

UNIVERSIDAD NACIONAL TECNOLÓGICA DE LIMA SUR
FACULTAD DE INGENIERÍA Y GESTIÓN
ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA



“COMPARACIÓN DE LA ENTALPÍA DE FORMACIÓN DE ALEACIONES Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) EN LA ESTRUCTURA B2 CON LA ESTRUCTURA B32 OBTENIDAS POR MEDIO DE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS, REALIZADO EN LA UNTELS.”

TESIS

Para optar el Título Profesional de

INGENIERO MECÁNICO ELECTRICISTA

PRESENTADO POR EL BACHILLER

DIAZ CHOQUE, MARTIN

ASESOR

GONZALES ORMEÑO, PABLO GUILLERMO

Villa El Salvador

2022

DEDICATORIA

A la memoria de mis queridos abuelos Constanza Paz Álvarez y Simeón Díaz Carpió que los llevo en mi corazón.

A mi querida abuela Glicería Medrano Quispe que siempre estuvo apoyándome en todo mi formación preuniversitaria y universitaria.

A mi madre Rina Rosario Choque Medrano por todo su apoyo que me dio en este gran camino e inculcar en seguir estudiando, y no claudicar ante nuevos retos.

A mi padre Raúl Jesús Díaz Paz por todo el apoyo que me dio.

A mi hermana Pilar Díaz Choque por todo apoyo y sus consejos, a mi cuñado Christian Javier Llacsá Díaz por haberme fomentado el inglés.

A mis tíos(as) Gladys Choque Cabezas, Yicela Choque Medrano, Martín Choque Medrano, Juan Eduardo Valencia Canela, Gabriela Antonia Riveros Carbajal, por todo el apoyo que me dieron y sus valiosos consejos.

A mis amigos Jony David Quispe Núñez, Jesica Pamela Leandro Chacón, Alex Jesús Gutiérrez Facundo, Yhonatan Chacñama Crisostomo, Michael Quintana Huerta y Diego Alejandro Coca Vargas, por todo el apoyo y consejos que me brindaron.

AGRADECIMIENTO

A la Universidad Nacional Tecnológica de Lima Sur (UNTELS), a los docentes de la Escuela de Ingeniería Mecánica Eléctrica, por la formación en el ámbito de Ingeniería, Ciencia e Investigación a mi persona.

Al Dr. Pablo Guillermo Gonzales Ormeño, por toda su dedicación como docente y asesor en este proyecto de investigación, además, en inculcarme una nueva visión en investigación.

Este trabajo fue financiado por el CONCYTEC-FONDECYT en el marco de la convocatoria “Proyecto Investigación Básica 2019-01” [número de contrato 387-2019], le agradezco por este apoyo económico.

Al Mg. Miguel Mendoza Flores, Dienes Ugarte Rojas, por su apoyo en el sistema operativo LINUX y en el manejo de algunos comandos del programa GNUPLOT.

RESUMEN

En este trabajo de investigación se analiza el comportamiento de las diferentes entalpías de formación de las aleaciones Ni-X (X=Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en las estructuras B2 y B32, también se calcula las propiedades mecánicas (módulo de compresibilidad) y electrónicas (parámetro de red, densidad de estado, momento magnético) de aquellas estructuras y en sus estados fundamentales. Se realizó el cálculo de primeros principios o llamado también *ab-initio*, utilizando la teoría funcional de la densidad (**DFT**) en el método de ondas planas aumentas y linealizadas con potencial completo (**FP-LAPW**), empleando la aproximación de la gradiente generalizada (**GGA**), implementado en el código computacional WIEN2k. En los resultados se encontró que la estructura más estable es la del NiAl-B2 con una entalpía de formación de -0.65 eV/mol y la más inestable es la del NiTa-B32 con una entalpía de formación de 0.14 eV/mol. La estructura con mayor módulo de compresibilidad es la del NiTa-B2 con 209.36 GPa y la de menor módulo de compresibilidad es la del NiZr-B32 con 133.20 GPa.

Palabras Claves:

Entalpía de formación, Estructuras B2, B32, Módulo de compresibilidad, Densidad de estados, Parámetro de red, Momento magnético, Teoría funcional de la densidad (DFT), Cálculo de primeros principios

ABSTRACT

In this research work analyzes the behavior of the different enthalpies of formation of the Ni-X (X=Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf and Ta) in the structures B2 and B32, is also calculated the mechanical properties (bulk modulus) and electronic (lattice parameter, density of state, magnetic momento) properties of those structures and in their fundamental states. It was carried out the calculation of first principles or also called ab-initio, using the density functional theory (**DFT**) in the method of augmented and linearized plane waves with full potential (**FP-LAPW**), using the generalized gradient approximation (**GGA**), implemented in the WIEN2k computational code. In the results, it was found that the most stable structure is that of NiAl-B2 with a formation enthalpy of -0.65 eV/mol and the most unstable is that of NiTa-B32 with a formation enthalpy of 0.14 eV/mol. The structure with the highest bulk modulus is that of NiTa-B2 with 209.36 GPa and the one with the lowest bulk modulus is that of NiZr-B32 with 133.20 GPa.

Keywords:

Enthalpy of Formation, Structures B2, B32, Bulk Modulus, Density of States, Lattice Parameter, Magnetic Momento, Density Functional Theory (DFT), Calculus of First Principles

LISTA DE ABREVIATURAS Y SÍMBOLOS

LISTAS DE ABREVIATURAS

VASP	:	<i>Vienna Ab-Initio Simulation Package</i>
MD	:	<i>Molecular Dynamics</i>
DFT	:	<i>Density Functional Theory</i>
APW	:	<i>Augmented Plane Wave</i>
LDA	:	<i>Local Density Approximation</i>
GGA	:	<i>Generalized Gradient Approximation</i>
PBE	:	<i>Perdew Burke Ernzerhof</i>
BCC	:	<i>Body Centered Cubic</i>
FCC	:	<i>Face Centered Cubic</i>
HCP	:	<i>Hexagonal Close Packed</i>
DOS	:	<i>Density Of State</i>
FP-LAPW	:	<i>Full Potential Linearized Augmented Plane Wave</i>
SCF	:	<i>Self-Consistent Field</i>

LISTAS DE SÍMBOLOS

Elementos		Numero atómico
Na	Sodio	11
Al	Aluminio	13
V	Vanadio	23
Fe	Hierro	26
Ni	Níquel	28
Cu	Cobre	29
Zr	Zirconio	40
Nb	Niobio	41
Ag	Plata	47
Pr	Praseodimio	59
Hf	Hafnio	72
Ta	Tantalio	73
Tl	Talio	81

ÍNDICE

DEDICATORIA.....	ii
AGRADECIMIENTO.....	iii
RESUMEN.....	iv
ABSTRACT.....	v
LISTA DE ABREVIATURAS Y SÍMBOLOS.....	vi
LISTA DE FIGURAS.....	x
LISTA DE TABLAS.....	xiii
INTRODUCCIÓN.....	1
CAPÍTULO I: PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	2
1.1 DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA.....	2
1.2 FORMULACIÓN DEL PROBLEMA.....	4
1.2.1 Problema general.....	4
1.2.2 Problemas específicos.....	4
1.3 OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN.....	4
1.3.1 Objetivo general.....	4
1.3.2 Objetivos específicos.....	4
1.4 DELIMITACIONES DEL PROBLEMA.....	5
1.4.1 Delimitación espacial.....	5
1.4.2 Delimitación temporal.....	5
1.5 JUSTIFICACIÓN.....	5
1.5.1 Teórica.....	5
1.5.2 Económica.....	5
1.5.3 Social.....	6
1.5.4 Educativa.....	6
CAPÍTULO II: MARCO TEÓRICO.....	7
2.1 ANTECEDENTES DE LA INVESTIGACIÓN.....	7
2.1.1 Antecedentes internacionales.....	7
2.2 BASE TEÓRICA.....	9
2.2.1 Energía total.....	9
2.2.2 Estructura cristalina.....	10
2.2.3 Parámetro de red.....	14
2.2.4 Energía de FERMI.....	14

2.2.5	Densidad electrónica de estado.....	14
2.2.6	Momento magnético	15
2.2.7	Módulo de compresibilidad	15
CAPÍTULO III: VARIABLE E HIPÓTESIS.....		16
3.1	DEFINICIÓN OPERACIONAL DE LAS VARIABLES	16
3.2	HIPÓTESIS DE LA INVESTIGACIÓN.....	18
3.2.1	Hipótesis general	18
3.2.2	Hipótesis específica	18
CAPÍTULO IV: METODOLOGÍA.....		19
4.1	DISEÑO DE LA INVESTIGACIÓN	19
4.2	DESCRIPCIÓN DE LA METODOLOGÍA	20
4.2.1	Cálculo de los primeros principios	20
4.2.2	El GGA.....	22
4.2.3	Método FP-LAPW.....	22
4.2.4	El código computacional WIEN2k.....	23
4.3	POBLACIÓN Y MUESTRA.....	24
4.4	TÉCNICA DE RECOLECCIÓN DE DATOS	24
4.5	INSTRUMENTOS DE RECOLECCIÓN DE DATOS.....	25
4.5.1	Validez.....	25
4.5.2	Confiabilidad	27
CAPÍTULO V: RESULTADOS.....		32
5.1	PROPIEDADES ELECTRÓNICAS	32
5.2	PROPIEDADES MECÁNICAS	42
CAPÍTULO VI: DISCUSIÓN DE RESULTADOS		54
6.1	CONTRASTACIÓN DE HIPÓTESIS CON LOS RESULTADOS	54
6.2	CONTRASTACIÓN DE RESULTADOS CON ESTUDIOS EXPERIMENTALES.....	55
CAPÍTULO VII: CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....		56
7.1	CONCLUSIONES	56
7.2	RECOMENDACIONES.....	57
CAPÍTULO VIII: REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS		58
ANEXOS.....		63
Anexo 1. Matriz de consistencia.....		64

Anexo 2. Tiempo computacional de los parámetros del Vanadio (V).....	66
Anexo 3. Gráfico de la energía mínima.....	68
Anexo 4. Propiedades electrónicas.....	93
Anexo 5. Cálculo de la entalpía de formación.....	100
Anexo 6. Pasos para el ingreso al WIEN2k.....	102

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 Estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC).....	11
Figura 2 Estructura cúbica centrada en las caras (FCC).....	12
Figura 3 Empaquetamiento hexagonal compacto (HCP).....	12
Figura 4 Estructura B2 del Ni-X (X=elementos de la 4ta y 5ta fila de la tabla periódica)....	13
Figura 5 Estructura B32 del Ni-X (X=elementos de la 4ta y 5ta fila de la tabla periódica)...	13
Figura 6 DOS de la Plata (Ag) en la estructura FCC con el spin up y down.....	14
Figura 7 La celda unitaria en las esferas atómicas (I) y la región intersticial (II).....	23
Figura 8 Diagrama de Flujo del Ciclo de Inicialización.....	26
Figura 9 Diagrama de Flujo del Ciclo de autoconsistencia.....	27
Figura 10 Gráfica de la Energía Total vs RKmax del Vanadio.....	29
Figura 11 Gráfica de la Energía Total vs Lmax del Vanadio.....	30
Figura 12 Gráfica de la Energía Total vs los Puntos K del Vanadio.....	31
Figura 13 Parámetro de red de los elementos en sus estados fundamentales-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	34
Figura 14 Parámetro de red de los elementos en sus estados fundamentales-Experimental según sus números atómicos.....	34
Figura 15 Parámetro de red de los elementos en sus estados fundamentales-obtenidos con el WIEN2k y la parte Experimental (literatura existente) según sus números atómicos.....	35
Figura 16 Parámetro de red de los compuestos en la estructura B2 - obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	36
Figura 17 Parámetro de red de los compuestos en la estructura B32- obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	37
Figura 18 Parámetro de red de las estructuras B2 y B32-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	38
Figura 19 Momento magnético de los elementos en sus estados fundamentales-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	39
Figura 20 Momento magnético de los compuestos en la estructura B2-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	40
Figura 21 Momento magnético de los compuestos en la estructura B32- obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	41
Figura 22 Momento magnético de las estructuras B2 y B32-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	42

Figura 23 Módulo de compresibilidad de los elementos en sus estados fundamentales-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	44
Figura 24 Módulo de compresibilidad de los elementos en sus estados fundamentales-Experimental según sus números atómicos.....	44
Figura 25 Módulo de compresibilidad de los elementos en su estado fundamental-obtenidos con el WIEN2K vs Experimental según sus números atómicos.....	45
Figura 26 Módulo de compresibilidad de los compuestos en la estructura B2- obtenidos con el WIEN2K según sus números atómicos.....	46
Figura 27 Módulo de compresibilidad de los compuestos en la estructura B32- obtenidos con el WIEN2K según sus números atómicos.....	48
Figura 28 Módulo de compresibilidad de las estructuras B2 y B32-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	49
Figura 29 Entalpía de formación de los compuestos en la estructura B2- obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	51
Figura 30 Entalpía de formación de los compuestos en la estructura B32- obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	52
Figura 31 Entalpía de formación de las estructuras B2 y B32-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos.....	53
Figura 32 Tiempo computacional en RKmax igual a 10.....	66
Figura 33 Tiempo computacional en Lmax igual a 10.....	66
Figura 34 Tiempo computacional en los puntos K igual a 10000.....	67
Figura 35 Energía total vs Parámetro de red del Al-FCC obtenidos por el WIEN2k.....	68
Figura 36 Energía total vs Parámetro de red del V-BCC obtenidos por el WIEN2k.....	69
Figura 37 Energía total vs Parámetro de red del Fe-BCC obtenidos por el WIEN2k.....	70
Figura 38 Energía total vs Parámetro de red del Ni-FCC obtenidos por el WIEN2k.....	71
Figura 39 Energía total vs Parámetro de red del Cu-FCC obtenidos por el WIEN2k.....	72
Figura 40 Energía total vs Parámetro de red del Zr-HCP obtenidos por el WIEN2k.....	73
Figura 41 Energía total vs Parámetro de red del Nb-BCC obtenidos por el WIEN2k.....	74
Figura 42 Energía total vs Parámetro de red del Hf-HCP obtenidos por el WIEN2k.....	75
Figura 43 Energía total vs Parámetro de red del Ta-BCC obtenidos por el WIEN2k.....	76
Figura 44 Energía total vs Parámetro de red del NiAl-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	77
Figura 45 Energía total vs Parámetro de red del NiV-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	78
Figura 46 Energía total vs Parámetro de red del NiFe-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	79
Figura 47 Energía total vs Parámetro de red del NiCu-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	80

Figura 48	Energía total vs Parámetro de red del NiZr-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	81
Figura 49	Energía total vs Parámetro de red del NiNb-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	82
Figura 50	Energía total vs Parámetro de red del NiHf-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	83
Figura 51	Energía total vs Parámetro de red del NiTa-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	84
Figura 52	Energía total vs Parámetro de red del NiAl-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	85
Figura 53	Energía total vs Parámetro de red del NiV-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	86
Figura 54	Energía total vs Parámetro de red del NiFe-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	87
Figura 55	Energía total vs Parámetro de red del NiCu-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	88
Figura 56	Energía total vs Parámetro de red del NiZr-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	89
Figura 57	Energía total vs Parámetro de red del NiNb-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	90
Figura 58	Energía total vs Parámetro de red del NiHf-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	91
Figura 59	Energía total vs Parámetro de red del NiTa-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	92
Figura 60	DOS del Al (FCC) con respecto a su energía, con el spin up y down.....	93
Figura 61	DOS del V (FCC), Ni (FCC), Fe (BCC), Cu (FCC) con respecto a su energía, con el spin up y down.....	94
Figura 62	DOS del Zr (HCP), Nb (BCC), Hf (HCP), Ta (BCC) con respecto a su energía, con el spin up y down.....	95
Figura 63	DOS del NiAl, NiV, NiFe, NiCu con respecto a su energía en la estructura B2, con el spin up y down.....	96
Figura 64	DOS del NiZr, NiNb, NiHf, NiTa con respecto a su energía en la estructura B2, con el spin up y down.....	97
Figura 65	DOS del NiAl, NiV, NiFe, NiCu con respecto a su energía en la estructura B32, con el spin up y down.....	98
Figura 66	DOS del NiZr, NiNb, NiHf, NiTa con respecto a su energía en la estructura B32, con el spin up y down.....	99
Figura 67	Plataforma del WIEN2k donde se crea la sección e ingresar a los archivos ya existentes	102
Figura 68	Complementación de los datos del átomo Vanadio (V_BCC).....	103
Figura 69	Pasos del init_lapw del átomo Vanadio (V_BCC).....	104
Figura 70	Cambio del RK_{max} y del L_{max} con el valor 10.....	104

LISTA DE TABLAS

Tabla 1 Variable independiente 1: Entalpía de formación	16
Tabla 2 Variable dependiente 1: Estructura B2	17
Tabla 3 Variable dependiente 2: Estructura B32	17
Tabla 4 Resultados de la Energía total vs RKmax del Vanadio	28
Tabla 5 Resultados de la Energía total vs Lmax del Vanadio	29
Tabla 6 Resultados de la Energía Total vs Puntos K del Vanadio	30
Tabla 7 Parámetro de red por el WIEN2k, experimental (existente en la literatura) y el margen de error de los elementos en sus estados fundamentales	33
Tabla 8 Parámetro de red de los compuestos en la estructura B2 obtenidos por el WIEN2k	35
Tabla 9 Parámetro de red de los compuestos en la estructura B32 obtenidos por el WIEN2k	36
Tabla 10 Momento magnético de los elementos en sus estados fundamentales obtenidos por el WIEN2k.....	38
Tabla 11 Momento magnético de los compuestos en la estructura B2 obtenidos por el WIEN2k.....	39
Tabla 12 Momento magnético de los compuestos en la estructura B32 obtenidos por el WIEN2k.....	40
Tabla 13 Módulo de compresibilidad por el WIEN2k, experimental (existente en la literatura) y el margen de error de los elementos en sus estados fundamentales	43
Tabla 14 Módulo de compresibilidad de los compuestos en la estructura B2 obtenidos por el WIEN2k.....	46
Tabla 15 Módulo de compresibilidad de los compuestos en la estructura B32 obtenidos por el WIEN2k.....	47
Tabla 16 Entalpía de formación de los compuestos en la estructura B2 obtenidos por el WIEN2k.....	50
Tabla 17 Entalpía de formación de los compuestos en la estructura B32 obtenidos por el WIEN2k.....	51
Tabla 18 Resultados del Al-FCC obtenidos por el WIEN2k.....	68
Tabla 19 Resultados del V-BCC obtenidos por el WIEN2k	69
Tabla 20 Resultados del Fe-BCC obtenidos por el WIEN2k.....	70
Tabla 21 Resultados del Ni-FCC obtenidos por el WIEN2k.....	71

Tabla 22 Resultados del Cu-FCC obtenidos por el WIEN2k.....	72
Tabla 23 Resultados del Zr-HCP obtenidos por el WIEN2k.....	73
Tabla 24 Resultados del Nb-BCC obtenidos por el WIEN2k	74
Tabla 25 Resultados del Hf-HCP obtenidos por el WIEN2k	75
Tabla 26 Resultados del Ta-BCC obtenidos por el WIEN2k.....	76
Tabla 27 Resultados del NiAl-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	77
Tabla 28 Resultados del NiV-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	78
Tabla 29 Resultados del NiFe-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	79
Tabla 30 Resultados del NiCu-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	80
Tabla 31 Resultados del NiZr-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	81
Tabla 32 Resultados del NiNb-B2 obtenidos por el WIEN2k.....	82
Tabla 33 Resultados del NiHf-B2 obtenidos por el WIEN2k	83
Tabla 34 Resultados del NiTa-B2 obtenidos por el WIEN2k	84
Tabla 35 Resultados del NiAl-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	85
Tabla 36 Resultados del NiV B32 obtenidos por el WIEN2k	86
Tabla 37 Resultados del NiFe-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	87
Tabla 38 Resultados del NiCu-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	88
Tabla 39 Resultados del NiZr-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	89
Tabla 40 Resultados del NiNb-B32 obtenidos por el WIEN2k.....	90
Tabla 41 Resultados del NiHf-B32 obtenidos por el WIEN2k	91
Tabla 42 Resultados del NiTa-B32 obtenidos por el WIEN2k	92

INTRODUCCIÓN

En 1963 en el Laboratorio de Artillería Naval (*Naval Ordnance Laboratory, NOL*) en Silver Springs (Maryland, USA), el Ingeniero Metalúrgico William J. Bruehler y sus colegas descubrieron por casualidad la aleación **Níquel-Titanio (NiTi)** o también conocido **NiTiNOL** (al juntar las dos abreviaturas), cuando estaban investigando una aleación no magnética, resistente al agua salada para uso naval (Vicente Suero, 2017; Bermejo Sánchez, 2013). Dicha aleación pertenece a las aleaciones con memoria de forma (*Shape Memory Alloys, SMAs*). En 1970 se demostró con éxito un acoplamiento de tubo Cryofit de aleación con memoria de forma en un avión de combate F-14 de la Marina de los USA (Wu y Schetky, 2000). En 1971 se sugirió utilizar el alambre de NiTi en la ortodoncia (Andreasen y Barrett, 1973). En 1974 se estudió las propiedades físicas y su utilización en el campo médico y dental (Civjan et al., 1975). En el área comercial la mayor parte se ha centrado en los dispositivos médicos debido al atractivo valor de negocio, pero el consumo de materiales de aleaciones de memoria de forma en las secciones industriales supera con creces el uso del campo médico, y la lista de aplicaciones comerciales está creciendo a un ritmo rápido (Wu y Schetky, 2000). La presente investigación propone la comparación de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 y B32. El interés de esta investigación se basa en aportar una metodología poco conocida en Perú para calcular la entalpía de formación, propiedades mecánicas y electrónicas en diferentes estructuras de la materia, debido a que si se realizara de forma experimental (muestras y equipos sofisticados) la investigación tendría un costo muy elevado.

La metodología de esta investigación se basa en cálculos de primeros principios, utilizando la onda plana aumentada linealizada de potencial completo (**FP-LAPW**) (Wei et al., 1985), en el esquema de la teoría funcional de la densidad (**DFT**) (Kohn y Sham, 1965), con la aproximación de la gradiente generalizada (**GGA-PBE**) (Perdew et al., 1999), implementado en la simulación computacional WIEN2k (Blaha et al., 2020). Se utilizó esta metodología porque el asesor de tesis viene trabajando 24 años con la metodología **FP-LAPW** y con esta metodología tiene más de 10 publicaciones internacionales.

CAPÍTULO I

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1 DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

Las aleaciones con memoria de forma (*Shape Memory Alloys, SMAs*) se relaciona a un grupo de materiales con la propiedad de recuperar su forma inicial cuando se somete a una carga termomecánica idónea (Matuszewski, 2020; Clithy, 2020). En 1963 el Ingeniero Metalúrgico William J. Buehler y sus colegas del Laboratorio de Artillería Naval de los U.S.A descubrieron el **NiTINOL**, el cual tenía excelentes aplicaciones en el campo de la Ingeniería y Medicina (Clithy, 2020; Hornbuckle, 2014). El Ni-Ti tiene dos composiciones, la primera es equiatómica (50% Ni y 50% Ti) y la segunda es casi equiatómica (alrededor de 51% Ni y 49% Ti), además tiene excelentes propiedades mecánicas, biocompatibilidad, resistencia a la corrosión y la capacidad para transformarse cerca a la temperatura ambiente (Ko et al., 2017). Este material constantemente está siendo estudiado por grupos de investigación en simulación computacional y experimentales.

Estudios experimentales han encontrado que al adicionar Cu, Fe, Nb y Zr a las aleaciones de Ni-Ti, conducen a varias transformaciones de fase y otras propiedades mecánicas (Lee y Rho, 2020).

En 1988 Walia describe mediante un estudio experimental, donde el Ni-Ti tiene aplicaciones en instrumentos endodónticos, a partir de alambres de ortodoncia para la fabricación de limas manuales, mostrando que un tipo de lima (limas número 15) son 3 veces más flexibles en movimiento de rotación horaria-antihoraria, y una resistencia superior a la fractura torsional cuando se compara con las limas de acero inoxidable del mismo número (Vicente Suero, 2017). La superplasticidad de las limas Ni-Ti permiten introducirse con facilidad en el orificio apical y no requiere un curvado como las limas de acero inoxidable, pero su principal inconveniente es que se rompen inesperadamente (Bermejo Sánchez,

2013). Estudios revelan que la fractura de limas Ni-Ti se debe a la fractura por torsión y de fatiga cíclica, se está buscando nuevas aleaciones con el objetivo de mejorar este problema (Vicente Suero, 2017).

La fabricación de limas de Ni-Ti está determinado por su proporción (56% Ni y 44% Ti) y su forma cristalina, por ello tienen un comportamiento no lineal que provoca una alteración de sus propiedades cristalográficas y mecánicas. Este comportamiento que tiene el Ni-Ti se puede apreciar en dos estructuras, la B2 (cúbica simple) y la B19 (ortorrómbica simple) (Vicente Suero, 2017; Bermejo Sánchez, 2013).

El estudio de las aleaciones de memoria de forma se puede realizar por técnicas experimentales o por simulación computacional, a continuación se menciona algunas referencias:

Zhoa y colaboradores estudiaron experimentalmente la estructura B19' (monoclínica simple) y la B2 en la aleación Ni-Ti-Pr, concluyeron que al aumentar la fracción del Pr en la aleación Ni-Ti-Pr disminuye gradualmente la temperatura inicial de la microestructura B19' (Zhao et al., 2017). La diferencia con la presente investigación se debe a que se realizó por simulación computacional.

Prokoshkin y colaboradores realizaron estudios experimentales mediante la comparación de un difractómetro de rayos X y otro de neutrones, para la estructura B19' en la aleación Ni-Ti (Prokoshkin et al., 2006). La diferencia con la presente investigación se debe a que se realizó por simulación computacional.

Kadkhodaei y van de Walle estudiaron por simulación computacional, en el marco de los cálculos de primeros principios, las propiedades térmicas de las fases del Pt-Ti y del Ni-Ti, mediante el método APW por medio del código computacional VASP. Sus resultados indica que las propiedades termodinámicas del Pt-Ti y del Ni-Ti mediante simulación computacional concuerdan con los datos experimentales (Kadkhodaei y van de Walle, 2018). La diferencia con la presente investigación se debe a que se utilizó el método FP-LAPW por medio del código computacional WIEN2k.

Ko y colaboradores realizaron por simulación computacional la transformación de fase del Ni-Ti en las estructuras B2 a la B19', mediante el método computacional MD, en el marco de los cálculos de primeros principios. Sus resultados reproducen con exactitud las características reportadas por los experimentales de las transformaciones de fase del Ni-Ti (Ko et al., 2017). La diferencia con la presente investigación se debe a que se utilizó el método FP-LAPW por medio del código computacional WIEN2k.

Kulkova y sus colaboradores estudiaron por simulación computacional el cambio de la estructura Ni-Ti durante la transformación B2 a la B19, mediante el método computacional WIEN2k, en el marco de los cálculos de primeros principios. Sus resultados muestran que las estructuras electrónicas cambian de manera insignificante con la transformación de la B19 a la B2 (Kulkova et al., 2003).

En esta tesis se realizó el cálculo de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 y la estructura B32. Se estudió la estructura B2 porque que se encuentran en la fase austenítica, y la estructura B32 tiene similitud con la B2. En la propuesta presentada, se utilizó el método FP-LAPW por medio del código computacional WIEN2k. Luego de que se obtuvo los cálculos, se analizó el comportamiento de estas dos estructuras, porque dichas estructuras tienen una composición equiatómica, son cúbicas, por otro lado la estructura B2 tiene dos átomos a diferencia de la estructura B32 que tiene cuatro átomos y las posiciones de sus átomos son diferentes que la B2.

1.2 FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

1.2.1 Problema general

¿Puedo comparar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 y B32 obtenidas por el WIEN2k?

1.2.2 Problemas específicos

- a. ¿Puedo analizar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 obtenidas por el WIEN2k?
- b. ¿Puedo analizar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B32 obtenidas por el WIEN2k?

1.3 OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN

1.3.1 Objetivo general

Comparar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 y B32 obtenidas por el WIEN2k.

1.3.2 Objetivos específicos

- a. Analizar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 obtenidas por el WIEN2k.
- b. Analizar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B32 obtenidas por el WIEN2k.

1.4 DELIMITACIONES DEL PROBLEMA

1.4.1 Delimitación espacial

La investigación se desarrolló en la UNTELS.

1.4.2 Delimitación temporal

La investigación se desarrolló en el periodo 2020-2022. Se debe al hecho que durante el año 2020-2021 sucedió la pandemia del COVID-19 en todo el mundo, lo cual la UNTELS estuvo en cuarentena y tuvo que adaptarse a la virtualidad hasta diciembre del 2021 donde comenzó la semipresencialidad.

1.5 JUSTIFICACIÓN

1.5.1 Teórica

La información obtenida de esta investigación podrá ser utilizada por grupos de investigación en la parte experimental para que corroboren los resultados obtenidos en la presente tesis, para que posteriormente se elabore un prototipo y finalmente se realice la fabricación de piezas para diferentes equipos y/o instrumentos en el área que se aplique.

1.5.2 Económica

Por medio de simulaciones computacionales (en el marco de los cálculos de primeros principios) se obtiene las propiedades mecánicas (módulo de compresibilidad: **B**) y propiedades electrónicas (parámetro de red, densidad de estado, momento magnético) de las estructuras metálicas e intermetálicas. Utilizando simulaciones computacionales se estaría prediciendo el comportamiento de los sistemas analizados. Las universidades con carreras en ciencias de los materiales o afines y con poco presupuesto en investigación podrían invertir en este método computacional, estarían reduciendo costos en muestras y

equipos sofisticados que se emplean en técnicas experimentales, claro está desde que se cuente con personal calificado.

Mediante la ley 30309-CONCYTEC, ley que promueve proyectos de **Investigación, Desarrollo tecnológico e innovación (I+D+i)**, busca que las empresas inviertan en estos proyectos para que desarrollen competitividad de sus organizaciones. El estado concede una deducción tributaria sobre los gastos incurridos en los proyectos **I+D+i** hasta un 215% cuando lo desarrolla la empresa o 175% con apoyo de centros de investigación. Si se buscaría ampliar esta investigación, se puede presentar a cualquier empresa para que se beneficie en la ley 30309 y así incentivar a los próximos ingenieros para que realicen investigación.

1.5.3 Social

Los resultados obtenidos de esta investigación beneficiaria a los grupos de investigación experimental para la optimización de propiedades, en la fabricación de instrumentos en el área de endodoncia, específicamente en las limas endodónticas.

1.5.4 Educativa

Continuar el desarrollo de la investigación en la carrera de Ingeniería Mecánica y/o Ciencia de los Materiales, con énfasis en la simulación computacional.

CAPÍTULO II

MARCO TEÓRICO

2.1 ANTECEDENTES DE LA INVESTIGACIÓN

Para realizar este trabajo, se encontró con las siguientes investigaciones y tesis que a continuación se detallará siguiendo este orden, su año de publicación, el título, la metodología, sus resultados y conclusiones; además tienen relación con el tema de aleaciones de Ni-Ti. Con respecto a los antecedentes nacionales no existen, porque esta área recién se está incursionando en el campo de la Ciencia e Ingeniería en el Perú.

2.1.1 Antecedentes internacionales

La investigación de Kadkhodaei y van de Walle (2018). Cálculos de primeros principios de las propiedades térmicas de las fases mecánicamente inestables de las aleaciones de memoria de forma Pt-Ti y Ni-Ti, de la Revista Acta Materia, su objetivo fue evaluar las aleaciones de memoria de forma en las estructuras Ni-Ti (B2), Pt-Ti (B2), Pt-Ti (B19) y del Ni-Ti (B19'). Realizaron cálculos de primeros principios utilizando el *Vienna Ab-Initio Simulation Package (VASP)*, en el esquema de la teoría funcional de la densidad (**DFT**), usando la proyección de ondas aumentadas (**APW**) con aproximación de la gradiente generalizada (**GGA-PBE**). Sus resultados computacionales mostraron que la temperatura de conducción de la estructura B2 a la B19' del Ni-Ti tenía 258 K (-15.15 °C), la temperatura de conducción de la estructura B2 a la B19' del Pt-Ti tenía 1171K (897.85 °C). Concluyeron que las propiedades termodinámicas de las estructuras Pt-Ti y Ni-Ti coinciden con los datos experimentales. La diferencia con la presente investigación se debe a que se utilizó el método de onda plana aumentada

linealizada de potencial completo (**FP-LAPW**) por medio de los códigos computaciones WIEN2k.

El trabajo de maestría de Vicente Suero (2017). Efecto de la temperatura corporal en medio líquido en la resistencia a la fatiga cíclica de las limas Heyflex CM y Heyflex EDM, de la Escuela de Posgrado de la Universidad Complutense de Madrid, su objetivo fue la comparación a la fatiga cíclica entre las limas Heyflex CM y Heyflex EDM a una distancia de 5 mm y 10 mm de la punta, a una temperatura corporal en un medio con agua destilada. Realizó un estudio experimental in vitro, utilizando 80 limas que se subdividieron en 4 grupos de 20 limas que fueron: 20 limas de Heyflex CM a una distancia de 5 mm de la punta, 20 limas de Heyflex EDM a una distancia de 5 mm de la punta, 20 limas de Heyflex CM a una distancia de 10 mm de la punta, 20 limas de Heyflex EDM a una distancia de 10 mm de la punta; todo esto sumergido en el dispositivo de fatiga cíclica en agua doblemente destilada de tipo Milli-Q (con el fin de producir un ambiente similar al de conductos radiculares). Complementando su estudio usó el software Weibull (Software de la corporación Reliasoft de los U.S.A), el cual estudia la fatiga de los materiales y permite medir la fatiga de forma acumulativa, mediante la curva de Weibull. Sus resultados mostraron que los valores de la lima Heyflex CM tenía una pendiente más vertical que la lima Heyflex EDM, ambas a una distancia de 5 mm de la punta. Concluye que la lima Heyflex EDM tenían una resistencia significativamente mayor a la lima Heyflex CM, ambas a una distancia de 5 mm de la punta. La diferencia con la presente investigación se debe a que se realizó por simulación computacional.

