

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

ИНСТИТУТ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК И МАТЕМАТИКИ

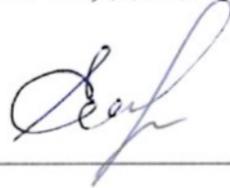
Кафедра теоретической и математической физики

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА
ПОГЛОЩЕНИЯ ЭНЕРГИИ ПЕРЕМЕННОГО ПОЛЯ В
ФЕРРОЖИДКОСТЯХ И ФЕРРОКОМПОЗИТАХ КАК ОСНОВА
РАЗВИТИЯ МЕТОДА МАГНИТНОЙ ГИПЕРТЕРМИИ**

Направление подготовки 01.04.01 «Современные проблемы математики»

Зав. кафедрой:

д. ф.-м. н., доц. Е. А. Елфимова



Магистерская диссертация

**Кузнецовой
Анастасии Андреевны**



Нормоконтролер:

к. ф.-м. н. Е. С. Пьянзина



Научный руководитель:

д. ф.-м. н., доц. Е. А. Елфимова



Екатеринбург

2022

РЕФЕРАТ

Кузнецова Анастасия Андреевна, «Математическое моделирование процесса поглощения энергии переменного поля в феррожидкостях и феррокомпозитах как основа развития метода магнитной гипертермии». Работа содержит 51 страницу, 17 рисунков. Список литературы содержит 20 наименований.

Ключевые слова: МАГНИТНЫЕ ЧАСТИЦЫ, МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ, УРАВНЕНИЕ ФОККЕРА-ПЛАНКА-БРАУНА, ПЛОТНОСТЬ ВЕРОЯТНОСТИ, ДИНАМИЧЕСКАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ, УДЕЛЬНАЯ ПОГЛОЩАЕМАЯ МОЩНОСТЬ, МЕЖЧАСТИЧНЫЕ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Целью работы является исследование процесса поглощения энергии переменного магнитного поля в концентрированных феррожидкостях и феррокомпозитах, которые моделировались системой взаимодействующих подвижных или обездвиженных магнитных частиц.

В работе, основываясь на решении уравнения Фоккера-Планка-Брауна аналитически определена динамическая магнитная восприимчивость обездвиженных магнитных частиц к слабым переменным магнитным полям с учетом межчастичных диполь-дипольных взаимодействий. Полученное решение, а также известные из литературы аналитические и численные данные динамической восприимчивости ансамбля магнитных частиц использовались для моделирования и анализа удельной поглощаемой мощности в зависимости от режимных параметров рассматриваемой системы.

В первой главе представлен обзор литературы, связанной с данной тематикой работы.

Во второй главе описана математическая модель системы взаимодействующих обездвиженных магнитных частиц и даны определения магнитных характеристик рассматриваемой системы.

В третьей главе получены формулы для динамической восприимчивости ансамбля обездвиженных взаимодействующих магнитных частиц, а также

приведен обзор известных из литературы аналитических формул и численных результатов расчета динамической восприимчивости подвижных и обездвиженных магнитных частиц.

В четвертой главе получена формула, построены графики и проанализировано поведение удельной поглощаемой мощности для моделей подвижных и обездвиженных магнитных частиц. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. Построенная в этой главе теория является основой для применения мягких магнитных материалов в медико-биологических приложениях, использующих метод магнитной гипертермии.

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

SLP – удельная поглощаемая мощность;

HLC – коллагеновая белковая оболочка;

\vec{n} – ось легкого намагничивания;

\vec{m}_i – магнитный момент частицы;

V – объем мягкого магнитного материала;

n – числовая концентрация магнитных частиц в магнитном материале;

N – общее количество магнитных частиц в магнитном материале;

R – радиус цилиндрической трубки;

\vec{H} – переменное магнитное поле;

h – амплитуда переменного магнитного поля;

ω – угловая частота переменного магнитного поля;

t – время;

m – модуль магнитного момента;

M_s – намагниченность насыщения магнитного материала;

d – диаметр частицы;

τ – время релаксации магнитного момента;

σ – параметр магнитной анизотропии;

K – константа кристаллографической магнитной анизотропии;

k_B – постоянная Больцмана;

T – температура среды;

\tilde{U} – полная потенциальная энергия системы;

\vec{r} – расстояние между двумя магнитными частицами;

α – параметр Ланжевена;

μ_0 – магнитная постоянная;

χ_L – восприимчивость Ланжевена;

χ – динамическая восприимчивость;

χ' – реальная часть динамической восприимчивости;

χ'' – мнимая часть динамической восприимчивости;

η – вязкость среды;

l – ширина слоя, покрывающего частицы;

f – частота переменного магнитного поля;

ρ – плотность материала магнитной частицы;

ϕ – объемная концентрация магнитных частиц в магнитном материале.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	7
Глава 1. Обзор литературы	9
Глава 2. Математическая модель	12
Глава 3. Исследование динамики магнитных частиц во внешнем магнитном поле	16
3.1 Модель обездвиженных магнитных частиц. Исследование динамической восприимчивости.....	16
3.1.1 Аналитическое решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна. Одночастичное приближение	16
3.1.2 Аналитическое решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна с учетом взаимодействия между частицами	21
3.2 Модель подвижных взаимодействующих магнитных частиц. Формулы динамической восприимчивости.....	25
Глава 4. Удельная поглощаемая мощность систем взаимодействующих магнитных частиц	27
4.1 SLP модели обездвиженных магнитных частиц под действием внешнего магнитного поля	27
4.2 SLP модели подвижных частиц под действием внешнего магнитного поля.....	33
4.3 Сравнение теории с экспериментальными данными	37
4.4 Сравнение SLP модели подвижных частиц и модели обездвиженных магнитных частиц	39
Заключение	41
Список литературы	43
Приложение	46

ВВЕДЕНИЕ

Мягкими магнитными материалами называют композиты, состоящие из полимерных или жидких сред с внедренными в них магнитными наночастицами (феррожидкости, феррогели, магнитоэластомеры, феррокомпозиты). Такими материалами можно управлять с помощью магнитного поля, поэтому они широко применяются в различных технологиях, в том числе в биомедицинских приложениях. В частности, мягкие магнитные материалы активно применяются в методе магнитной гипертермии.

Суть данного медицинского метода состоит в том, что магнитные частицы, покрытые специальными биоактивными слоями [1], внедряются в область, где ранее были обнаружены опухолевые клетки. Благодаря такому внешнему покрытию, частицы захватываются этими клетками. После внедрения магнитного материала область, в которой обнаружена опухоль, помещается во внешнее переменное магнитное поле. При воздействии магнитного поля частицы разогреваются и нагревают клетки, которые ранее захватили магнитные частицы. Если температура опухолевых клеток превышает 43-44 °С [2], происходит денатурация белка и клетки погибают. При этом важно, что здоровые клетки гибнут при более высоких температурах (примерно 52-55 °С). В локальном разрушении раковых тканей и сохранении здоровых заключается эффект метода магнитной гипертермии.

Для того, чтобы эффективно применять метод магнитной гипертермии, необходимо управлять внедряемыми магнитными частицами. Корректное управление возможно, если теоретически описать закономерности для удельной поглощаемой мощности (в иностранной литературе *specific loss power*, сокращенно SLP). Данная величина характеризует количество выделяемой магнитными частицами тепловой энергии, которая впоследствии передается опухолевым клеткам. Для расчета SLP необходимо знать величину динамического отклика системы магнитных частиц на внешнее магнитное поле, то есть динамическую восприимчивость. Именно аналитическим и

численным расчетам динамической восприимчивости взаимодействующих магнитных частиц и вычислению SLP при определенных параметрах магнитных полей и внедряемого материала (амплитуды и частоты магнитного поля, диаметр магнитных частиц и т.д.) посвящена данная работа.

Целью магистерской диссертации является исследование процесса поглощения энергии переменного магнитного поля в концентрированных феррожидкостях и феррокомпозитах, которые моделировались системой взаимодействующих подвижных или обездвиженных магнитных частиц.

В данной работе решаются следующие задачи:

1. Построение аналитического решения уравнения Фоккера-Планка-Брауна для нахождения динамического отклика системы взаимодействующих обездвиженных магнитных частиц на внешнее магнитное поле малой амплитуды.
2. Обзор известных из литературы аналитических формул и численных результатов расчета динамической восприимчивости подвижных и обездвиженных магнитных частиц.
3. Определение SLP для моделей подвижных и обездвиженных магнитных частиц на основе полученных в настоящей работе и известных из литературы данных динамической восприимчивости.
4. Анализ полученных результатов и сравнение SLP для разных моделей и интенсивностей магнитного поля. Тестирование результатов на экспериментальных данных.

ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

В настоящее время разрабатываются разные “умные” вещества. Например, учеными синтезируются мягкие магнитные материалы, которые представляют собой взвеси магнитных наночастиц в жидкости или полимере (феррожидкости, феррогели, феррокомпозиты) [1, 2, 3]. Поскольку данными материалами можно управлять, их применяют в различных медицинских методах и разработках промышленности. Свойства мягких магнитных материалов зависят от того, в какую матрицу внедряются магнитные частицы (в полимерную [2] или в жидкую [4]).

Одним из достаточно важных и перспективных направлений применения мягких магнитных материалов является магнитная гипертермия. Поскольку рак является второй главной болезнью в мире, вызывающей летальный исход [2], необходимо разрабатывать и усовершенствовать методы лечения этой болезни. Магнитная гипертермия является одним из способов лечения злокачественных опухолей. Совместное применение данного метода с радиотерапией и химиотерапией дают хорошие результаты лечения данного заболевания [2]. Метод магнитной гипертермии основан на внедрении магнитных наночастиц в жидкой или полимерной матрице в опухолевую область с последующим их нагревом внешним магнитным полем. Данным процессом нужно грамотно управлять, чтобы не причинить вреда здоровым клеткам и не навредить организму в целом, в том числе нужно накладывать ограничения на используемые амплитуды, частоты полей и на форму, размеры и концентрацию магнитных частиц [2, 5, 6].

Для того, чтобы определить, насколько нагреются опухолевые клетки, необходимо вычислить, какое количество тепловой энергии будет передано магнитными частицами клеткам при воздействии внешнего магнитного поля, то есть рассчитать SLP. В случае модели подвижных частиц с броуновским механизмом релаксации магнитного момента тепловыделение обусловлено вязким трением и межчастичными диполь-дипольными взаимодействиями. Если же мы рассматриваем модель обездвиженных магнитных частиц с

неелевским механизмом релаксации магнитного момента, то тепловыделение обусловлено магнитной анизотропией частиц и межчастичными взаимодействиями. Существует большое количество научных работ, в которых рассматривается влияние броуновского и неелевского механизмов релаксации на SLP. Например, в работе [7] авторами рассматривается выделение энергии магнитных наночастиц в суспензии с учетом броуновского механизма релаксации, а в статье [8] для исследования передачи тепла феррокомпозита при воздействии на него магнитным полем учитывается неелевский механизм.

Экспериментальных исследований, посвященных методу магнитной гипертермии, достаточно много [2, 4]. Так, в работе [9] рассказывается о практическом применении магнитных материалов для лечения глиобластомы и рака простаты, а также подробно описываются виды магнитной гипертермии и их особенности. В статьях [2, 6] авторы подробно описывают, какие параметры и свойства магнитного материала и внешних полей можно использовать для практического применения магнитной гипертермии и достижения наилучшего энергетического эффекта. Для того, чтобы применять данный метод на людях, необходимо рассматривать менее токсичные материалы (на основе магнетита или маггемита), а также стоит ограничивать амплитуду переменного магнитного поля 15 кА/м и использовать частоты поля от 15 кГц до 330 кГц. Такие ограничения возникают в связи с тем, что частоты поля выше или ниже указанных негативно сказываются на человеческом организме.

В работе [5] авторы исследуют, какими свойствами должен обладать слой, покрывающий магнитные частицы, какие обычно материалы для этого используют, а также причины, по которым магнитные частицы необходимо покрывать определенными составами и преимущества такой модификации. Чанг Ли и другие ученые в статье [1] исследуют как раз один из возможных вариантов материала для покрытия наночастиц в мягких магнитных материалах. Авторы данной статьи подробно описывают, как синтезируется

материал HLC (human-like collagen protein-coated, в переводе коллагеновая белковая оболочка), как происходит покрытие частиц такой оболочкой, а также как изменяется SLP магнитных частиц, покрытых HLC материалом под действием магнитного поля.

Трудность в применении магнитной гипертермии, заключается в том, что не хватает достаточной теоретической основы для данного метода. В большинстве научных работ, посвященных SLP и, соответственно, методу магнитной гипертермии, не учитываются взаимодействия между магнитными частицами в материале (например, работы [10, 11]), а значит эти результаты можно применять лишь для слабо-концентрированных систем. Чтобы технологии, основанные на использовании мягких магнитных материалов, совершенствовались, необходимо создавать математические модели с учетом межчастичных взаимодействий [12, 13, 14], которые позволят предсказывать поведение таких материалов.

Данная работа посвящена исследованию SLP системы взаимодействующих магнитных частиц, находящихся во внешнем магнитном поле: происходит поиск параметров мягких магнитных материалов, а также характеристик магнитных полей, при которых SLP достигает наибольших значений, что способствует наилучшим результатам в магнитной гипертермии.

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В данной работе магнитный мягкий материал моделируется системой из однородно намагниченных твердых сфер, обладающих внутренней магнитной анизотропией (одноосной). Магнитные частицы обездвижены, их оси легкого намагничивания \vec{n} сонаправлены. Осью легкого намагничивания магнитной частицы принято считать направление, вдоль которого работа намагничивания частицы, производимая внешним магнитным полем, минимальна.

