

УДК 621.391.82

И. Р. Пархомей, А. Р. Пархомей, О. Н. Отыченко

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НАНОМАГНЕТИТА НА СВОЙСТВА БИОГЕННОГО ГИДРОКСИАПАТИТА

Аннотация: Целью данной работы является исследование с помощью моделирования нестационарного процесса влияния ферромагнитных добавок на физико-химические параметры материала, полученного на основе биогенного гидроксиапатита, легированного наномангнетитом. Условия проведения моделирования определены количеством легирующей добавки, исходя из медицинского назначения создаваемого биоматериала, и в исследуемых образцах составляло не более 2 % масс. Модель учитывает те ограничения, что исследуемые материалы имеют вид порошка или спрессованных таблеток были получены при температуре термообработки ниже точки Кюри для оксида железа в различных газовых средах. Для изучения свойств материала выполнялось моделирование изменения микроструктуры образца, а также моделировались особенности физиологической среды.

Ключевые слова: гидроксиапатит, наномангнетит, легирование, микроструктура, фазовый состав.

Введение

Весьма актуальной проблемой является моделирование поведения лечебных препаратов для направленного введения в определённую точку организма, обеспечения пролонгации их действия с оптимизацией биологических и физико-химических свойств. К материалам, на основе которых можно создавать нужные композиции, относится гидроксиапатит (ГА). Он является составной частью минералогического состава костных тканей, поэтому практически не отторгается другими тканями организма при внедрении в качестве имплантата. Таким образом, ГА возможно использовать для введения медицинских препаратов в проблемные зоны костных тканей человека [1]. В литературе [1, 4] имеются отдельные сведения о том, что в присутствии ферромагнитных легирующих добавок в ГА можно контролировать дозировку препарата в необходимую область, а также скорость биорегенерационных процессов в организме под воздействием магнитного поля [5]. Существует также не до конца выясненная взаимосвязь между ионами железа и кальция, участвующими в процессах обмена веществ в живых организмах. Известно, что недостаток железа может привести к существенному недостатку кальция в составе кости и развитию вследствие этого тяжёлой формы

остеопороза [1]. В связи с этим представляет интерес создания многомерной модели влияния наличия различных составляющих в биоматериалах, заменяющих дефектные участки кости, на характер их растворения в физиологических средах как предварительный этап выяснения взаимосвязи между ионами компонента в процессах обмена веществ [1, 2, 4]. Создание такого рода многомерной модели ускорит процесс уточнения рецептуры вещества, а также позволит сократить время на проведение полунатурных исследований.

Целью данной работы является разработка многомерной модели основных физико-химических свойств и параметров материала на основе биогенного ГА, легированного наномангнетитом, после его термообработки в различных средах. Количество легирующей добавки, исходя из медицинского назначения создаваемого биоматериала, в исследуемых образцах составляло не более 2 % масс.

Условия и ограничения моделирования

Исследуемые образцы на основе гидроксиапатита биологического (БГА) происхождения рассматриваются в модели в виде порошков и образцов определённой формы при температуре термообработки меньше точки Кюри для оксида железа в различных газовых средах, а именно, в вакуумной, углекислотной, и на воздухе при $t = 500$ °С на протяжении двух часов. Сведения о наномангнетите с удельной поверхностью 48 м²/г и размером частиц 50 – 60 нм получены методом рентгенофазового анализа. Микроструктура материалов была исследована с использованием сканирующего микроскопа *Jeol Superprobe 733*. Взаимодействие образцов рассматривается в среде изотонического физиологического раствора NaCl 0,9 % масс. на 2, 5 и 7 при температуре $36,5$ – 37 °С.

Результаты моделирования

Фазовый состав исследуемых порошковых композитов анализировали с помощью многомерной топологической программной среды КОМПАС-ГРАФИК [3]. Кривые интенсивности линий отражения для легированных и нелегированных материалов представлены на рис. 1. По анализу дебаеграмм моделируемых материалов было установлено наличие основных линий отражения для БГА в диапазоне 2θ 36 – 38° . Определены также линии в диапазоне 34 – 39° , как линии характерные для наномангнетита.

