

УДК 004.942:537.636

<https://doi.org/10.21869/2223-1528-2026-16-1-57-67>



Моделирование феррожидкости, наполненной смесью сферических и эллипсоидальных магнитных частиц

П. В. Меленев¹✉

¹Институт механики сплошных сред Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук
ул. А. Королёва, д. 1, г. Пермь 614013, Российская Федерация

✉ e-mail: melenev@icmm.ru

Резюме

Цель – разработать модель феррожидкости, магнитное наполнение которой состоит из наночастиц двух форм: сферы и вытянутого эллипсоида вращения; на основе предложенной модели исследовать магнитные свойства феррожидкости.

Методы. Моделирование проводится в рамках подхода крупнозернистой молекулярной динамики. Феррожидкость представлена в виде совокупности частиц двух форм: 1) сферической, для имитации которой используется потенциал Леннарда – Джонса и 2) вытянутого эллипсоида вращения, описываемого анизотропным потенциалом Гая – Берне. Для моделирования стерического взаимодействия разнотипных частиц вводится смешанный потенциал. С магнитной точки зрения вытянутая частица рассматривается как цепочка точечных диполей, ориентированных вдоль большой оси эллипсоида. Тепловая флуктуация феррожидкости имитируется включением в систему термостата Ланжевена.

Результаты. Проведены серии тестовых расчётов в системах с разными соотношениями частиц двух типов, но одинаковой общей объёмной концентрацией магнитного наполнителя. Получены кривые квазистатического намагничивания образцов, которые показали, в частности, рост магнитной восприимчивости феррожидкости с включением в неё эллипсоидальных частиц. Кроме того, проведена оценка образования частицами объединений в зависимости от состава системы.

Заключение. Предложена модель феррожидкости, наполненной частицами сферической и вытянутой эллипсоидальной формами, для имитации стерических взаимодействий которых использованы соответствующие пространственные потенциалы. Тестовые расчёты на образцах с разным соотношением частиц двух типов показали работоспособность и физическую адекватность разработанной модели. Дальнейшее развитие предложенного подхода связано в первую очередь с добавлением возможности описания полидисперсности анизотропных частиц.

Ключевые слова: магнитная жидкость; магнитные наночастицы; молекулярная динамика.

Конфликт интересов: Автор декларирует отсутствие явных и потенциальных конфликтов интересов, связанных с публикацией настоящей статьи.

Финансирование: Исследование проведено в рамках выполнения государственного задания по теме номер 126020916888-9.

Для цитирования: Меленев П. В. Моделирование феррожидкости, наполненной смесью сферических и эллипсоидальных магнитных частиц // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. 2026. Т. 16, № 1. С. 57–67. <https://doi.org/10.21869/2223-1528-2026-16-1-57-67>.

Поступила в редакцию 17.12.2025

Подписана в печать 24.02.2026

Опубликована 25.03.2026

Simulation of the ferrofluid filled with a mixture of spherical and ellipsoidal magnetic particles

Petr V. Melenev¹ ✉

¹Institute of Continuous Media Mechanics of Perm Federal Research Center of Ural branch of Russian Academy of Science

1 A. Korolev Str., Perm 614013, Russian Federation

✉ e-mail: melenev@icmm.ru

Abstract

The purpose – to develop a model of a ferrofluid whose magnetic filler consists of nanoparticles of two shapes: spheres and prolate spheroids, which must be taken into account when describing magnetic and steric interactions; based on the proposed model, to investigate the magnetic properties of the ferrofluid.

Methods. The simulation is performed within the framework of the coarse-grained molecular dynamics approach. The ferrofluid is represented as a collection of particles of two shapes: 1) spherical, simulated using the Lennard-Jones potential, and 2) prolate ellipsoids of revolution, described by the anisotropic Gay-Berne potential. A mixed potential is introduced to model steric interactions between particles of different types. The magnetic state of an elongated particle is simulated by a chain of point dipoles oriented along the major axis of the spheroid. Thermal fluctuations in the ferrofluid are simulated by incorporating a Langevin thermostat into the system.

Results. A series of test calculations were performed on ferrofluid samples with different ratios of the two particle types but the same total volume concentration of the magnetic filler. Quasi-static magnetization curves were obtained for the samples, which showed, in particular, an increase in the magnetic susceptibility of the ferrofluid upon the inclusion of ellipsoidal particles.

Conclusion. A model of a ferrofluid filled with spherical and prolate ellipsoidal particles has been proposed, with corresponding spatial potentials used to simulate their steric interactions. Test calculations on samples with different ratios of the two particle types demonstrated the functionality and physical adequacy of the developed model. The further development of the proposed approach is primarily associated with adding the capability to describe the polydispersity of anisotropic particles.

Keyword: ferrofluids; magnetic nanoparticles; molecular dynamics.

Conflict of interest: The Author declare the absence of obvious and potential conflicts of interest related to the publication of this article.

Funding: The study was fulfilled in a framework of realization of program of Russian Federal Agency for Scientific Organization, theme number 126020916888-9.

For citation: Melenev P. V. Simulation of the ferrofluid filled with a mixture of spherical and ellipsoidal magnetic particles. *Izvestiya Yugo-Zapadnogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Tekhnika i tekhnologii = Proceedings of the Southwest State University. Series: Engineering and Technologies*. 2026;16(1):57-67. (In Russ.) <https://doi.org/10.21869/2223-1528-2026-16-1-57-67>.

