

Estudio del Sistema Heusler AlCu_2Ni por método de primeros principios

José Andrés Evangelio Vergaray[†], Pablo Guillermo Gonzales Ormeño

Universidad Nacional del Callao

Contacto: jaevangeliov@unac.edu.pe[†]

RESUMEN

En el presente trabajo se estudio la estructura electrónica del compuesto AlCu_2Ni . Dicho compuesto pertenece a la familia de materiales Heusler, familia descubierta hace más de 100 años y que aún sigue siendo investigada, ya que constantemente surgen nuevas propiedades y campos potenciales de aplicación. La estructura electrónica de los materiales Huesler ofrece propiedades que permite la realización de funcionalidades demandadas pero aparentemente contradictorias dentro de un compuesto ternario, ya que posee una facilidad en alterar sus intervalos de banda entre 0 a ≈ 4 eV cambiando la composición química [1]. Estos materiales poseen una estructura FCC, con grupo espacial $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$ (n. 225). Para el estudio de la estructura electrónica del compuesto AlCu_2Ni se utilizó el software QUANTUM ESPRESSO[2] simulando una celda unitaria de 4 átomos, con un parámetro de red de 5.7894Å. De acuerdo a su DOS y las bandas de energía, no posee banda prohibida por lo que se concluye que el material es un conductor. Se llegó a calcular la entalpía de formación, obteniendo un valor de -0.2875 eV/atom.

Referencias

- [1] T. Graf, C. Felser y S. S. Parkin, "Simple rules for the understanding of Heusler compounds," *Progress in Solid State Chemistry*, vol. 39, n.º 1, págs. 1-50, 2011, ISSN: 0079-6786. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.progsolidstchem.2011.02.001>. dirección: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0079678611000021>.
- [2] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al., "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 21, n.º 39, pág. 395 502, sep. de 2009. DOI: [10.1088/0953-8984/21/39/395502](https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502). dirección: <https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>.