

Esfuerzo triaxial ideal de Ti, Zr y Hf con estructura *fcc*: un estudio de primeros principios

A. Bautista Hernández^a, J.H. Camacho García^b, M. Salazar Villanueva^a, E. Chigo Anota^c, A. Macías Cervantes^a

^aFacultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Puebla,

Apartado Postal J-39, Puebla, Pue., 72570, México,

e-mail: alejandro.bautistah@gmail.com

^bInstituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla,

Apartado Postal J-48, Puebla, Pue., 72570, México.

^cFacultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Puebla,

Puebla, Pue., 72570, México.

Recibido el 16 de agosto de 2010; aceptado el 9 de febrero de 2011

A temperatura y presión ambiente el Ti, Zr y Hf cristalizan en la fase hexagonal compacta. Recientemente se ha reportado que estos elementos son elásticamente metaestables [14] en la estructura cúbica centrada en las caras (*fcc*). En este trabajo presentamos el esfuerzo triaxial ideal de los metales Ti, Zr y Hf con estructura *fcc*, obtenido mediante cálculos de primeros principios usando la teoría del funcional de la densidad. Se usó la aproximación de gradiente generalizado y local de la densidad para la energía de intercambio-correlación, además para la interacción electrón-núcleo se emplearon pseudopotenciales. A partir del cálculo de la energía total para cada elemento, se obtuvieron parámetros de red, módulos de compresibilidad, de corte y Young, así como también constantes de elasticidad en ausencia de esfuerzo y como función del esfuerzo aplicado. En el estado de mínima energía, se obtiene buen acuerdo de los parámetros de red y constantes de elasticidad con datos experimentales. Mediante los criterios de Born-Wang estudiamos la resistencia mecánica ideal a compresión de cada elemento. Los valores de los esfuerzos máximos (15, 13.5 y 22.8 GPa para Ti, Zr y Hf, respectivamente) se explican en términos de la densidad de estados y densidad de carga a nivel de Fermi.

Descriptores: Cálculos de primeros principios; resistencia ideal; módulos de elasticidad.

At room temperature and zero pressure Ti, Zr and Hf crystallize in the hexagonal close-packed phase. Recent reports have shown that these elements are elastically metastable [14] in the structure face-centered cubic (*fcc*). We present the ideal triaxial strength of Ti, Zr and Hf metals with *fcc* structure, obtained by first principles calculations using the Density Functional Theory. It was used the Generalized Gradient Approximation and Local Density Approximation for exchange-correlation energy and the electron-nucleus interaction we use pseudopotentials. From the calculation of total energy for each element were obtained lattice parameters, bulk, shear and Young modulus, as well as elastic constants in the absence of stress and as a function of applied stress. In the ground state, we obtain good agreement in lattice parameters and elastic constants with experimental data. From the Born-Wang criteria we studied the ideal mechanical resistance to compression of each element. The maximum values of the stress (15, 13.5 and 22.8 GPa for Ti, Zr and Hf, respectively) are explained in terms of the density of states and charge density at the Fermi level.

Keywords: First principles calculations; ideal strength; elasticity modulus.

PACS: 62.20.Fe; 62.20.Dc

1. Introducción

Los metales del grupo IVB (Ti, Zr y Hf) cristalizan en la estructura hexagonal compacta (*hcp* por sus siglas en inglés) a temperatura y presión ambiente. Cuando se incrementa la temperatura, a presión constante, se transforman en la estructura cúbica centrada en el cuerpo (*bcc*) [1]. Bajo la aplicación de presión hidrostática, a temperatura ambiente, estos elementos siguen la secuencia de transformación de fase *hcp* $\rightarrow$ ω $\rightarrow$ *bcc* [2]. Esta secuencia esta en buen acuerdo con datos experimentales y teóricos [3-7] y en el caso del Ti *bcc* es una predicción teórica. Por otro lado, la búsqueda de nuevos alótropos en elementos ha sido un tema de mucho interés por las nuevas propiedades físicas y químicas que estos alótropos pueden tener. En el caso del Ti existe evidencia indirecta de este elemento en la estructura *fcc*. Por ejemplo, se ha reportado el crecimiento epitaxial de películas de Ti *fcc* sobre monocristales de NaCl [8], Al (011), Ni (001), Al (001)

y SiC (0001) [9-12]. Existen también reportes del crecimiento de Hf *fcc* sobre multicapas de Hf/Fe [13]. Esta evidencia experimental hizo que creciera en interés, desde el punto de vista teórico y experimental, acerca de la existencia de los elementos Ti, Zr y Hf en la estructura *fcc*. Recientemente se ha reportado que estos elementos son metaestables en la estructura *fcc* [14], a partir del estudio de la estabilidad elástica mediante los criterios de Born [15].

