

Феррит Нано Соронзон Материалын Био-Анагаахын Хэрэглээ

Д. Сангаа¹,* Б. Тэмүүжин¹, Э. Баянжаргал¹, Б. Энхмэнд¹, Н. Цогбадрах²,
Х. Хиразава (Hirazawa)³, Э. Уянга^{4,4}, И.А. Бобриков⁴, Ш. Чу (Chu)⁵

¹ ШУА, Физик технологийн Хүрээлэн, Улаанбаатар– 13330

² МУИС, ШУС, Физикийн тэнхим, Улаанбаатар– 14201

³Технологийн Үндэсний Хүрээлэн, Ехима хот, 792 – 8580, Япон

⁴ЦШНИ, Нейтрон физикийн Лаборатори, Дубна хот, 141980, ОХУ

⁵ Хятадын ШУА, Их Энергийн физикийн Хүрээлэн, Бээжин, 100049, Хятад

Хувьсах соронзон оронд дулаан ялгаруулдаг шпинел бүтэцтэй феррит төрлийн соронзон нано материалыг хавдрын эсрэг халуун (hyperthermia) эмчилгээнд хэрэглэх зорилгоор судалж байна. Дулаан ялгаруулдаг шинж чанар нь материалын химийн найрлага, ионуудын тархалт, спины чиглэл болон бэлтгэх аргаас шууд хамаардаг. Хатуу төлвийн урвалын арга ашиглан гарган авсан $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ феррит нунтаг материалын хувьсах соронзон оронд дулаан ялгаруулдаг учир шалтгаан, механизм болон соронзон шинж чанарыг рентген дифракц, нейтрон дифракц, синхротрон цацрагийн сарнилын аргаар судлав. Соронзон материалын дулаан ялгаруулдаг механизмыг тайлбарлах үүднээс $MgFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$, $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ болон $MgFe_2O_4$, $Mg(Fe_xAl_{2-x})O_4$ нэгдлүүдийн электрон, соронзон төлвийг квант механикийн тулгуур зарчмын онолоор тооцоолж бодсон үр дүнг тусгав.

Түлхүүр үг: Шпинел, феррит, дулаан ялгаруулалт, халуун (hyperthermia) эмчилгээ, хавдрын эмчилгээ, рентген дифракц, нейтрон дифракц, синхротрон цацрагийн сарнилын спектроскоп, квант механик, тулгуур зарчим

I. ОРШИЛ

Нано соронзон бодисыг анх 1960 онд АНУ-ын Сансар судлалын төв (NASA)-д хэрэглэж эхэлсэн байна. Соронзон шинж чанартай нано материалыг анагаах ухаанд дараах чиглэлээр ашиглаж байна: Хавдрын халуун эмчилгээ, соронзон резонанс зураг (MRI) оношлогоо, эмийн эмчилгээ, Дезоксирибонуклейны хүчил (ДНХ) болон эсийн нарийвчилсан ялгах шинжилгээ зэрэгт өргөнөөр ашиглаж байна[1]. Анагаахын салбарт өргөн хэрэглэгдэж байгаа нано соронзон материалын төрөлд ферритүүд: MFe_2O_4 $M = Mn, Ni, Co, Cu, Mg, Zn, Fe$ болон төмрийн исэл $\gamma - Fe_2O_3$, зарим хайлшууд багтана.

Fe_3O_4 нэгдэлд Mn^{2+} , Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} зэрэг ионуудыг дангаар болон хольж нэмснээр соронзон шинж чанарыг нь өөрчилж, удирдаж болдог учир био-анагаах ухаанд, тухайлбал хавдрын халуун эмчилгээ (hyperthermia)-д өргөн хэрэглэх боломж нээгдэж байна[2].

ШУА-ийн Физик, технологийн хүрээлэнгийн Материал судлалын салбарт орчин үед электроникт болон био-анагаах ухаанд өргөн хэрэглэгдэх боломжтой феррит төрлийн материалын кристалл болон соронзон бүтэц, нейтрон синхротрон дифракцын судалгаа явагдаж байна. Тухайлбал, хавдрын халуун эмчилгээний гол материал болох феррит $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ нэгдлүүдийн соронзон шинж

чанар [3-6], кристалл болон соронзон бүтцийн рентген [7], нейтрон дифракц [8], синхротрон цацрагийн шингээлт [9]-ийн туршлагын судалгаа, кристалл тор дахь ионуудын спин, электроны энергийн түгэлтийн (DFT) онолын судалгааны [9-10] ажлууд хийгджээ.

Феррит төрлийн материалын соронзон оронд дулаан ялгаруулах үзэгдлийн физик мөн чанар нь кристаллын фазын шилжилт, кристалл торын атомуудын түгэлт, соронзон моментын түгэлт, нано бөөмийн соронзон моментын релакс зэрэг зэрэг хатуу биеийн физикийн суурь ойлголтуудтай холбоотой гэж үзэж байна. Ийм ч учраас нейтрон болон синхротрон цацрагийн сарнилын аргууд уг үзэгдлийн мөн чанарыг тайлах гол түлхүүр болоод байна [11].

