



Fecha de presentación del Informe: Día Mes Año

Datos generales del Proyecto

Código del proyecto: CI 7932			
Título del proyecto: Estudio Experimental y Computacional de sistemas Magnéticos nanoestructurados y nanoparticulados y el efecto del Ni en las propiedades de imanes permanentes			
Facultad o Instituto Académico: Facultad de Ciencias Naturales y Exactas			
Departamento o Escuela: Departamento de Física			
Grupo (s) de investigación: Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase			
Investigadores ¹	Nombre	Tiempo asignado	Tiempo dedicado
Investigador Principal	William Richard Aguirre Contreras	5 h/s	5 h/s
Coinvestigadores	Ligia Edith Zamora Alfonso	5 h/s	5 h/s
	Germán Antonio Pérez Alcázar	5 h/s	5 h/s
	Jesús Anselmo Tabares Giraldo	5 h/s	5 h/s
	<i>Estudiante de Maestría</i> Ana María Schonhobel Sánchez	18 h/s	18 h/s
Otros participantes	<i>Estudiante de Doctorado</i> Juan Sebastián Trujillo Hernández	10 h/s	10 h/s
	<i>Estudiante de Pregrado</i> Diego Fernando Andrade Melo	10 h/s	10 h/s

¹ Todas las personas relacionadas en el informe y que participen en el proyecto deben haber suscrito el acta de propiedad intelectual de acuerdo con los formatos establecidos.

1. Resumen:

Con programación en C++ simulamos sistemas de dos nanopartículas (NPs) esféricas tipo *núcleo/coraza* con estructura *bcc*, con espines interactuando por intercambio directo (ferro en el núcleo, y antiferro en la coraza), con Hamiltoniano de Ising $\frac{1}{2}$ y con las NPS interactuando por interacción dipolar magnética con un acople de intensidad g ($g = 0, 1 \times 10^{-6}, 5 \times 10^{-6}, 1 \times 10^{-5}, 5 \times 10^{-5}, \dots 5 \times 10^{-2}$ y 1×10^{-1}). Variando los radios externos, desde $R_e=1$ hasta 5 parámetros de red y diferentes espesores, por método de Monte Carlo (con dinámica de Metropolis con flipeo por espín y por nanopartícula) se enfriaron los sistemas en campo nulo (ZFC) y se obtuvieron sus energías, magnetizaciones, capacidades caloríficas, susceptibilidades y factores de Edward Anderson. Los resultados fueron analizados con programación hecha en VBasic (Excel®) y se encontró que los sistemas presentan a temperaturas altas transiciones críticas (Curie, Neel o Curie/Neel) y a temperaturas bajas transiciones superpara-superferro a una “temperatura de bloqueo” (T_B); esta temperatura T_B crece con el factor de acople dipolar g y, a diferencia de la reportado en la literatura, no depende del tiempo τ de la medida, este resultado fue verificado al solucionar en forma exacta los correspondientes sistemas de nanopartículas de 15 átomos. Este estudio sirvió como tesis de maestría de Ana María Schonhobel.

Sebastián Trujillo, doctorando dirigido por el profesor Jesús Tabares (investigador de este proyecto), por fundición de arco aleó muestras de $\text{Nd}_{16}(\text{Fe}_{76-x}\text{Ni}_x)\text{B}_8$ ($x = 0, 10, 20$ y 25) y las trató térmicamente a 1073 K durante 30 min. Los DRX de estas muestras microparticuladas mostraron que para $x = 10$ y 20 prevalece una fase magnética dura $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ con fases minoritarias $\alpha\text{-Fe}$, $\text{Nd}_{1.1}\text{Fe}_4\text{B}_4$ (paramagnética). Se encontró una fase NdNi_2 que aumenta al crecer la concentración de Ni. Posteriormente, por molienda mecánica asistida por surfactante se obtuvieron muestras nanoparticuladas. En ambos tipos de muestras el tamaño de cristalito de la fase dura no cambia con el contenido de Ni, pero los granos en los micropulvos son oblato mientras que en los nanopulvos son simétricos ($\phi \cong 35$ nm). Los espectros Mössbauer fueron ajustados con sextetes (seis para el $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ y uno para el $\alpha\text{-Fe}$) y un doblete ($\text{Nd}_{1.1}\text{Fe}_4\text{B}_4$). Para las muestras micro y nano particuladas los ciclos de histéresis presentan un carácter magnéticamente duro y el campo magnético hiperfino medio disminuye con el contenido de Ni. En todas las concentraciones H_c y M_r/M_s son mayor para los nanopulvos que para los

micropolvos. Los nanopolvos con $x = 10$ alcanzaron valores de $H_c = 2$ kOe y $M_r/M_s = 0,54$. Los diagramas de Henkel mostraron que la interacción predominante en los micropolvos es la dipolar, mientras que en los nanopolvos lo es la interacción de intercambio ferromagnética (favoreciéndose la magnetización).