El esfuerzo ideal -en un cristal libre de defectos y a $T=0$ K- es el esfuerzo medido en el punto de inflexión de la curva de energía vs. deformación, que corresponde al esfuerzo máximo del diagrama esfuerzo-deformación. Si no aparece alguna inestabilidad (elástica o vibracional) antes de este punto, el esfuerzo máximo corresponderá al esfuerzo ideal. Por lo tanto, el estudio del esfuerzo ideal puede ayudar a identificar aspectos del comportamiento mecánico de los materiales, que dependen de cuestiones básicas como la estructura

cristalina y el enlace químico. A pesar de las aproximaciones realizadas, el valor del esfuerzo ideal se puede acercar a situaciones reales en donde la densidad de defectos es muy baja, tales como estudios de nanoidentación. En situaciones normales, el esfuerzo ideal aporta resultados cualitativos del comportamiento mecánico de los materiales. Mientras que la mayoría de los estudios de esfuerzo ideal han sido realizados casos tales como la tensión uniaxial, de corte y direcciones de deslizamiento, el esfuerzo que influye en la mayor parte de los fenómenos mecánicos es de carácter multiaxial [16]. Por ejemplo, el valor del esfuerzo triaxial a tensión juega un papel muy importante en el estudio de la propagación de grietas debido a esfuerzos triaxiales en la punta de la grieta [16].

En este trabajo estudiamos la resistencia mecánica ideal de los elementos Ti, Zr y Hf con estructura *fcc*, pues de acuerdo a nuestro mejor conocimiento no existe un estudio al respecto. Este artículo está organizado de la siguiente manera: en la Sec. 2 presentamos los detalles computacionales del trabajo, así como también la metodología de cálculo, en la Sec. 3 presentamos nuestros principales resultados y finalmente damos nuestras conclusiones.

2. Métodos de cálculo

Se realizaron cálculos de primeros principios para obtener parámetros de red y constantes de elasticidad de Ti, Zr y Hf en las estructuras *hcp* y *fcc*, usando la teoría del funcional de la densidad (TFD) [17]. Usamos el programa CASTEP [18] el cual utiliza una expansión de ondas planas para la función de onda, usando una energía de corte de 500 eV, para Ti y Zr y 550 eV para Hf. Para la energía de intercambio-correlación usamos la aproximación de gradiente generalizado (GGA) parametrizada por Perdew, Burke y Enzerhof [19] y la aproximación local de la densidad (LDA) en la parametrización de Perdew y Zunger [20]. En la elección del funcional de intercambio-correlación, seguimos el criterio de minimizar el porcentaje de error en las constantes de elasticidad, debido a que los criterios de estabilidad elástica dependen de los valores de dichas constantes. Para la interacción electrón-ion usamos la aproximación de pseudopotenciales construidos en el esquema de Vanderbilt [21]. El muestreo en la zona de Brillouin fue realizado en el esquema de Monkhorst-Pack [22], usando mallas de $16 \times 16 \times 12$ para las estructuras hexagonales y $16 \times 16 \times 16$ para las estructuras cúbicas. Estos valores de energías de corte y mallas permiten que los cambios en la energía total sean menores a 1 meV/átomo, garantizando una buena convergencia. Para mayor simplicidad no se toma en cuenta el efecto espin-órbita debido a que no cambian significativamente los parámetros de red y constantes de elasticidad [23]. Por otro lado, las constantes de elasticidad fueron calculadas por el método de deformaciones finitas [24], dando buen acuerdo con datos experimentales disponibles. Para utilizar este método de cálculo, se realizaron estudios de convergencia como función de la deformación aplicada, malla de puntos *k* y energía de corte, dando errores de 0.3 GPa en promedio, debido a éstos parámetros de cálculo.

Para asegurarnos de que las predicciones en este trabajo son confiables, calculamos primero los parámetros de red y constantes de elasticidad de los elementos en la estructura *hcp*. Los errores en nuestros cálculos son del mismo orden que los reportados habitualmente en la literatura. Por lo tanto, usando la misma metodología calculamos los parámetros de red y constantes de elasticidad para las estructuras cúbicas.

