

УДК 538.955

<https://doi.org/10.21869/2223-1528-2026-16-1-97-113>



Влияние формы на динамические свойства магнитной активной частицы типа «малина»

Т. Д. Беляева^{1✉}, Е. В. Новак²

¹Специализированный учебно-научный центр Уральского федерального университета имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
ул. Данилы Зверева, д. 30, г. Екатеринбург 620137, Российская Федерация

²Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
ул. Ленина, д. 51, г. Екатеринбург 620000, Российская Федерация

✉e-mail: tatiana.mizgireva@urfu.ru

Резюме

Цель. Установление закономерностей влияния геометрической формы (сфера или эллипсоиды с отношением полуосей 1:1:2 и 1:1:3) на динамические характеристики магнитных активных частиц типа «малина», анализ их поступательного и вращательного движения в условиях наличия и отсутствия внешнего магнитного поля, а также при варьировании величины активной силы, приложенной к поверхности частицы.

Методы. Для достижения поставленной цели была разработана математическая модель эллипсоидальной магнитной частицы. Модель представляет собой жесткий каркас из центральной частицы и набора периферических субчастиц, равномерно распределенных по поверхности и внутри объема эллипсоида, что позволяет точно учитывать гидродинамические взаимодействия и анизотропию формы. Компьютерное моделирование выполнялось методом молекулярной динамики в пакете ESPResSo. Коэффициенты вращательного и поступательного трения для эллипсоидов были рассчитаны аналитически. Исследование проведено для широкого спектра значений активной силы и напряженности внешнего магнитного поля.

Результаты. В ходе компьютерных экспериментов было обнаружено, что эллипсоидальные частицы демонстрируют качественно иную динамику по сравнению со сферическими: их траектории становятся более сложными и хаотичными, особенно при увеличении активной силы. Анализ среднеквадратичного смещения показал, что форма частицы влияет на продолжительность баллистического режима и скорость перехода к диффузионному движению. Показано, что внешнее магнитное поле практически не влияет на движение частиц вдоль его направления, однако существенно подавляет подвижность в поперечном направлении, усиливая анизотропию диффузии.

Заключение. Динамика активных магнитных частиц определяется сложным взаимодействием трех ключевых факторов: форма частицы, величина движущей силы и напряженность внешнего магнитного поля. Полученные результаты подчеркивают необходимость комплексного учета этих параметров для предсказания поведения коллоидных систем, что имеет критическое значение для разработки эффективных методов адресной доставки веществ в медицинских и биотехнологических приложениях.

Ключевые слова: магнитные наночастицы; частицы типа «малина»; эллипсоидальные частицы; компьютерное моделирование; молекулярная динамика.

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (тема № FEUZ-2026-0016).

Конфликт интересов: Авторы декларируют отсутствие явных и потенциальных конфликтов интересов, связанных с публикацией настоящей статьи.

Для цитирования: Беляева Т. Д., Новак Е. В. Влияние формы на динамические свойства магнитной активной частицы типа «малина» // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. 2026. Т. 16, № 1. С. 97–113. <https://doi.org/10.21869/2223-1528-2026-16-1-97-113>.

Поступила в редакцию 23.01.2026

Подписана в печать 20.02.2026

Опубликована 25.03.2026

The influence of shape on the dynamic properties of a magnetic active particle of the raspberry type

Tatyana D. Belyaeva¹ ✉, Ekaterina V. Novak²

¹ Specialized Educational and Scientific Center of Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin,
30 Danila Zvereva Str., Yekaterinburg 620137, Russian Federation

²Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin
51 Lenina Str., Yekaterinburg 620000, Russian Federation

✉ e-mail: tatiana.mizgireva@urfu.ru

Abstract

Purpose. To investigate the dynamic properties of magnetic active "raspberry"-type particles of different shapes under the influence and in the absence of an external magnetic field.

Methods. A mathematical model of ellipsoidal magnetic "raspberry"-type particles was developed for detailed simulation of translational and rotational processes of magnetic nanoparticles. Computational experiments based on this model were performed using molecular dynamics methods, followed by analysis of the obtained results.

Results. It was found that ellipsoidal particles demonstrate more complex and chaotic motion compared to spherical counterparts, especially with increasing aspect ratios and higher activation forces. The application of an external magnetic field has almost no effect on particle motion along the field direction, but it significantly reduces their velocity in the transverse direction, thus enhancing the anisotropy of motion.

Conclusion. The dynamic properties of active magnetic particles are determined by a complex interrelation between their shape, activation force, and external magnetic field, emphasizing the significance of taking into account these factors when designing colloidal systems for substance transport.

Keywords: magnetic nanoparticles; raspberry particles; ellipsoidal particles; computer simulation; molecular dynamics.

Funding: This work was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme № FEUZ-2026-0016).

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

For citation: Belyaeva T.D., Novak E.V. The influence of shape on the dynamic properties of a magnetic active particle of the raspberry type. *Izvestiya Yugo-Zapadnogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Tekhnika i tekhnologii = Proceedings of the Southwest State University. Series: Engineering and Technologies*. 2026;16(1):97-113. (In Russ.) <https://doi.org/10.21869/2223-1528-2026-16-1-97-113>.

Received 23.01.2026

Accepted 20.02.2026

Published 25.03.2026

Введение

Наша природа богата примерами высокоэффективных способов преобразования разных видов энергии в кинетическую, позволяя живым существам преодолевать ограничения окружающей среды. Примечательно, что бактерии и другие микроорганизмы способны уверенно продвигаться сквозь вязкую жидкость, задей-

ствуя эффективные механизмы энергопреобразования. Современные технологические достижения позволили создать искусственные активные частицы [1], демонстрирующие способность преобразовывать химическую энергию в направленные движения [2]. Важно подчеркнуть, что подобный процесс может запускаться даже локальными температурными колебаниями [3].

Основой концепции активных частиц стали частицы Януса, характеризующиеся поверхностью, состоящей из разнородных зон с отличающимися физико-химическими свойствами [4]. Тем не менее наблюдения показали тенденцию снижения точности ориентации и направления движения таких частиц со временем [5]. Решение этой проблемы состоит во введении постоянного дипольного момента в центральную часть частицы. Благодаря сильному внешнему магнитному полю удастся минимизировать влияние хаотических тепловых колебаний, достигая точного контроля над положением и направлением движения частиц. Такие частицы имеют огромное прикладное значение, например, для точной доставки медикаментов к пораженным участкам тела.

Распределение химического реагента на композитной частице, обладающей однородной структурой, осложняет управляемость процессом движения. Именно поэтому особое внимание привлекают частицы анизотропной формы, среди которых выделяются эллипсоиды. Особенность эллипсоидов заключается в наличии двух возможных вариантов ориентации магнитного момента: вдоль большой или малой оси, в зависимости от природы используемого материала. Такое поведение схоже с изученными ранее магнитными кубами с интегрированными наномоторами [6].

Главная *цель* настоящей работы – проанализировать влияние формы и размера активных магнитных частиц на их динамические свойства. Предметом исследования являются эллипсоидальные частицы двух вариаций, а также сферические частицы, что позволит детально изучить взаимосвязь между формой частиц и особенностями их движения. Особое внимание уделено построению многочастичной модели активной частицы. Проведенные исследования позволяют выявить оп-

тимальные формы частиц для осуществления эффективных транспортировок, представляющих значительный интерес для медицинских и технологических приложений.