Para analizar curvas de histéresis magnética y obtener diagramas Henkel por Thamm-Hesse se escribió un programa en Visual Basic ejecutables sobre Excel®.

Con miras a desarrollar imanes permanentes tipo blando/duro nanoparticulados, se estudiaron aleaciones $Fe_{1-x}Al_x$ con baja concentración de aluminio ($x = n/32$, $n = 1, 2, \dots, 6$) y mediante molienda asistida por surfactante se obtuvieron nanopartículas de esta aleación.

2. Síntesis del proyecto:

Tema: Estudio computacional de la respuesta magnética de nanopartículas esféricas núcleo/coraza con interacción de intercambio entre espines e interacción dipolar entre partículas y comportamiento experimental del $Nd_{16}(Fe_{76-x}Ni_x)B_8$.

Objetivos:

General

Realizar un estudio sistemático del efecto de la sustitución de Fe por Ni, en las propiedades magnéticas, estructurales, mecánicas y de resistencia a la oxidación de nanopartículas de aleaciones tipo $Nd_{16}(Fe_{76-x}Ni_x)B_8$ (para $x < 20$) preparadas por fusión y correlacionar los resultados con estudios computacionales de sistemas *core-shell*.

Específicos

1. Fundir muestras del tipo $Nd_{16}(Fe_{76-x}Ni_x)B_8$, con $x < 20$, para posteriormente ser tratadas térmicamente. Inicialmente serán tratadas a $1000^\circ C$ durante 3 días, ya que previamente se observó que este tratamiento induce la fase dura con tamaños nanométricos.
2. Preparar estas mismas composiciones por precipitación mediante una ruta química a partir

de la estequiometría entre cloruros de Nd, de Fe, de B y de Ni en solventes de hexano y etanol, para luego precipitar nanopartículas por calentamiento.

3. Caracterizar estructuralmente por DRX (difracción de rayos-x y SEM (microscopía electrónica de barrido) las muestras producidas. Los difractogramas se refinarán por el método Rietveld.
4. Medir las muestras por espectrometría Mössbauer a temperatura ambiente y a bajas temperaturas y ajustar sus espectros. En caso necesario se harán medidas con aplicación de campo.
5. Realizar medidas magnéticas (susceptibilidad magnética ac, ciclos de histéresis y magnetización FC (enfriando con campo) y ZFC (enfriando sin campo).
6. Se harán ensayos de microdureza en las diferentes muestras preparadas. Para el caso de los polvos nanoparticulados serán sinterizados antes de estos ensayos.
7. Muestras debidamente pesadas se someterán a diferentes tratamientos térmicos en la atmósfera ambiental. Se estudiará en ellas la ganancia de peso y por DRX y Mössbauer, las diferentes fases inducidas.
8. Desarrollar los algoritmos capaces de construir dos NPs virtuales con estructura bcc, de forma cúbica, esférica y cilíndrica.
9. Implementar en el código Monte Carlo desarrollado en el Grupo de Metalurgia y Transiciones de Fase (GMTF) los cambios necesarios para establecer la interacción dipolar de las dos NPs.
10. Usar las simulaciones computacionales para obtener el comportamiento de la energía, la magnetización, el calor específico, la susceptibilidad y el factor de Edward-Anderson como función de la temperatura.
11. Correlacionar las medidas magnéticas y estructurales, con las mecánicas y del proceso de oxidación, para dilucidar el efecto del Ni en estas propiedades.
12. Contrastar los resultados experimentales magnéticos y los de simulación, elaborar publicaciones y rendir informes.

Metodología Desarrollada.

La metodología usada difiere ligeramente de la propuesta por obvias razones.

