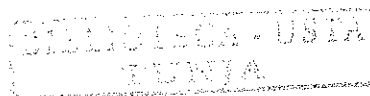


TIE
R29
2012

0943

COMPARACIÓN DE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DEL VOLUMEN
 MgB_2 Y EN LA SUPERFICIE slab 1×1



LUIS CARLOS REYES PARRA

0943

UNIVERSIDAD SANTO TOMÁS
FACULTAD DE INGENIERÍA ELECTRÓNICA

TUNJA

2012

**COMPARACIÓN DE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DEL VOLUMEN
 MgB_2 Y EN LA SUPERFICIE slab 1×1**

LUIS CARLOS REYES PARRA

**Trabajo de grado en la modalidad
“Monografía”
con el objetivo de obtener el Título de
INGENIERO ELECTRÓNICO**

DIRECTORA:

Sully Segura Peña

MSc. Física

**UNIVERSIDAD SANTO TOMÁS
FACULTAD DE INGENIERÍA ELECTRÓNICA**

TUNJA

2012

Nota de Aceptación:

Firma del presidente del jurado

Firma del jurado

Firma del jurado

**ESTE TRABAJO ES
RESPONSABILIDAD ÚNICA Y EXCLUSIVA
DEL AUTOR**

Tunja, Octubre de 2012

AGRADECIMIENTOS

El autor expresa su agradecimiento a:

Al DIOS supremo

A mi familia, por su constante apoyo.

A Sully Segura, docente de la Universidad Santo Tomás Tunja seccional Tunja, directora del proyecto.

Al profesor Jairo Arbey Rodríguez, por su asesoría y ayuda en el software Wien2K.

Al grupo de investigaciones en Nanotecnología y Nuevos Materiales NMT⁹, por esta oportunidad de pertenecer a un grupo especializado.

Al centro de investigaciones por su apoyo y colaboración en el proyecto.

A José Ricardo Casallas, decano de la Facultad de Ingeniería Electrónica por sus aportes y ayuda profesional.

A los docentes de la Facultad de Ingeniería Electrónica, por sus aportes teóricos y apoyo.

CONTENIDO

	Pág.
LISTA DE FIGURAS	10
LISTA DE TABLAS	12

ABSTRACT

In this document work, I have calculated the structural and electronic properties of Magnesium Diboride MgB_2 in volume and surface in the slab 1×1 , using *density functional theory* DFT with the Generalized Gradient Approximation (GGA) to calculate the correlation energy exchange with the method full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW).

With the obtained results, I have found the lattice parameters which the energy of the structure is minimized and stabilized. I show the difference between the obtained values with experimental values; also I have obtained the density of states and band structures by atoms and orbitals, which allowed the electronic description of the material.

For another hand, I show the possible electronic applications can be found in surface as the thin film and volume with the realization of superconducting wires. This difference allows a rational use of energy, developing any application for example, super-currents in various systems.

Keywords: Magnesium Diboride, Superconductivity, Density of States, Band Structure.

1.5	Superconductividad en MgB_2	43
1.5.1	Dos bandas superconductoras	43
1.5.2	Efecto isótopo	44
1.6	Propiedades básicas	45
1.7	Posibles aplicaciones	47
CAPÍTULO 2		
2.	MARCO TEÓRICO	53
2.1	Ecuación de Schrödinger	53
2.1.1	Definición ecuación de Schrödinger	53
2.1.2	Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo	54
2.2	Densidad electrónica	55
2.3	Operadores de la mecánica cuántica	55
2.4	Operador Hamiltoniano	56
2.5	Condiciones límites periódicos – Teorema de Bloch (1928)	57
2.6	Aproximación adiabática Born-Oppenheimer (BO)	58
2.7	Método variacional de la ecuación de Schrödinger	58
2.8	Método de Hartree-Fock	59
2.9	Determinante de Slater	60
2.10	Estructura de bandas	61
2.11	Bandas de energía	62
2.12	Densidad de estados DOS	63
CAPÍTULO 3		
3.	METODOLOGÍA	65
3.1	Teoría Funcional Densidad – Importancia	65

3.2	¿Qué es un funcional?	65
3.3	Aproximación Hohenberg-Kohn	66
3.4	Teoría Thomas y Fermi	66
3.5	Aproximación Kohn-Sham	67
3.6	Software Wien2K	68
3.7	Aproximación densidad local LDA	69
3.7.1	Aproximación densidad local espín LSDA	69
3.8	Aproximación gradiente generalizado GGA	70
3.9	Métodos ondas planas aumentadas APW	70
3.9.1	Ondas planas aumentadas linearizadas potencial completo FP-LAPW	71
3.9.2	Método APW + lo	73
3.10	Estructura de los cálculos Wien2K	73
CAPÍTULO 4		
4.	RESULTADOS	77
4.1	Detalles Cristalográficos Generales	77
4.1.1	Características Red directa	77
4.1.2	Red recíproca o primera zona de Brillouin	80
4.2	Celda y parámetros de red del MgB_2 en el volumen	81
4.3	Resultados de los cálculos estructurales de la celda unitaria del MgB_2	82
4.3.1	Detalles computacionales	82
4.3.2	Cálculo de las distancias interplanares y de coordinación en el volumen MgB_2	84
4.4	Optimización del volumen	87
4.4.1	Optimización de los parámetros de red en el volumen del MgB_2	87

4.4.2	Parámetros de red y módulo de volumen	88
4.5	Cálculos DFT para superficies de sólidos	90
4.5.1	Importancia de las superficies	91
4.5.2	Celda y parámetros de red del MgB_2 en la Supercelda.	92
4.6	Propiedades electrónicas del Diboruro de Magnesio MgB_2	93
4.6.1	Primera zona de Brillouin MgB_2	94
4.7	Cálculos de la estructura electrónica	95
4.8	Resultados de las propiedades electrónicas del MgB_2	96
4.8.1	Análisis en el volumen	96
4.9	Análisis en la superficie	100
4.9.1	Análisis en la superficie terminada en magnesio	100
4.9.2	Para la densidad de estados de la superficie terminada en Magnesio.	101
4.9.3	Análisis de las propiedades electrónicas de la superficie terminada en B	103
4.9.4	Para la densidad de estados de la superficie terminada en Boro	105
4.10	Descripción de las propiedades magnéticas del MgB_2 tanto en el volumen y en la superficie.	107
4.11	Personas que participan en el proyecto	114
4.12	Recursos disponibles	114
4.12.1	Recursos humanos	114
4.12.2	Recursos materiales	114
4.12.3	Recursos financieros	115
4.12.4	Recursos locativos	115
	CONCLUSIONES	116
	RECOMENDACIONES	117

ESTRATEGIAS DE DIVULGACIÓN	118
BIBLIOGRAFÍA	119
INFOGRAFÍA	128
ANEXO I. ESPECTROSCOPIA DE FOTO-ELECTRÓN RESUELTA POR ÁNGULOS ARPES	133
ANEXO II. ENTIDADES DE INVESTIGACIÓN EN EL DIBORURO DE MAGNESIO MgB_2	134
ANEXO III. SINTETIZACIÓN DEL DIBORURO DE MAGNESIO MgB_2	135
ANEXO IV. CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA DE LOS ÁTOMOS Y NÚMEROS CUÁNTICOS	138
ANEXO V. UNIDADES ATÓMICAS	142

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Descubrimiento de la superconductividad en el Mercurio.	37
Figura 2. Temperatura crítica de transición del superconductor MgB_2 .	38
Figura 3. Efecto Meissner en los superconductores.	40
Figura 4. Fenómeno de levitación magnética en los superconductores.	41
Figura 5. Formación de Pares de Cooper en una red cristalina.	42
Figura 6. Formación de junturas Josephson.	43
Figura 7. Descripción cables superconductores a base de Diboruro de Magnesio	49
Figura 8. Formas geométricas del cable superconductor Diboruro de Magnesio.	49
Figura 9. Limitador de corriente FCL de Hypertech.	50
Figura 10. Descripción resonadora magnética – MRopen.	51
Figura 11. Diagrama de energía en función de k .	62
Figura 12. Bandas de energía en un sólido.	63
Figura 13. Comportamiento de la Densidad de Estados del Si.	64
Figura 14. Logo software Wien2K – Universidad de Vienna.	68
Figura 15. Partición de la celda unitaria en esferas atómicas (I) y región intersticial (II).	71
Figura 16. Diagrama de flujo de un campo autoconsistente en Wien2K.	76
Figura 17. Retículos de Bravais.	78
Figura 18. a) Celdas primitiva y unitaria de una red cubica y b) celda Wigner Seitz.	79
Figura 19. Intersección de un plano con los ejes coordenados.	79
Figura 20. Descripción Primera zona de Brillouin.	80
Figura 21. Estructura cristalina del superconductor MgB_2 .	82

Figura 22. Superficie (0001), de la estructura cristalina hexagonal compacta.	82
Figura 23. Distancia entre átomos de magnesio-magnesio y magnesio-boro.	85
Figura 24. Estructura tridimensional del Diboruro de Magnesio. a) Vista superior, b) vista en relieve, c) vista frontal, d) vista derecha.	86
Figura 25. Gráfica de Energía total en función del parámetro de red.	89
Figura 26. Modelo de supercelda, incluyendo superficies slabs y vacío.	91
Figura 27. Descripción superficies MgB_2 . Se describen tres imágenes, a) terminada en boro, b) celda Wigner Seitz superficie terminada en boro y c) superficie terminada en magnesio.	93
Figura 28. Celda de Wigner Seitz del Diboruro de Magnesio MgB_2 .	94
Figura 29. Primera zona de Brillouin del superconductor MgB_2 .	95
Figura 30. Estructura de bandas y Densidades de estados en el volumen respetivamente.	97
Figura 31. Estructura de bandas los orbitales $p_x + p_y$ y p_z del boro. Estudios realizados en el volumen.	98
Figura 32. Estructura de bandas los orbitales $p_x + p_y$ y p_z del magnesio. Estudios realizados en el volumen.	99
Figura 33. Densidad de estados del boro y magnesio respectivamente. Corresponden al análisis generado en el volumen del compuesto.	99
Figura 34. Estructura de bandas y Densidades de estados totales respectivamente, estas contribuciones son en la superficie terminada en magnesio.	100
Figura 35. Densidad de estados de la contribución de boros y magnesios. Estudios realizados en la superficie terminada en magnesio.	101
Figura 36. Estructura de bandas del boro en los orbitales $p_x + p_y$ y p_z respectivamente. Estudio realizado en la superficie terminada en magnesio.	102
Figura 37. Estructura de bandas del magnesio en los orbitales $p_x + p_y$ y p_z respectivamente. Estudio realizado en la superficie terminada en magnesio.	103

Figura 38. Estructura de bandas y densidad de estados totales, de la superficie terminada en boro.	104
Figura 39. Densidad de estados de la contribución de boros y magnesios respectivamente; estudios realizados en la superficie terminada en boro.	105
Figura 40. Estructura de bandas del boro en los orbitales $p_x + p_y$ y p_z respectivamente. Estudio realizado en la superficie terminada en boro.	106
Figura 41. Estructura de bandas de magnesio en los orbitales $p_x + p_y$ y p_z respectivamente. Estudio realizado en la superficie terminada en boro.	107
Figura 42. Descripción espín up y down del boro en el volumen del MgB_2 .	108
Figura 43. Descripción espín up y down del magnesio en el volumen del MgB_2 .	109
Figura 44. Descripción espín up y down del boro en la superficie terminada en boro del MgB_2 .	110
Figura 45. Descripción espín up y down del magnesio en la superficie terminada en boro del MgB_2 .	111
Figura 46. Descripción espín up y down del boro en la superficie terminada en magnesio del MgB_2 .	112
Figura 47. Descripción espín up y down del magnesio en la superficie terminada en magnesio del MgB_2 .	113
Figura 48. Principio básico de un experimento de fotoemisión de ángulo resuelto.	133
Figura 49. Diferencia entre la técnica polvo en tubo PIT, ex situ (izquierda) e in situ (derecha).	136
Figura 50. Configuración electrónica de los átomos. a) Energía del orbital y b) secuencia de distribución de orbitales.	139
Figura 51. Configuración electrónica del boro.	140
Figura 52. Configuración electrónica del magnesio.	141

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1 Lista de algunos parámetros superconductores del MgB_2 .	45
Tabla 2. Aplicaciones del superconductor Diboruro de Magnesio MgB_2 .	48
Tabla 3. Operadores de la mecánica cuántica.	56
Tabla 4. Programas auxiliares (script), del software Wien2K.	74
Tabla 5. Parámetros de red del Diboruro de Magnesio en el volumen.	81
Tabla 6. Posiciones relativas de los átomos en el MgB_2 .	83
Tabla 7. Coordenadas de los átomos de magnesio en el MgB_2 .	85
Tabla 8. Coordenadas de los átomos de boro en el MgB_2 .	86
Tabla 9. Valores obtenidos del Volumen de la celda convencional, parámetros de red y módulo de volumen, empleando el método de Hartree-Fock, LDA, GGA y experimental.	90
Tabla 10. Parámetros de red de la supercelda.	92
Tabla 11. Precio y disponibilidad, del Diboruro de Magnesio MgB_2 .	137
Tabla 12. Resumen de las unidades atómicas.	142

LISTA DE ECUACIONES

	Pág.
Ecuación 1. Ecuación tridimensional de Schrödinger.	53
Ecuación 2. Operador Laplaciano.	54
Ecuación 3. Función de onda independiente del tiempo.	54
Ecuación 4. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.	54
Ecuación 5. Ecuación de Schrödinger simplificada.	54
Ecuación 6. Ecuación de Schrödinger con Hamiltoniano.	54
Ecuación 7. Definición de probabilidad de encontrar una partícula.	55
Ecuación 8. Densidad de probabilidad de encontrar una partícula.	55
Ecuación 9. Descripción simplificada del Hamiltoniano molecular.	56
Ecuación 10. Descripción completa del Hamiltoniano molecular.	56
Ecuación 11. Hamiltoniano molecular.	57
Ecuación 12. Principio de periodicidad de Bloch.	57
Ecuación 13. Teorema de Bloch.	58
Ecuación 14. Hamiltoniano electrónico.	58
Ecuación 15. Teorema variacional.	59
Ecuación 16. Funcional de la energía del orbital.	59
Ecuación 17. Principio de superposición de función de onda orbital.	59
Ecuación 18. Producto de Hartree.	59
Ecuación 19. Ecuación de Schrödinger para un solo orbital.	60
Ecuación 20. Energía potencial de correlación e intercambio.	60
Ecuación 21. Densidad de probabilidad orbital.	60
Ecuación 22. Energía de Hartree.	60

Ecuación 23. Determinante de Slater.	61
Ecuación 24. Ecuación de Hartree-Fock.	62
Ecuación 25. Definición de funcional.	64
Ecuación 26. Primer teorema de Hohenberg-Kohn (simplificado).	64
Ecuación 27. Teoría Thomas y Fermi.	65
Ecuación 28. Energía potencial aproximación Kohn-Sham (simplificado).	65
Ecuación 29. Energía potencial aproximación Kohn-Sham (completa).	66
Ecuación 30. Energía potencial aproximación Kohn-Sham.	65
Ecuación 31. Aproximación Kohn-Sham.	66
Ecuación 32. Aproximación densidad local LDA.	68
Ecuación 33. Aproximación densidad local espín LSDA.	68
Ecuación 34. Energía correlación e intercambio, LSDA.	69
Ecuación 35. Teorema variacional de la energía correlación e intercambio.	69
Ecuación 36. Ecuación de Schrödinger computacional.	69
Ecuación 37. Energía correlación e intercambio, GGA.	69
Ecuación 38. Aproximación de ondas planas APW.	70
Ecuación 39. Función de onda región atómica, aproximación LAPW.	71
Ecuación 40. Función de onda región intersticial, aproximación LAPW.	71
Ecuación 41. Método ondas planas aumentadas linearizadas LAPW.	71
Ecuación 42. Función de onda con orbitales locales, aproximación LAPW.	72
Ecuación 43. Aproximación ondas planas con orbital local (simplificada).	72
Ecuación 44. Aproximación ondas planas con orbital local.	72
Ecuación 45. Relación vectores red recíproca y red directa.	82
Ecuación 46. Fórmula de distancias en tres dimensiones.	85

Ecuación 47. Energía de un orbital, estructura de bandas.	94
Ecuación 48. Definición de densidad de estados DOS.	96

LISTA DE ANEXOS

	pág.
ANEXO I. Espectroscopia de foto-electrón resuelta por ángulos Pares.	133
ANEXO II. Entidades de investigación en el Diboruro de Magnesio MgB_2 .	134
ANEXO III. Sintetización del Diboruro de Magnesio MgB_2	135
ANEXO IV. Configuración electrónica de los átomos y números cuánticos.	138
ANEXO IV. Unidades atómicas.	142

LISTA DE ABREVIACIONES

AC	Corriente alterna, en inglés Alternating Current
a_i	Vectores de red
BCS	Teoría Bardeen, Cooper and Schrieffer
b_i	Vectores de red recíproca
BZ	Primera zona de Brillouin, en inglés First Brillouin Zone
DC	Corriente directa, en inglés Direct Current
DFT	Teoría Funcional Densidad, en inglés Density Functional Theory
e	Carga del electrón
ϵ_F	Energía de Fermi
et al	(Autores)
FCL	Limitador de falla de corriente, en inglés Fault Current Limiter
G	Traslaciones de red recíproca
$\hat{H}$	Operador Hamiltoniano
$\hat{H}_e$	Hamiltoniano electrónico
$\hbar$	Constante de Planck reducida
HTS	Superconductor de alta temperatura, en inglés High Temperature Superconductor
k	Vector de onda en la primera zona de Brillouin
LTS	Superconductor de baja temperatura, en inglés Low Temperature Superconductor
M	Número de núcleos
m	Masa del electrón

MRI	Imágenes de resonancia magnética, en inglés Magnetic Resonance Imaging
N	Número de electrones
NMR	Resonancia magnética nuclear, en inglés Nuclear Magnetic Resonance
PIT	Polvo en tubo, en inglés Powder In Tube
RMT	Radio de las esferas de muffin-tin
RSFQ	Cuanto flujo único rápido, o en inglés Rapid Single Flux Quantum
PLD	Deposición laser pulsada, en inglés Pulsed Laser Deposition
Punto Γ	Zona centro de Brillouin
SFCL	Superconductor limitador de corriente, en inglés Superconducting Fault Limiters Current
SQUID	Dispositivo superconductor de interferencia cuántica, en inglés Superconducting QUantum Interference Device
SSC	Superconductor supercolisionador, en inglés Superconducting Super Collider
T	Traslaciones de red
XC	Intercambio-correlación
XRD	Difracción de rayos X, en inglés X-Ray Diffraction
wt.%	Porcentaje peso

LISTA DE SÍMBOLOS

a, c	Parámetros de red
α, β, γ	Ángulos entre ejes unitarios
$\text{\AA}$	Unidades en Angstrom
ξ	Longitud de coherencia
h, k, l	Índices de Miller de planos cristalográficos
J_c	Densidad de corriente crítica
H_c	Campo crítico
H_{c1}	Campo crítico inferior
H_{c2}	Campo crítico superior
H_{irr}	Campo irreversible
k	Vector de onda en la primera zona de Brillouin (BZ)
λ	Longitud de penetración
nm	Nanómetro
$n(r)$	Densidad electrónica
T_c	Temperatura Crítica Transición

GLOSARIO

En seguida se encuentra un vocabulario básico de física de estado sólido, mecánica cuántica y superconductividad que tienen el propósito de orientar al lector.

AB INITIO: método computacional de química cuántica.

ACELERADORES DE PARTÍCULAS: dispositivo que usa campos electromagnéticos para acelerar partículas cargadas y colisionarlas con otras partículas, para así generar nuevas partículas.

APROXIMACIÓN DENSIDAD LOCAL LDA: separa la energía correlación intercambio.

APRIMACIÓN GRADIENTE GENERALIZADO GGA: los funcionales de correlación y de intercambio dependen, además de la densidad, del gradiente de la densidad.

APROXIMACIÓN HOHENBERG-KOHN: la energía del estado fundamental $E[n]$ puede ser minimizada a través del funcional de la densidad electrónica.

APROXIMACIÓN KOHN-SHAM: reemplaza el problema original de varios cuerpos por un sistema auxiliar de partículas independientes.

APROXIMACIÓN ONDAS PLANAS AUMENTADAS APW: es un método para resolver las ecuaciones de Kohn-Sham para la densidad de estado base, la energía total [1].

APROXIMACIÓN ONDAS PLANAS AUMENTADAS LINEARIZADAS LAPW: es una linealización de las funciones de onda en la región intersticial, que sirve para resolver la ecuación de Schrödinger radial.

BASE: es un átomo, iones, o colección de átomos o iones.

BORO: elemento químico que tiene el símbolo B y número atómico $Z = 5$.

BOROCARBUIROS: son compuestos que contienen tanto boro y el carbono.

BOSÓN: son aquellas partículas que tienen un espín entero.

CABLES DE CORRIENTE (CURRENT LEADS): son cables capaces de proporcionar una alta cantidad de corriente en tiempos casi infinitos.

CAMPO CRÍTICO H_c : campo magnético máximo que un superconductor puede soportar antes de que se apaga o deja el estado superconductor. Existe la relación directamente proporcional entre T_c y H_c .

CAMPO CRÍTICO INFERIOR H_{c1} : límite entre la transición de un estado normal a un estado superconductor.

CAMPO CRÍTICO SUPERIOR H_{c2} : límite de campo magnético que destruye la superconductividad en los materiales.

CAMPO IRREVERSIBLE H_{irr} : campo magnético capaz de mover los vórtices en el superconductor.

CATÁLISIS: mecanismos por el cual se aceleran los procesos de reacción química.

CELDA UNITARIA: es una región del espacio que cuando se repite, completa todo el espacio.

CELDA WIGNER-SEITZ: se define como una celda primitiva importante, muy empleada en teoría de bandas electrónicas, llamada celda de Wigner-Seitz, la cual despliega la simetría total del cristal de cualquier red de Bravais.

CERÁMICO: superconductores cerámicos son compuestos inorgánicos formados por reacción de un metal con el oxígeno, nitrógeno, carbono o silicio.

CONDUCTIVIDAD: propiedad de los materiales que consiste en transmitir electricidad o calor.

CRIOTÓN: es un interruptor que funciona entre el estado normal y el estado superconductor, mediante la presencia de campos magnéticos externos.

CUANTO: energía de cada fotón.

CUANTO FLUJO ÚNICO Y RÁPIDO RSFQ: tecnología digital electrónica basado en los efectos cuánticos de los dispositivos superconductores (uniones Josephson).

DENSIDAD: magnitud escalar que relaciona la cantidad de masa y el volumen.

DENSIDAD DE CORRIENTE CRÍTICA J_c : corriente máxima que un superconductor puede fluir.

DENSIDAD DE ESTADOS DOS: Es el número de estados electrónico con energías en el intervalo $(E, E + dE)$.

DENSIDAD DE PORTADORES: indica el número de portadores de carga por volumen.

DERIVADA FUNCIONAL: derivada de una funcional $E[\varphi_i]$ con respecto a un orbital φ_i .

DETERMINANTE DE SLATER: es el que utiliza el producto de Hartree-Fock e incluye las funciones de onda antisimétricas como soluciones del problema de un sistema de muchas partículas. Además incluye el término correlación e intercambio entre electrones.

DIAMAGNETISMO: capacidad de un material en repeler un campo magnético.

ECUACION DE BROGLIE: cualquier partícula puede considerarse como una onda $\lambda = h/mv$.

ECUACIÓN DE ESTADO DE MURNAGHAN: desarrollada por Francis D. Murnaghan, presenta una ecuación de estado para la representación de sólidos entre la dependencia energética y el volumen.

ECUACIÓN DE ONDA: una función que representa el comportamiento de una onda simple en el espacio y el tiempo.

ECUACION DE SCHRÖDINGER: descripción de las partículas microscópicas en función de la ecuación de ondas y el postulado De Broglie.

EFEECTO ISÓTOPO: la masa atómica tiene influencia en la temperatura crítica de transición T_c .

EFEECTO MEISSNER: desaparición parcial o completa de las líneas de flujo de campo magnético en el estado superconductor de un material.

ENERGÍA DE IONIZACIÓN: es la mínima energía para sacar un electrón de un átomo en su configuración fundamental.

ESFERAS DE MUFFIN-TIN: es el método de partición de un sistema en esferas atómicas y regiones intersticiales.

ESTRUCTURA CRISTALINA: se define como la distribución de átomos, iones o moléculas, en el espacio tridimensional, estas estructuras poseen varias simetrías y usualmente se encuentran como esferas agrupadas.

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA: es un método universal que exactamente describe un sistema real en la naturaleza. Las estructuras estables de sólidos son más naturalmente clasificadas en términos de la estructura electrónica del estado fundamental.

ESTRUCTURA DE BANDAS: intervalos de energía de cada orbital, que un electrón puede poseer.

EXCITÓN: un mecanismo de interacción más fuerte que los fonones e interacciona a temperatura más altas.

FACTOR DE EMPAQUETAMIENTO: relación del volumen de átomos en la celda y el volumen de la celda unitaria.

FERMIÓN: es cualquier partícula que tiene un número espín impar medio.

FONÓN: vibración de la red cristalina.

FOTÓN: partícula de luz que se propaga en el vacío.

FRECUENCIA (ν): número de ciclos por segundo. Su unidad es el Hertz.

FUNCIONAL: tomo una función y define un único número de la función

FUNCIÓN DE ONDA ψ : expresa la amplitud de una onda, en cada punto e instante.

GAP: es un intervalo de energía prohibida.

GAP DE ENERGÍA: energía requerida para romper un par de electrones.

GRUPO ESPACIAL: son los grupos de transformación del espacio tridimensional (grupos de simetría) y son 230.

HAMILTONIANO: es un operador que representa la energía total del sistema, constituido generalmente por los electrones, núcleos de los átomos.

HTS: acrónimo de "High Temperature Superconductor", o en español SAT Superconductor de Alta Temperatura.

HUECO: vacante de carga positiva de una red cristalina, ante la escasez de un electrón.

IMÁGENES DE RESONANCIA MAGNÉTICA MRI: técnica no invasiva, capaz de detectar la estructura y composición del cuerpo a analizar.

ÍNDICES DE MILLER: es una notación empleada para localizar direcciones y planos de una celda unitaria. Son enteros l , h , k , que refiere a las intercesiones hecha por un plano de ejes definidos por a_1, a_2, a_3 .

INVERSIÓN A TRAVÉS DEL CENTRO DE SIMETRÍA: si hay un punto de la red, que se mueve hacia el centro y luego se aleja a una distancia igual, pero en sentido contrario y se observa que el conjunto permanece inalterado.

ISÓTOPO: son átomos que tienen el mismo número atómico, pero tienen una masa diferente.

LONGITUD DE COHERENCIA ξ : tamaño del Par de Cooper, y es descrita como la distancia más corta, en la que la superconductividad se puede mantener en un material.

LONGITUD DE ONDA (λ): distancia que hay entre picos.

LUZ: es una radiación electromagnética, es decir una onda en campo magnético y eléctrico.

MAGNESIO: elemento químico que tiene el símbolo Mg y número atómico $Z = 12$.

MAGNONES: fluctuaciones de espín, que se propagan a través de la red y que crean una especie de camino que los electrones pueden seguir sin sufrir obstáculos.

METODO AUTOCONSISTENTE SCF: resuelve la ecuación numéricamente para cada electrón moviéndose en un potencial central debido al núcleo y otros electrones.

METODO DE HARTREE-FOCK: considera un sistema de N partículas, como la superposición de un sistema de electrones independientes.

METODO VARIACIONAL: relaciona la energía de estado fundamental con la energía de la función de onda exacta.

NÚMERO ATOMICO (Z): es el número de electrones de un átomo.

ONDA: perturbación que viaja en el espacio, que posee frecuencia, período y fase.

ONDA PLANA: describe un electrón que se propaga por el espacio real.

ORBITAL: es una función de probabilidad de encontrar un electrón de energía específica.

ORBITAL ANTITENLAZANTE: de mayor energía, y en consecuencia en un estado de repulsión.

ORBITAL ENLAZANTE: de menor energía que cualquiera de los orbitales atómicos de los cuales se creó.

PARÁMETRO DE RED: longitud de los lados de la celda unitaria y los ángulos entre ellos.

PARES DE COOPER: apareamiento de electrones en el estado superconductor e interaccionan con la red cristalina, facilitando la conducción eléctrica.

PLASMONES: atribuye el emparejamiento de electrones a altas temperaturas al mecanismo derivado de movimientos colectivos de electrones.

PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE DE HEISENBERG: no es posible determinar la posición y momento de un electrón al mismo tiempo.

PRINCIPIO DE EXCLUSIÓN DE PAULLI: dos electrones no puede tener todos sus números cuánticos iguales, por tanto un orbital solo posee dos electrones.

PROFUNDIDAD DE PENETRACIÓN λ : es la profundidad de un campo magnético penetra en la superficie del superconductor.

RADIO ATÓMICO: distancia media entre dos núcleos vecinos.

RED: es un infinito arreglo de puntos en el espacio, en el cual cada punto tiene idénticas propiedades que los otros puntos.

RED RECÍPROCA: son todos los vectores de onda K que conducen a ondas planas con la periodicidad de una red de Bravais.

REFLEXIÓN EN UN PLANO DE SIMETRÍA: si la reflexión de un plano pasa a través de un punto y lo deja inalterado, se dice que tiene un plano de simetría.

RESISTENCIA: oposición de un material al flujo de corriente eléctrica a través de él.

RESISTIVIDAD: resistencia eléctrica de un material. Es el inverso de la conductividad.

RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR NRM: es una herramienta usada en química para estudiar las estructuras de moléculas basadas en el espín nuclear de los átomos

ROTACIÓN: rotación con respecto a un eje de simetría, si una rotación de $\frac{2\pi}{n}$ deja al punto inalterado, entonces se tiene un eje de simetría de orden n , con $n = 1, 2, 3, 4, \text{ o } 6$.

SUPERCONDUCTOR: un elemento de aleación metálica, o compuesto que conducen la electricidad sin resistencia por debajo de una cierta temperatura.

SUPERCONDUCTOR LIMITADOR DE FALLA DE CORRIENTE SFCL: dispositivo superconductor que limita el potencial cuando se produce un fallo de corriente.

SUPERCONDUCTOR SUPERCOLISIONADOR SSC: acelerador de partículas, con mayores características que los actuales.

TEMPERATURA CRÍTICA T_c : representa la temperatura de transición crítica por debajo del cual el material comienza a superconducir.

TEOREMA DE BLOCH: la función de onda en un cristal perfecto es un estado propio del momento del cristal.

TEORÍA FUNCIONAL DENSIDAD DFT: método de la mecánica cuántica para determinar la estructura electrónica (estado fundamental) de los sólidos. Si el sistema en cuestión posee N electrones el problema hasta acá es $3N$ dimensional. El propósito de esta Teoría, es reducir la dimensionalidad del problema calculando la energía electrónica a partir, no de la función de onda sino de la densidad electrónica. Así el problema se reduce a uno tridimensional.

VÓRTICES: tubos de remolinos de corriente eléctrica inducida por un campo magnético externo en la superficie del material superconductor.

WIEN2K: programa que realiza los cálculos de estructura electrónica de los sólidos utilizando la teoría funcional densidad DFT.

ZONA DE BRILLOUIN: es la celda Wigner Seitz de la red directa.

RESUMEN

En este trabajo de tesis se han calculado las propiedades estructurales y electrónicas del Diboruro de Magnesio MgB_2 en el volumen y en la superficie en el slab 1×1 , mediante la teoría funcional densidad DFT, con la aproximación del gradiente generalizado (GGA) para calcular la energía de correlación intercambio con el método de ondas planas aumentadas linearizadas (FP-LAPW).

Con los resultados obtenidos se hallaron los parámetros de red en donde la energía de la estructura se hace mínima y se estabiliza. Se presenta la diferencia entre los valores obtenidos y los valores experimentales; además se obtuvieron la densidad de estados y estructura de bandas por átomo y por orbital, los cuales permitieron la descripción electrónica del material.

Además de presentar lo calculado en este trabajo, se muestran las posibles aplicaciones electrónicas puesto que se pueden encontrar aplicaciones en la superficie en películas delgadas y en el volumen como la realización de cables superconductores. Esta diferencia, permite hacer un uso racional de la energía, desarrollando cualquier aplicación en supercorrientes en diferentes sistemas.

Palabras clave: Diboruro de Magnesio, Superconductividad, Densidad de Estados, Estructura de Bandas.

INTRODUCCIÓN

La importancia de esta investigación radica en la exploración de los ambientes tecnológicos y científicos con las nuevas invenciones que confirman el progreso de Ingeniería Electrónica y Eléctrica, además trascendentales en el desarrollo social de las comunidades que las incorporen. Gracias a los nuevos materiales y variedad de manifestaciones¹, es dispendioso conocer sus principales características de forma empírica o teórica; este estudio tecnológico es complejo, ya que este país no cuenta con una infraestructura que permita incursionar en alta tecnología, pero tiene la fortaleza de contar con un talento humano capaz de realizar cualquier proyecto de investigación en aspectos modernos, permitiendo involucrarse en aspectos de educación, investigación y sociedad.

Por tanto, este proyecto hace énfasis en el análisis y deducciones de las propiedades de los materiales mediante modelos teóricos, que han cobrado importancia ya que son altamente eficientes en la descripción de las principales propiedades físicas como las electrónicas, ópticas, térmicas, etc.; de acuerdo con estos principios, es necesario realizar un profundo entendimiento de los materiales que constituye una herramienta interpretativa que agiliza su comprensión, por medio de una investigación interdisciplinar, holística y exploratoria que permita entender los fenómenos tan particulares como la superconductividad.

La superconductividad (1911), es uno de los fenómenos que han sido ampliamente estudiados, pero sus aplicaciones a nivel tecnológico son escasas, una de las razones es que no se tiene un modelo teórico único para explicarla y la otra razón es que este fenómeno se manifiesta según las características estructurales de los materiales. Actualmente el Diboruro de Magnesio MgB_2 (2001), es un superconductor metálico, que se ha venido caracterizando, permitiendo conocer sus propiedades, a través de estudios teóricos que confirman la existencia de supercorrientes, y propiedades magnéticas prometedoras para aplicaciones tecnológicas.

Una manera más sutil de entender la superconductividad, es que permitirá solucionar los problemas energéticos en nuestra sociedad, con la disminución de pérdidas por resistividad (20%), además mejorando el desempeño térmico de los dispositivos; asimismo, el futuro de la industria electrónica depende de la

¹ Por ejemplo: el carbono es un material, que de acuerdo a la configuración de la estructura cristalina hace posible cualquier tipo de aplicación: grafito, diamante, fullerenos, nanotubos, carbinos.

capacidad de desarrollo en nuevos materiales, fiables, eficaces y económicos con el Diboruro de Magnesio, facilitando cualquier aplicación electrónica.

El actual proyecto de investigación, se ha realizado en conjunto con la Universidad Santo Tomás seccional Tunja, el centro de investigaciones CIUSTA, el grupo de investigación en nanotecnología y nuevos materiales NMT⁹; en efecto utiliza la técnica de cálculo computacional *ab initio*, destacada por su precisión en el software Wien2K²; este software permite obtener la solución aproximada de la ecuación de Schrödinger y a partir de ella se determina las propiedades estructurales como el parámetro de red y la energía fundamental (mínima) del sistema, además de calcular la densidad de estados y estructura de bandas del material, que se caracterizan por determinar las propiedades electrónicas del mismo, los resultados son coherentes en una discrepancia con respecto al método empírico alrededor del 1%.

El propósito de este proyecto es realizar una contrastación de las propiedades electrónicas utilizando la densidad de estados DOS y estructura de bandas en el material superconductor Diboruro de Magnesio MgB_2 , en el volumen y en la superficie slab 1×1 , en la dirección de crecimiento $[0001]$ que es la más común de la estructura hexagonal MgB_2 , es normal al eje c y hay mayor disposición de átomos.

Este trabajo de tesis se encuentra estructurado de la manera siguiente:

En el capítulo 1, se encuentra una descripción general de la superconductividad destacando las características del Diboruro de Magnesio y sus principales aplicaciones.

En el Capítulo 2, se da una descripción de la mecánica cuántica como modelo principal descriptivo de los sistemas de partículas atómicas, con la invención de la ecuación de Schrödinger y las aproximaciones de Hartree, Slater que determinaron las principales propiedades de los materiales.

En el Capítulo 3, se encuentra los fundamentos de la teoría funcional densidad, incluyendo los teoremas de Hohenberg, Kohn y Sham, que son base fundamental para determinar las propiedades del sistema a partir de la densidad.

En el Capítulo 4, se destaca la metodología utilizada con los fundamentos de la mecánica cuántica y la teoría funcional densidad en el software Wien2K, el cual

² Desarrollado en la Universidad de Viena, Austria, bajo ambiente LINUX, que calcula las estructuras de bandas, densidad de estados, difracción de rayos X y propiedades ópticas de una estructura cristalográfica Software.

hace posible la solución numérica³ de la ecuación de Schrödinger, que permite determinar las propiedades electrónicas de los materiales sin encontrar discrepancias con el mundo real.