Материалы и методы

Описание математической модели

Для моделирования активных частиц необходимо создать физический аналог системы без моделирования химических реакций. В противном случае необходимо будет совмещать слишком разные временные масштабы и масштабы длины, спускаться на атомарный уровень и неминуемо столкнуться с ограничениями на размер системы. В моделировании методом молекулярной динамики на привычном для нас уровне, где единица длины – это несколько нанометров, а атомарные степени свободы усреднены за счет эффективных межчастичных потенциалов, действие наномотора может быть представлено постоянной силой, приложенной вдоль оси движения активной частицы, в сочетании с адекватным выбором коэффициента трения, зависящего от скорости, что приводит к постоянной конечной скорости пловца (активной частицы). Этот подход называется моделью активных броуновских частиц и используется для изучения различных свойств систем активных частиц в моделировании. Данная модель полностью описывает динамику активных коллоидов даже на малых масштабах длины [7]. Для еще более точного описания движения активных частиц и их вращения используется решетчатый метод Больцмана, который обеспечивает изящный способ описания движения частиц типа «малина», т. е. частиц, состоящих из множества более мелких частиц [8]. При адекватном учете всех технических предпосылок для создания модели исследования в работе [9] показывают, что метод решетчатых уравнений Больцмана легко

справляется с моделированием, включающим тысячи пловцов.

В данной работе используется модель эллипсоидальной магнитной частицы типа «малина» для точного моделирования поступательной, а также вращательной диффузии магнитных наночастиц (рис. 1). Каждая наночастица моделировалась как структура из нескольких субчастиц и благодаря своему внешнему виду такие типы структур и получили название

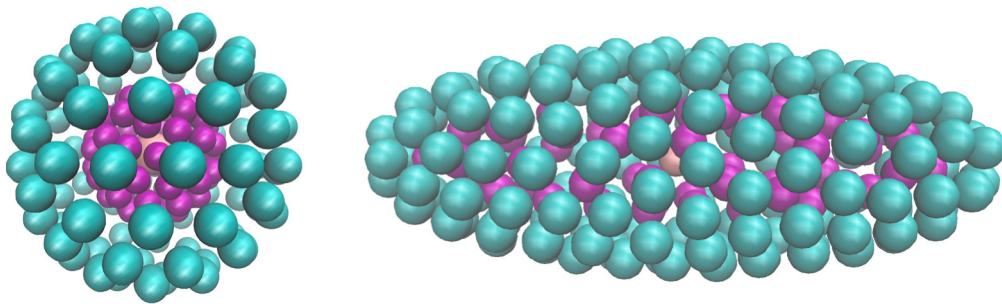


Рис. 1. Схематичное представление моделируемой частицы «малина» (размеры каждой субчастицы уменьшены в два раза для наглядности изображения схемы размещения частиц)

Fig. 1. Schematic representation of the simulated «raspberry» particle (the sizes of each particle are reduced by half to show the layout)

Для построения эллипсоидальной частицы используется комбинированный метод, включающий в себя два подхода: метод построения сферической структуры, описанный в работе [10], и способ размещения шарообразных компонентов на поверхности эллипсоида, изложенный в дополнительном разделе работы [11].

На начальном этапе центральная частица располагается в центре системы координат, что обеспечивает одинаковые относительные положения всех остальных частиц относительно нее. Поверхность эллипсоида с заданными полуосями (a, b, c) служит основой для формирования внешней оболочки. Внешняя оболочка формируется случайным распределением частиц на этой поверхности следующим образом. Генерируются три случайных числа: $p_1 = r_1 \cdot a$; $p_2 = r_2 \cdot b$, $p_3 = r_3 \cdot c$, где

«raspberry» – «малина». С помощью частиц данного типа можно придать изучаемому объекту поверхность и форму, которые критически важны для гидродинамических взаимодействий. Все параметры рассматриваемой частицы были подобраны таким образом, чтобы она могла имитировать свойства магнетитовой частицы. За счет того, что этот магнитный материал нетоксичен, он активно применяется в качестве основы для различных биоприложений.

$r_1; r_2; r_3 \in [0; 1)$. Затем вычисляется позиция каждой частицы (x, y, z) на поверхности эллипсоида:

$$x = \frac{p_1}{a}; y = \frac{p_2}{b}; z = \frac{p_3}{c},$$

где $d = \sqrt{\left(\frac{p_1}{a}\right)^2 + \left(\frac{p_2}{b}\right)^2 + \left(\frac{p_3}{c}\right)^2}$. Первоначально распределение является равномерным, однако для предотвращения перекрытия частиц применяется потенциал отталкивания типа Уикса – Чендлера – Андерсона (WCA) [12]:

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

Однако этот потенциал способен выводить частицы с поверхности эллипсоида, поэтому необходим дополнительный

механизм возвращения частиц на поверхность и второй потенциал, чтобы удерживать частицы на поверхности. Для сферической частицы подходит обычный гармонический потенциал, связывающий ее с центральной частицей, что является недостаточным для эллипсоидальной частицы из-за её анизотропии. Задача для эллипсоида решается поиском ближайшей точки на поверхности для каждой частицы, используя условие параллельности нормального вектора $\vec{n}$ и направления смещения частицы $\vec{r} - \vec{r}_s$, где $\vec{r}$ определяет текущее положение частицы, $\vec{r}_s$ – положение искомой ближайшей точки на поверхности эллипсоида. Решение задачи позволяет определить точную позицию частицы на поверхности. Далее пространство внутри оболочки заполняется гидродинамически связанными точками (субчастицами), образуя внутренний слой. Вся внутренняя область делится на концентрические слои равной толщины, которые заполняются аналогичным способом, используемым для внешней оболочки. Затем проводится

процедура виртуализации всех внутренних и внешних частиц относительно центральной частицы. Внешние и внутренние частицы теряют самостоятельность в движении и следуют исключительно перемещению и вращению центральной частицы. Их масса и моменты инерции переносятся на центральную частицу, объединяя всю систему в одно твердое тело. Все силы, действующие на отдельные частицы, немедленно передаются центральной частице. Итоговая структура представляет собой однородное распределение частиц внутри эллипсоидальной формы.

В настоящей статье рассмотрены модели эллипсоидов вращения с отношением полуосей 1:1:3 и 1:1:2. Также в качестве референсной модели рассматривалась сфера. Нами была построена и изучена особая конфигурация, известная как частица Януса. Такая частица характеризуется наличием активных частиц, расположенных только на одной половине её поверхности вдоль главной оси Ox , тогда как вторая половина покрыта пассивными частицами (рис. 2).

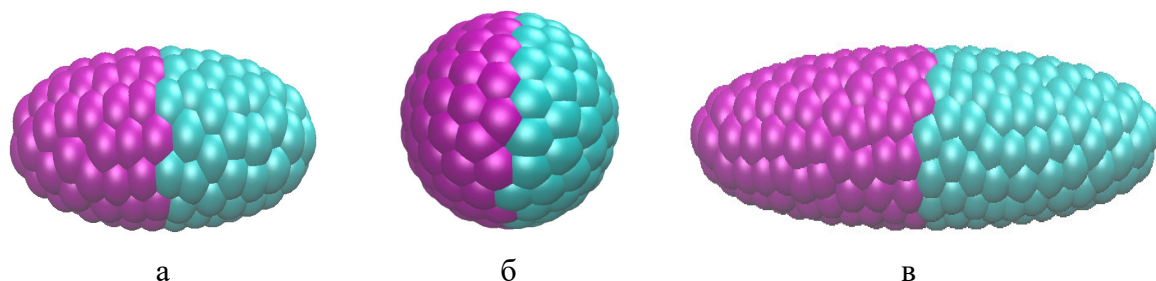


Рис. 2. «Малина» с активной половиной, левая половина состоит из активных частиц, а правая из пассивных: а – эллипсоид с большой полуосью $a = 2$; б – сфера с радиусом 1; в – эллипсоид с большой полуосью $a = 3$

Fig. 2. "Raspberry" with an active half, where the left side consists of active particles and the right side of passive ones: а – ellipsoid with major semi-axis $a = 2$; б – sphere with radius 1; в – ellipsoid with major semi-axis $a = 3$

Для изучения вклада активной части частиц в динамику «малины» менялись значения постоянной силы, которая действовала на них. Рассмотрены значения силы f равные 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1; 3 в единицах моделирования. Чтобы изучить влияние магнитного поля на систему,

были выбраны следующие значения напряжённости поля H в используемых единицах моделирования: 0, 2 и 5.

