

Simulación Monte Carlo de nanopartículas tridimensionales de Magnetita con diversas formas convexas

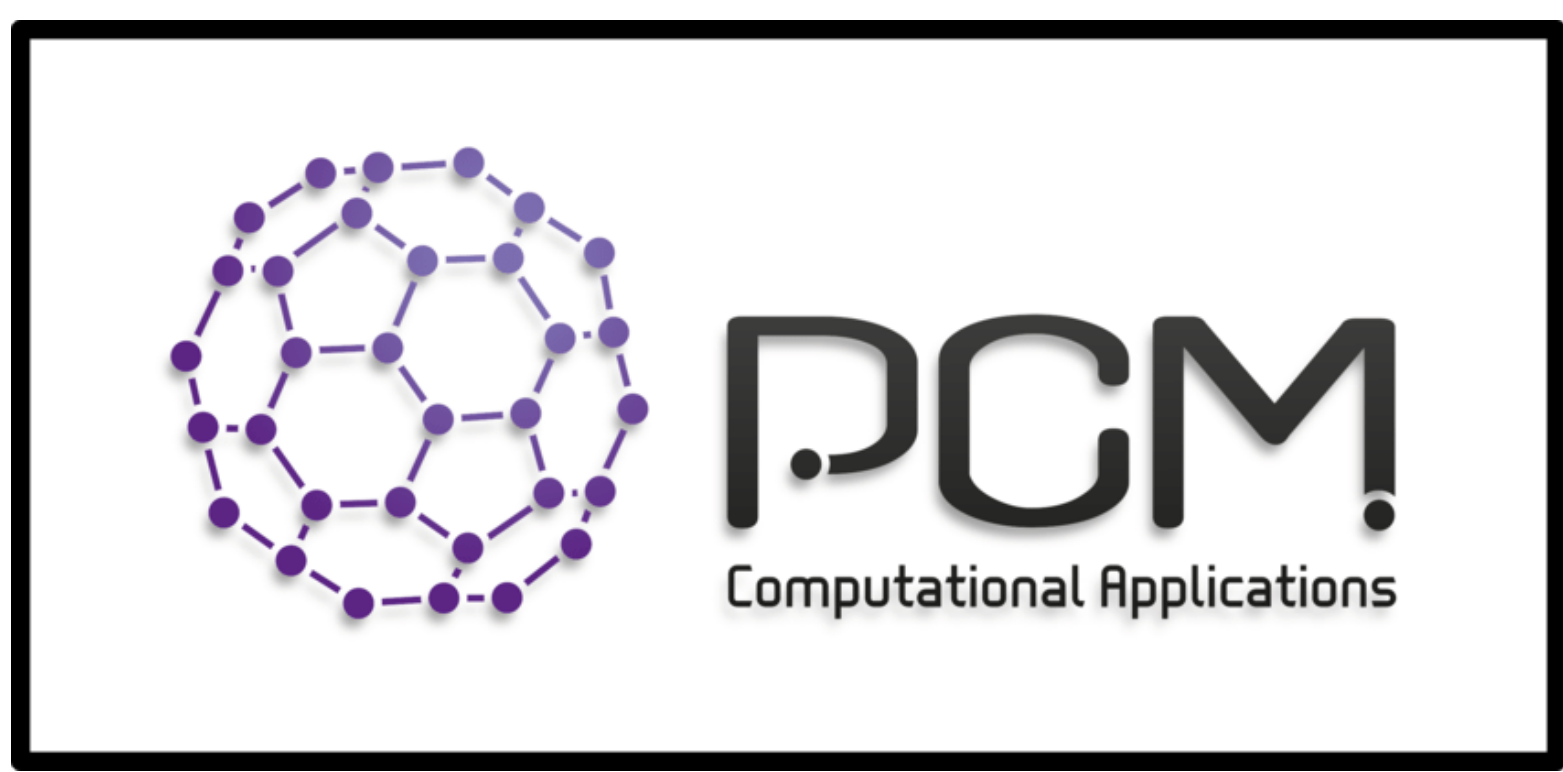
Sebastián Serna Ospina

Directora: Elisabeth Restrepo Parra

Codirector: José Antonio Valencia-Aricapa

PCM Computational Applications, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,
Universidad Nacional de Colombia - Sede Manizales

ssernao@unal.edu.co



Introducción

Entre los materiales más usados en la actualidad tenemos los materiales magnéticos, aplicados a una gran variedad de necesidades. En especial, el uso de nanopartículas ha tomado mayor relevancia en los últimos años en diversos campos, como la biomedicina, donde se ha investigado su utilidad en imagen por resonancia magnética (IRM), administración dirigida de medicamentos (Targeted Drug Delivery) y terapia de hipertermia, esta última destacando como un posible tratamiento en la lucha contra el cáncer. Entre estos materiales encontramos la magnetita (Fe_3O_4), la cual, podemos encontrar en la naturaleza y tiene inherentemente altas propiedades magnéticas, lo que la convierte en un recurso importante. Este trabajo se centra en el estudio de este material a nivel nanométrico conocido como nanopartícula, la cual es la forma más común en el mercado. En varios trabajos experimentales se han utilizado diferentes tamaños y formas, sin embargo, en el campo computacional es un tema de mayor complejidad al momento de simular sus características, dado que, su estructura cristalina es definida como espinela inversa. A nivel experimental, las formas de las nanopartículas comerciales no son totalmente esféricas, lo cual puede afectar sus propiedades magnéticas. En este trabajo se estudian las propiedades magnéticas de nanopartículas de magnetita con diferentes formas tridimensionales mediante técnicas de simulación, utilizando el método Monte Carlo con el algoritmo de Metrópolis.