La investigación de Ko et al. (2017). Procesos a la escala atómica de transformaciones de fase en aleaciones Ni-Ti nanocristalinas con memoria de forma, de la Revista Acta Materia, su objetivo fue el estudio del Ni-Ti en las estructuras B2 y B19'. Utilizaron el método computacional *Molecular Dynamics* (**MD**), en el marco de los cálculos de primeros principios. Sus resultados mostraron que al someter la estructura B2 durante un enfriamiento y luego aún recalentamiento comenzaba a transformarse en la estructura B19'. Concluyeron que sus resultados por simulación computación coinciden con los datos experimentales. La diferencia con la presente investigación se debe a que se utilizó el método de onda plana aumentada linealizada de potencial completo (**FP-LAPW**) por medio de los códigos computaciones WIEN2k.

La investigación de Lang et al. (2014). Estructura cristalina y energía libre de Ti_2Ni_3 precipitadas en aleaciones de Ti-Ni a partir de los primeros principios, de la Revista

Computational Materials Science, su objetivo fue evaluar la estructura ortorrómbica ($\text{Ti}_2\text{Ni}_3\text{-L}$, baja temperatura), tetragonal ($\text{Ti}_2\text{Ni}_3\text{-H}$, alta temperatura). Realizaron cálculos de los primeros principios por medio del *Vienna Ab-Initio Simulation Package* (**VASP**), en el esquema de la teoría funcional de la densidad (**DFT**) con aproximación de la gradiente generalizada (**GGA-PBE**). Sus resultados mostraron que la entalpía de formación del $\text{Ti}_2\text{Ni}_3\text{-L}$ fue de -0.46 eV/atom, y la del $\text{Ti}_2\text{Ni}_3\text{-H}$ fue de -0.45 eV/atom. Concluyeron que la estructura ortorrómbica ($\text{Ti}_2\text{Ni}_3\text{-L}$) es relativamente más estable que la estructura tetragonal ($\text{Ti}_2\text{Ni}_3\text{-H}$). La diferencia con la presente investigación se debe a que se utilizó el método de onda plana aumentada linealizada de potencial completo (**FP-LAPW**) por medio de los códigos computaciones WIEN2k.

El trabajo de maestría de Bermejo Sánchez (2013). Efecto de la esterilización en la resistencia a la fatiga cíclica de las limas Heyflex CM, de la Escuela de Posgrado de la Universidad Complutense de Madrid, su objetivo fue la comparación de la resistencia a la fatiga cíclica entre las limas Heyflex CM nuevas y esterilizadas, a una distancia de 5 y 11 mm de la punta. Realizó un estudio experimental in vitro, utilizando 180 limas que se dividieron en 6 grupos de 30 limas que fueron: 30 limas Heyflex CM nuevas a una distancia de 5 mm de la punta, 30 limas Heyflex CM nuevas a una distancia de 11 mm de la punta, 30 limas Heyflex CM esterilizada y fatigada una vez a una distancia de 5 mm de la punta, 30 limas Heyflex CM esterilizada y fatigada una vez a una distancia de 11 mm de la punta, 30 limas Heyflex CM esterilizada dos veces y fatigada una vez a una distancia de 5 mm de la punta, 30 limas Heyflex CM esterilizada dos veces y fatigada una vez a una distancia de 11 mm de la punta. Complementado su estudio utilizó el software Weibull, el cual estudia la fatiga de los materiales y permite medir la fatiga de forma acumulativa, mediante la curva de Weibull. Sus resultados mostraron que las limas Heyflex CM nuevas a una distancia de 5 mm tenían una pendiente más inclinada que las demás limas. Concluye que la resistencia a la fatiga de las limas Heyflex CM nuevas a una distancia de 5 mm de la punta es mayor que las demás limas. La diferencia con la presente investigación se debe a que se realizó por simulación computacional.

2.2 BASE TEÓRICA

2.2.1 Energía total

La energía total (E_{tot}) está en función de la densidad electrónica, significa que la información de la función de onda permanece en la densidad de probabilidades

(Chelikowsky, 2019; Mendoza, 2019). Está determinado por la Ecuación 1 (Kohn y Sham, 1965):

$$E_{\text{tot}}(\rho \uparrow, \rho \downarrow) = T_s(\rho \uparrow, \rho \downarrow) + E_{ee}(\rho \uparrow, \rho \downarrow) + E_{Ne}(\rho \uparrow, \rho \downarrow) + E_{xc}(\rho \uparrow, \rho \downarrow) + E_{NN}(\rho \uparrow, \rho \downarrow) \quad (1)$$

Donde $\rho \uparrow, \rho \downarrow$ es la densidad electrónica (siendo $\rho \uparrow$ la orientación hacia arriba y $\rho \downarrow$ la orientación hacia abajo), $E_{\text{tot}}(\rho \uparrow, \rho \downarrow)$ es la energía total, $T_s(\rho \uparrow, \rho \downarrow)$ es la energía cinética de partículas no interactuantes, $E_{ee}(\rho \uparrow, \rho \downarrow)$ es la energía de repulsión de electrón-electrón, $E_{Ne}(\rho \uparrow, \rho \downarrow)$ es la energía de atracción de núcleo-electrón, $E_{xc}(\rho \uparrow, \rho \downarrow)$ es la energía de intercambio de correlación, $E_{NN}(\rho \uparrow, \rho \downarrow)$ es la energía de coulomb.

2.2.1.1 Entalpía de formación

La entalpía de formación (ΔH) verifica la formación espontánea de un compuesto cuando su $\Delta H < 0$, o no se forma espontáneamente el compuesto cuando su $\Delta H > 0$, su temperatura está por debajo del cero absoluto (Lu y Zunger, 1994), es decir a más negativo su entalpía de formación es más estable el compuesto, por el contrario, si la entalpía de formación es más positiva es más inestable el compuesto. Está determinado por la Ecuación 2 (Lang et al., 2014):

$$\Delta H = \frac{E(F) - [N_x E(x^{E..F}) + N_y E(y^{E..F})]}{N_x + N_y} \quad (2)$$

Donde $E(F)$ la energía total del compuesto “xy”, $E(x^{E..F})$ la energía total del átomo “x”, $E(y^{E..F})$ la energía total del átomo “y”, N_x y N_y la cantidad de átomos “x”, ” y”.

2.2.2 Estructura cristalina

La estructura cristalina presenta un ordenamiento de los átomos, iones o moléculas, y es una estructura geoméricamente definida (Callister et al., 2016). Se forma cuando se une una base de átomos de estructura idéntica a todos los puntos de la red (Kittel, 2013).

Existen 14 redes de Bravais, en las redes cúbicas existen tres tipos de redes de Bravais (primitiva (P), centrada en el cuerpo (BCC) y la centrada en las caras (FCC)); en la red tetragonal solo existen dos redes de Bravais (simple, centrada en el cuerpo); en la red ortorrómbica existen cuatro redes de Bravais (simple, centrada en el cuerpo, centrada en las bases y centrada en las caras); en la red romboédrica solo existe una red de Bravais; en la red hexagonal solo existe una red de Bravais; en la red monocíclica existe dos redes

de Bravais (simple, centrada en las caras); en la red triclínica existe una red de Bravais (Askeland y Wright, 2016). A continuación, definiré brevemente algunas de estas estructuras:

2.2.2.1 Estructura BCC

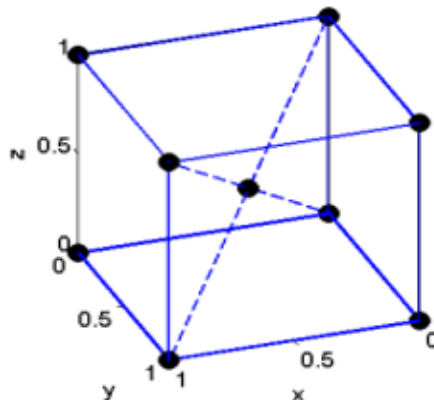
Es la estructura cúbica centrada en el cuerpo (**BCC**), contiene dos átomos de los cuales uno se encuentra en el centro y el otro se encuentra en los ocho vértices de la celda (el átomo fraccionado en ocho partes, es decir un 1/8 va a cada vértice del cubo); en la Figura 1 se muestra la BCC (Hasbun y Datta, 2019).

$$a=b=c$$

$$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$

Figura 1

Estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC)



Fuente: (Hasbun y Datta, 2019, p.3)

2.2.2.2 Estructura FCC

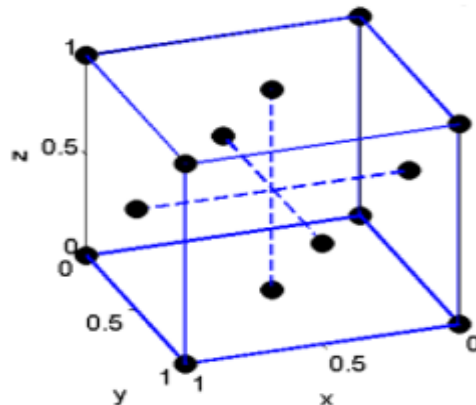
Es la estructura cúbica centrada en las caras (**FCC**), contiene cuatro átomos de los cuales tres se encuentran centradas en las seis caras de la celda (cada átomo fraccionado en dos partes (es decir que en cada cara hay 1/2 átomo) y el otro se encuentra en los ocho vértices de la celda (es decir que en cada vértice hay 1/8 de átomo); en la Figura 2 se muestra la FCC (Hasbun y Datta, 2019).

$$a=b=c$$

$$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$

Figura 2

Estructura cúbica centrada en las caras (FCC)



Fuente: (Hasbun y Datta, 2019, p.3)

2.2.2.3 Estructura HCP

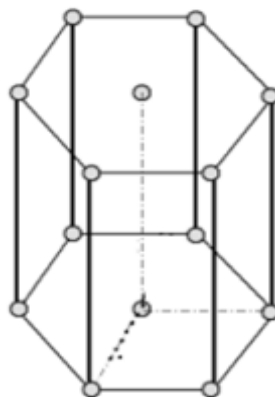
Es el empaquetamiento hexagonal compacto (**HCP**), las posiciones de los átomos en esta estructura no constituyen una red espacial, simplemente su red espacial es hexagonal (es decir que el hexágono cuenta con dos átomos de base) (Kittel, 2013), en la Figura 3 se muestra el HCP (Hasbun y Datta, 2019).

$$a=b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

Figura 3

Empaquetamiento hexagonal compacto (HCP)



Fuente: (Hasbun y Datta, 2019, p.28)

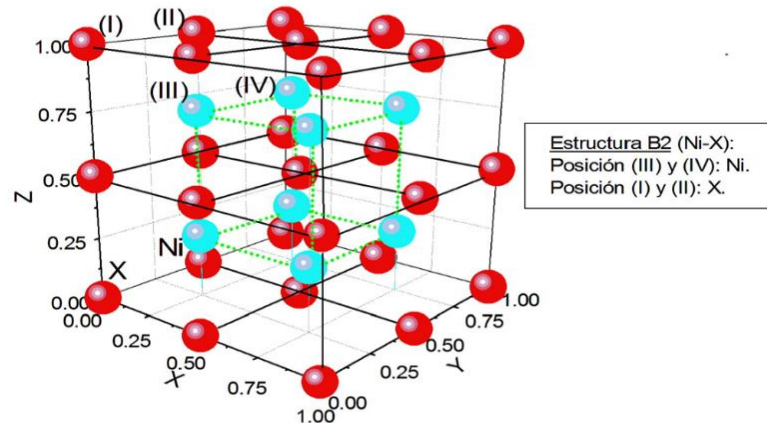
2.2.2.4 Estructura B2

Es una estructura cúbica primitiva o también equiatómica AB que tiene dos átomos, está formado por un átomo de tipo A en la posición (0,0,0) y otro átomo de tipo B en la

posición (0.5,0.5,0.5) (Hasbun y Datta, 2019; Graef y McHenry, 2012). En la literatura se le conoce como fase austenítica o de alta temperatura (Davey et al., 2020; Kumar y Waghmare, 2020; Yu y Liu, 2019; Zhao et al., 2017), en la Figura 4 se muestra la B2 (Gonzales Ormeño, 2021).

Figura 4

Estructura B2 del Ni-X (X= elementos de la 4ta y 5ta fila de la tabla periódica)



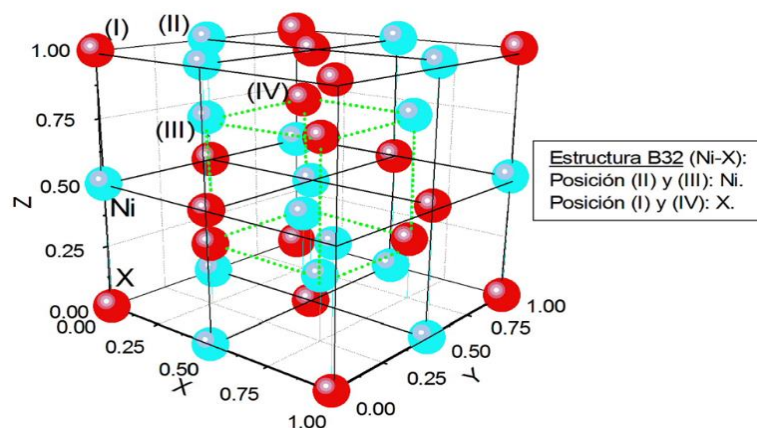
Fuente: (Gonzales Ormeño, 2021)

2.2.2.5 Estructura B32

Es una estructura cúbica centrada en las caras (FCC) conocida en la literatura como Sodio-Talio (NaTl) o también equiatómica AB que tiene cuatro átomos, está formado por dos átomos de tipo A en las posiciones (0,0,0), (0.25,0.25,0.25) y por dos átomos de tipo B en las posiciones (0.5,0.5,0.5), (0.75,0.75,0.75) (Graef y McHenry, 2012), en la Figura 5 se muestra la B32 (Gonzales Ormeño, 2021).

Figura 5

Estructura B32 del Ni-X (X= elementos de la 4ta y 5ta fila de la tabla periódica)



Fuente: (Gonzales Ormeño, 2021)

2.2.3 Parámetro de red

El parámetro de red (a) define la dimensión de la celda unitaria en una estructura cristalina, su dimensión de la celda unitaria está en términos de seis parámetros: la longitud de las tres aristas de la estructura (a , b y c) y los tres ángulos de las aristas (α , β , γ) (Askeland y Wright, 2016).

2.2.4 Energía de FERMI

Es la energía más alta del estado electrónico ocupado ($T=0$ K, ya que distintas a cero las excitaciones térmicas de los electrones conducen a una población de estados por encima de la energía de FERMI) (Sholl y Steckel, 2009).

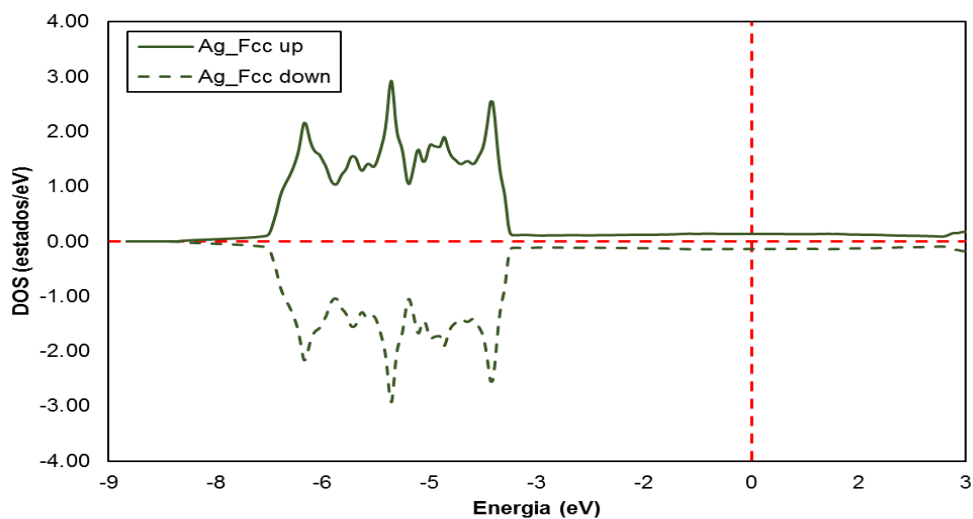
2.2.5 Densidad electrónica de estado

La densidad electrónica de estado (**DOS**) determina si un material es metal o no metal (semiconductor o aislante) cuando su **DOS** es distinto de cero en el nivel de FERMI; en un metal hay estados electrónicos justo por encima de la energía de FERMI que podrían ser poblados por estos electrones acelerados y como resultado el material puede conducir fácilmente la electricidad (Sholl y Steckel, 2009).

En la Figura 6 se muestra el DOS de la Plata (Ag) de su spin up y down, además se muestra la energía de FERMI mediante la línea de color rojo (en los puntos 0,0).

Figura 6

DOS de la Plata (Ag) en la estructura FCC con el spin up y down



Nota: con el WIEN2K se obtuvo los valores del DOS y la energía, luego se trasladaron al Excel para su gráfica.

2.2.6 Momento magnético

El momento magnético (μ) es una dimensión de la intensidad del magnetismo que es producido por un átomo (Gratton, 2003). Mediante la teoría funcional de la densidad, el momento magnético se define como la diferencia entre los electrones spin-up ($N\uparrow$) y spin-down ($N\downarrow$), está determinado por la siguiente Ecuación 3 (Blaha et al., 2020).

$$\mu = (N\uparrow) - (N\downarrow) \quad (3)$$

2.2.7 Módulo de compresibilidad

El módulo de compresibilidad (*Bulk modulus*: B_0) mide cuanto resiste un material a la compresión uniforme, es decir que al aumentar la presión del compuesto causa una deformación del volumen proporcionalmente (Young y Freedman, 2018). Se calcula por medio de la ecuación de estado, que está dado por la Ecuación 4 (Murnaghan, 1994).

$$E_{\text{tot}}(a) = E_c + \frac{9V_0B_0}{16} \left(\left[\left(\frac{a_0}{a} \right)^2 - 1 \right]^2 B'_0 + \left[\left(\frac{a_0}{a} \right)^2 - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{a_0}{a} \right)^2 \right] \right) \quad (4)$$

Donde E_c es la energía de cohesión (muestra la estabilidad del material), a_0 es el parámetro de red de la energía de cohesión, B_0 es el módulo de compresibilidad, B'_0 es el coeficiente del módulo de compresibilidad, V_0 es el volumen de la energía de cohesión.

CAPÍTULO III

VARIABLE E HIPÓTESIS

3.1 DEFINICIÓN OPERACIONAL DE LAS VARIABLES

Tabla 1

Variable independiente 1: Entalpía de formación

Tipo variable	de	Definición conceptual	Definición operacional	Dimensión	Indicador
Independiente		verifica la formación espontánea de un compuesto ($\Delta H < 0$) o no se forma espontáneamente el compuesto ($\Delta H > 0$), a una temperatura de 0 K	La entalpía de formación se obtiene de la energía total del compuesto ($E(F)$) menos la energía total de los átomos que conforma el compuesto ($E(x^{E.F.})$, $E(y^{E.F.})$).	La energía total del compuesto y la energía total de los átomos que conforman el compuesto.	Energía total
Escala medición	de	Unidad medida	de Índice	Valor	Técnica e instrumento
Escalar		eV/mol	eV/mol	Positivo o negativo	La observación, y la computadora de la UNTELS.

Tabla 2

Variable dependiente 1: Estructura B2

Tipo de variable	Definición conceptual	Definición operacional	Dimensión	Indicador
Dependiente	Es una estructura cúbica simple de tipo equiatómica que tiene dos átomos.	El compuesto AB, está formado por un átomo de tipo A en la posición (0,0,0) y un átomo de tipo B en la posición (0.25,0.25,0.25).	Estructura B2	<ul style="list-style-type: none"> • Parámetro de red • Densidad de estado • Momento magnético • Módulo de compresibilidad
Escala de medición	Unidad de medida	Índice	Valor	Técnica e instrumento
Escalar	<ul style="list-style-type: none"> • Å • State/eV • μ • GPa 	<ul style="list-style-type: none"> • Å • State/eV • μ • GPa 	Valor numérico	La observación, y la computadora de la UNTELS.

Tabla 3

Variable dependiente 2: Estructura B32

Tipo de variable	Definición conceptual	Definición operacional	Dimensión	Indicador
Dependiente	Es una estructura cúbica centrada en las caras (FCC) de tipo equiatómica que tiene cuatro átomos.	El compuesto AB, está formado por dos átomos de tipo A en la posición (0,0,0), (0.25,0.25,0.25) y dos átomos de tipo B en la posición (0.5,0.5,0.5), (0.75,0.75,0.75).	Estructura B32	<ul style="list-style-type: none"> • Parámetro de red • Densidad de estado • Momento magnético • Módulo de compresibilidad
Escala de medición	Unidad de medida	Índice	Valor	Técnica e instrumento
Escalar	<ul style="list-style-type: none"> • Å • State/eV • μ • GPa 	<ul style="list-style-type: none"> • Å • State/eV • μ • GPa 	Valor numérico	La observación, y la computadora de la UNTELS.

3.2 HIPÓTESIS DE LA INVESTIGACIÓN

3.2.1 Hipótesis general

En la estructura B2 y B32, que aleaciones del Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) tienen entalpía de formación negativa.

3.2.2 Hipótesis específica

- a.** En la estructura B2, que aleaciones del Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) tienen entalpía de formación negativa.
- b.** En la estructura B32, que aleaciones del Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) tienen entalpía de formación negativa.

CAPÍTULO IV

METODOLOGÍA

En esta investigación se utilizó el método **FP-LAPW** en su versión computacional WIEN2k (en el esquema de cálculos de primeros principios).

“Toda investigación se sustenta en una metodología, la cual detalla cómo se realizará la investigación en función del tipo de estudio, diseño de investigación, población, muestra, instrumentos, técnica de recolección de datos y el tipo de tratamiento estadístico para especificar la información sobre las variables de estudio” (Balestrini, 2006, p.126).

4.1 DISEÑO DE LA INVESTIGACIÓN

El diseño de la investigación es “como un plan estructurado de acción que, en función de unos objetivos básicos está orientado a la obtención de información o datos relevantes a los problemas planteados” (Anguera Argilaga et al., 1995, p. 27.)

La investigación básica, su propósito es desarrollar nuevos conocimientos y campos de investigación (Tamayo y Tamayo, 2004).

El diseño de la investigación no experimental es cuando las variables de investigación no son manipuladas, debido a que los hechos se presentan en un ambiente real y en un tiempo definido para que luego sea analizado (Hernández et al., 2014; Palella y Martins, 2012).

El nivel de investigación correlacional determina el grado de relación que existe entre las variables (Arias, 2012; Palella y Martins, 2012).

El presente proyecto de investigación tiene una investigación básica con un diseño no experimental. Además, tiene un nivel de investigación correlacional porque se analizó el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 con la estructura B32 obtenidas por el WIEN2k.

4.2 DESCRIPCIÓN DE LA METODOLOGÍA

El proyecto de investigación analizó el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2, luego en la estructura B32 y por último se comparó el comportamiento de las entalpías de formación de estas dos estructuras (B2, B32) porque son equiatómicas, se aplicó la metodología de los cálculos de primeros principios, utilizando la onda plana aumentada linealizada de potencial completo (**FP-LAPW**) (Wei et al., 1985), en el esquema de la teoría funcional de la densidad (**DFT**) (Kohn y Sham, 1965), con la aproximación de la gradiente generalizada (**GGA**) (Perdew et al., 1999), implementado en la simulación computacional WIEN2k (Blaha et al., 2020).

4.2.1 Cálculo de los primeros principios

Los cálculos de los primeros principios se basan en leyes de mecánica cuántica que no necesitan datos experimentales, solo se necesita saber el número atómico y las posiciones atómicas del elemento o de los elementos que forman el compuesto. Este método resuelve la ecuación de Schrödinger, y permite calcular la energía total mediante la teoría funcional de la densidad, del mismo modo este método proporciona las propiedades (mecánicas y electrónicas) de los sistemas sólidos (Lee, 2016; Carrión, 2013). En la Ecuación 5 se muestra la ecuación de Schrödinger (Gratton, 2003):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (5)$$

Donde $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ es la energía cinética, $V(x)\psi(x)$ es la energía potencial, E es la energía total, $\psi(x)$ es la función de onda.

4.2.1.1 Teoría funcional de la densidad

La ecuación de Schrödinger puede calcular la energía total de los sistemas sólidos que tienen hasta dos electrones, pero el problema es cuando tienen más de dos electrones. Se puede resolver por el método de Hartree-Fock, este método cumple en los átomos y moléculas que están enfocados en su mayoría en área de la química, por lo que se recomienda la teoría funcional de la densidad en los estados sólidos (Cottenier, 2013).

La teoría funcional de la densidad es un procedimiento aproximado a la solución de la ecuación de Schrödinger, donde se realiza una minimización de la funcional de la

energía en relación con la densidad electrónica (Mendoza Flores, 2015). Es un procedimiento alternativo para obtener información de un sistema sólido, permitiendo calcular su energía e incluyendo la correlación electrónica (DOS, Banda de energía) (Carrión, 2013).

La teoría funcional de la densidad está basada en la ecuación de Kohn-Sham, el cual nos da una solución aproximada a la ecuación de Schrödinger, además la funcional relaciona la densidad electrónica y la energía total.

4.2.1.1.1 Teoría de Hohenberg-Kohn

Trata del estado fundamental de un gas de electrones en interacción en un potencial externo ($V(r)$), sobre las limitaciones de los métodos generalizados de Thomas-Fermi, y presenta dos teoremas que dice lo siguiente (Hohenberg y Kohn, 1964):

- a. Teorema I:** la energía del estado fundamental de la ecuación de Schrödinger es la única funcional de la densidad electrónica. Quiere formular que la densidad del estado fundamental está relacionada con el $V(r)$ (Rico Vanegas, 2016; Mendoza Flores, 2015; Sholl y Steckel, 2009).
- b. Teorema II:** la densidad electrónica que minimiza la energía de la funcional general es la verdadera densidad electrónica correspondiente a la solución completa de la ecuación de Schrödinger. Es decir, para hallar la densidad de estado fundamental exacta $N_0(r)$ y la energía $E[n]$, se toma el menor valor en la minimización de la energía $E[n]$ con relación a la variación de la función densidad $N(r)$ (Chelikowsky, 2019; Mendoza Flores, 2015; Sholl y Steckel, 2009).

4.2.1.1.2 Ecuación de Kohn-Sham

A partir de la teoría de Hohenberg y Kohn, se desarrollaron métodos de aproximación para tratar un sistema no homogéneo de electrones en interacción, pero estos métodos son exactos para sistemas de densidad alta o de variación lenta (Kohn y Sham, 1965).

La ecuación de Kohn-Sham define que la densidad electrónica del estado base debe encontrarse en un sistema equivalente no interactuante (Solorio Hernández, 2018; Dovale Farelo, 2018). El funcional de energía de Kohn-Sham (E_{KS}) se expresa en la Ecuación 6 (Cottenier, 2013):

$$E_{KS}[\rho] = E_{EK}[\rho] + E_H[\rho] + E_{EXT}[\rho] + E_{XC}[\rho] \quad (6)$$

Donde $[\rho]$ es la densidad electrónica, $E_{KS}[\rho]$ es el funcional de energía de Kohn-Sham, $E_{EK}[\rho]$ es el funcional de energía cinética de los electrones en el sistema no interactuante, $E_H[\rho]$ es la funcional de energía generada por la repulsión de Coulomb de los electrones (Energía de Hartree), $E_{EXT}[\rho]$ es la funcional de energía de interacción ion-electrón, $E_{XC}[\rho]$ es el funcional de energía de intercambio-correlación.

Para resolver la ecuación de Kohn-Sham, se necesita la energía de intercambio y correlación $E_{XC}[\rho]$, se puede aplicar: la aproximación de la densidad local (**LDA**) (Perdew y Wang, 1992), la aproximación de la gradiente generalizada (**GGA**) (Perdew et al., 1999). En este proyecto de investigación se aplicó el **GGA-PBE** (Perdew et al., 1996).

Con este formalismo se basan varios métodos tales como VASP, que es un software que se tiene que adquirir la licencia para poder utilizar. Pero en el Perú no hay grupos de investigación que utilicen ese software, porque su costo es 10 veces más que la licencia del WIEN2k. También existe otro método que recientemente está siendo utilizado (15 años) que se conoce como Quantum Espresso, este software es utilizado por un grupo de investigación de la Universidad Nacional de Ingeniería (UNI) y es libre.

4.2.2 El GGA

La aproximación de la gradiente generalizada (**GGA**), es una funcional semi-local, considera la densidad y la variación de la densidad alrededor de cada punto (Morgade, 2015); se expresa en la Ecuación 7 (Perdew et al., 1996):

$$E_{XC}^{GGA}[n, \nabla n] = \int n(\vec{r}) F_{xc}(n(\vec{r}), \nabla n(\vec{r})) d\vec{r} \quad (7)$$

Donde E_{XC}^{GGA} es la energía E_{XC} resuelta por el GGA, F_{xc} es el factor de mejora, $n(\vec{r})$ es la densidad local, $\nabla n(\vec{r})$ es la variación de la densidad.

4.2.3 Método FP-LAPW

Es un método de onda plana aumentada linealizada de potencial completo (**FP-LAPW**), que revuelve la ecuación de Kohn-Sham donde la densidad de estado y la energía total encajan especialmente en una base adaptada al problema (Blaha et al., 2020). Esta aplicación se logra dividiendo la región intersticial y la celda unitaria en las esferas atómicas, porque permite calcular cualquier compuesto o sistema sólido (Otero

de la Roza y Luaña, 2009). En las Ecuaciones 8 y 9 definen la celda unitaria en las esferas atómicas y la región intersticial, en la Figura 7 se muestra la celda unitaria en las esferas atómicas y la región intersticial (Blaha et al., 2020).

a. La celda unitaria en las esferas atómicas (I), está dado por la Ecuación 8:

$$\phi(\vec{r})_{lm}^{lo} = \sum_{l,m} [A_{lm}U_l(E_{l,1}, \vec{r}) + B_{lm}\dot{U}_l(E_{l,1}, \vec{r})]Y_{lm}(\vec{r}), r \in S_\alpha \quad (8)$$

Donde $\phi(\vec{r})_{lm}^{lo}$ es la función de onda del orbital local, A_{lm} , B_{lm} son los coeficientes de expansión, Y_{lm} es el armónico esférico, \dot{U}_l es la solución de la ecuación de Schrödinger radial para la energía $E_{l,1}$, $\dot{U}_l(E_{l,1}, \vec{r})$ es la derivada con respecto a $U_l(E_{l,1}, \vec{r})$ evaluado en el valor E_l .

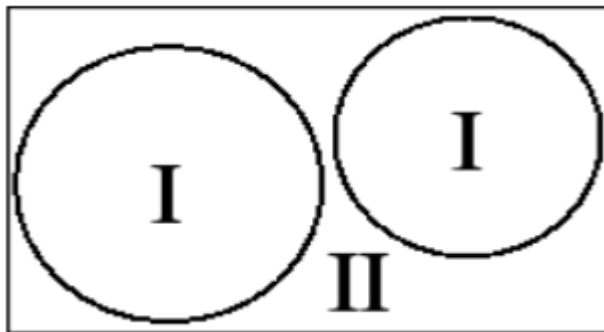
b. En la región intersticial (II), está dado por la Ecuación 9:

$$\phi_{k_n} = \frac{1}{\sqrt{V_{cel}}} e^{i(k_n)r}, r \in I \quad (9)$$

Donde $K_n = K+K_n$ son los vectores de la red recíproca, K es un vector de la primera Irreducible Zona de Brillouin (IBZ), V_{cel} es el volumen de la celda.

Figura 7

La celda unitaria en las esferas atómicas (I) y la región intersticial (II)



Fuente: (Blaha et al., 2020, p.2)

4.2.4 El código computacional WIEN2k

Son códigos computacionales (*ifort compiler + mkl-library, o gfortran + openblas*) que realiza cálculos de estructura electrónica de sólidos, utilizando la teoría funcional de la densidad, basados en el método de onda plana aumentada linealizada de potencial para resolver la ecuación de Kohn-Sham, y es uno de los esquemas más precisos para cálculos

de estructura de bandas (Blaha et al., 2020). Calcula la energía total, propiedades estructurales, magnetismo, módulo de compresibilidad, densidad de estado, parámetro de red (Valencia Giraldo, 2012).

Se ejecuta en la plataforma Linux, su lenguaje de programación es el Fortran 90 (Blaha et al., 2020). El usuario proporciona al programa el número atómico y las posiciones atómicas del elemento o de los elementos que conforman el sistema para iniciar el cálculo.

4.3 POBLACIÓN Y MUESTRA

La población es un conjunto de elementos finitos o infinitos que tienen características en común o no, y que solo será válida en las conclusiones obtenidas en la investigación (Arias, 2012; Balestrini, 2006).

Si la población es pequeña y finita, es decir menos de 100 elementos, no será necesario tener una muestra, porque la población resulta accesible al investigador (Arias, 2012; Tamayo y Tamayo, 2004; Balestrini, 2006).

En el proyecto de investigación se tuvieron las aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en las estructuras B2 y B32, adicionalmente se estudió los elementos en su estado fundamental (Ni, Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta). La suma de estos tres sistemas (B2, B32 y los elementos en su estado fundamental) son un total de 25 sistemas sólidos. La presente investigación no requiere de procesamiento estadístico de datos, debido a su diseño de investigación. Un trabajo de investigación similar con esta misma metodología lo realizó Mendoza Flores en el 2015.

4.4 TÉCNICA DE RECOLECCIÓN DE DATOS

La técnica de recolección de datos es, un procedimiento que nos permite obtener información, para dar respuesta de la pregunta de investigación planteada por el investigador (Arias, 2012; Hurtado de Barrera, 2000). La observación como técnica es el estudio de cualquier hecho o fenómeno que le ocurra al objeto estudiado, por medio de la visualización del investigador (Sierra Bravo, 1997; Arias, 2012).

La investigación “Comparación de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 con la estructura B32 obtenidas por medio de cálculos de primeros principios, realizado en la UNTELS”, se ha utilizado la técnica de la observación.

4.5 INSTRUMENTOS DE RECOLECCIÓN DE DATOS

Los instrumentos de recolección de datos hacen que el investigador tome cualquier recurso para poder obtener, registrar o almacenar información de la investigación (Arias, 2012; Baena Paz, 2017; Sabino, 1992). Los instrumentos electrónicos son otro tipo de instrumento en la cual son útiles para almacenar o registrar alguna información de datos (Hernández et., 2014).

