot{\psi} \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

Важливо підкреслити, що останні рівняння дуже схожі (та не абсолютно однакові) на відповідні рівняння для кутів Ейлера [84], оскільки характер отримання обох систем рівнянь однаковий. З системи (1.13) вже можна безпосередньо отримати диференціальні рівняння першого порядку відносно полярного та азимутального кутів наночастинки, в яких похідні будуть міститися ліворуч від знака рівності

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= \omega_y \cos \phi - \omega_x \sin \phi, \\ \dot{\phi} &= \omega_z - (\omega_x \cos \phi + \omega_y \sin \phi) \cot \theta. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Наступні три рівняння можуть бути отримані безпосередньо з вихідної системи рівнянь (1.2) користуючись стандартним поданням вектора  $\mathbf{m}$  в сферичних координатах. І, як результат, запишемо шукану систему

рівнянь в безрозмірній формі

$$\begin{aligned}
\frac{d\theta}{d\tilde{t}} &= \tilde{\omega}_y \cos \phi - \tilde{\omega}_x \sin \phi, \\
\frac{d\phi}{d\tilde{t}} &= \tilde{\omega}_z - (\tilde{\omega}_x \cos \phi + \tilde{\omega}_y \sin \phi) \cot \theta, \\
\frac{d\tilde{\omega}_x}{d\tilde{t}} &= \frac{1}{v} (h_z \sin \theta \sin \phi - h_y \cos \theta - \tilde{\omega}_x), \\
\frac{d\tilde{\omega}_y}{d\tilde{t}} &= \frac{1}{v} (h_x \cos \theta - h_z \sin \theta \cos \phi + \tilde{\omega}_y), \\
\frac{d\tilde{\omega}_z}{d\tilde{t}} &= \frac{1}{v} (h_y \sin \theta \cos \phi - h_x \sin \theta \sin \phi - \tilde{\omega}_z).
\end{aligned} \tag{1.15}$$

де  $\tilde{\omega}_i = \omega_i / \Omega_{cr}$ ,  $v = \tau_r^2 / \tau_0^2$ ,  $i = x, y, z$ . Записана система може бути легко перекладена на всі відомі техніки чисельного розв'язання диференціальних рівнянь.

### 1.2.5 Стохастичне наближення: основні рівняння

У випадку, коли розмір частинок досить малий, лівою частиною рівняння (1.1b), тобто доданком, що містить момент інерції  $\mathbf{J}\boldsymbol{\omega}$ , можна знехтувати для частот поля у кіло-, мега- та, навіть гігагерцовому діапазоні, які є найбільш цікавими з практичної точки зору. Використовуючи це вже безінерційне наближення і припускаючи, що в системі ще діє випадковий момент сил  $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}(t)$ , який генерується термостатом, можна записати

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{6\eta} \mathbf{M} \times \mathbf{H} + \frac{1}{6\eta V} \boldsymbol{\xi}. \tag{1.16}$$

Підставимо останній вираз у рівняння (1.1a), та отримаємо рівняння

$$\dot{\mathbf{M}} = -\frac{1}{6\eta} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{H}) - \frac{1}{6\eta V} \mathbf{M} \times \boldsymbol{\xi}, \tag{1.17}$$

яке описує стохастичне обертання частинок у в'язкій рідині. Оскільки намагніченість частинки  $M$  постійна у часі, для подальших розрахунків

доцільно переписати рівняння (1.17) у сферичних координатах.

$$\begin{aligned} \dot{\theta} = & \frac{1}{\tau_1} (h_x \sin \theta \cos \phi + h_y \sin \theta \sin \phi + h_z \cos \theta) \cot \theta \\ & - \frac{1}{\tau_1} \frac{h_z}{\sin \theta} + \sqrt{\frac{2}{\tau_2}} (\zeta_y \cos \phi - \zeta_x \sin \phi), \end{aligned} \quad (1.18a)$$

$$\begin{aligned} \dot{\phi} = & \frac{1}{\tau_1 \sin^2 \theta} (h_y \cos \phi - h_x \sin \phi) \\ & - \sqrt{\frac{2}{\tau_2}} [(\zeta_x \cos \phi + \zeta_y \sin \phi) \cot \theta - \zeta_z]. \end{aligned} \quad (1.18b)$$

Тут  $\zeta = (12\eta V k_B T)^{-1/2} \xi$  – перемасштабований випадковий момент сили,  $k_B$  – константа Больцмана,  $T$  – абсолютна температура,  $\tau_1 = 6\eta/M^2$  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 Гауссовські 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.

### 1.2.6 Стохастичне наближення: рівняння Фокера-Планка

Важливою особливістю рівнянь Ланжевена у формі (1.18) є те, що шуми  $\zeta_\nu$  мультиплікативні, тобто вони множаться на функції полярного та азимутального кутів  $\theta$  і  $\phi$ . Тому властивості руху, отримані за допомогою таких рівнянь можуть залежати від інтерпретації шумів, що, в свою чергу (див., наприклад, у [85, 86]), може ускладнити подальші дослідження. На противагу, властивості деяких багатовимірних систем можуть не залежати від інтерпретації шумів [87], що відкриває можливості для подальшого спрощення. Для цього розглянемо проблему стохастичного обертання частинки з іншої точки зору, а, саме, зі статистичної [88].

Спершу перепишемо систему стохастичних рівнянь (1.18) у вигляді

$$\dot{u}_i = f_i(\mathbf{u}, t) + \sum_{j=1}^3 g_{ij}(\mathbf{u}) \zeta_j. \quad (1.19)$$

Тут  $u_i$  ( $i = 1, 2$ ) є компонентами  $2 \times 1$  матриці [двохкомпонентний вектор  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t)$ ] ( $u_i = (u_1, u_2)$ ) з  $u_1 = \theta$  та  $u_2 = \phi$ , а доданок, що відповідає за знос  $f_i(\mathbf{u}, t)$  складає елементи  $2 \times 1$  матриці

$$(f_i) = -\frac{1}{\tau_1} \begin{pmatrix} \partial w / \partial u_1 \\ \sin^{-2} u_1 \partial w / \partial u_2 \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

де  $w = W/V M^2$ ,  $W = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{H}$  – магнітна енергія, або т.з. енергія Зеємана,  $\zeta_1 = \zeta_x(t)$ ,  $\zeta_2 = \zeta_y(t)$ ,  $\zeta_3 = \zeta_z(t)$ , та функції  $g_{ij}(\mathbf{u})$  є елементами  $2 \times 3$  матриці

$$(g_{ij}) = -\sqrt{\frac{2}{\tau_2}} \begin{pmatrix} \sin u_2 & -\cos u_2 & 0 \\ \cot u_1 \cos u_2 & \cot u_1 \sin u_2 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.21)$$

Далі, щоб розписати рівняння (1.19), спочатку припускаємо, що прирощення  $\delta u_i = u_i(t + \tau) - u_i(t)$  змінних  $u_i$  за умови, що  $\tau \ll \min\{\tau_1, \tau_2\}$  визначаються як

$$\delta u_i = f_i(\mathbf{u}, t)\tau + \sum_{j=1}^3 g_{ij}[\mathbf{u}(t + \lambda_j \tau)] \delta W_j, \quad (1.22)$$

де  $\lambda_j \in [0, 1]$  – параметри, які характеризують дію білого шуму  $\zeta_j$ , та  $\delta W_j = W_j(t + \tau) - W_j(t)$  – прирощення вінеровських процесів,  $W_j(t)$ , які генеруються шумами  $\zeta_j$ . Оскільки ці шуми вважаються незалежними і статистично еквівалентними, приріст  $\delta W_j$  може повністю характеризуватися двома умовами

$$\langle \delta W_j \rangle = 0, \quad \langle \delta W_j \delta W_l \rangle = \Delta \delta_{jl} \tau \quad (1.23)$$

де  $\delta_{jl}$  – дельта-символ Кронекера. Нарешті, якщо прийняти до уваги той

факт, що  $u_k(t + \lambda_j \tau) \approx u_k(t) + \lambda_j \delta u_k$  та розписати останній доданок у рівнянні (1.22) з лінійною точністю відносно  $\tau$ , отримаємо

$$\begin{aligned} \delta u_i = & f_i(\mathbf{u}, t)\tau + \sum_{j=1}^3 g_{ij}(\mathbf{u})\delta W_j \\ & + \sum_{k=1}^2 \sum_{j,l=1}^3 \lambda_j \frac{\partial g_{ij}(\mathbf{u})}{\partial u_k} g_{kl}(\mathbf{u})\delta W_l \delta W_j. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Таким чином, стохастичні рівняння (1.19) стали визначеними для різничної схеми (1.24), в якій дія шумів враховується не лише завдяки приращенням  $\delta W_j$  вінеровських процесів, згенерованих шумами  $\zeta_j$ , але й також завдяки параметру  $\lambda_j$ , який реалізує додатковий зв'язок системи з білими шумами. Оскільки останній доданок в правій частині рівняння (1.24) має порядок першого ступеня  $\tau$  [порівняно з (1.23)], такий зв'язок може суттєво змінити статистичні властивості величини  $u_i$ . Хоча випадки, в яких  $\lambda_j = 0, 1/2$ , та 1, що відповідає інтерпретаціям рівнянь Ланжевена за Іто [89], Стратоновича [90], та Климонтовича [91] відповідно, що найчастіше використовуються, будь-які інші значення  $\lambda_j$  є дозволеними з математичної точки зору. Таким чином, вибір параметрів  $\lambda_j$  у рівняннях (1.18) може бути здійсненим з фізичних міркувань, як буде показано нижче.

Тепер, використовуючи рівняння (1.23) та (1.24), а, також, дворівневу процедуру осереднення [92], ми визначаємо рівняння Фокера-Планка, що відповідає рівнянню Ланжевена (1.19). Введемо залежну від часу щільність ймовірності для обертових станів наночастинки  $P = P(\mathbf{U}, t)$  де  $\mathbf{u}(t) = \mathbf{U}$  як  $P = \langle \delta(\mathbf{u}(t) - \mathbf{U}) \rangle$ , де  $\mathbf{U}$  є матрицею-вектором з постійними компонентами  $U_1$  and  $U_2$ . Далі, прямими обчисленнями, аналогічними до поданих у роботі [87] отримуємо шукане рівняння Фокера-Планка у



наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P + \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial U_i} \left( f_i(\mathbf{U}, t) + \tilde{f}_i(\mathbf{U}) \right) P \\ - \frac{\Delta}{2} \sum_{i,k=1}^2 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial U_i \partial U_k} g_{ij}(\mathbf{U}) g_{kj}(\mathbf{U}) P = 0, \end{aligned} \quad (1.25)$$

де

$$\tilde{f}_i(\mathbf{U}) = \Delta \sum_{k=1}^2 \sum_{j=1}^3 \lambda_j \frac{\partial g_{ij}(\mathbf{U})}{\partial U_k} g_{kj}(\mathbf{U}) \quad (1.26)$$

є додатковими, індукованими шумом, зносіві доданки, які залежать від інтерпретації шуму (тобто, від параметрів  $\lambda_j$ ) в стохастичних рівняннях (1.19). Варто зазначити тим не менше, що оскільки шум  $\zeta_3$  є адитивним, і тому доданки  $\partial g_{i3}(\mathbf{U})/\partial U_k = 0$ , та, як наслідок, і щільність ймовірності  $P$  не залежать від  $\lambda_3$ .

Якщо безрозмірна магнітна енергія  $w$  не залежить від часу, то виконуються умови  $f_i(\mathbf{U}, t) = f_i(\mathbf{U})$  та, як наслідок,  $P$  прямує до рівноважного значення  $P_0 = P_0(\mathbf{U})$  as  $t \rightarrow \infty$ . В цьому окремому випадку рівняння (1.25) для  $P_0$  набуває вигляду

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial U_i} \left( f_i(\mathbf{U}) + \tilde{f}_i(\mathbf{U}) \right) P_0 \\ - \frac{\Delta}{2} \sum_{i,k=1}^2 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial U_i \partial U_k} g_{ij}(\mathbf{U}) g_{kj}(\mathbf{U}) P_0 = 0. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Природно припустити, що розв'язком цього рівняння є щільність ймовірності Больцмана, яка для  $h = 0$  може бути записана у відомій формі.

$$P_0 = \frac{1}{4\pi} \frac{\kappa h_z}{\sinh(\kappa h_z)} \sin U_1 e^{\kappa h_z \cos U_1}, \quad (1.28)$$

Легко побачити, що введений раніше параметр  $\kappa$  і нічим іншим, як відношенням характеристичних часів  $\kappa = \tau_2/\tau_1 = M^2 V/(k_B T)$ .

Підстановкою рівняння (1.28) у рівняння (1.27) та використовуючи означення (1.20) та (1.21), прямими обчисленнями отримуємо

$$\begin{aligned} \lambda_1 + \lambda_2 - 1 + \frac{\kappa h_z}{\Delta} [2 + \Delta(\lambda_1 + \lambda_2 - 3)] \cos U_1 \\ - (\lambda_2 - \lambda_1) \cos(2U_2) \left( \frac{4}{\sin^2 U_1} + \kappa h_z \cos U_1 - 1 \right) \\ + \frac{(\kappa h_z)^2}{\Delta} (\Delta - 1) \sin^2 U_1 = 0. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Ця умова виконується для всіх можливих значень змінних  $U_1$  and  $U_2$  ( $0 \leq U_1 \leq \pi$ ,  $0 \leq U_2 < 2\pi$ ) та параметру  $\kappa h_z$  ( $0 \leq \kappa h_z < \infty$ ), тобто, рівняння (1.28) є ров'язком рівняння Фокера-Планка (1.27), якщо лише

$$\Delta = 1, \quad \lambda_1 = \lambda_2 = \frac{1}{2}. \quad (1.30)$$

Таким чином, рівняння (1.18) з гаусовими білими шумами одиничної інтенсивності інтерпретуються в сенсі Стратоновича, випадкові обертання наночастинок характеризуються статистикою Больцмана для достатньо великих значеннях часу спостереження.

Далі, з урахуванням умов (1.30) та введенням для зручності нових змінних  $\Theta = U_1$  and  $\Phi = U_2$ , рівняння Фоккера-Планка(1.25) може бути переписане у такому вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} - \frac{1}{\tau_1} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left( \frac{\partial w}{\partial \Theta} - \frac{1}{\kappa} \cot \Theta \right) P - \frac{1}{\tau_1 \sin^2 \Theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} \left( \frac{\partial w}{\partial \Phi} P \right) \\ - \frac{1}{\tau_2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \Theta^2} + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right) P = 0. \end{aligned} \quad (1.31)$$

або розписавши частинні похідні від енергії у явному вигляді

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial P}{\partial t} + \\
& + \frac{1}{\tau_1} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left[ (h_x \cos \Phi + h_y \sin \Phi) \cos \Theta - h_z \sin \Theta \right. \\
& \left. + \frac{\cot \Theta}{\kappa} \right] P + \frac{1}{\tau_1 \sin^2 \Theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} (h_y \cos \Phi - h_x \sin \Phi) P \\
& - \frac{1}{\tau_2} \frac{\partial^2 P}{\partial \Theta^2} - \frac{1}{\tau_2} \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 P}{\partial \Phi^2} = 0,
\end{aligned} \tag{1.32}$$

Ми припускаємо, що розв'язок  $P = P(\Theta, \Phi, t)$  цього рівняння є нормованим, тобто,

$$\int_0^\pi d\Theta \int_0^{2\pi} d\Phi P(\Theta, \Phi, t) = 1, \tag{1.33}$$

та задовольняє початковим умовам  $P(\Theta, \Psi, 0) = \delta(\Theta - \Theta_0)\delta(\Phi - \Phi_0)$  with  $\Theta_0 = \theta(0)$  and  $\Phi_0 = \phi(0)$ .

### 1.2.7 Стохастичне наближення: ефективні рівняння Ланжевена

Згідно з наведеними вище результатами, основні рівняння Ланжевена (1.18) слід інтерпретувати в сенсі Стратоновича. Завдяки цьому, а також тому, що система двох рівнянь (1.18) містить три Гаусівських білих шуми, дослідження динаміки обертання наночастинок за допомогою чисельного розв'язання цих рівнянь не є цілком практичним. Тому зручно використовувати замість рівнянь (1.18) 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. Показано, що відповідну систему ефективних рівнянь Ланжевена

можна записати як

$$\begin{aligned}\dot{\theta} &= -\frac{1}{\tau_1} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{1}{\tau_2} \cot \theta + \sqrt{\frac{2}{\tau_2}} \mu_1, \\ \dot{\phi} &= -\frac{1}{\tau_1 \sin^2 \theta} \frac{\partial w}{\partial \phi} + \sqrt{\frac{2}{\tau_2}} \frac{1}{\sin \theta} \mu_2,\end{aligned}\tag{1.34}$$

або після подання похідних від безрозмірної енергії за кутовими координатами в явному вигляді

$$\begin{aligned}\dot{\theta} &= \frac{1}{\tau_1} (h_x \cos \phi + h_y \sin \phi) \cos \theta - \frac{1}{\tau_1} h_z \sin \theta \\ &\quad + \frac{1}{\tau_2} \cot \theta + \sqrt{\frac{2}{\tau_2}} \mu_1,\end{aligned}\tag{1.35a}$$

$$\begin{aligned}\dot{\phi} &= \frac{1}{\tau_1} (h_y \cos \phi - h_x \sin \phi) \frac{1}{\sin \theta} \\ &\quad + \sqrt{\frac{2}{\tau_2}} \frac{1}{\sin \theta} \mu_2,\end{aligned}\tag{1.35b}$$

де  $\mu_i = \mu_i(t)$  ( $i = 1, 2$ ) незалежні Гаусівські біліх шуми з нульовим середнім  $\langle \mu_i(t) \rangle = 0$ , та кореляційною функцією, пропорційною до дельта-функції,  $\langle \mu_i(t) \mu_i(t') \rangle = \delta(t - t')$ . Зазначимо, що аналогічна система ефективних рівнянь Ланжевена, що відповідає рівнянню Ландау-Ліфшица-Гілберта, що описує стохастичну динаміку намагніченості в однодоменних феромагнітних наночастинках, вбудованих у тверду матрицю, була запропонована в роботі [93], та для опису обертальної динаміки феромагнітних часток у рідинах в роботі [94].

У відповідності до результатів роботи [94], щільність ймовірностей розв'язків рівнянь (1.35) задовольняє рівнянню Фокера-Планка (1.31). Як наслідок, обертальні властивості феромагнітних наночастинок можуть бути описані або відповідно до співвідношень (1.35), інтерпретованими в сенсі Стратоновича, або, що еквівалентно, рівняннями (1.35), інтерпретованими в сенсі Іто. Чудова особливість останнього рівняння полягає в тому, що, незалежно від їх інтерпретації, відповідне рівняння Фокера-Планка задано рівнянням (1.31). В останньому можна

переконатися, якщо переписати рівняння (1.35) у формі

$$\dot{u}_i = F_i(\mathbf{u}, t) + \sum_{j=1}^2 G_{ij}(\mathbf{u})\mu_j, \quad (1.36)$$

де

$$(F_i) = -\frac{1}{\tau_1} \begin{pmatrix} \partial w / \partial u_1 - (1/\kappa) \cot u_1 \\ \sin^{-2} u_1 \partial w / \partial u_2 \end{pmatrix} \quad (1.37)$$

та

$$(G_{ij}) = \sqrt{\frac{2}{\tau_2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/\sin u_1 \end{pmatrix}, \quad (1.38)$$

та з урахуванням того, що

$$\sum_{k=1}^2 \frac{\partial G_{ij}(\mathbf{u})}{\partial u_k} G_{kj}(\mathbf{u}) = 0 \quad (1.39)$$

що має місце для усіх  $i$  та  $j$ . Це означає, що [87] [див. також рівняння (1.25) та (1.26)] рівняння Фокера-Планка, яке відповідає рівнянню (1.35), тобто, рівняння (1.31), не залежить від параметрів  $\lambda_j$  які забезпечують кількісний сенс інтерпретації стохастичних рівнянь (1.35). Хоча цей висновок очевидний для  $\lambda_1$  (тому що шум  $\mu_1$  є адитивним), незалежність рівняння (1.31) від  $\lambda_2$  є доволі неочікуваною (оскільки шум  $\mu_2$  є мультиплікативним). Зазначимо в цьому контексті, що, на відміну від одномірного випадку, завжди існує клас багатовимірних рівнянь Ланжевена з мультиплікативними Гауссівськими білими шумами, інтерпретація яких не впливає на відповідні рівняння Фокера-Планка. Отримані вище результати показують, що рівняння (1.35) належать до цього унікального класу рівнянь Ланжевена.

В статистичному сенсі останні рівняння еквівалентні початковим рівнянням руху (1.18). У той же час, рівняння (1.35), на відміну від рівнянь (1.18), не містять тих доданків, що складаються з функцій куткових

аргументів, помножених на шуми, які відповідають за теплові збурення тих же самих (що принципово) кутових координат. Іншими словами, хоч рівняння (1.35b) формально містить мультиплікативний шум, але тут шум, що відповідає відповідає за теплові коливання азимутального кута  $\phi$  множиться на функцію від полярного кута  $\theta$ . Останній факт дозволяє в подальшому не зважати на наявність таких формально мультиплікативного шуму під час подальшої чисельної обробки. Оскільки  $\mu_i$  представлені Гауссовськими білими шумами, які інтерпретуються в сенсі Стратоновича, використання рівняння (1.35) замість (1.18) в чисельному моделюванні зручніше завдяки більш простим і швидшим алгоритмам. Це особливо важливо з точки зору моделювання великих ансамблів наночастинок, оскільки тут є критичним час виконання однієї ітерації для однієї частинки. Шляхом введення безрозмірного часу  $\tilde{t} = t/\tau_1$ , можна записати систему *приведених ефективних* рівнянь Ланжевена (1.35) як зазначено нижче

$$\begin{aligned} \frac{d\theta}{d\tilde{t}} &= (h_x \cos \phi + h_y \sin \phi) \cos \theta - h_z \sin \theta \\ &\quad + \frac{1}{\kappa} \cot \theta + \sqrt{\frac{2}{\kappa}} \tilde{\mu}_1, \end{aligned} \quad (1.40a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\phi}{d\tilde{t}} &= \frac{1}{\sin \theta} (h_y \cos \phi - h_x \sin \phi) \\ &\quad - \sqrt{\frac{2}{\kappa}} \frac{1}{\sin \theta} \tilde{\mu}_2, \end{aligned} \quad (1.40b)$$

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

### 1.2.8 Моделювання ансамблю взаємодіючих частинок

Взаємодія є дуже важливим фактором, що визначає динаміку і властивості феррорідини. Проблема потребує розгляду з двох точок зору. З однієї сторони, отримані дипольні поля, що діють на кожену

частинку, можуть істотно впливати на динаміку обертання та, зокрема, на енергію, яка поглинається від зовнішнього поля. З іншої сторони, дипольна взаємодія через свій характер зумовлює кластерну структуру ансамблю, і у самоузгоджений спосіб впливає на розподіл дипольних полів. Точний аналітичний опис ансамблю частинок у в'язкій рідині, що збуджуються змінними у часі полями у в'язкій рідині, швидше за все, неможливий. Тому тут затребуваним є чисельне моделювання. Як зазначалося вище, існує два підходи для моделювання ансамблів ферромагнітних частинок, а саме, методи МС (Монте-Карло) і МД (Молекулярна динаміка) (див. [57–59]). Останній підхід більш підходить для високопродуктивного моделювання в режимі реального часу, але він потребує великих обчислювальних потужностей. У зв'язку з цим ключову роль відіграє оптимальна форма основних рівнянь, що описують динаміку однієї частинки. І ефективні рівняння (1.40) цілком підходять для цих цілей.

Саме тут ми розширюємо модель, розроблену для одночастинкового наближення до випадку ансамблю. Ми припускаємо, що ансамбль складається з однакових сферичних однорідних ферромагнітних одновісних частинок з параметрами, викладеними вище. Обертаний рух таких частинок описується ефективними стохастичними рівняннями, подібними до рівнянь (1.40), які доповнюються стандартними рівняннями поступального руху [64, 95] записані для безінерційного випадку як

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_k}{d\tilde{t}} &= (h_{kx} \cos \phi_k + h_{ky} \sin \phi_k) \cos \theta_k - h_{kz} \sin \theta_k \\ &\quad + \frac{1}{\kappa} \cot \theta_k + \sqrt{\frac{2}{\kappa}} \tilde{\mu}_{k1}, \end{aligned} \quad (1.41a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_k}{d\tilde{t}} &= \frac{1}{\sin \theta_k} (h_{ky} \cos \phi_k - h_{kx} \sin \phi_k) \\ &\quad - \sqrt{\frac{2}{\kappa}} \frac{1}{\sin \theta_k} \tilde{\mu}_{k2}, \end{aligned} \quad (1.41b)$$

$$\frac{d\boldsymbol{\rho}_k}{d\tilde{t}} = \frac{16\pi}{9} (\mathbf{f}_k^{dip} + \mathbf{f}_k^{sr}) + \sqrt{\frac{8}{3\kappa}} \tilde{\mu}_{k3}, \quad (1.41c)$$

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,  $\mathbf{h}_k = \mathbf{h}_k^{dip} + \mathbf{h}^{ext}$  – результуюче безрозмірне поле, що діє на  $k$ -у частинку, яке складається з зовнішньої однорідної частини ( $\mathbf{h}^{ext} = \mathbf{H}^{ext}/M$ ) і результуючого безрозмірного локального дипольного поля, що залежить від положення частинок

$$\mathbf{h}_k^{dip} = \sum_{j=1, j \neq k}^N \frac{4\pi}{3} \frac{\boldsymbol{\rho}_{kj}(\mathbf{m}_j \boldsymbol{\rho}_{kj}) - \mathbf{m}_j \boldsymbol{\rho}_{kj}^2}{\rho_{kj}^5}, \quad (1.42)$$

де  $\boldsymbol{\rho}_{kj}$  – вектор, що з'єднує дві частинки, виміряний в одиницях  $R$ ,  $\mathbf{m}_j = \mathbf{M}_j/M$  – масштабований магнітний момент  $j$ -ї частинки;  $N$  – загальна кількість частинок.

На кожен частинку діють дві сили, які слід враховувати. По-перше,  $\mathbf{f}_k^{dip}$  це сила, що діє на  $k$ -у частинку внаслідок її дипольної взаємодії з усіма іншими частинками у ансамблі. По-друге,  $\mathbf{f}_k^{sr}$  це сила, що зумовлена наявністю спеціального покриття наночастинок, яке широко використовується в реальних феррорідинах для запобігання агрегації частинок. Для подання у явному вигляді  $\mathbf{f}_k^{dip}$ , ми застосували стандартне визначення  $\mathbf{f}_k^{dip} = (\mathbf{m}_k \nabla_k) \mathbf{h}_k^{dip}$ . Покриття забезпечує в першу чергу відштовхування частинок. У літературі є багато прикладів, коли сила, зумовлена таким покриттям, моделюється за допомогою потенціалу Леннарда-Джонса. Цей тип потенціалу є найбільш прийнятним для подальшого моделювання, оскільки вона характеризується рівноважним станом, що запобігає нескінченному розбігу частинок, навіть якщо дипольна взаємодія слабка.  $\mathbf{f}_k^{sr} = -\nabla_k W_k$ , де  $W_k = 4\varepsilon \sum_{j=1, j \neq k}^N \left[ (\sigma/\rho_{kj})^{12} - (\sigma/\rho_{kj})^6 \right]$ . Тут,  $\sigma$  – параметр, що визначає рівноважну відстань між двома частинками, і  $\varepsilon$  – параметр, що визначає глибину потенціального бар'єру, який треба подолати, щоб розвести дві частинки на нескінченну відстань. Нарешті, ми переписуємо вищезазначені



сили, що діють на частинку як

$$\mathbf{f}_k^{dip} = \sum_{j=1, j \neq k}^N \left[ 3 \frac{\boldsymbol{\rho}_{kj}(\mathbf{m}_j \mathbf{m}_k) + \mathbf{m}_k(\mathbf{m}_j \boldsymbol{\rho}_{kj}) + \mathbf{m}_j(\mathbf{m}_k \boldsymbol{\rho}_{kj})}{\rho_{kj}^5} - 15 \frac{\boldsymbol{\rho}_{kj}(\mathbf{m}_k \boldsymbol{\rho}_{kj})(\mathbf{m}_j \boldsymbol{\rho}_{kj})}{\rho_{kj}^7} \right], \quad (1.43a)$$

$$\mathbf{f}_k^{sr} = 24\varepsilon \sum_{j=1, j \neq k}^N \frac{\boldsymbol{\rho}_{kj}}{\rho_{kj}^2} \left[ \left( \frac{\sigma}{\rho_{kj}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{\rho_{kj}} \right)^6 \right]. \quad (1.43b)$$

Розрахунок дипольного поля - це найбільш витратна для обчислення частина чисельного алгоритму. Це основний фактор, що визначає оптимальний баланс між часом обчислення ( $\mathcal{T}_{sim}$ ), розміром ансамблю ( $N$ ), та обладнання, що використовується. Точний прямий розрахунок дипольних полів, індукованих усіма частинками, характеризується квадратичною залежністю між часом моделювання та розміром ансамблю ( $\mathcal{T}_{sim} \sim N^2$ ). Замість громіздкого точного розрахунку використовуються два наближення. Першим наближенням є так званий швидкий мультипольний метод [96] що забезпечує продуктивність на рівні співвідношення  $\mathcal{T}_{sim} \sim N$ , а другий - алгоритм Барнса-Хата [75], що забезпечує продуктивність на рівні співвідношення  $\mathcal{T}_{sim} \sim N \log N$ . Незважаючи на кращі показники швидкості, швидкий мультипольний метод не обчислює кореляції станів найближчих сусідніх частинок (що, насправді, зумовлюють основний вплив в ансамблі) з високою точністю. Тому в нашому розрахунку ми використали підхід Барнса-Хата. Головна ідея останнього полягає в усередненні полів, що збуджуються частинками, які досить віддалені від заданої, і, навпаки, поля, що збуджуються найближчими частинками, розраховуються точно.

Іншою важливою особливістю нашого чисельного підходу є використання обчислювальних можливостей графічних процесорів відеокарт. Це дає можливість в багато разів збільшити продуктивність обчислень на звичайному комп'ютері. Графічні процесори відеокарти призначені для відображення відео в реальному часі можуть бути адаптовані для обчислень загального призначення. Так звана технологія

CUDA, яку розробила компанія Nvidia [76], надає нам зручні інструменти для цього. Сьогодні багато наукових проблем можна вирішити недорого та без використання спеціалізованих апаратних можливостей, таких як кластери чи суперкомп'ютери. Колективна динаміка ансамблів частинок з дипольною взаємодією на великих відстанях є підходящою проблемою для демонстрації здатності CUDA. Деталі використаної методики моделювання пояснюються в нашій попередній роботі [95].

### 1.2.9 Втрати потужності: визначення та методика розрахунку

Динаміка частинки у в'язкій рідині супроводжується дисипацією енергії. Втрати потужності  $Q$ , тобто розсіювання магнітної енергії за одиницю часу, вводиться стандартно використовуючи варіацію магнітної енергії  $\delta W$ , яка пов'язана з елементарним прирощенням магнітного моменту  $\delta \mathbf{M}$  у зовнішньому полі  $\mathbf{H}^{ext}$ . У припущенні, що всі зміни енергії перетворюються на незворотні втрати, можна написати  $\delta Q = \mathbf{H}^{ext} \delta \mathbf{M}$ . Якщо знехтувати шумом, то в одночастинковому випадку результуюча величина  $Q$  отримується шляхом усереднення за часом

$$Q = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} \mathbf{H}^{ext} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} dt. \quad (1.44)$$

Далі буде зручно послуговуватись потужністю втрат у приведеній формі  $q = Q/(M^2 \tau_1^{-1})$ , яка з врахуванням (1.44) може бути записана у формі

$$q = \lim_{\tilde{\tau} \rightarrow \infty} \frac{1}{\tilde{\tau}} \int_0^{\tilde{\tau}} \mathbf{h}^{ext} \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \tilde{t}} d\tilde{t}, \quad (1.45)$$

Тут доречно підкреслити, що в найпростіших випадках періодичного вимушеного руху  $\mathbf{M}$  інтегрування в рівнянні (1.45) може бути проведено тільки за періодом поля ( $\tilde{\mathcal{T}} = \mathcal{T}/\tau_1$ ),

$$q = \frac{1}{\tilde{\mathcal{T}}} \int_0^{\tilde{\mathcal{T}}} \mathbf{h}^{ext} \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \tilde{t}} d\tilde{t}. \quad (1.46)$$

У стохастичному випадку для отримання результату нам потрібно додатково виконати усереднення по всіх кутових станах з урахуванням

ймовірності кожного з них. У цьому випадку безрозмірна потужність втрат розраховується наступним чином

$$q = \lim_{\tilde{\tau} \rightarrow \infty} \int_{\pi}^0 d\theta \int_{2\pi}^0 d\phi P(\theta, \phi, \tilde{t}) \int_0^{\tilde{\tau}} \mathbf{h}^{ext} \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \tilde{t}} d\tilde{t}. \quad (1.47)$$

Оскільки  $\mathbf{m}$  – стохастична функція, інтегрування у формулі (1.47) не може бути здійснено у спосіб, прийнятий для регулярних функцій. Основна складність тут полягає в інтерпретації похідної від часу  $\mathbf{m}$ . Щоб уникнути цього, використаємо добре відомий підхід інтегрування частинами  $\int_a^b \mathcal{U}(x) \mathcal{V}'(x) dx = [\mathcal{U}(x) \mathcal{V}(x)]_a^b - \int_a^b \mathcal{U}'(x) \mathcal{V}(x) dx$ . Тоді ми нехтуємо можливими нелінійними ефектами, такими як хаотичні [97] або квазіперіодичні [98] режими, які мають місце, наприклад, у внутрішній магнітній динаміці у нерухомій частинці. З чисельного розв'язку рівнянь руху (1.18) для детерміністичного наближення і рівняння руху (1.35) для ненульової температури можна зробити наступні висновки. По-перше, вищезазначені режими можуть генеруватися у вузькому частотному діапазоні, коли  $\Omega \sim 1/\tau_1$ . По-друге, у нашому випадку ефекти, викликані цими режимами, пригнічуються тепловими шумами у великому масштабі часу. Тому ми припускаємо  $[\mathbf{m}\mathbf{h}]_{\tilde{\tau}}^0 = 0$ , і для подальших розрахунків ми використовуємо відношення

$$q = - \lim_{\tilde{\tau} \rightarrow \infty} \int_{\pi}^0 d\theta \int_{2\pi}^0 d\phi P(\theta, \phi, \tilde{t}) \int_0^{\tilde{\tau}} \mathbf{m} \frac{\partial \mathbf{h}^{ext}}{\partial \tilde{t}} d\tilde{t}. \quad (1.48)$$

Якщо густина ймовірності  $P(\theta, \phi, \tilde{t})$  це відома функція періоду  $\tilde{\mathcal{T}}$ , інтегрування в рівнянні (1.48) здійснюється саме на цьому періоді

$$q = - \frac{1}{\tilde{\mathcal{T}}} \int_{\pi}^0 d\theta \int_{2\pi}^0 d\phi P(\theta, \phi, \tilde{t}) \int_0^{\tilde{\mathcal{T}}} \mathbf{m} \frac{\partial \mathbf{h}^{ext}}{\partial \tilde{t}} d\tilde{t}. \quad (1.49)$$

Для чисельного моделювання інтегрування в рівнянні (1.48) замінюється суммою, і використовується відповідна різницева схема. На основі сферичного подання одиничного магнітного моменту  $\mathbf{m} = \mathbf{e}_x \sin \theta \cos \phi + \mathbf{e}_y \sin \theta \sin \phi + \mathbf{e}_z \cos \theta$  і рівняння (1.48), явний вигляд цієї

різничевої схеми можна записати як

$$\begin{aligned}
 q = & - \frac{1}{N_1 N_2} \sum_{i=1}^{N_1 N_2} \left[ \sin \theta(\tilde{t}_i) \cos \phi(\tilde{t}_i) \frac{\partial h_x^{ext}(\tilde{t}_i)}{\partial \tilde{t}} \right. \\
 & + \sin \theta(\tilde{t}_i) \sin \phi(\tilde{t}_i) \frac{\partial h_y^{ext}(\tilde{t}_i)}{\partial \tilde{t}} \\
 & \left. + \cos \theta(\tilde{t}_i) \frac{\partial h_z^{ext}(\tilde{t}_i)}{\partial \tilde{t}} \right] \Delta \tilde{t}, \tag{1.50}
 \end{aligned}$$

де  $N_1 = \tilde{T}/\Delta \tilde{t}$  – кількість кроків за період зовнішнього поля,  $N_2 = \tilde{T}_{sim}/\tilde{T}$  – кількість періодів, протягом яких здійснюється моделювання,  $\Delta \tilde{t}$  – величина елементарного часового приросту, який є постійним у моделюванні.

Нарешті, у випадку взаємодіючого ансамблю, що складається з  $N$  частинок і моделюється за допомогою рівнянь (1.41), нам потрібно провести додаткове усереднення за усіма частинками в ансамблі. Тому тут запропонована методологія обчислення потужності втрат знову ускладнюється шляхом реалізації додаткової процедури осереднення у виразі (1.50). В результаті фінальна формула для розрахунку втрат потужності у ансамблі частинок, які взаємодіють, має такий вигляд:

$$\begin{aligned}
 q = & - \frac{1}{N_1 N_2 N} \sum_{k=1}^N \sum_{i=1}^{N_1 N_2} \left[ \sin \theta_k(\tilde{t}_i) \cos \phi_k(\tilde{t}_i) \frac{\partial h_{kx}^{ext}(\tilde{t}_i)}{\partial \tilde{t}} \right. \\
 & + \sin \theta_k(\tilde{t}_i) \sin \phi_k(\tilde{t}_i) \frac{\partial h_{ky}^{ext}(\tilde{t}_i)}{\partial \tilde{t}} \\
 & \left. + \cos \theta_k(\tilde{t}_i) \frac{\partial h_{kz}^{ext}(\tilde{t}_i)}{\partial \tilde{t}} \right] \Delta \tilde{t}. \tag{1.51}
 \end{aligned}$$

Ми припускаємо, що зменшення енергії зовнішнього поля одночасно компенсується від джерела зовнішнього поля. Крім того, ми не враховуємо збільшення енергії, що виникає внаслідок зміни дипольного поля  $\mathbf{h}_k^{dip}$ . Зростання енергії вибраної частки зі зміною дипольного поля супроводжується таким самим зменшенням енергії інших частинок, які є джерелами цього дипольного поля. Іншими словами, дипольне поле може передавати енергію від однієї частки до іншої, але не може призвести до

наявності додаткових втрат потужності.

Деталі чисельного розрахунку в даній роботі є наступні. Для моделювання одностинкової стохастичної динаміки, системи рівнянь (1.40) розв'язуються методом Рунге-Кутта другого порядку з часовим кроком  $\Delta\tilde{t} = 0.005\tilde{T}$  в діапазоні  $N_2 = 1000$  безрозмірних періодів поля для кожної точки графіку залежності. Для моделювання поведінки ансамблю частинок, що взаємодіють, система рівнянь (1.41) розв'язуються аналогічним чином з часовим кроком  $\Delta\tilde{t} = 0.005\tilde{T}$  в діапазоні  $N_2 = 1000$  безрозмірних періодів поля для кожної точки графіку для  $N = 4096$  кількості частинок. Значення інших параметрів системи зазначені нижче. Для нашого моделювання були використані відеокарти Nvidia GeForce 450 GTS і Nvidia GeForce 650 GTS Ti. Код програми був реалізований за допомогою мови C++ та середовища розробки Eclipse.

### 1.3 Детерміністичний обертальний рух та потужність втрат наночастинки у періодичному зовнішньому полі

#### 1.3.1 Аналітичні результати детерміністичного наближення: дія циркулярно-поляризованого поля

Припустимо, на частнику діє циркулярно поляризоване поле 1.3а, яку в безрозмірному вигляді запишеться:

$$\mathbf{h}^{ext}(t) = \mathbf{e}_x h_m \cos(\tilde{\Omega}t) + \mathbf{e}_y \rho h_m \sin(\tilde{\Omega}t) + \mathbf{e}_z h_{z0}, \quad (1.52)$$

Щоб описати траєкторії наночастинки, підставимо вираз для зовнішнього поля (1.52) у систему рівнянь (1.7). Користаючись безрозмірним значенням частоти  $\tilde{\Omega} = \Omega/\Omega_{cr}$ , отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{d^2\theta}{d^2\tilde{t}} + \frac{1}{v} \frac{d\theta}{d\tilde{t}} - \left( \frac{d\psi}{d\tilde{t}} \right)^2 \sin\theta \cos\theta &= \frac{h_m}{v} \cos\psi \cos\theta - \frac{h_{z0}}{v} \sin\theta, \\ \left( \frac{d^2\psi}{d^2\tilde{t}} + \frac{1}{v} \frac{d\psi}{d\tilde{t}} \right) \sin\theta + 2 \frac{d\theta}{d\tilde{t}} \frac{d\psi}{d\tilde{t}} \cos\theta &= -\frac{h_m}{v} \sin\psi, \end{aligned} \quad (1.53)$$

де  $\psi = \phi - \varrho\tilde{\Omega}\tilde{t}$ . Однорідна прецесія синхронно із зовнішнім полем є природним розв'язком системи рівнянь (1.53). Цей режим характеризується постійним значенням кута відставання  $\Phi = \lim_{\tilde{t} \rightarrow \infty} \psi$ , та постійним значенням кута прецесії  $\Theta = \lim_{\tilde{t} \rightarrow \infty} \theta$ . Підстановкою зазначених розв'язків у вихідне рівняння (1.53) дозволяє отримати систему алгебраїчних рівнянь для обчислення невідомих  $\Phi$  and  $\Theta$

$$\begin{aligned} \cos \Theta \left( \tilde{\Omega}^2 v \sin \Theta + h_m \cos \Phi \right) &= h_{z0} \sin \Theta, \\ \tilde{\Omega} \sin \Theta &= h_m \sin \Phi. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Остання система може бути розв'язана чисельно якщо інші параметри системи задані. Середнє значення потужності втрат може бути знайдена використовуючи вирази (1.54) та (1.46) у наступному вигляді

$$q = \tilde{\Omega}^2 \sin^2 \Theta. \quad (1.55)$$

Тут потрібно зробити зауваження: вираз (1.55) для малих кутів прецесії даний результат співпадає з виразом отриманим Ксі та ін. у роботі [34] у лінійному наближенні.

Отримані розв'язки системи (1.54) є стабільними якщо  $h_{z0} \neq 0$ . У зворотному випадку, стабільна прецесія має місце лише якщо виконується умова  $\tilde{\Omega} \leq h_m$ . В свою чергу, коли  $\tilde{\Omega} > h_m$  має місце так звана неоднорідна прецесія, яка буде описана чисельно далі. Однак, треба відзначити наступне. Якщо припустити, що умова  $\theta = \pi/2$  є справедливою, та використовуючи вже відоме подання  $\phi(\tilde{t}) = \tilde{\Omega}\tilde{t} - \psi(\tilde{t})$ , можна записати

$$\frac{d^2\psi}{d^2\tilde{t}} + \frac{1}{v} \frac{d\psi}{d\tilde{t}} + \frac{h_m}{v} \sin \psi = 0. \quad (1.56)$$

Це відоме рівняння загасаючого маятника зі сталим обертовим моментом [99].

Користуючись системою (1.54) та за умови  $h_{z0} > 0$ , легко може бути показано, що стаціонарний розв'язок детерміністичних рівнянь руху (1.53)

можна записати як

$$\begin{pmatrix} \Theta \\ \Phi \end{pmatrix} = \arcsin \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\Gamma^2 - \sqrt{\Gamma^4 - 4\tilde{\Omega}^2 h_m^2}} \begin{pmatrix} 1/\tilde{\Omega} \\ 1/h_m \end{pmatrix} \right] \quad (1.57)$$

( $\Gamma^2 = \tilde{\Omega}^2 + h_m^2 + h_{z0}^2$ ). Також можна довести, що цей розв'язок є стійким по відношенню до малих збурень кутів  $\Theta$  and  $\Phi$ . Таким чином, розв'язок вихідних диференціальних рівнянь (1.53) якщо  $h_{0z} > 0$  завжди прямує до стаціонарних розв'язків, що задається рівняннями (1.54) коли час прямує до нескінченності ( $t \rightarrow \infty$ ). Зокрема,  $z$ -компонента безрозмірної намагніченості наночастинок на великих часових проміжках в  $m_z = \cos \Theta$  визначається як

$$m_z = \frac{1}{\sqrt{2\tilde{\Omega}}} \sqrt{2\tilde{\Omega}^2 - \Gamma^2 + \sqrt{\Gamma^4 - 4\tilde{\Omega}^2 h_m^2}}. \quad (1.58)$$

Загалом,  $m_z$  як функція параметрів  $\tilde{\Omega}$ ,  $h_m$  and  $h_{z0}$  демонструє схильну до насичення поведінку:  $m_z \rightarrow h_z/\sqrt{h_m^2 + h_{z0}^2}$  як  $\tilde{\Omega} \rightarrow 0$ ,  $m_z \rightarrow 1$  як  $\tilde{\Omega} \rightarrow \infty$ ,  $h_m \rightarrow 0$  або  $h_{z0} \rightarrow \infty$ , та  $m_z \rightarrow 0$  як  $h_m \rightarrow \infty$ . В той самий час, залежність  $m_z$  оп  $\tilde{\Omega}$  та  $h_m$  за умови  $h_z \rightarrow 0$  не є абсолютно очевидною. Справді, з рівняння (1.58) можна показати

$$\mu = \lim_{h_{z0} \rightarrow 0} m_z = \begin{cases} 0, & \tilde{\Omega}/h_m < 1 \\ \sqrt{1 - (\tilde{\Omega}/h_m)^2}, & \tilde{\Omega}/h_m \geq 1, \end{cases} \quad (1.59)$$

тобто, намагніченість наночастинок вздовж вісі  $z$   $\mu$  залежить від співвідношення  $\tilde{\Omega}/h_m$  та, що більш важливо, поведінка  $\mu$  в областях  $\tilde{\Omega}/h_m < 1$  та  $\tilde{\Omega}/h_m \geq 1$  є зовсім різною. Як проілюстровано на рисунку ??, чисельних розв'язок вихідних диференціальних рівнянь (1.53) чисельні дані підтверджують зазначені аналітичні результати. Тут чисельні розрахунки проводились для наночастинок магнетита ( $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), що зважені у воді. У цьому випадку намагніченість насичення наночастинок, динамічна в'язкість води і критична частота  $\Omega_{cr}$  за кімнатної температури  $T = 298$  К мають значення відповідно  $4\pi M = 3.89 \times 10^3$  Гс,  $\eta = 8.90 \times 10^{-3}$

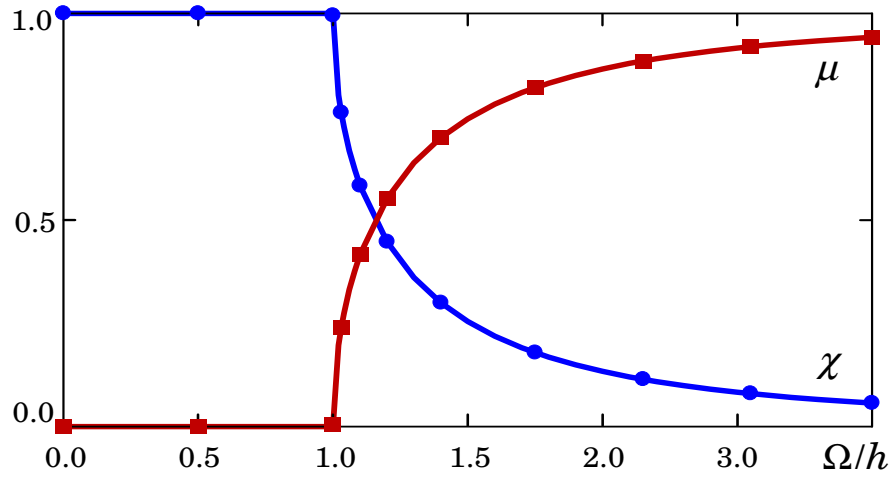


Рисунок 1.3 – Намагніченість наночастинки  $\mu$  вздовж вісі  $z$  та середня кутова швидкість обертання  $\chi$  як функція від співвідношення частоти та амплітуди  $\tilde{\Omega}/h_m$ . Суцільна крива подає аналітичні результати (1.59) and (1.61), а маркери показують відповідні чисельні значення отримані за наступних умов  $t = 10^7 \tau_1$  шляхом чисельного розв'язку рівняння (1.15) для частинок магнетиту. Чисельні значення  $\mu$  and  $\chi$ , були отримані для  $h_z = 10^{-3}$  та  $h_{z0} = 0$ , відповідно, та не залежать від початкових значень полярного та азимутального кутів  $\theta(0)$  and  $\psi(0)$ .

П та  $\Omega_{cr} = 1.79 \times 10^6 \text{ c}^{-1}$ , відповідно.

Рівняння (1.59) у випадку  $h_{z0} = 0$  має більш простий, але цікавий розв'язок. Якщо  $\tilde{\Omega}/h_m < 1$  то з рівнянь (1.54) та (1.57) можна отримати

$$\Theta = \frac{\pi}{2}, \quad \Phi = \arcsin\left(\frac{\tilde{\Omega}}{h_m}\right), \quad (1.60)$$

та, як і у попередньому випадку, ці розв'язки є стійкими. На противагу, якщо справедлива умова  $\tilde{\Omega}/h_m \geq 1$  то тоді усталені розв'язки (1.53) є періодичними у часі з періодом  $t_{st} = \pi \tau_1 / \sqrt{\tilde{\Omega}^2 - h_m^2}$  (періодичний режим обертання) [78]. Якщо більш точно, то в цьому випадку кути  $\theta(t)$  і  $\psi(t)$  змінюються у спосіб  $\theta(t + t_{st}) = \theta(t)$  and  $\psi(t + t_{st}) = \pi + \psi(t)$ . Використовуючи ці результати, видається можливим визначити результуючу кутову швидкість частинки у такому вигляді  $\chi = (1/\Omega) \lim_{t \rightarrow \infty} \phi(t)/t$ . Далі, оскільки  $\phi(\tilde{t}) = \tilde{\Omega} \tilde{t} - \psi(\tilde{t})$ , з наведеного означення середньої швидкості  $\chi = 1$  for  $\tilde{\Omega}/h_m < 1$  та  $\chi = 1 - \pi/(\tilde{\Omega} t_{st})$



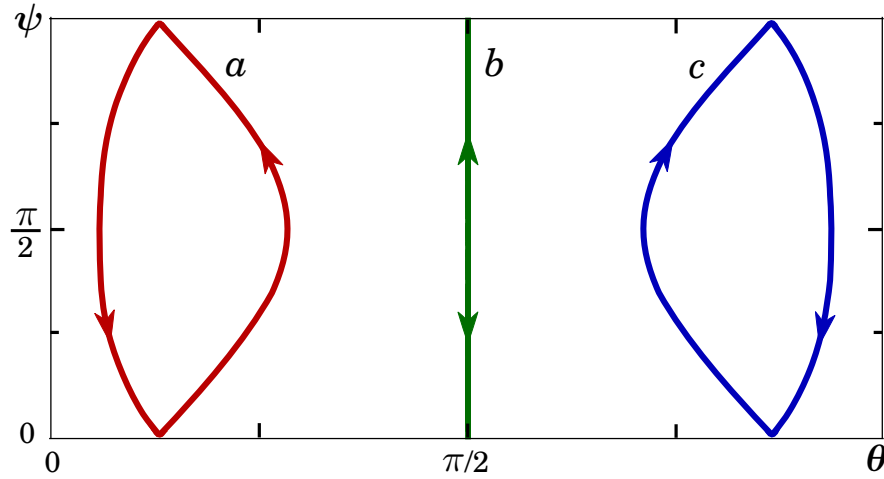


Рисунок 1.4 – Приклад усталених обертальних траєкторій, що показують залежність від початкового значення полярного кута  $\theta(0)$ . Чисельні дані отримані шляхом розв’язання рівняння (1.15) для параметрів  $\tilde{\Omega} = 2.5$ ,  $h_m = 1$ ,  $h_{z0} = 0$ ,  $\psi(0) = 0$ , and  $\theta(0) = 0.4$  (a),  $\theta(0) = \pi/2$  (b),  $\theta(0) = 2.7$  (c). На рисунках кути виміряні в радіанах, кут відставання  $\psi(t)$  приведений до інтервалу  $[0, \pi]$ , стрілки показують часову еволюцію з часом, а виродження траєкторії  $b$  відповідає обертанню частинки у площині  $xy$  [тобто,  $\theta(t) = \pi/2$ ].

for  $\tilde{\Omega}/h_m \geq 1$ , або,

$$\chi = \begin{cases} 1, & \tilde{\Omega}/h_m < 1 \\ 1 - \sqrt{1 - (\tilde{\Omega}/h_m)^2}, & \tilde{\Omega}/h_m \geq 1. \end{cases} \quad (1.61)$$

Така залежність швидкості  $\chi$  від  $\tilde{\Omega}/h_m$  також підтверджується чисельним моделюванням, як показано на рисунку 1.3.

Порівнянням виразу (1.61) зі співвідношенням (1.59), можна простежити, що намагніченість наночастинки  $\mu$  ата її середня кутова швидкість  $\chi$  пов’язані простим, але вартим відзнаки способом:  $\mu + \chi = 1$ . Слід зазначити, що, хоча стаціонарна динаміка магнітного моменту  $\mathbf{m}$  at  $h_{z0} = 0$  and  $\tilde{\Omega}/h_m \geq 1$  може сильно залежати від початкового положення цього вектору (див. Рис. 1.4 для ілюстрації), середня кутова швидкість  $\chi$  від початкового положення не залежить. Тому, умова  $\mu + \chi = 1$  є універсальною з тієї точки зору, що визначається виключно відношенням частоти і амплітуди зовнішнього поля  $\tilde{\Omega}/h_m$  та не залежить від початкових умов  $\theta(0)$  та  $\psi(0)$ .

Щоб уникнути плутанини у тлумаченні вищезазначеної умови, спочатку нагадаємо, що за умови  $h_{z0} > 0$  стаціонарні розв'язки диференціальних рівнянь (1.53), що задаються алгебраїчним рівнянням (1.54) є стійкими для усіх значень відношення  $\tilde{\Omega}/h_m$ . У випадку, коли  $m_z$  визначається рівнянням (1.58),  $\chi = 1$  та, якщо на додачу,  $m_z$  підкоряється виразу (1.59) якщо  $h_{z0}$  приймає невелику але ненульову величину. На противагу, у випадку, коли  $h_z = 0$ , стаціонарний розв'язок (1.60) рівняння (1.53) є стабільним за умови  $\tilde{\Omega}/h_m < 1$  і ці рівняння за умови  $\tilde{\Omega}/h_m \geq 1$  мають періодичні салі розв'язки, то вираз для середньої швидкості задається виразом (1.61), тоді коли намагніченість вздовж вісі  $z$  відсутня, або  $\mu = 0$ . Останній результат є прямим наслідком виразу  $\mu = (1/t_{st}) \int_0^{t_{st}} dt \cos \theta(t)$ , який враховує всі існуючі розв'язки рівняння (1.53) за умови  $\tilde{\Omega}/h_m \geq 1$ , та показує (якщо  $h_{z0} = 0$ ) що жодне підмагнічування, зумовлене динамічними ефектами, відсутнє. Таким чином, умова  $\mu + \chi = 1$  є справедливою коли величина  $\mu$  пов'язана з  $m_z$ , коли  $h_{z0} \ll 1$  (але не за умови  $h_{z0} = 0$ ), а величина  $\chi$  розраховується якщо  $h_{z0} = 0$ . Зазначимо в цьому контексті, що режим обертання наночастинок, що існує при нескінченно малих значеннях сталого поля  $h_{z0}$ , повністю руйнується тепловими флуктуаціями.

### 1.3.2 Аналітичні результати детерміністичного наближення: дія лінійно-поляризованого поля

Для спрощення подальшого аналізу, розглянемо зовнішнє поле типу (1.3b), що у безрозмірному вигляді подається як

$$\mathbf{h}(t) = \mathbf{e}_z h_m \cos(\tilde{\Omega}t). \quad (1.62)$$

Після підстановки виразу (1.62) у систему (1.7) рівняння руху набуває наступної форми:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\theta}{d^2\tilde{t}} + \frac{1}{v} \frac{d\theta}{d\tilde{t}} - \left( \frac{d\phi}{d\tilde{t}} \right)^2 \sin\theta \cos\theta &= -\frac{h_m}{v} \sin\theta \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t}), \\ \left( \frac{d^2\phi}{d^2\tilde{t}} + \frac{1}{v} \frac{d\phi}{d\tilde{t}} \right) \sin\theta + 2 \frac{d\theta}{d\tilde{t}} \frac{d\phi}{d\tilde{t}} \cos\theta &= 0. \end{aligned} \quad (1.63)$$

З другого рівняння системи (1.63) можна отримати

$$\left( \frac{d\phi}{d\tilde{t}} \right)^{-1} \frac{d^2\phi}{d^2\tilde{t}} + \frac{1}{v} = -2 \frac{d\theta}{d\tilde{t}} \frac{\cos\theta}{\sin\theta}. \quad (1.64)$$

Останній вираз може бути проінтегрований

$$\left| \frac{d\phi}{d\tilde{t}} \right| = \left| \frac{d\phi(0)}{d\tilde{t}} \right| \sin^{-2}\theta \exp\left(-\frac{\tilde{t}}{v}\right). \quad (1.65)$$

Оскільки азимутальний кут експоненціально прямує до сталого значення, подальший розгляд будемо проводити лише для полярного кута. тобто, подальший рух будемо розглядати як плаский. Тому з першого рівняння системи (1.63) отримаємо

$$\frac{d^2\theta}{d^2\tilde{t}} + \frac{1}{v} \frac{d\theta}{d\tilde{t}} = -\frac{h_m}{v} \sin\theta \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t}). \quad (1.66)$$

Це рівняння має наступний розв'язок у безінерційному наближенні ( $I \rightarrow 0$ ,  $\ddot{\theta} \equiv 0$ )

$$\tan(\theta/2) = \tan(\theta_0/2) \exp\left[-\sin(\tilde{\Omega}\tilde{t}) \frac{h_m}{\tilde{\Omega}}\right], \quad (1.67)$$

де  $\theta_0$  є початкове значення полярного кута магнітного моменту  $\mathbf{m}$ . Відзначимо, що схоже рівняння вже зустрічалося у роботі [35], однак там воно використовувалося для описання сумісної динаміки магнітного моменту в наночастинці зі скінченною анізотропією та її механічного обертання як цілого у лінійному наближенні. Слід зазначити, що там цей вираз був отриманий в межах суперечливих базових рівнянь.

Користуючись (1.46), тсереднє значення потужності втрат в режимі однорідної прецесії може бути записане як

$$q = \frac{\tilde{\Omega}^2 h_m}{2\pi} \int_0^{\frac{\tilde{\Omega}}{2\pi}} d\tilde{t} \tanh \left[ \frac{h_m}{\tilde{\Omega}} \sin(\tilde{\Omega}\tilde{t}) - \frac{x_0}{2} \right] \sin(\tilde{\Omega}\tilde{t}), \quad (1.68)$$

де  $x_0 = \ln(\tan^2 \theta_0/2)$  є константа, що визначається початковим станом магнітного моменту  $\mathbf{m}$ .

### 1.3.3 Аналітичні результати детерміністичного наближення: межа великих частот та лінійне наближення

Якщо виконується умова  $\tilde{\Omega} \gg h_m$ , магнітний момент здійснює малі коливання. Точкою рівноваги для таких коливань слугує початкове положення магнітного моменту, або її задає прикладене постійне зовнішнє поле  $\mathbf{h}_{z'0}$ . ТДля спрощення подальшого аналізу припустимо, що напрямок постійного поля  $\mathbf{h}_{z'0}$  так само як і початкового положення вектора  $\mathbf{m}$  задається кутами  $\theta_0$  та  $\phi_0$  (див. Рис. 1.5). Статичне поле є не перпендикулярним до змінного поля, що розширює межі застосування нашої моделі. Зокрема, в якості поля  $\mathbf{h}_{z'0}$  можна розглядати локальне дипольне поле, яке індукується всіма частинками в ферорідини.

На рисунку 1.5 зображена нова (штрихована) координатна система, що задається ортами  $(\mathbf{e}_{x'}, \mathbf{e}_{y'}, \mathbf{e}_{z'})$ . Така система нерухома, але повернута відносно лабораторної на кути  $\theta_0$  and  $\phi_0$ . Змінне поле (1.52) в цих нових координатах може бути подано за допомогою матриці повороту, аналогічної до (3.12), однак, записаної для змінних  $\theta_0$  and  $\phi_0$  замість  $\theta$  та  $\phi$  відповідно. Якщо прийняти до уваги, що тут статичне поле колінеарне до вісі  $z'$  за визначенням ( $\mathbf{h}_{z'0} = \mathbf{e}_{z'} h_{z'0}$ ), загальний вираз для поля набирає вигляду

$$\mathbf{h}' = \begin{pmatrix} h_m \cos \theta_0 \cos \phi_0 \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t}) + \varrho h_m \cos \theta_0 \sin \phi_0 \sin(\tilde{\Omega}\tilde{t}) \\ -h_m \sin \phi_0 \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t}) + \varrho h_m \cos \phi_0 \sin(\tilde{\Omega}\tilde{t}) \\ h_m \sin \theta_0 [\cos \phi_0 \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t}) + \varrho \sin \phi_0 \sin(\tilde{\Omega}\tilde{t})] + h_{z'0} \end{pmatrix}. \quad (1.69)$$

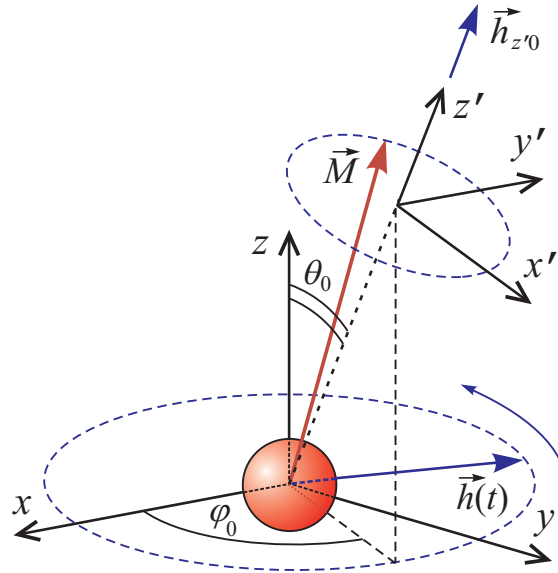


Рисунок 1.5 – Схематичне зображення наночастинки та систем координат, що використовуються для опису високочастотного наближення.