Nanopartículas Regulares

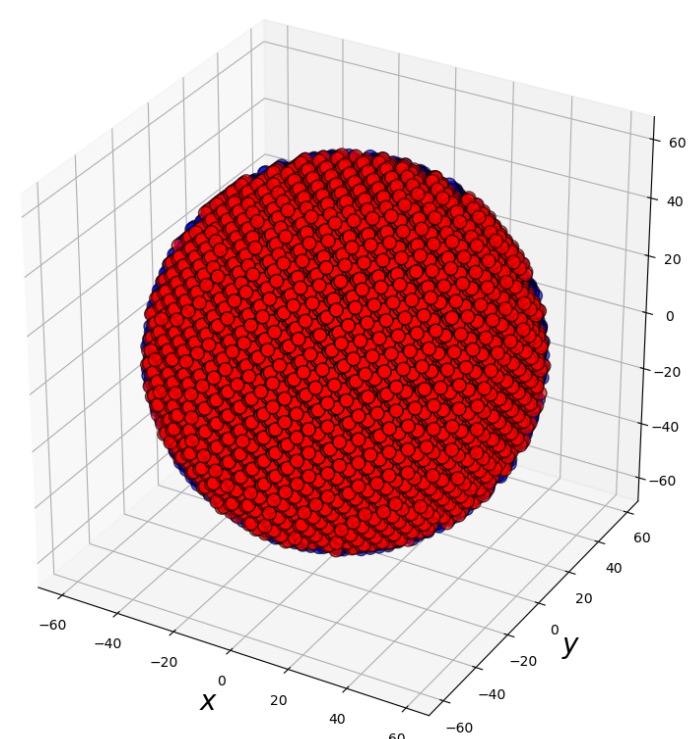


Figura 1. Forma esférica.

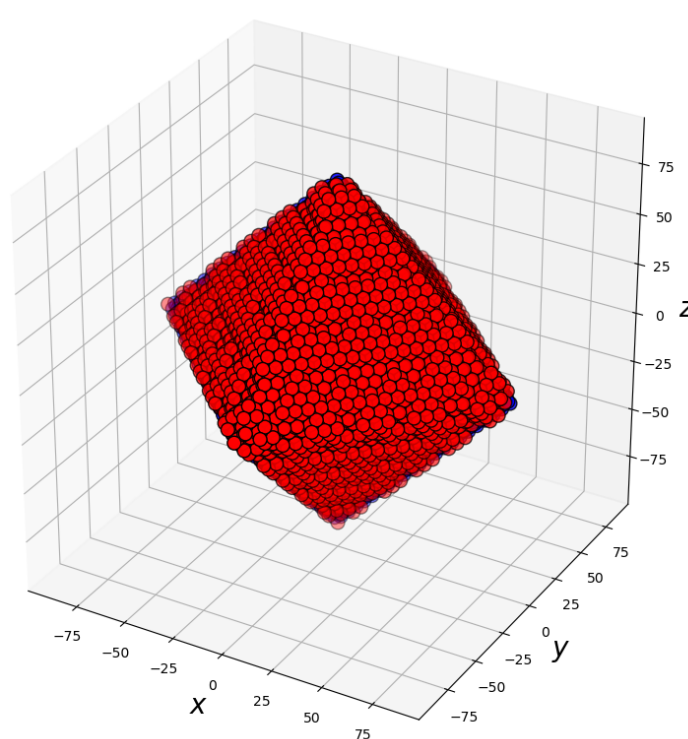


Figura 2. Forma octaédrica.

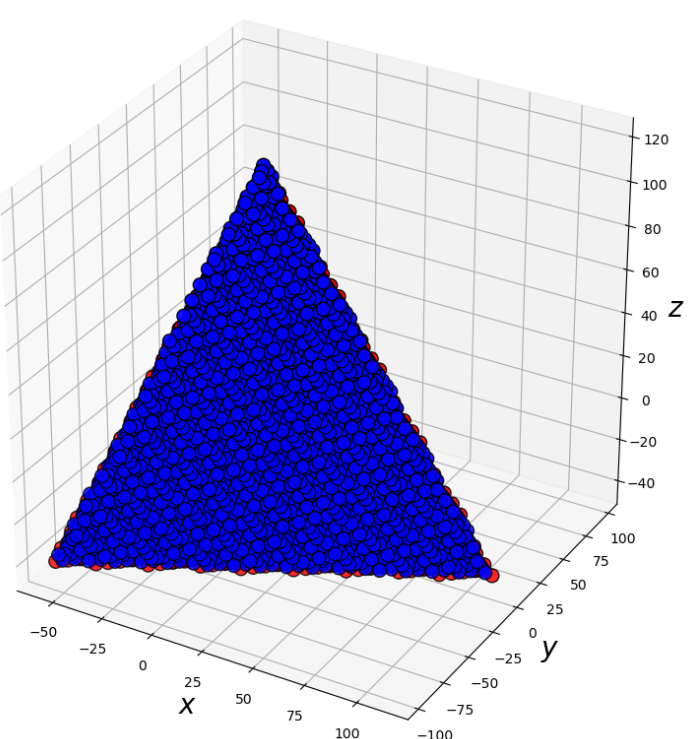


Figura 3. Forma tetraédrica.