Un cristal cúbico tiene tres constantes de elasticidad independientes: C_{11} , C_{12} y C_{44} . A partir de los valores de las constantes de elasticidad se obtuvieron el módulo de compresibilidad (*B*), módulo de corte (*G*) y el módulo de Young (*E*) en el esquema de Voigt [25]. Para que un cristal con esta simetría sea estable elásticamente se deben de cumplir los tres criterios de Born-Wang [26]:

$$C_{11} + 2C_{12} + \sigma > 0, \quad (1)$$

$$C_{11} - C_{12} - 2\sigma > 0, \quad (2)$$

$$C_{44} - \sigma > 0. \quad (3)$$

La primera condición corresponde a la desaparición del módulo de compresibilidad, la segunda corresponde a una inestabilidad de corte provocada por una reducción en la simetría del cristal, de cúbico a tetragonal u ortorrómbica. De la misma forma, la tercera condición corresponde a inestabilidades de corte provocadas por deformaciones de C_{44} .

3. Resultados y discusión

Como se mencionó anteriormente, utilizamos dos tipos de funcionales con el objetivo de minimizar los errores en el cálculo de las constantes elásticas. En la Tabla I se presentan los resultados de los parámetros de red y constantes elásticas experimentales y teóricas para los elementos Ti, Zr y Hf en la estructura *hcp*. Para el Ti y Zr, los errores de los parámetros de red con respecto a los datos experimentales son menores a 1 % y 3 % para el funcional GGA y LDA, respectivamente. En el caso del Hf los errores máximos son de 1.25 % para el funcional GGA y de 3.2 % para LDA. En un cristal hexagonal hay cinco constantes de elasticidad independientes: C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} y C_{44} . A partir de la comparación de las constantes de elasticidad calculadas y resultados experimentales, se obtienen errores de 7.6 % y 18.4 % en promedio para el funcional GGA y LDA, respectivamente. Por lo tanto, a partir de esta parte, los cálculos presentados serán con el funcional GGA. Por otro lado, los valores de estos errores están de acuerdo con los calculados por metodologías de primeros principios. Esta primera validación de nuestra metodología de cálculo nos garantiza al menos que los resultados que obtengamos con las estructuras *fcc* tendrán errores similares en los parámetros de red y constantes de elasticidad (alrededor 1 % y 7.6 %, respectivamente).

La Tabla II muestra los parámetros de red, constantes de elasticidad, módulos de compresibilidad (*B*), corte (*G*) y de Young (*E*) para las estructuras *fcc* de los elementos Ti, Zr y Hf. Los parámetros de red calculados se comparan con datos

TABLA I. Parámetros de red y constantes elásticas experimentales y teóricas para cada elemento en la estructura *hcp*. Entre paréntesis se muestran los errores del cálculo de las constantes elásticas con respecto a datos experimentales.

Elemento	a (Å)/ c(Å)	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₁₃ (GPa)	C ₃₃ (GPa)	C ₄₄ (GPa)
Ti						
Este trabajo (GGA)	2.94/4.65	166.74 (4.2)	91.07 (1.2)	75.31 (14.1)	188 (3.86)	41.34 (11)
Este trabajo (LDA)	2.86/4.53	182.86 (14.3)	101.37 (12.6)	92.63 (40)	208 (14.9)	34.6 (25.6)
Exp. (Ref. 28 y 29)	2.95/4.67	160	90	66	181	46.5
Otros cálculos (Ref. 30)	-	175	82.6	74.7	196	41.8
Zr						
Este trabajo (GGA)	3.22/5.17	139.18 (3)	68.93 (4.9)	65.64 (0.3)	163.83 (0.6)	25.72 (19.8)
Este trabajo (LDA)	3.14/5.08	145.49 (1.4)	73.26 (1)	80.40 (22.9)	177.11 (7.4)	18.23 (43.1)
Exp. (Ref. 28 y 29)	3.23/5.14	143.5	72.5	65.4	164.9	32.07
Otros cálculos (Ref. 31)	3.24/5.18	141.1	67.6	64.3	166.9	25.8
Otros cálculos (Ref. 32)	-	139.4	71.3	66.3	162.7	25.5
Hf						
Este trabajo (GGA)	3.23/5.10	168.15 (7)	72.96 (5.2)	70.64 (7)	184.04 (6.6)	41.44 (25.6)
Este trabajo (LDA)	3.08/4.92	202.04 (11.6)	81.79 (6.2)	88.94 (34.7)	227.04 (15.2)	41.18 (26)
Exp. (Ref. 28 y 29)	3.19/5.05	181	77	66	197	55.7

TABLA II. Parámetros de red, constantes elásticas, módulos de compresibilidad (B), módulo de corte (G) y módulo de Young (E) experimentales y teóricas para cada elemento en la estructura *fcc*.

