

Улсын бүртгэлийн дугаар
9095578

Нууцын зэрэглэл: Б

Аравтын бүрэн
ангиллын код

Сэдэвт ажлыг хэрэгжүүлэх
гэрээний дугаар: ШУГх/ОХУ/_2019/06

**ШИНЖЛЭХ УХААНЫ АКАДЕМИ
ФИЗИК, ТЕХНОЛОГИЙН ХҮРЭЭЛЭН**

**Цахилгаан соронзон долгионы хамгаалалт болон био-
анагаах ухаанд хэрэглэгдэх феррит функциональ
системийн бүтцийн болон соронзон шинж чанарын
судалгаа**

Гадаадтай хамтарсан төслийн тайлан

2019 – 2022

Төслийн удирдагч:

Д.Сангаа, ШУ-ны доктор (ScD)

Санхүүжүүлэгч байгууллага:

Шинжлэх ухаан технологийн сан

Захиалагч байгууллага:

Боловсрол, шинжлэх ухааны яам

Тайлан өмчлөгч:

Физик, Технологийн Хүрээлэн
Энхтайваны өргөн чөлөө 54Б.
Улаанбаатар 13330, Монгол улс
Утас: 458397, 99194346
Э-хаяг: dsangaa@gmail.com

Улаанбаатар

2023

РЕФЕРАТ

Энэхүү төсөл нь 2019 оны 11 сарын 05-ны өдрийн ШуГх/ОХУ/_2019/06 тоот гэрээний дагуу 2019-2022 оны хооронд ОХУ-ын Ломоносовын нэрэмжит Москвагийн их сургуулийн Физикийн тэнхимтэй хамтран хэрэгжүүлсэн болно. Төслийн хүрээнд имфакт фактор бүхий мэргэжлийн сэтгүүлд 5 эрдэм шинжилгээний өгүүлэл, 1 гарын авлага хэвлүүлж, 3 илтгэл олон улсын хуралд илтгэсэн байна.

Төслийн цахилгаан соронзон долгионы хамгаалалт болон био-анагаах ухаанд хэрэглэгдэх феррит функциональ системийн бүтцийн болон соронзон шинж чанарын судалгааг гүйцэтгэх зорилгийн хүрээнд дараах ажлуудыг гүйцэтгэсэн.

1. Туршлагын судалгаа: Соронзон бүтцийг Мёссбауэрийн спектрометрийн арга, нейтроны сарнилын аргаар харьцуулан судлав.
2. Онолын судалгаа: Феррит нэгдлийн физик шинж чанарыг квант онолоор тайлбарлав.

Энэхүү судалгааны ажилд цахилгаан соронзон хамгаалагч материалд зориулагдсан хэт өндөр молекул жин бүхий поли-этилен(UHMWPE), магнийн феррит, иттрийн гарнет бөөмүүдийн судалгааг хийв. Ферритийг UHMWPE-тэй хольцлон механик химийн идэвхжүүлэлтийн аргаар гарган авсан ба бүтэц, морфологи, соронзон төлөвт үзүүлэх нөлөөллийг электрон микроскоп, нейтроны дифракц, Мёссбауэр, FTIR спектроскопийг ашиглан гүйцэтгэв. Соронзон бөөмийг гарган авах синтезийн төрөл нь бөөмсийн хэмжээ, морфологи, кристал бүтэц (инверсийн параметр) болон соронзон шинж чанарт ихээхэн нөлөө үзүүлдэг болохыг тогтоосон. Эдгээр бүх судлагдсан параметрууд функциональ полимер нийлмэл материалын шинж чанарыг тодорхойлоход чухал үүрэг гүйцэтгэж байна. Янз бүрийн бөөмийн хэмжээ (35 -185 нм) бүхий $Y_3Fe_5O_{12}$ феррит нэгдлийг тунадасжуулах аргаар гарган авч төмрийн локаль атомын бүтцийг $57Fe$ Мёссбауэрын спектроскопийн аргаар судалсан.

$Y_3Fe_5O_{12}$ нэгдэлд нэмэлт фаз үүсч улмаар системийн соронзон шинж чанарт нь нөлөөлж байгаа хэмжилтийн үр дүнд үндэслэн YIG бүтцэд дотоод цэгэн дефект үүсгэн дефект бүрийн бүтцийн энергийн тооцоог гүйцэтгэв.

Түлхүүр үг: Соронзон материалууд, Феррит, Гарнет, UHMWPE, Нейтрон диффракц, Мёссбауэрын спектроскопи

ТӨСЛИЙН ГҮЙЦЭТГЭГЧИД:

1. Дэлэгийн Сангаа -
ФТХ–ийн Функциональ материалын лабораторийн ЭШТэрА, Академич
2. Нармандахын Жаргалан -
ФТХ–ийн Функциональ материалын лабораторийн эрхлэгч, Доктор (Ph.D)
3. Энхнарангийн Уянга -
ФТХ–ийн Функциональ материалын лабораторийн ЭШДэдА, Доктор (Ph.D)
4. Ихбаярын Хишигдэмбэрэл -
ФТХ–ийн Функциональ материалын лабораторийн ЭШДэдА, докторант
5. Бэхбаатарын Энхмэнд -
ФТХ–ийн Функциональ материалын лабораторийн ЭШДэдА, магистр
6. Баатарцогтын Хонгорзул -
ФТХ–ийн Функциональ материалын лабораторийн ЭШДэдА, докторант

ГЭРЭЭТ ГҮЙЦЭТГЭГЧ:

7. Галсангийн Сэвжидсүрэн -
ФТХ–ийн Эрдэмтэн нарийн бичгийн дарга, Доктор (Ph.D)
8. Доржийн Одхүү -
ФТХ–ийн Функциональ материалын лабораторийн ЭШТэрА, Доктор (Ph.D)

**ХАМТРАН АЖИЛЛАСАН ГАДААД, ДОТООДЫН ИХ ДЭЭД СУРГУУЛЬ,
ЛАБОРАТОРИУД:**

- МУИС-ийн ШУС-ийн Байгалийн Ухааны Сургууль;
- ШУТИС-ийн ШУС-ийн Материал Судлалын Сургууль;
- ОХУ–ын Ломоносовын нэрэмжит Москвагийн их сургууль;
- БНСУ-ын Инчеоны их сургууль;
- Япон улсын Ивате их сургууль;

АГУУЛГА

НЭГ. ОРШИЛ	7
1.1. Цахилгаан соронзон долгионоос хамгаалагч материал	7
1.2. Мессбауэрийн спектрометрийн арга	12
ХОЁР. УНМҮРЕ/ФЕРРИТ НЭГДЛИЙН СУДАЛГАА	19
2.1. Туршилтын хэсэг	19
2.2. Үр дүн, хэлэлцүүлэг	21
2.3. Дүгнэлт	35
ГУРАВ. ГАРНЕТ НЭГДЛИЙН СУДАЛГАА	36
3.1. Химийн синтез	37
3.2. Морфологийн судалгаа	38
3.3. Кристалл бүтцийн судалгаа	39
3.4. Мессбауэрийн судалгаа	40
3.5. Соронзон шинж чанарын судалгаа	43
3.6. Дулаан ялгаруулах чадамжийн судалгаа	47
3.7. Онолын тооцооллын үр дүн.....	49
ХАВСРАЛТ 1.	65
ХАВСРАЛТ 2.	66

“Цахилгаан соронзон долгионы хамгаалалт болон био-анагаах ухаанд хэрэглэгдэх феррит функциональ системийн бүтцийн болон соронзон шинж чанарын судалгаа” нэртэй хамтарсан төсөл хэрэгжүүлэх, санхүүжүүлэх
2019 оны 11-р сарын 05 -ны өдрийн
ШуГх/ОХУ/_2019/06 дугаар
гэрээний 1 дүгээр хавсралт

ТӨСЛИЙН ҮР ДҮНГИЙН ДААЛГАВАР

/Техникийн даалгавар/

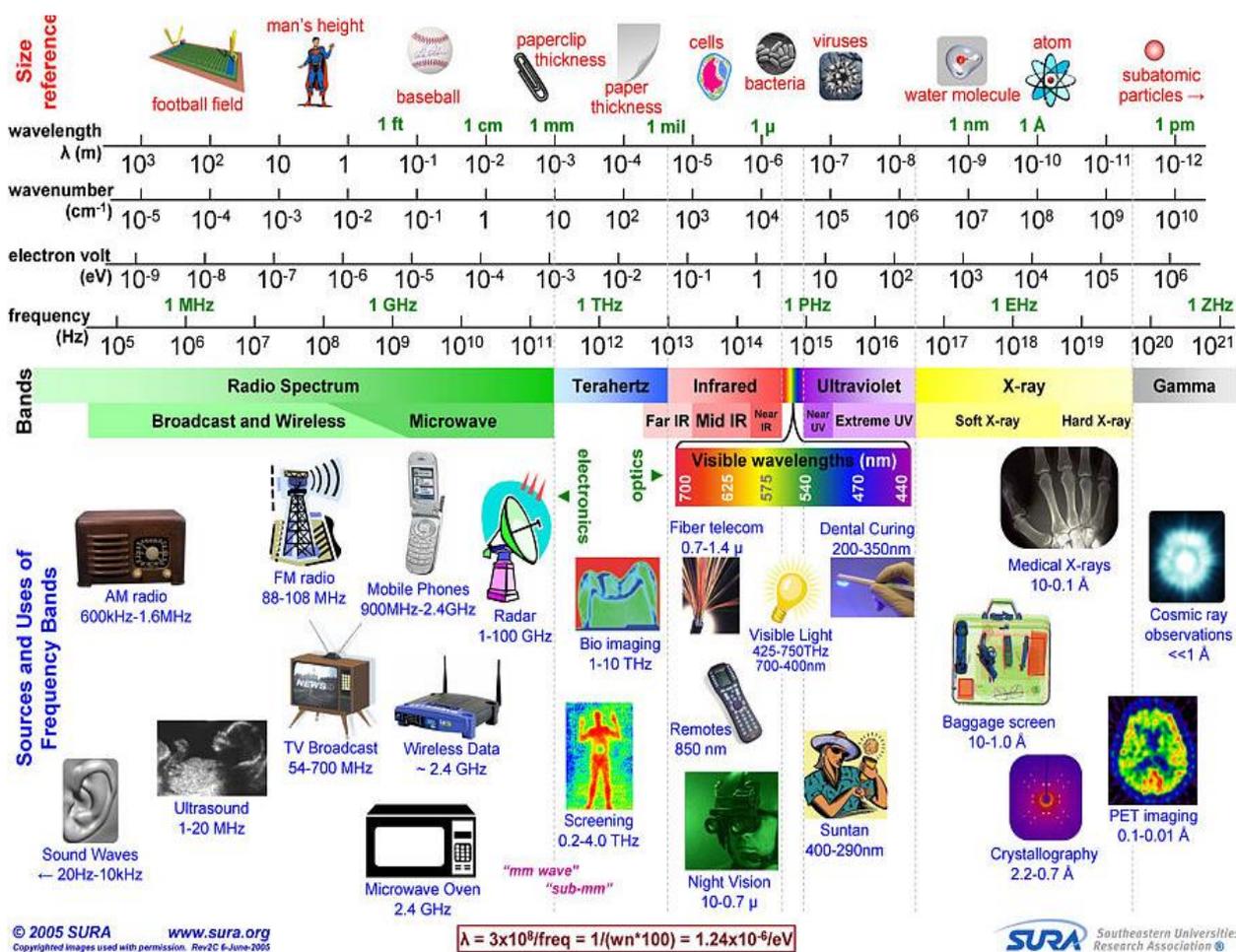
Д/д	Төслөөр бий болох үр дүн	Тоо хэмжээ	Үр дүнгийн үзүүлэлт	Үр дүнг хүлээлгэн өгөх хугацаа (он, сар)
1	Био-анагаах ухаанд хэрэглэгдэх феррит системийн соронзон шинж чанар, дулаан ялгарах үзэгдлийг бөөмийн төрөл, хэмжээ, гадаргуугийн бүтэц, цахилгаан соронзон орны төрлөөс хамааруулан судлах	2	Эрдэм шинжилгээний дотоодод илтгэл, өгүүлэл хэвлэнэ	2019 он 12 сар
2	Феррит нано хэмжээст материалыг Мессбауэрийн спектрометрийн аргаар судлах	4	Эрдэм шинжилгээний гадаадад өгүүлэл- 3, илтгэл- 1	2020 он 9 сар
3	Нано соронз материалын шинж чанарын спин чиглэл болон долгионы тэгшитгэлийн судалгаанд нягтын функциональ онол (DFT) болон псевдопотенциалын онолын аргыг хэрэглэнэ	4	Эрдэм шинжилгээний дотоодод 1 өгүүлэл гадаадад 1 өгүүлэл - Хурлын илтгэл гадаадад 1, дотоодод 1	2020 он 10 сар
4	Био-анагаах ухаанд хэрэглэгдэх феррит системийн бүтцийн болон соронзон шинж чанарыг феррит бөөмийн бүрэлдэхүүн болон хольцын төрлөөс хамааруулан нейтроны сарнилын аргаар судална.	2	Эрдэм шинжилгээний гадаадад өгүүлэл - 1 Хурлын гадаадад илтгэл - 1	2021 он 9 сар
5	Төслийн эцсийн тайлан бичиж хүлээлгэн өгнө	1	Эцсийн тайлан	2021 он 12 сар

Энэхүү тайлан 3 бүлэг, 12 дэд бүлэгтэй бөгөөд ШУТ-ийн төсөл хэрэгжүүлэх, санхүүжүүлэх 2019 оны 11-р сарын 05 -ны өдрийн ШуГх/ОХУ/_2019/06 тоот гэрээний 1-р хавсралтад заагдсан “Төслийн үр дүнгийн даалгавар”-т тусгасан ажлын дагуу бичигдсэн болно.

НЭГ. ОРШИЛ

1.1. Цахилгаан соронзон долгионоос хамгаалагч материал

Өнөөдөр бид байгалийн үүсгүүрт буюу дэлхийн (сансрын) сул цахилгаан соронзон орон, мөн хүний үйл ажиллагааны дүнд бий болсон хиймэл цахилгаан соронзон орны нөлөөлөлд ажиллаж амьдарч байна. Байгалийн үүсгүүртэй тогтмол үйлчилж байдаг цахилгаан соронзон орон нь хүний амьдралын үйл ажиллагаанд тодорхой ач холбогдолтой бөгөөд салшгүй нэг хэсэг болсоор иржээ. Гэтэл байгалийн бус гаралтай, хиймэл үүсгүүрийн улмаас хүн ам ихтэй томоохон хотууд дахь цахилгаан соронзон орон нь байгалийн дэвсгэр хэмжээтэй харьцуулахад их хэмжээгээр ихэсч бохирдол үүсгэж байна. Ялангуяа радио долгион ($10^4 - 10^{10}$ Гц) ба богино долгионы ($10^9 - 10^{12}$ Гц) давтамжийн мужид ажилладаг төхөөрөмжүүд (жишээлбэл, гар утас, wifi төхөөрөмж) нь энэ долгионыг ихээр цацаргаж, ялгаруулж байдаг.

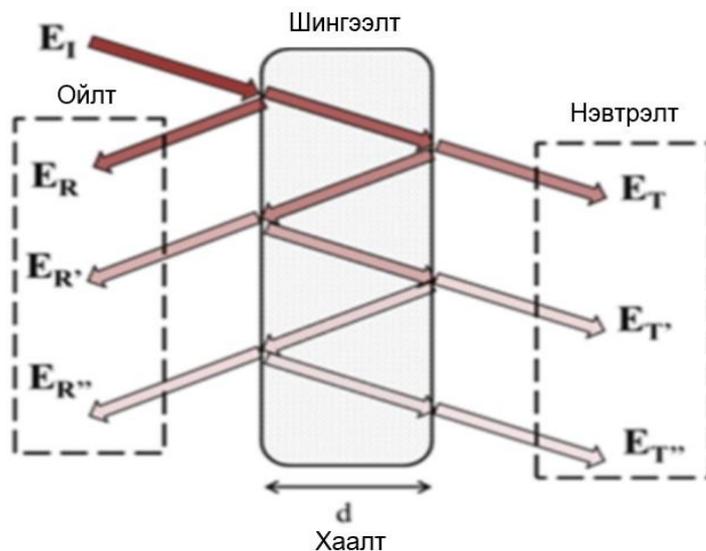


Зураг 1. Цахилгаан соронзон долгионы шинж чанар

Иймд цахилгаан соронзон долгионы (ЦСД) нөлөө орчин үеийн нийгэмд ноцтой асуудал болж байна. Цахилгаан соронзон долгионоос электрон төхөөрөмжийн аюулгүй үйл ажиллагаа, хүний эрүүл мэндийг хамгаалах асуудал маш чухалаар хөндөгдөж ирсэн. Одоогоор ЦСД-ы хүний эрүүл мэндэд үзүүлэх нөлөөллийг тодорхой гаргаж ирээгүй байгаа боловч дэлхийн олон улс орнууд хүлцэх хэмжээ, стандартыг гаргаж мөрдөж байна. Манай улс ч мөн адил MNS 3964:1987, MNS 5148:2015, MNS 6574:2016, MNS 5594:2020 зэрэг цахилгаан соронзон орны нөлөөллийг хэмжих арга зүй, хамгаалах арга, техникийн шаардлага, аюулгүйн түвшин зэргийг тодорхойлсон стандартуудыг мөрддөг байна. Харин цахилгаан соронзон орон нь метал дамжуулагч дахь электронтой харилцан үйлчилснээр техник, тоног төхөөрөмжийн хэвийн ажиллагаанд нөлөөлөх, саатуулах, эвдрэх зэрэг асуудалд хүргэдэг байна. Тиймээс сүүлийн хорин жилийн хугацаанд ЦСД-оос хамгаалах материалыг гарган авах, боловсруулах судалгаа эрчимтэй хөгжиж байна.

ЦСД шингэх болон ойх үзэгдлийг ашиглан түүний нөлөөллөөс хамгаалах материалыг боловсруулдаг. Хамгийн чухал ажлын давтамжууд нь ГГц мужид буюу долгионы урт нь “урт” мужид хамаардаг. Жишээлбэл, 1 ГГц давтамж нь 0.30 м долгионы урттай байна. Ийм учраас ЦСД-оос хамгаалах материалууд нь богино долгионы зуухны хаалганы адил төмөр утсан тор шиг хэлбэртэй байдаг. Урт долгионы урттай тул ЦСД хамгаалах материал нь заавал микро эсвэл нано бүтэцтэй байх албагүй байдаг.

ЦСД –оос хамгаалах материалд цахилгаан эсэргүүцэл багатай металл (зэс, гууль, хөнгөн цагаан гэх мэт), металлын хайлш, нүүрстөрөгчийн төрлүүд, керамик, цемент (бетон), дамжуулагч полимерууд багтдаг. Тухайлбал барилгын бетон нь радио долгионыг ойлгох чадвар бага боловч найрлагад нь дамжуулагч (тухайлбал нүүрстөрөгчийн хоолой) материал нэмж өгснөөр ийм чадамжтай болгодог байна. Ийм материалууд нь цахилгаан соронзон долгионыг сайн хаах үйлчлэл үзүүлдгийн учир гэвэл; цахилгаан соронзон орны үйлчлэлээр тухайн материал дотор хуйларсан гүйдэл буюу Эдди цахилгаан гүйдэл үүссэний улмаас хоёрдогч орон үүсдэгт оршино. Ийнхүү шинээр үүссэн орны далайц нь ойролцоогоор хаах орны далайцтай тэнцэх ба харин фаз нь эсрэг болно. Иймд хоёр орон нэмэгдэх зарчим ёсоор хаалтын материалын нимгэн үе давхарга доторхи нийлбэр орон маш хурдан унтран замхарна [1]. Гэхдээ ЦСД-ыг буцааж ойлгох нь ойр орчимд байх байгаль орчин, хүний биед таатай биш үзэгдэл учир шингээлт давамгайлах нь чухал юм.



Зураг 2. ЦСД-оос хамгаалах материалын ажиллах зарчим

Тухайн материалын соронзон болон цахилгаан оронтой хэрхэн харилцан үйлчилж байгааг ойлгох нь энэхүү материалыг хөгжүүлэх гол түлхүүр болно. Материалын соронзон болон диэлектрик шинж чанар нь ЦСД-г шингээх чадварыг дэмждэг бөгөөд гадны цахилгаан соронзон оронтой материалын соронзон болон цахилгаан диполь харилцан үйлчилсний улмаас цацрагийг шингээдэг байна. Энэ үзэгдэл нь соронзон болон цахилгаан диполийн үйлчлэл (давтамж нэмэгдэх тусам нэмэгддэг бөгөөд соронзон мөхлөгийн хэмжээ, мөхлөгийн хилийн хөдөлгөөнөөс хамаарна), диполь-диполь харилцан үйлчлэл, соронзон болон цахилгаан мэдрэх чадвараас шууд хамаардаг. Диэлектрик шинж чанар нь цахилгаан дамжуулах чадвартай хамааралтайг бид мэднэ. Тэгвэл дамжуулагч шинж чанар бүхий нүүрстөрөгчийн материалын хувьд гарган авах арга буюу шатаах температураас дамжуулал шууд хамааралтай. Нөгөө талаар температур нь кристал бүтцийн эрэмбэтэй шууд хамааралтай байна. Эндээс ЦСД хамгаалагч материалын үзүүлэлтийг таамаглах боломжтой болж байна.

ЦСД хамгаалагч материал нь:

- Цахилгаан дамжуулал өндөр;
- Соронзон нэвтрүүлэх чадвар өндөр;
- Диэлектрик
- Хувийн гадаргуугийн талбай/интерфейс өндөр

ЦСД хамгаалагч материалуудад металл ба нүүрстөрөгчийн төрлийн материалуудыг ихэвчлэн хэрэглэдэг бөгөөд энэ нь өндөр цахилгаан дамжуулах

чадвартай бөгөөд цахилгаан оронтой харилцан үйлчлэх чөлөөт электронууд ихтэй байдаг. Керамик болон цементийн хувьд үр ашиг харьцангуй бага. Ямар ч төрлийн материалын хувьд соронзон шинж чанартай нэмэлт нэгдлийн тусламжтайгаар соронзон оронтой харилцан үйлчлэлийг ихэсгэж ЦСД-ыг шингээх чадварыг нэмэгдүүлдэг байна.

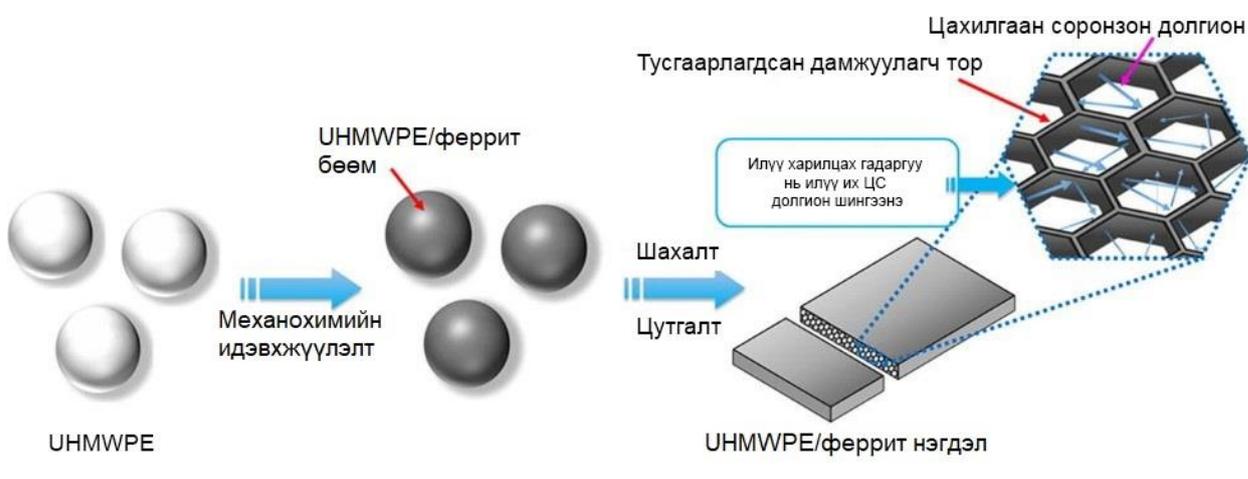
Соронзон материалыг полимертэй хослуулан өвөрмөц шинж чанартай шинэ композит материал гарган авснаар электроник (цахилгаан соронзон долгион шингээгч, мэдрэгч, тусгаарлагч) болон био-анагаах (MRI тодосгогч бодис) зэрэг салбаруудад өргөн хэрэглэх боломж гарч ирч байна [1]. Эрдэмтэд шинэ төрлийн ЦСД-оос хамгаалагч материалын судалгааг эрчимтэй явуулж байгаагийн нэг нь хөнгөн бөгөөд хүссэн хэлбэр, хэмжээ, хэвэнд ордог материал болох полимер агуулсан композит материалыг цахилгаан соронзон цацрагаас хамгаалахад ашиглах явдал юм [2-4]. Бүрэлдэхүүндээ полимер болон соронзон бөөм агуулсан шинэ төрлийн композит материал нь цахилгаан соронзон долгионы урттай ойролцоо хэмжээтэй бөөмүүдийнхээ улмаас уг материал дундуур нэвтрэх долгионы замын уртыг удирдсанаар түүнийг шингээх эсвэл сарниулах боломжийг олгодог. Цахилгаан дамжуулах чадвар өндөр металлуудыг (Ag, Ni г.м) полимер ЦСД хамгаалагч материалд нэмэлтээр ашиглаж болох боловч эдгээр нь их хэмжээгээр орж (>50 жин %) байж бүтээмжийг нэмэгдүүлдэг учир үнэ өндөр болох дутагдалтай талтай [2].

Бидний судалгааны объект соронзон шинж чанартай ферритын бөөмүүдийг композит материалд ашиглах нь электрон болон биоанагаах ухааны технологид чухал ач холбогдолтой [7]. Ферритийн хувьд сонирхол ихээр татаж байгаа нь цахилгаан соронзон цацрагаас (зуугаас мянган МГц хүртэлх радио давтамж) хамгаалах, бүрэх, тэр дундаа зөөврийн төхөөрөмжийг хамгаалахад ашиглагдах боломжтой холбоотой юм. Ферритүүдийн шинж чанар нь гарган авсан синтезийн арга, найрлага, бүтэц, морфологи, бөөмийн хэмжээ зэргээс ихээхэн хамаардаг. Мөн полимер бүхий композит материалын шинж чанар нь фазын нэгэн төрөл байдал, бөөмийн нэгэн жигд тархалт зэргээс маш ихээр хамаардаг байна. Иймд полимерийн гадаргуу дээр соронзон бөөмийг нэгэн жигд тархалттайгаар суулгаснаар хүчтэй интерфэйс бүхий композит нэгдэл гарган авах нь зайлшгүй шийдвэрлэх асуудал юм.

Соронзон материалаар бид шпинель бүлгийн магнийн феррит $MgFe_2O_4$ -ийг сонгон авч судалсан [8]. Шпинелийн кристал бүтцийн онцлог нь бүтцийн томьёо $(Mg_{1-x}Fe_x)[Mg_xFe_{2-x}]O_4$ бөгөөд дугуй хаалт болон дөрвөлжин хаалт нь тетраэдрин

(A)- катионы байрлалыг, октаэдрин [B] катионы байрлалыг тус тус илэрхийлнэ. х нь катионуудын түгэлтыг тодорхойлдог инверсийн зэрэг юм. Магнийн феррит нь ферросоронзон шинж чанартай бөгөөд инверсийн зэрэг нь синтезийн температур ба хөргөлтийн хурдаас хамаардаг [9].

Полимер материалаар хэт өндөр молекул жинтэй поли-этилен (UHMWPE-Ultrahigh molecular weight polyethylene)-ийг сонгон авсан ба энэ нь композит материалд холбогч (binder) болгон ашигладаг полимер материалуудын дунд онцгой байр эзэлдэг [10]. Энэ нь түүний механик шинж чанар (бат бэх), химийн эсэргүүцэл (in aggressive env) зэрэг өвөрмөц физик-химийн шинж чанаруудтай холбоотой. Тэгвэл UHMWPE дээр суурилсан композит материалын физик-химийн шинж чанарыг атом, молекул, супермолекулын бүтцээр нь тодорхойлж удирдах боломжтой.



Зураг 3. UHMWPE/феррит материалын ЦСД-оос хамгаалах механизм

Композит материалыг синтезлэн гарган авах хамгийн үр дүнтэй аргуудын нэг нь механик химийн аргаар идэвхжүүлэх явдал юм. Механик химийн аргаар идэвхжүүлэх үед дараах процессууд явагддаг: Идэвхит гадаргуугийн талбайг ихэсгэх, гинжин хэлхээний холбоо тасарсны улмаас шинэ молекул бүтэц үүсэх г.м

Энэхүү ажлаар бид цахилгаан соронзон долгионоос хамгаалагч материалд зориулан хэт өндөр молекул жинтэй полиэтилен дээр суурилсан феррит композит нэгдлийг механохимийн аргаар синтезлэн гарган авч, материалын бүтэц, морфологи, соронзон шинж чанарт магнийн ферритын бөөмс хэрхэн нөлөөлж байгааг электрон микроскоп, рентген туяаны дифракц, Мёссбауэр, FTIR спектроскопи ашиглан судаллаа.

Энэхүү арга нь өнөө цагт шинжлэх ухаан технологийн төрөл бүрийн салбарт өргөн хэрэглэгдэж байна [13, 14]. Орчин үед 40 гаруй химийн элементийн хувьд Мессбауэрын эффект ажиглагддаг болохыг тогтоогоод байна (Зураг 4).

