

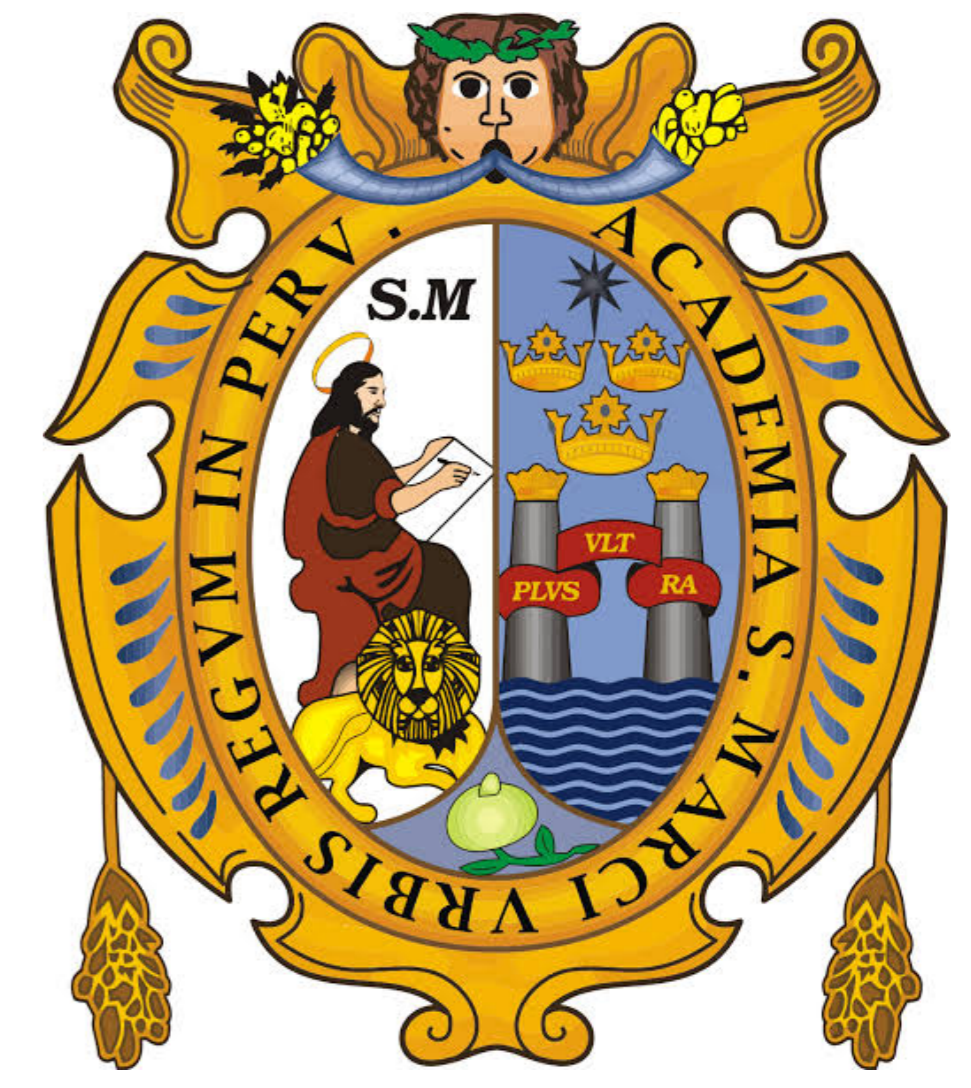
# Incremento de la hipertermia magnética en nanocadenas de nanopartículas de magnetita $Fe_3O_4$

J. Gomez Quispe<sup>1,2\*</sup>, C. Rojas Ayala<sup>1</sup>, J. Rojas Tapia<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Ap. Postal 14-0149, Lima, Perú.

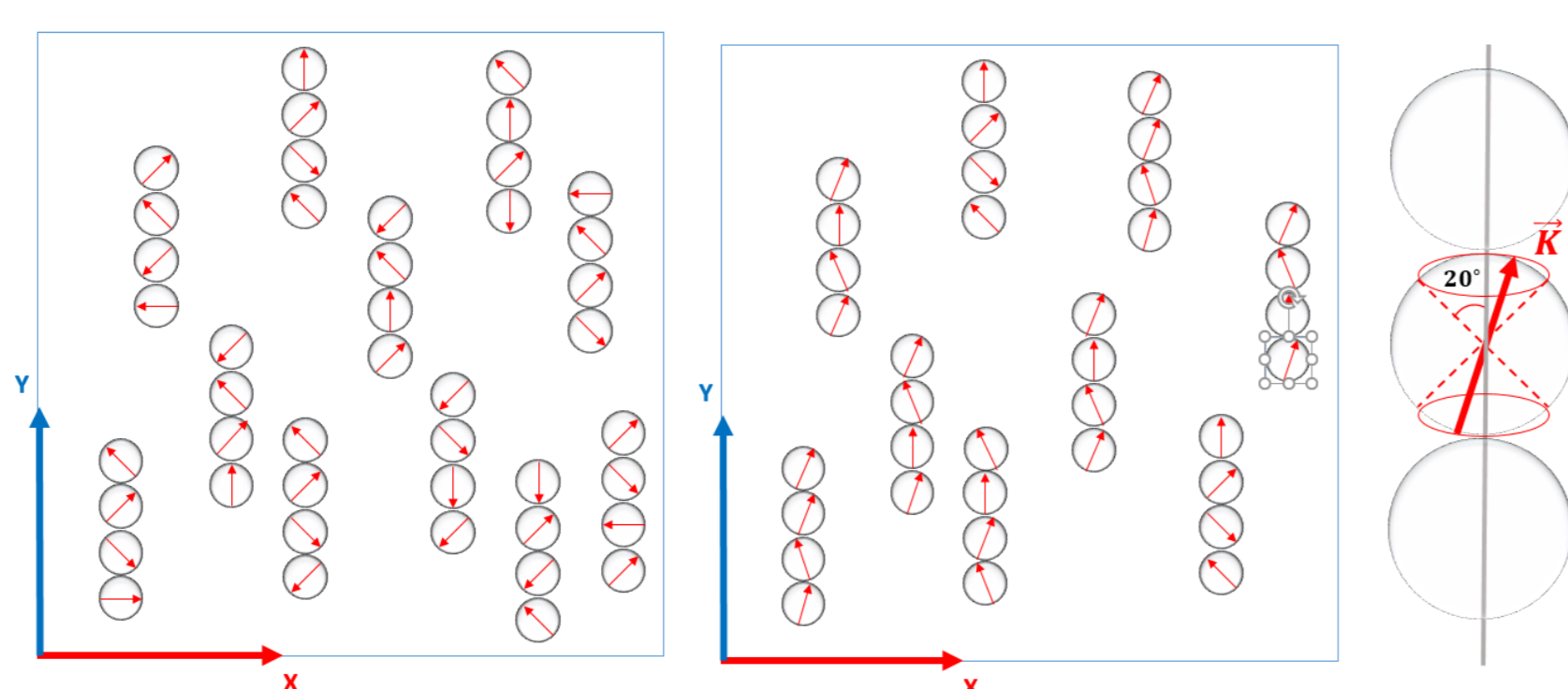
<sup>2</sup>Centro para las ciencias humanas y naturales, Universidade Federal do ABC, Santo André 09210-580, SP, Brazil