Микроструктура и распределение наномангнетита некоторых образцов описана в [1]. Из анализа микрофотографий полученных образцов [1, 5] установлена сложная микроструктура материала, состоящая из агломератов отдельных зёрен

и пор разного размера. Размер агломератов находится в пределах от 0,3 до 2 мкм, что достаточно точно возможно учесть в модели. Из [1, 5] следует, что распределение оксида железа довольно равномерное. Образцы, как в присутствии легирующей добавки, так и без неё, при различных условиях термообработки имеют схожую микроструктуру. Значения общей пористости спрессованных таблеток и порошков, полученных при термообработке в вакууме, представлены на рис. 2.

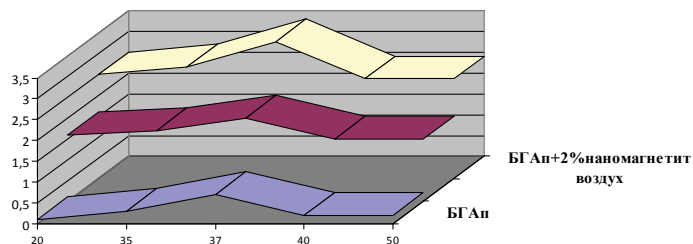


Рис. 1. Диаграммы интенсивности линий отражения легированных и нелегированных материалов, полученных после термообработки в различных средах.

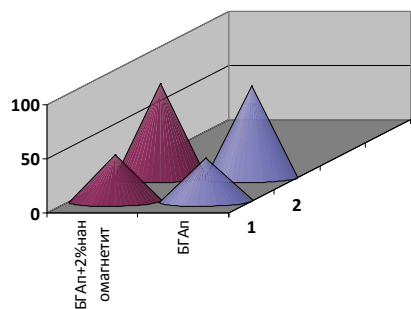


Рис. 2. Пористость образцов БГА и БГА + 2 % наномангнетит после термообработки в вакууме

Модельная диаграмма на рис. 2 показывает, что общая пористость для образцов в виде таблеток составляет 42,30 % для БГА и 44,84 % для БГА + 2 % наномангнетит, а для порошков – 92,53 % для БГА и 93,34 % для БГА + 2 % наномангнетит. При этом открытая пористость для таблеток имеет значения: 40,8 % (БГА) и 42,58 % (БГА + 2 % наномангнетит). Незначительную разницу пористости

между легированными и нелегированными образцами можно объяснить близкими значениями удельной поверхности порошков, которая находилась в пределах 5,35–5,45 м²/г. Из этого следует, что наличие указанного количества добавок магнетита практически не влияет на микроструктуру и пористость материала.

Моделирование намагниченности. Результаты моделирования удельной намагниченности легированных образцов с различной термообработкой представлены на рис. 3. Модель показала, что обработка образцов на воздухе приводит к частичному переходу наномангнетита Fe₃O₄ в Fe₂O₃, в результате чего удельная магнитная восприимчивость несколько снижается [5]. Как следует из результатов моделирования по определению удельной магнитной восприимчивости исследованных материалов, величина её зависит преимущественно от условий спекания образцов. Моделирование растворимости. Для изучения поведения легированного материала в организме человека были проведены опыты в модельных жидкостях путём виртуального погружения в раствор на срок до 7 суток.

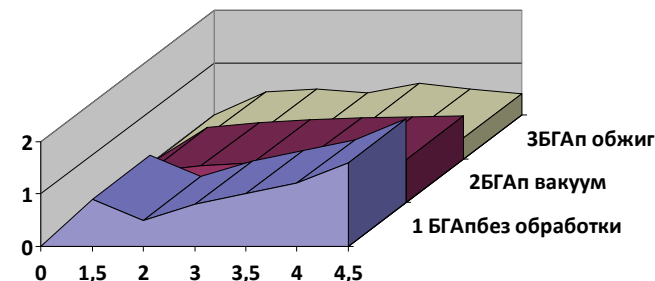


Рис. 3. Удельная намагниченность легированных материалов при термообработке в различных средах:

- 1 – БГА + 2 % Fe₃O₄ без термообработки;
- 2 – БГА + 2 % Fe₃O₄ в вакууме при $t = 500$ °С;
- 3 – БГА + 2 % Fe₃O₄ обжиг в воздушной среде

Данные по скорости растворимости порошков в физиологическом растворе представлены на рис. 4 и 5. Как видно из рис. 4, максимальная скорость растворимости для образца без термообработки достигается уже на 2 сутки, а для образцов с термической обработкой – на 5-е. При этом меньшей скоростью растворимости обладает материал БГА + 2 % Fe₃O₄ с термообработкой в вакууме.

