

Determinación teórica del corrimiento isomérico del ^{57}Fe para diferentes compuestos basados en Fe: Métodos de primeros principios y espectroscopía Mössbauer

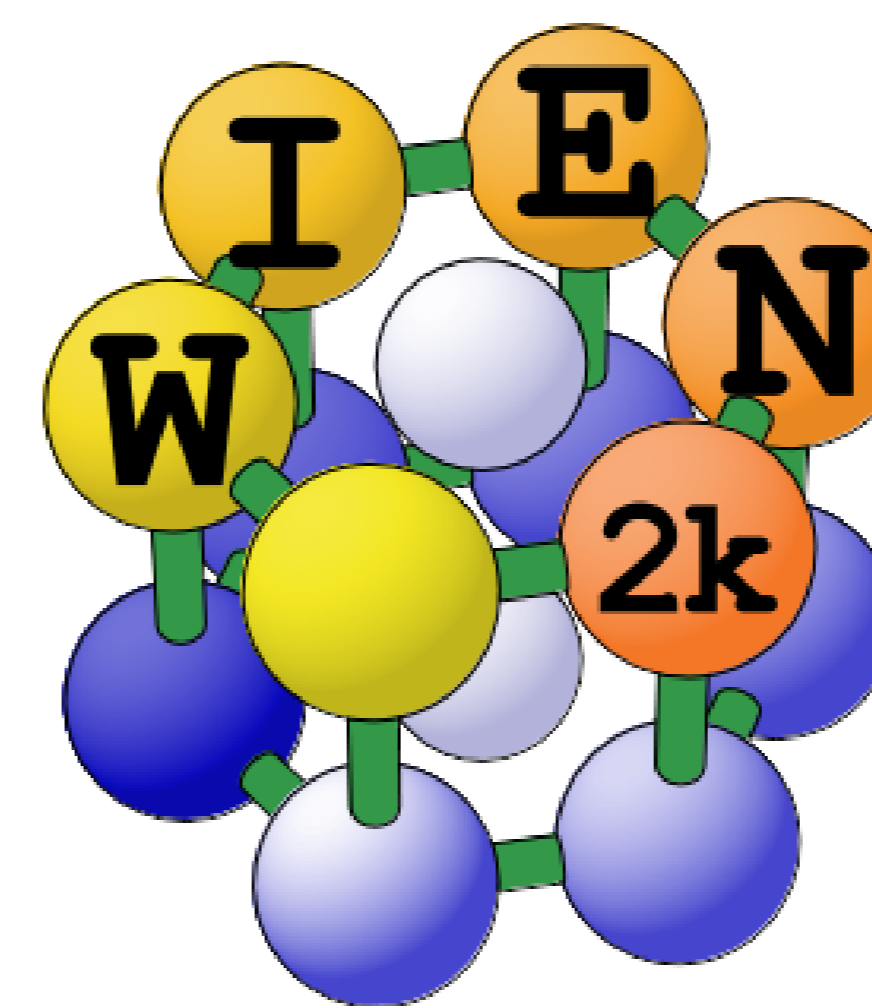
Brusasco C. Gastón ¹, Mudarra Navarro Azucena M. ^{1,2}, Errico Leonardo A ^{1,2,3}
Peltzer y Blancá Eitel L. ⁴, Gil Rebaza Arles V. ^{1,2}



1 Departamento de Física, Fac. de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, 1900 La Plata – Argentina.
2 Instituto de Física La Plata IFLP – CONICET CCT La Plata, 1900 La Plata – Argentina.
3 Universidad Nacional del Noroeste de la Provincia de Buenos Aires UNNOBA, Monteagudo 2772, Pergamino CP 2700, Buenos Aires – Argentina.
4 Universidad Nacional de La Plata UNLP, 1900 La Plata – Argentina.