Elemento	a (Å)	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	B (GPa)	G (GPa)	E (GPa)
Ti							
Este trabajo	4.11	127.40	96.68	59.33	106.92	67.52	43.96
Otros cálculos (Ref. 14)	4.11	-	-	61	107	-	-
Exp. (Ref. 11)	4.15	-	-	-	-	-	-
Zr							
Este trabajo	4.52	110.84	79.85	48.24	90.18	56.44	43.97
Otros cálculos (Ref. 14)	4.52	-	-	53	91	-	-
Exp.	-	-	-	-	-	-	-
Hf							
Este trabajo	4.53	132.27	84.41	56.46	100.37	65.96	66.50
Otros cálculos (Ref. 14)	4.48	-	-	67	103	-	-
Exp. (Ref. 13)	4.64	-	-	-	-	-	-

experimentales y teóricos de las Refs. 11, 13 y 14. Para Zr no hay datos experimentales disponibles, hasta donde tenemos conocimiento. Los módulos de compresibilidad y corte se comparan con resultados teóricos de la Ref. 14. Los parámetros de red de nuestros resultados coinciden con la Ref. 14 para el Ti y Zr y en el caso del Hf nuestra desviación es mucho menor al 1 %. En los parámetros de red experimentales tenemos errores del 1 % y 2.3 %, para el Ti y Hf, respectivamente. Con respecto a los módulos de compresibilidad y de corte obtenemos un buen acuerdo con los resultados de la Ref. 14, con desviaciones menores al 1 %. Los módulos de Young son iguales para el Ti y Zr (dentro de los límites de los

errores de cálculo) y para el Hf el valor es más grande. Para tener una idea de la elasticidad de estos elementos hicimos el cálculo del módulo de Young del aluminio por esta misma metodología y se obtiene un valor de 63.9 GPa (valor experimental de 69 GPa). De acuerdo a estos valores el Ti y Zr tienen una elasticidad menor y el Hf similar al aluminio.

En la Fig. 1 se muestran los resultados de los criterios de estabilidad elástica (Ecs. (1), (2) y (3)), como función del esfuerzo triaxial a compresión aplicado. Para los tres elementos el primer criterio crece linealmente y en el caso del segundo y tercer criterio disminuyen como función del esfuerzo. A partir de un ajuste de un polinomio de segundo grado obtene-

