

Superficie de fermi de los compuestos intermetálicos Al_3Ti , $AlTi$ y $AlTi_3$

Pábel J. Machado
Ney J. Luiggi
Universidad de Oriente
p.j.001@hotmail.com

Fecha de recepción: 08- 04- 2016 Fecha de aceptación: 12- 05- 2016

Resumen

Los compuestos intermetálicos son aleaciones que presentan una estructura cristalina ordenada. Investigaciones anteriores han mostrado que algunos compuestos del sistema aluminio-titanio poseen excelentes propiedades a altas temperaturas, pudiendo ser usados para remplazar los materiales utilizados actualmente en la industria automotriz, aeronáutica, aeroespacial, entre otras. Por otra parte, propiedades como la superficie de Fermi de los intermetálicos del sistema aluminio-titanio ha sido poco estudiadas; por esta razón,

se realizó un estudio ab-initio de la superficie de Fermi de los compuestos intermetálicos Al_3Ti , $AlTi$ y $AlTi_3$. Para la realización de este trabajo se utilizó el software WIEN 97, que se basa en la teoría del funcional de la densidad (DFT) tomando el método FPLAPW (Full Potential Linearized Plane Waves) para realizar cálculos de estructura electrónica de sistemas cristalinos, y con este se halló la energía de Fermi y los vectores k_f asociados, que permiten construir la superficie de Fermi. El cálculo evidencia que para el Al_3Ti existen tres bandas que cruzan el nivel de Fermi, para el $AlTi$ se obtuvieron cin-

co bandas y para el $AlTi_3$ dos bandas. No se consiguieron reportes previos de estas superficies, por lo menos en las bibliografías consultadas. Se comprobó que el número de bandas que cruzan el nivel de Fermi está relacionado con las concentraciones de aluminio y de titanio presentes en el intermetálico, presentando el intermetálico con mayor concentración de titanio un comportamiento semimetálico

Palabras clave: Intermetálicos; semimetálicos; fermi

Fermi surface of Al_3Ti , $AlTi$ and $AlTi_3$ intermetallic compounds

Abstract

Intermetallic compounds are alloys with an ordered crystalline structure. Previous research has shown that some compounds of the aluminum-titanium system possess excellent properties at high temperatures, and can be used to replace materials currently used in the automotive, aeronautical, and aerospace industries, among others. On the other hand, properties such as the Fermi surface of the aluminum-titanium system intermetallics have been little studied; for this reason, an ab-initio study

of the Fermi surface of the Al_3Ti , $AlTi$ and $AlTi_3$ intermetallic compounds was carried out. To carry out this work, the software WIEN 97 was used, which is based on the density functional theory (DFT) taking the FPLAPW method (Full Potential Linearized Plane Waves) to perform electronic structure calculations of crystalline systems, and with it, the Fermi energy and associated k_f vectors were found, which allow building the Fermi surface. The calculation shows that for Al_3Ti there are three bands that cross the Fermi level, for $AlTi$ five bands were obtained and for

$AlTi_3$ two bands. No previous reports of these surfaces were obtained, at least in the bibliographies consulted. It was verified that the number of bands that cross the level of Fermi is related to the concentrations of aluminum and titanium present in the intermetallic, presenting the intermetallic with greater concentration of titanium a semi-metallic behavior.

Key words: Intermetallic; semi-metallic; fermi

Introducción

Los compuestos intermetálicos son aleaciones que poseen una estequiometría y concentración fijas a lo largo de todo el cristal, otorgándoles propiedades que pueden ser aprovechadas en todos los campos de la industria (Varin, 2000). En particular los compuestos a base de aluminio y titanio han sido estudiados extensivamente debido a sus excelentes propiedades a altas temperaturas, y a su especial utilidad en campos como la industria aeronáutica y automotriz. Recientemente, se ha puesto especial atención al estudio ab-initio de las propiedades electrónicas, debido a que estas han sido poco estudiadas en

relación a otras propiedades en los compuestos del sistema Al-Ti (Hong *et al.*, 1991; Rajendra *et al.*, 2003; Asta *et al.*, 1992).

Una de las propiedades electrónicas es la superficie de Fermi, que es una superficie de energía constante evaluada en $E = E_f$, y cuya importancia reside en que todas las propiedades electrónicas de los materiales se desarrollan en el nivel de Fermi (Kittel, 1996).