Далі для зручності припускаємо, що за умови  $\varrho = \pm 1$ , рівняння (1.69) задає циркулярно-поляризоване поле, тоді як за умови  $\varrho = 0$  задається лінійно-поляризоване поле. Для опису малих коливань подамо вектор магнітного моменту в новій системі координат як  $\mathbf{m}' = \mathbf{e}_{x'}m_{x'} + \mathbf{e}_{y'}m_{y'} + \mathbf{e}_{z'}$ . Далі зробимо припущення, що відповідає лінійному наближенню  $m_{x'}, m_{y'}, \omega_{x'}, \omega_{y'}, \omega_{z'} \sim h$  та з точністю до членів першого порядку з системи (1.2) можна отримати

$$\begin{aligned}
 \frac{dm_{x'}}{d\tilde{t}} &= \tilde{\omega}_{y'}, \\
 \frac{dm_{y'}}{d\tilde{t}} &= -\tilde{\omega}_{x'}, \\
 \frac{d\tilde{\omega}_{x'}}{d\tilde{t}} &= \frac{1}{v} [m_{y'} h_{z'0} + h_m \sin \phi_0 \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t}) - \\
 &\quad - \varrho h_m \cos \phi_0 \sin(\tilde{\Omega}\tilde{t}) - \tilde{\omega}_{x'}], \\
 \frac{d\tilde{\omega}_{y'}}{d\tilde{t}} &= \frac{1}{v} [-m_{x'} h_{z'0} + h_m \cos \theta_0 \cos \phi_0 \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t}) + \\
 &\quad + \varrho h \cos \theta_0 \sin \phi_0 \sin(\tilde{\Omega}\tilde{t}) - \tilde{\omega}_{y'}], \\
 \frac{d\tilde{\omega}_{z'}}{d\tilde{t}} &= -\frac{1}{v} \tilde{\omega}_{z'}.
 \end{aligned} \tag{1.70}$$

Розв'язок такої лінійної системи рівнянь будемо шукати у стандартному вигляді

$$\begin{aligned}
 m_{x'} &= a \cos(\tilde{\Omega}t) + b \sin(\tilde{\Omega}t), \\
 m_{y'} &= c \cos(\tilde{\Omega}t) + d \sin(\tilde{\Omega}t), \\
 \tilde{\omega}_{x'} &= f \cos(\tilde{\Omega}t) + g \sin(\tilde{\Omega}t), \\
 \tilde{\omega}_{y'} &= k \cos(\tilde{\Omega}t) + l \sin(\tilde{\Omega}t), \\
 \tilde{\omega}_{z'} &= p \cos(\tilde{\Omega}t) + q \sin(\tilde{\Omega}t).
 \end{aligned}
 \tag{1.71}$$

Підстановкою (1.71) в (1.70) та з урахуванням лінійної незалежності тригонометричних функцій  $\sin(\tilde{\Omega}t)$  та  $\cos(\tilde{\Omega}t)$ , можна прямими обчисленнями отримати вже алгебраїчні рівняння відносно лінійних коефіцієнтів, що задають гармонічні коливання вектора  $\mathbf{m}$

$$\begin{aligned}
 a &= -h_m \cos \theta_0 \frac{(v\tilde{\Omega}^2 - h_{z'0}) \cos \phi_0 + \varrho\tilde{\Omega} \sin \phi_0}{\tilde{\Omega}^2 + (v\tilde{\Omega}^2 - h_{z'0})^2}, \\
 b &= -h_m \cos \theta_0 \frac{\varrho(v\tilde{\Omega}^2 - h_{z'0}) \sin \phi_0 - \tilde{\Omega} \cos \phi_0}{\tilde{\Omega}^2 + (v\tilde{\Omega}^2 - h_{z'0})^2}, \\
 c &= h_m \frac{(v\tilde{\Omega}^2 - h_{z'0}) \sin \phi_0 - \varrho\tilde{\Omega} \cos \phi_0}{\tilde{\Omega}^2 + (v\tilde{\Omega}^2 - h_{z'0})^2}, \\
 d &= -h_m \frac{\varrho(v\tilde{\Omega}^2 - h_{z'0}) \cos \phi_0 + \tilde{\Omega} \sin \phi_0}{\tilde{\Omega}^2 + (v\tilde{\Omega}^2 - h_{z'0})^2}.
 \end{aligned}
 \tag{1.72}$$

Нарешті, після підстановки виразів (1.71) та (1.72) у вираз для потужності втрат (1.46) з подальшим інтегруванням останнього, фінальний вираз для потужності втрат можна записати як

$$q = \frac{\tilde{\Omega}^2 h_m^2 D}{2[\tilde{\Omega}^2 + (v\tilde{\Omega}^2 - h_{z'0})^2]},
 \tag{1.73}$$

де

$$D = \cos^2 \theta_0 (\cos^2 \phi_0 + \varrho^2 \sin^2 \phi_0) + \varrho^2 \cos^2 \phi_0 + \sin^2 \phi_0
 \tag{1.74}$$

є параметром, який визначається початковим положенням магнітного моменту. Проаналізуємо вираз (1.73). 1) У випадку, коли прикладене циркулярно-поляризоване поле, вираз для параметр набуває вигляду  $D = 1 + \cos^2 \theta_0$  ( $1 \leq D \leq 2$ ). В той самий час для лінійно-поляризованого поля  $D = \cos^2 \phi_0 (\cos^2 \theta_0 - 1) + 1$  ( $0 \leq D \leq 1$ ). Таким чином, циркулярно-поляризоване поле є, як мінімум, вдвічі ефективнішим з точки зору енергії, яка поглинається порівняно з лінійно-поляризованим полем за умови, що  $\tilde{\Omega} \gg h_m$ . 2) Коли  $h_{z'0} = 0$ , осциляції відбуваються навколо початкового положення, тому потужність втрат визначається в тому числі величиною  $\theta_0$ . 3) Коли виконується умова  $h_{z'0} \gg \tilde{\Omega}$ , потужність втрат залежить від величини постійного поля, а також амплітуди та частоти змінного поля: асимптотичні вирази мають вигляд  $q \sim \tilde{\Omega}^2 h_m^2 / h_{z'0}^2$ . 4) В іншому випадку, для малих значень постійного поля  $h_{z'0} \ll \tilde{\Omega}$ , асимптотики мають вигляд  $q \sim h_m^2$  що означає, що потужність залежить лише від параметрів змінного поля. Отанні відомості дають додаткову можливість керування величиною потужності втрат постійним полем  $h_{z'0}$  у широкому діапазоні частот (див. рисунок 1.6). 5) Нарешті, якщо частинка достатньо мала, або якщо частота достатньо велика ( $\tilde{\Omega} \gg 1/v$ ), то асимптотичне значення потужності втрат має вигляд  $q \sim h_m^2 / (v^2 \tilde{\Omega}^4)$ . Таким чином, ефекти, що зумовлені інертними властивостями наночастинки мають місце коли виконується умова  $\tilde{\Omega} > 1/v$  або має місце ще одне характерне значення частоти  $\Omega_I = \Omega_{cr}/v$ :  $\Omega_I \approx 3.83 \cdot 10^{10}$  Гц. для вже згаданих наночастинок магхеміту  $R = 20\text{nm}$  [80]). Дані оцінки близькі до наведених раніше у роботі [41]. Таким чином, якщо виконується умова  $\Omega \ll \Omega_I$ , інерційним доданком в рівняннях руху (1.2) можна знехтувати і послуговуватися спрощеним рівнянням

$$\dot{\mathbf{m}} = \frac{\tau_r}{\tau_0^2} \boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{h}), \quad (1.75)$$

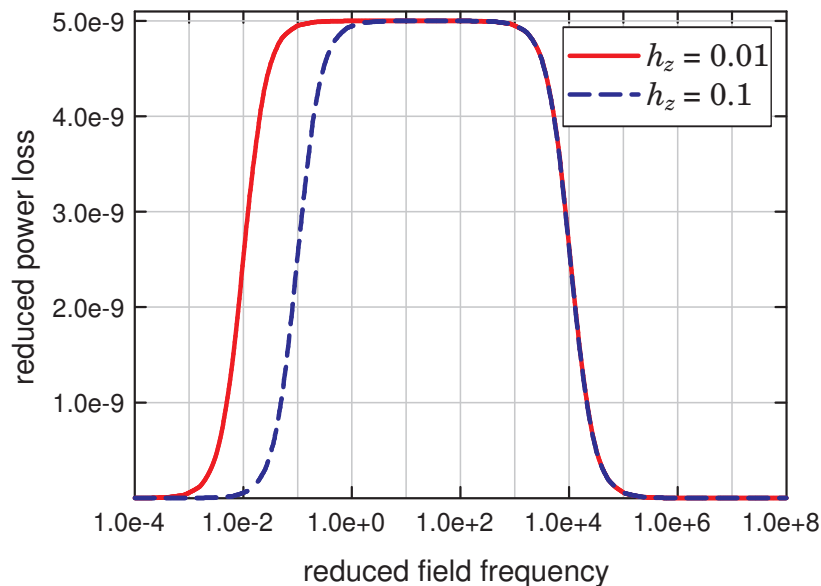


Рисунок 1.6 – Результати: Потужність втрат для високочастотного наближення, отримано за допомогою виразу (1.73). На частинку діє циркулярно-поляризоване поле виду (1.52). Значення параметрів системи вибрані такими, що відповідають магхеміту магхеміту [80] з наступними параметрами: середній радіус  $R = 20\text{nm}$ , намагніченість  $M = 4.25 \cdot 10^3$  Гс,  $\eta = 5 \cdot 10^{-2}$  П,  $\varrho = 1$ ,  $h = 0.05$ ,  $\theta_0 = 0.01$ . Простежується можливість контролювати потужність  $q(\tilde{\Omega})$  сталим полем  $h_{z'0}$ .

або в сферичних координатах

$$\begin{aligned}\dot{\theta} &= \cos \theta (h_x \cos \phi + h_y \sin \phi) - h_{z'0} \sin \theta, \\ \dot{\phi} &= \frac{1}{\sin \theta} (h_y \cos \phi - h_x \sin \phi).\end{aligned}\tag{1.76}$$

#### 1.3.4 Чисельні результати детерміністичного наближення: загальний випадок

Для підтвердження аналітичних результатів, отриманих вище, опишемо поведінку потужність втрат у всьому діапазоні параметрів, ата візуалізуємо дані за допомогою чисельного моделювання. Така процедура здійснюється за допомогою рівняння (1.15) та метода Рунге-Кутти 4-го порядку. Проаналізуємо спочатку випадок дії циркулярно-поляризованого поля, див. вираз (1.52),  $\varrho = 1$ . Як можна побачити з аналітичних результатів, отриманих вище, за умови  $h_m > \tilde{\Omega}$ , частинка здійснює однорідну прецесію і весь внесок у потужність втрат відбувається



завдяки лише обертальному руху. Обертання відбувається з частотою поля, тому втрати визначаються кінетичною енергією частинки. Тому легко зрозуміти, що у цьому випадку  $q \sim \tilde{\Omega}^2$ , що й підтверджується чисельно. Якщо ж  $h_m \ll \tilde{\Omega}$ , мають місце обертальні коливання, що відбуваються, знову ж таки, з частотою зовнішнього поля, однак їх амплітуда зменшується прямопропорційно до частоти. Саме тому у зазначеному випадку величина  $q$  практично не залежить від  $\tilde{\Omega}$ . Цей факт також підтверджено чисельним моделюванням. У той самий час, коли  $h_m < \tilde{\Omega}$  та  $h_m \sim \tilde{\Omega}$ , динаміка стає більш складною. Це проявляється у генерації неоднорідного прецесійного режиму так само як і у випадку динаміки магнітного моменту в нерухомій наночастинки з одноосьовою анізотропією [98, 100]. В цьому режимі кут  $\theta$  магнітного моменту змінюється періодично у часі, при цьому період таких змін не співпадає з періодом зовнішнього поля. Подібні осциляції демонструє кут  $\phi$  разом із лінійним зростанням у часі. Цей тип руху характеризується меншою миттєвою кутовою швидкістю наночастинки, що призводить до зменшення втрат потужності. Воно виражається в значному зменшенні на залежності  $q(\tilde{\Omega})$  для фіксованої амплітуди  $h_m$ , коли частота досягає значення  $\Omega_{cr}$ . Результати чисельних обчислень подані у формі "тривимірний водоспад" показані на рисунку 1.7.

Тобто, на противагу випадку наночастинка жорстко зафіксована в твердій матриці, частотна залежність потужності втрат  $q(\tilde{\Omega})$  не демонструє резонансний характер та має ненульове асимптотичне значення потужності для великих частот. Даний факт може бути поясненим у наступний спосіб. Якщо зростає частота поля, середня кутова швидкість наночастинки прямує до нуля, і частинка лише коливається навколо початкового положення. Частота таких коливань визначається лінійним наближенням та прямує до частоти поля  $\tilde{\Omega}$ . При цьому амплітуда поля у відповідності до виразів (1.72), на противагу, зростає лінійно з частотою. Обидві зазначені тренди компенсують один одного, в результаті чого  $q$  прямує до величини, знайденої у лінійному наближенні (1.73), яке не залежить від частоти (див. Рис. 1.7).

Іншою особливістю неоднорідного режиму є залежність траєкторії

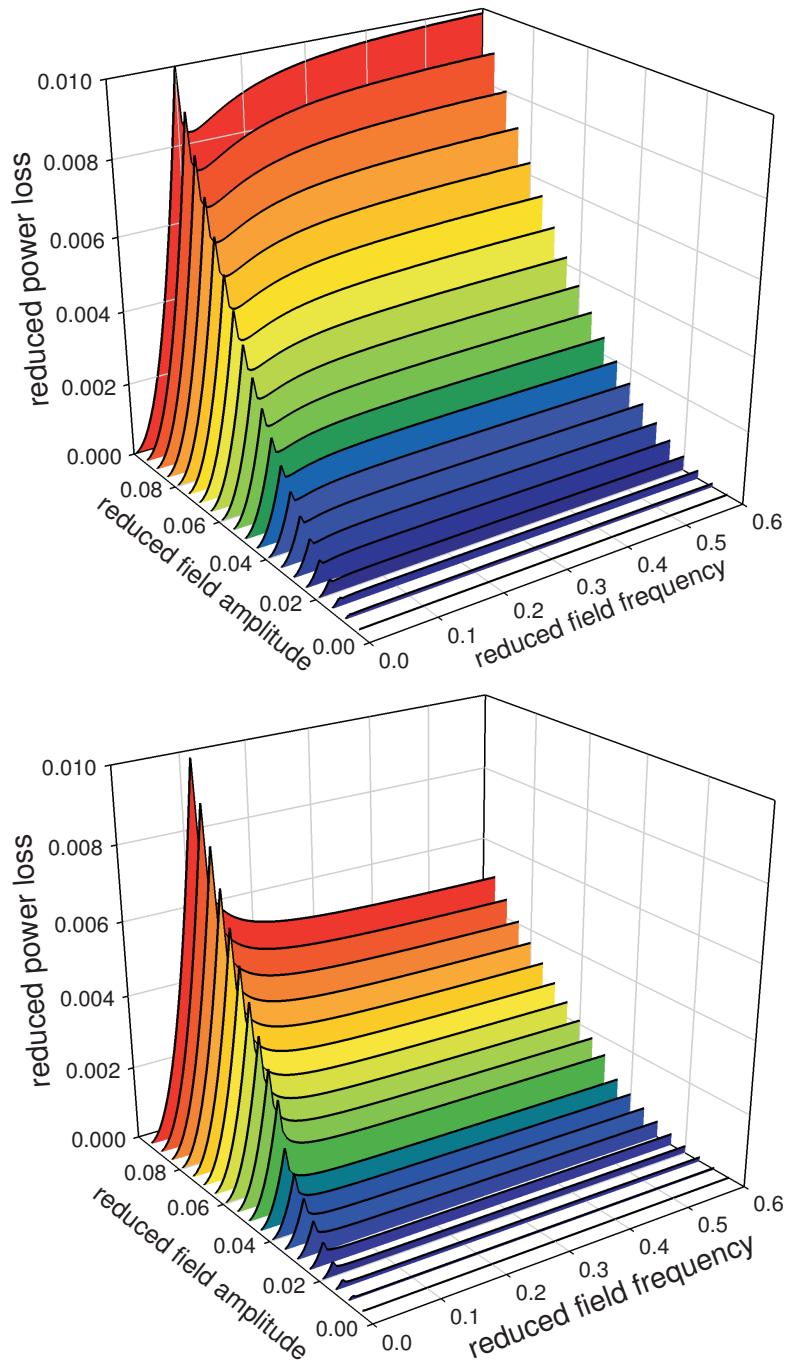


Рисунок 1.7 – Результати чисельного знаходження потужності втрат для різних початкових умов:  $\theta_0 = 0.01$  (а),  $\theta_0 = \pi/2 - 0.01$  (б). Прикладено циркулярно-поляризоване поле (1.52). Значення параметрів системи вибрані такими, що відповідають магхеміту магхеміту [80] з наступними параметрами: середній радіус  $R = 20\text{nm}$ , намагніченість  $M = 4.25 \cdot 10^3$  Гс,  $\eta = 5 \cdot 10^{-2}$  П,  $\varrho = 1$ . Спостерігається насичений характер частотних залежностей потужності втрат та зменшення величини  $q(\Omega)$  завдяки генерації неоднорідної прецесії.

від початкових умов  $\mathbf{m}$ . Цей факт викликаний відсутністю будь-яких локальних мінімумів, які можуть захопити магнітний момент, коли зовнішнє поле вимикається. Така різниця призводить до залежності втрат потужності  $q$  від  $\theta_0$ , аналогічно до випадку великих частот. Асимптотичні значення визначаються виразом ні значення визначаються виразом (1.73), що підтверджується чисельним моделюванням. Тут і далі розглядаються дві граничні ситуації  $\theta_0 \rightarrow \pi/2$ , і  $\theta_0 \rightarrow 0$ . Особливої уваги заслуговує перший випадок. Тут справедливості рівняння (1.56) обґрунтовується чисельно: лише кут  $\phi$  змінюється в часі, в той час як  $\theta$  залишається незмінним і дорівнює  $\theta_0 = \pi/2$ .

Вплив статичного поля на динаміку магнітного моменту полягає, по-перше, у частковому закріпленні  $\mathbf{m}$  вздовж напрямку статичного поля  $\mathbf{h}_0$ . Таке закріплення призводить до зменшення рухливості магнітного моменту і його реакції на змінне поле. Очевидно, що зміни у значенні  $q$  визначатимуться напрямком статичного поля відносно змінного. Слід зазначити, що оскільки статичне поле встановлює нову так звану "точку тяжіння" для магнітного моменту  $\mathbf{m}$ , залежність траєкторій від початкового положення магнітного моменту, коли умова  $h_m < \tilde{\Omega}$  порушується. Вищевикладене дає можливість зменшити втрати потужності, або, навпаки, посилити її за допомогою статичного поля. Розглянемо найпростіші та найбільш показові ситуації: статичне поле лежить в площині поляризації ( $\mathbf{h}_0 = (h_{x0}, 0, 0)$ ) і перпендикулярно до нього ( $\mathbf{h}_0 = (0, 0, h_{z0})$ ). Також ми припускаємо, що перед тим, як прикласти статичне поле  $\mathbf{h}_0$  встановлюються стабільні режими прецесії  $\mathbf{m}$  для початкових умов  $\theta_0 \rightarrow \pi/2$  або  $\theta_0 \rightarrow 0$ . Таким чином, можливі наступні випадки (див. Рис. 1.8).

1)  $\theta_0 \rightarrow \pi/2$ ,  $\mathbf{h}_0 = (0, 0, h_{z0})$ . Якщо  $h_{z0} \ll h$ , статичне поле доволі слабо впливає на потужність втрат  $q$  якщо  $\mathbf{m}$  здійснює однорідну прецесію (за умови  $\tilde{\Omega} < h_m$ ). Та в той самий час, завдяки пригніченню неоднорідного режима для більших частот ( $\tilde{\Omega} > h_m$ ), статичним полем  $\mathbf{h}_0 = (0, 0, h_{z0})$  спостерігається зростання  $q$  (на рисунку 1.8 це видно завдяки співвідношенню синьої суцільної та червоної штрихованої ліній). Цей ефект вартий спеціальної уваги, однак він руйнується при достатньо

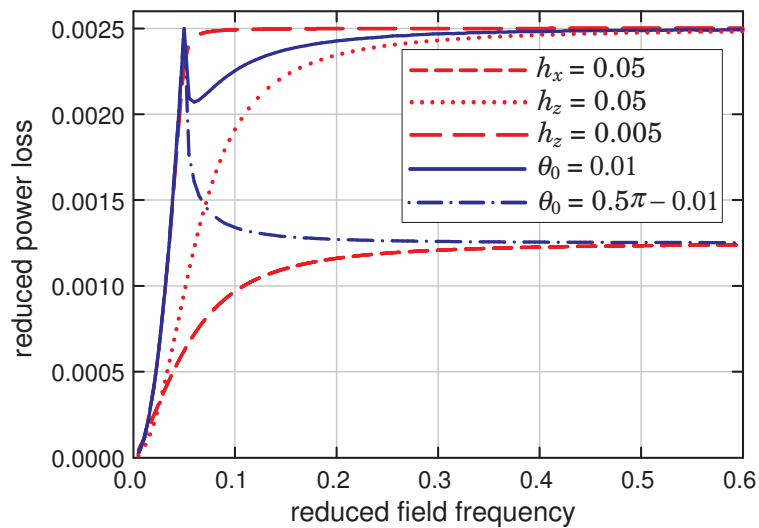


Рисунок 1.8 – Порівняння чисельних результатів для втрат потужності, отриманих для різних початкових умов і додаткових статичних полів. Прикладено циркулярно-поляризоване поле (1.52). Значення параметрів системи вибрані такими, що відповідають магхеміту [80] з наступними параметрами: середній радіус  $R = 20$  нм, намагніченість  $M = 4.25 \cdot 10^3$  Гс,  $\eta = 5 \cdot 10^{-2}$  П,  $h = 0.05$ ,  $\varrho = 1$ . Криві, отримані для стабільних режимів при відсутності статичного поля, показані синім кольором. Криві, отримані після прикладання статичного поля (нечутливі до початкових умов), показані червоним кольором. Результати свідчать про можливість контролю швидкості нагрівання за допомогою статичного поля.

великих значеннях статичних полів ( $h_{z0} \sim h_m$ ) через те, що магнітний момент  $\mathbf{m}$  блокується взагалі статичним полем (див. співвідношення синьої суцільної та червоної точкової лінії на рисунку 1.8).

2)  $\theta_0 \rightarrow \pi/2$ ,  $\mathbf{h}_0 = (h_{x0}, 0, 0)$ . If  $h_{x0} < h_m$ , статичне поле  $\mathbf{h}_0$  не впливає суттєво на потужність втрат, оскільки воно здатно як прискорювати, так і гальмувати магнітний момент  $\mathbf{m}$  залежно від фази змінного поля  $\mathbf{h}(t)$ . В результаті, ці два ефекти (прискорення та уповільнення) компенсують один одного. Однак коли  $h_{x0} \geq h_m$ ,  $\mathbf{m}$  завжди коливається навколо постійного поля  $\mathbf{h}_0$  у площині  $xoy$  замість того, щоб обертатися, що призводить до зменшення  $q$  для усього діапазону частот: див. співвідношення синьої штрих-пунктирної та червоної короткоштрихованої лінії на рисунку 1.8.

3)  $\theta_0 \rightarrow 0$ ,  $\mathbf{h}_0 = (h_{x0}, 0, 0)$ . Головний ефект від статичного поля  $\mathbf{h}_0 = (h_{x0}, 0, 0)$  полягає у зменшенні кількостей ступенів вільності для магнітного моменту  $\mathbf{m}$ . Коли прикладене поле типу  $h_{x0}$  лише азимутальний кут  $\phi$  змінюється, що зумовлює зменшення кутової швидкості обертання наночастинки та, як наслідок, потужності втрат. Це особливо виражено коли  $h_{x0} > h_m$  порівняно з випадком відсутності статичного поля, коли  $\mathbf{m}$  початково спрямований перпендикулярно до площини поляризації змінного поля. Можне спостерігати відповідні залежності потужностей втрат  $q(\tilde{\Omega})$  різняться в багато разів якщо  $\tilde{\Omega} \sim h_m$  та в два рази and для великих значень частоти ( $\tilde{\Omega} \gg h_m$ ), дивись різницю між синьою суцільною та червоною дрібноштрихованою кривими на рисунку 1.8.

4)  $\theta_0 \rightarrow 0$ ,  $\mathbf{h}_0 = (0, 0, h_{z0})$ . Дана ситуація характеризується збільшенням потужності втрат за допомогою статичного поля незалежно від його значення у випадку, коли  $\tilde{\Omega} \gg h_m$ . У іншому випадку, коли  $\tilde{\Omega} < h_m$ , достатньо слабе постійне поле ( $h_{z0} < h_m$ ) не впливає на величину потужності втрат (див. синю штрих-пунктирну лінію та червону довогштриховану лінію на рисунку 1.8). Якщо  $h_{z0} > h_m$ , статичне поле зменшує  $q$ , див. синю штрих-пунктирну та червону точкову лінії на рисунку 1.8.

Розглянемо тепер результати дії лінійно-поляризованого поля. Для кращої порівнянності отриманих результатів визначимо лінійно

поляризоване поле за допомогою виразу (1.52), коли  $\varrho = 0$ . Результати моделювання показані у стилі "тривимірний водоспад" показані на рисунку ???. По-перше, тут залежність від початкових умов має місце для всіх параметрів змінного поля, тоді як у попередньому випадку режим однорідної прецесії до них не чутливий. Крім того, лінійна поляризація змінного поля призводить до додаткової залежності від початкового азимутального кута  $\phi_0$ . Але, насправді, цей факт не носить ніяких нових ефектів, і далі ми завжди будемо вважати що  $\phi_0 = 0$ . Коли зовнішнє поле коливається вздовж напрямку, що перпендикулярний початковому положенню  $\mathbf{m}$ , або  $\theta_0 \rightarrow 0$ , потужність втрат зростає монотонно впритул до значень, що відповідають заданим виразом (1.73). В зворотному випадку коли,  $\theta_0 \rightarrow \pi/2$ , змінне поле прикладене вздовж початкового положення магнітного моменту, залежність  $q(\tilde{\Omega})$  є унімодалною, і умова  $q \rightarrow 0$  зберігається для достатньо великих частот  $\tilde{\Omega}$ . Це може бути пояснене занадто малим значенням крутного моменту, що діє на магнітний момент в початковому стані якщо змінне поле має вигляд  $\mathbf{h}(\tilde{t}) = \mathbf{e}_x h_m \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t})$ . Таким чином, наночастинка зберігає початкове положення і не реагує на змінне поле.

Вплив статичного поля на втрати потужності тут також сильно залежить від напрямку цього поля відносно початкового положення магнітного моменту і лінійно поляризованого поля. Випадки збігу вихідних положень і статичних полів ( $\theta_0 \rightarrow 0$ ,  $\mathbf{h}_0 = (0, 0, h_{z0})$  and  $\theta_0 \rightarrow \pi/2$ ,  $\mathbf{h}_0 = (h_{x0}, 0, 0)$ ) показані на рисунку 1.10. Можна бачити, що статичне поле зменшує втрати потужності тут, тому що пригнічує відгук  $\mathbf{m}$  на поле  $\mathbf{h}(\tilde{t}) = \mathbf{e}_x h \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t})$  (дивись положення штрих-пунктирної синьої лінії відносно червоної короткоштрихованої лінії та положення синьої суцільної лінії відносно червоної довгоштрихованої лінії на рисунку 1.10). Збільшення величини  $q$  через статичне поле можливе для не дуже малих частот, коли початкова позиція  $\mathbf{m}$  близька до лінії дії поля  $\mathbf{h}$  ( $\theta_0 \rightarrow \pi/2$ ), але статичне поле намагається збільшити кут між ними (див. червону довго-штрихову і синю штрих-пунктирну лінії на рис. 1.10).

Тому, можна зробити висновок, що статичне поле може збільшувати втрати потужності, коли воно застосовується перпендикулярно до змінного

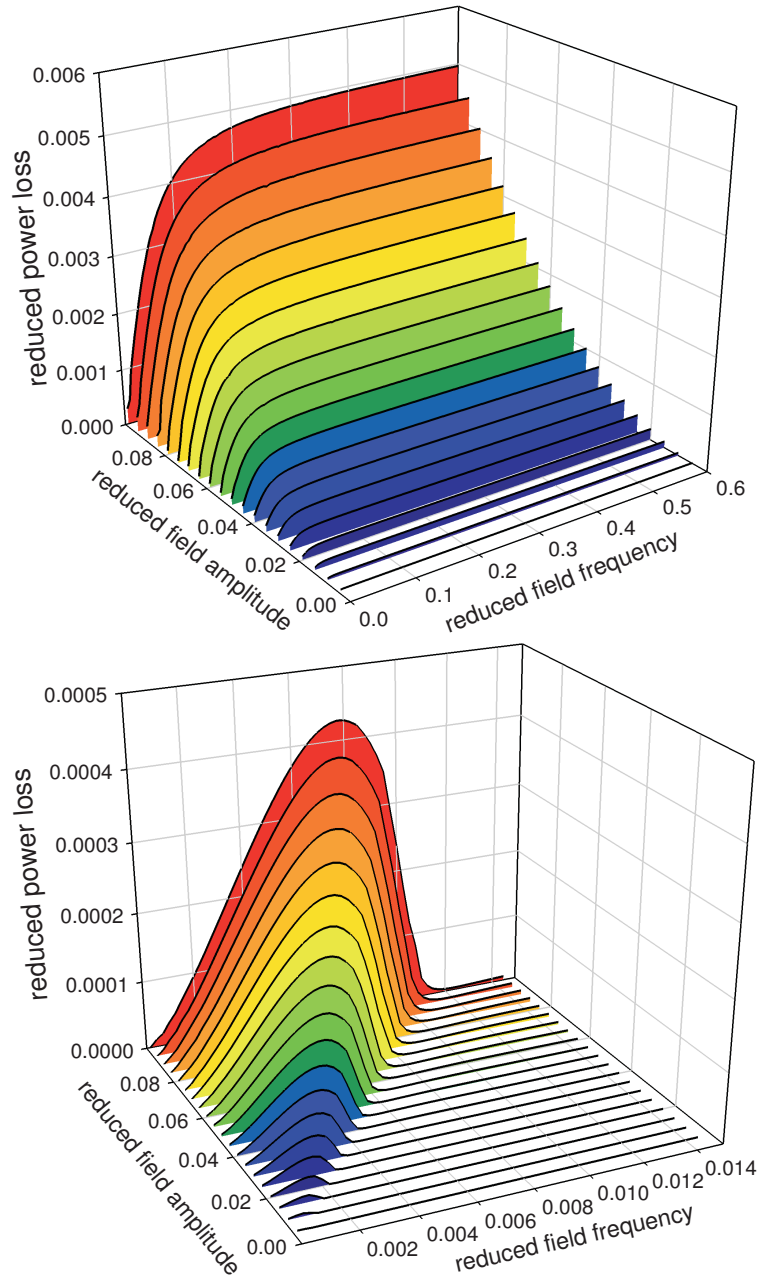


Рисунок 1.9 – Порівняння чисельних результатів для втрат потужності, отриманих для різних початкових умов і додаткових статичних полів.  $\theta_0 = 0.01$  (верхнє зображення),  $\theta_0 = \pi/2 - 0.01$  (нижнє зображення). Прикладено лінійно-поляризоване поле (1.52) ( $\varrho = 0$ ). Значення параметрів системи вибрані такими, що відповідають магхеміту магхеміту [80] з наступними параметрами: середній радіус  $R = 20$  нм, намагніченість  $M = 4.25 \cdot 10^3$  Гс,  $\eta = 5 \cdot 10^{-2}$  П,  $h_m = 0.05$ . Спостерігається сильна залежність від початкових умов магнітного моменту.

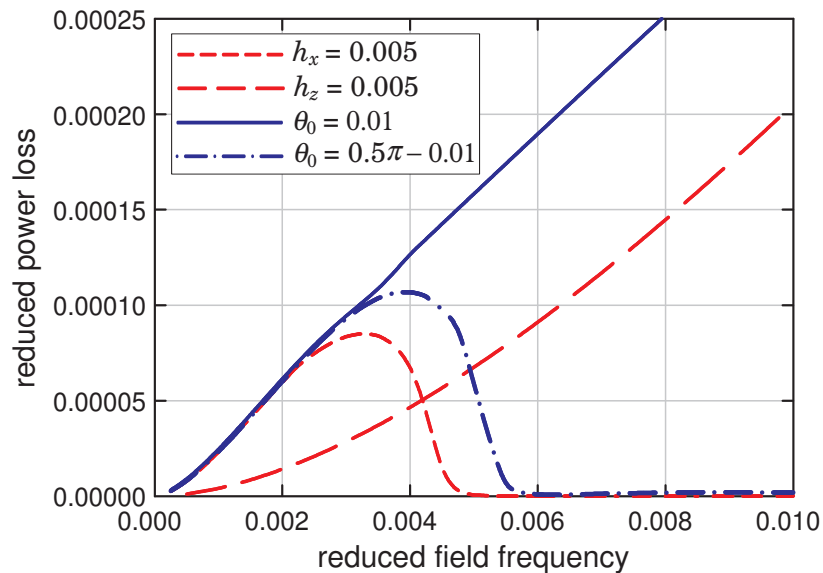


Рисунок 1.10 – Порівняння чисельних результатів для втрат потужності, отриманих для різних початкових умов і додаткових статичних полів. Прикладено лінійно-поляризоване поле (1.52) ( $\varrho = 0$ ). Значення параметрів системи вибрані такими, що відповідають магхеміту магхеміту [80] з наступними параметрами: середній радіус  $R = 20$  нм, намагніченість  $M = 4.25 \cdot 10^3$  Гс,  $\eta = 5 \cdot 10^{-2}$  П,  $h_m = 0.05$ . Результати свідчать про можливість контролю швидкості нагрівання за допомогою статичного поля.

поля. Цей факт дає нам ще одну можливість контролювати швидкість нагрівання.

Порівняння втрат потужності для різної поляризації поля показано на Рис. 1.11. Видно, що для малих частот лінійна поляризація продукує значно більші втрати потужності для тих же параметрів поля і початкових умов. Цей досить несподіваний результат можна пояснити наступним чином. Хоча циркулярно-поляризоване поле обертає магнітний момент наночастинки з частотою поля, лінійно поляризоване поле інвертує напрямок  $\mathbf{m}$  двічі протягом періоду поля. Швидкість останнього переорієнтаційного руху, по суті, визначається характерним часом реакції наночастинок у зовнішньому полі. У даному випадку він менший, ніж період поля. Таким чином, переорієнтація відбувається швидше, ніж змінюється поле, що призводить, відповідно, до більшого споживання енергії. Коли частота зростає, період поля стає меншим, ніж характерний час реакції наночастинок, і  $\mathbf{m}$  тепер не має достатньо часу на повну переорієнтацію і вищенаведення ефект зникає. Тому



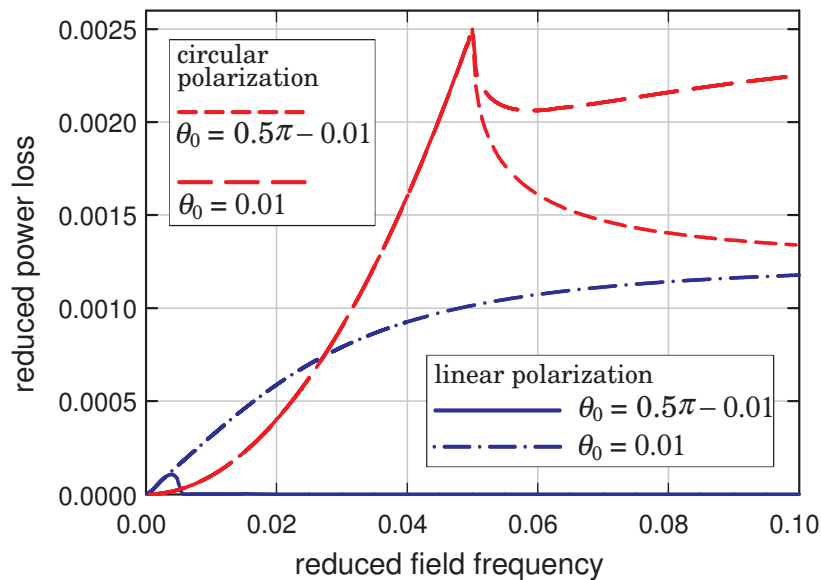


Рисунок 1.11 – Порівняння чисельних результатів для втрат потужності, отриманих для різних поляризацій змінного поля. Значення параметрів системи вибрані такими, що відповідають магхеміту магхеміту [80] з наступними параметрами: середній радіус  $R = 20$  нм, намагніченість  $M = 4.25 \cdot 10^3$  Гс,  $\eta = 5 \cdot 10^{-2}$  П,  $h_m = 0.05$ . Підтверджується перевага лінійно-поляризованого поля на малих частотах з точки зору потужності поглинання.

циркулярно поляризоване поле тут дає більші втрати енергії порівняно з лінійно поляризованим. В інших випадках для нагрівальних цілей перевага циркулярно поляризованого поля над лінійно поляризованою очевидна і впливає з наведеного вище аналізу.

#### 1.4 Вплив термостату на обертальну динаміку наночастинки

Очевидно, що теплові флуктуації розмивають обертальні траєкторії наночастинки і пригнічують її відгук на зовнішнє поле. Це є причиною падіння втрат потужності з температурою. І швидкість цього падіння викликає великий інтерес як з теоретичного, так і з практичного погляду. З цією метою пряме інтегрування рівнянь руху, які є стохастичними, тут не підходить. Тому аналітичні оцінки проводяться статистично, використовуючи функцію щільності ймовірності та формалізму рівняння Фоккера-Планка, див. рівняння (1.32). Через труднощі в точному інтегруванні рівняння (1.32) у випадку дії змінного періодичного поля,

його розв'язок часто шукають в різних наближеннях, таких як наближення ефективного поля [41], де форма розподілу відповідає розподілу в статичному полі або стаціонарний розв'язок в лінійному наближенні відносно доданків з  $\kappa\tilde{\Omega}$  [88]. Примітно, що у випадку дії лінійно-поляризованого поля (1.3b), рівняння Фоккера-Планка (1.32) можна знайти точно у вигляді рядів [45]. Тут ми підбиваємо підсумки всіх результатів у контексті проблеми втрат потужності та підтверджуємо їх чисельно, на базі виведених ефективних рівнянь (1.40).

#### 1.4.1 Аналітичні і чисельні результати стохастичного наближення: дія циркулярно-поляризованого поля

У випадку дії циркулярно поляризованого поля, наближений розв'язок рівняння Фоккера-Планка (1.32) заснований на синхронному (в середньому сенсі) обертанні  $\mathbf{m}$  разом з  $\mathbf{h}^{ext}$  [88]. Перехід від азимутального кута  $\phi$  до кута відставання  $\psi = \phi - \tilde{\Omega}\tilde{t}$  дозволяє нам подати стаціонарний розв'язок  $P_{st}$  рівняння Фоккера-Планка (1.32) як функцію двох змінних  $P_{st} = P_{st}(\theta, \psi)$ . Оскільки  $\partial P_{st}/\partial\tilde{t} = \tilde{\Omega}\partial P_{st}/\partial\psi$ , ми можемо знайти рівняння для стаціонарної щільності ймовірності  $P_{st}$  безпосередньо з (1.32)

$$\begin{aligned} & \tilde{\Omega}\frac{\partial P_{st}}{\partial\psi} + \\ & + \frac{\partial}{\partial\theta} \left[ h_m \cos\psi \cos\theta - h_z \sin\theta + \frac{\cot\theta}{\kappa} \right] P_{st} \\ & + \sin^2\theta \frac{\partial}{\partial\psi} h_m \sin\psi P_{st} - \frac{1}{\kappa} \frac{\partial^2 P_{st}}{\partial\theta^2} \\ & - \frac{1}{\kappa} \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 P_{st}}{\partial\psi^2} = 0. \end{aligned} \quad (1.77)$$

За умови, що  $\kappa\tilde{\Omega} \ll 1$ , стаціонарна щільність ймовірності  $P_{st}$  може бути подана в лінійному наближенні відносно до доданків пропорційних до  $\kappa\tilde{\Omega}$

$$P_{st} = (1 + \kappa\tilde{\Omega}F)P_0, \quad (1.78)$$

де

$$\begin{aligned}
 P_0 &= \frac{1}{Z} \sin \theta \exp [\kappa h_m (\sin \theta \cos \psi - h_z \cos \theta)], \\
 Z &= \int_0^\pi d\Theta \int_0^{2\pi} d\psi \sin \theta \exp [\kappa h_m (\sin \theta \cos \psi - h_z \cos \theta)].
 \end{aligned}
 \tag{1.79}$$

Надалі ми обмежимося випадком, коли  $h_z = 0$  і  $\kappa h_m \ll 1$ . Користуючись виразом (1.79) та (1.77), легко показати, що з точністю до членів першого порядку щодо  $\kappa h_m$  невідома функція  $F$  визначається рівнянням

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 F}{\partial \psi^2} = -\kappa h_m \sin \theta \sin \psi.
 \tag{1.80}$$

Розв'язок цього рівняння досить простий

$$F = \frac{1}{2} \kappa h_m \sin \theta \sin \psi.
 \tag{1.81}$$

Враховуючи, що з квадратичною точністю щодо  $\kappa h_m$ , постійну нормалізації в рівнянні (1.79) можна записати як  $Z = 4\pi(1 + \kappa^2 h_m^2/6)$  і тоді

$$\begin{aligned}
 P_0 &= \frac{\sin \theta}{4\pi} \left[ 1 + \kappa h_m \sin \theta \cos \psi \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\kappa^2 h_m^2}{6} (1 - 3 \sin^2 \theta \cos^2 \psi) \right],
 \end{aligned}
 \tag{1.82}$$

з (1.78) можна легко отримати

$$\begin{aligned}
 P_{\text{st}} &= \frac{\sin \theta}{4\pi} \left[ 1 + \kappa h_m \sin \theta \cos \psi - \frac{\kappa^2 h_m^2}{6} (1 - 3 \sin^2 \theta \cos^2 \psi) \right] \\
 &\quad + \frac{1}{8\pi} \kappa^2 h_m \tilde{\Omega} \sin^2 \theta \sin \psi.
 \end{aligned}
 \tag{1.83}$$

Втрати потужності  $q$  у випадку дії циркулярно-поляризованого поля також отримуються прямою підстановкою виразу (1.83) у (1.49). Зрештою,

ми отримуємо наступну формулу

$$q = \frac{1}{6} h_m^2 \tilde{\Omega}^2 \kappa^2. \quad (1.84)$$

Головною особливістю останнього виразу є квадратична залежність від амплітуди  $h_m$ , що не характерно для випадку відсутності шуму, див. вираз (1.55). Тут уваги заслуговує квадратична залежність саме від параметру  $\kappa$  і означає, що втрати потужності залежать від температури як  $T^{-2}$ . Тут ми підкреслюємо, що (1.84) не застосовується для малих інтенсивностей теплового шуму, коли  $\kappa \gg 1$ .

Щоб перевірити наші аналітичні висновки та побачити область застосування отриманого результату, було виконано моделювання на основі чисельного інтегрування ефективних стохастичних рівнянь (1.40). Для верифікації нашого чисельного інструменту спочатку підрахуємо величину

$$\Sigma = \frac{8\pi}{\kappa^2 h_m^2} (P_{st} - P_0)|_{\Psi=\pi/2}. \quad (1.85)$$

Відповідно до рівняння (1.82), ця величина характеризує різницю між усталеним (коли  $\tilde{\Omega} \neq 0$ ) та рівноважним (коли  $\tilde{\Omega} = 0$ ) щільностями ймовірності  $\Psi = \pi/2$  та виражається як  $\Sigma = (\tilde{\Omega}/h_m) \sin^2 \Theta$ . Чисельні результати для  $\Sigma$  як функції кута  $\Theta$  одержані шляхом чисельного розв'язання рівнянь (1.40) для  $\tau_1 = 5.56 \times 10^{-7}$  с,  $\kappa = 8$ ,  $h_{z0} = 0$  та різних значень характеристик поля  $h_m$  and  $\tilde{\Omega}$ . Розв'язки цих рівнянь, або пари кутів  $\theta_n = \theta(\tilde{t}_n)$  and  $\psi_n = \psi(\tilde{t}_n)$ , визначаються для моментів часу  $\tilde{t}_n = 10^5 + n\Delta\tilde{t}$  (тут  $10^5$  – так званий час очікування, необхідний для завершення перехідних процесів та досягнення усталеного режиму),  $n = \overline{1, N}$ ,  $N = 10^{11}$  та  $\Delta\tilde{t} = 10^{-2}$ . Нарешті, чисельні значення щільності ймовірності  $P_{st}|_{\Psi=\pi/2}$  та  $P_0|_{\Psi=\pi/2}$  вираховуються як  $N_{\mathcal{M}}|_{\tilde{\Omega} \neq 0}/(\Delta\Theta\Delta\Psi N)$  та  $N_{\mathcal{M}}|_{\tilde{\Omega}=0}/(\Delta\Theta\Delta\Psi N)$ , відповідно. Тут,  $N_{\mathcal{M}}$  число пар (серед загальної кількості  $N$  пар), що задовольняють умовам  $\theta_n \in [\mathcal{M}\Delta\Theta - \Delta\Theta, \mathcal{M}\Delta\Theta]$  та  $\psi_n \in [\pi/2 - \Delta\Psi/2, \pi/2 + \Delta\Psi/2]$ , в яких параметр  $\mathcal{M}$ ,  $\Delta\Theta$  та  $\Delta\Psi$  вибрані як  $\mathcal{M} = \overline{1, 155}$  and  $\Delta\Theta = \Delta\Psi = \pi/155$  (також відзначимо що  $\sum_{\mathcal{M}} N_{\mathcal{M}} = N$ ).

Як показано на рисунку 1.12, результати моделювання  $\Theta$ -залежності

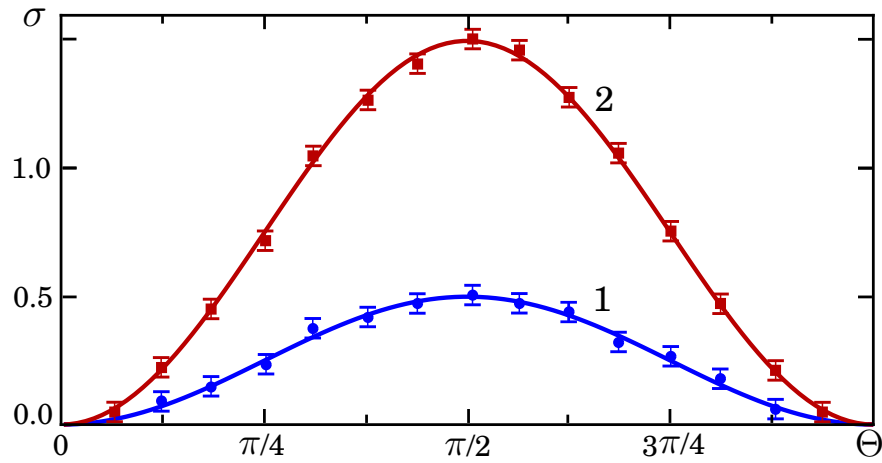


Рисунок 1.12 – Залежність  $\Sigma$  від  $\Theta$  для  $\tilde{\Omega}/h_m = 0.5$  (1) та  $\tilde{\Omega}/h_m = 1.5$  (2). Суцільна крива відповідає теоретичним результатам  $\Sigma = (\tilde{\Omega}/h_m) \sin^2 \Theta$  а маркери відповідають значенням  $\Sigma$ , знайденим чисельно. Останні отримані з використанням рівняння (1.40) для  $h_m = 2.5 \times 10^{-2}$ ,  $\tilde{\Omega} = 1.25 \times 10^{-2}$  (1) та  $\tilde{\Omega} = 3.75 \times 10^{-2}$  (2); інші параметри зазначені за текстом.

$\Sigma$  дуже добре узгоджуються з теоретичними прогнозами, що дозволяє зробити такі висновки. По-перше, розв'язок (1.82) рівняння Фокера-Планка (1.77) правильно описує довготривалу поведінку обертального руху наночастинок в в'язкій рідині. По-друге, оскільки різниця  $(P_{st} - P_0)|_{\Psi=\pi/2}$  має другий порядок точності відносно  $\kappa h_m$ , ефективні рівняння Ланжевена (1.40) можуть бути використані для прогнозування і дослідження більш "тонких" ефектів у обертальному русі. І по-третє, подання  $P_{st} = P_{st}(\Theta, \Psi)$ , що є ключовим припущенням нашого аналізу, виконується не тільки на  $\tilde{\Omega}/h_m < 1$  (як це очікується з розгляду детерміністичного наближення, коли тепловими флуктуаціями знехтувано), але й також коли  $\tilde{\Omega}/h_m \geq 1$ . Останнє означає, що можлива наявність неоднорідної прецесії не впливає на сталу щільність ймовірності  $P_{st}$ .

Чисельним розв'язанням рівняння (1.40) далі визначаються середні значення намагінченості наночастинок та середні значення її кутової швидкості,  $\langle \mu \rangle$  та  $\langle \chi \rangle$ . Обчислення проводились у такий спосіб:  $\langle \mu \rangle = (1/l) \sum_{i=1}^l \cos \theta_i$  та  $\langle \chi \rangle = 1 - (1/l) \sum_{i=1}^l \psi_i / (\tilde{\Omega} \tilde{t}_{sim})$ , де  $\theta_i = \theta_i(\tilde{t}_{sim})$  та  $\psi_i = \psi_i(\tilde{t}_{sim})$  значення кутових координат на  $i$ -му запуску,  $\tilde{t}_{sim}$  час моделювання, and  $l$  є кількістю запусків процедури чисельного

розрахунку. В даному випадку були обрані такі значення параметрів:  $\tilde{t}_{\text{sim}} = 10^6$  та  $l = 10^5$ ; інші ж параметри аналогічні, тим, що використовувалися під час одержання даних для рисунка 1.3. Тут важливо зазначити, що коли  $\tilde{t}_{\text{sim}}$  приймає достатньо великі значення, статистичні властивості кутів  $\theta_i$  та  $\psi_i$  не залежать від початкових умов.

Далі, з використанням аналогічного підходу було встановлено, що  $\langle \mu \rangle = 0$  для всіх скінчених значень параметра  $\kappa$ , який, нагадаємо, оберненопропорційний до температури. На перший погляд, цей результат не узгоджується з поведінкою  $\mu$  для детерміністичного наближення (коли  $\kappa = \infty$ ), див. Рис. 1.3, оскільки  $\langle \mu \rangle$  для великих значень  $\kappa$  мають прямувати до  $\mu$ . Та якщо  $\mu$  визначається чисельним способом для малих (але ненульових) значень зовнішнього сталого поля  $h_{z0}$  (або,  $h_{z0} = 10^{-3}$  на рисунку 1.3), то, з рештою,  $\langle \mu \rangle$  за  $\kappa \gg 1/h_{z0}$  й справді прямує до  $\mu$ . Однак, коли  $\mu$  є математично визначеною величиною за умови  $h_z \rightarrow 0$ , таке трактування безпідставне для будь-яких скінчених  $\kappa$ . Фактично, періодичний режим обертання наночастинки, який існує у наближенні нульової температури за умови  $h_{z0} = 0$  та  $\tilde{\Omega}/h_m \geq 1$ , руйнується:  $\lim_{h_{z0} \rightarrow 0^\pm} m_z = \pm \mu$ . Термічний крутний момент довільної потужності повністю руйнує цей режим, приводячи до того, що  $\langle \mu \rangle = 0$ .

Вплив теплового крутного моменту на середню кутову частоту обертання наночастинки, що збуджується зовнішнім циркулярно-поляризованим полем (за умови  $h_{z0} = 0$ ), проілюстровано на Рис. 1.13. Як видно, середня кутова частота  $\langle \chi \rangle$  сильно залежить від теплового крутного моменту (чим менше параметр  $\kappa$ , тим більше випадковий крутний момент) та виявляє досить виражену залежність від частоти зовнішнього поля  $\tilde{\Omega}$ . Оскільки виконується умова  $\langle \tilde{\mu}_{1,2}(\tilde{t}) \rangle = 0$ , див. рівняння (1.40), залежність  $\langle \chi \rangle$  від  $\kappa$  та  $\tilde{\Omega}$  є виключно нелінійним ефектом. Найбільш яскравим його проявом є те, що теплові флуктуації можуть збільшувати і зменшувати кутову частоту наночастинок порівняно з детермінованим випадком. Зокрема, якщо  $\tilde{\Omega}_c$  є розв'язком рівняння  $\epsilon = 0$  ( $\epsilon = \langle \chi \rangle|_{\kappa=\infty} - \langle \chi \rangle$ ) відносно  $\tilde{\Omega}$ , тоді теплові коливання зменшують частоту обертання ( $\epsilon > 0$ ) коли  $\tilde{\Omega} < \tilde{\Omega}_c$ , та збільшують їх ( $\epsilon < 0$ ) коли  $\tilde{\Omega} > \tilde{\Omega}_c$  (див. Рис. 1.14). Зазначимо, що  $\tilde{\Omega}_c$  зростає разом з тим як  $|\min \epsilon|$

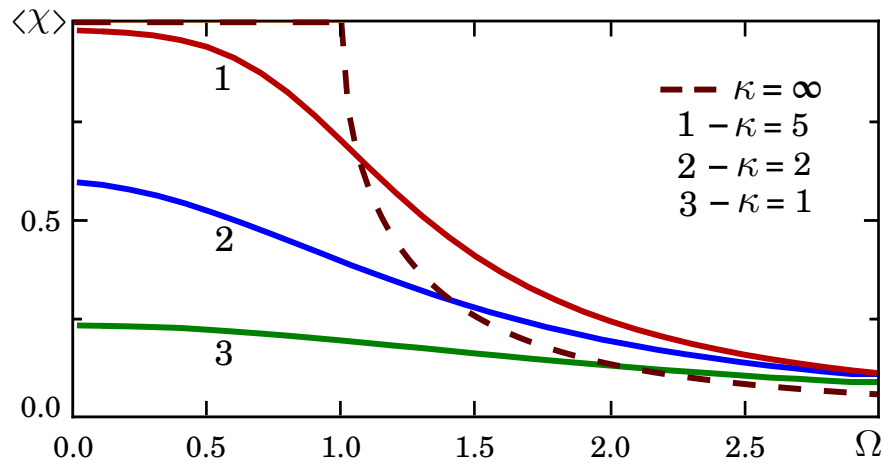


Рисунок 1.13 – Середнє значення безрозмірної кутової швидкості обертання наночастинки  $\langle \chi \rangle$ , як функція безрозмірної частоти  $\tilde{\Omega}$  якщо  $h_{z0} = 0$ ,  $h_m = 1$  та різних значень інтенсивності теплового шуму  $\kappa$ . Суцільні лінії отримані шляхом чисельного розв’язання стохастичних рівнянь (1.40), а штрихована лінія одержана прямим обчисленням відповідно виразу (1.61), що відповідає детерміністичному наближенню ( $\langle \chi \rangle|_{\kappa=\infty} = \chi$ ).

зменшується з зі зменшенням  $\kappa$ , та  $\epsilon$  прямує до нуля зі збільшенням частоти  $\tilde{\Omega}$ .

Далі, прямим чисельним розв’язком ефективних рівнянь Ланжевена (1.40), досліджуємо роль теплового випадкового обертального моменту в динаміці наночастинок для випадку  $h_{z0} \neq 0$ . Перш ніж приступити до аналізу теплових ефектів, нагадаємо, що в детерміністичному випадку стаціонарна динаміка наночастинок має прецесійний характер, що описується постійними кутом прецесії та кутом відставання (1.57). Як наслідок, в цьому випадку безрозмірна швидкість обертання  $\chi = 1$ , або можна казати, що частинка обертається з частотою зовнішнього поля, а  $z$ -компонента безрозмірного магнітного моменту задається виразом (1.58).

Оскільки рівняння (1.40) нелінійні, крутий момент від випадкових термічних сил суттєво впливають на осереднені характеристики прецесійного руху наночастинки. Зокрема, завдяки такій дії, середня кутова частота прецесії стає менше частоти зовнішнього магнітного поля, тобто,  $\langle \chi \rangle < 1$  для усіх скінчених значень  $\kappa$ . Більш того, чисельне моделювання показує, що  $\langle \chi \rangle$  є монотонною функцією, що зменшується від  $1/\kappa$ , з граничними значеннями  $\langle \chi \rangle|_{1/\kappa=0} = 1$  та  $\langle \chi \rangle|_{1/\kappa=\infty} = 0$ . Середня

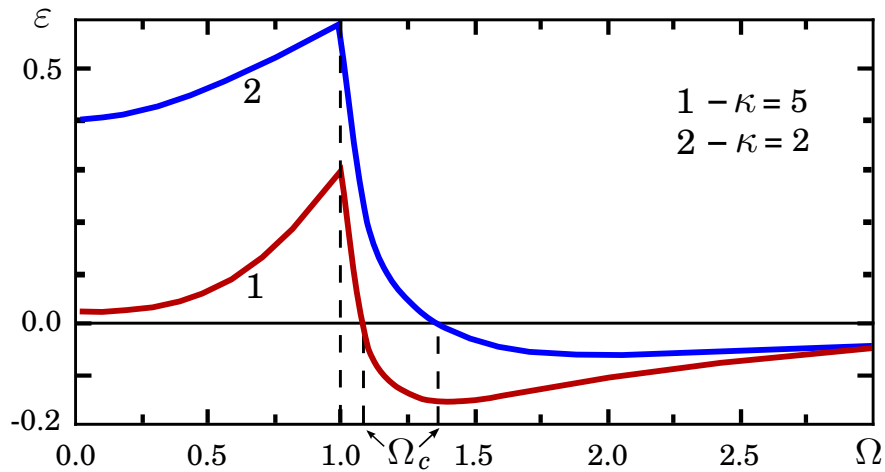


Рисунок 1.14 – Залежність різниці середньої швидкості обертання для заданої температури та середньої швидкості обертання для детерміністичного наближення  $\epsilon(\tilde{\Omega})$  для різних значень інтенсивності теплового шуму  $\kappa$ . Обрані параметри обчислень відповідають аналогам для Рис. 1.13.

частота обертання  $\langle \chi \rangle$  також монотонно зменшується зі збільшенням частоти  $\tilde{\Omega}$  (див. Рис. 1.15), та  $\langle \chi \rangle \rightarrow 0$  як  $\tilde{\Omega} \rightarrow \infty$  для усіх скінчених  $\kappa$ . Важливою особливістю цих залежностей є те, що вони зменшуються повільніше з ростом  $h_{z0}$ . Цей факт свідчить про існування характерної частоти  $\tilde{\Omega}_0$ , яка розділяє дві якісно різні поведінки  $\langle \chi \rangle$  як функції  $h_{z0}$ . Мається на увазі, що  $\tilde{\Omega} < \tilde{\Omega}_0$  та  $\langle \chi \rangle$  монотонно спадає зі збільшенням  $h_{z0}$ , та  $\langle \chi \rangle$  виявляє немонотонну залежність  $h_{z0}$  якщо  $\tilde{\Omega} > \tilde{\Omega}_0$ , як показано на Рис. 1.16. Важливо підкреслити, що всі ці варті особливої уваги властивості середньої частоти прецесії наночастинок виникають в результаті теплових флуктуацій на відміну від детерміністичного випадку, коли  $\langle \chi \rangle = 1$ .

Нарешті, залежність середнього значення безрозмірної намагніченості  $\langle m_z \rangle$  від  $\tilde{\Omega}$  та  $\kappa$  продемонстрована на Рис. 1.17. Як бачимо,  $\langle m_z \rangle$  прямує до значень, передбачених теоретично відповідно до виразу (1.58) зі зростанням  $\kappa$ , та  $\langle m_z \rangle$  практично не залежить від  $\tilde{\Omega}$  для відносно невеликих значень  $\kappa$ . Оскільки ліміт  $\tilde{\Omega} \rightarrow \infty$  відповідає відсутності поля, що обертається з виразу (1.28) можна отримати  $\langle m_z \rangle|_{\tilde{\Omega} \rightarrow \infty} = 2\pi \int_0^\pi \cos \theta P_0(\theta) d\theta = L(\kappa h_z)$ , де  $L(x) = \coth x - 1/x$  – відома функція Ланжевена. Зокрема, для кривих 1, 2 та 3 функція  $L(\kappa h_z)$  приблизно дорівнює 0.778, 0.438 and 0.099, відповідно.



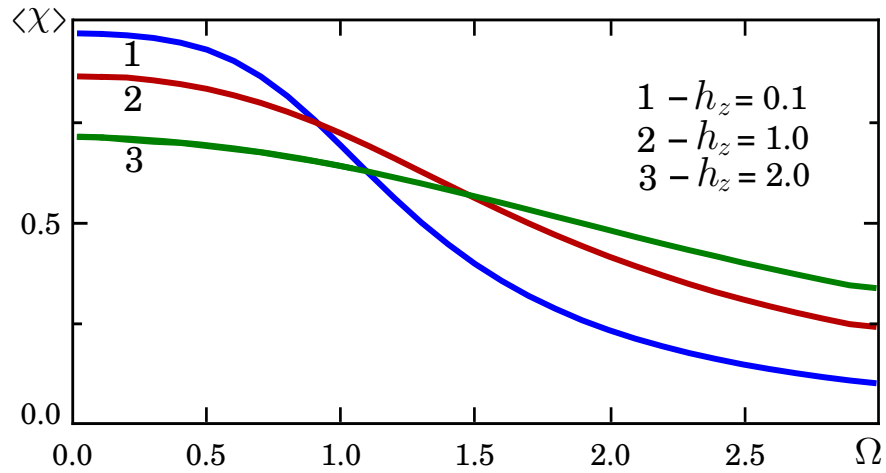


Рисунок 1.15 – Середнє значення безрозмірної кутової швидкості обертання наночастинки як функція безрозмірної частоти  $\tilde{\Omega}$  для  $h_m = 1$ ,  $\kappa = 5$  та різних значень параметру  $h_{z0}$ .

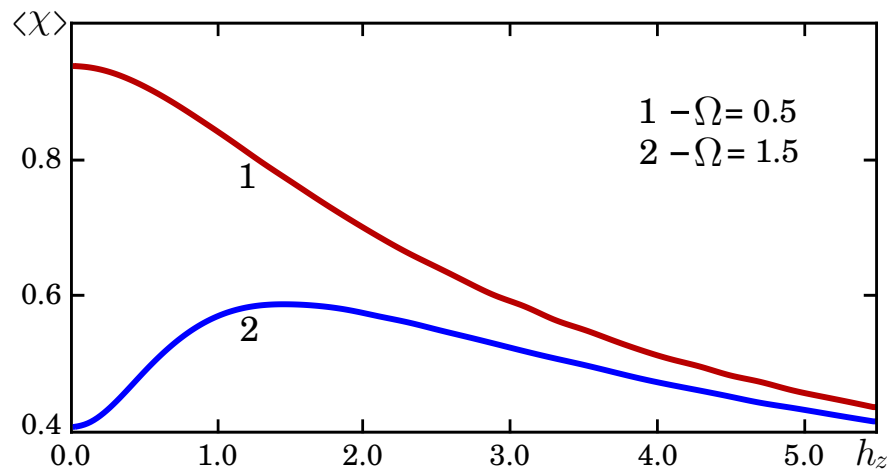


Рисунок 1.16 – Середнє значення безрозмірної кутової швидкості обертання наночастинки як функція зовнішнього постійного поля  $h_{z0}$  for  $h_m = 1$ ,  $\kappa = 5$  та двох значень частоти  $\tilde{\Omega}$ . Має місце характерна частота  $\tilde{\Omega}_0$  яка розділяє монотонний режим ( $\tilde{\Omega} < \tilde{\Omega}_0$ ) та немонотонний режим ( $\tilde{\Omega} > \tilde{\Omega}_0$ ) залежності  $\langle \chi \rangle$  від  $h_{z0}$ , яка для даних значень параметрів складає  $\tilde{\Omega}_0 = 0.78$ .

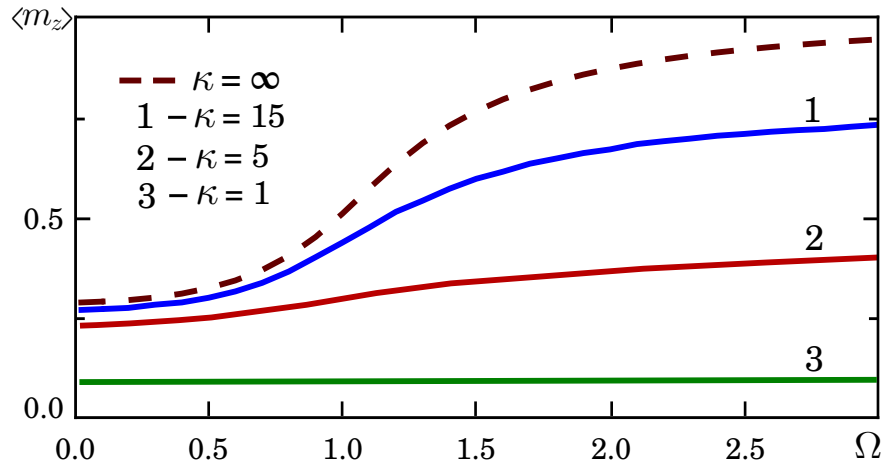


Рисунок 1.17 – Частотна залежність середньої намагніченості наночастинки для  $h_{z0} = 0.3$ ,  $h_m = 1$  та різних значень відношення магнітної та теплової енергій  $\kappa$ . Пунктирна крива репрезентує теоретичні результати (1.58) для детерміністичного випадку.

