

Espectro Auger y de emisión en aleaciones metálicas de aluminio y magnesio

ALVARO LUIS MORALES

Departamento de Física, Facultad de Ciencias

Universidad de Antioquia

Apartado Aéreo 1226, Medellín, Colombia

Recibido el 17 de febrero de 1993; aceptado el 27 de julio de 1993

RESUMEN. Se presentan cálculos de la densidad de estados en aleaciones metálicas de aluminio (Al) y magnesio (Mg) usando los métodos LMTO y de aglomerados repetidos. Por primera vez, partiendo de primeros principios, se obtienen resultados teóricos para la densidad de estados de aleaciones diluidas de Al y Mg: con esta densidad se calculan los espectros Auger KLV y de emisión, dentro de la aproximación de una partícula, los que reproducen las características más sobresalientes de las medidas experimentales según las cuales: a) se presenta un pico prominente en la densidad de estados de carácter S , que concuerda con el espectro de emisión experimental, en la aleación diluida compuesta por Mg cristalino con impurezas de Al; b) este pico característico no aparece en el espectro Auger KLV, de la aleación diluida compuesta por Al cristalino con impurezas de Mg. Se encuentra además, que la densidad de estados para Mg, con un átomo de Mg ionizado, es muy similar a la densidad de estados de Mg con una impureza de Al. Este resultado concuerda con la conocida aproximación de iones equivalentes, lo que demuestra la bondad del método utilizado en este estudio. Los resultados teóricos para la densidad de estados reproducen las características principales de las medidas experimentales y reafirman la conveniencia del método utilizado en este trabajo para el estudio de estos sistemas.

ABSTRACT. Results are presented for the density of states (DOS) of alloys between Mg and Al (Mg-Al) using the linear muffin-tin-orbital (LMTO) repeated cluster method. For the first time are obtained, from first principles calculations, the DOS of dilute Mg-Al alloys and from them the one-particle KLV Auger and emission spectra, which show the main features of the experimental measurements. The experimental spectral profiles show the following features: a) there is a peak, at the bottom of the conduction band, in the S partial density of states (S PDOS) which agrees with the measured emission spectrum from a dilute Mg-Al alloy with low Al content; b) no peak is present, at the bottom of the band, in the S PDOS according to the KLV Auger spectrum from a dilute Mg-Al alloy with low Mg content. Furthermore calculations are presented which confirm the well known equivalent-core approximation, *i.e.* the DOS of a core-ionized Mg atom in a Mg host is quite similar to that of an Al impurity in a Mg host, this fact gives confidence in the validity of this approach.

PACS: 71.10.+x; 71.20.-b; 71.55.-i

1. INTRODUCCIÓN

El interés por el estudio de aleaciones metálicas se debe a sus aplicaciones tecnológicas y a los problemas teóricos que plantea el estudio de sus propiedades, en especial cuando se utilizan métodos de primeros principios para los cuales se han desarrollado técnicas

computacionales [1-3]. En particular, el estudio de la estructura electrónica de aleaciones diluidas, reflejada en la densidad de estados, permite dilucidar el mecanismo de formación de las aleaciones observando los cambios ocurridos en la densidad de estados (DDE) de carácter S o P .

El objetivo de este trabajo es obtener, con métodos de primeros principios, la densidad de estados de las aleaciones diluidas de Al y Mg y de su relación con los espectros Auger KLV y de emisión, establecer si las características notables que aparecen en los espectros experimentales, y que difieren de las que provienen de la estructura de bandas, son consecuencia de la estructura de la DDE.

Von Barth y Grossmann [4] demostraron, para sodio cristalino, que el espectro Auger KLV proporciona información acerca de la DDE alrededor de una impureza de sodio ionizada (ion de sodio que contiene un hueco en un nivel iónico), la cual presenta una estructura con dos picos situados cerca al fondo de la banda de conducción y al nivel de Fermi, respectivamente, y donde el primero de ellos no es reconciliable con ningún rasgo característico de la estructura de bandas del sistema neutro.

También se demuestra, por ejemplo en Parratt [5], que debido a las reglas de selección dipolares, el espectro de emisión K refleja la DDE de carácter P del átomo en su estado fundamental y el espectro de emisión L la DDE de carácter S y D del átomo en su estado fundamental (en Al y Mg la DDE de carácter D es pequeña y en general se desprecia).

