

Phase separation



4^o problema físico más importante de la década según la American Physical Society (APS)

Cesga

A. Rodríguez

A. Gómez

Departamento de Química Física

F. Rivadulla

J. Rivas

Instituto Investigaciones Tecnológicas

A. Piñeiro

V. Pardo

D. Baldomir

Aplicaciones tecnológicas de Óxidos de Metales de transición:

- Almacenamiento de carga eléctrica
- Transporte electrónico
- Ayudar a la optimización de la tecnología de las baterías (móviles, ordenadores portátiles)
- Sensores magnéticos

Phase separation



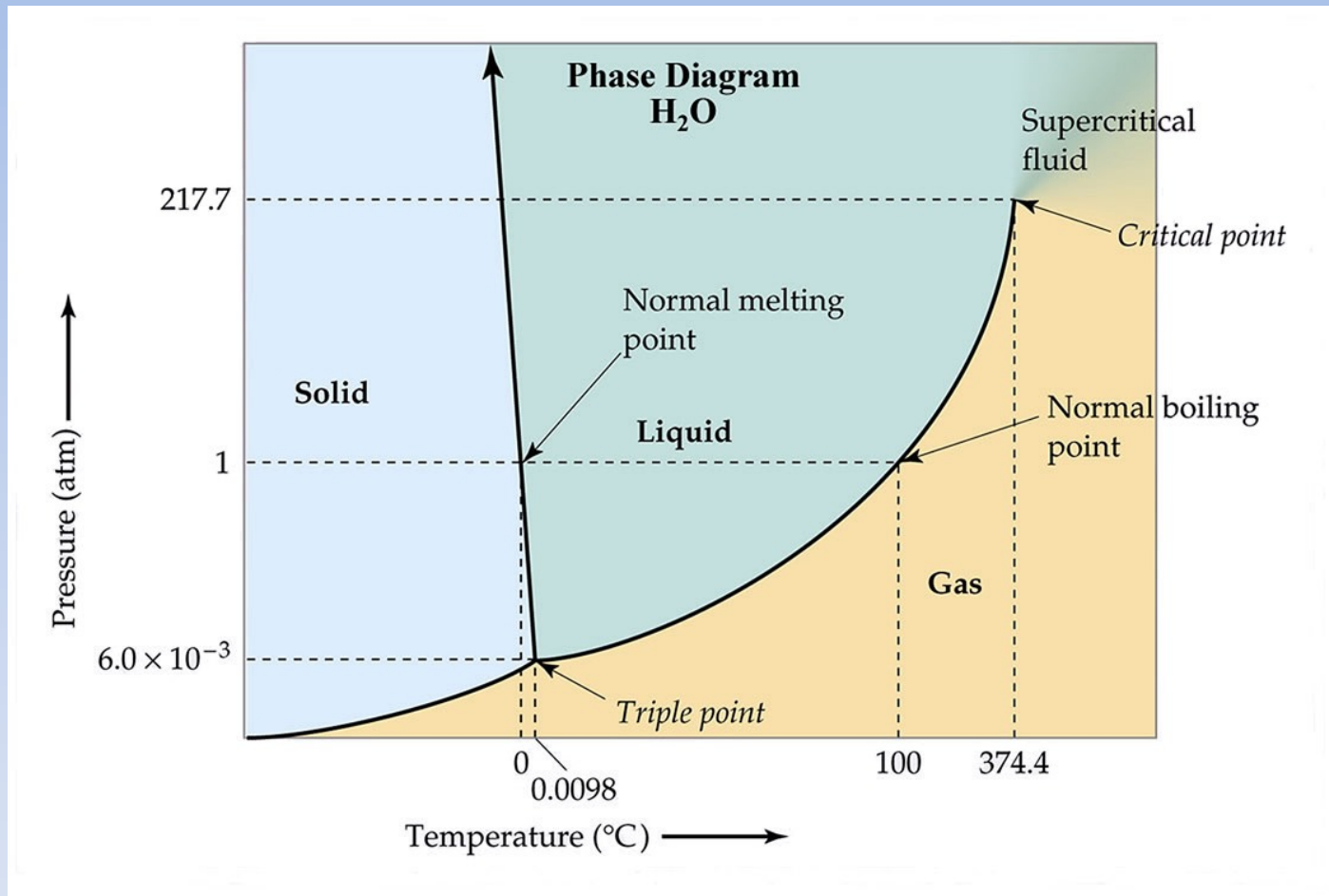
Sólido

Líquido

Gas

Fases del agua

Diagrama de fases del agua



Separación de fases electrónica

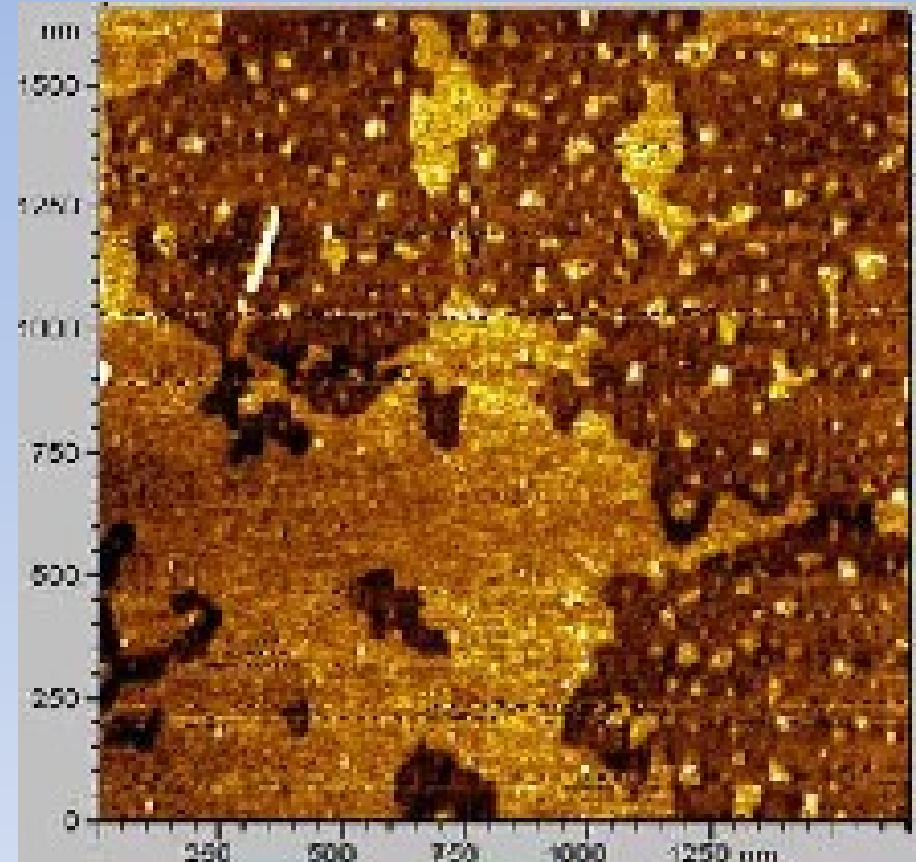
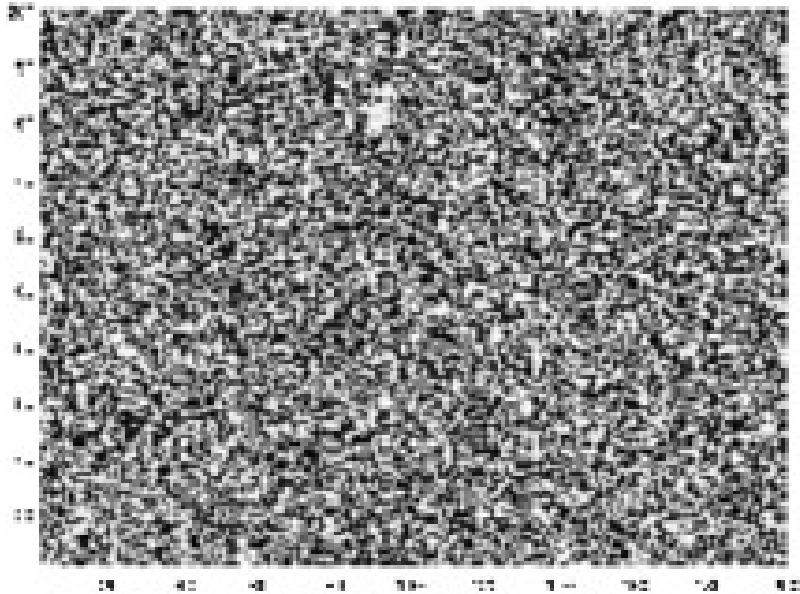
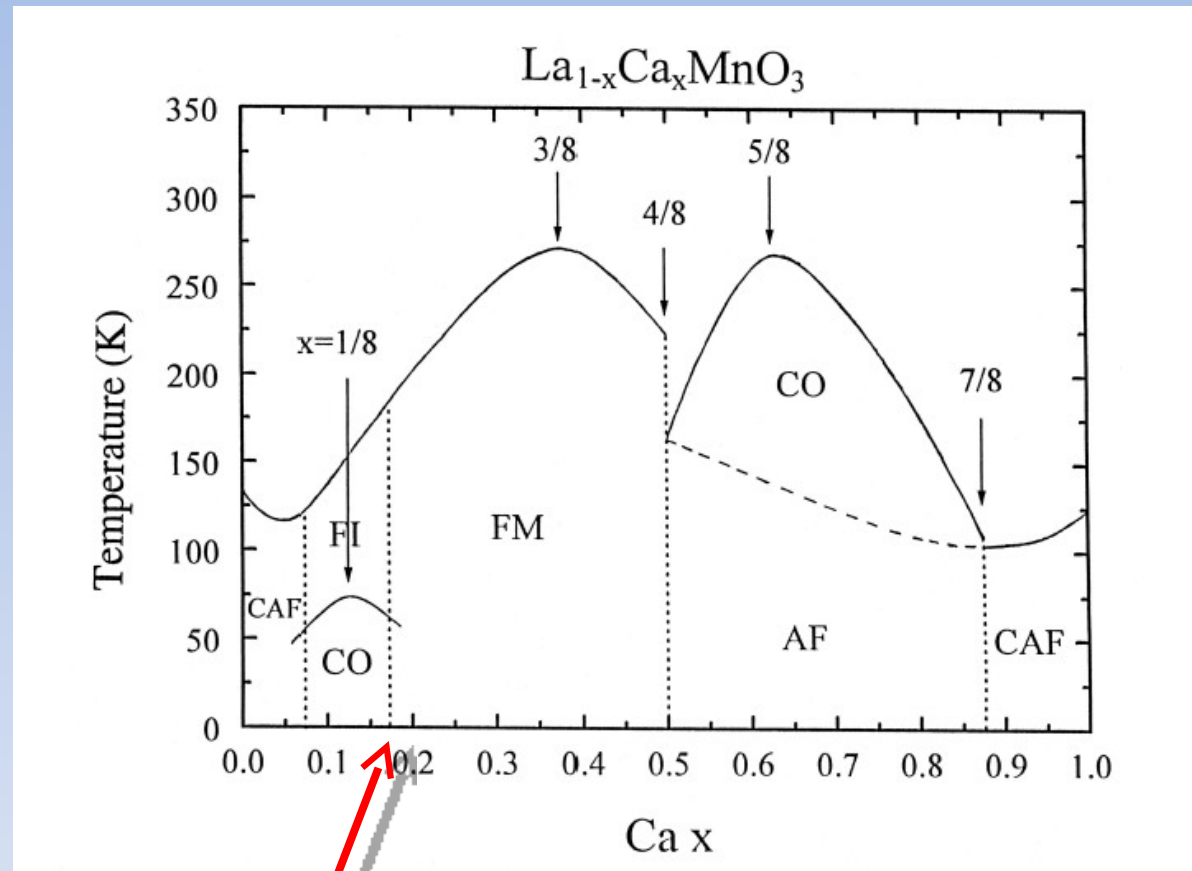
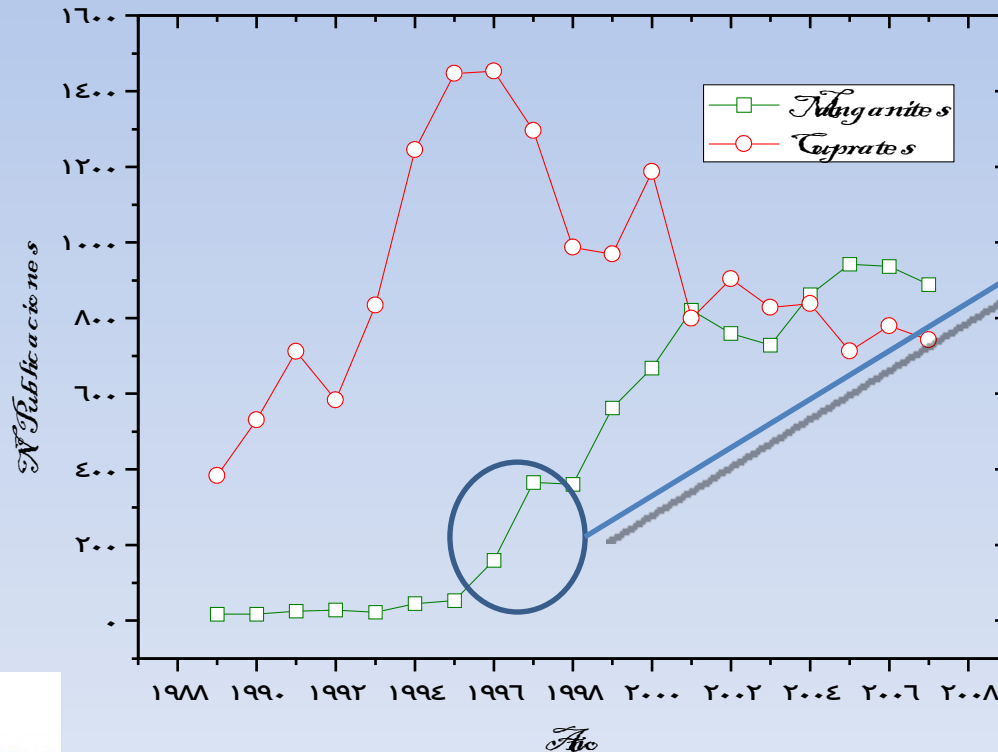