Метод молекулярной динамики

Компьютерные эксперименты проводились методом молекулярной динамики

с использованием пакета ESPResSoMD 4.2.2¹. Метод молекулярной динамики (МД) представляет собой компьютерную технику детерминированного моделирования, применяемую для изучения динамики классических многокомпонентных систем. Основным принцип МД заключается в численном интегрировании уравнений движения Ньютона, дискретизированных по времени, с учётом действующих в системе сил. Согласно данному подходу понятие «частица» трактуется абстрагированно, пока её размеры достаточно велики, а скорость достаточно низка, чтобы удовлетворять требованиям классического формализма.

В нашем исследовании основной объект изучения – магнитные наночастицы диаметром от 10 до 20 нм, что примерно в сто раз превышает размер молекулы воды. Временные интервалы, требуемые для поворотов наночастиц в жидкости при комнатной температуре, составляют 10^{-6} – 10^{-5} с, что значительно дольше аналогичных показателей для молекулы воды. Следовательно, рассматриваемые частицы намного крупнее и медленнее молекул растворителя, что позволяет исключить необходимость учёта микроскопических деталей. Но в то же время наночастицы столь малы, что испытывают броуновское движение, вызванное случайными ударами молекул растворителя и проявляющимся эффектом вязкости. Именно поэтому влияние растворителя должно учитываться иначе. Стандартный подход предполагает введение случайной силы, действующей на частицы, и решение уравнений Ланжевена следующего вида:

$$M_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i - \Gamma_T \vec{v}_i + 2\vec{\xi}_i^T; \quad (2)$$

$$I_i \frac{d\vec{\omega}_i}{dt} = \vec{\tau}_i - \Gamma_R \vec{\omega}_i + 2\vec{\xi}_i^R, \quad (3)$$

где для i -й частицы M_i – масса; $\vec{v}_i$ – скорость; $\vec{F}_i$ – сила, действующая на нее; Γ_T – коэффициент трения; $\vec{\xi}_i^T$ – стохастическая сила, моделирующая случайные силы, действующие на i -ю частицу из окружающей среды; I_i – тензор инерции; $\vec{\omega}_i$ – угловая скорость; $\vec{\tau}_i$ – момент силы, действующий на нее; Γ_R – коэффициент вращательного трения; $\vec{\xi}_i^R$ – стохастический момент, служащий той же цели, что и $\vec{\xi}_i^T$. Коэффициенты трения учитывают диссипацию энергии в окружающей жидкости, а стохастические имитируют столкновения частиц с молекулами растворителя при фиксированной температуре. Оба стохастических коэффициента удовлетворяют следующим условиям:

$$\langle \vec{\xi}_i^{T/R} \rangle = 0, \langle \vec{\xi}_i^{T/R}(t) \vec{\xi}_i^{T/R}(t') \rangle = 2\Gamma_{T/R} k_B T \delta_{l,k} \delta(t - t'), \quad (4)$$

где $l, k = x, y, z$. Уравнения Ланжевена дискретизируются и интегрируются по времени t с шагом Δt , обычно используя алгоритм Верле [13], который является самозапускающимся и поддерживает стабильность симуляции. Алгоритм полностью обратим по времени и сохраняет фазовый объем, что подразумевает сохранение энергии. Глобальная ошибка, связанная с алгоритмом Верле, имеет третий порядок для положения и второй порядок для скорости. Стандартный подход к моделированию объемных систем – использование периодических граничных условий. Это означает, что вдоль основного симуляционного бокса, где частицы изначально размещены, создается бесконечное число идентичных реплик, так что когда частица покидает основной бокс, ее реплика входит в него с противоположной стороны.

¹ Extensible Simulation Package for Research on Soft Matter Systems // Espresso MD. URL: <https://espressomd.github.io> (дата обращения: 18.12.2025).

Симуляционный протокол и параметры

В данной работе симуляционный протокол был следующим. Физические характеристики центральной реальной частицы включали в себя дипольный момент, массу и моменты инерции. Модуль дипольного момента задавался равным 9, при этом его направление изначально совпадало с осью Ox , масса частицы определялась исходя из геометрии и задавалась вручную для каждого варианта, например, для параметра $a = 3 - 42.30$, для $a = 5 - 32.75$, а для сферы – 26.40, что обеспечивало реалистичное моделирование динамики с учетом внутренней структуры. Моменты инерции рассчитывались для каждой геометрии частицы и задавались в настройках моделирования, учитывая сопротивление вращению и кинематическую реакцию частицы на внешние и внутренние силы. Для активных частиц дополнительно задавались сила активности f и направление движения, совпадающее с осью Ox , что позволяло моделировать активное движение системы. Все параметры задавались в безразмерных единицах, принятых в ESPResSo, что обеспечивало универсальность и согласованность моделирования.

Основные параметры моделирования включали размеры бокса, вязкость среды, температуру, шаг интегрирования, параметры термостата Ланжевена, а также величины внешнего магнитного поля и другие условия, необходимые для корректного моделирования одной частицы типа «малина».

Процедура моделирования включала в себя генерацию начальной конфигурации системы, ее термализацию, запуск численного счета с числом шагов равным $5 \cdot 10^6$, с сохранением траекторий частиц и расчетом корреляционных функций для последующего анализа динамических и структурных свойств системы через каж-

дую тысячу шагов, дополнительно проводилось усреднение по пяти независимым конфигурациям. В процессе моделирования сохранялись данные о позициях, ориентациях, скоростях частиц, а также о взаимодействиях и энергетических характеристиках системы, что позволяло проводить комплексный анализ поведения системы в различных условиях и при различных параметрах.

Для корректной настройки термостата Ланжевена для эллипсоидальных частиц были вычислены коэффициенты трения γ согласно работе [14]. Алгоритм был следующий: сначала необходимо определить вспомогательные интегралы:

$$\epsilon_j = \int_0^\infty \frac{1}{(a_j^2 + L) \sqrt{(a_1^2 + L)(a_2^2 + L)(a_3^2 + L)}} dL; \quad (5)$$

$$\epsilon_{hi} = \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{(a_1^2 + L)(a_2^2 + L)(a_3^2 + L)}} dL. \quad (6)$$

Вращательные коэффициенты трения для эллипсоида (диагональные элементы матрицы K_r) вычислялись следующим образом:

$$K_{r,ii} = \frac{a_j^2 + a_k^2}{\epsilon_j a_j^2 + \epsilon_k a_k^2}, \quad (7)$$

где (i, j, k) – циклическая перестановка индексов (например, для $i = 1, j = 2, k = 3$), и т.д.);

$$K_r = K_r \cdot \frac{16\pi}{3}; \quad \gamma_r = \sum_{i=1}^3 K_{r,ii}. \quad (8)$$

Поступательные коэффициенты трения (диагональные элементы матрицы K_t):

$$K_{t,ii} = \frac{1}{\epsilon_{hi} + \epsilon_i a_i^2}; \quad (9)$$

$$K_t = K_t \cdot 16\pi, \quad \gamma_t = \sum_{i=1}^3 K_{t,ii}. \quad (10)$$

Все параметры рассчитываются для заданных полуосей эллипсоида (a_1, a_2, a_3), а γ_r определяет силу вязкого сопротивления вращения эллипсоида, γ_t – силу вязкого сопротивления поступательного движения эллипсоида.