Para metales simples el espectro de emisión es pobre en estructura, no presenta picos protuberantes, excepto en la región cercana al nivel de Fermi, donde se presenta un pico proveniente de la DDE tipo P , incrementado por el fenómeno de creación de pares electrón-hueco durante la transición, al desaparecer repentinamente el potencial coulombiano producido por el hueco. Neddermeyer [6] encontró experimentalmente que la aleación de Mg con bajo contenido de Al presenta una estructura de doble pico en su espectro de emisión L23 proveniente de Al. El pico a bajas energías es debido a la DDE de carácter S y el otro, cercano al nivel de Fermi, se debe en parte a la DDE tipo P y a la creación de pares electrón-hueco durante la transición (fenómeno de muchos cuerpos no incluido en este estudio ya que está por fuera de la aproximación de una partícula).

Para la otra aleación de interés, Al con bajo contenido de Mg, Hannah *et al.* [7] han obtenido experimentalmente un espectro Auger KLV proveniente del Mg pobre en estructura, que no muestra un pico sobresaliente a bajas energías en contraste con el que se presenta en metales simples como el sodio [4]. En este caso no ocurre el fenómeno de creación de pares electrón-hueco, ya que el hueco existe tanto en el estado inicial como en el estado final, o sea, no desaparece durante la transición. Los resultados teóricos para la DDE, en la aproximación de una partícula, confirman este comportamiento.

Para calcular la DDE de sodio con una impureza ionizada, Von Barth y Grossmann [4] propusieron el método de aglomerados repetidos (Sec. 3), el cual utilizaron Almladh y Morales [8-10] para metales simples y semiconductores. En este trabajo se utilizó dicho método para obtener las funciones de onda de aleaciones metálicas de Al y Mg en el límite de disolución infinita, lo cual significa considerar una sola impureza inmersa en un medio cristalino.

A continuación, en la Sec. 2, se describe la teoría, el método en la Sec. 3, los resultados en la Sec. 4 y finalmente las conclusiones.

2. TEORÍA

La teoría para procesos de emisión y Auger KLV, en la aproximación de una partícula, está bien establecida en la literatura [4,8,9]. En ambos casos se parte de la regla de oro de Fermi, la cual permite calcular la intensidad $I(E)$ de electrones emitidos o la intensidad de radiación emitida con una energía E . Dicha intensidad depende de la probabilidad de transición entre el estado inicial $|i\rangle$ y el estado final $|f\rangle$ del sistema, a los cuales corresponden energías E_i y E_f , respectivamente, y está dada por la expresión

$$I(E) = \sum_f |\langle f|T|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i), \tag{1}$$

donde T es el operador que representa la interacción responsable de la transición y δ es la función delta de Dirac.

En el espectro Auger KLV, un electrón de la capa L atómica decae a la capa K atómica y la energía de la transición es transferida a un electrón de la banda de conducción, el cual sale del sólido. El estado inicial del sistema se describe con una función de onda para los N electrones de conducción y un hueco en la capa K y el estado final por una función de onda para $(N - 1)$ electrones en la banda de conducción, un hueco en la capa L y un electrón que emerge del sólido. El operador de la transición es el potencial coulombiano producido por el hueco en la capa K , cuya interacción con los electrones de la banda de conducción es la causa de la transición Auger. El efecto espín-órbita desdobra el nivel L en dos subniveles llamados $L1$ y $L23$; por lo tanto, existen dos espectros, el $KL1V$ y el $KL23V$, y ambos se han medido experimentalmente. El espectro Auger KLV teórico $I_{KLV}(E)$, en la aproximación de una partícula, es una suma ponderada de la densidad de estados de carácter S (DDE_S) y de la densidad de estados de carácter P (DDE_P). La proporción de cada una (A_j, B_j) depende de los elementos matriciales de la transición y de las reglas de selección:

$$I_{KLjV}(E) = A_j DDE_S + B_j DDE_P \quad (Lj = L1, L23). \tag{2}$$

En el espectro de emisión un electrón de la banda de conducción realiza una transición a un hueco en la capa K o L ($L1$ o $L23$) atómica. El estado inicial del sistema se describe con una función de onda para N electrones y un hueco en la capa $L(K)$ y el estado final con una función de onda para $(N - 1)$ electrones en la banda de conducción, la capa $L(K)$ en su estado fundamental y un fotón que sale del sólido. El operador de la transición es el vector de posición (o el momento) que describe el acoplamiento del sistema al campo de fotones. Debido a las reglas de selección para transiciones dipolares, el espectro de emisión L , $I_{EL}(E)$, en la aproximación de una partícula, es el producto de dos funciones: la densidad de estados de carácter S y los elementos matriciales de la transición. El espectro de emisión K , $I_{EK}(E)$, es el producto de la densidad de estados de carácter P y los elementos matriciales de la transición $M_i(E)$:

