

DE TTK



1949

Mágneses nanorészecske hipertermia

Egyetemi doktori (PhD) értekezés

Hammersberg-Ganczstuckhné Rácz Judit

Témavezető
Dr. Nándori István

Debreceni Egyetem
Természettudományi Doktori Tanács
Fizikai Tudományok Doktori Iskolája
Debrecen, 2017

Készült

a Debreceni Egyetem
Fizikai Tudományok Doktori Iskolájának
Fizikai módszerek interdiszciplináris kutatásokban programja keretében
az MTA Atommagkutató Intézetben

Ezen értekezést a Debreceni Egyetem Természettudományi Doktori Tanács Fizikai Tudományok Doktori Iskolája Fizikai módszerek interdiszciplinális kutatásokban programja keretében készítettem a Debreceni Egyetem természettudományi doktori (PhD) fokozatának elnyerése céljából. Nyilatkozom arról, hogy a tézisekben leírt eredmények nem képezik más PhD disszertáció részét.

Debrecen, 2017

.....
Hammersberg-Ganczstuckhné Rác Judit
jelölt

Tanúsítom, hogy Hammersberg-Ganczstuckhné Rác Judit doktorjelölt 2012-2017 között a fent megnevezett Doktori Iskola Fizikai módszerek interdiszciplinális kutatásokban programjának keretében irányításommal végezte munkáját. Az értekezésben foglalt eredményekhez a jelölt önálló alkotó tevékenységével meghatározóan hozzájárult. Nyilatkozom továbbá arról, hogy a tézisekben leírt eredmények nem képezik más PhD disszertáció részét. Az értekezés elfogadását javaslom.

Debrecen, 2017

.....
Dr. Nándori István
témavezető

Mágneses nanorészecske hipertermia

Értekezés a doktori (PhD) fokozat megszerzése érdekében
a fizika tudományágban

Írta: Hammersberg-Ganczstuckhné Rácz Judit
okleveles fizikatanár-matematikatanár

Készült a Debreceni Egyetem Fizikai Tudományok Doktori Iskolája
Fizikai módszerek interdiszciplináris kutatásokban programja keretében

Témavezető: Dr. Nándori István

A doktori szigorlati bizottság:

elnök:	Dr. Beke Dezső	
tagok:	Dr. Kiss Árpád Zoltán	
	Dr. Horváth Ákos	

A doktori szigorlat időpontja: 2016. június 3.

Az értekezés bírálói:

Dr.
Dr.

A bírálóbizottság:

elnök:	Dr.
tagok:	Dr.
	Dr.
	Dr.
	Dr.

Az értekezés védésének időpontja:

Tartalomjegyzék

Bevezetés és célkitűzés	1
I. Irodalmi előzmények	3
1. Mágneses lázterápia	5
1.1. Orvosi alkalmazások	5
1.2. Mágneses nanorészecskék	8
1.3. Anyagok mágneses tulajdonságai	10
2. Landau-Lifshitz-Gilbert egyenlet	17
2.1. Mágneses relaxáció	17
2.2. Néel-relaxáció, LLG egyenlet	20
2.3. Precesszió	21
2.4. Súrlódás	22
3. Izotróp (stacionárius) eset	27
3.1. Lineárisan polarizált (rezgő) tér	27
3.1.1. Csillapított (súrlódásos) precesszió	28
3.1.2. Fajlagos energiaveszteség	29
3.2. Cirkulárisan polarizált (forgó) tér	30
3.2.1. Csillapított (súrlódásos) precesszió	31
3.2.2. Fajlagos energiaveszteség	35
3.3. Rezgő és forgó esetek összehasonlítása	36

II. Eredmények	39
4. Anizotróp eset, pályatérképek	41
4.1. Anizotróp egyenletek	42
4.2. Pályatérképek	48
4.2.1. Izotróp eset	48
4.2.2. Anizotróp eset	49
5. Stacionárius megoldás, $\lambda_{\text{eff}} > 0$	53
5.1. Forgó tér, stacionárius megoldás, $\lambda_{\text{eff}} > 0$	53
5.2. Rezgő tér, $\lambda_{\text{eff}} \gg 1$	57
6. Stacionárius megoldás, $\lambda_{\text{eff}} < 0$	61
6.1. Magas frekvencia és $\lambda_{\text{eff}} < 0$	61
6.2. Alacsony frekvencia és $\lambda_{\text{eff}} < 0$	64
7. Nem stacionárius megoldás – új típusú gerjesztés	67
7.1. Nem stacionárius megoldás - minimális disszipáció elve	68
7.2. Periodikusan váltakozó forgó tér	70
7.3. Javaslat kísérleti megvalósításhoz, kitekintés	72
Összefoglalás	75
Summary	79
Köszönetnyilvánítás	83
Publikációs lista	85
Irodalomjegyzék	89

Bevezetés és célkitűzés

Az élő szervezetbe bejuttatott mágneses nanorészecskék relaxációjának hőtermelés céljából végzett vizsgálata, azaz a lokalizált lázterápia ötlete, több évtizedre tekint vissza. A mágneses nanorészecske olyan nanoméretű egykristály, amely ferromágneses tulajdonsággal rendelkezik és egyetlen mágneses doménből áll. Minden nanorészecskéhez rendelhető egy mágnesezettség vektor. Az egyes nanorészecskék mágnesezettségük révén a külső mágneses térrel kölcsönhatásba lépnek. Időben változó gerjesztő tér esetén a nanorészecskék relaxációval követik a teret, abból energiát vesznek fel, amit leadnak a közvetlen környezetüknek.

A szervezetbe juttatott mágneses nanorészecskék külső változó mágneses tér hatására hőt termelnek, ami felhasználható például a tumorsejtek elpusztítására. A lokalizált hőkezelés sok esetben ígéretes kiegészítő kezelési eljárás, mivel sugárterápiával kombinálva a sejtciklus különböző szakaszaiban hatnak. Bizonyos német klinikákon már gyakorlatban is alkalmazzák a mágneses lázterápiát, azonban hatékonyságának elfogadható szintre való emelése eddig nem sikerült. Ennek az az oka, hogy a szervezetbe juttatott mágneses nanorészecskék többnyire gyorsan kiürülnek, illetve a véráram hatékonyan szállítja el a termelt hőt, ami jelen esetben kedvezőtlen. Ezért fontos a "hőtermelési hatékonyság" növelése, például a fizikai paraméterek optimalizálásával.

A jelen kutatási téma célkitűzése a mágneses lázterápia hatékonyabbá tétele, a fizikai paraméterek változtatásával. Az értekezésemben ismertetett eredmények egy, már elkezdett szisztematikus elméleti vizsgálat következő lépéseként tekinthetők, melynek során a mágneses nanorészecskék dinamikáját és az ebből származtatott "hőtermelést" vizsgálom lineárisan polarizált (rezgő) és ciklikusan polarizált (forgó) mágneses mező hatására. Az optimális energiavesztést az amplitúdó és a frekvencia függvényében rezgő mágneses tér esetén

már részletesen tanulmányozták. Azonban a forgó mágneses mező hatása viszonylag kevés figyelmet kapott.

Arra a kérdésre kerestem a választ, hogy lehetséges-e - és ha igen, akkor milyen feltételek mellett tudunk - nagyobb "hőtermelést" elérni forgó tér alkalmazásával.

Az értekezés kiindulópontjául szolgáló előzetes eredmények azt mutatták, hogy izotróp mágneses nanorészecskék esetén a rezgő tér alkalmazása a kedvezőbb. A konkrét végrehajtandó feladatomban az anizotrópia figyelembevétele volt.

Megmutattam, hogy mágneses lázterápia során használt alacsony frekvenciákon a forgó tér forgási síkjára merőleges anizotrópia tér nem növeli az izotróp forgó esethez képest az energiavesztést [1]. Azonban javasoltam egy új típusú gerjesztő teret, amely minden ciklusban forgási irányt vált és megmutattam, hogy ezen váltakozó irányú forgó tér alkalmazásával minden eddig vizsgált esetben hatékonyabb "hőtermelés" érhető el [2].

I. rész

Irodalmi előzmények

1. fejezet

Mágneses lázterápia

1.1. Orvosi alkalmazások

Magyarországon évente közel ötvenezer rákos megbetegedést diagnosztizálnak és körülbelül harmincezren halnak meg valamely daganattípus miatt. Hazánk ezekkel a számadatokkal az elsők között helyezkedik el a világon a daganatos halálozások ranglistáján. A leggyakoribb és legveszélyesebb daganattípus a tüdőrák, amely világviszonylatban körülbelül 1.8 millió emberéletet követel évente, ami az összes daganatos halálozás 18%-át teszi ki.

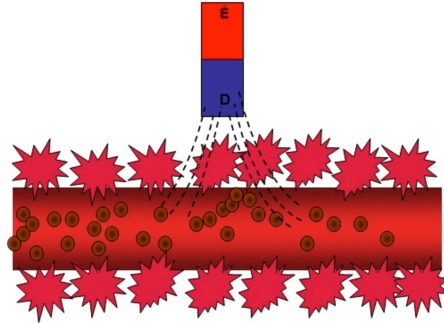
Egyes rákos megbetegedések (agydaganat, mellhártyadaganat) kezelésében áttörést hozhat a lokális mágneses lázterápia (hipertermia), amely egy alternatív daganatkezelési lehetőség. A módszer azon a fizikai jelenségen alapul, hogy a mágneses nanorészecskéket változó külső mágneses térbe helyezve a részecskék a külső térből energiát vesznek fel, amelyet hő formájában leadnak közvetlen környezetüknek, vagyis lokális hőtermelésre, "fűtésre" alkalmazhatók. Ezt használjuk fel a tumorsejtek ellen, hiszen azok érzékenyebben reagálnak a magas hőmérsékletre és elpusztulnak anélkül, hogy az egész emberi szervezetet terhelnének, illetve a környező egészséges szöveteket károsítanánk. Ez azt jelenti, hogy ez az összeállítás orvosi célokra, tumorterápiára alkalmazható, bár egészen más gondolkodásmódot igényel az orvosoktól és meglehetősen eltér az eddig ismert kezelési módoktól (sugárkezelés, kemoterápia, műtéti beavatkozások). A szakemberek szerint a mágneses hipertermia - kombinálva hagyományos módszerekkel (pl. sugárkezelés) - paradigmaváltást eredményezhet bizonyos rákos elváltozások kezelésében.

Az elmúlt évtizedekben hatalmas mértékű fejlődés figyelhető meg az orvostudomány területén. Amíg a XIX. században csak a sebészeti úton történő kezelés, vagyis a daganat kimetszése adott új esélyt a túlélésre, addig a XX. században két új terápiával bővült az eszköztár: 1901-től sugárterápiát, majd 1946-tól már kemoterápiát is alkalmaznak. A XXI. században egy újabb ötlet jelent meg a daganatkezelés területén, a hipertermia. Maga az alapötlet nem újdonság, hiszen a lázterápia már az ókorban is ismert volt, Hippokratész szavai-val élve: „Amit az orvosság nem gyógyít meg, azt gyógyítja a szike. Amit a szike nem képes meggyógyítani, azt a tűz gyógyítja meg.” Parmenidész olasz filozófus és orvos szintén nagy jelentőséget tulajdonított a láznak az orvoslás területén: „Tegyél képessé engem, hogy mesterségesen lázat váltsak ki és meggyógyítok minden betegséget.” Tulajdonképpen a mágneses hipertermia célja sem más: mesterségesen lázat kíván előidézni az emberi szervezetben. A láz a szervezet természetes védekező reakciója. A magas hőmérséklet egyes kórokozók illetve tumorsejtek számára elviselhetetlen lehet. A lázas állapot további előnye, hogy a fehérvérsejtek magasabb hőmérsékleten gyorsabban szaporodnak, ami szintén segíthet egyes betegségek leküzdésében.

A mágneses nanorészecskék relaxációja vagy általánosabban a mágnesezettség dinamikájának vizsgálata ferromágneses egydoménes rendszerekben elméleti és gyakorlati szempontból is érdekes. A fent említett mágneses hipertermia mellett számos más alkalmazási területet lehet említeni, pl.: ferromágneses rezonancia, mágneses információtárolás, MRI. A legtöbb esetben nagyon fontos a mágneses nanorészecskék relaxációja során fellépő energia-vesztés csökkentése. Ez alól természetesen kivételt képez a külső gerjesztő tér alacsony frekvenciás tartományába eső orvosi alkalmazások esete, azaz a hipertermia, ahol éppen az energiavesztés maximalizálása az elérendő cél. A mágneses nanorészecskékkel végzett hipertermia jól alkalmazható eljárás lehet a sugárterápiás és a kemoterápiás kezelések kiegészítéseként, illetve lehetőséget biztosíthat kemoterápiás gyógyszerek szállítására. A sokrétű alkalmazási lehetőség miatt a relaxáció vizsgálata mágneses nanorészecske rendszerekben napjainkban is meglehetősen aktív terület. Ahhoz, hogy a mágneses nanorészecskék orvosi kezelésekre alkalmassá váljanak, számos kritériumnak kell eleget tenniük, ezért a hipertermiás kezelések eredményességéhez nélkülözhetetlen a különböző szakterületen dolgozók (orvosok, biológusok, vegyészek, fizikusok) összehangolt együttműködése.

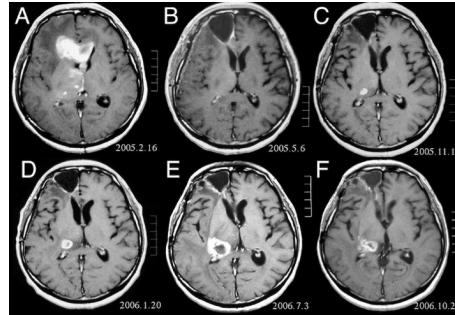
Mielőtt a mágneses hipertermia területén elért kutatási eredményeimet ismertetném, röviden vázolom a mágneses lázterápia más daganatkezelési módszerekkel szemben mutatott előnyeit és a hipertermiában főszerepet játszó mágneses nanorészecskék legfontosabb tulajdonságait.

- Az eljárás legfontosabb előnye, hogy jól lokalizált, hiszen a mágneses nanorészecskék a külső mágneses térrel terelhetők, irányíthatók, így ott fejtik ki hőtermelő hatásukat, ahol erre ténylegesen szükség van [4], elkerülve ezzel az egész emberi szervezet terhelését (1.1 ábra).



1.1. ábra. A mágneses nanorészecskék irányítása külső mágneses térrel.

- A hipertermia nem vált ki olyan súlyos mellékhatásokat, mint például a kemoterápia, így nem okoz fejfájást, hányást, hányingert, allergiás reakciókat.
- Alkalmas lehet olyan daganattípus kezelésére, amely sebészeti úton többnyire nem elérhető (pl. agydaganat) (1.2 ábra), vagy kemoterápiával nem kezelhető (pl. mellhártyadaganat). Az agydaganat hagyományos úton történő kezelésénél problémát okozhat a véragyagát, amely megakadályozza a gyógyszermolekulák célterületre történő eljuttatását, vagyis a gyógyszeres kezelési eljárás komoly nehézségekbe ütközik, ugyanakkor az agyban lévő tumor érzékenyen reagál a hőkezelésre [4].
- Megfelelő koncentrációban nem mérgező. Bár a különböző vasvegyületek (FeO_2 , Fe_2O_4) az emberi szervezet számára mérgezők lehetnek, de megfelelő biokompatibilis burkolattal ellátva a mágneses nanorészecskéket, megakadályozhatjuk, hogy a véráramba juttatva az emberi szervezet mérgezéséhez vezessen.
- Ahhoz, hogy a tumorról szemben sikeresen lépünk fel, a tumor minden egyes grammjához 10 mg vas bejuttatására van szükség. Az emberi máj



1.2. ábra. Agydaganat kezelésének különböző fázisai műtéti eljárás és kemo-
terápiás kezelésekre [4].

grammonként 4 mg vas befogadására képes. Egy egészséges felnőtt ember májának tömege kb. 1200 - 1700 g, vagyis maximálisan 4800 - 6800 mg vas juttatható be az emberi szervezetbe károsodás nélkül. Ez a mennyiség egy hatalmas, hozzávetőleg fél emberi agy méretű tumor elpusztítására képes [4].

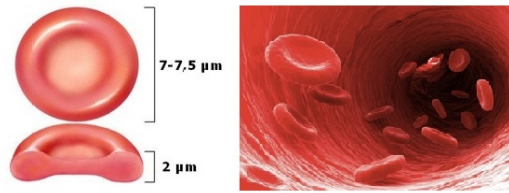
- Az eddigi tapasztalatok alapján a hipertermiát elsősorban kiegészítő terápiaként célszerű alkalmazni, mert sugárterápiával kombinálva jelentős synergikus hatást tapasztalunk, amiatt, hogy a mágneses nanorészecskékkel végzett hőtermelés és a sugárkezelés a sejtélet különböző ciklusaiban hat.

1.2. Mágneses nanorészecskék

Ahhoz, hogy a hipertermiás alkalmazással maximális hőveszteséget érjünk el, a mágneses nanorészecskéknek számos kritériumnak kell eleget tenniük. Ezek közül az alábbiak a legfontosabbak:

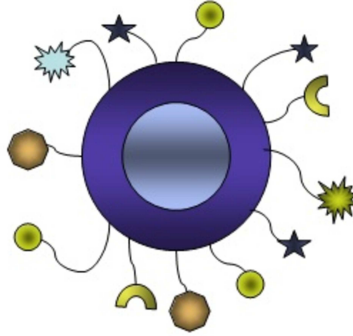
- Optimális esetben a nanorészecskék a 10 – 200 nm-es mérettartományba esnek. Az ennél kisebb méretű részecskék a veseműködés hatására túl gyorsan távoznak az emberi szervezetből, illetve könnyen összetapadhatnak, ami kedvezőtlen jelenség a kolloidális stabilitás biztosítása szempontjából, míg a 200 nm-t meghaladó részecskékben doménfalak jelen-

nek meg, így csökken a hőtermelés hatékonysága [4]. A mágneses nanorészecskéket szállító rendszer a vér, ahol a nanorészecskékhez képest 3 nagyságrenddel nagyobb vörösvérsejteket találunk (a vörösvérsejt átmérője 6 - 8 μm , míg maximális vastagsága 2 - 2.5 μm)(1.3 ábra). A mágneses nanorészecskék kis méretűnek számítanak az emberi szervezetben.



1.3. ábra. A vörösvérsejt méretei [5].

- A mágneses nanorészecskéknek egydoménesnek kell lenniük. Az energia-termelés szempontjából ez sokkal kedvezőbb és az eredő mágnesezettség is nagyobb, szemben azokkal a részecskékkel, amelyek doménfalakat tartalmaznak.
- A hőmérsékletet tekintve nagyon fontos, hogy a Curie-hőmérséklet alatti tartományban maradjunk, hiszen a mágneses nanorészecskéknek kell, hogy legyen eredő mágnesezettsége.
- A mágneses nanorészecskéket körülvevő biokompatibilis külső burkolat szerepe többszörös (1.4 ábra). Egyrészt megvédi az emberi szervezetet az egyébként mérgező hatású ferromágneses nanorészecskéktől, másrészt megakadályozza, hogy a részecskék összeálljanak és láncokat alkossanak. A terápia szempontjából rendkívül fontos, hogy a részecskék lokálisan fejtsék ki hőtermelő hatásukat. A hatékony célbajuttatás érdekében a mágneses nanorészecskéket különböző markerekkel kell felruházni, hogy "irányíthatók" legyenek és a megfelelő tumorsejtekhez "odataláljanak". A biokompatibilis külső burkolat lehetőséget ad a gyógyszermolekulák megkötésére is.
- Az emberi szervezet szempontjából rendkívül fontos, hogy a hőtermelés során a maximális hőmérséklet nem haladhatja meg a 45 °C-ot. Kétféle



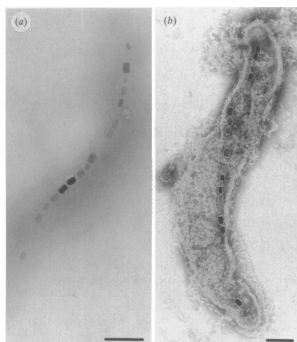
1.4. ábra. Biokompatibilis burkolattal ellátott mágneses nanorészecske sematikus ábrája.

sejthalál létezik: az apoptózis és a nekrosis. Az apoptózissal elhaló sejtek membránja nem szakad fel, tartalmuk nem jut ki az extracelluláris térbe, ezért nem okoznak gyulladást. Az apoptózis során, amelyet programozott sejthalálként is szoktak emlegetni az elpusztult sejteket a makrofágok fagocitálják, miközben nem bocsájtanak ki gyulladást indukáló vegyületeket, így a szövetek szerkezete épen marad. A nekrosis folyamata során a sejtalkotók és maguk a sejtek is megduzzadnak és lizálódnak, így a környezetükben gyulladásoos reakciót indítanak el. A nekrosis következtében vérmérgezés, gyulladás, góc alakul ki az emberi szervezetben [4]. Ezért nagyon fontos, hogy csakis olyan anyagok alkalmasak számunkra, amelyek Curie-hőmérséklete $44 - 45\text{ }^{\circ}\text{C}$ környékén van, hiszen így megakadályozhatjuk, hogy az emberi szervezetben a túlfűtés révén nagyobb gondot okozzunk, hiszen Curie-hőmérséklet felett az anyagok elveszítik mágneses tulajdonságukat és ezzel egyidőben megszűnik a hőtermelés is.

1.3. Anyagok mágneses tulajdonságai

Az emberiség régóta felhasználja a mágneses anyagokat, gondoljunk például az iránytűre, amelyet időszámításunk előtt 1000 évvel már alkalmaztak az akkori szárazföldi utazók az ókori Kínában, de a mágnesség elméletének kidolgozása még a mai napig sem zárult le. Érdekességgépp érdemes megjegyezni, hogy például a madarak képesek a Föld mágneses terét érzékelni, és ezáltal

tájékozódni. Továbbá, hogy léteznek olyan baktériumok, amelyek képesek mágneses anyagok előállítására (1.5 ábra). A hétköznapi életben is gyakran találkozunk mágnesekkel, a háztartásunk szinte minden szegletében fellelhetők mágneses anyagok, például a számítógépes merevlemez, a szekrényzárak vagy a motorok mágnesei, de tulajdonképpen maga a Földünk is egy hatalmas mágnes.



1.5. ábra. Transzmissziós elektronmikroszkóppal készített felvétel a baktériumban keletkező mágneses láncról [6].

