



**UNIVERSIDADE FEDERAL DA FRONTEIRA SUL
CAMPUS CERRO LARGO
FÍSICA – LICENCIATURA**

GUSTAVO STEINMETZ

**PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, MAGNÉTICAS, HIPERFINAS E
ENERGIAS DE FORMAÇÃO DAS LIGAS INTERMETÁLICAS Fe-Al:
UM ESTUDO *AB-INITIO***

CERRO LARGO

2015

GUSTAVO STEINMETZ

**PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, MAGNÉTICAS, HIPERFINAS E
ENERGIAS DE FORMAÇÃO DAS LIGAS INTERMETÁLICAS Fe-Al:
UM ESTUDO *AB-INITIO***

Trabalho de conclusão apresentado ao curso de Física - Licenciatura da Universidade Federal da Fronteira Sul, Campus Cerro Largo, como requisito parcial para a obtenção do título de licenciando em Física.

Orientador: Prof^o Dr. Ney Sodre dos Santos

CERRO LARGO

2015



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL

UNIVERSIDADE FEDERAL DA FRONTEIRA SUL
CAMPUS CERRO LARGO

COORDENAÇÃO DO CURSO DE FÍSICA – LICENCIATURA



Ministério da Educação

Universidade Federal da Fronteira
Sul

Campus Cerro Largo
Rua Major Antônio Cardoso, 590
Cerro Largo-RS CEP 97900-000

(55) 3359-3950
www.uffs.edu.br

CERTIDÃO

Certifico que aos 26 dias do mês de junho de dois mil e quinze, na sala 102 – Auditório do Bloco A, nas dependências da Universidade Federal da Fronteira Sul, *Campus Cerro Largo*, o acadêmico Gustavo Steinmetz, realizou defesa do Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação em Física – Licenciatura, com o seguinte título: “Propriedades estruturais, magnéticas, hiperfinas e energias de formação das ligas intermetálicas Fe-Al: um estudo *ab initio*”, sendo avaliado pelo Professor Orientador Ney Sodré dos Santos e demais membros da Banca Examinadora: Professores Marcos Alexandre Dullius e Thiago de Cacio Luchese, tendo obtido nota 9,0.

Cerro Largo, 26 de junho de 2015.

Professor(a) Orientador(a)

Santos

Ney Sodré dos

Professor(a) Avaliador(a)

Thiago

Professor(a) Avaliador(a)

marcos A. Dullius

Propriedades estruturais, magnéticas, hiperfinas e energias de formação das ligas intermetálicas Fe-Al: um estudo *ab initio*.

Gustavo Steinmetz^{1*}, Ney Sodre^{2**}

Resumo

Propriedades estruturais, magnéticas e as interações hiperfinas das ligas metálicas Fe-Al são calculadas usando o método *Full Potential Linearized Augmented Plane Wave* (FP-LAPW) no esquema da Teoria do Funcional da Densidade (*Density Functional Theory*-DFT). O potencial de troca-correlação utilizado durante os cálculos é a aproximação (*Generalized Gradient Approximation*-GGA-PBE) [1] com spin polarizado. As propriedades estruturais calculadas como o parâmetro de rede (a_0), o módulo da elasticidade (B) e a derivada do módulo da elasticidade em relação a pressão (B') estão em concordância com os dados experimentais disponíveis. As propriedades hiperfinas quando presentes nas estruturas binárias das ligas de Fe-Al são apresentadas, bem como suas propriedades magnéticas. Calculamos as energias de formação (para as ligas binárias Fe-Al), através dos dados obtidos via métodos de primeiros princípios *all electron* presentes no código Wien2k [2].

Palavras-chave:

Cálculo Ab-initio. Estrutura eletrônica. Propriedades estruturais, magnéticas e hiperfinas.

¹ Universidade Federal da Fronteira Sul, Brasil, Cerro Largo

² Universidade Federal da Fronteira Sul, Brasil, Cerro Largo

*e-mail: gustavosteinmetz@hotmail.com

**e-mail: neysodre@if.usp.br

Sumário

Introdução	1
1 Detalhes Computacionais	2
2 Resultados e discussões	2
2.1 Propriedades estruturais	2
2.2 Propriedades Magnéticas	6
2.3 Propriedades Hiperfinas	7
2.4 Energias de Formação	7
3 Conclusão	8
Agradecimentos	9
Referências	9

Introdução

Existe um grande interesse no desenvolvimento de novos materiais para aplicação tecnológica em diferentes áreas. O desenvolvimento das teorias ligadas a estrutura da matéria condensada e aumento da capacidade e desempenho do hardware dos computadores fez com que profissionais das áreas das Ciências e Engenharias passassem a pesquisar de uma forma mais intensa o ramo do estado sólido da matéria.

Os compostos intermetálicos, são os compostos formados a partir da combinação de elementos metálicos da tabela periódica dos elementos, compõem uma classe de materiais metálicos que hoje tem intenso estudo por cientistas de materiais e engenheiros. Estes materiais já são indispensáveis em muitas aplicações e oferecem a possibilidade de proporcionar avanços em, por exemplo, materiais estruturais de alta temperatura para engenharia metalúrgica e materiais magnéticos [3], aplicações nas quais o Fe-Al tem potencial, apesar de ainda se ter dificuldade de mantê-lo estável.

Nosso objetivo neste artigo é investigar as propriedades estruturais, hiperfinas, magnéticas, eletrônicas e as energias de formação dos compostos ordenados Fe-Al utilizando a *Density Functional Theory* (DFT). Não se trata de uma investigação puramente experimental ou teórica em sua totalidade, mas sim, uma abordagem teórica, incluindo a parte computacional para a obtenção dos dados onde utilizamos o código Wien2k e sempre que possível comparando estes dados com resultados da literatura.

Neste trabalho, pretendemos contribuir para o estudo das ligas intermetálicas Fe-Al através da realização de uma investigação de primeiros princípios (*ab-initio*) utilizando o método *Full Potential Linearized Augmented Plane Wave* (FP-LAPW) na teoria DFT e a aproximação *Generalized Gradient Approximation* (GGA) [1] para o potencial de troca e

correlação, utilizando o código Wien2K elaborado e mantido por P. Blaha e K. Schwarz [2].

