

Efecto de la temperatura en las propiedades estructurales y dinámicas de Ag líquida: un estudio con dinámica molecular

E. Urrutia Bañuelos

*Programa de Posgrado en Ciencias Físicas, División de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Sonora, 83000 México.
e-mail: eurrutia@cajeme.cifus.uson.mx*

A. Posada Amarillas

*Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Apartado Postal 5-088, 83190 Hermosillo, Son., México.
e-mail: posada@cajeme.cifus.uson.mx*

Recibido el 31 de enero de 2003; aceptado el 28 de mayo de 2003

En este trabajo se hace un estudio mediante simulación con dinámica molecular (DM) de los cambios inducidos por cambios en la temperatura en las propiedades estructurales y dinámicas en Ag líquida. Las interacciones atómicas se modelan con un potencial semiempírico de n-cuerpos basado en la aproximación de los segundos momentos de la densidad de estados de un hamiltoniano amarre fuerte. Calculamos el calor latente de fusión a partir de la curva calórica y la función de distribución de pares ($g(r)$) a partir de una serie de configuraciones tomadas a diferentes instantes de tiempo. Esto nos permite estudiar los cambios estructurales, mientras que los cambios en las propiedades dinámicas se estudian a través de la función de autocorrelación de velocidades y del desplazamiento cuadrático medio. El coeficiente de autodifusión y su comportamiento con la temperatura, obtenido de la simulación, muestra el comportamiento característico de los líquidos simples. Nuestros resultados se compararon con datos experimentales disponibles.

Descriptores: Simulación computacional; calor latente de fusión; estructura; dinámica; Ag líquida; alta temperatura.

In this work we studied the temperature-induced changes in the structural and dynamical properties of liquid Ag using molecular dynamics (DM) computer simulation. The atomic interactions are modeled through a semiempirical potential function which incorporates n-body effects and is based on the second moments approximation of the density of states of a tight-binding Hamiltonian. The caloric curve was used to calculate the latent heat of fusion and the pair distribution function, $g(r)$, was calculated from a set of atomic configurations collected at several time-steps. The dynamical properties are studied through the velocity autocorrelation function and the mean-square displacement. The self-diffusion coefficient and its behavior with the temperature, obtained from our simulations, shows the typical behavior of the simple liquids. Our results are compared to available experimental data.

Keywords: Computer simulation; latent heat of fusion; structure; dynamic; liquid Ag; high temperature.

PACS: 02.70.Ns; 61.20.Ja; 61.20.Lc; 61.25.Mv

1. Introducción

El estudio de las propiedades estructurales y dinámicas de los materiales ha sido un tema que en años recientes a recibido una gran atención tanto teórica como experimentalmente, debido principalmente a que aún no ha quedado completamente comprendida la forma en que los distintos materiales se comportan ante distintas condiciones térmicas, particularmente en los metales líquidos [1-8,12-20].

En los metales líquidos, debido a las altas temperaturas con las cuales se tienen que trabajar y a la gran reactividad que presentan estos sistemas con sus contenedores, se han propuesto novedosas y sofisticadas técnicas para el estudio de sus propiedades en las cuales se combinan técnicas bien establecidas de dispersión de rayos X [9,10] con novedosas técnicas de levitación para obtener información de la estructura de metales líquido puros [3,4]. Experimentos recientes [5] reportan la existencia de microestructuras con simetrías pentagonales en plomo líquido sobre un sustrato de silicio, a través de dispersión de rayos X que inciden en un ángulo tal que la superficie de silicio refleje todo el haz. Sin embargo un estu-

dio experimental sistemático completo del comportamiento de sus propiedades estructurales y dinámicas como función de la temperatura es todavía difícil de lograr.

Por otra parte, la información experimental ha motivado la realización de estudios teóricos y de simulación computacional a través de teorías aproximadas y potenciales semiempíricos que modelen las interacciones atómicas, para reproducir estos resultados y entender de una manera más completa sus propiedades estructurales y dinámicas, así como predecir los efectos al cambiar sus condiciones externas. Dentro de los más exitosos podemos mencionar al método de Car-Parrinello [7], aunque es computacionalmente costoso. Otro esquema ampliamente utilizado es el método del átomo embebido (EAM) [11-13,17,19]. Éste es un potencial semiempírico que tiene una parte atractiva correspondiente a la contribución de n-cuerpos, expresando la energía del sistema de átomos como una funcional de la densidad electrónica total. Además, incluye un potencial de pares repulsivo de corto alcance entre los átomos [8,11-13]. Los métodos mencionados anteriormente han demostrado ser muy confiables al reproducir con bastante aproximación los resultados expe-

rimentales de la estructura estática ($g(r)$) de metales nobles y de transición en la fase líquida [7,8].

Estudios recientes utilizando versiones de EAM han permitido calcular con DM el coeficiente de autodifusión (D) alrededor de la temperatura de fusión (T_m) en metales nobles y de transición [8,12]. Alemany *et al.* [13] hicieron un estudio de propiedades dinámicas con DM utilizando la versión de Voter y Chen del EAM, reportando resultados del coeficiente de difusión y la viscosidad de corte de metales líquidos alrededor de la temperatura de fusión, encontrando buena concordancia con los datos experimentales para la viscosidad de corte de Cu, Ag y Au. Otros potenciales han sido utilizados también para simular aleaciones metálicas [11,16].

