

Propriedades elásticas de sistemas cristalinos com simetria tetragonal e hexagonal

Frederico Ayres, Suzan G. Benetti

Rua A, s/n
Depto. De Matemática, FACIEX, UNEMAT
78390-000, Barra do Bugres, MT, Brasil
E-mail: ayres@unemat.br

João F. Justo

Escola Politécnica, USP
CP 61548, 05424-970, São Paulo, SP, Brasil

Wanda V. M. Machado, Lucy V. C. Assali

Instituto de Física, USP
CP 66318, 05315-970, São Paulo, SP, Brasil

A resposta de materiais a estímulos externos pode ser quantificada em termos das suas constantes elásticas, cuja análise pode fornecer informações sobre suas propriedades. Nosso trabalho se baseia na utilização de um procedimento teórico para determinação de tais constantes através de um código computacional utilizado para cálculos das propriedades eletrônicas e estruturais de materiais. No caso de sistemas cristalinos cúbicos, existem inúmeros trabalhos na literatura [1-3]. No entanto, há poucas referências no caso de sistemas tetragonais e hexagonais [4,5]. Essa escassez de trabalhos pode ser devido ao fato de não ser direta a generalização do procedimento para o caso de sistemas de mais baixa simetria (não cúbicos). Nesse trabalho, determinaremos as constantes elásticas do NbIr, um material que possui estrutura tetragonal simples. Os nossos resultados serão comparados com os obtidos por Mehl e colaboradores [5], que obtiveram seus resultados através do método LAPW (“Linearized Augmented Plane Waves”). Com relação às constantes elásticas de materiais com estruturas hexagonais, comparamos os nossos resultados para o 2H-GaN com os resultados teóricos obtidos por Ambacher [6].

Para investigar as constantes elásticas, primeiro determinamos as energias totais do sistema cristalino, as quais foram calculadas através do método APW+lo (“Augmented Plane Waves plus local orbitals”) [7,8], implementado no código computacional WIEN2k [9], que se baseia na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) [10-12]. Esse é um método de primeiros princípios que permite a determinação da configuração de equilíbrio a partir da variação da energia total da célula unitária em função do volume da mesma. No código WIEN2k está implementado o procedimento para cálculo das constantes elásticas de materiais com estrutura cúbica, mas não com estruturas não-cúbicas, como o que propomos nesse trabalho.

Através desse procedimento, obtivemos a configuração de mínima energia, a qual utilizamos

como base para a determinação das constantes elásticas, que foi o motivo principal do nosso trabalho. O procedimento utilizado foi a transformação da célula unitária do sistema cristalino, modificando a sua simetria e, para cada uma dessas simetrias, provocamos a deformação da estrutura em torno do ponto de equilíbrio. No caso de uma estrutura tetragonal simples, o tensor de tensão elástica possui seis constantes a serem determinadas, em vez das três dos sistemas com estrutura cúbica. A matriz das constantes elásticas de uma célula com estrutura tetragonal simples está apresentada a seguir:

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \quad (1)$$

Portanto, devem ser feitas seis deformações para que o problema tenha solução e, conseqüentemente, sejam obtidas as constantes elásticas de tal sistema.

Então, uma vez definidas as deformações δ do material, passamos às variações de δ em torno do ponto de equilíbrio ($\delta=0$). A máxima deformação de δ foi de 5%, para evitar efeitos de ordens superiores. Seguindo o procedimento de Mehl e colaboradores [5], as deformações provocadas no material seguem as equações a seguir:

$$\frac{\Delta E_1}{V_0} = (C_{11} + C_{12})\delta^2 \quad (2)$$

$$\frac{\Delta E_2}{V_0} = (C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13})\delta^2 \quad (3)$$

$$\frac{\Delta E_3}{V_0} = \frac{C_{33}}{2}\delta^2 \quad (4)$$

$$\frac{\Delta E_4}{V_0} = (C_{11} - C_{12})\delta^2 \quad (5)$$

$$\frac{\Delta E_5}{V_0} = C_{44}\delta^2 \quad (6)$$

$$\frac{\Delta E_6}{V_0} = \frac{C_{66}}{2}\delta^2 \quad (7)$$

que são as seis equações necessárias para a determinação das seis constantes elásticas de um sistema tetragonal simples. As equações de (2) a (7) mostram o comportamento quadrático da variação de energia ΔE em função da deformação δ . No caso de um sistema com estrutura hexagonal, basta assumir $C_{66} = C_{11} - C_{12}$.