O uso de cálculos de primeiros princípios oferece uma das mais poderosas ferramentas para a realização de estudos teóricos de um importante número de propriedades físicas e químicas da matéria condensada com grande precisão [4].

1. Detalhes Computacionais

Os cálculos de primeiros princípios são realizados utilizando o potencial da onda plana aumentada (FP-LAPW) linearizado com o método implementado no código WIEN2K. O potencial de troca e correlação é calculado dentro da (GGA) por Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [1]. Neste método FP-LAPW, não existem aproximações da forma da densidade de carga ou potencial. O espaço é dividido em duas regiões, uma esférica *muffin-tin* (MT) em torno dos núcleos, em que as soluções radiais da equação de Schrodinger e suas derivadas da energia são usadas como funções de base, e a região intersticial entre os *muffin-tins*, em que o conjunto de base consiste em ondas planas. A energia de corte que define a separação entre o núcleo e os estados de valência é fixado em $-6,0$ Ry para as estruturas desordenadas Al-A2 e o Fe-A2. Sendo que para as ligas com estequiometrias FeAl-B2, Fe₃Al-D03, FeAl₃-D03 e FeAl-B32 foram utilizados o valor de $-7,0$ Ry para energia de corte.

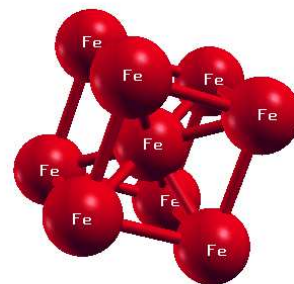
Para integração da zona de Brillouin (*Irreducible Brillouin Zone - IBZ*) foi utilizado o método do tetraedro [5] com 413 k-points. Foram obtidos soluções com precisão de convergência da ordem de 10^{-7} Ry para as energias e para a carga o critério de convergência foi de 10^{-4} u.a.. Para isso, chegou-se à otimização de $R_{MT}K_{max} = 10$ (onde R_{MT} é o menor dos raios de muffin-tin [2] e K_{max} é a onda plana de corte) o processo de otimização para o número de pontos K conduziu para 413 k-points na *IBZ*. Como podemos ver as energias tendem a atingir o equilíbrio na quarta casa depois da vírgula a partir de 413 pontos k.

2. Resultados e discussões

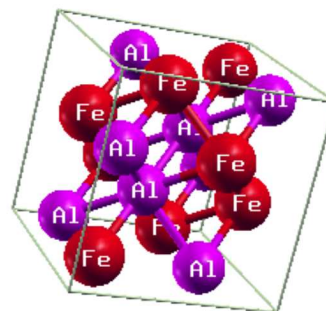
2.1 Propriedades estruturais

As informações que definem os compostos estequiométricos utilizados são mostrados nas tabelas 1, 2 e nas figuras 3 e 4. Comparamos nossos resultados para os parâmetros de rede com os dados teóricos e experimentais apresentados no trabalho de Ormeño e autores [6]. Para as estruturas desordenadas obtivemos: o Al-A2 apresentou um erro percentual de 0,07% em relação ao Ormeño. Já o Fe-A2 apresentou um erro percentual de 0,86% em relação ao dado teórico de Ormeño e 1,2% para o valor experimental por ele mostrado. Para as estruturas estequiométricas ordenadas obtivemos: o FeAl-B2 apresentou um erro percentual de 0,36% em relação ao valor teórico e 1,05% em relação ao experimental; o FeAl-B32 apresentou um erro percentual de 0,5%; e para os compostos ricos em alumínio (FeAl₃-D03) e ricos em ferro (Fe₃Al-D03) encontramos, respectivamente, os erros percentuais de 0,43%

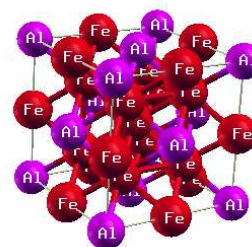
e 0,72% em relação aos dados teóricos de Ormeño. Para o parâmetro de rede experimental do Fe₃Al-D03 encontramos um erro percentual de 0,72%.



(a)



(b)



(c)

Figura 3. Estruturas cristalinas obtidas com o software XCrysDen: a) Fe-A2, b) FeAl-B32, c) Fe₃Al-D03.

Uma maneira de evidenciar a boa aproximação dos nos-

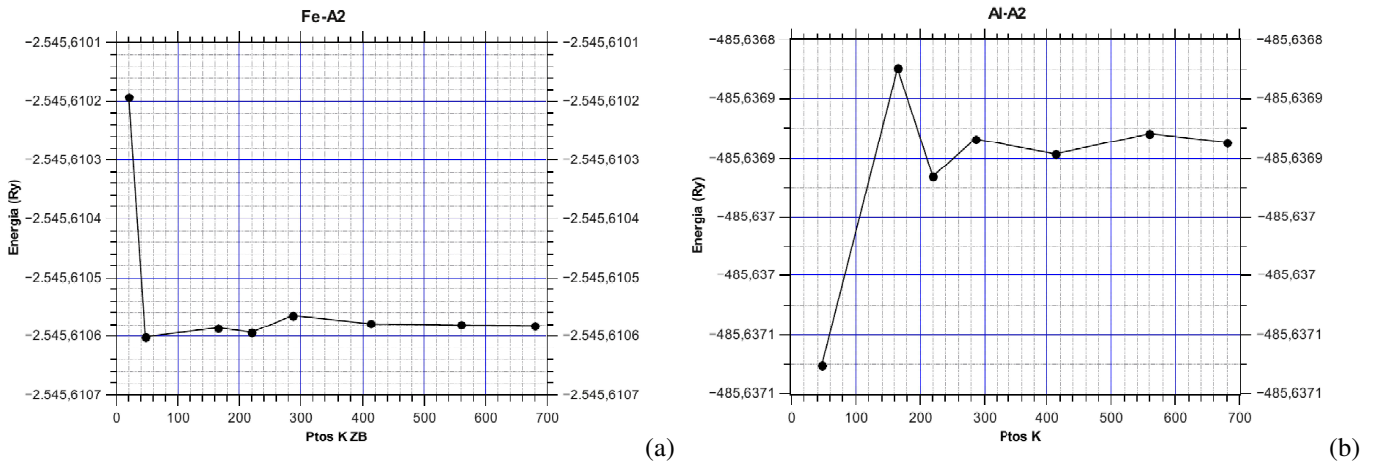


Figura 1. Otimização das estruturas desordenadas em relação ao número de pontos K na zona de Brillouin: (a) Fe-A2, (b) Al-A2.

