

DOI: <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2024.11.12>

УДК: 537.6; 536.2

## МОДЕЛЬ МИКРОКУЛЕРА НА ОСНОВЕ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ДЛЯ БИМЕДИЦИНСКИХ УСТРОЙСТВ

А.А. Амиров<sup>1</sup>, М.А. Колюшенков<sup>1</sup>, А.П. Каманцев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Университет науки и технологий МИСИС  
119049, Москва, Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1.

<sup>2</sup> Институт радиоэлектроники и электроники им. В.А. Котельникова РАН  
125009, Москва, ул. Моховая, 11, корп. 7

Статья поступила в редакцию 25 ноября 2024 г.

**Аннотация.** Предложена модель микрофлюидного биомедицинского устройства, использующего изменение температуры за счет магнитокалорического эффекта сплава FeRh для управления смачиваемостью каналов, модифицированных термочувствительным полимером PNIPAM. Данный подход обеспечивает значительные преимущества перед традиционными резистивными нагревателями: он позволяет как охлаждать, так и нагревать микроканалы с высокой скоростью и низкой инерционностью, что особенно важно для температурного контроля в микрофлюидных системах. С помощью компьютерного моделирования было продемонстрировано, что при приложении магнитного поля 1,8 Тл микроканалы, покрытые термочувствительным полимером PNIPAM, охлаждаются до нижней критической температуры растворения ( $< 32^{\circ}\text{C}$ ) за время менее 0,04 с, что существенно быстрее, чем в случае использования резистивного или термоэлектрического охлаждения. Представленный подход может быть использован для разработки новых типов микрофлюидных устройств для

создания микрокапель различного типа, которые могут применяться в биомедицине и фармацевтике.

**Ключевые слова:** точечное охлаждение, магнитокалорический эффект, FeRh, микрофлюидика, термочувствительные полимеры, PNIPAM.

**Финансирование:** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-19-00782).

**Автор для переписки:** Амиров Абдулкарим Абдулнатипович, [amiroff\\_a@mail.ru](mailto:amiroff_a@mail.ru)

Одна из актуальных задач современной микроэлектроники и биомедицинского приборостроения связана с разработкой безопасных и эффективных систем для точечного отведения тепла [1]. Как известно, согласно статистике, с 1960-х годов количество производимых транзисторов в интегральных схемах ежегодно удваивается в два раза (закон Мура). Увеличение количества транзисторов приводит к увеличению выделяемого тепла, а их миниатюризация – к возрастанию плотности тепловыделения. Следовательно, становится актуальным локальное отведение тепла в высокопроизводительных вычислительных системах. Такой подход, основанный на точечном охлаждении, носит термин «spot cooling» и высоко востребован в современной микроэлектронике и вычислительной технике [2].

Проблема точечного и безопасного охлаждения также актуальна и биомедицинском приборостроении. Одним из таких активно развивающихся направлений является микрофлюидика, основанная на управлении потоками жидкостей в малых объемах протекающих в микро(нано) каналах [3]. Микрофлюидные устройства активно используют в настоящее время в молекулярной биологии, фармацевтике и медицинской диагностике. Микрофлюидные процессы нашли свое применение и микроэлектронике для точечного охлаждения процессоров. В работе [4] были предложены новые подходы к созданию микрофлюидных устройств, в которых микроканалы для

передачи жидкости были функционализированы термочувствительными полимерами на основе поли(N-изопропилакриламид)а (PNIPAM). Было показано, что смачиваемостью каналов в микрофлюидных устройствах можно управлять за счет точечного нагрева PNIPAM, это может быть использовано для контроля параметров образования микрокапель, что актуально при разработке новых лекарственных препаратов и способов их доставки. Стоит отметить, что PNIPAM является одним из известных и хорошо изученных термочувствительных полимеров с нижней критической температурой растворения (НКТР) в водных растворах и при нагревании выше 32°C обратимо переходит из гидратированного в дегидратированное состояние, теряя около 90% своего объема [5],[6]. НКТР в PNIPAM близка к физиологическим температурам и благодаря этому он рассматривается в качестве перспективного материала для тканевой инженерии, регенеративной медицины и тераностики [7],[8].

