01;14

Решение обратной краевой задачи для модели распределения наночастиц в магнитном поле

© Ф.Г. Рутберг¹, Е.Г. Абрамов², Е.В. Богомолова², В.А. Коликов¹, Л.К. Панина², В.Н. Снетов¹

¹ Институт электрофизики и электроэнергетики РАН, Санкт-Петербург ² Санкт-Петербургский государственный университет E-mail: kolikov1@yandex.ru

Поступило в Редакцию 6 апреля 2015 г.

Сформулирована и решена обратная задача определения области, в которой скорости перемещения магнитных наночастиц или модифицированных ими биологических клеток (микроагрегатов) под действием магнитного поля обращаются в ноль. Определены изолинии нулевых скоростей для трех вариантов расположения постоянного магнита. Решение обратной задачи в поле тяготения при заданных магнитной индукции, плотности среды, концентрации микроагрегатов, размере наночастиц и их намагниченности зависит от размера биоклетки и числа наночастиц, присоединенных к ней, и позволяет определять область захвата микроагрегатов магнитным полем.

В последние годы заметно возрос интерес исследователей к разработкам новых методов производства наночастиц [1,2], в том числе магнитных, и их использования для модификации биологических структур [3]. Суперпарамагнитные наночастицы широко используются в медико-биологических приложениях [4]. Актуальным направлением использования магнитных наночастиц является экология [5]. Для успешного развития и применения технологий, основанных на свойстве микроагрегатов перемещаться в магнитном поле, разрабатываются биологически совместимые покрытия [6]. Данное свойство микроагрегатов дает возможность разрабатывать новые методы сепарации и осаждения [7], управления клетками и их колониями [8]. Традиционный подход, используемый в механике сплошных сред, позволяет создавать математические модели, описывающие так называемые "магнитные жидкости" с одинаковой по всему объему намагниченностью или прово-

23



Рис. 1. Расчетная область эксперимента.

дящие жидкости и газы, намагниченность которых является следствием приложения к ним внешней ЭДС [9].

Известно, что решение обратных краевых задач направлено на построение контура области с заданными свойствами. Для биомедицинских и биоинженерных приложений необходимо сформулировать обратную задачу поиска координат области, в которой скорости движения магнитных наночастиц или микроагрегатов обращаются в ноль. Основные допущения при создании подобной модели сводятся к тому, что вода неподвижна и имеет пренебрежимо низкую электропроводность. В нашем случае при решении обратной краевой задачи рассматриваются воздействия только магнитного и гравитационного



Рис. 2. Изолинии плотности потока магнитной индукции в плоскости *x* = 0.

полей на микроагрегаты. Сила, действующая на единичный объем жидкости и ансамбль частиц, в которой отсутствует ток проводимости, т. е. rot $\mathbf{H} = 0$:

$$\mathbf{f} = \nabla_B (\mathbf{M} \ \mathbf{B}). \tag{1}$$

Для крупных магнитных частиц намагниченность **М** является функцией от напряженности магнитного поля и времени [10] и описывается функцией Ланжевена в рамках явления суперпарамагнетизма. Полагаем, что намагниченность наноструктуры размером, большим одного домена, но содержащей однодоменные наночастицы, также описывается функцией Ланжевена при условии сферической формы наноструктуры и равномерности заполнения наночастицами ее объема [11]. Рассматривая

микроагрегат как ансамбль встроенных в него суперпарамагнитных наночастиц, полагаем, что магнитный момент одного такого агрегата

$$\mathbf{j} = \frac{4}{3} N_n \pi r_n^3 M_s L \left(\frac{4\pi_n^3 M_s B}{3kT} \right) \frac{\mathbf{B}}{B},\tag{2}$$

где N_n — число наночастиц, r_n — радиус наночастицы, M_s — скалярная величина магнитного насыщения материала однодоменной частицы, B — величина магнитной индукции, а $L(\xi) = \operatorname{cth}(\xi) - \frac{1}{\xi}$ — функция Ланжевена.