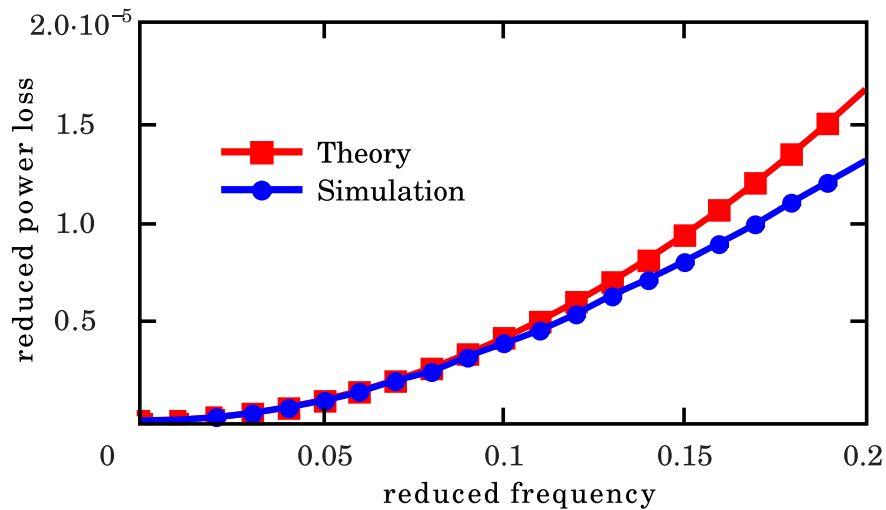


Рисунок 1.18 – Порівняння аналітичних та чисельних результатів під дією циркулярно поляризованого поля. Співвідношення між магнітною та тепловою енергією має значення  $\kappa = 5$ , амплітуда поля має значення  $h_m = 0.01$ . Теорія дає більші значення, і різниця збільшується з частотою.

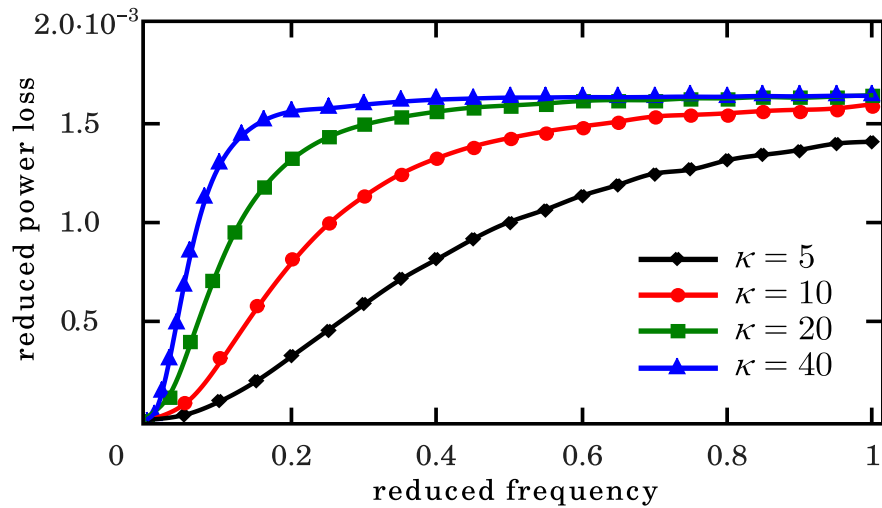


Рисунок 1.19 – Частотні залежності втрати потужності для різних значень співвідношення між магнітною та тепловою енергіями при дії циркулярно поляризованого поля. Амплітуди поля має значення  $h_m = 0.05$ . Поведінка подібна до випадку дії лінійно поляризованого поля (див. Рис. 1.22), але значення приблизно в два рази більші.

Далі, як ми можемо побачити з Рис. 1.18, аналітичні та чисельні результати добре корелюють для цікавих з практичної точки зору значень інтенсивностей шуму та параметрів зовнішнього поля. Таким чином, для  $\kappa = 5$  та  $h_m = 0.01$ , вираз для потужності (1.84) дає достовірні результати для частот поля до  $\tilde{\Omega} \sim 0.1$ . Вивчення втрат потужності у всьому прийнятному діапазоні параметрів може виконуватися лише чисельно. Як і слід було очікувати, коли відношення магнітної і теплової енергії  $\kappa$  зростає, втрати потужності прямують до граничних значень, які задаються детерміністичним наближенням. Як ми можемо побачити з Рис. 1.18, для малих частот різниця між значеннями втрат потужності зростає нелінійно від  $\kappa$ . Однак, ця різниця зменшується зі зростанням частоти  $\tilde{\Omega}$  і стає досить незначною вже для  $\tilde{\Omega} \sim 1$ . На високих частотах значення  $q$  прямують до константи, яка пропорційна до  $h_m$  в широкому діапазоні  $\kappa$ . Порівнюючи Рис. 1.19 та Рис. 1.22 можна зробити висновок, що залежності, отримані для циркулярно та лінійно поляризованих полів, якісно аналогічні. Відповідно до результатів у випадку відсутності шуму (??), асимптотичні значення на високих частотах для циркулярно поляризованого поля приблизно в два рази більше, ніж для лінійно поляризованого поля. Різниця в два рази актуальна практично для

всього діапазону частот, що є наслідком наявності термостату і не завжди характерно для випадку відсутності шуму. Інтегровані результати для різних значень  $\kappa$  та  $h_m$  проілюстровані на Рис. 1.20, де всі зазначені тенденції та особливості показані у однаковий спосіб. Як видно з Рис. 1.20a, для малих частот ( $\tilde{\Omega} = 0.05$  на рисунку) характер залежностей знаходиться в хорошому узгодженні з аналітичним виразом (1.84), де втрати потужності пропорційні  $\kappa^2$  та  $h_m^2$ . На противагу, як впливає з Рис. 1.20b, для великих частот ( $\tilde{\Omega} = 1$  на рисунку) залежність від  $\kappa$  стає слабкою, а нелінійне зростання від  $h_m$  залишається.

В якості попереднього підсумку, ми хочемо підкреслити наступне. Теплові коливання призводять до падіння втрат потужності, але за характером залежностей  $q(\tilde{\Omega})$  залишається подібним отриманої у детерміністичному наближенні. Різниця викликана тепловим шумом зменшується з частотою поля. Результати, подані для циркулярно-поляризованого поля якісно корелюють з результатами, отриманими в роботах [43, 44], в той час як для лінійно поляризованого поля ми ґрунтувались на обчисленнях, поданих у роботі [45]. Але ми провели наше дослідження всіх цих випадків в єдиній і методологічно однозначній манері, аналітична складова якої заснована на рівнянні Фоккера-Планка (1.32) та визначенні втрат потужності у вигляді (1.44). У свою чергу, ефективна форма рівняння Ланжевена (1.40) використовувалася для чисельного моделювання, що в результаті дало нам можливість простежити глибоке розуміння ролі теплових флуктуацій в поглинанні змінного поля наночастинкою, в наближенні жорсткого диполя.

#### 1.4.2 Аналітичні і чисельні результати стохастичного наближення: дія лінійно-поляризованого поля

По-перше, розглянемо випадок, коли зовнішнє поле коливається уздовж вісі  $z$ , див. рівняння (1.3b). З міркувань симетрії, ми припускаємо, що щільність ймовірності  $P$  залежить тільки від полярного кута  $\theta$  і не залежить від азимутального кута  $\phi$ . Потім, наслідуючи [45], подаємо щільність ймовірності як  $P$  у формі  $P = P(\theta, \tilde{t}) = \sin \theta f(\tilde{t})$

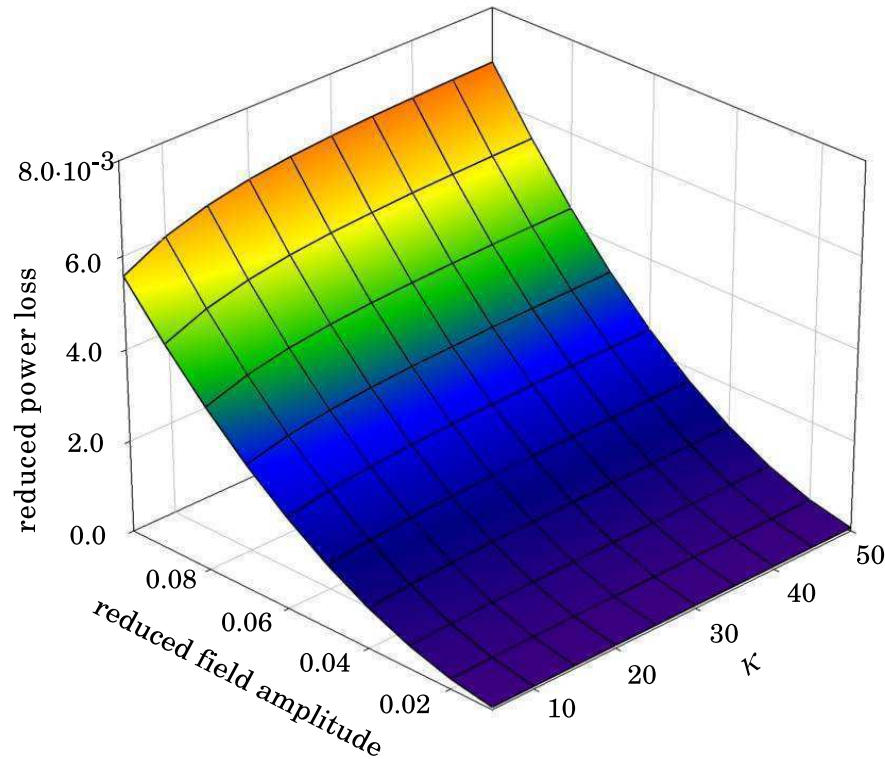
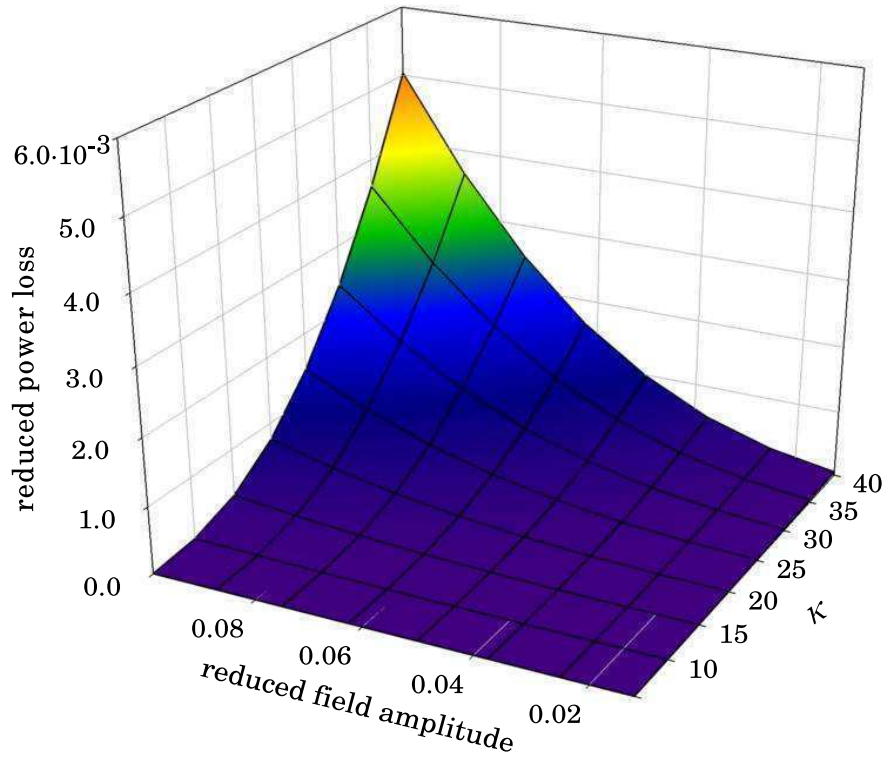


Рисунок 1.20 – Залежність втрат потужності від частоти поля та співвідношення магнітної та теплової енергій при дії циркулярно поляризованого поля. Частина а) демонструє сильне нелінійне зниження втрат потужності за обома параметрами, у випадку малої частоти (значення частоти поля обрано як  $\tilde{\Omega} = 0.05$ ). Частина б) демонструє слабку залежність втрат потужності від співвідношення між магнітною та тепловою енергіями, у випадку великих частот (значення частоти поля обрано як  $\tilde{\Omega} = 1$ )

що, в свою чергу, дозволяє спростити рівняння Фоккера-Планка (1.32) до вигляду

$$\frac{df}{d\tilde{t}} = \frac{1}{\kappa} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} + f \kappa h_m \sin^2 \theta \cos(\tilde{\Omega} \tilde{t}) \right) \right]. \quad (1.86)$$

Для спрощення подальших розрахунків використаємо позначення  $\cos \theta = x$  та перепишемо вираз (1.86)

$$\frac{df}{d\tilde{t}} = \frac{1}{\kappa} \frac{\partial}{\partial x} \left[ (1 - x^2) \frac{\partial f}{\partial x} - \kappa h_m \cot(\tilde{\Omega} \tilde{t}) (1 - x^2) f \right]. \quad (1.87)$$

Ми підкреслюємо, що рівняння (1.87) повністю збігається з відповідним виразом в [45]. Його розв'язок можна тримати шляхом розкладання на поліноми Лежандра та гармоніки

$$\begin{aligned} f &= \\ &= \frac{1}{2} + \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[ \sum_{n=0}^{\infty} A_{\ell n} \cos(n\tilde{\Omega} \tilde{t}) + \sum_{n=0}^{\infty} B_{\ell n} \sin(n\tilde{\Omega} \tilde{t}) \right] \mathcal{P}_{\ell}(x), \end{aligned} \quad (1.88)$$

де  $\mathcal{P}_{\ell}(x)$  - поліноми Лежандра,  $n, \ell$  - цілі числа. Пряма підстановка рівняння (1.88) в (1.87) дозволяє нам вивести алгебраїчну систему рівнянь, розв'язком якої є невідомі коефіцієнти  $A_{\ell n}, B_{\ell n}$

$$\begin{aligned} -n\tilde{\Omega} A_{\ell n} &= \\ &= \frac{1}{\kappa} \left[ -\ell(\ell + 1) B_{\ell n} + \frac{\kappa h_m}{2} \left( \frac{\ell(\ell + 1)}{2\ell - 1} (B_{\ell-1, n-1} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + B_{\ell-1, n+1}) - \frac{\ell(\ell + 1)}{2\ell + 3} (B_{\ell+1, n-1} + B_{\ell+1, n+1}) \right) \right], \end{aligned} \quad (1.89)$$

$$\begin{aligned}
n\tilde{\Omega}B_{\ell n} = & \frac{1}{\kappa} \left[ -\ell(\ell+1)A_{\ell n} + \right. \\
& + \frac{\kappa h_m}{2} \left( \frac{\ell(\ell+1)}{2\ell-1} ((1+\delta_{n\ell})A_{\ell-1,n-1} + A_{\ell-1,n+1}) \right. \\
& \left. \left. - \frac{\ell(\ell+1)}{2\ell+3} ((1+\delta_{n\ell})A_{\ell+1,n-1} + A_{\ell+1,n+1}) \right) \right],
\end{aligned} \tag{1.90}$$

де  $n \geq 1$  або  $\ell \geq 1$ . Інші випадки визначаються наступним чином

$$A_{\ell 0} = \frac{\kappa h_m}{2} \left[ \frac{1}{2\ell-1} A_{\ell-1,1} - \frac{1}{2\ell+3} A_{\ell+1,1} \right] \tag{1.91}$$

для  $\ell \geq 1$ ,  $A_{00} = 0.5$ ,  $A_{0n} = 0$ ,  $B_{\ell 0} = 0$ ,  $B_{0n} = 0$ , і, нарешті,  $A_{\ell n} = 0$ ,  $B_{\ell n} = 0$ , коли  $\ell + n$  непарне.

Втрати потужності  $\tilde{\Omega}$  у випадку дії лінійно поляризованого поля легко отримати прямою підстановкою виразу (1.88) (з урахуванням, що  $P = P(\theta, \tilde{t}) = \sin \theta f(\tilde{t})$ ) до означення потужностей втрат у вигляді (1.49). Після виконання всіх процедур інтегрування, остаточний вираз має досить просту форму

$$q = \frac{1}{3} h_m \tilde{\Omega} B_{11}, \tag{1.92}$$

що корелює з детерміністичним аналогом. Вплив шуму прихований в параметрі  $B_{11}$ , який можна проаналізувати лише чисельно. Як видно з Рис. 1.21, залежність  $B_{11}(\kappa)$ , яка була отримана шляхом чисельного аналізу виразів (1.89)-(1.91), демонструє насичений характер на великих частотах. Для малих значень параметру  $\kappa$ , значення  $B_{11}$  швидко зростає на великих частотах, тоді як для великих  $\kappa$  ці тенденції змінюються на протилежні. Цей факт говорить про перевагу використання високочастотних полів при високих температурах. Нарешті,  $B_{11}(\kappa)$  зростає з амплітудою поля, особливо для великих  $\kappa$ . Таким чином, чутливість  $B_{11}$  до  $\kappa$  зростає з амплітудою та частотою поля  $h_m$  і  $\tilde{\Omega}$ .

Для підтвердження аналітичних висновків була проведена серія циклів симуляції на основі числового інтегрування (1.40). Як ми можемо побачити з Рис. 1.22, аналітичні та числові результати добре узгоджуються

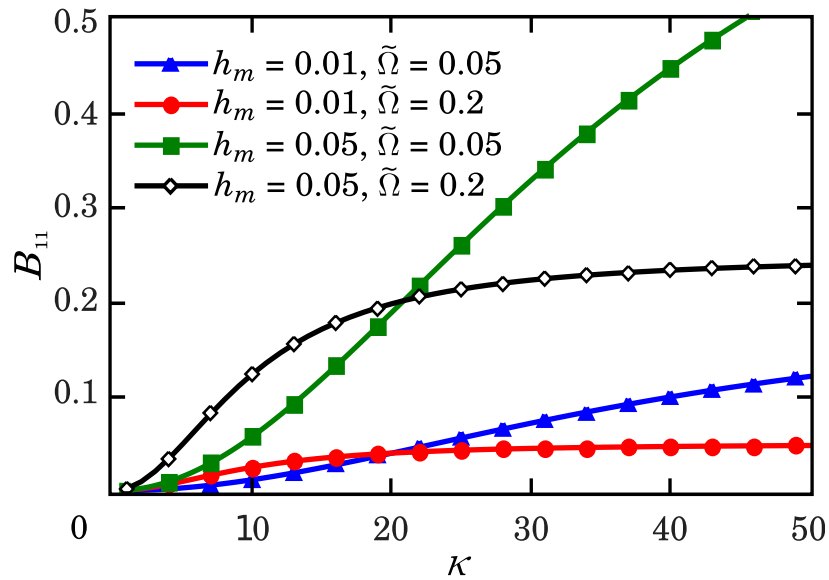


Рисунок 1.21 – Чисельно отримані залежності коефіцієнта  $B_{11}$  в Eqs. (1.90) від параметра  $\kappa$ , який представляє собою відношення між магнітною і тепловою енергією. Насичений характер і складна частотна поведінка у фокусі

в широкому діапазоні параметрів. Залежності якісно схожі з аналогами для детерміністичного наближення. а кількісна різниця зменшується з  $\kappa$ . Зрештою, ця різниця більш виражена для малих частот і зникає для великих  $\tilde{\Omega}$ .

### 1.5 Вплив взаємодії між частинками на потужність втрат: чисельне моделювання ансамблю

Взаємодія між частинками може істотно впливати на реакцію на зовнішнє поле, і урахування цієї взаємодії є важливим з огляду на практичні застосування феррорідин. Навіть для порівняно невеликих значень об'ємної концентрації частинок (наприклад, 1 %), внаслідок відштовхування, викликаного поверхнево-активним покриттям кожної частинки і далекодіючої дипольної взаємодії між частинками, поведінка кожної з них буде відрізнятися від результатів наближення однієї частинки, наведеного вище. Дипольна взаємодія намагається об'єднати частинки у кластери. Такі структури є надзвичайно небажаними для гіпертермії з точки зору подальшої метаболізації та виведення наночастинок після сеансу терапії. Щоб запобігти цій кластеризації, частинки



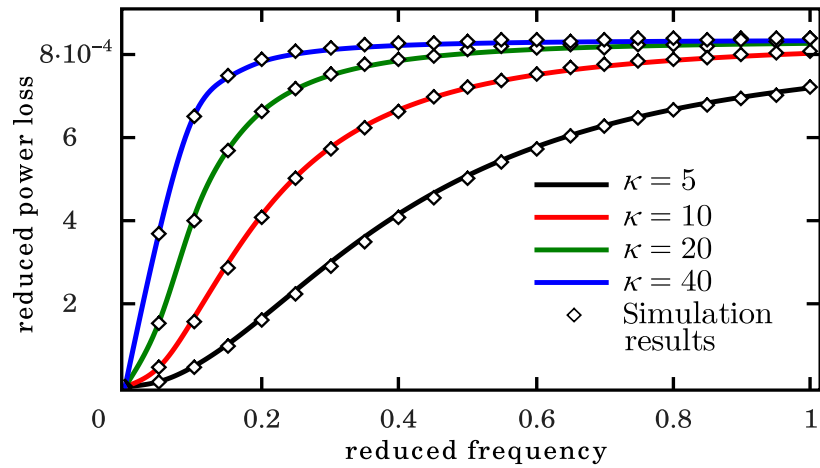


Рисунок 1.22 – Частотні залежності втрат потужності при різних значеннях відношення між магнітною та тепловою енергіями під час дії лінійно поляризованого поля. Амплітуди поля має значення  $h_m = 0.05$ . Чисельні та аналітичні прогнози добре узгоджуються між собою. Насичений характер поведінки і відповідність з результатами у випадку відсутності шуму, виділені

покриті поверхнево-активною речовиною, що забезпечує відштовхування. Конкуренція між вищезгаданими взаємодіями може змінити питомі втрати потужності кожної частинки в широкому діапазоні, що і є предметом розгляду цього розділу.

Взаємодія між частинками, за великим рахунком, збільшує магнітну енергію, і у цього факту є два наслідки. По-перше, регулярна компонента руху стає сильнішою через взаємодію, а стохастичний компонент, навпаки, пригнічується. На перший погляд, таке стримування може призвести до підвищення втрат потужності. По-друге, взаємодія фіксує магнітні моменти частинок, а відгук на зовнішнє поле стає більш слабким. Ця тенденція призводить, навпаки, до зменшення втрат потужності, що спостерігалось в останніх експериментах [26–31, 31–33]. Тим не менше, згадані експерименти не описують всі можливі ситуації та говорять про необхідність майбутніх експериментальних та чисельних досліджень.

Як зазначено вище, взаємодія призводить до утворення кластерів, коли сильні дипольні поля утримують кожну частинку, що перешкоджає подальшим поступальним і обертальним рухам. У той же час, кластери є джерелом декількох явищ, які суттєво змінюють значення втрат потужності. По-перше, кожна частка намагається зменшити свою енергію

і перейти до рівноважного або квазірівноважного стану, викликаного взаємодією. Зокрема, такі стани утворюються дипольним полем, яке намагається впорядкувати магнітні моменти частинок уздовж визначених напрямків. Через теплові коливання магнітний момент разом з частинкою може здійснювати перехід або перемикання між цими станами. Такі перемикання змінюють магнітну конфігурацію у кластерах і, навіть, призводять до їх часткових руйнувань. За певних обставин це може призвести до збільшення втрат потужності. По-друге, досить великі коливання можуть повністю дизасемблювати кластери, після чого відгук наночастинок на зовнішнє поле покращиться. Це також здатне збільшити втрати потужності, і ми інтерпретуємо це як конструктивну роль теплового шуму. Всі вищезгадані явища, включаючи вплив параметрів системи на їх умови виникнення були досліджені ретельно та детально. Найбільш цікавим є вплив об'ємної концентрації частинок, інтенсивності шуму та характеристика поверхнево-активних речовин на поведінку ансамбля, зокрема на потужність втрат.

Щоб пояснити згадані явища, розглянемо механізми формування кластерів детально. З позиції мінімальної магнітостатичної енергії, частинки повинні бути якнайближче одна до одної. Крім того, магнітний момент кожної частинки повинен бути спрямований вздовж результуючого дипольного поля, яке генерується іншими частинками. Оскільки магнітні силові лінії є замкнутими кривими, відбуваються дві тенденції. По-перше, магнітні моменти частинок намагаються бути вирівняні вздовж одного напрямку, і це призводить до формування ланцюжкового кластера. По-друге, фрагменти ланцюжка, як правило, розташовуються антипаралельно і притягують один одного, утворюючи антиферромагнітну структуру. Для запобігання такої агломерації кожна частинка покрита спеціальною поверхнево-активною речовиною, що забезпечує стеричне відштовхування. Змагання між притяганням диполя та стеричним відштовхуванням можуть призвести до зовсім різних результатів. Потрібно підкреслити, що оскільки величина намагніченості є важливою для методу гіпертермії, доцільно синтезувати частинки з більшою намагніченістю, наскільки це можливо. Як наслідок, інтенсивність дипольної взаємодії повинна збільшуватися, а

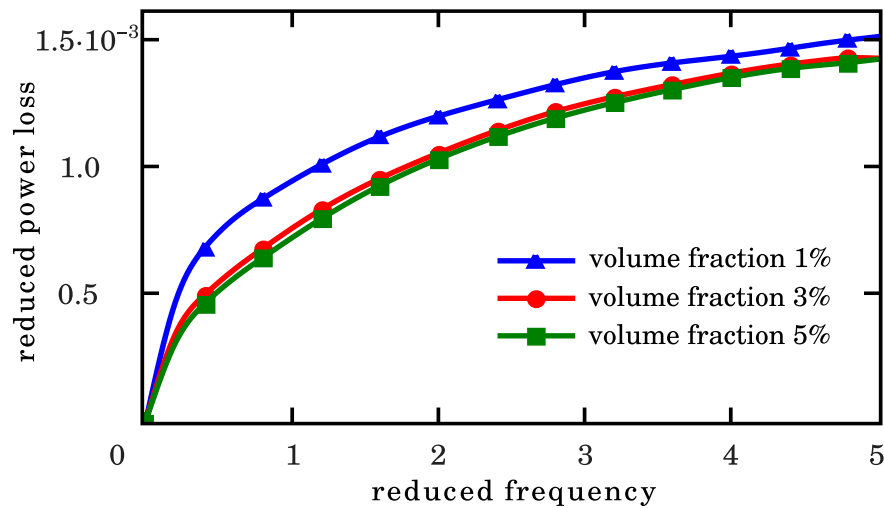


Рисунок 1.23 – Результати моделювання ансамблю: частотні залежності втрат потужності для різних значень об’ємної концентрації частинок при дії циркулярно поляризованого поля. Амплітуда поля має значення  $h_m = 0.05$ , співвідношення між магнітною та тепловою енергіями має значення  $\kappa = 10$ , значення глибини потенціального бар’єру обрано  $\varepsilon = 0.04$ , безрозмірна рівноважна відстань між двома частинками має значення  $\sigma = 2.25$ . Частинки об’єднані в ланцюжково-подібні структури

кластери ставатимуть щільніше. Тому актуальність врахування взаємодії стає більшою.

Різні параметри системи впливають на процес формування кластерів по-різному, і цей вплив може бути неоднозначним. Як правило, збільшення об’ємної концентрації частинок призводить до їх агломерації, що, в свою чергу, призводить до зменшення втрат потужності (див. Рис. 1.23). Ми схильні пояснювати це різними типами та зміною конфігурацій кластерів зі змінами концентрації. Коли об’ємна концентрація частинок невелика, утворюються ланцюжкові структури. Частинки в таких структурах слабо взаємодіють, тому вони більш чутливі до зовнішнього поля. Для більшої об’ємної концентрації частинок короткі ланцюжкові фрагменти приєднуються один до одного, створюючи більш щільні структури з більш сильною взаємодією. І ці агреговані структури мають слабку реакцію на зовнішнє поле. Але є деякі винятки з цих тенденцій. По-перше, коли інтенсивність шуму досить мала, роль концентрації частинок може бути незначною. Це відбувається тому, що сформовані скупчення для різних об’ємних концентрацій мають схожу структуру і залишаються стабільними. По-друге, втрата потужності

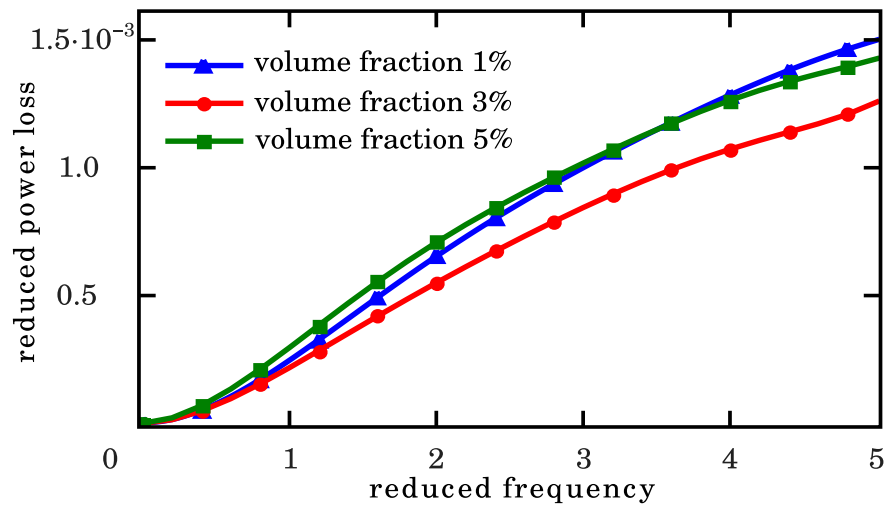


Рисунок 1.24 – Результати моделювання ансамблю: частотні залежності втрат потужності для різних значень об’ємної концентрації частинок при дії циркулярно поляризованого поля. Амплітуди поля має значення  $h_m = 0.05$ , співвідношення між магнітною та тепловою енергіями має значення  $\kappa = 25$ , глибина потенціального бар’єру має значення  $\varepsilon = 0.04$ , безрозмірна рівноважна відстань між двома частинками має значення  $\sigma = 2.25$ . Частинки об’єднуються в щільні кластери, що складається з фрагментів ланцюжків

може збільшуватися з об’ємною концентрацією, як видно з Рис. 1.24 з наступних причин. Коли взаємодія між частинками в кластерах сильна, для перемагнічування всього кластера потрібне сильне поле, і, як наслідок, петля гістерезису розширюється. Це підтверджується тим, що крива для 5% на Рис. 1.24 розміщена вище за криву 3%. Цей ефект зникає на більших частотах, коли кластери не встигають здійснювати повний оберт протягом періоду поля. Тут сильна взаємодія пригнічує реакцію кожної частинки, і втрати потужності, навпаки, стають меншими порівняно з випадком менших об’ємних концентрацій. Неоднозначний характер залежності втрат потужності від концентрації частинок має експериментальне підтвердження у експериментальних дослідженнях питомої швидкості абсорбції наночастинок оксиду заліза, зважених у різних в’язких органічних розчинах [101] (Див. Рис. 4).

Теплові коливання порушують впорядкування у кластерах зі зростанням температури, і це може по-різному вплинути на відгук феррорідини до зовнішнього поля. Дуже цікавий ефект відбувається за певних обставин, коли магнітна енергія частинки більша, ніж тепла,

але не настільки велика, щоб виключити істотні коливання протягом періоду поля. У цьому випадку кожна частинка в кластері знаходиться в квазірівноважному стані, що забезпечується результируючим дипольним полем. Магнітний момент частинки часто коливається біля одного з цих станів. Через рідкісні, але сильні коливання частинка може переходити з одного стану в іншу. Таке явище схоже на релаксацію магнітного моменту у фіксованій одноосьовій частинці, що було описано в [81] або на перемикання викликане полем тієї ж частинки, розглянуте в [83]. Перехідний процес протікає досить швидко, але під час цього кожна частинка знаходиться в дуже збудженому стані, який характеризується високою енергією у зовнішньому полі. Як правило, це призводить до збільшення втрат потужності, особливо для високих частот, коли час одного переходу стає порівняним з періодом поля. Такий приріст розсіювання енергії вимагає ряду умов, оскільки багато факторів впливають на співвідношення теплової та детерміністичної магнітної енергій, а саме, інтенсивності шуму, параметрів поверхнево-активних речовин та типів кластерів. На Рис. 1.25, збільшення втрат потужності через теплові коливання відображається в поведінці кривої для  $\kappa = 25$ . Як видно, криві для  $\kappa = 25$  та  $\kappa = 40$  збігаються для малих частот. Але в той час як частота збільшується, різниця між кривими для  $\kappa = 25$  та  $\kappa = 40$  стає більшою. Слід очікувати, для частот більше, ніж  $\tilde{\Omega} = 5$  значення втрат потужності для  $\kappa = 25$  будуть більшими, ніж для  $\kappa = 10$ . У цьому сенсі цей ефект може бути більш продуктивним з точки зору збільшення потужності втрат, ніж розпад кластеру, описаний нижче.

Незважаючи на те, що шум пригнічує відгук кожної частинки на зовнішнє поле, для взаємодіючого ансамблю його дія, як вже демонструвалось вище, може призвести до зовсім різних результатів. Частинки в щільних скупченнях міцно зв'язані і слабо піддаються дії зовнішнього поля. Але якщо тепла енергія порівнянна з магнітною, то теплові коливання роблять частинки вільними, що повністю запобігає утворенню кластера. Таким чином, теплові коливання напряду збільшують реакцію частинок на зовнішнє періодичне поле і, відповідно, енергію, поглинену від цього поля. Ми схильні тлумачити це як

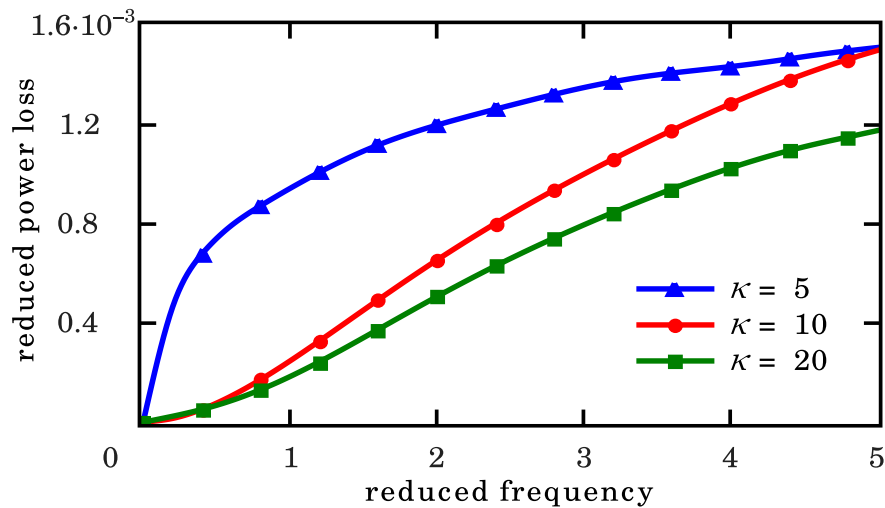


Рисунок 1.25 – Результати моделювання ансамблю: частотні залежності втрат потужності для різних значень відношення магнітної та теплової енергій при дії циркулярно поляризованого поля. Амплітуда поля має значення  $h_m = 0.05$ , об’ємна концентрація частинок має значення 1 відсоток, значення глибини потенціального бар’єру обрано  $\varepsilon = 0.04$ , безрозмірна рівноважна відстань між двома частинками має значення  $\sigma = 2.25$ . Походження незвичайної поведінки кривої для  $\kappa = 25$  полягає в перемиканнях частинок між квазірівноважними станами, які виникають внаслідок дії локальних дипольних полів.

конструктивну роль шуму. Результати набору серій пусків чисельного моделювання, що підтверджують це явище, зображені на Рис. 1.26. По-перше, для великої інтенсивності шуму ( $\kappa = 10$ ) агрегація частинок не відбувається, і це явище дуже виражено. По-друге, для меншої інтенсивності шумів, проте, кластери частково сформовані, але вони можуть бути знищені в залежності від інших параметрів. Як видно, на низьких частотах крива для  $\kappa = 25$  майже збігається з кривою для  $\kappa = 40$ , і обидві вони розташовані далеко вище кривої для  $\kappa = 10$ . В обох випадках утворюються схожі кластери, і вони не повністю руйнуються тепловими шумами. Але для високих частот, коли індуковані полем коливання частинок сприяють руйнуванню кластерів, різниця між згаданими кривими збільшується. Узагальнюючи, ми зазначимо, що взаємодія між частинками, а також тепловий шум пригнічує реакцію частинок на зовнішнє поле. В той же час, обидва ці фактори можуть конкурувати один з одним, а результуюча втрата потужності в періодичному зовнішньому полі може широко варіюватися. Вирішальну

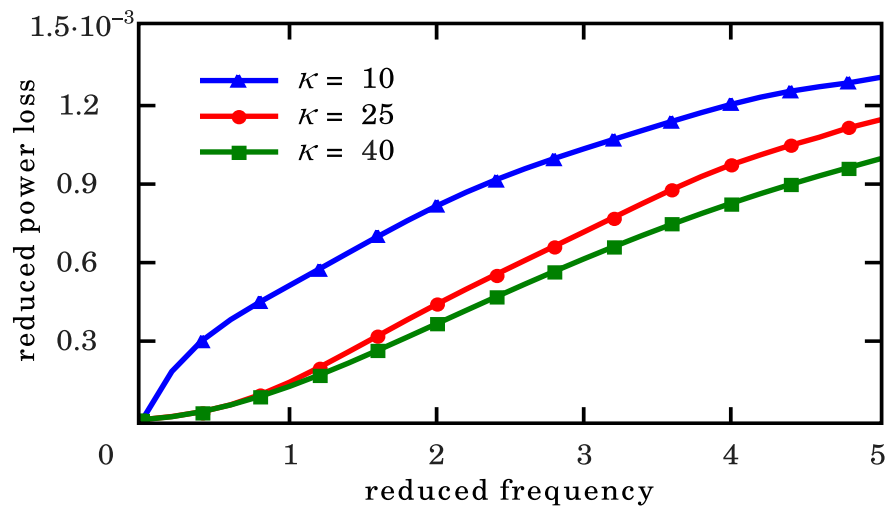


Рисунок 1.26 – Результати моделювання ансамблю: частотні залежності втрат потужності для різних значень відношення магнітної та теплової енергій при дії циркулярно-поляризованого поля. Амплітуда поля має значення  $h_m = 0.05$ , об’ємна концентрація частинок має значення 3 відсотки, значення глибини потенціального бар’єру обрано  $\varepsilon = 0.02$ , безрозмірна рівноважна відстань між двома частинками має значення  $\sigma = 2.25$ . Полози кривих показують, що кластери руйнуються повністю при збільшенні інтенсивності шуму.

роль тут відіграє утворення кластерів внаслідок дипольної взаємодії з подальшими перетвореннями кластерів та руйнуванням завдяки тепловим флуктуаціям та дії зовнішнього періодичного поля. Головний практичний результат полягає в тому, що підвищення температури *може сприяти* поглинанню енергії. І тому існує дві причини: перемикання частинок у кластері внаслідок коливань, тимчасово руйнуючи магнітний порядок, і повне розкладання кластерів шумом, що збільшує реакцію частинок на зовнішнє поле.

## 1.6 Висновки до розділу 1

Представлено комплексне дослідження взаємодії однакових сферичних однорідних частинок намагніченості  $M$ , які поміщені у рідину в’язкості  $\eta$ , з періодичним зовнішнім магнітним полем амплітуди  $h_m$  і частоти  $\Omega$ . Ми скористались моделлю жорсткого диполя, яка ґрунтується на припущенні, що магнітний момент зафіксований в кристалічній решітці за допомогою високої магнітної анізотропії. Основні зусилля

зосереджені на дослідженні нагрівання навколишнього середовища, яке є результатом взаємодії зовнішнього поля з частинками. Ми характеризуємо це нагрівання безрозмірною втратою потужності  $q$ . Дослідження проводилося в три етапи. По-перше, ми провели розгляд одночастинкового детерміністичного наближення. По-друге, ми врахували як зовнішнє поле, так і теплові флуктуації, використовуючи рівняння Ланжевена та Фоккера-Планка. І нарешті, ефекти взаємодії між частками досліджувались чисельно за допомогою алгоритму Барнса-Хату [75] та технології CUDA [76]. Підсумуємо наші висновки наступним чином.

У детерміністичному наближенні показано, що циркулярно-поляризоване зовнішнє поле з безрозмірною амплітудою  $h_m$  та безрозмірною частотою  $\tilde{\Omega}$  може генерувати три періодичні режими: однорідна прецесія (якщо  $\tilde{\Omega} \leq h_m$ ), неоднорідна прецесія (якщо  $\tilde{\Omega} \sim h_m$ ) та режим малих обертальних коливань (якщо  $\tilde{\Omega} \gg h_m$ ). Перший та останній режими описані аналітично. Поведінка безрозмірних втрат потужності є наступною:  $q \sim h_m^2 \tilde{\Omega}^2$  для однорідного режиму,  $q \sim h_m^2 (1 + \cos^2 \theta_0)$  для режиму малих обертальних коливань ( $\theta_0$  є початкове значення полярного кута магнітного моменту наночастинки). Неоднорідний режим, в який переходить однорідний зі збільшенням частоти супроводжується зменшенням  $q$ . Важливо відзначити, залежність величини  $q$  від початкових умов та схильність до насиченого характеру якщо  $\tilde{\Omega} > h_m$ .

Наночастинка, збуджувана лінійно-поляризованим полем, виконує коливання з частотою поля в заданій площині. Цей рух був описаний аналітично в безмасовій апроксимації. Залежність втрат потужності від частоти в загальному випадку є унімодалною і прямує до константи  $\sim h_m^2 \cos^2 \theta_0$ , Зокрема,  $q \rightarrow 0$  якщо  $\mathbf{m}(0) \parallel \mathbf{h}$ , а енергія лінійно-поляризованого-поля в цьому випадку не поглинається наночастинкою ( $\mathbf{m}(0)$  – одиничний вектор магнітного моменту в початковому стані).

Проаналізовано істотний вплив статичного поля  $\mathbf{h}_0$  на процес перетворення енергії змінного поля в теплову. Якщо дія статичного поля прагне нспрямувати магнітний момент перпендикулярно площині (лінії) дії змінного поля, то таке постійнеполе збільшує втрати потужності.



В той же час, постійне поле  $\mathbf{h}_0$  зв'язує магнітний момент і зменшує його відгук до змінного поля, що призводить до зменшення втрат потужності. В результаті конкуренції цих двох ефектів статичне поле може підвищити ефективність нагрівання в наступних ситуаціях. 1) Прикладено циркулярно-поляризоване поле, та виконуються умови  $\tilde{\Omega} > h_m$  ( $\tilde{\Omega} \sim h_m$ ),  $\mathbf{h}_0$  перпендикулярне площині поляризації,  $h_0 \ll h_m$ . 2) Прикладено лінійно-поляризоване поле та виконуються такі умови  $\tilde{\Omega} > h_0$ ,  $\mathbf{h}_0 \perp \mathbf{h}$ ,  $\theta_0 \approx \pi/2$ . 3) У випадку, коли  $\tilde{\Omega} \gg h_m$ ,  $\theta_0 = \pi/2$ , значення  $q$  можуть бути вдвічі більшими, для будь-якого типу поляризації зовнішнього поля  $\mathbf{h}$  та для будь-якого модуля значення постійного поля  $\mathbf{h}_0$  якщо  $\mathbf{h} \perp \mathbf{h}_0$ .

Нарешті, слід зробити висновок, що лінійно поляризоване поле є більш ефективним для нагрівання порівняно з циркулярно-поляризованим коли частота досить мала ( $\tilde{\Omega} \ll h_m$ ). Походження такої поведінки викликано швидкими переорієнтаціями магнітних моментів наночастинок між двома антипаралельними напрямками, викликаними лінійно поляризованим полем. У решті діапазону частот циркулярно-поляризоване поле характеризується втратою потужності в два рази більшою ( $\tilde{\Omega} \gg h_m$ ) при тих самих початкових умовах. Тому результати динамічного наближення для високих частот зовнішнього поля можуть бути застосовані до реальної частинки в рідині.

Далі, ми показали, що теплові коливання нелінійно знижують втрати потужності на невеликих частотах. Так, для циркулярно-поляризованого зовнішнього поля це зменшення реалізується як  $\kappa^2$  ( $\kappa$  - відношення магнітної та теплової енергій), за умов  $\kappa h_m \ll 1$ ,  $\kappa \tilde{\Omega} \ll 1$ . У той же час, для досить великих частот ( $\tilde{\Omega} \sim 1$ ), різниця між значеннями втрат потужності при різній інтенсивності шуму, яка визначається  $\kappa$ , стає менш вираженою. І нарешті, коли  $\tilde{\Omega} \ll 1$ , результати майже не відрізняються від детерміністичного наближення в широкому діапазоні  $\kappa$ . Така поведінка повинна враховуватися для підвищення ефективності методу магнітної гіпертермії.

Значення втрат потужності для циркулярно-поляризованого поля приблизно в два рази перевищують значення для лінійно поляризованого у всьому діапазоні частот. Це очевидно для квазірівноважного наближення,

описаного в [25] і впливає з нашого аналізу ліміту випадку без шуму для високих частот. Але це досить несподівано в світлі низькочастотної поведінки в динамічному наближенні, описаному вище. Цей факт говорить про те, що теплові коливання якісно змінюють поведінку частинок.

Нарешті, встановлено, що взаємодія між частинками сильно впливає на сприйнятливості ансамблю до зовнішніх періодичних полів. Через утворення кластерів кожна частинка знаходиться під дією досить сильного результуючого дипольного поля, що ускладнює її реакцію на зовнішнє. Очевидно, це призводить до значного зниження втрат потужності, що узгоджується з експериментами. У той же час можливі різні типи кластерів, і навіть невеликі зміни параметрів поля, частинок або рідини можуть викликати зовсім іншу структуру ансамблю. Ці ефекти особливо актуальні для низьких частот, коли кластери повністю переорієнтуються протягом періоду поля. Це призводить до сильної різниці між значеннями  $q$  в порівнянні з результатами випадку однієї частинки. Ця різниця зменшується з частотою поля, оскільки для високих частот кожна частинка виконує коливання навколо свого початкового положення без повної інверсії намагніченості. Тому вплив взаємодії не є критичним, коли  $\tilde{\Omega} \gg 1$ , виключаючи конкретну ситуацію, описану нижче.

Проте, взаємодія між частинками та тепловий шум є конкуруючими факторами. Ми виявили дві ситуації, коли тепловий шум призводить до збільшення втрат потужності при наявності взаємодії між частинками. Ми пов'язуємо ці явища з конструктивною роллю шуму. У обох згаданих випадках отримані значення  $q$  можуть майже дорівнювати значенням для одночастинкового детерміністичного наближення. Перший з них має місце, коли інтенсивність шуму велика. В даному випадку руйнуються кластери, що призводить до збільшення  $q$  в наслідок кращої реакції частинок на зовнішнє поле. І за певних інших умов більша інтенсивність шуму відповідає більшим втратам потужності. Другий з них має місце, коли інтенсивність шуму не настільки велика, і магнітна енергія є порівняною з тепловою. Тут коливання частково розмивають порядок частинок у кластері, що також веде до значного збільшення  $q$  для високих частот поля. Ми пояснили це поодинокими інвертуваннями частинок

в кластері між квазірівноважними станами, утвореними дипольними полями. Процес переключення здійснюється через вкрай збуджені стани, що характеризуються високою енергією. Саме високе споживання енергії в цих згаданих станах викликає збільшення втрат потужності, що спостерігаються.

## 2 ІНДУКОВАНА НАМАГНІЧЕНІСТЬ, ПОТУЖНІСТЬ ВТРАТ В СИСТЕМІ ФЕРОМАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК ФІКСОВАНИХ У ТВЕРДІЙ МАТРИЦІ

### 2.1 Вступ до розділу 2

Вивчення динаміки намагніченості в однодомених ферромагнітних частинках (наночастинах) є дуже важливою як для фундаментальних досліджень, так і для практичного застосування. Найбільший інтерес мають динамічні ефекти, пов'язані з різкою зміною намагніченості, які виникають внаслідок невеликих змін керувального параметра. Одним з таких ефектів є перемикання (інверсія) намагніченості наночастинок. В залежності від застосування, процес переходу потребує певної оптимізації. Зокрема, для зменшення часу перемикання в пристроях магнітного запису нещодавно було запропоновано так зване прецесійне перемиканням [102–105] і перемиканням за допомогою мікрохвиль [106–110]. Магнітні резонанси в наночастинках і переходи між різними динамічними станами напруженості можуть мати велику роль і в гіпертермії, оскільки саме у безпосередній близькості від цих резонансів і переходів мають місце суттєві зміни дисипативних властивостей. Цікавою особливістю детерміністичної динаміки намагніченості в наночастинках, збуджуваних періодичними магнітними полями, є те, що вона може бути хаотичною [111–114]. З теоретичної точки зору особливий інтерес мають переходи між регулярними і хаотичними режимами динаміки намагніченості, а також перехід до хаосу.

Нелінійна динаміка намагніченості в ферромагнітних наночастинках, що індукуюється циркулярно-поляризованим магнітним полем, добре вивчена для окремого випадку одноосьових наночастинок, чії легкі осі перпендикулярні площини поляризації [100, 115]. Використовуючи детерміністичне рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта, в роботах [116, 117] показано, що динаміка намагніченості завжди є регулярною, і в стаціонарному стані існують лише періодичні і квазіперіодичні динамічні режими. Крім цього, в роботі [118] отримані умови стійкості періодичних

режимів і індукованої намагніченості, в [119] побудована фазова діаграма можливих режимів в площині "амплітуда-частота" зовнішнього магнітного поля, в [39, 40] розраховується втрата потужності в разі періодичних режимів, а в [97] вивчається вплив переходів між різними динамічними режимами на потужність втрат. У роботах [118, 120] досліджуються деякі теплові ефекти в таких системах, в тому числі теплове посилення індукованої намагніченості і резонансне пригнічення термічної стійкості цих режимів.

Завдяки симетрії моделі, багато з наведених вище результатів були отримані аналітично. У той же час, ряд важливих особливостей динаміки намагніченості (наприклад, деякі резонанси вищих порядків і хаотична динаміка) неможливі для опису в рамках цієї моделі. Тому в даному розділі НДР ми розглянемо більш загальний випадок, коли зовнішнє магнітне поле є еліптично поляризованим і легкі осі наночастинок мають випадкові напрямки. Нашу основну увагу буде зосереджено на з'ясуванні того, як нелінійні резонанси і переходи між різними режимами динаміки намагніченості впливають на магнітні властивості систем наночастинок.

Наступним вагомим результатом, отриманим для моделі фіксованої наночастинок стала низка результатів для частинки, що окрім зовнішнього поля піддається дії ще й спіно-поляризованого струму. Важливо зазначити, що задача перемагнічування наночастинок спіно-поляризованим струмом має значний прикладний інтерес, оскільки тісно пов'язана з роботою пристроїв спінтроники [121, 122]. Зокрема, найочевиднішим практичним застосуванням задачі є перезапис інформації в комітках магніторезистивної оперативної пам'яті (Magnetic Random Access Memory – MRAM) [123, 124]. Така пам'ять за швидкістю, ємністю та стабільністю запису переважає всі аналоги і тому претендує на роль «універсальної пам'яті», що здатна замінити собою усі інші.

На сьогоднішній день пропонується декілька способів перемагнічування комірки MRAM. Перший з них – це перемагнічування зовнішнім полем, що в свою чергу, створюється зовнішнім струмом. Недоліком підходу є достатньо великий струм, в той час як для портативних пристроїв потрібне низьке споживання енергії, та

ймовірність несанкціонованого перемагнічування сусідніх комірок для високоємних пристроїв з великою щільністю запису.

Нова технологія перенесення спінового моменту (Spin-Transfer Torque – STT) [125, 126], або перемикання за допомогою перенесення спіна використовує електрони з заданим станом спіна. Під час проходження таких електронів через вільний феромагнітний шар, їх спіновий момент передається намагніченості цього шару та переорієнтує її. Це зменшує величину струму, необхідну для запису інформації в комірку пам'яті. Технологія STT повинна вирішити проблеми, з якими «класична» технологія MRAM зіткнеться при збільшенні щільності розміщення елементів пам'яті і відповідного збільшення струму, необхідного для запису.

В найпростішому випадку для теоретичного та чисельного розв'язання поставленої задачі можна використовувати рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта у припущенні, що шар феромагнітика намагнічений однорідно, а процеси перемагнічування відбуваються шляхом когерентного обертання всіх спінів [117]. Така модель широко використовується як для опису динаміки намагніченості під дією зовнішнього поля, так і під дією спін-поляризованого струму [127]. Зокрема, динамічні ефекти в намагніченості наночастинки у зовнішньому періодичному полі досліджені у роботах [119, 127–129]. Динаміка намагніченості під впливом спін-поляризованого струму розглядалась у роботах [130–135]. Та не зважаючи на достаньо знаність та розробленість проблематики, всі можливі режими магнітної динаміки під впливом зовнішнього поля і спін-поляризованого струму досі не описані аналітично.

## **2.2 Модель наночастинки в твердій матриці та рівняння внутрішньої магнітної динаміки**

### **2.2.1 Базові рівняння**

Розглянемо систему феромагнітних наночастинок, що збуджуються зовнішнім магнітним полем вигляду (1.3а). Наночастки системи вважаються невзаємодіючими і однодоменними (так звані частки Стонера-

Вольфарта [136]), і розподілені в діелектричній матриці. Єдиним розходженням між ними є спрямування їх осей анізотропії (легкі осі), що, в свою чергу, для кожної з наночастинок характеризується одиничним вектором

$$\mathbf{e}_a = \sin \vartheta_a \cos \varphi_a \mathbf{e}_x + \sin \vartheta_a \sin \varphi_a \mathbf{e}_y + \cos \vartheta_a \mathbf{e}_z, \quad (2.1)$$

де  $\vartheta_a$  та  $\varphi_a$  – полярний і азимутальний кути  $\mathbf{e}_a$ . З наступного аналізу ми припускаємо, що напрямки цього вектора є випадковими і рівномірно розподілені по сфері. Це означає, що кути  $\vartheta_a$  і  $\varphi_a$  також випадкові і їх загальна щільність ймовірності  $P(\vartheta, \varphi)$  в якій  $\vartheta_a = \vartheta$  та  $\varphi_a = \varphi$  задаються у вигляді

$$P(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \sin \vartheta. \quad (2.2)$$

Магнітний стан кожної наночастинок в системі описується вектором намагніченості  $\mathbf{M} = \mathbf{M}(t)$ , динаміка якого визначається детермінованим рівнянням Ландау-Ліфшиця-Гільберта [116, 117]

$$\frac{d}{dt} \mathbf{M} = -\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} + \frac{\alpha}{M} \mathbf{M} \times \frac{d}{dt} \mathbf{M}. \quad (2.3)$$

Тут  $\gamma (> 0)$  – гіромагнітне відношення,  $\alpha (> 0)$  – безрозмірний параметр загасання,  $M = |\mathbf{M}| = \text{const}$ , а символ  $\times$  означає векторний добуток. Ефективне магнітне поле  $\mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H}_{\text{eff}}(t)$ , діюче на наночастинку, подається у наступному вигляді:

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \frac{H_a}{M} (\mathbf{M} \cdot \mathbf{e}_a) \mathbf{e}_a + \mathbf{H}, \quad (2.4)$$

де  $H_a$  – поле магнітної анізотропії, а точка позначає скалярний добуток. При введенні безрозмірної намагніченості  $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M$  ( $|\mathbf{m}| = 1$ ) і безрозмірного ефективного магнітного поля  $\mathbf{h}_{\text{eff}} = \mathbf{H}_{\text{eff}}/H_a$ , рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта (2.3) може бути приведено до вигляду:

$$(1 + \alpha^2) \dot{\mathbf{m}} = -\mathbf{m} \times \mathbf{h}_{\text{eff}} - \alpha \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{h}_{\text{eff}}). \quad (2.5)$$

Тут диференціювання виконується по безрозмірному часу  $\tilde{t} = \Omega_r t$ ,  $\Omega_r = \gamma H_a$  – характерна кутова частота прецесії намагніченості, і, відповідно до (1.3a) та (2.4),

$$\mathbf{h}_{\text{eff}} = (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e}_a) \mathbf{e}_a + h_m \cos(\tilde{\Omega} \tilde{t}) \mathbf{e}_x + \varrho h_m \sin(\tilde{\Omega} \tilde{t}) \mathbf{e}_y \quad (2.6)$$

де  $h = H/H_a$  і  $\tilde{\Omega} = \Omega/\Omega_r$  відповідно, безрозмірна амплітуда і безрозмірна кутова частота зовнішнього магнітного поля  $\mathbf{H}$ . Так як напрямок  $\mathbf{e}_a$  випадковий, то і динаміка  $\mathbf{m}$  в різних системах наночастинок різна. Таким чином, ключову роль в описі відповідних магнітних властивостей такої системи відіграють магнітні властивості наночастинок.

Далі нас цікавлять дві характеристики наночастинок. Перша - середня безрозмірна намагніченість  $\langle \overline{\mathbf{m}} \rangle$ , індукована еліптично-поляризованим магнітним полем. Тут риска над символом означає усереднення по безрозмірному інтервалу часу  $\tilde{\mathcal{T}} = \mathcal{T} \Omega_r$ ,

$$\overline{(\cdot)} = \frac{1}{\tilde{\mathcal{T}}} \int_0^{\tilde{\mathcal{T}}} d\tilde{t} (\cdot), \quad (2.7)$$

а кутові дужки - усереднення за всіма можливими орієнтаціями одиничного вектора  $\mathbf{e}_a$ ,

$$\langle (\cdot) \rangle = \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi P(\vartheta, \varphi) (\cdot). \quad (2.8)$$

Слід зазначити, що вибір  $\mathcal{T}$  залежить від динамічного режиму  $\mathbf{m}$ . Зокрема, в разі сталої динаміки, інтервал часу  $\tilde{\mathcal{T}}$  повинен бути обраний як  $\tilde{\mathcal{T}} = 2\pi/\tilde{\Omega}$ . У протилежному випадку, якщо  $\mathbf{m}$  демонструє хаотичну динаміку, то наступна умова має бути виконана в якості:  $\tilde{\mathcal{T}} \gg 2\pi/\tilde{\Omega}$ . Ще однією з наших цілей є зниження втрат потужності  $Q$ , що визначається аналогічно до випадку наночастинки з "вмороженим" моментом, що зважена в рідині, див. вираз (1.44). У безрозмірному вигляді аналогічно до виразу (1.45) можна записати

$$q = \frac{1}{\tilde{\mathcal{T}}} \int_0^{\tilde{\mathcal{T}}} \mathbf{h}_{\text{eff}} \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \tilde{t}} d\tilde{t}. \quad (2.9)$$



Використовуючи рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта (2.3) та означення осереднення за часом (2.7), ця величина може бути записана наступним чином:

$$q = \alpha \langle \dot{\mathbf{m}}^2 \rangle. \quad (2.10)$$

Якщо система наночастинок містить  $N$  наночастинок об'ємом  $\mathcal{V}$  то індукована намагніченість і щільність втрати потужності для цієї системи виражаються через наведені вище величини  $\langle \bar{\mathbf{m}} \rangle$  та  $q$  як  $nMV \langle \bar{\mathbf{m}} \rangle$  і  $n\Omega_r H_a MV q$ , відповідно, де  $n = N/\mathcal{V}$  – концентрація наночастинок.

### 2.2.2 Умови застосування детерміністичного наближення для моделі фіксованої наночастинок

Сформулюємо тепер умови, за яких дана модель є реалістичною. Перш за все, ми припускаємо, що сила обмінної взаємодії між спінами є перевищує всі інші енергії взаємодії в системі. У цьому випадку модуль намагніченості приблизно постійний, і обертання намагніченості може бути описано рівнянням (2.3). Оскільки обертання вважається когерентним, наночастинок повинні бути однодоменними. Це означає, що радіус наночастинок  $R$  повинен бути менше деякого критичного значення  $R_2$ , яке, в залежності від матеріалу, коливається від кількох нанометрів до декількох десятків, або навіть сотень нанометрів (наприклад,  $R_2 \simeq 2.35$  нм для  $\text{Ni}_{08}\text{Fe}_{02}$ ,  $R_2 \simeq 9.5$  нм для  $\text{Fe}$ , та  $R_2 \simeq 240$  нм для  $\text{MnBi}$  [137]). Загалом, через теплові флуктуації, когерентне обертання намагніченості в наночастинках з  $r < R_2$  є випадковим. В рамках стохастичного рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта ці флуктуації, як правило, враховуються шляхом додавання гаусівського білого шуму для ефективного магнітного поля [81]. Проте, якщо теплова енергія  $k_B T$  ( $k_B$  – стала Больцмана,  $T$  – абсолютна температура) набагато менша, ніж масштаб енергії в системі  $Vw$  ( $w = M \min(H_a, H)$  – шкала щільності енергії), то тепловою флуктуацією можна знехтувати. Це відбувається при  $R \gg R_1 = (6k_B T / \pi w)^{1/3}$  і, таким чином, намагніченість однорідна і її динаміка стає наближено детермінованою, якщо діаметр наночастинок задовольняє

умова  $R_1 \ll R < R_2$ . Умова  $R_1 \ll R$  також може бути використана для оцінки максимальної температури, при якій зберігається детерміноване наближення (в тому випадку, якщо максимальна температура менше, ніж температура блокування). Варто відзначити, що ці умови мають не дуже критичний характер і в деяких випадках можуть бути виконані навіть за кімнатної температури. [97]

Крім того, ми використовуємо наближення невзаємодіючих наночастинок, тобто передбачається, що середня відстань між частинками  $r$  настільки велика, що сумарне магнітне поле, яке генерується оточуючими наночастинками, дуже мале в порівнянні з полем анізотропії і зовнішніми магнітними полями. В дипольному наближенні цю відстань можна грубо оцінити з умови  $(r/R)^3 \gg M/\min(H_a, H)$ . На перший погляд, навіть в умовах зроблених припущень, вибір ефективного магнітного поля у вигляді (2.4) у цьому випадку є незадовільним. Причина полягає в тому, що поле  $\mathbf{H}_{\text{eff}}$  не містить розмагнічувальне магнітне поле, яке завжди існує в феромагнітних зразках і, в основному, ним не можна нехтувати. Але в разі однодомених частинок сферичної форми розмагнічувальне поле складає  $-(4\pi/3)\mathbf{M}$  і, оскільки справедливе співвідношення  $\mathbf{M} \times \mathbf{M} = 0$ , то це поле не впливає на динаміку намагніченості і ним все-таки можна знехтувати в  $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ . Зверніть увагу, що наш підхід може бути також застосований і до провідності наночастинок. Це відбувається тому, що основний ефект провідності полягає в збільшенні параметра загасання  $\alpha$ . [138, 139] Нарешті, згідно з визначенням (2.8), цікавлячі нас величини,  $\langle \bar{\mathbf{m}} \rangle$  і  $q$ , залежать від щільності ймовірності  $P(\vartheta, \varphi)$  спрямованих легких осей. Вибір однорідного розподілу цих напрямків викликаний як фізичної (нульова намагніченість непровідних систем) так і математичної (просте інтегрування по кутах  $\vartheta$  та  $\varphi$ ) причинами. Проте, так само можливий будь-який інший вибір  $P(\vartheta, \varphi)$  в цьому випадку єдиною проблемою є аналітичний розрахунок інтегралів в (2.8).

### 2.2.3 Вплив спін-поляризованого струму

Вплив спін-поляризованого струму. Пов'язаний з взаємодією спінів електронів струму з магнітною решіткою. У 1996 р. Д. Слончевским [140] і Л. Берже [131] було показано, що дію спін-поляризованого струму можна розкласти на дві складові, одна з яких створює прецесію намагніченості  $\mathbf{M}$  навколо напрямку поляризації струму, а друга змінює кут між векторами поляризації струму й намагніченості зразка. Рівняння, що описує цей процес називається рівнянням Ландау-Ліфшиця-Гільберта з струмовим членом Слончевського-Берже (ЛЛГСБ), і записується шляхом додавання відповідних членів до рівняння 2.3. В результаті можна записати

$$\dot{\mathbf{m}} = -\mathbf{m} \times \mathbf{h}_{\text{eff}} + \alpha \mathbf{m} \times \dot{\mathbf{m}} + \xi_p \mathcal{J} \mathbf{s} \times \mathbf{m} + \xi_d \mathcal{J} \mathbf{m} \times (\mathbf{s} \times \mathbf{m}). \quad (2.11)$$

Тут доданок  $\xi_p \mathcal{J} \mathbf{s} \times \mathbf{m}$  відповідає за внесок спін-поляризованого струму до прецесійного доданку в рівнянні Ландау-Ліфшиця-Гільберта, а  $\xi_d \mathcal{J} \mathbf{m} \times (\mathbf{s} \times \mathbf{m})$  відповідає за внесок спін-поляризованого струму до дисипативного доданку в рівнянні Ландау-Ліфшиця-Гільберта,  $\xi_d$  та  $\xi_p$  – певні константи, які залежать від матеріалу,  $\mathcal{J}$  – густина струму,  $\mathbf{s}$  – вектор, що визначає напрям поляризації струму.