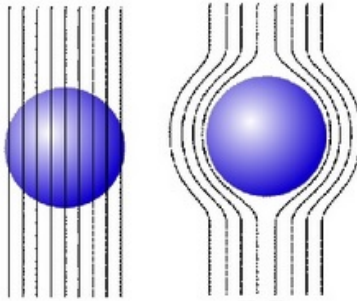
Az anyagokat mágneses szempontból a mágneses szuszceptibilitás (χ_m) előjele és nagyságrendje szerint szokás csoportosítani (1.1 táblázat). Ez alapján megkülönböztetünk a dia-, para- és ferromágneses anyagokat.

	példa	χ_m	μ_r
diamágnes	réz, higany, víz	kicsi, negatív ($-10^{-6} - -10^{-5}$)	< 1
paramágnes	volfram, oxigén	kicsi, pozitív ($10^{-5} - 10^{-3}$)	> 1
ferromágnes	vas, nikkel	nagy, pozitív ($10^3 - 10^5$)	$\gg 1$

1.1. táblázat. Az anyagok felosztása mágneses tulajdonságaik alapján.

- A diamágneses anyagok külső mágneses mező nélkül semmiféle mágneses tulajdonságot nem mutatnak, ugyanis olyan atomokból épülnek fel, amelyek nem rendelkeznek saját mágneses momentummal: elektronjaik spinjei páronként ellentétes irányúak, ezért ($S = 0$) és a pályamozgásból származó mágneses momentumuk is zérus ($L = 0$). Az ilyen anyagokat mágneses térbe helyezve a mágneses tér az elektronok mozgását

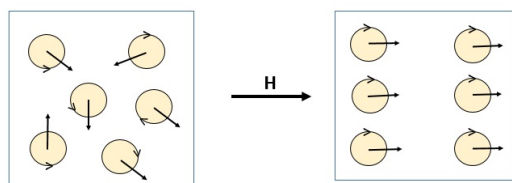
módosítja, aminek következtében létrejön egy gyenge, a külső térrel ellentétes irányú mágneses tér. A külső mágneses mező hatására az egyes atomok mágneses dipólusokká válnak, amelynek eredő mágneses momentuma és a vele arányos $\mathbf{M}$ mágnesezettség a külső $\mathbf{H}$ mágneses térerősséggel ellentétes irányú. Emiatt a $\mathbf{B}$ közegbeli mágneses indukció lecsökken a $\mathbf{B}_0 = \mu_0 \mathbf{H}$ vákuumbeli indukcióhoz képest. A közegbeli mágneses indukció csökkenése ($\mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H}$) azonban csak nagyon kicsi, hiszen $\mu_r \sim 0.999$, ahol μ_0 a vákuum permeabilitás és μ_r a relatív permeabilitás. A diamágneses anyagoknál a Lenz-törvénnyel összhangban az atomi elektronpályákban a külső mágneses tér hatására bekövetkező változások csökkentik a külső fluxust, tehát a kialakuló mágnesezettség a külső térrel ellentétes irányú. A diamágnességre egy különleges példa a szupravezető állapot (1.6 ábra), ahol az anyag tökéletes diamágnesként viselkedik.



1.6. ábra. Az ábrán egy fémgömb látható, bal oldalon normál, jobb oldalon szupravezető állapotban.

- A paramágneses anyagok atomjainak eredő mágneses momentuma nem zérus, a külső mágneses tér az atomi mágneses dipólusokat a tér irányába igyekszik beállítani. A dipólusok beállításából származó mágneses momentum a tér irányába mutat és az anyagban a mágneses tér megnő (1.7 ábra). A hőmérséklet növelésével azonban a beállítás hatékonysága csökken, ezt fejezi ki a Curie-törvény: $\chi_m = C/T$, ahol T a hőmérséklet és C anyag-specifikus állandó, azaz mágneses szuszceptibilitásuk a hőmérséklettel fordítottan arányos. Az ilyen anyagok a külső mágneses térerősséggel ($\mathbf{H}$) azonos irányban mágneseződnek és a vákuumbeli indukcióhoz képest

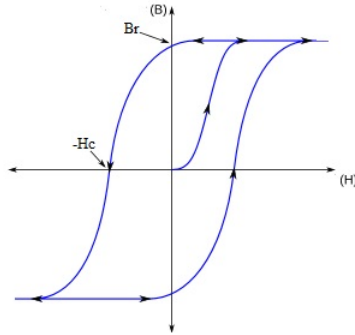
növelik a mágneses mező indukcióját, $\mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H}$. Ez a növelés azonban nagyon kicsi, hiszen $\mu_r \sim 1.00002$. A paramágneses anyagokra jellemző tehát, hogy elektronjai a saját mágneses momentumukon kívül pályamomentummal is rendelkeznek, de az egyes elektronokhoz tartozó mágneses momentumok a külső mágneses tér nélkül rendezetlenül helyezkednek el. Ekkor a paramágneses anyag mágneses szempontból semleges. Külső mágneses mező hatására azonban a mágneses momentumok némiképp rendeződnek és többé-kevésbé beállnak a külső $\mathbf{H}$ térerősség irányába, ami által növelik a $\mathbf{B}$ eredő mágneses indukciót az anyag belsőjében.



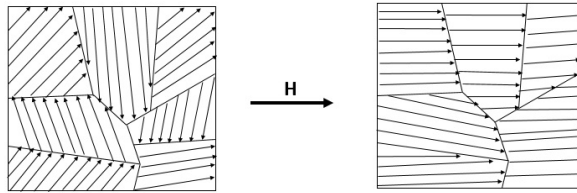
1.7. ábra. Atomi szintű paramágnes

- Ferromágneses anyagok: számos anyag, köztük a vas, a kobalt és a nikkel esetén kristályos állapotban a χ_m mágneses szuszceptibilitás nagy és a mágnesezettség ($\mathbf{M}$) a térerősségtől erősen, de nem lineárisan függ. Ezeket az anyagokat ferromágneses anyagoknak nevezzük, amelyek mágnesezettsége mágneses hiszterézist mutat, vagyis a térerősséget csökkentve az anyag zérus térerősségnél is mágneses lesz. Ezt a $\mathbf{B}_r$ indukciót remanenciának nevezzük. A ferromágneses anyag permanens mágnesként viselkedik. A permanens mágnesek olyan ferromágneses anyagok (pl. vas, acél), amelyek a mágnesező áram megszűnte után is megtartják mágneseességüket. Az ilyen anyagokból permanens, állandó mágnes készíthető, pl. iránytű, rúd-mágnes, patkómágnes. A mágnesezettség megszüntetéséhez szükséges térerősséget koercitív erőnek ($\mathbf{H}_c$) nevezzük. A ferromágneses anyagok mágnesező hatásra mutatott viselkedését az úgynevezett hiszterézis-görbével lehet jellemezni (1.8 ábra). Ez a görbe általában szimmetrikus, területe jellemző az átmágnesezési folyamat energiavesztésére.

A hiszterézis görbén végighaladva az átmágnesezéshez szükséges energia az úgynevezett hiszterézis-veszteség. A ferromágneses anyagok az anyagra jellemző Curie-pont feletti hőmérsékleten elvesztik ferromágneses tulajdonságukat és paramágnesekké válnak. (Néhány anyag Curie-hőmérséklete: $T_c^{\text{vas}}=769\text{ }^\circ\text{C}$, $T_c^{\text{kobalt}}=1075\text{ }^\circ\text{C}$, $T_c^{\text{nikkel}}=360\text{ }^\circ\text{C}$). A ferromágneses anyagokra a Curie-törvény az alábbi formában érvényes: $\chi_m = C/(T-T_c)$. A ferromágneses anyagok kristályos szerkezetűek. Kristályukban – külső mágneses mező nélkül is – az egyes tartományok (domének) már eleve felmágnesezett állapotban vannak. A doménszerkezet a ferromágneses anyagok sajátossága. Mágnesezéskor az egész tartomány együtt és ugrásszerűen áll be egy, a külső mágneses térerősség irányához közelebb eső irányba, ezzel jelentősen megnövelve az eredő mágneses indukciót (1.9 ábra).

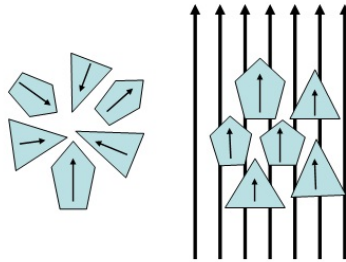


1.8. ábra. Ferromágneses anyagokra jellemző mágneses hiszterézishurok.



1.9. ábra. Ferromágnes.

- A szuperparamágnesek jellemző módon olyan anyagok, amelyek nanoméretű ferromágneses részecskékből állnak (1.10 ábra), melyek úgy viselkednek, mint egy szokásos paramágnes, azonban mágneses szuszceptibilitásuk (χ_m) jóval nagyobb értéket vehet fel. Ennek oka, hogy egy 10 - 20 nm méretű részecskében (jellemző módon egykristályban) elhelyezkedő atomok ferromágnesként viselkednek, azaz $T < T_c$ alatt rendelkeznek egy eredő mágnesezettséggel, ami jóval nagyobb, mint a szokásos paramágnesekre jellemző atomi szintű mágnesezettség. A mágneses lázterápiában használt anyagok is ebbe a kategóriába tartoznak.



1.10. ábra. Szuperparamágnes.

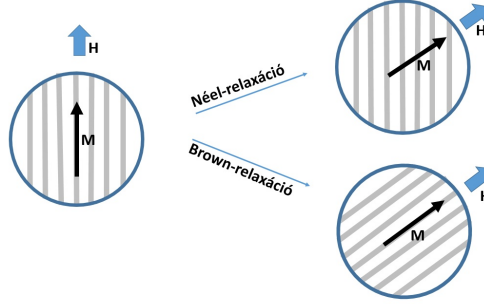
2. fejezet

Landau-Lifshitz-Gilbert egyenlet

Mágneses nanorészecskékkel megvalósuló hőtermelés kétféleképpen lehetséges: vagy a mágneses nanorészecske rögzített és csak a mágnesezettség orientációja változik, ebben az esetben Néel-relaxációról beszélünk, vagy maga a mágneses nanorészecske is elfordulhat, ebben az esetben Brown-relaxációról van szó (2.1 ábra). Az azonban mindkét relaxációban közös, hogy a részecske a külső gerjesztő térből vesz fel energiát és azt súrlódás hatására leadja a közvetlen környezetének. Az első esetben mágneses viszkozitásról, míg a második esetben a szokásos értelemben vett viszkozitásról beszélünk. Ennek megfelelően a két eset tárgyalása ugyanazon matematikai formalizmus segítségével lehetséges, legfeljebb viszkozitási együtthatóban térnek el egymástól. Ebben a fejezetben kerül bevezetésre az egyetlen mágneses nanorészecske relaxációját (mágneses momentumának időfüggését) leíró determinisztikus Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) differenciálegyenlet.

2.1. Mágneses relaxáció

A ferromágneses nanorészecske-rendszerek dinamikájának vizsgálata napjainkban is aktív kutatási terület, mert számos területen lehet alkalmazni. Ilyen például a mágneses információtárolás, spintronika, ferrofluidok, mágneses rezonanciás képalkotás (MRI) és orvosbiológiai (pl. tumorterápiás) alkalmazások [4], [8], [18–25], [27, 28], [34–46]. A legtöbb esetben az egy ciklusra eső ener-



2.1. ábra. A Néel- és a Brown-relaxáció

giaveszteség minimalizálása az elérendő cél, ezzel szemben a tumorterápiás kezelések során alkalmazott hipertermia (mágneses lázterápia) esetében a feladat a külső mágneses tér által irányított mágneses nanorészecskék fűtési hatékonyságának növelése. Kis méretű nanorészecskék (200 nm) jellemző módon egyetlen mágneses doménből állnak és az említett alkalmazások során többnyire elvárás, hogy a nanorészecskék ne tartalmazzanak doménfalakat. Tehát az egydoménes ferromágneses részecskék mágnesezettségének dinamikáját különböző feltételek mellett különféle motivációval vizsgálták.

Ezek közül talán a legismertebb példa a ferromágneses rezonancia. Ebben az esetben egy erős statikus $\mathbf{B}$ indukciójú mágneses mező hatására a mágneses részecskék rendeződnek. A mágneses mező forgatónyomatéka $\mathcal{M} = \mathbf{m} \times \mathbf{B}$, amely merőleges a $\mathbf{B}$ és az $\mathbf{m}$ vektorok által kifeszített síkra, melynek hatására az $\mathbf{m}$ mágneses momentum egy bizonyos szöggel lemaradva precesszál a tér körül. Rezonancia észlelhető a $\mathbf{B}$ -re merőleges alternáló tér hatására, melynek maximális értéke a Larmor-frekvencia ($\omega_L = \gamma |\mathbf{B}|$). A mágneses információtárolás során a mágneses nanorészecskék mozdulatlanok, a helyük és az orientációjuk fix és a stabilitás mellett a legfontosabb követelmény, hogy a mágneses átfordítás (switching) minimális veszteséggel járjon.

A ferrofluidok olyan mágneses nanorészecskéket tartalmaznak, amelyek helyzete és orientációja külső mágneses tér segítségével változtatható. A mágneses nanorészecskék hipertermiás alkalmazása során a legfontosabb követelmény az energiaveszteség növelése. Pontosabban maximalizálni kell a fajlagos abszorpció rátát (fajlagos veszteségi ráta vagy fűtési ráta), vagyis növelni kell a mágneses nanorészecskék másodpercenkénti energiaveszteségét. Azok a

feltételek, amelyekkel a maximalizálás megvalósítható, meglehetősen nehezen teljesíthetők a biofizikai korlátok miatt.

Ferrofluidokban a mágneses részecskék mozgékonyága fontos meghatározója az energiavesztésnek. Mivel a részecskék szabadon foroghatnak, így az $E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$ potenciális energia kétféleképp csökkenthető: vagy a mágneses momentum fordul el a tér irányába és közben a részecske mozdulatlan (Néel-relaxáció), vagy az egész részecske forog (Brown-relaxáció). Az utóbbi esetben a részecskék a felületükön létrejövő viszkózus súrlódás miatt fellépő energiát közvetlenül a folyadéknak adják át. A Néel-relaxáció során az energia átkerül a rácsba, vagyis a fononok és a magnonok elnyelik, mielőtt a hőszállítás a folyadékhöz továbbítja. Mindkét folyamat jellemezhető a megfelelő relaxációs időkkal τ_N és τ_B , de a paraméterezés elrejtí a két mechanizmus közti különbséget. A látszólagos hasonlóságot tovább hangsúlyozza a "mágneses viszkozitás" kifejezés, amely a Néel-relaxáció "szinonímája".

A hipertermia során általános gyakorlat, hogy a ferrofluidokban jelen lévő mágneses nanorészecskék 10^5 Hz frekvenciájú alternáló mágneses mező hatására hőt termelnek, amely felhasználható a rosszindulatú daganatokkal szemben. Az optimális energiavesztéseget az amplitúdó és a frekvencia függvényében lineárisan polarizált mágneses tér esetén már részletesen tanulmányozták [9]. Azonban a cirkulárisan polarizált mágneses mező hatása elenyésző figyelmet kapott.

Értekezésemben ismertetett eredmények egy, már elkezdett szisztematikus elméleti vizsgálat következő lépéseként tekinthetők, melynek során a mágneses nanorészecskék dinamikáját vizsgáljuk lineárisan polarizált és cirkulárisan polarizált mágneses mező hatására. A tanulmány végső célja a maximális fűtési teljesítmény feltételeinek elemzése a hipertermia tartományán belül. A Néel- és a Brown-relaxáció egymáshoz viszonyított súlya nem egyértelmű. Hergt és munkatársai [8] szuszceptibilitás méréseket végeztek koloid szuszpenzióban található maghemite ($\gamma\text{Fe}_2\text{O}_3$) részecskékkal, miközben a frekvencia 10 Hz és 1 MHz közötti tartományban változott. Amikor a részecskék mozdulatlanok váltak, a szuszceptibilitás nagyon széles csúcsa 1 kHz-nél eltűnt. Ebben az esetben egyértelműen a viszkózus veszteség (Brown-relaxáció) a domináns. Másrészt ezek a szerzők rámutattak arra a tényre is, hogy a részecskék mozgása a daganatos szöveteken belül nem ismert. Ha beszorulnak a szövetek közé, akkor a részecskék nem képesek forogni és így csak a Néel-relaxáció léphet fel.

A mágneses nanorészecskék relaxációjának leírására az egyik legegyszerűbb módszer a Landau–Lifshitz–Gilbert (LLG) egyenlet használata, amely lehet determinisztikus vagy sztochasztikus. Ezen egyenlet megoldásával megkapjuk a mágneszettség vektor időbeli változását külső gerjesztő tér jelenlétében, vagyis

ez a mozgásegyenlet. A determinisztikus LLG egyenlet tartalmaz egy sűrűlódás jellegű tagot, ennek segítségével írjuk le a relaxációt. Sztochasztikus esetben a termikus fluktuációk is fontos szerepet játszanak, ami a környezettel való termikus kölcsönhatás pontosabb leírását jelenti, viszont a megoldás megtalálása nehezebb feladat. A sztochasztikus LLG egyenlettel nem végeztem vizsgálatokat. Ha ismerjük az LLG egyenlet megoldását, akkor ki tudjuk számítani a veszteséget, vagyis például az egy ciklusra eső hőtermelést.

2.2. Néel-relaxáció, LLG egyenlet

Egydoménos részecske mágneses relaxációját a Landau-Lifshitz egyenlet írja le [10]. A determinisztikus Landau-Lifshitz egyenlet alakja,

$$\frac{d}{dt}\mathbf{m} = \mu_0\gamma_0 \left([\mathbf{m} \times \mathbf{H}] + \frac{\alpha}{m_S} [[\mathbf{m} \times \mathbf{H}] \times \mathbf{m}] \right), \quad (2.1)$$

ahol $\mathbf{m}$ a részecske mágnesezettség vektora, $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N/A}^2$ a vákuum permeabilitás, $|\gamma_0| = 8.82 \times 10^{10}$ az elektron giromágneses állandója, α egy dimenziótlan csillapítási (sűrűlódási) konstans, m_S a telítési (szaturációs) mágnesezettség és $\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu_0$ az alkalmazott mágneses tér.

A Gilbert egyenlet alakja pedig [12],

$$\frac{d}{dt}\mathbf{m} = \mu_0\gamma_0 \left([\mathbf{m} \times \mathbf{H}] - \eta[\mathbf{m} \times \frac{d}{dt}\mathbf{m}] \right) \quad (2.2)$$

A következő két alfejezetben megmutatom, hogy a Gilbert egyenlet átírható olyan alakra, mint a Landau-Lifshitz egyenlet, amelyre a determinisztikus Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) egyenlet néven hivatkozom, ami az alábbi módon írható fel,

$$\frac{d}{dt}\mathbf{m} = \mu_0\gamma \left([\mathbf{m} \times \mathbf{H}] + \frac{\alpha}{m_S} [[\mathbf{m} \times \mathbf{H}] \times \mathbf{m}] \right), \quad (2.3)$$

ahol $\alpha = \mu_0\gamma_0\eta m_S$ és $\gamma = \gamma_0/(1 + \alpha^2)$ az effektív giromágneses állandó, illetve η a sűrűlódási konstans.

A determinisztikus LLG egyenlet legfontosabb tulajdonsága, hogy a mágnesezettség vektor nagyságát nem változtatja meg, mivel az egyenlet jobb oldalán szerepelő vektor merőleges a mágnesezettség vektorra, azaz $dm^2/dt = 2 \cdot \mathbf{m} \cdot d\mathbf{m}/dt = 0$. Tehát a mágnesezettség vektor nagysága nem változik a külső tér hatására, amit a 2.4. alfejezetben részleteiben megmutatok.

Következésképpen a (2.3) egyenlet átírható alkalmasabb formába, bevezetve az $\mathbf{M} = \mathbf{m}/m_S$ egységvektort:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{M} = \mu_0\gamma[\mathbf{M} \times \mathbf{H}] + \mu_0\gamma\alpha[(\mathbf{M} \times \mathbf{H}) \times \mathbf{M}] = \gamma'[\mathbf{M} \times \mathbf{H}] + \alpha'[(\mathbf{M} \times \mathbf{H}) \times \mathbf{M}]. \quad (2.4)$$

ahol $\mathbf{m}$ a mágnesezettség vektor és m_S annak nagysága (telítési mágnesezettség). Az új együtthatók a (2.1) és (2.2) egyenleteknek megfelelően lettek megválasztva, $\gamma' = \mu_0\gamma = \mu_0\gamma_0/(1+\alpha^2)$ és $\alpha' = \mu_0\gamma\alpha = \mu_0^2\gamma_0^2\eta m_S/(1+\alpha^2)$. Az így definiált együtthatókkal el is jutottunk a Landau-Lifshitz és a Gilbert egyenletekből megalkotott Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) egyenlethez (2.3), amely a Néel-relaxáció leírására már hibátlanul alkalmas.

2.3. Precesszió

Vizsgáljuk első lépésként az LLG egyenlet első tagját, ami a Larmor-precesszió leírásáért felelős. Induljunk ki a klasszikus mechanika alapkövéből, Newton II. törvényéből

$$m\ddot{\mathbf{r}} = m\mathbf{a} = \dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F} \quad (2.5)$$

ahol $\mathbf{r}$ a helyzetvektor, m a tömeg, $\mathbf{a}$ a gyorsulás, $\mathbf{p}$ az impulzus és $\mathbf{F}$ az eredő erő és $\ddot{\mathbf{r}} = \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}$. Ha ezt vektoriális szorzással megszorozzuk balról a helyzetvektorral, akkor a perdülettételt kapjuk. Felhasználva, hogy $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$

$$\dot{\mathbf{L}} = \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{p} + \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{p}} = \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{p}} \quad (2.6)$$

$$\mathcal{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} \quad (2.7)$$

ahol kihasználtuk az $\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}$ és a $\mathbf{p}$ vektorok párhuzamosságát. Tehát a perdülettétel a következő alakban írható,

$$\dot{\mathbf{L}} = \mathcal{M} \quad (2.8)$$

ahol $\mathcal{M}$ a forgatónyomaték és $\mathbf{L}$ a perdület.

Egy $\mathbf{m}$ mágneses momentum perdülete és mágneses momentuma között szoros összefüggés van. Tekintsünk például egy elektront, ami a Bohr-modell szerint kering az atommag körül. Mivel az elektron töltést hordoz, ezért felfogható úgy, mint egy köráram. Egy köráram által keltett mágneses momentum

$$\mathbf{m} = I\mathbf{f} \quad (2.9)$$

ahol $\mathbf{f}$ nagysága az áram által közrezárt felület ($r^2\pi$), iránya pedig ezen felület normálisával megegyező. Felhasználva, hogy

$$v = \frac{2\pi r}{T} \quad L = m_e r v = m_e r^2 \frac{2\pi}{T} \quad (2.10)$$

egyszerű számolással adódik az áramerősség is a következőképpen

$$I = \frac{dQ}{dt} = \frac{e}{T} = \frac{e}{2m_e} \frac{L}{r^2\pi}. \quad (2.11)$$

Végül a kapott összefüggés

$$\mathbf{m} = \frac{e}{2m_e} \mathbf{L}. \quad (2.12)$$

Tehát láthatjuk, hogy a mágneses momentum arányos a perdülettel, ahol az arányossági tényezőt giromágneses állandónak nevezzük

$$\mathbf{m} = \gamma_0 \mathbf{L}. \quad (2.13)$$

Egy külső $\mathbf{H}$ mágneses tér jelenlétében a mágneses momentumokra forgatónyomaték hat az alábbi módon

$$\mathcal{M} = \mathbf{m} \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{m} \times \mathbf{H}. \quad (2.14)$$

Behelyettesítve a perdülettelbe, azonnal adódik a mágneses momentum mozgásegyenlete külső mágneses térben

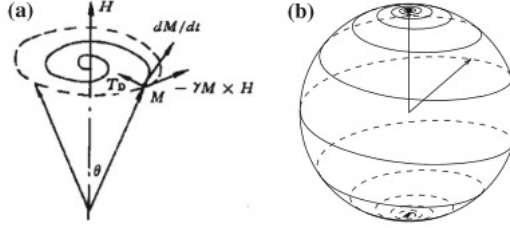
$$\dot{\mathbf{m}} = \mu_0 \gamma_0 [\mathbf{m} \times \mathbf{H}] \quad (2.15)$$

amely meghatározza a Larmor-precessziót.