Основная идея, предлагаемая в настоящей работе, основана на изучении возможности использования альтернативных методов локального управления температурой микрофлюидных чипов с микроканалами, модифицированными термочувствительными полимерами, где в качестве одного из решений предлагается использовать магнитокалорический эффект (МКЭ) [9]. МКЭ, природа которого основана на адиабатическом изменении температуры или изотермическом изменении энтропии, вследствие изменения приложенного магнитного поля на сегодняшний день рассматривается в качестве перспективной системы для твердотельного охлаждения [10]. Обсуждается также возможность использования материалов с калорическими и мультикалорическими эффектами для приложений спинтроники, магноники и биомедицины [11, 12]. Преимуществами использования МКЭ по сравнению с резистивными нагревателями является возможность его использования как для нагрева, так и для охлаждения, а также низкая инерционность, что позволяет обратимо управлять температурой за короткие промежутки времени. В качестве рабочего тела для точечного магнитного охлаждения нами предлагается

использовать сплав на основе FeRh с составом близким к экваторному, который демонстрирует рекордные для магнитных материалов значения МКЭ [13]. Кроме того, температура магнитного фазового перехода I рода при которой он демонстрирует максимум близка к физиологическим температурам и температурным режимам, используемым в биологических инкубаторах для культивирования микробиологических объектов.

На рисунке 1. приведена схема, описывающая принцип работы микрофлюидного устройства для генерации микрокапель с переменной смачиваемостью каналов за счет управляемого МКЭ. Как известно, каналы с гидрофобной поверхностью позволяют получать микрокапли на водной основе, в то время как, гидрофильные- используют для получения микрокапель на основе масел и различных органических растворителей. Реактор для генерации микрокапель представляет собой канал, изготовленный из полимера полидиметилосилан (PDMS) выбранной конфигурации.

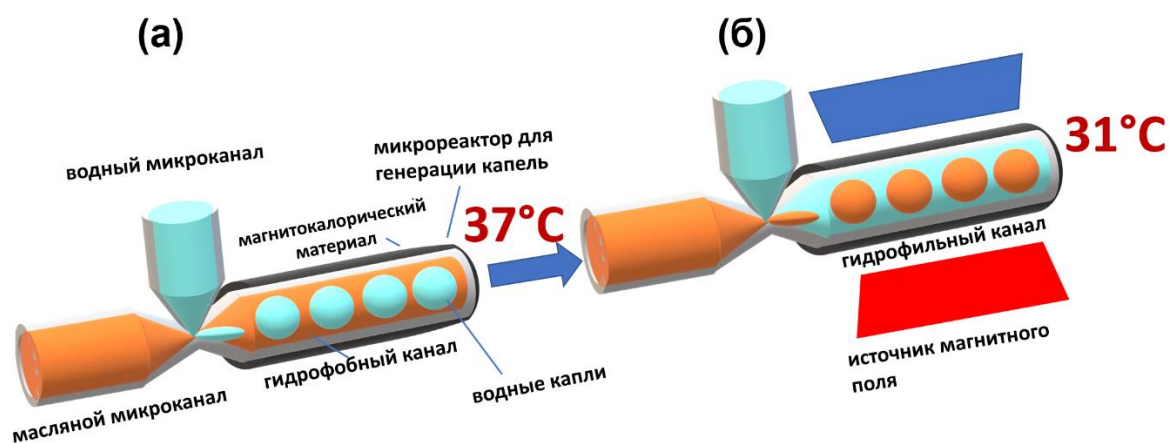


Рис. 1. Схема и принцип работы микрофлюидного устройства с управляемой смачиваемостью микроканалов. Стенки реактора образования микрокапель в гидрофобном (а) и гидрофильном состояниях (б).

Выбор PDMS обусловлен, тем что данный полимер благодаря своим оптическим и механическим свойствам широко применяется для создания различных биомедицинских устройств, в том числе с использованием аддитивных методов (3D-4D печать). Внутренняя поверхность модифицирована термочувствительным полимером PNIPAM. Модификация поверхности может быть реализована различными физическими и химическими методами: в работе

[4], микроканалы из PDMS были покрыты термочувствительным полимером PNIPAM методом УФ-полимеризации. С наружной стороны микроканалов в форме цилиндра коаксиально устанавливается материал (в нашем случае FeRh) с «гигантским» МКЭ в области рабочей температуры микрофлюидного устройства. Магнитокалорический материал в данном случае выполняет роль рабочего тела магнитного регенератора, который в результате прямого или обратного МКЭ нагревает или охлаждает микроканал из PDMS.