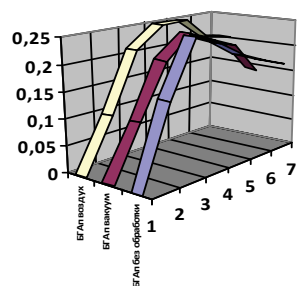


Рис. 4. Скорость растворимости порошков:

- 1 – БГА+2 % Fe_3O_4 без термической обработки;
- 2 – БГА+2 % Fe_3O_4 в вакууме, при $t = 500^\circ\text{C}$;
- 3 – БГА+2 % Fe_3O_4 в воздушной среде при $t = 500^\circ\text{C}$

На основании данных моделирования можно сделать вывод о том, что термообработка влияет как на достижение максимальных значений скорости растворимости в физрастворе, так и на величину растворимости. Кроме того, было проведено моделирование скорости растворимости для БГА +2 % Fe_3O_4 без термической обработки в SBF (*Simulated Body Fluid*) после 7 суток пребывания в растворе. Для данного образца скорость растворимости составила 0,26 % масс./сутки, что значительно выше, чем для образцов в физиологическом растворе. Было проведено также моделирование растворимости образцов в виде таблеток после термической обработки в вакууме, при $t = 500^\circ\text{C}$ после 7 суток пребывания в физ. растворе, результаты которых представлены на рис. 5. Как видно из результатов моделирования, легированный материал обладает большей скоростью растворимости.

Учитывая результаты, полученные в [4], следует обратить внимание на использование внешнего облучения электромагнитным полем для ускорения процесса растворимости. Особое внимание заслуживает подбор характеристик облучения по частоте и фазе, что позволит достичь резонансного воздействия. Это, в свою очередь, существенно снизит мощность, затрачиваемую на формирование сигнала облучения.

Это может быть связано с каталитическим действием легирующей добавки, которая и повышает растворимость БГА за счёт частичного перехода самой до-

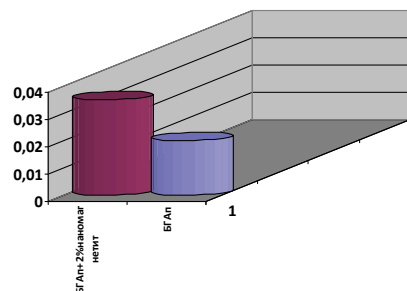


Рис. 5. Скорость растворимости таблеток в физиологическом растворе в течение 7 суток

бавки в физ. раствор. По сравнению с образцами в виде порошка скорость растворимости таблеток снижается примерно в 5–10 раз. Значительное изменение скорости растворимости материалов связано с различной пористостью [6,7].

Выводы

Исходя из медицинского назначения создаваемого биоматериала, выбрано количество легирующей добавки в исследуемых образцах, которое не превышало 2 % масс., о чём свидетельствуют данные многомерного моделирования, и совпадает с подобными результатами рентгеновского анализа. Приемлемая сходимость результатов моделирования с аналогичными экспериментальными данными позволяет утверждать о возможности применения многомерных моделей программного комплекса КОМПАС – ГРАФИК для исследований физико-химических процессов. Этим достигается существенное снижение затрат на проведение полунатурного эксперимента и сокращается время обработки результатов.

Комплексный анализ многомерной модели позволил установить, что наличие легирующей добавки и вид термообработки практически не влияют на структуру полученных образцов, но незначительно повышают пористость, что следует из анализа их микроструктуры. Незначительное уменьшение удельной намагниченности образца, обработанного в воздушной среде, связано с переходом магнетита (Fe_3O_4) в гематит (Fe_2O_3). Скорость растворения в физиологическом растворе для порошковых материалов значительно выше, чем для компактных образцов и достигает максимальных значений на 2–5 сутки. По результатам моделирования, оптимальным является материал, прошедший термообработку в вакууме при давлении $4 \cdot 10^{-5}$ мм рт. ст. и температуре 500°C , поскольку такой режим термообработки позволяет сохранить магнитные свойства легирующей добавки и избежать фазового перехода магнетита в гематит.

