



CARACTERIZACIÓN E IMPORTANCIA DEL COMPUESTO Y_2BaCuO_5 (Y211) – FASE VERDE

Melchor Nicolás Llosa Demartini^a

*^aLab. Superconductividad, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos. Ap. Postal 14-0149,
Lima 14, Perú.*

Resumen

En este trabajo de Tesis, se presentan los resultados obtenidos del compuesto Y_2BaCuO_5 (Sistema Y211) mediante las técnicas experimentales de difracción de rayos X (DRX), microscopía electrónica de barrido (SEM) y análisis EDAX (Energy dispersive analysis with X-rays). La fase Y_2BaCuO_5 es una fase precursora del superconductor más estudiado, el $YBa_2Cu_3O_7$ (denominado sistema Y123) que tiene una temperatura crítica aproximada de 92 K. El compuesto $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ es una triple Perovskita que tiene una estructura ortorrómbica cuya preparación mediante la reacción de estado sólido requiere de una calcinación y de dos tratamientos térmicos en flujo de oxígeno a 950°C. Del producto final obtenido en la preparación del Y123 coexisten fases como el compuesto Y_2BaCuO_5 (Y211), también llamado fase verde debido a su coloración verde que presenta, y la fase CuO, que aparece en pequeñas proporciones. En el presente trabajo se estudia el compuesto precursor Y_2BaCuO_5 (Y211) sometido a un posterior recocido a temperaturas mayores que 1000 °C. Se realiza dos tratamientos térmicos a temperaturas de 1100 °C y 1300 °C. La caracterización estructural se realizó mediante los difractogramas de rayos X y el análisis estructural se realizó utilizando el método de Rietveld, en la que propuso diferentes modelos de su estructura cristalina que permitió determinar que se trata de una fase ortorrómbica de grupo espacial Pnma. Además, mediante el método de Rietveld método se determinó los respectivos parámetros de red para modelar la estructura. El estudio morfológico y químico fue realizado mediante un microscopio electrónico de barrido y análisis EDAX, respectivamente.

PACS: 74.25.-q; 74.25.Dw; 74.25.Ha; 74.70.-b, 61.10.-i

Palabras claves: Y_2BaCuO_5 ; Análisis Rietveld; XRD.



PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DEL COMPUESTO SUPERCONDUCTOR



Richard Bellido Quispe^a

^aLab. Superconductividad, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Ap. Postal 14-0149, Lima 14, Perú.

Resumen

El compuesto superconductor $\text{CaLaBaCu}_3\text{O}_{7.8}$ (La-1113) registra una temperatura crítica de 80 K y es isomorfo al superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7.8}$ (Y-123) que tiene una temperatura crítica de 90 K. Con la finalidad de estudiar el efecto de la incorporación del oxianión $(\text{BO}_3)^{3-}$ en el sistema La-1113, se preparó el compuesto $\text{CaLaBaCu}_{2.80}(\text{BO}_3)_{0.20}\text{O}_{6.40}$ en condiciones normales de presión y temperatura.

El patrón de difracción de rayos X muestra que el $\text{CaLaBaCu}_{2.80}(\text{BO}_3)_{0.20}\text{O}_{6.40}$ tiene una fase ortorrómbica con grupo espacial Pmmm, además se detectó en pequeñas proporciones la fase secundaria BaCuO_2 .

Con la finalidad de realizar un refinamiento por el método de Rietveld, se propuso un modelo estructural usando el software CARINE v3.1 en la que se colocó el oxianión $(\text{BO}_3)^{3-}$ en el sitio del Cu(1) de la cadena, encontrándose los parámetros de red: $a = 3.8843 \text{ \AA}$, $b = 3.8902 \text{ \AA}$ y $c = 11.6405 \text{ \AA}$.

La medida de la susceptibilidad magnética en el rango de temperatura de 5 a 100 K se realizó en condiciones de enfriamiento con campo cero (ZFC) y se usó el sistema MMPS (Magnetic Measurement Property System) que usa el sensor SQUID, y se pudo comprobar el comportamiento diamagnético del compuesto $\text{CaLaBaCu}_{2.80}(\text{BO}_3)_{0.20}\text{O}_{6.40}$ registrando una temperatura crítica de 68 K.

En la región normal, es decir en el rango de temperatura de 100-300 K, el compuesto es antiferromagnético siguiendo la ley de Curie-Weiss, bajo un campo aplicado de 5 KOe.

