

Simulación Monte Carlo de nanopartículas tridimensionales de Magnetita en formas convencionales y dodecaédrica

S. Serna-Ospina, J. A. Valencia-Aricapa, E. Restrepo-Parra
PCM Computational Applications, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,
Universidad Nacional de Colombia - Sede Manizales
ssernao@unal.edu.co



Introducción

La magnetita es el mineral con mayor magnetismo que se puede encontrar naturalmente, lo que la convierte en un recurso importante en una variedad de aplicaciones; 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, teniendo en cuenta sus partículas superficiales con valores anisotrópicos distintos por tener modelo core-shell.

Diseño de las muestras

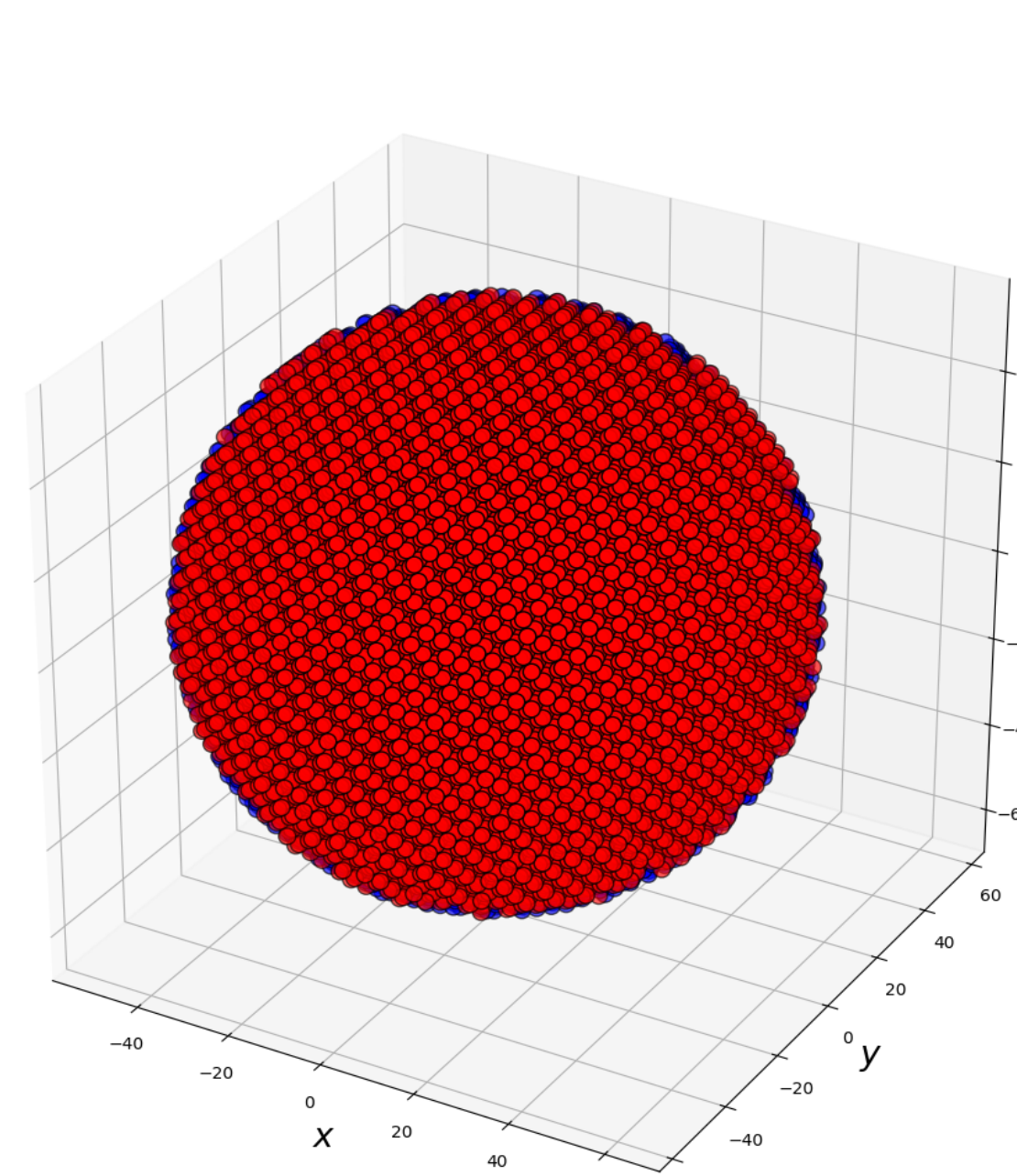


Figura 1. Nanopartícula con forma esférica

