



UNIVERSIDAD DE ORIENTE
NÚCLEO DE SUCRE
ESCUELA DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ELÁSTICAS DEL ALUMINIO PURO Y
DOPADO CON VACANCIAS E IMPUREZAS DE
ESCANDIO, CROMO, NÍQUEL Y COBRE BAJO PRESIÓN
(Modalidad: Tesis de Grado)

JESÚS ANDRÉS BELTRÁN MAICÁN

TRABAJO DE GRADO PRESENTADO COMO REQUISITO PARCIAL PARA
OPTAR AL TÍTULO DE LICENCIADO EN FÍSICA

Cumaná, 2020



UNIVERSIDAD DE ORIENTE
NÚCLEO DE SUCRE
ESCUELA DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ELÁSTICAS DEL ALUMINIO PURO Y
DOPADO CON VACANCIAS E IMPUREZAS DE
ESCANDIO, CROMO, NÍQUEL Y COBRE BAJO PRESIÓN
(Modalidad: Tesis de Grado)

JESÚS ANDRÉS BELTRÁN MAICÁN

TRABAJO DE GRADO PRESENTADO COMO REQUISITO PARCIAL PARA
OPTAR AL TÍTULO DE LICENCIADO EN FÍSICA

Cumaná, 2020

**ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ELÁSTICAS DEL ALUMINIO PURO Y
DOPADO CON VACANCIAS E IMPUREZAS DE ESCANDIO, CROMO,
NÍQUEL Y COBRE BAJO PRESIÓN**

Aprobado en nombre de la UNIVERSIDAD DE ORIENTE por el siguiente jurado
examinador:

Dr. Ney J. Luiggi A.
Asesor

Juan C. Ruiz G.
Jurado

María T. Malavé R.
Jurado

INDICE

DEDICATORIA.....	V
AGRADECIMIENTOS	VI
LISTA DE TABLAS.....	VII
LISTA DE FIGURAS	VIII
RESUMEN	XII
INTRODUCCIÓN	1
MARCO TEÓRICO.....	3
1.1. El problema de muchos cuerpos.....	3
1.1.1. Métodos ab initio	4
1.1.2. Aproximación de Born-Oppenheimer.....	4
1.2. Teoría del Funcional de la Densidad.....	6
1.2.1. Funcionales de Intercambio y Correlación.....	9
1.2.2. Base de ondas planas	11
1.2.3. Ciclo autoconsistente	13
1.2.4. Método FP-LAPW	15
1.2.5. Código Wien2k.....	19
1.3. Propiedades mecano-elásticas	20
1.3.1. Elasticidad en cristales	21
1.3.2. Ecuación de estado de Birch-Murnaghan.....	25
MODELO DE CÁLCULO	26
2.1. Optimización de volumen.....	27
2.2. Obtención de las constantes elásticas	27
RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	29
3.1. Estudio del Al.....	29
3.1.1. Celda unitaria y parámetro de red optimizado.	29
3.1.2. Estructura de bandas y densidad de estados.	31
3.1.3. Constantes y módulos elásticos.	35
3.2. Estudio del Al3-Sc.....	39
3.2.1. Celda unitaria y parámetro de red optimizado.	39
3.2.2. Estructura de bandas y densidad de estados.	40
3.3.3. Constantes y módulos elásticos.	44
3.3. Estudio del Al3-Cr.....	48

3.3.1. Celda unitaria y parámetro de red optimizado.	48
3.3.2. Estructura de bandas y densidad de estados.	49
3.3.3. Constantes y módulos elásticos.	54
3.4. Estudio del Al ₃ -Ni	58
3.4.1 Celda unitaria y parámetro de red optimizado.	58
3.4.2. Estructura de bandas y densidad de estados.	59
3.4.3. Constantes y módulos elásticos.	63
3.5. Estudio del Al ₃ -Cu	67
3.5.1 Celda unitaria y parámetro de red optimizado.	67
3.5.2. Estructura de bandas y densidad de estados.	68
3.5.3. Constantes y módulos elásticos.	73
3.6. Estudio del Al ₃ -v.....	76
3.6.1 Celda unitaria y parámetro de red optimizado.	76
3.6.2. Estructura de bandas y densidad de estados.	78
3.6.3. Constantes y módulos elásticos.	82
3.7. Comparación de los módulos elásticos de todas las estructuras.....	86
CONCLUSIONES	91
BIBLIOGRAFÍA	93
HOJA DE METADATOS.....	96

DEDICATORIA

A la memoria de mi abuelo, Eustacio Maicán; quien siempre amó a los nietos, a quienes llamaba sobrinos.

A mi abuela Isabel Barrios, a quien siempre tengo en mi corazón.

A mis padres Jesús Darío Beltrán y Liseth Maicán, quienes cada vez me sorprenden más con sus acertados consejos.

A Esther Rosales, quien siempre me ha impulsado a avanzar en la vida. A Carol Rodríguez, Andrés Dosil, Ariana Hernández y a toda la gente que he conocido en este arduo viaje.

AGRADECIMIENTOS

Al núcleo de Sucre de la universidad de Oriente, la casa más alta, la que ha sido un hogar para mí en estos últimos años de mi vida. A todos los profesores quienes han contribuido en mi educación y destacar entre ellos al Profesor Ney Luiggi, cuya dedicación académica no solo ha hecho posible éste trabajo sino también muchos otros. Agradezco especialmente el haberme brindado su apoyo constante, su orientación y su experiencia.

Agradezco a todos los amigos que he conocido en la universidad y en especial a Laurence Marcano, Andrés Dosil, Carol Rodríguez, Esther Rosales, Daniel Colmenares, Albert Ramos, y a María José Cortez. Con quienes he compartido mis años de carrera universitaria. También quiero agradecer a un amigo muy especial llamado Jaunt, que siempre me ha levantado cada vez que lo he necesitado.

También agradezco enormemente a todos a quienes he dedicado este trabajo de grado, sin ellos no lo habría podido lograr. ¡Muchas gracias a todos!

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Comparación entre el parámetro de red del Al obtenidos en este trabajo con las referencias [3] y [36].	30
Tabla 2. Constantes elásticas del Al bajo presión.....	35
Tabla 3. Comparación entre los resultados obtenidos en el presente trabajo para la red de Al a $p = 0$ con los obtenidos por Golesorkhtabar [3], y con los valores mostrados en las Ref. [36] y [37].	38
Tabla 4. Parámetro de red optimizado para el Al ₃ -Sc a $p = 0$	40
Tabla 5. Constantes elásticas del Al ₃ -Sc.....	44
Tabla 6. Parámetro de red optimizado para el Al ₃ -Cr a $p = 0$	49
Tabla 7. Constantes elásticas del Al ₃ -Cr.	54
Tabla 8. Parámetro de red optimizado para el Al ₃ -Ni a $p = 0$	59
Tabla 9. Constantes elásticas del Al ₃ -Ni.....	63
Tabla 10. Parámetro de red optimizado para el Al ₃ -Cu a $p = 0$	68
Tabla 11. Constantes elásticas del Al ₃ -Cu.	73
Tabla 12. Parámetro de red optimizado para el Al ₃ -v a $p = 0$	77
Tabla 13. Constantes elásticas del Al ₃ -v.	82

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Representación gráfica del enfoque de Khon-Sham.....	7
Figura 2. (a) El potencial periódico de la red. (b) La función periódica de la onda de Bloch. (c) Onda Plana del electrón libre. (d) Onda de Bloch.	12
Figura 3. Esquema representativo del ciclo auto-consistente para resolver las ecuaciones de Khon-Sham.	15
Figura 4. Descripción gráfica del comportamiento de una onda plana dentro de una esfera de <i>muffin-tin</i> ($S\alpha$) y en la región intersticial.	16
Figura 5. División de la celda unitaria en esferas atómicas (I) y región intersticial (II).....	20
Figura 6. Celda unitaria del Al grupo espacial 255.....	29
Figura 7. Optimización del volumen de la red de Al.	30
Figura 8. Estructura de bandas del Al a presión cero.	31
Figura 9. Estructura de bandas del Al a -6GPa.....	32
Figura 10. Estructura de bandas del Al a 6GPa.....	32
Figura 11. Densidad de estados del Al a presión cero.....	33
Figura 12. Densidad de estados del Al a -6GPa.	34
Figura 13. Densidad de estado del Al a 6GPa.	34
Figura 14. Módulo de compresibilidad para el Al a presiones de -6 a 6GPa.....	36
Figura 15. Módulo de cizalladura para el Al a presiones de -6 a 6GPa	36
Figura 16. Módulo de Young para el Al a presiones de -6 a 6GPa.	37
Figura 17. Radio de Poisson para el Al a presiones de -6 a 6GPa.	37
Figura 18. Magnitud B/G Sc a presiones de -6 a 6GPa.....	38
Figura 19. Celda unitaria del Al ₃ -Sc, grupo espacial 221.	39
Figura 20. Optimización del volumen de la red de Al ₃ -Sc.....	39
Figura 21. Estructura de bandas del Al ₃ -Sc a presión cero.	40
Figura 22. Estructura de bandas del Al ₃ -Sc a -6GPa.	41

Figura 23. Estructura de bandas del Al ₃ -Sc a 6GPa.....	41
Figura 24. Densidad de estados del Al ₃ -Sc a presión cero.	43
Figura 25. Densidad de estados del Al ₃ -Sc a -6GPa.....	43
Figura 26. Densidad de estados del Al ₃ -Sc a 6GPa.....	44
Figura 27. Módulo de compresibilidad para el Al ₃ -Sc a presiones de -6 a 6 GPa.....	45
Figura 28. Módulo de cizalladura para el Al ₃ -Sc a presiones de -6 a 6GPa.	46
Figura 29. Módulo de Young para el Al ₃ -Sc a presiones de -6 a 6 GPa.....	46
Figura 30. Radio de Poisson para el Al ₃ -Sc a presiones de -6 a 6 GPa.....	47
Figura 31. Magnitud B/G para el Al ₃ -Sc a presiones de -6 a 6GPa.	48
Figura 32. Celda unitaria del Al ₃ -Cr, grupo espacial 221.....	48
Figura 33. Optimización del volumen de la red de Al ₃ -Cr.	49
Figura 34. Estructura de bandas del Al ₃ -Cr a presión cero.	50
Figura 35. Estructura de bandas del Al ₃ -Cr a -6GPa.....	51
Figura 36. Estructura de bandas del Al ₃ -Cr a 6GPa.....	51
Figura 37. Densidad de estados del Al ₃ -Cr a presión cero.....	52
Figura 38. Densidad de estados del Al ₃ -Cr a -6GPa.	53
Figura 39. Densidad de estados del Al ₃ -Cr a 6GPa.	53
Figura 40. Módulo de compresibilidad para el Al ₃ -Cr a presiones de -6 a 6 GPa.....	55
Figura 41. Módulo de cizalladura para el Al ₃ -Cr a presiones de -6 a 6 GPa.	56
Figura 42. Módulo de Young para el Al ₃ -Cr a presiones de -6 a 6 GPa.	56
Figura 43. Radio de Poisson para el Al ₃ -Cr a presiones de -6 a 6 GPa.	57
Figura 44. Magnitud B/G para el Al ₃ -Cr a presiones de -6 a 6 GPa.....	58
Figura 45. Celda unitaria del Al ₃ -Ni, grupo espacial 221.	58
Figura 46. Optimización del volumen de la red Al ₃ -Ni.	59

Figura 47. Estructura de bandas del Al ₃ -Ni a presión cero.....	60
Figura 48. Estructura de bandas del Al ₃ -Ni a -6GPa.....	60
Figura 49. Estructura de bandas del Al ₃ -Ni a 6GPa.....	61
Figura 50. Densidad de estados del Al ₃ -Ni a presión cero.....	62
Figura 51. Densidad de estados del Al ₃ -Ni a -6GPa.....	62
Figura 52. Densidad de estados del Al ₃ -Ni a -6GPa.....	63
Figura 53. Módulo de compresibilidad para el Al ₃ -Ni a presiones de -6 a 6GPa.....	64
Figura 54. Módulo de cizalladura para el Al ₃ -Ni a presiones de -6 a 6GPa.....	65
Figura 55. Módulo de Young para el Al ₃ -Ni a presiones de -6 a 6 GPa.....	65
Figura 56. Radio de Poisson para el Al ₃ -Ni a presiones de -6 a 6GPa.....	66
Figura 57. Magnitud B/G para el Al ₃ -Ni a presiones de -6 a 6 GPa.....	67
Figura 58. Celda unitaria del Al ₃ -Cu, grupo espacial 221.....	67
Figura 59. Optimización del volumen de la red de Al ₃ -Cu.....	68
Figura 60. Estructura de bandas del Al ₃ -Cu a presión cero.....	69
Figura 61. Estructura de bandas del Al ₃ -Cu a -6GPa.....	70
Figura 62. Estructura de bandas del Al ₃ -Cu a 6GPa.....	70
Figura 63. Densidad de estados del Al ₃ -Cu a presión cero.....	71
Figura 64. Densidad de estados del Al ₃ -Cu a -6GPa.....	72
Figura 65. Densidad de estados del Al ₃ -Cu a 6GPa.....	72
Figura 66. Módulo de compresibilidad para el Al ₃ -Cu a presiones de -6 a 6GPa.....	73
Figura 67. Módulo de cizalladura para el Al ₃ -Cu a presiones de -6 a 6GPa.....	74
Figura 68. Módulo de Young para el Al ₃ -Cu a presiones de -6 a 6GPa.....	75
Figura 69. Radio de Poisson para el Al ₃ -Cu a presiones de -6 a 6GPa.....	75
Figura 70. Magnitud B/G para el Al ₃ -Cu a presiones de -6 a 6GPa.....	76
Figura 71. Celda unitaria del Al ₃ -v, grupo espacial 221.....	77

Figura 72. Optimización del volumen de la red Al3-v	77
Figura 73. Estructura de bandas del Al3-v a presión cero.	78
Figura 74. Estructura de bandas del Al3-v a -6GPa.....	79
Figura 75. Estructura de bandas del Al3-v a 6GPa.....	79
Figura 76. Densidad de estados del Al3-v a presión cero.....	80
Figura 77. Densidad de estados del Al3-v a -6GPa.	81
Figura 78. Densidad de estados del Al3-v a 6GPa.	81
Figura 79. Módulo de compresibilidad para el Al-v a presiones de -6 a 6GPa.	83
Figura 80. Módulo de cizalladura para el Al3-v a presiones de -6 a 6GPa. .	84
Figura 81. Módulo de Young para el Al3-v a presiones de -6 a 6GPa.	84
Figura 82. Radio de Poisson para el Al3-v a presiones de -6 a 6GPa.	85
Figura 83. Magnitud B/G para el Al3-v a presiones de -6 a 6GPa.....	86
Figura 84. Módulo de compresibilidad en función de la presión para las distintas estructuras.	87
Figura 85. Módulo de cizalladura en función de la presión para las distintas estructuras.	88
Figura 86. Módulo de Young en función de la presión para las distintas estructuras.	88
Figura 87. Radio de Poisson en función de la presión para las distintas estructuras.	89
Figura 88. Magnitud B/G en función de la presión para las distintas estructuras.	90

RESUMEN

En la presente investigación se realizó un estudio de primeros principios de las propiedades estructurales mecano-elásticas del aluminio (Al), y del Al dopado con vacancias (v) e impurezas de escandio (Sc), cromo (Cr), níquel (Ni) y cobre (Cu), a distintas presiones. Los cálculos se realizaron empleando la aproximación no relativista FP-LAPW dentro del marco de la teoría del Funcional de la Densidad (DFT), mientras que la energía de correlación e intercambio de los electrones se describe en la aproximación del gradiente generalizado (GGA) mediante el programa computacional Wien2k. Para esto se realizó una optimización de los parámetros cristalinos de la estructura del Al puro y de la estructura del aluminio con un átomo de su red reemplazado con una impureza o vacancia para luego determinar los módulos elásticos de cada estructura (Al3-Sc, Al3-Cr, Al3-Ni, Al3-Cu y Al3-v). Los parámetros de equilibrio de la red se obtuvieron mediante una optimización de volumen ajustada a la ecuación de estado de Birch-Murnaghan. En las estructuras estudiadas se notó un crecimiento del parámetro de red para el Al3-Sc y un decrecimiento para el Al3-Cr, Al3-Ni, Al3-Cu y Al3-v con respecto a la estructura original de Al. Con estos parámetros se evaluaron las bandas electrónicas y la densidad de estados de cada una de las estructuras consideradas, ratificando el carácter metálico de las mismas. Los módulos elásticos de cada estructura fueron evaluados desde un estado estructural comprimido a uno expandido, para presiones de -6, -4, -2, 0, 2, 4 y 6 GPa. La magnitud del módulo de compresibilidad (B) se ordenó de mayor a menor para las estructuras Al3-Ni, Al3-Cr, Al3-Cu, Al3-Sc, Al, Al3-v; este módulo presentó un comportamiento lineal con la presión en el rango de presiones estudiadas. El módulo de cizalladura (G) mostró un valor variante con la presión, siendo la estructura Al3-Sc la que generalmente presenta el mayor valor. El módulo de Young presentó un incremento para todas las estructuras estudiadas, especialmente la estructura Al3-Cr. En cuanto al radio de Poisson, se evidenció un incremento de éste para la estructura Al3-Ni y un decrecimiento

para el resto de ellas con respecto a la estructura original del Al. La explicación de este comportamiento radica en la interacción electrónica de los electrones s y p del aluminio con los electrones d de las estructuras estudiadas, la no existencia de dicha interacción en Al₃-v reafirman su bajo valor. Con la finalidad de determinar el carácter dúctil o frágil de las distintas estructuras se evaluó la magnitud B/G , sabiendo que un valor de 1,75 para dicha magnitud refleja que la estructura es dúctil y de lo contrario refleja fragilidad, lo que nos permitió concluir que reemplazar un átomo de la red de Al con un átomo de Ni mejora su ductilidad, mientras que la introducción de Cu y vacancias la reduce y la introducción de los átomos de Sc y Cr producen una estructura frágil.

INTRODUCCIÓN

En el estado sólido los átomos pueden adquirir un ordenamiento definido tridimensional, en tal caso se dice que tienen una estructura cristalina. En el caso de los metales, todos lo forman cristales en estado sólido [1]. Es este ordenamiento de los átomos que le confiere sus propiedades a los metales y, además, es bien conocido que la presión a la que esté sometido el cristal afecta dichas propiedades [2].

El aluminio se trata de un material muy importante y utilizado en todo tipo de industrias. Es un material realmente valioso porque es más ligero que otros metales como puedan ser el acero o el cobre. Además, cuenta con una resistencia bastante alta, con gran resistencia a las altas temperaturas y es flexible. También, es un excelente conductor de electricidad y calor lo que lo hace valioso en el sector eléctrico. Tampoco se trata de un material tóxico, por lo que no representa peligro para la vida humana. Se trata también de un material reciclable por lo que también tiene un aporte ecológico.

En el sector del transporte el aluminio es muy apreciado debido a que es un material ligero y económico. Es utilizado en todo tipo de vehículos terrestres, aeronáuticos e incluso aeroespaciales. En el sector alimenticio el aluminio es esencial para crear envases. Es bien sabido que este material es capaz de proteger los alimentos durante un largo periodo de tiempo y, de nuevo, se aprecia su ligereza.

El aluminio es también uno de los materiales más utilizados para fabricar aleaciones y entre los materiales más utilizados para alearse con el aluminio se encuentra el cobre (Cu), silicio (Si), cinc (Zn), magnesio (Mg) y manganeso (Mn), níquel (Ni), titanio (Ti), hierro (Fe), cromo (Cr) y cobalto (Co).

Por todas las aplicaciones que tiene el aluminio no es de extrañar que se le hayan dedicado muchos trabajos para estudiar sus propiedades y métodos de cristalización, tanto en su estado puro, como con impurezas y todo tipo de aleaciones [2,3,4,5]. Precisamente, éste trabajo se centra en estudiar los

módulos elásticos (el módulo de compresibilidad (B), el módulo de cizalladura (G), el módulo de Young (E), el radio de Poisson (ν) y la razón B/G del aluminio (Al), y el aluminio con impurezas de escandio (Al₃-Sc) cromo (Al₃-Cr), níquel (Al₃-Ni), cobre (Al₃-Cu), y con vacancias (Al₃-v), cuando el cristal está sometido a distintas presiones. Para ello se utilizó el programa WIEN2k, aplicando el método *full potential linearized augmented plane wave* (FP-LAPW) con la aproximación del gradiente generalizado (GGA).

Golesorkhtabar en 2013 [3] realizó una caracterización de varias estructuras, entre ellas la del Al, mediante el uso de programa WIEN2k aplicando el método FP-LAPW y la aproximación GGA. En su trabajo, Golesorkhtabar, determina entre otras cosas la estructura de equilibrio del aluminio, y sus módulos elásticos B , G , E y ν a presión cero.

El trabajo de Ruiz, C en 2011 [6]. En este caso determina B , G , E , ν y B/G a presión cero para los minerales Cu₃TMSe₄ (TM = V, Nb, Ta). También aplica la aproximación GGA, pero se muestra una explicación más detallada sobre las deformaciones que se deben aplicar a la red para conseguir las constantes y módulos elásticos.

Un cálculo sobre los módulos B , G , E , ν y razón B/G para distintas presiones fue realizado sobre las estructuras de ZnC y NbC fue realizado por Zidi, Y. en 2017 [7]. Donde de igual forma utiliza el programa WIEN2k y aplica el mismo método. En su trabajo se muestra detalladamente el modelo de cálculo y el proceso para llegar a dichos resultados, proceso que fue usado como referencia en el presente trabajo.

El presente trabajo está estructurado de la siguiente manera, el primer capítulo trata del marco teórico donde se explican los fundamentos teóricos. El segundo capítulo detalla la forma en la que se realizaron los cálculos. El tercer capítulo expone todos los resultados obtenidos y mediante gráficas, y tablas y se realiza el análisis correspondiente de estas. En el cuarto y último capítulo se exponen los resultados más importantes.

CAPÍTULO 1

MARCO TEÓRICO

1.1. El problema de muchos cuerpos

Los electrones y los núcleos presentes en los cristales conforman un sistema de muchos cuerpos cuya ecuación de Schrödinger es imposible de resolver en forma exacta. El hamiltoniano no relativista que describe a un sólido tiene la siguiente forma:

$$\hat{H} = \hat{T}_N + \hat{T}_e + \hat{U}_{eN} + \hat{U}_{ee} + \hat{U}_{NN} \quad (1)$$

Donde \hat{T}_N es el operador de energía cinética para cada núcleo en el sistema, \hat{T}_e es el operador de energía cinética para cada electrón y los últimos tres términos son las interacciones de origen coulombiano electrón-núcleo, electrón-electrón y núcleo-núcleo respectivamente. Cada uno de estos términos se expresa de la siguiente manera [8]:

$$\hat{T}_N = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_l \frac{\hat{\nabla}_l^2}{M_l} \quad (2)$$

$$\hat{T}_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \hat{\nabla}_i^2 \quad (3)$$

$$\hat{U}_{eN} = -\sum_{i,l} \frac{Z_l e^2}{|r_i - R_l|} \quad (4)$$

$$\hat{U}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \quad (5)$$

$$\hat{U}_{NN} = \frac{1}{2} \sum_{l \neq j} \frac{Z_l Z_j e^2}{|R_l - R_j|} \quad (6)$$

Expandiendo (1), el hamiltoniano resultante es:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_l \frac{\hat{\nabla}_l^2}{M_l} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{A=1}^N \frac{\hat{\nabla}_i^2}{m_e} - \sum_{i,l} \frac{Z_l e^2}{|r_i - R_l|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \frac{1}{2} \sum_{l \neq j} \frac{Z_l Z_j e^2}{|R_l - R_j|} \quad (7)$$

Dónde R_l , con $l = 1, 2, \dots, P$ es la posición de los P núcleos, M_l su masa. r_l con $i = 1, 2, \dots, N$ es la posición de los N electrones, su masa es m_e , su carga es e y Z_l es el número atómico. La energía del sistema se encuentra entonces mediante:

$$H\Psi = E\Psi \quad (8)$$

1.1.1. Métodos ab initio

Para resolver el problema de muchos cuerpos es necesario plantear un modelo mecánico-cuántico que describa y relacione la interacción de cada una de estas partículas con las demás. Un sistema de este tipo, incluso para un número limitado de átomos, tiene una cantidad grande de coordenadas que le imprime un alto grado de complejidad, y se dificulta resolver aun con el poder computacional disponible actualmente.

Sin embargo, se han planteado diversas metodologías capaces de describir dichos sistemas con resultados satisfactorios. Dentro de los más conocidos y utilizados para resolver se encuentran los métodos *ab initio*. La expresión *ab initio* proviene del latín y significa “desde el principio”. En el contexto de la física se dice que un cálculo es *ab initio*, o de primeros principios, si parte directamente de las leyes establecidas de la física sin incluir parámetros experimentales o modelos empíricos.

1.1.2. Aproximación de Born-Oppenheimer

La ecuación (1) representa un problema de muchos cuerpos y es extremadamente complicada de resolver debido a dos inconvenientes fundamentales: la gran cantidad de partículas que tiene el sistema y las

interacciones entre ellas, principalmente las interacciones electrón-núcleo. Por lo que se hace necesario usar algún método de aproximación.

Dado que los núcleos son mucho más masivos que los electrones y por lo tanto con mayor inercia, se puede asumir que los núcleos se encuentran fijos en ciertas posiciones dentro del cristal debido a que los electrones perciben sólo las posiciones instantáneas de los núcleos y no sus velocidades. Esto hace que la densidad electrónica dependa de la posición del núcleo y no de su velocidad. Se tiene ahora un conjunto de electrones moviéndose dentro de un potencial externo generado por los núcleos atómicos.

$$\hat{T}_N = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_l \frac{\hat{\nabla}_l^2}{M_l} \rightarrow \mathbf{0} \quad (9)$$

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{U}_{ee} + \hat{U}_{ext} \quad (10)$$

Es decir, el hamiltoniano de la energía se expresa como la suma de la energía cinética de los electrones, de la interacción coulombiana de los electrones y los núcleos y del potencial externo producido por los núcleos.

Uno de los principales inconvenientes de esta aproximación es que, a un nivel práctico, la interacción electrón-electrón sigue siendo un problema difícil de resolver, por la cantidad de partículas involucradas. La aproximación del campo medio propuesta por Hartree convierte el problema de muchos electrones interactuantes en muchos problemas de un sólo electrón independiente que interactúa con el campo medio que originan los demás electrones alrededor de él. Hartree propone una función de onda para resolver el problema, sin embargo, esta no cumple el principio de exclusión de Pauli porque no considera el efecto de intercambio. Es por esta razón Fock [9] propone una función de onda antisimétrica tipo determinante de Slater [10] para solucionar el problema. Esta solución incluye el efecto de intercambio, manteniendo el modelo de campo medio.

A pesar de las múltiples aproximaciones, la gran dificultad para resolver el problema sigue siendo muy grande debido al número de coordenadas que se deben considerar. Este inconveniente se soluciona de forma definitiva

introduciendo la densidad electrónica como variable central. La función de onda describe el estado cuántico de cada una de las partículas en función de las coordenadas de cada una de ellas. Es por ello que en los estudios de Hohenberg-Khon y Khon-Sham [11,12] se propuso cambiar esta función de onda por una nueva variable llamada densidad electrónica, la cual sólo depende de las tres coordenadas espaciales, y eventualmente del espín electrónico. Con la introducción de la densidad electrónica para simplificar el problema de muchos electrones nace la Teoría del Funcional de la Densidad.

1.2. Teoría del Funcional de la Densidad

La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) es uno de los métodos *ab initio* más importantes y utilizados actualmente para estudiar el problema de muchos cuerpos. La Teoría del Funcional de la Densidad establece que cualquier observable de un sistema de muchas partículas interactuantes puede ser visto como el funcional de la densidad electrónica del estado base $n_0(\mathbf{r})$. Es decir, una función escalar de la posición $n_0(\mathbf{r})$, en principio, determina toda la información contenida en la función de onda del sistema de muchos cuerpos para el estado base. Los fundamentos de esta teoría fueron establecidos por Hohenberg-Khon en 1964 [11] y por Khon-Sham en 1965 [12]. Hohenberg-Khon [11] probaron que la energía total, incluyendo intercambio y correlación, de un gas de electrones es una funcional única de la densidad electrónica. El mínimo valor del funcional de energía total es la energía del estado base del sistema y la densidad que lleva a este valor es la densidad de estado base de la partícula simple. Khon-Sham probaron que un problema de muchos electrones se puede representar mediante un conjunto de ecuaciones autoconsistentes de un electrón [9]:

Teorema I: Para cualquier sistema interactuante de partículas en un potencial externo $V(\mathbf{r})$, el potencial externo $V_{ex}(\mathbf{r})$ es determinado de manera única, excepto por una constante, por la densidad electrónica del estado base $n_0(\mathbf{r})$ [8].

Corolario I: Como el Hamiltoniano está totalmente determinado, a excepción de un cambio constante en la energía, entonces la función de onda para el sistema de muchos cuerpos está determinada para todos los estados del sistema (estado base y estados excitados). Por lo tanto, todas las propiedades del sistema están completamente determinadas conociendo únicamente la densidad electrónica del estado base $n_0(\mathbf{r})$ [8].

Teorema II: Un funcional universal de la energía $E[\mathbf{n}]$ en términos de la densidad electrónica $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ puede ser definido y es válido para cualquier potencial externo $V_{ex}(\mathbf{r})$. Para cualquier potencial externo en particular $V(\mathbf{r})$, la energía exacta del estado base de un sistema es el valor mínimo global del este funcional, y la densidad electrónica $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ que minimice el funcional será la densidad exacta del estado base $n_0(\mathbf{r})$ [8].

Corolario II: El funcional $E[\mathbf{n}]$ por si solo es capaz de determinar la energía exacta del estado base y la densidad electrónica. En general, los estados excitados de los electrones deben ser determinados por otros medios [8].

Para el desarrollo del método, en 1935 Khon y Sham proponen lo siguiente: “reemplazar el sistema original de muchos cuerpos interactuantes por un sistema equivalente no-interactuante cuya densidad electrónica del estado base coincida con la del sistema interactuante” [8]. Este enfoque es representado en la figura 1.

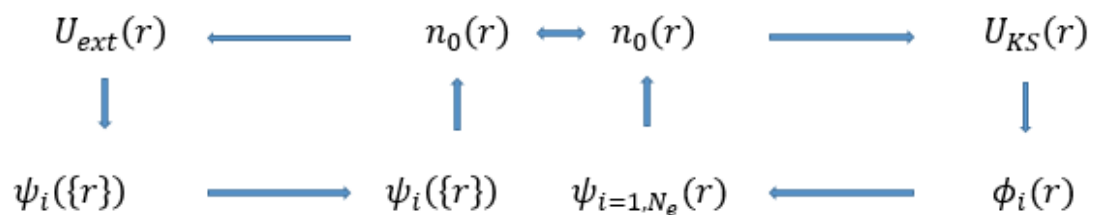


Figura 1. Representación gráfica del enfoque de Khon-Sham. La flecha central provee la conexión en ambas direcciones entre el sistema de muchos cuerpos (izquierda) y el sistema de partículas independientes (derecha). Por lo tanto, en principio la solución del sistema de partículas independientes del problema de Khon-Sham determina todas las propiedades del sistema de muchos cuerpos. Imagen tomada de la Ref. [8].

La ecuación de Khon-Sham está definida por un potencial externo efectivo $V_{ks}(\mathbf{r})$, el cual es ficticio, en el que se mueven las partículas no interactuantes [10].

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ks}(\mathbf{r}) \right) \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r}) \quad (11)$$

Los valores propios de la ecuación anterior corresponden a la energía de cada electrón para el orbital correspondiente de Khon-Sham ϕ_i , y el potencial externo efectivo está compuesto por el potencial externo V_{ext} , el potencial de Hartree V_H y el potencial de intercambio y correlación V_{xc} [10]. La teoría de Khon-Sham es exacta porque incluye desde un principio los efectos de intercambio y correlación.