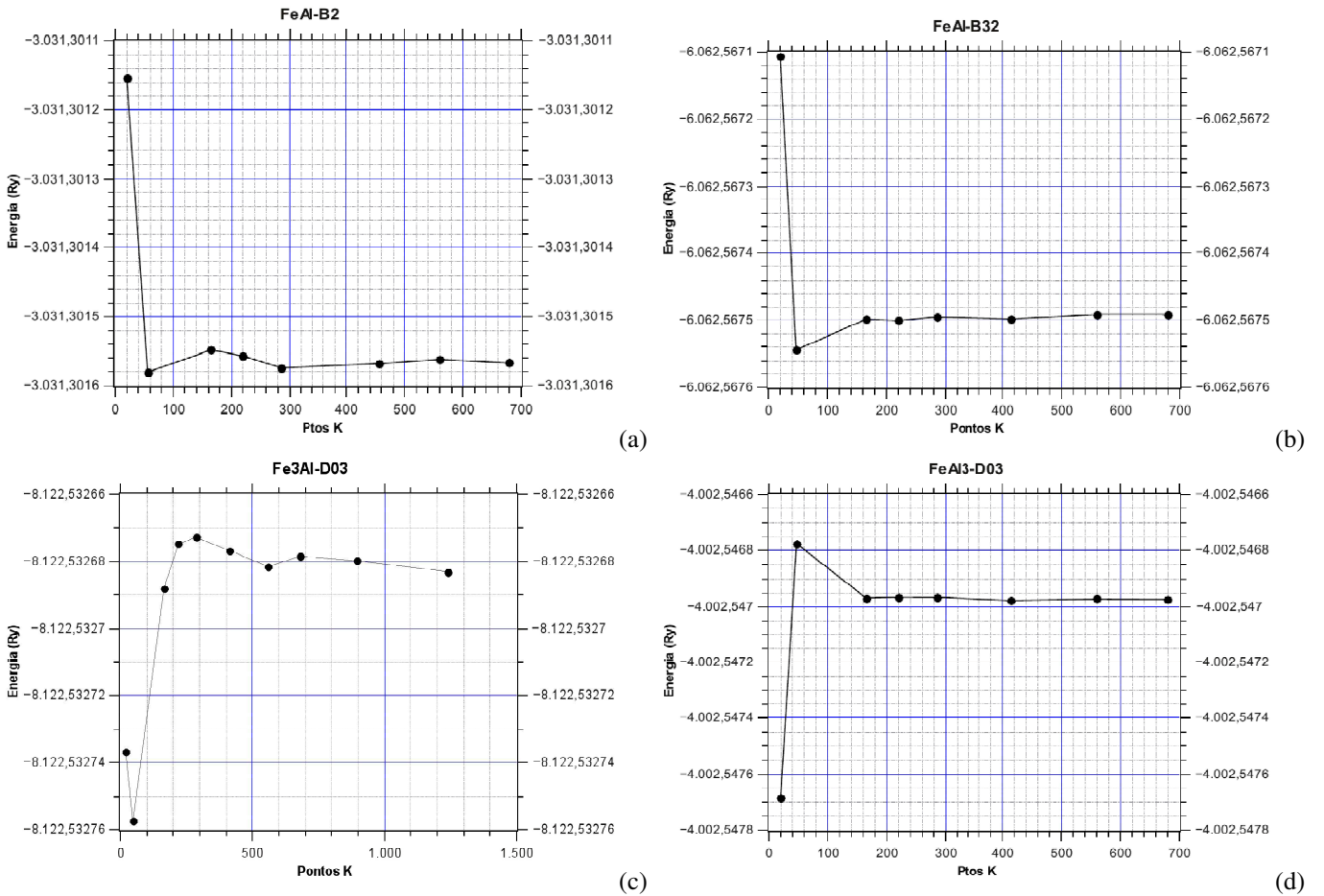


Figura 2. Otimização das ligas estequiometricas FeAl em relação ao número de pontos K na zona de Brillouin: (a) FeAl - B2, (b) - FeAl-B32, (c) - Fe3Al-D03, (d) - FeAl3-D03.

Os dados são observados que os erros percentuais estão em uma escala de medida que os tornam praticamente imperceptíveis aos instrumentos de medidas atuais. Como as medidas dos parâmetros de rede estão na ordem de angstroms seria necessário um equipamento com precisão da mesma ordem de grandeza, para ser capaz de detectar variações superiores a 10^{-8} metros.

Tabela 1. Número do espaço de grupo das estruturas usadas; Parâmetro de rede (LAT) em unidades atômicas ($1u.a. = 0,5291772108(18) \times 10^{-10}$ metros). A2, B2, B32 e D03 são notações cristalográficas.

Elemento	Número	Símbolo	LAT
Al-A2	#229	Im-3m	6.11799
Fe-A2	#229	Im-3m	5.35303
FeAl-B2	#221	Pm-3m	5.43618
FeAl-B32	#227	Fd-3m	11.09280
FeAl3-D03	#225	Fm-3m	11.30640
Fe3Al-D03	#225	Fm-3m	10.8632

Tabela 2. posições dos átomos na célula unitária. Multiplicidade na célula dos átomos (MULT).

Elemento	X	Y	Z	átomo	MULT
Al-A2	1	0	0	Al	1
Fe-A2	1	0	0	Fe	1
FeAl-B2	1	0	0	Fe	1
	2	0.5	0.5	Al	1
FeAl-B32	1	0.125	0.125	Fe	2
	2	0.375	0.375	Al	2
FeAl3-D03	1	0	0	Al	1
	2	0.5	0.5	Fe	1
	3	0.25	0.25	Al	2
Fe3Al-D03	1	0	0	Al	1
	2	0.5	0.5	Fe	1
	3	0.75	0.75	Fe	2

Os gráficos do comportamento da energia versus o volume expressam o método utilizado para se alcançar o estado fundamental da estrutura, ajustando os dados com a Equação de Estado de Birch-Murnaghan [7]. Os gráficos da energia total em função do volume são mostrados nas figuras 5 e 6. Desta forma, podemos obter a constante de equilíbrio da estrutura ou parâmetro de rede (a_0), o módulo da elasticidade (B) e a derivada em relação a pressão do módulo da elasticidade (B'). Estes valores são apresentados na Tabela 3.

