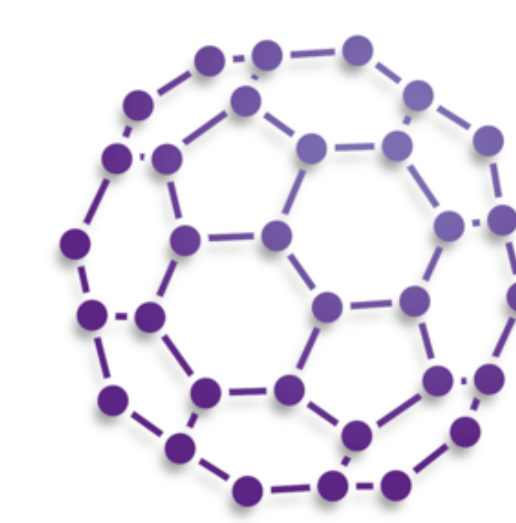




UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA

Simulación Monte Carlo de nanopartículas de Magnetita con variación de la forma tridimensional

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



PCM
Computational Applications

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 Metropolis, para finalmente hacer comparaciones de los resultados teniendo como base la forma esférica.

Diseño de las muestras

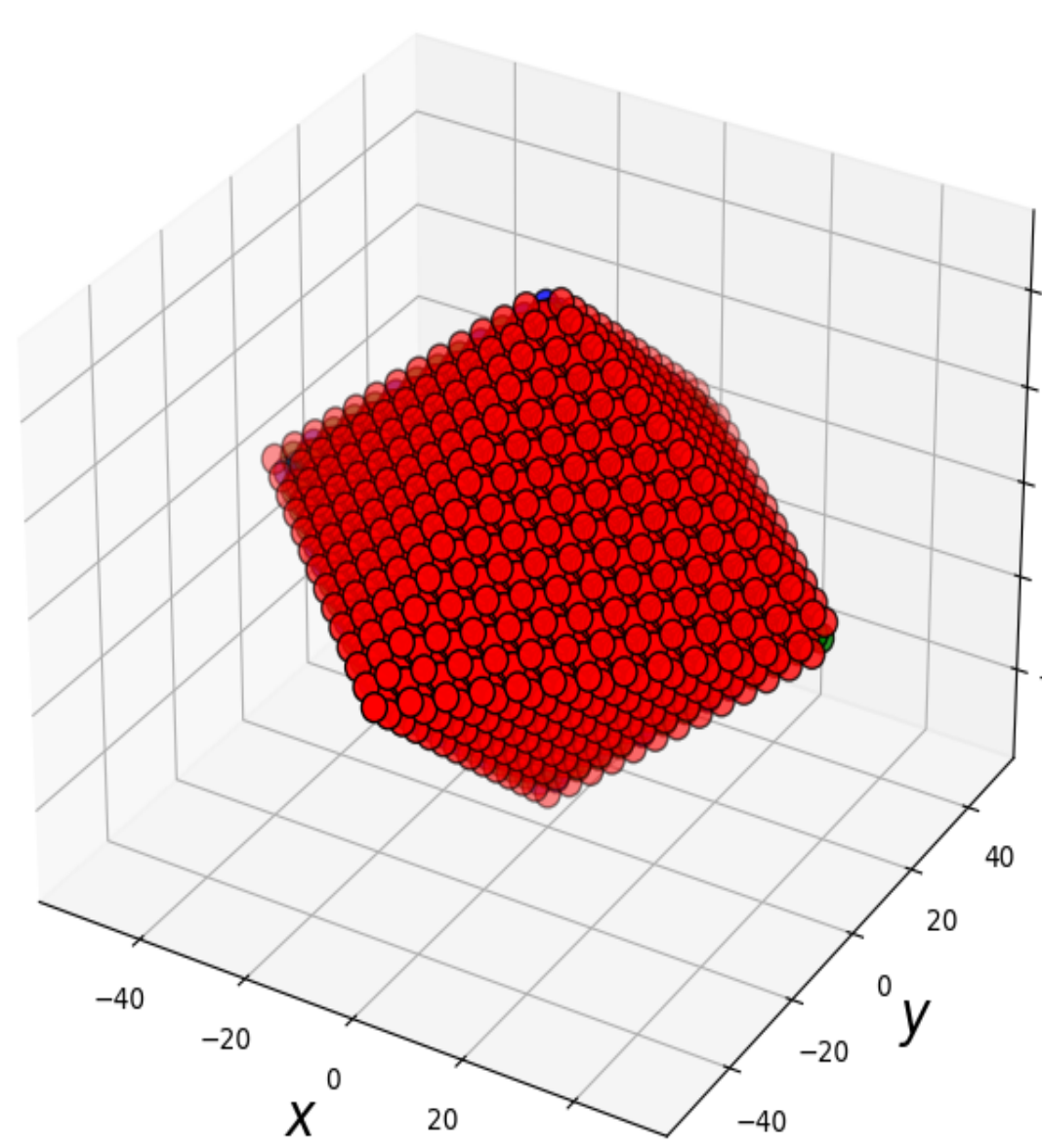


Figura 1. Nanopartícula con forma octaédrica

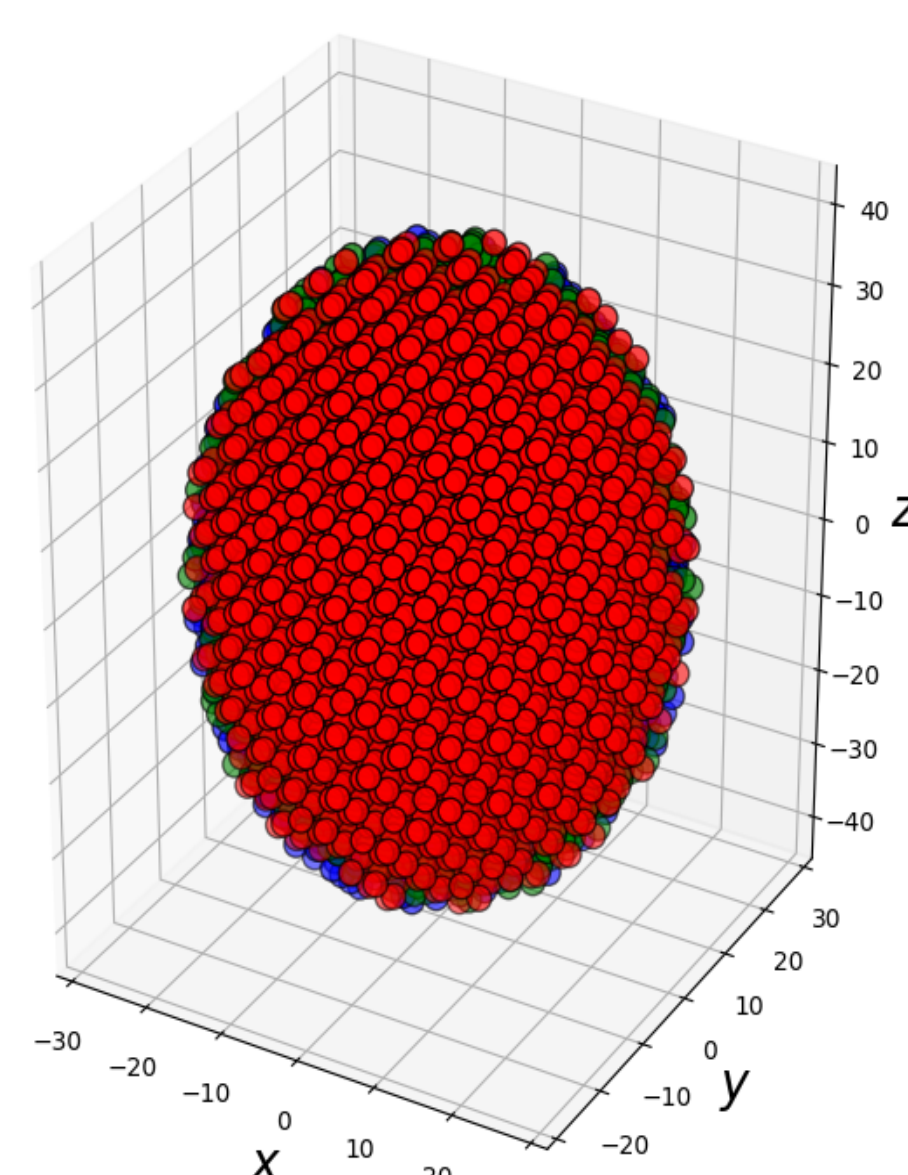


Figura 2. Nanopartícula con forma elipsoide vertical

