

Улсын бүртгэлийн дугаар  
9095578

Нууцын зэрэглэл: Б

Аравтын бүрэн  
ангилалын код

Сэдэвт ажлыг хэрэгжүүлэх  
гэрээний дугаар: ШуСс\_2018/22

## ШИНЖЛЭХ УХААНЫ АКАДЕМИ ФИЗИК ТЕХНОЛОГИЙН ХҮРЭЭЛЭН

# НАНО-СОРОНЗОНГИЙН ОНЦЛОГ, ТҮҮНИЙГ ХАВДРЫН ЭМЧИЛГЭЭНД ХЭРЭГЛЭХ БОЛОМЖ

Шинжлэх ухаан технологийн төслийн тайлан

2018 – 2021

Төслийн удирдагч: ..... Д.Сангаа, ШУ-ны доктор (ScD)

Санхүүжүүлэгч байгуулага: Шинжлэх ухаан технологийн сан

Захиалагч байгуулага: Боловсрол, шинжлэх ухааны яам

Тайлан өмчлөгч: Физик, Технологийн Хүрээлэн  
Энхтайваны Өргөн чөлөө 54Б.  
Улаанбаатар 13330, Монгол улс  
Утас: 99194346,  
Э-хаяг: dsangaa@gmail.com

Улаанбаатар  
2022

**Сэдэвт ажлын гүйцэтгэгчид:**

**Сэдвийн удирдагч:**

Д.Сангаа ШУА-ийн ФТХ-ийн Функциональ материалын лабораторийн эрдэм шинжилгээний ажилтан, Академич

**Үндсэн гүйцэтгэгчид:**

Н.Жаргалан ШУА-ийн ФТХ-ийн Функциональ материалын лабораторийн эрдэм шинжилгээний ахлах ажилтан, Доктор

Э.Уянга ШУА-ийн ФТХ-ийн Функциональ материалын лабораторийн эрдэм шинжилгээний ахлах ажилтан, Доктор

И.Хишигдэмбэрэл ШУА-ийн ФТХ-ийн Функциональ материалын лабораторийн эрдэм шинжилгээний дэд ажилтан, Докторант

Б.Хонгорзул ШУА-ийн ФТХ-ийн Функциональ материалын лабораторийн эрдэм шинжилгээний дэд ажилтан, Докторант

Б.Энхмэнд ШУА-ийн ФТХ-ийн Функциональ материалын лабораторийн эрдэм шинжилгээний дэд ажилтан, Магистр

**Гэрээт ажилтан:**

Э.Дамдинсүрэн МУИС, ШУС, Байгалийн ухааны сургууль, Доктор

Д.Одхүү БНСУ-ын Инчеоны улсын их сургууль, Доктор, Проф

Э.Баянжаргал ШУА-ийн ФТХ-ийн Багажит анализын лаборатори, Инженер

Ч.Энхболд ХСҮТ-ийн эмч, Анагаах ухааны доктор

**Хамтран ажилласан гадаад, дотоодын их дээд сургууль, лабораториуд:**

ШУА –ийн Биологийн Хүрээлэн;

ОХУ –ын Дубнагийн Цөмийн Шинжилгээний Нэгдсэн Институт;

ОХУ –ын Москвагийн Улсын Их Сургууль;

Япон улсын Нийхамагийн технологийн институт

## РЕФЕРАТ

Шинжлэх ухаан, технологийн сантай байгуулсан SST\_2018/22 тоот гэрээний дагуу “Нано-соронзонгийн онцлог, түүнийг хавдрын эмчилгээнд хэрэглэх боломж” суурь судалгааны төсөл ШУА-ийн Физик, технологийн хүрээлэн дээр 2018-2020 онд хэрэгжсэн. Төслийн зорилго нь холимог металл агуулсан соронзон нано материалын дотоод тогтцын зүй тогтол, соронзон шинж чанарыг квант механикийн онолоор болон атомын бүтцийн рентген дифракц, нил улаан туяаны спектрометрийн аргаар судлах явдал юм.

Соронзон шинж чанартай нано материалыг анагаах ухаанд хавдрын халуун эмчилгээ, соронзон резонанс зураг (MRI) оношлогоо, эмийн эмчилгээ, Дезоксирибонуклейны хүчил (ДНХ) болон эсийн нарийвчилсан ялгах шинжилгээ зэрэг чиглэлүүдээр ашиглаж байна. Тэр дундаа ферритүүд ( $MFe_2O_4$ ,  $M = Mn, Ni, Co, Cu, Mg, Zn, Fe$  г.м.) нь хольц элемент ашигласнаар соронзон шинж чанарыг нь өөрчилж, дулаан ялгаруулах чадамжийг удирдаж болдог учир өргөнөөр судлагдаж байна [1, 2].

Төслийн хүрээнд хэрэгжүүлсэн судалгааны ажлын хүрээнд бид дараах үр дүнгүүдийг гарган авлаа. Үүнд:

- Энгийн болон урвуу шпинел бүтцийн тохиолдолд феррит нэгдлийн электрон бүтэц, соронзон шинж чанарын онолын судалгааг гүйцэтгэснээр магни болон төмрийн атомуудын байрлал тетраэдр болон октаэдр байрлалд хэрхэн суухаас түүний соронзон шинж чанар хүчтэй хамаарч байгааг тооцоолон гаргав.
- Төмөр агуулсан феррит нэгдлүүдийг гарган авах химийн синтезийн горимыг тогтоох ажлыг гүйцэтгэв. Золь-гелийн аргаар гарган авсан  $MgFe_2O_4$  дээж нь куб шпинел бүтэцтэй, ямар нэгэн хольц байхгүй цэвэршилт өндөртэй, кристаллитын хэмжээ тохиромжтой (~50нм), дулаан дулаан ялгаруулах чадамж өндөр ( $42^\circ$ ) байв.
- Цэвэр магнийн ферритийн кристалл бүтцийн А болон В дэд торуудад орших катионуудыг соронзон болон соронзон бус шинж чанартай элементүүдээр хольцлох замаар катионы түгэлт, бүтэц, шинж чанарыг удирдах судалгааг явуулав.

- Дээрх судалгааны ажлуудад үндэслэн хамгийн өндөн дулаан ялгаруулах чадамж бүхий феррит нано материалыг хавдрын эс дээрх туршилтыг гүйцэтгэв. Бид судалгаандаа хүний умайн хүзүүний хавдрын эсийг сонгон авч  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  соронзон шинж чанар бүхий нано ферритийг ашиглан эсийн амьдрах чадварын үнэлгээг хийлээ.
- Өөрсдийн угсарсан соронзон орон үүсгэгч төхөөрөмжөөр халалт үүсгэж эсийн ургалтыг дарангуйлж байгаа эсэхийг судлан үзэхэд бидний гарган авсан феррит нано бөөм нь HeLa эсийн ургалтыг 16.8% -иар дарангуйлж байв.

Төслийн үр дүнгээр эрдэм шинжилгээний эрдэм шинжилгээний өгүүлэл – 15, мэргэжлийн ном – 1, танин мэдэхүйн ном – 1 хэвлүүлж, эрдэм шинжилгээний илтгэл 9-ийг хэлэлцүүлснээс 4-ийг олон улсын хуралд илтгэсэн байна. Мөн 1 судлаач “Магни болон Зэсийн феррит нэгдлүүдийн соронзон шинж чанарын онолын судалгаа” сэдвээр физикийн магистрын зэрэг хамгааллаа.

**Түлхүүр үг:** Феррит; шпинель бүтэц; хольц; кристалл болон молекул бүтэц; стехиометрийн харьцаа; DFT тооцоолол; хавдрын эс

## АГУУЛГА

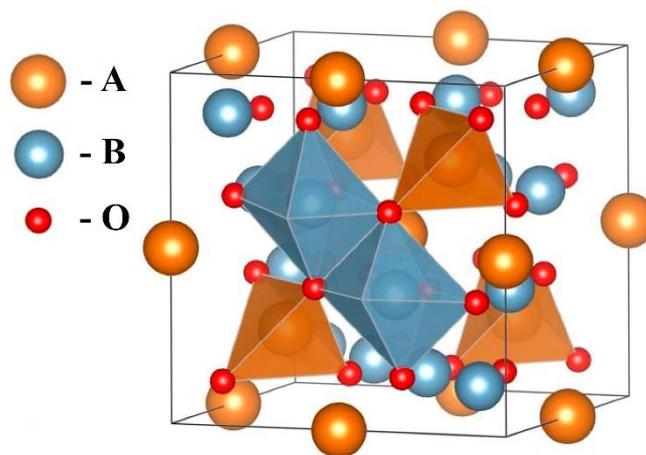
<b>НЭГ. СОРОНЗОН НАНО МАТЕРИАЛЫН ОНЦЛОГ</b> .....	7
1.1. Шпинел феррит нэгдлүүд .....	7
1.2. Феррит нано материалын дулаан ялгаруулах үзэгдэл .....	12
1.3. Дулаан ялгарах үзэгдлийг судлах арга зүй.....	16
<b>ХОЁР. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ</b> .....	18
2.1. Феррит нано материал гарган авах аргууд.....	18
2.2. Бүтцийн судалгааны арга зүй .....	20
2.3. Хувьсах соронзон орон үүсгэх төхөөрөмж.....	21
<b>ГУРАВ. ФЕРРИТ НАНО МАТЕРИАЛЫН ОНОЛЫН СУДАЛГАА</b> .....	25
3.1. Онолын тооцооны аргачлал .....	25
3.2. $MgFe_2O_4$ -ийн онолын тооцооны үр дүн .....	27
3.3. $Y_3Fe_5O_{12}$ , $Y_3Al_5O_{12}$ нэгдлүүдийн онолын судалгаа .....	30
3.4. Дүгнэлт .....	35
<b>ДӨРӨВ. ФЕРРИТ НАНО МАТЕРИАЛЫН БҮТЭЦ, ШИНЖ ЧАНАРЫН СУДАЛГАА</b> .....	36
4.1. Магнийн феррит нэгдлийн судалгаа .....	36
4.2. Зэсийн феррит нэгдлийн судалгаа.....	41
4.3. Зэс-магнийн холимог ( $Mg_{1-x}Cu_x$ ) $Fe_2O_4$ нэгдлийн судалгаа.....	45
4.4. Хөнгөн цагаан-төмрийн $Mg(Al_xFe_{2-x})O_4$ нэгдлийн судалгаа .....	51
4.5. Дүгнэлт .....	55
<b>ТАВ. ФЕРРИТ НАНО МАТЕРИАЛЫН ХЭРЭГЛЭЭ</b> .....	57
5.1. Хорт хавдрын өнөөгийн тоо баримт.....	57
5.2. Хорт хавдрын эмчилгээний аргууд.....	58
5.3. Гипертерм эмчилгээний зарчим.....	61
5.4. Феррит нэгдлийг хаврын эмчилгээнд туршсан судалгаа.....	62
5.5. Дүгнэлт .....	69

## НЭГ. СОРОНЗОН НАНО МАТЕРИАЛЫН ОНЦЛОГ

### 1.1. Шпинел феррит нэгдлүүд

Төмрийн исэл  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  бусад металлын исэлтэй нэгдэн үүсгэсэн химийн нэгдлийг феррит гэж нэрлэнэ. Феррит нэгдлийг кристалл бүтцээр нь шпинел-феррит, гранат-феррит, гекса-феррит, орто-феррит гэж ангилна. Эдгээрт шпинел-феррит нь кристалл куб тортой, огторгуйн групп  $Fd\bar{3}m$ ,  $M\text{Fe}_2\text{O}_4$ , (M-хоёр валент бүхий металл ион) гэсэн ерөнхий томьёотой, гранат-феррит куб бүтэцтэй, огторгуйн групп  $Ia\bar{3}d$ ,  $\text{Me}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$  (Me-газрын ховор элемент) ерөнхий томьёотой, гекса-феррит нь гексагональ тортой, огторгуйн групп  $P63/mmc$ ,  $\text{MeFe}_{12}\text{O}_{19}$  ерөнхий томьёотой, орто-феррит төрөл нь ромбо кристалл тортой, огторгуйн групп  $R\bar{3}m$ ,  $\text{MeFe}_3\text{O}_4$  ерөнхий томьёотой нэгдлүүд байдаг.

Шпинел бүтэц нь  $A^{2+}B_2^{3+}O_4^{2-}$  (A, B нь металл ионууд, O хүчилтөрөгчийн ион) гэсэн ерөнхий томьёотой байдаг агаад  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  минералын нэрээр “шпинел” гэж нэрлэжээ. Бүтцийн хувьд 8 томьёоны нэгжтэй, эгэл торондоо нийт  $8 \times 7 = 56$  ионтой. Хүчилтөрөгчийн ионууд (радиус ойролцоогоор 0.13нм) талд төвлөсөн куб байрлалд багцлагдаж, харьцангуй жижиг металл ион (радиус ойролцоогоор 0.07 – 0.08нм) нь тэдгээрийн хоорондох зайд байрлана (Зураг 1.1). Энэ зай нь 2 янз байдаг. Эхнийх нь тетраэдр буюу A байрлал, энэ байрлал нь булангуудад нь хүчилтөрөгчийн ионууд суусан дөрвөн талтын төвд байрлана. Хоёрдох нь октаэдр буюу B байрлал, энэ байрлал нь булангуудад нь хүчилтөрөгчийн ионууд суусан найман талтын төвд байрлана [3].



Зураг 1.1. Феррит нэгдлийн кристалл бүтэц

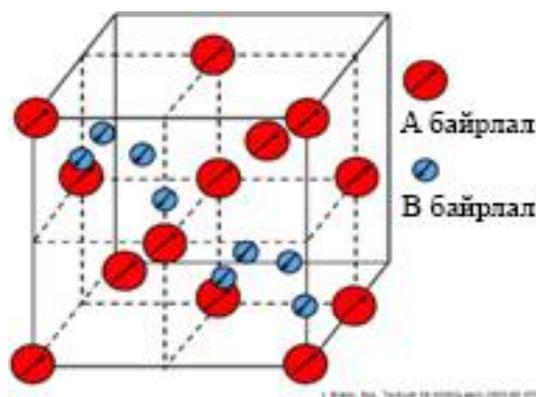
Шпинел бүтцийн шинж чанар эгэл тор доторх катионы түгэлтээс ихээхэн хамааралтай байдаг.  $(A_{(1-\delta)}^{(2+)}Fe_{\delta}^{(3+)})^{Tet}(A_{\delta}^{(2+)}Fe_{(2-\delta)}^{(3+)})^{Oct}O_4$  ерөнхий томъёотой шпинел бүтцийн бүх боломжит байрлалууд металл ионоор дүүргэгддэггүй, тетраэдр (A) ба октаэдр (B) байрлалд ионууд холилдон байршина. Түүний харьцааг инверсийн параметр гэж нэрлэдэг  $\delta$  хэмжигдэхүүн тодорхойлно. Уг параметр  $0 \leq \delta \leq 1$  утга авна. Тухайлбал, зөвхөн A байрлалын 1/8, B байрлалын 1/2 нь дүүргэгдсэн байна (Хүснэгт 1.1).  $MFe_2O_4$  ерөнхий томъёотой бүтцийн, бүх металлын ион  $M^{2+}$  нь A байрлалд,  $Fe^{3+}$  нь B байрлалд ( $\delta = 0$ ) байвал энэ бүтцийг энгийн (нормаль) шпинел гэнэ. Урвуу шпинел ( $\delta = 1$ ) гэдэгт хоёр валент бүхий  $M^{2+}$  ионууд B байрлалд, харин гурван валент бүхий  $Fe^{3+}$  ионууд A, B байрлалд хуваагдан байрладаг.  $MFe_2O_4$  (M=Fe, Co, Ni) төмөр, кобальт, никел ферритүүд нь урвуу бүтэцтэй бөгөөд бүгд феррисоронзон юм. Шпинел бүтэцтэй нэгдлүүдийг рентген болон нейтрон дифракцын аргаар судлахад ихэнх тохиолдолд дундын бүтэц  $0 \leq \delta \leq 1$  ажиглагддаг тул энгийн болон урвуу бүтцийг онцгой нөхцөл гэж үздэг.

**Хүснэгт 1.1.**  $MO \cdot Fe_2O_3$  ферритийн тор дахь металл ионуудын түгэлт

Байрлал	Боломжит тоо	Байрлах тоо	Байрлах ион	
			Энгийн шпинел	Урвуу шпинел
Тетраэдр A)	64	8	$8M^{2+}$	$8Fe^{3+}$
Октаэдр B)	32	16	$16Fe^{3+}$	$8Fe^{3+}$ $8M^{3+}$

Феррит материалын соронзон бүтцийг Зураг 1.2-т үзүүлэв. Ерөнхийдөө AB, AA, BB харилцан үйлчлэлүүд нь бүгд сөрөг шинж чанартай байдаг ч энэ нь нэгэн зэрэг тийм байх боломжгүй юм. AB харилцан үйлчлэл нь хамгийн хүчтэй ба бүх A моментууд нь хоорондоо параллель бөгөөд B моментуудтай эсрэг параллель байх зүй тогтолтой.  $CoFe_2O_4$  нэгдлээс бусад бүх ферритийн моментуудын кристаллографийн чиглэл нь  $\langle 111 \rangle$  байх ба энэ нь эгэл торын диагональ дагуу гэсэн үг.  $CoFe_2O_4$  нэгдлийн хувьд моментууд нь куб торын  $\langle 100 \rangle$  чиглэлтэй параллель байдаг.

$\text{NiFe}_2\text{O}_4$  нэгдлийн Ni-ийн хувьд бүтэц нь урвуу  $\text{Ni}^{2+}$  ионууд В байрлалд,  $\text{Fe}^{3+}$  ионууд нь А, В байрлалд тэнцүү хуваагдан байрлана. Иймээс  $\text{Fe}^{3+}$  моментууд усталцаад, Ni-ийн моментууд нийт моментыг бүрдүүлнэ ( $2\mu_B$ ). Эндээс үзэхэд урвуу шпинел ферритийн хувьд дивалент ионы момент нь соронзон ханалтыг илэрхийлнэ. Мөн Mn ферритийн хувьд урвуу биш ч нийт момент нь  $5\mu_B$  гэж гардаг ба энэ нь  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$  аль аль нь  $5\mu_B$  моменттой тул А, В -д хэрхэн тархсанаас үл хамааран  $5\mu_B$  байна. Харин Zn феррит нь энгийн бүтэцтэй, 0 моменттой  $\text{Zn}^{2+}$  ионууд А байрлалыг дүүргэн байрлана (Хүснэгт 1.2). Иймд АВ харилцан үйлчлэл байхгүй.



**Зураг 1.2.** Феррит материалын соронзон бүтэц

**Хүснэгт 1.2.** Феррит нэгдлүүдийн соронзон моментын утгууд

Феррит	$\text{MnFe}_2\text{O}_4$	$\text{FeFe}_2\text{O}_4$	$\text{CoFe}_2\text{O}_4$	$\text{NiFe}_2\text{O}_4$	$\text{CuFe}_2\text{O}_4$	$\text{ZnFe}_2\text{O}_4$
Хэмжсэн $\mu_B$	5	4	3	2	1	0
Тооцоолсон $\mu_B$	4.6	4.1	3.7	2.3	1.3	0

Сөрөг ВВ харилцан үйлчлэлээр В байрлал дахь  $\text{Fe}^{3+}$  ионууд антипараллел, нийт моментгүй болно (Зураг 1.3). Эндээс Zn нь антиферросоронзон материал гэж үзэж болох ба энэ нь зөвхөн 9К-ээс бага температурт л ийм шинж чанартай.



**Зураг 1.3.** А болон Б байрлал дахь төмрийн соронзон моментийн чиглэлийн хамаарал

ВВ харилцан үйлчлэл маш сул бөгөөд багахан дулааны энерги ч моментуудыг антипараллел жагсахад саад болдог. А, В байрлал дахь моментууд нь антипараллел байдаг ба үүнийг Хүснэгт 1.3. -т харуулав.

**Хүснэгт 1.3. Зарим ферритийн хувьд ион тархалт болон нийт соронзон момент**

Жишээ	Бүтэц	Материал	Тетраэдр		Октаэдр		Нийт момент ( $\mu_B$ /молекул)
			А байрлал		В байрлал		
1	Урвуу	$NiFe_2O_4$	$Fe^{3+}$		$Ni^{2+}$	$Fe^{3+}$	2
		Тоо ширхэг	5		2	5	
		Чиглэл	→		←	→	
2	Энгийн	$ZnFe_2O_4$	$Zn^{2+}$		$Fe^{3+}$	$Fe^{3+}$	0
			0		5	5	
					←	→	
3	Бараг урвуу	$MgFe_2O_4$	$Mg^{2+}, Fe^{3+}$		$Mg^{2+}$	$Fe^{3+}$	1
		Тоо ширхэг	0	4.5	0	5.5	
		Чиглэл	→			←	
4	Урвуу	$0.9NiO Fe_2O_3$	$Fe^{3+}$		$Ni^{2+}$	$Fe^{3+}$	1.8
		Тоо ширхэг	4.5		1.8	4.5	
		Чиглэл	→		←	←	
	Энгийн	$0.1ZnO Fe_2O_3$	$Zn^{2+}$		$Fe^{3+}$	$Fe^{3+}$	1.0
		Хэмжээ	0		0.5	0.5	
		Чиглэл			←	←	
		Тоо ширхэг	4.5		7.3		2.8
		Чиглэл	→		←		

Магнийн феррит  $MgFe_2O_4$ -ийг сонирхъё. Mg нь бүрэн урвуу биш учир дивалент ион болох  $Mg^{2+}$  ион нь нийт 0 моменттой байдаг. Учир нь  $Mg^{2+}$  ионы 0.1 нь А байрлалд байдаг ба ингэснээр А байрлал дахь ион  $0.9 \times (5) \mu_B = 4.5 \mu_B$  болох ба харин В байрлалынх  $1.1 \times (5) \mu_B = 5.5 \mu_B$  болж нийт момент  $1 \mu_B$  болно. Энэ нь туршлагын утгатай ( $1.1 \mu_B$ ) таардаг.

Цайр агуулсан холимог ферритүүдийн хувьд нэг сонирхолтой зүйл нь соронзжилтгүй  $Zn^{2+}$ -ийн нэмэлт нь соронзон моментыг ихэсгэдэг. Үүнийг (Хүснэгт 1.3.) 4 дэх жишээн дэх 10 мол% Zn феррит агуулсан 90 мол% Ni –ийн холимог ферритийн нийт моментоос харж болно. 0 моменттой  $Zn^{2+}$ -ийн ионууд цэвэр Zn –ийн ферритийн адил А байрлалд очсоноор А байрлалын момент суларч, Zn ферритийн  $Fe^{3+}$  ионууд хүчтэй АВ харилцан үйлчлэлээр В байрлал дахь моменттой параллель моменттой болно. Ингэснээр нийт момент цэвэр Ni ферритийн хувьд  $2.0\mu_B$  байдаг, холимог ферритийн хувьд  $2.8\mu_B$  болж өсдөг. Хэрэв ийм байдлаар 10 мол% тутамд  $0.8\mu_B$  –аар өсөж байвал цэвэр Zn феррит  $10\mu_B$  моменттой байхаар харагдаж байна.

Феррит шпинел нэгдлийн соронзон шинж чанар нь ион бүрийн соронзон момент, А, В байрлал дахь ионуудын түгэлт, харилцан үйлчлэлээс хамаарна. Бидний судалгаагаар холимог кристалл бүтэц бүхий  $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$  нэгдлийн соронзон шинж чанар нь  $MgFe_2O_4$  ба  $CuFe_2O_4$  нэг төрлийн шпинел бүтэц бүхий нэгдлээс эрс ялгаатай байдаг (Хүснэгт 1.4).

**Хүснэгт 1.4.** Ферритүүд дэх соронзон болон бусад өгөгдлүүд

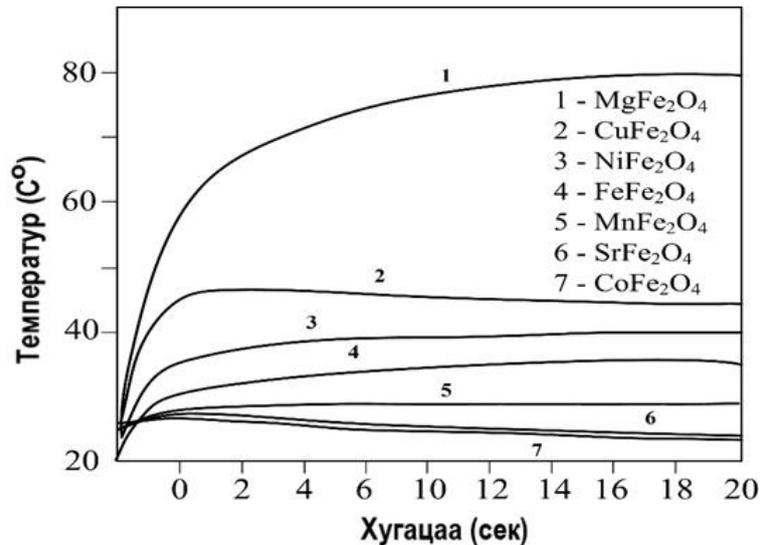
Нэгдэл	Торын параметр, а (нм)	Нягт (г/см <sup>3</sup> )	0К		20° С		T <sub>c</sub> (°С)
			$\sigma_0$ (эму/г)	M <sub>0</sub> (эму/см <sup>3</sup> )	$\sigma_s$ (эму/г)	M <sub>s</sub> (эму/см <sup>3</sup> )	
MnFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.85	5.00	112	560	80	400	300
FeFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.839	5.24	98	510	92	480	585
CoFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.838	5.29	90	475	80	425	520
NiFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.834	5.38	56	300	50	270	585
CuFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.837 <sup>a</sup>	5.41	30	160	25	135	455
MgFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.836	4.52	31	140	27	120	440
BaFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	a=0.588 c=2.32	5.28	100	530	72	380	450
Fe	0.287	7.87	222	1747	218	1714	770

## 1.2. Феррит нано материалын дулаан ялгаруулах үзэгдэл

Феррит  $MFe_2O_4$  ( $M = Mn, Ni, Co, Cu, Mg, Ni, Fe$ ) соронзон нано бөөмсийн (ихэвчлэн 5-100 нм хэмжээтэй) соронзон шинж чанар нано бөөмсийн хэмжээ, хэлбэрээс хамаардаг онцлогтой учир хими, физик, биологийн шинжлэх ухааны огтлол дээр ихээхэн сонирхол татаж байна. Түүнээс гадна нано хэмжээсийн орчимд соронзонд байдаг коэрцитив хүч ( $H_c$ ), ханалтын соронзжилт ( $J_s$ ) ба соронзон мэдрэх чадвар ( $\chi$ ) зэрэг хэмжигдэхүүн нь соронзон нано бөөмийн хэмжээ, хэлбэр, бүтэц зэргээс хүчтэй хамаарч байдаг. Энэхүү өвөрмөц соронзон шинж чанар, жижиг хэмжээ, био нийцтэй байдал зэрэг нь тэдгээрийг тухайлбал, соронзон резонансын дүрслэл (MRI)-ийн тодосгогч байдлыг сайжруулах, эмийн бодисын нано хэмжээт зөөгч болгох, цахилгаан соронзон энергийг дулааны энергид хувиргах, соронзон чиглүүлэгч ба био мэдрэгч бодис болгох зэргээр био-анагаахын салбарт төрөл бүрийн зориулалтаар өргөнөөр ашиглах боломж олгодог [4].

Орчин үед хавдрыг эмчлэх янз бүрийн аргууд хэрэглэж байгаа боловч, бусад эрхтэнд гэмтэл учруулахгүйгээр эмчилгээ хийх үр дүнтэй арга хараахан нээгдээгүй байна. Тэгвэл хавдрын халуун эмчилгээ буюу “hyperthermia” нь соронзон нано бөөмийг өвчний голомтод хүргэж, өндөр давтамжтай хувьсах соронзон оронгоор үйлчилснээр, дулаан ялгаруулж бусад эрүүл эсэд нөлөөлөлгүй зөвхөн хавдрын эсийг устгадаг дэвшилтэт арга юм. Энэ аргад соронзон феррит материалуудыг хэрэглэж жижиг биетэй амьтдын хавдрыг амжилттай эмчилж байгаа боловч хүний биед хэрэглэхэд хангалттай хэмжээний дулаан ялгаруулж чадахгүй дутагдалтай тал илэрсэн [5-7].

Өмнө хийгдсэн судалгааны үр дүнгүүдээс үзэхэд  $MgFe_2O_4$  феррит нэгдэл нь бусад феррит нэгдлүүдтэй харьцуулахад хувьсах соронзон оронд хамгийн их дулаан ялгаруулж байсан (Зураг 1.4). Тухайн нэгдлийн дулаан ялгаруулах чадамжид бөөмийн хэмжээ, морфологи, кристалл болон соронзон бүтцээс гадна тетраэдр болон октаэдр байршил дахь ионуудын түгэлт зэрэг нь чухал нөлөөтэй болох нь өмнөх судалгаануудаар тогтоогдсон байна.



**Зураг 1.4.** Феррит материалуудын дулаан ялгаруулах чадамж

Холимог шпинел ферритийн тохиолдолд хоёр ба түүнээс дээш катионыг агуулах бөгөөд тухайн материалуудын шинж чанарыг өөрчлөн сайжруулах боломжийг олгодог байна.  $MgFe_2O_4$  нэгдлийг  $Ca, Sr, Cu, Mn, Si, Ni$  элементүүдээр хольцлон шинж чанарыг нь сайжруулах судалгаанууд хийгдээд байна.

### 1.2.1. Неелийн болон Брауны релаксац

Ихэнх тохиолдолд нано бөөмсийн соронзжилт жигдэрсэн тэр чиглэлүүдэд шинж чанар нь үргэлж давуу байдаг бөгөөд эдгээр чиглэлд нанобөөмс анизотроп шинжтэй гэж үздэг. Хэрэв зөвхөн нэг чиглэл илүү давамгайл бол нэг тэнхлэгт анизотроп гэж ярьдаг. Нэг тэнхлэгт анизотроп шинжтэй нано бөөмсийн хувьд дулааны энергийн нөлөөгөөр санамсаргүй байдлаар соронзжилтын чиглэл сонгон байршихыг эрмэлзэн “савлана”. Энэ процесс нь нэгдүгээрт, соронзон моментын чиглэл өөрчлөгдөх, хоёрдугаарт, бөөм өөрийн тэнхлэгээ тойрон эргэх гэсэн 2 төрлийн механизмаар явагддаг. Тэдгээрийг Неел (Néel relaxation) ба Браун (Brownian relaxation) процесс гэж нэрлэнэ. Энэ савлах эффектийн дундаж хугацаа нь релаксацын хугацаа гэж нэрлэгддэг  $\tau$ -аар тодорхойлогдоно [8]:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{E_a}{k_B T}\right). \quad (1.1)$$

Энд  $\tau_0$  – судалж байгаа материалаас хамаарах тогтмол хугацаа. Энэ хэмжигдэхүүний утга нь  $10^{-9}$ - $10^{-12}$  сек.  $E_a = KV$  нь дулааны энергийн тусламжтайгаар давж соронзжилт

явагдах энергийн саад буюу анизотроп энерги,  $V$ - нано бөөмийн эзлэхүүн,  $k_B$ - Больцманы тогтмол,  $T$ -температур.

Аливаа физик хэмжигдэхүүнийг хэмжиж байгаа хэмжилтийн багаж төхөөрөмж нь тухайн физик утгыг хамгийн бага хугацаанд хэмжиж амжих  $t_m$  хэмжилтийн хугацаатай байдаг. Савлалтын хоорондох дундаж хугацаа хэмжилтийн хугацаанаас их байвал  $t_m \ll t$  нано бөөмс цоожлогдсон (блоклогдсон) төлөв байдал гэж нэрлэгдэх тодорхой төлөвт орно. Савлалтын хоорондох дундаж хугацаа хэмжилтийн хугацаанаас олон дахин бага  $t_m \gg t$  байвал хэмжилтийн явцад соронзжилтын янз бүрийн чиглэл тогтож амжихгүй байгаа флуктуац төлөвүүдийг ажиглаж чадахаас гадна хугацаагаар дундажлагдсан соронзон моментыг хэмжиж болно. Ийм төлөв байдлыг системийн супер парасоронзон төлөв гэж нэрлэдэг. Хэмжилтийн хугацаа ажиглагдах төлөв байдалд их хэмжээгээр нөлөөлдөг ч зарим хэмжилтийн хугацаа ямар хэмжээтэй байдгийг мэдэхэд илүүдэхгүй. Тогтмол соронзон оронд 100 сек., хувьсах соронзон оронгийнх  $10^{-1}$  -  $10^{-5}$  сек., Мёссбауэрийн спектроскопт  $10^{-7}$  -  $10^{-9}$  сек. байна.

Хувьсах соронзон оронд байгаа соронзон бөөмийн хувьд гадны соронзон орон, мөн өөрийн дотоод соронзон оронгийн харилцан үйлчлэлийн үр дүнд энерги (дулаан) ялгарна. Нано хэмжээст соронзон материалд дулаан ялгарах үзэгдэл нь соронзон бөөм доторх соронзон моментын чиглэл өөрчлөгдөж эргэн сэргэх Неелийн процесс болон уг бөөм өөрийн тэнхлэгээ тойрон эргэх Брауны процесстой уялдан үүснэ. Гаднын хувьсах оронгийн давтамжаас хамааран өөрчлөгдөх хугацаа нь соронзон бөөмийн дотоод оронгийн эргэн сэргэх хугацаа (relaxation time)-аас бага байна.

