

## Вклад внешнего магнитного поля в динамику фазового разделения двухкомпонентной магнитной смеси

Александр Янович Гильманов, Наталья Евгеньевна Сараева<sup>✉</sup>,  
Александр Павлович Шевелев

Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия  
Контакт для переписки: [natalia.saraeva@yandex.ru](mailto:natalia.saraeva@yandex.ru)<sup>✉</sup>

**Аннотация.** Фазовое разделение в полимерных смесях с магнитными наночастицами представляет собой перспективное направление в разработке функциональных мембранных материалов, особенно в контексте управляемой морфологии пор и селективности. Современные исследования показывают, что магнитное поле способно существенно влиять на кинетику и структуру фазовой инверсии, однако количественные модели, учитывающие эти эффекты, до настоящего времени развиты слабо. В данной работе предлагается модифицированная фазово-полевая модель Кана–Хиллиарда для двухкомпонентной магнитной смеси, включающая вклад внешнего магнитного поля в свободную энергию системы. Целью исследования является анализ влияния напряженности поля и параметра эффективного взаимодействия на динамику фазового разделения. Новизна работы заключается в численном подтверждении энергетического механизма магнитно-индукционного ускорения фазового разделения и морфологического упорядочивания, что расширяет возможности управляемого синтеза пористых композитов. Модель реализована численно в среде FEniCS с последующей визуализацией в ParaView. Проведен анализ динамики полной свободной энергии  $G(t)$  двухкомпонентной смеси в фазово-полевой модели с учетом внешнего магнитного поля. Расчеты показали, что магнитное поле существенно изменяет ход релаксации системы: при определенных сочетаниях напряженности поля  $H$  и параметра обменного взаимодействия  $\lambda$  система достигает энергетического минимума быстрее. Например, при умеренных  $\lambda$  свободная энергия быстро спадает к стационарному значению, тогда как для очень сильного поля ( $H = 10000$  А/м) процесс релаксации растягивается практически на весь интервал моделирования. Величина

$G(t)$  снижается монотонно, причем конечные значения энергии становятся значительно ниже при возрастании  $H$ , что указывает на усиленный процесс смешения фаз. В то же время при достаточно высоких  $\lambda$  функция  $G(t)$  нелинейно возрастает до стационарного значения. На диаграммах фазовой эволюции процесс увеличения свободной энергии сопровождается стремительным фазовым разделением двухкомпонентной смеси. Таким образом, динамика свободной энергии подтверждает энергетическую природу ускоренного фазового разделения: наличие магнитного поля приводит к переходу системы в более низкое энергетическое состояние и более быстрому установлению равновесного распределения компонентов в указанных режимах.

**Ключевые слова:** фазовое разделение, магнитные наночастицы, уравнение Кана–Хиллиарда, полимерные смеси, фазовая инверсия, численное моделирование, свободная энергия, мембранные материалы, магнитное поле, морфология пор

**Цитирование:** Гильманов А. Я., Сараева Н. Е., Шевелев А. П. 2025. Вклад внешнего магнитного поля в динамику фазового разделения двухкомпонентной магнитной смеси // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. Том 11. № 3 (43). С. 71–92. <https://doi.org/10.21684/2411-7978-2025-11-3-71-92>

Поступила 15.07.2025; одобрена 15.09.2025; принята 23.09.2025

## Contribution of an external magnetic field to the dynamics of phase separation in a binary magnetic mixture

Alexander Ya. Gilmanov, Natalia E. Saraeva<sup>✉</sup>, Alexander P. Shevelev

University of Tyumen, Tyumen, Russia

Corresponding author: natalia.saraeva@yandex.ru<sup>✉</sup>

**Abstract.** Phase separation in polymer mixtures with magnetic nanoparticles is a promising direction in the development of functional membrane materials, especially in the context of controlled pore morphology and selectivity. Modern research shows that the magnetic field can significantly affect the kinetics and structure of phase inversion, but quantitative models that take these effects into account have so far been poorly developed. In this paper, we propose a modified Kahn–Hilliard phase-field model for a two-component magnetic mixture that includes the contribution of an external magnetic field to the free energy of the system. The aim of the study

is to analyze the effect of field strength and the effective interaction parameter on the dynamics of phase separation. The novelty of the work lies in the numerical confirmation of the energy mechanism of magnetically induced acceleration of phase separation and morphological ordering, which expands the possibilities of controlled synthesis of porous composites. The model is implemented numerically in the FEniCS environment with subsequent visualization in ParaView. The dynamics of the total free energy  $G(t)$  of a two-component mixture is analyzed in a phase-field model taking into account an external magnetic field. Calculations have shown that the magnetic field significantly alters the relaxation process of the system: with certain combinations of the field strength  $H$  and the magnetic sensitivity parameter  $\lambda$ , the system reaches an energy minimum faster. For example, at moderate  $\lambda$ , the free energy rapidly decreases to a steady value, whereas for a very strong field ( $H = 10000$  A/m), the relaxation process stretches over almost the entire simulation interval. The value of  $G(t)$  decreases monotonously, and the final energy values become significantly lower as  $H$  increases, which indicates an enhanced phase mixing process. At the same time, at sufficiently high  $\lambda$ , the function  $G(t)$  increases non-linearly to a stationary value. In the diagrams of phase evolution, the process of increasing free energy is accompanied by a rapid phase separation of the two-component mixture. Thus, the dynamics of free energy confirms the energetic nature of accelerated phase separation: the presence of a magnetic field leads to the transition of the system to a lower energy state and a faster establishment of an equilibrium distribution of components in these modes.

**Keywords:** phase separation, magnetic nanoparticles, Cahn–Hilliard equation, polymer blends, phase inversion, numerical modeling, free energy, membrane materials, magnetic field, pore morphology

**Citation:** Gilmanov, A. Ya., Saraeva, N. E., & Shevelev, A. P. (2025). Contribution of an external magnetic field to the dynamics of phase separation in a binary magnetic mixture. *Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy*, 11(3), 71–92. <https://doi.org/10.21684/2411-7978-2025-11-3-71-92>

Received Jul. 15, 2025; Reviewed Sep. 15, 2025; Accepted Sep. 23, 2025

## Введение

Формирование пористых полимерных мембран методом фазовой инверсии основано на контролируемом разделении полимер–растворитель–нелетучий растворитель (или неполярный растворитель) системы из жидкого состояния в твердое [Wienk et al., 1996]. При погружении пленки полимерного раствора в ванну нелетучего растворителя происходит диффузионно-индуцированное расслоение: растворитель быстро покидает полимерный слой и заполняет ванну, а нелетучий растворитель, наоборот, проникает внутрь пленки. Этот процесс можно описать на фазовой диаграмме системы «полимер–растворитель–нелетучий растворитель», где раствор первоначально находится

в гомогенном состоянии и при контакте с нелетучим растворителем («коагулянтом») переходит в метастабильную или нестабильную область. В метастабильной области между кривыми бинодали и спинодали фазовое разделение идет механизмом нуклеации и роста, а в несплошной (спинодальной) области — механизмом разложения спинодали. В первом случае формируется полимерно-разбавленная фаза, которая затвердевает при достижении стеклования состава, после чего поры уже не изменяются; конечная структура представляет собой пористую мембрану с более крупными порами. Во втором случае («спиновое распадение») образуется более равномерная сетчатая структура. Таким образом, исходные условия и путь композиций определяют морфологию пленки: при мгновенном пересечении бинодали (быстрое демикширование) обычно образуются макровакуоли и тонкий пористый поверхностный слой, а при замедленном демикшировании — плотный поверхностный слой и закрытые поры (без макровакуолей) в подструктуре. Наличие добавок (высокомолекулярные или низкомолекулярные) дополнительно влияет на форму траектории изменения состава (т. н. «пути композиции») и, соответственно, на микро- и макроструктуру мембран.

Фазовое разделение полимерного раствора может быть инициировано различными способами:

- изменением температурных условий процесса (TIPS);
- введением нелетучего коагулянта в систему (NIPS);
- воздействием паром нелетучего растворителя (VIPS);
- испарением растворителя (FIPS).

Эти методы лежат в основе различных производственных технологий получения мембран. Ключевым фактором является положение начальной точки раствора на фазовой диаграмме и условия, по которым эта точка смещается в зону неустойчивости.