El funcional de energía para este sistema *equivalente* no-interactuante es lo que se conoce como el funcional de Khon-Sham $E_{ks}[\mathbf{n}(\mathbf{r})]$. La densidad del estado base será la que minimice el funcional de la energía. Por lo tanto, se debe derivar el funcional de la energía con respecto a la densidad e igualar a cero para minimizar la energía [11].

$$\frac{\delta E_{ks}[\mathbf{n}(\mathbf{r})]}{\delta \mathbf{n}} = 0 \quad (12)$$

La solución de esta ecuación nos lleva a las ecuaciones de Khon-Sham [11]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) \right) \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r}) \quad (13)$$

Para resolver estas ecuaciones se necesitan conocer dos cosas: la densidad electrónica y el potencial de intercambio y correlación. La densidad electrónica para un sistema de N partículas es [11]:

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \sum_i^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (14)$$

El potencial de intercambio y correlación $V_{xc}(\mathbf{r})$ considera todas las contribuciones cuánticas de la energía que no fueron tenidas en cuenta en los demás términos. La energía de correlación se asocia al hecho de que los electrones situados en una cierta región del espacio no se mueven

independientemente, si no, que al ser cargas negativas que se repelen entre ellas, su movimiento esta correlacionado. La energía de intercambio se asocia al principio de exclusión de Pauli, según el cual no deben existir dos electrones con el mismo estado cuántico. El potencial de intercambio y correlación se define como [11]:

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\mathbf{n}]}{\delta \mathbf{n}} \quad (15)$$

Como no es posible conocer de forma exacta el potencial de intercambio y correlación es necesario recurrir a aproximaciones. Por ello se han desarrollado varios funcionales de intercambio y correlación. En la siguiente sección hablaremos de los más utilizados.

1.2.1. Funcionales de Intercambio y Correlación

DFT incluye un funcional de intercambio y correlación perfecto $E_X[\mathbf{n}]$, que se necesita para calcular de forma exacta la energía del estado base y su densidad electrónica, pero no lo conocemos exactamente. Dos niveles de aproximación para el funcional de intercambio y correlación muy útiles son la Aproximación de Densidad Local y la Aproximación de Gradiente Generalizado

1.2.1.1. Aproximación de Densidad Local (LDA)

LDA, por sus siglas en inglés: “*Local-density approximation*”, es la forma aproximada del funcional de intercambio y correlación más sencilla en la teoría del funcional de la densidad. La formulación del funcional se basa en el estudio de un gas homogéneo de electrones [12], el cual se considera que está confinado en un volumen fijo, bajo el efecto de un potencial nuclear constante y cuyos electrones se repelen de acuerdo con la ley de Coulomb. Para este sistema es posible calcular de forma exacta el potencial de intercambio, sin embargo, para la energía de correlación es necesario el uso de métodos

numéricos [11]. Esta aproximación considera que la distribución espacial de la densidad electrónica varía muy poco en el sólido. La expresión para el funcional de intercambio y correlación es:

$$E_{xc}^{LDA}[n] = \int n(\mathbf{r})\epsilon_{xc}(n)d\mathbf{r} \quad (16)$$

Dónde $\epsilon_{xc}(n)$ es la energía y correlación por electrón en un gas homogéneo de electrones con densidad electrónica n . El esquema LDA utiliza la expresión para la energía intercambio deducida por Dirac en 1930 [15] y la energía de correlación con la parametrización de Perdew-Zunger [16] para el gas homogéneo. A pesar de ser una aproximación muy severa, en muchos casos los resultados concuerdan bastante bien con los datos experimentales. LDA se caracteriza por predecir de forma realista las estructuras atómicas de los materiales, sin embargo, no es precisa en la descripción energética de los enlaces atómicos sobreestimando las energías cohesión [8].

1.2.1.2. Aproximación de Gradiente Generalizado (GGA)

Con el ánimo de mejorar la descripción de la energía se han propuesto diferentes funcionales de intercambio y correlación tipo GGA, por sus siglas en inglés: *Generalized gradient approximation*. Estos funcionales semi-locales se caracterizan por considerar que la contribución de la energía no solo depende del valor de la densidad en cada punto, si no también, de la variación de la densidad alrededor de este punto. De acuerdo con lo anterior se ha planteado la expresión para el funcional de intercambio y correlación tipo GGA como:

$$E_{xc}^{GGA}[n, \nabla n] = \int n(\mathbf{r})F_{xc}[n(\mathbf{r}), \nabla n(\mathbf{r})]d\mathbf{r} \quad (17)$$

Donde F_{xc} es un funcional de la densidad local y de la variación espacial de la densidad. La corrección de los efectos de gradiente conduce a una mejor descripción de las energías de enlace y por tanto de las energías de cohesión para varios sólidos y moléculas. Algunos de los funcionales más empleados

son los desarrollados por Perdew-Wang en 1986 (PW86) [17], Perdew-Wang en 1991 (PW91) [18], Becke-Perdew en 1988 (BP) [19-21], y Perdew-Burke-Ernzerhof en 1996 (PBE) [22].

Con el potencial de intercambio y correlación representado de manera aproximada, ahora es necesario definir una base para poder expandir las funciones de una partícula de Khon-Sham que sea adecuada al problema.

1.2.2. Base de ondas planas

Un cristal puede definirse como un arreglo periódico de átomos. Por lo tanto, los núcleos atómicos con carga positiva representan un potencial periódico para los electrones $V(\mathbf{r})$. Por otro lado, un electrón libre es representado por una onda plana de la forma $e^{(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$, donde \mathbf{k} es un vector de onda que está confinado a la primera zona de Brillouin de la red recíproca [23].

El teorema de Bloch establece que la función de onda de un electrón ϕ_j , en un potencial periódico $V(\mathbf{r})$, puede expresarse como el producto de la onda plana $e^{(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$ y una función con la misma periodicidad de la red $u_j(\mathbf{r})$ [23].

$$\phi_j(\mathbf{r}) = e^{(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} u_j(\mathbf{r}) \quad (18)$$

En otras palabras, una onda de Bloch se podría interpretar como la onda plana del electrón libre modulada por una función periódica que tiene la periodicidad de la red cristalina tal como se observa en la siguiente figura.

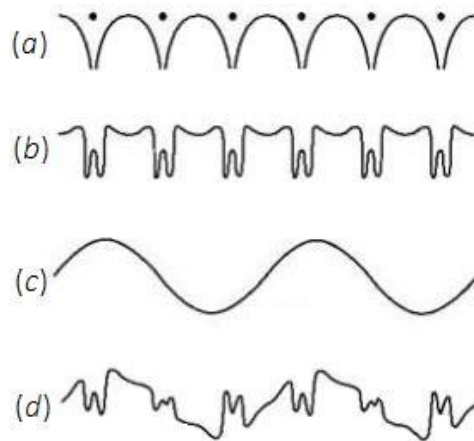


Figura 2. (a) El potencial periódico de la red. (b) La función periódica de la onda de Bloch. (c) Onda Plana del electrón libre. (d) Onda de Bloch.

Como $u_j(\mathbf{r})$ tiene la misma periodicidad de la red, se puede expresar en términos de una base de ondas planas con vectores \mathbf{G} de la red recíproca [24]:

$$\mathbf{u}_j(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} c_{j,\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (19)$$

Combinando las ecuaciones (19) y (18) es posible reescribir la función de onda electrónica de la siguiente forma [24]:

$$\phi_{j,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} c_{j,(\mathbf{k}+\mathbf{G})} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad (20)$$

Donde $c_{j,(\mathbf{k}+\mathbf{G})}$ son los coeficientes de las ondas planas. Todos los estados están identificados por el vector de Bloch $\vec{\mathbf{k}}$ y el índice de banda j . El índice de banda j , es del orden del número de electrones de la celda unidad. El vector de Bloch \mathbf{k} es un continuo, que está restringido a la primera zona de Brillouin y además sus componentes vectoriales (k_x, k_y, k_z) sólo pueden tomar los valores $n2\pi/L$, donde n es un entero y L la longitud del cristal [23].

Al reemplazar la ecuación (20) en (11) se obtiene una expresión para la ecuación de Khon-Sham en el espacio recíproco de la forma [11]:

$$\sum_{\mathbf{G}'} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + V_{KS}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \right] c_{j,(\mathbf{K}+\mathbf{G})} = \varepsilon_{j,(\mathbf{K}+\mathbf{G})} c_{j,(\mathbf{K}+\mathbf{G})} \quad (21)$$

$$V_{KS}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') = V_{ext}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') + V_H(\mathbf{G} - \mathbf{G}') + V_{xc}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \quad (22)$$

Sin embargo, no es deseable resolver el problema electrónico para una cantidad infinita de estados de Bloch. Los vectores \mathbf{k} cercanos tendrán información muy similar. Por esta razón se utiliza un número finito de puntos- \mathbf{k} en la primera zona de Brillouin.

Adicionalmente, la cantidad de ondas planas que forman la base se delimita hasta cierto valor máximo para la energía cinética de la onda plana, conocido como la energía de corte (E_{cut}) [24]:

$$E_{cut} = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \quad (23)$$

Donde \mathbf{k} es el vector de onda electrónico y \mathbf{G} son los vectores de red recíproca. Por lo tanto, el número de ondas planas difiere por cada punto- \mathbf{k} . Además, en la expansión los coeficientes tienden a hacerse cero para altas energías en las ondas planas, de otra forma la energía de la función de onda sería infinita. Es evidente que la precisión de los cálculos puede mejorar sistemáticamente aumentando el valor de la energía de corte E_{cut} , sin embargo, en la práctica, este valor deberá optimizarse para cada sistema.

1.2.3. Ciclo autoconsistente

En el inicio de la sección 1.2 se presentó la metodología propuesta por Khon y Sham para resolver el problema de muchos cuerpos. El procedimiento práctico para resolver el sistema es el siguiente: (1) con las coordenadas de los núcleos se calcula el potencial externo V_{ext} , (2) se supone una densidad electrónica inicial \mathbf{n}_0 ; \mathbf{n}_0 es calculada inicialmente sumando todas las densidades de los átomos aislados pero ubicados en las posiciones de la celda), (3) usando \mathbf{n}_0 se hacen cálculos del potencial de Hartree V_H y del potencial de intercambio y correlación V_{xc} , (4) se resuelven las ecuaciones de

Khon-Sham y se obtienen las funciones de onda electrónicas ϕ_i , (5) se calcula la densidad electrónica n a partir de las funciones de onda electrónicas ϕ_i , (6) se compara la densidad electrónica inicial n_0 y la final n , las cuales deben ser iguales dentro de un rango de tolerancia especificado por el usuario. Si no son iguales se repite el ciclo tomando como nueva densidad de partida, la densidad de salida mezclada adecuadamente con la densidad inicial, y el ciclo se repite tantas veces como sea necesario hasta que ambas densidades sean iguales ($n_{partida} = n$), de acuerdo con tolerancia elegida. Cuando esto suceda se dice que hemos alcanzado una solución auto-consistente [11]. Este proceso está representado en la figura 3 y se puede resolver mediante diferentes códigos numéricos como el Quantum ESPRESSO, WIEN2k, VASP, entre otros [27]. En el presente trabajo de investigación se utiliza el código WIEN2k.

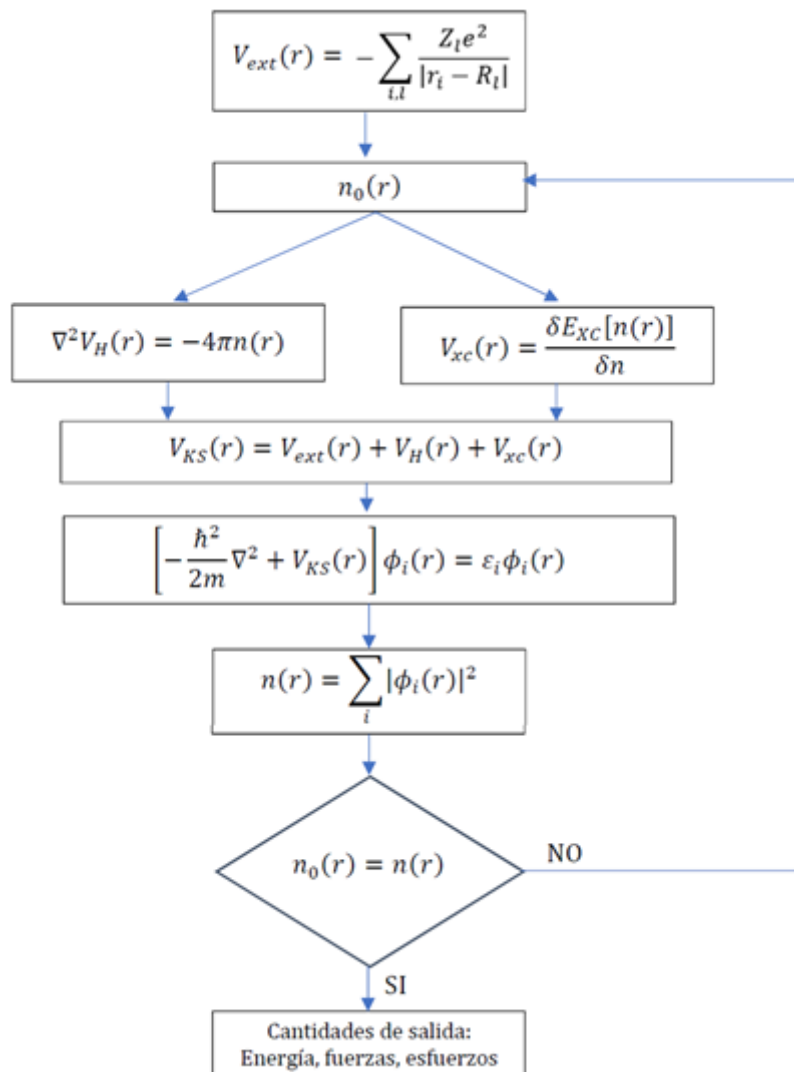


Figura 3. Esquema representativo del ciclo auto-consistente para resolver las ecuaciones de Kohn-Sham.

1.2.4. Método FP-LAPW

El método de ondas planas aumentadas linealizadas (LAPW) surge de la modificación del método de ondas planas aumentadas (APW) propuesto por Slater en 1937 [25,26]. Slater estableció de forma clara la esencia del método, así como su motivación, la cual consiste en que cerca del núcleo atómico el potencial y sus funciones de onda son semejantes al comportamiento de un átomo, es decir, el potencial varía fuertemente mientras que las funciones de onda son aproximadamente esféricas, por otra parte, en la región

comprendida entre los átomos el potencial es constante y las funciones de onda son ondas planas [24].

Según el planteamiento hecho por Slater, el espacio en un sistema puede dividirse en dos regiones. En la primera región se encuentran los átomos que pertenecen al sistema, y para cada uno de ellos se les asigna una esfera de radio R_α mejor conocida como esfera de *muffin-tin* (S_α). La segunda región consiste en el espacio intersticial comprendido entre las esferas de *muffin-tin*.

Una forma de visualizar el significado de una APW es pensar en una función oscilante que avanza a través de una celda unitaria (figura 4). Cada vez que la APW se encuentre un átomo en su recorrido, su comportamiento oscilante simple, cambia a un comportamiento más complejo dentro de la esfera de *muffin-tin*. No obstante, los valores de la función dentro y fuera se acoplan de forma suave.

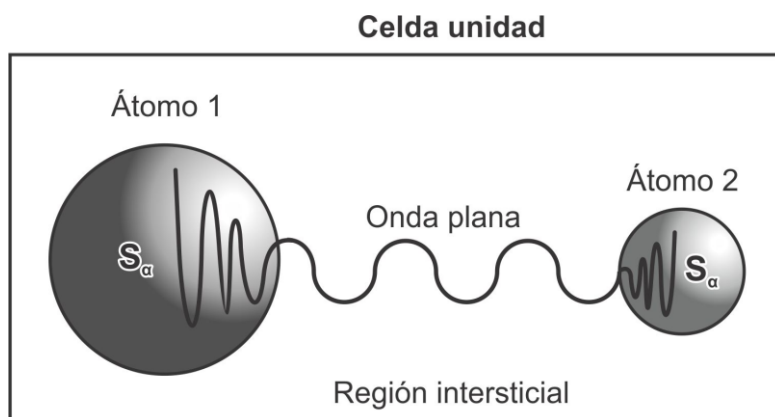


Figura 4. Descripción gráfica del comportamiento de una onda plana dentro de una esfera de *muffin-tin* (S_α) y en la región intersticial.

Por lo tanto, una función base APW consiste en una combinación de ondas planas en la zona intersticial, que se aumenta dentro de cada esfera con otra combinación lineal de las soluciones radiales $u_l^\alpha(r, E)$ de la ecuación de Schrödinger.

Una onda plana aumentada (APW) que se usa en la representación de ψ_k se define:

$$\phi_{\mathbf{G}}^k(\mathbf{r}, \mathbf{E}) = \begin{cases} \sum_{l,m} A_{l,m}^{\alpha,k+\mathbf{G}} u_l^\alpha(\mathbf{r}', \mathbf{E}) Y_m^l(\mathbf{r}') & \mathbf{r} \in S_\alpha \\ \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} & \mathbf{r} \in I \end{cases} \quad (24)$$

Los símbolos \mathbf{k} , \mathbf{G} , \mathbf{r} y V mantienen su significado usual (manteniendo la misma notación que en las secciones anteriores). Resulta evidente que la base APW es dependiente de \mathbf{k} . La posición de los átomos se da respecto al centro de cada esfera, mediante $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha$. Y_m^l son los armónicos esféricos. $A_{l,m}^{\alpha,k+\mathbf{G}}$ son parámetros indeterminados al igual que \mathbf{E} , el cual tiene dimensiones de energía. u_l^α son las soluciones de la parte radial de la ecuación de Schrödinger para el átomo libre α . Para un auténtico átomo libre, la condición de frontera $u_l^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{E})$ debe tender a cero cuando $\mathbf{r} \rightarrow \infty$, con lo que se limita el número de energías \mathbf{E} , para las cuales se puede encontrar una solución u_l^α . Sin embargo, como esta condición de frontera no se aplica aquí, se puede encontrar una solución numérica para cualquier \mathbf{E} . Como tal, las funciones u_l^α carecen de significado físico, debido a que son únicamente parte de una función base, no de la función propia buscada, pero como son muy parecidas a la verdadera función propia en la región del cristal, funcionan como una base de manera muy eficiente.

La función APW presenta un problema, debido a que solo es la solución a la ecuación de Schrödinger para el valor de energía E_l . Como la APW se define de esa forma, no hay libertad para permitir variaciones en la función de onda cuando una banda de energía se aleja de la referencia E_l . Por lo tanto, E_l debe ser igual a la banda de energía, lo que implica hallar el determinante de la ecuación de Khon y Sham en función de la banda de energía y calcular las raíces del polinomio característico del sistema, tarea que demanda mucho tiempo de cálculo.

El método LAPW surgió para solucionar el problema que presenta el método APW. LAPW considera dentro de las esferas de *muffin-tin* una base cuyos elementos son una combinación lineal de, no solo las soluciones radiales $u_l^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{E})$ sino también de su derivada con respecto de la energía $\dot{u}_l(\mathbf{r}, \mathbf{E}_l)$. Por

lo tanto, las funciones base para resolver las ecuaciones de Khon y Sham con el método LAPW resultan.

$$\phi_G^k(r, E) = \begin{cases} \sum_{l,m} [A_{l,m}^{\alpha,k+G} u_l^\alpha(r', E_l) + B_{l,m}^{\alpha,k+G} \dot{u}_l^\alpha(r, E_l^\alpha)] Y_m^l(r') & r \in S_\alpha \\ \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k+G)\cdot r} & r \in I \end{cases} \quad (25)$$

En el método LAPW las bandas de energía (en un punto \mathbf{k} dado) se obtienen de manera exacta con una sola diagonalización, mientras que en el método APW es necesaria una diagonalización para cada banda. Aunque el valor óptimo de E_l no se conoce de primera instancia, la flexibilidad surge de u_l permitiendo una solución exacta. Sin embargo, existe un costo por la flexibilidad adicional de las bases LAPW, el cual surge del requerimiento de que las funciones base tengan derivadas continuas. Dicho de otra forma, se requieren grandes energías de corte para construir las ondas planas, para lograr de esta forma un nivel dado de convergencia.

La exactitud de la base de ondas planas se determina mediante K_{max} (que representa a su vez el valor máximo del vector de onda $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$), dicho criterio se puede utilizar para las bases APW o LAPW. No obstante, existe un mejor criterio para juzgar la exactitud, el cual resulta del producto $S_\alpha^{min} K_{max}$, es decir, el producto entre el radio de menor tamaño de *muffin-tin* y K_{max} . Si se aumenta el radio de *muffin-tin* de menor tamaño, parte de las funciones de onda que se expresaban como ondas planas, dejaran de hacerlo, debido a que ahora interactuaran en mayor medida con el núcleo atómico, lo que provocaría un comportamiento más complejo de la función de onda, comparado con su comportamiento en cualquier otro lugar de la región intersticial. Como consecuencia se necesitarán menos ondas planas para describir las partes restantes de dicha región por lo que K_{max} puede reducirse. La reducción de K_{max} implica la reducción del tamaño de las matrices y debido a que la diagonalización de la matriz es muy costosa computacionalmente, un S_α^{min} más grande puede reducir considerablemente el tiempo de cómputo. Sin embargo, la S_α^{min} no puede ser demasiado grande, ya que los armónicos

esféricos no se satisfacen para describir las funciones de onda en la región lejana de los núcleos.

Otro punto que se debe considerar al momento de asignar un radio de *muffin-tin* es evitar que las esferas se traslapen. Por lo que se debe asignar un radio adecuado a las esferas de *muffin-tin*, tanto como para llenar lo más posible del espacio intersticial, así como para evitar que las esferas se traslapen.

Finalmente, de forma general el método LAPW expande el potencial del sólido de la siguiente forma

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} \sum_{l,m} V_{lm}(\mathbf{r}) Y_m^l(\hat{\mathbf{r}}) & \mathbf{r} \in S_\alpha \\ \sum_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} V_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} & \mathbf{r} \in I \end{cases} \quad (26)$$

De forma análoga la densidad de carga. A este procedimiento se le conoce frecuentemente como método de potencial completo (FP por su sigla en inglés).

1.2.5. Código Wien2k

WIEN2k es un paquete de cómputo que se desarrolló en Viena, Austria en 1990 [27] el cual está basado en teorías del estado sólido para hacer el análisis de distintas propiedades físicas de sólidos cristalinos tales como la densidad de estados del sólido, el espectro de rayos X, módulos elásticos, entre otras.

WIEN2k aplica la teoría de funcional de densidad (DFT) con la aproximación GGA y LDA, las cuales han demostrado ser uno de los mejores métodos para el cálculo de estructuras electrónicas en sólidos [3]. WIEN2k toma como funciones base el método de Ondas Planas Aumentadas Linealmente de Potencial Completo (FP-LAPW) el cual considera la división de la celda unitaria en dos regiones, la primera consiste en esferas de radio R_α , definidas como esferas de *muffin-tin*, las cuales se designan para cada átomo y además no deben traslaparse entre sí. La segunda consiste en una región intersticial, tal como se muestra en la figura 5. En cada una de las regiones se utilizan

diferentes bases, en el caso de las esferas se utilizan las soluciones radiales de la ecuación de Schrödinger, mientras que en la región intersticial se utilizan ondas planas, las cuales son soluciones de la ecuación de Schrödinger en un potencial constante.

El tamaño de las esferas influye directamente en el tiempo de cómputo. Mientras más pequeñas sean las esferas (teniendo como límite el volumen del núcleo atómico) los cálculos serán más precisos, pero requerirán más tiempo de cómputo; por el contrario, esferas más grandes (aunque nunca deben ser lo suficientemente grandes como para solaparse entre ellas) reducen el tiempo de cómputo, pero también reducen la precisión de éstos. Por consiguiente, debe asignarse un valor de radio apropiado, entre precisión y velocidad de cómputo, para cada esfera que se encuentre optimizada en el sistema que se vaya a analizar [27].

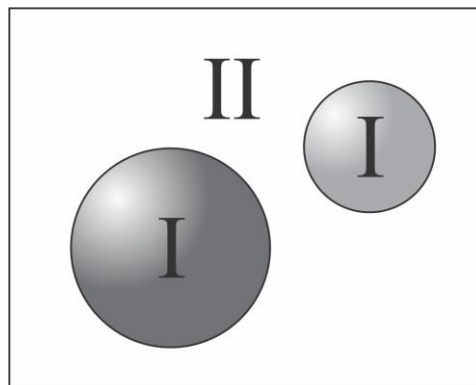


Figura 5. División de la celda unitaria en esferas atómicas (I) y región intersticial (II).

1.3. Propiedades mecano-elásticas

Las propiedades mecano-elásticas son aquellas que están relacionadas con los módulos elásticos del material, estas son:

- Cohesión: Resistencia de los átomos a separarse unos de otros.
- Plasticidad: capacidad de un material a deformarse ante la acción de una carga, permaneciendo la deformación al retirarse la misma. Es decir, es una deformación permanente e irreversible.

- Resistencia: se refiere a la propiedad que presentan los materiales para soportar diversas fuerzas sin romperse, adquirir deformaciones permanentes o deteriorarse de algún modo. Es la oposición al cambio de forma y a la separación, es decir a la destrucción por acción de fuerzas o cargas.
- Rigidez: capacidad soportar esfuerzos sin adquirir grandes deformaciones.
- Dureza: oposición que ofrecen los materiales a alteraciones físicas como la penetración, la abrasión y el rayado.
- Ductilidad: Medida de la capacidad del material para deformarse plásticamente sin romperse obteniendo hilos.
- Maleabilidad: se refiere a la propiedad que presentan los materiales de deformarse sin romperse obteniendo láminas.
- Elasticidad: se refiere a la propiedad que presentan los materiales de volver a su estado inicial cuando se aplica una fuerza sobre él.

Todas estas propiedades están relacionadas con el comportamiento elástico del material, algunas de ellas solo se pueden determinar empíricamente, otras mediante una convención empírica que la relaciona con algún módulo elástico (como sucede con la ductilidad, por ejemplo, dónde se considera que valores del radio de Poisson menores que 0.26 indica que el material es frágil y valores mayores que 0.26 indican un material dúctil [6] y en otros casos pueden medirse directamente.

1.3.1. Elasticidad en cristales

De la relación lineal tensión-deformación de un cristal, se conocen sus constantes elásticas. Según [27-31] está dada por la ecuación (26):

$$\tau_{ij} = \sum_{k,l=1}^3 C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (27)$$

Donde τ_{ij} son los coeficientes de los términos correspondientes a la presión en una dirección determinada, el tensor de rango cuatro c_{ijkl} representa las constantes elásticas y ϵ_{kl} es la deformación en una dirección determinada. La relación de la energía total del cristal y las deformaciones, según [27-31], está dada por la ecuación (28):

$$E = E_0 + V_0 \sum_{i,j=1}^3 \tau_{ij}^{(0)} \epsilon_{ij} + \frac{V_0}{2!} \sum_{i,j,k,l=1}^3 C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + \dots \quad (28)$$

Donde E es la energía del sistema, E_0 , V_0 y $\tau_{ij}^{(0)}$ son, respectivamente, la energía, el volumen y las tensiones internas del cristal en la estructura de referencia (usualmente el equilibrio). A fin de simplificar estas expresiones, es conveniente usar la notación de Voigt [3], en el que cada par de índices cartesianos ij se reemplazan por un solo índice α , de acuerdo con:

ij	11	22	33	23	13	12
α	1	2	3	4	5	6

Usando esta notación, la ecuación (27) puede expresarse como:

$$\tau_i = \sum_j^6 C_{ij} \epsilon_j \quad (29)$$

Y la ecuación (28):

$$E = E_0 + V_0 \sum_{i=1}^6 \tau_i^{(0)} \epsilon_i + \frac{V_0}{2!} \sum_{i,j=1}^6 C_{ij} \epsilon_i \epsilon_j + \dots \quad (30)$$

Si la estructura de referencia es elegida en el equilibrio, las tensiones internas ($\tau_i^{(0)}$) de la estructura de referencia desaparecen por lo que la ecuación cuatro se reduce a:

$$E = E_0 + \frac{V_0}{2!} \sum_{i,j=1}^6 C_{ij} \epsilon_i \epsilon_j + \dots \quad (31)$$

Notamos que las constantes elásticas C_{ij} pueden encontrarse derivando las ecuaciones (29) o (31):

$$C_{ij} = \frac{\partial \tau_i}{\partial \varepsilon_i} \quad (32)$$

Y

$$C_{ij} = \frac{1}{V_0} \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \quad (33)$$

La ecuación (33) le da el nombre de constantes elásticas de segundo orden, a las constantes C_{ij} .

En general, muchas propiedades de los cristales están relacionadas con las constantes elásticas de segundo orden. Las condiciones de estabilidad de los cristales, por ejemplo, están intrínsecamente relacionadas con sus constantes elásticas [30,31]. Las condiciones de estabilidad de los cristales fueron descritas por Born en 1940 [32]:

$$C_{11} - C_{12} > 0; C_{11} + 2C_{12} > 0; C_{44} > 0 \quad (34)$$

La ecuación (34) son las condiciones necesarias y suficientes de estabilidad en un cristal cúbico.

Entre los parámetros mecánicos que pueden ser descritos mediante las constantes elásticas se encuentran: el módulo de compresibilidad (B), el módulo de cizalladura (G), el módulo de Young (E) y el radio de Poisson (ν).

El módulo de compresibilidad mide la resistencia de un material a ser comprimido hidrostáticamente en respuesta a un cambio en la presión.

El módulo de cizalladura, mide la respuesta del material ante una deformación ocasionada por una fuerza que actúa sobre el cuerpo, paralela a una de las caras, mientras que la cara opuesta permanece fija.

El módulo de Young caracteriza el comportamiento de un material elástico, según la dirección en la que se aplica una fuerza. Mide la facilidad o dificultad

para estirar un material determinado, de modo que, un material con un módulo de Young bajo es un material fácil de estirar.

Si se somete el sólido a una tensión axial, este se contrae lateralmente; mientras que, si se le comprime, se ensancha lateralmente. El radio de Poisson, que es el cociente entre la deformación lateral y la deformación axial y cuantifica lo dúctil o frágil, como también lo plástico que es un material. El radio de Poisson de un material tiene valores entre -1 y 0.5. Cuanto mayor sea su valor, mayor es la plasticidad del material. El radio de Poisson también está relacionado con la ductilidad del material, es aceptado empíricamente que valores de $\nu < 0.26$ indica que el material es frágil y $\nu > 0.26$ indica que el material es dúctil [6]. Otro criterio utilizado para determinar el carácter dúctil o quebradizo de un material es la fórmula empírica de Pugh, la cual establece que si la razón entre $B/G > 1,75$ entonces el material se comporta de manera dúctil y en caso contrario el material es frágil [6].

Para un cristal cúbico se expresan de la siguiente manera [3,29,31]:

$$\mathbf{B} = \frac{1}{3}(\mathbf{C}_{11} - 2\mathbf{C}_{12}) \quad (35)$$

$$\mathbf{G} = \frac{1}{2}(\mathbf{G}_V + \mathbf{G}_R) \quad (36)$$

$$\mathbf{E} = \frac{9\mathbf{B}\mathbf{G}}{3\mathbf{B} + \mathbf{G}} \quad (37)$$

$$\nu = \frac{3\mathbf{B} - 2\mathbf{G}}{2(3\mathbf{B} + \mathbf{G})} \quad (38)$$

Dónde \mathbf{G}_V y \mathbf{G}_R son el módulo de cizalladura de Voigt y Reus respectivamente. El primero es para una tensión uniforme y el segundo en el caso de una deformación uniforme. Esto es, respectivamente, el límite superior e inferior del módulo de cizalladura.

$$\mathbf{G}_V = \frac{1}{5}(\mathbf{C}_{11} - \mathbf{C}_{12} + 3\mathbf{C}_{44}) \quad (39)$$

$$G_R = \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (40)$$

1.3.2. Ecuación de estado de Birch-Murnaghan [33,34]

El conocimiento de la energía da acceso a todas o casi todas las propiedades del cristal. En cuanto a las propiedades elásticas, obtenida la energía total para un cristal dado (esto es, sabiendo el volumen de la celda unitaria de dicho cristal) podemos repetir el proceso aplicando contracciones y expansiones a la celda unitaria del cristal para obtener una serie de puntos V , $E(V)$ y ajustar esos datos a la ecuación de estado de Birch-Murnaghan para encontrar el volumen y la energía de referencia, que por lo general se toma como referencia el volumen de equilibrio:

$$E = E_0 + \frac{9}{16} B V_0 \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^3 B'_0 + \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \right\} \quad (41)$$

Donde E es la energía del sistema, E_0 , V_0 , son la energía y el volumen de referencia respectivamente, B es el módulo de compresibilidad y B'_0 su derivada. Los valores de E_0 , V_0 , B y B'_0 se determinan mediante este ajuste. Y la presión del sistema puede encontrarse también por la ecuación de estado propuesta por Birch para la presión [34]:

$$P = \frac{3}{2} B \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{7}{3}} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{5}{3}} \right] \left\{ 1 + \frac{3}{4} (B'_0 - 4) \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right] \right\} \quad (42)$$

CAPÍTULO 2

MODELO DE CÁLCULO

Los cálculos se realizaron empleando la aproximación no relativista FP-LAPW dentro del marco de la teoría del Funcional de la Densidad (DFT), mientras que la energía de correlación e intercambio de los electrones se describe en la aproximación del gradiente generalizado (GGA).