### 1.2.2. Соронзон нано бөөмийн ялгаруулах дулаан

Нано бөөмийн хэмжээ ихсэхэд релаксацийн хугацаа ихэснэ. Шилжилтийн хугацаа  $t_N = t_m$  үед харгалзах  $T_B$ -температурыг супер парасоронзон хаалтын температур гэж нэрлээд дараах томъёогоор тодорхойлно:

$$T_B = \frac{KV_M}{k_B \ln \left( \frac{t_m}{\tau_0} \right)}. \quad (1.2)$$

Нано бөөмийн хэмжээ ихсэхэд супер парасоронзон шилжилтэд шаардлагатай  $k_B T$  дулаан их болно. Эндээс  $T_B$  их байх тутам бөөмийн хэмжээ их байна гэдгийг дээрх томъёо харуулж байна. Нано бөөмсийн харилцан үйлчлэл Вогель-Фулчерийн загвар ёсоор дараах зүй тогтолтой [9]:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{E_a}{k_B(T-T_0)}\right). \quad (1.3)$$

Энд:  $T_0$  Вогель-Фулчерийн температур.

### 1.2.3. Анизотроп ба соронзон мэдрэх чадвар

Соронзон нано бөөмс соронзон оронгийн үйлчлэлээр соронзжилт эргэн хувьсан өөрчлөгдөх процессод орж улмаар цахилгаан соронзон энергийг дулааны энерги болгон хувиргадаг [10]. Соронзжилт эргэн өөрчлөгдөх үзэгдэл гистерезисийн алдагдал (ферросоронзон нано бөөмс) ба соронзон мэдрэх чадварын алдагдал (супер парасоронзон нано бөөмс) гэсэн хоёр төрлөөр явагдана. Гистерезисийн алдагдал нь соронзон оронгийн далайц ( $H_{ac}$ ), мөн коэрцитив хүч ( $H_c = 2K/\mu_0 M_s$ ) -ээс хамаарна.

Хэрэв хувьсах соронзон орон  $\mu$  соронзон момент бүхий ферросоронзон нано бөөмд үйлчлэхэд соронзон төлөв мета төлөв байдалд оршино. Үүний дүнд соронзон момент чиглэлээ өөрчлөн эргэж энерги (Зееман энерги) нь  $+\mu_0 \mu H_k$  утгаас  $-\mu_0 \mu H_k$  болж  $2\mu_0 \mu H_k$  хэмжээний энерги дулаанд хувирна. Хувийн дулаан алдагдал  $P_H$  нь  $4\mu_0 \mu H_k f \Phi^{-1}$  буюу  $4\mu_0 M_s K f \rho^{-1}$  гэж тодорхойлогдоно. Энд,  $\Phi$  ба  $\rho$  нь нано бөөмийн жин, нягт. Нано бөөмийн Неелийн релаксацийн хугацаа  $\tau_N$  анизотроп энергиэр, Брауны релаксацийн хугацаа  $\tau_B$  нь гидродинамик эзлэхүүн ба орчны зуурамтгай чанараар, эдгээрийн нийлбэр эффе́ктив ( $\tau$ ) хугацаа дараах тэгшитгэлүүдээр тодорхойлогдоно.

$$\tau_N = \tau_0 \exp\left(\frac{KV_M}{k_B T}\right), \quad (1.4)$$

$$\tau_B = \frac{3V_H}{k_B T} \eta, \quad (1.5)$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_B} + \frac{1}{\tau_N} \quad \text{буюу} \quad \tau = \frac{\tau_B \tau_N}{\tau_B + \tau_N}$$

$$\tau = \frac{M_S}{2\gamma_0 K} \left( \frac{\pi k_B T}{V_M} \right) \exp \left( \frac{KV_M}{k_B T} \right). \quad (1.6)$$

Энд,  $\tau_0$ - тогтмол хэмжигдэхүүн, ойролцоогоор  $10^{-9}$  сек,  $K$  – анизотроп тогтмол,  $V_M$  - бөөмийн эзлэхүүн,  $k_B$  -Больцманы тогтмол,  $T$ -температур,  $\eta$ - зуурамтгайн коэффициент,  $V_H$ - бөөмийн гидродинамик эзлэхүүн.

Хувьсах соронзон оронд феррит нано бөөмийг оруулахад ялгарах чадал (дулааны хэмжээ)  $P$  дараах илэрхийллээр тодорхойлогдоно:

$$P = \frac{(\mu H \omega \tau)^2}{[2\tau k_B T \rho V (1 + \omega^2 \tau^2)]}. \quad (1.7)$$

Энд,  $\mu$ - бөөмийн соронзон момент,  $H$ - соронзон оронгийн хүчлэг,  $\omega$ - оронгийн өнцөг давтамж,  $\rho$ - нано материалын нягт.

Супер парасоронзон бөөмийн хувьд эзлэхүүн  $V_H$  багасахад  $\tau_V$  хугацаа түүнтэй шууд пропорционалаар багасах учир  $\tau$  хугацаа зөвхөн  $\tau_H$  хэмжигдэхүүнээр тодорхойлогдоно. Энэ тохиолдолд комплекс мэдрэх чадварын байгуулагч  $\chi''$  дараах томъёогоор бичигдэнэ:

$$\chi'' = \frac{\mu_0 \mu^2}{3k_B T} \left( \frac{\omega \tau}{1 + (\omega \tau)^2} \right). \quad (1.8)$$

Эндээс дараах илэрхийллийг гарган авч болно [7]:

$$P = \pi \mu_0 \chi'' H_{ac}^2 f \rho^{-1} = \frac{\pi \mu_0 \chi'' H_{ac}^2}{3\rho k_B T} \frac{2\pi f^2 H_{ac}^2 \tau}{[1 + (2\pi f \tau)^2]}. \quad (1.9)$$

Эцэст нь дүгнэн хэлэхэд, суперпара соронзон материалын хувьд  $M_S$  хэмжигдэхүүн их утгатай,  $K$  дундаж утгатай байвал хамгийн тохиромжтой гэж үзэж болно.

### 1.3. Дулаан ялгарах үзэгдлийг судлах арга зүй

Соронзон материалын хувьсах соронзон оронд дулаан ялгаруулах чадамжийг Хувийн Шингээх Чадал (XШЧ-specific absorption rate-SAR) гэсэн хэмжигдэхүүнээр тодорхойлдог. Энэ нь дээжийн нэгж масс дахь шингээсэн энерги (Вт/г) юм. XШЧ -г дараах үндсэн 3 аргаар тодорхойлдог. Үүнд: Дулаан хэмжилтийн арга, Соронзон хэмжилтийн арга, Аналитик арга.

Эхний аргад соронзон материалыг хувьсах соронзон оронд оруулан ялгарах дулааныг хэмждэг. Энд ялгарах дулаан болон температурын өсөлт хоорондын хамаарлаар ХШЧ –г тооцдог [9]. Харин хоёр дахь аргад соронзон хэмжилтээс дээжийн соронзон ханалтын утга болон гистерезисийн алдагдлыг тооцоолж олдог [11]. Сүүлийн буюу гурав дахь аргад ХШЧ –г тооцоолохдоо соронзон орны хүч, давтамж мөн тухайн материалын цөмийн хэмжээ, гидродинамик хэмжээ, анизотроп тогтмол зэрэг шинж чанаруудаар нь тодорхойлдог [11].

Дээрх аргуудаас дулаан хэмжилтийн арга нь хамгийн түгээмэл хэрэглэгддэг. Хувийн шингээх чадал гэх нэр томъёо нь цахилгаан соронзон долгион (хэт авиа)-ны үйлчлэлд буй биологийн эд эсийн нэгж эзлэхүүнд шингэх чадлыг илэрхийлнэ. Бидний авч үзэж буй тохиолдолд буюу соронзон материалын хувьд энэ хэмжигдэхүүн соронзон материалын нэгж массаас ялгарах дулааны чадлыг илэрхийлнэ. Иймд ХШЧ –ыг дараах томъёогоор тодорхойлно:

$$\text{ХШЧ} = \frac{c}{m} \frac{\Delta T}{\Delta t} \quad (1.10)$$

Энд, *c*-нано материал агуулсан коллоид шингээний хувийн дулаан багтаамж (усны хувьд  $c = 4.18 \text{ Ж}/(\text{г} \cdot \text{град})$ ),  $\frac{\Delta T}{\Delta t}$ -температурын хугацааны өөрчлөлт, *m* – соронзон материалын масс (г/мл).

Нано соронзон бөөмөөс үүсгэх дулааны тоо хэмжээг хувийн шингээх чадлаас гадна хувийн дулаан алдагдал (specific loss power-SLP), гэсэн хэмжигдэхүүнээр тодорхойлно [12]. Хэмжих нэгж нь Вт/кг байна. Хувийн дулаан алдагдал (ХДА)-ыг дараах харьцаагаар тооцоолдог [13]:

$$\text{ХДА} = \frac{c}{m} \frac{\Delta T}{\Delta t} \quad (1.11)$$

Соронзон гипертерм ойлголтын хүрээнд ХШЧ (1.10) ба ХДА (1.11) ижил хэмжигдэхүүнүүд байдаг. ХДА ойлголт нь өндөр давтамжийн долгион хүний биед хэрхэн шингээгдэх вэ гэдгийг тодорхойлдог учир Соронзон гипертерм салбарт хэрэглэгдэх нам буюу харьцангуй бага давтамжийн долгионы хувьд төдийлөн тохиромжгүй, нөгөө талаас “дулаан шингээлт” гэсэн ойлголт энэ салбарт тохирдоггүй. ХШЧ хэмжигдэхүүн нь нормчлогдсон массын хувьд ялгарч буй чадлын хэмжээг (хүч) илүү их нарийвчлалтай илэрхийлдэг байна.

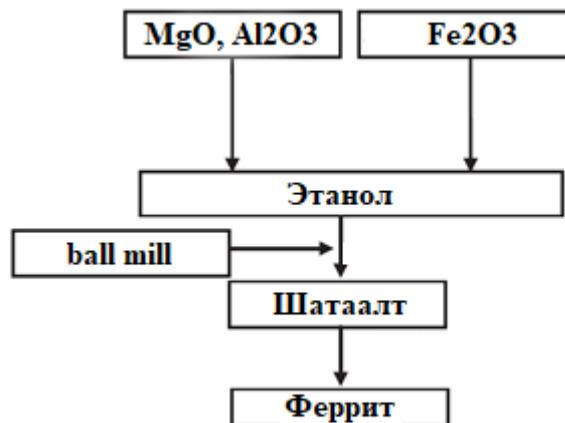
## ХОЁР. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ

### 2.1. Феррит nano материал гарган авах аргууд

Орчин үед феррит nano материал гарган авах олон төрлийн синтезийн аргууд ашиглагдаж байна. Үүнд химийн тунадасжилт, золь-гель, хатуу төлөвийн урвалын арга, гидротермал, электрохимийн гэх мэт олон аргууд бий. Эдгээр нь бүгд өөр өөрийн давуу болон сул талуудтай [14]. Энэ төслийн хүрээнд бид хатуу төлөвийн урвалын арга болон золь-гель аргуудыг ашиглан судалгааны дээжүүдийг гарган авсан.

#### 2.1.1. Хатуу төлөвийн урвалын арга

Хатуу төлөвийн урвалын арга нь химийн урвалжуудыг механик арга (ball mill)-аар нунтаглан холих замаар поликристалл материалыг гарган авах нилээн нийтлэг синтезийн арга юм. Уг урвал явагдахын тулд ихэвчлэн маш өндөр температурыг ашигладаг. Хатуу төлөвийн урвалд нөлөөлөх хүчин зүйлс нь урвалжуудын химийн болон морфологийн шинж чанар, түүний дотор урвалын идэвхжил, гадаргуугийн талбай, хатуу төлөвийн температур, даралт, орчин зэрэг урвалын нөхцөлүүд юм. Хатуу төлөвийн урвалын аргын давуу тал нь энгийн бөгөөд дээжийг их хэмжээгээр гарган авах боломжтой юм [15].



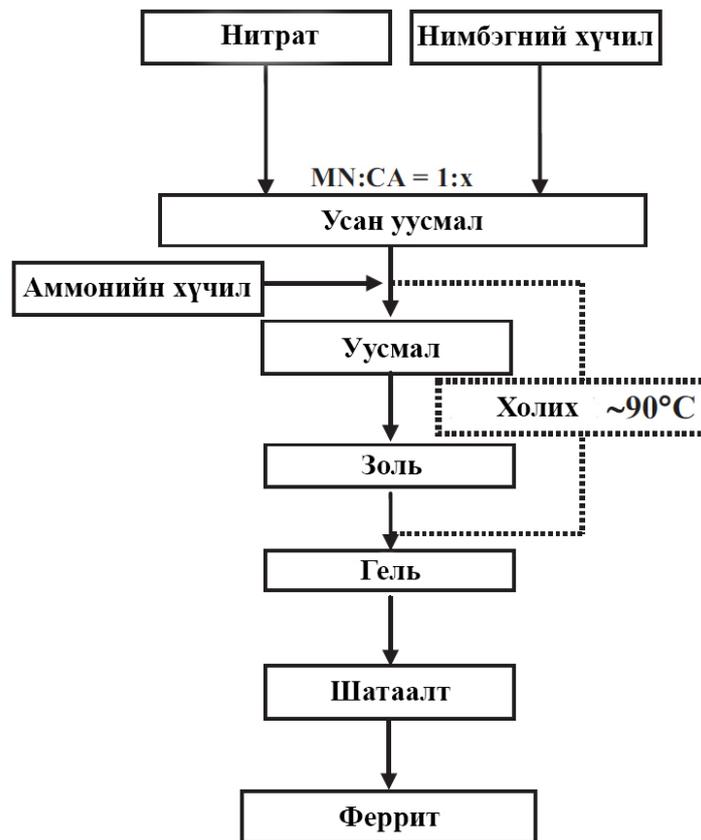
Зураг 2.1. Хатуу төлөвийн урвалын процессийн схем

#### 2.1.2. Золь-гель арга

Золь-гель аргын давуу тал нь өртөг бага, кристалжилтын хэмжээ нэгэн төрөл, цэвэршилт сайтай гарган авах боломжтой юм [16]. Золь-гель аргаар материал гарган авахад “золь” болон “гель” гэсэн хоёр фазыг дамжин дээжийг гарган авдаг.

“Золь” нь дээжийн шингэн орчин дахь коллоид уусмал юм. Нунтаг дээжийг золь-гелийн аргаар гарган авахад металл ионы нитрат болон усанд амархан уусдаг глицин, нимбэгний хүчил зэргийг металл ионуудын холбогчоор ашигладаг. Металл нитрат болон цитратын харьцаа 1:х байдаг (х нь ихэнх тохиолдолд 1 – 3). Давхар нэрсэн, ионгүйжүүлсэн усанд нитратуудыг уусгана. Уг нитрат болон нимбэгний хүчлийг усанд уусгахдаа өндөр градуст тасралтгүй хутгалттайгаар уусмал болгоно. Усны молекулууд ууршиж дуусахад уусмал зуурамтгай гель хэлбэрт орно [17].

Улмаар гелийг өндөр температурт шатааснаар дээж бэлэн болно. Золь-гель процессын схемийг зураг 2.2-т үзүүлэв. Нитрат болон металл ионуудын холбогч хоорондын харьцаа нь бөөмийн хэмжээ болон соронзон шинж чанарт нөлөөлдөг болохыг судалгаагаар тогтоогоод байна [18].



Зураг 2.2. Золь-гель процессийн схем

## 2.2. Бүтцийн судалгааны арга зүй

**Рентген дифракцын арга (XRD):** Рентген туяаны дифракц (XRD) нь материалын фазын агуулга, кристалл бүтэц, химийн найрлага, физик шинж чанарын талаар дэлгэрэнгүй мэдээлэл өгдөг техник юм. Судалгааны ажилд ФТХ ийн Shimadzu брэндийн  $\text{CuK}\alpha$  анод бүхий Maxima\_X XRD-7000 дифрактометрийг ашигласан.

**Нейтрон сарнилын арга:** Нейтрон нь бодис дахь атомын гүнд очиж цөмтэй харилцан үйлчилдэг учир хөнгөн цөм Li, H гэх мэт рентгенээр тодорхойлох боломжгүй элементүүдийг судлах боломжийг бидэнд олгодог. Нейтронографийн өгөгдлийг боловсруулснаар кристалл тор дахь атомын цөмийн түгэлтийг дэлгэрэнгүй тодорхойлох боломжтой. Нейтрон нь соронзон моменттой учир атомын цөмийн болон электроны спинтэй харилцан үйлчилж кристаллын соронзон бүтцийн дүр зургийг тодорхойлдог давуу талтай. Энэ төслийн хүрээнд Дубна дахь Цөмийн шинжилгээний нэгдсэн институт (ЦШНИ)–ийн IBR-2 реактор дээр өндөр ялгах чадвар бүхий нейтрон дифрактометр (Фурье дифрактометр) - ийг ашиглан кристалл болон соронзон бүтцийн судалгааг гүйцэтгэсэн.



**Зураг 2.3.** Олон улсын Цөмийн Шинжилгээний Нэгдсэн Институтийн Нейтроны физикийн лабораторийн Өндөр ялгах чадвар бүхий Фурье дифрактометр

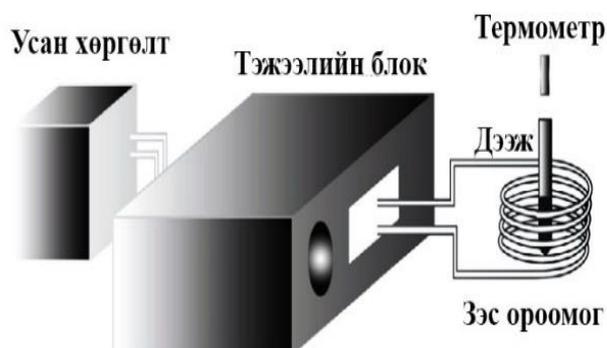
**Хэт ягаан туяаны спектроскоп (UV-Vis):** Хэт ягаан туяаны спектроскоп нь дээжид шингэсэн эсвэл дамжин өнгөрсөн хэт ягаан туяа эсвэл үзэгдэх гэрлийн салангид долгионы уртыг хоосон дээжтэй харьцуулан хэмждэг аналитик арга юм.

Судалгааны ажилд Shimadzu брэндийн UV 2550 спектрофотометр ашиглан хэмжилтийг явуулав.

**Нил улаан туяаны спектроскоп (FTIR):** Нил улаан туяаны спектроскоп нь органик, полимер, зарим тохиолдолд органик бус материалын агуулгыг тодорхойлоход ашигладаг аналитик арга юм. Судалгааны ажилд долгионы уртын  $500-4000\text{ см}^{-1}$  мужид Shimadzu брэндийн IR Prestige-21 спектрометр ашиглан хэмжилтийг явуулав.

### 2.3. Хувьсах соронзон орон үүсгэх төхөөрөмж

Соронзон nano материалаас дулаан ялгарах үзэгдлийг судлах зорилгоор бид эхний ээлжид хувьсах соронзон орон үүсгэх төхөөрөмжийг өөрсдөө угсарч суурилуулсан.



**Зураг 2.4.** а) Бидний угсарсан хувьсах соронзон орон үүсгэх төхөөрөмж, б) БНХАУ-д үйлдвэрлэсэн өндөр давтамжийн индукцийн халаалтын төхөөрөмж, в) төхөөрөмжийн бүдүүвч зураг

Өндөр давтамжийн индукцийн халаалтын төхөөрөмжийн зарчим нь өндөр давтамжийн хувьсах гүйдлийн урсгалыг зэс ороомгоор дамжуулан индукцийн гүйдэл үүсдэг (eddy current). Энэхүү хувьсах гүйдлийн нөлөөний улмаас дулаан үүсгэдэг тул халаалтын энэ аргыг индукцийн халаалт гэж нэрлэдэг. Индукцийн халаалт нь зэс ороомгийн төв хэсэгт хамгийн их хүчтэй явагддаг. Бидний угсарсан хувьсах соронзон орон үүсгэх төхөөрөмж нь 71 кГц-ийн давтамжийг үүсгэж байсан бөгөөд төмөр агуулсан нано соронзон бодисын дулаан ялгарах хэмжилтийг усан орчинд тасалгааны температурт хэмжилтийг хийж гүйцэтгэсэн. Дээжүүдийн хувьсах соронзон оронд ялгаруулж буй дулааныг термометр (алкоголь) болон хэт улаан туяаны камерын тусламжтай хэмжсэн. Мөн цаашдын нарийвчилсан судалгаануудад ашиглах зорилгоор Хятад улсын HAIMINGSI компанид үйлдвэрлэсэн өндөр давтамжийн төхөөрөмж ашиглагдаж байна. Зарчмын хувьд дээрх төхөөрөмжтэй ижил боловч 370 кГц хүртэлх өндөр давтамжийн мужид туршилт явуулах боломжтой юм. Угсарсан хувьсах соронзон орон үүсгэх төхөөрөмж, хэмжилтийн ерөнхий бүдүүвчийг зураг 2.4-д, үндсэн параметруудийг хүснэгт 2.1-д үзүүлэв.

**Хүснэгт 2.1.** Хувьсах соронзон орон үүсгэх төхөөрөмжийн параметр

Үндсэн параметрууд	Төхөөрөмж 1	Төхөөрөмж 2
	HAIMINGSI	
Ороомгийн ороодсын тоо	7	7
Ороомгийн дотоод диаметр (мм)	65	65
Давтамж (кГц)	71	370
Чадал (кВт)	2.5	
Усан хөргөлт (л/мин)	7-8	7-9

### 2.3.1. Соронзон орны судалгаа, тооцоо

Угсарсан соронзон төхөөрөмжийн үүсгэх соронзон орныг онолын хувьд тооцоолон загварчлах зорилгоор дараах тооцоог хийж гүйцэтгэлээ. Соленойдийн хувьд соронзон орныг тооцоолохын тулд эхлээд соленойдын нэг ороодсыг авч үзвэл соронзон орны индукц нь доорх томъёогоор илэрхийлэгдэнэ.

$$B = \frac{\mu_0 I a^2}{2r^3} \quad (2.1)$$

Харин ороодсоор гүйх гүйдлийн үүсгэх соронзон орны индукцыг Био-Савар-Лапласын хуулиар:

$$dB = \frac{\mu_0 I a^2}{2r^3} dx \frac{N}{2} = \frac{\mu_0 I a^2 N}{2L} \frac{dx}{((l-x)^2 + a^2)^{3/2}}$$

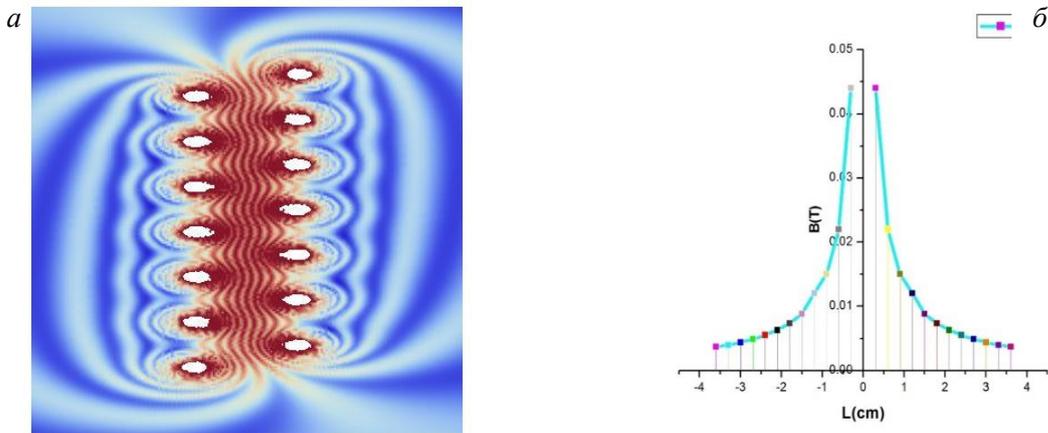
$$B = \frac{\mu_0 I a^2 N}{2L} \int_0^L \frac{dx}{((L-x)^2 + a^2)^{3/2}}$$

$$B = \frac{\mu_0 I a^2 N}{2L} \left[ \frac{l}{\sqrt{l^2 + a^2}} + \frac{L-l}{(L-l)^2 + a^2} \right]$$

$$B = \frac{\mu_0 I a^2 N}{L} [\cos\vartheta_1 - \cos\vartheta_2] \quad (2.2)$$

гэж бичигдэнэ.

Өөрсдийн угсарсан соронзон төхөөрөмжийн параметрууд болох ороомгийн радиус  $a=3.15$  см, гүйдэл  $I=15$  А, ороодсын тоог  $N=7$  орлуулан соронзон орны индукцийг солнойдын ( $\vartheta_1 = \vartheta_2 = 0$ ) хувьд тооцооллоо (Зураг 2.5).



**Зураг 2.5.** а – солнойдын үүсгэх соронзон орон; б – солнойдын соронзон орны индукц зайнаас хамаарах хамаарал

Ороомгийн голд үүсэх соронзон оронг дараах харьцаагаар тооцоолсон.

$$H = NIa^2 / 2(z^2 + a^2)^{3/2} \quad (2.3)$$

Энд:  $N$ - ороомгийн ороодсын тоо,  $I$ - гүйдэл,  $a$ -ороомгийн радиус,  $z$ -  $z$ -тэнхлэг дээрх ороомгийн төв хүртэлх зайг тус тус илэрхийлнэ. Бидний угсарсан хувьсах

соронзон зэс ороомгийн голд үүсэх соронзон орны хэмжээг (2.3) томъёогоор тооцоолоход  $1.006 \text{ кАм}^{-1}$  гэж тодорхойлогдлоо.

## ГУРАВ. ФЕРРИТ НАНО МАТЕРИАЛЫН ОНОЛЫН СУДАЛГАА

Сүүлийн жилүүдэд Хиразава [19] нарын судлаачид магнийн ферритийн дулаан ялгаруулах шинж чанарт  $Cu$ -ийн ион хэрхэн нөлөөлж байгааг судалсан бөгөөд  $Cu^{2+}$  ионыг хольцолсноор дулаан ялгаруулах чадамж өсөж буйг тогтоосон байна. Энэ нэгдлийн тухай хэд хэдэн судалгааны ажлууд хэвлэгдсэн байдаг боловч  $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$ -ийн бүтцийн өөрчлөлтийн тухай маш бага судлагдсан байдаг [20, 21]. Тийм учраас бид био-анагаахын хэрэглээтэй холбоотойгоор  $MgFe_2O_4$ -ийг  $Cu$ -аар хольцлосон нэгдэл болон итри төмрийн гарнет ( $Y_3Fe_5O_{12}$ ) материалуудын онол болон бүтцийн судалгааг хийлээ [22]. Ферритүүдийн кристалл, электрон болон соронзон бүтцийг нейтрон болон рентген дифрактометр, рентген туяаны шингээлтийн спектроскопыг ашиглан хийж, квант механикийн аргаар электрон болон соронзон бүтцийн онолын судалгааг хийв. Судалгааны ажлын зорилго нь феррит материалын дулаан ялгаруулах чадамжийг бүтцээс хамааруулан тайлбарлах явдал юм.

### 3.1. Онолын тооцооны аргачлал

$AB_2O_4$  гэсэн ерөнхий томъёо бүхий нормаль шпинель бүтэцтэй  $MgFe_2O_4$ -ийн ионууд диамонд( $A$ ) ба пироклор( $B$ ) гэсэн дэд торуудад байрлаж (Зураг 3.1) байхаар сонгон НФО-д [23, 24] тулгуурласан хавтгай долгионы псевдо потенциалыг ( $PW_{scf}$ ) [25] сонгон авч өргөтгөсөн градиентын (GGA) аргыг ашиглан QUANTUM ESPRESSO [26] багц программаар тооцоог гүйцэтгэв. Ион ба валентын электрон хоорондын харилцан үйлчлэл нь ультрасофт псевдо потенциалгаар илэрхийлэгддэг. Эдгээр элементүүд гадаад давхраандаа:  $O(2s^2, 2p^4)$ ,  $Mg(2p^6, 3s^1, 3p^{0.75})$ ,  $Fe(3s^2, 3p^6, 3d^{6.5}, 4s^1)$ ,  $Cu(3d^{9.5}, 4s^1, 4p^{0.5})$  орбиталиуд электроноор дүүргэгддэг. Харин долгион функц нь хавтгай долгионоор илэрхийлэгдэх ба кинетик энергийн дээд хязгаарыг 40 Рб (Ридберг) байхаар авч сонгон авсан. Атомын бүтэц, ионы байрлал, торын параметруудийг тодорхойлохын тулд атом бүрийн үлдэгдэл хүчийг 0.05 эВ/Å болтол оптимизац хийв.  $Fe(3d)$  болон  $Cu(3d)$  төлөвүүдэд электронуудын хүчтэй корреляцлах эффект илэрдэг ба Хаббард + Гамильтониан дээр суурилсан солилцол хоорондын соронзон эффектийн параметр ( $J_0$ ) болон Хаббардын параметр  $U = 7,5$ эВ-оор тус тус сонгон авч инвариант шугамчлах аргыг ашиглав.  $J_0$ -ийг шугаман харилцан үйлчлэлийн аргыг ашиглан тооцоолж соронзон ион бүрийг 1эВ

энергитэй гэж үзэв [27]. Атомын долгион функцийг ( $GGA + U + J_0$ ) байхаар сонгон авсан.

Бидний авч үзэж буй бүтэц нь тал төвлөсөн куб бүтэцтэй ба түүний эгэл торыг Дикартын координатын хүрээнд дараах байдлаар дүрслэв.

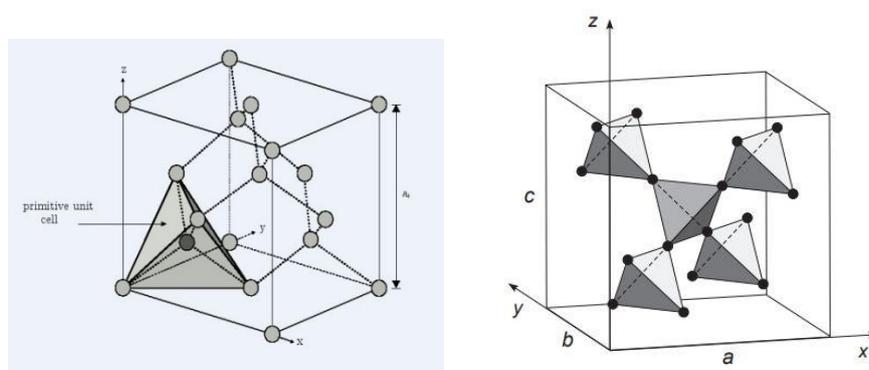
$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} (1); \vec{a}_2 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} (2); \vec{a}_3 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Магнийн ферритийн нормаль шпинел үе дэх магни болон төмрийн атомуудын байрлал тетраэдр болон октаэдр суурьшилд сууна гэдгийг тус тус харуулав.

$$\vec{r}_{Mg_1} = \frac{1}{8}a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} (4); \vec{r}_{Mg_2} = \frac{1}{8}a \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{8}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3)$$

$$\vec{r}_{Fe_1} = \frac{1}{8}a \begin{pmatrix} 1 \\ 5 \\ 5 \end{pmatrix} = \frac{1}{8}(9\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3) (6); \vec{r}_{Fe_2} = \frac{1}{8}a \begin{pmatrix} 5 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix} = \frac{1}{8}(\vec{a}_1 + 9\vec{a}_2 + \vec{a}_3)$$

$$\vec{r}_{Fe_3} = \frac{1}{8}a \begin{pmatrix} 5 \\ 5 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{8}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + 9\vec{a}_3) (8); \vec{r}_{Fe_4} = \frac{1}{8}a \begin{pmatrix} 5 \\ 5 \\ 5 \end{pmatrix} = \frac{5}{8}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3)$$



Зураг 3.1. (А) диамонд (В) пирохлор дэд торууд.

Тооцоог хийхдээ Магнийн ферритын хувьд дараах хоёр тохиолдлыг авч үзэв.

$$1. (Mg_{1-\delta}Fe_{\delta})[Mg_{\delta}Fe_{2-\delta}]O_4$$

- $\delta = 0$  ( $Mg$ )<sup>Tet</sup>[ $Fe_2$ ]<sup>Oct</sup> $O_4 \rightarrow$  нормаль шпинел
- $\delta = 1$  ( $Fe$ )<sup>Tet</sup>[ $MgFe$ ]<sup>Oct</sup> $O_4 \rightarrow$  инверс шпинел бүтэцтэй тохиолдлууд дээр тооцоог тус тус хийв.

(А) болон (В) дэд торууд дахь соронзон ионууд нь тетраэдр ба октаэдр гэсэн кристалл оронд тус тус байрлана гэж үзэж дараах тооцооллуудыг гүйцэтгэв.

### 3.2. $MgFe_2O_4$ -ийн онолын тооцооны үр дүн

Бид квант механикийн аргыг ферросоронзон (FM) ба антиферросоронзон (AFM) төлөвүүд дээр куб  $MgFe_2O_4$  фазын хувьд спиний туйлшралыг тооцоолон дараах үр дүнг гарган авав.

Нормаль шпинел бүтэц бүхий  $(Mg)_A[Fe_2]_BO_4$  нэгдлийн соронзон шинж чанар нь пироклор дэд торон дахь төмрийн гурван валенттай ион болох  $Fe^{3+}$ -ээр тодорхойлогдоно. Соронзон ионуудын спин нь В дэд торын булангуудад суух бөгөөд соронзон ион нь тэнцүү тоогоор хуваагдан сууна. Тиймээс антиферросоронзон төлөвүүдийн мөхөлт нь  $AB_2O_4$  томьёо бүхий нормаль шпинел бүтцийг алдагдуулдаг байна.