$$I_{Ej}(E) = M_i(E) DDE_i(E) \quad (j = L, K, \quad i = S, P). \tag{3}$$

La teoría muestra una relación estrecha entre los espectros y la densidad parcial de estados (DDE_S y DDE_P). Esta última se obtiene una vez que se ha logrado la solución autoconsistente de la ecuación de Schrödinger, usando la expresión

$$DDE_l(E) = \sum_{k,m} |B_L|^2 \delta(E - E_k) \quad (l = S, P), \quad (4)$$

donde L representa los números cuánticos (l, m) del momento angular, B_L son los coeficientes de expansión en el LMTO (véase la próxima sección) y E_k los autovalores de la energía.

Para los cálculos de la intensidad espectral $I(E)$ es necesario incluir en la Ec. (1) la regla semiempírica del estado final, desarrollada por Von Barth y Grossmann [4], la cual afirma que los espectros experimentales describen las propiedades espectrales del estado final del sistema. Esto implica usar funciones de onda que describen el estado final del sistema en la evaluación de los elementos matriciales de la transición. En el caso del espectro de emisión el estado final es el estado fundamental del sólido, mientras que, para el caso del espectro Auger KLV, el estado final es un estado cuasi-fundamental caracterizado por la presencia en el sistema de una impureza ionizada.

El cálculo de las funciones de onda para las aleaciones diluidas de Al y Mg conduce a enfrentar el problema de una impureza, el cual es difícil de resolver debido al rompimiento de la simetría translacional, lo que conlleva a incluir todas las partículas del sistema en la ecuación de Schrödinger. El método que se utilizó para solucionar dicho problema será descrito en la próxima sección.

3. EL MÉTODO DE AGLOMERADOS REPETIDOS

Se analizan dos casos para las aleaciones de los metales simples Al y Mg. La primera es una aleación formada por un cristal de Al con estructura FCC, uno de cuyos átomos es reemplazado por uno de Mg, se denota como Al-Mg. La segunda aleación se construye con base en un cristal de Mg con estructura HCP reemplazando uno de sus átomos por otro de Al, la cual se denota como Mg-Al. En ambos casos se tiene el problema de una impureza, inmersa en un medio cristalino, lo que requiere un método apropiado para hallar los autovalores de la energía y las funciones de onda pertinentes y así obtener la densidad de estados, el espectro de emisión y Auger KLV.

Un método adecuado es el de aglomerados repetidos, propuesto por Von Barth y Grossmann [4], en el cual un aglomerado está formado por una celda unitaria que contiene un número determinado de átomos, donde uno de ellos es la impureza y los demás se encuentran en el estado fundamental. Esta celda se repite en todas las direcciones para restaurar la simetría translacional y de esta manera se puede hacer uso de cualquier método de cálculo de estructura de bandas para hallar las funciones de onda requeridas.

Una desventaja del método es la interacción entre las impurezas pertenecientes a diferentes celdas unitarias, por esta razón, el aglomerado debe ser lo suficientemente grande para que las impurezas queden lo más alejadas entre sí y su interacción sea despreciable. Por otra parte, sólo interesan las propiedades locales del aglomerado, esto es, cerca de la

impureza, ya que en estos sistemas metálicos, cuyos electrones se comportan como libres, la longitud de apantallamiento de la impureza es muy corta, del orden de la distancia entre primeros vecinos.

Para calcular la estructura de bandas se usó el método llamado combinación lineal de orbitales de "muffin-tin" (LMTO) [11] en la aproximación de la esfera atómica, en la cual la celda de Wigner-Seitz o poliedro atómico se reemplaza por una esfera con el mismo volumen. La ecuación de Schrödinger se resuelve, dentro de este volumen, suponiendo que el potencial es esféricamente simétrico y las funciones de onda que se obtienen se acoplan a ondas esféricas libres en la frontera de la esfera atómica. Los orbitales así construidos se conocen como orbitales de "muffin-tin" (molde para hornear panecillos).

En la celda situada en el origen, $\mathbf{R} = 0$, los orbitales se expresan de la siguiente forma:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_L i^l B_L Y_L \phi(r), \quad (5)$$

donde L representa los números cuánticos del momento angular (l, m), Y_L son los armónicos esféricos y $\phi(r)$ las soluciones radiales en la esfera atómica.