La investigación “Comparación de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 con la estructura B32 obtenidas por medio de cálculos de primeros principios, ejecutado en la UNTELS”, se ha empleado como instrumento de investigación el servidor de la UNTELS, donde se instaló el WIEN2k para realizar los cálculos computacionales.

4.5.1 Validez

La validez es el grado en que un instrumento mide realmente lo que quiere medir (Hernández et., 2014; Palella y Martins, 2012; Hurtado de Barrera, 2000). La validez de contenido se relaciona al proceso de construcción del instrumento y a la medición del dominio de áreas posibles en las que se expresa el evento (Hurtado de Barrera, 2000).

4.5.1.1 Cálculo en el WIEN2k

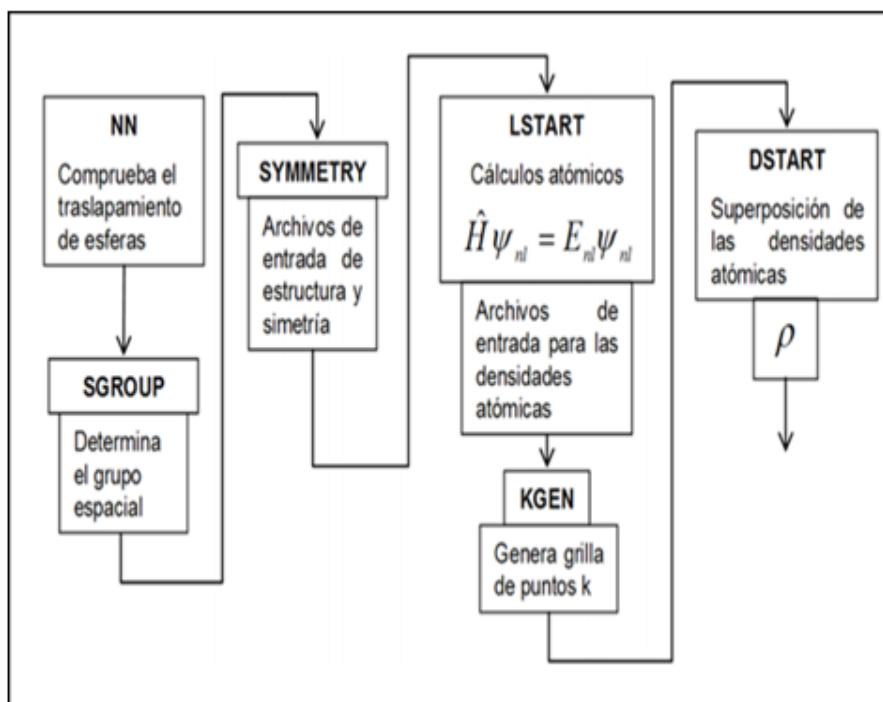
El código computacional WIEN2k ejecuta dos procesos básicos, el primero es el ciclo de inicialización y el segundo es el SCF o también llamado ciclo de autoconsistencia.

4.5.1.1.1 Ciclo de inicialización

Se inicia con el cálculo de la densidad electrónica como una superposición de las densidades de los átomos aislados. Está integrado por la colección de programas que se observa en la Figura 8 (Blaha et al., 2019).

Figura 8

Diagrama de Flujo del Ciclo de Inicialización



Fuente: (Blaha et al., 2019, p.44)

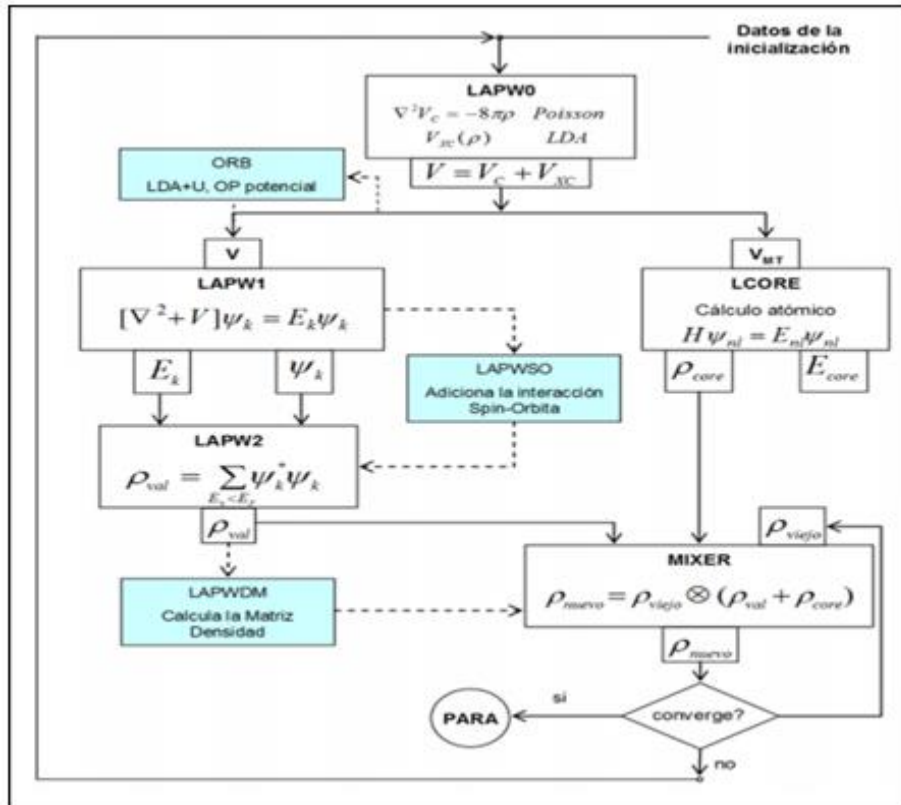
- a. NN: determina las distancias entre los átomos, además verifica si las esferas están superpuestas, si existiera el caso emitirá un mensaje de error.
- b. SGROUP: comprueba la estructura y determina el grupo espacial.
- c. SIMETRÍA: encuentra las operaciones de simetría del grupo espacial, y la simetría del grupo de puntos de cada átomo.
- d. LSTART: resuelve la ecuación radial de Dirac para átomos libres y crea densidades atómicas. Selecciona automáticamente los estados de semi núcleo y escribe los parámetros de la energía de corte.
- e. KGEN: genera los puntos K dado por el usuario y forma una malla K equidistante.
- f. DSTART: superpone las densidades atómicas y crea la densidad inicial para el ciclo SCF.

4.5.1.1.2 Ciclo de autoconsistencia

Este ciclo evalúa la convergencia de la energía, carga y fuerzas internas para el spin polarizado. El ciclo ejecuta cinco subprogramas ejecutándose cíclicamente y esto se observa en la Figura 9 el ciclo de autoconsistencia (Blaha et al., 2019).

Figura 9

Diagrama de Flujo del Ciclo de autoconsistencia



Fuente: (Blaha et al., 2019, p.44)

- a. LAPW0: calcula el potencial de Coulomb y el funcional de intercambio-correlación (XC) a partir de la densidad.
- b. LAPW1: calcula los autovalores y autovectores de valencia y semi-núcleo en todos los puntos K solicitados.
- c. LAPW2: calcula la densidad de electrones de valencia.
- d. LCore: calcula los valores propios del núcleo y la densidad del núcleo.
- e. MIXER: suma las densidades de núcleo y valencia, y mezcla la densidad total con las densidades de iteraciones anteriores.

En esta presente investigación los cálculos de autoconsistencia convergen cuando la diferencia de carga es de 0.00001 Ry.

4.5.2 Confiabilidad

El instrumento es confiable cuando se le aplica reiterativamente el instrumento a la unidad de estudio, los resultados obtenidos son aproximadamente iguales (Hernández et al., 2014; Palella y Martins, 2012; Hurtado de Barrera, 2000).

Para que los resultados del proyecto de investigación tengan una confiabilidad por medio del código computacional WIEN2k, se realizó tres procesos de convergencia el RK_{max} , L_{max} , los Puntos K; para obtener correctamente la minimización de la energía total, para ello se seleccionó al Vanadio (V) entre los 25 sistemas estudiados.

4.5.2.1 Convergencia del RK_{max}

Es el producto del radio de la esfera multiplicado por el vector K (Mendoza, 2019; Espitia-Rico y Díaz-Forero, 2016), está expresado por la Ecuación 10:

$$RK_{max} = R_{rmt} \times K_{max} \quad (10)$$

Donde R_{rmt} es el menor radio de la esfera atómica, K_{max} es la mayor longitud del vector K que se otorga para las ondas planas de la región intersticial, el RK_{max} puede tomar valores de 6 hasta 11, cuanto mayor es su valor mayor es el tiempo computacional (se muestra en el ANEXO 2).

Para obtener la convergencia del RK_{max} del Vanadio (sexta columna) como se observa en la Tabla 4, primero se tiene que fijar el $L_{max} = 6$, los puntos K = 1000 y el RK_{max} varía entre un rango de 6-11, donde converge con $RK_{max} = 10$ y con una energía total de -1898.64870 Ry. En la Figura 10 se observa la gráfica de convergencia entre la energía total y el RK_{max} .

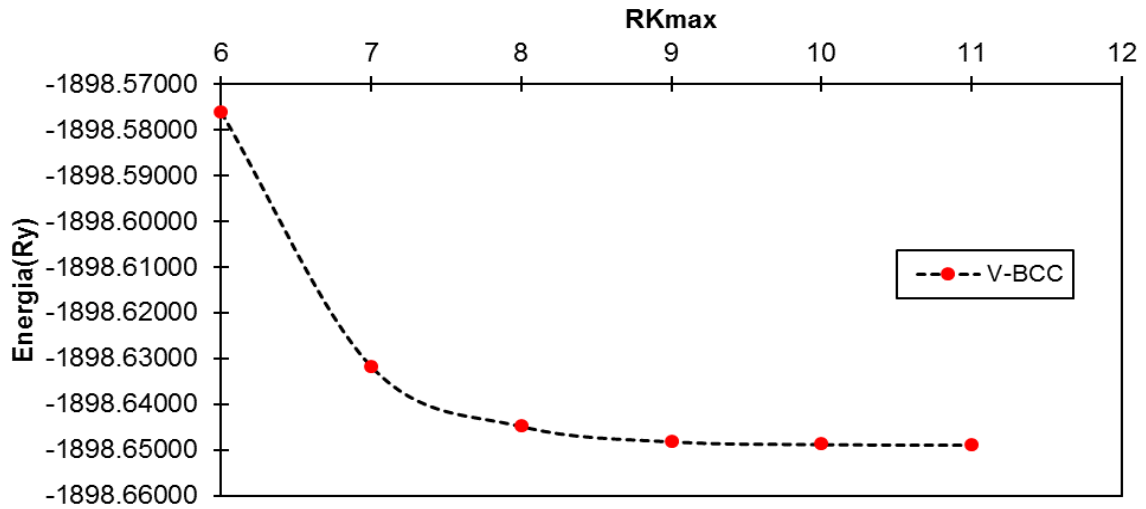
Tabla 4

Resultados de la Energía total vs RK_{max} del Vanadio

Energía Total (Ry)	-1898.57608	-1898.63166	-1898.64474	-1898.64809	-1898.64870	-1898.64883
RK_{max}	6	7	8	9	10	11
L_{max}	6	6	6	6	6	6
Puntos K	1000	1000	1000	1000	1000	1000

Figura 10

Gráfica de la Energía Total vs RK_{max} del Vanadio



Nota: con el WIEN2k se obtuvo la energía total (como se observa en la primera fila de la Tabla 4), con estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 10).

4.5.2.2 Convergencia del L_{max}

Dentro de las esferas atómicas la densidad de carga y los potenciales se expande en armónicos esféricos hasta llegar a un L_{max} (Espitia-Rico y Díaz-Forero, 2016), el L_{max} puede tomar valores de 6 hasta 11, cuanto mayor es su valor mayor es el tiempo computacional (se muestra en el ANEXO 2).

Para obtener la convergencia del L_{max} del Vanadio (sexta columna) como se observa en la Tabla 5, ya obtenido el valor convergido del $RK_{max} = 10$, se continúa fijando los puntos $K = 1000$ y el L_{max} varía entre un rango de 6-11, donde converge con $L_{max} = 10$ y con una energía total de -1898.64846 Ry. En la Figura 11 se observa la gráfica de convergencia entre la energía total y el L_{max} .

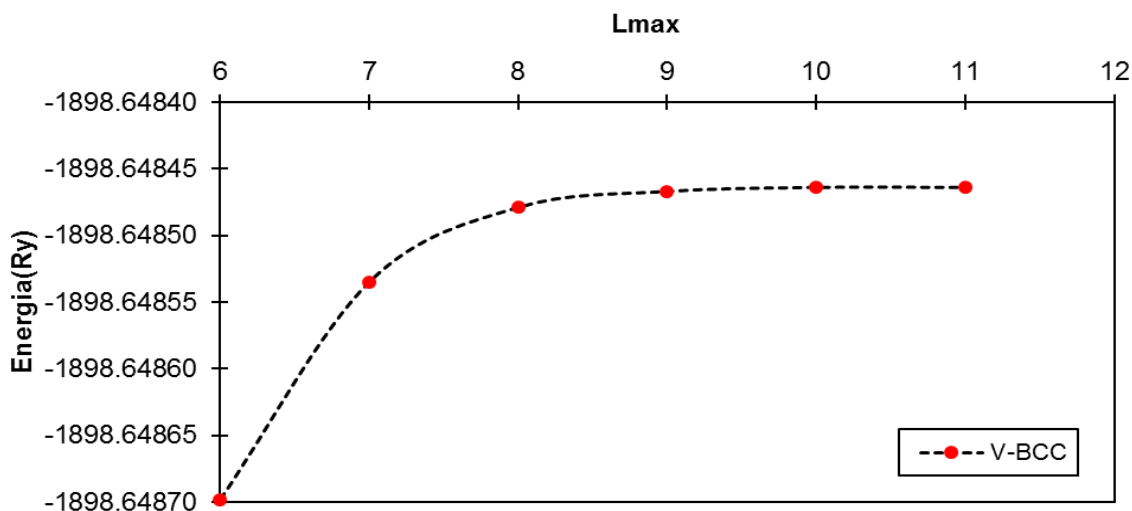
Tabla 5

Resultados de la Energía total vs L_{max} del Vanadio

Energía Total (Ry)	6	7	8	9	10	11
Energía Total (Ry)	-1898.64870	-1898.64854	-1898.64848	-1898.64847	-1898.64846	-1898.64846
L_{max}	6	7	8	9	10	11
RK_{max}	10	10	10	10	10	10
Puntos K	1000	1000	1000	1000	1000	1000

Figura 11

Gráfica de la Energía Total vs L_{\max} del Vanadio



Nota: con el WIEN2k se obtuvo la energía total (como se observa en la primera fila de la Tabla 5), con estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 11).

4.5.2.3 Convergencia de los Puntos K

El programa WIEN2k nos pide cuantos puntos K se tiene que utilizar. Se debe estudiar cómo cambia la energía total con respecto a los puntos K hasta que se observe que la energía total y los puntos K convergen (Mendoza, 2019). Los puntos K puede tomar valores de 1000 hasta 15000, cuanto mayor es su valor mayor es su tiempo computacional (se muestra en el ANEXO 2).

Para obtener la convergencia de los puntos K del Vanadio (quinta columna) como se observa en la Tabla 6, ya obtenidos los valores convergidos del $RK_{\max} = 10$ y del $L_{\max} = 10$, ahora queda variar los puntos K entre un rango de 1000-15000, donde converge los puntos K = 10000 y con una energía total de -1898.64804 Ry. En la Figura 12 se observa la gráfica de convergencia entre la energía total y los Puntos K.

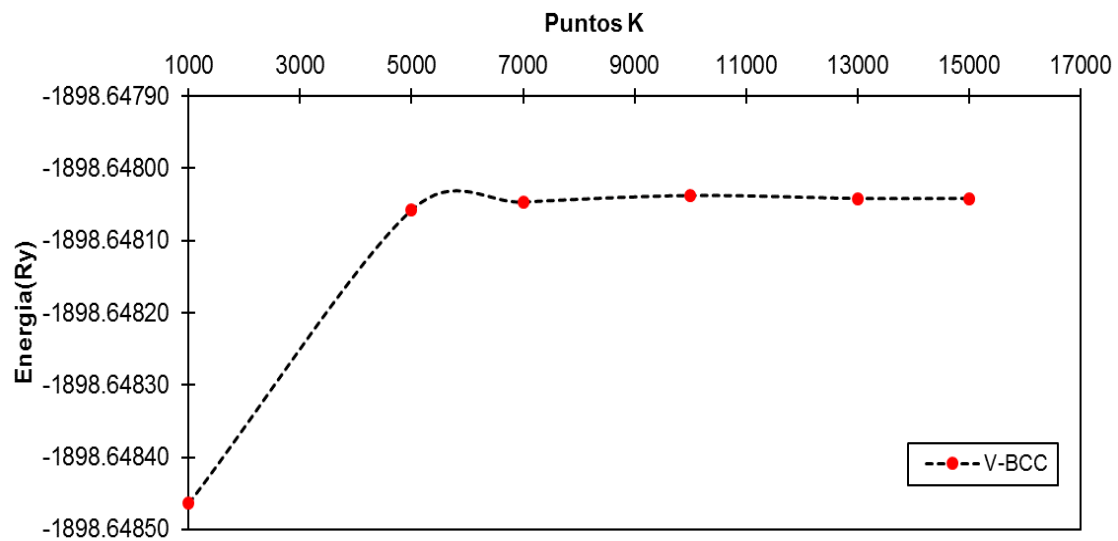
Tabla 6

Resultados de la Energía Total vs Puntos K del Vanadio

Energía Total (Ry)	1000	5000	7000	10000	13000	15000
Energía Total (Ry)	-1898.64846	-1898.64806	-1898.64805	-1898.64804	-1898.64804	-1898.64804
Puntos K	1000	5000	7000	10000	13000	15000
L_{\max}	10	10	10	10	10	10
RK_{\max}	10	10	10	10	10	10

Figura 12

Gráfica de la Energía Total vs los Puntos K del Vanadio



Nota: con el WIEN2k se obtuvo la energía total (como se observa en la primera fila de la Tabla 6), con estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 12).

Finalmente, ahora para trabajar cualquier sistema se utiliza los parámetros indicados con sus valores convergidos y que son:

- $RK_{\max} = 10$
- $L_{\max} = 10$
- Puntos K = 10000

CAPÍTULO V

RESULTADOS

En los siguientes incisos se muestran los resultados obtenidos, definidos con los parámetros $L_{\max} = 10$, $RK_{\max} = 10$, puntos K = 10000 y con una diferencia de carga de 0.00001 Ry, mediante simulación computación el cual se obtuvo las propiedades electrónicas (parámetro de red y momento magnético) y mecánicas (módulo de compresibilidad y la entalpía de formación). En el inciso de las propiedades electrónicas se muestran los resultados bajo el siguiente orden, los elementos en sus estados fundamentales, la estructura B2 y la estructura B32, de igual manera en el inciso de las propiedades mecánicas.

5.1 PROPIEDADES ELECTRÓNICAS

I. Parámetro de red

a. Elementos en sus estados fundamentales

En la segunda columna de la Tabla 7 se muestra los resultados obtenidos por el WIEN2k, en la tercera columna de la Tabla 7 se muestra los resultados experimentales existentes en la literatura (la cita del autor se encuentra debajo de la Tabla 7) y en la cuarta columna de la Tabla 7 se muestra el margen de error entre los resultados obtenidos por el WIEN2k con los experimentales. Con el WIEN2k para el Al se obtuvo un parámetro de red de 4.04 Å, su resultado experimental es de 4.05 Å por lo que haciendo una comparación entre el resultado teórico y experimental se obtiene un error de 0.25%, del mismo modo es para los restantes elementos, agregando que el Zr y el Hf por ser elementos hexagonales constan de dos valores (el Zr tiene 3,24 Å (eje X) y 5.17 Å (eje Z), el Hf tiene 3.21 Å (eje X) y 5.08 Å (eje Z)), se puede observar que el margen de error de los elementos en sus estados

fundamentales no supera el 1.5%. Con estas comparaciones podemos indicar que los resultados obtenidos por simulación computacional reproducen los valores experimentales con un error no mayor que el 1.5%.

Tabla 7

Parámetro de red por el WIEN2k, experimental (existente en la literatura) y el margen de error de los elementos en sus estados fundamentales

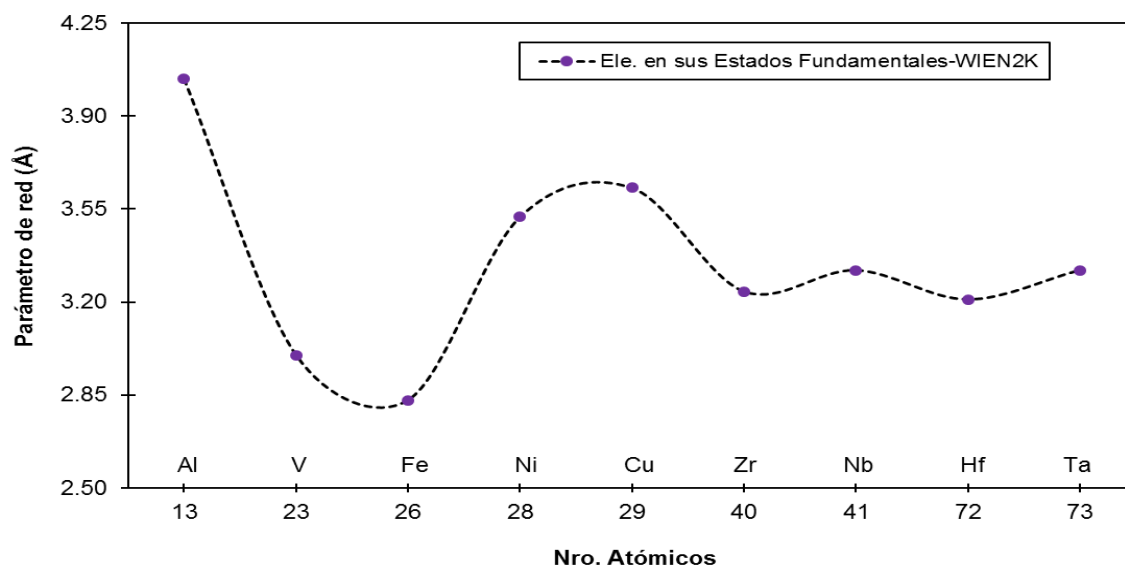
Elementos	a_0 (Å)	a_0 (Å) (exp)	Error (%)
Al	4.04	4.05	0.25
V	3.00	3.03	1.00
Fe	2.83	2.87	1.41
Ni	3.52	3.52	0.00
Cu	3.63	3.61	0.55
Zr	3.24	3.23	0.30
	5.17	5.15	0.38
Nb	3.32	3.30	0.60
Hf	3.21	3.19	0.62
	5.08	5.05	0.59
Ta	3.32	3.30	0.60

a_0 (Å)(exp). (Kittel, 2003, p.28)

- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 7 (segunda columna) se obtiene la Figura 13 el cual se observa el comportamiento ondulatorio del parámetro de red obtenido por el WIEN2k de los nueve elementos en sus estados fundamentales, acotando en el caso de Zr y Hf se utilizó el valor del eje X.
- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 7 (tercera columna) se obtiene la Figura 14 el cual se observa el comportamiento ondulatorio del parámetro de red experimental (existente en la literatura) de los nueve elementos en sus estados fundamentales el cual se elaboró con fin de utilizarlo en el siguiente punto, acotando en el caso de Zr y Hf se utilizó el valor del eje X.
- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 7 (segunda y tercera columna) se obtiene la Figura 15 donde se observa que no tiene mucha diferencia su comportamiento (ondulatorio) obtenidos por el WIEN2k con respecto a la parte experimental de los nueve elementos en sus estados fundamentales.

Figura 13

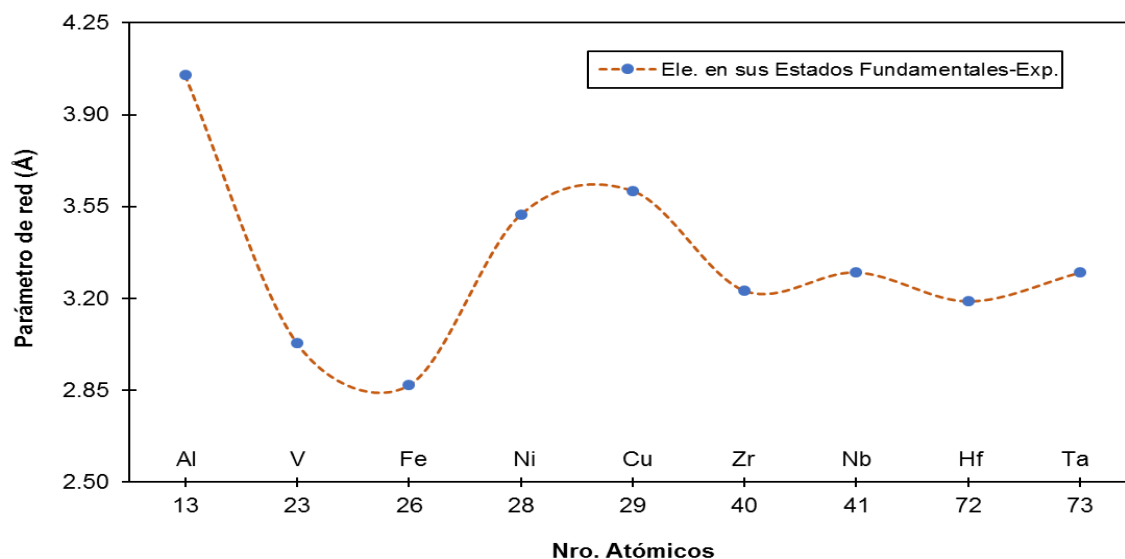
Parámetro de red de los elementos en sus estados fundamentales-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



Nota: con el WIEN2k se obtuvo el parámetro de red (como se observa en la segunda columna de la Tabla 7), estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 13).

Figura 14

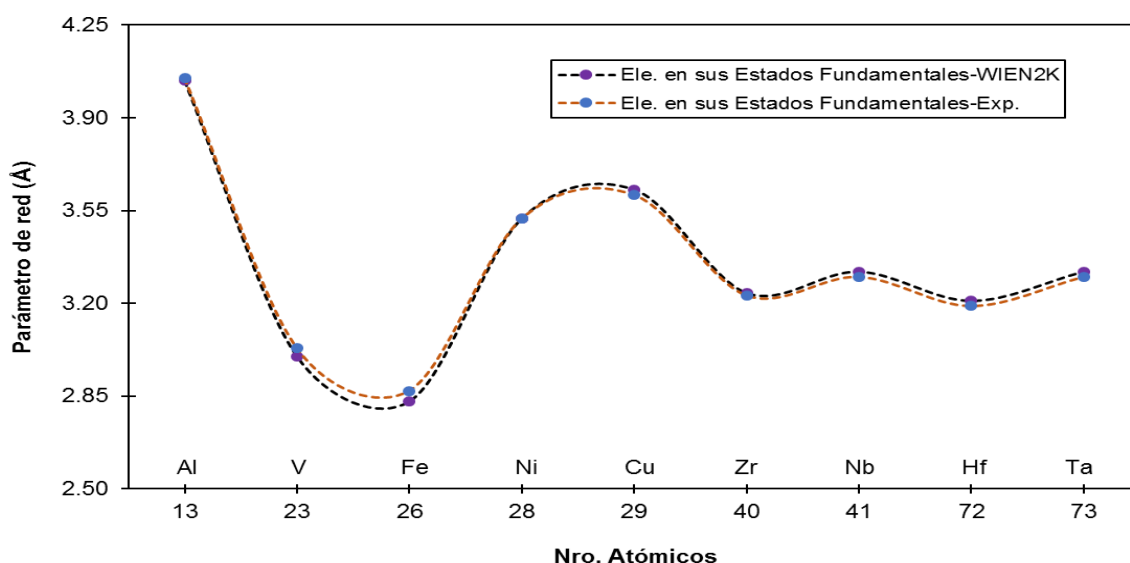
Parámetro de red de los elementos en sus estados fundamentales-Experimental según sus números atómicos



Nota: resultados existentes en la literatura de los parámetros de red (como se observa en la tercera columna de la Tabla 7), estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 14).

Figura 15

Parámetro de red de los elementos en sus estados fundamentales-obtenidos con el WIEN2k y la parte Experimental (literatura existente) según sus números atómicos



Nota: los parámetros de red existentes en la literatura y de los obtenidos del WIEN2k (como se observa en la segunda y tercera columna de la Tabla 7), se juntó la Figura 13 y 14 como se observa en la Figura 15.

b. Estructura B2

En la segunda columna de la Tabla 8 se muestra los resultados obtenidos por el WIEN2k, en este caso solo se encontró el resultado experimental existente en la literatura del compuesto NiAl, de los siete compuestos restantes aún no se tienen resultados experimentales existentes en la literatura. Con el WIEN2k para el NiAl obtuvo un parámetro de red de 2.9 Å y su resultado experimental es de 2.88 Å (Kittel, 2003, p.21) por lo que su margen de error es de 0.68%, el cual no supera el 1% de margen de error. Con esta comparación podemos indicar que el resultado obtenido por simulación computacional reproduce el valor experimental con un error no mayor al 1%.

Tabla 8

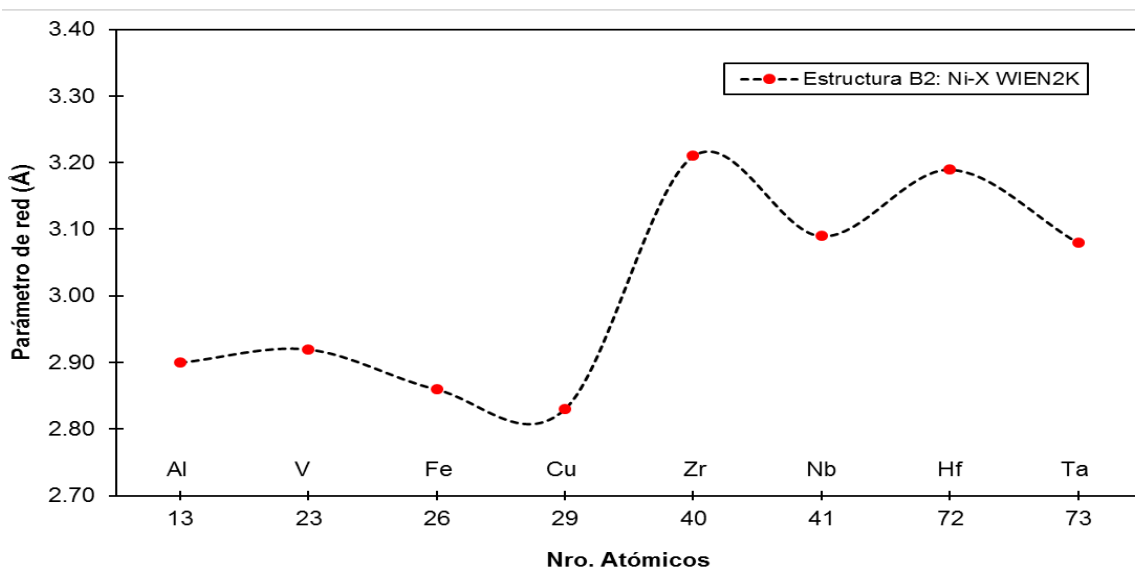
Parámetro de red de los compuestos en la estructura B2 obtenidos por el WIEN2k

Compuestos	a_0 (Å)
NiAl	2.90
NiV	2.92
NiFe	2.86
NiCu	2.83
NiZr	3.21
NiNb	3.09
NiHf	3.19
NiTa	3.08

- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 8 (segunda columna) se obtiene la Figura 16 el cual se observa el comportamiento ondulatorio del parámetro de red obtenido por el WIEN2k de los ocho compuestos en la estructura B2. Además, se puede observar el salto que existe entre el Cu y el Zr porque se encuentran en periodos distintos (Cu está en el periodo 4, y el Zr está en el periodo 5).

Figura 16

Parámetro de red de los compuestos en la estructura B2 - obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



Nota: con el WIEN2k se obtuvo el parámetro de red (como se observa en la segunda columna de la Tabla 8), estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 16).

c. Estructura B32

En segunda columna de la Tabla 9 se muestra los resultados obtenidos por el WIEN2k, en este caso no se encontró los resultados experimentales existentes en la literatura de los ocho compuestos.

Tabla 9

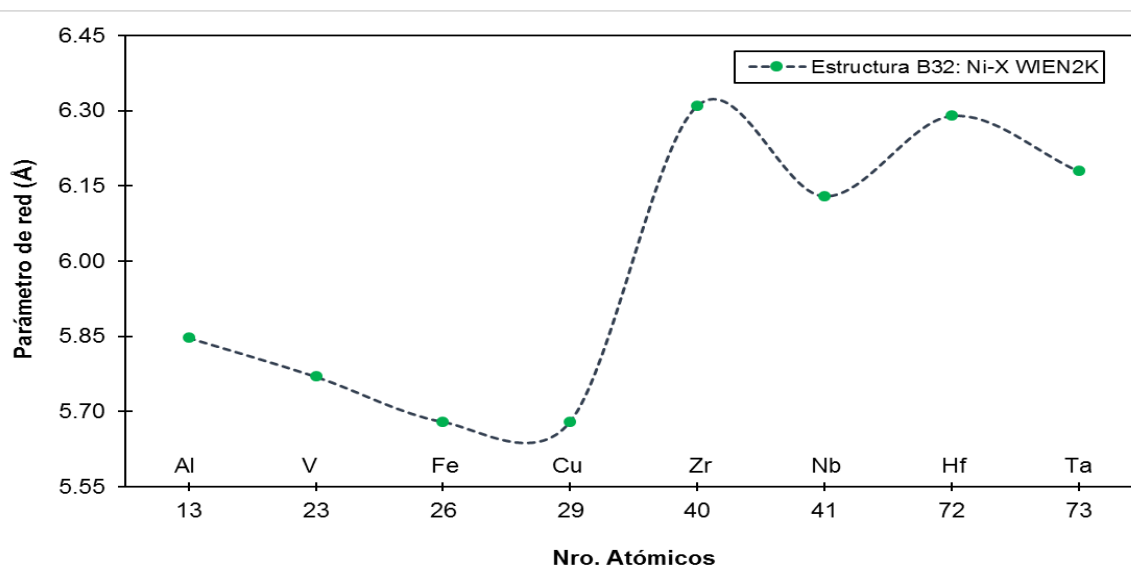
Parámetro de red de los compuestos en la estructura B32 obtenidos por el WIEN2k

Compuestos	a_0 (Å)
NiAl	5.85
NiV	5.77
NiFe	5.68
NiCu	5.68
NiZr	6.31
NiNb	6.13
NiHf	6.29
NiTa	6.18

- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 9 (segunda columna) se obtiene la Figura 17 el cual se observa el comportamiento ondulatorio del parámetro de red obtenido por el WIEN2k de los ocho compuestos en la estructura B32. Además, se puede observar el salto que existe entre el Cu y el Zr porque se encuentran en periodos distintos (Cu está en el periodo 4, y el Zr está en el periodo 5).