Correspondencia para: [juan.gomez10@unmsm.edu.pe](mailto:juan.gomez10@unmsm.edu.pe)



## INTRODUCCIÓN

Las nanopartículas (NPs) magnéticas son ampliamente investigadas por sus grandes potenciales aplicaciones en el campo médico, como el transporte de fármacos, resonancia magnética, y tratamiento de hipertermia magnética [1]. La hipertermia magnética (HM) consiste en la destrucción de células cancerígenas mediante calor, el cual es disipado por las NPs. Existen tres mecanismos para la generación de calor: relajación de Néel, relajación de Brown, y pérdidas por histéresis, las cuales ocurren de manera combinada. Sin embargo, para NPs ferromagnéticas que poseen un solo dominio magnético (macroespín), el mecanismo de generación de calor dominante es la pérdida por histéresis. El área histéresis representa la energía de un sistema magnético, el cual puede ser transferido en forma de calor. La tasa de absorción específica (SAR) es una medida que cuantifica esta capacidad de energía disipada por un sistema de NPs magnéticas. El ensamblaje en forma de nanocadenas (NCDs), puede incrementar la capacidad de calentamiento de las NPs, debido al efecto de la interacción dipolar y anisotropía [2]. En este trabajo, se utiliza el método Monte Carlo-Metrópolis, para calcular el SAR a bajas temperaturas  $T = 5K$ , de un sistema de NCDs conformados por NPs esféricas de magnetita. Se considera diferentes concentraciones, y distribución de ejes de anisotropía de manera aleatoria y restringida en un cono sólido de  $20^\circ$  grados.



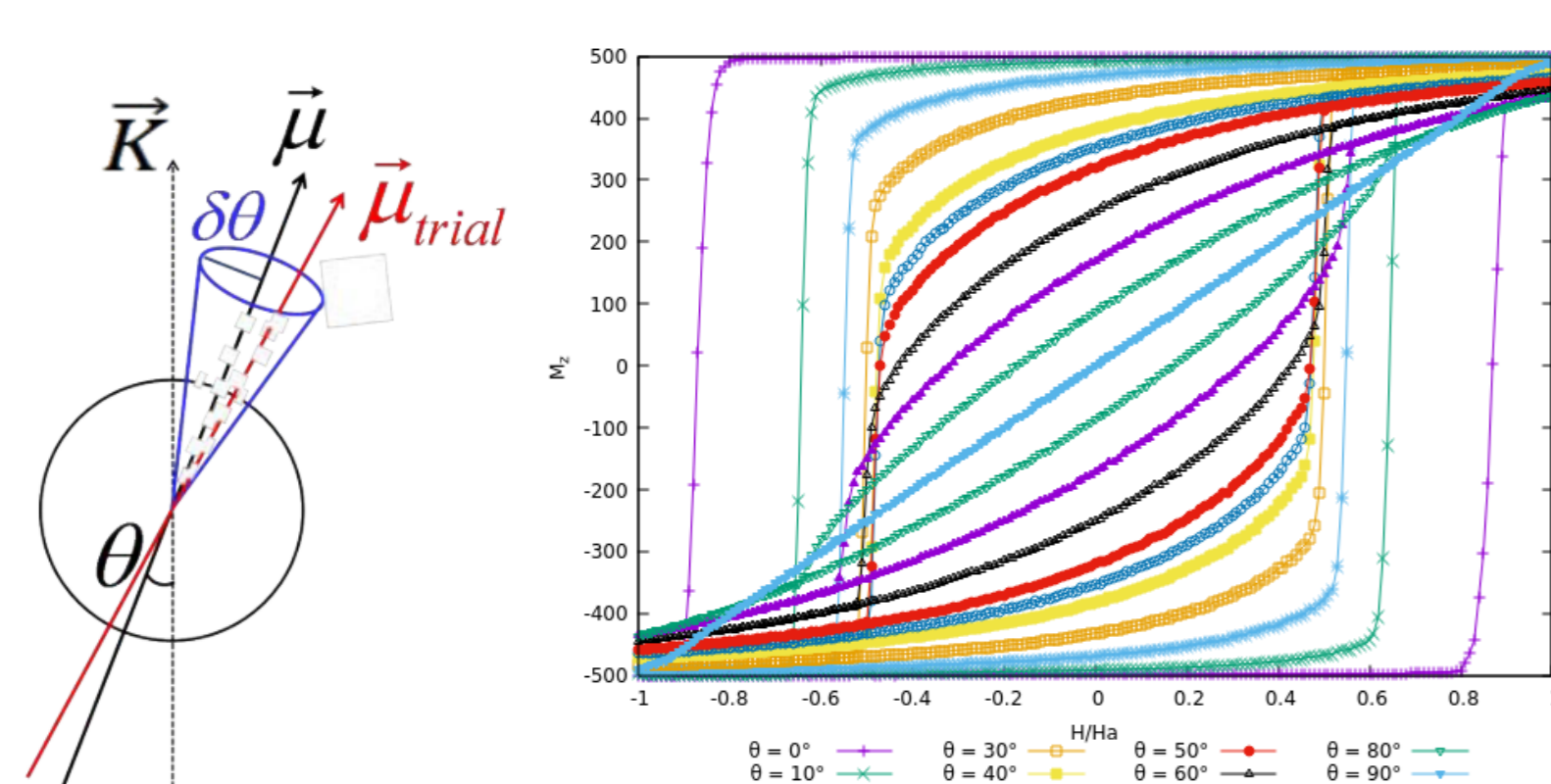
**Fig.1** Esquema representativo de nanocadenas conformadas por  $N = 4$  nanopartículas. Izquierda: nanocadenas con anisotropía aleatoria. Derecha: nanocadenas con anisotropía restringida.