Зэсийн феррит $CuFe_2O_4$ нь тодорхой температурт удаан хугацааны турш тетрагональ болон куб фазууд тэнцвэртэй шинж чанартайгаар зэрэгцэн оршин байдгийг уг судалгааны үр дүн харууллаа. Хөргөх процессын явцад үүссэн тетрагональ фаз нь тетрагональ гажилтын сонгомол утга ($\gamma = 1.06$)-тай боловч инверсийн параметр нь куб фазаас тетрагональ фаз руу шилжих шилжилтэнд бараг өөрчлөгдөхгүй байгаа нь фазын шилжилтийн загварыг эргэн харахад хүргэж байна. Үүнээс гадна бүтцийн параметруудийн температурын өөрчлөлтийн зүй тогтол нь фазын шилжилтийн гол шалтгаан нь төмөр ба зэсийн атомуудын харилцан шилжилт (миграция) биш, харин VO_6 -

* Electronic address: sangaa@ipt.ac.mn

октаэдруудын Ян-Теллер-ийн гажилттай холбоотой болохыг харуулж байна[3].

II. ФЕРРИТ НАНО МАТЕРИАЛД ДУЛААН ЯЛГАРАХ ҮЗЭГДЭЛ

Дулаан ялгарах үзэгдэл нь бага хэмжээтэй соронзон бөөм доторх соронзон моменты чиглэл өөрчлөгдөж эргэн сэргэх Неел (Néel relaxation) процесс болон уг бөөм өөрийн тэнхлэгээ тойрон эргэх Броун (Brownian relaxation) процесстэй уялдан үүснэ. Хувьсах соронзон оронд байгаа соронзон бөөмийн хувьд гадны соронзон орон, мөн өөрийн дотоод соронзон орны харилцан үйлчлэлийн үр дүнд энерги (дулаан) ялгарна[12]. Гадны хувьсах орны өөрчлөгдөх хугацаа нь давтамжаар тодорхойлогдох ба соронзон бөөмийн дотоод орны эргэн сэргэх хугацаа (relaxation time)-аас бага байна. Нано бөөмийн соронзон релаксийн Неел -ийн (τ_N) болон Броуны (τ_B) эффектив (τ_{eff}) хугацаа дараах тэгшитгэлүүдээр тодорхойлогдоно[12]:

$$\tau_N = \tau_0 \exp(KV_M/k_B T) \quad (1)$$

$$\tau_B = \frac{3V_{hyd}}{k_B T} \eta \quad (2)$$

$$\tau_{eff} = \frac{\tau_B \tau_N}{\tau_B + \tau_N} \quad (3)$$

Энд, τ_0 - тогтмол хэмжигдэхүүн ,ойролцоогоор 10^{-9} сек, K – анизотроп тогтмол, V_M - бөөмийн эзлэхүүн, k_B - Больцманы тогтмол, T – температур, η - зуурамтгайн коэффициент, V_{hyd} - бөөмийн гидродинамик эзлэхүүн.

Хувьсах соронзон оронд феррит нано бөөмийг оруулахад ялгарах чадал (дулааны хэмжээ) P дараах илэрхийллээр тодорхойлогдоно[13]:

$$P = \frac{(mH\omega\tau_{eff})^2}{[2\tau_{eff}k_B T \rho V (1 + \omega^2 \tau_{eff}^2)]} \quad (4)$$

Энд, m - бөөмийн соронзон момент, H - соронзон орны хүчлэг, ω - орны өнцөг давтамж, ρ - нано материалын нягт.

Туршлагын аргаар температурын градиентийн харьцаа ($dT/dt = K \cdot s^{-1}$) –г ашиглан хэмжилтийн эхний 5 минутын хугацаанд дулаан ялгаруулах чадвар ($W \cdot g^{-1}$) –ыг дараах харьцаагаар тооцоолдог арга байна[14]:

$$W \cdot g^{-1} = C \frac{dT}{dt} / M \quad (5)$$

Энд M – дээжийн масс (г), C – дээжийн нийт дулаан багтаамж.

III. НАНО МАТЕРИАЛЫГ ХАВДРЫН ХАЛУУН ЭМЧИЛГЭЭНД ХЭРЭГЛЭХ БОЛОМЖ

Хавдрын эмчилгээг дотор нь мэс засал, хими эмчилгээ, цацрагийн эмчилгээ, халуун эмчилгээ (hyperthermia) гэж хуваана. Хүний биеийн хавдартай хэсгийн эс, хавдартай эрхтэнг $41-46$ $^{\circ}C$ градус хүртэл тусгай аргаар халааж эмчлэхийг халуун эмчилгээ гэж нэрлэнэ. Энэ аргаар цахилгаан соронзон долгион болон лазерыг ашиглан хүний биеийн хавдартай хэсэгт өндөр температур үүсгэж хавдрын өсөлтийг зогсоож, эсийн үхжүүлж хавдрыг эмчилнэ. Халуун эмчилгээний аргыг элэгний хавдрын эмчилгээнд хэрэглэх ерөнхий зарчмыг (Зур. 1)-д үзүүлэв. Нано соронзон төмөр агуулсан бодисыг элэгний хавдартай хэсэгт тариурын тусламжтай оруулна. Өвчтний уг бодис бүхий хэсгийг хувьсах соронзон оронд оруулахад (давтамж 500 кГц) энэхүү бодис дулаан ялгаруулж тэр хэсгийн температур 42.5 (Цельсийн градус) –аас дээш температуртай болоход хавдрын эсийн өсөлт буурч тодорхой хугацааны эмчилгээ үр дүнтэй болно [15].