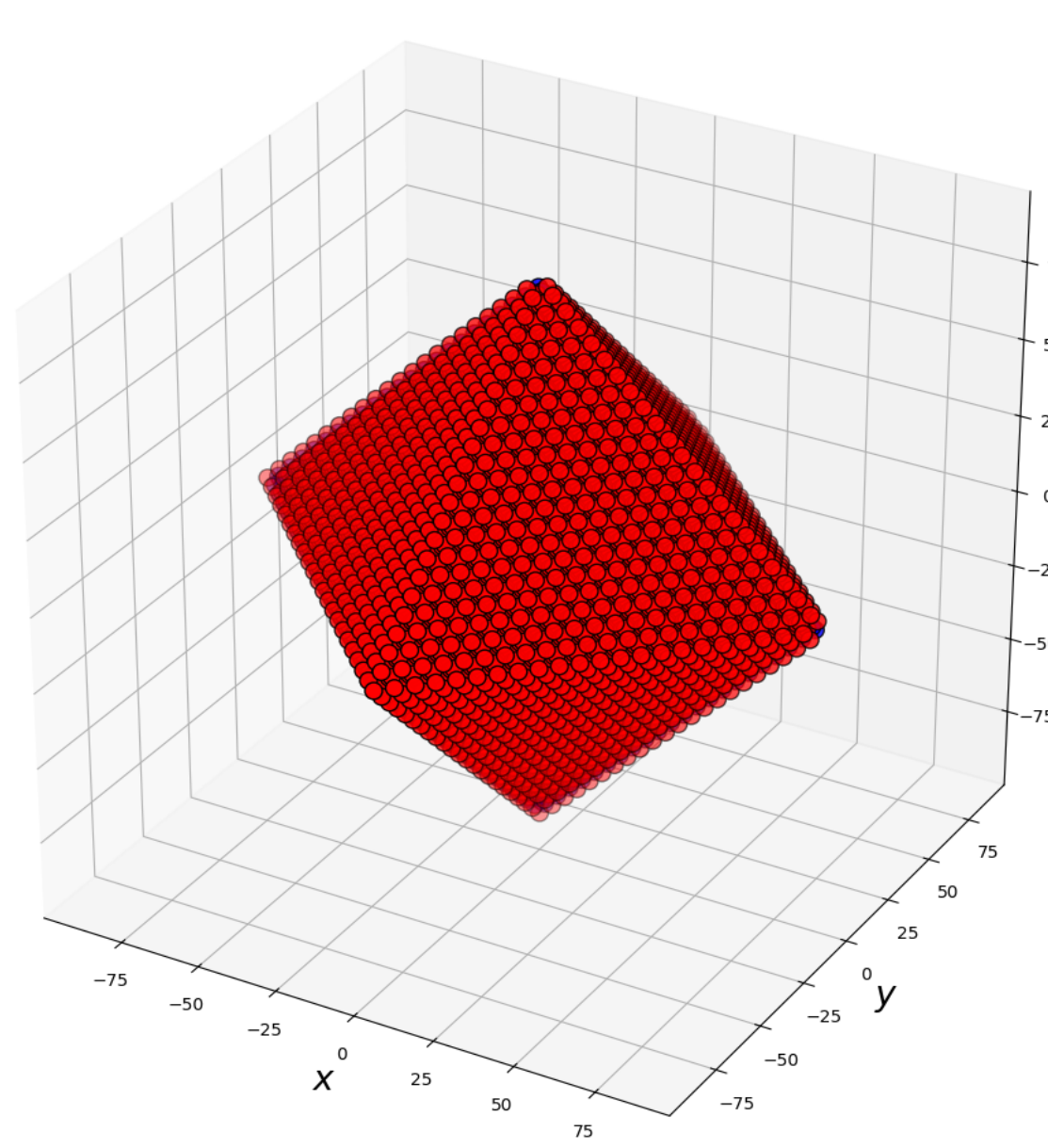


Figura 2. Nanopartícula con forma octaédrica

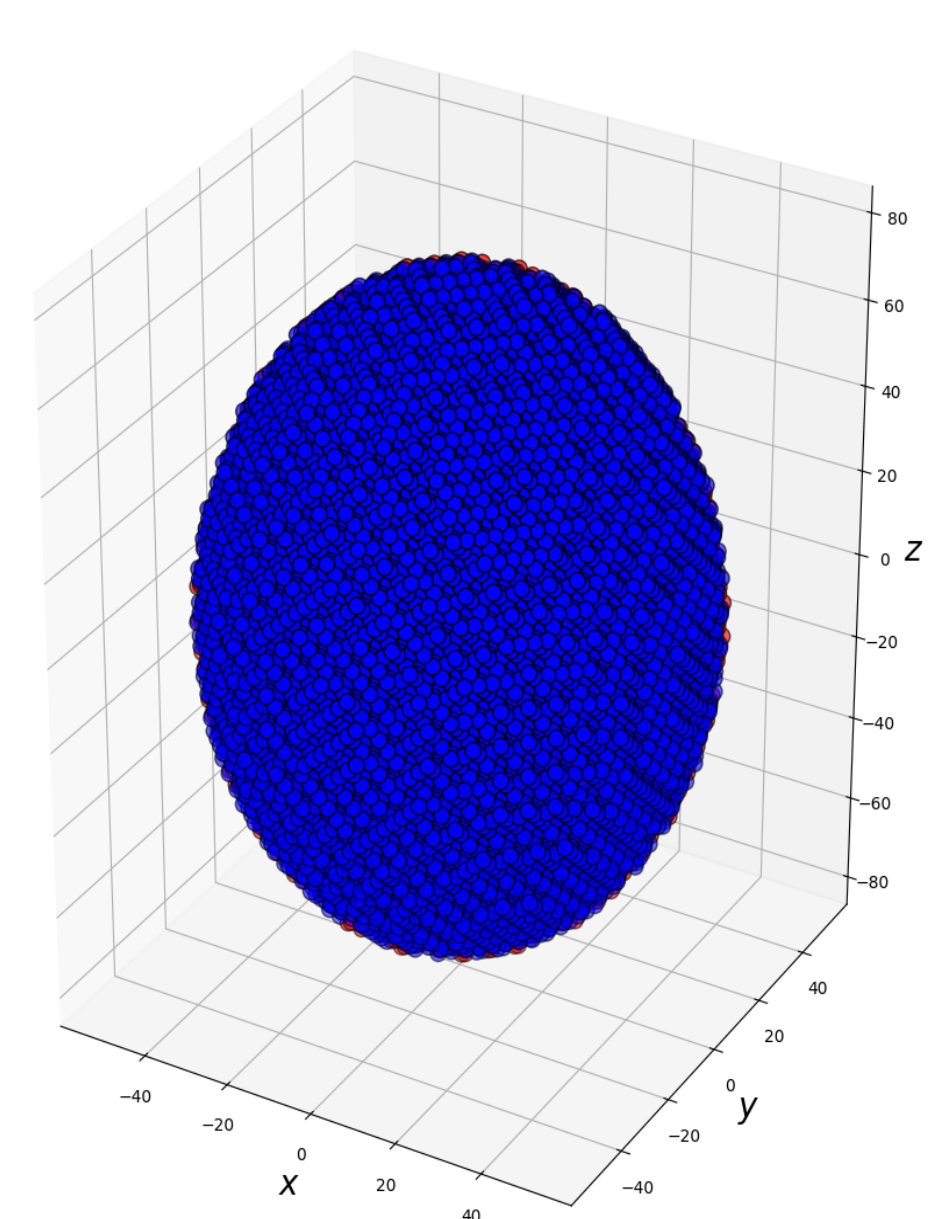


Figura 3. Nanopartícula con forma elipsoide vertical

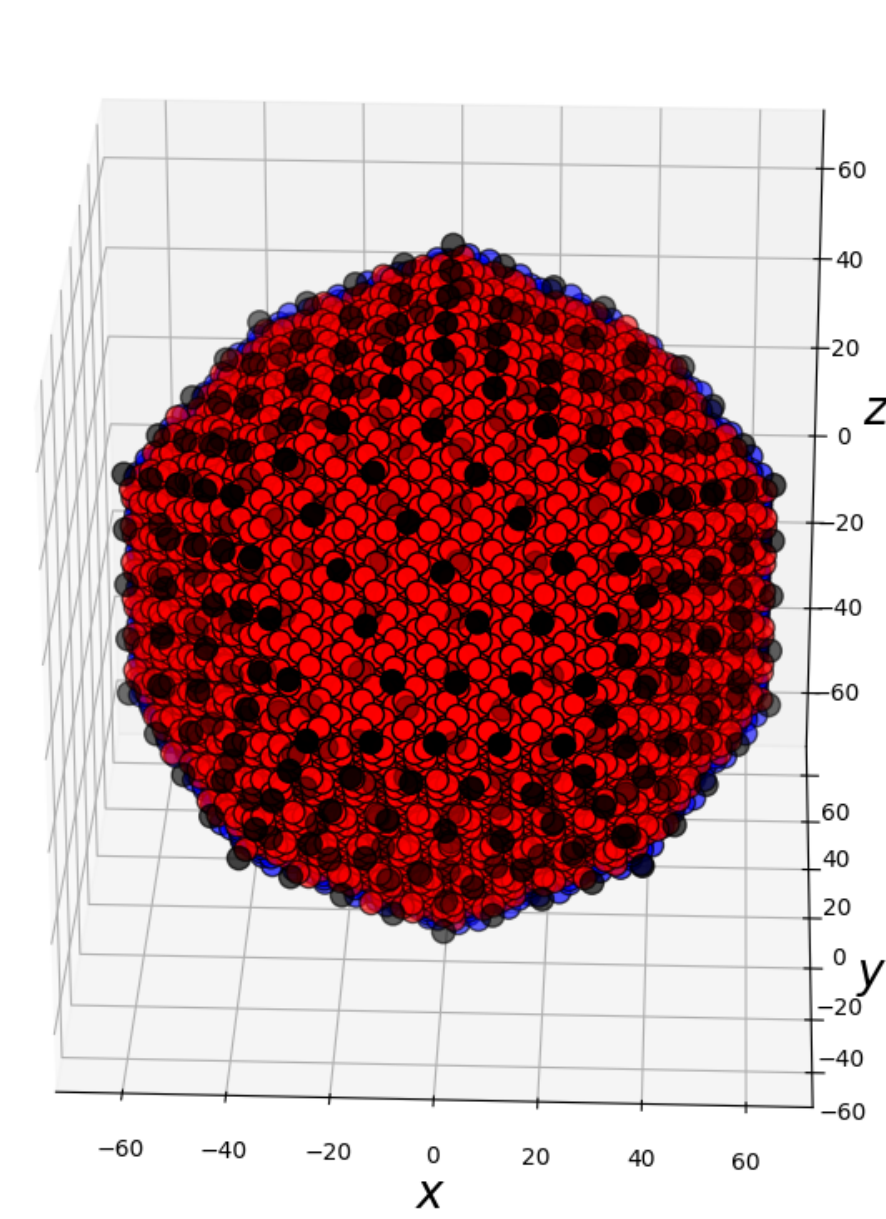


Figura 4. Nanopartícula con forma dodecaédrica

Metodología

Se crean las nanopartículas utilizando la estructura cristalina de la magnetita, la cual es de la forma de espinela inversa.