Цөмийн резонансын флуоресценцийн үзэгдлийг атомын спектр судлалын талбарт аль эрт хэрэглэдэг, мэддэг байжээ. Системийн шилжилтийн үед, жишээлбэл атом өдөөгдсөн төлөв В –ээс үндсэн төлөв А-д шилжихдээ ν_i давтамжтай фотон цацаргадаг. Мөн фотон ямар нэг биетрүү (бай уруу) нэвтрэх үедээ тухайн биетийн үндсэн А төлөвт орших атомд шингэснээр, уг атом нь өдөөгдсөн төлөв болох В уруу шилжилт хийх бөгөөд хэсэг хугацааны дараа уг атом үндсэн төлөв А уруу ν давтамжтай фотоныг цацарган шилжинэ.

Тэгвэл атомын цөмүүд нь дискрет энергийн төлөвүүдтэй учир энэ нь цөмийн резонансын флуоресценц явагдах нөхцөл болж өгдөг байна. Мессбауэрийн спектроскопи нь энэхүү бидний мэдэх флуоресценцийн үзэгдэл дээр суурилдаг байна. Ихэвчлэн ^{57}Co (хагас задралын үе: 270 өдөр) изотопийн задралаар үүссэн тогтвортой бус ^{57}Fe –ийн (энэ үед гамма цацраг, бусад төрлийн энергүүд ялгарна) шинж чанарт үндэслэдэг байна [15].

Цөм цацаргалт хийх, энерги ялгаруулах үед энерги хадгалагдах хууль ёсоор эсрэг чиглэлд импульсын хуулиар тухайн цөм тийрэгдэх буюу шилжилт хийдэг (галт зэвсэг болох бууг цөм гэж үзвэл сум – гамма цацрагаар буудах үед буу хойшоо тийрэх үзэгдэлтэй адилтгаж болно). Энергийг илэрхийлвэл [16]:

$$E_\gamma = E_i + E_R, \quad (14.5)$$

$$E_R = \frac{E_\gamma}{2mc^2}. \quad (14.6)$$

Энд E_γ - цацаргасан гамма цацрагийн энерги, E_i - цөмийн шилжилтийн энерги, E_R - тийрэлтийн энерги, m – цацаргалт хийх цөмийн масс болно.

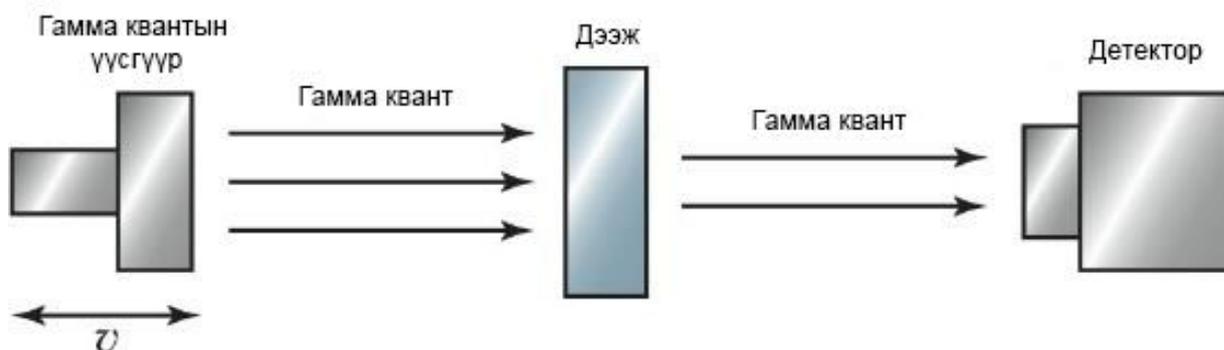
Гамма цацраг цөмд шингээгдэх процессын үед тухайн цөмийг өдөөгдсөн төлөв уруу шилжүүлж байгаа энерги нь E_R -ээр багасч байгааг дээрх томъёоноос харж болно. Их энергитэй цөмийн цацаргалтын хувьд энэхүү энергийн алдагдлын хэмжээ ихэсч цөмийн резонанс ажиглагдахгүй.

Хатуу биеийн хувьд цөм кристалл торд бэхлэгдэх/байрших учир энэхүү тийрэлтийн энерги $E_R \rightarrow 0$ (m нь бүхэл торын масс болно) буюу нийт торын хувьд хэлбэлзэл (фонон) үүсгэдэг. Энэ үзэгдэл явагдах магадлалыг бид f гэж үзвэл энэ нь

тийрэлт явагдахгүйгээр гамма цацрагийн энергийг цөм шингээх магадлалыг илэрхийлнэ. Мессбауэрийн спектроскопи нь f магадлал өндөр байх үзэгдэлд суурилж хэмжилт хийдэг. ^{57}Co атом ^{57}Fe уруу задрахад үүссэн гамма цацраг нь судлах бодисын цөмийн ойролцоо орших Fe ионуудад $E_R \rightarrow 0$ байх нөхцлөөр шингээгддэг. Өөрөөр хэлбэл тухайн цөмөөс цацарсан гамма цацраг нь ижил төрлийн изотоп агуулсан дээжид резонансаар шингээгдсэн тоо хэмжээг Мессбауэрийн спектроскопи хэмждэг. Үелэх системийн (Зураг 5) 40-өөс илүү элементэд энэхүү Мессбауэрийн үзэгдэл ажиглагддаг (өдөөгдсөн төлвийн амьдрах хугацаа $(10^{-6} - 10^{-11})$ сек, шилжилтийн энерги $(5 - 180$ кЭв)) боловч хамгийн тохиромжтой нь ^{57}Fe элемент юм. Хэрэв $E_\gamma \leq 5$ кЭв бол резонансын бус шингээлт, $E_\gamma \geq 180$ кЭв бол тийрэлтийн энерги ихэсч үүссэн резонансыг устгадаг. Энэ нөхцлийн улмаас Мессбауэрийн спектроскопиор судалгаа хийгддэг хориодхон элемент л байдаг байна. Үүнд: Fe, Sn, Sb, Te, I, Au, Ni, Ru, Ir, W, Kr, Xe газрын ховор элементүүд г.м. багтана.

E_e энергийн өндөр түвшнээс E_g үндсэн төлөв рүү шилжих магадлал буюу эрчим нь хамгийн боломжит магадлал болох E_0 шилжилтийн энергид төвөлсөн спектрийн шугам өгдөг. Өдөөгдсөн төлвийн амьдрах хугацаа нь $\Gamma \cdot \tau = \hbar$ томъёогоор энэхүү резонанс муруйг тодорхойлоход чухал үүрэгтэй оролцдог ба $10^{-11} \geq \tau \geq 10^{-6}$ сек байна. Энд τ – өдөөгдсөн төлвийн амьдрах хугацаа, Γ – энергийн түвшний өргөн (ΔE). Цацрагийн квант онол ёсоор энергийн түгэлт дараах байдлаар илэрхийлэгдэнэ:

$$I(E) = \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}.$$



Зураг 5. Мессбауэрийн спектроскопийн ажиллах зарчим

Мессбауэрийн спектроскопи нь хатуу дээжийг гамма цацрагийн шууд тусгал доор байрлуулж, дээжээр нэвт шингэж гарсан гамма цацрагийн эрчмийг детектор ашиглан хэмжих зарчмаар ажилладаг¹. Мессбауэрийн спектроскопийн хэмжилтийн үед γ -квантын үүсгүүр (эсвэл шингээгч) v – хурдтайгаар хөдөлж байдаг (Зураг 6). Доплерын эффектийн улмаас γ -квантын энерги нь $\Delta E = E_0 v/c$ (E_0 –резонанс шилжилтийн энерги, c -гэрлийн хурд).

Өмнө дурьдсанчлан гамма цацрагийг ялгаруулж буй үүсгүүрийн атом тэдгээрийг шингээж авсан дээж дэх атомуудтай ижил изотоптой байх ёстой. Эдгээр энергийн шилжилтүүд нь өчүүхэн бага ($\mu\text{эВ}$ –ээс ч бага) байдаг ч зарим радио идэвхит цөмүүд дэх маш нарийн спектрийн шугамтай гамма цацрагууд нь шингээлтийн хувьд илэрхий өөрчлөгдөх боловч маш бага энергийн шилжилт ажиглагддаг. Иймээс хоёр цөмийг резонанст оруулахын тулд гамма цацрагийн энергийг бага зэрэг өөрчлөх хэрэгтэй болох бөгөөд практик дээр үүнийг үргэлж Доплерийн эффектийг (шилжилтийг) ашиглан гүйцэтгэдэг. Мессбауэрийн спектроскопийн хувьд үүсгүүрийг шугаман хурдасгуур ашиглан тодорхой мужид хурдасгах замаар доплерийн эффект үүсгэж, гамма цацрагийн энергийг өөрчилдөг. Тухайлбал Fe^{57} хувьд ± 11 мм/сек (1 мм/сек-д 48.075 нэВ энерги харгалзана) байх жишээтэй²:

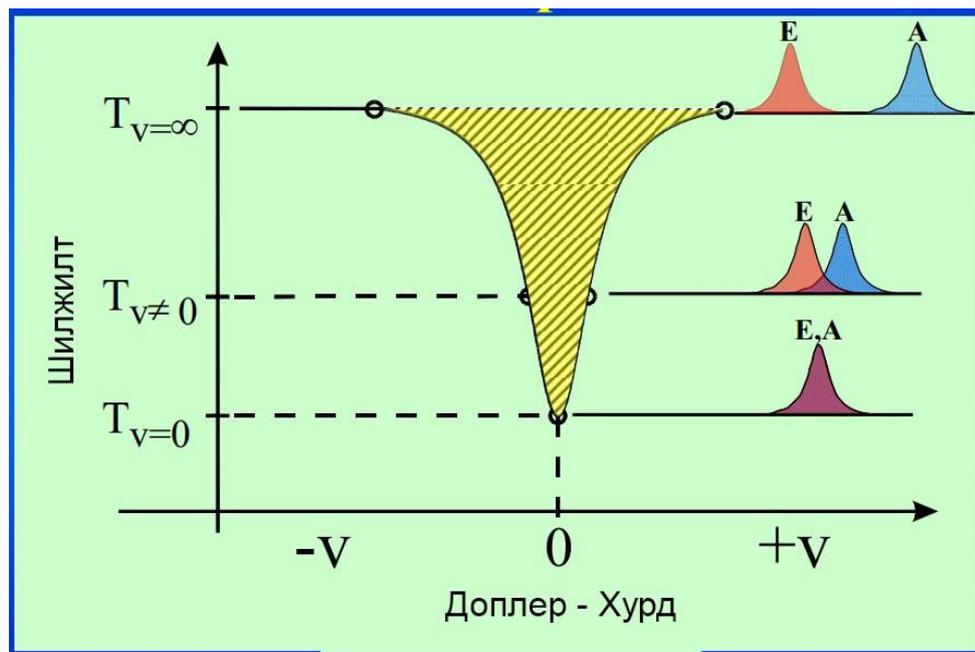
$$E(v) = E_0(1 + v/c).$$

Энд v – харьцангуй хурд, c – гэрлийн хурд.

Доплерийн эффектийн үр дүнд хэмжилтийн спектрт гамма цацрагийн эрчим нь үүсгүүрийн хурдны функцээр илэрхийлэгдэнэ. Дээжийн резонансын энергийн түвшинд харгалзах хурдаар гамма цацраг шингээгдэх учир спектрийн эрчим буурч, шингээлтийн пикүүд буюу урвуу спектр үүснэ. Эдгээр шингээлтийн пикийн тоо, байрлал, эрчмээс бид шингээгч цөмийн дотоод орчны мэдээллийг авснаар тухайн дээжийг тодорхойлдог байна. Зураг 7-д E цацаргалт болон A шингээлтийн шугамуудын давхацлын улмаас үүссэн резонанс шингээлтийн спектрийг үзүүлэв.

¹ Физическая энциклопедия М, 1990

² Gütlich, J. M.; The Principle of the Mössbauer Effect and Basic Concepts of Mössbauer Spectrometry, 2011

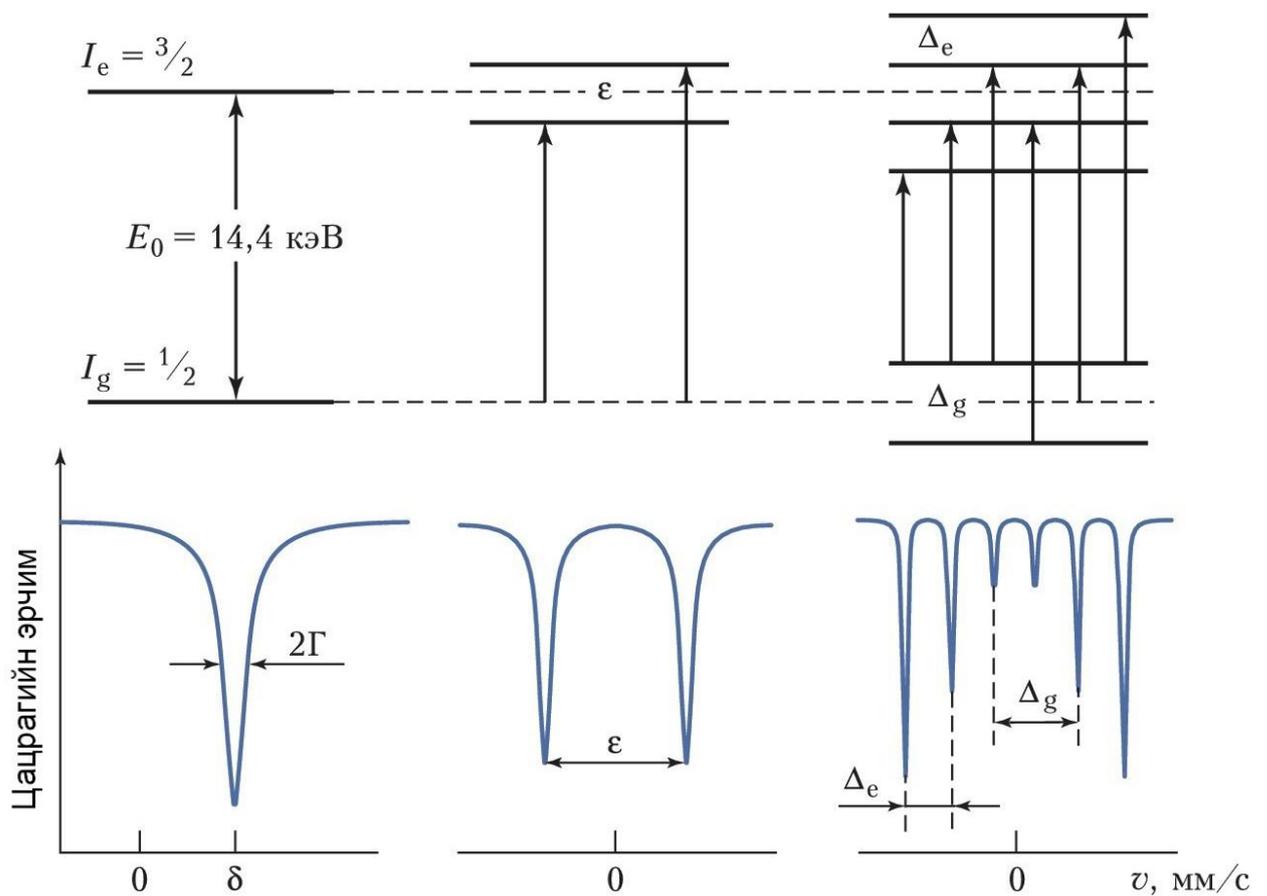


Зураг 6. Мессбауэрийн спектр

Хэрвээ цацаргалтын болон шингээлтийн цөмүүдийн дотоод орчин нь ялгаатай үед цөмийн шилжилтийн энерги нь мөн ялгаатай байх буюу энгийнээр илэрхийлвэл нэвтрэлтийн спектрт шилжилт, хуваагдлууд (doublet, sextet) ажиглагддаг байна. Цөмийн орчин гэдэг нь электроны тоо (Fe^0 , Fe^{2+} , Fe^{3+}), координатын тоо, байршлын симметр, соронзон эрэмбэ гэх мэт хүчин зүйлсээс хамаарч байдаг³.

Мессбауэрийн спектрийн хэлбэр нь цөмийн шинж чанар болон цөм нь дотоод цахилгаан, соронзон оронтой харилцан үйлчлэх үйлчлэл, мөн судалж байгаа материалын соронзон орон, тэдгээрийн хэмжээнээс хамаардаг. Тухайлбал, цөм болон цөмийг хүрээлэх электронуудын цахилгаан статик оронгийн харилцан үйлчлэлийг дурьдаж болно.

³ J.L.Bishop, J.F.Bell, J.F.Moersch, Remote Compositional Analysis, 2020



Зураг 7. Мессбауэрийн спектрийн төрлүүд

Мессбауэрийн спектроскопи нь гурван төрлийн цөмийн харилцан үйлчлэлийг бүртгэдэг. Үүнд:

1. Үүсгүүр болон шингээгчийн электроны нягтын зөрүүгээс үүссэн изомерийн шилжилт,
2. Ойролцоо орших электронуудын цахилгаан оронгийн градиентийн улмаас үүссэн квадраполийн хуваагдал (quadrupole),
3. Соронзон оронгийн улмаас үүсдэг Зееманы соронзон хуваагдал.

Изомерын шилжилт (δ) (мөн заримдаа химийн шилжилт гэж нэрлэдэг) нь түүний электронууд шилжсэний улмаас цөмийн резонансын энерги өөрчлөгдсөнийг тодорхойлсон харьцангуй хэмжүүр юм. Цөм дэх электрон цэнэгийн нягтаас хамааран бүхэл спектр нь эерэг эсвэл сөрөг чиглэлд шилждэг. Энэхүү өөрчлөлт нь тэг биш магадлалын s тойрог замын электрон ба тэдгээрийн тойрог замд байрладаг тэг биш эзэлхүүний цөмүүдийн хоорондох электростатик хариу урвалын улмаас үүсдэг. Зөвхөн s тойрог замд байрлах электронууд нь цөмд тэг биш байх магадлалтай байдаг. Гэхдээ p , d , f электронууд нь халхлагдах (экрэнчлагдах) эффектийн улмаас s электроны нягтад нөлөөлж болно.

Квадруполын хуваагдал (ΔE_Q) нь цөмийн энергийн түвшин ба эргэн тойрон дахь цахилгаан оронгийн градиент хоорондын харилцан үйлчлэлийн улмаас үүсдэг. Бөмбөрцөг бус цэнэгийн хуваарилалттай мужуудын бөөгнөрөлүүд, жишээлбэл спин квант тоо (I) $1/2$ -ээс их байгаа бүх зүйлс цөм дөрвөлсөн моменттой байж болно. Энэ тохиолдолд тэгш бус цахилгаан орон (тэгш бус электрон цэнэгийн хуваарилалт эсвэл лигандын зохион байгуулалтаар үүсгэгдсэн) нь цөмийн энергийн түвшин хуваагдахад хүргэдэг. Квадруполын хуваагдалтыг ашиглан исэлдэлтийн төлөв, спиний төрх байдал, симметрийн хавтгайнууд ба лигандуудын бүтэц зохион байгуулалтыг тодорхойлж болдог.

Соронзонгийн хуваагдал (hyperfine splitting) нь Зееманы үзэгдлийн нөлөөгөөр үүсдэг ба цөм болон түүний эргэн тойрны бусад соронзон оронгийн харилцан үйлчлэлийн үр дүнд бий болдог. Квант g - фактор гэж нэрлэгдэх цөмийн хэсгүүдийг илэрхийлэх пик хоорондын зайгаар соронзон оронг тодорхойлдог. Ферросоронзон материалд тэр тусмаа түүний дотор агуулагдах олон төмрийн нэгдлүүдэд байгалийн болон дотоод соронзон орон нэлээд хүчтэй давамгайлдаг бөгөөд эдгээрийн нөлөө нь Мессбауэрийн спектруудэд хүчтэй илэрдэг.

Энэхүү төслийн хүрээнд хийгдсэн Мессбауэрийн судалгааг MS1104Em спектрометр ашиглан $^{57}\text{Co}(\text{Rh})$ үүсгүүрээр дээжийн бүтэц, соронзон төлөвийг тасалгааны температур (300 K)-д тодорхойлсон. Спектрийн шинжилгээг SpectrRelax програм хангамж ашиглан хийсэн. Бүх спектрийг стандарт $\alpha\text{-Fe}$ -тэй харьцуулан тайлбарлав.

ХОЁР. UHMWPE/ФЕРРИТ НЭГДЛИЙН СУДАЛГАА

2.1. Туршилтын хэсэг

Нунтаг полиэтилен (UHMWPE) (Ticona GmbH-Герман, бөөмийн хэмжээ 100-160 мкм, молекул масс $4 \cdot 10^6$ г/моль) болон магнийн ферритын ($MgFe_2O_4$) бөөмсийг ашиглан механик идэвхижүүлэлтийн аргаар судалгааны дээжийг гарган авсан. Композит материал үүсгэх хольцыг дараах харьцаагаар сонгосон: 85 жин.% UHMWPE — 15 жин.% $MgFe_2O_4$.

Судалгааны дээжүүдийг дөрвөн төрлийн аргаар гарган авав: Хатуу төлөвийн арга (S1), Тунадасжуулах (S2), Золь-гель арга (S3) ба Механик синтез (S4).

Хатуу төлөвийн аргын синтез (S1) нь нунтаг (MgO ба Fe_2O_3) оксидыг стехиометрийн харьцаагаар сонгон авч нэг цагийн турш бөмбөлгөн нунтаглагчаар холино, дараа нь $1100^\circ C$ температурт нэг цагийн турш шатаана. Бэлэн болсон нэгдлийг бөмбөлгөн тээрэмд нунтаглана (эргэлтийн хурд 600 эрг/мин байсан).

Тунадасжуулах аргад (S2) нэрмэл усанд $Mg(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ ба $Fe(NO_3)_2 \cdot 9H_2O$ -нитратуудыг нэмнэ. 6 моль NaOH уусмал нэмж дараа нь нэрмэл усаар pH-ийг тохирох хэмжээнд хүртэл багасгана. Дараа нь гарган авсан нунтагыг $1100^\circ C$ -ийн температурт шатаана.

Золь-гелийн синтезийг (S3) магнийн нитрат $Mg(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$, 0.02 моль, 0.03 моль төмрийн нитрат $Fe(NO_3)_2 \cdot 9H_2O$ ашиглан усан орчинд явуулсан. Металлын нитратууд, нимбэгийн хүчлийн харьцаа 2:1 байхаар сонгон авав. Үүссэн гелийг дулаанаар боловсруулалтад $400^\circ C$ температурт 1 цагийн турш явуулна. Эцсийн шатаалтыг $1100^\circ C$ температурт гүйцэтгэв.

Механохимийн синтезийг (S4) өндөр цэвэршилттэй MgO ба Fe_2O_3 оксидыг бөмбөлгөн нунтаглагч ашиглан агаарт 2 цаг нунтаглаж, дараа нь $1100^\circ C$ -т шатаан гарган авна.

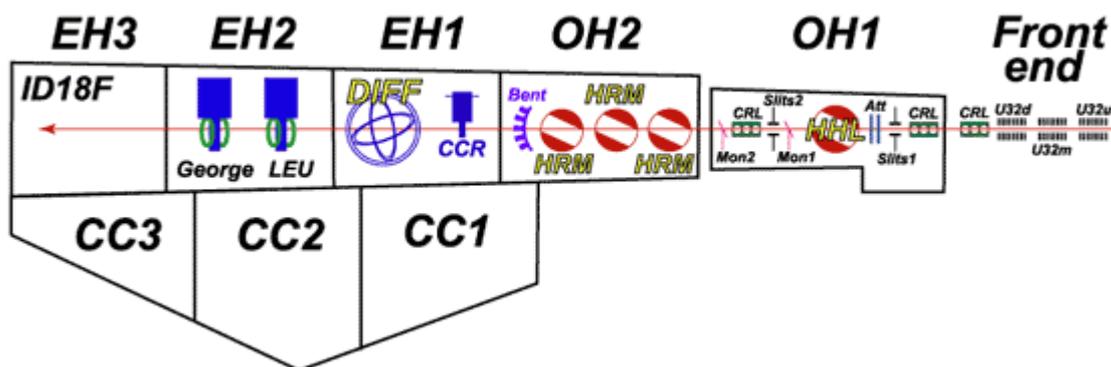
Механохимийн идэвхжүүлэлтийг аргоны орчинд бөмбөлгөн тээрэмдлэгийг 2 минутын турш гүйцэтгэсэн. Ган бөмбөлөгний диаметр - 5 мм, бөмбөгний жин - 200 г, судалгааны дээжийн жин 10 г, эргэлтийн хурд нь 1000 эрг/мин байв. Механохимийн синтезээр гарган авсан нэгдлийг UHMWPE/S1, UHMWPE/S2, UHMWPE/S3, UHMWPE/S4 тус тус тэмдэглэв.

Рентген туяаны дифракцийн (XRD) хэмжилтийг PIXcel3D детектороор тоноглогдсон PANalytical Empyrean нунтаг дээжний дифрактометр ашиглан хийв

(Брагг-Брентано геометр, $\text{CuK}\alpha$ -цацраг, Ni шүүлтүүр). ICDD PDF2 мэдээллийн санг ашиглан дээжийн фазыг тодорхойлов.

Нейтрон дифракц нь бодисын цөмтэй үйлчилдэг бөгөөд ялгах чадвар өндөр учир шпинел ферритийн бүтцийн нарийвчилсан судалгаанд ашиглахад нэн тохиромжтой арга юм. Нейтрон дифракцийн хэмжилтийг ОХУ-ын Дубна хотын Цөмийн шинжилгээний нэгдсэн институтын IBR-2 реакторын HRFD (өндөр нарийвчлалтай Фурье дифрактометр) багаж дээр хийсэн.

Мёссбауэрийн спектрийн (MS) судалгаагаар дээжийн бүтэц, соронзон төлөвийг цацрагийн $\text{Co}^{57}(\text{Rh})$ үүсгэвэрээр MS1104Em ашиглан хэмжилтийг тасалгааны температур (300 K)-д хийсэн. Синхротрон цацраг бүхий Мёссбауэрийн спектрийн хэмжилтийг ESRF (Европын синхротрон цацрагийн байгууламж, Гренобль, Франц) дахь Цөмийн резонансын ID18 цацрагийн шугамын Синхротрон Мёссбауэрийн үүсгэвэр (SMS) ашиглан гүйцэтгэсэн.



Зураг 1. ESRF (Европын синхротрон цацрагийн байгууламж, Гренобль, Франц) дахь Цөмийн резонансын ID18 хэмжилтийн суваг

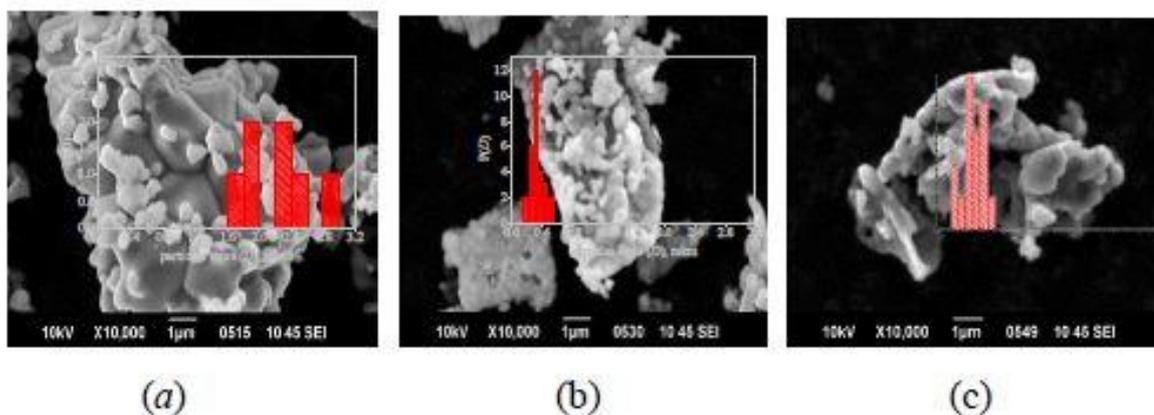
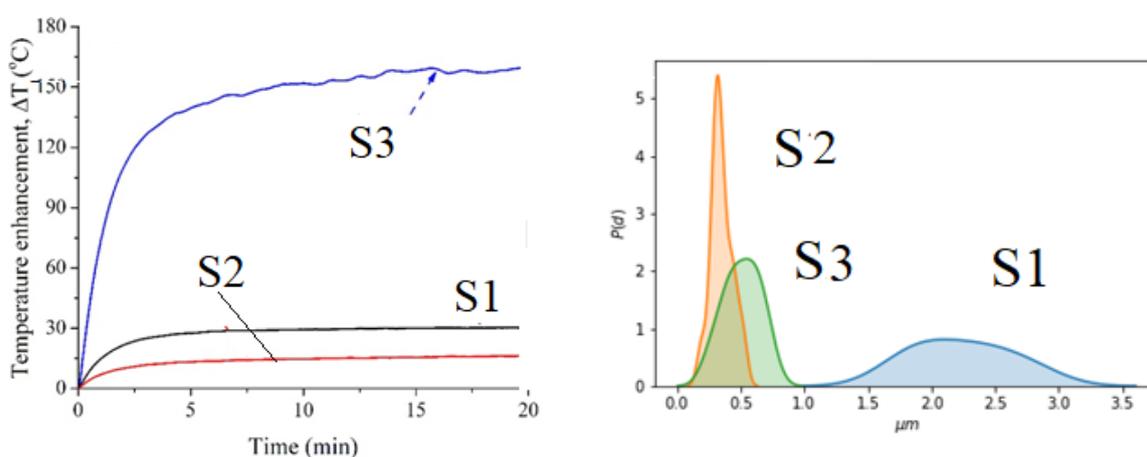
Энэ нь цацраг идэвхт үүсгэвэр бүхий ердийн Мёссбауэр спектроскоптой харьцуулахад SMS нь зүү шиг нарийн туяанд 100% ойлтгүй байх ба шугаман туйлширсан цацрагийг ашигласнаар жижиг цэгт төвлөрөхөд илүү хялбар байдаг. Дээжийг гели хийн солилцооны хөргөлттэй крио-соронзон системд суурилуулж, 4 К хэм хүртэл хөргөв.