Received 17.12.2025

Accepted 24.02.2025

Published 25.03.2026

Введение

Феррожидкости (ФЖ) – стабильные коллоиды магнитных наночастиц, диспергированных в несущей жидкости, – обладают уникальным сочетанием текучести и управляемого магнитного отклика [1]. Эти свойства лежат в основе многочисленных

приложений ФЖ – от систем охлаждения и инженерных уплотнений [2] до биомедицинских технологий, таких как магнитная гипертермия [3] и целевая доставка лекарств [4]. Макроскопические свойства феррожидкостей определяются микроскопическим поведением дисперсной фазы,

на которое решающее влияние оказывает форма наночастиц, определяющая, помимо прочего, магнитные и стерические взаимодействия между ними [5].

Исторически большинство теоретических моделей (например, изложенные в классической монографии [1]) опирались на предположение о сферичности частиц. Это допущение существенно упрощает аналитический расчёт, но не отражает всего разнообразия реальных систем. Более того, развитие методов химического синтеза позволило получать магнитные наночастицы контролируемой несферической формы: стержни, пластины [6], кубы [7] и др. Экспериментальное наблюдение динамики наноразмерных объектов и формирования полевых структур *in situ* сопряжено с техническими сложностями. В силу особого влияния, которое имеет внутренняя структура феррожидкости и её неоднородность на микроскопическом уровне (особенно в случае частиц анизотропной формы), на поведение ФЖ большую роль при теоретическом исследовании магнитных коллоидов играют дискретные методы компьютерного моделирования – Монте-Карло (описывающие поведения как в плоском [8], так и в объёмном [9] случаях), броуновской динамики частиц [10] и молекулярной динамики (МД). Последний в силу своей гибкости применяется, в частности, и для исследования аспектов поведения магнитных коллоидов с частицами наполнителя разной формы – диффузионных свойств стержнеобразных частиц Януса [11], кластерообразования в системах из магнитных «сфер» и «кубов» [12], влияние на плотность коллоида формы частиц (на примере сфер, стержней и плоских дисков) [13], оптических свойств феррожидкости со стержнеобразными частицами [14], влияние полидисперсности плоских частиц на внутреннюю структуру системы [15], зависимость теплопроводности феррожидкости от формы частиц [16] и др. Для описания поведения ФЖ с concentra-

цией наполнителя, не позволяющей игнорировать межчастичное взаимодействие, именно МД представляется наиболее гибким и в то же время эффективным с вычислительной точки зрения подходом к моделированию. При этом в большинстве работ, использующих МД для исследования систем, включающих вытянутые частицы, последние представляются как жёсткие сборки объектов сферической формы, что существенно повышает затраты на вычисления в случае моделирования большого числа анизотропных частиц. Другим вариантом учёта формы несферических объектов является применение анизотропных потенциалов для имитации стерических взаимодействий. В частности, для случая эллипсоидов вращения можно использовать двухчастичный потенциал Гая – Берне, т. е. обладающее явной зависимостью от взаимной ориентации частиц и вектора, соединяющего их центры, обобщение потенциала Леннарда – Джонса, который, в свою очередь, часто применяется для имитации стерических взаимодействий сферических объектов. Однако ни один из упомянутых выше потенциалов не может описать взаимодействие сферической и эллипсоидальной частицы, возникающее в системах с наполнением из частиц разной формы. В данной работе для решения этой проблемы применён смешанный потенциал, представляющий собой модификацию зависимости Гая – Берне. Кроме того, в работе магнитное состояние однородно намагниченной удлинённой эллипсоидальной частицы представляется в виде цепочки точечных диполей, расположенных вдоль её большой оси. Это позволяет учесть особенности магнитного поведения подобной частицы, используя при этом хорошо разработанный функционал расчёта взаимодействия точечных диполей.

Материалы и методы

Описание модели феррожидкости

Феррожидкость рассматривается как система взаимодействующих частиц двух

типов: 1) сферических с диаметром $d_p = 2r_p$ и 2) имеющих форму вытянутого эллипсоида вращения с полуосями $a_p < b_p$. Стерические взаимодействия между частицами первого типа описываются на основе потенциала Вика – Чандлера – Андерсена [17] (урезанный вариант Леннарда – Джонса, включающий лишь часть, отвечающую за отталкивание частиц):

$$U_{ij}^{WCA} = \begin{cases} 4\epsilon^{WCA} \left[\left(\sigma^{WCA}/r_{ij} \right)^{-12} - \left(\sigma^{WCA}/r_{ij} \right)^{-6} + 0,25 \right], & r_{ij} \leq d_p; \\ 0, & r_{ij} > d_p, \end{cases} \quad (1)$$

где i, j – номера сферических частиц; r_{ij} – расстояние между ними; ϵ^{WCA} – энергетический параметр потенциала, $\sigma^{WCA} = 2^{-1/6} d_p$ – пространственный параметр потенциала. Для имитации отталкивания при взаимопроникновении эллипсоидальных частиц применяется ограниченный потенциал Гая – Берне [18]:

$$U_{kl}^{GB} = \begin{cases} 4\epsilon^{GB} [\tilde{r}_{kl}^{-12} - \tilde{r}_{kl}^{-6}], & \partial U_{kl}^{GB} / \partial r_{kl} \leq 0; \\ 0, & \partial U_{kl}^{GB} / \partial r_{kl} > 0, \end{cases} \quad (2)$$