En el Capítulo 5, se indica todos los resultados dando prelación a los requerimientos de entrada con los parámetros de red, radios de Muffin Tin, y a partir de ellos se realiza la energía total, densidad de estados y estructura de bandas.

Posteriormente, se encuentra las conclusiones, bibliografía, e infografía del trabajo realizado. Este trabajo culmina con algunos anexos; el primero de ellos consiste en una técnica de estructura de bandas a nivel experimental ARPES, luego se enuncian las entidades de investigación multidisciplinar y empírica en el Dboruro de Magnesio; en seguida, se encuentra la distribución atómica de los elementos con la configuración electrónica y números atómicos, luego se encuentran las unidades atómicas utilizadas según en sistema MKS, y el cálculo DFT para superficies tipo supercelda.

³ Algoritmos que permiten resolver cualquier problema computacional.

JUSTIFICACIÓN

El material Diboruro de Magnesio MgB_2 es un material intermetálico que cuando se encuentra en fase normal puede desarrollar algunas propiedades metálicas, consolidando las propiedades eléctricas, térmicas, dúctil y maleabilidad que prometen una facilidad en la comprensión, sintetización y realización de dispositivos eléctricos y electrónicos.

Este proyecto tiene sentido, ya que la investigación realizada requiere el estudio complementario en física, mecánica cuántica, química, e ingeniería para la determinación de las propiedades electrónicas del material, considerada como la base fundamental para entender que sucede a nivel nano y que proyecciones puede desarrollar este tipo de materiales en nuestro entorno.

El software Wien2K, constituye una robusta herramienta computacional que permite efectuar los parámetros adecuados para describir cualquier material, en coherencia con la forma empírica. Además, este software presenta la factibilidad de considerar tratamientos convencionales como en el volumen y el desarrollo de estudios profesionales a nivel superficial, que facilitan al investigador detectar el confinamiento de las propiedades según su geometría.

La realización de este proyecto, presenta una información científica, alrededor de eficientes y nuevos materiales, describiendo la generación de un nuevo tipo de tecnología con perspectivas más satisfactorias en comparación con el transistor. El futuro de la sociedad depende de cómo se aborde este tipo de tecnología, aportando beneficios al medio ambiente, y solucionando cada una de las necesidades del hombre.

Por tanto, esta investigación multidisciplinar tiene gran importancia en ingeniería electrónica, ya que puede prestarse para la realización de proyectos empíricos con un futuro prometedor.

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Hasta la fecha, todos los estudios realizados para determinar las propiedades estructurales, electrónicas y superconductoras del Diboruro de Magnesio MgB_2 en el volumen, se han calculado a partir de primeros principios, revelando su comportamiento anómalo [2]. Los cálculos muestran que el Diboruro de Magnesio MgB_2 cristaliza hexagonal tipo grafito, con capas intercaladas entre boros y magnesios. Esta estructura atómica notablemente simple, ayudaría a entender la forma inusual en que el MgB_2 transfiere carga con lo que explicaría las propiedades no muy comunes en la estructura de bandas como el hecho de poseer dos gaps distintos [3]. Uno de los esfuerzos realizados por todos los investigadores ha sido caracterizar estos gaps, los cuales son un parámetro necesario para explorar el mecanismo de superconductividad.

La energía de los gap han sido medidas experimentalmente pero no concuerdan con lo predicho teóricamente, debido a la sensibilidad de las superficie [4], además se ha encontrado alta calidad en la orientación epitaxial de las películas de MgB_2 crecidas en sustratos de Al_2O_3 [5], la cual en cierta forma obliga a los teóricos a investigar y a caracterizar la estructura y los estados electrónicos en la superficie del MgB_2 .

Uno de los primeros cálculos reportados sobre el estudio de la superficie MgB_2 a primeros principios ha sido el de Zhenyu [6], I.I Mazin y V.P. Antropov [7], los cuales afirman que solo se ha estudiado teóricamente el 50% por ciento de la superficie terminada en Mg y propone hacer una análisis más detallado para encontrar la contribución de esta superficie en los cálculos ya realizados.

Teniendo en cuenta los resultados este trabajo hace una contribución a este problema pues se hizo una caracterización de las propiedades electrónicas del MgB_2 en la superficie con el slabs 1×1 .

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

- Analizar las propiedades electrónicas en el Diboruro de Magnesio MgB_2 , tanto en el volumen como en la superficie, a través de la Teoría Funcional Densidad.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Determinar los parámetros de red donde el Diboruro de Magnesio MgB_2 adquiriera una estructura estable usando el método DFT.
- Determinar las propiedades electrónicas del MgB_2 , en el volumen y en la superficie (slab 1×1).
- Analizar las propiedades electrónicas del MgB_2 , en el volumen y en la superficie (slab 1×1).
- Realizar una comparación de las propiedades electrónicas tanto en el volumen como en la superficie del MgB_2 .
- Explicar las posibles aplicaciones del MgB_2 en la superconductividad y en la ingeniería electrónica.

CAPÍTULO 1

1. ESTADO ACTUAL

1.1 Inicio de la superconductividad

La superconductividad es uno de los fenómenos más interesantes en la electrónica moderna [8]; está nace a partir del experimento de Heike Kamerlingh Onnes [9], quién en 1908 licuó helio líquido y alcanzó una temperatura de $4,22^{\circ}\text{K}$ (-260°C), pues no era tan evidente que la mayoría de gases se podrían licuarse a temperaturas muy por debajo de los cero grados centígrados (0°C); tres años después, se desplegó una serie de experimentos, de tal manera que aplicó este refrigerante (baño térmico) sobre metales puros inicialmente mercurio, lo que permitió conocer los fenómenos de los materiales a bajas temperaturas

Fue una revolución, cuando muestras de mercurio en contacto con helio líquido, perdieran 10^{-11} del valor resistivo en estado normal, hecho que se denominó superconductividad (1911) [10], no obstante, fue necesario estudiar la naturaleza de la conductividad con respecto a la temperatura y el resultado obtenido se encuentra en la figura 1, donde se describe una decaída lineal hasta cierta temperatura $T = 4,2^{\circ}\text{K}$, luego se presenta un salto abrupto hacia cero, encontrando la superconductividad, a esta transición se denomina temperatura crítica T_c , dos años después Onnes gana el premio nobel [106].

Estudios posteriores determinaron la superconductividad en otros elementos metálicos como estaño y plomo observando este mismo fenómeno a diferentes temperaturas $3,72^{\circ}\text{K}$ y $7,19^{\circ}\text{K}$ respectivamente, además se estudió el niobio, describiendo una mayor temperatura de crítica de transición $T_c = 9,15^{\circ}\text{K}$, la más alta entre los elementos puros [107]. Los científicos de la época querían encontrar un superconductor que describiera una alta temperatura de transición T_c , con el propósito de evitar la refrigeración de las muestras, lo que permitió realizar el experimento en aleaciones (mezclas entre metales e impurezas); en la década de los 60, se conoce la aleación Niobio-Germanio $NbGe$ con una mayor temperatura de transición de $T_c 23,2^{\circ}\text{K}$ [107].

Desde entonces, las aleaciones no presentaron una factible temperatura de transición T_c , por lo que las aplicaciones superconductoras estarían algo fuera del alcance, debido a su constante y costosa refrigeración.

característica de la superconductividad. Es por esto que en 2001, Akimitsu⁵ reportó la superconductividad del Diboruro de Magnesio MgB_2 y pocos días después, Nagamatsu reportó el estado superconductor de dicho componente, a una temperatura crítica de transición $T_c = 39.4^\circ K$ [16, 17], aunque el componente MgB_2 , fue sintetizado por primera vez en 1950, fue hasta en 2001, que se descubrió su superconductividad. A continuación la figura 2, describe el comportamiento resistivo en función de la temperatura del Diboruro de Magnesio MgB_2 , encontrada por Akimitsu y Nagamatsu.

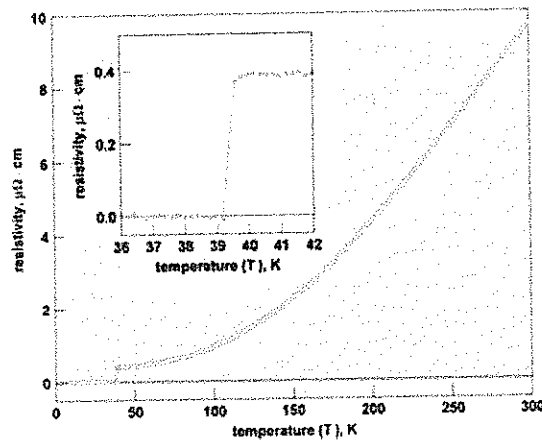


Figura 2. Temperatura crítica de transición del superconductor MgB_2 [110].

El Diboruro de Magnesio MgB_2 , presenta las condiciones más favorables entre la teoría y la experimentación, algunas de sus propiedades más optimistas son: alta temperatura de transición T_c , estructura cristalina simple, larga longitud de coherencia ξ , alta densidad de corriente J_c y campos críticos H_{c2} ; estas propiedades son competentes en el actual material Diboruro de Magnesio MgB_2 , para la realización de múltiples aplicaciones [18] y el reto de los investigadores es fabricarlo de una manera más económica. Una manera más sutil de entender la superconductividad, es que permitirá generar altos campos magnéticos, transmisión eficiente de energía eléctrica y la construcción de dispositivos electrónicos más pequeños, y potentes.

Acorde a su temperatura crítica de transición T_c , es posible usar varios tipos de refrigeración, neón o hidrógeno líquido [19], aunque el más factible es el enfriador criogénico (Service 2002), todas estas de menor costo que la refrigeración de helio líquido, esta requerida para el Niobio [20]. A partir del hallazgo de una temperatura récord entre los superconductores intermetálicos [21], se llegó a la pregunta ¿Que

⁵ El 10 enero de 2001, en la conferencia en Sendai, Japón.

Tabla 3. Operadores de la mecánica cuántica.

Cantidad	Operador
Posición	$\hat{x} = x$
Momento lineal	$\hat{p} = -i\hbar\nabla$
Energía	$\hat{E} = i\hbar\frac{\delta\psi}{\delta t}$
Energía potencial	$\hat{V} = V(x)$
Energía cinética	$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
Hamiltoniano	$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$

Fuente: [65].

La anterior Tabla 3, establece los principales operadores para determinar la posición, el momento, las energías del sistema a partir de la función de onda ψ , a continuación se indica el operador Hamiltoniano que se caracteriza por determinar las energías presentes en el sistema.

2.4 Operador Hamiltoniano

En un sistema molecular, la función de onda ψ describe la posición de los electrones y los núcleos de los átomos. Asimismo, el operador Hamiltoniano [65] es el que describe la contribución de la energía cinética T y la energía potencial V del sistema, a continuación se indica esta superposición.

$$\hat{H} = T + V \quad (9)$$

Si consideramos un sistema molecular que contiene M núcleos y N electrones, su Hamiltoniano sería:

$$H = T + V = T^n + T^e + V^{en} + V^{ee} + V^{nn} \quad (10)$$

Donde T^n , T^e describen la energía cinética de cada núcleo y electrón respectivamente, y V^{en} , V^{ee} , V^{nn} , es la energía potencial (interacción de Coulomb), a continuación se describe el Hamiltoniano se puede reescribir como sigue:

$$\text{Energía cinética de los núcleos: } T^n = \sum_A^M \left(-\frac{1}{2m_A} \nabla_A^2 \right)$$

$$\text{Energía cinética de los electrones: } T^e = \sum_\mu^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_\mu^2 \right)$$

$$\text{Energía potencial interacción electrón-núcleo } V^{en} = \sum_\mu^N \sum_A^M \frac{Z_A}{r_{\mu A}}$$

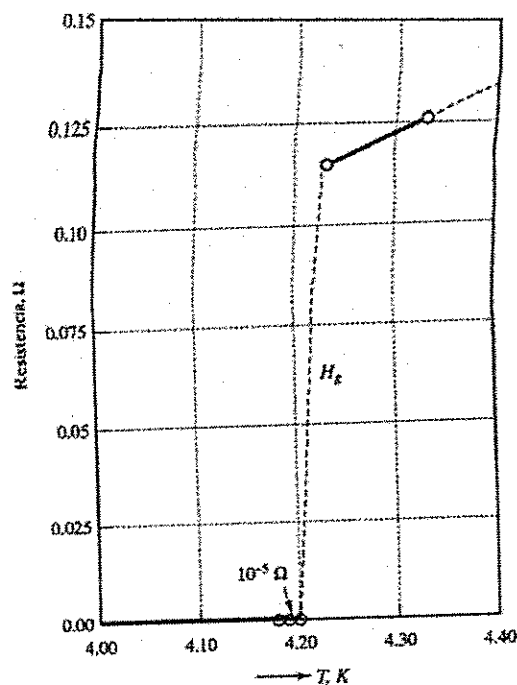


Figura 1. Descubrimiento de la superconductividad en el Mercurio [108].

Después de varias décadas, en 1986 J. Georg Bednorz y Karl Alex Müller [11] demostraron un avance en la temperatura de transición sobre los $T_c = 30^\circ K$ con el compuesto BaLaCuO [109], ellos fueron acreedores del premio nobel un año más tarde [106]. Desde entonces, se desplegó grandes investigaciones sobre los compuestos a base de óxido de cobre (CuO) o compuestos cerámicos⁴, conquistando nuevas temperaturas de transición T_c mucho más altas y generó una esperanza en la superconductividad aplicada.

Todos estos años, se ha experimentado los superconductores cerámicos como los más costosos, porque necesitan ser dopados con plata en un 70%, muy susceptibles ante campos magnéticos externos H_{c2} eliminando la superconductividad del material [109], por lo que su estudio en estos materiales es muy complejo, razón por la cual los superconductores cerámicos no son tan aplicables en aplicaciones industriales.

A partir de 1994, se consideró reanudar las investigaciones en componentes intermetálicos, especialmente en componentes ligeros a base de Boro y Borocarburos (YPd_2B_2C $T_c = 23^\circ K$) [12-15], que permitieran descubrir la nueva

⁴ Actualmente se tiene expectativa en este tipo de superconductores, ya que no necesita una refrigeración exhaustiva.

hace que el Diboruro de Magnesio MgB_2 sea tan especial?, ¿Por qué tiene una alta temperatura de transición?, preguntas que serán resueltas más adelante.

Los científicos generalmente asumen que la superconductividad se debe al acoplamiento de electrones de dos en dos (Par de Cooper), pero Zhu Yimei⁶ (2004) afirma: "Aunque este es el caso para la mayoría de los superconductores, no se ha demostrado todavía cómo los electrones contribuyen a la superconductividad en el Diboruro de Magnesio MgB_2 . Así que se decide mirar más de cerca la estructura electrónica de este material".

Igualmente Tafto (2004) coincide con la experiencia de la industria Superconductive components Inc (2004) [111], "A medida que adquirimos una mayor comprensión de las propiedades de Diboruro de Magnesio MgB_2 en el nivel atómico, estoy seguro de que, en un futuro cercano, vamos a ser capaces de relacionarlos con las propiedades macroscópicas tales como la superconductividad y tal vez explicar el origen de superconductividad en general". A continuación se tienen los referentes teóricos de los superconductores, a nivel magnético y eléctrico.

1.2 Efecto Meissner

En 1933, Walter Meissner y Robert Ochsenfeld [22] descubrieron la ausencia de líneas de campo magnético en el estado superconductor, exhibiendo propiedades de diamagnetismo perfecto (repulsión), esta es la principal diferencia entre un superconductor y un conductor perfecto (solo conduce electricidad sin resistencia). Los experimentos realizados consistían en aplicar campos magnéticos B_{ext} generados por fuentes externas sobre el material superconductor, a diferentes temperaturas. Mediante varios experimentos, el efecto Meissner desarrolló dos comportamientos lo que sugirió una clasificación, el primero de ellos conocidos como los superconductores tipo I o blandos y los superconductores tipo II o duros.

Los superconductores tipo I, se encuentran principalmente en los elementos puros [112], cuyo comportamiento se describen en dos estados: el primer estado es una fase Meissner, que describe un diamagnetismo perfecto, representada por la expulsión de líneas de campo del interior del superconductor $B = 0$, y el segundo estado o normal, es cuando hay la presencia de un campo crítico H_c , capaz de eliminar el fenómeno de superconductividad en el material, a continuación la figura 3a indica este efecto.

⁶ Físico avanzado de Brookhaven Servicio de Microscopía Electrónica

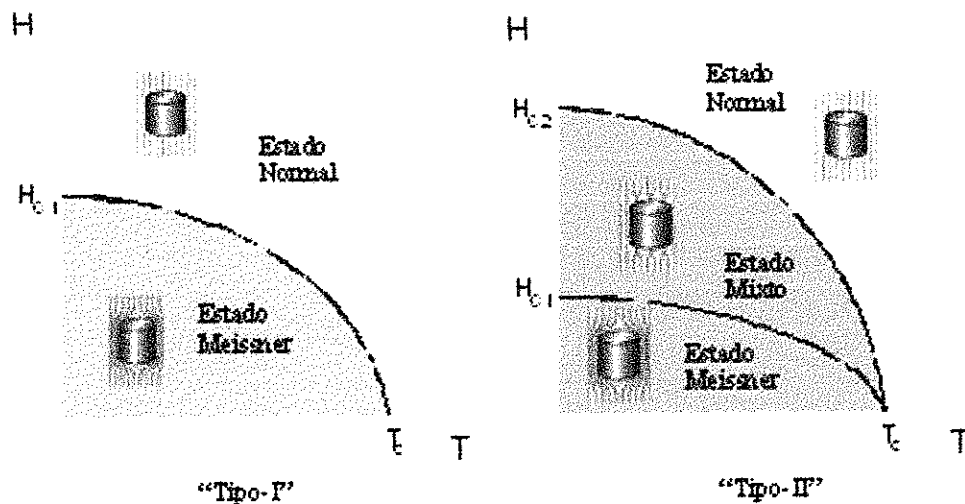


Figura 3. Efecto Meissner en los superconductores [113].

En seguida, los superconductores tipo II, su comportamiento se atribuye principalmente a la construcción de aleaciones⁷ [114], y se componen principalmente de tres estados; el primer estado es una fase Meissner, es cuando un superconductor se encuentra ante la ausencia de campo magnético y un campo magnético crítico inferior H_{c1} , en este estado se experimenta un diamagnetismo perfecto (expulsión $B = 0$), el segundo estado o vórtices (mixto) se encuentra entre un campo magnético inferior H_{c1} y un campo magnético superior H_{c2} , algunas líneas de campo alcanzan penetrar el material superconductor y el efecto Meissner es incompleto, el tercer estado o normal es cuando se elimina la superconductividad del material, ya que se supera el campo magnético superior H_{c2} . Anteriormente la figura 3, indica el comportamiento del efecto Meissner de los superconductores tipos I (izquierda) y tipo II (derecha).

En consecuencia, el efecto Meissner permitió rápidamente murmurar la rápida y efectiva generación de campos magnéticos por parte del superconductor. Según Meissner, el diamagnetismo generado por el superconductor surge de emisión de corrientes persistentes que fluyen para oponerse al campo (creación de campos opuestos), una aplicación general del efecto Meissner, es mediante la levitación magnética [23], la cual se indica en la figura 4.

⁷ Alexei Alexeyevich Abrikosov: físico teórico de la materia condensada, ganador del premio nobel (2003).

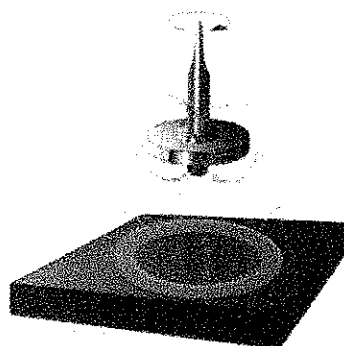


Figura 4. Fenómeno de levitación magnética en los superconductores [115].

La levitación magnética ya ha sido realizada a nivel experimental en laboratorios y la industria permitiendo ser una de las aplicaciones más sobresalientes de la superconductividad. A continuación encontramos una teoría que describe las supercorrientes generadas en la superconductividad.

1.3 Teoría BCS – primera teoría de la superconductividad

El efecto Meissner, fue una oportunidad de conocer las propiedades magnéticas en los superconductores, pero aún no se ha explicado como una estructura cristalina contribuye a la ampliación de la densidad de corriente cuando se baja la temperatura en los materiales, esta explicación la puede dar la teoría BCS. La Teoría BCS [24] (1957) tiene procedencia en las iniciales de los científicos John Bardeen, Leon Cooper y Robert Schrieffer, y mediante esta teoría, se explica los orígenes microscópicos de la superconductividad y sustentar algunas propiedades superconductoras.

En un superconductor, se presenta la posibilidad de agrupar electrones en parejas (Par de Cooper), la agrupación de estos electrones tiene carácter de un bosón y se condensan en el estado fundamental. A continuación la figura 5 indica cómo se generan los pares de Cooper.

El movimiento de los pares de Cooper solo está correlacionado con la red, ya que la atracción efectiva del par de Cooper es del orden de mili-electrón voltios, suficiente para estar apareado a bajas temperaturas y de este modo ser invisibles sobre la red. Por ejemplo, si aplicamos una energía externa, los pares de Cooper se mueven sin resistencia y la única manera es evitar el movimiento es dejar el estado superconductor. Cuando el superconductor deja su fase superconductora, todos los pares de Cooper se desintegran y el material vuelve a condiciones normales.

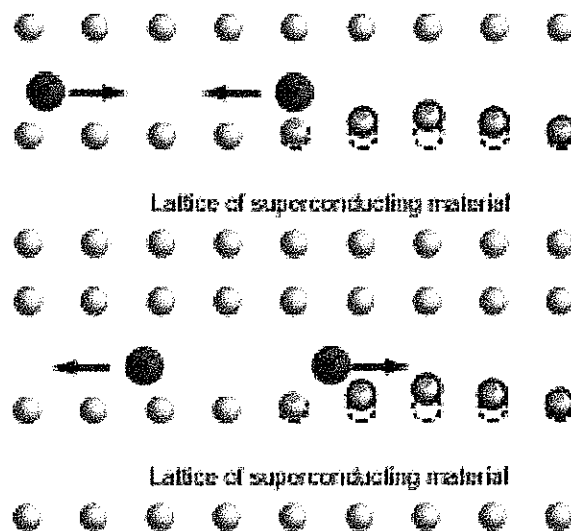


Figura 5. Formación de Pares de Cooper en una red cristalina [116].

Entre las características más relevantes a identificar la validez de la teoría BCS en un material superconductor podemos incluir: (1) la presencia de una banda prohibida (banda gap), que constituye la separación de la banda de conducción y la banda de valencia, (2) la interacción electrón-fonón, permite una deformación de la red, entonces el electrón se apoya de esta deformación minimizando su energía, e interaccionando más fácilmente entre electrones vecinos, (3) determinación de la profundidad de penetración λ y la longitud de coherencia ξ , (4) determinación de la temperatura crítica de transición T_c , (5) la cuantización de flujo magnético debida a los pares de Cooper.

De acuerdo con la teoría BCS, se dio una explicación ilustrativa del aumento de la densidad de corriente en los materiales superconductores, a continuación se presenta el efecto Josephson, como una aplicación de la física cuántica en la superconductividad.

1.4 Efecto Josephson

En 1962, Brian David Josephson [25] explicó la aparición de corriente eléctrica por efecto túnel entre dos superconductores separados por un aislante, este tipo de unión se denomina enlace débil o juntura Josephson. Experimentalmente, el efecto Josephson fue confirmado por P. Anderson y J. Rowell (1963).

Los efectos que se originan, a través del transporte por efecto túnel se incluyen: efecto Josephson de corriente continua SQUID DC [26] y efecto Josephson de corriente alterna SQUID AC [27]. El efecto Josephson en corriente continua, fluye

una corriente “continua” a través de la unión en ausencia de cualquier campo magnético o eléctrico, mientras que el efecto Josephson en corriente alterna, una tensión de corriente continua aplicada a través de la unión produce oscilaciones de corriente de radiofrecuencia a través de la unión. A continuación la figura 6, muestra una juntura Josephson.

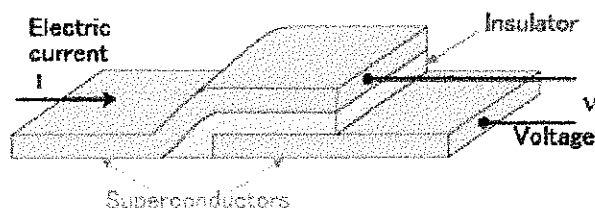


Figura 6. Formación de junturas Josephson [117].

Gracias al efecto Josephson pueden crearse uniones, que pueden ser los primeros switches, que presentan la facilidad de conmutar 100 veces más que el transistor, proyectando un gradual reemplazo y una mayor velocidad de procesamiento; una de las perspectivas de la superconductividad es llegar a reemplazar al transistor. Además pueden detectarse campos magnéticos extremadamente débiles (en el orden de femto-Teslas).

Considerablemente, la superconductividad se encuentra condicionada por estos tres últimos fenómenos, por esto conocemos una gran variedad de propiedades y de igual manera sus aplicaciones serán multidisciplinarias; a continuación se tiene en cuenta la superconductividad en el Diboruro de Magnesio MgB_2 .

1.5 Superconductividad en MgB_2

La descripción de la superconductividad en el Diboruro de Magnesio MgB_2 , se describe a partir de dos principios básicos: la existencia de bandas superconductoras y el efecto isótopo.

1.5.1 Dos bandas superconductoras

A partir del descubrimiento del Diboruro de Magnesio MgB_2 (2001), fue necesario explicar ¿Por qué la superconductividad en un elemento tan simple?, además ¿Por qué un compuesto con un tamaño reducido de electrones de valencia puede ser superconductor?, y muchas otras preguntas que hacían referencia a la estructura del material, por esto, se inicia grandes estudios teóricos y experimentales acerca de los controversiales gaps de energía (huecos), que permitan dar respuesta a todas estas preguntas.

Mediante los estudios teóricos *Ab initio* [28] (“primeros principios”), describen la presencia de dos bandas características del material: una banda sigma $\Delta_\sigma(0) \approx 7.2\text{meV}$ (“dominante”), originada de los orbitales sp^2 , $2s$ y $p_{x,y}$ del boro y una banda pi $\Delta_\pi(0) \approx 2.3\text{meV}$, con orbitales p_z del boro [29]. Entonces puede considerarse la causal del incremento de temperatura de transición T_c , el argumento de la presencia de dos gap de energía superconductora (huecos) [30], no obstante, los superconductores convencionales solo poseen un hueco (gap) superconductor [118].

Igualmente de manera experimental, los dos gap de energía superconductora del Diboruro de Magnesio MgB_2 , han sido estudiados completamente por la espectroscopia fotoemisión ángulo resuelto de alta resolución ARPES⁸ [31], espectroscopia de tunelamiento [32], tunelamiento punto de contacto [33, 34], estudios de calor específico [35], espectroscopia Ramam [36], los cuales confirman la existencia de dos (2) de gaps de energía superconductora, pero con diferentes valores, identificando un gap débilmente acoplado $\sigma = 5.5 - 7.7\text{ meV}$ y una gap fuertemente acoplado $\pi = 1.8 - 3\text{ meV}$, los errores encontrados son asociados a las impurezas de la superficie y homogeneidad [37]. Sin embargo, varios estudios, validan el juego de la dependencia “ k ” (vectores de la red recíproca) en un acople electrón-fonón como origen de múltiples gaps del Diboruro de Magnesio MgB_2 [38].

La existencia de los dos gaps de energía superconductora tiene influencia en la temperatura crítica de transición T_c de los materiales, por esto, se deseó analizar que contribución tiene la masa del material para incrementar la temperatura de transición T_c .

1.5.2 Efecto isótopo

De acuerdo con la teoría BCS, un cambio de la masa del material puede contribuir en la temperatura crítica de transición T_c , por esto se realizó el estudio isótopo en el Diboruro de Magnesio MgB_2 , iniciando con el elemento más ligero (de menor masa) del compuesto: el isótopo de boro $Mg^{10}B$ y $Mg^{11}B$, según la teoría podría diferir por un incremento de la temperatura de transición $\Delta T_c = 0.85^\circ K$, y de forma experimental el incremento fue de $\Delta T_c = 1^\circ K$ [39, 40]; en concordancia con la teoría BCS, el boro de menor masa podría conducir a altas frecuencias de vibración de la red, consolidando factible la superconductividad en elementos más ligeros [41, 42].

⁸ Describe completamente la estructura de bandas del material, para una descripción ver anexo I.

Las pruebas realizadas en el isótopo de magnesio, demuestra un retroceso con una contribución de $\alpha_M = 0.02$ [43], con respecto al boro $\alpha_B = 0.26 - 0.3$, en efecto las frecuencias vibracionales del magnesio es de baja contribución en la temperatura de transición T_c , al caso de despreciar su efecto y por esto las vibraciones del boro son más importantes en la superconductividad MgB_2 [42,43].

En contraste el estudio del efecto isótopo, determinan que los electrones forman pares de Cooper, y existe una interacción electrón-fonón en el estado superconductor, de modo que cumple con la teoría BCS (Bardeen, Cooper and Schrieffer), por tanto el Diboruro de Magnesio MgB_2 , se considera un superconductor convencional, con algunas propiedades de los superconductores de alta temperatura SAT.

1.6 Propiedades básicas

La importancia de las propiedades del Diboruro de Magnesio MgB_2 , radica en que contiene los valores convencionales más óptimos para empezar a realizar una aplicación [44]. En la Tabla 1, se resumen los diferentes parámetros que caracterizan este material.

Tabla 1 Lista de algunos parámetros superconductores del MgB_2 .

Parámetro	Valor experimental
Temperatura crítica	$T_c = 39 - 40^\circ K$
Densidad de corriente	$J_c = 10^6 A/cm^2$
Densidad (teórica)	$\rho = 2.55 g/cm^3$
Densidad de portadores	$N_s = 1.7 - 2.8 \times 10^{23} \text{ huecos}/cm^3$
Efecto isótopo	$\alpha_B + \alpha_M = 0.3 + 0.02$
Resistividad	$\rho_r(40K) = 0.4 - 16 \mu\Omega cm$
Longitud de Coherencia	$\xi_{ab}(0) = 3.7 - 12 nm$ $\xi_c(0) = 1.3 - 3.6 nm$
Profundidad de penetración	$\lambda(0) = 85 - 180 nm$
Gap energía	$\Delta_\sigma(0) = 5.5 - 8.2 meV$ $\Delta_\pi(0) = 1.5 - 3.5 meV$
Campo crítico superior	$H_{c2} : ab(0) = 14 - 39 T$ $H_{c2} : c(0) = 2 - 24 T$
Campo crítico inferior	$H_{c1}(0) = 27 - 48 mT$
Campo irreversible	$H_{irr}(0) = 6 - 35 T$

Fuente: [45].

De acuerdo con las propiedades básicas del MgB_2 , a continuación se sugiere efectuar la comparación de las principales propiedades del superconductor

metálico niobio ($NbTi$, Nb_3Sn) con el Diboruro de Magnesio MgB_2 , del cual se ha realizado una amplia cantidad de experimentos y este es un producto comercial. Entonces, el primer parámetro de un superconductor es la densidad de corriente o supercorriente que puede llegar a establecer un cable o una superficie, por tanto el MgB_2 y el niobio poseen un valor aproximado de $J_c = 1.0 \times 10^6 A/cm^2$ [46, 47]; si se realizará una comparación con el material convencional como el cobre [119, 120] $J_c = 2 - 35 A/cm^2$ se encuentra una optimización significativa mayor de 10000 veces.

Entre tanto su temperatura de transición $T_c = 39^\circ K$, se caracteriza por ser la más alta entre los superconductores intermetálicos, además posee una alta densidad de portadores $N_s = 1.7 - 2.8 \times 10^{23} \text{ huecos}/cm^3$, que nos indica la cantidad de portadores (huecos) en el volumen; en los materiales superconductores es convencional los portadores electrones, sin embargo el Diboruro de Magnesio MgB_2 no cumple con esta condición.

Posteriormente, la resistividad característica del MgB_2 es menor comparada con la del niobio $\rho_r(4K) = 235 \mu\Omega cm$ [48], esta cantidad escalar indica la oposición del material ante el movimiento de electrones, cuyo valor es cercano a cero o un valor despreciativo en micro ohmios $\mu\Omega$, y se debe en gran parte al tamaño de los pares de Cooper; la longitud de coherencia, se describe una amplia cantidad en el MgB_2 que en la aleación niobio titanio $NbTi$ $\xi = 1 - 10 nm$ [49, 50], por ende la teoría BCS implica que el MgB_2 posee supercorrientes estables. Además, la profundidad de penetración indica la máxima distancia de un campo magnético dentro del superconductor, por tanto el niobio no puede superar este valor [51].

El parámetro que describe los controversiales gap de energía, son $\Delta_\sigma(0) = 5.5 - 8.2 meV$, $\Delta_\pi(0) = 1.5 - 3.5 meV$, se debe a la estructura cristalina del material, en el MgB_2 con las bandas sigma y pi; también el campo crítico superior es mayor en el MgB_2 $H_{c2} : ab(0) = 14 - 39 T$, $H_{c2} : c(0) = 2 - 24 T$, que la aleación niobio estaño Nb_3Sn $H_{c2} = 12 T$ [52], el cual determina la cantidad de flujo externo que soporta el MgB_2 , antes de eliminar la superconductividad; como vemos el Diboruro de Magnesio MgB_2 posee una alta densidad de corriente y el campo crítico superior, permitiendo inferir aplicaciones más satisfactorias en el material de estudio que el niobio y sus principales aleaciones.

El parámetro de campo crítico inferior $H_{c1}(0) = 27 - 48 mT$ [53], determina el campo en el cual el efecto Meissner es incompleto o estado mixto, estos valores usualmente son pequeños por lo que el superconductor siempre trabaja en el

estado mixto. Y por último el parámetro campo irreversible $H_{irr}(0) = 6 - 35T$, es el campo capaz de excitar los vórtices del Diboruro de Magnesio, este valor es menor que el campo crítico superior H_{c2} .

Los anteriores aspectos son los parámetros más importantes en la superconductividad del Diboruro de Magnesio MgB_2 , en los que se tiene esperanzado realizar cualquier aplicación.

1.7 Posibles aplicaciones

Es una oportunidad contar con el Diboruro de Magnesio MgB_2 , ya que cuenta con una variedad de propiedades que hacen posible aplicaciones multidisciplinarias; en principio la superconductividad tiene en cuenta dos tipos de aplicaciones principales: microelectrónica y a larga escala. En aplicaciones microelectrónicas, usualmente se desempeñan la fabricación de películas delgadas $1\mu m$, capaces de desarrollar una óptima densidad de corriente J_c , sin embargo a larga escala se espera la fabricación de imanes y cables superconductores, competentes en el área industrial y comercial.

El material superconductor Diboruro de Magnesio MgB_2 , puede reemplazar los materiales convencionales, desarrollando mayor rendimiento, aspectos técnicos y costos reducidos, son en efecto la posibilidad de realizar aplicaciones superconductoras. A continuación en la Tabla 2, encontramos las principales aplicaciones del superconductor:

Las primeras aplicaciones dedicadas a la generación y almacenamiento de energía, se incluye el sistema de almacenamiento de energía magnética por superconducción SMES [54] con el sistema de condicionamiento de potencia superconductora avanzada (Advanced Superconducting Power Conditioning System) [55, 56], el cual describen una eficiencia superior al 95%; en la actualidad se encuentra estudios especializados en SMES y en Korea (Korea Electrotechnology Research Institute KERI) realiza un sistema a base de Diboruro de Magnesio MgB_2 que permita almacenar energía en grandes cantidades (10000 millones de Joules - 2800 kilowatts-hora), reemplazando las convencionales baterías.

Tabla 2. Aplicaciones del superconductor Diboruro de Magnesio MgB_2 .

Área	Aplicaciones
Generación	Generadores, SMES, Orientación superconductora para el

almacenamiento de energía	almacenamiento de volante
Distribución de energía	Cables, transformadores, motores, cables de corriente, FCL
Magnetismo	NMR, MRI, confinamiento magnético de reactores de plasma de fusión, aceleradores de partículas, imanes de alto campo, microscopía electrónica de alta resolución, cámaras de burbujas de detección de partículas
Electrónica	Filtros microondas, circuitos lógicos digitales RSFQ, aplicaciones sensores
Biomédica	Detección de campos neuromagnéticos, magnetoencefalografía, magnetocardiografía.
Industrial	Aislamiento y separación magnética, sensores
R & D	Cavidades RF superconductoras en aceleradores de partículas, sincrotrones, imanes de alto campo
Otras aplicaciones	Levitación magnética, magnetohidrodinámica, aplicaciones en el espacio.

Fuente: [121].

En conjunto con la generación y almacenamiento de energía, se dispone a la distribución de energía, el cual es uno de los campos con más trascendencia en la superconductividad, ya que los sistemas actuales pierden un 20% de energía a causa de la resistencia, en efecto, los cables superconductores pueden aumentar esta eficiencia. Los primeros estudios en el Dboruro de Magnesio MgB_2 permitieron realizar investigaciones científicas por la universidad de Cambridge⁹ y consolidando las primeras empresas innovadoras en el desarrollo de superconductores metálicos, quienes llegaron a sintetizar el material, uno de los resultados se indica en la siguiente figura 7.