Влияние **магнитных наночастиц** на формирование мембран стало предметом активных исследований. Добавление магнитных частиц в полимерную матрицу и наложение внешнего магнитного поля позволяют направленно изменять морфологию пор. Например, показано, что введение чистых магнитных наночастиц может **усилить порообразование** благодаря их участию в изменении термодинамического пути фазы при инверсии [Hosseini et al., 2019]. В частности, при наличии магнитного поля частицы склонны мигрировать к поверхности мембраны во время коагуляции, что приводит к более крупной пористости и улучшению гидрофильности пленки [Zinadini et al., 2017]. Экспериментально показано, что отверждение полимерной пленки в магнитном поле (например, порядка 0,1 Тесла) с магнитными наполнителями  $ZnFe_2O_4/SiO_2$  в полимере PES повышает проницаемость мембраны более чем в три раза (с 12 до 38  $kg/(m^2 \cdot ch)$ ) по сравнению с отсутствием поля. Это объясняется тем, что магнитные нанофильтры (в данном случае  $ZnFe_2O_4/SiO_2$ ) при действии поля накапливаются у поверхности полиэфирсульфоновой матрицы, изменяя структуру тонкого поверхностного слоя и делая его более пористым.

В более фундаментальной перспективе зарегистрировано образование упорядоченных магнитных структур при фазовом разделении полимер–растворитель–магнитные

частицы смесей. Так, в экспериментах с ферро раствором, содержащим полимерный компонент, наложенное перпендикулярное магнитное поле приводит к формированию лабиринтных, гексагональных или колонновидных структур с характерным размером порядка микрон [Runsgaard et al., 2010]. Эти структуры возникают из-за перераспределения растворителя между фазами при разделении под действием поля. Наложение магнитного поля приводит к отклонению размеров и форм выростов (капель) от обычных. Эти результаты свидетельствуют о том, что магнитное поле может существенно **стабилизировать крупномасштабные структуры** при фазовом разделении, изменяя кинетику и термодинамику процесса.

Таким образом, в настоящей работе мы расширяем ранее предложенную модель фазового разделения в двухкомпонентной магнитной смеси, учитывая эффекты магнитного поля.

## Математическая модель

Уравнение Кана–Хиллиарда является важным инструментом для моделирования фазовых переходов и структуры в многокомпонентных системах, таких как полимерные смеси [Cahn, Hilliard, 1959]. Оно описывает эволюцию концентрации компонентов системы во времени и пространстве под действием градиентов химического потенциала.

Основное уравнение Кана–Хиллиарда описывает фазовое разделение в смесях, учитывая диффузию, вызванную градиентом химического потенциала, описывает эволюцию параметра порядка. Для смеси, где объемная доля магнитной фазы  $\theta$ , а немагнитной —  $\phi$ , необходимо модифицировать модель, чтобы учесть влияние внешнего магнитного поля и термодинамику смеси. Уравнение Кана–Хиллиарда в стандартной форме:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \nabla \cdot (M_{ij} \nabla \mu_j), \quad (1)$$

где  $M_{ij}$  — это коэффициент подвижности, который может зависеть от концентрации и температуры.

Химический потенциал  $\mu_i$  связан со свободной энергией Гиббса  $G$  следующим образом:

$$\mu_i = \frac{\delta G}{\delta \phi_i}. \quad (2)$$

Свободная энергия Гиббса  $G$  может быть выражена через функционал Ландау–Гинзбурга:

$$G = \int \left( g_m(\phi_i) + \frac{\kappa_i}{2} (\nabla \phi_i)^2 \right) dV, \quad (3)$$

где  $g_m(\phi_i)$  — гомогенная часть свободной энергии Гиббса, а  $\kappa_i$  — параметр градиентной энергии.

Гомогенная часть свободной энергии Гиббса  $g_m(\phi_i)$  может быть выражена через различные термодинамические модели, такие как модель Флори–Хаггинса [Gooch, 2011], модель NRTL [O'Connell, Haile, 2005] или модель PC-SAFT [Chapman et al., 1989]. Например, для бинарной системы модель Флори–Хаггинса может быть записана следующим образом:

$$g_m(\phi_1) = \frac{\phi_1}{N_1} \ln \phi_1 + \frac{1 - \phi_1}{N_2} \ln(1 - \phi_1) + \chi_{\phi\chi} \phi_1 (1 - \phi_1), \quad (4)$$

где  $N_1$  и  $N_2$  — степени полимеризации компонентов, а  $\chi_{\phi\chi}$  — параметр взаимодействия Флори–Хаггинса.

Параметр градиентной энергии  $\kappa_i$  может быть определен через энтропийные и энタルпийные вклады [Inguva et al., 2021]. Например, для бинарной системы:

$$\kappa_i = \kappa_S + \kappa_H, \quad (5)$$

где  $\kappa_S$  и  $\kappa_H$  — это энтропийный и энタルпийный вклады соответственно.

Коэффициент подвижности  $M_{ij}$  может быть выражен через коэффициент диффузии  $D_{ij}$ :

$$M_{ij} = D_{ij} \phi_i (1 - \phi_i). \quad (6)$$

Для двухкомпонентной системы и под действием магнитного поля уравнение Кана–Хиллиарда может быть использовано для моделирования фазовых переходов и структуры. В этом случае свободная энергия Гиббса  $G$  должна включать вклад от магнитного поля:

$$G = \int \left( g_m(\phi_i) + \frac{\kappa_i}{2} (\nabla \phi_i)^2 + g_{\text{mag}}(\phi_i, H) \right) dV, \quad (7)$$

где  $g_{\text{mag}}(\phi_i, H)$  — магнитная часть свободной энергии, которая зависит от концентрации  $\phi_i$  и магнитного поля  $H$ .

Процесс намагничивания определяется полем, действующим на частицу, которое складывается из внешнего поля и собственных полей других частиц (диполь–дипольные взаимодействия) [Dikansky et al., 2021].

$$H_{\text{eff}} = H + \lambda M, \quad (8)$$

где  $M = H_{\text{eff}}$  — намагниченность [Balescu, 1978],  $\lambda$  — параметр эффективного поля. С научной точки зрения учет магнитного вклада в свободную энергию для фазовых переходов обоснован: например, в своем исследовании [Razumov, Shmakov, 2019] рас-

пада сплава Fe–Cu Разумов и Шмаков показали, что в сплаве Fe–Cu магнитная энергия существенно меняет границы спинодала и растворимости. Это согласуется с тем, что магнитный вклад  $\sim M^2$  (при линейном  $\chi$ ) может сдвигать термодинамические кривые. Однако критически важно, насколько точно рассчитана функция  $M(\phi, H)$ . В данной статье используется модель однофазной изотропии и линейности  $M = \chi H$ ; в таком случае магнитный вклад оказывается пропорционален  $H^2$  и действует как поправка к параметру взаимодействия. Это грубое приближение верно для парамагнетиков или слабых ферромагнетиков, но не учитывает сложных эффектов (удельная анизотропия, доменные структуры). Например, в сильном поле и при ферромагнетике намагниченность насыщается, и формула  $-\mu_0 \chi H^2$  перестает быть правильной и необходимо использовать нелинейные модели (например, модель Вейсса или Ланжевена) [Dikansky et al., 2021]. Во многих используют более сложные модели намагниченности, учитывая температурно-зависимый магнитный порядок. Однако в данной работе рассматриваются фазы наполнителей в полимерных растворах, которые могут проявлять не только ферромагнитные свойства частиц, как, например, в смешанных мембранах PES/Fe–Ni [Dan et al., 2023], но парамагнитные ионные жидкости, такие как бутилпиридиния тетрахлорид [Zazybin et al., 2017]. Поэтому упрощение модели в сторону однофазной изотропии и линейности для качественной оценки влияния магнитного поля на общую тенденцию фазового разделения и морфогенез доменов в макроскопическом приближении является допустимым в рамках поставленной задачи и позволяет существенно упростить расчеты без потери физической интерпретируемости результатов.

Подставляя  $M$ , получаем:

$$H_{\text{eff}} = \frac{H}{1 - \lambda \chi_0 \theta}. \quad (9)$$

С учетом теории эффективного поля и магнитной восприимчивости  $\chi = \chi_0 \theta$ , магнитный вклад:

$$g_{\text{mag}}(\phi_i, H) = -M H_{\text{eff}} = -\mu_0 \chi H_{\text{eff}}^2 = -\mu_0 \chi_0 \theta H_{\text{eff}}^2 = -\mu_0 \frac{\chi_0 \theta H^2}{(1 - \lambda \chi_0 \theta)^2}, \quad (10)$$

где  $\theta = 1 - \phi_i$  — концентрация магнитной фазы.