2.4. Súrlódás

Az előző alfejezetben tárgyaltam egy mágneses momentum mozgását külső elektromágneses térben, azonban a súrlódást nem vettem figyelembe. Ebben az alfejezetben azt vizsgálom, hogy súrlódás jelenlétében milyen változtatásokat kell eszközölni a helyes leírás érdekében.

Tapasztalat szerint a súrlódás hatására a Larmor-frekvenciával precesszáló mágneses momentum egy idő után beáll a statikus mágneses tér irányába. Ez alapján azt feltételezhetjük, hogy a súrlódást leíró forgatónyomaték a mágneses tér felé a forgat (2.2 ábra).



2.2. ábra. $\mathbf{M}$ mágneses momentumra ható $(-\gamma\mathbf{M} \times \mathbf{H})$ forgatónyomaték és az arra merőleges súrlódásért felelős tag (T_D) hatására kialakuló "spirális" mozgás (a). Az LLG egyenlet megőrzi az $\mathbf{M}$ mágneses momentum nagyságát (b). [7]

Ilyen irányú vektort úgy kaphatunk, ha vektoriálisan szorozzuk a precessziót okozó forgatónyomatékot az $\mathbf{m}$ mágneses momentummal. Ezt hozzáadva a mozgásegyenlethez kapjuk a Landau-Lifshitz egyenletet

$$\dot{\mathbf{m}} = \mu_0\gamma_0 [\mathbf{m} \times \mathbf{H}] + \frac{\mu_0\gamma_0\alpha}{m_s} [[\mathbf{m} \times \mathbf{H}] \times \mathbf{m}]. \quad (2.16)$$

Ez a naiv megközelítés azonban nem feltétlenül helyes. Látjuk például, hogy ha az $\alpha \rightarrow \infty$ határesetet nézzük, azaz ha a súrlódás paraméterét nagynak választjuk, akkor ahelyett, hogy a mozgás lelassulna, a mágneses momentum egy hirtelen változással beugrik a mágneses tér irányába, ami nyilvánvalóan nem lehetséges, mint ahogyan ezt korábban már Kikuchi [14] is megmutatta.

Landau és Lifshitz mellett Gilbert egy másfajta megközelítéssel élt. A súrlódást általánosan az okozza, hogy egy test egy közegben mozog, míg az ellenállást gyakorol rá, lassítva a mozgást. Így jogos az elképzelés, miszerint a súrlódás a mozgás sebességével arányos. Ennélfogva Gilbert a következő egyenletet posztulálta

$$\dot{\mathbf{m}} = \mu_0\gamma_0 [\mathbf{m} \times \mathbf{H}] - \mu_0\gamma_0\eta [\mathbf{m} \times \dot{\mathbf{m}}] \quad (2.17)$$

Mind a Landau-Lifshitz, mind pedig a Gilbert egyenlet a mágneses momentum nagyságát változatlanul hagyja. Ennek belátásához szorozzuk az egyenletek mindkét oldalát $\mathbf{m}$ -mel

$$\mathbf{m}\dot{\mathbf{m}} = \mu_0\gamma_0 \mathbf{m}[\mathbf{m} \times \mathbf{H}] + \frac{\mu_0\gamma_0\alpha}{m_s} \mathbf{m}[[\mathbf{m} \times \mathbf{H}] \times \mathbf{m}] \quad (2.18)$$

$$\mathbf{m}\dot{\mathbf{m}} = \mu_0\gamma_0 \mathbf{m}[\mathbf{m} \times \mathbf{H}] - \mu_0\gamma_0\eta \mathbf{m}[\mathbf{m} \times \dot{\mathbf{m}}] \quad (2.19)$$

A vegyes szorzatok tagjait cirkulárisan permutálva adódik mindkét egyenletből, hogy

$$\frac{1}{2} \frac{d(m^2)}{dt} = \mu_0 \gamma_0 \mathbf{H}[\mathbf{m} \times \mathbf{m}] + \frac{\mu_0 \gamma_0 \alpha}{m_s} [\mathbf{m} \times \mathbf{H}][\mathbf{m} \times \mathbf{m}] = \mathbf{0} \quad (2.20)$$

$$\frac{1}{2} \frac{d(m^2)}{dt} = \mu_0 \gamma_0 \mathbf{H}[\mathbf{m} \times \mathbf{m}] - \mu_0 \gamma_0 \eta \dot{\mathbf{m}}[\mathbf{m} \times \mathbf{m}] = \mathbf{0} \quad (2.21)$$

azaz $\mathbf{m}$ hossza valóban egy mozgásállandó, bármelyik egyenletet is nézzük.

A két egyenletet megfelelő átparaméterezéssel átírhatjuk egymásba. Ennek belátásához induljunk ki a Gilbert egyenletből, majd a jobb oldalon az $\dot{\mathbf{m}}$ helyére ismét írjuk be a teljes jobb oldalt

$$\dot{\mathbf{m}} = \mu_0 \gamma_0 [\mathbf{m} \times \mathbf{H}] - \mu_0 \gamma_0 \eta [\mathbf{m} \times [\mu_0 \gamma_0 [\mathbf{m} \times \mathbf{H}] - \mu_0 \gamma_0 \eta [\mathbf{m} \times \dot{\mathbf{m}}]]] \quad (2.22)$$

a zárójelet felbontva, valamint az $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$ vektorazonosságot felhasználva

$$\dot{\mathbf{m}} = \mu_0 \gamma_0 [\mathbf{m} \times \mathbf{H}] - \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta [\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{H}]] + \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta^2 [\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \dot{\mathbf{m}}]] \quad (2.23)$$

$$= \mu_0 \gamma_0 [\mathbf{m} \times \mathbf{H}] + \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta [[\mathbf{m} \times \mathbf{H}] \times \mathbf{m}] + \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta^2 [\mathbf{m}(\mathbf{m} \cdot \dot{\mathbf{m}}) - \dot{\mathbf{m}}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{m})]. \quad (2.24)$$

Vegyük észre, hogy $\mathbf{m}$ hossza nem változik, ezért $\mathbf{m} \cdot \dot{\mathbf{m}} = \mathbf{0}$ vagyis merőlegesek egymásra. Átrendezés után adódik, hogy

$$(1 + \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta^2 m^2) \dot{\mathbf{m}} = \mu_0 \gamma_0 [\mathbf{m} \times \mathbf{H}] + \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta [[\mathbf{m} \times \mathbf{H}] \times \mathbf{m}] \quad (2.25)$$

valamint

$$\dot{\mathbf{m}} = \frac{\mu_0 \gamma_0}{1 + \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta^2 m^2} [\mathbf{m} \times \mathbf{H}] + \frac{\mu_0^2 \gamma_0^2 \eta}{1 + \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta^2 m^2} [[\mathbf{m} \times \mathbf{H}] \times \mathbf{m}] \quad (2.26)$$

továbbá felhasználva, hogy $\mathbf{M} = \mathbf{m}/m_s$ az alábbi egyenletet kapjuk,

$$\dot{\mathbf{M}} = \frac{\mu_0 \gamma_0}{1 + \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta^2 m_s^2} [\mathbf{M} \times \mathbf{H}] + \frac{\mu_0^2 \gamma_0^2 \eta m_s}{1 + \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta^2 m_s^2} [[\mathbf{M} \times \mathbf{H}] \times \mathbf{M}]. \quad (2.27)$$

Tehát a

$$\gamma' = \frac{\mu_o \gamma_0}{1 + \alpha^2} = \frac{\mu_o \gamma_0}{1 + \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta^2 m_s^2} \quad \alpha' = \frac{\mu_0^2 \gamma_0^2 \eta m_s}{1 + \alpha^2} = \frac{\mu_0^2 \gamma_0^2 \eta m_s}{1 + \mu_0^2 \gamma_0^2 \eta^2 m_s^2} \quad (2.28)$$

megfeleltetésekkel a két egyenlet valóban azonos, ezért közös néven a Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) egyenlet elnevezést kapták. Habár funkcionális alakját tekintve ugyanazon egyenlethez sikerült visszajutnunk, azonban ha most ha a súrlódási paramétert növeljük, akkor a mozgás valóban "elhal".

Fontos megjegyezni, hogy az elektron töltése negatív, ezért a $\gamma_0 = \frac{e}{2m_e}$ negatívnak adódik. Ahhoz, hogy a szokásos γ_0 giromágneses állandó értékével számoljunk, célszerű az LLG egyenletben a γ_0 értékét ellentétes előjelűre változtatni.

$$\frac{d}{dt}\mathbf{M} = -\gamma'[\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}] + \alpha'[[\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}] \times \mathbf{M}] \quad (2.29)$$

3. fejezet

Izotróp (stacionárius) eset

A 2. fejezetben röviden összefoglaltam azokat az elméleti eszközöket, amelyek alkalmasak a Néel-relaxáció tanulmányozására és ismertettem a Landau-Lifshitz és a Gilbert egyenletek közötti összefüggést. Ebben a fejezetben ismertetem az izotróp egydoménes mágneses nanorészecske esetére a [3] publikációban kapott eredményeket, mint irodalmi előzményt. Az 1. alfejezetben a lineárisan polarizált mágneses mező esetét tárgyalom, amely során a Landau-Lifshitz-Gilbert egyenlet pontos analitikus megoldását mutatom be, amellyel a hőtermelés meghatározható. A 2. alfejezetben bemutatom a közelítő analitikus megoldásokat cirkulárisan polarizált mágneses tér esetén.

3.1. Lineárisan polarizált (rezgő) tér

Ebben a fejezetben az LLG egyenletnek egy egzakt analitikus megoldása kerül bemutatásra egy izotróp mágneses részecskére vonatkozóan, lineárisan polarizált (rezgő) mágneses térben. A váltakozó térről feltételezzük, hogy x irányú,

$$\mathbf{H} = H_0(\cos(\omega t), 0, 0), \quad (3.1)$$

ahol $\omega_L = \gamma' H_0$ a Larmor-frekvencia, ω a külső váltakozó mágneses tér szögsebessége.

3.1.1. Csillapított (súrlódásos) precesszió

A Néel-relaxációt feltételezve, az LLG egyenletben szereplő mágnesezettség vektor Descartes-féle koordinátái lineárisan polarizált térben a következők,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}M_x &= \alpha_N \cos(\omega t) (1 - M_x^2), \\ \frac{d}{dt}M_y &= \cos(\omega t) (\omega_L M_z - \alpha_N M_x M_y), \\ \frac{d}{dt}M_z &= -\cos(\omega t) (\omega_L M_y + \alpha_N M_x M_z),\end{aligned}\tag{3.2}$$

ahol az $\alpha_N = \alpha' H_0$ jelöli a súrlódás mértékét. Az analitikus megoldás

$$\begin{aligned}M_x(t) &= \frac{(M_{x0} - 1) + (M_{x0} + 1) \exp\left[\frac{2\alpha_N}{\omega} \sin(\omega t)\right]}{(1 - M_{x0}) + (M_{x0} + 1) \exp\left[\frac{2\alpha_N}{\omega} \sin(\omega t)\right]}, \\ M_y(t) &= \sqrt{1 - M_x^2(t)} \sin\left[\frac{\omega_L}{\omega} \sin(\omega t) + \delta_0\right], \\ M_z(t) &= \sqrt{1 - M_x^2(t)} \cos\left[\frac{\omega_L}{\omega} \sin(\omega t) + \delta_0\right],\end{aligned}\tag{3.3}$$

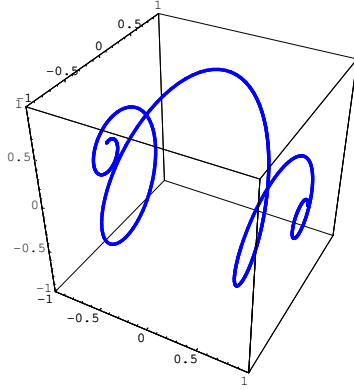
ahol az M_{x0} és δ_0 a kezdeti feltételekből meghatározhatók, $M_{x0} = M_x(0)$ és $\delta_0 = \arctan(M_y(0)/M_z(0))$.

Ha $(\alpha_N/\omega) \ll 1$ és $(\omega_L/\omega) \gg 1$, akkor az egységvektor precesszálása lassan az x tengelyhez közelít, lelassulás és előjel váltás előtt több ciklust megtéve. Fontos megjegyezni, hogy az első feltétel teljesül nagyon gyenge és nagyon erős súrlódás esetén egyaránt, mivel $\alpha_N \sim (1 + \alpha^2)^{-1}$ (lásd 3.1 ábra).

A statikus határértéknél, azaz ha $\omega \rightarrow 0$, a (3.3) egyenlet általános megoldása a következő alakra redukálódik,

$$\begin{aligned}M_x(t) &= \frac{(M_{x0} - 1) + (M_{x0} + 1) \exp[2\alpha_N t]}{(1 - M_{x0}) + (M_{x0} + 1) \exp[2\alpha_N t]}, \\ M_y(t) &= \sqrt{1 - M_x^2(t)} \sin[\omega_L t + \delta_0], \\ M_z(t) &= \sqrt{1 - M_x^2(t)} \cos[\omega_L t + \delta_0].\end{aligned}\tag{3.4}$$

Ebben az esetben az $\mathbf{M}$ vektor egy időfüggetlen ω_L szögsebességgel precesszál és egy konstans idővel $\sim 1/\alpha_N$ konvergál az x irányba (3.2 ábra). Az α_N paraméter megmutatja, hogy a mágneses momentum milyen szögsebességgel lassul, mielőtt megáll.



3.1. ábra. Egységnyi hosszúságú mágneszettség vektor végpontjának mozgása x -irányú rezgő tér hatására.

A gyakorlatban $H_0 \approx 10^4$ A/m, az $\alpha_N = \mu_0 \gamma_0 H_0 \alpha / (1 + \alpha^2) \approx \alpha / (1 + \alpha^2) \cdot 10^9$ s⁻¹, tehát kis súrlódás esetén is (pl.: $\alpha = 0.001$) nagyon gyors a konvergencia, M_y és M_z néhány mikrosekundumon belül eltűnik.

3.1.2. Fajlagos energiaveszteség

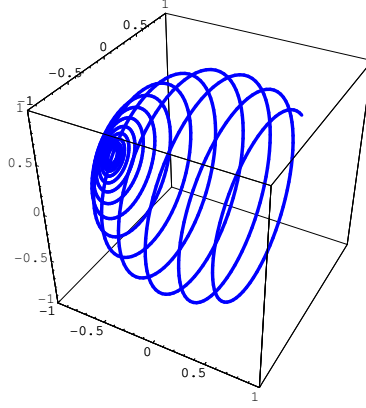
A fenti egyenletek lehetővé teszik, hogy kiszámoljuk az energiaveszteséget egy részecskére. Az egy ciklusra jutó energiadisszipáció a következőképpen számolható,

$$E = \mu_0 \int_0^{2\pi/\omega} dt \left(\mathbf{H} \cdot \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right) = \mu_0 m_S \int_0^{2\pi/\omega} dt \left(\mathbf{H} \cdot \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right). \quad (3.5)$$

Felhasználva a (3.1)-es kifejezést $\mathbf{H}$ -ra és az LLG egyenlet (3.3) megoldását, az egy ciklusban leadott energia,

$$E = \mu_0 m_S \alpha_N H_0 \int_0^{2\pi/\omega} dt [\cos(\omega t)]^2 [1 - M_x^2(t)], \quad (3.6)$$

numerikusan számolható. Az egy ciklusra jutó veszteség függ a kezdeti feltételektől, $M_{x0} = 0$ -nál van a maximuma.



3.2. ábra. Egységnyi hosszúságú mágnesezettség vektor végpontjának mozgása $(-x)$ -irányú statikus tér hatására.

Analitikus megoldás adható az $(\alpha_N/\omega) \ll 1$ határérték esetében. Félgömbre számolt átlagos hosszat helyettesítve a (3.6) kifejezés M_{x0} kezdőértékébe, $\alpha_N/\omega \ll 1$ esetben az energiavesztés

$$E_{\text{average}} \approx \frac{2}{3} \mu_0 \pi m_S H_0 \left(\frac{\alpha_N}{\omega} \right). \quad (3.7)$$

1 MHz-nél sokkal kisebb frekvenciák esetén az egy ciklusra jutó energiavesztés függetlenné válik a kezdeti feltételektől és a frekvenciától. Ebben a határesetben

$$E_{\text{average}} \approx E = 4\mu_0 m_S H_0. \quad (3.8)$$

3.2. Cirkulárisan polarizált (forgó) tér

Ebben az alfejezetben az LLG egyenlet egy analitikus megoldását ismertetem, rögzített egydoménés izotróp mágneses nanorészecskére, cirkulárisan polarizált, azaz forgó mágneses tér esetére. Az egzakt megoldás csak speciális kezdőfeltételek esetén érvényes. Azonban, egy rövid átmeneti (tranziens) szakaszt követően a mágnesezettség vektor beáll az egyenlet megoldásából kapott

úgynevezett stacionárius állapotba. Ebben a stacionárius esetben az egy ciklusra eső hőveszteség kiszámolható és összehasonlítható a lineárisan polarizált tér esetével. Feltesszük, hogy az alkalmazott mágneses tér az $x - y$ síkban forog ω szögsebességgel,

$$\mathbf{H} = \frac{\omega_L}{\gamma'} (\cos(\omega t), \sin(\omega t), 0) = H_0 (\cos(\omega t), \sin(\omega t), 0). \quad (3.9)$$

Itt ω a szögsebesség vektor nagysága, amely ebben az esetben merőleges az $x - y$ síkra.

3.2.1. Csillapított (súrlódásos) precesszió

Az LLG egyenlet mágnesezettség vektorának Descartes-féle koordinátái egy mágneses nanorészecskére, a Néel-relaxáció figyelembevételével, cirkulárisan polarizált mágneses térben

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} M_x &= -\omega_L M_z \sin(\omega t) + \alpha_N [-M_x M_y \sin(\omega t) + (M_y^2 + M_z^2) \cos(\omega t)], \\ \frac{d}{dt} M_y &= \omega_L M_z \cos(\omega t) + \alpha_N [-M_x M_y \cos(\omega t) + (M_x^2 + M_z^2) \sin(\omega t)], \\ \frac{d}{dt} M_z &= \omega_L [M_x \sin(\omega t) - M_y \cos(\omega t)] - \alpha_N [M_x M_z \cos(\omega t) + M_y M_z \sin(\omega t)]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Ezen egyenletrendszernek általános megoldása tetszőleges kezdőfeltételek mellett csak numerikusan létezik. Azonban a (3.10) LLG egyenletet kielégíti a következő stacionárius megoldás

$$\begin{aligned} M_x(t) &= M_{xy} \cos(\omega t - \varphi) = u_{x0} \cos(\omega t) - u_{y0} \sin(\omega t), \\ M_y(t) &= M_{xy} \sin(\omega t - \varphi) = u_{x0} \sin(\omega t) + u_{y0} \cos(\omega t), \\ M_z(t) &= \sqrt{1 - (u_{x0})^2 - (u_{y0})^2}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

ahol M_{xy} a mágnesezettség vektor projekciója az $x - y$ síkra, φ a fázis, továbbá $u_{x0} = M_{xy} \cos \varphi$ és $u_{y0} = -M_{xy} \sin \varphi$, amelyek kifejezhetők az LLG egyenletben szereplő paraméterekkel,

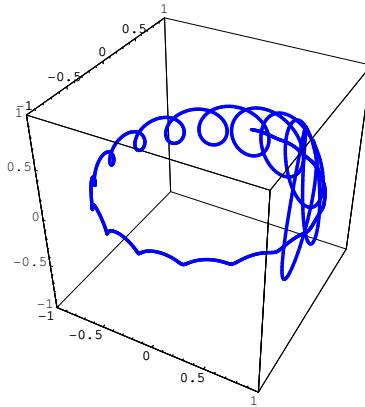
$$\begin{aligned}
u_{x0} &= \sqrt{\frac{\alpha_N^2 - \omega_L^2 - \omega^2 + \sqrt{4\alpha_N^2\omega_L^2 + (\alpha_N^2 - \omega_L^2 - \omega^2)^2}}{2\alpha_N^2}}, \\
u_{y0} &= -\frac{\alpha_N^2 + \omega_L^2 + \omega^2 - \sqrt{4\alpha_N^2\omega_L^2 + (\alpha_N^2 - \omega_L^2 - \omega^2)^2}}{2\omega\alpha_N}.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

A stacionárius megoldást megkaphatjuk úgy is, ha áttérünk a térrel együtt forgó vonatkoztatási rendszerbe, ahol a forgatás mátrixa,

$$\underline{\underline{O}}_1 = \begin{pmatrix} +\cos(\omega t) & +\sin(\omega t) & 0 \\ -\sin(\omega t) & +\cos(\omega t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.13}$$

majd vesszük az elforgatott mágneses vektorra ($\mathbf{u} = \underline{\underline{O}}_1 \mathbf{M}$) vonatkozó LLG egyenlet fixponti megoldását (ahol $d\mathbf{u}/dt = 0$).

A 3.3 ábra azt szemlélteti, hogy az LLG egyenlet (3.10) numerikus megoldásával kapott mágnesezettség vektor időbeli változása hogyan konvergál a (3.11) stacionárius megoldáshoz.



3.3. ábra. Egységnyi hosszúságú mágnesezettség vektor végpontjának időbeli változása $x - y$ síkban forgó külső tér esetén.

