

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
Факультет електроніки та інформаційних технологій

Кафедра електроніки, загальної та прикладної фізики

Кваліфікаційна робота магістра

**ЕФЕКТИВНІ РІВНЯННЯ РУХУ ФЕРОМАГНІТНИХ  
НАНОЧАСТИНОК В ОСЦИЛЮЮЧИХ ТА ГРАДІЄНТНИХ  
МАГНІТНИХ ПОЛЯХ**

Магістрант гр. ЕПм-82

П.В. Ключев

Науковий керівник,  
д-р фіз.-мат. наук, професор

С.І. Денисов

Завідувач кафедри ЕЗПФ,  
д-р фіз.-мат. наук, професор

І.Ю. Проценко

Суми 2019

## РЕФЕРАТ

Мета роботи полягала у побудові моделі для теоретичного опису спрямованого транспорту однодомених феромагнітних наночастинок у в'язкій рідині, індукованого сумісною дією обертального магнітного поля і змінного градієнтного магнітного поля. Актуальність цієї роботи зумовлена насамперед реальними перспективами використання таких частинок для доставки лікарських засобів до уражених органів.

Дослідження виконано в рамках моделі жорстких диполей з використанням теоретичних і чисельних методів аналізу динамічних систем. У наближенні малих чисел Рейнольдса отримано систему інтегродиференціальних рівнянь, що описують поступальний та обертальний рухи наночастинок в градієнтному та обертальному магнітних полях. У випадку коли зміщення частинки за період обертального поля є малим у порівнянні з її розміром, ця система зведена до системи значно простіших ефективних диференціальних рівнянь. Їх аналіз показав, що при таких умовах може існувати спрямований транспорт наночастинок.

Робота викладена на 25 сторінках, містить 2 рисунки та список цитованої літератури із 25 джерел.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** ФЕРОМАГНІТНІ НАНОЧАСТИНКИ, МОДЕЛЬ ЖОРСТКОГО ДИПОЛЯ, ЗМІННІ МАГНІТНІ ПОЛЯ, РІВНЯННЯ БАЛАНСУ СИЛ І МОМЕНТІВ, СПРЯМОВАНИЙ ТРАНСПОРТ.

## ЗМІСТ

<b>ВСТУП.....</b>	<b>5</b>
<b>РОЗДІЛ 1. РІВНЯННЯ РУХУ НАНОЧАСТИНКИ.....</b>	<b>6</b>
1.1 Загальні відомості про феромагнітні наночастинки.....	6
<u>1.1.1</u> Фізичні властивості магнітних наночастинок.....	7
1.2 Рівняння балансу сил та моментів.....	10
1.1. Наближення малих чисел Рейнольдса .....	12
1.2. Траєкторія частинок і середня швидкість.....	14
<b>РОЗДІЛ 2. ТЕОРЕТИЧНИЙ АНАЛІЗ ДИНАМІКИ ЧАСТИНОК .....</b>	<b>16</b>
2.1. Обертальне магнітне поле .....	16
2.2. Змінне градієнтне магнітне поле .....	16
<b>РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ .....</b>	<b>20</b>
<b>ВИСНОВКИ .....</b>	<b>22</b>
<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....</b>	<b>23</b>

## ВСТУП

Феромагнітні однодоменні наночастинки, що розподілені у в'язкій рідині, мають цікаві фізичні властивості і перспективи біомедичного застосування, такі як, наприклад, магнітна гіпертермія, візуалізація за допомогою магнітних частинок, сепарація клітин і доставка лікарських засобів [1-5]. Один з найпотужніших методів дослідження цих систем використовує дипольну апроксимацію, згідно з якою намагніченість частинок передбачається "вмороженою" в їх тіло [6, 7]. Основна перевага такої апроксимації полягає в тому, що динаміка частинок повністю описує динаміку намагнічування і, як наслідок, магнітні властивості таких систем. Зокрема, це наближення було використано для дослідження ролі магнітної дипольної взаємодії і теплових флуктуацій в дисипації енергії [8-12], формуванні структур внаслідок дипольної взаємодії, детермінованого і стохастичного обертання наночастинок і магнітного нагріву в детермінованому випадку [13].

Нещодавно, використовуючи дану апроксимацію, було теоретично і чисельно вивчено ефект спрямованого транспорту (дрейфу) зважених феромагнітних наночастинок, що виникає внаслідок дії сили Магнуса [14-17]. В цьому випадку наночастинки у в'язкій рідині виконують синхронізовані поступальні коливання і нерівномірні обертання, і тому можуть дрейфувати в деякому напрямку з постійною середньою швидкістю. У даній моделі поступальні і обертальні рухи колоїдних частинок генеруються рушійною силою і обертовим моментом відповідно. Однак, на відміну від обертального магнітного поля, яке генерує нерівномірний обертальний рух частинки, її коливальний рух генерувався абстрактною гармонічною силою. Цей факт робить неможливим визначення реальних транспортних властивостей наночастинок і, як наслідок, використання цих властивостей для сепарації частинок і доставки лікарських засобів.

Мета даної роботи – побудова фізично реалістичної моделі для теоретичного опису спрямованого транспорту однодоменних феромагнітних наночастинок у в'язкій рідині, індукованого сумісною дією обертального магнітного поля і змінного градієнтного магнітного поля.

## РОЗДІЛ 1. РІВНЯННЯ РУХУ НАНОЧАСТИНКИ

### 1.1 Загальні відомості про ферромагнітні наночастинки

Ферромагнітні наночастинки являють собою клас наночастинок, якими можна маніпулювати за допомогою магнітних полів. Такі частинки зазвичай складаються з двох компонентів, магнітного матеріалу і хімічного компонента, який має функціональне призначення. Фізичні та хімічні властивості ферромагнітних наночастинок багато в чому залежать від способу синтезу та хімічної будови. У більшості випадків частинки мають розмір від 1 до 100 нм і можуть проявляти суперпарамагнетизм. Такі частинки можуть бути об'єднані в кластер розміром 50-200 нм, який скрадатиметься із ряду індивідуальних магнітних наночастинок.

