

# **MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>(111)/BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub>(001) композит нэгдлийн соронзон шинж чанарын онолын судалгаа**

**Д.Содхүү<sup>1,2</sup>, Н.Жаргалан<sup>1</sup>, Д.Одхүү<sup>3</sup>, Э.Уянга<sup>1</sup>, Д.Сангаа<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>ШУА, Физик, технологийн хүрээлэн, Монгол улс

<sup>2</sup>МУИС, БУС, Физикийн тэнхим, Монгол улс

<sup>3</sup>Инчионы Их Сургууль, Физикийн тэнхим, БНСУ

Бид энэхүү судалгаагаар MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> нэгдлийн (111) гадаргуу болон BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub> нэгдлийн (001) гадаргуу бүхий композит нэгдлийн бүтцийн тогтворжилт, соронзон ханалтын утгыг ( $M_s$ ) нягтын функционал онол ашиглан онолын тооцооллыг гүйцэтгэлээ. Тооцооллын үр дүнд тодорхойлсон  $M_s$  утга нь туршилтын ерөнхий хандлагатай тохирч байна.

## **ОРШИЛ**

Техник, технологийн үсрэнгүй хөгжлийн үед соронзон материал, тэдгээрийн шинж чанарыг сайжруулах судалгааны ажлууд эрчимтэй хийгдэж байна [1-4]. Соронзон материалын чадал нь “Энергийн хамгийн их ялгарал (ВН<sub>max</sub>)” – аас хамаарах бөгөөд NdFeB нэгдлийн утга  $VN_{max} = 500$  кЖ/м<sup>3</sup> байдаг нь хамгийн өндөр хүчин чадал бүхий тогтмол соронзон материалд тооцогддог. Материалын соронзон шинж чанарыг илэрхийлэхдээ “Ханасан соронзжилт ( $M_s$ )”, “Коерцитив хүч ( $H_c$ )”, “Соронзон анизотропи энерги ( $K_u$ )” зэрэг хэмжигдэхүүнүүдийг ашигладаг. Хүчтэй соронзон материал нь ханалтын соронзжилт багатай, Кюри температур бага зэрэг сул талуудтай. Эдгээр сул талыг нөхөх, соронзон энергийн бүтээмжийг нэмэх нэг арга нь сул соронзон материалтай нийлүүлэн композит материал үүсгэх юм.

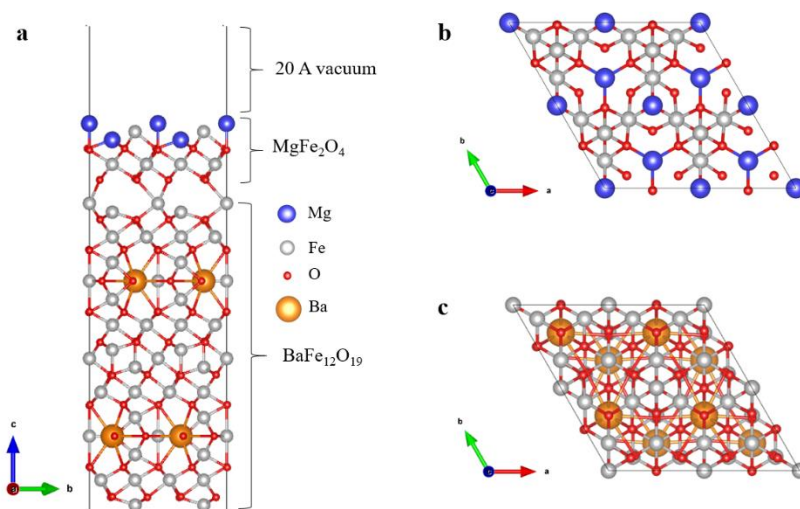
Энэхүү судалгааны ажилд сул соронзонгийн төлөөлөл болох MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, хүчтэй соронзонгийн төлөөлөл болох BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub> нэгдлүүдийг сонгон авч композит нэгдэл үүсгэн соронзон шинж чанар хэрхэн сайжирч байгааг харьцуулан судаллаа.

