

**Московский Государственный
Университет им. М.В. Ломоносова
Химический факультет**



**Подходы к использованию самоорганизации для
получения биооптимизованных
наноматериалов**

И.В. Мелихов

Подходы к новому материалу

1. Разработка технологической идеи нового материала.
Определение виртуальной функции $a^{\boxtimes}(b^{\boxtimes})$

$$a^{\boxtimes*} = \{a_1^* \dots a_i^* \dots a_p^*\} \quad b^{\boxtimes*} = \{b_1^* \dots b_i^* \dots b_p^*\}$$

Предсказание интервала Δb , в котором можно реализовать идею.

2. Определение реальной функции $a^{\boxtimes}(b^{\boxtimes})$ в лабораторных условиях. Нарботка опытных образцов материала в интервале Δb .
3. Экспериментальный отбор образцов, обеспечивающих выполнение функций материала при минимальной его массе. Определение функции $a_M^{\boxtimes}(b^{\boxtimes})$
4. Поиск конструкции и режимов работы аппаратов для реализации интервала Δb . Определение функции $b^{\boxtimes}(c^{\boxtimes})$ при $c^{\boxtimes} = \{c_1 \dots c_i \dots c_p\}$, где c_i – параметр аппарата.
5. Математическое обеспечение расчета функционала

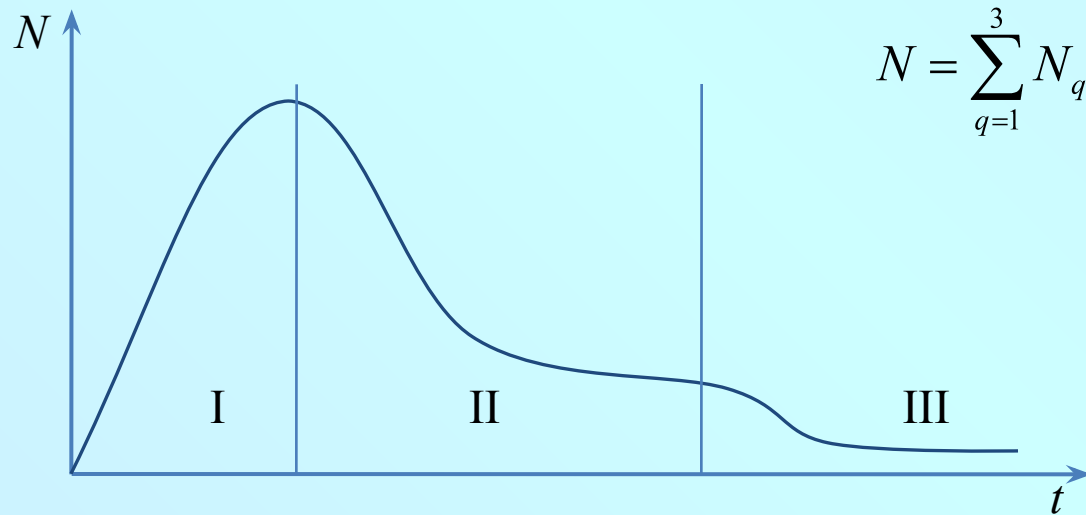
$$F = a_M^{\boxtimes} [b^{\boxtimes}(c^{\boxtimes})]$$

для широкого интервала Δa_M^{\boxtimes} .

