

Universidad de La Habana

Facultad de Física



**Estudio computacional de la estructura de bandas de los
compuestos Cd_3TeO_6 y CdTeO_3 .**

Tesis presentada en opción al Título de Licenciado en Física.

Autor

Ernesto Palmero Soler.

Tutor

Dr. Eduardo Menéndez Proupin, IMRE.

La Habana, Cuba
Junio 2002

Indice

Introducción	i
1 Fundamentos Teóricos	1
1.1 Teoría del Funcional de la Densidad	1
1.1.1 Funcionales	5
1.2 Pseudopotenciales	6
1.3 Estructura de Bandas	10
1.4 Código SIESTA	11
2 Resultados	13
2.1 Compuesto Ortotelurato de Cadmio(VI).	13
2.1.1 Estructura cristalina	13
2.1.2 Análisis del PAO.BasisSize	17
2.1.3 Análisis del PAO.EnergyShift	22
2.1.4 Análisis del MeshCutoff	30
2.1.5 Bandas	30
2.2 Compuesto Oxotelurato de Cadmio(IV)	32
2.2.1 Estructura cristalina	32
Conclusiones	41
A Función de distribución radial	43
B Entrada del código SIESTA para el compuesto Cd₃TeO₆	47