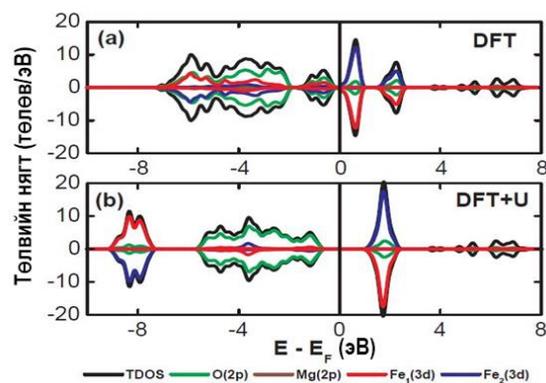
Нормаль шпинел бүтэц бүхий  $(Mg)_A[Fe_2]_BO_4$ -ийн онолын тооцооны үр дүнгээс соронзон моментууд нь  $Fe^{3+}$  ионы спин дээш чиглэсэн үед  $M(Fe_1)=4,03 \frac{\mu_B}{\text{атом}}$ , харин  $Fe^{3+}$  ионы спин доош чиглэсэн үед  $M(Fe_2)=-4,35 \frac{\mu_B}{\text{атом}}$  тус тус гарав. Мөн инверс шпинел бүтэц бүхий  $(Fe)_A[MgFe]_BO_4$ -ийн үед  $Fe^{3+}$  ион нь цөөн тооны Mg-ийн соронзон ионтой холилдон суух ба инверс шпинелийн үндсэн төлөвийн энерги нь нормаль шпинел бүтэцтэй үеийнхээс  $179,12 \frac{\text{мэВ}}{\text{тор}}$ -оор нэмэгдэж байв.

Нормаль, хагас инверс, бүтэн инверс шпинел тохиолдлуудад FM, AFM/FIM төлөвүүд хоорондын энергийн зөрүү  $\Delta E$  –ийг тус бүр тооцоолов. Магнийн ферритын нормаль шпинел тохиолдолын үндсэн төлөв нь хагас болон бүтэн инверс үеийнхээс илүү гүн сууж байсан нь нормаль шпинель бүтэц илүү тогтвортойг илэрхийлж байна. Торын параметр ( $a$ ) болон соронзон шинж чанарын хувьд  $M(Fe_1)$ ,  $M(Fe_2)$  -ийн онолын тооцооны үр дүн туршлагын [28],[29],[30] ажлын үр дүнтэй илүү тохирч байв.

Харин бүтэн инверс шпинел төлөвийн төмрийн соронзон моментууд нь  $M(Fe_1) = 3,99 \frac{\mu_B}{\text{атом}}$ ,  $M(Fe_2) = -4,35 \frac{\mu_B}{\text{атом}}$  гарав. Эдгээр үр дүн нь нейтрон дифракцийн судалгааны үр дүнтэй тохирч байна. FM болон AFM/FIM төлөвүүд хоорондын энергийн зөрүү нь нормаль шпинел болон инверс шпинел

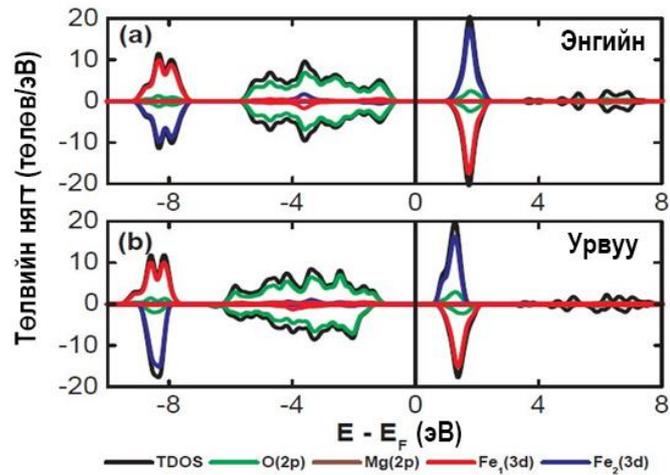
тохиолдолд тус тус  $\Delta E = 15,56 \frac{\text{мэВ}}{\text{тор}}$  болон  $\Delta E = 16,28 \frac{\text{мэВ}}{\text{тор}}$  байна.  $(\text{Fe})_A[\text{MgFe}]_B\text{O}_4$  үед AFM төлөв задарч спинүүдийн чиглэл хоорондын энергийн өөрчлөлт дээшээ чиглэлд  $0,512 \frac{\text{мэВ}}{\text{тор}}$  байна.

Мөн  $\text{MgFe}_2\text{O}_4$  нэгдлийн төлөвийн нягтыг нормаль шпинел тохиолдолд DFT болон DFT+U аргуудаар тооцоолсон үр дүнг (Зураг 3.2)-т үзүүлэв. Хар өнгөөр нийлбэр төлөвийн нягт, ногоон өнгөөр Хүчилтөрөгч  $\text{O}(2p)$ , бор өнгөөр Магний  $\text{Mg}(2p)$ , улаан өнгөөр Төмөр  $\text{Fe}_1(3d)$ , хөх өнгөөр Төмөр  $\text{Fe}_2(3d)$  ионуудыг тус бүр тэмдэглэв.



**Зураг 3.2.**  $(\text{Mg})_A[\text{Fe}_2]_B\text{O}_4$  нэгдлийн (a) DFT болон (b) DFT + U аргуудаар тооцоолсон нормаль шпинел үеийн нийлбэр болон орбиталь төлөвийн нягт. (Тэг энерги нь ферми түвшинг илэрхийлнэ.)

$(\text{Mg})_A[\text{Fe}_2]_B\text{O}_4$  –ийн нормаль болон инверс шпинел тохиолдлуудын хувьд төлөвийн нягтуудыг байгуулахад нормаль шпинел үед антиферросоронзон төлөвтэй байгаа нь (Зураг 3.3a)-аас харагдаж байна. Учир нь нормаль шпинел үед  $\text{Mg}^{(\text{tet})}(\text{Fe}^{2+}\text{Fe}^{3+})\text{O}_4$  буюу төмрийн хоёр өөр валент бүхий ионууд октаэдр байрлал дээрээ харилцан тэнцвэртэй сууж байгаа учир төлөвийн нягт симметр гарсан байна. Харин инверс шпинел тохиолдолд  $(\text{Fe}^{2+})^{(\text{tet})}(\text{MgFe}^{3+})^{\text{Oct}}\text{O}_4$  буюу төмрийн ион тетраэдр байрлалд сууж байгаа магнийн ион октаэдр байрлалд сууж байгаа төмрийн ионтой байрлалаа солино. Үүнээс шалтгаалан тетраэдр байрлалд сууж төмөр октаэдр байрлалд сууж байгаа төмөр тус бүрийн спин эсрэг чиглэлтэй болж улмаар (Зураг 3.3b)-д харуулснаар симметр бага зэрэг алдагдаж сул феррисоронзон эффект өгч байна.



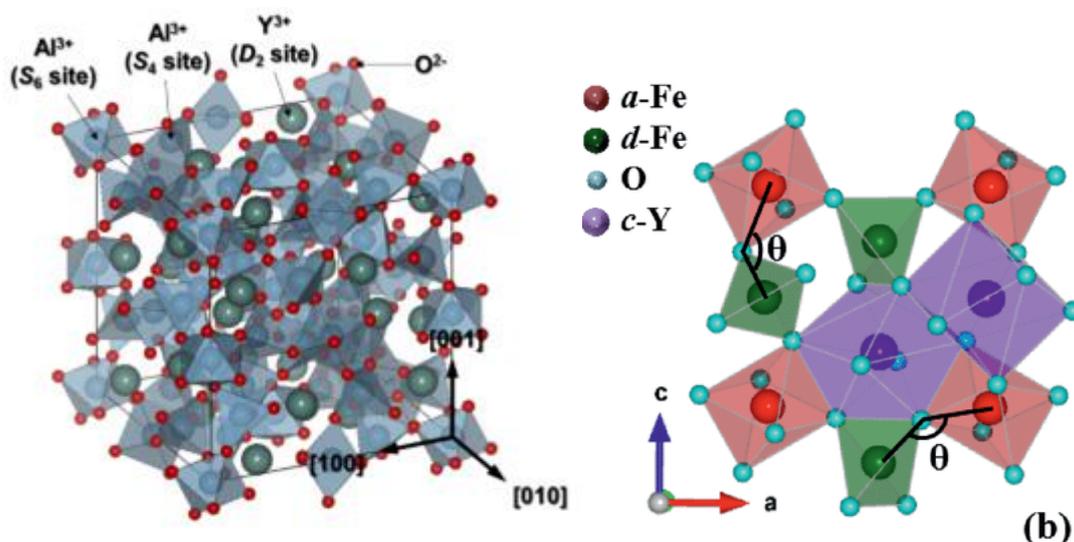
**Зураг 3.3.**  $(Mg)_A[Fe_2]_B O_4$  нэгдлийн (a) нормаль болон (b) инверс шпинел үеийн DFT + U тооцооны нийл ба орбиталь төлөвийн нягт. (Тэг энерги нь ферми төвшинг илэрхийлнэ).

### 3.3. $Y_3Fe_5O_{12}$ , $Y_3Al_5O_{12}$ нэгдлүүдийн онолын судалгаа

$Y_3Fe_5O_{12}$  (YIG),  $Y_3Al_5O_{12}$  (YAG) нэгдлүүдийн электрон бүтцийн онолын судалгааг *Quantum espresso* багц программын тусламжтайгаар гүйцэтгэв. Кристалл бүтцийн хувьд энэхүү хоёр нэгдэл нь *la3d* огторгуйн групп, *m3m* цэгэн групп-д харьяалагддаг.

Куб бүтэц бүхий YIG нэгдлийн торын тогтмол нь 12.376 Å ба эгэл тор бүр нь 24 ширхэг  $Y^{3+}$ , 40 ширхэг  $Fe^{3+}$ , 96 ширхэг  $O^{2-}$  ионуудаас нийт 160 атомаас бүрдэнэ.  $Y^{3+}$  ион нь *c* хэсэгт байрлах ба 8 хүчилтөрөгчийн атомаар хүрээлүүлсэн 8 өнцөг 12 талтай олон талт, 40  $Fe^{3+}$  ионуудын 16 нь *a* буюу октаэдр хэсэгт, 24 нь *d* буюу тетраэдр хэсгүүд тус тус байрлана (Зураг 3.4).

YAG хувьд Y болон O атомууд нь эгэл торын тогтмол нь 12.004 Å, Y болон O атомуудын байрлалын хувьд YIG-ийн атомуудын байрлалтай адил, харин  $Al^{3+}$  ионуудын 16 нь *a* буюу октаэдр хэсэгт, 24 нь *d* буюу тетраэдр хэсгүүд тус тус байрлана.

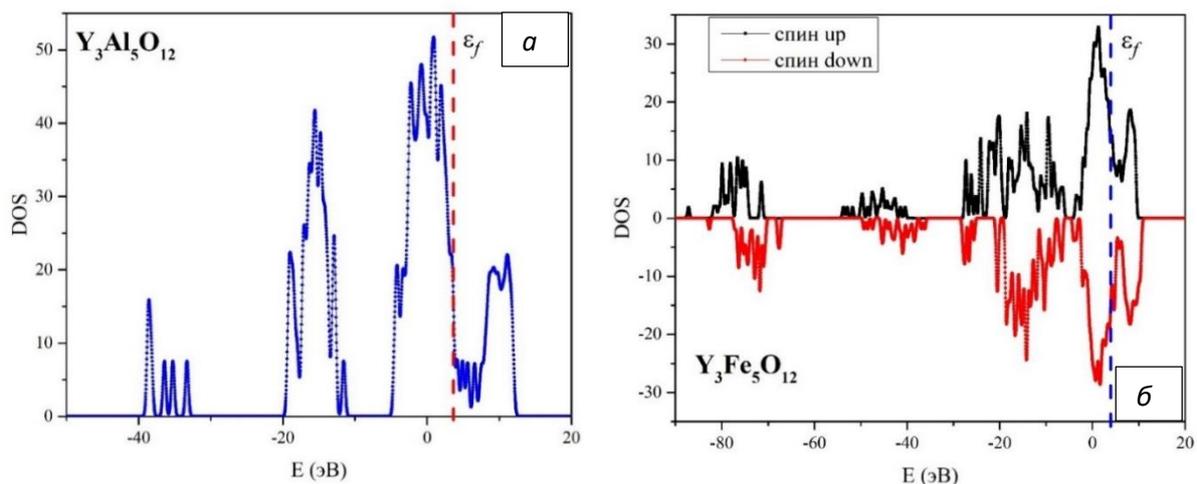


**Зураг 3.4.** а –  $Y_3Al_5O_{12}$  нэгдлийн эгэл тор, б –  $Y_3Fe_5O_{12}$  эгэл торд байрлах *a*, *c*, *d* хэсгүүд.

Хатуу биеийн онолын судалгааны тооцоонд нягтын функционал онолыг өргөн ашигладаг бөгөөд тоохон бодох хими, тоохон бодох физикт хамгийн түгээмэл хэрэглэгддэг аргуудын нэг юм. Бид тооцоондоо хавтгай долгионы кинетик энергийг 90 Рб, бриллион зон дахь *k* цэгийн торыг  $3 \times 3 \times 3$  харьцаатай байхаар, цэнэгүүдийн түгэлтийг электроны суурьшил Гауссын түгэлтээр 0.02 Рб байхаар авлаа.

YIG нэгдлийн соронзон шинж нь *a* хэсгийн  $Fe^{3+}$  ион, *b* хэсгийн  $Fe^{3+}$  хоорондох харилцан үйлчлэлээс гарч ирдэг. Харин YAG нэгдлийн хувьд соронзон соронзон шинж чанар байхгүй. Иймд YIG нэгдлийн тооцоо гүйцэтгэхдээ спины конфигурацийг тооцсон бол YAG нэгдлийн тооцоог гүйцэтгэхдээ спин тооцоогүй гүйцэтгэсэн болно. Y, Fe, O атомуудын *p*, *d* орбиталиуд дахь электрон нь дамжуулалд оролцох боломжтой нь тооцооны үр дүнгээс харагдаж байв.  $Y_3Fe_5O_{12}$  нэгдлийн хувьд металл шинж чанартай харин  $Y_3Al_5O_{12}$  нэгдэл хагас дамжуулагч шинж чанартай байв.

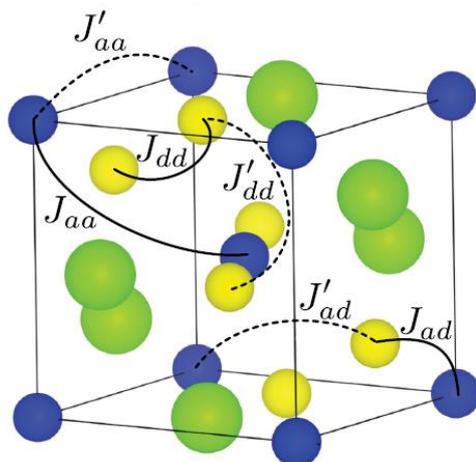
Электрон бүтцийн тооцоог Математик тоон технологийн хүрээлэнгийн тооцооллын төвийн супер компьютерүүд ашиглан параллелиар тооцоолсон. Нягтын функциональ онол ашиглан YIG, YAG нэгдлүүдийн төлөвийн нягтыг тооцоолсон үр дүнг зураг 3.5-д үзүүлэв.



**Зураг 3.5.** *a* - YAG нэгдлийн төлөвийн нягт, *б* - YIG нэгдлийн спин дээшээ болон доошоо харсан тохиолдлуудад тооцсон төлөвийн нягт.

Атомуудын орбиталиас хамаарсан төлөвийн нягтын тооцооноос харахад Y, Fe, Al, O-ийн атомуудын *p*, *d* орбиталиуд дахь электрон нь цахилгаан дамжуулалд оролцох боломжтой нь харагдаж байв. YIG нэгдлийн хувьд металл шинж чанартай харин YAG нэгдэл хагас дамжуулагч шинж чанартай байв. DFT тооцооноос гарсан тэнцвэржилтэд орсон торын параметруудийн ашиглан температураас хамаарсан соронзон шинж чанарын тооцоог Монте-Карло аргын тусламжтайгаар гүйцэтгэв.

Төмрийн атом хоорондын харилцан үйлчлэлийг тооцон соронзон шинж чанарыг тооцоолохдоо хамгийн ойр хөрш орших төмрийн атомуудын харилцан үйлчлэлээр тооцоолсон (Зураг 3.6).



**Зураг 3.6.** Fe-Fe-ийн харилцан үйлчлэлийн схем. Шулуун шугамаар ойрын хөршийг, тасархай зураасаар 2 дахь ойрын хөршүүдийг илэрхийллээ. aa, dd, ad нь харгалзан  $Fe^O-Fe^O$  (октаэдр-октаэдр),  $Fe^T-Fe^T$  (тетраэдр-тетраэдр) болон  $Fe^O-Fe^T$  (октаэдр-тетраэдр) байрлалууд дахь харилцан үйлчлэлүүдийг тус тус илтгэнэ [31].

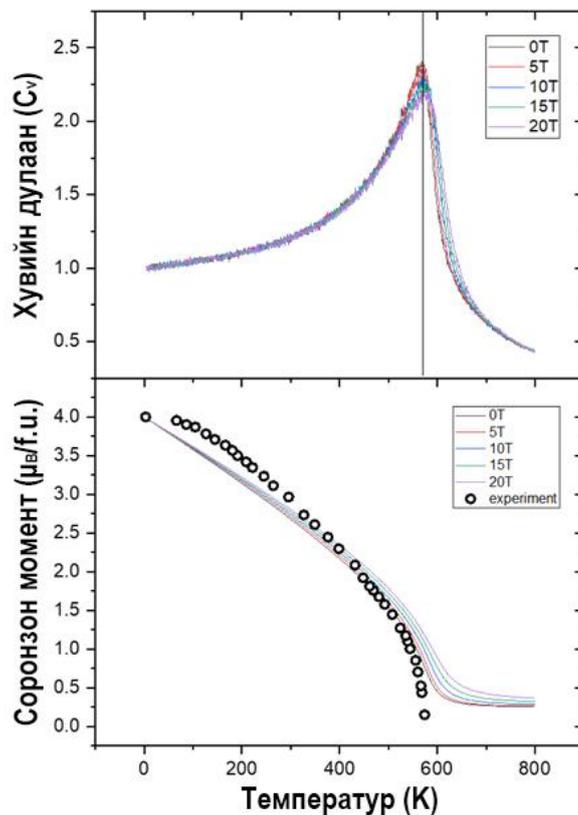
YIG системийн соронзон шинж чанар нь Гейзенбергийн загвараар маш сайн тайлбарлагддаг бөгөөд соронзон харилцан үйлчлэлийг дараах эффертив соронзон Гамилтонианаар тайлбарлан авч үзэж болно.

$$H = H_1^{ex} + H_2^{ex}$$

Энд

$$H_1^{ex} = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle_1} J_{1,ij} S_i \cdot S_j, \quad H_2^{ex} = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle_2} J_{2,ij} S_i \cdot S_j \quad (3.1)$$

Энд анхдагч болон хоёрдогч хамгийн ойр орших атомуудын соронзон харилцан үйлчлэлийг  $H_1^{ex}$ ,  $H_2^{ex}$  тэмдэглэгээгээр тус тус илэрхийлэв. Мөн энэхүү тооцоонд  $Fe^{+3}$  ионы спин квант тоог  $S=5/2$  үзсэн бөгөөд соронзон харилцан үйлчлэлийг илэрхийлж буй  $J$  параметруудийг *DFT* тооцооны үр дүнгээс “four state energy mapping method” аргыг ашиглан гаргаж авсан [32,33]. Тэгшитгэл (3.1)-ийг ашиглан Монте-Карло (Parallel Tempering Monte Carlo) аргаар [34] тооцоог  $4 \times 4 \times 4$  хэмжээтэй *supercell* дээр явуулж YIG системийн температураас хамаарсан соронзон шинж чанарыг гаргаж авав.



**Зураг 3.7.** 0-20 Тесла тогтмол соронзон оронд дахь YIG системийн температураас хамаарсан соронзон шинж чанар ба Кюри температурын хамаарал.

Монте-Карло тооцоог 2000 алхамтайгаар гүйцэтгэсэн бөгөөд 5.6 Å дотор нийтдээ 5 өөр соронзон харилцан үйлчлэл олсон ба эдгээрийн  $J$  параметруудийг хүснэгт 3.1-д үзүүлэв.

**Хүснэгт 3.1.**  $J$  параметрууд. (анхдагч болон хоёрдогч хамгийн ойр орших атомуудын үйлчлэлийг 1NN ба 2NN тэмдэглэгээгээр тус тус илэрхийлэв)

Соронзон харилцан үйлчлэл	$J$ (эВ)
1NN Fe <sup>T</sup> - Fe <sup>O</sup>	0.007448
1NN Fe <sup>T</sup> - Fe <sup>T</sup>	0.000364
1NN Fe <sup>O</sup> - Fe <sup>O</sup>	0.000084
1NN Fe <sup>O</sup> - Fe <sup>O</sup>	0.000040
2NN Fe <sup>T</sup> - Fe <sup>O</sup>	0.000156

Зураг 3.7-д YIG системийн соронзон шинж чанарыг 0-20 Тесла тогтмол соронзон оронд (DC magnetic field) Монте-Карло аргаар тооцоолсон үр дүнг үзүүлэв (Хүснэгт 3.1). Үр дүнгээс үзвэл, бидний тооцоогоор олсон YIG системийн соронзон шинж чанар, хувийн дулаан багтаамжийн утгууд нь туршилтын үр дүнтэй сайн тохирч байгаа нь харагдаж байна [35]. Тооцооны үр дүнгээс харахад тогтмол соронзон орон ихсэхэд Кюри температур дагаад шугаман хамаарлаар өсөж байгаа нь харагдаж байна. Өөрөөр хэлбэл тогтмол соронзон орон болон Кюри температур хоорондоо шууд шугаман хамааралтай болох нь ажиглагдлаа.

### 3.4. Дүгнэлт

$(Mg)_A[Fe_2]_BO_4$  нэгдлийн онолын тооцооны үр дүнгээс магни болон төмрийн атомуудын байрлал тетраэдр болон октаэдр байрлалд хэрхэн яаж суухаас түүний соронзон шинж чанар хүчтэй хамаарч байгааг харуулж туршилтын үр дүнг бататгалаа. Нормаль шпинел тохиолдолын үндсэн төлөв нь хагас болон бүтэн инверс үеийнхээс илүү гүн сууж байсан нь нормаль шпинель бүтэц илүү тогтвортойг илэрхийлж байв. Соронзон параметруудийн үр дүн нь нейтрон дифракцаар тодорхойлсон үр дүнгүүдтэй сайн тохирч байв.

$Y_3Fe_5O_{12}$  нэгдлийн онолын тооцооны хувьд түүний соронзон шинж чанар нь төмрийн атомуудаас хэрхэн хүчтэй хамаарч байгааг, төмөр-төмөрийн атомуудын харилцан үйлчлэлийг Монте-Карло аргын тусламжтайгаар тодорхойлов. Эдгээр параметруудийн тусламжтайгаар температураас хамаарсан тогмол соронзон орон дахь хувийн дулаан болон соронзон моментыг илүү нарийвчлал сайтайгаар тодорхойллоо.

## ДӨРӨВ. ФЕРРИТ НАНО МАТЕРИАЛЫН БҮТЭЦ, ШИНЖ ЧАНАРЫН СУДАЛГАА

### 4.1. Магнийн феррит нэгдлийн судалгаа

Магнийн феррит нь холимог шпинел бүтэцтэй бөгөөд  $Fe^{3+}$  ион болон  $Mg^{2+}$  ионууд нь тетраэдр болон октаэдр байрлалд тархан суурьшдаг.  $Mg^{2+}$  ионууд соронзон шинж чанаргүй боловч  $MgFe_2O_4$  нь соронзон шинж чанарыг харуулдаг нь тухайн материалын сонирхолтой шинж чанар юм. Түүний дулаан ялгаруулах шинж чанар нь гарган авах арга, бөөмийн хэмжээнээс хэрхэн хамаарч буйг тодорхойлох судалгааг гүйцэтгэсэн.

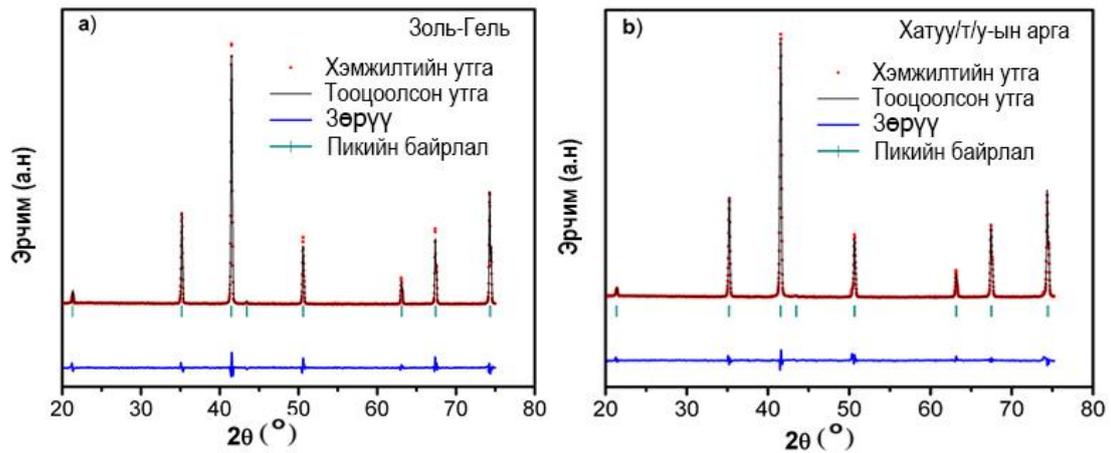
**Химийн синтезийн золь-гелийн арга:** Химийн синтезийн золь-гелийн аргаар  $MgFe_2O_4$  феррит материалыг гарган авахдаа магнийн нитрат (>99%), төмрийн нитрат (>99%), нимбэгний хүчил (>99.5%) – ийг тодорхой молийн харьцаагаар хольж соронзон хутгуур дээр 60-80°C температурт гель хэлбэрт оруулах хүртэл 6 цаг халааж 12 цагийн турш 100°C – т хатаав. Үүний дараа 1100°C – т 3 цаг шатааж дулааны боловсруулалтад оруулаад аяндаа хөргөж тасалгааны температурт хүргэх замаар гарган авлаа.

**Химийн синтезийн хатуу төлөвийн урвалын арга:**  $MgFe_2O_4$  нунтаг феррит нэгдлийг Японы Нийхама хотын Технологийн үндэсний хүрээлэнд хатуу төлөвийн урвалын аргаар тээрэмдэгч аппаратаар циркон бөмбөлөг ашиглан этанолын орчинд нано нунтаг ферритийн дээжийг гарган авсан [36].

#### 4.1.1. Кристалл бүтцийн судалгаа

Золь-гелийн арга болон хатуу төлөвийн урвалын аргаар гарган авсан  $MgFe_2O_4$  дээжүүдийн тасалгааны температурт хэмжсэн рентген дифракцын спектрийг зураг 4.1 –д үзүүлэв. Хэмжилтийн үр дүнг Ритвельдийн арга ашиглан боловсруулалт хийж бүтцийн параметруудийг тодорхойллоо (хүснэгт 4.1).

Рентген дифракцын спектрийн боловсруулалтаас үзэхэд  $MgFe_2O_4$  төрлийн куб шпинел (ICCD 00-088-1941), огторгуйн групп нь Fd-3m кристалл бүтэцтэй, ямар нэгэн хольц фаз илрээгүй цэвэршилт сайтай дээж болох нь харагдаж байна.



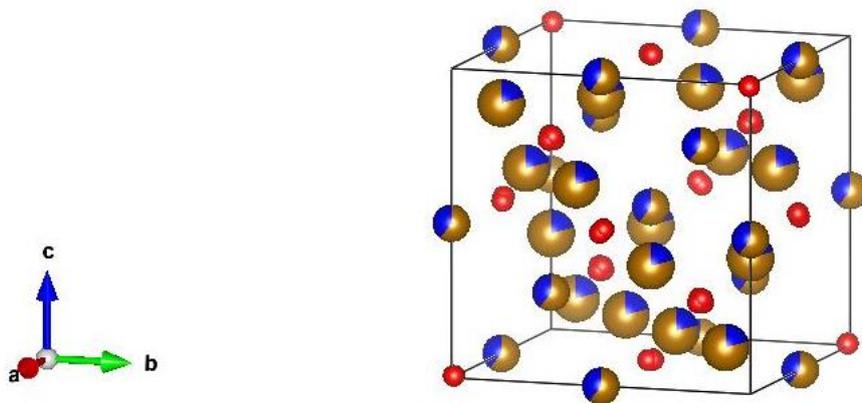
**Зураг 4.1.** а) Золь-гель аргаар болон б) Хатуу төлөвийн аргаар гарган авсан  $MgFe_2O_4$  дээжүүдийн рентген дифракцын спектр

Туршилтын үр дүнгээс дундаж кристаллитын хэмжээг Дебай-Шеррерийн тэгшитгэлийг ашиглан (311) хавтгайн хувьд дараах харьцаагаар тооцоолоход ~ 50 нм байна.

$$D = \frac{K\lambda}{\beta \cos\theta} \quad (4.1)$$

Энд:  $K$  - хэлбэрийн фактор (0.9),  $\lambda$  - долгионы урт,  $\beta$  - интеграл өргөн (FWHM).

Рентген дифракцын хэмжилтийн үр дүнг ашиглан золь-гел аргаар гарган авсан  $MgFe_2O_4$  нэгдлийн эгэл торын кристалл бүтцийг DIAMOND программаар байгуулсан.



**Зураг 4.2.**  $MgFe_2O_4$  нэгдлийн эгэл торын кристалл бүтэц

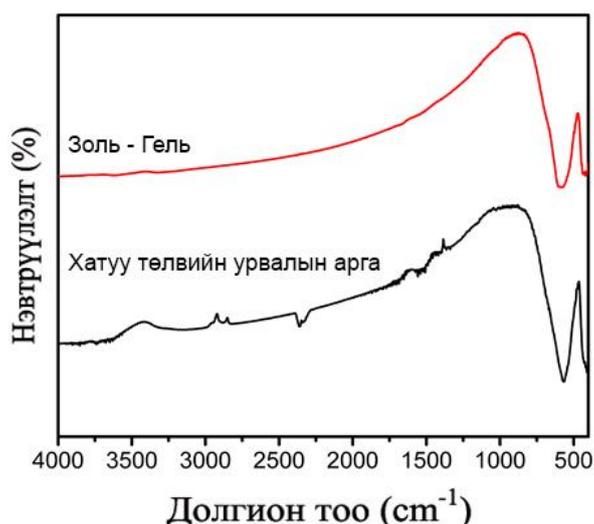
Зураг 4.2 –д үзүүлснээр  $MgFe_2O_4$ -нь эгэл торондоо 56 атомтай бөгөөд цэнхэр өнгөөр 8a тал буюу тетраэдр дэд орон тор дээр сууж байгаа магнийн атомуудыг, улаан өнгөөр 32e тал дээр сууж байгаа хүчилтөрөгчийн атомуудыг, шар өнгөөр 16d тал буюу октаэдр дэд орон тор дээр сууж байгаа төмрийн атомуудыг тус тус дүрслэв.

**Хүснэгт 4.1.**  $MgFe_2O_4$  бүтцийн параметрууд

Гарган авсан арга	Золь-гел	Хатуу төлөв
Торын тогтмол (Å)	8.382	8.374
Кристаллитын хэмжээ (нм)	58	54
Брэгг фактор (%)	2.88	2.03
Жинлэсэн фактор (%)	14.3	10.4

#### 4.1.2. Молекул бүтцийн судалгаа

Нил улаан туяаны спектрофотометр (FTIR) –н хэмжилтийг  $MgFe_2O_4$  нэгдлийг KBr-ын нунтагтай 1:10 массын харьцаатайгаар хольж  $400 - 4000\text{cm}^{-1}$  мужид хэмжилтийг хийв. Хэмжилтийн үр дүнгээс харахад  $400 - 1000\text{cm}^{-1}$  мужид металлын шингээлтийн хэлбэлзэл үүсдэг ба энэ мужид кристалл бүтэц дэх атомууд (металл – хүчилтөрөгч хоорондын ) -ын хоорондох зай өөрчлөгдсөнөөр үүсэх валентын хэлбэлзэл илэрсэн.



**Зураг 4.3.**  $MgFe_2O_4$  дээжийн нил улаан туяаны спектрометрийн хэмжилтийн үр дүн

Энэхүү валентын хэлбэлзлийг  $\nu$  үсгээр тэмдэглэдэг ба өндөр давтамжийн холбоо болох ( $\nu_1$ ) -  $580\text{cm}^{-1}$  мужид тетраэдр дэд орон тор дээрх  $\text{Mg}^{2+}$  исэлдэхүйн зэрэгтэй катионы хэлбэлзэл, харин бага давтамжийн холбоо болох ( $\nu_2$ ) -  $418\text{cm}^{-1}$  мужид октаэдр дэд орон тор дээрх  $\text{Fe}^{3+}$  исэлдэхүйн зэрэгтэй катионы хэлбэлзэл ажиглагдсан (зураг 4.3).

