



**Universidad
Carlos III de Madrid**

**TEXAS A&M
UNIVERSITY**

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE MATERIALES



María Isabel Martínez Torres¹, Militza Yomira Tomas Pedraza¹, Elvis Daniel Antonio Lara¹.

Asesor: Dra. Emilia Olivos Lagunes, José Ernesto Domínguez

Universidad Tecnológica Del Centro De Veracruz, Texas A&M University, Carlos III de Madrid

Tabla de Contenido

1	Resumen.....	3
1.1	< Palabras Clave. >	3
2	Abstract.....	3
2.1	< Keywords: (3-5 word)>	4
3	Referencias.....	4

1 Resumen

La simulación computacional es una herramienta importante para la creación de nuevos descubrimientos, hoy en día; es una nueva forma de hacer ciencia. Con la ayuda de equipos computacionales es posible realizar experimentos virtuales entre átomos a partir de un estudio fundamental y estadístico, dando como resultado la energía de los sistemas estudiados, esto permite predecir con éxito las propiedades físicas y químicas en los materiales. Además de ahorrar muchos recursos para la experimentación ya que la simulación no necesita altos gastos en comparación con los experimentos en los laboratorios.

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 o la aplicación de un campo eléctrico o magnético. Estos son los llamados materiales inteligentes de los cuales sobresalen los materiales con memoria.

Este proyecto está enfocado en las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de aleaciones multifuncionales, obtenidas mediante los métodos Ab-Initio, con el fin de que los resultados puedan ser usados por los grupos experimentales como referencia para la síntesis.

1.1 < Palabras Clave. >

Simulación, Aleaciones multifuncionales, Memoria de forma, Cálculos de Primeros Principios

2 Abstract

Computational simulation is an important tool for the creation of new discoveries, nowadays; it is a new way of doing science. With the help of computer equipment it's possible to perform virtual experiments between atoms from a fundamental and statistical study, resulting in the energy of the studied systems, this allows to predict with good approximation the physical and chemical properties in the materials. In addition to saving many resources for experimentation since the simulation does not need high costs compared with experiments in laboratories.

The metallic materials are in a constant evolution since they can change their properties and characteristics by the application of an external factor such as; temperature alterations, pressure or the application of an electric or magnetic field. These kinds of materials are so-called intelligent materials in which the shape memory alloys stand out.

This project is focused on the structural, electronic and magnetic properties of these multifunctional alloys, obtained through the Ab-Initio methods, in order that experimental groups can use the results as a reference for the synthesis.

2.1 < Keywords: (3-5 word)>

Computational Simulation, multifunctional alloys, shape memory alloys, DFT

Referencias

- [1] Giordano, R. N. (2012). Aleaciones ferromagnéticas con memoria de forma.
- [2] 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.
- [3] Lino, F. M. (2012). Aleaciones ferromagnéticas con memoria de forma NiMnIn obtenidas por enfriamiento ultrarrápido: transformación martensítica y caracterización magnetoestructural.
- [4] Gutiérrez, G. (2001). Elementos de simulación computacional.