

UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN CRISTÓBAL DE HUAMANGA

FACULTAD DE INGENIERÍA DE MINAS, GEOLOGÍA Y CIVIL

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN

PROGRAMA: FISICA APLICADA

ÁREA: CIENCIA DE MATERIALES



PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

**CARACTERIZACION ESTRUCTURAL Y PROPIEDADES
FERROMAGNÉTICAS DE LA ALEACIÓN: $Fe_{11}Mn_2Ga_3$.**

RESPONSABLE : Mg. MORALES MORALES, Oswaldo

MIEMBROS : Mg. JANAMPA QUISPE, Kléber
:

AYACUCHO – PERÚ

2018

I. GENERALIDADES

1.1. Título

CARACTERIZACION ESTRUCTURAL Y PROPIEDADES FERROMAGNÉTICAS DE LA ALEACIÓN: $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$

1.2. Responsable

Mg. MORALES MORALES, Oswaldo

Miembro

Mg. JANAMPA QUISPE, Kléber

1.3. Resumen

En el presente proyecto se propone elaborar un nuevo material, una aleación, cuya estequiometría sea $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$ y realizar la caracterización estructural y ferromagnética. Estas aleaciones ternarias, fuera de la estequiometría de Heusler, son parte de un grupo de materiales funcionales o también llamados como materiales inteligentes, porque son capaces de realizar muchas funciones controladas ante la variación de un parámetro externo como la temperatura, campo eléctrico, campo magnético, etc de tal modo que regresan a su situación inicial cuando el estímulo externo cesa. Estos materiales tienen muchas propiedades interesantes, que han despertado significativo interés a los científicos, debido a su utilización en una amplia gama de aplicaciones: como la refrigeración magnética, almacenamiento de información, spintrónica, nanotecnología, aisladores topológicos, etc y son excelentes para el desarrollo de nuevas tecnologías del futuro y cuidado del medio ambiente. La preparación de esta aleación se realizará en un horno eléctrico a 1100 °C, con tratamiento térmico para su homogenización y luego será caracterizado con el Difractómetro de rayos X, Espectroscopio Mössbauer y Magnetómetro de muestra vibrante (VSM).

1.4. Tipo de investigación

Aplicada – experimental

1.5. Cronograma de actividades detallado por trimestre

- a. Recopilación bibliográfica.
- b. Preparación de la muestra $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$.

- c. Caracterización estructural de $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$.
- d. Medidas de espectroscopia Mössbauer de $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$.
- e. Caracterización ferromagnética de $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$

Caracterización estructural.

Responsable: **Oswaldo Morales Morales**

ACTIVIDADES	TRIMESTRES			
	I	II	III	IV
Revisión Bibliográfica Aleaciones fuera de la estequiometria de Heusler.	X			
Elaboración de la muestra $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$		X		
Medidas de difracción de rayos X			X	
Caracterización estructural de la aleación $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$				X

Medidas de espectroscopia Mössbauer.

Responsable: **Oswaldo Morales Morales**

ACTIVIDADES	TRIMESTRES			
	I	II	III	IV
Revisión Bibliográfica Aleaciones fuera de la estequiometria de Heusler.	X			
Elaboración de la muestra $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$		X		
Medidas de difracción de espectroscopia Mössbauer			X	
Caracterización ferromagnética o paramagnética de $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$				X

Caracterización ferromagnética

Responsable: **Kleber Janampa Quispe**

ACTIVIDADES	TRIMESTRES			
	I	II	III	IV
Revisión Bibliográfica Aleaciones fuera de la estequiometria de Heusler.	X			
Elaboración de la muestra $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$		X		
Medidas de Magnetización -VSM			X	
Caracterización Magnética de la aleación $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$				X

Cálculo de la entropía magnética

Responsable: Kleber Janampa Quispe

ACTIVIDADES	TRIMESTRES			
	I	II	III	IV
Revisión Bibliográfica Aleaciones fuera de la estequiometría de Heusler.	X			
Elaboración de la muestra $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$		X		
Medidas de Magnetometría de muestra vibrante			X	
Cálculo de la entropía magnética de la aleación $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$				X

1.6. Recursos disponibles

Recursos Humanos:

- ✓ Investigadores de UNSCH
- ✓ Investigadores de UNMASM
- ✓ Estudiantes de la UNSCH

Recursos Materiales

- ✓ 10 g de Hierro de 99.99% de pureza.
- ✓ 6 g de Manganeso de 99.99% de pureza.
- ✓ 10 g de Galio de 99.99% de pureza.
- ✓ 01 Laptop I7.