Para la simulación de las propiedades magnéticas se empleó el método de Monte Carlo con el algoritmo Metropolis. La evolución del sistema sigue un modelo de espines tipo Heisenberg tridimensional, construyendo un hamiltoniano de tres términos de energía: Zeeman, Intercambio y Anisotropía cristalina como se muestra a continuación:

$$\hat{H} = \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j - \mu_s B \sum_i (S_i n_i) - \hat{H}_{ani}$$

En donde:

J_{ij} es la constante de interacción de intercambio entre los sitios i y j

B es la intensidad del campo magnético

n_i es la dirección del campo magnético del sitio i

μ_s es el momento magnético atómico

S_i y S_j son las direcciones de los momentos de espín de i y j respectivamente

y finalmente

\hat{H}_{ani} es el término de anisotropía que se toma como la suma de un componente interno y uno superficial, representados respectivamente por k_v y k_s , siendo éste último una fracción del primero.

Resultados

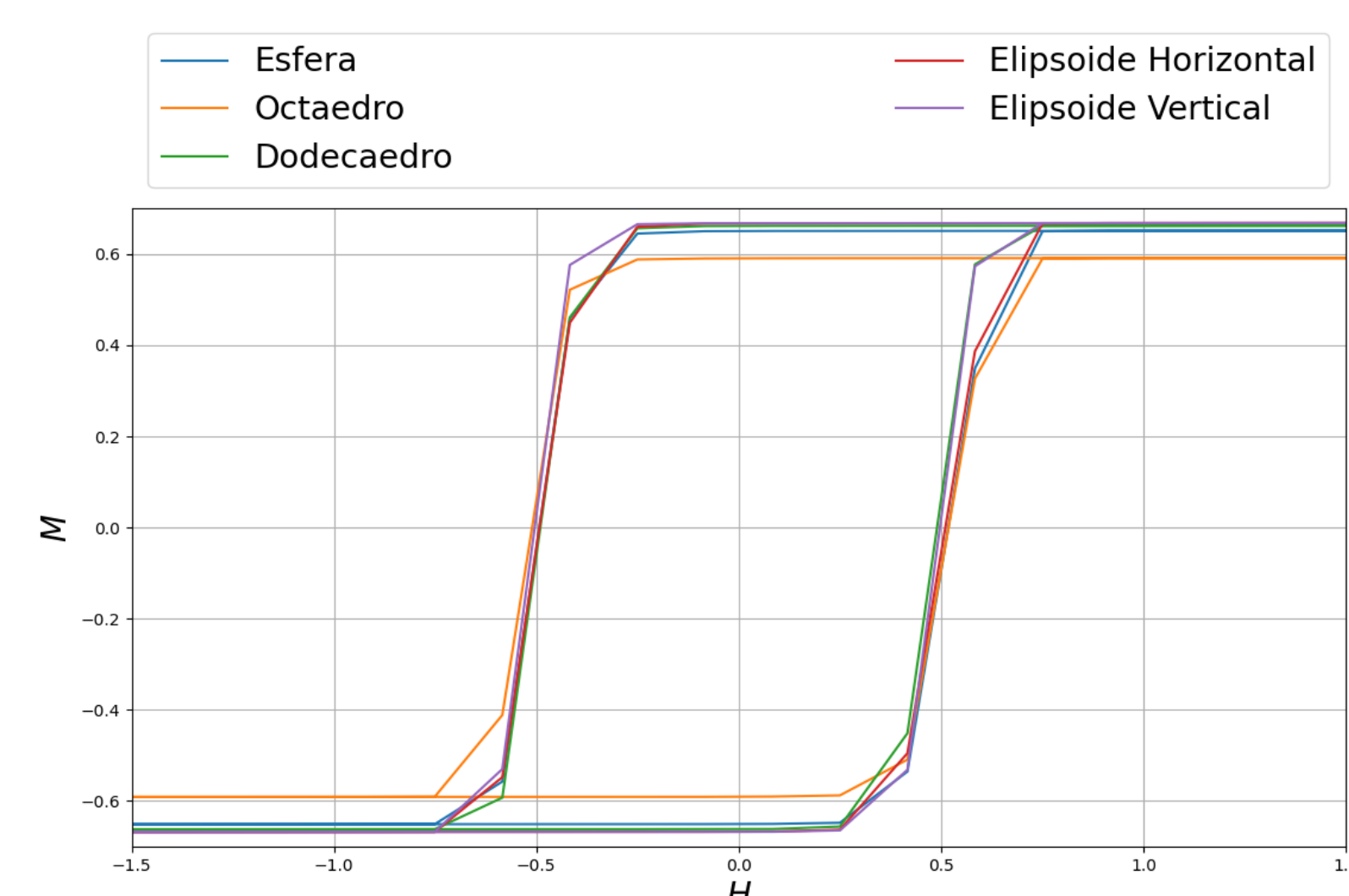


Figura 5. Magnetización contra Temperatura de nanopartículas sólidas

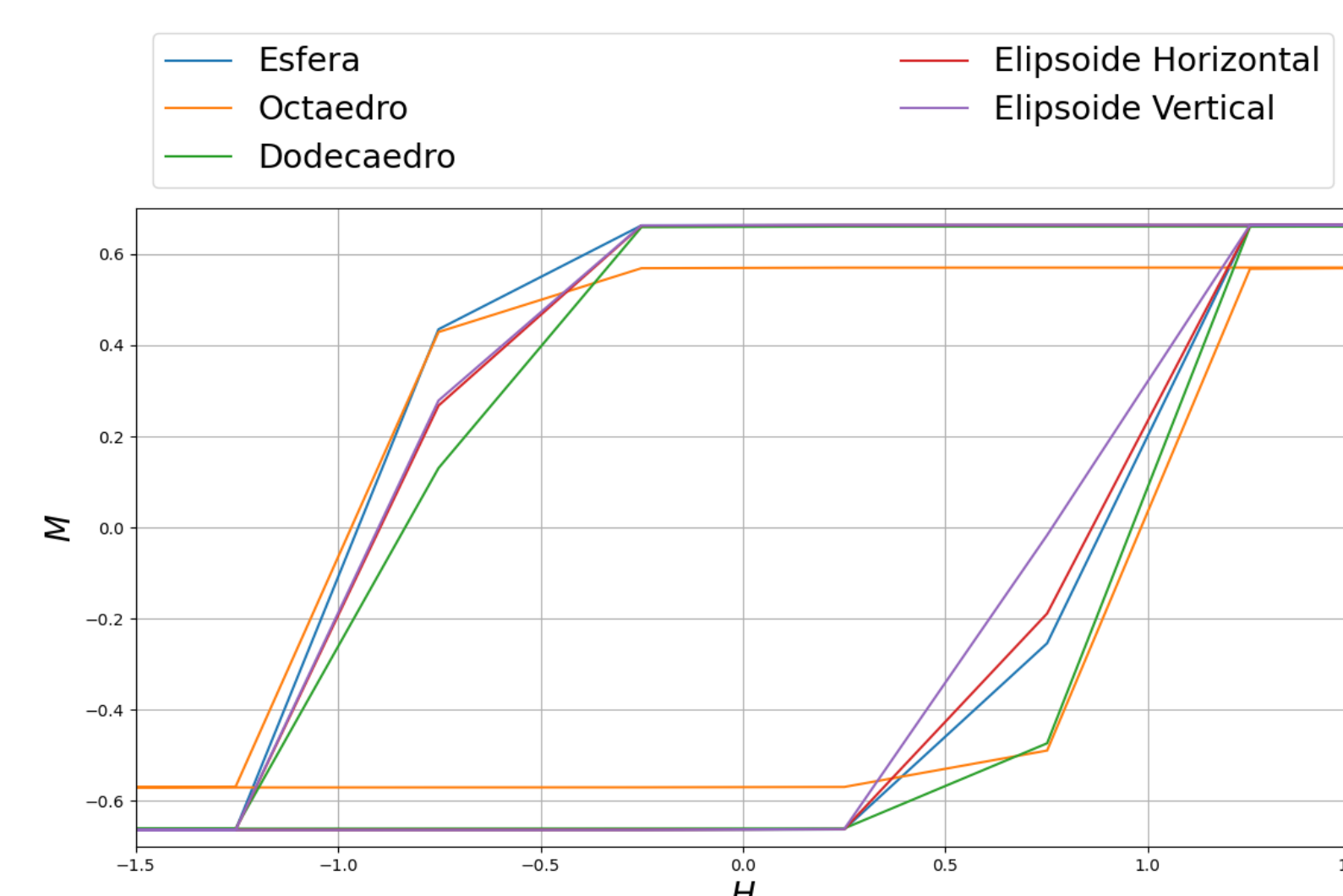


Figura 6. Magnetización contra Temperatura de nanopartículas en configuración Core-Shell con anisotropía superficial 0.5

