

Нано-ферригидрит бактериального происхождения

**Александр Геталов ЛМФ ОФВЭ НИЦ «КИ» – ПИЯФ
Семинар ОФВЭ, 16.4.2024**

- ДОКЛАД ОСНОВАН НА РАБОТАХ:

ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1026–1038

МАГНИТНЫЕ МЕЖЧАСТИЧНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И СУПЕРПАРАМАГНИТНАЯ БЛОКИРОВКА ПОРШКОВЫХ СИСТЕМ НАНОЧАСТИЦ БИОГЕННОГО ФЕРРИГИДРИТА

А. А. Красиков^{a}, Ю. В. Князев^a, Д. А. Балаев^{a**}, С. В. Столяр^{a,b}, В. П. Ладыгина^b,
А. Д. Балаев^a, Р. С. Истаков^a*

^a *Институт физики им. Л. В. Киренского ФИЦ КНЦ
Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^b *ФИЦ КНЦ
Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

- С. В. Столяр и др., ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2020, том 84, № 11, с. 1601–1604
- [Ю.В. Князев и др. Физика твердого тела](#) 65(6):979 January 2023
- А. А. Красиков, Ю. В. Князев, Д. А. Балаев и др. ЖЭТФ, 2023, том 164, вып. 6 (12), стр. 1026–1038

- Ферригидрит $\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$, а также оксиды трёхвалентного железа $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ и $\beta\text{-Fe}_2\text{O}_3$ полиморфных модификаций существуют только в наноразмерном виде.
- Термодинамически Ферригидрит $\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ или оксигидроксид Fe^{3+} по сравнению с другими гидроксидами и оксидами Fe^{3+} является соединением с наибольшей метастабильностью,
- при увеличении температуры, кислотности среды, размеров и т.д. переходит в гематит ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) и гетит (αFeOOH),
- характеризуется антиферромагнитным порядком с температурой Нееля ~ 350 К, но наличие дефектов в поверхностном слое приводит к появлению у антиферромагнитной наночастицы значительного некомпенсированного магнитного момента.
- Иными словами ферригидрит – композиционный наноматериал с антиферромагнитным ядром и ферро(ферри)магнитной оболочкой с постоянным магнитным моментом.

Химическую формулу ферригидрита обычно записывают в следующем виде: $5\text{Fe}^{2+}\text{O}^3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, однако ввиду дефектности структуры количество ОН-связей может меняться. В ферригидрите присутствует два типа анионных упаковок [3]. При образовании фрагмента с кубической упаковкой, в котором анионные плоскости располагаются в последовательности ABCABC, ионы Fe^{3+} заселяют **октаэдрические** позиции, формируя два соседних слоя октаэдров, занятых железом. При образовании фрагмента с гексагональной упаковкой, в котором анионные плоскости располагаются в последовательности ABAB (ACAC), формируются одиночные слои **октаэдров** [4].

- Ферригидрит формируется в ядре белкового комплекса — ферритина, представляющего собой капсулу из белка апоферритина, (наружный и внутренний диаметры которого — **12** и **5–8** нм соответственно) [5]. Этот комплекс присутствует в органах практически всех высших животных и выполняет функцию хранения ("депо") железа.
- 3. E. Jansen, A. Kyek, W. Schafer, U. Schwertmann. Appl. Phys. A 74, s1004(2002).
- 4. S.V. Stolyar, O.A. Bayukov, Y.L. Gurevich, V.P. Ladygina, R.S. Iskhakov, P.P. Pustoshilov. Inorg. Mater. 43, 638(2007).
- 5. Z. Wang, C. Li, M. Ellenburg, E. Soistman, J. Ruble, B. Wright, J.X. Ho, D.C. Carter. Acta Cryst. **D 62**, 800 (2006).

