

Суперкомпьютерное моделирование магнитных жидкостей



21 Суперкомпьютерное моделирование магнитных жидкостей

Простейшая магнитная жидкость — взвесь очень мелких железных опилок в трансформаторном масле, в обычных условиях ведущая себя как жидкая масса с вязкостью, соответствующей использованному для ее приготовления маслу. Попадая в магнитное поле, такая жидкость резко увеличивает свою вязкость. Причина такого поведения — формирование прочных цепочек из взаимодействующих друг с другом намагнитившихся частиц железа, играющих в данном случае роль строительной арматуры. Компьютерное моделирование позволит разобраться во всех деталях ее хитросплетений и выработать эффективные технологии создания новых материалов с управляемыми в реальном времени свойствами.

АВТОРЫ:

А.В. Теплухин – канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., Институт математических проблем биологии РАН, г. Пущино,
e-mail: tepl@impb.psn.ru

Описание проблемы

В последние годы резко повысился интерес к использованию нового класса «умных» материалов — дисперсий наночастиц ферромагнетика в различных жидкостях. Реологические (вязкостно-упругостные) характеристики таких сред контролируются воздействием магнитного поля и могут варьировать в очень широких пределах. Однако широта практического использования магнореологических эффектов в различных областях техники (гасители вибраций, демпферы-амортизаторы, электрические замки и т.п.) резко контрастирует с медленным развитием теоретических представлений об особенностях их структуры и свойств, позволяющих корректно описывать реакцию «магнитной жидкости» в широком диапазоне приложенных силовых полей. Используемые в материаловедении подходы, основанные на феноменологических моделях, недостаточно надежны для таких сред. Компьютерное моделирование магнитных дисперсий с помощью методов, применяемых для исследования структуры молекулярных жидкостей, вполне может способствовать решению отмеченных выше проблем.

Методы и технологии

В качестве компьютерной модели магнитной жидкости рассматривается система из нескольких сотен тысяч «магнитомягких» наночастиц сферической формы, занимающих кубическую ячейку пространства (дисперсии в трансформаторном масле с объемными долями частиц 10 и 25 %). Для устранения поверхностных эффектов на ячейку налагаются периодические граничные условия. Будем считать, что намагниченность отдельной частицы не зависит от состояния окружающих частиц, определяясь только величиной напряженности однородного внешнего магнитного поля \mathbf{V} , включаемого перпендикулярно одной из граней ячейки. Предположим также, что форма и размер частиц не изменяются, а частицы взаимодействуют в среде с локальной магнитной проницаемостью равной 1. Тогда поле намагниченной частицы можно заменить полем эквивалентного магнитного диполя. В рамках рассматриваемой модели векторы магнитных дипольных моментов будут параллельны друг другу и силовым линиям внешнего поля.

Движение частиц осуществляется в процессе компьютерного моделирования методом Монте-Карло, выполняемого в соответствии с процедурой Метрополиса [1] при комнатной температуре. Столь большое число частиц в мо-

дели диктуется масштаб структурных корреляций в «магнитных» жидкостях. Расчеты систем такого размера требуют значительных вычислительных ресурсов и выполняются на суперкомпьютерах путем параллельных вычислений [2].

Многопроцессорная вычислительная среда дает возможность параллельного выполнения нескольких испытаний на основе выборки по Метрополису, что существенно ускоряет расчеты. Для этого моделируемая элементарная ячейка кубической формы представляется в виде совокупности кубов меньшего объема, образующих регулярную пространственную решетку. Расчеты выполнялись на 512 процессорах в Межведомственном суперкомпьютерном Центре РАН. Каждый из процессоров, задействованных в решении данной задачи (одинаковые для всех процессоров инструкции, но разные данные), занят расчетами движения частиц своего куба.

Корректность вычислений по такой схеме возможна при условии статистической независимости частиц (обеспечивается за счет обрезания радиуса взаимодействия), изменяющих свое положение в пространстве на каждом шаге расчетов. Кроме того, в памяти каждого процессора должна храниться и своевременно обновляться информация, необходимая для расчета энергии взаимодействия компонентов каждого куба с частицами из окружающих кубов.

Основные результаты моделирования

На рис. 1 показан общий вид моделируемой ячейки магнитной жидкости в исходной конфигурации. 128 000 одинаковых ферромагнитных частиц радиусом 20 нанометров регулярно распределены по «областям влияния» 512 процессоров. После перемешивания в отсутствие внешнего магнитного поля (стадия моделирования при высокой температуре $\sim 600^\circ\text{C}$) распределение наночастиц полностью разупорядочено (рис. 2). После включения однородного внешнего магнитного поля при комнатной температуре система приобретает вид совокупности большого количества цепочек, ориентированных вдоль силовых линий магнитного поля (рис. 3).

На рис. 4 хорошо видно, что в жидкости с 10 %-ым объемным заполнением наночастицами формируется четко выраженная гексагональная система изолированных и слабо изогнутых жгутов (4–6 скрученных цепочек) или однослойных лент из 5–8 цепочек, расположенных бок о бок. Большая масса «сшивок» в этом образце — всего лишь результат проецирования изгибов этих цепочек на плоскость сечения, проходящую поперек магнитных силовых линий. В системе с 25 %-ым заполнением гексагональные мотивы сохраняются, но

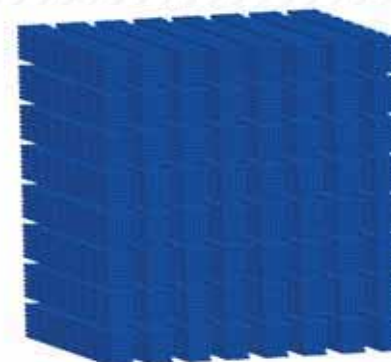


Рис. 1. Исходная конфигурация 128 000 частиц. Размер ребра ячейки – 3,5 мкм



Рис. 2. Структура дисперсии наночастиц после «размешивания»

