

# ОЦІНКА ПОХИБОК ПРИ РОЗРАХУНКУ ФУНКЦІЙ РОЗПОДІЛУ ЛОКАЛЬНИХ ПОЛІВ ЦИЛІНДРИЧНИХ ПАРАМАГНІТНИХ ЧАСТИНОК

**Ю. В. Яковенко, Ю. Б. Шевченко, В. В. Тришин**

*Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ*

Останніми роками деякі лабораторії розробили нові перспективні колоїдні системи для тераностики, які містять парамагнітні іони. Діагностична цінність цих наносистем визначається ефективністю їх впливу на релаксацію ядер оточуючих тканин по механізму прямої диполь-дипольної (dd) взаємодії. У попередніх дослідженнях [1] нами було вивчено ядерну релаксацію під впливом таких дисперсних частинок і введено функцію розподілу  $D_p(h)$ , яка описує просторовий розподіл середніх квадратів локальних магнітних полів, створених парамагнітною частинкою певної форми. Функція  $D_p(h)$  залежить від форми та розмірів частинки, а також від відстані  $h$  до її латеральної поверхні. Якщо відомі концентрація  $\sigma_\mu$  парамагнітних іонів з ефективними магнітними моментами  $\mu_{ef}$ , а також форма та розміри частинки, то  $D_p(h)$  цілком визначає вплив частинки на релаксацію ядер оточення. Раніше нами було отримано формули  $D_p(h)$  для частинок різної форми. При екстремально малих  $h$  (набагато менших за розміри частинок) формули  $D_p(h)$  для всіх типів частинок набувають вигляду  $D_0 = \frac{\pi}{6} \frac{1}{h^3}$ . Для сферичних частинок було отримано аналітичні вирази, які є точними при всіх радіусах частинок і відстанях  $h$ . Для циліндричних та пластиноподібних частинок формули  $D_p(h)$  отримано формули для граничного випадку, коли  $h$  є набагато менше за всі розміри частинки або коли довжина циліндра  $L$  або два лінійні розміри пластини є нескінченними.

Мета даної роботи – оцінити неточність при розрахунку  $D_p(h)$  циліндра скінченної довжини. Ми оцінюємо лише поля парамагнітних циліндрів з  $L > R$ , де  $R$  – радіус циліндра. У роботі [1] було отримано такі співвідношення:

$$D_{cyl}(b, L) = \int_{-L}^{+L} dz \iint_{C_R} dx dy [(x - R - h)^2 + y^2 + z^2]^{-3}, \quad (1)$$

$$D_{cyl}(b, L) = \frac{3\pi}{8h^3} \Phi(b, \lambda), \quad (2)$$

$$\Phi(b) = \Phi(b, \infty) = \iint_{C_{1/b}} d\xi d\eta [(1 + 1/b - \xi)^2 + \eta^2]^{-5/2} \quad (\text{при } L \rightarrow \infty), \quad (3)$$

$$\Phi_0(b) \approx \frac{4}{9} - \frac{b}{3} + \frac{b^2}{4} - \frac{b^3}{2} \quad (\text{при малих } b), \quad (4)$$

$$D_{cyl} \approx \frac{\pi}{6h^3} \quad (b \rightarrow 0), \quad (5)$$

$$\Phi_\infty(b) \approx \frac{\pi b^3}{\beta^5} \left(1 - \frac{25}{8\beta^2}\right) \quad (b \rightarrow \infty), \quad (6)$$

де  $b = h/R$ ,  $\lambda = L/R$ ;  $\xi = x/h$ ,  $\eta = y/h$ ,  $x$  та  $y$  – декартові координати.