Se han realizado cables con longitud de kilómetros, con el método polvo en tubo PIT [122] y las técnicas *ex situ* e *in situ*. En la actualidad, se conoce los primeros productos a nivel comercial por las empresas Hyper Tech Research Inc., Columbus, Ohio, Columbus Superconductors (2006), HANAU, Germany--(BUSINESS WIRE)--Bruker Energy and Supercon Technologies, Inc., Ames Laboratory, Hitachi, R & D, Argonne National Laboratory en Argonne Illinois, quienes desean conquistar el mercado europeo con la elaboración en masa de cables superconductores.

⁹ El primero en realizar un cable superconductor fue Bartek Glowacki en Europa. Actualmente, es el director del grupo de superconductividad aplicada y crioscopia, de la universidad de Cambridge.

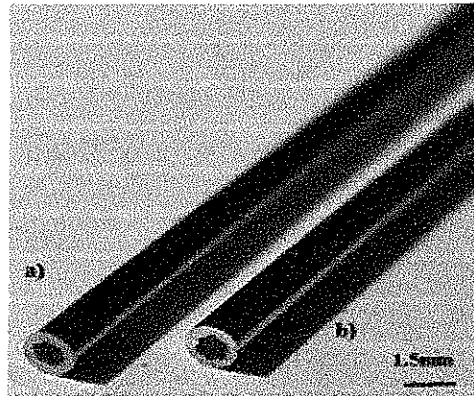


Figura 7. Descripción cables superconductores a base de Diboruro de Magnesio [123].

Todas estas empresas coinciden en la efectividad de la técnica de preparación, así como la forma de aislantes con cubierta refrigerante a su alrededor para mantener una temperatura inferior a la T_c , y en detalle su construcción existen tres tipos de cables superconductores: Rígidos (20 mts), semiflexibles (200-500 mts) y completamente flexible (<1Km), además se clasifican según su tecnología de fabricación en el transporte de corriente alterna AC o corriente directa DC, su principal diferencia radica en la disposición de los superconductores dentro del cable. En la siguiente figura 8, indica las diferentes formas geométricas de los cables superconductores, a base de Diboruro de Magnesio MgB_2 .

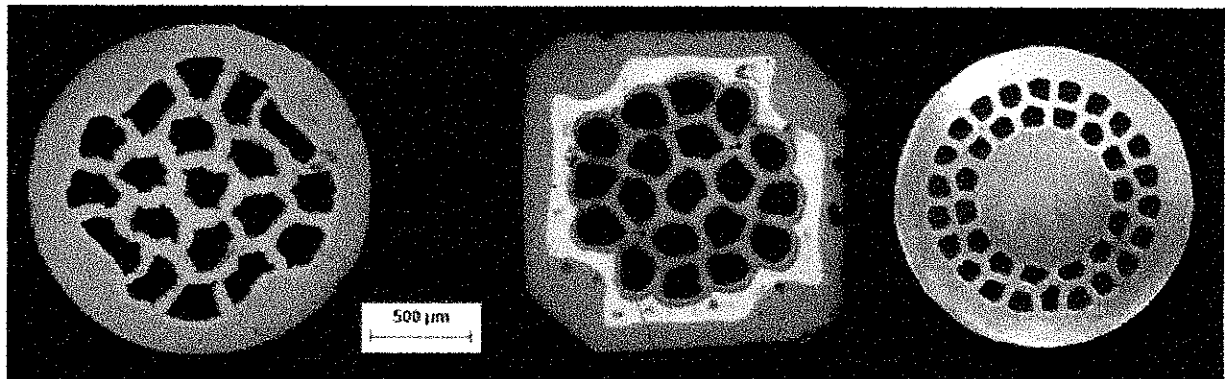


Figura 8. Formas geométricas del cable superconductor Diboruro de Magnesio [124].

La expectativa de realizar los primeros cables superconductores [57], expresó un fundamento muy claro en la realización de motores, bobinas, etc., que implican directamente en la generación y distribución de energía; sin embargo, en la actualidad se posee la dificultad de distribución de energía ante la instantánea demanda de usuarios (horas picos), una actual solución consiste en la creación de

cables de corriente o limitadores de corriente FCL¹⁰.

Estos sistemas de potencia utilizan a los limitadores de corriente superconductor SFCL [58, 59, 60], que son sistemas que tienen la capacidad de conmutar de un estado normal a un estado superconductor, lo que permite reacción instantánea y automática ante un falta de corriente.

La primera empresa que desarrolla este tipo de aplicación es Hyper Tech Energy SFCL y Cesi Ricerca – Lne. A continuación la figura 9, indica la realización de un limitador de corriente superconductor SFCL por la empresa Hypertech. Las aplicaciones anteriormente mencionadas hacen énfasis al fenómeno de superconducción, ahora explicaremos las aplicaciones enfocadas al magnetismo.

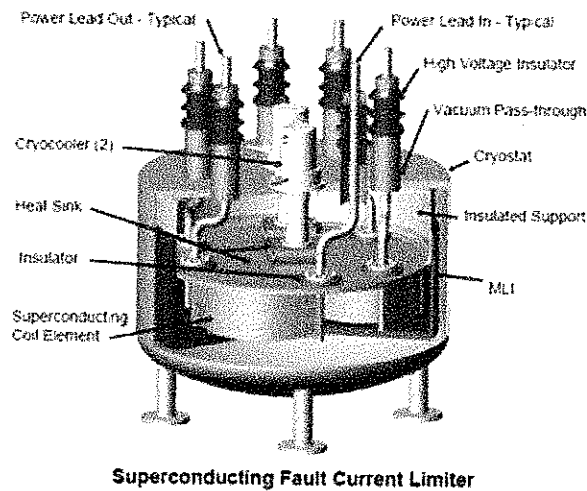


Figura 9. Limitador de corriente FCL de Hypertech [125].

Las aplicaciones magnéticas tienen un gran potencial, en la obtención imágenes de resonancia magnética MRI [61, 62], esta técnica permite a los médicos obtener imágenes detalladas del interior del cuerpo humano sin necesidad de cirugía o la exposición a la radiación ionizante, donde se requiere la generación de altos campos magnéticos, y es actualmente el mercado más importante para los superconductores de baja temperatura LTS; a nivel comercial Paramed Medical Systems (2008) de Genova Italia construyó el escáner MRopen de 0.5 tesla descrita en la figura 10.

¹⁰ Aplicados en un satélite japonés "Suzaku", el cual fue lanzado el 10 de julio del 2005, en Japón.

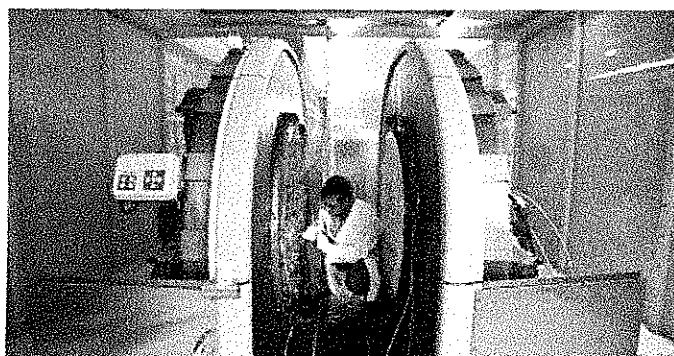


Figura 10. Descripción resonadora magnética – MRopen [126].

El anterior sistema abierto (Open MRI system), es un método revolucionario a nivel mundial porque aplica la técnica de implantación de campos magnéticos al aire, sin perturbaciones; para la realización de este dispositivo, se cuenta con la intervención de investigadores de las empresas Columbus Superconductors, ASG superconductors, Magnet Lab National High Magnetic Field Laboratory University of Florida, ASCG Applied Superconductivity and Cryoscience Group University Cambridge, en el anexo II encontrara más empresas que participan en este tipo de investigación.

Las aplicaciones magnéticas, tienen un mayor provecho en la química mediante la resonancia magnética nuclear NMR, pero estas solo han sido posibles en modestos laboratorios de investigación. Otro aspecto, son las aplicaciones electrónicas, mediante el dispositivo único y rápido flujo cuántico RSFQ, el cual permite realizar conmutaciones en orden de tiempo de nanosegundos y cantidades de energía superiores (mayores que 100KW), factible para reemplazar los transistores convencionales; en comunicaciones, los innovadores filtros *front end*, tiene una capacidad de filtrado de un orden mayor a 30, permitiendo crear sistemas de uso reducido de ancho de banda, fundamental para la actual demanda de usuarios.

Igualmente, en electrónica se han realizado las junturas Josephson o dispositivos SQUID (DC y RF), que son instrumentos más sensibles capaces de medir campos magnéticos (femto-teslas), cambios especiales de campos magnéticos, susceptibilidades magnéticas, voltajes muy pequeños y desplazamientos microscópicos (magnetómetro: cambio de flujo mucho más pequeño que un flujón), permitiendo innovar en aspectos de sensorica y se complementa con las aplicaciones biomédicas (detectar la actividad del cerebro humano); el Dboruro de Magnesio MgB_2 se ha desarrollado estudios de pre-factibilidad, con el propósito de desarrollar productos comerciales. A nivel biológico, se tiene la esperanza de

limpiar aguas contaminadas mediante la separación de impurezas [63] (utilizan campos magnéticos, las impurezas quedan ionizadas y pueden ser separadas), también en el análisis del crecimiento de plantas y animales, así con influencia magnética en reacciones químicas y ser utilizados en catálisis.

El departamento de defensa de Estados Unidos, consolida gran parte de dinero gubernamental para el desarrollo de investigación en materiales superconductores que permitan ser desarrolladas aplicaciones a nivel espacial, permitiendo detectar información de los espías vía satélite (NASA); en la actualidad, se reporta la realización del motor Fawley pero actualmente no se conoce un producto comercial e industrial.

En lo que se refiere a aplicaciones R & D, han permitido la creación de aceleradores de partículas con el INFN – Genova 2.35 tesla dipole magnet for particle accelerators, SINTEF Norway – Induction heater, y la posibilidad de sintetizar aceleradores de mucha energía¹¹, SSC – 20 veces más potente que el Tevatrón (85Km), USA; en la actualidad se ha realizado gran cantidad de aceleradores de partículas a base de Diboruro de Magnesio MgB_2 . Otras aplicaciones se incluyen, imanes superconductores, levitación magnética, criotrón o relevador superconductor, células de memoria, computadoras, los cuales han sido realizados por el superconductor niobio, sin embargo se estudia la posibilidad de cambiar el material reduciendo los costos e incrementando su eficiencia.

Como se observa, la actividad del Diboruro de Magnesio MgB_2 obedece a un trabajo teórico, por medio del cual se estudia las principales propiedades del material, y un trabajo experimental, el cual culmina con un trabajo interdisciplinar entre ingeniería, criogenización, sintetización, aislamiento, entre otras. En el anexo, se busca explicar la técnica de sintetización del Diboruro de Magnesio MgB_2 .

¹¹ electroimanes dipolares y cuadrupolares oscilantes de materiales superconductores, capaces de generar campos magnéticos más intensos.

CAPÍTULO 2

2. MARCO TEÓRICO

La mecánica clásica, fue una de las herramientas que Newton utilizó para demostrar el comportamiento de la materia, cuyas ideas fundamentales y leyes constituyen un esquema sencillo. Sin embargo, a medida que estudia la materia a nivel atómico se da cuenta de que realmente no se satisface entre la teoría y los hechos experimentales, por esto, utiliza la mecánica cuántica que proporciona una descripción completa de los sistemas atómicos.

La mecánica cuántica logra explicar algunos problemas experimentales en el siglo XIX, el primero de ellos fue la radiación de cuerpo negro, el efecto Compton, principio de Heisenberg, y como consecuencia se tiene la dualidad onda partícula, los cuantos de energía descrita por Planck; también, permite estudiar la composición fundamental de la materia, cuyo comportamiento se debe a propiedades como partícula o como onda, desde entonces, a nivel atómico se puede considerar como una onda.

2.1 Ecuación de Schrödinger

2.1.1 Definición ecuación de Schrödinger

La mecánica cuántica se basa fundamentalmente de una función matemática, la cual posee toda la información de sistema, a esta variable se le denomina función de estado ψ (función de onda del sistema); en general la función de onda ψ se encuentra en función del espacio y del tiempo $\psi(x, t)$. Posteriormente Erwin Schrödinger (1926) [64], propuso la posibilidad de caracterizar a una partícula (un electrón) mediante una función de onda (ψ), el cual uso la ecuación de ondas y una partícula de la ecuación De Broglie¹², el resultado es el siguiente:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m}(\nabla^2\psi(x, t)) + V\psi(x, t) = E\psi(x, t) \quad (1)$$

Donde m es la masa de la partícula y h es la constante de Planck, V es la energía potencial, E es la energía del electrón y el operador nabla ∇^2 es el Laplaciano. El operador Laplaciano se expresa, en términos de los diferenciales en x, y, z como:

$$\nabla^2 = \frac{\delta^2}{dx^2} \hat{i} + \frac{\delta^2}{dy^2} \hat{j} + \frac{\delta^2}{dz^2} \hat{k} \quad (2)$$

¹² Louis de Broglie (1923), postulo el movimiento de los electrones son ondulatoria, entonces un electrón que tiene masa m posee velocidad v y longitud de onda λ .

La ecuación de Schrödinger convencional, se encuentra en función de las coordenadas de todas las partículas y del tiempo, de manera que la solución de la función de onda se representa por $\psi(x, t) = \psi_0(x)e^{-iEt/\hbar}$.

La solución de la ecuación de Schrödinger determina la energía y otras propiedades de la molécula, por esto es importante determinar el comportamiento de las funciones de onda ψ que sean solución del sistema, ya que puede haber la posibilidad de ser estacionaria.

2.1.2 Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Para la mayoría de problemas, la función de onda ψ es estacionaria entonces, el potencial V en la ecuación de Schrödinger no depende del tiempo, permite entonces simplificar la función de onda mediante la separación de variables como el producto de una función espacial y una temporal.

$$\psi = \psi_r(r)\tau_t(t) \quad (3)$$

Donde $\psi_r(r)$ representa la función de onda espacial y $\tau_t(t)$ una función del tiempo (constante). De este modo, al reemplazar en la ecuación de Schrödinger tenemos.

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}(\nabla^2\psi(x)) + V\psi(x) = E\psi(x) \quad (4)$$

Los resultados de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, representa los diferentes estados estacionarios de una partícula, además se escribe de una forma más simple, mediante la agrupación de algunos términos semejantes como se ve a continuación:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2) + V \right\} \psi = E\psi \quad (5)$$

Las operaciones que se encuentra entre corchetes, puede ser posible definir mediante un operador denominado operador Hamilton $\hat{H}$, a continuación se indica la ecuación de Schrödinger simplificada.

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (6)$$

Dónde: ψ representa los estados propios o funciones de onda, el cual puede ser antisimétrico con respecto a los cambios de coordenadas electrónicos y de los núcleos.

2.2 Densidad electrónica

Aunque la función de onda ψ posee todas las propiedades del sistema, por sí sola no informa que sucede en el sistema. Entonces, la función de onda se caracteriza por contener una cantidad real y una imaginaria (compleja), cuando se realiza la operación del complejo conjugado, determinamos la cantidad real de la función de onda, a su vez indica la probabilidad de encontrar N electrones en un conjunto de coordenadas $r_1, \dots, r_N$. Matemáticamente la probabilidad es igual al producto $\psi^*(r_1, \dots, r_N)\psi(r_1, \dots, r_N)$, donde el asterisco (*) indica el complejo conjugado y se encuentra normalizada por¹³:

$$\int \psi^*(r_1, \dots, r_N)\psi(r_1, \dots, r_N) = 1 \quad (7)$$

La normalización asegura que la función de onda corresponda a las condiciones límite del sistema. La densidad electrónica en cualquier espacio $n(r)$, puede ser escrita en términos de las funciones de onda individuales como:

$$n(r) = 2 \sum_i \psi_i^*(r)\psi_i(r), \quad (8)$$

La suma es la probabilidad que un electrón individual con función de onda $\psi_i(r)$ es localizado en la posición r . El factor 2 aparece porque los electrones tienen espín y el estado del principio de exclusión de Pauli, de cada función de onda de electrón individual puede ser ocupado por dos electrones separados provistos por diferente espín.

La densidad electrónica $n(r)$, el cual es una función de solo tres coordenadas, contiene una gran información que es actualmente físicamente observable de la solución de la función de onda completa a la ecuación de Schrödinger, el cual es una función de 3N coordenadas.

2.3 Operadores de la mecánica cuántica

En mecánica cuántica un operador es un objeto matemático que actúa sobre una función de onda ψ para devolverlo a otro. Los operadores más importantes se describen en la siguiente Tabla 3.

¹³ Existe otra notación Dirac como $\langle \psi : \psi \rangle = 1$, donde el primero operador representa el complejo conjugado y el siguiente el operador convencional.

Energía potencial interacción electrón-electrón $V^{ee} = \sum_{\mu < \nu} \frac{1}{r_{\mu\nu}} = \sum_{\mu}^N h_{\mu} + \sum_{\mu < \nu}^N \frac{1}{r_{\mu\nu}}$

Energía potencial interacción núcleo-núcleo $V^{nn} = \sum_{A < B}^M \frac{Z_A Z_B}{r_{AB}}$

Como vemos el operador Hamiltoniano del estado fundamental incluye todas las interacciones físicas entre núcleos y electrones, a continuación el Hamiltoniano completo del sistema molecular [127] es:

$$H = \sum_A^N \left(-\frac{1}{2m_A} \nabla_A^2 \right) + \sum_{\mu}^n \left(-\frac{1}{2} \nabla_{\mu}^2 \right) + \sum_{\mu}^n \sum_A^N \frac{Z_A}{r_{\mu A}} + \sum_{\mu < \nu} \frac{1}{r_{\mu\nu}} + \sum_{A < B}^N \frac{Z_A Z_B}{r_{AB}} \quad (11)$$

Todos estos términos, permiten que la ecuación de Schrödinger sea una solución exacta, pero su solución es muy extensa y compleja, por lo que es necesario introducir una serie de aproximaciones, mencionados en la mecánica cuántica como es el teorema de Bloch, la aproximación Born Oppenheimer y el método de Hartree y Slater.

2.5 Condiciones límites periódicos – Teorema de Bloch (1928)

Según la estructura cristalina de la materia, está constituida a partir de la translación de una celda unitaria de manera infinita y es lo que conocemos en nuestro mundo macroscópico como sólido. En consecuencia Bloch [66], utilizó una función de onda de un electrón, el cual interactúa con un potencial periódico debido a los núcleos, matemáticamente se describe la periodicidad de la red como:

$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r}) \quad (12)$$

Donde $R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$ es la translación de la red. El teorema se enuncia como sigue: "Las funciones propias de la ecuación de ondas para un potencial periódico son el producto de una onda plana $e^{ik \cdot r}$ por una función $u_k(r + n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3) = u_k$ que representa la periodicidad de las redes cristalinas.

$$\psi_k(r) = u_k(r) e^{ik \cdot r} \quad (13)$$

Este teorema hace posible resolver la ecuación de Schrödinger para cada valor de k independientemente. El espacio de vectores r es llamado el espacio real y el espacio de vectores k es llamado el espacio recíproco o espacio k . En seguida, se tiene en cuenta la contribución de los núcleos y electrones en el movimiento molecular.

2.6 Aproximación adiabática Born-Oppenheimer (BO)

La observación de Max Born y Robert Oppenheimer (1927) [67] permite simplificar la solución de la ecuación de Schrödinger, está consiste en desacoplar el movimiento entre el núcleo y los electrones, con el argumento de que la masa del núcleo es 1836 veces que la masa de los electrones (ver anexo: unidades atómicas) y por tanto el núcleo permanece fijo dentro cierta posición del cristal. Entonces, es evidente que el movimiento es predominante en los electrones y a ellos es debido gran cantidad de propiedades.

En consecuencia, la energía cinética de los núcleos y las interacciones son constantes y el Hamiltoniano se puede separar en un Hamiltoniano electrónico (energía cinética el núcleo es cero) y un Hamiltoniano nuclear. A continuación se describe el Hamiltoniano electrónico.

$$\widehat{H}_{el} = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (14)$$

A continuación encontramos el teorema variacional de la ecuación de Schrödinger.

2.7 Método variacional de la ecuación de Schrödinger

El teorema variacional [68, 69], indica que la energía del estado fundamental de cualquier función de onda antisimétrica¹⁴ en coordenadas (electrones) y normalizada φ , será siempre mayor que la función de onda exacta ψ .

$$E(\varphi) > E(\psi) \quad (15)$$

En consecuencia el método define el funcional que se describe a continuación, el cual representa los estados estacionarios de la energía.

$$\varepsilon[\varphi] = \frac{\langle \varphi : H : \varphi \rangle}{\langle \varphi : \varphi \rangle} \quad (16)$$

Si se realiza un diferencial de la energía δE , los cambios son despreciables, y en concordancia con el principio de superposición, el conjunto de auto funciones del Hamiltoniano se puede aproximar como:

$$\psi = \sum_i c_i \psi_i \quad (17)$$

¹⁴ Electrones son fermiones.

Por tanto la sumatoria de los estados estacionarios de un solo electrón define la función de onda del sistema.

2.8 Método de Hartree-Fock

De acuerdo con la ecuación de Schrödinger, la función de onda electrónica ψ , es una función que depende coordenadas espaciales de cada N electrones, así $\psi = \psi(r_1 \dots r_N)$ y E es la energía de estado fundamental¹⁵. La función de onda electrónica de cada una de las coordenadas de todos los N electrones, es posible aproximar mediante el producto simple de la función de onda de un sólo electrón $\psi(r_i)$, tal como se indica a continuación:

$$\psi = \psi(r_1)\psi \dots (r_n) \quad (18)$$

Al incluir, la contribución de un solo orbital $\psi_i(r)$ en la ecuación de Schrödinger de una partícula se tiene:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}^i(R, r) \right) \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r) \quad (19)$$

Donde R , es la translación de la red, y la energía potencial $V_{eff}^i(R, r)$ se describe a continuación:

$$V_{eff}^i(R, r) = V(R, r) + \int \frac{\sum_{j \neq i}^N \rho_j(r')}{|r - r'|} dr' \quad (20)$$

Cuya densidad de probabilidad es:

$$\rho_j = |\psi_j(r)|^2 \quad (21)$$

La energía potencial posee una integral, que define el potencial electrostático clásico generado por la distribución de carga, se dice entonces que el potencial es autoconsistente, porque necesita correlacionar los valores en los que el orbital no se repite ($j \neq i$) [128], además la densidad de carga no incluye la carga asociada con la partícula i (i no participa en la sumatoria). Esta es considerada la aproximación de Hartree.

Asimismo, la aproximación de Hartree [70] toma en cuenta que la energía del sistema de varios cuerpos no es justamente la suma de los valores propios

¹⁵ La energía del estado fundamental es independiente del tiempo, así que se usa la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

(principio de superposición), porque la existencia de un potencial efectivo hace la interacción electrón-electrón sea contada dos veces. La expresión correcta de energía es:

$$E_H = \sum_{n=1}^N \epsilon_n - \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr', (22)$$

El conjunto de N ecuaciones diferenciales acopladas en la ecuación de Schrödinger, pueden ser resueltas mediante la minimización de la energía con respecto al conjunto de parámetros variacionales en una función de onda de prueba, mediante el recalcu de las densidades electrónicas y solucionando la ecuación de Schrödinger otra vez. Este procedimiento puede ser repetido muchas veces, hasta ser autoconsistente en la entrada y salida de la función de onda, este procedimiento es denominado aproximación autoconsistente de Hartree.

El producto de Hartree no satisface todas las condiciones de onda, porque los electrones son fermiones y la función de onda debe de cambiar de signo si dos electrones cambian de lugar, este es conocido como el principio de antisimetría, en sentido físico tienen en cuenta el espín, más adelante vemos como el determinante de Slater toma en cuenta estos parámetros.

2.9 Determinante de Slater

John C. Slater (1928) [71] propuso una función de onda antisimétrica¹⁶ de muchos electrones en la forma de determinante, que está constituida por la combinación de funciones de onda de un electrón que satisfacen el principio de antisimetría. El determinante de Slater de un sistema de n partículas es el siguiente:

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \psi_1(r_2) & \dots & \psi_1(r_n) \\ \psi_2(r_1) & \psi_2(r_2) & \dots & \psi_2(r_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_n(r_1) & \psi_n(r_2) & \dots & \psi_n(r_n) \end{vmatrix}, (23)$$

Donde $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ Es el factor de normalización. El determinante de Slater tiene la ventaja de correlacionar las funciones de onda, según su valor y signo, y si dos funciones de onda poseen el mismo valor, el determinante anula esta expresión (no permite estados degenerados). Mediante el uso del determinante de Slater, se asegura

¹⁶ Cambia de sitio los electrones (permutando sus coordenadas y las proyecciones del espín), la función debe de cambiar de signo.

que el método para resolver la ecuación de Schrödinger incluye el factor intercambio¹⁷.

La aproximación Hartree-Fock o campo autoconsistentes SCF, ha sido a lo largo del tiempo el camino de los químicos para los cálculos de la estructura electrónica de moléculas. En efecto, provee una forma razonable para sistemas atómicos y además correlaciones muchos cuerpos son ausentes.

Las ecuaciones de Hartree-Fock son semejantes a las ecuaciones de Hartree, excepto por el hecho de las integrales intercambio, la cual introduce términos adicionales en las ecuaciones diferenciales [72].

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(R, r) + \int \frac{\sum_{j \neq i}^N \rho_j(r')}{|r - r'|} dr' \right) \psi_i(r) - \sum_{j=1}^N \left(\sum_{\sigma} \int \frac{\psi_j^*(r', \sigma') \psi_i(r', \sigma')}{|r - r'|} \right) \psi_i(r, \sigma) = \sum_{j=1}^N \lambda_{ij} \psi_i(r, \sigma), \quad (24)$$

En los últimos años se ha demostrado un avance significativo en la determinación de las propiedades electrónicas de los materiales, mediante la teoría funcional densidad y que utilizan la aproximación densidad local LDA que incluyen el término intercambio y correlación. A continuación se describe la generación de estructura de bandas y densidad de estados DOS.

2.10 Estructura de bandas

La estructura de bandas, se define como los valores de la función de onda para diferentes direcciones de simetría de la primera zona de Brillouin. Se ha explicado, que un electrón libre, la energía potencial en la ecuación de Schrödinger es $V = 0$, entonces $\nabla^2 \psi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon) \psi(r) = 0$. De acuerdo con el teorema de Bloch, las funciones de onda y el potencial cumplen con el criterio de periodicidad, entonces permite determinar la energía del orbital descrito como:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (47)$$

Esta expresión tiene un comportamiento parabólico de la energía en función del vector de onda k . El potencial periódico, interactúa con el electrón de modo que el vector de onda sea influenciado, a continuación la figura 11, presenta la variación de la energía con respecto al vector de onda unidimensional, además se indica

¹⁷ Interacción electrón-electrón.

segmentos parabólicos de la energía y ocurre una discontinuidad en los límites de la primera zona de Brillouin $k = \pm n\pi/a$, con n entero.

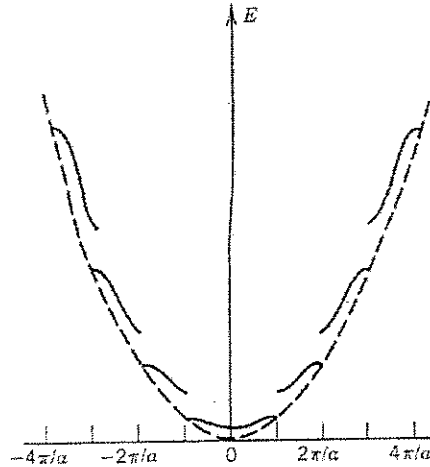


Figura 11. Diagrama de energía en función de k [73].

2.11 Bandas de energía

Las bandas de energía fue creado en 1928 y es de gran ayuda para comprender las propiedades de los sólidos; este concepto radica en posicionar los electrones en un átomo, incluyendo el principio de exclusión. Debido a las interacciones eléctricas, las funciones de ondas se distorsionan a medida que los electrones se alejan del núcleo (electrones de valencia), y en consecuencia las energías correspondientes a cada orbital varían hacia arriba y hacia abajo.

Entonces, los estados de valencia que antes producían un estado en el sistema, con un nivel definido de energía que podía dar cabida a N electrones, ahora producen una banda que contiene N niveles muy cercanos a continuación se indica en la figura 12, la variación de energía de cada estado en función de la separación atómica.

Estas bandas se distribuyen en estados de enlace, llamadas bandas de valencia (BV) y anti-enlace, llamadas bandas de conducción, (BC), separadas por una superficie de energía limitante conocida como energía de Fermi E_F . Sobre una estructura cristalina puede suceder que las bandas se traslapen o no, si no se pueden traslapar se observarán intervalos entre ellas que representan energías que los electrones no pueden poseer, denominadas, bandas prohibidas.

forma $e^{iK \cdot r}$, además los electrones asociados con ondas planas de esta forma tiene energía $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$. Como un resultado, la densidad de estados DOS puede ser determinada por integrar el resultado de la densidad electrónica en el k-espacio.

En seguida la figura 13, se representa la densidad de estados DOS para el silicio Si, como se indica en la DOS puede ser dividida en dos regiones separadas. La banda de valencia es la colección de todos los estado electrónicos ocupados, mientras todos los estados en la banda de conducción son vacíos ($T = 0^\circ K$). La región de energía que separa la banda de valencia y banda de conducción no contiene todos los estados electrónicos, esta es la banda hueco (band gap).

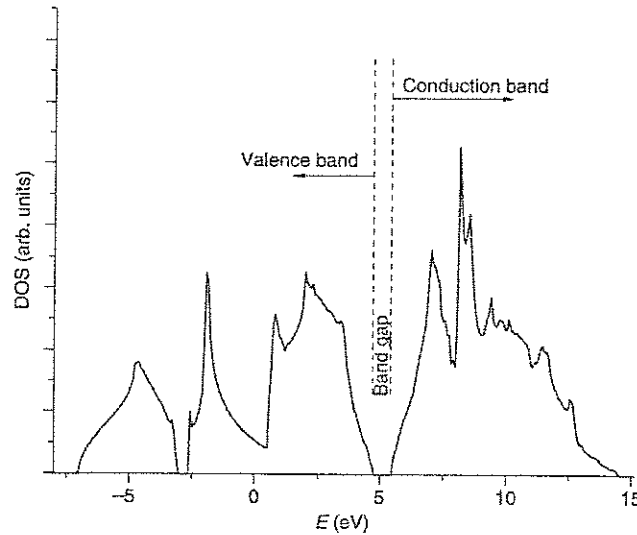


Figure 8.3 Calculated electronic DOS for bulk Si.

Figura 13. Comportamiento de la Densidad de Estados del Si [74].

CAPÍTULO 3

3. METODOLOGÍA

3.1 Teoría Funcional Densidad - Importancia

La Teoría Densidad Funcional DFT, ha sido soporte de los cálculos de estructura electrónica¹⁸, en mucho tiempo en física de estado sólido y química cuántica. Este método, permite tratar sistemas muy grandes mediante los métodos tradicionales ab initio (primeros principios), reconocidos por su precisión. Además, la teoría funcional densidad DFT, no es el camino directo para resolver la ecuación de Schrödinger, tampoco es un método simple de parametrizar resultados empíricos, es una manera de abordar cualquier problema interactuante, trazando un mapeo, mucho más fácil que resolver la solución de un problema no interactuante.

La principal idea de la teoría funcional densidad DFT se describe en el sistema de partículas de varios cuerpos interactuantes, mediante el funcional de la densidad de la partícula y no con el problema de la función de onda de varios cuerpos. Posee la ventaja de reducir los $3N$ grados de libertad del sistema de N cuerpos a solo tres coordenadas espaciales a través de la densidad de la partícula $[V]$.

La base fue postulada por el teorema Hohenberg-Kohn el cual considera todas la propiedades del sistema pueden ser funcionales de la densidad de estado fundamental. Además con el postulado de Born-Oppenheimer y Kohn-Sham han hecho prácticos los cálculos DFT mediante la aproximación del potencial intercambio-correlación (XC), que toma en cuenta el postulado de Pauli y el potencial de Coulomb¹⁹.

3.2 ¿Qué es un funcional?

Cuando hablamos de funcional, es más familiar el concepto de función. Una función toma el valor de una variable o variables y define un único número de estas variables, por ejemplo $f(x) = x^2 + 1$ [75].

Un funcional es similar, este toma una función y define un único número de la función por ejemplo:

$$F[f] = \int_0^1 f(x)dx = \left\{ \frac{(1)^3}{3} + (1) \right\} - \left\{ \frac{(0)^3}{3} + (0) \right\} = \frac{8}{3}, (25)$$

¹⁸ Se refiere a los niveles de energía de electrones y su distribución en el espacio y momento.

¹⁹ Fue imposible calcular exactamente el potencial XC (problema de varios cuerpos), una aproximación común es LDA.

Es un funcional de la función $f(x)$. Si evaluamos este funcional usando $f(x) = x^2 + 1$, obtenemos $F[f] = \frac{8}{3}$. A continuación encontramos el principal postulado de la teoría funcional densidad DFT.

3.3 Aproximación Hohenberg-Kohn

Hohenberg y Kohn (1964) [76] demostró que DFT puede ser una teoría exacta de un sistema de muchos cuerpos, tiene implicación en sistemas Born-Oppenheimer y el sistema de partículas interactuante con un potencial externo. Se basa en dos teoremas.

El primer teorema, expresa la energía de estado fundamental de la ecuación de Schrödinger, puede ser escrita como $E[n(r)]$, donde $n(r)$ es la densidad electrónica. Este es el campo conocido como teoría funcional densidad DFT. La función de onda de estado fundamental $\psi(r_1, \dots, r_N)$ es un funcional del potencial externo y además también de la densidad. Entonces, el estado fundamental es:

$$E = \langle \psi[n(r)] | \hat{H} | \psi[n(r)] \rangle, (26)$$

Además, el Hamiltoniano del sistema es $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V}$. Donde $\hat{T}$ es la energía cinética, $\hat{U}$ es la interacción electrón-electrón y $\hat{V}$ el potencial externo.

El segundo teorema de Hohenberg-Kohn afirma que para $E[n(r)]$ sea mínimo, la función de onda de estado fundamental y por lo tanto la densidad de estado fundamental puede ser usado en el primer teorema (ecuación anterior). Desafortunadamente, el teorema de Hohenberg-Kohn demuestra rigurosamente de la existencia de la densidad electrónica que puede ser usada para resolver la ecuación de Schrödinger.

3.4 Teoría Thomas y Fermi

L. H. Thomas y E. Fermi (1927) [77], dieron una prescripción para construir la energía total en términos de la densidad electrónica $n(r)$, usaron las expresiones de energía cinética, intercambio y correlación de un gas de electrones homogéneo para construir las mismas cantidades para un sistema no homogéneo de la siguiente manera: $E_\alpha = \int \varepsilon_\alpha[\rho(r)] dr$, donde $\varepsilon_\alpha[\rho(r)]$ es la densidad energía, calculada localmente para el valor de la densidad en un punto en el espacio.

Thomas y Fermi propusieron una expresión de la energía electrónica total donde la energía cinética, intercambio y contribuciones de correlación fueron tomados del

gas de electrones, el cual es una buena aproximación conocida. La idea fue construir las mismas cantidades para el sistema no homogéneo

$$E_{\alpha}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{\alpha}[\rho(r)] dr, (27)$$

Donde $\varepsilon_{\alpha}[\rho(r)]$ es la densidad de energía de contribución α (cinética, intercambio y correlación), calculada localmente al valor asumido por la densidad en cualquier punto del espacio. La expresión en corchetes cuadrados, indica un funcional dependiente de la energía y densidad de energía en la densidad electrónica. A continuación se describe las ecuaciones de Kohn Sham.

3.5 Aproximación Kohn-Sham

En 1965, W. Kohn y L. Sham [78] propusieron la idea de reemplazar la energía cinética de los electrones interactuantes con un sistema no-interactuante, porque este último puede ser fácilmente calculado. Sea un sistema de N electrones no interactuantes, que solo están afectados por la acción de un potencial externo, entonces la energía se define como:

$$E_s[\rho(r)] = T_s[\rho(r)] + \int V(r) \rho(r) dr, (28)$$

Si tenemos en cuenta la interacción, la energía queda en términos de:

$$\begin{aligned} E[\rho(r)] = & T[\rho(r)] \\ & + \int v(r) \rho(r) dr + V_{ee}[\rho(r)] + T_s[\rho(r)] - T_s[\rho(r)] + J[\rho(r)] \\ & - J[\rho(r)] \quad (29) \end{aligned}$$

Donde $J[\rho(r)]$ es la parte clásica de la interacción electrón-electrón, entonces la ecuación anterior se puede simplificar como:

$$E[\rho(r)] = T_s[\rho(r)] + J[\rho(r)] + \int V(r) \rho(r) dr + E_{xc}[\rho(r)] \quad (30)$$

Dónde: $E_{xc}[\rho(r)] = V_{ee}[\rho(r)] - J[\rho(r)] + T[\rho(r)] - T_s[\rho(r)]$ es la energía de intercambio y correlación. Esta contiene la parte cuántica de la interacción electrón-electrón y el error del funcional de la energía cinética $T[\rho(r)]$, por el funcional de la energía cinética de los electrones no interactuantes $T_s[\rho(r)]$.