Як правило, виконується умова  $\xi_d \gg \xi_p$ , тому, у дослідженнях доданком, що відповідає за внесок у дисипацію, нехтують [130–135]. Результуюче рівняння приймає вигляд

$$\dot{\mathbf{m}} = -\mathbf{m} \times (\mathbf{h}_{\text{eff}} + \xi_d \mathcal{J} \mathbf{s} \times \mathbf{m}) + \alpha \mathbf{m} \times \dot{\mathbf{m}}. \quad (2.12)$$

Рекурсивною підстановкою, аналогічною якій з рівняння (2.3) було одержане рівняння 2.5 перепишем (2.12) як

$$(1 + \alpha^2) \dot{\mathbf{m}} = -\mathbf{m} \times (\mathbf{h}_{\text{eff}} + \xi_d \mathcal{J} \mathbf{s} \times \mathbf{m}) - \alpha \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times (\mathbf{h}_{\text{eff}} + \xi_d \mathcal{J} \mathbf{s} \times \mathbf{m})). \quad (2.13)$$

## 2.3 Внутрішня динаміка намагніченості наночастинки в твердій матриці: результати

### 2.3.1 Теорія збурень та дробові резонанси у поведінці намагніченості

Припустимо, що  $h_m \ll 1$ , та подамо намагніченість у вигляді ряду  $\mathbf{m}$  у вигляді ряду

$$\mathbf{m} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{m}_n, \quad (2.14)$$

де  $\mathbf{m}_n = \mathbf{m}_n(\tilde{t})$  внесок в  $\mathbf{m}$  в  $n$ -му наближенні ( $|\mathbf{m}_n| \sim h^n$ ). Завдяки умові  $|\mathbf{m}| = 1$ , існує сильна залежність між  $\mathbf{m}_n$  з різними  $n$ . Дійсно, використовуючи той факт, що  $\mathbf{m}_0 = \mathbf{e}_a$ , умову  $|\mathbf{m}| = 1$  можна записати у вигляді

$$\sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{m}_n^2 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{m}_n \cdot \mathbf{e}_a + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=n+1}^{\infty} \mathbf{m}_n \cdot \mathbf{m}_k = 0. \quad (2.15)$$

Так як множина векторів  $\mathbf{m}_n$ , які вводяться замість одного вектора  $\mathbf{m}$ , нескінченна, то можна вимагати, щоб умова (2.15) виконувалася в усіх порядках теорії збурень, маючи на увазі, що будь-яка сума доданків, які мають той же порядок, дорівнює нулю. В цьому випадку для непарних ( $n = 2p-1$ ,  $p$  – натуральні числа) і для парних значень ( $n = 2p$ ) порядків, відповідно, отримуємо

$$\mathbf{m}_{2p-1} \cdot \mathbf{e}_a = - \sum_{l=1}^{p-1} \mathbf{m}_l \cdot \mathbf{m}_{2p-1-l} \quad (2.16)$$

і

$$\mathbf{m}_{2p} \cdot \mathbf{e}_a = -\frac{1}{2} \mathbf{m}_p^2 - \sum_{l=1}^{p-1} \mathbf{m}_l \cdot \mathbf{m}_{2p-l}. \quad (2.17)$$

Таким чином, незважаючи на те, що  $\mathbf{m}_n$  визначається в  $n$ -му кроці наближення, скалярний добуток  $\mathbf{m}_n \cdot \mathbf{e}_a$  може бути розрахований з використанням  $\mathbf{m}_l$ , отриманому на попередніх етапах (тобто, при  $l < n$ ).

У нашому аналізі ця властивість  $\mathbf{m}_n$  відіграє важливу роль. Відзначимо також, що при  $p = 1$  суми в правих частинах виразів (2.16) і (2.17) дорівнюють нулю і, тому

$$\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{e}_a = 0, \quad \mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{e}_a = -\frac{1}{2}\mathbf{m}_1^2. \quad (2.18)$$

Подання ряду для безрозмірного ефективного магнітного поля представляється як

$$\mathbf{h}_{\text{eff}} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{h}_n, \quad (2.19)$$

де у відповідності з (2.6), (2.14) і (2.18),  $\mathbf{h}_0 = \mathbf{e}_a$ ,  $\mathbf{h}_1 = \mathbf{H}/H_a = h_m \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t})\mathbf{e}_x + \varrho h_m \sin(\tilde{\Omega}\tilde{t})\mathbf{e}_y$ , та  $\mathbf{h}_n = (\mathbf{m}_n \cdot \mathbf{e}_a)\mathbf{e}_a$  при  $n \geq 2$ . Підстановкою ряду (2.14) та (2.19) в рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта (2.3) і з точністю до  $n$ -порядку за  $h_m$ , ми знаходимо наступне диференціальне рівняння першого порядку  $\mathbf{m}_n$ :

$$\begin{aligned} (1 + \alpha^2)\dot{\mathbf{m}}_n &= -\sum_{l=0}^n \mathbf{m}_l \times \mathbf{h}_{n-l} + \alpha \mathbf{h}_n \\ &\quad - \alpha \sum_{l=0}^n \sum_{k=0}^{n-l} (\mathbf{m}_k \cdot \mathbf{h}_{n-l-k}) \mathbf{m}_l. \end{aligned} \quad (2.20)$$

І, нарешті, шляхом поділу членів з  $\mathbf{m}_n$ , це рівняння зводиться до вигляду

$$(1 + \alpha^2)\dot{\mathbf{m}}_n + \alpha \mathbf{m}_n + \mathbf{m}_n \times \mathbf{e}_a = \mathbf{f}_n \quad (2.21)$$

при ( $n \geq 1$ ). Його права частина,  $\mathbf{f}_n = \mathbf{f}_n(\tilde{t})$ , задається у вигляді

$$\mathbf{f}_n = -\sum_{l=0}^{n-1} \mathbf{m}_l \times \mathbf{h}_{n-l} + \alpha \mathbf{h}_n - \alpha \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{k=0}^{n-l} (\mathbf{m}_k \cdot \mathbf{h}_{n-l-k}) \mathbf{m}_l \quad (2.22)$$

через умови (2.16) та (2.17), вона не залежить від  $\mathbf{m}_n$ . Таким чином, рівняння (2.21) лінійне за  $\mathbf{m}_n$ , а  $\mathbf{f}_n$  є заданою функцією від  $\tilde{t}$ , яка визначається шляхом розв'язання цього рівняння щодо  $\mathbf{m}_l$  для  $l < n$ . Зокрема, в першому ( $n = 1$ ) і другому ( $n = 2$ ) наближеннях визначення

(2.22) разом з умовами (2.18) дає

$$\mathbf{f}_1 = \mathbf{h}_1 \times \mathbf{e}_a + \alpha \mathbf{h}_1 - \alpha(\mathbf{h}_1 \cdot \mathbf{e}_a)\mathbf{e}_a \quad (2.23)$$

та

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_2 = & \mathbf{h}_1 \times \mathbf{m}_1 - \alpha(\mathbf{h}_1 \cdot \mathbf{m}_1)\mathbf{e}_a - \alpha(\mathbf{h}_1 \cdot \mathbf{e}_a)\mathbf{m}_1 \\ & + (\alpha/2)\mathbf{m}_1^2\mathbf{e}_a. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Щоб записати векторну формулу (2.22) у вигляді компонентів, зручно ввести нову декартову систему координат  $x'y'z'$ , що характеризується одиничними векторами  $\mathbf{e}_1$ ,  $\mathbf{e}_2$  та  $\mathbf{e}_a$ . Вектор  $\mathbf{e}_a$  визначений формулою (2.1), а інші можуть бути визначені наступним чином:

$$\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sin \vartheta_a}(\mathbf{e}_z \times \mathbf{e}_a) \times \mathbf{e}_a, \quad \mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sin \vartheta_a}\mathbf{e}_z \times \mathbf{e}_a. \quad (2.25)$$

Подамо в цій системі координат вектори  $\mathbf{m}_n$  і  $\mathbf{f}_n$  як

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_n = & m_{n1}\mathbf{e}_1 + m_{n2}\mathbf{e}_2 + m_{n3}\mathbf{e}_a, \\ \mathbf{f}_n = & f_{n1}\mathbf{e}_1 + f_{n2}\mathbf{e}_2 + f_{n3}\mathbf{e}_a \end{aligned} \quad (2.26)$$

і беручи до уваги, що  $m_{n3}$  в залежності від парності  $n$  задається формулою (2.16) або (2.17), з рівняння (2.21) для  $m_{n1}$  и  $m_{n2}$  отримуємо систему рівнянь

$$\begin{aligned} (1 + \alpha^2)\dot{m}_{n1} + \alpha m_{n1} + m_{n2} &= f_{n1}, \\ (1 + \alpha^2)\dot{m}_{n2} + \alpha m_{n2} - m_{n1} &= f_{n2}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

У стаціонарному стані, праві частини цих рівнянь є періодичними функціями від  $\tilde{t}$ , і в разі непарних  $n$  ( $n = 2p - 1$ ), їх можна записати в матричній формі

$$\begin{pmatrix} f_{n1} \\ f_{n2} \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^p \begin{pmatrix} q_{ni} & g_{ni} \\ u_{ni} & v_{ni} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin[(2i-1)\tilde{\Omega}\tilde{t}] \\ \cos[(2i-1)\tilde{\Omega}\tilde{t}] \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

У той час як елементи матриці (2.28) повинні бути визначені на попередніх етапах, елементів матриці виду

$$\begin{pmatrix} m_{n1} \\ m_{n2} \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^p \begin{pmatrix} a_{ni} & b_{ni} \\ c_{ni} & d_{ni} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin[(2i-1)\tilde{\Omega}t] \\ \cos[(2i-1)\tilde{\Omega}t] \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

зі стаціонарного розв'язку рівняння (2.27) задовольняють матричне рівняння

$$\begin{pmatrix} (1+\alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni} & \alpha & 0 & 1 \\ \alpha & -(1+\alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni} & 1 & 0 \\ 0 & -1 & (1+\alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni} & \alpha \\ -1 & 0 & \alpha & -(1+\alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{ni} \\ b_{ni} \\ c_{ni} \\ d_{ni} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{ni} \\ q_{ni} \\ v_{ni} \\ u_{ni} \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

де  $\tilde{\Omega}_{ni} = (2i-1)\tilde{\Omega}$ . У випадку парного  $n$  ( $n = 2p$ ), формули (2.28) та (2.29) слід замінити на

$$\begin{pmatrix} f_{n1} \\ f_{n2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{n0} \\ v_{n0} \end{pmatrix} + \sum_{i=1}^p \begin{pmatrix} q_{ni} & g_{ni} \\ u_{ni} & v_{ni} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin(2i\tilde{\Omega}t) \\ \cos(2i\tilde{\Omega}t) \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

і

$$\begin{pmatrix} m_{n1} \\ m_{n2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{n0} \\ d_{n0} \end{pmatrix} + \sum_{i=1}^p \begin{pmatrix} a_{ni} & b_{ni} \\ c_{ni} & d_{ni} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin(2i\tilde{\Omega}t) \\ \cos(2i\tilde{\Omega}t) \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

відповідно. Згідно формули (2.27), параметри  $b_{n0}$  і  $d_{n0}$ , тобто, які не залежать від часу частини  $m_{n1}$  і  $m_{n2}$ , визначаються рівняннями

$$\begin{aligned} \alpha b_{n0} + d_{n0} &= g_{n0}, \\ -b_{n0} + \alpha d_{n0} &= v_{n0} \end{aligned} \quad (2.33)$$

(параметри  $g_{n0}$  і  $v_{n0}$  передбачаються відомими), а елементи матриці в (2.32) задовольняють те ж саме рівняння (2.30) з  $\Omega_{ni} = 2i\Omega$ .

Розв'язок рівняння (2.33) задається у вигляді

$$b_{n0} = \frac{1}{(1+\alpha^2)}(\alpha g_{n0} - v_{n0}), \quad d_{n0} = \frac{1}{(1+\alpha^2)}(g_{n0} + \alpha v_{n0}), \quad (2.34)$$

і розв'язок матричного рівняння (2.30) визначається як

$$\begin{aligned}
a_{ni} &= \frac{1}{(1 + \alpha^2)\Delta_{ni}} \left[ -\tilde{\Omega}_{ni}(1 - \alpha^2 - (1 + \alpha^2)^2\tilde{\Omega}_{ni}^2)g_{ni} + \alpha(1 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni}^2)q_{ni} \right. \\
&\quad \left. - 2\alpha\tilde{\Omega}_{ni}v_{ni} - (1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni}^2)u_{ni} \right], \\
b_{ni} &= \frac{1}{(1 + \alpha^2)\Delta_{ni}} \left[ \alpha(1 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni}^2)g_{ni} + \tilde{\Omega}_{ni}(1 - \alpha^2 - (1 + \alpha^2)^2\tilde{\Omega}_{ni}^2)q_{ni} \right. \\
&\quad \left. - (1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni}^2)v_{ni} + 2\alpha\tilde{\Omega}_{ni}u_{ni} \right], \\
c_{ni} &= \frac{1}{(1 + \alpha^2)\Delta_{ni}} \left[ 2\alpha\tilde{\Omega}_{ni}g_{ni} + (1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni}^2)q_{ni} \right. \\
&\quad \left. - \tilde{\Omega}_{ni}(1 - \alpha^2 - (1 + \alpha^2)^2\tilde{\Omega}_{ni}^2)v_{ni} + \alpha(1 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni}^2)u_{ni} \right], \\
d_{ni} &= \frac{1}{(1 + \alpha^2)\Delta_{ni}} \left[ (1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni}^2)g_{ni} - 2\alpha\tilde{\Omega}_{ni}q_{ni} \right. \\
&\quad \left. + \alpha(1 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni}^2)v_{ni} + \tilde{\Omega}_{ni}(1 - \alpha^2 - (1 + \alpha^2)^2\tilde{\Omega}_{ni}^2)u_{ni} \right].
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Тут  $\tilde{\Omega}_{ni} = (2i - 1)\tilde{\Omega}$ , якщо  $n = 2p - 1$ , і  $\tilde{\Omega}_{ni} = 2i\tilde{\Omega}$ , якщо  $n = 2p$ ,  $i = \overline{1, p}$ ,  
і

$$\Delta_{ni} = (1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}_{ni}^2)^2 + 4\alpha^2\tilde{\Omega}_{ni}^2. \tag{2.36}$$

Нижче ми розглянемо більш докладно наближення першого і другого порядків і обговоримо більш детально вплив членів вищого порядку на стаціонарну намагніченість.

### 2.3.2 Наближення першого порядку

У цьому наближенні внесок в стаціонарний розв'язок рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта  $\mathbf{m}_1$ , може бути легко знайденим із загальних виразів (2.35), в яких  $n = i = p = 1$  і  $\tilde{\Omega}_{ni} = \tilde{\Omega}$ . Дійсно, переписавши рівняння (2.28) у вигляді

$$\begin{aligned}
f_{11} &= q_{11} \sin(\tilde{\Omega}\tilde{t}) + g_{11} \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t}), \\
f_{12} &= u_{11} \sin(\tilde{\Omega}\tilde{t}) + v_{11} \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t})
\end{aligned} \tag{2.37}$$



і з використанням векторної формули (2.23) разом з визначенням (2.1) і (2.25), отримуємо

$$\begin{aligned} q_{11} &= \varrho h_m(\kappa_a + \alpha\lambda_a\delta_a), & g_{11} &= -h_m(\delta_a - \alpha\lambda_a\kappa_a), \\ u_{11} &= -\varrho h_m(\lambda_a\delta_a - \alpha\kappa_a), & v_{11} &= -h_m(\lambda_a\kappa_a + \alpha\delta_a), \end{aligned} \quad (2.38)$$

де для скорочення ми вводимо позначення

$$\begin{aligned} \kappa_a &= \cos \varphi_a, & \delta_a &= \sin \varphi_a, \\ \lambda_a &= \cos \vartheta_a, & \chi_a &= \sin \vartheta_a. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Підстановкою коефіцієнтів, поданих у (2.38) до виразів (2.35), знаходимо

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{h_m}{\Delta_{11}} [2\alpha\varrho\tilde{\Omega}^2\kappa_a + \alpha\tilde{\Omega}(1 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\lambda_a\kappa_a \\ &\quad + \tilde{\Omega}(1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\delta_a + \varrho(1 - 2\tilde{\Omega}^2 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\lambda_a\delta_a], \\ b_{11} &= \frac{h_m}{\Delta_{11}} [\varrho\tilde{\Omega}(1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\kappa_a + (1 - 2\tilde{\Omega}^2 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\lambda_a\kappa_a \\ &\quad - 2\alpha\tilde{\Omega}^2\delta_a - \alpha\varrho\tilde{\Omega}(1 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\lambda_a\delta_a], \\ c_{11} &= \frac{h_m}{\Delta_{11}} [\varrho(1 - 2\tilde{\Omega}^2 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\kappa_a + \tilde{\Omega}(1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\lambda_a\kappa_a \\ &\quad - \alpha\tilde{\Omega}(1 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\delta_a - 2\alpha\varrho\tilde{\Omega}^2\lambda_a\delta_a], \\ d_{11} &= \frac{h_m}{\Delta_{11}} [-\alpha\varrho\tilde{\Omega}(1 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\kappa_a - 2\alpha\tilde{\Omega}^2\lambda_a\kappa_a \\ &\quad - (1 - 2\tilde{\Omega}^2 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\delta_a - \varrho\tilde{\Omega}(1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)\lambda_a\delta_a]. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Так як, згідно (2.36),

$$\Delta_{11} = (1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)^2 + 4\alpha^2\tilde{\Omega}^2 \quad (2.41)$$

і умови  $\alpha \ll 1$ , частотна залежність вкладу першого порядку в стаціонарному стані знижує намагніченість,

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_1 &= (a_{11}\mathbf{e}_1 + c_{11}\mathbf{e}_2) \sin(\tilde{\Omega}t) \\ &\quad + (b_{11}\mathbf{e}_1 + d_{11}\mathbf{e}_2) \cos(\tilde{\Omega}t), \end{aligned} \quad (2.42)$$

демонструє, в загальному, резонансну поведінку поблизу частоти феромагнітного резонансу ( $\tilde{\Omega} = 1$ ). Однак слід зазначити, що в деяких окремих випадках, наприклад, якщо  $\vartheta_a = \varphi_a = 0$  и  $\varrho = -1$  або якщо  $\vartheta_a = \pi/2$ ,  $\varphi_0 = 0$  и  $\varrho = 0$ , резонанс відсутній. У першому випадку, фізична причина полягає в тому, що напрямок обертання магнітного поля протилежний напрямку природної прецесії намагніченості наночастинок. [83] На противагу цьому, в другому випадку, причина полягає в тому, що в цьому наближенні магнітне поле, напрямок якого паралельно осі анізотропії наночастинок, не індукує динаміку намагніченості. Важливо підкреслити, що, оскільки характеристики даної системи усереднюються в усіх напрямках одиничного вектора  $\mathbf{e}_a$ , який імовірно повинен бути рівномірно розподілений по сфері, не існує ніякого вкладу від наночастинок з фіксованими  $\vartheta_a$  і  $\varphi_a$ .

### 2.3.3 Наближення другого порядку

Представлення (2.31) відповідає наближенню другого порядку при  $n = 2$  і  $i = p = 1$ , в результаті отримуємо

$$\begin{aligned} f_{21} &= g_{20} + q_{21} \sin(2\tilde{\Omega}\tilde{t}) + g_{21} \cos(2\tilde{\Omega}\tilde{t}), \\ f_{22} &= v_{20} + u_{21} \sin(2\tilde{\Omega}\tilde{t}) + v_{21} \cos(2\tilde{\Omega}\tilde{t}). \end{aligned} \quad (2.43)$$

Звідси, використовуючи (2.24) та (2.42), знаходимо

$$\begin{aligned} g_{20} &= -\frac{h_m}{2} [(d_{11} + \alpha b_{11})\kappa_a + \varrho(c_{11} + \alpha a_{11})\delta_a] \chi_a, \\ v_{20} &= \frac{h_m}{2} [(b_{11} - \alpha d_{11})\kappa_a + \varrho(a_{11} - \alpha c_{11})\delta_a] \chi_a \end{aligned} \quad (2.44)$$

i

$$\begin{aligned}
q_{21} &= -\frac{h_m}{2} [(c_{11} + \alpha a_{11})\kappa_a + \varrho(d_{11} + \alpha b_{11})\delta_a] \chi_a, \\
g_{21} &= -\frac{h_m}{2} [(d_{11} + \alpha b_{11})\kappa_a - \varrho(c_{11} + \alpha a_{11})\delta_a] \chi_a, \\
u_{21} &= \frac{h_m}{2} [(a_{11} - \alpha c_{11})\kappa_a + \varrho(b_{11} - \alpha d_{11})\delta_a] \chi_a, \\
v_{21} &= \frac{h_m}{2} [(b_{11} - \alpha d_{11})\kappa_a - \varrho(a_{11} - \alpha c_{11})\delta_a] \chi_a.
\end{aligned} \tag{2.45}$$

Тоді, переписавши представлення (2.32) у вигляді

$$\begin{aligned}
m_{21} &= b_{20} + a_{21} \sin(2\tilde{\Omega}\tilde{t}) + b_{21} \cos(2\tilde{\Omega}\tilde{t}), \\
m_{22} &= d_{20} + c_{21} \sin(2\tilde{\Omega}\tilde{t}) + d_{21} \cos(2\tilde{\Omega}\tilde{t})
\end{aligned} \tag{2.46}$$

та використовуючи (2.44), з (2.34) безпосередньо виходить

$$\begin{aligned}
b_{20} &= -\frac{h_m}{2} (b_{11}\kappa_a + \varrho a_{11}\delta_a) \chi_a, \\
d_{20} &= -\frac{h_m}{2} (d_{11}\kappa_a + \varrho c_{11}\delta_a) \chi_a.
\end{aligned} \tag{2.47}$$

В результаті, підставляючи коефіцієнти (2.45) в загальні вирази (2.35), отримуємо

$$\begin{aligned}
a_{21} &= \frac{h\chi_a}{2\Delta_{21}} \left[ - (1 - 8\tilde{\Omega}^2 + 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)A - 2\alpha\tilde{\Omega}(1 + 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)B \right. \\
&\quad \left. - 8\alpha\tilde{\Omega}^2C + 2\tilde{\Omega}(1 - 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)D \right], \\
b_{21} &= \frac{h\chi_a}{2\Delta_{21}} \left[ 2\alpha\tilde{\Omega}(1 + 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)A - (1 - 8\tilde{\Omega}^2 + 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)B \right. \\
&\quad \left. - 2\tilde{\Omega}(1 - 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)C - 8\alpha\tilde{\Omega}^2D \right], \\
c_{21} &= \frac{h\chi_a}{2\Delta_{21}} \left[ 8\alpha\tilde{\Omega}^2A - 2\tilde{\Omega}(1 - 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)B \right. \\
&\quad \left. - (1 - 8\tilde{\Omega}^2 + 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)C - 2\alpha\tilde{\Omega}(1 + 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)D \right], \\
d_{21} &= \frac{h\chi_a}{2\Delta_{21}} \left[ 2\tilde{\Omega}(1 - 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)A + 8\alpha\tilde{\Omega}^2B \right. \\
&\quad \left. + 2\alpha\tilde{\Omega}(1 + 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)C - (1 - 8\tilde{\Omega}^2 + 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)D \right],
\end{aligned} \tag{2.48}$$

де

$$\begin{aligned} A &= a_{11}\kappa_a + \varrho b_{11}\delta_a, & B &= b_{11}\kappa_a - \varrho a_{11}\delta_a, \\ C &= c_{11}\kappa_a + \varrho d_{11}\delta_a, & D &= d_{11}\kappa_a - \varrho c_{11}\delta_a, \end{aligned} \quad (2.49)$$

і, відповідно до визначення (2.36),

$$\Delta_{21} = (1 - 4(1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)^2 + 16\alpha^2\tilde{\Omega}^2. \quad (2.50)$$

Таким чином, внесок другого порядку в зменшення стаціонарної намагніченості задається у вигляді

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_2 &= b_{20}\mathbf{e}_1 + d_{20}\mathbf{e}_2 + (a_{21}\mathbf{e}_1 + c_{21}\mathbf{e}_2) \sin(2\tilde{\Omega}t) \\ &\quad + (b_{21}\mathbf{e}_1 + d_{21}\mathbf{e}_2) \cos(2\tilde{\Omega}t) - \frac{1}{2}\mathbf{m}_1^2\mathbf{e}_a. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Цей внесок, на відміну від апроксимації першого порядку, має резонансну залежність від наведеної частоти  $\tilde{\Omega}$  не тільки в безпосередній близькості від резонансу першого порядку ( $\tilde{\Omega} = 1$ ), але, і як випливає з (2.48) та (2.50), також і в безпосередній близькості від резонансу другого порядку ( $\tilde{\Omega} = 1/2$ ). Слід зазначити, що для наночастинок, які мають вісь анізотропії перпендикулярну площині поляризації (при  $\chi_a = 0$ ), цей ефект відсутній.

#### 2.3.4 Середня намагніченість наночастинок

Тепер, використовуючи наведені вище результати теорії збурень, визначимо середнє значення намагніченості наночастинок  $\langle \overline{\mathbf{m}} \rangle$  в квадратичному наближенні. Так як в цьому випадку  $\mathbf{m} = \mathbf{e}_a + \mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2$  з  $\mathbf{m}_1$  і  $\mathbf{m}_2$  задається формулою (2.42) и (2.51), відповідно, осередненням  $\mathbf{m}$  за часом отримуємо

$$\overline{\mathbf{m}} = b_{20}\mathbf{e}_1 + d_{20}\mathbf{e}_2 + \left(1 - \frac{1}{2}\overline{\mathbf{m}_1^2}\right)\mathbf{e}_a. \quad (2.52)$$

Звідси, з визначень (2.25) і (2.1) для одиничних векторів  $\mathbf{e}_1$ ,  $\mathbf{e}_2$  і  $\mathbf{e}_a$ ,

декартові компоненти  $\overline{\mathbf{m}}$  можна записати у вигляді

$$\overline{m}_x = b_{20}\lambda_a\kappa_a - d_{20}\delta_a + \left(1 - \frac{1}{2}\overline{\mathbf{m}}_1^2\right)\chi_a\kappa_a, \quad (2.53a)$$

$$\overline{m}_y = b_{20}\lambda_a\delta_a + d_{20}\kappa_a + \left(1 - \frac{1}{2}\overline{\mathbf{m}}_1^2\right)\chi_a\delta_a, \quad (2.53b)$$

$$\overline{m}_z = -b_{20}\chi_a + \left(1 - \frac{1}{2}\overline{\mathbf{m}}_1^2\right)\lambda_a. \quad (2.53c)$$

Тоді, осереднюємо ці компоненти за кутами  $\vartheta_a$  і  $\varphi_a$ , розподілених з густиною ймовірності (2.2). Приймаючи до уваги, що  $\langle F(\vartheta_a, \varphi_a) \rangle = 0$ , якщо  $F(\pi - \vartheta_a, \varphi_a) = -F(\vartheta_a, \varphi_a)$  або  $F(\vartheta_a, \pi + \varphi_a) = -F(\vartheta_a, \varphi_a)$ , можна переконатися, що всі усереднення в правих частинах (2.53a) і (2.53b) дорівнюють нулю, і тому

$$\langle \overline{m}_x \rangle = \langle \overline{m}_y \rangle = 0. \quad (2.54)$$

На противагу цьому, за винятком випадку  $\langle \lambda_a \rangle = 0$ , інші усереднення в правій частині (2.53c), тобто  $\langle b_{20}\chi_a \rangle$  та  $\langle \overline{\mathbf{m}}_1^2\lambda_a \rangle$  не дорівнюють нулю. Дійсно, використовуючи раніше отримані результати (2.47) та (2.40) замість умови  $\langle \chi_a^2\kappa_a^2 \rangle = \langle \chi_a^2\delta_a^2 \rangle = 1/3$ , які можуть бути перевірені безпосередньо з визначення (2.8), отримаємо

$$\langle b_{20}\chi_a \rangle = -\frac{\varrho h_m^2 \tilde{\Omega}}{3\Delta_{11}}(1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2). \quad (2.55)$$

Аналогічним чином, беручи до уваги, що

$$\overline{\mathbf{m}}_1^2 = \frac{1}{2}(a_{11}^2 + b_{11}^2 + c_{11}^2 + d_{11}^2) \quad (2.56)$$

і  $\langle \lambda_a^2\kappa_a^2 \rangle = \langle \lambda_a^2\delta_a^2 \rangle = 1/6$ , можна показати, що

$$\begin{aligned} \langle \overline{\mathbf{m}}_1^2\lambda_a \rangle &= \frac{2\varrho h_m^2 \tilde{\Omega}}{3\Delta_{11}^2} \left[ (1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)(1 - 2\tilde{\Omega}^2 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2) \right. \\ &\quad \left. + 2\alpha^2\tilde{\Omega}^2(1 + (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2) \right]. \end{aligned} \quad (2.57)$$

Нарешті, так як  $\langle \overline{m}_z \rangle = -\langle b_{20}\chi_a \rangle - \langle \overline{\mathbf{m}}_1^2\lambda_a \rangle/2$ , із (2.55) і (2.57) випливає,

що  $\langle \overline{m_z} \rangle = -\varrho(1 + \alpha^2)h_m^2\tilde{\Omega}^3/(3\Delta_{11})$  або, з позначенням (2.41),

$$\langle \overline{m_z} \rangle = -\frac{1}{3}\varrho(1 + \alpha^2)h_m^2 \frac{\tilde{\Omega}^3}{(1 - (1 + \alpha^2)\tilde{\Omega}^2)^2 + 4\alpha^2\tilde{\Omega}^2}. \quad (2.58)$$

Таким чином, еліптична поляризація магнітного поля (1.3а), яка не має постійних складових, намагнічує розглянуту систему феромагнітних наночастинок. Так як ці системи характеризуються рівномірним розподілом напрямків легких осей, без цього поля не існує власної намагніченості. Напрямок індукованої намагніченості перпендикулярний площині поляризації і залежить від напрямку обертання магнітного поля (тобто від знака  $\varrho$ ). Явище індукованого намагнічування має винятково динамічне походження: відповідно до рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта (2.5), вимушена динаміка зменшує намагніченість  $\mathbf{m}$  в наночастинках, які характеризуються векторами  $\mathbf{e}_a$  і  $-\mathbf{e}_a$ , абсолютно порізному. Варто нагадати, що індукована намагніченість (2.58) є ефектом другого порядку. Її головною особливістю є те, що  $\langle \overline{m_z} \rangle$  навколо точки  $\tilde{\Omega} = 1$  залежить від  $\tilde{\Omega}$  резонансним чином ( $\max |\langle \overline{m_z} \rangle| \simeq |\varrho|h_m^2/(12\alpha^2)$ , де  $\alpha \ll 1$ ). Слід також зазначити, що лінійно поляризоване магнітне поле (при  $\varrho = 0$ ) не може намагнітити системи феромагнітних наночастинок, що розглядаються.

Для перевірки теоретичних результатів, ми чисельно визначили стаціонарний розв'язок  $\mathbf{m}^{(l)}$  ( $l = \overline{1, N}$ ) рівняння (2.5) (у всіх наших чисельних розрахунках  $\alpha = 0.05$ ) для  $N = 2 \cdot 10^3$  наночастинок, у яких напрямки легкої осі розподілені з щільністю ймовірності (2.2). Тоді, обчислюючи середню намагніченість як  $\langle \overline{\mathbf{m}} \rangle_{\text{num}} = (1/N\tilde{T}) \sum_{l=1}^N \int_0^{\tilde{T}} \mathbf{m}^{(l)} dt$ , ми переконалися, що декартові компоненти  $\langle \overline{\mathbf{m}} \rangle_{\text{num}}$  дуже добре узгоджуються з припущеннями в (2.54) і (2.58), якщо амплітуда магнітного поля  $h_m$ , що зменшується, досить мала. Для ілюстрації, на Рис. 2.1 ми показали залежність  $\langle \overline{m_z} \rangle$  і  $\langle \overline{m_z} \rangle_{\text{num}}$  на низькій частоті для різних поляризацій зовнішнього магнітного поля щодо малої амплітуди.

Різниця між  $\langle \overline{m_z} \rangle$  та  $\langle \overline{m_z} \rangle_{\text{num}}$  як функція  $\tilde{\Omega}$  зростає зі збільшенням  $h_m$ . Для цього є кілька причин. Однією з них є те, що намагніченість

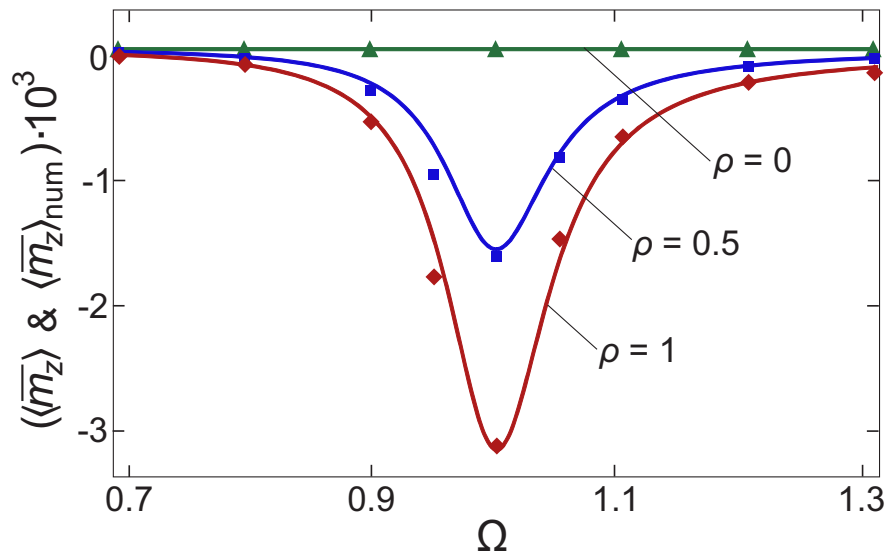


Рисунок 2.1 – Частотна залежність  $z$ -компоненти намагніченості. Суцільні лінії представляють собою теоретичний результат (2.58), маркерами показані чисельні результати для  $\langle \overline{m}_z \rangle_{\text{num}}$  (розмір маркерів перекриває величину похибки). Теоретичні та чисельні результати представлені для циркулярного ( $\rho = 1$ ), еліптично- ( $\rho = 0.5$ ) та лінійно-поляризованого ( $\rho = 0$ ) магнітного поля амплітудою  $h_m = 0.01$ .

деяких наночастинок, в залежності від напрямку їх легких осей, може переходити в новий стійкий стан зі збільшенням  $\tilde{\Omega}$ , якщо амплітуда  $h_m$  не дуже мала. В такому випадку, перехід відбувається при  $\tilde{\Omega} = \tilde{\Omega}_{\text{tr}}$ , де  $\tilde{\Omega}_{\text{tr}} (< 1)$  – частота переходу, і супроводжується різкою зміною стаціонарної траєкторії намагніченості (див. Рис. 4.11). Періоди усталених режимів  $\tilde{T}$  трохи нижче і трохи вище частоти переходу – рівні, перемикання з стаціонарного стану призводить до сильного зміни  $z$ -компоненти намагніченості при  $\tilde{\Omega} = \tilde{\Omega}_{\text{tr}}$  (тому що  $|\mathbf{m}^{(l)}| = 1$ ). Як показано на рис. 4.12, через існування частоти переходу  $\tilde{\Omega}_{\text{tr}}$  і його слабкій залежності від напрямків легких осей, частотна залежність  $\langle \overline{m}_z \rangle_{\text{num}}$  якісно відрізняється від теоретичного результату (2.58). При невеликому збільшенні  $h_m$ , пік  $|\langle \overline{m}_z \rangle_{\text{num}}|$  зміщується в бік низьких частот, а його максимальне значення зменшується, на відміну залежності  $|\langle \overline{m}_z \rangle|$ . В той же час, умова  $\langle \overline{m}_z \rangle|_{-\rho} = -\langle \overline{m}_z \rangle|_{\rho}$ , яка впливає з (2.58), має місце і для  $\langle \overline{m}_z \rangle_{\text{num}}$ . Відзначимо також, що невелика різниця між  $\langle \overline{m}_z \rangle$  і  $\langle \overline{m}_z \rangle_{\text{num}}$  при  $h_m = 0.01$  (див. Рис. 2.1,  $\tilde{\Omega} \simeq 0.95$ ) впливає з того факту, що в даному випадку є невелика частина наночастинок, в яких як і раніше має місце перехід до нового стаціонарного стану. Їх частка зменшується зі зменшенням  $h_m$  і,

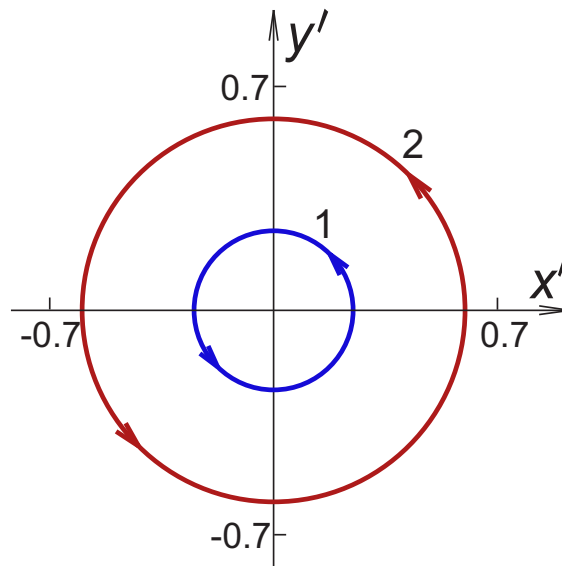


Рисунок 2.2 – Проекція стаціонарних траєкторій наведеної намагніченості на площину  $x'y'$  трохи нижче (1) і трохи вище (2) частоти переходу. Траєкторії отримані за допомогою чисельного розв'язку рівняння (2.5) для наночастинок, чий напрямок легкої осі характеризується кутами  $\vartheta_a = \pi/3$  і  $\varphi_a = 0$ , на які діє магнітне поле амплітудою  $h_m = 0.05$ , яке має кругову поляризацію ( $\varrho = 1$ ). В цьому випадку намагніченість наночастинок обертається в напрямку проти годинникової стрілки (показано стрілками), траєкторії майже кругові, а частота переходу приблизно визначається  $\tilde{\Omega}_{tr} \simeq 0.84$ .

наприклад, за  $h_m = 0.005$ , різниця практично зникає.

Друга причина полягає в тому, що роль членів вищого порядку  $\mathbf{m}_n$  ( $n \geq 3$ ) в розкладанні намагніченості  $\mathbf{m}$ , якими нехтували раніше в  $\langle \overline{m_z} \rangle$ , росте зі збільшенням  $h_m$ . Так, відповідно до (2.36), ці значення залежать від  $\tilde{\Omega}$  резонансним чином не тільки поблизу точки  $\tilde{\Omega} = 1$  (наприклад, резонансну поведінку  $\mathbf{m}_n$  з  $n = 2p$  відбувається навколо значень  $\tilde{\Omega} = 1/(2i)$ ,  $i = \overline{1, p}$ ), частотна залежність  $\mathbf{m}$  в наближенні  $n$ -го порядку може сильно відрізнятись від результату, отриманого в наближенні другого порядку. Незважаючи на це, усереднення  $\mathbf{m}$  може усунути деякі з резонансів (зокрема, в  $\langle \overline{m_z} \rangle$ , на відміну від  $m_z$ , не має ніякого резонансу на  $\tilde{\Omega} = 1/2$  в наближенні другого порядку), можна очікувати, що  $\langle \overline{m_z} \rangle$  як функція  $\tilde{\Omega}$  поводить ся якісно інакше для наближення більш високого порядку.

Щоб продемонструвати це в явному вигляді, давайте спочатку розглянемо наближення третього порядку за  $h_m$ , коли  $\mathbf{m} = \mathbf{e}_a + \sum_{n=1}^3 \mathbf{m}_n$ .



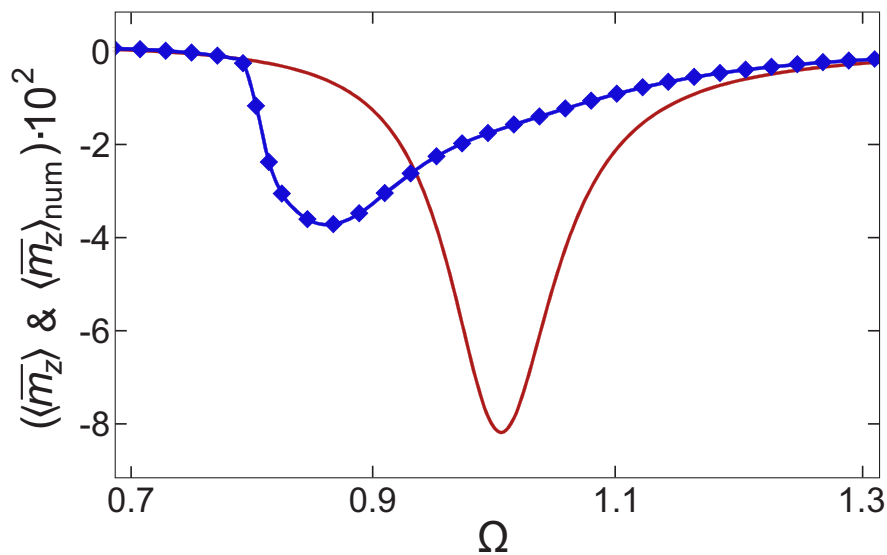


Рисунок 2.3 – Частотна залежність  $z$ -компоненти намагніченості за  $h_m = 0.05$  і  $\varrho = 1$ . Теоретичні ( $\langle \overline{m}_z \rangle$ ) і чисельні ( $\langle \overline{m}_z \rangle_{\text{num}}$ ) результати показані суцільними лініями і маркерами відповідно. Різниця між ними обумовлена переходами в динаміці намагніченості, аналогічно тій, що показана на Рис. 2.2 (ці переходи в наночастинках з різними напрямками легких осей відбуваються на різних частотах).

Використовуючі (2.16) та (2.29), знаходимо  $\overline{\mathbf{m}}_3 \cdot \mathbf{e}_a = -\overline{\mathbf{m}}_1 \cdot \overline{\mathbf{m}}_2 = 0$  і  $\overline{\mathbf{m}}_3 \cdot \mathbf{e}_1 = \overline{\mathbf{m}}_3 \cdot \mathbf{e}_2 = 0$ , тобто,  $\overline{\mathbf{m}}_3 = 0$ . Це означає, що  $\langle \overline{\mathbf{m}} \rangle = \langle \overline{\mathbf{m}}_2 \rangle$ , таким чином, формула (2.58) має місце і в наближенні третього порядку. На противагу цьому, в наближенні четвертого порядку за  $h_m$ , при  $\mathbf{m} = \mathbf{e}_a + \sum_{n=1}^4 \mathbf{m}_n$ , отримуємо  $\langle \overline{\mathbf{m}} \rangle = \langle \overline{\mathbf{m}}_2 \rangle + \langle \overline{\mathbf{m}}_4 \rangle$ , де у відповідності до (2.17) і (2.32),

$$\langle \overline{\mathbf{m}}_4 \rangle = -\frac{1}{2} \langle \overline{\mathbf{m}}_2^2 \mathbf{e}_a \rangle - \langle (\overline{\mathbf{m}}_1 \cdot \overline{\mathbf{m}}_3) \mathbf{e}_a \rangle. \quad (2.59)$$

Резонанс при  $\tilde{\Omega} = 1/3$ , який пов'язаний з частотною залежністю  $\mathbf{m}_3$ , усувається шляхом тимчасового усереднення, а останнє значення в (2.59), якщо воно відмінне від нуля, резонансно залежить від  $\tilde{\Omega}$  тільки в безпосередній близькості від точки  $\tilde{\Omega} = 1$ . Тому, так як цей вираз порядку  $h_m^4$ , то це якісно не змінює результат другого порядку (2.58). Що стосується першого виразу в правій частині (2.59), то, згідно (2.47)–(2.51), воно демонструє резонансну поведінку навколо двох знижених частот  $\tilde{\Omega} = 1/2$  і  $\tilde{\Omega} = 1$ . Цей вираз також має порядок  $h_m^4$ , але в цілому, ним можна знехтувати всюди, за винятком околиці точки  $\tilde{\Omega} = 1/2$ . У

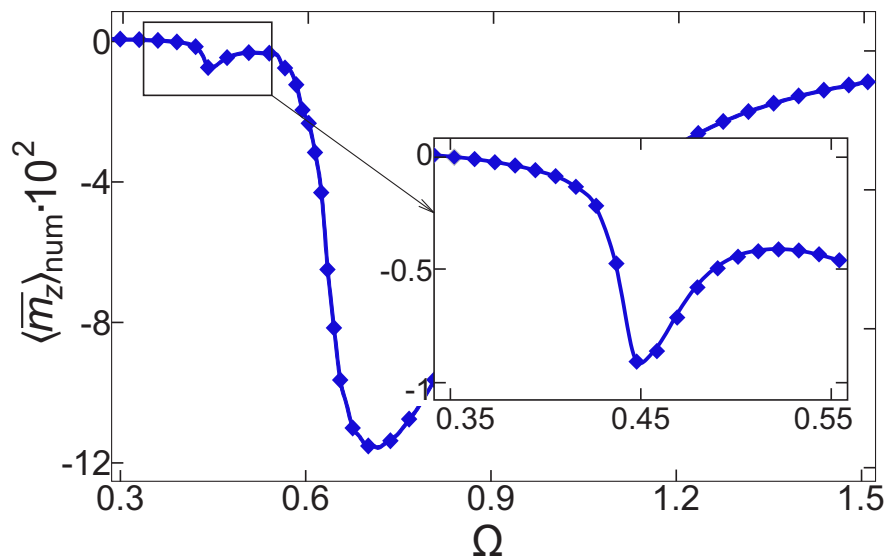


Рисунок 2.4 – Залежність  $\langle \overline{m}_z \rangle_{\text{num}}$  від безрозмірної частоти  $\tilde{\Omega}$  за  $h_m = 0.14$  і  $\varrho = 1$ . Вставка: та ж залежність показана в околі резонансу другого порядку.

цій частотній області можна очікувати, що  $z$ -компонента першого члена,  $-\langle \overline{\mathbf{m}}_2^2 \lambda_a \rangle / 2$ , перевищує  $\langle \overline{m}_z \rangle$ , якщо наведена амплітуда магнітного поля  $h_m$  не дуже мала. Як видно з попередніх результатів, в залежності від  $h_m$ ,  $z$ -компонента  $\langle \overline{\mathbf{m}} \rangle$  в наближенні порядку  $2p$  може демонструвати резонансну поведінку поблизу субгармонічних частот  $\tilde{\Omega} = 1/i$  з  $i = \overline{1, p}$  (резонансній частоті  $\tilde{\Omega} = 1/i$  відповідає  $i$ -й порядок резонансу). Частотна залежність  $\langle \overline{m}_z \rangle_{\text{num}}$ , ілюструє роль резонансу другого порядку, показаного на Рис. 2.4. З тієї ж причини, що і на рис. 2.3, локальний мінімум  $\langle \overline{m}_z \rangle_{\text{num}}$  зміщується (по відношенню до аналітичних результатів  $\tilde{\Omega} = 1/2$ ) в сторону більш низких частот.

При подальшому збільшенні  $h_m$ , динаміка намагнічування стає складнішою. Зокрема, в залежності від  $h_m$  і напрямків легких осей, перехід  $\mathbf{m}$  до нового стійкого стану може відбуватися таким чином, що знак скалярного добутку  $\mathbf{m} \cdot \mathbf{e}_a$  змінюється. Крім того, може бути кілька змін знака при подальшому зростанні частоти магнітного поля. Іншими словами, збільшення  $\tilde{\Omega}$  може привести до багаторазового перемикання намагніченості наночастинок. Оскільки кожне перемикання супроводжується сильною зміною  $m_z$  (якщо  $\vartheta_a$  не дуже близько до  $\pi/2$ ), ці перемикання можуть істотно вплинути на частотну залежність  $\langle \overline{m}_z \rangle_{\text{num}}$ , див. рис. 2.5. Для ілюстрації, на Рис. 2.6 показані приклади стаціонарних

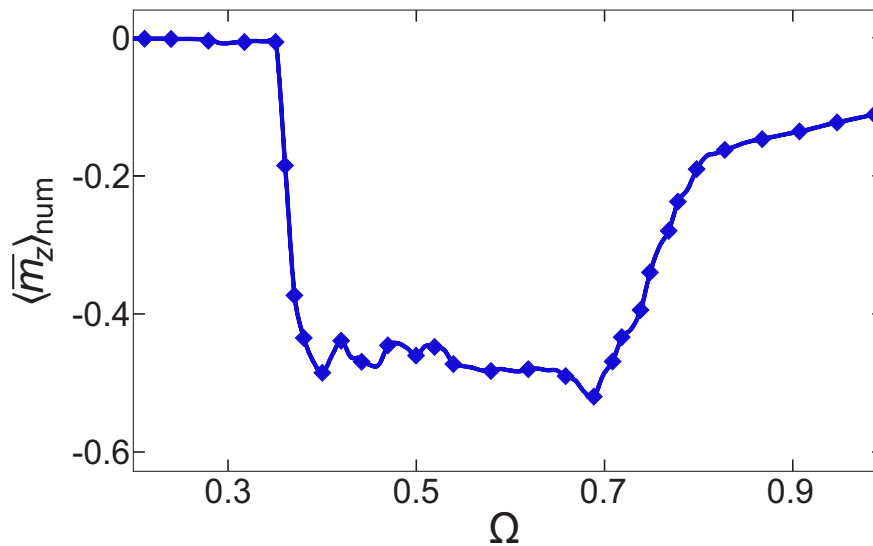


Рисунок 2.5 – Частотна залежність  $\langle \overline{m_z} \rangle_{\text{num}}$  при  $h_m = 0.25$  і  $\varrho = 1$ . Немонотонність  $\langle \overline{m_z} \rangle_{\text{num}}$ , яка відбувається в інтервалі  $(0.4, 0.7)$ , є результатом перемикання намагніченості в деяких наночастинках; ширина цього інтервалу зростає зі збільшенням  $h_m$ .

траєкторій  $\mathbf{m}$  безпосередньо до і після перемикання. Відзначимо також, що, якщо  $h_m$  досить велике, може існувати частотний інтервал, де динаміка намагніченості хаотична, тобто еволюція в часі  $\mathbf{m}$  надзвичайно чутлива до початкових умов. У наших чисельних розрахунках, інтервал усереднення за часом  $\tilde{T}$  для наночастинок з хаотичною динамікою намагніченості обраний в інтервалах  $2 \cdot 10^3/\tilde{\Omega}$  і  $4 \cdot 10^3/\tilde{\Omega}$  для  $\tilde{\Omega} < 1$  і  $\tilde{\Omega} \geq 1$ , відповідно. Виявилось, що індуковані частотою переходи до хаотичного режиму не особливо змінюють частотну залежність  $\langle \overline{m_z} \rangle_{\text{num}}$ .

### 2.3.5 Потужність втрат

Згідно з визначенням (2.10) і поданням ряду (2.14), втрата потужності при  $h_m \ll 1$  і за умови, що намагніченість  $\mathbf{m}$  не переходить в інший стаціонарний стан зі збільшенням  $h_m$  та  $\tilde{\Omega}$ , може бути виражена в загальному вигляді

$$q = \alpha \left\langle \overline{\left( \sum_{n=1}^{\infty} \dot{\mathbf{m}}_n \right)^2} \right\rangle. \quad (2.60)$$

Для простоти і наочності ми обмежимося другим порядком в розкладанні

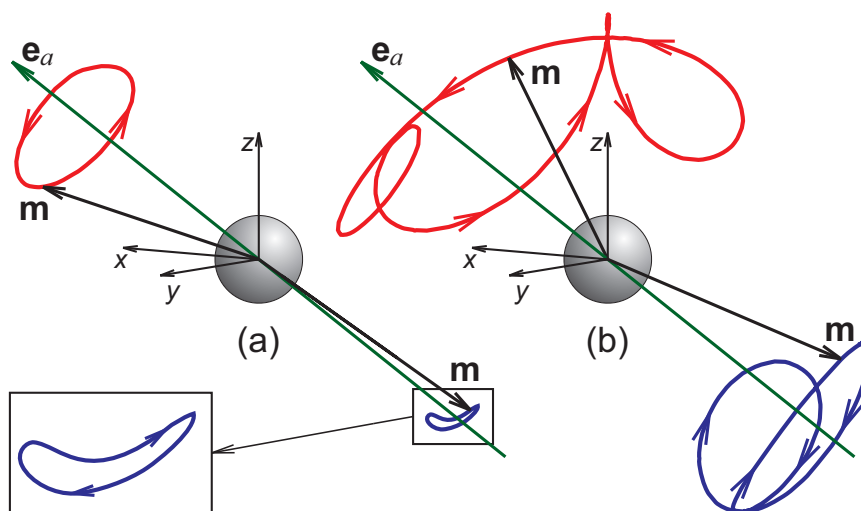


Рисунок 2.6 – Рівноважні траєкторії наведеної намагніченості  $\mathbf{m}$  для наночастинок з  $\vartheta_a = \pi/3$  і  $\varphi_a = 0$ , які обумовлені циркулярно поляризованим магнітним полем ( $\varrho = 1$ ) з амплітудою  $h_m = 0.14$  (a) та  $h_m = 0.25$  (b). Верхні (нижні) траєкторії відповідають полю частоти безпосередньо перед (після) перемиканням. При  $h_m = 0.14$  верхня траєкторія відповідає  $\tilde{\Omega} = 0.6$ , нижня до  $\tilde{\Omega} = 0.601$ , тобто  $\tilde{\Omega}_{tr} \in (0.6, 0.601)$ , і прецесія намагніченості в обох станах відбувається з частотою поля  $\tilde{\Omega}$ . В протилежному випадку, в  $h_m = 0.25$  верхня траєкторія відповідає  $\tilde{\Omega} = 0.485$ , нижня до  $\tilde{\Omega} = 0.486$ ,  $\tilde{\Omega}_{tr} \in (0.485, 0.486)$ , і, в той час як прецесія намагніченості в нижньому стані відбувається з частотою поля, частота прецесії в верхньому стані в два рази менше, ніж  $\tilde{\Omega}$ .

$q$  за ступенями  $h_m$ . У цьому наближенні наведений вище вираз говорить

$$q = \alpha \langle \overline{\dot{\mathbf{m}}_1^2} \rangle. \quad (2.61)$$

Згідно (2.42),  $\overline{\dot{\mathbf{m}}_1^2} = \tilde{\Omega}^2 \overline{\dot{\mathbf{m}}_1^2}$  та  $\overline{\dot{\mathbf{m}}_1^2}$  подається виразом (2.56), що ж стосується наведеної втрати потужності, то її можна записати у вигляді  $q = \alpha \tilde{\Omega}^2 (\langle a_{11}^2 \rangle + \langle b_{11}^2 \rangle + \langle c_{11}^2 \rangle + \langle d_{11}^2 \rangle)$ . Розрахунок цих середніх значень може бути проведений за допомогою виразів (2.40) разом з умовами  $\langle \kappa_a^2 \rangle = \langle \delta_a^2 \rangle = 1/2$  та  $\langle \lambda_a^2 \kappa_a^2 \rangle = \langle \lambda_a^2 \delta_a^2 \rangle = 1/6$ , в результаті чого ми отримуємо

$$q = \frac{1}{3} \alpha (1 + \varrho^2) h_m^2 \frac{\tilde{\Omega}^2 (1 + (1 + \alpha^2) \tilde{\Omega}^2)}{(1 - (1 + \alpha^2) \tilde{\Omega}^2)^2 + 4\alpha^2 \tilde{\Omega}^2}. \quad (2.62)$$

Таким чином, в наближенні другого порядку, зменшення втрати потужності  $q$  в залежності від наведеної частоти  $\tilde{\Omega}$  демонструє резонансну поведінку поблизу точки  $\tilde{\Omega} = 1$  і задовольняє умовам  $\max q \simeq (1 + \varrho^2) h_m^2 / (6\alpha)$  за умов  $\alpha \ll 1$  і  $q \simeq \alpha (1 + \varrho^2) h_m^2 / 3$  при  $\tilde{\Omega} \gg 1$  і  $\alpha \ll 1$ . Це не дивно, оскільки наближення другого порядку по втраті потужності відповідає наближенню першого порядку за намагніченістю. Щоб перевірити формулу (2.62), ми чисельно розраховували зниження втрат потужності як  $q_{\text{num}} = (1/N\tilde{T}) \sum_{l=1}^N \int_0^{\tilde{T}} q^{(l)} d\tilde{t}$ , де  $q^{(l)} = \alpha (\dot{\mathbf{m}}^{(l)})^2$ . Якщо амплітуда магнітного поля  $h_m$  досить мала, чисельні результати добре узгоджуються з аналітичними, як видно на Рис. 2.7. З тих же причин, що і для  $\langle \overline{m_z} \rangle$ , збільшення  $h_m$  призводить до появи різниці між  $q$  і  $q_{\text{num}}$ , див. Рис. 2.8.

Якщо амплітуда магнітного поля не дуже мала, нелінійні резонанси можуть впливати на частотну залежність втрати потужності. Зокрема, за умови, що  $\dot{\mathbf{m}} = \sum_{n=1}^3 \dot{\mathbf{m}}_n$  і, беручи до уваги, що відповідно до (2.42) і (2.51)  $\overline{\dot{\mathbf{m}}_1 \cdot \dot{\mathbf{m}}_2} = 0$ , отримуємо (з точністю до порядку  $h_m^4$ )

$$q = \alpha \langle \overline{\dot{\mathbf{m}}_1^2} + \overline{\dot{\mathbf{m}}_2^2} + 2\overline{\dot{\mathbf{m}}_1 \cdot \dot{\mathbf{m}}_3} \rangle. \quad (2.63)$$

Як видно з наведеного вище обговорення, член з  $\dot{\mathbf{m}}_1 \cdot \dot{\mathbf{m}}_3$  який викликає резонансну поведінку в безпосередній близькості від наведеної частоти  $\tilde{\Omega} = 1/3$ , звертаються в нуль при усередненні за часом. Таким чином, єдиний

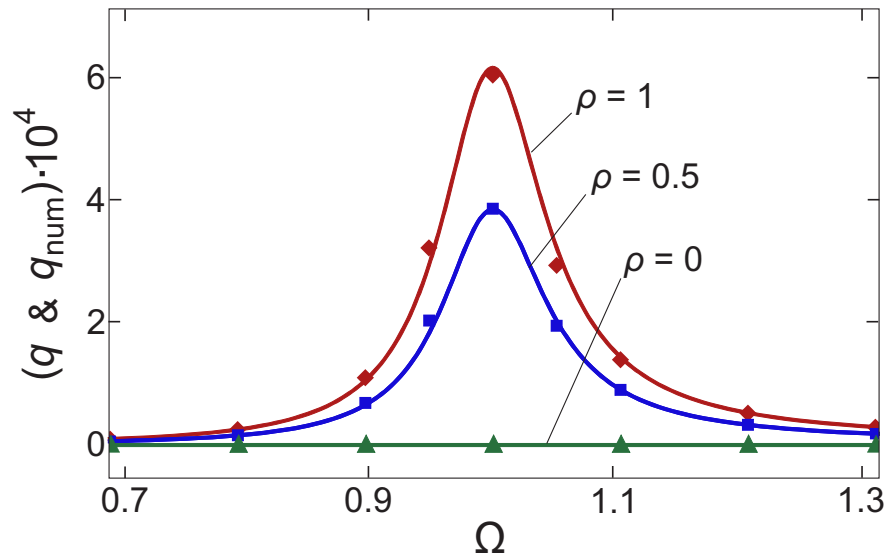


Рисунок 2.7 – Частотна залежність наведеної втрати потужності для циркулярного ( $\varrho = 1$ ), еліптичного ( $\varrho = 0.5$ ) та лінійно-поляризованого ( $\varrho = 0$ ) магнітного поля амплітудою  $h_m = 0.01$ . Чисельні результати ( $q_{\text{num}}$ ) отримані шляхом розв’язку рівняння (2.5) представлені символами, а суцільні лінії представляють теоретичний результат (2.62).

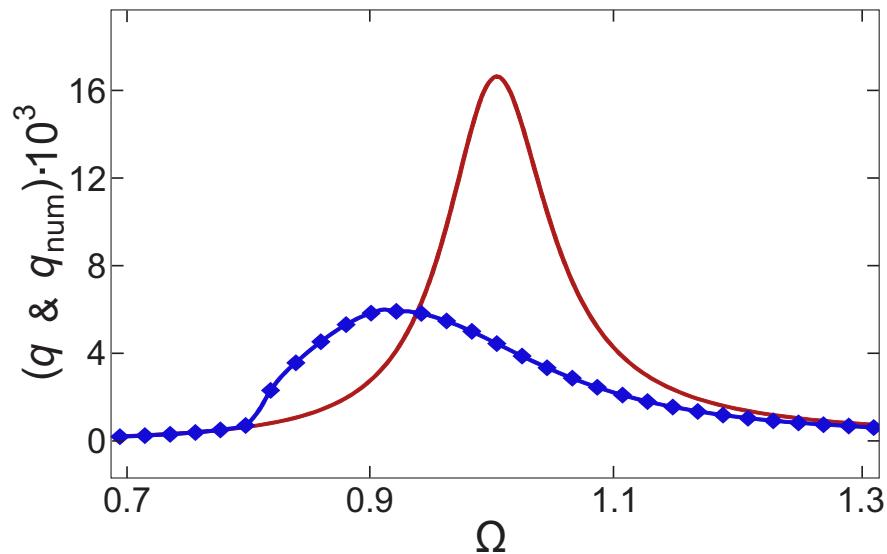


Рисунок 2.8 – Частотна залежність наведеної втрати потужності для  $h_m = 0.05$  и  $\varrho = 1$ . Теоретичні ( $q$ ) та чисельні ( $q_{\text{num}}$ ) результати показані суцільною лінією і символами відповідно. Різниця між  $q$  і  $q_{\text{num}}$  виникає з тих же причин, що і на рис. 2.3.

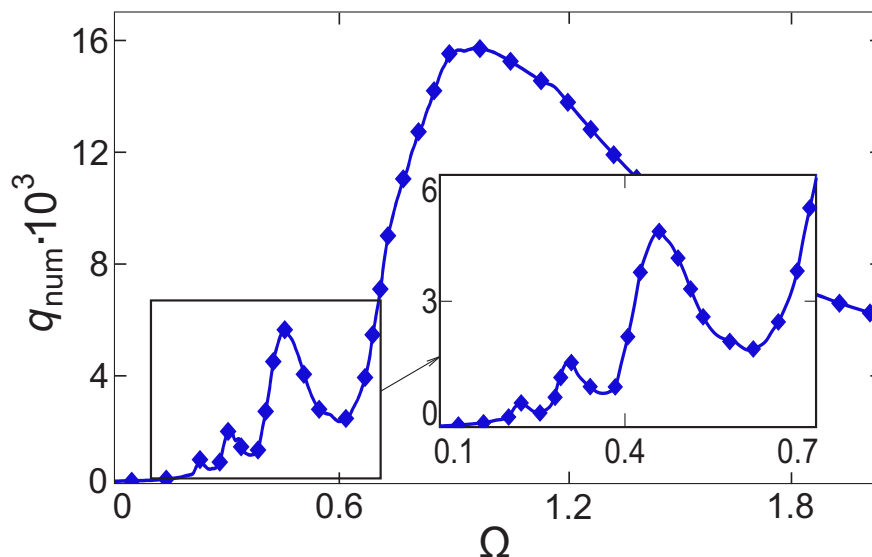


Рисунок 2.9 – Залежність  $q_{\text{num}}$  від наведеної частоти  $\tilde{\Omega}$  при  $h_m = 0.3$  и  $\varrho = 1$ . Примітка: та ж залежність в безпосередній близькості від четвертого порядку ( $\tilde{\Omega} = 1/4$ ), третього порядку ( $\tilde{\Omega} = 1/3$ ) і другого порядку ( $\tilde{\Omega} = 1/2$ ) резонансів. Зміщення піка позицій  $q_{\text{num}}$  зліва має те ж походження, що і зміщення мінімумів  $\langle \overline{m_z} \rangle_{\text{num}}$ .