Результаты и их обсуждение

Исследование в данной статье было начато с изучения траекторий частиц, чтобы определить влияние формы частицы на ее динамику. На рисунке 3 представлены девять тепловых карт, отражающих пространственно-временное распределение смещений частиц. Каждая карта соответствует различным значениям пара-

метров: величины большой полуоси эллипсоида a (1, 2 или 3) и силы активности $f(0, 0,5$ или $3,0)$. Цвета на тепловых картах представляют собой градиент от темного к светлому, где темные области соответствуют низким значениям функции распределения, а светлые области – высоким. Оси на графиках обозначены как Δx и Δy , что соответствует смещению вдоль оси Ox и усредненному смещению по перпендикулярным осям соответственно.

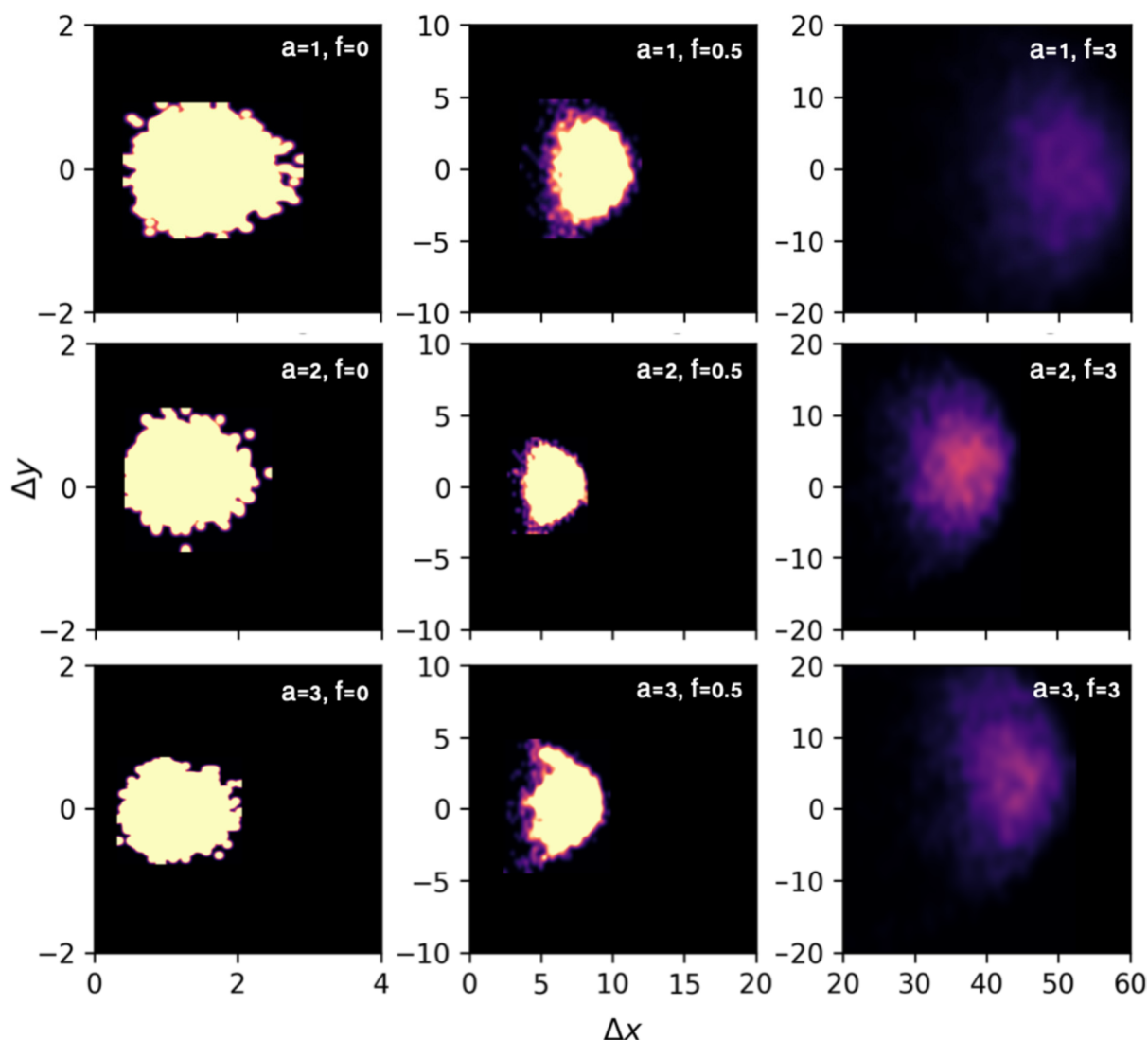


Рис. 3. Поперечное сечение пространственно-временной функции распределения смещений активной магнитной частицы в отсутствие внешнего магнитного поля. Значения величин большой полуоси a и силы активности f представлены на рисунках

Fig. 3. XZ cross-section of a space-averaged particle distribution function for an active magnetic particle in the absence of an external magnetic field. Values of major semi-axis a and activity force f are shown on the plots

Сравнивая тепловые карты при различных значениях большой полуоси эллипсоида (сверху вниз), существенных изменений в характере распределения смещений не выявлено. Независимо от увеличения большой полуоси эллипсоида структура и интенсивность тепловых карт остаются практически неизменными. Это указывает на то, что в исследуемом диапазоне параметров геометрический фактор не оказывает значимого влияния на траектории движения частиц в отсутствие внешнего магнитного поля. При переходе от меньших к большим значениям силы активности (слева направо) наблюдается существенное увеличение рассеяния траекторий движения частиц. Данный эффект свидетельствует о росте динамической активности системы: частицы приобретают большую подвижность, что приводит к более выраженному и хаотичному характеру их движения. Когда удлинение и активность увеличиваются одновременно, распределение становится ещё более асимметричным и размытым, что указывает на более сложное и непредсказуемое поведение удлинённых активных частиц.

Далее мы рассмотрели поведение частицы под влиянием внешнего магнитного поля (рис. 4). Можно отметить, что с увеличением силы активности наблюдается удлинение областей высокой интенсивности смещений. Это указывает на формирование более выраженного направленного и интенсивного движения частиц и связано с тем, что магнитное поле влияет на ориентацию частиц, что приводит к изменению их траекторий. Увеличение же большой полуоси эллипсоида в исследуемом диапазоне параметров по-прежнему не оказывает значимого влияния на траектории движения частиц.

Следующим шагом нашего исследования было построение среднеквадратичного смещения частиц (MSD) в отсутствие

внешнего магнитного поля. MSD вычислялся с использованием встроенного коррелятора в пакете ESPResSo, который определяет среднеквадратичное смещение частицы как функцию времени. На представленном графике (рис. 5) показано среднеквадратичное смещение (MSD) активной магнитной эллипсоидальной частицы в зависимости от времени t для различных значений большой полуоси эллипсоида a и силы активности f . При увеличении силы активности частиц наблюдается рост начального значения среднеквадратичного смещения, указывая на более интенсивное начальное движение системы, что согласуется с теоретическими представлениями о влиянии активности на кинетическую энергию частиц. Повышенная активность приводит к увеличению средней скорости частиц на начальном этапе, что отражается в более высоких значениях среднеквадратичного смещения.