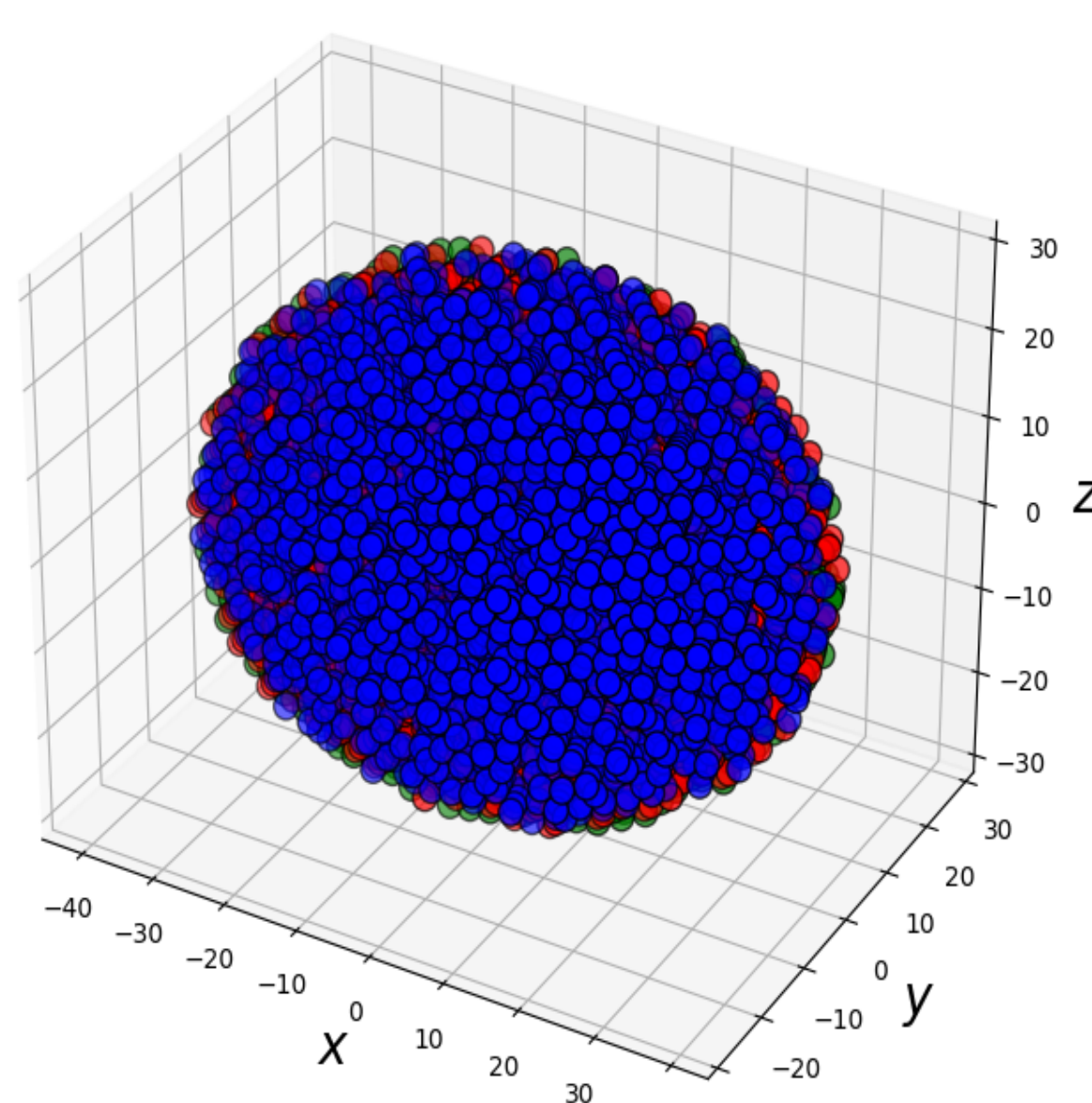


Figura 3. Nanopartícula con forma elipsoide horizontal

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 Carlos 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.

Este último puede tomar la forma de anisotropía uniaxial o anisotropía cúbica.