1. Revisión bibliográfica permanente por parte de todos los participantes.
2. Antes de desembolsarse el dinero para este proyecto, se inició con el análisis computacional desarrollando un algoritmo capaz de construir dos nanopartículas esféricas tipo núcleo/coraza con estructuras *bcc* y se implementó en el lenguaje de programación C.
3. Se verificó que los cambios realizados en el Software reproducen las soluciones conocidas del ferromagneto y antiferromagneto con estructura *bcc* y condiciones de contorno periódicas, cuando los radios de las esferas sobrepasan los tamaños de las matrices asociadas.
4. Se optimizaron los código de dos NPs homogéneas esféricas y se realizarán los barridos Monte Carlo con solo interacciones ferromagnéticas y posteriormente con solo interacciones antiferromagnéticas.
5. Se introdujo en el código el acople dipolar entre las NPs esféricas. Seguido a esto se verificó que el código con acople dipolar reprodujera los resultados sin acople en casos extremos.
6. Se construyeron las dos NPs *core-shell* y se verificó que en casos extremos se reproducían los resultados previos. Después se introdujo la interacción dipolar entre las NPs variando los parámetros de acople de las interacciones tanto de intercambio como dipolar.
7. Los resultados previos fueron presentados en el Latin American Workshop on Magnetism, Magnetic Materials and their Applications LAW3M, en Buenos Aires.
8. Se observó que para valores altos de la constante de acople dipolar se requerían vectores de exponenciales (utilizados para el cálculo de probabilidad en la dinámica de Metropolis) de una dimensión muchísimo más alta a la inicialmente planeada, se hicieron las modificaciones de fondo necesarias y se puso a punto el sistema.
9. Se observó que al introducir el acople dipolar entre las dos nanopartículas los algoritmos empleados no barrían apropiadamente el espacio de fase de los sistemas, para solucionar el problema se implementó un algoritmo mixto que incluía el conocido flipeo por espín con un flipeo completo del dipolo de una nanopartícula, esta solución propuesta - en nuestro proyecto y la tesis de maestría de la estudiante Schonhobel - permitió muestrear adecuadamente el espacio de fase.
10. Desde una perspectiva analítica, se solucionó en forma exacta un sistema de dos nanopartículas, cada una de ellas con 15 átomos para los casos completamente ferro, completamente antiferro y partícula núcleo/coraza.

11. Se compararon las respuestas magnéticas del sistema solucionado en forma exacta y del correspondiente sistema simulado, esto permitió validar las respuestas de la programación desarrollada para la simulación.
12. Se obtuvieron los resultados de las simulaciones para diferentes configuraciones, variando el radio de las nanopartículas ($R = 1$ a 6), el espesor de la coraza y la constante de acople dipolar ($g = 0,1 \times 10^{-4}$ a $1,0$).
13. Para analizar los resultados computacionales por simulación (336 sistemas analizados y cada uno de ellos simulados 4 veces con diferentes semillas aleatorias, para un total de 1344 barridos) se escribieron en Visual Basic (para funcionar sobre Excel®) programas que permitían visualizar las respuestas termodinámicas ($\langle E \rangle$, $\langle M \rangle$, C_p , χ y Q_{EA}) tanto del sistema como de cada nanopartícula, realizaban la estadística, identificaban la región térmica en la que aparecían las transiciones y permitían almacenar los resultados en forma sistemática.
14. La estudiante Ana María Schonhobel presentó ante el GMTF el trabajo realizado y posteriormente sustentó públicamente su tesis de maestría.
15. Se programó en Visual Basic (sobre Excel®) un programa que permite analizar las curvas de histéresis y obtener diagramas de Henkel usando el método de Thamm-Hesse.
16. El programa de Thamm-Hesse permitió analizar otros sistemas magnéticos; entre muchos otros, fue empleado para obtener el tipo de interacciones presentes en nanopartículas de $\text{Co}_{(1-x)}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ en ferrofluidos. Este sistema era estudiado por el entonces estudiante doctoral Javier A. López del Grupo de Películas Delgadas de la Universidad del Valle y dirigido por el profesor Gustavo Zambrano.
17. En Visual Basic para ejecutar sobre Excel® se programó una interfaz amigable que permitiera generar los archivos .COO para ajustar los espectros Mössbauer con el programa MOSFIT (mospc.exe)
18. Simultáneamente con los procesos anteriores se realizó la parte experimental. Usando un horno de arco se fundieron pastillas constituidas por polvos finos de 99,9% de pureza de Nd, Fe, Ni y B mezclados en las cantidades apropiadas para producir $\text{Nd}_{16}(\text{Fe}_{76-x}\text{Ni}_x)\text{B}_8$.
19. La muestra fundida y encapsulada en cuarzo fue horneada a 1073 K durante 30 minutos y templada rápidamente en agua.