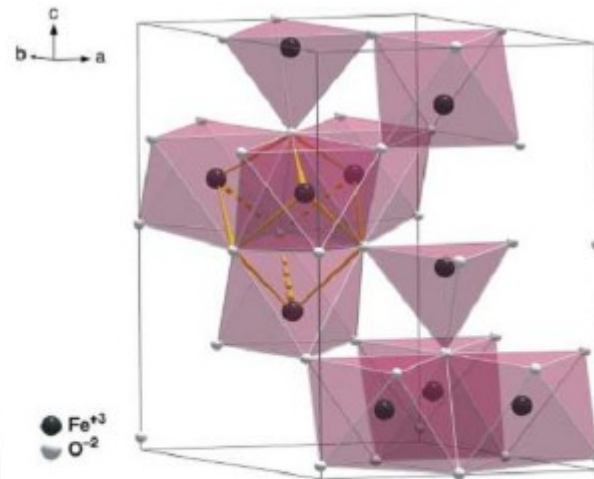
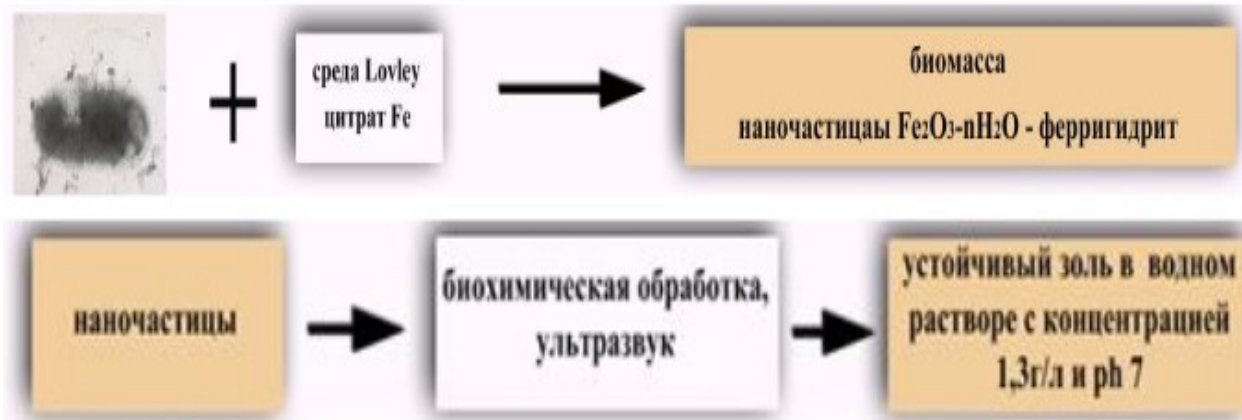
- Начиная с 1980-х годов было открыто большое число различных диссимиляторных железовосстанавливающих микроорганизмов (новая физиологическая группа - железоредуцирующие микроорганизмы). Они широко распространены практически во всех экологических нишах, а в некоторых, например, в подземных экосистемах, являются преобладающими, формируя однородное микробиологическое сообщество.
- По температуре обитания эти микроорганизмы делятся на психрофилы ($T = 0-20^{\circ}\text{C}$), мезофилы ($T = 20-45^{\circ}\text{C}$) и термофилы ($T > 45^{\circ}\text{C}$ термальные источники).
- По отношению к кислотности: ацидофилы ($\text{pH} < 6$), нейтрофилы ($6 < \text{pH} < 8$) и алкалофилы ($\text{pH} > 8.5$).
- По отношению к кислороду: аэробы, которые нуждаются в кислороде для дыхания, и анаэробы, способные существовать в отсутствие кислорода.
- Все они способны минерализовать большие удельные количества железа внутри и вне клетки, в частности, аккумулируя и ферригидрит.

- Ферригидрит играет огромную роль в метаболизме живых организмов.
- Важной особенностью ферригидрита является его **абсолютная биосовместимость**.
- Химическую формулу ферригидрита обычно записывают в следующем виде: $5\text{Fe}^{2+}\text{O}^{3-}\cdot 9\text{H}_2\text{O}$, однако ввиду дефектности структуры количество ОН-связей может меняться. В ферригидрите присутствует два типа анионных упаковок [3]. При образовании фрагмента с кубической упаковкой, в котором анионные плоскости располагаются в последовательности ABCABC, ионы Fe^{3+} заселяют октаэдрические позиции, формируя два соседних слоя октаэдров, занятых железом. При образовании фрагмента с гексагональной упаковкой, в котором анионные плоскости располагаются в последовательности ABAB (ACAC), формируются одиночные слои октаэдров [4].
- Ферригидрит формируется в ядре белкового комплекса — ферритина, представляющего собой капсулу из белка апоферритина, (наружный и внутренний диаметры которого — **12** и **5–8** нм соответственно) [5]. Этот комплекс присутствует в органах практически всех высших животных и выполняет функцию хранения ("депо") железа.
- 3. E. Jansen, A. Kyek, W. Schafer, U. Schwertmann. Appl. Phys. A 74, s1004(2002).
- 4. S.V. Stolyar, O.A. Bayukov, Y.L. Gurevich, V.P. Ladygina, R.S. Iskhakov, P.P. Pustoshilov. Inorg. Mater. 43, 638(2007).
- 5. Z. Wang, C. Li, M. Ellenburg, E. Soistman, J. Ruble, B. Wright, J.X. Ho, D.C. Carter. Acta Cryst. D 62, 800 (2006).
- В норме ~30% необходимого человеку железа депонируется в виде ферритина.
- Аналогом ферритина являются наночастицы ферригидрита (2-3 нм), синтезируемые анаэробными бактериями *Klebsiella oxytoca*, встроенные в полисахаридную матрицу. Поэтому они могут оказаться перспективным препаратом при лечении железодефицитной анемии.