Функцію  $\Phi(b)$  було розраховано чисельно (було використано функцію `quad` з бібліотеки `scipy`). На рис. 1 видно, що ані апроксимант  $\Phi_0(b)$  – рис. 1(a), ані апроксимант  $\Phi_\infty(b)$  – рис. 1(b) не є задовільними для  $b \sim 0,5 - 1,5$ . З цієї причини ми наближаємо розраховану функцію  $\Phi(b)$  апроксимацією Паде, яка враховує старші члени асимптотик (4) та (6):

$$\Phi_1(b) \approx \frac{4}{9} \frac{1 + \alpha b}{1 + \beta_1 b + \beta_2 b^2 + 4\alpha / (9\pi) b^3}. \quad (7)$$

Для  $b \approx 0$  отримуємо  $\Phi_1(b) \approx 4/9$ , що узгоджується з рівнянням (4). Для  $b \approx \infty$ , рівняння (7) дає  $\Phi_1(b) \approx \pi/b^2$ , що узгоджується з рівнянням (6). Використовуючи функцію `curve_fit` бібліотеки `scipy`, ми знайшли  $\alpha = 0,04$ ,  $\beta_1 = 0,74$  та  $\beta_2 = 0,17$ . Відносна похибка цього апроксиманта,  $\chi(b) = [\Phi_1(b) - \Phi(b)]/\Phi(b)$ , не перевищує 0,7%.

Було досліджено застосовність рівняння (7) для скінченної довжини циліндра ( $L$ ). Після заміни змінних з рівнянь (1) та (2) отримуємо

$$\Phi(b, \lambda) = \frac{2b^3}{3\pi} \iint_{C_1} \frac{d\xi d\eta}{\alpha^5} \left[ 3 \arctan(\Lambda) + \frac{3\Lambda^3 + 5\Lambda}{(1 + \Lambda^2)^2} \right] \quad (8)$$

де  $\tilde{\xi} = x/R$ ,  $\tilde{\eta} = y/R$ ,  $\alpha = [(1 + b - \tilde{\xi})^2 + \tilde{\eta}^2]^{1/2}$ ,  $\Lambda = \lambda/\alpha$ , та обчислюємо інтеграл у цьому рівнянні чисельно (тут ми також використали функцію `quad` з бібліотеки `scipy`). Як і слід було очікувати, скінченна довжина циліндра впливає на  $\Phi(b, \lambda)$  на великих відстанях  $b$ , див. рис. 3. На рис. 4 показано  $\chi(b, \lambda) = [\Phi_1(b) - \Phi(b, \lambda)]/\Phi(b, \lambda)$ , відповідні відносні похибки апроксиманта  $\Phi_1(b)$ . З рис. 4 робимо висновок, що наближення працює досить добре, коли  $h < d/3$ , де  $d$  – відстань до найближчої основи циліндра. Поблизу основ циліндра всі результати, отримані для нескінченного циліндра, не застосовні.

