

Propiedades elásticas y electrónicas del compuesto laminar



Ti₂GaN sometido a presión: estudio de primeros principios

J. Peralta^{1,2}, G. Gutiérrez¹, W. Orellana^{1,3}

¹Grupo de NanoMateriales, <http://www.gnm.cl/>

Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.

² Department of Engineering and Materials Sciences, Iowa State University

³ Departamento de Física, Universidad Andres Bello

gonzalo@fisica.ciencias.uchile.cl

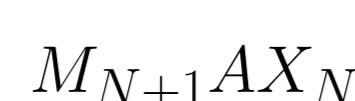


Resumen

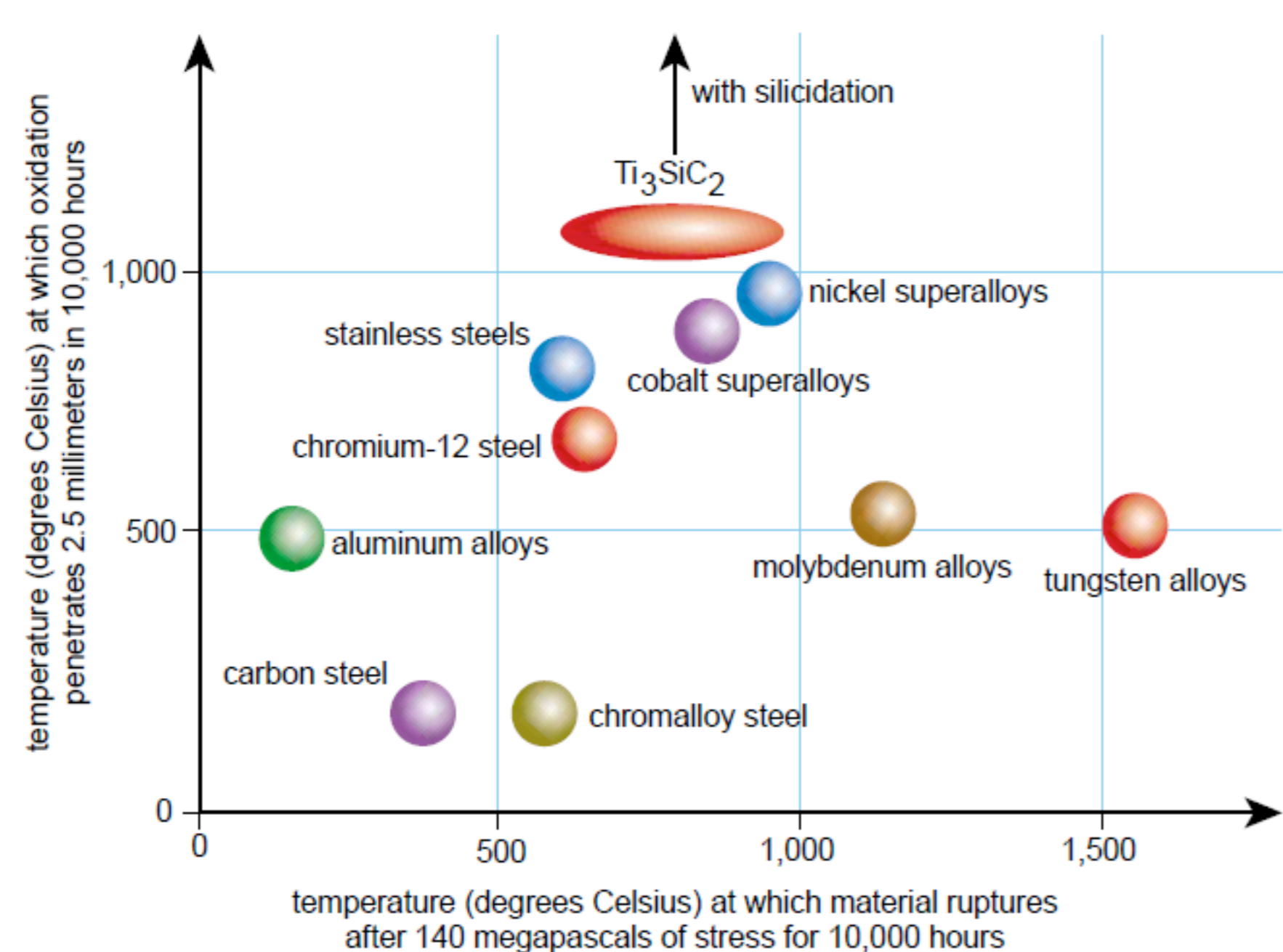
Se presentan resultados sobre las propiedades elásticas y electrónicas de este compuesto para seis densidades diferentes, hasta la presión de 60 GPa. El estudio se ha realizado por medio de cálculos libres de parámetros empíricos, o también llamados ab-initio o primeros principios, través de la Teoría del Funcional de la Densidad. El volumen de la celda unidad se escala y los átomos se dejan relajar a su posición de mínima energía, luego de lo cual se obtiene la muestra en la distintas densidades. Para cada una de estas densidades, se calculó el módulo de bulk, las densidad de estados electrónicas y las respectivas bandas de energía. A presión ambiente, los resultados obtenidos del cálculo ab-initio presentan una buen acuerdo con resultados experimentales recientes. Por su parte, de acuerdo a nuestros resultados, las propiedades electrónicas no presentan cambios significativos cuando la muestra es sometida a presión.

