

Descomposición espinodal en Cu-Al-Mn: simulación computacional

Facundo Arriaga^{a,b}, Diego Velázquez^{a,b}, Fernando Lanzini*^{a,b}

^a Universidad Nacional del Centro de la Prov. de Bs. As. (UNCPBA), Facultad de Cs. Exactas, Instituto de Física de Materiales Tandil (IFIMAT), Tandil, Bs. As., Argentina.

^b Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), CABA, Argentina.

* flanzini@ifimat.exa.unicen.edu.ar

La fase β de la aleación ternaria Cu-Al-Mn posee interés tecnológico debido a sus propiedades de memoria de forma, relacionada con una transformación martensítica que ocurre a bajas temperaturas. Posee además propiedades magnéticas asociadas con momentos localizados en los átomos Mn. La región de estabilidad de la fase β en el diagrama de fases se centra en la línea de composiciones $\text{Cu}_3\text{Al} - \text{Cu}_2\text{AlMn}$ (que corresponde a una concentración electrónica constante $e/a=1.5$). La transformación martensítica se observa para aleaciones con bajo contenido de Mn, mientras que los fenómenos magnéticos son relevantes para aleaciones más ricas en Mn y composiciones cercanas a la de Heusler, Cu_2AlMn . A composiciones intermedias se ha observado experimentalmente que ocurre una separación en dos fases a bajas temperaturas; una de estas fases tiene composición cercana a Cu_3Al y es paramagnética, mientras que la otra es similar a Cu_2AlMn y presenta orden ferromagnético [1]. En lo que refiere a la distribución atómica, ambas fases son ordenadas en primeros y segundos vecinos, configurando superestructuras del tipo L2_1 (DO_3).

La región de dos fases ha sido estudiada experimentalmente por diversos autores [2, 3]. Se ha sugerido que las interacciones magnéticas entre los átomos de Mn pueden ser una de las razones que determinan esta separación. Previamente, se han realizado modelos para describir los procesos de orden atómico y magnético a altas temperaturas [4], así como para estudiar la separación de fases promovida por magnetismo en sistemas genéricos [5].

En el presente trabajo, se implementa un modelo para describir la separación de fases DO_3 (paramagnética) + L2_1 (ferromagnética) en β Cu-Al-Mn, utilizando hamiltonianos tipo Ising y simulaciones de Montecarlo en el Conjunto Semi Gran Canónico ($N, \{\Delta\mu_i\}, P, T$). Se determina un conjunto de parámetros energéticos que reproducen la región de coexistencia de fases a bajas temperaturas para composiciones cercanas a la línea $\text{Cu}_3\text{Al} - \text{Cu}_2\text{AlMn}$. En el modelo obtenido, las interacciones magnéticas son responsables de la separación de las fases.

[1] M. Bouchard, G. Thomas. *Acta Metall.* 23 (12) (1975) 1485–1500.

[2] J. Marcos, Ll. Mañosa, A. Planes, R. Romero, M. L. Castro. *Phil. Mag.* 84.1 (2004): 45-90.

[3] D. Velázquez, M.A.E. Chaparro, H.N. Bohnel, R. Romero, F. Lanzini. *Mat. Chem. Phys.* 246 (2020): 122793.

[4] A. Alés, F. Lanzini. *Model. Simul. Mat. Sci. Eng.* 22.8 (2014): 085007.

[5] J. Marcos, E. Vives, T. Castán. *Phys.Rev. B* 63 (22) (2001) 224418.