20. Usando una lima de diamante se obtuvieron polvos de la muestra y a estos polvos se les hizo molienda asistida con surfactante, usando un molino planetario y por surfactante una mezcla de hexano y ácido oléico.
21. Después de lavar con etanol los polvos molidos se caracterizaron por difracción de rayos X, espectrometría Mössbauer (MS) y magnetometría de muestra vibrante (VSM).
22. Los resultados fueron ajustados con los programas GSAS para DRX, MOSFIT para MS y se obtuvieron diagramas de Henkel usando el método de Thamm-Hesse a partir de las curvas obtenidas en el VSM.
23. Parte de los resultados experimentales fueron presentados por el profesor Jesús A. Tabares en "*The 24th International Workshop on Rare-Earth and Future Permanent Magnets and Their Applications* REPM 2016" en Alemania en el mes de agosto de 2016.
24. Con miras a tener un referente experimental, que posteriormente permitirá comparar algunos de los resultados computacionales obtenidos en este proyecto con resultados experimentales, se le planteó como trabajo de grado al estudiante Diego Andrade la producción de nanopartículas de $\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x$ para concentraciones de $x = n/32$ ($n = 1, 2, 3, 4, 5$ y 6). Las muestras fueron obtenidas por fundición de arco y posteriormente nanoparticuladas usando molienda asistida con surfactante. Se evidenció mediante SEM que a las 7 horas de molienda asistida por surfactante (con una solución 1,06 molar de ácido oleico en hexano) es posible obtener nanopartículas inferiores a 100 nm.
25. El estudiante Diego Andrade presentó sus primeros resultados en el XXVI Congreso Nacional de Física en Manizales.
26. De los estudios experimentales se hizo notorio que el sistema $\text{Nd}_{16}(\text{Fe}_{76-x}\text{Ni}_x)\text{B}_8$ no es un buen candidato para comparar con los resultados computacionales debido a la presencia de demasiadas fases, que computacionalmente no es posible simular con sólo dos nanopartículas. Por tal razón se abandonó la idea de correlacionar los resultados computacionales y los experimentales.

Resultados obtenidos

Como resultados globales tenemos que:

- Se lograron producir polvos de $\text{Nd}_{16}(\text{Fe}_{76-x}\text{Ni}_x)\text{B}_8$ con diferentes concentraciones de Ni

($x=0,10,20,25$) mediante fundición de arco (micropolvos) y por molienda mecánica en la presencia de surfactante (nanopolvos). Se realizó la caracterización magnética, estructural y mecánica de los micropolvos y nanopolvos.

- Se realizaron estudios computacionales de sistemas tipo Núcleo/coraza.
- Se implementaron códigos en C++ capaces de simular nanopartículas esféricas core/shell acopladas dipolarmente y con interacciones de intercambio internas.
- Para analizar el gran volumen de información que surgió de las simulaciones se desarrolló en Visual Basic sobre Excel programación capaz de compendiar y apoyar en el análisis de tal volumen de información.
- Se obtuvo una solución exacta del sistema de dos nanopartículas, cada una de 15 átomos, acopladas dipolarmente y fue posible comparar los resultados de la simulación contra los resultados de la solución exacta obteniendo gran acuerdo entre ellos.
- Se estudio experimentalmente el sistema $\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x$ y se encontró que es posible obtener nanopartículas mediante molienda asistida por surfactante usando ácido oleico en hexano 1,06 M como surfactante. Se observó que la aleación $\text{Fe}_{0,875}\text{Al}_{0,125}$ nanoestructurada presenta anomalías en su comportamiento tanto en las respuestas estructurales (obtenidas por rayos X) como en las respuestas magnéticas (medida por Mössbauer y en la curva de histéresis), por tal razón es un sistema que amerita un estudio más detallado tanto él como en las concentraciones próximas.

A parte del software desarrollado para las simulaciones (hechos en C++) y su análisis (VB), se escribieron programas en Visual Basic ejecutables sobre Excel® para:

- Obtener diagramas de Thamm - Hesse a partir de las curvas de histéresis magnética de las muestras experimentales. El programa obtiene la curva de Thamm Hesse y los campos coercitivos, la magnetización remanente y la susceptibilidad paramagnética si la hay. Este programa permitió analizar los resultados obtenidos por el Grupo de Películas Delgadas de la Universidad del Valle para el sistema $\text{Co}_{(1-x)}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$; los diagramas de Thamm-Hesse obtenidos entraron a hacer parte de los resultados sometidos a publicación en la JCIS.

