

Efecto de la presión en las propiedades magnéticas de las aleaciones Fe-Rh y de Fases de Laves RAI_2 mediante cálculos DFT. Caso: RAI_2 ($R = Tb, Dy, Ho$)

Effect of pressure on the magnetic properties of Fe-Rh alloys and Laves RAI_2 phases through DFT calculations. Case: RAI_2 ($R = Tb, Dy, Ho$)

TOMÁS LÓPEZ SOLENZAL^a, CÉSAR FIDEL SÁNCHEZ VALDES^{a*}, MANUEL ANTONIO RAMOS MURILLO^a

^aDoctorado en Ciencia de los Materiales, Departamento de Física y Matemáticas, Instituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, México.

*Autor de correspondencia. Correo electrónico: cesar.sanchez@uacj.mx

N.º de resumen 7CP24-33	Formato Cartel
Tema Ciencia, ingeniería y tecnología de los materiales	Presentador Tomás López Solenzal
Fecha de la presentación Mayo 24, 2024	Estatus Estudio en curso

Resumen

En el presente trabajo se obtienen las densidades de estados electrónicos para las estructuras cristalinas cúbicas de las fases de Laves $TbAl_2$, $DyAl_2$ y $HoAl_2$, tanto en presencia como en ausencia de presiones hidrostáticas. A partir de las densidades de estados electrónicos se calcularon los momentos magnéticos totales de las estructuras. La aplicación de presión implicó una migración de electrones entre los orbitales. Los momentos magnéticos totales variaron de $12.62 \mu_B$, $10.70 \mu_B$ y $8.61 \mu_B$ a valores promedios de $11.5 \mu_B$, $9.87 \mu_B$ y $7.86 \mu_B$, para las estructuras $TbAl_2$, $DyAl_2$ y $HoAl_2$, respectivamente. Para altas presiones el carácter ferromagnético inicial de las fases de Laves $DyAl_2$ y $HoAl_2$ desaparece. Para la realización del trabajo se hace uso de la teoría del funcional de la densidad (p. ej., DFT) tal como viene implementado en el código CASTEP del programa Materials Studio, de Biovia.

Palabras clave: Fases de Laves; FeRh; DFT; compresión hidrostática; magneto-calórico.

Abstract

In the present work, the densities of electronic states are obtained for the cubic crystalline structures of the Laves $TbAl_2$, $DyAl_2$, and $HoAl_2$ phases, both in the presence and absence of hydrostatic pressures. The structures' total magnetic moments were calculated through the densities of electronic states. The application of pressure involved a migration of electrons between the orbitals. The total magnetic moments they were varied from $12.62 \mu_B$, $10.70 \mu_B$, and $8.61 \mu_B$ to average values of $11.5 \mu_B$, $9.87 \mu_B$, and $7.86 \mu_B$, for the $TbAl_2$, $DyAl_2$ and $HoAl_2$ structures, respectively. The initial ferromagnetic character of the Laves $DyAl_2$ and $HoAl_2$ phases disappears for high pressures. To carry out the work, use is made of density functional theory (i.e. DFT) as implemented in the CASTEP code of the Materials Studio program, from Biovia.

Keywords: Laves phases; FeRh; DFT; hydrostatic pressure; magneto-caloric.

Entidad legal responsable del estudio

Universidad Autónoma de Ciudad Juárez

Financiamiento

CONAHCYT.

Conflictos de interés

No hay conflicto de intereses en la publicación del presente resumen.