Figura 17

Parámetro de red de los compuestos en la estructura B32- obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



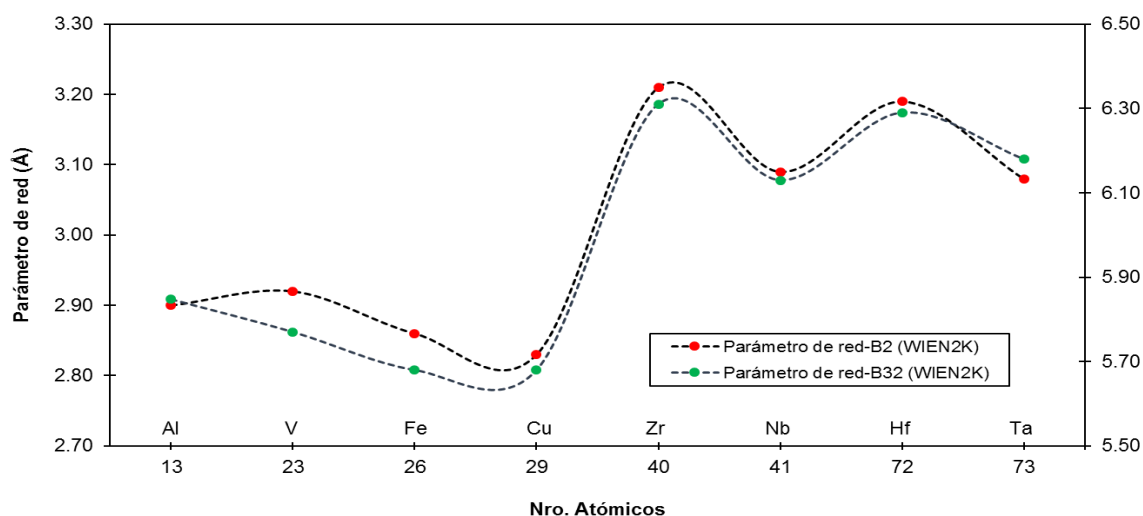
Nota: con el WIEN2k se obtuvo el parámetro de red (como se observa en la segunda columna de la Tabla 9), con estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 17).

d. Estructura B2 y B32

Mediante los resultados mostrados en la Tabla 8 y Tabla 9 (de la segunda columna) se obtiene la Figura 18 donde se observa que no se tiene mucha diferencia su comportamiento ondulatorio entre la estructura B2 y B32, pero su diferencia se encuentra en sus magnitudes del parámetro de red, debido a que en la estructura B2 el rango varía entre 2.70 a 3.30 Å, y en la estructura B32 es de 5.50 a 6.50 Å.

Figura 18

Parámetro de red de las estructuras B2 y B32-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



Nota: los parámetros de red de las estructuras B2 y B32 obtenidos por el WIEN2k (como se observa en la segunda de las Tablas 8 y 9), se juntó la Figura 16 y 17 como se observa en la Figura 18.

II. Momento magnético

a. Elementos en sus estados fundamentales

En la segunda columna de la Tabla 10 se muestra los resultados obtenidos por el WIEN2k, en este caso solo se encontró los resultados experimentales existentes en la literatura del Ni y Cu, de los siete elementos restantes aún no se tienen resultados experimentales existentes en la literatura. Con el WIEN2k el momento magnético del Ni obtuvo un valor de 0.63μ y para el Fe un valor de 2.16μ ; y sus resultados experimentales son los siguientes, del Ni es de 0.60μ (Kitel, 2003, p.512) y del Fe es de 2.2μ (Kitel., 2003, p.512).

Tabla 10

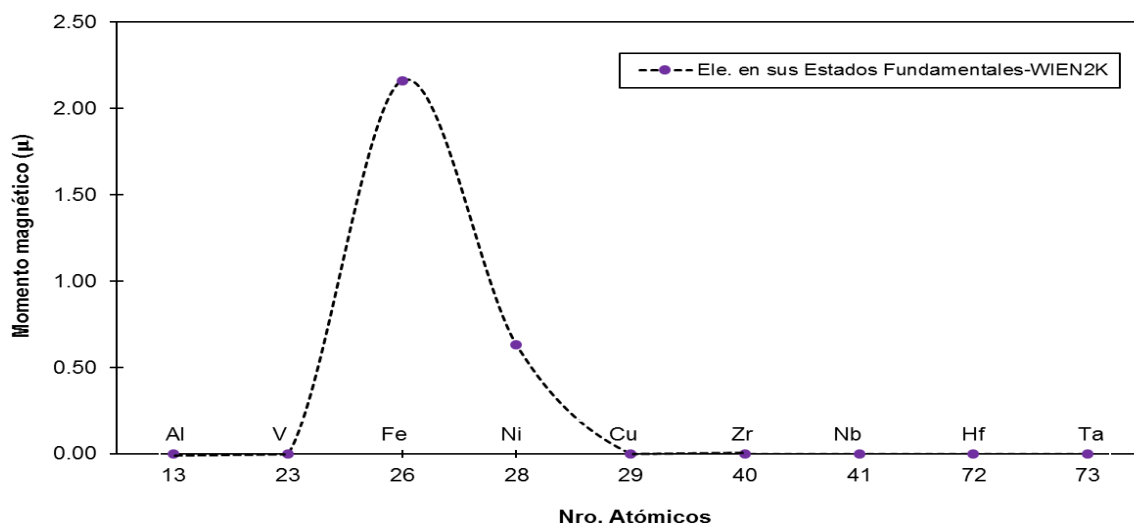
Momento magnético de los elementos en sus estados fundamentales obtenidos por el WIEN2k

Elementos	μ (Bor)
Al	-0
V	-0
Fe	2.16
Ni	0.63
Cu	-0
Zr	0
Nb	0
Hf	0
Ta	-0

- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 10 (segunda columna) se obtiene la Figura 19 el cual se observa que tiene un comportamiento semejante a la función Gaussiana el momento magnético obtenido por el WIEN2k de los elementos en sus estados fundamentales.

Figura 19

Momento magnético de los elementos en sus estados fundamentales-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



Nota: con el WIEN2k se obtuvo momento magnético (como se observa en la segunda columna de la Tabla 10), estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 19).

b. Estructura B2

En la segunda columna de la Tabla 11 se muestra los resultados obtenidos por el WIEN2k, en este caso no se encontró los resultados experimentales existentes en la literatura de los ocho compuestos.

Tabla 11

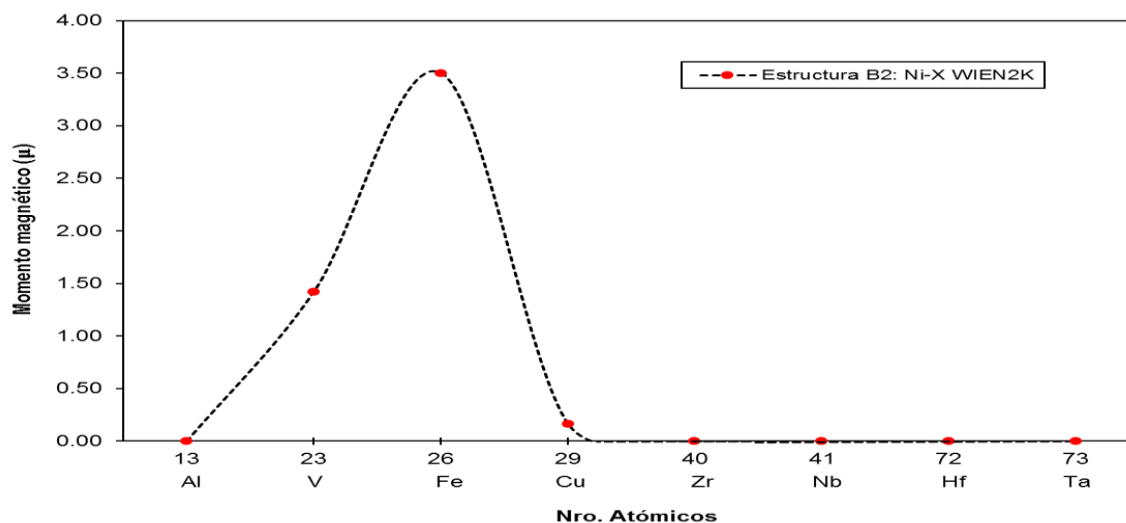
Momento magnético de los compuestos en la estructura B2 obtenidos por el WIEN2k

Compuestos	μ (Bor)
NiAl	0
NiV	1.42
NiFe	3.50
NiCu	0.16
NiZr	-0
NiNb	-0
NiHf	-0
NiTa	-0

- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 11 (segunda columna) se obtiene la Figura 20 el cual se observa que tiene un comportamiento semejante a la función Gaussiana el momento magnético obtenido por el WIEN2k de los ocho compuestos en la estructura B2.

Figura 20

Momento magnético de los compuestos en la estructura B2-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



Nota: con el WIEN2k se obtuvo momento magnético (como se observa en la segunda columna de la Tabla 11), con estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 20).

c. Estructura B32

En la segunda columna de la Tabla 12 se muestra los resultados obtenidos por el WIEN2k, en este caso no se encontró los resultados experimentales existentes en la literatura de los ocho compuestos.

Tabla 12

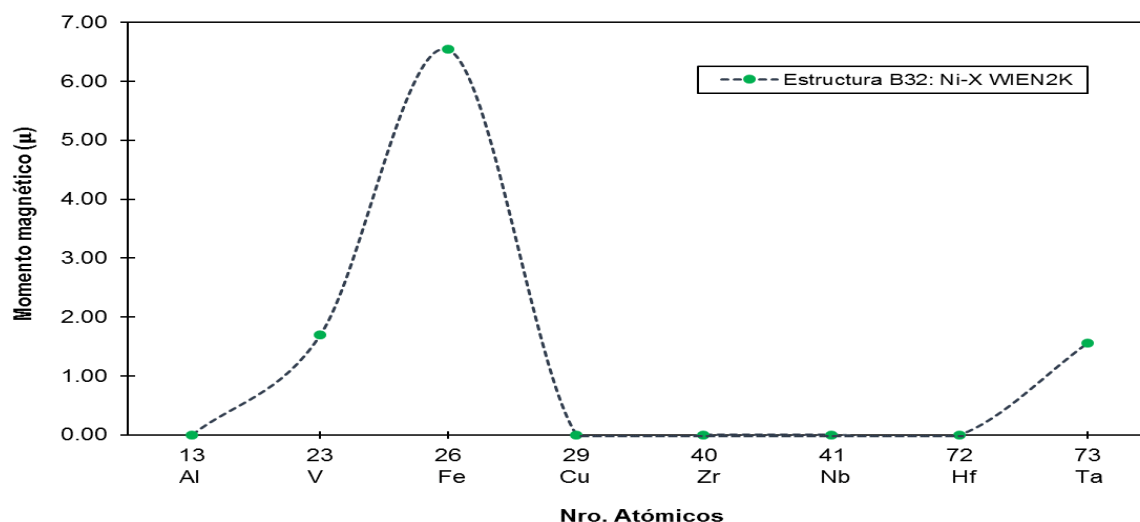
Momento magnético de los compuestos en la estructura B32 obtenidos por el WIEN2k

Compuestos	μ (Bor)
NiAl	-0
NiV	1.69
NiFe	6.54
NiCu	0
NiZr	-0
NiNb	0
NiHf	-0
NiTa	1.56

- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 12 (segunda columna) se obtiene la Figura 21 el cual se observa que tiene un comportamiento semejante a la función Gaussiana el momento magnético obtenido por el WIEN2k de los ocho compuestos en la estructura B32.

Figura 21

Momento magnético de los compuestos en la estructura B32- obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



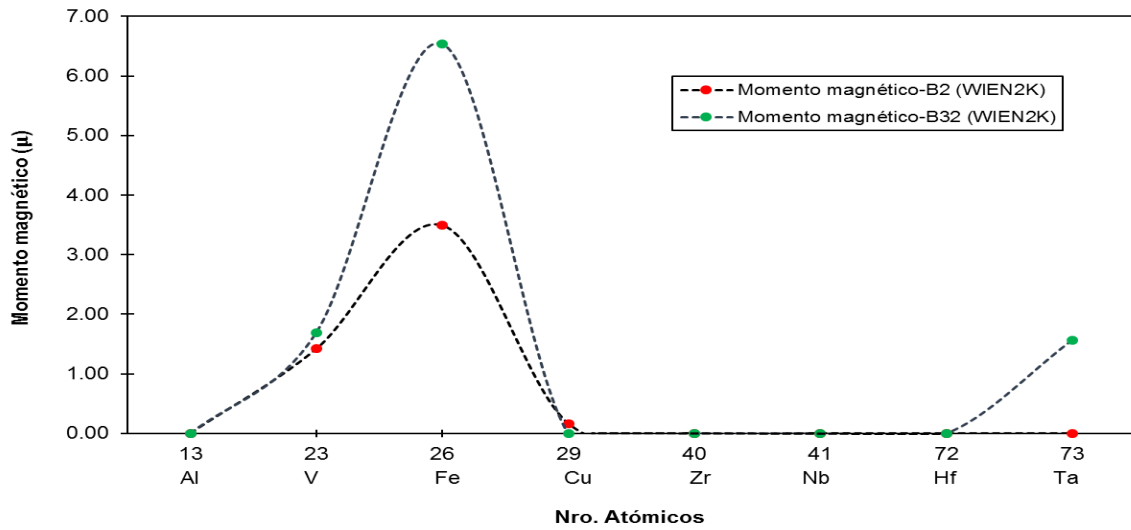
Nota: con el WIEN2k se obtuvo momento magnético (como se observa en la segunda columna de la Tabla 12), con estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 21).

d. Estructura B2 y B32

Mediante los resultados mostrados en la Tabla 11 y Tabla 12 (de la segunda columna) se obtiene la Figura 22 donde se observa que no se tiene mucha diferencia su comportamiento entre las estructuras B2 y B32, pero en donde se resalta son en el NiFe-B2 con un valor de 3.50 μ , NiFe-B32 con un valor de 6.54 μ ; NiTa-B2 con un valor de -0 μ , NiTa-B32 con un valor de 1.56 μ .

Figura 22

Momento magnético de las estructuras B2 y B32-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



Nota: momento magnético de las estructuras B2 y B32 obtenidos por el WIEN2k (como se observa en la segunda de las Tablas 11 y 12), se juntó la Figura 20 y 21 como se observa en la Figura 22.

5.2 PROPIEDADES MECÁNICAS

I. Módulo de compresibilidad

a. Elementos en sus estados fundamentales

En la segunda columna de la Tabla 13 se muestra los resultados obtenidos por el WIEN2k, en la tercera columna de la Tabla 13 se muestra los resultados experimentales existentes en la literatura (la cita del autor se encuentra debajo de la Tabla 13) y en la cuarta columna de la Tabla 13 se muestra el margen de error entre los resultados teóricos con los experimentales. Con el WIEN2k para el Al se obtuvo un módulo de compresibilidad de 77.05 GPa, su resultado experimental es de 72.20 GPa por lo que haciendo una comparación se obtiene un error de 6.29%, del mismo modo es para los restantes elementos, se puede observar que el margen de error de los elementos en su estado fundamenta no supera el 13%. Con estas comparaciones podemos indicar que los resultados obtenidos por simulación computacional reproducen los valores experimentales con un error no mayor que el 13%.

Tabla 13

Módulo de compresibilidad por el WIEN2k, experimental (existente en la literatura) y el margen de error de los elementos en sus estados fundamentales

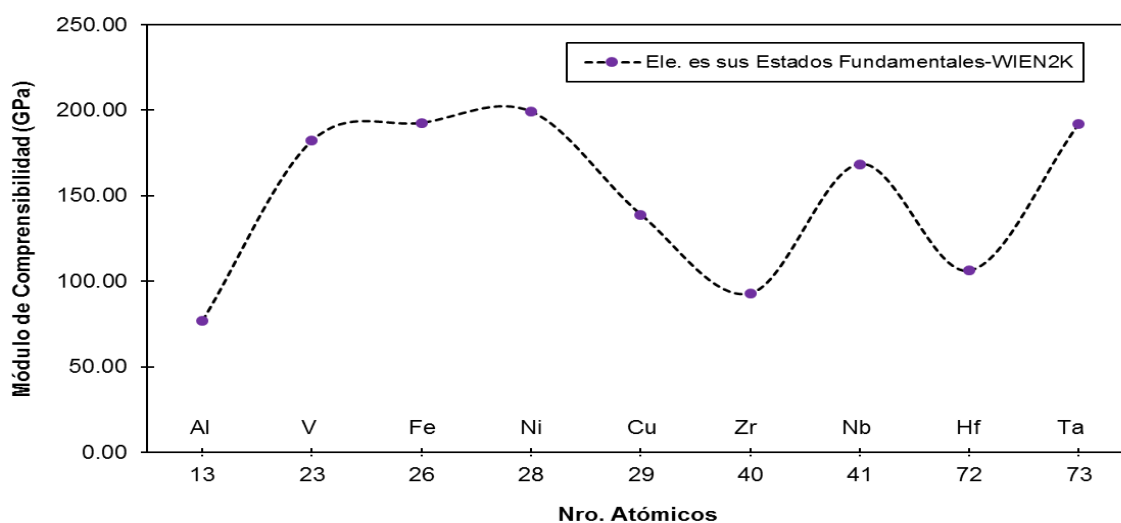
Elementos	B(GPa)	B(GPa) (exp.)	Error (%)
Al	77.05	72.20	6.29
V	182.17	161.90	11.12
Fe	192.47	168.30	12.55
Ni	199.03	186.00	6.54
Cu	138.93	137.00	1.38
Zr	92.88	83.30	10.31
Nb	168.50	170.20	1.00
Hf	106.17	109.00	2.66
Ta	192.02	200.00	4.15

B(GPa) (exp). (Kittel, 2003, p.68)

- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 13 (segunda columna) se obtiene la Figura 23 el cual se observa el comportamiento ondulatorio del módulo de compresibilidad obtenido por el WIEN2k de los nueve elementos en sus estados fundamentales. Se observa que el mínimo valor es del Al y el máximo valor es del Ni.
- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 13 (tercera columna) se obtiene la Figura 24 el cual se observa el comportamiento ondulatorio del módulo de compresibilidad experimental (existente en la literatura) de los nueve elementos en sus estados fundamentales. Se observa que el mínimo valor es el Al y el máximo valor es el Ta
- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 13 (segunda y tercera columna) se obtiene la Figura 25 donde se observa que no tiene mucha diferencia su comportamiento (ondulatorio) obtenido por el WIEN2k con respecto a la parte experimental de los nueve elementos en sus estados fundamentales.
- Para obtener el módulo de compresibilidad se debe formar una parábola vertical con los 11 cálculos obtenido con el WIEN2k, colocando los parámetros del RK_{max} , L_{max} , los puntos K y variando el volumen; en el ANEXO 3 se detalla el proceso.

Figura 23

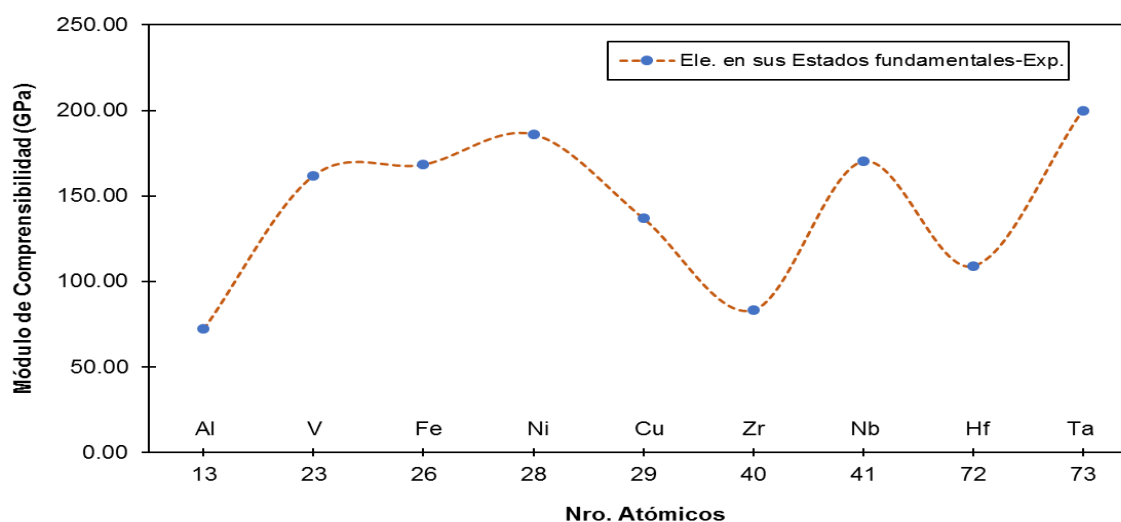
Módulo de compresibilidad de los elementos en sus estados fundamentales- obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



Nota: con el WIEN2k se obtuvo el módulo de compresibilidad (como se observa en la segunda columna de la Tabla 13), estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 23).

Figura 24

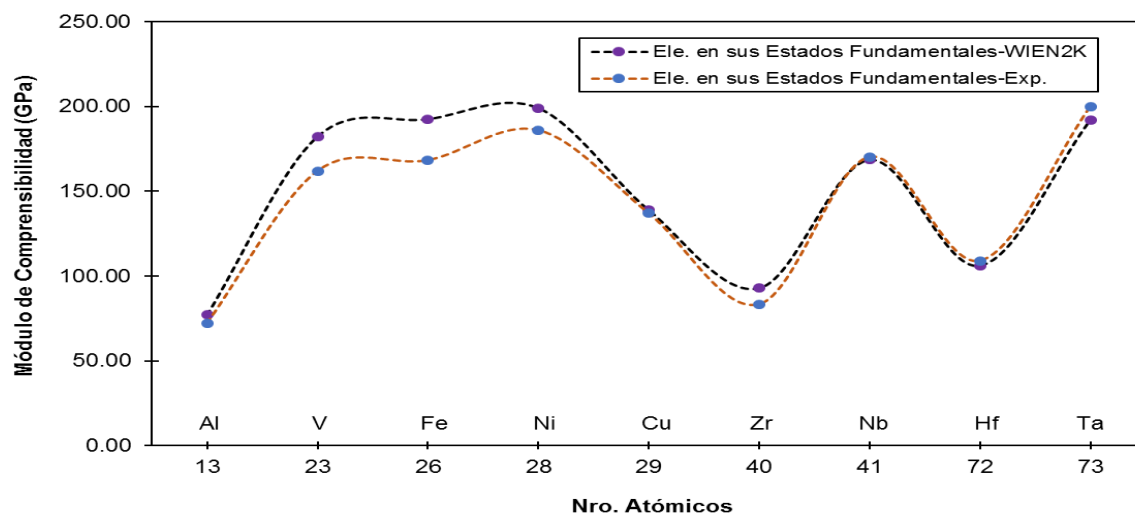
Módulo de compresibilidad de los elementos en sus estados fundamentales-Experimental según sus números atómicos



Nota: resultados existentes en la literatura de los módulos de compresibilidad (como se observa en la tercera columna de la Tabla 13), estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (Figura 24).

Figura 25

Módulo de compresibilidad de los elementos en su estado fundamental- obtenidos con el WIEN2K vs Experimental según sus números atómicos



Nota: los módulos de compresibilidad existentes en la literatura y de los obtenidos del WIEN2k (como se observa en la segunda y tercera columna de la Tabla 13), se juntó la Figura 23 y 24 como se observa en la Figura 25.

b. Estructura B2

En la segunda columna de la Tabla 14 se muestra los resultados obtenidos por el WIEN2k, en este caso solo se encontró el resultado experimental existente en la literatura del compuesto NiAl, de los siete compuestos restantes aún no se tienen resultados experimentales existentes en la literatura. Con el WIEN2k para el NiAl obtuvo un módulo de compresibilidad de 158.58 GPa y su resultado experimental es de 158.0 GPa (Rusović y Warlimont, 1997, p.613) por lo que su margen de error es de 0.36%, el cual no supera el 0.5% de margen de error. Con esta comparación podemos indicar que el resultado obtenido por simulación computacional reproduce el valor experimental con un error no mayor al 0.5%.

Tabla 14

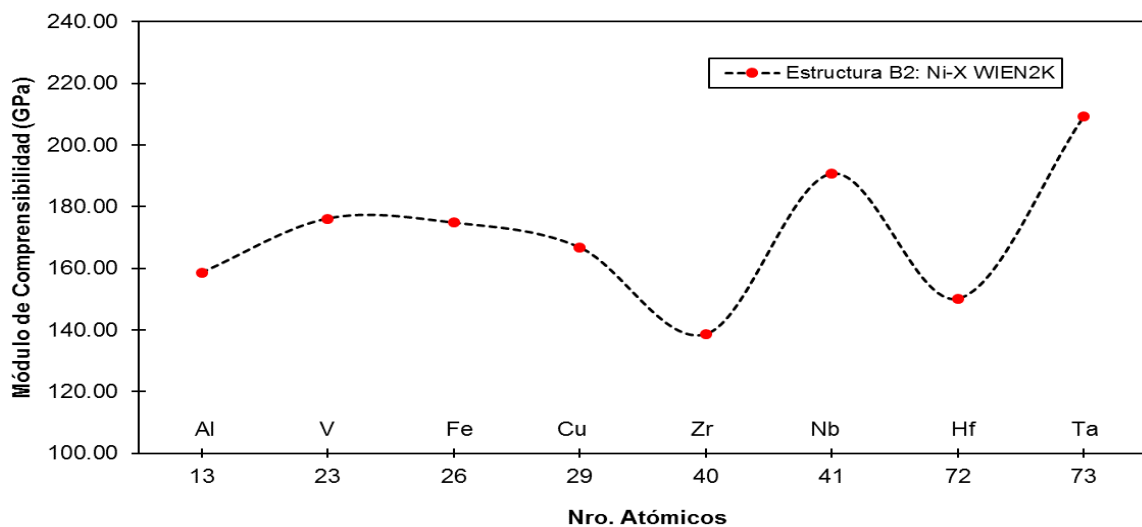
Módulo de compresibilidad de los compuestos en la estructura B2 obtenidos por el WIEN2k

Compuestos	B(GPa)
NiAl	158.58
NiV	176.14
NiFe	174.79
NiCu	166.74
NiZr	138.63
NiNb	190.69
NiHf	150.13
NiTa	209.36

- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 14 (segunda columna) se obtiene la Figura 26 el cual se observa el comportamiento ondulatorio del módulo de compresibilidad obtenido por el WIEN2k de los ocho compuestos en la estructura B2. Se observa que el mínimo valor es el NiAl y el máximo valor es el NiTa.
- Para obtener el módulo de compresibilidad se debe formar una parábola vertical con los 11 cálculos obtenidos con el WIEN2k, colocando los parámetros del RK_{max} , L_{max} , los puntos K y variando el volumen; en el ANEXO 3 se detalla el proceso.

Figura 26

Módulo de compresibilidad de los compuestos en la estructura B2- obtenidos con el WIEN2K según sus números atómicos



Nota: con el WIEN2k se obtuvo el módulo de compresibilidad (como se observa en la segunda columna de la Tabla 14), estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 26).

c. Estructura B32

En la segunda columna de la Tabla 15 se muestra los resultados teóricos obtenidos por el WIEN2k, en este caso no se encontró los resultados experimentales existentes en la literatura de los ocho compuestos.

Tabla 15

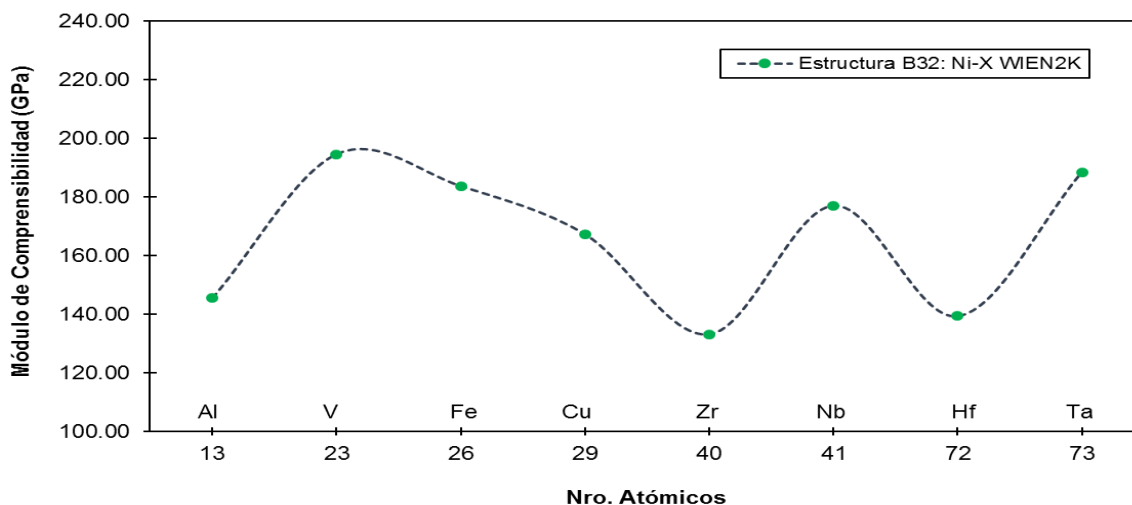
Módulo de compresibilidad de los compuestos en la estructura B32 obtenidos por el WIEN2k

Compuestos	B(GPa)
NiAl	145.60
NiV	194.59
NiFe	183.64
NiCu	167.24
NiZr	133.20
NiNb	177.01
NiHf	139.37
NiTa	188.40

- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 15 (segunda columna) se obtiene la Figura 27 el cual se observa el comportamiento ondulatorio del módulo de compresibilidad obtenido por el WIEN2k de los ocho compuestos en la estructura B32. Se observa que el mínimo valor es el NiZr y el máximo valor es el NiV.
- Para obtener el módulo de compresibilidad se debe formar una parábola vertical con los 11 cálculos obtenidos con el WIEN2k, colocando los parámetros del RK_{max} , L_{max} , los puntos K y variando el volumen; en el ANEXO 3 se detalla el proceso.

Figura 27

Módulo de compresibilidad de los compuestos en la estructura B32- obtenidos con el WIEN2K según sus números atómicos



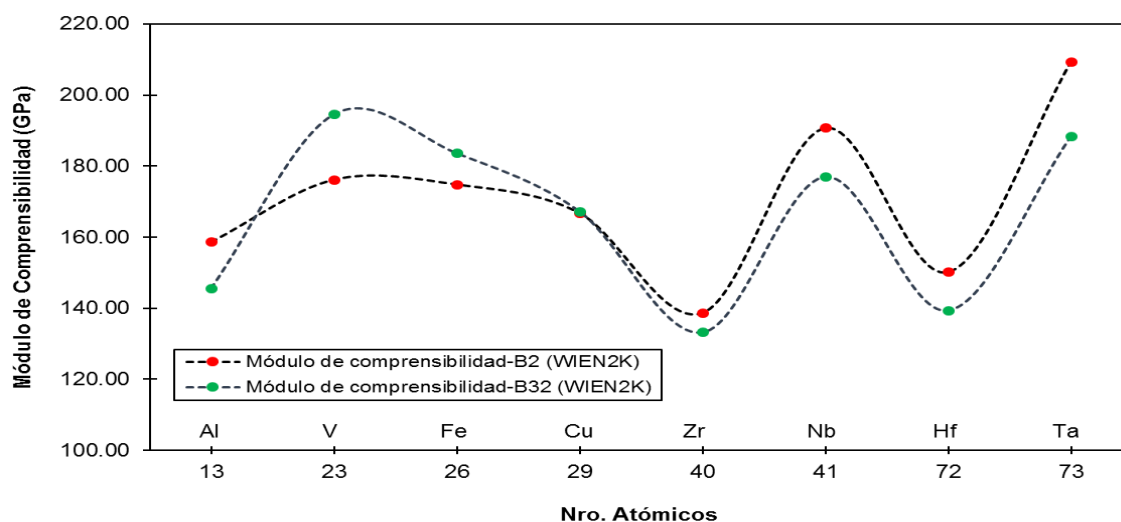
Nota: con el WIEN2k se obtuvo el módulo de compresibilidad (como se observa en la segunda columna de la Tabla 15), con estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 27).

d. Estructura B2 y B32

Mediante los resultados mostrados en la Tabla 14 y Tabla 15 (de la segunda columna) se obtiene la Figura 28 donde se observa que no se tiene mucha diferencia su comportamiento entre las estructuras B2 y B32, el que resalta más es el NiCu-B2 con valor de 166.74 GPa y el NiCu-B32 con un valor de 167.24 GPa ya que tienen mínima diferencia de valor, a diferencia de los siete compuestos restantes. Como se observa en la Figura 28 la estructura que tiene mayor módulo de compresibilidad es el NiTa-B2 con 209.36 GPa y la que tiene menor módulo de compresibilidad es el NiAl-B32 con 145.60 GPa. Además, en el NiZr, NiNb, NiHf, NiTa en la estructura B32 tiene menor módulo de compresibilidad a diferencia de la estructura B2 en dichos compuestos.

Figura 28

Módulo de compresibilidad de las estructuras B2 y B32-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



Nota: módulo de compresibilidad de las estructuras B2 y B32 obtenidos por el WIEN2k (como se observa en la segunda de las Tablas 14 y 15), se juntó la Figura 26 y 27 como se observa en la Figura 28.