Principales conclusiones y/o recomendaciones

Usando código desarrollado previamente por el investigador principal del proyecto, se implementaron en lenguaje C ++ dos programas: El primero capaz de construir dos nanopartículas tipo núcleo/coraza (virtuales, con una existencia aparente y exclusivamente en el ámbito computacional, no en el real) sobre una red *bcc* con diferentes radios interno/externo, en las cuales los espines del núcleo interactuaban ferromagnéticamente y los de la coraza y los interfaciales antiferromagnéticamente, El segundo programa un simulador Monte Carlo de barridos térmicos y de medición de variables termodinámicas Magnéticas, de los pares de nanopartículas virtuales generadas, usando dinámica de Metropolis y flipeo por nanopartículas con Hamiltoniano Ising e interacción dipolar. Se implementó en él la interacción dipolar entre las nanopartículas y la interacción de intercambio entre espines junto con un algoritmo con doble dinámica de Metropolis, por espín y por nanopartícula, no desarrollado antes.

Para analizar el volumen total de datos arrojados por la simulación, fue necesario desarrollar en Visual Basic, y usando las facilidades de Excel ® , un graficador y analizador de las respuestas termodinámicas de los barridos térmicos capaz de identificar por zonas térmicas las transiciones presentes en las diferentes variables termodinámicas medidas (entre ellas $\langle E \rangle$, $\langle M \rangle$, C_p , χ , $Q_{E_A} \dots$). El graficador-analizador permite cargar simultáneamente múltiples barridos y graficar todas las variables como función de la temperatura, restringir una zona térmica para buscar transiciones asociadas a cada variable y otras utilidades propias de este tipo de análisis para cruzar las diferentes respuestas configuracionales asociadas a las diferentes semillas de aleatorios empleadas.

Con el software desarrollado se pudieron obtener tanto las variables termodinámicas del sistema (magnetización media, susceptibilidad, energía media y capacidad calorífica entre otras) como las mismas variables para una sola nanopartícula, algo difícil de realizar experimentalmente y que permite una mayor comprensión del sistema.

Computacionalmente se obtuvieron en forma exacta los diagramas de fase de sistemas ferro, antiferro núcleo/coraza constituidos por dos nanopartículas con un radio de un parámetro de red

(2×15 átomos), sujetas a diferentes valores de acople dipolar. Se obtuvieron los diagramas de fase como función de la constante de acople dipolar para nanopartículas totalmente ferromagnéticas y antiferromagnéticas de diferentes tamaños. Se verificó que las NPs ferromagnéticas por tener momentos de dipolo más grandes logran acoplarse dipolarmente más fácilmente que las antiferromagnéticas, por ello vemos que las temperaturas de bloqueo de las NPs ferro se logran a temperaturas más altas que las NPs antiferro.

El trabajo mostró que en sistemas nanoscópicos con fases antiferromagnéticas la diferencia de ocupación entre las dos subredes determina la intensidad del acople dipolar, esta diferencia de ocupación puede ser incluso más relevante que el tamaño mismo de las nanopartículas.

Se obtuvieron los diagramas de fase como función de la constante de acople dipolar para nanopartículas tipo núcleo/coraza con diferentes radios externos e internos. Llegándose a establecer que este tipo de sistemas pueden llegar a presentar 6 fases magnéticas: Una fase Paramagnética y otra fase Núcleo:Ferro/Coraza:Antiferro debidas a las interacciones internas entre los espines; en la región de la fase Núcleo:Ferro/Coraza:Antiferro aparecen una fase Superparamagnética, una fase Superferromagnética (presente siempre que hay interacción dipolar entre las NPs) y en algunos sistemas persiste una componente paramagnética; por último, se observó una fase Núcleo:Ferro/Coraza:Ferro que aparece cuando las constantes dipolares son muy grandes y que dentro de nuestro trabajo hemos considerado que es físicamente poco realista.

La Componente Paramagnética que presentan algunas muestras pudo asociarse a espines interfaciales que se encuentran bajo la acción de interacciones competitivas perfectamente equilibradas. Este perfecto equilibrio es una consecuencia de la escogencia inicial de las energías de intercambio ($J_{AA} = -J_{AB} = 1$) y la existencia de posiciones interfaciales en la red cristalina que garantizan un igual número de enlaces ferromagnéticos y antiferromagnéticos sobre un mismo espín. En sistemas reales en que las interacciones competitivas no se pueden equilibrar perfectamente, estos espines muy posiblemente darían origen a una fase de vidrio de espín.

En todos los sistemas núcleo/coraza no triviales se presentó la fase de componente paramagnética que desaparece por debajo de una temperatura que hemos denominado

temperatura Para-Dipolar, por debajo de la cual la interacción dipolar logra orientar los espines que se hallaban perfectamente equilibrados; esta temperatura dipolar crece con el aumento del núcleo de las nanopartículas.