Detalle computacional:

- Cálculos ab-initio basados en la Teoría de la Funcional Densidad (DFT).
- Se han usado los métodos FP-LAPW (Wien2k [1]), pseudopotenciales y ondas plana (QuantumEspresso – GIPAW [2]), Orbitales locales (FPLO [3]).
- Intercambio-correlación: GGA-PBE [4].
- 200 k-points en la IBZ.
- $R_{\text{MT}} \times K_{\text{max}} = 9$ (wien2k), Ecut = 100 Ry (QuantumEspresso)
- Polarización de espín (sistemas magnéticos).



Sistema de estudio: compuestos basado en Fe

a-Fe (Im-3m), FeF₂ (P4₂/mnm), FeCl₂ (R-3m), FeBr₂ (P-3m1), FeF₃ (R-3c), FeTi (Pm-3m), FeCl₃ (R-3c), FeAl (Pm-3m), FeV (Pm-3m), FeCo (Pm-3m), Fe₂O₃ (R-3c), FeO (Fm-3m), g-Fe₄N (Pm-3m), GaFe₃N (P4/mmm), MnFe₃N (P4/mmm), Fe₂Zr (Fd-3m), FeZr₂ (I4/mcm), FeSi₂ (P4/mmm), FeGe₂ (I4/mcm), Fe₂As (P4/mmm), FeSn₂ (I4/mcm). FeAs (Pnma), FeAs₂ (Pnmm), FeZr₃ (Cmcm), Fe₂Ti (P63/mmc), Fe₅Th (P6/mmm), Fe₂Nb (P63/mmc), Fe₂Ta (P63/mmc), FeGe (P6/mmm), FeSn (P6/mmm), FeAl₃ (C12/m1), Fe₃Th (R-3m), Fe₇Nb₆ (R-3m), Fe₇Mo₆ (R-3m), Fe₇W₆ (R-3m), FeCO₃ (R-3c), FeSO₄ (Cmcm), FeMo₂S₄ (C1c1), FePS₃ (C12/m1), Ba₂FeS₃ (Pnma), Fe₂Si₄ (Pnma), KFeF₃ (Pm-3m), K₂FeO₄ (Pnma), SrFeO₄ (Pnma), BaFeO₄ (Pnma), Ba₂FeO₄ (P121/n1), FeTiO₃ (R-3), Zr₆FeSb₂ (P-62m), Zr₆FeSn₂ (P-62m), FeS (P-62c), FeS (P63/mmc), FeS (P4/nmm), ZrFeSi (Pnma), TaFeSi (Pnma), ZrFeGe (Pnma), TaFeGe (Pnma), FeAl₂O₄ (Fd-3m), FeV₂O₄ (Fd-3m), FeCr₂O₄ (Fd-3m), GeFe₂O₄ (Fd-3m), BaYFeO₄ (Pnma).

Resultados:

