

ЗАТВЕРДЖУЮ

Ректор Сумського державного університету

Василь КАРПУША



## АНОТОВАНИЙ ЗВІТ

Про виконану роботу у 2021 році в рамках реалізації проекту  
із виконання наукових досліджень та розробок

«Коллективна динаміка феромагнітних наночастинок зі скінченною анізотропією у в'язкій рідині»

### Назва конкурсу:

Спільний конкурс науково-дослідних проектів Державного фонду фундаментальних досліджень і Німецького Дослідницького Товариства (DFG)

Реєстраційний номер Проекту: Ф 81/41894

Науковий керівник Проекту: Лютий Тарас Володимирович

Підстави для реалізації Проекту з виконання наукових досліджень і розробок:

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо забезпечення укладання договорів про виконання наукових досліджень і розробок за рахунок грантової підтримки з переможцями спільного конкурсу наукових проектів Державного фонду фундаментальних досліджень і Німецького Дослідницького Товариства (DFG) (Ф81) від «06» липня 2021 року № 26.

## 1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проекту

Початок – 01.08.20201 р.

Закінчення – 2021 рік

Загальна вартість Проекту, грн. 325 788.00

Вартість Проекту по роках, грн.:

1-й рік 325 788.00

## 2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проекту було залучено 8 виконавців, з них:

доктори наук – 1

кандидати наук – 3

інші працівники – 4

### 3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ

Сумський державний університет.

40000, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2 (КОД ЄДРПОУ 05408289).

КВЕД 85,42 (основний).

Сумський державний університет входить до каталогу кращих дослідницьких університетів світу від Шанхайського рейтингу, а за рейтингом QS World University Rankings класифікуються як університет з високою дослідницькою продуктивністю. Його потужна та сучасна матеріально-технічна база забезпечила успішну реалізацію проєкту. Частина проєкту, що потребувала чисельних розрахунків була виконана за допомогою двох персональних комп'ютерів дві аудиторії та чотири персональні комп'ютери, обладнані відеокартами NVIDIA GeForce 650Ti. В декількох випадках сумськв група зверталась до колабораторів з Аугсбурзької групи, що ме стандартний обчислювальний кластер (з кількома сотнями ядер) і кластер графічного процесора (16 карт TESLA K20XM GPU). Університет надає постійний доступ до науко метричних баз даних Scopus і WoS, що дозволило проаналізувати результати сучасних наукових досліджень за тематикою проєкту. Для оформлення наукових статей та звіту використовувалися Ліцензійні пакети Microsoft Office 365 та хмарний безкоштовний LaTeX редактор та компілятор OverLeaf.

### 4. ОПИС ПРОЄКТУ

**4.1. Мета Проєкту** Проєкт спрямований на теоретичні дослідження і високопродуктивні моделювання динаміки нерівноважних ансамблів взаємодіючих феромагнітних наночастинок (ФНЧ), що збуджуються періодичним магнітним полем. Планується розглянути питання формування та динаміки нестационарних колективних станів і поглинання енергії магнітного поля у цих станах з подальшим виділенням тепла як функції параметрів поля і ФНЧ. Розроблені інструменти дозволяють нам оптимізувати реальні методи застосування ферорідин. Результати дозволять прогнозувати нові ефекти та стани ферорідин.

**4.2. Основні завдання Проєкту** 1) Чисельне моделювання динаміки ФНЧ у детерміністичному наближенні, отримання великої бази даних результатів та її обробка. 2) Запис мінімальної системи рівнянь руху для опису спрямованого транспорту ФНЧ в рідині. 3) Комплексний аналіз спрямованого транспорту ФНЧ в залежності від параметрів моделі та визначення їх оптимальних (з точки зору енергетичних втрат) значень. 4) Розбудова алгоритму та реалізація програми моделювання системи взаємодіючих наочастинок зі скінченною анізотропією. 5) Чисельне дослідження колективних ефектів та ролі скінченної анізотропії і термостату у поглинання енергії змінного поля системою наночастинок.

### 4.3. Детальний зміст Проєкту

**Сучасний стан проблеми.** Перспективи застосування феромагнітних наночастинок (ФНЧ) потребують мікроскопічного описання їх динаміки для керування їх властивостями. Станом на початок виконання Проєкту в літературі не подано задовільних аналітичних та чисельних результатів стосовно транспортних та термічних властивостей ансамблів ФНЧ зі скінченною анізотропією збуджуваних зовнішніми змінними полями.