Annak érdekében, hogy pontosabban megértsük az LLG egyenlet numerikus megoldását, tanácsos áttérni egy olyan speciális forgó koordináta-rendszerbe,

amely a Larmor-precessziót és a gerjesztő tér forgását jellemző szögsebesség vektorok összegeként kapott eredő vektorhoz van rögzítve. Ehhez az előbb bevezetett $\underline{\underline{O}}_1$ transzformáción kívül alkalmazunk kell két további forgatást,

$$\underline{\underline{O}}_2 = \begin{pmatrix} +\cos(\Theta) & 0 & -\sin(\Theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ +\sin(\Theta) & 0 & +\cos(\Theta) \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

$$\underline{\underline{O}}_3 = \begin{pmatrix} +\cos(\Omega t) & -\sin(\Omega t) & 0 \\ +\sin(\Omega t) & +\cos(\Omega t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

ahol $\cos(\Theta) = \omega/\Omega$, $\sin(\Theta) = \omega_L/\Omega$ és $\Omega = \sqrt{\omega^2 + \omega_L^2}$, amely alapján a mágnesezettség vektor új koordinátái $(\underline{\underline{O}}_3 \cdot \underline{\underline{O}}_2 \cdot \underline{\underline{O}}_1 \mathbf{M}) = (M_\xi, M_\eta, M_\zeta)$.

A transzformált LLG egyenlet

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} M_\xi &= \alpha_N \left[-M_\xi M_\eta \frac{\omega}{\Omega} \sin(\Omega t) - M_\xi M_\zeta \frac{\omega_L}{\Omega} + (1 - M_\xi^2) \frac{\omega}{\Omega} \cos(\Omega t) \right], \\ \frac{d}{dt} M_\eta &= \alpha_N \left[-M_\eta M_\xi \frac{\omega}{\Omega} \cos(\Omega t) - M_\eta M_\zeta \frac{\omega_L}{\Omega} + (1 - M_\eta^2) \frac{\omega}{\Omega} \sin(\Omega t) \right], \\ \frac{d}{dt} M_\zeta &= \alpha_N \left[-M_\zeta M_\xi \frac{\omega}{\Omega} \cos(\Omega t) - M_\zeta M_\eta \frac{\omega}{\Omega} \sin(\Omega t) + (1 - M_\zeta^2) \frac{\omega_L}{\Omega} \right] \end{aligned} \quad (3.16)$$

ahol (M_ξ, M_η, M_ζ) a mágnesezettség vektort reprezentálják ebben a speciálisan választott forgó vonatkoztatási rendszerben. Az $\mathbf{M}$ a transzformáció során egységvektor marad, így az LLG egyenlet M_ξ , M_η és M_ζ komponensei nem függetlenek. A (3.11) speciális megoldása a forgó koordinátákkal kifejezve,

$$\begin{aligned} M_\xi(t) &= M_{\xi\eta} \cos(\Omega t - \varphi_a) = M_{\xi 0}^{\text{spec}} \cos(\Omega t) - M_{\eta 0}^{\text{spec}} \sin(\Omega t), \\ M_\eta(t) &= M_{\xi\eta} \sin(\Omega t - \varphi_a) = M_{\xi 0}^{\text{spec}} \sin(\Omega t) + M_{\eta 0}^{\text{spec}} \cos(\Omega t), \\ M_\zeta(t) &= \sqrt{1 - (M_{\xi 0}^{\text{spec}})^2 - (M_{\eta 0}^{\text{spec}})^2}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

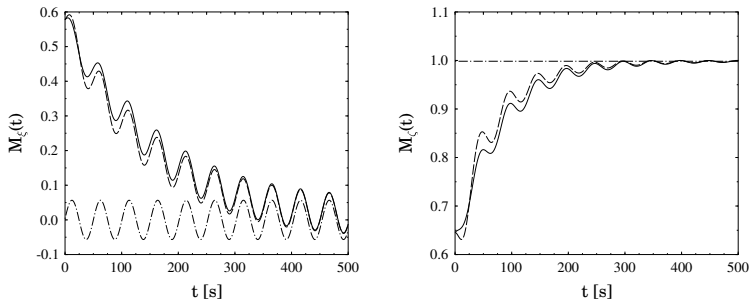
ahol $M_{\xi 0}^{\text{spec}} = M_{\xi\eta} \cos(\varphi_a)$, $M_{\eta 0}^{\text{spec}} = -M_{\xi\eta} \sin(\varphi_a)$ időfüggetlen paraméterek,

$$M_{\xi 0}^{\text{spec}} = \frac{\omega u_{x0} - \omega_L \sqrt{1 - (u_{x0})^2 - (u_{y0})^2}}{\Omega}, \quad M_{\eta 0}^{\text{spec}} = u_{y0}. \quad (3.18)$$

Ezen speciális forgó koordináta-rendszer előnye, hogy egy jó "keretrendszert" ad arra, hogy megkeressük az LLG egyenlet általános megoldását vagy alternatív módon találjunk egy közelítő megoldást. Például

$$\begin{aligned}
 M_\xi(t) &= M_{\xi 0}^{\text{spec}} \cos(\Omega t) - M_{\eta 0}^{\text{spec}} \sin(\Omega t) + (M_{\xi 0} - M_{\xi 0}^{\text{spec}}) e^{-\frac{\alpha N t}{\sqrt{2}}}, \\
 M_\eta(t) &= M_{\xi 0}^{\text{spec}} \sin(\Omega t) + M_{\eta 0}^{\text{spec}} \cos(\Omega t) + (M_{\eta 0} - M_{\eta 0}^{\text{spec}}) e^{-\frac{\alpha N t}{\sqrt{2}}}, \\
 M_\zeta(t) &= \sqrt{1 - [M_\xi(t)]^2 - [M_\eta(t)]^2},
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

jól közelíti az LLG egyenlet numerikus megoldását. Az exponenciális csökkenés, amelyet a komponensek utolsó járuléka szolgáltat, azt mutatja, hogy az általános megoldás gyorsan konvergál a speciális megoldás felé. Ezt demonstrálja a 3.4 ábra, $\alpha_N = 0.01 \text{ s}^{-1}$, ($\alpha = 0.14$) és $\omega = \omega_L = 0.088 \text{ s}^{-1}$, ahol az LLG egyenlet numerikus és közelítő megoldása van összehasonlítva. Egy másik következménye ennek az átmeneti (tranzienst) folyamatnak, a kezdeti értékektől való függetlenség, ugyanis a stacionárius megoldás nem függ a kezdőértékektől.



3.4. ábra. Az LLG egyenlet numerikus (folytonos vonal), közelítő (szaggatott vonal) és stacionárius (pontozott-szaggatott vonal) megoldása, ahol $\omega = \omega_L = 0.088 \text{ s}^{-1}$, $\alpha = 0.14$ [3].

Megjegyezzük, hogy gyenge és erős relaxáció határesetében a fáziskésés (φ), azaz a mágneszettség vektor forgási síkra vett vetületének és a forgó térnek az

egymással bezárt szöge nulla lesz,

$$u_{x0}(\alpha_N \rightarrow 0) = \frac{\omega_L}{\sqrt{\omega^2 + \omega_L^2}}, \quad u_{y0}(\alpha_N \rightarrow 0) = 0, \quad (3.20)$$

és

$$u_{x0}(\alpha_N \rightarrow 10^8 s^{-1}) \approx 1, \quad u_{y0}(\alpha_N \rightarrow 10^8 s^{-1}) \approx 0, \quad (3.21)$$

ahol $\alpha_N \approx 10^8 s^{-1}$ az erős relaxáció határértéke.

3.2.2. Fajlagos energiaveszteség

Ahhoz, hogy kiszámoljuk az egy ciklusra eső energiaveszteséget egy részecske esetében, megint a (3.5) egyenletet fogjuk használni. A speciális megoldás (3.11) használható arra, hogy megbecsüljük a cirkuláris polarizálás hatékonyságát, ugyanis hipertermia során a teret hosszú ideig ($\approx 10^3$ s-ig) szeretnénk alkalmazni az átmeneti (tranzienst) folyamat időtartamához ($\approx 10^{-6}$ s) képest. A speciális megoldás használatával (pontosított vonalak a 3.5 ábrán) integrálhatóvá válik az egy ciklusra eső energiaveszteség,

$$E = \mu_0 m_S \int_0^{2\pi/\omega} dt \left(\mathbf{H} \cdot \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right) = \mu_0 2\pi m_S H_0 (-u_{y0}). \quad (3.22)$$

Gyenge relaxáció (vagy nagy frekvencia) határesetére, $\alpha_N \ll \omega, \omega_L$, az u_{y0} Taylor-sorba fejtésével tanulmányozható, ahol az eredmény,

$$E \approx 2\pi\mu_0 m_S H_0 \left[\frac{\omega^2}{\omega_L^2 + \omega^2} \left(\frac{\alpha_N}{\omega} \right) - \frac{\omega^4 \omega_L^2}{(\omega_L^2 + \omega^2)^3} \left(\frac{\alpha_N}{\omega} \right)^3 \right] \quad (3.23)$$

azt mutatja, hogy relaxáció nélkül nincs disszipáció. Az $\alpha_N = \alpha\omega_L$ relációt bevezetve, ez a kifejezés olyan formába írható, amely a változók skálázását kiemeli

$$E \approx 2\pi\mu_0 m_S H_0 \frac{\omega}{\omega_L} \left[\left(\frac{\alpha}{1 + (\omega/\omega_L)^2} \right) - \left(\frac{\alpha}{1 + (\omega/\omega_L)^2} \right)^3 \right]. \quad (3.24)$$

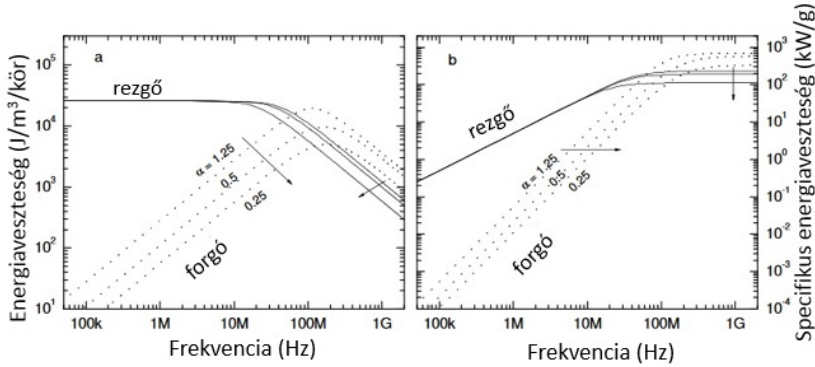
Erős relaxáció (vagy alacsony frekvencia) $\alpha_N \gg \omega, \omega_L$, hasonló skálázási viszonyokat mutat

$$E \approx 2\pi\mu_0 m_S H \left[\frac{\alpha_N^2}{\omega_L^2 + \alpha_N^2} \left(\frac{\omega}{\alpha_N} \right) - \frac{\alpha_N^4 \omega_L^2}{(\omega_L^2 + \alpha_N^2)^3} \left(\frac{\omega}{\alpha_N} \right)^3 \right], \quad (3.25)$$

$$E \approx 2\pi\mu_0 m_S H \frac{\omega}{\omega_L} \left[\left(\frac{\alpha}{1 + (\alpha)^2} \right) - \left(\frac{\alpha}{1 + (\alpha)^2} \right)^3 \right]. \quad (3.26)$$

3.3. Rezgő és forgó esetek összehasonlítása

Összehasonlítjuk a lineárisan és cirkulárisan polarizált mágneses tér hatására kapott energiaveszteséget.



3.5. ábra. (a) Az egy ciklusra eső energiaveszteség és (b) a specifikus energiaveszteség ábrázolása a frekvencia függvényében lineárisan polarizált és cirkulárisan polarizált mágneses tér hatására, különböző α súrlódási paraméterekkel. ($H_0 = 10^4$ A/m) [3]

A 3.5 ábra (a) részén az egy ciklusra eső energiaveszteség a frekvencia és a dimenziótlan α súrlódási paraméter függvényében van ábrázolva. Figyelembe véve a mágneses tér lineáris vagy cirkuláris polarizálását, ellentétesen lesz a Larmor-frekvenciánál kisebb, illetve nagyobb frekvencia az előnyös. Az előző esetben, ami a hipertermiánál releváns, az energia lineárisan polarizált mágneses térből való abszorpciója nagyságrendekkel felülmúlja a forgó térből származó abszorpciót.

A 3.5 ábra (a) részén látható "sátor" alakú görbék a 3.2.2. alfejezetben tárgyalt határeseteket hivatottak tükrözni. Az alacsony frekvenciás tartományban a lineárisan polarizált tér nagyságrendekkel felülmúlja a forgó tér esetén kapott energiaveszteséget.

A 3.5 ábra (b) része ugyanazokat az adatokat ábrázolja praktikusabb egységekben. Azt mutatja, hogy mennyi a fajlagos abszorpciós teljesítménye W/g-ban az egydoménes magnetit részecskének. A hipertermiának megfelelő frekvenciákon ($\sim 10^5$ Hz), lineárisan polarizált térben, kW/g-os veszteség érhető el, ami már elfogadható, míg cirkulárisan polarizált térben a veszteség nagyságrenddel alacsonyabb. A végső következtetés nyilvánvaló: ha izotróp esetben a Néel-relaxáció a domináns mechanizmus, akkor a technikai komplikációkat, amelyek a cirkulárisan polarizált tér nehéz geometriájának létrehozásából adódnak, nem kell fontolóra venni.

A 3. fejezetben [3] egyetlen izotróp nanorészecske egy ciklusra eső energia-veszteségét ismertettem oszcilláló (rezgő) és rotáló (forgó) külső tér hatására a termikus fluktuációk figyelembe vétele nélkül (3.5 ábra). Megmutattam, hogy alacsony frekvenciás határesetben, vagyis a hipertermia tartományban az egy ciklusra eső energiaveszteség rezgő tér alkalmazásával nagyobbak bizonyult, mint a forgó tér esetén. Annak érdekében, hogy megvizsgáljuk izotróp esetben a termikus fluktuációk szerepét, vessük össze a [18] publikáció eredményeivel, vagyis azzal az esettel, amikor a termikus fluktuációk is szerepeltek az egyenletekben. A [18] cikk 6. ábráján lévő szaggatott vonal megfelel a $T \rightarrow 0$ határesetnek és megegyezik a 3.5 ábra (a) részén lévő eredményekkel. A legfontosabb eredmény, hogy alacsony frekvenciatartományon a külső rezgő tér mindkét esetben ($T = 0$ és $T \neq 0$) nagyobb hőveszteséget szolgáltat, szemben a forgó térrel.

II. rész

Eredmények

4. fejezet

Anizotróp eset, pályatérképek

Ez a fejezet már a saját kutatási eredményeimet tartalmazza. A determinisztikus Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) egyenletet használom a mágnesezettség dinamikájának vizsgálatára. A 3. fejezetben megmutattam, hogy a determinisztikus LLG egyenlet segítségével hogyan határozhatjuk meg izotróp mágneses nanorészecskék külső rotáló mágneses tér hatására bekövetkező energiaveszteségét. Ebben a fejezetben mágneses anizotrópiával rendelkező részecskékre általánosítom ezt a módszert. Felírom az LLG egyenletet anizotrópia tér jelenlétében forgó gerjesztő térre és ellenőrzöm azt a szakirodalomban ismert alakokkal összehasonlítva. Bevezetem a pályatérképek használatát stacionárius megoldások vizsgálatára anizotróp esetben.

Általánosan bevett gyakorlat, hogy a legtöbb esetben lineárisan polarizált külső mágneses teret alkalmaznak, melynek frekvenciája 10^5 Hz. (Sőt, a lineárisan polarizált gerjesztő tér esetében azt is részletesen tanulmányozták, hogy milyen az optimális energiaveszteség a külső gerjesztő tér amplitúdójának és frekvenciájának függvényében [4], [8], [9], [19–26].) Felmerül a kérdés, hogy cirkulárisan polarizált külső gerjesztő tér alkalmazásával nem lehet-e jobb hőtermelést elérni [3], [18], [27], [28]. A cirkulárisan polarizált külső gerjesztő tér dinamikai effektusainak tanulmányozása az elmúlt időszakban jelentős figyelmet kapott. Részletes vizsgálatok történtek a rotáló mágneses térben lévő izotróp nanorészecskék energiaveszteségére vonatkozóan, mind a termikus fluktuációk figyelembevételével [18], [27], mind pedig a termikus fluktuációk fi-

figyelembevétele nélkül [3]. De egyáltalán nem végeztek olyan szisztematikus analízist, amely során az anizotrópia energiavesztésre gyakorolt hatását megvizsgálnák a hipertermia tartományába eső alacsony frekvenciás határesetben. A termikus fluktuációk figyelembevétele nélkül egyetlen mágneses nanorészecske relaxációjának és energiavesztésének vizsgálata cirkulárisan polarizált külső gerjesztő tér hatására megtörtént [3], melynek eredményeit a 3. fejezetben foglaltam össze. Alacsony frekvenciatartományban az egy ciklusra eső energiavesztés lineárisan polarizált (rezgő) gerjesztő tér esetén nagyobbak adódtak, szemben a cirkulárisan polarizált (forgó) gerjesztő tér alkalmazásával. A termikus fluktuációk izotróp rendszerek esetén szintén tanulmányozásra kerültek [18], amely tanulmány szerint alacsony frekvenciatartományban lineárisan polarizált gerjesztő tér alkalmazásával nagyobb hőleadás érhető el magasabb hőmérsékleti tartományban. Azonban vannak kísérleti eredmények [28], amelyek ettől eltérő képet mutatnak: a lineárisan és a cirkulárisan polarizált külső gerjesztő tér alkalmazásával azonos nagyságú hővesztés érhető el alacsony frekvenciatartományban. A ferrofluidoknak egy közismert tulajdonsága, hogy a részecskék láncokká állhatnak össze, ezáltal a minta nagy anizotrópiára tesz szert. Természetes módon merült fel tehát a kérdés, hogy az anizotrópia lehet-e felelős az elmélet és a kísérlet közti ellentmondásban. Ennek ellenőrzése további motivációt jelent az anizotrópia hőtermelésben játszott szerepének tisztázásában.

Ezen fejezet célja kettős: egyrészt általánosítom az LLG egyenletet anizotróp esetre (a termikus fluktuációk figyelembevétele nélkül). Másrészt ismertetek egy technikai eljárást, a pályatérképek használatát. A kutatómunkám során számos pályatérképet készítettem, melyek kiválóan szemléltetik a mágneses nanorészecskék mágnesezettség vektorának időbeli változását, térbeli elhelyezkedését.

4.1. Anizotróp egyenletek

A mágneses nanorészecske mozgásából származó mágneses relaxáció leírására számos fenomenologikus egyenlet létezik, amelyek közül az LLG egyenletet használtam az izotróp mágneses nanorészecskék dinamikájának leírására. Az anizotróp esetre történő általánosításhoz célszerű a Gilbert egyenletből kiindulni, ami anizotróp esetben is megőrzi a mágnesezettség vektor nagyságát. Éppen ezért a mozgásegyenletben érdemes áttérni az egydomén mágneses nanorészecske $\mathbf{m}$ mágnesezettség vektora helyett az $\mathbf{M}$ egységvektorra. $\mathbf{M} = \mathbf{m}/m_s$, m_s a telítési mágnesezettség, melynek értéke például Fe_3O_4 esetén 10^5 A/m .

A Gilbert egyenletet az alábbi módon írhatjuk fel,

$$\frac{d}{dt}\mathbf{M} = \gamma_0\mathbf{M} \times \left[\nabla_{\mathbf{M}}V + \mu_0\eta\frac{d}{dt}\mathbf{M} \right], \quad (4.1)$$

ahol

- γ_0 giromágneses állandó ($\gamma_0 = 1.76 \times 10^{11}$ Am²/Js)
- μ_0 vákuum permeabilitás ($\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ Tm/A vagy N/A²)
- V a potenciális energia
- η a súrlódási tényező
- $\nabla_{\mathbf{M}}$ a mágnesezettség szerinti gradiens vektor.

A potenciális energiának tartalmaznia kell a külső mágneses térhez köthető Zeeman-energiát és az anizotrópia energiát,

$$V = -\mu_0\mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}} - \frac{\mu_0}{2}H_aM_z^2 \quad (4.2)$$

ahol

- $H_a = H_0\lambda_{\text{eff}}$ az anizotrópia okozta mágneses tér
- M_z az egyre normált mágnesezettség vektor z komponense
- H_{ext} a külső forgó mágneses tér, amely merőleges az anizotrópia térre

$$\mathbf{H}_{\text{ext}} = H_0 (\cos(\omega t), \sin(\omega t), 0), \quad (4.3)$$

ahol ω a forgás szögsebessége. A külső mágneses tér és az anizotrópia tér együttese,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{eff}} &= -\frac{1}{\mu_0}\nabla_{\mathbf{M}}V = -\frac{1}{\mu_0}\left(\frac{d}{dM_x}, \frac{d}{dM_y}, \frac{d}{dM_z}\right)V \\ &= H_0 (\cos(\omega t), \sin(\omega t), \lambda_{\text{eff}}M_z), \end{aligned} \quad (4.4)$$

ahol $\lambda_{\text{eff}} = H_a/H_0$. Értelemszerűen, ha $\lambda_{\text{eff}} > 0$ ($H_a > 0$), akkor az anizotrópia által preferált irány a z -tengely felé mutat, míg abban az esetben, ha $\lambda_{\text{eff}} < 0$ ($H_a < 0$), akkor az $x - y$ sík a kedvező a mágnesezettség vektor számára. Giordano és munkatársai [29] az alakanizotrópia jelölésére más

szimbólumot használtak, ahol L a gömbszimmetriától való eltérést jellemző paraméter, $H_a = (3L - 1)m_s$.

A (4.4) egyenlet egytengelyű anizotróp részecskére vonatkozik, melynek potenciális energiája $-(\mu_0/2)H_0\lambda_{\text{eff}}M_z^2$, amely minimumot vesz fel $|M_z| = 1$ esetén, ha $\lambda_{\text{eff}} > 0$ illetve $M_z = 0$ esetén, ha $\lambda_{\text{eff}} < 0$. Így geometriai szempontból két különböző alakanizotrópiát különböztetünk meg, ha $\lambda_{\text{eff}} > 0$, akkor "szivar" alakú (oblate) anizotrópiáról beszélünk (melyet az értekezésem 5. fejezetében ismertetek részletesen), míg $\lambda_{\text{eff}} < 0$ esetben "lencse" alakú (prolate) anizotrópiáról van szó, melyet az értekezés 6. fejezetében tárgyalok.

A Gilbert egyenletet (4.1) átírhatjuk oly módon, hogy formailag hasonlítson a Landau-Lifshitz egyenlethez [10]. Az így kapott egyenletet nevezzük Landau-Lifshitz-Gilbert egyenletnek (LLG), ahogy ezt a 2. fejezetben megmutattam. Egydoménes részecske relaxációjának leírására a determinisztikus LLG egyenletet használom, azonban a teljes leírásához a hőmérsékleti fluktuációkat is figyelembe kell venni, ami a környezettel való termikus kölcsönhatás pontosabb leírását jelenti, viszont a megoldás megtalálása nehezebb feladat, ezért a sztochasztikus LLG egyenlettel nem végeztem vizsgálatokat. Azonban egyes esetekben (ilyen például a külső rotáló tér) a determinisztikus LLG egyenlet megbízható eredményt biztosít számunkra.