В рассматриваемой нами модели микрофлюидного устройства начальной рабочей температурой было выбрано  $37^{\circ}\text{C}$ , близкой к условиям, используемым для культивирования некоторых микробиологических культур (бактерии, клетки и пр.). В таком случае оптимальным будет использование магнитного материала с максимумом обратного МКЭ в этой области, что позволит реализовать функцию управления смачиваемостью микроканалов в режиме включения магнитного поля. Рассмотрим режим работы микрофлюидного устройства, соответствующий состоянию с гидрофобным микроканалом (рис. 1а). В данном режиме термочувствительный полимер PNIPAM находится выше температуры НКТР, когда полимер находится в дегидратированном состоянии с повышенным углом смачивания. Угол смачивания PNIPAM зависит различных факторов (молекулярная масса, pH среды, сополимеризация с другими полимерными группами и пр) и согласно данным работы [4] для PNIPAM полимеризованного на подложке из PDMS составляет  $\sim 95^{\circ}$  при температуре  $37^{\circ}\text{C}$ , соответствующий дегидратированному состоянию, когда полимер полностью вытесняет из своего объема воду. Такое состояние способствует к образованию микрокапель из гидрофильных жидкостей на водной основе. Включение магнитного поля в результате обратного МКЭ приводит к охлаждению модифицированного термочувствительным полимером PNIPAM канала и переводу его в гидратированное гелеобразное состояние с пониженным углом смачивания  $\sim 70^{\circ}$  при температуре  $30^{\circ}\text{C}$  согласно данным работы [4] (рис. 1б). Такое состояние способствует образованию гидрофобных микрокапель, например, на основе масел и органических растворителей.

Ключевым вопросом в предложенном подходе с использованием магнитокалорического материала является его способность обратимо индуцировать в полимере PNIPAM переход с НКТР в области  $\sim 32^{\circ}\text{C}$  в микроканалах заполненных рабочими жидкостями. Это в прежде всего будет определяться теплофизическими характеристиками рабочего тела, жидкости и материала, из которого изготовлен микроканал, а также соотношением масс активной и пассивной компонент участвующих в процессах теплообмена в результате МКЭ.

Для этой цели было проведено численное моделирование процессов распределения тепла с использованием метода конечных элементов в программном пакете COMSOL Multiphysics путем решения уравнения теплопроводности с использованием алгоритма трехдиагональной матрицы. Были построены трехмерные модели микрофлюидных устройств с различным соотношением диаметров микроканалов и магнитного регенератора. Моделирование производилось в интерфейсе Heat Transfer, теплофизические параметры рабочих сред жидкостей, рабочего тела магнитного материала и материала микроканала были взяты из справочников программного пакета COMSOL и литературных данных. Магнитокалорические свойства FeRh зависят не только от фазового состава, условий получения и термообработки, но и от протокола приложения магнитного поля (разовое или циклическое) [14].

Исходя из литературных данных адиабатическое изменение температуры упорядоченного в структуру типа CsCl сплава FeRh находится в диапазоне  $6-12^{\circ}\text{C}$  при изменении поля около 2 Тл. В нашей модели будем считать, что изменение магнитного поля на 1,8 Тл (достижимое с использованием постоянных магнитах со сборкой в структуру типа Хальбах) приводит к соответствующему изменению температуры по абсолютному значению на  $6^{\circ}\text{C}$ . Для расчетов использовались сетки типа free tetrahedral, максимальный размер элемента сетки в области моделируемого микроканала составил  $1\text{E}-5\text{ m}$ . Решение задачи хорошо сходится, в качестве критерия остановки выбрана относительная погрешность 0.001.

Схема моделируемого канала для генерации капель микрофлюидного устройства в разрезе приведена на рисунке 2.

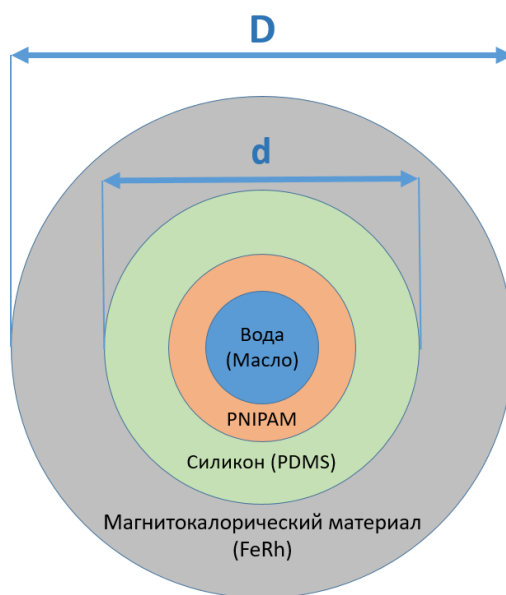


Рис. 2. Схематическое изображение разреза микроканала.