где k, l – номера эллипсоидальных частиц; r_{kl} – расстояние между ними; ϵ^{GB} – энергетический параметр потенциала Гая – Берне, который в данной модели был постоянной величиной и не зависел от взаимной ориентации частиц; $\tilde{r}_{kl}$ – приведённый межчастичный радиус;

$$\tilde{r}_{kl} = \frac{r_{kl} - \sigma^{GB}(\hat{r}_{kl}, e_k, e_l) + \sigma_0}{\sigma_0}. \quad (3)$$

В формуле (3) единичный вектор $\hat{r}_{kl} = r_{kl}/r_{kl}$ указывает направление межцентрового вектора частиц, e_k, e_l – орты больших осей частиц; σ_0 – постоянный пространственный параметр потенциала

Гая – Берне. Функция σ^{GB} задаёт асимметрию взаимодействия по отношению к ориентации частиц друг относительно друга:

$$\sigma^{GB}(\hat{r}_{kl}, e_k, e_l) = \sigma_0 \left\{ 1 - \frac{1}{2} \chi \left[\frac{(\hat{r}_{kl} \cdot e_k + \hat{r}_{kl} \cdot e_l)^2}{1 + \chi e_k \cdot e_l} + \frac{(\hat{r}_{kl} \cdot e_k - \hat{r}_{kl} \cdot e_l)^2}{1 - \chi e_k \cdot e_l} \right] \right\}^{-1/2}, \quad (4)$$

где параметр $\chi = (\kappa^2 - 1)/(\kappa^2 + 1)$; $\kappa = a_p/b_p$ – отношение осей эллипсоида, описывающего форму частиц. На данный момент рассматриваются только вытянутые частицы, т. е. $\kappa < 1$.

Для описания стерических взаимодействий между частицами разной формы вводится смешанный потенциал, учитывающий ориентацию произвольной эллипсоидальной частицы k относительно сферической i :

$$U_{ik}^{ES} = \begin{cases} 4\epsilon^{GB} [\tilde{s}_{ik}^{-12} - \tilde{s}_{ik}^{-6}], & \partial U_{ik}^{ES} / \partial r_{ik} \leq 0; \\ 0, & \partial U_{ik}^{ES} / \partial r_{ik} > 0; \end{cases} \quad (5)$$

$$\tilde{s}_{ik} = \frac{r_{ik} - \sigma^{ES}(\hat{r}_{ik}, e_k) + \sigma_0}{\sigma_0}; \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \sigma^{ES}(\hat{r}_{ik}, e_k) &= r_p + \left[\frac{(\hat{r}_{ik} \cdot e_k)^2}{b_p} + \frac{1 - (\hat{r}_{ik} \cdot e_k)^2}{a_p} \right]^{-1/2} = \\ &= r_p + \frac{\sigma_0 - r_p}{\sqrt{1 - \chi}} \left[\frac{(\hat{r}_{ik} \cdot e_k)^2}{1 + \chi} + \frac{1 - (\hat{r}_{ik} \cdot e_k)^2}{1 - \chi} \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Предполагается, что все частицы в системе имеют однодоменную магнитную структуру, и величина магнитного момента любой частицы не меняется, как и его ориентация относительно самой частицы, т. е. рассматривается только броуновский механизм магнитной релаксации. У эллипсоидальных частиц момент всегда направлен вдоль осей вращения, характеризуемых направляющими векторами e_k . В дальнейшем для общности орты магнитных моментов сферических

частиц также будут обозначаться через e_i . Величины моментов сферических и эллипсоидальных частиц пропорциональны их объёмам:

$$\mu_S = \frac{4}{3}\pi r_p^3 J_{sat}; \quad \mu_E = \frac{4}{3}\pi a_p^2 b_p J_{sat}, \quad (8)$$

где J_{sat} – намагничённость насыщения вещества частиц.

Для учёта магнитного взаимодействия между сферическими частицами используется диполь-дипольное приближение для моментов частиц, расположенных в их центрах:

$$U^{magn}(\mu_i, \mu_j) = U^{dd}(\mu_i, \mu_j, r_{ij}) = \frac{\mu_0 \mu_S^2 (e_i \cdot e_j) - 3(e_i \cdot r_{ij})(e_j \cdot r_{ij})}{4\pi r_{ij}^3}, \quad (9)$$

где μ_0 – магнитная проницаемость вакуума. При этом для более точного учёта магнитного состояния эллипсоидальных частиц при расчётах магнитный момент такой частицы (скажем, с номером k) заменяется на систему точечных диполей $\mu_k^{(\alpha)}$ (в дальнейшем именуемых субмоментами), центры которых равномерно распределены на оси вращения эллипсоида, а направления параллельны этой оси вращения и общему магнитному моменту частицы: $\mu_k^{(\alpha)} = \mu_k^{(\alpha)} e_k$. При этом величина субмомента $\mu_k^{(\alpha)} = V_k^{(\alpha)} J_{sat}$ определяется объёмом $V_k^{(\alpha)}$ сегмента эллипсоида, ограниченного плоскостями, параллельными главной плоскости эллипсоида, проходящими через середину отрезков, соединяющих центр данного субмомента с соседними (т. е. $\alpha - 1$ и/или $\alpha + 1$) либо крайнюю точку эллипсоида, если α является крайним субмоментом:

$$V_k^{(\alpha)} = \pi a_p^2 \left\{ l_E - \frac{1}{3b_p^2} \left[\left(z_\alpha + \frac{1}{2} l_E \right)^3 - \left(z_\alpha - \frac{1}{2} l_E \right)^3 \right] \right\}, \quad \alpha = 1 \dots (n_{seg} - 1), \quad (10)$$