Хэт улаан туяаны спектроскопи (FTIR) судалгааг Nicolet iS10 FTIR спектрометр ашиглан $4000\text{-}400\text{ см}^{-1}$ долгионы уртын мужид (АНУ-ын Thermo Scientific) гүйцэтгэв. Спектрийн шинжилгээг дундаж функцийг ашиглан фазыг Нортон-Веагер болон Merz аргаар тогтоов. Тасалгааны температурт соронзон шинж чанарын хэмжилтийг (соронзон гистерезисын гогцоо ба тэдгээрийн параметруудийг) VSM-3900 дээр 2Т хүртэлх соронзон оронд гүйцэтгэв.

2.2. Үр дүн, хэлэлцүүлэг

Эхлээд суурь материал болох ферритийн бүтэц шинж чанарын судалгааг гүйцэтгэсний дараа сайжруулсан UHMWPE/S1, UHMWPE/S2, UHMWPE/S3, UHMWPE/S4 дээжүүдийг харьцуулан судалсан.

Гурван өөр аргаар синтезлэн гарган авсан $MgFe_2O_4$ феррит бөөмүүдийг 20 минутын турш хувьсах гүйдлийн соронзон оронд оруулснаар ялгарах дулааныг хэмжиж Зураг 2а-д үзүүлэв. Хамгийн их дулаан ялгаруулсан дээж ($\Delta T = 158^\circ C$) нь зол-гель аргаар бэлтгэсэн S3 дээж байсан. Дээж S2 нь хамгийн бага ($\Delta T = 15^\circ C$) дулаан ялгаруулах чадамжтай байв. S1 дулаан ялгаруулах чадамж нь $\Delta T = 30^\circ C$ байна.

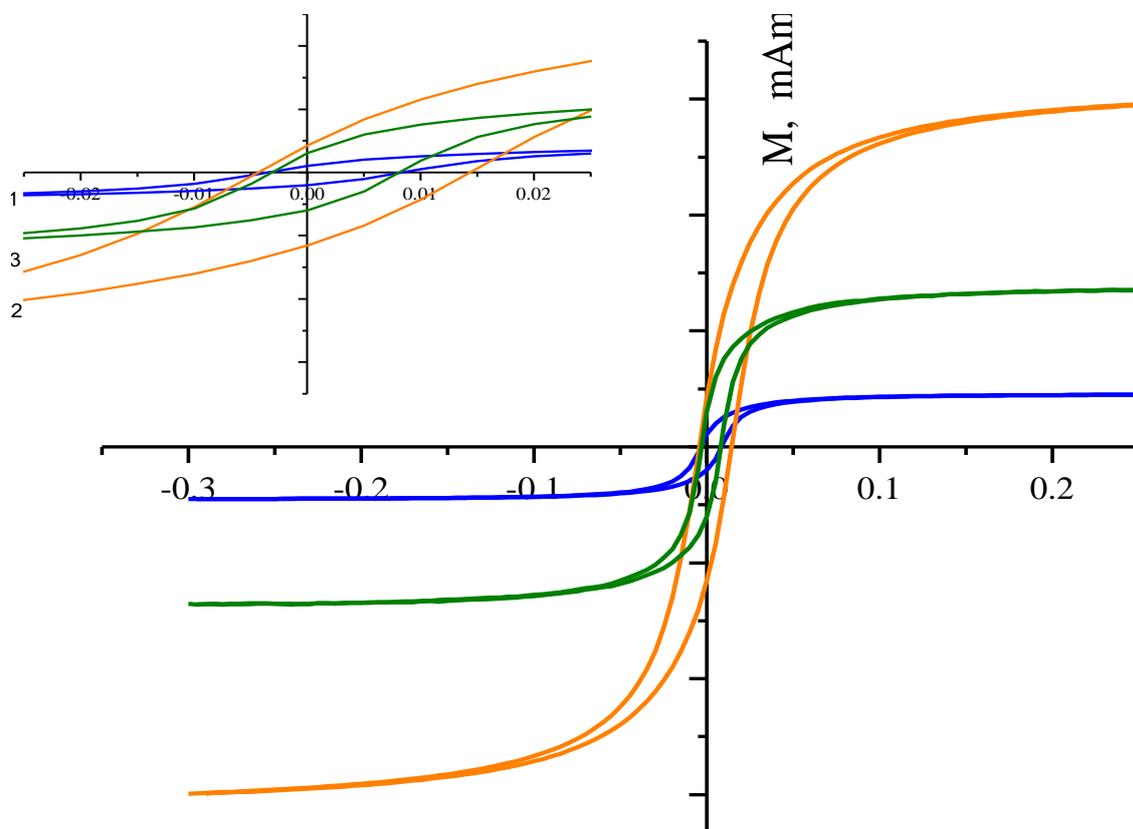


Зураг 2. Төрөл бүрийн аргаар бэлтгэсэн $MgFe_2O_4$ -ийн дулаан ялгаруулах чадамж ба мөхлөгийн хэмжээ. S1 (a), S2 (b), S3 (c) дээжийн SEM зураг

Синтезлэн гарган авсан дээжүүдийн микро бүтэц болон морфологийн онцлогийг тогтоохын тулд SEM шинжилгээг хийсэн. Quanta 3D FEG электрон микроскопийг ашиглан хэмжсэн бөгөөд IMAJEI програм ашиглан тодорхойлов (Зураг 2).

Соронзон дээжүүдэд бөөгнөрөл үүссэн ба жигд бус бүтэц ажиглагдсан. Нэмэлтээр хольцын жижиг хэсгүүд илэрсэн байна. Хольцууд нь жижиг хэмжээтэй бөгөөд дээжин дээр эмх замбараагүй тархсан байна. EDS шинжилгээгээр тэдгээр нь төмрийн исэл Fe_2O_3 болохыг тогтоов. SEM зургуудаас золь-гелийн аргаар гаргаж авсан S3 болон S2 дээжүүдийн бөөмийн хэмжээний дундажаар $D \sim 0.3$ ба $0.4 \mu m$ буюу хамгийн бага байсан. S1 дээжийн хувьд бөөмийн дундаж хэмжээ $D \sim 2,2$ байсан ба жижиг бохирдол хэсгүүд илэрсэн.

Бөөмийн хэмжээнээс хамаарч соронзон шинж чанар хэрхэн өөрчлөгдөж буйг тодруулахын тулд соронзон шинж чанар, домены бүтцээс хамааруулан FORC диаграммын хэмжилтийг гүйцэтгэж гистерезисийн гогцоо байгуулсан (Зураг 3). Гарган авсан дээжүүд нь бүгд феррисоронзон шинж чанартай байна. Хэмжилтийн үр дүнг боловсруулж соронзон параметрууд болох соронзон ханалт (M_s) ба коэрцитив хүч (H_c), гистерезисийн алдагдлын (Ph) утгуудыг феррит В-Н гогцооноос Стейнмецийн тэгшитгэлийг ашиглан тооцоолж 1-р хүснэгтэд нэгтгэн үзүүлэв.



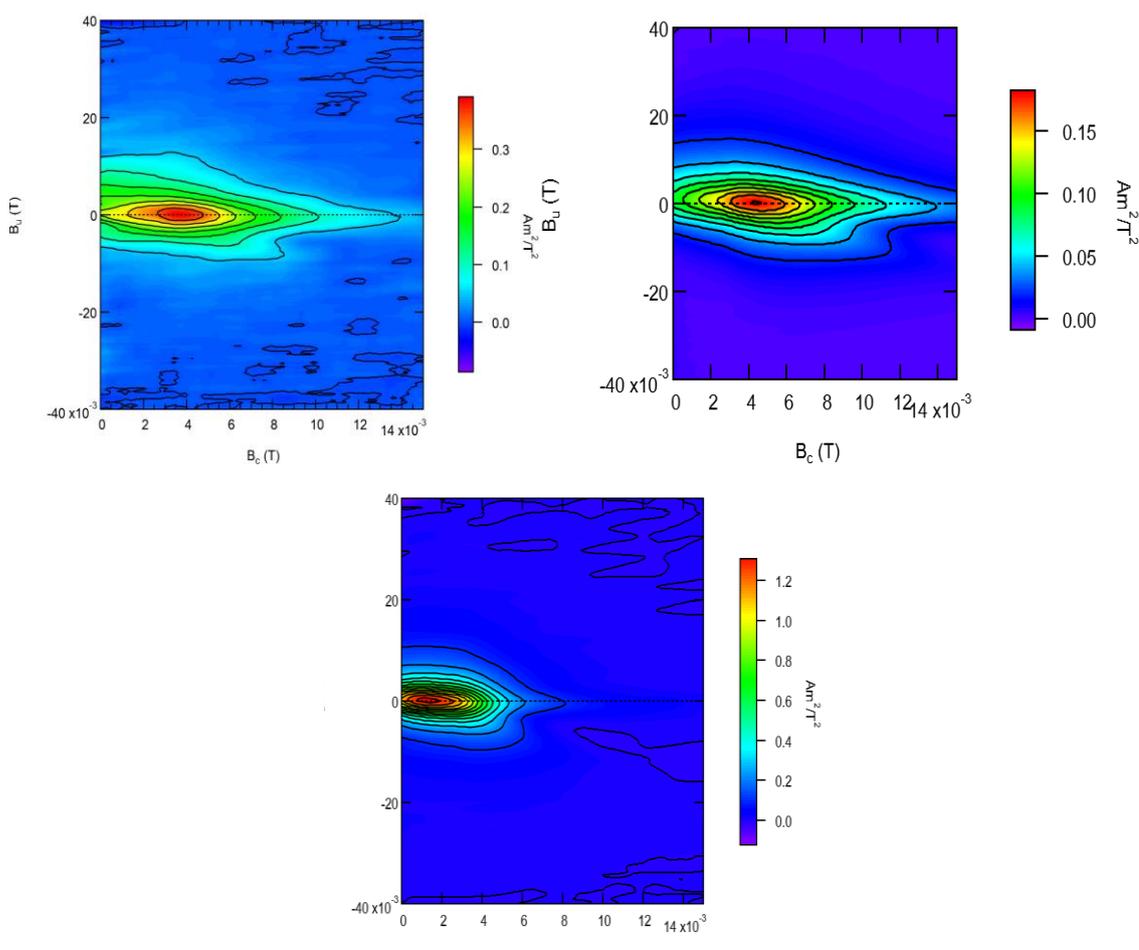
Зураг 3. Соронзон гистерезисийн гогцоо. Улбар шар – S2, ногоон – S3, хөх – S1.

Ерөнхий тохиолдолд температурын өсөлт нь гистерезис алдагдлын утгын өсөлтөөс хамаардаг. Гэвч хатуу урвалын аргаар гарган авсан дээжийн гистерезис

алдагдлын утга (Дээж S1) нь энэ хамаарлыг дагахгүй байгаа бөгөөд энэ нь $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (26%) хольцтой холбоотой байж болох юм (Фазын анализын үр дүнгээс). Энэ $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ нь ферритүүдийн дулаан үүсгэх чадварыг бууруулдаг.

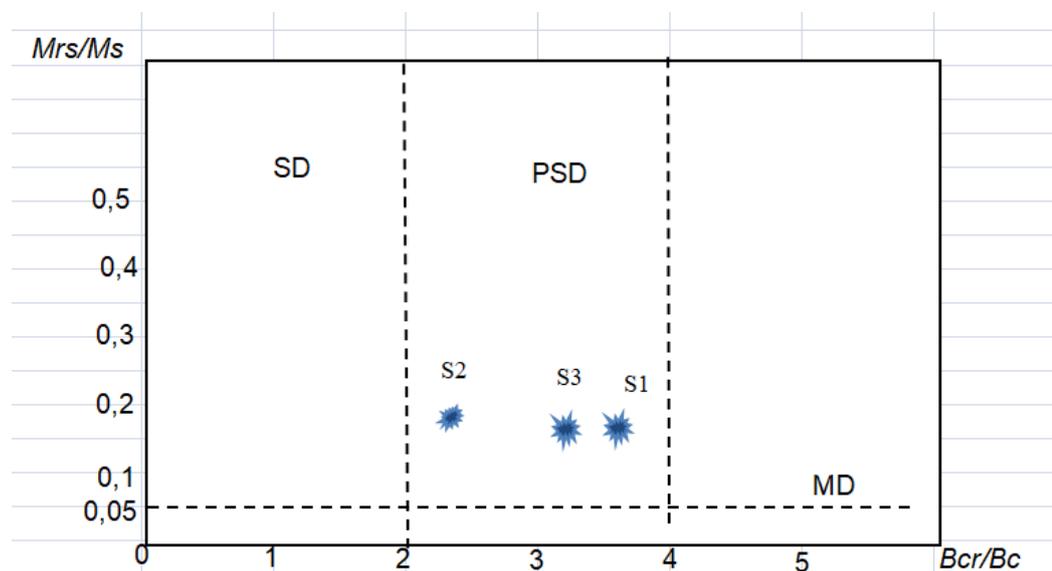
Хүснэгт 1. Феррит дээжийн соронзон моментууд (M_{net}), коерцитив(H_c), гистерезисийн алдагдал(Ph), температурын өсөлтийн (ΔT) утгууд.

Parameters	Sample S1	Sample S2	Sample S3
H_c , A/m	363.8	25.6	428.9
P_h , W/kg	1.322	0.054	2.613
ΔT , °C	30.2	16.1	158.4
M_{net} , μB	0.84	1.49	1.19



Зураг 4. Ялгаатай аргуудаар гарган авсан дээжүүдийн (S1-S3) FORC диаграмм

FORC диаграмм нь коэрцетив орон (H_c) болон соронзон бөөмсийн харилцан үйлчлэлийн тархалтыг харуулдаг. Зураг 4-өөс харахад судлагдсан дээжүүдийн FORC график нь хоорондоо төстэй боловч фазын бүтэц болон түгэлттэй холбоотой өөрийн өвөрмөц шинж чанартай байна. Тухайлбал FORC диаграммаас үзэхэд S1 дээжийн феррисоронзон фаз нь өндөр коэрцетивтой боловч бага соронзжилттой болох нь харагдаж байна. S2, S3-ийн FORC диаграммууд нь харилцан үйлчлэл бүхий жижиг хэсгүүдийн төлөв байдлаас хамаарна [48]. Ханалтын болон үлдэгдэл соронзжилтын харьцаа ($R = M_{rs}/M_s$) ба коэрцетив хүч болон үлдэгдэл коэрцетив хүч (H_{rs}/H_c) харьцааг үндэслэсэн. Соронзон ханалт (M_s) нь Брауны $H_c = 2K_1/\mu_0 M_s$ харьцаатай шууд хамааралтай бөгөөд бидний туршилтын өгөгдөл нь энэ хамааралтай тохирч байна [51]. Бүх дээжийн хувьд ханалтын болон үлдэгдэл соронзжилтын харьцаа $R \sim 0.18$ буюу стандарт утга 0.5-аас бага гарсан нь тэдгээрийн изотроп шинж чанарыг илтгэнэ. Соронзон домены төлөвийг Дей-Дунлопын (Day-Dunlop) график (Зураг.5)-ыг ашиглан тодорхойлсон. Ингэхэд гистерезисийн муруйгаас тодорхойлсон утгууд нь бидний гарган авсан дээжийн соронзон бөөмсийн хэмжээ нь псевдо-сингл доменд хамаарч байгааг харуулж байна.



Зураг 5. Төрөл бүрийн аргаар гарган авсан дээжүүдийн соронзон бөөмийн хэмжээг тодорхойлох Дей-Дунлопын диаграмм

Төрөл бүрийн аргаар гарган авсан ферритүүдийн нейтроны дифракцийн хэмжилтийг гүйцэтгэж кристал болон соронзон бүтцийг тодорхойлов. Хэмжилтийн өгөгдлөөс $a \approx 8.4 \text{ \AA}$ торын тогтмолтой $Fd3m$ (No. 227) куб бүтэцтэй, феррисоронз нэгдэл болохыг тогтоолоо. Энэ нь бидний өмнөх соронзон шинж чанарын

хэмжилтийн үр дүнг бататгаж байна. Ритвельдийн боловсруулалтын үр дүнг Хүснэгт 2-т жагсаав. Хэмжилтийн утгууд бусад ажлын үр дүнтэй ойролцоо байна. Зольгелийн аргаар бэлтгэсэн дээж S3 нь цэвэр куб шпинель бүтэцтэй байна. Синтезийн процессын улмаас S1 ба S2 дээжинд $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (R-3c огторгуйн групп бүхий ромбоэдр бүтэц), S1 дээжид MgO (Fm-3m огторгуйн групп бүхий куб бүтэц) нэмэлт фазуудын зарим пикүүд илэрсэн.

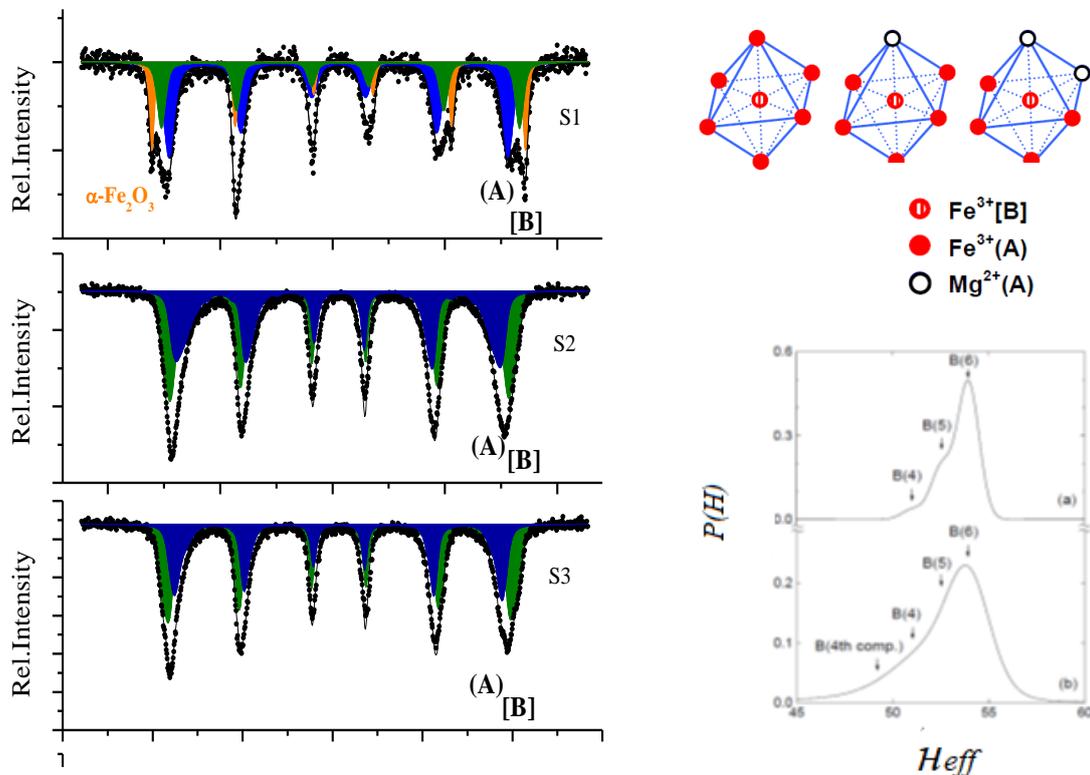
Ферритын инверсийн зэрэг буюу дэд торууд дээрх катионуудын түгэлт нь ферритүүдийн шинж чанарт нөлөөлдөг чухал үзүүлэлт юм. Дэд торон дахь катионуудын тархалт нь торын гажилт, мөхлөгийн хэмжээ, кристал торын эзэлхүүн, дэд торон дахь соронзон моментуудын чиглэл ба тэдгээрийн хоорондын харилцан үйлчлэл зэрэгт нөлөөлдөг. Магнийн ферритийн бүтцийн томьёог $(\text{Mg}_{1-\delta}\text{Fe}_\delta)_A[\text{Mg}_\delta\text{Fe}_{2-\delta}]_B\text{O}_4$ гэж бичих бөгөөд энд δ нь инверсийн зэрэг ((A) байрлал дахь Fe^{3+} катионуудын түгэлтээр тодорхойлогддог). Нейтрон хэмжилтийн давуу тал нь кристал дэд бүтэц дээрх катионуудын түгэлт (δ)-ийг нарийн тодорхойлох боломжийг олгодог. Тооцооллын үр дүнгээс (Хүснэгт 2) харахад S2 дээж нь хамгийн бага инверсийн параметртэй $\delta_N = 0.777$, харин S1 дээж хамгийн их 0.948 утгатай байна. Энэ нь тетраэдрийн байрлал дахь Fe^{3+} ионуудын түгэлт (δ)-ийг материал бэлтгэх процессоос хамааруулан удирдах боломжтой болохыг үзүүлж байна. Инверсийн зэрэг нь гарган авах арга, шатаалтын температур, хөргөлт зэргээс хамаардаг болохыг тогтоосон янз бүрийн судалгааны ажлууд байдаг.

Хүснэгт 2. Нейтрон дифракцын хэмжилтийн үр дүн. Статистик алдааг хаалтанд тэмдэглэв. a- торын параметр, δ - инверсийн параметр, M_A , M_B - A, B байрлалын соронзон моментууд

Parameters	Sample S1	Sample S2	Sample S3
a, Å	8.38068(2)	8.39273(1)	8.38698(1)
δ_N	0.948(5)	0.777(3)	0.863(4)
M_A	4.50(8)	4.43(6)	4.41(6)
M_B	1.83(3)	1.47(2)	1.61(2)
Fe_2O_3 , wt. %	26	17	–
MgO, wt. %	6	–	–

Мессбауэрийн спектрометрийг ашиглан δ_M инверсийн параметрийн утгыг олж бүтцийг тодорхойлох ажлыг гүйцэтгэсэн (Зураг 6). Спектрийн шинжилгээгээр эхний шатанд найрлагыг тодорхойлох боломжийг олгодог ба тэдний соронзон төлөв болон (синтезлэсэн феррит материалуудын цэвэршилтийг тодорхойлох) хэрэв хэмжээсийн эффект байгаа бол түүнийг илрүүлэх, үндсэн $MgFe_2O_4$ фазын дэд торон дахь атомуудын түгэлт, инверсийн зэрэг зэргийг тодорхойлох боломжтой.

Феррит материалуудын үндсэн фаз нь шпинель $MgFe_2O_4$ байсан бөгөөд энэ нь (A) ба [B] дэд спектрээс бүрдэнэ (Зураг 6-д цэнхэр, ногоон өнгөөр тэмдэглэв). $MgFe_2O_4$ дахь соронзон хуваагдлууд (hyperfine field) нь (A) болон [B] сайтууд дахь $Mg(2+)$ болон $Fe(3+)$ -ийн түгэлтээс тодорхой хамаардаг. Энэ хамаарлыг үндэслэн катионы тархалтыг тодорхойлж болно. Спектрээс харахад соронзон хуваагдлын ижил төстэй утгын улмаас (A) ба [B] дэд торуудын спектрүүдийн давхцал ажиглагдаж байна. Октаэдр байрлал дахь Fe ионуудад хамаарах секстет шугамууд нь тетраэдр байрлал дахь Fe-тэй харьцуулахад илүү өргөн байна. Энэ нь Fe^{3+} ба Mg^{2+} ионууд хамгийн ойрын хөрш зургаан тетраэдрт суурьшдагтай холбоотой.



Зураг 6. Төрөл бүрийн аргаар гарган авсан дээжүүдийн Мессбауэрийн спектрийн боловсруулалтын үр дүн

MgFe₂O₄-ийн балк бүтцийн хувьд Fe³⁺[B] ионы (A) байрлал дахь ойрын хөрш нь дараах магадлалын харьцаагаар тодорхойлогддог:

$$I(n) = \binom{6}{n} (1 - \gamma)^{6-n} \gamma^n$$

Энд I(n) нь тетраэдр байрлал дахь nFe³⁺ катионы секстетийн эрчим, $\gamma=(1-x)$ буюу Fe³⁺(B) -ийн эргэн тойрон дахь (A) байрлалын хамгийн ойрын хөрштэй холбоотой P(H) тархалтын функц дээрх B(6), B(5), B(4) соронзон хуваагдлууд.

P(H)_BP(H)_A тархалтын мэдээлэлээс инверсийн z зэргийг гарган авсан. Соронзон хуваагдлын компонентүүд (B(n), n) 6, 5, 4)-ийн түгэлт P(H) нь инверсийн зэрэгтэй давхцана гэж үзэн дэд спектрийн компонентүүдийн эрчим хоорондын хамаарлыг ашиглан тооцоолсон I(B(6)+B(5)+B(4)). SpectrRelax программд I(A) / I(Σ B) = f (A) / f (B) * δ / (2- δ) томъёонд үндэслэн спектрийн боловсруулалт хийж инверсийн параметрийг тооцоолсон. Тооцоолсон инверсийн зэрэг нь $\delta_M = 0.96$ (S1), 0.91 (S2), 0.81 (S3) болох нь нейтроны дифракцын хэмжилтээс гарсан δ_N инверсийн зэрэгтэй тодорхой хэмжээгээр хамааралтай байна (Хүснэгт 3).

Хүснэгт 3. Мёссбауэр спектроскопи ба нейтроны дифракцыг ашиглан тодорхойлсон инверсийн зэрэг.

Инверсийн зэрэг (T, B _{ext})	S1	S2	S3
δ_M (300K, 0T)	0.95	0.77	0.85
δ_M (4K, 0T)	0.89	0.62	0.81
δ_M (4K, 5T)	0.94	0.78	0.89
δ_N (300K, 0T)	0.95	0.78	0.86

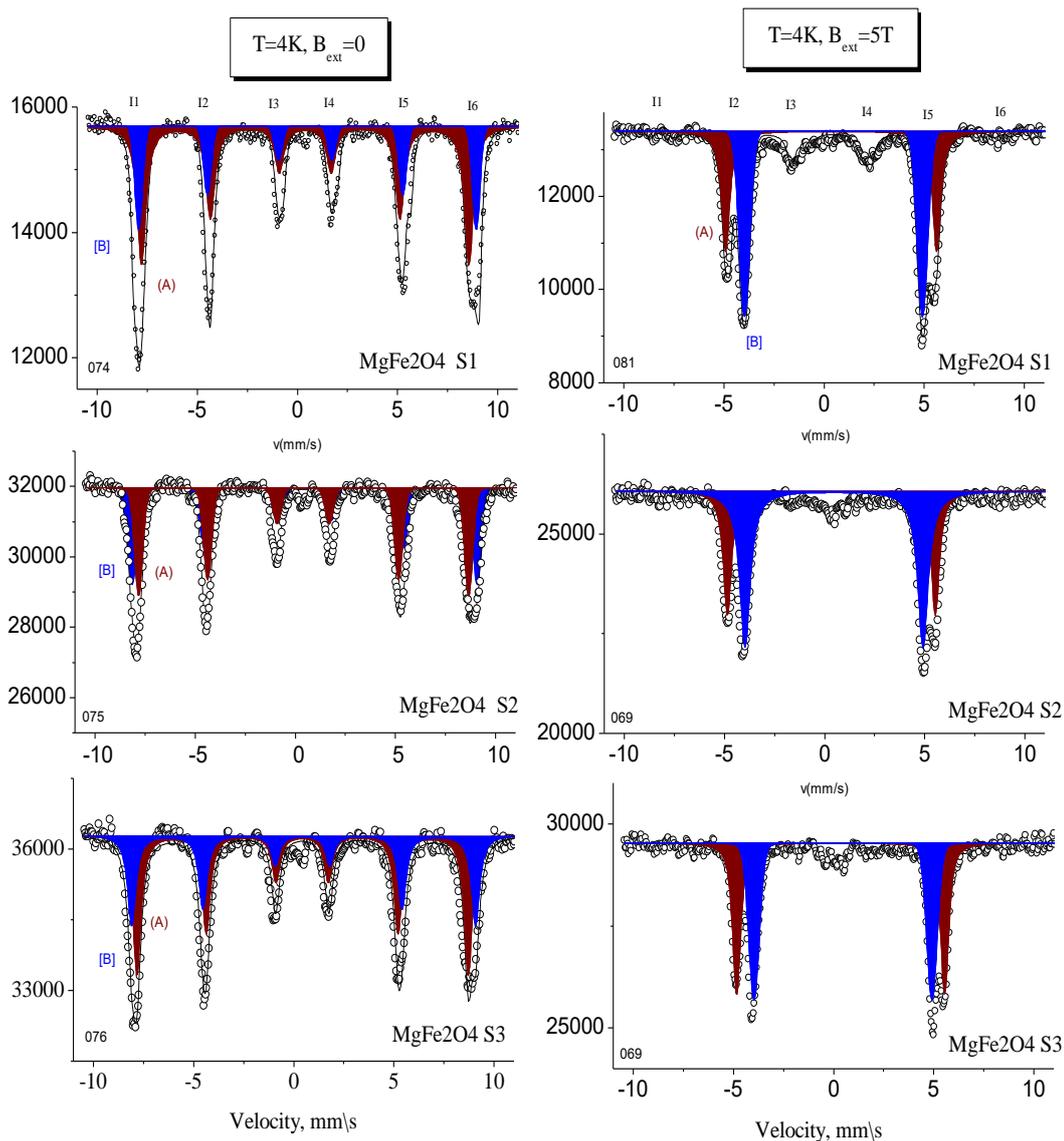
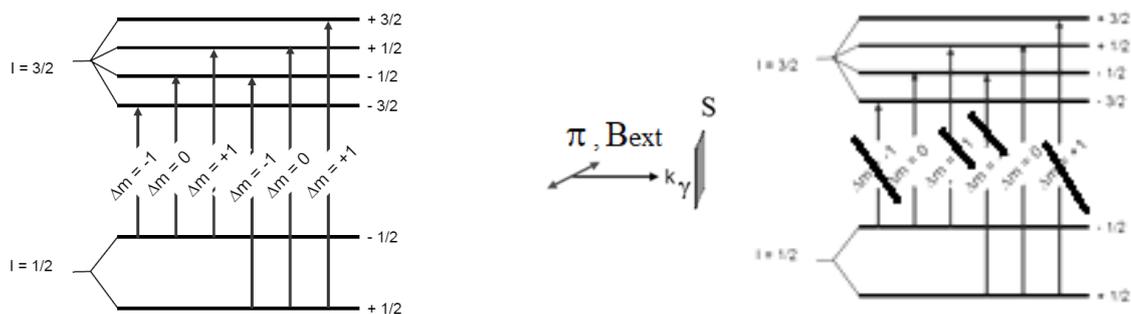
Гарган авсан гурван дээжийн нам температур дахь Мёссбауэрийн спектрийг Зураг 7-д харьцуулан үзүүлэв. Температур буурах тусам хоёр байрлал дахь соронзон хуваагдал нь нэмэгдэж 4.2 К үед ханалтад бараг хүрнэ. Бүтцийн тетраэдр байрлалд байрлах Fe³⁺ ба Mg²⁺-ийн өөр өөр харьцааны улмаас октаэдрийн талбайд харгалзах секстетийн шугамын өргөн нь илүү их байдаг.