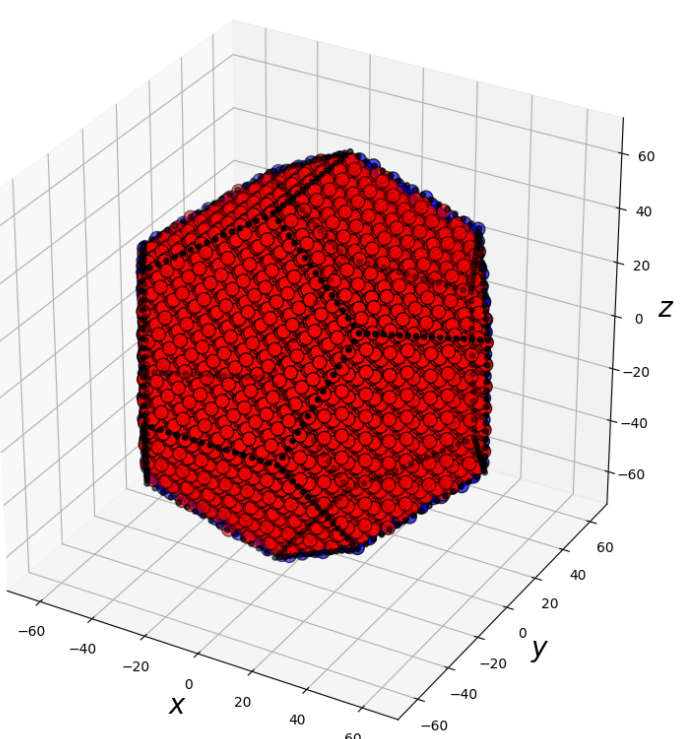


Figura 4. Forma dodecaédrica.

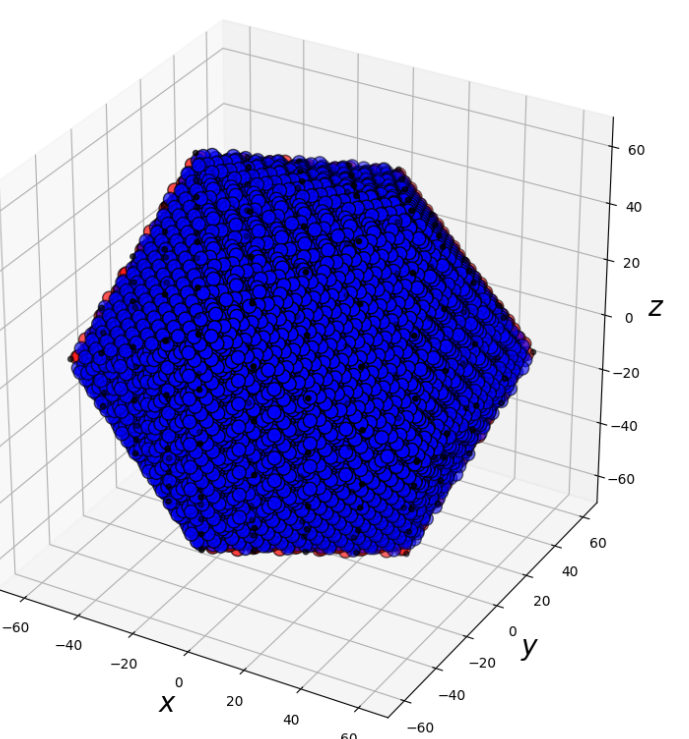


Figura 5. Forma icosaédrica.