1. Introducción

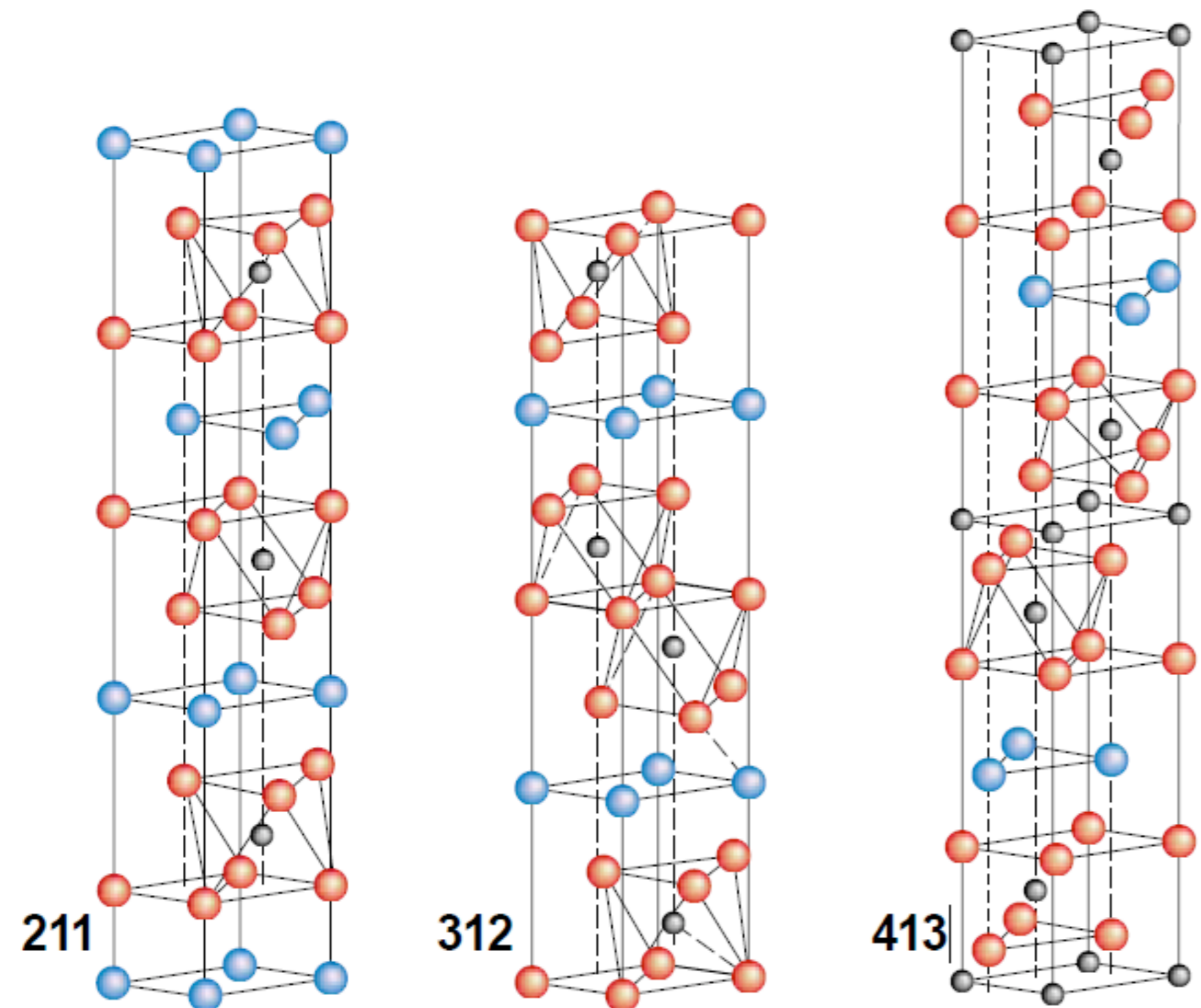
Las MAX phases son una familia de compuestos ternarios de fórmula general :



