

Apéndice A

Resultados

Para poder hacer un mejor análisis de los resultados expuestos en el capítulo 5 se analizaron los archivos *case.scf* con el programa *analyse* y *case.outputt* del programa *TETRA*. Los resultados de los cálculos realizados por el paquete **WIEN2K** se muestran a continuación; se clasificaron de acuerdo a la estructura y el método utilizado para los cálculos.

Las tablas A.1-A.9 se refieren a datos obtenidos por el programa *analyse* y se encuentran en el archivo *case.scf*.

	Energía Total	Energía Fermi	Carga
La	-16995.315121	0.36333	10.064390
Ce	-17730.727423	0.47779	10.148320
Pr	-18485.510085	0.39982	11.615630
Yb	-29151.848961	0.21424	22.700710

Tabla A.1: Resultados obtenidos para elementos con estructura FCC con la aproximación LDA.

	Energía Total	Energía Fermi	Carga
La	-33990.633411	0.43627	9.454898
Ce	-35461.447058	0.48067	10.147059
Pr	-36971.014293	0.39681	11.605810
Nd	-38519.974042	0.37569	12.657151
Gd	-45121.124528	0.32753	16.846149
Tb	-46875.629243	0.32825	17.923218
Dy	-48673.005618	0.32376	18.963138
Ho	-50513.868910	0.32196	19.997432
Er	-52398.845856	0.32701	21.050438
Tm	-54328.573758	0.33118	22.082507
Lu	-58324.583580	0.35303	23.989213

Tabla A.2: Resultados obtenidos para elementos con estructura HCP con la aproximación LDA.

	Energía Total	Energía Fermi	Carga
Eu	-21704.406438	0.19317	15.408948

Tabla A.3: Resultados obtenidos para elementos con estructura BCC con la aproximación LDA.

	Energía Total	Energía Fermi	MMT	Carga	Carga -up	Carga -dn
La	-16995.315110	0.36283	0.00745	5.029930	28.0345831	28.0296658
Ce	-17730.727171	0.48140	0.8708	4.782955	28.4498657	27.7011318
Pr	-18485.547840	0.40402	2.80373	4.550735	30.1090031	27.5501816
Yb	-28151.848977	0.21086	-0.01411	11.350386	34.3454230	34.3547863

Tabla A.4: Resultados obtenidos para elementos con estructura FCC con la aproximación LSDA.

	Energía Total	Energía Fermi	MMT	Carga	Carga -up	Carga -dn
La	-33990.633413	0.43658	0.02502	4.723305	27.7318125	27.7228443
Ce	-35461.449081	0.47837	2.25902	4.632254	28.5301075	27.6169397
Pr	-36971.094868	0.40810	5.91542	4.492451	30.1604217	27.4912021
Nd	-38521.204567	0.57226	7.59333	3.190756	29.5696098	26.1871254
Gd	-45122.163897	0.51018	15.43436	4.102004	34.2879224	27.1020641
Tb	-46876.428473	0.35606	11.88803	5.962262	34.8700611	28.9698795
Dy	-48673.536730	0.35142	9.45346	7.097135	34.8045116	30.0943480
Ho	-50514.156111	0.34049	6.68659	8.270051	34.6812332	31.2669741
Er	-52399.029161	0.34229	5.11535	9.253283	34.7598235	32.2417886
Tm	-54328.608399	0.33142	2.54260	10.439767	34.6669965	33.3954162
Lu	-58324.582882	0.35117	0.77579	11.865412	35.1246081	34.8592991

Tabla A.5: Resultados obtenidos para elementos con estructura HCP con la aproximación LSDA.

	Energía Total	Energía Fermi	MMT	Carga	Carga -up	Carga -dn
Eu	-21704.975907	0.17567	7.25274	4.339914	34.4558995	27.4006166

Tabla A.6: Resultados obtenidos para elementos con estructura BCC con la aproximación LSDA.

	Energía Total	Energía Fermi	MMT	Carga	Carga -up	Carga -dn
La	-16995.307287	0.43773	0.03224	4.713496	27.728028	27.7142906
Ce	-17730.680562	0.45158	1.25300	4.721985	28.864841	27.7241199
Pr	-18485.505378	0.40489	3.18988	4.382370	30.394798	27.3906252
Yb	-28151.819753	0.21027	0.00200	11.381327	34.379679	34.3824508

Tabla A.7: Resultados obtenidos para elementos con estructura FCC con la aproximación LDA+U.