II. Entalpía de formación

se calculó la entalpía de formación para las estructuras B2 y B32

a. Estructura B2

En la segunda columna de la Tabla 16 se muestra los resultados obtenidos por el WIEN2k, en este caso solo se encontró el resultado experimental existente en la literatura del compuesto NiAl, de los siete compuestos restantes aún no se tienen resultados experimentales existentes en la literatura. Con el WIEN2k para el NiAl obtuvo una entalpía de formación de -0.65 eV/mol y su resultado experimental es de -0.66 eV/mol (Kittel, 2003, p.28) por lo que su margen de error es de 1.51%, el cual no supera el 1.5% de margen de error. Con esta comparación podemos indicar que el resultado obtenido por simulación computacional reproduce el valor experimental con un error no mayor al 1.6%.

Tabla 16

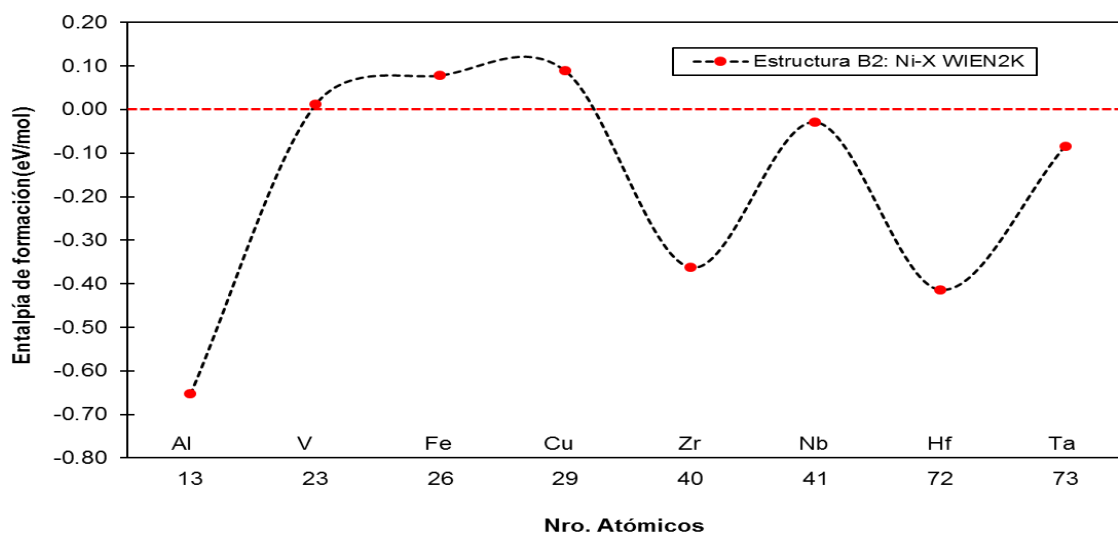
Entalpía de formación de los compuestos en la estructura B2 obtenidos por el WIEN2k

Compuestos	H(eV/mol)
NiAl	-0.65
NiV	0.01
NiFe	0.08
NiCu	0.09
NiZr	-0.36
NiNb	-0.03
NiHf	-0.41
NiTa	-0.08

- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 16 (segunda columna) se obtiene la Figura 29 el cual se observa el comportamiento ondulatorio de la entalpía de formación obtenido por el WIEN2k de los ocho compuestos en la estructura B2. El compuesto NiAl es el más estable de los ocho compuestos porque tiene la menor entalpía de formación negativa (-0.65 eV/mol) por el contrario, el compuesto NiCu es el más inestable porque tiene la mayor entalpía de formación positiva (0.09 eV/mol), como se puede observar en la Figura 29 y la Tabla 16. Los compuestos NiAl, NiZr, NiNb, NiHf, NiTa, son estables por tener una entalpía negativa (se encuentran debajo de la línea roja) y los compuestos NiV, NiFe, NiCu son inestables por tener una entalpía positiva (se encuentran encima de la línea roja) como se observa en la Figura 29.
- Como se observa en la Figura 29 el NiAl tiene una entalpía negativa (estable) debido a que se encuentra en el periodo 3 de la tabla periódica, luego el NiV, NiFe, NiCu tienen una entalpía positiva (inestable) porque se encuentran el periodo 4 de la tabla periódica, y por último el NiZr, NiNb, NiHf, NiTa tienen entalpía negativa (estable) porque se encuentran en el periodo 5 y 6 de la tabla periódica.
- En el ANEXO 5 se encuentra el procedimiento para calcular la entalpía de formación del NiAl, de igual manera el procedimiento es para los siete compuestos restantes (NiV, NiFe, NiCu, NiZr, NiNb, NiHf, NiTa).

Figura 29

Entalpía de formación de los compuestos en la estructura B2- obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



Nota: con el WIEN2k se obtuvo la entalpía de formación (como se observa en la segunda columna de la Tabla 16), estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 29).

b. Estructura B32

En la segunda columna de la Tabla 17 se muestra los resultados obtenidos por el WIEN2k, en este caso no se encontró los resultados experimentales existentes en la literatura de los ocho compuestos.

Tabla 17

Entalpía de formación de los compuestos en la estructura B32 obtenidos por el WIEN2k

Compuestos	H(eV/mol)
NiAl	-0.33
NiV	-0.08
NiFe	0.02
NiCu	0.08
NiZr	-0.15
NiNb	0.07
NiHf	-0.09
NiTa	0.14

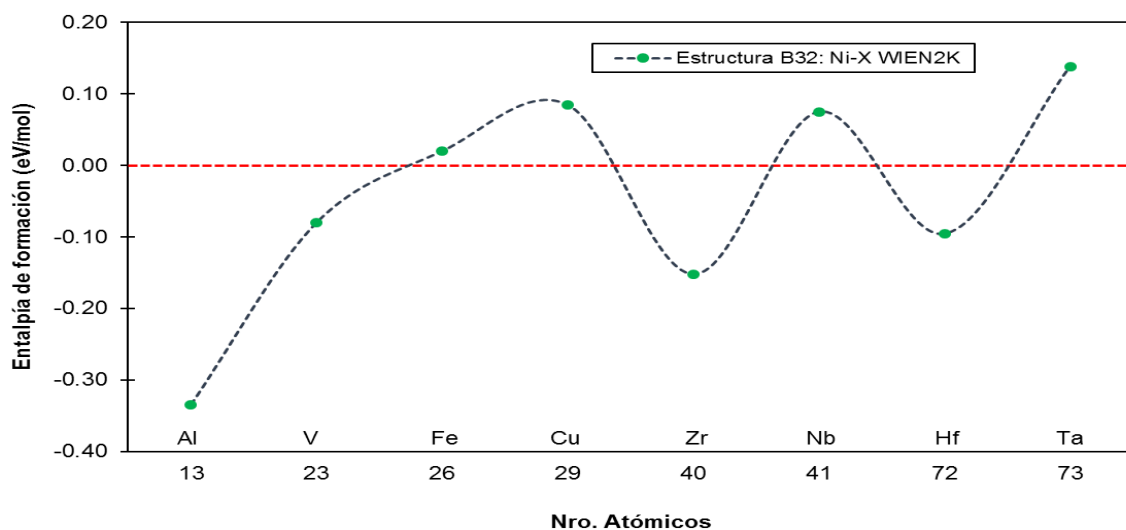
- Mediante los resultados mostrados en la Tabla 17 (segunda columna) se obtiene la Figura 30 el cual se observa el comportamiento ondulatorio de la entalpía de formación obtenido por el WIEN2k de los ocho compuestos en la estructura B32. El compuesto NiAl es el más estable de los ocho compuestos porque tiene la menor entalpía de formación negativa (-0.33 eV/mol) por el contrario, el

compuesto NiTa es el más inestable porque tiene la mayor entalpía de formación positiva (0.14 eV/mol), como se puede observar en la Figura 30 y la Tabla 17. Los compuestos NiAl, NiV, NiZr, NiHf son estables por tener una entalpía negativa (se encuentran debajo de la línea roja) y los compuestos NiFe, NiCu, NiNb, NiTa son inestables por tener una entalpía positiva (se encuentran encima de la línea roja) como se observa en la Figura 27.

- Como se observa en la Figura 30 el NiAl, NiV tienen una entalpía negativa (estable) debido a que se encuentran en el periodo 3 grupo IIIA y el periodo 4 grupo VB respectivamente de la tabla periódica, luego NiFe, NiCu tienen una entalpía positiva (inestable) porque se encuentran en el periodo 4 grupo VIIIB y IB respectivamente de la tabla periódica, el NiZr y NiHf, tienen entalpía negativa (estable) porque se encuentran en el periodo 5 y 6, en el mismo grupo IVB de la tabla periódica, por último el NiNb, NiTa tienen entalpía positiva (inestable) porque se encuentran en el periodo 5 y 6, en el mismo grupo VB de la tabla periódica.
- En el ANEXO 5 se encuentra el procedimiento para calcular la entalpía de formación del NiAl, de igual manera el procedimiento es para los siete compuestos restantes (NiV, NiFe, NiCu, NiZr, NiNb, NiHf, NiTa).

Figura 30

Entalpía de formación de los compuestos en la estructura B32- obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



Nota: con el WIEN2k se obtuvo la entalpía de formación (como se observa en la segunda columna de la Tabla 17), estos resultados se enviaron al Excel para su gráfica (como se observa en la Figura 30).

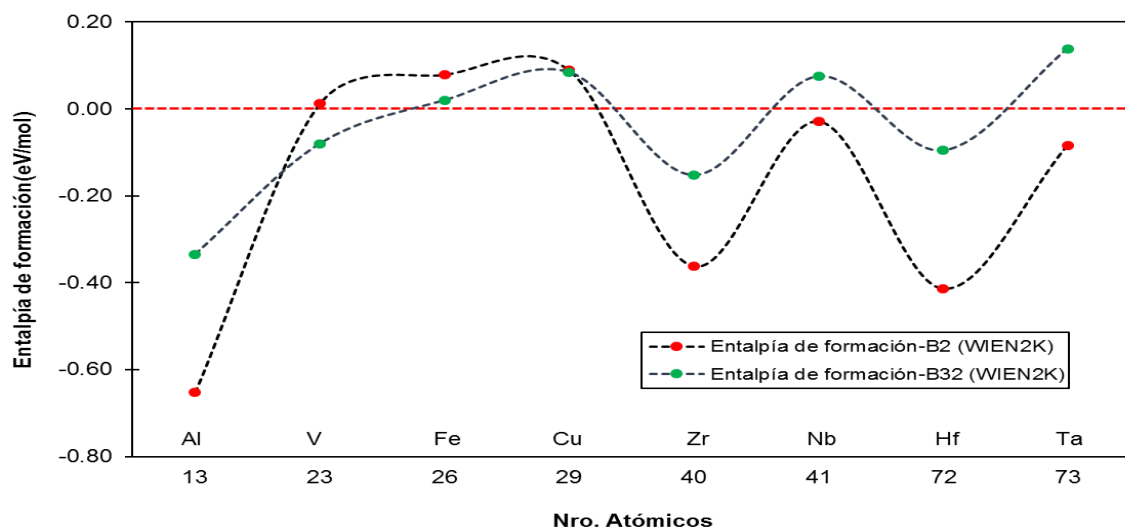
c. Estructura B2 y B32

Mediante los resultados mostrados en la Tabla 16 y Tabla 17 (de la segunda columna) se obtiene la Figura 31 donde se observa que no se tiene mucha diferencia su comportamiento entre las estructuras B2 y B32, el que resalta más es el NiCu-B2 con valor de 0.09 eV/mol y el NiCu-B32 con un valor de 0.08 eV/mol, ya que tienen mínima diferencia de valor y tienen entalpía de formación positiva (inestable). Como se observa en la Figura 31 la estructura que tiene menor entalpía de formación negativa (mayor estabilidad) es el NiAl-B2 con -0.64 eV/mol y la que tiene mayor entalpía de formación positiva (mayor inestabilidad) es el NiTa-B32 con 0.14 eV/mol.

El NiAl, NiZr, NiHf en las estructuras B2 y B32 mantienen una entalpía de formación negativa (mantienen su estabilidad); por el contrario los compuestos que mantienen su entalpía de formación positiva (mantienen su inestabilidad) son el NiFe, NiCu en las estructuras B2 y B32; en el NiV-B2 tiene una entalpía de formación positiva (inestable) y al cambiar su estructura a la B32 su entalpía de formación paso a hacer negativa (estable); el NiNb-B2, NiTa-B2 tienen una entalpía de formación negativa (estable) y al cambiar su estructura a la B32 su entalpía de formación paso a hacer positiva (inestable).

Figura 31

Entalpía de formación de las estructuras B2 y B32-obtenidos con el WIEN2k según sus números atómicos



Nota: entalpía de formación de las estructuras B2 y B32 obtenidos por el WIEN2k (como se observa en la segunda de las Tablas 16 y 17), se juntó la Figura 29 y 30 como se observa en la Figura 31.

CAPÍTULO VI

DISCUSIÓN DE RESULTADOS

6.1 CONTRASTACIÓN DE HIPÓTESIS CON LOS RESULTADOS

- a.** Comparando las estructuras B2 y B32 de los ocho compuestos, tres de ellos mantienen su entalpía de formación negativa (es decir que son compuestos que mantienen su estabilidad) los cuales son el NiAl, NiZr y NiHf; por el contrario, dos de ellos mantienen su entalpía de formación positiva (es decir son compuestos que mantienen su inestabilidad) los cuales son el NiFe, NiCu; por último de los tres restantes, uno de ellos es el NiV que cambia su entalpía de formación positiva (inestable) en la estructura B2 a una entalpía de formación negativa (estable) en la estructura B32; y los otros dos son el NiNb y NiTa que cambian su entalpía de formación negativa (estable) en la estructura B2 a una entalpía de formación positiva (inestable) en la estructura B32.
- b.** En la estructura B2 de los ocho compuestos, solo cinco de ellos tienen entalpía de formación negativa (es decir son compuestos estables) los cuales son el NiAl, NiZr, NiNb, NiHf y NiTa; el resto de los compuestos tienen una entalpía positiva (son compuestos inestables).
- c.** En la estructura B32 de los ocho compuestos, solo cuatro de ellos tienen entalpía de formación negativa (es decir son compuestos estables) los cuales son el NiAl, NiV, NiZr y NiHf; el resto de los compuestos tienen una entalpía positiva (son compuestos inestables).
- d.** El V-FCC al interactuar con el Ni-BCC en las estructuras B2 y B32, el compuesto tiene un comportamiento magnético. En la investigación “Cálculo de la Energía total del Sistema Hierro - Vanadio en la Estructura BCC por Método AB – Inicio” por

- Mendoza Flores en el 2015, de igual manera menciona que el V al interactuar con el Fe en las estructuras B2 y B32 el compuesto tiene un comportamiento magnético.
- e. Comparando las estructuras B2 y B32 de los ocho compuestos, el compuesto que tiene mayor módulo de compresibilidad es el NiTa-B2 con 209.36 GPa, y el que tiene menor módulo de compresibilidad es el NiZr-B32 con 133.20 GPa.
 - f. En la estructura B2, el compuesto que tiene mayor módulo de compresibilidad es el NiTa con 209.36 GPa, y el que tiene menor módulo de compresibilidad es el NiZr con 138.63 GPa.
 - g. En la estructura B32, el compuesto que tiene mayor módulo de compresibilidad es el NiV con 194.59 GPa, y el que tiene menor módulo de compresibilidad es el NiZr con 133.20 GPa.
 - h. Los compuestos metálicos mediante DOS son los siguientes: Fe-Bcc, Ni-Fcc, NiV-B2, NiV-B32, NiFe-B2, NiCu-B2, NiV-B32, NiFe-B32, NiTa-B32; los cuales se pueden observar en el ANEXO 4.

6.2 CONTRASTACIÓN DE RESULTADOS CON ESTUDIOS EXPERIMENTALES

- a. Los resultados experimentales del $B(\text{GPa})$, a_0 , μ en sus estados fundamentales se obtuvieron del libro “Introducción a la física del estado sólido” (Kittel, 2013).
- b. El resultado experimental del NiAl-B2 se encontró en la literatura y fueron: la $H(\text{eV/mol})$ por (Grun et al., 1998), el $a_0(\text{Å})$ por (Kittel, 2013), el $B(\text{GPa})$ por (Rusović y Warlimont, 1997).

CAPÍTULO VII

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

7.1 CONCLUSIONES

- a. En la comparación de las estructuras B2 y B32, los compuestos que tienen entalpía de formación negativa son los siguientes: el NiAl-B2 con -0.65 eV/mol y NiAl-B32 con -0.33 eV/mol, NiZr-B2 con -0.36 eV/mol y NiZr-B32 con -0.15 eV/mol, NiHf-B2 con -0.41 eV/mol y NiHf-B32 con -0.09 eV/mol, por lo tanto son compuestos que tienen más estabilidad. Pero también se obtuvieron entalpía de formación positiva que son los siguientes el NiFe-B2 con 0.08 eV/mol y NiFe-B32 con 0.02 eV/mol, NiCu-B2 con 0.09 eV/mol y NiCu-B32 con 0.08 eV/mol, por lo que son compuestos más inestables. Por último, en esta investigación no se obtuvo una entalpía de formación cero.
- b. En la estructura B2, los cinco compuestos que tienen la entalpía de formación negativa son los siguientes el NiAl con -0.65 eV/mol, NiZr con -0.36 eV/mol, NiNb con -0.03 eV/mol, NiHf con -0.41 eV/mol, NiTa con -0.08 eV/mol, por lo que son compuestos que tienen más estabilidad. Pero también se obtuvieron tres compuestos con entalpía de formación positiva que son los siguientes: el NiV-B2 con 0.01 eV/mol, NiFe-B2 con 0.08 eV/mol, NiCu-B2 con 0.09 eV/mol, por lo que son compuestos más inestables. Por último, no se obtuvo una entalpía de formación cero.
- c. En la estructura B32, los cuatro compuestos que tienen la entalpía de formación negativa son los siguientes, el NiAl con -0.33 eV/mol, NiV con -0.08 eV/mol, NiZr con -0.15 eV/mol, NiHf con -0.09 eV/mol. Pero también se obtuvieron cuatro compuestos con entalpía de formación positiva que son los siguientes, el NiFe con 0.02 eV/mol, NiCu con 0.08 eV/mol, NiNb con 0.07 eV/mol, NiTa con 0.14 eV/mol,

por lo que son compuestos más inestables. Por último, no se obtuvo una entalpía de formación cero.

7.2 RECOMENDACIONES

- a.** En esta investigación tan ambiciosa que fue, sugerimos que exista una continuidad de la misma por lo tanto proponemos futuros proyectos para que sean de interés a estudiantes interesados en esta área de investigación. Uno de los proyectos sería agregar una impureza a la estructura B2, pero se tiene que trabajar con estructuras mayores o también llamada supercelda, y para ello se tendría necesitar más tiempo computacional. Lo mismo sucedería con la estructura B32.

CAPÍTULO VIII

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Andreasen, G., y Barrett, R. (1973). An evaluation of cobalt-substituted nitinol wire in orthodontics. *American Journal of Orthodontics*, 63(5), 462-470. [https://doi.org/10.1016/0002-9416\(73\)90159-0](https://doi.org/10.1016/0002-9416(73)90159-0)
- Anguera Argilaga, M. T., Gras, J. A., Ato-García, M., Martínez Arias, R., Llobell, J. P., y Vallejo Seco, G. (1995). *Métodos de Investigación en Psicología*. Síntesis.
- Arias, F. (2012). *El Proyecto de la Investigación: Introducción a la metodología científica (6.ª ed.)*. EPISTEME.
- Askeland, D. R., y Wright, W. J. (2016). *Ciencia e ingeniería de materiales (6.ª ed.)*. Cengage Learning.
- Baena Paz, G. (2017). *Metodología de la Investigación (3.ª ed.)*. Patria.
- Balestrini, M. (2006). *Cómo se Elabora el Proyecto de Investigación (6.ª ed.)*. BL Consultores Asociados.
- Bermejo Sánchez, A. (2013). *Efecto de la esterilización en la resistencia a la fatiga cíclica de las limas Hyflex r CM a nivel apical y coronal. [Trabajo Fin de maestría, Universidad Complutense de Madrid]*. Repositorio Institucional. <https://eprints.ucm.es/id/eprint/22524/>
- Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G. K.H., Kvasnicka, D., Luitz, J., Laskowski, R., Tran, F., Marks, L. D. (2019). *WIEN2k: An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*. http://susi.theochem.tuwien.ac.at/reg_user/textbooks/usersguide.pdf
- Blaha, P., Schwarz, K., Tran, F., Laskowski, R., Madsen, G. K.H., y Marks, L. D. (2020). WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids. *The Journal of Chemical Physics*, 152(7), 074101. <https://doi.org/10.1063/1.5143061>.
- Callister, W., Rethwisch, D., Molera Solá, P., y Salán Ballesteros, N. (2016). *Ciencia e ingeniería de los materiales (9.ª ed.)*. Reverté.
- Carrión, S. (2013). *Estudio Teórico de las Propiedades Estructurales, Electrónicas, y de la Reactividad Química de Nanoestructuras de Molibdeno [Tesis de doctorado]*.

- Chelikowsky, J. R. (2019). *Introductory Quantum Mechanics with MATLAB: For Atoms, Molecules, Clusters, and Nanocrystals*. Wiley-vch.
- Civjan, S., Huget, E., y DeSimon, L. (1975). Potential applications of certain nickel-titanium (nitinol) alloys. *J Dent Res*, 54(1), 89-96. <https://doi.org/10.1177/00220345750540014301>.
- Clithy, E. (2020). Application of Shape Memory Alloy. *Science Insights*, 33(3), 167-174. <https://doi.org/10.15354/si.20.re072>.
- Cottenier, S. (2013). *Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction (2.^a ed.)*. Ghent University.
- Davey, T., Tran, N. D., Saengdeejing, A., y Chen, Y. (2020). First-principles-only CALPHAD phase diagram of the solid aluminium-nickel (Al-Ni) system. *Calphad*, 71, 102008. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2020.102008>.
- Dovale Farelo, V. F. (2018). *Estudio Ab Initio de las Propiedades Estructurales, Electrónicas y Magnéticas del AlAs Dopado con Cobalto, Níquel o Carbono [Tesis de maestría, Universidad del Norte]*. Repositorio. <http://hdl.handle.net/10584/8108>
- Espitia-Rico, M. J., y Díaz-Forero, J. H. (2016). Cálculo computacional de las propiedades magnéticas de la superred MnO/ZnO. *Tecno Lógicas*, 19(36), 41-48. <https://doi.org/10.22430/22565337.586>.
- Gonzales Ormeño, P. G. (2021, del 24 al 26 de noviembre). Entalpía de Formación de Aleaciones Ni-X (con X=elementos de 4ta y 5ta fila de la Tabla Periodica) en la estructura B2 y B32 desde Cálculos de Primeros Principios[conferencia]. *II Congreso Internacional de Ciencia, Tecnología e Innovación Untels*. Lima, Perú. <https://www.youtube.com/watch?v=M0JjMTnXhLg&t=5149s>
- Graef, D. M., y McHenry, M. E. (2012). *Structure of Materials: An Introduction to Crystallography, Diffraction and Symmetry (2.^a ed.)*. Cambridge University Press.
- Gratton, J. (2003). *INTRODUCCIÓN A LA MECÁNICA CUÁNTICA*. <http://materias.df.uba.ar/f4Ba2013c2/files/2012/07/cuantica-gratton.pdf>
- Grun, A., Henig, E.-T., Sommer, F., y Metallkd, Z. (1998). Calorimetric determination of the enthalpy of formation and the description of the constitutional defects of the ordered (Ni, Co)_{1-y}Al_y phase. *Zeitschrift fuer Metallkunde*, 89(9), 591-597.
- Hasbun, J. E., y Datta, T. (2019). *Introductory Solid State Physics with MATLAB Applications*. CRC Press.
- Hernández, R., Fernández, C., y Baptista, P. (2014). *Metodología de la Investigación (6.^a ed.)*. McGRAW-HILL.
- Hohenberg, P., y Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.*, 136(3B), B864-B871. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>.

- Hornbuckle, B. C. (2014). *Investigations in Phases Stability and Mechanical Attributes in Nickel-Rich Nitinol with and without Hafnium Additions [Tesis de doctorado, University of Alabama]*. Repositorio. <https://ir.ua.edu/handle/123456789/2166>
- Hurtado de Barrera, J. (2000). *Metodología de la Investigación Holística (3.ª ed.)*. Fundación Sypal.
- Kadkhodaei, S., y van de Walle, A. (2018). First-principles calculations of thermal properties of the mechanically unstable phases of the PtTi and NiTi shape memory Alloys. *Acta Materialia*, 147, 296-303. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.01.025>.
- Kittel, C. (2003). *Introducción a la física del estado sólido (3.ª ed.)*. Reverté.
- Ko, W., Maisel, S. B., Grabowski, B., Jeon, J. B., y Neugebauer, J. (2017). Atomic scale processes of phase transformations in nanocrystalline NiTi shape-memory Alloys. *Acta Materialia*, 123, 90-101. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.10.019>.
- Kohn, W., y Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev.*, 140(4A), A1133-A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>.
- Kulkova, S. E., Valujsky, D. V., Chudinov, D. V., Kim, J. S., y Lee, G. y. (2003). The change of TiNi surface electronic structure during B2-B19' martensitic transformation. *J. Phys. IV France*, 112, 861-864. <https://doi.org/10.1051/jp4:20031017>.
- Kumar, P., y Waghmare, U. V. (2020). First-principles Phonon-based Model and Theory of Martensitic Phase Transformation in NiTi Shape Memory Alloy. *Materialia*, 9, 100602. <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2020.100602>.
- Lang, P., Wojcik, T., Povoden-Karadeniz, E., Cirstea, C., y Kozeschnik, E. (2014). Crystal structure and free energy of Ti₂Ni₃ precipitates in Ti–Ni alloys from first principles. *Computational Materials Science*, 93, 46-49. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.06.019>.
- Lee, J. G. (2016). *Computational Materials Science: An Introduction (2.ª Ed.)*. CRC Press.
- Lee, K., y Rho, S. (2020). Phase Transitions and Electrochemical Corrosion Behaviors of Ti₅₀Ni_{50-x}Cu_x Shape Memory Alloys for Metallic Biomaterials. *Archives of Metallurgy & Materials*, 65(4), 1303-1306. <https://doi.org/10.24425/amm.2020.133689>.
- Lu, Z. W., y Zunger, A. (1994). Unequal wave vectors in short- versus long-range ordering in intermetallic compounds. *Phys. Rev. B*, 50(10), 6626-6636. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.6626>
- Matuszewski, L. (2020). Application of Shape Memory Alloys in Pipeline Couplings for Shipbuilding. *Polish Maritime Research*, 27(3), 82-88. <https://doi.org/10.2478/pomr-2020-0049>.
- Mendoza Flores, M. A. (2015). *Cálculo de la Energía total del Sistema Hierro - Vanadio en la Estructura BCC por Método AB - Inicio [Tesis de licenciatura, Universidad Nacional del Callao]*. Repositorio. <http://repositorio.unac.edu.pe/handle/UNAC/141>

- Mendoza, M. (2019). *Análisis de las propiedades ópticas del TiO₂ anatase dopado con N y F, por medio de cálculos DFT [Tesis de maestría, Universidad Nacional Mayor de San Marcos]*. Repositorio. <https://cybertesis.unmsm.edu.pe/handle/20.500.12672/10629>
- Morgade, C. I. (2015). *Estudio de las propiedades del TiO₂ modificado como soporte de reacciones catalíticas [Tesis doctoral, Universidad Nacional Del Sur]*. Repositorio. <https://repositoriodigital.uns.edu.ar/handle/123456789/2546>
- Murnaghan, F. D. (1994). The Compressibility of Media under Extreme Pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30(9), 244-247. <https://doi.org/10.1073/pnas.30.9.244>
- Otero de la Roza, A., y Luaña, V. (2009, 21-22 de diciembre). *WIEN2k: un código FPLAPW*. Academia.edu. https://www.academia.edu/4048492/A._Otero_de_la_Roza_y_V._%C4%B1ctor_Lu_a_na_Malta_WIEN2k_un_c_odigo_FPLAPW
- Parella, S., y Martins, F. (2012). *Metodología de la Investigación Cuantitativa (3.^a ed.)*. FEDUPEL.
- Perdew, J. P., y Wang, Y. (1992). Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Phys. Rev. B*, 45(23), 13244-13249. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.45.13244>.
- Perdew, J. P., Burke, K., y Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.*, 77(18), 3865-3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>.
- Perdew, J. P., Kurth, S., Zupan, A., y Blaha, P. (1999). Accurate Density Functional with Correct Formal Properties: A Step Beyond the Generalized Gradient Approximation. *Phys. Rev. Lett*, 82(12), 2544-2547. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.2544>.
- Prokoshkin, S. D., Korotitskiy, A. V., Tamonov, A. V., Khmelevskaya, I. Y., Brailovski, V., y Turenne, S. (2006). Comparative X-ray and time-of-flight neutron diffraction studies of martensite crystal lattice in stressed and unstressed binary Ti–Ni Alloys. *Materials Science & Engineering A*, 438-440, 549-552. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2006.02.135>.
- Rico Vanegas, J. A. (2016). *Estudio DFT de las Propiedades Estructurales y Electrónicas del X₂O (X = Cu, Ag, Au) [Tesis de licenciatura, Universidad Distrital Francisco José de Caldas]*. Repositorio. <http://hdl.handle.net/11349/4103>
- Rusović, N., y Warlimont, H. (1997). The elastic behaviour of β 2-NiAl alloys. *Phys Stat Sol A*, 44(2), 609-619. <https://doi.org/10.1002/psa.2210440225>
- Sabino, C. (1992). *El Proceso de la Investigación*. Panapo.
- Sholl, D. S., y Steckel, J. A. (2009). *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. Wiley-vch.
- Sierra Bravo, R. (1997). *Técnica de Investigación Social. Teoría y ejercicios (9.^a ed.)*. Paraninfo, S.A.

- Solorio Hernández, E. (2018). *Propiedades termoeléctricas del carbonitruro de renio (ReCN) [Tesis de maestría, Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada]*. Repositorio. <http://cicese.repositorioinstitucional.mx/jspui/handle/1007/2598>
- Tamayo y Tamayo, M. (2004). *El Proceso de la Investigación Científica: incluye evaluación y administración de proyectos de investigación (4.ª ed.)*. Limusa.
- Valencia Giraldo, A. (2012). *Diseño de Aleaciones*. Universidad de Antioquia.
- Vicente Suero, F. (2017). *Efecto de la temperatura corporal en medio líquido en la resistencia a la fatiga cíclica de las limas Heyflex CM y Heyflex EDM. [Trabajo fin de maestría, Universidad Complutense de Madrid]*. Repositorio. <https://eprints.ucm.es/id/eprint/45253/>
- Wei, S. H., Krakauer, H., y Weinert, M. (1985). Linearized augmented-plane-wave calculation of the electronic structure and total energy of tungsten. *Phys Rev B Condens Matter*, 32(12), 7792-7797. <https://doi.org/10.1103/physrevb.32.7792>.
- Wu, M.H., y Schetky, L.McD. (2000). Industrial applications for shape memory alloys. https://mrkspecialitymaterials.com/pdf/Tech%20Paper%20-%20Nitinol_Industrial_Applications.pdf
- Young, H. D., y Freedman, R. A. (2018). *FISICA UNIVERSITARIA CON FISICA MODERNA I*. Pearson.
- Yu, F., y Liu, Y. (2019). First-Principles Calculations of Structural, Mechanical, and Electronic Properties of the B2-Phase NiTi Shape-Memory Alloy Under High Pressure. *Computation*, 7(4), 57. <https://doi.org/10.3390/computation7040057>.
- Zhao, C., Zhao, S., Jin, Y., Guo, S., y Hou, Q. (2017). Microstructure and martensitic transformation of Ni–Ti–Pr Alloys. *Applied Physics A*, 123(9), 1-7. <https://doi.org/10.1007/s00339-017-1153-5>.