Стадийность фазообразования

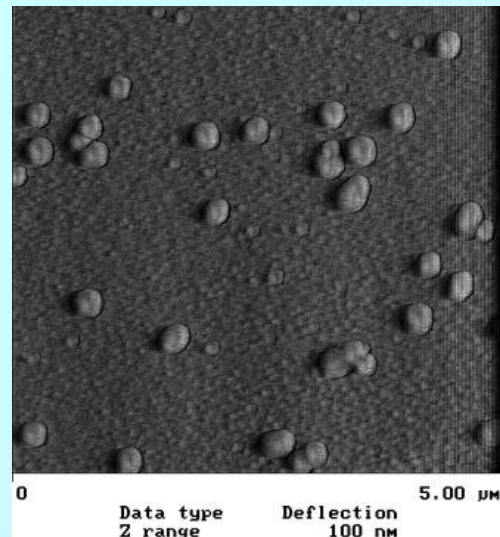
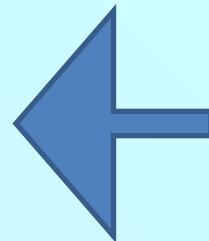
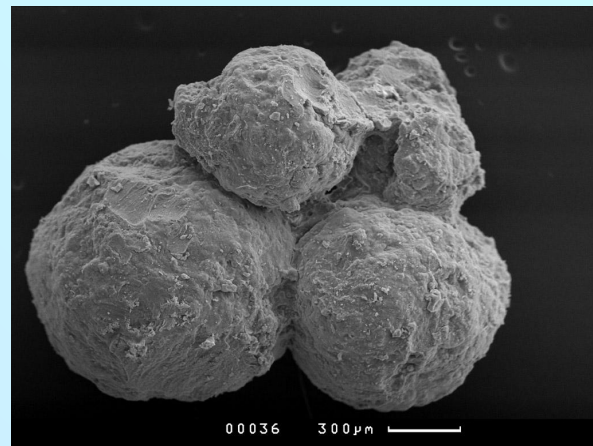
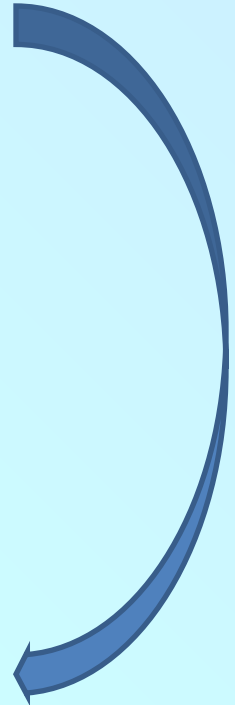
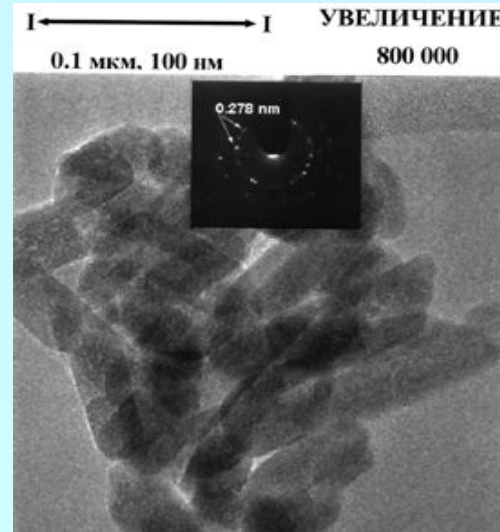
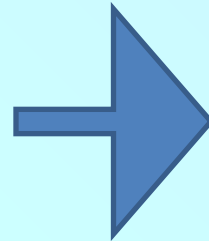
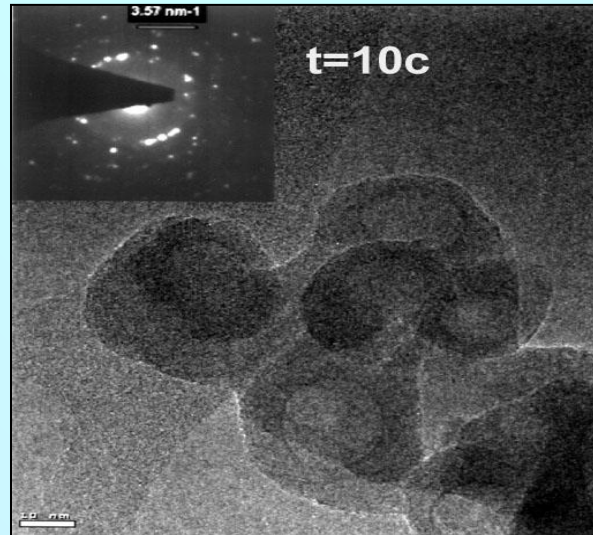
Закономерность I: Выделение твердого вещества из среды с высоким пересыщением происходит стадийно