## DETALLES COMPUTACIONALES

Se utiliza el método de Monte Carlo-Metrópolis, para simular los ciclos de histéresis, de un sistema de NCDs magnéticas conformadas por 1000 NPs esféricas de magnetita, con una constante de anisotropía efectiva  $K_{eff} = 15,0 \times 10^4 \text{ erg/cm}^3$ , y magnetización de saturación  $M_s = 370,0 \text{ emu/cm}^3$ . El hamiltoniano del sistema considera la energía de anisotropía ( $E_A$ ), relacionado al acoplamiento entre el macroespín y el eje fácil magnetización de las NPs. También es considerado la interacción entre el macroespín y el campo magnético externo aplicado, esta energía es denominada Energía de Zeeman ( $E_Z$ ). Finalmente, se considera la energía dipolar ( $E_D$ ), que es la energía de la interacción de los macroespines de todas las NPs del sistema.

$$E^{(i)} = -KV \left( \frac{\vec{\mu}_i \cdot \vec{n}_i}{|\vec{\mu}_i|} \right)^2 - \vec{\mu}_i \cdot \vec{H} + \sum_{j \neq i}^N \left( \frac{\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j}{r_{ij}} - \frac{3(\vec{\mu}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right)$$

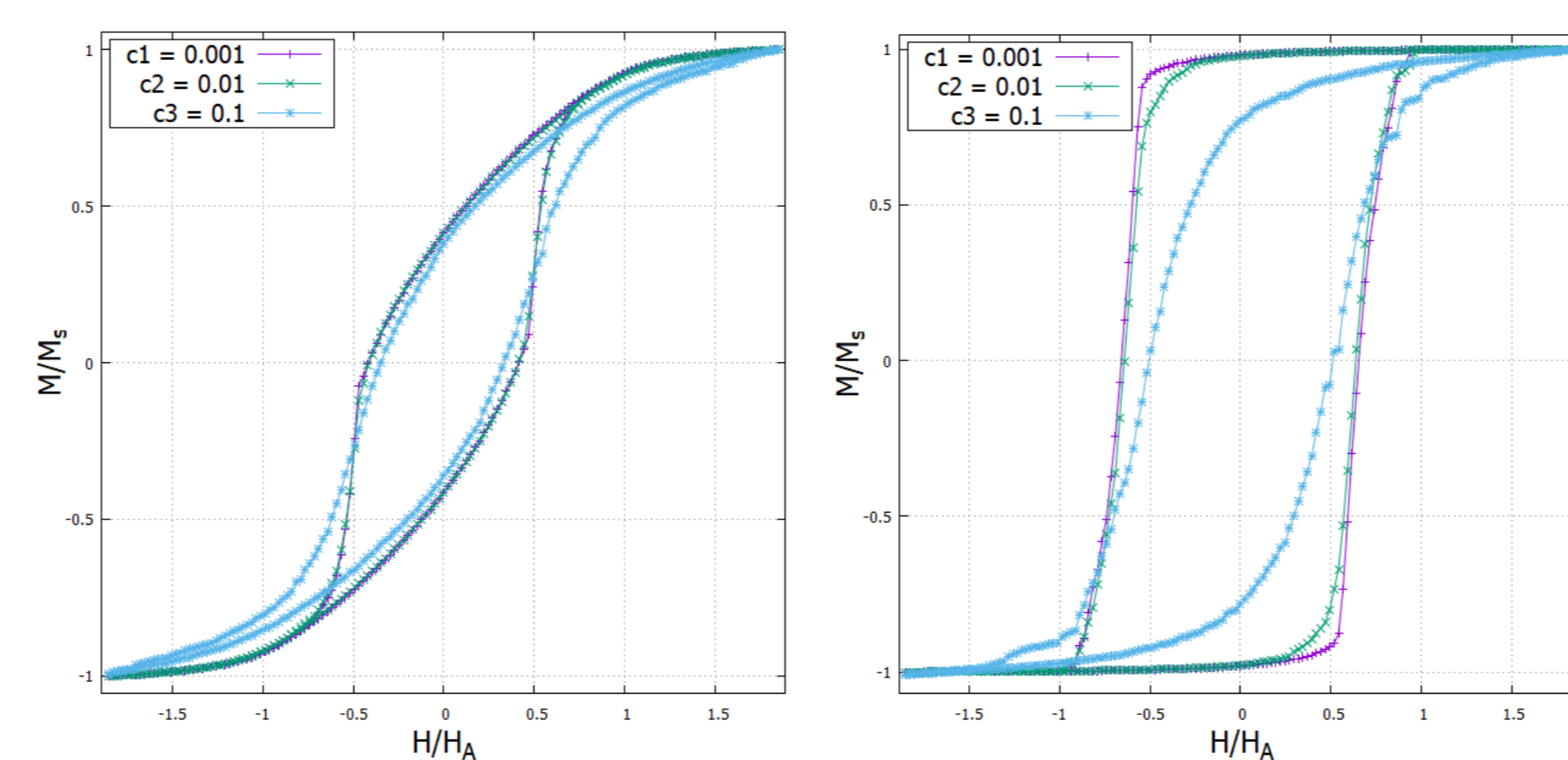
La dinámica del macroespín sigue una restricción de ángulo sólido que depende de la temperatura ( $t$ ),  $\delta\theta = (Ct)^{1/2}$ , donde  $C = 10,0$  es un constante relacionada a las características internas de las NPs, como tamaño, momento magnético, y anisotropía. La simulación consta de dos procedimientos, una termalización, con un paso de temperatura de  $\Delta T = 5K$ , que inicia desde temperatura ambiente  $T = 300K$  hasta  $T = 5K$ . Luego, se calcula el ciclo de histéresis con un paso de campo magnético de  $\Delta H = 20Oe$ . Para cada paso de histéresis, se utilizó 500 pasos de Monte Carlo, y se realizaron 10 promedios. La validación fue llevada con el cálculo del ciclo de histéresis para diferentes valores de  $\theta$ , donde  $\theta$  es el ángulo entre el eje de anisotropía y la dirección del campo magnético aplicado. Estos resultados son mostrados en la Fig.2, observándose la transición de forma rectangular a una relación lineal, típico de un sistema de NPs tipo Stoner Wohlfarth.