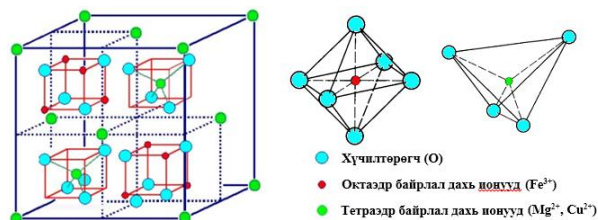
Зур. 1. Соронзон оронд элэгний хавдрын халуун эмчилгээ хийх зарчим

Хавдрын эдүүд нь судас багатай, эрүүл эдтэй харьцуулахад халууныг эсэргүүцэх чадвар багаас гадна эрүүл эстэй харьцуулахад метаболизм (бодисын солилцоо) өндөр байдаг учир халууныг мэдрэх чанар мөн өндөр байдаг чанар нь халуун эмчилгээ үр дүнтэй байх үндэс болдог.

IV. ШПИНЕЛ БҮТЭЦТЭЙ ФЕРРИТ НАНО МАТЕРИАЛУУД

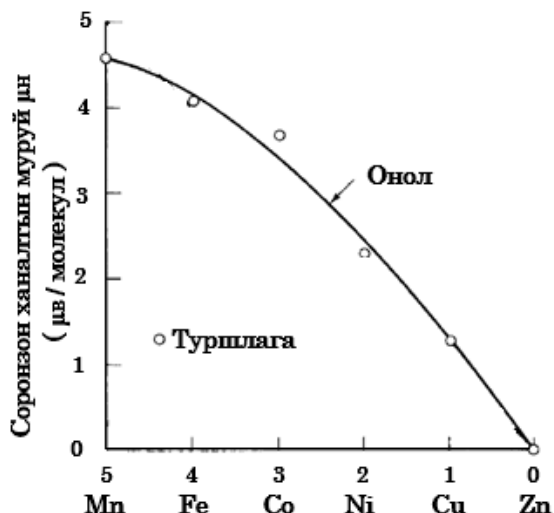
Ерөнхий AB_2O_4 томъёо бүхий соронзон MFe_2O_4 ($M = Mn, Ni, Co, Cu, Mg, Zn, Fe$) феррит нэгдлүүд куб кристалл бүтэцтэй агаад нэг эгэл торд нийт 56 ион (атом) оршино (Зур.

2а). Хүчилтөрөгчийн ионы радиус $\sim 0.13\text{нм}$, металл ионы радиус $\sim 0.08\text{нм}$ хэмжээтэй. Тетраэдр байрлалын төвд А – атом, зангилгаа бүрт О- хүчилтөрөгчийн 4-ион байрладаг бол октаэдр байрлалын төвд В- атом, октаэдрын зангилгаа бүрт О- хүчилтөрөгчийн 6-ион байрлана (Зур. 2б).



Зур. 2 Шпинел бүтэцтэй феррит нэгдлийн кристалл бүтэц

Феррит шпинел нэгдлийн соронзон шинж чанар нь ион бүрийн соронзон момент, А, В байрлал дахь ионуудын түгэлт, харилцан үйлчлэлээс хамаарна.



Зур. 3 $M\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($M = \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$) феррит нэгдлүүдийн соронзон ханалтын утга [16]

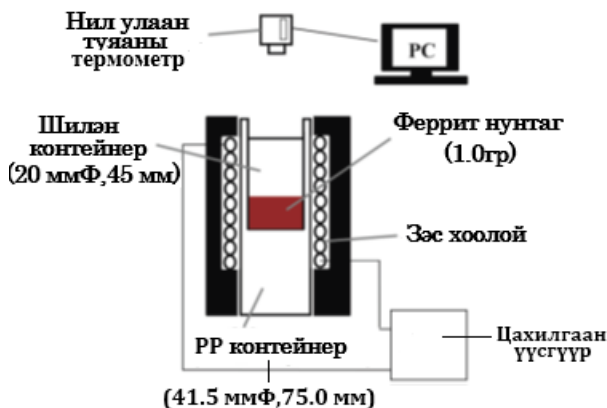
Манганы феррит MnFe_2O_4 -ийн бүх Mn^{2+} ионууд А байрлалд биш харин 80% нь А байрлалд, үлдсэн 20% нь В байрлалд байдаг бол магнийн феррит MgFe_2O_4 -ийн Mg^{2+} -ын 90% нь В байрлалд, 10% нь А байрлалд байрлана. Ийнхүү феррит шпинел нэгдлийн ионууд тетраэдр ба октаэдр байрлалд холилдон байрласнаас хамаарч соронзон шинж чанар өвөрмөц байдлаар илэрнэ (Зур. 3).

Ийнхүү холимог кристалл бүтэц бүхий $(\text{Mg}_x\text{Cu}_{1-x})\text{Fe}_2\text{O}_4$ нэгдлийн соронзон шинж чанар нь MgFe_2O_4 ба CuFe_2O_4 нэг төрлийн шпинел бүтэц бүхий нэгдлээс эрс ялгаатай байдаг.

V. ФЕРРИТ НАНО МАТЕРИАЛЫН СУДАЛГАА

A. Соронзон шинж чанарын судалгаа

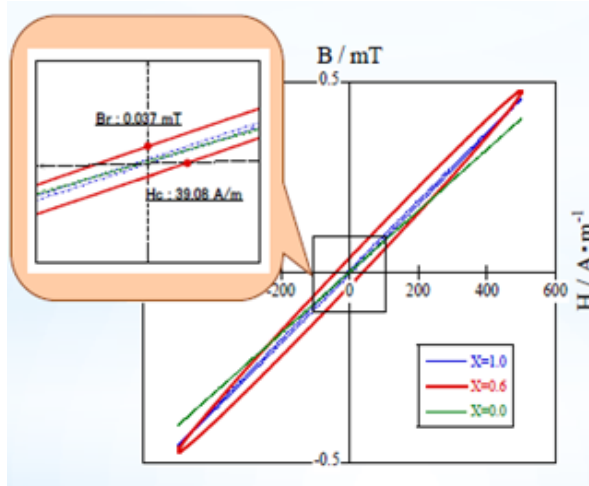
Хувьсах соронзон (АС) оронд феррит буюу төмөр агуулсан нунтаг бодисоос хамгийн их дулаан ялгаруулах чадвартай нь $(\text{Mg}_{x-1}\text{Cu}_x)\text{Fe}_2\text{O}_4$ төрлийн материал гэж туршлагаас тогтоосон юм (Зур.4).