- В работах Ладыгиной В.П. и Ищенко Л.А. был разработан способ получения стабильных зольей **наночастиц ферригидрита** биогенного происхождения.
- Из сапропеля, взятого из озера Боровое в Красноярском крае, они выделили культуру бактерий *Klebsiella oxytoca*, в процессе жизнедеятельности которых на поверхности клеток образуются наночастицы ферригидрита **от 2 до 8 нм** в зависимости от условий.
- Эти бактерии легко размножаются в лабораторных условиях, и могут быть использованы как «биофабрики» по производству наночастиц.
- Бактерия *Klebsiella oxytoca* синтезирует два типа наночастиц ферригидрита, различия которых достаточно четко определены с помощью мёссбауэровской спектроскопии. Они отличаются по количеству линий (две или шесть) в картинах рентгеновской дифракции. Соответственно, размер нанокристаллов варьируется от 2-4 нм в 2-линейчатой модификации до 5-6 нм в 6-линейчатой модификации.

- В современной химической промышленности каталитические процессы играют ключевую роль. Оксидные железосодержащие катализаторы, в частности на основе порошков ферригидрита, легированных атомами, Cr, Cu с размерами частиц 2-3 нм характеризуются высокой **удельной поверхностью 400 м²/г** и имеют большой потенциал применения в катализе, например, в реакциях синтеза углеводородов.
- Большие перспективы в использовании наночастиц ферригидрита в различных экологических приложениях. Благодаря высокой удельной поверхности ферригидрит взаимодействует с рядом экологически важных химических веществ, включая **мышьяк, свинец и другие тяжелые металлы, с фосфатами и многими органическими молекулами** по механизму поверхностной адсорбции/или соосаждения (очистка почвы, стоков, воды ...)

- **Технология синтеза биогенных наночастиц, метод отделения наночастиц от бактериальной культуры и изготовление магнитных золей.**
 - Бактериальная биомасса культуры *Klebsiella oxytoca* наращивалась в микроаэрофильных условиях на среде Lovley следующего состава (в г/л): NaHCO_3 – 2.5, $\text{CaCl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ – 0.1, KCl – 0.1, NH_4Cl – 1.5, $\text{NaH}_2\text{PO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ – 0.6, дрожжевой экстракт – 0.05. Концентрация цитрата Fe^{3+} варьировалась от 0.2 до 5 г/л. Отбор проб производился от 5 до 50 дней после засева микроорганизмов в питательную среду в зависимости от требований эксперимента
 -
 - Для выделения ферригидрита из осадка, полученного при центрифугировании (10 минут, 10000об/мин) 7-10 дневной культуры *Klebsiella oxytoca*, выращенной на среде Lovley, клетки бактерий разрушались ультразвуком (ультразвуковой дезинтегратор УЗДН (1 мин, 44 кГц, 20 Вт)) 3 раза по 3 мин в воде с интервалом 10 минут.
 - В течение всего процесса выделения наночастиц при обработке суспензии ультразвуком температура нагревания не превышала 50°C для того, чтобы предотвратить процесс распада органических соединений, покрывающих минеральное ядро ферригидрита.
 - Затем проводилось центрифугирование осадка при 10000об/мин в течение 10 мин, осадок снова заливали дистиллированной водой и повторяли цикл 3 раза.
 - Далее полученный осадок для удаления жирных кислот заливали ацетоном, диспергировали ультразвуком, инкубировали 30 минут, затем центрифугировали при 10000об/мин в течение 10 мин. Полученный осадок промывали дистиллированной водой и снова центрифугировали.
 - После этого полученный осадок диспергировали ультразвуком в водной среде, добавляли NaOH до получения 20% щелочного раствора и инкубировали в течение часа, затем центрифугировали при 10000об/мин в течение 10 мин.
- Собранный материал несколько раз диспергировали в дистиллированной воде, добавляя каждый раз NaCl до конечной концентрации 50 мМ, для осаждения наночастиц, до получения нейтрального pH супернатанта.
- Полученный конечный осадок снова заливали дистиллированной водой, диспергировали ультразвуком, центрифугировали при 10000об/мин в течение 10 минут для получения золя, при необходимости повторяли процедуру.



Модель структуры ферригидрита
 $5\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, состоящая из
кислородных октаэдров

- Важные, как с точки зрения физического материаловедения, так и для конкретных применений параметры:
- магнитный момент частицы μ_{un} и
- эффективная константа магнитной анизотропии K_{eff} .

Величина нескомпенсированного магнитного момента μ_{un} ,

- может быть оценена из соотношения

$$\mu_{un} \sim \mu_{at} N^b \quad (1)$$

- Здесь μ_{at} - магнитный момент магнитоактивного атома,
- N - количество магнитоактивных атомов в частице,
- а показатель степени b зависит от типа дефектов, приводящих к декомпенсации, он может принимать значения в диапазоне $1/3 - 2/3$.

- Для наночастиц ферригидрита (2 – 4 нм) и в молекулах ферритина было получено, что μ_{un} формируется спинами нескольких десятков атомов железа в частице ($\mu_{at} \approx 5\mu_B$, μ_B - магнетон Бора) и достигает

величин $\mu_{un} \approx 100 - 300 \mu_B$

- (показатель степени $b \approx 1/2$)

- T_B обычно определяется из магнитной восприимчивости, либо намагниченности в малом поле после охлаждения в нулевом внешнем поле (ZFC).
- Для систем невзаимодействующих частиц температура блокировки T_B определяется как

$$T_B = K_{\text{eff}} V / \ln(\tau_m / \tau_0) k \quad (2)$$

- из неель-брауновского выражения для характерного времени τ переворота магнитного момента частицы

$$\tau = \tau_0 \exp(K_{\text{eff}} V / kT)$$

- при $\tau = \tau_m$

τ_m - характеристическое время экспериментальной методики,

V - объем частицы, величина τ_0 находится в пределах $10^{-9} - 10^{-13}$ с,

k - постоянная Больцмана).