Как видно активной частью в устройстве является магнитокалорический материал параметры которого определяются его наружным диаметром  $D$ ,  $d$  – диаметр самого микроканала.

На рисунках 3 и 4 приведены расчеты распределения тепла в фиксированные моменты времени после включения (выключения) магнитного поля. Состояние при Время = 0 с соответствует моменту включения (рис. 3) или выключения (рис.4) магнитного поля.

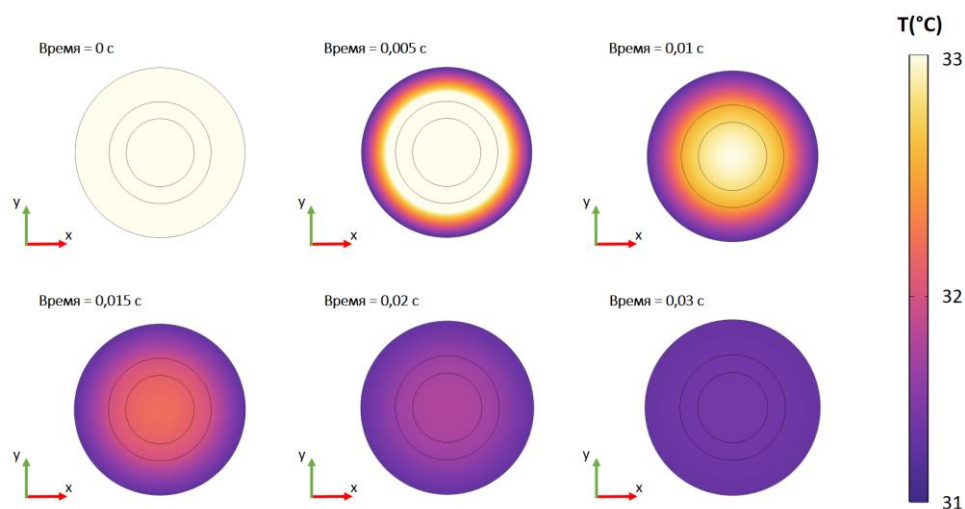


Рис. 3. Распределение температуры в сечении микроканала для разных моментов времени в режиме включения поля (охлаждение).