Магнитный момент отдельно взятой частицы \vec{m}_i пропорционален произведению намагниченности насыщения магнитного материала и объема его магнитного ядра. Магнитные частицы однородно распределены по всему объему мягкого магнитного материала V с числовой концентрацией $n = N/V$, где N – общее количество магнитных частиц в материале.

Система обездвиженных магнитных частиц содержится в длинной цилиндрической трубке радиуса R , ориентированной вдоль оси Oz . Ось легкого намагничивания \vec{n} направлена по оси Oz , поэтому координаты вектора оси легкого намагничивания имеют вид $\vec{n} = (0,0,1)$. На частицу действуют переменное магнитное поле \vec{H} . Поле сонаправлено с осью легкого намагничивания частицы \vec{n} , $\vec{H} = h e^{i\omega t} \vec{H}$. Здесь h – амплитуда внешнего переменного магнитного поля, ω – угловая частота поля, t – время, $\vec{H} = (0,0,1)$. В этом случае внутреннее поле внутри образца равно внешнему магнитному полю \vec{H} .

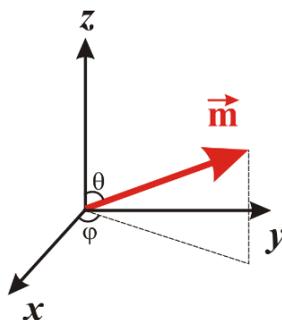


Рисунок 2.1 – Ориентация магнитного момента

Ориентация магнитного момента каждой частицы задается с помощью полярного θ_i и азимутального φ_i углов (см. рисунок 2.1), $\vec{m}_i = m\vec{m}$, где m – модуль магнитного момента, $\vec{m} = (\sin\theta_i \cos\varphi_i, \sin\theta_i \sin\varphi_i, \cos\theta_i)$ – единичный вектор магнитного момента, $m = M_s(\pi d^3/6)$, M_s – намагниченность насыщения магнитного материала, d – диаметр частицы. Плотность вероятности ориентации магнитного момента, изменяющаяся во времени t , может быть описана с помощью функции $W(t, \theta)$. Причем, поскольку система имеет симметрию, мы можем пренебречь зависимостью от угла φ . $W(t, \theta)$ определяется из решения уравнения Фоккера-Планка-Брауна [15] (сразу сделаем замену $x = \cos \theta$):

$$2\tau_D \frac{\partial W}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - x^2) \left(\frac{\partial W}{\partial x} + W \frac{\partial \tilde{U}}{\partial x} \right) \right], \quad (2.1)$$

где τ_D – время релаксации магнитного момента, $\tau_D = \sigma\tau_0$, σ – параметр магнитной анизотропии, $\sigma = K\pi d^3/(6k_B T)$, K – константа кристаллографической магнитной анизотропии, k_B – постоянная Больцмана, $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ Дж/К, T – температура среды, $\tau_0 = 10^{-9}$ с, \tilde{U} – полная потенциальная энергия системы. Чем больше параметр σ , тем выше степень “вмороженности” магнитного момента в частицу (при больших σ магнитный момент не может двигаться относительно частицы, при σ достаточно малых, магнитный момент может вращаться независимо от положения частицы). В данной работе исследуется область значений параметра σ от 0.01 до 11.

Энергия магнитной анизотропии и Зеемановская энергия взаимодействия частиц и магнитного поля задаются следующим образом:

$$\bar{U} = \frac{U}{k_B T} = -\sigma(\vec{m} \cdot \vec{n})^2 - \alpha e^{i\omega t} (\vec{m} \cdot \vec{H}), \quad (2.2)$$

где $\alpha = \mu_0 \hbar m / (k_B T)$ – параметр Ланжевена для переменного магнитного поля, μ_0 – магнитная постоянная, $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ Гн/м.

Для того, чтобы учесть межчастичные взаимодействия в системе, полная энергия \tilde{U} представляется в виде:

$$\tilde{U} = \bar{U} + n \langle W(t, \theta_2) U_{dd}(1,2) \Theta(1,2) \rangle_2 . \quad (2.3)$$

Впервые второе слагаемое формулы (2.3) было получено в работе [16]. $U_{dd}(1,2)$ – потенциал диполь-дипольного взаимодействия между случайными выбранными частицами 1 и 2:

$$U_{dd}(1,2) = \frac{\mu_0}{4\pi k_B T} \left(3 \frac{(\vec{m}_1 \cdot \vec{r})(\vec{m}_2 \cdot \vec{r})}{r^5} - \frac{(\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2)}{r^3} \right), \quad (2.4)$$

где \vec{r} – расстояние между первой и второй магнитными частицами, $r_i = r \vec{r}_i = r(\sin \beta_i \cos \xi_i, \sin \beta_i \sin \xi_i, \cos \beta_i)$, r – модуль вектора расстояния между частицами. Функция Хевисайда $\Theta(1,2)$ обеспечивает условие непроницаемости частиц. $\langle \dots \rangle_2$ обозначает усреднение по всем ориентациям магнитного момента частицы 2, которое было впервые представлено в работе [16] и определяется по формуле:

$$\begin{aligned} \langle \dots \rangle_k &= \int dm_k \int dr_k , \\ dm_k &= \frac{1}{4\pi} \sin \theta_k d\theta_k d\varphi_k , \\ dr_k &= r_k^2 dr_k \sin \beta_k d\beta_k d\xi_k . \end{aligned} \quad (2.5)$$

Проекция намагниченности системы магнитных частиц на ось Oz определяется по формуле:

$$M = n \int (\vec{m} \cdot \vec{H}) W(t, \theta) dm . \quad (2.6)$$

Динамическая магнитная восприимчивость по определению:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial \vec{H}}. \quad (2.7)$$

Далее в работе динамическая восприимчивость будет анализироваться как функция амплитуды или угловой частоты переменного магнитного поля.

ГЛАВА 3. ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ МАГНИТНЫХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

3.1 Модель обездвиженных магнитных частиц. Исследование динамической восприимчивости

3.1.1 Аналитическое решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна. Одночастичное приближение

Для того, чтобы найти динамическую восприимчивость модели обездвиженных магнитных частиц с учетом межчастичных взаимодействий, сначала необходимо решить уравнение Фоккера-Планка-Брауна в одночастичном случае, то есть в случае, когда не учитываются межчастичные диполь-дипольные взаимодействия. Соответственно, потенциальная энергия системы определяется следующим образом:

$$\tilde{U} = \bar{U} = -\sigma x^2 - \alpha e^{i\omega t} x. \quad (3.1)$$

Первое слагаемое формулы (3.1) отвечает за вклад в энергию внутренней магнитной анизотропии частиц. Второе слагаемое называется энергией Зеемана и отвечает за энергию взаимодействия магнитного момента с внешним магнитным полем.

Уравнение Фоккера-Планка-Брауна (2.1) является дифференциальным уравнением в частных производных параболического типа и собственными функциями данного уравнения являются полиномы Лежандра. Поэтому решение данного уравнения будем искать в виде суммы по полиномам Лежандра:

$$W^{id} = W_0 + \alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{A}_j P_j(x), \quad (3.2)$$

При этом, используя теорию возмущений, первое слагаемое этого ряда W_0 мы определяем как стационарное решение уравнения (2.1) (термодинамически устоявшееся решение, независящее от времени), которое находится из уравнения:

$$\frac{\partial W_0}{\partial x} + W_0 \frac{\partial \tilde{U}_{t=0}}{\partial x} = 0, \quad (3.3)$$

и имеет вид:

$$W_0 = C e^{-\tilde{U}_{t=0}} = \frac{2e^{\sigma x^2}}{\int_{-1}^1 e^{\sigma x^2} dx}, \quad (3.4)$$

Такое решение будет справедливо только для случая малых α , то есть построенную теорию можно будет использовать только при небольших значениях амплитуд внешнего магнитного поля.

Подставим решение (3.2) в уравнение (2.1) и распишем отдельно левую и правую части полученного выражения.

Левая часть (2.1) будет равна:

$$2\tau_D \frac{\partial W}{\partial t} = 2\tau_D \left(i\omega\alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{A}_j P_j(x) \right). \quad (3.5)$$

При преобразовании слагаемых будем также пользоваться тем, что α достаточно мало, и нелинейные слагаемые по α учитывать не будем.

Правая часть (2.1):

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x} \left[(1-x^2) \left\{ \frac{\partial W_0}{\partial x} + \alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{A}_j (P_j)' + (-2\sigma x - \alpha e^{i\omega t}) \left(W_0 + \alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{A}_j P_j(x) \right) \right\} \right] = \\
& \quad / * \frac{\partial}{\partial x} \left[(1-x^2) \frac{\partial P_j}{\partial x} \right] = (-j(j+1)) P_j * / \\
& = \alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{A}_j P_j(x) (-j(j+1)) - \frac{\partial}{\partial x} \left[(1-x^2) 2\sigma x \alpha e^{i\omega t} \left(\sum_{j=1}^{\infty} \tilde{A}_j P_j(x) \right) \right] - \quad (3.6) \\
& \quad - \alpha e^{i\omega t} \frac{\partial}{\partial x} ((1-x^2) W_0) = \alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} (-j)(j+1) \tilde{A}_j P_j(x) - 2\sigma \alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{A}_j P_j(x) + \\
& \quad + 6\sigma x^2 \alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{A}_j P_j(x) + 2\sigma x (1-x^2) \alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{A}_j P_j(x) - \alpha e^{i\omega t} \frac{\partial}{\partial x} ((1-x^2) W_0).
\end{aligned}$$

Чтобы преобразовать данное выражение, воспользуемся рекуррентными формулами для функций Лежандра [17]:

$$(1-x^2) \frac{dP_j}{dx} = \frac{j(j+1)}{2j+1} [P_{j-1} - P_{j+1}], \quad (3.7)$$

$$xP_j = \frac{1}{2j+1} (jP_{j-1} + (j+1)P_{j+1}), \quad (3.8)$$

$$xP_{j+1} = \frac{1}{2j+3} ((j+1)P_j + (j+2)P_{j+2}), \quad (3.9)$$

$$xP_{j-1} = \frac{1}{2j-1} ((j-1)P_{j-2} + jP_j). \quad (3.10)$$

Собрав все преобразованные выражения, разделив их на $\alpha e^{i\omega t}$, получаем новое выражение для уравнения (2.1):

$$\begin{aligned}
2\tau_D i\omega \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{A}_j P_j(x) &= -2xW_0(\sigma(1-x^2) - 1) - \sum_{j=1}^{\infty} j(j+1)\tilde{A}_j P_j(x) - \\
&- 2\sigma \sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{-j(j+1)}{(2j-1)(2j+3)} \right) \tilde{A}_j P_j(x) + \\
&+ 2\sigma \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(j+1)(j+3)(j+2)}{(2j+1)(2j+3)} \tilde{A}_j P_{j+2}(x) \\
&- 2\sigma \sum_{j=1}^{\infty} \frac{j(j-2)(j-1)}{(2j+1)(2j-1)} \tilde{A}_j P_{j-2}(x).
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Теперь умножим данное уравнение на P_j , проинтегрируем по x в пределах от -1 до 1 . Как итог, получаем формулу, связывающую коэффициенты \tilde{A}_j :

$$\begin{aligned}
\left[2\tau_D i\omega \frac{2}{2j+1} \tilde{A}_j \right] &= - \int_{-1}^{+1} 2xW_0(\sigma(1-x^2) - 1) P_j(x) dx + \\
&+ \left[\frac{-2}{2j+1} + 2\sigma \frac{2}{2j+1} \left(\frac{(j+1)j}{(2j-1)(2j+3)} \right) \tilde{A}_j + \right. \\
&\left. + 2\sigma \frac{2}{2j+1} \left(\frac{(j+1)j(j-1)}{(2j-1)(2j-3)} \right) \widetilde{A_{j-2}} - 2\sigma \frac{2}{2j+1} \left(\frac{(j+1)j(j+2)}{(2j+5)(2j+3)} \right) \widetilde{A_{j+2}} \right].
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Коэффициенты \tilde{A}_j определяются из решения линейной системы, состоящей из j уравнений. Эта система позволяет нам определить решение (3.2) с любой степенью точности. Таким образом, ограничивая количество уравнений, мы получаем замкнутую систему линейных уравнений относительно \tilde{A}_j , полагая, что последующие коэффициенты $\widetilde{A_{j+1}}$ равны нулю. Решение этой системы можно получить методом Крамера, посчитав два определителя.

Намагниченность найдем по формуле (2.7), используя вид решения (3.2):

$$\begin{aligned}
M &= n \int (\vec{m} \cdot \vec{H}) W^{id}(t, \theta) dm = \\
&= nm \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left(W_0 + \alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{A}_j P_j(\cos \theta) \right) (\sin \theta)^2 \sin \varphi d\theta d\varphi = \quad (3.13) \\
&= \frac{1}{3} nm \alpha e^{i\omega t} \tilde{A}_1.
\end{aligned}$$

Как видно из уравнения (3.13), в силу ортогональности полиномов Лежандра намагниченность зависит только от коэффициента \tilde{A}_1 .

Следовательно, динамическая восприимчивость определяется по формуле:

$$\chi = \chi_L \tilde{A}_1, \quad (3.14)$$

где $\chi_L = \mu_0 n m^2 / (3k_B T)$ – восприимчивость Ланжевена.