Однак великі ферромагнітні частинки втрачають свій гістерезис при кімнатній температурі, коли вони зменшуються до нанорозмірів. Виключення складають декілька матеріалів, таких як з'єднання FePt і SmCo зі звичайно високою магнітокристалічною анізотропією, яка може підтримувати постійний магнітний момент при кімнатній температурі в частинах розміром в декількох нанометрів. Завдяки застосуванню нещодавно розроблених методів «віджиму в сольовій матриці» та «зміна за допомогою ПАВ» були успішно синтезовані монодисперсні ферромагнітні наночастинки на основі FePt, SmCo та NdFeB. Ці наночастинки проявляють різні ферромагнітні властивості при кімнатній температурі в залежності від розмірів.

Ферромагнітні наночастинки в останній час активно досліджуються, а саме їх перспектива застосування якості будівельних блоків для сучасних об'ємних і тонкоплівкових магнітів, а також можуть застосовуватися в каталізі, включаючи каталізатори на основі наноматеріалів, біомедицині, магнітно перебудовуваних колоїдних фотонних кристалах, магнітно-резонансній томографії, збереженні даних, відновленні навколишнього середовища, нанорідинах, оптичних фільтрах і катіонних датчиках [18].

### 1.1.1 Фізичні властивості магнітних наночастинок

Властивості наночастинок значно відрізняються від аналогічних властивостей частинок з розмірами від часток мікрона і вище. Перерахуємо можливі причини, що обумовлюють цю відмінність.

1) Наночастинки є своєрідним мостом між об'ємними системами і атомами, тому їх властивості при збільшенні числа атомів у наночастинці змінюються від властивостей, характерних для відокремленого атома, до властивостей об'ємного тіла (квантово-хімічне опис).

2) У наночастинках частка поверхневих атомів порівнянна з часткою об'ємних, тому внесок поверхні призводить до появи нових властивостей і навіть нових незвичайних структурних станів.

3) Розмір наночастинок стає порівняним з характерними масштабами зміни фізичних властивостей матеріалу (розмірний ефект).

4) Малі розміри частинок призводять до неможливості колективних збуджень з довжинами хвиль, що перевищують розміри частинок, що істотно змінює їх термодинамічні властивості (finite size effect).

Виходячи з магнітних властивостей ансамблю малих частинок, виділяють два класи магнітних наночастинок: суперпарамагнітні (зазвичай з розмірами від 1-10 nm) і феромагнітні (10-50 nm). Магнітні властивості систем суперпарамагнітних частинок пояснюються на основі теорії суперпарамагнітної релаксації, заснованої на припущенні, що всередині кожної частинки має місце феромагнітний порядок. Очевидно, що експериментальне дослідження термодинамічних властивостей наночастинок поблизу основного стану більш повно може бути проведено на феромагнітних наночастинках.

Експериментальне вивчення магнітних наночастинок Fe, Co, Ni, а також сплавів на їх основі ускладнено тією обставиною, що при звичайних

атмосферних умовах наночастинки покриті окисної плівкою, порівнянної по товщині з розміром самої частинки.

Щоб уникнути утворення шару оксиду наночастинки готують в спеціальних матрицях або капсулюють їх в оболонку з матеріалу, що запобігає окислення. Однак це не проста технологічна задача. Для наночастинок через їх виняткової хімічної активності практично не існує інертного середовища.

Магнітні ефекти викликані рухами частинок, що мають як масу, так і електричні заряди. Обертова електрично заряджена частинка створює магнітний диполь, так званий магнетон. У феромагнітних матеріалах магнітони пов'язані групами. Магнітний домен (також званий доменом Вайса) відноситься до обсягу феромагнітного матеріалу, в якому всі магнітони вирівняні в одному напрямку силами обміну. Ця концепція доменів відрізняє феромагнетизм від парамагнетизму. Доменна структура феромагнітного матеріалу визначає розмірну залежність його магнітної поведінки. Коли розмір феромагнітного матеріалу зменшується нижче критичного значення, він стає єдиним доменом.

Магнетизм дрібних частинок походить від розмірних ефектів, які засновані на магнітній доменній структурі феромагнітних матеріалів. Передбачається, що стан найменшої вільної енергії феромагнітних частинок має рівномірну намагніченість для частинок, менших певного критичного розміру, і має нерівномірну намагніченість для більш великих частинок. Перші називають одиодоменними частинками, а другі - мультідоменними частинками. Згідно теорії магнітних доменів, на критичний розмір одного домена впливає декілька чинників, включаючи величину магнітного насичення, силу анізотропії кристалів і сили обміну, енергію поверхні або доменної стінки та форму частинок. Реакція феромагнітних матеріалів на прикладене поле добре описується петлею гістерезису, яка характеризується

двома основними параметрами: реманенцією і коерцитивністю. Останнє пов'язане з "товщиною" кривої. Маючи справу з дрібними частинками, коерцитивність є єдиною властивістю, що представляє найбільший інтерес, і вона сильно залежить від розміру. Було знайдено, що, оскільки розмір частинки зменшений, коерцитивність збільшується до максимуму і потім зменшується до нуля (Рис 1.1).