ANEXOS

ANEXO 1

Matriz de consistencia

PROBLEMA	OBJETIVOS	HIPÓTESIS	DIMENSIONES, INDICADORES E INDICES DE VARIABLES															
<p style="text-align: center;">PROBLEMA GENERAL</p> <p>¿Puedo comparar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 y B32 obtenidas por el WIEN2k?</p> <p style="text-align: center;">PROBLEMAS ESPECÍFICOS</p> <ul style="list-style-type: none"> • ¿Puedo analizar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 obtenidas por el WIEN2k? • ¿Puedo analizar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B32 obtenidas por el WIEN2k? 	<p style="text-align: center;">OBJETIVO GENERAL</p> <p>Comparar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 y B32 obtenidas por el WIEN2k.</p> <p style="text-align: center;">OBJETIVOS ESPECÍFICOS</p> <ul style="list-style-type: none"> • Analizar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 obtenidas por el WIEN2k. • Analizar el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B32 obtenidas por el WIEN2k. 	<p style="text-align: center;">HIPÓTESIS GENERAL</p> <p>En las estructuras B2 y B32, que aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) tienen entalpía de formación negativa.</p> <p style="text-align: center;">HIPÓTESIS ESPECÍFICAS</p> <ul style="list-style-type: none"> • En la estructura B2, que aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) tienen entalpía de formación negativa. • En la estructura B32, que aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) tienen entalpía de formación negativa. 	<p>VARIABLE 1: Entalpía de formación</p> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="width: 60%;">Dimensión o sub - variable</th> <th style="width: 20%;">Indicadores</th> <th style="width: 20%;">Índice</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>La energía total del sistema y la energía total de los átomos que forman el compuesto.</td> <td>La energía total.</td> <td>eV</td> </tr> </tbody> </table> <p>VARIABLE 2: Estructuras B2, B32</p> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="width: 20%;">Dimensión o sub - variable</th> <th style="width: 40%;">Indicadores</th> <th style="width: 40%;">Índice</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>B2</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> • Parámetro de red • Densidad de estado • Momento magnético • Módulo de compresibilidad </td> <td> <ul style="list-style-type: none"> • Å • State/eV • μ • GPa </td> </tr> <tr> <td>B32</td> <td> <ul style="list-style-type: none"> • Parámetro de red • Densidad de estado • Momento magnético • Módulo de compresibilidad </td> <td> <ul style="list-style-type: none"> • Å • State/eV • μ • GPa </td> </tr> </tbody> </table>	Dimensión o sub - variable	Indicadores	Índice	La energía total del sistema y la energía total de los átomos que forman el compuesto.	La energía total.	eV	Dimensión o sub - variable	Indicadores	Índice	B2	<ul style="list-style-type: none"> • Parámetro de red • Densidad de estado • Momento magnético • Módulo de compresibilidad 	<ul style="list-style-type: none"> • Å • State/eV • μ • GPa 	B32	<ul style="list-style-type: none"> • Parámetro de red • Densidad de estado • Momento magnético • Módulo de compresibilidad 	<ul style="list-style-type: none"> • Å • State/eV • μ • GPa
Dimensión o sub - variable	Indicadores	Índice																
La energía total del sistema y la energía total de los átomos que forman el compuesto.	La energía total.	eV																
Dimensión o sub - variable	Indicadores	Índice																
B2	<ul style="list-style-type: none"> • Parámetro de red • Densidad de estado • Momento magnético • Módulo de compresibilidad 	<ul style="list-style-type: none"> • Å • State/eV • μ • GPa 																
B32	<ul style="list-style-type: none"> • Parámetro de red • Densidad de estado • Momento magnético • Módulo de compresibilidad 	<ul style="list-style-type: none"> • Å • State/eV • μ • GPa 																

MÉTODO Y DISEÑO	POBLACIÓN Y MUESTRA	TÉCNICA E INSTRUMENTOS
<p data-bbox="310 191 432 224" style="text-align: center;">DISEÑO</p> <p data-bbox="37 245 709 529">En investigación se planteó una investigación básica con un diseño no experimental. Además, con un nivel de investigación correlacional porque se analizó el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 con la estructura B32 obtenidas por el WIEN2k.</p> <p data-bbox="302 748 441 781" style="text-align: center;">METODO</p> <p data-bbox="37 802 709 1284">Esta investigación analizó el comportamiento de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2, luego en la estructura B32 y por último se comparó el comportamiento de las entalpías de formación de estas dos estructuras (B2, B32) porque son estructuras equiatómica, aplicando la metodología de los primeros principios utilizando FP-LAPW en el esquema del DFT con GGA-PBE implementado en la simulación computacional WIEN2k.</p>	<p data-bbox="919 180 1100 212" style="text-align: center;">POBLACIÓN</p> <p data-bbox="730 233 1293 615">La población está representada por las aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en las estructuras B2 y B32, adicionalmente los elementos en su estado fundamental (Ni, Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta). La suma de estos tres (B2, B32 y en su estado fundamental) tiene un total de 25 sistemas sólidos.</p> <p data-bbox="932 773 1087 805" style="text-align: center;">MUESTRA</p> <p data-bbox="730 826 1293 907">Esta investigación no contempla alguna muestra por el tipo de investigación.</p>	<p data-bbox="1619 180 1757 212" style="text-align: center;">TÉCNICA</p> <p data-bbox="1314 233 2066 461">La investigación “Comparación de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 con la estructura B32 obtenidas por medio de los cálculos de primeros principios, realizado en la UNTELS.”, se ha utilizado la técnica de la observación.</p> <p data-bbox="1572 748 1799 781" style="text-align: center;">INSTRUMENTO</p> <p data-bbox="1314 802 2066 1135">La investigación “Comparación de la entalpía de formación de aleaciones Ni-X (X= Al, V, Fe, Cu, Zr, Nb, Hf y Ta) en la estructura B2 con la estructura B32 obtenidas por medio de los cálculos de primeros principios, realizado en la UNTELS”, se ha empleado como instrumento el servidor de la UNTELS, donde se instaló el WIEN2k para realizar los cálculos computacionales.</p>

- c. En la Figura 34 se observa el tiempo de cálculo por cada ciclo, en este caso para calcular la energía total parametrizado con los puntos K igual a 10000, y con 35 ciclos de cálculos por lo que su tiempo de cálculo es un total de 630s (el tiempo de cálculo por cada ciclo es de 18s).

Figura 34

Tiempo computacional en los puntos K igual a 10000

```
Calculating v-bcc in /home/martin/wien2k/v-bcc
on martin-B85M-D3H with PID 7414
using WIEN2k_18.2 (Release 17/7/2018) in /home/martin/wien2k
v-bcc.broyd* files removed !

start      (Sun Nov 21 17:15:55 -05 2021) with lapw0 (35/99 to go)
cycle 1    (Sun Nov 21 17:15:55 -05 2021) (35/99 to go)
v lapw0    (17:15:55) 0.8u 0.0s 0:00.87 100.0% 0+0k 0+4241o 0pf+0w
w lapw1 -up (17:15:56) 6.4u 0.1s 0:06.56 100.0% 0+0k 0+145761o 0pf+0w
v lapw1 -dn (17:16:03) 6.4u 0.1s 0:06.60 99.8% 0+0k 0+145681o 0pf+0w
v lapw2 -up (17:16:10) 1.4u 0.1s 0:01.60 99.3% 0+0k 0+7521o 0pf+0w
w lapw2 -dn (17:16:11) 1.5u 0.1s 0:01.60 100.0% 0+0k 0+7361o 0pf+0w
v lcore -up (17:16:13) 0.0u 0.0s 0:00.01 0.0% 0+0k 0+2321o 0pf+0w
w lcore -dn (17:16:13) 0.0u 0.0s 0:00.00 0.0% 0+0k 0+2241o 0pf+0w
v mXfer    (17:16:13) 0.0u 0.0s 0:00.02 50.0% 0+0k 0+10561o 0pf+0w
:ENERGY convergence: 0 0 .0001065650000000
:CHARGE convergence: 0 0.00001 .0016790

cycle 2    (Sun Nov 21 17:16:13 -05 2021) (34/98 to go)
v lapw0    (17:16:13) 0.8u 0.0s 0:00.87 98.8% 0+0k 0+4241o 0pf+0w
w lapw1 -up (17:16:14) 6.4u 0.1s 0:06.57 100.0% 0+0k 0+145681o 0pf+0w
v lapw1 -dn (17:16:21) 6.4u 0.1s 0:06.55 100.0% 0+0k 0+145601o 0pf+0w
w lapw2 -up (17:16:27) 1.5u 0.0s 0:01.59 100.0% 0+0k 0+7201o 0pf+0w
v lapw2 -dn (17:16:29) 1.5u 0.0s 0:01.58 100.0% 0+0k 0+7361o 0pf+0w
v lcore -up (17:16:30) 0.0u 0.0s 0:00.01 100.0% 0+0k 0+2321o 0pf+0w
w lcore -dn (17:16:30) 0.0u 0.0s 0:00.01 100.0% 0+0k 0+2241o 0pf+0w
v mXfer    (17:16:31) 0.0u 0.0s 0:00.02 100.0% 0+0k 0+10241o 0pf+0w
:ENERGY convergence: 0 0 .0002788500000000
:CHARGE convergence: 0 0.00001 .0015999
```

Nota: Imagen extraída de la plataforma del WIEN2k.

ANEXO 3

Gráficos de la Energía Mínima

I. En sus estados fundamentales

a. Resultados del Al-FCC:

Mediante los resultados de la Tabla 18 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 35. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (4.04 \AA) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

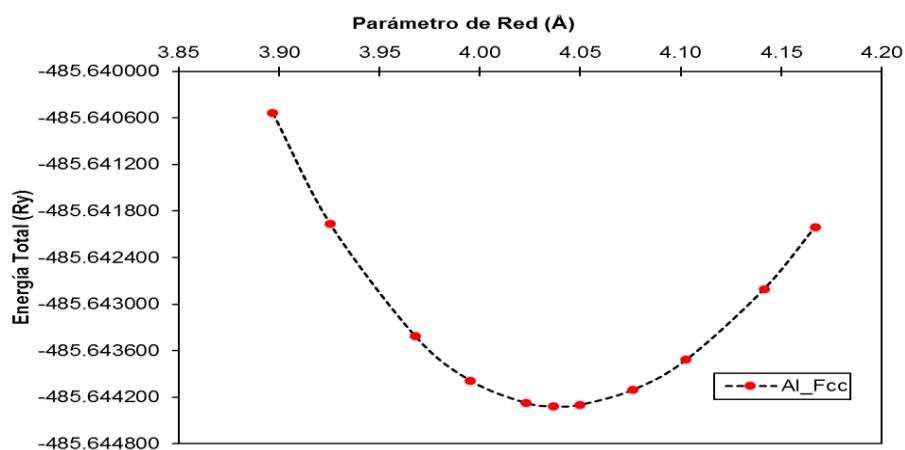
Tabla 18

Resultados del Al-FCC obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-485.640538	7.36	3.90	0
-8	-485.641968	7.42	3.93	0
-5	-485.643414	7.50	3.97	0
-3	-485.643988	7.55	4.00	0
-1	-485.644273	7.60	4.02	-0
0	-485.644316	7.63	4.04	-0
1	-485.644297	7.65	4.05	0
3	-485.644103	7.70	4.08	-0
5	-485.643715	7.75	4.10	-0
8	-485.642806	7.83	4.14	-0
10	-485.642006	7.87	4.17	0

Figura 35

Energía total vs Parámetro de red del Al-FCC obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 35 se obtiene el módulo de compresibilidad

b. Resultados del V-BCC:

Mediante los resultados de la Tabla 19 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 36. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (3.00 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

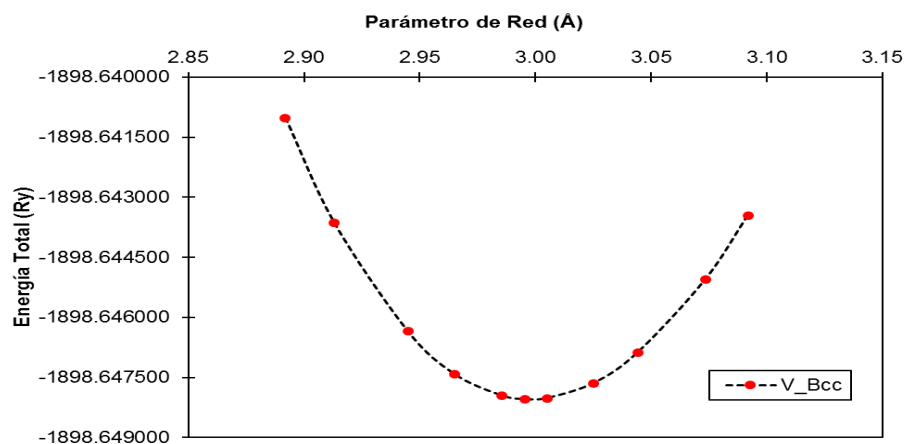
Tabla 19

Resultados del V-BCC obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-1898.641023	5.47	2.89	-0
-8	-1898.643648	5.51	2.91	-0
-5	-1898.646353	5.57	2.94	0
-3	-1898.647420	5.60	2.96	-0
-1	-1898.647958	5.64	2.99	-0
0	-1898.648046	5.66	3.00	-0
1	-1898.648019	5.68	3.01	0
3	-1898.647644	5.72	3.03	-0
5	-1898.646875	5.75	3.04	-0
8	-1898.645062	5.81	3.07	-0
10	-1898.643455	5.84	3.09	-0

Figura 36

Energía total vs Parámetro de red del V-BCC obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 36 se obtiene el módulo de compresibilidad

c. Resultados del Fe-BCC:

Mediante los resultados de la Tabla 20 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 37. Para obtener

dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (2.83 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

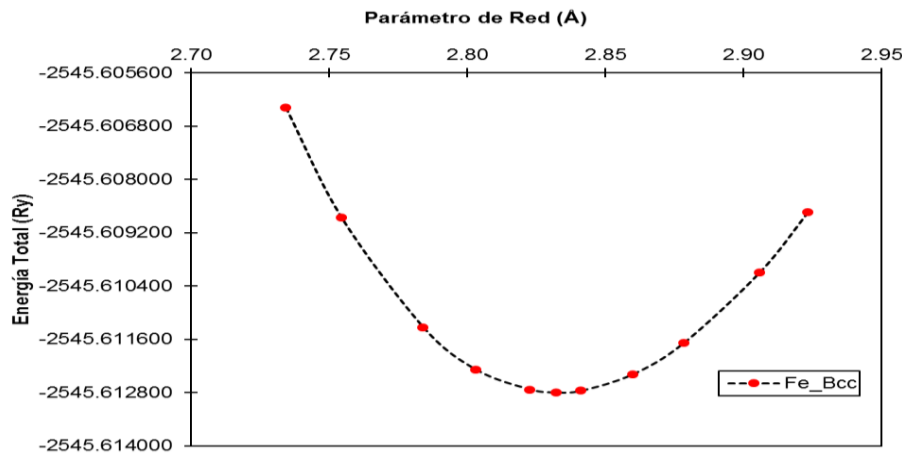
Tabla 20

Resultados del Fe-BCC obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-2545.606386	5.17	2.73	2.01
-8	-2545.608857	5.21	2.75	2.05
-5	-2545.611333	5.26	2.78	2.10
-3	-2545.612285	5.30	2.80	2.13
-1	-2545.612729	5.33	2.82	2.16
0	-2545.612797	5.35	2.83	2.17
1	-2545.612758	5.37	2.84	2.18
3	-2545.612391	5.40	2.86	2.21
5	-2545.611683	5.44	2.88	2.24
8	-2545.610091	5.49	2.91	2.30
10	-2545.608738	5.52	2.92	2.34

Figura 37

Energía total vs Parámetro de red del Fe-BCC obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 37 se obtiene el módulo de compresibilidad

d. Resultados del Ni-FCC:

Mediante los resultados de la Tabla 21 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 38. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (3.52 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

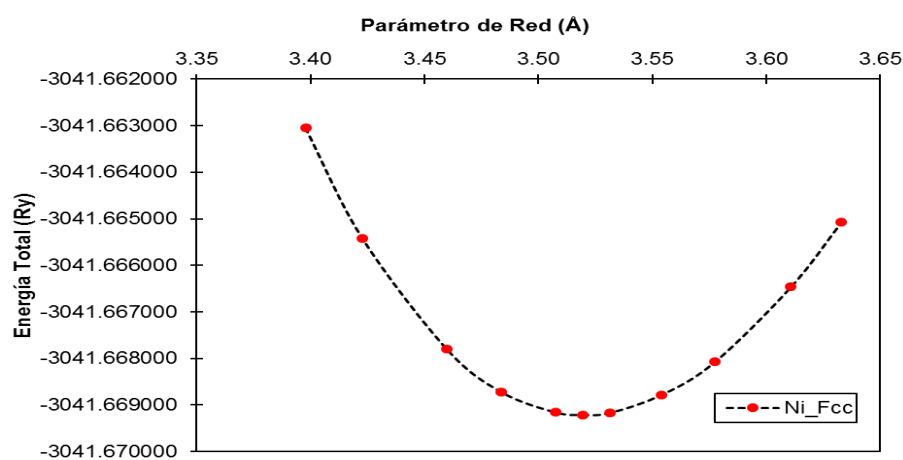
Tabla 21

Resultados del Ni-FCC obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-3041.663046	6.42	3.40	0.60
-8	-3041.665414	6.47	3.42	0.61
-5	-3041.667798	6.54	3.46	0.62
-3	-3041.668717	6.58	3.48	0.63
-1	-3041.669154	6.63	3.51	0.63
0	-3041.669209	6.65	3.52	0.64
1	-3041.669167	6.67	3.53	0.64
3	-3041.668779	6.72	3.55	0.64
5	-3041.668074	6.76	3.58	0.65
8	-3041.666464	6.82	3.61	0.66
10	-3041.665070	6.87	3.63	0.66

Figura 38

Energía total vs Parámetro de red del Ni-FCC obtenidos por el WIEN2k

**Nota:** con el comportamiento parabólico de la Figura 38 se obtiene el módulo de compresibilidad**e. Resultados del Cu-FCC:**

Mediante los resultados de la Tabla 22 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 39. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (3.63 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

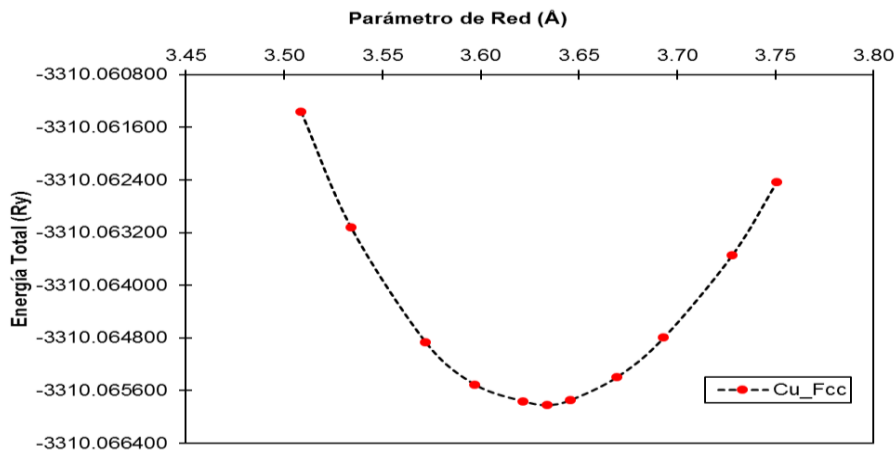
Tabla 22

Resultados del Cu-FCC obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-3310.061367	6.63	3.51	-0
-8	-3310.063122	6.68	3.53	-0
-5	-3310.064869	6.75	3.57	-0
-3	-3310.065507	6.80	3.60	-0
-1	-3310.065763	6.84	3.62	-0
0	-3310.065820	6.87	3.63	-0
1	-3310.065745	6.89	3.65	0
3	-3310.065395	6.93	3.67	-0
5	-3310.064796	6.98	3.69	0
8	-3310.063541	7.05	3.73	0
10	-3310.062427	7.09	3.75	0

Figura 39

Energía total vs Parámetro de red del Cu-FCC obtenidos por el WIEN2k

**Nota:** con el comportamiento parabólico de la Figura 39 se obtiene el módulo de compresibilidad**f. Resultados del Zr-HCP:**

Mediante los resultados de la Tabla 23 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 40. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (3.24 Å) en el eje X y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

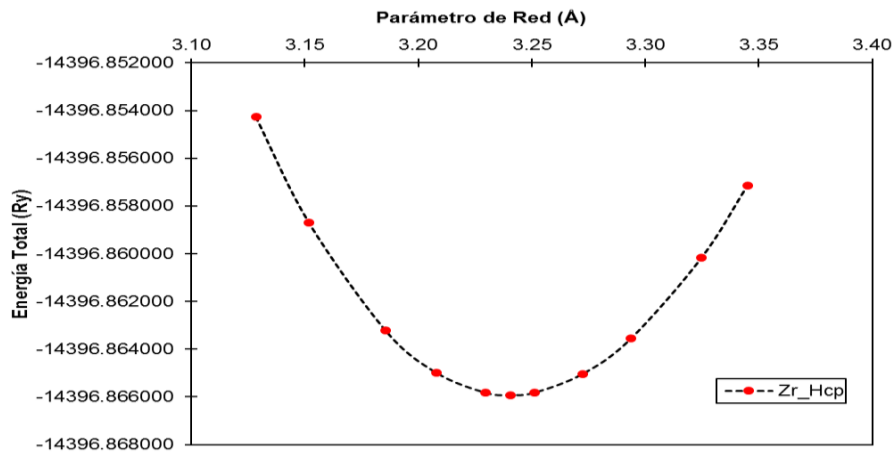
Tabla 23

Resultados del Zr-HCP obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total		Parámetro de red			Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(u.a.)	a(Å)	a(Å)	(μ_B)
-10	-14396.854272	5.91	9.43	3.13	4.99	0
-8	-14396.858685	5.96	9.50	3.15	5.03	-0
-5	-14396.863222	6.02	9.60	3.19	5.08	-0
-3	-14396.864980	6.06	9.67	3.21	5.11	-0
-1	-14396.865821	6.10	9.73	3.23	5.15	0
0	-14396.865920	6.12	9.76	3.24	5.17	-0
1	-14396.865817	6.14	9.80	3.25	5.18	-0
3	-14396.865034	6.18	9.86	3.27	5.22	0
5	-14396.863558	6.22	9.92	3.29	5.25	-0
8	-14396.860157	6.28	10.02	3.32	5.30	-0
10	-14396.857149	6.32	10.08	3.34	5.33	-0

Figura 40

Energía total vs Parámetro de red del Zr-HCP obtenidos por el WIEN2k

**Nota:** con el comportamiento parabólico de la Figura 40 se obtiene el módulo de compresibilidad**g. Resultados del Nb-BCC:**

Mediante los resultados de la Tabla 24 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 41. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (3.32 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

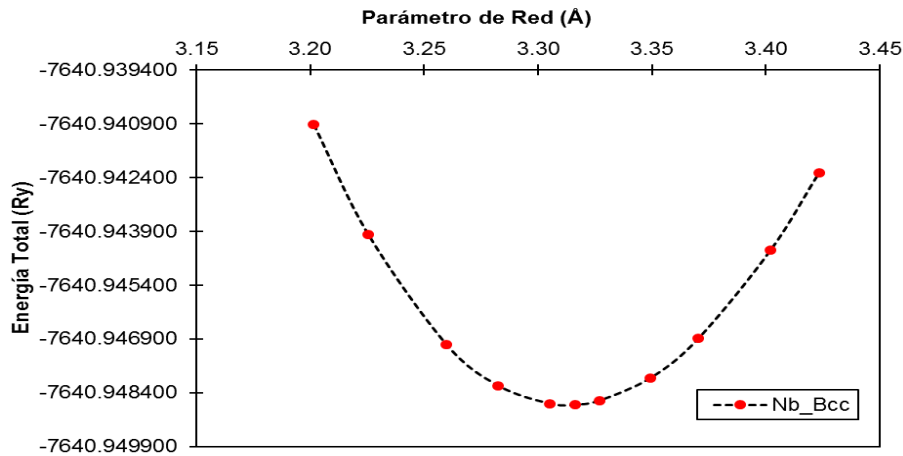
Tabla 24

Resultados del Nb-BCC obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-7640.940924	6.05	3.20	0
-8	-7640.943980	6.10	3.23	-0
-5	-7640.947054	6.16	3.26	-0
-3	-7640.948201	6.20	3.28	-0
-1	-7640.948702	6.25	3.31	-0
0	-7640.948730	6.27	3.32	0
1	-7640.948614	6.29	3.33	0
3	-7640.947991	6.33	3.35	-0
5	-7640.946886	6.37	3.37	-0
8	-7640.944418	6.43	3.40	-0
10	-7640.942273	6.47	3.42	-0

Figura 41

Energía total vs Parámetro de red del Nb-BCC obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 41 se obtiene el módulo de compresibilidad

h. Resultados del Hf-HCP:

Mediante los resultados de la Tabla 25 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 42. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (3.21 Å) en el eje X y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

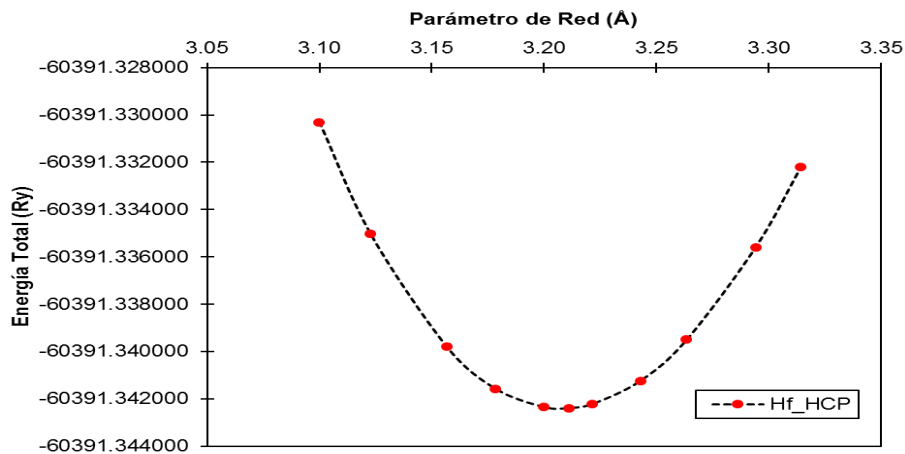
Tabla 25

Resultados del Hf-HCP obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red				Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(u.a.)	a(Å)	a(Å)	(μ_B)
-10	-60391.330313	5.86	9.27	3.10	4.91	0
-8	-60391.335036	5.90	9.34	3.12	4.94	0
-5	-60391.339798	5.97	9.44	3.16	5.00	0
-3	-60391.341577	6.01	9.51	3.18	5.03	0
-1	-60391.342355	6.05	9.57	3.20	5.07	0
0	-60391.342390	6.07	9.61	3.21	5.08	0
1	-60391.342217	6.09	9.64	3.22	5.10	0
3	-60391.341243	6.13	9.70	3.24	5.13	-0
5	-60391.339499	6.17	9.76	3.26	5.17	0
8	-60391.335589	6.23	9.86	3.29	5.22	-0
10	-60391.332206	6.26	9.92	3.31	5.25	0

Figura 42

Energía total vs Parámetro de red del Hf-HCP obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 42 se obtiene el módulo de compresibilidad

i. Resultados del Ta-BCC:

Mediante los resultados de la Tabla 26 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 43. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (3.32 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

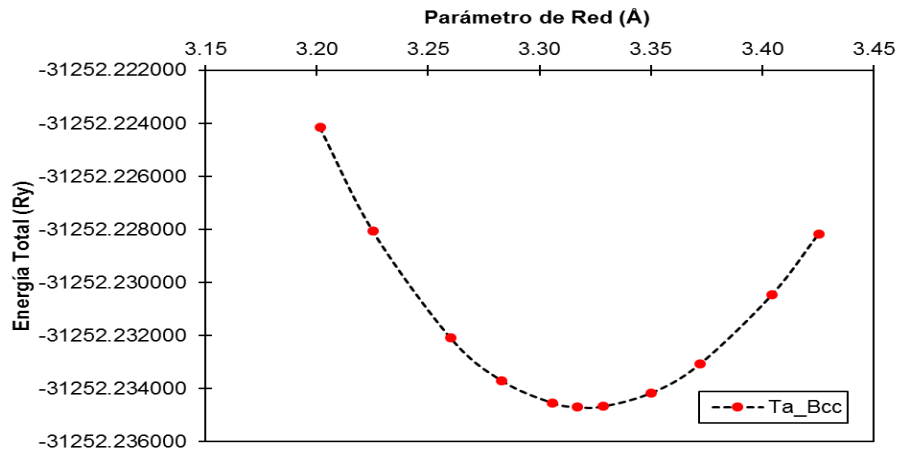
Tabla 26

Resultados del Ta-BCC obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-31252.224151	6.05	3.20	-0
-8	-31252.228065	6.10	3.23	-0
-5	-31252.232090	6.16	3.26	0
-3	-31252.233688	6.20	3.28	-0
-1	-31252.234529	6.25	3.31	-0
0	-31252.234686	6.27	3.32	-0
1	-31252.234662	6.29	3.33	-0
3	-31252.234158	6.33	3.35	0
5	-31252.233077	6.37	3.37	0
8	-31252.230473	6.43	3.40	0
10	-31252.228159	6.47	3.43	0

Figura 43

Energía total vs Parámetro de red del Ta-BCC obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 43 se obtiene el módulo de compresibilidad

II. B2

a. Resultados del NiAl:

Mediante los resultados de la Tabla 27 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 44. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (2.90 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

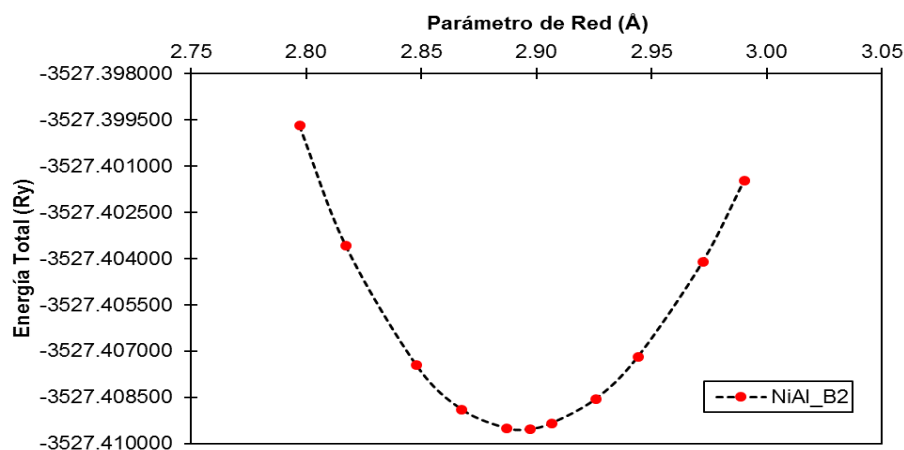
Tabla 27

Resultados del NiAl-B2 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-3527.399678	5.29	2.80	0
-8	-3527.403582	5.32	2.82	-0
-5	-3527.407463	5.38	2.85	-0
-3	-3527.408893	5.42	2.87	-0
-1	-3527.409506	5.46	2.89	-0
0	-3527.409535	5.48	2.90	0
1	-3527.409343	5.49	2.91	0
3	-3527.408561	5.53	2.93	-0
5	-3527.407174	5.56	2.94	-0
8	-3527.404093	5.62	2.97	0
10	-3527.401460	5.65	2.99	-0

Figura 44

Energía total vs Parámetro de red del NiAl-B2 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 44 se obtiene el módulo de compresibilidad

b. Resultados del NiV:

Mediante los resultados de la Tabla 28 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 45. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (2.92 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

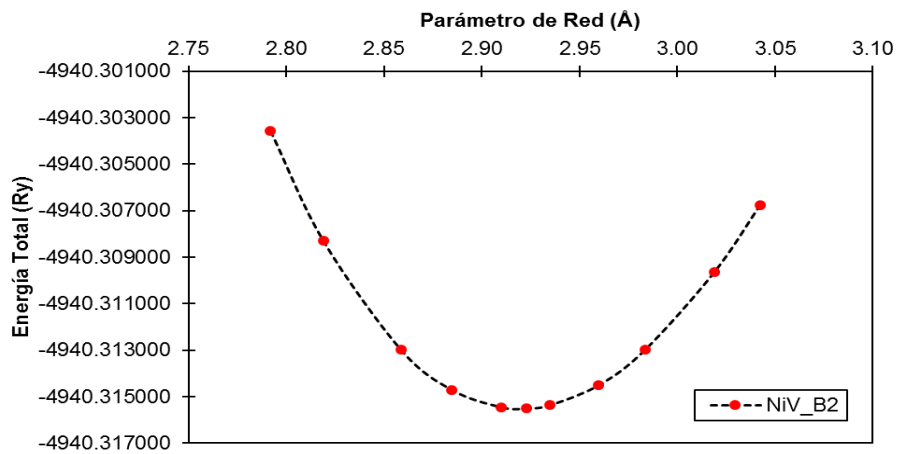
Tabla 28

Resultados del NiV-B2 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-4940.303571	5.28	2.79	1.08
-8	-4940.308300	5.33	2.82	1.11
-5	-4940.312980	5.40	2.86	1.19
-3	-4940.314703	5.45	2.88	1.26
-1	-4940.315452	5.50	2.91	1.36
0	-4940.315508	5.52	2.92	1.42
1	-4940.315361	5.55	2.93	1.48
3	-4940.314508	5.59	2.96	1.59
5	-4940.312982	5.64	2.98	1.70
8	-4940.309635	5.71	3.02	1.84
10	-4940.306775	5.75	3.04	1.93

Figura 45

Energía total vs Parámetro de red del NiV-B2 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 45 se obtiene el módulo de compresibilidad

c. Resultados del NiFe:

Mediante los resultados de la Tabla 29 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 46. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (2.86 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

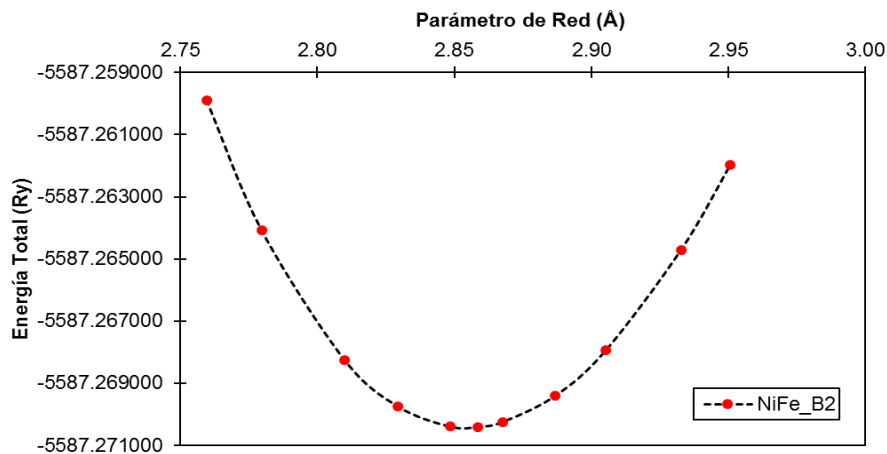
Tabla 29

Resultados del NiFe-B2 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-5587.259891	5.22	2.76	3.33
-8	-5587.264082	5.25	2.78	3.37
-5	-5587.268250	5.31	2.81	3.42
-3	-5587.269755	5.35	2.83	3.46
-1	-5587.270401	5.38	2.85	3.49
0	-5587.270410	5.40	2.86	3.50
1	-5587.270251	5.42	2.87	3.52
3	-5587.269416	5.46	2.89	3.55
5	-5587.267947	5.49	2.91	3.57
8	-5587.264704	5.54	2.93	3.61
10	-5587.261968	5.58	2.95	3.63

Figura 46

Energía total vs Parámetro de red del NiFe-B2 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 46 se obtiene el módulo de compresibilidad

d. Resultados del NiCu:

Mediante los resultados de la Tabla 30 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 47. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (2.83 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