Equipos e instrumentos del Laboratorio de Física- UNMSM

- ✓ Horno eléctrico de 1200 °C.
- ✓ Difractómetro de Rayos X.
- ✓ Espectrómetro Mössbauer.
- ✓ Magnetómetro de muestra vibrante.
- ✓ Software para análisis de datos.

1.7. Presupuesto

Bienes:

- | | | |
|--|-----|----------|
| ▪ Materiales de escritorio | S/. | 600,00 |
| ▪ Materiales de impresión | S/. | 400,00 |
| ▪ Textos y revistas especializadas | S/. | 1 500,00 |
| ▪ Material para publicación en una revista | S/. | 500,00 |

▪ Materiales para la elaboración de la muestra	S/. 9 600,00
▪ Equipos e instrumentos para el análisis y caracterización de la muestra.	S/. 5 000,00
Capacitación	
▪ Participación en la capacitación de preparación y caracterización de la muestra -método experimentales	S/. 6 400,00
Servicios:	
▪ Internet	400,00
▪ Impresiones	S/. 300,00
TOTAL	S/. 24 700,00

1.8. Financiamiento

Oficina General de Investigación e Innovación- UNSCH

II. PLAN DE INVESTIGACIÓN

1. Problema

Nominal

El problema de preparación de aleaciones metálicas puede ser superado con el uso de un horno de arco o un horno eléctrico con temperatura programables que trabaje en torno a 1100 °C. La mayor dificultad surge en la caracterización de estas muestras metálicas, requieren equipamiento e instrumentación altamente calificado. Particularmente la muestra **Fe₁₁Mn₂Ga₃** requiere de un difractómetro para su caracterización estructural, un espectrómetro Mössbauer para caracterización ferromagnética y de un Magnetómetro de muestra vibrante para caracterización magnética para la determinación de sus propiedades. Por tanto el problema es: ¿cuál es la estructura cristalina y las propiedades magnéticas de **Fe₁₁Mn₂Ga₃**?

Operativa

Problema General

¿Cómo es la estructura cristalina y propiedades ferromagnéticas de la aleación: Fe₁₁Mn₂Ga₃?

Problemas Específico

- ¿Cómo es la estructura cristalina y grupo espacial de la muestra Fe₁₁Mn₂Ga₃?

- ¿Cómo son las interacciones hiperfinas y los sitios de ^{57}Fe en la muestra $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$?
- ¿Qué propiedades ferromagnéticas tiene la muestra $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$?

2. Objetivos

General

- Determinar el tipo de estructura cristalina y las propiedades ferromagnéticas de la muestra $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$.

Específicos

- Determinar la estructura cristalina y grupo espacial de la muestra $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$.
- Determinar interacciones hiperfinas de $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$ y establecer si esta aleación es un material ferromagnético o paramagnético.
- Determinar las propiedades ferromagnéticas de la aleación $\text{Fe}_{11}\text{Mn}_2\text{Ga}_3$.

3. Marco Teórico

Antecedentes

Las aleaciones metálicas ternarias Cu_2MnAl fueron estudiadas por primera vez por el Químico Alemán Friedrich Heusler en 1903, por esta razón las aleaciones de tipo X_2YZ reciben el nombre de aleaciones de Heusler (Kudryavtsev, Uvarov et al. 2012). Estudios posteriores a Heusler de la aleación Cu_2MnAl mostraron tanto las propiedades magnéticas como las estructurales podían ser variados considerablemente con la variación de la temperatura y la composición química de estos materiales (Nong, Tai et al. 2011). Igualmente los estudios realizados en aleaciones fuera de la estequiometría de Heusler revelaron propiedades interesantes (Chen, Chen et al. 2011): memoria de forma, efecto magnetocalórico, magnetotransporte polarizado de spin, etc.

Para resolver las necesidades especiales de funcionamiento y aplicación de una nueva tecnología es necesario la elaboración de nuevos materiales que satisfagan esas nuevas necesidades y propiedades; entre estos materiales se destacan los así llamados “materiales funcionales o materiales inteligentes” (Aniruddha and Yoshiharu 2000) porque son capaces de realizar una función o respuesta controlada, variando apenas un parámetro externo como la temperatura o aplicando campo magnético o eléctrico o un esfuerzo: responden ante un estímulo de forma predeterminada en un tiempo apropiado y regresan a su situación inicial una vez que cesa el estímulo externo. A nivel de investigaciones de laboratorio, las aleaciones ternarias dentro y fuera de estequiometría de Heusler, resultan fundamentales y de mucha importancia por el desarrollo y aplicación de nuevas tecnologías (Singh and Kaur 2015) en el campo de Ciencia de materiales.