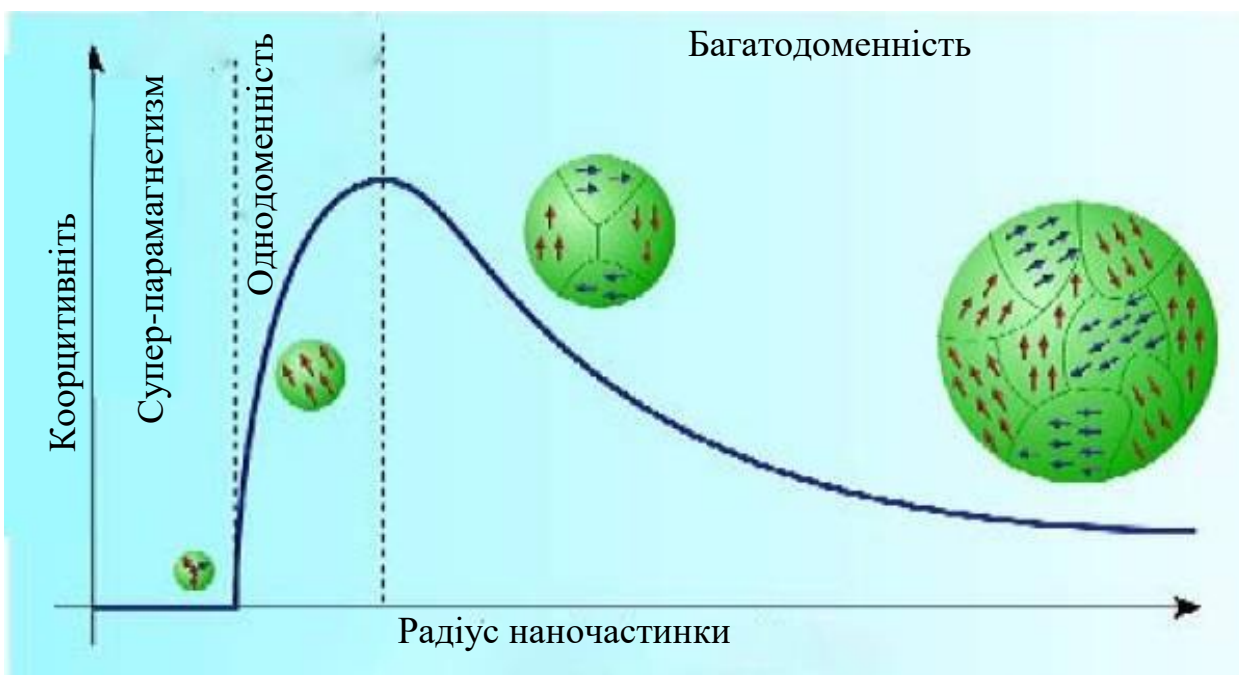


Рис 1.1 - Схематичне зображення коерцитивно-розмірних відношень наночастинок. Адаптовано із роботи [18].

Коли розмір однодоменних частинок зменшується нижче критичного діаметра, коерцитивна сила стає рівною нулю і такі частинки стають суперпарамагнітними. Суперпарамагнетизм викликаний тепловими ефектами. У суперпарамагнітних частинках теплові флуктуації досить сильні, щоб мимовільно розмагнічувати раніше насичену збірку. Отже, ці частинки мають нульову коерцитивність і не мають гістерезису. Наночастинки стають магнітними в присутності зовнішнього магнітного поля, але повертаються в немагнітний стан при його усуненні. Це дозволяє уникнути «активної»



поведінки частинок, коли немає прикладеного поля. Введені в системи, частинки є «магнітними» тільки в присутності зовнішнього поля, що дає їм унікальну перевагу при роботі в біологічному середовищі. Існує цілий ряд кристалічних матеріалів, які проявляють феромагнетизм, в тому числі Fe, Co або Ni. З ферит-оксид-магнетит ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) є найбільш магнітним з усіх зустрічаються в природі мінералів на землі, він широко використовується у вигляді суперпарамагнітних наночастинок для всіх видів біологічних застосувань [19].

## 1.2 Рівняння балансу сил та моментів

Досліджується спрямоване транспортування сферичної феромагнітної наночастинки, суспендованої у в'язку рідину, яка характеризується радіусом  $\alpha$  і намагніченістю  $\mathbf{M} = \mathbf{M}(\mathbf{R}, t)$ , де  $|\mathbf{M}| = M = \text{const}$  і  $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$  - радіус-вектор центра частинки. Радіус частинок обирається таким чином, щоб він був настільки малим, що однодомений стан реалізується і в той же час настільки великим, що тепловими коливаннями можна знехтувати (ці умови зберігаються для різних матеріалів, див., Наприклад, контрольний документ [31]). Що стосується радіус-вектора, припускаємо, що зміна намагніченості внаслідок зміни  $\mathbf{R}$  відбувається так повільно, що похідна  $d\mathbf{M}/dt$  може бути обчислена при фіксованому  $\mathbf{R}$ .

Якщо, крім того, анізотропне магнітне поле досить сильне, частка може бути пов'язана з жорстким магнітним диполем. У цьому наближенні намагніченість частинок прямує уздовж легкої осі частинок і, отже, задовольняє кінематичному диференціальних рівнянь  $d\mathbf{M}/dt = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{M}$ , де  $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}(\mathbf{R}, t)$  - кутова швидкість частинок.

Розглянемо ситуацію, коли наночастинка знаходиться під впливом нерівномірного магнітного поля

$$\mathbf{H} = H(\cos \psi \mathbf{e}_x + \sin \psi \mathbf{e}_y) \quad (1.1)$$

і змінного градієнтного магнітного поля

$$\mathbf{H}_g = gR_x \sin(\Omega t + \varphi) \mathbf{e}_x. \quad (1.2)$$

В даному випадку:

$H$  - амплітуда обертового поля;

$\psi = \psi(t)$ - залежний від часу кут, що задовольняє умовам періодичності  
 $\psi(t + T) = \psi(t)$  і  $\psi(t + T/2) = -\psi(t)$ ;

$T$  - період обертального поля;

$g (> 0)$  - градієнт магнітного поля;

$R_x$  -  $x$ -компонент  $\mathbf{R}$ ;

$\Omega = 2\pi/T$ - частота градієнтного поля,  $\phi \in [0, 2\pi)$ - Початкова фаза,

а  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$  і  $\mathbf{e}_z$  - одиничні вектори вздовж відповідних осей декартової системи координат  $x, y, z$ .

Щоб описати динаміку намагнічування в таких областях, ми припускаємо, що  $\mathbf{M}$  знаходиться в  $xy$  площині, тобто

$$\mathbf{M} = M (\cos \varphi \mathbf{e}_x + \sin \varphi \mathbf{e}_y) \quad (1.3)$$

де  $\varphi = \varphi(\mathbf{R}, t)$  є азимутним кутом вектора намагнічування.