Эффективным методом контролируемого управления размерами наночастиц ферригидрита является низкотемпературная ($150\text{--}200^\circ\text{C}$) термообработка получаемого золя. (При $T \gg 200^\circ\text{C}$ происходит превращение ферригидрита в гематит.)

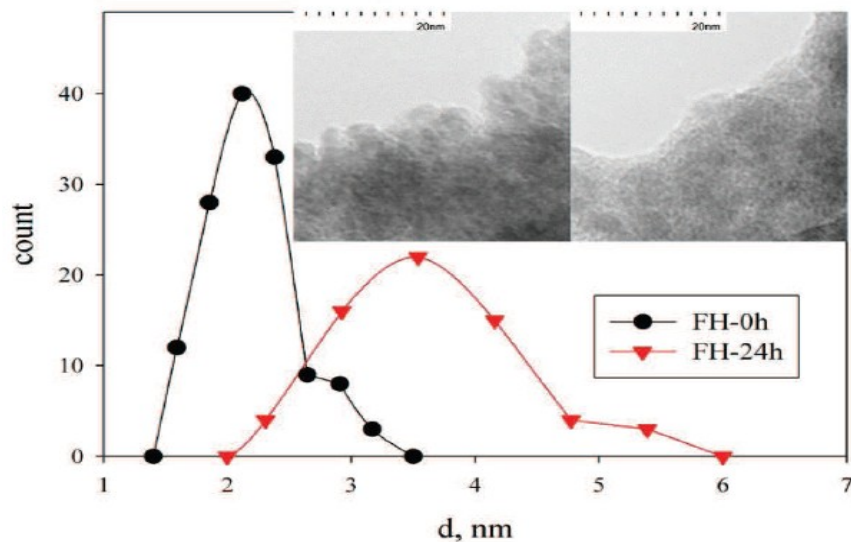


Рис. 1. (Цветной онлайн) Типичные изображения, полученные с помощью просвечивающей электронной микроскопии, для образцов FH-0h (фото слева), FH-24h (фото справа), а также распределения по размерам частиц

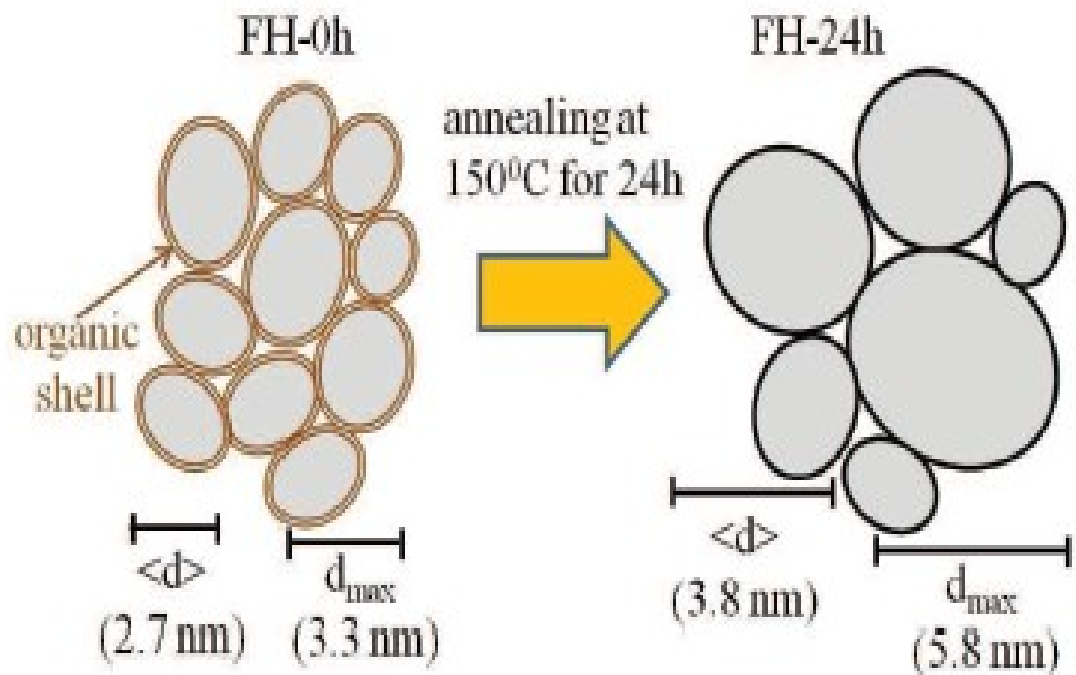


Рис. 2. (Цветной онлайн). Схематичное представление изменения микроструктуры в результате отжига для образцов FH-0h и FH-24h с соблюдением относительных размеров наночастиц ферригидрита

