"Estudio de la entalpía de formación de la aleación NiTi con impureza de Al en la estructura B2 por cálculos de primeros principios"

Frank Chico Azabache (UNMSM)
Tutor: Dr. Carlos Beltran Rios (UIS)

LA-CoNGA physics

5 de diciembre de 2022

Latin American alliance for Capacity buildiNG in Advanced physics
LA-CoNGA physics

Cofinanciado por el programa Erasmus+ de la Unión Europea

Contenidos

Introducción
- Introducción
- Descripción del proyecto

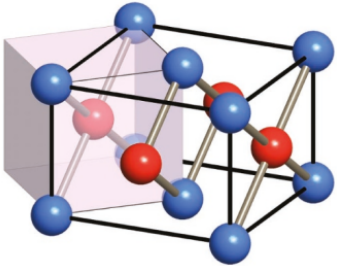
Metodología
- Teoría funcional de la densidad
- Sistema
- Simulaciones

Resultados

Conclusiones

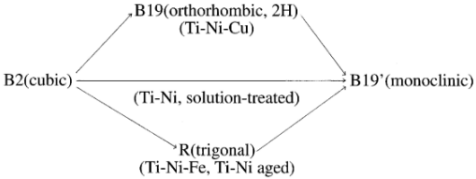
Introducción

NiTi (Nitinol)



B2 $\longrightarrow$ B19'

Transformación martensitica



Aplicaciones

- Implantes (ortodoncia y ortopedia)
- Aeronáutica

Descripción del proyecto

- **Objetivo general:** Estudiar la entalpía de formación del NiTi con impureza de Al para varias concentraciones a través de cálculos por primeros principios.

- **Objetivos específicos:**
  1. Determinar las configuraciones (Ni,Ti)
  2. Determinar la entalpía de formación
  3. Estudiar el mecanismo electrónico de la aleación con la impureza.

Metodología

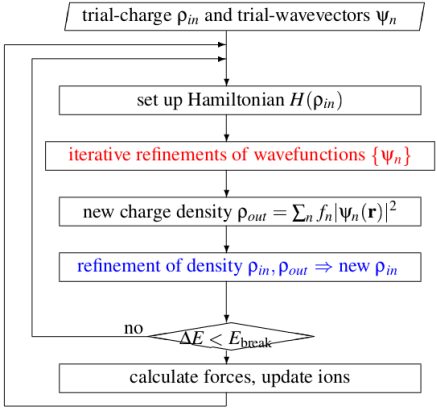
Cálculos por primeros principios $\longrightarrow$ Density Functional Theory (DFT)

— **DFT:** Ec. de Kohn-Sham

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_n(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r})\right)\psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i\psi_i$$

$$E[\rho] = E_c[\rho] + E_{xc}[\rho]$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i^N |\psi_i(\mathbf{r})|^2$$



Implementado: VASP 5.4.4

E. Correlacion-Intercambio: E_{xc}

$$E_{xc}[\rho] = ??$$

- Su forma exacta es desconocida.
- Aproximaciones: locales (LDA), semi-locales (GGA), híbridas

Aproximacion de gradiente generalizado (GGA):

$$E_{xc}^{GGA} = \int \rho(\mathbf{r})\epsilon_{xc}(\rho(\mathbf{r}), \nabla\rho\mathbf{r}))d\mathbf{r} \quad ; \quad \epsilon_{xc} : \text{g. de electrones}$$

- Funcional Perdew-Wang (PW91)
- Funcional Perdew Burke Ernzerhof (PBE)
- PBEsol

S. fuertemente correlacionados

- electrones: 3d, 4f o 5f
  - 3d: MnO, FeO, NiTi, NiO

DFT + U: método para solidos fuertemente correlacionados

$$E_{tot}^{DFT+U} = E_{tot}^{GGA} + E_U[n_{m_i m_j}^{I,\sigma,l}]$$

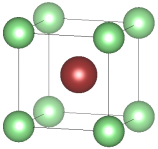
$n_{m_i m_j}^{I,\sigma,l}$: matriz densidad de electrones de momento angular l del átomo I

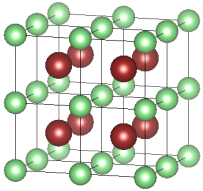
E_U: depende de dos parámetros, el termino de Hubbard U y el de intercambio J. Obtenidos empiricamente.

No se aplica DFT+U a electrones s o p, debido a que son delocalizados.