Оскільки це випливає з кінематичного рівняння, зв'язку між цим кутом і частотою, яку кутова швидкість дана звичайним відношенням

$$\frac{d}{dt} \varphi = \omega_z \quad (1.4)$$

(похідна часу взята в фіксованому  $\mathbf{R}$ ). Слід також підкреслити, що уявлення (1.3) є лише зручним наближенням; навіть в разі рівномірно обертового магнітного поля воно може бути порушено [22].

Розглянемо рівняння, що описують поступальну і обертальну динаміку колоїдної частинки. Через його нанорозмір інерційними ефектами можна з упевненістю знехтувати (див. Також [27]), і ці рівняння можна записати як

рівняння балансу сил  $\mathbf{f}_d + \mathbf{f}_f + \mathbf{f}_l = \mathbf{0}$  і рівняння балансу крутного моменту  $\mathbf{t}_d + \mathbf{t}_f = \mathbf{0}$  відповідно. Тут  $\mathbf{f}_d$  - рушійна сила, що генерується градієнтним магнітним полем,  $\mathbf{f}_f$  - сила тертя,  $\mathbf{f}_l$  - сила Магнуса або підйомна сила,  $\mathbf{t}_d$  - рушійний момент, що крутить, створюваний загальним магнітним полем  $\mathbf{H} + \mathbf{H}_g$ , і  $\mathbf{t}_f$  - крутильний момент тертя. З урахуванням того, що рушійна сила і крутильний момент визначаються як  $\mathbf{f}_d = V (\mathbf{M} \cdot \partial / \partial \mathbf{R}) \mathbf{H}_g$  ( $V = 4\pi\alpha^3/3$  обсяг частки, точка, позначає скалярний продукт), і  $\mathbf{t}_d = V \mathbf{M} \times (\mathbf{H} + \mathbf{H}_g)$  (знак  $\times$  позначає векторний добуток) і обчислюючи їх використовує (1.1) - (1.3), вищезгадані рівняння можуть бути переписані як

$$MVg \cos \varphi \sin(\Omega t + \phi) \mathbf{e}_x + \mathbf{f}_f + \mathbf{f}_l = 0 \quad (1.5)$$

і

$$MV [H \sin(\psi - \varphi) - gR_x \sin \varphi \sin(\Omega t + \phi)] \mathbf{e}_z + \mathbf{t}_f = 0. \quad (1.6)$$

Оскільки явні вирази для  $\mathbf{f}_f$ ,  $\mathbf{f}_l$  і  $\mathbf{t}_f$  в загальному випадку невідомі, нижче ми розглядаємо тільки випадок малих чисел Рейнольдса (для наночастинок ця умова не є надто обмежуючою).

### 1.1. Наближення малих чисел Рейнольдса

Поступальні і обертальні числа Рейнольдса, визначені як  $Re = 2\rho\alpha|\mathbf{v}|/\eta$  і  $Re_\omega = \rho\alpha^2|\omega|/\eta$ , відповідно, відіграють найбільш важливу роль у визначенні  $\mathbf{f}_f$ ,  $\mathbf{f}_l$  і  $\mathbf{t}_f$ . В даному випадку  $\rho$  - щільність рідини,  $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{R}, t)$  - швидкість поступального руху частинок,  $\eta$  - динамічна в'язкість рідини.

Якщо ці параметри обрані таким чином, що  $t Re \ll 1$  і  $Re_\omega \ll 1$ , то потік рідини, індукований рухомою частинкою, є ламінарним і, відповідний до [32],  $\mathbf{f}_f = -6\pi\eta\alpha\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{f}_l = \pi\rho\alpha^3\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}$  і  $\mathbf{t}_f = -8\pi\eta\alpha^3\boldsymbol{\omega}$ . Використовуючи останню формулу, з рівняння (1.6) знаходимо  $\boldsymbol{\omega} = \omega_z \mathbf{e}_z$  і

$$\omega_z = \frac{M}{6\eta} [H \sin(\psi - \varphi) - gR_x \sin \varphi \sin(\Omega t + \phi)]. \quad (1.7)$$

Потім, замінюючи (1.7) на Рівняння (1.4), кут запізнювання  $\chi = \chi(\mathbf{R}, t)$ , визначений як  $\chi = \psi - \varphi$  отримуємо рівняння

$$\frac{d}{dt} \chi + \omega^{(1)} \sin \chi + \omega^{(2)} \sin(\chi - \psi) \sin(\Omega t + \phi) = \frac{d}{dt} \psi \quad (1.8)$$

де

$$\omega^{(1)} = \frac{MH}{6\eta}, \quad \omega^{(2)} = \frac{MgR_x}{6\eta} \quad (1.9)$$

є характеристичними частотами, що виникають відповідно до обертowego і градієнтного магнітних полів.

Рівняння (1.5) з  $\mathbf{f}_f$  і  $\mathbf{f}_l$ , наведене вище, показує, що швидкість  $\mathbf{v}$  частинок має два компоненти,  $v_x = v_x(\mathbf{R}, t)$  і  $v_y = v_y(\mathbf{R}, t)$ , які можуть бути представлені як

$$v_x = v_0 \cos(\chi - \psi) \sin(\Omega t + \phi) \quad (1.10)$$

і

$$v_y = v_0 \gamma^{(1)} \sin \chi + \gamma^{(2)} \sin(\chi - \psi) \sin(\Omega t + \phi) \times \\ \times \cos(\chi - \psi) \sin(\Omega t + \phi). \quad (1.11)$$

Тут

$$v_0 = \frac{2a^2 Mg}{9\eta} \quad (1.12)$$

є характеристичною швидкістю частки і безрозмірними параметрами

$$\gamma^{(1)} = \frac{\rho a^2 MH}{36\eta^2}, \quad \gamma^{(2)} = \frac{\rho a^2 MgR_x}{36\eta^2}, \quad (1.13)$$

що характеризують вклади обертального магнітного поля ( $\gamma^{(1)}$ ) і змінного градієнтного магнітного поля ( $\gamma^{(2)}$ ) до сили Магнуса, що викликає рух частинок вздовж осі  $y$ . Слід також зазначити, що вирази (1.10) і (1.11) дійсні до першого порядку малості чисел Рейнольдса.