Nanopartículas Truncadas

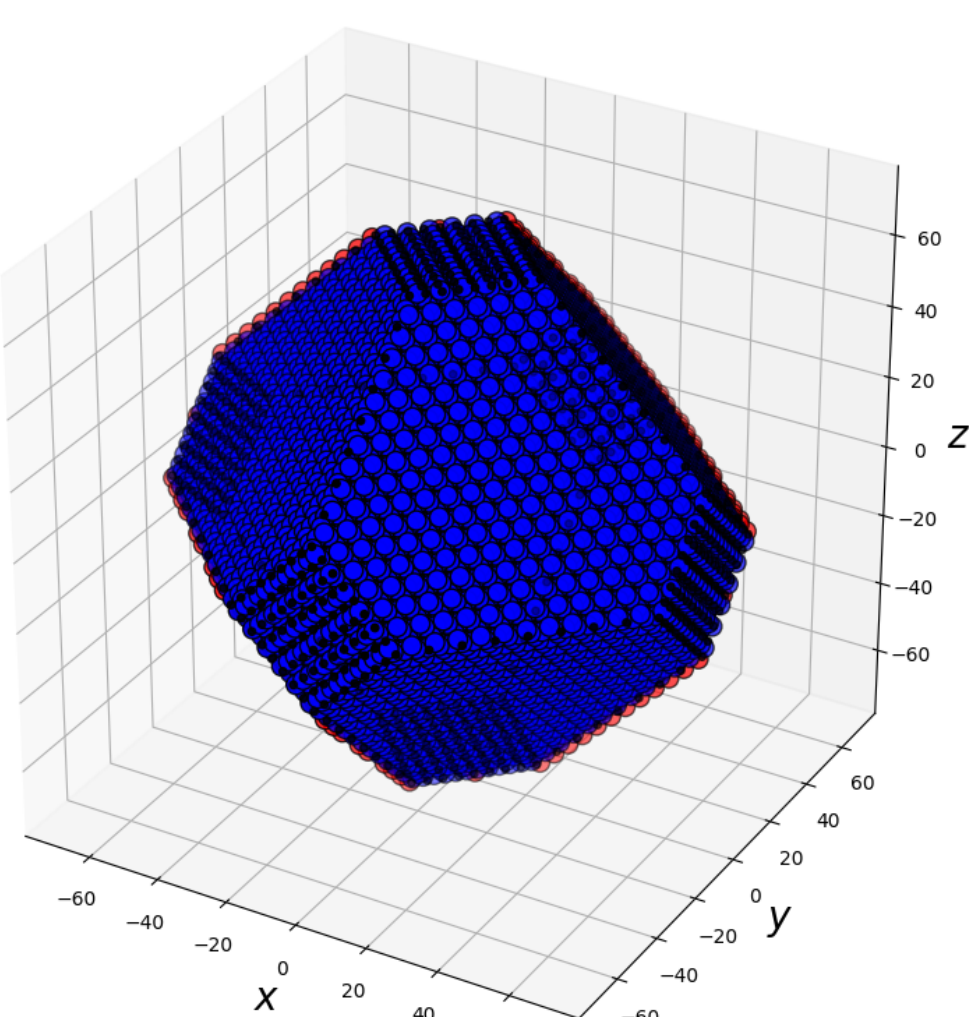


Figura 6. Forma octaédrica truncada

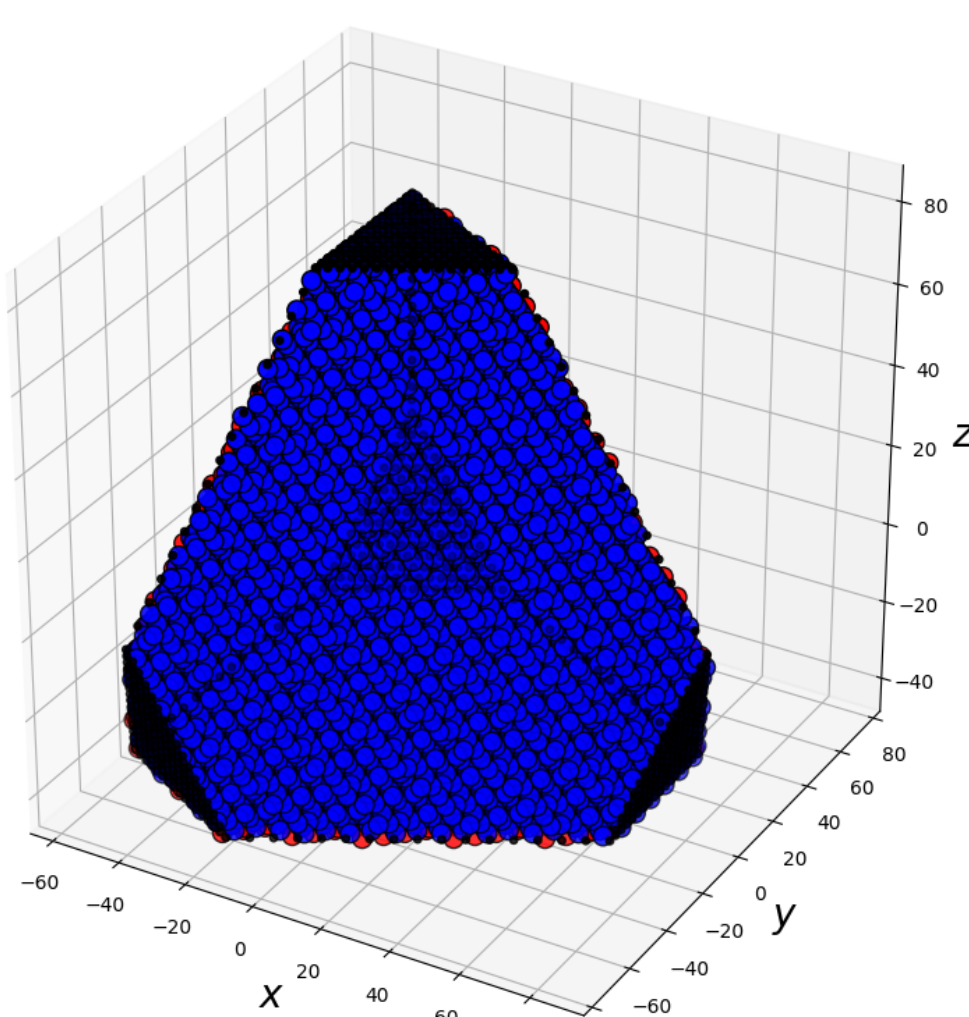


Figura 7. Forma tetraédrica truncada

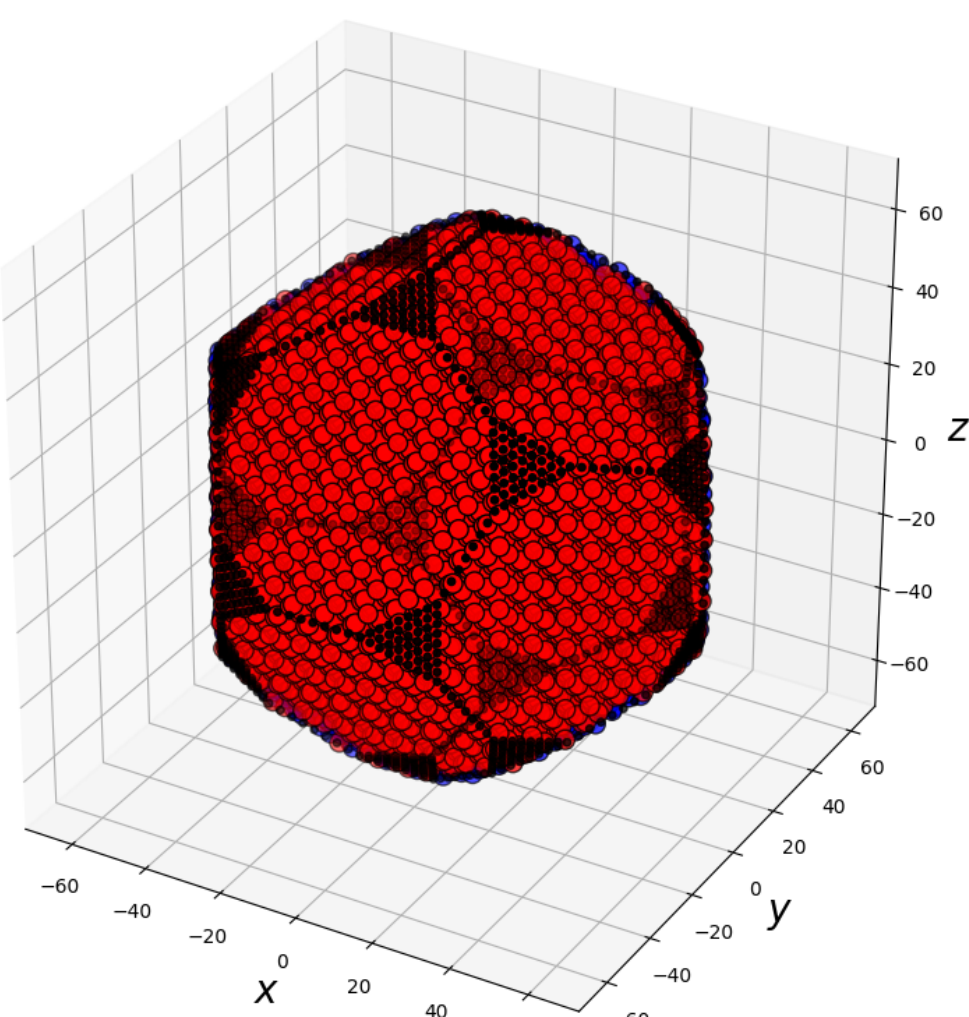