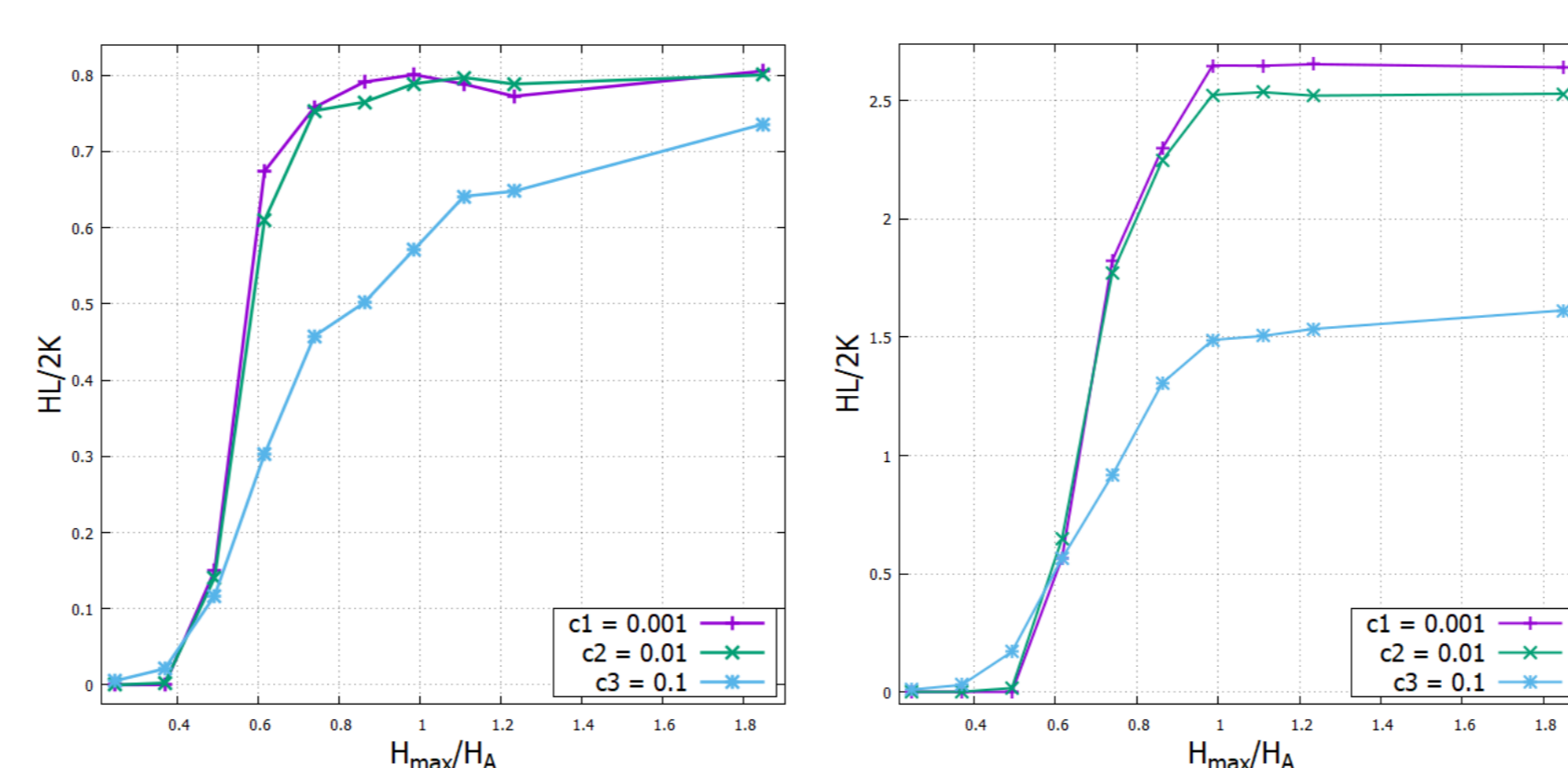
**Fig.2** Izquierda: Esquema de la restricción de ángulo sólido para el macroespín de la nanopartícula. Derecha: ciclos de histéresis para diferentes valores de  $\theta$ , donde  $\theta$  es el ángulo entre el eje de anisotropía y la dirección del campo magnético aplicado.

## RESULTADOS

En la Fig. 3, se muestra los resultados de los ciclos de histéresis para un sistema de NPs dispersadas, en función de la concentración, y para una anisotropía aleatoria y restringida, izquierda y derecha, respectivamente. Para ambos sistemas, se observa el efecto negativo de la concentración. Sin embargo, para el sistema con anisotropía restringida, se muestra un ciclo de histéresis con mayor área, originado por el acoplamiento entre el eje de anisotropía y la dirección del campo magnético aplicado. Los resultados mostrados en Fig. 4, son las áreas de histéresis  $HL/2K$  en función del campo magnético aplicado, donde se observa el incremento del área debido a la anisotropía restringida.