Шингээлтийн хэлбэлзлээс хамааруулж кристалл бүтэц дэх тетраэдр болон октаэдр дэд орон тор дээр суурьшиж байгаа металл – хүчилтөрөгч хоорондын холбоосын хүчийг дараах тэгшитгэлээр тооцоолж [37] үр дүнг хүснэгт 4.2 –т үзүүллээ.

$$f = 4\pi^2 c^2 \nu^2 \mu \quad (4.2)$$

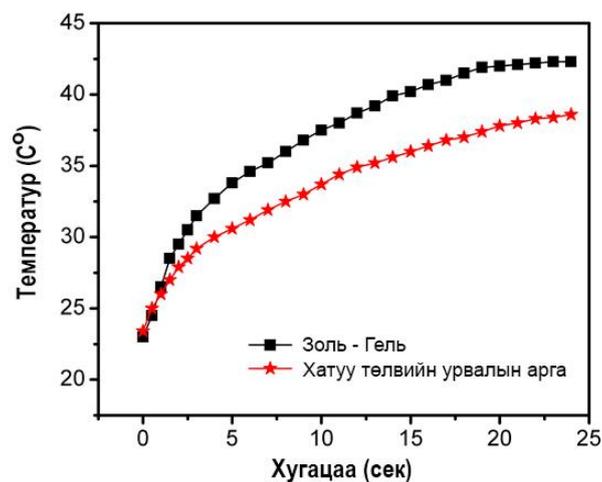
Энд:  $c$ - гэрлийн хурд,  $\nu$ - долгион тоо  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\mu$ - эмхтгэсэн масс =  $\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}$ ,  $m_1$ - катионы масс,  $m_2$ -анионы масс.

**Хүснэгт 4.2.** Кристалл бүтэц дэх атомуудын хоорондох холбоос хүчний тооцооны үр дүн

Гарган авсан арга	Золь-гель	Хатуу төлөв
Тетраэдр дэх ионы шингээлт $\nu_1$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	568.14	551.64
Октараэдр дэх ионы шингээлт $\nu_2$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	406.98	402.41
Тетраэдр дэх холбоос хүч $f_T$ ( $\times 10^5$ дин/см)	2.36	2.22
Октараэдр дэх холбоос хүч $f_O$ ( $\times 10^5$ дин/см)	1.21	1.18

#### 4.1.3. Дулаан ялгаруулалтын хэмжилт

$\text{MgFe}_2\text{O}_4$  феррит дээжийн дулаан ялгаруулах процессыг хувьсах соронзон орон үүсгэдэг төхөөрөмжийн тусламжтайгаар судлав. Соронзон дээжүүдийг 50 мг хэмжээтэйгээр 1 мл нэрмэл усанд хийж дулаан ялгаруулалтын хэмжилтийг гүйцэтгэлээ. Зураг 4.4 –т дээж болон уснаас хамаарсан температурын өөрчлөлтийн утгуудыг харуулав.



**Зураг 4.4.**  $MgFe_2O_4$  нэгдлийн хувьсах соронзон орны нөлөөгөөр үүсэх температур, хугацааны хамаарал

Эндээс үзэхэд тодорхой хугацааны дараа (~17–20 мин) дээжүүдийн температур тогтворжиж, температурын хамгийн их буюу ханалтын утга нь золь-гель аргаар гарган авсан дээжийн хувьд 42°C хүрч байсан бол хатуу төлөвийн урвалын аргаар гарган авсан дээжний хувьд 33°C байв. Уг үр дүнгээр томьёо (1.10) –ийг ашиглан ХШЧ –ыг тодорхойлов. ХШЧ утгуудыг тооцоолоход золь-гел – 5.25 Вт/гр, хатуу төлөвийн арга – 3.15 Вт/гр гарсан.

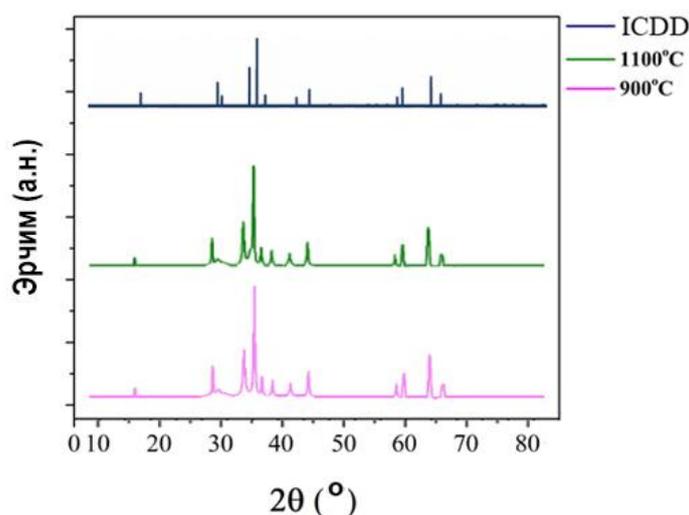
## 4.2. Зэсийн феррит нэгдлийн судалгаа

Зэсийн феррит  $\text{CuFe}_2\text{O}_4$  – ийн хувьд хамгийн их анхаарал татдаг сул соронзон феррит материалын нэг юм. Зэсийн феррит нь урвуу шпинел бүтэцтэй бөгөөд  $\text{Cu}^{2+}$  катионууд октаэдр хэсэгт байрладаг.  $\text{CuFe}_2\text{O}_4$ -ийн нэг онцлог шинж чанар нь энэ нэгдэл нь I41/amd орон зайн бүлэгтэй тетрагональ шпинел бөгөөд  $380^\circ - 450^\circ$  температурт куб симметрэй болж хувирдаг байна.

**Химийн синтез:**  $\text{CuFe}_2\text{O}_4$  соронзон nano материалыг золь-гелийн аргаар синтезлэн авсан. Синтезийг явуулахдаа зэсийн нитрат  $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (99.0%), төмрийн нитрат  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  (>98.5%), нимбэгний хүчил  $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$  (>99,5%)–үүдийн молийн харьцааг 1:2:4 байхаар сонгон авч нэрмэл усанд уусгасны дараагаар аммоны гидроксид  $\text{NH}_4\text{OH}(\text{H}_3\text{NO})$  (>99,5%)-ийг уусмалын pH-ийг 7 болтол нэмж өгсөн. Гарган авсан уусмалыг  $60^\circ\text{C}$ -д 8 цагийн турш гель хэлбэртэй болтол нь соронзон хутгуураар холин ууршуулна. Үүссэн гелийг  $100^\circ\text{C}$ -д 12 цагийн турш хатаана. Үүний дараа  $900^\circ\text{C}$ ,  $1100^\circ\text{C}$  -д 3 цаг шатааж нунтаг дээжүүдийг гарган авсан ба тус бүрийг А, Б дээж гэж нэрлэв.

### 4.2.1. Кристалл бүтцийн судалгаа

Золь-гелийн аргаар гарган авсан  $\text{CuFe}_2\text{O}_4$  дээжийн тасалгааны температурт хэмжсэн рентген дифракцын спектрийг зураг 4.5-т үзүүлэв.



**Зураг 4.5.**  $\text{CuFe}_2\text{O}_4$  дээжийн рентген дифракцын үр дүн

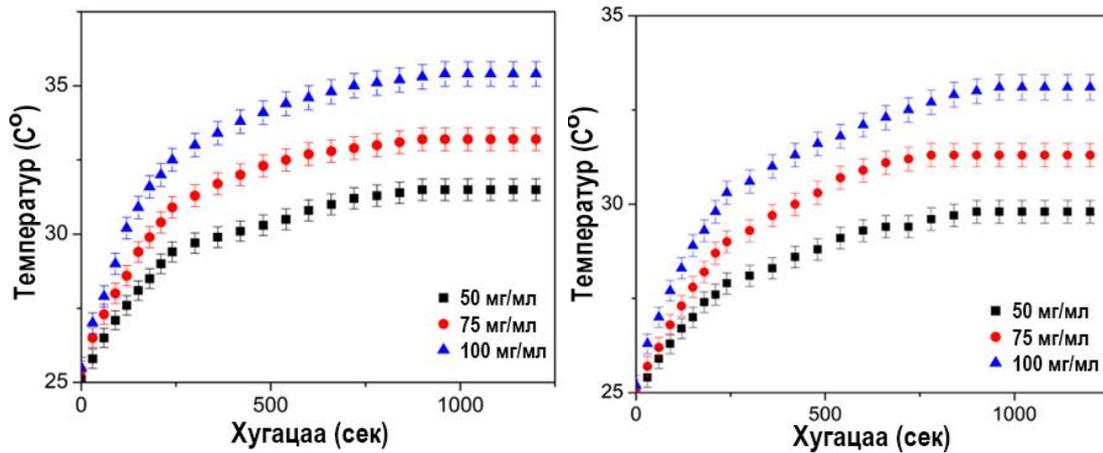
Хэмжилтийн үр дүнг Ритвельдийн арга ашиглан боловсруулалт хийж, бүтцийн параметруудийг тодорхойллоо (4.3-р хүснэгт). Боловсруулалтын үр дүнд  $CuFe_2O_4$  дээж нь  $I4_1/amd$  огторгуйн групп бүхий тетрагональ бүтэцтэй байв. Нэмэлтээр  $CuO$  –ын (2.3 жин.%) фаз сарнилын өнцгийн  $2\theta = 38^\circ$  орчимд илэрсэн. Шатаалтын температур ихсэхэд рентген дифракцын пикийн өргөн нарийсаж байгаа нь дээж температур ихсэх тусам илүү кристаллжиж байгааг илэрхийлж байна. Кристаллитын хэмжээ  $1100^\circ C$  температурт 25.8 нм –ээс 31 нм болж өссөн ба эгэл торын эзлэхүүн тэлсэн байна. Дээжийн кристалл бүтцийг тодорхойлсон үр дүнг хүснэгт 4.3-т харуулав.

**Хүснэгт 4.3.** Зэсийн феррит дээжүүдийн рентген дифракцын үр дүн

Шатаалтын температур	Торын тогтмол (Å)	Хүчилтөрөгчийн координат	Атом хоорондын зай (Å)	Кристалл-жилтын хэмжээ (нм)	$R_{exp}$	$\chi^2$
1100°	5.8287(a)	y(O)	0.0142	1.91885 (A-O)	31.9	4.44
	8.6637(c)	z(O)	0.2559	2.3945 (B-O)		
900°	5.7976(a)	y(O)	0.0131	1.92476 (A-O)	25.8	4.58
	8.7243(c)	z(O)	0.2514	2.38016 (B-O)		

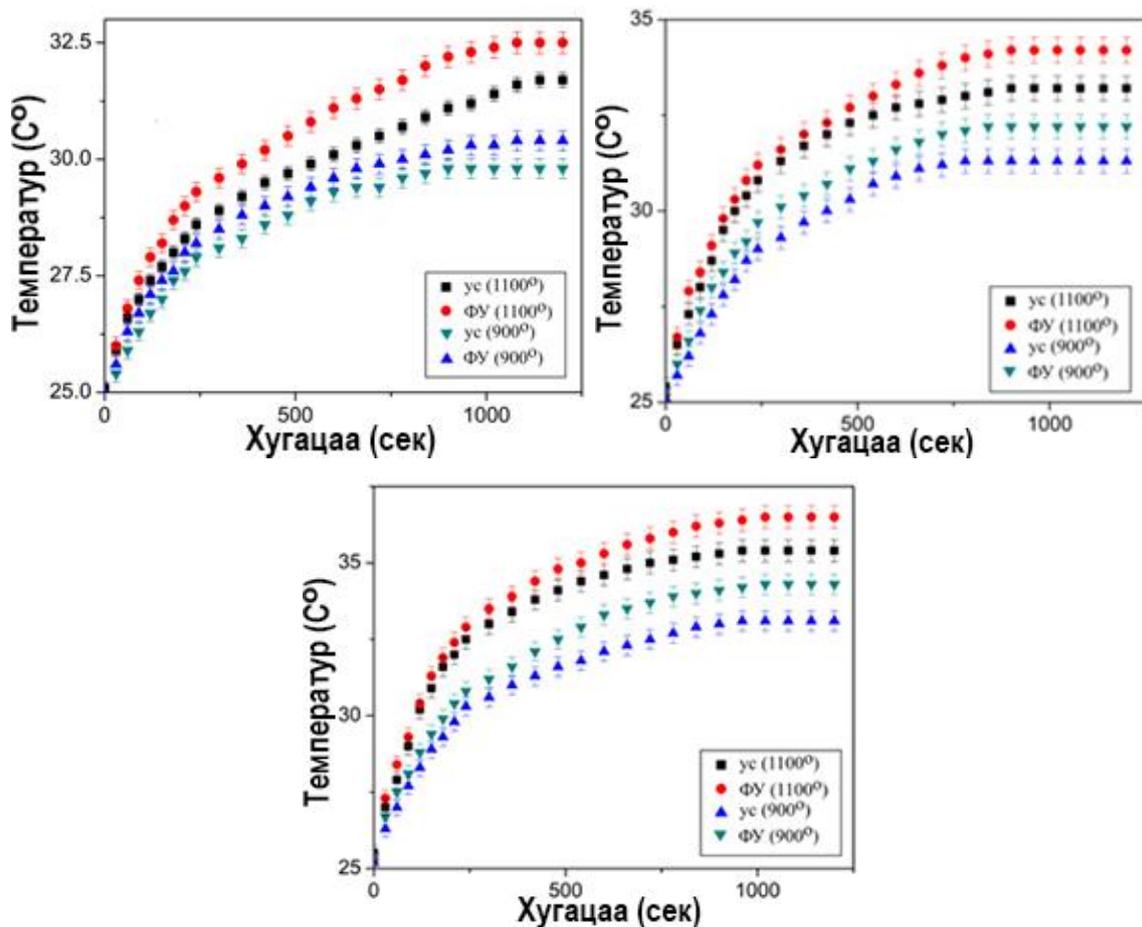
#### 4.2.2. Хувьсах соронзон оронд дулаан ялгаруулах туршилт

Соронзон материалын дулаан ялгаруулах үзэгдлийн концентрацаас хамаарсан хэмжилтийг А болон Б дээжийн хувьд усан орчинд, 50, 75, 100 мг/мл нөхцөлд явуулав. Температурын өсөлт болон концентрацийн хамаарлыг зураг 4.6-д үзүүллээ. Хэмжилтийн үр дүнгээс харахад 16 минутын дараа дээжүүдийн дулаан ялгаруулалт хамгийн их утгадаа ( $35.4^\circ C$ ) хүрч, тогтворжиж байлаа. Концентрац ихсэх тусам ялгаруулах дулааны хэмжээ ихсэж байна.



**Зураг 4.6.** Дээжүүдийн усан орчин дахь концентрацаас хамаарсан дулаан ялгаруулалтын хэмжилтийн (а) А дээж болон (б) Б дээжийн үр дүн

Мөн А болон Б дээжүүдийг физиологийн уусмал (7 рН) болон усан орчинд хэмжилтийг явуулж үр дүнг харьцуулан судаллаа (зураг 4.7).



**Зураг 4.7.** А, Б дээжүүдийн усан орчин болон физиологийн уусмал дахь концентрацаас хамаарсан дулаан ялгаруулалтын хэмжилтийн (а) 50 мг (б) 75 мг (в) 100 мг дээж, Энд ФУ-физиологийн уусмал

Физиологийн уусмал дахь А болон Б дээжүүдийн хувьд халалтын температур 32.5 болон 30.4 °С буюу усан орчноос илүү халж байв. Энэхүү хэмжилтийн үр дүнгээс бид орчин болон концентрацаас хамаарсан ХЧШ-н утгуудыг тэгшитгэл 1.10-ыг ашиглан А болон Б дээжийн хувьд тодорхойлсон хүснэгт 4.4-т үзүүлэв.

**Хүснэгт 4.4.** Температурын өөрчлөлт болон ЧХШ –ийн үр дүн

Дээж	Концентраци (мг)	ЧХШ (Вт/г)		Температур (°С)	
		Ус	ФУ	Ус	ФУ
А	50	1.61	1.6	31.5	32.3
	75	1.36	1.39	33.2	34.2
	100	1.22	1.26	35.4	36.5
Б	50	1.16	1.06	29.8	30.4
	75	0.96	0.98	31.3	32.2
	100	0.94	0.92	33.1	34.3

Уг орчноос хамаарсан дээжүүдийн дулаан ялгаруулалтын хэмжилтэд зөрүү ажиглагдсан ч чадлын хувийн шингээлтийн утгууд нь хоорондоо бараг ижил байсан нь дулаан ялгаруулалт нь орчны рН –аас илүүтэйгээр орчны дулаан багтаамжаас хамаарч буйг харуулж байна (Ус –  $c = 4.18$  Ж, Физиологийн уусмал -  $c = 4.06$  Ж).

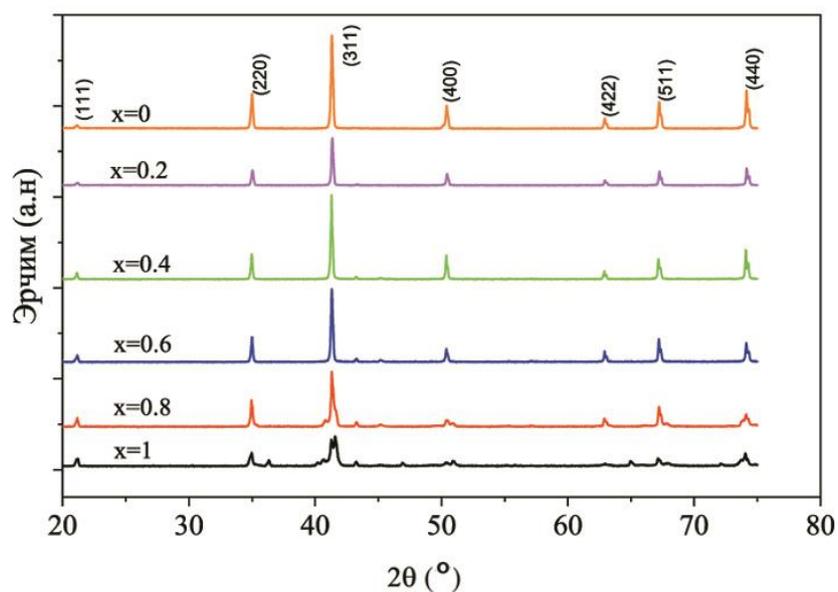
### 4.3. Зэс-магнийн холимог $(Mg_{1-x}Cu_x)Fe_2O_4$ нэгдлийн судалгаа

Өмнөх судалгаанд феррит материалыг гарган авах химийн синтезийн горим тогтоох ажлыг гүйцэтгэсэн. Энэ хэсэгт магнийн ферритийн октаэдр байршилд орших А катионыг  $Cu^{2+}$  хольц элементээр  $(Mg_{1-x}Cu_x)Fe_2O_4$ ,  $x = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$  хольцолж бүтэц, шинж чанарыг судалгааг гүйцэтгэсэн үр дүнг хэлэлцүүлнэ. Энэ хольц элемент нь ионы радиусын хувьд ойролцоо ( $r_{Mg} = 0.72 \text{ \AA}$ ,  $r_{Cu} = 0.73 \text{ \AA}$ ) учир кристалл торын гажиг үүсгэхгүй. Үүнээс гадна  $Cu^{2+}$  ион нь октаэдр байршилд суурьших илүү эрмэлзэлтэй байдаг (тогтвортой бүтцийн энерги бага) учир  $MgFe_2O_4$  кристаллын октаэдр байршил дахь  $Mg^{2+}$  ионыг халж суурьшина. Ингэснээр  $Mg^{2+}$  ( $\mu_B = 0$ ) соронзон бус элементийг соронзон шинж чанартай  $Cu^{2+}$  ( $\mu_B = 2$ ) ионоор хольцолсноор АВ харилцан үйлчлэлийн момент ихсэж соронзон шинж чанарыг нэмэгдүүлэх юм. Бүтцийн томьёо:  $(Mg_{1-\delta}Fe_{\delta})_A[Mg_{\delta-x}Cu_xFe_{2-\delta}]_B O_4$ ,  $x = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ .

**Химийн синтез:**  $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$ ,  $x = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$  материалыг золь-гелийн аргаар синтезлэн гарган авч, бүтэц шинж чанарыг судлав. Магни нитрат  $Mg(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$  (>99.0%), зэсийн нитрат  $Cu(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$  (99.0%), төмрийн нитрат  $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$  (>98.5%), нимбэгний хүчил  $C_6H_8O_7$  (>99,5%) –үүдийн молийн харьцааг 1:2:6 байхаар сонгон авч нэрмэл усанд уусгасны дараагаар аммоны гидроксид  $NH_4OH(N_3NO)$  (>99,5%)-ийг уусмалын рН-ийг 7 болтол нэмж өгсөн. Гарган авсан уусмалыг  $60^\circ C$ -д 8 цагийн турш гель хэлбэртэй болтол нь соронзон хутгуураар холин ууршуулна. Үүссэн гелийг  $100^\circ C$ -д 12 цагийн турш хатаана. Үүний дараа харгалзан  $500^\circ C$ ,  $700^\circ C$ ,  $900^\circ C$ ,  $1100^\circ C$  -д 3 цаг шатааж нунтаг дээжүүдийг гарган авсан.

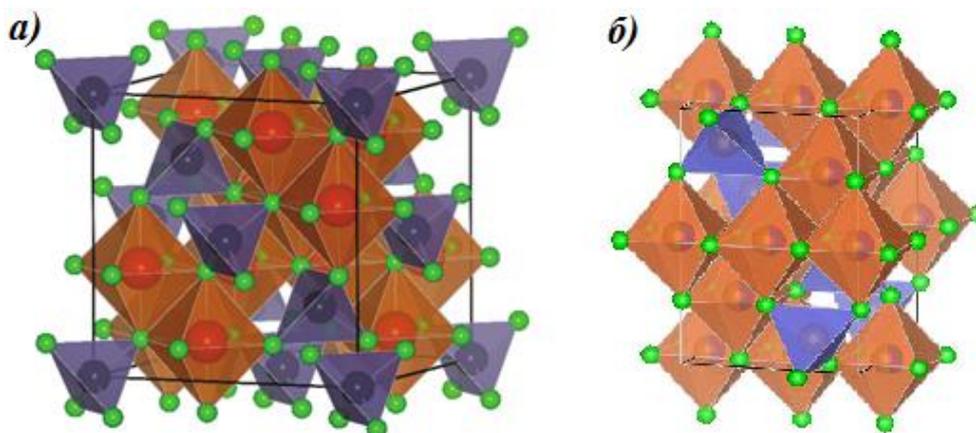
#### 4.3.1. Кристалл бүтцийн судалгаа

Феррит төрлийн шпинел бүтэцтэй кристалл  $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$  ( $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ ) нэгдлийн рентген дифракцын хэмжилтийн үр дүнг (Зураг 4.8)-д үзүүлэв. Рентген дифракцын аргаар бүрэлдэхүүнийг тодорхойлоход зэсийн хольцын хэмжээ  $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6$  утгатай байхад куб бүтэцтэй шпинел фаз үүсэж байсан бол  $x = 0.8, 1.0$  утгатай болсон үед дифракцын пик ( $2\theta = 41.3^\circ$ ) хуваагдаж байгаа нь шинэ төрлийн тетрагонал  $CuFe_2O_4$  фаз үүсэж байгааг харуулж байна.



**Зураг 4.8.**  $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$  нэгдлийн рентген дифракцын хэмжилтийн үр дүн

Уг феррит материалууд нь эгэл үүрэндээ 56 атомтай бөгөөд зураг 4.9-д рентген дифракцын хэмжилтийн үр дүнг ашиглан  $MgFe_2O_4$  болон  $CuFe_2O_4$  нэгдлийн эгэл торын кристалл бүтцийг VESTA программаар байгуулж үзүүлээ. Хөх өнгөөр 8a тал буюу тетраэдр дэд орон тор дээр сууж буй атомуудыг, ногоон өнгөөр 32e тал дээр сууж байгаа хүчилтөрөгчийн атомуудыг, бор өнгөөр 16d тал буюу октаэдр дэд орон тор дээр сууж байгаа атомуудыг тус тус дүрслэв.



**Зураг 4.9.** а)  $MgFe_2O_4$ -ийн кристалл бүтэц, б)  $CuFe_2O_4$ -ийн кристалл бүтэц  
 $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$  нэгдлийн рентген дифракцын үр дүнгээс  $Cu^{2+}$  хольцын хэмжээ байгааг тодорхойлсон.  $Mg^{2+}$  катионы ионы радиус нь (тетраэдрт 0.57 Å ба

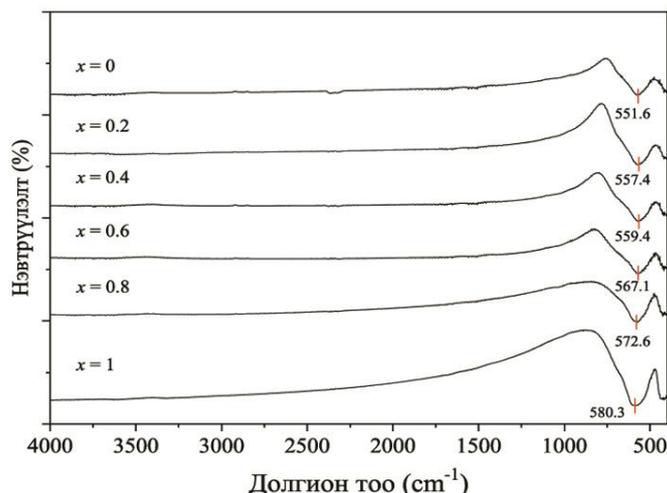
октаэдрт 0.72 Å) хольц  $Cu^{2+}$  катионы ионы радиустай (тетраэдрт 0.57Å ба октаэдрт 0.73 Å) ойролцоо учир торын параметрт бага хэмжээгээр ихэссэн нь ба уг рентген дифракцын үр дүнг хүснэгт 4.5 –д харуулав.

**Хүснэгт 4.5.**  $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$  нэгдлийн рентген дифракцын үр дүн

Дээж	Торын диаметр (Å)		Хүчилтөрөгчийн координат		Атом хоорондын зай (Å)	$R_{exp}$
	куб	тетрагональ	y(O)	z(O)		
$MgFe_2O_4$	8.375613	-	0.25643		1.8969 A-O 2.0477 B-O	4.67
$(Mg_{0.8}Cu_{0.2})Fe_2O_4$	8.379821	-	0.25578		1.8991 A-O 2.0473 B-O	5.88
$(Mg_{0.6}Cu_{0.4})Fe_2O_4$	8.385837	-	0.25712		1.9133 A-O 2.0403 B-O	4.15
$(Mg_{0.4}Cu_{0.6})Fe_2O_4$	8.377947	-	0.25398		1.9013 A-O 2.0467 B-O	4.58
$(Mg_{0.2}Cu_{0.8})Fe_2O_4$	8.3819	5.8793(a) 8.5131(c)	0.2568		1.9135 A-O 2.0401 B-O	3.95
$CuFe_2O_4$	-	5.8287(a) 8.6637(c)	y(O) 0.0142 z(O) 0.2559			4.44

#### 4.3.2. Молекул бүтцийн судалгаа

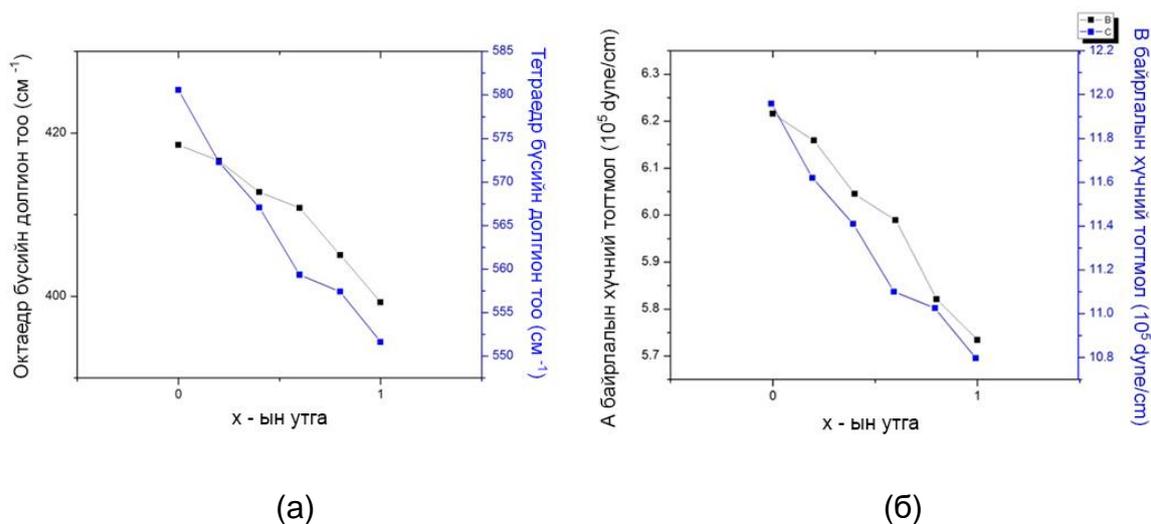
$Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$  ( $x= 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ ) нэгдлийн нил улаан туяаны спектрофотометрийн хэмжилтийг KBr-ын нунтагтай 1:10 массын харьцаатайгаар хольж  $400cm^{-1} - 4000cm^{-1}$  хэмжилтийг хийв (Зураг 4.10). Энгийн шпинелийн эгэл торын хэлбэлзэл нь тетраэдр (A) болон октаэдр (B) дэд орон тор дээрх металл хүчилтөрөгч хоорондын валентын хэлбэлзлээс хамаардаг ба  $400-600 cm^{-1}$  мужид нормаль шпинел төрлийн бүтэц үүсэж байгаа бөгөөд энэхүү мужид хоёр гол холбоос үүсдэг [38]. Үүнд шингээгдэх өндөр давтамжийн холбоо ( $\nu_1$ )  $\sim 580cm^{-1}$  мужид тетраэдр дэд орон тор дээрх 2+ исэлдэхүйн зэрэгтэй катионы хэлбэлзэл харин бага давтамжийн холбоо ( $\nu_2$ )  $\sim 418cm^{-1}$  мужид октаэдр дэд орон тор дээрх 3+ исэлдэхүйн зэрэгтэй катионы хэлбэлзэл бий болсон.



**Зураг 4.10.**  $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$  нэгдлийн нил улаан туяаны хэмжилтийн үр дүн

Нил улаан туяаны хэмжилтээр металлын ионы валентын хэлбэлзэл нь долгион тооны их мужруу шилжиж байна (Зураг 4.11а). Энэ нь тетраэдр болон октаэдр торуудад суурьшиж байгаа анион болон катионы хоорондох зай зэсийн хольцын хэмжээнээс хамаарч өөрчлөгдсөнтэй холбоотой ба тэдгээр анион катионуудын хоорондох холбоос хүч өөрчлөгдсөнтэй холбоотой юм.

Тетраэдр болон октаэдр дэх анион катион хоорондын холбоосын хүч нь металлын валентын хэлбэлзлээс шугаман хамааралтай багасаж байна (Зураг 4.11б).



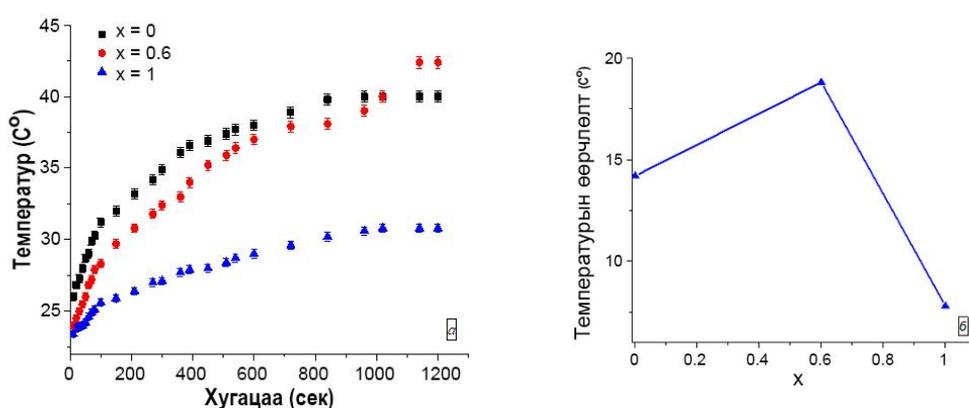
**Зураг 4.11.** а) Тетраэдр болон Октаэдр тор дахь шингээлт, б) Тетраэдр болон Октаэдр тор дахь холбоос хүч

**Хүснэгт 4.6.**  $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$  нэгдлийн тетраэдр болон октаэдр дэх ионы шингээлт болон тетраэдр болон октаэдр дэх ионы холбоос хүчний тооцооны үр дүн.

$x$	Тетраэдр дэх ионы шингээлт $\nu_1$ ( $cm^{-1}$ )	Октараэдр дэх ионы шингээлт $\nu_2$ ( $cm^{-1}$ )	Тетраэдр дэх холбоос хүч $f_T$ ( $\times 10^5$ дин/см)	Октараэдр дэх холбоос хүч $f_O$ ( $\times 10^5$ дин/см)
1	418.55	580.27	6.216	11.959
0.8	416.62	572.57	6.159	11.620
0.6	412.76	567.07	6.045	11.410
0.4	410.83	559.35	5.989	11.101
0.2	405.05	557.42	5.821	11.025
0	402.41	551.64	5.734	10.797

### 4.3.3. Дулаан ялгаруулалтын судалгаа

Зэс-магнийгын хольцоос хамаарсан 3 өөр дээжийн дулаан ялгаруулах процессыг усан орчинд судлав. Дулааны хэмжилтийг 2 мл усанд 50 мг дээж аван хувьсах соронзон орон үүсгэх төхөөрөмжөөр судалсан. Дээжүүдийн хувьд температур ханалтын утгадаа 17-20 минутад хүрч байв. Температур ханалтын утгууд  $x=0$ ,  $x=0.6$ ,  $x=1$  дээжүүдийн хувьд харгалзан  $40^\circ C$ ,  $42.4^\circ C$ ,  $30.8^\circ C$  байсан (зураг 4.12).



**Зураг 4.12.** Зэсийн ялгаатай агууламж бүхий дээжүүд а – температурын хугацаанаас хамаарсан өөрчлөлт, б – зэсийн агууламжаас хамаарсан халалт.