Las temperaturas de bloqueo y las temperaturas Para-Dipolar se pudieron observar como máximos en la susceptibilidad y en la capacidad calorífica, sin embargo, es recomendable que dichas variables se muestren en escala logarítmica.

Se encontró que tanto la temperatura de bloqueo como la temperatura Para-Dipolar varían linealmente con la constante de acople dipolar y en consecuencia la temperatura de bloqueo es inversamente proporcional al cubo de la distancia entre las NPs.

Se estableció que dada una interacción dipolar fija (que físicamente sería equivalente a mantener constante la distancia de separación entre nanopartículas), el aumentar el tamaño del núcleo ferromagnético aumenta fácilmente el momento dipolar de la nanopartícula, incrementando con ello el término de acople dipolar en el Hamiltoniano, y en consecuencia se pueden obtener temperaturas de bloqueo más altas; por el contrario al aumentar el tamaño de la coraza antiferromagnética se produjo una disminución de la temperatura de bloqueo.

En cuanto a la parte experimental:

Se obtuvieron polvos de $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ dopados con Ni mediante fundición por arco y molienda mecánica de altas energías con la asistencia de surfactante. Se demostró que la presencia del surfactante es importante para el tamaño de los cristalitos (17 nm para la fase magnética dura), la forma, la estructura y el magnetismo de las nanopartículas.

La molienda asistida con surfactante conduce a la formación de nanopartículas.

El estudio magnético obtenido por espectroscopía Mössbauer tiene sitios (16k1, 16k2, 8j1, 8j2, 4c, 4e, sb d) correspondientes a las fases que se encuentran por DRX y nos muestran cómo el comportamiento magnético del sistema se ve influenciado por la concentración de Ni.

Al aumentar el contenido de níquel se produce una disminución del campo magnético hiperfino medio.

Se observó que en la fase $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, los átomos de níquel tienen preferencia por los sitios 16k2, 8j2 y 4c, ya que en los espectros mossbauer se disminuye el porcentaje de área y el campo magnético hiperfino asociados a estos sitios. Algo similar se observó en el sitio d de la fase $\text{Nd}_{1.1}\text{Fe}_4\text{B}_4$.

A pesar de que el campo coercitivo y la magnetización remanente disminuyen con la adición de níquel la muestra mantuvo su carácter magnético duro. Por otro lado, el aumento de la concentración de níquel disminuye la magnetización de saturación. Este comportamiento puede explicarse debido a que el níquel tiene un momento magnético menor que el hierro y también estimula la creación de otras fases, disminuyendo la magnetización de saturación. Se obtuvieron grandes valores de campo coercitivo y magnetización remanente para las muestras asistidas con surfactante. La molienda mejora el acoplamiento por interacción de intercambio entre las fases ferromagnéticas. Las interacciones dipolares entre fases ferromagnéticas predominan en las muestras que no fueron asistidas con surfactante y el acoplamiento ferromagnético predomina en las muestras que si fueron asistidas con surfactante.

Para el sistema Fe-Al es posible nanoparticular el sistema mediante molienda mecánica asistida por surfactante y se observó que la muestra $\text{Fe}_{87.5}\text{Al}_{12.5}$ presenta anomalías estructurales y magnéticas sumamente interesantes que ameritan un estudio más detallado.

3. Productos:

Tabla No. 1. **Cantidad y tipo de productos pactados en el *Acta de Trabajo y Compromiso* y productos finalmente presentados**

TIPO DE PRODUCTOS	No. de PRODUCTOS PACTADOS		No. de PRODUCTOS PRESENTADOS	
Productos de nuevos conocimientos				
Artículo completo publicado en revistas A1 o A2	1		3 2 Sometidos, 1 para ser sometido	
•Software	0		2	
Formación de recursos humanos	No. de estudiantes vinculados	No. de tesis	No. De estudiantes Vinculados	No. De tesis
Estudiantes de maestría	1	0	1 Ana M Schönhöbel	1
Estudiantes de pregrado	2	0	1 Diego Andrade	1 Pendiente de sustentación D Andrade
Semillero de Investigación	1		1 Diego Andrade	
Productos de divulgación				
Publicaciones en revistas no indexadas	1			1
Ponencias presentadas en eventos (congresos, seminarios, coloquios, foros)	No. de ponencias nacionales	No. de ponencias internacionales	No. de ponencias nacionales	No. de ponencias internacionales
		1	1	2
Propuesta de investigación				
Propuestas presentadas en convocatorias externas para búsqueda de financiación.	1		1	

Tabla No. 2. Detalle de productos.

ARTÍCULOS

i.