Форма частицы, определяемая значением большой полуоси a , оказывает значительное влияние на ее движение. При фиксированном значении большой полуоси эллипсоида равном 1 (геометрически соответствующем сфере) частицы демонстрируют более свободное движение и выраженный баллистический режим по сравнению с частицами эллипсоидальной формы. В баллистическом режиме для всех исследуемых параметров график аппроксимируется линейной зависимостью от времени, что характерно для движения с постоянной скоростью и минимальным влиянием внешних факторов.

В отсутствие активного слоя на поверхности частиц наблюдается ускоренный переход системы из баллистического в диффузионный режим. Это обусловлено снижением устойчивости баллистического режима и более быстрым разрушением корреляций начального направления

движения. Для сферических частиц с высокой силой активности данный переход происходит особенно быстро и сопровождается резким увеличением значений среднеквадратичного смещения, что сви-

детельствует о высокой динамической активности системы и быстром рассеянии кинетической энергии. В диффузионном режиме мы видим случайное блуждание частиц и влияние силы активности становится менее заметным.

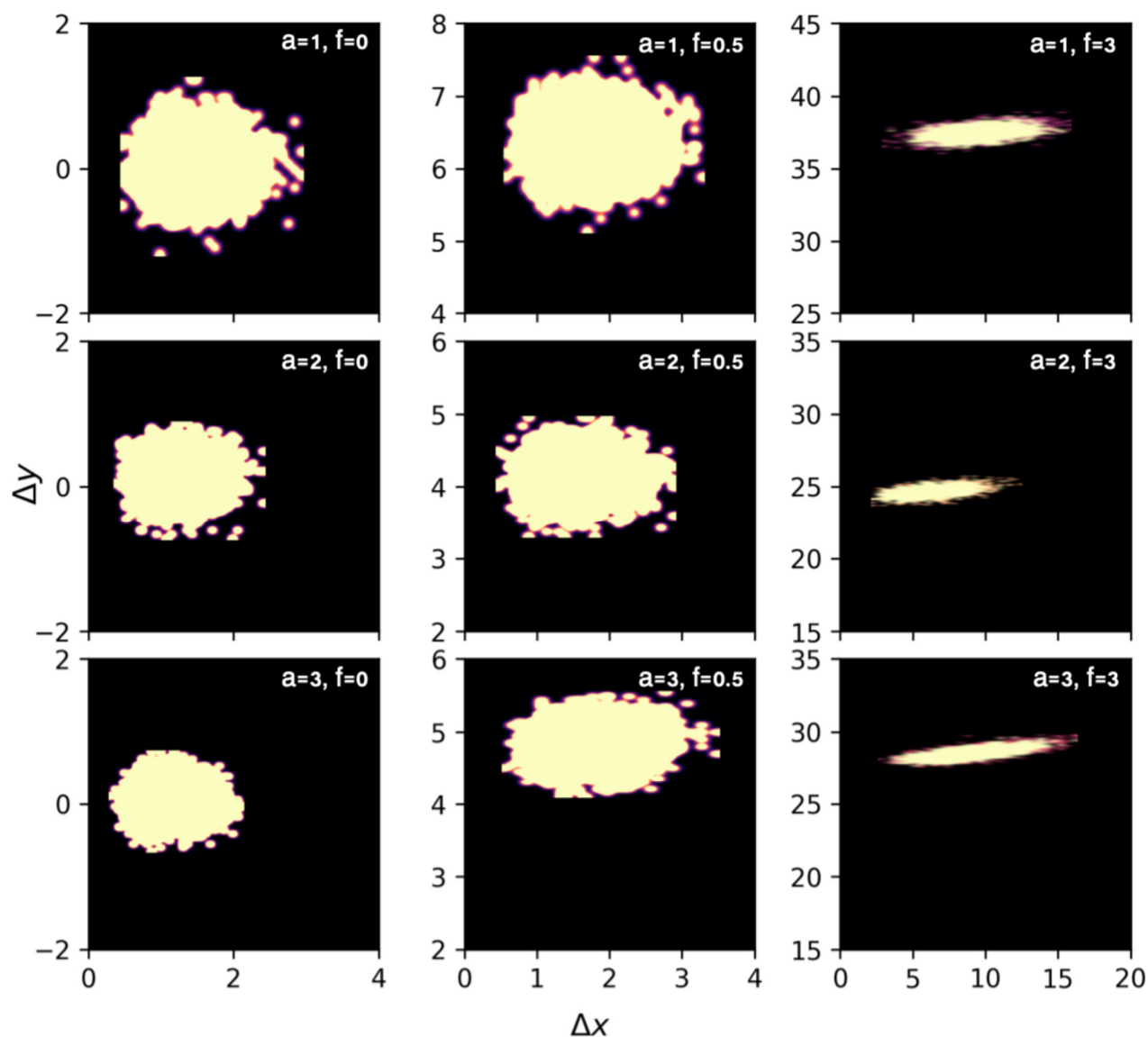


Рис. 4. Поперечное сечение пространственно-временной функции распределения смещений активной магнитной частицы в присутствии внешнего магнитного поля $H = 5$ (значения величины большой полуоси a и силы активности f представлены на рисунках)

Fig. 4. XZ cross-section of a space-averaged particle distribution function for an active magnetic particle in the presence of an external magnetic field $H = 5$ (Values of major semi-axis a and activity force f are shown on the plots)

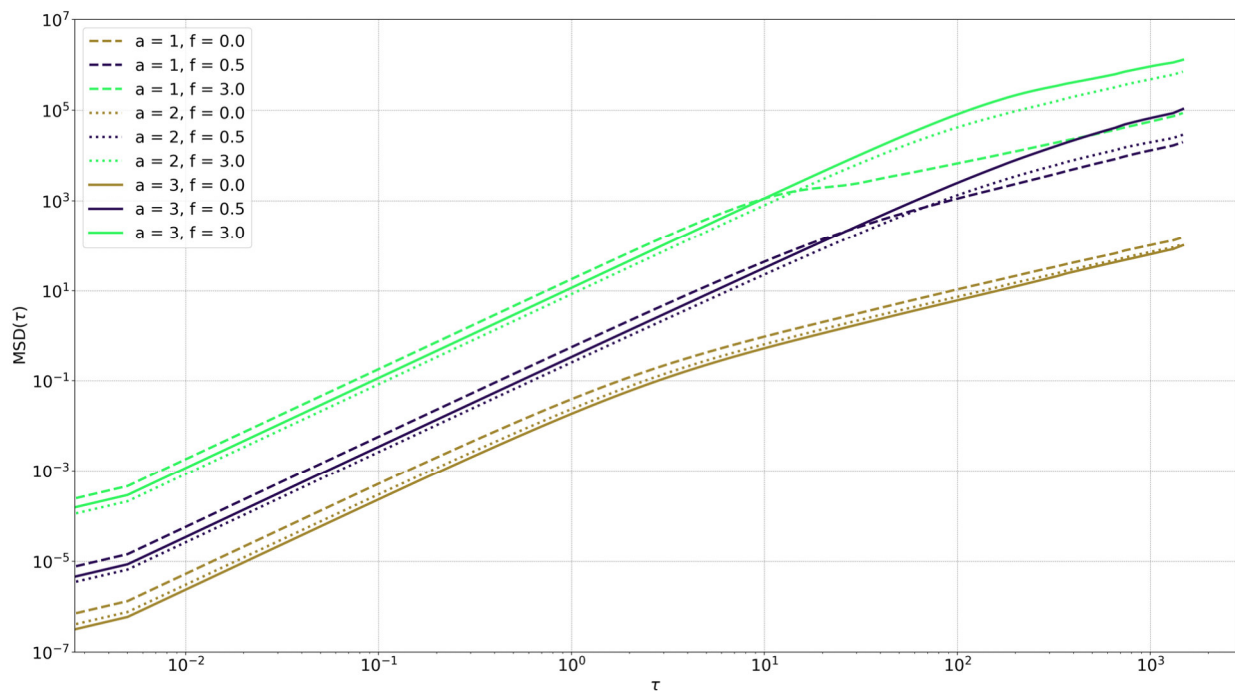


Рис. 5. Среднеквадратичное смещение (MSD) активной магнитной эллипсоидальной частицы в зависимости от времени τ для различных значений большой полуоси эллипсоида a и силы активности f