- При комнатной температуре (рис. 3а) спектры образцов представляют собой дублет, описываемый суперпозицией трех компонент. Эти три компоненты соответствуют трем неэквивалентным позициям железа (обозначенным как Fe1, Fe2, Fe3) в ферригидрите.
- Катионы железа находятся в трехвалентном состоянии во всех позициях.
- Соотношение относительных заселенностей A этих дублетов в спектрах обоих образцов практически идентично и близко к соотношению 3 : 2 : 1. Применительно к наноразмерным магнитным частицам дублет является проявлением СПМ состояния магнитных моментов частиц.
- Сверхтонкая структура спектра при $T=4.2$ К (рис. 3b) является признаком заблокированного состояния магнитных моментов частиц μ_{un} в мёссбауэровской методике. Для спектров при $T = 4.2$ К математическая обработка также как и для $T = 300$ К, показывает три характерные позиции железа (Fe1, Fe2, Fe3) в октаэдрическом окружении.
- Оба образца представляют собой наноразмерные частицы ферригидрита. Низкотемпературный отжиг не привел к появлению других фаз оксида железа.

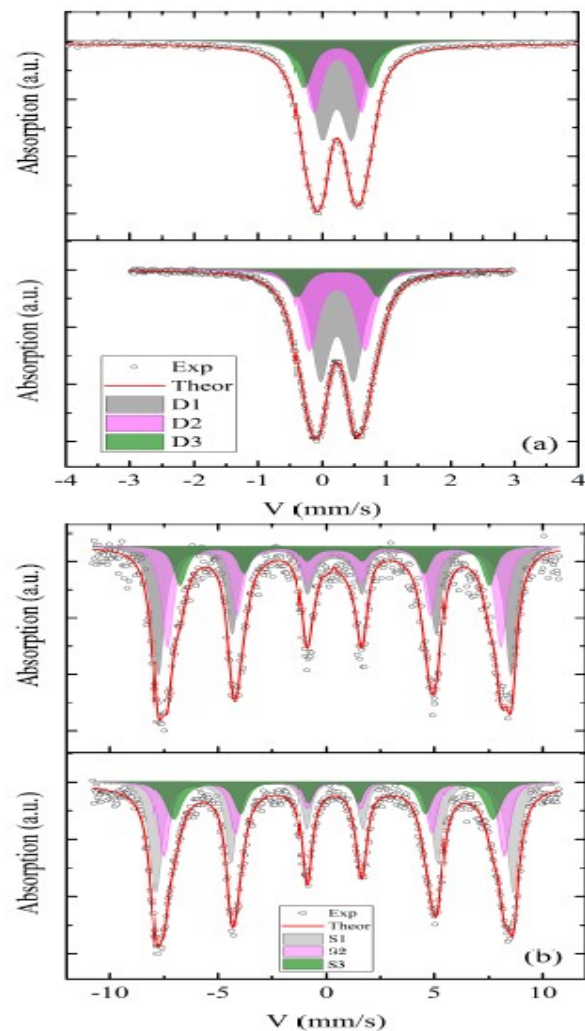


Рис. 3. (Цветной онлайн). Мёссбауэровские спектры образцов FH-0h (сверху) и FH-24h (снизу) образцов при 300 К (a) и при 4.2 К (b). Символы — эксперимент, линии — результаты обработки, закрашенные дублеты D (a) и секстеты S (b) — парциальные составляющие спектров (для D1, D2, D3 S1, S2, S3 номер соответствует позиции железа Fe1, Fe2, Fe3, см. табл. 1)

Таблица 1. Мёссбауэровские параметры при температурах 4.2 и 300 К. IS — химический сдвиг относительно α -Fe, ± 0.005 мм/с H_{hf} — сверхтонкое поле на ядрах железа, ± 2 кЭ, QS — квадрупольное расщепление, ± 0.02 мм/с, W — ширина мёссбауэровской линии на полувысоте, ± 0.02 мм/с, A — относительная заселенность позиции, ± 0.05 а.у.)

| Образец/ T | IS | H_{hf} | QS | W | A | Позиция |
|-----------------|-------|----------|------|------|------|---------|
| FH-24h 300 К | 0.336 | — | 0.52 | 0.37 | 0.51 | Fe1 |
| | 0.338 | — | 0.87 | 0.35 | 0.37 | Fe2 |
| | 0.338 | — | 1.27 | 0.33 | 0.13 | Fe3 |
| FH-24h 4.2 К | 0.488 | 513 | 0.0 | 0.49 | 0.45 | Fe1 |
| | 0.458 | 489 | 0.0 | 0.58 | 0.30 | Fe2 |
| | 0.428 | 459 | 0.0 | 0.49 | 0.23 | Fe3 |
| FH-0h 300 К | 0.334 | — | 0.47 | 0.37 | 0.48 | Fe1 |
| | 0.343 | — | 0.74 | 0.29 | 0.30 | Fe2 |
| | 0.344 | — | 1.06 | 0.33 | 0.22 | Fe3 |
| FH-0h 4.2 К | 0.501 | 508 | 0.0 | 0.23 | 0.47 | Fe1 |
| | 0.480 | 479 | 0.0 | 0.33 | 0.36 | Fe2 |
| | 0.499 | 443 | 0.0 | 0.58 | 0.15 | Fe3 |