## 1.2. Траєкторія частинок і середня швидкість

Оскільки рушійні магнітні поля вважаються періодичними з тим же періодом  $T$ , для подальшого аналізу зручно ввести уявлення  $t = nT + t'$ , де  $n = 0, 1, 2, \dots$  і  $t' \in [0, T]$ . Потім вводять частку в положення  $\mathbf{R}_n = \mathbf{R}(nT)$ . ( $\mathbf{R}_0 = R_{0x}e_x$  - вихідне положення частинок і кут запізнення  $\chi_n(\tau) = \chi(\mathbf{R}_n, \tau)$ ) на  $n$ -му часовому кроці, від Рівняння (1.8) отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \chi_n(\tau) + \omega^{(1)} \sin \chi_n(\tau) + \omega_n^{(2)} \sin[\chi_n(\tau) - \psi(\tau)] \times \\ \times \sin(\Omega\tau + \phi) = \frac{d}{d\tau} \psi(\tau) \end{aligned} \quad (1.14)$$

де

$$\omega_n^{(2)} = \frac{MgR_{nx}}{6\eta} \quad (1.15)$$

і початковий кут запізнювання  $\chi_n(0)$  визначається за попереднім тимчасовому етапу:  $\chi_n(0) = \chi_{n-1}(T)$ . Початковий кут затримки в  $n = 0$ ,  $\chi_0(0)$ , може бути вибраний з інтервалу  $(-\pi, \pi)$ . Зауважимо, що рівняння (1.14) має одне й те саме рішення, якщо параметри  $\phi$  і  $R_{nx}$ , введення швидкості частинок на  $n$ -ой тимчасовій стадії як  $\mathbf{v}_n(\tau) = \mathbf{v}(\mathbf{R}_n, \tau)$ , від (1.10) і (1.11) ми знаходимо

$$v_{nx}(\tau) = v_0 \cos[\chi_n(\tau) - \psi(\tau)] \sin(\Omega\tau + \phi) \quad (1.16)$$

i

$$v_{ny}(\tau) = v_0 \left[ \gamma^{(1)} \sin \lambda \ln(\tau) + \gamma_n^{(2)} \sin[\chi_n(\tau) - \psi(\tau)] \sin(\Omega\tau + \phi) \right] \times \\ \times \cos[\chi_n(\tau) - \psi(\tau)] \sin(\Omega\tau + \phi) \quad (1.17)$$

де

$$\gamma_n^{(2)} = \frac{\rho a^2 M g R_{nx}}{36 \eta^2}. \quad (1.18)$$

Важливо підкреслити, що положення частинок для  $n$ -го тимчасового кроку,  $\mathbf{R}_n$ , повністю визначається з попереднього тимчасового кроку:

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_{n-1} + \int_0^T v_{n-1}(\tau) d\tau \quad (1.19)$$

( $n \geq 1$ ). Цей факт дозволяє визначити траєкторію частинок протягом тимчасового інтервалу  $[0, NT]$  шляхом обчислення положень  $\mathbf{R}_n$  частинок для  $n = 1, 2, \dots, N$  (відгук,  $\mathbf{R}_0$  попередньо призначений). Для цього ми повинні вирішити рівняння (1.14), доповнений умовою (1.19), для  $n = 0, 1, \dots, N - 1$  і обчислити  $v_n(\tau)$  за допомогою (1.16) і (1.17). При цьому приходиться до вираження

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_0 + \sum_{k=1}^n \int_0^T v_{k-1}(\tau) d\tau \quad (1.20)$$

(сума дорівнює нулю, коли  $n = 0$ ). Використовуючи (1.20), можна також визначити середню швидкість колоїдних феромагнітних наночастинок, індуковану обертальним і градієнтним магнітними полями

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{NT} \sum_{k=1}^N \int_0^T \mathbf{v}_{k-1}(\tau) d\tau. \quad (1.21)$$

## РОЗДІЛ 2. ТЕОРЕТИЧНИЙ АНАЛІЗ ДИНАМІКИ ЧАСТИНОК

### 2.1. Обертальне магнітне поле

Спочатку розглянемо найпростішу ситуацію, коли градієнтне магнітне поле (1.2) вимкнено (тобто  $g = 0$ ). Оскільки згідно (1.12)  $v_0 = 0$ , з (1.16) і (1.17) випливає, що поступальний рух частки взагалі не відбувається. Тому цей випадок для нас не представляє інтересу. Відзначимо тільки, що обертальний рух частинок, викликане нерівномірно обертовим магнітним полем (1.1) описується за допомогою рівняння (1.14) з  $\omega_n^{(2)} = 0$ , який знаходився в стабільному стані зменшується до рівняння [25]

$$\frac{d}{d\tau} \chi_{st}(\tau) + \omega^{(1)} \sin \chi_{st}(\tau) = \frac{d}{d\tau} \psi(\tau), \quad (2.1)$$

$[\gamma_{st}(\tau) = \lim_{n \rightarrow \infty} \chi_n(\tau)]$ , що описує надлишкову динаміку періодично приводиться маятника. Це рівняння можна легко вирішити в чисельному відношенні для довільної періодичної функції  $\psi(\tau)$ , але його точне аналітичне рішення, як правило, недоступно. Наскільки нам відомо, повне аналітичне рішення рівняння (2.1) було знайдено тільки для періодичної трикутної функції [26].