Diagrama de fases (S.-W. Cheong and H.Y. Hwang: Ferromagnetism vs Charge/Orbital Ordering in Mixed-Valent Manganites, in Colossal Magnetoresistance Oxides, edited by Y. Tokura (Gordon & Breach, Monographs in Condensed Matter Science, London 1999))

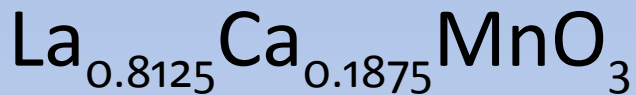






Número de papers en los últimos años con las palabras “manganite” o “manganites” en el abstract comparado con los que tienen las palabras “cuprate” o “cuprates”.
 Información obtenida online a través del Inspec



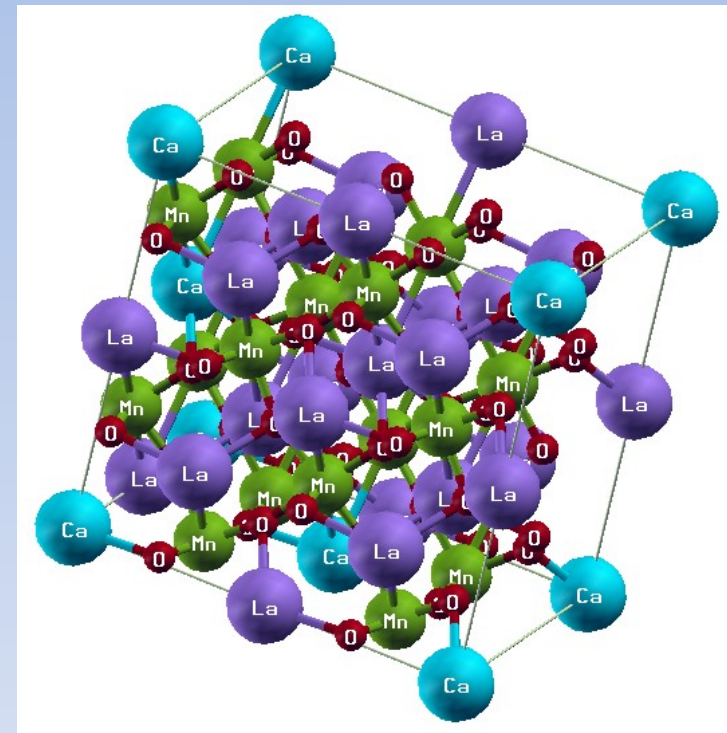
Debido al descubrimiento de la CMR (bases discos duros). Relacionado con el descubrimiento de la GMR (1988) por Albert Fert y Peter Grünberg, **Nobel de física de 2007**.

Introducimos la estructura a dopado $x=0.1875$



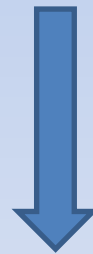
Átomos	Ca	La	Mn	O
				
número	3	13	16	48

22190 e-!!



Homogeneidad
química

- Para hacer el trabajo necesitaríamos dedicar un cluster típico de 20 máquinas durante **más de un año**
- Clusters típicos no disponen de los suficientes recursos de memoria



Cálculo inviable!!!