$$T_B = K_{eff} V / \ln(\tau_m / \tau_0) k \quad (2)$$

- В рамках модели случайной анизотропии авторами [3,8] была предложена следующая зависимость размера кластера $L_H(H)$ от поля:
- 3. M. Knobel, W. C. Nunes, et al. J. of Non-Crystalline Solids 353, 743 (2007).
- 8. J. M. Vargas, W. C. Nune

$$L_H(H) = d + \sqrt{\frac{2A_{eff}}{M_S H + C}} \quad (3)$$

- M_S - намагниченность насыщения частицы,
- параметры A_{eff} и C характеризуют интенсивность магнитных межчастичных взаимодействий.
- Выражение (3) содержит корневую зависимость корреляционного размера от внешнего поля, вытекающую из микромагнитной теории [46], и A_{eff} имеет тот же смысл, что обменная константа для нанокристаллических сплавов [3, 8],
- 46. E. M. Chudnovsky, W.M. Saslow, and R. A. Scrota, Phys. Rev. B 33, 251 (1986).
- Для рассматриваемого кластера частиц размера L_H константа магнитной анизотропии будет иной, чем для отдельной частицы:

$$K_H = K_{eff} / N_p^{1/2},$$

- где I — эффективной
- невз

$$T_B(H) = \frac{K_{eff} V}{k_B \ln(\tau / \tau_0)} \left[1 - \frac{M_S H}{2K_{eff}} \right]^{3/2} \quad (4)$$

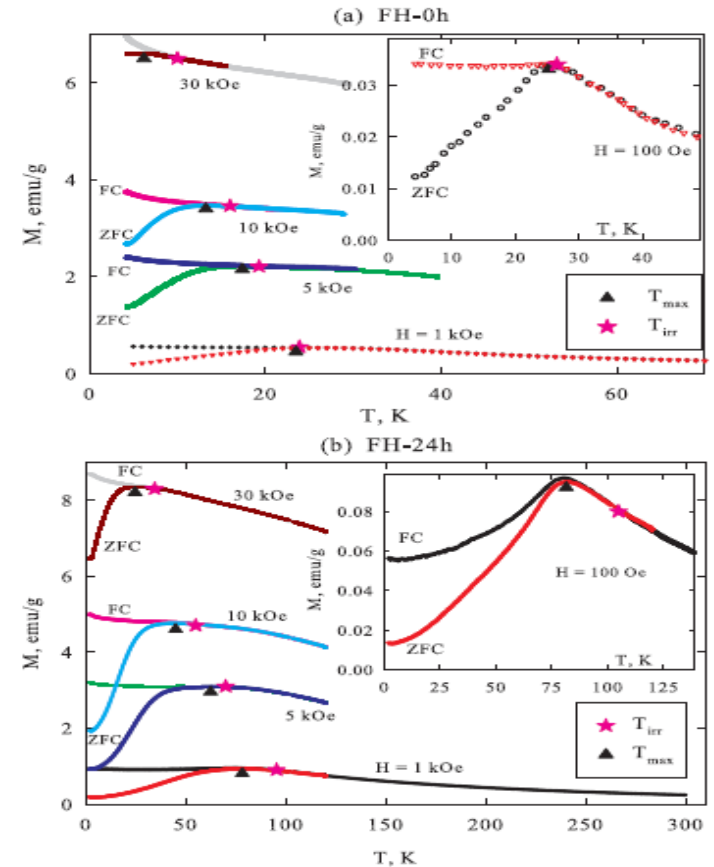


Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурные зависимости намагниченности $M(T)_{ZFC}$ и $M(T)_{FC}$ в различных полях (указаны на рисунках) для образцов FH-0h (a) и FH-24h (b). На вставках — данные для $H = 100$ Э. Также показаны характерные температуры необратимого поведения намагниченности T_{irr} и максимума зависимости $M(T)_{ZFC}$ T_{max} (см. легенды на рисунках)

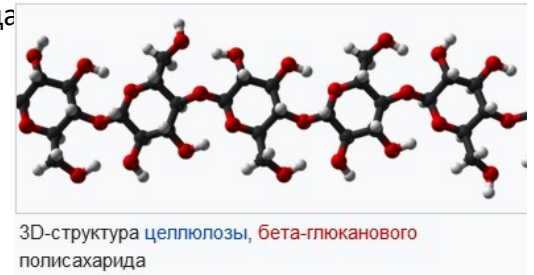
- Подстановка в (2) объема кластера вместо объема частицы (для случая частиц шарообразной формы) и соответствующей константы анизотропии K_H , с учетом объемной концентрации x магнитных частиц, приводит к следующему выражению для температуры СПМ блокировки:

$$T_B(H) = \frac{\pi K_{eff} [d^3 + x(L_H^3 - d^3)]}{6k_B \ln\left(\frac{\tau_m}{\tau_0}\right) \sqrt{1 + \frac{x(L_H^3 - d^3)}{d^3}}} \times$$

$$\times \left[1 - \frac{M_S H \sqrt{1 + \frac{x(L_H^3 - d^3)}{d^3}}}{2K_{eff}} \right]^{\frac{3}{2}}. \quad (5)$$

Согласно выражениям (2) и (5), температура СПМ блокировки пропорциональна объему частиц.