La aproximación más importante usada en el método LMTO es la aproximación local a la teoría de funcionales de densidad [12], donde se toma el potencial de intercambio-correlación como el de un gas de electrones homogéneo. De la práctica con el LMTO, se ha comprobado que este camino es adecuado para el cálculo de energías totales, densidades de carga, densidades de estados y produce resultados comparables con cualquier otro método para el cálculo de estructura de bandas [13].

Para ambos sistemas, **Al-Mg** y **Mg-Al**, el tamaño de la celda unitaria escogida es dos veces el tamaño de la celda convencional, en ese volumen se encuentran 16 átomos, uno de los cuales es la impureza. El tamaño de la celda se escoge mediante un compromiso entre minimizar las interacciones entre impurezas y tener un problema manejable desde el punto de vista computacional.

Las funciones de onda autoconsistentes fueron obtenidas en un conjunto de puntos K , uniformemente espaciados en el espacio recíproco, pertenecientes a la zona irreducible de Brillouin de cada cristal. Se tomaron 55 puntos para **Al-Mg** y 40 puntos para **Mg-Al**. La autoconsistencia se logró después de aproximadamente 15 iteraciones usando el criterio de que la diferencia entre el valor cuadrático medio del potencial de salida y el de entrada fuera del orden de 0.001 Ryd, con lo cual se obtienen funciones de onda de muy buena exactitud como se corroboró en la Ref. [8].

4. RESULTADOS

A. Densidad de estados

La Fig. 1 muestra la densidad parcial de estados para la aleación de **Mg-Al**, alrededor de la impureza de Al que se encuentra en el estado fundamental. La DDE_S (línea continua) presenta un pico a energías bajas cerca del fondo de la banda de conducción, que no es atribuible a la estructura de bandas y la DDE_P (línea de punto-rayado) presenta un pico

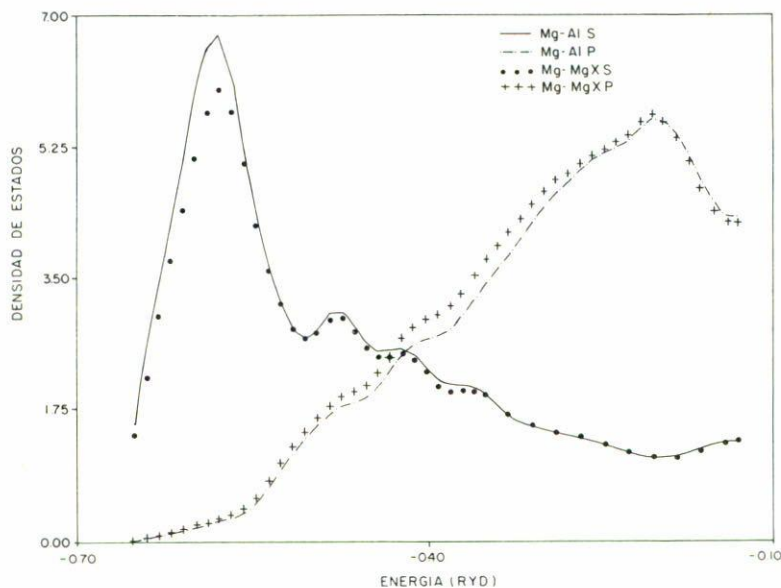


FIGURA 1. Densidad parcial de estados, de momento angular S y P , para Mg-Al (línea continua y línea raya-punto) y para Mg-Mg(X) (línea de puntos y línea de +).

cerca al nivel de Fermi (extremo derecho de las curvas), el cual proviene de la estructura de bandas (el fondo de la banda de conducción corresponde al extremo izquierdo de las curvas).

El análisis de estas curvas se concentrará en la forma de las mismas y no en la magnitud, ya que experimentalmente no es posible medir las intensidades absolutas de los espectros y, por esta razón, no se puede predecir la magnitud de la DDE.

Las formas de la DDE_P para la aleación y para Mg puro son muy similares, lo que no ocurre para la DDE_S que, en la aleación, presenta un pico protuberante cerca del fondo de la banda de conducción, llegando a alcanzar valores superiores a la DDE_P . Este pico es debido a la presencia de la impureza de Al neutra. De acuerdo con la teoría, la DDE_S se relaciona con el espectro de emisión L23, por lo que se espera observar el pico prominente a bajas energías.