Мёссбауэрын судалгаагаар Mg-ферритийн спектр нь Кюриин температур (T_c)-ээс хангалттай доогуур температурт инверсийн зэрэг δ (изомерын шилжилт) ~1 утгатай байх ба N_{eff} нь ковалент (Fe³⁺(A)-O²⁻ холбооноос Fe³⁺(B)-O²⁻ холбоо) шинж

чанартай тул октаэдр байрлал дахь Fe^{3+} -ийн хувьд тетраэдрээс их байна. Иймээс $Fe^{3+}(A)$ цөм дэх s-электроны нягт илүү их тул изомерын шилжилт бага байна. Үүнээс гадна ковалент нь Ферми харилцан үйлчлэлд эерэг хувь нэмэр оруулж, үүссэн соронзон хуваагдлыг бууруулдаг. Бид 4K-д дулааны хэлбэлзэлтэй тохирч буй бүх дээжинд секстет нарийсч байгааг ажиглав. Хэдий суперпарасоронзон релаксацын нөлөөг бууруулж байгаа ч туршилтын энэ нөхцөлд $MgFe_2O_4$ нано бөөмс дэх катионы тархалтыг нарийн тодорхойлоход дэд спектрүүд давхцаж байгаа тул тодорхойгүй хэвээр байна. Секстетүүдийн давхцлыг арилгахын тулд гадаад соронзон орон $H_{ext}=5T$ ашиглан бага температурт спектрийг хэмжив. Энэ тохиолдолд: $H_{ff}=H_{ext}+H_{hf}$ -д харгалзах соронзон хуваагдал үүсдэг. Мёссбауэрын туйлширсан үүсгүүрийг ашигласан тайлбарыг Зураг 7-д үзүүлэв. Ердийн Мёссбауэрын туршилтын цацраг идэвхт үүсгүүр нь туйлшралгүй цацраг ялгаруулдаг бөгөөд үүнтэй зэрэгцэн синхротроны үүсгүүрээс үүссэн фотонууд нь цахилгаан вектортой шугаман туйлширсан байх ба σ -туйлшрал хэмээн нэрлэгддэг. SMS-ийн цацраг нь босоо чиглэлд цахилгаан вектортой, хэвтээ чиглэлд соронзон вектортой шугаман туйлширсан байна. Гадаад соронзон орон нь SMS-ийн π туйлширсан γ -цацрагийн k_{\parallel} түгэлтэд хэвтээ ба перпендикуляр чиглэлтэй байна. Тиймээс $\Delta m=0$ -тэй шилжилтийн ганц эрчимийг авч үзэх хэрэгтэй.

Гадны соронзон орон (H_{ext}) өгөхөд дээжийн соронзжилт нь орны дагуу чиглэдэг. $(Mg_{0.09}Fe_{0.91}\uparrow)[Mg_{0.91}Fe_{1.09}\downarrow]O_4$ -ийн коллинеар бүтэцтэй байна. Шпинель феррит дэх (A) ба [B] байрлал дээрх Fe^{3+} катионуудын спинүүд эсрэг чиглэсэн үр дүнд гадаад орон нь (A) цэгүүд дээрх соронзон хуваагдал дээр нэмэгдэж [B] сайтууд дахь соронзон хуваагдлаас хасагдана. [B] байрлалуудад соронзон хуваагдал бага хэмжээгээр байгаа хэдий ч октаэдр болон тетраэдр дэх Fe^{3+} -ийг нарийвчлал өндөртэй олох боломжтой болно.

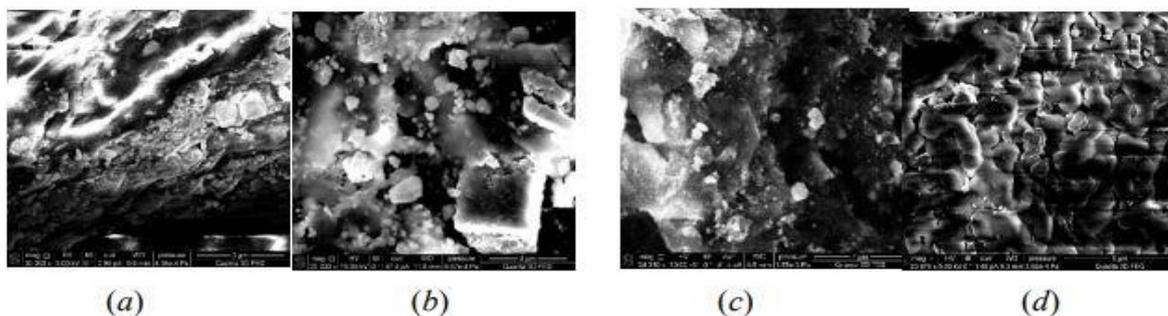
Спектрийн төв хэсгийн хоёр шингээлтийн максимум нь дутуу үүссэн феррит бөөмс бөгөөд тэдгээрийн хувьд цөм дэх талбайн хүч хамгийн бага утгатай байна. Энэ эффект нь феррит бөөмсийн кластер үүсэх эхний шатанд Fe^{3+} -ээр MgO-ийн фазыг өөрчилдөгтэй холбоотой ба эсвэл бүрэн талсжаагүй байх боломжтой. Мёссбауэрийн дэд спектрээс тооцоолсон феррит бөөмсийн инверсийн δ_M зэргийг нейтроны дифракцийн туршилтаас олж авсан δ_N -ийн хамт Хүснэгт 3-т үзүүлэв.



Зураг 7. Өөр өөр химийн горимоор (а- S1 хатуу төлөвийн керамик технологи; b- S2 урвуу тундас, с- S3 Золь-гель) гарган авсан $MgFe_2O_4$ феррит бөөмүүдийн температур 4K гадны соронзон орон 0T болон 4K ба 5T дахь Мёссбауэрийн спектр.

Нам температурын мужид тодорхойлсон δ_M инверсийн параметр нь нейтроны хэмжилтээр тодорхойлсон δ_N инверсийн зэрэгтэй хамгийн сайн тохирсон болохыг харж болно. Температурын өсөлт нь эхлээд $\delta = 0.863$ хүртэл нэмэгдэж, дараа нь инверсийн параметр цаашид өсөхөд буурч байна. $MgFe_2O_4$ -ийн инверсийн параметрын хамгийн тохиромжтой нь $\delta = 0.841$ бөгөөд дээж S3 ($\delta = 0.863$) энэ үр дүнтэй тохирч байна. Идеал бүтэцтэй кристаллууд өндөр дулаан ялгаруулах чадамжтай байдаг. Нөгөөтэйгүүр, $\delta > 0.9$ инверсийн параметртэй синтезлэн гарган авсан дээж нь хольцын фаз ($\alpha-Fe_2O_3$ ба MgO) байгаа тул дулаан ялгаруулах чадамж сул байна. Мёссбауэрын үр дүн нь нейтроны дифракцийн судалгааны үр дүнтэй маш сайн тохирч байв.

Хольцолсон UHMWPE/феррит нэгдлийн SEM зурагт (зураг 8) үзүүлснээр механик химийн идэвхжүүлэлтийн үед UHMWPE анхандаа бөөрөнхий хэлбэртэй байсан ба дараа нь түүний хэлбэр нь сунаж, давхарласан хайрслал хэлбэртэй болж өөрчлөгдсөн.



Зураг 8. UHMWPE/S1 (a), UHMWPE/S2(б), UHMWPE/S3 (в), UHMWPE/S4 (г) дээжүүдийн гадаргуугийн SEM зураг

Шинээр үүссэн энэ бүтэц нь хувийн гадаргуу (харилцан үйлчлэлийн) нэмэгдэхэд нөлөөлж байна. UHMWPE/S1-д нэгдлийн бөөмийн хэмжээ 500 мкм (зураг 8a) ба UHMWPE/S2, UHMWPE/S3 болон UHMWPE/S4-д 150-200 мкм байна. Үүнээс гадна, полимер нэгдлийн доторх ферритүүдийн бөөмийн хэмжээг хэмжихэд тэдгээрийн хэмжээ багасч байсан бөгөөд дундаж хэмжээ нь анхны төлөвтэй харьцуулахад бараг 10 дахин бага болсон байна.

Хүснэгт 4. Гарган авсан материалуудын бүтцийн параметр (*D*- дундаж бөөмийн хэмжээ (SEM), *d* - ширхэглээгийн хэмжээ(XRD))

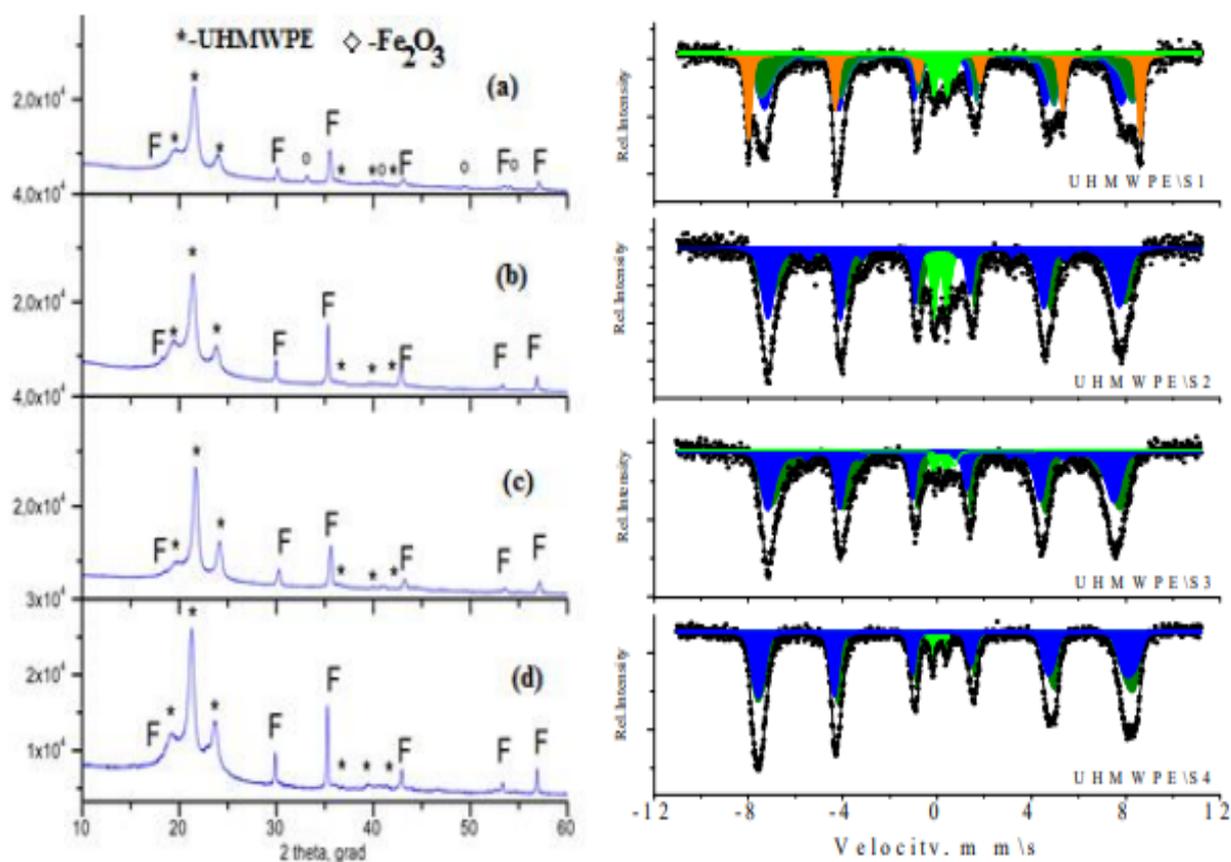
Дээжүүд	Фазын найрлага	D (μм)	d (Å)
UHMWPE/S1	MgFe ₂ O ₄ (UHMWPE, Fe ₂ O ₃)	0.5	50
UHMWPE/S2	MgFe ₂ O ₄ (UHMWPE)	0.4	47
UHMWPE/S3	MgFe ₂ O ₄ (UHMWPE)	0.5	55
UHMWPE/S4	MgFe ₂ O ₄ (UHMWPE, MgO)	5.3	465

Рентген фазын шинжилгээр (зураг 9, зүүн) дифракцийн пикүүд нь феррит болон UHMWPE-ийн бүтцэд харгалзах ба шинэ нийлмэл бүтэц үүсээгүй байгаа нь механик химийн идэвхжүүлэлтийн явцад ферритүүд полимерийн гадаргуу болон дотор амжилттай суусан болохыг харуулж байна.

XRD шинжилгээгээр UHMWPE-тай хольсны дараа феррит фазын дундаж мөхлөгийн хэмжээ огцом буурч байгааг харуулсан. Энэ нь SEM зургаас нэгдэл доторх бөөмийн хэмжээ буурч байсан үр дүнтэй тохирч байна.

Тасалгааны температурт хэмжсэн Мёссбауэрын спектр (Зураг 9, баруун) нь хольцлоогүй үеийн хэмжилтийн спектр (зураг 6)-ээс ялгаатай үр дүнг үзүүлсэн. Мөн UHMWPE/S1-ийн синтез хийсний дараах α -Fe₂O₃ фаз нь нэмэлтээр үүссэн (зураг-9 дэхь улбар шар компонент).

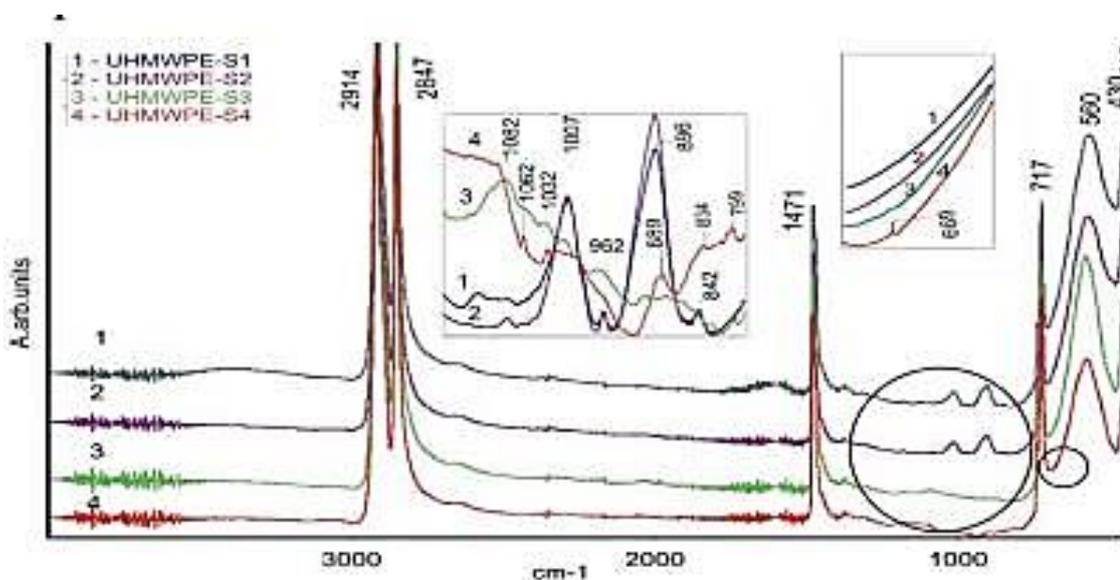
Спектрийн төв хэсэгт нэмэлт соронзон хуваагдал ажиглагдсан (цайвар ногоон өнгөөр дүрслэв). Энэ нь феррит материалууд UHMWPE-тэй механик химийн харилцан үйлчлэлд орсоны үр дүн боловч механик идэвхжүүлэлтийн үед феррит бөөмүүд устсантай холбоотой байж болно. Мёссбауэрын үр дүнгээс үзэхэд кристалл дэд тор дахь катионы суурьшил буюу инверсийн параметрийн өөрчлөлттэй давхцаж байна ($\delta = 0.99, 0.79, 0.88$ ба 0.86).



Зураг 9. UHMWPE/S1 нэгдлийн XRD загвар (зүүн) ба Мёссбауэрийн спектр (баруун) (а), UHMWPE/S2 (б), UHMWPE/S3 (в), UHMWPE/S4 (г).

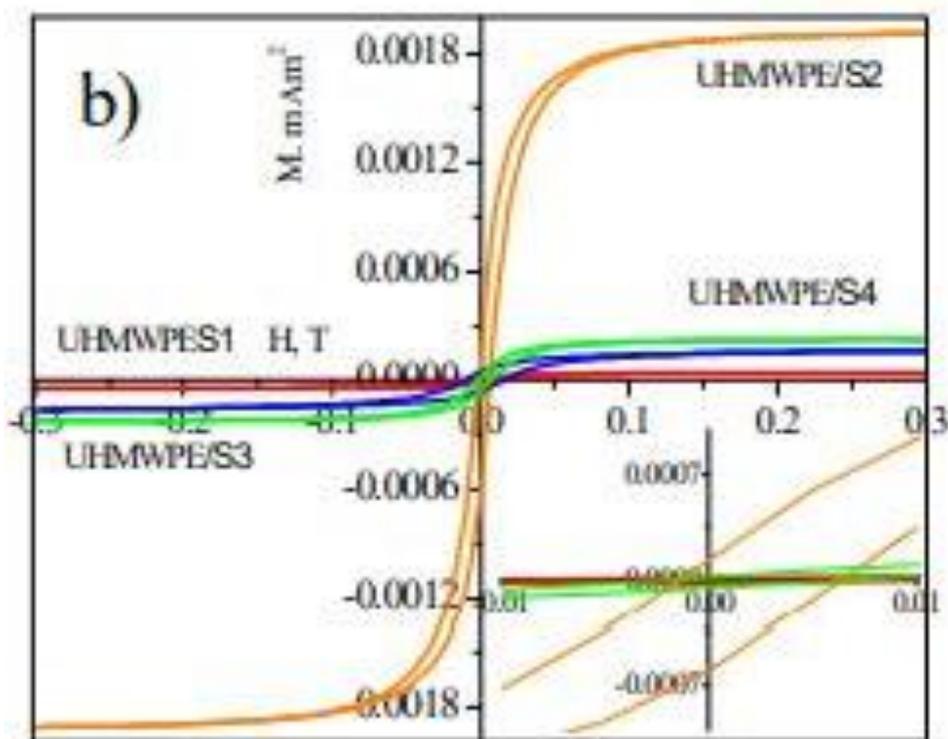
Мёссбауэрын параметруудийн давхардсан утгууд нь (изомерын шилжилт $G = 0.15$ мм/с ба дөрөв дахин хуваасан $\Delta = 0.46$ мм/с) нь октаэдр байрлал дахь $\text{Fe}(3+)$ -тай тохирч байна. Энэ нь механохимийн нөлөөгөөр ферритийн бөөмийн хэмжээ нь нанометр (~10-15 нм) хэмжээс хүртэл багассан ба тэдгээр нь хэт парасоронзон төлөвтэй болсонтой холбоотой.

Соронзон бөөм болон полимер хоорондын харилцан үйлчлэлийг шалгахын тулд бид FTIR спектроскопийг (зураг 10) давхар холбоос, исэлдэлтийн бүтээгдэхүүн байгаа эсэх мөн түүний хэмжээг тодорхойлохын тулд ашигласан.



Зураг 10. UHMWPE/феррит нэгдлийн FTIR-спектрүүд (хэлбэлзлийн зурвасын сонгосон хэсгүүдийг нарийвчлан харуулав).

FTIR спектрт аморф-кристалл төлөвт байгаа молекулуудын шингээлтийн зурвас бүхий (2913 см^{-1} ба 2846 см^{-1}) болон болон симметр, симметр бус C-H холбоос (1472 см^{-1} ба 1463 см^{-1}), C-H деформацийн хэлбэлзэл, CH_2 хэлбэлзэл (730 см^{-1} ба 720 см^{-1}), зөвхөн кристалл фаз дахь металлын холбоосын 720 см^{-1} хэлбэлзэлүүд илэрсэн. Эдгээр бүх нэгдлийн спектрүүдэд шилжилт ажиглагдаагүй. Харин шингээлийн эрчмийн ялгаа нь бөөмийн хэмжээ болон бөөмс дэх UHMWPE-ийн хэмжээнээс хамаарна. UHMWPE/S2 болон UHMWPE/S1 дээжүүд дэх Fe_2O_3 шингээлт, UHMWPE/S4 дэх Mg-O-ийн шингээлт нь $671, 511, 584, 449\text{ см}^{-1}$ тус тус илэрсэн байна. Эндээс зөвхөн MgFe_2O_4 шпинелийн Fe^{2+} ба Fe^{3+} ионуудтай октаэдр байрлалд байрлах Fe-O хэлбэлзэл илэрсэн нь полимерийн молекулууд соронзон бөөмийн гадаргуутай химийн холбоосд ороогүй болох нь харагдаж байна.



Зураг 11. (а) S1-S3 феррит бөөмүүдийн болон (б) нийлмэл материалын гистерезисийн муруйнууд.

Зураг 11-д UHMWPE/S1-S4 дээжүүдийн тасалгааны температур дахь соронзон $M(H)$ орны хамаарлыг (гистерезисын гогцоо) үзүүлэв. Механик химийн аргын судалгаанаас үзэхэд AGO-2 тээрэмд 2 минутын богино хугацаанд идэвхжүүлж UHMWPE/MgFe₂O₄-ийн нэгдэл үүсгэх уг арга нь феррит бөөмүүд болон UHMWPE-ийн тархалтыг нэмэгдүүлж, жигд бус тархалттай нийлмэл материал үүсгэдэг. Полимер доторх феррит бөөм, молекулын анхны бүтцийг өөрчилдөг. Нэгдлийн соронзон шинж чанарууд нь тэдгээрийг агуулсан ферритийн шинж чанараар ихэвчлэн тодорхойлогддог байна. Гистерезийн муруйнаас (соронзон ханалт M_s , үлдэгдэл соронзлолт M_r , коэрцетив хүч H_c) UHMWPE-тэй феррит бөөмсийг механикаар идэвхжүүлэхэд коэрцетив хүчний утга нэмэгдэж, соронзон ханалтын утга буурч байгааг харуулж байна. Энэ нь механик идэвхжлийн үр дүнд нэгдэл дахь ферритийн бөөмийн хэмжээ багассантай холбоотой юм.

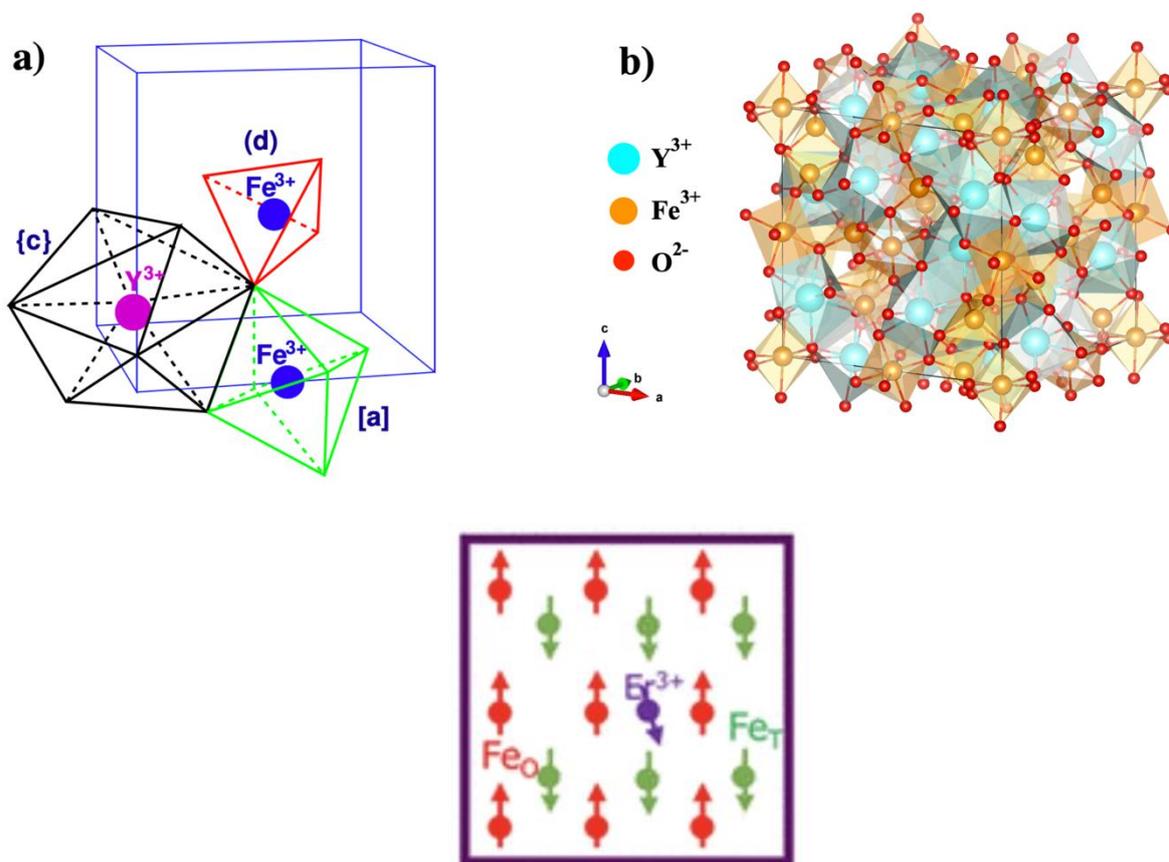
2.3. Дүгнэлт

Энэ ажилд феррит бөөмүүд болон тэдгээрийг агуулсан UHMPWE/феррит нэгдлийн бүтцийн болон соронзон шинж чанарыг судалсан. Шпинел бүтэцтэй бөөмсийн бүтэц-морфологийн шинж чанарт тэдгээрийг гарган авсан синтезийн арга нөлөөлж байсан бөгөөд энэ нь соронзон шинж чанар болон тэдгээрийг бүрдүүлсэн полимер нэгдэлд хэрхэн нөлөөлж байгааг харьцуулан харууллаа. Синтезийн параметрууд нь хэмжээ, морфологи, кристалл бүтэц (инверсийн параметр) болон соронзон шинж чанарт түлхүү нөлөөлсөн байна.

Цахилгаан соронзон долгионы хамгаалалтын материалыг гарган авахын тулд феррит бөөмүүдийн бүтэц, шинж чанарыг синтезийн аргаар удирдан соронзон шинж чанар бүхий полимер суурьтай нэгдлийг механик химийн аргаар хялбархан бий болгох боломжийг бидний үр дүн харуулж байна.

ГУРАВ. ГАРНЕТ НЭГДЛИЙН СУДАЛГАА

Итри төмрийн гарнет буюу итрийн феррит (химийн томъёо $Y_3Fe_5O_{12}$ -YIG) нь спинтроникс, фаз шилжүүлэгч, циркулятор, микродолгионы технологид хэрэглэгдэх боломжтой материал юм. Гарнетыг практикт ашиглах боломж нь соронзон, цахилгаан, оптик, цахилгаан соронзон, соронзон-оптик шинж чанаруудын нөлөөллөөр тодорхойлогддог. Энэ нэгдэл нь эгэл үүрэндээ 160 атомтай систем бөгөөд төмрийн нийт 40 атом нь $2:3 = 16:24$ харьцаагаар октаэдр болон тетраэдр байрлал дээр, итрийн 24 атом нь додекаэдр байрлал дээр суурьшдаг.



Зураг 12. YIG системийн кристалл бүтэц: (а) Тетраэдр, октаэдр, додекаэдр дэд торууд, (б) 160 атомтай эгэл үүр, (в) соронзон шинж чанар

YIG нь куб кристал бүтэцтэй, $Ia\bar{3}d$ огторгуйн бүлэгт хамаарах феррисоронзон материал юм. YIG-ийн феррисоронзон шинж чанар нь кристал бүтэц дэх тетраэдр ба октаэдр хоёр дэд торонд байрлах Fe^{3+} ионы антиферросоронзон харилцан үйлчлэлээс үүсдэг.

Хүснэгт 5. YIG нэгдэл

Томъёо	$Y_3Fe_5O_{12}; Y_3Fe_2(FeO_4)_3$
Бүтэц	Гарнет ($A_3B'_2B''_3O_{12}$)
Огторгуйн групп	<i>1a-3d</i>
Торын тогтмол	12.376 Å

Нэгэн жигд бөөмийн түгэлттэй, цэвэр YIG-ийг синтезлэн гарган авахад нэлээн хүндрэлтэй байдаг. Энэ процесс нь хэд хэдэн синтезийн хүчин зүйл, ялангуяа синтезийн температураас ихээхэн хамаардаг. Химийн синтезийн явцад үүссэн нэмэлт төмрийн исэл Fe₂O₃ эсвэл YFeO₃ зэрэг фаз, бага ч гэсэн хольц үүсгэх нь стехиометрийн бус эсвэл холимог валент бүхий тогтвортой бус төлөвийг бий болгодог. Үүний үр дүнд бөөмийн тархалт, хэмжээсийн нөлөөгөөр соронзон шинж чанар өөрчлөгддөг.