- Для анализа (3) и (5) необходимо предварительно определить минимальное количество подгоночных параметров (M_s , x , τ_m , τ_0 и d_{\max}).
- Значения M_s определяются из анализа изотерм кривых намагничивания $M(H)$ в СПМ области температур [13,14]. Обычно такой анализ заключается в фитировании экспериментальных данных функцией типа
- $M(H) = M_{sp}(H) + \chi H$.
- В результате подгонки определяется средний магнитный момент частицы $\langle \mu_{\text{цп}} \rangle$, причем значения $\langle \mu_{\text{цп}} \rangle$, обычно, слабо изменяются в области низких температур.
- Для исследованных образцов FH-0h и FH-24h величина $\langle \mu_{\text{цп}} \rangle$, в области низких температур составляет $\approx 160 \mu_B$ и $\approx 300 \mu_B$ соответственно.
- Из соотношения $M_s = \mu_{\text{цп}}/V$, получим, $M_s(\text{FH0h}) = 20 \text{ Gs}$ и $M_s(\text{FH-24h}) = 13.3 \text{ Gs}$
- (при значении плотности ферригидрита $\approx 3.8 \text{ g/cm}^3$).
- Концентрация частиц x определяется толщиной экзополисахаридного покрытия частиц ферригидрита, которое присутствует для образца FH-0h. Для этого образца мы берем значение $x = 0.75$, исходя из разумного предположения достаточно тонкого покрытия, средней толщиной порядка 0.15 нм. Для образца
- Общая формула большинства полисахаридов — $C_x(H_2O)_y$, где x обычно лежит между 200 и 2500.
- Общепринятые характерные времена $\tau_m = 10^2 \text{ с}$ (для SQUID магнитометра, вибрационного магнитометра) и $\tau_0 = 10^{-12} \text{ с}$,
- максимальные размеры частиц $d_{\max} = 3.3 \text{ нм}$ для FH-0h и
- $d_{\max} = 5.8 \text{ нм}$ для образца FH-24h по данным просвечивающей электронной микроскопии.



Температура T_{irr} , характеризующая начало необратимого поведения зависимостей $M(T)$ (рис. 4), соответствует частицам наибольшего размера d_{max} .

Таблица 2. Параметры, использованные при построении зависимостей $T_{irr}(H)$ на рис.5b и отношение $L_H(H=0)/\langle d \rangle$ ($\langle d \rangle = 2.7$ и 3.8 нм для образцов FH-0h и FH-24h соответственно)

| Образец | $x, \%$ | $K_{eff},$ эрг/см ³ | $C,$ эрг/см ³ | $A_{eff},$ эрг/см | $L_H(H=0),$ нм | $\frac{L_H(H=0)}{\langle d \rangle}$ |
|---------|---------|-----------------------------------|-----------------------------|----------------------|-------------------|--------------------------------------|
| FH-0h | 0.75 | $2.1 \cdot 10^6$ | $11.7 \cdot 10^4$ | $100 \cdot 10^{-10}$ | 7.4 | 2.7 |
| FH-24h | 1 | $1.4 \cdot 10^6$ | $4.8 \cdot 10^4$ | $120 \cdot 10^{-10}$ | 13.0 | 3.4 |