Gasto computacional →

FINISTERRAE

24 nodos: 16 cores

384 cores

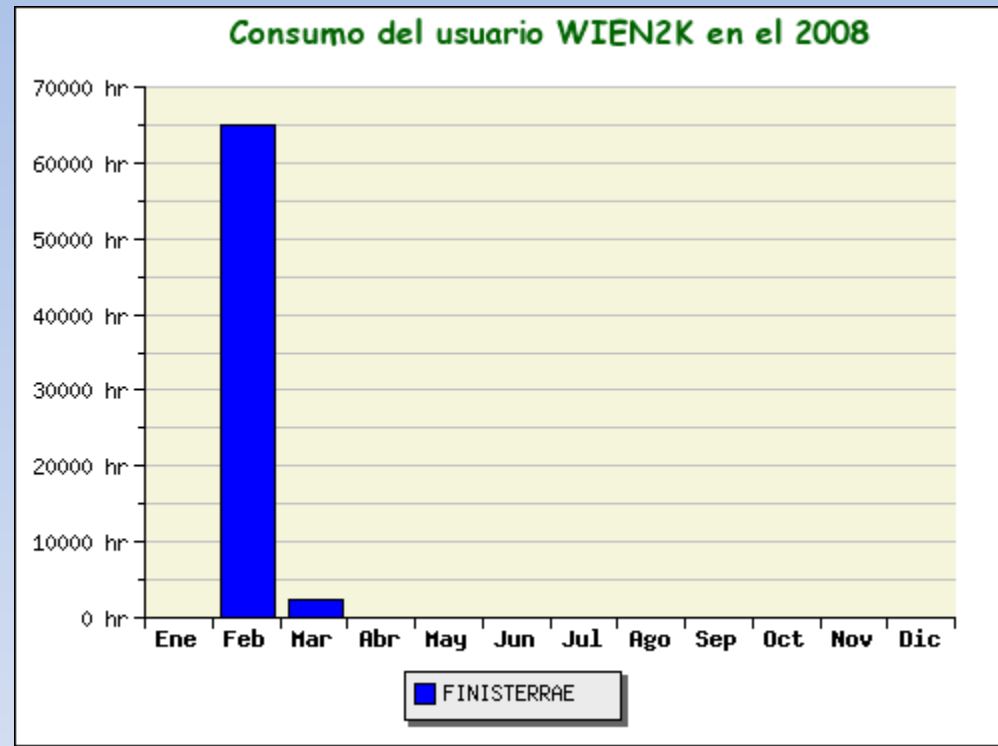
67.482 hr. y 33 min.

Consumo de memoria:

~2-4 GB por estructura

Espacio en disco:

~7-15 GB por estructura



Método computacional

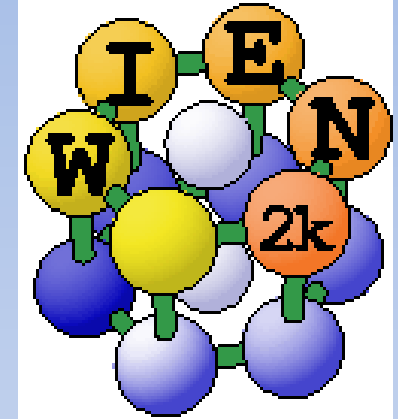
- All-electron scheme (no basta Dinámica molecular) Necesidad de mucha precisión
- DFT (Teoría del funcional de la densidad) **Nobel en química para Walter Kohn, 1998. Método más preciso para sólidos**



- Resolución de problemas de física de materiales, estado sólido, química cuántica, química física, etc

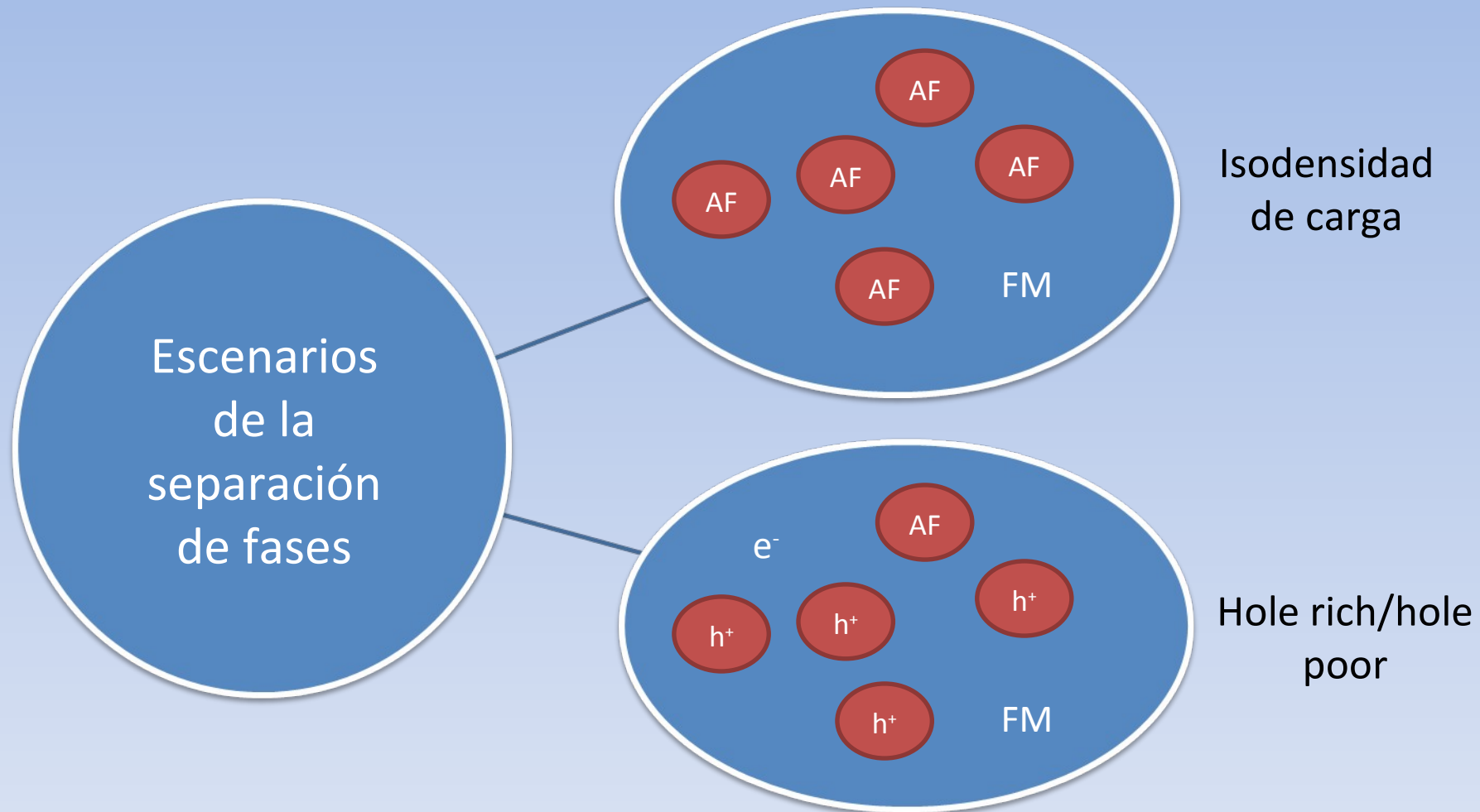
Programa utilizado

- Más de 1200 usuarios en todo el mundo (incluidas empresas)
- Aplicable a multitud de sistemas diferentes: superficies, semiconductores, metales, materiales altamente correlacionados: Sólidos cristalinos



P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Vienna University of Technology, Austria, 2001.