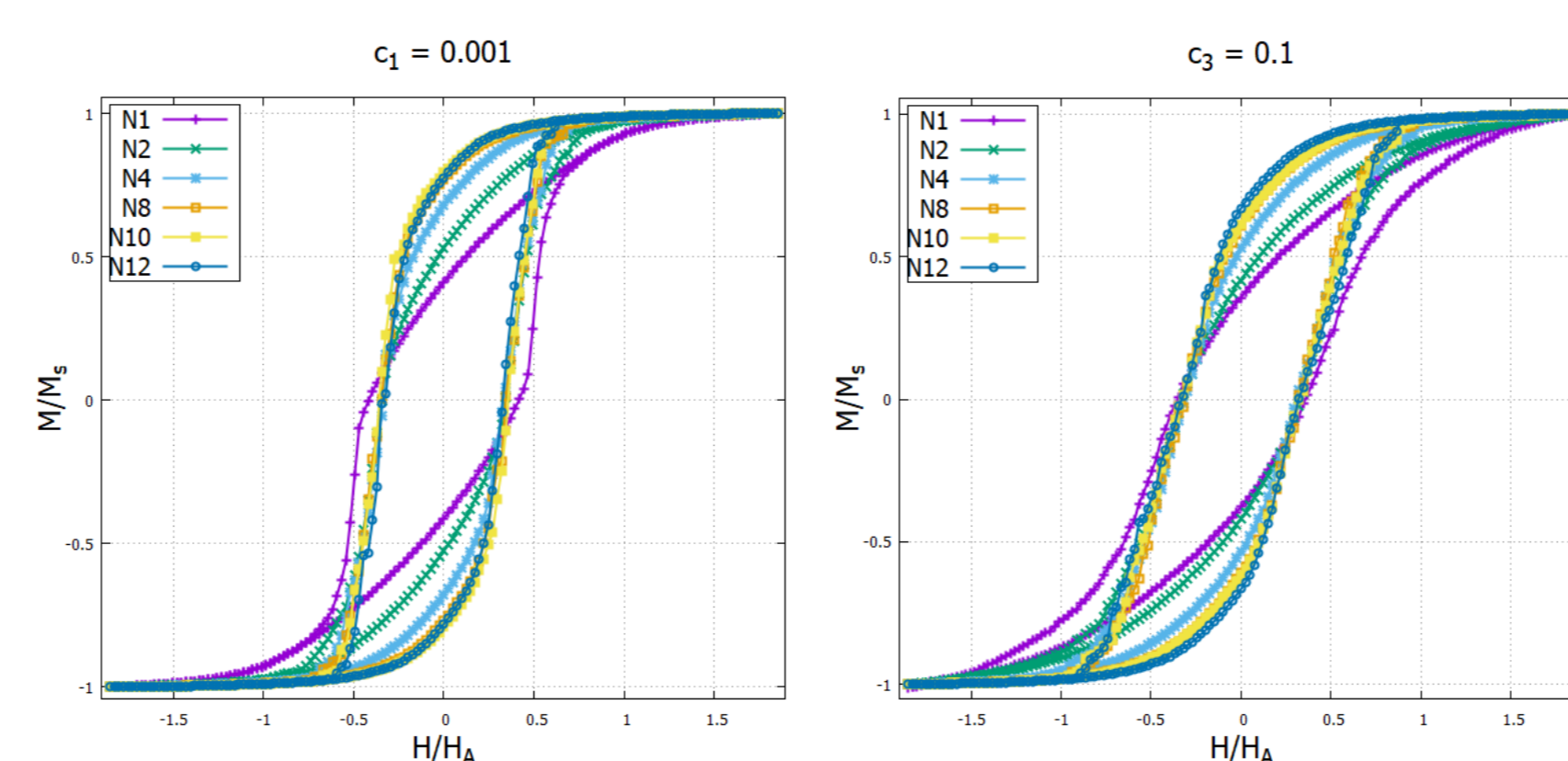


**Fig.3** Ciclos de histéresis para sistemas de nanopartículas dispersadas homogéneamente, en función de la concentración  $c_1 = 0,001$ ,  $c_2 = 0,01$  y  $c_3 = 0,1$ . Izquierda: sistema con anisotropía aleatoria. Derecha: sistema con anisotropía restringida.