Se realizó una optimización de los parámetros de red de la estructura de Al, obteniendo así la curva $E(V)$. Ajustando esta curva a la ecuación de estado de Birch-Murnaghan se obtuvo el módulo de compresibilidad (B), su primera derivada (B'), y el volumen de equilibrio (V_0). Luego, este volumen se sometió a distorsiones tetragonales y ortorrómbicas descritas en las expresiones (43) y (44) respectivamente.

$$\begin{pmatrix} 1 + \delta & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \delta & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(1 + \delta)^2} \end{pmatrix} \quad (43)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \delta & 0 \\ \delta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \delta^2 \end{pmatrix} \quad (44)$$

Estas permitieron aplicar el procedimiento propuesto por Söderlind [35], que junto al conocimiento de B permite conocer las constantes elásticas C_{11} , C_{12} y C_{44} . Las cuales se utilizaron calcular los módulos elásticos B , G , E y ν así como también la razón B/G . Este proceso se repite para la misma estructura sometida a diferentes presiones. Luego de obtener los módulos elásticos para la estructura del Al, se intercambié un átomo de aluminio de la red por una impureza o una vacancia.

2.1. Optimización de volumen

La disposición de los átomos en cada celda unitaria se realizó utilizando como base la celda unitaria del cristal de aluminio y para las impurezas se reemplazó un átomo de esta celda por una impureza de escandio, cromo, níquel, cobre o una vacancia según sea el caso estudiado. Los valores del R_{MT} (como se le llama al radio de la esfera de *muffin-tin* en el programa WIEN2k) utilizados para los átomos de aluminio fueron 2.29 mientras que para el escandio, cromo, níquel y cobre fue de 2.5 en todos los casos. El criterio de convergencia seleccionado para los ciclos SCF fue el de energía, con un valor de $E_{cut} = 0.01 \text{ mRy}$, criterio que podemos encontrar trabajos similares a éste [3]. Los cálculos se realizaron con 10000 puntos k para cada compuesto. En todos los casos el valor de corte es $R_{MT} * K_{max} = 9$.

El volumen de la celda unitaria varía de forma isotrópica, tanto en la expansión como en la compresión, lo que implica que las posiciones atómicas en la celda se mantienen relativas entre sí. Los cambios de volumen que sufre la celda se dan en porcentajes respecto a su volumen inicial, por ejemplo $\pm 10\%$ (el % negativo implica una compresión, mientras que un % positivo conlleva una expansión). Además, durante cada variación de volumen de la celda, se evalúa la energía del sistema.

2.2. Obtención de las constantes elásticas

En cada aleación estudiada se realizaron cálculos para obtener el volumen óptimo a presión cero y utilizando la curva energía vs volumen obtenida se utilizaron valores de volumen que correspondan a una presión cercana a -6, -4, -2, 0, 2, 4 y 6 GPa. Para cada uno de estos valores de presión se aplicaron deformaciones a sus respectivas redes manteniendo su volumen, pero variando sus posiciones atómicas para obtener redes ortorrómbicas y tetragonales, a parte de las cúbicas originales, lo que permite aplicar el

método propuesto por Söderlind [35] para calcular los valores de las constantes C_{11} , C_{12} y C_{44} .

Obtenidas las constantes elásticas para las distintas estructuras de aluminio y aluminio dopado, conocer los módulos elásticos (B , G , E y ν) es tan sencillo como aplicar las expresiones (35)-(38).

CAPÍTULO 3

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En el presente capítulo se expondrán los resultados obtenidos para las diferentes estructuras, su parámetro de red optimizado a presión cero, su estructura de bandas, su densidad de estados donde se ratifique el carácter metálico de las distintas estructuras sometidas o no bajo presión, los módulos elásticos B , G , E y ν así la magnitud B/G y discutir sobre las implicaciones más directas de algunos de estos resultados.

3.1. Estudio del Al

3.1.1. Celda unitaria y parámetro de red optimizado.

En la figura 6 se muestra la celda cúbica centrada en la cara (fcc por sus siglas en inglés) del aluminio, cuyo parámetro de red es mostrado comparativamente en la tabla 1. En la figura 7 se muestra el comportamiento de la energía en función del volumen de la celda de aluminio durante el proceso de optimización del parámetro de red.

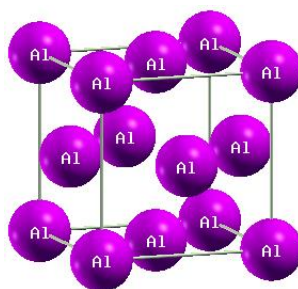


Figura 6. Celda unitaria del Al grupo espacial 255.

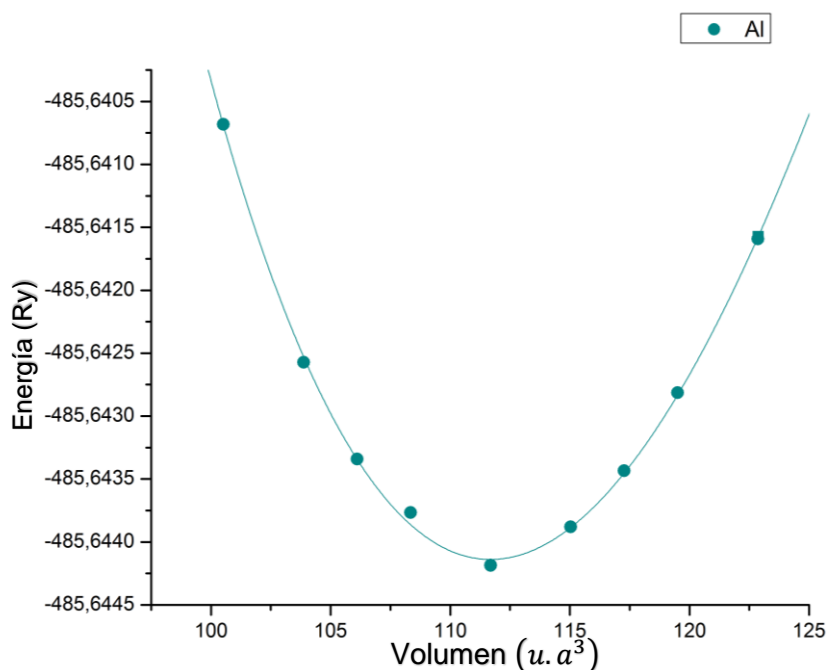


Figura 7. Optimización del volumen de la red de Al.

A partir de la figura 7 se determina la energía mínima que hace estable la estructura cristalina considerada y por supuesto su volumen, lo que permite conocer los valores del parámetro de red optimizado a presión cero. Este se muestra en la tabla 1, donde también se lo compara con los valores obtenidos por Goleorkhtabar [3] y los mostrados en la referencia [36].

Tabla 1. Comparación entre el parámetro de red del Al obtenidos en este trabajo con las referencias [3] y [36].

Al	Este trabajo	Ref [3]	Ref [36]
Parámetro de red ($u. a$)	7,645	7,636	7,653

Un estudio de optimización estructural similar se hizo para cada estructura al ser sometido a presiones diferentes de cero. En la tabla 1 puede apreciarse la cercanía del parámetro de red optimizado obtenido en este trabajo con el de las distintas referencias, lo que da una base sólida sobre los resultados obtenidos a partir de esta optimización y para la optimización del resto de estructuras estudiadas.

3.1.2. Estructura de bandas y densidad de estados.

Las figuras 8-10 muestran la estructura de bandas del Al sometido a presiones de 0, -6 y 6GPa respectivamente. Las gráficas muestran la energía en función de k en las direcciones de alta simetría de la primera zona de Brillouin $W\Lambda\Gamma\Delta XZWK$. El típico comportamiento de $E(k)$ es obtenido para cada caso, ratificando el carácter metálico del Al ante estos cambios de presión. Los niveles de Fermi representados en Rydberas son: 0.51806, 0.45228, 0.56445Ry respectivamente, producto de la reducción volúmica cuando es comprimido y el aumento del mismo cuando es expandido.

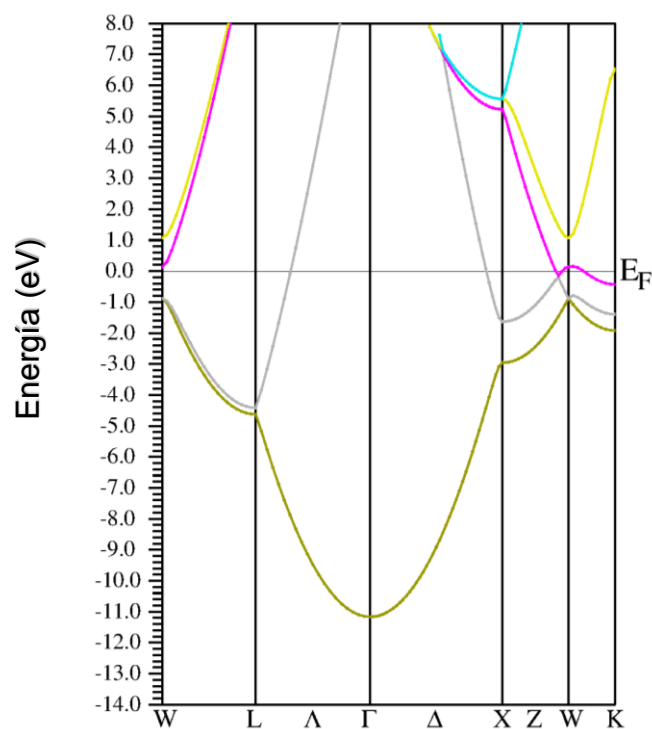


Figura 8. Estructura de bandas del Al a presión cero.

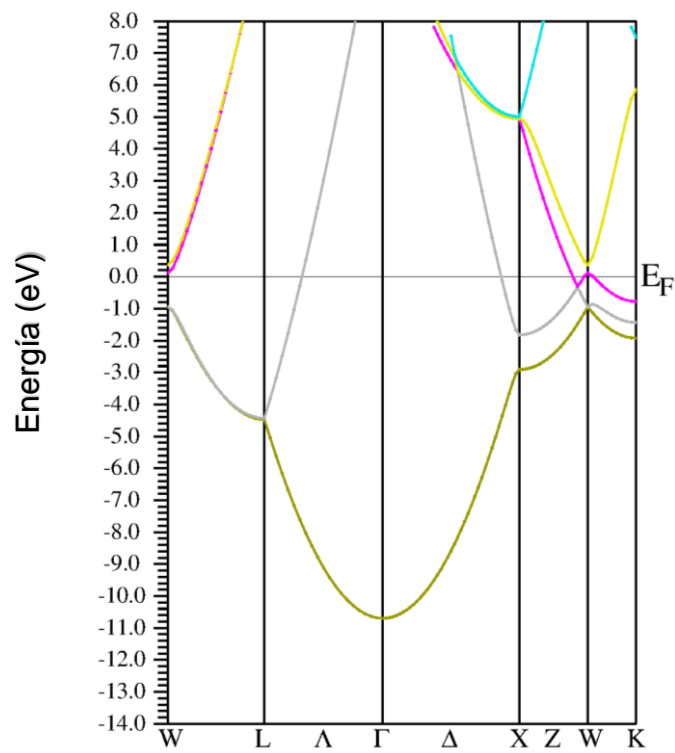


Figura 9. Estructura de bandas del Al a -6GPa.

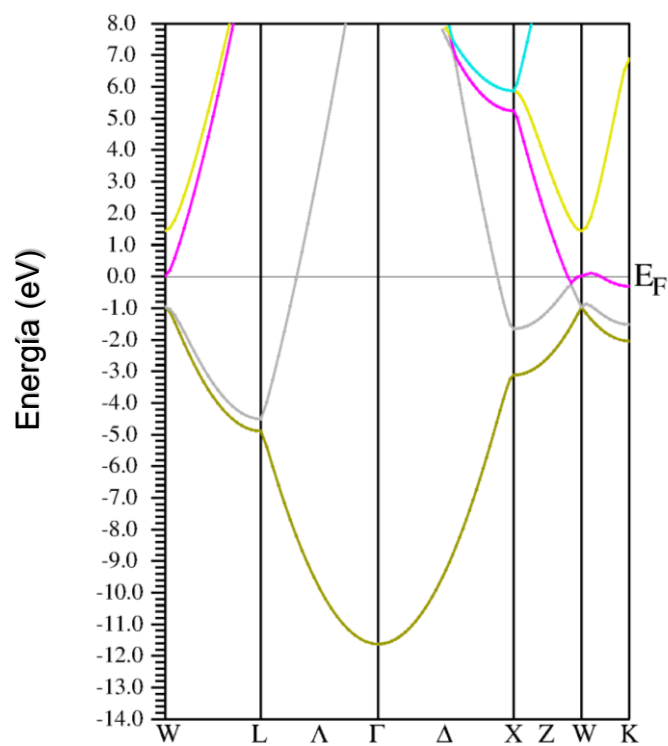


Figura 10. Estructura de bandas del Al a 6GPa.

En las figuras 11, 12 y 13 se grafica la densidad de estados total y parcial del Al a presión cero, -6GPa y 6GPa respectivamente. En ella se representan las contribuciones de los orbitales s y p del aluminio, la densidad de estados total de un átomo de aluminio y la densidad total de la celda unitaria. En general la contribución de orbitales s es superior a la de los orbitales p para energías inferiores a -5eV. Este límite se extiende hasta -4eV cuando la celda es expandida ($p = -6\text{GPa}$) y se contrae hasta -5eV cuando la celda se contrae ($p = 6\text{GPa}$). La mayor contribución a la densidad de estados en torno al nivel de Fermi proviene de los orbitales p. La posición del nivel de Fermi respecto al valle (*pseudogap*) de la densidad de estados (DOS) ha permitido a algunos autores [38] predecir la estabilidad relativa de algunas estructuras. De nuestros resultados podemos observar que el valle en torno al nivel de Fermi está compuesto de 2 semivalles para presiones menores o iguales a cero y de un valle único para $p = 6\text{GPa}$, estando la ubicación del nivel de Fermi a la derecha del *pseudogap* en cada uno de los casos. Esto es consecuencia del efecto diferente que la presión tiene sobre los orbitales s, desplazándolo en energía, mientras que los orbitales p permanece en un mínimo para todos los casos, lo cual habla de la estabilidad del aluminio cuando es sometido a presión.

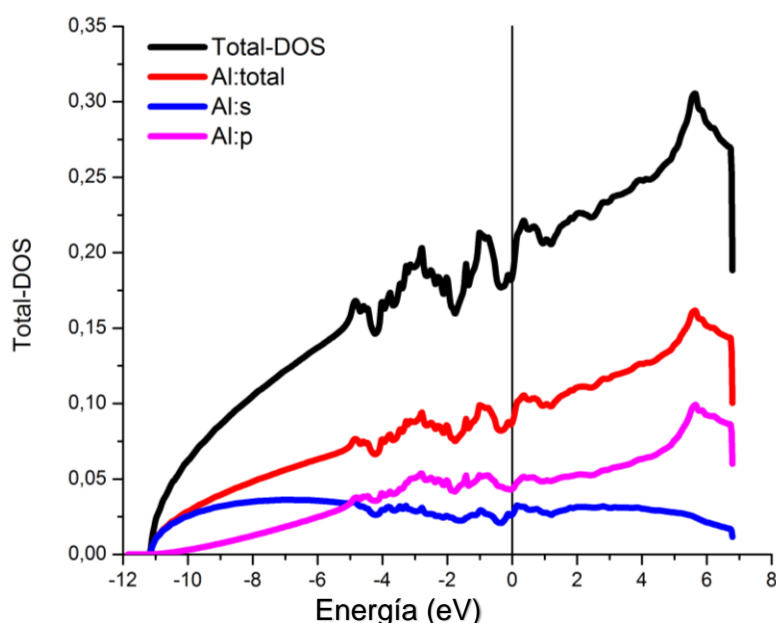


Figura 11. Densidad de estados del Al a presión cero.

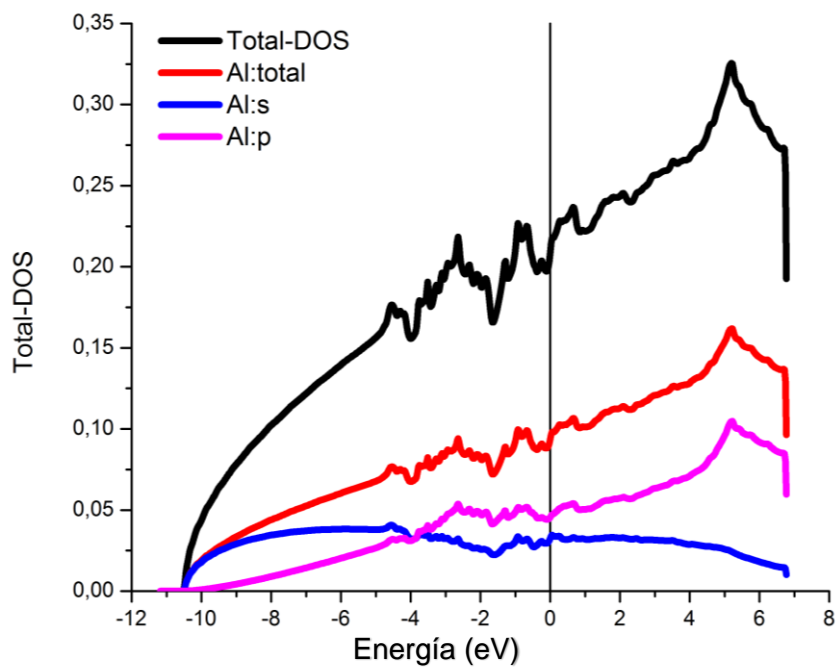


Figura 12. Densidad de estados del Al a -6GPa.

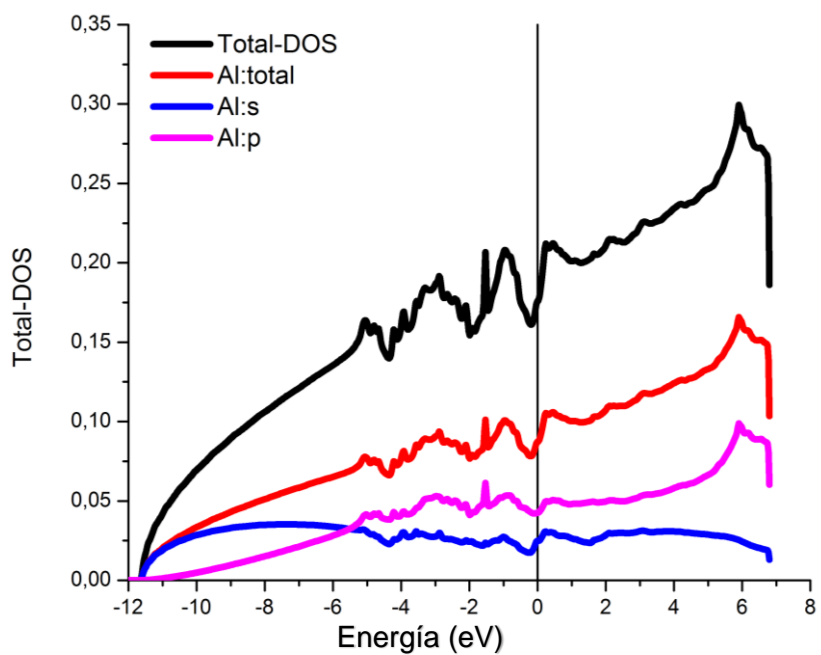


Figura 13. Densidad de estado del Al a 6GPa.

3.1.3. Constantes y módulos elásticos.

La tabla 2 contiene las constantes elásticas obtenidas en este trabajo para la estructura de Al a distintas presiones. Analizando estos resultados mediante las condiciones de estabilidad de Born [32], definidas en la ec. 34, se determina que esta estructura es estable.

Tabla 2. Constantes elásticas del Al bajo presión.

P (GPa)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
6	156,629	74,395	47,316
4	144,016	69,615	44,678
2	125,219	66,758	36,5319
0	110,008	61,073	31,714
-2	95,238	54,853	28,173
-4	78,184	49,086	23,282
-6	66,558	40,445	14,435

Conocidas las constantes elásticas procedemos a determinar los módulos de elasticidad del Al y el efecto que la presión tiene sobre dichos módulos.

En la figura 14 se muestra el módulo de compresibilidad (Módulo de *bulk*) en función de la presión para el aluminio puro. Un comportamiento lineal es obtenido para bajas presiones con una tendencia a apartarse de este comportamiento en la medida que el cristal es fuertemente comprimido. Un comportamiento similar es reportado para el módulo de cizalladura (Figura 15), con ligeras dispersiones a presiones por encima de 0GPa. Este comportamiento es replicado para el módulo de Young mostrado en la Figura 16.

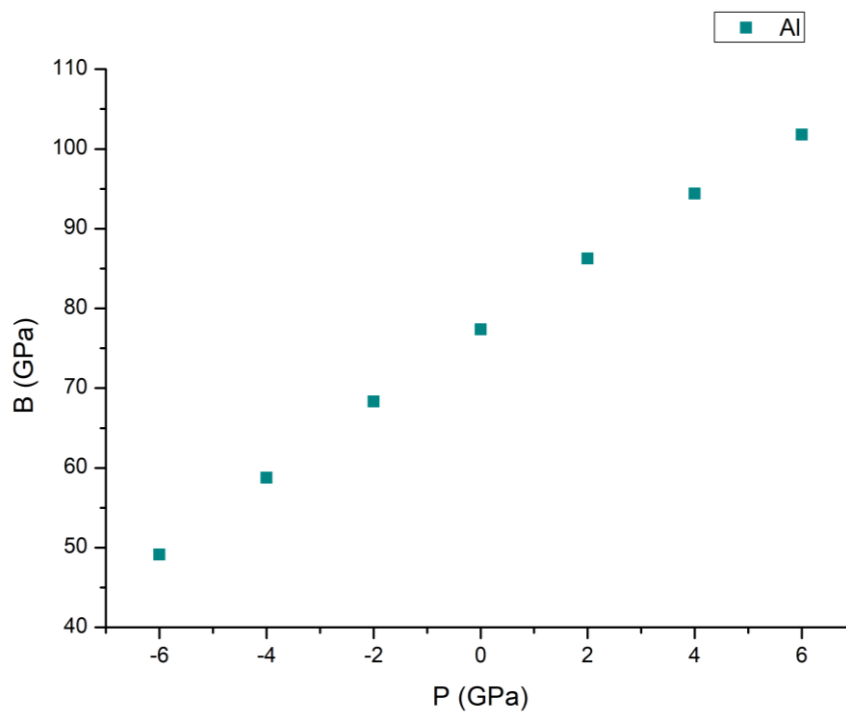


Figura 14. Módulo de compresibilidad para el Al a presiones de -6 a 6GPa.

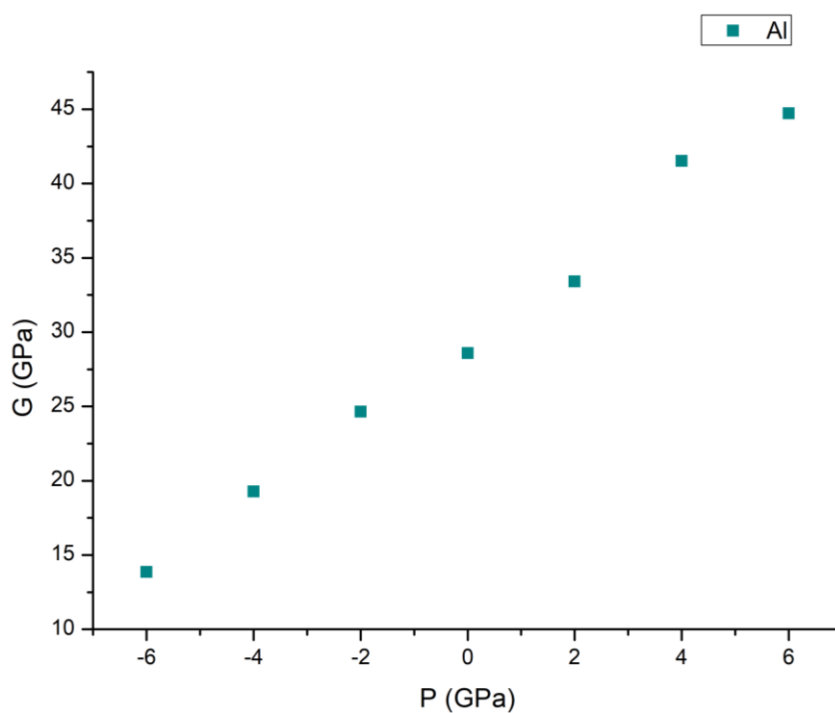


Figura 15. Módulo de cizalladura para el Al a presiones de -6 a 6GPa

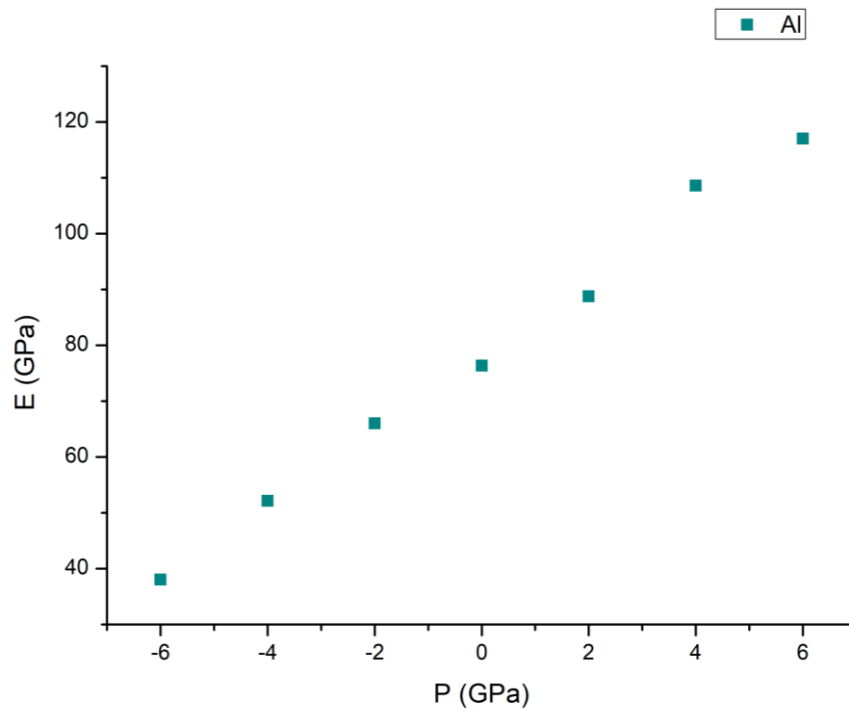


Figura 16. Módulo de Young para el Al a presiones de -6 a 6GPa.

En la figura 17 se muestran el radio de Poisson de la estructura de Al a distintas presiones, donde se observa que, aunque varíe un poco, el aluminio sigue siendo dúctil y mantiene una elevada plasticidad.

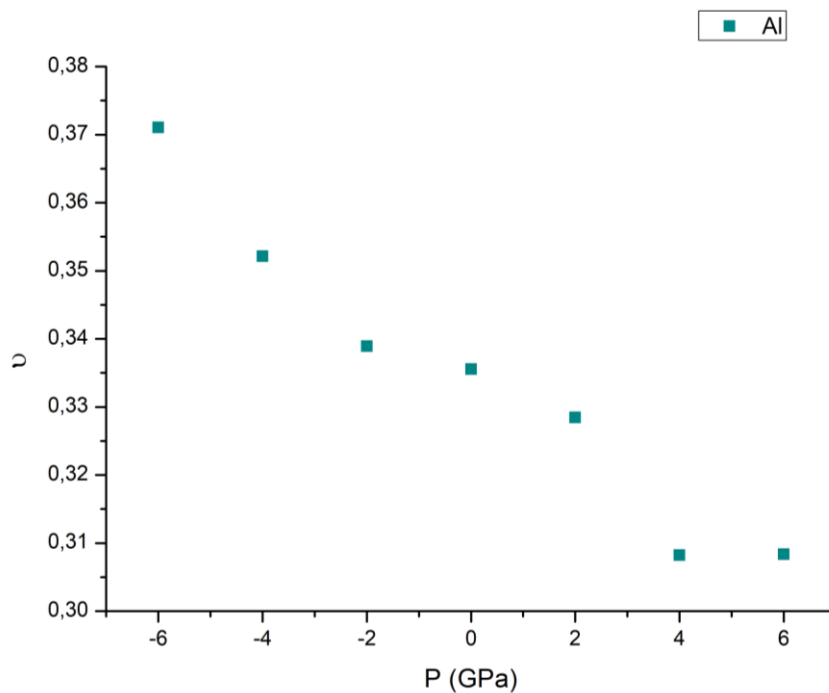


Figura 17. Radio de Poisson para el Al a presiones de -6 a 6GPa.

En cuanto a la razón B/G para el Al, se reportan valores superiores a 1,75, como se muestran en la figura 18, confirmando su naturaleza dúctil indicada por el radio de Poisson.

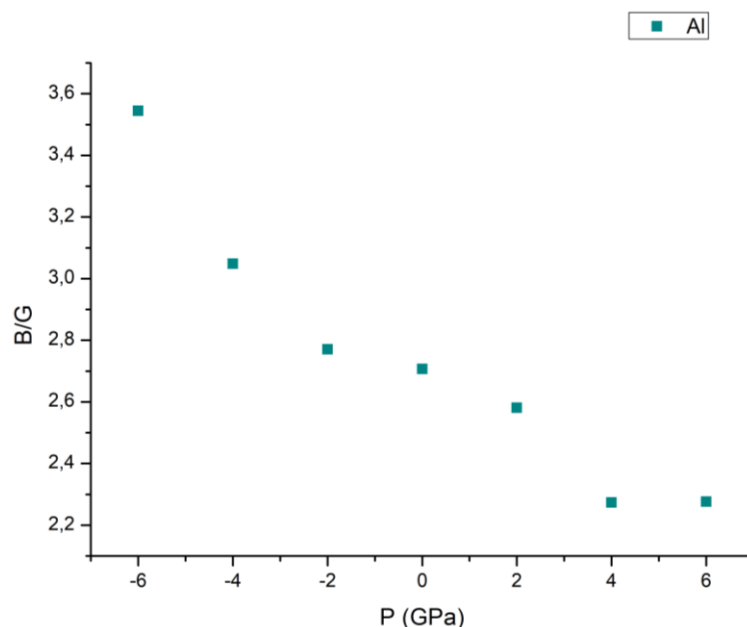


Figura 18. Magnitud B/G Sc a presiones de -6 a 6 GPa.

Un resumen comparativo entre los diferentes parámetros y módulos calculados en el presente trabajo y la literatura es mostrado en la tabla 3. En ella se ratifica la bondad de nuestro cálculo, ubicándose nuestros resultados entre los reportados en Ref. [3] y [36-37].

Tabla 3. Comparación entre los resultados obtenidos en el presente trabajo para la red de Al a $p = 0$ con los obtenidos por Golesorkhtabar [3], y con los valores mostrados en las Ref. [36] y [37].

Al	Este trabajo	Ref [3]	Ref [36,37]
Parámetro de red (<i>u. a</i>)	7,645	7.636	7,653
$C_{11}(GPa)$	110,01	112,10	108,00
$C_{12}(GPa)$	61,07	60,30	62,00
$C_{44}(GPa)$	31,71	32,80	28,30
$B(GPa)$	77,38	77,60	77,30
$G(GPa)$	28,82	29,90	26,05
$E(GPa)$	76,90	79,40	70,20
ν	0,33	0,33	0,35

3.2. Estudio del Al₃-Sc

3.2.1. Celda unitaria y parámetro de red optimizado.

En la figura 19 se muestra la celda unitaria de la estructura Al₃-Sc. En la figura 20 se muestra el comportamiento de la energía en función del volumen de la celda de aluminio durante el proceso de optimización del parámetro de red.