Список использованных источников

1. Куда А. А. Исследование влияния наномангнетита на свойства *in vitro* биогенного гидроксипатита. /А. А. Куда, О. Н. Отиченко, А. Р. Пархомей, Н. Д. Пинчук, И. В. Уварова // Журнал «Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии».К. : НАНУ, 2013 г. – Т. 11, №4. – С. 797–804.
2. Крючков Ю. Н. Моделирование пористой структуры и массопереноса в порошковых проницаемых материалах с учетом нелинейных структурных эффектов. / Ю. Н. Крючков // Монография. – К. : НАНУ, 1996 г. – С. 216.

3. Лобур М. В. Комп'ютерна графіка в САПР КОМПАС-3D. / М.В. Лобур // Львів : Львівська політехніка, 2012 р. – С. 232.
4. Толюпа С. В. Резонансні методи отримання і використання інформації в радіотехнології. / І. Р. Пархомей, В. А. Дружинін, В. С. Наконечний // Монографія. – Видавництво «Логос». – К. : ДУТ, 2013 р. – 146 с.
5. Отиченко О. М. Вплив попередньої магнітної обробки на динаміку розчинності композиційного гідроксиапатитного матеріалу / О. М. Отиченко, Н. Д. Пінчук, О. Р. Пархомей та ін. // Журнал «Наноструктурное материаловедение». – К. : НАНУ, 2014 р. – № 2. – С. 45–52.
6. Отиченко О.М. Вплив фазового складу та дисперсності фаз на біохімічні властивості легованого наномангнетитом гідроксиапатиту / О. М. Отиченко, О. Р. Пархомей, І. В. Уварова // Журнал «Наноструктурное материаловедение». – К. : НАНУ, 2015 р. – № 1. – С. 86–92.
7. Уварова І. В., Максименко В. Б. Біосумісні матеріали для медичних виробів : навч. посібн. – К. : КіМ, 2013. – 231 с.

УДК 621.391.68

І. Р.Пархомей, Н. В.Цьопа, Є. О. Батрак

ОБҐРУНТУВАННЯ ПАРАМЕТРІВ АНТЕН СИСТЕМ АВТОМАТИЧНОГО РАДІОМОНІТОРИНҐУ

Анотація: Підвищення ефективності радіолокації радіолокаційних об'єктів зі штучно зниженою ефективною площею віддзеркалення у значній мірі ускладнюється інформаційною невизначеністю щодо параметрів руху об'єкту. В умовах неможливості усунення інформаційної невизначеності доцільно застосовувати засоби штучного інтелекту, які мають здатність накопичувати узагальнювати та використовувати знання з метою оптимізації керування. Для синтезу систем керування зі штучним інтелектом використовуються апарат нечіткої математики, в основі якого лежить теорія нечітких множин. Припустивши що система керування антени також працює в умовах неінформаційної невизначеності, можна провести її удосконалення. Оскільки для контуру керування антени важлива не стільки пеленгаційна помилка скільки швидкість її зміни у функції кутів пеленгу об'єкту – тобто крутизна пеленгаційної помилки – то для компенсації її впливу необхідне введення функції (програми) компенсації паразитного зворотного зв'язку. Крім функції врахування компенсації пеленгаційної помилки в антенно-хвильових системах вводиться структурна компенсація, яка визначає зворотній знак паразитного зв'язку. Сполучення функціональної і структурної компенсації дозволяє забезпечити стійкий процес супроводження радіолокаційних об'єктів із допустимою динамічною помилкою тобто підвищити їх ефективність.

Ключові слова: ефективна площа віддзеркалення, система керування антеною, антенно-хвильова система, пеленгаційна помилка, інформаційна невизначеність.

Вступ

Один із шляхів підвищення ефективності радіолокації радіолокаційних об'єктів зі штучно зниженою ефективною площею віддзеркалення (ЕПВ) є оптимізація процесу їх супроводження. Вирішення цієї проблеми у значній мірі ускладнюється інформаційною невизначеністю щодо параметрів руху об'єкту головним чином за рахунок поглинання радіосигналу та складності технічної реалізації отриманих оптимальних алгоритмів керування в системі керування антеною (СКА).

© І. Р.Пархомей, Н. В.Цьопа, Є. О. Батрак