член  $\alpha \langle \overline{\mathbf{m}_2^2} \rangle$ , порядку  $h_m^4$ , може якісно змінити залежність частоти втрати потужності (2.62), порядком  $h_m^2$ . Згідно (2.48)–(2.51), це відбувається поблизу резонансу другого порядку, тобто в малій околиці наведеної частоти  $\tilde{\Omega} = 1/2$ . Аналогічний аналіз передбачає і підтверджені чисельно результати, див. рис. 2.9, що також можуть існувати резонанси вищих порядків. Зверніть увагу, що ці резонанси більш виражені для  $q_{\text{num}}$  ніж для  $\langle \overline{m_z} \rangle_{\text{num}}$ .

### 2.3.6 Прецесійний режим руху магнітного моменту з врахуванням спіно-поляризованого струму

Рівняння 2.13 може бути розв'язане аналітично лише в декількох специфічних випадках, коли зовнішня дія має достатньо простий характер. Зокрема, спочатку розглядається режим однорідної прецесії, коли магнітний момент обертається навколо осі анізотропії так, що його кут з цією віссю завжди постійний. Зазначений режим реалізовується, коли на магнітний момент діє магнітне поле, що обертається у площині, перпендикулярній до осі анізотропії, та (або) спіно-поляризованого струму, сталого за модулем та з напрямком вектора спінової поляризації  $\mathbf{s}$

спрямованим вздовж осі  $z$ . Далі, розглядається режим синхронних коливань, коли на магнітний момент  $\mathbf{m}$  діє лише змінний спін-поляризований струм, з напрямком вектору спінової поляризації  $\mathbf{s}$  спрямованим вздовж осі  $z$ . Нарешті, розглядається режим малих осциляцій, який може бути зумовленим малим змінним зовнішнім полем, прикладеним у площині, перпендикулярній до осі анізотропії, та (або) змінним спін-поляризованим струмом малої величини, коли вектор  $\mathbf{s}$  коливається також у площині, перпендикулярній до осі анізотропії.

Запишемо математичні умови реалізації прецесійного режиму. На додачу до дії циркулярно-поляризованого поля (1.3а) має виконуватися умова

$$\xi_d \mathcal{J}(\tilde{t})(\mathbf{s} \times \mathbf{m}) = \xi_d \mathcal{J}_0(\mathbf{e}_z \times \mathbf{m}), \quad (2.64)$$

де  $\mathcal{J}_0$  стала густина струму, віднесена до величини поля анізотропії. В сферичних координатах рівняння 2.13 можна подати як

$$(1 + \alpha^2) \dot{\vartheta} = \gamma h_m \sin(\varphi - \varrho \tilde{\Omega} \tilde{t}) + \gamma \xi_d \mathcal{J}_0 \sin \vartheta - \gamma \alpha \left[ \sin \vartheta (\cos \vartheta + h_{z0}) - h_m \cos \vartheta \cos(\varphi - \varrho \tilde{\Omega} \tilde{t}) \right] \quad (2.65a)$$

$$(1 + \alpha^2) \dot{\varphi} = \gamma \left[ \cos \vartheta + h_{z0} - h_m \cot \vartheta \cos(\varphi - \varrho \tilde{\Omega} \tilde{t}) \right] - \frac{\gamma \alpha}{\sin \vartheta} h_m \sin(\varphi - \varrho \tilde{\Omega} \tilde{t}) + \gamma \alpha \xi_d \mathcal{J}_0 \quad (2.65b)$$

де  $\vartheta$  – полярний кут, а  $\varphi$  – азимутальний кут вектора  $\mathbf{m}$ . Як зазначалось, рівняння (2.65а) та (2.65b) можуть мати розв'язки в окремих випадках. Нехай зовнішнє поле відсутнє, або  $h \equiv 0$ . Прецесійний режим математично виражається як

$$\vartheta = \vartheta_1, \dot{\vartheta} = 0, \varphi - \varrho \tilde{\Omega} \tilde{t} = \varphi_1, \dot{\varphi} = \tilde{\Omega}. \quad (2.66)$$

де  $\vartheta_1$  і  $\varphi_1$  – певні константи, що задають кут прецесії та кут відставання.



Прямою підстановкою (2.66) в систему (2.65) одержимо, що  $\varphi_1 = 0$ ,

$$\cos \vartheta_1 = \frac{\xi_d \mathcal{J}_0}{\alpha} \quad (2.67)$$

$$\tilde{\Omega} = \frac{\xi_d \mathcal{J}_0}{\alpha} \quad (2.68)$$

Далі, застосуємо умову (2.66) до випадку менш тривіального, коли магнітне поле типу (1.3а) ненульове. Вчинивши аналогічно, отримаємо

$$0 = -h_m \sin \varphi_1 + \xi_d \mathcal{J}_0 \sin \vartheta_1 - \alpha [\sin \vartheta_1 (\cos \vartheta_1 + h_{z0}) - h_m \cos \vartheta_1 \cos \varphi_1] \quad (2.69)$$

$$(1 + \alpha^2) \varrho \tilde{\Omega} = (\cos \vartheta_1 + h_{z0} - h_m \cot \vartheta_1 \cos \varphi_1) - \frac{\alpha}{\sin \vartheta_1} h_m \sin \varphi_1 + \alpha \xi_d \mathcal{J}_0 \quad (2.70)$$

Здійснивши відповідні алгебраїчні перетворення, отримаємо систему алгебраїчних рівнянь, розв'язок якої і буде описувати залежність прецесійного руху від параметрів частинки та струму.

$$\left( \xi_d \mathcal{J}_0 - \alpha \varrho \tilde{\Omega} \right) \sin \vartheta_1 = h_m \sin \varphi_1 \quad (2.71)$$

$$h_m^2 = \frac{1 - \cos^2 \vartheta_1}{\cos^2 \vartheta_1} \left[ (\alpha \varrho \tilde{\Omega} - \alpha \cos \vartheta_1 - \alpha h_{z0})^2 + \cos^2 \vartheta_1 (\xi_d \mathcal{J}_0 - \alpha \varrho \tilde{\Omega})^2 \right] \quad (2.72)$$

Вираз (2.71) разом з виразом (2.72) описують однорідну прецесію. При цьому точні значення кута затримки та кута прецесії можна обрахувати лише чисельно шляхом розв'язання алгебраїчних рівнянь (2.71) та (2.72).

### 2.3.7 Коливальний режим руху магнітного моменту з врахуванням спін-поляризованого струму

Запишемо математичні умови реалізації такого режиму

$$\begin{aligned}\xi_d \mathcal{J}(\tilde{t}) (\mathbf{s} \times \mathbf{m}) &= \xi_d \mathcal{J} (\mathbf{e}_z \times \mathbf{m}), \mathbf{h}(\tilde{t}) \equiv \mathbf{e}_z h_{z0}, \\ \mathcal{J} &= \mathcal{J}_m \cos \tilde{\Omega} \tilde{t}\end{aligned}\quad (2.73)$$

Тоді рівняння (2.65a) та (2.65b) можна трансформувати до вигляду

$$\begin{aligned}\dot{\vartheta} &= \xi_d \mathcal{J}_m \tilde{\Omega} \tilde{t} - \alpha \sin \vartheta (\cos \vartheta + h_{z0}) \\ \dot{\varphi} &= (\cos \vartheta + h_{z0}) + \alpha \xi_d \mathcal{J}_m \cos \tilde{\Omega} \tilde{t}\end{aligned}\quad (2.74)$$

Розглянемо окремий випадок:  $h_{z0} = 0, H_a \rightarrow 0$ .

$$\dot{\vartheta} = \gamma \xi_d \mathcal{J}_m \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} \sin \vartheta, \dot{\varphi} = \alpha \lambda \xi_d \mathcal{J}_m \cos \tilde{\Omega} \tilde{t}$$

Останнє рівняння дозволяє пряме інтегрування

$$\varphi = \varphi_0 + \frac{\alpha \xi_d \mathcal{J}_m}{\tilde{\Omega}} \sin \tilde{\Omega} \tilde{t}, \quad (2.75)$$

де  $\varphi_0$  певне початкове значення азимутального кута. Вираз же часової залежності полярного кута після інтегрування (2.74)

$$\tan \frac{\vartheta}{2} = \tan \frac{\vartheta_0}{2} \exp \left[ \frac{\xi_d \mathcal{J}_m}{\tilde{\Omega}} \sin \tilde{\Omega} \tilde{t} \right], \quad (2.76)$$

де  $\vartheta_0$  – певне початкове значення азимутального кута. Отримані залежності (2.75) та (2.76) схожі на аналогічні залежності отримані для частинок з малою анізотропією у в'язкому середовищі [35]. Вони будуть істотно залежати від параметрів зовнішньої дії та початкових умов, що показано на рисунках 2.10, 2.11, 2.10.

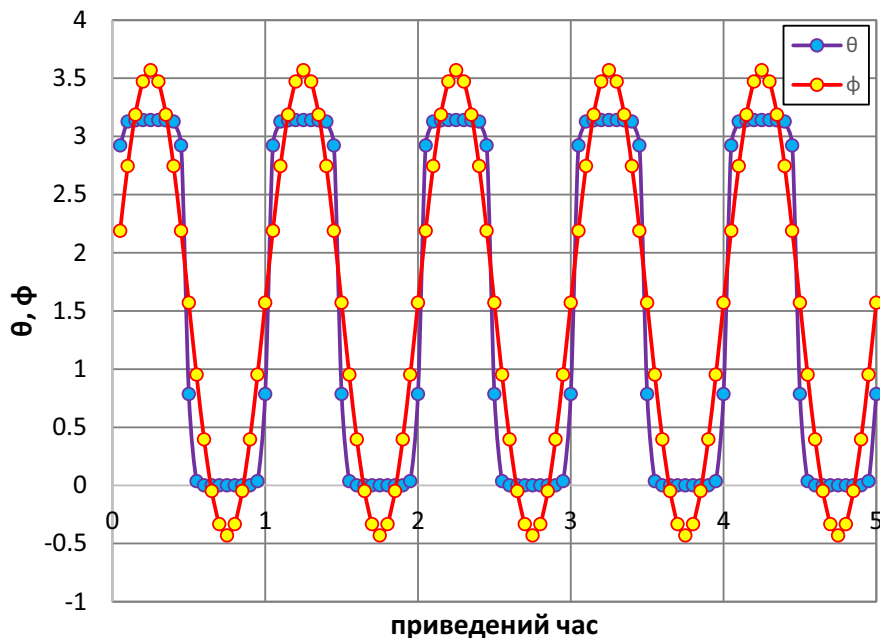


Рисунок 2.10 – Характерні траєкторії магнітного моменту у режимі синхронних коливань. Значення параметрів:  $\tilde{\Omega} = 1$ ,  $\alpha = 0.2$ ,  $\xi_d = 20$ ,  $\mathcal{J}_m = 0.5$ ,  $\vartheta_0 = \pi/4$ ,  $\varphi_0 = \pi/2$ .

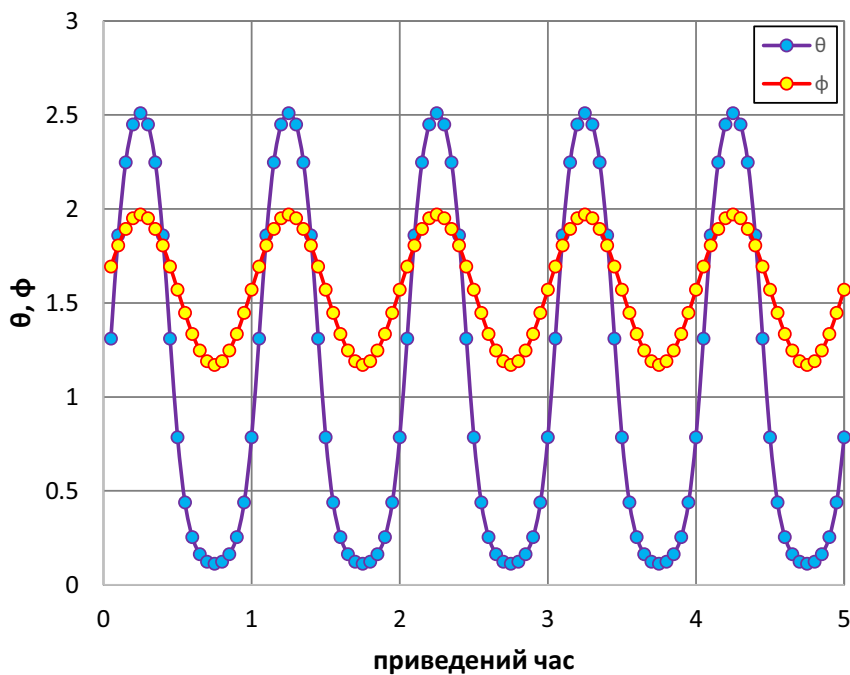


Рисунок 2.11 – Характерні траєкторії магнітного моменту у режимі синхронних коливань. Значення параметрів:  $\tilde{\Omega} = 1$ ,  $\alpha = 0.2$ ,  $\xi_d = 20$ ,  $\mathcal{J}_m = 0.1$ ,  $\vartheta_0 = \pi/4$ ,  $\varphi_0 = \pi/2$ .

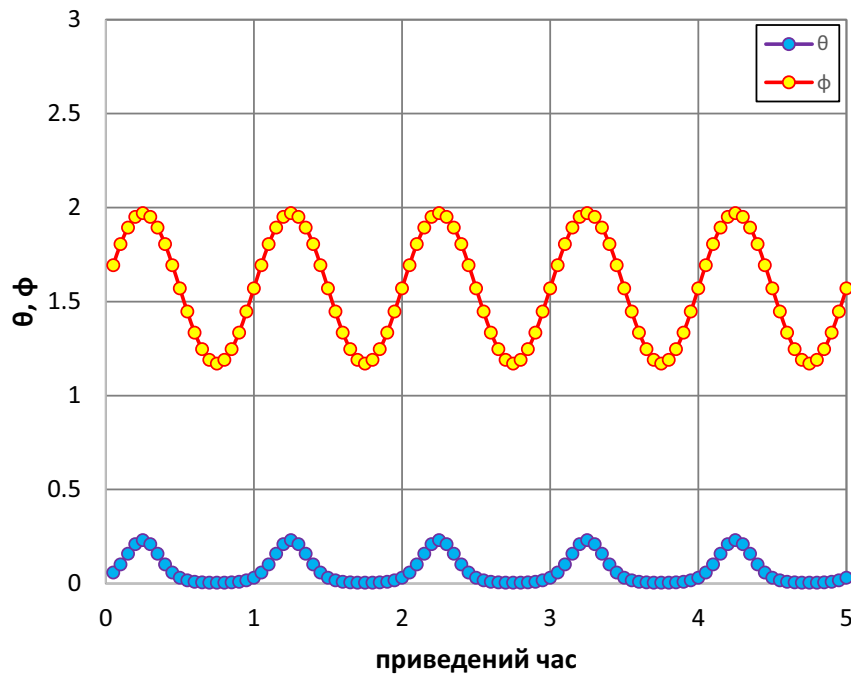


Рисунок 2.12 – Характерні траєкторії магнітного моменту у режимі синхронних коливань. Значення параметрів:  $\tilde{\Omega} = 1$ ,  $\alpha = 0.2$ ,  $\xi_d = 20$ ,  $\mathcal{J}_m = 0.1$ ,  $\vartheta_0 = \pi/100$ ,  $\varphi_0 = \pi/2$ .

### 2.3.8 Режим малих коливань магнітного моменту з врахуванням спінополяризованого струму

Нарешті, останній режим, який може бути описаний аналітично аналогічно апарату розвинутому в роботі [9] є режим малих коливань, що виникають в околі напрямку анізотропії. Для цього розглянемо основне модельне рівняння у вигляді (2.13). Математичні умови реалізації зазначеного режиму

$$\begin{aligned} \xi_d \mathcal{J}(\tilde{t}) (\mathbf{s} \times \mathbf{m}) &= \xi_d \mathcal{J}_m (\mathbf{e}_x \times \mathbf{m}), \\ \mathbf{H}(\tilde{t}) &\equiv 0, \quad \mathcal{J} = \mathcal{J}_m \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} \end{aligned} \quad (2.77)$$

Тут для простоти подальших обрахунків не враховуємо зовнішнє змінне поле, хоча з загальних міркувань це, можна зробити. Ефективне

поле тоді

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{e}_z (H_a m_z) + \xi_d \mathcal{J}_m \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} (\mathbf{e}_x \times \mathbf{m}),$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{e}_x m_x + \mathbf{e}_y m_y + \mathbf{e}_z.$$

Малі коливання будуть відбуватися саме навколо осі  $z$ , за виконання умов  $\xi_d \mathcal{J}_m \ll 1$ . Тому припускаємо

$$m_z \equiv 1, \quad m_{x,y} \ll 1, \quad m_{x,y} \sim \mathcal{J}_m \quad (2.78)$$

З використанням умов 2.78 можна лінеаризувати рівняння (2.13). Процедура лінеаризації передбачає нехтування усіма доданками, що пропорційні вищим ступеням  $\mathcal{J}_m$ , залишаючи лише пропорційні першому степеню. Виконаємо процедуру лінеаризації послідовно для усіх доданків в (2.13) з урахуванням 2.77 й отримаємо у безрозмірному вигляді

$$\frac{dm_x}{d\tilde{t}} = -m_y + \xi_d \mathcal{J}_m \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} - \alpha \frac{dm_y}{d\tilde{t}} \quad (2.79)$$

$$\frac{dm_y}{d\tilde{t}} = m_x + \alpha \frac{dm_x}{d\tilde{t}} \quad (2.80)$$

Розв'язок диференціальних рівнянь, як і в роботі [9], будемо шукати у вигляді суперпозиції тригонометричних функцій

$$m_x = a \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} + b \sin \tilde{\Omega} \tilde{t}, \quad (2.81)$$

$$m_y = c \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} + d \sin \tilde{\Omega} \tilde{t}. \quad (2.82)$$

Підстановкою та прирівнюванням множників біля відповідних функцій  $\sin \tilde{\Omega} \tilde{t}$  або  $\cos \tilde{\Omega} \tilde{t}$  одержуємо систему алгебраїчних рівнянь

$$-a\tilde{\Omega} = -d + \alpha c\tilde{\Omega}, \quad (2.83)$$

$$b\tilde{\Omega} = -c - \xi_d \mathcal{J}_m - \alpha d\tilde{\Omega}, \quad (2.84)$$

$$-c\tilde{\Omega} = b - \alpha a\tilde{\Omega}, \quad (2.85)$$

$$d\tilde{\Omega} = a + \alpha b\tilde{\Omega}. \quad (2.86)$$

Послідовною почерговою підстановкою отримаємо розв'язок

$$b = \xi_d \mathcal{J}_m \tilde{\Omega} \frac{(\tilde{\Omega}^2 (\alpha^2 - 1) + 1) - 2\alpha^2 \tilde{\Omega}^2}{\tilde{\Omega}^4 (\alpha^2 + 1)^2 + 2\tilde{\Omega}^2 (\alpha^2 - 1) + 1}, \quad (2.87)$$

$$d = -\xi_d \mathcal{J}_m \tilde{\Omega} \frac{(\tilde{\Omega}^2 (\alpha^2 - 1) + 1) + 2\tilde{\Omega}^2}{\tilde{\Omega}^4 (\alpha^2 + 1)^2 + 2\tilde{\Omega}^2 (\alpha^2 - 1) + 1}, \quad (2.88)$$

$$a = -\xi_d \mathcal{J}_m \tilde{\Omega} \frac{2\alpha\tilde{\Omega}}{\tilde{\Omega}^4 (\alpha^2 + 1)^2 + 2\tilde{\Omega}^2 (\alpha^2 - 1) + 1}, \quad (2.89)$$

$$c = -\xi_d \mathcal{J}_m \frac{\tilde{\Omega}^2 (\alpha^2 - 1) + 1}{\tilde{\Omega}^4 (\alpha^2 + 1)^2 + 2\tilde{\Omega}^2 (\alpha^2 - 1) + 1}. \quad (2.90)$$

Отримані вирази (2.89), (2.87), (2.90) та (2.88), фактично, описують режим малих коливань магнітного моменту під дією спін-поляризованого струму. Проілюструємо залежність одержаних величин від частоти для різних параметрів загасання: див. рис. 2.13, 2.14, 2.15.

## 2.4 Висновки до розділу 2

В даному розділі НДР була визначена середня намагніченість і потужність втрат для системи феромагнітних наночастинок, напрямки легких осей яких рівномірно розподілені в просторі і знаходяться в еліптично поляризованому магнітному полі. Одним з найбільш важливих

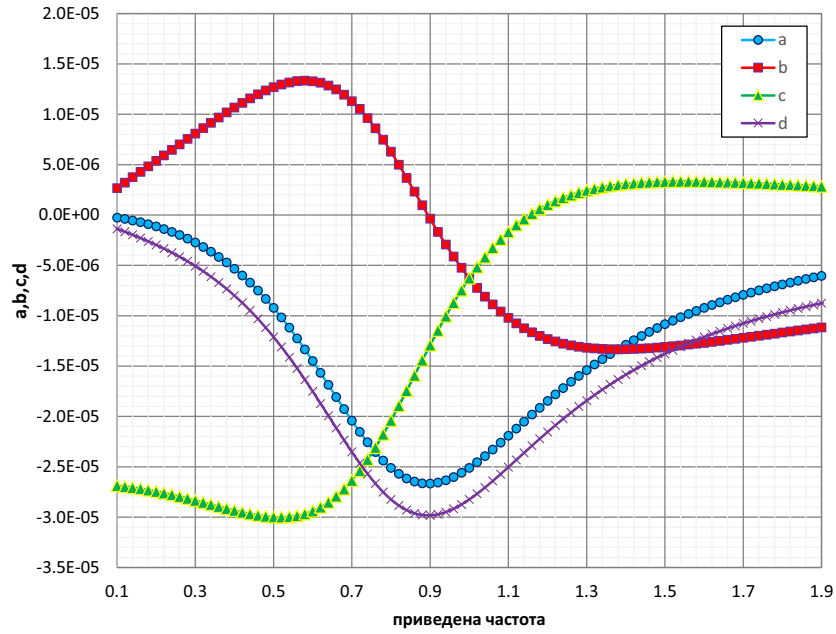


Рисунок 2.13 – Характерні частотні залежності лінійних коефіцієнтів у режимі малих коливань для  $\alpha = 0.5$ .

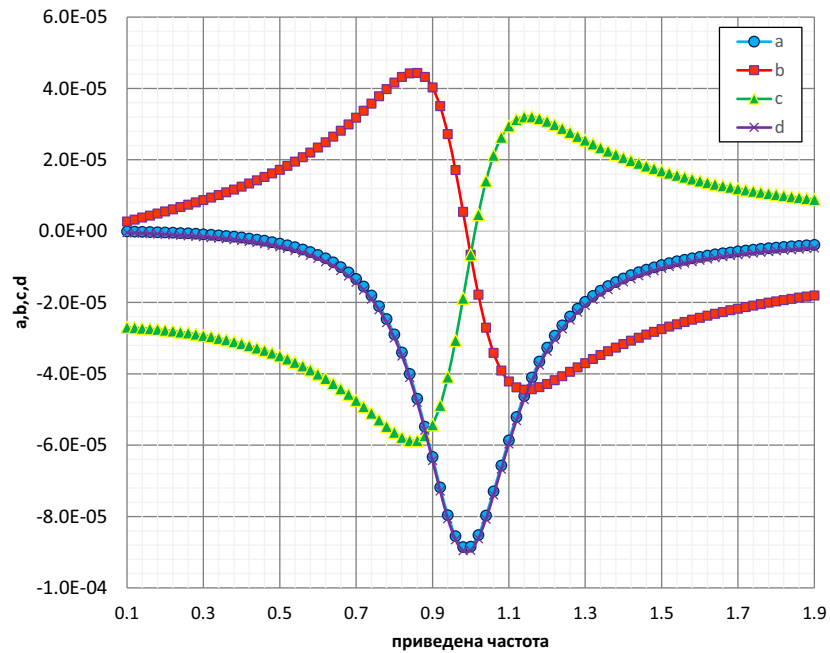


Рисунок 2.14 – Характерні частотні залежності лінійних коефіцієнтів у режимі малих коливань для  $\alpha = 0.15$ .

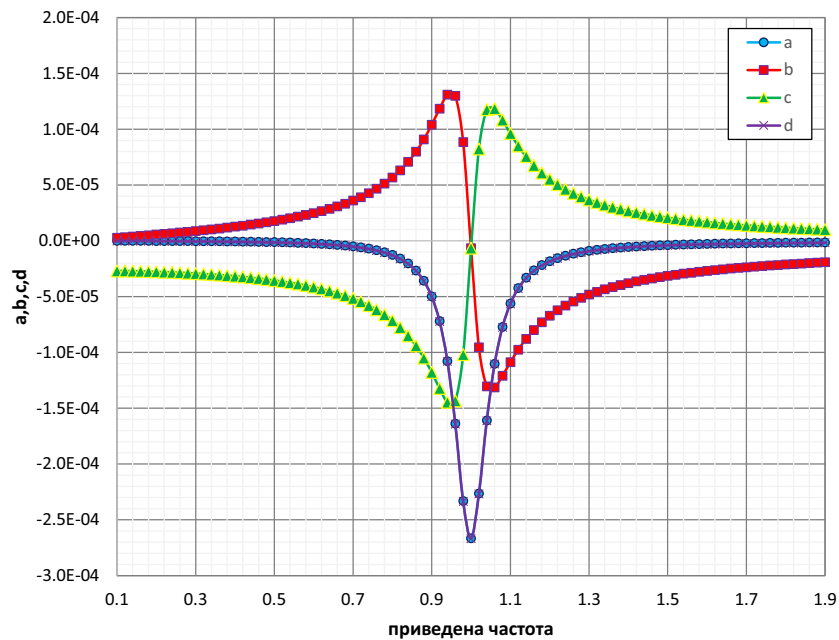


Рисунок 2.15 – Характерні частотні залежності лінійних коефіцієнтів у режимі малих коливань для  $\alpha = 0.05$ .

результатів є те, що таке поле намагнічує цю систему в напрямку, перпендикулярному площині поляризації. Це незвичайний результат, оскільки еліптично поляризоване магнітне поле не має складової в цьому напрямку. З фізичної точки зору поява середньої намагніченості є наслідком того факту, що власна прецесія намагніченості в наночастицях відбувається в напрямку проти годинникової стрілки. Саме через це властивості динаміка намагніченості в кожній з наночастинок, напрямки рівноважної намагніченості в яких протилежні, є різною. Хоч ця різниця є виключно динамічним, поляризаційно-залежним ефектом, і навіть після усереднення за ансамблем призводить до відмінної від нуля середньої намагніченості системи.

Для знаходження аналітичних виразів для середньої намагніченості і потужності втрат в разі малої амплітуди зовнішнього магнітного поля було розроблено загальну теорію збурень для рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта. В її рамках ми визначили стаціонарний розв'язок цього рівняння і розрахували середню намагніченість, а також втрату потужності з точністю до другого порядку малості. Важливою особливістю цих величин є те, що вони залежать резонансним чином від частоти магнітного поля. Слід підкреслити, що, відповідно до визначення,



вираз другого порядку для потужності втрат впливає з розв'язку першого порядку для рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта, і таким чином проявляє резонансну поведінку в околиці резонансу першого порядку. На відміну від цього вираз другого порядку для середньої намагніченості визначається розв'язок другого порядку для рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта. Хоча це рішення враховує вплив обох резонансів, першого і другого порядків, вплив резонансу другого порядку усувається шляхом усереднення. Ми підтвердили теоретичні пошуки за допомогою чисельних результатів, отриманих шляхом чисельного розв'язку рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта.

Наш теоретичний аналіз показав, і чисельні результати підтвердили, що субгармонічні резонанси, що виникають внаслідок нелінійності рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта, також впливають на частотну залежність середньої намагніченості і потужності втрат. Однак, оскільки субгармонічні резонанси з'являються при досить великих амплітудах еліптично поляризованого магнітного поля, нелінійні особливості динаміки намагніченості сильно впливають на частотну залежність даних величин. Ми виявили, що серед цих особливостей переходи між різними стаціонарними розв'язками рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта, які виникають під час змін частоти магнітного поля, грають найбільш важливу роль. Якщо ці переходи відбуваються без перемикання намагніченості, екстремуми середньої намагніченості і втрати потужності зміщуються в бік низьких частот. У протилежному випадку, якщо переходи у певній долі наночастинок супроводжуються перемиканням намагніченості (це можливо, якщо амплітуда поля досить велика), то частотна залежність цих величин, і перш за все середньої намагніченості, змінюється якісно. Нарешті, було встановлено, що переходи між регулярними і хаотичними режимами динаміки намагніченості впливають на ці величини незначним чином.

Ідповідно до запропонованої моделі, експериментальні системи повинні складатися з монодисперсних монодомених наночастинок, які орієнтовані випадковим чином і не взаємодіють один з одним. У той час як системи з монодисперсними монодоменими наночастишками є досить загальними

і можуть бути легко синтезовані [141], системи, що характеризуються рівномірним розподілом напрямків легких осей і незначним дипольним взаємодією, не настільки широко поширені. Наскільки нам відомо, однією з найбільш відповідних систем, у яких магнітна динаміка може бути описана пропонованою моделлю, є збірка наночастинок заліза і платини, вироблена при відносно низькій температурі відпалу [142]. Інший такою системою є двовимірна збірка наночастинок оксиду заліза, отриманих в результаті клік-реакції [143]. Якщо відстань між частинками досить велика, наночастинок в даній збірці задовольняють всім із зазначеним вище умовам.

Також було розглянуто детерміністичну вимушену магнітну динаміку наночастинок під дією зовнішнього змінного поля і спін-поляризованого струму на базі рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта з доданками Слончевського-Берже. Особливість моделі у тому, що спін-поляризований струм дає внесок, що можна трактувати як певне ефективне поле, напрям якого визначається взаємною орієнтацією магнітного моменту в поточному положенні та напрямком поляризації струму. Аналітично описані три режими усталеного руху магнітного моменту під дією зовнішніх полів та спін-поляризованого струму. Знайдені траєкторії дозволяють краще зрозуміти механізми перемикавання намагніченості та підібрати оптимальні параметри зовнішніх впливів для оптимального процесу запису.

Зокрема, описано режим прецесії та отримано алгебраїчні рівняння, розв'язком яких є значення кутів прецесії та відставання для магнітного моменту. Показано, що значення кутів визначається частотою поля, його амплітудою та густиною спін-поляризованого струму; а режим прецесії реалізується навіть за умови дії лише сталого спін-поляризованого струму. При цьому амплітуда й частота руху визначається як внутрішніми параметрами магнетика, так і густиною струму. Четвертий порядок отриманого рівняння для кута прецесії свідчить про існування як стабільних так і нестабільних розв'язків в обох взаємно протилежних напрямках, зумовлених однією анізотропією. Перемикавання між даними станами і буде являти собою процес перезапису у запам'ятовуючих пристроях.

Описано режим синхронних коливань, який характерний для відносно великих зовнішніх впливів, коли магнітна анізотропія не грає визначальної ролі. Чисельний аналіз отриманих залежностей дозволяє оцінити величину амплітуди та частоти зовнішньої дії.

Нарешті, у лінійному наближенні було досліджено режим малих коливань під дією змінного спін-поляризованого струму та досліджено резонансний характер цього типу магнітного руху залежно від частоти струму. Такий тип дії може мати допоміжний характер та призначатися для виведення магнітного моменту з рівноваги з подальшим перемиканням іншими зовнішніми впливами. Знайдені розв'язки дозволять правильно підібрати параметри наступного етапу.

Розвинута в роботі методологія дозволяє подальше ускладнення моделі та підвищення її реалістичності. Зокрема, наступним етапом має стати врахування дії теплових флуктуацій, роль яких може бути як небажаною з точки зору стабільності, так і конструктивною з точки зору їх безпосередньої участі в процесі перемагнічування. Врахування нелінійних ефектів в динаміці дозволить знайти кращі параметри перемагнічування, а, значить, для перезапису інформації.

### 3 ВПЛИВ СКІНЧЕННОСТІ АНІЗОТРОПІЇ НА ОБЕРТАЛЬНУ ДИНАМІКУ ФЕРОМАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК

#### 3.1 Вступ до розділу 3

Коректний опис динаміки феромагнітної наночастинки у в'язкій рідині є важливим для розуміння динаміки ферорідини під час її застосування. До сьогодні відгук ферорідин, що містять достатньо малі наночастинки, на зовнішнє змінне магнітне поле досліджується в першу чергу в рамках поняття комплексної магнітної сприйнятливості, що добре описана в роботі [25]. Однак, якщо магнітна енергія порівняна з термічною, відгук наночастинок буде визначатись в першу чергу індивідуальними траєкторіями наночастинок. Так, наприклад, детерміністичне обертання наночастинки у вязкому середовищі розглядається як основний канал дисипації для достатньо великих наночастинок, що здійснюють вимушене обертання під дією зовнішнього змінного поля [24]. Це дає підстави припускати, що детальний опис руху окремої наночастинки є актуальним.

Дві компоненти динаміки наночастинки слід розглядати одночасно для точного опису траєкторії: 1) механічне обертання (або так званий сферичний рух) наночастинки відносно в'язкої рідини; 2) внутрішня динаміка намагніченості наночастинки в кристалічній решітці. Оскільки одночасний опис двох зазначених рухів стикається з деякими труднощами, замість цього використовуються два наближення: 1) модель жорсткого диполя [16], коли магнітний момент наночастинки зафіксований в кристалічній решітці наночастинки завдяки сильній анізотропії, 2) модель фіксованої наночастинки [81], коли наночастинка вважається нерухомою завдяки жорсткому зв'язку з середовищем-носієм. Незважаючи на обмеження, обидва підходи широко використовуються для опису відгуку феромагнітної частинки в в'язкій рідині на змінний поле, включаючи проблему розрахунку втрат потужності, яка тісно пов'язана з таким методом терапії онкологічних захворювань як магнітна гіпертермія [?, 22].

Так, модель жорсткого диполя була успішно застосована у динамічному та стохастичному наближеннях: було знайдено втрату потужності для циркулярно-поляризованого [3, 43, 44] та лінійно-поляризованого [3, 45]. Ефективне рівняння Ланжевена та ключові характеристики динаміки обертання були встановлені в [88]. Розрахунок втрат потужності в рамках моделі фіксованої наночастинки, де враховується тільки внутрішня загасаюча прецесія магнітного моменту, був зроблений в роботах [39, 40, 97]. Нарешті, ця проблема була досліджена в роботах [71, 73] для ансамблю наночастинок.

Зв'язана динаміка наночастинки не може бути описана простою суперпозицією цих двох типів руху через істотні зміни у рівняннях руху. Вперше такий вид руху: одночасного руху магнітного моменту частинки і всієї частинки, був описаний в роботі [144]). Незважаючи на це, дискусія про основні рівняння руху продовжується до цих пір [35, 145–147]. Це особливо важливо в контексті нагрівання ферорідин змінним полем, коли обидва ці типи руху репрезентують канали дисипації енергії. Одна з перших успішних спроб щодо опису поглинання енергії була описана в роботі [34]. Там втрата потужності була отримана в динамічному наближенні шляхом лінеаризації рівняння Лагранжа в деяких конкретних випадках. Але в рамках цього підходу рівняння руху не використовувалися. Вивчення зв'язаної динаміки в циркулярно-поляризованому магнітному полі за допомогою спрощених рівнянь руху подано в [148], однак проблема абсорбції енергії не була розглянута. Потужність втрати була розрахована в останніх дослідженнях [35, 145]. На жаль, тут не застосовувався правильний явний вигляд рівнянь руху, що стимулює подальшу дискусію щодо базових моделей рівнянь [146, 147]. І лише нещодавно досягнуто суттєвого прогресу в описі поглинання енергії в'язко-зв'язаною наночастинкою зі скінченою кінцевою анізотропією [36]. Тут досліджувався спектр поглинання мікрохвиль з використанням методу лінійного відгуку. Але в'язкий доданок не враховувався у зазначеній роботі, що мотивує подальші дослідження.

Тому в даному розділі НДР ми використовуємо коректні рівняння руху, представлені в роботі [146] для дослідження відгуку наночастинок на

зовнішнє змінний поле. Основною метою є вивчення аспектів, пов'язаних з поглинанням енергії поля, з подальшою трансформацією в тепло. Зокрема, розглядається вплив рухливості легкої осі на резонансні залежності втрати потужності від частоти поля. Результати порівнюються з аналогами, отриманими за таких самих умов з використанням наближень жорсткого диполя та фіксованої наночастинки. У такий спосіб ми розкриваємо роль як в'язкого обертання цілої частки, так і загасаючої внутрішньої прецесії її магнітного моменту в процесі дисипації енергії. Робиться висновок про складний характер зв'язаної динаміки та неможливості розрізнити внесок кожного типу руху в сумісне нагрівання в динамічному наближенні.

### 3.2 Рівняння руху у випадку сумісної динаміки

Як випливає з [146], зв'язана магнітна динаміка та механічний рух в детерміністичному випадку підкоряються системі рівнянь

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{n}} &= \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{n}, \\ J\dot{\boldsymbol{\omega}} &= \gamma^{-1}V\dot{\mathbf{M}} + V\mathbf{M} \times \mathbf{H} - 6\eta V\boldsymbol{\omega},\end{aligned}\quad (3.1)$$

де  $(n)$  – одиничний вектор, який визначає напрямок осі анізотропії,  $\boldsymbol{\omega}$  – кутова швидкість частинки,  $J(= 8\pi\rho R^5/15)$  – момент інерції частки,  $\gamma$  – це гіромагнітне співвідношення,  $V$  – об'єм наночастинки, а точки над символами представляють похідні за часом.

Фактично, перше рівняння в множині (3.1) є умовою сферичного руху твердого тіла, а друге – класичним рівнянням обертання, де перший член являє собою основну відмінність від того ж рівняння для RD-моделі. Цей доданок походить від руху намагніченості всередині наночастинки відносно її кристалічної решітки. У свою чергу, динаміка намагніченості описується модифікованим рівнянням Ландау-Ліфшица-Гільберта

$$\dot{\mathbf{M}} = -\gamma\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{eff} + \alpha M^{-1} (\mathbf{M} \times \dot{\mathbf{M}} - \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{M}), \quad (3.2)$$

де  $\alpha$  – параметр загасання,  $\mathbf{H}_{eff}$  – це ефективне магнітне поле, в якому

враховується поле одноосьової анізотропії  $H_a$ , що зручно записати у вигляді

$$\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H} + H_a M^{-1} (\mathbf{Mn}) \mathbf{n}. \quad (3.3)$$

Тут різниця з оригінальним рівнянням Ландау-Ліфшица-Гільберта полягає у наявності доданку, що пропорційний до  $\mathbf{M} \times \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{M}$ , який виключає компоненту намагніченості  $\mathbf{M}$ , що обертається разом з кристалічною решіткою. Як правило, інерційний доданок в (3.1) може бути знехтуваним навіть для досить великих наночастинок ( $R > 20 \text{ nm}$ ) у широкому діапазоні частот. Тому для подальшого аналізу ми переписуємо рівняння руху (3.1) і (3.2) до більш зручної форми

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{n}} &= MH_a [\dot{\mathbf{m}} \times \mathbf{n} / \Omega_r + (\mathbf{m} \times \mathbf{h}) \times \mathbf{n}] / 6\eta, \\ \dot{\mathbf{m}}(1 + \beta) &= -\Omega_r \mathbf{m} \times \mathbf{h}_{eff}^1 + \alpha \mathbf{m} \times \dot{\mathbf{m}}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

нагадаємо, що  $\Omega_r = \gamma H_a$  – частота феромагнітного резонансу, а  $\beta = \alpha M / 6\gamma\eta$ ,

$$\mathbf{h}_{eff}^1 = (\mathbf{e}_x h_m \cos \Omega t + \mathbf{e}_y h_m \varrho \sin \Omega t) (1 + \beta) + (\mathbf{mn}) \mathbf{n}, \quad (3.5)$$

і, нарешті, як і в попередньому розділі,  $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M$ ,  $h = H/H_a$  – безрозмірні магнітний момент та амплітуда поля, відповідно. Для того, щоб розділити доданки, що містять похідні часу виконаємо рекурсивну підстановку (3.6) з врахуванням основних властивостей векторних добутків. У результаті ми отримуємо

$$\begin{aligned} \Omega_{cr}^{-1} \dot{\mathbf{n}} &= \dot{\mathbf{m}} \times \mathbf{n} / \Omega_r + (\mathbf{m} \times \mathbf{h}) \times \mathbf{n}, \\ (1 + \alpha_1^2) \Omega_{r1}^{-1} \dot{\mathbf{m}} &= -\mathbf{m} \times \mathbf{h}_{eff}^1 - \alpha_1 \mathbf{m} \times \mathbf{m} \times \mathbf{h}_{eff}^1, \end{aligned} \quad (3.6)$$

де  $\Omega_{cr} = H_a M / 6\eta$ ,  $\Omega_{r1} = \Omega_r / (1 + \beta)$ ,  $\alpha_1 = \alpha / (1 + \beta)$ .

Після стандартних перетворень та обчислень з урахуванням означення циркулярно-поляризованого поля (1.3а), можемо записати набір рівнянь відносно полярного  $\theta$  та азимутального  $\phi$  кутів вектора  $\mathbf{n}$ , а також

полярного  $\vartheta$  та азимутального  $\varphi$  кутів вектора  $\mathbf{m}$

$$\begin{aligned}
 (1 + \alpha_1^2)\Omega_{r_1}^{-1}\dot{\vartheta} &= f_1 + \alpha_1 f_2, \\
 (1 + \alpha_1^2)\Omega_{r_1}^{-1}\dot{\varphi} &= \sin^{-1}\vartheta(\alpha_1 f_1 - f_2), \\
 \Omega_{r_1}^{-1}\dot{\theta} &= \beta\alpha^{-1}(\omega_y \cos \phi - \omega_x \sin \phi), \\
 \Omega_{r_1}^{-1}\dot{\phi} &= \beta\alpha^{-1}[\omega_z - \cot \theta(\omega_y \sin \phi \\
 &\quad + \omega_x \cos \phi)],
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

де

$$\begin{aligned}
 f_1 &= [h_m(1 + \beta) \sin(\varrho\tilde{\Omega}\tilde{t} - \phi) - F \sin \theta \sin(\varphi - \phi)], \\
 f_2 &= \cos \vartheta [h_m(1 + \beta) \cos(\varrho\tilde{\Omega}\tilde{t} - \phi) \\
 &\quad + F \sin \theta \cos(\varphi - \phi)] - \sin \vartheta [(1 + \beta)h_{z0} \\
 &\quad + F \cos \theta], \\
 F &= \cos \theta \cos \vartheta + \cos(\varphi - \phi) \sin \theta \sin \vartheta (= \mathbf{mn}) \\
 \omega_x &= \dot{\vartheta} \cos \vartheta \cos \varphi + \dot{\varphi} \sin \vartheta \sin \varphi \\
 &\quad - (1 + \beta)[h_{z0} \sin \vartheta \sin \varphi + h_m \cos \vartheta \cos(\tilde{\Omega}\tilde{t})], \\
 \omega_y &= \dot{\vartheta} \cos \vartheta \sin \varphi + \dot{\varphi} \sin \vartheta \cos \varphi \\
 &\quad - (1 + \beta)[h_{z0} \sin \vartheta \cos \varphi + h \cos \vartheta \sin(\varrho\tilde{\Omega}\tilde{t})], \\
 \omega_z &= (1 + \beta)h_m \sin(\varrho\tilde{\Omega}\tilde{t} - \varphi) \sin \vartheta - \dot{\vartheta} \sin \vartheta.
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Тут  $\tilde{t} = \Omega_{r_1} t$ ,  $\tilde{\Omega} = \Omega/\Omega_{r_1}$ .

Важливо підкреслити, що система рівнянь (3.7) разом з позначеннями (3.8) придатні для подальшого чисельного обчислення. Отже, отримані вище модельні рівняння дозволяють вивчати прецесійний рух наночастинки, індукований зовнішнім циркулярно-поляризованим полем.



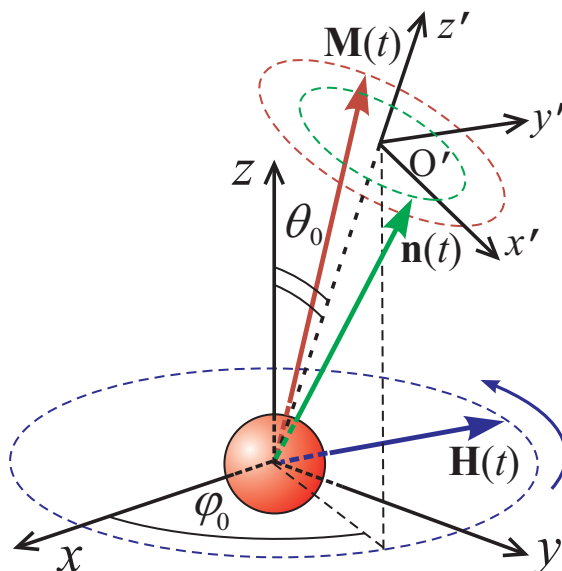


Рисунок 3.1 – Схематичне зображення наночастинки, поля що діє, та систем координат.

### 3.3 Результати опису сумісної магнітної динаміки та обертання наночастинки як цілого

#### 3.3.1 Режим малих коливань наночастинки та її магнітного моменту

Розв'язок системи рівнянь (3.6) можна знайти в лінійному наближенні для режиму малих коливань. У цьому режимі вектори  $\mathbf{m}$  і  $\mathbf{n}$  обертаються в малому околі початкового положення легкої осі, яке, у свою чергу, визначається кутами  $\theta_0$  і  $\phi_0$  (див. рис. 3.8). Це відбувається за досить малих амплітуд поля ( $h_m \ll 1$ ). Процедура лінеаризації, що використовується тут, аналогічна тій, що зазначена у роботі [97] і полягає в наступному. Введемо нову систему координат  $x'y'z'$  так, як показано на рис. 3.8. Така система є повернутою відносно лабораторної системи  $xuz$  на кути  $\theta_0$  і  $\phi_0$  відповідно. У цій новій системі координат вектори  $\mathbf{m}$  і  $\mathbf{n}$  можуть бути представлені в лінійному наближенні як

$$\mathbf{m} = \mathbf{e}_{x'} m_{x'} + \mathbf{e}_{y'} m_{y'} + \mathbf{e}_{z'}, \quad (3.9)$$

$$\mathbf{n} = \mathbf{e}_{x'} n_{x'} + \mathbf{e}_{y'} n_{y'} + \mathbf{e}_{z'}, \quad (3.10)$$

де  $\mathbf{e}_{x'}$ ,  $\mathbf{e}_{y'}$ ,  $\mathbf{e}_{z'}$  є одиничними векторами координатної системи  $x'y'z'$ . В цій системі, зовнішнє поле (1.3а) може бути записане з використанням матриці повороту як

$$\mathbf{h}' = \mathbf{C} \cdot \begin{pmatrix} h_m \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} \\ \varrho h_m \sin \tilde{\Omega} \tilde{t} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \cos \theta_0 \cos \phi_0 & \cos \theta_0 \sin \phi_0 & -\sin \theta_0 \\ -\sin \phi_0 & \cos \phi_0 & 0 \\ \sin \theta_0 \cos \phi_0 & \sin \theta_0 \sin \phi_0 & \cos \theta_0 \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

$$\mathbf{h}' = \begin{pmatrix} h_m \cos \theta_0 \cos \phi_0 \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} + \varrho h \cos \theta_0 \sin \phi_0 \sin \tilde{\Omega} \tilde{t} \\ -h_m \sin \phi_0 \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} + \varrho h_m \cos \phi_0 \sin \tilde{\Omega} \tilde{t} \\ h_m \sin \theta_0 \cos \phi_0 \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} + \varrho h_m \sin \theta_0 \sin \phi_0 \sin \tilde{\Omega} \tilde{t} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Все вищевказане дозволяє аналізувати характеристики реакції наночастинки на зовнішнє поле (1.3а) для усіх трьох апроксимацій у однаковий спосіб. Отримані нижче аналітичні розв'язки описують основну різницю між зв'язаним рухом магнітного моменту та всієї наночастинки і відокремленим рухом магнітного моменту, коли частинка зафіксована, та рухом усієї частинки з вмороженим магнітним моментом. Саме це й становить наші головні результати.

Ми починаємо з самого складного, але найцікавішого випадку: випадку, коли відбувається як механічне обертання, так і внутрішня магнітна динаміка одночасно. Використовуючи рівняння (3.13), припускаючи, що  $n_{x'}, n_{y'}, m_{x'}, m_{y'} \sim h_m$ , ігноруючи всі нелінійні щодо  $h_m$  доданки, з (3.6) можна вивести лінеаризовану систему рівнянь для  $\mathbf{m}$  і  $\mathbf{n}$

у такому вигляді:

$$\begin{aligned}
\dot{n}_{x'} &= \delta (\dot{m}_{y'}/\Omega_r + h_{x'}), \\
\dot{n}_{y'} &= -\delta (\dot{m}_{x'}/\Omega_r - h_{y'}), \\
(1 + \beta)\dot{m}_{x'} &= -m_{y'} + h_{y'} + n_{y'} - \alpha\dot{m}_{y'}, \\
(1 + \beta)\dot{m}_{y'} &= m_{x'} - h_{x'} - n_{x'} - \alpha\dot{m}_{x'}.
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Тут диференціювання виконується по безрозмірному часу  $\tilde{t}$ ,  $\delta = \Omega_{cr}/\Omega_r = \beta/\alpha$ . Розв'язок цієї системи рівнянь може бути записаний у стандартній формі

$$\begin{aligned}
n_{x'} &= a_n \cos \tilde{\Omega}\tilde{t} + b_n \sin \tilde{\Omega}\tilde{t}, \\
n_{y'} &= c_n \cos \tilde{\Omega}\tilde{t} + d_n \sin \tilde{\Omega}\tilde{t}, \\
m_{x'} &= a_m \cos \tilde{\Omega}\tilde{t} + b_m \sin \tilde{\Omega}\tilde{t}, \\
m_{y'} &= c_m \cos \tilde{\Omega}\tilde{t} + d_m \sin \tilde{\Omega}\tilde{t},
\end{aligned} \tag{3.15}$$

де  $a_n$ ,  $b_n$ ,  $c_n$ ,  $d_n$ ,  $a_m$ ,  $b_m$ ,  $c_m$  та  $d_m$  сталі коефіцієнти, які потрібно визначити. Підстановкою рівняння (3.15) в (3.14) та користуючись лінійною незалежністю тригонометричних функцій, отримуємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь для коефіцієнтів, що відповідають за коливання вектору  $\mathbf{m}$

$$\begin{aligned}
(1 + \beta)\tilde{\Omega}a_m &= d_m + \delta b_m - \alpha\tilde{\Omega}c_m - A_m, \\
(1 + \beta)\tilde{\Omega}b_m &= -c_m - \delta a_m - \alpha\tilde{\Omega}d_m + B_m, \\
(1 + \beta)\tilde{\Omega}c_m &= -b_m + \delta d_m + \alpha\tilde{\Omega}a_m - C_m, \\
(1 + \beta)\tilde{\Omega}d_m &= a_m - \delta c_m + \alpha\tilde{\Omega}b_m + D_m
\end{aligned} \tag{3.16}$$

и точні вирази для коефіцієнтів, що відповідають вектору  $\mathbf{n}$ .

$$\begin{aligned}
a_n &= \delta c_m - \varrho\tilde{\Omega}^{-1}h_m \cos \theta_0 \sin \phi_0, \\
b_n &= \delta d_m + \tilde{\Omega}^{-1}h_m \cos \theta_0 \cos \phi_0, \\
c_n &= -\delta a_m - \varrho\tilde{\Omega}^{-1}h_m \cos \phi_0, \\
d_n &= -\delta b_m - \tilde{\Omega}^{-1}h_m \sin \phi_0.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Тут

$$\begin{aligned}
 A_m &= \varrho h_m(1 + \beta) \cos \phi_0 - \tilde{\Omega}^{-1} h_m \sin \phi_0, \\
 B_m &= -h_m(1 + \beta) \sin \phi_0 - \varrho \tilde{\Omega}^{-1} h_m \cos \phi_0, \\
 C_m &= -\varrho h_m(1 + \beta) \cos \theta_0 \sin \phi_0 - \tilde{\Omega}^{-1} h_m \cos \theta_0 \cos \phi_0, \\
 D_m &= -h_m(1 + \beta) \cos \theta_0 \cos \phi_0 + \varrho \tilde{\Omega}^{-1} h_m \cos \theta_0 \sin \phi_0.
 \end{aligned}$$

З виразу (3.16) можна обчислити невідомі константи  $a_m$ ,  $b_m$ ,  $c_m$ , and  $d_m$  наступним чином

$$\begin{aligned}
 a_m &= Z^{-1} \left[ \tilde{\Omega}_1 D_m + \tilde{\Omega}_2 B_m + \tilde{\Omega}_3 C_m + \tilde{\Omega}_4 A_m \right], \\
 b_m &= Z^{-1} \left[ \tilde{\Omega}_1 C_m + \tilde{\Omega}_2 A_m - \tilde{\Omega}_3 D_m - \tilde{\Omega}_4 B_m \right], \\
 c_m &= Z^{-1} \left[ -\tilde{\Omega}_1 B_m + \tilde{\Omega}_2 D_m - \tilde{\Omega}_3 A_m + \tilde{\Omega}_4 C_m \right], \\
 d_m &= Z^{-1} \left[ -\tilde{\Omega}_1 A_m + \tilde{\Omega}_2 C_m + \tilde{\Omega}_3 B_m - \tilde{\Omega}_4 D_m \right],
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

де

$$\begin{aligned}
 Z &= \tilde{\Omega}^4 \alpha^4 + 2\tilde{\Omega}^4 \alpha^2 \beta^2 + \tilde{\Omega}^4 \beta^4 + 4\tilde{\Omega}^4 \alpha^2 \beta + \\
 &+ 4\tilde{\Omega}^4 \beta^3 + 2\tilde{\Omega}^4 \alpha^2 + 6\tilde{\Omega}^4 \beta^2 - 2\tilde{\Omega}^2 \alpha^2 \delta^2 + \\
 &+ 2\tilde{\Omega}^2 \beta^2 \delta^2 + 4\tilde{\Omega}^4 \beta + 8\tilde{\Omega}^2 \alpha \beta \delta + \\
 &+ 4\tilde{\Omega}^2 \beta \delta^2 + \tilde{\Omega}^4 + 2\tilde{\Omega}^2 \alpha^2 + 8\tilde{\Omega}^2 \alpha \delta - \\
 &- 2\tilde{\Omega}^2 \beta^2 + 2\tilde{\Omega}^2 \delta^2 + \delta^4 - 4\tilde{\Omega}^2 \beta - 2\tilde{\Omega}^2 + \\
 &+ 2\delta^2 + 1,
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\Omega}_1 &= -\tilde{\Omega}^2\alpha^2 - 2\tilde{\Omega}^2\alpha\beta\delta - 2\tilde{\Omega}^2\alpha\delta + \\
&\quad + \tilde{\Omega}^2\beta^2 + 2\tilde{\Omega}^2\beta + \tilde{\Omega}^2 - \delta^2 - 1, \\
\tilde{\Omega}_2 &= -\tilde{\Omega}^2\alpha^2\delta + 2\tilde{\Omega}^2\alpha\beta + 2\tilde{\Omega}^2\alpha + \\
&\quad + \tilde{\Omega}^2\beta^2\delta + 2\tilde{\Omega}^2\beta\delta + \tilde{\Omega}^2\delta + \delta^3 + \delta, \\
\tilde{\Omega}_3 &= \tilde{\Omega}^3\alpha^3 + \tilde{\Omega}^3\alpha\beta^2 + 2\tilde{\Omega}^3\alpha\beta + \\
&\quad + \tilde{\Omega}^3\alpha - \tilde{\Omega}\alpha\delta^2 + \tilde{\Omega}\alpha + 2\tilde{\Omega}\beta\delta + \\
&\quad + 2\tilde{\Omega}\delta, \\
\tilde{\Omega}_4 &= -\tilde{\Omega}^3\alpha^2\beta - \tilde{\Omega}^3\alpha^2 - \tilde{\Omega}^3\beta^3 - \\
&\quad - 3\tilde{\Omega}^3\beta^2 - 3\tilde{\Omega}^3\beta - \tilde{\Omega}^3 - 2\tilde{\Omega}\alpha\delta - \\
&\quad - \tilde{\Omega}\beta\delta^2 + \tilde{\Omega}\beta - \tilde{\Omega}\delta^2 + \tilde{\Omega}.
\end{aligned}$$

Використовуючи рівняння (3.18), можна встановити явний вигляд констант у виразі (3.17), які визначають обертальну динаміку частинки як цілого. Отримані вирази для траєкторій наночастинки дозволяють записати аналітичне співвідношення для питомої потужності втрат  $q$ . Безпосереднє інтегрування виразу (2.9), в якому під ефективним полем слід розуміти поле вигляду (3.5) з підстановкою (3.15), (3.18) та (3.17) дає нам наступну формулу:

$$\begin{aligned}
q &= 0.5\tilde{\Omega}(b_m h_m \cos \theta_0 \cos \phi_0 - a_m \rho h_m \cos \theta_0 \sin \phi_0 - \\
&\quad - d_m h_m \sin \phi_0 - c_m \rho h_m \cos \phi_0 + b_m a_n - a_m b_n + d_m c_n - \\
&\quad - c_m d_n).
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Залежність  $q$  від параметрів системи, особливо на частоті зовнішнього поля, являє великий інтерес і буде розглянута нижче. Але не менш цікавим є порівняння цього результату з аналогічним результатом в інших наближеннях, таких як модель фіксованої наночастинки та модель жорсткого диполя, що були розглянуті вище.

### 3.3.2 Режим малих коливань намагніченості у нерухомій наночастинці

На даному етапі повторимо розгляд магнітної динаміки всередині

нерухомої частинки з використанням лише лінійного наближення для простоти подальшого порівняльного аналізу. Як і в попередньому випадку, лінеаризовані рівняння руху записуються у припущенні  $m_{x'}, m_{y'} \sim h_m$ , а всі доданки, нелінійні відносно амплітуди поля  $h_m$  нехтуються. З використанням виразу (3.13), у кінцевому підсумку отримуємо з (2.3) лінеаризовану систему рівнянь для вектора  $\mathbf{m}$  у наступному вигляді

$$\begin{aligned}\dot{m}_{x'} &= -\dot{m}_{y'} + h_{y'} - \alpha \dot{m}_{y'}, \\ \dot{m}_{y'} &= \dot{m}_{x'} - h_{x'} - \alpha \dot{m}_{x'}.\end{aligned}\quad (3.21)$$

Далі, загальна форма розв'язку (3.21) може бути просто записана у стандартному вигляді

$$\begin{aligned}m_{x'} &= a_{fp} \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} + b_{fp} \sin \tilde{\Omega} \tilde{t}, \\ m_{y'} &= c_{fp} \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} + d_{fp} \sin \tilde{\Omega} \tilde{t},\end{aligned}\quad (3.22)$$

де  $a_{fp}$ ,  $b_{fp}$ ,  $c_{fp}$ , та  $d_{fp}$  є амплітуди осциляцій магнітного моменту всередині нерухомої наночастинки. Підстановкою виразу (3.22) у (3.21) отримуємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь, розв'язком яких є шукані амплітуди

$$\begin{aligned}\tilde{\Omega} a_{fp} &= (d_{fp} - \varrho h_m \cos \phi_0) - \alpha \tilde{\Omega} c_{fp}, \\ \tilde{\Omega} b_{fp} &= -(c_{fp} + h_m \sin \phi_0) - \alpha \tilde{\Omega} d_{fp}, \\ \tilde{\Omega} c_{fp} &= -(b_{fp} - \varrho h_m \cos \theta_0 \sin \phi_0) + \alpha \tilde{\Omega} a_{fp}, \\ \tilde{\Omega} d_{fp} &= (a_{fp} - h_m \cos \theta_0 \cos \phi_0) + \alpha \tilde{\Omega} b_{fp}.\end{aligned}\quad (3.23)$$

Після відповідних розрахунків, отримуємо розв'язок (3.23)

$$\begin{aligned}a_{fp} &= -Z_{fp}^{-1} \left[ \tilde{\Omega}_1^{fp} B_{fp} + \tilde{\Omega}_2^{fp} A_{fp} \right], \\ b_{fp} &= Z_{fp}^{-1} \left[ \tilde{\Omega}_1^{fp} C_{fp} + \tilde{\Omega}_2^{fp} D_{fp} \right], \\ a_{fp} &= Z_{fp}^{-1} \left[ \tilde{\Omega}_1^{fp} A_{fp} - \tilde{\Omega}_2^{fp} B_{fp} \right], \\ d_{fp} &= Z_{fp}^{-1} \left[ -\tilde{\Omega}_1^{fp} D_{fp} + \tilde{\Omega}_2^{fp} C_{fp} \right],\end{aligned}\quad (3.24)$$

де

$$Z_{fp} = 4\alpha^2\tilde{\Omega}^4 + \left( (\alpha^2 - 1)\tilde{\Omega}^{-2} + 1 \right)^2, \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} \Omega_1^{fp} &= 2\alpha\tilde{\Omega}^2, \\ \Omega_2^{fp} &= (\alpha^2 - 1)\tilde{\Omega}^2 + 1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{fp} &= \varrho h_m \tilde{\Omega} (\alpha \cos \theta_0 \sin \phi_0 - \cos \phi_0) - h_m \cos \theta_0 \cos \phi_0, \\ B_{fp} &= \varrho h_m \tilde{\Omega} (\cos \phi_0 \sin \phi_0 + \alpha \cos \phi_0) + h_m \sin \phi_0, \\ C_{fp} &= h_m \tilde{\Omega} (\cos \theta_0 \cos \phi_0 - \alpha \sin \phi_0) + \varrho h_m \cos \phi_0, \\ D_{fp} &= h_m \tilde{\Omega} (\alpha \cos \theta_0 \cos \phi_0 + \sin \phi_0) + \varrho h_m \cos \theta_0 \sin \phi_0. \end{aligned}$$

Потужність втрат в цьому випадку також може бути знайдена шляхом прямого інтегрування (2.9) з підстановкою (3.22) та (3.24)

$$\begin{aligned} q &= 0.5 h_m \tilde{\Omega} \Omega_r Z_{fp}^{-1} \{ \tilde{\Omega}_1^{fp} [2\varrho h_m \cos \theta_0 + \\ &+ h_m \tilde{\Omega} D] + \tilde{\Omega}_2^{fp} \alpha h_m \tilde{\Omega} D \}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

де

$$D = \cos^2 \theta_0 (\cos^2 \phi_0 + \varrho^2 \sin^2 \phi_0) + \varrho^2 \cos^2 \phi_0 + \sin^2 \phi_0. \quad (3.27)$$

Отриманий вираз (3.26) подібний до вже раніше оприлюдненого у [97], але узагальненого на випадок довільної орієнтації легкої осі наночастинки. Незважаючи на кількісну різницю, обумовлену поворотом легкої осі, залишається якісний характер частотної поведінки  $q$ .

### 3.3.3 Режим малих коливань усієї наночастинки із зафіксованим магнітним моментом

І, нарешті, повторимо в рамках єдиного підходу лінійний аналіз випадку жорсткого диполя. У цій так званій RD-моделі лінеаризовані

рівняння мають найпростішу форму. Нагадаємо, що рівняння жорсткого диполя без врахування моменту інерції може бути записане як

$$\dot{\mathbf{n}} = -\Omega_{cr} \mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{h}), \quad (3.28)$$

Розкладанням у ряд з точністю до лінійних членів та враховуючи (3.13), записуємо лінеаризовану систему рівнянь для вектора легкої вісі  $\mathbf{n}$  у такому вигляді

$$\begin{aligned} \dot{n}_{x'} &= \Omega_{cr} h_{x'}, \\ \dot{n}_{y'} &= \Omega_{cr} h_{y'}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Як і в попередньому випадку, ми використовуємо тригонометричне подання розв'язку (3.29)

$$\begin{aligned} n_{x'} &= a_{rd} \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} + b_{rd} \sin \tilde{\Omega} \tilde{t}, \\ n_{y'} &= c_{rd} \cos \tilde{\Omega} \tilde{t} + d_{rd} \sin \tilde{\Omega} \tilde{t}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Після прямої підстановки (3.30) в (3.29), легко можна отримати невідомі константи, які є амплітудами вектора  $\mathbf{n}$

$$\begin{aligned} a_{rd} &= h_m \Omega_{cr} \sin \phi_0 / \Omega, \\ b_{rd} &= h_m \Omega_{cr} \cos \theta_0 \cos \phi_0 / \Omega, \\ c_{rd} &= -h_m \Omega_{cr} \cos \phi_0 / \Omega, \\ d_{rd} &= h_m \Omega_{cr} \cos \theta_0 \sin \phi_0 / \Omega. \end{aligned} \quad (3.31)$$

І, нарешті, ми можемо відразу знайти потужність втрат за співвідношення (1.46) підставляючи у нього вирази (3.30) та (3.31)

$$q = 0.5 \Omega_{cr} h_m^2 D. \quad (3.32)$$

Примітно, що  $q$  не залежить від частоти, оскільки під час зростання частоти  $\Omega$  коефіцієнти (3.31) відразу пропорційно зменшуються, що компенсує можливий зростання втрат потужності.