La mayor parte de las aleaciones ternarias tienen propiedades de *memoria de forma* que su respuesta se sustente en una transición de fase del material (transición magnética o transición estructural).

Aleaciones de Heusler

Son aleaciones ternarias del tipo X_2YZ o XYZ en razón de que fueron estudiadas por primera vez por el Químico Alemán Friedrich Heusler (Han, Wang et al. 2009), donde **X** es un metal noble o de transición 3d, 4d o 5d con la capa externa d más que medio lleno, **Y** un metal de transición con 3d, 4d o 5d con el orbital d externo menos que medio lleno y **Z** un metal de transición s-p (metales con camada externa d totalmente incompletas o totalmente completas). Por ejemplo Cu_2MnAl , Fe_2MnAl , Fe_2MnGa , $CuMnSb$, etc. Esta aleaciones muestran muchas propiedades interesantes como: memoria de forma, efecto magneto calóricos, semimetalidad, Estudios posteriores a Heusler de la aleación Cu_2MnAl mostraron tanto las propiedades magnéticas como las estructurales podían ser variados considerablemente con la variación de la temperatura y la composición química de estos materiales (Yang, Wu et al. 2016).

Las aleaciones de Heusler, según su estructura cristalina, se clasifican en dos grupos: a) Semi Heusler aquellas que tienen estequiometría de tipo XYZ y con estructura cristalina $C1_b$ y grupo espacial $F43m$ y b) Ful Heusler aquellas que tienen estequiometría del tipo X_2YZ y estructura cristalina $L2_1$, grupo espacial $Fm\bar{3}m$; donde X e Y son metales de transición en tanto que Z puede ser un no metal no magnético o semiconductor. La celda unitaria de la estructura cristalina $L2_1$ consiste de cuatro sub redes cúbicas centradas en las caras FCC, en cuanto la estructura $C1_b$ está formada por la remoción de uno de los sitios X y también es FCC (Nong, Tai et al. 2011).

H																			He
Li	Be												B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg												Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pd	Bi	Po	At	Rn		
Fr	Ra																		
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Fig. Elementos de las que se puede componer las aleaciones de Heusler.

Las aleaciones ternarias de Tipo $X_a Y_b Z_c$, son denominados aleaciones fuera de la estequiometría de Heusler donde a es distinto a 2 y b y c son distintos de 1. La característica común de estas aleaciones es que su fase madre es austenítica con una estructura cúbica de grupo espacial $Fm\bar{3}m$ y de orden atómico L21. Estas aleaciones también presentan transición estructural que depende más de la concentración de sus elementos componentes, la temperatura que lo caracteriza es T_M . Mientras que la temperatura de Curie T_c no depende mucho de la concentración (Kudryavtsev, Uvarov et al. 2012).

4. Hipótesis

Hipótesis General

El difractor de rayos X, espectroscopio Mössbauer y el Magnetómetro de muestra vibrante permiten la caracterización estructural y magnética del nuevo material $Fe_{11}Mn_2Ga_3$.

Hipótesis Específicas

- El Difractor de rayos X permite la caracterización estructural del nuevo material $Fe_{11}Mn_2Ga_3$.
- El Espectrómetro Mössbauer permite la caracterización ferromagnética del nuevo material $Fe_{11}Mn_2Ga_3$.
- El Magnetómetro de muestra vibrante permite la caracterización magnética del nuevo material $Fe_{11}Mn_2Ga_3$.

5. Variables e Indicadores

Variables Independientes

- El material nuevo $Fe_{11}Mn_2Ga_3$

Indicadores

- Concentración de Fe
- Concentración de Mn
- Concentración de Ga

Variables Dependientes

- Característica estructural y magnética del material

Indicadores

- Parámetros de red y grupo espacial de $Fe_{11}Mn_2Ga_3$

- Temperaturas de transición.
- Parámetros de Mössbauer.

6. Diseño metodológico detallado

- **Tipo de Investigación:**

Aplicada

- **Nivel de Investigación:**

Experimental

- **Método:**

Analítico y comparativo

- **Diseño:**

Explicativo

- **Técnica**

Aplicación de software

- **Instrumentos**

Difractómetro de rayos X, espectroscopio Mössbauer y el Magnetómetro de muestra vibrante, horno de temperatura controlable.