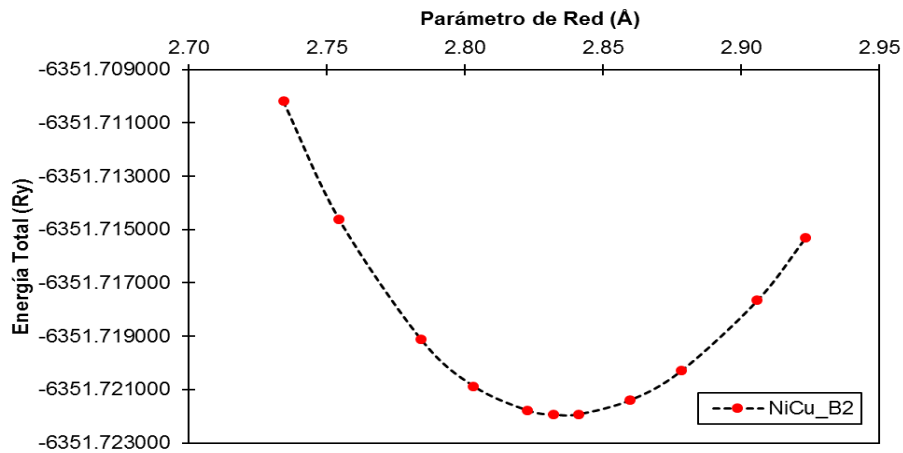
Tabla 30

Resultados del NiCu-B2 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-6351.710189	5.17	2.73	0.15
-8	-6351.714605	5.21	2.75	0.15
-5	-6351.719113	5.26	2.78	0.16
-3	-6351.720873	5.30	2.80	0.16
-1	-6351.721784	5.33	2.82	0.16
0	-6351.721930	5.35	2.83	0.17
1	-6351.721923	5.37	2.84	0.17
3	-6351.721396	5.40	2.86	0.17
5	-6351.720292	5.44	2.88	0.18
8	-6351.717652	5.49	2.91	0.18
10	-6351.715301	5.52	2.92	0.19

Figura 47

Energía total vs Parámetro de red del NiCu-B2 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 47 se obtiene el módulo de compresibilidad

e. Resultados del NiZr:

Mediante los resultados de la Tabla 31 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 48. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (3.21 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

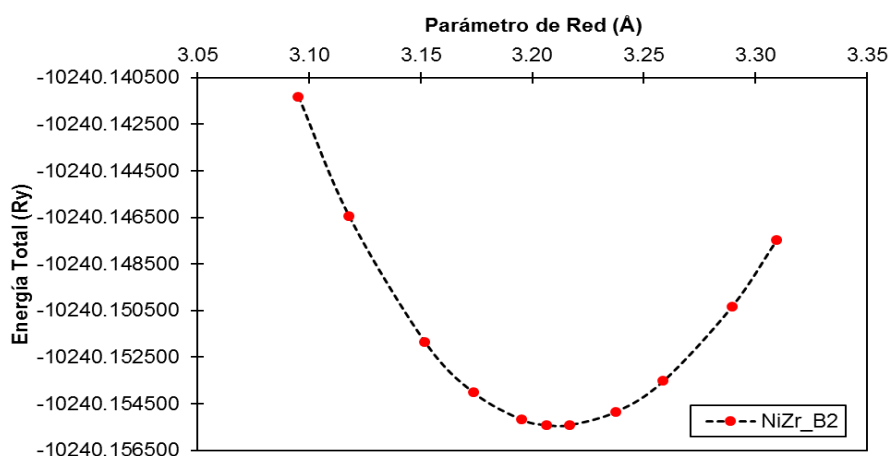
Tabla 31

Resultados del NiZr-B2 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-10240.141307	5.85	3.10	-0
-8	-10240.146456	5.89	3.12	-0
-5	-10240.151838	5.96	3.15	-0
-3	-10240.154010	6.00	3.17	-0
-1	-10240.155177	6.04	3.20	-0
0	-10240.155405	6.06	3.21	-0
1	-10240.155403	6.08	3.22	0
3	-10240.154836	6.12	3.24	-0
5	-10240.153518	6.16	3.26	0
8	-10240.150328	6.22	3.29	0
10	-10240.147468	6.25	3.31	0

Figura 48

Energía total vs Parámetro de red del NiZr-B2 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 48 se obtiene el módulo de compresibilidad

f. Resultados del NiNb:

Mediante los resultados de la Tabla 32 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 49. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (3.09 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

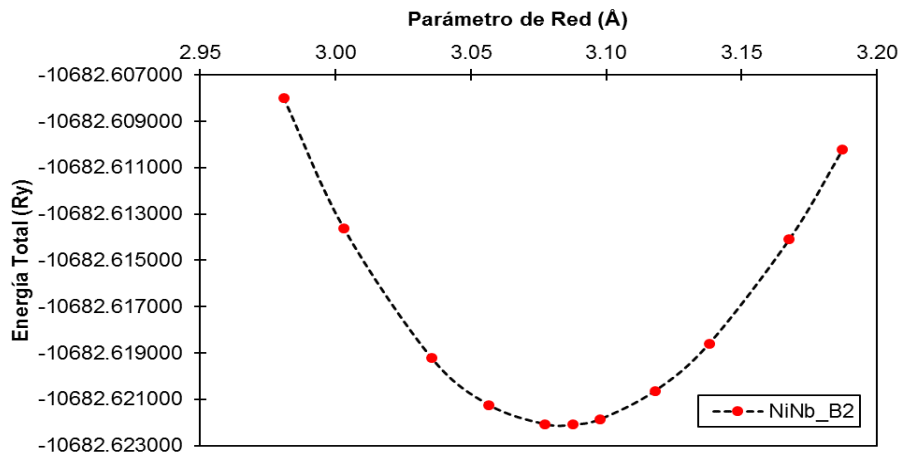
Tabla 32

Resultados del NiNb-B2 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-10682.607980	5.63	2.98	-0
-8	-10682.613618	5.68	3.00	-0
-5	-10682.619201	5.74	3.04	-0
-3	-10682.621238	5.78	3.06	0
-1	-10682.622071	5.82	3.08	0
0	-10682.622096	5.84	3.09	-0
1	-10682.621856	5.85	3.10	-0
3	-10682.620642	5.89	3.12	-0
5	-10682.618588	5.93	3.14	-0
8	-10682.614075	5.99	3.17	0
10	-10682.610221	6.02	3.19	0

Figura 49

Energía total vs Parámetro de red del NiNb-B2 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 49 se obtiene el módulo de compresibilidad

g. Resultados del NiHf:

Mediante los resultados de la Tabla 33 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 50. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (3.19 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

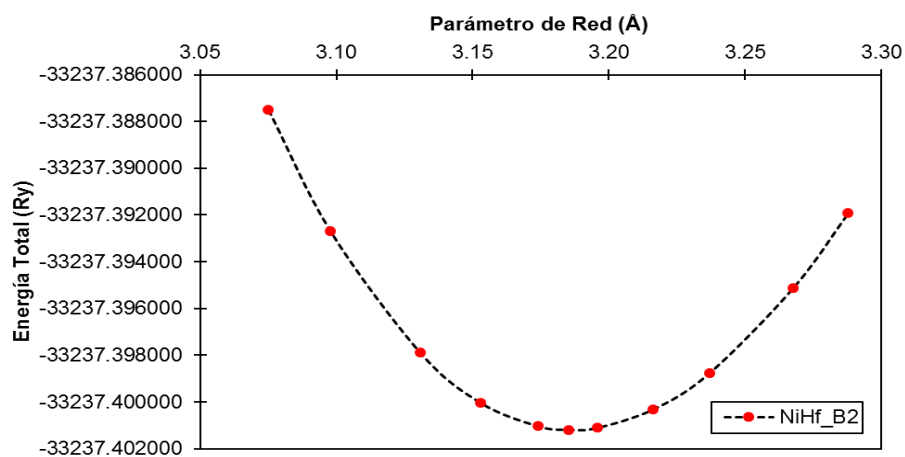
Tabla 33

Resultados del NiHf-B2 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-33237.387499	5.81	3.08	-0
-8	-33237.392697	5.85	3.10	-0
-5	-33237.397880	5.92	3.13	-0
-3	-33237.400040	5.96	3.15	0
-1	-33237.401043	6.00	3.17	-0
0	-33237.401193	6.02	3.19	-0
1	-33237.401112	6.04	3.20	0
3	-33237.400313	6.08	3.22	0
5	-33237.398755	6.12	3.24	0
8	-33237.395112	6.18	3.27	0
10	-33237.391923	6.21	3.29	0

Figura 50

Energía total vs Parámetro de red del NiHf-B2 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 50 se obtiene el módulo de compresibilidad

h. Resultados del NiTa:

Mediante los resultados de la Tabla 34 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 51. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (3.08 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

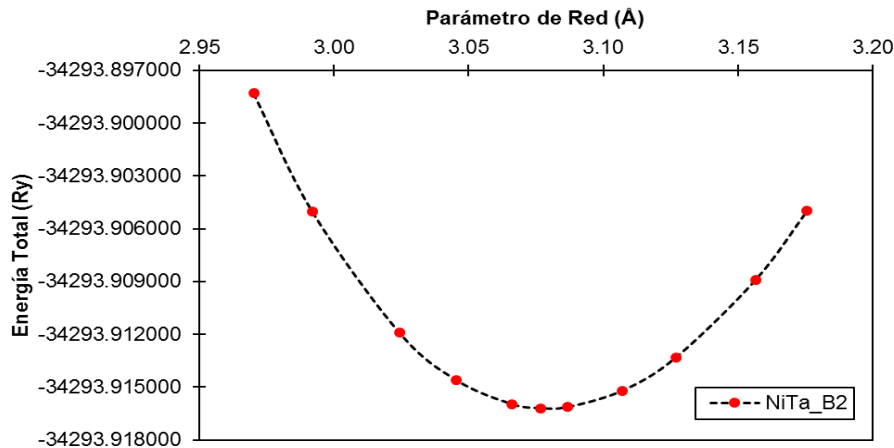
Tabla 34

Resultados del NiTa-B2 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-34293.898303	5.61	2.97	-0
-8	-34293.905020	5.65	2.99	-0
-5	-34293.911902	5.72	3.02	-0
-3	-34293.914611	5.76	3.05	-0
-1	-34293.915971	5.79	3.07	-0
0	-34293.916197	5.81	3.08	-0
1	-34293.916139	5.83	3.09	0
3	-34293.915223	5.87	3.11	0
5	-34293.913317	5.91	3.13	0
8	-34293.908888	5.97	3.16	0
10	-34293.904982	6.00	3.18	0

Figura 51

Energía total vs Parámetro de red del NiTa-B2 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 51 se obtiene el módulo de compresibilidad

III. B32

a. Resultados del NiAl:

Mediante los resultados de la Tabla 35 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 52. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (5.85 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

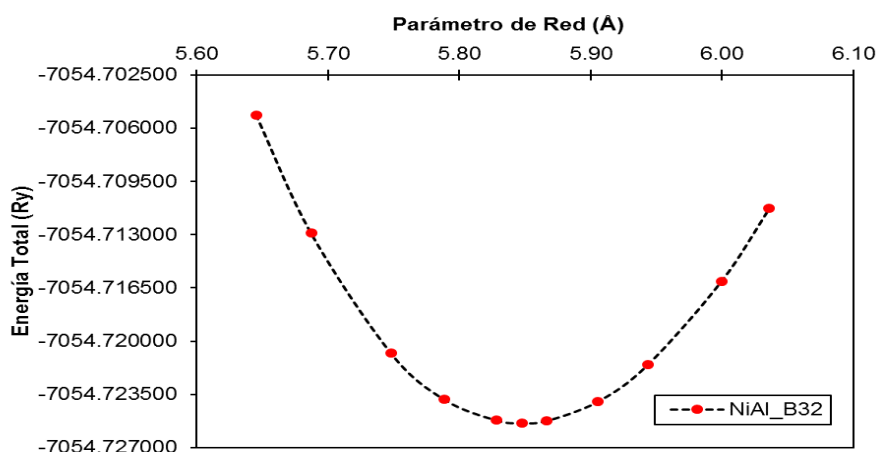
Tabla 35

Resultados del NiAl-B32 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-7054.705128	10.67	5.65	-0
-8	-7054.712903	10.75	5.69	-0
-5	-7054.720797	10.86	5.75	0
-3	-7054.723823	10.94	5.79	-0
-1	-7054.725196	11.01	5.83	-0
0	-7054.725383	11.05	5.85	-0
1	-7054.725232	11.09	5.87	-0
3	-7054.723982	11.16	5.91	-0
5	-7054.721557	11.23	5.94	-0
8	-7054.716069	11.34	6.00	-0
10	-7054.711284	11.41	6.04	0

Figura 52

Energía total vs Parámetro de red del NiAl-B32 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 52 se obtiene el módulo de compresibilidad

b. Resultados del NiV:

Mediante los resultados de la Tabla 36 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 53. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (5.77 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

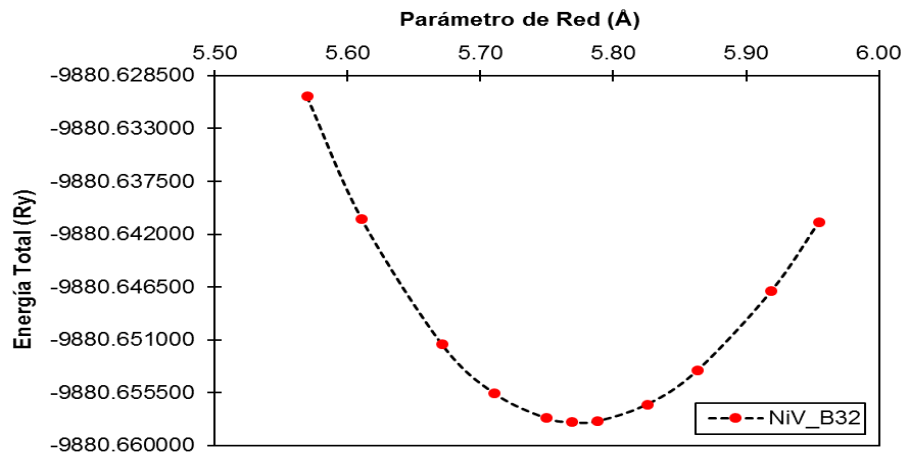
Tabla 36

Resultados del NiV B32 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-9880.630263	10.53	5.57	1.54
-8	-9880.640725	10.60	5.61	1.57
-5	-9880.651388	10.72	5.67	1.61
-3	-9880.655547	10.79	5.71	1.64
-1	-9880.657673	10.87	5.75	1.67
0	-9880.658018	10.90	5.77	1.70
1	-9880.657931	10.94	5.79	1.72
3	-9880.656502	11.01	5.83	1.78
5	-9880.653622	11.08	5.86	1.85
8	-9880.646875	11.19	5.92	1.95
10	-9880.640990	11.25	5.95	1.99

Figura 53

Energía total vs Parámetro de red del NiV-B32 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 53 se obtiene el módulo de compresibilidad

c. Resultados del NiFe:

Mediante los resultados de la Tabla 37 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 54. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (5.68 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

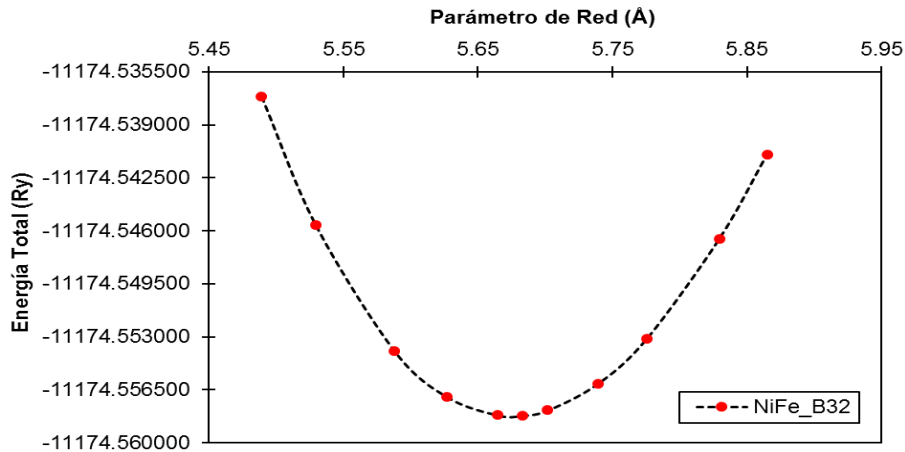
Tabla 37

Resultados del NiFe-B32 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-11174.537145	10.37	5.49	6.16
-8	-11174.545619	10.45	5.53	6.25
-5	-11174.553953	10.56	5.59	6.37
-3	-11174.556950	10.63	5.63	6.44
-1	-11174.558175	10.71	5.66	6.51
0	-11174.558197	10.74	5.68	6.54
1	-11174.557847	10.78	5.70	6.57
3	-11174.556103	10.85	5.74	6.63
5	-11174.553113	10.91	5.78	6.68
8	-11174.546506	11.02	5.83	6.76
10	-11174.540950	11.08	5.86	6.80

Figura 54

Energía total vs Parámetro de red del NiFe-B32 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 54 se obtiene el módulo de compresibilidad

d. Resultados del NiCu:

Mediante los resultados de la Tabla 38 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 55. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (5.68 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

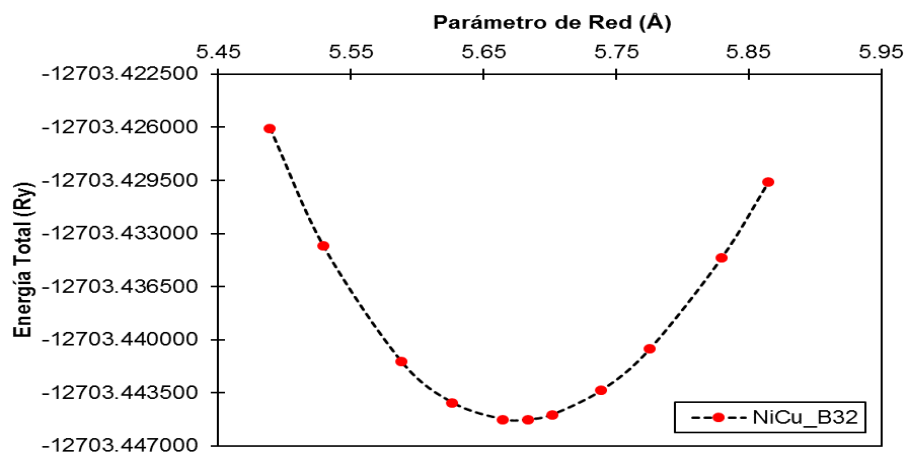
Tabla 38

Resultados del NiCu-B32 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-12703.426063	10.37	5.49	-0
-8	-12703.433839	10.45	5.53	-0
-5	-12703.441451	10.56	5.59	-0
-3	-12703.444167	10.63	5.63	-0
-1	-12703.445256	10.71	5.66	-0
0	-12703.445271	10.74	5.68	0
1	-12703.444942	10.78	5.70	0
3	-12703.443342	10.85	5.74	-0
5	-12703.440610	10.91	5.78	0
8	-12703.434622	11.02	5.83	-0
10	-12703.429601	11.08	5.86	0

Figura 55

Energía total vs Parámetro de red del NiCu-B32 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 55 se obtiene el módulo de compresibilidad

e. Resultados del NiZr:

Mediante los resultados de la Tabla 39 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 56. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (6.31 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

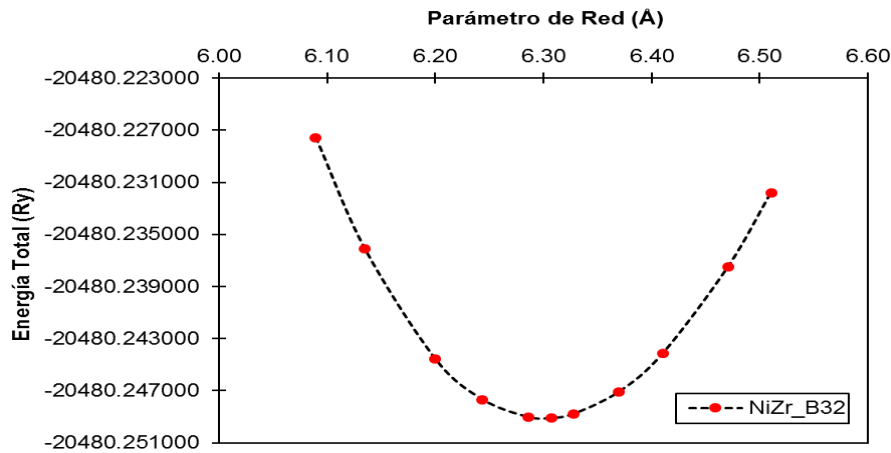
Tabla 39

Resultados del NiZr-B32 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-20480.227572	11.51	6.09	-0
-8	-20480.236074	11.59	6.13	-0
-5	-20480.244588	11.72	6.20	0
-3	-20480.247683	11.80	6.24	-0
-1	-20480.249045	11.88	6.29	0
0	-20480.249112	11.92	6.31	-0
1	-20480.248788	11.96	6.33	-0
3	-20480.247097	12.04	6.37	0
5	-20480.244126	12.11	6.41	-0
8	-20480.237474	12.23	6.47	-0
10	-20480.231793	12.30	6.51	-0

Figura 56

Energía total vs Parámetro de red del NiZr-B32 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 56 se obtiene el módulo de compresibilidad

f. Resultados del NiNb:

Mediante los resultados de la Tabla 40 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 57. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (6.13 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

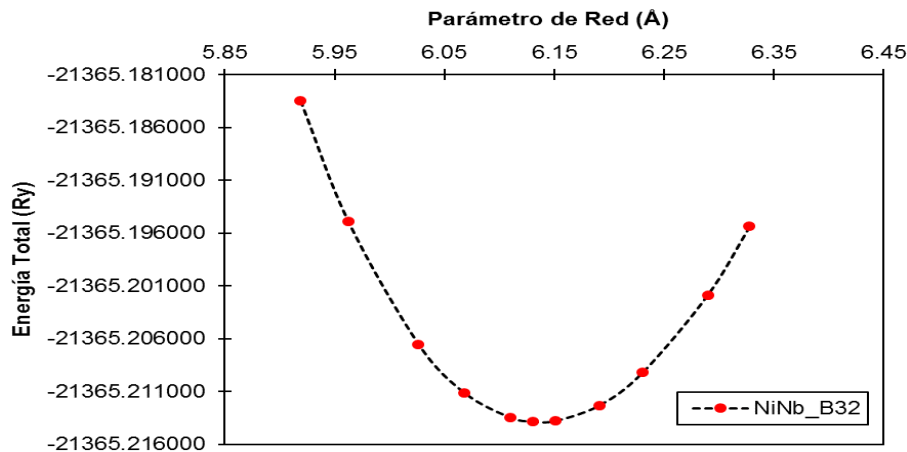
Tabla 40

Resultados del NiNb-B32 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-21365.183477	11.19	5.92	-0
-8	-21365.194899	11.27	5.96	-0
-5	-21365.206537	11.39	6.03	-0
-3	-21365.211137	11.47	6.07	-0
-1	-21365.213474	11.55	6.11	0
0	-21365.213855	11.59	6.13	0
1	-21365.213796	11.62	6.15	0
3	-21365.212336	11.70	6.19	0
5	-21365.209195	11.77	6.23	-0
8	-21365.201867	11.89	6.29	0
10	-21365.195385	11.96	6.33	0

Figura 57

Energía total vs Parámetro de red del NiNb-B32 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 78 se obtiene el módulo de compresibilidad

g. Resultados del NiHf:

Mediante los resultados de la Tabla 41 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 58. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (6.29 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

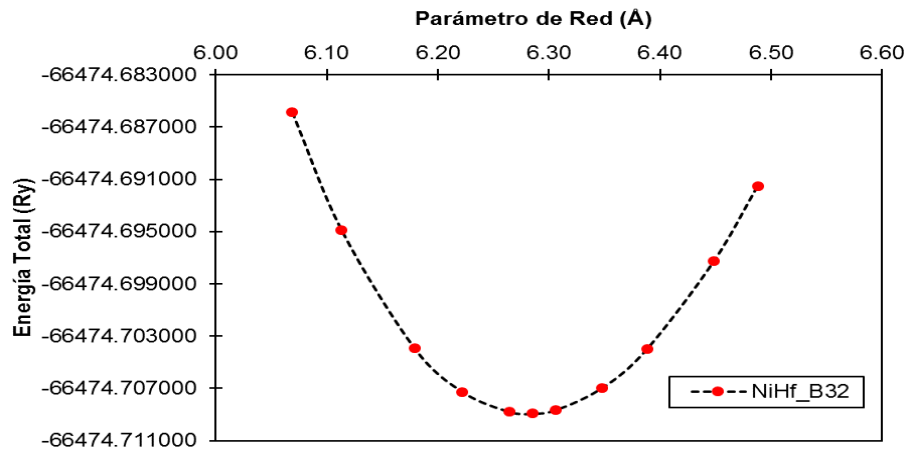
Tabla 41

Resultados del NiHf-B32 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-66474.685857	11.47	6.07	0
-8	-66474.694887	11.55	6.11	-0
-5	-66474.703913	11.68	6.18	-0
-3	-66474.707275	11.76	6.22	0
-1	-66474.708796	11.84	6.26	-0
0	-66474.708936	11.88	6.29	-0
1	-66474.708661	11.92	6.31	-0
3	-66474.707002	12.00	6.35	-0
5	-66474.704003	12.07	6.39	0
8	-66474.697274	12.19	6.45	-0
10	-66474.691491	12.26	6.49	-0

Figura 58

Energía total vs Parámetro de red del NiHf-B32 obtenidos por el WIEN2k



Nota: con el comportamiento parabólico de la Figura 58 se obtiene el módulo de compresibilidad

h. Resultados del NiTa:

Mediante los resultados de la Tabla 42 (segunda y tercera columna) se obtiene la curva de la energía total mínima como se observa en la Figura 59. Para obtener dicha curva primero se tiene que colocar el parámetro de red (6.18 Å) y luego variar el volumen de la estructura (como se observa en la primera columna), todo esto en el WIEN2k.

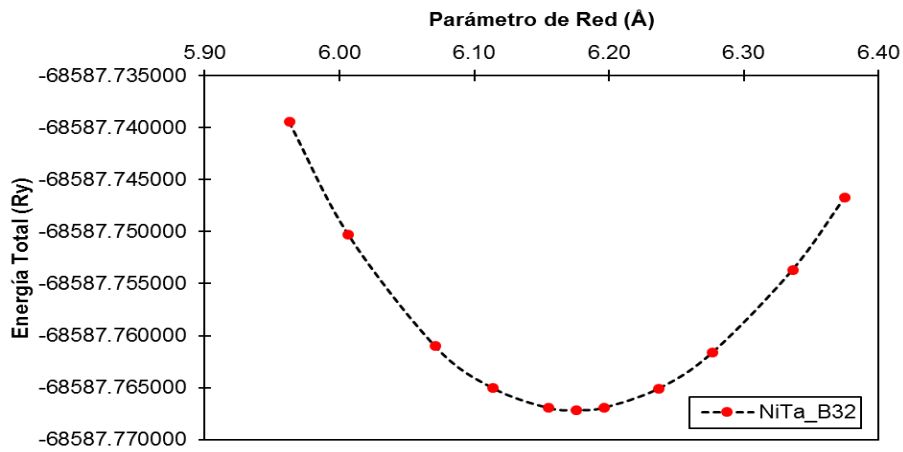
Tabla 42

Resultados del NiTa-B32 obtenidos por el WIEN2k

Volumen	Energía Total	Parámetro de red		Momento Magnético
	(Ry)	a(u.a.)	a(Å)	(μ_B)
-10	-68587.739463	11.27	5.96	-0
-8	-68587.750305	11.35	6.01	-0
-5	-68587.761027	11.47	6.07	-0.27
-3	-68587.765006	11.55	6.11	1.20
-1	-68587.766930	11.63	6.15	1.42
0	-68587.767138	11.67	6.18	1.56
1	-68587.766921	11.71	6.20	1.62
3	-68587.765087	11.79	6.24	1.72
5	-68587.761601	11.86	6.28	1.84
8	-68587.753673	11.97	6.34	1.94
10	-68587.746748	12.05	6.38	1.98

Figura 59

Energía total vs Parámetro de red del NiTa-B32 obtenidos por el WIEN2k

**Nota:** con el comportamiento parabólico de la Figura 59 se obtiene el módulo de compresibilidad

ANEXO 4

Propiedades electrónicas

Usando el código WIEN2k mediante la metodología FP-LAPW, se obtuvo la densidad de estados (DOS) de la B2, B32 y de los elementos en sus estados fundamentales, en las siguientes figuras se observa el DOS de las estructuras estudiadas.

a. En su estado fundamental

La línea roja (horizontal y vertical) se debe a la diferencia entre la energía total y la energía de FERMI. Los valores menores a 0 (abscisa) se encuentran los electrones desocupado, pero los valores mayores a 0 (abscisa) se encuentra los electrones ocupado. En las siguientes Figuras (60 al 62) se muestra DOS de los elementos fundamentales, el Ni, Fe son elementos magnéticos porque son asimétricos (por su spin up y down), los demás elementos son no magnéticos porque son simétricos (por su spin up y down).

Figura 60

DOS del Al (FCC) con respecto a su energía, con el spin up y down

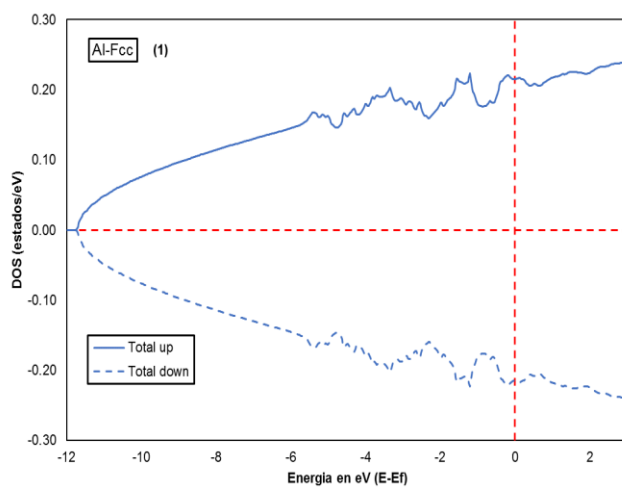


Figura 61

DOS del V (FCC), Ni (FCC), Fe (BCC), Cu (FCC) con respecto a su energía, con el spin up y down

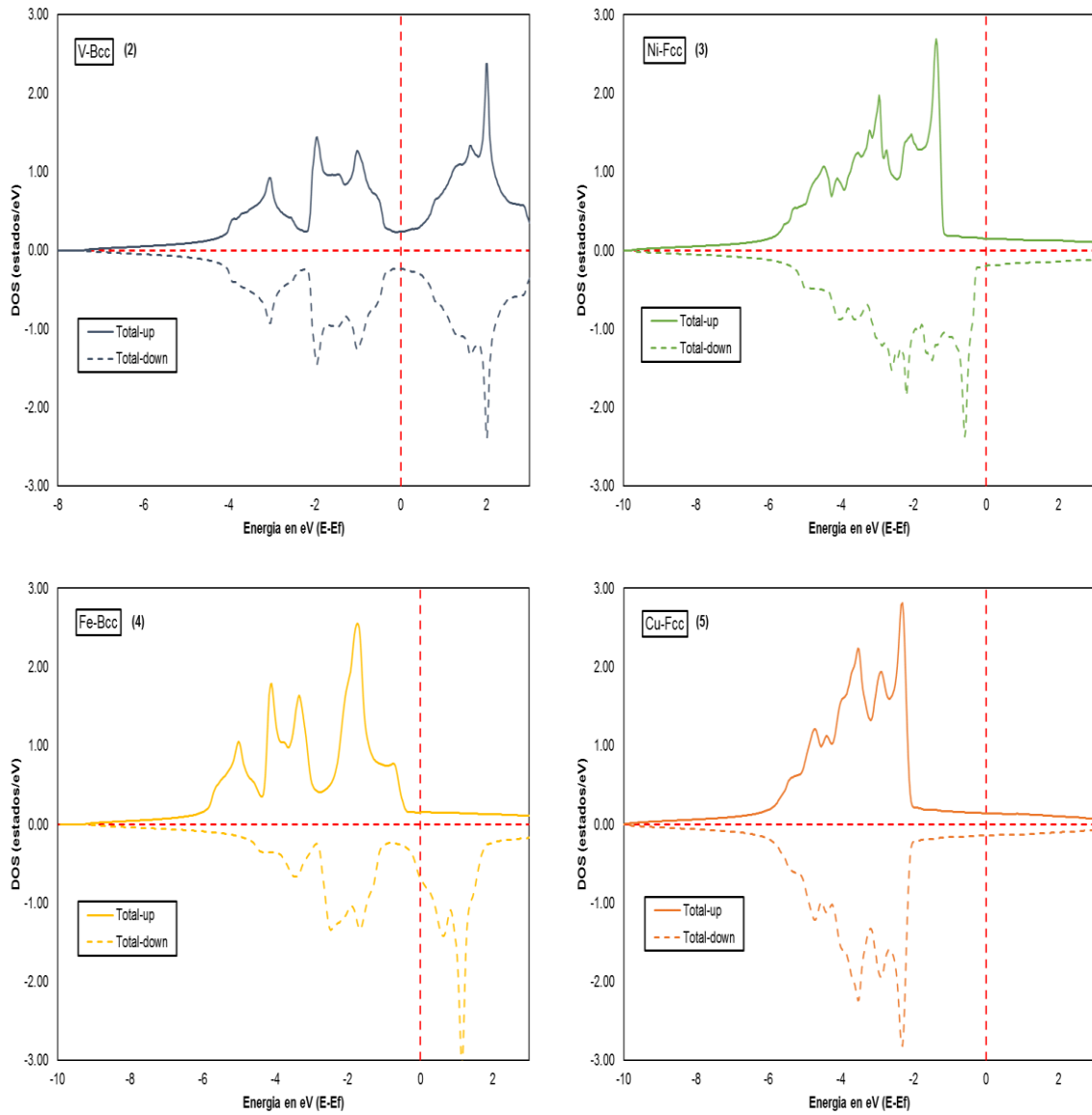
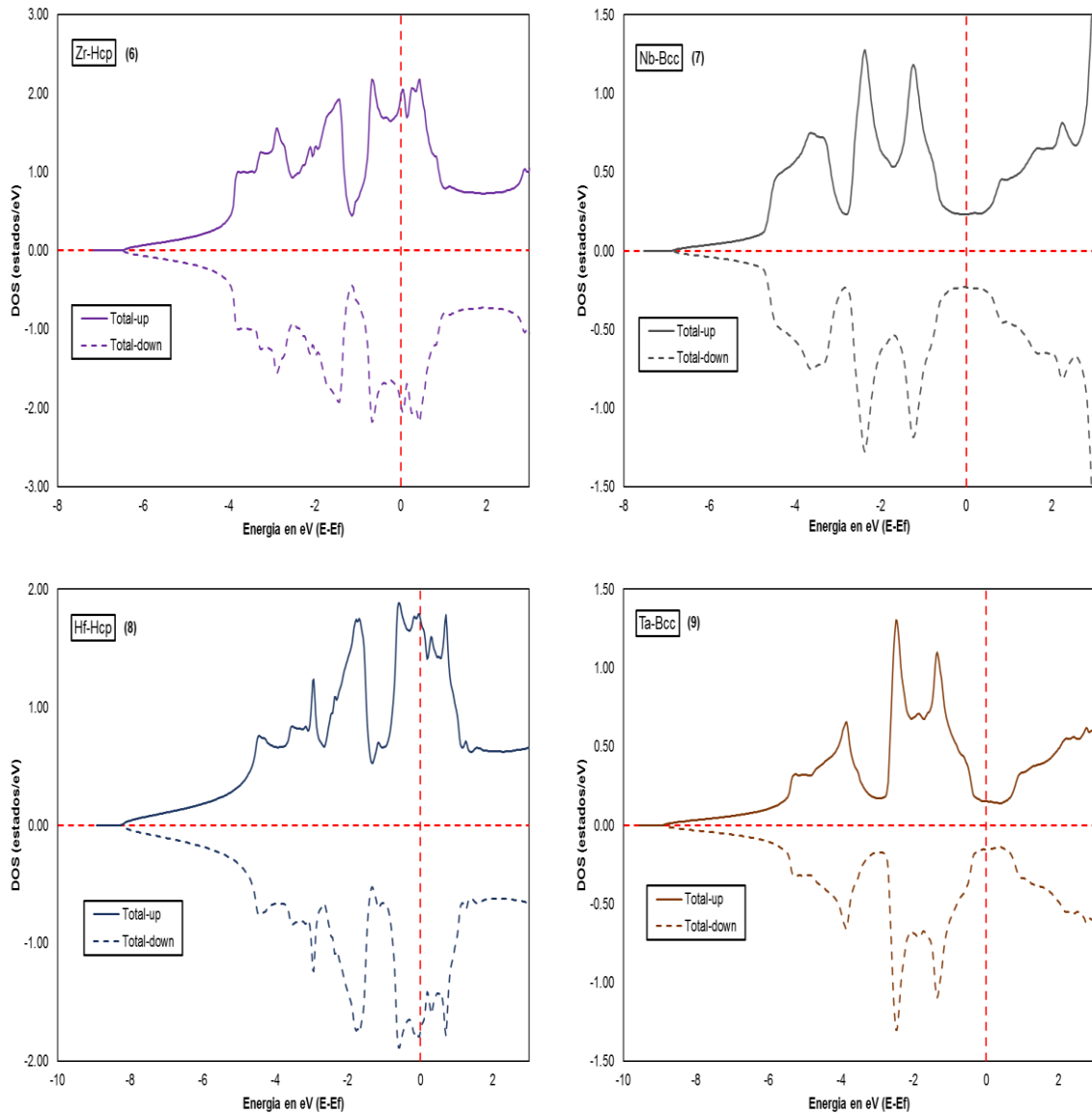


Figura 62

DOS del Zr (HCP), Nb (BCC), Hf (HCP), Ta (BCC) con respecto a su energía, con el spin up y down



b. Estructura B2

La línea roja (horizontal y vertical) se debe a la diferencia entre la energía total y la energía de FERMI. Los valores menores a 0 (abscisa) se encuentran los electrones desocupado, pero los valores mayores a 0 (abscisa) se encuentra los electrones ocupado. En las siguientes Figuras (63 y 64) se muestra DOS de las estructuras B2, el NiV, NiFe, NiCu son elementos magnéticos porque son asimétricos (por su spin up y down), los demás elementos son no magnéticos porque son simétricos (por su spin up y down).