La densidad electrónica para el estado fundamental está en función de un conjunto de orbitales Kohn-Sham

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N \varphi_i^*(r) \varphi_i(r), \quad (31)$$

De acuerdo con el principio variacional la energía electrónica $E[\rho(r)]$ se deriva las ecuaciones de Kohn-Sham y se resuelven mediante un proceso autoconsistente de Hartree.

3.6 Software Wien2K

El código Wien2K fue creado por el grupo de Instituto de química de materiales de la Universidad Tecnológica de Viena (1990) [129] con la versión Wien93 y publicado por P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, and S. B. Trickey [79]. Durante, estos 20 años el software se realiza en código FORTRAN 90, y requiere un sistema operativo UNIX para su funcionamiento, además se encuentra estructurado vía script celda-C, que ha permitido mejorar las versiones UNIX del código origen, con las versiones Wien93, Wien95, Wien97 y Wien2K. En seguida se encuentra en la figura 14 el logo de Wien2K, cuya licencia se encuentra adscrita a la Universidad Santo Tomás Tunja.

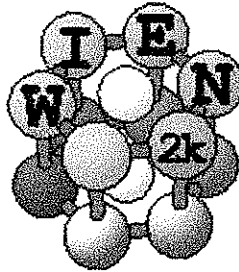


Figura 14. Logo software Wien2K – Universidad de Viena [80].

Este software, utiliza las teorías de estado sólido, para hacer posible los cálculos de estructura electrónica en sólidos cristalinos usando la teoría funcional densidad DFT. Para su desarrollo establece el método ondas planas aumentadas Linearizadas LAPW, con la opción del método de orbitales locales, uno de los más seguros en el cálculo de estructuras de bandas. En este trabajo, se ha empleado la versión Wien2K, a continuación se indica las aproximaciones que realiza el software.

3.7 Aproximación densidad local LDA

Es un modelo en que separa las funciones de correlación intercambio E_{xc} . Esta se divide en dos, una contempla solo el intercambio y la otra la correlación, de modo que:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r)] dr \quad (32)$$

Donde ε_{xc} es la energía de correlación-intercambio para una partícula para un gas de electrones uniforme de densidad ρ .

3.7.1 Aproximación densidad local espín LSDA

Por medio de esta teoría, se logra resolver el problema de muchos electrones en un cristal, mediante una expresión exacta de intercambio y ajustes numéricos a la energía de correlación para el gas de electrones homogéneo, con la técnica de aproximación de densidad de espín local (LSDA en inglés: Local Spin Density Approximation).

Aquí las cantidades principal es la densidad espín $\rho_\sigma(r)$, en términos de la energía total es:

$$E_{tot}(\rho_\uparrow, \rho_\downarrow) = T_s(\rho_\uparrow, \rho_\downarrow) + E_{ee}(\rho_\uparrow, \rho_\downarrow) + E_{Ne}(\rho_\uparrow, \rho_\downarrow) + E_{xc}(\rho_\uparrow, \rho_\downarrow) + E_{NN}, \quad (33)$$

Dónde: T_s , es la energía cinética electrónica.

E_{ee} , es el término de repulsión electrón – electrón.

E_{Ne} , energía potencial de atracción núcleo – electrón.

E_{xc} , es la energía de correlación de intercambio, e incluye la interacción electrón – electrón.

E_{NN} , repulsión entre pares de núcleos, convencionalmente como la energía cinética en partículas no interactuantes.

Dos postulados comprenden la aproximación densidad local espín LSDA:

1. Asume que la energía correlación intercambio E_{xc} , puede ser escrita en términos de la densidad de energía correlación intercambio local μ_{xc} en todo tiempo (espín up más espín down) densidad electrónica como:

$$E_{xc} = \int \mu_{xc}(\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}) * [\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}] dr \quad (34)$$

2. Elige la forma particular para μ_{xc} . La energía total E_{tot} , tiene un equivalente variacional con el principio de Rayleigh-Ritz. El camino conocido más efectivo es minimizar E_{tot} por medio del principio variacional, es introducir orbitales X_{ik}^{σ} obligadas a construir las densidades de espín como:

$$\rho_{\sigma}(r) = \sum_{i,k} \rho_{ik}^{\sigma} |X_{ik}^{\sigma}(r)|^2, \quad (35)$$

Donde, ρ_{ik}^{σ} son los números ocupados tales como $0 \leq \rho_{ik}^{\sigma} \leq \frac{1}{w_k}$, con w_k es el ancho de simetría requerida del punto k . Entonces la variación de E_{tot} dada en las ecuaciones de Kohn-Sham (en unidades atómicas Rayleigh),

$$[-\nabla^2 + V_{Ne} + V_{ee} + V_{xc}^{\sigma}] X_{ik}^{\sigma}(r) = \epsilon_{ik}^{\sigma} X_{ik}^{\sigma}(r), \quad (36)$$

El cual puede ser resuelto y constituye la primera tarea computacional. Estas ecuaciones de Kohn-Sham pueden ser resueltas auto consistentemente en un proceso iterativo, desde encontrar los orbitales Kohn-Sham requiere el conocimiento de los potenciales que ellos mismos dependen de la densidad (espín -) y por lo tanto en los orbitales otra vez.

3.8 Aproximación gradiente generalizado GGA

El método aproximación gradiente generalizado GGA consiste en relacionar los funcionales de correlación e intercambio es un funcional local de la densidad electrónica espín y sus gradientes. A continuación se encuentra la expresión matemática que describe la aproximación gradiente generalizado.

$$E_{xc}^{GGA}(\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}) = \int \epsilon_{xc}(\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}) \rho(r) \nabla \rho(r), \quad (37)$$

La incorporación del gradiente puede dar una mejor descripción del sistema, es utilizado en las propiedades del estado fundamental en materiales ligeros, moléculas y sólidos producen parámetros de red en equilibrio con respecto a la aproximación densidad local espín LSDA.

3.9 Métodos ondas planas aumentadas APW

Recientemente, el desarrollo de los métodos de onda plana de Slater APW [81]. Estos postulados consisten en la generación de una función de onda particular

para ciertos orbitales. Es un método que resuelve las ecuaciones de Kohn-Sham para la densidad de estado de estado base, la energía total y valores propios del sistema, se usan ondas planas, de modo que se realice una conveniente partición del sistema. Para cumplir con este objetivo, la celda unitaria se divide en una región denominada esferas de Muffin Tin (S) y una región intersticial (I), a continuación se indica en la figura 15 la división del espacio de la celda unitaria.

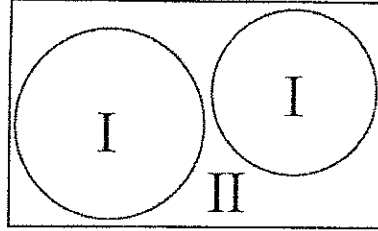


Figura 15. Partición de la celda unitaria en esferas atómicas (I) y región intersticial (II) [80].

Según la aproximación los estados u orbitales que se encuentran en el interior de la esfera se denominan estados de core (núcleo) y los restantes (exterior) son estados de valencia. Esta aproximación supone ondas planas $\psi_k(r)$ en la región intersticial y en los estados de valencia la oscilación es más rápida, en efecto la descripción matemática es:

$$\psi_k = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik \cdot r} & r \in II \\ \sum_{l,m} A_{lm}^{\alpha,k+K} u_l^{\alpha}(r, \epsilon_l) Y_m^l(r') & r \in I \end{array} \right\}, \quad (38)$$

Donde r son las posiciones (coordenadas esféricas) dentro de la esfera, r' especifica la parte angular (θ', ϕ') . $u_l^{\alpha}(r, \epsilon_l)$ y $Y_m^l(r')$ son soluciones de la ecuación de Schrödinger de átomo de hidrogeno y el factor $A_{lm}^{\alpha,k+K}$ son los coeficientes del método.

3.9.1 Ondas planas aumentadas linearizadas potencial completo FP-LAPW

El método ondas planas aumentadas linearizadas potencial completo, es considerado a ser el cálculo de estructura electrónica más exacto, y tiene en cuenta el método ondas planas aumentadas APW, introducido por Slater [82].

En este enfoque, el espacio real es dividido en regiones esféricas alrededor de los átomos ("esferas atómicas" o "muffin-tin") y la región intersticial entre las esferas.

1. Dentro de la esfera atómica (I), de radio R_t , una combinación lineal de funciones radiales armónicos esféricos $Y_{lm}(r)$ es utilizado

$$\phi_{kn} = \sum_{lm} [A_{lm, kn} u_l(r, E_l) + B_{lm, kn} \dot{u}_l(r, E_l)] Y_{lm}(\hat{r}), \quad (39)$$

Donde $u_l(r, E_l)$ (en el origen) es la solución regular de la ecuación radial de Schrödinger para energía E_l (elige normalmente en el centro de la banda correspondiente con carácter 1-enlace) y la parte esférica del potencial esférico interior t ; $\dot{u}_l(r, E_l)$ es la energía derivada de u_l evaluada en la misma energía E_l . Una combinación lineal de estas dos funciones constituye la linealización de la función radial; los coeficientes A_{lm} , y, B_{lm} son funciones de k_n determinada por exigir que esta función base coincida (en valor y pendiente) cada onda plana (PW) la correspondiente función base de la región intersticial; u_l , y, $\dot{u}_l$ son obtenidas por integración numérica de la ecuación radial de Schrödinger sobre una malla radial dentro de la esfera.

2. En la región intersticial (II) una expansión de onda plana es utilizada

$$\phi_{kn} = \frac{1}{\sqrt{w}} e^{ik_n \cdot r}, \quad (40)$$

Donde $k_n = k + K_n$; K_n es el vector de red recíproco y k es el vector de onda dentro de la primera zona de Brillouin. Cada onda plana es aumentada por una función átomo-enlace en cada esfera atómica.

Las soluciones de las ecuaciones de Kohn-Sham se expanden en este conjunto base combinado de LAPW de acuerdo al método variacional lineal

$$\psi_k = \sum_n c_n \phi_{kn}, \quad (41)$$

Y los coeficientes c_n son determinados por el principio variacional Rayleigh-Ritz.

Con el fin de mejorar la linealización (es decir, para aumentar la flexibilidad de la base) y para hacer posible un tratamiento de estados semi-núcleo y valencia en una ventana de energía (para garantizar la ortogonalidad) adicionar (k_n independiente) funciones base se puede hacer. Se les llama "orbitales locales lo" (Singh 91) y consiste de combinaciones lineales de 2 funciones radiales a 2 energías diferentes (por ejemplo: la energía 3s y 4s) y una energía derivada (en una de estas energías):

$$\phi_{lm}^{LO} = [A_{lm}u_l(r, E_{1,l}) + B_{lm}\dot{u}_l(r, E_{2,l}) + C_{lm}u_l(r, E_{2,l})]Y_{lm}(\hat{r}), (42)$$

Los coeficientes A_{lm} , B_{lm} , y, C_{lm} son determinados por los requerimientos que ϕ^{LO} podrían ser normalizados y tiene valor de cero y la pendiente en el límite de la esfera.

3.9.2 Método APW + lo

Sjöstedt, Nordström and Singh (2000) han demostrado que el método LAPW con la restricción adicional sobre condición lineal de las ondas planas dentro de la esfera es el camino no más eficiente al método APW linealización Slater. Este puede ser hecho más eficiente cuando uno usa el estándar APW básico, pero de curso con $u_l(r, E_l)$ a la energía fija E_l en orden para mantener el problema del valor propio lineal. Entonces se adiciona un nuevo orbital local (lo) para tener la suficiente flexibilidad en las funciones bases radiales:

$$\phi_{kn} = \sum_{lm} [A_{lm, kn} u_l(r, E_l)] Y_{lm}(\hat{r}), (43)$$

$$\phi_{lm}^{lo} = [A_{lm} u_l(r, E_{1,l}) + B_{lm} \dot{u}_l(r, E_{1,l})] Y_{lm}(\hat{r}), (44)$$

Este nuevo orbital local lo, los términos A_{lm} , y, B_{lm} no dependen de k_n y están determinados por el requerimiento que el orbital local es cero en el límite de la esfera y normalizado. Entonces, se construyó las funciones base que tiene "torceduras/asperezas" en el límite de la esfera, el cual hace necesario incluir términos de superficies en la parte de energía cinética del Hamiltoniano. Note, casi, que la función de onda total es, por supuesto, lisa y diferenciable.

3.10 Estructura de los cálculos Wien2K

Este trabajo se realizó en el software de química computacional Wien2K; el procedimiento recomendado, consiste en primer lugar crear una nueva sesión, que permita guardar los cálculos de la estructura electrónica de un compuesto o elemento determinado.

Posteriormente, se realizan las configuraciones de entrada *StructGen*, que consiste en la especificación de cantidad de átomos, las posiciones cristalinas, números atómicos, radios de Muffin Tin²⁰ y a partir de estos parámetros, se ejecuta automáticamente un programa auxiliar que determina las propiedades de la molécula, tales como las distancias de los vecinos más cercanos, el grupo

²⁰ Si existen varios átomos, se puede asignar un valor RMT para cada uno.

espacial, las simetrías de la red, las densidades de estados, los vectores de onda, y la densidad de carga. A continuación la Tabla 4, indica cada uno de los script (programas auxiliares) del software Wien2K, antes de realizar cualquier cálculo autoconsistente.

Tabla 4. Programas auxiliares (script), del software Wien2K.

<i>nn</i>	Distancia del vecino más cercano (posiciones atómicas de la unitaria especificada)
<i>SGROUP</i>	Determina el grupo espacial (tipo de red, constantes de red, posiciones de los átomos)
<i>SYMETRY</i>	Determina la simetría de la red (tipo de red, posiciones atómicas)
<i>LSTART</i>	Código atómico relativista <i>LSDA</i> y genera las densidades atómicas, crea los potenciales atómicos, y las densidades de valencia atómicas.
<i>KGEN</i>	Genera la malla <i>k</i> de la zona de Brillouin.
<i>DSTART</i>	Este programa genera un densidad de carga cristalina inicial mediante superposición de densidades atómicas generadas por <i>Lstart</i> .

Fuente: [130].

De acuerdo con los parámetros de entrada, se establecen los criterios de convergencia del cálculo autoconsistente, además se incluye la cantidad de vectores de onda *k* que se encuentran en la primera zona de Brillouin, ya que entre mayor número más exacto será los cálculos, pero el cálculo tardara más tiempo en converger. De acuerdo con estos criterios de convergencia, el ciclo de autoconsistente consiste de los siguientes pasos:

1. LAPW0: genera el potencial V_{tot} como la suma del potencial de Coulomb V_c y el potencial intercambio correlación V_{xc} a partir de la densidad.
2. LAPW1: establece el Hamiltoniano y la matriz de superposición y se encuentra por diagonalización de valores propios y vectores propios. Utiliza del conjunto LAPW base y el método APW con el objetivo de eficacia máxima. Calcula las bandas de valencia y los estados semi-core.

3. LAPWSO: recalcula los autoestados introduciendo la corrección del efecto Espín-Órbita en un procedimiento de segundo variacional y calcula los valores propios y los vectores propios utilizando las funciones de onda relativistas escalares de *lapw1*.
4. LAPW2: obtiene las densidades de carga²¹ a partir de los autovectores de *lapw1* y calcula la energía de Fermi.
5. LCORE: calcula los estados de core para la parte actual esférica del potencial, produce los valores propios básicos con sus correspondientes densidades y la contribución básica a las fuerzas atómicas.
6. MIXER: mezcla las densidades electrónicas del núcleo, semi-núcleo y los estados de valencia, se añaden para producir una nueva densidad total.

Teniendo en cuenta, los anteriores seis (6) pasos se determina un cálculo autoconsistente, que su principal función es determinar la densidad de estados fundamental. Para la realización de este proyecto, fue necesario seguir con serie de tareas que cumplieran con este proceso, a continuación la figura 16 se enuncia el esquemático o diagrama de flujo que representa un cálculo autoconsistente, en el software Wien2K a través del método FP-LAPW.

Luego, de realizar el proceso autoconsistente en el software Wien2K existe una herramienta *analyse*, este script (programa auxiliar) busca el archivo *case.scf* y extrae los valores deseados: energía total ENE (Ry), energía de Fermi FER, momento magnético total (espín) MMTOT, carga CHA. Para calcular la Densidad de Estados parcial y total, se emplea el método de tetraedro (Bloch et al 1994), donde la densidad de estados es igual a la suma de la densidad de estados atómicos e intersticiales.

²¹ Es una representación para cada estado ocupado y cada vector k , entonces le corresponde cargas atómicas dentro de las esferas se obtienen por integración.

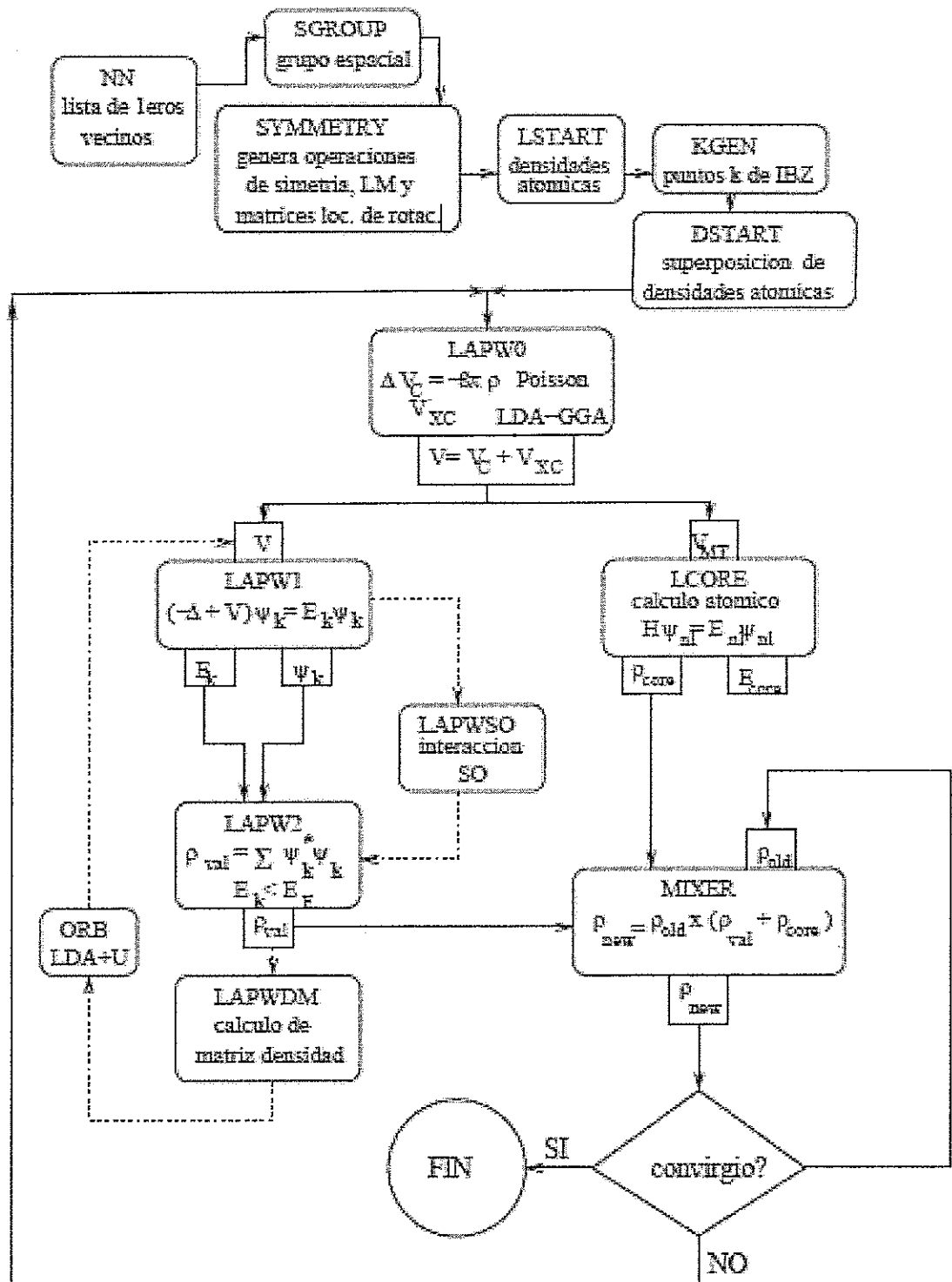


Figura 16. Diagrama de flujo de un campo autoconsistente en Wien2K [80].

CAPÍTULO 4

4. RESULTADOS

En primera instancia se presentan los detalles computacionales junto con la descripción cristalográfica para cualquier elemento, esta nos permite describir con precisión las características cristalográficas del MgB_2 tanto en el volumen y como en la superficie, en seguida se describirá los parámetros de red obtenidos por la optimización y por último se presentan las propiedades eléctricas en el volumen y en la superficie, junto con su respectivo análisis.

4.1 Detalles Cristalográficos Generales

4.1.1 Características Red directa

Los sólidos cristalinos son más fáciles de estudiar porque mantienen una sola forma y un orden, además porque es la principal causal de las propiedades físicas de los materiales. La unidad fundamental de un sólido, es su estructura cristalina que a su vez se encuentra formada por una celda cristalina y una base. Estas celdas cristalinas se han distribuido en siete (7) sistemas cristalinos que con la distribución del motivo originan las 14 redes de Bravais, descritas en la figura 17.

La base es el motivo, átomo, o moléculas que corresponde a cada punto de la red. Además de la geometría y el motivo de las redes de Bravais, se tiene en cuenta la mínima región dada por los vectores de translación²² a , b , c , y tres ángulos que determinan un paralelogramo, denominada red unitaria; cuando se aplica el operador translación a la red aparecen dos nuevas celdas: unitaria y primitiva.

La celda unitaria es un volumen del espacio que trasladado a todos los puntos llena todo el espacio sin vacíos ni solapamientos y genera el cristal completo; la celda unitaria, es generalmente mayor que la celda primitiva. A continuación la figura 18a, indica la relación entre la celda primitiva (volumen interior) y la celda unitaria (volumen exterior) [83]. La celda Wigner-Seitz es una celda primitiva construida bisectando por planos perpendiculares las distancias a primeros vecinos, así como se indica a continuación e la figura 18b [84].

²² También son denominado vectores primitivos.

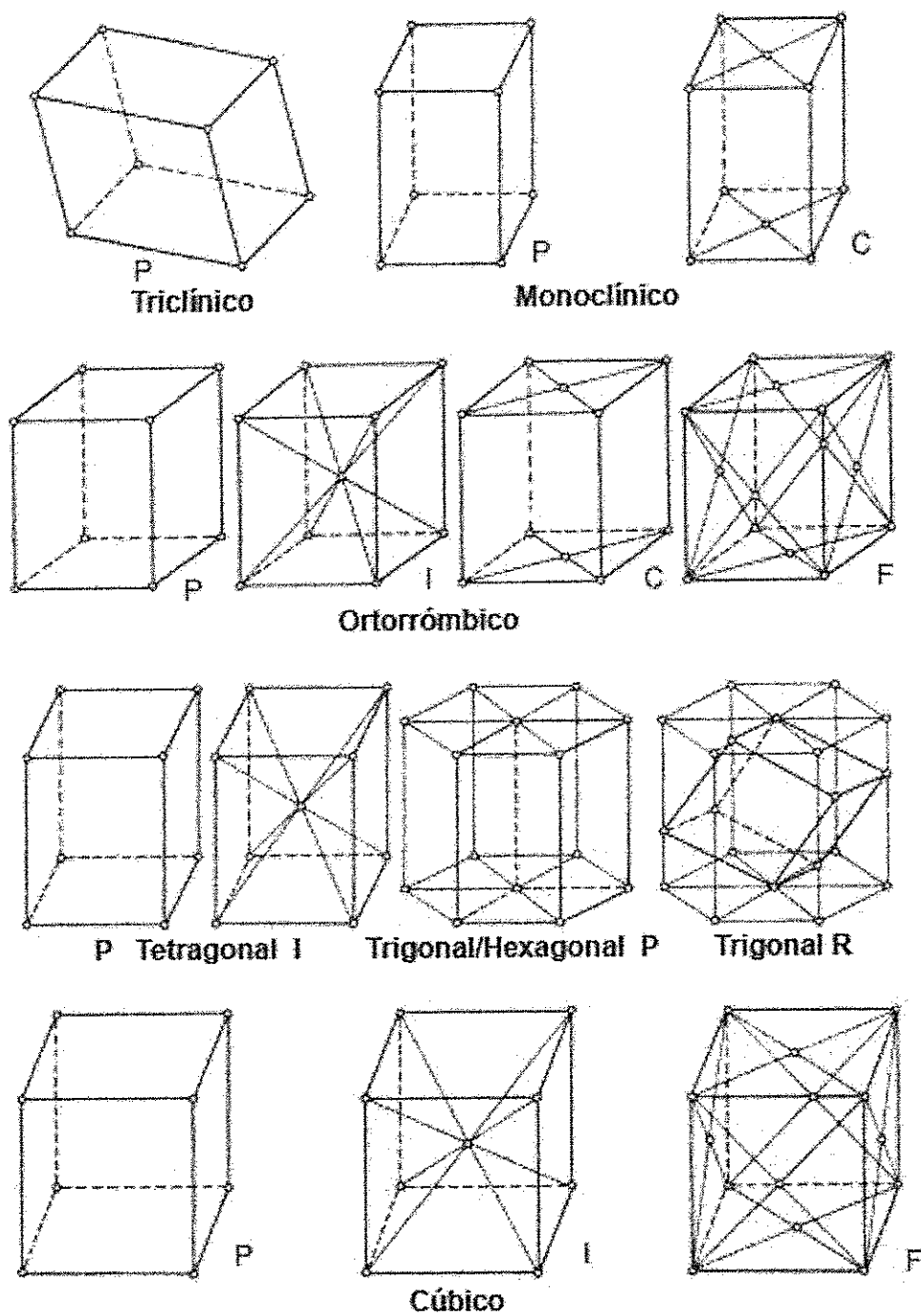


Figura 17. Retículos de Bravais [131].

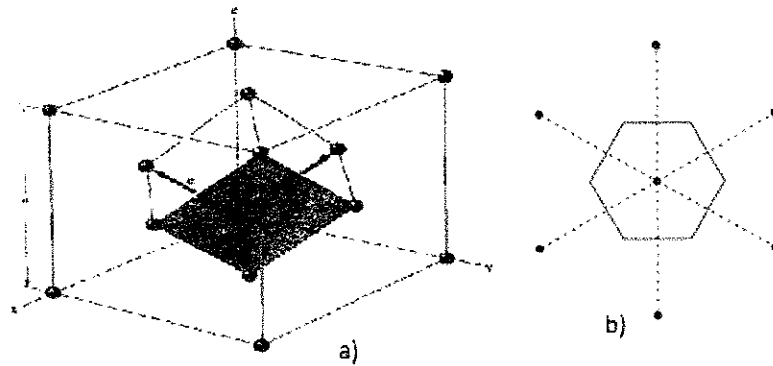


Figura 18. a) Celdas primitiva y unitaria de una red cubica y b) celda Wigner Seitz [85].

Una de las ventajas de las estructuras cristalinas, es que poseen simetrías que permiten simplificar el estudio del material. Las principales operaciones de simetría son: simetría de rotación de orden n , es una rotación alrededor de un eje a un ángulo $2\pi/n$; simetría de reflexión, se obtiene en la mitad de un cristal reflejado en un plano de simetría que pasa por algún punto de la red reproduce la mitad; centro de inversión, un punto de la red efectúa la operación $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ [132, 133]. Una necesidad de orientación la realiza los índices de Miller, estos son empleados para denotar las direcciones de planos de una celda unitaria. Consiste de tres números enteros positivos o negativos (h, k, l) , que representan las intersecciones de un plano. A continuación se presenta algunas características importantes: los índices denotan un solo plano o algunos planos paralelos. Sobre la figura 19, a) se indica los planos cristalinos [231], y en b) se encuentran los planos [100], [110], [111], [200], $[\bar{1}00]$, respectivamente.

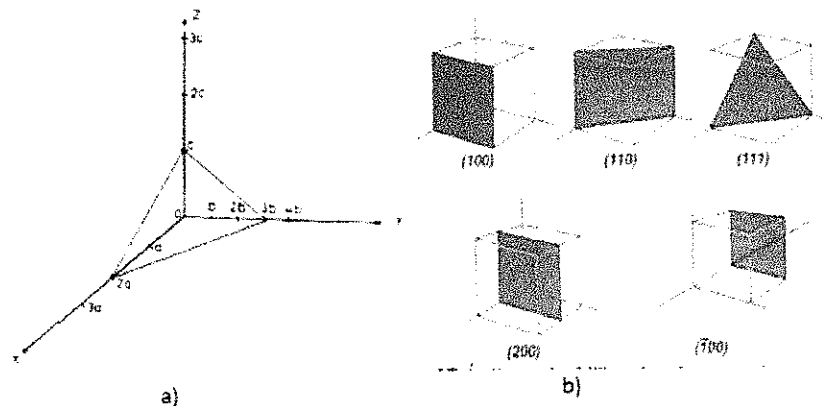


Figura 19. Intersección de un plano con los ejes coordenados [132].

4.1.2 Red recíproca o primera zona de Brillouin

La celda Wigner Seitz de la red recíproca se denomina primera zona de Brillouin, y es el conjunto de vectores de onda $\vec{k}$ cuyas ondas planas tienen la periodicidad de la red de Bravais. Del mismo modo que una celda primitiva unidad contiene toda la información sobre la estructura de un cristal, la primera zona de Brillouin contiene toda la información sobre las ondas planas que se propaguen en ese cristal. A continuación la figura 20, indica la primera zona de Brillouin de una red cubica simple.

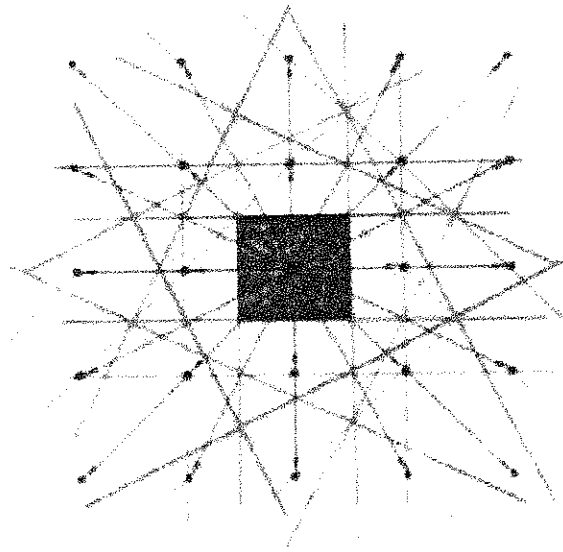


Figura 20. Descripción Primera zona de Brillouin [135].

Luego de haber definido las posiciones en el espacio real, en términos de los vectores de red a_1, a_2 y a_3 , es útil definir tres vectores que definen puestos en la red recíproca. Estos vectores son llamados los vectores de la red recíproca b_1, b_2 y b_3 , y son relacionados:

$$\left\{ \begin{array}{l} b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} \\ b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_2 \cdot (a_3 \times a_1)} \\ b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_3 \cdot (a_1 \times a_2)} \end{array} \right\}, (45)$$

Asimismo, como en la red directa se definió la celda de Wigner-Seitz, en la red recíproca la celda de Wigner-Seitz se describe como la primera zona de Brillouin

BZ. La primera zona de Brillouin juega un rol central en la teoría de bandas en los materiales. Muchos puntos en la zona de Brillouin con especial significado son dados por nombres individuales.

4.2 Celda y parámetros de red del MgB_2 en el volumen

La estructura cristalina del MgB_2 , es una estructura hexagonal, la cual contiene como motivo un átomo (1) de Magnesio y dos (2) de Boro, con un total de 22 electrones, según su número atómico y la configuración electrónica para el magnesio $Z = 12$, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ y el boro $Z = 5$, $1s^2 2s^2 2p^1$.

La estructura hexagonal, posee simetría con su grupo espacial 191 o $P6/mmm$ [134] de acuerdo a la clasificación de las tablas internacionales de cristalografía. La expresión $P6/mmm$ o $P6/m 2/m 2/m$ señala los elementos principales de simetría que tiene este grupo, algunas características son:

- Seis ejes de simetría seis paralelos al eje c y un plano de reflexión m perpendicular a dicho eje.
- Ejes de simetría binaria paralelos a los ejes a_j y plano de reflexión perpendicular a ellos.
- Ejes de simetría binaria sobre la dirección cristalográfica $[210]$ y plano de reflexión perpendicular a ella.
- Posee, además, ejes de simetría ternaria y un centro de inversión $[90]$.

A continuación en la Tabla 5, describe los parámetros de red de la celda unitaria, con ángulos $\alpha = \beta = 90^\circ$ y $\gamma = 120^\circ$ [88, 89]. Esta estructura consiste de capas hexagonales de magnesio Mg, alternando con capas de grafito de átomos de boro B, tal como se indica en la figura 21.

Tabla 5. Parámetros de red del Diboruro de Magnesio en el volumen.

Parámetro	Angstrom	Bohr
$a = b$	3.083551Å	5.827918B
c	3.521488Å	6.655619B
c/a	1.142023	

Fuente: autor.

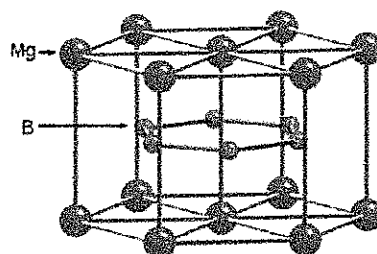


Figura 21. Estructura cristalina del superconductor MgB_2 [89].

Los índices de Miller de la red hexagonal, tienen un eje de simetría normal al plano base. Usar el sistema de tres índices de Miller, para esta estructura es deficiente. Una mejor solución es usar cuatro ejes, el sistema de cuatro índices para sólidos hcp $[h, k, i, l]$. A continuación la figura 22, se encuentra un ejemplo de la superficie (0001).

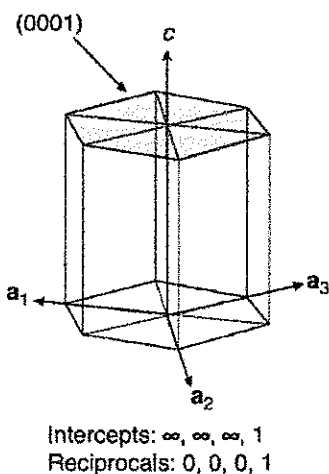


Figura 22. Superficie (0001), de la estructura cristalina hexagonal compacta [87].

4.3 Resultados de los cálculos estructurales de la celda unitaria del MgB_2

4.3.1 Detalles computacionales

La simulación realizada, se tiene en cuenta la posición de los átomos de magnesio y boro, que se encuentran en la siguiente Tabla 6, por tanto son los parámetros de entrada del programa.

Tabla 6. Posiciones relativas de los átomos en el MgB_2 .

Átomo	X	Y	Z
Mg	0	0	0
B	1/3	2/3	1/2
B	2/3	1/3	1/2

Fuente: [136].

Con la posición de los átomos en la celda unitaria establecidos en la anterior Tabla 6, los parámetros de red teóricos presentan un margen de error máximo de 0.3% en comparación con los valores experimentales [92, 93], y sus ángulos entre vértices son $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$.

La configuración de los radios de Muffin Tin se ingresó los valores $R_{MT} = 2.35 \text{ a.u.}$ para el magnesio y $R_{MT} = 1.67 \text{ a.u.}$ para el boro, considerados en el método APW como el radio de alcance del potencial de los núcleos, sin existencia de traslape²³; además el límite para la energía de ondas planas se tomó en cuenta con el parámetro $R_{mt}K_{max} = 7$, donde R_{mt} es el radio esférico atómico más pequeño en la celda unitaria y K_{max} es la magnitud del vector más largo y se encuentra en concordancia con las especificaciones del software, también se tiene en cuenta el listado de tablas internacionales de cristalografía, con el número de operaciones de simetría para la red hexagonal es 24, que agiliza los cálculos estructura de bandas.

La energía de separación entre estados de core - valencia es de $6Ry$ y es la recomendada por Perdew-Burke-Ernzerhof 96, inclusive el cálculo de autoconsistente se detuvo cuando la diferencia de energía entre ciclos consecutivos era inferior a $1 \times 10^{-4} Ry$ y el parámetro de mezclado de las densidades entre dos ciclos consecutivos es igual a 0.4, siguiendo el esquema Broyden. La densidad de carga y los potenciales son ampliados en armónicos de red hasta $l = 6$ dentro de las esferas y una serie de Fourier en la región intersticial.

El potencial de intercambio y correlación son tratados con la aproximación gradiente generalizado GGA usando la parametrización de Perdew; para este desarrollo se usó una serie de Fourier del potencial con la magnitud del vector más largo en la expansión de densidad de carga $G_{max} = 12$, sin embargo los valores recomendados se encuentran entre $G_{max} = 15 - 24$, siendo G un vector en el espacio recíproco. El número de puntos de malla radial es $NPT = 381$, para los

²³ La integración k sobre la primera zona de Brillouin es realizada con el esquemático Monk.

cálculos LDA es considerada una buena aproximación pero para GGA el valor es más alto, y en concordancia nuestro valor es de $NPT = 781$.