Sistema

- **Estructura:** B2, superred $2 \times 2 \times 2$





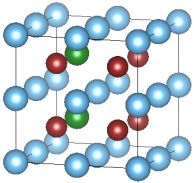
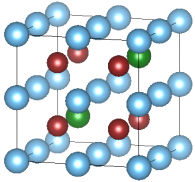
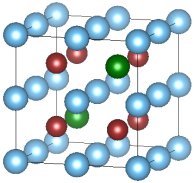
- **Método:** Sustitución atómica (Site-Ocuppancy Disorder - SOD)

a: atomo e: estructura

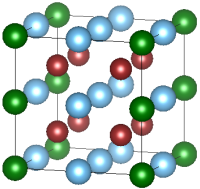
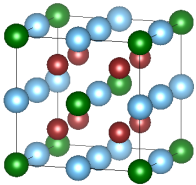
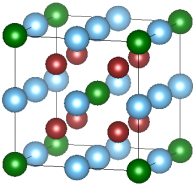
1a : 1e	3a : 3e	5a : 3e	7a : 1e
2a : 3e	4a : 6e	6a : 3e	

Sistema (cont)

- $Al \longrightarrow Ni$

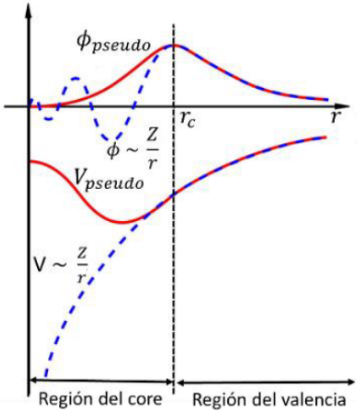




- $Al \longrightarrow Ti$

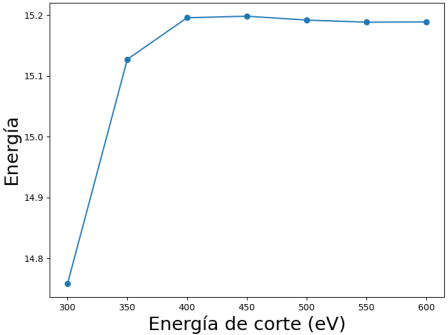
Simulaciones

- Método: proyector de ondas aumentadas (PAW)
- Pseudopotenciales
  - Ni: $3d^9\ 4s^1$
  - Ti: $3d^3\ 4s^1$
  - Al: $3s^2 3p^1$
- E. Correlación-Intercambio: aproximación de gradiente generalizado GGA-PBEsol
- electrones d: DFT+U (Liechtenstein) (correlación fuerte)

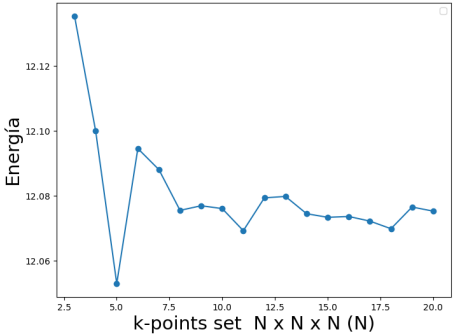


Test de convergencia

Energía de corte



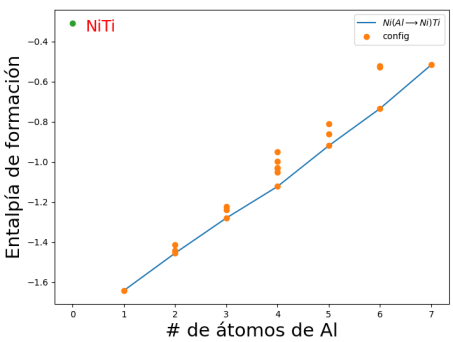
K-points



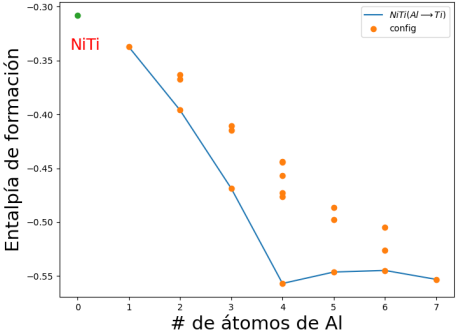
La energía de corte utilizada fue 600 eV y el numero de k-points tomados fue 13.