3.1.2 Аналитическое решение уравнения Фоккера-Планка-Брауна с учетом взаимодействия между частицами

При учете межчастичных взаимодействий потенциальная энергия имеет дополнительное слагаемое, линейное по концентрации:

$$\tilde{U} = \bar{U} + n \langle W^{id}(t, \theta_2) U_{dd}(1,2) \Theta(1,2) \rangle_2. \quad (3.15)$$

$W^{id}(t, \theta_2)$ была вычислена в разделе 3.1.1. Распишем второе слагаемое формулы (3.15):

$$\begin{aligned} \langle W^{id}(t, \theta_2) U_{dd}(1,2) \Theta(1,2) \rangle_2 &= \int d\vec{m}_2 \int d\vec{r}_2 U_{dd}(1,2) W^{id}(t, \theta_2), \\ \int d\vec{m}_2 &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta_2 d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_2, \\ \int d\vec{r}_2 &= \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{2\pi} d\xi_2 \int_0^\pi \sin \beta_2 d\beta_2 \int_1^{R/\sin \beta_2} r_2^2 dr_2. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Подставляя результат интегрирования (3.16) в формулу (3.15), получаем:

$$n \langle W^{id}(t, \theta_2) U_{dd}(1,2) \Theta(1,2) \rangle_2 = \frac{1}{3} \alpha e^{i\omega t} \chi_L \widetilde{A}_1 x, \quad (3.17)$$

Выражение для энергии (3.15) будет иметь вид:

$$\tilde{U} = -\sigma x^2 - \alpha e^{i\omega t} x \left(1 + \frac{1}{3} \chi_L \widetilde{A}_1\right), \quad (3.18)$$

Теперь необходимо решить уравнение Фоккера-Планка-Брауна (2.1) с учетом нового выражения для потенциальной энергии (3.18). Решение данного уравнения будет иметь вид:

$$W = W_0 + \alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} A_j P_j(x), \quad (3.19)$$

Подставим решение (3.19) в правую и левую часть уравнения (2.1).

Получаем:

$$\begin{aligned} 2\tau_D i\omega \sum_{j=1}^{\infty} A_j P_j(x) &= 2xW_0(1 - \sigma(1 - x^2)) \left(1 + \frac{1}{3}\chi_L \widetilde{A}_1\right) - \\ &= - \sum_{j=1}^{\infty} j(j+1)A_j P_j(x) + 2\sigma \sum_{j=1}^{\infty} \frac{j(j+1)}{(2j-1)(2j+3)} A_j P_j(x) + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(3+j)(j+1)(j+2)}{(2j+1)(2j+3)} j P_{j+2}(x) - 2\sigma \sum_{j=1}^{\infty} \frac{j(j-2)(j-1)}{(2j+1)(2j-1)} A_j P_{j-2}(x). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Уравнение решается аналогично тому, как оно было решено в разделе 3.1.1 для одночастичного случая. Получаем выражение, связывающее коэффициенты A_j с учетом межчастичных взаимодействий:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{+1} 2xW_0(\sigma(1-x^2) - 1) \left(1 + \frac{1}{3}\chi_L \widetilde{A}_1\right) P_j(x) dx &= \left[2\tau_D i\omega \frac{-2}{2j+1} A_j\right] + \\ &+ \left[\frac{-2}{2j+1} A_j j(j+1) + 2\sigma \frac{2}{2j+1} \left(\frac{(j+1)j}{(2j-1)(2j+3)}\right) A_j + \right. \\ &+ 2\sigma \frac{2}{2j+1} \left(\frac{(j+1)j(j-1)}{(2j-1)(2j-3)}\right) A_{j-2} - 2\sigma \frac{2}{2j+1} \left(\frac{(j+1)j(j+2)}{(2j+5)(2j+3)}\right) A_{j+2} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Как уже было уточнено в разделе 3.1.1, чтобы найти первые j коэффициентов A_j , нужно решить систему из j уравнений.

Намагниченность найдем по формуле (2.6), используя вид решения (3.19):

$$M = nm \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left(W_0 + \alpha e^{i\omega t} \sum_{j=1}^{\infty} A_j P_j(\cos \theta) \right) (\sin \theta)^2 \sin \varphi d\theta d\varphi = \quad (3.22)$$

$$= \frac{1}{3} nm \alpha e^{i\omega t} A_1$$

Динамическая восприимчивость в силу (2.7) определяется по формуле:

$$\chi = \chi_L A_1. \quad (3.23)$$

Как видно из формулы (3.23), для нахождения динамической восприимчивости нам необходимо рассчитывать только первый коэффициент ряда A_1 . Для поиска аналитического решения системы уравнений (3.21) была составлена система из $j=20$ уравнений, поскольку для рассматриваемого в дальнейшем в работе диапазона значений σ (от 0.01 до 11) достаточно брать такое количество слагаемых ряда, чтобы ряд сходился (см. рисунок 3.1 – 3.2).

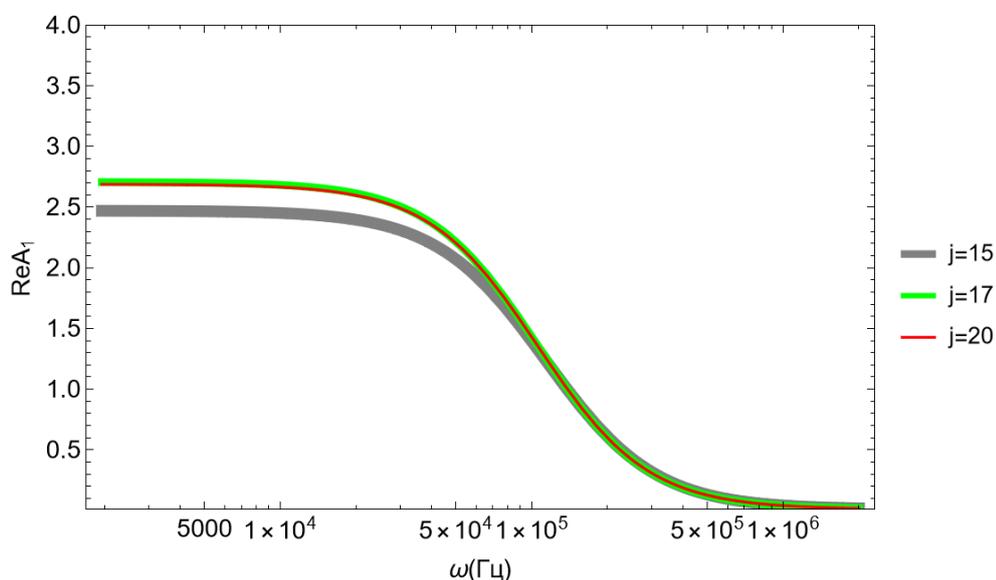


Рисунок 3.1 – Действительная часть коэффициента A_1 при $\sigma = 10.33$

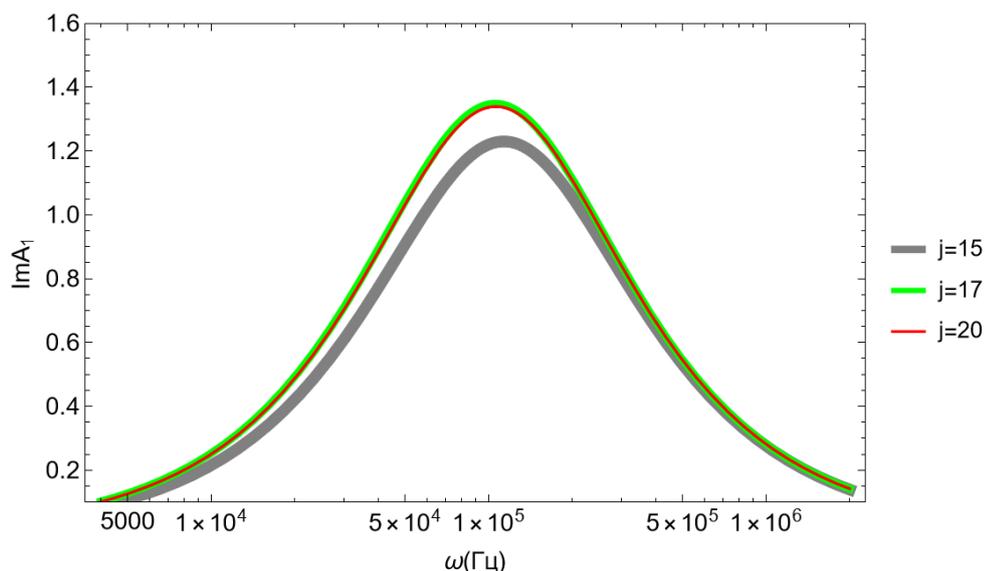


Рисунок 3.2 – Мнимая часть коэффициента A_1 при $\sigma = 10.33$

Для аналитического решения системы уравнений и нахождения динамической восприимчивости и SLP магнитных частиц в зависимости от угловой частоты магнитных полей малых амплитуд используется Wolfram Mathematica, поскольку программы, написанные в данном приложении, позволяют проводить наиболее удобные для построения графиков и менее затратные по времени аналитические вычисления. Код программ прилагается в Приложении.

Полученная в этой главе теория справедлива для системы обездвиженных частиц со взаимодействиями при малых α и она будет использоваться в дальнейшем для вычисления SLP в малых полях. Для вычисления SLP данной системы магнитных частиц во внешних переменных магнитных полях с большими значениями амплитуд мы будем использовать данные численного моделирования, описанные в статье [18].

3.2 Модель подвижных взаимодействующих магнитных частиц.

Формулы динамической восприимчивости

Для вычисления динамической восприимчивости системы подвижных взаимодействующих магнитных частиц при малых амплитудах переменного поля использовалась аналитическая формула, полученная в работе [16]:

$$\chi_D'(\omega) = \frac{\chi_L}{1 + \omega\tau_B}, \quad (3.24)$$

$$\chi_D''(\omega) = \frac{\chi_L\omega\tau_B}{1 + \omega\tau_B}, \quad (3.25)$$

$$\chi'(\omega) = \chi_D'(\omega) + \frac{1}{3}(\chi_D'(\omega)^2 - \chi_D''(\omega)^2), \quad (3.26)$$

$$\chi''(\omega) = \chi_D''(\omega) \left(1 + \frac{2}{3}\chi_D'(\omega)\right), \quad (3.27)$$

где $\chi'(\omega)$ – реальная часть динамической восприимчивости $\chi(\omega)$, $\chi''(\omega)$ – мнимая часть динамической восприимчивости $\chi(\omega)$, τ_B – броуновское время релаксации, $\tau_B = \eta\pi(d + 2l)^3/(2k_B T)$, η – вязкость среды, l – ширина слоя, покрывающего частицы.

Для определения динамической восприимчивости модели подвижных частиц, находящихся в переменном магнитном поле большой амплитуды, были использованы аналитические формулы, предложенные в статье [19]:

$$\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega), \quad (3.28)$$

$$\chi'(\omega) = \frac{\chi_0}{1 + \omega\tau_e}, \quad (3.29)$$

$$\chi''(\omega) = k \frac{\chi_0\omega\tau_e}{1 + \omega\tau_e}, \quad (3.30)$$

$$\chi_0 = \chi_L \left(1 + \frac{\chi_L}{3}\right) \left(1 - \frac{0.101\alpha^2}{1 + 0.276\alpha + 0.104\alpha^2}\right), \quad (3.31)$$

$$\frac{1}{\tau_e} = \frac{1}{\tau_B} \sqrt{\left(1 - \frac{\chi_L}{3}\right) + 0.076\alpha^2}, \quad (3.32)$$

$$k = 1 + \frac{0.027\alpha^2}{1 + 0.102\alpha + 0.047\alpha^2}. \quad (3.33)$$

В дальнейшем мы будем использовать формулы (3.24) – (3.27) и (3.28) – (3.33) для определения SLP модели подвижных частиц. Для определения динамической восприимчивости и затем SLP рассматриваемой в данном разделе модели в зависимости от угловой частоты магнитных полей на основе аналитических формул используется Wolfram Mathematica. Код программ прилагается в Приложении.

ГЛАВА 4. УДЕЛЬНАЯ ПОГЛОЩАЕМАЯ МОЩНОСТЬ СИСТЕМ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ МАГНИТНЫХ ЧАСТИЦ

4.1 SLP модели обездвиженных магнитных частиц под действием внешнего магнитного поля

Согласно [10], SLP в расчете на единицу массы частицы определяется следующей формулой:

$$SLP = \frac{\mu_0 \pi f h^2 \chi''}{\rho \phi} \quad (4.1)$$

Здесь $f = \omega/2\pi$, ρ – плотность материала частицы, $\phi = \pi n(d^3/6)$ – объемная концентрация частиц в магнитном материале.

Соответственно, для нахождения SLP модели обездвиженных магнитных частиц использовалась формула (4.1).

Исследования, которые проводились ранее, говорят о том, что для применения метода магнитной гипертермии необходимо рассматривать менее токсичные материалы (на основе магнетита или маггемита), стоит ограничивать амплитуду и частоты используемого переменного магнитного поля $h \times f < 5 \times 10^9$ А/(м·с) [4]. При этом амплитуда h не должна превышать 15 кА/м [2]. Такое ограничение частоты возникает вследствие того, что параметры поля, не удовлетворяющие неравенству, оказывают негативное влияние на человеческий организм. Так, пациенты, которым диагностировали рак простаты, при проведении лечения методом магнитной гипертермии, чувствовали себя дискомфортно при амплитуде переменного магнитного поле выше 13 кА/м [2]. В данной работе исследование проводится в заданных областях параметров для того, чтобы тестировать теорию в применении к методу магнитной гипертермии.