Los parámetros de salida constituyen: la energía total calculada $ENE = -500.15 Ry$, la energía de Fermi $FER = 0.44387$, la convergencia de las dos últimas interacciones $\int |\rho_n - \rho_{n-1}| dr$, la distancia de carga es $DIS = 0.3566236$, con una diferencia densidad de carga total para un átomo entre menos de dos interacciones $DTO = 0.4390890$. Además, la carga total en la esfera es de $NTO = 3.541646$, con cargas parciales en la esfera $QTL = 1.1058$, y el potencial intercambio-correlación de esta cálculo fue de $POT = 12$, con un tamaño matriz actual de $RKM = 6.99$ que determina el chequeo de normalización de las densidades de carga electrónica $NEC = 22$.

4.3.2 Cálculo de las distancias interplanares y de coordinación en el volumen MgB_2

Una de las ventajas, es que la estructura hexagonal tiene el número de coordinación 12, esto significa que cada átomo de magnesio tiene doce (12) boros equidistantes como sus vecinos más cercanos. Se quiere demostrar esta afirmación, mediante la posición de cada uno de los átomos de magnesio y boro, se puede determinar la distancia de separación y luego así contrastar la distancia más corta, a continuación la Tabla 7 y 8 resaltan las coordenadas de los átomos magnesio-magnesio y magnesio-boro, respectivamente.

De acuerdo con la siguiente formula (46), podemos realizar la correlación de la distancia atómica entre el magnesio-magnesio y boro-magnesio, entonces el módulo de la distancia tridimensional es:

$$d_{Mg-Mg} = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}, \quad (46)$$

Entonces, si se aplica esta fórmula al átomo de magnesio 1 y 2, tenemos que:

$$d_{Mg-Mg} = \sqrt{(28.6165 - 19.0777)^2 + (5.5073 - 11.0147)^2 + (12.5791 - 12.5791)^2}$$

$$d_{Mg-Mg} = \sqrt{(90.989)^2 + (30.332)^2 + (0)^2} = 11.015$$

Por tanto la distancia entre magnesio y boro es:

$$d_{Mg-B} = \sqrt{(19.0777 - 22.258)^2 + (11.0147 - 5.5073)^2 + (12.5791 - 6.2895)^2}$$

$$d_{Mg-B} = \sqrt{(-3.1801)^2 + (5.5075)^2 + (6.2895)^2} = 8.9445$$

Como vemos, la distancia magnesio-boro es la más pequeña, por tanto los vecinos del magnesio corresponden a dos capas, cada una de 6 boros como vecinos próximos, a continuación se indica las distancias realizadas, así como los doce (12) vecinos del magnesio, donde los átomos de boro se encuentran en gris y los de magnesio en azul, a continuación se indica en la figura 23.

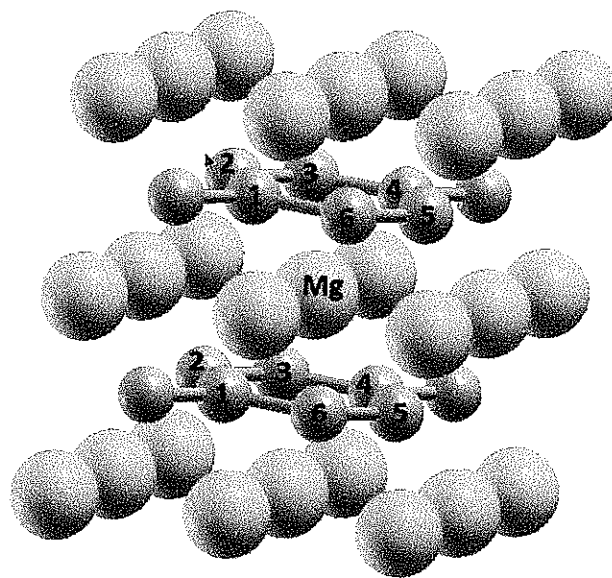


Figura 23. Distancia entre átomos de magnesio-magnesio y magnesio-boro.

Fuente: autor.

Tabla 7. Coordenadas de los átomos de magnesio en el MgB_2 .

Átomo	X (B)	Y (B)	Z (B)
Mg1	19,0777	11,0147	12,5791
Mg2	28,6165	5,5073	12,5791
Mg3	28,6165	16,5220	12,5791
Mg4	19,0777	22,0295	12,5791
Mg5	9,5256	16,5220	12,5791
Mg6	9,5256	5,5073	12,5791

Fuente: autor.

Tabla 8. Coordenadas de los átomos de boro en el MgB_2 .

átomo	X (B)	Y (B)	Z (B)
B1	22,258	5,5073	6,2895
B2	25,438	11,015	6,2895
B3	22,258	16,522	6,2895
B4	15,898	16,522	6,2895
B5	12,719	11,015	6,2895
B6	15,898	5,5073	6,2895

Fuente: autor.

A continuación la figura 24, se muestra varias perspectivas de la celda unitaria convencional que identifica a esta estructura hexagonal, denotando los granos en gris y verde correspondiente a Magnesio y Boro, respectivamente. De esta estructura es importante resaltar, la gran conectividad de los granos, permitiendo poseer una dualidad de propiedades, unas descritas principalmente en la vista frontal c) y vista derecha d).

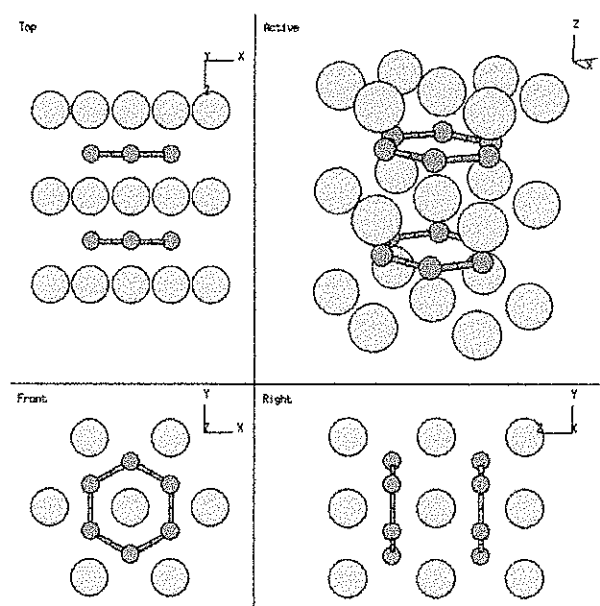


Figura 24. Estructura tridimensional del Diboruro de Magnesio. a) Vista superior, b) vista en relieve, c) vista frontal, d) vista derecha [70].

4.4 Optimización del volumen

Este trabajo ha realizado los cálculos *ab initio*, con la teoría funcional al densidad con la solución de las ecuaciones de Kohn-Sham, fueron desarrollados en el programa Wien2K, usando para el funcional de intercambio-correlación con la Aproximación de Gradiente Generalizado (GGA) de Perdew que incluye un procedimiento autoconsistente para obtener la energía de las funciones de ondas base del Diboruro de Magnesio MgB_2 .

4.4.1 Optimización de los parámetros de red en el volumen del MgB_2

Uno de los cálculos de mayor importancia para la determinación de las propiedades estructurales de un material es el cálculo de la energía total del sistema, la cual representa la energía de cohesión de los átomos que conforman el sólido. Estas propiedades se obtienen minimizando la energía total con respecto al volumen de la celda convencional. Por medio de este procedimiento podemos obtener parámetros de red, módulo de volumen y otros parámetros de la estructura de equilibrio desde un punto de vista teórico.

Se optimizó el conjunto base del boro y magnesio, corriendo el programa auxiliar *Optimize.job*, el cual genera una serie de archivos *struct* con varios volúmenes (volumen, radios c/a , parámetros de red), con una variación de la red desde -10 , -5 , 0 , $+5$ y $+10\%$. Se puede configurar los parámetros de entrada del script acorde a las necesidades, mediante el comando *runsp_lapw* y especifica los diferentes parámetros de convergencia, luego guarda la configuración con el comando *save_lapw* y vuelve a realizar un cálculo autoconsistente. Cuando el programa ha finalizado, se visualiza el comportamiento de la curva de la energía; asimismo existe una serie de cálculos autoconsistentes con la energía correspondiente a los parámetros modificados, el cual permite encontrar los correspondientes parámetros de equilibrio.

También puede considerarse la minimización de los parámetros de entrada con la herramienta *min_lapw*, que considera la optimización de las fuerzas calculadas en el núcleo. El software Wien2K 11.1, posee dos posibilidades para determinar la posición de equilibrio de todos los átomos individuales de forma automática (Obedecen las restricciones de simetría de un grupo espacial determinado).

1. La secuencia de comandos *min_lapw*, junto con el programa *mini* que ejecuta un ciclo SCF, actualiza las posiciones usando las fuerzas calculadas y reinicia un nuevo ciclo SCF. Esto continúa hasta que las fuerzas caen por debajo de cierto valor.

2. Utilice los archivos normales SCF, corre *lapw* con una entrada especial en *case.inm* tal que la densidad de carga y las posiciones son simultáneamente optimizadas durante el ciclo SCF.

En la actualidad se recomienda la segunda opción, aunque hay casos en que este esquema es lento o nunca convergen.

Una secuencia típica de comandos para una optimización de las posiciones internas podría ser así:

- Generar un archivo *struct*.
- *init_lapw*.
- *run_lapw*.
- Inspeccionar los archivos SCF si tiene las fuerzas significativas (usualmente menor 5mRy/Bohr), de lo contrario están más o menos en las posiciones óptimas.

4.4.2 Parámetros de red y módulo de volumen

Mediante deformaciones iguales en todas las direcciones de la red podemos calcular las propiedades estructurales del estado base minimizando la energía total con respecto al volumen de la celda unitaria. La energía total se calculó haciendo variaciones del volumen de la celda convencional, modificando los parámetros de red experimentales. Los valores experimentales de los parámetros de la celda unitaria del MgB_2 son: $a = 3.084\text{\AA}$ y $c = 3.522\text{\AA}$ (Wyckoff, 1963). Se obtuvieron cinco (5) diferentes valores de estos parámetros variando su longitud desde $\pm 1\%$ hasta $\pm 2\%$. Estas modificaciones permitieron que pudiésemos realizar una expansión y compresión uniforme del volumen de la celda unitaria.

Los valores obtenidos en la energía, para cada cambio en el volumen, fueron ajustados por medio de la ecuación de estado de Murnaghan, la cual se define como la relación entre la presión y el volumen de una sustancia a temperatura constante. El estudio de las fuerzas en átomos y moléculas, así como sus propiedades termodinámicas son esenciales para poder explicar una ecuación de estado en sólidos.

$$E(V) = E(V_o) + \left(\frac{B_o V_o}{B'_o} \right) \left[\frac{\left(\frac{V_o}{V} \right)^{B'_o}}{B'_o - 1} + 1 \right] - \frac{B_o V_o}{B'_o - 1}$$

Donde V es el volumen de la celda primitiva, V_o el volumen en equilibrio, B_o es el modulo del volumen y B'_o la derivada del modulo B_o con respecto a la presión para

el volumen de equilibrio. Los coeficientes de esta ecuación se calculan por el método de mínimos cuadrados, así puede calcularse el volumen de equilibrio y el módulo de volumen; este último es igual al inverso de la compresibilidad $1/k$, la cual expresa como un indicador de cambio de volumen en respuesta a cambio de presión a temperatura constante e igual a cero ($k = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \big|_T$).

Esta ecuación de estado se puede ajustar con la energía de cohesión del sólido, que es consecuencia de la interacción atractiva entre las cargas negativas de los electrones y las cargas positivas de los núcleos, es decir su origen en las fuerzas que mantienen los átomos ligados.

La curva del ajuste en donde empleamos la parametrización PW-GGA se presenta en la figura 25; en ella se muestra la variación de la energía en función del volumen.

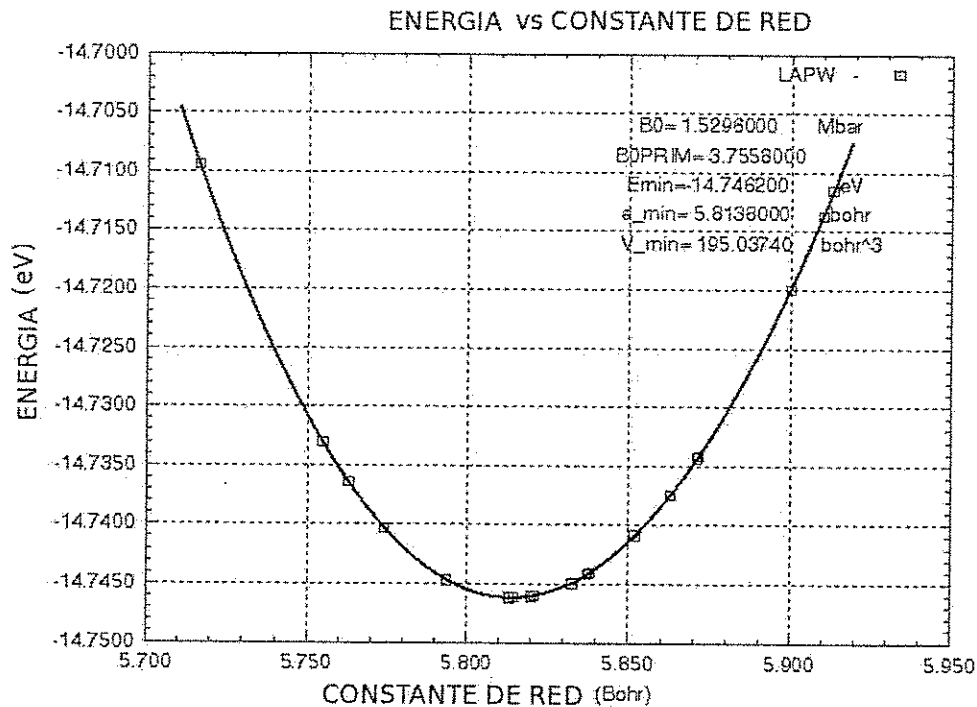


Figura 25. Gráfica de Energía total en función del parámetro de red.

Fuente: Wien2k- usuario.

En la Tabla 9 se detallan los resultados obtenidos del volumen de la estructura en equilibrio, los parámetros de red y el módulo de volumen, mediante diferentes estrategias empleadas. De acuerdo con los valores obtenidos, podemos decir que

la aproximación gradiente generalizado GGA es una fuerte correlación con el experimento y por tanto el potencial correlación e intercambio presenta un error de 0.014% en los parámetros de red. El resultado del módulo de volumen es de 152.9GPa el cual es el método más aproximado al valor experimental; también se ha realizado un contraste con varios estudios realizados con diferentes técnicas de aproximación, observando que los parámetros experimentales concuerdan por un error mínimo a los valores obtenidos en la aproximación GGA de Perdrew, tal como se indica en la Tabla 9.

Tabla 9. Valores obtenidos del Volumen de la celda convencional, parámetros de red y módulo de volumen, empleando el método de Hartree-Fock, LDA, GGA y experimental.

Método	$V(B)$	$a(B)$	$c(B)$	c/a	% error	B(GPa)
Hartree-Fock	203.4887	5.9035	6.7418	1.142	1.28	157
VW-LDA	136.0621	5.7708	6.5553	1.1359	0.99	163
PW-GGA	195.0374	5.8279	6.6556	1.142	0.014	152.9
Experimental	195.8549	5,82876	6,6565	1.142		151

Fuente: [17, 104].

Mediante los valores estructurales encontrados en la optimización del volumen, se ha realizado la densidad de estados tanto totales como parciales y la estructura de bandas.

4.5 Cálculos DFT para superficies de sólidos

En principio una superficie, se define como un trozo del material que es infinito en dos dimensiones, pero finito a lo largo de la superficie normal; la superficie creada es un lugar donde moléculas de fase gaseosa o líquida están en contacto con el material y como consecuencia, estos átomos en la superficie tendrán baja coordinación que en los granos (polvo). Debido al cambio de coordinación, la superficie geométrica se puede reconstruir y deja a los átomos de superficie encontrar las nuevas posiciones de equilibrio.

Para simulaciones de superficie, hay diferentes modelos que pueden ser usados, más notablemente el modelo de supercelda y el modelo de grupo, en el actual proyecto usamos el método de supercelda.

El modelo de supercelda, incluye inter-capas de trozos (celdas cristalinas) y vacío; el trozo en la supercelda es infinito y periódico en direcciones paralelas a la superficie, pero finita en la dirección perpendicular a la superficie. Esta

configuración permite la formación de banda con correctas dispersiones, por tanto hay dos cosas importantes que deben ser mencionadas usando el modelo supercelda. El grosor del vacío debe ser grande lo suficiente como para evitar trozos de superficies consecutivas viéndose entre ellas, y el grosor del trozo debe evitar la interacción entre las dos superficies de un trozo [105]. Esto normalmente también asegura que la capa media del trozo presenta las propiedades enlace de granos, para tener una noción más abstracta, observe la figura 26.

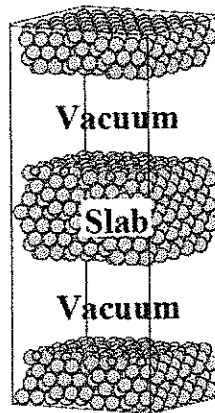


Figura 26. Modelo de supercelda, incluyendo superficies slabs y vacío [142].

La descripción de la técnica de grupo trata la superficie como un grupo pequeño aislado de átomos, que posee la misma simetría y arreglo atómico como la superficie del cristal²⁴. Para nuestro caso, usaremos el método de Supercelda cuya técnica es más completa y permitirá observar otras propiedades que en el volumen no se tiene detalle.

4.5.1 Importancia de las superficies

El estudio de superficies, tiene un fundamento básico en la determinación de la geometría y estructura electrónica, ya que permite conocer básicamente los parámetros de red más estables en comparación con el volumen, además la estructura electrónica es más compleja, pues contiene información precisa acerca de la periodicidad, adición de impurezas o defectos de la red.

El modelo de materiales, se ve restringido a los recursos computacionales, ya que al simular un sólido de grandes dimensiones en el volumen, en efecto no habría solución sino por el contrario, entraríamos en cálculos extensos y complejos, por esto es necesario el estudio en superficies.

²⁴ P. J. Feibelman, Phys. Rev. B 60, 11118 (1999)

4.5.2 Celda y parámetros de red del MgB_2 en la Supercelda.

Para el estudio de la superficie, se realizó un estudio con el slab $a = 1 \times b = 1 \times c = 1$; entre tanto se realizó dos tipos de superficies, una terminada en boro y otra en magnesio (ver anexo). La supercelda creada, constituye un slab $1 \times 1 \times 8$, con una (1) capa de ubicación de átomos y siete (7) capas vacías, con parámetros de red encontrados en la siguiente Tabla 10 y un volumen característico de la supercelda es $V = 1566.1591ua^3$, y un uso de cinco (5) átomos en la superficie terminada en boro y cuatro (4) en la superficie terminada en magnesio, aun conservando las propiedades de la estructura hexagonal e igualmente su simetría.

Tabla 10. Parámetros de red de la supercelda.

Parámetro	Angstrom	Bohr
$a = b$	3.083551Å	5.82792B
c	29.1708Å	53.24295B
c/a	9.1358	

Fuente: autor.

Para el estudio de la superficie se usaron los parámetros de red optimizados y tomando como sistema de referencia un conjunto de capas hexagonales de iones de Mg alternado con iones de B en la misma simetría, en estructura panal se construyeron películas en superficies (0001), en seguida la figura 27, describe en a) a la superficie terminada en boro, en b) a la celda Wiener Seitz correspondiente a la superficie terminada en boro y por último en c) la superficie terminada en magnesio.

Las películas se cierran en siete (7) capas vacías adicionales colindantes con cada una de estas superficies como se observa en la siguiente figura 27a) y 27c), la cual esquematiza la superficie terminada en Mg y la superficie terminada en Boro, respectivamente.

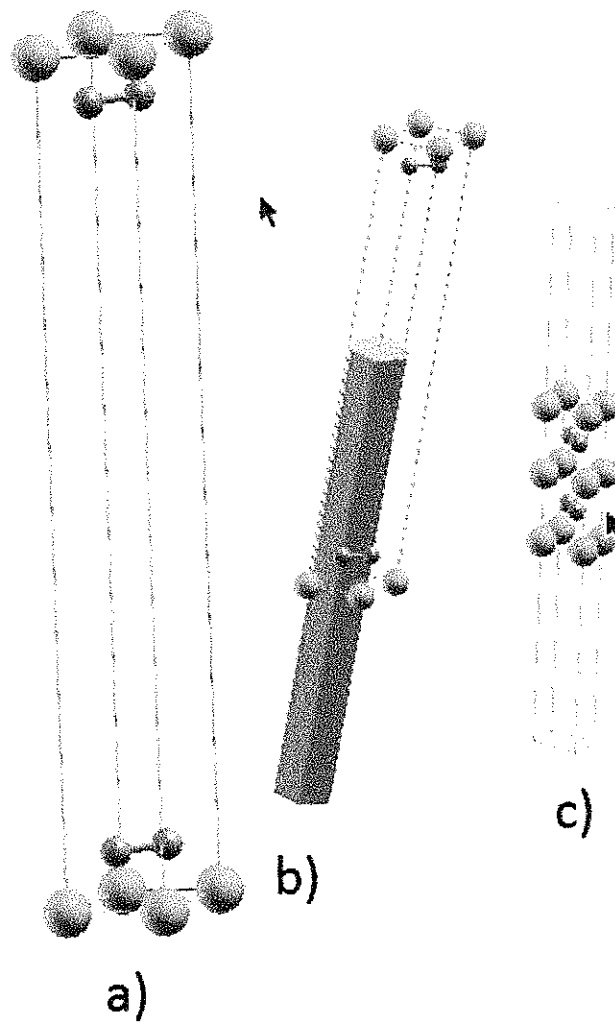


Figura 27. Descripción superficies MgB_2 . Se describen tres imágenes, a) terminada en boro, b) celda Wigner Seitz superficie terminada en boro y c) superficie terminada en magnesio.

Fuente: Wien2K.

4.6 Propiedades electrónicas del Diboruro de Magnesio MgB_2

Para estudiar las propiedades electrónicas de cualquier material se debe tener conocimiento de la Primera zona de Brillouin MgB_2 , donde se confinan las principales propiedades de un cristal.

4.6.1 Primera zona de Brillouin MgB_2

La celda Wigner Seitz en el Diboruro de Magnesio, se encuentra descrita en la siguiente figura 28; de acuerdo a la geometría toma la distancia desde un magnesio a sus boros más cercanos y determina las propiedades físicas por simetría.

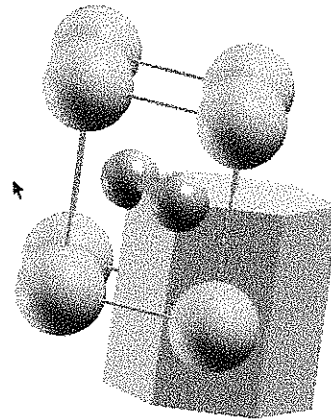


Figura 28. Celda de Wigner Seitz del Diboruro de Magnesio MgB_2 .

Fuente: Wien2K.

La siguiente figura 29, indica la primera zona de Brillouin para el Diboruro de Magnesio, en ella observamos los sejes k_x , k_y , k_z , del espacio recíproco y los puntos de máxima simetría de la celda, denotados por las letras Γ , A , L , H , M , K ²⁵, etc. Γ se encuentra en el centro de la zona, en el punto $(0, 0, 0)$ y se despliega la totalidad de la simetría hexagonal de la celda, las otras letras señalan las fronteras de la primera zona de Brillouin en direcciones de alta simetría, $A = (0 \ 0 \ 1/2)$, $L = (1/2 \ 0 \ 1/2)$, $H = (1/2 \ 0 \ 1/2)$, $M = (2/3 \ 1/3 \ 0)$, $K = (1/2 \ 0 \ 0)$ [91]. Los puntos anteriormente enunciados son de gran importancia, ya que identifican zonas donde se realizan cálculos de las propiedades de los materiales, tales como bandas.

²⁵ Notación Slater y Wigner.

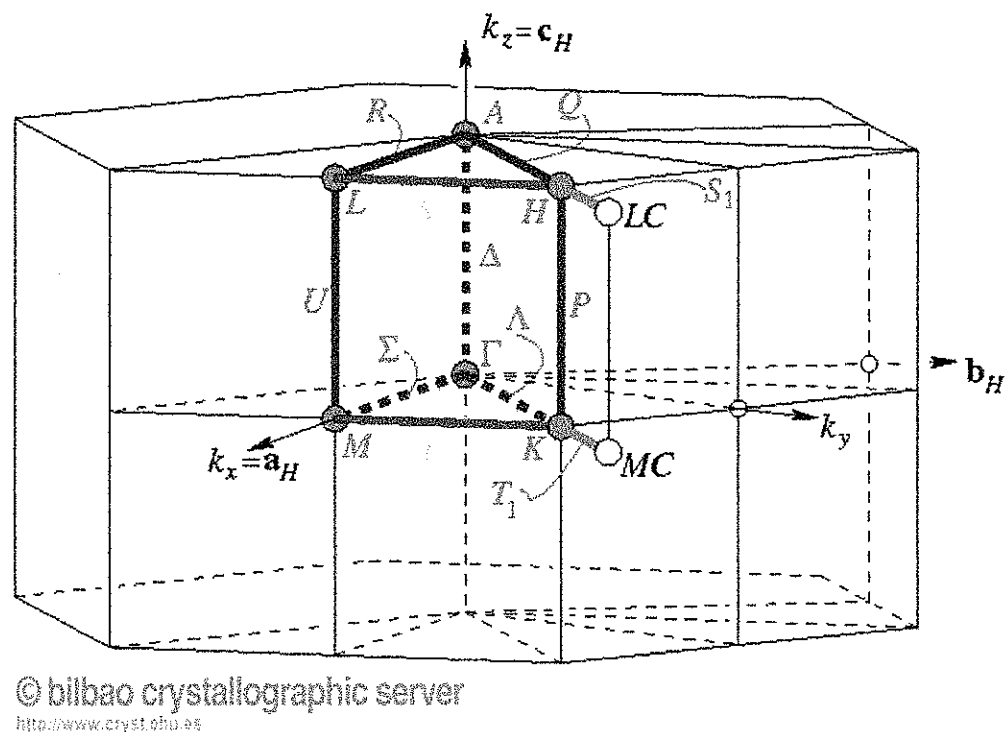


Figura 29. Primera zona de Brillouin del superconductor MgB_2 [136].

4.7 Cálculos de la estructura electrónica

El cálculo de las propiedades electrónicas juega un papel importante para fijar la estructura, conductividad, las propiedades térmicas, ópticas y magnéticas de un material. Las bandas de energía se originan cuando un conjunto de átomos que constituyen un cristal aportan sus niveles de energía formándose con ellos bandas compuestas de una gran cantidad de niveles muy próximos entre sí, de tal manera que cada banda aparece como un desarrollo continuo que cubre un intervalo de energías permitidas que un electrón puede poseer.

En nuestros cálculos de las Densidades de Estado (DOS) se trabajó en las totales, por átomo y por orbital. Se aclaran que estas densidades de estado se calculan en el estado normal del compuesto y no en el estado superconductor debido a que el Método de Funcional de Densidad (DFT) solo calcula las densidades electrónicas en el estado base. De esta forma se determina las propiedades electrónicas en el volumen y la superficie del MgB_2 .

4.8 Resultados de las propiedades electrónicas del MgB_2

4.8.1 Análisis en el volumen

Para los cálculos en el código Wien2K de la estructura de bandas se utilizaron 1500 puntos k , con 352 puntos en la zona irreducible de Brillouin y se comprueba que con dicho valor está asegurada la convergencia en los puntos k , en la Figura 30 se muestran, al lado izquierdo, la estructura de bandas y al lado derecho la densidad de estados para el volumen del MgB_2 .

En la gráfica de las bandas de energía, las bandas de valencia están compuestas principalmente de orbitales s de B y Mg en la parte más baja, para la parte más alta se encuentra contribuciones de p del boro. Cerca nivel de Fermi no existe bandas prohibidas, se observa en la figura 30 una banda semillena que en su mayoría está compuesta por orbitales p de B, lo que nos indica que MgB_2 tiene propiedades metálicas.

Esta banda está compuesta por dos grupos de orbitales, el primer grupo está compuesto por los orbitales del p_z cortan el punto K de alta simetría por encima del nivel de Fermi con una energía de 1.8eV y el segundo grupo está compuesto por orbitales $p_x + p_y$ con cuatro bandas que cortan el punto K por debajo del nivel de Fermi en energías de -5.8 y -7.1eV. Las bandas de conducción están formadas principalmente por orbitales $p_x + p_y$ del B y en la parte más alta por $p_x + p_y$ del Mg.

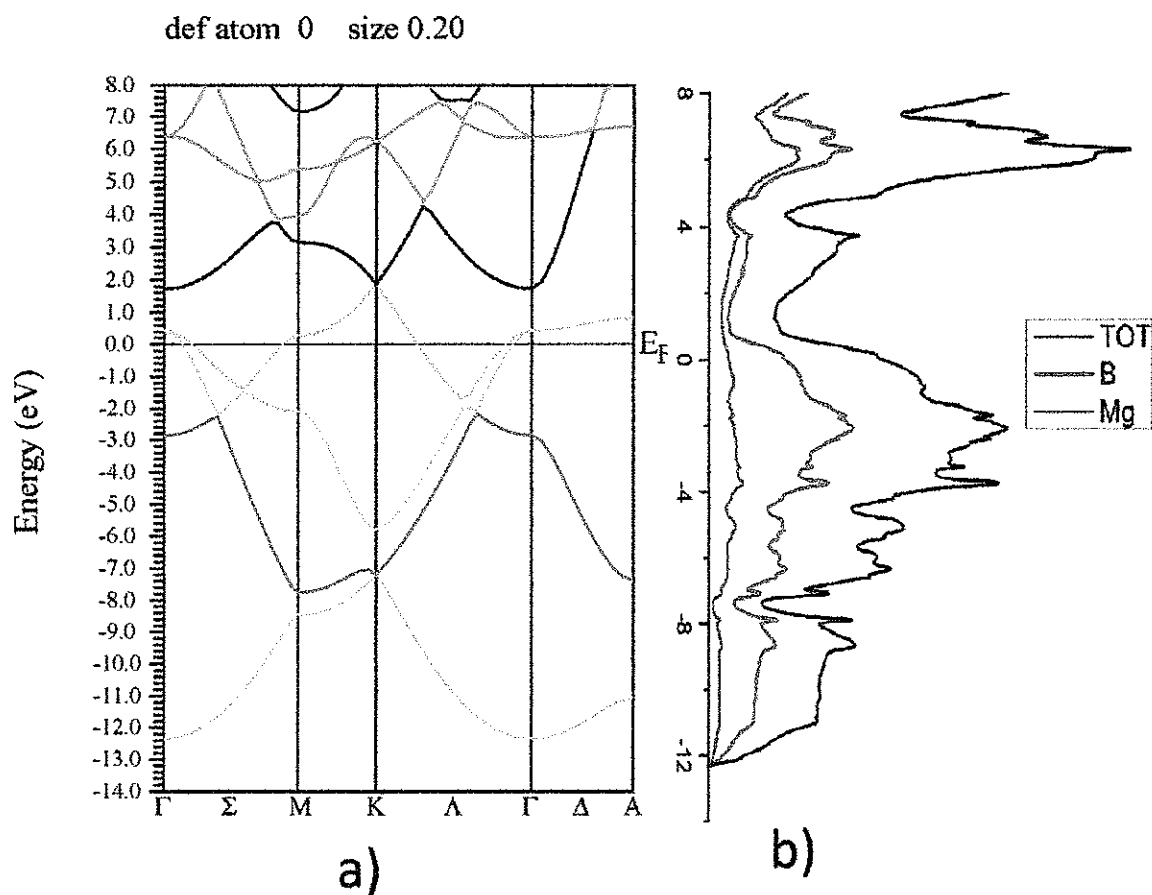


Figura 30. Estructura de bandas y Densidades de estados en el volumen respectivamente.

Fuente: autor.

Para las densidades de estados DOS la gráfica de color negro muestra la DOS densidad total del MgB_2 y sus respectivas contribuciones de Boro (Rojo) y del Magnesio (Azul). Por debajo del nivel de Fermi la contribución más fuerte la está haciendo los Boros p_z y cerca del nivel de Fermi lo acentúan los orbitales p_z , $p_x + p_y$ del mismo Boro; y en menor medida los orbitales $p_x + p_y$ del Magnesio, hay una fuerte correlación entre los dos propiciando la acumulación de electrones en esta región. Por debajo del nivel de Fermi están los orbitales p_z del boro y en menor medida los orbitales s . Se observa que alrededor del nivel de Fermi se superponen las densidades de Magnesio y Boro lo cual confirman que el material sea un metal.

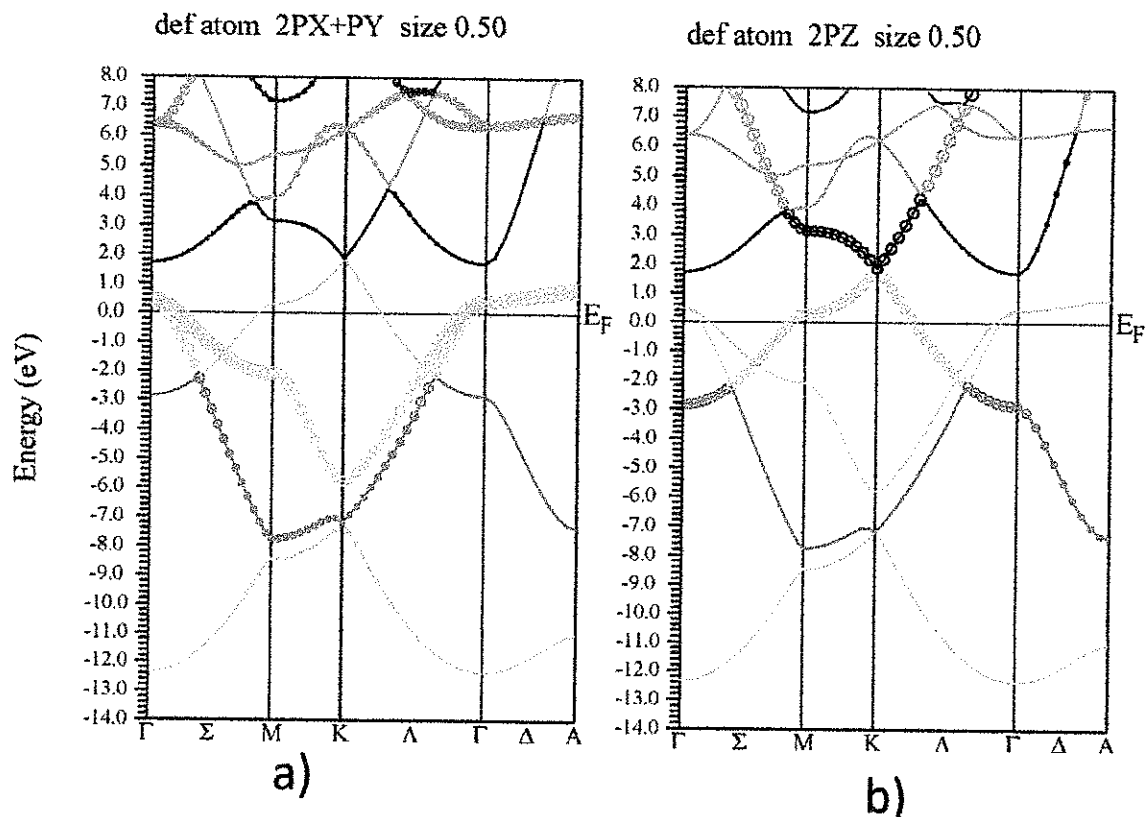


Figura 31. Estructura de bandas los orbitales $p_x + p_y$ y p_z del boro. Estudios realizados en el volumen.

Fuente: autor.

