Estudio de las propiedades físicas de aleaciones magneto-elásticas y de fases de Laves

199270 ; Tomás López Solenzal , Cesar Fidel Sánchez Valdés y José Luis Enríquez Carrejo

Instituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Av. Del Charro No.450 Col. Partido Romero 32310, Cd. Juárez

A través de la teoría del funcional de la densidad (DFT por sus siglas en inglés), como viene en el módulo CASTEP, del programa Materials Studio, de Biovia, se estudian las propiedades magnéticas de las transformaciones de fase magnéticas. El objeto de estudio son las aleaciones binarias magneto-elásticas $Fe_{50}Rh_{50}$ y fases de Laves (como RNi_2 con R = {Dy, Tb}). Las mismas se pueden usar como material magneto-calórico en la refrigeración de estado sólido. Se concreta la posibilidad de obtener la estructura de bandas y la densidad de estados, y por ende la energía de Fermi; para posteriormente calcular la magnetización y la capacidad calorífica de las aleaciones bajo estudio. Se obtienen las densidades de estado y las estructuras de bandas para las aleaciones FeRh, $TbNi_2$ y $DyNi_2$, en las configuraciones magnéticas, Ferromagnéticas, Antiferromagnéticas y Paramagnéticas, según corresponde a cada aleación.

INTRODUCCIÓN

La aleación $Fe_{49}Rh_{51}$ posee un efecto magneto-calórico gigante (ΔT_{ad} = -12.9 K para un campo magnético de 2 T) y durante la transición el volumen de la celda varia sobre el 1%. Aschauer *et al* empleando cálculos de primeros principios sugieren que la aplicación de un esfuerzo uniaxial puede provocar una transformación en la estructura cristalina cubica a otras fases (ortorrómbica o tetragonal), modificando a su vez su estructura magnética [1, 2]. Otras aleaciones muy atractivas son $DyNi_2$ y $TbNi_2$. Las cuales son muy prometedoras para temperaturas inferiores a los 100K, rango en el cual ocurren sus respectivas transiciones de fase [3].

A través de la teoría del funcional de la densidad, como viene en el módulo CASTEP del programa Materials Studio, se estudian las propiedades magnéticas de las transformaciones de fase magnéticas de las aleaciones FeRh, $DyNi_2$ y $TbNi_2$.

HIPOTÉSIS

Las aleaciones binarias magneto-elásticas de $Fe_{50}Rh_{50}$ (que se puede designar como Fe -Rh) y fases de Laves (como RNi_2 con R = {Dy, Tb}), se pueden usar como material magneto-calórico en la refrigeración de estado sólido. Se estudian a través de la teoría de la densidad funcional (en inglés, “density functional theory”; DFT) a través del código CASTEP, del programa Materials Studio, Biovia. Dicha teoría nos permite obtener la densidad de estados electrónicos y por ende estudiar las propiedades magnéticas de distintas transformaciones de fase magnéticas.

OBJETIVO GENERAL

Estudiar las propiedades electrónicas, magnéticas y las transformaciones de fase en aleaciones tales como Fe-Rh y RNi_2 con R = {Dy, Tb} a través de cálculos DFT, según el módulo CASTEP, del programa Materials Studio.

OBJETIVO ESPECIFICOS

- Modelar la estructura cristalina de las aleaciones Fe-Rh y RNi_2 para obtener sus densidades de estados electrónicos y sus patrones de difracción de rayos X.
- Estudiar las propiedades magnéticas y las transformaciones de fase magnéticas en las aleaciones Fe-Rh y RNi_2 a través de cálculos DFT, empleando el módulo CASTEP del programa Materials Studio, Biovia.
- Correlacionar los resultados teóricos obtenidos con los datos experimentales y la literatura científica.

