

## ナノ Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 粒のヒステリシス損シミュレーションと ハイパーサーミアへの適用性

小畑修二、米田守重\*  
(電機大理工, \*日本電子専門)

Hysteresis loss simulations of Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles and adaptability for hyperthermia  
S. Obata and M. Yoneda  
(Tokyo Denki University, \*Japan Electronic College)

### はじめに

近年、ナノ磁性体の磁化特性の研究が飛躍的に進み、多くの実験結果が示されている。ナノ磁性は形状依存性を持ち、バルク磁性とは異なる様々な特徴を有することが明らかにされた。磁性アルブミンなども製造され、ナノ磁性体の人体への挿入が可能と成って、ヒステリシス損による癌の温熱療法が盛んに検討されている。しかしながら、こうしたヒステリシス損を求める計算理論は長らく存在せず、理論的な裏付けは皆無であった。本発表では、磁気双極子モーメント相互作用に基づき、ナノ磁性体のヒステリシス特性のシミュレーションを行い、ナノ Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> ヒステリシス損による癌の温熱療法の適用性を理論的に検討する。

### 計算理論

一般的スピン系の相互作用エネルギーは演算子@と磁気双極子モーメント  $\mu$  を用いて

$$\hat{H} = \sum_{i>j} (J_{ij} \mu_i @ \mu_j + W_{ij}) - (\sum_i \mu_i) \cdot H \quad \dots (1)$$

と表され、磁気双極子モーメント間相互作用エネルギー  $W_{ij}$  は2点間の位置ベクトルを  $d_{ij} \mathbf{e}_{ij}$  として

$$W_{ij} = \frac{1}{4\pi\mu_0 d_{ij}^3} \{(\mu_i \cdot \mu_j) - 3(\mu_i \cdot \mathbf{e}_{ij})(\mu_j \cdot \mathbf{e}_{ij})\} \quad \dots (2)$$

と表される。演算子@にはハイゼンベルグモデル、イジングモデル、X-Yモデルなど様々な演算形式が有るが、本研究では古典スピン系とする。 $J_{ij}$  は分子結合に於ける電子の静電場のエネルギーで形成され、量子化した分子軌道の電場エネルギーから固有状態として定まる。その為、スピン結合のエネルギーを与えるが磁場に対するヒステリシス特性は持たない。 $W_{ij}$  と  $\mu H$  は磁場のエネルギーで、 $W_{ij}$  は古典磁気双極子によるエネルギーを表す。ヒステリシス損は外部磁場と磁気モーメント磁場の為すエネルギーとして磁性体により消費され、熱エネルギーに変換される。この様に磁性に直接関わるエネルギーは  $W_{ij}$  となり、ヒステリシスは  $W_{ij} - \mu H$  で決定される。従って、ヒステリシス特性だけを論ずるならば  $W_{ij} - \mu H$  だけで良く、ヒステリシス損はこの項だけで求まる。エネルギー消費はこのシミュレーションのヒステリシス損から求める。

### 計算方法

計算は外場  $H$  の変化ごとに全空間の  $W_{ij}$  について  $\mu_i$  のモーメント方位を変え、最小状態を選択する。全スピンについてエネルギー計算を繰り返し行い、変化が無くなるまで繰り返し、基底状態を求める。系全体のエネルギーを決定する。 $J_{ij}$  による磁化はキュリー温度  $T_c$  に関わるがヒステリシス特性には大きく関わらないので Fig.1 では省いた。

1) Shuji Obata: Materials Transactions, **55** (2014) 1591-8.

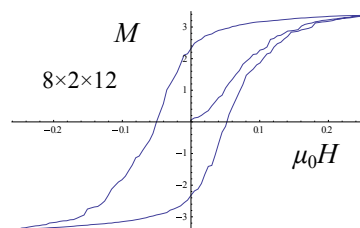


Fig.1 M-H curve of nano-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>