

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE MATERIALES

Aleación Fe₂CoGa

María Isabel Martínez Torres¹, Militza Yomira Tomas Pedraza¹, Elvis Daniel Antonio Lara¹, Emilia Olivos Lagunes^{1,2}, José Ernesto Domínguez³
 Universidad Tecnológica Del Centro De Veracruz¹, Texas A&M University², Universidad Carlos III de Madrid³

Resumen

La simulación computacional es una herramienta que nos permite diseñar y crear nuevos materiales, gracias a ella es posible realizar experimentos a partir de un estudio fundamental y estadístico con ayuda de métodos AB-INITIO que permiten predecir sus propiedades. Los materiales metálicos se encuentran en una constante evolución, ya que pueden cambiar sus propiedades y características por la aplicación de un factor externo como alteraciones de la temperatura, presión, la aplicación de un campo eléctrico o magnético. Este estudio está enfocado en obtener las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de aleaciones multifuncionales usando los métodos de Primeros Principios con el fin de que los resultados sirvan como referencia de síntesis a grupos experimentales.

Introducción

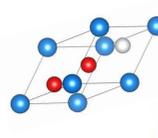
Las aleaciones Heusler son compuestos metálicos que poseen propiedades magnéticas aunque incluso ninguno de sus componentes sean ferromagnético

Formula Química: X_2YZ

Composición:

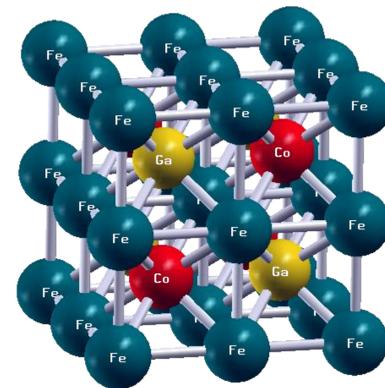
H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
Fr	Ra																	
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

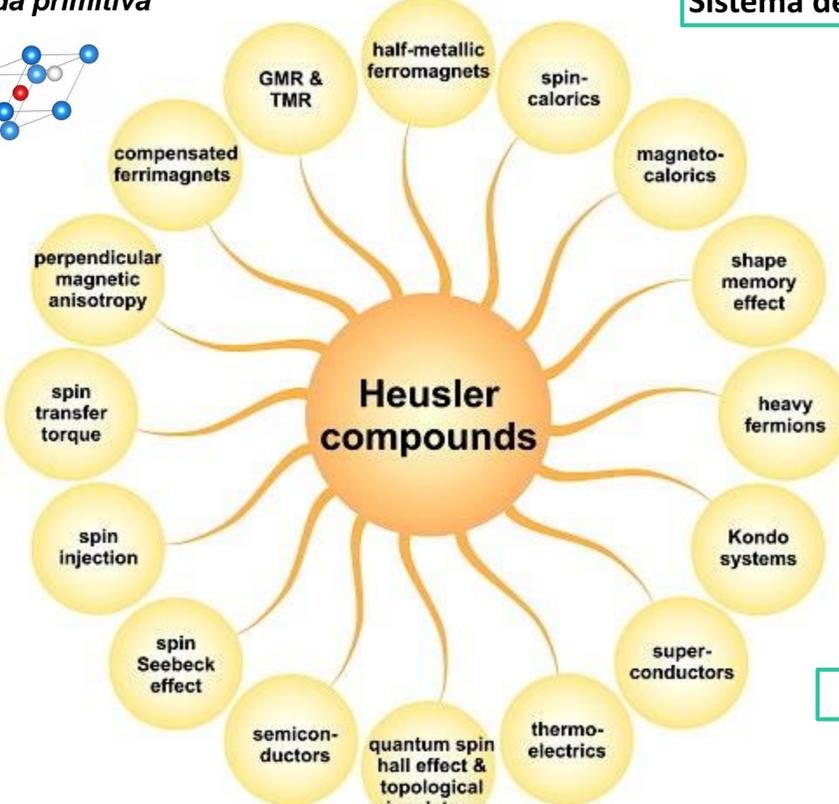
Celda primitiva



Sistema de estudio

Aleación ferromagnética Fe₂CoGa

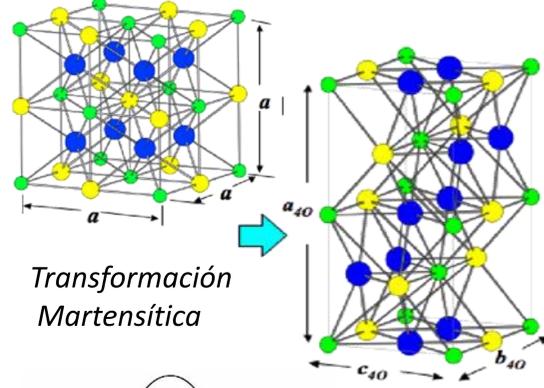




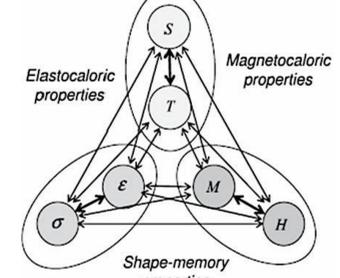
Heusler compounds

- GMR & TMR
- half-metallic ferromagnets
- spin-calorics
- magneto-calorics
- shape memory effect
- heavy fermions
- Kondo systems
- super-conductors
- thermo-electrics
- quantum spin hall effect & topological insulators
- semiconductors
- spin Seebeck effect
- spin injection
- spin transfer torque
- perpendicular magnetic anisotropy
- compensated ferrimagnets