En este trabajo de investigación se realizó un estudio ab-initio de compuestos intermetálicos del sistema aluminio-titanio y con ella se obtuvo la superficie de Fermi. Se utilizó el método FLAPW,

a través del software WIEN 97 (Blaha *et al.*, 2000).

Bases teóricas

1) Teoría del funcional de la densidad

La teoría del funcional de la densidad (DFT por sus siglas en inglés) actualmente se basa en la solución de la ecuación de Kohn-Sham para el sistema de n electrones (Parr *et al.*, 1989; Kohn *et al.*, 1965), en la cual aproximaron el problema de n partículas al de n ecuaciones de una partícula representada por un orbital denominado orbital de Kohn-Sham.

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v(r) + \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} + v_{xc}(\mathbf{r}) \right] \Psi_i = \epsilon_i \Psi_i \quad (1)$$

Donde el primer término representa la energía cinética del electrón, el segundo término representa el potencial electrón-ión, el tercero representa la contribución de Hartree y el último es el potencial de intercambio y correlación; ϵ_i es el autovalor de energía correspondiente al autoestado ψ_i .

2) Método FP-LAPW

El método FP-LAPW (por sus siglas en inglés Full Potential Linearized

Augmented Plane Waves) es una modificación del método APW y se basa en la aproximación de muffin-tin del potencial del cristal $V(r)$, que separa el espacio de la celda unitaria en dos regiones: (a) una región esférica centrada en cada una de las posiciones atómicas, de forma que no se superponen entre sí (región I); y (b) una región intersticial en los sitios que no llenan las esferas (región II) (Blaha *et al.*, 2000; Louks, 1967).

Con esto, se pueden tomar diferentes conjuntos bases en las regiones de la celda unitaria: una combinación de armónicos esféricos dentro de las esferas (I), y una combinación lineal de ondas planas en las regiones intersticiales (II).

$$\varphi(r) = \begin{cases} \sum_{lm} [A_{lm} R_l(r, E_{1,l}) + B_{lm} \hat{R}_l(r, E_{1,l}) + C_{lm} R_l(r, E_{2,l})] Y_{lm}(\hat{r}), & \text{Arrel} \\ \frac{1}{\Omega} \sum_c C_c e^{i(G+\kappa)\cdot r}, & \text{Arrel} \end{cases} \quad (2)$$

Siendo ϕ es la función de onda, Ω es el volumen de la celda, es la solución regular de la parte radial de la ecuación de Schrödinger, son armónicos esféricos; además, y son coeficientes de expansión (Blaha *et al.*, 2000).

Esta elección del conjunto base tiene la ventaja de que puede reproducir con mayor eficacia estados que varían rápidamente como los estados de carozo y los estados de electrones d y f .

Metodología

En este estudio se utilizó el software WIEN 97, que se basa en el esquema DFT utilizando el método FP-LAPW como conjunto base. Se tomó el funcional PBE para la obtención de la energía de intercambio y correlación y se tomaron 1000 puntos \mathbf{k} para la integración en la primera zona de Brillouin. Se calculó la estructura de bandas utilizando el subprograma Spaghetti del paquete WIEN 97, a través de arreglos de puntos en diferentes direcciones tomando como referencia a los puntos de alta simetría

para cada estructura:

Para el Al_3Ti se utilizaron las direcciones ΓMSNS0 y $\text{PGM}\Gamma$.

Para el AlTi se usó $\text{ZAM}\Gamma\text{ZRXT}\Gamma$.

Para el AlTi_3 se emplearon las direcciones $\Gamma\text{MK}\Gamma$ y ALHA .

Los cálculos de superficie de Fermi se hicieron tomando direcciones radiales a través de diferentes planos paralelos a los ejes X, Y Z respectivamente, de todo el volumen de la primera zona de Brillouin. Luego se determinó la estructura de bandas para cada una de dichas direcciones para obtener una serie de puntos \mathbf{k} con su respectiva energía. Por último, para hallar k_f en la energía $E = E_f$, se hizo una interpolación utilizando el método de aceleración de Aitken.

Resultados

El número de bandas total para cada intermetálico se obtuvo multiplicando el número de átomos por celda unitaria por la cantidad de estados que pueden ser ocupados en los orbitales de valencia de dichos átomos individuales. Por

lo tanto, se tiene que:

Al_3Ti : Posee seis átomos de aluminio y dos de titanio por celda unitaria, por lo tanto se tienen $6 \times 8 = 48$ y $2 \times 12 = 24$ bandas para un total de 72 bandas en la región de valencia.