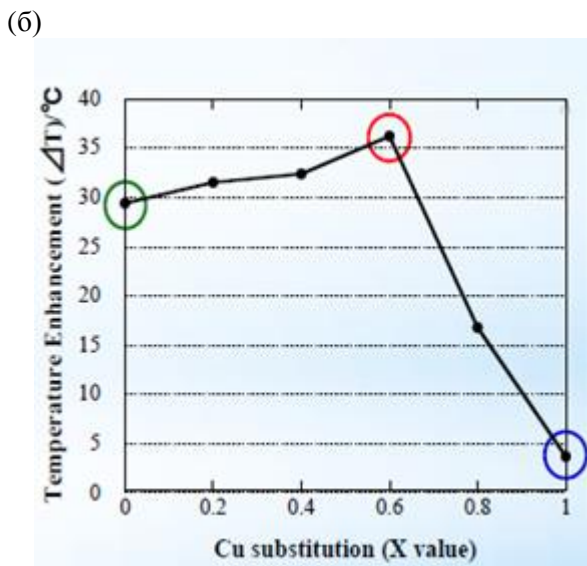


Зур.4. Дулаан ялгаруулалтыг хэмжих төхөөрөмж [5]

Дулаан ялгарах процесс нь соронзон материалын В-Н соронзон шинж чанарын гистересийн алдагдалтай холбоотой төдийгүй энэ төрлийн бодисын кристалл бүтэцтэй, өөрөөр хэлбэл, торын куб бүтэц гажих тутам гистересийн алдагдал ихэсч улмаар дулаан ялгаралтын хэмжээ ихэсдэг.

(a)



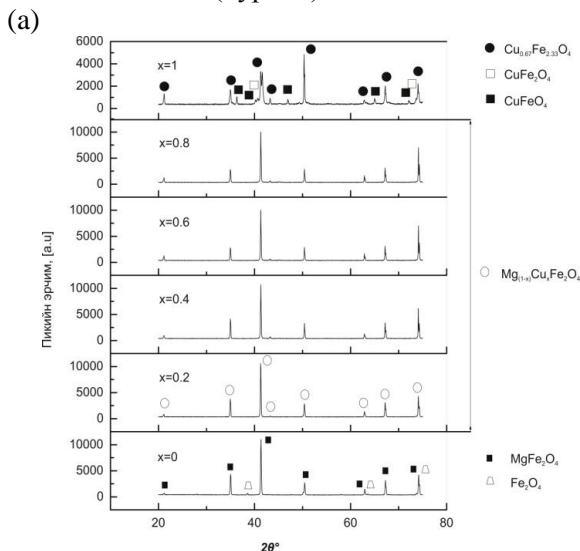


Зур.5. (а) $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ нэгдлийн гистерезисийн муруй. (б) $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ нунтаг нэгдлийн хувьсах соронзон оронд ($H=370$ кГц, $I=1.77$ кА/м) ялгаруулах дулааны хэмжээ ээс (Cu)-ийн орцоос хамаарах зүй тогтол.

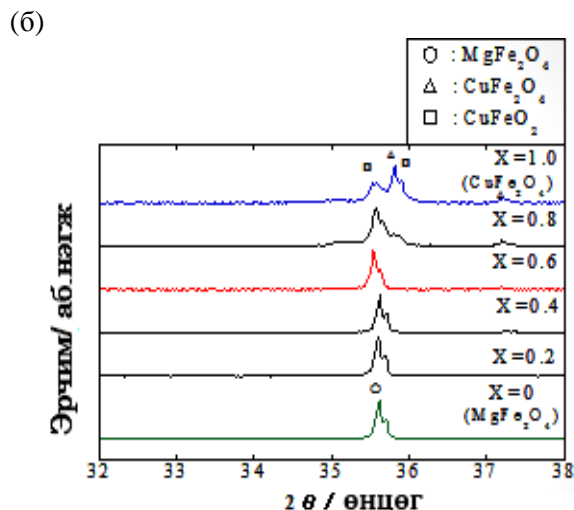
Холимог бүтэц бүхий энэ бодисыг соронзон оронд оруулахад ($H=370$ кГц, $I=1.77$ кА/м) ялгаруулах дулаан нь $x=0$ байх үед $\Delta T=30$ градус, $x=0.6$ үед $\Delta T=37$ градус байна (Зур.5).

В. Рентген дифракцын судалгаа

Феррит төрлийн бүтэцтэй куб кристалл $MgFe_2O_4$ нэгдэлд Cu-ийн атомыг нэмж, орцын хэмжээг өөрчилсөөр $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ холимог бүтэцтэй нэгдлүүд гарган авч, эцэст нь нэг фазтай тетрагонал кристалл $CuFe_2O_4$, гарган авсан 6 төрлийн дээжийн рентген дифракцын өөрчлөлтийг (Зур.6а)-д үзүүлэв. Cu-ийн хэмжээ $x=0.6, 0.8$ утгатай болсон үед дифракцын пик ($2\theta = 35.6$ град.) хуваагдаж байгаа нь шинэ төрлийн $CuFe_2O_4$ фаз үүсч байгааг батална (Зур. 6б).