En la Fig. 1 se incluye, para comparación con la aleación, la DDE para Mg HCP en el cual se ha reemplazado uno de sus átomos por otro de Mg con un hueco en la capa atómica $2P$ [Mg-Mg(X)]. Los puntos corresponden a la DDE_S y los signos (+) a la DDE_P . De acuerdo a la aproximación ($Z + 1$) o aproximación de iones equivalentes [1,14], un átomo con un hueco se comporta como el átomo siguiente en la tabla periódica, por lo tanto, se espera que Mg(X) se comporte como Al; ambos sistemas deben producir DDE muy similares. Se observa un acuerdo muy razonable, en la forma y la magnitud, entre ambas densidades de estado lo cual da confianza en los resultados producidos por el método para las aleaciones estudiadas.

La Fig. 2 presenta las curvas para la DDE_S (línea punto-rama) y DDE_P (línea de puntos) correspondientes a la aleación de Al-Mg, con la impureza de Mg en el estado fundamental, las cuales se relacionan con el espectro de emisión L23 y K , respectivamente. En este

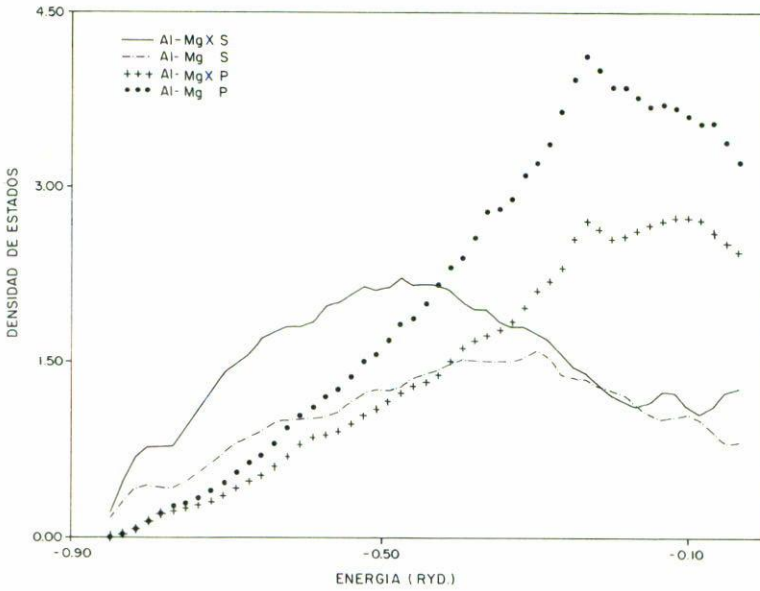


FIGURA 2. Densidad parcial de estados, de momento angular S y P , para Al-Mg (línea raya-punto y línea de $+$) y para $\text{Al-Mg}(X)$ (línea continua y línea de puntos).

caso no existe un pico prominente en el DDE_S y se espera que el espectro de emisión L23 tenga una forma similar a dicha densidad. Se presentan también los resultados para la densidad de estados correspondientes a $\text{Al-Mg}(X)$ donde la impureza de Mg presenta un hueco en un nivel iónico $2P$, los cuales se relacionan con el espectro Auger KLV. A diferencia del sistema Mg-Mg(X) mostrado en la Fig. 1 la DDE_S correspondiente a esta aleación no muestra un pico protuberante, a bajas energías, lo cual indica que no siempre una impureza ionizada produce tal distorsión en la DDE_S . Comparando los resultados para ambos sistemas se nota que la presencia de la impureza, ya sea ionizada o neutra, no produce una distorsión fuerte de la DDE_S en forma de picos agudos; en cuanto a la DDE_P la forma es similar. La diferencia en la magnitud de la DDE se debe a que alrededor del Mg ionizado hay un electrón de valencia extra apantallando la carga positiva del ion.

La Fig. 3 presenta una comparación entre la densidad de estados del Al-Mg y Al puro, donde se observa la distorsión causada en la DDE al introducir, por sustitución, una impureza de Mg. La forma de la DDE_P (línea de rayas largas para Al y línea de rayas cortas para Al-Mg) es muy similar en ambos sistemas, ya que los rasgos de la estructura de bandas aparecen a la misma energía, pero en el caso de la DDE_S si aparece una distorsión, sin presentarse picos protuberantes, ya que para la aleación el máximo de la curva (línea de punto-rama para Al-Mg) se desplaza en la dirección del nivel de Fermi.