где l_E – расстояние между центрами субмоментов (в расчётах он был равен

$2b_p/g_{rem}$, g_{rem} равен целой части отношения b_p/a_p); z_α – координата центра субмомента α на оси координат, совпадающей с осью вращения эллипсоида, с началом отсчёта в его центре и направленной по магнитному моменту частицы; n_{seg} – число сегментов эллипсоида (и субмоментов частицы). После этого магнитное взаимодействие магнитного момента эллипсоидальной частицы k с другим магнитным моментом системы μ_m описывается как сумма диполь-дипольных взаимодействий с субмоментами $\mu_k^{(\alpha)}$:

$$U^{magn}(\mu_m, \mu_k) = \sum_{\alpha=1}^{n_{seg}} U^{dd}(\mu_m, \mu_k^{(\alpha)}, r_{mk}^{(\alpha)}), \quad (11)$$

где $r_{mk}^{(\alpha)}$ – вектор, соединяющий центры μ_m и $\mu_k^{(\alpha)}$. В случае если μ_m – это момент сферической частицы, $r_{mk}^{(\alpha)} = r_{mk} + z_{(\alpha)} e_k$. Если же $\mu_m = \mu_l^{(\beta)}$ – это субмомент другой эллипсоидальной частицы с номером l , то $r_{mk}^{(\alpha)} = r_{lk}^{(\beta\alpha)} = r_{lk} - z_\beta e_l + z_\alpha e_k$. Таким образом, для расчёта магнитного взаимодействия по предложенной мультипольной схеме не требуется дополнительных вычислений межчастичных расстояний.

Присутствие в системе внешнего однородного магнитного поля H учитывается добавлением слагаемого Зеемана к общей энергии системы:

$$U^H(\mu_i) = -\mu_0 \mu_i \cdot H, \quad U^H(\mu_k) = \sum_{\alpha=1}^{n_{seg}} U^H(\mu_k^{(\alpha)}). \quad (12)$$

Тепловое воздействие со стороны среды-носителя на магнитные частицы учитывается введением в систему термостата Ланжевена с постоянной температурой T [19].

Состояние системы выявляется в ходе численного интегрирования уравнений

динамики поступательного и вращательного движения частиц. Частицы считались однородными, поэтому их массы и тензоры инерции пропорциональны их объемам. Тензоры инерции вытянутых частиц заданы с учётом анизотропии формы.

Идентификация параметров модели

В качестве реального прототипа моделируемой системы рассматривается феррожидкость, синтезированная в Институте технической химии ПФИЦ УрО РАН, с магнитным наполнением, состоящим из двух типов частиц феррита меди: изометрических с характерным размером 20 нм (они имитируются сферическими частицами) и стержнеобразными с характерной длиной порядка 60 нм и толщиной около 15 нм (моделируются удлинёнными эллипсоидами с соотношением осей равным 4). К сожалению, на данный момент не проведено детального экспериментального исследования этого магнитного материала, поэтому необходимые для расчётов данные были взяты из работ других коллективов, изучавших аналогичные наночастицы CuFe_2O_4 . Таким образом была сделана оценка для намагничённости насыщения (на основе обобщения информации из работ [20–22]) и плотности вещества частиц [23]: $J_{\text{sat}} = 2,16 \cdot 10^5 \text{ А/м}$; $\rho_p = 5,4 \times 10^3 \text{ кг/м}^3$. Рассматривалось поведение системы при комнатной температуре, соответственно, характерная энергия тепловых флуктуаций в системе $k_B T \approx 4,14 \times 10^{-11} \text{ Дж}$.

Результаты и их обсуждение

Была рассмотрена серия «образцов» модельной феррожидкости с одинаковой объёмной долей магнитного наполнителя: $\phi = (N_S V_S + N_E V_E) / V_{\text{box}}$, где N_S, N_E – количества сферических и эллипсоидальных частиц, а V_{box} – общий объём расчётной области. Доли вытянутых частиц в системе характеризуются величиной $c_E = (N_E V_E) / (V_{\text{box}} \phi)$. В данной работе рассмотрены результаты тестовых рас-

чётов для «образцов» с $\phi = 0,01$ и $c_E = 0; 0,1; 0,25; 0,5; 1,0$. Представленные данные получены усреднением по 10 реализациям систем каждого типа. Расчёты проводились с применением программного пакета крупно-зернистой молекулярной динамики ESPResSo [24].