### 2.2. Змінне градієнтне магнітне поле

Розглянемо рух частинок, викликаний тільки змінним градієнтним магнітним полем (1.2). З урахуванням того, що в цьому випадку  $\omega^{(l)} = \gamma^{(l)} = 0$  і повертається до змінної  $\varphi_n(\tau) = \psi(\tau) - \chi_n(\tau)$ , рівняння (1.14) спрощує до

$$\frac{d}{d\tau} \varphi_n(\tau) + \omega_n^{(2)} \sin \varphi_n(\tau) \sin(\Omega\tau + \phi) = 0 \quad (2.2)$$

і швидкісні компоненти (1.16) і (1.17) приймають форму

$$v_{nx}(\tau) = v_0 \cos \varphi_n(\tau) \sin(\Omega\tau + \phi) \quad (2.3)$$

і

$$v_{ny}(\tau) = -v_0 \gamma_n^{(2)} \sin \varphi_n(\tau) \cos \varphi_n(\tau) \sin^2(\Omega\tau + \phi) \quad (2.4)$$

відповідно. Як видно з (2.2) - (2.4), градієнтне магнітне поле (1.2) може викликати як поступальні, так і обертальні рухи колоїдних феромагнітних частинок. Щоб отримати більше інформації про ці рухи, вирішуємо рівняння (2.2) аналітично розділення змінних. Переписуючи його в формі

$$\int_{\varphi_n(0)}^{\varphi_n(\tau)} \frac{d\varphi}{\sin \varphi} = -\omega_n^{(2)} \int_0^\tau \sin(\Omega t + \phi) dt \quad (2.5)$$

і використання умови  $\varphi_n(0) = \varphi_0(0)$ , який слід з умов  $\varphi_n(T) = \varphi_n(0)$  і  $\varphi_n(0) = \varphi_{n-l}(T)$ , після інтеграції в (3,5) ми отримуємо

$$\frac{1 - \cos \varphi_n(\tau)}{1 + \cos \varphi_n(\tau)} = \frac{1 - \cos \varphi_0(0)}{1 + \cos \varphi_0(0)} e^{2\kappa_n f(\tau)} \quad (2.6)$$

де  $\kappa_n = \omega_n^{(2)}/\Omega$  і  $f(\tau) = \cos(\Omega\tau + \phi) - \cos \phi$ . Вирішуючи рівняння (2.6) щодо,  $\cos \varphi_n(\tau)$ , Використовуючи алгебру отримуємо

$$\cos \varphi_n(\tau) = \frac{\cos \varphi_0(0) \cosh[\kappa_n f(\tau)] - \sinh[\kappa_n f(\tau)]}{\cosh[\kappa_n f(\tau)] - \cos \varphi_0(0) \sinh[\kappa_n f(\tau)]}. \quad (2.7)$$

Відповідно до (2.7), поведінка часу азимутального кута  $\varphi_n(\tau)$  намагнічування частки сильно залежить від свого початкового значення  $\varphi_0(0)$ . Зокрема, якщо  $\varphi_0(0) = 0$  або  $\pi$  тоді частка не обертається,  $\varphi_n(\tau) = \varphi_0(0)$ , це виконує гармонійне рух уздовж магнітного поля градієнта, тобто  $v_{nx} = v_0 \cos \varphi_0(0) \times \sin(\Omega\tau + \phi)$  і  $v_{ny} = 0$ , і положення частинки не змінюється в польовий період,  $\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_0$ .



Навпаки, динаміка частинок, початкова намагніченість яких не паралельна градієнтному магнітному полю, набагато складніше. Дійсно, вибираючи для простоти  $\varphi_0(0) = \pi / 2$ , від (2.7) отримуємо

$$\varphi_n(\tau) = \arccos(\tanh[K_n f(\tau)]) \quad (2.8)$$

тобто магнітне поле градієнта викликає неоднорідне обертання таких частинок. У той же час, згідно з (2.3), (2.4) і (2.8), вони виконують також перекладне рух, що характеризується миттєвими швидкостями

$$v_{nx}(\tau) = -v_0 \tanh[K_n f(\tau)] \sin(\Omega\tau + \phi) \quad (2.9)$$

і

$$v_{ny}(\tau) = v_0 \gamma_n^{(2)} \frac{\tanh[\kappa_n f(\tau)]}{\cosh[K_n f(\tau)]} \sin^2(\Omega\tau + \phi). \quad (2.10)$$

Відзначимо, що в останній формулі використано наближення,  $\sin \varphi_n(\tau) = 1 / \cosh[\kappa_n f(\tau)]$  тому що  $\varphi_n(\tau) \in (0, \pi)$ .

Як впливає з (1.19) і (2.9), різниця  $\Delta X_n = R_{nx} - R_{n-1x}$  задана

$$\Delta X_n = -v_0 \int_0^T \tanh[\kappa_{n-1} f(\tau)] \sin(\Omega\tau + \phi) d\tau. \quad (2.11)$$

Поділ інтервалу інтегрування на два підінтервала  $[0, T/2]$  і  $[T/2, T]$  і введення нової інтегральної змінної  $\kappa_{n-1} f(\tau)$  замість  $\tau$ , з (2.11) прямолінійно знаходить  $\Delta X_n = 0$ , тобто відповідно до (1.20),  $R_{nx} = R_{0x}$  для всіх  $n$ .

Це означає, що компонент  $x$  середнього положення частинок на будь-якому часовому етапі збігається з початковим.

Точно так же використовуючи (1.19), (2.10) і умови  $\kappa_n = \kappa_0$  і  $\gamma_n^{(2)} = \gamma_0^{(2)}$ , які випливають з вищезазначеного результату, розходження  $\Delta Y_n = R_{ny} - R_{n-1y}$  може бути представлений у формі

$$\Delta Y_n = v_0 \gamma_0^{(2)} \int_0^T \frac{\tanh[\kappa_0 f(\tau)]}{\cosh[\kappa_0 f(\tau)]} \sin^2(\Omega\tau + \phi) d\tau. \quad (2.12)$$

Замінюючи відношення

$$\frac{\tanh[\kappa_0 f(\tau)]}{\cosh[\kappa_0 f(\tau)]} \sin(\Omega\tau + \phi) = \frac{1}{K_0 \Omega} \frac{d}{d\tau} \frac{1}{\cosh[\kappa_0 f(\tau)]}$$

і об'єднуючись по частинах, можна легко отримати

$$\Delta Y_n = -\frac{v_0 \gamma_0^{(2)}}{K_0} \int_0^T \frac{\cos(\Omega\tau + \phi)}{\cosh[\kappa_0 f(\tau)]} d\tau. \quad (2.13)$$

На закінчення, вводячи нову змінну інтеграла  $\xi = \cos(\Omega\tau + \phi)$  і інтегруючи через підінтервали  $[0, T/2]$  і  $[T/2, T]$ , ми можемо переконатися, що  $\Delta Y_n = 0$  і тому  $R_{ny} = 0$ . Таким чином, коли  $\phi_0(0) = \pi / 2$ , змінне магнітне поле градієнта викликає і періодичні поступальні і обертальні рухи колоїдних феромагнітних наночастинок, але дрейф частинок не спостерігається.

### РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ

Ми починаємо чисельний аналіз з перевірки наших теоретичних результатів. На Рис 3.1 ми показуємо тимчасову залежність азимутального кута  $\varphi_n(\tau)$  [це збігається з  $\varphi_0(\tau)$ ] обчислена і використовує аналітична формула (2.8) і рішення рівняння (2.2) чисельно для  $\varphi_0(0) = \pi/2$ . Ці результати представлені для наночастинок  $Co$  суспендованих у воді при кімнатній температурі (295K), що характеризуються параметрами  $a = 2 \times 10^{-6} \text{ см}$ ,  $M = 1,42 \times 10^3 \text{ етм/см}^3$ ,  $\rho = 1 \text{ г/см}^3$ ,  $\eta = 9,62 \times 10^{-3} \text{ П}$  і піддаються градієнтному магнітному полю (2.2) з  $g = 10^2 \text{ Ое/см}$  і  $\omega = 10^5 \text{ рад/с}$  (для цих параметрів  $v_0 = 1,31 \times 10^{-5} \text{ см/с}$ ).

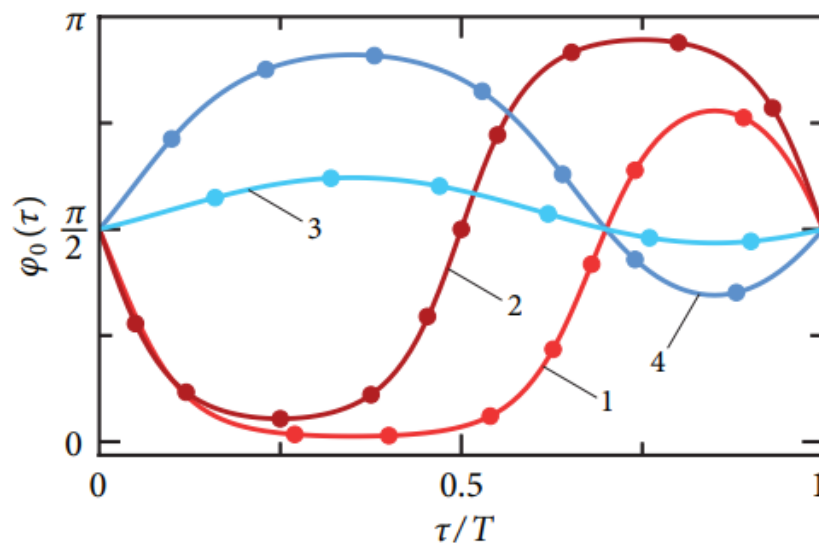


Рис 3.1 - Діаграми азимутального кута намагнічування  $\varphi_0(\tau)$  при  $\varphi_0(0) = \pi/2$  та різних значень початкового положення частинок  $R_{0x}$  і фаз  $\varphi$ . Суцільні лінії та символи являють собою аналітичні результат (2.8) і числове рішення рівняння (2.2) відповідно. Криві 1 і 2 відповідають випадку при  $R_{0x} = 0,1 \text{ см}$ ,  $\varphi = 0,3\pi$  (1) і  $\varphi = 0,5\pi$  (2), а криві 3 і 4 у випадку з  $\varphi = 1,3\pi$ ,  $R_{0x} = 0,01 \text{ см}$  (3) і  $R_{0x} = 0,05 \text{ см}$  (4); інші параметри наведені в тексті

Як видно, аналітичні та числові рішення рівняння (2.2) повністю узгоджені. Згідно (2.8), обертання частинок поблизу точки  $x = 0$  (коли  $|K_0| \ll 1$ ) відбувається поблизу початкового азимутального кута, в той час як обертання частинок, розташованих далеко від нього (коли  $|K_0| > 1$ ) відбувається таким чином, що азимутальний кут намагнічування різко змінюється в межах від 0 до  $\pi$ . Оскільки параметр  $\gamma_0^{(2)}$  малий (наприклад,  $\gamma_0^{(2)} = 1,7 \times 10^{-4}$  навіть для  $R_{0x} = 1$  см), значення амплітуди компонента  $x$  швидкості частки істотно перевищує значення амплітуди його компонента  $y$ . Використовуючи чисельний розв'язок рівняння (2.2) і вираз (1.20), ми підтвердили аналітичний результат  $\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_0$ , що показує, що змінне градієнтне магнітне поле не викликає спрямованого перенесення колоїдних феромагнітних частинок. Потрібно також підкреслити, що числовий розв'язок рівняння (2.2) при  $\varphi_0(0) \neq \pi/2$  підтверджує аналітичний розв'язок (2.7). У цьому випадку немає і спрямованого транспорту.

## ВИСНОВКИ

1. Використовуючи рівняння балансу сил і моментів, у наближенні малих чисел Рейнольдса отримано систему інтегро-диференціальних рівнянь, що описують поступальний і обертальний рухи наночастинок у в'язкій рідині під впливом градієнтного та обертального магнітних полів.

2. У випадку, якщо зміщення наночастинок за період обертального поля є малим у порівнянні з її діаметром, ця система рівнянь зведена до системи ефективних диференціальних рівнянь руху, теоретичний і чисельний аналіз яких є значно простішим.