PACS: 74.25.-q; 74.25.Dw; 74.25.Ha; 74.70.-b, 61.10.-i

Palabras claves: $\text{CaLaBaCu}_{2.80}(\text{BO}_3)_{0.20}\text{O}_{6.40}$; Análisis Rietveld; XRD.



PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DEL COMPUESTO SUPERCONDUCTOR $[Y_{0.8}Ca_{0.2}]SrBaCu_{2.8}(BO_3)_{0.2}O_{6.4}$

Bram Leo Willems^a

^aLab. Superconductividad, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Ap. Postal 14-0149, Lima 14, Perú.

Resumen

Luego del descubrimiento del $YBa_2Cu_3O_{7-8}$ en 1987 científicos diversos han venido preparado y estudiando diferentes variantes de estos compuestos en las que se realizaron sustituciones catiónicas y/o aniónicas con la finalidad de estudiar las transformaciones estructurales y la temperatura crítica superconductora.

El presente trabajo nace a partir de reportes, en revistas especializadas, las cuales indican que el $(Y_{0.85}Ca_{0.15})Sr_{0.5}Ba_{1.5}Cu_{2.5}(BO_3)_{0.5}O_8$ es superconductor con una temperatura crítica a 55 K y que el compuesto $(Y_{0.5}Ca_{0.5})SrBaCu_{2.75}(BO_3)_{0.25}O_8$ es superconductor con una temperatura crítica igual a 50 K.

Se hace una revisión de los conceptos teóricos de superconductividad y se preparó una muestra $[Y_{0.8}Ca_{0.2}]SrBaCu_{2.8}(BO_3)_{0.2}O_{6.4}$ a través del método de reacción del estado sólido.

Se analizó la muestra usando la difracción de rayos X con posterior refinamiento de los datos mediante el método de Rietveld y la simulación de estos el programa CaRine con el fin de determinar el tipo de estructura que posee además de saber que grupo espacial pertenece.

Se realizó la medida de la susceptibilidad magnética mediante un equipo de magnetometría que usa el sensor SQUID con el fin de determinar la temperatura crítica.

PACS: 74.25.-q; 74.25.Dw; 74.25.Ha; 74.70.-b, 61.10.-i

Palabras claves: $[Y_{0.8}Ca_{0.2}]SrBaCu_{2.8}(BO_3)_{0.2}O_{6.4}$; Análisis Rietveld; XRD.



DETERMINACIÓN DE LA INFLUENCIA DE LAS DIVERSAS CONTRIBUCIONES DE LOS POTENCIALES DE PARES EN METALES SIMPLES Y SEMICONDUCTORES AMORFOS

Bach. Wilfredo Morales Castro^a

^aLab. Física Computacional, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Ap. Postal 14-0149,
Lima 14, Perú.

Resumen

En los metales simples se caracterizan por tener en el estado cristalino estructuras de banda que son reconocidas como del tipo de electrones libres, como en el Na, Mg, Al y Pb. Sus energías de bandas de valencia están bastante separadas de las más próximas de los niveles core. Los metales están compuestos de núcleos pesados cargados y de electrones livianos en una mezcla eléctricamente neutra. En la mayoría de los metales algunos de los electrones están muy ligados al núcleo y desempeñan un papel pasivo de la determinación de las propiedades del metal. Pero el resto de los electrones, denominados de valencia, tienen grados de libertad los cuales deben ser tomados en cuenta explícitamente. De hecho el metal debe ser considerado como una mezcla de dos componentes: iones y electrones interactuantes. Sin embargo, para muchos propósitos, un metal simple se puede reducir a un sistema "cuasi" de una sola componente con interacciones efectivas entre los iones redefinidos adecuadamente: el potencial de pares efectivo.

La interacción entre un ión y un electrón, en un metal simple es caracterizada por un potencial $V(r) \sim -Ze^2/r$ fuera del core e intensamente negativo dentro de él. A causa de su intensidad este potencial no es factible de ser tratado por la teoría de perturbaciones, lo que resulta contradictorio por que los electrones de valencia deben conducirse para muchos propósitos como electrones libres. Esta contradicción se resuelve haciendo uso de la teoría de pseudopotenciales, que consiste en esencia es reemplazar el intenso potencial $V(r)$ por un pseudopotencial mucho más débil V^{ps} que tenga el mismo espectro de valores propios de baja energía. Como se verá siempre es posible para los metales simples escoger un pseudopotencial ab initio suficientemente pequeño en la región core y, por tanto, susceptible de ser tratado por la teoría de perturbaciones.