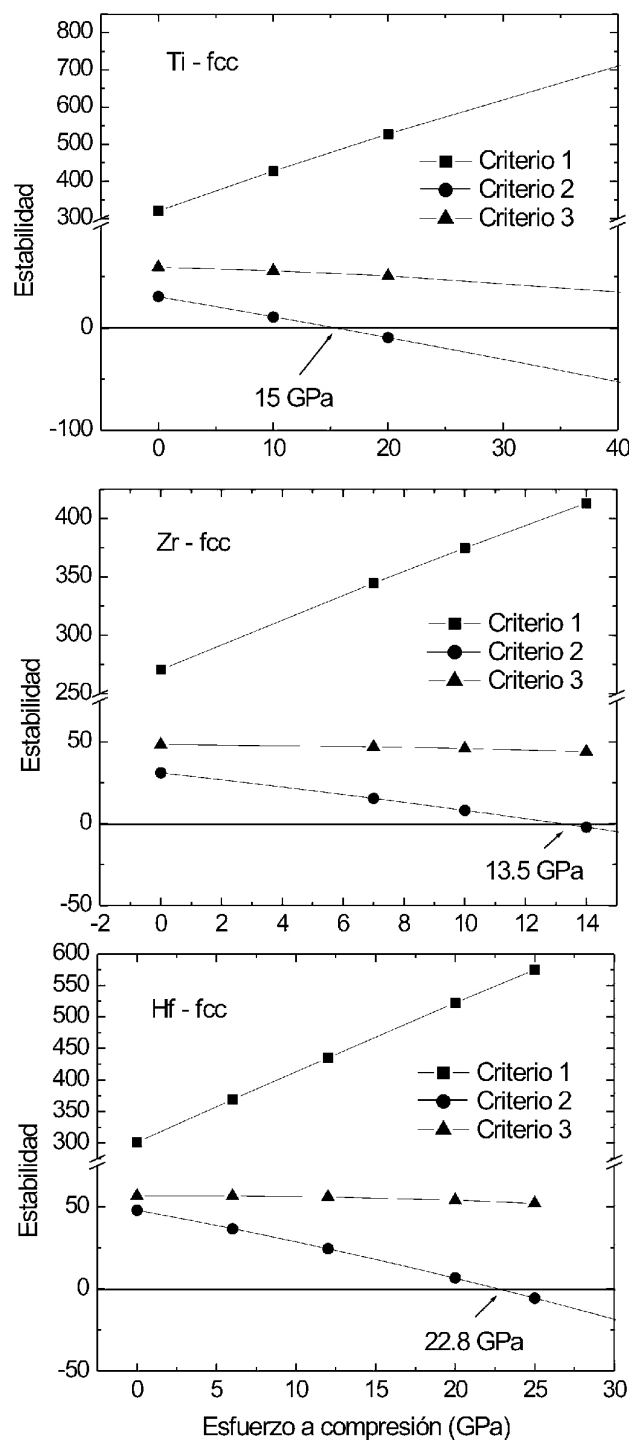


FIGURA 1. Criterios de Born-Wang como función del esfuerzo a compresión aplicado para el Ti, Zr y Hf en la estructura *fcc*.

mos que los tres elementos se vuelven inestables por el segundo criterio de estabilidad a los esfuerzos de 15, 13.5 y 22.8 GPa para el Ti, Zr y Hf, respectivamente. Esto significa que, con la aplicación de esfuerzos hidrostáticos, estos elementos tienden a reducir su simetría, de cúbica a tetragonal u ortorrómbica.

Para explicar los valores de los esfuerzos máximos, hemos calculado la densidad de estados electrónica para el Ti,