### 3.3.4 Порівняльний аналіз результатів

Порівняння виразів втрат потужності, отриманих вище, дає низку висновків, і деякі з них є досить несподіваними з першого погляду. По-перше, роль внутрішнього магнітного руху є первинною. Як впливає з виразів (3.20) та (3.26), залежність безрозмірної втрати потужності від безрозмірної частоти  $q(\tilde{\Omega})$  для моделі зафіксованої частинки та моделі в'язко-зв'язаної наночастинки з скінченною анізотропією подібні: вони обидві демонструють резонансну поведінку. У той же час для моделі жорсткого диполя така залежність являє собою константу або пряму, що не залежить від частоти (див. (3.32)). Тому динаміка магнітного моменту, представленого одиничним вектором  $\mathbf{m}$ , визначає результуючу втрату потужності в широкому діапазоні досить реалістичних параметрів. Але кількісне порівняння цих залежностей дозволяє нам припустити, що осциляції легкої вісі можуть значно змінити втрати потужності, викликані загасаючою прецесією  $\mathbf{m}$ . Причини цього полягають в характері колективного руху легкої осі, поданої вектором  $\mathbf{n}$ , і магнітним моментом, поданого вектором  $\mathbf{m}$ . Хоча відбувається лише гармонічний рух зазначених векторів, співвідношення фаз та амплітуд може призвести до достатньо різних значень розсіювання енергії в системі. Далі ми розглянемо поведінку потужності втрат  $q(\tilde{\Omega})$  в контексті особливостей руху векторів  $\mathbf{m}$  і  $\mathbf{n}$ .

Поведінка  $q(\tilde{\Omega})$  обумовлена особливостями коефіцієнтів  $a_m(\tilde{\Omega})$ ,  $b_m(\tilde{\Omega})$ ,  $c_m(\tilde{\Omega})$ , та  $d_m(\tilde{\Omega})$ , які визначають динаміку  $\mathbf{m}$  і  $a_n(\tilde{\Omega})$ ,  $b_n(\tilde{\Omega})$ ,  $c_n(\tilde{\Omega})$ , та  $d_n(\tilde{\Omega})$ , що визначає динаміку  $\mathbf{n}$  (див. Рис. 3.2). Як видно, для частот, що знаходяться далеко від резонансної, вектори  $\mathbf{m}$  та  $\mathbf{n}$  майже збігаються і обертаються синхронно. Тут модель в'язко-зв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією та модель фіксованої частинки дають дуже близькі значення втрати потужності. Але поблизу резонансу, якщо  $\tilde{\Omega} \approx 1$ , коефіцієнти  $a_m(\tilde{\Omega})$ ,  $b_m(\tilde{\Omega})$ ,  $c_m(\tilde{\Omega})$ , та  $d_m(\tilde{\Omega})$  мають виражені максимуми і змінюють знаки, тоді коли коефіцієнти  $a_n(\tilde{\Omega})$ ,  $b_n(\tilde{\Omega})$ ,  $c_n(\tilde{\Omega})$ , and  $d_n(\tilde{\Omega})$  залишаються такими самими на усьому діапазоні частоти.

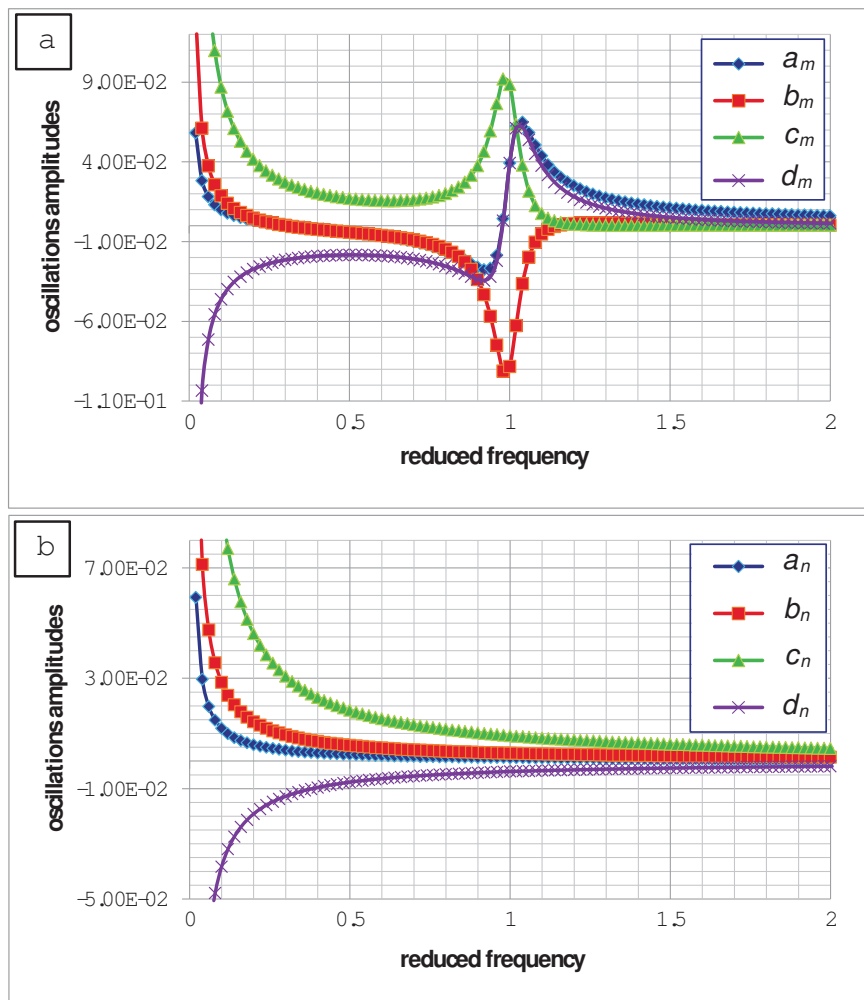


Рисунок 3.2 – Залежності амплітуд зв'язаних коливань магнітного моменту (3.18) та легкої вісі (3.17) від частоти зовнішнього поля. Використовувалися такі значення параметрів  $M = 338 \text{ G}$ ,  $H_a = 910 \text{ E}$ ,  $\eta = 0.006 \text{ П}$ ,  $\alpha = 0.05$  що відповідає частникам магнетиту ( $\gamma - \text{Fe}_2\text{O}_3$ ) у воді за температури of  $42 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $\varrho = -1$ ,  $h_m = 0.01$ ,  $\theta_0 = 0.4\pi$ ,  $\varphi_0 = 0.125\pi$ .

Тому вектори  $\mathbf{m}$  та  $\mathbf{n}$  обертаються у асинхронний спосіб, що веде до більшого кута між магнітним моментом і результуючим чи ефективним полем  $\mathbf{h}_{eff}$ . Разом зі зростанням кута прецесії вектора  $\mathbf{m}$  це призводить до зростання втрат потужності в порівнянні з випадком фіксованої частинки (див. Рис. 3.3).

Якщо в'язкість порівняно невелика, вектор  $\mathbf{n}$  стає більш сприйнятливим до зовнішнього поля, і магнітний момент, що обертається, може легко залучати до обертання цілу наночастинку. Однак, це не викликає більш інтенсивного руху в результаті. По перше, тут відбувається значне зменшення коефіцієнтів  $a_m(\tilde{\Omega})$ ,  $b_m(\tilde{\Omega})$ ,  $c_m(\tilde{\Omega})$ , та  $d_m(\tilde{\Omega})$  біля резонансу у порівнянні з випадком більшої в'язкості. Тоді

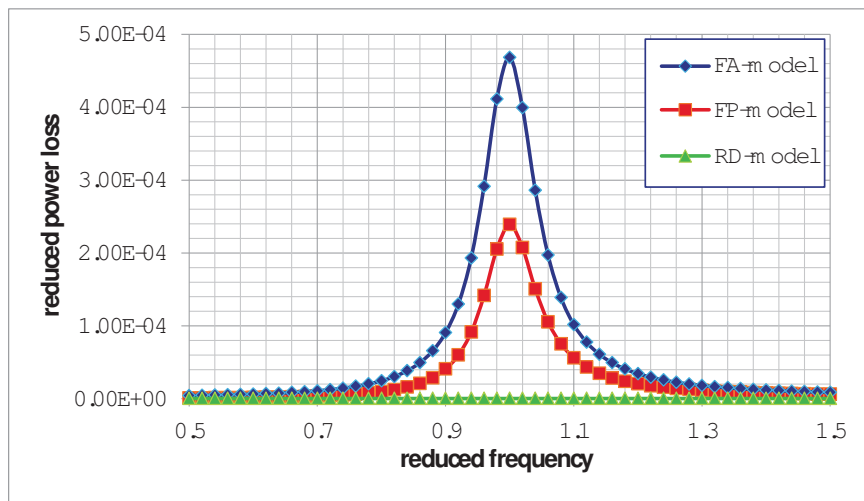


Рисунок 3.3 – Частотна залежність потужності втрат для випадку жорсткого диполя, фіксованої наночастинки, та в'язко-зв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією. Використані параметри такі самі як і для побудови рисунка 3.2.

змінюються лише знаки коефіцієнтів  $b_m(\tilde{\Omega})$  and  $d_m(\tilde{\Omega})$  (див. Рис. 3.4). Нарешті, залежності  $a_n(\tilde{\Omega})$ ,  $b_n(\tilde{\Omega})$ ,  $c_n(\tilde{\Omega})$ , and  $d_n(\tilde{\Omega})$  отримують локальні максимуми (рис. 3.4) і трохи зменшують абсолютні значення в околі  $\tilde{\Omega} = 1$ . Отже, ефект вираженого асинхронного обертання  $\mathbf{n}$  і  $\mathbf{m}$ , що є актуальним для вищесказаного випадку, наразі зникає, і ці вектори стають майже паралельними для усього діапазону частот. Оскільки кут між магнітним моментом і результуючим полем зменшується, модель в'язко-зв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією у цьому випадку прогнозує більш низькі значення втрат потужності, ніж модель нерухомої частинки поблизу резонансу (рис. 3.5).

Описана вище ситуація є причиною для екстремальної чутливості втрати потужності до параметрів системи, яка може бути корисною в застосуваннях і може бути використана в ряді випадків. Навпаки, в інших випадках така чутливість може бути дуже небажаною, і треба вжити заходів для запобігання. Незалежно від подальших цілей, необхідно докладно дослідити вплив основних параметрів. Це особливо важливо для проектування ансамблів наночастинок із зазначеними властивостями для таких важливих застосувань, як мікрохвильові поглиначі або магнітна гіпертермія, де основними характеристиками є нагрівання та/або поглинання.

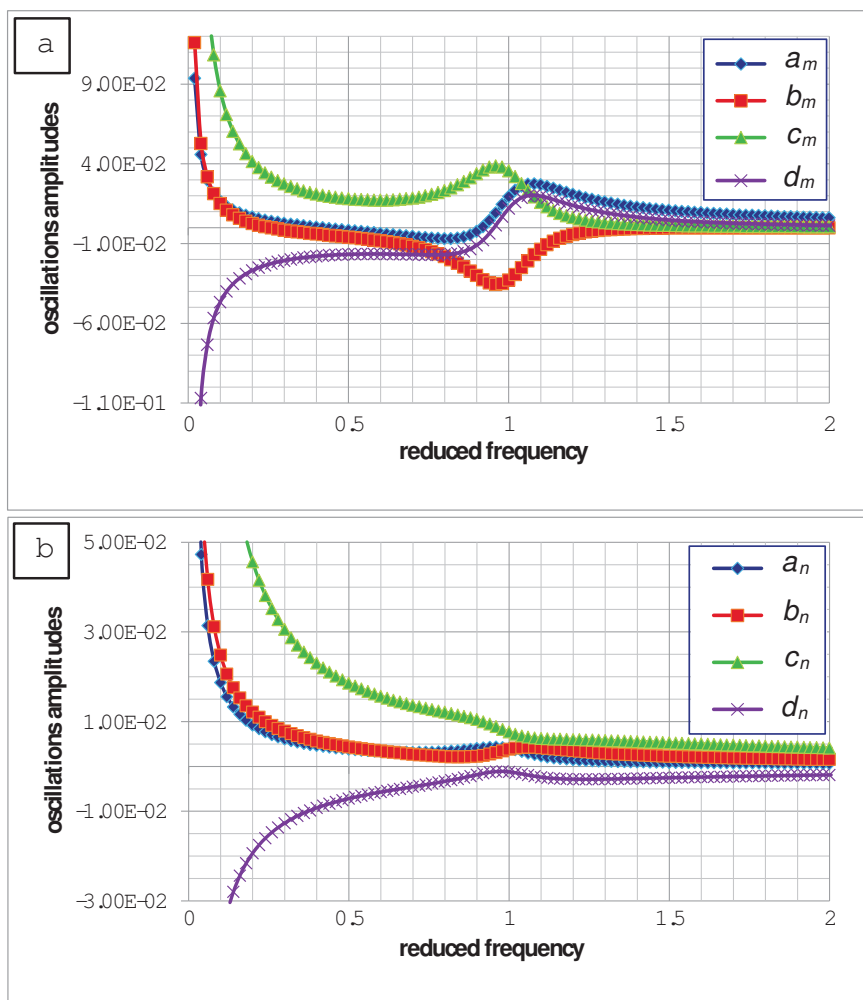


Рисунок 3.4 – Залежності амплітуд зв'язаних коливань магнітного моменту (3.18) та легкої вісі (3.17) від частоти зовнішнього поля. Використані параметри такі самі як і для побудови рисунка 3.2, однак  $\eta = 4.0^{-5}$  П.

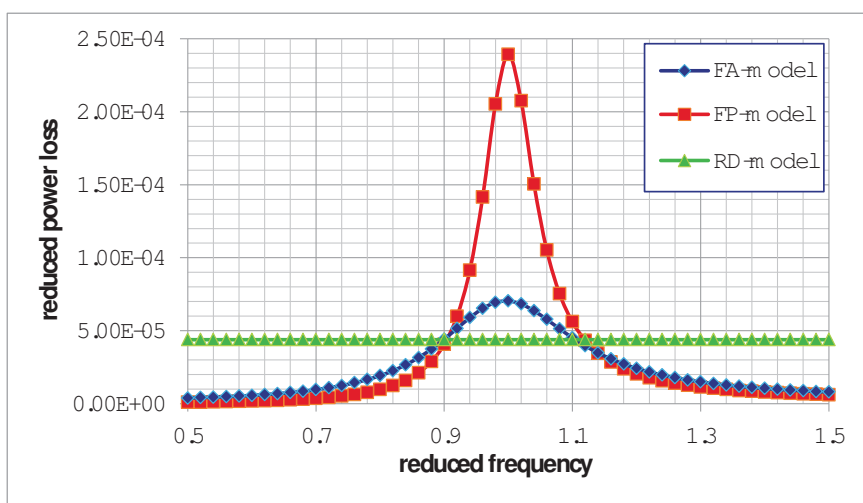


Рисунок 3.5 – Частотна залежність потужності втрат для випадку жорсткого диполя, фіксованої наночастинки, та в'язкозв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією. Використані параметри такі самі як і для побудови рисунка 3.2, але  $\eta = 4.0^{-5}$  П.

У цьому відношенні найбільш цікавими є схожі параметри  $\alpha$  та  $\eta$ . На рис. 3.6а, зображено порівняння втрат потужності для двох значень  $\alpha$  з використанням наближення фіксованої частки та наближення в'язкозв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією. Як і очікувалося, зменшення  $\alpha$  призводить до пропорційного збільшення втрат потужності для обох наближень. В той же час, зміна в'язкості  $\eta$  призводить до різної поведінки втрат потужності, отриманої для моделей жорсткого диполя та наближення в'язкозв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією (див. Рис. 3.6б) Для першого випадку відбувається пропорційний ріст  $q(\tilde{\Omega})$  зі зменшенням  $\eta$ . Але для другого випадку прийняття до уваги скінченності анізотропії призводить до протилежних результатів. Тут ми відзначаємо нелінійне зростання в  $q(\tilde{\Omega})$  зі зростаючою в'язкістю  $\eta$ . Як було пояснено вище, походження цього ефекту слід шукати у відносному русі векторів  $\mathbf{n}$  та  $\mathbf{m}$ . Далі, щоб оцінити придатність моделі жорсткого диполя, необхідно порівняти значення втрат потужності для цих двох випадків. Як видно з рисунка 3.6б, можливі різні ситуації, оскільки за умови розблокування магнітного моменту  $\mathbf{m}$  існують два різних типу поведінки. Перший тип - це асинхронні коливання  $\mathbf{m}$  та  $\mathbf{n}$ , коли значення  $q(\tilde{\Omega})$  для моделі в'язкозв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією може бути значно більшим, ніж значення, передбачені моделлю жорсткого диполя. Другий тип - синхронний рух магнітного моменту та легкої осі. Тут обидва механізми дисипації пригнічуються, оскільки амплітуди коливань  $\mathbf{n}$  і  $\mathbf{m}$  стають меншими. Як результат, втрата потужності для випадку скінченної анізотропії може бути значно нижчою, ніж значення, отримане для моделі жорсткого диполя. Це дозволяє зробити висновок про низьку придатність моделі жорсткого диполя для високих частот.

Ще одне важливе питання, яке необхідно враховувати, – це вплив орієнтації зовнішнього поля по відношенню до наночастинки. Як впливає з виразів (3.20), (3.26), (3.32), ця орієнтація визначається типом поляризації та початковим положенням легкої осі. Модель жорсткого диполя передбачає різницю втрат потужності не більш ніж у два рази, коли  $\varrho$  змінюється у діапазоні  $[-1...1]$ . Відповідно до двох інших моделей,

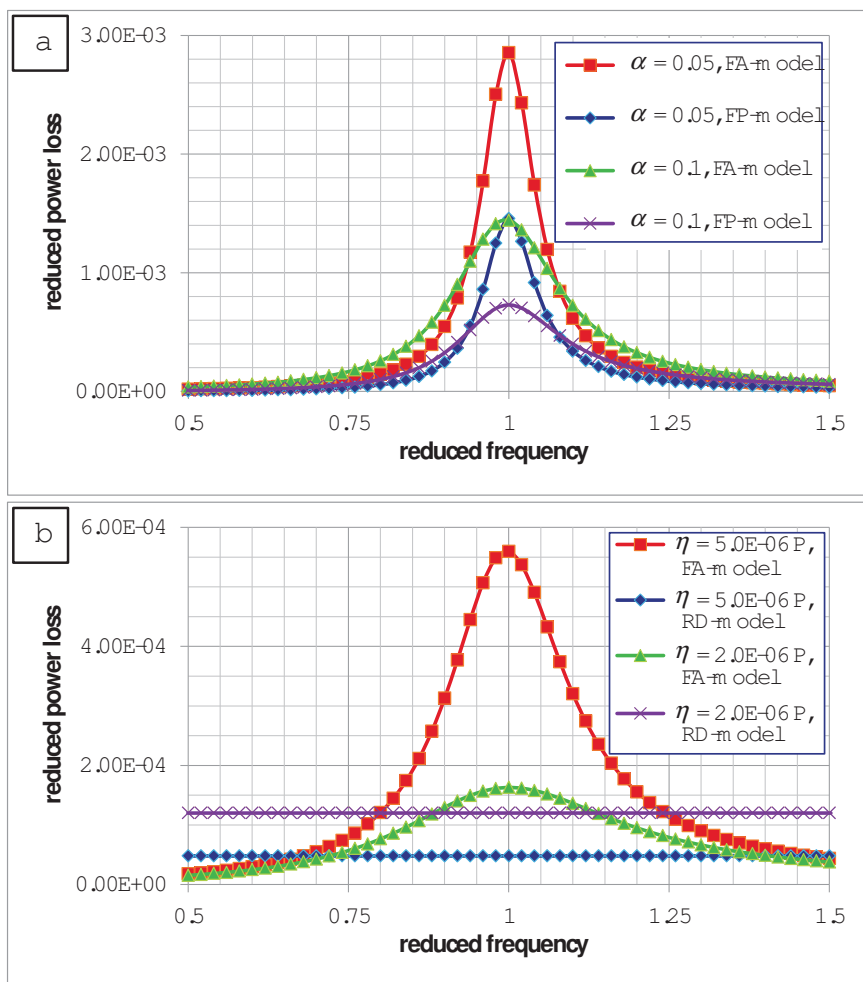


Рисунок 3.6 – Чутливість потужності втрат до параметрів загасання. Рисунок а: випадок фіксованої наночастинки та випадок в'язкозв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією для різних значень параметра  $\alpha$ . Рисунок б: випадок жорсткого диполя випадок в'язкозв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією для різних значень величини в'язкості  $\eta$ . Параметри, що використовуються тут, не зазначені в легенді на рисунку, такі ж, як у підпис до рисунку 3.2, але  $\theta_0 = 0.25\pi$ .

залежність втрат потужності від параметру  $\varrho$  є більш сильною та складною. Як видно з рис. 3.7а величина  $q(\tilde{\Omega})$  може відрізнятись як мінімум у 10 разів в залежності від  $\varrho$  для моделі в'язков'язаної наночастинки з скінченною анізотропією. Тут треба зауважити, що ця залежність нелінійна, та найнижча залежність  $q(\tilde{\Omega})$  не відповідає  $\varrho = 0$  або  $\varrho = \pm 1$ . Початкове положення легкої осі, заданої кутом  $\theta_0$ , також істотно впливає на втрату потужності. Як видно з рис. 3.7б, ця різниця може бути принаймні 20 разів. Оскільки наночастинки в реальних ферорідинах нерівномірно розподілені, можна виділити наступне. По-перше, дипольна взаємодія, яка намагається організувати ансамбль, може суттєво вплинути на втрату потужності. По-друге, зовнішній градієнт магнітного поля, який використовується для контролю нагрівання під час гіпертермії, також визначає втрату потужності. І, по-третє, ми можемо легко контролювати втрати потужності в широкому діапазоні значень завдяки постійному зовнішньому полю, яке визначає напрямок легкої осі наночастинки.

### 3.3.5 Сумісна прецесія наночастинки та її магнітного моменту

У разі синхронної прецесії векторів  $\mathbf{m}$  та  $\mathbf{n}$  з зовнішнім циркулярно-поляризованим полем (див. Рис. 3.8), стаціонарне рішення системи рівнянь (3.1), (3.2) може бути отримані у вигляді  $\varphi = \varrho\tilde{\Omega}\tilde{t} - \varphi_1$ ,  $\vartheta = \vartheta_1$ ,  $\phi = \varrho\tilde{\Omega}\tilde{t} - \phi_1$ ,  $\theta = \theta_1$ . Щоб знайти невідомі константи  $\varphi_1$ ,  $\phi_1$  та  $\vartheta_1$ ,  $\theta_1$ , ми використали умову відсутності руху магнітного моменту відносно кристалічної решітки наночастинок

$$\dot{\mathbf{m}} - \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{m} = 0. \quad (3.33)$$

Після підстановки рівняння (3.33) у друге рівняння (3.1) і нехтуючи моментом інерції, ми отримуємо

$$0 = \Omega_{cr}(\mathbf{m} \times \mathbf{n})(\mathbf{m}\mathbf{n}) + \boldsymbol{\omega}. \quad (3.34)$$

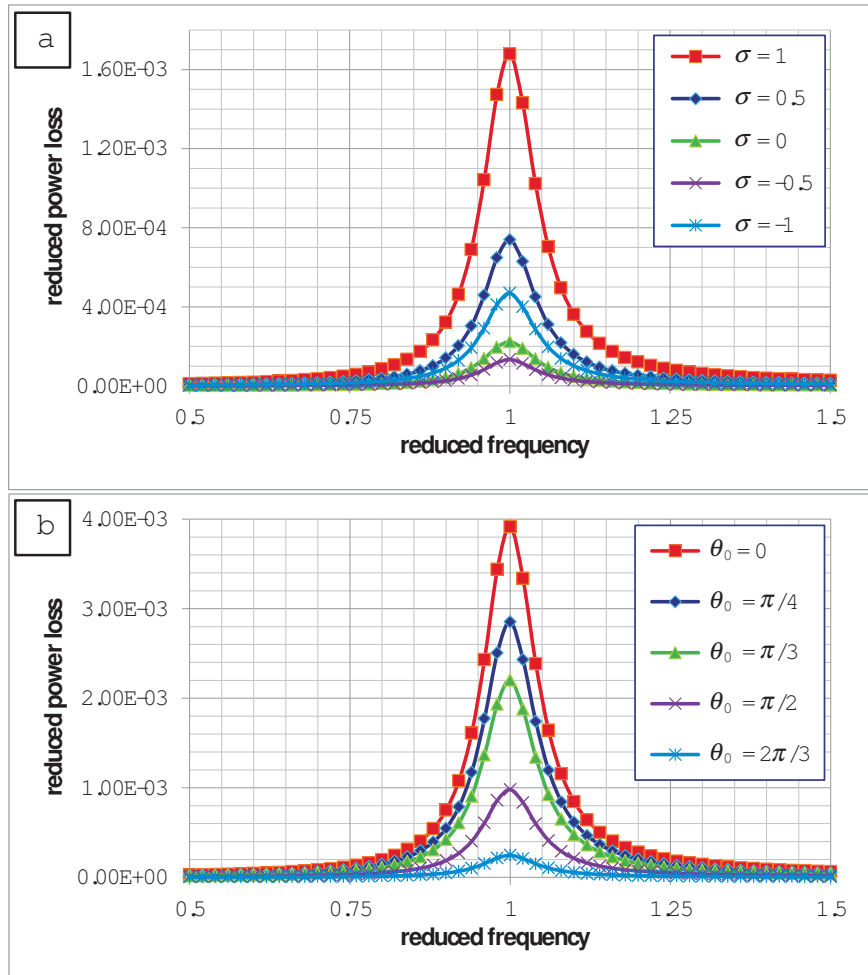


Рисунок 3.7 – Чутливість втрати потужності до орієнтації наночастинки по відношенню до зовнішнього поля для випадку в'язко-зв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією. Параметри, що використовуються тут, не зазначені в легенді на рисунку, такі ж, як у підпис до рисунку 3.2, однак  $\theta_0 = 0.25\pi$  для рисунку а та  $\rho = 1$  для рисунку б.





і представимо вектор  $\boldsymbol{\omega}$ ,  $\mathbf{m}$ , та  $\mathbf{n}$  в лабораторній системі з використанням матриці обертання рівняння (3.36). Це дозволяє безпосередньо отримати набір алгебраїчних рівнянь

$$\begin{aligned} -\sin \vartheta_1 \sin \varphi_1 \left( \frac{\rho\Omega}{\Omega_r} - h_z \right) &= \sin \theta_1 \cos \theta_1 \cos \phi_1 \frac{\rho\Omega}{\Omega_{cr}}, \\ h \sin \vartheta_1 \sin \varphi_1 &= \sin^2 \theta_1 \frac{\rho\Omega}{\Omega_{cr}}, \\ F_1 \sin(\vartheta_1 - \theta_1) \sin \varphi_1 &= \sin \vartheta_1 \left( \frac{\rho\Omega}{\Omega_r} - h_z \right), \\ F_1 \sin \theta_1 \sin(\varphi_1 - \phi_1) &= h \sin \varphi_1. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Виконуємо інтегрування рівняння (2.10) з врахуванням подання векторів  $\mathbf{m}$  та  $\mathbf{n}$  у сферичній системі координат

$$\dot{\mathbf{m}} = (-\rho\Omega \sin \vartheta_1 \sin \Psi_1, \rho\Omega \sin \vartheta_1 \cos \Psi_1, 0), \quad (3.39)$$

$$\mathbf{n} = (\sin \theta_1 \cos \Phi_1, \sin \theta_1 \sin \Phi_1, \cos \theta_1), \quad (3.40)$$

де  $\Psi_1 = \rho\tilde{\Omega}t - \varphi_1$ , ми отримуємо

$$q = 2\rho\tilde{\Omega} \sin \vartheta_1 \sin \varphi_1. \quad (3.41)$$

Важливо сказати, що рівняння (3.41) отримане з врахуванням скінченності анізотропії схоже на відповідне рівняння, отримане для моделі фіксованої наночастинки рівняння (2.62).

Скористаємось рівнянням (2.10) і подамо вектора  $\mathbf{m}$  та  $\mathbf{n}$  в сферичній системі координат, можна знайти вираз для чисельного розрахунку втрат потужності як

$$\begin{aligned} q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[ h_{xi} (\cos \vartheta_i \cos \varphi_i \Delta \vartheta_i - \sin \vartheta_i \sin \varphi_i \Delta \phi_i) \right. \\ \left. + h_{yi} (\cos \vartheta_i \sin \varphi_i \Delta \theta_i + \sin \vartheta_i \cos \varphi_i \Delta \varphi_i) \right. \\ \left. - h_{zi} \sin \vartheta_i \Delta \vartheta_i \right], \end{aligned} \quad (3.42)$$

де  $N = \tilde{\mathcal{T}}_{\text{sim}} / \Delta \tilde{t}$  ( $\tilde{\mathcal{T}}_{\text{sim}} = \mathcal{T}_{\text{sim}} \Omega_{r1}$  та обирається як  $10^5$  в моделюванні) –

це кількість етапів часу для зовнішнього періодичного поля,  $\Delta\tilde{t} (\ll 1/\tilde{\Omega})$  – значення кроку часу в чисельному розрахунку,  $\vartheta_i = \vartheta(\tilde{t}_i)$ ,  $\varphi_i = \varphi(\tilde{t}_i)$ ,  $\Delta\vartheta_i = \frac{\partial\vartheta(\tilde{t}_i)}{\partial\tilde{t}}\Delta\tilde{t}$ ,  $\Delta\varphi_i = \frac{\partial\varphi(\tilde{t}_i)}{\partial\tilde{t}}\Delta\tilde{t}$ ,

$$\begin{aligned} h_{xi} &= h_m \cos(\varrho\tilde{\Omega}\tilde{t}_i) + F_i \sin\theta_i \cos\phi_i, \\ h_{yi} &= h_m \sin(\varrho\tilde{\Omega}\tilde{t}_i) + F_i \sin\theta_i \sin\phi_i, \\ h_{zi} &= h_{z0} + F_i \cos\theta_i, \end{aligned} \quad (3.43)$$

$$F_i = F(\tilde{t}_i), \theta_i = \theta(\tilde{t}_i), \phi_i = \phi(\tilde{t}_i).$$

Додаткова ступінь свободи дає можливість системі показувати більш цікаву і складну поведінку динаміки наночастинок. Спочатку, як і в попередніх випадках, з'являється звичайний неоднорідний режим, який характеризується коливанням кутів прецесії. Нагадаємо, що період цих коливань не збігається з полем. Далі, як і у випадку фіксованої наночастинок, може відбуватися перемикання між двома рівномірними режимами, що характеризуються різними напрямками орієнтаціями наночастинок. Більше того, має місце ще один цікавий режим. Він характеризується нерухомим магнітним моментом, при цьому сама наночастинка здійснює коливання: кути  $\theta$  та  $\phi$  вектора  $\mathbf{n}$  змінюються синхронно разом із зовнішнім полем без видимого дрейфу, в той час, коли кути  $\vartheta$  та  $\varphi$  вектора  $\mathbf{m}$  залишаються практично постійними. Такий тип руху досить поширений. Він відбувається в стані "вгору" та "вниз" відповідно до напрямку поляризації зовнішнього поля. Переходи між цими типами руху відбуваються в стрибкоподібно, що відображається у різких змінах залежності  $q(\tilde{\Omega})$ . Зрештою, ми робимо висновок, що перемикання між рівномірним і неоднорідним режимами супроводжується різким збільшенням втрат потужності. Перемикання між двома однорідними режимами з переорієнтацією наночастинок призводить до зменшення втрат потужності, щонайменше, на порядок. Найбільш типові залежності  $q(\tilde{\Omega})$  показані на Рис. 3.9).

### 3.4 Висновки до розділу 3

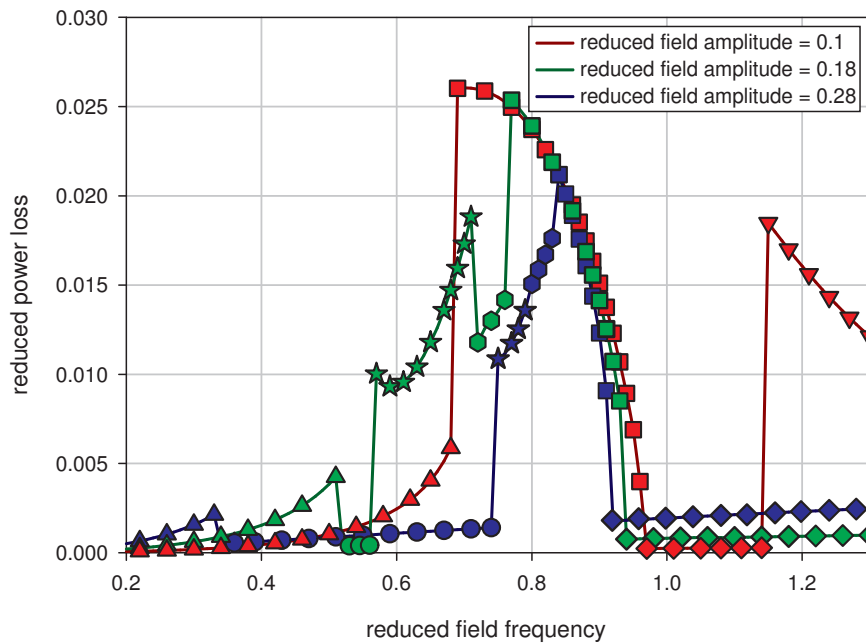


Рисунок 3.9 – Модель наночастинки в рідині з кінцевою анізотропією: найбільш типові залежності втрат потужності від частоти поля для різних амплітуд поля. Значення системних параметрів наступні:  $\alpha = 0.1$ ,  $\eta = 0.006$  П,  $M = 338$  Г,  $\varrho = +1$ ,  $h_{z0} = 0$ . Чисельне моделювання в обраному діапазоні параметрів поля не чутливе до початкових умов. Трикутні маркери позначають однорідну прецесію в положенні «вгору»; маркери кола позначають рівномірну прецесію після переходу на «вниз»; маркери зірки позначають неоднорідну прецесію; квадратні, шестикутні та трикутники маркери позначають неоднорідний режим з нерухомим магнітним моментом «вгорі»; маркери-ромби позначають неоднорідний режим з нерухомим магнітним моментом «вниз».

Підсумки наших досліджень щодо впливу скінченності анізотропії на обертальну динаміку можна підбити наступним чином. 1) Розглянуто режим малих коливань для пов'язаного магнітного та механічного руху в'язкозв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією. Цей режим має місце, коли амплітуда зовнішнього змінного поля набагато менша, ніж значення поля одноосової анізотропії наночастинок ( $H \ll H_a$ ). 2) Загасаюча прецесія магнітного моменту всередині наночастинки пріоритетним чином визначає величину втрати потужності та резонансний характер її частотної залежності. 3) Потужність втрат може бути істотно змінена рухом легкої осі наночастинки. Для реалістичних параметрів системи втрата потужності, отримана для моделі в'язкозв'язаної наночастинки зі скінченною анізотропією, перевищує значення, отримане для моделі фіксованої частинки. 4) Зниження в'язкості рідини-носія призводить до непропорційного зменшення втрати потужності, що поблизу резонансу може бути набагато меншим, ніж значення, отримане для моделі фіксованої частинки. Така складна кореляція між магнітною динамікою та механічним рухом не дозволяє відокремити внесок цих двох механізмів у дисипацію. 5) Потужність втрати надзвичайно чутлива до параметрів системи та початкового положення наночастинки. Це слід враховувати і може використовуватися, наприклад, для контролю температури нагріву та поглинання. Хоча результати отримані в динамічному наближенні, вони встановлюють обмеження для більш точних моделей, що враховують теплові коливання та міжчастинкову взаємодію.

Для прецесійного типу руху нами були записані алгебраїчні рівняння для кутів прецесії та відставання для векторів  $\mathbf{m}$  та  $\mathbf{n}$ . Методологічна особливість нашого підходу полягає в поданні вектора кутової швидкості в системі координат, що обертається з зовнішнім циркулярно-поляризованим полем, з подальшим перетворенням в лабораторну систему координат. Основними властивостями розв'язку отриманих алгебраїчних рівнянь є. По-перше, магнітний момент наночастинки завжди становить менший кут з зовнішнім полем, ніж вісь анізотропії, і, як наслідок, втрати енергії зменшуються зі зменшенням поля анізотропії. По друге, прецесійна динаміка передбачає наявність деякого ефективного поля,

перпендикулярного площині поля поляризації поля, залежно від поданої частоти та напрямку поляризації. Це ефективне поле можна порівняти з полем анізотропії у випадку високих частот.

Досліджено прецесійний режим сумісної динаміки під дією циркулярно-поляризованого поля. Оскільки обрано зовнішнє поле, що обертається, природно, що найпростішим способом вимушеного руху є однорідна прецесія. Цей режим характеризується постійними кутами прецесії та кутами відставання, значення яких залежать від параметрів системи. Алгебраїчні рівняння для цих залежностей були отримані для всіх розглянутих випадків. Встановлено, основні властивості розв'язків отриманих алгебраїчних рівнянь для випадку зв'язаної динаміки. Зокрема, по-перше, магнітний момент наночастинок завжди становить менший кут з зовнішнім полем, ніж з віссю анізотропії. По друге, прецесійна динаміка передбачає наявність деякого ефективного поля, перпендикулярного площині поляризації поля, залежно від заданої частоти та напрямку поляризації. Для високих частот це ефективне поле досить велике і може утримувати магнітний момент майже в напрямку, перпендикулярному площині поляризації зовнішнього поля. Останній факт підтверджено чисельно. Нарешті, вирази для втрати потужності були отримані для випадку в'язкого обертання наночастинок з кінцевою анізотропією.

Неоднорідний режим є ключовим питанням досліджень і він був описаний численно. Цей режим полягає в періодичних змінах полярних кутів з періодом, який не збігається з першим полем. Активація неоднорідного режиму прецесії супроводжується зміною втрати потужності. Для моделі жорсткого диполя, коли магнітний момент вважається фіксованим всередині кристалічної решітки, неоднорідний режим має наслідком зменшення потужності втрат. Однак для випадку фіксованої наночастинок, коли лише внутрішня магнітна динаміка має місце та у випадку зв'язаного руху наночастинок з кінцевою анізотропією у в'язкому носії, неоднорідна прецесія призводить до значного збільшення втрат потужності. Сумісна динаміка демонструє також інші підтипи неоднорідної прецесії, які характеризується незміною намагніченістю наночастинок, та синхронним коливаннями легкої вісі наночастинок разом

із зовнішнім полем. Цей рух реалізується для досить широкого діапазону параметрів і може включати кілька режимів, що відрізняються дискретними положеннями намагніченості. Перемикання між ними та режимами інших типів також пов'язане з різкими змінами втрати потужності.

## 4 СПРЯМОВАНИЙ ТРАНСПОРТ ПЕРІОДИЧНО ЗБУДЖЕНИХ ФЕРОМАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК, ІНДУКОВАНИЙ СИЛОЮ МАГНУСА В РІДКІЙ МАТРИЦІ

### 4.1 Вступ до розділу 4

Ефект Магнуса – це відхилення траєкторії тіла, що рухається в середовищі з обертанням, від траєкторії цього ж тіла, що рухається без обертання. Цей ефект відіграє важливу роль, наприклад, у спорті [149,150], аеронавтиці [151] та формуванні планет [152,153]. Зазначимо, що ефект Магнуса може існувати і у випадку локалізованих утворень середовища, таких як вихори у магнетиках, надпровідниках і надплинних рідинах, але його природа в кожному такому випадку своя (див., наприклад, [154,155]).

Силу, яка викликає зміну траєкторії тіла що рухається з обертанням, зазвичай називають силою Магнуса. Оскільки ця сила залежить від багатьох факторів, таких як розмір тіла, його форми та шорсткості поверхні, від характеристик його поступального та обертального рухів, динаміки навколишнього середовища тощо, її розрахунок не є простою задачею. Більше того, за певних умов (наприклад при русі в розрідженому газі сфери, що обертається [156,157]), може існувати зворотний, а не класичний, ефект Магнуса, в якому напрямок сили Магнуса є протилежним до того, що визначається принципом Бернуллі. Однак у випадку гладких сферичних частинок, чиї поступальні та обертальні рухи характеризуються малими числами Рейнольдса, ефект Магнуса є класичним, а силу Магнуса можна визначити аналітично [158]. Хоч загалом ці умови є досить обмежувальними, їх можна легко реалізувати для малих частинок, диспергованих у рідкій матриці.

Цей підхід особливо корисний при вивченні трансляційної та обертальної динаміки однодомених феромагнітних часток у суспензіях. Такі частинки можуть бути використані в таких біомедичних технологіях, як сепарація клітин, доставка ліків та лікування гіпертермією [159,160].



Для гіпертермії найважливішу роль відіграють обертальні властивості частинок та їх намагніченість, тому вони є предметом багатьох досліджень. Зокрема, обертальні властивості, викликані лінійними та циркулярно поляризованими магнітними полями, вже добре вивчені в роботах [146,147] та [37,88], відповідно.

На відміну від цього, особливості трансляційної динаміки ферромагнітних частинок під дією гармонічної сили та коливального магнітного поля не викликали такого інтересу. Це пояснюється тим, що через відносно невелику силу Магнуса, зміщення часток, спричинене цією силою протягом періоду поля, також незначне. Однак, якщо зовнішня сила і магнітне поле належним чином синхронізовані, сила Магнуса може індукувати спрямований транспорт (дрейф) частинок. Цей ефект, який був передбачений і докладно вивчений в роботах [6–8, 161], представляє особливий інтерес для сепарації частинок, оскільки величину швидкості дрейфу та напрямок дрейфу можна легко керувати зовнішніми параметрами.

В даному розділі ефект дрейфу ферромагнітних частинок в рідкій матриці, який виникає під дією сили Магнуса, розглянуто як в детерміністичному випадку, так і в стохастичному, коли враховуються теплові флуктуації.

#### 4.2 Мінімальна система рівнянь руху в детерміністичному випадку

У нашій моделі ферромагнітні частинки, що рухаються у в'язкій рідині, вважаються сферичними та гладкими. Їх радіус  $a$  вважається настільки малим, що реалізується однодоменний стан, і тому намагніченість частинок  $\mathbf{M}$  є функцією лише часу:  $\mathbf{M} = \mathbf{M}(t)$ . Якщо анізотропне магнітне поле досить велике, то вектор  $\mathbf{M}$  приблизно паралельний осі анізотропії. У цьому наближенні намагніченість вмерожена в частинку і, отже, її динаміка регулюється кінематичним диференціальним рівнянням  $d\mathbf{M}/dt = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{M}$ , де  $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}(t)$  – кутова швидкість частинки. Також ми припускаємо, що трансляційне і обертальне числа Рейнольдса,  $Re_t$  і

$Re_r$ , набагато менші 1 (оскільки  $\max(a)$  зазвичай не перевищує кількох сотень нанометрів [162, 163], ця умова не є дуже обмежувальною для зважених частинок). У цьому випадку інерційними ефектами в динаміці частинок можна знехтувати і, як наслідок, рівняння для поступального та обертального рухів частинки зводяться до рівнянь балансу сил та моментів,  $\mathbf{F} = 0$  і  $\mathbf{T} = 0$ , відповідно.

Нехтуючи взаємодією між частинками, ми включаємо в загальну силу  $\mathbf{F}$  вплив на частинку зовнішньої рушійної сили  $\mathbf{f}_d = \mathbf{f}_d(t)$ , силу тертя  $\mathbf{f}_f = \mathbf{f}_f(t)$  та силу Магнуса  $\mathbf{f}_l = \mathbf{f}_l(t)$ . Вибираємо рушійну силу у вигляді  $\mathbf{f}_d = f_m \sin(\Omega t - \phi) \mathbf{e}_x$ , де  $f_m$ ,  $\Omega$ , і  $\phi$  - відповідно амплітуда, кутова частота та початкова фаза сили, а  $\mathbf{e}_x$  - одиничний вектор вздовж осі  $x$  в декартовій системі координат. Згідно з припущеннями, сила тертя визначається законом Стокса,  $\mathbf{f}_f = -6\pi\eta a \mathbf{v}$  ( $\eta$  - це динамічна в'язкість рідини,  $\mathbf{v} = \mathbf{v}(t)$  - лінійна швидкість частинки), а сила Магнуса визначається за формулою [158]  $\mathbf{f}_l = \pi\rho a^3 \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}$  ( $\rho$  - щільність рідини, знак  $\times$  позначає векторний добуток).

Припускається також, що зважені частинки знаходяться під дією однорідного зовнішнього магнітного поля  $\mathbf{H} = \mathbf{H}(t)$ . Оскільки обертальний момент, який діє на магнітний момент частинки  $V\mathbf{M}$  ( $V = 4\pi a^3/3$  - об'єм частинки), дорівнює  $V\mathbf{M} \times \mathbf{H}$ , а намагніченість вважається замороженою в частинку, механічний обертальний момент  $\mathbf{t}_m$ , індукований магнітним полем, визначається виразом  $\mathbf{t}_m = V\mathbf{M} \times \mathbf{H}$ . Додатково до цього вкладу загальний обертальний момент  $\mathbf{T}$ , що діє на частинку, включає також момент тертя  $\mathbf{t}_f = -8\pi\eta a^3 \boldsymbol{\omega}$ . Тому рівняння балансу моментів приймає вигляд  $\mathbf{t}_m + \mathbf{t}_f = 0$ . Рівняння  $\mathbf{F} = 0$ ,  $\mathbf{T} = 0$  і кінематичне диференціальне рівняння  $d\mathbf{M}/dt = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{M}$  формують систему рівнянь, що визначає  $\mathbf{v}$ ,  $\boldsymbol{\omega}$  та  $\mathbf{M}$  як функції часу. Розв'язок рівняння моментів  $\mathbf{T} = 0$  відносно кутової швидкості частинки дає  $\boldsymbol{\omega} = (1/6\eta) \mathbf{M} \times \mathbf{H}$ . Підставляючи цей розв'язок в інші рівняння системи отримуємо

$$\mathbf{u} + \gamma \mathbf{u} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{h}) = \sin(2\pi\tau) \mathbf{e}_x, \quad (4.1a)$$

$$\dot{\mathbf{m}} = -\alpha \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{h}). \quad (4.1b)$$

Тут  $\mathbf{u} = \mathbf{v}/v_m$ ,  $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M$  і  $\mathbf{h} = \mathbf{H}/H_m$  – безрозмірні швидкість частинки, її намагніченість та зовнішнє магнітне поле, відповідно,  $v_m = f_m/6\pi a\eta$ ,  $H_m = \max |\mathbf{H}|$  ( $|\mathbf{h}| = 1$ ), крапка над вектором означає похідну відносно безрозмірного часу  $\tau = \Omega t/2\pi$ . Безрозмірні параметри  $\gamma$  і  $\alpha$  визначаються як

$$\gamma = \frac{\rho a^2 M H_m}{36\eta^2}, \quad \alpha = \frac{\pi M H_m}{3\eta\Omega}. \quad (4.2)$$

Відповідно до рівнянь (4.1) параметр  $\gamma$  характеризує величину сили Магнуса, а параметр  $\alpha$  характеризує зворотній релаксаційний час обертання.

Для подальшого спрощення ми припускаємо, що магнітне поле  $\mathbf{h}$  та намагніченість  $\mathbf{m}$  неоднорідно обертаються в площині  $xy$  і можуть бути представлені у вигляді

$$\mathbf{h} = \cos \psi \mathbf{e}_x + \sin \psi \mathbf{e}_y, \quad (4.3a)$$

$$\mathbf{m} = \cos \varphi \mathbf{e}_x + \sin \varphi \mathbf{e}_y, \quad (4.3b)$$

де азимутальний кут магнітного поля,  $\psi = \psi(\tau + \phi/2\pi)$ , є заданою періодичною функцією  $\tau$ , що задовольняє умовам  $\psi|_{1/2+\tau} = -\psi|_{\tau}$ . Слід також підкреслити, що ця умова означає, що  $\psi(\tau)$  – періодична функція з періодом 1 (і, таким чином,  $\psi|_{1+\tau} = \psi|_{\tau}$ ),  $\phi \in [0, 2\pi]$  – початкова фаза, а  $\varphi = \varphi(\tau)$  – азимутальний кут вектора намагніченості. Виходячи з вищеприписаного, ми знаходимо  $\mathbf{m} \times \mathbf{h} = \sin \chi \mathbf{e}_z$  ( $\chi = \psi - \varphi$  – кут відставання),  $\mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{h}) = \sin \chi (\sin \varphi \mathbf{e}_x - \cos \varphi \mathbf{e}_y)$ , і  $\dot{\mathbf{m}} = -\dot{\varphi} (\sin \varphi \mathbf{e}_x - \cos \varphi \mathbf{e}_y)$ . Тому з рівняння (4.1) та умови  $\gamma \ll 1$  (оскільки  $\gamma \sim a^2$ , ця умова не є надто сильною для диспергованих частинок), ми отримуємо потрібну нам систему рівнянь:

$$\mathbf{u} = (\mathbf{e}_x + \gamma \sin \chi \mathbf{e}_y) \sin (2\pi\tau), \quad (4.4a)$$

$$\dot{\chi} + \alpha \sin \chi = \dot{\psi} \quad (4.4b)$$

(для визначеності ми обираємо  $\chi|_{\tau=0} = 0$ ). Ця система рівнянь мінімальна

в тому сенсі, що віна є найпростішою, яка описує поступальний рух частинок, що нерівномірно обертаються у в'язкій рідині.

Таким чином, щоб знайти характеристики поступального руху зважених феромагнітних частинок в детерміністичному випадку, що визначається рівнянням (4.4a), спочатку потрібно знайти розв'язок рівняння (4.4b), що описує динаміку періодичного збудженого маятника з великим загасанням. Деякі властивості його розв'язків вже вивчалися, наприклад, у контексті джозефсоновських з'єднань [164, 165]. Однак, наскільки нам відомо, не існує відомих стаціонарних розв'язків цього рівняння. Оскільки швидкість дрейфу визначається в стаціонарному стані (див. нижче), їх пошук має велике значення при аналітичному вивченні транспортних властивостей диспергованих частинок.

### 4.3 Траєкторія частинок і швидкість дрейфу в детерміністичному випадку

Відповідно до (4.4a) формулу  $\mathbf{S}(\tau) = \int_0^\tau \mathbf{u}(\tau') d\tau'$ , що визначає положення центру частинки в момент часу  $\tau$ , можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(\tau) = & \frac{1}{2\pi} [1 - \cos(2\pi\tau)] \mathbf{e}_x \\ & + \gamma \int_0^\tau \sin[\chi(\tau' + \phi/2\pi)] \sin(2\pi\tau') d\tau' \mathbf{e}_y. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Представимо безрозмірний час  $\tau$  як  $\tau = n + \xi$ , де  $n = 0, 1, 2, \dots$  і  $\xi \in [0, 1]$ , та введемо відносне положення частинки як  $\mathbf{R}_n(\xi) = \mathbf{S}(n + \xi) - \mathbf{S}(n)$ . Далі, записавши формулу для траєкторії частинок в стаціонарному стані як  $\mathbf{R}(\xi) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{R}_n(\xi)$ , знаходимо

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\xi) = & \frac{1}{2\pi} [1 - \cos(2\pi\xi)] \mathbf{e}_x \\ & + \gamma \int_{\phi/2\pi}^{\xi + \phi/2\pi} \sin[\chi_{\text{st}}(\xi')] \sin(2\pi\xi' - \phi) d\xi' \mathbf{e}_y, \end{aligned} \quad (4.6)$$

де  $\chi_{\text{st}}(\xi) = \lim_{n \rightarrow \infty} \chi(n + \xi)$  – стаціонарний розв'язок рівняння (4.4b) при  $\phi = 0$ .

Безрозмірне зміщення частинок протягом одного періоду зовнішньої сили (нагадаємо, у нашій моделі магнітне поле має той же самий період) задається формулою  $\mathbf{s} = \mathbf{R}(1)$ . Звідси, використавши (4.6) та умови  $\chi_{\text{st}}(0) = \chi_{\text{st}}(1)$  і  $\sin[\chi_{\text{st}}(1/2 + \xi)] = -\sin[\chi_{\text{st}}(\xi)]$ , отримуємо  $s_x = 0$  і

$$s_y = 2\gamma \int_0^{1/2} \sin[\chi_{\text{st}}(\xi)] \sin(2\pi\xi - \phi) d\xi. \quad (4.7)$$

Останній результат показує, що спільна дія гармонічної сили та нерівномірно обертового магнітного поля викликає дрейф частинок вздовж осі  $y$ . Завдяки своєму визначенню, величину цього зміщення,  $s_y$ , можна також розглядати як безрозмірну швидкість дрейфу частинки (розмірна швидкість дрейфу записується як  $v_{\text{dr}} = v_m s_y$ ) [7]. Нашою наступною метою є пошук точних розв'язків рівняння (4.4b) у стаціонарному стані, визначення швидкість дрейфу  $s_y$ , та вивчення її залежності від параметрів моделі.

#### 4.4 Точні аналітичні результати в детерміністичному випадку

Розглянемо випадок, в якому азимутальний кут  $\psi(\tau)$  магнітного поля задається трикутною хвилею, тобто періодичною функцією

$$\psi(\tau) = \frac{2}{\pi} \psi_m \arcsin[\cos(2\pi\tau)] \quad (4.8)$$

( $\psi_m > 0$ , див рис. 4.10). Головною перевагою такого вибору  $\psi(\tau)$  є можливість знаходження аналітичного розв'язку рівняння (4.4b) в стаціонарному стані. Дійсно, згідно з (4.8),  $\dot{\psi}(\tau)$  є квадратною хвилею, тобто  $\dot{\psi}(\tau) = \mp 4\psi_m$ , де верхній знак відповідає  $\tau \in [n, n + 1/2)$ , а нижній –  $\tau \in [n + 1/2, n + 1)$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ). Тому в цьому випадку рівняння (4.4b) (нагадаємо, ми обрали  $\phi = 0$ ) може бути записане в диференціальній формі

$$\frac{d\chi}{\sin \chi \pm \kappa} = -\alpha d\tau, \quad (4.9)$$

де  $\kappa = 4\psi_m/\alpha$  – безрозмірний параметр, що характеризує амплітуду квадратної хвилі.

Згідно з (4.7), нас буде цікавити стаціонарний розв'язок рівняння (4.9),  $\chi_{st}(\xi) = \lim_{n \rightarrow \infty} \chi(n + \xi)$ . Враховуючи той факт, що функція  $\chi_{st}(\xi)$  є періодичною з періодом 1, ми обмежимо безрозмірний час  $\xi$  інтервалом  $[0, 1]$ . У відповідності з цим за допомогою рівняння (4.9) знаходимо наступні рівняння для  $\chi_{st}(\xi)$ :

$$\int_{\chi_{st}(0)}^{\chi_{st}(\xi)} \frac{dx}{\sin x + \kappa} = -\alpha \xi \quad \text{при } \xi \in [0, 1/2), \quad (4.10a)$$

$$\int_{\chi_{st}(1/2)}^{\chi_{st}(\xi)} \frac{dx}{\sin x - \kappa} = -\alpha \left( \xi - \frac{1}{2} \right) \quad \text{при } \xi \in [1/2, 1). \quad (4.10b)$$

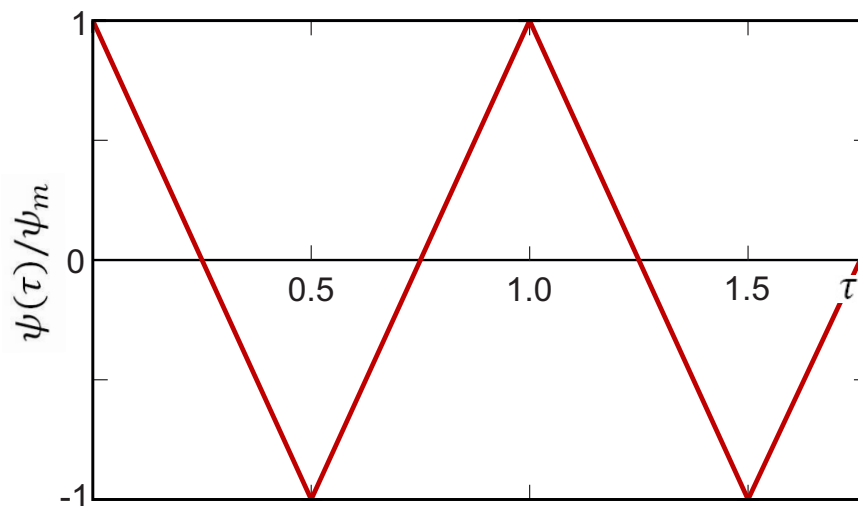


Рисунок 4.10 – - Графік функції  $\psi(\tau)/\psi_m$ , що визначається формулою (4.8). Ця функція періодична з періодом 1 і задовольняє умові антисиметрії  $\psi(1/2 + \tau) = -\psi(\tau)$ .

Використавши той факт, що  $\dot{\psi}(1/2 + \xi) = -\dot{\psi}(\xi)$ , за допомогою рівняння (4.4b) легко показати, що умова

$$\chi_{st}(1/2 + \xi) = -2\pi l - \chi_{st}(\xi) \quad (4.11)$$

має виконуватись при цілих значеннях  $l$ , які визначаються параметрами  $\alpha$  та  $\kappa$  (див. нижче). Це означає, що рівняння (4.10b) може бути виключене з подальшого аналізу, і для знаходження  $\chi_{st}(\xi)$  на інтервалі  $[0, 1]$  ми можемо

використати рівняння (4.10a) та умову (4.11). Оскільки інтеграл в рівнянні (4.10a) залежить від того, чи є параметр  $\kappa$  більшим, меншим чи рівним одиниці, ми розглянемо дрейфовий рух частинок в цих випадках окремо.

#### 4.4.1 Дрейф при $\kappa < 1$

Простий аналіз рівнянь (4.10) показує, що у випадку  $\kappa < 1$  стаціонарний розв'язок рівняння (4.9) має задовольняти наступним нерівностям:  $-\arcsin \kappa < \chi_{st}(\xi) < \arcsin \kappa$ . З цього випливає, що  $l = 0$ , тобто умова (4.11) при  $\kappa < 1$  зводиться до  $\chi_{st}(1/2 + \xi) = -\chi_{st}(\xi)$ . Щоб знайти  $\chi_{st}(\xi)$  при  $\xi \in [0, 1/2)$ , використаємо рівняння (4.10a) і стандартний інтеграл

$$\int \frac{dx}{\sin x + \kappa} = \frac{1}{\sqrt{1 - \kappa^2}} \ln \frac{\kappa \tan(x/2) + 1 - \sqrt{1 - \kappa^2}}{\kappa \tan(x/2) + 1 + \sqrt{1 - \kappa^2}} \quad (4.12)$$

(див. формулу (1.5.9.14) в [166]). Вводячи позначення

$$Q(\xi) = \kappa \tan \frac{\chi_{st}(\xi)}{2} + 1 \quad (4.13)$$

і

$$\sigma = \frac{\alpha}{4} \sqrt{1 - \kappa^2} \quad (4.14)$$

та використовуючи (4.12), рівняння (4.10a) може бути представлене у формі

$$\frac{Q(\xi) - \sqrt{1 - \kappa^2}}{Q(\xi) + \sqrt{1 - \kappa^2}} = \frac{Q(0) - \sqrt{1 - \kappa^2}}{Q(0) + \sqrt{1 - \kappa^2}} e^{-4\sigma\xi}. \quad (4.15)$$

Розв'язком цього рівняння відносно  $Q(\xi)$  є функція

$$Q(\xi) = \sqrt{1 - \kappa^2} \frac{Q(0) + \sqrt{1 - \kappa^2} \tanh(2\sigma\xi)}{Q(0) \tanh(2\sigma\xi) + \sqrt{1 - \kappa^2}}, \quad (4.16)$$

де величина  $Q(0)$  також може бути визначена з рівняння (4.15). Дійсно, підставивши в це рівняння  $\xi = 1/2$  і замінивши  $Q(1/2)$  на  $2 - Q(0)$  [це

можливо через те, що  $\chi_{st}(1/2) = -\chi_{st}(0)$ ], отримуємо

$$Q(0) = \kappa^2 \frac{\tanh \sigma}{\sqrt{1 - \kappa^2 / \cosh^2 \sigma} + \sqrt{1 - \kappa^2}} + 1. \quad (4.17)$$

Тепер, використовуючи позначення (4.13), кут відставання в стаціонарному стані може бути представлений як

$$\chi_{st}(\xi) = 2 \arctan \frac{Q(\xi) - 1}{\kappa}, \quad (4.18)$$

де  $\arctan x$  відповідає основному значенню арктангенса, тобто  $\arctan x$  належить інтервалу  $(-\pi/2, \pi/2)$ . Зазначимо також, що у випадку, коли  $\xi = 0$ , вирази (4.18) і (4.17) дають наступний результат:

$$\chi_{st}(0) = \arctan \left( \frac{\kappa}{\sqrt{1 - \kappa^2}} \tanh \sigma \right). \quad (4.19)$$

Це означає, що умова  $\chi_{st}(0) \in [0, \pi/2)$  виконується завжди.

Графіки функції  $\chi_{st}(\xi)$  на інтервалі  $[0, 1]$ , які отримані з (4.16)–(4.18) та умови  $\chi_{st}(1/2 + \xi) = -\chi_{st}(\xi)$ , показані на рис. 4.11 суцільною на пунктирною лініями відповідно. Як видно, чисельні результати, які представлені на рисунку квадратними та трикутними символами, підтверджують аналітичні результати. Вплив сили Магнуса на траєкторії магнітних частинок, що викликає їх дрейф, проілюстровано на рис. 4.12. Як і раніше, наші теоретичні та чисельні результати повністю узгоджуються.

Нарешті, розрахуємо швидкість дрейфу феромагнітних частинок, що індукуються силою Магнуса. Враховуючи, що  $\sin(2 \arctan x) = 2x/(1+x^2)$ , з (4.18) отримуємо

$$\sin[\chi_{st}(\xi)] = 2\kappa \frac{Q(\xi) - 1}{\kappa^2 + (Q(\xi) - 1)^2}. \quad (4.20)$$

Підставляючи праву частину цього співвідношення в (4.7), приходимо до



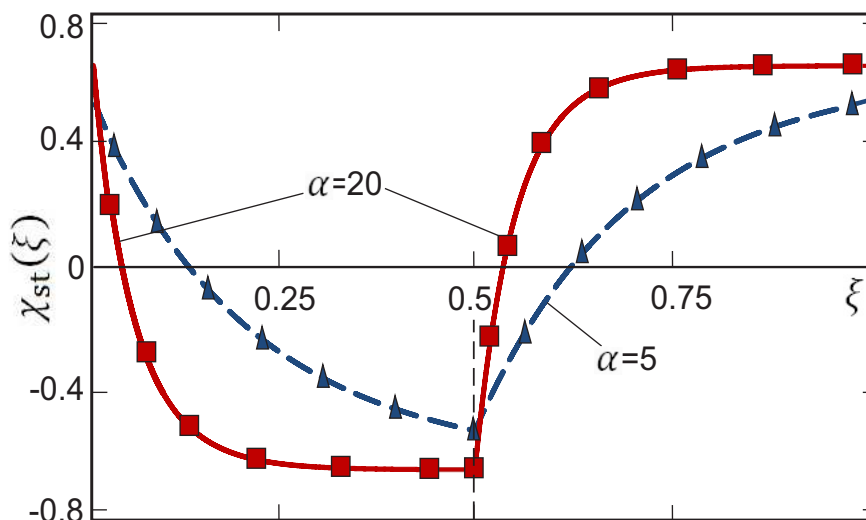


Рисунок 4.11 – Часова залежність кута відставання в стаціонарному стані при  $\kappa = 0.6$ . Суцільна та пунктирна лінії представляють теоретичний результат (4.18) для  $\alpha = 20$  і  $\alpha = 5$  відповідно. Для цих же значень  $\alpha$  чисельний розв'язок рівняння (4.4b) на  $n$ -му періоді функції (4.8) (для досягнення стаціонарного стану було обрано  $n = 10^2$ ) представлені квадратними та трикутними символами.