Каждый численный эксперимент по расчёту кривой намагничивания начинался в системе со случайным распределением центров частиц и направлений их моментов (ориентаций больших осей эллипсоидальных частиц). Далее системе давалось заданное число расчётных шагов на релаксацию при отсутствии внешнего магнитного поля, но при включённом термостате Ланжевена. Полученное состояние считалось исходным. Далее включалось однородное магнитное поле H неизменного направления (в нашем случае совпадающим с осью Oz лабораторной системы координат), амплитуда которого увеличивалась ступенчатым образом с фиксированным шагом до заданной максимальной величины H_{max} . При каждом изменении H системе давалось время на релаксацию, после чего определялся её общий магнитный момент $M = \sum \mu_m$ (здесь суммирование осуществляется по всем моментам системы), а также его нормированная проекция на направление внешнего магнитного поля: $m_z = M \cdot e_z / M_{\text{sat}}$, где e_z – орт оси Oz , а M_{sat} – величина магнитного момента системы в насыщении.

Зависимость относительной проекции магнитного момента системы m_z от величины приложенного магнитного поля представлена на рисунке 1. Величина поля указана в единицах безразмерного параметра Ланжевена для сферических частиц $\xi_S = \mu_0 \mu_S H / (k_B T)$. Дополнительно для сравнения на рисунке показана (чёрной непрерывной кривой) зависимость намагничённости монодисперсного ансамбля невзаимодействующих суперпарамагнитных частиц, описываемая функцией Ланжевена: $L(\xi_S) = \text{cth}(\xi_S) - \xi_S^{-1}$. Видно, что увеличение количества вытянутых частиц

приводит к росту намагниченности, что можно объяснить большей величиной магнитных моментов у частиц этого типа,

которая играет более важную роль в условиях невысокой магнитной концентрации в системе.

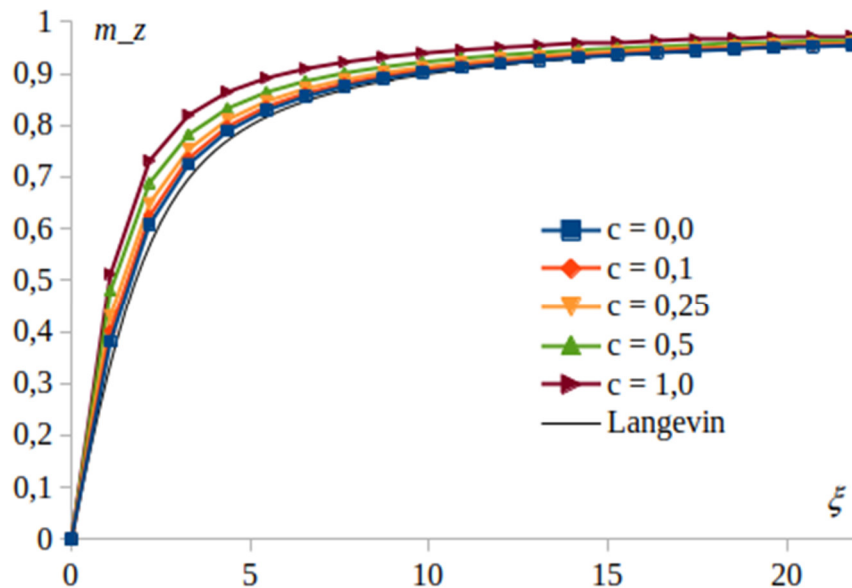


Рис. 1. Зависимость проекции нормированного магнитного момента образца на направление внешнего поля от его величины (в единицах параметра Ланжевена для сферических частиц). Представлены результаты для систем с долей эллипсоидальных частиц $c_E = 0; 0,1; 0,25; 0,5; 1,0$, а также зависимость Ланжевена для ансамбля невзаимодействующих сферических частиц (чёрная линия без знаков)

Fig. 1. The dependence of the field projection of normalized sample magnetic moment on the external field strength (expressed in Langevin parameter units for spherical particles). There are presented results for the systems with portion of a ellipsoidal particles equals $c_E = 0; 0,1; 0,25; 0,5; 1,0$ and Langevin dependence for an ensemble of non-interacting spherical particles (black continues line)

Помимо измерения общего магнитного отклика системы, исследовалось образование в ней магнитных агрегатов. Для этого в заданный момент расчёта для каждой частицы определялось число ближайших соседей, которыми считались те, чьи центры удалены от центра данной частицы: 1) для случая пары сферических частиц – не более чем на $2,5r_p$; 2) для случая пары эллипсоидальных частиц – не более чем $2,2b_p$; 3) для пары разнотипных частиц – не более чем на $1,2(b_p + r_p)$. Далее подсчитывалось число объединений A_k из заданного числа частиц k , а также доля частиц, участвующих в соответствующих объединениях: $a_k = k A_k / (N_S + N_E)$. Параллельно рассчитывалось среднее рас-

стояние между частицами одного объединения $\langle r \rangle_k$. Расчёты показали, что в рассматриваемых вариантах системы практически отсутствуют объединения (определяемые по описанным выше критериям), включающие 4 и более частицы, а величина A_3 не превышала 15 ни в одной из полученных оценок.

На рисунке 2 приведены зависимости от доли эллипсоидальных частиц c_E относительного числа частиц, задействованных в парах, a_2 (левая шкала значений и чёрные линии) в исходной конфигурации (штриховая линия и круги) и после включения $H = H_{\max}$ (сплошная линия и квадраты), а также величины $\langle r \rangle_2 / d_p$ (правая шкала значений и серые линии) в те же моменты расчёта.