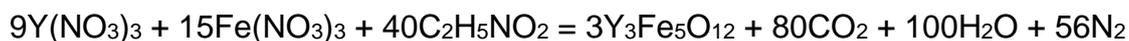
3.1. Химийн синтез

Энэхүү ажлаар глицин ашиглан уусмалын шаталтын аргаар (Solution Combustion Synthesis) синтезлэн гарган авсан цэвэр YIG-ийн бөөмийн хэмжээ, кристалл, соронзон бүтэц, тэдгээрийн соронзон шинж чанар, дулаан үүсгэх шинж чанарт үзүүлэх нөлөөллийг судалсан болно.



Зураг 13. Уусмалын шатаалтын SCS аргын схем.

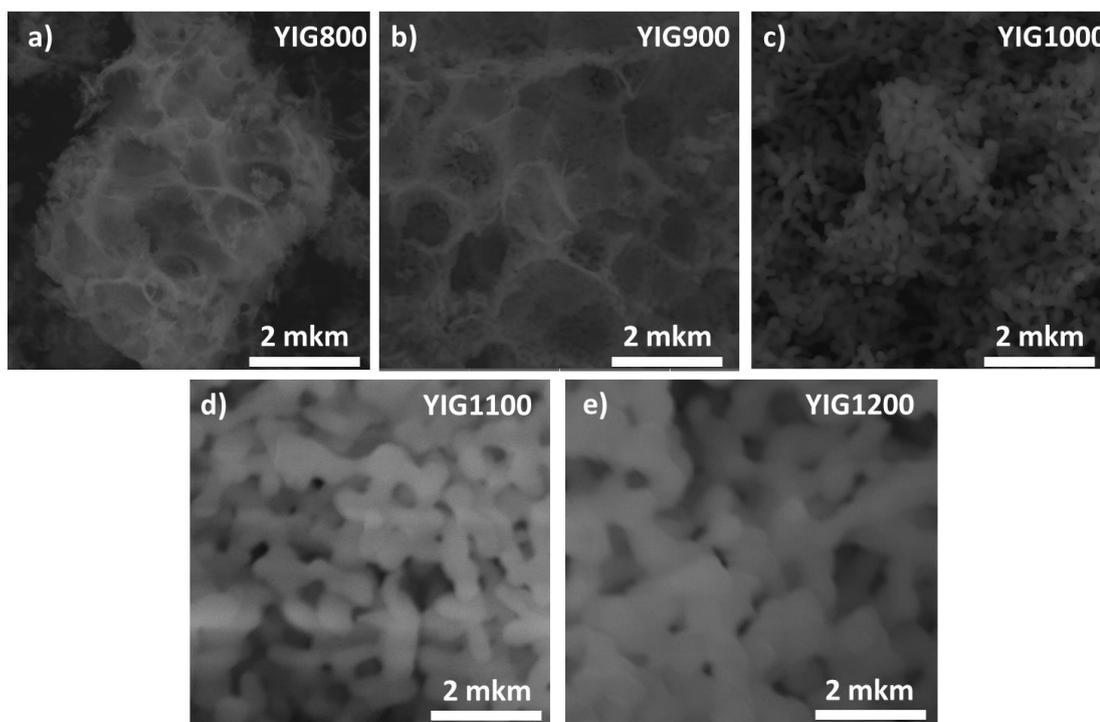
Итри төмрийн гарнет нунтаг дээжийг итрийн нитрат 99.0% цэвэршилтэй $Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ ба төмрийн (III) нитрат $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$, ашиглан уусмалын шаталтын синтезээр нийлэгжүүлсэн. Исэлдүүлэгчээр 99.5% цэвэршилтэй глицин $C_2H_5NO_2$ -ийг түлш болгон G/N харьцаа 2.0 байхаар сонгон авсан байна. Химийн урвалын тэгшитгэлийг дараах байдлаар илэрхийлж болно.



Эцэст нь дээжийг нэгэн төрлийн нунтаг болгон нунтаглаж, дараа нь 800, 900, 1000, 1100, 1200°C янз бүрийн температурт 4 цагийн турш агаарт шатааж, цэвэр иттри төмрийн гарнет нанобөөмийг (YIG) гаргаж авсан. Дээжүүдийг YIG800, YIG900, YIG1000, YIG1100, YIG1200 гэж тус тус тэмдэглэв.

3.2. Морфологийн судалгаа

Синтезлэн гарган авсан дээжүүд нь микроскопийн үр дүнгээс өөр өөр морфологи, хэмжээтэй тархалттай болох нь харагдаж байна. Зураг 14 дээр үзүүлсэн SEM зургууд нь дээжийн морфологи нь маш нарийн ширхэгтэй, сүвэрхэг морфологиос (Зураг 14 а, b) илүү том, сайтар талстжсан морфологитой болж өөрчлөгдөж байгааг харуулж байна (Зураг 14 с-е).



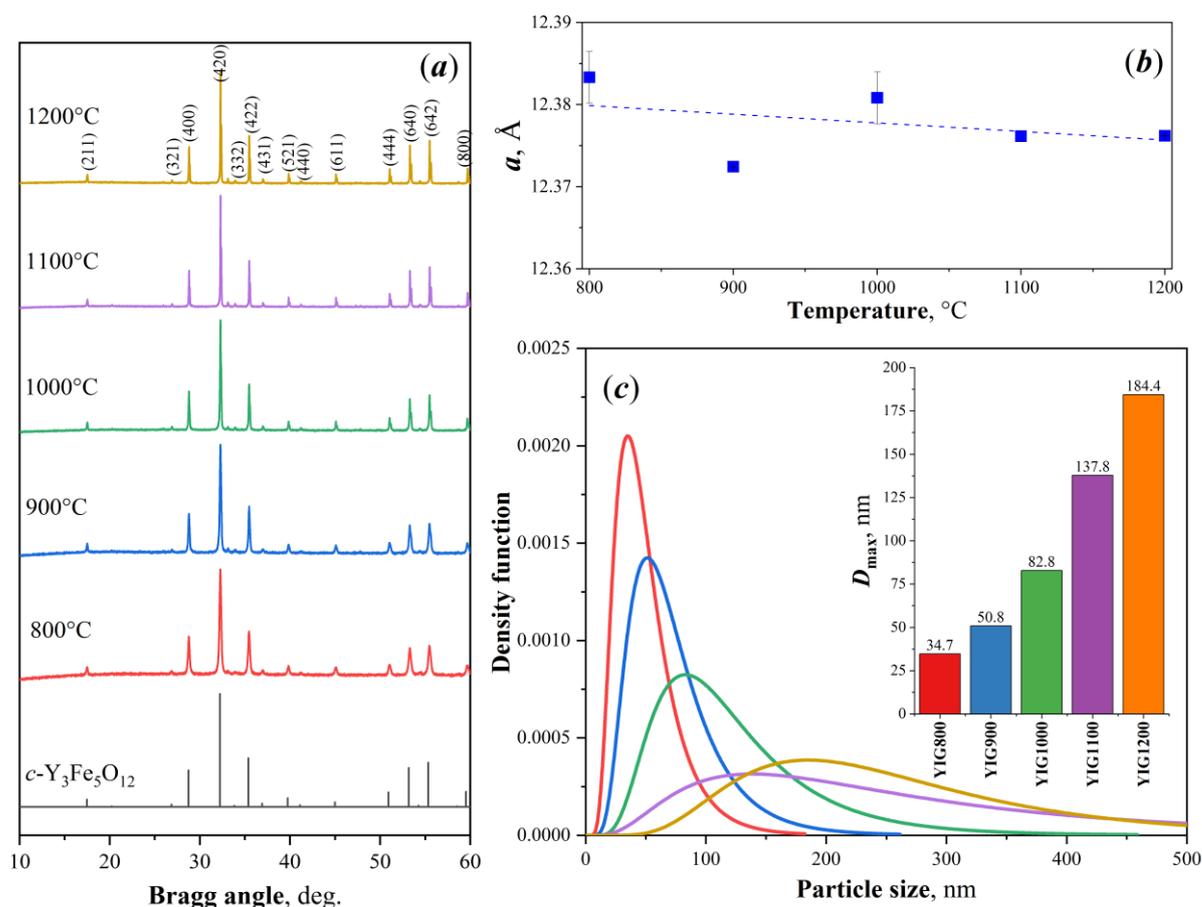
Зураг 14. SEM зураг YIG нанобөөмүүд 800 (a), 900(b), 1000(c), 1100(d) and 1200 (e) температурт шатааж гарган авсан.

3.3. Кристалл бүтцийн судалгаа

Зураг15 а -д XRD хэмжилтийн үр дүнг үзүүлсэн байна. Бүх дээжүүд нь нэгэн төрлийн La3d огторгуйн групп бүхий куб бүтэцтэй Y3Fe5O12 фаз байв. YIG дээжийн бүх дифракцийн пикүүд нь цэвэр YIG-тэй таарч байсан. Зөвхөн YIG900 нь үндсэн фазаас гадна нэмэлтээр гематит $\alpha\text{-Fe2O3}$ -ийн фаз илэрсэн байна. Дээжид нэмэлт хольц гарч ирэх нь бэлтгэх явцад шаталтын бүтээгдэхүүнийг хэсэгчлэн нүүрстөрөгчжүүлж байгаатай холбоотой байж болно. Дулааны боловсруулалтын дараа хольц фаз үүсэх нь дээжийн бөөмийн жигд бус түгэлтэд хүргэдэг. Тооцоолсон торны тогтмол нь $a=12.385\pm 0.002 \text{ \AA}$ (YIG800) -аас жигдхэн буурч, $a= 12.375\pm 0.002 \text{ \AA}$ (YIG1200) утгад хүрэв (Зураг 15b). Үүний үр дүнд кристалл бүтэц илүү нягт болсон. Бөөмийн хэмжээсийн тархалт болон нягтын хамаарлыг Зураг 15в-д үзүүллээ. Синтезийн температураас хамаарсан дундаж кристаллитийн хэмжээг Зураг 15с –д үзүүлэв. Бөөмийн дээд хэмжээ нь YIG800-YIG1200 дээжинд харгалзах 35, 50, 83, 137, 187 нм байна. YIG800-ийн хувьд бөөмийн хэмжээний түгэлт нэгэн жигд байна.

Хүснэгт 6. Синтезийн температур болон бөөмийн шинж чанар

Дээжүүд	T, °C	D_{max} , нм	Ханалтын соронзжилт, I_s , emu/g	Кюри температур, T_c , °C	SAR, Вт/г (H=70 Oe f=300kHz)
YIG800	800	35	24.2	256	25
YIG900	900	51	25.0	267	14
YIG1000	1000	83	27.0	270	8
YIG1100	1100	137	25.7	269	16
YIG1200	1200	184	26.3	272	25



Зураг 15. XRD хэмжилтийн үр дүн (a), торын тогтмол (b), SEM үр дүнгээс тодорхойлсон бөөмийн хэмжээсийн түгэлт (c), D_{max} - кристаллитийн хэмжээ.

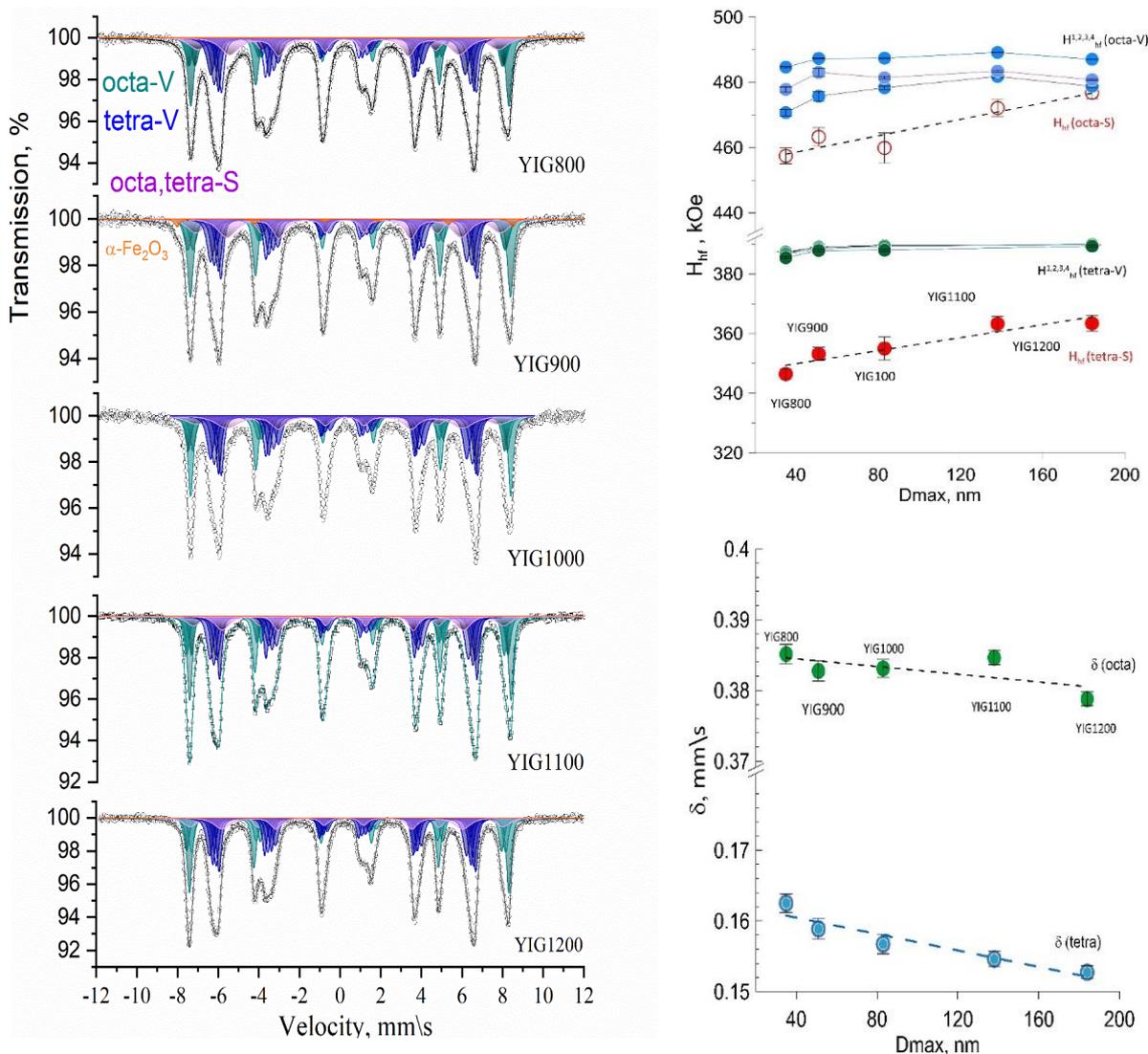
3.4. Мессбауэрийн судалгаа

Тасалгааны температурт хэмжсэн Мессбауэрийн спектрийг Зураг 16-д үзүүлэв. Спектрийн хэлбэр нь жижиг нанобөөм бүхий YIG-ийн хувьд үзүүлэх кристалл ба соронзон бүтцийн шинж чанартай байна. Спектрийн шугамын өргөсөлт ба анизотропи нь гарнетийн дэд торууд дахь төмрийн байрлалтай тохирч байна. Бүх спектрийн гол хэсгийг үзүүлэхийн тулд итри-төмрийн гарнетын бүтэц дэх эквивалент биш төмрийн байршлуудтай тохирох хэд хэдэн дэд спектруудийг үзүүлсэн бөгөөд соронзон диполийн харилцан үйлчлэлтэй харьцуулахад квадруполь харилцан үйлчлэл өндөр байсан учраас хэт нарийн(hyperfine) харилцан үйлчлэлийг бүтэн Хамильтоны загварыг ашиглан боловсруулав.

Гарнетийн феррисоронзон шинж чанарыг нь антиферросоронзон шинж чанар бүхий (16) октаэдр ба (24) тетраэдр дэд торууд дахь төмрийн атомуудаас бүрдсэн хэмжээгээрээ тэнцүү бус соронзон дэд кристалл бүтэцтэй холбон тайлбарладаг.

Мёссбауэрийн YIG спектр нь ихэвчлэн хүчилтөрөгчийн орчин дахь Fe³⁺-ийн хэд хэдэн октаэдр (a) (ногоон өнгөтэй) ба тетраэдр (d) (цэнхэр өнгөтэй) бүтцийн хэсгүүдэд тохирох дэд торуудаас бүрддэг ба тэдгээрийн хэмжээ, параметруудийг тухайн элементийн суурьшил болон цахилгаан орны градиент тензорын үндсэн тэнхлэг хоорондын θ өнцгөөр тодорхойлогддог.

Синтезийн үр дүнд хэд хэдэн кристалл ба соронзон бүтцийн гажилт бүхий фаз үүссэн гэж үзсэн бөгөөд энэ нь ажиглагдсан дэд спектрийн бүрэлдэхүүн хэсгүүдийн тоо, тэдгээрийн параметрууд, харилцан хамаарлыг тайлбарладаг.

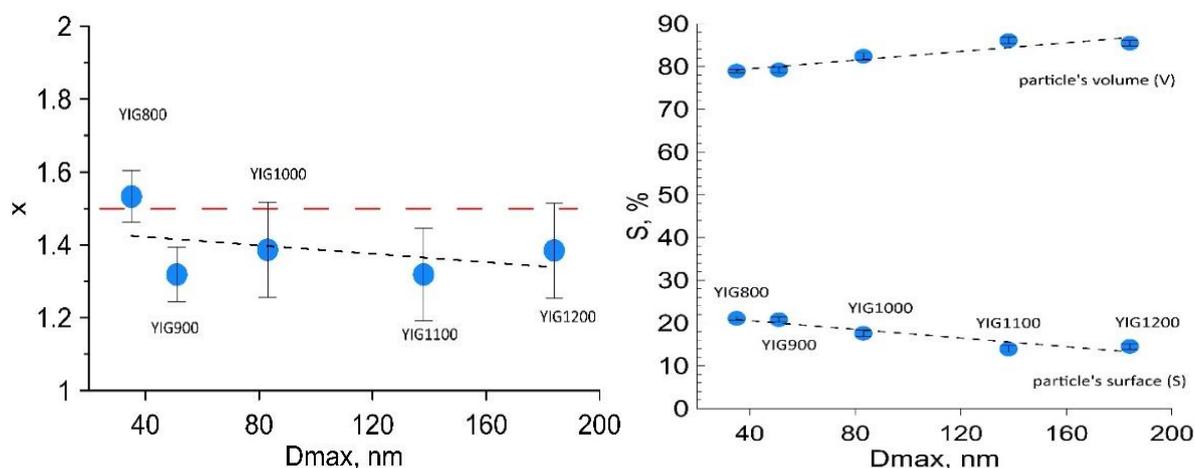


Зураг 16. 300K температурт хэмжсэн (октаэдр- ногоон, тетраэдр- цэнхэр) YIG бөөмсийн Мёссбауэрын спектр. Хэт нарийн соронзон орон (H_{hf}) (a) изомер шилжилт(б) (b) бөөмийн хэмжээнээс хамаарах хамаарал.

YIG800 болон YIG900 бөөмийн эзлэхүүн нь Fe^{3+} байрлалын N_{hf} (окта-V) ба тетра- Fe^{3+} байрлалын N_{hf} (тетра-V)-ийн хэт нарийн соронзон орны утга нь YIG-ийн балк бүтцийн (Зураг-16) характеристикаас бага байна.

Тодруулбал, бөөмийн гадаргуу дээрх Fe^{3+} ионуудтай холбоотой харгалзах хэт нарийн орнууд нь $N_{hf}(\text{octa-S})$ ба $N_{hf}(\text{tetra-S})$ нь тасарсан холбоосууд болон бүтцийн эвдрэлийн улмаас мэдэгдэхүйц багасав.

a болон d байршлуудын хувьд изомерын шилжилтийн (δ) дундаж утгуудын бууралт нь XRD үр дүнгээс тодорхойлсон торын параметрийн утга буурч байгаа шалтгааныг бөөмийн кристал бүтэц илүү сайжирч байгаатай холбон тайлбарлаж байна.



Зураг 17. Инверсийн зэрэг (a) дахь төмрийн гадаргын болон bulk fraction-ий хэмжээ (b) бөөмийн хэмжээнээс хамаарах хамаарал.

Түүнчлэн, Fe^{3+} эзэлсэн талбайн эргэн тойронд соронзон биш төмрийн статистик тархалтаас үүдэн локаль нэгэн төрлийн бус байдал илэрсэнтэй холбоотойгоор бүх бүрэлдэхүүн хэсгүүдийн шугамын өргөсөлт ажиглагдаж байна.

Бүх дээжүүдийн хувьд N_{hf} -ийн тархалтыг тетраэдр биш харин октаэдр байршлуудын хувьд гарган авсан.

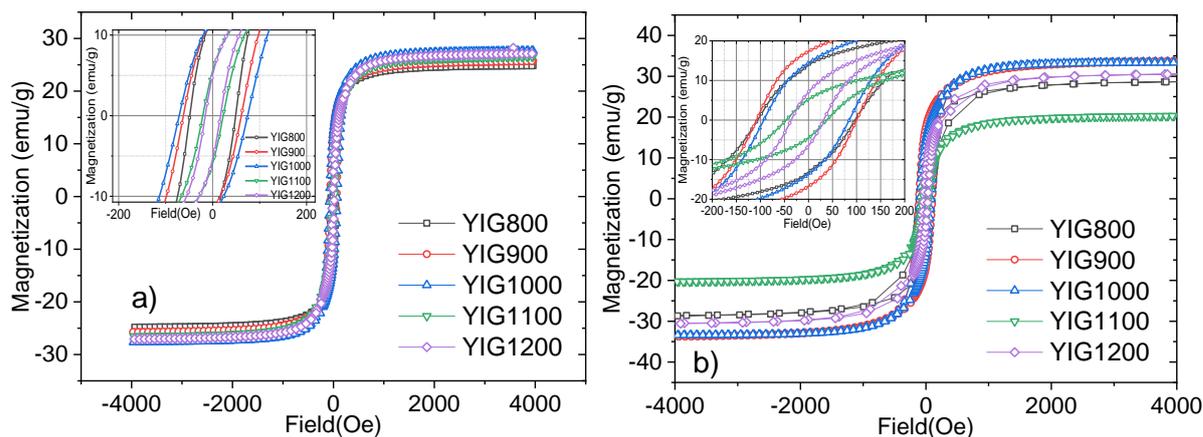
Fe^{3+} -ийн дэд торон дахь тархалтыг Мёссбауэрийн тохируулгын үр дүнгийн харьцаагаар тодорхойлсон: $nd/n_a = x = (S_d/S_a) (f_a/f_d)$, энд: $f_a/f_d=0.94$ -тасалгааны температур дахь a - ба d - талбайн гамма цацрагийн цөмийн резонансын буцалтгүй шингээлтийн магадлал [22].

Сайжруулсан кристал бүтцийн хувьд онолын утгаас $x=1.5$ хазайж байгаа ажиглагдаж байгаа нь шатаалтын температуртай утгыг багасгаж байгаатай холбоотой (Зураг-6а). Бөөм дэх төмрийн ионы гадаргуугийн эзлэхүүний хэмжээ (Зураг-6b) YIG800-аас YIG1200 хүртэл бараг хоёр дахин өсөхөд бөөмийн хэмжээ буурч байгаагаар тодорхойлогддог.

3.5. Соронзон шинж чанарын судалгаа

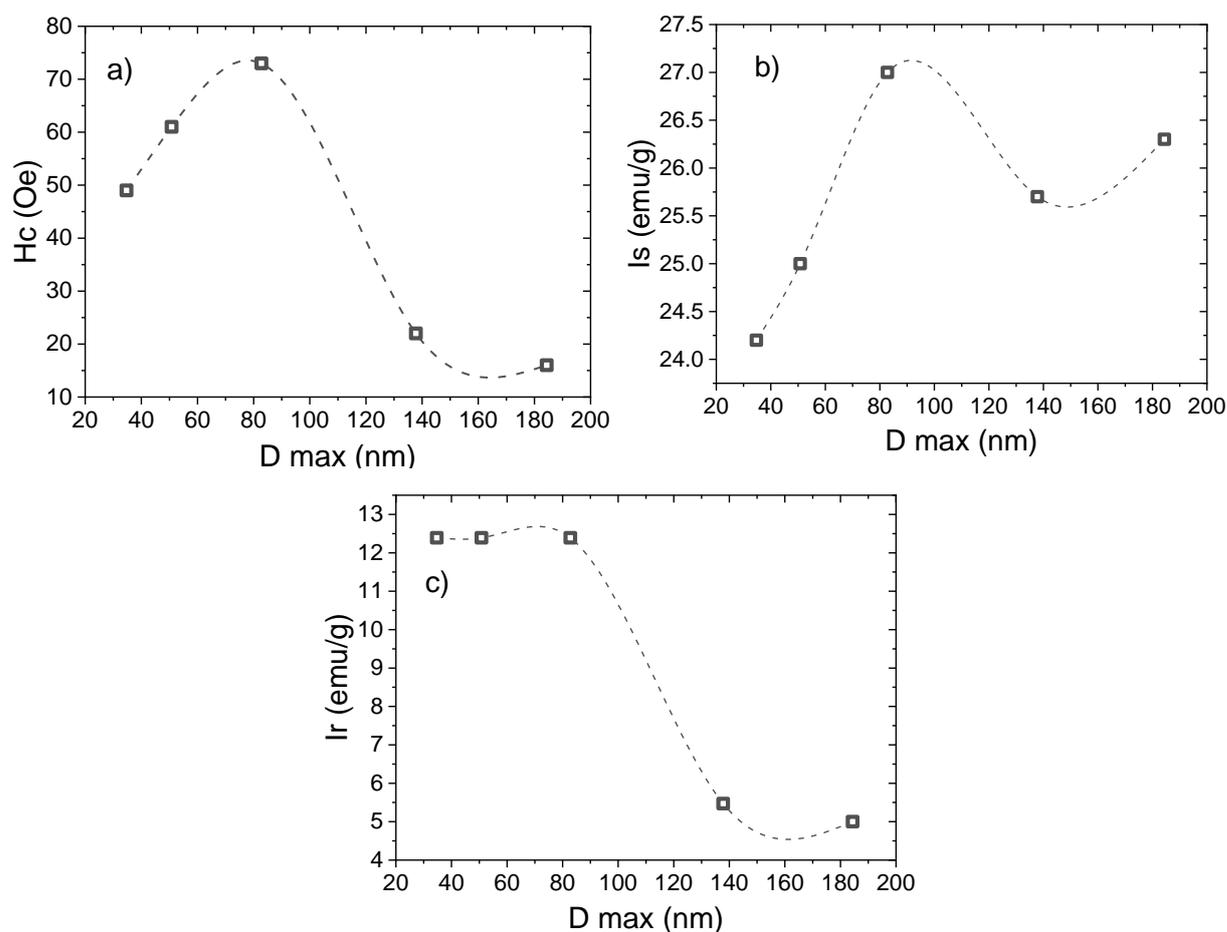
YIG nano бөөмсийн соронзон шинж чанарыг тасалгааны температур дэх хэмжилтийг Зураг 18-д үзүүлэв. Бүх дээжүүд ферросоронзон гистерезисийг харуулсан. Бүх гистерезисийн гогцоонд корцитив хүч тэгээс ялгаатай бөгөөд ханалтын талбай нь 1000 Oe-ээс их байна.

Корцитив хүч, ханасан соронзжилт, үлдэгдэл соронзжилтын утгуудын бөөмийн хэмжээнээс хамаарах хамаарлыг Зураг 19-д үзүүлэв. Дээжийн корцитив хүч бөөмийн дундаж хэмжээнээс шугаман бус хамааралтай байгаа нь ажиглагдав (Зураг 19а). YIG1000 дээжид хамгийн их корцитив хүч H_c ажиглагдсан. Үүнийг бөөмсийн соронзон төлөвийн өөрчлөлтөөр тайлбарлаж болно. Дээжийн дундаж бөөмийн хэмжээ ихэссэнээр гадаргуугийн соронзон анизотропи буурахад хүргэж байна. Үүний үр дүнд бөөмс нь нэг домэйнээс олон домэйн төлөвт шилждэг бөгөөд энэ нь корцитив хүчийн хэмжээнд нөлөөлдөг. Бусад судалгааны ажилд супер парасоронзон төлөвт шилжих YIG nano бөөмсийн диаметр $D_{cr}(sp)$ нь 35 нм гэсэн хэмжээтэй тохирч байна. Тиймээс зөвхөн YIG800 нь супер парасоронзон шинж чанарыг үзүүлж байна. Ийм корцитив шинж чанарыг тайлбарлаж болох өөр нэг шалтгаан нь синтезийн явцын улмаас бага зэрэг хүчилтөрөгчийн дутагдалтай бүтэц үүссэн байж болно. Изомер шилжилтийн бага зэрэг хазайлт (Зураг 5. дээр улаан сумаар тэмдэглэгдсэн. b) октаэдр сайт дээр электрон нягтын өөрчлөлтийг харуулж байна. $D_{crit} \sim 100$ нм-тэй ойролцоо диаметртэй бөөмүүд гол төлөв нэг домэйн төлөвт байна гэж бид таамаглаж байна. Энэ үр дүн нь бусад өгүүллийн өгөгдөлтэй сайн тохирч байна. Уг дээж нь монодисперс биш гэдгийг тэмдэглэх нь зүйтэй. Тиймээс дээж бүр өөр өөр микросоронзон төлөвт бөөмс агуулдаг. Тиймээс бид дээж дэх ихэнх бөөмс нь өөр өөр микросоронзон төлөвт байгааг л тооцоолж болно.



Зураг 18. Синтез хийсэн дээжийн хувьд 300 K (а) ба 90 K (б) хэмд гистерезисийн гогцоо.