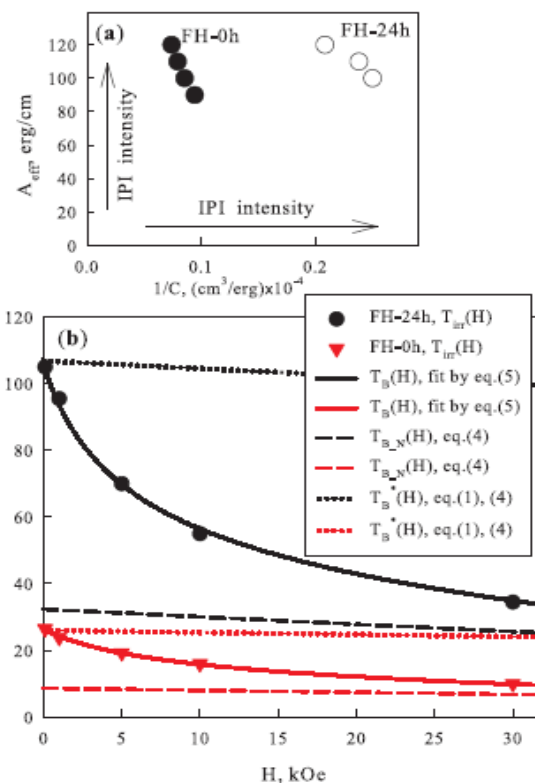


Рис. 5. (Цветной онлайн) *a* — области значений подгочных параметров C и A_{eff} , при которых достигается хорошее согласие зависимостей $T_{irr}(H)$ и расчетом по модели СА, в координатах $1/C, A_{eff}$. *b* — температуры T_{irr} в зависимости от внешнего поля H (символы) для исследованных образцов. Сплошные линии — результаты подгонки в рамках модели СА — выражения (3) и (5) с параметрами, указанными в табл. 2. Точечные линии построены по выражению (4) при согласии с экспериментом в поле 100 Э. Штриховые линии — «ожидаемые» зависимости температуры блокировки при полном отсутствии магнитных межчастичных взаимодействий (выражение (4)) с величинами K_{eff} , приведенными в табл. 2

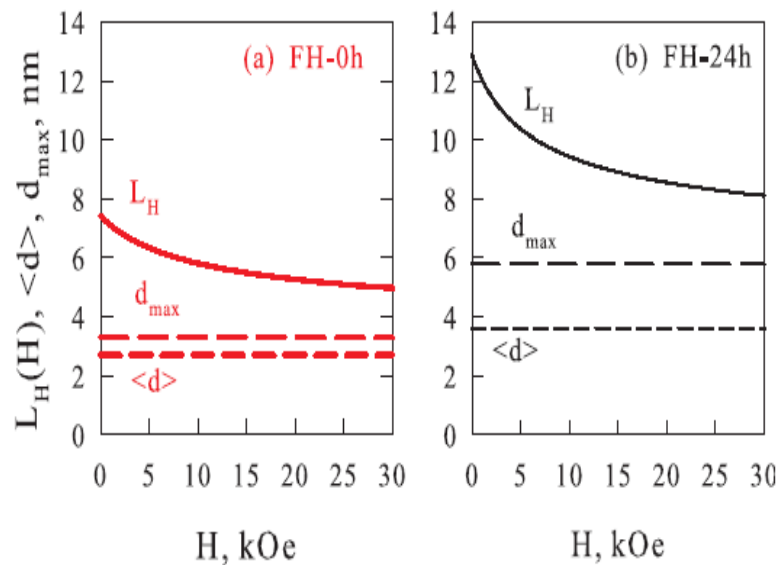


Рис. 6. (Цветной онлайн) Поведение размера кластера L_H от внешнего поля, полученное в результате подгонки зависимостей $T_{irr}(H)$ (рис. 5b) по выражениям (3) и (5), в сравнении со средним $\langle d \rangle$ и максимальным d_{\max} размерами частиц образцов FH-0h (a) FH-24h (b)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- В данной работе была исследована зависимость температуры СПМ блокировки от внешнего магнитного поля $T_B(H)$ двух образцов порошковых систем наноферригидрита.
- Анализ полученных зависимостей $T_B(H)$ показал, что классическое выражение, в котором нет учета магнитных межчастичных взаимодействий, не может описать экспериментально наблюдаемое достаточно быстрое уменьшение температуры блокировки с увеличением внешнего поля.
- С другой стороны, подход в рамках модели СА [3, 8], в котором рассматриваются кластеры частиц, магнитные моменты которых ведут себя скоррелировано, позволяет не только достигнуть хорошего согласия экспериментальных и модельных зависимостей $T_B(H)$, но и получить разумные величины эффективной константы магнитной анизотропии. Скоррелированное поведение магнитных моментов частиц является признаком магнитных межчастичных взаимодействий, и, следовательно, в магнитном поведении систем наночастиц ферригидрита такие взаимодействия играют важную и существенную роль.
- Кроме указанной особенности функциональной зависимости $T_B(H)$ (быстрое уменьшение с ростом поля), магнитные межчастичные взаимодействия приводят к увеличению температуры СПМ блокировки, определяемой в небольших полях.
- Отметим, что при использовании классического неель-брауновского выражения, извлекаемые константы магнитной анизотропии получаются завышенными в несколько раз. В рамках использованного подхода модели СА возможно получить величины констант магнитной анизотропии K_{eff} , как характеристику невзаимодействующих частиц. Для образцов ферригидрита, исследованных в данной работе, величины K_{eff} оказались зависимыми от размера частиц, что позволяет говорить о вкладе поверхностной магнитной анизотропии и разделить константы, соответствующие объемной и поверхностной анизотропии:
$$K_v \approx 4.7 \cdot 10^5 \text{ эрг/см}^3, K_s = 0.09 \text{ эрг/см}^2.$$
- Проведенная количественная оценка энергии магнитных взаимодействий превышает возможный вклад магнитных диполь-дипольных взаимодействий, что указывает на обменные (прямые, либо косвенные) взаимодействия между атомами соседних частиц в исследованных системах ферригидрита.

Спасибо за внимание!!!