Основываясь на исследованиях, описанных в работах [5, 8, 9, 20] SLP будем рассматривать для параметров системы, представленных в таблице 4.1. Рассматриваемый магнитный материал – магнетит.

Параметр	Величина	Единица
ρ	4900	кг/м ³
M_s	480	кА/м
K	14×10^3	Дж/м ³

Таблица 4.1 – Параметры магнитного материала, используемые при расчетах SLP модели обездвиженных магнитных частиц

В дальнейшем все графики SLP будут построены при восприимчивости Ланжевена $\chi_L = 1.1$. Данное значение χ_L соответствует умеренно концентрированным образцам, с умеренными межчастичными диполь-дипольными взаимодействиями. Рассматриваются следующие пять моделей обездвиженных магнитных частиц, в которых $\chi_L = 1.1$ (таблица 4.2).

Диаметры частиц более 18 нм не рассматривались, поскольку используемые численные данные корректны при $\sigma \leq 11$ (параметр магнитной анизотропии прямо пропорционален диаметру используемых магнитных частиц).

Модель	M_1	M_2	M_3	M_4	M_5
Параметр					
$d(\text{нм})$	8	10	12	16	18
σ	0.907	1.77	3.06	7.25	10.33
ϕ	0.172	0.088	0.051	0.021	0.015

Таблица 4.2 – Параметры рассматриваемых моделей обездвиженных магнитных частиц

Ниже представлены графики SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля ω (см. рисунок 4.1 – 4.5) для рассматриваемых моделей.

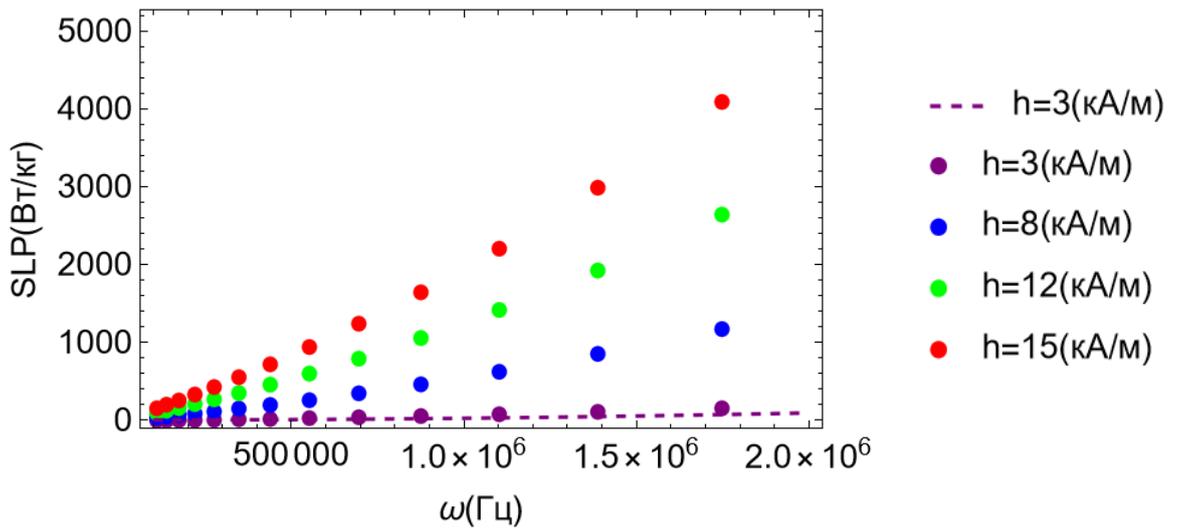


Рисунок 4.1 – SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели M_1 . SLP, определенное на основе аналитического решения для динамической восприимчивости (3.23), представлено пунктирной линией. Точки соответствуют SLP, вычисленной на основе численных данных динамической восприимчивости из [18]

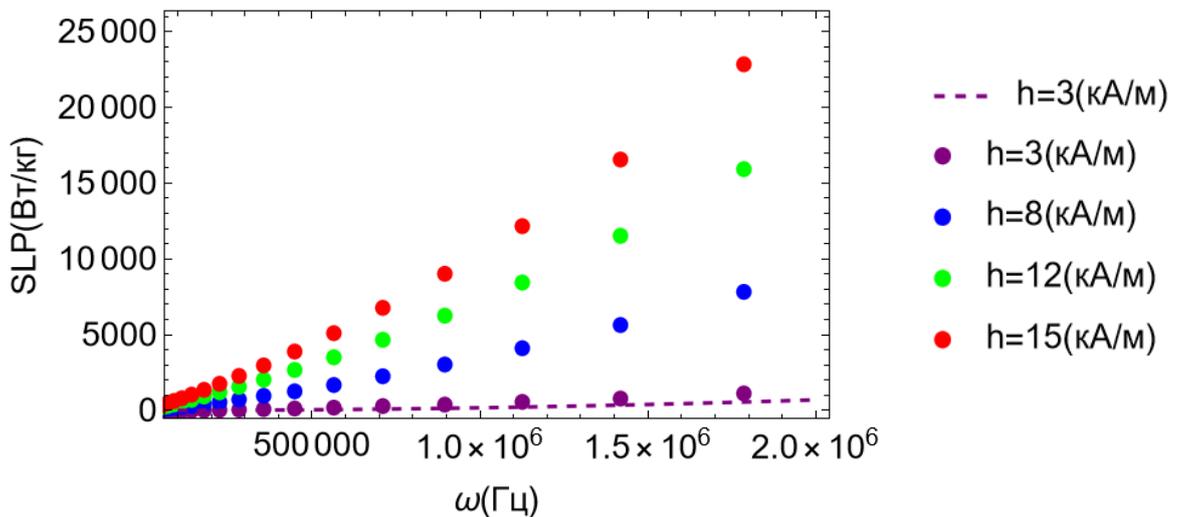


Рисунок 4.2 – SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели M_2 . SLP, определенное на основе аналитического решения для динамической восприимчивости (3.23), представлено пунктирной линией. Точки соответствуют SLP, вычисленной на основе численных данных динамической восприимчивости из [18]

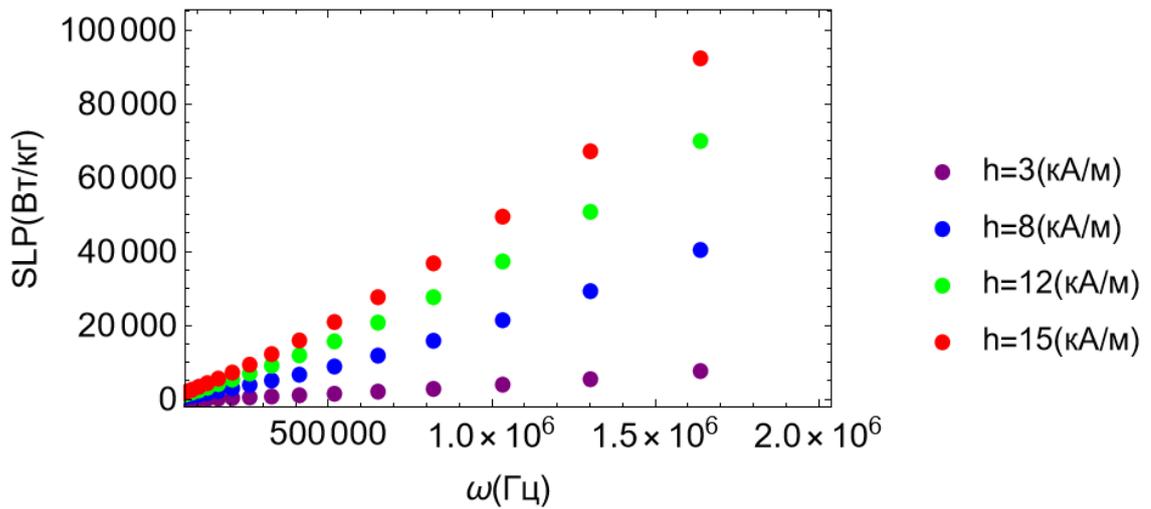


Рисунок 4.3 – SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели M_3 . Точки соответствуют SLP, вычисленной на основе численных данных динамической восприимчивости из [18]

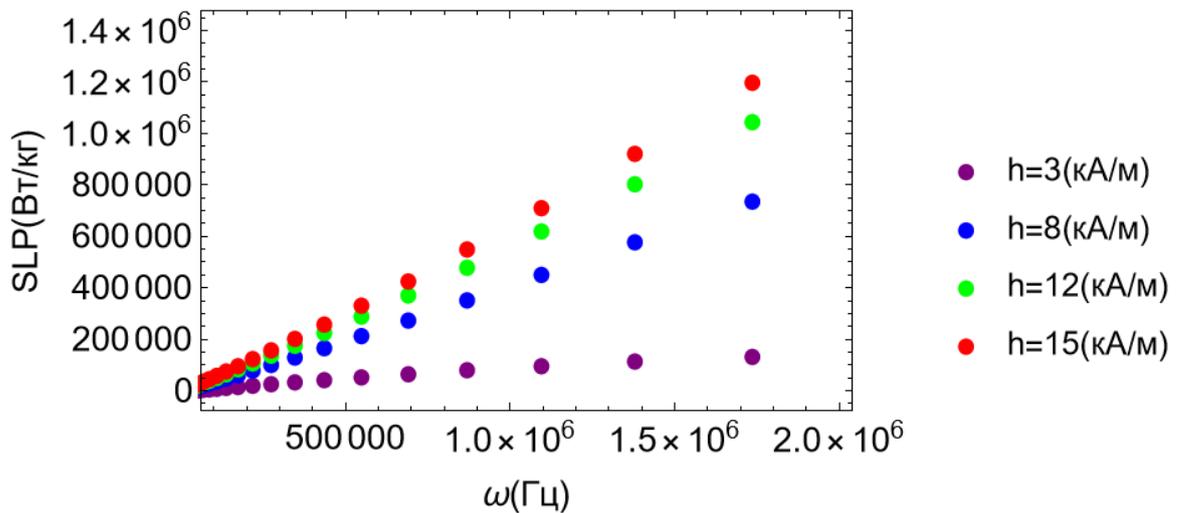


Рисунок 4.4 – SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели M_4 . Точки соответствуют SLP, вычисленной на основе численных данных динамической восприимчивости из [18]

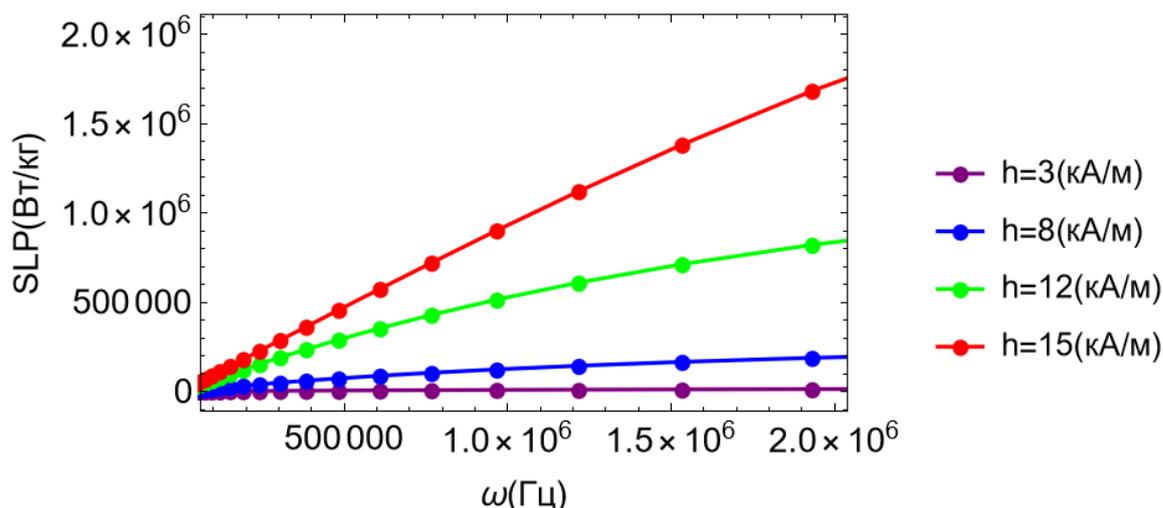


Рисунок 4.5 – SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели M_5 . Точки, соединенные линией, соответствуют SLP, вычисленной на основе численных данных динамической восприимчивости из [18]

Анализируя рисунки (4.1) – (4.5) можно заметить следующие закономерности.

Для частиц диаметром 8 нм и 10 нм, аналитическое решение и численное при амплитуде поля 3 кА/м хорошо согласуются. Данная ситуация не противоречит тому, что аналитическое решение корректно только при малых амплитудах поля. При увеличении диаметра и амплитуды поля расхождение усиливается, соответственно для частиц диаметром более 10 нм и амплитуд поля более 3 кА/м использовать аналитическое решение (3.23) для динамической восприимчивости при расчете SLP невозможно. Поэтому для больших диаметров частиц и амплитуд использовались численные результаты [18] для нахождения SLP.