A energia total por célula unitária de FeAl-B2 na estrutura cúbica é mostrada na Fig. 5. O estado fundamental calculado para a estrutura B2 apresentou um parâmetro de rede de ($a_0 = 5.35u.a.$) que está em concordância com o valor experimental, com um erro percentual de 2,5% em relação ao dado presente na literatura [8] para o parâmetro de rede ($a_{exp} = 5.49u.a.$).

Quando se analisa o comportamento tensão-deformação, o grau que uma estrutura se deforma depende da magnitude

Tabela 3. V_0 ($u.a.$): volume mínimo medido em unidades atômicas; B (GPa): módulo da elasticidade; B' (derivada de B em relação a pressão); E_T (Ry): energia total medida em Rydberg.

Elemento	V_0	B (GPa)	B'	E_T
Al-A2	115.1117	66.9040	0.8821	-485.63689645
Fe-A2	76.8805	173.6341	6.5266	-2545.61057857
FeAl-B2	161.1069	167.5293	1.7356	-3031.30156801
FeAl-B32	341.2505	142.1399	4.4167	-6062.56749484
FeAl3-D03	361.3365	115.6654	6.2104	-4002.54697868
Fe3Al-D03	320.4935	150.6012	4.2232	-8122.53267677

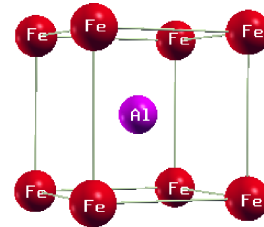


Figura 4. Estrutura cristalina do FeAl-B2 obtida com o software XCrysDen [9].

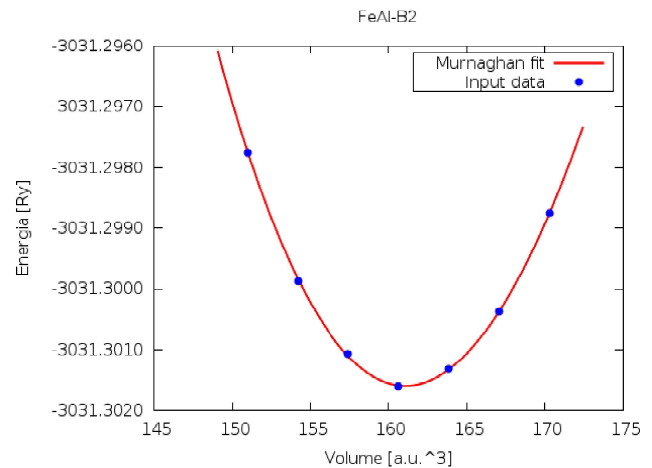


Figura 5. A dependência da energia total de FeAl-B2 em relação ao volume da célula unitária.