- **Estructura del diseño metodológico**

A partir de los componentes de alta pureza (99.9%) de Fe, Mn y Ga se preparará la muestra en horno eléctrico en torno a 1000 °C durante dos días. La caracterización estructural se hará con el Difractómetro, la caracterización magnética y sus propiedades se harán con el espectrómetro Mössbauer y el Magnetómetro de muestra vibrante.

7. Referencia Bibliográfica

Aniruddha, D. and S. Yoshiharu (2000). "Electronic structure of the Cu₂MnAl Heusler alloy." Journal of Physics: Condensed Matter **12**(13): 2997.

Chen, X., Y. Chen and Y. Tang (2011). "Phase, structural, and magnetocaloric properties of high temperature annealed LaFe_{11.6}Si_{1.4}BX." Journal of Alloys and Compounds **509**(6): 2864-2869.

Han, Z. D., D. H. Wang, C. L. Zhang, H. C. Xuan, J. R. Zhang, B. X. Gu and Y. W. Du (2009). "Effect of lattice contraction on martensitic transformation and magnetocaloric effect in Ge doped Ni–Mn–Sn alloys." Materials Science and Engineering: B **157**(1): 40-43.

- Kudryavtsev, Y. V., N. V. Uvarov, V. N. Iermolenko, I. N. Glavatskyy and J. Dubowik (2012). "Electronic structure, magnetic and optical properties of Fe₂MnGa Heusler alloy." Acta Materialia **60**(12): 4780-4786.
- Nong, N. V., L. T. Tai, N. T. Huy, N. T. Trung, C. R. H. Bahl, R. Venkatesh, F. W. Poulsen and N. Pryds (2011). "Structural, magnetic and magnetocaloric properties of Heusler alloys Ni₅₀Mn₃₈Sb₁₂ with boron addition." Materials Science and Engineering: B **176**(16): 1322-1325.
- Singh, K. and D. Kaur (2015). "Manifestation of martensitic phase transformation and magneto-caloric properties in high quality magnetron sputtered Ni–Mn–In//Si ultra thin films." Sensors and Actuators A: Physical **236**: 247-256.
- Yang, X., X. Wu, B. Wu, Y. Feng, P. Li and H. Huang (2016). "First-principles calculated spin-gapless semiconducting behavior in quaternary VCoHfGa and CrFeHfGa Heusler compounds." Materials Science and Engineering: B **209**: 45-50.

ANEXOS

a.1 Matriz de Consistencia

a.2 Declaración jurada de autenticidad del proyecto de investigación

a.3 Declaración Jurada (anexo 07)

a.4 Tabla para evaluación del proyecto de investigación

ANEXO: a ->2.

**DECLARACIÓN JURADA DE AUTENTECIDAD
DEL PROYECTO DE INVESTIGACION**

Yo, OSWALDO MORALES MORALES, identificado con DNI N° 28249883, Profesor Auxiliar Nombrado a Tiempo Completo, adscrito al Departamento Académico de Matemáticas y Física de la Facultad de Ingeniería de Minas, Geología y Civil de la UNSCH, con domicilio legal en Sector Educación MzC-12, de la ciudad de Huamanga;

DECLARO BAJO JURAMENTO:

Que, el Proyecto de investigación: CARACTERIZACION ESTRUCTURAL Y PROPIEDADES FERROMAGNÉTICAS DE LA ALEACIÓN: **Fe₁₁Mn₂Ga₃** es auténtico y creación original de los autores del proyecto.

En señal de cumplimiento del presente documento, firmo en la ciudad de Ayacucho, a los tres días del mes de Diciembre de 2018.

Mg. Oswaldo Morales Morales

DNI N° 28249883

ANEXO a ->3

DECLARACIÓN JURADA

Yo, OSWALDO MORALES MORALES, identificado con DNI N° 28249883, Profesor Auxiliar Nombrado a Tiempo Completo, adscrito al Departamento Académico de Matemáticas y Física de la Facultad de Ingeniería de Minas, Geología y Civil de la UNSCH, con domicilio legal en Sector Educación MzC-12, de la ciudad de Huamanga;

DECLARO BAJO JURAMENTO:

Que, laboro en la Universidad Nacional de San Cristóbal de Huamanga, bajo el régimen de Tiempo Completo, disponiendo del tiempo suficiente para desarrollar mis actividades de investigación que me permiten acceder el incentivo económico de la Ayuda Financiera a la Investigación, otorgado por la UNSCH.

En señal de cumplimiento del presente documento, firmo en la ciudad de Ayacucho, a los tres días del mes de Diciembre de 2018.

Mg. Oswaldo Morales Morales

DNI N° 28249883