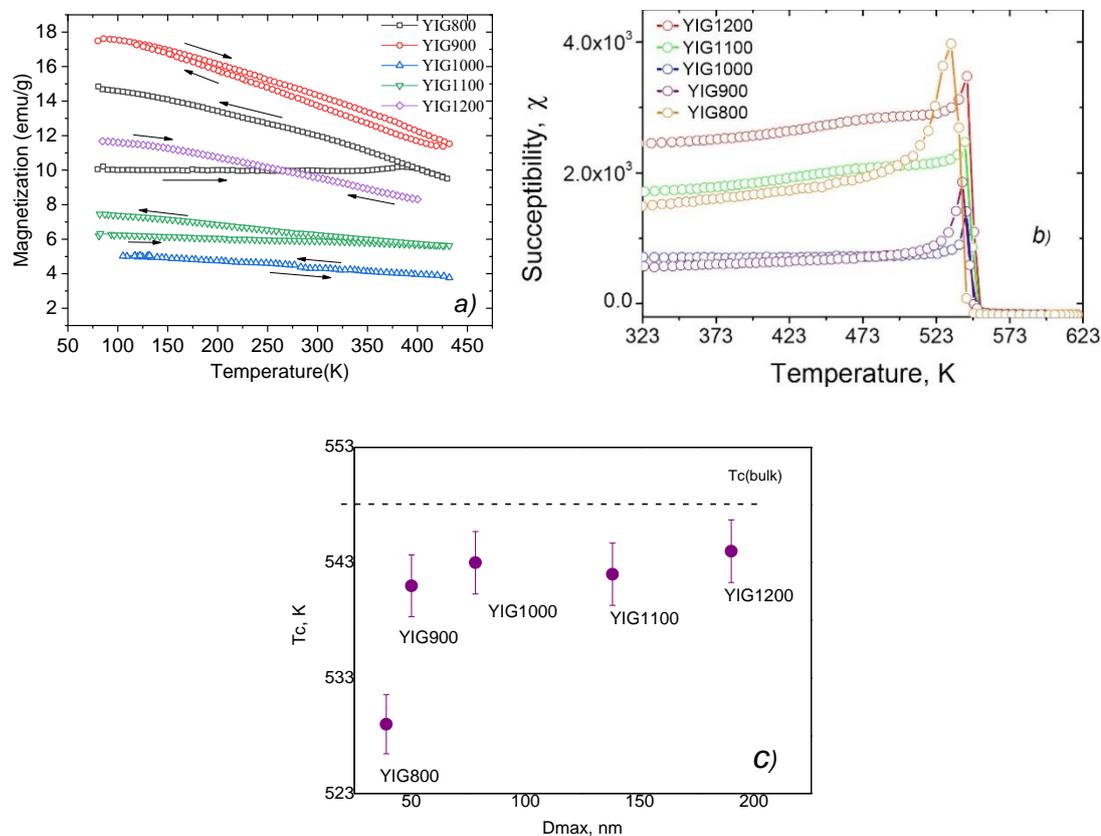
Бөөмийн хэмжээнээс үлдэгдэл соронзжилтын хамаарлын үр дүн (Зураг 19в) нь корцитив хүчний шинж чанартай харилцан уялдаатай байна. Зураг 8б нь дундаж ширхгийн хэмжээнээс ханасан соронзлолын хамаарлыг харуулав. Бүх дээжийн ханалтын соронзлолын утга нь 292 K-ийн их хэмжээний YIG (27.40 эму/г - 3.62 Бор магнетон)-ийн ханалтын соронзжилтоос бага байна. Үүнийг гадаргуу дээр соронзон моментын хазайлт байгаатай холбон тайлбарлаж болно. YIG800, YIG900, YIG1000 дээжийн ханалтын соронзжилтын өсөлт нь супер парасоронзон хэсгүүдийн фракц буурсантай холбоотой гэж бид таамаглаж байна. Ханалтын соронзжилтыг нэмэгдүүлэх өөр нэг шалтгаан нь налуу соронзон дэд тор бүхий гадаргуугийн атомуудын эзлэх хувь буурах явдал юм. D тах хэмжээтэй 80-аас 200 нм хүртэлх монотоник бус үйлдлийг тэмдэглэх нь зүйтэй. Дундаж 138 нм диаметртэй ханасан соронзжилтын орон нутгийн хамгийн бага хэмжээг (мөн бага температурт огцом бууралт) өмнө дурдсан дэд торуудын хооронд катионы тархалтын өөрчлөлт байгаатай холбон тайлбарлаж болно.



Зураг 19. Өрөөний температурт бөөмийн хэмжээ корцитив хүчээс (а), ханасан соронзжилтоос (б) ба үлдэгдэл соронзжилтоос (в) хамаарах хамаарал.

Бөөмийн дундаж хэмжээ нэмэгдэхийн хэрээр ханасан соронзжилтын өсөлтийг бөөмийн дийлэнх хэсэгт агуулагдах атомын хэмжээтэй харьцуулахад гадаргуугийн ойролцоох атомуудын эзлэх хувь буурсантай холбон тайлбарлаж болно. Энэ нь бөөмийн гадаргуу дээрх хазайсан эргэлтийн төлөвийг бууруулсан Моссбауэрийн спектрийн шинжилгээнээс олж авсан дүгнэлтийг баталж байна. Жижиг соронзон оронд (50 Oe) соронзжилтын температурын хамаарлыг Зураг 20а-д үзүүлэв. Соронзонжилтын сулрах үйл явцыг судлахын тулд гадны соронзон орны утга нь корцитив хүчний утгаас бага байхаар сонгосон. YIG800-аас бусад бүх дээжүүд нь халаалтын (ZFC - тэг талбайн хөргөлттэй) ба хөргөлтийн (FC - талбайн хөргөлттэй) муруйг харуулж байна. YIG800 дээжийн ZFC-FC муруйнуудын ялгааг энэ дээжид суперпарасоронзон бөөмсийн нэлээд хэсэг байгаагаар тайлбарлаж болно. Эдгээр муруйнуудын зөрүүгээс харахад YIG800-ийн суперпарасоронзон төлөвөөс ферросоронзон төлөв рүү шилжихэд тохирох хаах температур нь 385 K байна гэж тооцоолж болно. Бусад бүх дээжүүд нь харагдахуйц суперпарасоронзон шинж

чанарыг харуулахгүй. Мөн бүх дээжийн хувьд Кюригийн температур T_c 450К-ээс дээш байгаа нь тодорхой байна.

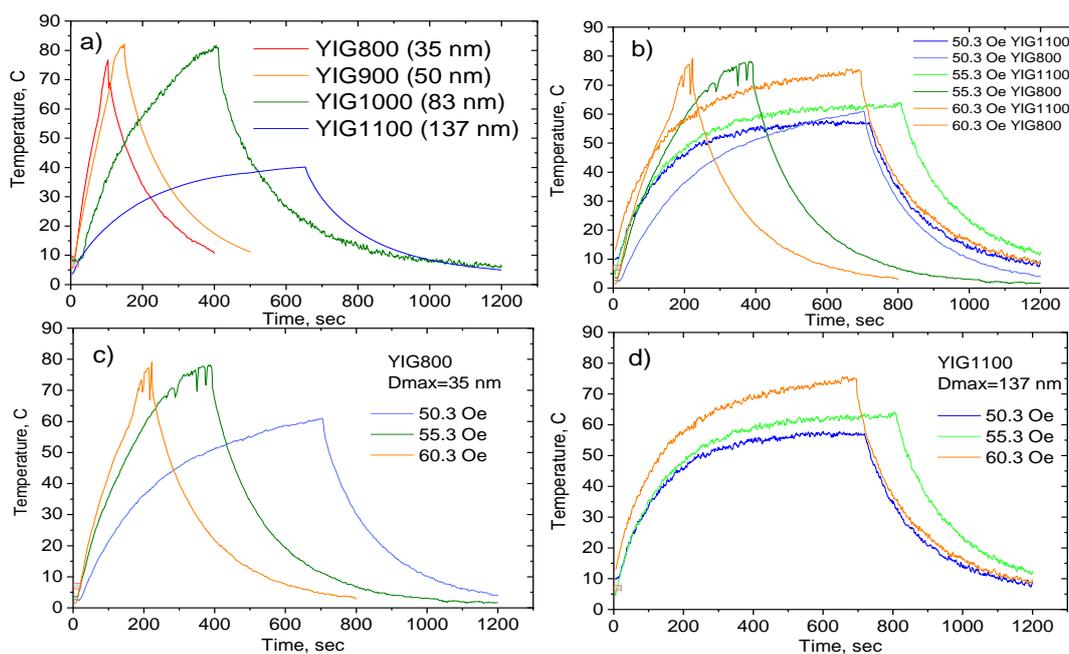


Зураг 20. Жижиг соронзон орон дахь соронзжилтын температурын хамаарал (50 Oe) (a), соронзон мэдрэг чанар температурын хамаарал (b) ба Кюри температур (c).

Бид Хопкинсоны эффект дээр үндэслэн соронзон мэдрэг чанарын температурын хамаарлаас (Зураг 20б) T_c утгыг хэмжсэн. Тиймээс дээжийн соронзжилт нь түүний анхны мэдрэг чанараар тодорхойлогддог. Зураг 9а-д хамгийн өндөр соронзжилтыг YIG900 дээж харуулсан бөгөөд энэ нь нэг домэинтэй бөөмсийн агууламж хамгийн өндөр байгаа бололтой. Бөөмийн хэмжээ ихсэх нь орны хэмжээ нэмэгдэхэд хүргэдэг. Тиймээс YIG1100 - YIG1200 дээжийн соронзжилт нь Зураг 8с-д бага байна. Анхны соронзон мэдрэг чанарт соронзон дэд торны налуу нөлөөг мөн анхаарч үзэх хэрэгтэй. Бөөмийн хэмжээ ихсэх нь энэ нөлөөг дарангуйлдаг бөгөөд энэ нь YIG1100, YIG1200 дээжийн соронзжилт YIG1000 дээжийн соронзжилттой харьцуулахад нэмэгддэг.

3.6. Дулаан ялгаруулах чадамжийн судалгаа

Зураг 21-д YIG-ын бөөмийн хэмжээнээс хамаарсан дулаан ялгарах болон хөрөх үеийн муруйг үзүүлэв. Үр дүнгээс харахад бөөмийн дулаан ялгаруулах чадамж нь соронзон орны параметрууд болон бөөмсийн хэмжээнээс хамаарч байна. YIG800, YIG900, YIG1000 бөөмүүдийн хувьд соронзон орны хэмжээ болон давтамжаас хамаарч богино хугацаанд дулаан ялгаруулж (хэдхэн минутын дотор 80 °C) байсан бол YIG1000 нь харьцангуй удаан дулаан ялгаруулж байна.



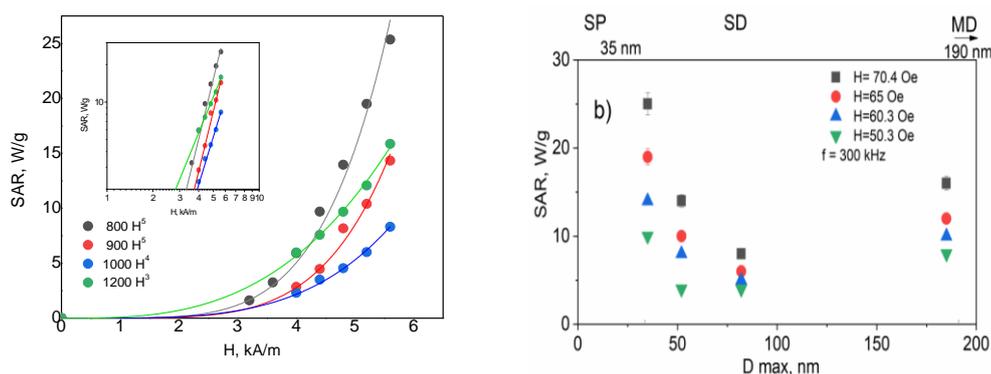
Зураг 21. (a) $H=70,4$ Oe дахь бөөмийн хэмжээ (35 ба 137 нм), температур хугацааны хамаарал, (b) өөр өөр H соронзон орон дахь температур хугацааны хамаарал (c) өөр өөр H соронзон орон дахь YIG800 бөөмийн температурын хамаарал, d) өөр өөр H соронзон орон дахь YIG1100 бөөмийн температурын хамаарал.

Зураг 22а-д хэмжилтийн утгыг ашиглан хувийн шингээх чадлын тооцооны үр дүнг үзүүлэв. Энэ нь дээжийн энергийн алдагдал соронзон орны утгаараа экспонентын өөр өөр хэмжээтэй пропорциональ байгааг харуулж байна. Гистерезисын алдагдлын H_c коэрцитив хүч нь бөөмийн хэмжээ нэмэгдэхийн хэрээр дулаан ялгаруулах чадамж буурч байгаатай холбоотой ба бөөмийн диаметр ($1/D_{max}$) болон нэг соронзон төлөвөөс нөгөөд шилжих шилжилтийн эсрэг пропорциональ хамааралтай байна. Хувьсах гүйдлийн соронзон орон дахь бөөмийн

дулаан ялгаруулах механизм нь гарган авсан бөөм дэх SAR-ийн төлөвийг хоёр мужид хувааж болно.

YIG800 ба YIG900 бага хэмжээтэй дээжүүд нь 75 ба 80 °C хүртэл дулаан ялгаруулж байсан бол бөөмийн хэмжээ томрох тусам дулаан ялгаруулах чадамж буурч 60 °C хүртэл халж байна.

Энэ шинж чанар нь бөөмийн соронзон төлөвтэй холбоотой H_c , I_s , I_{rs} -ийн бага утгууд болон стехиометрийн үзүүлэлтээс инверсийн параметрийн хазайлт 1.5-тай тэнцүү байгаатай холбон тайлбарлаж болно. YIG800 инверсийн параметр нь ойролцоогоор $\chi=1.5$ байна. Гэхдээ энэ бөөмийн хувьд хэмжээ (35 нм) нь YIG-ийн супер парасоронзон утгатай тохирч байна. Иймээс эдгээр бөөмсийн шинж чанар нь соронзон моментын релаксацийн шинж чанартай холбоотой. YIG1000-YIG1200-ийн бөөмүүд нь олон домейн (MD) бөөмүүдийн гистерезисийн алдагдал, жижиг бөөмүүдийн релаксацийн шинж чанар болон тэдгээрийн соронзон харилцан үйлчлэл зэрэг илүү төвөгтэй механизмаар удирддаг. Энэ нь харилцан үйлчлэлцдэг соронзон бөөмүүд нь хувьсах соронзон оронд дулаан дамжуулах нарийн төвөгтэй механизмыг үзүүлж болохыг харуулсан. Учир нь "бөөмсүүд нь гадны соронзон орноор хөдөлж эхэлдэг ба энэ ажил нь замаас ихээхэн хамаардаг". Тухайлбал, нэг бөөмс солигдох үед нөгөө хэсэг нь диполяр орныг өөрчилдөг тул түүний соронзлол нь дулаан болж хувирах ажил хийдэг.



Зураг 22. 300 кГц давтамжтай соронзон орон дахь SAR-ийн тооцооны үр дүн а) өөр өөр соронзон орон дахь бөөмийн хэмжээнээс хамаарсан үр дүн (b) SP – супер парасоронзон төлөв болон SD – нэг домэйн төлөв, MD – олон домэйн төлөвөөс хамаарсан үр дүн.

3.7. Онолын тооцооллын үр дүн

Дээрх туршилтын үр дүнгээс гарсан $Y_3Fe_5O_{12}$ нэгдэлд нэмэлт фаз үүсч улмаар системийн соронзон шинж чанарт нь нөлөөлж байгаа хэмжилтийн үр дүнд үндэслэн YIG бүтцэд дотоод цэгэн дефект үүсгэн дефект бүрийн бүтцийн энергийг (formation energy) тодорхойлох судалгааг гүйцэтгэлээ. Ингэхдээ:

1. Вакэнси,
2. Байрлалын бус дефект,
3. Френкел дефект,
4. Бүтцийн завсрын дефект

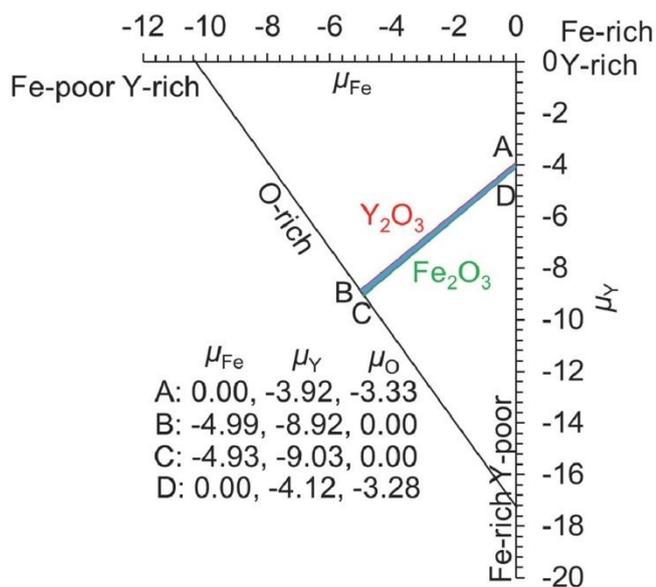
зэрэг дөрвөн төрлийн дефектийг системдээ үүсгэн нийт 14 ялгаатай бүтэц үүсгэн тооцоо хийсэн. Үндсэн төлвийн тооцооллын үр дүнд системийн нийт соронзон момент 38.65 μ_B утгатай байсан ба дефект үүсгэсэн тооцооны үр дүнтэй уг утгыг харьцуулна.

Тооцооллын арга: Тооцооллыг Венийн *ab initio* симуляцийн багц (VASP) программыг ашиглан гүйцэтгэсэн ба электрон-ионы харилцан үйлчлэлийг дүрслэхдээ проекторын нэмэгдүүлсэн долгионы (PAW) арга, солилцол-корреляцийн функционалаар ерөнхий градиентийн ойролцооллын (GGA) аргыг ашигласан. GGA аргыг сонгон ашиглахаас өмнө солилцол-корреляцийн ялгаатай хоёр функциональ болох локаль нягтын ойролцоолол (LDA) болон GGA аргыг ашиглан тооцоолол хийж үзэн соронзон системд илүү тохиромжтой арга болох GGA аргыг ашигласан болно. Системийн нийт энергийн нийлэлтийг шалгахдаа тест тооцооллууд хийж хавтгай-долгионы тайралтын энерги 500 эВ байхаар сонгосон. Валентийн электронуудын тоо нь Fe ионуудын хувьд 14 ($3p^63d^64s^2$), Y ионуудын хувьд 11 ($4s^24p^64d^15s^2$), O ионуудын хувьд 6 ($2s^22p^4$) байсан ба үлдсэнийг нь үндсэн төлөв гэж үзсэн. Өөртөө-нийцэх (self-consistent) тооцооллын нийлэлтийн (iteration) дэс дараалсан хоёр цикл хоорондын энергийн зөрүү 10^{-5} эВ байхаар тооцсон. Торын тогтмол, атомын байрлалууд зэрэг геометр бүтцийн параметруудийг атом бүр дээрх Хэллман-Файнманы хүч 10^{-4} эВ/Å утгаас бага болох хүртэл релаксяци хийсэн. Fe атомын локалчлагдсан 3d төлвүүдийн шинж чанарыг тооцохын тулд тест тооцоо хийж Кулоны засвар (GGA+U) Fe атом тус бүрд $U_{eff}=6$ эВ утгатай байхаар сонгосон. Бүх тооцоолол Монхорст-Багц (Monkhorst-Pack) дахь k-цэгийн тор $2 \times 2 \times 2$ үед хийгдсэн болно.

Дефекттэй системийн бүтцийн энергийг бодох тэгшитгэл:

$$E_f(D, q) = E_{D@YIG} - E_{YIG} + \sum n_i(E_i + \mu_i) + q(E_{VBM} + E_F)$$

Цэнэгийн q төлөвт байгаа D дефектийн бүтцийн энергийг ашиглан тодорхойлно. Энд E_{YIG} нь ямар нэг дефектгүй YIG системийн энерги, $E_{D@YIG}$ нь цэнэгийн q төлөвт буй релаксаци хийгдсэн D дефекттэй системийн энерги. D нь үүсгэсэн дефектүүд бөгөөд үүнд вакэнси, байрлалын бус дефект, Френкел дефект, бүтцийн завсрын дефект орно. μ_i нь E_i энергитэй элементийн хатуу/хийд хамаарах i бүрэлдэхүүн хэсгийн химийн потенциал бөгөөд n_i нь YIG системд нэмсэн ($n_i < 0$) эсвэл хассан ($n_i > 0$) атомын тоо болно. Бид тооцоогоо цэнэгийн саармаг буюу $q=0$ төлөвт гүйцэтгэсэн тул тэгшитгэлийн дөрөв дэх нэмэгдэхүүнийг тооцохгүй орхино.



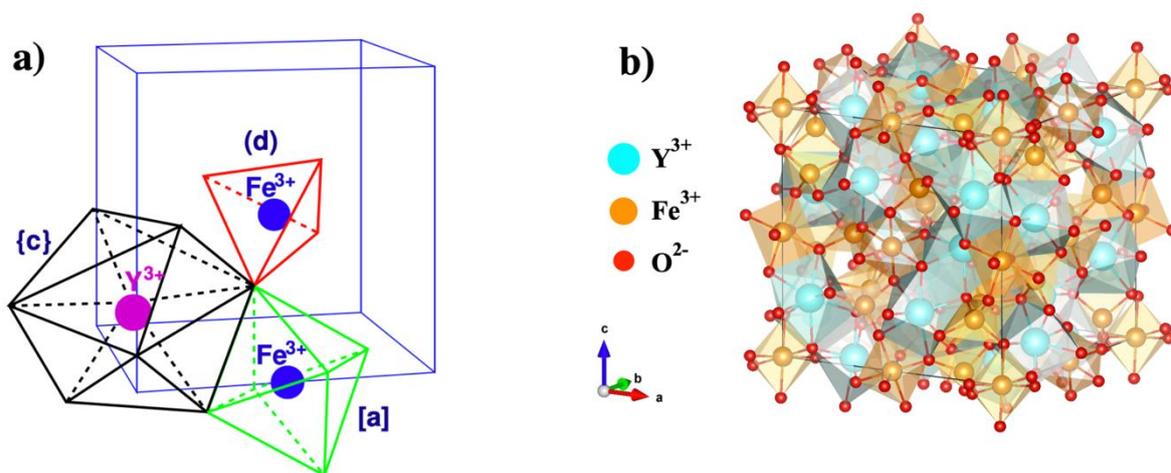
Зураг 23. YIG системийн фазын диаграм. YIG тогтвортой байх Y, Fe болон O-н химийн потенциалын бүсийг цайвар цэнхэр өнгийн муж илэрхийлнэ. Энэ бүсээс дээш Y_2O_3 үүснэ. Энэ бүсийн доор Fe_2O_3 үүснэ.⁴

YIG-ийн фазын диаграмыг (Зураг 23)-т үзүүлэв. μ_Y , μ_{Fe} , μ_O химийн потенциалууд нь тэдгээрийн элемент фазауд (Y, Fe ба O_2 молекул) болон исэл (Fe_2O_3 ба Y_2O_3)-ийн фазын утгуудаар хязгаарлагддаг. Туршилтын ажлаар нэмэлт фаз үүссэний улмаас соронзон шинж чанарт нөлөөлж байгаа үр дүн гарсан ба фазын диаграмын систем нь ижилхэн учраас бид фазын диаграмыг нарийвчлан тодорхойлолж цаг алдалгүй бусад судлаачдын ажлаас ишлэн хэрэглэж байгаа

⁴ J.Appl.Phys. **128**, 183904 (2020); doi: 10.1063/5.0021862

болно. Энд (А ба D буюу $\mu_{Fe} = 0$) цэгүүд нь бага хүчилтөрөгчтэй (О-бага) эсвэл төмрөөр баялаг (Fe-их) нөхцөл бол (В ба С буюу $\mu_O = 0$) цэгүүд нь хүчилтөрөгчөөр баялаг (О-их) нөхцлийг илэрхийлнэ.

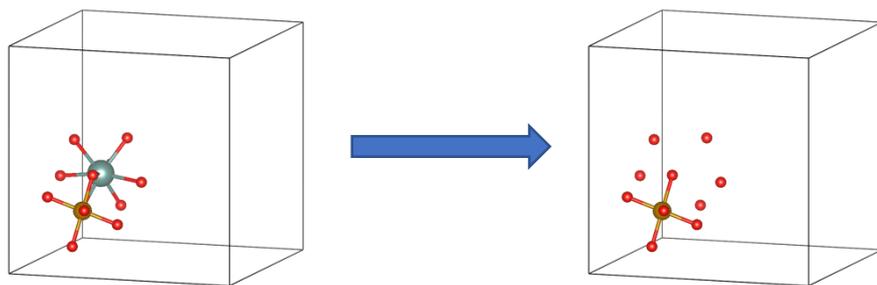
Зураг 24-т харагдаж байгаачлан YIG-н системд хоёр төрлийн дэд тортой төмрийн атом байх ба тетраэдр (Fe^{Tet}) ба октаэдр (Fe^{Oct}) төмрийн атомууд нь харгалзан дөрөв болон зургаан хүчилтөрөгчийн атомтай холбогдоно. Иймд дефектүүдээ үүсгэхдээ төмрийн атомуудын дэд торууд дээр анхаарал хандуулах шаардлагатай.



Зураг 14. YIG системийн бүтэц

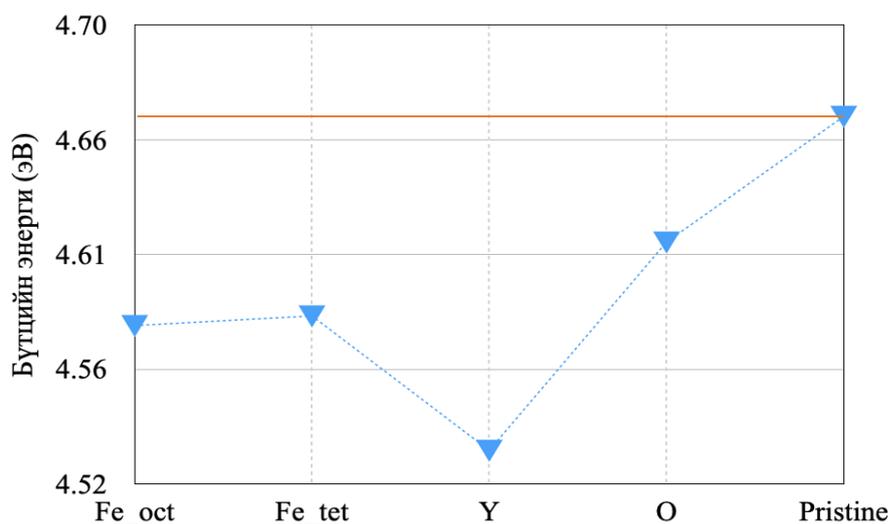
Дефекттэй тооцоололд вакэнси ($V_{Fe^{Oct}}$, $V_{Fe^{Tet}}$, V_Y , V_O), бүтцийн завсрын (I_{Fe} , I_Y , I_O), байрлалын бус (Fe_Y , $Y_{Fe^{Oct}}$, $Y_{Fe^{Tet}}$) болон Френкел ($F_{Fe^{Oct}}$, $F_{Fe^{Tet}}$, F_O , F_Y) зэрэг нийт 14 төрлийн дефекттэй бүтцийг авч үзсэн.

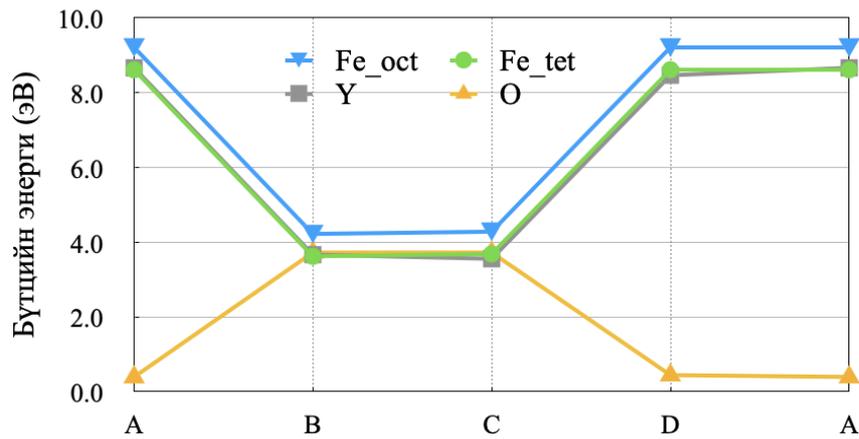
Вакэнси дефект ($V_{Fe^{Oct}}$, $V_{Fe^{Tet}}$, V_Y , V_O): Оронт тор дахь тодорхой атомыг сугалан авах буюу нийт 160 атомаас октаэдр Fe атом ($V_{Fe^{Oct}}$), тетраэдр Fe атом ($V_{Fe^{Tet}}$), иттрийн атом (V_Y) болон хүчилтөрөгчийн атомыг (V_O) сугалан авч нийт 159 атомтай вакэнси бүхий бүтэц үүсгэн тооцоолол явуулсан. Дефектийн жишээ загварыг Зураг 25-д үзүүлэв.



Зураг 25. Вакэнси дефект үүсгэх жишээ. Y атомын вакэнси.