Utilizando o código WIEN2k, obtivemos as energias totais da configuração de equilíbrio para cada transformação. Esse cálculo permitiu o teste de convergência, uma vez que as energias mínimas para cada transformação devem ser as mesmas. Diferenças em energia indicam que o cálculo não está convergido. Nesse caso, os parâmetros para cálculo devem ser ajustados até a obtenção da energia mínima equivalente para cada transformação. A simetria do cristal é diminuída ao sofrer a transformação, o que torna o cálculo mais demorado. Uma das dificuldades encontradas foi justamente com relação ao tempo computacional, pois para algumas transformações, a simetria diminui consideravelmente. Além disso, para cada transformação, deve ser variado o parâmetro δ , dentro do intervalo $(-0,05 \leq \delta \leq 0,05)$, o que exige o cálculo da energia total do sistema para cada valor de δ . Assim, obtivemos um gráfico de energia em função da deformação δ e, a partir desse gráfico, foi ajustado um polinômio, através do qual determinamos a constante associada ao termo quadrático, o que forneceu os valores das constantes elásticas, que estão apresentadas na tabela I.

Constantes elásticas (Mbar)	Mehl <i>et al.</i> [5]	Nossos resultados
C_{11}	5,8	4,8
C_{12}	1,2	1,3
C_{13}	2,5	2,1
C_{33}	4,9	4,8
C_{44}	1,8	1,8
C_{66}	0,8	0,7

Tabela I: Comparação entre os valores das constantes elásticas do NbIr determinados por Mehl e colaboradores [5] e os nossos resultados.

Através da análise da tabela I, podemos dizer que os nossos resultados estão compatíveis com os obtidos por Mehl e colaboradores [5].

Realizamos, também, alguns testes para o 2H-GaN, que possui estrutura tetragonal. Os nossos resultados estão apresentados na tabela II, comparados com os obtidos por Ambacher [6].

Podemos verificar, através da tabela II que os nossos resultados para um material com estrutura hexagonal também está compatível com os resultados da literatura.

Constantes elásticas (Mbar)	Ambacher [6]	Nossos resultados
$C_{11} + C_{12}$	5,0	5,0
C_{13}	1,0	0,5
C_{33}	4,1	4,1
C_{44}	0,9	1,0

Tabela II: Comparação entre os valores das constantes elásticas do 2H-GaN determinados por Ambacher [6] e os nossos resultados.

Portanto, uma vez que os resultados tanto para um material com estrutura tetragonal quanto hexagonal estão compatíveis com os da literatura, o código WIEN2k é adequado para implementação desse procedimento de cálculo das constantes elásticas. Esse procedimento já está sendo implementado em tal código.

Agradecemos ao projeto LIPE-UNEMAT (Laboratório de Instrumentação para o Ensino-UNEMAT) de Barra do Bugres e à FAPEMAT que forneceram parte da infra-estrutura necessária para o desenvolvimento desse trabalho, à FAPESP e ao CNPq pelo financiamento desse projeto e ao LCCA-USP pela infra-estrutura computacional.

Referências

- [1] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed., John Wiley & Sons, 1996.
- [2] I. S. Sokolnikoff, *Mathematical Theory of Elasticity*, 2nd ed., McGraw-Hill Book Company, 1956.
- [3] J. P. Hirth e J. Lothe, *Theory of Dislocations*, McGraw-Hill Book Company, 1967.
- [4] S. Q. Wang e H. Q. Ye, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 5307 (2003).
- [5] M. J. Mehl, J.E. Osburn, D. A. Papaconstantopoulos e B. M. Klein, *Phys.Rev. B* **41**, 10311 (1990).

- [6] O. Ambacher, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31**, 2653 (1998)
- [7] E. Sjöstedt, L. Nordström e D. J. Singh, *Solid State Comm.* **114**, 15 (2000).
- [8] E. Sjöstedt e L. Nordström, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 12485 (2002).
- [9] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin e S.B. Trickey, *Comput. Phys. Commun.* **59**, 399 (1990).
- [10] W. Kohn, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1999).
- [11] P. Hohenberg e W. Kohn, *Phys. Rev. B* **136**, 864 (1964).
- [12] W. Kohn e L. J. Sham, *Phys. Rev. A* **140**, 1133 (1965).