Магнитная часть свободной энергии Гиббса:

$$G_{\text{magnetic}} = -\mu_0 \int \frac{\chi_0 \theta H^2}{(1 - \lambda \chi_0 \theta)^2} dV. \quad (11)$$

Полная свободная энергия Гиббса:

$$G = \int \left( g_m(\phi_i) + \frac{\kappa_i}{2} (\nabla \phi_i)^2 + g_{\text{mag}}(\phi_i, H) \right) dV, \quad (12)$$

$$G = \int \left( \frac{\phi_1}{N_1} \ln \phi_1 + \frac{1 - \phi_1}{N_2} \ln(1 - \phi_1) + \chi_{\phi X} \phi_1 (1 - \phi_1) + \frac{\kappa_S + \kappa_H}{2} (\nabla \phi_i)^2 - \mu_0 \frac{\chi_0 (1 - \phi_i) H^2}{(1 - \lambda \chi_0 (1 - \phi_i))^2} \right) dV. \quad (13)$$

Химический потенциал:

$$\frac{\partial G_{\text{magnetic}}}{\partial \phi_i} = \mu_0 \chi_0 H^2 \cdot \frac{1 + 2\lambda \chi_0 (1 - \phi_1)}{(1 - \lambda \chi_0 (1 - \phi_1))^3}, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial \phi_1} = & \frac{1}{N_1} (\ln \phi_1 + 1) - \frac{1}{N_2} (\ln(1 - \phi_1) + 1) + \chi_{\phi X} (1 - 2\phi_1) - \\ & (\kappa_S + \kappa_H) \nabla^2 \phi_1 + \mu_0 \chi_0 H^2 \cdot \frac{1 + 2\lambda \chi_0 (1 - \phi_1)}{(1 - \lambda \chi_0 (1 - \phi_1))^3}. \end{aligned} \quad (15)$$

Таким образом, получено модифицированное уравнение Кана–Хиллиарда:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_i}{\partial t} &= \nabla \cdot (M_{ij} \nabla \mu_j) \\ &= \nabla \cdot \left[ D_{ij} \phi_i (1 - \phi_i) \nabla \left( \frac{1}{N_1} (\ln \phi_1 + 1) - \frac{1}{N_2} (\ln(1 - \phi_1) + 1) + \chi_{\phi X} (1 - 2\phi_1) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - (\kappa_S + \kappa_H) \nabla^2 \phi_1 + \mu_0 \chi_0 H^2 \cdot \frac{1 + 2\lambda \chi_0 (1 - \phi_1)}{(1 - \lambda \chi_0 (1 - \phi_1))^3} \right) \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

## Численное моделирование

Для решения полученной системы использован метод конечных элементов с помощью библиотеки FEniCS (DolfinX) [FEniCS, n.d.]. Рассматривается двумерная задача на квадратном слое — прототип мембранны — с размером  $L \times L$ , выбранным сопоставимо с типичными толщинами осадка (например,  $L = 100 - 200$  нм в нормированных единицах), хотя все величины могут быть безразмеризованы. Временная эволюция интегрируется явной или неявной схемами (например,  $\theta$ -методом) с малым шагом времени, достаточным для устойчивости.

Для упрощенной модели полагаем **граничные условия** для поля концентрации и химического потенциала, что соответствует отсутствию потока материала через границы:

$$\nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \nabla \mu \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{на } \partial \Omega.$$

Это гарантирует сохранение общего количества вещества в системе. Такие условия естественно применяются при моделировании пленок; аналогичные условия используются в демонстрационных примерах FEniCS для уравнения Кана–Хиллиарда.

Кроме того, вводится начальное случайное возмущение концентрации вокруг среднего значения (обычно  $\phi = 0,5$ ), чтобы запустить фазовое разделение спинодальным механизмом.

Параметры задачи сконструированы так, чтобы иметь физическую размерность или нормировки: коэффициент подвижности  $M$  нормирован так, чтобы обеспечить сравнимые по времени расслоение и коагуляцию (типично  $M \sim 1$ ). Градиентный коэффициент  $\kappa$  выбирается маленьким ( $\kappa \ll 1$ ) для того, чтобы интерфейсные слои были узкими относительно всей системы, но не настолько малыми, чтобы численно было сложно разрешать погон. Температурный (или  $\chi$ ) параметр Флори–Хаггинаса выбирается таким, чтобы бесполевая система действительно разделялась ( $\chi_{\text{ФХ}} = 1,5$ ), как принято в моделях спинодального распада полимер–растворитель [Chapman et al., 1989; König et al., 2021]. В случае магнитного поля учитывается его диапазон: мы варьируем напряженность магнитного поля от  $H = 0$  А/м до 10000 А/м (в соответствии с экспериментальными работами [Пелевина, 2016]). Параметр  $\chi_0$  подобран таким образом, чтобы вклад  $-\chi_0 H^2 \phi$  был соизмерим с Флори–Хаггинсовским потенциалом при выбранных  $H$ ; на практике рассматриваются значения  $\chi_0 \sim 0,10$ .

## Вариационная схема (FEniCS)

В настоящей работе уравнения Кана–Хиллиарда, данные уравнениями (15) и (16), решаются с использованием открытого исходного кода решателя уравнений в частных производных на основе конечных элементов FEniCS.

Начальное условие поля  $\phi_1$  устанавливается равномерно на значении  $\phi_{1,0}$ , нарушаяется случайной переменной шумом величиной 0,01 для инициализации демикширования.

В FEniCS уравнения записываются в слабой форме. Используем смешанное пространство для  $\phi$  и  $\mu$ :

эволюция  $\phi$ :

$$\int \frac{\partial \phi}{\partial t} q dx + \int M \nabla \mu \cdot \nabla q dx = 0; \quad (17)$$

эволюция  $\mu$ :

$$\int \mu v dx - \int \left( \frac{\partial g_m}{\partial \phi} v + (\kappa_s + \kappa_h) \nabla \phi \cdot \nabla v + \frac{\partial g_{\text{mag}}}{\partial \phi} v \right) dx = 0, \quad (18)$$

где  $q(x)$ ,  $v(x)$  — тестовые функции для вариационной (слабой) формы уравнений  $\phi$  и  $\mu$  соответственно.

Определим  $f_{\text{hom}} = g_m + g_{\text{mag}}$ , тогда

$$\frac{\partial f_{\text{hom}}}{\partial \phi} = \frac{\partial g_m}{\partial \phi} + \frac{\partial g_{\text{mag}}}{\partial \phi}. \quad (19)$$

И слабая форма для  $\mu$ :

$$F_1 = \int \mu v dx - \int \frac{\partial f_{\text{hom}}}{\partial \phi} v dx - \int (\kappa_S + \kappa_H) \nabla \phi \cdot \nabla v dx. \quad (20)$$

Исходные данные:

$\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-6}$ с	тестовый шаг по времени;
$M = 1,0$	подвижность фазы;
$N_1 = 1,0$	степень полимеризации фазы 1;
$N_2 = 1,0$	степень полимеризации фазы 2;
$\chi_{\phi x} = 1,5$	параметр Флори–Хаггинса;
$\kappa_S = 0,005$	энтропийный градиентный параметр;
$\kappa_H = 0,005$	энталпийный градиентный параметр;
$\chi_0 = 1,0 \cdot 10^{-1}$	магнитная восприимчивость;
$\lambda = 0,1 \dots 0,3$	параметр эффективного поля;
$H = 0 \dots 10000$	напряженность магнитного поля.

Затем данные моделирования экспортируются в виде серии файлов VTK и подвергаются постобработке с использованием ParaView 5.6.1. Используется цветовая схема по умолчанию «От холодного к теплому», где красные и синие цвета соответствуют регионам, богатыми фазами 1 и 2 соответственно.

Полная свободная энергия системы  $G(t)$  вычисляется на каждом временном шаге как объемный интеграл от суммарного функционала плотности энергии:

$$G = \int \left( g_m(\phi_i) + \frac{\kappa_i}{2} (\nabla \phi_i)^2 + g_{\text{mag}}(\phi_i, H) \right) dV. \quad (21)$$

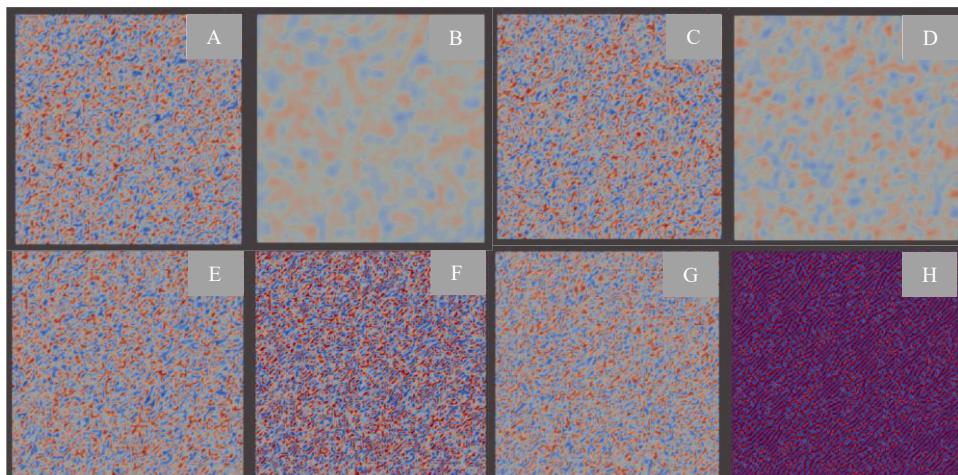
Эволюция  $G(t)$  отслеживалась вычислением этого интеграла на каждом шаге моделирования; таким образом получались кривые зависимости полной свободной энергии от времени. Функция  $G(t)$  является ключевым диагностическим параметром для отслеживания энергетической динамики системы: ее монотонное убывание обычно соответствует процессу смешения, а рост — термодинамически обусловленному разделению фаз.