Phase separation



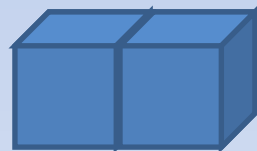
Resolución fases separadas: probamos varias configuraciones.

FM:  AF: 

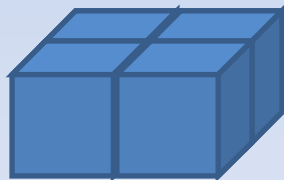
Creamos varias superestructuras partiendo de la celda primitiva (1x1x1)



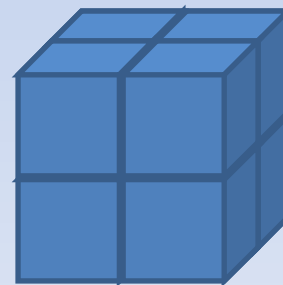
2x1x1



2x2x1



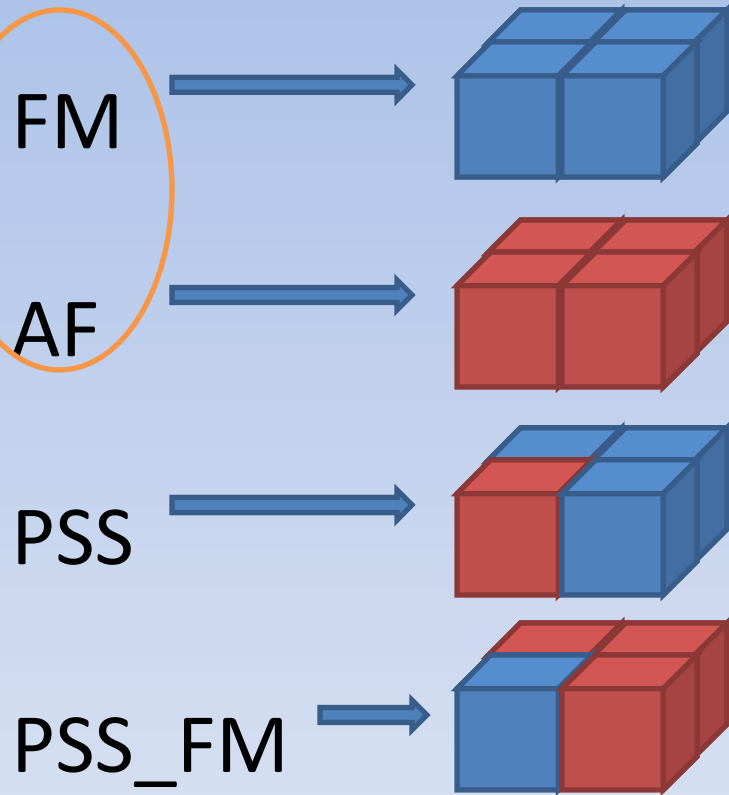
2x2x2



Phase separation

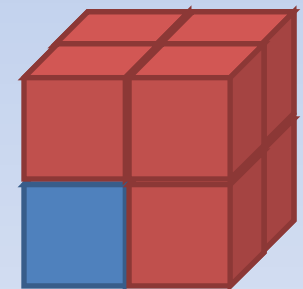
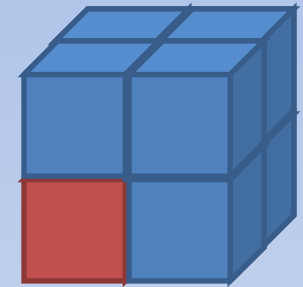
Configuraciones calculadas

 = FM  = AF

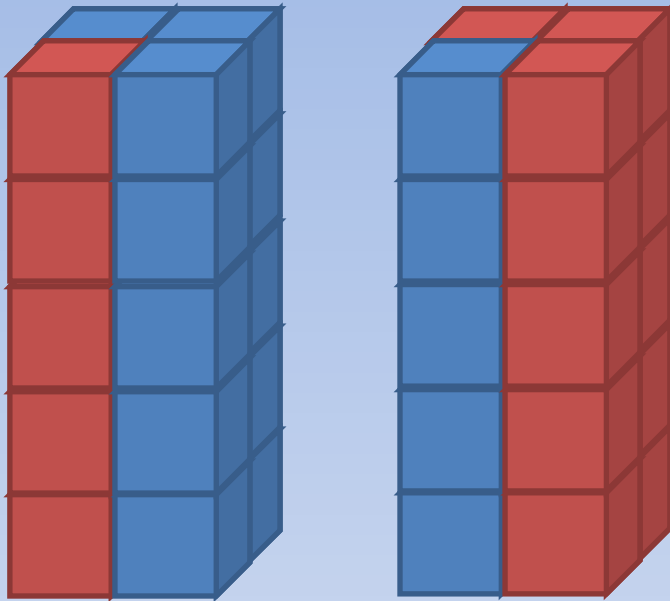


PSS_big

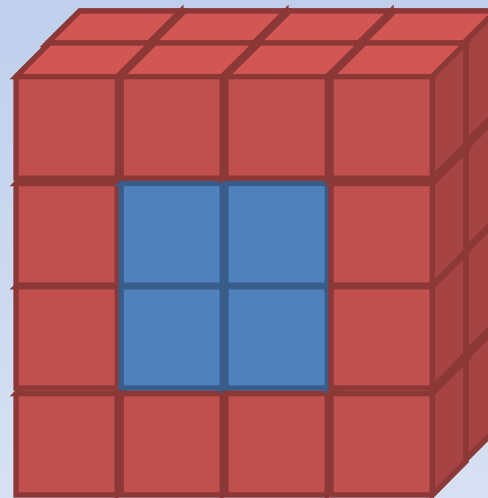
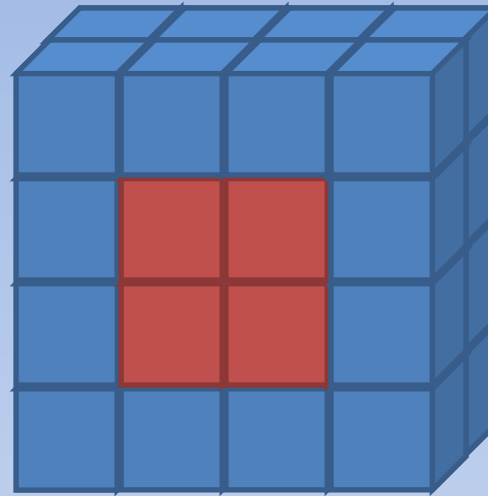
PSS_FM_big