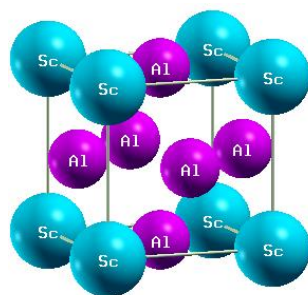


Figura 19. Celda unitaria del Al₃-Sc, grupo espacial 221.

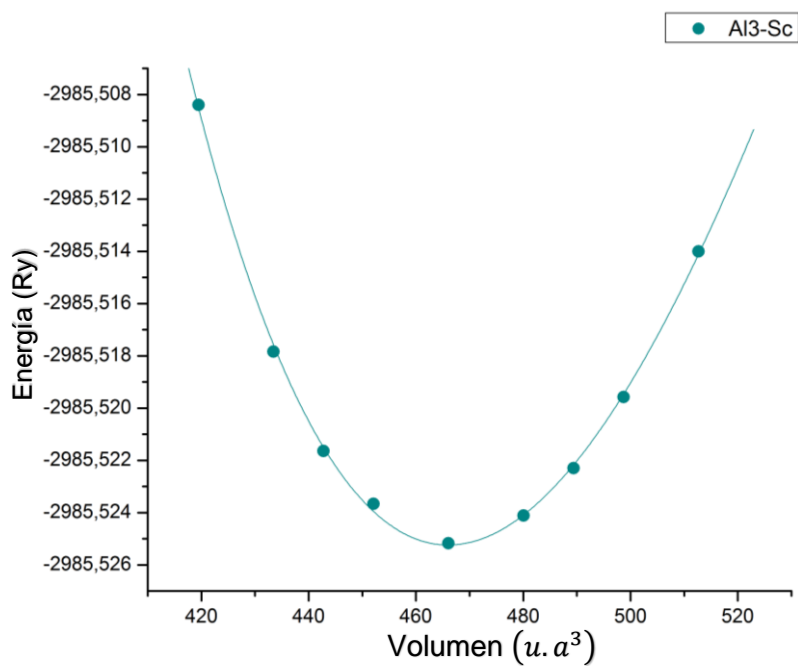


Figura 20. Optimización del volumen de la red de Al₃-Sc.

En la tabla 4 se muestra el parámetro de red optimizado para la estructura Al3-Sc, se observa que éste ha aumentado ligeramente, con respecto al valor obtenido para el Al.

Tabla 4. Parámetro de red optimizado para el Al3-Sc a $p = 0$.

Red	Parámetro de red (<i>u. a</i>)
Al	7,645
Al3-Sc	7,753

3.2.2. Estructura de bandas y densidad de estados.

Las figuras 21-23 muestran la estructura de bandas del Al3-Sc sometido a presiones de 0, -6 y 6GPa respectivamente. Las gráficas muestran la energía en función de k en las direcciones de alta simetría de la primera zona de Brillouin $W\Gamma\Delta XZM\Sigma\Gamma$. El típico comportamiento de $E(\mathbf{k})$ es obtenido para cada caso, ratificando el carácter metálico del Al3-Sc ante estos cambios de presión. Los niveles de Fermi representados en Rydberas son: 0.52058, 0.46617, 0.56126Ry respectivamente.

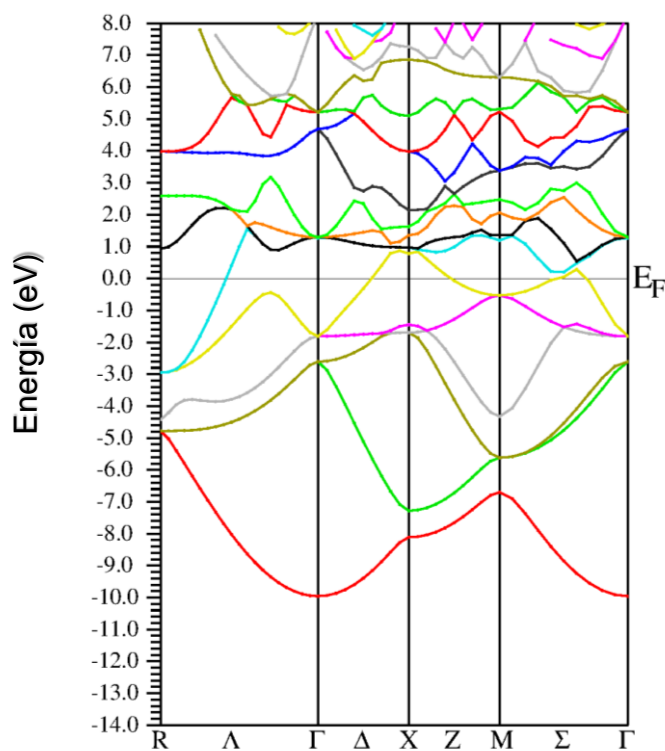
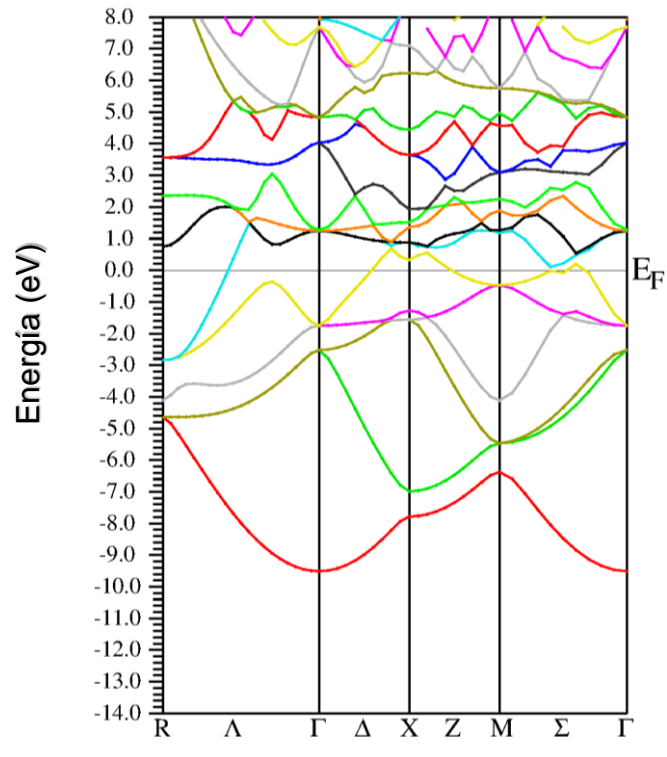
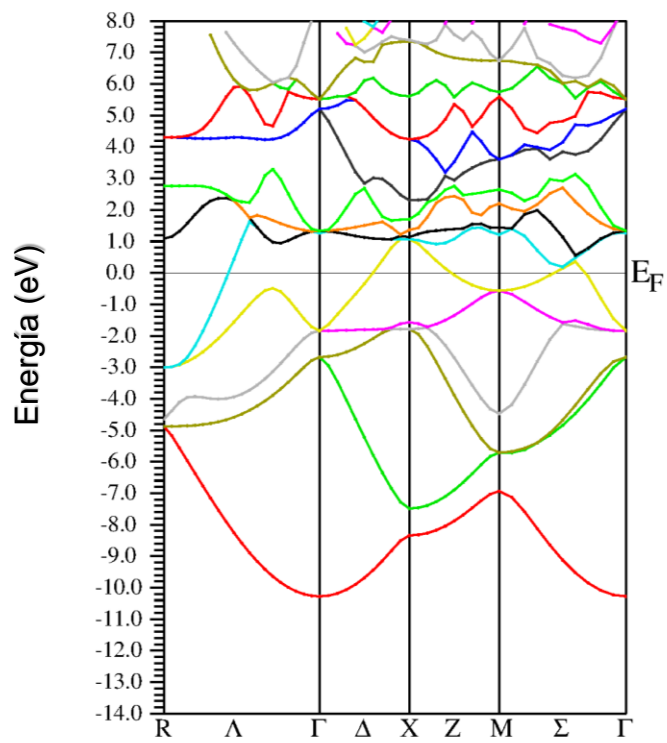


Figura 21. Estructura de bandas del Al3-Sc a presión cero.

Figura 22. Estructura de bandas del Al₃-Sc a -6GPa.Figura 23. Estructura de bandas del Al₃-Sc a 6GPa.

En las figuras 24, 25 y 26 se gráfica la densidad de estados total y parcial del Al₃-Sc a presión cero, -6GPa y 6GPa respectivamente. En ella se representa la contribución de los orbitales s y p del aluminio y los orbitales s, p y d del Sc. Cuatro regiones bien diferenciadas señalan la preponderancia de un elemento sobre el otro. En la primera región que se extiende hasta -1.5eV el Al predomina sobre el Sc, viniendo la mayor contribución de los orbitales s del Al hasta -4 eV y de los orbitales p entre -4 y -1.5eV. La segunda región, entre -1.5eV y 1.5 eV, presenta un marcado solapamiento de la densidad del Al con la densidad del Sc, ambos elementos contribuyendo de manera similar. En esta región se ubica el nivel de Fermi, lo que indica que las propiedades electrónicas estarán marcadas principalmente por la participación de los orbitales p del Al y d del Sc está última dominada por los orbitales d. Entre 1.5eV y 4eV los orbitales d del Sc son dominantes, mientras que en la cuarta región (por encima de 4eV) nuevamente ambos elementos contribuyen de manera similar a la DOS. El efecto de la presión es cambiar los límites de coexistencia de esas regiones. Cuando la celda es expandida ($p = -6\text{GPa}$) la primera región se expande hasta -1.2eV, mientras se contrae hasta 1.9eV cuando se aplica una presión de 6GPa. Las demás regiones igualmente fluctúan proporcionalmente. Para esta estructura el nivel de Fermi se ubica en un *semiplateau* a la izquierda del *pseudogap*, lo que indica que tal estructura es menos estable que la del Al.

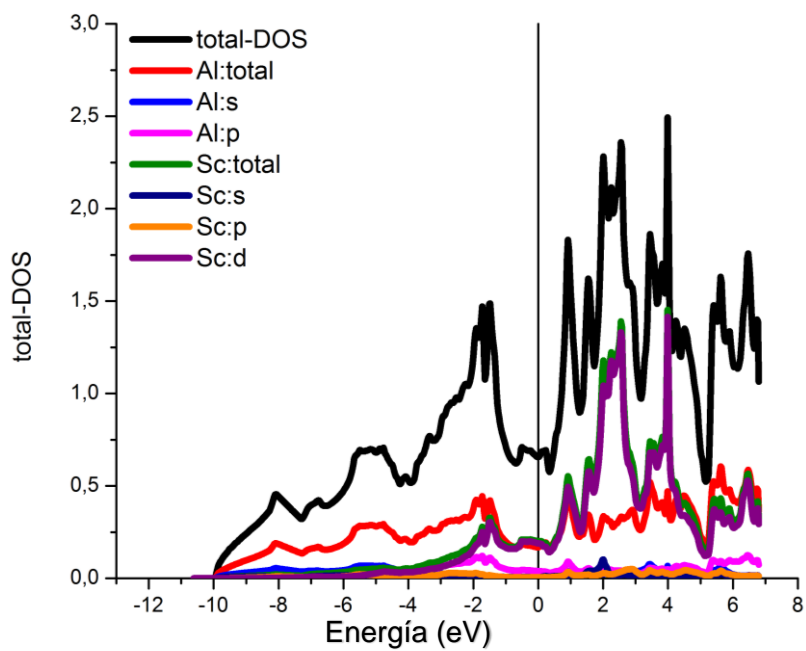


Figura 24. Densidad de estados del Al₃-Sc a presión cero.

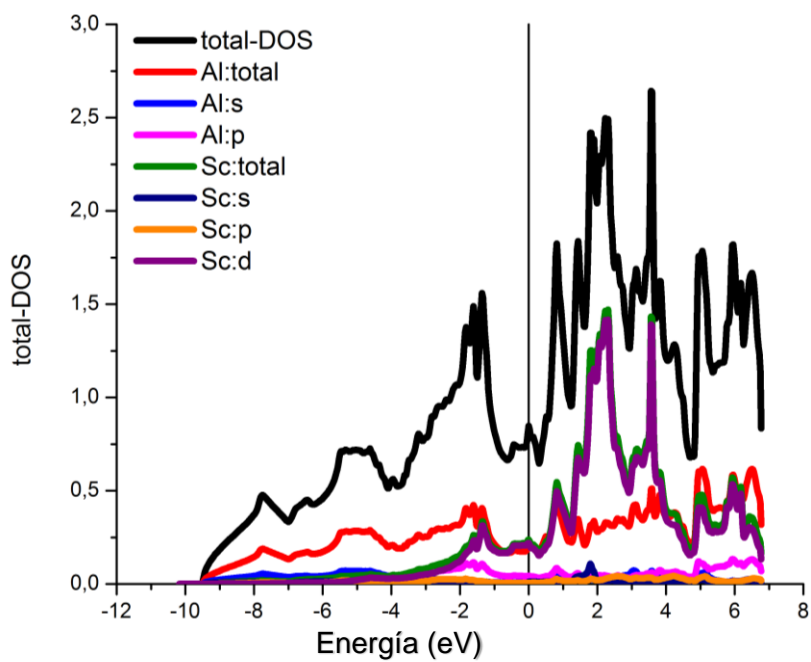


Figura 25. Densidad de estados del Al₃-Sc a -6GPa.

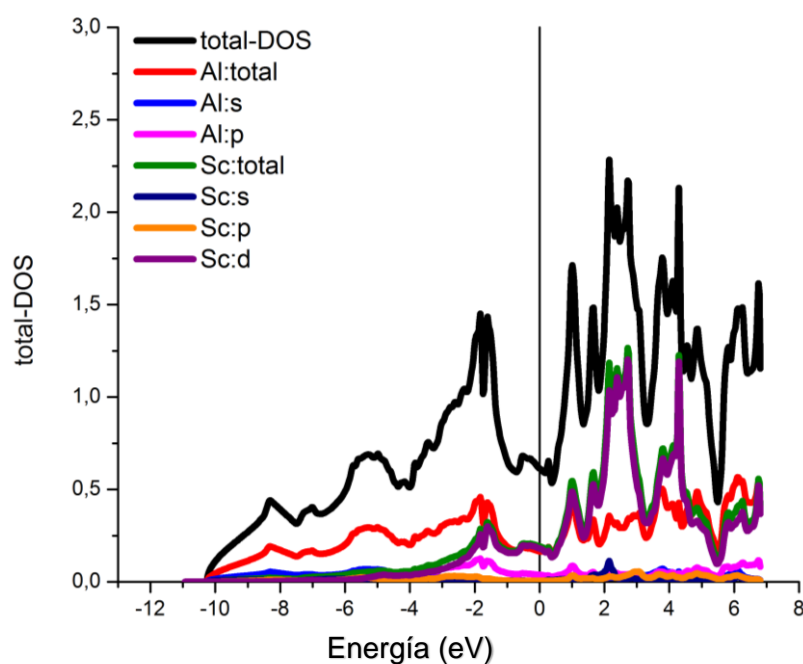


Figura 26. Densidad de estados del Al₃-Sc a 6GPa.

3.3.3. Constantes y módulos elásticos.

La tabla 5 muestra las constantes elásticas del Al₃-Sc a distintas presiones, evidenciándose de las mismas que cumplen las condiciones de estabilidad de Born.

Tabla 5. Constantes elásticas del Al₃-Sc.

P (GPa)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
6	223,384	51,373	92,021
4	212,043	46,304	86,734
2	190,518	46,716	78,664
0	179,050	40,709	71,946
-2	168,950	34,656	66,504
-4	150,989	30,511	57,952
-6	131,991	28,283	43,230

Conocidas las constantes elásticas procedemos a determinar los módulos de elasticidad del Al₃-Sc y el efecto que la presión tiene sobre dichos módulos.

En la figura 27 se muestra el módulo de compresibilidad en función de la presión para el Al3-Sc. Un comportamiento lineal con la presión es mostrado, muy similar en forma al obtenido para el Al pero de menor magnitud, lo que indica que la incorporación de Sc al Al lo hace mas resistente a la compresión. El cristal expandido muestra una mayor brecha entre B_{Al} y B_{Al_3-Sc} que cuando dicha estructura está comprimida.

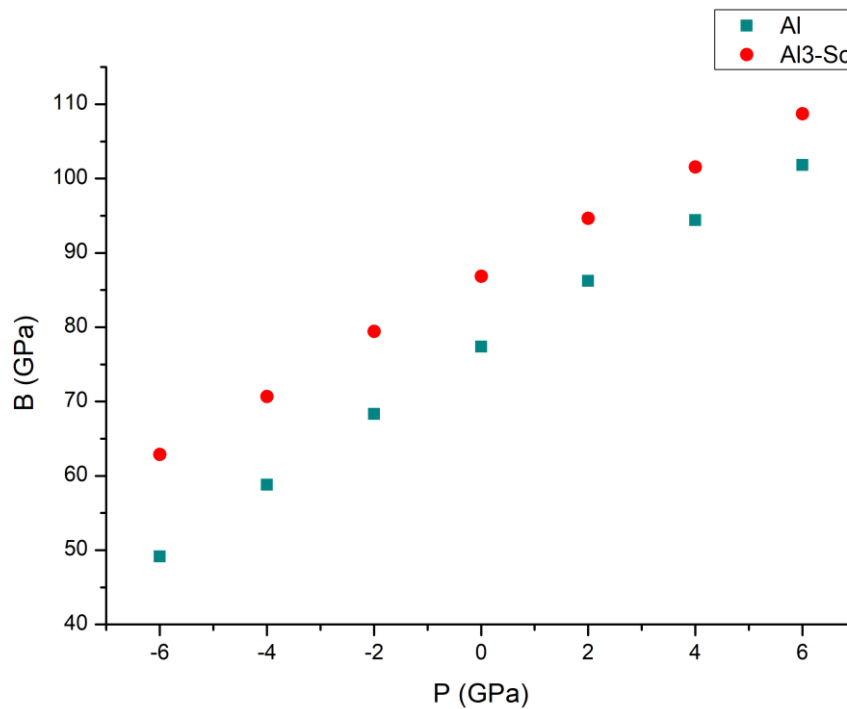


Figura 27. Módulo de compresibilidad para el Al3-Sc a presiones de -6 a 6GPa.

En la figura 28 se muestra el módulo de cizalladura en función de la presión para el Al3-Sc. En comportamiento mostrado no es completamente lineal, y similar en forma al obtenido para el Al. La magnitud también es muy superior a la del Al, lo que indica que la incorporación de Sc al Al lo hace mas resistente al cambio de forma cuando es sometido a un esfuerzo constante. El cristal expandido muestra una menor brecha entre G_{Al} y G_{Al_3-Sc} que cuando dicha estructura está comprimida.

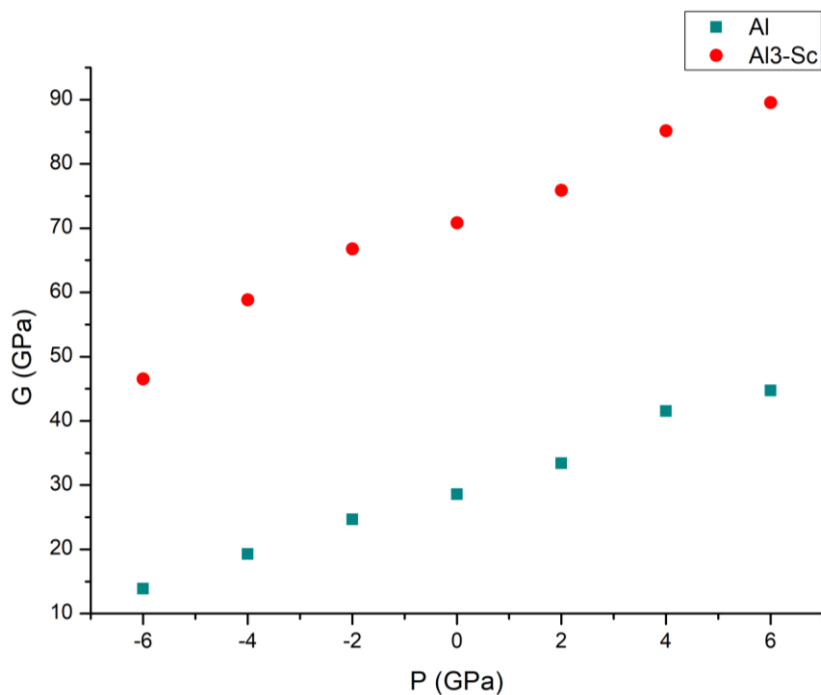


Figura 28. Módulo de cizalladura para el Al₃-Sc a presiones de -6 a 6 GPa.

En la figura 29 se muestra el módulo de Young en función de la presión para la estructura Al₃-Sc y para el Al puro. De dicha gráfica se concluye que el comportamiento elástico del Al es superior en todo el rango de presión estudiado al de la estructura Al₃-Sc.

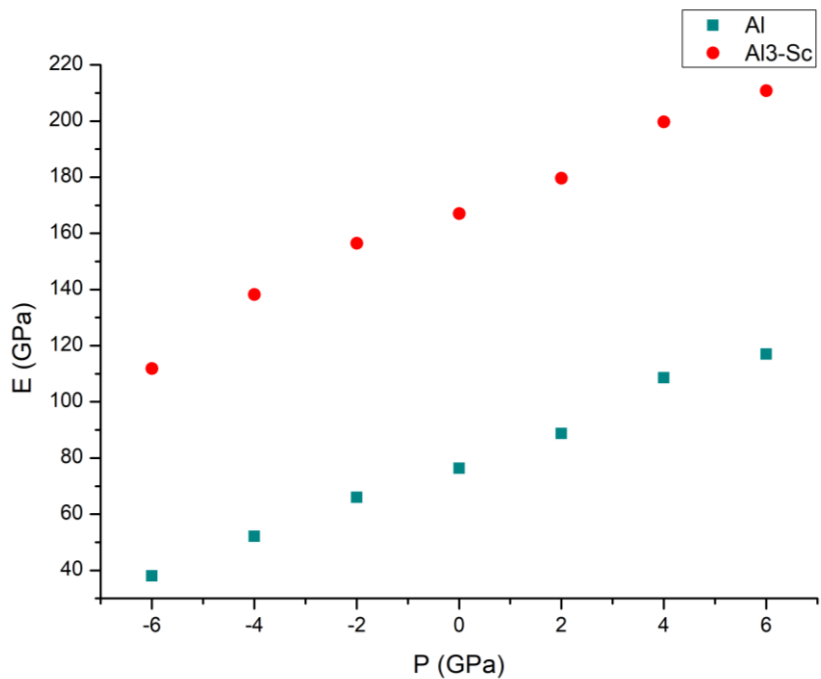


Figura 29. Módulo de Young para el Al₃-Sc a presiones de -6 a 6 GPa.

En la figura 30 se muestra el radio de Poisson en función de la presión, evidenciando como el agregar Sc a la red de Al disminuye su plasticidad y ductilidad, volviéndose una estructura poco plástica y muy frágil.

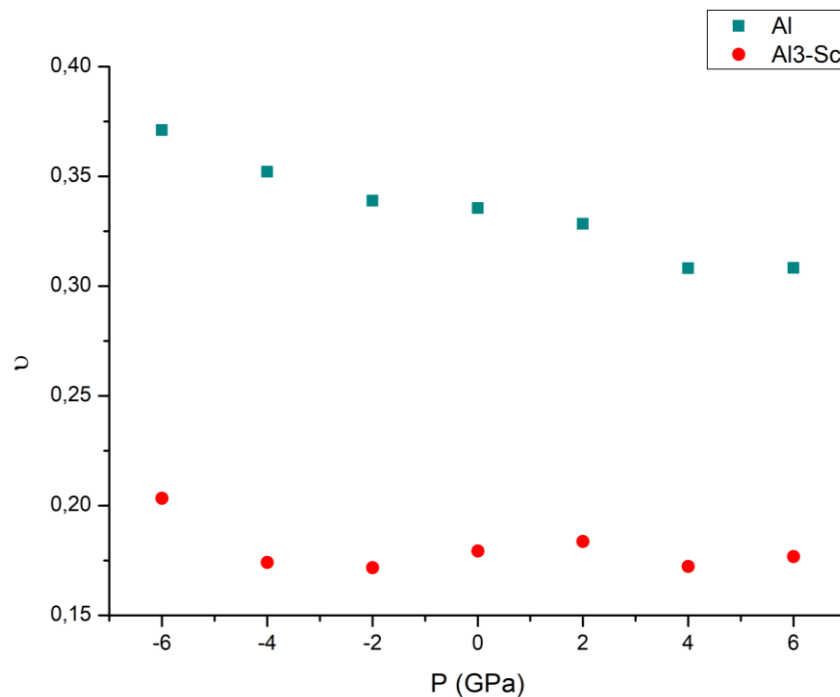


Figura 30. Radio de Poisson para el Al₃-Sc a presiones de -6 a 6 GPa.

La figura 31 muestra la razón B/G de la estructura del Al₃-Sc, mostrando que esta estructura tiene valores inferiores a 1,75, confirmando la naturaleza frágil de la misma, tal y como lo indicaba el radio de Poisson.

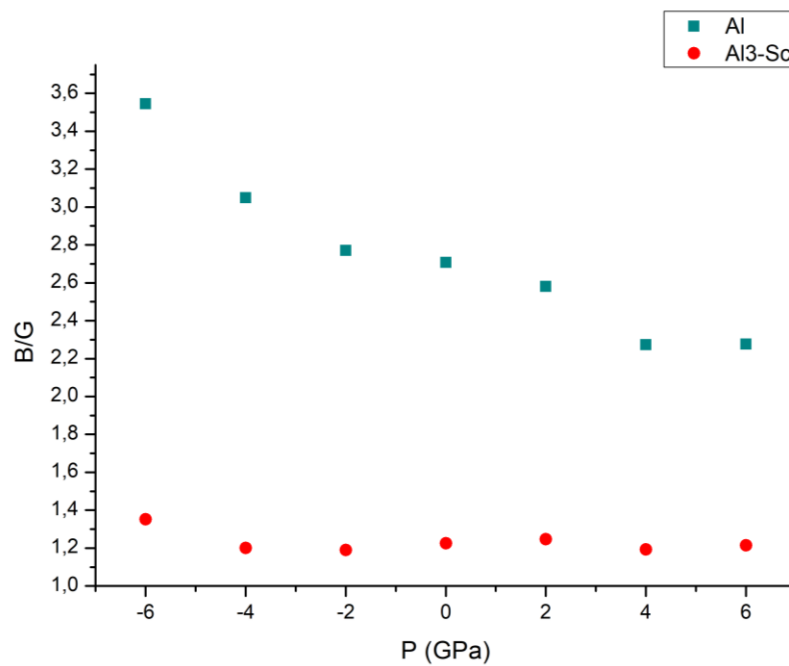


Figura 31. Magnitud B/G para el Al3-Sc a presiones de -6 a 6 GPa.

3.3. Estudio del Al3-Cr

3.3.1. Celda unitaria y parámetro de red optimizado.

En la figura 32 se muestra la celda unitaria de la estructura Al3-Cr, mientras que en la figura 33 se muestra la curva de energía electrónica en función del volumen para la optimización del parámetro de red.

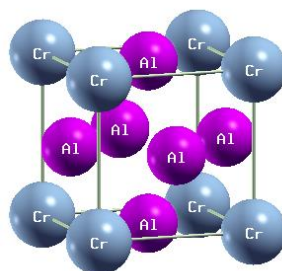


Figura 32. Celda unitaria del Al3-Cr, grupo espacial 221.

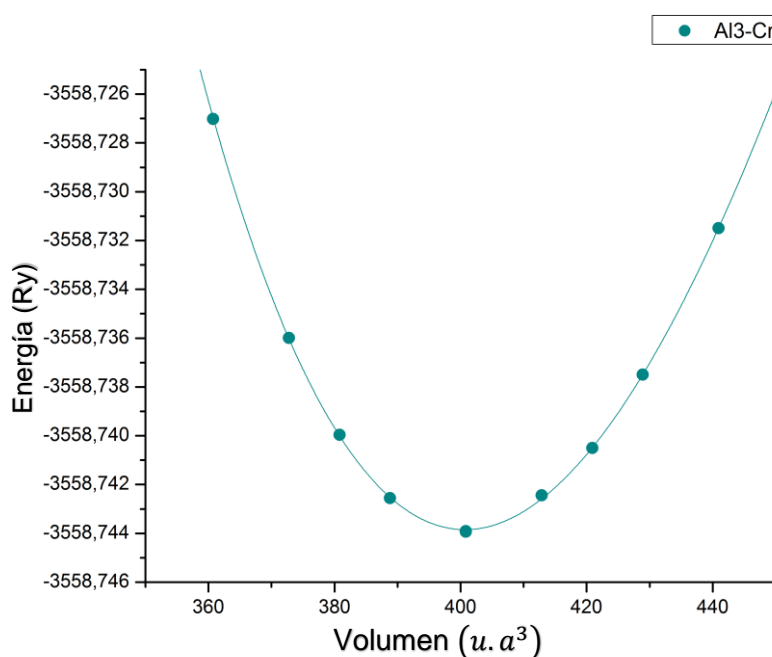


Figura 33. Optimización del volumen de la red de Al3-Cr.

Los resultados deducidos del mínimo de energía de dicha figura son mostrados en la tabla 6, donde se observa que el parámetro de red de la estructura optimizada del Al3-Cr ha disminuido considerablemente con respecto al Al.

Tabla 6. Parámetro de red optimizado para el Al3-Cr a $p = 0$.

Red	Parámetro de red (u.a)
Al	7,645
Al3-Cr	7,372

3.3.2. Estructura de bandas y densidad de estados.

Las figuras 34-36 muestran la estructura de bandas del Al3-Cr sometido a presiones de 0, -6 y 6GPa respectivamente. Las gráficas muestran la energía en función de k en las direcciones de alta simetría de la primera zona de Brillouin $R\Gamma\Delta XZM\Sigma\Gamma$. Los niveles de Fermi representados en Rydberas son: 0.58206, 0.53564, 0.62011Ry respectivamente. Esto se traduce en una menor ocupación electrónica cuando el cristal es expandido que cuando este es

comprimido, sin embargo el comportamiento cualitativo de cada banda en torno al nivel de Fermi se conserva, garantizando el carácter metálico de tal estructura.

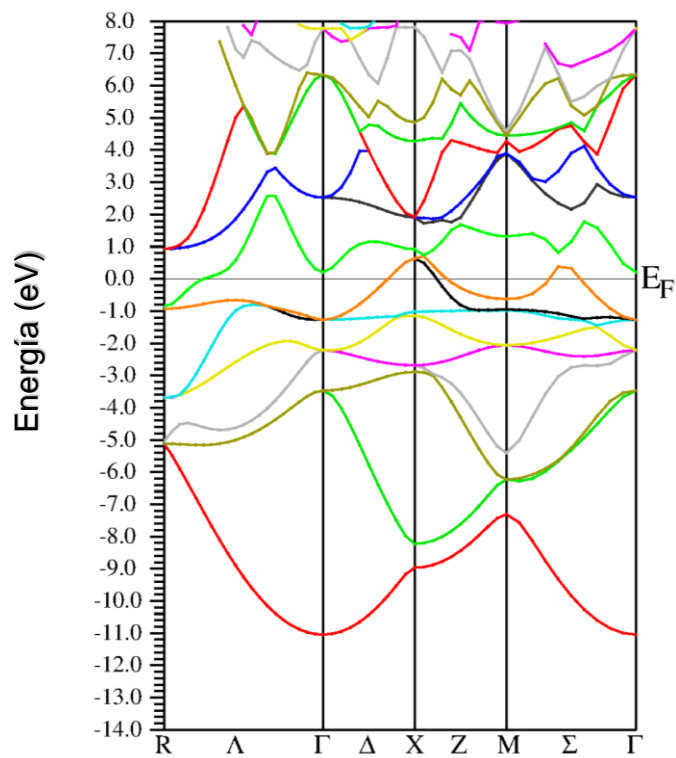


Figura 34. Estructura de bandas del Al₃-Cr a presión cero.