Resultados

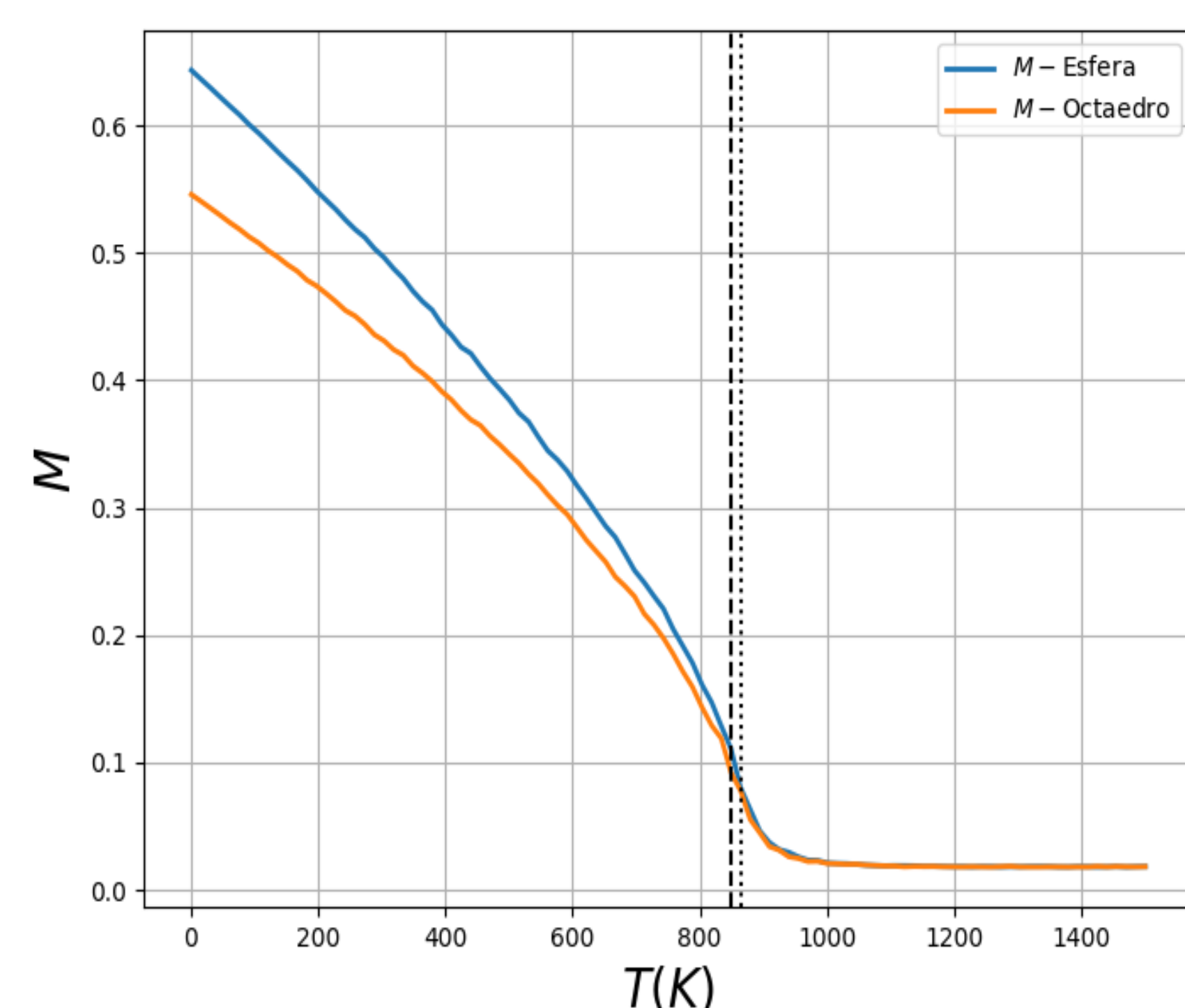


Figura 4. Magnetización contra Temperatura para comparación de Esfera con Octaedro

