

# Capítulo 6

## Conclusiones

El estudio de las propiedades ópticas y magnéticas es ahora no sólo parte de la física y la química experimental ya que con los programas computacionales desarrollados actualmente se puede hacer el estudio de algunas propiedades de moléculas y sólidos. En particular, es posible hacer cálculos *ab initio* de propiedades de metales con el paquete de cómputo **WIEN2K** que antes se obtenían por métodos experimentales o con modelos *ad hoc*.

Dentro de este estudio se destaca el análisis de propiedades intrínsecas de metales tales como la energía total y la carga total. Así mismo es posible hacer un estudio de la densidad de estados y la estructura de bandas de energía de sólidos cristalinos; su importancia radica en la aplicación de los resultados en las teorías modernas de la física y la química.

En este trabajo se compararon las estructuras de los elementos de la familia de los metales lantánidos conforme aumenta el número de electrones en la capa  $f$ . Dichas comparaciones se realizaron a través de la energía total, la energía de Fermi, el momento magnético total, la carga total y la carga debida a los electrones  $\alpha$  y  $\beta$ , y la densidad de estados total y del orbital  $4f$  en el nivel de Fermi.

Se observó el comportamiento de estas propiedades electrónicas de la capa  $f$  característica de los lantánidos. Se comprobó que los electrones en el orbital  $4f$ , tratados como electrones de la zona intersticial en la aproximación de Muffin Tin, se comportan como estados localizados. Ésto debido a que las bandas de energía relacionadas con estos electrones son bandas cuya curvatura es muy pequeña, lo cual hace que la masa efectiva de éstos sea muy grande.

Estos electrones algunas veces son tratados como electrones de valencia y otras como electrones de conducción debido a su localización. En las gráficas de la densidad de estados se observó que éstos son electrones de valencia debido a que su energía se encuentra en un rango menor que la energía de Fermi.

Debido a la falta de datos experimentales a bajas temperaturas fue necesario el cálculo

de funciones termodinámicas definidas por la densidad de estados en el nivel de Fermi para poder realizar alguna comparación entre datos teóricos y los arrojados por el programa **WIEN2K**. La razón de Wilson es un ejemplo de los cálculos realizados. Éste predice que el valor que se obtenga no debe diferir de la unidad ya que si ésto pasa existe algún tipo de interacción. En nuestro caso se obtuvieron valores de 0.9997 para cada elemento de la serie.

Con este estudio general de los lantánidos de manera preliminar, puede ahora dirigirse el esfuerzo a tratar de analizar comportamientos específicos interesantes de estos metales. Entre otros por ejemplo, el explicar por qué bajo presión hidrostática existen cambios de fase estructurales en ellos, dando lugar a cambios en sus propiedades.

Otros fenómenos importantes a estudiar serían la superconductividad que presentan a bajas temperaturas, el efecto Kondo cuando se les agregan impurezas, sus estados ferromagnético y antiferromagnético, etc. Todos ellos de gran actualidad por sus aplicaciones; además, porque se sigue buscando la teoría general capaz de explicarlos a todos (aunque algunos tienen explicaciones particulares). Se concluye que dentro de esa teoría deberán de estar contenidos los conceptos de la teoría de muchos cuerpos, para el manejo correcto de los efectos de correlación, que como aquí se vió, hasta ahora se ha logrado manejar como corrección a los trabajos de Hartree y Fock o de DFT. A pesar de ello los actuales códigos sirven muy bien para estudiar y predecir una gran cantidad de propiedades de los materiales más sencillos; el paquete **WIEN2K** es uno de los más utilizados en la actualidad para el estudio de semiconductores y cristales iónicos, entre otros.

Finalmente, es necesario el desarrollo de una teoría que permita cálculos *ab initio* de propiedades que tome en cuenta la temperatura a la cual se encuentra el sólido. Con ésto se podrían comparar los resultados que se obtengan con los valores experimentales existentes ya que éstos sólo se tienen para temperaturas de 300 K.