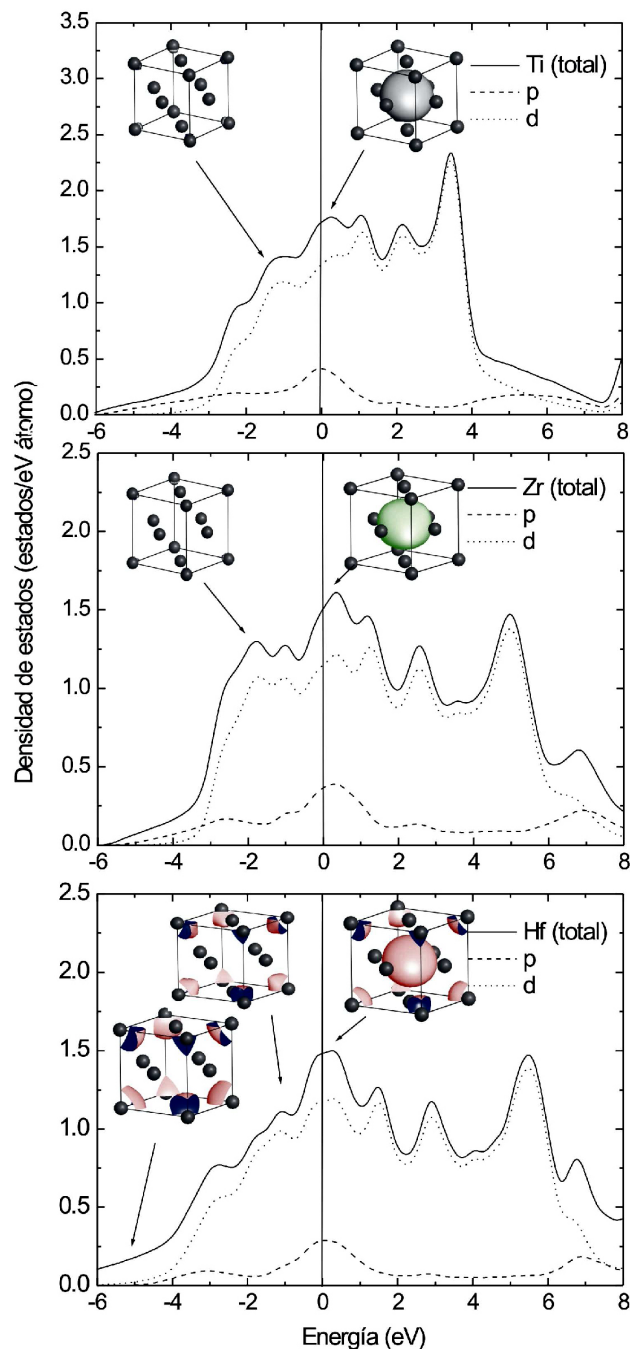


FIGURA 2. Densidad de estados total y parcial para el Ti, Zr y Hf en la estructura *fcc*. Se muestran las densidades de carga asociadas a algunas regiones de la densidad de estados.

Zr y Hf en la estructura *fcc* (Fig. 2). Las características generales de la densidad de estados han sido discutidas previamente [14] y sólo resaltaremos los aspectos relacionados al nivel de Fermi y su densidad electrónica asociada. Es conocido en la literatura que varias propiedades físicas tales como las ópticas y de conducción eléctrica dependen del comportamiento de los estados electrónicos en el nivel de Fermi. Por lo tanto, daremos una explicación cuantitativa a nivel de Fermi de la resistencia mecánica. Para cada elemento la línea continua corresponde a la densidad de estados total y las líneas a

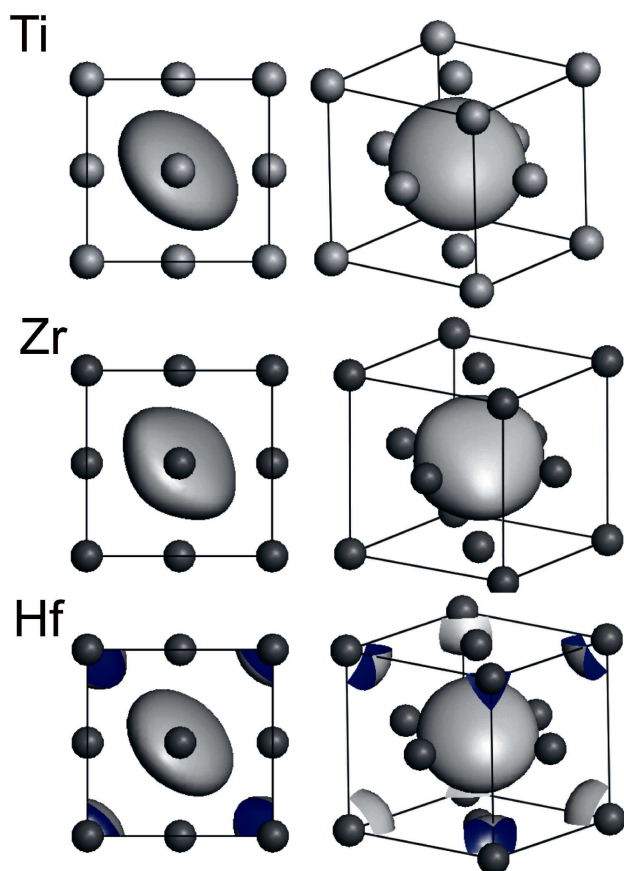


FIGURA 3. Densidad de carga para el Ti, Zr y Hf en la estructura *fcc* a nivel de Fermi. Se muestran las vistas isométricas y la del plano (001).

trazos y de puntos corresponden a los niveles electrónicos *p* y *d*, respectivamente. Para estos tres elementos los niveles electrónicos que contribuyen al nivel de Fermi son los estados *d*, en mayor proporción, y *p*, en menor proporción. Los estados electrónicos *s* se encuentran a energías menores y su contribución es menor. En la parte superior de cada gráfica se muestra la densidad electrónica asociada en diferentes regiones de la densidad de estados. Podemos observar para los tres elementos que los estados electrónicos antes del nivel de Fermi la densidad de carga es mínima y está concentrada en los átomos de los vértices de la celda unitaria. En el caso del Ti y Zr esta carga es apenas perceptible en la Fig. 2. Sin embargo, la densidad de carga a nivel de Fermi muestra una mayor proporción y tiene características particulares para cada elemento. Para tener una mejor vista de esta carga la hemos graficado y se muestra en la Fig. 3. En esta figura se muestran dos vistas de la densidad de carga, una vista isométrica y otra sobre plano (001). Se puede notar que para el Ti y Zr la densidad de carga es de tipo esferoidal y se sitúa entre los átomos que están en las caras de la celda unitaria. Esta carga es ligeramente más grande en el caso del Ti. La densidad de carga para el Hf muestra también estas características y tiene la misma forma que la densidad de carga del Ti. Adicionalmente a esta carga, el Hf también tiene carga en los átomos de los vértices de la celda unitaria. Un comportamiento similar

