



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

Study of physical properties of magneto-elastic alloy and Lava phases

Tomás López Solenzal^a, César Fidel Sánchez Valdés^{a*}, José Luis Enríquez Carrejo^a

^aDepartamento de Física y Matemáticas, Maestría en Ciencia de los Materiales, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, México. *Autor de correspondencia. Correo: cesar.sanchez@uacj.mx

No. de resumen

2CP21-151

Formato

Cartel

Evento

2.º Coloquio de Posgrados del IIT

Presentador

Tomás López Solenzal

Tema

Ciencia, Ingeniería y Tecnología de los Materiales

Estatus

Estudio en curso

Fecha de la presentación

Noviembre 11-12, 2021

Resumen

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 $\text{Fe}_{50}\text{Rh}_{50}$ (FeRh) y fases de Laves (como RNi_2 con $R = \{\text{Dy}, \text{Tb}\}$), Las mismas pueden usarse como material magneto-calórico en la refrigeración de estado sólido. Se modelan las estructuras ideales de las aleaciones FeRh y las fases de Laves DyNi_2 y TbNi_2 . Se obtienen las densidades de estados y las estructuras de bandas de las aleaciones FeRh, DyNi_2 y TbNi_2 en sus correspondientes configuraciones magnéticas, paramagnética, ferromagnética y antiferromagnética.

Palabras clave: DFT; CASTEP; FeRh; magneto-calórico; fases de Laves.

Abstract

Through the density functional theory (DFT), as it comes in the CASTEP module of Biovia's program, Materials Studio, the magnetic properties of magnetic phase transformation are studied. The object of study is the binary magneto-elastic alloys $\text{Fe}_{50}\text{Rh}_{50}$ (FeRh) and Laves phases (RNi_2 with $R = \{\text{Dy}, \text{Tb}\}$). They can be used as magneto-caloric materials in solid state refrigeration. The density of states and band structure of the alloys FeRh, DyNi_2 and TbNi_2 are obtained in their corresponding magnetic configurations, paramagnetic, ferromagnetic and antiferromagnetic.

Keywords: DFT; CASTEP; FeRh; magneto-caloric; Laves phases.



Entidad legal responsable del estudio

Universidad Autónoma de Ciudad Juárez.

Financiamiento

Sin financiamiento.

Conflictos de interés

Los autores declaran que no existe conflicto de intereses.