Figura 8. Forma dodecaédrica truncada

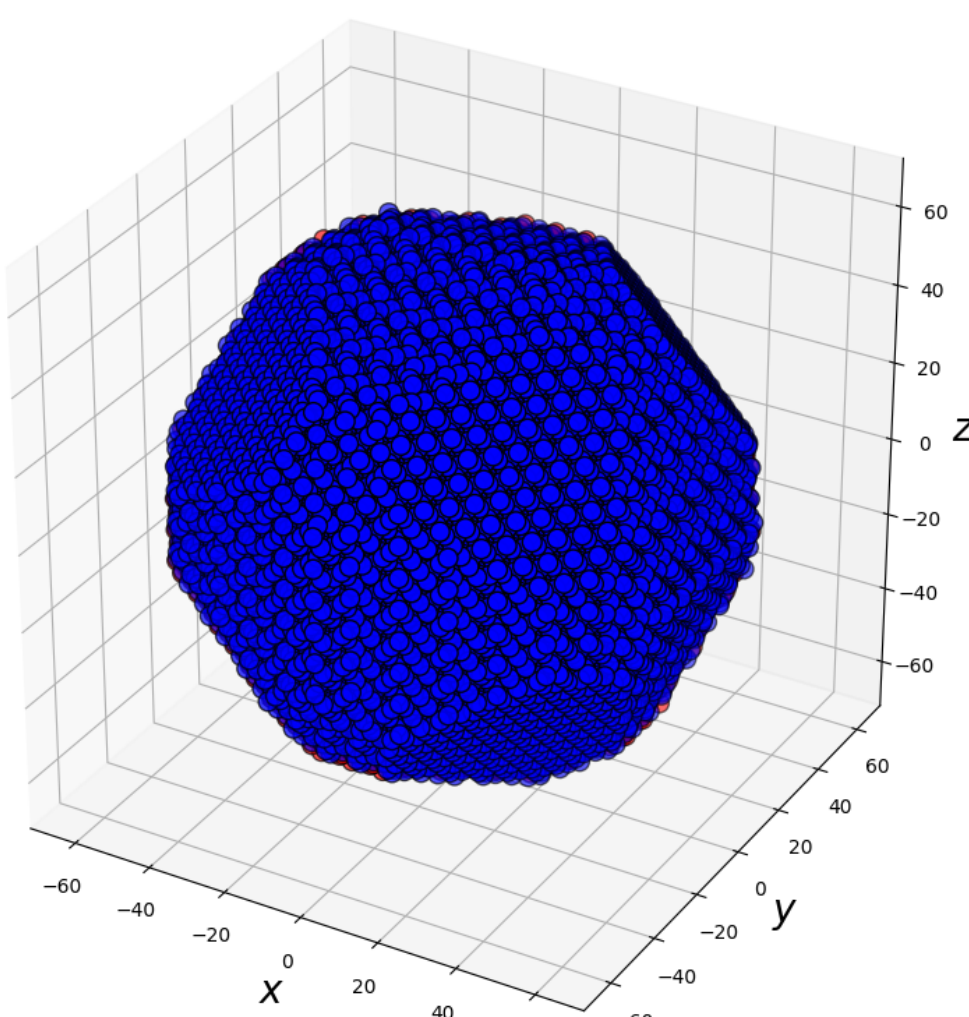


Figura 9. Forma icosaédrica truncada

Resultados

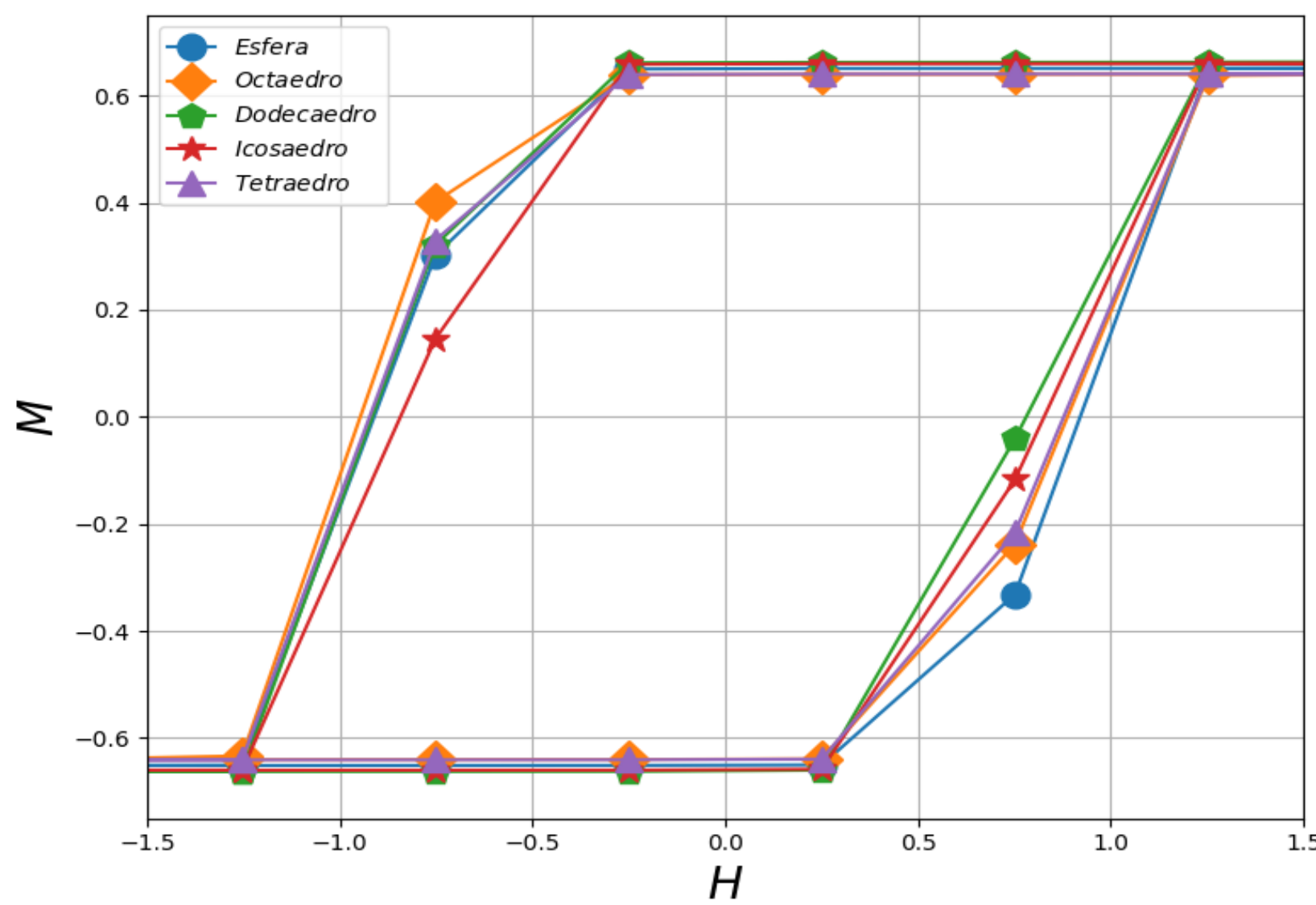