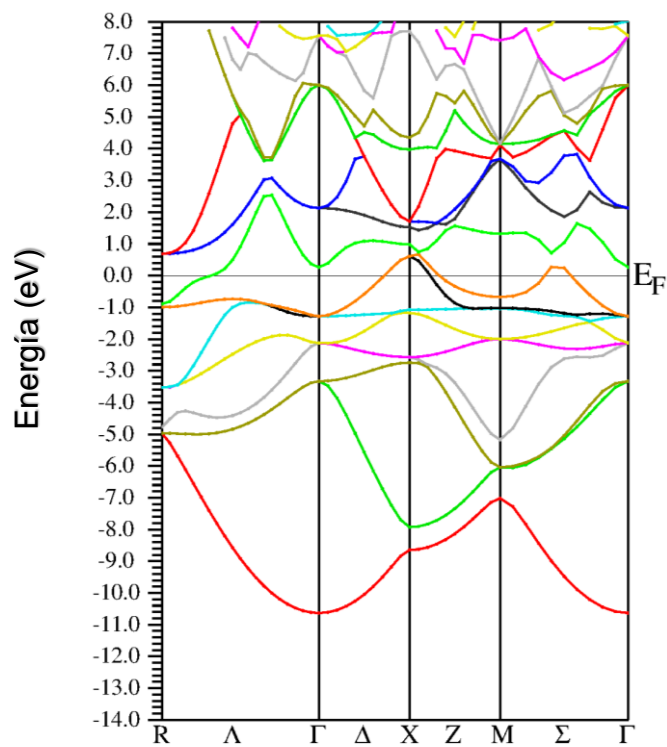


Figura 35. Estructura de bandas del Al3-Cr a -6GPa.

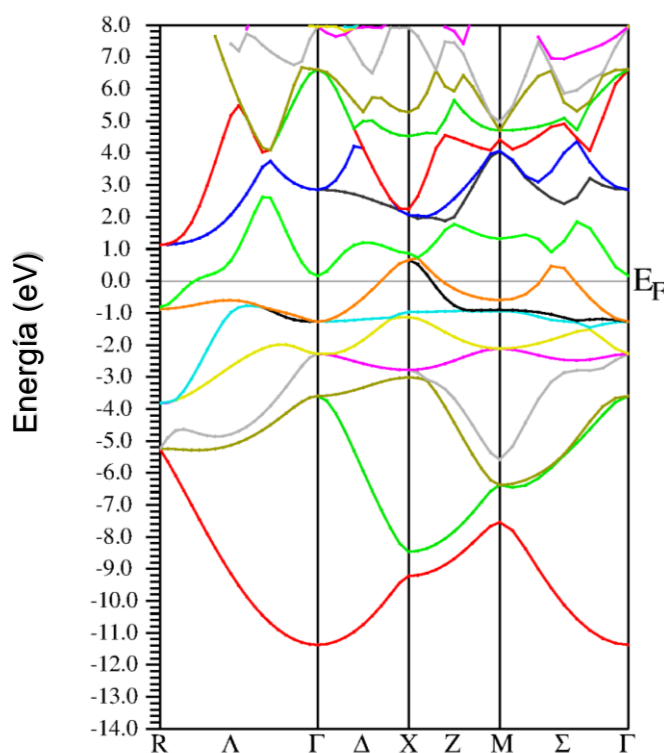


Figura 36. Estructura de bandas del Al3-Cr a 6GPa.

Los detalles de la participación de los diferentes orbitales atómicos del Al y del Cr son mostrados en las figuras 37, 38 y 39 donde se gráfica la densidad de estados total y parcial del Al3-Cr a presión cero, -6GPa y 6GPa respectivamente. En ella se representa la contribución de los orbitales s y p del aluminio y los orbitales s, p y d del Cr. Cuatro regiones bien diferenciadas señalan la preponderancia de un elemento sobre el otro. En la primera región que se extiende hasta -3.5eV, el Al predomina sobre el Cr, viniendo la mayor contribución de los orbitales s del Al hasta -4.5eV y de los orbitales p entre -4.5 y -3.5eV. La segunda región, entre -3.5eV y 0.7eV, presenta un marcado dominio de los orbitales d del Cr sobre la densidad del Al. En esta región se ubica el nivel de Fermi, lo que indica que las propiedades electrónicas estarán marcadas principalmente por la participación de los orbitales d del Cr, aunque hacia el límite de esta región comienza a hacerse importante los orbitales p del Al. Entre 0.7eV y 2eV los orbitales d del Cr son ligeramente dominantes, mientras que en la cuarta región (por encima de 2eV) la densidad de estados

del Al pasa a ser mayor que la del Cr. Nuevamente, el efecto de la presión es cambiar los límites de coexistencia de esas regiones y por supuesto la magnitud de la DOS, incrementándose a menor presión y disminuyendo a mayor presión, sin embargo, cuando la celda es expandida ($p = -6\text{GPa}$) la primera región se expande hasta -1.2eV , mientras se contrae hasta 1.9eV cuando se aplica una presión de 6GPa . Las demás regiones igualmente fluctúan proporcionalmente. Para esta estructura el nivel de Fermi se ubica a la izquierda del *pseudogap*, lo que indica que tal estructura es menos estable que la del Al.

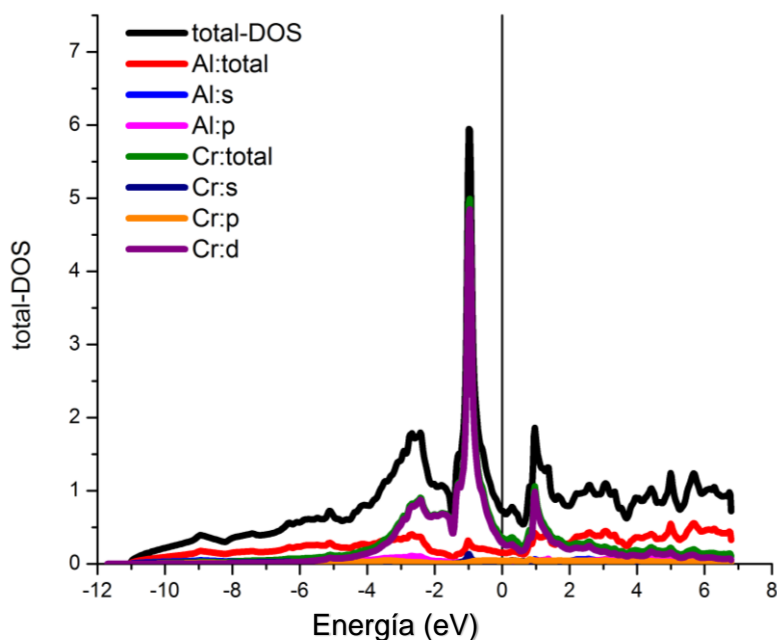
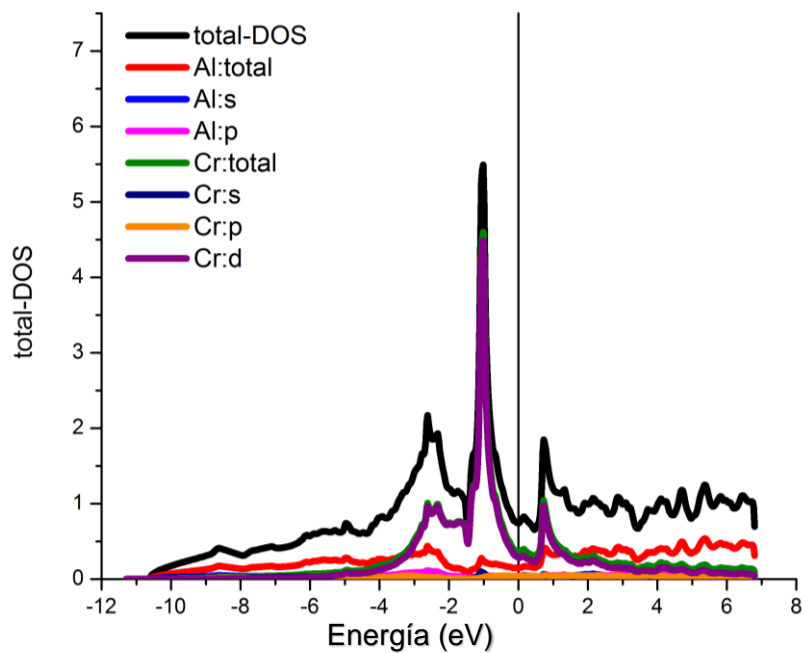
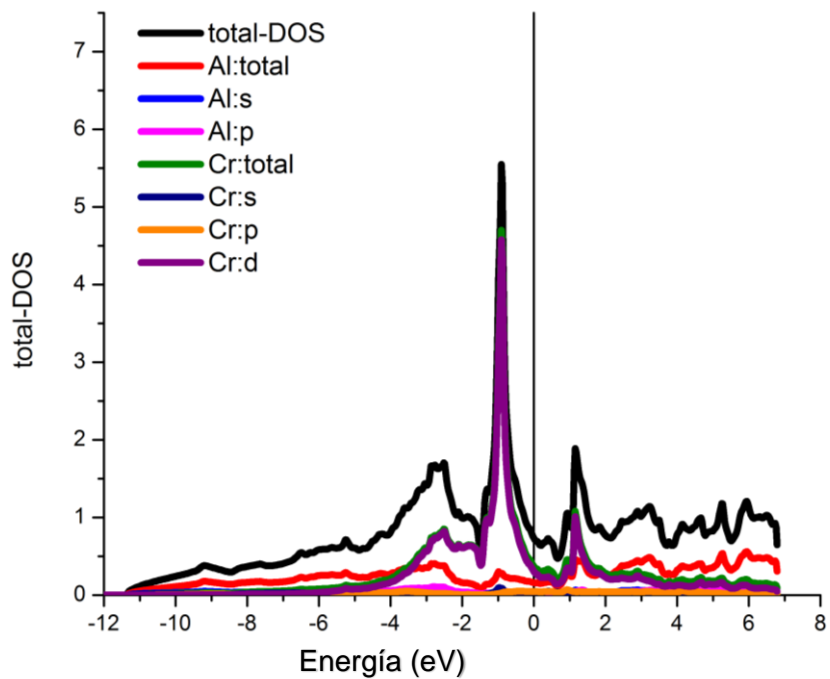


Figura 37. Densidad de estados del Al₃-Cr a presión cero.

Figura 38. Densidad de estados del Al₃-Cr a -6 GPa.Figura 39. Densidad de estados del Al₃-Cr a 6 GPa.

3.3.3. Constantes y módulos elásticos.

La tabla 7, muestra las constantes elásticas del Al₃-Cr a distintas presiones, donde se observa que cumplen las condiciones de estabilidad de Born.

Tabla 7. Constantes elásticas del Al₃-Cr.

P (GPa)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
6	224,315	79,534	100,414
4	213,417	73,877	93,134
2	204,098	68,515	83,181
0	187,281	65,333	75,199
-2	184,731	55,513	65,629
-4	163,544	52,867	57,737
-6	153,045	43,865	47,255

Conocidas las constantes elásticas procedemos a determinar los módulos de elasticidad del Al₃-Cr y el efecto de la presión sobre dichos módulos.

En la figura 40 se muestra el módulo de compresibilidad en función de la presión para el Al₃-Cr. Un comportamiento lineal con la presión es mostrado, muy similar en forma al obtenido para el Al pero de mayor magnitud, lo que indica que la incorporación de Cr al Al lo hace menos resistente a la compresión. El cristal muestra una brecha entre B_{Al} y B_{Al_3-Cr} que se mantiene con la presión.

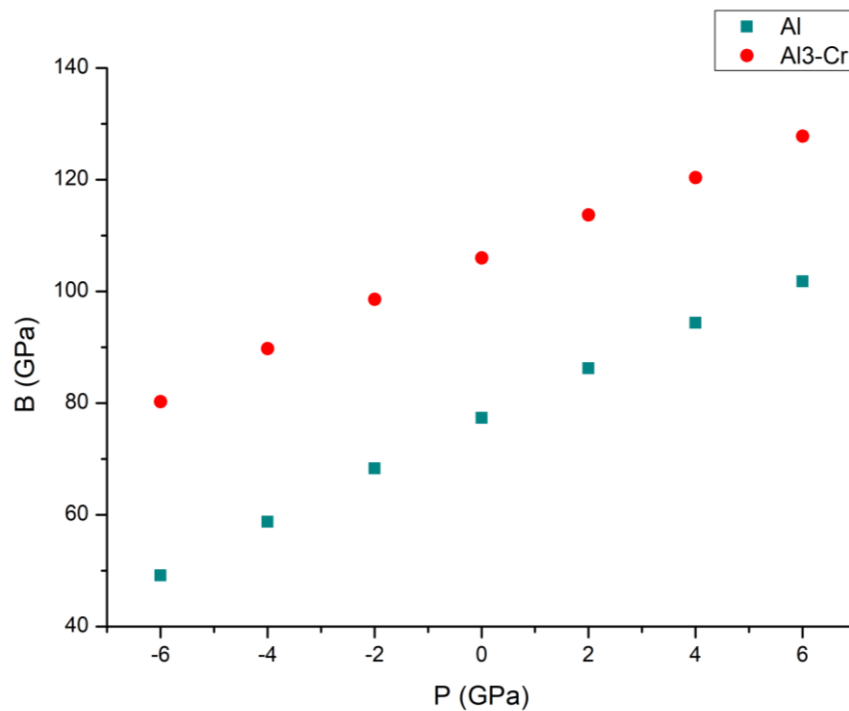


Figura 40. Módulo de compresibilidad para el Al₃-Cr a presiones de -6 a 6 GPa.

En la figura 41 se muestra el módulo de cizalladura en función de la presión para el Al₃-Cr. En comportamiento mostrado tiende a ser lineal, y similar en forma al obtenido para el Al. La magnitud también es muy superior a la del Al, lo que indica que la incorporación de Cr al Al lo hace más resistente al cambio de forma cuando es sometido a un esfuerzo constante. El cristal expandido muestra una brecha similar entre G_{Al} y G_{Al_3-Cr} que cuando dicha estructura está comprimida.

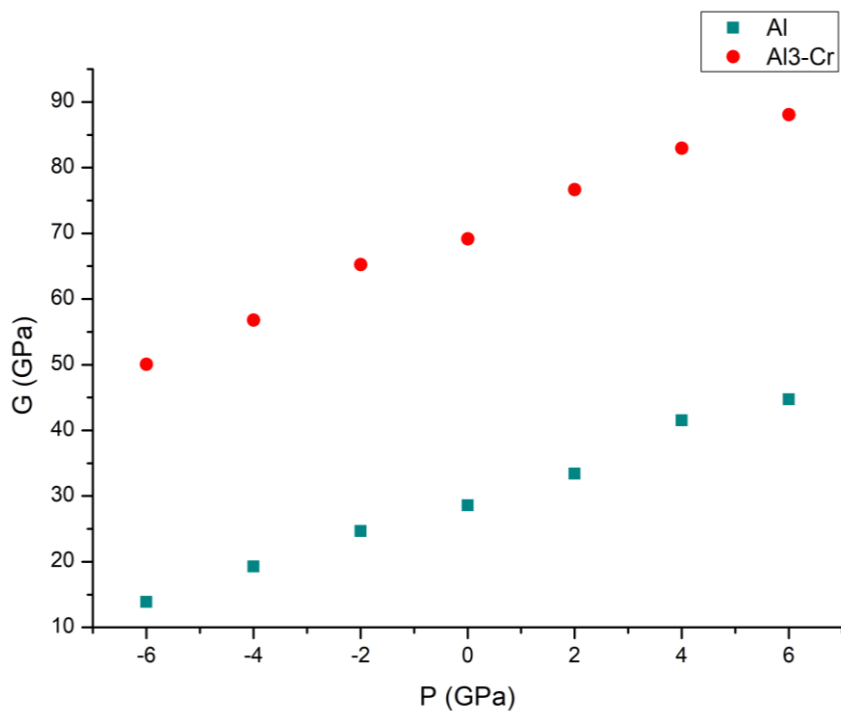


Figura 41. Módulo de cizalladura para el Al₃-Cr a presiones de -6 a 6 GPa.

En la figura 42 se muestra el módulo de Young en función de la presión para la estructura Al₃-Cr y para el Al puro. De dicha gráfica se concluye que el comportamiento elástico del Al₃-Sc es superior en todo el rango de presión estudiado al de la del Al puro.

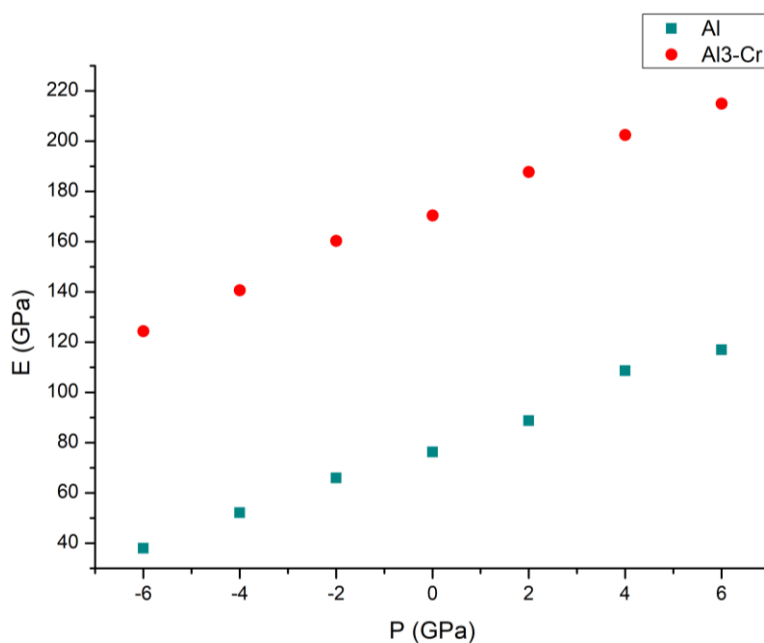


Figura 42. Módulo de Young para el Al₃-Cr a presiones de -6 a 6 GPa.

En la figura 43 se grafica la evolución del radio de Poisson con la presión, confirmando que el agregar Cr a la red de Al disminuye su plasticidad y ductilidad, volviéndose una estructura poco plástica y frágil, reflejado en la considerable disminución del radio de Poisson.

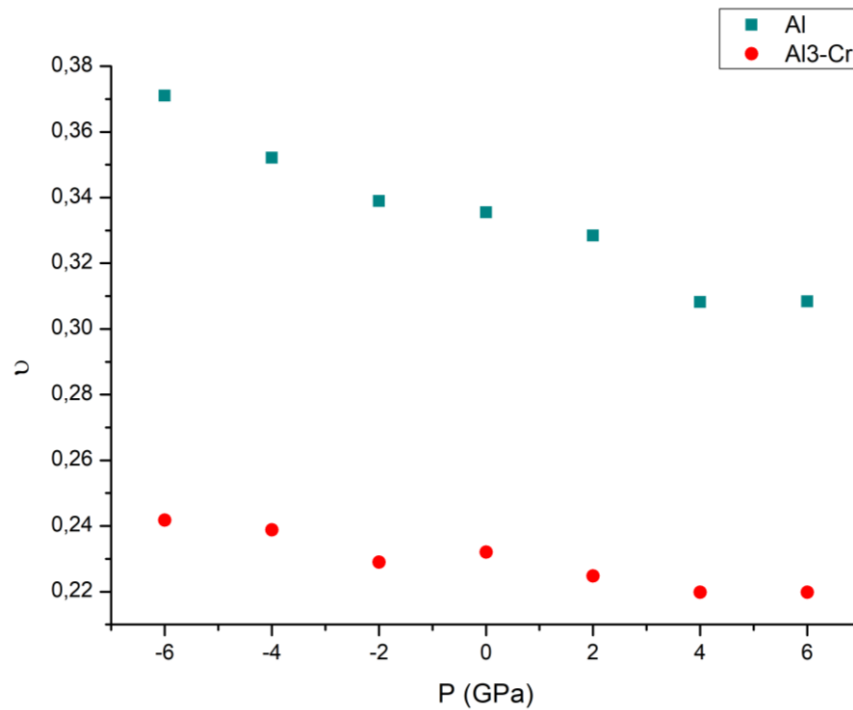


Figura 43. Radio de Poisson para el Al₃-Cr a presiones de -6 a 6 GPa.

La figura 44 muestra la razón B/G de la estructura del Al₃-Cr en función de la presión, evidenciándose que esta estructura tiene valores inferiores a 1,75, lo cual confirma la naturaleza frágil de la misma, como indicaba el radio de Poisson.

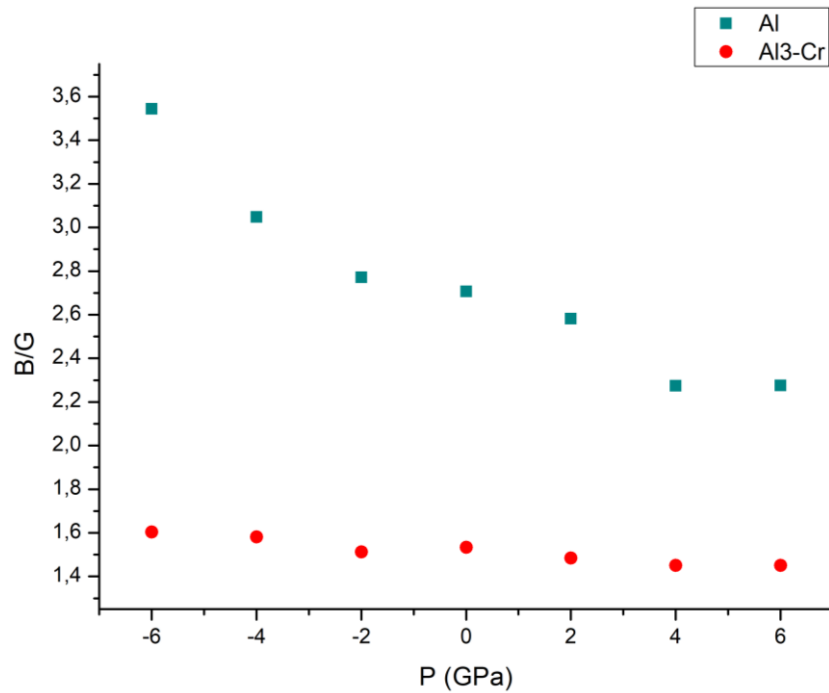


Figura 44. Magnitud B/G para el Al₃-Cr a presiones de -6 a 6 GPa.

3.4. Estudio del Al₃-Ni

3.4.1 Celda unitaria y parámetro de red optimizado.

En la figura 45 se muestra la celda unitaria de la estructura Al₃-Ni. En la figura 46 se muestra el comportamiento de la energía en función del volumen de la celda de aluminio durante el proceso de optimización del parámetro de red.

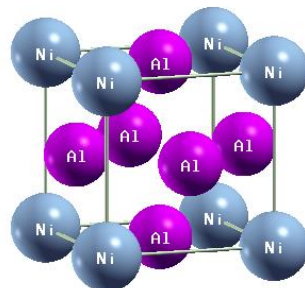


Figura 45. Celda unitaria del Al₃-Ni, grupo espacial 221.

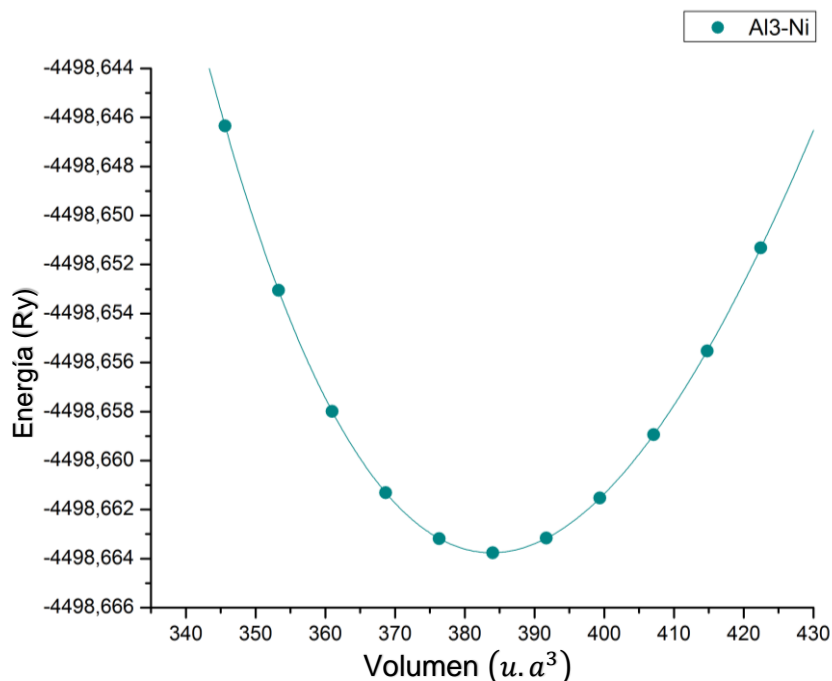


Figura 46. Optimización del volumen de la red Al3-Ni.

En tabla 8 se muestra el parámetro de red de la estructura optimizada del Al3-Ni, mostrando el mismo una importante disminución con respecto al Al.

Tabla 8. Parámetro de red optimizado para el Al3-Ni a $p = 0$.

Red	Parámetro de red ($u. a$)
Al	7,645
Al3-Ni	7,268

3.4.2. Estructura de bandas y densidad de estados.

Las figuras 47-49 muestran las estructuras de bandas del Al3-Ni sometido a presiones de 0, -6 y 6 GPa respectivamente. Las gráficas muestran la energía en función de k en las direcciones de alta simetría de la primera zona de Brillouin $R\Gamma\Delta XZM\Sigma\Gamma$. Los niveles de Fermi representados en Rydberas son: 0.56126, 0.51796, 0.60397Ry para presión cero, -6GPa y 6GPa respectivamente. El efecto de la presión es variar ligeramente la ocupación electrónica en las mismas. Note que en el centro de la zona de Brillouin los

pockets de electrones desaparecen cuando la presión es de -6 GPa, mientras que aparecen y crecen cuando la estructura es comprimida.

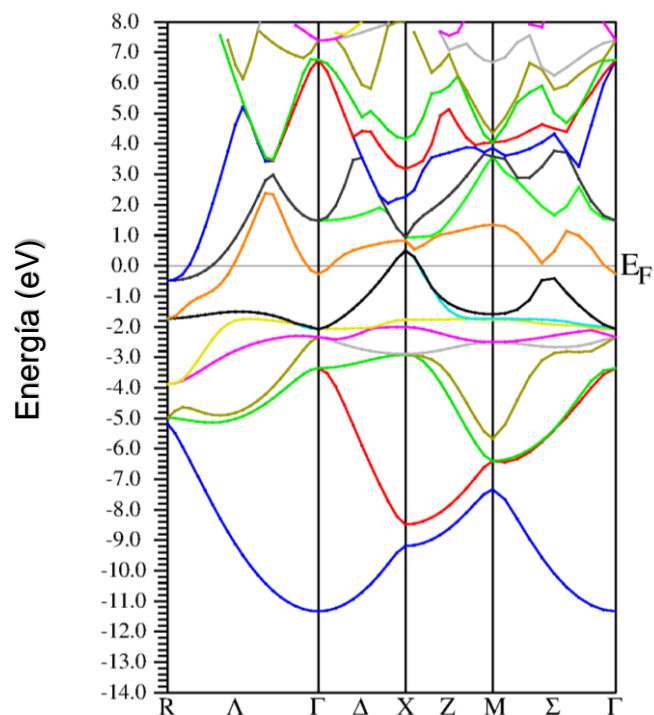


Figura 47. Estructura de bandas del Al₃Ni a presión cero

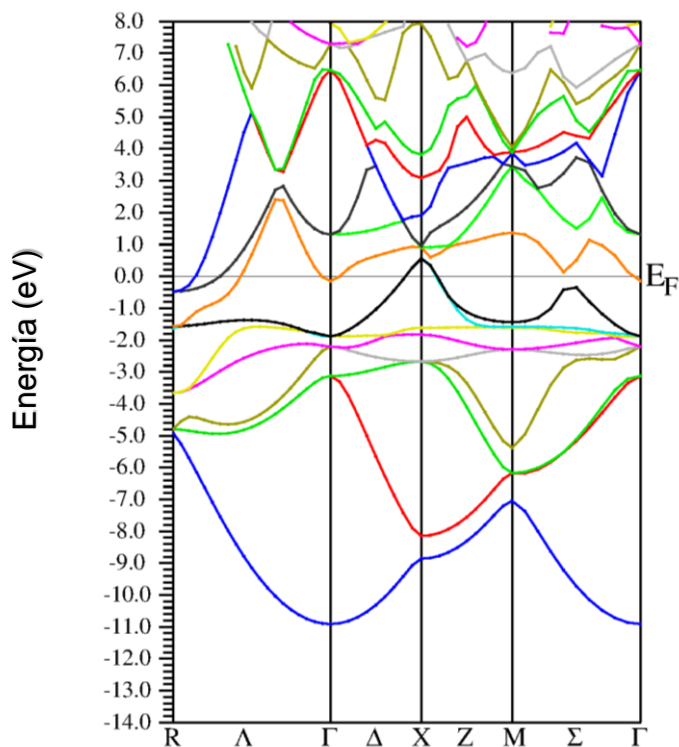


Figura 48. Estructura de bandas del Al₃Ni a -6 GPa

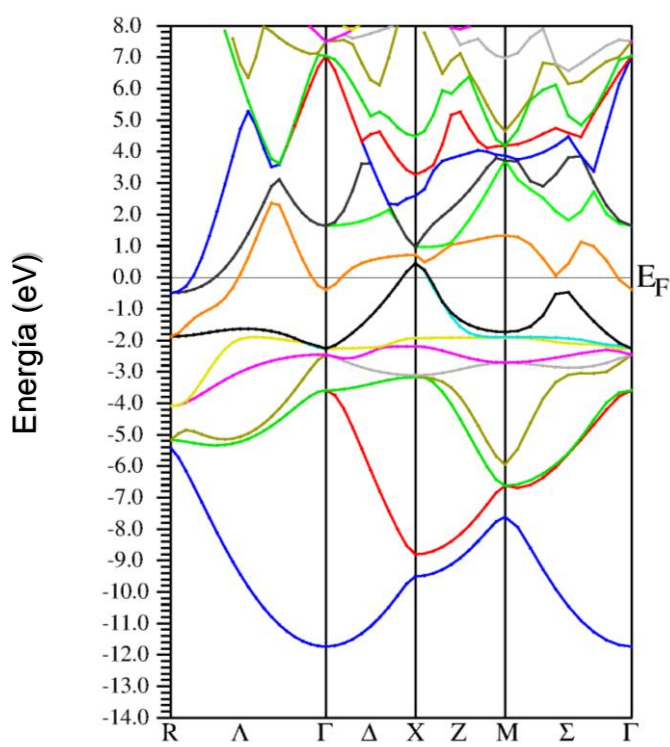


Figura 49. Estructura de bandas del Al₃-Ni a 6 GPa

Los detalles de la participación de los diferentes orbitales atómicos del Al y del Ni son mostrados en las figuras 50, 51 y 52, donde se gráfica la densidad de estados total y parcial del Al₃-Ni a presión cero, -6GPa y 6GPa respectivamente. En ella se representa la contribución de los orbitales s y p del aluminio y los orbitales s, p y d del Ni. Cuatro regiones bien diferenciadas señalan la preponderancia de un elemento sobre el otro. En la primera región, de muy bajo DOS, que se extiende hasta -3.5eV el Al predomina ligeramente sobre el Ni. La segunda región, entre -3.5eV y -0.5eV, presenta un marcado dominio de los orbitales d del Ni sobre la densidad del Al. Luego en torno al nivel de Fermi ocurre un solapamiento de los orbitales p del aluminio con los estados d del Ni, de tal forma que las propiedades electrónicas estarán marcadas principalmente por la participación de estos orbitales. En la última región por encima de 1.7eV, la DOS del Al es dominante sobre la DOS del Ni. Nuevamente, el efecto de la presión es cambiar los límites de coexistencia de esas regiones y por supuesto la magnitud de la DOS, incrementándose a

menor presión y disminuyendo a mayor presión. Para esta estructura el nivel de Fermi se ubica a la derecha del *pseudogap*, incluso más allá del máximo que limita el valle.