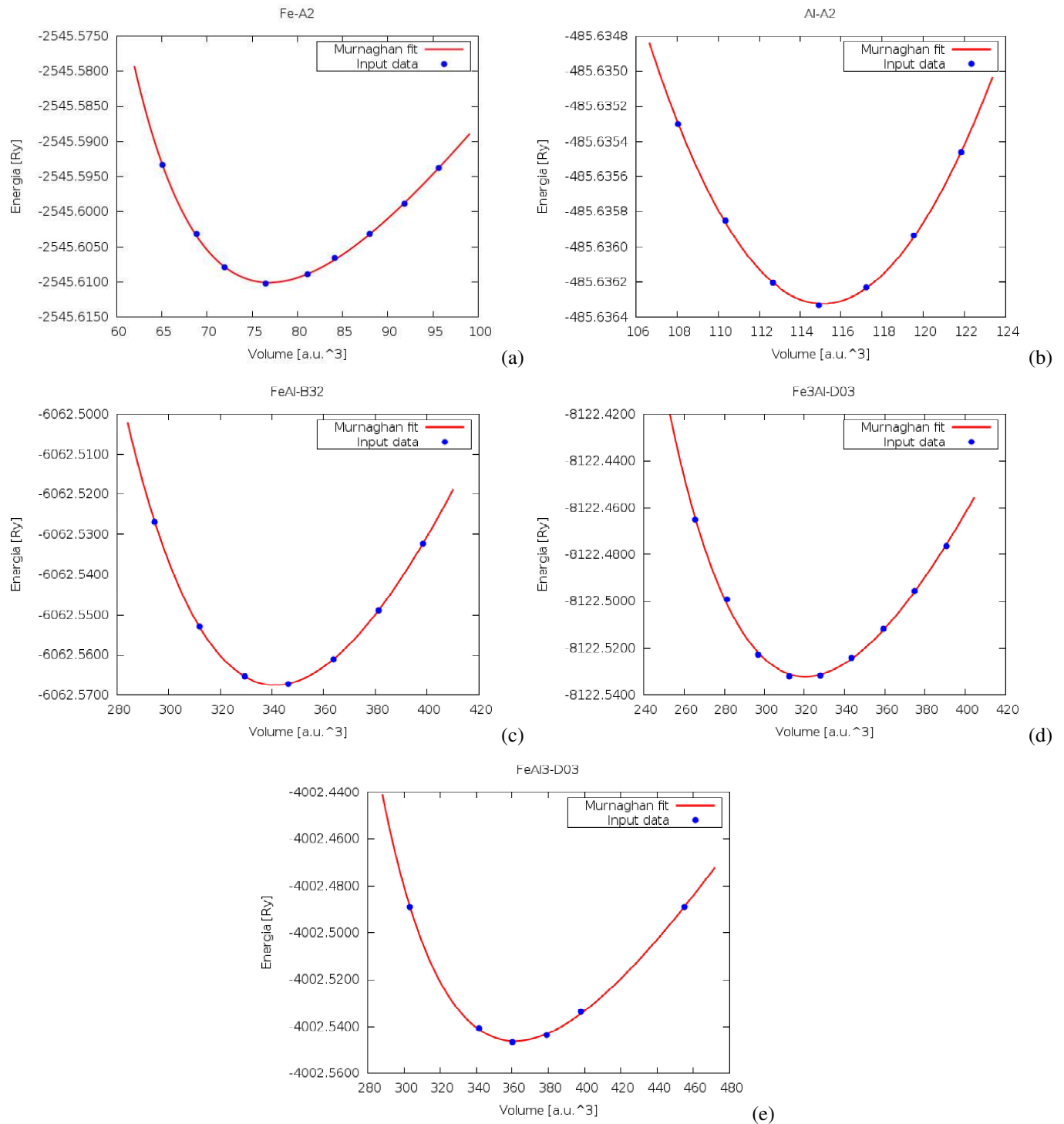


Figura 6. A dependência da energia total em relação ao volume da célula unitária para: (a) Fe-A2, (b) Al-A2, (c) FeAl-B32, (d) Fe3Al-D03 (e) FeAl3-D03.

da tensão imposta. Para a maioria dos metais submetidos a uma tensão de tração em níveis relativamente baixos, a tensão e a deformação são proporcionais entre si. Essa relação é conhecida como lei de Hooke e a constante de proporcionalidade é o módulo de elasticidade B ou módulo de Young [10].

O módulo da elasticidade (*bulk modulus* (B)) é uma medida da rigidez do cristal, assim, um grande valor de B implica que menor será a deformação elástica resultante de uma tensão de engenharia. Tanto os resultados experimentais, quanto os teóricos da literatura para a liga intermetálica FeAl-B2 são apresentados e comparados com os nossos dados na tabela 4. Podemos ver que nossos resultados estão em melhor concordância com os dados experimentais em relação aos de Nguyen et al [11].

Tabela 4. Parâmetro de rede calculado a_0 (Å), módulo de elasticidade B (GPa) e derivada do módulo de elasticidade em relação a pressão (B'), para o FeAl-B2.

Composto	Parâmetro de rede a_0 (Å)	B_0 (GPa)	(B')
FeAl-B2			
calc.	2.8766	167.5293	1.7356
teor. ^{a)}	2.8434	183	-
Exp. ^{a)}	2.9027	152	-

^{a)} Ref. [11];

2.2 Propriedades Magnéticas

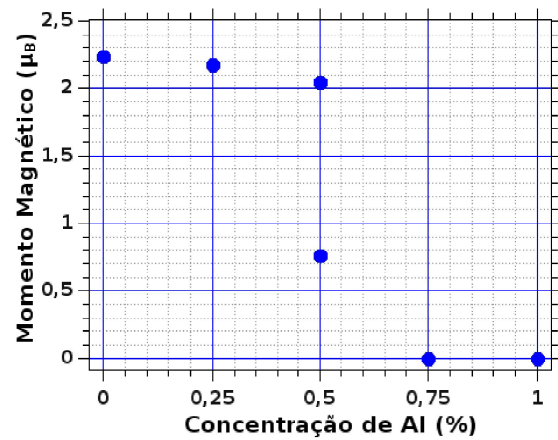
Os comportamentos magnéticos totais para os sítios de Ferro são resumidos na tabela 6. Os resultados obtidos neste trabalho via FP-LAPW para o momento magnético local são comparados com os resultados experimentais obtidos a partir da literatura [6]. Com spin-polarizado a maioria dos compostos com estequiometria BCC apresenta característica ferromagnética no estado fundamental. As exceções são FeAl3-D03, Al-A2 e FeAl-B2 em que obtivemos valores próximos a zero para momento magnético. Os nossos resultados teóricos concordam com os resultados presentes na literatura dentro de uma margem de erro aceitável, como podemos ver na tabela 5, na qual observamos um erro percentual sempre inferior a 10%.

Tabela 5. Erros percentuais do momento magnético em relação ao trabalho de Ormeño.

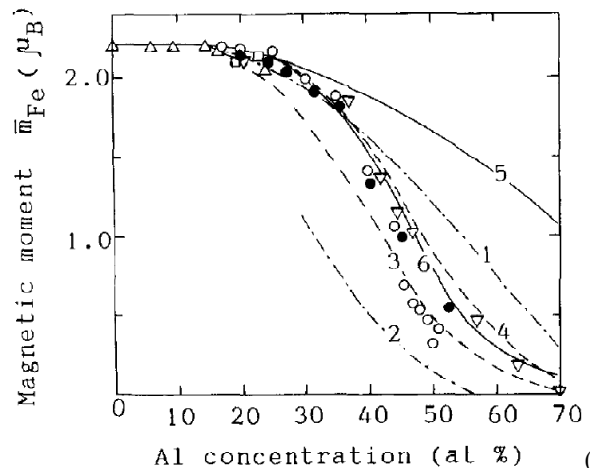
Elemento	Erro %
Fe-A2	0,6
Fe3Al-D03	9,9
FeAl-B2	3,6
FeAl-B32	0,9
FeAl3-D03	0

Os dados calculados para o momento magnético dos compostos foram comparados com os dados do trabalho de Orme-

ño et al [6], onde o momento magnético para o sítio de Ferro para a estequiometria desordenada e ordenada Fe-A2 e Fe3Al-D03 apresentaram um erro percentual em relação aos dados experimentais de respectivamente, 0,6% e 9,9%. Para os compostos estequiométricos, FeAl-B2 e FeAl-B32, os erros percentuais em relação aos dados aqui calculados são 3,6% e 0,9%. Para a estequiometria FeAl3-D03, tanto os dados de Ormeño quanto os apresentados na tabela 6 estão em completa concordância com os dados experimentais [12] visto que, experimentalmente o momento magnético para o FeAl3-D03 é nulo. Se observarmos a precisão da medição experimental do momento magnético, ambas podem ser consideradas como um valor nulo para o momento. Na figura 7 é ilustrado o comportamento magnético das estruturas estequiométricas Fe-Al em relação a concentração de alumínio que está em ótima concordância com os gráficos experimentais dados na referência [13].



