
Reporte de resultados del trabajo realizado durante 2016

Responsable: Dra. Yesenia Arredondo León

Participantes:

- 1.- Dr. Oracio Navarro Chávez – Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM
- 2.- M. en C. Abdul Mauricio Reyes Usuga – Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Tipo de proyecto solicitado: Proyecto de investigación regular

Recursos asignados: 515099.63 horas CPU

No. De procesadores para cada trabajo: 64-256 procesadores empleados

Software: Quantum Espresso

Se reportan resultados relativos a los siguientes temas de investigación abordados mediante la teoría de funcionales de la densidad usando la suite de quantum espresso:

- 1.- Investigación de la variación del momento magnético en el compuesto Sr_2FeMoO_6 debido a sustitución catiónica
- 2.- Sistemas compuestos de indio-grafeno
- 3.- Interacción espín-órbita en los compuestos PbX ($X=S, Se, Te$)

*Investigación de la variación del momento magnético
en el compuesto Sr_2FeMoO_6 debido a sustitución catiónica*

Las investigaciones en materiales magnéticos han tomado nuevas direcciones con la habilidad que se ha ganado en su síntesis, dado que los portadores de carga muestran una importante polarización de espín. También, los avances en el campo de la electrónica en la miniaturización de dispositivos han permitido dejar ver tales efectos. Sin embargo, es sabido que una de las razones de las discrepancias entre resultados teóricos y experimentales del momento magnético en los sitios de Fe del compuesto Sr_2FeMoO_6 (SFMO), es debido a los efectos de desorden. Además, se sabe que la introducción de electrones como portadores de carga que van a ocupar estados libres en orbitales d del compuesto mencionado, pueden ser la causa del incremento en la temperatura de Curie. Es por este motivo que la introducción de La en sitios de Sr es de interés, ya que se espera que aparezcan nuevos efectos en la conducción.

Metas alcanzadas

- 1.- Se optimizó la estructura cristalina del compuesto SFMO, tanto de 80 átomos como de 160 átomos. Si bien en el régimen estequiométrico esto puede no ser relevante, nuestro interés por introducir desorden

catiónico en los átomos de Fe y Mo, establece ciertas restricciones en el tamaño de la super-celda a investigar. Figuras 1 y 2.

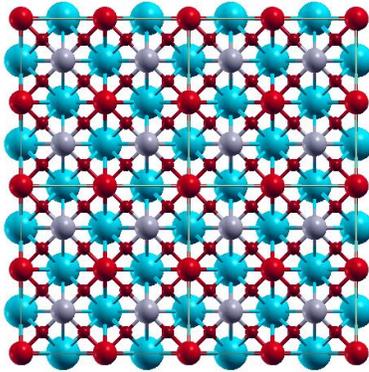


Figura 1a. Relajación estructural del sistema con 80 átomos.

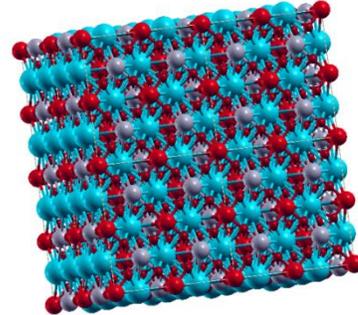


Figura 1b. Relajación estructural del sistema con 80 átomos.

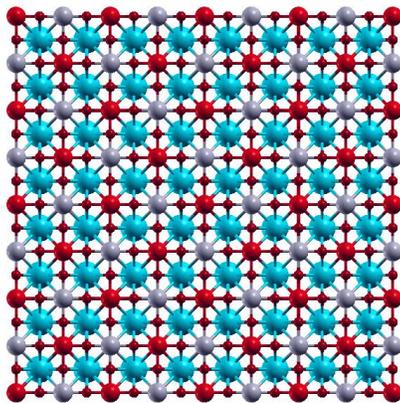


Figura 2a. Relajación estructural del sistema con 160 átomos.

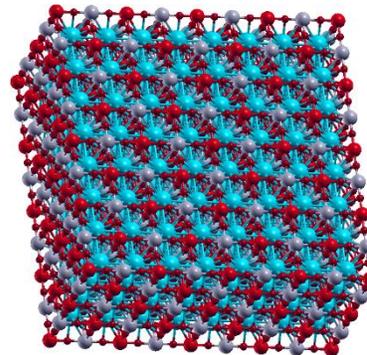


Figura 2b. Relajación estructural del sistema con 160 átomos.

2.- Investigación de la interacción local en átomos de Fe y en átomos de Mo.

Uno de los retos importantes de nuestra investigación es el estudio de los parámetros de interacción y su contribución energética en nuestros sistemas. Se ha reportado que existe una interacción tipo Hubbard, denotada por la letra U , que indica el costo energético por tener sitios de Fe o de Mo doblemente ocupados por electrones. El valor de U no se puede medir experimentalmente, así que es de importancia que se estimen intervalos de valor que nos lleven a cálculos que se puedan comparar con resultados experimentales. La investigación del valor del parámetro U se hizo en forma indirecta a través del cálculo de la densidad de estados de los sistemas. Ver figura 3.