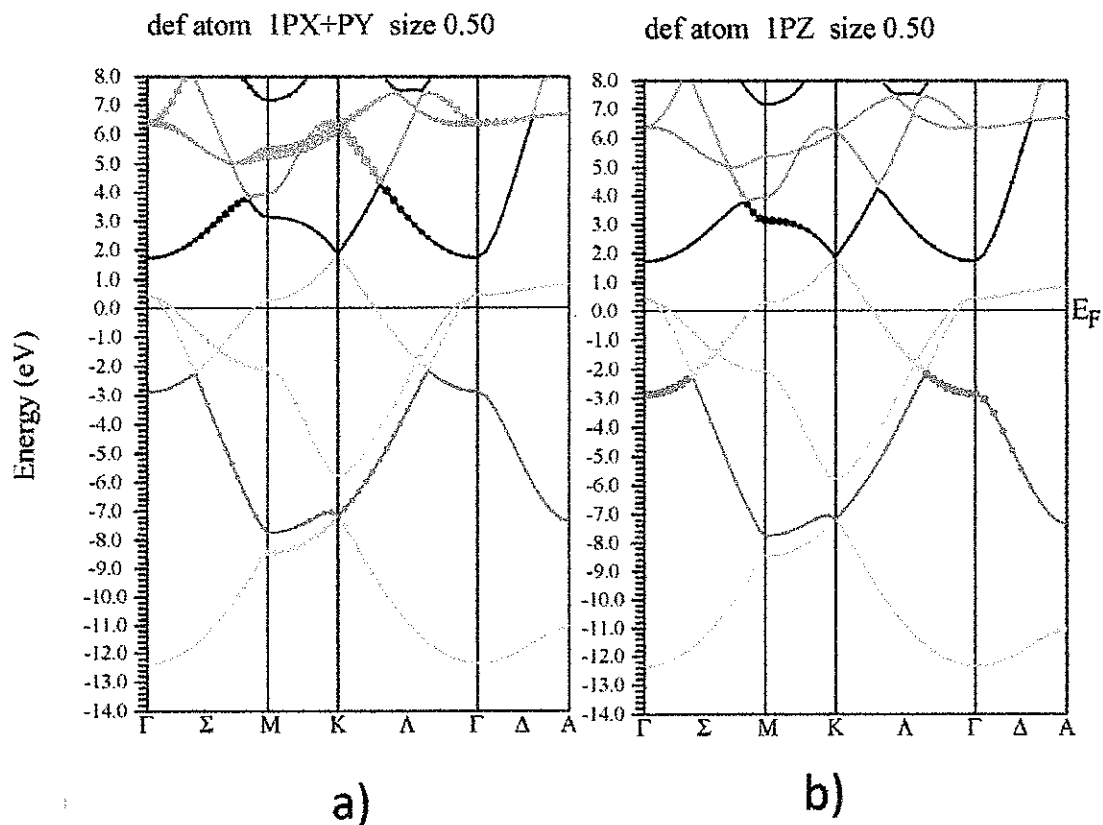


Figura 32. Estructura de bandas los orbitales $p_x + p_y$ y p_z del magnesio. Estudios realizados en el volumen.

Fuente Wien2k.

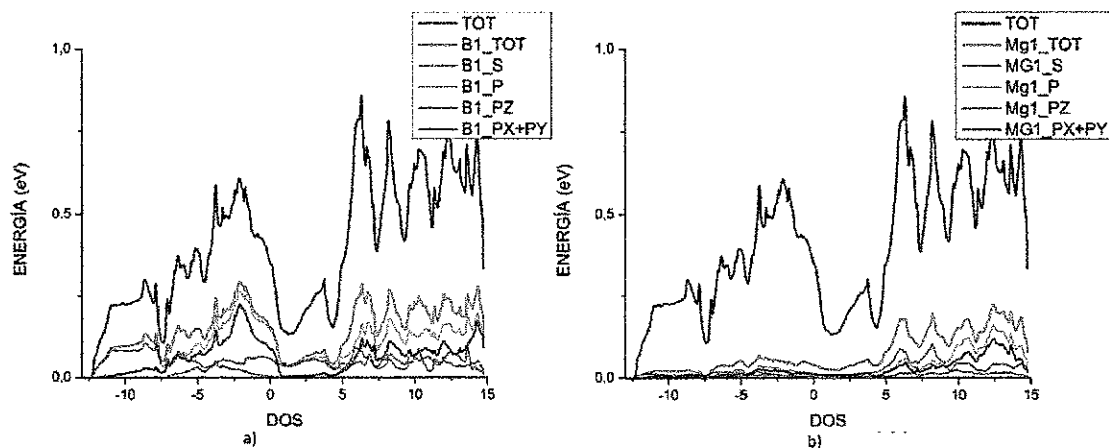


Figura 33. Densidad de estados del boro y magnesio respectivamente. Corresponden al análisis generado en el volumen del compuesto.

Fuente: autor.

Como anteriormente se indica las densidades de estados en el volumen, hacemos énfasis en el comportamiento de estructura de bandas generadas a partir del análisis en el volumen. Las bandas enunciadas son la de los orbitales p_z y $p_x + p_y$, los cuales presentan una mayor actividad a lo largo del estudio de nuestro material. Se observa que hay una superposición de densidades de estado tanto de magnesio y de boro, contribuyendo más los orbitales p_z del boro con los $p_x + p_y$ del magnesio y del boro. En cuanto a la bandas de conducción la mayoría de DOS está determinada por los orbitales p_z y p_x del Magnesio. Nuestro resultado está completamente de acuerdo con el hallado por Nuñez González et al [93].

4.9 Análisis en la superficie

4.9.1 Análisis en la superficie terminada en magnesio

La siguiente figura 34, se muestra la contribución total en magnesios y boros en la superficie terminada en magnesio; dentro de las mayores contribuciones esta la del boro por debajo de la energía de Fermi y seguidamente la del magnesio.

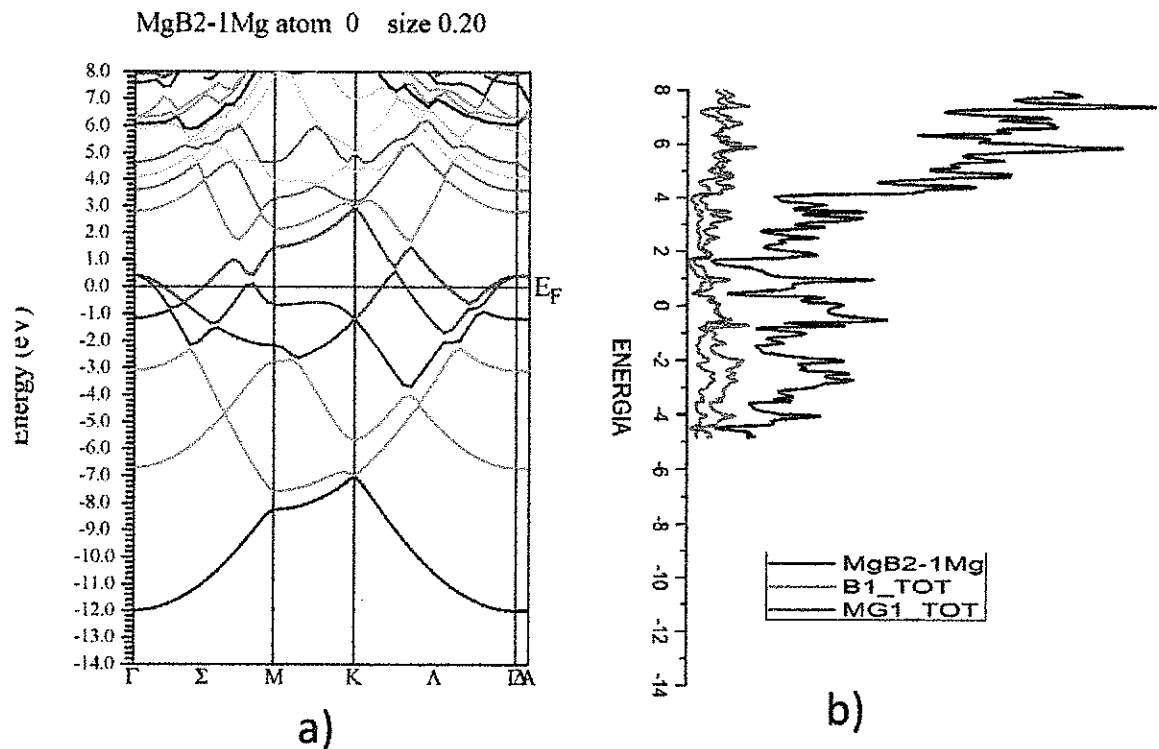


Figura 34. Estructura de bandas y Densidades de estados totales respectivamente, estas contribuciones son en la superficie terminada en magnesio.

Fuente: autor.

En la figura 34 se representa las Bandas de Energía y la DOS las cuales nos confirma que las bandas de valencia contribuye el s del B, alrededor del nivel de Fermi las bandas que confieren las características metálicas están fuertemente determinadas por los orbitales $p_x + p_y$ del B, se encuentra nuevamente una correlación fuerte entre los p_z del B y los $p_x + p_y$ del Mg; también se observa que los orbitales p_z del B se cruzan por encima del nivel de fermi en los puntos de simetría en el punto M en 1.2 eV y en el punto K a 0.5 eV. Para las bandas de conducción, contribuyen los s del Mg y p_z del B.

4.9.2 Para la densidad de estados de la superficie terminada en Magnesio.

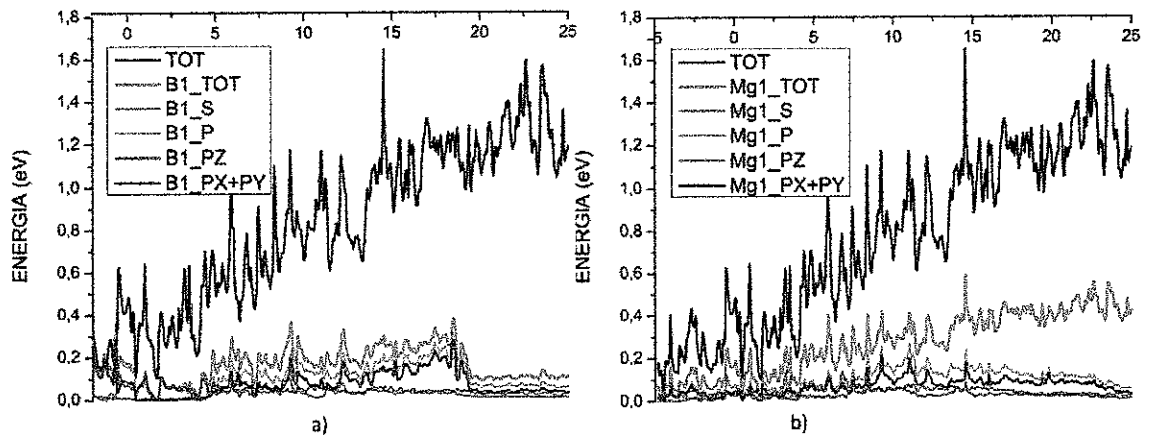


Figura 35. Densidad de estados de la contribución de boros y magnesios. Estudios realizados en la superficie terminada en magnesio.

Fuente: autor.

Para la densidad de estados de la superficie terminada en magnesio, en la parte más baja del nivel de fermi hay contribuciones fuertes del orbital $B_{p_x + p_y}$; acercándose por debajo del nivel de fermi existen contribuciones de nuevamente $B_{p_x + p_y}$ y Mg_s , por encima del nivel de fermi están los B_{p_z} y $Mg_{p_x + p_y}$. Para la estructura de bandas terminada en magnesio tenemos los siguientes resultados: Para las bandas de energía, en la parte de valencia contribuyen los boros en el orbital s y en menor medida los magnesios s ; los responsables de las propiedades metálicas (cerca del nivel de fermi) hay contribuciones de los orbitales $B_{p_x + p_y}$, disminuyendo la contribución de los B_{p_z} y aumenta la contribución de los magnesios $Mg_{p_x + p_y}$.

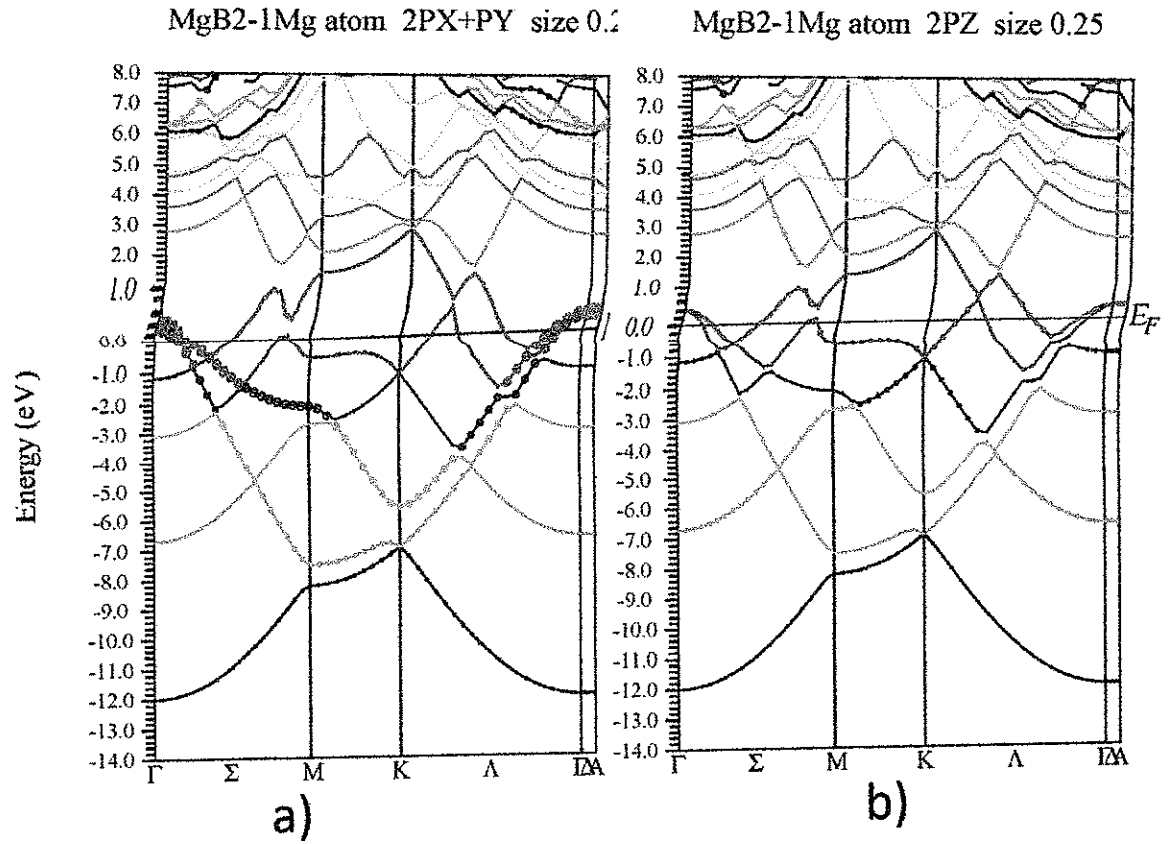


Figura 36. Estructura de bandas del boro en los orbitales $p_x + p_y$ y p_z respectivamente. Estudio realizado en la superficie terminada en magnesio.
Fuente: autor.

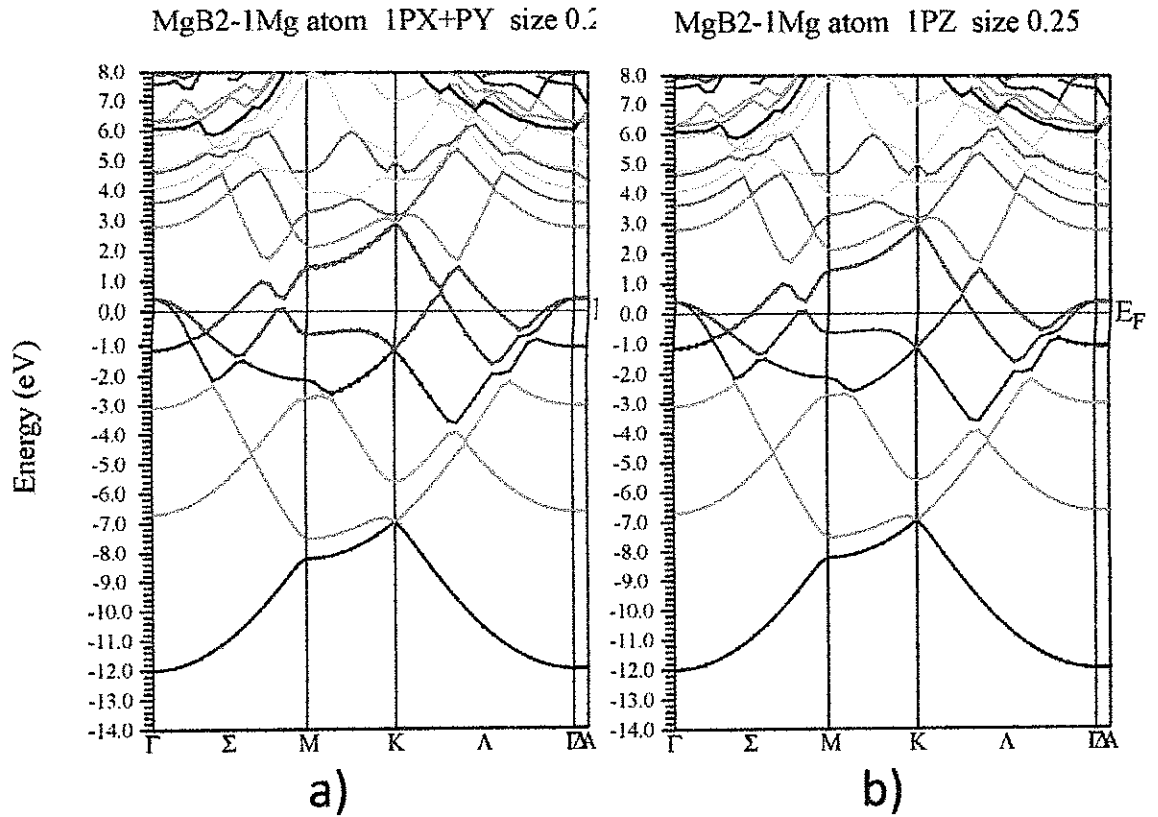


Figura 37. Estructura de bandas del magnesio en los orbitales $p_x + p_y$ y p_z respectivamente. Estudio realizado en la superficie terminada en magnesio.
Fuente: autor.

4.9.3 Análisis de las propiedades electrónicas de la superficie terminada en boro.

A continuación, la figura 38 se ilustran las densidades de estados en el volumen tanto en terminación en boro como en magnesio respectivamente. Es necesario conocer la contribución en el volumen y en la superficie para luego analizar las muestras y así concluir con el trabajo de caracterización del MgB_2 .

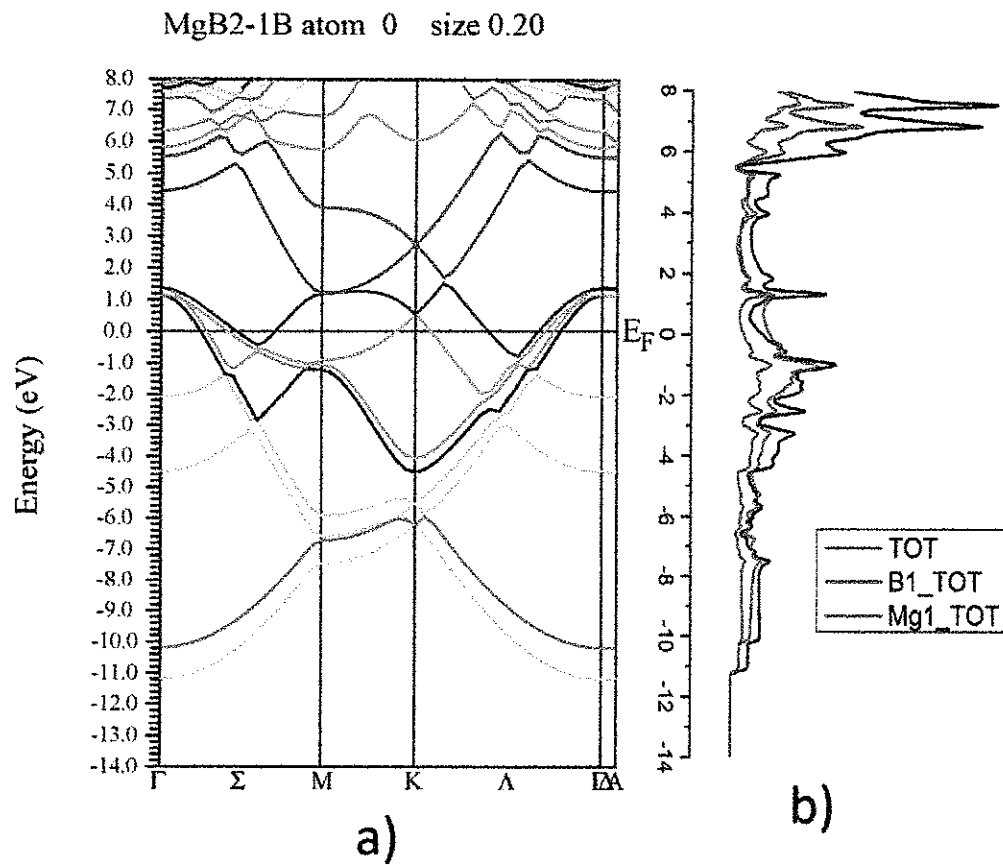


Figura 38. Estructura de bandas y densidad de estados totales, de la superficie terminada en boro.

Fuente: autor.

4.9.4 Para la densidad de estados de la superficie terminada en Boro

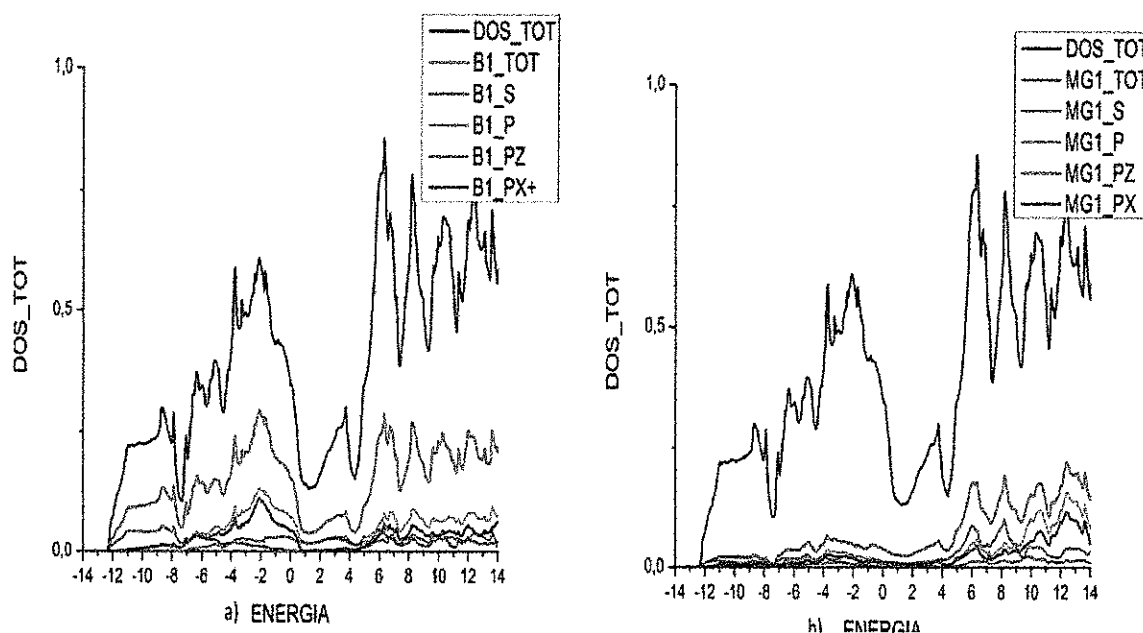


Figura 39. Densidad de estados de la contribución de boros y magnesios respectivamente; estudios realizados en la superficie terminada en boro.

Fuente: autor.

En la parte baja del nivel de Fermi las contribuciones en mayor medida el orbital B_s y menor medida los Mg_s , por debajo pero cerca al nivel de Fermi encontramos un pico pronunciado de los $B_{p_x + p_y}$ y a lo acentúan los orbitales $Mg_{p_x + p_y}$, por encima pero cercano al nivel de Fermi encontramos contribuciones B_{p_z} asimismo Mg_s . Lejos del nivel Fermi contribuyen los $B_{p_x + p_y}$ y Mg_s .

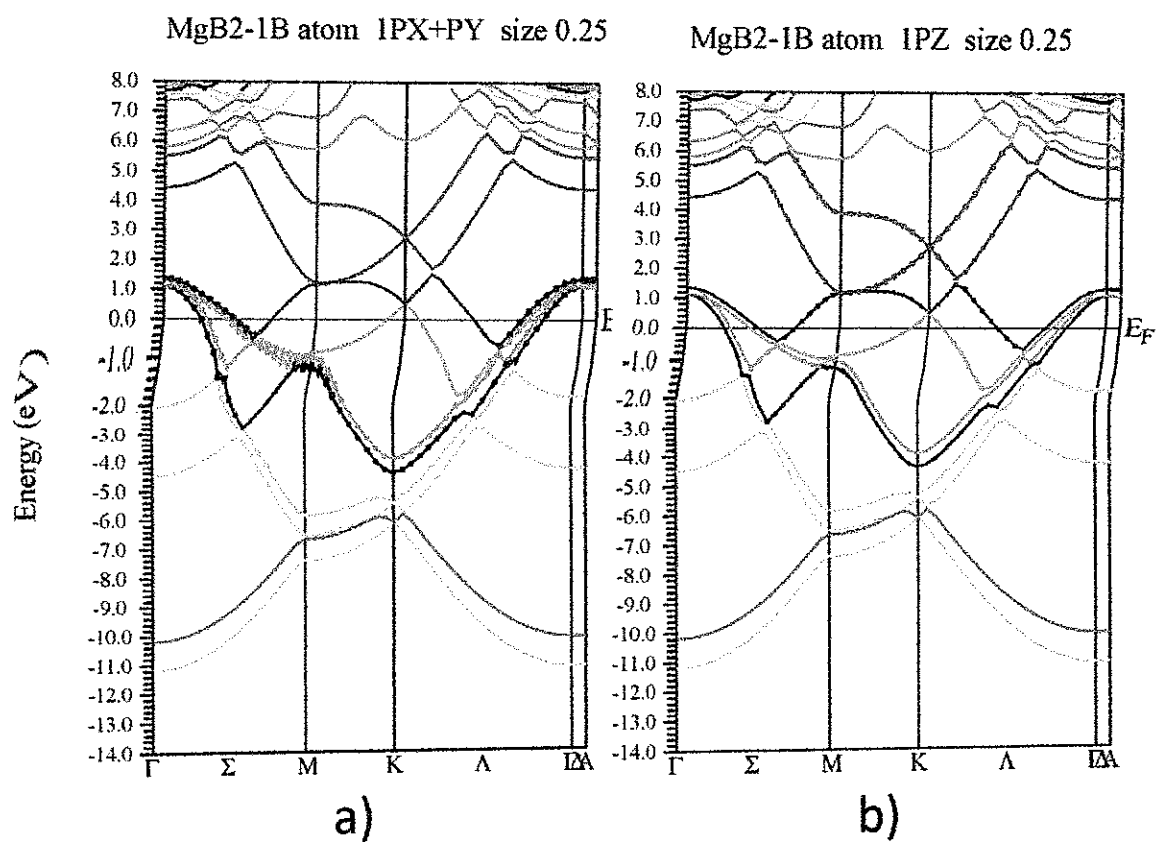


Figura 40. Estructura de bandas del boro en los orbitales $p_x + p_y$ y p_z respectivamente. Estudio realizado en la superficie terminada en boro.
Fuente: autor.

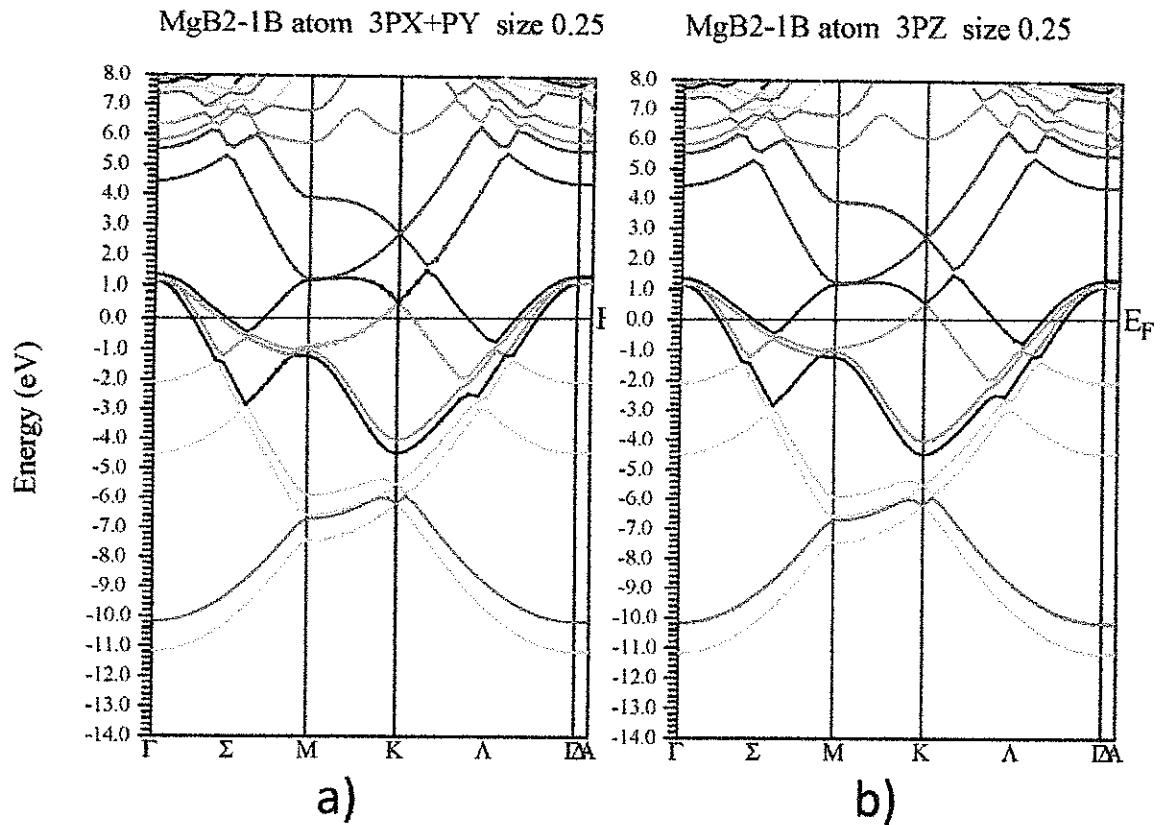


Figura 41. Estructura de bandas de magnesio en los orbitales $p_x + p_y$ y p_z respectivamente. Estudio realizado en la superficie terminada en boro.

Fuente: autor.

Revisando las Bandas de Energía nos confirma que las bandas de valencia contribuye el B_{s_1} , alrededor del nivel de Fermi las bandas que confieren las características metálicas están fuertemente determinadas por B_{p_1} , con los orbitales $p_x + p_y$ y se observa que existe una correlación fuerte entre los B_{p_z} y los $Mg_{p_x + p_y}$; también se observa que los orbitales p_z se cruzan por encima del nivel de Fermi en los puntos de simetría uno lo hace en el punto M en 1.2 eV y en el punto K a 0.5 eV. Para las bandas de conducción, contribuyen los Mg_{s_1} , y B_{p_z} .

4.10 Descripción de las propiedades magnéticas del MgB_2 tanto en el volumen y en la superficie.

En las figuras siguientes [42] – [47] se hace una comparación por átomo y por orbital relacionando los espines up y down, estas gráficas arrojaron que existe

simetría en las densidades con lo cual se puede concluir que no existe un momento magnético neto, así que el material no exhibe propiedades magnéticas netas.

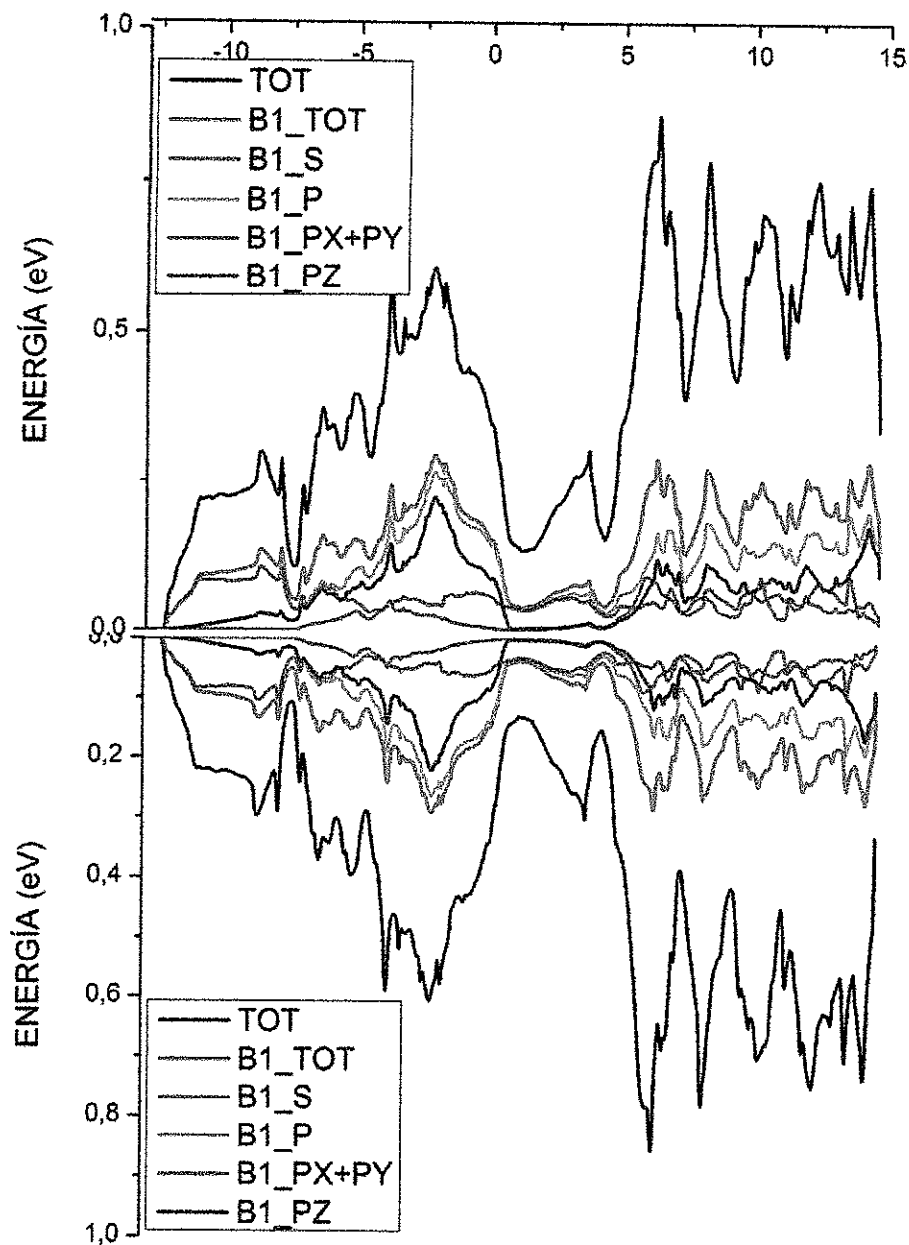


Figura 42. Descripción espín up y down del boro en el volumen del MgB_2 .

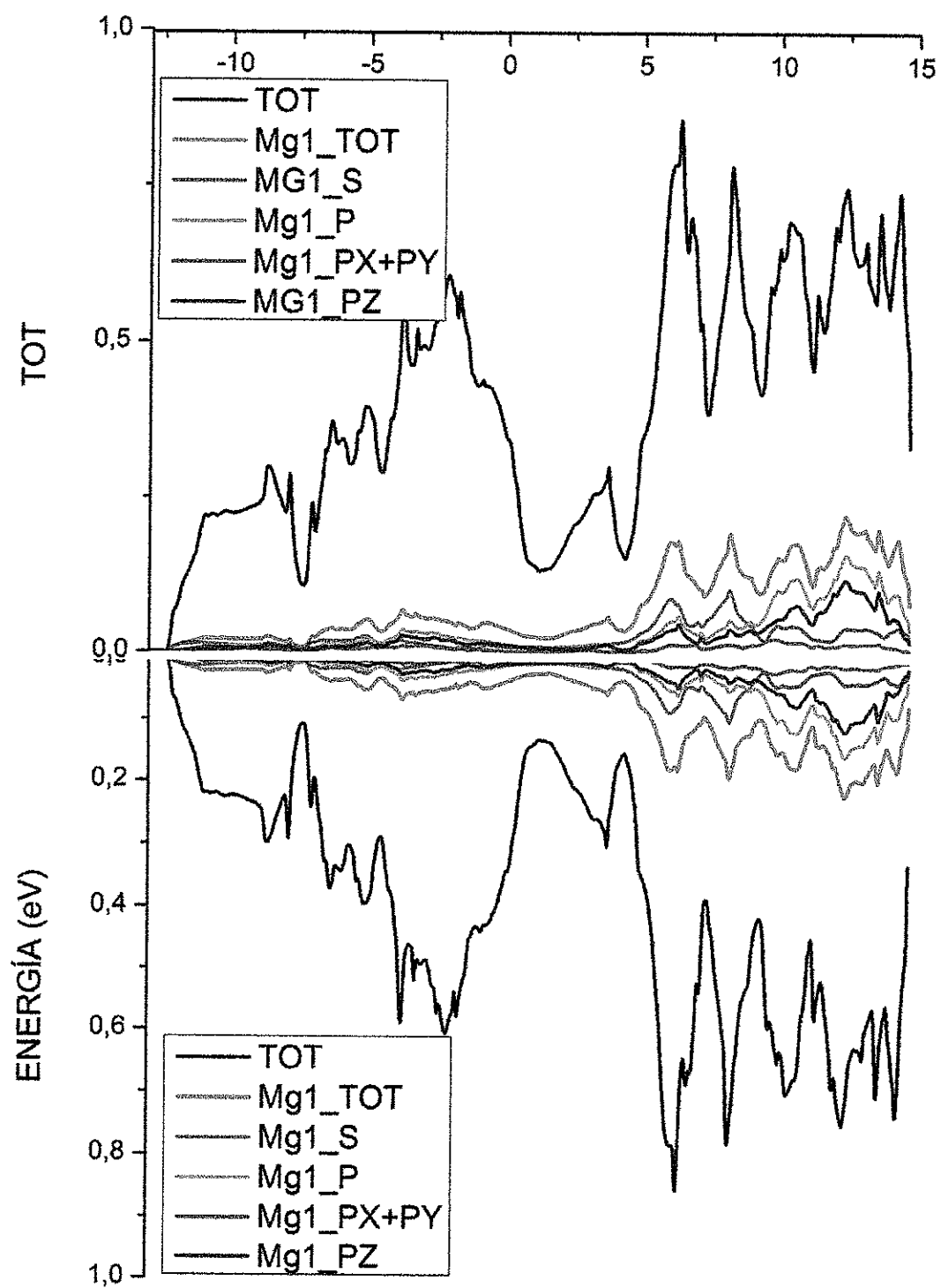


Figura 43. Descripción espín up y down del magnesio en el volumen del MgB_2 .