(a)



(b)

Figura 7. Momento magnético em função da concentração de Al nos compostos ferro alumínio BCC comparados com as tendência de comportamento presentes no trabalho de Yelsukov et al [13].

Com a adição inicial de alumínio a saturação das ligas caem a uma taxa de $2.2 \mu_B$ por átomo de alumínio [14], mas caem mais rapidamente à medida que o composto se apro-

xima da estrutura FeAl3-D03. Essa é uma explicação experimental para a redução do magnetismo, mas, a explicação teórica para a queda do momento magnético para as estequiometrias Fe-Al ainda não foi elaborada, sendo um problema em aberto.

Os dados apresentados e comparados com os trabalhos de Ormeño também estão em concordância em ordem de grandeza com os dados para o momento magnético apresentados no trabalho de Plazaola et al [15].

Tabela 6. Momentos magnéticos totais (MM-TOT) em magneton de Bohr (μ_B), nos sítios de Fe na posição 1 e na posição 2, se houver (00i, i = 1,2).

Elemento	001	002	MM-TOT (Fe)
Al-A2	0	-	0
Fe-A2	2.23330	-	2.2333
FeAl-B2	0.75608	-	0.75608
FeAl-B32	2.04839	-	2.04839
FeAl3-D03	-0.00006	-	-0.00006
Fe3Al-D03	2.42198	1.93034	2.17616

2.3 Propriedades Hiperfinas

Entende-se por *interações hiperfinas* aquelas interações que envolvem multipolos magnéticos e elétricos nucleares. Momentos de multipolo interagem com campos elétricos e magnéticos, quer gerados dentro da matéria condensada, quer por fontes externas, dando origem ao *espectro hiperfino* [16].

Obtivemos os campos hiperfinos para cada sítio das estruturas estequiométricas estudadas e os resultados são apresentados na tabela 7.

Tabela 7. Campos hiperfinos totais (HFF) em (kGauss) por sítio.

Elemento	HFF-1	HFF-2	HFF-3
Al-A2	(Al) 0	-	-
Fe-A2	(Fe) -309.967	-	-
FeAl-B2	(Fe) -75.781	(Al) -39.089	-
FeAl-B32	(Fe) -201.877	(Al) 2.689	-
FeAl3-D03	(Al) -0.012	(Fe) -0.022	(Al) 0.015
Fe3Al-D03	(Al) -44.273	(Fe) -309.494	(Fe) -255.245

O campo magnético hiperfino \vec{B}_{hf} é medido, por exemplo, por espectroscopia Mössbauer e pode ser expresso como a soma vetorial de três componentes:

$$\vec{B}_{hf} = \vec{B}_d + \vec{B}_o + \vec{B}_c \quad (1)$$

onde \vec{B}_d é o termo de dipolo, \vec{B}_o é o termo orbital e \vec{B}_c é o termo de contato de Fermi. Para sistemas e compostos de ligas de ferro e alumínio, o termo orbital é pequeno porque o valor esperado do momento orbital, $\langle L \rangle$, é congelado pelo campo cristalino, e o termo dipolar é da ordem de 2 T, ou seja, os dois termos são muito menores do que \vec{B}_{hf} [17].

Se negligenciarmos os dois primeiros termos e considerarmos apenas o termo dominante na equação 1, B_{hf} pode

ser expresso da seguinte forma [17]:

$$B_{hf} = a' \sum [\rho_i^\uparrow(0) - \rho_i^\downarrow(0)] \quad (2)$$

Onde o termo representado pela somatória na equação 2 representa o valor médio do momento magnético. Sendo que os termos $\rho_i^\uparrow(0)$ e $\rho_i^\downarrow(0)$ são as densidades de spin *up* e *down* no estado fundamental.

Nossa constante a' para FeAl-B2 vale $-100.2288 \text{ kG}/\mu_B$. Para FeAl-B32 vale $-98.5539 \text{ kG}/\mu_B$. Para FeAl3-D03 vale $366.6666 \text{ kG}/\mu_B$. Para Fe3Al-D03 vale $-129.7558 \text{ kG}/\mu_B$ onde para Dubiel [17] encontra um valor entre $-171 \text{ kG}/\mu_B$ e $-121 \text{ kG}/\mu_B$.

Akai et al [18] em seu trabalho, traz um valor de campo hiperfino para Fe-fcc de $-339 \text{ kG}/\mu_B$. S. Cottenier e M. Rots em comunicação privada, livro a ser lançado (Hyperfine Interactions and their Applications in Nuclear Condensed Matter Physics: a microscopic introduction) obteve no capítulo 5, o valor do campo hiperfino para a estrutura desordenada de Fe-A2 como sendo de -314 kGauss e que está em ótima concordância com o valor obtido nesse trabalho. O autor Johnson [14] apresenta valores para o campo hiperfino do Fe3Al-D03 e FeAl-B32, sendo o primeiro -318 kGauss e o segundo como -242 kGauss . Para a estrutura Fe3Al-D03 o desvio percentual do nosso dado em relação aquele apresentado por Johnson foi de 2,7% ao passo que para a estrutura FeAl-B32, tal erro foi de 16,6%.

Traçando o gráfico do comportamento do campo hiperfino em relação a concentração de alumínio percebemos que sua tendência é linear, ilustrado na figura 8. A reta traçada via regressão linear utilizando o método dos mínimos quadrados mostra uma concordância com os gráficos experimentais dados nas referências [19, 20].

2.4 Energias de Formação

A Tabela 8 mostra as energias de formação calculadas para as estruturas estequiométricas ordenadas estudadas neste trabalho em comparação com aqueles do trabalho [6]. A Figura 9 apresenta o diagrama de fase para o estado fundamental para as ligas estequiométricas em temperatura de 0 K. Como pode ser observado há existência da estrutura estequiométrica ordenada Fe3Al-D03 submersa por estruturas desordenadas A2 e estruturas estequiométricas B2 em equilíbrio com fases ordenadas e desordenadas. Isto qualitativamente concorda com o diagrama de fase experimental obtido por [6] para a composição de ferro-alumínio a temperatura de 0 K.