**Новизна проєкту.** Для зазначених ФНЧ вперше описано режими, що генеруються обертовим полем. Проаналізовано вплив динаміки на енергію, що поглинається. Вперше аналітично описано ефект індукованого дисипацією обертання магніто-ізотропної наночастинки у обертovому полі. Вперше проаналізовано чотири режими спрямованого транспорту ФНЧ, індукованих сумісною дією постійного градієнтного та однорідного магнітних полів.

**Методологія дослідження.** Для досягнення заявлених результатів використовувалися наступні методи: методи векторного аналізу, метод диференціальних рівнянь, асимптотичні методи, методи чисельного інтегрування диференціальних рівнянь Рунге-Кутта, метод паралельних обчислень на графічних процесорах за допомогою CUDA.

## 5. НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ

### 5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, які очікуються отримати в рамках виконання Проєкту

Для детерміністичного наближення розроблено математичний та чисельний апарат для описання зв'язаної динаміки ФНЧ у в'язкій рідині. Тут розглядається як сферичний рух частинки навколо її центру мас, так і загасаючу прецесію її намагніченості всередині відносно кристалічної решітки. В рамках запропонованого мікроскопічного підходу використовуються класичні рівняння, зокрема основне рівняння динаміки обертового руху, кінематичне рівняння та рівняння Ландау-Ліфшиця-Гільберта. При цьому вони мають всі необхідні уточнення, що вимагаються законом збереження повного моменту імпульсу та міркуваннями відносності магнітної динаміки у системі відліку кристалічної решітки ФНЧ, що обертається. Був детально вивчений режим однорідної прецесії, що характеризується постійними кутами прецесії та постійними кутами відставання, значення яких залежать від параметрів наночастинки, поля та середовища. Отримано алгебраїчні рівняння для цих залежностей, та характеристики їх розв'язків.

Чисельно досліджено неоднорідний режим за якого відбуваються періодичні зміни полярних кутів як магнітного моменту, так і осі анізотропії з періодом, який не кратний періоду зовнішнього поля. Активація неоднорідного режиму прецесії супроводжується змінами втрат потужності, що також проаналізовано чисельно. Встановлено, що генрування такого режиму може призводити не до зменшення, а до збільшення швидкості нагрівання. Встановлено, що сумісна динаміка, зв'язаний рух демонструє інший тип неоднорідної прецесії, що часто переходить у хаотичний, а також досліджено ще два нових хаотичних режими.

Встановлено та проаналізовано явище індукованого дисипацією обертання магніто-ізотропної ФНЧ, зваженої у в'язкій рідині, що збуджується циркулярно поляризованим полем. Було описано як синхронну прецесію магнітного моменту наночастинки та наночастинки як цілого, так і випадки, коли швидкості зазначених прецесійних динамік не співпадають. Показано, що у загальному випадку кутова швидкість обертання ФНЧ є нелінійною функцією частоти і може бути як монотонно зростаючою так і унімодальною з максимумом, пропорційним амплітуді поля.

Як аналітичними так і чисельними методами показано встановлено, що градієнтне магнітне поле, яке змінюється з часом за гармонійним законом, може ініціювати неочікуваний ефект – появу спрямованого транспорту ФНЧ. Сформульовано умови існування цього ефекту та визначено

залежність від часу середньої швидкості ФНЧ. Показано, що причиною появи транспорту є перпендикулярна до градієнтного поля компонента зовнішнього однорідного магнітного поля.

Перелік публікацій за проектом.