La Fig. 4 presenta una comparación de las densidades de estados para Al y $\text{Al-Mg}(X)$. La forma de la DDE_P [línea de rayas largas para Al y línea de rayas cortas para $\text{Al-Mg}(X)$] es muy similar mientras que la forma de la DDE_S [línea continua para Al y línea de raya-punto para $\text{Al-Mg}(X)$] es diferente ya que el máximo de la curva para la aleación se desplaza hacia el nivel de Fermi. De acuerdo a la aproximación de iones equivalentes

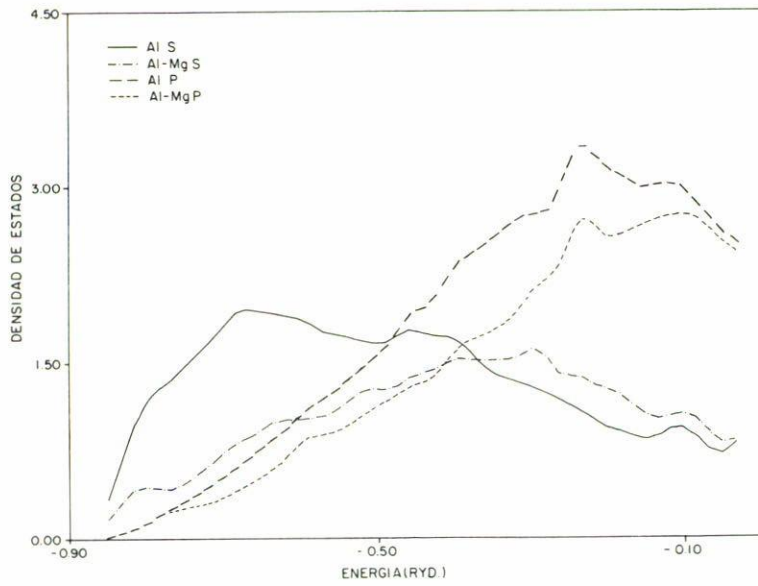


FIGURA 3. Densidad parcial de estados, de momento angular *S* y *P*, para Al (línea continua y línea de rayas largas) y para Al-Mg (línea raya-punto y línea de rayas cortas).

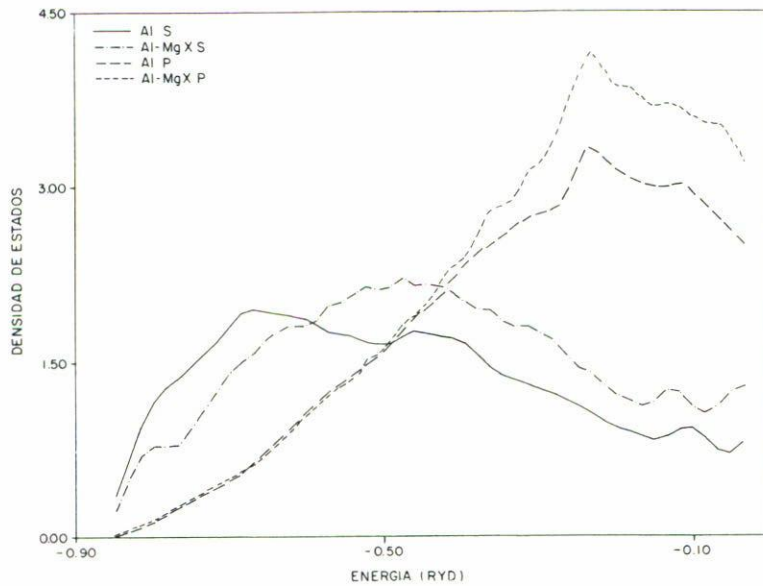


FIGURA 4. Densidad parcial de estados, de momento angular *S* y *P*, para Al (línea continua y línea de rayas largas) y para Al-Mg(*X*) (línea raya-punto y línea de rayas cortas).

Mg(*X*) debe comportarse como Al, sin embargo se observa que el acuerdo no es tan bueno como para los sistemas mostrados en la Fig. 1, y por lo tanto la aproximación de iones equivalentes no es adecuada en este caso.