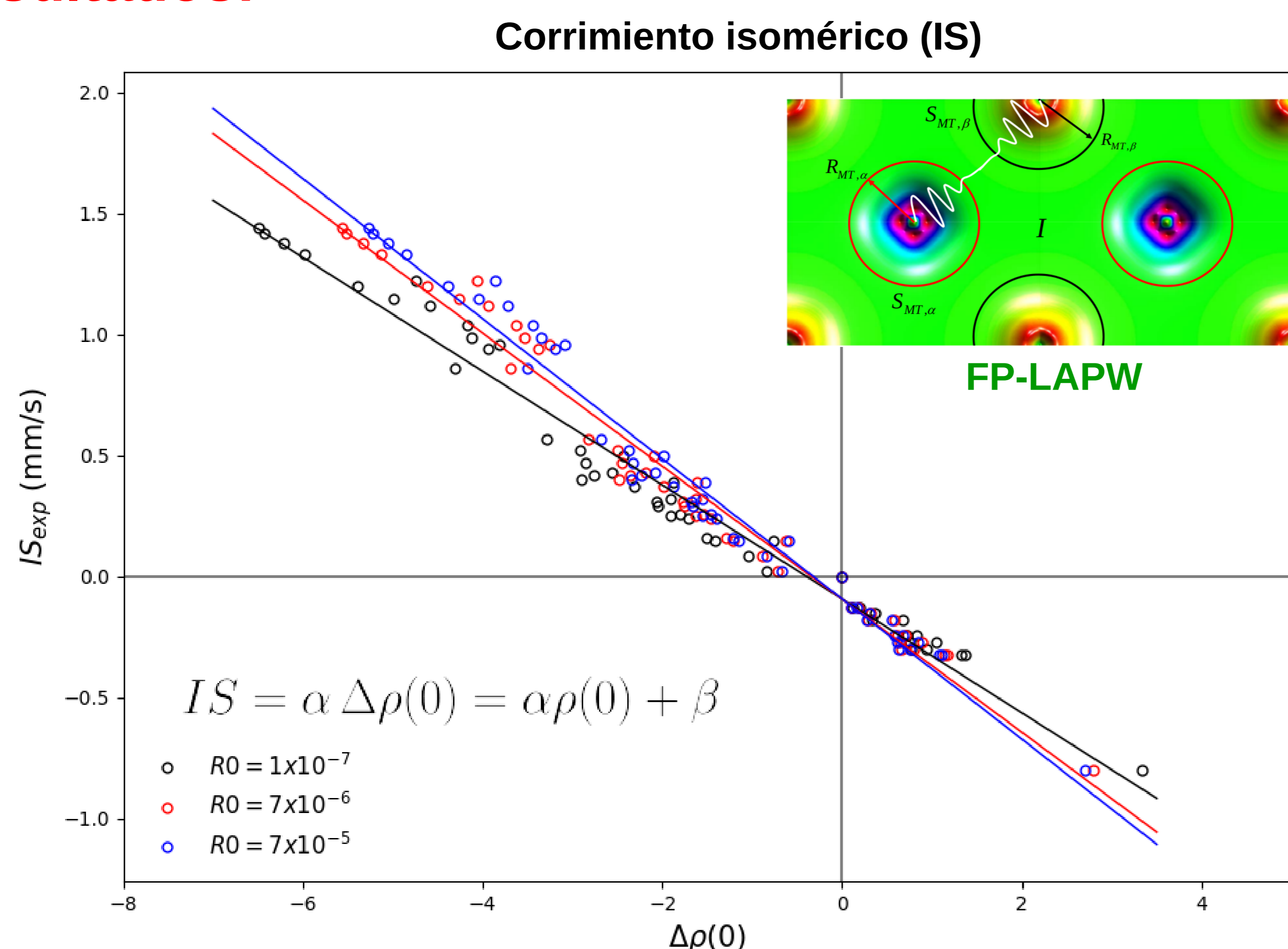


Figura 1: Relación entre la diferencia de las densidades de carga cercano al núcleo del átomo de Fe y el corrimiento isomérico experimental.