Cuando se reúne un conjunto de átomos para formar un metal simple los electrones de valencia se delocalizan, y el sistema se presenta como un conjunto de iones sumergidos en el subsistema de los electrones de valencia, donde la interacción resulta apantallada por estos electrones. El apantallamiento electrónico produce modulaciones en la distribución de carga alrededor de cada ión. Entonces la densidad electrónica modulada actúa en torno a la red iónica básica, de tal forma que da como resultado una contribución dependiente de la estructura a la energía total, la cual puede ser evaluada utilizando la teoría de perturbaciones de segundo orden dentro de la aproximación de electrones cercanamente libre (NFE). Como resultado de esta evaluación se logra obtener que la parte de la energía dependiente de la estructura se exprese como una suma de potenciales de pares interatómicos oscilatorios. Estos potenciales efectivos representan la interacción entre un ión descubierto y un ión apantallado. Se demuestra que estos potenciales pueden dividirse en tres contribuciones bien definidas: la primera intensamente repulsiva, la otra relativamente atractiva y la tercera marcadamente oscilatoria presentando las denominadas oscilaciones de Friedel. El presente trabajo tiene como principal objetivo determinar el grado de influencia de cada una de las tres contribuciones del potencial de pares en la estructura de los metales simples.

Para ello es necesario generar un sistema metálico para lo que se hará uso del método standard clásico computacional de la dinámica molecular. Consiste a partir de una distribución inicial de unos miles de átomos en relajar los mismos utilizando potenciales de pares efectivos entre los componentes del sistema, construidos previamente. Después de algunos miles de interacciones en lo cual se baja también la temperatura del sistema, se llega a una distribución final de los átomos caracterizada por funciones de distribución de pares y sus transformadas de Fourier conocidas como factores de estructura. Haciendo adecuadas y sistemáticas variaciones en cada una de las tres contribuciones del potencial de pares efectivo utilizado, es posible determinar la influencia de cada una de ellas, tanto en la función de distribución de pares como en el factor de estructura, obtenidos por la simulación computacional con el método de la dinámica molecular.

En la primera parte de este trabajo se presentan exposiciones bastante resumidas de la teoría de pseudopotenciales *ab initio*, de la teoría de la construcción de pares y de su división en tres contribuciones, así como la teoría del método de la dinámica molecular. Luego se presentan los programas de simulación computacional requeridos para el cálculo de los pseudopotenciales, de los potenciales de pares efectivos y su división y de las funciones de distribución de pares y los correspondientes factores de estructura. Varios de estos programas, principalmente los básicos, han sido desarrollados y probados su calidad con anterioridad. Otros han sido desarrollados específicamente para los objetivos propuestos.

En la segunda parte se hace la exposición de los cálculos realizados. Primero se expone analítica y gráficamente los resultados de los cálculos, mediante la dinámica molecular, de la función de correlación de pares y del factor de estructura de tres metales simples (Al, Na y Mg) en su punto de fusión y, paralelamente, con fines comparativos, de dos semiconductores amorfos (Si y Ge). En estos cálculos se utiliza un potencial de pares efectivo determinado a partir de la función de respuesta de Lindhard en su forma exacta. Se hace, también, una comparación entre los resultados con los correspondientes experimentales.

Luego, se muestra los resultados de los mismos cálculos sobre los mismos elementos utilizando esta vez un potencial de pares efectivo expresado como la suma de tres términos oscilatorios, y, luego, son también comparados con los resultados anteriores y con los experimentales.

Finalmente, se hace un análisis de grado de influencia en los resultados de cada término del potencial de pares efectivo, mediante la aviación sistemática de los componentes de cada término. Se hace un análisis particular para el caso de los semiconductores amorfo, en el que se investiga sobre la posibilidad de ajustar dichos términos desde las componentes de la función dieléctrica inversa a fin de obtener los resultados más próximos a los experimentales, y se ensaya una explicación del significado físico de dichos ajustes.

PACS: 71.15.-m; 71.15.Pd; 71.23.-k; 71.23.Cq

Palabras claves: Teoría de pseudopotenciales *ab initio*, potencial de pares efectivo, teoría de perturbaciones, dinámica molecular, semiconductores amorfos.