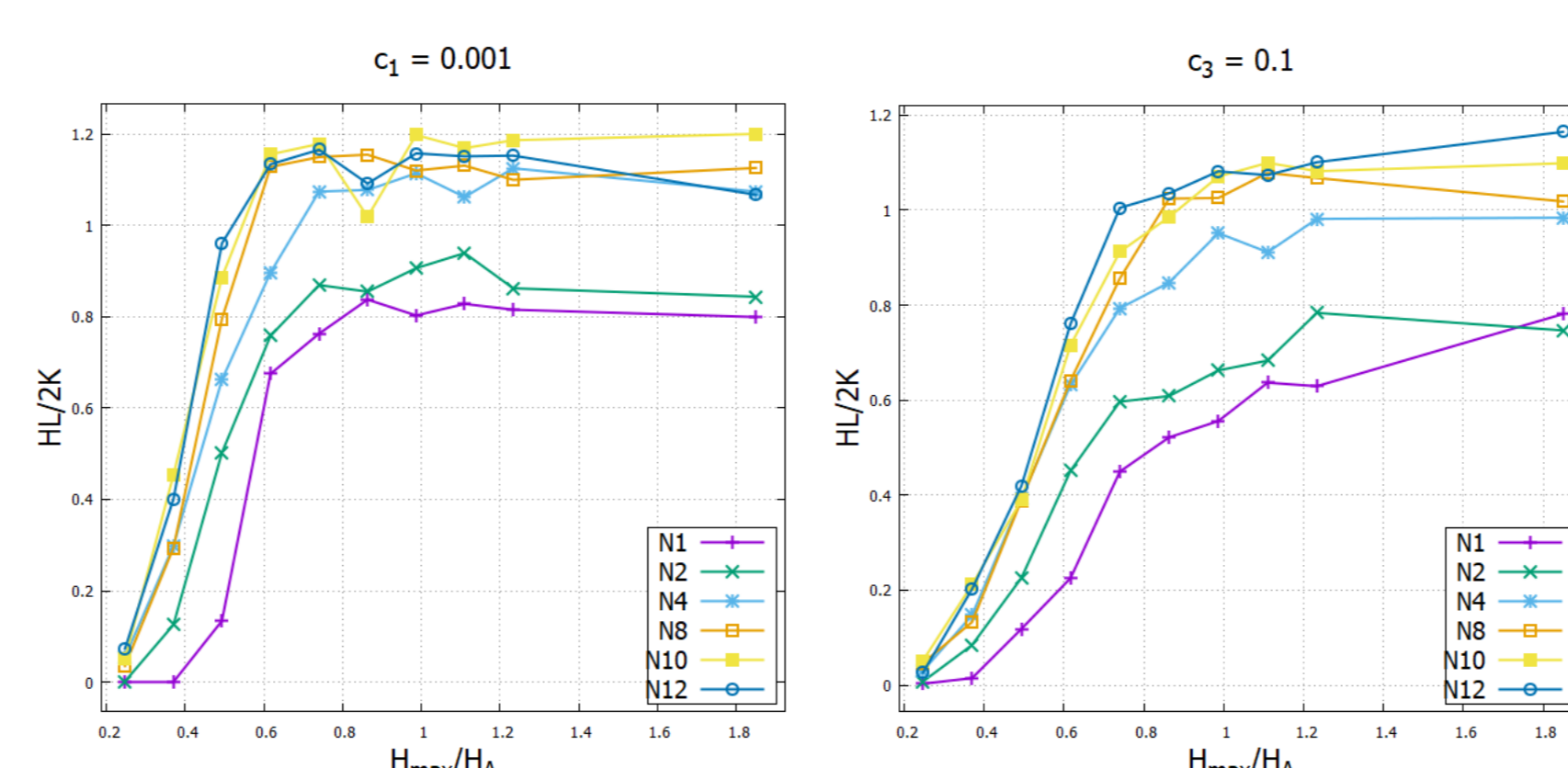


**Fig.4** Áreas de histéresis  $HL/2K$  para sistemas de nanopartículas dispersadas homogéneamente, en función de la concentración  $c_1 = 0,001$ ,  $c_2 = 0,01$  y  $c_3 = 0,1$ . Izquierda: sistema con anisotropía aleatoria. Derecha: sistema con anisotropía restringida.

Los resultados mostrados en la Fig. 5 y Fig. 6, para NCDs con anisotropía aleatoria, corresponden a los ciclos de histéresis, y la variación de su área  $HL/2K$ , respectivamente. Se observa el efecto del ensamblaje en forma de cadena como un alargamiento del ciclo de histéresis, para ambos valores de concentración  $c_1$  y  $c_3$ . Mayores valores de área son observados para las NCDs, en comparación que un sistema de NPs con anisotropía aleatoria. Este incremento es observado para todo el rango de campo magnético.



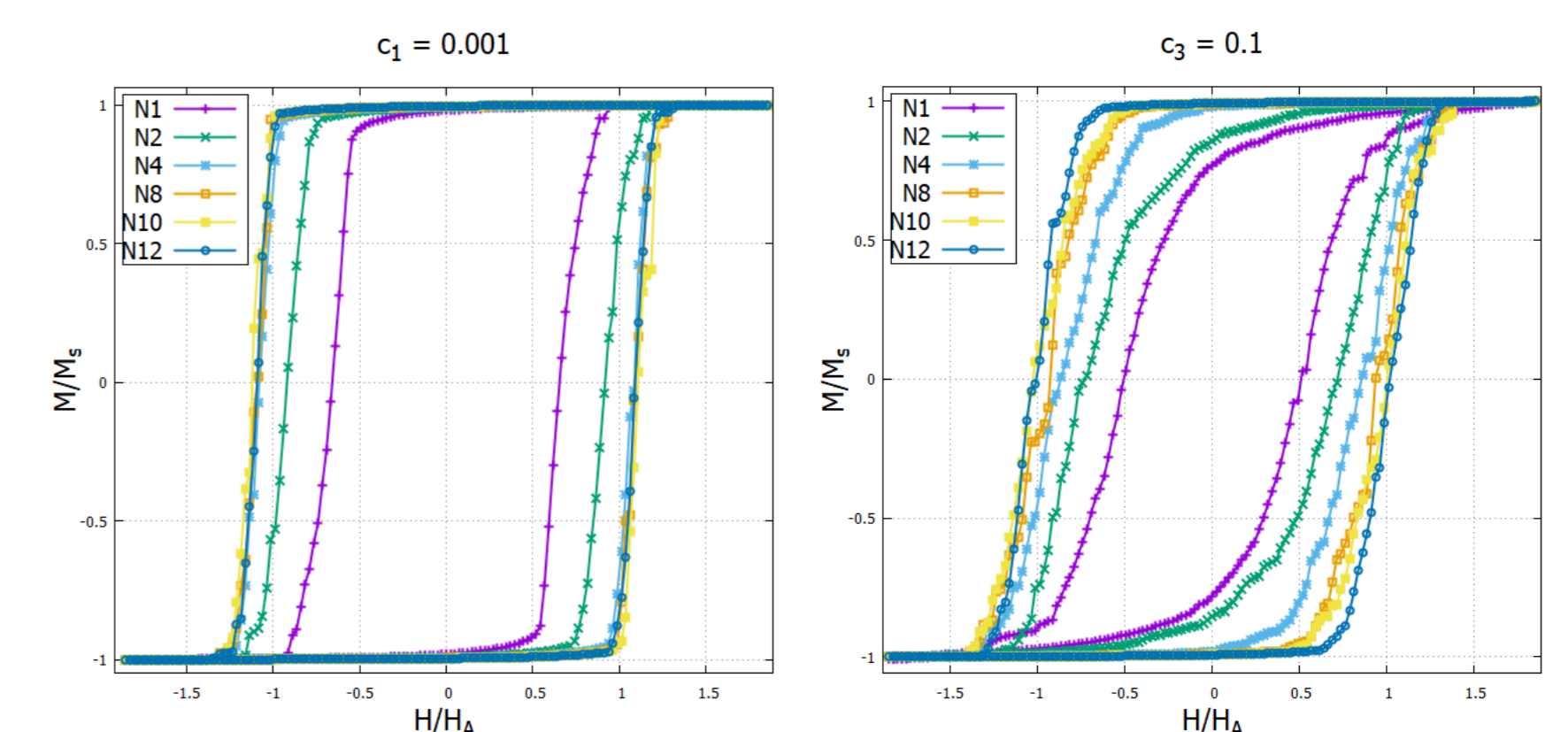
**Fig.5** Ciclos de histéresis para nanocadenas con anisotropía aleatoria, para diferentes valores de  $N$ . Izquierda:  $c_1 = 0,001$ . Derecha:  $c_3 = 0,1$ .



