

## МАРГАНЕЦ-ЗАМЕЩЕННЫЕ СТРУКТУРЫ ГИДРОКСИАПАТИТА: МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ

Быстров В.С., Парамонова Е.В., Авакян Л.А.<sup>1</sup>, Макарова С.В.<sup>2</sup>, Булина Н.В.<sup>2</sup>,  
Семёнов С.В.<sup>3</sup>, Рубайло А.И.<sup>4</sup>

Институт математических проблем биологии РАН – филиал Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 142290 Пушкино, Россия, [vsbys@mail.ru](mailto:vsbys@mail.ru)

<sup>1</sup>Физический факультет, Южный Федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

<sup>2</sup>Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия

<sup>3</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

<sup>4</sup>Красноярский центр коллективного пользования СО РАН, Красноярск, Россия

Гидроксиапатит (ГАП) является минеральным компонентом костей и зубов, обладает хорошей биосовместимостью и поэтому в основном используется в медицине для восстановления костной ткани. В тоже время ГАП все шире применяется и в других областях, в т.ч. для магнитно-резонансной томографии и для локальной магнитной гипертермии при лечении опухолей рака [1], благодаря возможности включения в их состав ионов железа, марганца и др., имеющих магнитные свойства. Кристаллическая структура ГАП достаточно гибкая и легко интегрирует в себя различные ионы, что и влияет на свойства ГАП. Одним из важных таких катионов является марганец. В данной работе представлены результаты моделирования решетки Mn-ГАП с различным числом замещений Mn/Ca в разных позициях, полученные с использованием высокоточных расчетов методами теории функционала плотности с гибридными функционалами [2]. Также приведены экспериментальные данные по синтезу Mn-ГАП механохимическим методом. Расчетные и экспериментальные данные показывают хорошее соответствие: параметры элементарной ячейки и объем уменьшаются с увеличением замещений Mn/Ca [3], что соответствует ионным радиусам Ca и Mn. Эти результаты аналогичны результатам, полученным для замещений Mg/Ca в Mg-ГАП [4]. Однако, тут возникают дополнительные электронные уровни энергии внутри запрещенной зоны  $E_g$  Mn-НАР, тогда как в Mg-НАР нет уровней внутри запрещенной зоны, изменяется только ширина  $E_g$ . При введении Mn изменяется энергия фотовозбуждения, и ее эффективное значение  $E_g^*$  становится меньше ширины запрещенной зоны  $E_g$  в чистом ГАП. Возникают также и магнитные свойства НАР-Mn (до 5 магн.Бора/ячейку для 1-го Mn) пропорциональные количеству введенного Mn. Экспериментальные измерения магнитных свойств Mn-ГАП образцов на вибрационном магнитометре VSM 8604 дали значения намагниченности до 0.3 emu/g в поле 1.5 Т при температуре 300 К. Полученные результаты свидетельствуют о хорошей перспективе возможных применений создаваемых Mn-ГАП структур.

### Литература

1. *Tampieri A., et al. Acta Biomater.*, **V. 8**, 2012, P. 843–851.
2. *Bystrov V., Paramonova E., et al. Nanomaterials*, **V. 11**, 2021, P. 2752.
3. *Быстров В.С., и др. Изв. РАН. Серия физическая*, **Т. 88**, № 5, 2024, С. 80-86.
4. *Bystrov V.S., Paramonova E.V., Avakyan L.A., et. al., Materials*, **V. 16**, 2023, P. 5945.