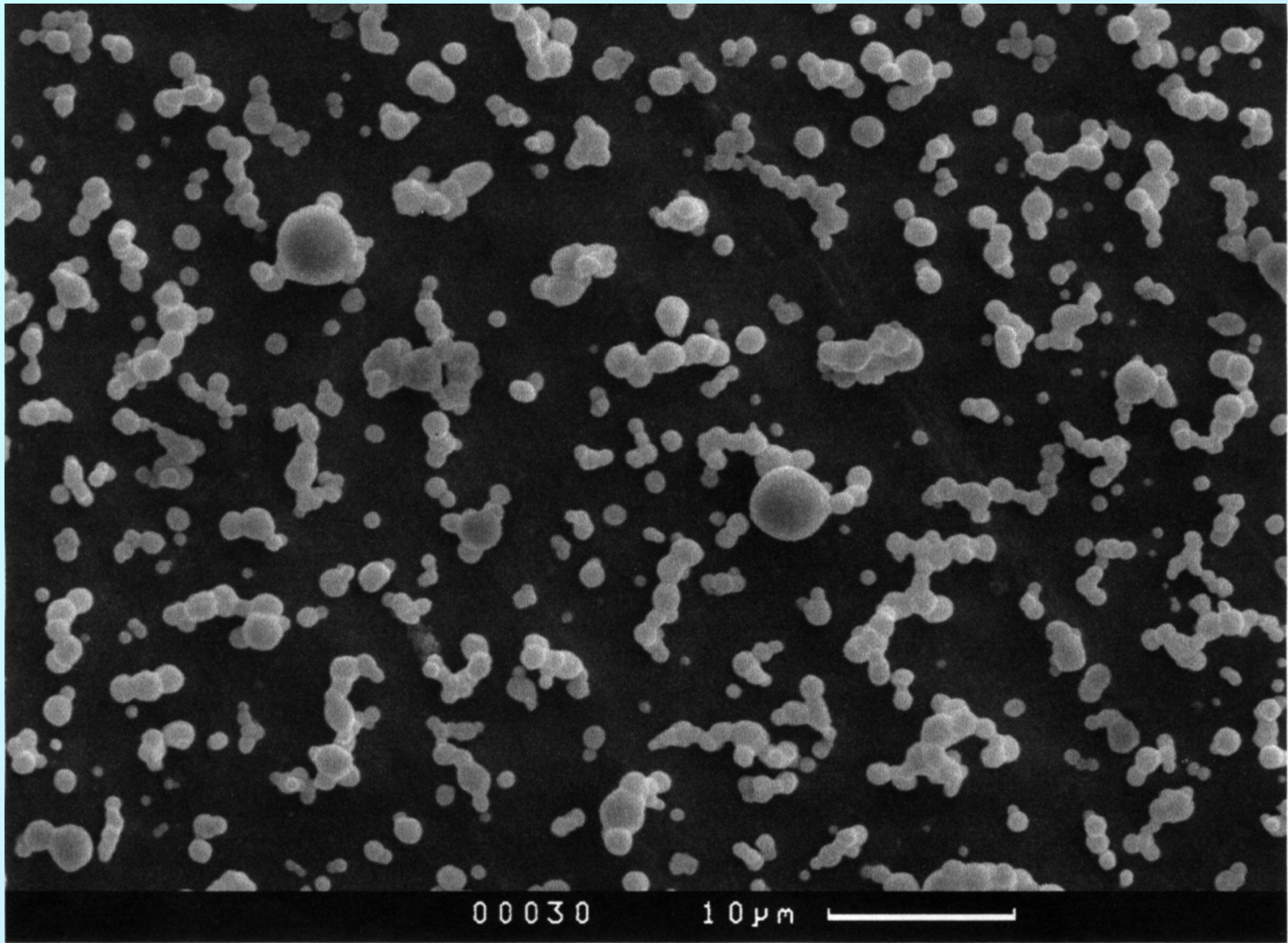
- Стадии**
- Зарождения и роста первичных нанокристаллов, $N_1 \gg N_2, N_3$
 - Образования агрегатов первого поколения, $N_2 \gg N_1, N_3$
 - Самосборка агрегатов с образованием агрегатов второго поколения, $N_3 \gg N_1, N_2$