Figura 10. Magnetización contra Campo Magnético de nanopartículas con formas de sólidos platónicos.

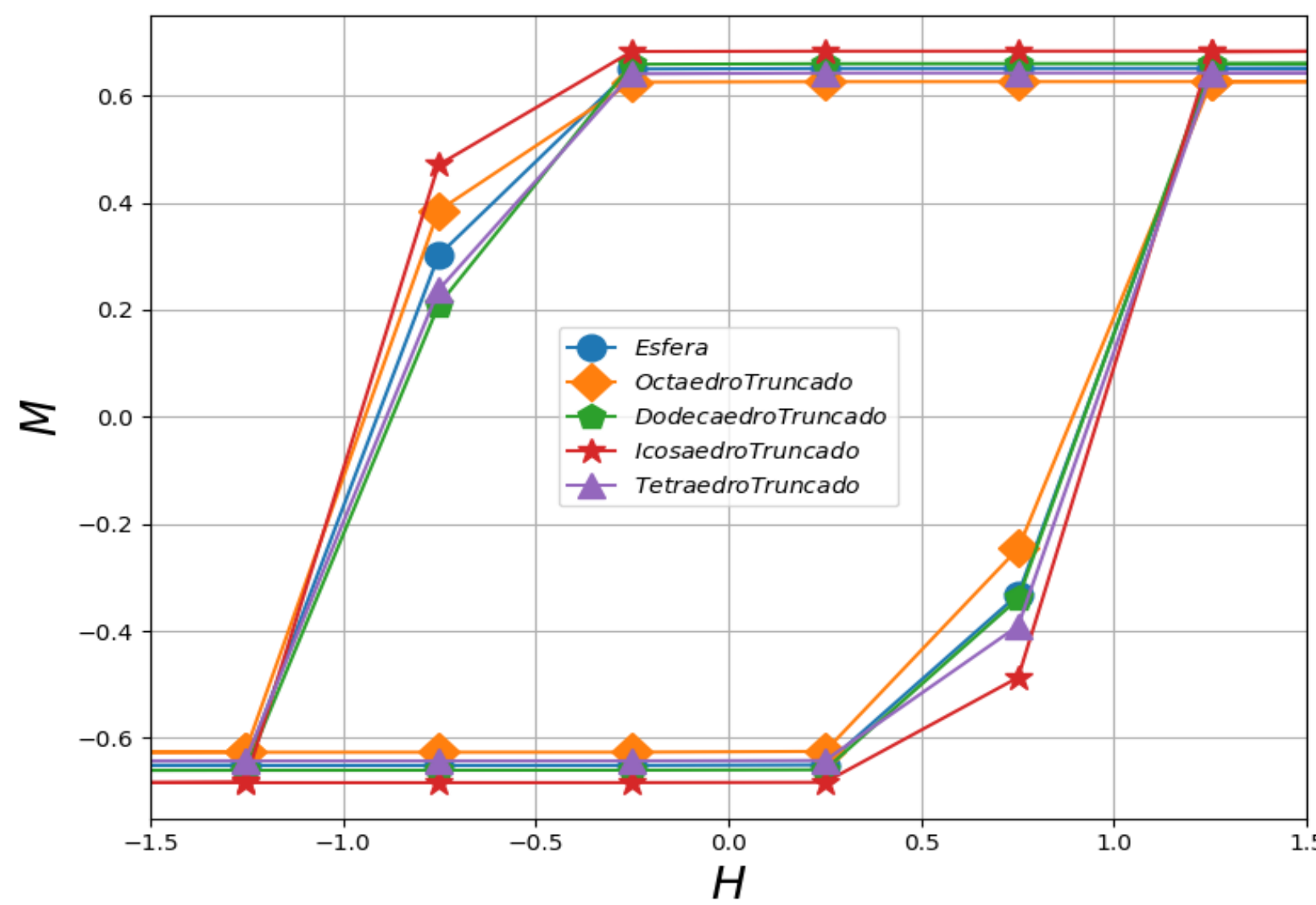


Figura 11. Magnetización contra Campo Magnético de nanopartículas con formas truncadas.