Расчеты выполнялись в среде FEniCS, интеграция по времени — явной схемой с шагом 1 мкс, пространственная сетка достаточно детализирована для точного учета узких интерфейсных слоев. На каждом шаге формировался вектор значений  $\phi$ , затем по нему вычислялся объемный интеграл для получения  $G(t)$ . Это позволило построить зависимости  $G(t)$  для набора сочетаний  $H \in \{0, 1000, 5000, 10000\}$  А/м и  $\lambda \in [0,1]$ .

## Результаты и обсуждение

На рис. 1 приведены типичные результаты моделирования фазового разделения двухфазной смеси. При отсутствии внешнего поля ( $H = 0$ ) система демиксируется относительно медленно: начальная случайная неоднородность превращается в сплошные домены без явной ориентации (рис. 1A–B). В то же время при сильном поле ( $H = 10000$ ) разделение

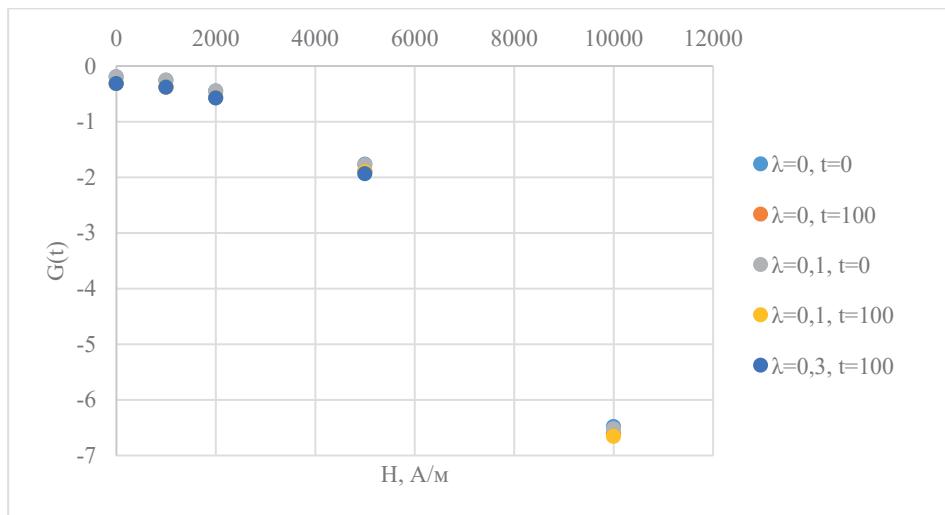
ние фаз заметно ускоряется. Систему уже на 100-м шаге времени можно считать близкой к установившемуся состоянию с разделенными крупными доменами (рис. 1Н). Как видно из сравнения блоков В и D (рис. 1), увеличение  $H$  ведет к более быстрому фазовому разделению и формированию более выраженной доменной структуры. Дополнительно рост параметра  $\lambda$  (усиление эффективного поля взаимодействия диполей) усиливает влияние магнитного поля: при больших  $\lambda$  образующиеся домены становятся заметно удлиненными и выравниваются вдоль направления поля. Это согласуется с общим представлением о поведении магнитных фаз: без поля объекты примерно сферичны, а при наложении поля они ориентируются вдоль него и вытягиваются [Ivanov, Zubarev, 2020].



**Рис. 1.** Фазовая эволюция при  $H = 0$ ,  $\lambda = 0,1$ ,  $\chi_{\phi x} = 1,5$ ,  $\chi = 0,1$ : А) 0t; Б) 100t; фазовая эволюция при  $H = 10000$ ,  $\lambda = 0,1$ ,  $\chi_{\phi x} = 1,5$ ,  $\chi = 0,1$ : С) 0t; Д) 100t; фазовая эволюция при  $H = 10000$ ,  $\lambda = 0,2$ ,  $\chi_{\phi x} = 1,5$ ,  $\chi = 0,1$ : Е) 0t; Ф) 100t; фазовая эволюция при  $H = 10000$ ,  $\lambda = 0,3$ ,  $\chi_{\phi x} = 1,5$ ,  $\chi = 0,1$ : Г) 0t; Н) 100t

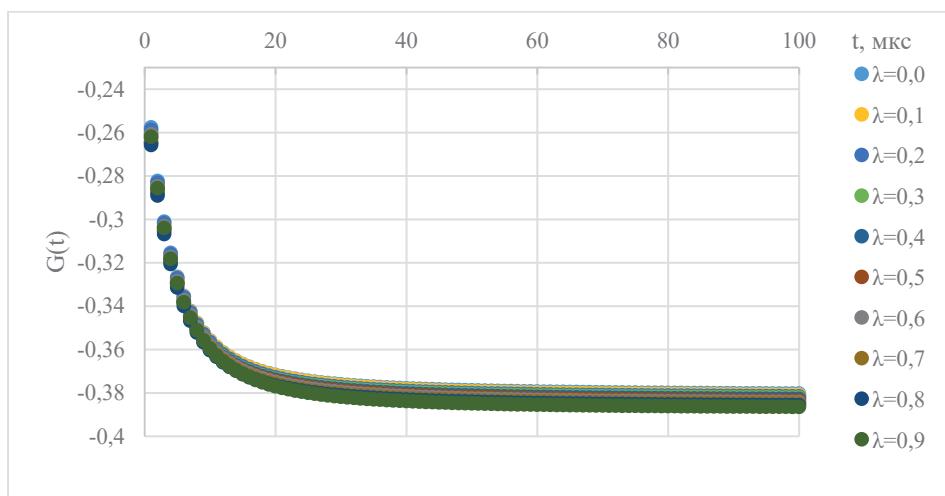
**Fig. 1.** Phase evolution under different magnetic field and interaction parameters:  
 $H = 0$ ,  $\lambda = 0,1$ ,  $\chi_{\phi x} = 1,5$ ,  $\chi = 0,1$ : А) 0t; Б) 100t;  $H = 10000$ ,  $\lambda = 0,1$ ,  $\chi_{\phi x} = 1,5$ ,  $\chi = 0,1$ :  
С) 0t; Д) 100t;  $H = 10000$ ,  $\lambda = 0,2$ ,  $\chi_{\phi x} = 1,5$ ,  $\chi = 0,1$ : Е) 0t; Ф) 100t;  $H = 10000$ ,  $\lambda = 0,3$ ,  
 $\chi_{\phi x} = 1,5$ ,  $\chi = 0,1$ : Г) 0t; Н) 100t

Графики зависимости свободной энергии  $G(t)$  при различных значениях внешнего магнитного поля и параметра обменного взаимодействия  $\lambda$ , представленные на рис. 2–6, демонстрируют характерные особенности кинетики фазового разделения в бинарной магнитной смеси. На начальном этапе эволюции, при  $t \rightarrow 0$ , кривые свободной энергии во всех точках пространственного параметра  $\lambda$  практически совпадают, что отражает отсутствие заметного влияния магнитного поля на исходную метастабильную конфигурацию (см. рис. 2). По мере развития процесса, однако, наблюдается монотонное снижение  $G(t)$ , сопровождаемое формированием энергетического плато, величина и скорость достижения которого оказываются строго зависящими от обоих управляемых параметров.