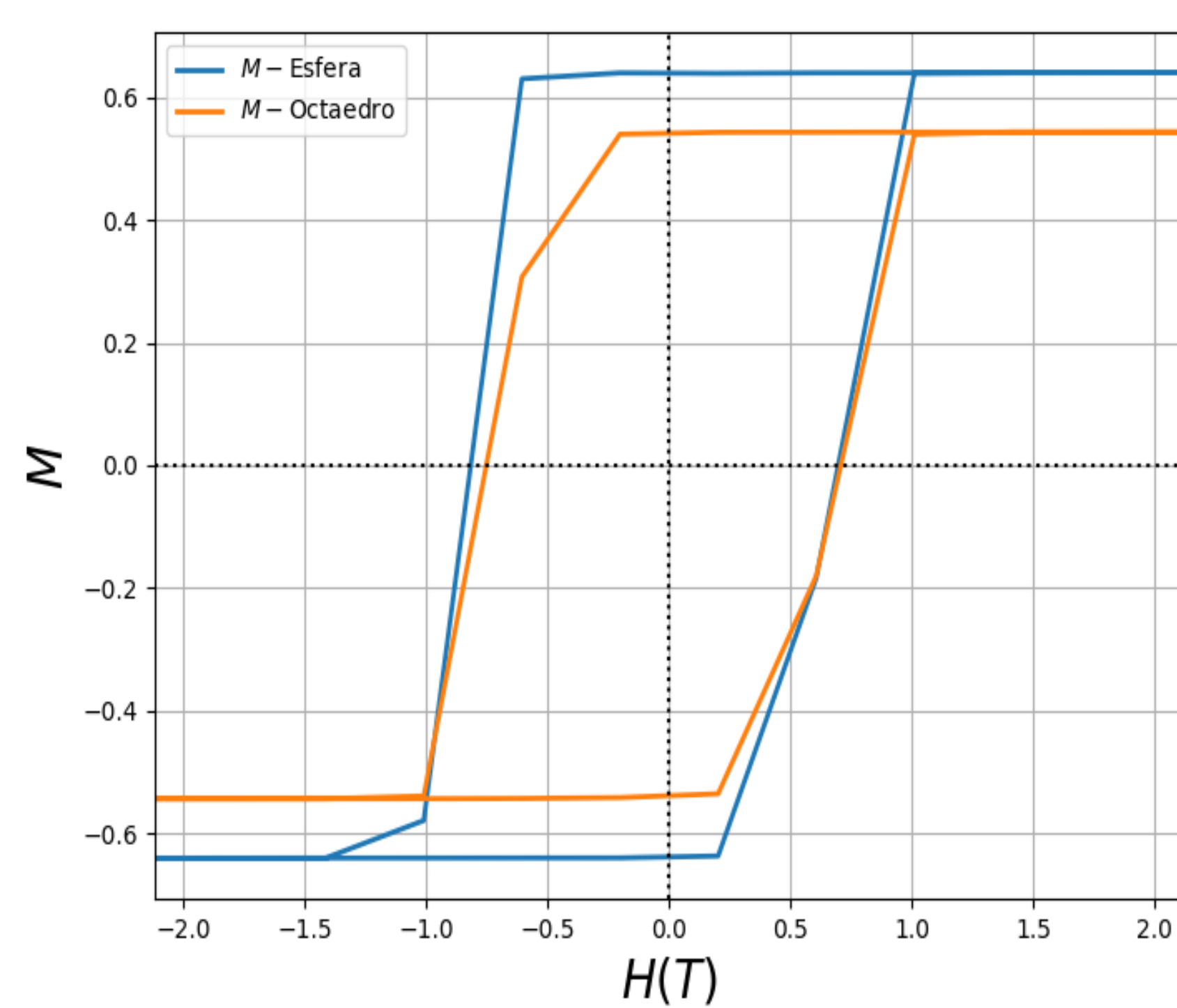


Figura 5. Magnetización contra Campo Magnético(H) para comparación de Esfera con Octaedro