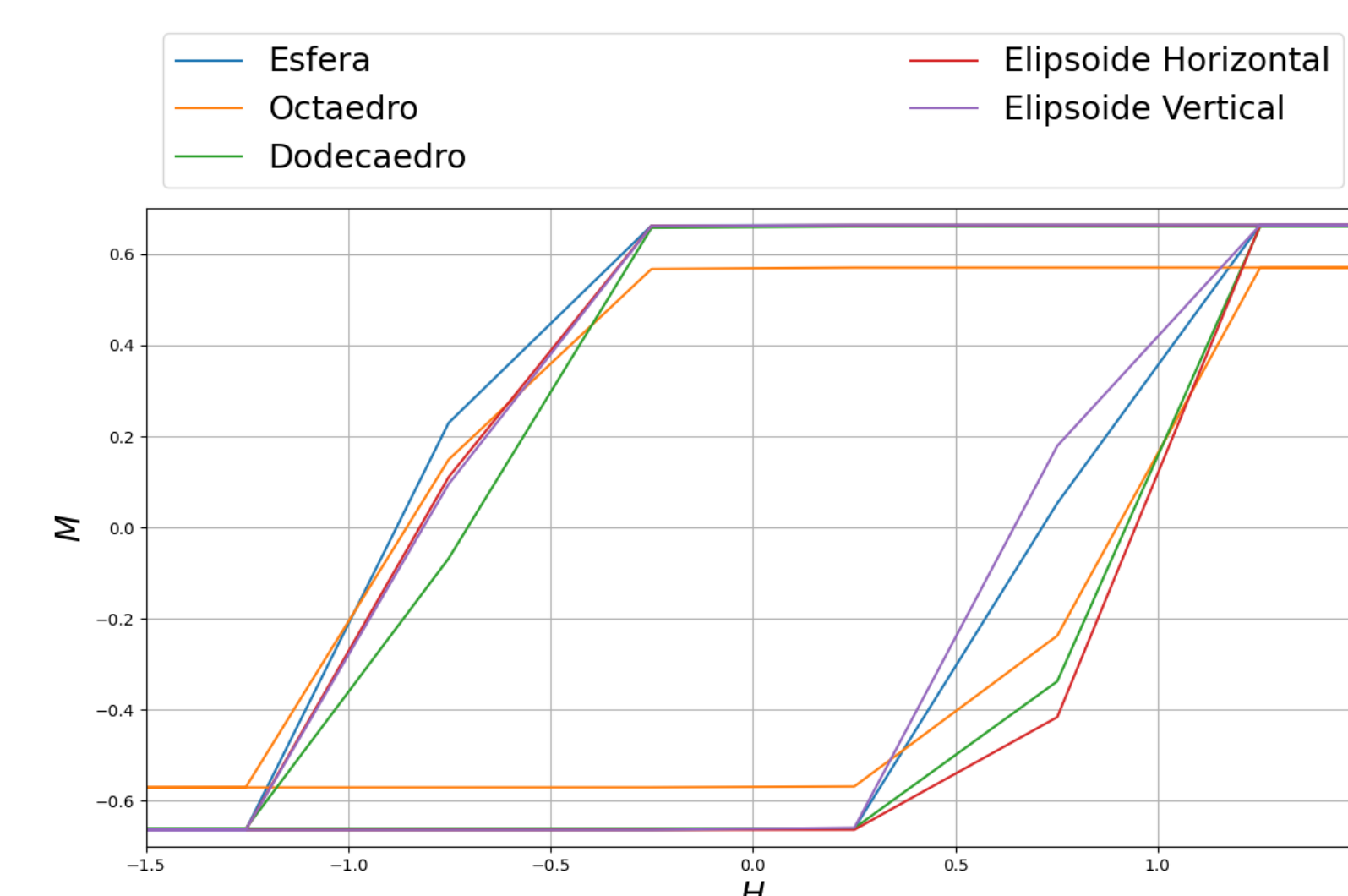


Figura 7. Magnetización contra Temperatura de nanopartículas en configuración Core-Shell con anisotropía superficial 0.8