	Energía Total	Energía Fermi	MMT	Carga	Carga -up	Carga -dn
La	-33990.610476	0.44277	0.01549	4.720681	27.726793	27.7214806
Ce	-35461.330176	0.44943	2.42440	4.733735	28.8562362	27.7325838
Pr	-36970.989314	0.41676	5.63824	4.530963	30.116137	27.5327923
Nd	-38520.300347	0.40409	7.33901	4.601045	31.042174	27.6026347
Gd	-45122.211386	0.36719	15.60341	4.602504	35.140036	27.6024398
Tb	-46876.351524	0.36552	13.44263	5.655263	35.151730	28.6547150
Dy	-48673.414550	0.34254	8.92419	7.306322	34.681043	30.2951540
Ho	-50514.267276	0.33212	6.38520	8.449041	34.594459	31.4474627
Er	-52399.088326	0.35894	7.16774	8.750703	35.160108	31.7508036
Tm	-54328.521248	0.34691	3.17091	10.195799	34.811173	33.1899982
Lu	-58324.578993	0.35222	0.80115	11.855449	35.132179	34.8554473

Tabla A.8: Resultados obtenidos para elementos con estructura HCP con la aproximación LDA+U.

	Energía Total	Energía Fermi	MMT	Carga	Carga -up	Carga -dn
Eu	-21704.947248	0.20596	7.33929	4.221942	34.3182294	27.2211584

Tabla A.9: Resultados obtenidos para elementos con estructura BCC con la aproximación LDA+U.

	D O S			Gamma		
	DOS(Fer)	Total	Orb f	Gamma(Fer)	Total	Orb f
La	33.91	25.41	2.95	39.96	29.94	3.47
Ce	40.33	33.60	27.95	47.53	39.60	32.94
Pr	112.29	104.51	96.63	132.33	123.16	113.88
Yb	4.07	2.31	0.85	4.80	2.72	1.00

Tabla A.10: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura FCC con el método LDA

	D O S			Gamma		
	DOS(Fer)	Total	Orb f	Gamma(Fer)	Total	Orb f
La	50.65	31.83	2.26	59.69	37.51	2.67
Ce	137.35	119.58	52.36	161.58	140.92	61.70
Pr	341.90	318.93	147.15	402.91	375.85	173.41
Nd	519.67	504.24	246.25	612.41	594.22	290.20
Gd	685.12	670.03	326.21	807.38	789.60	384.42
Tb	921.79	904.70	441.76	1086.29	1066.15	520.59
Dy	825.43	815.14	400.73	972.73	960.61	472.24
Ho	1542.50	1533.97	761.20	1817.76	1807.72	897.04
Er	1823.69	1825.86	902.34	2149.13	2139.91	1063.36
Tm	983.42	977.10	482.71	1158.91	1151.47	568.85
Lu	54.87	38.94	0.39	64.66	45.89	0.46

Tabla A.11: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura HCP con el método LDA.

	D O S			Gamma		
	DOS(Fer)	Total	Orb f	Gamma(Fer)	Total	Orb f
Eu	1409.91	1381.00	1367.57	1661.51	1627.45	1611.62

Tabla A.12: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura BCC con el método LDA.

	Electrones α (LSDA)					
	D O S (Fermi)			Gamma(Fermi)		
	Total	Orb tot.	Orb f	γ	Orb tot.	Orb f
La	16.78	12.57	1.49	19.77	14.81	1.75
Ce	33.70	29.65	27.07	39.71	34.94	31.91
Pr	12.13	12.82	113.94	151	143.55	134.27
Yb	1.90	1.07	0.39	2.24	1.26	0.46

Tabla A.13: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura FCC -up con el método LSDA.

	Electrones β (LSDA)					
	D O S (Fermi)			Gamma(Fermi)		
	Total	Orb tot.	Orb f	γ	Orb tot.	Orb f
La	17.10	12.82	1.47	20.15	15.11	1.73
Ce	28.8	20.48	12.06	33.94	24.14	14.22
Pr	6.84	4.53	0.6	8.06	5.34	0.7
Yb	1.97	1.12	0.42	2.32	1.32	0.49

Tabla A.14: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura FCC -dn con el método LSDA.

	Electrones α (LSDA)					
	D O S (Fermi)			Gamma(Fermi)		
	Total	Orb tot.	Orb f	γ	Orb tot.	Orb f
La	26.69	16.74	1.19	31.46	19.72	1.4
Ce	90.76	79.98	35.88	106.95	94.25	42.29
Pr	280.88	268.64	127.16	331.01	316.58	
Nd	86.41	69.49	33.24	101.83	81.89	39.17
Gd	9.28	3.79	0.05	10.93	4.47	0.05
Tb	29.82	20.21	0.25	35.14	23.82	0.29
Dy	22.76	15.39	0.20	26.82	18.14	0.24
Ho	15.18	10.29	0.13	17.89	12.12	0.15
Er	21.30	14.43	0.24	25.1	17.01	0.28
Tm	12.05	8.27	0.33	14.2	9.75	0.39
Lu	19.59	13.92	0.18	23.09	16.4	0.21

Tabla A.15: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura HCP -up con el método LSDA.