Entalpía de formación del NiTiAl

$$Ni(Al \longrightarrow Ni)Ti$$

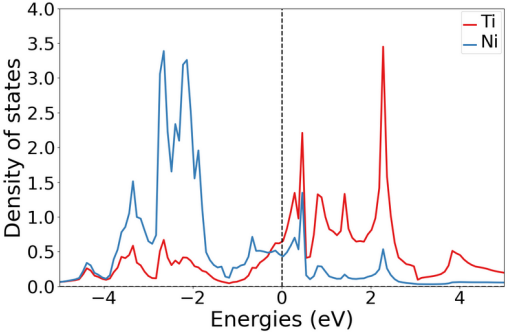


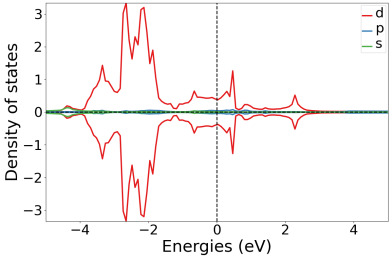
$$NiTi(Al \longrightarrow Ti)$$

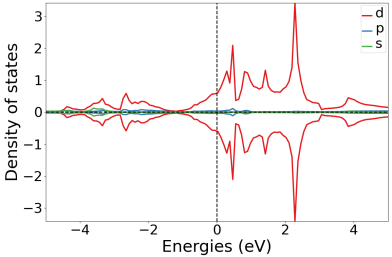


La estructura B2 se vuelve mas estable con el aumento de Al sustituyendo al Ti.

Densidad de estados del NiTi







Densidad de estados NiTiAl

Ni($Al \longrightarrow Ni$) Ti:

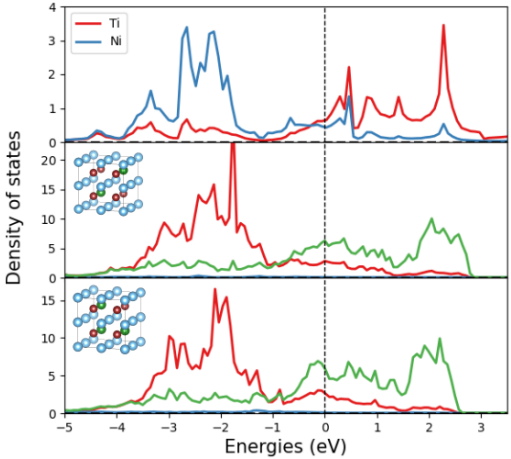


Figura: Densidad de estados del NiTi con 0, 2 y 3 átomos de Al.

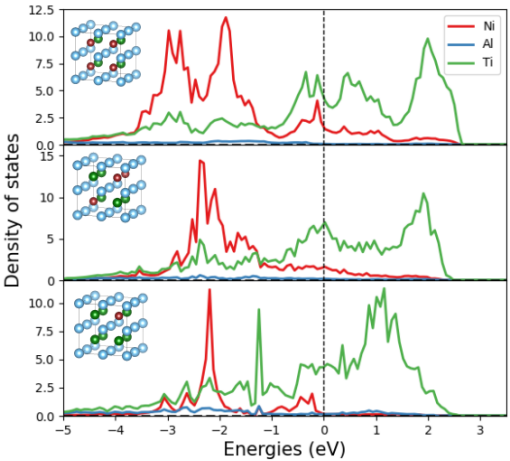
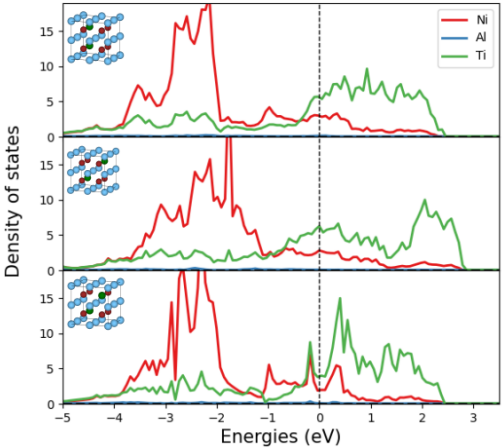
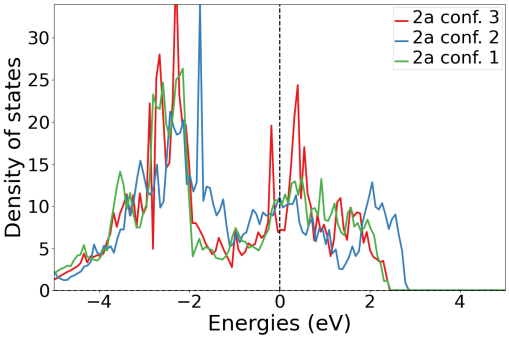


Figura: Densidad de estados del NiTi con 4,5 y 7 átomos de Al.