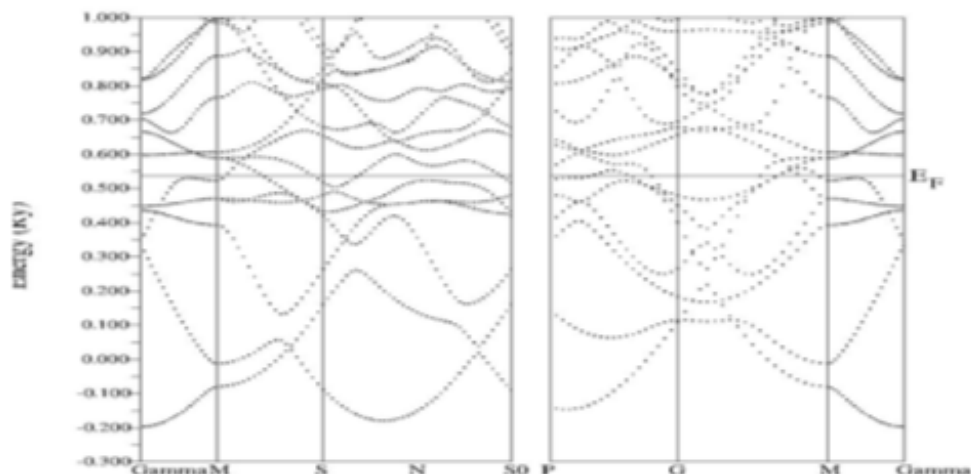
AlTi : Posee dos átomos de titanio y uno de aluminio, de lo que se obtienen $2 \times 12 = 24$ y $1 \times 8 = 8$ bandas para un total de 32 bandas de valencia.

AlTi_3 : Posee seis átomos de titanio y dos de aluminio, lo que da $6 \times 12 = 72$ y $2 \times 8 = 16$ bandas para un total de 88 bandas en la región de valencia.

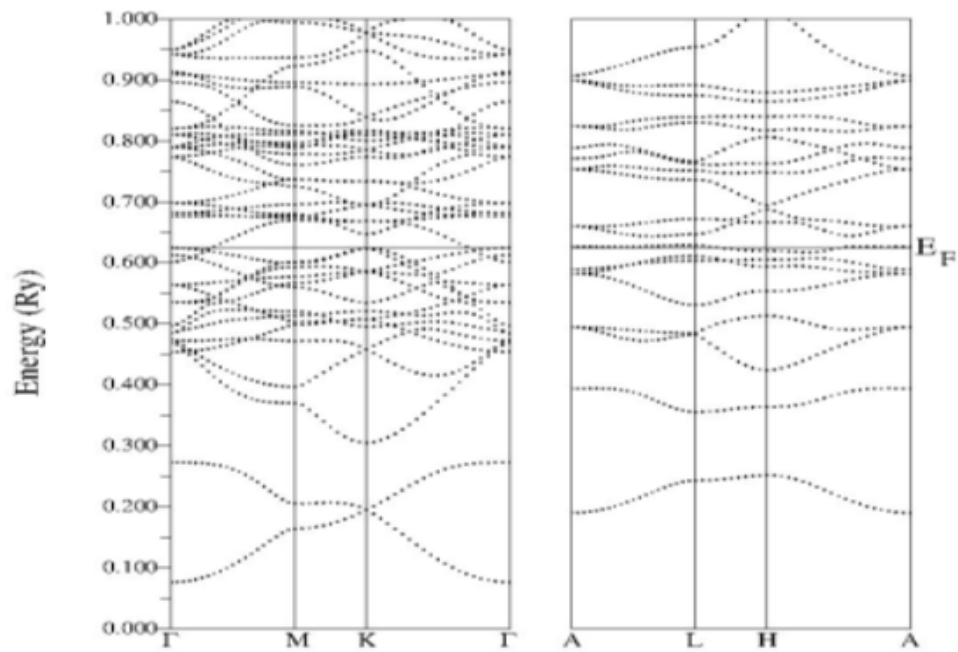
En la figura 1 se muestra la estructura de bandas de los intermetálicos, allí se puede observar el comportamiento conductor de los compuestos Al_3Ti y AlTi , debido a la gran cantidad de bandas que cruzan el nivel de Fermi en distintas direcciones; sin embargo, el AlTi_3 presenta un carácter semimetálico, el cual es apreciable en las direcciones ALHA , mientras que en las direcciones $\Gamma\text{MK}\Gamma$ existen bandas que cruzan el nivel de Fermi cerca del punto Γ .