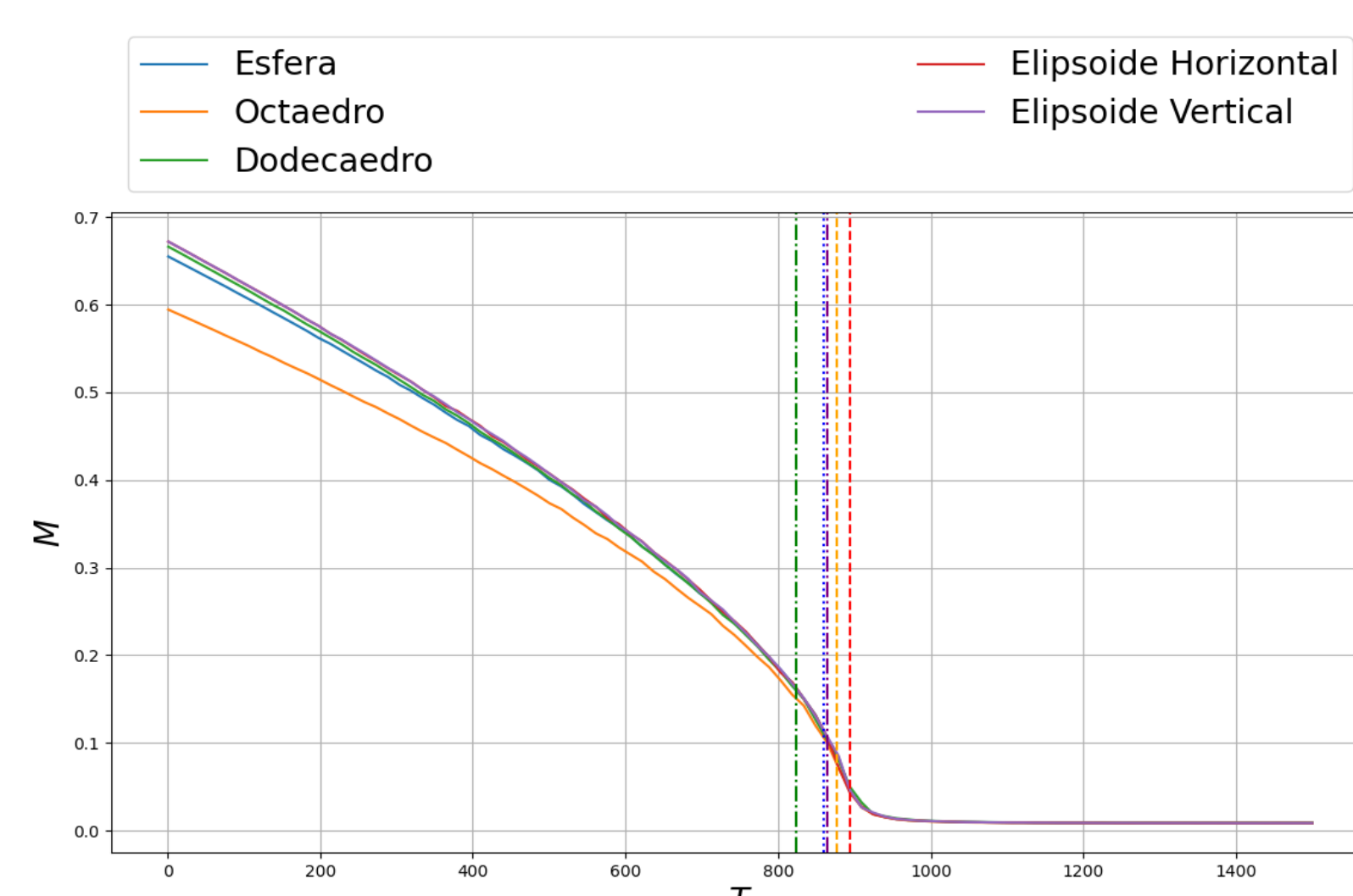


Figura 9. Magnetización contra Campo Magnético de nanopartículas sólidas

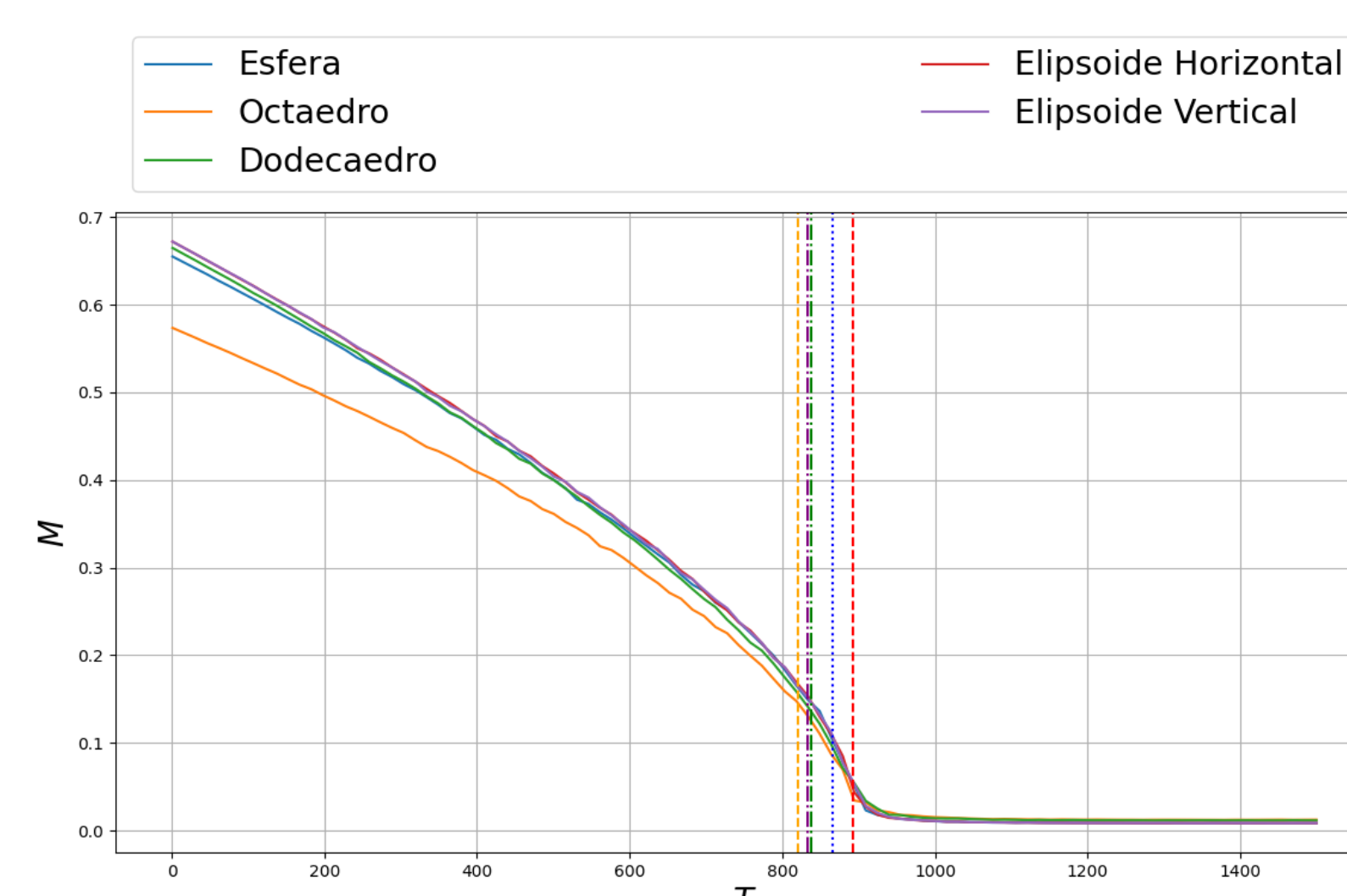


Figura 10. Magnetización contra Campo Magnético de nanopartículas en configuración Core-Shell con anisotropía superficial de 0.5