TABLA III. Aportaciones de los niveles electrónicos *p* y *d* a la densidad de estados total en el estado base y en el esfuerzo máximo para el Ti, Zr y Hf en la estructura *fcc*.

Elemento	Este trabajo	Ref. 14	%
Ti			
Total (0 GPa)	1.71	1.75	100
<i>p</i>	0.41	-	22.3
<i>d</i>	1.32	-	77
Total (15 GPa)	1.50	-	100
<i>p</i>	0.37	-	22
<i>d</i>	1.17	-	78
Zr			
Total (0 GPa)	1.50	1.66	100
<i>p</i>	0.35	-	24
<i>d</i>	1.14	-	76
Total (13.5 GPa)	1.24	-	100
<i>p</i>	0.29	-	23
<i>d</i>	0.96	-	77
Hf			
Total (0 GPa)	1.48	1.49	100
<i>p</i>	0.28	-	21
<i>d</i>	1.17	-	79
Total (22.8 GPa)	1.17	-	100
<i>p</i>	0.19	-	18
<i>d</i>	0.96	-	82

con algunas variaciones en la proporción de la densidad de carga se obtiene para estos tres elementos cuando están sometidos a los esfuerzos máximos. Por lo tanto, podemos explicar los valores de la resistencia mecánica de estos elementos a partir de la densidad de estados y densidad electrónica a nivel de Fermi: el Hf tiene una resistencia mecánica mayor que el Ti y Zr debido al tipo de enlace químico a nivel de Fermi. Esto es debido a que todos los átomos de la celda unitaria del Hf participan en el enlace químico. En el caso del Ti su resistencia mecánica es mayor que la del Zr debido a una mayor proporción en la densidad de carga. Para probar cuantitativamente esta conjetura, a partir de la Fig. 2 (Tabla III) se han calculado la aportación de cada uno de estos niveles electrónicos (*p* y *d*) a la densidad de estados total, normalizando al 100 % la densidad de estados total en el nivel de Fermi. Cabe señalar que tenemos un buen acuerdo con la Ref. 14 con respecto a los valores de los estados a nivel de Fermi para los tres elementos. En esta tabla se muestran las aportaciones de los niveles *p* y *d* en ausencia de esfuerzo (0 GPa) y al esfuerzo máximo. Para los tres elementos tenemos una transferencia de carga principalmente de los niveles *p* → *d*. Sin embargo, la mayor proporción de esta transferencia la tenemos en el Hf (82 %), después en el Ti (78 %) y finalmente en el Zr (77 %). Este comportamiento fue veri-

ficado utilizando pseudopotenciales que conservan la norma con el código Abinit [27], obteniéndose el mismo resultado. Estos valores se muestran muy cercanos entre sí debido a que sólo se está analizando la densidad de carga al nivel de Fermi. Por lo tanto, la mayor proporción de transferencia de carga se obtiene para el Hf, después para el Ti y finalmente para el Zr. Estos valores de transferencia nos indican una mayor proporción de carga en Hf, lo que origina un enlace mas fuerte que en el Ti y Zr.

4. Conclusiones

Se presentó un estudio de primeros principios de la resistencia mecánica ideal de los metales Ti, Zr y Hf con estructura fcc. Para estas fases metaestables se obtuvieron los parámetros de red y constantes de elasticidad en ausencia de esfuerzo aplicado, obteniéndose un buen acuerdo con resultados disponibles en la literatura. Reportamos los esfuerzos máximos

a compresión para el Ti (15 GPa), Zr (13.5 GPa) y Hf (22.8). A partir del criterio de estabilidad no satisfecho, el esfuerzo a compresión aplicado tiende a reducir la simetría del cristal, de cúbica a tetragonal u ortorrómbica. Los esfuerzos máximos son explicados a partir de la densidad de estados y densidad de carga a nivel de Fermi, debido a una mayor transferencia de carga en el Hf. Esto origina un enlace mas fuerte que en el caso del Ti y Zr. Finalmente, a partir de los módulos de Young calculados se espera que el Hf tenga una región de elasticidad mas grande que el aluminio y menor para los metales Ti y Zr.