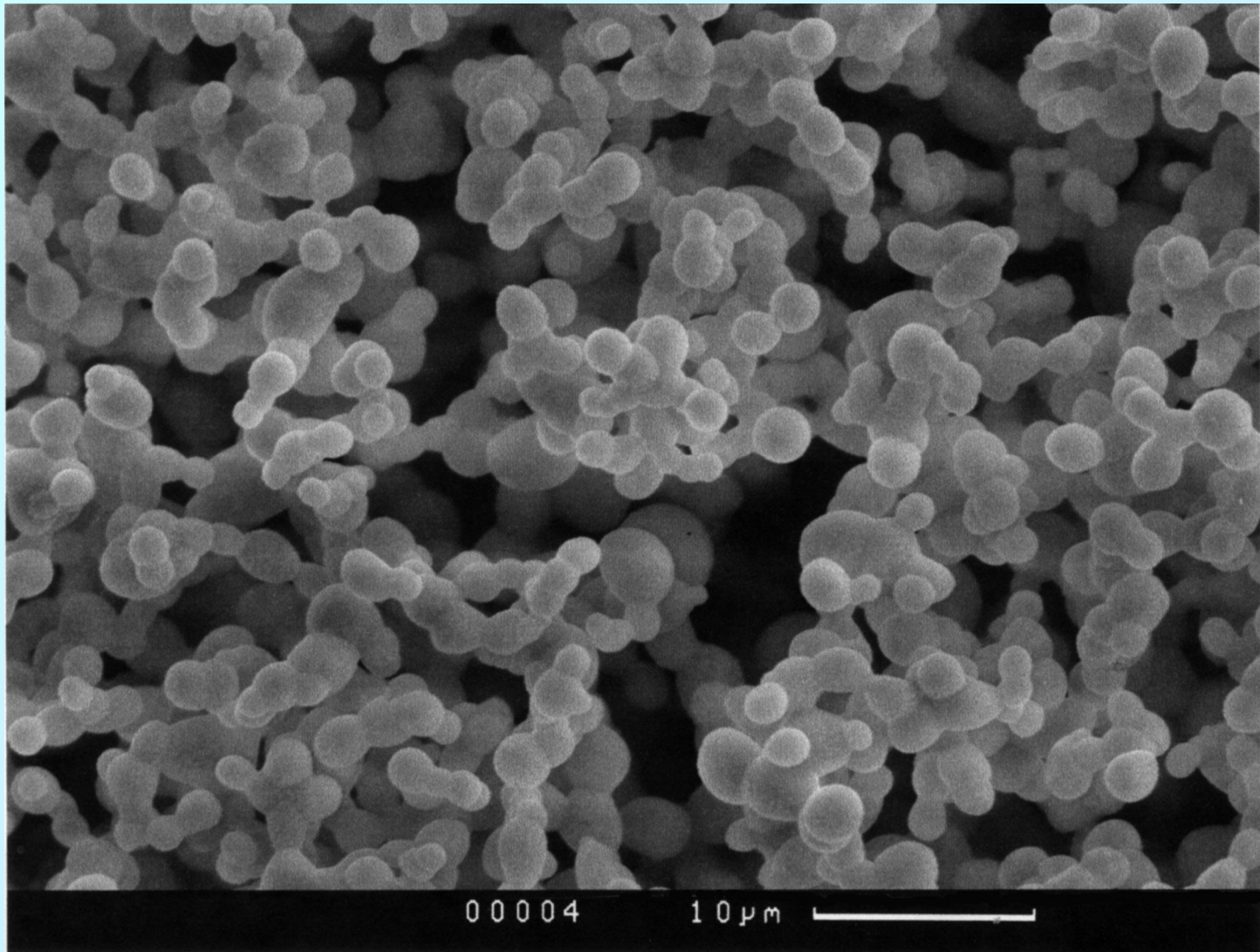


Изменение числа частиц в закрытой системе во времени

Морфологические формы наногидроксиапатита









Характеризация наноматериала

$$\bar{a} = \{a_1 \dots a_p\} \quad a_i = \frac{1}{N_q} \int_{\bar{x}} x_i \varphi_q(\bar{x}, t) d\bar{x} \quad \bar{x} = \{x_1 \dots x_p\}$$

x_i – размер, форма, состав, скорость движения, структура

$$\bar{b} = \{b_1 \dots b_p\} \quad b_i = \frac{1}{N_q} \int_{\bar{x}} b_i(x_i) \varphi_q(\bar{x}, t) d\bar{x}$$

$b_i(\bar{x})$ – интенсивность растворения, сорбции, топохимической реакции, адгезии