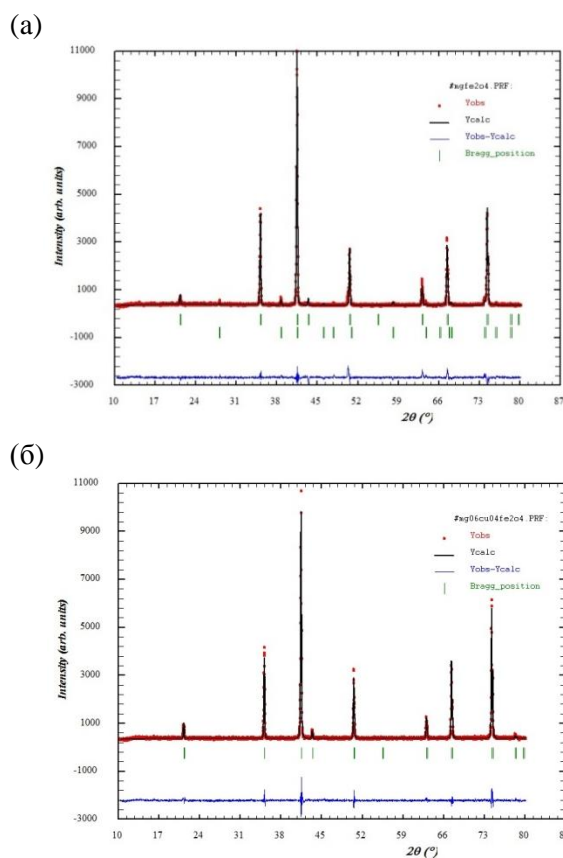


Ref.ICDD-PDF2



Зур.6. (а) $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ нэгдлийн рентген дифрактограмм. (б) $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ нэгдлийн дифракцын пикийн өөрчлөлт

Одоо үед өргөнөөр ашиглагдаж байгаа рентген болон нейтроны дифракцын хэмжилтийн өгөгдлийг боловсруулах программууд тухайлбал, FULLPROF программ тухайн кристалл нэгдлийг бүрдүүлэгч атом (ион) бүрийн кристалл тор дахь байрлалыг төдийгүй ижил байрлалд орших ялгаатай атомууд (Mg_y - Cu_x)-ын харьцааг нарийвчлан тодорхойлдог (Зур.7).



Зур.7. $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ нэгдлийн Ритвельдийн аргаар боловсруулсан рентген дифрактограмм. (а) $x=0.0$; (б) $x=0.4$

С. Нейтрон дифракцын судалгаа

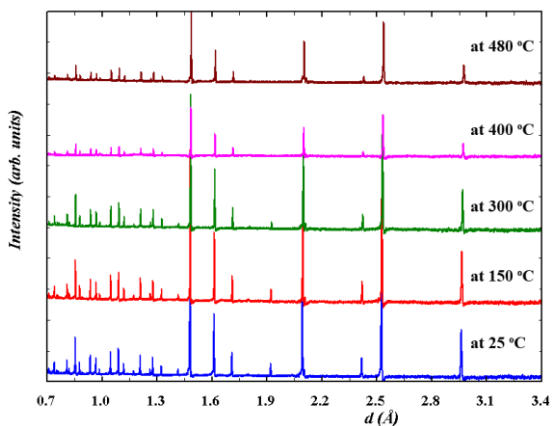
Холимог ($Mg_{x-1}Cu_x$) Fe_2O_4 системийн нейтрон дифракцын судалгаа нь соронзон бус Mg^{2+} ион болон соронзон Cu^{2+} , Fe^{3+} ионууд $MgFe_2O_4$ куб фазад, мөн тетрагонал $CuFe_2O_4$ фазын А-болон В- байршилд хэрхэн түгэн байрлахыг тодруулах боломжтой. Хатуу урвалын аргаар гарган авсан холимог ($Mg_{x-1}Cu_x$) Fe_2O_4 нэгдлийн кристалл болон соронзон бүтцийг ОХУ-ын Дубна хот дать Цөмийн шинжилгээний нэгдсэн Институтын

ИБР-2 реакторын өндөр ялгах чадварын Фурье нейтрон дифрактометр дээр $T = 25, 150, 300, 400, 480$ °C температурын орчинд судлав [7]. Цэвэр $MgFe_2O_4$ нэгдэл куб кристалл бүтэцтэй (Oгг.групп Fd-3m), агаад тасалгааны температурт бүрэн инверс шпинел (инверс параметр $x \approx 1$) ферри-соронзон бүтэцтэй. Торын тогтмол температураас шугаман хамаарахад харин А-О болон В-О холбоо тогтмол утгатай байсан нь өндөр температур нь октаэдр болон тетра-эдрийн хоорондох зайд нөлөөлж байгааг үзүүлж байна (Хүснэгт.1).

Хүснэгт.1 Феррит $MgFe_2O_4$ нэгдлийн хэд хэдэн температур дахь нейтрон дифракцын хэмжилтийн Ритвельд боловсруулалтын үр дүн. R_{exp} – энгийн туршилагын R- фактор, R_{wp} – жигнэсэн R- фактор, a , Å – торын параметр, $x(O)$ - хүчилтөрөгч байрлал, изотроп дулааны фактор(B), катион байрлал, холбоосын урт, μ_A , μ_B -A ба B байрлал дахь соронзон момент.