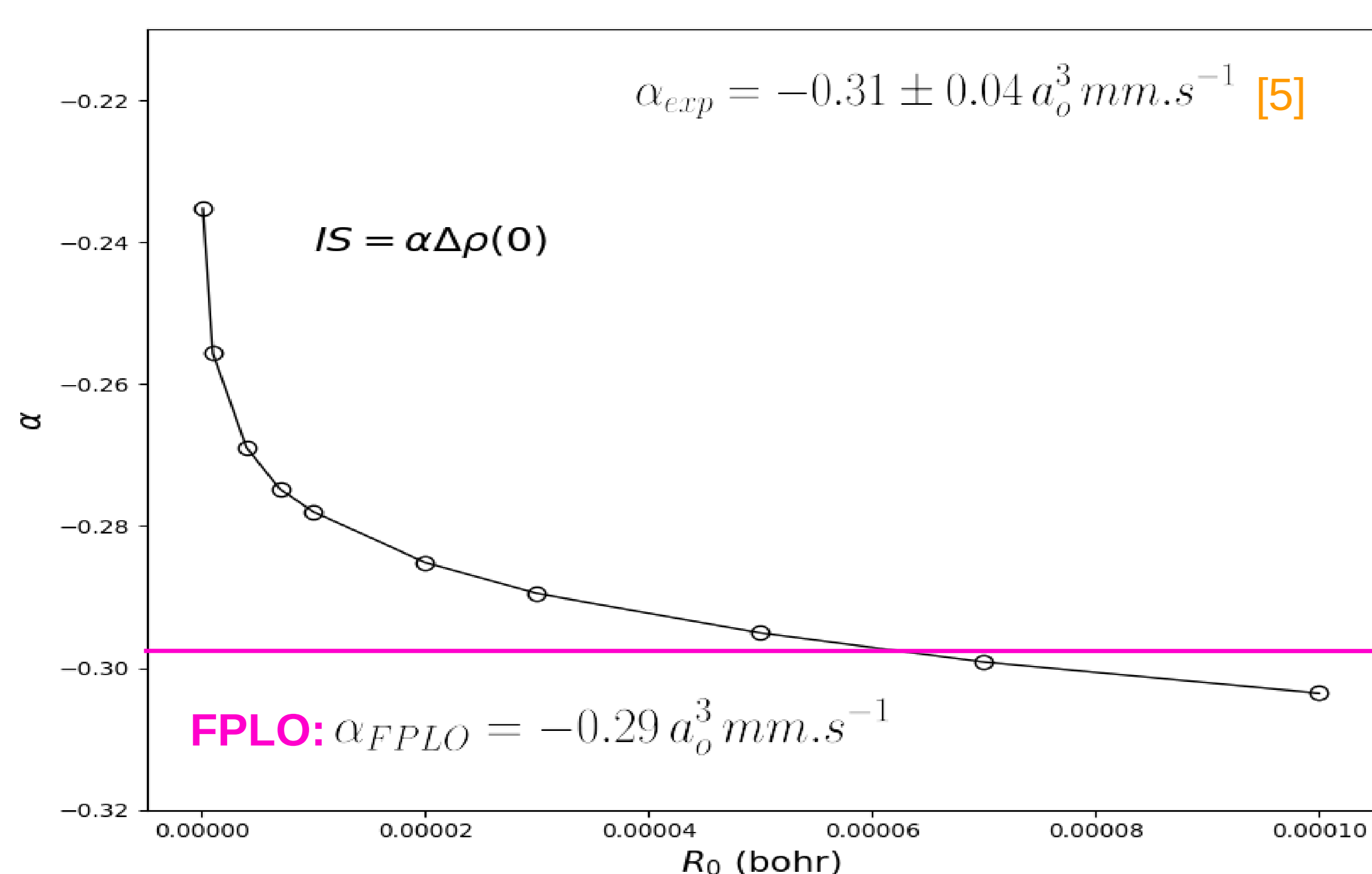


Figura 2: Variación de la constante "alpha" con el valor de R0.