Folytatva az anizotrópia tér figyelembe vételét a (4.1) Gilbert egyenletből kapott determinisztikus LLG egyenlet alakja a következő,

$$\frac{d}{dt}\mathbf{M} = -\gamma'[\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}] + \alpha'[[\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}] \times \mathbf{M}] \quad (4.5)$$

az alábbi együtthatókkal:

- $\gamma' = \mu_0\gamma_0/(1 + \alpha^2)$ arányos a giromágneses együtthatóval, de függ az α' súrlódási tényezőtől, a súrlódás leírására bevezetett fenomenologikus állandótól is.
- $\alpha' = \mu_0^2\gamma_0^2\eta m_s/(1 + \alpha^2)$ súrlódási tényező
- μ_0 vákuum permeabilitás
- γ_0 giromágneses állandó
- $\alpha = \mu_0\gamma_0\eta m_s$ dimenzió nélküli súrlódási állandó
- $\gamma = \gamma_0/(1 + \alpha^2)$ effektív giromágneses együttható.

Az LLG egyenletben szereplő γ' és α' tehát az alábbi módon is felírható: $\gamma' = \mu_0\gamma$ és $\alpha' = \mu_0\gamma\alpha$. Az effektív mágneses tér az alábbi módon definiálható,

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H}_{\text{ext}} + \mathbf{H}_{\text{aniso}} \quad (4.6)$$

vagyis a külső forgó vagy rezgő mágneses tér (H_{ext}) és az anizotrópia tér (H_{aniso}) együttese. Például az $x - y$ síkban forgó külső tér alakja,

$$\mathbf{H}_{\text{ext}} = \frac{\omega_L}{\gamma'} (\cos(\omega t), \sin(\omega t), 0), \quad (4.7)$$

ahol ω a forgás szögsebessége és $\omega_L = \gamma'|\mathbf{H}|$ a Larmor-frekvencia. A szögsebesség vektor merőleges az $x - y$ síkra.

Az egyszerűség kedvéért és a szakirodalomban szereplő adatokkal való összehasonlítás céljából [16], [30] speciálisan olyan egytengelyű anizotróp mágneses nanorészecskével dolgoztam, amelynek mágnesezettség vektora z -irányú, tehát az anizotrópia tér merőleges a forgás síkjára, ahogy ezt a fejezet elején bevezettem

$$\mathbf{H}_{\text{aniso}} = \frac{\omega_L}{\gamma'} (0, 0, \lambda_{\text{eff}} M_z), \quad (4.8)$$

ahol M_z a mágnesezettség vektor z -komponense, λ_{eff} pedig az anizotrópia mértékét jellemző dimenziótlán paraméter, amely megmutatja, hogy az anizotrópia tér mennyire releváns a külső gerjesztő térhez képest. Abban az esetben, ha $\lambda_{\text{eff}} \rightarrow \infty$, akkor az anizotrópia tér dominál és a külső gerjesztő tér elhanyagolható az anizotrópia térhez képest.

A továbbiakban érdemes áttérni forgó vonatkoztatási rendszerbe, amelyben a mágnesezettség vektor időfüggetlen [3], [16], [30], továbbá az LLG egyenlet megoldásai fixpontokként jelennek meg (stacionárius megoldás). A koordináta-transzformáció $\mathbf{O}_1$ mátrixát, amely az LLG egyenletet a külső mágneses tér z -irányú tengelye körül forgó koordináta-rendszerbe transzformálja, a 3. fejezetben szereplő (3.13) egyenlet adja meg.

Az új, Descartes-koordinátákbeli $\mathbf{u}$ egységvektor komponensei (u_x, u_y, u_z) az alábbi transzformáció segítségével kaphatók meg az inerciarendszerben definiált mágnesezettség vektorból,

$$(u_x, u_y, u_z) = \underline{\underline{\mathbf{O}_1}} \mathbf{M}, \quad (4.9)$$

amely koordinátákra az anizotrópiát figyelembe vevő LLG egyenlet (4.5) az alábbi formában írható fel,

$$\begin{aligned}
\frac{du_x}{dt} &= \omega u_y + \alpha_N u_y^2 + \alpha_N u_z^2 \\
&\quad - \omega_L \lambda_{\text{eff}} u_y u_z - \alpha_N \lambda_{\text{eff}} u_x u_z^2, \\
\frac{du_y}{dt} &= -\omega u_x - \omega_L u_z - \alpha_N u_x u_y \\
&\quad + \omega_L \lambda_{\text{eff}} u_x u_z - \alpha_N \lambda_{\text{eff}} u_y u_z^2, \\
\frac{du_z}{dt} &= \omega_L u_y - \alpha_N u_x u_z + \alpha_N \lambda_{\text{eff}} (1 - u_z^2) u_z,
\end{aligned} \tag{4.10}$$

ahol $\alpha_N = \alpha' |\mathbf{H}|$. Fontos megjegyezni, hogy amíg λ_{eff} dimenziótlan mennyiség, addig α_N , ω és ω_L dimenziója 1/s. Bevezetve a $\tilde{t} = t/t_0$ dimenziótlan időmennyiséget, minden egyes frekvencia dimenziójú mennyiség dimenziótlaná tehető.

A gyakorlatból ismert, hogy $H_0 \approx 18$ kA/m [50], amely alapján megállapítottuk, hogy ω_L nagyságrendileg 10^9 Hz. Hipertermia tartományon az alkalmazott tér frekvenciája $(1 - 5) \times 10^5$ Hz közötti értéket vehet fel, tehát az ω négy nagyságrenddel kisebb ω_L értékénél, továbbá $\alpha_N = \alpha \omega_L$. Tehát az általunk használt paraméterek (ω , ω_L , α_N) hipertermia tartományon ($\alpha = 0.1$ és $H_0 = 18$ kA/m) az alábbi értékeket veszik fel,

$$\omega = 5 \times 10^5 \text{ Hz}, \omega_L = 4 \times 10^9 \text{ Hz}, \alpha_N = 4 \times 10^8 \text{ Hz}. \tag{4.11}$$

A mértékegységeket elhagyhatjuk, ha bevezetjük a "dimenziótlan időt" $\tilde{t} = t/t_0$, ahol $t_0 = 0.5 \times 10^{-10}$ s. Így a (4.11) egyenletben szereplő együtthatók az alábbi módon írhatók át dimenziótlan mennyiségekké,

$$\begin{aligned}
\omega &\rightarrow \omega t_0 = 2.5 \times 10^{-5}, \\
\omega_L &\rightarrow \omega_L t_0 = 0.2, \\
\alpha_N &\rightarrow \alpha_N t_0 = 0.02.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Az anizotrópiát figyelembe vevő LLG egyenleteket (4.10) levezettem és a szakirodalomban meglévő eredményekkel [16] azonos egyenletet kaptam. Az

egyenletek megoldását azonban egy teljesen új, a szakirodalomban eddig nem alkalmazott módszerrel, a pályatérképek módszerével dolgoztam ki, amely módszert a következő alfejezetben részletesen is ismertetem.

Mivel az LLG egyenlet megőrzi az $\mathbf{M}$ mágnesezettség vektor nagyságát, ezért a forgó vonatkoztatási rendszerben az $\mathbf{u}$ egységvektor Descartes-koordinátái közül csupán kettő független. Annak érdekében, hogy a mágnesezettség vektor orientációját vizsgáljam, bevezettem két szöget (θ , ϕ polárkoordinátákat), melyeket az alábbi egyenletek definiálnak:

$$\begin{aligned} u_x &= \sin \theta \cos \phi, \\ u_y &= -\sin \theta \sin \phi, \\ u_z &= \cos \theta. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Így a forgó vonatkoztatási rendszerben a három Descartes-koordinátára kapott LLG egyenlet (4.10) a θ , ϕ polárkoordinátákkal mindössze két független differenciálegyenletre redukálódik:

$$\begin{aligned} \frac{d\theta}{dt} &= \omega_L \sin \phi + \alpha_N \cos \theta \cos \phi - \alpha_N \lambda_{\text{eff}} \sin \theta \cos \theta, \\ \frac{d\phi}{dt} &= \omega_L \cos \phi \frac{\cos \theta}{\sin \theta} + w - \alpha_N \frac{\sin \phi}{\sin \theta} - \omega_L \lambda_{\text{eff}} \cos \theta. \end{aligned} \quad (4.14)$$

ahol $\omega_L = \gamma' |\mathbf{H}|$ és $\alpha_N = \alpha' |\mathbf{H}|$.

Az így kapott egyenletek a paraméterek megfelelő definiálásával szintén megegyeznek a szakirodalomban meglévő egyenletekkel ([30] cikk 2. és 3. egyenlet), amennyiben a statikus tér zérus ($h_{az} = 0$).

Annak érdekében, hogy az anizotrópia szerepét tanulmányozzam, az izotróp esetben megismert stratégiát követtem. Vagyis kiszámítottam az egy ciklusra eső energiavesztést a fixponti egyenletek megoldásának meghatározása által. A három csatolt algebrai egyenlet anizotróp esetben az alábbi,

$$\begin{aligned} 0 &= \omega u_y + \alpha_N u_y^2 + \alpha_N u_z^2 - \omega_L \lambda_{\text{eff}} u_y u_z - \alpha_N \lambda_{\text{eff}} u_x u_z^2, \\ 0 &= -\omega u_x - \omega_L u_z - \alpha_N u_x u_y + \omega_L \lambda_{\text{eff}} u_x u_z - \alpha_N \lambda_{\text{eff}} u_y u_z^2, \\ 0 &= \omega_L u_y - \alpha_N u_x u_z + \alpha_N \lambda_{\text{eff}} (1 - u_z^2) u_z, \end{aligned} \quad (4.15)$$

amely természetesen megegyezik a korábban ismertetett (4.10) egyenlettel, azzal a különbséggel, hogy a bal oldalon álló deriváltak nullának adódtak, hiszen a forgó vonatkoztatási rendszerben az $\mathbf{u}$ egységvektor időfüggetlen stacionárius megoldás esetén.

A három csatolt algebrai egyenletből algebrai úton felírtam egy egyenletet u_z -re,

$$0 = \frac{1 - u_z^2}{u_z^2} \left(\left[u_z - \frac{r \omega_L}{\lambda_{\text{eff}}} \right]^2 + \left[u_z \frac{r \alpha_N}{\lambda_{\text{eff}}} \right]^2 \right) - \frac{1}{\lambda_{\text{eff}}^2} \quad (4.16)$$

ahol $r = \omega/(\omega_L^2 + \alpha_N^2)$. Ezt az egyenletet összehasonlítottam a szakirodalomban szereplő egyenletekkel és azt találtam, hogy teljesen azonos a [16] közlemény (3.8) egyenletével, amennyiben a statikus tér zérus. A nanorészecske mágneses momentumának és a dinamikai effektusoknak a kapcsolatát forgó mágneses tér hatására már korábban is tanulmányozták [16], [31], [32], [33], azonban az energiavesztéset egyetlen alkalommal sem határozták meg. Ezen energiavesztés kiszámítása jelentette kutatómunkám egyik fő célját.

4.2. Pályatérképek

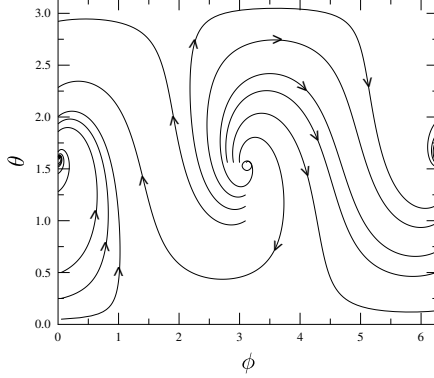
4.2.1. Izotróp eset

Az izotróp esetre felírt LLG egyenlet megoldása során a mágnesezettség vektor - kezdőfeltételtől függetlenül - mindig beáll egy stacionárius megoldásra,

$$\begin{aligned} M_x(t) &= u_{x0} \cos(\omega t) - u_{y0} \sin(\omega t), \\ M_y(t) &= u_{x0} \sin(\omega t) + u_{y0} \cos(\omega t), \\ M_z(t) &= u_{z0}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

ami a forgó térhez rögzített rendszerben egy fixponti megoldást jelent [3]. Fixpont alatt azt értjük, hogy a forgó koordináta-rendszerben érvényes differenciálegyenletek bal oldalán álló $d\theta/dt$ és $d\phi/dt$ deriváltak nullának adódnak, az inerciarendszerben a mozgás forgó marad.

A 4.1 ábrán két, jól elkülöníthető fixpont jelenik meg, egy vonzó fixpont (pont) ($\phi = 0.02, \theta = 1.61$), és egy taszító fixpont (üres kör) ($\phi = 3.12, \theta = 1.53$). A polárkoordinátákat úgy választottam, hogy az egyenlítő az ábrát két egyenlő részre osztó vízszintes vonal legyen. Természetesen a fixpontok koordinátáit analitikai úton is meghatározhatjuk a (4.10) egyenletek megoldásával, figyelembe véve, hogy $\lambda_{\text{eff}} = 0$. Az egyenletek megoldása a vonzó fixpontra (3.12). (A taszító fixpontra vonatkozó megoldás mindössze annyiban különbözik, hogy az u_{x0} -t és u_{z0} -t meg kell szorozni (-1)-gyel.)



4.1. ábra. Az ábrán az izotróp esetre ($\lambda_{\text{eff}} = 0$) vonatkozó LLG egyenlet numerikus megoldása látható, az $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.01$; $\omega_L = 0.2$ paraméterekkel.

A stacionárius megoldás lehetővé teszi, hogy meghatározzuk izotróp esetben az egy ciklusra eső energiaveszteséget, vagyis a hőtermelés mértékét, melyet az alábbi egyenlettel végeztünk el,

$$E = \mu_0 m_S \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} dt \left(\mathbf{H} \cdot \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right) = \mu_0 2\pi m_S H(-u_{y0}), \quad (4.18)$$

amely a hipertermia tartományában, vagyis alacsony frekvenciás határesetben ($\omega \ll \alpha_N$) az alábbi formában írható fel,

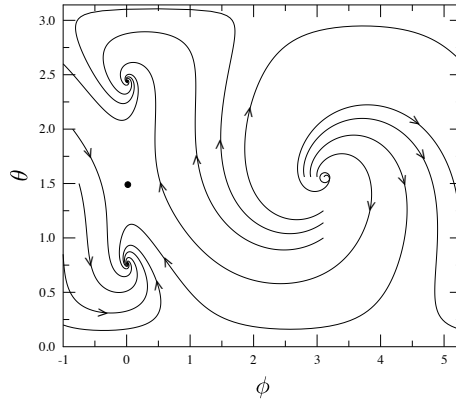
$$E = 2\pi\mu_0 m_S H \left[\frac{\alpha_N \omega}{\omega_L^2 + \alpha_N^2} - \frac{\alpha_N \omega_L^2 \omega^3}{(\omega_L^2 + \alpha_N^2)^3} + \mathcal{O}(\omega^5) \right]. \quad (4.19)$$

A relaxáció elméleti tanulmányozása során az adódott, hogy izotróp nanorészecskék alacsony frekvenciás határesetében, vagyis a hipertermia tartományában, a rezgő külső gerjesztő tér alkalmazásával nagyobb energiaveszteség érhető el, mint a forgó külső gerjesztő tér felhasználásával.

4.2.2. Anizotróp eset

Anizotróp ($\lambda_{\text{eff}} \neq 0$) esetben az LLG egyenlet megoldása során, a forgó térhez rögzített vonatkoztatási rendszerben szintén fixponti megoldásokat kapunk. A vonzó fixpontok száma azonban függ az anizotrópia mértékétől.

Anizotróp esetben minden egyes α_N , ω , és ω_L paraméterhármashoz tartozik egy λ_{cr} kritikus anizotrópiaérték, amelynél nagyobb λ_{eff} értékek esetén már nem egy, hanem két vonzó fixpont jelenik meg. Az egyik vonzó fixpont az egyenlítő alatt, míg a másik az egyenlítő felett helyezkedik el, a két vonzó fixpontot pedig a nyeregpont (különálló fekete pont) szeparálja el egymástól, mint ahogyan ezt az 4.2 ábra is szemlélteti.



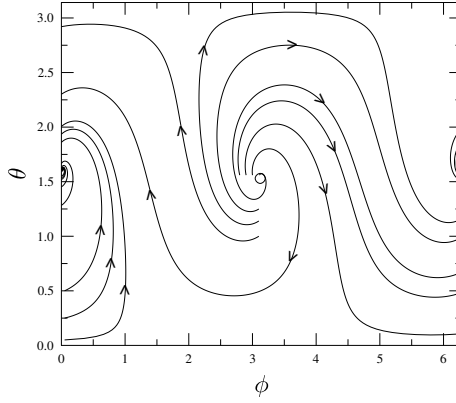
4.2. ábra. A mágnesezettség vektor θ - ϕ polárkoordinátái a térrel együtt forgó vonatkoztatási rendszerben. A nyilak a mágnesezettségi vektor mozgási irányát jelölik. Az ábra paraméterei: $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.01$; $\omega_L = 0.2$ és $\lambda_{\text{eff}} = 1.5$

Ugyanezen α_N , ω és ω_L értékek mellett, de alacsonyabb anizotrópia értékkel ($\lambda_{\text{eff}} = 0.05$) is készítettem fázistérképet, amely során az izotróp esethez ugyan nagyon hasonló, de nem azonos ábrát kaptam (4.3 ábra).

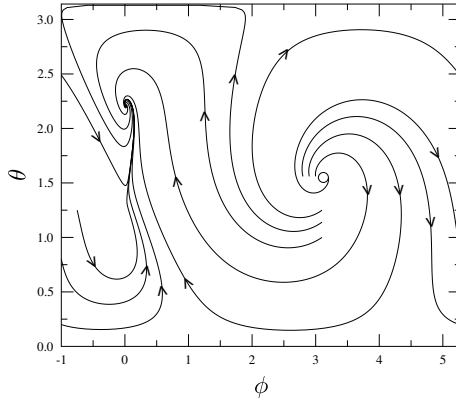
Az anizotrópia mértékét lépcsről-lépcsre növelve megtaláltam azt a kritikus értéket ($\lambda_{\text{cr}} = 1.175$), amelynél még éppen csak egy vonzó fixpont látható, de az ábra már sejteti a második vonzó fixpont megjelenését (4.4 ábra). A vonzó fixpontok számának növekedése egyben azt is jelenti, hogy az energiaveszteséget nem elegendő csupán egy pontra számolni, hanem a második vonzó fixpontra is alkalmazni kell az energiaveszteség meghatározására szolgáló képletet.

Az energiaveszteség kiszámítását a teljesség kedvéért a magasabb frekvenciák irányába haladva is elvégeztem [47], itt azonban törekedni kellett arra, hogy még a hipertermia tartományán belül maradjak, hiszen ellenkező esetben az eljárás alkalmatlanná válik tumorterápiás célokra. Az így kapott

eredményeket a (4.5) ábra foglalja össze, ahol az anizotrópia kritikus értékéhez tartozó pályatérképet tüntettem fel az egyre növekvő frekvenciák irányába haladva.



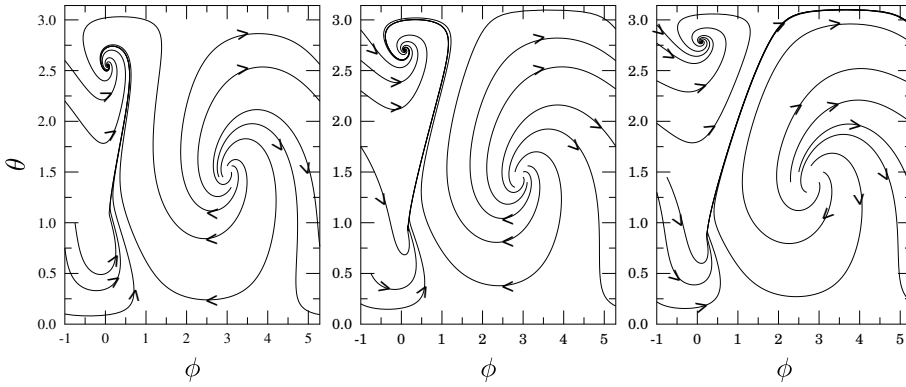
4.3. ábra. Alacsony anizotrópia értékhez tartozó pályatérkép. Az ábra paraméterei: $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.01$; $\omega_L = 0.2$ és $\lambda_{\text{eff}} = 0.05$



4.4. ábra. A kritikus anizotrópia értékhez tartozó pályatérkép. Az ábra paraméterei: $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.01$; $\omega_L = 0.2$ és $\lambda_{\text{eff}} = 1.175$

ω	λ_{cr}	E/1. fixpont	E/2. fixpont
0.01	1.175	0.013	0.0175
0.05	1.55	0.03	0.07
0.10	1.90	0.04	0.13
0.15	2.20	0.04	0.16

4.1. táblázat. A táblázat az anizotrópia kritikus értékének és az egy ciklusra eső energiaveszteségnek a külső mágneses tér frekvenciájától való függését tartalmazza, $\alpha_N = 0.1$ és $\omega_L = 0.2$ és λ_{eff} értéke a λ_{cr} -hoz képest 0.01-dal nagyobb.



4.5. ábra. Kritikus anizotrópia értékekhez tartozó pályatérképek, különböző frekvencia értékek esetén. (a) $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.05$; $\omega_L = 0.2$ $\lambda_{\text{cr}} = 1.55$ (b) $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.1$; $\omega_L = 0.2$ $\lambda_{\text{cr}} = 1.9$ (c) $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.15$; $\omega_L = 0.2$ $\lambda_{\text{cr}} = 2.2$

5. fejezet

Stacionárius megoldás, $\lambda_{\text{eff}} > 0$

Ebben a fejezetben az LLG egyenlet stacionárius megoldását vizsgálom "szivar" alakú ($\lambda_{\text{eff}} > 0$) anizotrópia tér jelenlétében, forgó külső tér mellett, ahol az anizotrópia tér iránya merőleges a forgási síkra. A térrel együtt forgó vonatkoztatási rendszerben ezen stacionárius megoldások fixpontok. Kritikus anizotrópia érték alatt ($\lambda_{\text{eff}} < \lambda_{\text{cr}}$) egy, felette ($\lambda_{\text{eff}} > \lambda_{\text{cr}}$) kettő fixponti megoldást kapunk. Ezen fixpontok (stacionárius megoldások) segítségével az egy forgási ciklusra eső energiaveszteség meghatározható és összehasonlítható az izotróp forgó illetve rezgő esettel. Megmutatom, hogy a cirkulárisan polarizált mágneses tér az egy ciklusra eső energiaveszteséget anizotróp esetben ($\lambda_{\text{eff}} > 0$) csökkenti az izotróp esethez viszonyítva, ha csak a dinamikai effektusokat vesszük számításba, azaz a termikus fluktuációk nincsenek figyelembe véve. Tehát alacsony frekvenciás esetben, vagyis a hipertermia tartományában, izotróp nanorészecskék alkalmazása hatékonyabb hőtermelést eredményez.