**Рис. 2.** Зависимость свободной энергии  $G(t)$  от величины внешнего магнитного поля  $H$  при различных  $\lambda$  (параметр обменного взаимодействия) и разных моментах времени фазовой эволюции

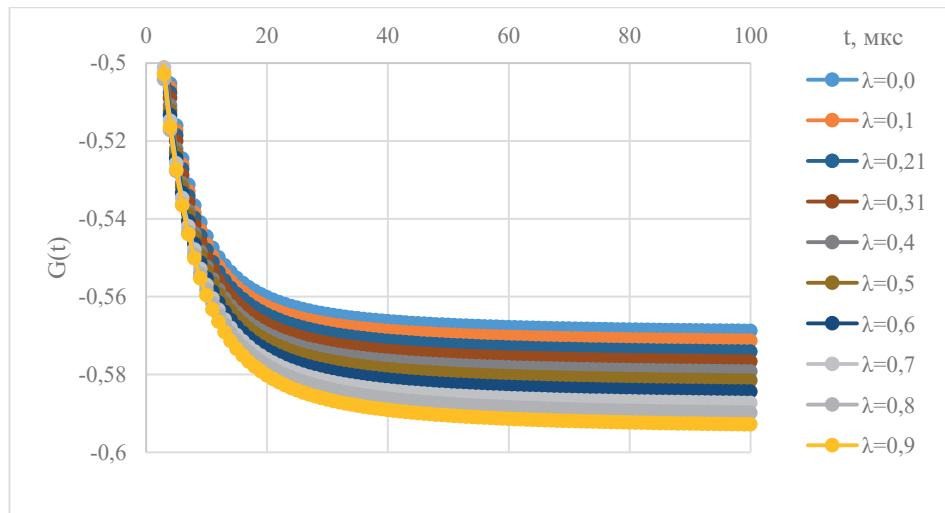
**Fig. 2.** Dependence of the free energy  $G(t)$  on the magnitude of the external magnetic field  $H$  at various  $\lambda$  (exchange interaction parameter) and different moments of time in the phase evolution



**Рис. 3.** Эволюция свободной энергии  $G(t)$  при внешнем магнитном поле  $H = 1000$  А/м при различных  $\lambda$  (параметр обменного взаимодействия)

**Fig. 3.** Evolution of free energy  $G(t)$  under an external magnetic field  $H = 1000$  A/m for various  $\lambda$  (exchange interaction parameter)

При небольших значениях  $H$  ( $H = 1000$  А/м) свободная энергия убывает относительно плавно и продолжительно: на рис. 3 кривые слегка сгущаются к плато лишь при  $t$  порядка 150–200 условных единиц, а различия между кривыми при  $\lambda$  от 0,1 до 0,9 проявляются преимущественно в смещении времени выхода на стационарное состояние и уровне установившейся энергии. Увеличение  $\lambda$  при том же  $H$  приводит к ускорению снижения  $G$  и более раннему формированию плато, что ярко видно в сравнении динамик на рис. 3: кривые при  $\lambda \geq 0,5$  проходят через зону активного спада значительно быстрее, чем при  $\lambda \leq 0,3$ , однако в обеих группах время стабилизации энергии остается существенно большим по сравнению с более сильными полями.



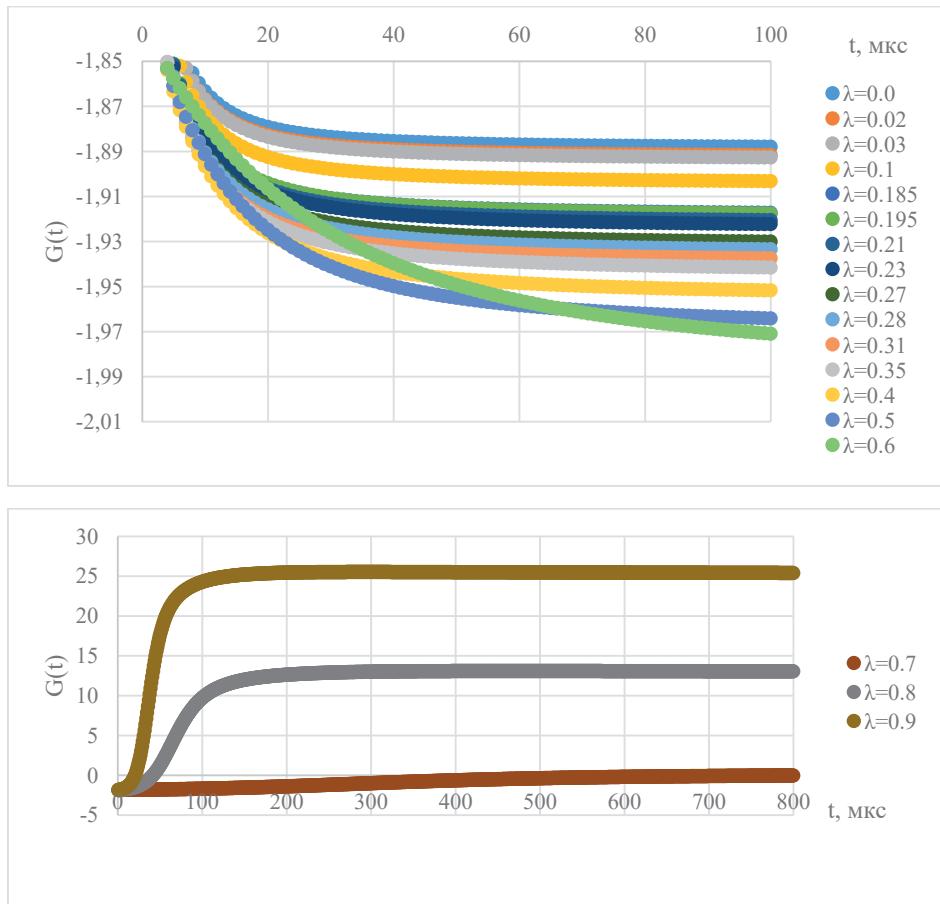
**Рис. 4.** Эволюция свободной энергии  $G(t)$  при внешнем магнитном поле  $H = 2000$  А/м при различных  $\lambda$  (параметр обменного взаимодействия)

**Fig. 4.** Evolution of free energy  $G(t)$  under an external magnetic field  $H = 2000$  A/m for various  $\lambda$  (exchange interaction parameter)

Повышение напряженности поля до  $H = 2000$  А/м (рис. 4) приводит к заметному сокращению характерного времени перехода к плато: большинство кривых достигает стационарного уровня уже при  $t \approx 100$  мкс. При этом разница между динамиками при низких  $\lambda$  и высоких  $\lambda$  становится более выраженной — кривые, относящиеся к  $\lambda = 0,7$  и  $0,9$ , практически «замирают» у минимальных значений  $G$  уже в интервале  $t < 50$  мкс, в то время как графики при  $\lambda = 0,1$ – $0,3$  все еще демонстрируют слабый спад до  $t \approx 80$  мкс. Такая дифференциация обусловливает увеличение амплитуды энергетического выигрыша для больших  $\lambda$  при умеренных полях, но при этом абсолютные значения установившегося  $G$  в всех кривых оказываются ниже, чем при  $H = 1000$  А/м.

При пороговом поле  $H = 5000$  А/м (см. рис. 5) характер поведения  $G(t)$  приобретает двоякое свойство: для  $\lambda \leq 0,3$  свободная энергия демонстрирует сравнительно гладкий переход к плато на интервале  $t \approx 30$ – $50$  мкс, тогда как при  $\lambda \geq 0,5$  наблюдается выраженный

ный «скачок» — резкое падение  $G$  в промежутке  $t \approx 10$ –30 мкс, за которым следуют флюктуации вокруг стабилизированного уровня. Энергетическое плато формируется на более низком значении  $G$ , чем при  $H = 2000$  А/м, и при высоких  $\lambda$  характеризуется не полностью гладкой, а слегка рябой траекторией, указывающей на возможные перестройки микроструктуры уже после первоначального спада.

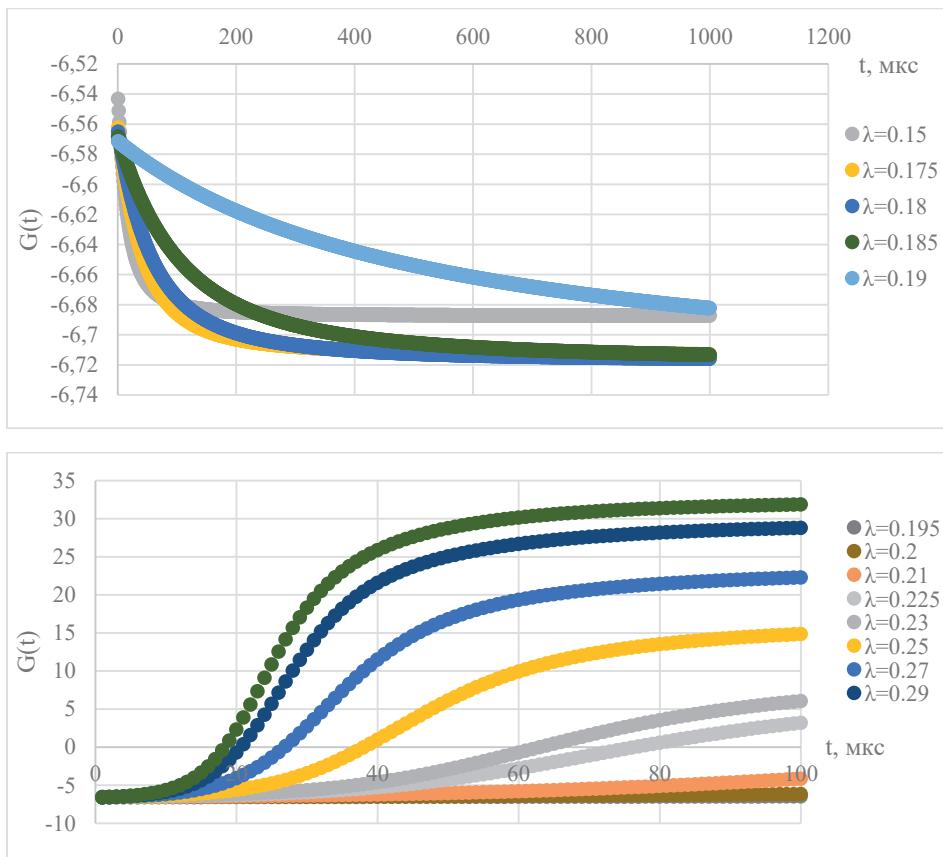


**Рис. 5.** Эволюция свободной энергии  $G(t)$  при внешнем магнитном поле  $H = 5000$  А/м при различных  $\lambda$  (параметр обменного взаимодействия)

