

МАГНИТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ ДЛЯ КОМПОНЕНТОВ МРТ-ДИАГНОСТИКИ И ЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ

А. С. Корсакова¹, Д. А. Котиков², К. С. Ливонович³, Т. Г. Шутова³,
Ю. С. Гайдук², В. В. Паньков²

¹⁾ Научно-исследовательский институт физико-химических проблем БГУ,
ул. Ленинградская, 14, 220030 Минск, Беларусь

²⁾ Белорусский государственный университет, просп. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

³⁾ ГНУ «Институт химии новых материалов НАН Беларуси», ул. Ф. Скорины, 36,
220141 Минск, Беларусь
e-mail: j_hajduk@bk.ru

Методами рентгенофазового анализа и инфракрасной спектроскопии установлено образование однофазных твердых растворов оксида железа и оксида марганца со структурой шпинели в системе $Mn_xFe_{3-x}O_4$ ($x = 0; 0,3; 0,6; 0,8; 1,0; 1,2; 1,4; 1,8$). Максимальная намагниченность насыщения обнаружена для состава $Mn_{0,3}Fe_{2,7}O_4$ ($M_s = 68 \text{ A} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{кг}^{-1}$ при 300 К и $M_s = 85 \text{ A} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{кг}^{-1}$ при 5 К), что связано с изменением катионного распределения по тетраэдрическим и октаэдрическим пустотам. Полученные материалы стабилизировали в виде коллоидных растворов с использованием ряда полиэлектролитов. Установлено, что лучшее стабилизирующее действие оказывал поли(диаллилдиметиламмоний хлорид) PDDA из-за особенностей его строения. Предложен способ управления магнитными свойствами магнетита путем частичного замещения ионов железа в структуре магнетита марганцем. Изменение величины намагниченности и коэрцитивной силы возможно путем изменения степени замещения. Сравнительно высокие значения удельной намагниченности, а также однородность магнитных частиц по размеру могут представлять практический интерес для изготовления контрастных агентов в МРТ-диагностике.

Ключевые слова: наночастицы; намагниченность насыщения; контрастные агенты; МРТ-диагностика.

MAGNETIC NANOPARTICLES FOR COMPONENTS OF MRI DIAGNOSTIC AND ELECTRONIC DEVICES

A. S. Korsakova¹, D. A. Kotsikau², K. S. Livanovich³, T. G. Shutava³,
Yu. S. Haiduk², V. V. Pankov²

¹⁾ Research Institute for Physical Chemical Problems of the Belarusian State University,
14, Leningradskaya st, 220030, Minsk, Belarus

²⁾ Belarusian State University, 4, Nezavisimosti av., 220030 Minsk, Belarus

³⁾ Institute of Chemistry of New Materials NAS of Belarus,
36, F. Skoriny st., 220141, Minsk, Belarus

Corresponding author: Yu. S. Haiduk (e-mail: j_hajduk@bk.ru)

The formation of single-phase solid solutions of iron oxide and manganese oxide with a spinel structure in $Mn_xFe_{3-x}O_4$ system ($x = 0; 0.3; 0.6; 0.8; 1.0; 1.2; 1.4; 1.8$) has been

established by methods of X-ray phase analysis and infrared spectroscopy. The maximum saturation magnetization was found for the composition $\text{Mn}_{0.3}\text{Fe}_{2.7}\text{O}_4$ ($M_s = 68 \text{ A}\cdot\text{m}^2\cdot\text{kg}^{-1}$ at 300 K and $M_s = 85 \text{ A}\cdot\text{m}^2\cdot\text{kg}^{-1}$ at 5 K), which is associated with a change in the cationic distribution over tetrahedral and octahedral voids. The materials obtained were stabilized in the form of colloidal solutions using a number of polyelectrolytes. It was found that poly(diallyldimethylammonium chloride) – PDDA had the best stabilizing effect due to its structural features. A method for controlling the magnetic properties of magnetite by partial replacement of iron ions in the magnetite structure with manganese is proposed. Changing the magnitude of the magnetization and coercive force is possible by changing the degree of substitution. Relatively high values of specific magnetization, as well as uniformity of magnetic particles in size, can be of practical interest, for the manufacture of contrast agents in MRI diagnostics.

Key words: nanoparticles; saturation magnetization; contrast agents; MRI diagnostics.

Полный текст материалов доклада будет опубликован в журнале «Журнал Белорусского государственного университета. Физика»; 2021 г.

STRUCTURE AND ELECTRONIC PROPERTIES OF $\text{MoS}_{1.5}\text{Se}_{0.5}$ ALLOY FROM FIRST-PRINCIPALS CALCULATIONS

V. Gusakov¹, J. Gusakova², B. Tay³

¹⁾ *Scientific-Practical Materials Research Center of NASB, P. Browki 19, 220072 Minsk, Belarus, e-mail: gusakov@ifftp.bas-net.by*

²⁾ *Novitas Center, Nanyang Technological University, 50 Nanyang Ave. 639798 Singapore, e-mail: julia001@e.ntu.edu.sg*

³⁾ *CINTRA UMI CNRS/NTU/THALES, 50 Nanyang Drive 637553 Singapore, e-mail: ebktay@ntu.edu.sg*

Corresponding author: V. Gusakov (gusakov@ifftp.bas-net.by)

The effects of relative positions of Se atoms in a real monolayer alloy $\text{MoS}_{1.5}\text{Se}_{0.5}$ have been studied. It is demonstrated that the distribution of Se atoms between top and bottom chalcogen planes is most energetically favorable. For a more probable distribution of Se atoms $\text{MoS}_{1.5}\text{Se}_{0.5}$ monolayer alloy is a direct semiconductor with the fundamental band gap equal 2.35 eV. We have also evaluated the optical band gap of alloy at 77 K (1.86 eV) and room temperature (1.80 eV), which is in good agreement with the experimentally measured band gap of 1.79 eV.

Key words: transition metal dichalcogenides; alloy; DFT.

INTRODUCTION

Semiconducting transition metal dichalcogenides (TMDs) represent a class of layered materials with a nonzero band gap, which exploration started decades ago and continues until present [1, 2]. Transition metal dichalcogenides have attracted much attention owing to their rich physics and promising applications in electronic and optoelectronic devices [2]. TMD monolayers such as MoS_2 , MoSe_2 , WS_2 , WSe_2 are direct band gap semiconductors (with optical band gap of 1–2 eV) [3]. The crystal-phase engineering of TMDs is criti-