наступного виразу для швидкості дрейфу:

$$s_y = 4\gamma\kappa \int_0^{1/2} \frac{Q(\xi) - 1}{\kappa^2 + (Q(\xi) - 1)^2} \sin(2\pi\xi - \phi) d\xi, \quad (4.21)$$

що виконується при  $\kappa < 1$ . У граничному випадку, коли  $\alpha \rightarrow \infty$ , за допомогою (4.16) і (4.21) знаходимо, що  $Q(\xi)|_{\alpha=\infty} = \sqrt{1 - \kappa^2}$  ( $\xi \neq 0$ ) і

$$s_y|_{\alpha=\infty} = -\frac{2}{\pi} \gamma\kappa \cos \phi. \quad (4.22)$$

У протилежному граничному випадку, коли  $\alpha \rightarrow 0$ , ми маємо  $Q(\xi) \sim 1 + (\kappa^2/8)(1 - 4\xi)\alpha$  і, як наслідок,

$$s_y|_{\alpha \rightarrow 0} \sim -\frac{1}{\pi^2} \gamma\kappa\alpha \sin \phi. \quad (4.23)$$

На рис. 4.13 показані залежності швидкості дрейфу (4.21) від параметра  $\alpha$  для різних значень початкової фази  $\phi$ . Їх особливістю є наявність локальних максимумів або мінімумів. Оскільки  $\alpha$  залежить від кутової частоти  $\Omega$  (див. рівняння 4.2), то існує така частота, при

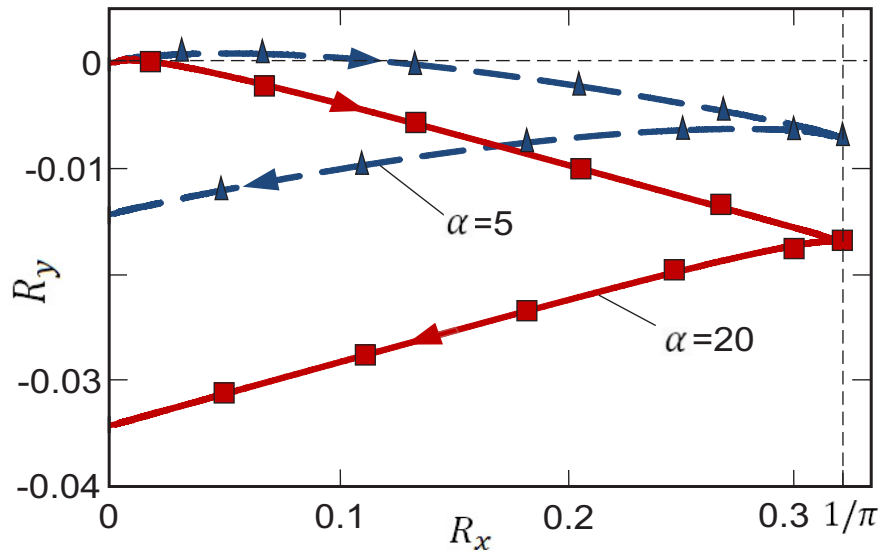


Рисунок 4.12 – - Фрагменти стаціонарних траєкторій частинок, що отримані при  $\kappa = 0.6$ ,  $\gamma = 0.1$  і  $\phi = 0$  для одного періоду рушійної сили. Суцільною та пунктирною лініями зображено теоретичні траєкторії, які знайдені за допомогою (4.6) і (4.20) для  $\alpha = 20$  і  $\alpha = 5$ . Початкова точка цих траєкторій відповідає  $\xi = 0$  ( $R_x|_{\xi=0} = R_y|_{\xi=0} = 0$ ), а кінцеві точки відповідають  $\xi = 1$  і визначають швидкості дрейфу ( $R_x|_{\xi=1} = 0$ ,  $R_y|_{\xi=1} = s_y$ ). Квадратними та трикутними символами позначені позиції частинок, які знайдені за допомогою (4.6) шляхом чисельного розв'язку рівняння (4.4b).

якій абсолютна величина швидкості дрейфу досягає максимуму. Інша важлива особливість полягає в тому, що, в залежності від початкової фази, дрейф різних частинок (тобто частинок, що характеризуються різними значеннями параметра  $\alpha$ ) може відбуватися в протилежних напрямках. Саме така ситуація показана на рисунку 4.13 при  $\phi = 0.6$  rad. В цього випадку всі частинки з  $\alpha < \alpha_{cr}$ , де  $\alpha_{cr} \approx 20.58$  є розв'язком рівняння  $s_y = 0$ , дрейфують проти осі  $y$  ( $s_y < 0$ ), а всі частинки з  $\alpha > \alpha_{cr}$  дрейфують вздовж цієї осі ( $s_y > 0$ ). У роботі [7] ми запропонували використовувати це явище для сепарації феромагнітних "core-shell" частинок у суспензіях. Слід також підкреслити, що, згідно з (4.21), початкова фаза магнітного поля сильно впливає на швидкість дрейфу. Як видно з рис. 4.14, початкова фаза визначає як величину швидкості дрейфу, так і його напрямок.

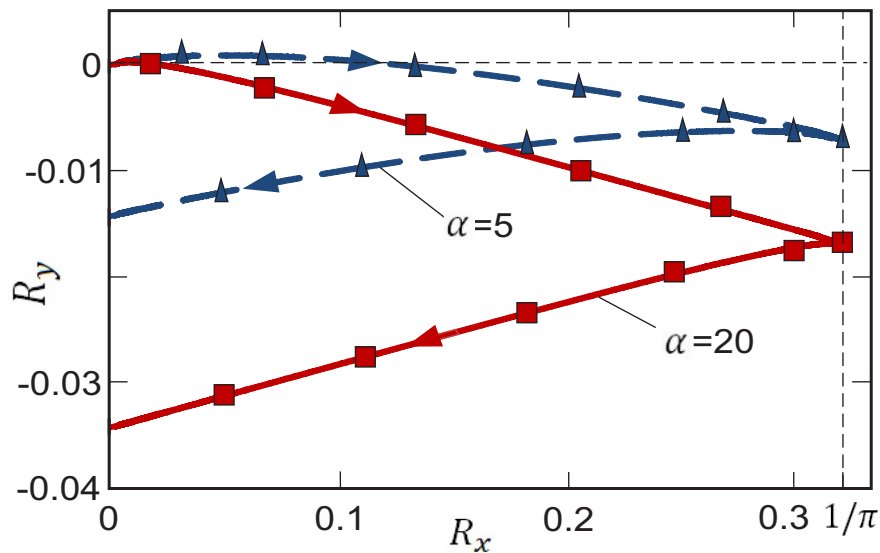


Рисунок 4.13 – Швидкість дрейфу  $s_y/\gamma$  як функція параметру  $\alpha$ . Суцільні лінії, що зображують залежність цієї функції від початкової фази  $\phi$  (вимірюється в радіанах), представляє теоретичний результат (4.21) при  $\kappa = 0.6$ . Чисельні результати, які були отримані з (4.7) і рівняння (4.4b), зображені квадратними символами.

#### 4.4.2 Дрейф при $\kappa = 1$

Для того, щоб знайти швидкість дрейфу при  $\kappa = 1$ , спочатку знайдемо значення вищенаведених виразів при  $\kappa \rightarrow 1$ . Оскільки  $\tanh x \sim x$  та  $\cosh x \sim 1$  при  $x \rightarrow 0$ , з (4.16) та (4.17) отримуємо

$$Q(\xi)|_{\kappa=1} = \frac{2 Q(0)|_{\kappa=1}}{\alpha Q(0)|_{\kappa=1} \xi + 2} \quad (4.24)$$

і

$$Q(0)|_{\kappa=1} = \frac{1 + \alpha/4 + \sqrt{1 + (\alpha/4)^2}}{1 + \sqrt{1 + (\alpha/4)^2}} \quad (4.25)$$

[зазначимо також, що, згідно з (4.19),  $\chi_{st}(0)|_{\kappa=1} = \arctan(\alpha/4)$ ]. Далі, використовуючи (4.24) і (4.25), формулу (4.20) можемо звести до

$$\sin[\chi_{st}(\xi)]|_{\kappa=1} = -1 + \frac{2}{1 + q^2(\xi)}, \quad (4.26)$$

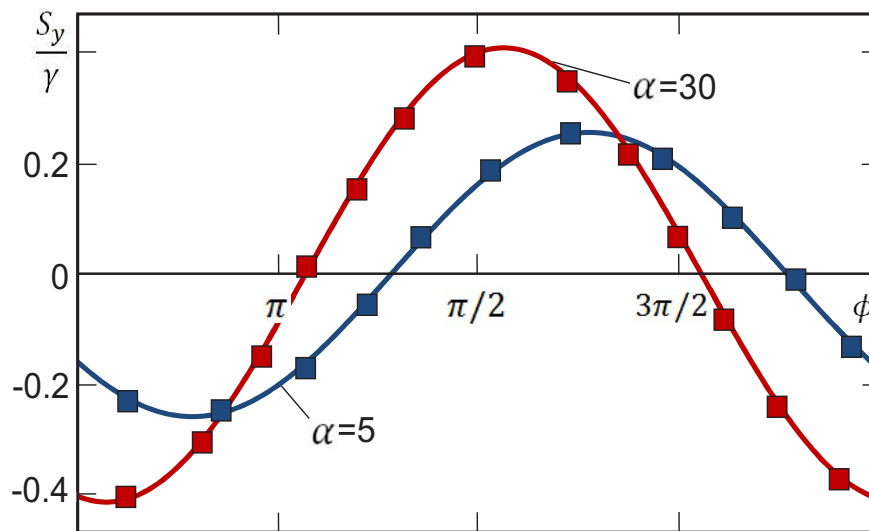


Рисунок 4.14 – Швидкість дрейфу  $s_y/\gamma$  як функція початкової фази  $\phi$  при  $\kappa = 0.6$  і різних значеннях  $\alpha$ . Теоретичні та чисельні результати визначаються так само, як і на рис. 4.13.

де

$$q(\xi) = \alpha\xi - \frac{\alpha}{4} + \sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{4}\right)^2}, \quad (4.27)$$

і знайти швидкість дрейфу частинок (4.21) при  $\kappa = 1$  у вигляді

$$s_y|_{\kappa=1} = -\frac{2\gamma}{\pi} \cos \phi + 4\gamma \int_0^{1/2} \frac{\sin(2\pi\xi - \phi)}{1 + q^2(\xi)} d\xi. \quad (4.28)$$

Відзначимо, що цей же самий результат можна отримати шляхом аналітичного розв'язку рівняння (4.4b) при  $\kappa = 1$  [7].

#### 4.4.3 Дрейф при $\kappa > 1$

За цієї умови розв'язок рівняння (4.10a) може суттєво відрізнятись від отриманого при  $\kappa \leq 1$ . Причиною є те, що підінтегральна функція в (4.10a) є обмеженою, і тому кут відставання  $\chi_{st}(\xi)$  може змінюватися у достатньо широкому інтервалі. Іншими словами, якщо параметри  $\alpha$  та  $\kappa$  є достатньо великими (див. нижче), то  $l$  в (4.11) може бути ненульовим. Щоб знайти у цьому випадку  $\chi_{st}(\xi)$ , використаємо стандартний інтеграл

(див. формулу (1.5.9.13) в [166])

$$\int \frac{dx}{\sin x + \kappa} = \frac{2}{\sqrt{\kappa^2 - 1}} \arctan \frac{\kappa \tan(x/2) + 1}{\sqrt{\kappa^2 - 1}} \quad (4.29)$$

( $\kappa > 1$ ). З урахуванням цього результату рівняння (4.10а) може бути зведене до

$$\tan \left( \arctan \frac{R(0)}{\sqrt{\kappa^2 - 1}} - \arctan \frac{R(\xi)}{\sqrt{\kappa^2 - 1}} \right) = \tan(2\nu\xi), \quad (4.30)$$

де, за визначенням,

$$R(\xi) = \kappa \tan \frac{\chi_{st}(\xi)}{2} + 1 \quad (4.31)$$

(тобто  $R(\xi)$  це  $Q(\xi)$  при  $\kappa > 1$ ) і

$$\nu = \frac{\alpha}{4} \sqrt{\kappa^2 - 1}. \quad (4.32)$$

Розв'язуючи відносно  $R(\xi)$  рівняння

$$\sqrt{\kappa^2 - 1} \frac{R(0) - R(\xi)}{\kappa^2 - 1 + R(0)R(\xi)} = \tan(2\nu\xi), \quad (4.33)$$

що випливає з рівняння (4.13), знаходимо

$$R(\xi) = \sqrt{\kappa^2 - 1} \frac{R(0) - \sqrt{\kappa^2 - 1} \tan(2\nu\xi)}{R(0) \tan(2\nu\xi) + \sqrt{\kappa^2 - 1}}. \quad (4.34)$$

Початкове значення цієї функції,  $R(0)$ , задовольняє рівнянню

$$\frac{2\sqrt{\kappa^2 - 1} [R(0) - 1]}{\kappa^2 - 1 + R(0)[2 - R(0)]} = \tan \nu, \quad (4.35)$$

яке може бути отримане з (4.33) при  $\xi = 1/2$  і умови (4.11). Припускаючи, що  $\chi_{st}(0) \in (0, \pi)$ , розв'язок рівняння (4.35), що задовольняє умові  $R(0) > 1$ , набуває вигляду

$$R(0) = 1 - \frac{\sqrt{\kappa^2 - 1}}{\tan \nu} + \sqrt{\frac{\kappa^2 - 1}{\tan^2 \nu} + \kappa^2}. \quad (4.36)$$

Якщо величина параметру  $\nu$  належить інтервалу  $(\pi p, \pi p + \pi)$ , тобто

$$p\pi < \nu < (p+1)\pi \quad (4.37)$$

( $p = 0, 1, 2, \dots$ ), тоді з (4.31), (4.36) та  $\tan x = 2 \tan(x/2)/[1 - \tan^2(x/2)]$  отримуємо

$$\chi_{\text{st}}(0) = \arctan\left(\frac{\kappa}{\sqrt{\kappa^2 - 1}} \tan \nu\right) \quad (4.38)$$

при  $p\pi < \nu < p\pi + \pi/2$  і

$$\chi_{\text{st}}(0) = \pi + \arctan\left(\frac{\kappa}{\sqrt{\kappa^2 - 1}} \tan \nu\right) \quad (4.39)$$

при  $p\pi + \pi/2 < \nu < p\pi + \pi$ . Зазначимо також, що, оскільки відповідно до (4.38) і (4.39)  $\chi_{\text{st}}(0)|_{\nu=p\pi+\pi/2-0} = \chi_{\text{st}}(0)|_{\nu=p\pi+\pi/2+0}$ ,  $\chi_{\text{st}}(0)$  – безперервна функція параметрів  $\alpha$  і  $\kappa$ .

Як це впливає з визначення (4.31) і того факту, що кут відставання в стаціонарному стані  $\chi_{\text{st}}(\xi)$  монотонно зменшується в інтервалі  $[0, 1/2)$ , функція  $\chi_{\text{st}}(\xi)$  за умов (4.37) може бути виражена через  $R(\xi)$  в наступному вигляді:

$$\chi_{\text{st}}(\xi) = -2\pi p(\xi) + 2 \arctan \frac{R(\xi) - 1}{\kappa}. \quad (4.40)$$

Тут  $p(\xi)$  – цілочисельна функція змінної  $\xi$  [нагадуємо,  $\xi \in [0, 1/2)$ ], що забезпечує неперервність  $\chi_{\text{st}}(\xi)$ . Наприклад, якщо  $0 < \nu < \pi$  (тобто коли  $p = 0$ ), тоді  $p(\xi) = 0$  для всіх допустимих значень  $\xi$ . Якщо ж  $p \geq 1$ , тоді  $p(\xi)$  визначається як

$$p(\xi) = \begin{cases} 0, & 0 \leq \xi < \xi_1, \\ 1, & \xi_1 < \xi < \xi_2, \\ \vdots & \vdots \\ p, & \xi_p < \xi < 1/2, \end{cases} \quad (4.41)$$

де

$$\xi_k = \frac{1}{2\nu} \left( k\pi - \arctan \frac{\sqrt{\kappa^2 - 1}}{R(0)} \right) \quad (4.42)$$

( $k = 1, 2, \dots, p$ ) є розв'язками рівняння  $\tan(2\nu\xi) = -\sqrt{\kappa^2 - 1}/R(0)$ , що належать інтервалу  $[0, 1/2)$ . Слід підкреслити, що, згідно з (4.34),  $|R(\xi_k)| = \infty$  і, оскільки  $p(1/2) = p$ , ціле число  $l$  в умові  $\chi_{\text{st}}(1/2) = -2\pi l - \chi_{\text{st}}(0)$ , що слідує з (4.11), дорівнює  $p$ . Для ілюстрації, на рис. 4.15 показана залежність кута відставання (4.40) від безрозмірного часу  $\xi$  при  $\alpha = 5$  для двох значень параметра  $\kappa$ . А саме, якщо  $\kappa = 2.5$ , тобто  $\nu \approx 2.86 \in (0, \pi)$ , тоді функція  $p(\xi)$  дорівнює нулю і, оскільки  $p = l = 0$ , в цьому випадку кут відставання задовольняє умові  $\chi_{\text{st}}(1/2 + \xi) = -\chi_{\text{st}}(\xi)$ . Навпаки, якщо  $\kappa = 3.5$ , тобто  $\nu \approx 4.19 \in (\pi, 2\pi)$ , тоді  $p(\xi) = 0$  при  $0 \leq \xi < \xi_1$ , і  $p(\xi) = 1$  при  $\xi_1 < \xi < 1/2$ , де, згідно з (4.42),  $\xi_1 \approx 0.28$ . Тому в цьому випадку  $p = l = 1$  і, як наслідок повинна дотримуватись умова  $\chi_{\text{st}}(1/2 + \xi) = -2\pi - \chi_{\text{st}}(\xi)$ . Числові значення для  $\chi_{\text{st}}(\xi)$ , які отримані шляхом чисельного розв'язку рівняння (4.4b) з початковою умовою  $\chi(0) = 0$ , представлені квадратними символами.

Для розрахунку швидкості дрейфу при  $\kappa > 1$  спочатку виразимо  $\sin[\chi_{\text{st}}(\xi)]$  через  $R(\xi)$ . Використовуючи ту же процедуру, що і в розділі 4.4.1, отримуємо

$$\sin[\chi_{\text{st}}(\xi)] = 2\kappa \frac{R(\xi) - 1}{\kappa^2 + (R(\xi) - 1)^2} \quad (4.43)$$

і, отже, швидкість дрейфу частинок (4.7) приймає вигляд

$$s_y = 4\gamma\kappa \int_0^{1/2} \frac{R(\xi) - 1}{\kappa^2 + (R(\xi) - 1)^2} \sin(2\pi\xi - \phi) d\xi. \quad (4.44)$$

Варто відзначити, що у випадку, коли  $\alpha \rightarrow 0$  і  $\kappa \rightarrow 1$ , цей результат зводиться до (4.23) і (4.28) відповідно.

Аналіз показав, що залежності швидкості дрейфу (4.44) від параметру  $\alpha$  і початкової фази  $\phi$  якісно такі ж, як і при  $\kappa < 1$ . Тому тут ми більш детально проаналізуємо залежність  $s_y$  від  $\kappa$ , що зображена на

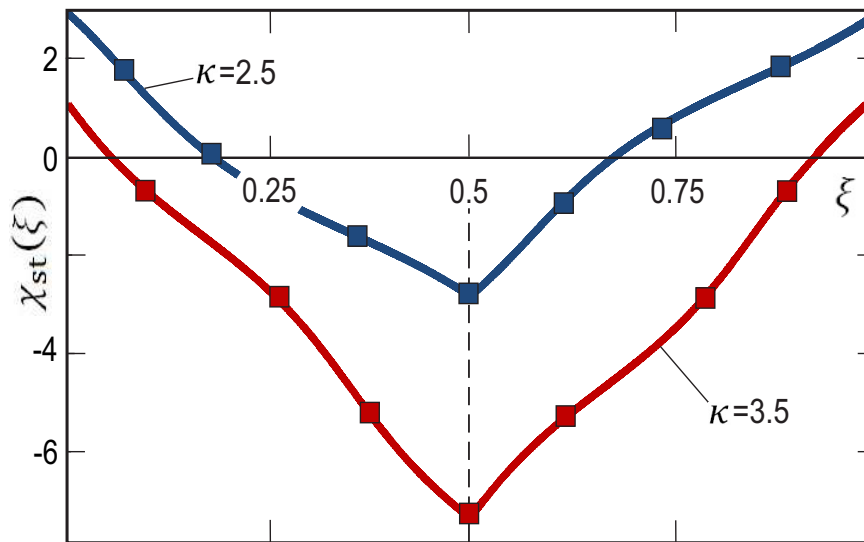


Рисунок 4.15 – Кут відставання в стаціонарному стані як функція безрозмірного часу  $\xi$  при  $\alpha = 5$ ,  $\phi = 0$  і різних  $\kappa$ . Суцільні лінії представляють теоретичний результат (4.40), а квадратні символи представляють результати чисельного розв'язку рівняння (4.4b), що задовольняє початковій умові  $\chi(0) = 0$ . Лінія з  $\kappa = 2.5$  відповідає умові  $p = 0$  [тому що в цьому випадку  $\nu \approx 2.86 \in (0, \pi)$ ], а лінія з  $\kappa = 3.5$  відповідає умові  $p = 1$  [тому що в цьому випадку  $\nu \approx 4.19 \in (\pi, 2\pi)$ ].

рисунку 4.16. Теоретичні результати для  $s_y$  (суцільні лінії) отримані з (4.21) (при  $\kappa < 1$ ) і (4.44) (при  $\kappa > 1$ ), а чисельні результати (квадратні символи) отримані з (4.7) шляхом чисельного розв'язку рівняння (4.4b). Найважливішою особливістю  $s_y$  як функції  $\kappa$  є те, що величина швидкості дрейфу,  $|s_y|$ , має максимум при  $\kappa = \kappa_m > 1$  (оскільки  $s_y|_{\pi+\phi} = -s_y|_{\phi}$ , напрям швидкості залежить від  $\phi$ ). Зокрема, якщо  $\phi = 0$  і  $\alpha = 10$ , тоді  $\kappa_m \approx 1.25$  і  $(s_y/\gamma)|_{\kappa=\kappa_m} \approx -0.44$  (див. криву для  $\alpha = 10$  на рис. 4.16). Якщо, крім того,  $\gamma = 0.1$  і  $v_m = 10^{-2}$  см/с [7], тоді для розмірної швидкості дрейфу  $v_{dr} = v_m s_y$  знаходимо  $v_{dr}|_{\kappa=\kappa_m} \approx -4.4 \times 10^3$  нм/с. Слід також зазначити, що в той час як  $s_y$  при  $\kappa > \kappa_m$  є монотонною функцією параметра  $\kappa$ , це не так для  $ds_y/d\kappa$  (для ілюстрації див. криві при  $\alpha = 10$  і  $\alpha = 50$ ). Нарешті, використовуючи (4.21), можна переконатися, що  $s_y \sim (1/\pi^2)\gamma\kappa\alpha \sin \phi$  при  $\kappa \rightarrow 0$ , тобто асимптотична формула (4.23) справедлива як при  $\alpha \rightarrow 0$ , так і при  $\kappa \rightarrow 0$ , а асимптотична формула (4.22) добре описує залежність  $s_y$  від  $\kappa$  при  $\alpha = 50$  і  $\kappa < 1$ .



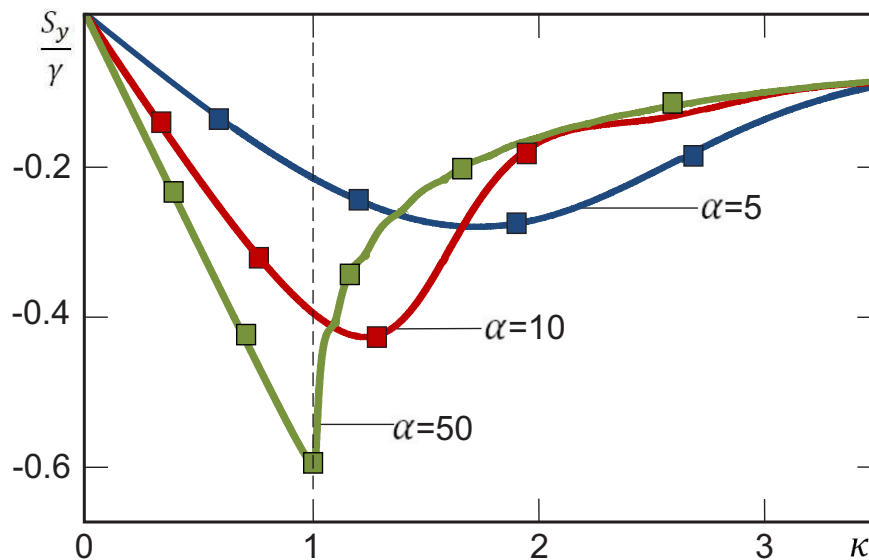


Рисунок 4.16 – Швидкість дрейфу  $s_y/\gamma$  як функція параметру  $\kappa$  при  $\phi = 0$  і різних значеннях  $\alpha$ . Теоретичні криві при  $\kappa < 1$  і  $\kappa > 1$  розраховані за формулами (4.21) і (4.44) відповідно, а чисельні результати (квадратні символи) отримані з визначення (4.7) і рівняння (4.4b).

#### 4.5 Система стохастичних рівнянь руху частинок

В стохастичному випадку, коли враховується вплив теплових флуктуацій, окрім сил, що діють на феромагнітну частинку в детерміністичному випадку, в загальну силу  $\mathbf{F}$  будемо включати також випадкову силу  $\mathbf{f}_s = \mathbf{f}_s(t)$ . Ця сила зазвичай моделюється гаусівським білим шумом, що характеризується нульовим середнім значенням  $\langle f_{si}(t) \rangle = 0$  та кореляційною функцією (див., наприклад, посилання [167])

$$\langle f_{si}(t) f_{sj}(t') \rangle = 2\Delta_1 \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (4.45)$$

Тут  $f_{si}(t)$  ( $i = x, y, z$ ) – декартові компоненти випадкової сили, кутові скобки позначають усереднення за всіма реалізаціями  $\mathbf{f}_s(t)$ ,  $\Delta_1 = 6\pi\eta a k_B T$  – інтенсивність шуму,  $k_B$  – постійна Больцмана,  $T$  – абсолютна температура,  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера, і  $\delta(\tau)$  –  $\delta$  функція Дірака. Таким чином, у даному випадку рівняння балансу сил  $\mathbf{F} = \mathbf{f}_d + \mathbf{f}_f + \mathbf{f}_l + \mathbf{f}_s = 0$  є стохастичним і може бути записано у вигляді

$$\mathbf{v} - \frac{\text{Re}_r}{6\omega_m} \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v} = v_m \sin(\Omega t - \phi) \mathbf{e}_x + \frac{1}{6\pi\eta a} \mathbf{f}_s, \quad (4.46)$$

де обертальне число Рейнольдса визначається як  $Re_r = \rho a^2 \omega_m / \eta$ ,  $\omega_m = \max |\boldsymbol{\omega}|$ , і  $v_m = f_m / 6\pi\eta a$ . (Зазначимо для повноти, що трансляційне число Рейнольдса визначається як  $Re_t = \rho a v_m / \eta$ .)

Теплові флуктуації породжують також випадковий обертальний момент  $\mathbf{t}_s = \mathbf{t}_s(t)$ , який будемо апроксимувати іншим гаусівським білим шумом з нульовим середнім значенням  $\langle t_{si}(t) \rangle = 0$  і кореляційною функцією

$$\langle t_{si}(t) t_{sj}(t') \rangle = 2\Delta_2 \delta_{ij} \delta(t - t'), \quad (4.47)$$

де  $\Delta_2 = 6\eta V k_B T$  – інтенсивність цього шуму [167]. Тому рівняння балансу моментів приймає вигляд  $\mathbf{T} = \mathbf{t}_m + \mathbf{t}_f + \mathbf{t}_s = 0$ , а його розв'язок відносно кутової швидкості частинки дає

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{6\eta} \mathbf{M} \times \mathbf{H} + \frac{1}{6\eta V} \mathbf{t}_s. \quad (4.48)$$

Підставляючи цей вираз для кутової швидкості в кінематичне рівняння, отримуємо наступне стохастичне диференціальне рівняння для намагніченості частинки:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{M} = -\frac{1}{6\eta} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{H}) - \frac{1}{6\eta V} \mathbf{M} \times \mathbf{t}_s. \quad (4.49)$$

Таким чином, в даній моделі трансляційний та обертальний рухи зважених феромагнітних частинок описуються стохастичними рівняннями (4.46), (4.48) і (4.49). Вони показують, що, хоча обертання частинки впливає (завдяки силі Магнуса) на трансляційний рух, її обертання не залежить від трансляційного руху. Тому, щоб знайти статистичні характеристики поступального руху таких частинок, включаючи їх дрейфову швидкість, ми повинні спочатку визначити їх обертальні властивості, які описуються рівняннями (4.48) і (4.49).

Для початку перепишемо рівняння (4.49) у безрозмірному вигляді

$$\dot{\mathbf{m}} = -\alpha \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{h}) - \beta \mathbf{m} \times \boldsymbol{\xi}, \quad (4.50)$$

де крапка над  $\mathbf{m}$  позначає похідну за безрозмірним часом  $\tau$ ,  $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}(\tau) = \mathbf{t}_s(2\pi\tau/\Omega)/\sqrt{4\eta a^3\Omega k_B T}$  – безрозмірний гаусівський білий шум, що задається умовами

$$\langle \xi_i(\tau) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(\tau) \xi_j(\tau') \rangle = 2\delta_{ij}\delta(\tau - \tau'), \quad (4.51)$$

а безрозмірний параметр  $\beta$  визначається за формулою

$$\beta = \left( \frac{k_B T}{4\eta a^3 \Omega} \right)^{1/2}. \quad (4.52)$$

Згідно з рівнянням (4.50) параметр  $\beta$  характеризує інтенсивність теплових флуктуацій. Зазначимо також, що в цих змінних кутова швидкість частинки (4.48) записується як

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{\Omega}{2\pi}(\alpha \mathbf{m} \times \mathbf{h} + \beta \boldsymbol{\xi}). \quad (4.53)$$

Далі представимо одиничний вектор  $\mathbf{m}$  у вигляді

$$\mathbf{m} = \sin \theta \cos \varphi \mathbf{e}_x + \sin \theta \sin \varphi \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z, \quad (4.54)$$

де  $\theta = \theta(\tau)$  і  $\varphi = \varphi(\tau)$  – полярний і азимутальний кути вектора  $\mathbf{m}$ . Тепер, підставляючи (4.54) і (4.3а) в рівняння (4.50), отримуємо наступну систему стохастичних рівнянь:

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= \alpha \cos \theta \cos(\psi - \varphi) - \beta(\xi_x \sin \varphi - \xi_y \cos \varphi), \\ \dot{\varphi} &= \alpha \frac{\sin(\psi - \varphi)}{\sin \theta} - \beta \cot \theta (\xi_x \cos \varphi + \xi_y \sin \varphi) + \beta \xi_z. \end{aligned} \quad (4.55)$$

Рівняння (4.55) після введення кута відставання  $\chi = \psi - \varphi$  можуть бути переписані у вигляді

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= \alpha \cos \theta \cos \chi - \beta[\xi_x \sin(\psi - \chi) - \xi_y \cos(\psi - \chi)], \\ \dot{\chi} &= \dot{\psi} - \alpha \frac{\sin \chi}{\sin \theta} + \beta \cot \theta [\xi_x \cos(\psi - \chi) + \xi_y \sin(\psi - \chi)] - \beta \xi_z. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Саме ці стохастичні диференціальні рівняння будуть використані для

вивчення впливу теплових флуктуацій на дрейф частинок.

В принципі, можна знайти точний розв'язок рівняння (4.46) відносно безрозмірної швидкості частинки  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\tau) = \mathbf{v}(2\pi\tau/\Omega)/v_m$ . Однак, оскільки сила Магнуса знайдена з лінійною точністю (по числу Рейнольдса) [158], розв'язок цього рівняння повинен визначатися з такою ж точністю. Тому, представляючи  $\mathbf{u}$  у вигляді  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_1$ , де  $|\mathbf{u}_0| \sim 1$  і  $|\mathbf{u}_1| \sim \text{Re}_r$ , із рівняння (4.46) одразу знаходимо

$$\mathbf{u}_0 = \sin(2\pi\tau - \phi) \mathbf{e}_x + \sigma \boldsymbol{\nu} \quad (4.57)$$

і

$$\mathbf{u}_1 = \frac{\text{Re}_r}{6\omega_m} \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{u}_0. \quad (4.58)$$

Тут  $\sigma = \sqrt{\Omega k_B T / 2\pi f_m v_m}$  – безрозмірний параметр, що характеризує величину випадкової сили, а  $\boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{\nu}(\tau) = \mathbf{f}_s(2\pi\tau/\Omega) / \sqrt{3\eta a \Omega k_B T}$  – безрозмірний гаусівський білий шум, що характеризується моментами

$$\langle \nu_i(\tau) \rangle = 0, \quad \langle \nu_i(\tau) \nu_j(\tau') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(\tau - \tau'). \quad (4.59)$$

Таким чином, відповідно до (4.57) і (4.58), випадкова швидкість частинки може бути записана як

$$\begin{aligned} \mathbf{u} = & \left( \mathbf{e}_x + \frac{\text{Re}_r}{6\omega_m} \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{e}_x \right) \sin(2\pi\tau - \phi) \\ & + \sigma \left( \boldsymbol{\nu} + \frac{\text{Re}_r}{6\omega_m} \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\nu} \right). \end{aligned} \quad (4.60)$$

Важливо зазначити, що вираз (4.60) справедливий лише тоді, коли кутова швидкість частинки  $\boldsymbol{\omega}$  не містить вкладу білого шуму. Причиною є те, що множення узагальнених функцій, у тому числі гаусівських білих шумів, не визначається математично (докладніше див., наприклад, [85]). Отже, якщо  $\boldsymbol{\omega}$  задано формулою (4.53), то вираз (4.60) для швидкості частинки не є коректним (оскільки  $\mathbf{u}$  містить член, пропорційний  $\boldsymbol{\xi} \times \boldsymbol{\nu}$ ). Однак вираз (4.60) може бути використаний для визначення середньої

швидкості дрейфу частинок.

#### 4.6 Середня швидкість дрейфу частинок

Для того, щоб отримати вираз для середньої швидкості дрейфу частинок в стохастичному випадку, припустимо, що кутова швидкість визначається стохастичним диференціальним рівнянням  $Jd\boldsymbol{\omega}/dt = \mathbf{T}$  ( $J$  – момент інерції частки). У цьому випадку вищезазначена проблема з множенням узагальнених функцій не з'являється, і швидкість частинки (4.60) може бути усереднена за реалізаціями білих шумів  $\boldsymbol{\xi}$  та  $\boldsymbol{\nu}$ . Враховуючи, що  $\langle \boldsymbol{\nu} \rangle = 0$  і, оскільки компоненти цих шумів є статистично незалежними, виконується умова  $\langle \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\nu} \rangle = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle \times \langle \boldsymbol{\nu} \rangle = 0$ , знаходимо

$$\langle \mathbf{u} \rangle = \left( \mathbf{e}_x + \frac{\text{Re}_r}{6\omega_m} \langle \boldsymbol{\omega} \rangle \times \mathbf{e}_x \right) \sin(2\pi\tau - \phi). \quad (4.61)$$

Тепер, використовуючи безінерційне наближення ( $J \rightarrow 0$ ), що приводить до рівняння балансу моментів  $\mathbf{T} = 0$ , з (4.61) і (4.53) знаходимо наступний вираз для миттєвої середньої швидкості частинки:

$$\langle \mathbf{u} \rangle = [\mathbf{e}_x - \gamma \mathbf{e}_x \times (\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{h})] \sin(2\pi\tau - \phi), \quad (4.62)$$

де безрозмірний параметр

$$\gamma = \frac{\text{Re}_r \alpha \Omega}{12\pi\omega_m} = \frac{\rho a^2 M H_m}{36\eta^2} \quad (4.63)$$

( $\gamma \ll 1$ ) характеризує внесок сили Магнуса в  $\langle \mathbf{u} \rangle$ . Формула (4.62) показує, що теплові флуктуації впливають на середню швидкість частинки лише через безрозмірну середню намагніченість  $\langle \mathbf{m} \rangle$  частинки.

Визначимо безрозмірну середню швидкість дрейфу частинки  $\langle \mathbf{s} \rangle$  як її стаціонарне переміщення протягом одного періоду магнітного поля, тобто  $\langle \mathbf{s} \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_n^{n+1} \langle \mathbf{u}(\tau) \rangle d\tau$  ( $n$  – ціле число). Щоб знайти явний вираз для

$\langle \mathbf{s} \rangle$ , спершу зазначимо, що, відповідно до (4.54) і (4.3a),

$$\mathbf{e}_x \times (\langle \mathbf{m} \rangle \times \mathbf{h}) = -\langle \sin \theta \sin \chi \rangle \mathbf{e}_y + \langle \cos \theta \rangle \cos \psi \mathbf{e}_z. \quad (4.64)$$

Потім, прийнявши  $\tau = n + \xi$  з  $\xi \in (0, 1)$ , можемо записати  $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle \mathbf{u}(n + \xi) \rangle = \langle \mathbf{u}_{\text{st}}(\xi) \rangle$ , де індекс 'st' позначає стаціонарний стан. Нарешті, використовуючи умову симетрії  $\langle \cos \theta_{\text{st}}(\xi) \rangle = 0$  та раніше отримані результати, знаходимо  $\langle \mathbf{s} \rangle = s_y \mathbf{e}_y$  і

$$\langle s_y \rangle = \gamma \int_0^1 \langle \sin \theta_{\text{st}}(\xi) \sin \chi_{\text{st}}(\xi) \rangle \sin(2\pi\xi - \phi) d\xi. \quad (4.65)$$

Таким чином, дрейфовий рух частинок, індукований силою Магнуса, відбувається вздовж осі  $y$  з незалежною від часу безрозмірною швидкістю дрейфу (4.65). Зазначимо, що знайдена швидкість – це безрозмірна сила Магнуса, усереднена за часом та за тепловими флуктуаціями. Взагалі кажучи, її можна розрахувати шляхом чисельного розв'язання системи стохастичних рівнянь (4.56). Але для аналітичного визначення середньої швидкості дрейфу зручно ввести рівняння Фоккера-Планка, що відповідає цій системі стохастичних рівнянь.

## 4.7 Рівняння Фоккера-Планка

Рівняння Фоккера-Планка, що відповідає сукупності стохастичних диференціальних рівнянь (4.56), можна отримати за допомогою стандартних методів [85, 86, 167–169]. Важливою особливістю цих рівнянь є те, що гаусівські білі шуми в них є мультиплікативними і, як наслідок, статистичні характеристики їх розв'язків,  $\theta(\tau)$  і  $\varphi(\tau)$ , залежать від інтерпретації цих шумів. Використовуючи довільну інтерпретацію, в [88] ми показали, що шуми  $\xi_i(\tau)$  слід тлумачити в сенсі Стратоновича [90] (щоб отримати розподіл Больцмана в рівновазі) і отримали відповідне рівняння Фоккера-Планка у випадку рівномірного обертання магнітного поля. Просте узагальнення нашого підходу до випадку неоднорідного обертання магнітного поля призводить до рівняння Фоккера-Планка, яке

в операторній формі можна записати як

$$\frac{\partial}{\partial \tau} P + \psi \frac{\partial}{\partial \chi} P = \hat{L}P. \quad (4.66)$$

Тут  $P = P(\theta, \chi, \tau)$  – густина ймовірності того, що  $\theta(\tau) = \theta$  ( $0 \leq \theta \leq \pi$ ) і  $\chi(\tau) = \chi$  ( $0 \leq \chi < 2\pi$ ), тобто,

$$P = \langle \delta[\theta - \theta(\tau)] \delta[\chi - \chi(\tau)] \rangle, \quad (4.67)$$

і

$$\begin{aligned} \hat{L}P = & -\alpha \cos \chi \frac{\partial}{\partial \theta} \cos \theta P + \alpha \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \chi} \sin \chi P \\ & - \beta^2 \frac{\partial}{\partial \theta} \cot \theta P + \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} P + \beta^2 \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} P. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Густина ймовірності  $P$  повинна задовольняти умові нормування  $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} P d\theta d\chi = 1$  і початковій умові  $P(\theta, \chi, 0) = \delta(\theta - \theta_0) \delta(\chi - \chi_0)$ , де  $\theta_0 = \theta(0)$  та  $\chi_0 = \chi(0)$ .

Покажемо тепер, що  $\langle \cos \theta_{st}(\xi) \rangle = 0$ . Для цього спочатку визначимо стаціонарну густину ймовірності як  $P_{st}(\theta, \chi, \xi) = \lim_{n \rightarrow \infty} P(\theta, \chi, n + \xi)$  і представимо  $\langle \cos \theta_{st}(\xi) \rangle$  у вигляді

$$\langle \cos \theta_{st}(\xi) \rangle = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \cos \theta P_{st}(\theta, \chi, \xi) d\theta d\chi. \quad (4.69)$$

Тепер, використовуючи умову симетрії  $P_{st}(\theta, \chi, \xi) = P_{st}(\pi - \theta, \chi, \xi)$ , що випливає з рівняння Фоккера-Планка (4.66), можна легко переконатися, що  $\int_0^\pi \cos \theta P_{st}(\theta, \chi, \xi) d\theta = 0$ , тобто умова  $\langle \cos \theta_{st}(\xi) \rangle = 0$  дійсно має місце.

#### 4.8 Система ефективних стохастичних рівнянь

Нагадаємо, рівняння Фоккера-Планка (4.66) відповідає системі стохастичних диференціальних рівнянь (4.56), в яких гаусівські білі шуми  $\xi_i(\tau)$  інтерпретуються в сенсі Стратоновича. Нескладно перевірити (див., наприклад, [88]), що це ж рівняння (4.66) відповідає також наступній

системі ефективних стохастичних диференціальних рівнянь:

$$\begin{aligned}\dot{\theta} &= \alpha \cos \theta \cos \chi + \beta^2 \cot \theta + \sqrt{2} \beta \zeta_1, \\ \dot{\chi} &= \dot{\psi} - \alpha \frac{\sin \chi}{\sin \theta} - \sqrt{2} \beta \frac{1}{\sin \theta} \zeta_2,\end{aligned}\tag{4.70}$$

де гаусівські білі шуми  $\zeta_i = \zeta_i(\tau)$ , ( $i = 1, 2$ ) інтерпретуються в сенсі Іто [89] і повністю характеризуються першими двома моментами

$$\langle \zeta_i(\tau) \rangle = 0, \quad \langle \zeta_i(\tau) \zeta_j(\tau') \rangle = \delta_{ij} \delta(\tau - \tau').\tag{4.71}$$

Це означає, що розв'язки систем рівнянь (4.56) і (4.70) відносно полярного кута  $\theta(\tau)$  і кута відставання  $\chi(\tau)$  мають однакову густину ймовірності  $P(\theta, \chi, \tau)$ . Слово "ефективні" використовується тут щоб підкреслити, що система рівнянь (4.70) це, по-перше, не система звичайних стохастичних диференціальних рівнянь (тому що детерміністичний доданок  $\beta^2 \cot \theta$  має стохастичне походження) і, по-друге, вона набагато простіша, ніж система базових рівнянь (4.56).

Цікава властивість системи рівнянь (4.70), яка випливає з результатів роботи [87], є та, що, незважаючи на мультиплікативний характер шуму  $\zeta_2$ , статистичні характеристики кутів  $\theta(\tau)$  і  $\chi(\tau)$  не залежать від інтерпретації шумів  $\zeta_i$  [88]. Відзначимо також, що системи ефективних стохастичних диференціальних рівнянь, що описують обертальну динаміку феромагнітних частинок у в'язкій матриці та динаміку намагніченості в феромагнітних частинках, вбудованих у тверду матрицю, вперше запропоновано в роботах [94] та [93] відповідно.

#### 4.9 Аналітичні результати: Сильні теплові флуктуації

Оскільки малі теплові флуктуації не впливають суттєво на детерміністичний дрейф частинок, докладно вивчений в роботах [6, 7, 161] і викладений в розділах 4.2 – 4.4, нижче буде теоретично досліджено роль великих теплових коливань. Для цього ми розглянемо стохастичну динаміку частинки в рамках моделі плоского ротатора та загальної моделі.



### 4.9.1 Модель плоского ротатора

В рамках цієї моделі передбачається, що обертання намагніченості відбувається лише в площині  $xy$ . Це обертання описується другим рівнянням в системі (4.70) з  $\theta = \pi/2$ , тобто,

$$\dot{\chi} = \dot{\psi} - \alpha \sin \chi - \sqrt{2} \beta \zeta_2. \quad (4.72)$$

Рівняння Фоккера-Планка, пов'язане з рівнянням (4.72), можна записати наступним чином [порівняйте його з (4.66)]:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} P + \dot{\psi} \frac{\partial}{\partial \chi} P = \hat{L}_\perp P, \quad (4.73)$$

де  $P = P(\chi, \tau)$  – густина ймовірності того, що  $\chi(\tau) = \chi$ , та

$$\hat{L}_\perp P = \alpha \frac{\partial}{\partial \chi} \sin \chi P + \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} P. \quad (4.74)$$

У рівноважному стані, коли  $\dot{\psi} = 0$  ( $\psi(\tau) = \text{const}$ ) і  $\tau \rightarrow \infty$ , тобто коли ліва частина рівняння Фоккера-Планка (4.73) дорівнює нулю, рівноважна густина ймовірності  $P_{\text{eq}}(\chi)$  задовольняє рівнянню  $\hat{L}_\perp P_{\text{eq}}(\chi) = 0$ . Можна легко перевірити, що його нормований розв'язок на будь-якому інтервалі довжини  $2\pi$  [наприклад,  $\chi \in [0, 2\pi]$ ] є густина ймовірності фон Мізеса

$$P_{\text{eq}}(\chi) = \frac{e^{\epsilon \cos \chi}}{2\pi I_0(\epsilon)}, \quad (4.75)$$

де безрозмірний параметр

$$\epsilon = \frac{\alpha}{\beta^2} = \frac{MH_m V}{k_B T} \quad (4.76)$$

– це відношення магнітної енергії до теплової і  $I_0(\epsilon)$  – модифікована функція Бесселя першого роду та нульового порядку. Зауважимо, що, оскільки розподіл фон Мізеса є круговим аналогом нормального розподілу,

він широко використовується в різних застосуваннях, див., наприклад, посилання [170, 171].

Як впливає з (4.65), в моделі плоского ротатора швидкість дрейфу ферромагнітних частинок визначається за формулою

$$\langle s_y \rangle = \gamma \int_0^1 \langle \sin \chi_{st}(\xi) \rangle \sin(2\pi\xi - \phi) d\xi, \quad (4.77)$$

де

$$\langle \sin \chi_{st}(\xi) \rangle = \int_0^{2\pi} \sin \chi P_{st}(\chi, \xi) d\chi \quad (4.78)$$

з  $P_{st}(\chi, \xi) = \lim_{n \rightarrow \infty} P(\chi, n + \xi)$ . Нашою метою тут є визначення швидкості дрейфу (4.77) у випадку великих теплових флуктуацій, коли  $\beta \rightarrow \infty$ .

Оскільки згідно з (4.76) в цьому випадку  $\epsilon \rightarrow 0$ , стаціонарний розв'язок рівняння (4.73) може бути представлений у вигляді

$$P_{st}(\chi, \xi) = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\chi, \xi). \quad (4.79)$$

Тут функції  $P_l(\chi, \xi) = P_l$  мають порядок малості  $\epsilon^l$ , тобто  $P_l \sim \epsilon^l$ , і задовольняють умовам періодичності  $P_l(\chi + 2\pi, \xi) = P_l(\chi, \xi)$  та  $P_l(\chi, \xi + 1) = P_l(\chi, \xi)$ . В нульовому порядку малості маємо  $P_0 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} P_{eq}(\chi) = 1/2\pi$ , а функції  $P_l$  ( $l \geq 1$ ) пов'язані з функціями  $P_{l-1}$  наступним чином:

$$\frac{\partial^2}{\partial \chi^2} P_l = \frac{\epsilon}{\alpha} \left( \frac{\partial}{\partial \xi} P_{l-1} + \dot{\psi}(\xi) \frac{\partial}{\partial \chi} P_{l-1} - \alpha \frac{\partial}{\partial \chi} \sin \chi P_{l-1} \right). \quad (4.80)$$

Використовуючи це рекурентне співвідношення, неважко показати, що стаціонарна густина ймовірності (4.79) в наближенні другого порядку (коли  $l \leq 2$ ) має вигляд

$$P_{st}(\chi, \xi) = \frac{1}{2\pi} + \frac{\epsilon}{2\pi} \cos \chi + \frac{\epsilon^2}{8\pi} \cos 2\chi + \frac{\epsilon^2}{2\pi\alpha} \dot{\psi}(\xi) \sin \chi. \quad (4.81)$$

Перші три доданки в правій частині цього виразу являють собою члени розкладу функції  $P_{eq}(\chi)$  в ряд за степенями  $\epsilon$ , які у відповідності з (4.77) і

(4.78) не впливають на величину швидкості дрейфу  $\langle s_y \rangle$ . Останній же член в (4.81), який враховує індуковане магнітним полем обертання частинки, дає

$$\langle s_y \rangle = \frac{\gamma \epsilon^2}{2\alpha} \int_0^1 \dot{\psi}(\xi) \sin(2\pi\xi - \phi) d\xi. \quad (4.82)$$

Припустимо для простоти, що азимутальний кут  $\psi(\tau)$  магнітного поля (4.3а) змінюється з часом як

$$\psi(\tau) = \psi_m \cos(2\pi\tau), \quad (4.83)$$

де  $\psi_m$  – амплітуда (в радіанах) періодичної функції  $\psi(\tau)$ . Тоді, враховуючи, що в даному випадку

$$\int_0^1 \dot{\psi}(\xi) \sin(2\pi\xi - \phi) d\xi = -\pi\psi_m \cos \phi, \quad (4.84)$$

швидкість дрейфу частинки (4.82) може бути зведена до

$$\langle s_y \rangle = -\frac{\pi\psi_m\gamma\epsilon^2}{2\alpha} \cos \phi. \quad (4.85)$$

Згідно з цим результатом сильні теплові флуктуації істотно знижують швидкість дрейфу феромагнітних частинок ( $\langle s_y \rangle$  прямує до нуля квадратично при  $\epsilon \rightarrow 0$ ). Зазначимо також, що  $\langle s_y \rangle$  лінійно залежить від амплітуди  $\psi_m$  азимутального кута магнітного поля і періодично від початкової фази  $\phi$  зовнішньої сили.

#### 4.9.2 Загальна модель

Оскільки детерміністична динаміка намагніченості частинки відбувається в площині обертання магнітного поля [6, 7], модель плоского ротатора цілком доречна для опису дрейфового руху феромагнітних частинок при відсутності теплових флуктуацій. Проте наявність таких флуктуацій, особливо сильних, потребує використання більш загальної

моделі. Причиною є те, що флуктуації вектора намагніченості поза площиною, які завжди існують, не розглядаються в моделі плоского ротора. Тому, щоб дослідити вплив цих флуктуацій на швидкість дрейфу, ми будемо використовувати загальне рівняння Фоккера-Планка (4.66).

У випадку статичного магнітного поля (коли  $\psi(\tau) = \text{const}$ ) розв'язок рівняння (4.66) у рівноважному стані добре відомий:

$$P_{\text{eq}}(\theta, \chi) = \frac{1}{4\pi} \frac{\epsilon}{\sinh \epsilon} \sin \theta e^{\epsilon \sin \theta \cos \chi}. \quad (4.86)$$

В той же час, якщо  $\psi(\tau) \neq 0$  і  $\epsilon \rightarrow 0$ , стаціонарний розв'язок цього рівняння можна шукати у вигляді

$$P_{\text{st}}(\theta, \chi, \xi) = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\theta, \chi, \xi), \quad (4.87)$$

де  $P_l(\theta, \chi, \xi) = P_l \sim \epsilon^l$  і  $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} P_l d\theta d\chi = 0$  при  $l \geq 1$ . З (4.86) відразу знаходимо  $P_0 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} P_{\text{eq}}(\theta, \chi) = (1/4\pi) \sin \theta$ , а використовуючи рівняння (4.66) неважко показати, що, якщо функція  $P_{l-1}$  (з  $l \geq 1$ ) відома, тоді функція  $P_l$  може бути визначена шляхом розв'язання рівняння

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} P_l + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} P_l - \frac{\partial}{\partial \theta} \cot \theta P_l = \frac{\epsilon}{\alpha} \left( \frac{\partial}{\partial \tau} P_{l-1} + \dot{\psi} \frac{\partial}{\partial \chi} P_{l-1} \right. \\ \left. + \alpha \cos \chi \frac{\partial}{\partial \theta} \cos \theta P_{l-1} - \alpha \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \chi} \sin \chi P_{l-1} \right). \end{aligned} \quad (4.88)$$

Послідовний розв'язок цього рівняння при  $l = 1$  і  $2$  дозволили визначити стаціонарну густину ймовірності  $P_{\text{st}}(\theta, \chi, \xi)$  з точністю до другого порядку включно

$$\begin{aligned} P_{\text{st}}(\theta, \chi, \xi) = \frac{1}{4\pi} \sin \theta + \frac{\epsilon}{4\pi} \sin^2 \theta \cos \chi - \frac{\epsilon^2}{24\pi} \sin \theta \\ \times (1 - 3 \sin^2 \theta \cos^2 \chi) + \frac{\epsilon^2}{8\pi\alpha} \dot{\psi}(\xi) \sin^2 \theta \sin \chi. \end{aligned} \quad (4.89)$$

Як і у випадку плоского ротора, перші три доданки в правій частині (4.89), які виникають з розкладу рівноважної густини ймовірності (4.86) в

ряд за ступенями  $\epsilon$ , не впливають на величину інтеграла

$$\langle \sin \theta_{st}(\xi) \sin \chi_{st}(\xi) \rangle = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta \sin \chi P_{st}(\theta, \chi, \xi) d\theta d\chi, \quad (4.90)$$

і, як наслідок, не впливають на середню швидкість дрейфу (4.65). Що стосується останнього доданку в (4.89), то, приймаючи до уваги, що  $\int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta = 4/3$  і  $\int_0^{2\pi} \sin^2 \chi d\chi = \pi$ , його вклад в швидкість дрейфу  $\langle s_y \rangle$  дає

$$\langle s_y \rangle = \frac{\gamma \epsilon^2}{6\alpha} \int_0^1 \dot{\psi}(\xi) \sin(2\pi\xi - \phi) d\xi, \quad (4.91)$$

якщо кут  $\psi(\tau)$  є довільним, та

$$\langle s_y \rangle = -\frac{\pi \psi_m \gamma \epsilon^2}{6\alpha} \cos \phi, \quad (4.92)$$

якщо кут  $\psi(\tau)$  визначається за формулою (4.83).

Порівнюючи формули (4.82) і (4.91) бачимо, що швидкість дрейфу частинок, яка передбачена в моделі плоского ротатора, втричі більша ніж та, яка передбачена в загальній моделі. Оскільки єдина відмінність між цими моделями є флуктуації вектора намагніченості поза площиною ротатора, можна зробити висновок, що саме ці флуктуації відповідальні за трикратне зменшення швидкості дрейфу.

#### 4.10 Температурні ефекти в дрейфовому русі: Чисельні результати

Для перевірки аналітичних результатів (4.85) і (4.92) ми спочатку провели чисельне моделювання стохастичних рівнянь (4.4b) і (4.70) і знайшли їх розв'язок,  $\chi^{(i)}(n + \xi)$  та  $\theta^{(i)}(n + \xi)$ , в  $i$ -у запуску. Потім, вибираючи  $n \gg 1$ , ми розрахували середні значення  $\langle \sin \chi_{st}(\xi) \rangle$  і

$\langle \sin \theta_{st}(\xi) \sin \chi_{st}(\xi) \rangle$  за формулами

$$\langle \sin \chi_{st}(\xi) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sin \chi^{(i)}(n + \xi) \quad (4.93)$$

i

$$\langle \sin \theta_{st}(\xi) \sin \chi_{st}(\xi) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sin \theta^{(i)}(n + \xi) \sin \chi^{(i)}(n + \xi), \quad (4.94)$$

де  $N(\gg 1)$  – загальна кількість запусків (ці формули стають точними, якщо  $N, n \rightarrow \infty$ ). Далі, використовуючи (4.93) і (4.94), ми визначили швидкість дрейфу (4.77) в рамках моделі плоского ротора та швидкість дрейфу (4.65) в рамках загальної моделі.

Залежності приведеної швидкості дрейфу  $\langle s_y \rangle / \gamma$  від параметра  $\epsilon$ , які отримані за описаними вище процедурами для двох моделей, показані на рис. 4.17 (використовувалися наступні параметри моделювання:  $\alpha = 0.01$ ,  $\psi_m = 1 \text{ rad}$ ,  $\phi = 0 \text{ rad}$ ,  $n = 200$ , та  $N = 10^7$ ). Як видно, результати моделювання добре узгоджуються з теоретично передбаченими,

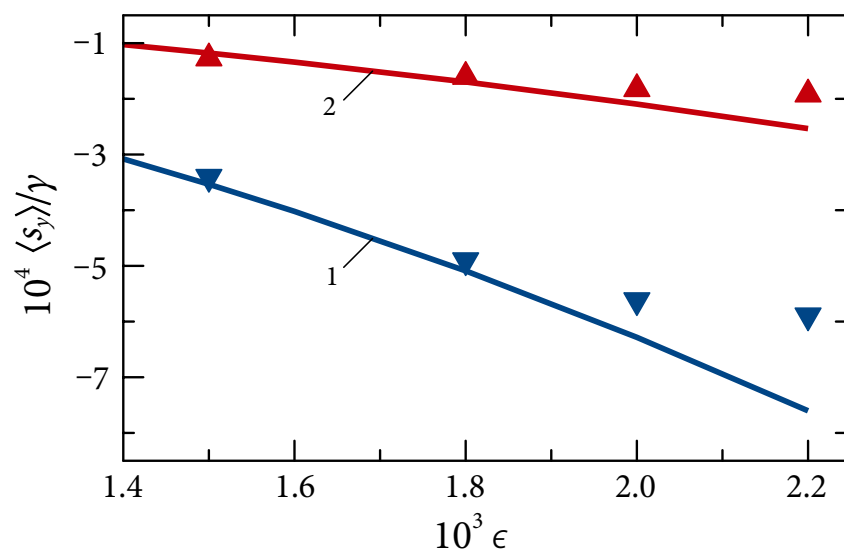


Рисунок 4.17 – - Приведена швидкість дрейфу як функція  $\epsilon$  при  $\epsilon \ll 1$ . Трикутні символи представляють результати чисельного моделювання, а суцільні лінії 1 та 2 представляють теоретичні результати (4.85) і (4.92) відповідно.

якщо параметр  $\epsilon$  достатньо малий. Це підтверджує як наші аналітичні результати, так і процедуру моделювання. Більше того, чисельні

результати підтверджують сильний вплив флуктуацій намагніченості, які відбуваються поза площиною ротатора, на швидкість дрейфу частинок. Тому, щоб врахувати ці флуктуації, в нашому подальшому аналізі ми будемо використовувати загальну систему ефективних стохастичних диференціальних рівнянь (4.70).

Слід зазначити, що згідно з рівняннями (4.70) вплив температури на обертальні властивості частинок може відбуватися не тільки через те, що параметр  $\beta$  явним чином залежить від  $T$ , див. (4.52), а і внаслідок температурної залежності намагніченості  $M$  та динамічної в'язкості  $\eta$ . Для ілюстрації розглянемо  $\text{Co}$  наночастинки, що зважені у воді, температура якої змінюється в інтервалі  $\Delta T$  від 273 К (температура близька до замерзання води) до 373 К (температура близька до кипіння води). Оскільки температура Кюрі кобальта  $1.398 \times 10^3$  К (див. посилання [163], таб. 2.3), намагніченість  $\text{Co}$  повільно змінюється в інтервалі  $\Delta T$ . Тому  $M$  в даному температурному інтервалі можна вважати постійною величиною, наприклад,  $M = 1.422 \times 10^3$  етс/см<sup>3</sup> – намагніченість насичення кобальту при кімнатній температурі (див. посилання [163], таб. 2.9). Навпаки, динамічна в'язкість води сильно зменшується зі зростанням температури. Наприклад, згідно з експериментальними даними (див. посилання [172], розд. 6), отримуємо  $\eta|_{T=273.64\text{К}}/\eta|_{T=371.24\text{К}} = 6.095$ . Оскільки параметри  $\alpha$  та  $\beta$  залежать від  $\eta$ , це означає, що необхідно враховувати температурну залежність динамічної в'язкості, щоб коректно описати дрейф таких частинок. Для цього ми використаємо наближену формулу

$$\eta = 10^{A+B/(T-C)}, \quad (4.95)$$

яка добре відтворює експериментальні дані для динамічної в'язкості води в даному інтервалі  $\Delta T$  (див. посилання [172], таб. 4.9). Тут,  $A = -3.5318$ ,  $B = 220.57$ ,  $C = 149.39$ ,  $T$  береться в кельвінах, а  $\eta$  – в пуазах (Р).

Використовуючи описану вище процедуру, ми чисельно визначили приведену швидкість дрейфу  $\langle s_y \rangle / \gamma$  як функцію температури для наночастинок  $\text{Co}$  зважених у воді (у всіх обчисленнях ми приймали

$n = 50$  і  $N = 10^5$ ). Рисунок 4.18 ілюструє температурну залежність цієї швидкості у випадках, коли  $H_m = 10^2$  Oe,  $\psi_m = 1$  rad,  $\Omega = 10^6$  rad/s,  $\phi = 0$  rad,  $a = 2$  nm (лінія з перевернутими трикутниками),

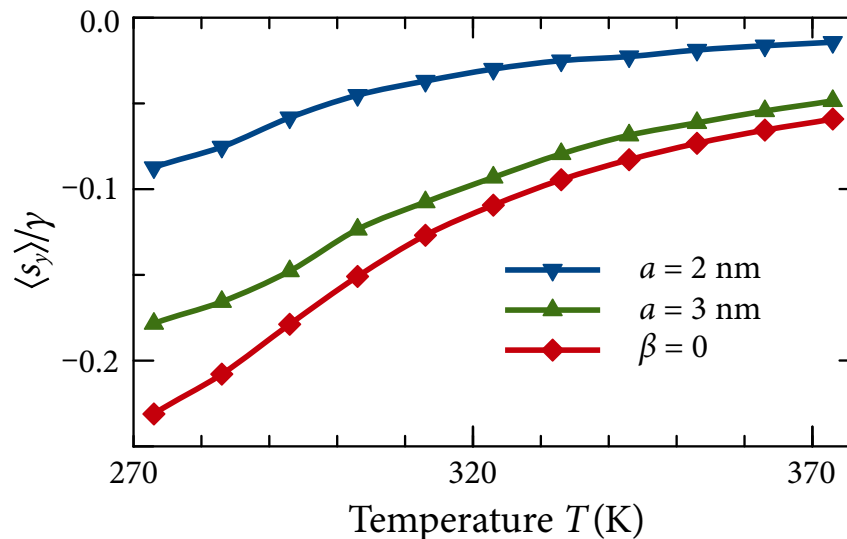


Рисунок 4.18 – - Температурна залежність приведеної швидкості дрейфу наночастинок Co з різним радіусом, зважених у воді. Залежність при  $\beta = 0$  відповідає великому радіусу частинки.

і  $a = 3$  nm (лінія із звичайними трикутниками). При збільшенні радіусу частинки  $a$  швидкість дрейфу швидко наближається до граничної функції (представленої лінією з ромбами), що відповідає випадку  $\beta = 0$ . Зокрема, різницею між цими функціями можна знехтувати вже при  $a > 5$  nm (цей радіус повільно зростає зі зменшенням  $H_m$ ). Це означає, що теплові флуктуації зменшують швидкість дрейфу відносно малих частинок (коли  $a < 5$  nm), тоді як у випадку більших частинок їх дрейфова швидкість залежить від температури виключно через температурну залежність динамічної в'язкості води. У цьому контексті важливо зазначити, що відповідно до викладеної вище теорії, детерміністичний підхід до опису дрейфового руху феромагнітних часток справедливий, якщо  $a \gtrsim 10$  nm. Цей факт значно розширює діапазон придатності детерміністичної теорії, який був приблизно оцінений як  $a \gtrsim 100$  nm [7].