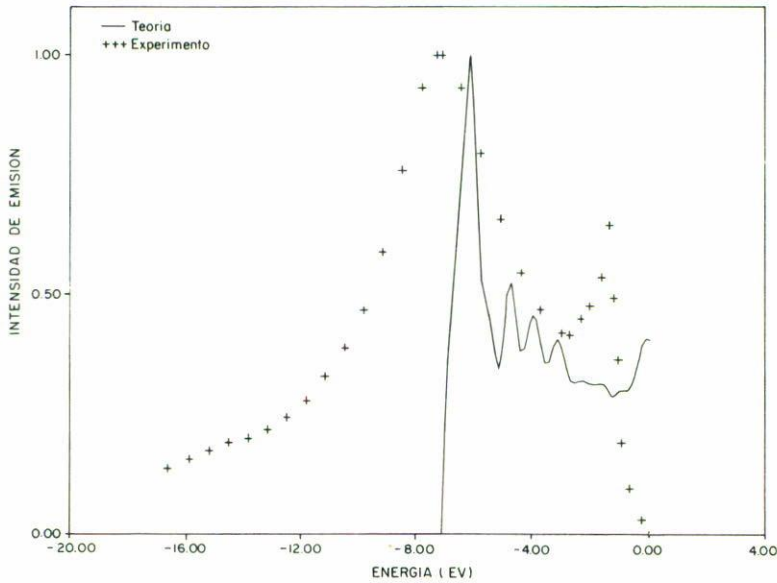


FIGURA 5. Espectro de emisión teórico para una aleación diluida de Mg-Al (línea continua), en la aproximación de una partícula, y experimental para la aleación $\text{Al}_5\text{Mg}_{95}$ (línea de +).

B. Espectro de emisión en Mg-Al

En la Fig. 5 se presentan los espectros de emisión L23, teórico y experimental, provenientes de la impureza, para $\text{Al}_5\text{Mg}_{95}$ [6]; el espectro teórico ha sido normalizado a la unidad. Este espectro está relacionado con la DDE_S y por lo tanto aparece un pico prominente a energías bajas en ambos espectros y un pico proveniente de la estructura de bandas cerca al nivel de Fermi, el cual aparece de mayor magnitud en el espectro experimental debido al efecto adicional de creación de pares electrón-hueco en el proceso.

Se quiere aclarar que el objetivo es el de observar si la teoría produce resultados que expliquen las tendencias experimentales en cuanto a la presencia o no de picos protuberantes no atribuibles a la estructura de bandas, y no hacer una comparación detallada la cual deberá tener en cuenta la exactitud de la medida experimental, el tiempo de vida del nivel iónico involucrado en la transición, efectos fonónicos y los efectos de la creación de pares electrón-hueco durante la transición. Este análisis más completo se desarrolla actualmente.

De nuevo, el espectro teórico presenta los rasgos esenciales del espectro experimental, o sea, la estructura de doble pico a energías muy similares (los picos alrededor de $E = 4.0$ eV tienden a desaparecer al incluir los efectos mencionados anteriormente).

C. Espectro Auger KLV en Al-Mg

La Fig. 6 contiene los espectros Auger KL23V, teórico y experimental, provenientes de la impureza, para la aleación $\text{Mg}_{13}\text{Al}_{87}$ [7] (línea de +). Los resultados experimentales han

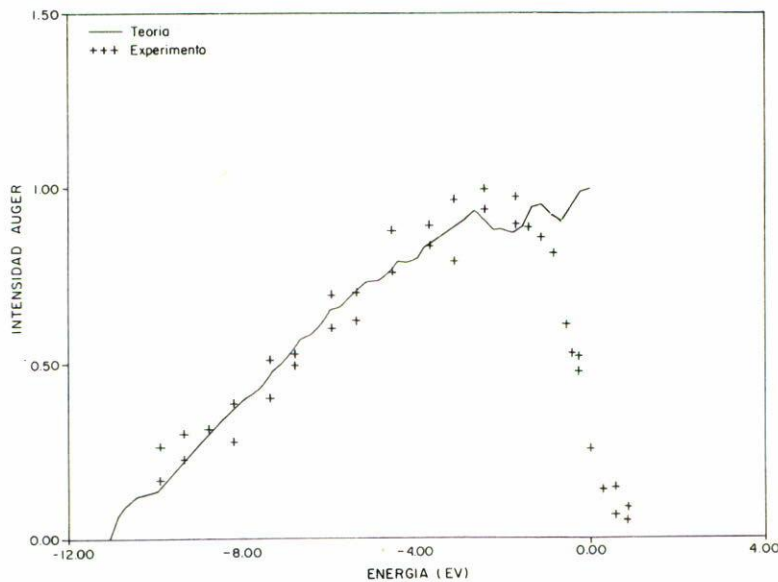


FIGURA 6. Espectro Auger KL23V teórico para una aleación diluida de Al-Mg (línea continua), en la aproximación de una partícula, y experimental para la aleación $Mg_{13}Al_{87}$ (línea de +).

mostrado para este caso, que aunque existe un hueco en la impureza no se genera un pico prominente en el espectro a bajas energías, tal como ocurre en los metales simples [4,8]. Este comportamiento experimental es también el obtenido de los cálculos teóricos, ya que ambos espectros muestran un pico cerca del nivel de Fermi, proveniente de la estructura de bandas, y correspondiente al pico en la DDE_P (véase la Fig. 2).