Для частиц диаметром 12 нм при частотах, применяемых в гипертермии, выделение энергии увеличивается с увеличением амплитуды поля. Точно также происходит и для частиц с большим диаметром. Однако, при некоторых амплитудах поля удельная поглощаемая мощность достигает насыщения, то есть при увеличении частоты поля SLP не изменяется. Наиболее заметен данный эффект у частиц диаметром 18 нм (см. рисунок 4.5). При этом чем больше диаметр частиц, тем шире диапазон амплитуд, при которых выделение

энергии стабилизируется. Стоит отметить, что увеличение амплитуды поля также увеличивает SLP.

4.2 SLP модели подвижных частиц под действием внешнего магнитного поля

Аналогично разделу 4.1, SLP модели подвижных магнитных частиц рассчитывалось по формуле (4.1). При этом мнимая часть динамической восприимчивости определялась при помощи формул (3.24) – (3.27) и (3.28) – (3.33). При исследовании данной модели также, как и в случае модели обездвиженных магнитных частиц, стоит соблюдать ограничения, накладываемые на магнитный материал и характеристики переменного поля в магнитной гипертермии. В данной работе исследование проводится в заданных областях параметров для того, чтобы тестировать теорию в применении к данному медицинскому методу.

SLP рассматривается для параметров системы, описанных в таблице 4.3. Рассматриваемый магнитный материал – магнетит.

Параметр	Величина	Единица
ρ	4900	кг/м ³
M_s	480	кА/м
η (вязкость среды)	4016×10^{-6}	Па·с

Таблица 4.3 – Параметры магнитного материала, используемые при расчетах SLP модели подвижных магнитных частиц

Рассматриваются следующие пять моделей подвижных магнитных частиц, в которых $\chi_L = 1.1$ (таблица 4.4).

Модель	M_1^*	M_2^*	M_3^*	M_4^*	M_5^*
Параметр					
d (нм)	8	10	12	16	18
ϕ	0.172	0.088	0.051	0.021	0.015

Таблица 4.4 – Параметры рассматриваемых моделей подвижных магнитных частиц

Ниже представлены графики SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля ω (см. рисунок 4.6 – 4.10) для рассматриваемых моделей.

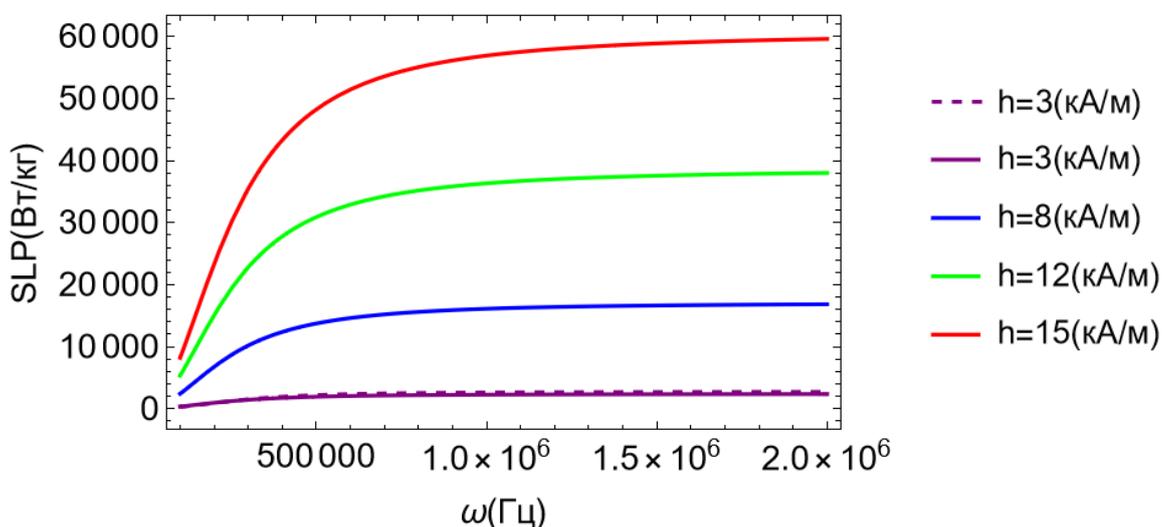


Рисунок 4.6 – SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели M_1^* . SLP, определенное на основе аналитических формул для динамической восприимчивости из [16] представлено пунктирной линией. Сплошные линии соответствуют SLP, вычисленной на основе аналитических формул из [19]

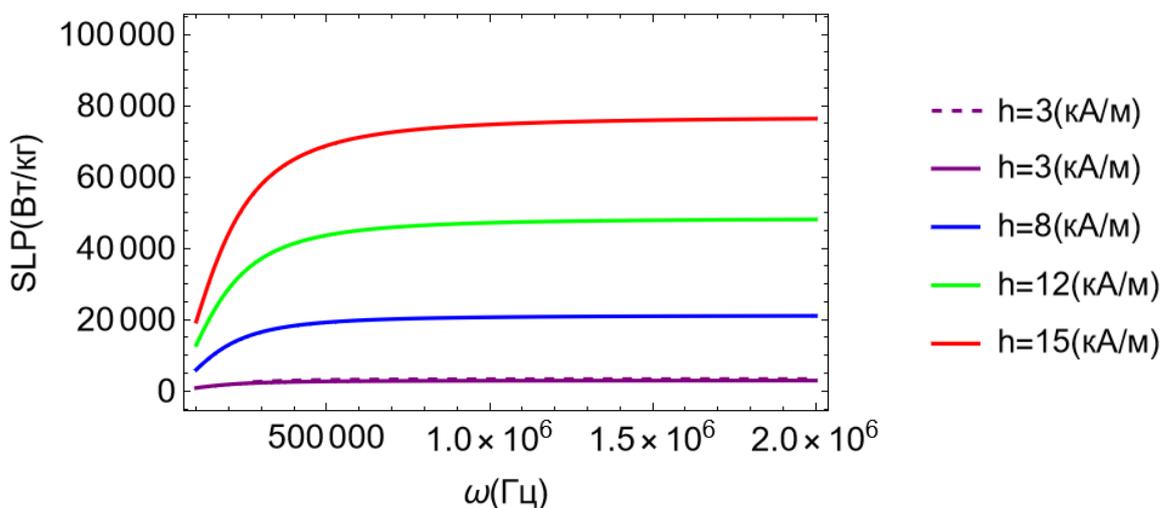


Рисунок 4.7 – SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели M_2^* . SLP, определенное на основе аналитических формул для динамической восприимчивости из [16] представлено пунктирной линией. Сплошные линии соответствуют SLP, вычисленной на основе аналитических формул из [19]

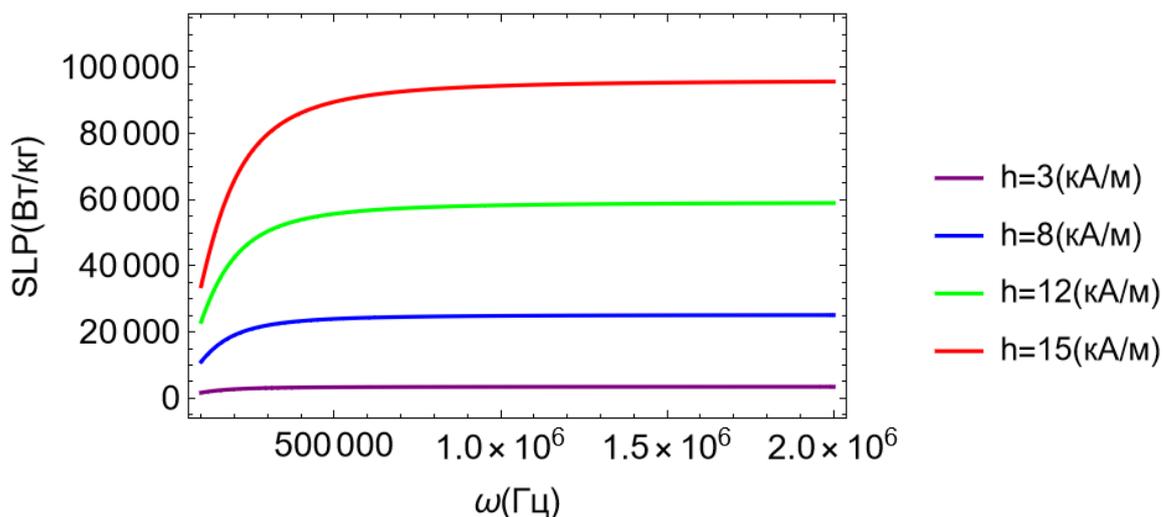


Рисунок 4.8 – SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели M_3^* . Сплошные линии соответствуют SLP, вычисленной на основе аналитических формул для динамической восприимчивости из [19]

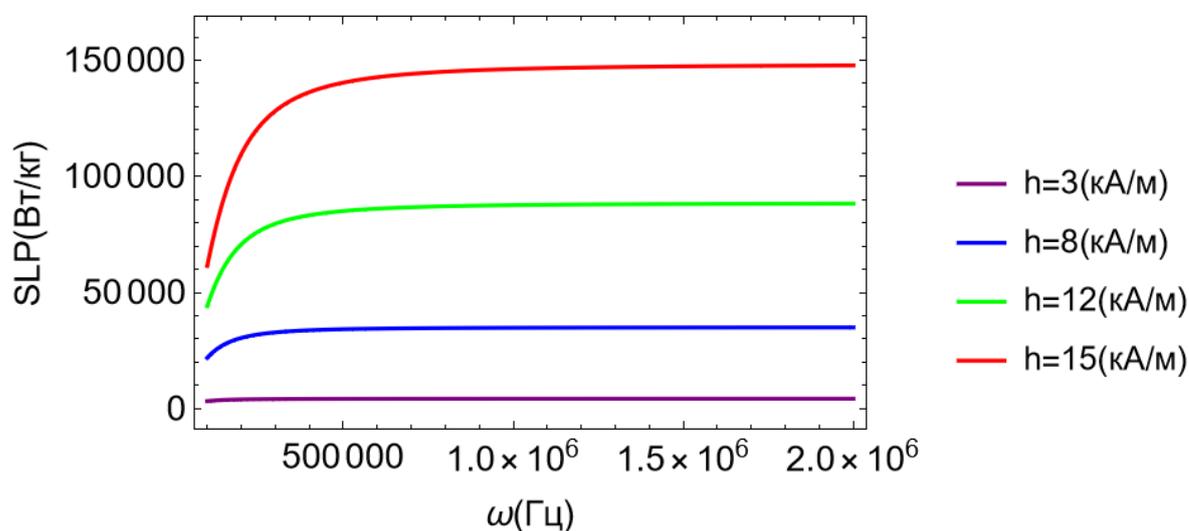


Рисунок 4.9 – SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели M_4^* . Сплошные линии соответствуют SLP, вычисленной на основе аналитических формул для динамической восприимчивости из [19]

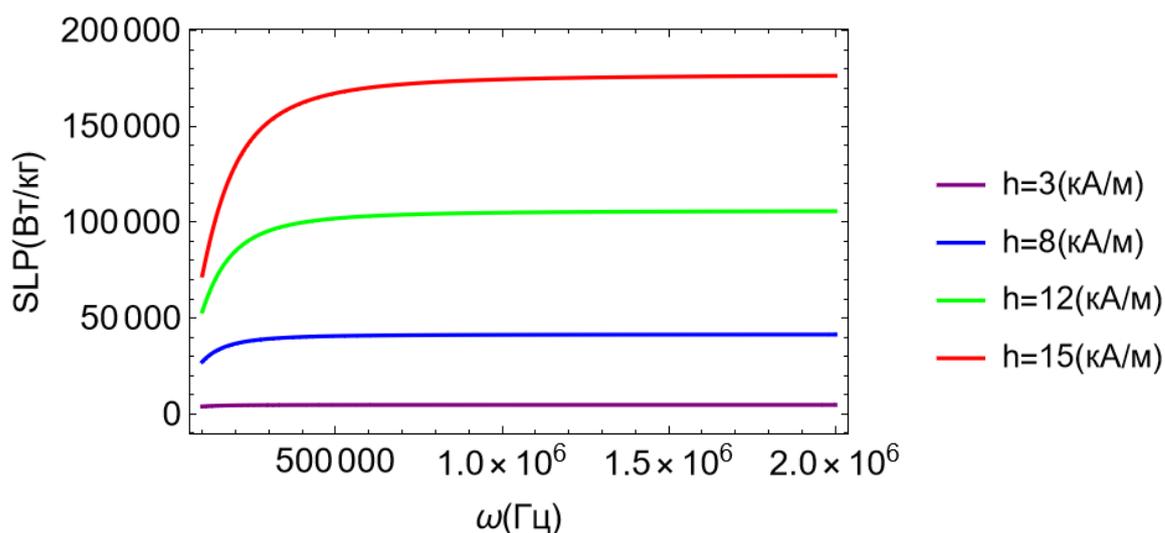


Рисунок 4.10 – SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели M_5^* . Сплошные линии соответствуют SLP, вычисленной на основе аналитических формул для динамической восприимчивости из [19]

Анализируя рисунки (4.6) – (4.10) можно сделать следующие выводы.

SLP, рассчитанное при помощи аналитических формул (3.24) – (3.27) [16], можно рассматривать только для малых амплитуд поля. Для частиц диаметром 8 и 10 нм, аналитическое решение при малых амплитудах поля и аналитическое решение при любых амплитудах переменного поля при амплитуде поля 3 кА/м хорошо согласуются. Для частиц диаметром больше 10 нм рассматривалось только аналитическое решение, корректное для любых амплитуд переменного магнитного поля.