METODOLOGIA

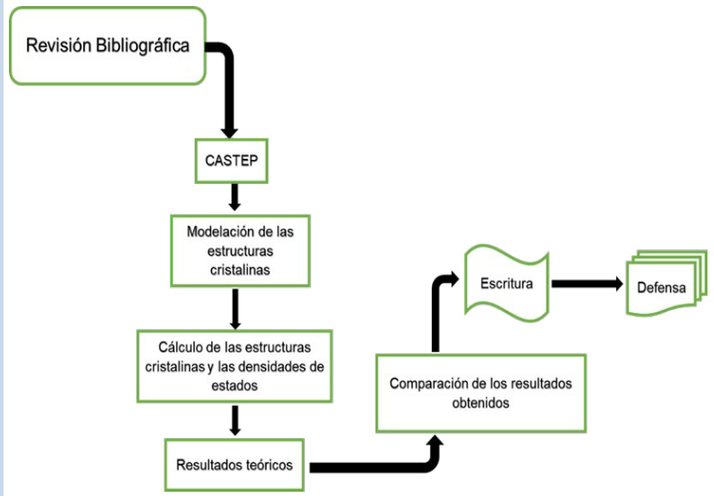
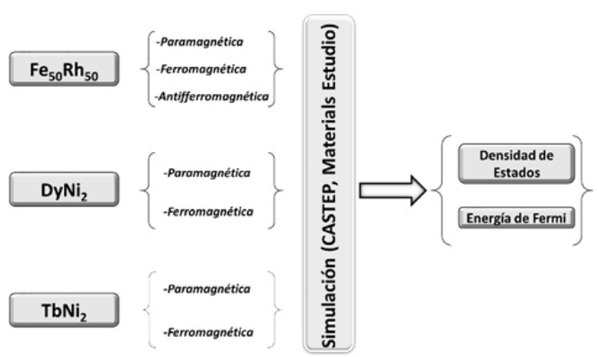
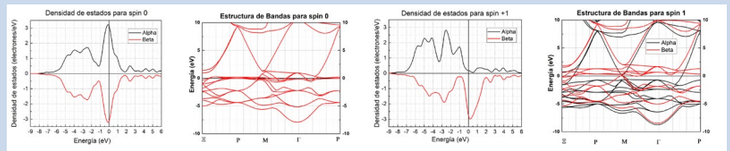


Diagrama de flujo de la Metodología

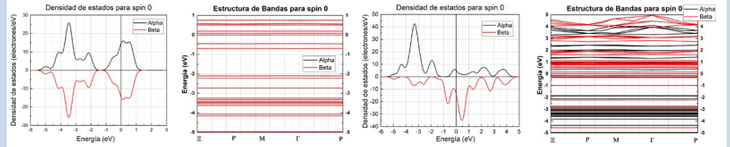
DISEÑO DE EXPERIMENTOS



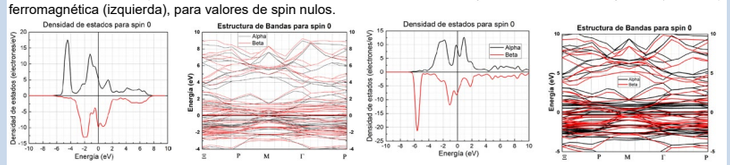
RESULTADOS



Densidades de estado y estructuras de bandas de la aleación FeRh con configuración paramagnética para spin = (0;1)



Densidades de estado y estructuras de bandas de la aleación FeRh con configuraciones antiferromagnética (derecha y ferromagnética (izquierda), para valores de spin nulos.



Densidades de estado y estructura de bandas para $TbNi_2$ (derecha) y $DyNi_2$ (izquierda), para valores de spin nulos.

CONCLUSIONES

Se modelaron las aleaciones FeRh y RNi_2 con R={Dy; Tb}. Se calcularon las densidades de estado y estructuras de bandas de las aleaciones bajo estudio para los correspondientes ordenamientos magnéticos: Paramagnético, Antiferromagnético y Ferromagnético. Para la aleación FeRh se obtuvo una densidad de estados simétrica sobre el nivel de Fermi para los ordenamientos Paramagnético y Antiferromagnético, indicando una magnetización nula. Para el ordenamiento Ferromagnético se obtuvo una densidad de estados asimétrica sobre el nivel de Fermi, indicando una magnetización diferente de cero.

Para las aleaciones $TbNi_2$ y $DyNi_2$ se obtuvieron las densidades de estados y las estructuras de bandas. La asimetría sobre el nivel de Fermi nos da evidencia de una magnetización no nula, lo que se corresponde con un ordenamiento Ferromagnético.

REFERENCIAS

[1] V. L. Moruzzi and P. M. Marcus, “Antiferromagnetic-ferromagnetic transition in FeRh”, Phys. Rev. B, Vol. 46 (1992) 2864. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.2864

[2] J. Aschauer, R. Braddell, S. A. Brechbuhl, P. M. Derlet, N. A. Spaldin, “Strain-induced structural instability in FeRh”, Phys. Rev. B, Vol. 94 (2016) 014109. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.014109

[3] Karl A. Gschneidner, Vitalij K. Pecharsky, “Binary rare earth Laves phases – an overview”, Z. Kristallogr., Vol. 221 (2006) 375–381. DOI: https://doi.org/10.1524/zkri.2006.221.5-7.375