Fig. 5. Mean squared displacement (MSD) of an active magnetic ellipsoidal particle as a function of time τ for various values of the ellipsoid's major semi-axis a and activity force f

Далее мы провели анализ среднеквадратичного смещения частиц при различных значениях напряженности внешнего магнитного поля, результаты представлены на рисунках 6 и 7. Анализ движения частицы в направлении, параллельном полю $H = 2$, не показал существенных изменений по сравнению с данными, полученными в отсутствие магнитного поля. Однако в изучаемых временных масштабах для активных частиц переход к диффузионному режиму не наблюдается. В то же время анализ MSD в направлении, перпендикулярном магнитному полю, выявляет отклонения от линейной зависимости, характерной для баллистического режима. Это указывает на то, что движение частиц в данном направлении становится менее упорядоченным, и при переходе в

диффузионный режим наблюдается более выраженное хаотичное поведение. Кроме того, начальное значение MSD в перпендикулярном направлении оказывается ниже, чем в параллельном, что свидетельствует о подавлении начальной подвижности частиц под действием магнитного поля в этом направлении. Влияние напряженности магнитного поля H (рис. 7) на динамику активной эллипсоидальной частицы можно увидеть лишь в перпендикулярном направлении (правый график). С увеличением напряженности магнитного поля отмечается более быстрый переход системы в диффузионный режим, что указывает на усиление ограничивающего влияния магнитного поля на движение частиц поперёк его направления.

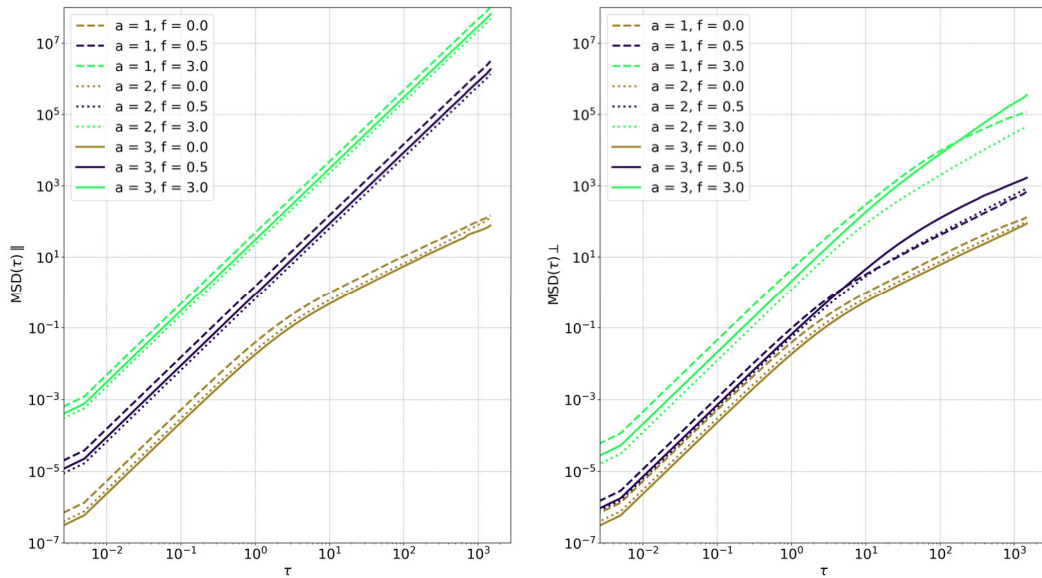


Рис. 6. Среднеквадратичное смещение (MSD) активной магнитной эллипсоидальной частицы в зависимости от времени τ для различных значений большой полуоси эллипсоида a и силы активности f (левый график показывает значения параллельно полю $H = 2$; правый – перпендикулярно)

Fig. 6. Mean squared displacement (MSD) of an active magnetic ellipsoidal particle as a function of time τ for various values of the ellipsoid's major semi-axis a and activity force f . The left graph shows values parallel to the magnetic field $H = 2$ (while the right graph shows values perpendicular to the magnetic field)

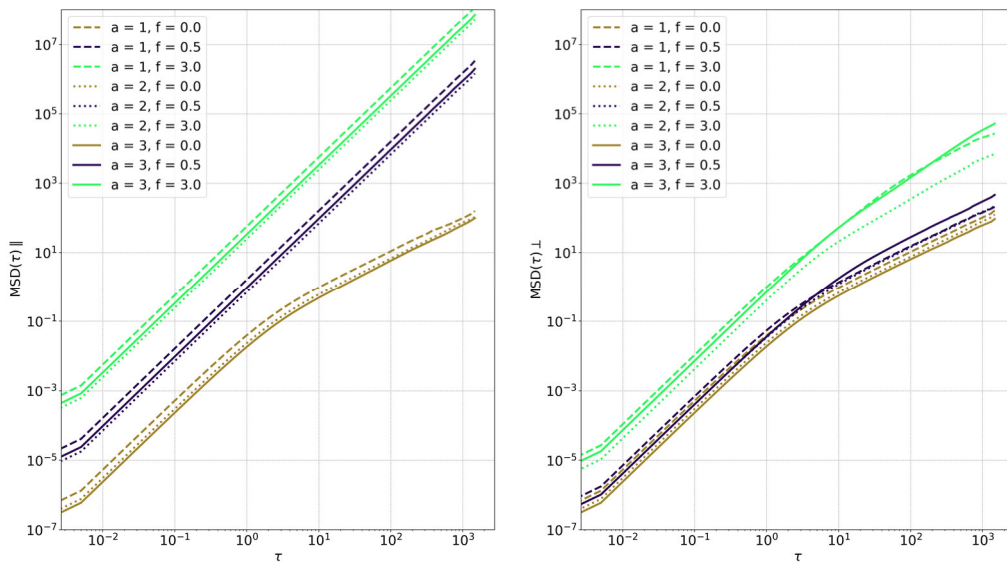


Рис. 7. Среднеквадратичное смещение (MSD) активной магнитной эллипсоидальной частицы в зависимости от времени τ для различных значений большой полуоси эллипсоида a и силы активности f (левый график показывает значения параллельно полю $H = 5$, правый – перпендикулярно)

Fig. 7. Mean squared displacement (MSD) of an active magnetic ellipsoidal particle as a function of time τ for various values of the ellipsoid's major semi-axis a and activity force f . The left graph shows values parallel to the magnetic field $H = 5$ (while the right graph shows values perpendicular to the magnetic field)

Для количественной оценки диффузионных свойств магнитной частицы был рассчитан коэффициент диффузии D на основе анализа среднеквадратичного смещения. Для определения коэффициента диффузии использовалась линейная часть зависимости MSD от времени, соответствующая режиму нормальной диффузии. Наклон прямой, аппроксимирующей линейный участок графика, был определён методом наименьших квадратов. Коэффици-

циент диффузии рассчитывался по формуле $D = A/2d$, где A – наклон линейной аппроксимации, d – размерность системы (в исследуемом случае $d = 3$) [15]. Таким образом, коэффициент диффузии определялся из выражения: $MSD(t) = 2dDt$ [16], что позволяет количественно охарактеризовать динамику частицы в исследуемой системе [17].