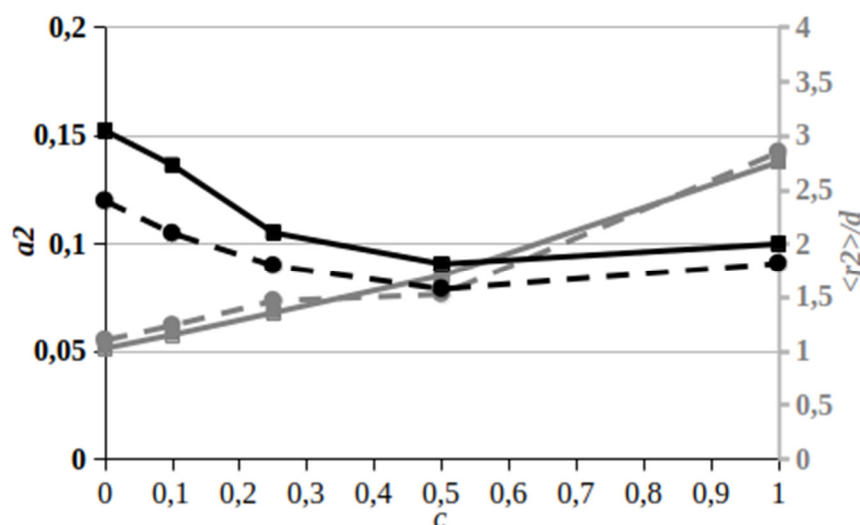


Рис. 2. Относительное число частиц, задействованных в парах a_2 (левая шкала значений и чёрные линии) и величина среднего межцентрового расстояния в парах $\langle r \rangle_2/d_p$ (правая шкала значений и серые линии) в зависимости от доли эллипсоидальных частиц c_E . Представлены результаты для исходного состояния системы (штриховые линии и круглые символы), а также при максимальном приложенном поле (сплошные линии и квадратные символы)

Fig. 2. Dependence of the relative number of particles involved in pairs a_2 (left value scale and black lines) and the mean center-to-center distance in pairs $\langle r \rangle_2/d_p$ (right value scale and gray lines) on the fraction of ellipsoidal particles in the system c_E . Results are shown for the initial state of the system (dashed lines and circular symbols) and for the maximum applied field (solid lines and square symbols)

Как и можно было ожидать, внешнее поле стимулирует формирование объединений частиц. При этом в системе сферических частиц пары образуются легче, чем в смешанных ансамблях, что, по-видимому, связано с более высокой подвижностью изотропных частиц. Небольшой рост a_2 при переходе к $c_E = 1,0$, возможно, объясняется тем, что в других случаях сферические частицы формируют пары с эллипсоидальными и тем самым препятствуют их перемещению в сторону более удалённых (в силу меньшего количества) и менее подвижных (в силу больших размера и массы) по сравнению со сферическими эллипсоидальными частиц. Рост межчастичного расстояния в парах в поле указывает на увеличение количества пар с участием эллипсоидальных частиц.

Выводы

На основе подхода крупнозернистой молекулярной динамики (КЗМД) разрабо-

тана модель магнитной жидкости, наполненной смесью частиц сферической и вытянутой эллипсоидальной формы. Стерические взаимодействия между частицами задаются потенциалами, зависящими лишь от расстояния между центрами и ориентации частиц, что с вычислительной точки зрения представляется более предпочтительным вариантом по сравнению с многочастичным описанием анизотропных частиц. При этом магнитное взаимодействие удлинённых частиц описывается на основе мультипольного подхода, позволяющего учесть распределение намагниченности внутри этих частиц, используя хорошо разработанный и эффективный функционал расчёта диполь-дипольных взаимодействий.

Проведена серия тестовых расчётов для систем с заданной общей концентрацией магнитного наполнителя $\phi = 0,01$ и разным соотношением частиц двух типов с более массивными эллипсоидальными частицами. Расчёт квазистатических кривых намагничивания показал усиление

намагниченности с ростом доли эллипсоидальных частиц. Оценка числа объединений частиц в моделируемых ансамблях выявила почти полное отсутствие кластеров из четырех и более частиц и более высокую способность сферических частиц образовывать пары. Отметим, что приведенные результаты получены для варианта системы с невысокой объемной концентрацией магнитного наполнителя, не позволяющей в полной мере оценить роль межчастичного взаимодействия в поведении моделируемой феррожидкости.

Дальнейшее развитие предложенного подхода связано, прежде всего, с добавлением возможности учесть полидисперс-

ность магнитных наночастиц, практически всегда присутствующую в реальных феррожидкостях и существенно влияющую на магнитный отклик материалов. Для этого необходимо будет разработать смешанные потенциалы стерических взаимодействий эллипсоидальных частиц разных размеров. Другим многообещающим направлением, существенно расширяющим круг применения модели, было бы включение в расчёт гидродинамических взаимодействий частиц со средоносителем и между собой. Помощь в решении этой задачи может оказать совместное применение методов КЗМД и решёточных уравнений Больцмана.