$$\varphi_q(\bar{x}, t) = \varphi_q(x_1) f_q(x_2, x_1)$$

$$\frac{\partial \varphi_q(x_1, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(D_q \frac{\partial \varphi_q}{\partial x_1} - G_q \varphi_q \right) + \omega_q$$

$$G_q = \sum_{q_1 < q} \Delta x_1 (\alpha_1 \alpha_2 N_{q_1} - \beta_{q_1}) \quad D_q = P_A G_q$$

Стадийность = отбор конфигураций с малыми β_q

Характеризация оптимальных форм наноматериалов

$$\overset{\boxtimes}{a} = \{a_1 \dots a_i \dots a_p\}$$

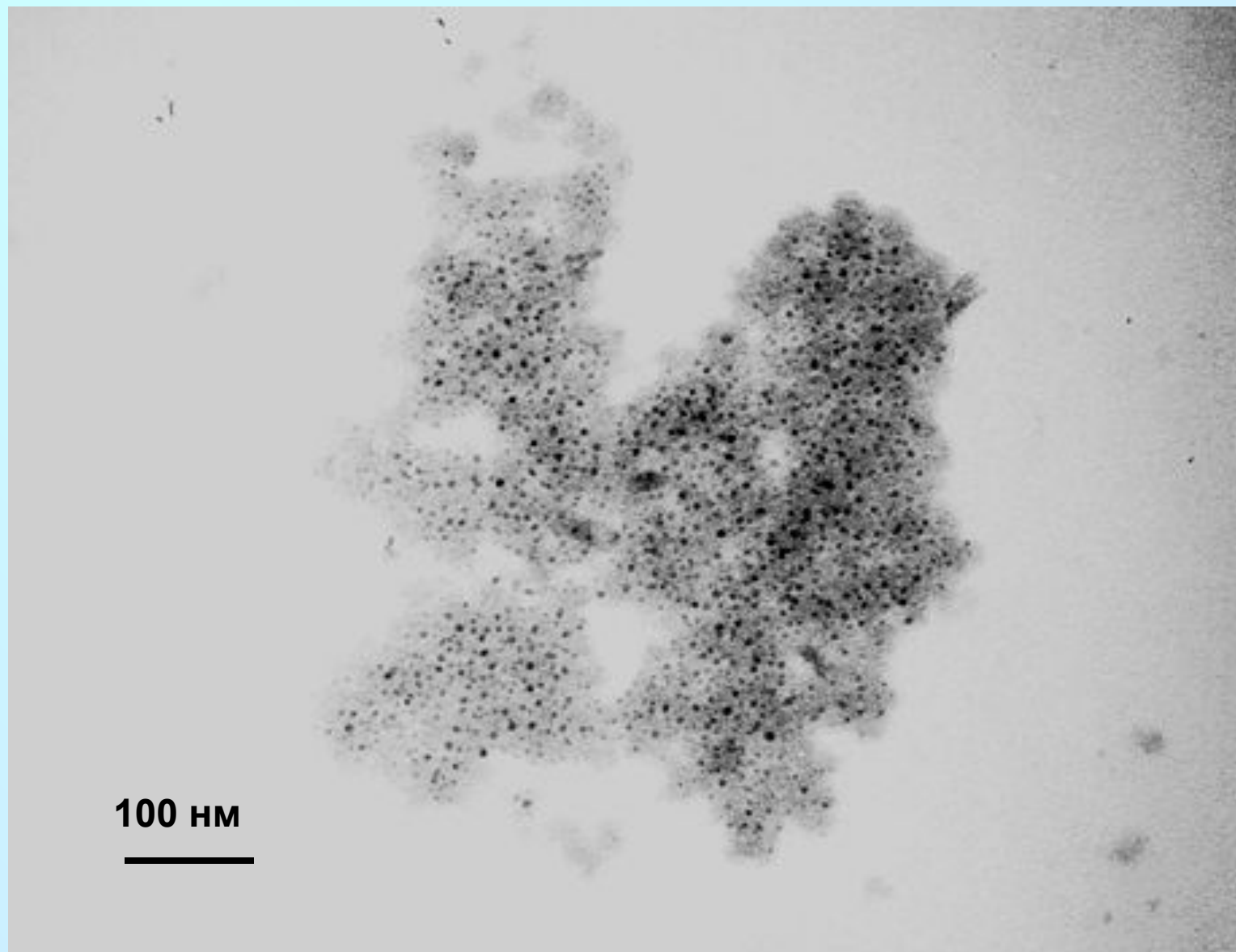
$$\overset{\boxtimes}{x} = \{x_1 \dots x_i \dots x_p\}$$