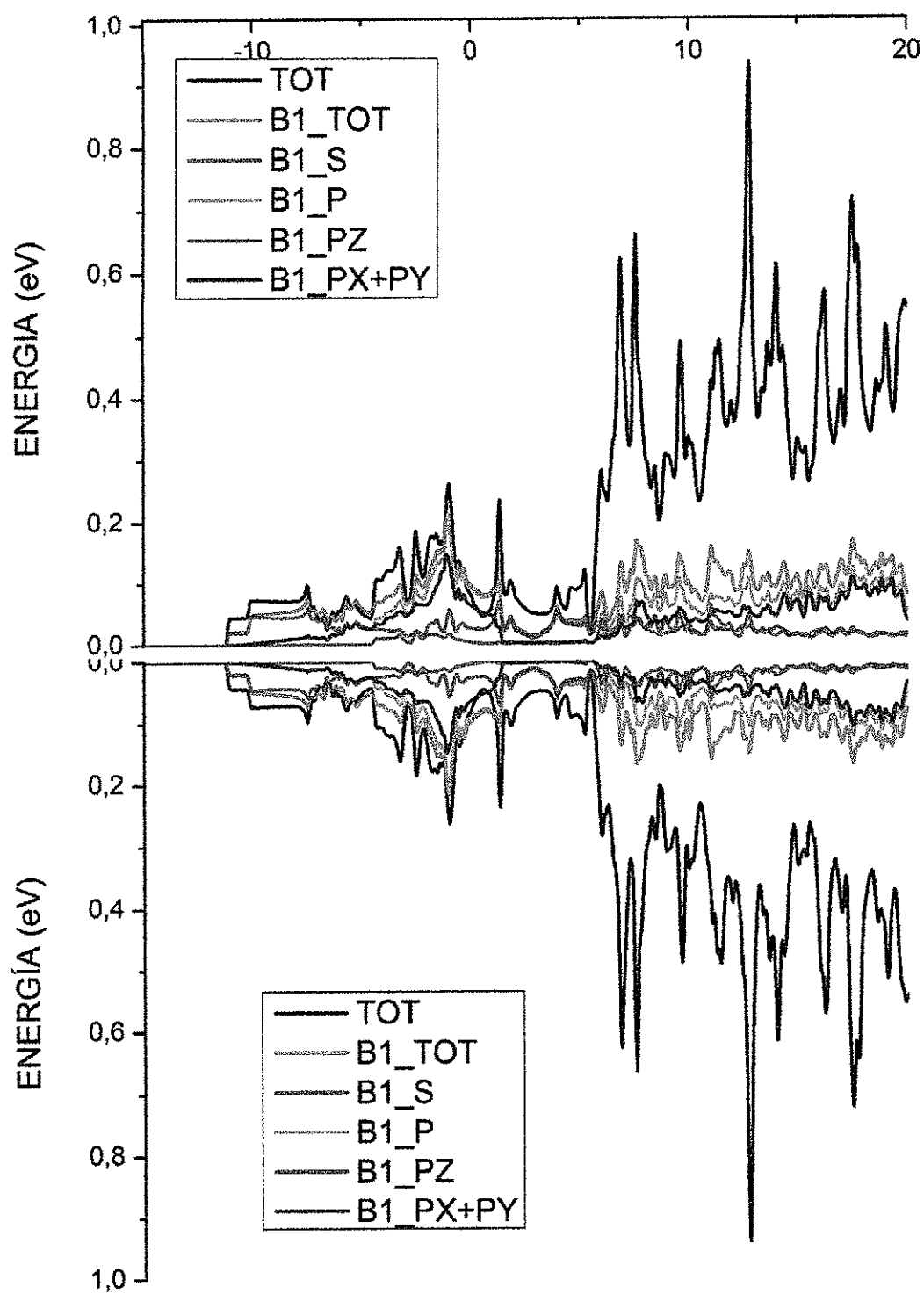


Figura 44. Descripción espín up y down del boro en la superficie terminada en boro del MgB_2 .

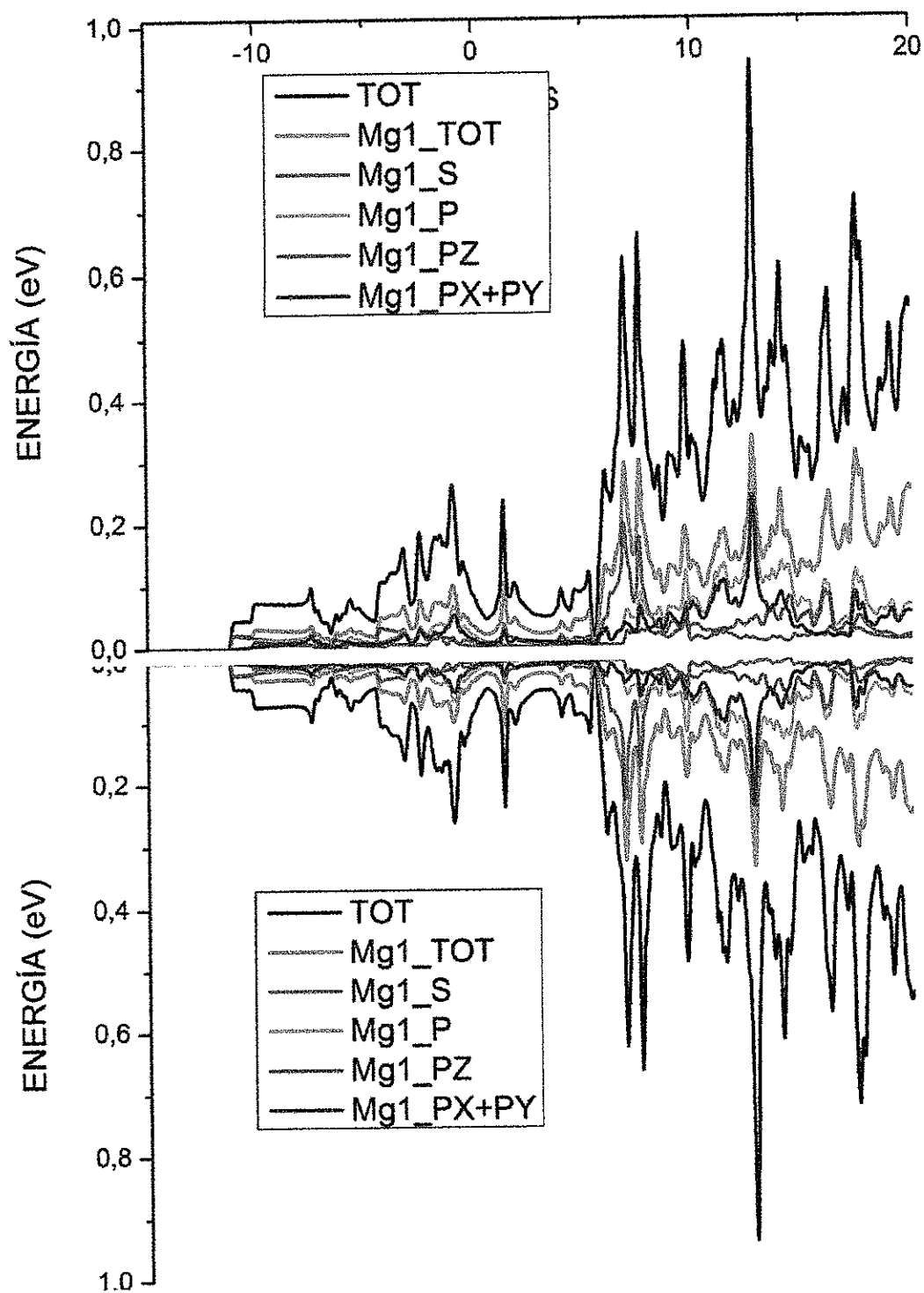


Figura 45. Descripción espín up y down del magnesio en la superficie terminada en boro del MgB_2 .

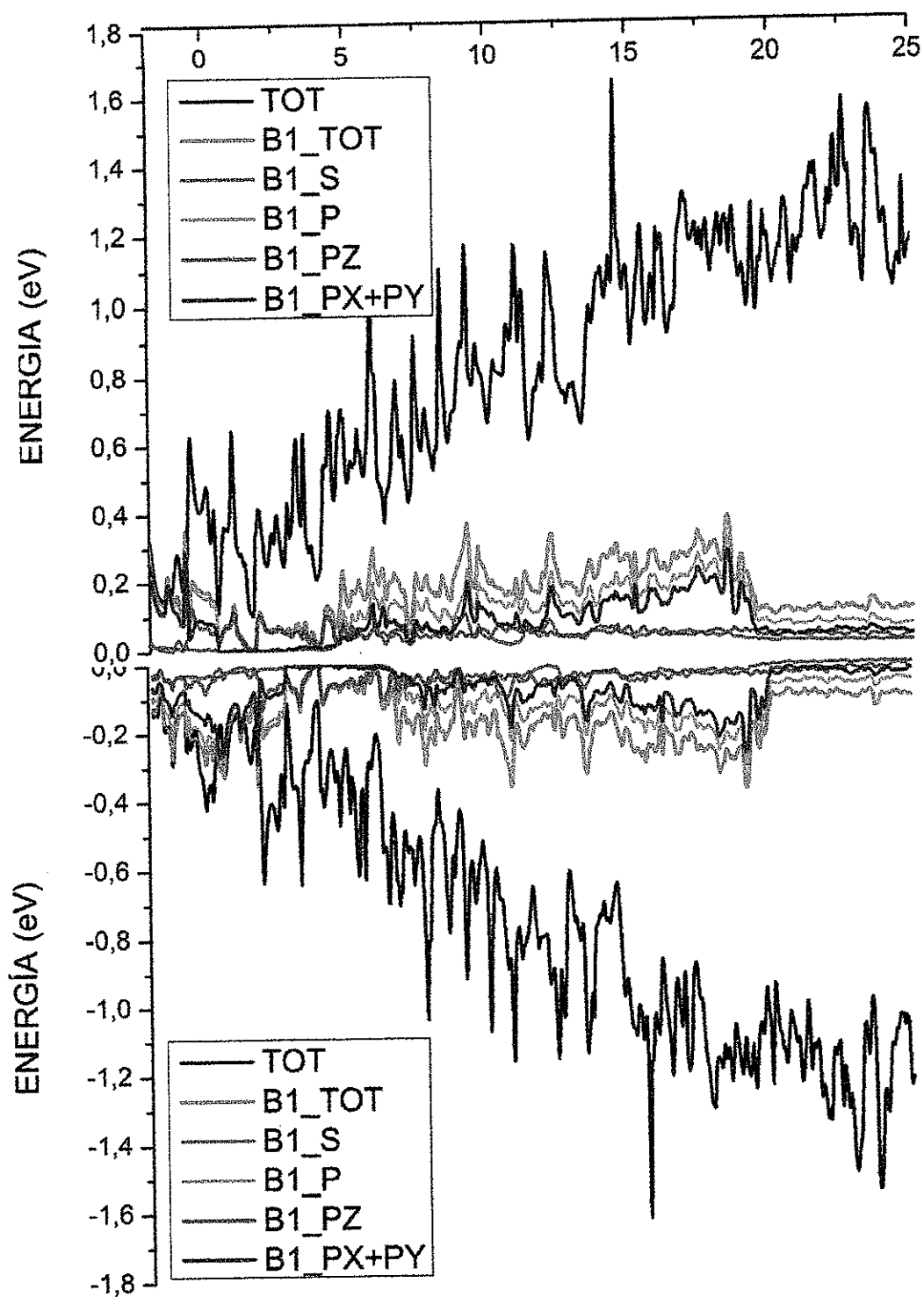


Figura 46. Descripción espín up y down del boro en la superficie terminada en magnesio del MgB_2 .

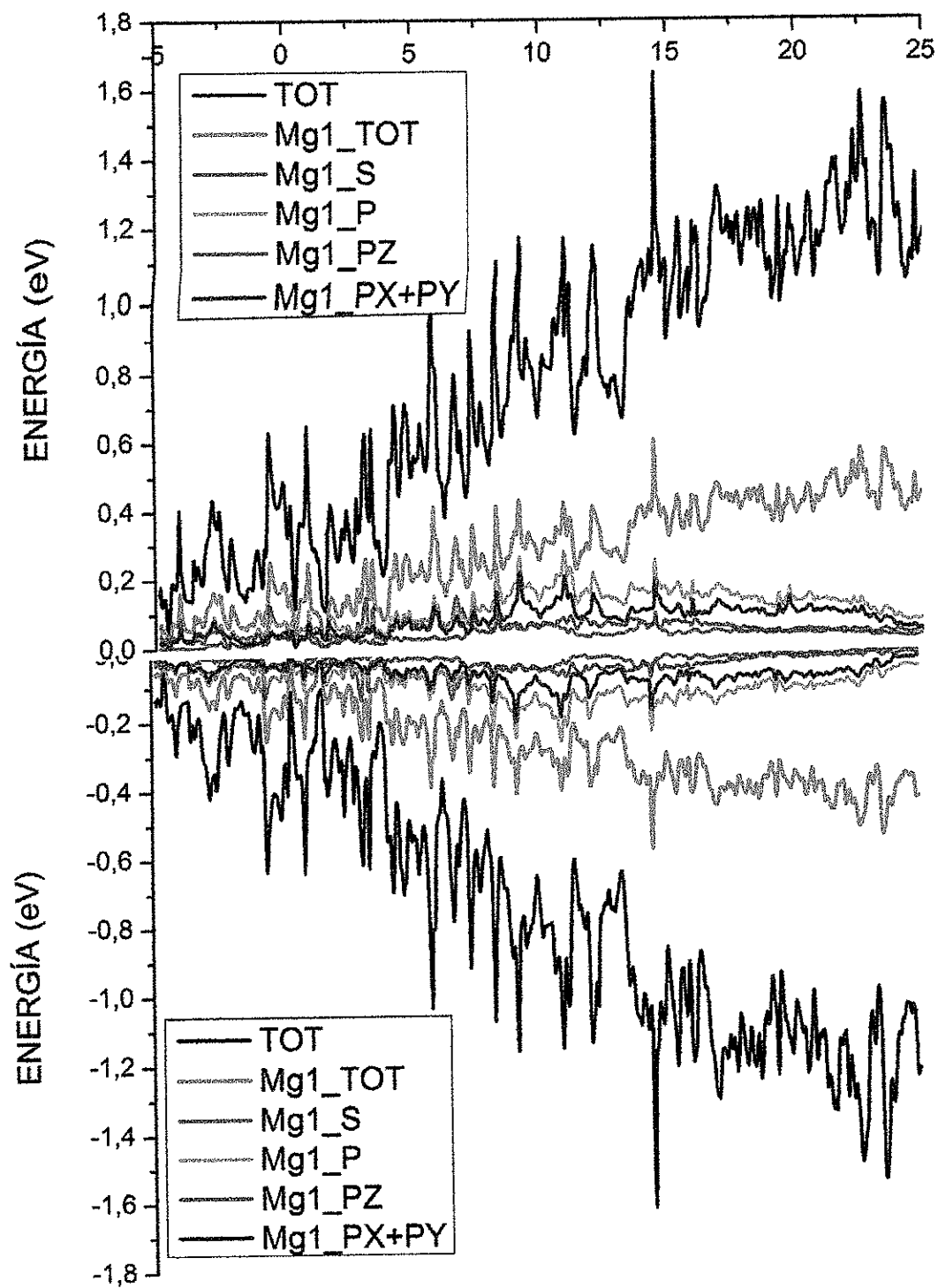


Figura 47. Descripción espín up y down del magnesio en la superficie terminada en magnesio del MgB_2 .

4.11 Personas que participan en el proyecto

Para el desarrollo del proyecto se hizo necesaria la participación de:

- **DIRECTORA DEL PROYECTO:** Msc. Sully Segura Peña

Maestría Física Pura, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia. Docente Ciencias Básicas, Universidad Santo Tomás Tunja. Directora grupo de Investigación Nuevos Materiales y Nanotecnología.

- **ASESOR DEL PROYECTO:** Msc. Jairo Arbey Rodríguez

Físico y Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad Nacional de Colombia. Docente Universidad Nacional de Colombia categoría Asociado, investigador Grupo de Física de La Materia Condensada de la misma universidad.

- **JOVEN INVESTIGADOR:** Luis Carlos Reyes Parra.

Estudiante de Ingeniería Electrónica de la Universidad Santo Tomás, seccional Tunja. Joven Investigador del Grupo de Investigaciones de Nuevos Materiales y Nanotecnología.

4.12 Recursos disponibles

4.12.1 Recursos humanos

- Grupo de Investigación en Nuevos Materiales y Nanotecnología. Universidad Santo Tomás Tunja.
- Docentes Ciencias Básicas.
- Docentes Ingeniería Electrónica.

4.12.2 Recursos materiales

Computador Personal: Herramienta de trabajo, para normalizar y presentar los datos obtenidos del software Wien2K. El software que cumple con este objetivo

hace parte de la versión demo de las empresas Microsoft (Word, Excel, Power Point) y el OriginLab.

4.12.3 Recursos financieros

Los costos aproximados, del proyecto son los siguientes:

Valor Total del Proyecto	\$ 5.525.000
Valor Aporte CIUSTA	\$ 4.800.000
Valor Aporte Investigador	\$ 725.000

Como se observa en el anterior estado de cuentas, más de un 80% aportó la Universidad Santo Tomás Tunja, mediante el Centro de Investigaciones CIUSTA. Los aportes más significativos, hacen parte del uso del nuevo equipo pc de trabajo del laboratorio de física y la licencia académica Wien2K; los demás requerimientos son necesarios para complementar la información obtenida y la divulgación del proyecto de investigación.

4.12.4 Recursos locativos

Infraestructura y equipos presentes en los laboratorios de Física de Ciencias Básicas, Universidad Santo Tomás Tunja.

CONCLUSIONES

De este trabajo se concluye en primera instancia que los resultados concuerdan con las caracterizaciones realizadas con este mismo método por Rodríguez en el Volumen del MgB_2 .

Tanto para el volumen como para las superficies terminadas en Boro o en Magnesio las mayores contribuciones electrónicas las están haciendo los orbitales $p_x + p_y$ del Boro.

Se observa también que existe fuerte acople para los orbitales B_{p_z} y los $p_x + p_y$ del Mg ya que en la superficie terminada en Mg se observa que disminuye la contribución de los B_{p_z} pero se incrementa en la misma zona los $Mg_{p_x + p_y}$.

En cuanto a las terminaciones del MgB_2 en boro las bandas de Boro permanecen constantes como el volumen, se acentúan y los orbitales $Mg_{p_x + p_y}$ contribuyen a los p_z , pero no los desplaza.

RECOMENDACIONES

Este es un primer acercamiento para la caracterización de la superficie del Diboruro de Magnesio MgB_2 , se plantea seguir aumentando las capas para completar la supercelda de tal forma que la reconstrucción permita identificar los mismos resultados descritos por el volumen.

Otros estudios complementarios que permitan fortalecer el actual proyecto son:

- Realizar un estudio exhaustivo en física de estado sólido y teoría de bandas, que permitan resaltar nuevas propiedades a través de las propiedades magnéticas y ópticas.
- Una gran propuesta, se ha dado alrededor de los dopantes teóricos y experimentales, que permiten la sustitución de elementos que puedan mejorar algunas de sus propiedades superconductoras como temperatura de transición T_c , densidad de corriente J_c , campos magnéticos H_c, H_{c2}, H_{irr} . En los referentes teóricos se ha tenido en cuenta un nano-dopante tanto para el magnesio como para el boro, permitiendo determinar, calcular y desarrollar nuevas propiedades.
- Un primer intento se efectúa con aluminio y carbono, los cuales poseen un átomo más que los electrones de magnesio y boro, respectivamente; los experimentos realizados han confirmado un benefactor cuando se utiliza sustituciones de nano orden permitiendo circundar en materiales como $Mg_{1-x}Al_xB_2$ y $MgB_{2-x}C_x$.

ESTRATEGIAS DE DIVULGACIÓN

Publicación de artículos

En proceso de evaluación:

DFT Aplicado en el Estudio de las Propiedades Electrónicas de la Superficie del MgB₂. III Encuentro Colombiano Micro y Nanotecnología - Universidad de los Andes (2011).

Encuentro

IX Encuentro Regional de Semilleros de Investigación. Universidad de Boyacá. Mayo (2011).

III Encuentro Colombiano de Micro y Nanotecnología. Universidad Los Andes. Agosto (2011).

X Encuentro Regional de Semilleros de Investigación. Escuela de Policía Rafael Reyes.

Jornada

Jornada de Ingeniería Electrónica "El bicentenario". Universidad Santo Tomás Tunja. Mayo (2011).

Séptima semana Ingeniería Electrónica. Universidad Antonio Nariño. Octubre (2011).

IV Jornada de Ingeniería Electrónica. Facultad de Ingeniería Electrónica Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia – Sede Sogamoso (2005).

Congresos internacionales

Congreso Internacional de Investigación, USTA Tunja 15 años. Universidad Santo Tomás. Septiembre de (2011).

II Congreso Internacional de Instrumentación, Control y Telecomunicaciones. Universidad Santo Tomás Tunja. Octubre (2011)

BIBLIOGRAFÍA

- [1]. Miguel Angel Ocaña Bribiesca. Estructura electrónica de metales simples de lantánidos. México, 2004 Tesis profesional. Universidad de las Américas Puebla, Escuela de Ciencias. Disponible en la página web: http://catarina.udlap.mx/u_dl_a/tales/documentos/lfa/ocana_b_ma/capitulo3.pdf
- [2]. HASE I AND YAMAJI. Nesting properties and anomalous band effect in MgB₂. K 2001 Preprint, cond-mat/0106620
- [3]. F. GIUBILEO, D. RODITCHEV, W. SACKS, R. LAMY AND J. KLEIN. Strong Coupling and Double Gap Density of States in Superconducting MgB₂. To appear in Phys. Rev. Lett.
- [4]. K. H. P. KIM, C. U. JUNG, H.-S. LEE, B. KANG, AND S.-I. LEE. Surface contribution to the superconducting properties of MgB₂ single crystals. Phys. Rev. B 68, 172502 (2003). <http://arxiv.org/pdf/cond-mat/0307445v1.pdf>
- [5]. A. PLECENIK, L. SATRAPINSKY, P. KUS, S. GAZI, S. BENACKA, I. VAVRA AND I. KOSTIC. MgB₂ Superconductor thin films on si and Al₂O₃ substrates. To appear in Phys. Rev. Lett.
- [6]. ZHENYU LI, JINLONG YANG, J.G. HOU, QINGSHI ZHU. A first-principles study of MgB₂ (0001) surfaces. Physical Review B, vol. 65, Número 10, id. 100507, 28 June 2011. Disponible: <http://arxiv.org/pdf/cond-mat/0106590v1.pdf>
- [7]. J. KORTUS.; I.I. MAZIN; KIRILL D. BELASHCHENKO; V.P. ANTROPOV; L.L. BOYER. Superconductivity of Metallic Boron in MgB₂. Physical Review Letters, VOLUME 86, NUMBER 20, 14 MAY 2001.
- [8]. L. M. FALICOV. Superconductivity: A Brief Introduction to its Phenomenology and Theories. IEEE JOURNAL OF QUANTUM ELECTRONICS. VOL. 25. NO II. NOVEMBER 1989. <http://dx.doi.org/10.1109/3.42067>
- [9]. COLLINS, L. Out of cold storage [Electronics Future]. This paper appears in: Engineering & Technology. Date of Publication: 05 Dec.-15 Jan. 5 2009. Volume: 4, Issue: 21 Page(s): 37-39 Product Type: Journals & Magazines.
- [10]. H. KAMERLINGH Onnes, Leiden Commun. 120b, 112b, 124c (1911).

- [11]. MASAHIRO HORIBE. Preparation of Ramp-edge Interface Modified Junctions for HTS SFQ Circuits. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 11, NO. 1, MARCH 2001. ISSN: 1051-8223.
- [12]. CAPPANNINI, OM. Presión dependencia de compresibilidades en YNi₂B₂C y YPD₂B₂C. Physica C, Volumen. 306, Número 1-2, p. 101-106. Doi: 10.1016/S0921-4534 (98) 00351-7. ISSN: 1051-8223
- [13]. NAGARAJAN R, MAZUMDAR C, HOSSIAN Z, DHAR S K, GOPALAKRISHNAN K V, GUPTA L C, GODART C, PADALIA B D, VIJAYRAGHAVAN R 1994 Phys. Rev. Lett. 72 274. <http://www.iisc.ernet.in/currsci/jan102005/83.pdf>
- [14]. CAVA R J et al. 1994 Nature 367 252.
- [15]. EISAKI H, TAKAJI H, CAVA R J, BATLOGG B, KRAJEWSKI J J, PECK, Jr W F, MIZUHASHI K, LEE J O and Uchida S 1994 Phys. Rev. B 50 647.
- [16]. J. AKIMITSU. Symposium on Transition Metal Oxides. Sendai, Japan, 2001.
- [17]. J. NAGAMATSU, N. NAKAGAWA, T. MURANAKA, Y. ZENITANI, and J. AKIMITSU. Nature, 410:63, 2001.
- [18]. TISEANU, ION. Characterization of superconducting wires by cone-beam micro-tomography. Nuclear Science Symposium Conference Record IEEE, 19-25 Oct. 2008.
- [19]. HIROMI HIRABAYASHI. Feasibility of Hydrogen Cooled Superconducting Magnets. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 16, NO. 2, JUNE 2006.
- [20]. CANFIELD PAUL C. AND SERGEY L. BUD'KO. Low-Temperature Superconductivity is Warming Up. Scientific American 292, 80 - 87 (2005). Doi:10.1038/scientificamerican0405-80
- [21]. TAKANO, Y. National Research Institute for Metals. Superconducting properties of MgB₂ bulk materials prepared by high-pressure sintering. Applied Physics Letters, Date of Publication: May 2001. Volume: 78 , Issue: 19. Page(s): 2914 - 2916. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1371239>.
- [22]. U. ATZMONY. Is There a Paramagnetic Meissner-Ochsenfeld Effect?. IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS, VOL 31, NO 6, NOVEMBER 1995.

- [23]. HELLMAN, F. La levitación de un imán sobre un superconductor de tipo plano II. Journal of Applied Physics, Jan 1988, Volume: 63 , Issue: 2 Page(s): 447 - 450. <http://dx.doi.org/10.1063/1.340262>.
- [24]. ERREA, ION. Isotope effect in the superconducting high-pressure simple cubic phase of calcium from first principles. Journal of Applied Physics, Jun 2012, Volume: 111, Issue: 11, Page(s): 112604 - 112604-5 <http://dx.doi.org/10.1063/1.4726161>.
- [25]. ELLIS DAVID. Josephson junctions. Electronics and Power, October 1968, Volume: 14 , Issue: 10.
- [26]. JUAN CASAS. PERFORMANCE OF A DOUBLE DC SQUID MAGNETOMETER. IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS, VOL. 27, NO. 2, MARCH 1991.
- [27]. SOERENSEN, O. H. Analysis of the ac SQUID with low inductance and low critical current. Journal of Applied Physics, Volume: 47 , Issue: 11 Page(s): 5030 - 5037. <http://dx.doi.org/10.1063/1.322461>.
- [28]. CLEMENTI, ENRICO. Ab Initio Computations in Atoms and Molecules. IBM Journal of Research and Development, Jan. 1995, Volume: 9 , Issue: 1 Page(s): 2 - 19 .
- [29]. BRACCINI V. High-field superconductivity in alloyed MgB2 thin films (2003). Disponible en la página web: <http://arxiv.org/ftp/cond-mat/papers/0402/0402001.pdf>
- [30]. SOUMA S. et al. 2003. Nature 423 65.
- [31]. TAKAHASHI T, SATO T, SOUMA S, MURANAKA T and AKIMITSU J 2001, High-Resolution Photoemission Study of MgB2, Phys. Rev. Lett. 86 4915
- [32]. X. X. Xi, "Two-band superconductor magnesium diboride," Rep. Prog. Phys. 71, 116501, 2008.
- [33]. GIUBILEO F, RODITCHEV D, SACKS W, LAMY R and KLEIN J 2001 Preprint, Strong Coupling and Double Gap Density of States in Superconducting MgB2, cond-mat/0105146
- [34]. SZABO P, SAMUELY P, KACMARCIK J, KLEIN Th, MARCUS J, FRUCHART D, MIRAGLIA S, MARCENAT C and JANSEN A G M 2001 Preprint, Evidence for

two superconducting energy gaps in MgB₂ by point-contact spectroscopy, condmat/ 0105598, to appear in Phys. Rev. Lett.

[35]. KREMER R K, GIBSON B J and AHN K 2001 Preprint, Heat capacity of MgB₂: evidence for moderately strong coupling behaviour, cond-mat/0102432

[36]. CHEN X K, KONSTANTINOVIC M J, IRWIN J C, LAWRIE D D and FRANCK J P 2001 Preprint, Investigation of the Superconducting Gap in MgB₂ by Raman Spectroscopy, cond-mat/0104005, to appear in Phys. Rev. Lett.

[37]. R. L. MENG. Study of Intermetallic Compounds Isostructural to MgB₂. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 13, NO. 2, JUNE 2003.

[38]. TSUDA S. Definitive experimental evidence for two-band superconductivity in MgB₂. Disponible en línea: <http://arxiv.org/ftp/cond-mat/papers/0303/0303636.pdf>

[39]. C. TARANTINI. Critical Field of Magnesium Diboride in Substituted and Irradiated Samples. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 15, NO. 2, JUNE 2005.

[40]. BUD'KO S. (26 February 2001). "Boron Isotope Effect in Superconducting MgB₂". Physical Review Letters 86: 1877. arXiv:cond-mat/0101463. Bibcode 2001PhRvL..86.1877B. doi:10.1103/PhysRevLett.86.1877.

[41]. CAVA ROBERT J. Nature 410, 23-24 (1 March 2001), doi:10.1038/35065177

[42]. BUD'KO S.L., LAPERTOT G., PETROVIC C., CUNNINGHAM C.E., ANDERSON N., CANFIELD P.C., Phys. Rev. Lett. 86, 1877 (2001).

[43]. HINKS D G, CLAUS H and JORGENSEN J D 2001, The complex nature of superconductivity in MgB₂ as revealed by the reduced total isotope effect, Nature 411 457

[44]. S. X. DOU. Plenary Talk - Strain Engineering for Improvement in J_c and H_{irr} and H_{c2} in MgB₂. Proceedings of 2011 IEEE International Conference on Applied Superconductivity and Electromagnetic Devices Sydney, Australia, December 14-16, 2011.

[45]. GERMÁN DARÍO SERRANO. Optimización de las propiedades superconductoras en Alambres y Cintas de MgB₂ para la obtención de altos campos magnéticos. Bariloche, 2005, 560. Tesis en Maestría en Ciencias Físicas. Instituto Balseiro Comisión Nacional de Energía Atómica, Universidad del Cuyo.

- [46]. SUENAGA, M. LUHMAN. Effects of heat treatment and doping with Zr on the superconducting critical current densities of multifilamentary Nb₃Sn wires. Journal of Applied Physics, Volume: 45 , Issue: 9, Page(s): 4049 - 4053. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1663911>.
- [47]. STEVE CARABELLO. Differential Conductance Measurements of MgB₂-Based Josephson Junctions Below 1 Kelvin. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 21, NO. 3, JUNE 2011.
- [48]. Mike D. Sumption. Effect of Cable Edge Deformation on RRR and Magnetization of Strands Extracted From Nb₂Sn Rutherford-Type Cables. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 19, NO. 3, JUNE 2009.
- [49]. MEINGAST, C. Quantitative description of a very high critical current density Nb-Ti superconductor during its final optimization strain. II. Flux pinning mechanisms. Journal of Applied Physics, Volume: 66 , Issue: 12, Page(s): 5971 - 5983. <http://dx.doi.org/10.1063/1.343625>.
- [50]. LEI YU. Measurement of the Coherence Length of Sputtered Nb_{0.62}Ti_{0.38}N Thin Films. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 12, NO. 2, JUNE 2002.
- [51]. LEE, S. F.; LIOU, Y. ; YAO, Y. D. ; SHIH, W. T. ; YU, C. Journal of Applied Physics, Volume: 87 , Issue: 9, Page(s): 5564 - 5566. <http://dx.doi.org/10.1063/1.373405>.
- [52]. J.L DUCHATEAU, D. NB₃SN SUPERCONDUCTOR FOR FUSION APPLICATION: FACING NET-ITER SPECIFICATIONS, EVALUATION OF INDUSTRIAL CAPABILITY. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 3, NO.1, MARCH 1993.
- [53]. C. TARANTINI, V. Critical Field of Magnesium Diboride in Substituted and Irradiated Samples. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 15, NO. 2, JUNE 2005.
- [54]. YASUHIRO MAKIDA. Design of SMES System With Liquid Hydrogen for Emergency Purpose. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 17, NO. 2, JUNE 2007.
- [55]. T. SHINTOMI. Advanced Superconducting Power Conditioning System for Effective Use of Renewable Energy. International Conference on Renewable

Energies and Power Quality (ICREPQ'12) Santiago de Compostela (Spain), 28th to 30th March, 2012.

[56]. TAKATARO HAMAJIMA. Application of SMES and Fuel Cell System Combined With Liquid Hydrogen Vehicle Station to Renewable Energy Control. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 22, NO. 3, JUNE 2012

[57]. KALSI, S. Applications of High Temperature Superconductors to Electric Power Equipment. Publisher: Wiley-IEEE Press, Pages: 7 -34, Edition: 1. Copyright Year: 2011, ISBN: 9780470877890.

[58]. LIN YE. Husband. MgB₂ Sample Tests for Possible Applications of Superconducting Fault Current Limiters. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 17, NO. 2, JUNE 2007.

[59]. XIAOZE PEI. Experimental Tests on a Superconducting Fault Current Limiter Using Three-Strand MgB Wire. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 22, NO. 3, JUNE 2012.

[60]. P D HOPEWELL. A Practical Superconducting Fault Current Limiter (0225). Prague, 8-11 June 2009.

[61]. WEIJUN YAO. Coils for MRI Applications. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 20, NO. 3, JUNE 2010.

[62]. D. ZHANG. Research on Stability of Superconducting Magnet for MRI. IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 21, NO. 3, JUNE 2011

[63]. BARSOUM, MICHEL. Use of the Meissner effect to separate, purify, and classify superconducting powders. Applied Physics Letters, Dec 1987, Volume: 51, Issue: 23, Page(s): 1954 - 1956. <http://dx.doi.org/10.1063/1.98311>.

[64]. SCHRÖDINGER, ERWIN. "An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules"(December 1926). Phys. Rev. 28 (6) 28 (6): 1049–1070. <http://adsabs.harvard.edu/abs/1926PhRv...28.1049S>

[65]. R. RESNICK, R. EISBERG. Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles (2nd Edition), John Wiley & Sons, 1985, ISBN 978-0-471-87373-0

- [66]. FELIX BLOCH. "Über die der Quantenmechanik Elektronen en Kristallgittern"(1928). <http://dx.doi.org/10.1007%2F01339455>
- [67]. BORN, MAX; OPPENHEIMER, J. ROBERT. "Zur Quantentheorie der Molekeln [On the Quantum Theory of Molecules]" (in German 1927). *Annalen der Physik* 389 (20): 457–484. doi:10.1002/andp.19273892002.
- [68]. GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. Upper Saddle River (1995), New Jersey: Prentice Hall. ISBN 0-13-124405-1.
- [69]. SAKURAI, J. *Modern Quantum Mechanics* (1994). Addison-Wesley. ISBN 0-201-53929-2.
- [70]. HINCHLIFFE, ALAN. *Modelling Molecular Structures* (2000). John Wiley & Sons Ltd. p. 186. ISBN 0-471-48993-X.
- [71]. SLATER, J. "The Theory of Complex Spectra" (1929). *Physical Review* 34 (2): 1293–1295. doi:10.1103/PhysRev.34.1293.
- [72]. IVÁN SCIVETTI. Hidrógeno: más allá de la aproximación clásica. Universidad Nacional de Cuyo. Junio 2003, disponible: <http://ricabib.cab.cnea.gov.ar/19/1/1Scivetti.pdf>.
- [73]. HUMMEL, ROLF E. *Electronic Properties of Materials*. Third edition. Ed. Springer 2001, page 38
- [74]. SEARS ZEMANSKY. *Física universitaria*. Volumen 1, decimosegunda edición, PEARSON EDUCACION, México, 2009. ISBN: 978-607-442-28-7.
- [75]. KIERON BURKE. *The ABC of DFT*. Department of Chemistry, University of California, Irvine. Abril 10, 2007, disponible: <http://chem.ps.uci.edu/%CB%9Ckieron/dft/book/>
- [76]. HOHENBERG, PIERRE; WALTER KOHN. "Inhomogeneous electron gas"(1964). *Physical Review* 136 (3B): B864–B871. doi:10.1103/PhysRev.136.B864
- [77]. THOMAS, L. H. "The calculation of atomic fields"(1927). *Proc. Cambridge Phil. Soc.* 23 (5): 542–548. doi:10.1017/S0305004100011683
- [78]. KOHN, WALTER; SHAM, LU JEU. "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects"(1965). *Physical Review* 140 (4A): A1133–A1138. doi:10.1103/PhysRev.140.A1133.