**Fig. 5.** Evolution of the free energy  $G(t)$  under an external magnetic field  $H = 5000$  A/m for various  $\lambda$  (exchange interaction parameter)

Максимальное поле  $H = 10000$  А/м (см. рис. 6) обеспечивает максимально стремительную динамику: все кривые сливаются в единый пульсированно-спадающий фронт, приводящий к стационарному уровню в пределах  $t < 20$  мкс. При слабых  $\lambda$  ( $\leq 0,3$ ) плато образуется практически мгновенно, без заметных колебаний, в то время как при  $\lambda \geq 0,5$  на кривых фиксируются незначительные осцилляции даже после основного

спада. Конечные уровни свободной энергии при  $H = 10000$  стабильно находятся ниже аналогичных плато при меньших полях, причем разница между кривыми минимальна, что свидетельствует о доминирующем воздействии внешнего поля над вкладом  $\lambda$  в высокополевом режиме.



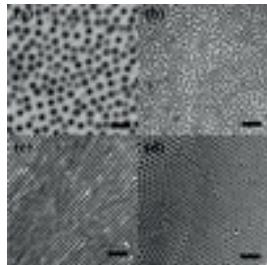
**Рис. 6.** Эволюция свободной энергии  $G(t)$  при внешнем магнитном поле  $H = 10000$  А/м при различных  $\lambda$  (параметр обменного взаимодействия)

**Fig. 6.** Evolution of free energy  $G(t)$  under an external magnetic field  $H = 10000$  A/m for various  $\lambda$  (exchange interaction parameter)

## Анализ динамики свободной энергии при фазовом разделении в магнитной смеси

Нами получены зависимости свободной энергии  $G(t)$  от времени для различных величин внешнего поля  $H$  и параметра обменного взаимодействия  $\lambda$ . При малых  $H$  и  $\lambda$  свободная энергия убывает монотонно — типично для спинодального разложения, аналогично классическим моделям Кана–Хиллиарда без поля. Так, König и соавт. [2021] показали,

что в двухкомпонентной смеси при первоначальной стадии расслоения микроструктура формируется плавно, а характерный размер доменов растет по степенному закону (экспонента около  $1/3$ ). В наших расчетах при  $H = 1000\text{--}2000\text{ A/m}$  заметен подобный монотонный спад  $G(t)$ , что указывает на преобладание спинодальных механизмов.



**Рис. 7.** Экспериментальные структуры фазового разделения в полимере/ферроякдкость под перпендикулярным полем [Rungsawang et al., 2010]: сформировались лабиринтные и столбчатые домены

**Fig. 7.** Experimental structures of phase separation in polymer/ferrofluid under a perpendicular field (Rungsawang et al., 2010): labyrinthine and columnar domains were formed

При возрастании поля  $H$  и особенно параметра  $\lambda$  поведение  $G(t)$  заметно меняется. Наблюдается глубокий начальный спад энергии (активизация демикширования), однако при больших  $\lambda$  ( $\approx 0,7\text{--}0,9$ ) свободная энергия выходит на неровную трассу — перестает убывать и даже резко возрастает (см.  $\lambda=0,7\text{--}0,8$  при  $H = 5000$  на рис. 2). Это свидетельствует о переходе от классического спинодального разложения к магнитно-ориентированным структурам. Rungsawang и соавт. [2010] описали, что под перпендикулярным полем в частично смешиваемой системе формируются постоянные *лабиринтные* или *столбчатые* структуры. На рис. 7 (слева сверху) показаны такие узорчатые домены; они возникают за счет перераспределения жидкостей при демикшировании в присутствии поля. Наши результаты соответствуют этим наблюдениям: при увеличении  $H$  и  $\lambda$  энергетический минимум смещается, а морфология меняется, что приводит к образованию упорядоченных анизотропных доменов.

Иванов и Зубарев [2020] подчеркивают, что при магнетизации частицы образуют цепочки, а каплевидные агрегаты сильно вытягиваются вдоль поля. Действительно, в наших моделях при высоком  $\lambda$  капельные домены («иглы») и цепочки наночастиц остаются вытянутыми по направлению поля и не сливаются в сферические включения. В узких зазорах такое поле стимулирует образование стабильных цилиндрических доменов, балансирующих между силой поверхностного натяжения и демагнетизацией. В работе Иванова показано, что магнетизация домена дает тенденцию к удлинению, что согласуется с экспериментами Genc и др. [2014], где под полем феррочастицы выстраиваются «голова-хвост» (цепи) и формируют анизотропные рассеивающие структуры.

Экспериментальные данные по магнитным системам подтверждают наши выводы. Например, при изготовлении полимерных мембран с магнитными частицами под полем отме-

ченко перераспределение частиц и изменение пористой структуры. Zinadini и соавт. [2017] показали, что введение  $ZnFe_2O_4/SiO_2$ -наночастиц и замена ванночки со средствами коагуляции на магнитную приводят к миграции частиц к поверхности пленки и образованию более пористой гидрофильной оболочки. Это соответствует тому, что внешний магнитный вклад «уводит» частицы в одну область, меняет энергию интерфейса и, как следствие, кинетику расслоения. Аналогично, в экспериментах «магнитофильтр»-мембран наблюдают уменьшение контактного угла и рост потока под действием магнитного поля, что указывает на переориентацию пор и доменов [Hosseini et al., 2019]. Таким образом, дополнение свободной энергии магнитной составляющей приводит к альтернативным механизмам разделения фаз по сравнению с немагнитным случаем.

С позиции известных механизмов разделения: при спинодальном разложении энергия монотонно спадает, домены возникают сразу по всей области образца и затем укрупняются за счет слияния. Именно такое поведение хорошо описано работами типа [König et al., 2021]. В наших моделях при слабом поле найдено схожее поведение: свободная энергия быстро падает на начальной стадии и медленно спадает затем. При более сильном поле (и большом  $\lambda$ ) мы наблюдаем проявления ориентированного фазового разделения: домены уже не сливаются в сферические «капли», а удлиняются и могут стабилизироваться. Это соответствует переходу к spinodal-to-spinodal с магнитной анизотропией или даже к полю-зависимому ядовому рассеянию. Ключевое отличие — появление устоявшихся анизотропных доменов («игл», колонн, лабиринтов), эквивалентное наблюдаемому в [Rungsawang et al., 2010]. При этом в нашем моделировании сильное магнитное взаимодействие снижает конечную энергию системы, что может свидетельствовать о более глубокой метастабильности новой морфологии.

Наконец, магнитный вклад влияет на скорость и результаты разделения. Магнитная энергия диполей и взаимодействие с полем ускоряют начальное демикширование (что видно из резкого спада  $G(t)$  при росте  $H$ ) и одновременно создают энергетические барьеры для укрупнения доменов. В эксперименте это проявляется в «замороженных» схемах разделения — например, Rungsawang и др. [2010] наблюдали постоянные лабиринты, не исчезающие со временем. В наших расчетах при высоком  $\lambda$  свободная энергия  $G(t)$  выходит из монотонности, что указывает на замедление укрупнения: система достигает энергетического минимума в анизотропной конфигурации быстрее и остается в нем (минимум  $G$  при высоких  $\lambda$  меньше, чем при  $\lambda \approx 0$ ). Таким образом, магнитное взаимодействие вносит в свободную энергию дополнительный терм «ориентации», который меняет кинетику фазового разделения и конечную морфологию (домены вытянуты вдоль поля).

Поведение свободной энергии в наших графиках согласуется с теоретическими моделями спинодального разложения (монотонный спад при слабом поле), но демонстрирует новые черты при усилении магнитного взаимодействия — образование ориентированных, устойчивых доменов. Эти особенности совпадают с экспериментальными наблюдениями лабиринтных/игольчатых структур и миграции наночастиц под полем. Магнитный вклад в энергию не только смещает исходное состояние свободной энергии, но и изменяет скорость разделения фаз: он направляет домены вдоль поля и может стабилизировать мелкие структуры, что подтверждается конкретными исследованиями.