Tipo de producto:	Artículo
Nombre General:	Sometido a publicación en Revista A1 JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE, ISSN 1095-7103
Nombre Particular:	Zn concentration influence on the structure, morphology and magnetic properties of $\text{Co}_{(1-x)}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanoparticles in ferrofluids.
Ciudad y fechas:	Aún no ha sido publicado.
Participantes:	J. Lopez, W.R. Aguirre-Contreras , M. E. Gómez and G. Zambrano
Sitio de información:	http://www.journals.elsevier.com/journal-of-colloid-and-interface-science
Formas organizativas:	- Grupo de Películas Delgadas. - Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.



ii.

Tipo de producto:	Artículo
Nombre General:	Sometido a publicación en Revista A1 PHYSICA A
Nombre Particular:	Exact solutions and Monte Carlo simulations of nanoparticles coupling by dipolar interactions
Ciudad y fechas:	Aún no ha sido publicado.
Participantes:	A. M. Schönhöbel, W. R. Aguirre-Contreras
Sitio de información:	Pendiente
Formas organizativas:	Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.



iii.

Tipo de producto:	Artículo
Nombre General:	Pendiente para ser sometido en revista A1.
Nombre Particular:	Study of the magnetic and structural properties of Nd ₂ Fe ₁₄ B Nanoparticles Doped With Co and Ni During Surfactant-Assisted Ball-Milling
Ciudad y fechas:	Pendiente
Participantes:	J. S. Trujillo Hernández, J. A. Tabares and G. A. Pérez Alcázar
Sitio de información:	Pendiente
Formas organizativas:	Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.



SOFTWARE

iv.

Tipo de producto:	Software
Nombre General:	Sistema de Simulación computacional para el análisis magnético de nanoesferas Core/Shell con espines 1/2 en estructura bcc.
Nombre Particular:	• Generador de Muestras Virtuales • Simulador Monte Carlo de barridos térmicos y de medición de variables termodinámicas usando dinámica de Metropolis y Flípeo por nanopartículas core/shell con Hamiltoniano Ising e interacción bipolar • Graficador y Analizador de barridos térmicos obtenidos por Monte Carlo
Ciudad y fechas:	Cali, 2013-2015
Participantes:	Ana María Schönhöbel S. y W. Richard Aguirre C.
Sitio de información:	GMTF
Formas organizativas:	Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.



V.

Tipo de producto:	Software
Nombre General:	Analizador de Curvas Experimentales de histéresis magnética para calcular los parámetros de la histéresis y el diagrama de Thamm-Hesse
Nombre Particular:	Analizador de Curvas Experimentales de histéresis magnética para calcular los parámetros de la histéresis y el diagrama de Thamm-Hesse
Ciudad y fechas:	Cali, 2013-2016
Participantes:	W. Richard Aguirre C.
Sitio de información:	GMTF
Formas organizativas:	Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.



FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS

vi.

Tipo de producto:	Tesis
Nombre General:	Tesis de Maestría en Ciencias - Física
Nombre Particular:	Simulaciones Monte Carlo de nanopartículas magnéticas núcleo/coraza acopladas dipolarmente
Ciudad y fechas:	Cali, 28 de agosto de 2015
Participantes:	Ana María Schönhöbel Sánchez
Sitio de información:	Biblioteca Universidad del Valle
Formas organizativas:	Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.



vii.

Tipo de producto:	Tesis
Nombre General:	Trabajo de Grado en Física
Nombre Particular:	Producción y caracterización de nano-partículas de hierro dopadas con aluminio.
Ciudad y fechas:	Cali, a la espera de sustentación en el mes de noviembre de 2016.
Participantes:	Diego Fernando Andrade Melo
Sitio de información:	Biblioteca Universidad del Valle
Formas organizativas:	Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.



SEMILLERO DE INVESTIGACIÓN

viii.

Tipo de producto:	Semillero de Investigación
Nombre General:	--
Nombre Particular:	• Pasantía en investigación I - Ciencias • Pasantía en investigación II - Ciencias
Ciudad y fechas:	Cali, Agosto 2014 a Julio 2015.
Participantes:	Diego Fernando Andrade Melo
Sitio de información:	--
Formas organizativas:	Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.



PUBLICACIONES EN REVISTAS NO IDEXADAS

ix.

Tipo de producto:	Artículo
Nombre General:	Proceedings. Rare-Earth and Future Permanent magnets and their Applications (REPM 2016) Darmstadt, Germany. Pags. 673 – 680.
Nombre Particular:	Comparative magnetic and structural properties study of Nd ₂ Fe ₁₄ B micro and nanopowders doped with Ni
Ciudad y fechas:	Darmstadt – Alemania, 28 de agosto al 1 de septiembre de 2016
Participantes:	J. S. Trujillo Hernández, J. A. Tabares and G. A. Pérez Alcázar
Sitio de información:	http://www.repm2016.tu-darmstadt.de/repm_2016/index.en.jsp
Formas organizativas:	Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.