На рисунке 8 представлены значения коэффициента диффузии частицы при различных значениях силы активности.

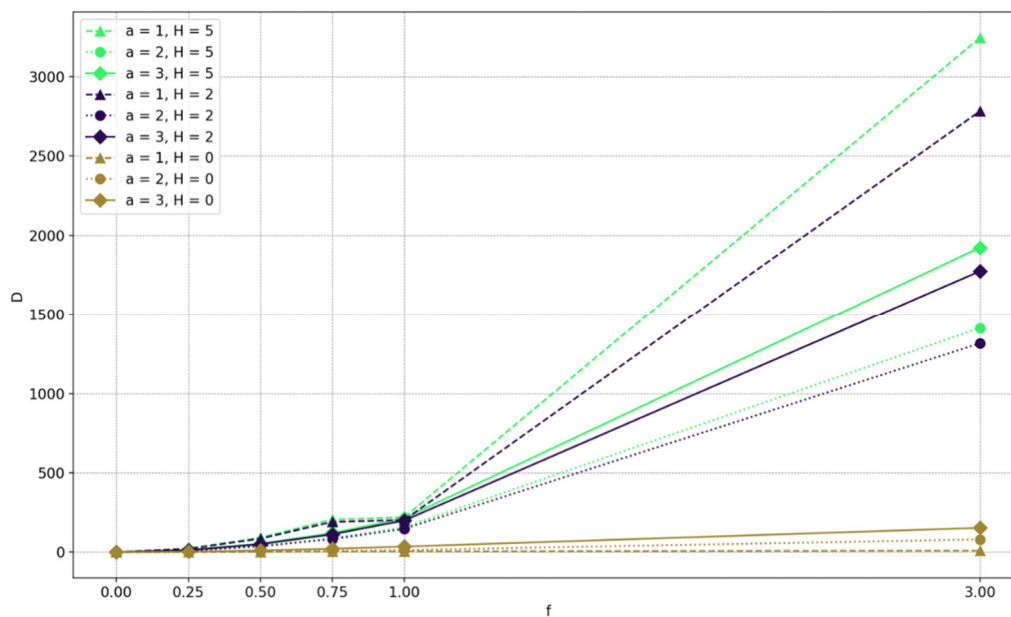


Рис. 8. Зависимость коэффициента диффузии от силы активности частиц (цветом обозначены различные значения внешнего магнитного поля, форма маркеров соответствует различным значениям радиуса эллипсоида; по оси ординат отложен коэффициент диффузии, по оси абсцисс – сила активности)

Fig. 8. The dependence of the diffusion coefficient on the particle's activity strength (the colors indicate different values of external magnetic fields, and the shapes of the markers correspond to different ellipsoid radii. The diffusion coefficient is plotted along the ordinate axis, and the activity strength is plotted along the abscissa axis)

Анализируя полученные данные, можно отметить, что с увеличением силы активности при любом наборе параметров наблюдается рост коэффициента диффузии. При сравнении результатов для различных форм частиц и напряженности магнитного поля выявляются дополнительные особенности. В отсутствие магнитного поля максимальные значения коэффициента диффузии достигаются для наиболее вытянутых эллипсоидов, что мо-

жет быть связано с особенностями гидродинамического взаимодействия и ориентационной подвижности таких частиц. Однако при наличии магнитного поля максимальные значения коэффициента диффузии наблюдаются для сферических частиц. Это может быть связано с тем, что магнитное поле ограничивает вращательную и поступательную свободу вытянутых частиц, снижая их эффективность перемещения по сравнению со сферой.

При анализе коэффициентов диффузии при силе активности равной 3 установлено, что при фиксированном радиусе эллипсоида наблюдается рост коэффициента диффузии с увеличением внешнего магнитного поля. В условиях отсутствия магнитного поля значения коэффициента диффузии оказываются существенно ниже, что свидетельствует о заметном усилении диффузионного транспорта под действием магнитного поля.

Выводы

В данной работе нами исследованы динамические свойства магнитных активных частиц типа «малина» различной формы в присутствии и в отсутствие внешнего магнитного поля. Мы обнаружили, что форма частицы оказывает значительное влияние на её динамические свойства. В частности, эллипсоидальные частицы демонстрируют более сложное поведение по сравнению с сферическими частицами. Увеличение большой полуоси эллипсоида приводит к более выраженному и хаотичному характеру движения, особенно при высоких значениях силы активности. Анализ показал, что с увеличением роста скорости частицы наблюдается рост среднеквадратичного смещения, что указывает на более интенсивное движение системы. При высоких значениях активной скорости частицы приобретают большую подвижность, что приводит к более выраженному и хаотичному характеру их движения.

Мы установили, что в отсутствие внешнего магнитного поля увеличение силы активности способствует более сильному начальному движению и ускоряет переход системы в диффузионный режим. Сферические частицы показывают более выраженный баллистический режим, а отсутствие активного слоя уско-

ряет выход системы в диффузионный режим. Высокая активность и малые размеры частиц способствуют более быстрому и интенсивному переходу к хаотическому движению.

Внешнее магнитное поле практически не влияет на динамику движения частиц вдоль направления поля, что подтверждается качественным совпадением кривых среднеквадратичного смещения с результатами для случая без поля. В перпендикулярном же направлении магнитное поле приводит к снижению начальной подвижности частиц, отклонению среднеквадратичного смещения от линейной зависимости, подавлению баллистического режима и ускоренному переходу к диффузионному поведению. Усиление магнитного поля способствует более быстрому наступлению диффузионного режима в перпендикулярном направлении, что указывает на рост анизотропии динамики системы.

Мы также обнаружили, что в отсутствие магнитного поля максимальные значения коэффициента диффузии достигаются для наиболее вытянутых эллипсоидов, что должно быть связано с особенностями гидродинамического взаимодействия и ориентационной подвижности таких частиц. При наличии магнитного поля максимальные значения коэффициента диффузии наблюдаются для сферических частиц.

Полученные результаты демонстрируют сложную взаимосвязь между формой частицы, активной скоростью и внешним магнитным полем, определяющую динамические свойства системы. Корректный учет всех составляющих имеет особенно важное значение для разработки и оптимизации систем активных частиц для медицинских и технологических приложений.