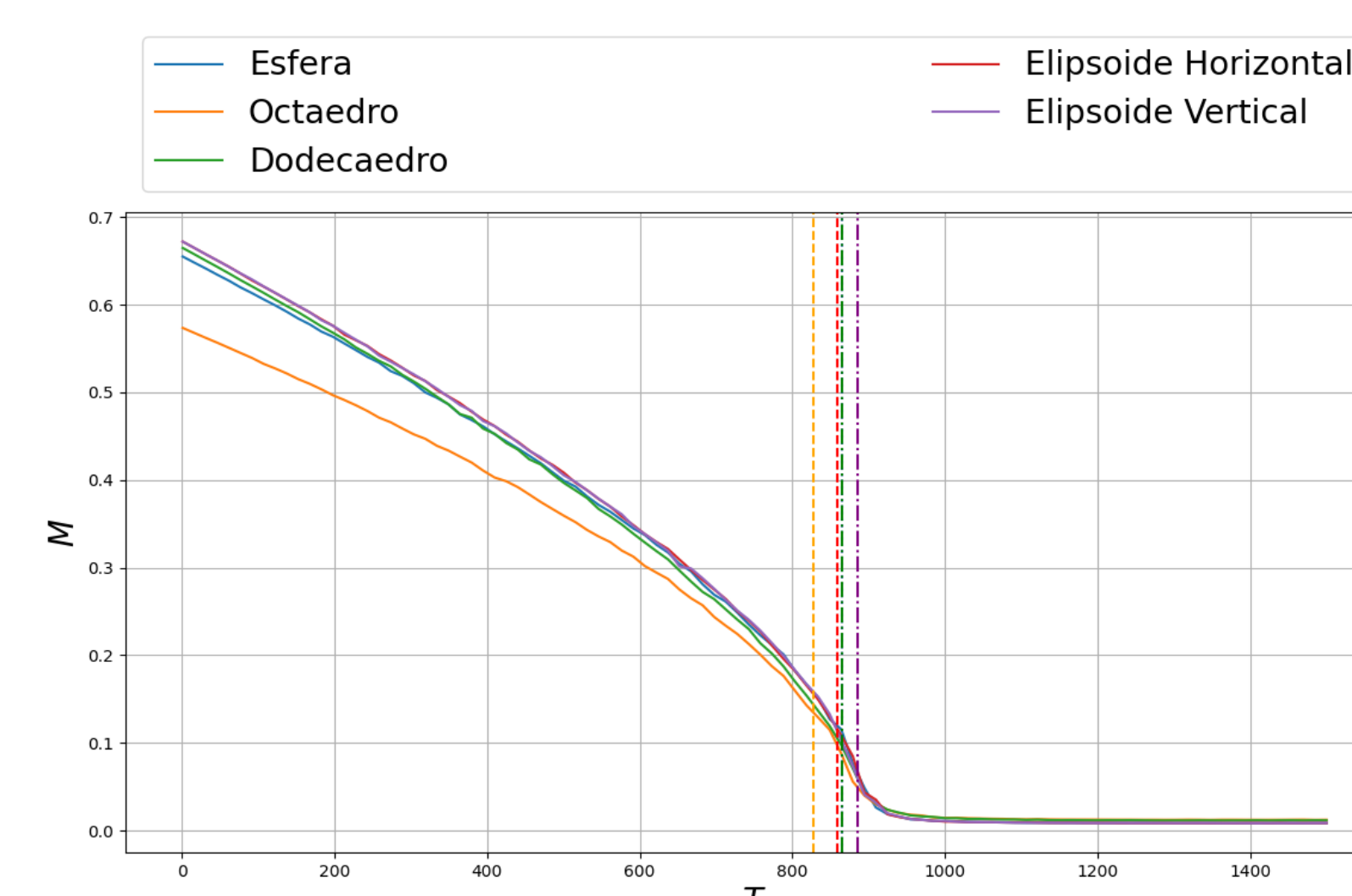


Figura 11. Magnetización contra Campo Magnético de nanopartículas en configuración Core-Shell con anisotropía superficial de 0.8

Conclusiones

Se simularon diversas formas de nanopartículas, con el dodecaedro como principal interés por ser la más comparable con nanopartículas reales teniendo en cuenta sus imperfecciones al momento de ser creadas. En las gráficas de ciclos de histéresis y ciclos de temperatura se puede notar una cercanía general entre el dodecaedro y la esfera mayor al de otras formas, en especial el octaedro.

Bibliografía

- S. Kumar. "Studies on Electrical and Magnetic Properties of in3 Substituted Nanocrystalline Mn Zn Ferrites". Shivaji University Department of Physics. <http://hdl.handle.net/10603/143552>.
- Phan MH, Alonso J, Khurshid H, Lampen-Kelley P, Chandra S, Stojak Repa K, Nemati Z, Das R, Iglesias Ó, Srikanth H. Exchange Bias Effects in Iron Oxide-Based Nanoparticle Systems. Nanomaterials (Basel). 2016 Nov 23;6(11):221. doi: 10.3390/nano6110221.
- Kong, Ing & Ahmad, Sahrim & Abdullah, M. & Yusoff, Ahmad. (2009). The Effect Of Temperature On Magnetic Behavior Of Magnetite Nanoparticles And Its Nanocomposites. AIP Conference Proceedings. 1136. 830-834. doi: 10.1063/1.3160267.
- "Model and method". PCM Computational Applications. <https://pcm-ca.github.io/vegas/model-and-method/>.