Список литературы

1. Rosensweig R. E. *Ferrohydrodynamics*. New York: Dover Publications, 2013. 368 p.
2. Leakage-free rotating seal systems with magnetic nanofluids and magnetic composite fluids designed for various applications / T. Borbáth, D. Bica, I. Potencz, I. Borbáth, T. Boros, L. Vékás // *International Journal of Fluid Machinery and Systems*. 2011. Vol. 4, no. 1. P. 67–75.
3. Odenbach S. Recent progress in magnetic fluid research // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2004. Vol. 16, no. 32. P. R1135.
4. 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.
5. Odenbach S. *Colloid magnetic fluids*. Berlin; Heidelberg: Springer, 2009. 763 p.
6. Lisjak D., Mertelj A. Anisotropic magnetic nanoparticles: A review of their properties, syntheses and potential applications // *Progress in Materials Science*. 2018. Vol. 95. P. 286–328.
7. Water-soluble Iron oxide nanocubes with high values of specific absorption rate for cancer cell hyperthermia treatment / P. Guardia, R. Di Corato, L. Lartigue, C. Wilhelm, A. Espinosa, M. Garcia-Hernandez [et al.] // *ACS Nano*. 2012. Vol. 6, no. 4. P. 3080–3091.
8. Aoshima M., Satoh A. Two-dimensional Monte Carlo simulations of a colloidal dispersion composed of rod-like ferromagnetic particles in the absence of an applied magnetic field // *Elsevier Journal of Colloid and Interface Science*. 2005. Vol. 293, no. 1. P. 77–87.
9. Satoh A. Monte Carlo simulations on phase change in aggregate structures of ferromagnetic spherocylinder particles // *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2016. Vol. 504. P. 393–399.
10. Sánchez J. H., Rinaldi C. Rotational Brownian dynamics simulations of non-interacting magnetized ellipsoidal particles in d.c. and a.c. magnetic fields // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2009. Vol. 321, no. 19. P. 2985–2991.
11. Kharazmi A., Priezjev N.V. Molecular dynamics simulations of the rotational and translational diffusion of a Janus rod-Shaped nanoparticle // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2017. Vol. 121. P. 7133–7139.
12. Cluster analysis in systems of magnetic spheres and cubes / E. S. Pyanzina, A. V. Gudkova, J. G. Donaldson, S. S. Kantorovich // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2017. Vol. 431. P. 201–204.
13. Abbasi M., Heyhat M. M., Rajabpour A. Study of the effects of particle shape and base fluid type on density of nanofluids using ternary mixture formula: A molecular dynamics simulation // *Journal of Molecular Liquids*. 2020. Vol. 305, no. 8. P. 112831.
14. Ying Y., Xu K., Si G. Simulation and experiment study of a new type magnetic fluid optical grating // *Optik*. 2020. Vol. 202. P. 163561.

15. The influence of polydispersity on the structural properties of the isotropic phase of magnetic nanoplatelets / M. Rosenberg, Ž. Gregorin, P. H. Boštjančič, P. Sebastián, D. Lisjak, S. S. Kantorovich [et al.] // *Journal of Molecular Liquids*. 2020. Vol. 312. P. 113293.
16. The computational study of nanoparticles shape effects on thermal behavior of H₂O-Fe nanofluid: A molecular dynamics approach / Y. Shi, A. Abidi, Y. Khetib, L. Zhang, M. Sharifpur, G. Cheraghian // *Journal of Molecular Liquids*. 2022. Vol. 346. P. 118093.
17. Weeks J. D., Chandler D., Andersen H. C. Role of repulsive forces in determining the equilibrium structure of simple liquids // *Journal of Chemical Physics*. 1971. Vol. 54. P. 5237-5247.
18. Gay J. G., Berne B. J. Modification of the overlap potential to mimic a linear site-site potential // *Journal of Chemical Physics*. 1981. Vol. 74. P. 3316-3319.
19. Grest G. S., Kremer K. Molecular dynamics simulation for polymers in the presence of a heat bath // *Physical Review A*. 1986. Vol. 33, no. 5. P. 3628-3621.
20. The structure of Copper ferrite prepared by five methods and its catalytic activity on lignin oxidative degradation / Z. Ye, Z. Deng, L. Zhang, J. Chen, G. Wang, Z. Wu // *Materials Research Express*. 2020. Vol. 7, no. 3. P. 035007.
21. Younes A., Kherrouba N., Bouamer A. Magnetic, optical, structural and thermal properties of copper ferrite nanostructured synthesized by mechanical alloying // *Micro & Nano Letters*. 2020. Vol. 16, no. 4. P. 251-256.
22. Copper ferrite nanoparticles synthesized using anion-exchange resin: influence of synthesis parameters on the cubic phase stability / S. Saikova, A. Pavlikov, D. Karpov, A. Samoilov, S. Kirik, M. Volochaev [et al.] // *Materials*. 2023. Vol. 16, no. 6. P. 2318.
23. Structural and electrical properties of Copper ferrite (CuFe₂O₄) Nps / V. K. Surashe, V. Mahale, A. P. Keche, R. C. Alange, P. S. Aghav, R. G. Dorik // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. Vol. 1644, no. 1. P. 012025.
24. ESPResSo 4.0 – an extensible software package for simulating soft matter systems / F. Weik, R. Weeber, K. Szuttor, K. Breitsprecher, J. de Graaf, M. Kuron [et al.] // *The European Physical Journal Special Topics*. 2019. Vol. 227. P. 1789-1816.

