



Contribution ID : 23

Type : video conference

Cálculos ab-initio para el estudio de las propiedades estructurales, magnéticas e hiperfinas del sistema $MgFe_2O_4$

Thursday, 24 September 2020 14:40 (20)

Las ferritas (MFe_2O_4) son una de las familias de materiales magnéticos más estudiados tanto desde el punto de vista básico como aplicado. Las ferritas cristalizan en la estructura espinela y poseen dos sitios para los cationes, A y B. Esta característica hace que sus propiedades magnéticas de estos óxidos dependan de la distribución de cationes en las subredes de sitios A y B. El acoplamiento magnético entre los cationes es de superintercambio vía mediación con los oxígenos, dando como resultado acoplamientos A-O-A (JAA), B-O-B (JBB) y A-O-B (JAB), donde A y B representan los sitios estructurales. En los casos en que M es un metal no magnético (Zn, Ti, etc.) y los Fe ocupan sólo los sitios B (estructura normal) únicamente se presentan débiles interacciones B-O-B, lo que da lugar a bajas temperaturas de orden. Dado que los Fe forman una red tipo pirocloro con frustración geométrica más el desorden de espín en la subred de sitios B el estado fundamental es altamente degenerado, pudiendo presentarse ordenamientos magnéticos antiferromagnéticos, ferrimagnéticos o de tipo vidrio de espín a bajas temperaturas. A medida que el número de iones Fe en sitios A se incrementa se producen cambios en la interacción Fe-Fe y por ende en la respuesta magnética del sistema. En el presente trabajo, reportamos los resultados del estudio de las propiedades estructurales, magnéticas e hiperfinas de la ferrita de Mg, $MgFe_2O_4$ a partir de cálculos de primeros principios basados en la Teoría de la Funcional Densidad (DFT) y el método Full Potential - Linearized Augmented PlaneWave (FP-LAPW). Esta ferrita se reporta como invertida (sitios A ocupados por Fe y los B por Fe y Mn en igual proporción). Con el fin de determinar el estado fundamental estructural y magnético exploramos sistemas con diferentes grados de inversión catiónica, distribución de iones Mg y Fe en la subred de sitios A y B y diferentes configuraciones magnéticas.

Primary author(s) : Dr GIL REBAZA, Arles V. (Instituto de Física La Plata IFLP-CONICET, Universidad Nacional de La Plata, La Plata - Argentina.); Mr MEDINA CHANDUVÍ, Hugo (Instituto de Física La Plata IFLP-CONICET, Universidad Nacional de La Plata, La Plata - Argentina.); Dr MUDARRA NAVARRO, Azucena (Instituto de Física La Plata IFLP-CONICET, Universidad Nacional de La Plata, La Plata - Argentina.); Dr ERRICO, Leonardo (Instituto de Física La Plata IFLP-CONICET, Universidad Nacional de La Plata, La Plata - Argentina.)

Presenter(s) : Dr GIL REBAZA, Arles V. (Instituto de Física La Plata IFLP-CONICET, Universidad Nacional de La Plata, La Plata - Argentina.)

Session Classification : Materials Science and Nanotechnology

Track Classification : Materials Science and Nanotechnology