Densidad de estados NiTiAl

Ni($Al \longrightarrow Ni$) Ti: 2 atomos





Densidad de estados NiTiAl

Ni($Al \longrightarrow Ti$) Ti:

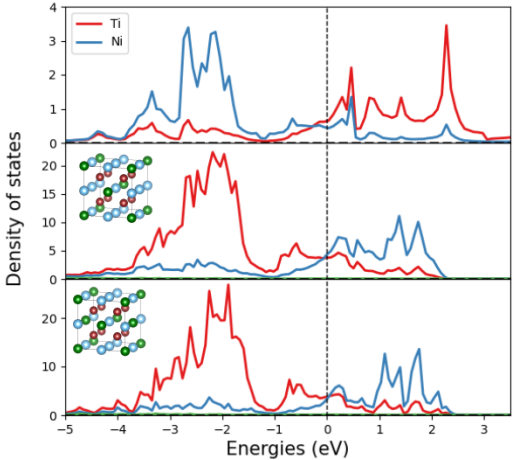


Figura: Densidad de estados del NiTi con 0, 2 y 3 átomos de Al.

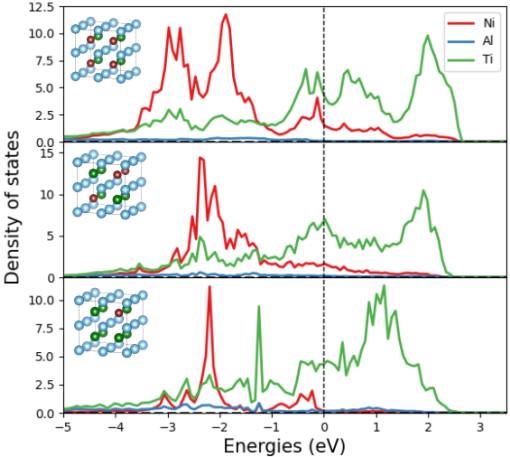
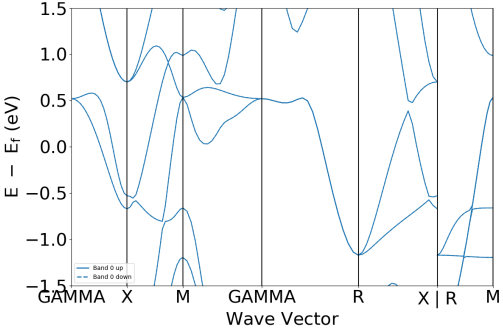
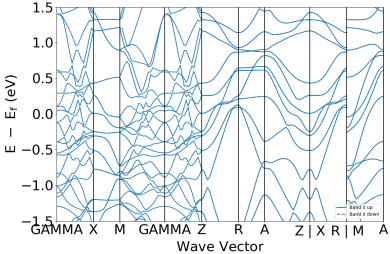
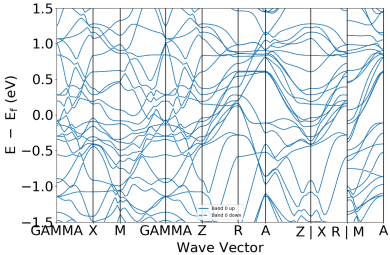


Figura: Densidad de estados del NiTi con 4,5 y 7 átomos de Al.

Estructura de bandas del NiTiAl







Conclusiones y perspectivas

- Menor entalpía de formación del NiTi-B2 con la inclusión de la impureza de Al.
- Aumento de la entalpía de formación con el aumento de Al para el reemplazo de Ni. Disminución de la misma en el caso del reemplazo de Ti
- Mejora la estabilidad de la B2 con el aumento de impurezas de Al para el reemplazo de Ni.
- Estudio de las propiedades elásticas y magnéticas.
- Estudio de la transformación martensítica del NiTi con impureza de Al

http://laconga.redclara.net

contacto@laconga.redclara.net

lacongaphysics

Latin American alliance for Capacity buildiNG in Advanced physics

LA-CoNGA physics

Cofinanciado por el programa Erasmus+ de la Unión Europea

El apoyo de la Comisión Europea para la producción de esta publicación no constituye una aprobación del contenido, el cual refleja únicamente las opiniones de los autores, y la Comisión no se hace responsable del uso que pueda hacerse de la información contenida en la misma.