PONENCIAS

x.

Tipo de producto:	Ponencia Nacional
Nombre General:	XXVI Congreso Nacional de Física
Nombre Particular:	Producción y caracterización de nanopartículas de FeAl.
Ciudad y fechas:	Manizales, 29 de septiembre al 2 de octubre de 2015
Participantes:	Diego Fernando Andrade Melo, William Richard Aguirre Contreras, Juan Sebastián Trujillo Hernández y Faustino Reyes Gómez
Sitio de información:	Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales
Formas organizativas:	Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.

xi.

Tipo de producto:	Ponencia Internacional
Nombre General:	REPM 2016 DARMSTADT The 24th International Workshop on Rare-Earth and Future Permanent Magnets and Their Applications
Nombre Particular:	Comparative magnetic and structural properties study of Nd ₂ Fe ₁₄ B micro and nanopowders doped with Ni
Ciudad y fechas:	Darmstadt – Germany, 28 de Agosto al 1 Septiembre 2016
Participantes:	J. S. Trujillo Hernández, J. A. Tabares and G. A. Pérez Alcázar
Sitio de información:	http://www.repm2016.tu-darmstadt.de/repm_2016/index.en.jsp Technische Universität Darmstadt
Formas organizativas:	Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.



xii.

Tipo de producto:	Ponencia Internacional
Nombre General:	International Conference on the Applications of the Mössbauer Effect (ICAME 2015)
Nombre Particular:	Study of the magnetic and structural properties of Nd ₂ Fe ₁₄ B Nanoparticles Doped With Co and Ni During Surfactant-Assisted Ball-Milling
Ciudad y fechas:	Hamburg, 13 al 18 de septiembre de 2016
Participantes:	J. S. Trujillo Hernández, J. A. Tabares and G. A. Pérez Alcázar
Sitio de información:	http://www.icame2015hamburg.de/e248172/index.html
Formas organizativas:	Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali.



Propuestas de Investigación

xiii.

Tipo de producto:	Propuesta de Investigación
Nombre General:	
Nombre Particular:	CI 71047 Producción y caracterización de materiales magnéticamente duros y blandos a partir de nanopartículas magnéticas producidas por aleamiento mecánico con surfactantes.
Ciudad y fechas:	Cali
Participantes:	Ligia Edith Zamora Alfonso (IP), Germán Antonio Pérez Alcázar (C), Jesús Anselmo Tabares Giraldo (C), William Richard Aguirre Contreras (C), Hernan Dario Colorado (C), Juan Sebastian Trujillo (ED) y Eduardo Ruiz Saldarriaga (EM)
Sitio de información:	Vicerrectoría de Investigaciones.
Formas organizativas:	- Grupo de Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase. Departamento de Física, Universidad del Valle, Meléndez, A.A. 25360, Cali. - Grupo "Ciencia de Materiales". Facultad de Ciencias, Universidad del Tolima. C.P. 730006299, Ibagué, Tolima



4. Impactos actual o potencial:

Desde el punto de vista teórico se ha ampliado la comprensión de los procesos magnéticos que ocurren en los sistemas nanoparticulados. Los resultados aquí obtenidos por el grupo GMTF (que provienen de su trabajo histórico y no sólo de este proyecto) se han divulgado en diferentes ámbitos: Universidad del Valle, nacional e internacional.

La formación en investigación de la estudiante de maestría (Ana María Schonhobel) y el estudiante de pregrado de Física (Diego Andrade) tendrá un impacto a mediano y largo plazo tanto en el ámbito académico investigativo como en el docente.

Se desarrolló software que facilitará el trabajo de los miembros del grupo GMTF, a corto y mediano plazo.

La posibilidad de obtener sistemas nanoparticulados mediante molienda asistida por surfactante tendrá un impacto positivo en los trabajos desarrollados por la Universidad del Valle, vale la pena anotar que este logro no se circunscribe exclusivamente a este proyecto y es más el resultado del trabajo que históricamente ha desarrollado el GMTF.

La presente versión del informe contiene las observaciones de los evaluadores:

Firma del investigador principal

VoBo. Vicedecano de Investigaciones

*Por favor presente su informe impreso y en formato digital en hoja tamaño carta, letra arial 11,
con espacios de 1 1/2*