Параметрууд	Температур, °C				
	25	150	300	400	480
R_{exp}	2.48	2.22	4.63	7.96	6.76
R_{wp}	6.39	4.38	7.17	11.2	13.3
a , Å	8.3781(1)	8.3868(7)	8.3993(6)	8.4091(9)	8.4193(1)
B_A , Å	0.07(4)	0.41(3)	0.47(3)	0.32(4)	0.99(5)
B_B , Å	0.32(5)	0.54(3)	0.74(3)	0.61(5)	1.370(6)
$x(O)$	0.2567(1)	0.2565(9)	0.2561(9)	0.2563(1)	0.2561(1)
B_O , Å	0.63(4)	0.86(3)	1.21(3)	0.97(3)	1.68(1)
$n_A(Fe)$	0.99(1)	0.99(2)	0.99(1)	0.89(9)	0.97(2)
A-O, Å	1.912(11)	1.910(8)	1.908(8)	1.912(10)	1.912(13)
B-O, Å	2.039(11)	2.044(8)	2.049(8)	2.051(10)	2.055(13)
Fe_A-Fe_B , Å	3.473(3)	3.477(5)	3.482(4)	3.486(3)	3.490(5)
μ_A	5.2(1)	4.9(1)	3.9(1)	2.9(2)	-
μ_B	3.7(1)	3.4(1)	2.8(1)	0	-

Нейтрон дифракцын зургаас үзэхэд температур ихсэх тутам соронзон пикийн хэмжээ багасч байв (Зур.8).

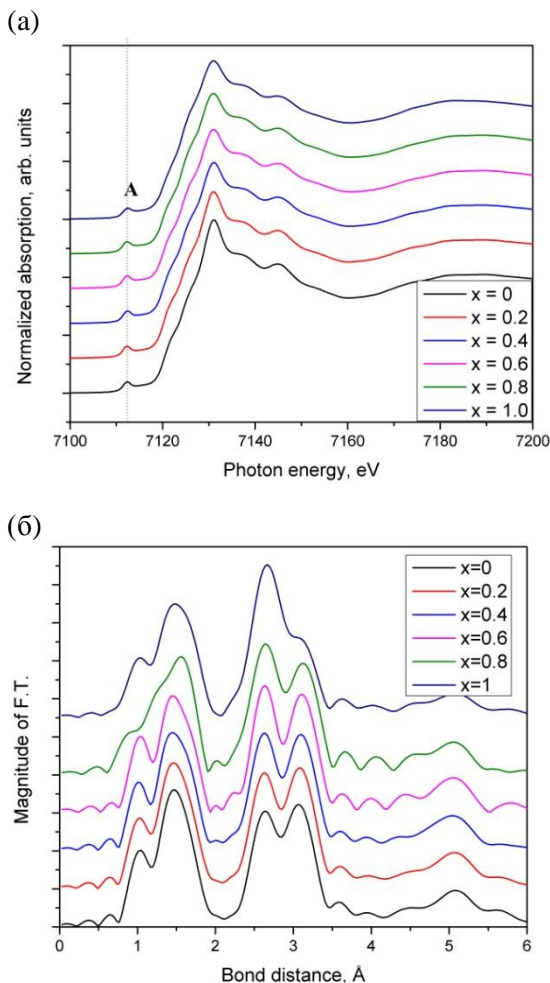


Зур.8. ($Mg_{x-1}Cu_x$) Fe_2O_4 нэгдлийн кристалл болон соронзон бүтцийн төрөл бүрийн температур дахь нейтрон дифракцын зураг.

Д. Синхротрон шингээлтийн судалгаа

Нано хэмжээст шпинел феррит ($Mg_{1-x}Cu_x$) Fe_2O_4 ($x=0,0.2,0.4,0.6,0.8,1$) нунтаг материалыг Бээжингийн Синхротрон цацрагийн судалгааны төвийн рентген-синхротрон шингээлтийн туршилтын суваг (1W1B-hard X-ray Absorption Fine Structure)-ийг ашиглан судлав[8]. Синхротрон цацрагийн шингээлтийн (XAS) хэмжилтээс ($Mg_{1-x}Cu_x$) Fe_2O_4 нэгдлийн кристалл бүтцэнд Fe ба Cu –ийн ионы байршил, исэлдэлтийн хэмжээг тодорхойлсон төдийгүй үндсэн исэл дэх тухайн метал кластерийн орц, хэмжээг өндөр нарийвчлалтай тодорхойлдог шингээлтийн (XANES) аргаар уг нэгдэл дэх Fe^{3+} ионд харгалзах $1s \rightarrow 3d$ шилжилтийн шингээлт (A –тэмдэглэсэн) энергийн ~ 7112 эВ утганд харгалзаж байгааг тогтоов (Зур.9. зүүн). Энэ хэмжилтийн эрчим ихтэй EXAFS спектрууд Fe –ионууд тетрагонал төдийгүй мөн октаэдр

байршилд байгааг баталж байна (Зур.9, баруун). Зэсийн агууламж ихсэхэд Fe ион нь октаэдр байршилд шилжсэнээр инверсээс нормал шпинел бүтэц үүсгэж эхлэж байна.



Зур.9. $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ бүтцийн Fe-ийн K-хязгаарын XANES спектр (a) болон түүний EXAFS спектр (б).