- [1] Lyutyu T.V., Denisov S.I., Hänggi P. Dissipation-induced rotation of suspended ferromagnetic nanoparticles // Phys. Rev. B 100, 134403 (2019). [Q1, IF=4.036, SNIP=1.03, Scopus & WoS] <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.134403>
- [2] Lyutyu T.V., Reva V.V., Petrenko N.S., Pavlyuk M.O. Forced precession of a ferromagnetic nanoparticle with a finite anisotropy suspended in a liquid: Nonlinear aspects // J. Nano- Electron. Phys. 11, 05021 (2019). [Q3, IF=0.676, SNIP=0.47, Scopus] [https://doi.org/10.21272/jnep.11\(5\).05013](https://doi.org/10.21272/jnep.11(5).05013)
- [3] Denisov S.I., Lyutyu T.V., Liutyi A.T. Drift of suspended single-domain nanoparticles in a harmonically oscillating gradient magnetic field // J. Phys. D: Appl. Phys. 55, 045001 (2022). [Q1, IF=3.207, SNIP=1.14, Scopus & WoS] <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ac2db6>
- [4] Denisov S.I., Moskalenko M.M., Lyutyu T.V., Baryba M.Yu. Numerical analysis of the nanoparticle dynamics in a viscous liquid: Deterministic approach // J. Nano- Electron. Phys. 13, 06027 (2021). [Q3, IF=0.676, SNIP=0.47 Scopus] [https://doi.org/10.21272/jnep.13\(6\).06027](https://doi.org/10.21272/jnep.13(6).06027)

## **5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами**

Модель, що покладена в основу проекту, передбачає наявність незакріпленого жорстко магнітного моменту кожної наночастинки, зваженої в рідині. Саме тому опис механізмів поглинання енергії змінного магнітного поля, має істотно більше прикладне значення для методу гіпертермії (метод терапії ракових пухлин на основі локального нагрівання), ніж попередні результати, отримані раніше, у більш грубих моделях. Контрольованість процесу нагрівання є ключовим питанням для методу гіпертермії, тому оцінки оптимальних параметрів, які зроблені в рамках проекту, є дуже затребуваними.

Запропонований підхід до керування трансляційним рухом ФНЧ переважає аналоги завдяки розгляду більш загального випадку: коли градієнтне поле є не стаціонарним, а змінним у часі. Зокрема такий підхід надає можливість комбінувати процеси концентрації ФНЧ з процесами їх нагрівання. Також періодичний характер градієнтного поля генерує керовані додатковими стаціонарними полями нові режими транспорту. Відповідно, отримуємо більше можливостей стосовно прецезійного керування транспортом наночастинок.

## **5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проекту для економіки та суспільства.**

Одержані у роботі результати, що стосуються енергетичних втрат в наночастинках, а також виявлених особливостей їх руху в зовнішніх магнітних полях, можуть бути корисними з точки зору практичного використання наноматеріалів в біомедицині. Так, наприклад, транспортні властивості наночастинок в градієнтних і однорідних магнітних полях можуть бути використані для сепарації клітин та адресної доставки ліків. Оскільки змінне у часі градієнтне магнітне поле призводить як до нагрівання наночастинок, так і до їх переміщення, отримані результати можуть бути корисними і в гіпертермії – перспективному методі лікування ракових захворювань.

#### 5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.

Чітке розуміння поведінки кожної частинки є ключем до ефективного використання цих розроблених середовищ. Крім того, це найнадійніший спосіб значного покращення продуктивності застосувань ферорідин. По-перше, очікувані результати мають значення для розробки та вдосконалення техніки безпечної та добре керованої магнітної гіпертермії. Оскільки цей метод пов'язаний зі здоров'ям людини, питання ефективності та безпеки мають першочергове значення. Глибоке розуміння мікроскопічної поведінки кожної магнітної частинки та їх колективної поведінки дозволяють нам виконати всі необхідні передбачення. У зв'язку з цим, основне значення має нелінійна реакція ансамблів частинок на зовнішні дії та її чутливість до внутрішніх параметрів. Деякі ефекти можуть бути небажаними, і в нашому дослідженні будуть запропоновані заходи для їх запобігання. Деякі з них, навпаки, можуть мати практичне значення і бути успішно використані в реальних технологіях. Наше дослідження має на меті запропонувати, як саме їх використовувати.

По-друге, очікувані результати корисні для виробництва високопродуктивних мікрохвильових композитних поглиначів. Такі матеріали можуть стати основою для антирадарного покриття для безпілотних літальних апаратів, броньованих машин, ракет для систем залпового вогню і тактичних балістичних ракет. Нелінійні та колективні ефекти слід враховувати для їх ефективного використання.

Примітка: анотований звіт не містить відомостей заборонених до відкритого опублікування

Науковий керівник Проєкту

Доцент кафедри електроніки, загальної та прикладної фізики

  
(підпис)

Тарас ЛЮТИЙ