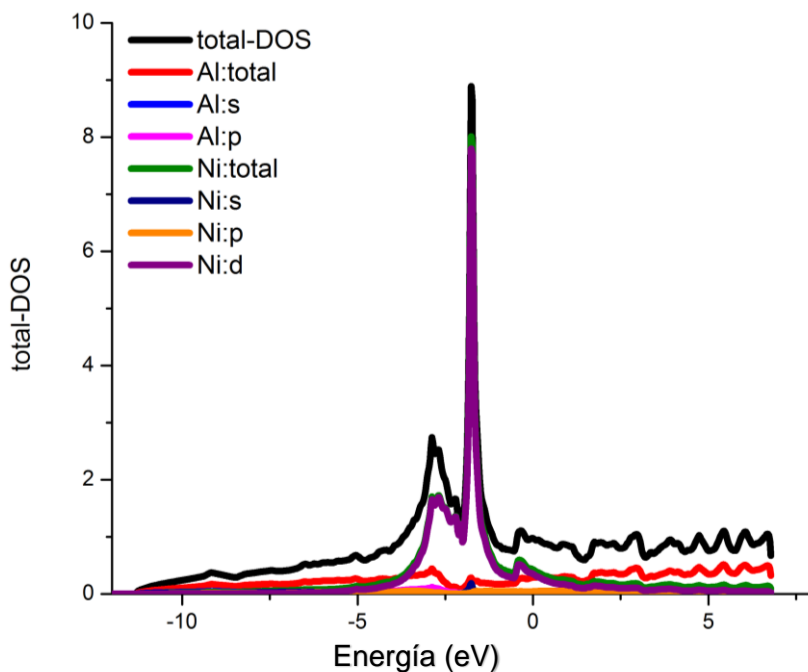


Figura 50. Densidad de estados del Al₃-Ni a presión cero.

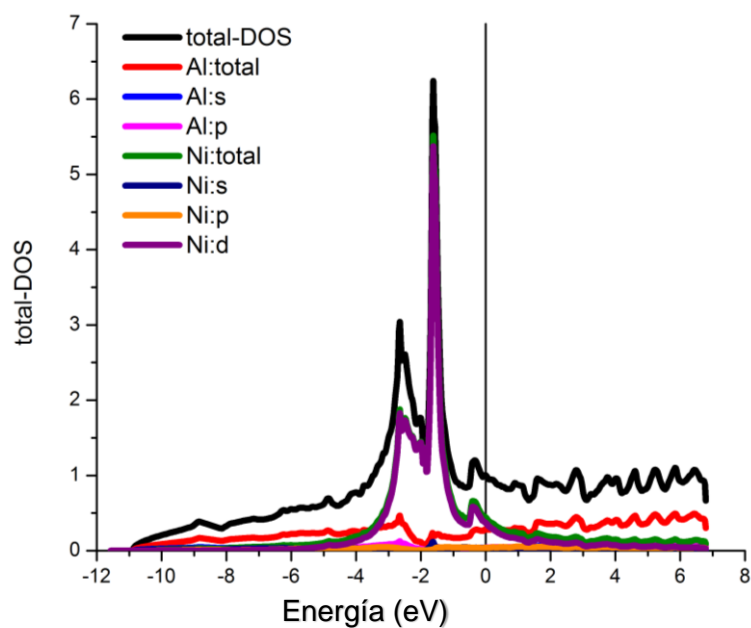


Figura 51. Densidad de estados del Al₃-Ni a -6 GPa.

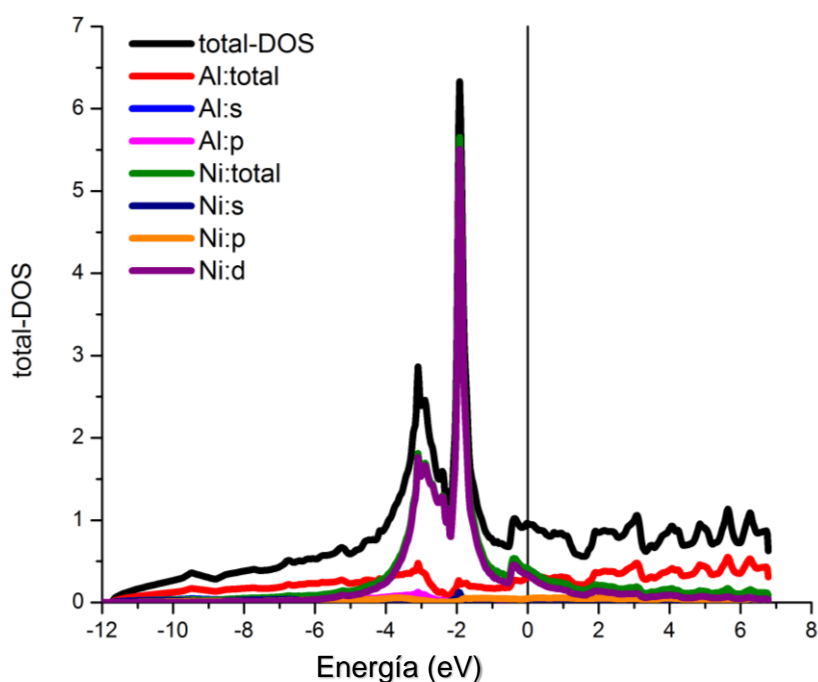


Figura 52. Densidad de estados del Al₃-Ni a -6 GPa.

3.4.3. Constantes y módulos elásticos.

Las constantes elásticas de la estructura Al₃-Ni a distintas presiones, se presenta en la tabla 9. La relación de las diferentes constantes elásticas permite la corroboración de las condiciones de estabilidad de Born.

Tabla 9. Constantes elásticas del Al₃-Ni.

P (GPa)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
6	225,417	89,986	40,015
4	215,083	83,750	34,253
2	201,880	78,665	28,204
0	189,3662	72,839	23,311
-2	177,277	66,738	16,492
-4	164,975	60,333	10,053
-6	151,287	54,232	5,062

En la figura 53 se muestra el módulo de compresibilidad en función de la presión para el Al₃-Ni. Se muestra un comportamiento lineal con la presión,

muy similar en forma al obtenido para el Al pero de mayor magnitud, lo que indica que la incorporación de Ni al Al lo hace menos compresible. El cristal muestra una brecha entre B_{Al} y B_{Al_3-Ni} que se mantiene con la presión.

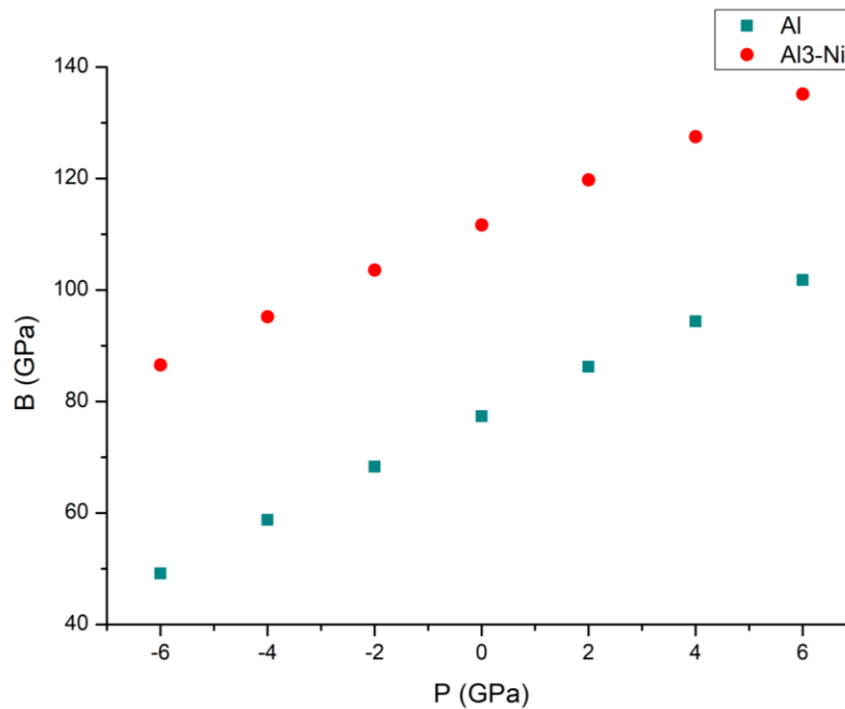


Figura 53. Módulo de compresibilidad para el Al₃-Ni a presiones de -6 a 6GPa.

En la figura 54 se muestra el módulo de cizalladura en función de la presión para el Al₃-Ni. En comportamiento mostrado tiende a ser lineal, y ligeramente diferente cuando el cristal es comprimido. La magnitud de G también es ligeramente superior a la del Al, lo que indica que la incorporación de Ni al Al lo hace un poco mas resistente al cambio de forma cuando es sometido a un esfuerzo constante. La brecha entre G_{Al} y G_{Al_3-Ni} es muy reducida, siendo un poco superior cuando el cristal está comprimido.

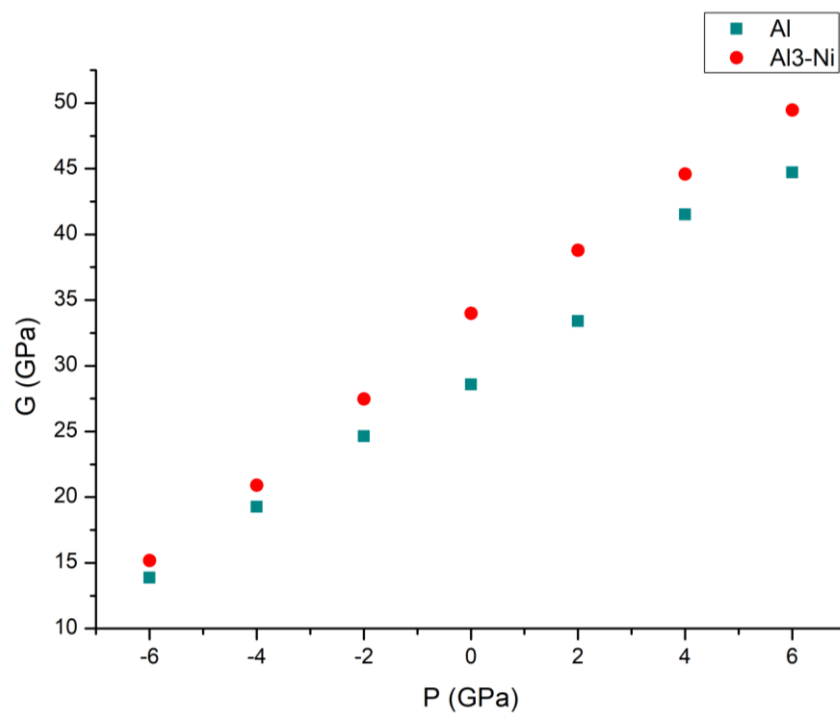


Figura 54. Módulo de cizalladura para el Al₃-Ni a presiones de -6 a 6 GPa.

En cuanto al módulo de Young mostrado en la figura 55 evidencia un comportamiento elástico inferior del Al₃-Ni sobre el Al puro en todo el rango de presión estudiado.

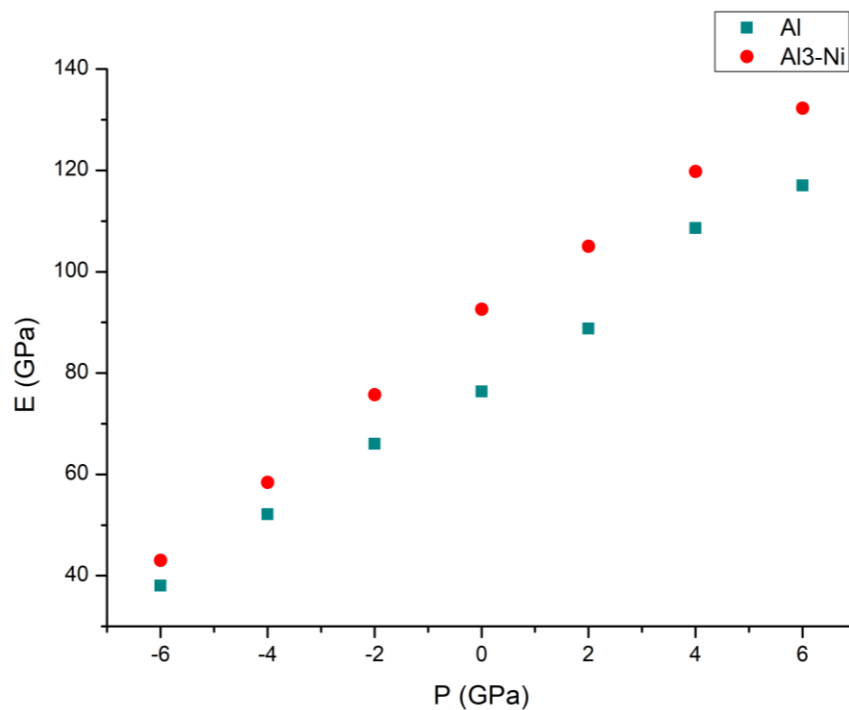


Figura 55. Módulo de Young para el Al₃-Ni a presiones de -6 a 6 GPa.

En la figura 56 se muestra como el agregar Ni a la estructura del Al, se obtiene una estructura más dúctil y plástica, tal y como se ve reflejado en el incremento del radio de Poisson mostrado en la figura 56.

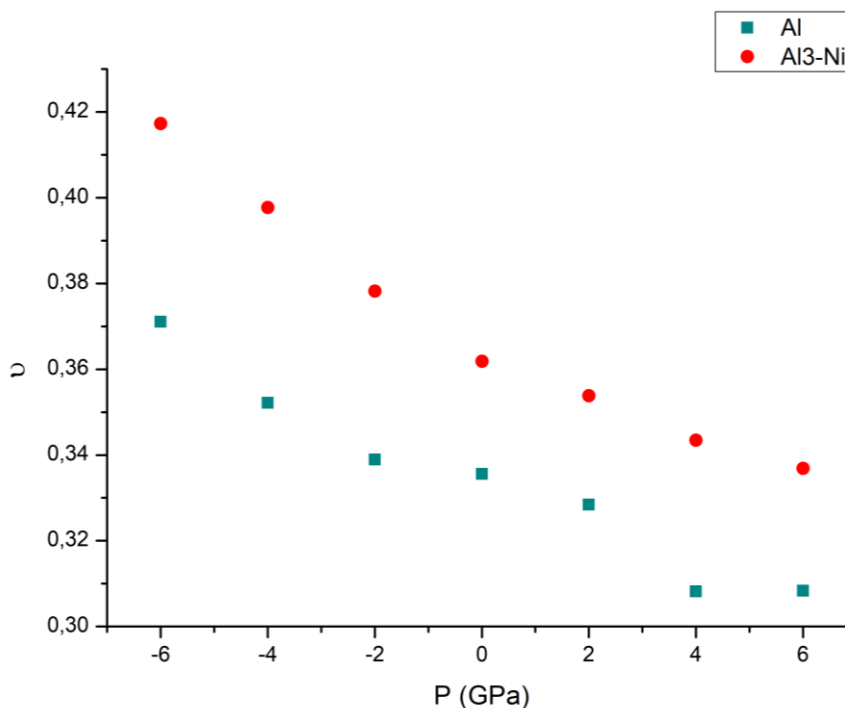


Figura 56. Radio de Poisson para el Al₃-Ni a presiones de -6 a 6 GPa.

La figura 57 confirma el incremento en la ductilidad como efecto de la introducción del átomo de Ni a la red de Al, reflejado en un aumento considerable de la magnitud B/G respecto al Al. Sin embargo, el incremento de la presión hace que este radio decrezca haciendo menos dúctil a la estructura.

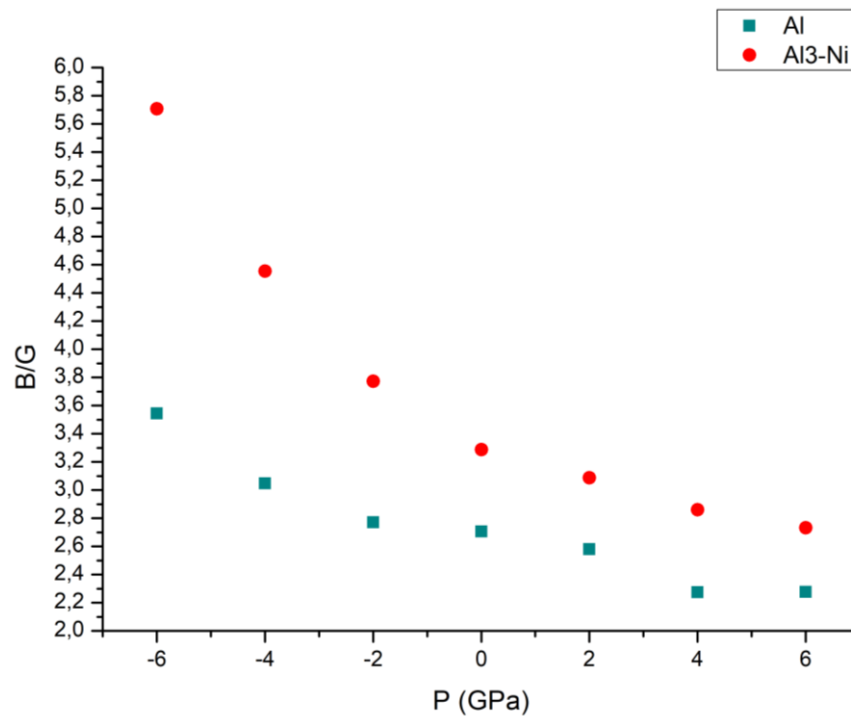


Figura 57. Magnitud B/G para el Al₃-Ni a presiones de -6 a 6 GPa.

3.5. Estudio del Al₃-Cu

3.5.1 Celda unitaria y parámetro de red optimizado.

En la figura 58 se muestra la celda unitaria del Al₃-Cu. En la figura 59 se muestra el comportamiento de la energía en función del volumen de la celda unitaria durante el proceso de optimización del parámetro de red.

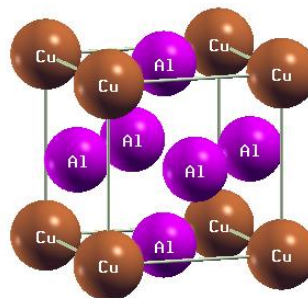


Figura 58. Celda unitaria del Al₃-Cu, grupo espacial 221.

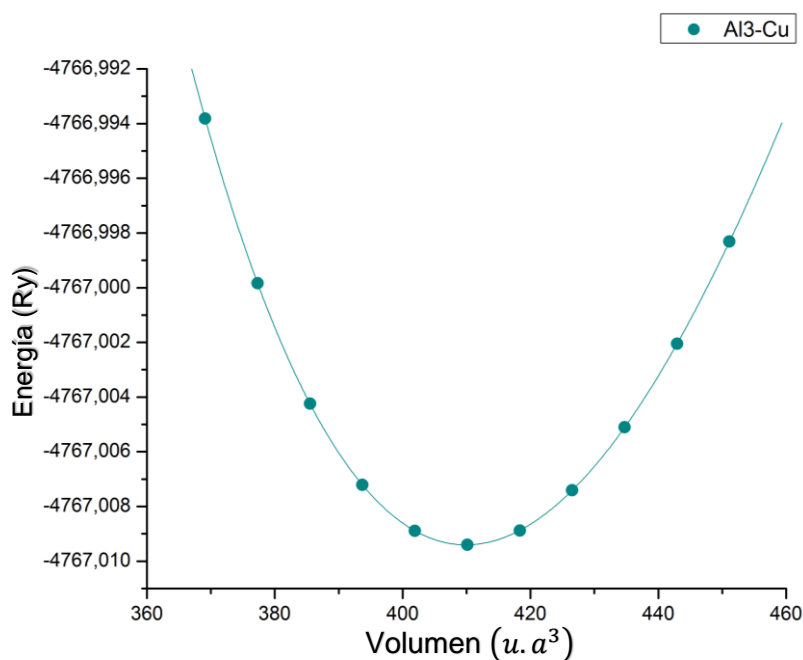


Figura 59. Optimización del volumen de la red de Al3-Cu

En tabla 10 se presenta el parámetro de red de la estructura optimizada del Al3-Cu y se observa una disminución de dicho parámetro con respecto al del Al.

Tabla 10. Parámetro de red optimizado para el Al3-Cu a $p = 0$.

Red	Parámetro de red (u. a)
Al	7,645
Al3-Cu	7,429

3.5.2. Estructura de bandas y densidad de estados.

Las figuras 60-62 muestran las estructuras de bandas del Al3-Cu sometido a presiones de 0, -6 y 6GPa respectivamente. Las gráficas muestran la energía en función de k en las direcciones de alta simetría de la primera zona de Brillouin $R\Gamma\Delta XZM\Sigma\Gamma$. Los niveles de Fermi representados en Rydberas son: 0.52382, 0.46962, 0.56647Ry para presión cero, -6GPa y 6GPa respectivamente, ratificando en cada caso el carácter conductor de dicha estructura. Al cambiar el volumen de la celda unitaria, la presión tiene el efecto

de alargar o encoger las bandas que cruzan el nivel de Fermi para las estructuras comprimidas y expandidas respectivamente. Las múltiples bandas cruzadas por el nivel de Fermi a cada una de las presiones mostradas hace presumir una superficie de Fermi compleja con *pockets* de electrones en torno a Γ y de huecos en torno a X.

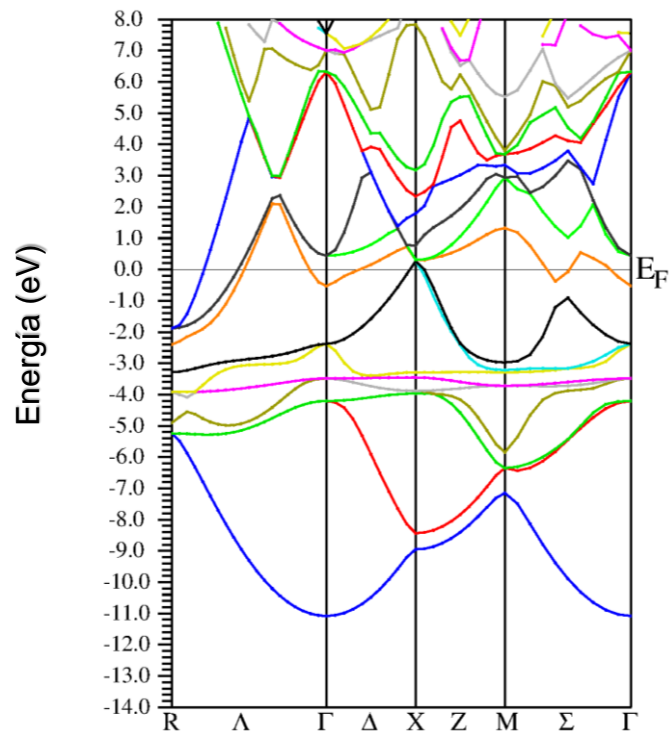


Figura 60. Estructura de bandas del Al₃-Cu a presión cero.

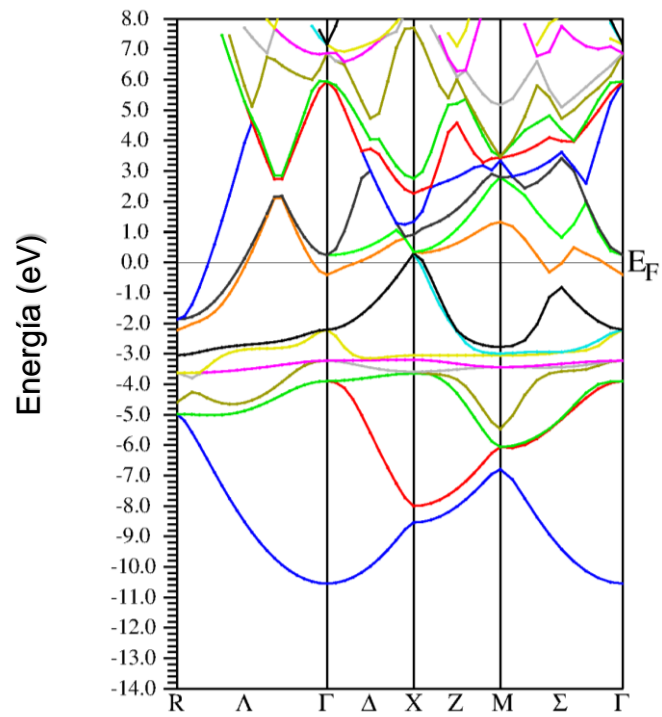


Figura 61. Estructura de bandas del Al₃-Cu a -6GPa.

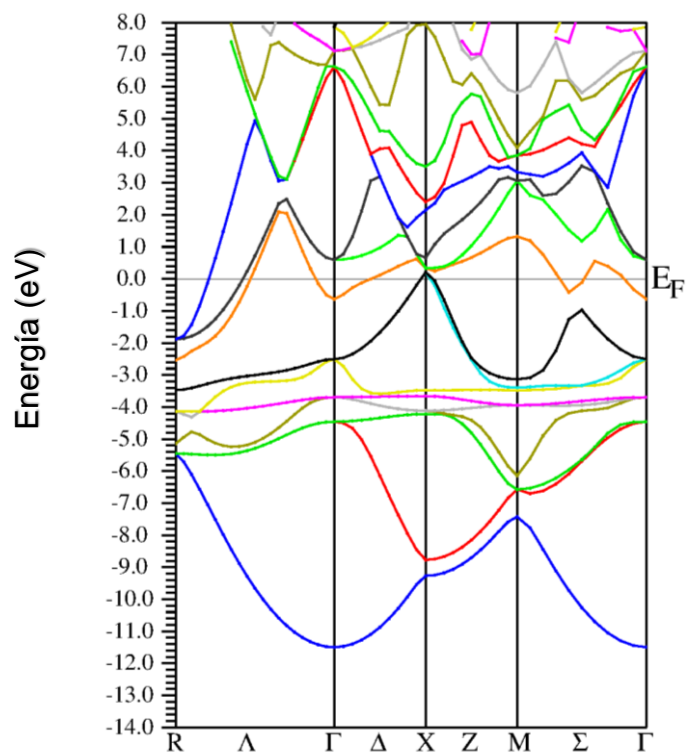


Figura 62. Estructura de bandas del Al₃-Cu a 6GPa.

Los detalles de la participación de los diferentes orbitales atómicos del Al y del Cu se muestran en las figuras 63, 64 y 65, donde se grafica la densidad de estados total y parcial del Al₃-Cu a presión cero, -6GPa y 6GPa respectivamente. Se traza la contribución de los orbitales s y p del aluminio y los orbitales s, p y d del Cu. Solo tres regiones en dicha gráfica son bien diferenciadas, siendo la más importante en magnitud la contribución de los electrones d del Cu, que se ubica entre -5 y -2eV. Esto justifica el hecho de que algunos autores en el trato de sistemas diluidos de Al-Cu consideran de manera principal los detalles electrónicos del Al [39]. Nuevamente, el efecto de la presión es cambiar los límites de coexistencia de esas regiones y por supuesto la magnitud de la DOS, que para el caso de la estructura comprimida presenta una magnitud bastante inferior a la de la estructura expandida. Para esta estructura el nivel de Fermi se ubica en un *plateau* muy alejado de las fluctuaciones que los orbitales inducen en DOS en la vecindad de -4eV.

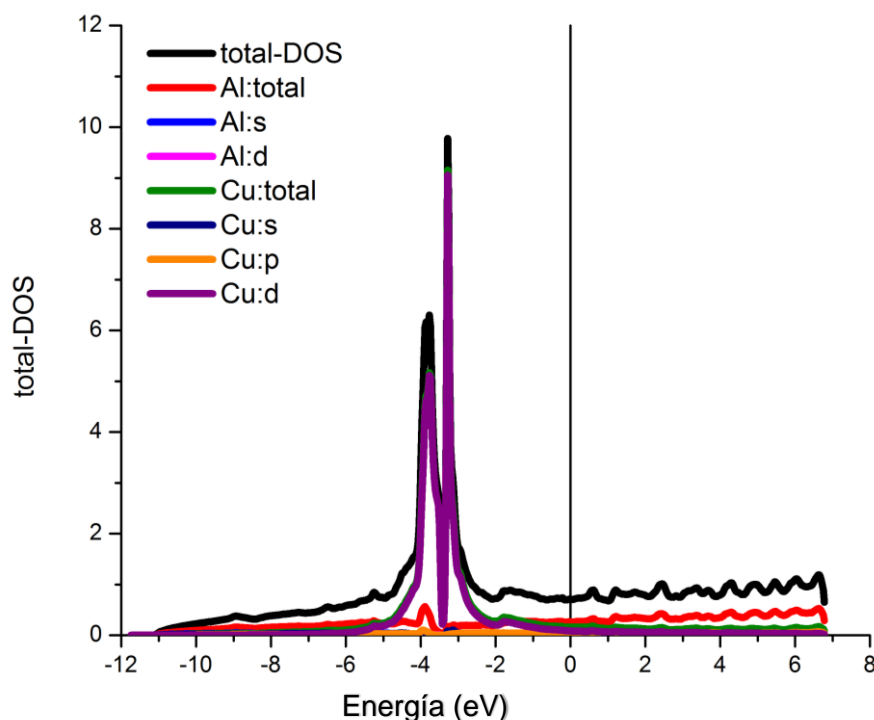
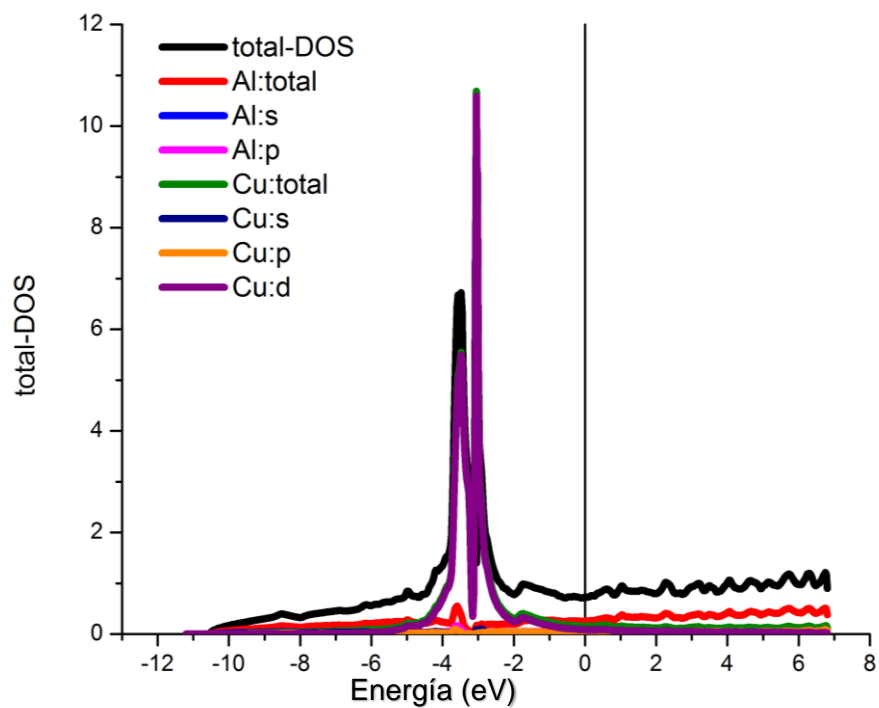
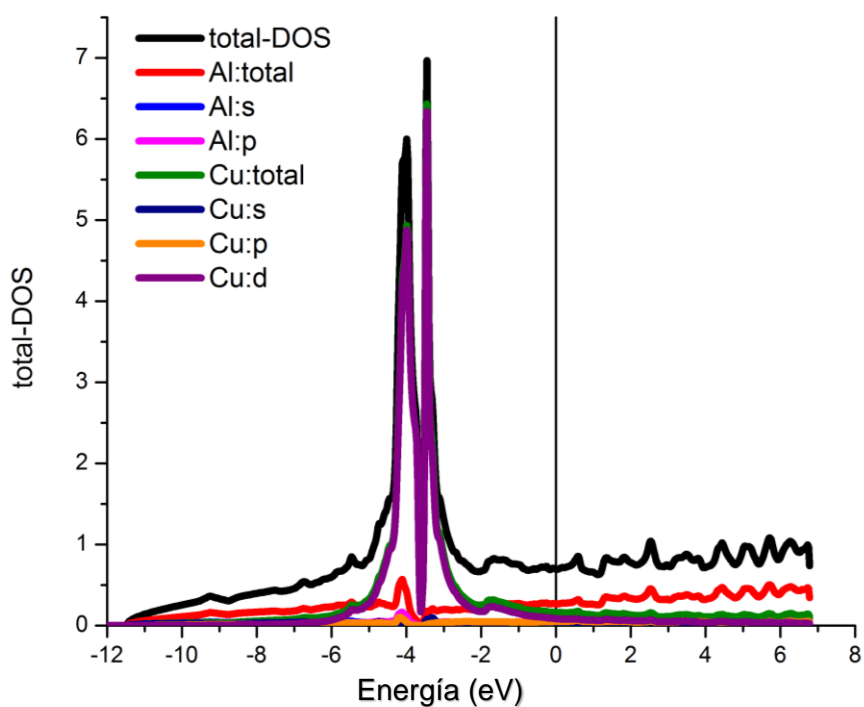


Figura 63. Densidad de estados del Al₃-Cu a presión cero.