Figura 1. Estructura de bandas de los intermetálicos. (a) Al_3Ti . (b) AlTi . (c) AlTi_3

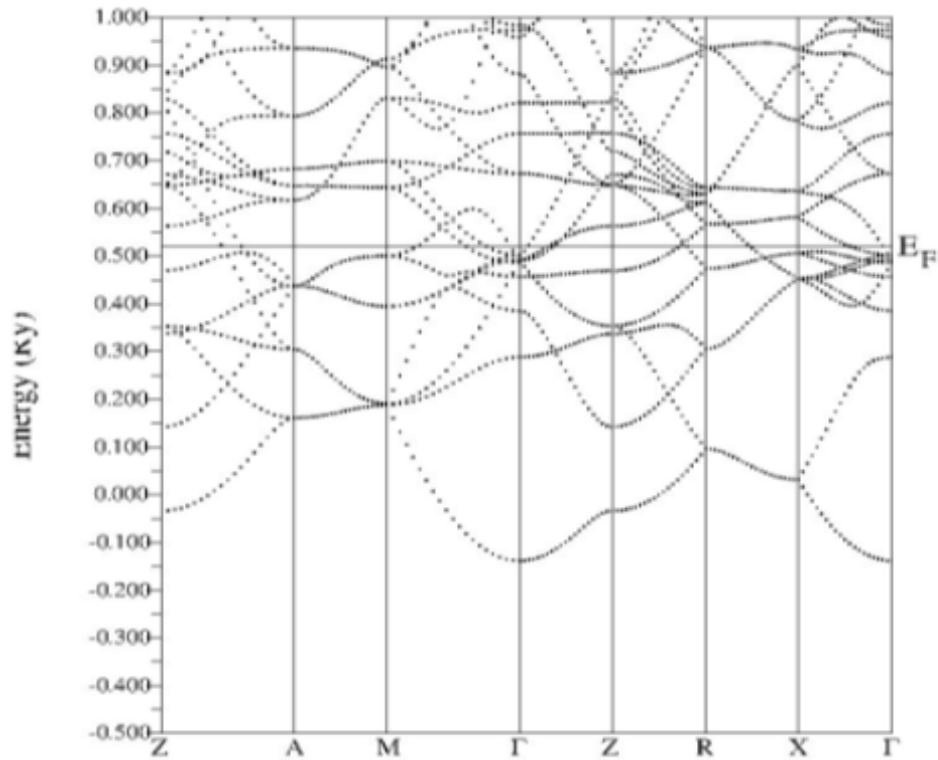
A)



B)



C)

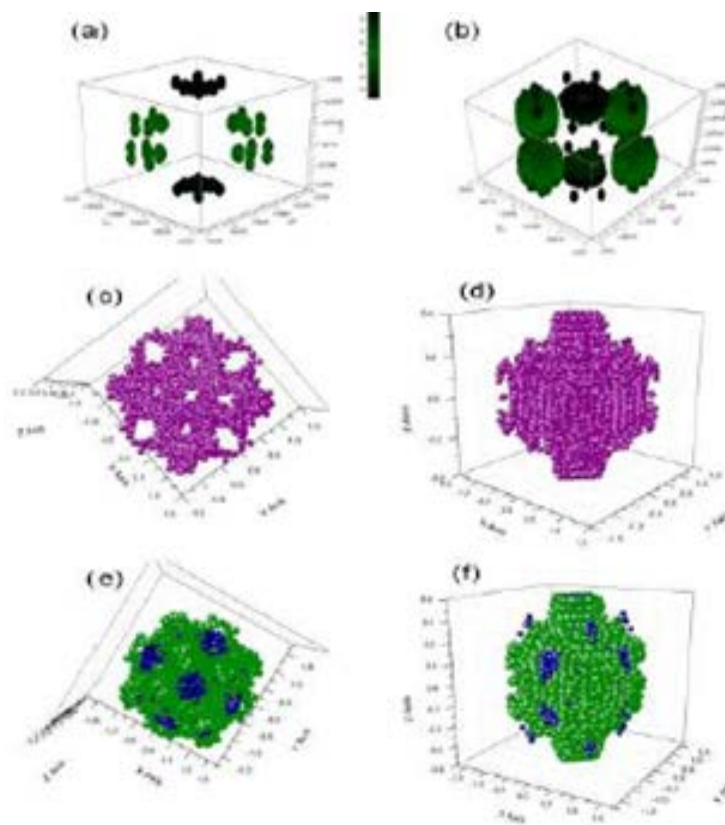


En la figura 2 se presenta la superficie de Fermi del Al_3Ti , donde se muestran las representaciones de los puntos k debidas contribuciones de las bandas 18, 19 y 20 (figuras 2.a, 2.b, 2.c y 2.d, res-