Е. Электрон бүтэц болоод соронзон төлөвийн онолын судалгаа

Феррит бүтэцтэй $MgFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$, $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ болон $Mg(Fe_xAl_{2-x})O_4$ нэгдлийн электрон бүтэц болоод соронзон төлөвийн судалгааг квант механикийн үндсэн зарчимд (first-principles) үндэслэгдсэн нягтын функционал онол (DFT)-ыг ашиглан тооцоолж, зарим таамаглалыг дэвшүүлэв [9-11]. $CuFe_2O_4$ нэгдлийн хувьд куб кристалл бүтцээс тетрагональ бүтэц рүү Ян-Теллерийн эффектний улмаас фазын шинжилт хийдэг. Ян-Теллерийн системийн нэг онцлог нь түүний кристалл бүтцийн болон соронзон шинж чанарууд харилцан уялдаа, хамааралтай байдаг оршино. Түүнээс гадна ян-теллерийн ионуудын хооронд электрон-хэлбэлзлэлийн, квадруполийн, солилцлын гэсэн гурван төрлийн харилцан

үйлчлэл явагдана. Электрон-хэлбэлзлэлийн харилцан үйлчлэл нь тухайн ионы орчим дахь деформацтай холбоотой, кристаллд төрөл бүрийн катионтой холбогдон үүсэх деформациуд өөр хоорондоо харилцан үйлчилнэ. Нөгөө квадруполь-квадруполийн шууд харилцан үйлчлэл нь эцсийн дүндээ орбиталь эрэмбэлэлд хүргэдэг бол гурав дахь харилцан үйлчлэл болох орбиталиудын эрэмбэлэлтийн солилцлын механизм нь зарим тохиолдолд зөв орбиталь бүтцийг буй болгодог. Бодит тохиолдолд эдгээр гурван үйлчлэл нэгэн зэрэг явагдах учир аль нь давамгайлж байгааг тогтоох тун түвэгтэй асуудал юм [17].

Төлвийн нягт (Density of state)-ын квант механикийн компьютер тооцоог WIEN2K багц программын шугаман өргөтгөлтэй хавтгай долгионы аргаар спины туйлшрал, тоохон локаль спин нягтын ойролцоолол (Local Spin Density Approximation), ерөнхий градиентийн ойролцоолол (Generalized Gradient Approximation) зэрэг хувилбаруудыг ашиглан $CuFe_2O_4$ нэгдлийн куб болон тетрагональ фазуудын хувьд гүйцэтгэв [10]. Цаашид рентген бүтцийн судалгаа (XRD)-ийн нарийвчилсан үр дүнг ашиглан $MgFe_2O_4$ материалын хувьд соронзон шинж чанар нь инверсийн зэргээс хамаардаг тухай таамаглалыг батлах шаардлага тавигдаж байна.

VI. ДҮГНЭЛТ

- Феррит кристаллууд хувьсах соронзон оронд дулаан ялгаруулдаг өвөрмөц шинж чанартай бодис учир хавдрын эмчилгээнд хэрэглэх боломжтой. $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ нэгдлийн хувьд $x=0.6$ утганд хамгийн их дулаан ялгаруулна.
- Кристалл тор дахь атомуудын байршил, кристаллын бүтцийн фазын шилжилт нь дулаан ялгаруулдаг шинж чанартай холбоотой, уг нэгдлийн хувьд фазын шилжилтийн гол шалтгаан нь төмөр ба магни-зэсийн атомуудын харилцан шилжилт, Ян-Теллер-ийн гажилт гэдгийг тогтоосон байна
- Соронзон шинж чанарыг тодорхойлогч соронзон момент, спин түгэлтийн зүй тогтлыг нейтрон дифракцын нарийвчилсан аргаар судалж тайлбарлагдах боломжтой.
- Кристалл тор дахь ионуудын харилцан байршил, тэдгээрийн түгэлт, фазын шилжилтийг рентген, нейтрон дифракц болон синхротрон цацрагийн сарнилын аргаар судалж болно.

- Кристалл тор дахь ионуудын спин, электроны энергийн түгэлтийг квант механикийн үндсэн зарчимд үндэслэгдсэн нягтын функционал онолын тусламжтай тайлбарлах боломжтой.

VII. ТАЛАРХАЛ

Тус ажлыг ШУТС-ийн №: SST-006/2015 суурь судалгааны төслийн хүрээнд гүйцэтгэв. Нейтрон дифракцын хэмжилтийг ОХУ-ын Дубна хот дахь ЦШНИ-д, Синхротрон сарнилын хэмжилтийг Бээжингийн Синхротрон цацрагийн судалгааны төвд гүйцэтгэхэд дэмжлэг үзүүлж зөвлөгөө өгсөн профессор А.М. Балагуров (ЦШНИ), профессор Ж. Занг (Jing Zhang, BSRF) нарт талархал илэрхийлэе.