3. За допомогою ефективних рівнянь визначено середню швидкість наночастинок і траєкторію їх руху. Показано, зокрема, що при наявності лише обертального магнітного поля спрямованих рух частинок відсутній. Знайдено також точний розв'язок ефективних рівнянь руху у випадку дії лише змінного градієнтного магнітного поля. Встановлено, що в залежності від характеристик градієнтного поля швидкість спрямованого транспорту наночастинок може досягати десятків, або навіть сотень нанометрів за секунду.

4. Аналітичні результати роботи підтверджено шляхом порівняння з результатами, отриманими надійними методами чисельного розв'язання ефективних рівнянь руху.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Laurent S., Dutz S., Hafeli U.O., Mahmoudi M. Magnetic fluid hyperthermia: Focus on superparamagnetic iron oxide nanoparticles // *Advances in Colloid and Interface Science*. - 2011. - V. 166. -P. 8-23.
2. Perigo E.A., Hemery G., Sandre O., Ortega D., Garaio E., Plazaola F., Teran F.J. Fundamentals and advances in magnetic hyperthermia // *Applied Physics Reviews*.- 2015. - V. 2. -P.104.
3. Gleich, B., Weizenecker, J. Tomographic imaging using the nonlinear response of magnetic particles // *Nature* 435. - 2005. - P. 1214–1217.
4. Pankhurst Q.A., Thanh N.T.K, Progress in applications of magnetic nanoparticles in biomedicine // *Journal of Physics D: Applied Physics*.- 2009.- V. 42. - P. 22.
5. Saritas EU, Goodwill PW, Croft LR, Konkle JJ, Lu K, Zheng B, Conolly SM. Magnetic particle imaging (MPI) for NMR and MRI researchers // *J. Magn. Reson.*- 2013. – V. 229. -P.116-126.
6. D.W. Inglis, R. Riehn, R.H. Austin, J.C. Sturm. Continuous microfluidic immunomagnetic cell separation // *Appl. Phys. Lett.*- 2004. -V. 85. -P. 5093-5095.
7. Zborowski M., Chalmers J.J.. *Magnetic Cell Separation* // Amsterdam: Elsevier.- 2008. -V. 32. -P. 486.
8. Hejazian M., Nguyen W. Li, N.-T., Lab on a chip for continuous-flow magnetic cell separation // *Lab Chip*.- 2015. -V. 15. -P. 959.
9. Arruebo M., Fernandez-Pacheco R., Ibarra M.R., Santamar J. Magnetic nanoparticles for drug delivery // *Nano Today* 2 .-2007. -V. 13(2). - P. 22–32.
10. Sun C., Lee J.S.H., Zhang M., Magnetic nanoparticles in MR imaging and drug delivery // *Adv. Drug Delivery Rev.*- 2008. -V. 11. - P.1252–1265.
11. Ulbrich K., Hola K., Subr V., Bakandritsos A., Targeted drug delivery with polymers and magnetic nanoparticles: Covalent and noncovalent approaches, release control, and clinical studies // *Chem. Rev.*- 2016. -V. 116. - P. 5338–5431.

12. Berkov D.V., Iskakova L.Yu., Zubarev A.Yu.. Theoretical study of the magnetization dynamics of nondilute ferrofluids // *Phys. Rev.* - 2009.- V. 79. - P. 12.
13. Raikher Yu.L., Stepanov V.I.. Power losses in a suspension of magnetic dipoles under a rotating field // *Phys. Rev.*-2011. -V. 83. -P. 79.
14. Lyutyy T.V., Reva V.V., Energy dissipation of rigid dipoles in a viscous fluid under the action of a time-periodic field: The influence of thermal bath and dipole interaction // *Phys. Rev.*-2018. -V. 97. -P.
15. Denisov S.I., Pedchenko B.O. Drift of suspended ferromagnetic particles due to the Magnus effect // *J. Appl. Phys.*.- 2017. -V. 121. -P.4.
16. Denisov S.I., Pedchenko B.O., Kvasnina O.V., Denisova E.S.. Exactly solvable model for drift of suspended ferromagnetic particles induced by the Magnus force // *J. Magn. Magn. Mater.*.- 2017.- V. 443.- P. 89–95.
17. Denisov S.I., Lyutyy T.V., Reva V.V., Yermolenko A.S., Temperature effects on drift of suspended single-domain particles induced by the Magnus force // *Phys. Rev.*.- 2018.- V. 97. -P. 3.
18. Qu LH, Peng ZA, Peng XG. Alternative routes toward high quality CdSe nanocrystals. *Nano Lett.* - 2001. -V. 1(6). -P. 333–337.
19. Ilg P., Evangelopoulos A.E.A.S., Magnetic susceptibility, nanorheology, and magnetoviscosity of magnetic nanoparticles in viscoelastic environments // *Phys. Rev.*-2018. -V. 97. -P. 17.
20. Lyutyy T.V., Dynamics and energy dissipation of a rigid dipole driven by the RF-field in a viscous fluid: Deterministic approach // *Eur. Phys. J.*- 2018.- V. 41.- P. 142.
21. Lyutyy T.V., Denisov S.I., Reva V.V., Bystrik Yu.S.. Rotational properties of ferromagnetic nanoparticles driven by a precessing magnetic field in a viscous fluid // *Phys. Rev.*-2015. -V. 92. -P. 61.

22. Odenbach S. Colloidal Magnetic Fluids: Basics // Development and Application of Ferrofluids.- Berlin Heidelberg: Springer.- 2009. -V. 54. – P. 92.
23. Song Y., Cheng D., L. Microfluidics: Fundamentals, Devices and Applications // Weinheim: Wiley-VCH. -2018. -V.1. -P. 598.
24. D.W. Inglis, R. Riehn, R.H. Austin, J.C. Sturm. Continuous microfluidic immunomagnetic cell separation // Appl. Phys. Lett.- 2004. -V. 85. -P. 5093-5095.
25. Zborowski M., Chalmers J.J.. Magnetic Cell Separation // Amsterdam: Elsevier.- 2008. -V. 32. -P. 486.