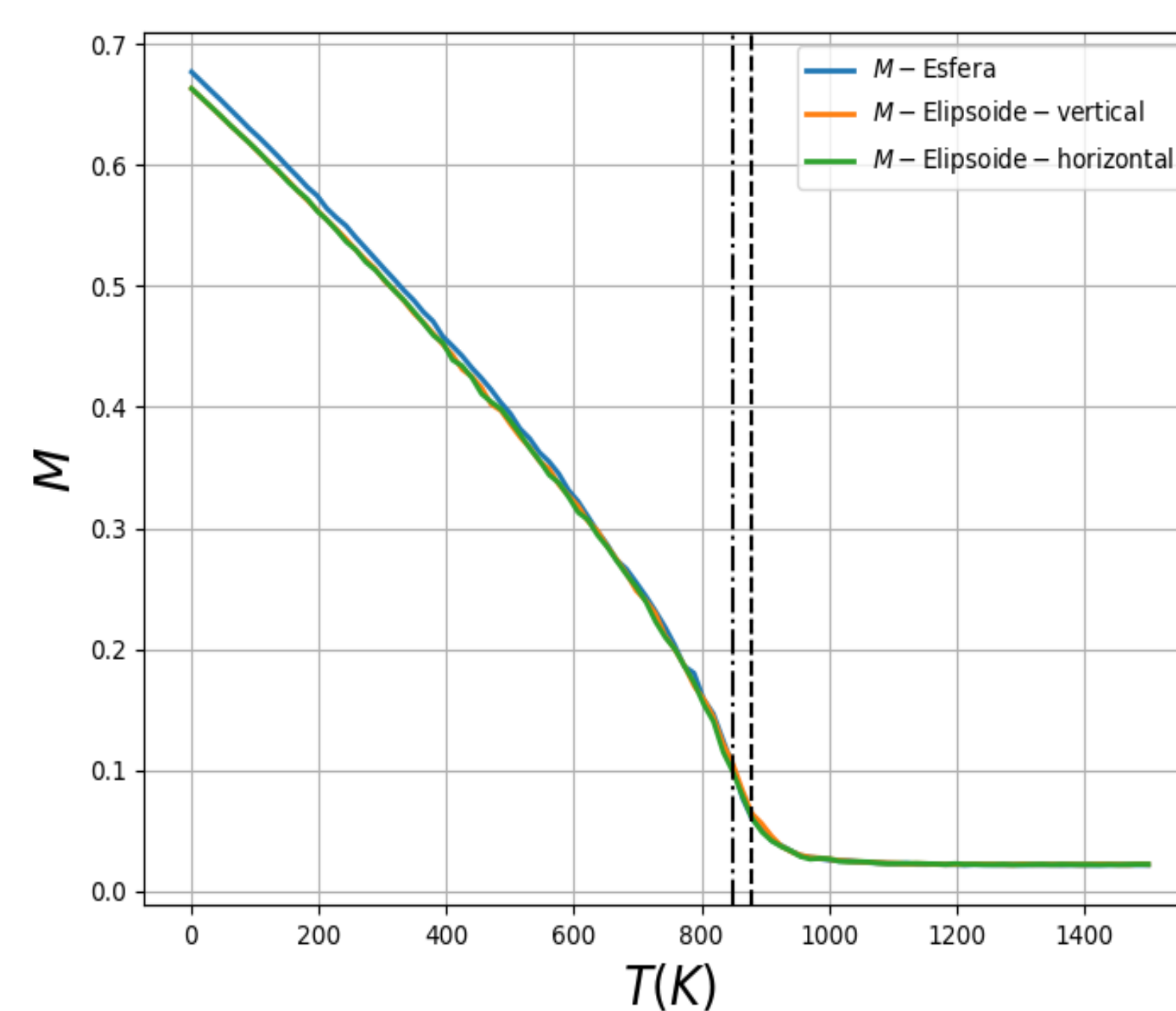


Figura 6. Magnetización contra Temperatura para comparación de Esfera con Elipsoides