- Donde M es un metal de transición temprana (ej: titanio, zirconio), A es un elemento del grupo A (ej. germanio, aluminio) y X puede ser C o N.
- Estos compuestos poseen propiedades inusuales :
 - Por una parte se comportan como metales.
 - Por otro lado tienen un comportamiento cerámico.



- Estos compuestos fueron encontrados en los años 60 por Jeitschko et al., quienes trabajaban en el campo de la química encontrando nuevos sistemas ternarios basados en metales de transición temprana.
- Dentro de estos compuestos habían sintetizado aproximadamente 40 carburos, llamados Hägg o fase-H.
- Luego de pasar desatendidos durante más de 30 años, Barsoum puso atención a este nuevo tipo de materiales (M Barsoum, Prog. Solid St. Chem. 28, 201 (2000)).
- Las MAX phases se pueden dividir en tres grupos, según el número de átomos M, A y X en cada molécula. Estos grupos son conocidos como 211, 312 y 413. Los que se distinguen sólo por la secuencia de apilado.



2. Metodología.

- Cálculo de estructura electrónica se realiza en el marco de la teoría del funcional de la densidad.
- La hipótesis principal de DFT es que la densidad electrónica $n(\vec{r})$, contiene información completa acerca del sistema.
- Se considera que la energía es un funcional de la forma

$$E[n(\vec{r})] = F[n(\vec{r})] + \int d\vec{r} \hat{V}_{ext}(\vec{r})n(\vec{r}) \quad (1)$$

- donde F se escribe :

$$F[n(\vec{r})] = E_K[n(\vec{r})] + E_H[n(\vec{r})] + E_{XC}[n(\vec{r})] \quad (2)$$

- Lo que debe aproximarse, es el término de intercambio-correlación, $E_{XC}[n(\vec{r})]$:

- Algunas aproximaciones

- Local Density Approximation : $E_{xc}[n(\vec{r})] = \int d\vec{r} n(\vec{r}) \epsilon_{xc}(n(\vec{r}))$
- General Gradient Approximation : $V_{xc}(\vec{r}) = V_{xc}(n, |\nabla n|)$
- En este trabajo hemos utilizado GGA, usando el software VASP y la aproximación utilizada es PW91, debida a Perdew y Yang (Physical Review B, 45:13244-13249, (1992)).

3. Resultados

Las MAX phases pertenecen al grupo espacial P63/mmc (194). La siguiente tabla lista los 8 átomos base de la celda unidad de una MAX phase 211 (Phys. Rev. B 71, 024105(2005)). Los vectores de celda son $\vec{a}_1 = 2c_2a(1, -c_3, 0)$, $\vec{a}_2 = 2c_2a(1, c_3, 0)$ y $\vec{a}_3 = c(0, 0, 1)$. Donde $c_1 = 1/3$, $c_2 = 1/4$ y $c_3 = 1/\sqrt{c_1}$.

Tipo	número	Posición
X	1	0
M	2	$c_1(\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2) + z_m\vec{a}_3$
A	3	$c_1(2\vec{a}_1 + \vec{a}_2) + c_2\vec{a}_3$
M	4	$c_1(\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2) + (2c_2 - z_m)\vec{a}_3$
X	5	$2c_2\vec{a}_3$
M	6	$c_1(2\vec{a}_1 + \vec{a}_2) + (2c_2 + z_m)\vec{a}_3$
A	7	$c_1(\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2) + 3c_2\vec{a}_3$
M	8	$c_1(2\vec{a}_1 + \vec{a}_2) + (1 - z_m)\vec{a}_3$

La constante z_m corresponde a un grado de libertad interno para cada fase.