Este resultado puede esperarse si se recuerda que un átomo de Mg, con un hueco, se comporta como Al y, por lo tanto, la perturbación causada por esta impureza debe ser pequeña, su DDE debe parecerse bastante a Al puro (véase la Fig. 4), sin producirse picos agudos en la misma. Como consecuencia de este comportamiento, se concluye que el electrón de apantallamiento del hueco, en el Mg, se distribuye en toda la banda de conducción y no en una región estrecha, cercana al fondo de la banda, tal como sucede en Mg-Mg(X).

5. CONCLUSIONES

De este trabajo se desprende que el uso de los métodos LMTO y de aglomerados repetidos es útil y produce resultados razonables de la densidad de estados para sistemas tan complejos como aleaciones metálicas. La bondad de los resultados se comprueba al obtener, a partir de la DDE, los espectros Auger y de emisión, que describen las características principales de los espectros experimentales, los cuales muestran la presencia o no del pico protuberante en la densidad de estados de momento angular S .

Se comprueba, además, con el método descrito anteriormente, la siguiente hipótesis [1,14]: que la estructura electrónica alrededor de una impureza ionizada es muy similar

a la del ion que le sigue en la tabla periódica y cuya valencia es una unidad mayor que el cristal base (Fig. 1), como es el caso de $Mg(X)$, el cual se comporta como Al en $Mg-Mg(X)$.

Se encuentra, para el caso de $Al-Mg(X)$, que la impureza ionizada se comporta sólo en forma aproximada como Al, ya que se nota una distorsión en la forma de la DDE_S , en contraste con el comportamiento de los sistemas en la Fig. 1. Esto indica que la aproximación de iones equivalentes no es adecuada cuando la valencia de la impureza es menor que la valencia del cristal base. Se concluye además que el electrón de apantallamiento no produce un pico agudo, a energías bajas, en la DDE.

Los cambios que ocurren en la estructura electrónica del cristal base al introducirle impurezas, y de esta forma cambiar las interacciones entre átomos, se concentran en la DDE_S (véase la Fig. 3), la cual cambia substancialmente de forma presentándose su máximo, en la aleación, a energías cercanas al nivel de Fermi (extremo derecho de la figura). La DDE_P cambia poco, su forma es muy similar, mostrando las características de la estructura de bandas a las mismas energías.

Al comparar $Al-Mg$ y $Al-Mg(X)$ se encuentra que la forma de la DDE_P es muy similar y que sólo la DDE_S cambia drásticamente. Se observa, también, la tendencia de la DDE a encontrarse más perturbada, con respecto a Al puro, en $Al-Mg$ y más cercana al cristal base en $Al-Mg(X)$.

En general, en estas aleaciones, se nota que los cambios en la densidad de estado de carácter S son los que deciden el comportamiento del material en los procesos de emisión y Auger KLV.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece el financiamiento parcial de este proyecto por parte del "International Science Programs" (Uppsala, Suecia) y al Dr. Manuel J. Páez por la lectura crítica del manuscrito.

REFERENCIAS

1. C.-O. Almladh and U. von Barth, *Phys. Rev.* **B13** (1976) 3307.
2. J. Bernholc and S.T. Pantelides, *Phys. Rev.* **B18** (1978) 1780.
3. G.A. Baraff and M. Schluter, *Phys. Rev.* **B19** (1979) 4965.
4. U. Von Barth and G. Grossmann, *Phys. Scr.* **28** (1983) 107.
5. L.G. Parratt, *Rev. Mod. Phys.* **31** (1959) 616.
6. H. Neddermeyer, in *Band Structure Spectroscopy of Metals and Alloys*, editado by D.J. Fabian and L.M. Watson, Academic, New York, (1973) pp. 152-172.
7. P.H. Hannah, P. Weightman, and P.T. Andrews, *Phys. Rev.* **B31** (1985) 6238.
8. C.-O. Almladh and A.L. Morales, *Phys. Rev.* **B39** (1989) 3489.
9. C.-O. Almladh and A.L. Morales, *Phys. Rev.* **B39** (1989) 3503.
10. C.-O. Almladh and A.L. Morales, *J. de Physique* **C9** (1987) 879.
11. O.K. Andersen, *Phys. Rev.* **B12** (1975) 3060.
12. W. Kohn and L.J. Sham, *Phys. Rev.* **140** (1965) A1133.
13. H.L. Skriver, *The LMTO Method* (1984) Springer, Berlín.
14. C.P. Flynn, *Phys. Rev. Lett.* **37** (1976) 1445.