5.1. Forgó tér, stacionárius megoldás, $\lambda_{\text{eff}} > 0$

A (4.16) egyenletet analitikusan is megoldhatjuk, melynek eredményeként meghatározzuk a vonzó fixpont (vagy fixpontok) Descartes-koordinátáit a forgó vonatkoztatási rendszerben. Ha az u_{y0} (vagyis a vonzó fixpont y-koordinátája) ismert, akkor az izotróp esethez hasonlóan meghatározhatjuk az egy ciklusra eső energiaveszteséget. Orvosbiológiai alkalmazások során, mint amilyen a hi-

pertermia is, kizárólag az alacsony frekvenciás tartomány használható. Ezért alacsony frekvencia tartományában $\omega \ll \alpha_N$ és kis anizotrópiánál $\lambda_{\text{eff}} \ll 1$ csupán egyetlen vonzó fixpont található a pályatérképen, melynek u_{y0} koordinátája,

$$u_{y0} \approx -\frac{\alpha_N \omega}{\omega_L^2 + \alpha_N^2} + \frac{\alpha_N \omega_L^2 \omega^3}{(\omega_L^2 + \alpha_N^2)^3} (1 + 2\lambda_{\text{eff}}). \quad (5.1)$$

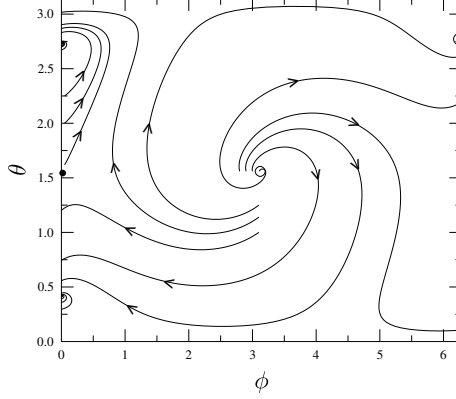
Ezt az egyenletet behelyettesítve az egy ciklusra eső energiaveszteséget kifejező egyenletbe (4.18), azt kapjuk, hogy,

$$E \approx 2\pi\mu_0 m_S H \left[\frac{\alpha_N \omega}{\omega_L^2 + \alpha_N^2} - \frac{\alpha_N \omega_L^2 \omega^3}{(\omega_L^2 + \alpha_N^2)^3} (1 + 2\lambda_{\text{eff}}) \right], \quad (5.2)$$

amely egyenlet azt mutatja, hogy az alacsony frekvenciatartományon a kis anizotrópia érték nem módosítja az egy ciklusra eső energiaveszteséget az izotróp esethez képest. Nagyobb frekvencia értékek és kis anizotrópia esetén az egy ciklusra eső energiaveszteség csökken az izotróp esethez viszonyítva, ha $\lambda_{\text{eff}} > 0$. Ezt az analitikus eredményt támasztja alá a (4.14) egyenlet numerikus megoldása is (alacsony frekvencia, kis anizotrópia), amely a 4.3 ábrán látható. Ez az ábra nagyon hasonlít az izotróp esetben kapott 4.1 ábrához, de nem azonos vele. A két ábra trajektóriái a fixpontoktól távol különböznek egymástól, de ez az eltérés nagyon kicsi. Azonban alacsony frekvencia és kis anizotrópia esetén a 4.1 és a 4.3 ábra egymásnak megfelelő vonzó és taszító fixpontjai egybeesnek. Az izotróp és az anizotróp esetben a vonzó fixpontok koordinátái közti különbség magasabb frekvenciákon ismerhető fel. Például a [1] cikkben található 3. ábra vonzó fixpontjának koordinátája $u_{y0} = -0.0956$, numerikus megoldás alapján $u_{y0} = -0.0957$, míg ugyanezekkel a koordinátákkal izotróp esetre $u_{y0} = -0.0961$ adódott. Az egy ciklusra eső energiaveszteséget (amely arányos $-u_{y0}$ értékével) az anizotrópia csökkenti az izotróp esethez képest azonos ω , ω_L és α_N esetén.

A továbbiakban tekintsük az alacsony frekvencia, de nagy anizotrópia határesetét. Ebben az esetben már két vonzó fixpont jelenik meg (5.1 ábra), melyek közül az egyik az egyenlítő fölött, míg a másik az egyenlítő alatt helyezkedik el.

Nagy anizotrópia értékek esetén a vonzó fixpontok ϕ -koordinátái azonosak, míg a θ -koordinátái szimmetrikusak az egyenlítőre, így a vonzó fixpontok Descartes-koordinátái $u_{x0}^{\text{fel}} = u_{x0}^{\text{le}}$, $|u_{z0}^{\text{fel}}| = |u_{z0}^{\text{le}}|$ és $u_{y0}^{\text{fel}} = u_{y0}^{\text{le}}$. Tehát mindkét vonzó fixpontnak azonos y -koordinátái vannak a forgó vonatkoztatási-



5.1. ábra. Alacsony frekvencia és nagy anizotrópia értékhez tartozó pályatérkép. Az ábra paraméterei: $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.01$; $\omega_L = 0.2$ és $\lambda_{\text{eff}} = 2.5$

rendszerben, amely az alábbi képlettel írható le,

$$u_{y0} \approx -\frac{\alpha_N \omega}{\omega_L^2 + \alpha_N^2} \frac{1}{\lambda_{\text{eff}}^2}. \quad (5.3)$$

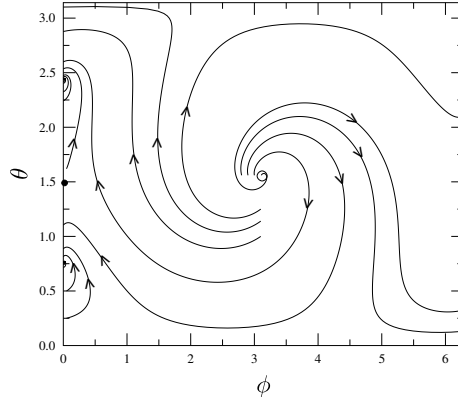
Ezt a képletet behelyettesítve az egy ciklusra eső energiavesztés kifejező (4.18) egyenletbe, azt kapjuk, hogy:

$$E \approx 2\pi\mu_0 m_S H \left[\frac{\alpha_N \omega}{\omega_L^2 + \alpha_N^2} \frac{1}{\lambda_{\text{eff}}^2} \right], \quad (5.4)$$

amely $\lambda_{\text{eff}} \rightarrow \infty$ határesetben eltűnik.

Extrém nagy anizotróp határesetben tehát nincs energiavesztés, mivel a mágnesezettség vektor párhuzamos az anizotrópia térről (könnyű mágnesezettségi irány), függetlenül a forgó mágneses tértől. Sőt, ha a $\lambda_{\text{eff}} \rightarrow \infty$ határesetet tekintjük, akkor az x és y komponens a 0-hoz tart, míg a z komponens ± 1 -hez. A θ - ϕ síkon a vonzó fixpontok a pólusokhoz tartanak, vagyis $\phi = 0$ és $\theta = 0, \pi$. Ha az anizotrópia értéke csökken, akkor a vonzó fixpontok elmozdulnak a pólusoktól az egyenlítő irányába (5.2 ábra).

A következő ábrán az energiavesztés ábrázoltam az anizotrópia függvényében, amelyen azt látjuk, hogy forgó mágneses tér esetén az energiavesztés monoton függvénye az anizotrópiának. Az így kapott eredményeket



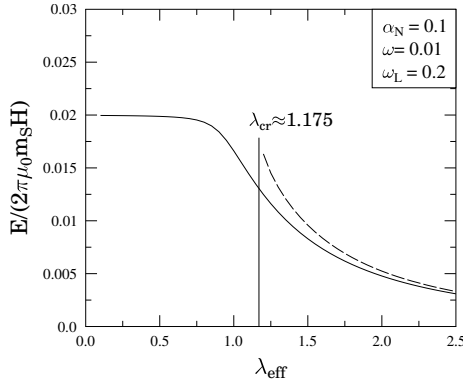
5.2. ábra. Az ábra paramétereit: $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.01$; $\omega_L = 0.2$ és $\lambda_{\text{eff}} = 1.5$

a 5.3 ábra szemlélteti, ahol a vízszintes tengelyen az anizotrópia nagysága, a függőleges tengelyen pedig az egy ciklusra eső energiavesztés van feltüntetve. A folytonos és a szaggatott vonal a két különböző vonzó fixponthoz tartozó energiavesztést szemlélteti, amely a $\lambda_{\text{eff}} \rightarrow 0$ határesetben az izotróp egyrészecskére vonatkozó számítási eredményeket adja vissza.

Jól látható, hogy a függvény monoton csökkenő, vagyis az anizotróp egyrészecskét leíró esetben [1] nem tudunk nagyobb energiavesztést elérni, mint korábban az izotróp esetben [3]. Az is leolvasható a 5.3 ábráról, hogy ha csak egyetlen vonzó fixpont van, vagyis $\lambda_{\text{eff}} < \lambda_{\text{cr}}$, akkor az energiavesztés nem sokkal tér el az izotróp esettől, míg a második vonzó fixpont, vagyis $\lambda_{\text{eff}} > \lambda_{\text{cr}}$ megjelenése nagymértékben lecsökkenti az energiavesztést, ami jelen esetben kedvezőtlen jelenség.

Így tehát összegezve a kutatási eredményeimet, megállapítható, hogy alacsony frekvenciás határesetben a "szivar" alakú anizotrópia $\lambda_{\text{eff}} > 0$ (ami merőleges a külső forgó térre) nem képes növelni a mágneses nanorészecskék fűtési hatékonyságát.

A teljesség kedvéért megvizsgáltam a nagyfrekvenciás határesetet is, annak ellenére, hogy ez nem alkalmazható tumorterápiás célokra, mivel a hipertermia tartományán kívül esik. A nagy frekvencia és nagy anizotrópia értékekhez tartozó pályatérképet a 5.4 ábra szemlélteti, amelyet összehasonlítottam az ugyanezen anizotrópia érték mellett, de alacsony frekvenciatartományon készült pályatérképpel (5.1 ábra). A hasonlóság a két pályatérkép között az, hogy mind



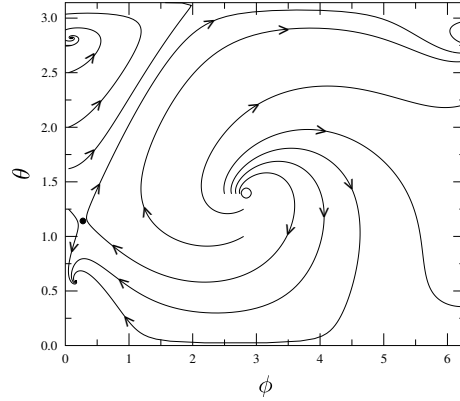
5.3. ábra. Az energiavesztés ábrázolása az anizotrópia függvényében. A folytonos vonal az egyenlítő alatti, a szaggatott vonal az egyenlítő feletti vonzó fixponthoz tartozó energiavesztést ábrázolja.

az alacsony, mind a magas frekvenciatartományon két vonzó fixpont jelenik meg, azonban a magas frekvenciatartományon különböző koordinátái vannak a θ - ϕ síkon. Így az energiavesztések különböznek egymástól.

Összegzésképp arra a megállapításra jutottam, hogy az egytengelyű anizotrópia (abban az esetben, ha az anizotrópia tér merőleges a külső forgó mágneses térre), vagy nem változtatja meg az egy ciklusra eső energiavesztést (alacsony anizotrópia értékek esetén), vagy az energiavesztés csökken az izotróp esethez képest.

5.2. Rezgő tér, $\lambda_{\text{eff}} \gg 1$

A doktori kutatómunkám célja az volt, hogy megvizsgáljam az anizotrópia szerepét. Azaz, hogy a mágneses nanorészecskék anizotrópiája külső forgó mágneses tér alkalmazása mellett növelheti-e a hőtermelés hatékonyságát. Eredményül azt kaptam (amelyet az előző részben részletesen ismertettem), hogy az egytengelyű anizotrópia (az anizotrópia tér merőleges a külső forgó térre) és $\lambda_{\text{eff}} > 0$, cirkulárisan polarizált külső tér alkalmazásával az egy ciklusra eső energiavesztés vagy változatlan marad (alacsony anizotrópia), vagy csökken (nagy anizotrópia). Korábbi kutatómunka eredményeként [3] azonban láthattuk, hogy az izotróp nanorészecskék külső rezgő mágneses tér al-



5.4. ábra. Nagy frekvencia és nagy anizotrópia értékhez tartozó pályatérkép. Az ábra paraméterei: $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.15$; $\omega_L = 0.2$ és $\lambda_{\text{eff}} = 2.5$

kalmazásával alacsony frekvenciás határesetben nagyobb hőtermelésre képesek, mint forgó tér esetén. Továbbá egy későbbi vizsgálat [18] arra is rámutatott, hogy ez az eredmény termikus fluktuációk jelenlétében is megbízható. Így megállapíthatjuk, hogy cirkulárisan polarizált külső tér alkalmazása nem tud jobb fűtési teljesítményt szolgáltatni sem izotróp, sem anizotróp mágneses nanorészecske rendszerek esetén. A termikus fluktuációk hatását nem vettem figyelembe.

A kísérleti eredményekre [28] magyarázatot keresve talán érdemes lehet megvizsgálni az energiavesztéséget lineárisan polarizált külső gerjesztő tér és nagy anizotrópia értékek esetén. Érdemes megjegyezni, hogy a ferrofluidok egyik jellemző tulajdonsága, hogy a nanorészecskék lánc alakzatba rendeződnek és ezáltal igen jelentős anizotrópia értéket eredményeznek [48], azaz a nem megfelelő kolloidális stabilitás rendkívül nagy anizotrópia $\lambda_{\text{eff}} \gg 1$ megjelenéséhez vezethet. Ebben az alfejezetben ismertetem az LLG egyenlet megoldását egydoménos mágneses nanorészecskére, abban az esetben, ha a nanorészecske nagy anizotrópia értékekkel rendelkezik és lineárisan polarizált külső mágneses teret alkalmazunk. Feltételezzük, hogy az alkalmazott tér az x -tengely körül oszcillál ω körfrekvenciával,

$$\mathbf{H}_{\text{ext}} = H_0(\cos(\omega t), 0, 0), \quad (5.5)$$

ahol $\omega_L = \gamma' H_0$ Larmor-frekvencia.

A cirkulárisan polarizált esethez hasonlóan egytengelyű anizotróp mágneses nanorészecskét vizsgáltam, ahol a mágnesezettség vektor az x -tengely irányába mutat:

$$\mathbf{H}_{\text{aniso}} = H_0(\lambda_{\text{eff}} M_x, 0, 0), \quad (5.6)$$

ahol M_x a mágnesezettség vektor x -koordinátája és λ_{eff} az anizotrópia mértékét leíró paraméter.

Alternáló külső mágneses tér esetén célszerű az eredeti LLG egyenletet (4.5) alkalmazni a forgó vonatkoztatási rendszerben érvényes (4.10) egyenlet helyett. Az LLG egyenlet a mágnesezettség vektor Descartes-koordinátaival az alábbi formában írható fel:

$$\begin{aligned} \frac{dM_x}{dt} &= \alpha_N(\lambda_{\text{eff}} M_x + \cos(\omega t))(1 - M_x^2), \\ \frac{dM_y}{dt} &= -(\omega_L M_z + \alpha_N M_x M_y)(\cos(\omega t) + \lambda_{\text{eff}} M_x), \\ \frac{dM_z}{dt} &= (\omega_L M_y + \alpha_N M_x M_z)(\cos(\omega t) + \lambda_{\text{eff}} M_x), \end{aligned} \quad (5.7)$$

amely analitikus úton nem oldható meg. Extrém nagy anizotrópia értékek esetén, amikor a $\cos(\omega t)$ elhanyagolható a $\lambda_{\text{eff}} M_x$ értékéhez képest, akkor az M_x időtől való függését az alábbi módon is felírhatjuk:

$$M_x(t) = \pm \frac{\exp(\alpha_N \lambda_{\text{eff}} t)}{\sqrt{\exp(2\alpha_N \lambda_{\text{eff}} t) - C}}, \quad (5.8)$$

ahol $C = 1 - 1/M_{x0}^2$. A $t \rightarrow \infty$ határesetben a (5.8) egyenlet megoldása ± 1 -hez tart és az egy ciklusra eső energiaveszteség eltűnik.

Összegzésként megállapíthatjuk tehát, hogy extrém nagy anizotrópia értékek és lineárisan polarizált külső mágneses tér alkalmazása esetén a mágneses nanorészecske hőtermelése megszűnik. Azonos eredményt kaptunk cirkulárisan polarizált külső gerjesztő tér esetén is, ami magyarázatul szolgálhat a [28] publikációban közölt kísérleti eredményekre.

Így, ha a ferrofluid nem megfelelő módon volt előkészítve (a kolloidális stabilitás nem megfelelő), akkor a nanorészecskék láncokká álltak össze, az anizotrópia értéke megnőtt és az energiaveszteség pedig gyorsan nullára csökkent. "Hőtermelés" szempontjából még rosszabb a helyzet, ha a nem megfelelő kolloidális stabilitás miatt az "összetapadó" nanorészecskék gyűrűt alkotnak. Ekkor ugyanis lényegében nullára esik le a gyűrű egészét jellemezhető mágneszettség és így megszűnik a relaxáció.

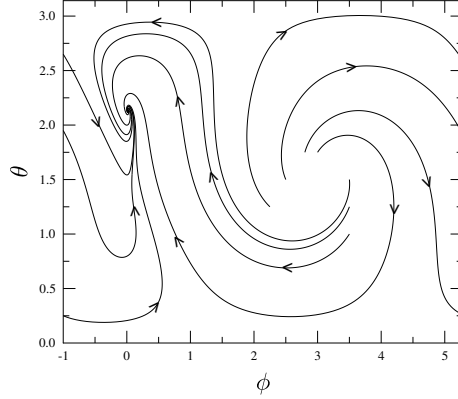
6. fejezet

Stacionárius megoldás, $\lambda_{\text{eff}} < 0$

Ebben a fejezetben az LLG egyenlet stacionárius megoldását vizsgálom anizotrópia tér jelenlétében, amely merőleges a külső forgó tér forgási síkjára, továbbá megkövetelem, hogy legyen $\lambda_{\text{eff}} < 0$, azaz "lencse" alakú anizotrópiát választok. Ebben az elrendezésben az anizotrópia által vezérelt kedvező helyzet merőleges a forgástengelyre. Az itt kapott eredményeket összevetem az 5. fejezetben tárgyalt "szivar" alakú ($\lambda_{\text{eff}} > 0$) esettel. Megmutatom, hogy magas frekvenciáknál és nagy anizotrópia mellett ($|\lambda_{\text{eff}}| > \lambda_{\text{cr}}$) a lencse-elrendezés hatékonyabb hőtermelést tesz lehetővé még az izotróp esethez képest is. Azonban azt is megmutatom, hogy alacsony frekvenciáknál ez eltűnik és lényegében az izotróp esettel azonos hőtermelést kapunk. Azaz a mágneses lázterápia hatékonyságának növelésére más módszert kell keresnünk.

6.1. Magas frekvencia és $\lambda_{\text{eff}} < 0$

Az eddigi várakozásoknak megfelelően (5. fejezet) az anizotrópia kritikus értéke alatt $|\lambda_{\text{eff}}| < \lambda_{\text{cr}}$ csupán egyetlen vonzó fixpont jelenik meg, amely megfelel az eredeti LLG egyenlet (4.5) stacionárius megoldásának. Ez teljesül mind pozitív $\lambda_{\text{eff}} > 0$, mind negatív $\lambda_{\text{eff}} < 0$ esetben, akár csak a magas anizotrópia értékek $|\lambda_{\text{eff}}| > \lambda_{\text{cr}}$ mellett tapasztalt újabb fixpont, azaz újabb stacionárius megoldás megjelenése, lásd 6.1 ábra.



6.1. ábra. Az ábra paramétereit: $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.01$; $\omega_L = 0.2$ és $\lambda_{\text{eff}} = -1.1$

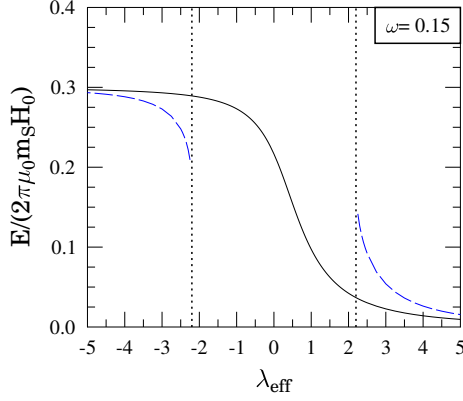
Az egy ciklusra eső energiavesztés meghatározása a vonzó fixpontra vagy fixpontokra kapott megoldás felhasználásával lehetséges,

$$\begin{aligned} E &= \mu_0 m_S \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} dt \left(\mathbf{H}_{\text{eff}} \cdot \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right) \\ &= \mu_0 2\pi m_S H_0 (-u_{y0}), \end{aligned} \quad (6.1)$$

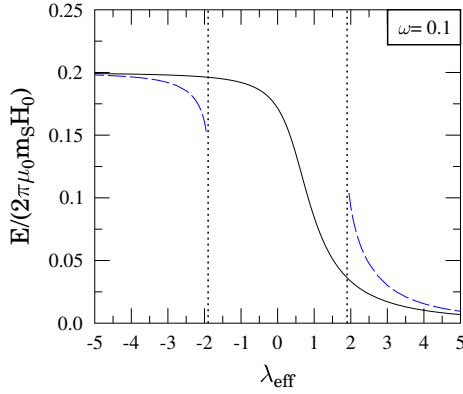
amely az alábbi közelítő alakban írható fel,

$$E \approx 2\pi\mu_0 m_S H_0 \left[\frac{\alpha_N \omega}{\omega_L^2 + \alpha_N^2} - \frac{\alpha_N \omega_L^2 \omega^3}{(\omega_L^2 + \alpha_N^2)^3} (1 + 2\lambda_{\text{eff}}) \right], \quad (6.2)$$

amely eredmény egyaránt érvényes "szivar" és "lencse" alakanizotrópia esetén. Vizsgáljuk először a nagy frekvenciák tartományát. Ekkor nagy anizotrópia esetén $|\lambda_{\text{eff}}| > \lambda_{\text{cr}}$ az egy ciklusra eső energiavesztés nullához tart, ha $\lambda_{\text{eff}} > 0$ (lásd 5. fejezet). Azonban $\lambda_{\text{eff}} < 0$ ("lencse" alakú anizotrópia) esetben nagyobb energiavesztést, azaz hatékonyabb "hőtermelést" kapunk még az izotróp esethez képest is (lásd a 6.2 ábrán folytonos vonallal jelölt $\lambda_{\text{eff}} < 0$ tartomány), amit érdemes összevetni ugyanazon az ábrán bemutatott "szivar" alakanizotrópia esetével, ahol $\lambda_{\text{eff}} > 0$).