Дулааны эмчилгээний үед хавдрын эсийг устгахын тулд температурыг  $42^\circ C$  –т 30 минутын барих шаардлагатай байдаг бөгөөд мөн эрүүл эсэд нөлөөлөхгүйн

тулд  $46^{\circ}\text{C}$ -аас хэтэрч болохгүй. Манай судалсан дээжүүдийн хувьд  $x=0.6$  буюу  $(\text{Mg}_{0.4}\text{Cu}_{0.6})\text{Fe}_2\text{O}_4$  дээж хамгийн их дулаан ялгаруулж байсан бөгөөд хавдрын эсийг устгах температуртай ойролцоо дулаан ялгаруулсан. Үүнийг үйлчилж буй соронзон орны хүчлэгийг удирдан багасгах замаар бууруулах боломжтой.

Судалгаанд ашигласан дээжүүд болох  $x=0$ ,  $x=0.6$ ,  $x=1$  дээжүүдийн хувьд ХШЧ-г (4.3) томъёогоор тооцоолж үзэхэд харгалзан 9.6 Вт/гр, 11 Вт/гр, 5.5 Вт/гр гарсан.

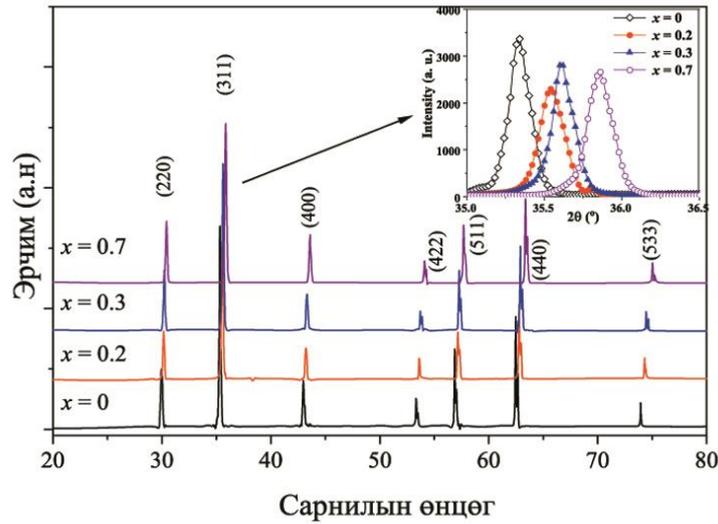
#### 4.4. Хөнгөн цагаан-төмрийн $Mg(Al_xFe_{2-x})O_4$ нэгдлийн судалгаа

Өмнөх судалгаанд магнийн ферритийн А катионыг хольцолсон бол энэхүү хэсэгт В катионыг соронзон бус элементээр хольцолж бүтэц болон дулаан ялгаруулах шинж чанарт нөлөөлөх нөлөөллийг судалсан юм. Хольц элементээр  $Al^{3+}$  ионыг сонгон авсан нь ионы радиус ойролцоо ( $r_{Fe} = 0.55 \text{ \AA}$ ,  $r_{Al} = 0.535 \text{ \AA}$ ), соронзон шинж чанаргүй, нөгөө талаар  $MgAl_2Fe_4$  нь энгийн шпинел буюу  $Al^{3+}$  ион нь октаэдр байршилд суурьших эрмэлзэлтэй буюу холимог шпинелээс ялгаатай бүтэцтэй юм. Бүтцийн томьёо нь  $(Mg_{1-\delta}Fe_{\delta})_A[Mg_{\delta}Al_xFe_{2-\delta-x}]_BO_2$ ,  $x = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ .

**Химийн синтез:**  $MgAl_xFe_{2-x}O_4$  ( $x=0.0, 0.2, 0.3, 0.7, 2$ ) нунтаг холимог феррит нэгдлийг золь-гель аргыг ашиглан бэлтгэв. 100 мл нэрмэл усанд  $Mg(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ ,  $Al(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ ,  $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$  нэгдлүүдийг тодорхой стехеометрийн харьцаатайгаар уусгаж нимбэгний хүчил болон этиленгликолтой тодорхой молийн харьцаатайгаар хольж  $200^\circ C$ -т гурван цаг халааж гель хэлбэртэй болгосон. Ферритийн анхдагч бүтцийг бий болгохын тулд гарган авсан гель хэлбэртэй дээжийг  $400^\circ C$  температурт нэг цаг шатаан органик нэгдлүүдийг зайлуулж агаартай орчинд  $400^\circ C$ - $1200^\circ C$  мужид нэг цаг шатааж нунтаг дээжүүдийг гарган авав.

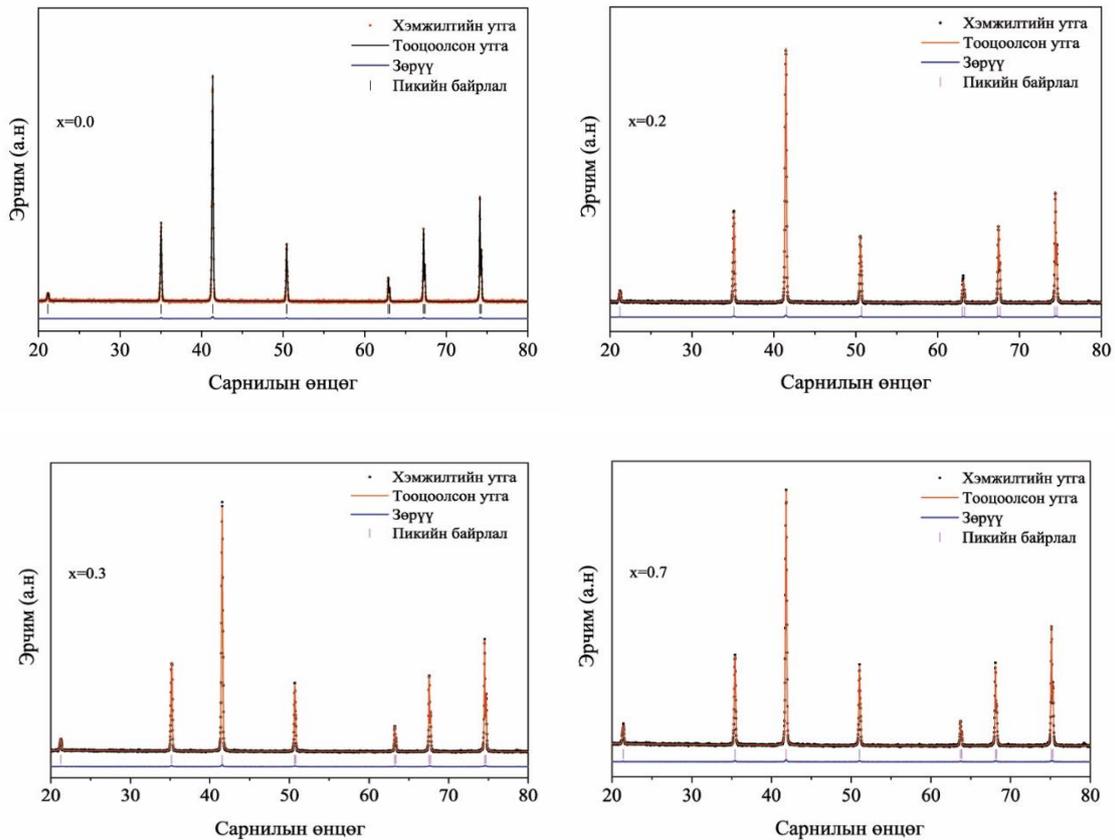
##### 4.4.1. Кристалл бүтцийн судалгаа

Рентген дифракцын хэмжилтийг дифракцын өнцөг  $20$ - $80^\circ$ , хоолойн хүчдэл  $40$  кВ, гүйдэл  $20$  мА, Cu K $\alpha$  цацраг ашиглан тасалгааны температурт хийж гүйцэтгэв. Хэмжилтийн үр дүнг Ритвельдийн арга ашиглан боловсруулалт хийж бүтцийн параметруудийг тодорхойллоо (хүснэгт 4.7).



**Зураг 4.13.**  $MgAl_xFe_{2-x}O_4$  нэгдлийн рентген дифракцын хэмжилтийн үр дүн

Рентген дифракцын хэмжилтээс кристаллын ионы түгэлтээс хамаарч пикийн эрчмийн багасалт болон пикийн шилжилт ажиглагдаж байна. Энэ нь кристаллын эгэл торын хэмжээ өөрчлөгдсөнтэй холбоотой юм (зураг 4.13).

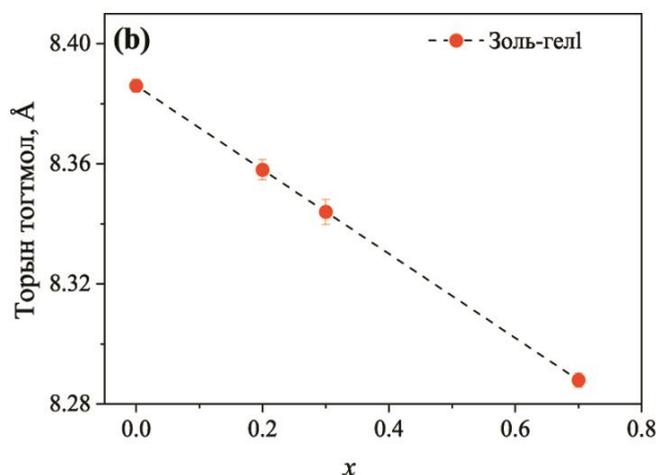


**Зураг 4.14.**  $MgAl_xFe_{2-x}O_4$  ( $x=0, 0.2, 0.3, 0.7$ ) нэгдлүүдийн Ритвельд аргаар боловсруулсан спектрүүд.

**Хүснэгт 4.7.**  $MgAl_xFe_{2-x}O_4$  ( $x=0, 0.2, 0.3, 0.7, 2$ ) нэгдлийн рентген дифрактограммыг Ритвельдийн аргаар боловсруулсны дараах кристалл бүтцийн параметрууд

x	$A_{\text{куб}}, \text{Å}$	Катионы түгэлт	
		Тетраэдр (8a) тор	Октаэдр (16d) тор
0.0	8.3849±0.0012	(Fe <sub>0.81</sub> Mg <sub>0.19</sub> ) <sub>A</sub>	(Fe <sub>1.19</sub> Mg <sub>0.81</sub> ) <sub>B</sub>
0.2	8.3529±0.0032	(Fe <sub>0.81</sub> Mg <sub>0.19</sub> ) <sub>A</sub>	(Fe <sub>1.10</sub> Mg <sub>0.76</sub> Al <sub>0.13</sub> ) <sub>B</sub>
0.3	8.3429±0.0018	(Fe <sub>0.81</sub> Mg <sub>0.19</sub> ) <sub>A</sub>	(Fe <sub>0.96</sub> Mg <sub>0.81</sub> Al <sub>0.21</sub> ) <sub>B</sub>
0.7	8.2913±0.0003	(Fe <sub>0.72</sub> Mg <sub>0.28</sub> ) <sub>A</sub>	(Fe <sub>0.47</sub> Mg <sub>0.78</sub> Al <sub>0.78</sub> ) <sub>B</sub>

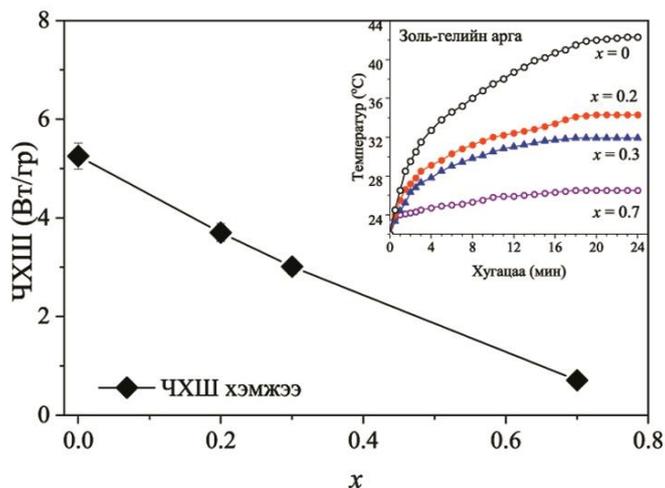
Рентген дифрактограммыг Ритвельдийн аргаар боловсруулсан үр дүнгээс харахад торын параметр буурч кристаллын эгэл торын эзлэхүүн багасаж байна. тодорхойлсон  $MgAl_xFe_{2-x}O_4$  нунтаг ферритийн торын параметрийн утгыг нэгдлийн стехеометрийн харьцаа (x)-ээс хамааруулсан үр дүнг (Зураг 4.15) -д үзүүлэв. Хөнгөн цагааны тетраэдр дэд орон тор дээрх катионы түгэлтийн концентрацийн хэмжээнээс хамаарч торын параметрийн хэмжээ нь буурч байна ( $r_{\text{Al}} = 0.535\text{Å}$ ) <  $r_{\text{Fe}} = 0.55\text{Å}$ ).



**Зураг 4.15.**  $MgAl_xFe_{2-x}O_4$  кристаллын торын параметр

#### 4.4.2. Дулаан ялгаруулалтын судалгаа

$Mg(Al_xFe_{2-x})O_4$  феррит дээжийн дулаан ялгаруулах процессыг хувьсах соронзон орон үүсгэдэг төхөөрөмжийн тусламжтайгаар судлав. Соронзон дээжүүдийг 50 мг хэмжээтэйгээр 1 мл нэрмэл усанд хийж дулаан ялгаруулалтын хэмжилтийг гүйцэтгэлээ.



**Зураг 4.16.**  $Mg(Al_xFe_{2-x})O_4$  дээжүүдийн ялгаруулах дулаан болон ХШЧ хөнгөн цагааны концентрацийн хэмжээнээс хамаарсан хамаарал

Зураг 4.16 –д хольц элементийн концентрациас хамаарсан температурын өөрчлөлтийн утгуудыг харуулав. Эндээс үзэхэд тодорхой хугацааны дараа (~17–20 мин) дээжүүдийн температур тогтворжиж, температурын хамгийн их буюу ханалтын утга нь золь-гель аргаар гарган авсан дээжийн хувьд  $42^\circ\text{C}$  хүрч байсан бол хатуу төлөвийн урвалын аргаар гарган авсан дээжний хувьд  $33^\circ\text{C}$  байв. Мөн туршилтын үр дүнгээс томьёо (4.1) –ыг ашиглан ХШЧ –г тодорхойлсон.

ХШЧ –ын утгуудыг тооцоолоход  $MgFe_2O_4$  дээжийн хувьд – 5.25 Вт/гр, хөнгөн цагаанаар хольцолсноор концентрацаас хамаарч – 3.70 Вт/гр, 3.01 Вт/гр, 0.71 Вт/гр гарсан бөгөөд энэ нь хөнгөн цагааны хольцоос хамаарч соронзон шинж чанар буурсантай холбоотой юм.

**Хүснэгт 4.8.**  $MgAl_xFe_{2-x}O_4$  ( $x= 0, 0.2, 0.3, 0.7, 2$ ) нэгдлийн хувийн шингээх чадлыг тооцоолсон үр дүн

Дээж	ХШЧ (Вт/гр)
$MgFe_2O_4$	5.25
$MgAl_{0.2}Fe_{1.8}O_4$	3.70
$MgAl_{0.3}Fe_{1.7}O_4$	3.01
$MgAl_{0.7}Fe_{1.3}O_4$	0.71

#### 4.5. Дүгнэлт

Судалгааны ажлын хүрээнд химийн синтезийн горим тогтоохоор цэвэр  $MgFe_2O_4$ ,  $CuFe_2O_4$  нэгдлүүдийг хамгийн түгээмэл хэрэглэгддэг (гарц их, цэвэршилт өндөр г.м) химийн синтезийн золь-гел болон хатуу төлөвийн урвалын хоёр аргыг ашиглан гарган авав. Ингэхэд золь-гелийн аргаар гарган авсан  $MgFe_2O_4$  дээж нь куб шпинел бүтэцтэй, ямар нэгэн хольц байхгүй цэвэршилт өндөртэй, кристаллитын хэмжээ тохиромжтой (~50нм), дулаан дулаан ялгаруулах чадамж өндөр (42°) байв.

Хольц элемент ашиглан соронзон шинж чанарыг нь өөрчилж, удирдах зорилгоор  $MgFe_2O_4$  нэгдлийг  $Cu^{2+}$  элементээр хольцолж, бүтэц шинж чанарын хамаарлыг тодорхойлов. Зэсийн хольцын хэмжээ  $x=0.8$  хүрэх үед тетрагональ  $CuFe_2O_4$  фаз үүсэж байгааг тогтоолоо. Энэ нь тетраэдр дэх төмрийн агууламж хангалттай хэмжээнд хүрэх үед (манай тохиолдолд  $Cu$  агуулга 0.8 хүрэх) куб бүтцээс тетрагональ руу фазын шилжилт хийдэг болохыг үзүүлж байна. Кристалл бүтцийн нарийвчилсан судалгаагаар  $Cu^{2+}$  хольцын улмаас ферритийн эгэл торын эзлэхүүн бага хэмжээгээр тэлснээр холбоосын хүч буурсан, соронзон момент нь октаэдр дэд бүтцээс тетраэдр бүтэц рүү шилжсэн буюу торын хүчиллэгийн хэмжээ ихэссэн, тетраэдрийн байршил дээр төмрийн ионууд цугларснаар урвуу шпинел бүтэц үүссэн болохыг тодорхойлов. Дулаан ялгаруулах чадамжийг хэмжихэд  $x=0.6$  дээжийн хувьд хамгийн өндөр дулаан ялгаруулалт болох 42.6°C хүрсэн бөгөөд ХШЧ –г тодорхойлоход 11 Вт/гр буюу цэвэр магнийн феррит дээжээс (9.6 Вт/гр) өндөр байсан.

Мөн химийн синтезийн золь-гелийн арга ашиглан гарган авсан  $MgAl_xFe_{2-x}O_4$  нэгдлийн судалгааг хийлээ. Энд  $x$  –ийн утгыг 0, 0.2, 0.3, 0.7 –оор авсан бөгөөд рентген дифракцын аргаар бүтцийн параметрууд болон катионы түгэлтийг тодорхойлсон. Хөнгөн цагаан хольцын хэмжээ ихэсэх үед торын тогтмол 8.38 Å –аас 8.28 Å хүртэл буурсан бөгөөд хөнгөн цагааны атомын хувьд октаэдр байрлалд суурьшиж байсан. Уг дээжүүдийн дулаан ялгаруулах чадамжийг тодорхойлоход хөнгөн цагааны хольц нэмэгдэхэд ялгаруулах дулаан буурч байсан бөгөөд  $x$  –ийн утга 0.7 байхад маш бага буюу 26°C хүрч, ХШЧ нь 0.71 Вт/гр хүртэл буурсан.

Энэхүү судалгааны ажлын хүрээнд 71 кГц –н давтамж бүхий соронзон орон үүсгэх төхөөрөмжийг угсран дулаан ялгаруулах чадамжийн судалгааг гүйцэтгэсэн. Хэмжилтийг 50, 75, 100мг –аар сонгон авч дулаан ялгаруулалт дээжийн хэмжээнээс хэрхэн хамаархыг судлахад дээжийн концентрацийг өөрчилснөөр ялгаруулах дулааныг удирдах боломжтой бөгөөд ялгарах дулаан дээжийн концентрацаас пропорционал хамааралтай болохыг тогтоов. Мөн хэмжилтийг орчноос хамааруулах судлах зорилгоор ус болон физиологийн уусмалд хийн харьцуулахад хоорондох зөрүү нь орчны дулаан багтаамжаас хамаарч байв.

## ТАВ. ФЕРРИТ НАНО МАТЕРИАЛЫН ХЭРЭГЛЭЭ

Сүүлийн жилүүдэд хавдрын эсрэг халуун эмчилгээнд зориулж хувьсах соронзон орны нөлөөгөөр дулаан ялгаруулах чадамж өндөр материалыг судлах ажил эрчимтэй явагдаж байна [39]. Энэ аргын нэг болох гипертерм эмчилгээ нь хорт хавдрын эсийн орчны температурыг дээшлүүлж устгах зорилготой юм. Хорт хавдрын эсүүд нь эрүүл эстэй харьцуулахад бүтэц, морфологи, үйл ажиллагааны хувьд маш их өөрчлөлтөд орсон байдаг. Үүний нэг жишээ нь: халуунд мэдрэмтгий буюу тэсвэр муутай байх шинж чанар юм. Тиймээс гипертерм эмчилгээ нь мэс засал, хими эмчилгээ, цацрагийн эмчилгээтэй харьцуулахад гаж нөлөө багатай, бие махбодод эрсдэл багатай гэсэн давуу талтай [40].

### 5.1. Хорт хавдрын өнөөгийн тоо баримт

Дэлхийн хэмжээнд хорт хавдрын улмаас нас барж буй хүмүүсийн тоо жил бүр ихэссээр байна. 2019 оны тоо баримтаар нас барагсдын 6 хүн тутмын нэг хорт хавдрын улмаас хорвоог орхисноос эдгээрийн 70 гаруй хувь нь буурай болон дундаж хөгжилтэй орнуудын иргэд байна. 1990 онд хавдрын улмаас нас барсан хүний тоо 5.7 сая байсан бол 2021 онд 10 сая болж ихэссэн байна [41, 42].

Монгол орны хувьд жилд дунджаар 5000 гаруй хүн хорт хавдраар өвдөж, 3000 гаруй хүн нас барж байгаа ба нийт хавдартай гэж оношлогдсон өвчтөний 70 гаруй хувь нь хожуу үедээ эмнэлэгт хандсан гэсэн харамсалтай тоо мэдээ байна. Монгол улс нь ходоод болон элэгний хорт хавдраар өвчлөгсдийн тоогоороо дэлхийд тэргүүлж байгаа бол улаан хоолойн хавдраар 5-р байранд байна. Иймд хорт хавдрыг өвчлөлийн эрт үед нь оношлох, эмчлэх боломжийг нэмэгдүүлэх, боломжит шинэ арга, технологи хөгжүүлэх, нэвтрүүлэх шаардлага чухлаар тавигдаж байна.

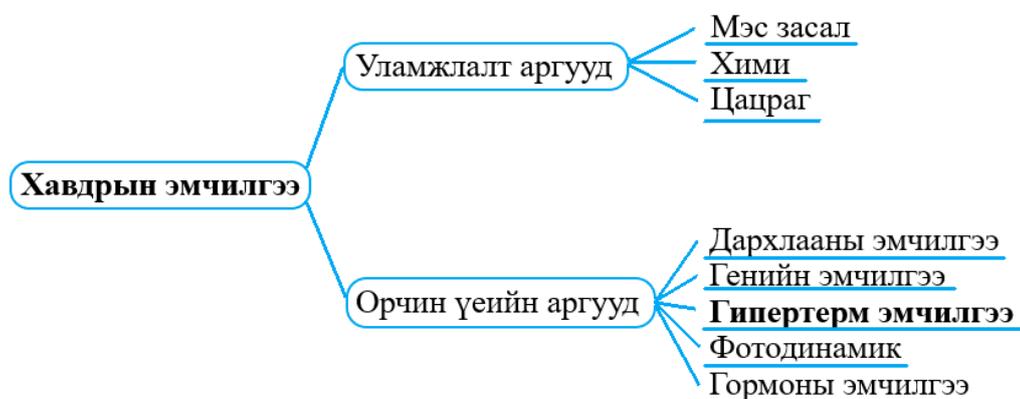
Хорт хавдар нь хүн төрөлхтний хувьд шинэ өвчин биш, эрт үед ч хорт хавдар өвчин байсаар байжээ. Энгийн ойлголтоор бол хорт хавдар нь хүний биеийн аль нэг хэсэгт хэвийн эсийн оронд үүссэн гаж эсүүд зүй тогтолгүй өсч, олшрох процесс юм. Хавдрын эс нь цус болон лимф буюу тунгалгийн урсгалаар дамжин биеийн бусад хэсгүүдэд тархдаг ба энэ өвчин нь мутацид орсон генээс болж үүсдэгийг өнөөгийн шинжлэх ухаан нотлоод байна. Гаднын маш олон хүчин зүйлийн нөлөөгөөр ген мутацид орох ба уг генийг агуулсан эс хорт хавдрын эс болон хувирч маш хурдтай өсч улмаар организмын тэнцвэрт байдал алдагдана. Хорт хавдрын эсийг буй болгодог гол ген нь онкогенесис (Oncogenesis) ген юм.

Уг ген мутацид орж өөрчлөгдөн эсийг маш олноор нь хувилан олшруулж хавдрын хэмжээнд хүргэнэ. Эсрэгээрээ энэхүү хяналтгүй эсийн хуваагдлыг хавдар дарангуйлагч (Tumor suppressor genes) ген зогсоож засварладаг. Гэхдээ энэхүү хавдар дарангуйлагч ген мутацид орох магадлалтай. Энэ тохиолдолд хяналтгүй өсч буй эсийг зогсоох, засварлах боломжгүй болдог. Хавдар дарангуйлагч ген онкогенесис гентэй харьцуулбал мутацид орох магадлал бага байдаг.

Нийт хавдрын 90-95% нь хүрээлэн буй орчин, хувь хүний амьдралын хэв маяг, хооллолт зэргээс шалтгаалсан генийн гажгаас үүсдэг бол үлдсэн 5-10% нь удамшсан генээс болно. Хорт хавдар үүсгэхэд тамхи 25-30%, буруу хооллолт ба таргалалт 30-35%, халдварт өвчин 15-20%, цацраг, стресс болон хөдөлгөөний дутагдлаас 10% хүртэлх хувиар нөлөөлдөг байна.

## 5.2. Хорт хавдрын эмчилгээний аргууд

Хүн төрөлхтөн хорт хавдартай анх нүүр тулж, танин мэдэж, эмчлэхийг оролдох болсноос өнөөг хүртэл маш олон төрлийн эмчилгээний аргууд үүсэн бий болж хөгжсөөр байна. Тухайн өвчтөний биеийн байдал, хавдрын төрөл болон үе шатуудаас хамаарч тохирох хавдрыг устгах, багасгах, өсөлтийг удаашруулах, өвчтөний биеийг тогтворжуулах эмчилгээнүүдээс сонгодог байна. Ингэхдээ ихэвчлэн өвчтөнд үзүүлэх сөрөг нөлөөг багасгаж хэрэглэж буй аргын үр ашгийг нэмэгдүүлэхийн тулд хэд хэдэн аргийг хослуулан хэрэглэдэг. Өнөөг хүртэл хөгжүүлж байгаа эмчилгээний арга, технологиуд өвчтөнд үзүүлэх сөрөг нөлөөг арилгаж зөвхөн хавдартай хэсэгт үйлчлэл үзүүлэхийг үндсэн зорилго болгон ажиллаж байна. Хавдрын эмчилгээг дотор нь мэс засал, хими эмчилгээ, цацрагийн эмчилгээ, халуун эмчилгээ гэх зэргээр хуваана. (Зураг 5.1 )



Зураг 5.1. Хавдрын эмчилгээний төрлүүд

**Мэс засал:** Онолын хувьд цусны (гематологи) хавдраас бусад бүх хавдрыг мэс заслын эмчлэх боломжтой гэж үздэг байсан боловч амьдралд биелэгддэггүй. Хавдар хэдий жижиг хэмжээтэй байсан ч тодорхой нөхцөлд хүний биеийн бусад хэсэгт тархдаг. Мэс засал бүрэн хийх эрсдэлтэй, бусад хэсэгт тархсан байх магадлал өндөр байх зэрэг тохиолдолд химийн эмчилгээг давхар ашигладаг.

**Химийн эмчилгээ:** Химийн эмчилгээ нь хавдрын эсийг устгах зорилготой эмчилгээ юм. Хавдрын төрөл болон онцлогоос хамаарч 100 гаруй төрлийн хавдрын эсийг дарангуйлах эм, бэлдмэлийг эмчилгээнд хэрэглэж байна. Гэхдээ химийн эмчилгээ нь зөвхөн хавдрын эсийг устгах төдийгүй хүний биеийн хурдан хуваагдаж өсдөг эрүүл эсүүдэд сөрөг нөлөө үзүүлэх, устгах сөрөг талтай.

**Цацраг туяаны эмчилгээ:** Цацраг туяа эмчилгээ нь ионжуулагч цацрагийн тусламжтайгаар хорт хавдрыг эмчлэх арга юм. Цацрагийн эмчилгээг анагаах ухаан, эмчилгээнд зориулсан тусгай багаж төхөөрөмж, шугаман хурдасгуурыг ашиглан эгэл бөөмсийн тодорхой урсгалыг урьдчилан тэмдэглэсэн хэсэгт тусгана. Элемент хэсгүүдийн урсгалын нөлөөн дор түрэмгий хортой эсийн ДНХ бүтэц нь эргэлт буцалтгүй устдаг бөгөөд энэ нь цаашдын хуваагдахаас сэргийлдэг. Цацрагийн эмчилгээний зорилго, тухайн өвчтөний онцлогоос хамааруулан альфа цацраг; бета цацраг; гамма цацраг; рентген туяа; нейтрон цацраг; протоны цацраг; пи-мезоны цацраг зэргийг өргөн ашигладаг бөгөөд эмчилгээний бусад аргуудтай хослуулах нь элбэг. Цөмийн эгэл хэсгүүдийн урсгал буюу цацраг туяаны нөлөөгөөр хавдрын эсийн ДНХ бүтэц нь эвдэрч устдаг учир эсийн цаашдын өсөлт, хуваагдалт зогсоно. Хорт хавдрын эсүүд идэвхтэй, илүү хурдтай хуваагдаж байдаг учир цацраг туяаны иончлолд эрүүл эд, эсээс илүү өртөмтгий, иймээс хурдан мөхдөг. Хорт хавдрын эсийн ДНХ-ийн бүтэц нь цацрагийн эмчилгээний явцад түүний өсөлт, хуваагдалд саад учруулдаг усны цацраг идэвхжил, эсийн цитоплазмын өөрчлөлтийн улмаас хурдан эвдэрнэ.

**Зорилтот эмчилгээ:** Энэхүү эмчилгээний арга нь химийн эмчилгээтэй төстэй боловч зөвхөн тухайн хавдарт нөлөөлөх эсрэг биет, генүүд, уургуудын тусламжтайгаар хавдрын өсөлт, хуваагдал, тархалтыг зогсоодог. Эдгээр молекулт нэгдлүүд нь эсийн өсөх, хуваагдах дохиог хааж эсвэл бүүр ажиллагаагүй болгохоос гадна эрүүл эсүүдийг илүү удаан амьдрах нөхцөл боломжоор хангадаг. Харамсалтай нь энэхүү аргыг бүх төрлийн хавдрыг эмчлэхэд ашиглах боломжгүй байгаа юм. Уг эмчилгээний арга нь моноклонал

эсрэг бие болон жижиг молекулт нэгдлүүдийн тусламжтайгаар зарим төрлийн хөхний, уушгины хавдар зэргийг эмчлэх боломжтой байгаа юм. Өвчтөний биед оруулсан эсрэг биетүүд хавдрын эсийн гадна талд эсвэл эсийн дотор талд байрлаж эсийг үхүүлэх хорт бодис ялгаруулж устгадаг бол жижиг молекулт нэгдлүүд хавдрын эсийн өсөх, үржих процессыг хаадаг.

**Дархлааны эмчилгээ:** Дархлааны эмчилгээ нь өвчтөний өөрийн дархлалын системийн идэвхийг нэмэгдүүлж хавдрын эс болон халдварыг устгадаг эмчилгээ юм. Ингэхдээ халдвар болон хавдрын эсийг илрүүлдэг хяналтын цэгийг идэвхжүүлж хавдрын эсийг устгадаг Т- эсийн тусламжтайгаар ажиллагаагүй болгодог. 2018 онд АНУ-ын Ж.П.Аллисон (James P. Allison) болон Т.Хонжо ((Tasuku Honjo) нар “Дархлааны эсүүдийн саатлуурыг дарангуйлснаар хорт хавдар өвчнийг эмчлэх боломж” нээлтээр Нобелийн шагналыг Анагаах ухаан, физиологийн салбарт хүртсэн байна. (<https://www.nobelprize.org/prizes/medicine/2018/summary>)

**Фотодинамик эмчилгээ:** Энэ арга нь фотохимийн урвалын үед үүсдэг хүчилтөрөгчийг ашиглан хавдрын эсийг устгахад үндэслэдэг. Энэ урвалд оролцдог бүрэлдэхүүн хэсгүүд нь биеийн эд эсэд байдаг, гэрлийн үйлчлэлээр идэвхэждэг хүчилтөрөгч, түүнчлэн гэрлийн энергийг мэдрэх, дамжуулах чадвартай тусгай бодисууд–фотосенсибилизатор (photosensitizers) юм. Гэрлийн нөлөөгөөр хүчилтөрөгч идэвхтэй байдалд орж улмаар хавдрын эсүүдэд сөргөөр нөлөөлдөг. Гэрлийн эх үүсвэрт тодорхой долгионы урт бүхий лазерыг ашигладаг. Фотодинамик эмчилгээ 2-3 орчим долоо хоног үргэлжилдэг ба цацраг туяа, хими болон мэс заслын эмчилгээтэй хослуулж болдог ажээ.

**Генийн эмчилгээ:** Аливаа хорт хавдар үүсэх шалтгаан нь ДНХ дотор явагддаг мутацитай холбоотой гэсэн онол сүүлийн үед хөгжиж байгаа боловч генийн код хаана, яагаад эвдэгддэг вэ гэдэг талаар эрдэмтэд тун бага мэдээлэлтэй байна. Генийн код эвдэрснээр хорт хавдар үүсдэг гэсэн онолоор бол хорт хавдар гэдэг бол янз бүрийн эрхтнүүдэд үүсдэг нэг төрлийн өвчин бус харин нэг ерөнхий зүй тогтлоор явагддаг 200 төрлийн өвчнүүдийн ерөнхий нэр гэж үздэг. Хүний биеийн хаа нэг хэсэгт нэг эс нь мутацид оронгуут тухайн эс ямар ч хяналтгүйгээр маш хурдан хуваагдаж эхэлснээр хавдар үүсдэг байна. Судлаачид хэдэн мянган генийн мутацийг илрүүлсэн төдийгүй генийн кодыг эвдэгдэхэд хүргэдэг 80 орчим хүчин зүйлийг нэрлээд байна.