pectivamente) que son las que cruzan el nivel de Fermi en este intermetálico. Además se muestra la superficie total (figuras 2.e y 2.f), cuya mayor contribución es la banda 20 y posee una forma

de balón de rugby, mientras que las bandas 18 y 19 permanecen dentro de esta última en cavidades de su interior.

Figura 2. Superficie de Fermi del Al_3Ti . (a) banda 18. (b) banda 19. (c) banda 20 vista superior. (d) banda 20 vista lateral. (e) Superficie de Fermi total vista superior. (f) superficie de Fermi total vista lateral

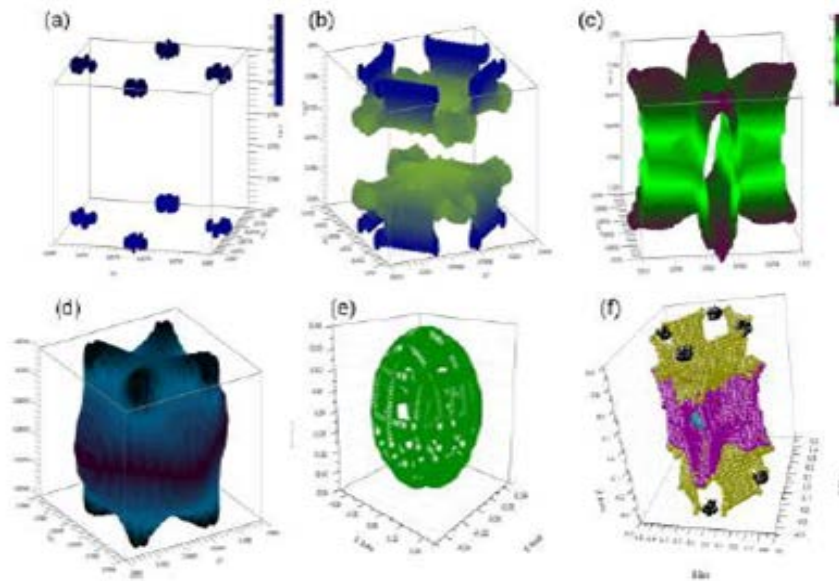


La figura 3 muestra las representaciones de los puntos k debidas a las contribuciones de las bandas 20, 21, 22, 23 y 24 (figuras 3.a, 3.b, 3.c, 3.d y 3.e, respectivamente) que son las que conforman la superficie de Fermi de este

intermetálico en su fase estable, y cuyas mayores contribuciones son de las bandas 21 y 22. La Figura 3.f contiene la superficie de Fermi total del intermetálico AlTi , donde se observan la banda 20 en color negro, la banda 21 en color

amarillo, la banda 22 en color violeta y la banda 23 apenas visible en azul cian. La banda 24 no se puede observar debido a que es pequeña en comparación a las demás y se encuentra dentro de la banda 23.

Figura 3. Superficie de Fermi del AlTi. (a) banda 20. (b) banda 21. (c) banda 22. (d) banda 23. (e) banda 24. (f) superficie de Fermi total.