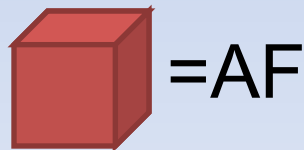
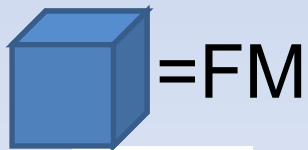
Phase separation



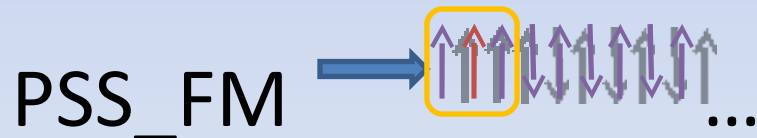
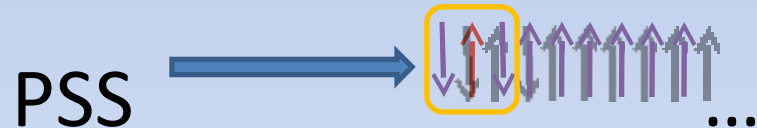
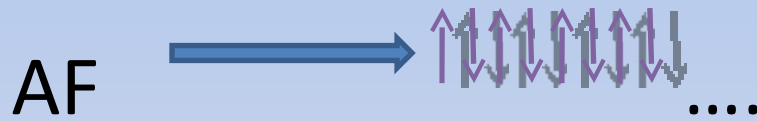
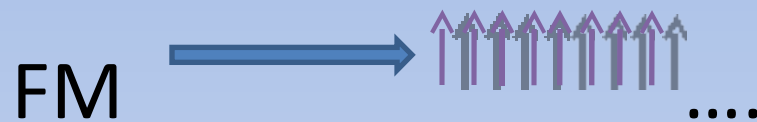
Cadenas Unidimensionales
 3170 e⁻



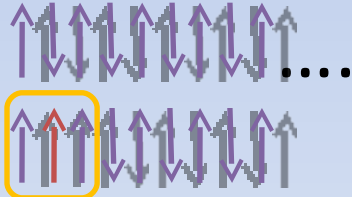
Caso real
 6340 e⁻



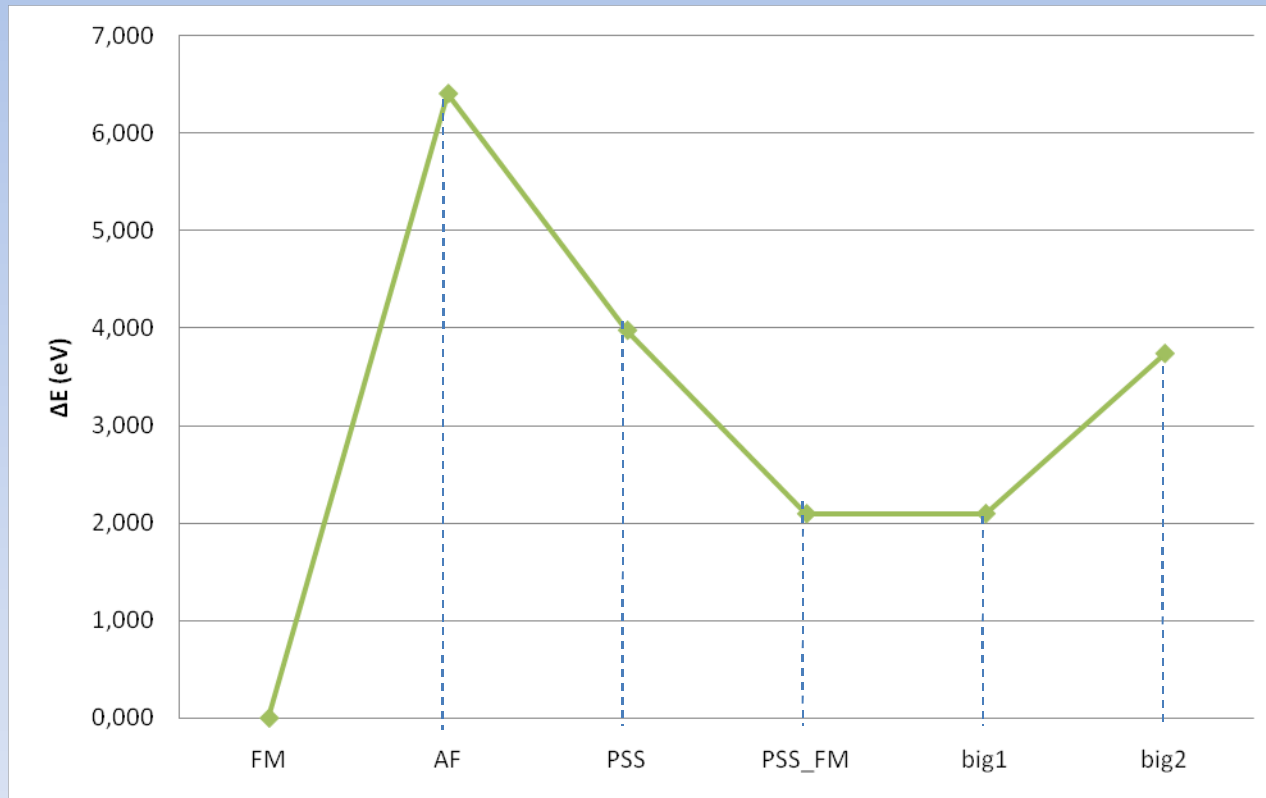
Configuraciones (imagen 2D) $\uparrow\uparrow\uparrow = \text{FM}$ $\uparrow\downarrow = \text{AF}$