$$a_i = \int_{\overset{\boxtimes}{x}} (\omega_i z_i / m) \varphi(\overset{\boxtimes}{x}, t) d\overset{\boxtimes}{x}$$

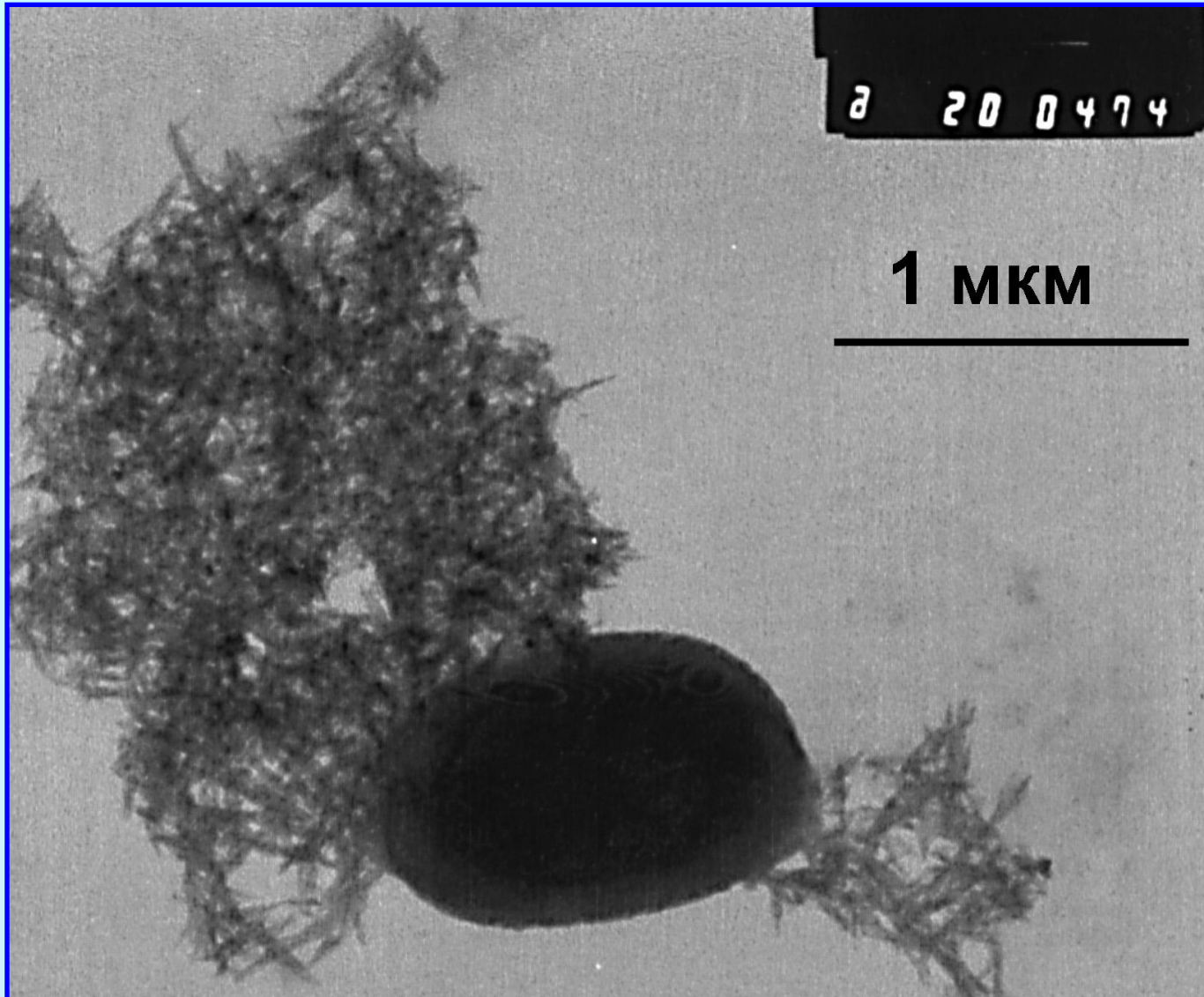
$$F = \overset{\boxtimes}{a} \left[\overset{\boxtimes}{b} (\overset{\boxtimes}{c}) \right]$$