Figura 64. Densidad de estados del Al₃-Cu a -6GPa.Figura 65. Densidad de estados del Al₃-Cu a 6GPa.

3.5.3. Constantes y módulos elásticos.

Las constantes elásticas del Al₃-Cu a distintas presiones se muestran en la tabla 11. Como en todos los casos anteriores las condiciones de estabilidad de Born son cumplidas.

Tabla 11. Constantes elásticas del Al₃-Cu.

P (GPa)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
6	215,851	67,405	44,833
4	205,029	61,755	39,270
2	190,422	57,033	33,764
0	177,961	51,241	27,989
-2	164,828	45,177	22,537
-4	150,163	39,544	16,544
-6	134,694	33,652	10,158

En la figura 66 se muestra el módulo de compresibilidad en función de la presión para el Al₃-Cu. Se muestra un comportamiento lineal con la presión, muy similar en forma al obtenido para el Al pero de mayor magnitud, lo que indica que la incorporación de Cu al Al lo hace menos compresible. El cristal muestra una brecha entre B_{Al} y B_{Al_3-Cu} que se mantiene con la presión.

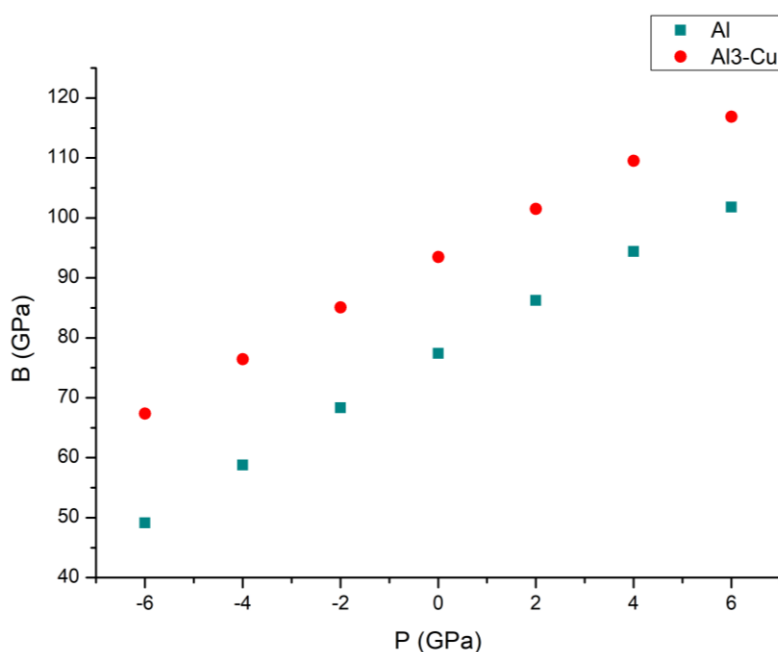


Figura 66. Módulo de compresibilidad para el Al₃-Cu a presiones de -6 a 6GPa.

En la figura 67 se muestra el módulo de cizalladura en función de la presión para el Al₃-Cu. El comportamiento mostrado tiende a ser lineal, y ligeramente diferente cuando el cristal es comprimido. La magnitud de G también es superior a la del Al, lo que indica que la incorporación de Cu al Al lo hace un poco más resistente al cambio de forma cuando es sometido a un esfuerzo constante. La brecha entre G_{Al} y G_{Al_3-Cu} es aproximadamente de 15 GPa, siendo un poco superior cuando el cristal está comprimido.

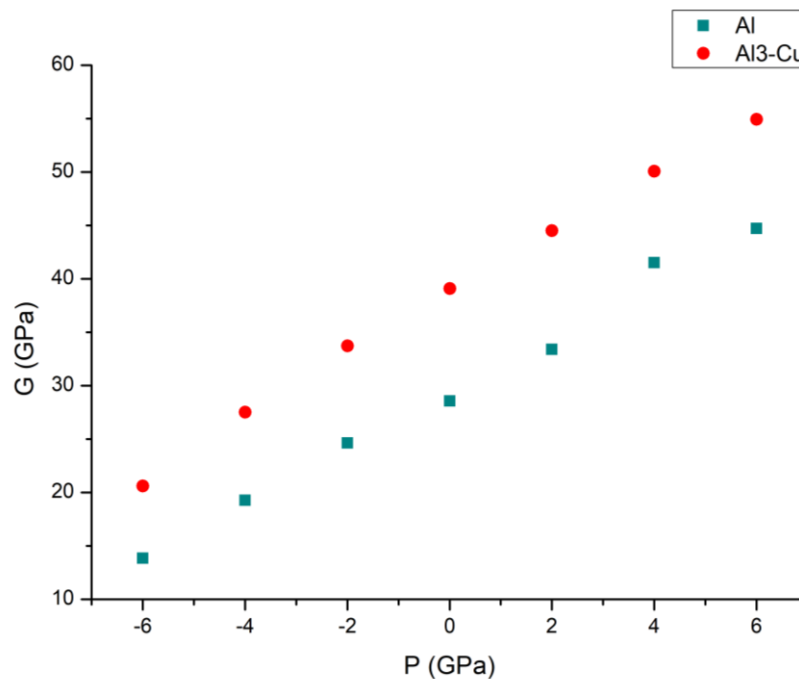


Figura 67. Módulo de cizalladura para el Al₃-Cu a presiones de -6 a 6 GPa.

El módulo de Young se muestra en la figura 68, en la cual dicha estructura se muestra más elástica que la del Al.

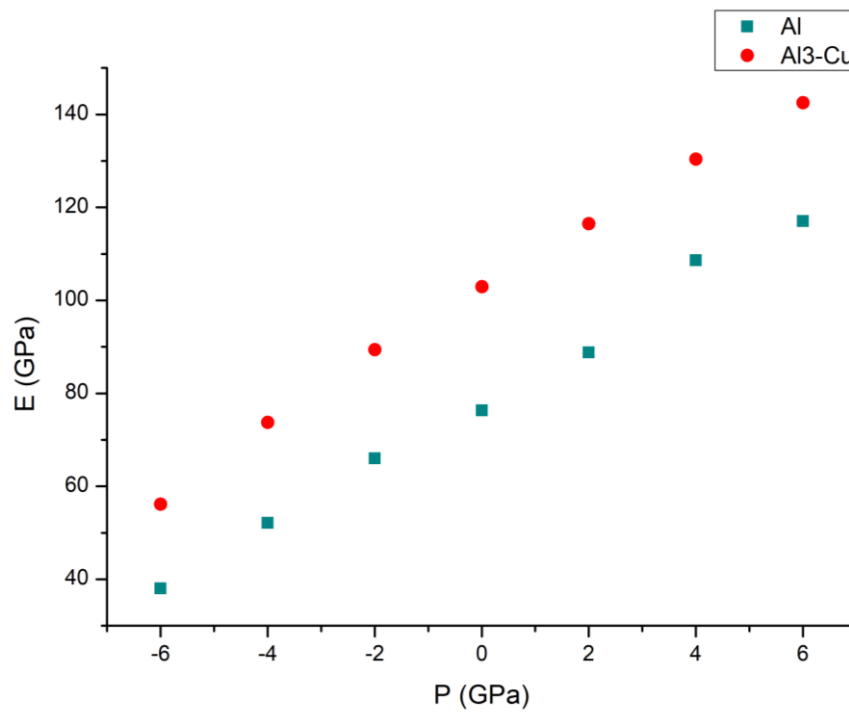


Figura 68. Módulo de Young para el Al₃-Cu a presiones de -6 a 6GPa.

El radio de Poisson mostrada en la figura 69 confirma este hecho de que esta es estructura ligeramente menos dúctil y plástica respecto al Al.

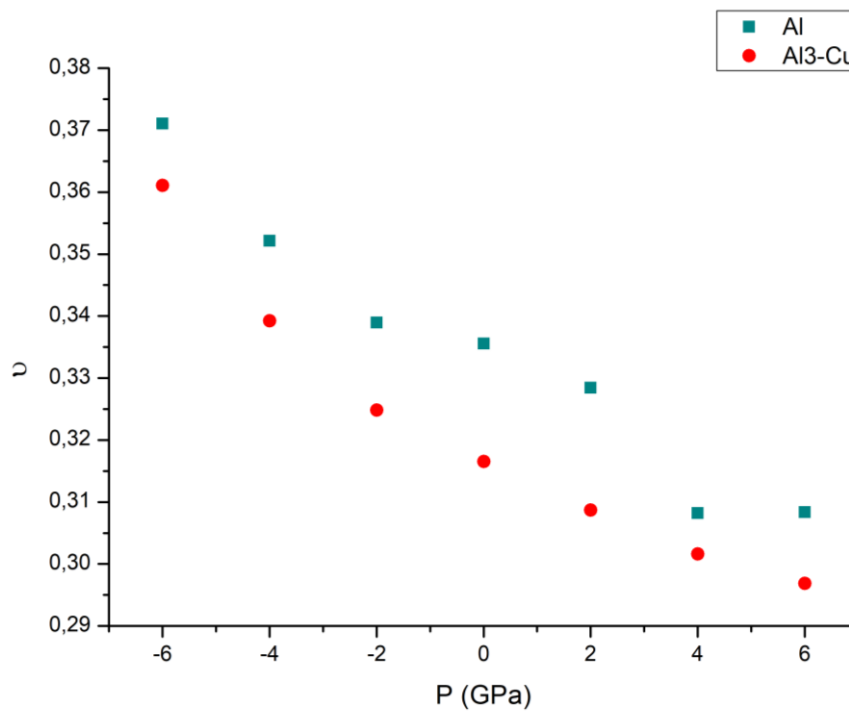


Figura 69. Radio de Poisson para el Al₃-Cu a presiones de -6 a 6GPa.

Mediante el estudio de la magnitud B/G que se muestra en la figura 70 confirma la pérdida de ductilidad como efecto de la introducción del átomo de cobre a la red de Al.

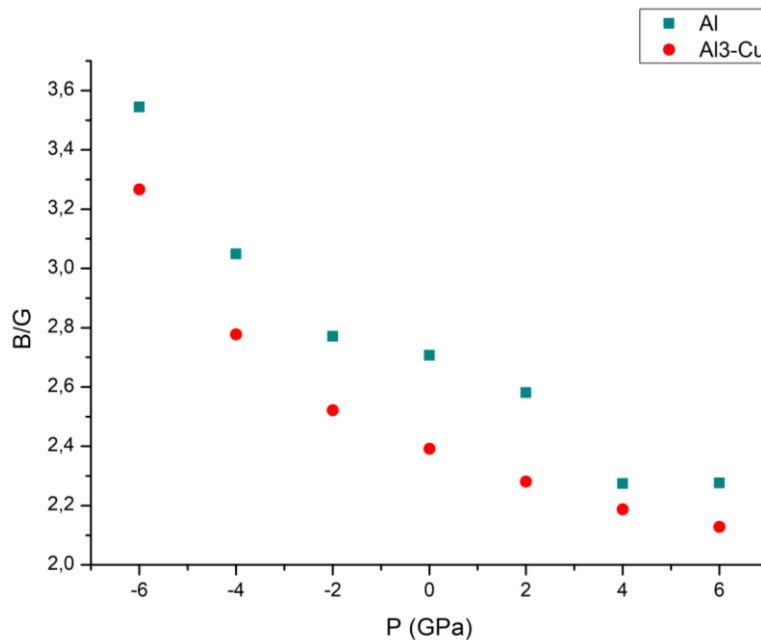


Figura 70. Magnitud B/G para el Al3-Cu a presiones de -6 a 6 GPa.

3.6. Estudio del Al3-v

3.6.1 Celda unitaria y parámetro de red optimizado.

En la figura 71 se muestra el cambio la celda unitaria de Al, cuando un átomo de Al es sacado. En la figura 72 se muestra el comportamiento de la energía en función del volumen de la celda de aluminio durante el proceso de optimización del parámetro de red. Un importante incremento de la energía electrónica de equilibrio se reporta en esta estructura -1456Ry respecto a las estructuras que contienen electrones d (que presentan valores de energía menores a -2900Ry), pero en ambos casos inferiores a las reportadas para el Al puro.

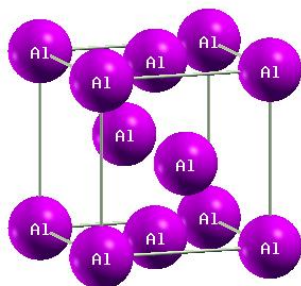


Figura 71. Celda unitaria del Al_{3-v}, grupo espacial 221.

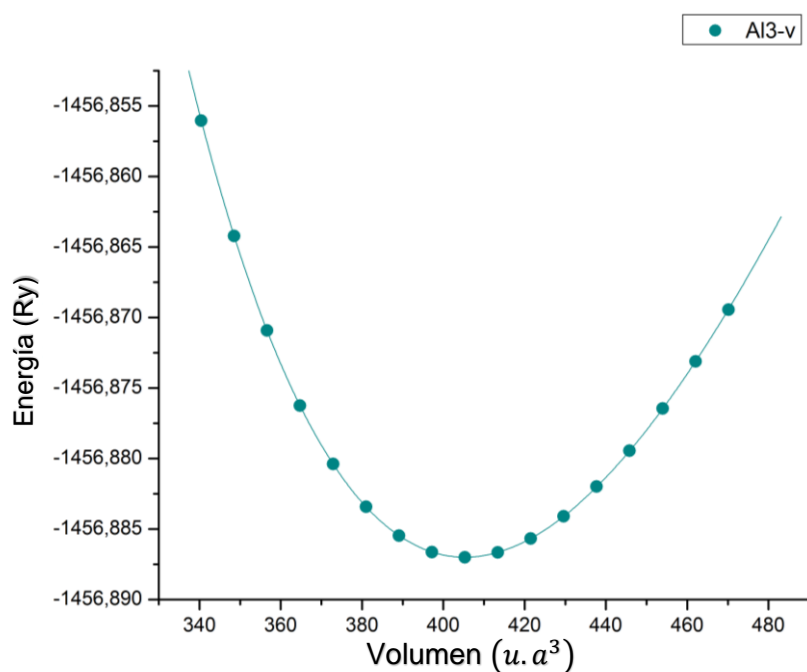


Figura 72. Optimización del volumen de la red Al_{3-v}

En tabla 12 se muestra el parámetro de red de la estructura optimizada del Al_{3-v}, y se observa que el parámetro de red ha disminuido con respecto al Al, como cabría esperar cuando se introduce una vacancia a una red.

Tabla 12. Parámetro de red optimizado para el Al_{3-v} a $p = 0$.

Red	Parámetro de red (u. a)
Al	7,645
Al _{3-v}	7,401

3.6.2. Estructura de bandas y densidad de estados.

Las figuras 73-75 muestran las estructuras de bandas del Al₃-v sometido a presiones de 0, -6 y 6GPa respectivamente. Las gráficas muestran la energía en función de k en las direcciones de alta simetría de la primera zona de Brillouin R Λ Γ Δ XZ Σ Γ . Los niveles de Fermi representados en Rydberas son: 0.35813, 0.30218, 0.40493Ry para presión cero, -6GPa y 6GPa respectivamente, los cuales son sumamente bajos en comparación de estructuras con presencia de orbitales d. Para esta estructura, se reporta un efecto bien marcado en torno a los puntos de alta simetría y su intersección con el nivel de Fermi. La presión hace desaparecer los *pockets* de electrones observados en el punto Γ de la red comprimida, los cuales si aparecen en la red extendida, mientras que los *pockets* de huecos en torno al punto X desaparecen en la estructura expandida.

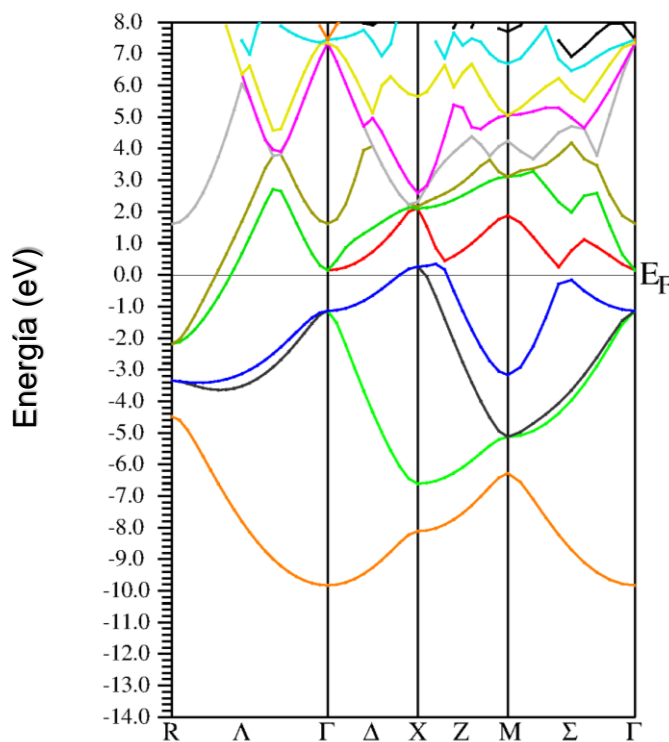


Figura 73. Estructura de bandas del Al₃-v a presión cero.

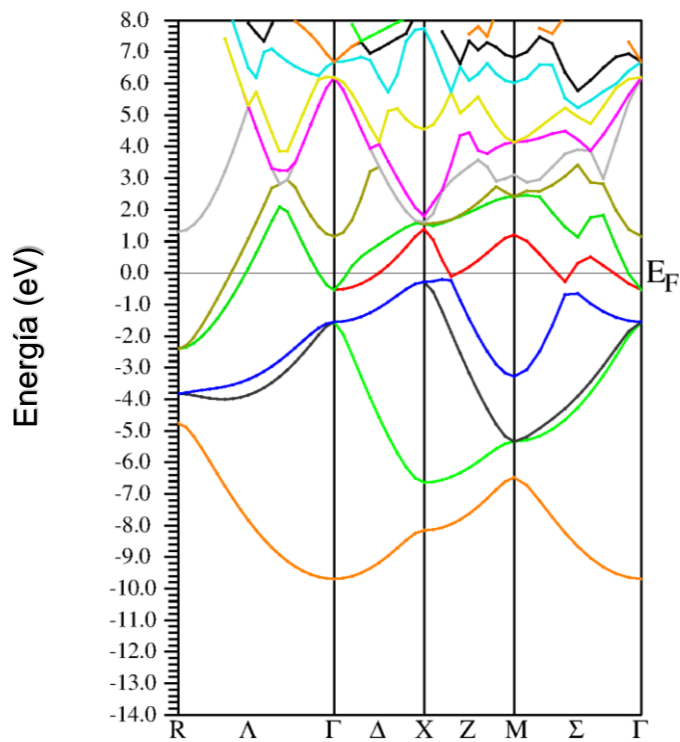


Figura 74. Estructura de bandas del Al₃-v a -6GPa.

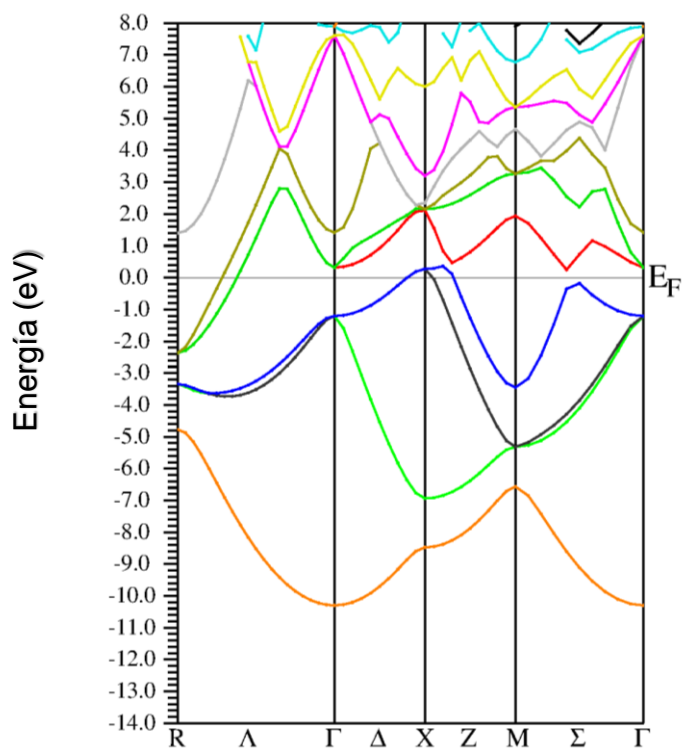


Figura 75. Estructura de bandas del Al₃-v a 6GPa.

La densidad de estados graficada en las figuras 76, 77 y 78 muestran dos regiones importantes. La primera hasta -3eV dominada por los orbitales s del Al y por encima de este valor dominan los orbitales p del Al. El nivel de Fermi se ubica en esta segunda región, y por lo tanto controlado por los estados p. La presión desplaza muy poco estos límites.

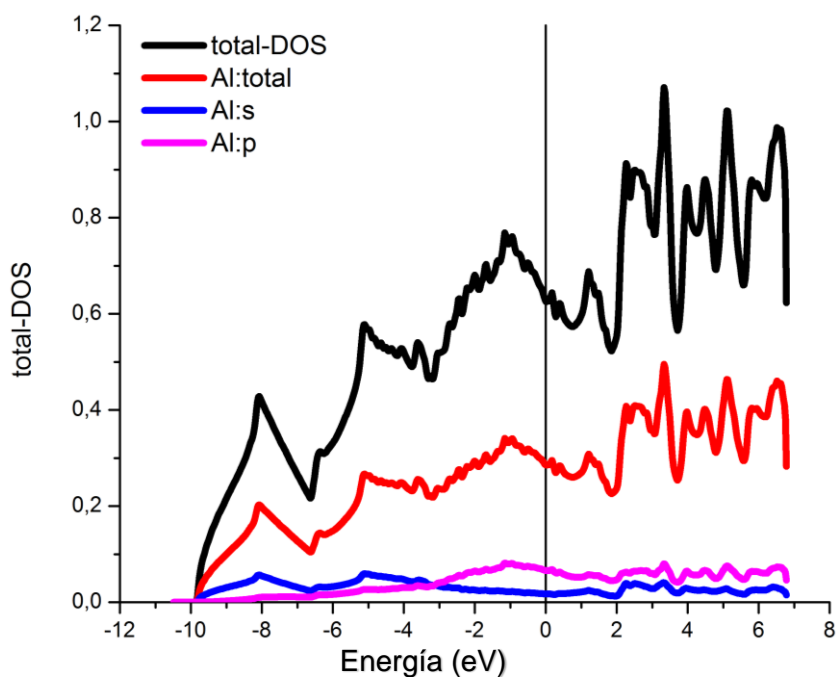
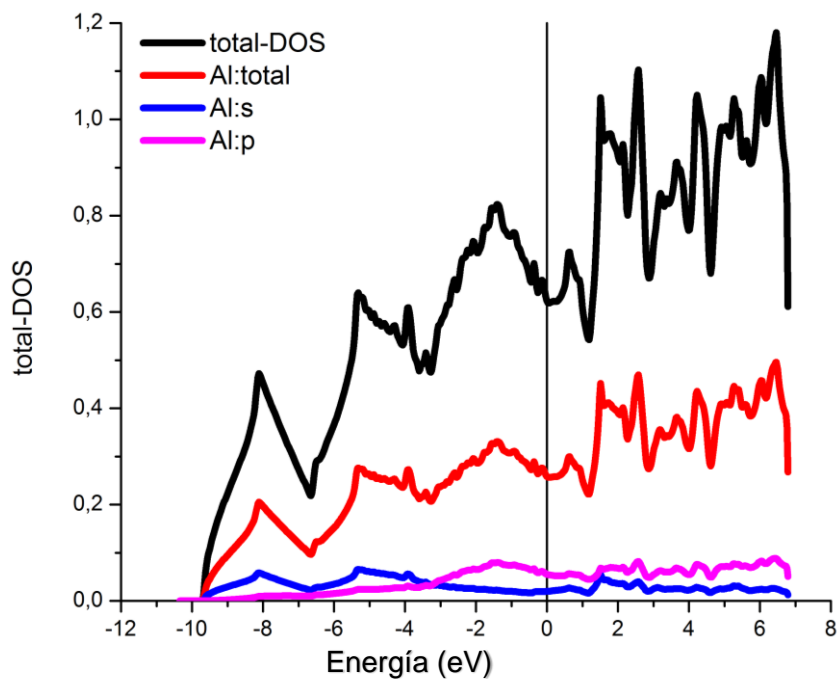
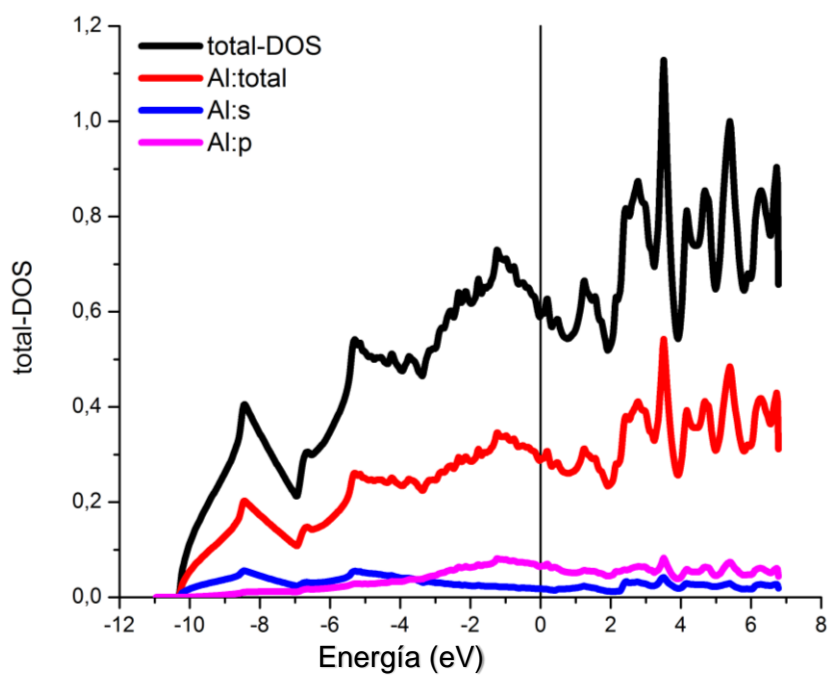


Figura 76. Densidad de estados del Al₃-v a presión cero.

Figura 77. Densidad de estados del Al₃-v a -6GPa.Figura 78. Densidad de estados del Al₃-v a 6GPa.

3.6.3. Constantes y módulos elásticos.

En la tabla 13 se muestran las constantes elásticas del Al₃-v a distintas presiones, donde podemos constatar el cumplimiento de las condiciones de estabilidad de Born.

Tabla 13. Constantes elásticas del Al₃-v.

P (GPa)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
6	134,441	63,483	50,167
4	124,638	57,831	45,764
2	114,668	51,724	39,775
0	105,090	44,844	34,759
-2	94,511	37,944	29,436
-4	81,504	31,055	23,885
-6	64,448	24,643	17,229

En la figura 79 se muestra el módulo de compresibilidad en función de la presión para el Al₃-v. Se muestra un comportamiento lineal con la presión, muy similar en forma al obtenido para el Al pero de menor magnitud, lo que indica que la sustracción de un átomo de Al hace más compresible a dicha estructura. El cristal muestra una brecha entre B_{Al} y B_{Al_3-v} que se mantiene con la presión.

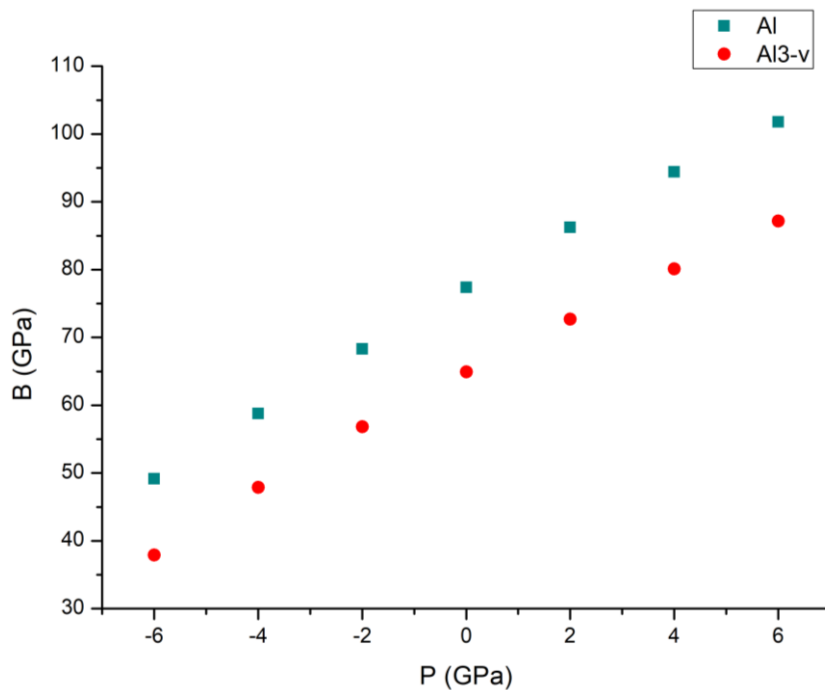


Figura 79. Módulo de compresibilidad para el Al-v a presiones de -6 a 6GPa.

En la figura 80 se muestra el módulo de cizalladura en función de la presión para el Al₃-v. En comportamiento mostrado de este módulo es completamente diferente al reportado previamente en los demás casos estudiados. El cristal expandido muestra una magnitud de G inferior al del Al cuando este es expandido, mientras que cuando lo comprimimos su valor sobre pasa al del Al. De allí que la condición estructural de este sistema sea altamente dependiente de la presión.

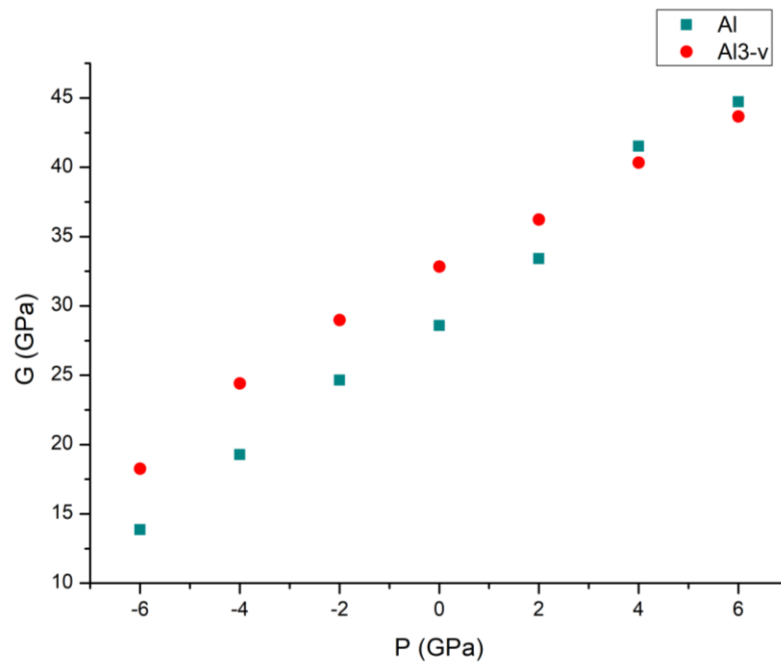


Figura 80. Módulo de cizalladura para el Al₃-v a presiones de -6 a 6GPa.

El módulo de Young mostrado en la figura 81 presenta el mismo comportamiento cualitativo, siendo superior para bajas presiones que E del Al, pero para altas presiones el Al se vuelve más elástico.