## **ТООЦООЛЛЫН АРГА ЗҮЙ**

Энэхүү судалгааны ажил нь (VASP) кодыг ашиглан гүйцэтгэсэн бөгөөд солилцоо-харилцан үйлчлэлийн функционалд Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) өргөтгөсөн градиентийн ойролцооллын (GGA) аргачлал болон Ван дер Ваальсын харилцан үйлчлэлийг ашигласан болно [5-7].

MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> нэгдлийн хувьд шпинель куб бүтэцтэй, эгэл үүрэндээ 56 атомтай, торын параметр нь ( $a=b=c=8.54\text{Å}$ ). Харин BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub> нэгдлийн хувьд гексагонал бүтэцтэй, эгэл үүрэндээ 64 атомтай, торын тогтмолууд нь харгалзан  $a=b=6.02\text{Å}$   $c=23.5\text{Å}$  байдаг [8].

Композит нэгдлийн бүтцийг үүсгэхдээ торын параметрийн зөрүүг хамгийн бага байх MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (111) ба BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub> (001) гадагууг сонгон авч Material Studio програм хангамжийн тусламжтайгаар үүсгэсэн. BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub> (001) гадаргууг үүсгэхийн тулд эгэл торыг өргөтгөн 2x2x1 супертор үүсгэн тус тооцоог гүйцэтгэв. Тогтворжилтын тооцоог зөвхөн 2 нэгдлийн гадаргуугийн атомуудыг чөлөөтэй хөдлөж байхаар, бусад атомууд болон системийн эзэлхүүнийг түгжиж тогтворжилтын тооцоог гүйцэтгэсэн. Дээрх тогтвортой бүтцийг тодорхойлох тооцоололд торын энергийн таслалыг 500 эВ,  $k$  цэгийг 1x1x1 байхаар сонгон авав.



Зураг 1. Тогтворжилтийн тооцооны дараах композит нэгдэлийн бүтэцийн зураг.

BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub>-ийн соронзон шинж чанарыг ферри соронзон байхаар спиний чиглэлүүдийг өмнөх онолын судалгаанд [8] дурдагдсантай адилаар 2a, 2b болон 12k талст байрлал дахь Fe атомууд нь спин дээш чиглэсэн, харин бусад байрлал дахь Fe атомууд нь спин доош чиглэсэн сонгов.

### ҮР ДҮН БА ДҮГНЭЛТ

Өмнөх ажлуудад [1, 9, 10] бидний сонгон авсан системүүд нь тогтвортой болохыг

тодорхойлсон бөгөөд эдгээр тогтвортой бүтцүүдийг ашиглан композит нэгдлээ үүсгэв. Энэхүү тооцоонд бид 2 системийн гадаргуугийн харилцан үйлчлэл, цэнэгийн шилжилтийг тооцохын тулд Ван-дер Ваалсын харилцан үйлчлэлийг нэмэлтээр оруулж тооцоог гүйцэтгэсэн. Композит систем нь үүсэхдээ 2 системүүдийн гадагуугийн O болон Fe атомуудын хоорондын холбоосоор үүсч байгаа нь Зураг 1-с харагдаж байна.

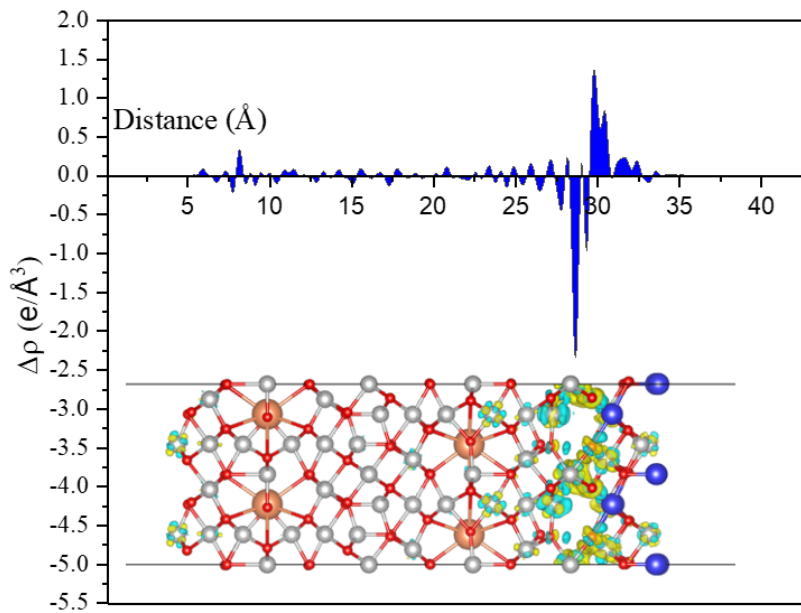
**Хүснэгт 1.** Сонгон авсан BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub>, MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> нэгдлүүдийн балк болон нимгэн үе, композит нэгдлүүдийн бүтцүүдийн мэдээлэл торны тогтмолууд a ба c (Å-ээр), эзэлхүүн (Å<sup>3</sup>-ээр), нийт энергийг (eV)-ээр харьцуулан үзүүлэв.

