

COLOQUIO DE LICENCIATURA EN FÍSICA

Altas presiones: validación de la información estructural a partir de medidas experimentales con resultados teóricos

Henry Mauricio Ortiz Salamanca

Universidad Distrital Francisco José de Caldas

Jueves 03 de Marzo 2016 3:30 p.m. Macarena A Sala 413



UNIVERSIDAD DISTRITAL
FRANCISCO JOSÉ DE CALDAS

Invita y Organiza: Licenciatura en Física

RESUMEN: Las medidas experimentales en altas presiones son realizadas dentro de celdas de presión (DAC). Estos dispositivos están formados por dos diamantes (yuxtapuestos) los cuales ejercen una fuerza constante en el interior de ella. Allí mismo, se introduce un medio transmisor de la presión, que garantiza mediciones bajo condiciones hidrostáticas y un sensor de presión. En la DAC se realizan medidas de XRD y de espectroscopia Raman que permite establecer transiciones de fase sólido-sólido al aumentar la presión. Estas dos técnicas permiten validar la estructura cristalina y el grupo de simetría asociado. Los datos de XRD son ajustados a partir de los parámetros de red de la celda, el parámetro libre (posición de Wychoff) y el volumen de la celda. Con la información cristalográfica obtenida de la XRD se realizan cálculos teóricos (en el modelo de DFT), de primeros principios, de relajación estructural determinando de mínimo volumen, asociado al valor de mínima energía de la estructura. Luego, se realizan cálculos de dinámica de la red que permiten obtener las frecuencias de vibración fonónicas de la celda primitiva. Con estos resultados experimentales/teóricos se valida la estructura cristalográfica y las propiedades vibracionales del compuesto. Es por ello que en el In_2O_3 hemos determinado las fases de alta presión de tal forma que las caracterizamos estructuralmente y vibracionalmente. Como resultado final, el proceso de aumentar la presión en el óxido de indio se sintetizó la fase corindon no antes observada y cerrando el ciclo de fases del material.