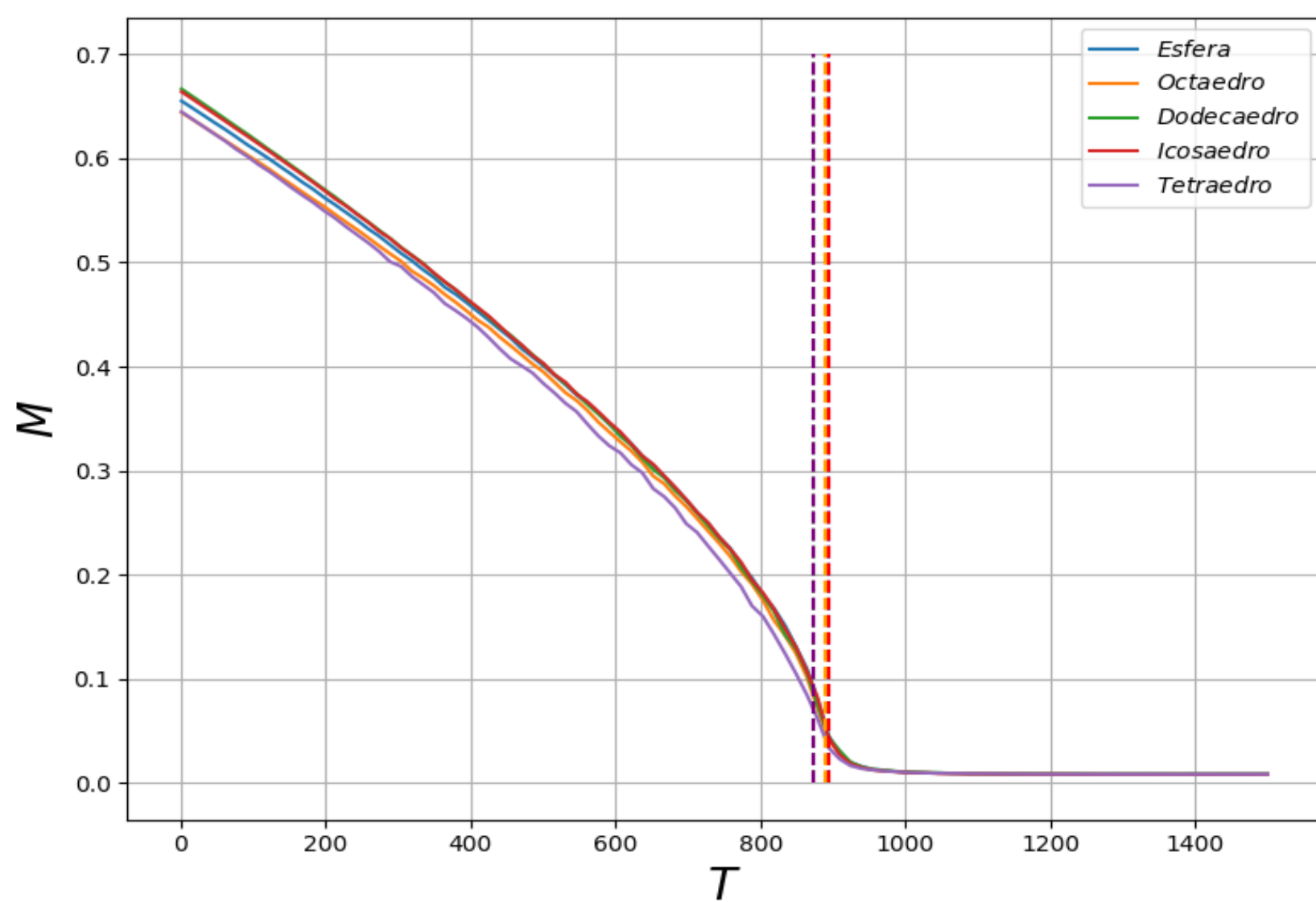


Figura 12. Magnetización contra Temperatura de nanopartículas con formas de sólidos platónicos.