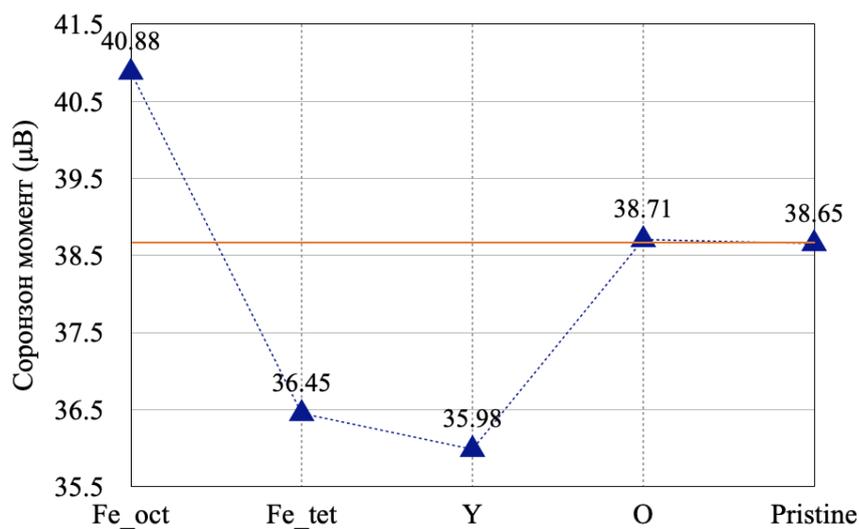
Бүтцийн энергийг химийн потенциалын нөлөөлөлгүй үед тооцоход $V_{Fe^{Oct}}$, $V_{Fe^{Tet}}$, V_Y , V_O вакэнси дефектүүд цэвэр төлвийн бүтцийн энергиэс бага энергитэй (Зураг 26а) үр дүн үзүүлсэн ба YIG системд уг дефектүүд бүгд үүсэх боломжтой. Иймд дараах дефектүүд ямар нөхцөлд түлхүү үүсэх боломжтойг шалгах зорилгоор вакэнси дефекттэй системүүдийн бүтцийн энергийг химийн потенциалас хамааруулан дүрсэлсэн үр дүнг (Зураг 4б)-д үзүүллээ. Химийн потенциал тооцсон үед V_O бүтэц нь бусад вакэнси дефектээс бага бүтцийн энергитэй байгаа ба эдгээр нь O-бага (A ба D) нөхцөл болон O-их (B ба C) нөхцөлд харгалзан 0.39 эВ ба 3.72 эВ утгатай байна. $V_{Fe^{Oct}}$, $V_{Fe^{Tet}}$, V_Y төрлийн дефектүүд нь O-их (B ба C) нөхцөлд харгалзан 4.22 эВ, 3.62 эВ, 3.66 эВ утгатай байгаа ба хүчилтөрөгчөөр баялаг нөхцөлд дээрх дефектүүд үүсэх магадлалтай.





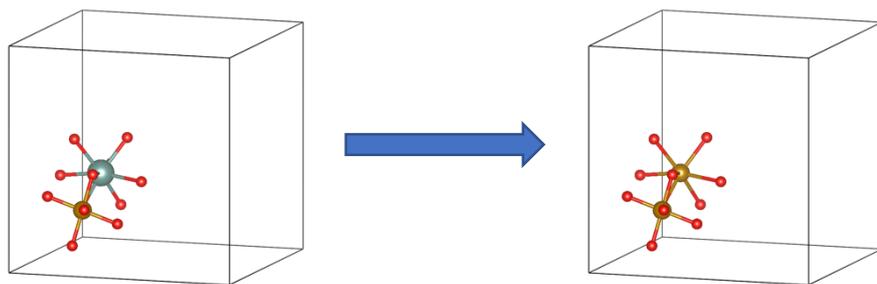
Зураг 26. Вакэнси дефектийн (а) бүтцийн энерги ба дефектгүй цэвэр төлвийн бүтцийн энергийн харьцуулалт, (б) бүтцийн энергийг химийн потенциалас хамааруулан тодорхойлсон үр дүн.

Вакэнси дефектүүд системийн нийт соронзон моментод хэрхэн нөлөөлөх нөлөөллийг шалгахар дефект бүрийн соронзон моментийг тооцсон тооцооллын үр дүнг Зураг 27-д үзүүллээ. $V_{Fe^{Oct}}$ дефекттэй үед системийн нийт соронзон момент өссөн, $V_{Fe^{Tet}}$ ба V_Y дефекттэй үед нийт соронзон момент буурсан бол V_O дефект соронзон моментод үнэмлэхүйц нөлөө үзүүлээгүй болно. YIG нэгдлийн феррисоронзон шинж чанар нь систем дэх төрмийн атомуудын дэд тор хоорондын харилцан үйлчлэлээс үүсдэг тул октаэдр болон тетраэдр дэд торон дээр байрлах төмрийн атомын вакэнси үүсгэсэн дефектүүд соронзон моментод шууд нөлөө үзүүлж байна.



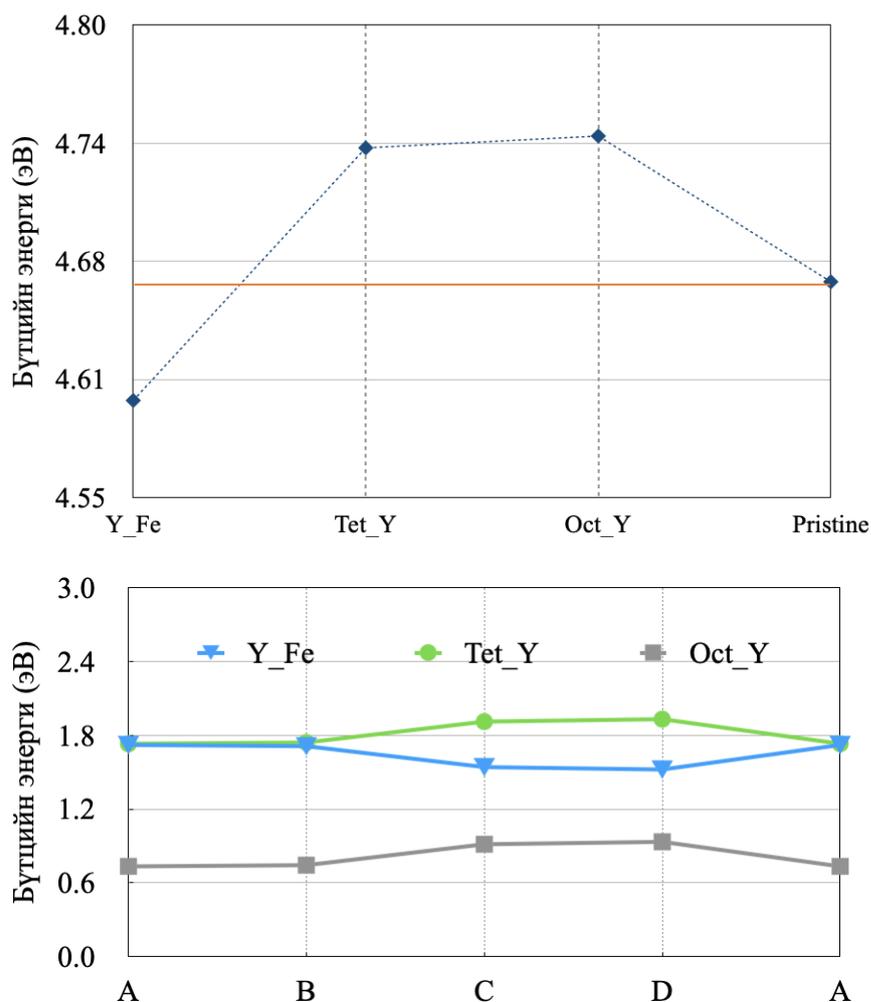
Зураг 27. Вакэнси дефекттэй бүтцүүдийн соронзон моментийн утга

Байрлалын бус дефект (Fe_Y , Y_{Fe}^{Oct} , Y_{Fe}^{Tet}): Байрлалын бус (A_B) дефект үүсгэхдээ В атомын байрлал дээр А атомыг В атомаар сольж үүсгэсэн. Дефектийн жишээ загварыг Зураг 28-д үзүүлэв. Төмрийн атомыг иттрийн атомын байрлалд суулгасан (Fe_Y), иттрийн атомыг октаэдр төмрийн атомын байрлал дээр суулгасан (Y_{Fe}^{Oct}) ба иттрийн атомыг тетраэдр төмрийн атомын байрлал дээрх суулгасан (Y_{Fe}^{Tet}) дефектүүд үүсгэн нийт 160 атомтай систем дээр тооцоолол явуулсан.



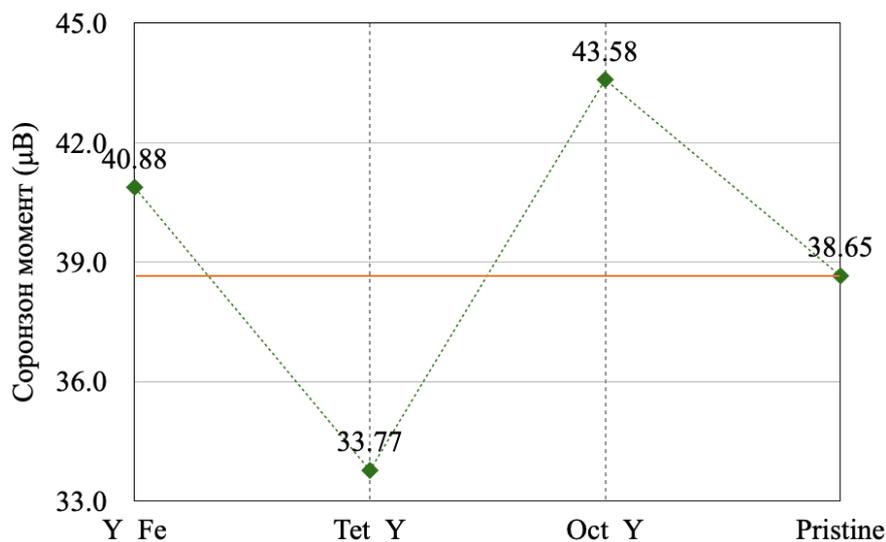
Зураг 28. Байрлалын бус дефектийн жишээ. Fe атом Y атомын байрлал дээрх дефект (Fe_Y)

Бүтцийн энергийг химийн потенциалын нөлөөлөлгүй үед тооцоход Y_{Fe}^{Oct} , Y_{Fe}^{Tet} дефектүүд цэвэр төлвийн бүтцийн энергиэс их энергитэй (Зураг 29а) үр дүн үзүүлсэн ба YIG системд уг дефектүүд бүгд үүсэх магадлал бага. Харин Fe_Y дефектийн бүтцийн энерги цэвэр төлвийнхөөс бага утгатай байна. Химийн потенциал тооцсон үед Fe_Y дефектийн бүтцийн энерги (1.52 эВ ~ 1.72 эВ) болон Y_{Fe}^{Tet} дефектийн бүтцийн энергитэй (1.74 эВ ~ 1.91 эВ) ойролцоо утгатай бөгөөд эдгээр нь Y_{Fe}^{Oct} дефектийн бүтцийн энергиэс (0.73 эВ ~ 0.93 эВ) их байна. Байрлалын бус дефектүүд дундаас үүсэх магадлал хамгийн ихтэй буюу бүтцийн энерги багатай дефект болох Fe_Y дефектийн үүсэх нөхцлийн нэмэлт мэдээллийг химийн потенциал тооцсон үр дүнгээс харах боломжгүй байна. Учир нь бүтцийн энерги багасч буй C ба D цэгүүд нь O-их ба O-бага нөхцөлд харгалзаж байгаагаас бид уг дефектийн үүсэх нөхцлийн тухай хариулт хэлэх боломжгүйд хүрч байна.



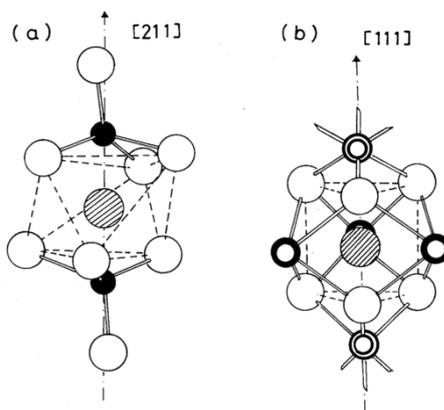
Зураг 29. Байрлалын бус дефектийн а) бүтцийн энерги ба дефектгүй цэвэр төлвийн бүтцийн энергийн харьцуулалт, б) бүтцийн энергийг химийн потенциалас хамааруулан тодорхойлсон үр дүн.

Байрлалын бус дефектүүд системийн нийт соронзон моментод хэрхэн нөлөөлөх нөлөөллийг шалгахад дефект бүрийн соронзон моментийг тооцсон тооцооллын үр дүнг (Зураг 8)-д үзүүлээ. Y_{Fe}^{Oct} дефекттэй үед системийн нийт соронзон момент буурсан, Y_{Fe}^{Tet} ба Fe_Y дефекттэй үед нийт соронзон момент өссөн болно.

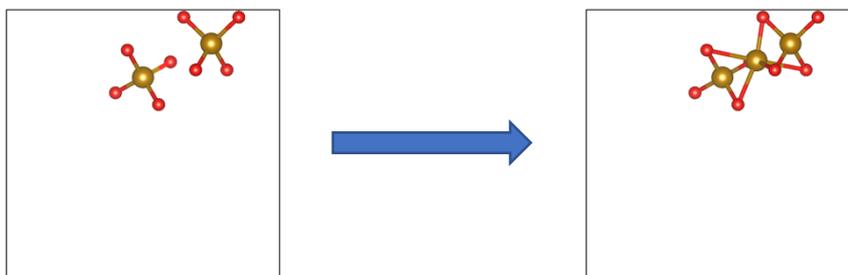


Зураг 30. Байрлалын бус дефекттэй бүтцүүдийн соронзон моментийн утга

Бүтцийн завсрын дефект (I_{Fe} , I_Y , I_O): 160 атомтай систем доторх хоосон орон зайд Fe, O, Y атом нэмж байрлуулан (I_{Fe} , I_Y , I_O) завсрын дефектүүд үүсгэн 161 атомтай системийн тооцоо гүйцэтгэсэн. YIG системд хоёр төрлийн завсрын хоосон орон зай байдаг бөгөөд уг байрлалуудын загварыг Зураг 31-д үзүүлэв. Зураг 31а болон б-д үзүүлсэн боломжит завсрын байрлалуудаас эхний байрлалыг сонгон авч тооцоо хийсэн болно.

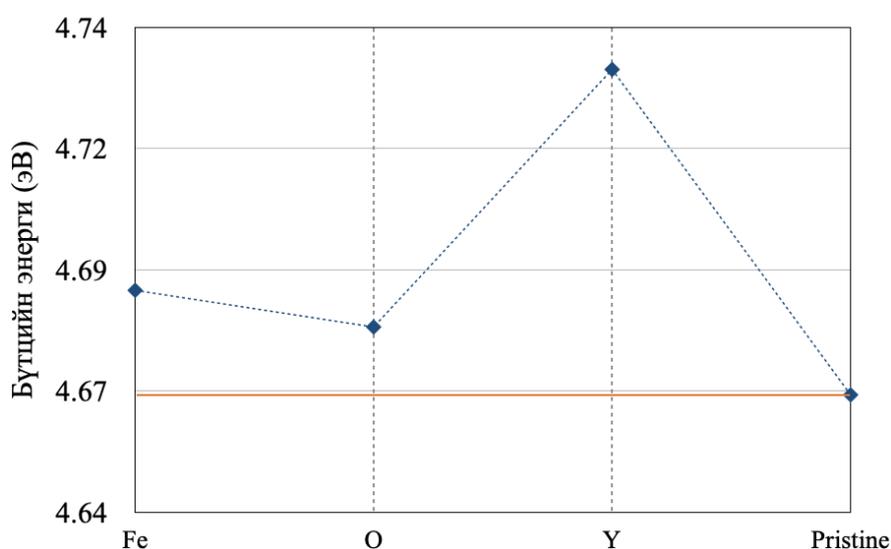


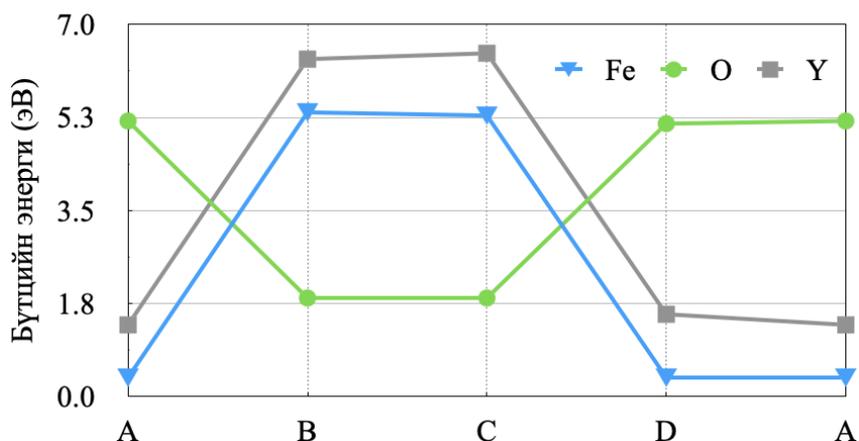
Зураг 31. YIG системд байж болох боломжит завсрын байрлалуудын загвар. (а) Хоёр тетраэдр төмрийн атомын хоорондох завсрын байрлал, (б) хоёр октаэдр төмрийн атом болон гурван итрийн атомын хоорондох завсрын байрлал.



Зураг 32. Бүтцийн завсрын дефектийн жишээ. Fe атом завсрын байрлал дээрх дефект (I_{Fe})

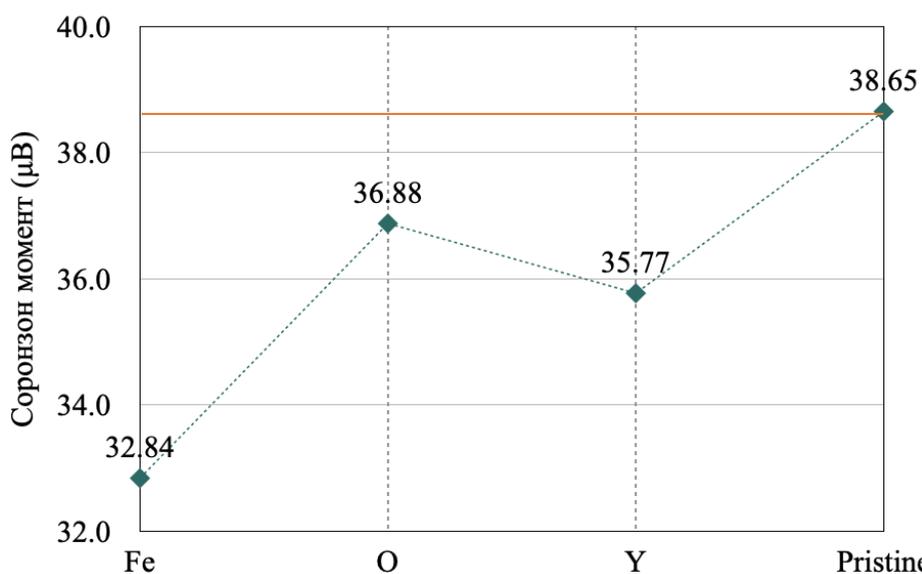
Бүтцийн энергийг химийн потенциалын нөлөөлөлгүй үед тооцоход I_{Fe} , I_{γ} , I_{\circ} дефектүүд цэвэр төлвийн бүтцийн энергээс их энергитэй (Зураг 33а) үр дүн үзүүлсэн ба YIG системд уг дефектүүд үүсэх магадлал бага. Химийн потенциал тооцсон (Зураг 33б) үед I_{\circ} дефект нь O-их нөхцөлд 1.85 эВ бүтцийн энергитэй ба I_{Fe} болон I_{γ} дефектүүд нь O-бага нөхцөлд харгалзан 0.36 эВ ба 1.35 эВ бүтцийн энергийн утгатай байна. Цэвэр төлвийн системийн бүтцийн энергийн 4.66 эВ утгаас дээрх утгууд бага буюу I_{\circ} дефект нь O-их (B ба C) нөхцөлд үүсэх, I_{Fe} болон I_{γ} дефектүүд нь O-бага (A ба D) нөхцөлд үүсэх боломжтой боловч үндсэн бүтцийн энерги нь 4.66 эВ утгаас их учраас завсрын дефектүүд YIG системд үүсэх боломж бага гэж үзэж байна.





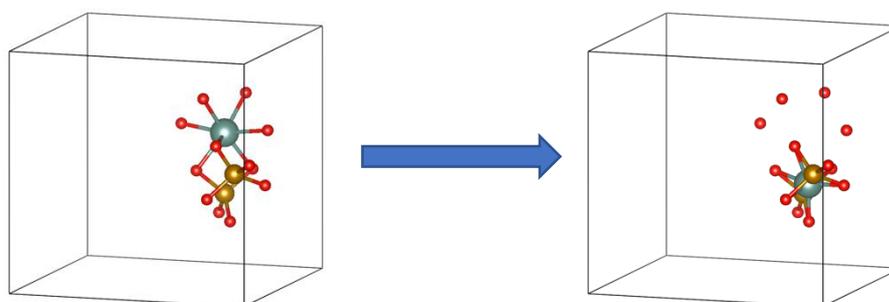
Зураг 33. Бүтцийн завсрын дефектийн бүтцийн энерги

Химийн потенциал тооцсон үр дүнг үндэслэн завсрын дефектүүд үүсэх боломжтой гэж үзвэл завсрын дефектүүд нь системийн нийт соронзон моментод хэрхэн нөлөөлөхийг Зураг 34-т үзүүллээ.



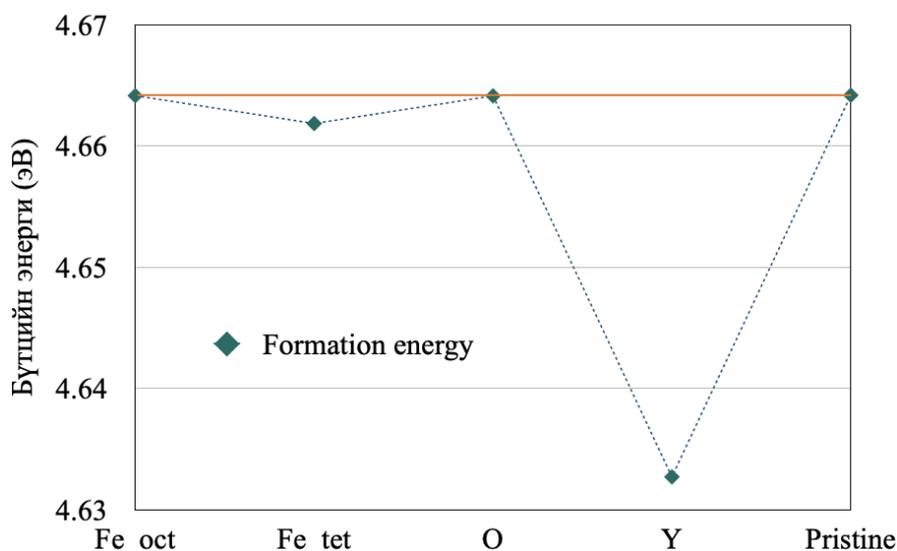
Зураг 34. Бүтцийн бус дефектийн соронзон моментийн утга

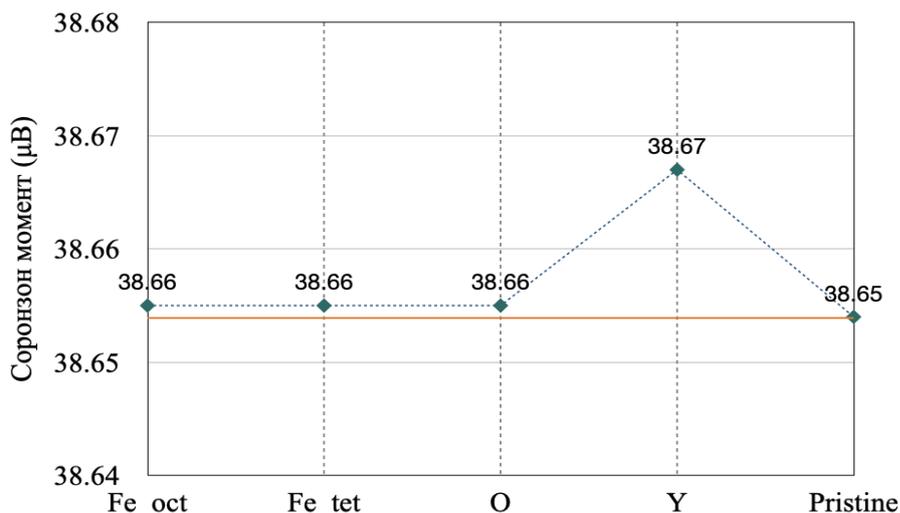
Френкел дефект ($F_{Fe^{Oct}}$, $F_{Fe^{Tet}}$, F_O , F_Y): 160 атомтай систем доторх хоосон орон зайд А атом нэмж байрлуулан А атомын өмнөх байрлалд вакэнси үүсгэж Френкел дефектийг загварчилсан ба нийт 160 атомтай системийн тооцоо гүйцэтгэсэн.



Зураг 35. Френкел дефектийн жишээ. Y атомын Френкел дефект (F_Y)

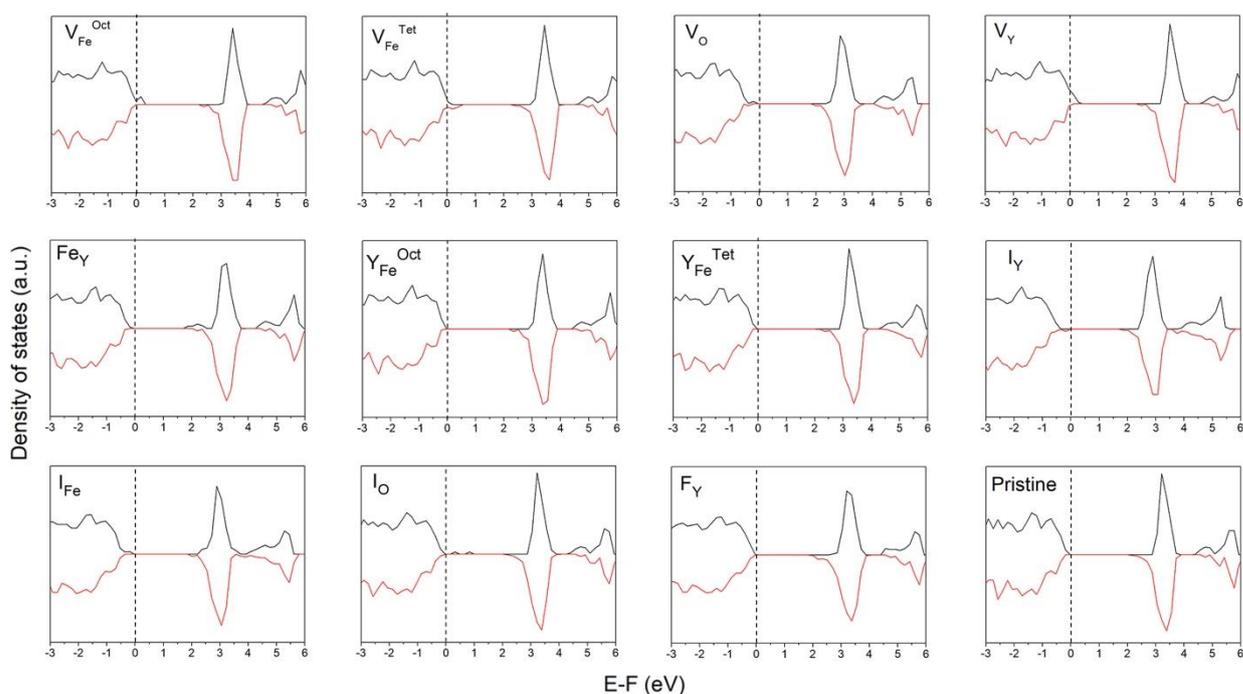
Френкел дефект үүсгэсэн F_{Fe}^{Oct} , F_{Fe}^{Tet} , F_O , F_Y бүтцүүдэд реляксац хийсний дараа завсрын байрлал дахь атом нь анхны байрлалдаа суурьшсан болохыг Зураг 36-аас харж болно. Энд F_{Fe}^{Oct} , F_{Fe}^{Tet} , F_O төрлийн Френкел дефектийн бүтцийн энергийн үр дүн болон системийн соронзон моментийн үр дүнгүүд нь цэвэр төлвийн үр дүнгээс зөрөхгүй буюу ялгаагүй байна. Иймд эдгээр Френкел дефектийн нөлөөг авч үзэхгүй байж болно. Харин Y атомын хувьд үүсгэсэн F_Y дефектийн бүтцийн энерги үндсэн YIG системийн бүтцийн энергиэс бага утгатай гарсан тул үүсэх боломжтой дефект гэж үзсэн. F_Y дефект системийн нийт соронзон моментод өөрчлөлт үзүүлээгүй.