Систем	a (Å)	c (Å)	Эзэлхүүн (Å <sup>3</sup> )	Нийт энерги (eV)
BaFe <sub>12</sub> O <sub>19</sub>	6.02	23.49	736.12	-469.10
MgFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.44	8.44	606.52	-389.92
BaFe <sub>12</sub> O <sub>19</sub> (001)	12.03	22.84	2863.75	-1932.23
MgFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (111)	12.03	4.28	534.88	-346.23
MgFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> /BaFe <sub>12</sub> O <sub>19</sub>	12.03	28.65	3592.78	-2313.65

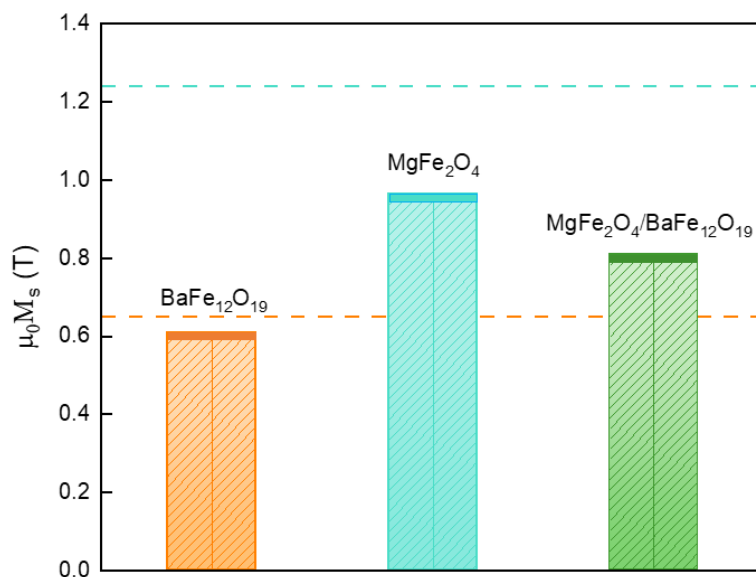
Композит нэгдэл үүсгэхдээ өмнө дурдагдсан BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub> (001) гадарга бүхий 2x2x1 супертор үүсгэн MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (111) гадагуутай түгжигдэж байгааг хүснэгт 1-с харж болно.

Гадаргуу дахь цэнэгийн нягтыг Зураг 2-т харуулав. Графикийн доод хэсэгт цэнэгийн түгэлтийг харуулав. Шар өнгөөр будагдсан

хэсэг нь цэнэгийн нягтрал нэмэгдсэн, цэнхэр өнгөөр будагдсан хэсэг нь цэнэгийн хомсдол үүсэнийг тус тус илэрхийлнэ. BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub> -ийн гадагуугийн орчимд электроны илүүдэл, MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-ийн орчимд хомсдол үүсэж байгаа нь графикаас харвал харагдаж байна.