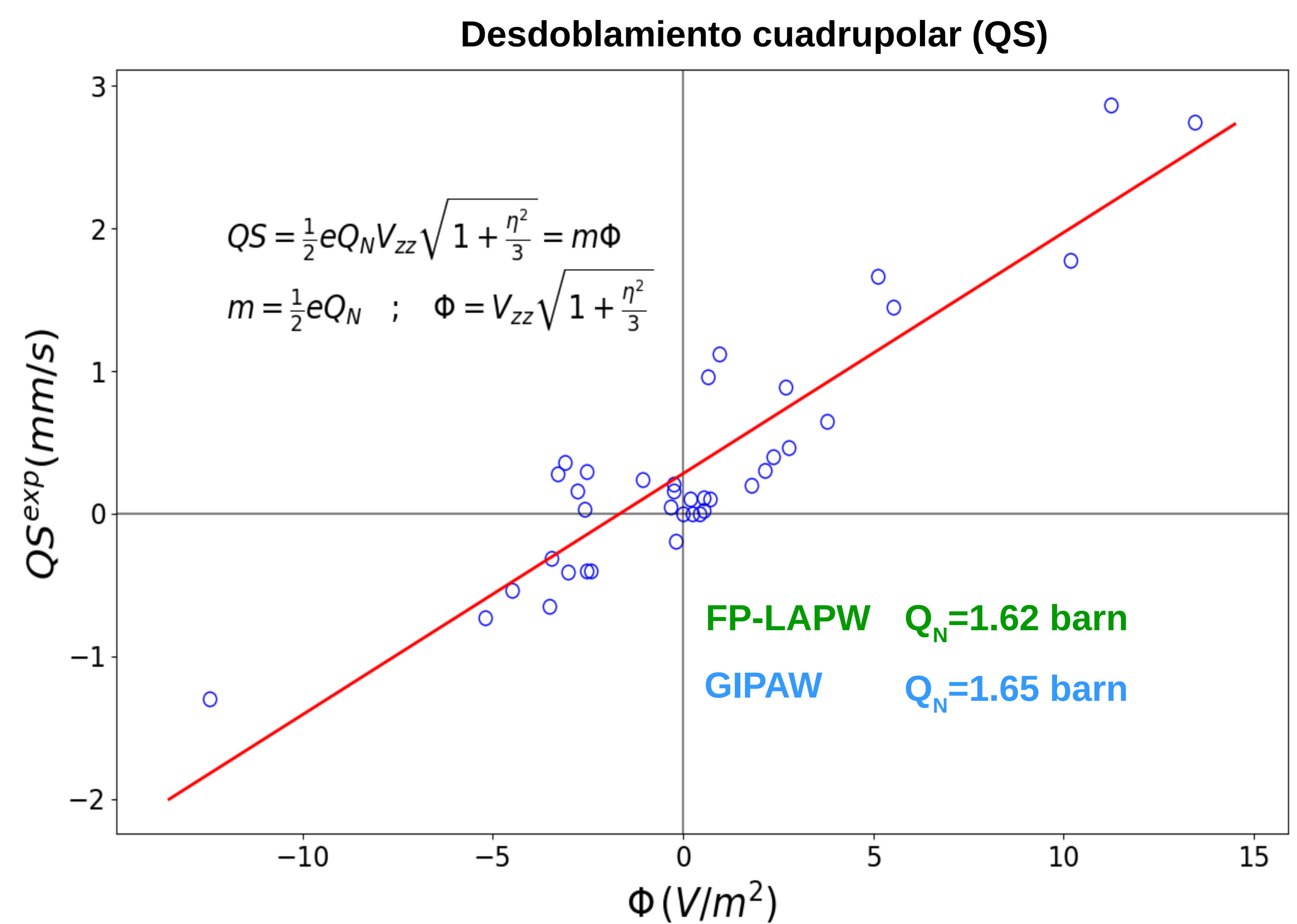


Figura 3: Correlación entre el gradiente de campo eléctrico (DFT) y el desdoblamiento cuadrupolar (experimental).

Conclusiones:

- ◆ Es importante hacer una calibración entre datos experimentales y teóricos del corrimiento isomérico para poder predecir las propiedades hiperfinas de nuevos compuestos basados en Fe.
- ◆ El modelo nuclear de tamaño finito (FPLO) describe mejor la densidad electrónica cercano al núcleo en comparación al modelo de carga puntual (FP-LAPW) el cual depende de la distancia.
- ◆ Se determinó el momento cuadrupolar nuclear del ^{57}Fe usando dos diferentes métodos, FP-LAPW y GIPAW, este último es un método relativamente nuevo basado en el método de pseudopotenciales, con una eficiencia semejante al tradicional método FP-LAPW.

Proyecto Acelerado de Computo 2019 (IPAC – TUPAC HPC), SNCAD – MinCyT.

Referencias:

- [1] DOI: 10.1063/1.5143061
[2] DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502, DOI: 10.1063/5.0005082
[3] DOI: 10.1103/PhysRevB.59.1743, DOI: 10.1103/PhysRevB.60.14035
[4] DOI: 10.1103/PhysRevB.54.16533
[5] DOI: 10.1039/B918655G