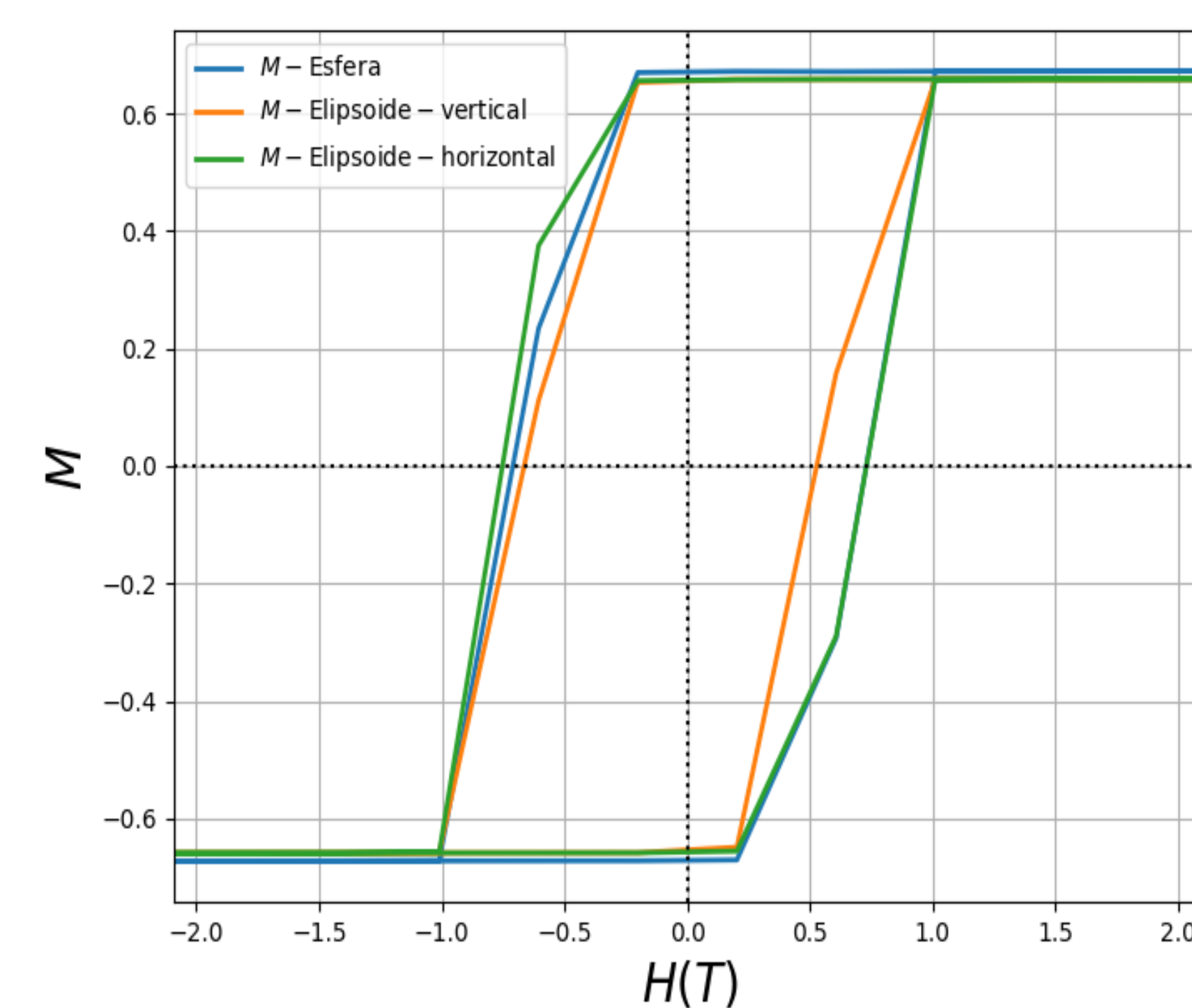


Figura 7. Magnetización contra Campo Magnético(H) para comparación de Esfera con Elipsoides

| Comparación esfera/octaedro | | | | | | | |
|-----------------------------|----|--------|-------|-----------------|-------|-------|---------|
| Forma | L | -Hc | +Hc | \overline{Hc} | Ms | Mr | Tc(K) |
| Esfera | 9 | -0.808 | 0.808 | 0.808 | 0.641 | 0.639 | 864.061 |
| Octaedro | 13 | -0.808 | 0.808 | 0.808 | 0.545 | 0.541 | 848.919 |

| Comparación esfera/variación de elipsoide | | | | | | | |
|---|----|--------|-------|-----------------|-------|-------|---------|
| Forma | L | -Hc | +Hc | \overline{Hc} | Ms | Mr | Tc(K) |
| Esfera | 8 | -0.808 | 0.808 | 0.808 | 0.675 | 0.671 | 879.202 |
| Elipsoide vertical | 10 | -0.808 | 0.404 | 0.606 | 0.661 | 0.656 | 879.202 |
| Elipsoide horizontal | 10 | -0.808 | 0.808 | 0.808 | 0.661 | 0.657 | 848.919 |

| Porcentaje de diferencia entre resultados | | | | | |
|---|---------|-----------------|----------|----------|---------|
| Forma | Tamaño | \overline{Hc} | Ms | Mr | Tc |
| Octaedro | <1 % | <1 % | 14.977 % | 15.336 % | 1.752 % |
| Elipsoide vertical | 2.345 % | 25 % | 2.074 % | 2.236 % | <1 % |
| Elipsoide horizontal | 2.345 % | <1 % | 2.074 % | 2.086 % | 3.444 % |

Conclusiones

Se logró crear nanopartículas con formas tridimensionales basadas en las encontradas en trabajos experimentales, tales como octaédricos y elipsoides. Además, se comprobó que existe una diferencia entre las propiedades magnéticas de las nanopartículas obtenidas, por ejemplo, los valores de los diferentes formas tienen magnitudes menores o iguales a los de una nanopartícula esférica.

Bibliografía

- M. Forti, P. Alonso, P. Gargano y G. Rubiolo. "Esfuerzo de corte en Interfaces Fe/Fe₃O₄". Scielo. <https://doi.org/10.1590/S1517-707620180002.0446>.
- "Estructura de las ferritas cerámicas". UPV Universitat Politècnica de València. https://www.upv.es/materiales/Fcm/Fcm10/pfcm10_5_7.html.
- 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>.
- "Model and method". PCM Computational Applications. <https://pcm-ca.github.io/vegas/model-and-method/>.