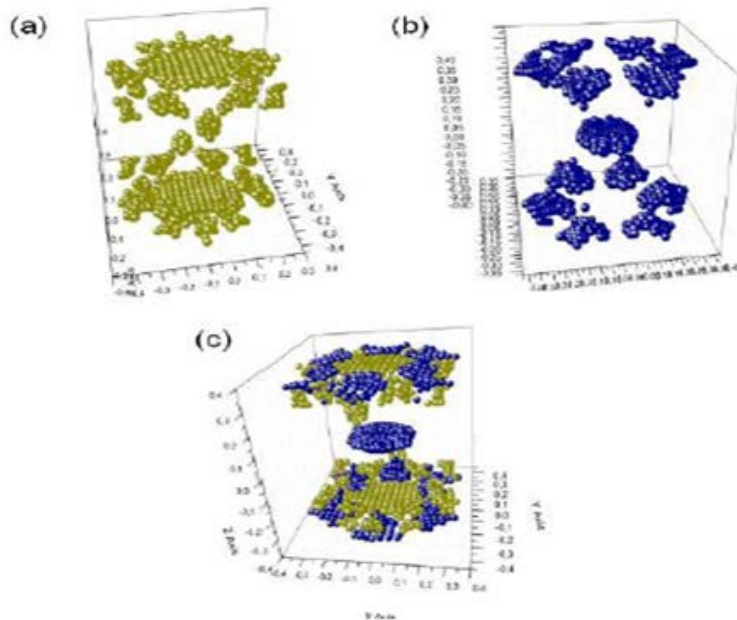


Las representaciones de los puntos k obtenidas para las bandas que cruzan el nivel de Fermi para el AlTi3 se muestran en la figura 4. En este intermetálico solo las bandas 45 y 46 tocan este nivel,

y se observa que solo aparecen contribuciones cerca de la parte superior e inferior de la primera zona de Brillouin, dejando grandes espacios entre ellas; este comportamiento es característico

en materiales de estructura hexagonal compacta con poca conductividad eléctrica como el titanio puro en su fase alfa.

Figura 4. Superficie de Fermi del AlTi3. (a) banda 45. (b) banda 46. (c) superficie de Fermi total.



Conclusiones

La estructura de bandas y la superficie de Fermi de los intermetálicos del sistema Al-Ti fueron estudiadas usando el esquema DFT a través del paquete computacional WIEN 97, llegando a las siguientes conclusiones:

El incremento del número de átomos de Ti en el sistema Al-Ti hace que las diferentes propiedades estudiadas se presenten de manera intrincada dada la complejidad estructural que conlleva a tener más átomos por celda unidad, y además hacen más complicadas la estructura de bandas electrónicas.

Se demostró el carácter conductor de los intermetálicos estudiados, aunque el comportamiento semimetálico del AlTi₃ en ciertas direcciones, indica que la concentración de titanio disminuye la característica conductora en el sistema aluminio-titanio.

De la superficie de Fermi se puede concluir que para concentraciones similares de aluminio y titanio se produce una mayor incidencia de bandas en el nivel de Fermi; por lo tanto, la conductividad se incrementa al tener mayor disposición de estados que cruzan este nivel. Estos resultados, por ser los primeros en obtenerse para los intermetálicos Al₃Ti, AlTi y AlTi₃, deberían ser estudiados con más detalle para obtener las contribuciones de portadores de carga a la superficie de Fermi.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo financiero de la Universidad de Oriente a través del proyecto POA 2009/05.

Referencias Bibliográficas

Asta M., De Fontaine D., Van Schilfgaarde M., Sluiter M. and Methfessel M. 1992. First-principles phase-stability study of fcc alloys in the Ti-Al system. *Physical Review B*. 46: 5055 - 5072.

Blaha P., Schwarz K., and Luitz J. 2000. Wien 97 A full potential linearized augmented plane waves package for calculating crystal properties. Technical University of Vienna. Vienna.

Hong T., Watson-Yang T. J., Freeman A. J., Oguchi T. and Jian-Hua X. 1991. Crystal structure, phase stability, and electronic structure of Al-Ti intermetallics: TiAl₃. *Physical Review B*. 41: 12462 – 12467.

Hong T., Watson-Yang T. J., Guo X. J., Freeman A. J., Oguchi T. and Jian-Hua Xu. 1991. Crystal structure, phase stability, and electronic structure of Al-Ti intermetallics: Ti₃Al. *Physical Review B*. 43: 1940 - 1947.

Kittel C. 1996. Introduction to solid state physics. Séptima edición. John Wiley & Sons, Inc. New York.

Kohn W. and Sham L. J. 1965. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*. 140: 1133 – 1138.

Louks T. L. 1967. Augmented Plane Wave Method. W. A. Benjamin Inc. New York.

Parr R. and Yang W. 1989. Density functional theory of atoms and molecules. Oxford University press, Inc. New York.

Rajendra R. Z. and Mishin Y. 2003. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system. *Physical Review B*. 68: 1 - 14.

Varin R. A. 2000. Intermetallics: Crystal structures. *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*. Elsevier Science LTD. Págs. 1 – 4.