## Заключение

Расширенная модель Кана–Хиллиарда, включающая магнитный вклад в свободную энергию Гиббса, позволяет описывать фазовое разделение двухкомпонентных магнитных смесей под действием внешнего поля. Проведенное численное моделирование показало, что внешнее магнитное поле ускоряет фазовое разделение и приводит к формированию более крупных, ориентированных вдоль поля доменов (см. рис. 1). Это свидетельствует о важном вкладе магнитного поля в динамику и термодинамику системы. Анализ динамики полной свободной энергии системы  $G(t)$ , проведенный на основе численного моделирования, продемонстрировал, что внешнее магнитное поле оказывает существенное влияние не только на кинетику, но и на энергетический сценарий фазового разделения. При низких значениях параметра эффективного магнитного взаимодействия  $\lambda$  свободная энергия убывает со временем, что соответствует смешению фаз. Однако при превышении определенного порога ( $\lambda \gtrsim 0,2$ ) функция  $G(t)$  начинает возрастать, отражая термодинамически обусловленное формирование фазовой структуры. Этот эффект особенно выражен при сильных магнитных полях ( $H = 10000$  А/м), где рост энергии сопровождается ускоренным переходом к устойчивому состоянию. Таким образом, энергетическая траектория системы (уход из метастабильного минимума) подтверждает, что магнитное поле может не только ускорять фазовое разделение, но и **качественно менять его термодинамический механизм**. Эти результаты согласуются с современными теоретическими и экспериментальными исследованиями, показывающими, что магнитные взаимодействия способны «выталкивать» систему в более выгодную с точки зрения полной энергии морфологию. Модельная динамика  $G(t)$  служит тем самым не только диагностическим инструментом, но и обоснованием применения магнитного поля для управляемого морфогенеза в полимерных и коллоидных системах для оптимизации и управления свойствами полимерных мембран с магнитными наполнителями, а магнитное поле выступает как дополнительный механизм управления их структурой и производительностью.

## Список источников

- Балеску Р. 1978. Равновесная и неравновесная статистическая механика / пер. с англ. под ред. Д. Н. Зубарева, Ю. Л. Климонтовича. М.: Издательство «Мир». Том 1. 405 с.
- Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. 1982. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука. 624 с.
- Пелевина Д. А. 2016. Форма свободной поверхности магнитной жидкости с цилиндрическим концентратором магнитного поля // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. № 6. С. 15–24. <https://doi.org/10.7868/S0568528116060104>. EDN YSXLDF.
- Bender P., Bogart L. K., Posth O. [et al.]. 2017. Structural and magnetic properties of multi-core nanoparticles analysed using a generalised numerical inversion method // Nature. Scientific Reports. Vol. 7. 45990. <https://doi.org/10.1038/srep45990>
- Cahn J. W., Hilliard J. E. 1959. Free energy of a nonuniform system. III. Nucleation in a two-component incompressible fluid // Journal of Chemical Physics. Vol. 31. Pp. 688–699. <https://doi.org/10.1063/1.1730447>

- Chapman W. G., Gubbins K. E., Jackson G., Radosz M. 1989. SAFT: Equation-of-state solution model for associating fluids // *Fluid Phase Equilibria*. Vol. 52. Pp. 31–38. [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(89\)80308-5](https://doi.org/10.1016/0378-3812(89)80308-5)
- Dan Xu, Chengcai Li, Jinyang Liu, Guojin Liu, Hailin Zhu, Huapeng Zhang, Bin Yu, Yuhai Guo. 2023. PES/Fe3S4@NiO self-cleaning membrane with rapid catalysis for effective emulsion separation and dye degradation // *Journal of Membrane Science*. Vol. 684. 121874. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2023.121874>
- Dikansky Yu. I., Ispiryany A. G., Arefyev I. M., Kunikin S. A. 2021. Effective fields in magnetic colloids and features of their magnetization kinetics // *The European Physical Journal E*. Vol. 44. Article 2. <https://doi.org/10.1140/epje/s10189-021-00015-y>
- FEniCS Project. (n.d.). Cahn–Hilliard Equation Demo. DOLFINx. [https://docs.fenicsproject.org/dolfinx/main/python/demos/demo\\_cahn-hilliard.html](https://docs.fenicsproject.org/dolfinx/main/python/demos/demo_cahn-hilliard.html) (дата обращения 04.01.2025).
- Genc S., Derin B. 2014. Synthesis and rheology of ferrofluids: A review // *Current Opinion in Chemical Engineering*. Vol. 3. Pp. 118–124. <https://doi.org/10.1016/j.coche.2013.12.006>
- Gooch J. W. 2011. Flory–Huggins theory // *Encyclopedic Dictionary of Polymers* / J. W. Gooch (Ed.). New York, NY: Springer. P. 315. [https://doi.org/10.1007/978-1-4419-6247-8\\_5128](https://doi.org/10.1007/978-1-4419-6247-8_5128)
- Hosseini S. M., Afshari M., Fazlali A. R., Koudzari Farahani S., Bandehali S., Van der Bruggen B., Bagheripour E. 2019. Mixed matrix PES-based nanofiltration membrane decorated by ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ –polyvinylpyrrolidone) composite nanoparticles with intensified antifouling and separation characteristics // *Chemical Engineering Research and Design*. Vol. 147. Pp. 390–398. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2019.05.025>
- Ingava P. K., Walker P. J., Yew H. W., Zhu K., Haslam A. J., Matar O. K. 2021. Continuum-scale modelling of polymer blends using the Cahn–Hilliard equation: Transport and thermodynamics // *Soft Matter*. No. 17. Pp. 5645–5665. <https://doi.org/10.1039/D1SM00272D>
- Ivanov A. O., Zubarev A. 2020. Chain formation and phase separation in ferrofluids: The influence on viscous properties // *Materials*. Vol. 13(18). 3956. <https://doi.org/10.3390/ma13183956>
- Ivanov A. O., Zubarev A. Yu. 1999. Kinetics of a ferrofluid phase separation induced by an external magnetic field // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. Vol. 201. No. 1–3. Pp. 222–225. [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(99\)00051-7](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(99)00051-7)
- König B., Ronsin O. J. J., Harting J. 2021. Two-dimensional Cahn–Hilliard simulations for coarsening kinetics of spinodal decomposition in binary mixtures // *Physical Chemistry Chemical Physics*. Vol. 23(43). Pp. 24823–24833. <https://doi.org/10.1039/D1CP03229A>
- Logg A., Mardal K.-A., Wells G. (Eds.). 2012. *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method* // *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Berlin: Springer Berlin, Heidelberg. 731 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-23099-8>
- Nady N., Salem N., Kandil S. H. 2022. Novel magnetic iron–nickel/poly(ethersulfone) mixed matrix membranes for oxygen separation potential without applying an external magnetic field // *Nature. Scientific Reports*. Vol. 12. 13675. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-16979-6>
- O’Connell J. P., Haile J. M. 2005. *NRTL Model* // *Thermodynamics: Fundamentals for Applications*. Cambridge: Cambridge University Press. Pp. 636–638, appendices.
- Razumov I. K., Shmakov I. G. 2019. The model of decomposition of a Fe–Cu alloy with concentration-depending interatomic interactions // *Physics of the Solid State*. Vol. 61. Pp. 952–961. <https://doi.org/10.1134/S1063783419060180>

- Rodríguez-Arco L., López-López M. T., Durán J. D. G., Zubarev A., Chirikov D. 2011. Stability and magnetorheological behaviour of magnetic fluids based on ionic liquids // *Journal of Physics: Condensed Matter*. Vol. 23. No. 45. 455101. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/23/45/455101>
- Rungsawang R., da Silva J., Wu C.-P., Sivaniah E., Ionescu A., Barnes C. H. W., Darton N. J. 2010. Magnetically induced pattern formation in phase separating polymer-solvent-nanoparticle mixtures // *Physical Review Letters*. Vol. 104. No. 25. 255703. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.255703>
- Tsouris C., Scott T. C. 1995. Flocculation of paramagnetic particles in a magnetic field // *Journal of Colloid and Interface Science*. Vol. 171(2). Pp. 319–330. <https://doi.org/10.1006/jcis.1995.1186>
- Wienk I. M., Boom R. M., Beerlage M. A. M., Bulte A. M. W., Smolders C. A., Strathmann H. 1996. Recent advances in the formation of phase inversion membranes made from amorphous or semi-crystalline polymers // *Journal of Membrane Science*. Vol. 113. No. 2. Pp. 361–371. [https://doi.org/10.1016/0376-7388\(95\)00256-1](https://doi.org/10.1016/0376-7388(95)00256-1)
- Zazybin A. G., Rafikova Kh., Yu V., Zolotareva D., Dembitsky V. M., Sasaki T. 2017. Metal-containing ionic liquids: Current paradigm and applications // *Russian Chemical Reviews*. Vol. 86(12). Pp. 1254–1270. <https://doi.org/10.1070/RCR4743>
- Zinadini S., Zinatizadeh A. A. L., Rahimi M., Vatanpour V. 2017. Magnetic field-augmented coagulation bath during phase inversion for preparation of  $ZnFe_2O_4/SiO_2/PES$  nanofiltration membrane: A novel method for flux enhancement and fouling resistance // *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*. Vol. 46. Pp. 9–18. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2016.08.005>