При увеличении амплитуды магнитного поля и диаметра магнитных частиц увеличивается SLP.

Стоит отметить, что для всех рассматриваемых диаметров частиц SLP достигает насыщения на рассматриваемом диапазоне частот, который применяется в магнитной гипертермии. Соответственно, при росте частоты магнитного поля количества тепла, выделяемого магнитными частицами, не будет увеличиваться.

4.3 Сравнение теории с экспериментальными данными

Для дальнейшего исследования нам необходимо рассчитать динамическую восприимчивость в зависимости от амплитуды переменного магнитного поля. В формулах (3.28) – (3.33) присутствует параметр Ланжевена, который меняет значение при варьировании амплитуды переменного поля.

Для нахождения SLP системы подвижных магнитных частиц в зависимости от амплитуды магнитных полей на основе аналитических формул динамической восприимчивости используется Wolfram Mathematica. Код программы прилагается в Приложении.

Для расчета SLP были рассмотрены такие параметры магнитных частиц и магнитных полей, для которых авторы работы [4] экспериментально измерили SLP (таблица 4.5). Исследуемым материалом является LiZn-феррит.

Параметр	Величина	Единица
M_s	429	кА/м
η (вязкость среды)	0.8×10^{-3}	Па·с

Таблица 4.5 – Параметры магнитного материала, используемые для сравнения теории с экспериментальными данными

Дальнейшие результаты были построены для образцов с частотой магнитного поля $f = 10^5$ Гц. В статье [4] были исследованы полидисперсные магнитные материалы. В нашем же исследовании модель основывается на монодисперсности рассматриваемого материала.

Ниже представлен графики SLP в зависимости от амплитуды магнитного поля h (см. рисунок 4.11) для частоты магнитного поля $f = 10^5$ Гц.

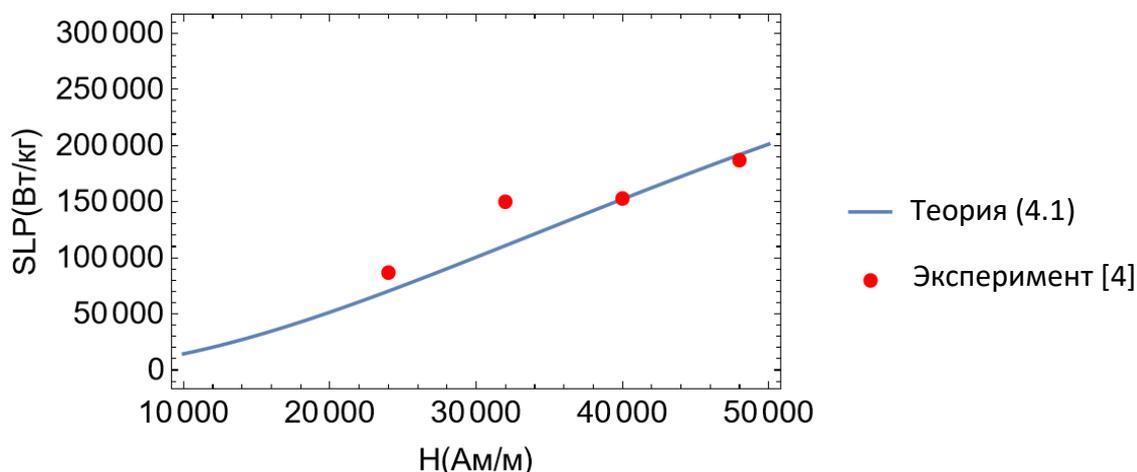


Рисунок 4.11 – SLP в зависимости от амплитуды магнитного поля для магнитных частиц диаметром 10 нм. В теории использовались значения восприимчивости из [19]

В ходе анализа полученных результатов были сделаны следующие заключения.

Даже небольшое изменение диаметра магнитных частиц, плотности магнитного материала и вязкости среды существенно сказывается на изменении SLP.

Количество выделяемой энергии LiZn-ферритом больше, чем SLP магнетита при одних и тех же параметрах системы частиц и используемых магнитных полях. Также, согласно [4], он менее токсичен. Соответственно, применение данного материала в магнитной гипертермии наиболее выгодно.

Теоретические данные, полученные в ходе нашего исследования при помощи аналитических формул, относительно хорошо согласуются с данными экспериментов. Следовательно, используемые нами модель исследования и аналитические формулы позволяют корректно рассчитывать выделение энергии магнитными частицами под действием переменного магнитного поля.

4.4 Сравнение SLP модели подвижных частиц и модели обездвиженных магнитных частиц

В данном разделе будет проведено сравнение поведения SLP модели подвижных частиц с поведением SLP модели обездвиженных частиц в одинаковом диапазоне угловых частот переменного магнитного поля.

Сравниваются между собой модели M_2 и M_2^* , M_3 и M_3^* , M_4 и M_4^* . Ниже представлены графики SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля ω (см. рисунок 4.12 – 4.14) для рассматриваемых моделей.

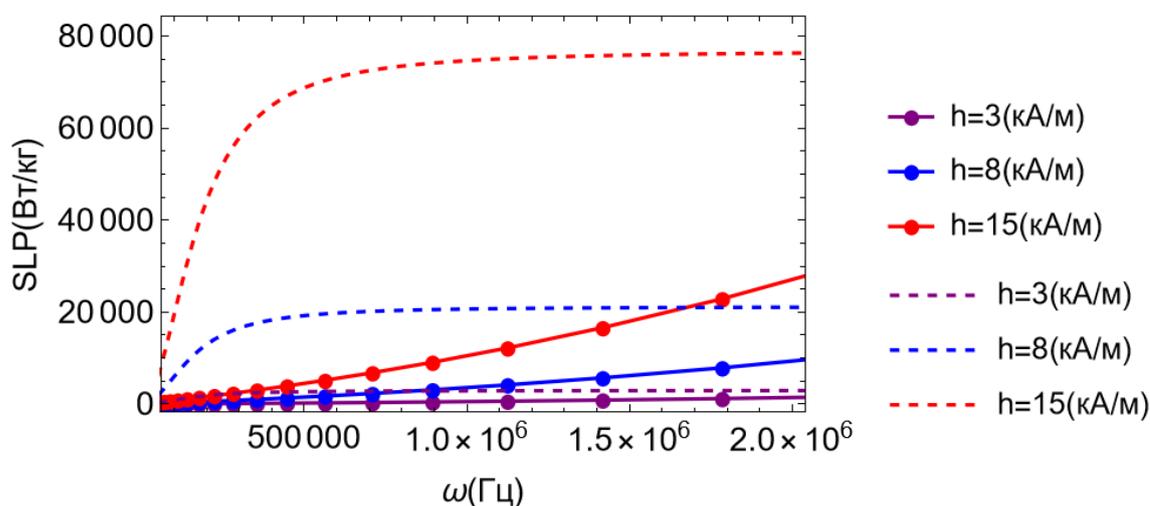


Рисунок 4.12 – Сравнение SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели обездвиженных частиц M_2 (сплошные линии) с моделью подвижных частиц M_2^* (пунктирные линии) для разных амплитуд поля

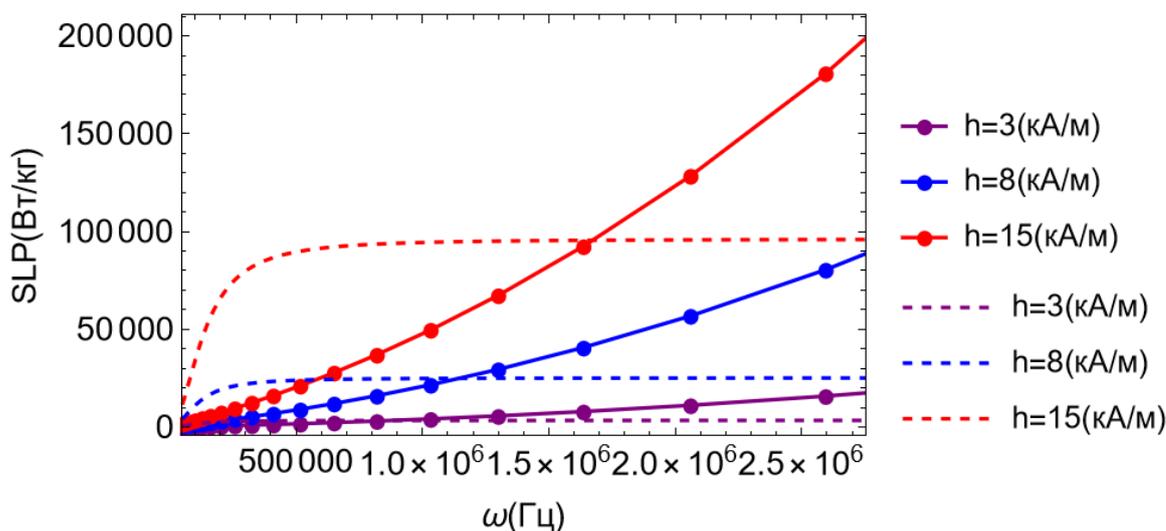


Рисунок 4.13 – Сравнение SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели обездвиженных частиц M_3 (сплошные линии) с моделью подвижных частиц M_3^* (пунктирные линии) для разных амплитуд поля

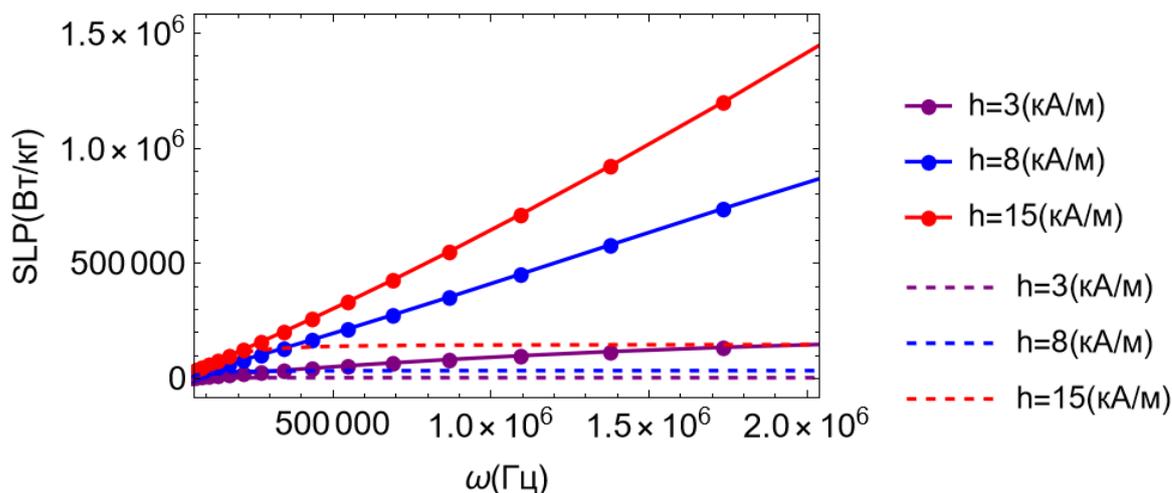


Рисунок 4.14 – Сравнение SLP в зависимости от угловой частоты магнитного поля для модели обездвиженных частиц M_4 (сплошные линии) с моделью подвижных частиц M_4^* (пунктирные линии) для разных амплитуд поля

Анализируя рисунки (4.12) – (4.14) можно заметить следующие закономерности.

Подвижные частицы диаметром 10 нм в заданном диапазоне угловых частот выделяют больше энергии, чем обездвиженные. Однако с увеличением диаметра при достижении определённых угловых частот поля SLP модели обездвиженных части становится больше SLP модели подвижных частиц. Для магнитных частиц диаметром 16 нм (см. рисунок 4.14) почти на всем рассматриваемом диапазоне частот SLP модели обездвиженных частиц превышает SLP модели подвижных частиц.

Соответственно, для получения наилучшего энергетического эффекта стоит использовать частицы диаметром более 10 нм в случае внедрения частиц в полимерный композит. Рассматриваемый случай внедрения магнитных частиц с такими диаметрами в жидкую матрицу не подходит для применения в магнитной гипертермии, поскольку магнитным материалом не будет выделено достаточного количества тепла для нагрева опухолевых клеток.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследован процесс поглощения энергии переменного магнитного поля в системах взаимодействующих подвижных и обездвиженных магнитных частиц. Из решения уравнения Фоккера-Планка-Брауна аналитически определена динамическая магнитная восприимчивость обездвиженных магнитных частиц в слабых переменных магнитных полях с учетом межчастичных диполь-дипольных взаимодействий. Полученное решение, а также известные из литературы аналитические и численные данные динамической восприимчивости ансамбля магнитных частиц использовались для моделирования и анализа удельной поглощаемой мощности (SLP) в зависимости от режимных параметров рассматриваемой системы.

Было показано, что аналитические формулы динамической восприимчивости, полученные для случая слабых магнитных полей, можно использовать для определения SLP ансамблей магнитных частиц, диаметр которых не превышает 10 нм и при амплитуде поля менее 3 кА/м.

Установлено, что увеличение диаметра магнитных частиц или амплитуды внешнего поля приводит к увеличению SLP как для модели подвижных частиц, так и для модели обездвиженных частиц. Однако, при достижении определенных частот поля SLP системы магнитных частиц достигает насыщения. При этом чем больше диаметр рассматриваемых частиц, тем меньше значение частоты, на которой происходит такой эффект.

При сравнении SLP модели подвижных частиц с SLP моделью обездвиженных частиц был сделан вывод, что для достижения наилучшего гипертермического эффекта в полимерных средах стоит использовать частицы с диаметром более 10 нм.