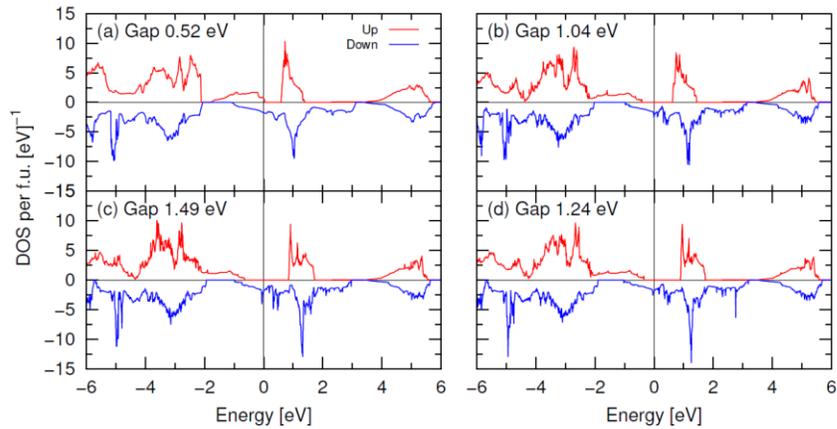


Figura 3. Densidad de estados total (DOS) para (a) SFMO sin U. (b) $U_{Fe} = 3.0\text{eV}$ y $U_{Mo} = 1.0\text{eV}$, que corresponden a datos reportados en la literatura. (c) $U_{Fe} = 4.96\text{eV}$ y $U_{Mo} = 3.56\text{eV}$ para la súper-celda de 80 átomos. (d) $U_{Fe} = 3.2\text{eV}$ y $U_{Mo} = 3.7\text{eV}$ para la súper-celda de 160 átomos.

3.- Cálculos de densidad de estados para el sistema dopado con La. En estudios previos, cuando se dopa el sistema ordenado de la doble perovskita SFMO, se ha observado un aumento en la temperatura de Curie debido al acoplamiento de orbitales de los nuevos electrones itinerantes. En esta sección se muestran los resultados de cálculos la densidad de estados (DOS) y momento magnético total del sistema SFMO cuando se dopan sitios de Fe con La en una composición de $x = 0.25$. Se muestran además los cálculos correspondientes con los valores de los potenciales efectivos de interacción (U_{Fe} y U_{Mo}) con los cuales se toma en cuenta los efectos de doble-intercambio presentes en este sistema. Figura 4.

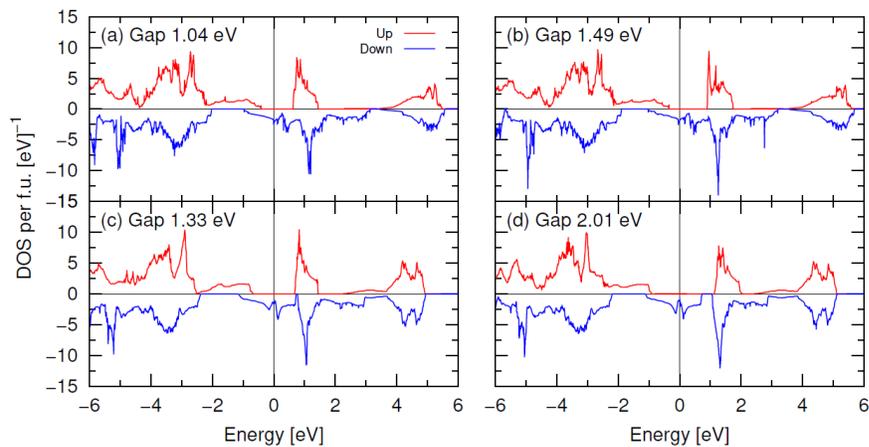


Figura 4. Densidad de estados total (DOS) (a) para SFMO sin dopar y con $U_{Fe} = 3.0\text{eV}$ y $U_{Mo} = 1.0\text{eV}$. Y para los sistemas dopados con La con (b) $U_{Fe} = 4.96\text{eV}$ y $U_{Mo} = 3.56\text{eV}$ y (d) $U_{Fe} = 3.2$ y $U_{Mo} = 3.7$ para la súper-celda de 80 átomos.

Se reporta un artículo publicado en la Revista Mexicana de Física y se tiene un manuscrito en preparación para envío en los siguientes dos meses.

El trabajo anterior se presentó en el siguiente congreso:

Latin american workshop on magnetism, magnetic materials and their applications. Se llevó a cabo en noviembre de 2016.

<http://law3m.ipicyt.edu.mx>

Materiales compuestos Indio-grafeno

Un aspecto relevante en la ingeniería de sistemas electrónicos es el diseño de sistemas eficientes de enfriamiento para minimizar los efectos negativos debido al aumento de temperatura por la fricción que se origina al paso de la corriente electrónica. La excelente conductividad térmica del grafeno y su naturaleza bidimensional proveen condiciones de especial interés por la gran área superficial, libre de defectos, que permitiría una eficiente difusión de calor. En este trabajo se investiga el efecto de la presencia de planos y plaquetas de grafeno sobre indio en bulto, el cual es un importante componente electrónico, sobre la conductancia eléctrica de este tipo de materiales compuestos.