A energia de formação é calcula usando as energias totais E_T presentes na tabela 3 da seguinte forma:

$$F_E = \frac{E_{T(Fe-Al)} - n_1(E_{T(Al-A2)}) - n_2(E_{T(Fe-A2)})}{n_1 + n_2} \quad (3)$$

A energia de formação para FeAl-B2 apresenta um erro percentual de 2,9%. FeAl-B32 apresenta um erro percentual de 5,7%. FeAl3-D03 apresenta um erro percentual de 11,5%

e o Fe₃Al-D03 um erro percentual de 1,5% em relação às energias de formação calculadas por Ormeño et al [6] e presentes na tabela 8.

Tabela 8. Energias de formação (F_E) em (kJ/mol), para as estequiometrias ordenadas e os erros percentuais (E%).

Elemento	F_E	$F_E^{(a)}$	E%
FeAl-B2	-35.507533	-36.56	2.9
FeAl-B32	-23.809803	-25.25	5.7
FeAl ₃ -D03	-8.438484	-9.54	11.5
Fe ₃ Al-D03	-21.01997	-21.35	1.5

a) Ref. [6];

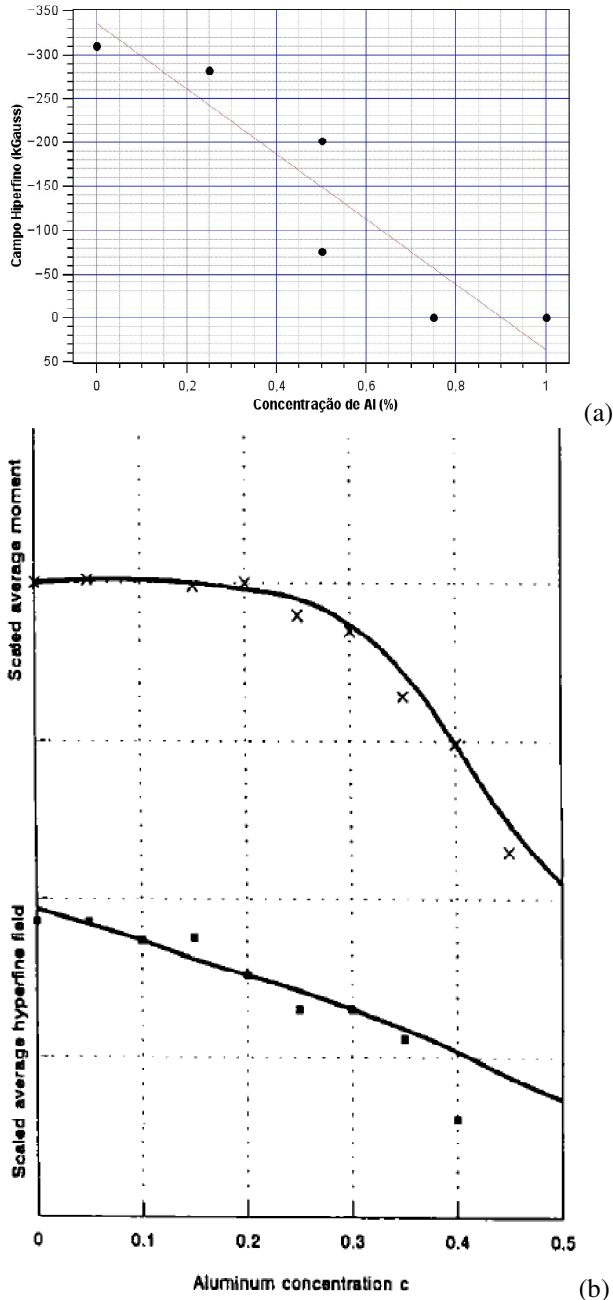


Figura 8. Campo hiperfino para as estruturas BCCs (Fe-Al) em função da concentração de Al. A tendência de comportamento é comparada com os trabalhos de Stronach et al e Elzain et al [19, 20].

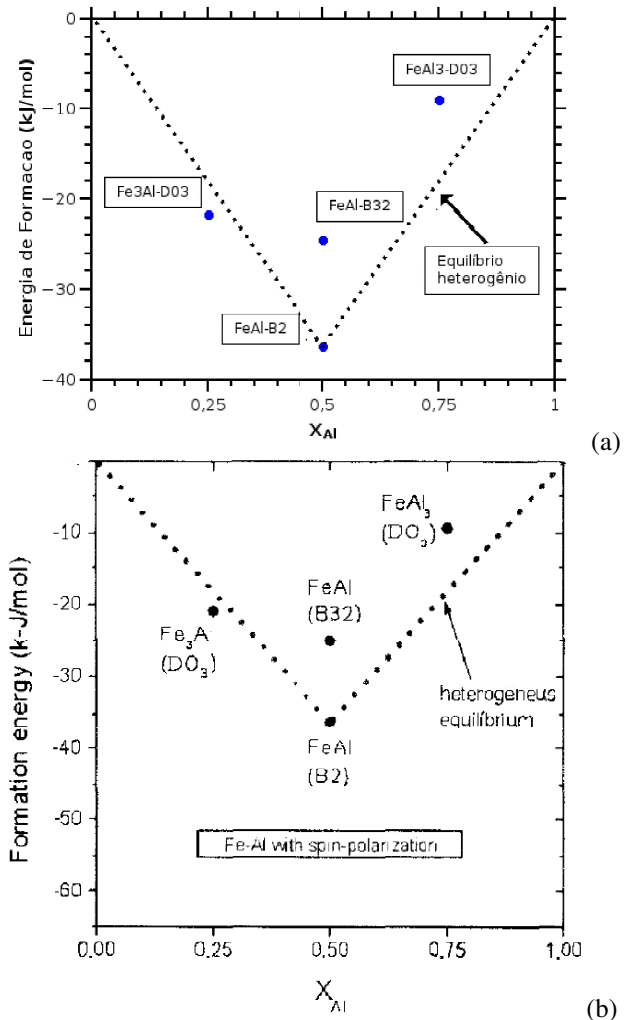


Figura 9. Energia de formação Comparado com Ormeño [6]