	Electrones α (LSDA)					
	D O S (Fermi)			Gamma(Fermi)		
	Total	Orb tot.	Orb f	γ	Orb tot.	Orb f
La	24.4	15.42	1.09	28.75	18.17	1.28
Ce	36.88	24.93	5.97	43.47	29.38	7.04
Pr	10.98	6.84	0.37	12.94	8.06	0.43
Nd	1.75	0.4	0.06	2.06	0.47	0.07
Gd	27.46	14.23	3.9	32.36	16.77	4.6
Tb	164.42	157.29	74.05	193.76	185.36	87.27
Dy	448.8	439.16	212.19	528.89	517.53	250.06
Ho	776.70	768.86	380.11	915.30	906.06	447.95
Er	260.95	254.1	120.82	307.52	299.44	142.38
Tm	590.36	586.91	290.73	695.71	691.65	342.61
Lu	23.03	16.47	0.12	27.14	19.41	0.15

Tabla A.16: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura HCP -dn con el método LSDA.

Electrones α (LSDA)						
D O S (Fermi)				Gamma(Fermi)		
	Total	Orb tot.	Orb f	γ	Orb tot.	Orb f
Eu	7.66	5.04	1.91	9.03	5.94	2.25

Tabla A.17: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura BCC -up con el método LSDA.

Electrones β (LSDA)						
D O S (Fermi)				Gamma(Fermi)		
	Total	Orb tot.	Orb f	γ	Orb tot.	Orb f
Eu	11.24	5.95	0.06	13.25	7.01	0.07

Tabla A.18: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura BCC -dn con el método LSDA.

	Electrones α (LDA+U)					
	D O S (Fermi)			γ	Gamma(Fermi)	
	Total	Orb tot.	Orb f		Orb tot.	Orb f
La	12.70	7.62	0.32	14.97	8.98	0.38
Ce	7.34	4.87	0.66	8.64	5.73	0.78
Pr	45.09	42.13	37.63	53.13	49.65	44.34
Yb	0.93	0.40	0.01	1.10	0.47	0.01

Tabla A.19: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura FCC -up con el método LDA+U.

	Electrones β (LDA+U)					
	D O S (Fermi)			γ	Gamma(Fermi)	
	Total	Orb tot.	Orb f		Orb tot.	Orb f
La	13.69	8.22	0.32	16.14	9.68	0.38
Ce	15.70	10.07	0.46	18.50	11.86	0.54
Pr	9.99	5.94	0.15	11.78	7.00	0.18
Yb	1.70	0.75	0.02	2.00	0.88	0.03

Tabla A.20: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura FCC -dn con el método LDA+U.

	Electrones α (LDA+U)					
	D O S (Fermi)			γ	Gamma(Fermi)	
	Total	Orb tot.	Orb f		Orb tot.	Orb f
La	26.1	16.11	0.4	30.76	18.99	0.47
Ce	28.43	19.16	1.16	33.51	22.58	1.37
Pr	162.77	150.56	66.44	191.82	177.43	78.3
Nd	15.58	10.34	0.6	18.36	12.19	0.71
Gd	10.17	6.82	0.08	11.98	8.04	0.10
Tb	7.61	5.38	0.08	8.97	6.34	0.09
Dy	18.00	12.08	0.32	21.22	14.23	0.38
Ho	11.10	7.34	0.20	13.08	8.65	0.24
Er	12.26	8.65	0.12	14.45	10.19	0.14
Tm	24.57	16.94	0.14	28.95	19.96	0.17
Lu	16.48	11.64	0.16	19.42	13.72	0.18

Tabla A.21: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura HCP -up con el método LDA+U.

	Electrones β (LDA+U)					
	D O S (Fermi)			γ	Gamma(Fermi)	
	Total	Orb tot.	Orb f		Orb tot.	Orb f
La	25.47	15.74	0.38	30.02	18.55	0.45
Ce	18.52	12.33	0.5	21.82	14.58	0.59
Pr	15.15	9.3	0.21	17.85	10.96	0.24
Nd	24.92	15.84	0.39	29.36	18.67	0.46
Gd	15.46	9.86	0.14	18.22	11.62	0.17
Tb	13.54	9.31	0.63	15.95	10.98	0.74
Dy	107.80	104.92	50.04	127.03	123.65	58.97
Ho	13.02	9.89	2.21	15.35	11.65	2.61
Er	14.73	10.30	0.14	17.36	12.14	0.16
Tm	165.10	153.66	66.80	194.56	181.08	78.72
Lu	23.48	16.76	0.12	27.67	19.75	0.14

Tabla A.22: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura HCP -dn con el método LDA+U.

Electrones α (LDA+U)						
D O S (Fermi)				Gamma(Fermi)		
	Total	Orb tot.	Orb f	γ	Orb tot.	Orb f
Eu	7.79	3.29	0.16	9.18	3.88	0.19

Tabla A.23: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura BCC -up con el método LDA+U.

Electrones β (LDA+U)						
D O S (Fermi)				Gamma(Fermi)		
	Total	Orb tot.	Orb f	γ	Orb tot.	Orb f
Eu	9.36	3.68	0.02	11.03	4.34	0.03

Tabla A.24: Densidad de estados y γ en el nivel de Fermi para elementos de estructura BCC -dn con el método LDA+U.