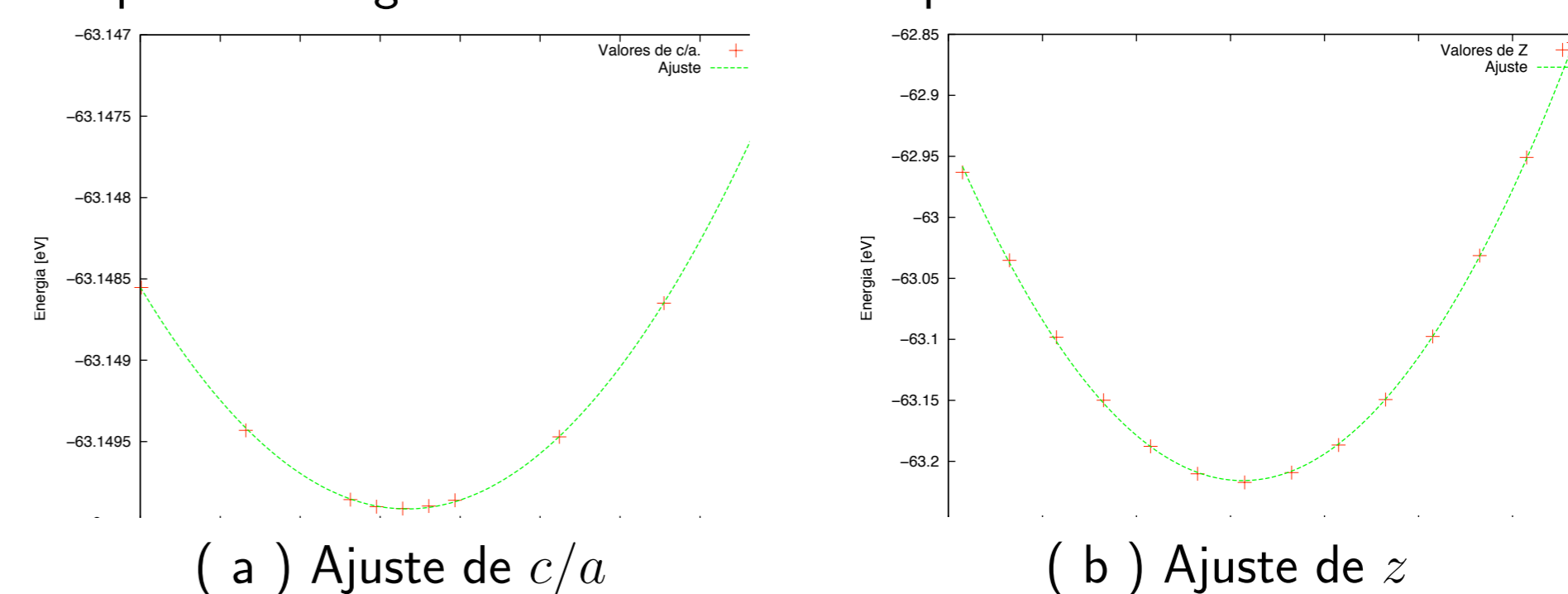


Figura 1: Ajuste de los parámetros de la celda c/a y z

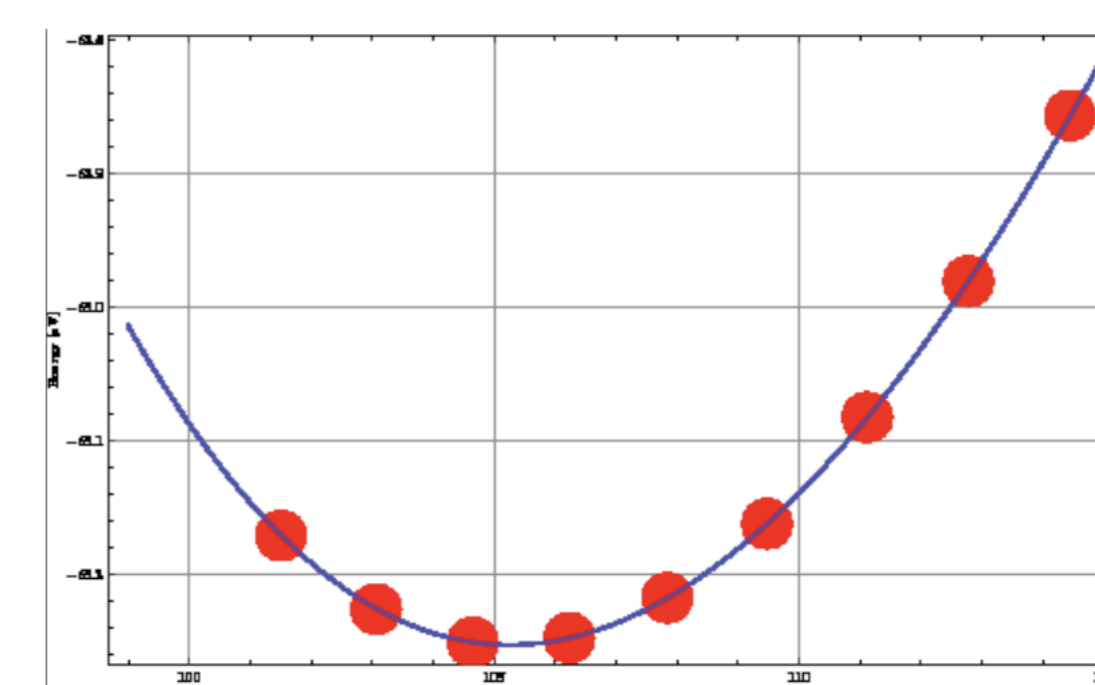
- El módulo de bulk es un valor que indica la capacidad de restitución de un material sometido a presión hidrostática:

