



Contribution ID : 56

Type : Poster

Estudio estructural y electrónico de la aleación η -Al₅Fe₂ preparado por horno de arco

Las aleaciones intermetálicas Fe-Al exhiben propiedades físicas altamente atractivas, tales como una elevada resistencia mecánica y una excelente resistencia a la corrosión para bajas altas concentraciones de aluminio. La muestra Fe-Al fue preparada por la técnica de horno de arco para luego realizarle tratamiento térmico de 850 C por 48 horas. Para luego hacer medidas de difracción de rayos X y espectroscopia Mössbauer. Para poder realizar cálculos por DFT definimos el grupo espacial C₂/m con la composición Al_{5.5}Fe₂ que es la fase η -Al₅Fe₂. Luego de definir las posiciones atómicas pasamos al cálculo de estructura electrónica y el gradiente de campo eléctrico usando el software computacional QUANTUM ESPRESSO. Los resultados de DRX muestra claramente la formación del compuesto intermetálico Al₅Fe₂, con estructura ortorrómbica y grupo espacial C₂cm. el ajuste Mössbauer fue realizado con un solo sitio de átomo de hierro con un valor de gradiente de campo eléctrico (EFG) de $\Delta E_Q = 0.48$ mm/s. Los cálculos de estructura electrónica muestran el comportamiento metálico del η -Al₅Fe₂ con un valor de energía de Fermi de 15.0623 eV. Además, de un valor hiperfino de gradiente de campo eléctrico de 0.0023 Vm^{-2} y un parámetro de asimetría $\eta = 0.27800$.

Primary author(s) : ROCHA CABRERA, Ronald David (UNMSM)

Presenter(s) : ROCHA CABRERA, Ronald David (UNMSM)

Session Classification : Materials Science