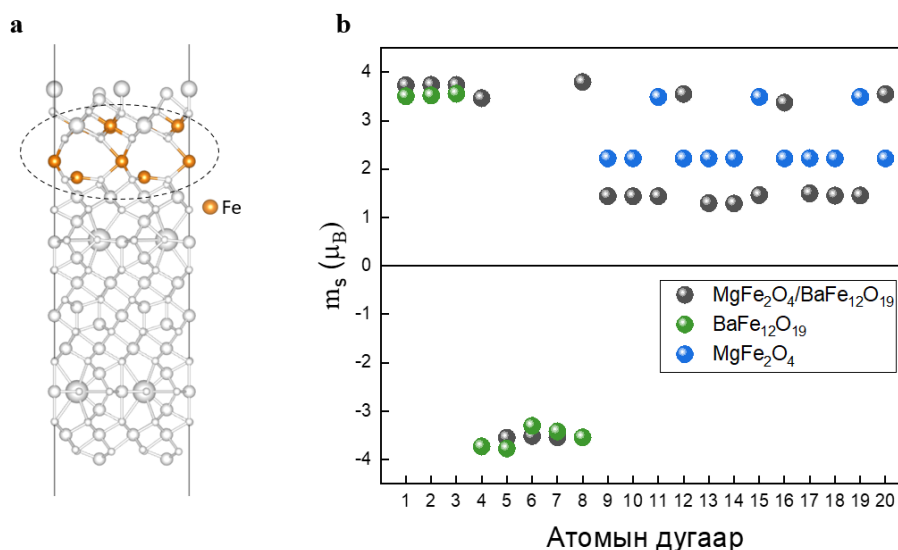
Зураг 2.  $MgFe_2O_4/BaFe_{12}O_{19}$  нэгдлийн цэнэгийн нягтын зөрүү ( $\Delta\rho$ ) зайнаас хамаарах хамаарал.



Зураг 3. (a)  $MgFe_2O_4/BaFe_{12}O_{19}$  композит нэгдлийн гадаргуугийн төмрийн (Fe) атомыг байрлалууд. (b) Гадаргуугийн Fe атом тус бүрийн соронзон спин момент ( $m_s$ )

Соронзонгийн тооцооны үр дүнгээс  $MgFe_2O_4$  (111) болон  $BaFe_{12}O_{19}$  (100) системүүдийн нийт соронзжилт нь харгалзан 0.96 ба 0.61 T байв. Харин тасархай зураасаар нэгдэл тус бүрийн балк үеийн нийт соронзжилтийн утгуудыг тэмдэглэв. Балк үеийн

соронзжилтын утгаас бидний үүсгэсэн чиглэлүүдийн дагуу үүсгэсэн бүтцийн соронзжилтийн утга нь ялгаатай байгаа нь үүссэн нэгдлийн зузаан, атомуудын байрлалтай холбоотой.



**Зураг 4:** (а)  $MgFe_2O_4/BaFe_{12}O_{19}$  композит нэгдлийн гадаргуугийн төмрийн (Fe) атомыг байрлалууд. (б) Гадаргуугийн Fe атом тус бүрийн соронзон спин момент ( $m_s$ )

Систем тус бүрийн болон композит нэгдлийн ханалтын соронзжилтын ялгааг Зураг 3-д үзүүлэв. Үр дүнгээс харвал ханалтын соронзжилтын хувьд хүчтэй соронзон нэгдэл болох  $BaFe_{12}O_{19}$  утга нь сул соронзон нэгдэл болох нь  $MgFe_2O_4$  -ээс бага байгаа нь соронзонгийн ангилалын зүй тогтол, түүнд харгалзах соронзон параметруудийг тодорхойлсон ерөнхий зүй тогтолтой сайн тохирч байна. Харин композит нэгдлийн хувьд ханалтын соронзжилт нь  $BaFe_{12}O_{19}$  болон  $MgFe_2O_4$  нэгдлүүдийн дунд утга авч байгаа нь бидний таамаглаж байгаа энергийн бүтээмж ( $BH_{max}$ ) нь хүчтэй соронзон материалаас сайжирч байгааг илтгэж байна. Нөгөө талаас гадаргуугийн орчимд байрлах Fe атомуудын соронзон спиний тооцооноос  $BaFe_{12}O_{19}$  гадаргуудахь 4 дахь болон 8 дахь Fe атомуудын атомын спиний чиглэл эргэсэн, 9-20 дахь атомуудын спиний моментыг утгын өөрчлөлтүүд нь композит нэгдлийн гадаргуугийн орчимд spring exchange үзэгдэл ажиглагдаж байгааг илэрхийлж байна. Эцэст нь дүгнэхэд  $MgFe_2O_4(111)/BaFe_{12}O_{19}(001)$  бүхий композит нэгдэл нь гадаргуугийн орчимд явагдаж буй солилцлын харилцан үйлчлэлийн нөлөөгөөр  $BaFe_{12}O_{19}$  хүчтэй соронзон материалтай нэгдэлтэй харьцуулахад энергийн бүтээмж өндөртэй материал гарах боломжтойг харуулж байна.