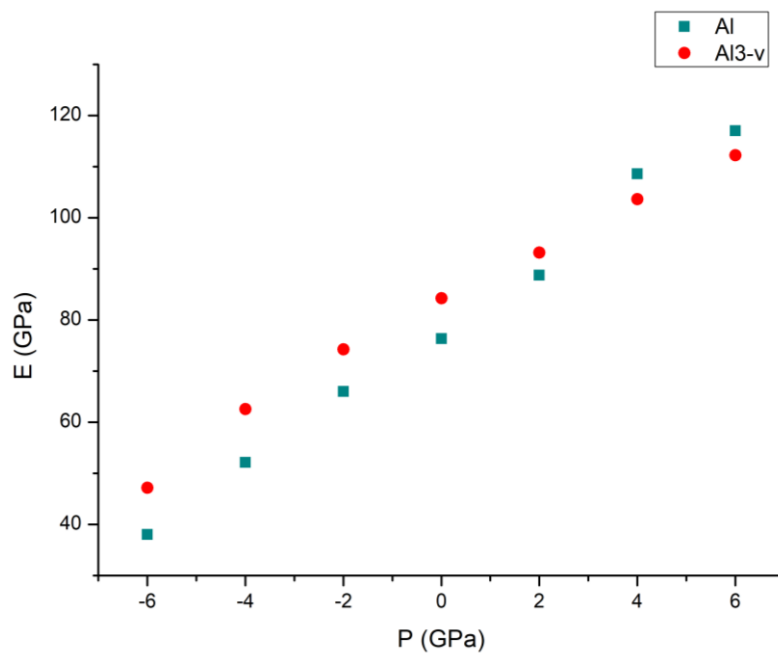


Figura 81. Módulo de Young para el Al₃-v a presiones de -6 a 6GPa.

En la figura 82, mediante la gráfica del radio de Poisson en función de la presión, se muestra como al extraer un átomo de la estructura del Al y crear una vacancia, resulta en una estructura mucho menos plástica y más frágil.

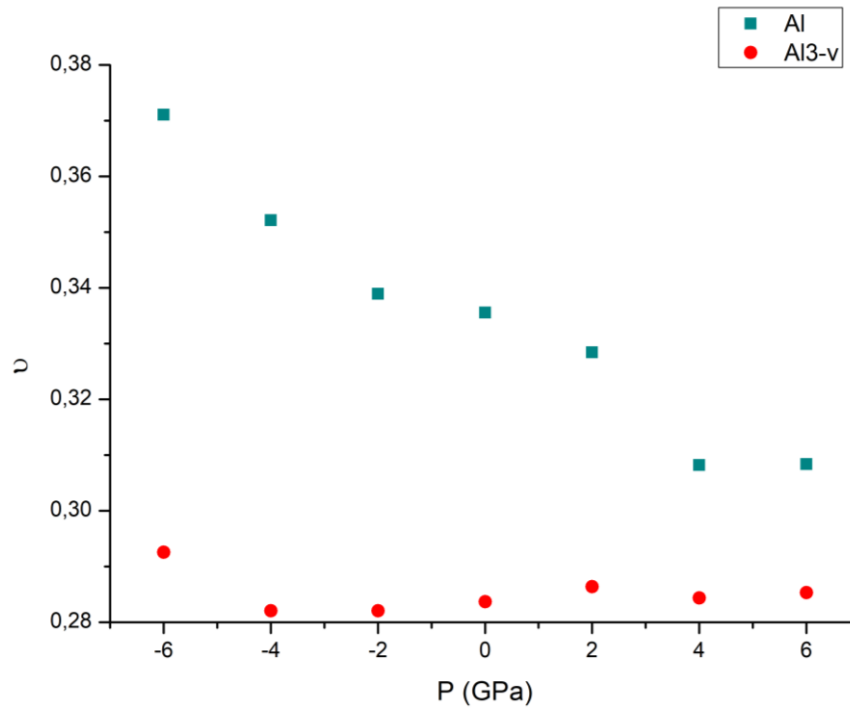


Figura 82. Radio de Poisson para el Al3-v a presiones de -6 a 6GPa.

La figura 83, a través de la gráfica de B/G en función de la presión, confirma la reducción de la ductilidad provocada por la vacancia introducida en la red de Al aunque la estructura Al3-v se sigue considerando dúctil.

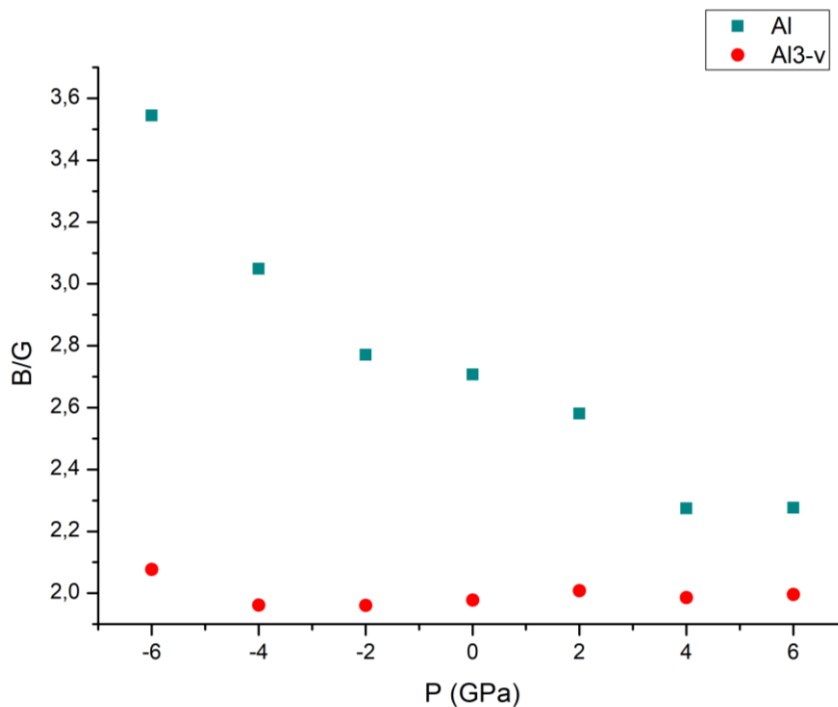


Figura 83. Magnitud B/G para el Al3-v a presiones de -6 a 6GPa.

3.7. Comparación de los módulos elásticos de todas las estructuras

En la figura 84 se grafica el módulo de compresibilidad en función de la presión para cada una de las estructuras propuestas. Puede observarse un incremento en el módulo de compresibilidad para todas las estructuras con respecto a la red original del Al, con la excepción de la estructura correspondiente a Al3-v; por su parte, el Al3-Ni es la estructura que presenta el mayor valor en este módulo. También se puede apreciar un comportamiento lineal de $B(p)$. La secuencia en magnitud de este módulo es de mayor a menor la siguiente: Al3-Ni, Al3-Cr, Al3-Cu, Al3-Sc, Al y, por último, Al3-v.

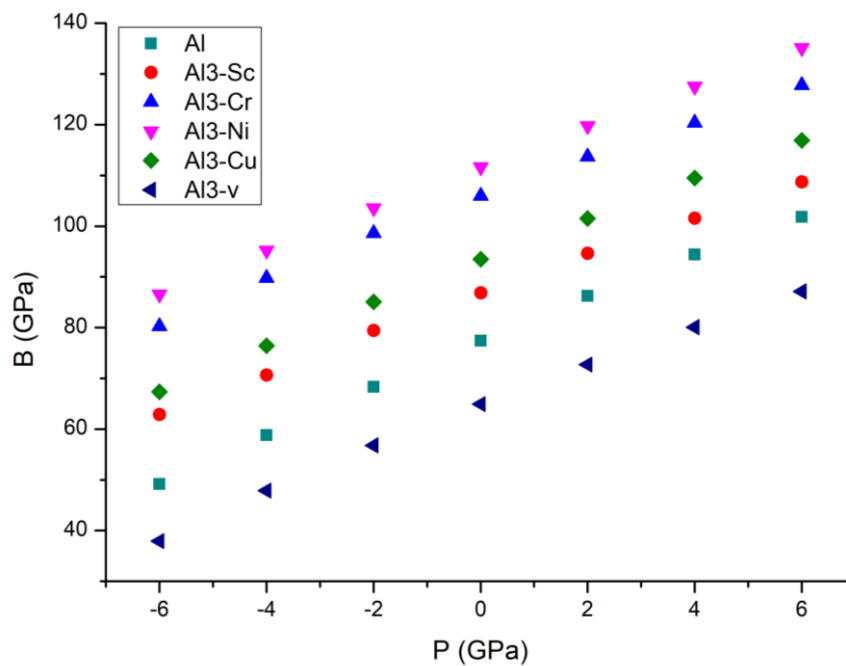


Figura 84. Módulo de compresibilidad en función de la presión para las distintas estructuras.

En la figura 85 se grafica el módulo de cizalladura en función de la presión para cada una de las estructuras propuestas. Se observa que el módulo de cizalladura presenta un incremento para todas las estructuras estudiadas con respecto al Al, salvo para algunas presiones. Un comportamiento similar se presenta en la figura 86, donde se grafica el módulo Young.

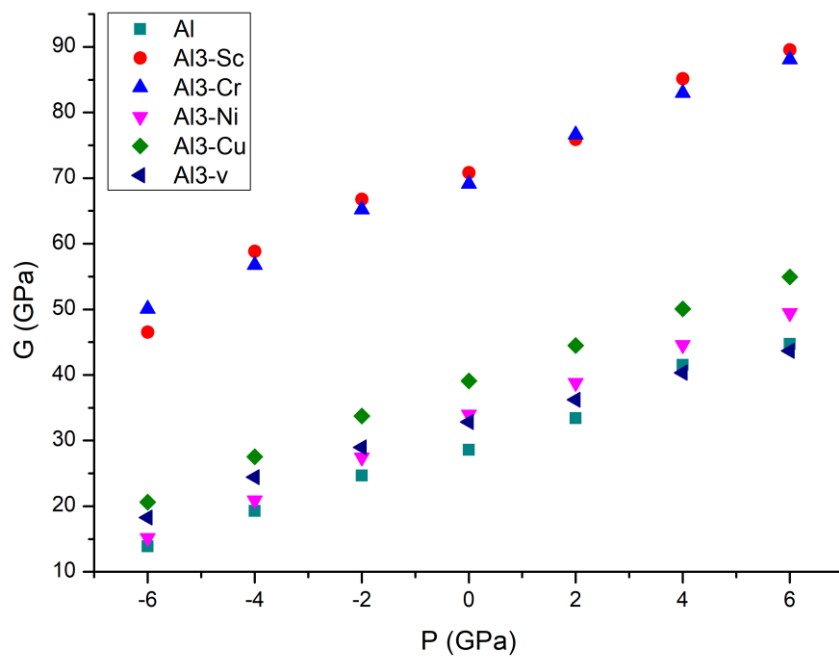


Figura 85. Módulo de cizalladura en función de la presión para las distintas estructuras.

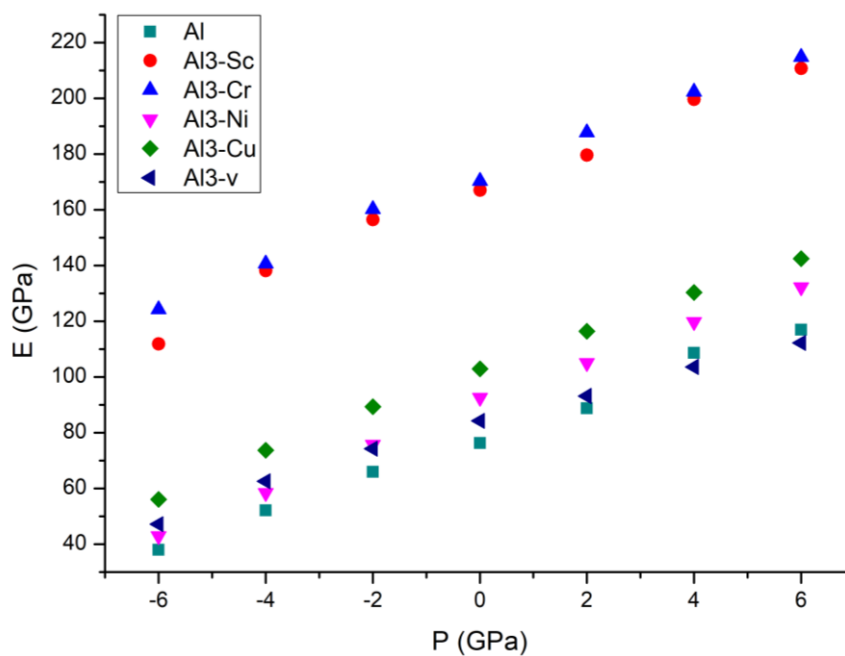


Figura 86. Módulo de Young en función de la presión para las distintas estructuras.

La figura 87 muestra el radio de Poisson para las diferentes estructuras, apreciando que solo el Al₃-Ni presenta un aumento en la plasticidad, reflejado en el incremento del radio de Poisson, con respecto a la estructura original.

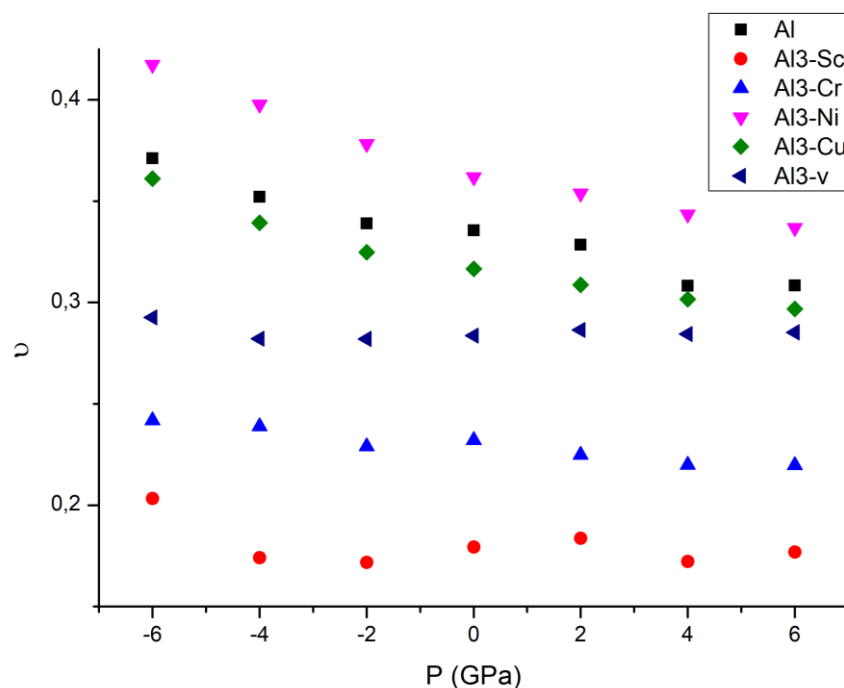


Figura 87. Radio de Poisson en función de la presión para las distintas estructuras.

La figura 88 muestra la magnitud B/G , donde se observa que al reemplazar un átomo de la red de Al por un átomo de Ni mejora su ductilidad, mientras que un átomo de Cu la reduce ligeramente. Las vacancias reducen en gran medida esta propiedad, mientras que la introducción de los átomos de Sc y Cr producen una estructura frágil.

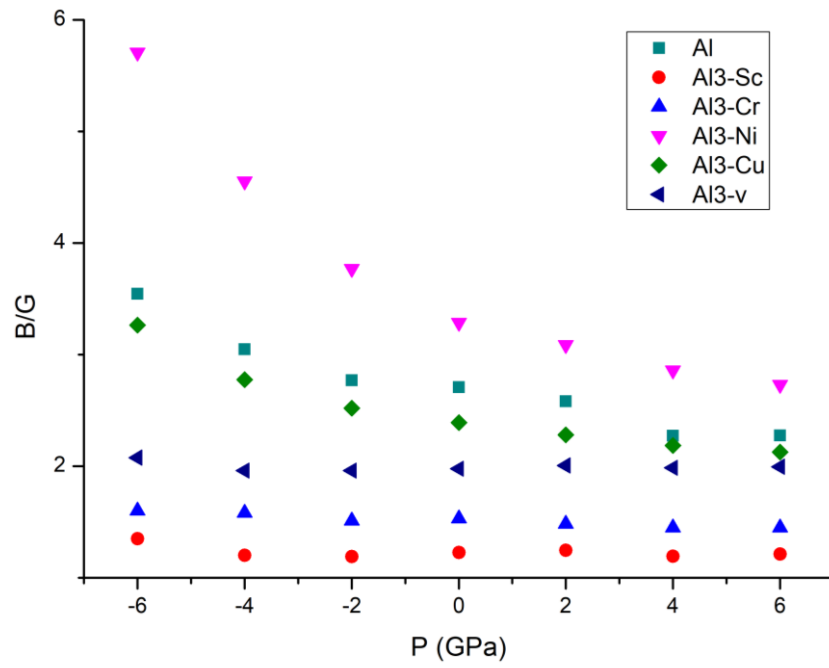


Figura 88. Magnitud B/G en función de la presión para las distintas estructuras.

CAPÍTULO 4

CONCLUSIONES

En el presente trabajo se estudió el efecto de la introducción de un átomo de impureza/vacancia en una red cristalina de aluminio bajo diferentes presiones, siendo los resultados obtenidos más importantes los siguientes:

1. En las estructuras estudiadas se notó un crecimiento del parámetro de red para el Al₃-Sc y un decrecimiento para el Al₃-Cr, Al₃-Ni, Al₃-Cu y Al₃-v con respecto a la estructura original de Al.
2. Las bandas electrónicas de cada una de las estructuras consideradas, ratificaron el carácter metálico de las mismas con y sin presión.
3. Se evidenció que para las estructuras que incluyen átomos de Sc, Cr, Ni y Cu son los electrones d los que dominan la densidad de estados de las diferentes estructuras. La posición del *pseudogap* de la DOS en el caso del Sc se ubica después del nivel de Fermi, mientras que para los otros elementos se ubica antes. La magnitud de DOS está relacionada con la cantidad de electrones d en las estructuras estudiadas. La presión al modificar los parámetros de red, también modifican las regiones de dominio de los diferentes orbitales.
4. Se comprobó que todas las estructuras estudiadas bajo las diferentes presiones cumplen con las condiciones de estabilidad de Born.
5. El módulo de compresibilidad aumentó para casi todas las estructuras con respecto a la red de Al, salvo por la estructura Al₃-v. También se observó un comportamiento lineal del módulo de compresibilidad con respecto a la presión.
6. En cuanto al módulo de cizalladura, el orden de qué estructuras presentan mayor valor varía con respecto a la presión, pero por lo general, el Al₃-Sc presenta el mayor valor.
7. En cuanto al módulo de Young, todas las estructuras presentan un incremento en este módulo, especialmente la estructura Al₃-Cr.

8. En cuanto al radio de Poisson, se evidenció un incremento de éste (lo que también implica un incremento en la ductilidad) en la estructura Al₃-Ni y un decrecimiento para el resto de ellas con respecto a la estructura original del Al.
9. La magnitud B/G de las diferentes estructuras determinó que, con respecto a la estructura original de Al, el Al₃-Ni presenta una mejora en su ductilidad, la introducción de Cu la reduce ligeramente. Las vacancias reducen en gran medida esta propiedad, mientras que la introducción de los átomos de Sc y Cr producen una estructura frágil.

Como continuación a este trabajo se propone realizar un estudio similar a éste utilizando estructuras con una proporción de vacancias e impurezas mucho menor, más adecuada a lo que se encuentra en la literatura y en la práctica. Proporción que no se pudo emplear en este trabajo debido a limitaciones de hardware.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Hinojosa, M. 2000. *La estructura cristalina de los metales. Ingenierías*, 3: 20-25.
- [2] Marcus, P y Qiu, S. 2009. *Elasticity in crystals under pressure. J. of Physics: Condensed Matter*, 21: 115401.
- [3] Golesorkhtabar, R; Draxl, C; Pavone, P; Spitaler, J y Puschnig, P. 2013. *Computer Physics Communications*, 184: 1861-1873.
- [4] Korostelev, V. y Denisov, M. 2018. *Crystallization of aluminum alloys under pressure. IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*. 450: 032012.
- [5] Mclellan, R. e Ishikawa, T. 1987. *The elastic properties of aluminum at high temperatures. J. Phys. Chem. Solids*, 48: 603-606.
- [6] Ruiz, C. y Osorio-Guillén, J. 2011. *Estudio teórico de las propiedades elásticas de los minerales Cu_3TMSe_4 ($TM = V, Nb, Ta$) por medio de cálculos atomísticos de primeros-principios. Ingeniería y Ciencia ISSN 1794-9165*, 7: 131-150.
- [7] Zidi, Y; Méçabih, S; Abbar, B. y Amari, S. 2017. *Structural, elastic and electronic properties of transition metal carbides ZnC, NbC and their ternary alloys $Zn_xNb_{1-x}C$. Physica B: Physics of Condensed Matter*; S0921-4526(17)31018-9.
- [8] Martin, R. 2004. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methos*.
- [9] Fock, V. 1930. *Approximation method for solving the quantum mechanical multibody problem. Z. Phys.*, 61.
- [10] Slater, J. 1929. *The theory of complex spectra. Phys. Rev.* 34: 1293-1322.
- [11] Hogenberg, P. y Khon, W. 1964. *Inhomogeneous Electron Gas. Phys. Rev*, 136.
- [12] Khon, W. y Sham, J. *Phys.* 1965. *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. Rev.*, 140.

- [13] Giustino, F. 2014. *Materials Modelling Using Density Functional Theory: Properties and Predictions*. Oxford University Press.
- [14] Ceperley, D. y Alder, B. 1980. *Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method*. *Phys. Rev. Lett.*, 45: 566–569.
- [15] Dirac, P. 1930. *Note on Exchange Phenomena in the Thomas Atom*. *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 26: 376–385.
- [16] Perdew, J. y Zunger, A. 1981. *Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems*. *Phys. Rev. B*, 23: 5048–5079.
- [17] Perdew, J. y Wang, Y. 1986. *Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy: Generalized gradient approximation*. *Phys. Rev. B*, 33: 8800–8802.
- [18] Perdew, J. y Wang, Y. 1992. *Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy*. *Phys. Rev. B.*, 45: 13244–13249.
- [19] Perdew, J. 1986. *Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas*. *Phys. Rev. B.*, 33: 8822–8824.
- [20] Becke, A. 1988. *Correlation energy of an inhomogeneous electron gas: A coordinate-space model*. *J. Chem. Phys.*, 88: 1053–1062.
- [21] Becke, A. 1988. *Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior*. *Phys. Rev. A.*, 38: 3098–3100
- [22] Perdew, J; Burke, K. y Ernzerhof, M. 1996. *Generalized Gradient Approximation Made Simple*. *Phys. Rev. Lett.*, 77: 3865–3868.
- [23] Kittel, C. 2005. *Introduction to solid state physics*. 8th ed. USA: Wiley.
- [24] Kohanoff, J. 2006. *Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods*. Cambridge: Cambridge University Press.
- [25] Slater, J. 1937. *Wave functions in a periodic potential*. *Phys. Rev.*, 51: 846–851.
- [26] Slater, J. 1964. *Energy Band Calculations by the Augmented Plane Wave Method*. *Adv. in Quantum Chemistry*, 1: 35-58.

- [27] Blaha, P; Schwarz, K; Sorantin, P. y Trickey, S. 1990. *Full-potential, linearized augmented plane wave programs for crystalline systems. Comput. Phys. Commun.*, 21: 399–415.
- [28] Barron, T. y Klein, M. 1965. *Second-order elastic constants of a solid under stress. Proc Phys. Soc.*, 85.
- [29] Wallace, D. 1972. *Thermodynamics of crystals*. Sydney.
- [30] Rahmati, A; Goohestani, M; Badehian, H; y Baizae, M. 2014. *Ab. Initio Study of the Structural, Elastic, Electronic and Optical Properties of Cu₃N. Materials Research*, 17: 303-310.
- [31] Mouhat, F. y Coudert, F-X. 2014. *Necessary and Sufficient Elastic Stability Conditions in Various Crystal Systems. Physical Review, B*, 90, 224104.
- [32] Born, M. 1940. *On the stability of crystal lattices. I. Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 36: 160-172.
- [33] Murnaghan, F. 1928. *On the energy of deformation of an elastic solid. Mathematics*, 14.
- [34] Birch, F. 1947. *Finite elastic strain of cubic crystals. Phys. Rev.*, 71.
- [35] Söderlind, P; Eriksson, O; Wills, M. y Boring, A. 1993. *Theory of elastic constants of cubic transition metals and alloys. Phys. Rev. B.*, ISSN 0163-1829, 48: 5844-5851.
- [36] Chiarotti, G. 1995. *Interaction of Charged Particles and Atoms with Surfaces*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. Vol. 24c.
- [37] Every, A. y McCurdy, A. 1992. *Second and Higher Order Elastic Constantst*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg. Vol. 29a.
- [38] Ravindran, P. y Asokamani, R. 1997. *Correlation between electronic structure, mechanical properties and phase stability in intermetallic compounds. Bull. Mater. Sci*, 20(4): 613-622.
- [39] Fourneie, V. 1999. *Electronic structure calculations of Al-Cu alloys: comparison with experimental results on Hume-Rothery phases. Philosophical Magazine*. Vol. 79.

HOJA DE METADATOS

Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 1/6

Título	ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ELÁSTICAS DEL ALUMINIO PURO Y DOPADO CON VACANCIAS E IMPUREZAS DE ESCANDIO, CROMO, NÍQUEL Y COBRE BAJO PRESIÓN
---------------	---

Autor(es)

Apellidos y Nombres	Código CVLAC / e-mail	
Jesús A. Beltrán M.	CVLAC	25.060.355
	e-mail	jbeltran0561@gaill.com
	e-mail	
	CVLAC	
	e-mail	
	e-mail	
	CVLAC	
	e-mail	
	e-mail	

Palabras o frases claves:

DFT, módulos elásticos, red fcc, aluminio, dopaje, condición de estabilidad, ecuación de estado de Birch-Murnaghan.

Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 2/6

Líneas y sub líneas de investigación:

Área	Sub área
Ciencias	Física

Resumen (abstract):

En la presente investigación se realizó un estudio de primeros principios de las propiedades estructurales mecano-elásticas del aluminio (Al), y del Al dopado con vacancias (v) e impurezas de escandio (Sc), cromo (Cr), níquel (Ni) y cobre (Cu), a distintas presiones. Los cálculos se realizaron empleando la aproximación no relativista FP-LAPW dentro del marco de la teoría del Funcional de la Densidad (DFT), mientras que la energía de correlación e intercambio de los electrones se describe en la aproximación del gradiente generalizado (GGA) mediante el programa computacional Wien2k. Para esto se realizó una optimización de los parámetros cristalinos de la estructura del Al puro y de la estructura del aluminio con un átomo de su red reemplazado con una impureza o vacancia para luego determinar los módulos elásticos de cada estructura (Al3-Sc, Al3-Cr, Al3-Ni, Al3-Cu y Al3-v). Los parámetros de equilibrio de la red se obtuvieron mediante una optimización de volumen ajustada a la ecuación de estado de Birch-Murnaghan. En las estructuras estudiadas se notó un crecimiento del parámetro de red para el Al3-Sc y un decrecimiento para el Al3-Cr, Al3-Ni, Al3-Cu y Al3-v con respecto a la estructura original de Al. Con estos parámetros se evaluaron las bandas electrónicas y la densidad de estados de cada una de las estructuras consideradas, ratificando el carácter metálico de las mismas. Los módulos elásticos de cada estructura fueron evaluados desde un estado estructural comprimido a uno expandido, para presiones de -6, -4, -2, 0, 2, 4 y 6GPa. La magnitud del módulo de compresibilidad (B) se ordenó de mayor a menor para las estructuras Al3-Ni, Al3-Cr, Al3-Cu, Al3-Sc, Al, Al3-v; este módulo presentó un comportamiento lineal con la presión en el rango de presiones estudiadas. El módulo de cizalladura (G) mostró un valor variante con la presión, siendo la estructura Al3-Sc la que generalmente presenta el mayor valor. El módulo de Young presentó un incremento para todas las estructuras estudiadas, especialmente la estructura Al3-Cr. En cuanto al radio de Poisson, se evidenció un incremento de éste para la estructura Al3-Ni y un decrecimiento para el resto de ellas con respecto a la estructura original del Al. La explicación de este comportamiento radica en la interacción electrónica de los electrones s y p del aluminio con los electrones d de las estructuras estudiadas, la no existencia de dicha interacción en Al3-v reafirman su bajo valor. Con la finalidad de determinar el carácter dúctil o frágil de las distintas estructuras se evaluó la magnitud B/G, sabiendo que un valor de 1,75 para dicha magnitud refleja que la estructura es dúctil y de lo contrario refleja fragilidad, lo que nos permitió concluir que reemplazar un átomo de la red de Al con un átomo de Ni mejora su ductilidad, mientras que la introducción de Cu y vacancias la reduce y la introducción de los átomos de Sc y Cr producen una estructura frágil.

Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 3/6

Contribuidores:

Nombres y Apellidos	ROL / Código CVLAC / e-mail	
Dr. Ney J. Luiggi A.	ROL	CA <input type="checkbox"/> AS <input checked="" type="checkbox"/> TU <input type="checkbox"/> JU <input type="checkbox"/>
	CVLAC	4.029.742
	e-mail	nluiggi51@gmail.com
Juan C. Ruiz G.	ROL	CA <input type="checkbox"/> AS <input type="checkbox"/> TU <input type="checkbox"/> JU <input checked="" type="checkbox"/>
	CVLAC	8.442.683
	e-mail	juancarlosruizgomez@yahoo.com
María T. Malavé R.	ROL	CA <input type="checkbox"/> AS <input type="checkbox"/> TU <input type="checkbox"/> JU <input checked="" type="checkbox"/>
	CVLAC	
	e-mail	mtmalave@udo.edu.ve

Fecha de discusión y aprobación:

Año Mes Día

2020	2	28
------	---	----

Lenguaje: SPA

Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 4/6

Archivo(s):

Nombre de archivo	Tipo MIME
Tesis-JesusBeltran.pdf	application/pdf

Alcance:

Espacial: Internacional
Temporal: Intemporal

Título o Grado asociado con el trabajo: Licenciado en Física

Nivel Asociado con el Trabajo: Licenciatura

Área de Estudio: Física

Institución(es) que garantiza(n) el Título o grado: UNIVERSIDAD DE ORIENTE

Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 5/6



UNIVERSIDAD DE ORIENTE
CONSEJO UNIVERSITARIO
RECTORADO

CUN°0975

Cumaná, 04 AGO 2009

Ciudadano
Prof. JESÚS MARTÍNEZ YÉPEZ
Vicerrector Académico
Universidad de Oriente
Su Despacho

Estimado Profesor Martínez:

Cumplo en notificarle que el Consejo Universitario, en Reunión Ordinaria celebrada en Centro de Convenciones de Cantaura, los días 28 y 29 de julio de 2009, conoció el punto de agenda **"SOLICITUD DE AUTORIZACIÓN PARA PUBLICAR TODA LA PRODUCCIÓN INTELECTUAL DE LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE EN EL REPOSITORIO INSTITUCIONAL DE LA UDO, SEGÚN VRAC N° 696/2009"**.

Leído el oficio SIBI – 139/2009 de fecha 09-07-2009, suscrita por el Dr. Abul K. Bashirullah, Director de Bibliotecas, este Cuerpo Colegiado decidió, por unanimidad, autorizar la publicación de toda la producción intelectual de la Universidad de Oriente en el Repositorio en cuestión.

UNIVERSIDAD DE ORIENTE
SISTEMA DE BIBLIOTECA
RECIBIDO POR *[Firma]*
FECHA 5/8/09 HORA 5:30

Comunicación que hago a usted a los fines consiguientes.

Cordialmente,

[Firma]
JUAN A. BOLANOS CUMBELO
Secretario



C.C: Rectora, Vicerrectora Administrativa, Decanos de los Núcleos, Coordinador General de Administración, Director de Personal, Dirección de Finanzas, Dirección de Presupuesto, Contraloría Interna, Consultoría Jurídica, Director de Bibliotecas, Dirección de Publicaciones, Dirección de Computación, Coordinación de Teleinformática, Coordinación General de Postgrado.

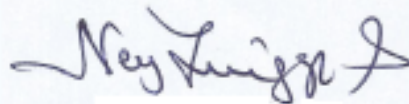
JABC/YGC/manuja

Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 6/6

Artículo 41 del REGLAMENTO DE TRABAJO DE PREGRADO (vigente a partir del II Semestre 2009, según comunicación CU-034-2009): "los Trabajos de Grado son de la exclusiva propiedad de la Universidad de Oriente, y sólo podrán ser utilizados para otros fines con el consentimiento del Consejo de Núcleo respectivo, quien deberá participarlo previamente al Consejo Universitario para su autorización".



Br. Jesús A. Beltrán Maicán.
Autor



Dr. Ney J. Luiggi A.
Asesor