## References

- Balescu, R. (1978). *Equilibrium and nonequilibrium Statistical Mechanics* (Transl. from English and ed. by D. N. Zubarev, Yu. L. Klimontovich). Vol. 1. Mir. [In Russian]
- Landau, L. D., & Lifshits, E. M. (1982). *Electrodynamics of Continuous Media*. Nauka. [In Russian]
- Pelevina, D. A. (2016). Shape of the free surface of a magnetic fluid containing a cylindrical concentrator of the magnetic field. *Fluid Dynamics*, 6, 15–24. <https://doi.org/10.7868/S0568528116060104>. EDN YSXLD. [In Russian]
- Bender, P., Bogart, L. K., Posth, O. [et al.]. (2017). Structural and magnetic properties of multi-core nanoparticles analysed using a generalised numerical inversion method. *Nature. Scientific Reports*, 7, 45990. <https://doi.org/10.1038/srep45990>
- Cahn, J. W., & Hilliard, J. E. (1959). Free energy of a nonuniform system. III. Nucleation in a two-component incompressible fluid. *Journal of Chemical Physics*, 31, 688–699. <https://doi.org/10.1063/1.1730447>
- Chapman, W. G., Gubbins, K. E., Jackson, G., & Radosz, M. (1989). SAFT: Equation-of-state solution model for associating fluids. *Fluid Phase Equilibria*, 52, 31–38. [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(89\)80308-5](https://doi.org/10.1016/0378-3812(89)80308-5)
- Dan, Xu, Chengcui, Li, Jinyang, Liu, Guojin, Liu, Hailin, Zhu, Huapeng, Zhang, Bin, Yu, & Yuhai, Guo. (2023). PES/Fe3S4@NiO self-cleaning membrane with rapid catalysis for effective emulsion separation and dye degradation. *Journal of Membrane Science*, 684, 121874. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2023.121874>

- Dikansky, Yu. I., Ispiryan, A. G., Arefyev, I. M., & Kunikin, S. A. (2021). Effective fields in magnetic colloids and features of their magnetization kinetics. *The European Physical Journal E*, 44, 2. <https://doi.org/10.1140/epje/s10189-021-00015-y>
- FEniCS Project. (n.d.). *Cahn–Hilliard Equation Demo. DOLFINx*. Retrieved January 4, 2025, from [https://docs.fenicsproject.org/dolfinx/main/python/demos/demo\\_cahn-hilliard.html](https://docs.fenicsproject.org/dolfinx/main/python/demos/demo_cahn-hilliard.html)
- Genc, S., & Derin, B. (2014). Synthesis and rheology of ferrofluids: A review. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 3, 118–124. <https://doi.org/10.1016/j.coche.2013.12.006>
- Gooch, J. W. (2011). Flory–Huggins theory. In J. W. Gooch (Ed.), *Encyclopedic Dictionary of Polymers*. Springer. P. 315. [https://doi.org/10.1007/978-1-4419-6247-8\\_5128](https://doi.org/10.1007/978-1-4419-6247-8_5128)
- Hosseini, S. M., Afshari, M., Fazlali, A. R., Koudzari Farahani, S., Bandehali, S., Van der Bruggen, B., & Bagheripour, E. (2019). Mixed matrix PES-based nanofiltration membrane decorated by ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ –polyvinylpyrrolidone) composite nanoparticles with intensified antifouling and separation characteristics. *Chemical Engineering Research and Design*, 147, 390–398. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2019.05.025>
- Inguva, P. K., Walker, P. J., Yew, H. W., Zhu, K., Haslam, A. J., & Matar, O. K. 2021. Continuum-scale modelling of polymer blends using the Cahn–Hilliard equation: Transport and thermodynamics. *Soft Matter*, (17), 5645–5665. <https://doi.org/10.1039/D1SM00272D>
- Ivanov, A. O., & Zubarev, A. (2020). Chain formation and phase separation in ferrofluids: The influence on viscous properties. *Materials*, 13(18), 3956. <https://doi.org/10.3390/ma13183956>
- Ivanov, A. O., & Zubarev, A. Yu. (1999). Kinetics of a ferrofluid phase separation induced by an external magnetic field. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 201(1–3), 222–225. [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(99\)00051-7](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(99)00051-7)
- König, B., Ronsin, O. J. J., & Harting, J. (2021). Two-dimensional Cahn–Hilliard simulations for coarsening kinetics of spinodal decomposition in binary mixtures. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 23(43), 24823–24833. <https://doi.org/10.1039/D1CP03229A>
- Logg, A., Mardal, K.-A., & Wells, G. (Eds.). (2012). *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer Berlin, Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-23099-8>
- Nady, N., Salem, N., & Kandil, S. H. (2022). Novel magnetic iron–nickel/poly(ethersulfone) mixed matrix membranes for oxygen separation potential without applying an external magnetic field. *Nature. Scientific Reports*, 12, 13675. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-16979-6>
- O’Connell, J. P., & Haile, J. M. (2005). NRTL Model. In *Thermodynamics: Fundamentals for Applications*. Pp. 636–638, appendices. Cambridge University Press.
- Razumov, I. K., & Shmakov, I. G. (2019). The model of decomposition of a Fe–Cu alloy with concentration-depending interatomic interactions. *Physics of the Solid State*, 61, 952–961. <https://doi.org/10.1134/S1063783419060180>
- Rodríguez-Arco, L., López-López, M. T., Durán, J. D. G., Zubarev, A., & Chirikov, D. (2011). Stability and magnetorheological behaviour of magnetic fluids based on ionic liquids. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 23(45), 455101. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/23/45/455101>
- Rungsawang, R., da Silva, J., Wu, C.-P., Sivaniah, E., Ionescu, A., Barnes, C. H. W., & Darton, N. J. (2010). Magnetically induced pattern formation in phase separating polymer-solvent-nanoparticle mixtures. *Physical Review Letters*, 104(25), 255703. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.255703>

- Tsouris, C., & Scott, T. C. (1995). Flocculation of paramagnetic particles in a magnetic field. *Journal of Colloid and Interface Science*, 171(2), 319–330. <https://doi.org/10.1006/jcis.1995.1186>
- Wienk, I. M., Boom, R. M., Beerlage, M. A. M., Bulte, A. M. W., Smolders, C. A., & Strathmann, H. (1996). Recent advances in the formation of phase inversion membranes made from amorphous or semi-crystalline polymers. *Journal of Membrane Science*, 113(2), 361–371. [https://doi.org/10.1016/0376-7388\(95\)00256-1](https://doi.org/10.1016/0376-7388(95)00256-1)
- Zazybin, A. G., Rafikova, Kh., Yu, V., Zolotareva, D., Dembitsky, V. M., & Sasaki, T. (2017). Metal-containing ionic liquids: Current paradigm and applications. *Russian Chemical Reviews*, 86(12), 1254–1270. <https://doi.org/10.1070/RCR4743>
- Zinadini, S., Zinatizadeh, A. A. L., Rahimi, M., & Vatanpour, V. (2017). Magnetic field-augmented coagulation bath during phase inversion for preparation of ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/SiO<sub>2</sub>/PES nanofiltration membrane: A novel method for flux enhancement and fouling resistance. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 46, 9–18. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2016.08.005>

## Сведения об авторах

Александр Янович Гильманов, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра моделирования физических процессов и систем, Школа естественных наук, Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия  
a.y.gilmanov@utmn.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7115-1629>

Наталья Евгеньевна Сараева, аспирант, кафедра прикладной и технической физики, Школа естественных наук, Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия  
natalia.saraeva@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0003-8717-3851>

Александр Павлович Шевелев, доктор физико-математических наук, профессор, кафедра моделирования физических процессов и систем, Школа естественных наук, Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия  
a.p.shevelev@utmn.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0017-4871>

## Information about the authors

Alexander Ya. Gilmanov, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Department of Modeling of Physical Processes and Systems, School of Natural Sciences, University of Tyumen, Tyumen, Russia  
a.y.gilmanov@utmn.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7115-1629>

Natalia E. Saraeva, Postgraduate Student, Department of Applied and Technical Physics, School of Natural Sciences, University of Tyumen, Tyumen, Russia  
natalia.saraeva@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0003-8717-3851>

Alexander P. Shevelev, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Department of Modeling of Physical Processes and Systems, School of Natural Sciences, University of Tyumen, Tyumen, Russia  
a.p.shevelev@utmn.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0017-4871>