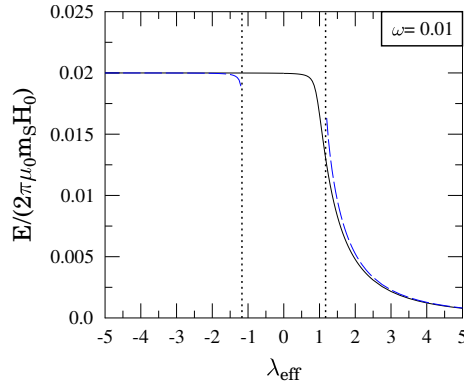
6.2. ábra. Az ábrán az energiaveszteséget ábrázoltam az anizotrópia függvényében. A fekete folytonos vonal jelöli az első vonzó fixponthoz, míg a kék szaggatott vonal a második vonzó fixponthoz tartozó energiaveszteséget. A pontozott vonallal az anizotrópia kritikus értékét ($\lambda_{\text{cr}} = \pm 2.2$) jelöltem. Az ábra paraméterei: $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.15$; $\omega_L = 0.2$ és $\lambda_{\text{eff}} \in [-5, 5]$.



6.3. ábra. Az ábrán az energiaveszteséget ábrázoltam az anizotrópia függvényében. A fekete folytonos vonal jelöli az első vonzó fixponthoz, míg a kék szaggatott vonal a második vonzó fixponthoz tartozó energiaveszteséget. A pontozott vonallal az anizotrópia kritikus értékét ($\lambda_{\text{cr}} = \pm 1.9$) jelöltem. Az ábra paraméterei: $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.1$; $\omega_L = 0.2$ és $\lambda_{\text{eff}} \in [-5, 5]$.

6.2. Alacsony frekvencia és $\lambda_{\text{eff}} < 0$

A (6.2) egyenletből következik, hogy pozitív (negatív) anizotrópia értékek esetén az egy ciklusra eső energiaveszteség csökken (nő), habár viszonylag nagy frekvencia szükséges hozzá. Alacsony frekvenciatartományon ($\omega \rightarrow 0$) az anizotrópia szerepe irreleváns. Ez az eredmény a 6.4 ábrán látható, amely azt szemlélteti, hogy $|\lambda_{\text{eff}}| < \lambda_{\text{cr}}$ esetén és kis frekvencia értékekre az egy ciklusra eső energiaveszteség megegyezik az izotróp esetben kapott értékkel, függetlenül a λ_{eff} előjelétől, vagyis az anizotrópia ezen a tartományon gyakorlatilag elveszti szerepét. Hasonló tendencia figyelhető meg az anizotrópia kritikus értéke fölött is, amelyet a 6.4 ábrán szaggatott vonallal ábrázoltam.



6.4. ábra. Az ábrán az energiaveszteséget ábrázoltam az anizotrópia függvényében. A fekete folytonos vonal jelöli az első vonzó fixponthoz, míg a kék szaggatott vonal a második vonzó fixponthoz tartozó energiaveszteséget. A pontozott vonallal az anizotrópia kritikus értékét ($\lambda_{\text{cr}} = \pm 1.175$) jelöltem. Az ábra paraméterei: $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.01$; $\omega_L = 0.2$ és $\lambda_{\text{eff}} \in [-5, 5]$.

Alacsony frekvenciatartományon látható, hogy a szaggatott vonal 0-hoz tart, ha $\lambda_{\text{eff}} > 0$, illetve egy konstanshoz, ha $\lambda_{\text{eff}} < 0$. Erről az ábráról leolvasható, hogy hipertermiás alkalmazásként a nanorészecskék "lencse" alakú ($\lambda_{\text{eff}} < 0$) anizotrópiája eredményez ugyan energiaveszteség növekedést, de ez alacsony frekvenciákon kevésbé jelentős, sőt ha $\omega \rightarrow 0$, akkor egy konstanshoz tart, amely azonos az izotróp esetben kapott értékkel.

Fontos továbbá megjegyezni, hogy az ábrák az alábbi frekvenciatartományon

készültek: $\omega = 0.01\text{--}0.15$, amelyek orvosiológiai alkalmazás szempontjából túlságosan nagy értékek. Vagyis az ábrákon bemutatott eredmények az alacsonyabb frekvenciák (hipertermia tartományában) felé haladva markánsabbá válnak. Ezért más, hatékonyabb módszert kell keresnünk, amellyel növelhetjük az energiavesztés hatékonyságát.

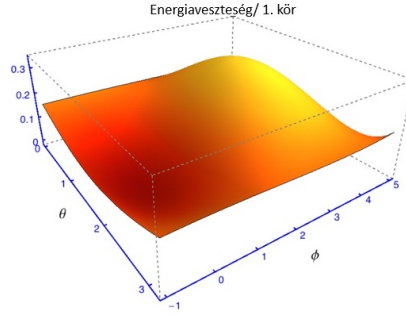
7. fejezet

Nem stacionárius megoldás – új típusú gerjesztés

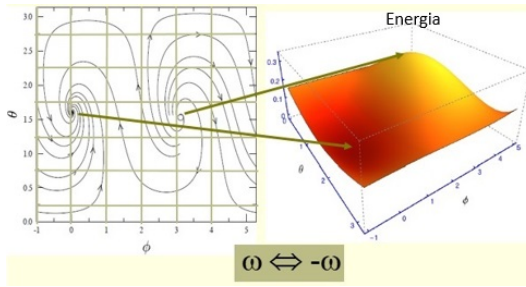
Az 5. és 6. fejezetben megmutattam, hogy mágneses lázterápia során használható alacsony frekvenciákon, a forgó tér forgási síkjára merőleges anizotrópia tér vagy nem növeli ($\lambda_{\text{eff}} < 0$), vagy kifejezetten csökkenti ($\lambda_{\text{eff}} > \lambda_{\text{cr}}$) az izotróp forgó esethez képest az energiaveszteséget, ha minden esetben a stacionárius megoldásra támaszkodunk. Ebben a fejezetben azt vizsgálom, hogy kaphatunk-e nagyobb energiaveszteséget (azaz hatékonyabb "hőtermelést"), ha nem stacionárius megoldásokkal számolok. Megmutatom, hogy a minimális disszipáció elvével összhangban, a stacionárius megoldáshoz tartozó energiaveszteség mindig minimális, azaz nem stacionárius esetre számolva hatékonyabb hőtermelés érhető el. Azonban a rendszer nagyon gyorsan (kevesebb, mint negyed ciklus alatt) a stacionárius megoldáshoz konvergál, ezért ha hatékonyabb hőtermelést akarunk elérni, szükség van arra, hogy a rendszert minden ciklusban kimozdítsuk a fixponti helyzetből. Erre javaslok egy új típusú gerjesztő teret, melyben minden ciklusban megváltoztatjuk a forgás irányát. Megmutatom, hogy ezen váltakozó irányú forgó tér alkalmazásával minden eddig vizsgált esetnél (izotróp-anizotróp, rezgő-forgó) hatékonyabb "hőtermelés" érhető el, ami azonban egy speciális elrendezést kíván: "szivar" alakú anizotrópiát ($\lambda_{\text{eff}} > 0$), ahol az anizotrópia tér iránya merőleges a váltakozó irányú forgó tér forgási síkjára, továbbá értéke a kritikus értékhez közeli ($\lambda_{\text{eff}} \approx \lambda_{\text{cr}}$). Végül javaslatot teszek a periodikusan váltakozó irányú külső forgó tér kísérleti megvalósítására jobban használható alakra.

7.1. Nem stacionárius megoldás - minimális disszipáció elve

Mostanáig az LLG egyenlet stacionárius megoldását vizsgáltam, amely segítségével meghatároztam az egy ciklusra eső energiavesztéséget. Azonban releváns a kérdés, hogy a stacionárius megoldáson kívül nem kaphatunk-e nagyobb energiavesztéséget egy ciklus alatt. Ezen kérdés vizsgálata céljából elkészítettem egy 3D ábrát (7.1), amelyen az **első ciklusra** eső energiavesztéséget ábrázoltam a θ - ϕ síkon, úgy, hogy az adott θ - ϕ értékről indítottam a mágneszettség vektort és (numerikusan) számoltam az energiavesztéséget, de mindig csak az első kört figyelembe véve.



7.1. ábra. Az ábra megértését segítheti a 7.2 ábra, ahol a 3D grafikonhoz tartozó pályatérképet is megjelenítettem.



7.2. ábra. Az ábra paraméterei: $\alpha_N = 0.1$; $\omega = 0.01$; $\omega_L = 0.2$ és $\lambda_{\text{eff}} = 0.05$.

Fontos megjegyezni, hogy alacsony frekvenciatartományon, amely alkalmas hipertermiás kezelések során, az LLG egyenlet megoldása, amely a mágnesezettség vektor időfüggését írja le, mindig gyorsan beáll a vonzó fixpontra. Azt mondhatjuk, hogy a mágnesezettség vektor egy negyed kör megtétele után 1%-os pontossággal a vonzó fixponthoz tartozó stacionárius megoldás értékét veszi fel. A 7.1 ábrán a "völgy" a vonzó fixpontnak felel meg, amely a legkisebb energiaveszteséget eredményezi egy ciklus alatt, míg a "hegy" a taszító fixpontnak felel meg, ahol az egy ciklusra eső energiaveszteség maximális (lásd 7.2 ábra). Habár a 7.1 ábrán megjelenő eredményeket numerikus megoldás útján kaptam, megközelítő analitikus levezetés lehetséges izotróp esetben ($\lambda_{\text{eff}} = 0$). Valóban, az LLG egyenlet közelítő megoldása a (3.19) formula, amit a következőképpen írhatunk,

$$\begin{aligned}
 M_\xi(t) &= M_{\xi 0}^{\text{spec}} \cos(\Omega t) - M_{\eta 0}^{\text{spec}} \sin(\Omega t) \\
 &\quad + (M_{\xi 0} - M_{\xi 0}^{\text{spec}}) e^{-\frac{\alpha_N t}{\sqrt{2}}}, \\
 M_\eta(t) &= M_{\xi 0}^{\text{spec}} \sin(\Omega t) + M_{\eta 0}^{\text{spec}} \cos(\Omega t) \\
 &\quad + (M_{\eta 0} - M_{\eta 0}^{\text{spec}}) e^{-\frac{\alpha_N t}{\sqrt{2}}}, \\
 M_\zeta(t) &= \sqrt{1 - [M_\xi(t)]^2 - [M_\eta(t)]^2},
 \end{aligned} \tag{7.1}$$

ahol (M_ξ, M_η, M_ζ) a mágnesezettség vektor koordinátái a speciálisan választott forgó koordináta-rendszerben, lineáris függést ad a kezdőértékek Descartes-koordinátáitól $M_{\xi 0}, M_{\eta 0}$. ($M_{\xi 0}^{\text{spec}}, M_{\eta 0}^{\text{spec}}$ az alábbi paraméterektől függ: $\omega, \omega_L, \alpha_N$ és a (3.18) egyenlet definiálja és $\Omega = \sqrt{\omega^2 + \omega_L^2}$.)

Tehát a (6.1) és (7.1) egyenletek alapján az egy ciklusra eső energiaveszteség lineárisan függ a kezdőérték Descartes-koordinátáitól $(M_{\xi 0}, M_{\eta 0})$, így ha kifejezzük azokat polárkoordináták segítségével

$$M_{\xi 0} \sim \sin(\theta) \cos(\phi), \quad M_{\eta 0} \sim \sin(\theta) \sin(\phi), \tag{7.2}$$

akkor az első ciklusra (1 körre) eső energiaveszteség θ - ϕ kezdőfeltételtől való függésére a következőt kapjuk,

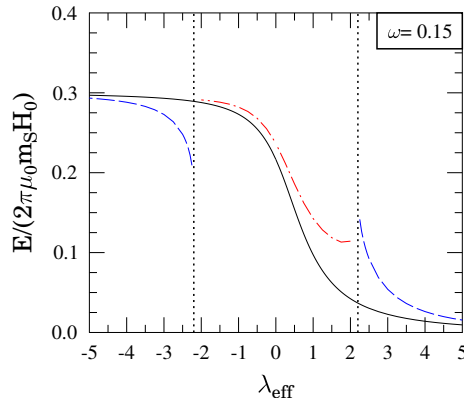
$$E/(1. \text{ kör}) = A \sin(\theta) \cos(\phi) + B \sin(\theta) \sin(\phi), \tag{7.3}$$

ahol az A és B konstansok, melyek az alábbi paraméterektől függnak: ω, ω_L és α_N . Az izotróp esetre érvényes (7.3) képlet olyan 3D ábrát eredményez, amely nagyon hasonlít a 7.1 ábrán bemutatott kis anizotrópia esetére vonatkozó numerikus megoldáshoz. A 7.1 ábrán szemléltetett numerikus megoldás

megfelel a minimális disszipáció elvének, így egyértelmű, hogy nagyobb effektív hőtermelést érhetünk el, ha a rendszer nem stacionárius megoldását tekintjük. Ez az előzetes eredmény ugyan nem határozza meg pontosan az energiaveszteség fokozásához szükséges új módszert, de a 7.1 ábra maximuma és minimuma közötti két nagyságrendi különbség indokolja, hogy olyan gerjesztő teret válasszunk, amely minden ciklusban kimozdítja a mágnesezettség vektort a stacionárius helyzetből.

7.2. Periodikusan váltakozó forgó tér

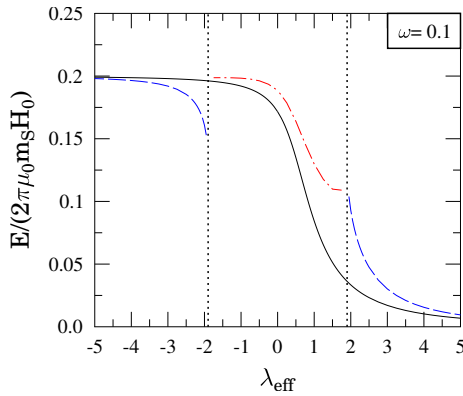
Új ötletként megvizsgáltam az egy ciklusra eső energiaveszteséget olyan külső forgó mágneses tér alkalmazása mellett, melynek forgásiránya periodikusan váltakozik, vagyis minden egyes teljes kör megtétele után a (4.4) egyenletben szereplő ω előjele megváltozik. A forgásirány változtatásával a stacionárius megoldás pozíciója is megváltozik, vagyis $\omega > 0$ esetén az egyenlítő alatt, míg $\omega < 0$ esetén az egyenlítő felett helyezkedik el a vonzó fixpont a pályatérképen. Így a mágneses nanorészecske mágnesezettség vektora mindig elmozdul az éppen eltűnő vonzó fixpontból és tart az újonnan megjelenő irányába. Fontos meg-



7.3. ábra. A periodikusan váltakozó forgó tér alkalmazásával elért energiaveszteséget pontozott-szaggatott (piros) vonallal ábrázoltam. Az ábra paraméterei azonosak a 6.2 ábra paramétereivel.

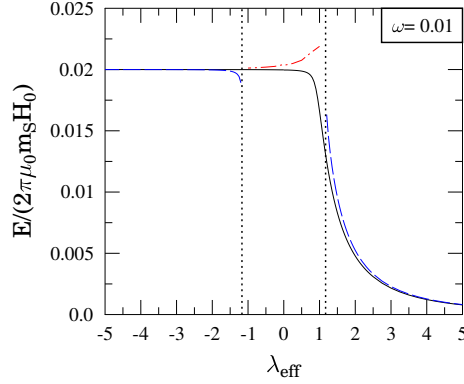
említeni, hogy az anizotrópia kritikus értéke feletti tartományon nem végeztem számításokat, hiszen abban az esetben már több mint egy vonzó fixpont jelenik meg. A forgó tér forgásirányának változtatásával kapott energiaveszteség a 7.3, 7.4 és 7.5 ábrákon látható.

Magas frekvenciákon ($\omega = 0.15$ és $\omega = 0.1$) az anizotrópia előjelétől függetlenül az egy ciklusra eső energiaveszteségben határozott növekedés mutatkozik. A hatás $\lambda_{\text{eff}} > 0$ ("szivar" alakú anizotrópia) esetén nagyobb, hiszen ebben az esetben az $\omega > 0$ és $\omega < 0$ esethez tartozó stacionárius megoldások (vonzó fixpontjai) távolabb helyezkednek el egymástól (lásd 7.3 és 7.4 ábrák).



7.4. ábra. Periodikusan váltakozó forgó tér alkalmazásával a hőtermelés hatékonyabbá tehető, ezt szemlélteti a piros pontozott-szaggatott vonal. Az ábra paraméterei megegyeznek a 6.3 ábra paramétereivel.

Alacsony frekvenciatartományon ($\omega = 0.01$) az új eljárás megváltoztatja az energiaveszteség értékét. A 7.5 ábrán látható, hogy a $\lambda_{\text{eff}} > 0$ esetben az egy ciklusra eső energiaveszteség minden korábban számolt értéknél nagyobbak adódott, beleértve a $\lambda_{\text{eff}} < 0$ esetet is. Például a 7.6 ábra szerint a súrlódási tényező alacsony értékeinél ($\alpha_N = 0.05$ és $\alpha_N = 0.01$) az energiaveszteség monoton nő az anizotrópia értékével, elérve így a 15%-100% terjedő energiaveszteség növekedést az izotróp esethez képest. A növekedés maximuma az anizotrópia kritikus értéke alatt figyelhető meg, közel a λ_{cr} értékhez. Ez a kutatás szempontjából rendkívül pozitív eredmény a 7.6 ábrán van részletezve. Az előzőek alapján tehát azt a megállapítást tehetjük, hogy az egy ciklusra eső energiaveszteség határfoka növelhető, ha



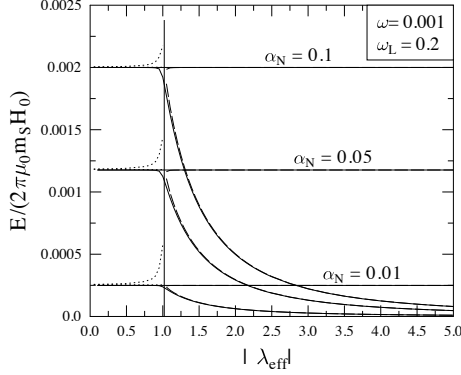
7.5. ábra. A hőtermelés hatékonyságában határozott növekedés látható alacsony frekvencia tartományon, melyet a piros pontozott-szaggatott vonal szemléltet. Az ábra paramétereit azonosak a 6.4 ábra paramétereivel.

- a sűrűlási tényező értéke a $\alpha = 0.1 - 0.3$ tartományba esik, ahol $\alpha_N = \alpha\omega_L = 0.02-0.06$
- az anizotrópia értéke közel esik a kritikus értékhez $\lambda_{\text{eff}} = \lambda_{\text{cr}} \approx 1$
- a külső forgó tér forgásiránya periodikusan váltakozik.

Összegzőként megállapítom, hogy a 7.6 ábrán, amelyen az energia-veszteséget ábrázoltam az anizotrópia függvényében, látható csúcsok megjelenésének kettős oka van: (i) egyrészt azt szemlélteti, hogy nagyobb energiaveszteség érhető el, ha a rendszer nem stacionárius megoldását tekintjük, melyet az újfajta külső tér (egyidejűleg rotáló és alternáló) alkalmazásával érünk el, (ii) másrészt a hatás a $|\lambda_{\text{eff}}| = 1$ érték közelében fokozódik igazán, ahol a rendszer közel van az anizotrópia kritikus értékéhez $|\lambda_{\text{cr}}| \approx 1$.

7.3. Javaslat kísérleti megvalósításhoz, kitekintés

Végezetül, a periodikus irányváltoztatásra képes új típusú gerjesztő tér kísérleti megvalósítására tennék javaslatot. Az előző alfejezetben vizsgált váltakozó forgó tér alkalmazása megkövetelte, hogy minden ciklus végén éles váltás történjen,



7.6. ábra. Az ábrán az energiaveszteséget ábrázoltam az anizotrópia függvényében, alacsony frekvencia tartományon ($\omega = 0.001$).

ami a gyakorlati megvalósítást megnehezíti. A javaslatom, egy a kísérlet szempontjából is preferált külső forgó mágneses térre az alábbi egyenlettel írható fel,

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = H_0 (\cos(2\omega t), \sin(\omega t), \lambda_{\text{eff}} M_z), \quad (7.4)$$

ahol a forgó tér forgásiránya minden félkör megtétele után megváltozik. Egy aerogel mátrixban lévő jól elszeparált és orientált mágneses nanorészecskék tökéletes kísérleti eszközként szolgálnának a (7.4) egyenletben leírtak megvalósítására és a megnövekedett energiaveszteség tesztelésére. A gyakorlati előnye a (7.4) egyenletben leírtaknak, hogy a két különböző, fázisban kötött frekvencia használata (ω és 2ω) nem igényel gyors átkapcsolást.

Az energiaveszteség (fűtési hatékonyság) vizsgálata a (7.4) külső térre folyamatban van. Ugyancsak vizsgálni szeretnénk a termikus fluktuációk hatását (sztochasztikus LLG egyenlet használatával), továbbá a kísérleti megvalósítást megkönnyítő z -irányú statikus tér figyelembevételét.

Összefoglalás

A mágneses nanorészecskékkel végzett "hőtermelést" már gyakorlatban is alkalmazzák orvosi, elsősorban tumorterápiás eljárásokban. A módszer nem új, több évtizedre tekint vissza, sok esetben ígéretes kiegészítő kezelési eljárás, különösen olyan daganatos elváltozások kezelésében, ahol a kemoterápia nehézségekbe ütközik (például a mellhártya vagy az agy tumoros megbetegedései). Az eljárást bizonyos német klinikákon már gyakorlatban is alkalmazzák, mégis eddig komoly akadályba ütközött hatékonyságának elfogadható szintre való emelése. Ennek elsősorban az az oka, hogy a szervezetbe juttatott és megfelelően lokalizált mágneses nanorészecskék gyorsan kiürülnek az emberi szervezetből. Így, ha "hőtermelésre" akarjuk használni azokat, akkor fontos a hatékonyság növelése, például a fizikai paraméterek optimalizálásával.

Értekezésemben ismertetett eredmények egy korábban elkezdett szisztematikus elméleti vizsgálat következő lépéseként tekinthetők, melynek során a mágneses nanorészecskék dinamikáját és az ebből származtatott "hőtermelést" vizsgáltam lineárisan polarizált (rezgő) és cirkulárisan polarizált (forgó) mágneses mező hatására. Arra a kérdésre kerestem a választ, hogy lehetséges-e és ha igen, akkor milyen feltételek mellett tudunk nagyobb "hőtermelést" elérni forgó tér alkalmazásával.

Az értekezés kiindulópontjául szolgáló előzetes eredmények azt mutatták, hogy izotróp mágneses nanorészecskék esetén a rezgő tér alkalmazása a kedvezőbb. A konkrét végrehajtandó feladatom az anizotrópia figyelembevétele volt.