Список литературы

1. Clustering and pattern formation in active colloids driven by competing attractive and repulsive interactions / A. Kaiser, B. Hofmann, F. Müller, C. Bechinger // *Physical Review Letters*. 2012. Vol. 108. P. 268307. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.268307>.
2. Chepizko O., Kohler D., Bechinger C. Direct observation of nonequilibrium phase transitions in vibrated granular matter // *Physical Review Letters*. 2013. Vol. 111. P. 160604. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.160604>.
3. Probing orientational order in anisotropic liquids via computer simulations / Y. Chubak, Z. Wang, M. Liu, J. de Graaf // *Physical Review Research*. 2020. Vol. 2. P. 043249. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.043249>.
4. Novak E. V., Pyanzina E. S., Kantorovich S. S. Behaviour of magnetic Janus-like colloids // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2015. Vol. 27. P. 234102. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/23/234102>.
5. Bistable self-assembly in homogeneous colloidal systems for flexible modular architectures / G. Steinbach, D. Nissen, M. Albrecht, E. V. Novak, P. A. Sánchez, S.S. Kantorovich [et al.] // *Soft Matter*. 2020. Vol. 16. P. 10463-10474. <https://doi.org/10.1039/D0SM01422F>.
6. Kaiser M., Kantorovich S. S. Flux and separation of magneto-active superballs in applied fields // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2021. Vol. 23. P. 23827-23835. <https://doi.org/10.1039/d1cp03343c>.
7. Probing the spatiotemporal dynamics of catalytic Janus particles with single-particle tracking and differential dynamic microscopy / C. Kurzthaler, C. Devailly, J. Arlt, T. Franosch, W. C. K. Poon, V. A. Martinez [et al.] // *Physical Review Letters*. 2018. Vol. 121, is. 7. P. 078001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.078001>.
8. Lattice-Boltzmann hydrodynamics of anisotropic active matter / J. De Graaf, H. Menke, A. J. T. M. Mathijssen, M. Fabritius, C. Holm // *The Journal of Chemical Physics*. 2016. Vol. 144, is. 13. P. 134901. <https://doi.org/10.1063/1.4944138>.
9. Run-and-tumble particles with hydrodynamics: sedimentation, trapping, and upstream swimming / R. W. Nash, R. Adhikari, J. Tailleur, M. E. Cates // *Physical Review Letters*. 2010. Vol. 104, is. 25. P. 258101. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.258101>.
10. The raspberry model for hydrodynamic interactions revisited. I. Periodic arrays of spheres and dumbbells / L. P. Fischer, T. Peter, C. Holm, J. de Graaf // *The Journal of Chemical Physics*. 2015. Vol. 143. P. 084107. <https://doi.org/10.1063/1.4928502>.
11. Ustach V. D., Faller R. The raspberry model for protein-like particles: ellipsoids and confinement in cylindrical pores // *The European Physical Journal Special Topics*. 2016. Vol. 225, is. 8-9. P. 1643-1662. <https://doi.org/10.1140/epjst/e2016-60161-y>.
12. Chandler D., Weeks J. D., Andersen H. C. Van der Waals theory of the liquid-vapor critical point // *The Journal Chemical Physics*. 1971. Vol. 5, is. 12. P. 4824-4835. <https://doi.org/10.1063/1.1674857>.
13. Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // *Physical Review*. 1967. Vol. 159, is. 1. P. 98-103. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.159.98>.
14. Brenner H. The Stokes resistance of an arbitrary particle. II. An extension // *Chemical Engineering Sciences*. 1963. Vol. 18. P. 1-25. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(63\)85002-X](https://doi.org/10.1016/0009-2509(63)85002-X).
15. Einstein A. On the movement of small particles suspended in a stationary liquid demanded by the molecular-kinetic theory of heat // *Annals of Physics*. 1905. Vol. 17. P. 549-560. <https://doi.org/10.1002/andp.19053220806>.
16. Qian H., Sheetz M. P., Elson E. L. Single particle tracking. Analysis of diffusion and flow in two-dimensional systems // *Biophysical Journal*. 1991. Vol. 60. P. 910-921. [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(91\)82125-7](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(91)82125-7).
17. Saxton M. J. Single-particle tracking: effects of corrals // *Biophysical Journal*. 1995. Vol. 69. P. 389-398. [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(95\)79917-6](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(95)79917-6).

References

1. Kaiser A., Hofmann B., Müller F., Bechinger C. Clustering and pattern formation in active colloids Driven by Competing Attractive and Repulsive Interactions. *Physical Review Letters*. 2012;108:268307. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.268307>.
2. Chepizko O., Kohler D., Bechinger C. Direct observation of nonequilibrium phase transitions in vibrated granular matter. *Physical Review Letters*. 2013;111:160604. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.160604>.
3. Chubak Y., Wang Z., Liu M., de Graaf J. Probing orientational order in anisotropic liquids via computer simulations. *Physical Review Research*. 2020;2:043249. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.043249>.
4. Novak E.V., Pyanzina E.S., Kantorovich S.S. Behaviour of magnetic Janus-like colloids. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2015;27:234102. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/23/234102>.
5. Steinbach G., Nissen D., Albrecht M., Novak E.V., Sánchez P.A., Kantorovich S.S., et al. Bistable self-assembly in homogeneous colloidal systems for flexible modular architectures. *Soft Matter*. 2020;16:10463-10474. <https://doi.org/10.1039/D0SM01422F>.
6. Kaiser M., Kantorovich S.S. Flux and separation of magneto-active superballs in applied fields. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2021;23:23827-23835. <https://doi.org/10.1039/d1cp03343c>.
7. Kurzthaler C., Devailly C., Arlt J., Franosch T., Poon W.C.K., Martinez V.A., et al. Probing the spatiotemporal dynamics of catalytic Janus particles with single-particle tracking and differential dynamic microscopy. *Physical Review Letters*. 2018;121(7):078001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.078001>.
8. De Graaf J., Menke H., Mathijssen A.J.T.M., Fabritius M., Holm C. Lattice-Boltzmann hydrodynamics of anisotropic active matter. *The Journal of Chemical Physics*. 2016;144(13):134901. <https://doi.org/10.1063/1.4944138>.
9. Nash R.W., Adhikari R., Tailleur J., Cates M.E. Run-and-tumble particles with hydrodynamics: sedimentation, trapping, and upstream swimming. *Physical Review Letters*. 2010;104(25):258101. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.258101>.
10. Fischer L.P., Peter T., Holm C., de Graaf J. The raspberry model for hydrodynamic interactions revisited. I. Periodic arrays of spheres and dumbbells. *The Journal of Chemical Physics*. 2015;143:084107. <https://doi.org/10.1063/1.4928502>.
11. Ustach V.D., Faller R. The raspberry model for protein-like particles: ellipsoids and confinement in cylindrical pores. *The European Physical Journal Special Topics*. 2016;225(8-9):1643-1662. <https://doi.org/10.1140/epjst/e2016-60161-y>.
12. Chandler D., Weeks J.D., Andersen H.C. Van der Waals theory of the liquid-vapor critical point. *The Journal Chemical Physics*. 1971;54(12):4824-4835. <https://doi.org/10.1063/1.1674857>.
13. Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Physical Review*. 1967;159(1):98-103. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.159.98>.
14. Brenner H. The Stokes resistance of an arbitrary particle. II. An extension. *Chemical Engineering Sciences*. 1963;18:1-25. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(63\)85002-X](https://doi.org/10.1016/0009-2509(63)85002-X).
15. Einstein A. On the movement of small particles suspended in a stationary liquid demanded by the molecular-kinetic theory of heat. *Annals of Physics*. 1905;17:549-560. <https://doi.org/10.1002/andp.19053220806>.
16. Qian H., Sheetz M.P., Elson E.L. Single particle tracking. Analysis of diffusion and flow in two-dimensional systems. *Biophysical Journal*. 1991;60:910-921. [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(91\)82125-7](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(91)82125-7).
17. Saxton M.J. Single-particle tracking: effects of corrals. *Biophysical Journal*. 1995;69:389-398. [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(95\)79917-6](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(95)79917-6).

Информация об авторах / Information about the Authors

Беляева Татьяна Дмитриевна, аспирант, Специализированный научный центр Уральского федерального университета имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: tatiana.mizgireva@urfu.ru, ORCID: 0009-0003-4670-0889

Tatyana D. Belyaeva, Postgraduate Student, Specialized scientific center of the Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russian Federation, e-mail: tatiana.mizgireva@urfu.ru, ORCID: 0009-0003-4670-0889

Новак Екатерина Владимировна, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры теоретической и математической физики, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: ekaterina.novak@urfu.ru, ORCID: 0000-0002-4034-6861

Ekaterina V. Novak, Candidate of Sciences (Physics and Mathematics), Associate Professor at the Department of Theoretical and Mathematical Physics, Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russian Federation, e-mail: ekaterina.novak@urfu.ru, ORCID: 0000-0002-4034-6861