Figura 63

DOS del NiAl, NiV, NiFe, NiCu con respecto a su energía en la estructura B2, con el spin up y down

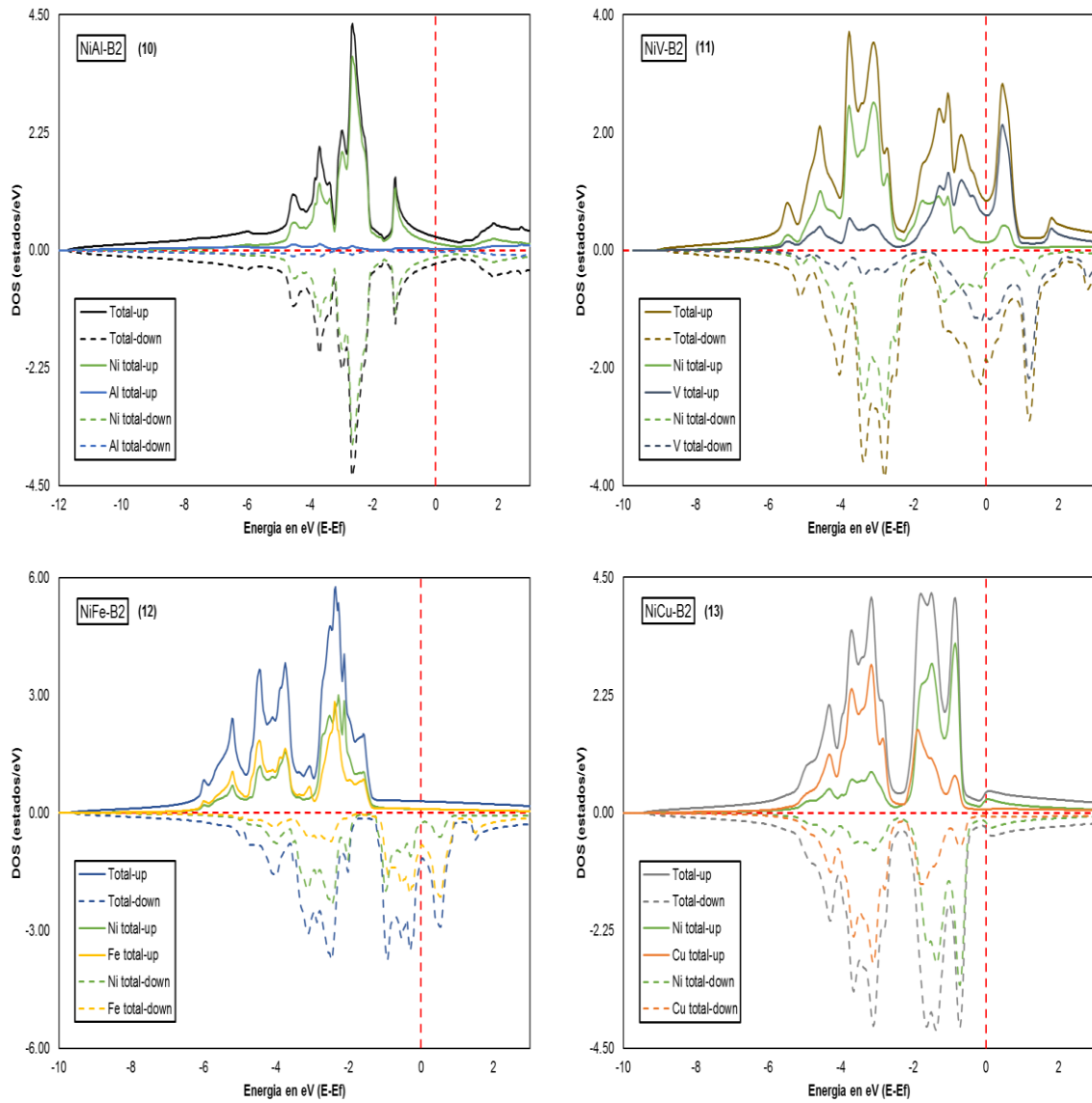
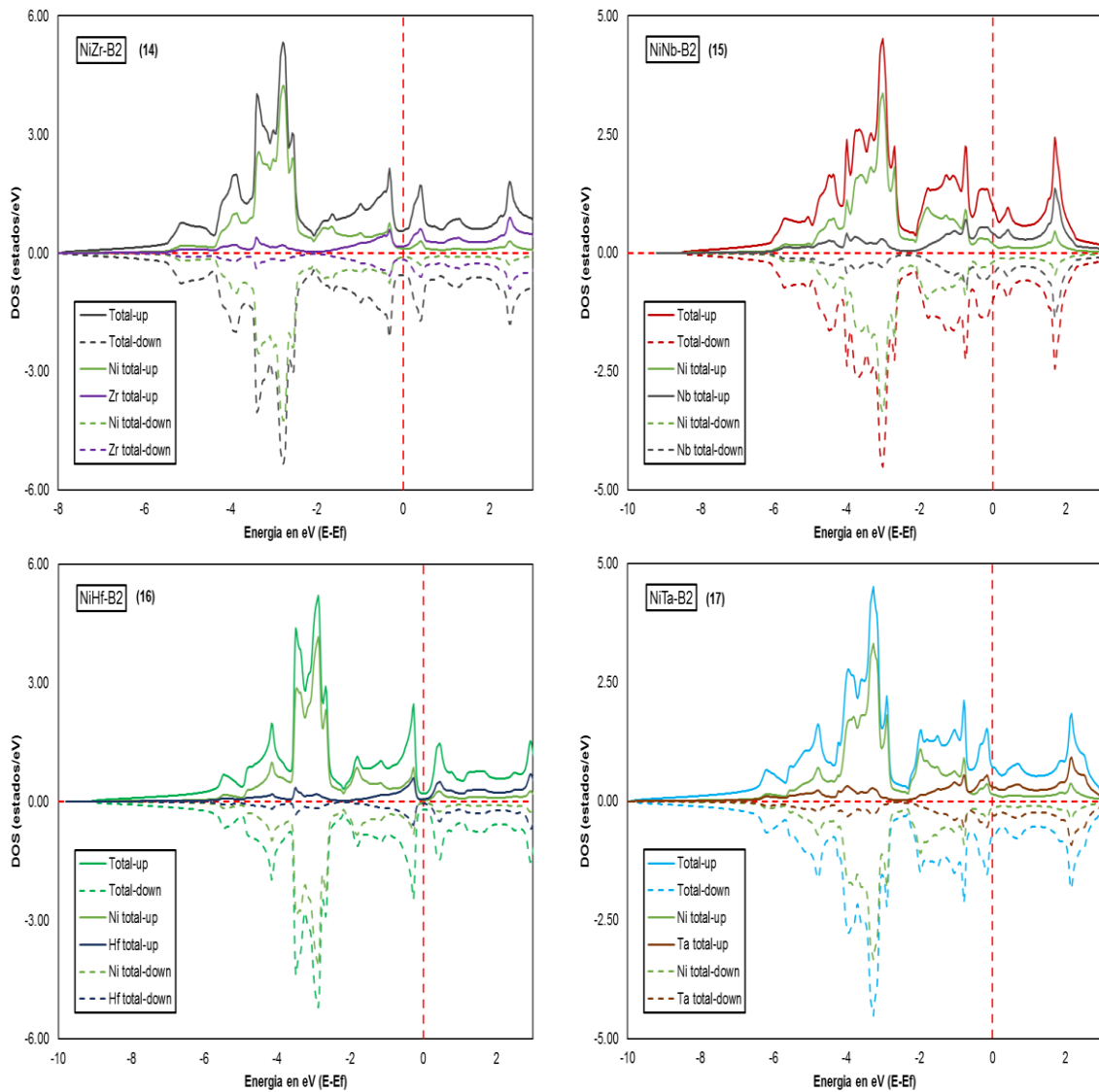


Figura 64

DOS del NiZr, NiNb, NiHf, NiTa con respecto a su energía en la estructura B2, con el spin up y down



c. Estructura B32

La línea roja (horizontal y vertical) se debe a la diferencia entre la energía total y la energía de FERMI. Los valores menores a 0 (abscisa) se encuentran los electrones desocupado, pero los valores mayores a 0 (abscisa) se encuentra los electrones ocupado. En las siguientes Figuras (65 y 66) se muestra DOS de las estructuras B32, el NiV, NiFe, NiTa son elementos magnéticos porque son asimétricos (por su spin up y down), los demás elementos son no magnéticos porque son simétricos (por su spin up y down).

Figura 65

DOS del NiAl, NiV, NiFe, NiCu con respecto a su energía en la estructura B32, con el spin up y down

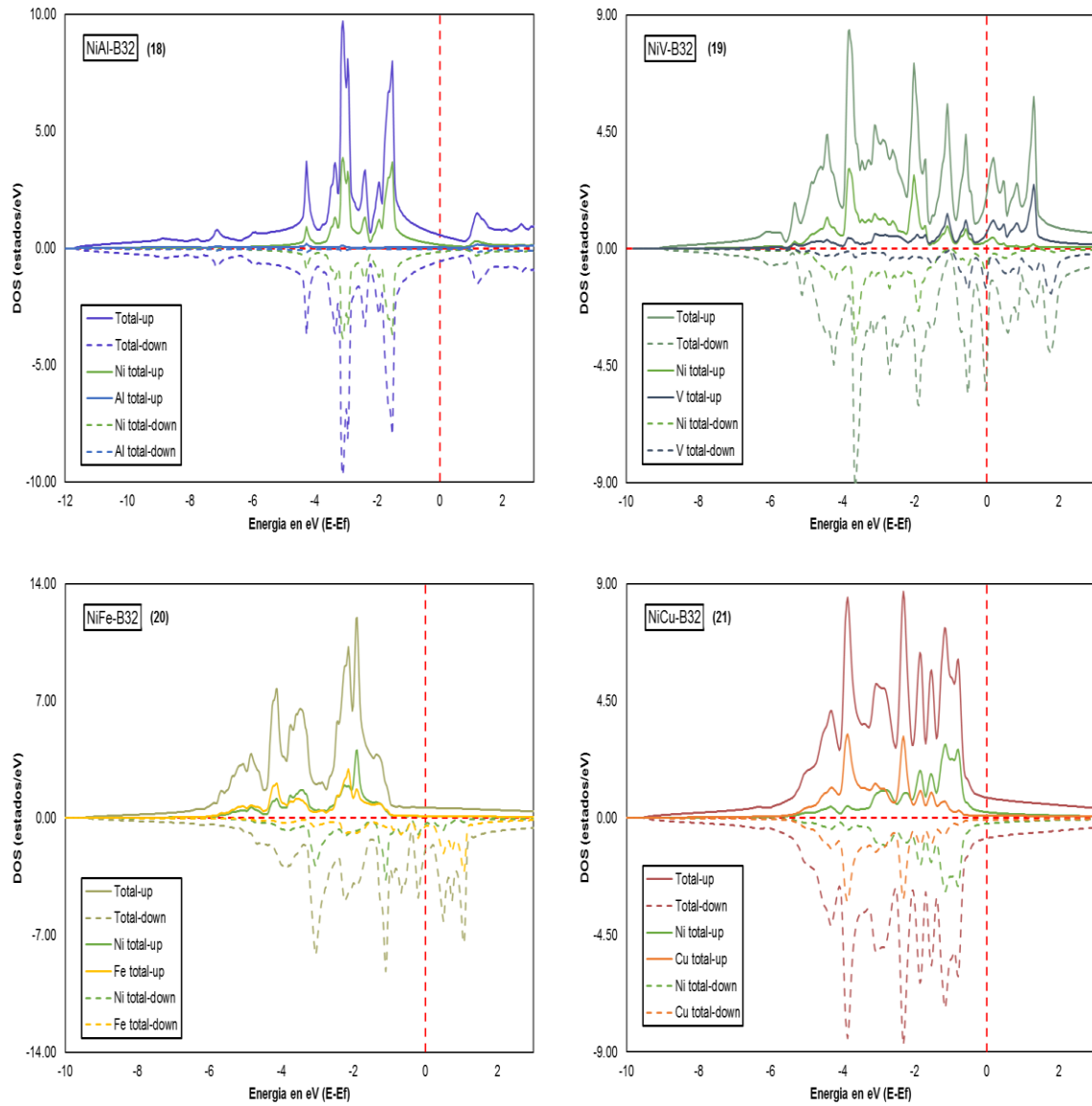
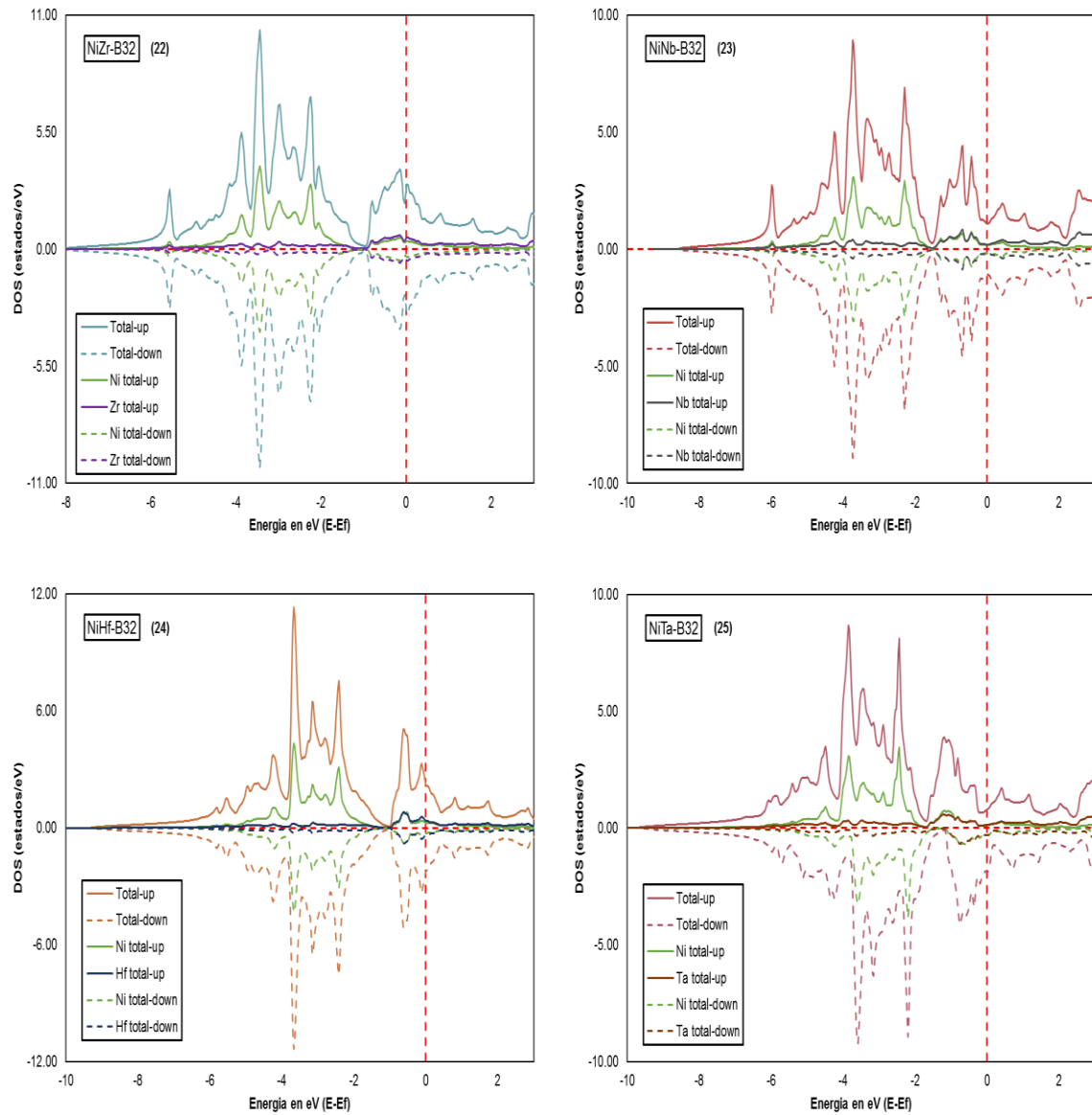


Figura 66

DOS del NiZr, NiNb, NiHf, NiTa con respecto a su energía en la estructura B32, con el spin up y down



ANEXO 5

Cálculo de la entalpía de formación

$$\Delta H^{xy} = \frac{E(F) - [N_x E(x^{E.F}) + N_y E(y^{E.F})]}{N_x + N_y} \quad (2)$$

I. B2

Para realizar el cálculo de la entalpía de formación se tiene que aplicar la Ecuación 2, donde ΔH^{xy} es igual al $E(F)$ (es la energía mínima total del NiAl-B2) menos la suma de $N_x E(x^{E.F})$ (energía mínima total del Ni-Fcc por la cantidad de átomos del Ni) y de $N_y E(y^{E.F})$ (energía mínima total del Al-Fcc por la cantidad de átomos del Al), todo esto dividido por la suma de N_x (un átomo de Ni, porque es parte de la estructura B2) y N_y (un átomo de Al, porque es parte de la estructura B2). De la misma forma se realiza para los otros siete compuestos (NiV, NiFe, NiCu, NiZr, NiNb, NiHf, NiTa).

a. NiAl:

$$\frac{-3527.4095 - (-3041.6692 - 485.6443)}{2} = -0.048 \text{ Ry}$$

Conversión:

$$-0.048 \text{ Ry} \times \left(\frac{2.1798741 \times 10^{-18} \text{ J}}{\text{Ry}} \right) \times \left(\frac{6.0022140857 \times 10^{21}}{\text{mol}} \right)$$

$$= -63.0186 \text{ kJ/mol} \times \left(\frac{1 \text{ eV}}{96.52579 \text{ kJ}} \right)$$

$$\Delta H^{xy} = -0.65 \text{ eV/mol}$$

II. B32

Para realizar el cálculo de la entalpía de formación se tiene que aplicar la Ecuación 2, donde ΔH^{xy} es igual a la $E(F)$ (es la energía mínima total del NiAl-B32) menos la suma de $N_x E(x^{E.F})$ (energía mínima total del Ni-Fcc por la cantidad de átomos de Ni) y de $N_y E(y^{E.F})$ (energía mínima total del Al-Fcc por la cantidad de átomos de Al), todo esto dividido por la suma de N_x (dos átomos de Ni, porque es parte de la estructura B32) y N_y (dos átomos de Al, porque es parte de la estructura

B32). De la misma forma se realiza para los otros siete compuestos (NiV, NiFe, NiCu, NiZr, NiNb, NiHf, NiTa).

a. NiAl:

$$\frac{-7054.7253 - (-3041.6692 - 485.6443)}{4} = -0.0246 \text{ Ry}$$

Conversión:

$$\begin{aligned} & -0.0246 \text{ Ry} \times \left(\frac{2.1798741 \times 10^{-18} \text{ J}}{\text{Ry}} \right) \times \left(\frac{6.0022140857 \times 10^{21}}{\text{mol}} \right) \\ & = -32.2717 \text{ kJ/mol} \times \left(\frac{1 \text{ eV}}{96.52579 \text{ kJ}} \right) \end{aligned}$$

$$\Delta H^{xy} = -0.33 \text{ eV/mol}$$

ANEXO 6

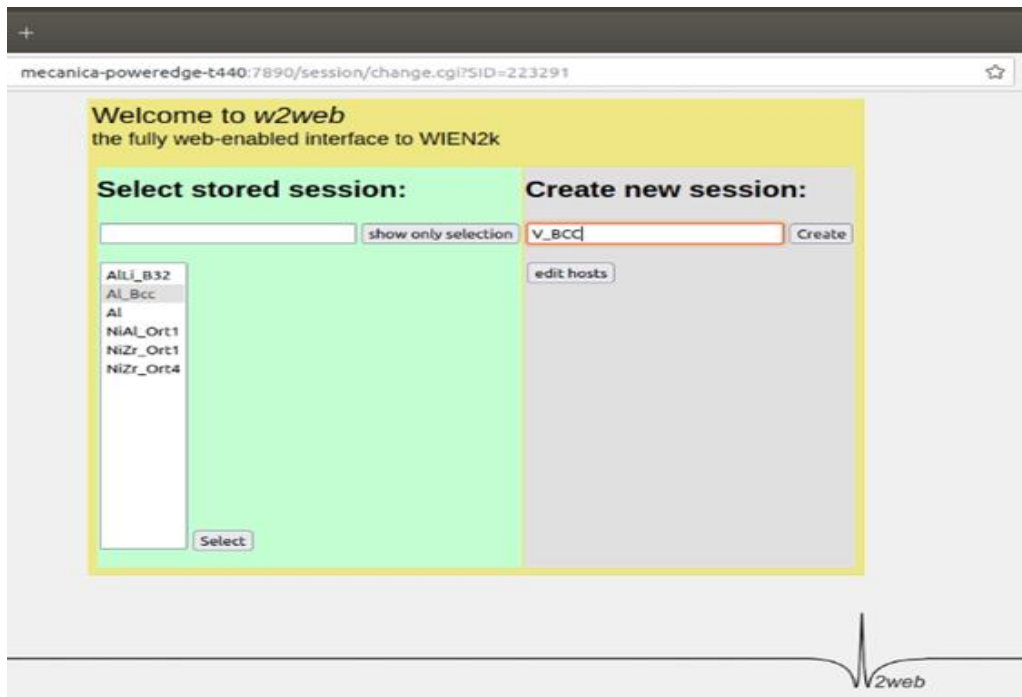
Pasos para el ingreso al WIEN2k

I. Creación de una nueva sesión

Se ingresa al interfaz del WIEN2k, luego se crea una nueva sesión con la estructura que el usuario desee y haga clic en el botón crear. En la Figura 67 se muestra el interfaz del WIEN2k donde se visualiza la estructura del Vanadio (V_BCC) que es parte de las estructuras estudiadas en la presente tesis.

Figura 67

Plataforma del WIEN2k donde se crea la sección e ingresar a los archivos ya existentes.



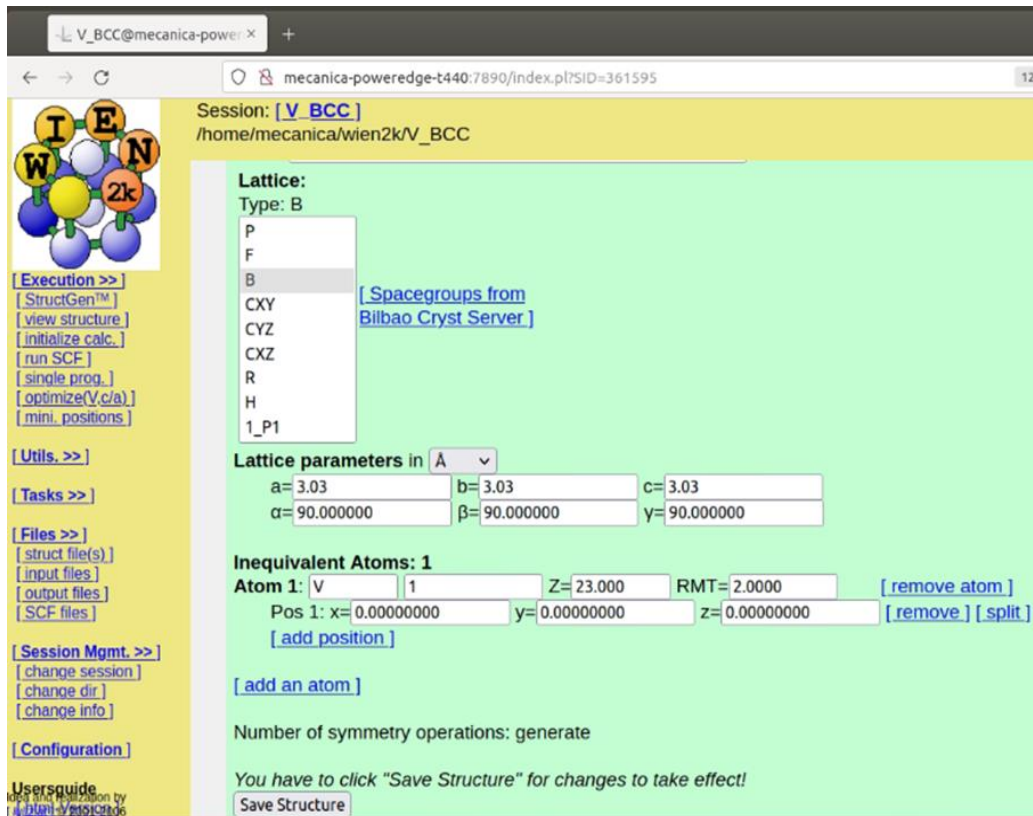
Nota: imagen extraída de la plataforma del WIEN2k.

II. Crear los datos de la estructura caso.struct

Se ingresa los siguientes datos: el tipo de estructura, el parámetro de red, las posiciones del átomo en los ejes x, y, z. Al ingresar el átomo Vanadio (V_BCC) automáticamente reconocerá su número atómico, el RMT por defecto es el número 2, una vez culminado con el ingreso de datos hacer clic en guardar. En la Figura 68 se muestra el ingreso del V_BCC.

Figura 68

Complementación de los datos del átomo Vanadio (V_BCC)



Nota: imagen extraída de la plataforma del WIEN2k.

III. Iniciación del cálculo (**init lapw**)

Se escribe la dirección donde se encuentra el WIEN2k y se coloca `init_lapw`, luego se comienza con los siguientes pasos:

- **nn:** permite determinar los radios de las esferas atómicas, se escribe por defecto el número 2.
- **x lstart:** se especifica el potencial de correlación de intercambio deseado, se escribe el 13 el cual pertenece al GGA-PBE 96 (mencionado en el marco teórico). Además, la energía de corte se escribe como recomendación el número -6.0 Ry.
- **x kgen:** son los puntos K, se escribe el 10000.
- **x dstart:** genera una densidad inicial para el ciclo SCF, también nos preguntan si deseamos calcular la polarización del spin, por lo que se escribe “y”.

Si todo está correcto al finalizar dirá que el **init_lapw** está “ok”. En la Figura 69 se muestra los pasos.

Al terminar con todos los pasos, se busca el archivo V_BCC.init1 para colocar el RK_{max} igual a 10, y el L_{max} igual a 10. En la Figura 70 se muestra el RK_{max} y el L_{max} con dichos valores.

Figura 69

Pasos del `init_lapw` del átomo Vanadio (V_BCC)

```

next is nn
> nn (19:30:33) specify nn-bondlength factor: (usually=2) [and optionally dlimit, dstmax (about 1.d-5, 20)]
2
DSTMAX: 22.000000476837158
ltx,lty,ltz 5 5 5 30.000000000000000 30.000000000000000 30.000000000000000
NAMED ATOM: V 1 Z changed to IATNR+999 to determine equivalency

ATOM 1 V 1 ATOM 1 V 1
RMT( 1)=2.00000 AND RMT( 1)=2.00000
SUMS TO 4.00000 LT. NN-DIST= 5.19615
STOP NN ENDS
> lstart (19:31:39) SELECT XCPOT:
recommended: PBE [(13) GGA of Perdew-Burke-Ernzerhof 96]
LDA [( 5)]
WC [(11) GGA of Wu-Cohen 2006]
PBESOL [(19) GGA of Perdew etal. 2008]

13
SELECT ENERGY to separate core and valence states:
recommended: -6.0 Ry (check how much core charge leaks out of MT-sphere)
ALTERNATIVELY: specify charge localization (between 0.97 and 1.0) to select core state
-6.0
Note: The following floating-point exceptions are signalling: IEEE_UNDERFLOW_FLAG IEEE_DENORMAL
STOP LSTART ENDS
0.0u 0.0s 0:07.52 1.1% 0+0k 280+528to 2pf+0w
----> continue with kgen or edit the V_BCC.lnst file and rerun lstart (c/e)
c
----> in V_BCC.in1_st select RKmax ( usually 5.0 - 9.0 ), LVNS and LOS
----> in V_BCC.in2_st select GMAX and Fermi-Energy method
> inputfiles prepared (19:32:38)
inputfiles prepared
next is kgen
> kgen (19:32:38) NUMBER OF K-POINTS IN WHOLE CELL: (0 allows to specify 3 divisions of G)
10000
length of reciprocal lattice vectors: 1.481 1.481 1.481 21.544 21.544 21.544
Shift of k-mesh allowed. Do you want to shift: (0=no, 1=shift)
1
286 k-points generated, ndiv= 21 21 21
STOP KGEN ENDS
0.2u 0.0s 0:11.37 1.7% 0+0k 120+2336to 1pf+0w
----> check in V_BCC.klist number of generated K-points
----> continue with dstart or execute kgen again or exit (c/e/x)
c
next is dstart
> dstart -p (19:33:53) running dstart in single mode
STOP DSTART ENDS
0.8u 0.0s 0:00.82 98.7% 0+0k 0+208to 0pf+0w
----> check in V_BCC.outputd if gmax > gmin, normalization
----> new V_BCC.in0 generated
----> do you want to perform a spinpolarized calculation ? (n/y)
y
> dstart -up -p (19:34:07) running dstart in single mode
STOP DSTART ENDS
0.8u 0.0s 0:00.82 98.7% 0+0k 0+208to 0pf+0w
> dstart -dn -p (19:34:11) running dstart in single mode
STOP DSTART ENDS
0.8u 0.0s 0:00.83 100.0% 0+0k 0+208to 0pf+0w
----> do you want to perform an antiferromagnetic calculation ? (N/y)
N
init_lapw finished ok
mecanica@mecanica-PowerEdge-T440:~/wien2k/V_BCC$

```

Nota: imagen extraída de la plataforma del WIEN2k.

Figura 70

Cambio del RK_{max} y del L_{max} con el valor 10

```

WFFIL EF= 0.50000 (WFFIL, WFPRI, ENFIL, SUPWF)
10.0 10 4 ELPA pxq hm (R-MT*K-MAX,MAX L IN WF,V-NMT,lib,gridshape,hm/lm)
0.30 5 0 (GLOBAL E-PARAMETER WITH n OTHER CHOICES, global APW/LAPW)
0 0.30 0.0000 CONT 1
0 -4.89 0.0001 STOP 1
1 0.30 0.0000 CONT 1
1 -2.94 0.0001 STOP 1
2 0.30 0.0010 CONT 1
K-VECTORS FROM UNIT:4 -9.0 1.5 31 emin / de (emax=Ef+de) / nband

```

Nota: imagen extraída de la plataforma del WIEN2k.