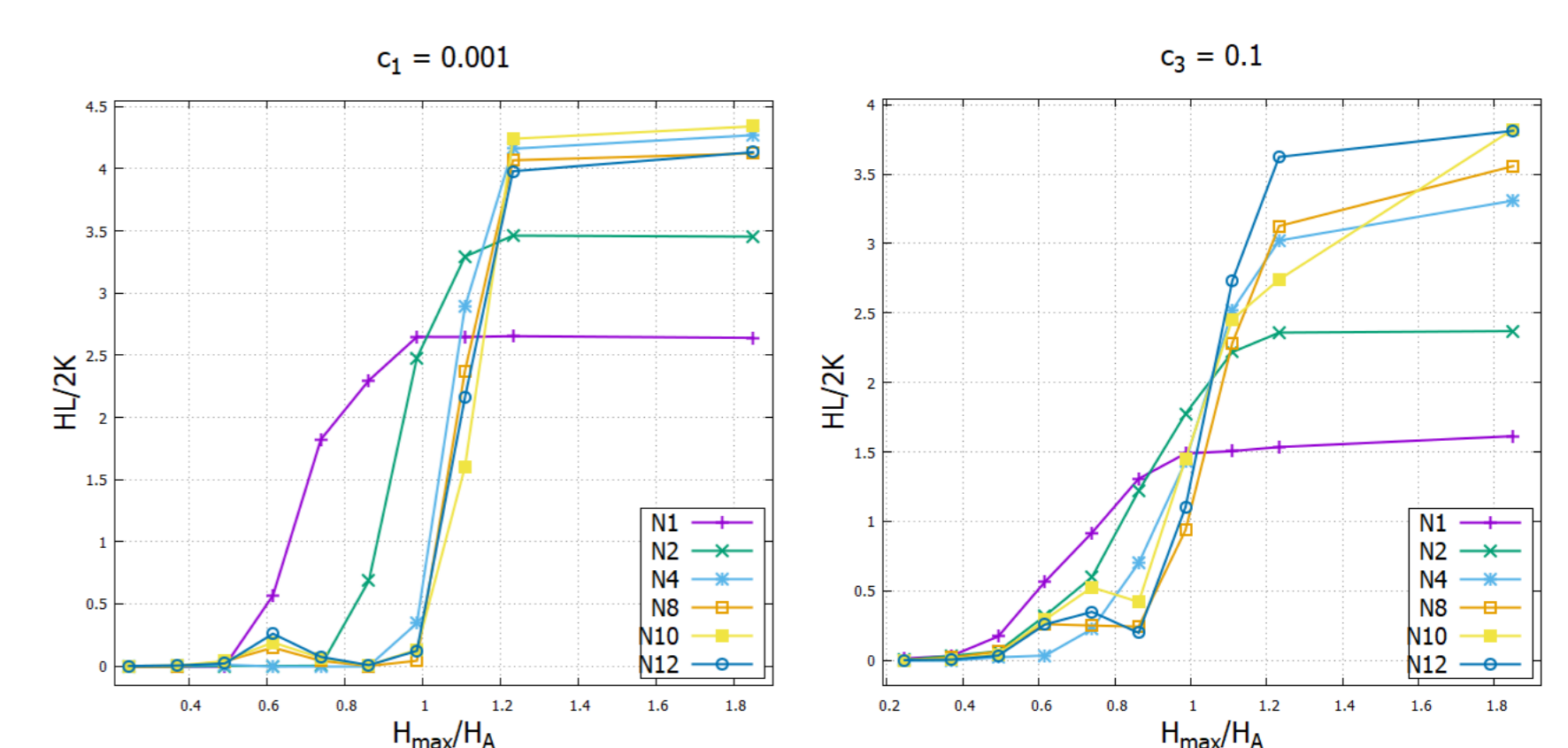
**Fig.6** Áreas de histéresis  $HL/2K$  para nanocadenas con anisotropía aleatoria, para diferentes valores de  $N$ . Izquierda:  $c_1 = 0,001$ . Derecha:  $c_3 = 0,1$ .

Por otro lado, el sistema de NCDs con anisotropía restringida (ver Fig. 7), muestran un efecto de ensanchamiento, incrementando su área en función del número de NPs que forman la cadena  $N$ . Este efecto se muestra para ambos valores de concentración  $c_1 = 0,001$  y  $c_3 = 0,1$ . En la Fig. 8, se observa que los valores de área para este sistema es mayor que las otras, obteniéndose valores máximos  $HL/2K > 4,0$ . Este incremento se observa solo en el régimen de

alto campo magnético  $H_{max} > 1,0$ , mostrándose un efecto de bloqueo.

