

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

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

TOMÁS LÓPEZ SOLENZAL^a, CESAR 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 electrónico: cesar.sanchez@uacj.mx

No. de resumen	Formato
3CP22-74	Ponencia
Evento	Presentador
3.º Coloquio de Posgrados del IIT	Tomás López Solenzal
Tema	Estatus
Ciencia, ingeniería y Tecnología de los materiales	Estudio terminado
Fecha de la presentación	
Mayo 26, 2022	

Resumen

El objetivo de este trabajo es estudiar las propiedades electrónicas, magnéticas y las transformaciones de fase en las aleaciones $\text{Fe}_{50}\text{Rh}_{50}$ y RNi_2 con $R = \{\text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho} \text{ y } \text{Er}\}$, haciendo uso de la teoría del funcional de la densidad (DFT). Para simular la aleación $\text{Fe}_{50}\text{Rh}_{50}$, se hizo uso de una celda cristalina con parámetro de red de 3.00 Å y ordenamiento tipo CsCl. Se obtuvieron las densidades de estados electrónicos totales y parciales para dos tipos de ordenamiento antiferromagnético: AFI y AFII, así como para los ordenamientos ferromagnéticos y paramagnéticos. A través de las DOS y PDOS se calcularon los valores de magnetización dando 0.53 μ_B para el AFI, 3.46 μ_B para el AFII, 3.80 μ_B para el ferromagnético y 0.53 μ_B para el paramagnético. Las fases de Laves RNi_2 fueron simuladas empleando una estructura tipo MgCu_2 con parámetros de red de 7.16 Å, 7.17 Å, 7.11 Å y 7.13 Å correspondientes a las aleaciones TbNi_2 , DyNi_2 , HoNi_2 , y ErNi_2 . Se obtuvieron las densidades electrónicas totales y parciales y se determinaron los valores de magnetización correspondientes a cada estructura cristalina para un ordenamiento ferromagnético. Los valores de magnetización obtenidos fueron 11.84 μ_B , 8.61 μ_B , 8.12 μ_B y 5.56 μ_B para las estructuras TbNi_2 , DyNi_2 , HoNi_2 , y ErNi_2 . De las densidades de estado parciales se obtuvo que los orbitales d y f son los que más contribuyen a la magnetización de las estructuras cristalinas. Todos los cálculos se realizaron empleando el código CASTEP, como viene implementado en el programa Materials Studio.

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

Abstract

The objective of this work is to study the electronic and magnetic properties and the phase transformations in $\text{Fe}_{50}\text{Rh}_{50}$ and RNi_2 alloys with $R = \{\text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho} \text{ and } \text{Er}\}$, using the density functional theory (DFT). To simulate the $\text{Fe}_{50}\text{Rh}_{50}$ alloy, a crystalline cell with a lattice parameter of 3.00 Å and CsCl-type ordering was used. Total and partial densities of electronic states were obtained for two types of antiferromagnetic array: AFI and AFII, as well as for ferromagnetic and paramagnetic arrays. Through the DOS and PDOS, the magnetization values were calculated giving 0.53 μ_B for the AFI, 3.46 μ_B for the AFII, 3.80 μ_B for the ferromagnetic and 0.53 μ_B for the paramagnetic. The Laves RNi_2 phases were simulated using a MgCu_2 -like structure with lattice parameters of 7.16 Å, 7.17 Å, 7.11 Å, and 7.13 Å corresponding to the TbNi_2 , DyNi_2 , HoNi_2 , and ErNi_2 alloys. The total and partial electronic densities were obtained and the magnetization values corresponding to each crystalline structure for a ferromagnetic arrangement were determined. The magnetization values obtained were 11.84 μ_B , 8.61 μ_B , 8.12 μ_B and 5.56 μ_B for the TbNi_2 , DyNi_2 , HoNi_2 , and ErNi_2 structures. From the partial densities of state, it was obtained that the d and f orbitals are the ones that contribute the most to the magnetization of the crystalline structures. All calculations were performed using the CASTEP code, as implemented in the Materials Studio program.



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

Entidad legal responsable del estudio

Universidad Autónoma de Ciudad Juárez.

Financiamiento

Sin financiamiento.

Conflictos de interés

Sin conflicto de interés.