baratz | ODA

Estudio desde primeros principios de propiedades electrónicas y estructurales de sólidos [

López Solano, Juan Javier

Universidad de La Laguna,
D.L. 2009

Recurso Electrónico

En esta tesis se han estudiado los efectos de la presión sobre sólidos cristalinos, empleando métodos teóricos ab initio fundados en la Teoría del Funcional de la Densidad. Todos los cálculos se han realizado a temperatura nula, utilizando el método de pseudopotenciales y bases de ondas planas. La primera parte de este trabajo trata sobre el compuesto InAs. Se han encontrado nuevas fases de muy alta presión más estables que la tipo CsCI habitual, que pueden estar relacionadas con las fases desordenadas observadas experimentalmente en compuestos similares. En la segunda parte, se presentan resultados de los compuestos tipo scheelita YLiF4, CaWO4, SrWO4, BaWO4 y PbWO4. Junto con resultados experimentales, este estudio ha permitido establecer una secuencia coherente de transiciones de fase en estos y otros compuestos relacionados

https://rebiunoda.pro.baratznet.cloud:28443/OpacDiscovery/public/catalog/detail/b2FpOmNlbGVicmF0aW9uOmVzLmJhcmF0ei5yZW4vNzgxNDk2MQ

Título: Estudio desde primeros principios de propiedades electrónicas y estructurales de sólidos Archivo de ordenador] Juan Javier López Solano ; directores, Alfonso Muñoz González, Andrés Mujica Fernaud

Editorial: La Laguna Universidad de La Laguna D.L. 2009

Descripción física: 1 disco óptico electrónico (CD-ROM) 12 cm + 1 folleto

Mención de serie: Soportes Audiovisuales e Informático. Serie Tesis Doctorales. Ciencias y tecnologías v. 3

Tesis: Tesis publicada. Universidad de La Laguna, 2006. Curso 2006/07. Facultad de Física. Departamento de Física Fundamental II

Tipo recurso electrónico: CD-ROM

Copyright/Depósito Legal: TF 196-2009

ISBN: 9788477567370

Materia Entidad: Universidad de La Laguna- Tesis y disertaciones académicas

Materia: Semiconductores- Tesis y disertaciones académicas Estructura cristalina (Sólidos)- Tesis y disertaciones académicas

Autores: Muñoz González, Alfonso, dir Mujica Fernaud, Andrés, dir

Entidades: Universidad de La Laguna. Departamento de Física Fundamental II Universidad de La Laguna ed

---

Baratz Innovación Documental

- Gran Vía, 59 28013 Madrid
- (+34) 91 456 03 60
- informa@baratz.es