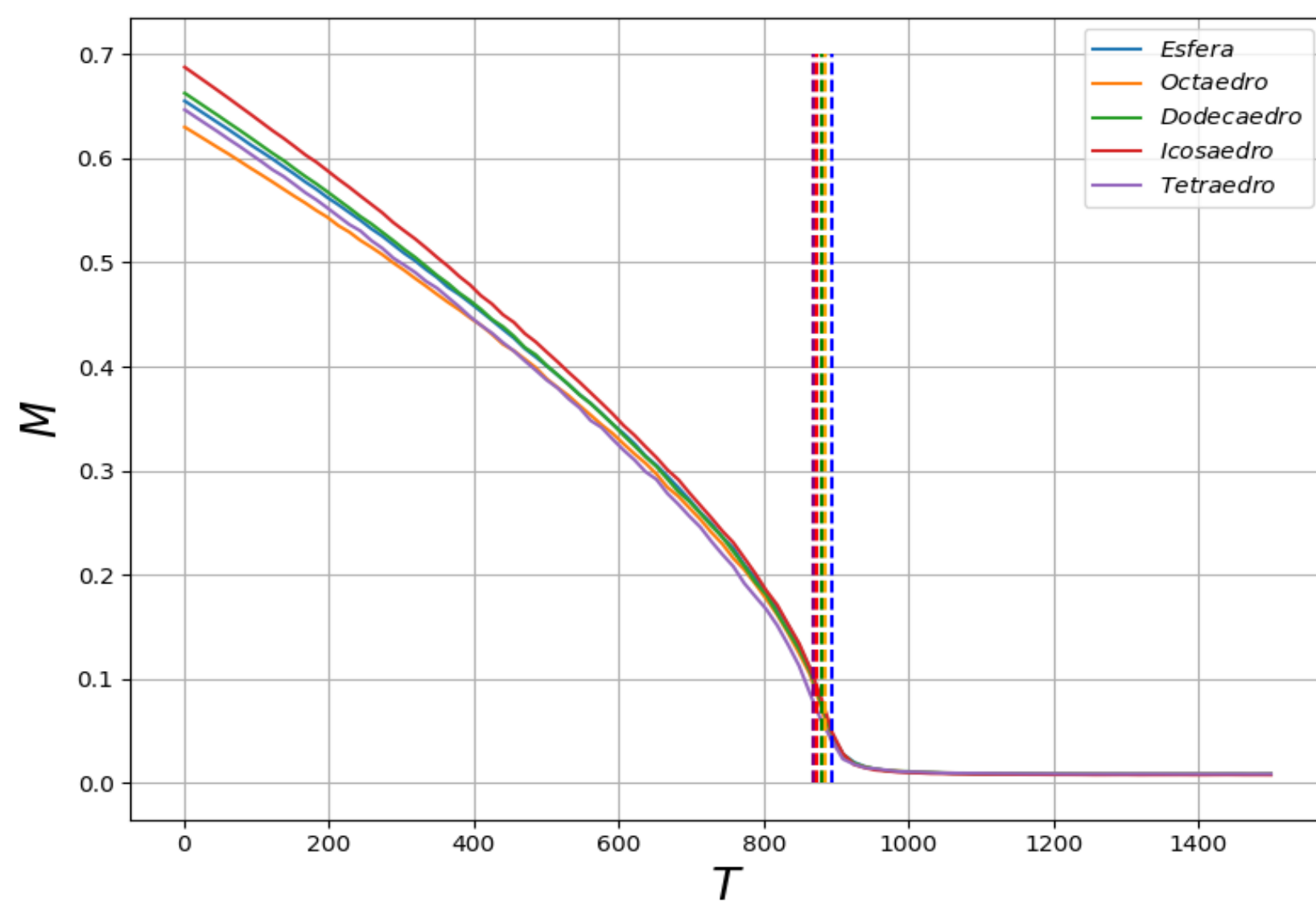


Figura 13. Magnetización contra Temperatura de nanopartículas con formas truncadas.

Análisis

Formas	Diámetro [nm]	# iones	% iones	Ms	%Ms	Mr	%Mr	Tc [K]	%Tc
Esfera	12,58	42593	-	1.018	-	0.650	-	894.343	-
Octaedro	18,46	42936	< 1 %	1.035	1,67 %	0.639	1,69 %	889.296	< 1 %
Octaedro Truncado	19,29	41126	3,4 %	1.034	1,57 %	0.626	3,69 %	884.249	1,13 %
Tetraedro	25,17	41853	1,7 %	1.048	2,95 %	0.640	1,54 %	874.155	2,26 %
Tetraedro Truncado	25,17	39221	7,9 %	1.042	2,36 %	0.642	1,23 %	869.108	2,82 %
Dodecaedro	14,26	41076	3,6 %	1.023	< 1 %	0.662	1,85 %	874.155	2,26 %
Dodecaedro Truncado	14,26	40852	4,1 %	1.022	< 1 %	0.659	1,38 %	879.202	1,69 %
Icosaedro	15,10	44827	5,2 %	1.016	< 1 %	0.659	1,39 %	894.343	< 1 %
Icosaedro Truncado	15,10	48983	15 %	1.009	< 1 %	0.683	5,08 %	874.155	2,25 %

Tabla 1. Comparación de las propiedades de las nanopartículas en base a la muestra esférica.

Conclusiones

Se logró la creación de nanopartículas con formas regulares y truncadas haciendo uso de una nueva metodología, esto con el fin de simular nanopartículas más cercanas a formas en el campo experimental. Se encontró una menor diferencia en las formas de esfera y muestras regulares para los ciclos de histeresis o temperatura, por el contrario se encuentra una diferencia considerable con las formas truncadas, por ende, es posible encontrar cambios significados asociados únicamente a la forma

Bibliografía

- S. M. Forti, P. Alonso, P. Gargano y G. Rubiolo, "Shear behavior of Fe/Fe₃O₄ interfaces," *Revista Materia*, 23, 2 2018, issn: 15177076. doi: 10.1590/S1517-707620180002.0446.
- L. D. P. y B. Kurt, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Second Edition*, Second Edition. Cambridge University, 2005, isbn: 978-0-511-13098-4.
- C. J. Chen, R. K. Chiang, J. S. Wang y S. L. Wang, "Synthesis and magnetic properties of octahedral magnetite nanoparticles in 20-110 nm range," *Journal of Nanoparticle Research*, 15, 8 ago. de 2013, issn: 1572896X. doi: 10.1007/s11051-013-1845-5.
- L. D. Marks y L. Peng, *Nanoparticle shape, thermodynamics and kinetics*, ene. de 2016. doi: 10.1088/0953-8984/28/5/053001.
- J. D. Alzate-Cardona, D. Sabogal-Suárez, O. D. Arbeláez-Echeverri y E. Restrepo-Parra, "VEGAS: Software package for the atomistic simulation of magnetic materials," *Revista Mexicana de Física*, 64, págs. 490-497, 2018.