### 5.3. Гипертерм эмчилгээний зарчим

Энгийн эсүүд харьцангуй өндөр 46°C температурт амьдрах чадвартай байдаг. Өвчтөний хавдартай хэсгийн эс, хавдартай эрхтэнг 41-46°C градус хүртэл тусгай аргаар халааж эмчлэхийг халуун эмчилгээ буюу гипертерм эмчилгээ гэж нэрлэнэ. Халуун эмчилгээний явцад нано соронзон төмөр агуулсан бодисыг хавдартай тухайн хэсэгт тариурын тусламжтай оруулна. Дараа нь өвчтөнийг хувьсах соронзон оронд оруулахад (давтамж 500 кГц) бодис бүхий хэсэгт дулаан ялгарч температур 42.5 (Цельсийн градус) –аас дээш температуртай болоход хавдрын эсийн өсөлт буурч, эмчилгээ үр дүнтэй болно (Зураг 5.2).



Зураг 5.2. Халуун эмчилгээ хийх зарчим

Хавдрын эд, эс нь эрүүл эсийг бодвол метаболизм (бодисын солилцоо) өндөр, цусан хангамж их, хурдан өсөж үрждэг учир судас багатай эрүүл эдтэй харьцуулахад халууныг даах чадвар багатай байдаг.

## 5.4. Феррит нэгдлийг хаврын эмчилгээнд туршсан судалгаа

### 5.4.1. Шугаман эс

Шугаман эсүүд (cell lines) нь анагаах салбарт тэр дундаа хавдрын судалгаа, эмийн туршилтуудад өргөн хэрэглэгддэг *in vitro* систем юм. Тохиромжтой нөхцөлд өсгөвөрлөсөн хавдрын эсүүд нь хорт хавдрын генетик шинж чанарыг хадгалж чаддаг нь *in vitro* нөхцөлд хавдрын судалгааг хийх боломжийг олгож байгаа юм [43]. Судалгаанд хэрэглэсэн Hela шугаман эс нь хүний умайн хүзүүний хорт хавдраас гаралтай эпители эс бөгөөд хамгийн анх 1951 онд Хенрита лэкс (Henrietta lacks) гэдэг нэртэй эмэгтэйн хавдрын эсээс ялгаж лабораторийн нөхцөлд ургуулсан шугаман эс юм [44]. Эсийн биологич мэргэжилтэй Жорж Гей эрдэмтний судагааны тайланд энэхүү эс нь 24 цагийн дотор 1ш эс 2ш болж хуваагдаж байсан ба амьдрах чадвар маш сайтай үхэшгүй мөнхийн эс байсныг тодорхойлсон. Түүнчлэн хавдрын эсүүд нь эрүүл эстэй харьцуулахад бүтэц, морфологи, үйл ажиллагааны хувьд маш их өөрчлөлтөнд орсон байдаг ба үүний нэг жишээ нь эрүүл эстэй харьцуулахад халуунд мэдрэмтгий, тэвсэр муутай байдаг. Бидний бэлтгэсэн шугаман эсийн хяналтын дээжийн морфологийн үр дүнг зураг 5.4-д үзүүлээ.



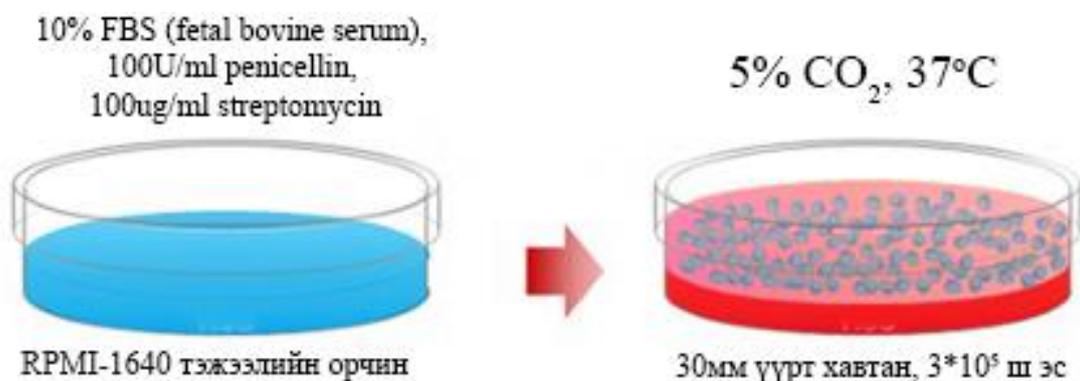
Зураг 5.3. Hela эсийн морфологи

Энэхүү судалгааны ажлаар гарган авсан  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  феррит соронзон nano бөөмийг тохиромжтой нөхцөлд ургуулсан Hela эсэд үйлчлүүлэн концентрацийн ялгаатай байдлаар цитотоксик буюу амьд эсэд учруулах хоруу чанарыг нь судалсан.

#### 5.4.2. Дээж бэлтгэл болон эсийн өсгөвөр

**Дээж бэлтгэл:** Химийн синтезийн золь-гелийн аргаар  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  феррит дээжийг гарган авахдаа магнийн нитрат (>99%), төмрийн нитрат (>99%), никел нитрат (>99%), нимбэгний хүчил (>99.5%) – ийг тооцоолсон молийн харьцаагаар авч соронзон хутгуурын үйлчлэл дор 100°C-ийн температурт халааж гел хэлбэрт оруулав. Үүний дараа 1 цагийн турш 400°C – т дулааны боловсруулалт хийж, 900°C – т 2 цаг шатааж кристаллжууллаа.

**Эс ургах ургах нөхцөл:** Эсийн өсгөвөр (cell culture) гэдэг нь эсийг хиймэл орчинд *in vitro* нөхцөл амьдруулах, өсгөвөрлөхийг хэлнэ. Өсгөвөрлөхийн өмнө эхлээд эсийг эдээс шууд салган авч энзимийн ба механик аргаар тусгаарлан авна. Үүний дараа тусгаарлаж авсан эс тохиромжтой нөхцөлд үржих (бүрэн тархах-reach confluence) үе шатыг анхдагч өсгөвөр гэнэ. Энэ үед эсийг цааш ургах хангалттай бололцоогоор хангахын тулд цэвэр өсгөврийн-орчин (growth medium)-той шинэ саванд сэлгэн-өсгөвөрлөх (subculture) (дамжуулах-passage) хэрэгтэй. Эсийн шугамыг хувиргаж хязгааргүйгээр хуваагдах чадвартай болгосонг байнгийн эсийн шугам (continuous cell line) гэнэ. Эсийг тохиромжит саванд шингэн орчинд өсгөвөрлөдөг.



**Зураг 5.5.** Эс ургах нөхцөл

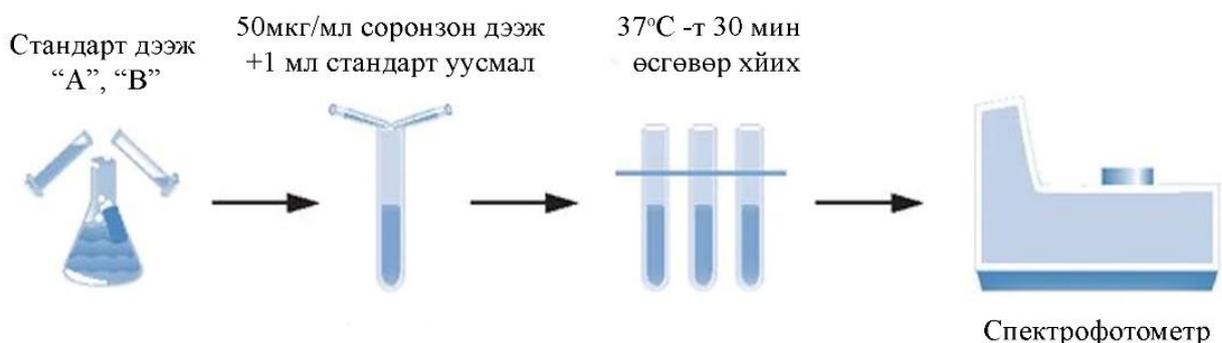
Эсийн төрлөөс хамааран өсгөвөрийн нөхцөл өөр өөр байдаг ч эсийн зохиомол орчин тогтсон хэм хэмжээнд тодорхой агууламжтай байна. Үүнд: нэн шаардлагатай тэжээлийн бодис (амин хүчил, нүүрс ус, амин дэм, эрдэс), өсөлтийн хүчин зүйл, даавар, хий (O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>), орчны физик-химийн тохируулагч (pH, осмос даралт, хэм) гэх мэт. Ихэнх эс хатуу буюу хагас хатуу гадаргууд наалдаж ургадаг (наалддаг-adherent эсвэл дан үе өсгөвөр -monolayer culture) бол зарим эс өсгөврийн орчинд хөвж (цийдэм өсгөвөр хөвмөг -suspension culture)

ургадаг [45]. Бид туршландаа соронзон nano бөөмийг хүний умайн хүзүүн хавдрын HeLa шугаман эс (HeLa ATCC<sup>R</sup> CCL-2<sup>TM</sup>) дээр туршсан. Эсийг 10% FBS (fetal bovine serum), 100U/ml penicillin, 100ug/ml streptomycin бүхий RPMI-1640 тэжээлийн орчинд 5% CO<sub>2</sub>, 37 °C бүхий нөхцөлд өсгөвөрлөсөн (Зураг 5.5). Үүний дараагаар 2 өдөр тутамд тэжээлийн орчинг сольж байв.

### 5.4.3. Судалгааны арга зүй

**Дулаан ялгаруулалтыг тодорхойлох:** Соронзон nano бөөмийн хувьсах соронзон орны нөлөөгөөр ялгаруулах дулааныг өөрсдийн угсарсан хувьсах соронзон орон үүсгэх төхөөрөмжийн тусламжтайгаар бүртгэв [46]. Феррит соронзон бөөмөөр үйлчлүүлсэн эсийг хувьсах соронзонд нэг удаа 20 минут үйлчлүүлж туршилтаа гүйцэтгэсэн.

**Цитотоксик идэвхийг тодорхойлох:** Эсэд үзүүлэх цитотоксик идэвхийг тодорхойлохын тулд Bicinchoninic acid assay (BCA assay) ашигласан ба өмнө судлагдаж байсан ижил төрлийн соронзон nano бөөмийн цитотоксик идэвхийг тодорхойлсон судалгаанууд дээр тулгуурлан 50мкг/мл, 100мкг/мл болон 150мкг/мл концентрацуудаар үйлчлэв [47]. Тус коцентрацуудаар эсүүдийг 24 цаг үйлчилсний дараагаар 1X PBS (Phosphate-buffered saline) уусмалаар эсүүдтэй холбогдоогүй сул соронзон nano бөөмийг угааж авав. Угаасны дараагаар 2 өдөр тутам тэжээлийн орчинг сольж байсан бөгөөд 1-ээс 6 дахь өдрүүдэд эсүүдийг цуглуулан авч эсийн лизат дахь уургийн хэмжээг Pierce<sup>TM</sup> BCA protein assay kit ашиглан үйлдвэрлэгчийн зааврын дагуу тодорхойлон доорх бүдүүвч зургийн дагуу уургийн хэмжээг тооцов (Зураг 5.6).

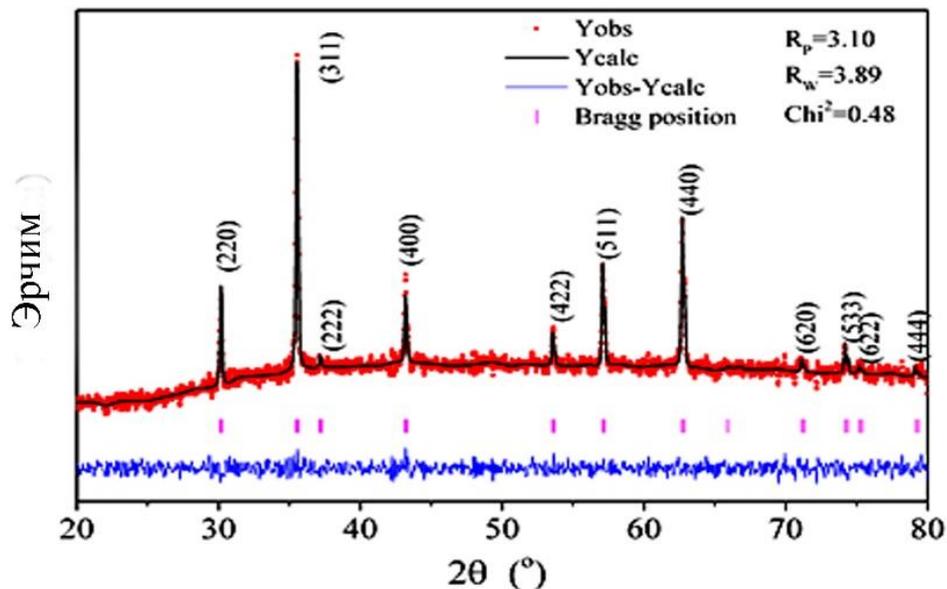


Зураг 5.6. Уургийн хэмжээг тодорхойлох бүдүүвч зураг

**Колони үүсэлтийг тодорхойлох:** Клоногенийн шинжилгээ буюу колони үүсэх шинжилгээ гэж нэрлэдэг нь эсийн амьд үлдэх шинжилгээ юм. Энэ нь дан эсийн амьд үлдэх, колони үүсгэх нөхөн үржих чадварыг үнэлдэг [48]. Бид 6 үүрт хавтанд 500 эс/үүр хэмжээтэй эсээ тарьж 24 цаг өсгөвөрлөв. Өсгөвөрлөсөн эсүүдийг гарган авсан феррит соронзон дээжээр 7 хоног үйлчлүүлсэний дараагаар 4% формальдегидаар 30 минут эсүүдийг фиксацлаж, 0.4% *tryphan blue* будагч бодисоор эсүүдийг будаж, гэрлийн микроскопын 40 болон 100 дахин өсгөлтөөр харж зургийг авсан.

#### 5.4.4. Үр дүн ба хэлэлцүүлэг

**Кристалл бүтцийн судалгаа:** Золь-гелийн аргаар гарган авсан  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  дээжийн тасалгааны температурт хэмжсэн рентген дифракцын спектрийг зураг 5.7-т үзүүлэв. Фазын анализаар бидний гарган авсан дээж нь ямар нэгэн нэмэлт фаз байхгүй цэвэр  $MgFe_2O_4$  (ICDD 00-088-1941) дээж болохыг тодорхойлов.



**Зураг 5.7.**  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  нэгдлийн рентген дифрактограммыг Ритвельд аргаар боловсруулсан үр дүн. Улаан – хэмжилтийн өгөгдөл, хар – Ритвельд аргаар тооцоолсон спектр, цэнхэр – хэмжилтийн болон тооцооллын спектрийн ялгаа, босоо зураас – Брэггийн пикийн байршлыг тус тус заана.

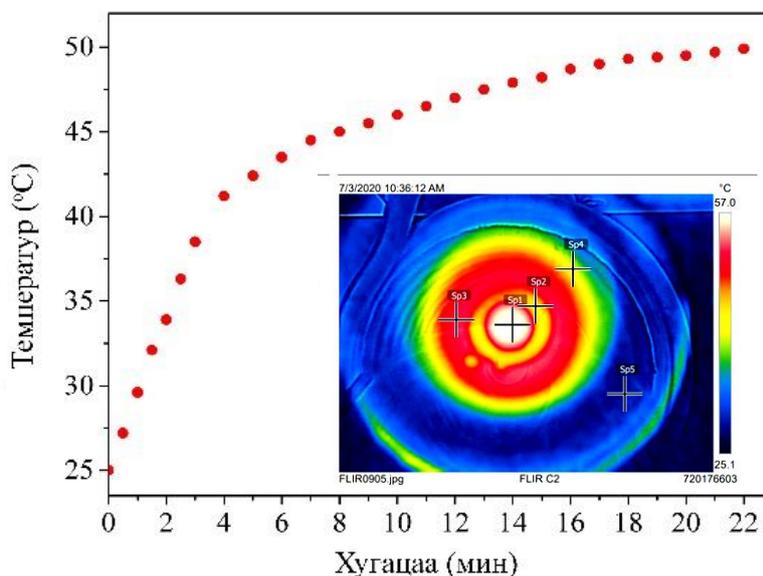
Ритвельдийн арга ашиглан боловсруулалт хийж кристалл бүтцийг тодорхойлоход  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  дээж нь Fd-3m огторгуйн групп, 8.376Å торын тогтмол бүхий куб шпинел кристалл бүтэцтэй байлаа. Дифракцын пикээс дундаж

кристаллитын хэмжээг Дебай-Шеррерийн тэгшитгэлийг ашиглан (311) хавтгайн хувьд тооцоолоход 58 нм буюу дараагийн эс дээр турших судалгааны ажилд тохиромжтой нано хэмжээтэй байв (Хүснэгт 5.1).

**Хүснэгт 5.1.** Бүтцийн параметруудийн боловсруулалтын үр дүн

Параметрууд	Тоо хэмжээ
Торын тогтмол (Å)	8.376
Кристаллитын хэмжээ (нм)	58
Брэгг фактор, $R_B$ (%)	3.10
Тохирлын үнэлгээ, $\chi^2$	0.46

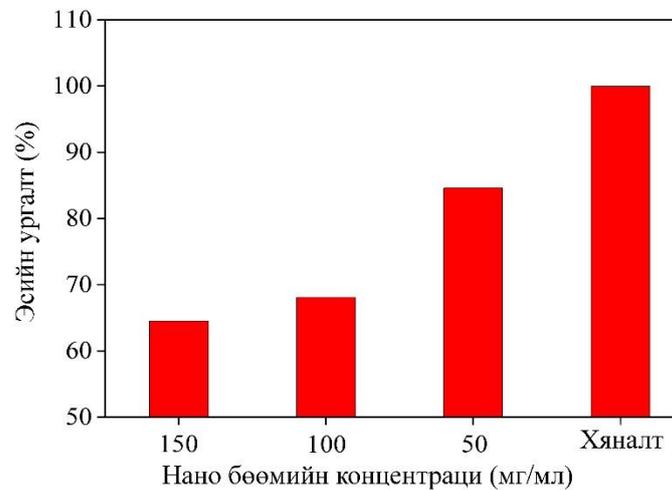
**Соронзон материалын дулаан ялгаруулалтын хэмжилт:** Гарган авсан феррит дээжийг 50 мг/мл хэмжээгээр нэрмэл усанд хийж дулаан ялгаруулалтын хэмжилтийг гүйцэтгэлээ. Зураг 5.8а-д дээжийн хугацаанаас хамаарсан температурын өөрчлөлтийн хэмжилтийн утга, хэмжилтийн явцад FLIR нил улаан туяаны камераар авсан дулаан ялгаруулалтыг үзүүлэв.



**Зураг 5.8.** а)  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  феррит нэгдлийн хувьсах соронзон орны нөлөөгөөр үүсэх температур, хугацааны хамаарал

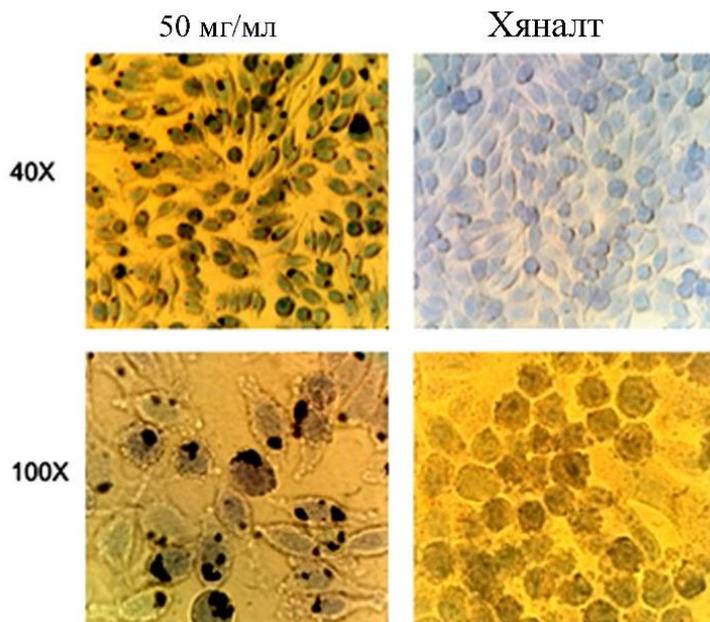
Хэмжилтийн үр дүнгээс гарган авсан дээжийн ялгаруулах температурын хамгийн их буюу хангалтын утга нь 49.9°C буюу гипертермд хэрэглэхэд хангалттай соронзон шинж чанарыг үзүүлж байсан учир эс дээрх туршилтаа гүйцэтгэсэн.

**Цитотоксик идэвхийг тодорхойлох:** Соронзон бөөмөөр үйлчлээгүй эсийг хяналтын дээж болгон авсан ба 50мкг/мл, 100мкг/мл, 150мкг/мл концентрац бүхий  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  нано бөөмөөр тус тус 24 цаг үйлчилсэн эсийг 6 өдрийн турш өсгөвөрлөсний дараагаар нийт уургийг BCA assay-аар хэмжив (Зураг 5.7). Хяналтын эсүүдийн шингээлтийн утгатай харьцуулан эсийн ургалтыг тодорхойлоход 150мкг/мл концентрацтайгаар үйлчилсэн эсүүдийн уургийн хэмжээ хяналттай харьцуулахад 35.5%-иар бага, 100мкг/мл байхад 31.3% -иар бага байсан бол 50мкг/мл хэмжээтэй үед эсэд хоруу байх шинж чанар нь бусдаас харьцангуй бага буюу 15.4% -иар буурсан байсан (Зураг 5.9). Иймд цаашдын судалгаанд эсэд хоруу чанар хамгийн бага байх концентрац болох 50мкг/мл-ээр эсүүдийг үйлчлэн хувьсах соронзон оронд оруулж туршилтаа явуулсан.



**Зураг 5.9.** Эсүүдийг ялгаатай концентрацуудаар 24 цаг үйлчилсний дараагаар 6 өдөр өсгөвөрлөн уургийн хэмжээг шалгасан байдал.

Долоон өдрийн турш 50 мг/мл концентрац бүхий нано бөөмөөр эсүүдийг үйлчлүүлэн гэрлийн микроскопын 40 болон 100 дахин өсгөлтөөр зургийг авч нано бөөм эстэй хэрхэн холбогдсон болохыг тодорхойлов (Зураг 5.10). Феррит нано бөөмийн соронзон чанараас үүдэлтэй зарим хэсгүүд хоорондоо бөөгнөрсөн байгаа (зургийн хар цэгүүд)-г харж болно (Зураг 5.10). Жижиг бөөмүүдийг эсүүд залгисан бол том хэсгүүд эсийн мембраны гадаргууд наалдсан (adhesion) байгаа нь харагдаж байна.



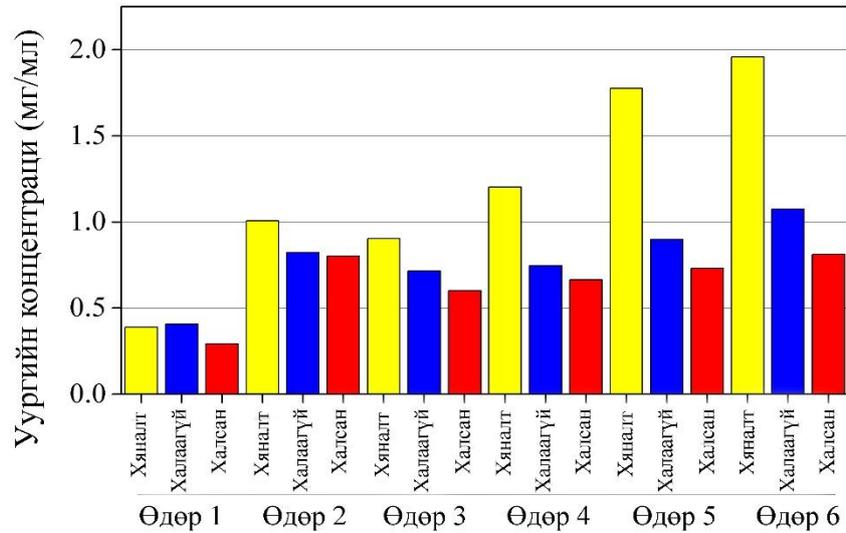
**Зураг 5.10.** Эсүүдийн нано бөөмөөр 7 хоногийн турш үйлчлүүлсэн болон үйлчлүүлээгүй (хяналт) эсүүд гэрлийн микроскопын зураг (40X болон 100X)

50мкг/мл концентрацтай феррит соронзон нано бөөмөөр эсийг үйлчилж хувьсах соронзон орноор үйлчлүүлсэн (халаасан) болон үйлчлүүлээгүй (халаагаагүй) эсүүдийг хяналтийн эсүүдтэй харьцуулан судаллаа (Хүснэгт 5.2).

**Хүснэгт 5.2.** Эсийн уургийн хэмжээний тооцооны үр дүн

Дээж	Өдөр 1	Өдөр 2	Өдөр 3	Өдөр 4	Өдөр 5	Өдөр 6
Хяналт (мг/мл)	0.389	1.007	0.904	1.205	1.776	1.957
Халаагүй (мг/мл)	0.408	0.824	0.716	0.747	0.901	1.075
Халсан (мг/мл)	0.293	0.801	0.602	0.665	0.731	0.813

Туршилтын эхэнд феррит соронзон нано бөөм бүхий эсийг хувьсах соронзон оронгоор нэг удаа 20 минутын турш үйлчлүүлсэн. Үр дүнгээс харахад ижил концентрацаар үйлчилсэн боловч хувьсах соронзон орон үүсгэх төхөөрөмжөөр үйлчлүүлсэн эсүүдийн ургалт үйлчлүүлээгүй эсүүдтэй харьцуулахад уургийн хэмжээ дунджаар 16.8%-иар бага байгаа нь эсэд байгаа нано бөөм соронзон орон үүсгэх төхөөрөмжөөр өдөөгдөн халалт үүссэнээр эсийн ургалтыг удаашруулж байгааг харуулж байна (Зураг 5.11, Хүснэгт 5.2).



**Зураг 5.11.** Зургаан өдрийн турш эсүүдийг цуглуулж нийт уураг ялган харьцуулсан байдал

### 5.5. Дүгнэлт

Бид судалгаандаа хүний умайн хүзүүний хавдрын эсийг сонгон авч  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  соронзон шинж чанар бүхий нано ферритийг ашиглан эсийн амьдрах чадварын үнэлгээг хийлээ.  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  нано бөөмийг 3 өөр концентрацаар эсэд үйлчлэн нийт уургийн хэмжээгээр амьд эсийн хэмжээг тодорхойлсон бөгөөд 50мкг/мл концентрац нь цитотоксид идэвх бага буюу амьд эсэд үзүүлэх хоруу чанар хамгийн багатай байсан. Иймд цаашдын судалгаанд тус концентрацийн үе дэх соронзон орон үүсгэгч төхөөрөмжөөр халалт үүсэж эсийн ургалтыг дарангуйлж байгаа эсэхийг судлан үзэхэд Hela эсийн ургалтыг 16.8% -иар дарангуйлж байв. Энэ нь тухайн нано бөөм хавдрын эсрэг үйлчлэх боломжтойгоос гадна цаашид нарийвчлан судлах боломжтойг харуулж байна.

## Ном зүй

1. Sharifi, H. Shokrollahi, S. Amiri, "Ferrite-based magnetic nano fluids used in hyperthermia applications", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 324 (2012) 903–915.
2. M. Faraji, Y. Yamini, M. Rezaee. *Magnetic Nanoparticles: Synthesis, Stabilization, Functionalization, Characterization, and Applications.*, J. Iran. Chem. Soc., Vol. 7, No. 1, March 2010, pp. 1-37.
3. Э.Баянжаргал, Д.Сангаа, И.Хишигдэмбэрэл, "Шпинел бүтэцтэй  $MgAl_xFe_{2-x}O_4$ ,  $x=0.7$  нэгдлийн рентген дифракцын судалгааны үр дүн" *Физик Технологийн Хүрээлэн, Бүтээл №43*, 2016
4. D.H. Kim, D.E. Nikles, C.S. Brazel, *Materials*, vol. 3, pp. 4051-4065, 2010.
5. W. Wu, Z. Wu, T. Yu, C. Jiang, W. Kim, *Recent progress on magnetic iron oxide nanoparticles: synthesis, surface functional strategies and biomedical applications*, *Sci. Technol. Adv. Mater.* 16 (2015) 3161-3164.
6. H. Aono, *Development of nano-sized super paramagnetic ferrites having heat generation ability in an AC magnetic field for thermal coagulation therapy*, *J. Ceram. Soc. Jpn.* 122 (2014) 237-243.
7. A. Hervault, N. Thanh, *Magnetic nanoparticle-based therapeutic agents for thermo-chemotherapy treatment of cancer*, *Nanoscale* (2013) 1-18.
8. N. Tran, T.J. Webster, *Journal of Materials Chemistry*, vol. 20, pp. 8760-8767, 2010.
9. M. Ghobeiti-Hasab, *International Journal of Materials and Metallurgical Engineering*, vol. 8, no. 12, pp. 1363-1366, 2014.
10. Mahnaz Amiri, Masoud Salavati-Niasari, Ahmad Akbari, *Advances in Colloid and Interface Science*, vol. 265, pp. 29-44, 2019.
11. E. Garaio, O. Sandre et al, *Nanotechnology* 26, 015704, 18pp, 2015
12. Minhong Jeun, Seongtae Bae, Asahi Tomitaka, Yasushi Takemura, Ki Ho Park et al., *Appl. Phys. Lett.*, vol. 95, p. 082501, 2009.
13. K. Murase, *Methods for Estimating Specific Loss Power in Magnetic Hyperthermia*, *Journal of Applied Sciences*, 2016, 6, 815-825
14. Amal.S, Hind.H, Rachid.E, Mohamed.A, Samir.Q, Nouredine.B "Spinel ferrites nanoparticles: Synthesis methods and application in heterogeneous

- Fenton oxidation of organic pollutants – A review” Applied Surface Science Advances 6 (2021) 100145
15. A.R. West, Solid State Chemistry and its Applications, Wiley, (2014)
  16. T. Maehara, et al., *Selection of ferrite powder for thermal coagulation therapy with alternating magnetic field*, J. Mater. Sci. 40 (2005) 135-138.
  17. A. Loganathan, K. Kumar, *Effects on structural, optical, and magnetic properties of pure and Sr-substituted  $MgFe_2O_4$  nanoparticles at different calcination temperatures*, Appl. Nanosci. 6 (2016) 629-639.
  18. M. Yousefi, M.H. Kamel Attar Kar, *Ni-doped  $MgFe_2O_4$  nanoferrite as a novel catalyst for selective oxidation of benzyl alcohol to benzaldehyde*, Main Group Chem. 12 (2013) 177-184.
  19. S. Utsunomiya, H. Hirazawa, H. Aono, T. Naohara, T. Maehara and Y. Watanabe “Heat generation ability of nanosized  $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$  ferrite in an AC magnetic field” J. Magn. Soc. Jpn., 37, 291-294 (2013)
  20. M.A. Hakim, Sh Akhter, D.P. Paul, S.M. Hoque, *Effect of Mg substituted on physical and magnetic properties of Cu-Mg ferrites*, Appl. Res. J. (2015) 91-96.
  21. C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila, *Introduction to Frustrated Magnetism*, Springer, 2011.
  22. Hideyuki.H, Reika.M, Masanori.S, Uyanga.E, Sangaa.D, Kiseleva.T, Jun.Y, Hiroshi.F and Hiromichi.A “Heat generation in the AC magnetic field of fine  $Y_3Fe_5O_{12}$  powder materials prepared by modifying co-precipitation synthesis” Journal of the Ceramic Society of Japan 129 [9] 579-583 2021
  23. W. Kohn, L.J. Sham, *Self-consistent equations including exchange and correlation effects*, Phys. Rev. 140 (1965) A1133-A1138.
  24. J.P. Perdew, et al., *Atoms, molecules, solids, and surfaces: applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation*, Phys. Rev. B46 (1992) 6671-6686.
  25. P. Gianmazzi, et al., *QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*, J. Phys. Condens. Matter 21 (2009) 395502-395521.
  26. B. Hummetoglu, R.M. Wentzcovich, M. Cococcioni, *First-principles study of electronic and structural properties of CuO*, Phys. Rev. B 84 (2011) 115108-115115.