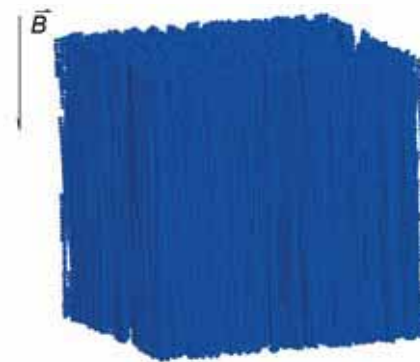


Рис. 3. Структура магнитной жидкости после включения внешнего однородного магнитного поля B (направление показано стрелкой)

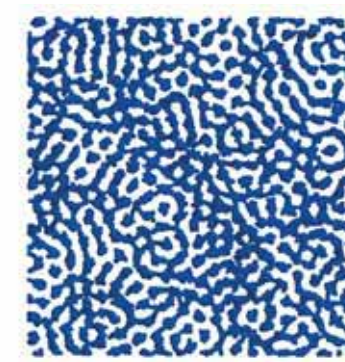


Рис. 4. Структура намагнитченной дисперсии наночастиц с объемным заполнением 10 %. Вид вдоль силовых линий магнитного поля

жгуты и ленты оказываются значительно утолщенными и сросшимися за счет боковых ответвлений (Y-образные бифуркации цепочек).

Равновесные структуры дисперсий с объемным заполнением 10 % и 25 % в магнитном поле были получены и для систем, содержащих смесь из 384 000 сферических ферромагнитных частиц с радиусами 20 и 11,9 нм соответственно (примерно 1:1 по объемам, на одну большую — 4,8 маленьких). Из рис. 5 видно, что крупные частицы формируют гексагональную каркасную структуру, укупанную разупорядоченной шубой мелких частиц. В целом, структура системы

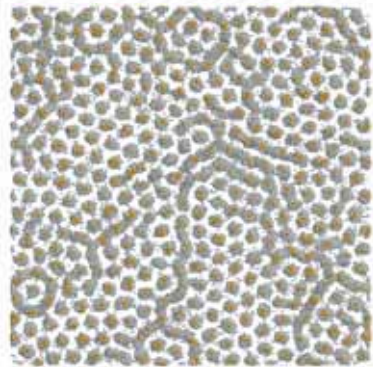


Рис. 5.
Структура намагниченной дисперсии смеси наночастиц различного радиуса (объемное заполнение 10 %). Вид вдоль силовых линий магнитного поля

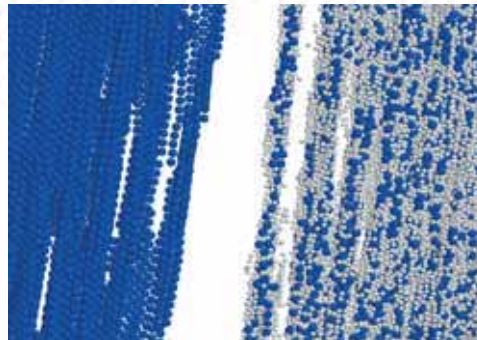


Рис. 6.
Виды цепочек наночастиц в масляных дисперсиях с объемным заполнением 10 %: слева гомогенная система, справа – смесь частиц двух диаметров

жгутов и лент у смеси выглядит более регулярной, чем в гомогенной дисперсии. Но расположение (цепочка) частиц в отдельном жгуте (ленте) гомогенной дисперсии существенно ровнее, чем для смеси (рис. 6). Более подробное изложение результатов моделирования можно найти в работе [3].

Следует отметить, что общий вид концентрированных дисперсий напоминает лабиринтные доменные структуры, формирующиеся в монокристаллических пленках ферритов-гранатов [4].

Перспективы

Как показало моделирование, равновесная структура (а вследствие этого и реологические характеристики) магнитной жидкости существенно зависит от объемной доли наночастиц. В рамках рассмотренной модели влияние величины радиуса частиц и интенсивности внешнего магнитного поля сказывается лишь на значениях энергий межчастичных взаимодействий и не оказывает прямого влияния на структурные характеристики. Однако присутствие частиц различного радиуса может сильно повлиять на структуру дисперсии.

В данной работе не был затронут вопрос о роли формы наночастиц. Тем не менее, это направление исследований может выявить ряд новых механизмов структурообразования в магнитных жидкостях. В первую очередь это относится к исследованию дисперсий частиц, у которых центры приложения сил магнитной и механической природы не совпадают, а также к изучению смесей частиц,

характеризующихся различными размагничивающими факторами (например, смесь дисков и игл). В формировании структуры таких жидкостей величина внешнего магнитного поля уже может играть ключевую роль.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Metropolis N.A., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // J. Chem. Phys. – 1953. – V. 21. – № 6. – P. 1087–1092.
2. Теплухин А.В. Многопроцессорное моделирование гидратации мезоскопических фрагментов ДНК // Математическое моделирование. – 2004. – Т. 16. – №11. – С. 15–24.
3. Теплухин А.В. Моделирование структуры дисперсий наночастиц с индуцированными магнитными диполями // Коллоид. жур. – 2008. – Т. 70. – №6. – С. 824–832.
4. Кандаурова Г.С. Новые явления в низкочастотной динамике коллектива магнитных доменов // Успехи физ. наук. – 2002. – Т. 172. – № 10. – С. 1165–1187.