Az értekezésben ismertetett saját eredményeimet a 4 – 7. fejezetekben tárgyaltam. A mágnesezettség dinamikájának vizsgálatára a determinisztikus Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) egyenletet használtam, amit felírtam anizotrópia tér jelenlétében forgó gerjesztő térre és ellenőriztem azt a szakirodalomban is-

mert alakkal összehasonlítva. Bevezettem a pályatérképek használatát stacionárius megoldások vizsgálatára anizotróp esetben.

Az 5. és 6. fejezetben megmutattam, hogy mágneses lázterápia során használható alacsony frekvenciákon, a forgó tér forgási síkjára merőleges anizotrópia tér vagy nem növeli ($\lambda_{\text{eff}} < 0$), vagy kifejezetten csökkenti ($\lambda_{\text{eff}} > \lambda_{\text{cr}}$) az izotróp forgó esethez képest az energiaveszteséget, ha minden esetben a stacionárius megoldásra támaszkodunk.

A 7. fejezetben azt vizsgáltam, hogy kaphatunk-e nagyobb energiaveszteséget (azaz hatékonyabb "hőtermelést"), ha nem stacionárius megoldásokkal számolok. Megmutattam, hogy a minimális disszipáció elvével összhangban, a stacionárius megoldáshoz tartozó energiaveszteség mindig minimális, azaz nem stacionárius esetre számolva hatékonyabb hőtermelés érhető el. Azonban a rendszer nagyon gyorsan (kevesebb, mint negyed ciklus alatt) a stacionárius megoldáshoz konvergál, ezért ha hatékonyabb hőtermelést akarunk elérni, szükség van arra, hogy a rendszert minden ciklusban kimozdítsuk a fixponti helyzetből. Erre javasoltam egy új típusú gerjesztő teret, melyben minden ciklusban megváltoztattam a forgás irányát. Megmutattam, hogy ezen váltakozó irányú forgó tér alkalmazásával minden eddig vizsgált esetben (izotróp-anizotróp, rezgő-forgó) hatékonyabb "hőtermelés" érhető el, ami azonban egy speciális elrendezést kíván: "szivar" alakú anizotrópiát ($\lambda_{\text{eff}} > 0$), ahol az anizotrópia tér iránya merőleges a váltakozó irányú forgó tér forgási síkjára, továbbá értéke a kritikus értékhez közeli ($\lambda_{\text{eff}} \approx \lambda_{\text{cr}}$). Végül javaslatot tettem a periodikusan váltakozó irányú külső forgó tér kísérleti megvalósítására jobban használható alakra.

Vagyis megmutattam, hogy mágneses nanorészecskék alkalmazásával akkor érhető el hatékonyabb "hőtermelés", ha a külső forgó tér forgásiránya periodikusan váltakozik, ahol a fűtési hatékonyság növelése az alábbi feltételekhez kötött:

- **Alkalmazott tér:** az új típusú gerjesztő tér, melynek forgásiránya periodikusan váltakozik, megvalósításához használhatjuk a (4.4) egyenletet, amelyben ω előjele minden teljes kör megtétele után megváltozik, vagy használhatjuk a (7.4) egyenletet, amelyben $\cos(2\omega t)$ minden félkör megtétele után előidézi a kívánt forgási irány változtatást. A hipertermia tartományában a frekvencia $\omega = 1 - 5 \times 10^5$ Hz és az alkalmazott tér amplitúdója $H_0 \approx 0.2 \times 10^5$ A/m.

- **Anizotrópia:** feltételezzük, hogy a mágneses nanorészecskék "szivar" $|\lambda_{\text{eff}}| > 0$ alakanizotrópiával rendelkeznek, melynek értéke a kritikushoz közeli, azaz $\lambda_{\text{eff}} = H_a/H_0 \approx 1$. Ebben az esetben a nanorészecske egyetlen precessziós módussal, azaz stacionárius megoldással rendelkezik. Azonban nagy anizotrópia érték esetén ($\lambda_{\text{eff}} > \lambda_{\text{cr}}$), amelyet a [49] publikációban is vizsgáltak ($\tilde{h} = \lambda_{\text{eff}}^{-1}$) több, mint egy precessziós módus jelenik meg. Anizotrópia vizsgálatánál figyelembe kell venni a nanorészecskék felépítését és az egymással való kölcsönhatásukat [51–53].
- **Orientáció:** az alakanizotrópiáról azt feltételezzük, hogy merőleges az alkalmazott tér forgási síkjára. A gyakorlatban ez a speciális helyzet úgy érhető el, hogy egy erős statikus mágneses mezőt kapcsolunk be, amely az összes nanorészecskét beállítja a megfelelő irányba. A statikus tér hatásának vizsgálata a következő elméleti lépés. Jelen munkában ezt nem vizsgáltam [54–59].
- **Súrlódás:** a dimenziótlan súrlódási tényező $\alpha_N = 0.1 - 0.3$ tartományon belül változik. Ezen a tartományon a fűtési hatékonyság 100% – 15%-os növekedését tapasztaltam [2]. A súrlódási tényező kisebb értékénél tapasztaltam nagyobb energiavesztést.

Summary

The local induction of heat by magnetic nanoparticles has already received direct applications in cancer therapy. The idea of the method is not new, it runs back to decades and it is a promising complementary therapy, in particular in those cases where conventional treatments such as surgery or chemo therapy cannot be applied (e.g., tumorous deceases of the brain). There are medical centres in Germany where magnetic hyperthermia is available as a possible additional cancer treatment in practice, although its efficacy is still not satisfactory. The main reason is that heat transfer by blood flow is very efficient and nanoparticles cannot be localised for sufficiently long enough time due to natural excretion processes of the human body. Thus, it is an important issue to improve the heat generation of magnetic hyperthermia by optimising its physical parameters for example.

The findings of the present thesis can be considered as a part of a systematic study of comparing the dynamics and the heat generation of magnetic nanoparticles under rotating and oscillating external fields. The questions addressed were (i) to clarify whether a more efficient magnetic hyperthermia is possible by a rotating field, (ii) in case of an affirmative answer, to determine the conditions for such a heat generation.

Previous results, serve as starting point for the present work, show that the use of an oscillating external field is more favourable than a rotating one in case of isotropic particles. My task was to take into account anisotropy.

Findings obtained by myself are presented in sections 4-7. In order to describe the dynamics of magnetic moment I used the so called deterministic Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) equation which was generalised for the case where the anisotropy field caused by the shape anisotropy of the nanoparticles is assumed

to be perpendicular to the plane of rotation of the applied external field. I derived the LLG equation for such a configuration and recovered the form known in the literature. Furthermore, I introduced a new technique, i.e., the use of orbit maps, to consider the steady state solutions of the LLG equation in case of anisotropy.

In sections 5 and 6, I demonstrated that at low-frequencies suitable for magnetic hyperthermia, anisotropy (with the above configuration) either does not increase ($\lambda_{eff} < 0$) or decrease definitely ($\lambda_{eff} > 0$) the energy loss per cycle compared to the isotropic case if one relies on the steady state solutions of the LLG equation.

In section 7, I considered whether it is possible to enhance the efficacy of magnetic hyperthermia, i.e., to increase energy losses out of the steady state. I showed that in accordance with the theorem of minimal dissipation, the energy loss has a minimum when it is evaluated at steady states, thus, it increases if it is calculated out of steady states. However, the magnetic moment is shown to converge to the steady state very rapidly, so, enhancement of energy loss is possible only if the magnetisation is removed from this preferred position in every cycle. In order to achieve this I proposed a new type of applied field where the direction of rotation is changed to its opposite in every cycle. I showed that this new applied field produces us the best efficacy among any considered cases (isotropic-anisotropic, oscillating-rotating) but requiring a special orientation: "cigar"-type uniaxial anisotropy ($\lambda_{eff} > 0$) where the anisotropy field is perpendicular to the plane of rotation and its magnitude is around the critical value ($\lambda_{eff} \sim \lambda_c$). Finally, I suggested a possible experimental realisation of this new applied field.

Therefore, I showed that a more efficient heat generation by magnetic nanoparticles is possible if the direction of the rotating external field changes periodically where the conditions towards an enhance of heating efficiency are the followings.

- **Applied field:** A new type of "rotating" applied field is proposed here which has a periodically alternating direction either using the form (4.4) where ω is assumed to change sign in every full circle or using (7.4) where the 2ω of the cosine naturally provides us with the required change in the direction in every half cycle. The frequency is in the range of hyperthermia, i.e. $\omega = 1 - 5 \times 10^5$ Hz and the amplitude of the applied field is $H_0 \approx 0.2 \times 10^5$ A/m.

-
- **Anisotropy** The nanoparticles are assumed to be oblate ellipsoids where the shape anisotropy is moderate, i.e. $\lambda_{\text{eff}} = H_a/H_0 \approx 1$ In this case the nanoparticle has a single precession mode. However, for larger anisotropy, i.e. $\lambda_{\text{eff}} > \lambda_{cr}$ which has been discussed in [49] (where $\tilde{h} = \lambda_{\text{eff}}^{-1}$), more than one precession modes appear. Finally, let us note that regarding the anisotropy, one has to take into account the structure formation and synchronization of interacting magnetic nanoparticles which have been studied e.g., in [51–53] for rotating fields.
 - **Orientation** The anisotropy field is assumed to be perpendicular to the plane where the applied field rotates. In practice, this special situation can be achieved by switching on a strong static field which orients all the nanoparticles. The next theoretical step is the analysis of the effect of the static field. In the present work I have not studied this case [54–59].
 - **Damping** The dimensionless damping constant is chosen to be in the range $\alpha = 0.1 - 0.3$. Accordingly, the enhancement effect shown in this work is 100% - 15% [2]. In case of a smaller damping the enhancement is larger.

Köszönetnyilvánítás

Hálás köszönettel tartozom témavezetőmnek, Dr. Nándori Istvánnak, aki az évek során mindvégig figyelemmel kísérte munkámat, szakmai tanácsaival hozzájárult kutatómunkám sikerességéhez, segített az eredmények értékelésében, bemutatásában és önzetlen támogatást nyújtott abban, hogy ez a dolgozat elkészülhetett.

Köszönöm Dr. Szabó Istvánnak és Dr. de Châtel Péternek a szakmai diskussziókat és értékes tanácsokat, melyek nélkülözhetetlen segítséget nyújtottak a dolgozatomban foglalt eredmények megszületéséhez.

Köszönettel tartozom kollégáimnak, Borbélyné Bacsó Viktóriának, Iszály Zsófiának és Márián István Gábornak, akik lehetővé tették, hogy munkám során mindvégig kellemes, együttműködő, baráti légkörben dolgozhattam. Köszönöm az értekezés végső formába öntése előtti átolvasásban nyújtott segítségüket és hasznos tanácsaikat.

Köszönetemet fejezem ki Dr. Kunné Dr. Sohler Dorottyanak és Zolnai Dórának az ügyintézésben nyújtott segítségükért.

Nem utolsó sorban hálás köszönettel tartozom Családomnak, Férjemnek, akik önzetlen és megértő támogatásukkal lehetővé tették doktori tanulmányaim elvégzését.

Publikációs lista

Referált folyóiratban megjelent közlemények

- I. Nándori, **J. Rácz**, *Magnetic particle hyperthermia: power losses under circularly polarized field in anisotropic nanoparticles*, Physical Review E **86** (2012) 061404.
IF: **2.313**, Független hivatkozás: **14**
 - Zs. Jánosfalvi, J. Hakl, P. de Châtel, Advances in Condensed Matter Physics, Volume 2014 (2014), Article ID 125454.
 - Zs. Jánosfalvi, J. Hakl, K. Vad, arXiv:1212.5810 [cond-mat.mes-hall].
 - T. V. Lyutyy, S. I. Denisov, A. Yu. Polyakov, C. Binns, International Conference Nanomaterials: applications and properties. **1** (2012) 04MFPN16.
 - I. Blazkova, *et al.*, Int. J. Mol. Sci. **14** (2013) 13391-13402.
 - I. Blazkova, *et al.*, Proceedings of International PhD Students Conference. Brno: Mendel University in Brno, MendelNet (2013) 691.
 - T. V. Lyutyy, S. I. Denisov, A. Yu. Peletskyi, and C. Binns, Phys. Rev. B **91** 054425 (2015).
 - Swasti Pandey, Thesis (MS.c), Creighton University, Omaha Nebraska (2015).
 - S. I. Denisov, T. V. Lyutyy, B. O. Pedchenko, and O. M. Hryshko, Phys. Rev. B **94**, 024406 (2016).
 - S. M. Hoque, *et al.*, Contrast Media and Molecular Imaging, Wiley 2016, DOI: 10.1002/cmml.1713
 - Hedyeh Keshtgar, *et al.*, arXiv:1610.01072 [cond-mat.mes-hall].
 - M. M. Beck, C. Lammel, B. Gleich, JMMM **427**,195 (2017)

- D. B. Reeves, Thesis (Ph.D), Dartmouth College, ProQuest Dissertations Publishing, (2015) 3707730.
- D. B. Reeves, book chapter SPRINGER, ISBN: 978-3-662-52779-5, page 121-156, edited by C.S.S.R. Kumar.
- T. V. Lyutyy, O. M. Hryshko, A. A. Kovner, arXiv:1706.00777.
- **J. Rácz**, P. F. de Châtel, I. A. Szabó, L. Szunyogh, I. Nándori, *Improved efficiency of heat generation in nonlinear dynamics of magnetic nanoparticles*
Phys. Rev. E **93**, 012607 (2016).
IF: **2.366**, Független hivatkozás: **4**
- S. I. Denisov, T. V. Lyutyy, B. O. Pedchenko, and O. M. Hryshko, Phys. Rev. B **94**, 024406 (2016).
- A Skumiel, B Leszczyński, M Molcan, M Timko, JMMM **420** (2016) 177.
- A. M. Feron and R. E. Camley, Phys. Rev. B **95**, (2017) 104421.
- T. V. Lyutyy, O. M. Hryshko, A. A. Kovner, arXiv:1706.00777.

Egyéb közlemények

- **J. Rácz**, I. Nándori, J. Halász, P.F. de Châtel, *Anisotropic magnetic nanoparticles-more effective hyperthermia for cancer therapy?*
Acta Phys. Debrecina **47** (2013) 163.
- **J. Rácz**, P.F. de Châtel, I. A. Szabó, I. Nándori, *Enhance heating efficiency of magnetic nanoparticles*
Acta Phys. Debrecina **48** (2014)
- **Rácz Judit**, Nándori István, *Lázterápia mágneses nanorészecskékkal*
Fizikai Szemle **64** (2014) 298.
- **Rácz J.**, Nándori I., *Mágneses nanorészecske hyperthermia*
in Trócsányi Zoltán, Rajta István, Nándori István (szerk.)
Magyar Fizikus Vándorgyűlés-Book of abstracts Debrecen (2013) 98.
- **Rácz J.**, Nándori I., *Mágneses nanorészecske hyperthermia*
Poszter, Magyar Fizikus Vándorgyűlés, Debrecen (2013)

-
- **J. Rácz**, P. F. de Châtel, I. A. Szabó, L. Szunyogh, I. Nándori, *Improved efficiency of heat generation in nonlinear dynamics of magnetic nanoparticles*
Poszter, Magyar Fizikus Vándorgyűlés, Szeged (2016)

Irodalomjegyzék

- [1] I. Nándori, J. Rácz, Phys. Rev. E **86** (2012) 061404.
- [2] J. Rácz, P. F. de Châtel, I. A. Szabó, L. Szunyogh, I. Nándori, Phys. Rev. E **93**, 012607 (2016).
- [3] P. F. de Châtel, I. Nándori, J. Hakl, S. Mészáros and K. Vad, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 124202 (2009).
- [4] A. L. E. Rast, Thesis (Ph.D.) University of Alabama, Birmingham (2011);
- [5] www.vitalmagazin.hu www.emberi-test.iw.hu
- [6] Meldrum et al, Proc. Roy. Soc. B **251** (1993) 231.
- [7] D. Wei, Micromagnetics and Recording Materials, SpringerBriefs in 21 Applied Sciences and Technology, DOI: 10.1007/978-3-642-28577-6-2, (2012)
- [8] R. Hergt, S. Dutz, R. Muller, M. Zeisberger, J. Phys.: Condens. Matter **18** S2919 (2006); R. Hergt, S. Dutz, J. Magn. Magn. Mater. **311**, 187 (2007).
- [9] W. T. Coffey and P. C. Fannin, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 3677 (2002); P. Moroz, S. K. Jones and B. N. Gray, Int. J. Hyperthermia **18**, 267 (2002).
- [10] L. Landau and E. Lifshitz, Phys. Z. Sowjetunion **8**, 153 (1935).
- [11] L. C. R. Néel, Acad. Sci. (Paris) **228**, 664 (1949).
- [12] T. L. Gilbert, Phys. Rev. **100**, 1243 (1956).
- [13] W. F. Brown Jr, IEEE Trans. Magn. **15**, 1196 (1979).

- [14] R. Kikuchi, J. Appl. Phys. **27**, 1352 (1956).
- [15] Z. Z. Sun, X. R. Wang, Phys. Rev. B **73**, 092416 (2006).
- [16] S. I. Denisov, T. V. Lyutyy, P. Hänggi, K. N. Trohidou, Phys. Rev. B **74**, 104406 (2006).
- [17] X. G. Li, D. Y. Geng, H. Meng, P. J. Shang and Z. D. Zhang, Appl. Phys. Lett. **92**, 173117 (2008).
- [18] Yu. L. Raikher and V. I. Stepanov, Phys. Rev. E **83**, 021401 (2011).
- [19] Q. A. Pankhurst, J. Connolly, S. K. Jones, and J. Dobson, J. Phys. D: Appl. Phys. **36**, R167 (2003);
- [20] M. Ferrari, Nat. Rev. Cancer **5**, 161 (2005);
- [21] S. Laurent, D. Forge, M. Port, A. Roch, C. Robic, L. Vander Elst, and R. N. Muller, Chem. Rev. **108**, 2064 (2008);
- [22] J. D. Alper, Thesis (Ph.D.), Massachusetts Institute of Technology (2010);
- [23] Quian Wang and Jing Liu, Fundamental Biomedical Technologies **5**, 567-598 (2011), Springer Science+Business Media: *Intercellular Delivery* (ed. A. Prokop);
- [24] D. E. Bordelon, C. Cornejo, C. Grüttner, F. Westphal, T. L. DeWeese, R. Ivkov, J. Appl. Phys. **109**, 124904 (2011);
- [25] A. Arakaki, K. Shibata, T. Mogi, M. Hosokawa, K. Hatakeyama, H. Gomyo, T. Taguchi, H. Wake, T. Tanaami, T. Matsunaga and T. Tanaka, Polymer Journal **44**, 672 (2012).
- [26] I. S. Poperechny, Yu. L. Raikher, and V. I. Stepanov, Phys. Rev. B **82**, 174423 (2010)
- [27] P. Cantillon-Murphy, L.L. Wald, E. Adalsteinsson, M. Zahn, JMMM **322**, 727 (2010).
- [28] O. O. Ahsen, U. Yilmaz, M. D. Aksoy, G. Ertas, E. Atalar, JMMM **322**, 3053 (2010).
- [29] S. Giordano, Y. Dusch, N. Tiercelin, P. Pernod, V. Preobrazhensky, Eur. Phys. J. B **86**, 249 (2013).

-
- [30] Giorgio Bertotti, Claudio Serpico, and Isaak D. Mayergoyz, Phys. Rev. Lett. **86**, 724 (2001).
- [31] S. I. Denisov, T. V. Lyutyy, P. Hänggi, Phys. Rev. Lett. **97**, 227202 (2006).
- [32] S. I. Denisov, T. V. Lyutyy, C. Binns, P. Hänggi, JMMM **322**, 1360 (2010).
- [33] S. I. Denisov, A. Yu. Polyakov, and T. V. Lyutyy, Phys. Rev. B **84**, 174410 (2011).
- [34] C. Scherer, H.G. Matuttis, Phys. Rev. E **63** 011504 (2000);
- [35] J. Embs, H. W. Müller, C. Wagner, K. Knorr, and M. Lücke, Phys. Rev. E **61**, R2196 (2000);
- [36] B. U. Felderhof, Phys. Rev. E **62**, 3848 (2000);
- [37] M.I. Shliomis, Phys. Rev. E **64**, 063501 (2001);
- [38] B. U. Felderhof, Phys. Rev. E **64**, 063502 (2001);
- [39] H.W. Müller and M. Liu, Phys. Rev. E **64**, 061405 (2001);
- [40] J. P. Embs, S. May, C. Wagner, A. V. Kityk, A. Leschhorn, and M. Lücke, Phys. Rev. E **73**, 036302 (2006);
- [41] A. Leschhorn, M. Lücke, C. Hoffmann and S. Altmeyer, Phys. Rev. E **79**, 036308 (2009).
- [42] M.I. Shliomis, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **61**, 2411 (1971) [Sov. Phys. JETP **34**, 1291 (1972)];
- [43] M.I. Shliomis, Usp. Fiz. Nauk **112**, 427 (1974) [Sov. Phys. Usp. **17**, 153 (1974)];
- [44] R.E. Rosensweig, Ferrohydrodynamics, Cambridge University Press, Cambridge, (1985);
- [45] M.I. Shliomis, Phys. Rev. E **64**, 060501(2001);
- [46] M. V. Petrova, *et al.*, Applied Magnetic Resonance **41**, 525 (2011).
- [47] J. Rácz, I. Nándori, J. Halász, P. F. de Châtel, ACTA PHYSICA DEBRECINA XLVII, **163** (2013).

- [48] L-M. He, Commun. Theor. Phys. **55** (2011) 537.
- [49] T. V. Lyutyy, S. I. Denisov, A. Yu. Peletskyi and C. Binns, Phys. Rev. B. **91**, 054425 (2015).
- [50] M. Johannsen, U. Gneveckow, K. Taymoorian, C.H. Cho, B. Thiesen, R. Scholz, N. Waldöfner, S.A. Loening, P. Wust and A. Jordan, Actas Urol. Esp. **31** (2007) 660.
- [51] J. E. Martin, R. A. Andreson, C. P. Tigges, J. Chem. Phys. **108**, 7887 (1998)
- [52] J. E. Martin, R. A. Andreson, C. P. Tigges, J. Chem. Phys. **110**, 4854 (1999);
- [53] S. Jäger and S. H. L. Klapp, Soft Matter **7**, 6606 (2011).
- [54] A. Hajdu, *et al.*, Colloids and Surfaces B: Biointerfaces **94**, 242 (2012);
- [55] I. Y. Toth, *et al.*, Langmuir **28**, 16638 (2012);
- [56] M. Szekeres, *et al.*, Int. J. Mol. Sci. **14**, 14550 (2013);
- [57] I. Y. Toth, *et al.*, Langmuir **30**, 15451 (2014);
- [58] M. Szekeres, *et al.*, Nanomedicine and Nanotechnology, **6**, 1000252 (2015);
- [59] I. Y. Toth, *et al.*, JMMM **380**, 168 (2015).