

Capítulo 1

Introducción

La teoría de funcionales de densidad (*Density Functional Theory*, DFT) es una propuesta teórica para obtener las propiedades de un sistema en términos de la densidad electrónica. Usando un principio variacional para ello, se obtienen ecuaciones para las funciones de onda orbitales (de una sola partícula) de ese sistema, que en el caso de un sólido se les conoce como ecuaciones de Bloch. Estas ecuaciones son simplemente las soluciones de la ecuación de Schrödinger para los electrones, considerando que cada una debe ser de la forma de onda plana multiplicada por una función periódica. El hamiltoniano utilizado contiene a la energía cinética de las partículas y un potencial que se escribe en la forma de funcional de densidad.

Dentro del estudio de materiales ópticos y magnéticos hay mucho interés en diseñar y probar programas basados en las teorías modernas de estado sólido que permitan realizar estudios teóricos y comparar los resultados con los datos experimentales existentes.

Con el desarrollo de los programas de cómputo actuales es posible hacer estos estudios. En este trabajo se utilizó el programa **WIEN2K** desarrollado en la Universidad Tecnológica de Viena, Austria. Éste calcula ciertas propiedades de sólidos cristalinos aplicando la teoría de funcionales de densidad con funciones base del tipo ondas planas aumentadas con orbitales locales.

El objetivo principal de este trabajo es la obtención teórica de la estructura electrónica de los metales lantánidos y su análisis en relación a sus propiedades electrónicas. Las propiedades de estos metales que se estudian son la energía total y la energía de Fermi, el momento magnético, la carga debida a los electrones α y β , y la densidad de estados total y del orbital f en el nivel de Fermi. Así mismo, se analiza la densidad de estados total y del orbital f en el nivel de Fermi y su relación con la estructura de bandas de energía para ambos casos para cada elemento. Se hace una comparación de las estructuras electrónicas de los elementos de la familia de los metales lantánidos conforme aumenta el número de electrones en la capa f .

Para ello es necesario un entrenamiento en un código moderno de estado sólido, como

lo es el paquete **WIEN2K**, y el conocimiento de las bases de la teoría del estado sólido que lo sustenta. Ésto debido a la diversidad de opciones para las entradas y la selección de opciones iniciales que se incluyen en el programa.

En este documento se describen algunos aspectos importantes de los metales lantánidos y se exponen las teorías de Hartree-Fock y la teoría de funcionales de densidad junto con los diversos métodos para resolver las ecuaciones de Kohn-Sham en los capítulos dos y tres. En el capítulo cuatro se describen los principales algoritmos del paquete utilizados y se muestra un ejemplo de los resultados obtenidos de los distintos programas. Finalmente se detallan los resultados obtenidos de los cálculos de estructura aplicados a los lantánidos en el capítulo cinco.

En este trabajo no se hace un estudio demasiado profundo de las teorías ya desarrolladas, ni se pretende escribir un nuevo código que lleve a cabo los cálculos deseados. Se busca conocer los fundamentos y aplicaciones de un programa de cálculos de estructura *ab initio* de sólidos cristalinos.