

УДК 537.633.9

**Компьютерное моделирование поведения магнитных наночастиц в магнитном поле.**

**Иванова. Т.С.** (Школа №259, Санкт-Петербург), **Казаченко Е.М.** (Школа №176, Самара)

**Научный руководитель – Сенникова Д.В. –**

(Университет ИТМО).

**Введение.** Магнитные наночастицы — это объекты с характерными линейными размерами 1–100 нм, обладающие ярко выраженными магнитными свойствами. С такими частицами просто взаимодействовать благодаря имеющемуся собственному магнитному моменту, взаимодействуя с которым можно выстраивать частицы в некоторые структуры или направлять в заданную область образца. Управление осуществляется бесконтактно при помощи изменения воздействующего магнитного поля. Зачастую магнитные наночастицы помещают в биоинертные матрицы, что делает частицы биосовместимыми [1]. Магнитные наночастицы не взаимодействуют с тканями организма и не оказывают токсического воздействия [2], поэтому применение магнитных наночастиц в медицине полностью безопасно. Приведённые преимущества привели к развитию сфер, использующих магнитные наночастицы. На данный момент такие структуры находят применение в биомедицинском детектировании, терапии [3], доставке лекарств [4] и в многих других направлениях. Изучение теории движения магнитных наночастиц позволяет более эффективно структурировать их необходимым образом и предсказывать направление их движения, что особо важно в биомедицинских приложениях.

**Основная часть.** Магнитное поле может создаваться электрическим током или, в случае постоянных магнитов, магнитными моментами электронов в атомах, коротким лазерным импульсом, электрическим или переменным магнитным полем [5]. Движение магнитных наночастиц определяется несколькими факторами, включая размер частиц, температуру и наличие магнитного поля. [6]

Одним из методов изучения поведения магнитных наночастиц может быть компьютерное моделирование. Такой подход позволяет проводить предварительные эксперименты, не используя материальные образцы, а также визуализировать полученную теоретическую модель. Существует множество инструментов для компьютерного моделирования: COMSOL Multiphysics, CST, Quantum Electronics. В данном исследовании был выбран именно первый вариант благодаря большому количеству обучающих ресурсов и открытости сообщества.

В качестве источника магнитного поля в настоящей модели был выбран постоянный магнит, который был смоделирован при помощи модуля Magnetic Fields. Модуль Charged Particle Tracing отвечал за генерацию частиц и приложение к ним силы со стороны магнитного поля. На данном этапе моделирования имеет смысл отказаться от 3D системы потому как в современных исследованиях движение магнитных наночастиц рассматривается не в объёме, а на поверхности. В контексте модели проверялись теоретические результаты работ [7] и [8], визуализировались предполагаемые траектории магнитных наночастиц в магнитном поле на основе выведенных формул силы действия магнитного поля.

**Выводы.** Проведён анализ теоретических моделей движения, описанных в работах [7] и [8]. Полученные траектории коррелировали с результатами реальных экспериментов [9], исходя из данных наблюдений были сделаны выводы о корректности приведённых в указанных статьях формулах, описывающих характер движения магнитных наночастиц в магнитном поле. Было изучено влияние формы источника постоянного магнитного поля на

характер распределения эквипотенциальных линий и на траектории движения изучаемых структур.

Полученная компьютерная модель может использоваться в качестве дополнительного инструмента изучения характера движения магнитных наночастиц. Изменение таких параметров, как профиль распределения магнитного поля, количество частиц и их свойств может помочь обнаружить более эффективные подходы к управлению магнитными наночастицами.

#### **Список использованных источников:**

1. Биомедицинские применения магнитных наночастиц. Наука и технологии в промышленности. 90 - 99. Никифоров, В. (2011).
2. Спекл-корреляционный датчик для детектирования скорости микроциркуляторного кровотока. Давыдов С. Н. (2020)
3. Использование магнитных наночастиц в биомедицине // Бюллетень сибирской медицины. 2008. №2. Першина А. Г., Сазонов Алексей Эдуардович, Мильто И. В.
4. Перспективы применения магнитных наночастиц для целевой доставки лекарств. Айрапетян Д.К (2015)
5. Наномеханическое управление активностью ферментов, иммобилизованных на однодоменных магнитных наночастицах // Ю.И. Головин, С.Л. Грибановский, Н.Л. Клячко, А.В. Кабанов.
6. Magnetic nanoparticles: preparation, structure and properties. 2013. Gubin, S. P. / Koksharov, Yu A. / Khomutov, G. B. / Yurkov, G. Yu.
7. Импульсные электрические заряды в воде как средство получения магнитных наночастиц для транспорта микроорганизмов. Ф. Г. Рутберг, В. А. Коликов, В. Н. Снетов, А. Ю. Стогов, Е. Г. Абрамов.
8. Определение баланса сил, действующих на наночастицу в электротехнической системе магнитной сепарации. Е.Е. Волканин, А.В. Некрасов, А.П. Оксанич, В.П. Ляшенко
9. Empirical and simulated evaluations of easy-axis dynamics of magnetic nanoparticles based on their magnetization response in alternating magnetic field 2021. Ota, Satoshi / Ohkawara, Seiichi / Hirano, Harutoyo / Futagawa, Masato / Takemura, Yasushi