VIII. НОМ ЗҮЙ

- [1] I. Sharifi, H. Shokrollahi, S. Amiri, "Ferrite-based magnetic nano fluids used in hyperthermia applications", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 324 (2012) 903–915.
- [2] M. Faraji, Y. Yamini, M. Rezaee. *Magnetic Nanoparticles: Synthesis, Stabilization, Functionalization, Characterization, and Applications.*, J. Iran. Chem. Soc., Vol. 7, No. 1, March 2010, pp. 1-37.
- [3] A.M. Balagurov, I. A. Bobrikov, M. S. Maschenko, D. Sangaa, and V. G. Simkin, "Structural Phase Transition in CuFe₂O₄ Spinel", *Crystallography Reports*, 2013, Vol. 58, No. 5, pp. 710–717.
- [4] Hideyuki Hirazawa, Yoshiki Ito, Deleg Sangaa, Namsrai Tsogbadrakh, Hiromichi Aono, Takashi Naohara. "Heat Generation Ability in AC magnetic Field of MgAl_xFe_{2-x}O₄ Ferrite Powder Prepared by Sol-Gel method", *AIP Conference Proceedings*, 1763, 020009 (2016); doi: 10.1063/1.4961342.
- [5] T. Shiraiishi, H. Hirazawa, D. Sangaa, N. Tsogbadrakh, H. Aono. "Heat generation ability of Mg(1-X)Cu(X)Fe(2)O(4) ferrite in AC magnetic field", 25th Conference on Materials Science Society of Japan, Shikoku section, National Institute of Technology, NIIHAMA College, 2016, Ehima, Japan
- [6] Y. Ito, H. Hirazawa, D. Sangaa, N. Tsogbadrakh, H. Aono. "Heat generation ability in AC magnetic field of Al substituted MgFe(2)O(4)", 25th Conference on Materials Science Society of Japan, Shikoku section, National Institute of Technology, NIIHAMA College, 2016, Ehima, Japan
- [7] E. Uyanga, I. A. Bobrikov, D. Sangaa, H. Hirazawa, A. M. Balagurov. "Neutron diffraction study of crystal and magnetic structures of MgFe₂O₄ ferrite", *ICCP-6 International Conference Proceeding*, Ulaanbaatar, 2016.
- [8] D. Sangaa, Sh. Chu, E. Uyanga, B. Enkhmend., X-ray absorption study of magnetic powder materials (Mg_{1-x}Cu_x)Fe₂O₄. Submitted to The Annual Report of Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, 2016.
- [9] N. Tsogbadrakh, D. Sangaa, H. Hirazawa, V. Yu Yushankhai, Chunfeng, B. Enkhmend. "Magnetic phase transitions in (Cu/Mg)Al_xFe_{2-x}O₄ (x = 0,1 and 2) alloys: First-principles method", *ICCP-6 International Conference Proceeding*, Ulaanbaatar, 2016.
- [10] Б. Тэмүүжин, Н.Цогбадрах, Д.Сангаа Феррит CuFe₂O₄ нэгдлийн куб ба тетрагональ фазуудын тогтворжилт ба электрон бүтцийн AB INITIO квант механикийн судалгаа, *Физик, Технологийн Хүрээлэнгийн Бүтээл*, №4-, Хууд.96-102.
- [11] В. Temuujin, D. Sangaa, I. Hishigdemberel, B. Enkhmend., "AB-INITIO STUDY OF ELECTRONIC STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF FERRITES" p.308-311, *Nanomaterials and Nanotechnologies-VI, International Scientific Conference*, 22-26 August, 2016, Ulan-Ude, Russia.
- [12] Balagurov A M, Bobrikov I A, Pomjakushin V Yu, Sheptyakov D V and Yushankhai V Yu 2015 *J. Magn. Magn. Matter.* 374 591
- [13] M. Suto, Y. Hirota, H. Mamiya, A. Fujita, R. Kasuya, K. Tohji, B. Jeyadevan, Heat dissipation mechanism of magnetite nanoparticles in magnetic fluid hyperthermia, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 321 (2009), 1493–1496.
- [14] D.H. Kim, D.E. Nikles, C.S. Brazel, "Synthesis and characterization of multi-functional chitosan–MnFe₂O₄ nanoparticles for magnetic hyperthermia and drug delivery", *Materials* 3 (2010) 4051–4065.
- [15] N. Tran, T.J. Webster, "Magnetic nanoparticles: biomedical applications and challenges", *Journal of Materials Chemistry* 20 (2010) 8760–8767.
- [16] B.D. Culity, C.D. Graham *Introduction to Magnetic materials*, Second Edition, 2009.
- [17] К.И. Кугель, Д.И.Хомский. *УФН* 136, 621 (1982).

Ferrite Magnetic Nanomaterials for Biomedical Applications

D. Sangaa¹, B. Temuujiin¹, E. Bayanjargal¹, B. Enkhmend¹, N. Tsogbadrakh², H. Hirazawa³, I.A. Bobrikov⁴, E. Uyanga^{1,4}, Sh. Chu⁵

¹*Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Science, Ulaanbaatar – 13330, Mongolia*

²*Department of Physics, National University of Mongolia, Ulaanbaatar -14201, Mongolia*

³*Department of Environment Materials Engineering, National Institute of Technology, Niihama College, Ehima, 792 – 8580, Japan*

⁴*Frank Laboratory of Neutron Physics JINR, 141980, Dubna, Russia*

⁵*Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100049, China*

The magnetic material such as spinel ferrite powder samples having high heat generation ability in AC magnetic field was studied for application to hyperthermia treatment of cancer tumor. These properties of ferrites are strongly depending on their chemical composition, ion distribution, spin orientation and method of preparation in general and crystal structure in particular nature of material. The $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ type ferrite powders that have high heat generation ability in AC magnetic field were prepared by solid reaction method and the mixture phase of cubic and tetragonal structures were obtained from XRD result. In this study the reasons for this high heat generation mechanism and their magnetic properties of the ferrite powders in AC magnetic field using XRD, neutron diffraction and X-Ray synchrotron absorption spectroscopy were investigated. To explain the mechanism to occurs the heat generation ability in the magnetic materials and the electronic and magnetic states of $MgFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$, $(Mg_{x-1}Cu_x)Fe_2O_4$ and $MgFe_2O_4$, $Mg(Fe_xAl_{2-x})O_4$ were theoretically defined by First-principles method.

Keywords: spinel, ferrite, heat generation, hyperthermia, cancer treatment, X-Ray diffraction, neutron diffraction, X-Ray absorption spectroscopy, quantum mechanics, first-principles method.