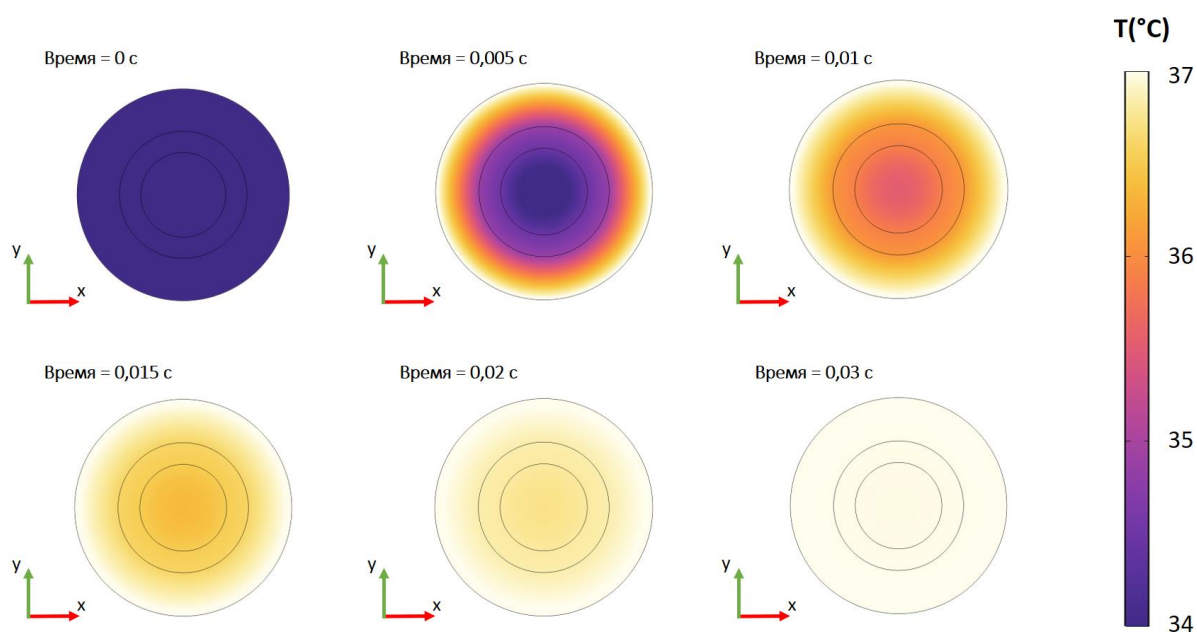


Рис. 4. Распределение температуры в сечении микроканала для разных моментов времени в режиме выключения поля (нагрев).

Важным параметром, влияющим на скорость охлаждения и нагревания системы, является отношение диаметра слоя магнитокалорического материала к диаметру внутреннего канала  $D/d$  (см. рис. 2). Как показывают расчеты, для случая с  $D/d = 10$  приложение магнитного поля 1,8 Тл способно эффективно охлаждать микроканала ниже НКТР  $\sim 32^\circ\text{C}$ , достигая температуры  $\sim 31^\circ\text{C}$ , и возвращать в исходное состояние  $\sim 37^\circ\text{C}$  при выключении магнитного поля 1,8 Тл. Как видно из рисунка 5, процесс охлаждения полностью завершается за достаточно короткое время  $\sim 0,04$  с, что значительно быстрее чем в случае использования резистивного нагревателя или термоэлектрического элемента.

При этом, в режиме включения магнитного поля, когда активируется гидрофильный канал используются теплофизические параметры дистиллированной воды, которая смачивается со стенками, а в случае выключения магнитного поля - касторового масла. Изменение температуры до температуры ниже НКТР в результате МКЭ достигается в первую очередь за счет изменения соотношения объемов магнитного материала и рабочей жидкости. Как видно из рис. 6 уменьшение объема магнитокалорического материала FeRh, которое связано с соотношением диаметров  $D/d$  вплоть до  $D/d = 1.5$  позволяет



эффективно управлять температурой микроканалов и охлаждать полимер до температуры с НКТР, что указывает на возможность дальнейшей миниатюризации и оптимизации микрофлюидного устройства.