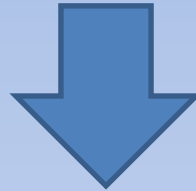
PSS_big \rightarrow 

PSS_FM_big \rightarrow 

Estabilidad

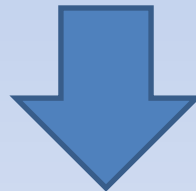


FM es la fase *más estable* : ~ 131 meV/Mn (~ 1520 K)



Separación de fases magnética solamente

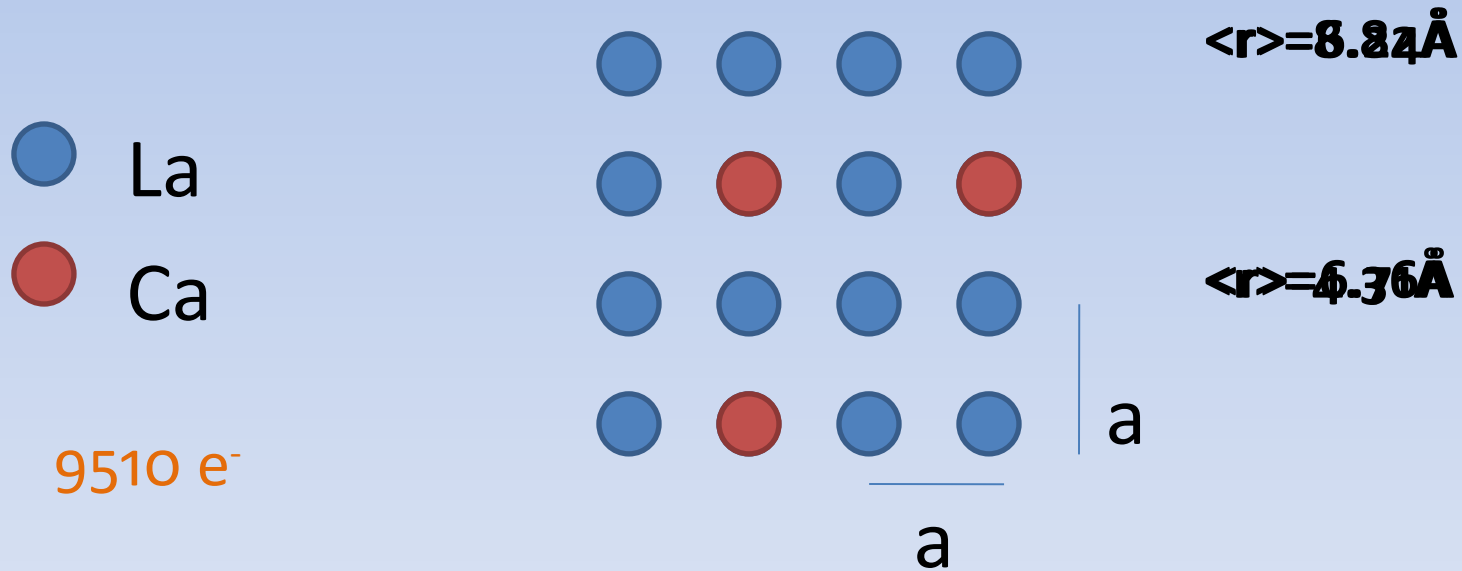
NO ES ESTABLE



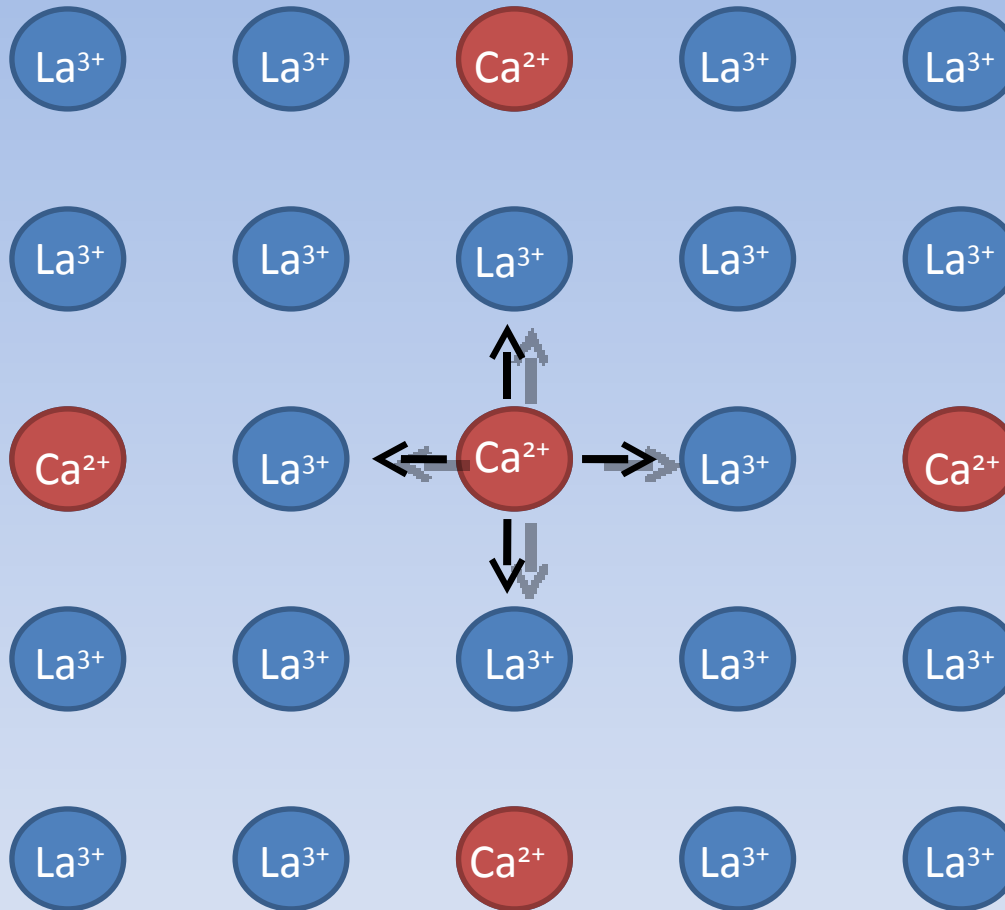
Probamos inhomogeneidades químicas a escala
nanométrica

Probaremos varias configuraciones químicas.