Metas alcanzadas

1.- Optimización estructural en un sistema con una sola capa de indio. Figura 5.

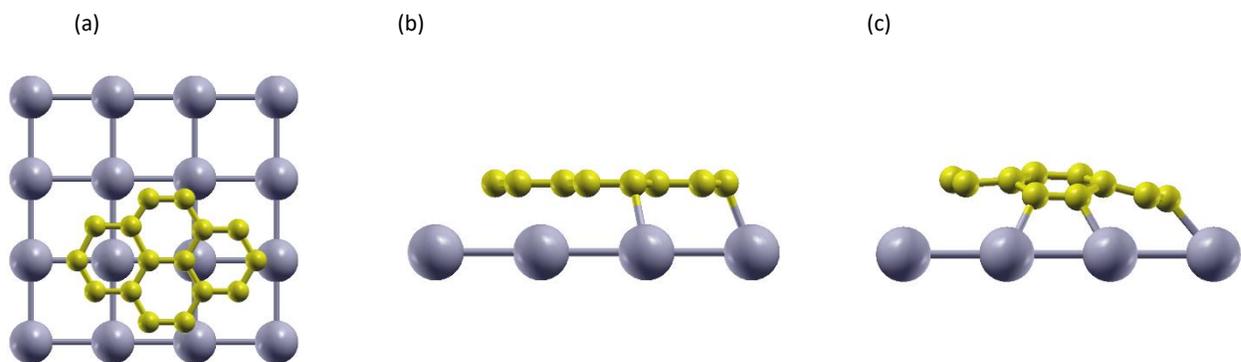


Figura 5. (a) Vista superior de la súper celda utilizada. Un cuadrado de indio y una hojuela de carbono ordenada en estructura hexagonal. (b) Vista lateral del sistema al inicio de cálculo. (c) Resultado de la relajación estructural. Se observan los enlaces formados entre los átomos de indio y los de carbono.

2.- resultados de DOS y conductancia. Usando los programas de wannier dentro de quantum espresso se hizo un primer cálculo de conductancia eléctrica en el sistema.

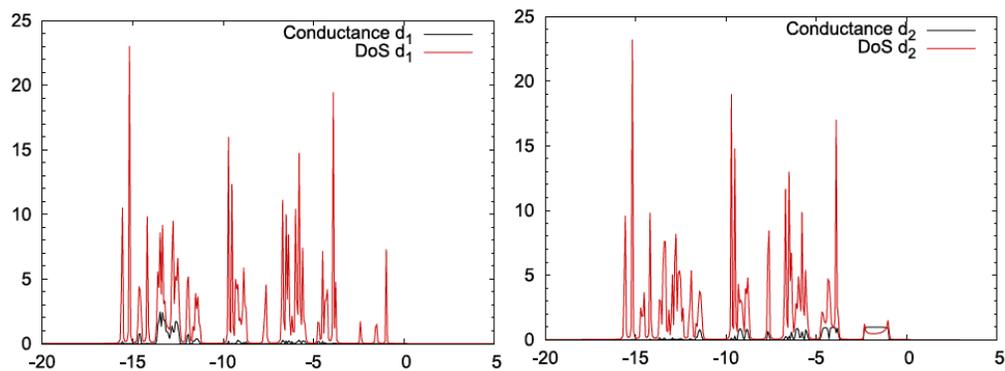


Figura 6. Resultados de DOS y Conductancia usando funciones de onda localizadas para la monocapa con plaquetas de grafeno. Se observa un ligero incremento en la conductancia en la dirección x, comparada con el resultado del indio en bulto. La DOS aumenta de manera significativa.

El trabajo anterior se presentó en el siguiente congreso:

LIX Congreso Nacional de Física organizado por la Sociedad Mexicana de Física y celebrado en León, Guanajuato en octubre de 2016.

<http://www.smf.mx/actividades/congreso-nacional-de-fisica>

Interacción espín-órbita en compuestos PbX (X=S, Se, Te)

Los calcogenuros de plomo PbX (X = S, Se, Te) son de gran interés debido a su potencial aplicación en espintrónica y como materiales termoeléctricos, ya que exhiben baja conductividad térmica a altas temperaturas. En este trabajo, la teoría de la densidad funcional se utiliza para realizar cálculos de estructura de banda en los calcogenuros de plomo bajo una interacción de spin-órbita modulada, lo cual arrojaría detalle sobre la masa efectiva de los electrones o cuasi-partículas.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS SUPERIORES, UNIDAD MORELIA

Meta alcanzada

1.- Cálculo de estructuras de bandas. Se anexa charla presentada en evento.

El trabajo anterior se presentó en el siguiente congreso:

Latin american workshop on magnetism, magnetic materials and their applications. Se llevó a cabo en noviembre de 2016.

<http://law3m.ipicyt.edu.mx>