ω_i – частота актов изменения a_i , $z_i = z_i(\overset{\boxtimes}{b})$ – элементарный скачок свойств

Наночастицы ГАП в коллагене

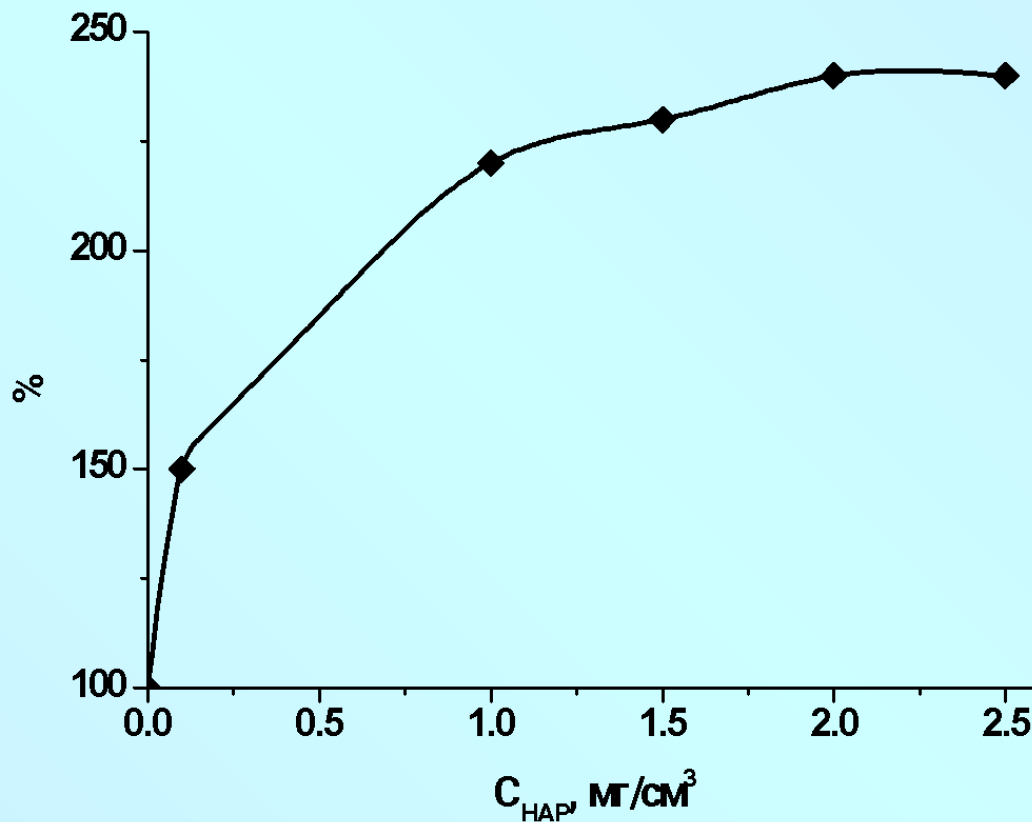


Наночастицы в биологических системах



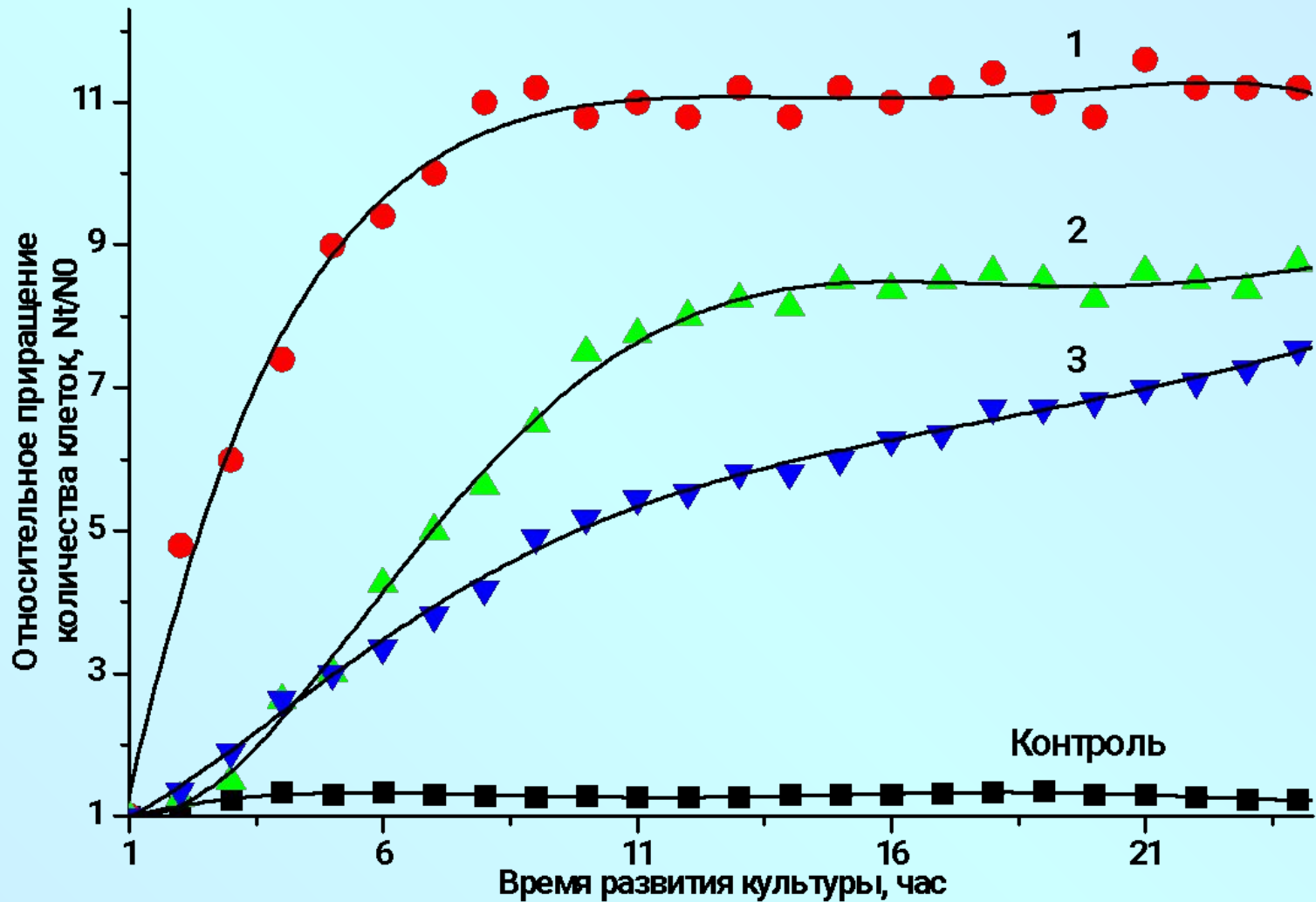
ГАП (5.5%) + бактерии рода *Streptococcus* (25°C)

Пролиферативная активность остеобластов (%) в зависимости от содержания наногидроксиапатита



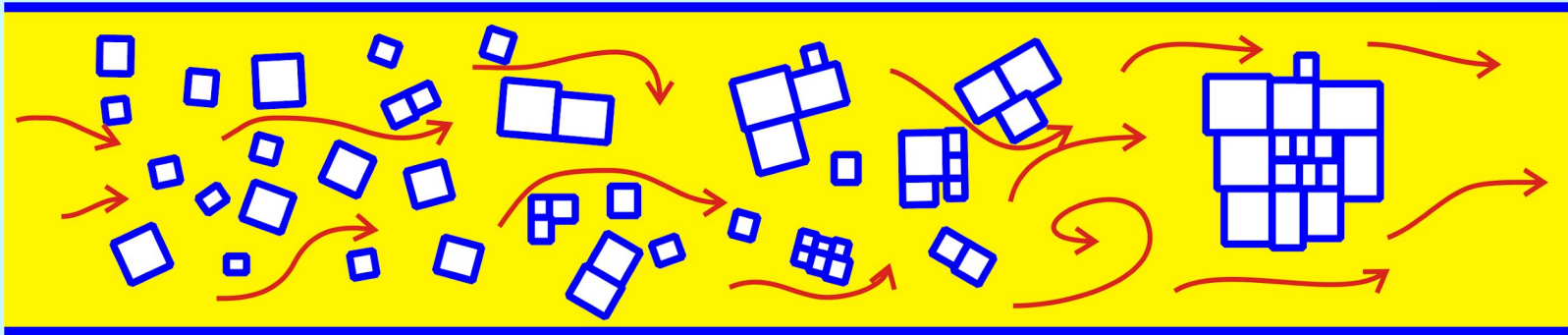
За 100 % взята пролиферативная активность остеобластов в отсутствии гидроксиапатита