Variable: distancias promedio entre Calcio en la red $\longrightarrow \langle r \rangle = (\sum r_i) / 3 \longrightarrow 3 \text{ Ca}$

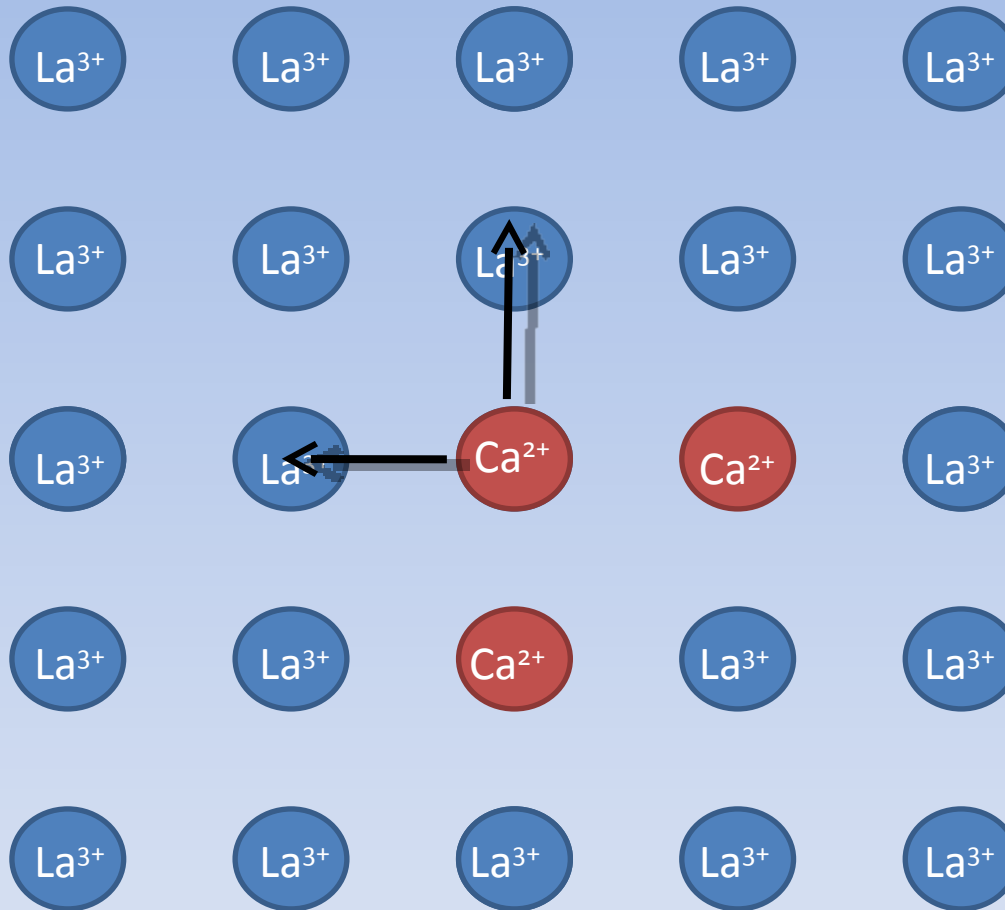


Phase separation



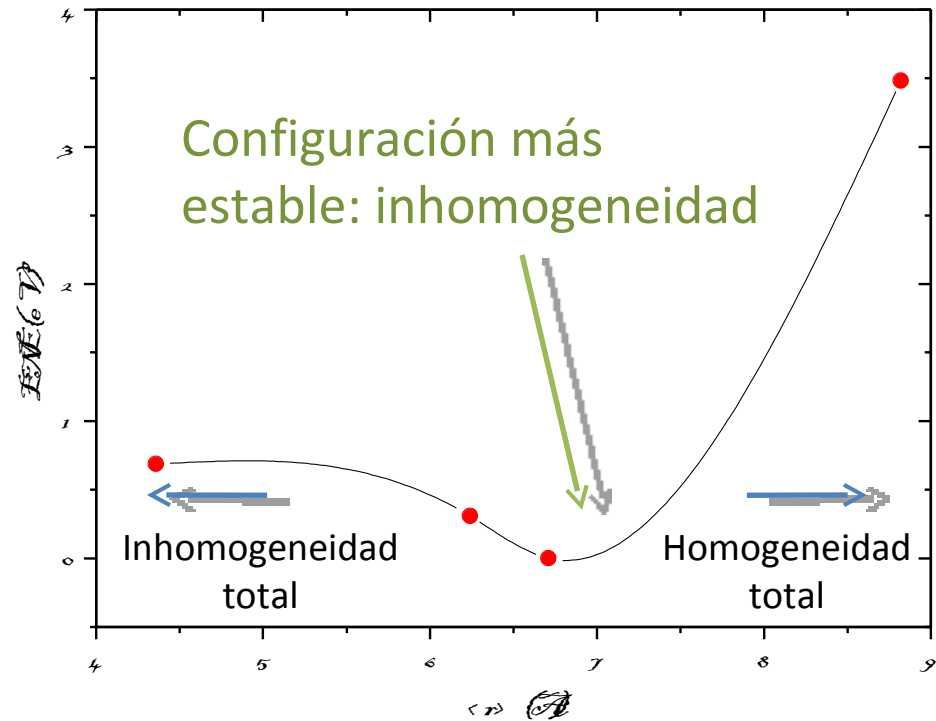
Homogeneidad

Phase separation



Inhomogeneidad

Energía
normalizada a la
configuración
más estable
frente al radio
promedio entre
las impurezas de
calcio



Conclusiones:

- Separación de fases magnéticas por sí sola no basta para explicar el problema
- Existe un fenómeno químico (concentraciones locales de dopado) que sí lo explica
- Esto implica creación de zonas ricas en huecos y en electrones dentro del cristal (homogeneidad no sirve)



Phase separation

Agradecimientos



MAT 2006-10027

“Estudio de la separación de fases en óxidos magnéticos combinando teoría y experimento”

- Sección Magnetismo Teórico y Computacional del Laboratorio de Sistemas del Instituto de Investigaciones Tecnológicas (J.E. Arias, J. Castro, M. Pereiro, J. Botana, D. Serantes)