## ТАЛАРХАЛ

Энэхүү онолын судалгаа нь ШУА-ын ФТХ-ийн суурь санхүүжилтийн хүрээнд ШУА-ын МТТХ-ийн тооцоолох төв болон БНСУ-ын Инчеоны их сургуулийн тооцооллын төвүүдийн тусламжтайгаар гүйцэтгэгдсэн болно.

## НОМ ЗҮЙ

- [1] A.V. Trukhanov, V.O. Turchenko, I.A. Bobrikov, S.V. Trukhanov, I.S. Kazakevich, A.M. Balagurov, "Crystal structure and magnetic properties of the  $BaFe_{12-x}Al_xO_{19}$  ( $x=0.1-1.2$ ) solid solutions," *J. Magn. Magn. Mater.* **393** (2015) 253–259, <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2015.05.076>.
- [2] K.C. Babu, N.W. Madhuri, "Microwave processed NiMg ferrite: studies on structural and magnetic properties," *J. Magn. Magn. Mater.* **420** (2016) 109–116, <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.07.031>.
- [3] A. Manohar, C. Krishnamoorthi, K. Chandra, B. Naidu, C. Pavithra, "Dielectric, magnetic hyperthermia, and photocatalytic properties of  $ZnFe_2O_4$  nanoparticles synthesized by solvothermal reflux method," *Appl. Phys.* **125** (7) (2019) 477, <https://doi.org/10.1007/s00339-019-2760-0>.
- [4] M.A. Darwish, A.T. Morchenko, H.F. Abosheish, V.G. Kostishyn, V.A. Turchenko, M.A. Almessiere, Y. Slimani, A. Baykal, A.V. Trukhanov, "Impact of the exfoliated graphite on magnetic and microwave properties of the hexaferrite-based composites," *J. Alloys Compd.*

- 878** (2021) 160397, <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.160397>.
- [5] Jinwoo Park, Byung Deok Yu, Suklyun Hong, "Van der Waals density functional theory study for bulk solids with BCC, FCC, and diamond structures," *Current Applied Physics*, **15** (2015) 885–891, <https://doi.org/10.1016/j.cap.2015.03.028>.
- [6] G. Kresse, J. Furthmüller, "Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set," *Physical Review B*, **54** (1996) 11169–11186, <https://doi.org/10.1103/physrevb.54.11169>.
- [7] John P. Perdew, Kieron Burke, Matthias Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple," *Physical Review Letters*, **77** (1996) 3865–3868, <https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.3865>.
- [8] B. Khongorzul, N. Jargalan, N. Tsogbadrakh, D. Odkhuu, S.V. Trukhanov, A.V. Trukhanov, D. Sangaa, "Correlation of the crystal features, magnetic parameters, and electronic structure of Bi-substituted  $BaFe_{12-x}Bi_xO_{19}$  hexaferrites: Theoretical background," *Ceramics International*, **49** (2023) 15492–15499, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.01.184>.
- [9] E. Uyangaa, K. Khishigdemberel, B. Khongorzul, T. Yu. Kiseleva, S. Kobayashi, P. Yu. Tyapkin, C. Noda, N. Jargalan, D. Sangaa, D. Odkhuu, "Enhancing heat generation ability and magnetic properties of  $MgFe_2O_4$  with Ni substitutes for biomedical applications," *Materials Today Chemistry*, **35** (2024) 101841, <https://doi.org/10.1016/j.mtchem.2023.101841>.
- [10] H.J. Hook, "Thermal Stability of Barium Ferrite ( $BaFe_{12}O_{19}$ )," *Journal of the American Ceramic Society*, **47** (1964) 579–581, <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1964.tb13821.x>.

## ABSTRACT

In this study, we performed theoretical calculations using density functional theory to investigate the structural stability and saturation magnetization (Ms) of a composite system comprising the (111) surface of  $MgFe_2O_4$  and the (001) surface of  $BaFe_{12}O_{19}$ . The calculated Ms value aligns well with the general trend observed in experimental results.