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)$$

- Por ejemplo el valor del módulo de bulk para el acero es de 160[GPa], tres veces el valor del vidrio.
- Usamos la ecuación de Birch y Murnaghan para ajustar energía en términos del volumen y módulo de elasticidad B :

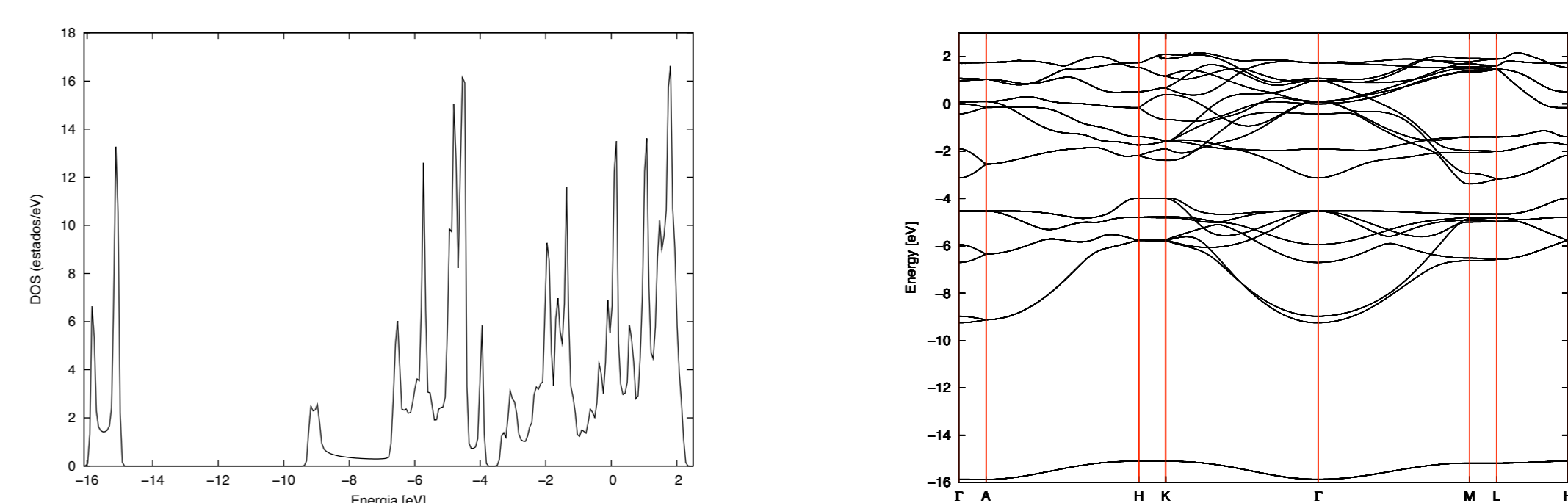
$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0B_0}{16} \left(\left(\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right)^3 B'_0 \right) + \frac{9V_0B_0}{16} \left(\left(\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right)^2 \cdot \left(6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \right) \right)$$

- Acá B_0 corresponde al módulo de Bulk de la muestra. Para nuestra simulación hemos variado el volumen de la celda inicial entre un -2% y un 2%.