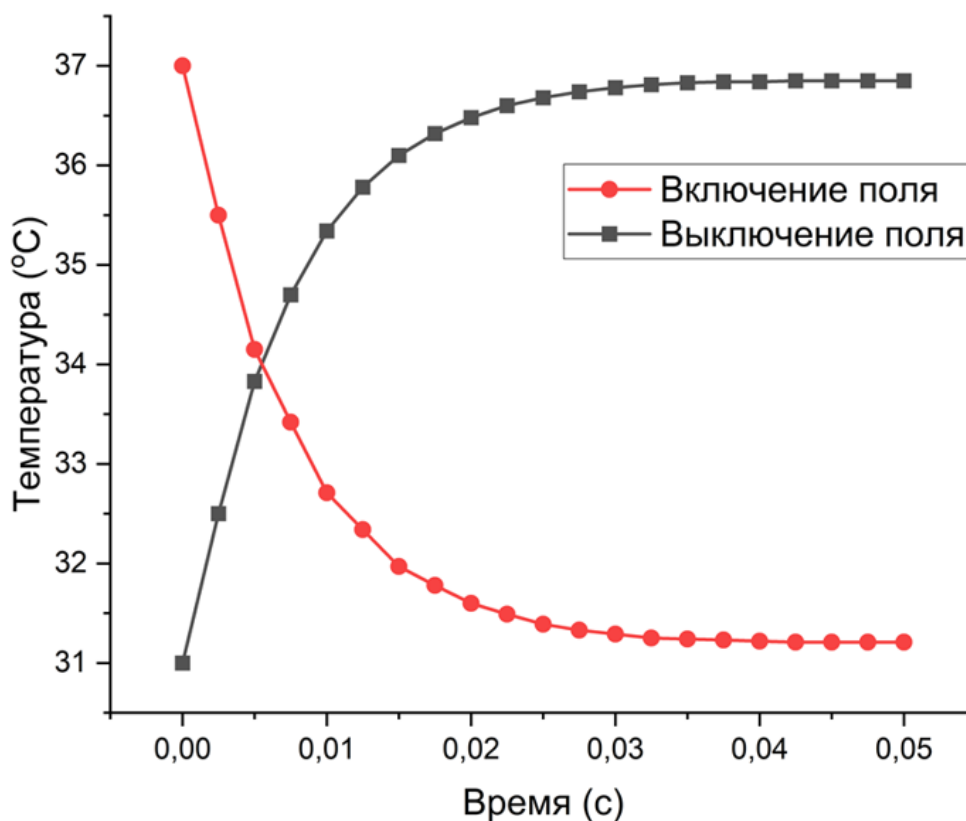


Рис. 5. Зависимость температуры поверхности PNIPAM от времени.

Возможности использования микроканалов с термическим переключением смачиваемости путем применения подходящих гидрофильных и гидрофобных поверхностно-активных веществ в водной и масляной фазах были продемонстрированы в работах [4-15]. Одним из недостатков этой работе является сложность обратного переключения смачиваемости каналов: например, процесс охлаждения до комнатной происходит за счет пассивного рассеяния тепла в относительно долгий промежуток времени. Использование МКЭ позволит это реализовать в достаточно короткий промежуток времени  $< 100$  мс. В пользу этого также говорит тот факт, что экспериментально в режиме *in situ* была продемонстрирована возможность обратимого переключения состоянием PNIPAM, нанесенного на подложку гадолиния Gd за время менее чем 1 с в результате МКЭ путем разового включения или выключения магнитного поля 8 Тл [16].

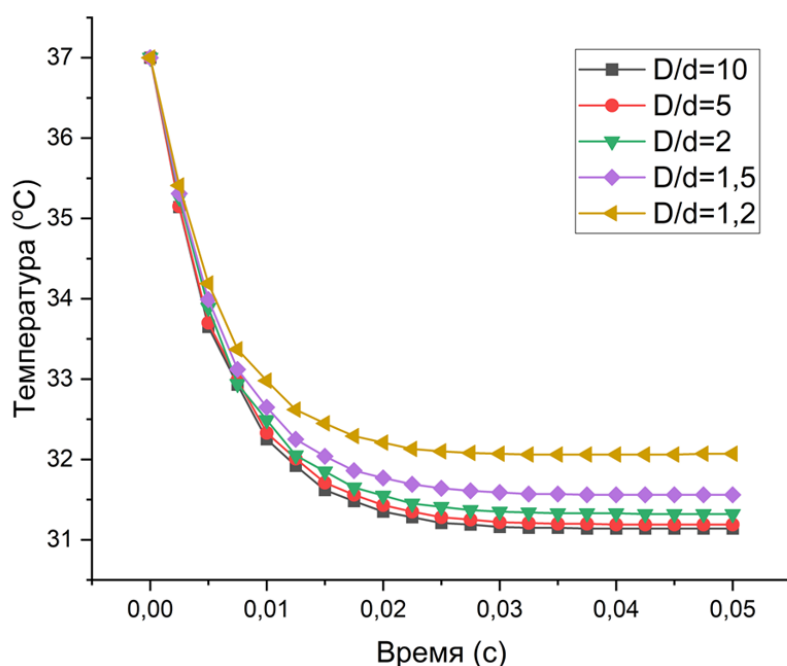


Рис. 6. Зависимости температуры поверхности PNIPAM от времени для различных значений соотношения  $D/d$ .

Немаловажным аспектом в таком устройстве является создание компактного источника магнитного поля способного создать магнитное поле до 1,8 Тл. По нашим предварительным расчетам в зазоре менее 1 мм может быть достигнуто магнитное поле до 1,8 Тл с использованием источника магнитного поля на постоянных магнитах типа NdFeB с остаточной индукцией не менее 1,2 Тл, собранных в структуру типа Хальбах.

## Заключение

В работе была рассмотрена модель нового микрофлюидного устройства с термическим переключением смачиваемости каналов, использующая МКЭ для точечного изменения температуры каналов. С помощью методов компьютерного моделирования была показана возможность быстрого (менее чем 0,04 с) и обратимого переключения состояния микроканалов из гидрофобного в гидрофильное состояние за счет МКЭ. Такой подход имеет преимущества по сравнению с обычным резистивным нагревателем и будет весьма полезен для изучения механизмов образования микрокапель различного типа (вода/масло или масло/вода), которые могут быть востребованы в фармацевтической, пищевой и косметической промышленности.