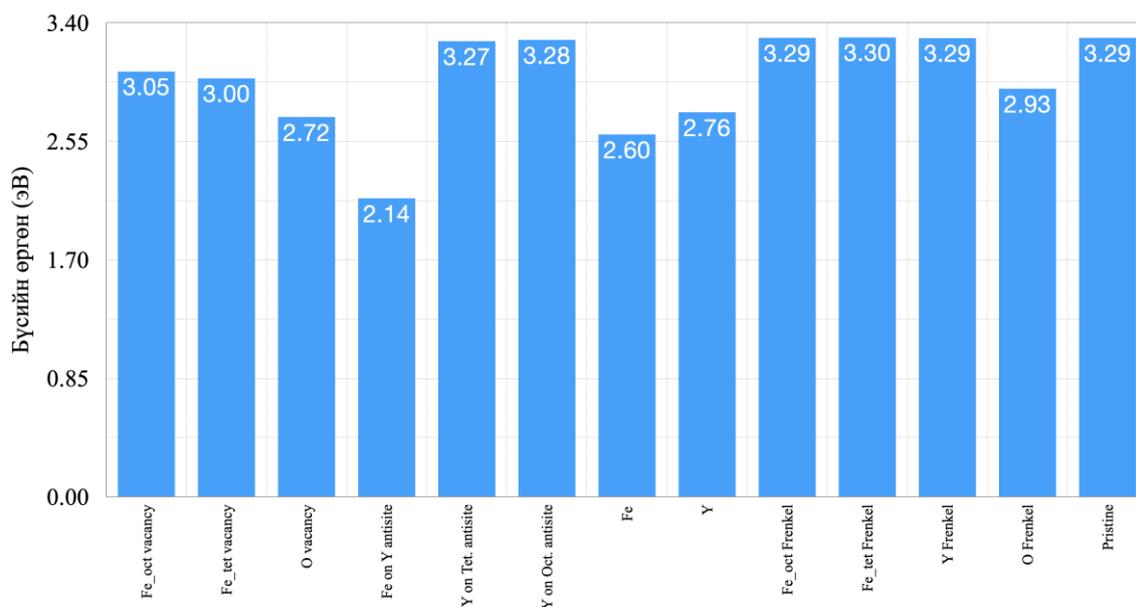


Зураг 36. Френкел дефектийн бүтцийн энерги, Френкел дефектийн соронзон моментийн утга

Зураг 37-д нийт дефектүүдийн төлвийн нягтыг үзүүлээ. YIG системд янз бүрийн дотоод цэгэн дефект үүсгэн соронзон шинж чанарт нь нөлөөлөх нөлөөллийг судлах зорилгоор дээрх тооцооллуудыг хийсэн тул төлвийн нягтын үр дүн чухал шаардлагатай биш ч цаашлан бүсийн өргөн, дамжууллын шинж чанарыг нь судлах шаардлагатай үед энэ үр дүн чухал. Дефекттэй системүүдийн бүсийн өргөний (band gap) утгуудыг Зураг 38-д үзүүлээ.



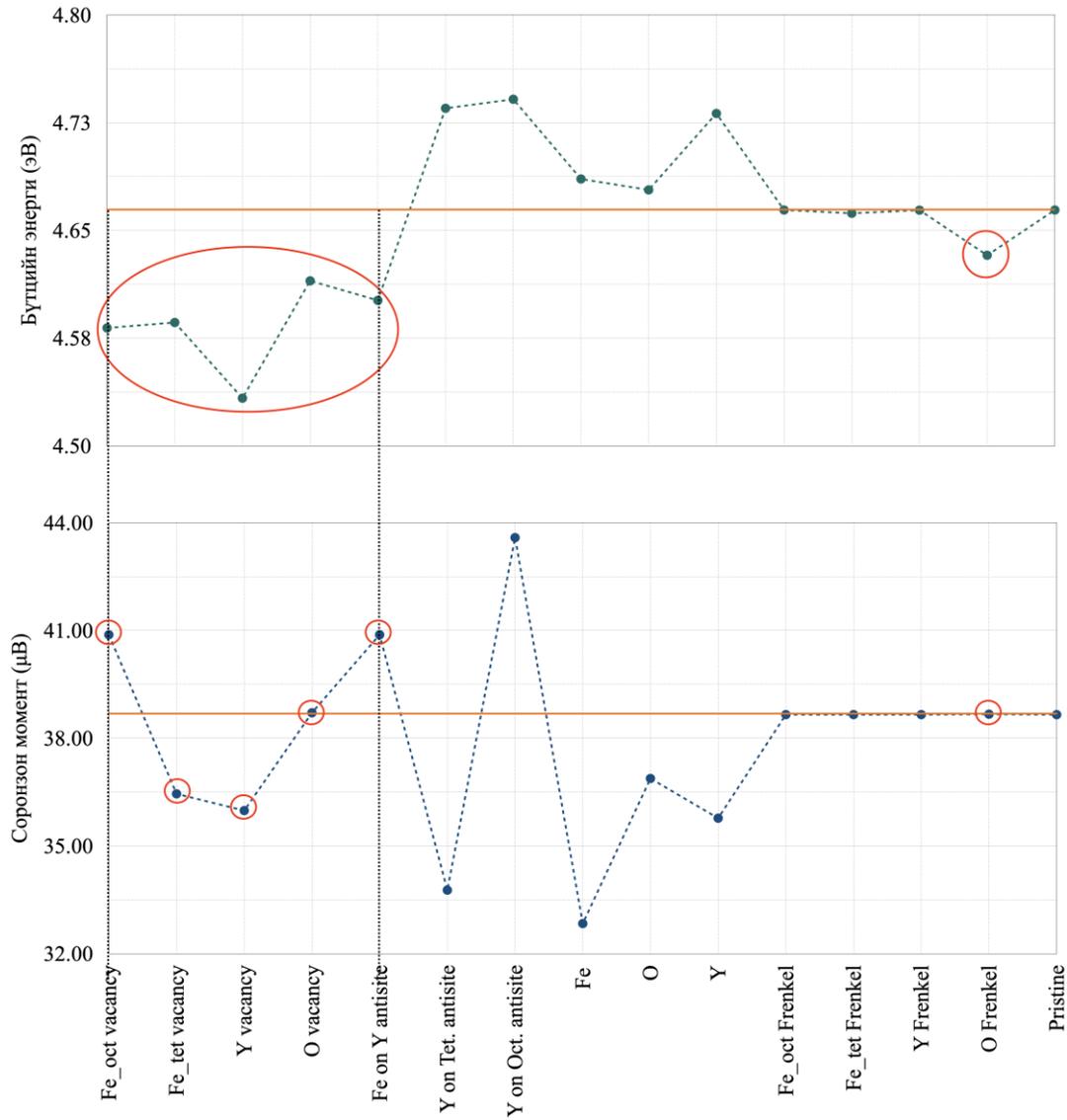
Зураг 37. Дефект үүсгэсэн бүтцүүдийн төлвийн нягт



Зураг 38. Дефекттэй системүүдийн бүсийн өргөний утга

Нийт дефектүүдийн бүтцийн энерги ба соронзон моментийн утгуудыг нэгтгэн Зураг 39-д үзүүлэв. Энд V_{Fe}^{Oct} , V_{Fe}^{Tet} , V_Y , V_O , Fe_Y , F_Y дефектүүд $Y_3Fe_5O_{12}$ системд үүсэх боломжтой дотоод цэгэн дефектүүд болохыг тогтоолоо. Химийн потенциал тооцсон үр дүнгээс харахад V_O дефект нь хүчилтөрөгч их, бага аль ч нөхцөлд үүсэх боломжтой бол V_{Fe}^{Oct} , V_{Fe}^{Tet} , V_Y төрлийн дефектүүд нь хүчилтөрөгчөөр баялаг нөхцөлд л үүсэх боломжтой. Fe_Y , F_Y дефектүүдийн үүсэх нөхцөлийг химийн потенциал ашиглан тодорхойлсон үр дүнгээс тайлбарлах боломжгүй.

Эдгээр дефектүүдээс V_{Fe}^{Oct} болон Fe_Y дефектүүд нь системийн соронзон шинж чанарыг ихэсгэж байгаа ба V_{Fe}^{Tet} болон V_Y дефектүүд нь соронзон шинж чанарыг багасгаж байна. Харин V_O болон F_Y дефектүүд нь системийн соронзон шинж чанарт нөлөө үзүүлэхгүй байна.



Зураг 39. Нийт дефектүүдийн бүтцийн энерги ба соронзон моментийн утгууд

Хүснэгт 7. Онолын тооцооллын үр дүн

	Нийт энерги (эВ)	Төлөвийн энерги (эВ)	Соронзон момент (μв)	Хоритой бүсийн өргөн (эВ)
Pristine	-1214.0622	4.6642	38.654	3.291
Fe_oct vacancy	-1200.6029	4.5821	40.879	3.050
Fe_tet vacancy	-1201.2012	4.5859	36.449	3.001
Y vacancy	-1195.0231	4.5332	35.983	-
O vacancy	-1205.9513	4.6149	38.706	2.723
Fe on Y antisite	-1206.2158	4.6013	40.879	2.140
Y on Tet. antisite	-1218.4570	4.7350	33.768	3.267
Y on Oct. antisite	-1219.4549	4.7413	43.584	3.276
Fe	-1217.9547	4.6858	32.837	2.598
O	-1216.5967	4.6782	36.877	-
Y	-1223.0885	4.7314	35.771	2.758
Fe_oct Frenkel	-1214.0621	4.6642	38.655	3.291
Fe_tet Frenkel	-1213.6942	4.6619	38.655	3.295
Y Frenkel	-1214.0595	4.6641	38.655	3.290
O Frenkel	-1209.0283	4.6327	38.667	2.927

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Д.Батмөнх “Улаанбаатар хотод тархах цахилгаан соронзон долгионы бохирдол” ССТ, 2014 он
- [2] J. Mater. Eng. Perform., 9 (2000), pp. 350-354
- [7] Zhang L, Bi S and Liu M 2018 Intech Open p 8
- [8] Sepelak V, Feldhogg A and Heitijans P 2006 Chemistry of Materials 18 3057
- [9] Tretiakov Yu D, Oleinikov N N and Granik V A 1973 Physical and Chemical Basis of Ferrites Thermal Treatment (Moscow: Moscow State University Press) p 200 (In Russ)
- [10] Selutin G E, Gavrilov Yu Yu et al 2010 Chemistry for Sustainable Development 18 301
- [11] П.Б. Фабричный, К.В. Похолок, Мессбауэровская спектроскопия и ее применение для химической диагностики неорганических материалов, М., 2012
- [12] T.C. Gibb, Principles of Mössbauer Spectroscopy, Chapman and Hall, London 1976
- [13] Химические применения мессбауэровской спектроскопии. Под ред. Гольданского В.И. М.: Мир, 1970
- [14] Gutlich P., Eckhard B., Trautwein A. Mossbauer spectroscopy and transition metal chemistry, Springer Verlag, 2010
- [15] Royal Society of Chemistry website, Introduction to Mössbauer Spectroscopy
- [16] А.А. Новакова, Т.Ю. Киселова, “Мессбауэровская спектроскопия в физике конденсированного состояния” Спецпрактикум часть 1, Москва 2019

**“ЦАХИЛГААН СОРОНЗОН ДОЛГИОНЫ ХАМГААЛАЛТ БОЛОН БИО-АНАГААХ
УХААНД ХЭРЭГЛЭГДЭХ ФЕРРИТ ФУНКЦИОНАЛЬ СИСТЕМИЙН БҮТЦИЙН
БОЛОН СОРОНЗОН ШИНЖ ЧАНАРЫН СУДАЛГАА” ГАДААДТАЙ ХАМТАРСАН
ТӨСЛИЙН ХҮРЭЭНД 2019-2022 ОНД ХЭВЛҮҮЛСЭН БҮТЭЭЛИЙН ТАЛААР**

2019-2022 онд академич Д.Сангаагийн удирдсан “Цахилгаан соронзон долгионы хамгаалалт болон био-анагаах ухаанд хэрэглэгдэх феррит функциональ системийн бүтцийн болон соронзон шинж чанарын судалгаа” гадаадтай хамтарсан төслийн хүрээнд имфакт фактор бүхий мэргэжлийн сэтгүүлд 5 эрдэм шинжилгээний өгүүлэл, 1 гарын авлага хэвлүүлж, 3 илтгэл олон улсын хуралд илтгэсэн байна.

Хэлэлцүүлсэн илтгэл

1. О.Намуундарь, Н.Жаргалан, Б.Энхмэнд, Г.Буянцэцэг, “Цахилгаан соронзон долгионы интерференцээс хамгаалах $Y_3Fe_5O_{12}$ нэгдэл агуулсан соронзон бэх гарган авах нь”, Монголын Физикийн Нийгэмлэгийн хурал, 2021 он
2. O.Namuundari, J.Davaasambuу, N.Jargalan, D.Odkhuu, T.Yu.Kiseleva, “First-principles calculation of the electronic structure and magnetic properties of yttrium iron garnet ($Y_3Fe_5O_{12}$)”, International Conference on Materials Science, Mongolia, 2021.
3. S. Kobayashi, T. Kiseleva, D. Sangaa, N. Jargalan, E. Uyanga “Magnetic vortex mobility for hollow Fe_3O_4 submicron particles studied by a hysteresis scaling technique” The proceedings of the 67th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, 2022.

ХАВСРАЛТ 2.

“ЦАХИЛГААН СОРОНЗОН ДОЛГИОНЫ ХАМГААЛАЛТ БОЛОН БИО-АНАГААХ УХААНД ХЭРЭГЛЭГДЭХ ФЕРРИТ ФУНКЦИОНАЛЬ СИСТЕМИЙН БҮТЦИЙН БОЛОН СОРОНЗОН ШИНЖ ЧАНАРЫН СУДАЛГАА” ГАДААДТАЙ ХАМТАРСАН ТӨСЛИЙН ХҮРЭЭНД 2019-2022 ОНД ХЭВЛҮҮЛСЭН БҮТЭЭЛИЙН ЖАГСААЛТ

2019 он

1. T. Yu. Kiseleva, ..., U. Enhnaran, D. Sangaa. *Structure and magnetic properties of mechanochemically synthesized UHMWPE/ferrite composites as precursors for electromagnetic shielding materials*, Journal of Physics: Conference Series 1347 (2019), 012029. IF=0.547

2020 он

1. 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

2021 он

1. T Yu Kiseleva, ... D Sangaa, E Uyanga, *Mechanosynthesized Composite Materials Based on Ultrahigh Molecular Weight Polyethylene Modified with Magnesium Ferrite Particles*, Inorganic Materials: Applied Research (2021) 740 – 749. IF=0.747

2022 он

1. T Yu Kiseleva, ... D Sangaa, E Uyanga et al., *Size-Dependent Structural, Magnetic and Magnetothermal Properties of $Y_3Fe_5O_{12}$ Fine Particles Obtained by SCS*, Nanomaterials (2022) 2733. IF=5.719
2. T Yu Kiseleva, E Uyanga et al., *Structure, Magnetic, And Magnetocaloric Properties Of Submicronic Yttrium Iron Garnet Particles*, Journal of Structural Chemistry (2022) 26-36. IF=0.720

Structure and magnetic properties of mechanochemically synthesized UHMWPE/ferrite composites as precursors for electromagnetic shielding materials

T Yu Kiseleva¹, A S Ilyushin¹, E V Lazareva¹, I P Ivanenko¹, E V Yakuta¹,
A V Khakhalin¹, S I Zholudev², S A Kovaleva³, E T Devyatkina⁴,
T F Grigoryeva⁴, K V Frolov⁵, G P Markov⁶, U Enhnaran⁷, D Sangaa⁷

¹ Moscow M.V.Lomonosov State University, Physics Faculty, 119991, Moscow, Russia

² Technological Institute for Superhard and Carbon Materials, 142190, Troitsk, Moscow region, Russia

³ The Joint Institute of Mechanical Engineering, 220072, Minsk, Belarus

⁴ Institute of Solid state chemistry and mechanochemistry, 630128, Novosibirsk, Russia

⁵ Shubnikov Institute of Crystallography, Moscow, Russia

⁶ Shmidt' Institute of the Physics of the Earth, Moscow, Russia

⁷ Institute of Science and Technology, Ulaan Baator, Mongolia

E-mail: Kiseleva.tyu@gmail.com

Abstract. In this paper, a study of composite materials based on ultrahigh molecular weight polyethylene (UHMWPE) and magnesium ferrite particles — precursors for electromagnetic shielding materials was carried out. Scanning electron microscopy, X-ray diffraction, Mossbauer and FTIR spectroscopy have been applied to study the influence of structural, morphological and magnetic state of ferrite particles on the composite polymer materials formed by the method of mechanochemical activation in mixtures of ferrites with UHMWPE. It was revealed that synthesis method type showed a significant effect on the size, morphology, crystal structure (inversion parameter) and magnetic properties of ferrite particles. All of these studied parameters determine their functional properties as an independent material, and their properties in the composition of the functional polymer composite material.

1. Introduction

Composites combining magnetic materials with polymers have found a wide range of applications in sensors, electromagnetic wave absorbers, vibration isolators, magnetic resonance imaging contrast agents as well as magnets [1]. Incorporation of magnetic fillers into polymeric matrices leads to unique properties which can be implemented in new specific purposes. The problem of protecting electronic equipment and human from electromagnetic and ionizing radiation, both artificial and



Structural, infrared and magnetic properties of $MgAl_xFe_{2-x}O_4$ compounds: Effect of the preparation methods and Al substitution

I. Khishigdemberel^{a,*}, E. Uyanga^a, H. Hirazawa^b, B. Enkhmend^a, I.A. Bobrikov^c, D. Sangaa^a, T. Kiseleva^d

^a Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Sciences, 13330, Ulaanbaatar, Mongolia

^b National Institute of Technology, Niigata College, Ehima, 792 – 8580, Japan

^c Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie Str., Dubna, 141980, Russia

^d 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 $MgAl_xFe_{2-x}O_4$ ($x = 0.0, 0.2, 0.3, 0.7$ 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 $MgAl_xFe_{2-x}O_4$ ferrites for SG and additional $MgAl_2O_4$ 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 $MgAl_xFe_{2-x}O_4$ ferrites for SG and additional $MgAl_2O_4$ 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 Al^{3+} concentration. The tetrahedral force constant (K_T) increases continuously with 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 alternation 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 $MgAl_xFe_{2-x}O_4$ -SR ferrites are higher than those of $MgAl_xFe_{2-x}O_4$ -SG samples. Moreover, doping element is affected to cation distribution between tetrahedral and octahedral sites. For $MgAl_xFe_{2-x}O_4$, 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 ($n-MgFe_2O_4$) for the removal of kinetics of adsorption process [5]. The general chemical formula AB_2O_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 μm), $MgFe_2O_4$ has the highest heating ability of the various commercial ferrites of

* Corresponding author.

E-mail address: 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.

Mechanosynthesized Composite Materials Based on Ultrahigh Molecular Weight Polyethylene Modified with Magnesium Ferrite Particles

[T. Yu. Kiseleva](#) , [E. T. Devyatkina](#), [T. F. Grigoreva](#), [E. V. Yakuta](#), [E. V. Lazareva](#), [S. V. Vosmerikov](#), [S. I. Zholudev](#), [I. P. Ivanenko](#), [G. P. Markov](#), [D. Sangaa](#), [E. Uyanga](#) & [A. S. Ilyushin](#)

Inorganic Materials: Applied Research **12**, 740–749 (2021) | [Cite this article](#)

62 Accesses | [Metrics](#)

Abstract

Composite materials based on ultrahigh molecular weight polyethylene (UHMWPE) and magnesium ferrite particles—precursors for future formation of light protective material against electromagnetic radiation—have been synthesized mechanochemically. By application of scanning electron microscopy, X-ray diffraction, differential scanning calorimetry, and magnetic measurements, the influence of the methods of synthesizing ferrite particles (solid phase, coprecipitation, sol–gel, or mechanochemical synthesis) on the structural and morphological characteristics of UHMWPE/ferrite composite materials has been studied. It is shown that the mechanochemical method of composite formation contributes to an increase in the dispersity of ferrite particles, by their nonuniform distribution in the UHMWPE volume with the transformation of its supramolecular structure. The method of synthesizing ferrite particles has a different effect on the formation of the molecular structure of UHMWPE: the appearance of a larger number of molecular structures with low melting points was a sign of greater homogeneity of mixing using smaller and uniform particles of ferrite. The observed formation of low molecular weight polymer chains should increase the rate of mutual diffusion between the boundaries of the polymer particles, which in sintering processes will lead to better sintering of the particles.



Article

Size-Dependent Structural, Magnetic and Magnetothermal Properties of $Y_3Fe_5O_{12}$ Fine Particles Obtained by SCS

Tatiana Kiseleva ¹, Rashad Abbas ², Kirill Martinson ³, Aleksei Komlev ¹, Evgenia Lazareva ¹, Pavel Tyapkin ⁴, Evgeniy Solodov ¹, Vyacheslav Rusakov ¹, Alexander Pyatakov ¹, Alexander Tishin ¹, Nikolai Perov ^{1,*}, Enkhnarayan Uyanga ⁵, Deleg Sangaa ⁵ and Vadim Popkov ³

¹ Physics Faculty, Moscow M.V. Lomonosov State University, Leninskie Gory, b.1, Str. 2, 119991 Moscow, Russia

² Saint Petersburg State Institute of Technology, 190013 St. Petersburg, Russia

³ Ioffe Institute, Politechnicheskaya Str., 26, 194021 St. Petersburg, Russia

⁴ Institute of Solid-State Chemistry and Mechanochemistry RAS, Kutateladze Str., 18, 630090 Novosibirsk, Russia

⁵ Institute of Physics and Technology, Ulaanbaatar 13330, Mongolia

* Correspondence: perov@magn.ru; Tel.: +7-495-939-1847



Citation: Kiseleva, T.; Abbas, R.; Martinson, K.; Komlev, A.; Lazareva, E.; Tyapkin, P.; Solodov, E.; Rusakov, V.; Pyatakov, A.; Tishin, A.; et al. Size-Dependent Structural, Magnetic and Magnetothermal Properties of $Y_3Fe_5O_{12}$ Fine Particles Obtained by SCS. *Nanomaterials* 2022, 12, 2733. <https://doi.org/10.3390/nano12162733>

Academic Editor: Yang-Ye Cheng

Received: 18 July 2022

Accepted: 5 August 2022

Published: 9 August 2022

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright © 2022 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Abstract Iron-containing oxides are the most important functional substance class and find a tremendous variety of applications. An attractive modern application is their use in biomedical technologies as components in systems for imaging, drug delivery, magnetically mediated hyperthermia, etc. In this paper, we report the results of the experimental investigation of submicron $Y_3Fe_5O_{12}$ garnet particles obtained in different sizes by solution combustion synthesis (SCS) using glycine organic fuel to discuss the interdependence of peculiarities of the crystal and magnetic structure and size's influence on its functional magnetothermal performance. A complex study including Mössbauer and Raman spectroscopy accompanied by X-ray diffractometry, SEM, and measurements of field and temperature magnetic properties were performed. The influence of the size effects and perfectness of structure on the particle set magnetization was revealed. The ranges of different mechanisms of magnetothermal effect in the AC magnetic field were determined.

Keywords: garnet; magnetothermal; heat generation ability; cation distribution; X-ray diffraction; Mössbauer spectroscopy; Raman spectroscopy; magnetic measurements

1. Introduction

Yttrium ferrite $Y_3Fe_5O_{12}$ (YIG) with a garnet structure is well known as an attractive material for practical applications in microwave technology, circulators and phase shifters, and spintronics [1–7]. The possibility for the practical application of ferrite garnets is determined by the presence of a number of effects that manifest themselves in the magnetic, electrical, optical, electromagnetic, and magneto-optical properties. The newly explored applications of this compound are related to several interesting effects arising from the structural distortion caused by the electrical polarizability or hopping charge carriers [8] in the presence of a magnetic field. Another promising effect occurs in fine YIG particles with the redistribution of the spin coupled dipole moments upon the application of an AC magnetic field [9,10]. It results in a functional magnetothermal effect for magnetothermic, ablation [11–15], and photothermal therapy [16] and as a part of organic composite networks [13,17,18].

The YIG crystallographic structure was reviewed in [19,20]. According to known crystallography concepts, YIG belongs to the space group O_h^{10} . There are eight formula units in a cubic YIG unit cell. The trivalent iron atoms occupy the 24d and 16a positions. They are surrounded by oxygen atoms (96 h) with a tetrahedral (for d-site) and octahedral (for a-site) structure. Namely, the structure of YIG has three types of polyhedra: FeO_4 tetrahedra and FeO_6 octahedra are joined alternatively by sharing corners and together share edges

Published: 28 February 2022

STRUCTURE, MAGNETIC, AND MAGNETOCALORIC PROPERTIES OF SUBMICRONIC YTTRIUM IRON GARNET PARTICLES

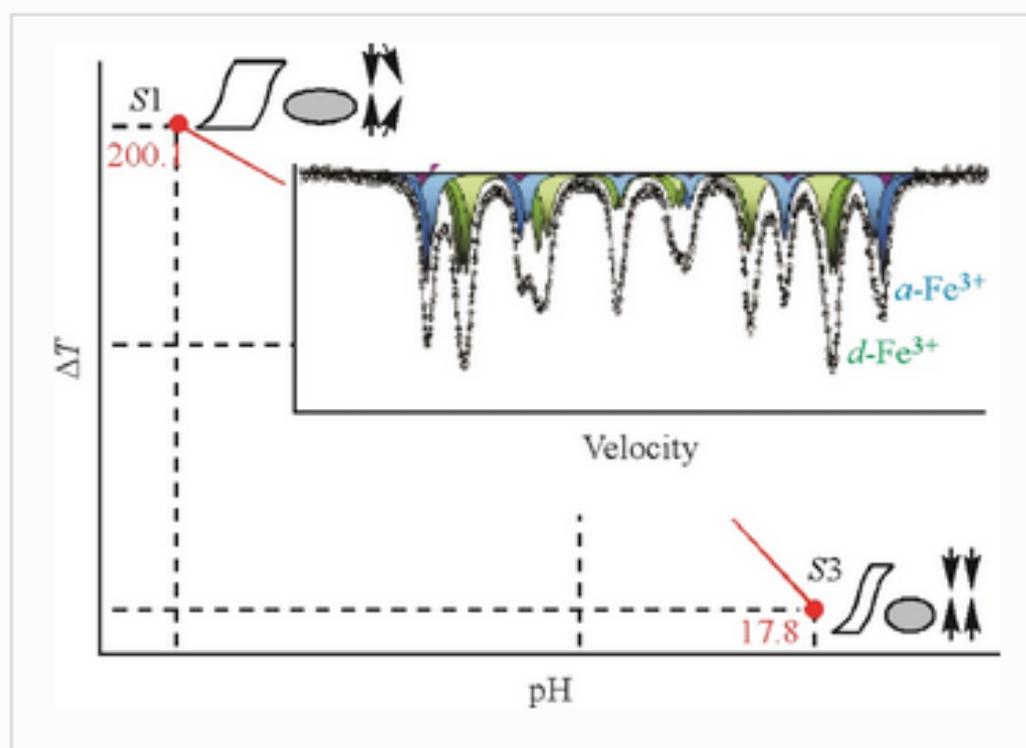
T. Yu. Kisileva[✉], E. Uyanga, O. V. Kostenko, P. Yu. Tyapkin, I. P. Ivanenko, S. I. Zholudev, G. P. Markov, E. T. Davyatkina, N. Jargalan, T. F. Grigorieva, D. Sangaa & A. S. Ilyushin

Journal of Structural Chemistry 63, 26–36 (2022) | [Cite this article](#)

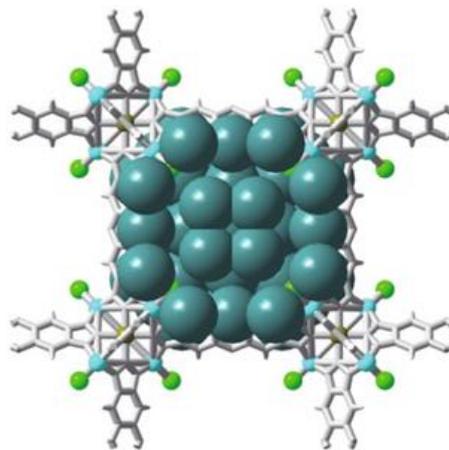
103 Accesses | 1 Citations | [Metrics](#)

Abstract

Scanning electron microscopy, X-ray diffraction, Raman and Mössbauer spectroscopies, field and temperature dependences of magnetic saturation and magnetocaloric effect in alternating magnetic fields are used to study submicron yttrium ferrite particles prepared by reverse coprecipitation from nitrate solutions at various pH values and subsequent heat treatment. The size, phase purity, and structural state of prepared particles determine the magnitude of the magnetocaloric effect exhibited by the particles in the external alternating magnetic field (370 kHz, 1.77 kA/m).



FULLPROF SUITE ПРОГРАММ



Уланбаатар хот
2020 он

УДИРТАЛ

Аливаа туршилтын үр дүнг боловсруулж хэрэгтэй мэдээлээ олж авах процесс нь маш чухал бөгөөд ярвигтай ажил байдаг. Тэгвэл энэхүү гарын авлагыг бодисын кристалл болон соронзон бүтцийг тодорхойлодог чухал ач холбогдолтой Рентген дифрактометр (X-Ray Diffractometer - XRD)-ийн хэмжээний өгөгдлийг боловсруулах арга зүй, програмыг эзэмшүүлэх зорилгоор боловсруулсан болно.

XRD нь нунтаг кристалл бодисоос сарнисан рентген цацрагийн дифракцын эрчмийг орон зайд тогтмол алхамтай сарнилын өнцгөөр өөрчлөх замаар бүртгэдэг (1, 2θ) багаж юм. XRD багажны өөрийнх нь программ нь тухайн бодист өндөр нарийвчлалтай фазын анализ хийдэг. Харин энэ ажилд ашигласан FullProf Suite багц программ нь фазын анализ хийсэн хэмжээний өгөгдлийг Ритвелдийн аргад үндэслэн кристалл бүтцийн анализыг хийж загварчилна. Мөн энэхүү багц программ нь рентген дифракцын спектрт анализ хийхээс гадна бас нейтроны дифракцад ч анализ хийх боломжийг олгодог ба Windows болон Linux үйлдлийн системийн аль алинд нь ажилдаараа давуу талтай юм.

FullProf Suite багц программ нь туршилтын спектрт анализ хийж гарсан үр дүнгээр бүтцийн 3D загвар (FPStudio), холбоосын урт (BondStr), урвуу торын к-вектор (ksearch)-г тодорхойлох зэрэг нэмэлт дэд програмуудыг агуулдаг. Энэ гарын авлагаар туршилтын өгөгдөлд боловсруулалт хийдэг гол программ болох EdPCF болон WinPLOTR дэд програмуудыг танилцуулна.

Доктор (PhD) Э. Уянга
Докторант Ц. Цог-Очир

Шинжлэх Ухааны Академи
Физик, Технологийн Хүрээлэн