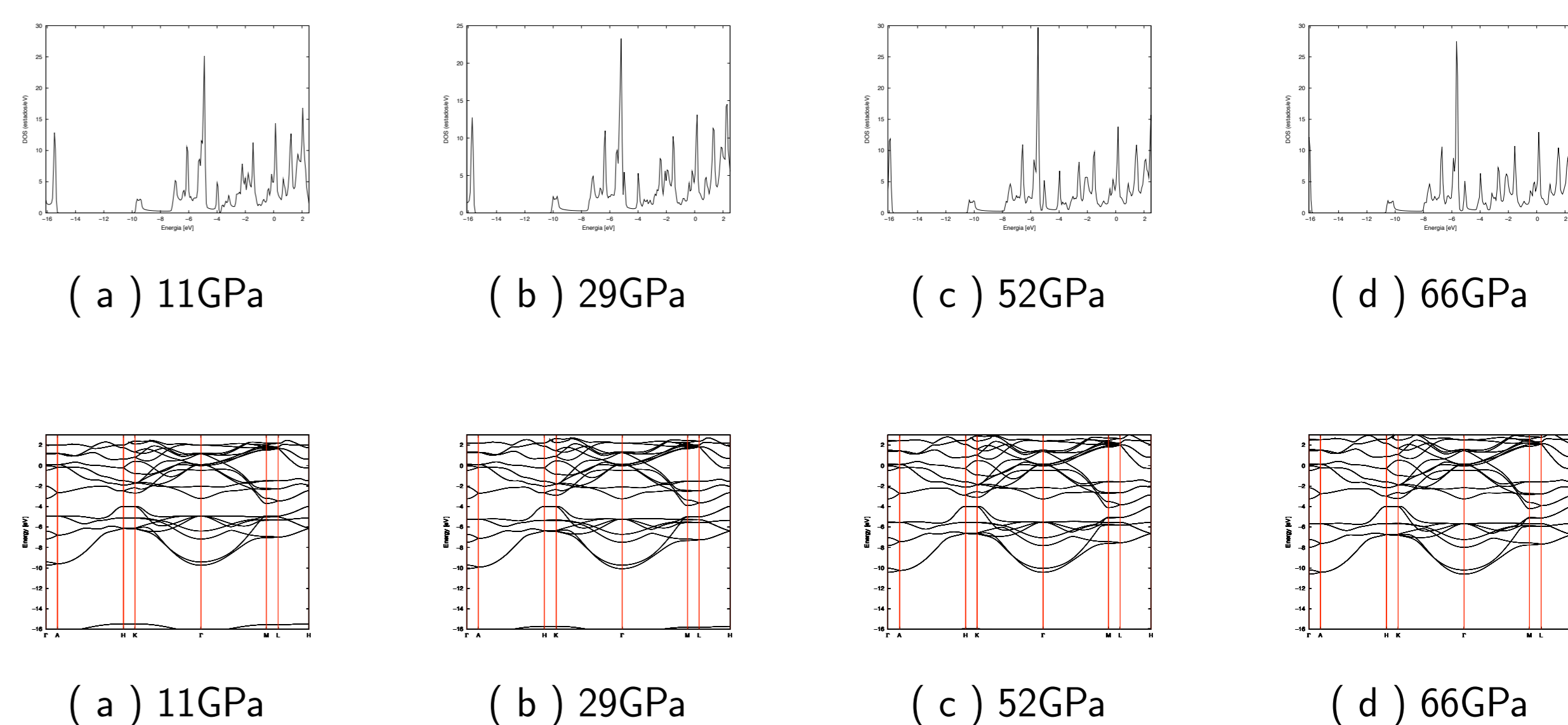
- Valor del módulo de Bulk: 184.54 GPa. (Experimental: S. Saxena : 158±0.5 GPa).

Las propiedades electrónicas son determinadas a través de la densidad de estados electrónicas y la estructura de bandas.



(a) Densidad de Estados para Ti₂GaN (b) Estructura de bandas para Ti₂GaN

Propiedades electrónicas de la celda a medida que aumenta la presión.



(a) 11GPa (b) 29GPa (c) 52GPa (d) 66GPa

4. Agradecimientos

Este trabajo es apoyado por el Proyecto AFORS-USA FA9550-06-1-0540 *Thermophysical modeling of novel machineable ceramic materials* y ENL 10/06 VRID-U. de Chile.