3. Conclusão

Apresentamos neste trabalho o estudo das propriedades estruturais, magnéticas, hiperfinas e a energia de formação

das ligas intermetálicas Fe-Al. Mostramos que os cálculos de estrutura eletrônica usando o método *FP-LAPW* com *Generalized gradient Approximation (GGA)* na estrutura da *Teoria do Funcional da Densidade* nos fornece dados consistentes com os dados experimentais. O parâmetro de rede encontrado está em bom acordo com os resultados experimentais na ordem de menos de 1,2% de erro percentual e confirma nossa preposição. Conseguimos prever muitas propriedades estruturais como por exemplo: o módulo da elasticidade diminuindo o erro da literatura em 50% em relação ao valor experimental para a estrutura estequiométrica ordenada FeAl-B2. Para as propriedades magnéticas encontramos um erro percentual de 0,6% para o momento magnético para o Fe-A2 experimental. Nossos dados para o campo hiperfino, quando analisado a tendência de comportamento em relação a concentração de alumínio, mostra a mesma tendência de comportamento com todas as referências experimentais encontradas. O campo hiperfino encontrado para a estrutura Fe3Al-D03 possui um erro percentual de 2,7% em relação aos dados experimentais. Para a energia de formação a metodologia apresentada fornece resultados consistentes com a literatura, tanto experimental quanto teórica.

A metodologia apresentada neste trabalho se mostrou um método viável e barato para prever o comportamento de materiais fortemente correlacionados.

Agradecimentos

Agradecemos a Dra Helena Maria Petrilli (IFUSP) por nos permitir o uso do software aqui apresentado bem como ao Dr. Cláudio G. Schön (POLI-USP) pelas discussões extremamente profícuas e que enriqueceram consideravelmente o bom andamento do trabalho. A Intel por nos ceder os compiladores e as bibliotecas matemáticas utilizadas no desenvolvimento do trabalho.

Referências

- [1] J. P. PERDEW, K. BURKE, AND M. ERNZERHOF, *Generalized gradient approximation made simple*, Phys. Rev. Lett., 77 (1996), pp. 3865–3868.
- [2] P. BLAHA, K. SCHWARZ, G. K. H. MADSEN, D. KVASNICKA, AND J. LUITZ, **WIEN2k**, *An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria), 2001. ISBN 3-9501031-1-2
- [3] M. J. MEHL, B. M. KLEIN, AND D. A. PAPACONSTANTOPOULOS, *Intermetallic Compounds: Principles and Applications*, vol. 1, John Wiley & Sons Ltd., London, 1994, ch. First-Principles Calculation of Elastic Properties.
- [4] S. COTTENIER, *Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction*, 2002-2013 2nd ISBN 978-90-807215-1-7 (freely available at http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks).
- [5] P. E. BLÖCHL, O. JEPSEN, AND O. K. ANDERSEN, *Improved tetrahedron method for brillouin-zone integrations*, Phys. Rev. B, 49 (1994), pp. 16223–16233.
- [6] P. G. GONZALES-ORMEÑO, H. M. PETRILLI, AND C. G. SCHÖN, *Ab-initio calculations of the formation energies of BCC-based superlattices in the Fe – Al*, Calphad, 26 (2002), pp. 573 – 582.
- [7] F. D. MURNAGHAN, *The compressibility of media under extreme pressures*, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 30 (1944), pp. 244–247.
- [8] P. VILLARS AND R. D. CALVERT, *Pearson’s handbook of crystallographic data for Intermetallic phases*, ASM International, Metals Park-OH, USA, 1985.
- [9] A. KOKALJ, 2003, Vol. 28, p. 155. Code available from <http://www.xcrysden.org/>.
- [10] W. D. CALLISTER, *Ciência e engenharia de materiais: uma introdução*, LTC, Rio de Janeiro, 2013.
- [11] D. N. MANH, A. M. BRATKOVSKY, AND D. G. PETTIFOR, *Quantum mechanical predictions in intermetallics modelling*, Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, 351 (1995), pp. 529 – 542.
- [12] P. G. GONZALES-ORMEÑO, R. N. NOGUEIRA, C. G. SCHÖN, AND H. M. PETRILLI, *Magnetic behavior of Fe sites in Fe–Mo–Al alloys: The role of the first neighborhood*, Calphad, 29 (2005), pp. 222 – 229.
- [13] E. YELSUKOV, E. VORONINA, AND V. BARINOV, *Mössbauer study of magnetic properties formation in disordered Fe-Al alloys*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 115 (1992), pp. 271 – 280.
- [14] C. E. JOHNSON, M. S. RIDOUT, AND T. E. CRANSHAW, *The Mössbauer effect in iron alloys*, Proceedings of the Physical Society, 81 (1963), p. 1079.
- [15] F. PLAZAOLA, E. APIÑANIZ, D. M. RODRIGUEZ, E. LEGARRA, AND J. S. GARITAONANDIA, *Fe-Al alloy’s magnetism*, Advanced Magnetic Materials, (2012), pp. 133 – 170.
- [16] I. S. OLIVEIRA AND A. P. GUIMARÃES, *Interações hiperfinas*, Revista Brasileira de Ensino de Física, 22 (2000), pp. 353 – 359.
- [17] S. DUBIEL, *Relationship between the magnetic hyperfine field and the magnetic moment*, Journal of Alloys and Compounds, 488 (2009), pp. 18 – 22.
- [18] H. AKAI, M. AKAI, S. BLÜGEL, B. DRITTLER, H. EBERT, K. TERAKURA, R. ZELLER, AND P. H. DEDERICHS, *Theory of hyperfine interactions in metals*, Progress of Theoretical Physics Supplement, (1990), pp. 11 – 77.
- [19] C. E. STRONACH, W. J. KOSSLER, J. LINDEMUTH, K. G. PETZINGER, A. T. FIORY, R. P. MINNICH, W. F.

LANKFORD, J. J. SINGH, AND K. G. LYNN, *Muon hyperfine fields in Fe(Al) alloys*, Phys. Rev. B, 20 (1979), pp. 2315–2322.

- [20] M. E. ELZAIN AND A. A. YOUSIF, *Magnetism in BCC Fe-Al alloy*, Hyperfine Interactions, 94 (1994), pp. 1873 – 1878.