Рассмотрим случай, когда магнитное и гравитационное поля, выталкивающая сила уравновешивают друг друга так, что микроагрегат неподвижен, а сила трения отсутствует:

$$0 = \frac{\nabla_B (\mathbf{J} \cdot \mathbf{B})}{m} + \frac{4\pi r_m^3 \mathbf{g}(\rho - \rho_0)}{3m}.$$
 (3)

Заменим массу частицы *m* на ее плотность ρ :

$$0 = \frac{3\nabla_B(\mathbf{J} \cdot \mathbf{B})}{4\pi r_m^3 \rho} + \mathbf{g} \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right). \tag{4}$$

Используя формулу (2), запишем формулу (4) как

$$L(\xi) \operatorname{grad} B = \frac{r_m^3 \mathbf{g}(\rho_0 - \rho)}{r_n^3 N_n M_s}.$$
(5)

Полученную формулу используем для численного эксперимента, в котором микроагрегаты, находящиеся в закрытом сосуде, осаждаются на его стенке под действием магнитного поля магнита. Расчетная область эксперимента представлена на рис. 1.

На рис. 2 представлены изолинии плотности потока магнитной индукции в плоскости x = 0 расчетной области для двух вариантов расположения магнита. Решение обратной задачи при заданных магнитной индукции, плотности среды, концентрации микроагрегатов, размере наночастиц и их намагниченности зависит от размера микроагрегата и числа наночастиц, присоединенных к одной биоклетке. На рис. 3 представлено решение обратной задачи в плоскости x = 0 расчетной области в виде изолиний нулевой скорости микроагрегатов. Диаметр



Письма в ЖТФ, 2015, том 41, вып. 18



Письма в ЖТФ, 2015, том 41, вып. 18

микроагрегатов варьируется от 1.2 до 2.4 µm, число наночастиц, приходящихся на клетку, 200, 400, 600, 800, 1000 (слева направо). Согласно представленным решениям, увеличение числа наночастиц на клетке или же уменьшение ее размера увеличивает размер области в сосуде, в пределах которой клетки осаждаются магнитным полем.

Таким образом, сформулирована и решена обратная задача, позволяющая находить в магнитном и гравитационном полях изолинии нулевых скоростей биологических клеток, модифицированных суперпарамагнитными наночастицами.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 14-08-01279-А.

Список литературы

- [1] Rutberg Ph.G., Kolikov V.A., Kurochkin V.E., Panina L.K., Rutberg A.Ph. // IEEE Trans. Plasma Sci. 2007. V. 35. N 4. P. 1111–1118.
- [2] Рутберг Ф.Г., Коликов В.А., Курочкин В.Е., Мальцев В.Г. Способ производства наночастиц: Пат. на изобр. № 2272697. Приоритет 07 сентября 2004 г., зарег. 27 марта 2006 г.
- [3] Рутберг Ф.Г., Коликов В.А., Снетов В.Н., Стогов А.Ю., Абрамов Е.Г., Богомолова Е.В., Панина Л.К. // ЖТФ. 2012. Т. 82. В. 12. С. 52–57.
- [4] Gupta A.K., Gupta M. // Biomaterials. 2005. V. 26. N 18. P. 3995-4021.
- [5] Tang S.C.N., Lo I.M.C. // Water research. 2013. V. 47. P. 2613–2632.
- [6] Fakhrullin R., Garcia-Alonso J., Paunov V.A. // Soft Matter. 2010. N 6. P. 391–397.
- [7] Pamme N., Wilhelm C. // Lab. Chip. 2006. V. 6. P. 974-980.
- [8] Wilhelm C. et al. // Physic. Rev. 2007. V. 75. N 4. P. 041 906 (1-6).
- [9] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 8. Электродинамика сплошных сред. М.: Физматлит, 2005. 656 с.
- [10] Сыроватский С.И. // УФН. 1957. Т. 62. В. 3. С. 247-303.
- [11] Шлиомис М.И. // УФН. 1974. Т. 112. В. 3. С. 427-458.