**Финансирование:** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-19-00782).

### Литература

1. Joshi Y. et al. Some Aspects of Microchannel Heat Transfer //Nano-Bio-Electronic, Photonic and MEMS Packaging. – 2010. – С. 431-477. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-49991-4\\_10](https://doi.org/10.1007/978-3-030-49991-4_10)
2. Bar-Cohen A., Wang P. On-chip thermal management and hot-spot remediation //Nano-Bio-Electronic, Photonic and MEMS Packaging. – 2021. – С. 157-203. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-49991-4\\_9](https://doi.org/10.1007/978-3-030-49991-4_9)
3. Whitesides G.M. The origins and the future of microfluidics //nature. – 2006. – Т. 442. – №. 7101. – С. 368-373. <https://doi.org/10.1038/nature05058>
4. Li L. et al. In-channel responsive surface wettability for reversible and multiform emulsion droplet preparation and applications // ACS applied materials & interfaces. – 2019. – Т. 11. – №. 18. – С. 16934-16943. <https://doi.org/10.1021/acsami.9b03160>
5. Schild H.G. Poly (N-isopropylacrylamide): experiment, theory and application // Progress in polymer science. – 1992. – Т. 17. – №. 2. – С. 163-249. [https://doi.org/10.1016/0079-6700\(92\)90023-R](https://doi.org/10.1016/0079-6700(92)90023-R)
6. Gilcreest V. P. et al. Thermoresponsive poly (N-isopropylacrylamide) copolymers: Contact angles and surface energies of polymer films // Langmuir. – 2004. – Т. 20. – №. 23. – С. 10138-10145. <https://doi.org/10.1021/la0487996>
7. Xu X. et al. Poly (N-isopropylacrylamide)-based thermoresponsive composite hydrogels for biomedical applications //Polymers. – 2020. – Т. 12. – №. 3. – С. 580. <https://doi.org/10.3390/polym12030580>
8. Rzaev Z.M.O., Dincer S., Pişkin E. Functional copolymers of N-isopropylacrylamide for bioengineering applications // Progress in Polymer Science. – 2007. – Т. 32. – №. 5. – С. 534-595. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2007.01.006>

9. Tishin A.M., Spichkin Y.I. The magnetocaloric effect and its applications. – CRC Press, 2016. <https://doi.org/10.1887/0750309229>
10. Klinar K. et al. Perspectives and energy applications of magnetocaloric, pyromagnetic, electrocaloric, and pyroelectric materials // Advanced Energy Materials. – 2024. – С. 2401739. <https://doi.org/10.1002/aenm.202401739>
11. Amirov A.A., Tishin A.M., Pakhomov O.V. Multicalorics - New materials for energy and straintronics // Phys. Solid State. – 2022. – Т. 64. – С. 383. <https://doi.org/10.21883/pss.2022.04.53494.34s>
12. Amirov A. Multiferroic, magnetic, and magnetoelectric nanomaterials for medical applications // Magnetic Materials and Technologies for Medical Applications. – Woodhead Publishing, 2022. – С. 469-484. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-822532-5.00003-0>
13. Nikitin S.A. et al. The magnetocaloric effect in Fe<sub>49</sub>Rh<sub>51</sub> compound // Physics Letters A. – 1990. – Т. 148. – №. 6-7. – С. 363-366. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(90\)90819-A](https://doi.org/10.1016/0375-9601(90)90819-A)
14. Chirkova A. et al. Giant adiabatic temperature change in FeRh alloys evidenced by direct measurements under cyclic conditions // Acta Materialia. – 2016. – Т. 106. – С. 15-21. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.11.054>
15. Li L. et al. Autonomous capillary microfluidic devices with constant flow rate and temperature-controlled valving // Soft Matter. – 2021. – Т. 17. – №. 33. – С. 7781-7791. <https://doi.org/10.1039/D1SM00625H>
16. Amirov A.A. et al. Smart thermoresponsive composite activated by magnetocaloric effect // Materials Letters. – 2021. – Т. 304. – С. 130626. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.130626>

**Для цитирования:**

Амиров А.А., Колющенко М.А., Каманцев А.П. Модель микрокулера на основе магнитокалорического эффекта для биомедицинских устройств // Журнал радиоэлектроники. – 2024. – №. 11. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2024.11.12>