- [79]. P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, and S. B. Trickey, in *Comput. Phys. Commun.* 59, 399 (1990).
- [80]. PETER BLAHA, KARLHEINZ SCHWARZ, GEORG MADSEN, DIETER KVASNICKA, JOACHIM LUITZ. WIEN2k, An Augmented PlaneWave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties. revised edition WIEN2k 11.1 (Release 11.04.2011). ISBN 3-9501031-1-2
- [81]. SCHWARZ et al. 2001
- [82]. J. C. SLATER, *Phys. Rev.* 51 (1937) 846.
- [83]. G. ROMERO PAREDES. SEES Departamento de Ing. Eléctrica. CINVESTAV.
- [84]. JOSÉ ROGAN C. Introducción a la Física de Sólidos. Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.; disponible:<http://fisica.ciencias.uchile.cl/~emenendez/docencia/fissol/solidos-04e.pdf>
- [85]. KITTEL, CHARLES (1996). *Introducción a la Física del Estado Sólido* . Nueva York: Wiley ISBN 0-471-14286-7.
- [86]. LEVINE, IRA N. (1991). *Química Cuántica* . Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall. pp 455-544. ISBN 0-205-12770-3 .
- [87]. DAVID S. SHOLL; JANICE A. STECKEL. *Density Functional Theory, A Practical Introduction*. Wiley. ISBN 978 0 470 37317 0
- [88]. J. D. JORGENSEN, D. G. HINKS AND S. SHORT, *Phys. Rev. B* 63, 224522 (2001).
- [89]. L. ALVAREZ. EL DIBORURO DE MAGNESIO Y SUS PROPIEDADES PRINCIPALES. *Revista de Física*, No 35, Diciembre 2007.
- [90]. VILLARS and CALVERT, *Pearson's Handbook*, Vol. I, p. 656. Versión online: <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/struk/c32.html>
- [91]. RAMÍREZ, R. y M. C. BÖHM. 1988. The use of symetry in recíprocal space integrations. Asymetric units and weighting factors for numerical integration procedures in any crystal simetry. *Int. J. Quan. Chem.* 34: 571-594 p.
- [92]. Wyckoff, R. W. G. *Crystal structures* Vol. 1. Interscience publishers. U.S.A. Segunda edición. Nueva York. 397 pp 1965

- [93]. Armando Reyes Serrato (2001). Cálculos ab initio de la estructura electrónica del superconductor MgB₂. *Revista Mexicana de Física* 48(5) 391-396.
- [94]. Kai Roßnagel, Lutz Kipp, and Michael Skibowski. Angle-resolved photoelectron spectroscopy: From photoemission imaging to spatial resolution. Wolfgang Schattke, Michel A. Van Hove (Eds.). *Solid-State Photoemission and Related Methods*. © 2003 WILEY-VCH GmbH & Co.
- [95]. *Solid-State Photoemission and Related Methods*. Wolfgang Schattke, Michel A. Van Hove (Eds.). 2003 WILEY-VCH GmbH & Co.
- [96]. CHROMIK S., STRBIK V., BENACKA S., JERGEL Mi., JERGEL Ma., FALCONY C., ANDRADE E., CHEANG-WONG J.C., *Superficies y Vacío* 13 (2001) 57.
- [97]. CHRISTEN H.M., ZHAI H.Y., CANTONI C., PARANTHAMAN M., SALES B.C., ROULEAU C., NORTON D.P., CHRISTEN D.K., LOWNDES D.H., *cond-mat/0103618*.
- [98]. CHEN X H, WANG Y S, XUE Y Y, MENG R L, WANG Y Q AND CHU C W. Correlation between the residual resistance ratio and magnetoresistance in MgB₂, 2001 Preprint, *cond-mat/0107154*
- [99]. ZE LIU • SHOUMO ZHANG • JIARUI YANG • JEFFERSON ZHE LIU • YANLIAN YANG, QUANSHUI ZHENG. Interlayer shear strength of single crystalline graphite. <http://dx.doi.org/10.1016/j.bbr.2011.03.031>
- [100]. FLÜKIGER E. Superconducting materials for industrial applications. Manep.
- [101]. YIYING WU, BENJAMIN MESSER, and PEIDONG YANG. Superconducting MgB₂ Nanowires. *Adv. Mater.* 2001, 13, No. 19, October 2
- [102]. NISHIBORI E, TAKATA M, SAKATA M, TANAKA H, MURANAKA T AND AKIMITSU J. Bonding Nature in MgB₂, 2001 Preprint, *cond-mat/0105555*
- [103]. SERQUIS, et al. 2005, Xu.
- [104]. GRANT Paul M. Potential Electric Power Applications for Magnesium Diboride. Disponible en línea: <http://www.w2agz.com/Documents/Potential%20Electric%20Power%20Applications%20for%20Magnesium%20Dibori.pdf>

[105]. M. P. Allen and D. J. Tildesley. Computer Simulation of Liquids (Oxford University Press, 1987). N. K. Wannier. Rev. Mod. Phys. 64, 1045 (1992).

INFOGRAFÍA

[106]. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/ (galardones de premios nobel)

[107].
http://bibliotecadigital.ilce.edu.mx/sites/ciencia/volumen2/ciencia3/104/htm/sec_8.htm (Biblioteca digital Instituto Latinoamericano de la Comunicación Educativa – México)

[108]. <http://buscandoasusy.wordpress.com/category/historias/> (Superconductividad y efecto Meissner)

[109]. <http://spectrum.ieee.org/semiconductors/materials/the-sensible-superconductor/0> (Revista IEEE Spectrum)

[110]. <http://accessscience.com/search.aspx?rootID=794445> (Access Science from McGraw-Hill)

[111]. <http://www.superconductivecomp.com> (SCI Engineered Materials, Inc.)

[112]. <http://www.superconductors.org/Type1.htm> (Sc para principiantes)

[113]. <http://aportes.educ.ar/fisica/nucleo-teorico/estado-del-arte/superfluidez-y-superconductividad/superconductividad.php> (Física para Educar)

[114]. <http://www.superconductors.org/Type2.htm> (Sc para principiantes)

[115]. <http://www.comohacer.eu/como-hacer-levitacion-magnetica/> (Cómo hacer levitación magnética)

[116]. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/solids/coop.html> (HyperPhysics, conceptos de física)

[117]. <http://www.nanored.buap.mx/1900-1985.html> (Benemérita Universidad Autónoma de Puebla)

[118]. http://www.superconductors.org/39K_updt.htm (información superconductora para principiantes)

- [119]. <http://www.finishing.com/91/82.shtml> (The home page of the finishing industry)
- [120]. <http://www.copperinfo.co.uk/busbars/pub22-copper-for-busbars/sec3.htm> (Cooper Development Association)
- [121]. <http://www.msm.cam.ac.uk/asgc/lectures/applications/> (APPLIED SUPERCONDUCTIVITY AND CRYOSCIENCE GROUP)
- [122]. <http://digital.csic.es/bitstream/10261/48199/1/9-ICMA%20I%5B1%5D.pdf> (Superconductividad en el ICMA)
- [123]. <http://www.msm.cam.ac.uk/asgc/materials/mgb2insitu.jpg> (Universidad Cambridge MgB2)
- [124]. <http://www.columbussuperconductors.com/img/shapes.gif> (Columbus superconductors)
- [125]. <http://www.hypertechresearch.com/> (Hyper Tech Research, Inc.)
- [126]. <http://www.paramedia.com/images/nosotros3.jpg> (Paramed Latin America)
- [127]. <http://www.ua.es/cuantica/docencia/ccem/teoria/node6.html> (Universidad de Alicante)
- [128]. <http://nereida.deioc.ull.es/~pcgull/ihiu01/cdrom/gaussian/contenido/node8.html> (universidad de la laguna – España)
- [129]. http://catarina.udlap.mx/u_dl_a/tales/documentos/lfa/ocana_b_ma/capitulo4.pdf (Coleccion de Tesis Digitales Universidad de las Américas Puebla – México)
- [130]. <http://www.qft.iqfr.csic.es/docs/Wien2K/> (Universidad de Salamanca)
- [131]. http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/parte_03_4.html (Department of Crystallography and Structural Biology)
- [132]. <http://132.248.12.175/mbizarro/> (Universidad nacional autónoma de México)
- [133]. <http://ocw.uniovi.es> (Universidad de Oviedo)
- [134]. <http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/large/sgp.htm> (Applied Chemical Crystallography Group)

- [135]. <http://www.ie.cinvestav.mx/> (Departamento de Ingeniería Eléctrica)
- [136]. <http://www.cryst.ehu.es/cryst/kvec/fig/f6ommmP.gif> (Bilbao Crystallographic Server)
- [137]. Tomado de la página web: http://www.wtec.org/loyola/scpa/05_02.htm (World Technology Evaluation Center)
- [138]. <http://www.sigmaaldrich.com/us-export.html> (Sigma-Aldrich)
- [139]. <http://chemed.chem.wisc.edu/chempaths> (Student Resources for General Chemistry)
- [140]. <http://cienciasdejoseleg.blogspot.com/2012/02/boro-segun-el-modelo-de-bohr.html> (Ciencia de Joseleg)
- [141]. http://natxopont.orgfree.com/fq3eso-moodle/Tema-5/53_configuracin_electrnica.html (Profesor Natxo Pont)
- [142]. <http://www.cmp.ucl.ac.uk/~drb/Thesis/Masterch2.html> (UCL Physics & Astronomy)

Libros Digitales:

- NEIL W. ASHCROFT Y N. DAVID MERMIN (1976). Física del Estado Sólido . Orlando:. Harcourt ISBN 0-03-049346-3.
- CRAMER, CHRISTOPHER J. (2002). Essentials of Computational Chemistry. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd.. pp. 153–189. ISBN 0-471-48552-7.
- RICHARD M. MARTIN. Electronic Structure Basic Theory and Practical Methods. Cambridge University Press, pp. 100-150. ISBN 0 521 78285 6.
- EBERHARD ENGEL; REINER M. DREIZLER. Theoretical and Mathematical Physics Density Functional Theory An Advanced Course. Springer. ISSN 1864-5879, ISBN 978-3-642-14089-1
- JORGE KOHANOFF. Electronic Structure Calculations For Solids And Molecules, Theory and Computational Methods. Cambridge University Press. ISBN-13 978-0-521-81591-8
- YONGSHENG ZHANG. First-principles Statistical Mechanics Approach to Step Decoration at Solid Surfaces. im Fachbereich Physik der Freien Universität Berlin eingereichte Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades. Berlin 2008.

C. FIOLEAIS F. NOGUEIRA M. MARQUES (EDS.). A Primer in Density Functional Theory. Springer. ISSN 0075-8450.

FRED MANBY. Advanced Electronic Structure Theory. Disponible: <http://www.chm.bris.ac.uk/pt/manby/>

WOLFGANG SCHATTKE, MICHEL A. VAN HOVE (EDS.). Solid-State Photoemission and Related Methods. 2003 WILEY-VCH GmbH & Co.

PRATIM KUMAR CHATTARAI. Chemical Reactivity Theory, A Density Functional View. CRC Press (2009). ISBN13: 978-1-4200-6543-5.

VICTOR ANTONOV. Electronic Structure and Magneto-Optical Properties of Solids. Kluwer Academic Publishers. ISBN: 1-4020-1906-8.

ADRIAN P. SUTTON. Electronic Structure of Materials. Oxford Science Publications. ISBN: 0-19-851754-8.

EYVIND H. WICHMANN. Física Cuántica. Reveté s.a. McGraw-Hill (1971).

YORIKIYO NAGASHIMA. Elementary Particle Physics Volume 1: Quantum Field Theory and Particles. Wiley. ISBN: 978-3-527-40962-4.

CHARLES P. POOLE. Superconductivity. Elsevier. ISBN: 0-12-561456-X.

JOHN ROBERT SCHRIEFFER. Handbook of high-temperature superconductivity, theory and experiment. Springer. ISBN: 0-387-35071-3.

A. G. MAMALIS. Processing of high-temperature superconductors at high strain rates. tecnominc publishing company, inc. ISBN: 1-56676-878-0.

BERND SEEBER. Handbook of applied Superconductivity. IOP Publishing 1998. ISBN: 0 7503 0377 8.

CHARLES P. POOLE. Handbook of superconductivity. Academic Press (2000). ISBN:0-12-561460-8.

Trabajos relacionados:

DEVINA SHARMA; JAGDISH KUMAR; ARPITA VAJPAYEE; RANJAN KUMAR; P.K. AHLUWALIA; V.P.S. AWANA. Comparative Experimental and Density Functional Theory (DFT) Study of the Physical Properties of MgB₂ and AlB₂. J. Supercond Nov Magn, 2 February 2011. DOI 10.1007/s10948-011-1146-0.

D M GAITONDE, P MODAK, R S RAO and B K GODWAL. Electronic structure and superconductivity of MgB₂. Bull. Mater. Sci., Vol. 26, No. 1, January 2003, pp. 137–141.

A. FLORIS, G. PROFETA, N. N. LATHIOTAKIS, M. LÜDERS, M. A. L. MARQUES, C. FRANCHINI, E. K. U. GROSS, A. CONTINENZA, AND S. MASSIDDA. Superconducting properties of MgB₂ from first principles.

MIHHAIL KLOPOV. Lattice distortion by impurities in MgB₂. Proc. Estonian Acad. Sci. Phys. Math., 2006, 55, 1, 53–57

J. Kartuz, I. I. Mazin, K. D. Belashchenko, V. P. Antropov, and L. L. Boyer, (condmat/0101446). <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0101446>

G. Satta, G. Profeta, F. Bernardini, A. Continenza and S. Massidda, (cond-mat/0102358). <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0102358>

K. D. Belashchenko, M. van Schilfgaarde, and V. P. Antropov, (cond-mat/0102290). <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0102290>

ANEXO I

ESPECTROSCOPIA DE FOTO-ELECTRÓN RESUELTA POR ÁNGULOS ARPES

Definición

(ARPES) es una de las técnicas más completas en la investigación de la estructura electrónica de los materiales. Entonces, ARPES es una de las técnicas de obtención de imágenes suministrando imágenes del espacio k de dispersión de bandas tanto en las superficies de energía constante. Una de las desventajas, radica en la resolución espacial de la técnica, el cual es generalmente limitado al tamaño de la muestra, en general de algunos $100\mu\text{m}$.

La idea general del experimento ARPES se ilustra en la siguiente figura 48; consiste de una luz monocromática de una energía dada $h\nu$ es absorbida por un material cristalino y la intensidad de los fotoelectrones salientes es medida en función de la energía cinética E_k y ángulos de emisión ϑ y ϕ , [94, 95].

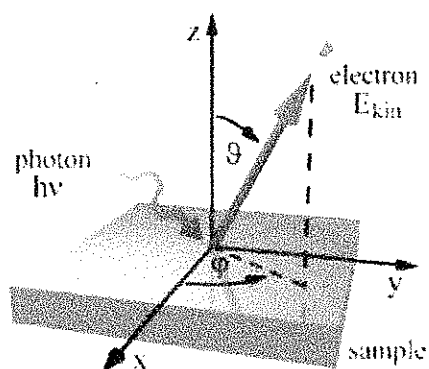


Figura 48. Principio básico de un experimento de fotoemisión de ángulo resuelto [95].

ANEXO II

ENTIDADES DE INVESTIGACIÓN EN EL DIBORURO DE MAGNESIO MgB_2

Desde el descubrimiento del Diboruro de Magnesio MgB_2 (2001), se ha venido trabajando en labores multidisciplinarias con la esperanza de realizar cualquier aplicación sostenible. Los principales colaboradores, se debe a profesores, estudiantes e investigadores teóricos, que han participado en proyectos empresariales con el propósito de hacer del Diboruro de Magnesio MgB_2 , el material del futuro en electrónica, a continuación se encuentra algunos investigadores experimentales:

1. Ames Laboratory / Iowa State University (D. Finnemore, P. Canfield et al)
2. DOE Center of Synthesis and Processing (CSP) Center of Excellence for High Field Intermetallic Superconductors
3. SUNY-Stony Brook (Center for Thermal Spray Research)
4. Hyper Tech Research (M. Tomsic)
5. Northwestern University (D. Dunand) & Northeastern University (J. Blucher)
6. Harvard University (W. Croft, W. MoberlyChan)
7. NESPA NanoEngineered superconductors for power applications in framework of Marie Curie Research training network
8. The Ohio State University- Wright Center of Innovation in Biomedical Imaging, Ohio State University-Laboratory for Applied Superconductivity & Magnetism

ANEXO III

SINTETIZACIÓN DEL DIBORURO DE MAGNESIO MgB_2

El Diboruro de Magnesio MgB_2 , presenta la cualidad de que las temperaturas de fusión del boro y magnesio son diferentes, por esto se cuenta con varias técnicas, como: Método de Vacío [96] (evaporización de haz de electrones), Deposición de láser pulsado PLD [97], recubrimiento por inmersión, deposición de películas delgadas, técnicas de crecimiento mayor [137], co-evaporación, polvo en tubo PIT (*in-situ*, *ex-situ*), método de transporte de vapor. En la actualidad, la técnica más utilizada es el polvo en Tubo PIT ya que permite optimizar las características de maleabilidad y ductilidad del Diboruro de Magnesio MgB_2 , además es posible agregar nanodopantes.

El método Polvo en Tubo PIT, en esencia consiste en colocar polvos de magnesio y boro en un tubo metálico, y alrededor se localiza el refrigerante (neón o hidrógeno líquido), luego se dispone a un tratamiento térmico usualmente de $900^{\circ}C$, por dos horas; la complejidad del método está de acuerdo a las necesidades de la aplicación. Actualmente se encuentra dos procesos: la técnica *in-situ* y *ex-situ*, la diferencia entre uno y otro, radica en que la primera técnica utiliza la mezcla de MgB_2 , mientras que la otra utiliza polvos de Mg y B, sin reaccionar, para una ilustración se da la figura 49, que se encuentra a continuación.

La técnica *in-situ*, presenta varias ventajas como bajo costo, alto factor de llenado, proceso de alta velocidad, bajos proceso de reacción de temperatura, fácil cuando se realiza dopajes de nanopartículas [98]; mientras la técnica *ex-situ*, permite realizar alambres de gran longitud, geometría compleja (multifilamento), control de granulometría de polvo y grado de pureza; mediante esta técnica, produce los mejores conductores [99].

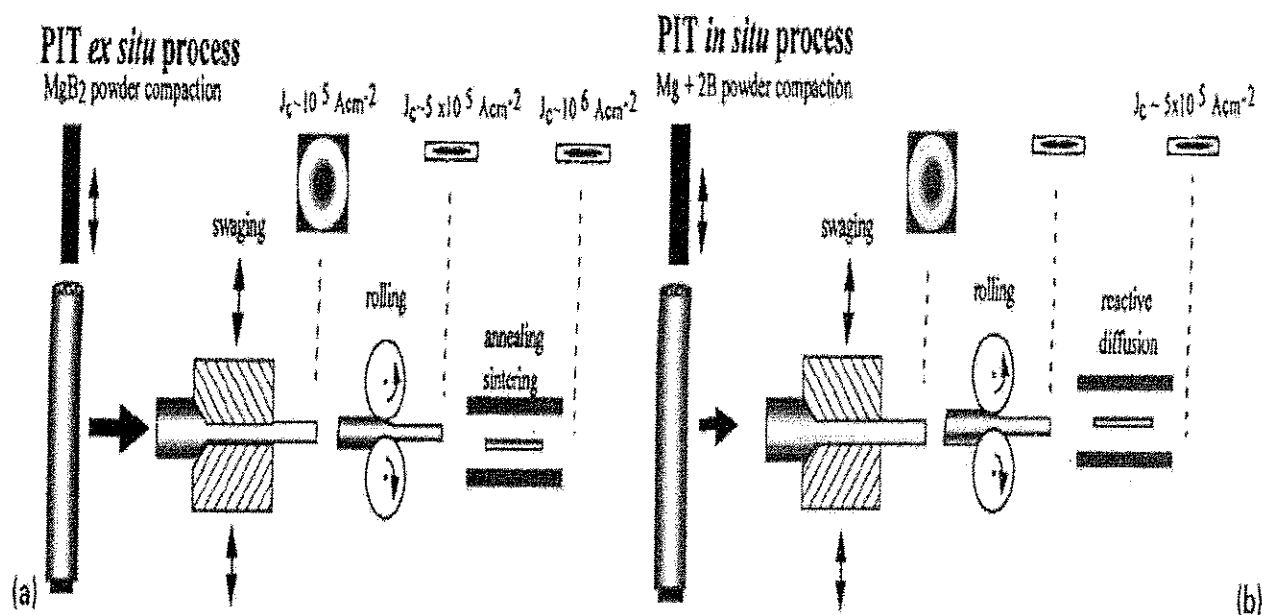


Figura 49. Diferencia entre la técnica polvo en tubo PIT, ex situ (izquierda) e in situ (derecha) [70].

Varios estudios experimentales, permitieron determinar una variación entre los parámetros nominales y real del MgB_2 , hecho que se denominó el efecto de la sustitución química; los resultados de densidad de corriente encontrados en orden descendente son: policristalinos $J_c = 10^6 \text{ A/cm}^2$, cintas, bloque y películas delgadas $J_c = 10^5 \text{ A/cm}^2$, polvo $J_c = 10^4 \text{ A/cm}^2$ [100-104]. En el anexo III, encontramos algunos costos del superconductor de Diboruro de Magnesio.

Costo de Muestras de Diboruro de Magnesio Sintetizadas

Una de las ventajas en la fabricación del Diboruro de Magnesio MgB_2 , se hace a partir de una disponibilidad por los proveedores químicos, no obstante, este material se encuentra sintetizado desde 1953.

El parámetro más importante de un proyecto es su costo, en este caso es reducido ya que los materiales magnesio y boro son abundantes y de alta pureza, además su costo es menor que el niobio y plata que en los superconductores de alta temperatura HTS. El precio estimado comercialmente del MgB_2 , es de \$300/kg, a \$750/kg o 150€ por kilogramo por la empresa Columbus Superconductors. Sin embargo, a empresa Sigma de Estados Unidos ofrece el polvo, 100 malla, >99%

base de metal con apariencia 5,25g en una botella de vidrio²⁶, en la Tabla 11 se describe el precio

Tabla 11. Precio y disponibilidad, del Diboruro de Magnesio MgB_2 .

Tamaño	Disponibilidad	Precio (USD)
553913-5G	En venta desde 18-09-12	42.40
553913-25G	En venta desde 18-09-12	141.00

Fuente: [138].

²⁶ Copyright © 2012 Sigma-Aldrich Co. LLC. All Rights Reserved.

ANEXO IV

CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA DE LOS ÁTOMOS Y NÚMEROS CUÁNTICOS

Números cuánticos n, l, m_l, s

En mecánica cuántica, la única descripción de un átomo se encuentra con la determinación de las propiedades físicas del orbital, ya que este agrupa los electrones según a la distribución de los cuatro números cuánticos n, l, m_l, s .

El número cuántico principal n , indica la distancia entre el núcleo y el electrón de un determinado orbital, además describe la energía del electrón²⁷. El número cuántico secundario o azimutal l : forma de nube electrónica asociada a un electrón (subniveles de n). l Toma valores desde 0 hasta $(n - 1)$ ²⁸. El número cuántico magnético m_l : indica cómo está orientada la nube electrónica que rodea el núcleo. Toma cualquier valor desde -1 hasta 1 y el número cuántico espín s : indica el giro del electrón, alrededor de sí mismo, toma valores de $(+1/2)$ y $(-1/2)$, a continuación se encuentra, el principio de distribución de electrones.

Principio de exclusión de pauli

Si dos electrones tienen iguales los números cuánticos n, l, m por tanto se encuentra en un mismo orbital, y es necesario conocer el valor del número cuántico espín $s = +1/2$ ó $s = -1/2$.

Configuración electrónica

La configuración electrónica determina la ubicación o distribución de los electrones en los orbitales, de acuerdo a los números cuánticos de un determinado átomo y el principio de exclusión de Pauli; entonces, la configuración electrónica fundamental se obtiene llenando los orbitales por orden creciente de energía²⁹. Por ejemplo, los primeros electrones, se ubican en el orbital más bajo $1s^1$, la adición produce usar otro orbital $1s^2$ (principio de exclusión de Pauli), si se incorpora un nuevo electrón se traslada a un nuevo orbital de mayor energía $2s^1$ y así sucesivamente hasta completar el número atómico del elemento; el

²⁷ Los niveles $n = (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7)$ pueden ser denotados con las letras K, L, M, N, O, P, Q , respectivamente.

²⁸ Los subniveles $(0, 1, 2, y 3)$ serán reemplazados por las letras s, p, d, f respectivamente para representar los orbitales.

²⁹ Principio de Aufbau

seguimiento de la distribución de orbitales se encuentra en la siguiente figura 50, observemos en la parte izquierda a) que algunos orbitales aún no completan el nivel y pasa a un orbital de nivel superior, debido a que posee una cantidad de energía menor, por ejemplo: la transición de $3p$ a $4s$ y luego retorna a $3d$. En la parte b) se indica la secuencia.

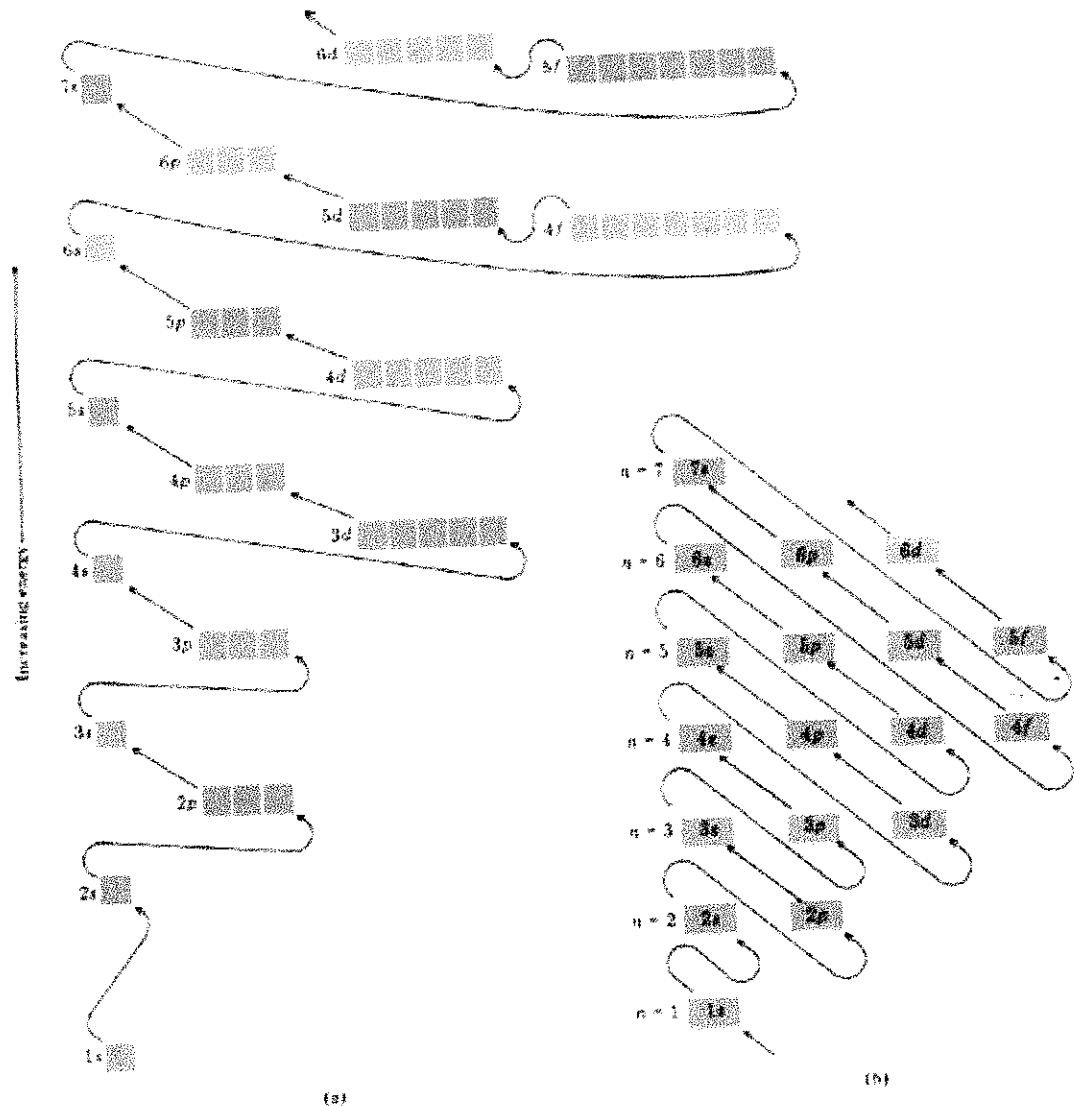


Figura 50. Configuración electrónica de los átomos. a) Energía del orbital y b) secuencia de distribución de orbitales [139].

La configuración electrónica es uno de los primeros avances para determinar la estructura electrónica, ya que cuenta con una descripción simple de los orbitales de los materiales. En seguida, encontramos un ejemplo:

Boro: $1s^2 2s^2 2p^1$

En la siguiente página, encontramos la figura 51 que indica el esquemático de la configuración electrónica correspondiente al boro; si se considera un isótopo, ocurre un cambio de cantidad de neutrones en el núcleo.

Magnesio: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

Asimismo, la figura 52 se encuentra la configuración electrónica correspondiente al magnesio.

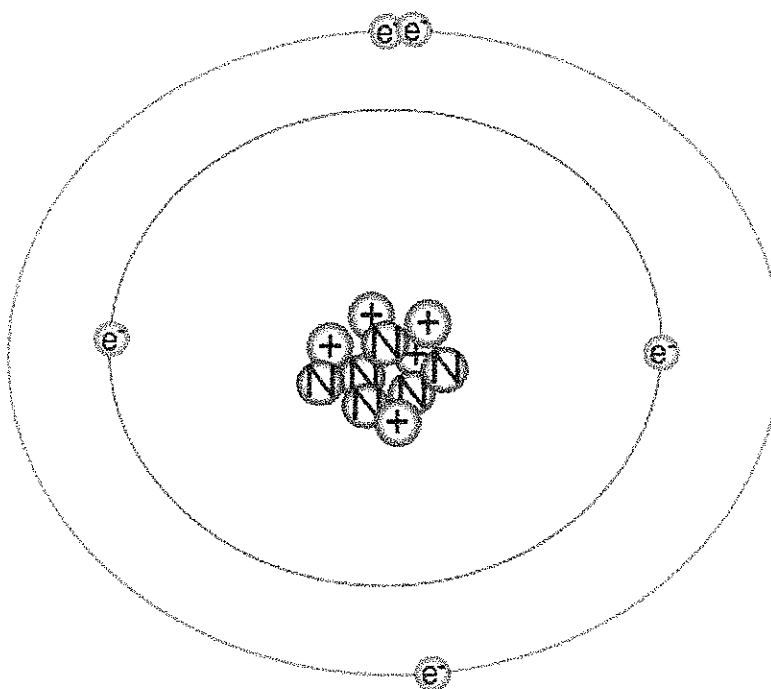


Figura 51. Configuración electrónica del boro [140].

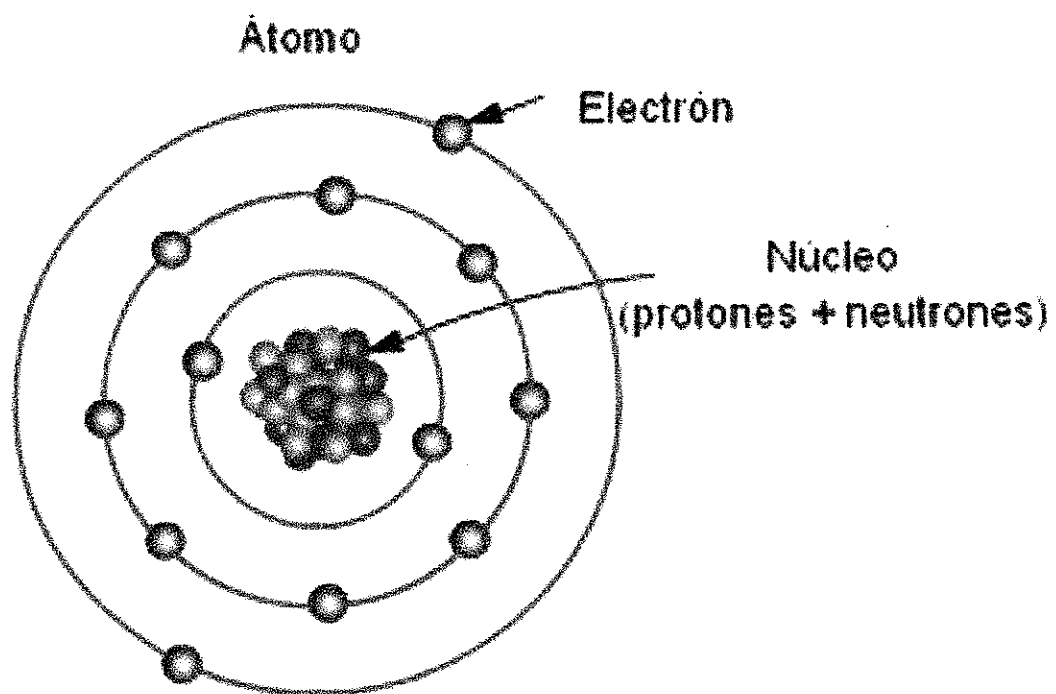


Figura 52. Configuración electrónica del magnesio [140].

ANEXO V

UNIDADES ATÓMICAS

Las unidades atómicas se caracterizan por ser dimensionalmente pequeñas. A continuación la Tabla 12 se encuentra algunas unidades atómicas:

Tabla 12. Resumen de las unidades atómicas.

Cantidad física	Unidades atómicas	CGS	MKS
Carga electrón e	1	$4.8 \times 10^{-10} \text{esu}$	$1.6 \times 10^{-19} \text{Coulomb}$
Masa electrón m_e	1	$9.1 \times 10^{-28} \text{g}$	$9.1 \times 10^{-31} \text{Kg}$
Cte. Planck $\hbar$	1	$1.05 \times 10^{-27} \text{ergs}$	$1.05 \times 10^{-34} \text{Joules}$
Radio de Bohr a_0	$\hbar^2/(m_e e^2) = 1 \text{Bohr}$	$5.3 \times 10^{-9} \text{cm}$	$5.3 \times 10^{-11} \text{m}$
E. potencial $1e$	$e^2/a_0 = 1 \text{Harttre}$	$4.4 \times 10^{-11} \text{ergs}$	$4.4 \times 10^{-18} \text{Joules}$

Fuente: [74].

Las unidades energéticas se pueden representar en varias notaciones. A continuación se encuentra la relación de la energía en *rydeberg* y *Harttre* en electrón-voltios eV :

$$E_{Ryd} = \frac{e^2}{2a_0} = 13.6eV \leftrightarrow E_{Harttre} = \frac{e^2}{a_0} = 6.8eV$$

Unidades de masa: Las masas más importantes a nivel atómico, se incluye la masa del electrón, protón, y neutrón, a continuación se encuentra sus valores.

Masa del electrón: $m_e = 9.1093826(16) \times 10^{-31} \text{Kg}$;

Masa del protón: $m_p = 1.67262171(29) \times 10^{-27} \text{Kg}$

Masa del neutrón: $m_n = 1.67492728(29) \times 10^{-27} \text{Kg}$

Carga del electrón: $e = 1.602117653(14) \times 10^{-19} \text{C}$

Momento angular

Constante de Planck: $h = 6.6260693(11) \times 10^{-34} \text{J.s}$

Constante de Planck reducida: $\hbar = 1.054 \times 10^{-34} \text{J.s}$

Temperatura

Una de las temperaturas más importantes es el Cero absoluto: 0°K , -273.15°C , denotado primeramente por la escala kelvin y centígrados, respectivamente.