27. L. Xie, G. Jin, L. He, G.E.W. Bauer, J. Barker, K. Xia, *Phys. Rev. B*, **95**, 014423, (2017)
28. E. Uyanga, D. Sangaa, H. Hirazawa, N. Tsog-badrakh, N. Jargalan, I.A.Bobrikov and A.M. Balagurov, *Structural investigation of chemically synthesized ferrite nanomaterials*, *Mat. Res. Bull.* (Submitted in 2017).
29. J. P. Singh, S. O. Won, W. C. Lim, *Microstructure, local electronic structure and optical behavior of amorphous zinc ferrite thin film*, *Mol. Struc.* 108, 444, 2016.
30. Y. Iqbal, H. Bae, I. Rhee, *Journal of Korean Physical Society*, 68, pp. 587, (2016).
31. H. J. Xiang, E. J. Kan, S.-H. Wei, M.-H. Whangbo, X. G. Gong, *Phys. Rev. B*, 84, 224429, (2011)
32. H. Xiang, C. Lee, H.-J. Koo, X. Gong, M.-H. Whangbo, *Dalt. Trans.*, 42, 823 (2013)
33. Y. Miyatake, M. Yamamoto, J. J. Kim, M. Toyonaga, and O. Nagai, *J. Phys. C Solid State Phys.*, 19, 2539 (1986)]
34. E.E. Anderson, *Phys. Rev.*, 134, A1581-A1585, (1982)
35. D. Sangaa, B. Khongorzul, E. Uyanga, N. Jargalan, N. Tsogbadrakh and H. Hirazawa, *An overview of investigation for ferrite magnetic nanomaterials*, *Sol. Stat. Phen*, Vol 271, pp 51-63, 2017.
36. Waldron R., *Phys. Rev.* 99 (1955) 1727–1735
37. Kim D., Nikles E., Brazel C., *Materials*. 3 (2010) 4051–4065
38. Ch. Sirinavas, B.V. Tirupanyam. S.S. Meena, ***J. Magn. Magn. Matter***, 407, pp. 135-141, (2016)
39. T. Saga, H. Sakahara, Y. Nakamoto, et al., *Eur. J. Cancer* 37 (2001) 1429.
40. J. Jimenez, L.R. Negrete, F. Abdullaev, et al., *Exp. Toxicol. Pathol.* 60 (2008)
41. <https://ourworldindata.org/cancer#deaths-from-cancer>
42. <https://www.worldlifeexpectancy.com/cause-of-death/all-cancers/by-country/>
43. Peppino Mirabelli, Luigi Coppola, Marco Salvatore, “Cancer Cell Lines Are Useful Model Systems for Medical Research”, *Cancers (Basel)*, (2019) Aug 11(8): 1098
44. Jontha J. M. Landry, Paul Theodor Pyl, Tobias Rausch, Thomas Zichner, Manu M. Tekkedil, Adrian M. Stutz, Anna Jauch, Raeka S. Aiyar, Gregoire Pau, Nicolas Delhomme, Julien Gagneur, Jan O. Korbel, Wolfgang Huber and Lars

- M.Steinmetz, “The Genomic and Transcriptomic Landscape of a HeLa Cell Line”, G3 (Bethesda), (2013) Aug 3(8): 1213-1224
45. I. Khishigdemberel, E. Uyanga, et al., Solid State Sciences 109 (2020) 106400
46. Kaur, G., & Dufour, J. M. (2012). Cell lines. Spermatogenesis, 2(1), 1–5. doi:10.4161/spmg.19885
47. Asahi Tomitakaa, Atsuo Hirukawaa, Tsutomu Yamadaa, Shin Morishitab, Yasushi Takemuraa, “Biocompatibility of various ferrite nanoparticles evaluated by in vitro cytotoxicity assays using HeLa cells”, Journal of Magnetism and Magnetic Material, (2019) 1482-1484
48. Franken, N. A. P., Rodermond, H. M., Stap, J., Haveman, J. & Bree, C. V. Clonogenic assay of cells in vitro. *Nature Protocols*1, 2315–2319 (2006).

## ХАВСРАЛТ 1.

### “НАНО-СОРОНЗОНГИЙН ОНЦЛОГ, ТҮҮНИЙГ ХАВДРЫН ЭМЧИЛГЭЭНД ХЭРЭГЛЭХ БОЛОМЖ” СУУРЬ СУДАЛГААНЫ ТӨСЛИЙН ХҮРЭЭНД 2018-2021 ОНД ХЭВЛҮҮЛСЭН БҮТЭЭЛИЙН ТАЛААР

2018-2021 онд академич Д.Сангаагийн удирдсан “Наносистемийн бүтцийн эвдрэл болон шилжилтийн процессыг дулаан нейтрон сарнилын аргаар судлах” суурь судалгааны төслийн хүрээнд эрдэм шинжилгээний өгүүлэл – 15, мэргэжлийн ном – 1, танин мэдэхүйн ном – 1 хэвлүүлж, эрдэм шинжилгээний илтгэл 10-ийг хэлэлцүүлснээс 5-ийг олон улсын хуралд илтгэсэн байна. Мөн 1 судлаач физикийн магистрын зэрэг хамгаалсан.

#### Нэг сэдэвт бүтээл

1. Д.Сангаа, Э.Уянга “Соронзон” 2020 он
2. Д.Сангаа, Б.Хонгорзул “Тэгш хэмийн гайхамшиг” 2019 он
3. Б.Хонгорзул “Магни болон Зэсийн феррит нэгдлүүдийн соронзон шинж чанарын онолын судалгаа” магистрийн диссертаци, 2018 он

#### Эрдэм шинжилгээний өгүүлэл

1. Khishigdemberel, E. Uyanga, H. Hirazawa, D. Sangaa, “. Influence of Cu dope on the structural behavior of  $MgFe_2O_4$  at various temperatures” *Physica B: Condensed Matter*, 544 (2018) 73–78 **/IF 2.436/**
2. D. Odkhuu, T. Tsevelmaa, D. Sangaa, N. Tsogbadrakh, S. H. Rhim, S. C. Hong “First-principles study of magnetization reorientation and large perpendicular magnetic anisotropy in  $CuFe_2O_4/MgO$  heterostructures” *J. Physical review B* 98 (2018) 094408
3. Tomomasa Sakai, Hideyuki Hirazawa, Deleg Sangaa, Uyanga Enkhnanan, Hiromichi Aono “Improvement of self-heating ability in AC magnetic field of  $MgFe_2O_4$  powder prepared by Polymerization method”, *Materials today: proceedings Materials today: proceedings* 16 (2019) 206–210.

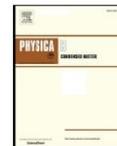
4. Chunfeng B, Tegus O, Tsogbadrakh N, Sangaa D “Structure, Magnetism, and Heating Properties in AC Magnetic Field of  $Mg_{1-x}Ca_xFe_2O_4$ ”, Materials Reports 33 (2019) 122- 124.
5. Khishigdemberel, E. Uyanga, H. Hirazawa, B.Enkhmend, I.A.Bobrikov, D. Sangaa, T. Kiseleva “Structural, infrared and magnetic properties of  $MgAl_xFe_{2-x}O_4$  compounds: Effect of the preparation methods and Al substitution” Solid State Sciences 109 (2020) 106400 **/IF 3.059/**
6. D.D.Ding, ..., D.Sangaa, D.Odkhuu (2020) “Experimental and theoretical studies on the room-temperature ferromagnetism in new  $(1-x)Bi_{1/2}Na_{1/2}TiO_3+xCoTiO_3$  solid solution materials” *Vacuum*, 179 (2020) 109551
7. B. Chunfeng, O. Tegus, T. Ochirkhyag, D. Odkhuu, N. Tsogbadrakh, D. Sangaa, J. Davaasambuу “Study of structural and magnetic properties of spinel Zn doped cobalt ferrites” Journal of Solid State Phenomena 310 (2020) 124-133
8. Khishigdemberel Ikhbayar, Nomin Myagmar, Gantulga Davaakhuu, Uyanga Enkhnarayan et al., “Evaluation of the Influence of Ferrite Magnetic Nanoparticle for Cancer Cell”, Solid State Phenomena (2021) 146 – 151.
9. H. Hirazawa, ..., E. Uyanga, D. Sangaa, ..., Heat generation in the AC magnetic field of fine  $Y_3Fe_5O_{12}$  powder materials prepared by modifying co-precipitation synthesis, Journal of the Ceramic Society of Japan (2021) 579 – 583.
10. B. Enkhmend, I. Khishigdemberel, N. Jargalan, D. Sangaa “Study of cation distribution effect on Cu and Cr doped  $MgFe_2O_4$  spinel ferrite” Advanced Physical Research, 3(2), 59-67, 2021.
11. Chun Feng, Н.Цогбадрах, О.Төгс, Хашчулуун, Д. Сангаа “ $Mg_{0.9}Ca_{0.1}Fe_2O_4$  нэгдлийн гарган авах арга ба түүний соронзон шинж чанарт үзүүлэх нөлөө”, МУИС-ийн Физик сэтгүүл 28(510) (2019) 1-5.
12. Б.Энхмэнд, И.Хишигдэмбэрэл, Б.Хонгорзул, Э.Уянга, Н.Жаргалан, Д.Сангаа, Э.Дамдинсүрэн “Төмөр агуулсан нано-соронзон материалын дулаан ялгаруулах чадамжийн судалгаа”, ШУА-ФТХ-ийн бүтээл №45
13. Б.Энхмэнд, И.Хишигдэмбэрэл, Э.Уянга, Н.Жаргалан, Д.Сангаа “ $CuFe_2O_4$  болон  $MgFe_2O_4$  феррит материалын чадлын хувийн шингээлтийн судалгаа”, ШУА-ФТХ-ийн бүтээл №46

14. Н.Жаргалан, Б.Тэмүүжин, Д.Сангаа, Н.Цогбадрах “ $Y_3Fe_5O_{12}$  нэгдлийн онолын судалгааны зарим үр дүн”, ШУА-ФТХ-ийн бүтээл №46
15. И.Хишигдэмбэрэл, М.Номин, Д.Гантулга, Э.Уянга, Б.Энхмэнд, Ц.Оюунсүрэн, Д.Сангаа “Наносоронзон феррит материалаар хавдрын эсийн ургалтыг удаашруулах туршилтын үр дүн” ФТХ-ийн бүтээл 47.

#### Эрдэм шинжилгээний илтгэл

1. B. Khongorzul, B. Enkhmend, I. Khishigdemberel, E. Uyanga, N. Jargalan, D. Sangaa “Study on crystal structure and magnetic properties of magnesium and copper ferrite  $Mg_{1-x}Cu_xFe_2O_4$  nano materials” FICSE-2019 conference proceedings, vol 1, 539-544, 2019
2. B. Khongorzul, B. Enkhmend, I. Khishigdemberel, E. Uyanga, N. Jargalan, D. Sangaa “Study of heat generation ability of magnesium and copper ferrite materials”, 8<sup>th</sup> International Conference on Materials Science (ICMS 2019)
3. Б. Хонгорзул, Н.Цогбадрах, Д.Сангаа, “Магни болон Зэсийн феррит нэгдлүүдийн соронзон шинж чанарын онолын судалгаа”, МУИС-ШУС, Физикийн тэнхим, Бакалавр, Магистрант, Докторантын ЭШХ
4. Б.Хонгорзул, Э.Уянга, И.Хишигдэмбэрэл, Б.Энхмэнд, Н.Жаргалан, Д.Сангаа, “Төмөр агуулсан нано-материалын соронзон шинж чанарын судалгаа, түүний био-анагаахын хэрэглээ”, Хүрэлтогоот-2018 эрдэм шинжилгээний хурал
5. И.Хишигдэмбэрэл, Б.Энхмэнд, Б.Хонгорзул, Э.Уянга, Д.Сангаа, Н.Жаргалан “Био-анагаахад хэрэглэгдэх наносоронзон материалын судалгаа” Хүрэл тогоот 2019 эрдэм шинжилгээний хурлын эмхэтгэл, 76-80, 2019
6. Б.Энхмэнд, И.Хишигдэмбэрэл, Б.Хонгорзул, Э.Уянга, Н.Жаргалан, Д.Сангаа, Э.Дамдинсүрэн “Төмөр агуулсан соронзон материалын дулаан ялгаруулах чадамжын судалгаа”, Монголын физикийн нийгэмлэгийн эрдэм шинжилгээний хурал 2019
7. I. Khishigdemberel, M.Nomin, Gantulga, E. Uyanga, B. Enkhmend, Ts.Oyunsuren, D. Sangaa “Biocompatibility of  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  ferrite nanoparticles evaluated by in vitro cytotoxicity assays using HeLa cells” 9<sup>th</sup> International Conference on Materials Science (ICMS 2020)

8. B. Enkhmend “Investigation on structural and morphological properties of aluminum doped yttrium ferrite” 10<sup>th</sup> International Conference on Materials Science (ICMS 2021) November 20, 2021
9. Н.Жаргалан “ФТХ-д хийгдэж байгаа соронзон материалын судалгааны товч үр дүнгээс” Монголын Физикийн Нийгэмлэгийн хурал, 2021



## Influence of Cu dope on the structural behavior of $\text{MgFe}_2\text{O}_4$ at various temperatures

I. Khishigdemberel<sup>a,\*</sup>, E. Uyanga<sup>a</sup>, H. Hirazawa<sup>b</sup>, D. Sangaa<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Institute of Physics and Technology, MAS, Peace Avenue 54 B, Ulaanbaatar 13330, Mongolia

<sup>b</sup> National Institute of Technology, Niihama College, Ehima, 792 – 8580, Japan



### ARTICLE INFO

**Keywords:**  
Ferrites  
X-ray and neutron diffraction  
High temperature  
FT-IR  
Hysteresis loss

### ABSTRACT

The influence of Cu doping on the  $\text{MgFe}_2\text{O}_4$  crystal and magnetic structure has been studied at various temperatures. A series of  $\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$  ( $x = 0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ ) spinels have been prepared by a chemical solid-state reaction method. The diffraction patterns confirmed that the formation of the single cubic spinel phase obtained for samples with a Cu content of up to 0.6. The second phase of a small amount of tetragonal  $\text{CuFe}_2\text{O}_4$  phase was observed in the sample with  $x = 0.8$ . Cu doping increased and stabilized the magnetization of  $\text{MgFe}_2\text{O}_4$  at a high temperature. The crystal phase of Cu doped  $\text{MgFe}_2\text{O}_4$  was not changed up to 753 K.

### 1. Introduction

Amongst the spinel ferrite families, magnesium ferrite ( $\text{MgFe}_2\text{O}_4$ ) is a soft magnetic n-type semiconducting material that finds applications in the fields of heterogeneous catalysis, adsorption, sensors and magnetic technologies [1,2]. Numerous studies have been carried out on the spinel ferrites which had the general formula  $(\text{M}_{1-8}\text{Fe}_8)[\text{M}_8\text{Fe}_{2-8}]\text{O}_4$  due to their chemical and structural simplicity. The divalent metal element M (Mg, Zn, Cu, Fe, Co, Ni, or the mixture of them) can occupy either tetrahedral 8a (marked A) or octahedral 16b [marked B] sites of a spinel structure as depicted by the parentheses and brackets, respectively [3–5].

The crystal structure lies between a normal and an inverse spinel type that depends on the fraction of  $\text{Fe}^{3+}$  -ions at the tetrahedral sites [6].  $\text{MgFe}_2\text{O}_4$  has a partially inverse spinel structure with the preference of  $\text{Mg}^{2+}$  cations mainly on octahedral sites [7,8], while copper ferrite ( $\text{CuFe}_2\text{O}_4$ ) has an inverse spinel structure, in which all  $\text{Cu}^{2+}$  cations occupy octahedral sites [9,10]. Substitution of copper for  $\text{MgFe}_2\text{O}_4$  resulted in the enhancement of permeability as well as magnetization values [11].

In our previous work [12], we performed a detailed investigation of the crystal structure of Cu doped  $\text{MgFe}_2\text{O}_4$  at room temperature. In the present paper, structural properties of magnesium ferrite were explored at various temperatures. In order to test the phase stability and observe the structural evolution of the magnesium ferrite, some in-situ and ex-situ annealing experiments were performed under different temperatures, ranging from 298 to 753 K. Structural characteristics were studied by x-ray and neutron diffraction. Formation of ferrite was also

confirmed by using Fourier-transform infrared spectroscopy (FT-IR). The main attention was paid to the evolution of the  $\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$  under various annealing conditions.

### 2. Experimental

$\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$  type powder was prepared by a solid reaction method using MgO, CuO,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  powder as a starting material [13]. Phase analysis of the samples were carried out using an x-ray powder diffractometer, Shimadzu XRD-7000 with  $\text{CuK}\alpha$  radiation and  $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$ . Neutron diffraction measurements were performed on the HRFD (High Resolution Fourier Diffractometer) instrument at the IBR-2 reactor, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia [9]. FT-IR spectra were recorded for all samples in range of  $4000 \text{ cm}^{-1}$  to  $400 \text{ cm}^{-1}$  on Shimadzu IR Prestige-21 spectrometer. The annealing temperatures ranged from 298 to 753 K and the holding time for 2 h with a heating ramp of  $10 \text{ }^\circ\text{C}/\text{min}$ . The hysteresis loss value in the AC magnetic field was obtained using a B–H analyzer (HP5060A, Hewlett-Packard, Co., Ltd).

### 3. Result and discussion

#### 3.1. Phase analysis

Fig. 1 shows the XRD patterns of the  $\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$  samples with  $x = 0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$  which the peaks identified with Miller indices. The data showed intense sharp peaks and revealed well-crystalline single spinel structures. The result of phase analysis of patterns

\* Corresponding author.

E-mail address: [hishigee@ipt.ac.mn](mailto:hishigee@ipt.ac.mn) (I. Khishigdemberel).

<https://doi.org/10.1016/j.physb.2018.05.032>

Received 16 April 2018; Received in revised form 15 May 2018; Accepted 21 May 2018

Available online 23 May 2018

0921-4526/ © 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.

**First-principles study of magnetization reorientation and large perpendicular magnetic anisotropy in CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/MgO heterostructures**D. Odkhuu,<sup>1</sup> T. Tsevelmaa,<sup>2</sup> D. Sangaa,<sup>3</sup> N. Tsogbadrakh,<sup>4</sup> S. H. Rhim,<sup>2</sup> and S. C. Hong<sup>2</sup><sup>1</sup>Department of Physics, Incheon National University, Incheon 22012, South Korea<sup>2</sup>Department of Physics and EHSRC, University of Ulsan, Ulsan 44610, South Korea<sup>3</sup>Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Sciences, Ulaanbaatar 13330, Mongolia<sup>4</sup>Department of Physics, National University of Mongolia, Ulaanbaatar 14201, Mongolia

(Received 20 March 2018; revised manuscript received 5 July 2018; published 10 September 2018)

Herein, using first-principles calculations we predict magnetization reorientation and large perpendicular magnetic anisotropy (PMA) in spinel Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/MgO heterostructure by replacing the octahedral Fe ions with Cu. The substitutional Cu<sup>2+</sup> ions prefer the octahedral site within the *xy*-plane layer in an inverse spinel structure, which is associated with the Jahn-Teller tetragonal and *xy*-plane twisted distortions. While magnetization of Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/MgO is significantly reduced in CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/MgO, the presence of the substitutional Cu<sup>2+</sup> ions reorients magnetization from an in-plane to perpendicular magnetic anisotropy. More remarkably, PMA further increases gradually with the film thickness of CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> layers in the CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/MgO heterostructure. The underlying mechanism for this large PMA is the interplay of the spin-orbit-coupled Cu *d<sub>xy</sub>-d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>* states in the center layers and the Fe *d<sub>z<sup>2</sup></sub>*-O *p<sub>z</sub>* hybridization at the interface. These findings point toward the feasibility of reducing magnetization and enhancing PMA in spinel structures for spintronics applications.

DOI: 10.1103/PhysRevB.98.094408

**I. INTRODUCTION**

Epitaxial growth of ferromagnetic (FM) materials on insulating MgO has been of interest for spintronics applications such as spin-transfer torque and magnetoelectric memory devices owing to their large magnetoresistance and perpendicular magnetic anisotropy (PMA) [1]. Nevertheless, there are still intense research efforts to reduce the critical current density  $I_c$  required for magnetization switching of a free FM layer in magnetic tunnel junctions (MTJs) while retaining thermal stability  $\Delta$ .  $\Delta$  is maintained by the large PMA according to  $\Delta = KV/k_B T$ , where  $K$ ,  $V$ ,  $k_B$ , and  $T$  are anisotropy, volume, Boltzmann's constant, and temperature, respectively [2]. On the other hand, low saturation magnetization  $M_s$  favors the reduction of  $I_c$  through  $I_c = \frac{2e}{\hbar} \frac{\alpha}{\eta} M_s V (H_k + 2\pi M_s)$ , where  $\alpha$ ,  $\eta$ , and  $H_k$  represent the Gilbert damping coefficient, spin polarization factor, and Stoner-Wolfarth switching field, respectively [3]. Most materials proposed for memory applications are soft magnets, i.e.,  $H_k \ll M_s$ ; thus,  $I_c \sim M_s^2 V$ . The utilization of low-magnetization materials [i.e., ferrimagnetic (FIM) and antiferromagnetic materials] rather than FM materials, preferably with the large PMA, in MTJs could thus provide an alternative way to minimize  $I_c$  and maximize  $\Delta$  at the same time [4,5] and also reduce stray fields in real devices [6,7].

Owing to these prerequisites, spinel magnetite (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) and its doped alloys ( $M\text{Fe}_2\text{O}_4$ , where  $M$  represents a metallic element) have been recently regarded as promising candidate materials for spintronics applications [8–14]. Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> has a FIM ground state with antiparallel spin orientation on tetrahedral to octahedral sites and undergoes a first-order metal-to-insulator Verwey transition at  $T_V \sim 120$  K, which is mostly attributed to the long-range charge ordering of Fe<sup>2+</sup>

and Fe<sup>3+</sup> ions on octahedral sites [15]. Remarkably, in both experimental and theoretical studies, the substitution of  $M$  ( $M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mn}, \text{or Cu}$ ) atoms for the Fe sites has been shown to improve and modify dramatically the magnetic and electronic properties of Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> [16–21]. In particular, copper ferrite (CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) exhibits intriguing physical properties [22–27], including a phase transition from tetragonal to cubic upon temperature [28,29], which depends on the degree of inversion parameter  $x$  in the stoichiometric formula  $(\text{Cu}_x^{2+}\text{Fe}_{1-x}^{3+})_A(\text{Cu}_{1-x}^{2+}\text{Fe}_{1+x}^{3+})_B\text{O}_4$ , where A and B denote the tetrahedral and octahedral sites, respectively. The inversion parameter is equal to zero for the inverse spinel structure, and  $x = 1$  when the spinel is normal. The degree of inversion changes during the cubic-to-tetragonal transition, where the redistribution of Cu atoms from A to B sites alters the ground multiplet from triplet to doublet and thus alters magnetic properties [30,31]. Nevertheless, experiments revealed that the Cu<sup>2+</sup> ions occupy the octahedral sites of the spinel lattice, leading to a structural formula close to  $(\text{Fe}^{3+})_A(\text{Cu}^{2+}\text{Fe}^{3+})_B\text{O}_4$  and a Jahn-Teller distortion ( $c/a > 1$ ) [25–27]. In addition to these intriguing phenomena, the renewed interest in research targets seemingly resides in the possible PMA, a preferable magnetization direction normal to the film plane, and its tunability by the B-site  $M$  substitution in Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, which remains unexplored.

In this paper, we predict the magnetization reorientation and large enhancement of PMA in Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/MgO(001) films by replacing the octahedral Fe with Cu. Using on-site correction for Coulomb interaction in density functional theory (DFT+ $U$ ) calculations, the ground states of the structural and magnetic structures are first determined for bulk CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> in both normal and inverse spinel structures. It is found that the substitutional Cu<sup>2+</sup> ions prefer the octahedral site within



## ФЕРРИСОРОНЗОН НАНОМАТЕРИАЛЫН ДУЛААН ЯЛГАРУУЛАХ ЧАДАМЖИЙН СУДАЛГАА

Б.Энхмэнд<sup>\*а</sup>, И.Хишигдэмбэрэл<sup>а</sup>, Б.Хонгорзул<sup>а</sup>,  
Н.Жаргалан<sup>а</sup>, Э.Дамдинсүрэн<sup>б</sup>, Э.Уянга<sup>а</sup>, Д.Сангаа<sup>а</sup>

<sup>а</sup> ШУА, Физик, технологийн хүрээлэн,  
Материал судлалын салбар,

<sup>б</sup> МУИС, Хэрэглээний шинжлэх ухаан инженерчлэлийн сургууль

### Удиртгал

Энэхүү ажилд золь-гелийн аргаар синтезлэн гарган авсан магнийн феррит ( $MgFe_2O_4$ ) нэгдлийн хувьсах соронзон оронд дулаан ялгаруулах чадамжийг дээжний хэмжээнээс хамааруулан өөрсдийн угсарч бүтээсэн усан хөргүүр бүхий соронзон орон үүсгэх төхөөрөмжийг ашиглан гүйцэтгэсэн судалгааны үр дүнгээс тусгалаа. Дээжний хэмжээ 50, 75, 100, 125, 150 мг үед дулаан ялгаруулалтын температур 34-өөс 54<sup>0</sup>С хооронд, дулаан ялгаруулах чадамж (SAR) харгалзан 25.69 Вт/гр, 24.04 Вт/гр, 22.97 Вт/гр, 20.75 Вт/гр, 17.29 Вт/гр байгааг хэмжилтээр тогтоов.

Түлхүүр үгс: Соронзон нанобөөм, феррит, хувьсах соронзон орон, чадлын хувийн шингээлт

## 1 ОРШИЛ

Сүүлийн жилүүдэд соронзон шинж чанар бүхий наноматериалыг био - анагаахын салбарт, тухайлбал хавдрын халуун эмчилгээ (hyperthermia)-д ашиглах чиглэлийн судалгаа эрчимтэй хөгжиж байна. Хавдрын халуун эмчилгээний гол зарчим нь соронзон нано бөөмийг бусад эмийн хамт өвчний голомтод хүргэж, өндөр давтамжтай хувьсах соронзон оронгоор үйлчлэхэд уг бөөм дулаан ялгаруулснаар хавдрын эсийн өсөлт зогсдогт оршино[1-3]. Дулаан ялгаруулах чадамжтай наносоронзон материал нь ихэвчлэн феррисоронзон шинж чанар бүхий  $MFe_2O_4$  төрлийн нэгдлүүд байдаг. Эдгээр нэгдлүүд дотроос магнийн феррит  $MgFe_2O_4$  куб шпинель бүтэцтэй, дулаан ялгаруулах чадамж ихтэй онцлог материал юм [4,5]. Судалгааны өмнөх ажлуудад [6,7] магнийн

\* э-шуудан: enkhmendb@mas.ac.mn



Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)

ScienceDirect

Materials Today: Proceedings 16 (2019) 206–210

materialstoday:  
PROCEEDINGS

[www.materialstoday.com/proceedings](http://www.materialstoday.com/proceedings)

ISAC-6\_2018

## Improvement of self-heating ability in AC magnetic field of $MgFe_2O_4$ powder prepared by Polymerization method

Tomomasa Sakai<sup>a</sup>, Hideyuki Hirazawa<sup>a\*</sup>, Deleg Sangaa<sup>b</sup>,  
Uyanga Enkhnarant<sup>b</sup>, Hiromichi Aono<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Department of Environmental Materials Engineering, National Institute of Technology, Niihama College,  
Niihama 792-8580, Japan

<sup>b</sup>Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Science, Ulaan Baatar 13330, Mongolia

<sup>c</sup>Graduate School of Science and Engineering, Ehime University, Matsuyama 790-8577, Japan

### Abstract

The spinel type  $MgFe_2O_4$  ferrite powder having self-heating ability in an AC magnetic field was prepared by polymerization method in order to investigate the application for thermal coagulation treatment of cancer tissue. The single phase of cubic ferrite structure was obtained for all samples synthesized with different CA/MN (Citric Acid / Metal Nitrate) conditions. The heat-generation-ability was extremely improved at CA/MN=2.0 sample ( $\Delta T = 168^\circ C$ ), however the heat-generation-property decreased with increase in CA/MN ratio. Hysteresis loss value also increased at CA/MN=2.0 sample, it was suggested that the heat-generation-ability of  $MgFe_2O_4$  powder prepared by polymerization method was depended on hysteresis loss value.

© 2019 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Selection and/or Peer-review under responsibility of 6th International Symposium on Advanced Ceramics.

*Keywords:*  $MgFe_2O_4$ ; Ferrite; Magnetic properties; Heat-generation-ability; AC magnetic field

### 1. Introduction

Thermal coagulation techniques, utilize the powdered magnetic material in an AC magnetic field, have been studied to realize the new treatment method of cancerous tissue [1]. For the system of this therapy, the magnetic particles encapsulated in a liposome can be placed on cancer tumor by drug delivery (DDS), after that the magnetic material is heated over  $42.5^\circ C$  by external magnetic field. This therapy using an AC magnetic field provides less damage to the patient, because there is no need to perform surgical operation or side effects due to the use of an anti-

\*Corresponding author. Tel. : +81-897-37-7801

E-mail address: [hirazawa@mat.niihama-nct.ac.jp](mailto:hirazawa@mat.niihama-nct.ac.jp)

2214-7853 © 2019 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Selection and/or Peer-review under responsibility of 6th International Symposium on Advanced Ceramics.

## Mg<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>化合物的结构、磁性及交变磁场中的发热性能

春风<sup>1,2</sup>, 特格斯<sup>1,3</sup>, Tsogbadrakh N<sup>2</sup>, Sangaa D<sup>3</sup>

- 1 内蒙古师范大学内蒙古自治区功能材料物理与化学重点实验室, 呼和浩特 010022
- 2 蒙古国立大学物理系, 乌兰巴托 14201, 蒙古国
- 3 蒙古科学院物理与技术研究所, 乌兰巴托 13330, 蒙古国

采用固相反应法制备了 Mg<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (x = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4) 系多晶铁氧体, 利用 X 射线衍射 (XRD) 法测定样品的物相结构, 采用扫描电镜 (SEM) 观察样品形貌和分析其化学成分, 用磁性测量仪对样品的磁性能进行了表征, 并测定了交变磁场 (频率为 25 kHz) 中样品的发热性能。结果表明, Ca 含量 x = 0~0.3 时, 样品均为单相立方尖晶石结构, 当 Ca 含量 x = 0.4 时样品呈现四方相; 晶格常数和晶粒尺寸均随 x 值增加而逐渐增大, 而饱和磁化强度 (M<sub>s</sub>) 先增大后减小, 矫顽力增大。当 x = 0.1 时样品的 M<sub>s</sub> 达到最大值 16.37 A · m<sup>2</sup> · kg<sup>-1</sup>, 发热性能最佳。适量的 Ca 取代 Mg 可以提高 Mg<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 铁氧体的磁性能及发热性能。

关键词 铁氧体 磁性 磁致发热性能 磁滞损耗

中图分类号: O482.54 文献标识码: A

## Structure, Magnetism and Heating Properties in AC Magnetic Field of Mg<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Ferrites

Chunfeng B<sup>1,2</sup>, Tegus O<sup>1,3</sup>, Tsogbadrakh N<sup>2</sup>, Sangaa D<sup>3</sup>

- 1 Inner Mongolia Key Laboratory for Physics and Chemistry of Functional Materials, Inner Mongolia Normal University, Hohhot 010022
- 2 Department of Physics, National University of Mongolia, Ulaanbaatar 14201, Mongolia
- 3 Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Science, Ulaanbaatar 13330, Mongolia

A series of Mg<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> ferrites was prepared by a solid-state reaction method. The crystal structure, the morphology and chemical composition, the magnetic properties of the ferrites were investigated by using XRD, SEM and VSM, respectively. The heating performance was measured in an alternating magnetic field (25 kHz). The results show that the ferrites form the single-phase cubic spinel structure in the Ca content x between 0 and 0.3, while a tetragonal phase forms at x = 0.4. The lattice constants, the coercivity and the grain sizes increase with x, while the saturation magnetization changes nonlinearly. The saturation magnetization (M<sub>s</sub>) reaches a maximum of 16.37 A · m<sup>2</sup> · kg<sup>-1</sup> and the heating property is maximum at x = 0.1. It turns out that appropriate amounts of Ca substitution for Mg could improve the magnetic and heating performance of the ferrites, which have potential application and promising approaches for tumor therapy.

Key words ferrites, magnetic property, magnetic heating property, hysteresis loss

### 0 引言

近年来,人们发现尖晶石型结构的 MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 铁氧体在热凝固疗法 (Thermal coagulation therapy) 中作为发热介质具有良好的应用效果<sup>[1-3]</sup>, 可用于肿瘤热治疗, 引起广泛的关注。肿瘤热治疗是利用肿瘤细胞对热的敏感性与人体组织正常细胞不同的特点, 通过将磁流体注射或植入到肿瘤部位, 使其在外加磁场作用下产生热能, 产生的热能释放在肿瘤部位, 维持一段时间内局部温度在 42~46 °C 之间<sup>[4,5]</sup>, 从而达到杀死肿瘤细胞的目的。这种治疗方法具有对肿瘤组织加热均匀、磁靶向性好<sup>[6]</sup>、可精准控制温度等优点, 且不受肿瘤体积和部位的限制, 因此在治疗肿瘤领域中显示出良好的应用前景, 日益受到研究者的重视。

交变磁场致磁性颗粒发热有几种机制。一般情况下毫米级颗粒或块状物内产热主要是靠涡流损耗和磁滞损耗<sup>[4]</sup>。对于尺寸在微米级的磁性颗粒来说, 磁滞损耗产热成为主导作用, 剩余损耗主要由奈尔弛豫 (Néel relaxation) 和布朗弛豫产生热能。而纳米级的磁性颗粒则主要通过剩余损耗获得

大的磁致热效应<sup>[7]</sup>。由于铁磁性材料和亚铁磁性材料在交变磁场中进行反复磁化时具有磁滞现象, 使部分电磁能转化为热能。发热量与磁滞回线图所包围的面积成正比<sup>[1]</sup>。

MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 铁氧体在交变磁场中的磁致发热性能与其颗粒大小和物相结构密切相关<sup>[4,7]</sup>, 显然, 磁性介质的产热效率较高, 可以缩短磁场作用时间或降低磁场的频率和强度, 对实际应用具有重要意义。在肿瘤热疗过程中, 磁性粒子在交变磁场中发热量的大小对治疗的效果影响显著<sup>[7]</sup>; 提高磁致发热性能可增强热治疗的疗效, 减少注入体内的药剂量从而减轻对人体的毒副作用及减小施加磁场强度和频率<sup>[8,9]</sup>。因此, 人们采取各种方式来提高铁氧体颗粒的磁致热效应。Hirazawa 等<sup>[12]</sup>报道显示各种铁氧体粉末中 MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 的发热性能最好, 并用反向共沉淀法制备出 Mg<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 粉末。但这种方法工艺复杂, 不适合批量生产。基于前人研究基础, 本工作采用固相合成法制备了 Ca 掺杂的 Mg<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 铁氧体粉末, 并研究了掺杂量对基体材料结构、磁性能和磁致热效应的影响, 发现以 Ca 离子替换 Mg 离子能够改善铁氧体的发热性能。

基金项目: 蒙古国立大学项目 (P2018-3612)

This work was financially supported by the National University of Mongolia (P2018-3612).