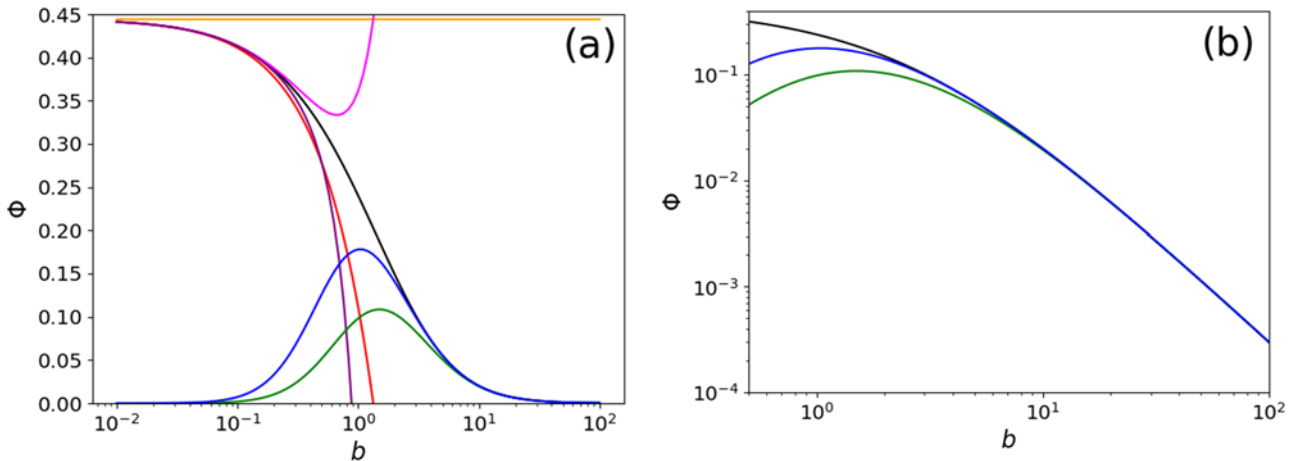


Рис.1. (а) – Розрахована чисельно функція  $\Phi(b)$ , див. (3), і його апроксиманти  $\Phi_0(b)$  (див. (4)), та  $\Phi_\infty(b)$  (див. (6)), а також апроксимації, отримані шляхом усічення  $\Phi_0(b)$  та  $\Phi_\infty(b)$ . Позначення: чорна крива,  $\Phi(b)$ ; помаранчева, константа  $4/9$ ; червона,  $4/9 - b/3$ ; бузкова,  $4/9 - b/3 + b^2/4$ ; фіолетова,  $\Phi_0(b)$ ; зелена,  $\pi b^3/\beta^5$ ; синя,  $\Phi_\infty(b)$ . (б) –  $\Phi(b)$  та  $\Phi_\infty(b)$  при великих значеннях  $b$ .

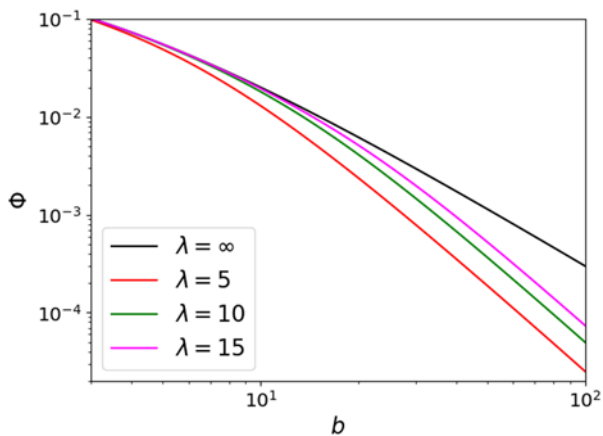


Рис. 2. Функції  $\Phi(b, \lambda)$  для різних  $\lambda$ .

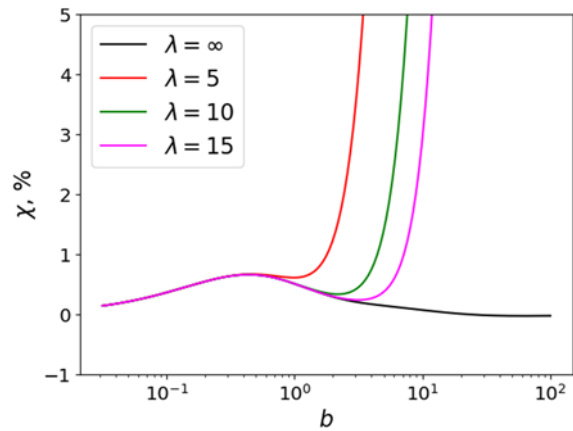


Рис. 3. Відносна похибка апроксиманта  $\Phi_1(b)$  для різних  $\lambda$ .

1. Yu.B. Shevchenko, T.M. Malysheva, Yu.V. Yakovenko, V.V. Tryshyn, Abstracts of the XXIX Yearly Scientific Conference of the Institute for Nuclear Research, Kyiv, Ukraine, 26–30 September 2022 (Kyiv, 2022), pp. 231–232.