Відповідно до (4.65) швидкість дрейфу  $\langle s_y \rangle$  – це періодична функція початкової фази  $\phi$ , що задовольняє умові  $\langle s_y \rangle|_{\pi+\phi} = -\langle s_y \rangle|_{\phi}$ . Внаслідок цього  $\langle s_y \rangle$  при фіксованій температурі може змінювати знак (тобто може змінювати напрямок дрейфу) при зміні  $\phi$ . Можна також очікувати, що



зміна напрямку дрейфу може бути викликана зміною температури  $T$ , якщо початкова фаза  $\phi$  вибрана належним чином. Дійсно, припускаючи для простоти, що теплові флуктуації відсутні (тобто,  $\beta = 0$ ), з рівняння (4.4b) випливає, що його стаціонарний розв'язок  $\chi_{st}(\tau)$  і, отже, швидкість дрейфу (4.77) залежать від параметру  $\alpha$  (докладніше див. посилання [6]) і від температури (оскільки  $\eta = \eta(T)$ ). Це означає, що якщо початкова фаза  $\phi$  близька до  $\phi_0$ , де  $\phi_0$  є розв'язок рівняння  $\langle s_y \rangle = 0$ , то зміна знака  $\langle s_y \rangle$  може відбуватися завдяки зміні  $T$ . Ці очікування повністю підтверджені результатами моделювання, представленими на рис. 4.19.

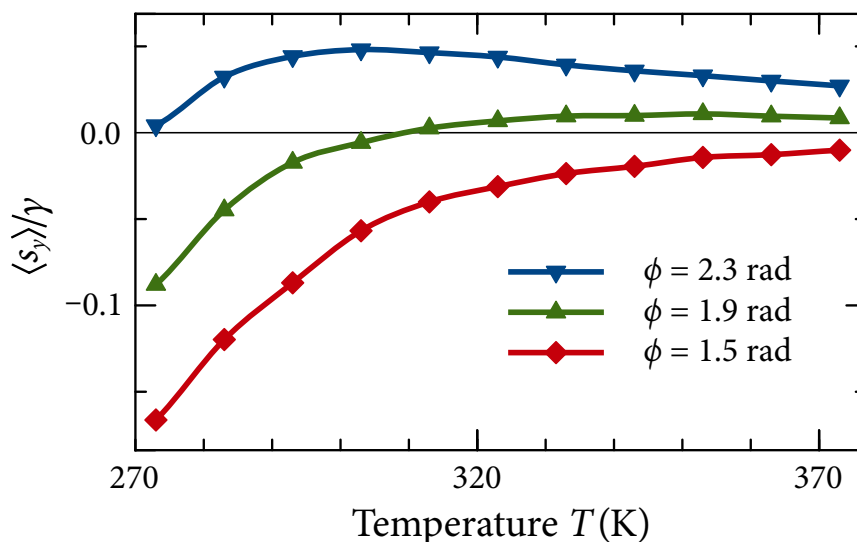


Рисунок 4.19 – - Приведена швидкість дрейфу наночастинки  $S_0$  як функція температури для різних значень початкової фази  $\phi$ . Радіус частинки становить  $a = 3 \text{ nm}$ , а інші параметри такі ж, як на рис. 4.18.

Для того, щоб отримати більш повне уявлення про поведінку дрейфової швидкості  $S_0$  наночастинок, ми розрахували її залежність від характеристик магнітного поля, а саме від його величини  $H_m$ , частоти  $\Omega$  і кута  $\psi_m$ . Залежність  $\langle s_y \rangle / \gamma$  від  $H_m$  для наночастинки з радіусом  $a = 5 \text{ nm}$ , яка визначена при кімнатній температурі  $T = 295 \text{ K}$ ,  $\Omega = 5 \times 10^5 \text{ rad/s}$  та  $\psi_m = 1 \text{ rad}$ , показана на рис. 4.20 для різних кутів  $\phi$ . Оскільки зміна  $H_m$  еквівалентна зміні параметра  $\alpha$ , отримані результати аналогічні результатам, отриманим у детерміністичному підході в розділі 4.4 та роботі [6]. Рисунок 4.21 ілюструє залежність  $\langle s_y \rangle / \gamma$  від  $\Omega$  для  $T = 295 \text{ K}$ ,  $H_m = 10 \text{ Oe}$ ,  $\psi_m = 1 \text{ rad}$ ,  $\phi = 0 \text{ rad}$  і різних радіусів частинки. Як видно, зменшення розміру частинки

зменшує абсолютну величину приведеної швидкості дрейфу і зміщує мінімум цієї швидкості вправо. Це відбувається тому, що величина теплових флуктуацій, яка характеризується параметром  $\beta$ , зростає при зменшенні розміру частинок, див. (4.52). Нарешті, на рис. 4.22 показана залежність  $\langle s_y \rangle / \gamma$  від  $\psi_m$ , яка розрахована для  $a = 5 \text{ nm}$ ,  $H_m = 10 \text{ Oe}$ ,  $\Omega = 5 \times 10^5 \text{ rad/s}$ ,  $\phi = 0 \text{ rad}$  і різних температур. У цьому випадку вплив температури на приведену дрейфову швидкість обумовлений як температурною залежністю динамічної в'язкості води, так і тепловими флуктуаціями. Слід також мати на увазі, що залежність розмірної дрейфової швидкості  $v_{\text{dr}} = v_m \langle s_y \rangle$  від температури відрізняється від приведеної швидкості дрейфу  $\langle s_y \rangle / \gamma$ , оскільки параметри  $v_m$  і  $\gamma$  залежать від  $T$  через динамічну в'язкість води.

Нарешті, оцінимо характерну швидкість  $v_m = f_m / 6\pi\eta a$  і швидкість дрейфу  $v_{\text{dr}}$  для  $\text{Co}$  наночастинок зважених у воді при кімнатній температурі. Якщо керуюча сила  $\mathbf{f}_d$  породжується градієнтним магнітним полем  $\mathbf{H}_g = gx \sin(\Omega t - \phi) \mathbf{e}_x$  ( $g$  – градієнт магнітного поля), то її амплітуда може бути оцінена як  $f_m = VMg$  і, отже,  $v_m = 2a^2 Mg / 9\eta$ . Оскільки характерна швидкість  $v_m$  і параметр  $\gamma$  сильно зростають зі збільшенням розміру частинок, очікується, що дрейфу, індукований силою Магнуса, може бути використаний для сепарації великих частинок (тому що вони дрейфують з відносно великими швидкостями). Зокрема, припускаючи що  $a = 100 \text{ nm}$  (хоча цей радіус перевищує критичний [163], однодоменний стан може існувати внаслідок великого магнітного поля),  $g = 10^3 \text{ Oe/cm}$ ,  $H_m = 10^3 \text{ Oe}$  і беручи до уваги, що  $\eta = 9.62 \times 10^{-3} \text{ P}$  для  $T = 295 \text{ K}$ , отримуємо  $v_m = 3.29 \times 10^{-3} \text{ cm/s}$  і  $\gamma = 4.27 \times 10^{-2}$ . Тому, приймаючи  $\langle s_y \rangle / \gamma = -0.17$  (див. рис. 4.18, лінія з ромбами), знаходимо  $v_{\text{dr}} = -239 \text{ nm/s}$ . Слід також зазначити, що швидкість дрейфу може бути збільшена шляхом відповідного вибору зовнішніх параметрів, при яких макроскопічне зміщення наночастинок може відбуватися за порівняно короткі проміжки часу [7].

#### 4.11 Висновки до розділу 4

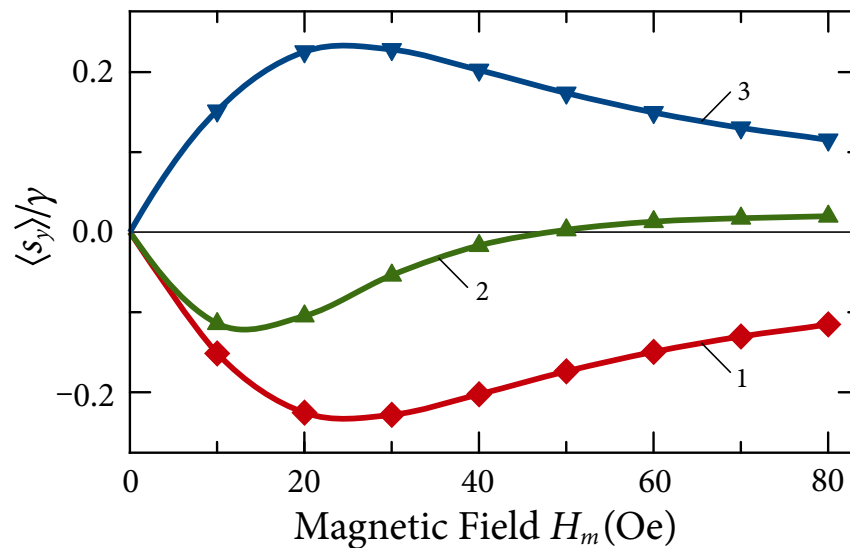


Рисунок 4.20 – - Приведена швидкість дрейфу  $S_0$  наночастинки як функція величини магнітного поля  $H_m$  для різних значень початкової фази  $\phi$ . Лінія 1 відповідає  $\phi = 0.4$  rad, лінія 2 –  $\phi = 2.0$  rad, а лінія 3 –  $\phi = (\pi + 0.4)$  rad.

В даному розділі ми представили аналітичні та чисельні результати щодо індукованого силою Магнуса дрейфу зважених у в'язкій рідині феромагнітних наночастинок. В основу теорії цього ефекту, передбаченого авторами проекту, покладено ідею про те, що якщо коливальний та обертальний рухи наночастинки певним чином синхронізовані, тоді усереднена за періодом коливань сила Магнуса, яка діє на цю частинку, може бути відмінною від нуля. Саме завдяки цієї сили і виникає дрейфовий рух (тобто спрямований транспорт) наночастинок у напрямку, перпендикулярному до осі їх коливань. Для перевірки даної гіпотези нами були запропоновані детерміністична та більш загальна статистична теорії дрейфу феромагнітних наночастинок.

Детерміністична теорія базується на мінімальній системі рівнянь для поступального та обертального рухів однодоменної частинки, викликаних періодичною силою та магнітним полем, що обертається неоднорідно. Аналіз цієї системи рівнянь, яка була отримана в наближенні, коли намагніченість частинки заморожена в її тіло, а числа Рейнольдса малі, дозволив знайти загальний вираз для швидкості дрейфу. У випадку, коли азимутальний кут магнітного поля задається трикутною хвилею, знайдено точний розв'язок даної системи рівнянь руху, за його допомогою

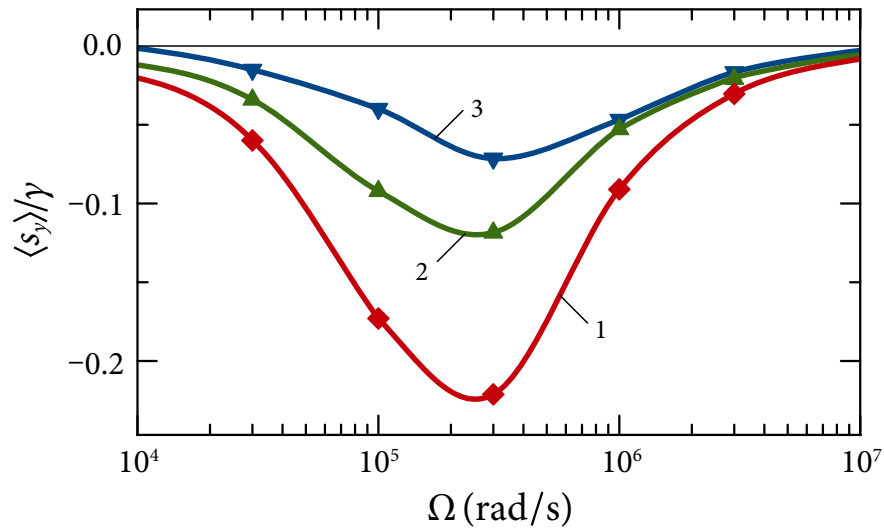


Рисунок 4.21 – Частотна залежність приведеної швидкості дрейфу для різних радіусів  $S_0$  наночастинок. Лінія 1 відповідає великому радіусу ( $\beta = 0$ ), лінія 2 –  $a = 5$  nm, а лінія 3 –  $a = 4$  nm. Вісь  $\Omega$  взята в логарифмічному масштабі.

виявлено існування трьох режимів обертання наночастинок і в кожному з цих режимів визначено швидкість дрейфу. Встановлено, зокрема, що початкова фаза магнітного поля є важливим керуючим параметром дрейфового руху частинок: оскільки швидкість дрейфу є періодичною функцією початкової фази, за її допомогою можна змінювати як швидкість дрейфового руху, так і його напрямок (на протилежний). Іншою важливою особливістю дрейфового руху частинок є те, що на залежності швидкості дрейфу від максимального кута повороту магнітного поля існує яскраво виражений екстремум. Шляхом відповідного вибору лише початкової фази та максимального кута повороту магнітного поля встановлена можливість керування швидкістю дрейфу наночастинок як в одному напрямку, так і в протилежному. Ми підтвердили всі наші теоретичні передбачення чисельними результатами.

Вперше побудовано статистичну теорію дрейфу зважених ферромагнітних наночастинок, в якій враховується як температурна залежність динамічної в'язкості рідини, так і теплові флуктуації, що генерують броунівський поступальний та обертальний рухи таких частинок. В її основу покладено систему стохастичних рівнянь поступального та обертального рухів наночастинок і відповідне рівняння Фоккера-Планка. В рамках цієї теорії визначена середня швидкість

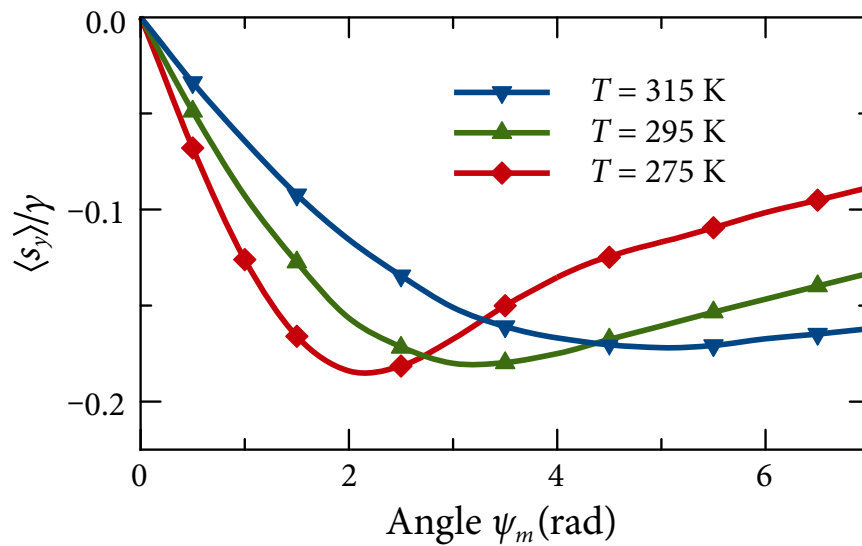


Рисунок 4.22 – - Приведена швидкість дрейфу  $S_0$  наночастинки як функція кута  $\psi_m$  при різних температурах.

дрейфу частинок, що генерується силою Магнуса, проаналізована її залежність від параметрів моделі та показано, що теплові флуктуації не призводять до повного зникнення ефекту дрейфу; вони лише зменшують швидкість дрейфу. Знайдено також аналітичний вираз для середньої швидкості дрейфу у випадку великих температур і встановлено, що детерміністична теорія дрейфового руху наночастинок справедлива, якщо їх розмір перевищує або порядку десяти нанометрів. Найбільш важливим (з точки зору практичних застосувань) і неочікуваних нових результатів роботи є встановлення (теоретично та шляхом чисельного моделювання) того факту, що існують умови, при виконанні яких напрямок дрейфу наночастинок змінюється на протилежний при зміні температури.

## ВИСНОВКИ

Таким чином, в даній НДР аналітично та чисельно вивчено широке коло магнітних, теплових та транспортних властивостей періодично збуджених систем феромагнітних наночастинок, розподілених в твердій та рідкій матрицях. Оскільки докладні висновки зроблено в кінці кожного розділу, нижче наведемо лише короткий їх опис.

У першому розділі основна увага приділена вивченню обертальної динаміки феромагнітних частинок та її впливу на енергетичні втрати в системах таких частинок розподілених у в'язкій рідині. Використовуючи модель частинки з вмороженою намагніченістю (тобто модель жорсткого диполя) і детерміністичне наближення показано, що циркулярно-поляризоване зовнішнє магнітне поле може генерувати три режими обертальної динаміки частинок, для кожного з яких визначено потужність енергетичних втрат. Встановлено, що з точки зору енергетичних втрат лінійно-поляризоване магнітне поле є більш ефективним, ніж циркулярно-поляризоване, якщо його частота досить мала. Визначено також умови, при виконанні яких зовнішнє постійне магнітне поле може підвищити ефективність нагрівання феромагнітних наночастинок в рідині.

В цьому ж розділі докладно вивчено вплив теплових флуктуацій обертального руху наночастинок та їх диполь-дипольної взаємодії на потужність втрат. Використовуючи стохастичні рівняння обертального руху та відповідне рівняння Фоккера-Планка встановлено, що теплові флуктуації суттєво знижують потужність втрат при малих частотах зовнішнього поля, тоді як при великих частотах їх вклад незначний. Що ж стосується впливу диполь-дипольної взаємодії, то шляхом чисельного моделювання показано, що взаємодія між феромагнітними частинками суттєво впливає (внаслідок утворення кластерної структури) на їх магнітну сприйнятливність і, як наслідок, на потужність енергетичних втрат. Встановлено, що конкуруючий характер диполь-дипольної взаємодії і теплових флуктуацій відповідає за два режими втрат. Перший реалізується у випадку відносно великих інтенсивностей теплового шуму і характеризується зростанням енергетичних втрат при

зростанні інтенсивності теплових флуктуацій, а другий існує при малих інтенсивностях шуму. В останньому випадку енергетичні втрати залежать від кластерної структури системи, яка, в свою чергу, залежить від інтенсивності диполь-дипольної взаємодії.

Другий розділ присвячено вивченню особливостей динаміки намагніченості та потужності втрат у системах феромагнітних наночастинок розподілених в твердій матриці і збуджених еліптично поляризованим магнітним полем. Ці системи складаються з однодомених частинок, напрямком осей легкого намагнічування яких рівномірно розподілений у просторі. Для цього класу систем побудовано загальну теорію збурень, яка дозволяє знайти розв'язки рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта у випадку малої амплітуди магнітного поля і аналітично розрахувати індуковану намагніченість таких систем та втрати енергії в них. Встановлено, зокрема, що індукована намагніченість та потужність втрат зазнають резонансного підсилення в околі частот субгармонічних резонансів. Для вивчення частотної залежності даних величин в загальному випадку довільної амплітуди поля розроблено процедуру їх чисельного визначення. Коректність запропонованої процедури підтверджена шляхом порівняння аналітичних результатів з чисельними у випадку малої амплітуди еліптично поляризованого магнітного поля. Встановлено також, що зі збільшенням амплітуди поля частотні залежності зазначених величин зазнають якісних змін. Аналіз динаміки намагніченості в наночастинках показав, що відбувається це завдяки стрибкоподібним переходам між різними режимами вимушеної прецесії намагніченості. При цьому найбільший вклад дають переходи, що супроводжуються переорієнтацією магнітних моментів наночастинок.

У третьому розділі досліджено сумісну магнітну і обертальну динаміку феромагнітних наночастинок зі скінченим полем одновісної анізотропії, що індукується циркулярно-поляризованим магнітним полем. Для опису обертальної динаміки використано рівняння, записане на основі загального закону збереження моменту імпульсу, а для опису внутрішньої магнітної динаміки використано модифіковане рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта. У випадку, коли амплітуда циркулярно-поляризованого поля набагато

менша поля анізотропії, знайдено розв'язки цих рівнянь і розраховано потужність енергетичних втрат. Аналіз показав, що загасаюча прецесія магнітного моменту наночастинки є основним каналом дисипації енергії і відповідає за резонансний характер її частотної залежності. Встановлено також, що зниження в'язкості рідини призводить до суттєвого зменшення потужності втрат. Її величина поблизу резонансної частоти може бути набагато меншою ніж та, що відповідає моделі фіксованої у просторі частинки.

Нарешті, у четвертому розділі викладено основні положення теорії дрейфу феромагнітних частинок у в'язкій рідині, що індукується силою Магнуса. В рамках детерміністичного підходу, що базується на мінімальній системі рівнянь для поступального та обертального рухів однодомної частинки з вмороженою намагніченістю (модель жорсткого диполя), отримано загальний вираз для швидкості її дрейфу. У випадку, коли азимутальний кут магнітного поля постійної амплітуди змінюється з часом як періодична трикутна функція, ці рівняння були розв'язані аналітично, а швидкість дрейфу знайдена у явному вигляді. Її аналіз показав, зокрема, що шляхом зміни початкової фази та максимального кута повороту магнітного поля можна змінювати як швидкість дрейфового руху, так і його напрямок. Цей теоретично передбачений ефект запропоновано використовувати для вибіркової сепарації наночастинок за їх розміром і намагніченістю.

Побудовано також статистичну теорію дрейфу феромагнітних частинок, що враховує вплив теплових флуктуацій. В її основу покладено систему стохастичних рівнянь поступального та обертального рухів частинки і відповідне рівняння Фоккера-Планка, чий стаціонарний розв'язок був використаний для визначення середньої швидкості дрейфу частинок. Показано, що детерміністичне наближення можна використовувати, якщо розмір частинок перевищує або порядку десяти нанометрів; у протилежному випадку теплові флуктуації суттєво зменшують швидкість дрейфу. Одним із найбільш значущих результатів, отриманих в рамках статистичної теорії, є встановлення того факту, що існують умови, при виконанні яких напрямок дрейфу



наночастинок змінюється на протилежний при зміні температури. Чисельне моделювання дрейфового руху феромагнітних частинок підтвердило всі теоретичні передбачення.

## ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Induced magnetization and power loss for a periodically driven system of ferromagnetic nanoparticles with randomly oriented easy axes / S. I. Denisov, T. V. Lyutyi, B. O. Pedchenko, O. M. Hryshko // Phys. Rev. B. — 2016. — Jul. — Vol. 94. — P. 024406. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.024406>.
2. Reva V. V., Lyutyi V., Yermolenko A. S. Energy dissipation of interacting rigid dipoles driven by the RF-field in a viscous fluid // 2017 IEEE International Young Scientists Forum on Applied Physics and Engineering (YSF). — 2017. — Oct. — P. 303–306.
3. Reva V. V., Lyutyi T. V. Microwave absorption by a rigid dipole in a viscous fluid // 2016 II International Young Scientists Forum on Applied Physics and Engineering (YSF). — 2016. — Oct. — P. 104–107.
4. Precession of a Fine Magnetic Particle with Finite Anisotropy in a Viscous Fluid / T. V. Lyutyi, O. M. Hryshko, A. A. Kovner, E. S. Denisova // J. Nano- Electron. Phys. — 2016. — Vol. 8, no. 4. — P. 04086. — Access mode: [https://dx.doi.org/10.21272/jnep.8\(4\(2\)\).04086](https://dx.doi.org/10.21272/jnep.8(4(2)).04086).
5. Lyutyi T. V., Denisova E. S., Kvasnina A. V. Forced coupled motion of the nanoparticle magnetic moment and the whole nanoparticle in a viscous fluid // 2017 IEEE 7th International Conference Nanomaterials: Application Properties (NAP). — 2017. — Sep. — P. 02MFPM09–1–02MFPM09–4.
6. Exactly solvable model for drift of suspended ferromagnetic particles induced by the Magnus force / S.I. Denisov, B.O. Pedchenko, O.V. Kvasnina, E.S. Denisova // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2017. — Vol. 443. — P. 89 – 95. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885317316530>.
7. Denisov S. I., Pedchenko B. O. Drift of suspended ferromagnetic particles due to the Magnus effect // Journal of Applied Physics. — 2017. — Vol. 121, no. 4. — P. 043912. — <https://doi.org/10.1063/1.4975031>.
8. Temperature effects on drift of suspended single-domain particles induced by the Magnus force / S. I. Denisov, T. V. Lyutyi, V. V. Reva, A. S. Yer-

- molenko // Phys. Rev. E. — 2018. — Mar. — Vol. 97. — P. 032608. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.97.032608>.
9. Lyutyy T. V., Hryshko O. M., Kovner A. A. Power loss for a periodically driven ferromagnetic nanoparticle in a viscous fluid: The finite anisotropy aspects // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2018. — Vol. 446, no. Supplement C. — P. 87 – 94. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885317310740>.
  10. Lyutyy T. V., Reva V. 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 // Phys. Rev. E. — 2018. — May. — Vol. 97. — P. 052611. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.97.052611>.
  11. Lyutyy T. V. Dynamics and energy dissipation of a rigid dipole driven by the RF-field in a viscous fluid: Deterministic approach // The European Physical Journal E. — 2018. — Dec. — Vol. 41, no. 12. — P. 142. — Access mode: <https://doi.org/10.1140/epje/i2018-11756-x>.
  12. Lyutyy T. V., Krekshyn D. M. Oscillatory Magnetic Dynamics of a Nanoparticle Driven by an External field and Spin-polarized Current // J. Nano- Electron. Phys. — 2018. — Vol. 10, no. 5. — P. 05033. — Access mode: [https://doi.org/10.21272/jnep.10\(5\).05033](https://doi.org/10.21272/jnep.10(5).05033).
  13. Lyutyy T.V., Hryshko O.M., Yakovenko M.Yu. Uniform and nonuniform precession of a nanoparticle with finite anisotropy in a liquid: Opportunities and limitations for magnetic fluid hyperthermia // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2019. — Vol. 473. — P. 198 – 204. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885318322868>.
  14. Denisov S.I., Bystrik Yu.S. Statistics of bounded processes driven by Poisson white noise // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2019. — Vol. 515. — P. 38 – 46. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437118312998>.
  15. Rosensweig R.E. Ferrohydrodynamics. — Cambridge University Press, 1985. — ISBN: 0486678342.
  16. Shliomis M I. Magnetic fluids // Soviet Physics Uspekhi. — 1974. — Vol. 17, no. 2. — P. 153. — Access mode: <http://stacks.iop.org/0038-5670/17/i=2/a=R02>.

17. Conducting ferrofluid: a high-performance microwave shielding material / Monika Mishra, Avnish Pratap Singh, B. P. Singh et al. // *J. Mater. Chem. A.* — 2014. — Vol. 2. — P. 13159–13168. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1039/C4TA01681E>.
18. Designing Of MWCNT/ Ferrofluid/ Flyash Multiphase Composite As Safeguard For Electromagnetic Radiation / Pradeep Sambyal, Avnish Pratap Singh, Meenakshi Verma et al. // *Adv. Mater. Lett.* — 2015. — Vol. 6. — P. 585–591. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.5185/amlett.2015.5807>.
19. Microwave shielding properties of Co/Ni attached to single walled carbon nanotubes / B. P. Singh, D. K. Saket, A. P. Singh et al. // *J. Mater. Chem. A.* — 2015. — Vol. 3. — P. 13203–13209. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1039/C5TA02381E>.
20. Varshney Swati, Dhawan S. K. Improved Electromagnetic Shielding Performance of Lightweight Compression Molded Polypyrrole/Ferrite Composite Sheets // *Journal of Electronic Materials.* — 2017. — Mar. — Vol. 46, no. 3. — P. 1811–1820.
21. Varshney Swati, Dhawan S.K. Designing of Materials for EMI Shielding Applications // *Microwave Materials and Applications 2V Set.* — Hoboken, New Jersey, USA : John Wiley & Sons, Inc., 2017. — P. 575–602. — ISBN: 9781119208549. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1002/9781119208549.ch13>.
22. Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine / Q A Pankhurst, J Connolly, S K Jones, J Dobson // *Journal of Physics D: Applied Physics.* — 2003. — Vol. 36, no. 13. — P. R167. — Access mode: <http://stacks.iop.org/0022-3727/36/i=13/a=201>.
23. Magnetic fluid hyperthermia (MFH): Cancer treatment with AC magnetic field induced excitation of biocompatible superparamagnetic nanoparticles / Andreas Jordan, Regina Scholz, Peter Wust et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 1999. — Vol. 201, no. 1. — P. 413 – 419. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885399000888>.
24. Andrä W., Nowak H. *Magnetism in Medicine: A Handbook.* — Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2007. — ISBN: 9783527405589. — Access mode:

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9783527610174>.

25. Rosensweig R.E. Heating magnetic fluid with alternating magnetic field // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2002. — Vol. 252. — P. 370 – 374. — Proceedings of the 9th International Conference on Magnetic Fluids. Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885302007060>.
26. Effects of magnetic dipolar interactions on the specific time constant in superparamagnetic nanoparticle systems / N Iacob, G Schinteie, C Bartha et al. // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2016. — Vol. 49, no. 29. — P. 295001. — Access mode: <http://stacks.iop.org/0022-3727/49/i=29/a=295001>.
27. Relevant Parameters for Magnetic Hyperthermia in Biological Applications: Agglomeration, Concentration, and Viscosity / Y. Piñeiro, Z. Vargas-Osorio, M. Bañobre López et al. // IEEE Transactions on Magnetics. — 2016. — Vol. 52, no. 7. — P. 2300704. — Access mode: <http://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/7381656/>.
28. Trisnanto Suko Bagus, Kitamoto Yoshitaka. Brownian particle-kinetics in a superparamagnetic ferrofluid subjected to static magnetic-field // AIP Conference Proceedings. — 2017. — Vol. 1807, no. 1. — P. 020021. — <http://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.4974803>.
29. Improving the magnetic heating by disaggregating nanoparticles / F. Arteaga-Cardona, K. Rojas-Rojas, R. Costo et al. // Journal of Alloys and Compounds. — 2016. — Vol. 663, no. Supplement C. — P. 636 – 644. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838815315413>.
30. Predictable Heating and Positive MRI Contrast from a Mesoporous Silica-Coated Iron Oxide Nanoparticle / Katie R. Hurley, Hattie L. Ring, Michael Etheridge et al. // Molecular Pharmaceutics. — 2016. — Vol. 13, no. 7. — P. 2172–2183. — PMID: 26991550. <http://dx.doi.org/10.1021/acs.molpharmaceut.5b00866>.
31. Size-Dependent Heating of Magnetic Iron Oxide Nanoparticles / Sheng Tong, Christopher A. Quinto, Linlin Zhang et al. // ACS Nano. — 2017. — Vol. 11, no. 7. — P. 6808–6816. — PMID: 28625045. <http://dx.doi.org/10.1021/acsnano.7b01762>.
32. Effective heating of magnetic nanoparticle aggregates for in vivo nano-

- theranostic hyperthermia / C Wang, C H Hsu, Z Li et al. // Int. J. Nanomedicine. — 2017. — Aug. — Vol. 12. — P. 6273–6287. — Access mode: <https://doi.org/10.2147/IJN.S141072>.
33. Lee Sanghoon, Jeun Minhong. Size Dependence of Alternating Current Magnetically-Induced Heating Characteristics of Ferrimagnetic  $MgFe_2O_4$  Nanoparticles in Powder and Fluidic States // Sci. Adv. Mater. — 2017. — May. — Vol. 9. — P. 804–809. — Access mode: <https://doi.org/10.1166/sam.2017.2948>.
34. Precessional dynamics of single-domain magnetic nanoparticles driven by small ac magnetic fields / Haiwen Xi, Kai-Zhong Gao, Yiming Shi, Song Xue // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2006. — Vol. 39, no. 22. — P. 4746. — Access mode: <http://stacks.iop.org/0022-3727/39/i=22/a=002>.
35. Usov N. A., Liubimov B. Ya. Dynamics of magnetic nanoparticle in a viscous liquid: Application to magnetic nanoparticle hyperthermia // Journal of Applied Physics. — 2012. — Vol. 112, no. 2. — P. 023901. — <http://dx.doi.org/10.1063/1.4737126>.
36. Magnetomechanical coupling and ferromagnetic resonance in magnetic nanoparticles / Hedyeh Keshtgar, Simon Streib, Akashdeep Kamra et al. // Phys. Rev. B. — 2017. — Apr. — Vol. 95. — P. 134447. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.134447>.
37. Usadel Klaus D. Dynamics of magnetic nanoparticles in a viscous fluid driven by rotating magnetic fields // Phys. Rev. B. — 2017. — Mar. — Vol. 95. — P. 104430. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.104430>.
38. Weizenecker Jürgen. The Fokker-Planck Equation for Coupled Brown-Néel-Rotation // Physics in Medicine and Biology. — 2018. — Vol. 63, no. 3. — P. 035004. — Access mode: <http://stacks.iop.org/0031-9155/63/i=3/a=035004>.
39. Nándori I., Rácz J. Magnetic particle hyperthermia: Power losses under circularly polarized field in anisotropic nanoparticles // Phys. Rev. E. — 2012. — Dec. — Vol. 86. — P. 061404. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.86.061404>.

40. Improved efficiency of heat generation in nonlinear dynamics of magnetic nanoparticles / J. Rácz, P. F. de Châtel, I. A. Szabó et al. // *Phys. Rev. E*. — 2016. — Jan. — Vol. 93. — P. 012607. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.93.012607>.
41. Raikher Y. L., Shliomis M. I. The Effective Field Method in the Orientational Kinetics of Magnetic Fluids and Liquid Crystals // *Advances in Chemical Physics*. — 1994. — Vol. 87. — P. 595–751. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1002/9780470141465.ch8>.
42. Scherer Claudio, Matuttis Hans-Georg. Rotational dynamics of magnetic particles in suspensions // *Phys. Rev. E*. — 2000. — Dec. — Vol. 63. — P. 011504. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.63.011504>.
43. Raikher Yu. L., Stepanov V. I. Energy absorption by a magnetic nanoparticle suspension in a rotating field // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2011. — Vol. 112, no. 1. — P. 173–177. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1134/S1063776110061160>.
44. Raikher Yu. L., Stepanov V. I. Power losses in a suspension of magnetic dipoles under a rotating field // *Phys. Rev. E*. — 2011. — Feb. — Vol. 83. — P. 021401. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.83.021401>.
45. Felderhof B U, Jones R B. Mean field theory of the nonlinear response of an interacting dipolar system with rotational diffusion to an oscillating field // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2003. — Vol. 15, no. 23. — P. 4011. — Access mode: <http://stacks.iop.org/0953-8984/15/i=23/a=313>.
46. Soto-Aquino D., Rinaldi C. Magnetoviscosity in dilute ferrofluids from rotational Brownian dynamics simulations // *Phys. Rev. E*. — 2010. — Oct. — Vol. 82. — P. 046310. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.82.046310>.
47. Soto-Aquino D., Rinaldi C. Nonlinear energy dissipation of magnetic nanoparticles in oscillating magnetic fields // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2015. — Vol. 393. — P. 46 – 55. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885315301335>.
48. Curie-Weiss behavior in ferrofluids / K. O'Grady, A. Bradbury,

- S.W. Charles et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 1983. — Vol. 31, no. Part 2. — P. 958 – 960. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0304885383907552>.
49. Morozov K.I., Lebedev A.V. The effect of magneto-dipole interactions on the magnetization curves of ferrocolloids // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 1990. — Vol. 85, no. 1. — P. 51 – 53. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0304885390900151>.
50. Buyevich Yu.A., Ivanov A.O. Equilibrium properties of ferrocolloids // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. — 1992. — Vol. 190, no. 3. — P. 276 – 294. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037843719290037Q>.
51. Ivanov Alexey O., Kuznetsova Olga B. Magnetic properties of dense ferrofluids: An influence of interparticle correlations // *Phys. Rev. E*. — 2001. — Sep. — Vol. 64. — P. 041405. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.64.041405>.
52. Berkov D. V., Iskakova L. Yu., Zubarev A. Yu. Theoretical study of the magnetization dynamics of nondilute ferrofluids // *Phys. Rev. E*. — 2009. — Feb. — Vol. 79. — P. 021407. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.79.021407>.
53. Huke B, Lücke M. Magnetic properties of colloidal suspensions of interacting magnetic particles // *Reports on Progress in Physics*. — 2004. — Vol. 67, no. 10. — P. 1731. — Access mode: <http://stacks.iop.org/0034-4885/67/i=10/a=R01>.
54. Groh B., Dietrich S. Structural and thermal properties of orientationally ordered dipolar fluids // *Phys. Rev. E*. — 1996. — Mar. — Vol. 53. — P. 2509–2530. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.53.2509>.
55. Groh B., Dietrich S. Inhomogeneous magnetization in dipolar ferromagnetic liquids // *Phys. Rev. E*. — 1998. — Apr. — Vol. 57. — P. 4535–4546. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.57.4535>.
56. Nonmonotonic Magnetic Susceptibility of Dipolar Hard-Spheres at Low Temperature and Density / Sofia Kantorovich, Alexey O. Ivanov, Lorenzo Rovigatti et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2013. — Apr. — Vol. 110. — P. 148306. — Access mode:



- <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.148306>.
57. Gould Harvey, Tobochnik Jan, Christian Wolfgang. An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems.
  58. Rapaport D. C. The Art of Molecular Dynamics Simulation. — Shaftesbury Road, Cambridge, CB2 8BS, United Kingdom : Cambridge University Press, 2004. — ISBN: 9780521825689. — Access mode: <http://www.cambridge.org/catalogue/catalogue.asp?isbn=9780521825689>.
  59. Haile J. M. Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods. — Hoboken, New Jersey, USA : John Wiley & Sons, Inc., 1997. — ISBN: 9780471184393. — Access mode: <http://eu.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-047118439X.html>.
  60. Particle cluster configuration in magnetic fluids / R W Chantrell, A Bradbury, J Popplewell, S W Charles // Journal of Physics D: Applied Physics. — 1980. — Vol. 13, no. 7. — P. L119. — Access mode: <http://stacks.iop.org/0022-3727/13/i=7/a=003>.
  61. Bradbury A., Menear S., Chantrell R.W. A Monte Carlo calculation of the magnetic properties of a ferrofluid containing interacting polydispersed particles // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 1986. — Vol. 54, no. Part 2. — P. 745 – 746. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0304885386902337>.
  62. Cluster-based Monte Carlo simulation of ferrofluids / S. W. Davis, W. McCausland, H. C. McGahagan et al. // Phys. Rev. E. — 1999. — Feb. — Vol. 59. — P. 2424–2428. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.59.2424>.
  63. Huang J. P., Wang Z. W., Holm C. Computer simulations of the structure of colloidal ferrofluids // Phys. Rev. E. — 2005. — Jun. — Vol. 71. — P. 061203. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.71.061203>.
  64. Wang Zuowei, Holm Christian, Müller Hanns Walter. Molecular dynamics study on the equilibrium magnetization properties and structure of ferrofluids // Phys. Rev. E. — 2002. — Aug. — Vol. 66. — P. 021405. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.66.021405>.
  65. Magnetic properties of polydisperse ferrofluids: A critical com-

- parison between experiment, theory, and computer simulation / Alexey O. Ivanov, Sofia S. Kantorovich, Evgeniy N. Reznikov et al. // *Phys. Rev. E.* — 2007. — Jun. — Vol. 75. — P. 061405. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.75.061405>.
66. Molecular dynamics study of the primary ferrofluid aggregate formation / B.M. Tanygin, V.F. Kovalenko, M.V. Petrychuk, S.A. Dzyan // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 2012. — Vol. 324, no. 23. — P. 4006 – 4010. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885312005823>.
67. Sreekumari Aparna, Ilg Patrick. Slow relaxation in structure-forming ferrofluids // *Phys. Rev. E.* — 2013. — Oct. — Vol. 88. — P. 042315. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.88.042315>.
68. Sreekumari Aparna, Ilg Patrick. Anisotropy of magneto-viscous effect in structure-forming ferrofluids // *Phys. Rev. E.* — 2015. — Jul. — Vol. 92. — P. 012306. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.92.012306>.
69. Influence of dipolar interactions on the magnetic susceptibility spectra of ferrofluids / Julien O. Sindt, Philip J. Camp, Sofia S. Kantorovich et al. // *Phys. Rev. E.* — 2016. — Jun. — Vol. 93. — P. 063117. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.93.063117>.
70. Ivanov Alexey O., Zverev Vladimir S., Kantorovich Sofia S. Revealing the signature of dipolar interactions in dynamic spectra of polydisperse magnetic nanoparticles // *Soft Matter.* — 2016. — Vol. 12. — P. 3507–3513. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1039/C5SM02679B>.
71. Haase C., Nowak U. Role of dipole-dipole interactions for hyperthermia heating of magnetic nanoparticle ensembles // *Phys. Rev. B.* — 2012. — Jan. — Vol. 85. — P. 045435. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.045435>.
72. Increase of magnetic hyperthermia efficiency due to dipolar interactions in low-anisotropy magnetic nanoparticles: Theoretical and experimental results / B. Mehdaoui, R. P. Tan, A. Meffre et al. // *Phys. Rev. B.* — 2013. — May. — Vol. 87. — P. 174419. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.174419>.

73. Landi Gabriel T. Role of dipolar interaction in magnetic hyperthermia // *Phys. Rev. B.* — 2014. — Jan. — Vol. 89. — P. 014403. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.014403>.
74. Tan R. P., Carrey J., Respaud M. Magnetic hyperthermia properties of nanoparticles inside lysosomes using kinetic Monte Carlo simulations: Influence of key parameters and dipolar interactions, and evidence for strong spatial variation of heating power // *Phys. Rev. B.* — 2014. — Dec. — Vol. 90. — P. 214421. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.214421>.
75. Barnes Josh, Hut Piet. A hierarchical  $O(N \log N)$  force-calculation algorithm // *Nature.* — 1986. — Dec. — Vol. 324. — P. 446 – 449. — Access mode: <https://www.nature.com/nature/journal/v324/n6096/abs/324446a0.html>.
76. Jason Sanders Edward Kandrot. *CUDA by Example: An Introduction to General-Purpose GPU Programming.* — San Francisco, USA : Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 2011. — ISBN: 978-0-13-138768-3.
77. Newman J. J., Yarbrough R. B. Motions of a Magnetic Particle in a Viscous Medium // *Journal of Applied Physics.* — 1968. — Vol. 39, no. 12. — P. 5566–5569. — <https://doi.org/10.1063/1.1656014>.
78. Hall W. F., Busenberg S. N. Viscosity of Magnetic Suspensions // *The Journal of Chemical Physics.* — 1969. — Vol. 51, no. 1. — P. 137–144. — <http://dx.doi.org/10.1063/1.1671698>.
79. Kim Yung Sam, Hochstrasser Robin M. Applications of 2D IR Spectroscopy to Peptides, Proteins, and Hydrogen-Bond Dynamics // *J. Phys. Chem. B.* — 2009. — Oct. — Vol. 113. — P. 8231 – 8251. — Access mode: <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp8113978>.
80. Dar M. Ibrahim, Shivashankar S. A. Single crystalline magnetite, maghemite, and hematite nanoparticles with rich coercivity // *RSC Adv.* — 2014. — Vol. 4. — P. 4105–4113. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1039/C3RA45457F>.
81. Brown William Fuller. Thermal Fluctuations of a Single-Domain Particle // *Phys. Rev.* — 1963. — Jun. — Vol. 130. — P. 1677–1686. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.1677>.
82. Denisov S.I, Yunda A.N. Thermal-induced inversion of the magnetic

- moment in superparamagnetic particles // *Physica B: Condensed Matter*. — 1998. — Vol. 245, no. 3. — P. 282 – 287. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452697008788>.
83. Denisov S. I., Lyutyty T. V., Hänggi P. Magnetization of Nanoparticle Systems in a Rotating Magnetic Field // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Nov. — Vol. 97. — P. 227202. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.227202>.
84. Goldstein Herbert. *Classical Mechanics*. — Pearson Education, 2002. — ISBN: 9788177582833. — Access mode: <https://books.google.com.ua/books?id=Spy6xHWFJIEC>.
85. W. Horsthemke R. Lefever. *Noise-Induced Transitions. Theory and Applications in Physics, Chemistry, and Biology*. — Berlin : Springer-Verlag, 1984. — P. 322. — ISBN: 978-3-540-11359-1.
86. Risken H. *The Fokker-Planck-Equation: Methods of Solution and Applications*. — 2nd ed. edition. — 1989. — 01.
87. Role of the interpretation of stochastic calculus in systems with cross-correlated Gaussian white noises / Vicen ç Méndez, S. I. Denisov, Daniel Campos, Werner Horsthemke // *Phys. Rev. E*. — 2014. — Jul. — Vol. 90. — P. 012116. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.012116>.
88. Rotational properties of ferromagnetic nanoparticles driven by a precessing magnetic field in a viscous fluid / T. V. Lyutyty, S. I. Denisov, V. V. Reva, Yu. S. Bystrik // *Phys. Rev. E*. — 2015. — Oct. — Vol. 92. — P. 042312. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.92.042312>.
- 89.
90. Stratonovich R. A New Representation for Stochastic Integrals and Equations // *SIAM Journal on Control*. — 1966. — Vol. 4, no. 2. — P. 362–371. — <https://doi.org/10.1137/0304028>.
91. Klimontovich Yu. L. *Statistical Theory of Open Systems*. — Berlin : Springer, Dordrecht, 1995.
92. Denisov S. I., Vitrenko A. N., Horsthemke Werner. Nonequilibrium transitions induced by the cross-correlation of white noises // *Phys. Rev. E*. — 2003. — Oct. — Vol. 68. — P. 046132. — Access mode:

- <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.68.046132>.
93. Rapidly driven nanoparticles: Mean first-passage times and relaxation of the magnetic moment / S. I. Denisov, K. Sakmann, P. Talkner, P. Hänggi // *Phys. Rev. B.* — 2007. — May. — Vol. 75. — P. 184432. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.184432>.
  94. Raible Martin, Engel Andreas. Langevin equation for the rotation of a magnetic particle // *Applied Organometallic Chemistry.* — 2004. — Vol. 18, no. 10. — P. 536–541. — <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/aoc.757>.
  95. Large-scale ferrofluid simulations on graphics processing units / A.Yu. Polyakov, T.V. Lyutyy, S. Denisov et al. // *Computer Physics Communications.* — 2013. — Vol. 184, no. 6. — P. 1483 – 1489. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465513000337>.
  96. Greengard L., Rokhlin V. A Fast Algorithm for Particle Simulations // *Journal of Computational Physics.* — 1997. — Vol. 135, no. 2. — P. 280 – 292. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999197957065>.
  97. Energy dissipation in single-domain ferromagnetic nanoparticles: Dynamical approach / T. V. Lyutyy, S. I. Denisov, A. Yu. Peletskyi, C. Binns // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Feb. — Vol. 91. — P. 054425. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.054425>.
  98. Switching properties of ferromagnetic nanoparticles driven by a circularly polarized magnetic field / T V Lyutyy, A Yu Polyakov, A V Rot-Serov, C Binns // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 2009. — Vol. 21, no. 39. — P. 396002. — Access mode: <http://stacks.iop.org/0953-8984/21/i=39/a=396002>.
  99. Gitterman Moshe. *The Chaotic Pendulum.* — 5 Toh Tuck Link, Singapore 596224 : World Scientific, 2010. — <https://www.worldscientific.com/doi/pdf/10.1142/7861>.
  100. Bertotti Giorgio, Serpico Claudio, Mayergoyz Isaak D. Nonlinear Magnetization Dynamics under Circularly Polarized Field // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — Jan. — Vol. 86. — P. 724–727. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.724>.
  101. Influence of the aggregation, concentration, and viscosity on the nano-

- magnetism of iron oxide nanoparticle colloids for magnetic hyperthermia / David Cabrera, Julio Camarero, Daniel Ortega, Francisco J. Teran // *J. Nanopart. Res.* — 2015. — Oct. — Vol. 17. — P. 121 – 126. — Access mode: <https://doi.org/10.1007/s11051-015-2921-9>.
102. Switching behavior of a Stoner particle beyond the relaxation time limit / M. Bauer, J. Fassbender, B. Hillebrands, R. L. Stamps // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Feb. — Vol. 61. — P. 3410–3416. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.61.3410>.
103. Coherent suppression of magnetic ringing in microscopic spin valve elements / H. W. Schumacher, C. Chappert, P. Crozat et al. // *Applied Physics Letters.* — 2002. — Vol. 80, no. 20. — P. 3781–3783. — <http://dx.doi.org/10.1063/1.1480476>.
104. Serpico C., Mayergoyz I. D., Bertotti G. Analytical solutions of Landau–Lifshitz equation for precessional switching // *Journal of Applied Physics.* — 2003. — Vol. 93, no. 10. — P. 6909–6911. — <http://dx.doi.org/10.1063/1.1557278>.
105. Sun Z. Z., Wang X. R. Fast magnetization switching of Stoner particles: A nonlinear dynamics picture // *Phys. Rev. B.* — 2005. — May. — Vol. 71. — P. 174430. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.174430>.
106. C.Thirion, W.Wernsdorfer, D.Mailly. Switching of magnetization by non-linear resonance studied in single nanoparticles // *Nat Mater.* — 2003. — Vol. 2, no. 8. — P. 524–527. — <http://dx.doi.org/10.1038/nmat946>.
107. Sun Z. Z., Wang X. R. Magnetization reversal through synchronization with a microwave // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Oct. — Vol. 74. — P. 132401. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.132401>.
108. Woltersdorf Georg, Back Christian H. Microwave Assisted Switching of Single Domain  $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$  Elements // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Nov. — Vol. 99. — P. 227207. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.227207>.
109. Nonlinear-dynamical-system approach to microwave-assisted magnetization dynamics (invited) / G. Bertotti, I. D. Mayergoyz, C. Serpico et al. // *Journal of Applied Physics.* — 2009. — Vol. 105, no. 7. — P. 07B712. — <http://dx.doi.org/10.1063/1.3072075>.

110. Phase Dependence of Microwave-Assisted Switching of a Single Magnetic Nanoparticle / R. Piquerel, O. Gaier, E. Bonet et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Mar. — Vol. 112. — P. 117203. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.117203>.
111. Álvarez Luis Fernández, Pla Oscar, Chubykalo Oksana. Quasiperiodicity, bistability, and chaos in the Landau-Lifshitz equation // *Phys. Rev. B.* — 2000. — May. — Vol. 61. — P. 11613–11617. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.61.11613>.
112. Chaotic dynamics of a magnetic nanoparticle / J. Bragard, H. Pleiner, O. J. Suarez et al. // *Phys. Rev. E.* — 2011. — Sep. — Vol. 84. — P. 037202. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.84.037202>.
113. Magnetization Dynamics Under a Quasiperiodic Magnetic Field / D. Laroze, D. Becerra-Alonso, J. A. C. Gallas, H. Pleiner // *IEEE Transactions on Magnetics.* — 2012. — Nov. — Vol. 48, no. 11. — P. 3567–3570.
114. Heteroclinic tangle phenomena in nanomagnets subject to time-harmonic excitations / C. Serpico, A. Quercia, G. Bertotti et al. // *Journal of Applied Physics.* — 2015. — Vol. 117, no. 17. — P. 17B719. — <http://dx.doi.org/10.1063/1.4914530>.
115. Bertotti G., Mayergoyz I. D., Serpico C. Analysis of instabilities in nonlinear Landau–Lifshitz–Gilbert dynamics under circularly polarized fields // *Journal of Applied Physics.* — 2002. — Vol. 91, no. 10. — P. 7556–7558. — <http://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.1450844>.
116. Landau Lev D, Lifshitz Es. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies // *Phys. Z. Sowjetunion.* — 1935. — Vol. 8, no. 153. — P. 101–114.
117. Gilbert T. L. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials // *IEEE Transactions on Magnetics.* — 2004. — Nov. — Vol. 40, no. 6. — P. 3443–3449.
118. Dynamical and thermal effects in nanoparticle systems driven by a rotating magnetic field / S. I. Denisov, T. V. Lyutyy, P. Hänggi, K. N. Trohidou // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Sep. — Vol. 74. — P. 104406. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.104406>.
119. Phase diagrams for the precession states of the nanoparticle mag-

- netization in a rotating magnetic field / S.I. Denisov, T.V. Lyutyty, C. Binns, P. Hanggi // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2010. — Vol. 322, no. 9. — P. 1360 – 1362. — Proceedings of the Joint European Magnetic Symposia. Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885309009330>.
120. Denisov S. I., Polyakov A. Yu., Lyutyty T. V. Resonant suppression of thermal stability of the nanoparticle magnetization by a rotating magnetic field // *Phys. Rev. B*. — 2011. — Nov. — Vol. 84. — P. 174410. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.174410>.
121. Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future / S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman et al. // *Science*. — 2001. — Vol. 294, no. 5546. — P. 1488–1495. — <http://science.sciencemag.org/content/294/5546/1488.full.pdf>.
122. Žutić Igor, Fabian Jaroslav, Das Sarma S. Spintronics: Fundamentals and applications // *Rev. Mod. Phys.* — 2004. — Apr. — Vol. 76. — P. 323–410. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.76.323>.
123. Daughton J.M. Magnetoresistive memory technology // *Thin Solid Films*. — 1992. — Vol. 216, no. 1. — P. 162 – 168. — Papers presented at the International Workshop on Science and Technology of Thin Films for the 21st Century, Evanston,IL, USA, July 28-August 2, 1991. Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/004060909290888I>.
124. A novel nonvolatile memory with spin torque transfer magnetization switching: spinram / M. Hosomi, H. Yamagishi, T. Yamamoto et al. // *IEEE International Electron Devices Meeting, 2005. IEDM Technical Digest*. — 2005. — Dec. — P. 459–462.
125. Ralph D.C., Stiles M.D. Spin transfer torques // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2008. — Vol. 320, no. 7. — P. 1190 – 1216. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885307010116>.
126. Stiles M. D., Zangwill A. Anatomy of spin-transfer torque // *Phys. Rev. B*. — 2002. — Jun. — Vol. 66. — P. 014407. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.014407>.
127. in *Nanosystems Nonlinear Magnetization Dynamics* / Ed. by Bertotti Giorgio, Mayergoyz Isaak D, Serpico Claudio. Elsevier Se-



- ries in Electromagnetism. — Oxford : Elsevier, 2009. — P. 469.
128. Magnetization Switching and Microwave Oscillations in Nanomagnets Driven by Spin-Polarized Currents / G. Bertotti, C. Serpico, I. D. Mayergoyz et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Apr. — Vol. 94. — P. 127206. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.127206>.
  129. Nonlinear aspects of Landau-Lifshitz-Gilbert dynamics under circularly polarized field / G. Bertotti, C. Serpico, I.D. Mayergoyz, A. Magni // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 2001. — Vol. 226-230. — P. 495 - 497. — Proceedings of the International Conference on Magnetism (ICM 2000). Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885300009859>.
  130. Field dependence of magnetization reversal by spin transfer / J. Grollier, V. Cros, H. Jaffrès et al. // *Phys. Rev. B.* — 2003. — May. — Vol. 67. — P. 174402. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.67.174402>.
  131. Berger L. Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Oct. — Vol. 54. — P. 9353–9358. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.54.9353>.
  132. Li Z., Zhang S. Magnetization dynamics with a spin-transfer torque // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Jul. — Vol. 68. — P. 024404. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.024404>.
  133. Xi Haiwen, Shi Yiming. High frequency magnetization rotation induced by a dc spin-polarized current in magnetic nanostructures // *Journal of Applied Physics.* — 2004. — Vol. 96, no. 3. — P. 1585–1590. — <https://doi.org/10.1063/1.1766408>.
  134. Sun J.Z. Current-driven magnetic switching in manganite trilayer junctions // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 1999. — Vol. 202, no. 1. — P. 157 - 162. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885399002899>.
  135. Sun J. Z. Spin-current interaction with a monodomain magnetic body: A model study // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Jul. — Vol. 62. — P. 570–578. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.62.570>.
  136. Stoner E. C., Wohlfarth E. P. A Mechanism of Magnetic Hysteresis in Het-

- erogeneous Alloys // Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. — 1948. — Vol. 240, no. 826. — P. 599–642. — <http://rsta.royalsocietypublishing.org/content/240/826/599.full.pdf>.
137. Guimaraes A.P. Principles of Nanomagnetism. — Springer Nature Switzerland AG, 2017. — Access mode: <https://www.springer.com/gp/book/9783642261114>.
138. Martinez E., Lopez-Diaz L., Torres L. Nonphenomenological damping constant due to eddy current losses in uniformly magnetized samples // Journal of Applied Physics. — 2006. — Vol. 99, no. 12. — P. 123912. — <http://dx.doi.org/10.1063/1.2206881>.
139. Eddy current effects in the magnetization dynamics of ferromagnetic metal nanoparticles / S. I. Denisov, T. V. Lyuty, B. O. Pedchenko, H. V. Babych // Journal of Applied Physics. — 2014. — Vol. 116, no. 4. — P. 043911. — <http://dx.doi.org/10.1063/1.4891455>.
140. Slonczewski J.C. Current-driven excitation of magnetic multilayers // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 1996. — Vol. 159, no. 1. — P. L1 – L7. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0304885396000625>.
141. Magnetic nanoparticles: synthesis, functionalization, and applications in bioimaging and magnetic energy storage / Natalie A. Frey, Sheng Peng, Kai Cheng, Shouheng Sun // Chem. Soc. Rev. — 2009. — Vol. 38. — P. 2532–2542. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1039/B815548H>.
142. Sun Shouheng. Self-Assembled Nanomagnets // Advanced Magnetic Nanostructures / Ed. by David Sellmyer, Ralph Skomski. — Boston, MA : Springer US, 2006. — P. 239–260. — ISBN: 978-0-387-23316-1.
143. 2D assembly of non-interacting magnetic iron oxide nanoparticles via "click" chemistry / Delphine Toulemon, Benoit P. Pichon, Xavier Cattoen et al. // Chem. Commun. — 2011. — Vol. 47. — P. 11954–11956. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1039/C1CC14661K>.
144. Tsebers A. O. Simultaneous rotational diffusion of the magnetic moment and the solid matrix of a single-domain ferromagnetic particle // Magnetohydrodynamics. — 1975. — Vol. 11, no. 3. — P. 273–278. — Access mode: <http://mhd.sal.lv/contents/1975/3/MG.11.3.2.R.html>.
145. Mamiya Hiroaki, Jeyadevan Balachandran. Hyperthermic effects of dissi-

- pative structures of magnetic nanoparticles in large alternating magnetic fields // *Scientific Reports*. — 2011. — Nov. — Vol. 1. — P. 157 EP. — Article. Access mode: <http://dx.doi.org/10.1038/srep00157>.
146. Usadel K. D., Usadel C. Dynamics of magnetic single domain particles embedded in a viscous liquid // *Journal of Applied Physics*. — 2015. — Vol. 118, no. 23. — P. 234303. — <http://dx.doi.org/10.1063/1.4937919>.
147. Usov N.A., Liubimov B. Ya. Magnetic nanoparticle motion in external magnetic field // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2015. — Vol. 385. — P. 339 – 346. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885315002565>.
148. Cīmurs J., Cēbers A. Dynamics of anisotropic superparamagnetic particles in a precessing magnetic field // *Phys. Rev. E*. — 2013. — Jun. — Vol. 87. — P. 062318. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.87.062318>.
149. Mehta Rabindra D. Sports Ball Aerodynamics // *Sport Aerodynamics* / Ed. by Helge Norstrud. — Vienna : Springer Vienna, 2008. — P. 229–331. — ISBN: 978-3-211-89297-8. — Access mode: [https://doi.org/10.1007/978-3-211-89297-8\\_12](https://doi.org/10.1007/978-3-211-89297-8_12).
150. Cross R. *Physics of Baseball & Softball*. — Springer, New York, 2011. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4419-8113-4>.
151. Seifert Jost. A review of the Magnus effect in aeronautics // *Progress in Aerospace Sciences*. — 2012. — Vol. 55, no. Supplement C. — P. 17 – 45. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0376042112000656>.
152. Forbes John C. Curveballs in protoplanetary discs – the effect of the Magnus force on planet formation // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. — 2015. — Vol. 453, no. 2. — P. 1779–1792. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/stv1712>.
153. Yamaguchi Masaki S., Kimura Shigeo S. Effect of lift force on the aerodynamics of dust grains in the protoplanetary disk // *Earth, Planets and Space*. — 2014. — Oct. — Vol. 66, no. 1. — P. 132. — Access mode: <https://doi.org/10.1186/1880-5981-66-132>.
154. Thompson L. R., Stamp P. C. E. Effective Magnus Force on a Magnetic Vortex // *Quantum Magnetism* / Ed. by Bernard Barbara, Yosef Imry, G. Sawatzky,

- P. C. E. Stamp. — Dordrecht : Springer Netherlands, 2008. — P. 175–192. — ISBN: 978-1-4020-8512-3. — Access mode: [https://doi.org/10.1007/978-1-4020-8512-3\\_13](https://doi.org/10.1007/978-1-4020-8512-3_13).
155. Sonin E.B. Dynamics of Quantised Vortices in Superfluids. — Cambridge University Press, 2016. — ISBN: 9781107006683.
156. Borg Karl I., Söderholm Lars H., Essén Hanno. Force on a spinning sphere moving in a rarefied gas // *Physics of Fluids*. — 2003. — Vol. 15, no. 3. — P. 736–741. — <https://doi.org/10.1063/1.1541026>.
157. Inverse Magnus effect on a rotating sphere: when and why / Jooha Kim, Haecheon Choi, Hyungmin Park, Jung Yul Yoo // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2014. — Vol. 754.
158. Rubinow S. I., Keller Joseph B. The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1961. — Vol. 11, no. 3. — P. 447–459.
159. Progress in applications of magnetic nanoparticles in biomedicine / Q A Pankhurst, N T K Thanh, S K Jones, J Dobson // *Journal of Physics D: Applied Physics*. — 2009. — Vol. 42, no. 22. — P. 224001. — Access mode: <http://stacks.iop.org/0022-3727/42/i=22/a=224001>.
160. Magnetic Iron Oxide Nanoparticles: Synthesis, Stabilization, Vectorization, Physicochemical Characterizations, and Biological Applications / Sophie Laurent, Delphine Forge, Marc Port et al. // *Chemical Reviews*. — 2008. — Vol. 108, no. 6. — P. 2064–2110. — PMID: 18543879. <http://dx.doi.org/10.1021/cr068445e>.
161. S. I. Denisov B. O. Pedchenko M. O. Pavlyuk. Unidirectional transport of ferromagnetic particles in a viscous liquid induced by the Magnus force // *J. Nano- Electron. Phys.* — 2016. — Vol. 8, no. 4. — P. 04087.
162. Skomski R. Simple Models of Magnetism. — New York : Oxford University Press, 2008. — ISBN: 978-0-19-857075-2.
163. P. Guimarães Alberto. Principles of Nanomagnetism. — 2nd ed. edition. — 2017. — 01.
164. Kim Jinhee, Sosso Andrea, Clark Alan F. Dynamics of overdamped Josephson junctions driven by a square-wave pulse // *Journal of Applied Physics*. — 1998. — Vol. 83, no. 6. — P. 3225–3232. —

<https://doi.org/10.1063/1.367089>.

165. Isohätälä Jukka, Alekseev Kirill N. Stability properties of periodically driven overdamped pendula and their implications to physics of semiconductor superlattices and Josephson junctions // *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*. — 2010. — Vol. 20, no. 2. — P. 023116. — <https://doi.org/10.1063/1.3382087>.
166. A.P. Prudnikov, Yu.A. Brychkov, O.I. Marichev. *Integrals and Series*. — Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1986. — Vol. 1: Elementary Functions.
167. W. T. Coffey Yu. P. Kalmykov, Waldron J. T. *The Langevin Equation: With Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry and Electrical Engineering*. — 2nd ed. edition. — 2004. — 09.
168. Gardiner C.W. *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences*. Transl. from the English. — 3rd ed. edition. — Berlin : Springer-Verlag, 2004. — ISBN: 978-3-540-20882-2.
169. Kampen N.G.V. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. — 3rd ed. edition. — 2007. — 01.
170. Mardia K. V. *Statistics of Directional Data*. — London : Academic Press, 1972. — ISBN: 978-0-12-471150-1.
171. Jammalamadaka S. R., SenGupta A. *Topics in circular statistics*. — Singapore : World ScientificPub Co Inc., 2001. — 01. — Vol. 5. — ISBN: 978-981-02-3778-3.
172. D. S. Viswanath T.K. Ghosh D. H. L. Prasad N. V. K. Dutt, Rani K. Y. *Viscosity of liquid*. — Dordrecht : Springer, 2007. — 01. — ISBN: 978-1-4020-5482-2.