References

1. Rosensweig R.E. *Ferrohydrodynamics*. New York: Dover Publications; 2013. 368 p.
2. Borbáth T., Bica D., Potencz I., Borbáth I., Boros T., Vékás L. Leakage-free rotating seal systems with magnetic nanofluids and magnetic composite fluids designed for various applications. *International Journal of Fluid Machinery and Systems* 2011;4(1):67-75.
3. Odenbach S. Recent progress in magnetic fluid research. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2004;16(32):R1135.
4. Pankhurst Q.A., Thanh N.T.K., Jones S.K., Dobson J. Progress in applications of magnetic nanoparticles in biomedicine. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2009;42(22):224001.
5. Odenbach S. *Colloid magnetic fluids*. Berlin, Heidelberg: Springer; 2009. 763 p.
6. Lisjak D., Mertelj A. Anisotropic magnetic nanoparticles: A review of their properties, syntheses and potential applications. *Progress in Materials Science*. 2018;(95):286-328.
7. Guardia P., Di Corato R., Lartigue L., Wilhelm C., Espinosa A., Garcia-Hernandez M., et al. Water-soluble Iron oxide nanocubes with high values of specific absorption rate for cancer cell hyperthermia treatment. *ACS Nano*. 2012;6(4):3080-3091.
8. Aoshima M. Satoh A. Two-dimensional Monte Carlo simulations of a colloidal dispersion composed of rod-like ferromagnetic particles in the absence of an applied magnetic field. *Elsevier Journal of Colloid and Interface Science*. 2005;293(1):77-87.
9. Satoh A. Monte Carlo simulations on phase change in aggregate structures of ferromagnetic spherocylinder particles. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2016;504:393-399.
10. Sánchez J.H., Rinaldi C. Rotational Brownian dynamics simulations of non-interacting magnetized ellipsoidal particles in d.c. and a.c. magnetic fields. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2009;321(19):2985-2991.

11. Kharazmi A., Priezjev N.V. Molecular dynamics simulations of the rotational and translational diffusion of a Janus Rod-Shaped nanoparticle. *The Journal of Physical Chemistry B*. 2017;121:7133-7139.
12. Pyanzina E.S., Gudkova A.V., Donaldson J.G., Kantorovich S.S. Cluster analysis in systems of magnetic spheres and cubes. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2017;431:201-204.
13. Abbasi M., Heyhat M.M., Rajabpour A. Study of the effects of particle shape and base fluid type on density of nanofluids using ternary mixture formula: A molecular dynamics simulation. *Journal of Molecular Liquids*. 2020;305(8):112831.
14. Ying Y., Xu K., Si G. Simulation and experiment study of a new type magnetic fluid optical grating. *Optik*. 2020;202:163561.
15. Rosenberg M., Gregorin Ž, Boštjančič P.H., Sebastián P., Lisjak D., Kantorovich S.S., et al. The influence of polydispersity on the structural properties of the isotropic phase of magnetic nanoplatelets. *Journal of Molecular Liquids*. 2020;312:113293.
16. Shi Y., Abidi A., Khetib Y., Zhang L., Sharifpur M., Cheraghian G. The computational study of nanoparticles shape effects on thermal behavior of H₂O-Fe nanofluid: A molecular dynamics approach. *Journal of Molecular Liquids*. 2022;346:118093.
17. Weeks J.D., Chandler D., Andersen H.C. Role of repulsive forces in determining the equilibrium structure of simple liquids. *Journal of Chemical Physics*. 1971;54:5237-5247.
18. Gay J.G., Berne B.J. Modification of the overlap potential to mimic a linear site-site potential. *Journal of Chemical Physics*. 1981;74:3316-3319.
19. Grest G.S., Kremer K. Molecular dynamics simulation for polymers in the presence of a heat bath. *Physical Review A*. 1986;33(5):3628-3621.
20. Ye Z., Deng Z., Zhang L., Chen J., Wang G., Wu Z. The structure of copper ferrite prepared by five methods and its catalytic activity on lignin oxidative degradation. *Materials Research Express*. 2020;7(3):035007.
21. Younes A., Kherrouba N., Bouamer A. Magnetic, optical, structural and thermal properties of copper ferrite nanostructured synthesized by mechanical alloying. *Micro & Nano Letters*. 2020;16(4):251-256.
22. Saikova S., Pavlikov A., Karpov D., Samoilov A., Kirik S., Volochaev M., et al. Copper ferrite nanoparticles synthesized using anion-exchange resin: influence of synthesis parameters on the cubic phase stability. *Materials*. 2023;16(6):2318.
23. Surashe V.K., Mahale V., Kechhe A.P., Alange R.C., Aghav P.S., Dorik R.G. Structural and electrical properties of copper ferrite (CuFe₂O₄) Nps. *Journal of Physics: Conference Series*. 2020;1644(1):012025.
24. Weik F., Weeber R., Szuttor K., Breitsprecher K., de Graaf J., Kuron M., et al. ESPResSo 4.0 – an extensible software package for simulating soft matter systems. *The European Physical Journal Special Topics*. 2019;227:1789-1816.

Информация об авторах / Information about the Authors

Меленев Петр Викторович, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, Институт механики сплошных сред Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук, г. Пермь, Российская Федерация, e-mail: melenev@icmm.ru, ORCID: 0000-0002-8634-4837, Researcher: K-5135-2014

Petr V. Melenev, Candidate of Sciences (Physics and Mathematics), Researcher, Institute of Continuous Media Mechanics of Perm Federal Research Center of Ural branch of Russian Academy of Science, Perm, Russian Federation, e-mail: melenev@icmm.ru, ORCID: 0000-0002-8634-4837, Researcher: K-5135-2014