✉ tegusph@imnu.edu.cn

122



## $CuFe_2O_4$ БОЛОН $MgFe_2O_4$ ФЕРРИТ МАТЕРИАЛЫН ЧАДЛЫН ХУВИЙН ШИНГЭЭЛТИЙН СУДАЛГАА

Б.Энхмэнд\*, И.Хишигдэмбэрэл, Н.Жаргалан, Э.Уянга,  
Д.Сангаа

ШУА, Физик, технологийн хүрээлэн,  
Материал судлалын салбар

### Удиртгал

Хувьсах соронзон оронд дулаан ялгаруулдаг шпинел бүтэцтэй феррит төрлийн соронзон нано материалыг хавдрын эсрэг халуун (*hyperthermia*) эмчилгээнд хэрэглэх зорилгоор судалж байна. Дулаан ялгаруулах шинж чанар нь материалын химийн найрлага, ионуудын тархалт, спины чиглэл болон химийн аргаас шууд хамаардаг. Энэ ажилд химийн синтезийн золь-гелийн арга болон хатуу төлөвийн урвалын аргуудаар гарган авсан  $MgFe_2O_4$  болон  $CuFe_2O_4$  феррит нэгдлийн фазын анализ, кристалл бүтэц, цэвэршилтийг рентген дифракцын аргаар судлав. Түүнчлэн хувьсах соронзон орны нөлөөгөөр дээжээс ялгарах дулааныг дээж гарган авах синтезийн горимоос хамааруулан тодорхойлов.

**Түлхүүр үгс:** Золь-гель, хатуу төлөвийн арга, феррит, рентген дифракц, хувьсах соронзон орон, чадлын хувийн шингээлт

## 1 ОРШИЛ

Өнөөдөр анагаах ухаанд хавдрын эсрэг халуун эмчилгээнд зориулж хувьсах соронзон орны нөлөөгөөр дулаан ялгаруулах чадамж бүхий материалыг судлах ажил эрчимтэй явагдаж байна [1]. Хавдрын эсийг  $41-46^{\circ}C$  температур хүртэл тусгай аргаар халааж эмчлэхийг “Халуун эмчилгээ” гэж нэрлэдэг. Зураг 1-д халуун эмчилгээний аргыг элэгний хавдрын эмчилгээнд хэрэглэх ерөнхий зарчмыг үзүүлэв.

\* э-шуудан: enkhmendb@mas.ac.mn



Contents lists available at ScienceDirect

Solid State Sciences

journal homepage: <http://www.elsevier.com/locate/ssscie>

## Structural, infrared and magnetic properties of $\text{MgAl}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$ compounds: Effect of the preparation methods and Al substitution

I. Khishigdemberel<sup>a,\*</sup>, E. Uyanga<sup>a</sup>, H. Hirazawa<sup>b</sup>, B. Enkhmend<sup>a</sup>, I.A. Bobrikov<sup>c</sup>, D. Sangaa<sup>a</sup>, T. Kiseleva<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Sciences, 13330, Ulaanbaatar, Mongolia

<sup>b</sup> National Institute of Technology, Niihama College, Ehima, 792 – 8580, Japan

<sup>c</sup> Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie Str., Dubna, 141980, Russia

<sup>d</sup> Moscow M.V.Lomonosov State University, Physics Faculty, Moscow, 119192, Russia

### ARTICLE INFO

#### Keywords:

Ferrite  
Spinel structure  
X-ray and neutron diffraction  
Williamson and Hall method  
SEM and SAR

### ABSTRACT

Aluminum substituted magnesium ferrite  $\text{MgAl}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$  ( $x = 0.0, 0.2, 0.3, 0.7$  and  $2.0$ ) are prepared by two commonly-used methods: Sol-gel (SG) and Solid-phase reaction (SR). Structural studies are carried out using X-ray and neutron diffraction, and FTIR techniques, and heat generation ability in the AC magnetic field is explored by the specially designed device. Diffraction patterns revealed the formation of single cubic spinel  $\text{MgAl}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$  ferrites for SG and additional  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  phases at higher concentration of aluminum ( $x > 0.3$ ) in SR samples. Structural studies are carried out using X-ray and neutron diffraction, and FTIR techniques, scanning electron microscopy (SEM) and heat generation ability in the AC magnetic field is explored by the specially designed device. This study attempts to compare both chemical methods, and to correlate the properties with Al substitution concentration. Diffraction patterns revealed the formation of single cubic spinel  $\text{MgAl}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$  ferrites for SG and additional  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  phases at higher concentration of aluminum ( $x > 0.3$ ) in SR samples. FTIR was used to confirm the spinel structure, the main vibrating modes were observed to shift to higher wave number with increasing  $\text{Al}^{3+}$  concentration. The tetrahedral force constant ( $K_T$ ) increases continuously with  $\text{Al}^{3+}$  concentration. The morphology investigations revealed the spherical morphology of particles with some agglomeration. The heat-generation ability was enhanced with decreasing Al concentration. Upon exposure to an external alternating magnetic field of 70 kHz and intensity of 54.3 mT, specific power absorption rate (SAR) of the Magnesium ferrite aluminates. The heat generation ability of the  $\text{MgAl}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$ -SR ferrites are higher than those of  $\text{MgAl}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$ -SG samples. Moreover, doping element is affected to cation distribution between tetrahedral and octahedral sites. For  $\text{MgAl}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$ , heat generation ability will be influenced by additional magnetic properties and cation distribution. This will be distinguished by more detailed investigation for magnetic properties.

### 1. Introduction

Recent years, the ferrites have scientific and technological importance due to their magnetic properties, and also a broad range of applications such as magnetic recording, ferro fluids, magnetic resonance imaging, biomedicine, catalyst [1–4]. Moreover, some other work has been reported in the application of nano-magnesian ferrite ( $n\text{-MgFe}_2\text{O}_4$ ) for the removal of kinetics of adsorption process [5]. The general chemical formula  $\text{AB}_2\text{O}_4$  is a technologically important class of magnetic oxides, where A is a divalent metal ion (cation) and B is a trivalent metal

ion (cation). Ferrites at the nano level acquire the distinguishable physical and chemical properties than their bulk forms [6]. These distinguishable and remarkable properties lead to the applicability of ferrites in different fields ranging from electronics industry to the biomedical field [7]. Usually, in magnetically diluted ferrites, the ferric ions are distributed among octahedral B site and tetrahedral A site lattice positions. Many ferrites have been reported as heat generation materials in the AC magnetic field. In the case of a ferrimagnetic materials having a large particle size (particle size: several  $\mu\text{m}$ ),  $\text{MgFe}_2\text{O}_4$  has the highest heating ability of the various commercial ferrites of

\* Corresponding author.

E-mail address: [khishigdembereli@mas.ac.mn](mailto:khishigdembereli@mas.ac.mn) (I. Khishigdemberel).

<https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2020.106400>

Received 4 February 2020; Received in revised form 25 August 2020; Accepted 25 August 2020

Available online 23 September 2020

1293-2558/© 2020 Elsevier Masson SAS. All rights reserved.

## Journal Pre-proof

Experimental and theoretical studies on the room-temperature ferromagnetism in new  $(1-x)\text{Bi}_{1/2}\text{Na}_{1/2}\text{TiO}_3+x\text{CoTiO}_3$  solid solution materials

D.D. Dung, N.Q. Dung, M.M. Hue, N.H. Lam, L.H. Bac, L.T.K. Phuong, N.N. Trung, D.D. Tuan, N.D. Quan, D. Sangaa, D. Odkhuu

PII: S0042-207X(20)30415-2

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2020.109551>

Reference: VAC 109551

To appear in: *Vacuum*

Received Date: 5 March 2020

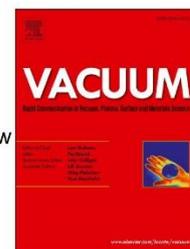
Revised Date: 23 May 2020

Accepted Date: 9 June 2020

Please cite this article as: Dung DD, Dung NQ, Hue MM, Lam NH, Bac LH, Phuong LTK, Trung NN, Tuan DD, Quan ND, Sangaa D, Odkhuu D, Experimental and theoretical studies on the room-temperature ferromagnetism in new  $(1-x)\text{Bi}_{1/2}\text{Na}_{1/2}\text{TiO}_3+x\text{CoTiO}_3$  solid solution materials, *Vacuum* (2020), doi: <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2020.109551>.

This is a PDF file of an article that has undergone enhancements after acceptance, such as the addition of a cover page and metadata, and formatting for readability, but it is not yet the definitive version of record. This version will undergo additional copyediting, typesetting and review before it is published in its final form, but we are providing this version to give early visibility of the article. Please note that, during the production process, errors may be discovered which could affect the content, and all legal disclaimers that apply to the journal pertain.

© 2020 Published by Elsevier Ltd.



## Study of Structural and Magnetic Properties of Spinel Zn Doped Cobalt Ferrites

B. Chunfeng<sup>1,2</sup>, O. Tegus<sup>2</sup>, T. Ochirkhyag<sup>3</sup>, D. Odkhuu<sup>3</sup>, N. Tsogbadrakh<sup>1\*</sup>,  
 D. Sangaa<sup>4</sup> and J. Davaasambuu<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, 14201, Mongolia

<sup>2</sup>Inner Mongolia Key Laboratory for Physics and Chemistry of Functional Materials,  
 Inner Mongolia Normal University, Hohhot 010022, China

<sup>3</sup>Department of Physics, Incheon National University, Incheon 22012, South Korea

<sup>4</sup>Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Science,  
 Ulaanbaatar, 13330, Mongolia

\*Tsogbadrakh@num.edu.mn

**Keywords:** CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, Magnetism, Curie temperature, XRD, EDS, XPS, DFT

**Abstract.** Herein, the spinel Co<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (x = 0, 0.2, 0.4 and 0.6) powder samples have been prepared by the solid-state reaction method. We have carried out the measurements of crystal structure, element analysis, material characterization, magnetic property and Curie temperature using the X-ray diffraction (XRD), Energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS), X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and vibrating sample magnetometer, and the first-principles calculations within the framework of the density functional theory (DFT). The EDS measurement indicates that the Co<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> powder samples have been successfully synthesized and exhibited the cubic spinel structures. Both the lattice constant and crystallite size increase with the Zn concentration due to the larger ionic radius of Zn<sup>2+</sup> ion than the Co<sup>2+</sup> ion. The concentration ratio of the Co<sup>2+</sup> and Co<sup>3+</sup> ions can be predicted by the distribution of cations between the A and B sites by the XPS measurement. For the magnetic properties, the residual magnetization, coercivity and Curie temperature decrease monotonically as the Zn concentration increases, while the saturation magnetization initially increases and then decreases at the room temperature. For the Co<sub>0.8</sub>Zn<sub>0.2</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> sample, the magnetic saturation reaches the maximum value of 62.98 Am<sup>2</sup>kg<sup>-1</sup>, due to a large amount of the Co<sup>3+</sup> ions. The adequate replacement of Zn ion for the Co site can improve the magnetic properties of spinel Co<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> powders, and effectively regulates the Curie temperature.

### Introduction

The spinel-type cobalt ferrite (CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) has high-frequency characteristics, including high magnetic permeability (about 10<sup>2-4</sup> H/m) and high resistivity (10<sup>2-4</sup> Ω·m) [1-3]. It has been widely used in information storage and communication equipment, magnetic recording, biomedicine and other industrial applications [4-8]. Moreover, these spinel compounds have attracted widespread attention due to their advantages such as simple preparation and low cost of raw materials. The preparation methods of the spinel CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> sample include chemical co-precipitation method, hydrothermal method and solid-phase reaction method [9,10]. The ferrite powder prepared by the solid-phase sintering reaction has stable performance, which is suitable for industrial mass production.

Generally, the AB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> is a chemical formula of spinel ferrites, where the A is divalent metal ions with similar ionic radius in the tetragonal site and the B is the trivalent metal ions in the octahedral site [5]. The distributions of the cations in A and B sites are that (the strongest in the A site) A ← Zn<sup>2+</sup>, Cd<sup>2+</sup>, Ga<sup>3+</sup>, In<sup>3+</sup>, Mn<sup>2+</sup>, Fe<sup>3+</sup>, Mn<sup>3+</sup>, Fe<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Co<sup>2+</sup>, Ti<sup>4+</sup>, Ni<sup>2+</sup>, Cr<sup>2+</sup> → B (which is the strongest in the B site). Therefore, the distributions of divalent metal ion (M<sup>2+</sup>) at the A site and the trivalent Fe<sup>3+</sup> ion at the B site are usually represented by the (M<sub>1-δ}^{2+}Fe<sub>δ}^{3+})<sub>A}^{Tet} [M<sub>δ}^{2+}Fe<sub>2-δ}^{3+}]<sub>B}^{Oct} O<sub>4</sub>, where the δ is the fraction to occupy the trivalent metal ion from the divalent metal ions at the A site to the B</sub></sub></sub></sub></sub></sub>

## Evaluation of the Influence of Ferrite Magnetic Nanoparticle for Cancer Cell

Khishigdemberel Ikhbayar<sup>1,a\*</sup>, Nomin Myagmar<sup>1,b</sup>, Gantulga Davaakhuu<sup>2,c</sup>,  
Uyanga Enkhnarant<sup>1,d</sup>, Enkhmend Bekhbaatar<sup>1,e</sup>, Jargalan Narmandakh<sup>1,f</sup>,  
Oyunsuren Tsendsuren<sup>2,g</sup> and Sangaa Deleg<sup>1,h</sup>

<sup>1</sup>Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Sciences,  
13330 Ulaanbaatar, Mongolia

<sup>2</sup>Institute of Biology, Mongolian Academy of Sciences, 13330 Ulaanbaatar, Mongolia

\*khishigdembereli@mas.ac.mn, <sup>b</sup>nominm@mas.ac.mn, <sup>c</sup>gtulga37@gmail.com,

<sup>d</sup>uyangae@mas.ac.mn, <sup>e</sup>enkhmendb@mas.ac.mn, <sup>f</sup>jargalann@mas.ac.mn,

<sup>g</sup>oyunsuren@mas.ac.mn, <sup>h</sup>sangaa@mas.ac.mn

**Keywords:** Ferrite; Hela cells; crystal structure; cytotoxic activity

**Abstract.** Magnetic nanoparticles for thermotherapy must be biocompatible and possess high thermal efficiency as heating elements. The biocompatibility of  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  nanoparticles was studied using a cytotoxicity colony formation assay and a cell viability assay. HeLa cells exhibited cytotoxic effects when exposed to three different concentrations of 150  $\mu\text{g/ml}$ , 100  $\mu\text{g/ml}$ , and 50  $\mu\text{g/ml}$  nanoparticles. Therefore, concentrations of 50  $\mu\text{g/ml}$  showed the lowest cytotoxic activity and the lowest toxicity to living cells. In vitro cytotoxicity of samples was then investigated by two methods, colony formation assay and cell viability assay. The Hela inhibited cell growth as 16.8% during heating by magnetic field generators.

### Introduction

Magnetic nanoparticles can be applied in biomedicine because of their small size, stability, easy functionalization and optical properties [1]. Thus, there are number of publications focused on studying the toxicity and the effects of these nanoparticles on different human cells and living organisms [2]. For example, the toxicity of  $MgFe_2O_4$  nanoparticles towards MCF-7 human breast cancer cells was demonstrated [3].  $NiFe_2O_4$  nanoparticles caused a decrease in cell viability in some types of human cells [4] and their cytotoxicity increases as the size of the particle increases [5].  $ZnFe_2O_4$  nanoparticles induced cytotoxicity and oxidative stress in some human cells in the dosage range of 10–40  $\mu\text{g mL}^{-1}$  [6]. On the other hand,  $CoFe_2O_4$  nanoparticles showed no significant toxicity effect on human cancer line cells at the concentration of 0.095–0.95  $\mu\text{g mL}^{-1}$  and cell viability increases in parallel with the concentration of the nanoparticles [7]. Previous studies have suggested that the cytotoxicity of nickel ferrite nanoparticles arises in part from their effect on cellular energy metabolism, as nickel ferrite nanoparticles decrease mitochondrial function [8]. This application allows the insertion of magnetic nanoparticles into solid tumors followed by exposure to an alternating current (AC) magnetic field, which increases the temperature and subsequently kills the cancer cells with fewer side effects on normal cells [9]. The cytotoxic properties of the spinel family are varied and depend strongly on their elemental composition, surrounding coatings, fabrication method, and the cell line tested. [10]. Cell lines are an in vitro system widely used in medicine, including cancer research and drug testing. Under appropriate conditions, cultured cancer cells are able to maintain the genetic characteristics of cancer, which allows for cancer research [11]. The Hela cells used in the study were epithelial cells derived from human cervical cancer and were the first linear cells to be grown under laboratory conditions [12].

In the present paper, Ni doped magnesium ferrite nanoparticles were synthesized *via* sol-gel method and the structures of these nanoparticles were characterized by XRD which is used to identify the elements in the sample quantitatively. The cytotoxic effect of the samples against human cervical cancer cells is investigated in order to realize the goal of transforming cancer cell populations. The

## FULL PAPER

## Heat generation in the AC magnetic field of fine $Y_3Fe_5O_{12}$ powder materials prepared by modifying co-precipitation synthesis

Hideyuki HIRAZAWA<sup>1,†</sup>, Reika MATSUMOTO<sup>1</sup>, Masanori SAKAMOTO<sup>1</sup>, Uyanga ENKHANARAN<sup>2</sup>, Deleg SANGAA<sup>2</sup>, Tatiana Yu. KISELEVA<sup>3</sup>, Jun YANO<sup>1</sup>, Hiroshi FUKUOKA<sup>4</sup> and Hiromichi AONO<sup>5</sup>

<sup>1</sup>National Institute of Technology, Niihama College, 7–1 Yagumo-tyo, Niihama, Ehime 792–8580, Japan

<sup>2</sup>Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Sciences, Peace Avenue 54B, Ulaanbaatar 13330, Mongolia

<sup>3</sup>Faculty of Physics, Moscow M.V. Lomonosov State University, 1–2 Leninskie Gory, Moscow 119991, Russian Federation

<sup>4</sup>Department of Applied Chemistry, Graduate School of Engineering, Hiroshima University,

Higashi-Hiroshima, Hiroshima 739–8527, Japan

<sup>5</sup>Graduate School of Science and Engineering, Ehime University, 3 Bunkyo-tyo, Matsuyama 790–8577, Japan

Fine  $Y_3Fe_5O_{12}$  (YIG) powder with self-heat generation ability in an AC magnetic field was prepared by a modified co-precipitation method and calcined at 600–1100 °C. Using this method, a single phase of the YIG ferrite structure was obtained at a low calcination temperature. The heat generation ability of the modified synthesis sample with a particle diameter of ~120 nm in a AC magnetic field was significantly improved. The correlation between heat generation ability and hysteresis loss was not confirmed for this sample, which suggests that the heat generation of YIG ferrite powder might have been caused by another factor that differs from the magnetic loss.

©2021 The Ceramic Society of Japan. All rights reserved.

Key-words :  $Y_3Fe_5O_{12}$ , Heat generation ability, AC magnetic field, Ferrite nano particle, Co-precipitation

[Received April 23, 2021; Accepted June 30, 2021]

### 1. Introduction

Thermal coagulation techniques that utilize an AC magnetic field to generate heat have been investigated to reduce the need for invasive surgical approaches in the treatment of cancer.<sup>1)–6)</sup> For this thermal therapy, fine magnetic materials such as ferrite nanoparticles that possess a self-heating ability in an AC magnetic field have been studied for application as a heating element to damage cancerous tumors. To date,  $FeFe_2O_4$  loaded liposomes have been investigated as candidate materials for this type of therapy,<sup>3)</sup> but were found to have insufficient heat generation ability. In addition, the heating ability of  $FeFe_2O_4$  decreases with oxidation of the Fe(II) ion in the magnetite.<sup>7)</sup> For the aforementioned reasons, considerable research has gone into improving the self-heating ability of potential material in an AC magnetic field; research has especially been conducted on the synthesis of fine powder material (<100 nm) for application in drug delivery systems.

In recent years, YIG ferrite powder, with high heat generation ability among various ferrite powder samples, has been prepared by chemical synthesis.<sup>8)–15)</sup> Furthermore, we reported that when lanthanum was added, the heat generation property of the YIG composite powder was

remarkably improved in AC magnetic fields.<sup>16)</sup> However, these YIG ferrite samples had large particle diameters that was caused by grain growth due to calcination over 1100 °C in order to obtain a single phase of the YIG ferrite structure. In this study, we attempted to synthesize YIG ferrite nanoparticles prepared by a modified co-precipitation method that investigated the work of Hosseinzadeh et al. to clarify the heat generation behavior of fine YIG powders in an AC magnetic field.<sup>17)</sup>

### 2. Experimental procedure

Two types of YIG ferrite powders were synthesized: one using a normal co-precipitation method and the other using a modified co-precipitation method. All chemicals were purchased from companies and used without further purification. In the normal co-precipitation synthesis, yttrium nitrate hydrous [ $Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ , 99.9%, Kojundo Chemical Laboratory Co., Ltd.] and iron(III) nitrate enneahydrate [ $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ ,  $\geq 99.0\%$ , Nacalai Tesque, Inc., Japan] were used as starting materials. These nitrates were dissolved in deionized water to prepare a mixed metal aqueous solution. The mixed aqueous solution was placed in a hot water bath at 80 °C with magnetic stirring; then NaOH solution (6 mol/l, 140 ml) was directly added drop-wise into the mixed metal solution to form hydroxides. These precipitates were filtered, washed with pure water until pH < 10, and dried at 100 °C for 24 h. The precursor powder obtained was then calcined at 600–1100 °C for

<sup>†</sup> Corresponding author: H. Hirazawa; E-mail: hirazawa@mat.niihama-nct.ac.jp

## STUDY OF CATION DISTRIBUTION EFFECT ON Cu AND Cr DOPED MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> SPINEL FERRITE

B. Enkhmend, I. Khishigdemberel, N. Jargalan, D. Sangaa

Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Sciences, Ulaanbaatar, Mongolia

**Abstract.** In this work, we have carried out a comprehensive study on the impact of cation distribution towards tuning the structural and molecular parameters and finally optimizing the heating efficiency of the nanoparticles for magnetic hyperthermia application. Nanomagnetic spinel ferrite samples with the general formula Mg<sub>0.4</sub>Cu<sub>0.6</sub>Cr<sub>x</sub>Fe<sub>2-x</sub>O<sub>4</sub> ( $x = 0.0, 0.2, 0.5, 1.0$ ) which synthesized by sol-gel method, has been studied by different methods. Characteristics structural parameters have been examined from X-ray diffraction spectra by employing standard Rietveld refinement techniques. The vibrational study was achieved using Fourier Transform-Infrared (FT-IR) spectroscopy. Cation migration in the unit cell is confirmed from the XRD peak intensity and FTIR study. The shifting of bands toward high frequency is attributed to the decrease in the unit cell dimension as confirmed from XRD results and substitution of lighter cations Cr<sup>3+</sup> for Fe<sup>3+</sup> in the system. The heat generation ability of the synthesized samples was studied upon exposure to an external alternating magnetic field of 75 kHz and 7.5 kA/m. Specific absorption rate (SAR) of the ferrite samples calculated by calorimetric method.

**Keywords:** Ferrite, spinel structure, x-ray diffraction, Rietveld analysis, cation distribution and SAR.

**Corresponding Author:** B. Enkhmend, Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Sciences, 13330 Ulaanbaatar, Mongolia, e-mail: [enkhmendb@mas.ac.mn](mailto:enkhmendb@mas.ac.mn)

**Received:** 30 June 2021;

**Accepted:** 14 July 2021;

**Published:** 20 August 2021.

### 1. Introduction

Although significant advances have been made by nanoparticles for the applications in magnetic hyperthermia, the optimization and related mechanism of heating efficiency is nevertheless a challenge. The cation distribution effect plays a major role in the heat generation ability for the spinel ferrite. The spinel ferrites with general formula MFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> have been used in many industrial applications. By adjusting the chemical identity of the M<sup>2+</sup> cation, the magnetic configurations of MFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> are tunable to provide a wide range of magnetic properties (O'Handley, 2000). Some of the applications of these materials are in permanent magnets, recording devices, electronic and microwave devices, high frequencies device and catalyst for environment. In addition, magnetic nanoparticles can be utilized for the magnetic hyperthermia treatment of cancer. The magnetic nanoparticles are used as heat generators under an alternating magnetic field.

In ferrites, the magnetic properties are mainly dependent on the type of metal ions and their distribution between the tetrahedral (A) and octahedral (B) sites (Kumar *et al.*, 2017) Spinel ferrites usually contains a crystal structure with the space group, Fd3m, having 56 atoms; 32 are oxygen anions with a close packed cubic structure, and the rest are metal cations: 8 (of 64 available) occupying the tetrahedral (A) sites and 16 (of 32

**Tunability of magnetic anisotropy of Co on two-dimensional materials by tetrahedral bonding**D. Odkhuu,<sup>1,\*</sup> T. Tsevelmaa,<sup>2</sup> P. Taivansaikhan,<sup>1</sup> N. Park,<sup>3</sup> S. C. Hong,<sup>2</sup> and S. H. Rhim<sup>2,†</sup><sup>1</sup>Department of Physics, Incheon National University, Incheon 22012, South Korea<sup>2</sup>Department of Physics and EHSRC, University of Ulsan, Ulsan 44610, South Korea<sup>3</sup>Department of Physics, Ulsan National Institute of Science and Technology, Ulsan 689-798, South Korea (Received 31 May 2018; revised manuscript received 11 November 2018; published 18 January 2019)

Pairing of  $\pi$  electronic state structures with functional or metallic atoms makes them possible to engineer physical and chemical properties. Herein, we predict the reorientation of magnetization of Co on hexagonal BN (*h*-BN) and graphene multilayers. The driving mechanism is the formation of the tetrahedral bonding between  $sp^3$  and  $d$  orbitals at the interface. More specifically, the intrinsic  $\pi$  bonding of *h*-BN and graphene is transformed to  $sp^3$  as a result of strong hybridization with metallic  $d_{z^2}$  orbital. The different features of these two tetrahedral bondings,  $sp^2$  and  $sp^3$ , are well manifested in charge density and density of states in the vicinity of the interface, along with associated band structure near the  $\bar{K}$  valley. Our findings provide an approach to tailoring magnetism by means of degree of the interlayer hybrid bonds in two-dimensional layered materials.

DOI: 10.1103/PhysRevB.99.014419

**I. INTRODUCTION**

Two-dimensional (2D) materials, down to one or a few atoms thick, have been still active in modern material physics, including spintronics [1,2], spin orbitronics [3], and spin Hall effects [4,5], owing to the intriguing properties associated with their unique atomic and electronic structures. In particular, intense research efforts continue to seek possibilities for engineering the physical and chemical properties of mono- and multilayer graphene [6–8] to fulfill the technological prerequisites, where attempts by decorating with functional species or/and metals are prominent [9,10]. On the other hand, the presence of graphene can also substantially alter the electronic and magnetic properties of transition metal (TM) atoms, which depends on the degree of hybridization between the metal  $d$  and graphene  $\pi$  orbitals [11]. In these contexts, the exploration in other archetypal 2D structures such as hexagonal boron nitride (*h*-BN), which is a structural analog of graphene with broken sublattice symmetry, emerges as one of the central interests from both fundamental and technological standpoints.

In spintronics, perpendicular magnetic anisotropy (PMA) is of crucial significance, where its tunability is essential to enhance the performance. Furthermore, combinations with 2D materials have possibilities for manipulating the magnetism and magnetic anisotropy of TM atoms in graphene [12–15]. For example, an unexpectedly large PMA up to an order of 100 meV was predicted in cobalt dimer-benzene pairs [12]. Nevertheless, subsequent experiments have shown that the individual Co atoms adsorbed onto graphene on a Pt(111) exhibit in-plane magnetic anisotropy [13]. Interestingly, it is further identified that the preferable magnetization direction of Co adatoms on graphene depends on the

underlying metallic substrate: magnetization is perpendicular in graphene/Ru(0001) and in-plane in graphene/Ir(111) [14], where different graphene/metal interactions are responsible, i.e., chemisorption in graphene/Ru, physisorption in graphene/Ir [14], and graphene/Pt [13]. In recent studies, through  $Cp_z-Cod_{z^2}$  hybridization, the presence of fullerene molecules necessitates magnetization reorientation of the underlying Co films in-plane to perpendicular [15].

In addition to these remarkable findings, the promising alternative for tailoring the magnetic anisotropy of TM atoms seemingly resides in the use of even stronger bonding features between the tetrahedral  $sp^3$  and metallic  $d$  orbitals. In this paper, the reorientation of magnetization of Co is predicted on *h*-BN via  $sp^2$ - $sp^3$  transition. The bond transition includes hybridization with metallic  $d$  orbitals, where the  $sp^3$ - $d_{z^2}$  hybridization is crucial for the magnetization reversal. Moreover, the bond transition also accompanies the sign change in Berry curvature, which may invite experiments to verify using the spin Hall [4,16,17] and the inverse spin Hall effect [18,19]. Further investigations demonstrate the reorientation of magnetization in a similar phase transition involving carbon  $sp^3$  bonds from graphene layers [10,20].

**II. COMPUTATIONAL METHOD**

Density functional theory (DFT) calculations are performed using Vienna *ab initio* simulation package (VASP) [21–23]. The exchange-correlation interactions are treated by the generalized gradient approximation formulated by Perdew, Burke, and Ernzerhof (PBE) [24]. The long-range dispersion corrections for the interlayer interaction were taken into account within the semiempirical DFT-D2 approach suggested by Grimme [25]. We used  $2 \times 2$  graphene and *h*-BN cells in the lateral 2D lattice for all the calculations. More details of our model geometries are provided in the following section. We use an energy cutoff of 400 eV, a  $21 \times 21 \times 1$   $k$  mesh, and relaxation with force criteria of  $10^{-2}$  eV/Å. The

\*odkhuu@inu.ac.kr

†sonny@ulsan.ac.kr



## НАНОСОРОНЗОН ФЕРРИТ МАТЕРИАЛААР ХАВДРЫН ЭСИЙН УРГАЛТЫГ УДААШРУУЛАХ ТУРШИЛТЫН ҮР ДҮН

И.Хишигдэмбэрэл<sup>a\*</sup>, М.Номин<sup>b</sup>, Д.Гантулга<sup>b</sup>, Э.Уянга<sup>a</sup>,  
Б.Энхмэнд<sup>a</sup>, Н.Жаргалан<sup>a</sup>, Ц.Оюунсүрэн<sup>b</sup>, Д.Сангаа<sup>a</sup>

<sup>1</sup>ШУА, Физик, технологийн хүрээлэн, Материал судлалын салбар

<sup>2</sup>ШУА, Биологийн хүрээлэн, Молекул биологийн лаборатори

### Удиртгал

Энэхүү ажилд хувьсах соронзон оронд дулаан ялгаруулдаг шпинел бүтэцтэй  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  феррит соронзон нано бөөмийн амьд эсэд үзүүлэх хорюу чанарын судалгааг хүний умайн хүзүүний хавдрын эс (Hela cell) дээр туршив.  $Mg_{0.8}Ni_{0.2}Fe_2O_4$  нано бөөмийг 150мг/мл, 100мг/мл болон 50 мг/мл гэсэн 3 өөр концентрациар эсэд үйлчлэн нийт уургийн хэмжээгээр амьд эсийн хэмжээг тодорхойлсон бөгөөд 50мкг/мл концентраци нь цитотоксид идэвх бага буюу амьд эсэд үзүүлэх хорюу чанар хамгийн багатай байсан. Иймд цаашидын судалгаанд тус концентрацийн үе дэх соронзон орон үүсгэгч төхөөрөмжөөр халалт үүсээж эсийн ургалтыг дарангуйлж байгаа эсэхийг судлан үзэхэд Hela эсийн ургалтыг 16.8 % -иар дарангуйлж байв.

Түлхүүр үгс: Феррит, Hela эс, кристалл бүтэц, цитотоксик идэвх

## 1 ОРШИЛ

Сүүлийн жилүүдэд хавдрын эсрэг халуун эмчилгээнд зориулж хувьсах соронзон орны нөлөөгөөр дулаан ялгаруулах өндөр чадамж бүхий материалыг судлах ажил эрчимтэй явагдаж байна [1]. Энэ аргын нэг болох гипертерм (hyperthermia) эмчилгээ нь хорт хавдрын эсийн орчны температурыг (42 - 45°C) өсгөж устгах зорилготой юм. Хорт хавдрын эсүүд нь эрүүл эстэй харьцуулахад бүтэц, морфологи, үйл ажиллагааны хувьд маш их өөрчлөлтөнд орсон байдаг ба үүний нэг жишээ нь эрүүл эстэй харьцуулахад халуунд мэдрэмтгий, тэвсэр муутай байдаг. Тиймээс гипертерм эмчилгээ нь мэс засал, хими эмчилгээ, цацрагийн эмчилгээтэй харьцуулахад эрүүл эсэд нөлөөлөхгүй,

\*э-шуудан: khishigdembereli@mas.ac.mn