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por la VIEP-BUAP (Proyecto No. BAH-ING11-I), FI-BUAP y Conacyt. Agradecemos el tiempo de cómputo al Centro Nacional de Supercómputo (CNS, México).

1. S.K. Sikka, Y.K. Vohra, and R. Chidambaram, *Prog. Mater. Sci.* **27** (1982) 245.
2. R. Ahuja, J.M. Wills, B. Johansson, and O. Eriksson, *Phys. Rev. B* **48** (1993) 16269.
3. H. Xia, S.J. Duclos, A.L. Ruoff, and Y.K. Vohra, *Phys. Rev. Lett.* **64** (1990) 204.
4. H. Xia, G. Parthasarathy, H. Lou, Y.K. Vohra, and A.L. Ruoff, *Phys. Rev. B* **42** (1990) 6736.
5. I. Bakonyi, H. Ebert, and A.I. Liechtenstein, *Phys. Rev. B* **48** (1993) 7841.
6. G. Jomard, L. Magaud, and A. Pasturel, *Philos. Mag. B* **77** (1998) 67.
7. P.S. Balog and R.A. Secco, *J. Phys.: Condens. Matter* **11** (1999) 1273.
8. F.E. Wawner, Jr. and K.R. Lawless, *J. Vac. Sci. Technol.* **6** (1969) 588.
9. A.A. Saleh, V. Shutthanandan, and R.J. Smith, *J. Vac. Sci. Technol. A* **11** (1993) 1982.
10. A.F. Jankowski and M.A. Wall, *J. Mater. Res.* **9** (1994) 31.
11. S.K. Kim, F. Jona, and P.M. Marcus, *J. Phys.: Condens. Matter* **8** (1996) 25.
12. Y. Sugawara, N. Shibata, S. Hara, and Y. Ikuhara, *J. Mater. Res.* **15** (2000) 2121.
13. Z.S. Zhang and F. Pan, *Thin Solid Films* **375** (2000) 192.
14. A. Aguayo, G. Murrieta, and R. de Coss, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 092106.
15. J. Wang, S. Yip, S.R. Phillpot, and D. Wolf, *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 4182.
16. D.M. Clatterbuck, D.C. Chrzan, and J.W. Morris Jr., *Scripta Materialia* **49** (2003) 1007.
17. P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136** (1964) B864; W. Kohn and L. Sham, *Phys. Rev.* **140** (1965) A1133.
18. S.J. Clark et al., *Zeitschrift fuer Kristallographie* **220** (2005) 567.
19. J.P. Perdew, K. Burke, and M. Enzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.
20. J.P. Perdew, A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23** (1981) 5048.
21. D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **41** (1990) 7892.
22. H.J. Monkhorst and J.D. Pack, *Phys. Rev. B* **16** (1977) 1748.
23. Los errores en los parámetros de red y constantes de elasticidad calculadas con el efecto espín-órbita son menores al 1 %.
24. S.Q. Wang and H.Q. Ye, *Phys. Stat. Sol. (b)* **240** (2003) 45.
25. W. Voigt, *Annals of Physics (Leipzig)* **33** (1889) 573; R.F.S. Hearmon, *An introduction to applied anisotropic elasticity* (Oxford: University Press, 1961).
26. J. Wang, J. Li, S. Yip, S. Phillpot, and D. Wolf, *Phys. Rev. B* **52** (1995) 12627.
27. X. Gonze et al., *Z. Kristallogr* **220** (2005) 558.
28. C.S. Barrett, and T.B. Massalski, *Structure of Metals Tercera Edición* (Oxford: Pergamon, 1980).
29. M. Levi, H.E. Bass, and R.R. Stern, "Handbook of elastic properties of solids, liquids, and gases" Vol. II, (Academic Press, 2001).
30. C.-E. Hu et al., *J. of Appl. Phys.* **107** (2010) 093509.
31. Y.-J. Hao, L. Zhang, X.-R. Chen, and Y.-H. Li, *J. Phys.: Condens. Matter* **20** (2008) 235230.
32. H. Ikehata et al., *Phys. Rev. B* **70** (2004) 174113.