Transformación Martensítica



Elastocaloric properties



Magnetocaloric properties

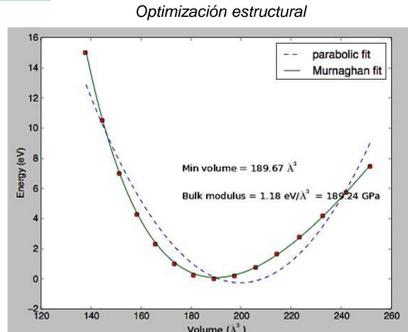
Shape-memory properties

La característica más importante de estos materiales es el fuerte acoplamiento entre las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas que exhiben.

Estructura	a (Å)	M(μB)	Factor de Compresibilidad (x10 ⁻³ GPa ⁻¹)	C.T. (K)
L2 ₁	5.809	5.529	6.093	1096.94
Inversa	5.769	5.538	5.134	1115.39
CF	5.771	5.582	5.718	1191.55
Ref.	5.781	6.09		1165

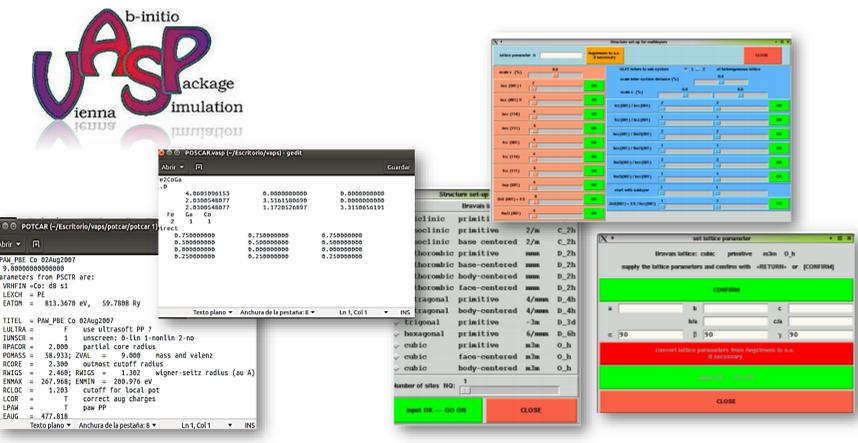
Resultados

Optimización estructural



Min volume = 189.67 Å³
 Bulk modulus = 1.18 eV/Å³ = 189.24 GPa

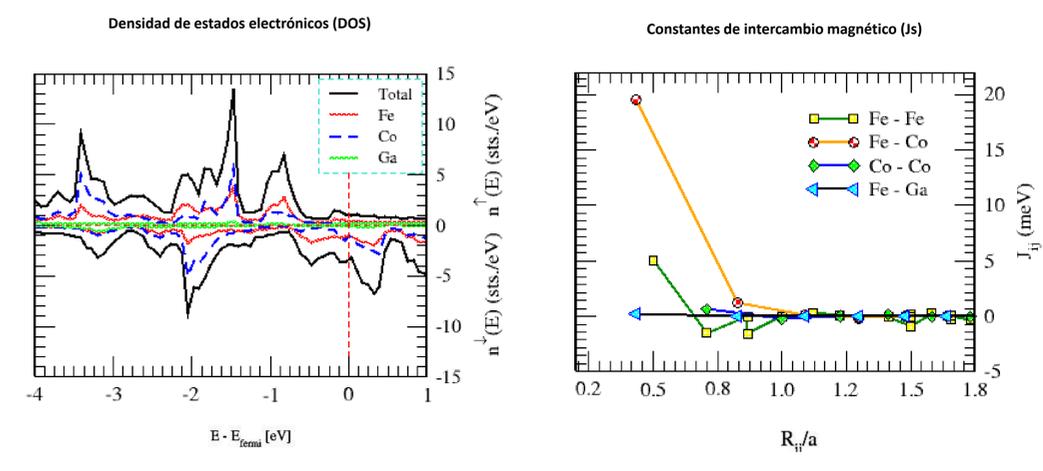
Herramientas computacionales



VASP package simulation

SPR-KKR

Con el fin de entender a fondo los fenómenos físicos que se dan en algunos materiales el proceso se lleva a cabo utilizando el código de ondas planas VASP y el paquete SPRKKR.



REFERENCIAS

- [1] P. J. Webster and K. R. A. Ziebeck, "Heusler Alloys," in Landolt-Börnstein New Series Group III, Vol. 19C, H. R. J. Wijn (Ed.) (Springer, Berlin, 1988) p. 75
- [2] H. Ebert, The Munich SPR-KKR package Version 5.4 (2005).
- [3] Lino, F. M. (2012). Aleaciones ferromagnéticas con memoria de forma NiMnIn obtenidas por enfriamiento ultrarrápido: transformación martensítica y caracterización magnetoestructural.
- [4] Castillo P. O. (2011) Efectos calóricos en aleaciones tipo Heusler con efecto memoria de forma magnético.
- [5] H.Ebert, J. Minar, and V. Popescu, Lecture Notes in Physics 580,371 (2001)
- [6] H.Ebert The Munich SPR-KKR package Version 7.7.0