Взаимодействие наногидроксиапатита с клетками бактерий



Изменение числа колониеобразующих единиц *Escherichia coli*, при культивировании на минимальной синтетической питательной среде М9 в присутствии суспензии гидроксиапатита с различным содержанием твердой фазы: 1 – 0.5%; 2 – 1.0%; 3 – 5.5%; контроль - без гидроксиапатита

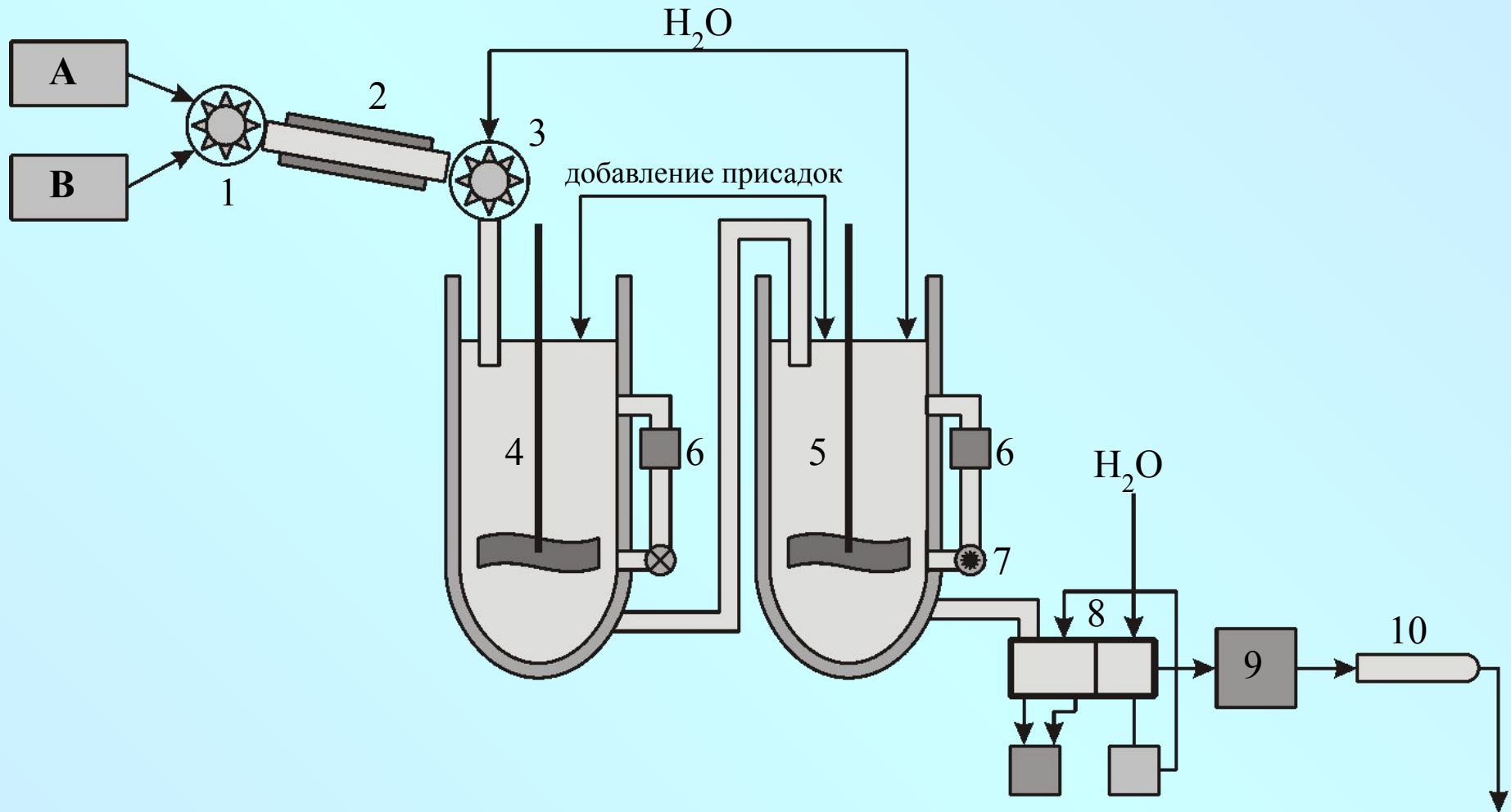
Самоорганизация в движущихся суспензиях



Частота отбора конфигураций

$$\omega = \frac{1}{6} v^{7/4} \varepsilon_0^{-1/4} \left(l_H L^2 \right)^{-1} \int_{l_H}^{l_B} (1 + Z) x^{-3} dx$$

Принципиальная схема получения дисперсного продукта



1 – скоростной смеситель, 2 – реактор, 3 – смеситель, 4 – кристаллизатор I, 5 – кристаллизатор II, 6 – узел термического воздействия, 7 – узел ультразвуковой обработки (РАМП), 8 – фильтр, 9 – смеситель промытого осадка с водой, 10 – вакуумная распылительная сушка.

(В.Н. Рудин, 2005)