Определена и проанализирована SLP магнитных частиц LiZn-феррита, взвешенных в жидкости, которая находится в магнитном поле. Для применения в магнитной гипертермии наиболее выгодно использовать частицы LiZn-феррита, поскольку он менее токсичен и выделяет больше

тепловой энергии, чем магнетит. Проведенные в данной работе расчеты достаточно хорошо согласуются с данными эксперимента.

Полученные результаты являются основой для развития метода магнитной гипертермии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Chang L., Liu Xiao Li The efficiency of magnetic hyperthermia and in vivo histocompatibility for human-like collagen protein-coated magnetic nanoparticles // *International Journal of Nanomedicine*. – 2016. – V. II. – P. 1175-1185.
- [2] Kazantseva N. E., Smolkova I. S., Babayan V., Vilcakova J., Smolka P., Saha P. Magnetic nanomaterials for arterial embolization and hyperthermia of parenchymal organs tumors: a review // *Nanomaterials*. – 2021. – V. 11, № 3402. – P. 1-28.
- [3] Safronov A. P., Samatov O. M., Tyukova I. S., Mikhnevich E. A., Beketov I. V. Heating of polyacrylamide ferrogel by alternating magnetic field // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2016. – № 3402. – P. 24-29.
- [4] Barrera G., Coisson M., Celegato F., Martio L., Tiwari P., Verma R., Kane S., Mazaleyrat F., Tiberto P. Specific Loss Power of Co/Li/Zn-mixed ferrite powders for magnetic hyperthermia // *Sensors*. – 2020. – V. 20, № 2151. – P. 1-16.
- [5] Hedayatnasab Z., Abnisa F., Wan Daud W. M. A. Investigation properties of superparamagnetic nanoparticles and magnetic field-dependent hyperthermia therapy // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – 2018. – № 334. – P. 1-7.
- [6] Ramazanov M., Karimova A., Shirinova H. Magnetism for Drug Delivery, MRI and Hyperthermia Applications: a Review // *Biointerface Research in Applied Chemistry*. – 2021. – V. 11, № 2. – P. 8654-8668.
- [7] Райхер Ю. Л., Степанов В. И. Поглощение энергии вращающегося поля в суспензии магнитных наночастиц // *ЖЭТФ*. – 2011. – Т. 139, № 1. – С. 199-204.
- [8] Zubarev A. Yu., Iskakova L. Yu., Abu-Bakr A. F. Magnetic hyperthermia in solid magnetic colloids // *Physica A*. – 2017. – № 467. – P. 59-66.

- [9] Ortega D., Pankhurst Q. A. Magnetic hyperthermia // Royal Society of Chemistry: Cambridge, Nanoscience. – 2013. – № 1. – P. 60-68.
- [10] Rosensweig R. E. Heating magnetic fluid with alternating magnetic field // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2002. – V. 252, № 1. – P. 370-374.
- [11] Raikher Yu. L., Stepanov V. I. Physical aspects of magnetic hyperthermia: Low-frequency ac field absorption in a magnetic colloid // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2014. – V. 368. – P. 421-427.
- [12] Zubarev A. Yu. Magnetic hyperthermia in a system of ferromagnetic particles, frozen in a carrier medium: Effect of interparticle interactions // Physical Review E. – 2018. – № 98. – P. 1-7.
- [13] Zubarev A. Yu., Iskakova L. Yu., Safronov A. P., Krekhno R. V., Kuznetsov D. K., Beketov I. V. Positive feedback of interparticle interaction on magnetic hyperthermia // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2019. – № 489. – P. 1-7.
- [14] Abu-Bakr A.F., Zubarev A. Yu. Effect of interparticle interaction on magnetic hyperthermia: homogeneous spatial distribution of the particles // Philosophical Transactions Royal Society A. – 2019. – № 337. – P. 1-11.
- [15] Brown W. F. Thermal Fluctuations of a Single-Domain Particle // Physical Review. – 1963. – V. 2130, № 5. – P. 1677-1686.
- [16] Ivanov A. O., Zverev V. S., Kantorovich S. S. Revealing the signature of dipolar interactions in dynamic spectra of polydisperse magnetic nanoparticles // Soft Matter. – 2016. – V. 12, № 15. – P. 3507-3513.
- [17] Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики: учебник для вузов. – Москва: Изд-во МГУ, Наука, 2004. – С. 672-674.
- [18] Ambarov A. V., Zverev V. S., Elfimova E. A. Numerical modeling of the magnetic response of interacting superparamagnetic particles to an ac field

with arbitrary amplitude // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2020. – № 28. – P. 1-15.

[19] Elfimova E. A., Rusanov M. S., Zverev V. S. Dynamic magnetic susceptibility of ferrofluid: The influence of interparticle interactions and ac field amplitude // Physical Review E. – 2021. – № 104. – P. 1-11.

[20] Dutz S., Hergt R. Magnetic nanoparticle heating and heat transfer on a microscale: Basic principles, realities and physical limitations of hyperthermia for tumour therapy // International Journal of Hyperthermia. –2013. – V. 29, № 8. – P. 790-800.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Ниже представлен код программы в Wolfram Mathematica, применяемый для нахождения SLP модели обездвиженных магнитных частиц во внешнем переменном магнитном поле в зависимости от угловой частоты поля:

```
Kj=14*103;
kb=1.38*10-23;(* Дж/К = кг м^2/с^2К *)(*Константа Больцмана*)
μ0=4Pi*10-7;(* Гн/м = кг м^2/с^2А^2м *) (*магнитная постоянная*)
T=300;(* К *) (*Температура*)
Ms=480*103;(* Ам/м *) (*намагниченность насыщения*)
τ0=10^(-9);
ρ=4.9*103; (* кг/м^3 *)(*плотность магнитного материала*)
nc=16.8*1022;(* 1/м^3 *)(*числовая концентрация магнитного материала,
количество частиц/объем смеси = N/V*)
d=10*10-9;(* м *) (*диаметр ядра частицы*)
l=2*10-9;(* м *) (*ширина оболочки вокруг частицы*)
Vm=Pi *(d3)/6; (* м^3 *) (*объем ядра частицы*)
Vh=Pi *((d+2*l)3)/6; (* м^3 *) (*объем частицы с слоем*)
φ=Vm*nc;(* 1 *)(*объемная концентрация магнитного материала, объем
магнитного материала/объем смеси = Vm/V*)
χL=μ0*(Vm2)*(Ms2)*nc/(3*kb *T) (* 1 *) (*восприимчивость Ланжевена*)
sigma=Kj*Vm/(kb*T)
TD=τ0*sigma
a[n_]:= n*(n+1)-2*sigma*((n (1+n))/((2n-1)(2n+3)))+2*ω*TD*I;
c[n_]:= -2 sigma*((n(n+1)(n-1))/((2n-3)(2n-1)));
b[n_]:= 2sigma*((n(n+1)(n+2))/((2n+5)(2n+3)));
Dd:=x*(1-(1-x^2)*sigma)*((1/2)*Integrate[Exp[sigma*(x^2)],{x, -
1,1}]^(-1))*Exp[sigma*(x^2)];
Kk[n_]:= (2n+1)*Integrate[Dd* LegendreP[n,x],{x, -1,1}];
(* n=20 *)
matrix20:={ {a[1],0,b[1],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{0,a[2],0,b[2],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{c[3],0,a[3],0,b[3],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{0,c[4],0,a[4],0,b[4],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{0,0,c[5],0,a[5],0,b[5],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{0,0,0,c[6],0,a[6],0,b[6],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{0,0,0,0,c[7],0,a[7],0,b[7],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{0,0,0,0,0,c[8],0,a[8],0,b[8],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{0,0,0,0,0,0,c[9],0,a[9],0,b[9],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{0,0,0,0,0,0,0,c[10],0,a[10],0,b[10],0,0,0,0,0,0,0,0},
{0,0,0,0,0,0,0,0,c[11],0,a[11],0,b[11],0,0,0,0,0,0,0},
{0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[12],0,a[12],0,b[12],0,0,0,0,0,0},
{0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[13],0,a[13],0,b[13],0,0,0,0,0},
{0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[14],0,a[14],0,b[14],0,0,0,0},
{0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[15],0,a[15],0,b[15],0,0,0},
{0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[16],0,a[16],0,b[16],0,0},
{0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[17],0,a[17],0,b[17],0},
{0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[18],0,a[18],0,b[18]},
{0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[19],0,a[19],0},
```

```

        {0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[20],0,a[20]}
    }
matrix220:={{Kk[1],0,b[1],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{Kk[2],a[2],0,b[2],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{Kk[3],0,a[3],0,b[3],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{Kk[4],c[4],0,a[4],0,b[4],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{Kk[5],0,c[5],0,a[5],0,b[5],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{Kk[6],0,0,c[6],0,a[6],0,b[6],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{Kk[7],0,0,0,c[7],0,a[7],0,b[7],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{Kk[8],0,0,0,0,c[8],0,a[8],0,b[8],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{Kk[9],0,0,0,0,0,c[9],0,a[9],0,b[9],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0},
{Kk[10],0,0,0,0,0,0,c[10],0,a[10],0,b[10],0,0,0,0,0,0,0,0},
{Kk[11],0,0,0,0,0,0,0,c[11],0,a[11],0,b[11],0,0,0,0,0,0,0},
{Kk[12],0,0,0,0,0,0,0,0,c[12],0,a[12],0,b[12],0,0,0,0,0,0},
{Kk[13],0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[13],0,a[13],0,b[13],0,0,0,0,0},
{Kk[14],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[14],0,a[14],0,b[14],0,0,0,0},
{Kk[15],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[15],0,a[15],0,b[15],0,0,0},
{Kk[16],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[16],0,a[16],0,b[16],0,0},
{Kk[17],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[17],0,a[17],0,b[17],0},
{Kk[18],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[18],0,a[18],0,b[18]},
{Kk[19],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[19],0,a[19],0},
{Kk[20],0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,c[20],0,a[20]}}
Xi20=χL*(Det[matrix220]/Det[matrix20]);
XiI20=(1+(Xi20)/3)*Xi20;
SLPI20[ω_,h_]:=(-Im[XiI20])*μ0*(ω/(2*Pi))*Pi*(h^2)/(φ*ρ);
analyticInteraction=Plot[{{
SLPI20[ω,3*(10^3)]}, {SLPI20[ω,8*(10^3)]}, {SLPI20[ω,12*(10^3)]}
,{SLPI20[ω,15*(10^3)]}*}), {ω,10000,200000}, PlotStyle->{{Purple,
Dashed},{Blue, Dashed},{Green, Dashed},{Red, Dashed}}, PlotLegends-
>{"аналитика, h=3(кА/м)", "h=8(кА/м)", "h=12(кА/м)", "h=15(кА/м)"}];
f3=OpenRead["D:\\FerroN\\Для
Магистерской\\Data\\d10_h3\\IMXi_interaction.txt"];
data3=ReadList[f3,{{(Number),(Number)}}]; Close[f3];
For [i=1,i<=41,i++,(data3[[i,1]]=data3[[i,1]]/TD)];
For
[i=1,i<=41,i++,(data3[[i,2]]=data3[[i,2]]*μ0*(data3[[i,1]]/(2*Pi))*Pi*
((3*(10^3))^2)/(φ*ρ))];
f8=OpenRead["D:\\FerroN\\Для
Магистерской\\Data\\d10_h8\\IMXi_interaction.txt"];
data8=ReadList[f8,{{(Number),(Number)}}]; Close[f8];
For [i=1,i<=41,i++,(data8[[i,1]]=data8[[i,1]]/TD)];
For
[i=1,i<=41,i++,(data8[[i,2]]=data8[[i,2]]*μ0*(data8[[i,1]]/(2*Pi))*Pi*
((8*(10^3))^2)/(φ*ρ))];
f12=OpenRead["D:\\FerroN\\Для
Магистерской\\Data\\d10_h12\\IMXi_interaction.txt"];
data12=ReadList[f12,{{(Number),(Number)}}]; Close[f12];
For [i=1,i<=41,i++,(data12[[i,1]]=data12[[i,1]]/TD)];
For
[i=1,i<=41,i++,(data12[[i,2]]=data12[[i,2]]*μ0*(data12[[i,1]]/(2*Pi))*
Pi*((12*(10^3))^2)/(φ*ρ))];

```

```

f15=OpenRead["D:\\FerroN\\Для
Магистерской\\Data\\d10_h15\\IMXi_interaction.txt"];
data15=ReadList[f15,{(Number),(Number)}]; Close[f15];
For [i=1,i<=41,i++,(data15[[i,1]]=data15[[i,1]]/TD)];
For
[i=1,i<=41,i++,(data15[[i,2]]=data15[[i,2]]*μ0*(data15[[i,1]]/(2*Pi))*
Pi*((15*(10^(3)))^(2))/(φ*ρ))];
numberInteraction=ListPlot[{data3, data8, data12, data15}, PlotRange-
>All, Frame->True, PlotStyle->{{Purple},{Blue},{Green},{Red}},
PlotMarkers->{"●","●","●","●"}, PlotLegends-
>{"h=3(кА/м)", "h=8(кА/м)", "h=12(кА/м)", "h=15(кА/м)"}];
Show[{numberInteraction, analyticInteraction},Frame->True, FrameLabel-
>{"ω(Гц)", "SLP(Вт/кг)"}, PlotRange->{{100000,2000000},{0,25000}},
FrameStyle->Directive[Black,14], ImageSize->Medium]