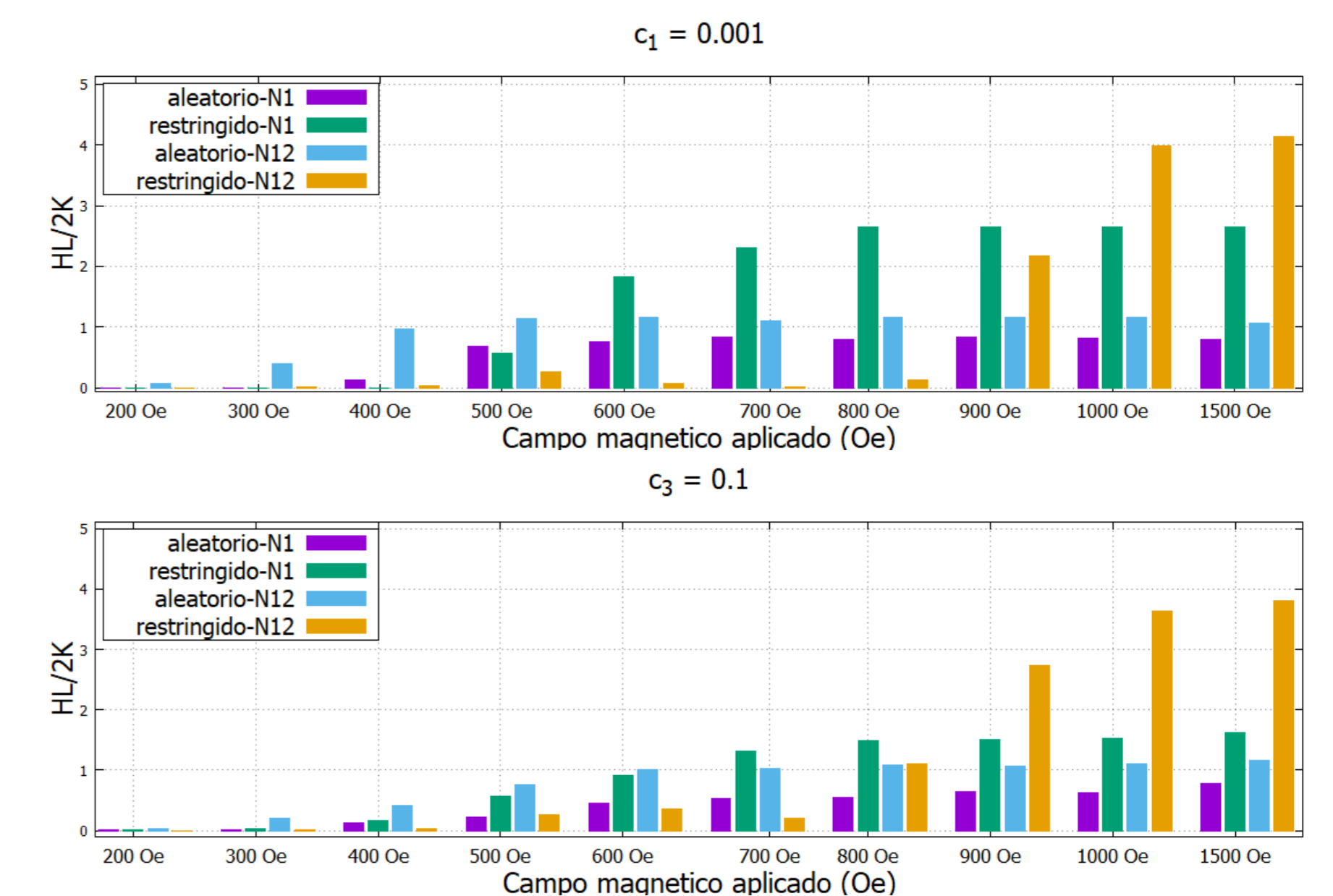


**Fig.7** Ciclos de histéresis para nanocadenas con anisotropía restringida, para diferentes valores de  $N$ . Izquierda:  $c_1 = 0,001$ . Derecha:  $c_3 = 0,1$ .



**Fig.8** Áreas de histéresis  $HL/2K$  para nanocadenas con anisotropía restringida, para diferentes valores de  $N$ . Izquierda:  $c_1 = 0,001$ . Derecha:  $c_3 = 0,1$ .

La comparación de las áreas de histéresis de los sistemas simulados que poseen mayor área, son mostrados en la Fig. 9, para los valores de concentración  $c_1$  y  $c_3$ . Se observa que el sistema de NCDs  $N = 12$  con anisotropía restringida, para ambos casos  $c_1$  y  $c_3$ , posee mayor área de histéresis que los otros sistemas.



**Fig.9** Gráfica comparativa de las áreas de histéresis  $HL/2K$ , para los diferentes sistemas simulados, con diferentes valores de concentración, arriba:  $c_1 = 0,001$ , y abajo:  $c_3 = 0,1$ .

## CONCLUSIONES

La concentración tiene un efecto positivo sobre el área de histéresis, para los sistemas de NPs dispersados homogéneamente, en la región de bajo campo. En los sistemas de nanocadenas la concentración tiene un efecto negativo, reduciendo el área de histéresis en todo el rango de campo magnético. Los resultados muestran el incremento de la capacidad de calentamiento en las NCDs con anisotropía restringida. Sin embargo, su aplicación en hipertermia magnética podría prohibirse debido a los límites biológicos del cuerpo humano, debido a que presenta buena capacidad calentamiento solo para grandes campos magnéticos aplicados. Por otro lado, las NCDs con anisotropía aleatoria, muestran un incremento de su capacidad de calentamiento, en todo el rango de campo magnético, mostrándose como un sistema con gran potencial de mejorar el tratamiento de hipertermia magnética.

## Referencias

- [1] Liqun Wang, Xuegang Lu, Jieqiong Wang, Sen Yang, and Xiaoping Song. Facile synthesis of Fe@Fe2O3 nanochains exhibiting high heating efficiency in magnetic hyperthermia. *Journal of Alloys and Compounds*, 681:50-56, 10 2016.
- [2] David Serantes, Konstantinos Simeonidis, Makis Angelakeris, Oksana Chubykalo-Fesenko, Marzia Marciello, María del Puerto Morales, Daniel Baldomir, and Carlos Martínez-Boubeta. Multiplying Magnetic Hyperthermia Response by Nanoparticle Assembling. *The Journal of Physical Chemistry C*, 118(11):5927-5934, 3 2014.
- [3] D. Serantes, D. Baldomir, C. Martínez-Boubeta, K. Simeonidis, M. Angelakeris, E. Natividad, M. Castro, A. Mediano, D.-X. Chen, A. Sanchez, L.I. Balcells, and B. Martínez. Influence of dipolar interactions on hyperthermia properties of ferromagnetic particles. *Journal of Applied Physics*, 108(7):073918, 10 2010.