```

Ниже представлен код программы в Wolfram Mathematica, применяемый для нахождения SLP модели подвижных магнитных частиц во внешнем переменном магнитном поле в зависимости от угловой частоты поля:

```

kb=1.38*10^-23;(* Дж/К = кг м^2/с^2К *)(*Константа Больцмана*)
μ0=4Pi*10^-7;(* Гн/м = кг м^2/с^2А^2м *) (*магнитная постоянная*)
T=300;(* К *) (*Температура*)
Ms=480*103;(* Ам/м *) (*намагниченность насыщения*)
τ0=10^(-9);
ρ=4.9*103; (* кг/м^3 *)(*плотность магнитного материала*)
η=4*10^-3;(* Па/с = кг/м*с *)(*вязкость раствора
nc=16.8*1022;(* 1/м^3 *)(*числовая концентрация магнитного материала,
количество частиц/объем смеси = N/V*)
d=10*10^-9;(* м *) (*диаметр ядра частицы*)
l=2*10^-9;(* м *) (*ширина оболочки вокруг частицы*)
α[h_]=(μ0*Ms*Vm*h)/(kb*T); (*амплитуда поля преобразованная*)
Vm=Pi *(d^3)/6; (* м^3 *) (*объем ядра частицы*)
Vh=Pi *((d+2*l)^3)/6; (* м^3 *) (*объем частицы с слоем*)
φ=Vm*nc;(* 1 *);(*объемная концентрация магнитного материала, объем
магнитного материала/объем смеси = Vm/V*)
TB=3*η*Vh/(kb* T); (* с *) (*Броуновское время Релаксации*)
χL=μ0*(Vm^2)*(Ms^2)*nc/(3*kb *T) (* 1 *) (*восприимчивость Ланжевена*)
TE[h_]=TB/Sqrt[(1-Subscript[χ, L]/3)^2+0.076*(α[h])^2]; (* 1 *)
k[h_]=1+(0.027*(α[h])^2)/(1+0.102*(α[h])+0.047*(α[h])^2); (* 1 *)
X0[h_]=χL*(1+χL/3)*(1-
(0.101*(α[h])^2)/(1+0.276*(α[h])+0.104*(α[h])^2));(* 1 *)(*значение
действительной части восприимчивости на низких частотах*)
ReX[ω_,h_]=X0[h]/(1+(ω*TE[h])^2); (* 1 *) (*действительная часть
динамической восприимчивости*)
ImX[ω_,h_]=(k[h]*X0[h]*(ω*TE[h]))/(1+(ω*TE[h])^2); (* 1 *) (*мнимая
часть динамической восприимчивости*)
SLP[ω_,h_]=ImX[ω,h]*μ0*ω*h^2/(2*φ*ρ); (* Вт/кг = (кг*м^2/с^3)/кг*)
(*удельная поглощаемая мощность*)
ReXD[ω_,h_]=χL/(1+(ω^2*TB^2));

```

```

ImXD[ω_,h_]=χL*ω*TB/(1+(ω2*TB2));
ReXI[ω_,h_]=ReXD[ω,h]+((ReXD[ω,h]2-ImXD[ω,h]2)/3);
ImXI[ω_,h_]=ImXD[ω,h]*(1+2*ReXD[ω,h]/3);
SLPI[ω_,h_]=ImXI[ω,h]*μ0*ω*h2/(2*φ*ρ);
analiticI=Plot[{SLPI[ω,3*103], SLPI[ω,8*103], SLPI[ω,12*103],
SLPI[ω,15*103]}, {ω,100000,2000000}, PlotStyle->{{Purple,
Dashed},{Blue, Dashed},{Green, Dashed},{Red, Dashed}}];
analitic=Plot[{SLP[ω,3*103],SLP[ω,8*103],SLP[ω,12*103],SLP[ω,15*103]},
{ω,100000,2000000}, PlotStyle->{{Purple},{Blue},{Green},{Red}},
PlotLegends->{"h=3(кА/м)", "h=8(кА/м)", "h=12(кА/м)", "h=15(кА/м)"}];
Show[{analiticI, analitic}, Frame->True, FrameLabel-
>{"ω(Гц)", "SLP(Вт/кг)"}, PlotRange->{{100000, 2000000},{0, 100000}},
FrameStyle->Directive[Black,14], ImageSize->Medium]

```

Ниже представлен код программы в Wolfram Mathematica, применяемый для сравнения SLP модели подвижных частиц в зависимости от амплитуды внешнего переменного магнитного поля с экспериментальными данными:

```

kb=1.38*10-23;(* Дж/К = кг м^2/с^2К *) (*Константа Больцмана*)
μ0=4Pi*10-7;(* Гн/м = кг м^2/с^2А^2м *) (*магнитная постоянная*)
T=300;(* К *) (*Температура*)
Ms=429*103;(* Ам/м *) (*намагниченность насыщения*)
ρ=4.9*103; (* кг/м^3 *) (*плотность магнитного материала*)
η=0.8*10-3;(* Па/с = кг/м*с *) (*вязкость раствора*)
mc=27 ;(* кг/м^3*) (*массовая концентрация, масса магнитного
материала/объем всей смеси = φ*ρ*)
d=10*10-9;(* м *) (*диаметр ядра частицы*)
l=0*10-9;(* м *) (*ширина оболочки вокруг частицы*)
f=100*103;(* Гц=1/с *) (*частота поля*)
ω=f*(2*Pi); (* Гц=1/с *) (*угловая частота поля*)
Vm=Pi *(d3)/6; (* м^3 *) (*объем ядра частицы*)
Vh=Pi *((d+2*l)3)/6; (* м^3 *) (*объем частицы с слоем*)
nc=mc/(Vm*ρ); (* 1/м^3 *) (*числовая концентрация магнитного
материала, количество частиц/объем смеси = N/V*)
φ=Vm*nc;(* 1 *) (*объемная концентрация магнитного материала, объем
магнитного материала/объем смеси = Vm/V*)
TB=3*η*Vh/(kb* T); (* с *) (*Броуновское время Релаксации*)
χL=μ0*(Vm2)*(Ms2)*nc/(3*kb *T); (* 1 *) (*восприимчивость Ланжевена*)
ReXD=χL/(1+ω2 TB2);
ImXD=χLωTB(1+ω2 TB2);
ReXI=ReXD+4*Pi*(ReXD2-ImXD2)/3;
ImXI=ImXD*(1+8*Pi*ReXD/3);
α[h_]=μ0*h*Ms *Vm/(kb* T);(* 1 *) (*амплитуда поля преобразованная*)
TE[h_]=TB/Sqrt[(1-Subscript[χ, L]/3)2+0.076*(α[h])2]; (* 1 *)
k[h_]=1+(0.027*(α[h])2)/(1+0.102*(α[h])+0.047*(α[h])2); (* 1 *)
X0[h_]=χL*(1+χL/3)*(1-
(0.101*(α[h])2)/(1+0.276*(α[h])+0.104*(α[h])2));(* 1 *)(*значение
действительной части восприимчивости на низких частотах*)
ReX[h_]=X0[h]/(1+(ω*TE[h])2); (* 1 *) (*действительная часть
динамической восприимчивости*)

```

```

ImX[h_]=(k[h]*X0[h]*(w*TE[h]))/(1+(w*TE[h])^2); (* 1 *) (*мнимая часть
динамической восприимчивости*)
SLP[h_]=ImX[h]*mu0*f*Pi*h^2/(mc); (* Вт/кг = (кг*м^2/с^3)/кг*)
(*удельная поглощаемая мощность*)
analitic=Plot[SLP[h],{h,10000,50000}, PlotLegends->{"аналитика"}];
experiment=ListPlot[{{24000,87000},{32000,150000},{40000,153000},{4800
0,187000}},PlotMarkers->{"•"}, InterpolationOrder->1,PlotStyle->{Red},
PlotLegends->{"эксперимент"}];
Show[{analitic, experiment},Frame->True, FrameLabel-
>{"H(Ам/м)", "SLP(Вт/кг)"}, PlotRange->{{10000,50000},{0,300000}},
FrameStyle->Directive[Black,14], ImageSize->Medium]

```

Ниже представлен код программы в Wolfram Mathematica, применяемый для сравнения SLP модели обездвиженных магнитных частиц с SLP моделью подвижных магнитных частиц:

```

Kj=14*10^3;(* для полимера *)
kb=1.38*10^-23;(* Дж/К = кг м^2/с^2К *)(*Константа Больцмана*)
mu0=4*Pi*10^-7;(* Гн/м = кг м^2/с^2А^2м *) (*магнитная постоянная*)
T=300;(* К *) (*Температура*)
Ms=480*10^3;(* Ам/м *) (*намагниченность насыщения*)
tau0=10^(-9);
rho=4.9*10^3; (* кг/м^3 *)(*плотность магнитного материала*)
nc=5.6*10^22 ;(* 1/м^3 *)(*числовая концентрация магнитного материала,
количество частиц/объем смеси = N/V*)
eta=4*10^-3;(* Па/с = кг/м*с *)(*вязкость раствора*)
d=12*10^-9;(* м *) (*диаметр ядра частицы*)
l=2*10^-9;(* м *) (*ширина оболочки вокруг частицы*)
Vm=Pi *(d^3)/6; (* м^3 *) (*объем ядра частицы*)
Vh=Pi *((d+2*l)^3)/6; (* м^3 *) (*объем частицы с слоем*)
phi=Vm*nc;(* 1 *)(*объемная концентрация магнитного материала, объем
магнитного материала/объем смеси = Vm/V*)
chiL=mu0*(Vm^2)*(Ms^2)*nc/(3*kb *T); (* 1 *) (*восприимчивость Ланжевена*)
sigma=Kj*Vm/(kb*T);
TD=tau0*sigma;
(*амплитуда магнитного поля*)
alpha[h_]=(mu0*Ms*Vm*h)/(kb*T);(* 1 *)
(*амплитуда поля преобразованная*)
f3=OpenRead["D:\\FerroN\\Для
Магистерской\\Data\\d12_h3\\IMXi_interaction.txt"];
data3=ReadList[f3,{(Number),(Number)}]; Close[f3];
For [i=1,i<=81,i++,(data3[[i,1]]=data3[[i,1]]/TD)];
For
[i=1,i<=81,i++,(data3[[i,2]]=data3[[i,2]]*mu0*(data3[[i,1]]/(2*Pi))*Pi*
((3*(10^(3)))^(2))/(phi*rho))];
f8=OpenRead["D:\\FerroN\\Для
Магистерской\\Data\\d12_h8\\IMXi_interaction.txt"];
data8=ReadList[f8,{(Number),(Number)}]; Close[f8];
For [i=1,i<=81,i++,(data8[[i,1]]=data8[[i,1]]/TD)];

```

```

For
[i=1,i<=81,i++,(data8[[i,2]]=data8[[i,2]]*μ0*(data8[[i,1]]/(2*Pi))*Pi*
((8*(10^(3)))^(2))/(φ*ρ));
f15=OpenRead["D:\\FerroN\\Для
Магистерской\\Data\\d12_h15\\IMXi_interaction.txt"];
data15=ReadList[f15,{(Number),(Number)}]; Close[f15];
For [i=1,i<=81,i++,(data15[[i,1]]=data15[[i,1]]/TD)];
For
[i=1,i<=81,i++,(data15[[i,2]]=data15[[i,2]]*μ0*(data15[[i,1]]/(2*Pi))*
Pi*((15*(10^(3)))^(2))/(φ*ρ));
numberInteraction=ListPlot[{data3,data8,data15},PlotRange->All,Frame-
>True,PlotStyle->{{Purple},{Blue},{Red}},PlotMarkers-
>{"●","●","●"},PlotLegends->{"h=3(кА/м)","h=8(кА/м)","h=15(кА/м)"}];
TB=3*η*Vh/(kb* T); (* с *) (*Броуновское время Релаксации*)
TE[h_]=TB/Sqrt[(1-Subscript[χ, L]/3)2+0.076*(α[h])2]; (* 1 *)
k[h_]=1+(0.027*(α[h])2)/(1+0.102*(α[h])+0.047*(α[h])2); (* 1 *)
X0[h_]=χL*(1+χL/3)*(1-
(0.101*(α[h])2)/(1+0.276*(α[h])+0.104*(α[h])2));(* 1 *)(*значение
действительной части восприимчивости на низких частотах*)
ReX[ω_,h_]=X0[h]/(1+(ω*TE[h])2); (* 1 *) (*действительная часть
динамической восприимчивости*)
ImX[ω_,h_]=(k[h]*X0[h]*(ω*TE[h]))/(1+(ω*TE[h])2); (* 1 *) (*мнимая
часть динамической восприимчивости*)
SLP[ω_,h_]=ImX[ω,h]*μ0*ω*h2/(2*φ*ρ); (* Вт/кг = (кг*м^2/с^3)/кг*)
(*удельная поглощаемая мощность*)
analitic=Plot[{SLP[ω,3*103],SLP[ω,8*103],SLP[ω,15*103]},{ω,50000,28000
00},PlotStyle->{{Purple},{Blue},{Red}},PlotLegends-
>{"h=3(кА/м)","h=8(кА/м)","h=15(кА/м)"}];
Show[{numberInteraction, analitic}, Frame->True, FrameLabel-
>{"ω(Гц)","SLP(Вт/кг)"}, PlotRange->{{100000,2700000},{0,200000}},
FrameStyle->Directive[Black,14], ImageSize->Medium]

```