En este trabajo hacemos simulación con DM de metales líquidos utilizando un potencial amarre fuerte de n-cuerpos en la aproximación de los segundos momentos (TB-SMA), que contiene parámetros cuyos valores son tomados del bulto [6,14, 20-29]. Uno de los primeros aciertos de este potencial fue reproducir resultados experimentales que los potenciales pares de Morse y Lennard-Jones no habían podido explicar satisfactoriamente, particularmente la contracción de la distancia entre los planos de las superficies de los sólidos metálicos cristalinos [21]; hecho observado experimentalmente [30].

Otros autores [22,23] han utilizado el potencial para hacer estudios sistemáticos de varios metales y aleaciones metálicas encontrando buena aproximación con los datos experimentales disponibles en el bulto. También se han hecho extensiones para aplicarlo a temperaturas finitas alrededor de la T_m reproduciendo razonablemente las temperaturas experimentales. Esto sugirió el uso de este potencial para ser aplicado a temperaturas finitas en los metales líquidos y hacer estudios de la estructura y propiedades dinámicas. Por ejemplo, Posada-Amarillas y Garzón [24], utilizan este potencial para simular el proceso de amorfización de Ni. Los resultados obtenidos de la simulación de la $g(r)$ tanto en fase líquida como amorfa, reproducen el comportamiento experimental del desdoblamiento del segundo pico característico de los amorfos.

Gómez *et al.* [29] utilizaron el potencial TB-SMA propuesto por Ducastelle y otros autores para simular, con el método de Monte-Carlo (MC), el comportamiento de la energía del sistema al incrementar la temperatura. Encuentran que la transición sólido-líquido del Pb se da a una temperatura de 625 K, contra 601 K reportada experimentalmente. Por otra parte, Alemany *et al.* [14] realizan una simulación con DM para estudiar el coeficiente de difusión y la viscosidad de metales de transición y simples alrededor de la T_m . Tales resultados son comparados con los datos experimentales disponibles, encontrando buena aproximación para algunos casos.

Es importante mencionar que este potencial no sólo se ha utilizado para simular metales en el bulto, sino que también se ha utilizado para simular cúmulos metálicos [25-28] y calcular el cambio de su estructura y energías mínimas para cada estructura. Los resultados de las simulaciones han sido com-

parados con resultados obtenidos mediante métodos de primeros principios o experimentos, confirmando en una buena cantidad de casos, los resultados obtenidos con el potencial semiempírico. Por ejemplo, los resultados experimentales del factor de estructura para Au confirman el desorden predicho por la simulación para algunos isómeros de Au [26].

El propósito de este trabajo es hacer un estudio sistemático del comportamiento de las propiedades estructurales y dinámicas como función de la temperatura a través de simulación computacional con DM, utilizando el potencial de Gupta (TB-SMA) para describir la interacción entre átomos. El trabajo está organizado de siguiente manera: en la Sec. 2 se presenta el potencial de interacción atómica con sus parámetros y la metodología utilizada en la simulación. En la Sec. 3 se presentan los resultados estructurales y dinámicos. En la Sec. 4 se discuten los resultados y se dan las conclusiones de la presente investigación.

2. Metodología

En nuestra simulación con DM empleamos una celda unitaria conteniendo 500 átomos de Ag, sujeta a condiciones de frontera periódicas para simular al sistema extendido [9,10]. Las interacciones son modeladas con un potencial semiempírico de n-cuerpos basado en un hamiltoniano amarre fuerte en la aproximación de segundo momento de la densidad de estados [21-23], cuya expresión analítica es

$$V(r) = \sum_i^N \left[A \sum_{i \neq j}^N e^{-p(r_{ij}/r_0 - 1)} - \xi \left[\sum_{i \neq j}^N e^{-2q(r_{ij}/r_0 - 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \right], \quad (1)$$

donde $A = 0.103$ eV, $\xi = 1.178$ eV, $p = 10.93$, $q = 3.138$, $r_0 = 2.89$ Å y la energía de cohesión $U_c = 2.96$ eV, son parámetros ajustados a valores del bulto que caracterizan a la plata [23].

Los átomos son colocados inicialmente en un arreglo fcc y las velocidades iniciales son ajustadas para que cumplan con la condición física de que el momento lineal del sistema sea cero [9]. Para controlar la temperatura, las velocidades son escaladas según

$$v^* = v^* \sqrt{\frac{T_D^*}{T_A^*}}, \quad (2)$$

en donde el asterisco significa que la cantidad ha sido adimensionalizada con los parámetros característicos del material [9]. T_D^* es la temperatura a la que se desea mantener al sistema y T_A^* es la temperatura del sistema, asociada con su energía cinética mediante el principio de equipartición de la energía. Esta cantidad se calcula de acuerdo a la siguiente

expresión [9]:

$$T_A^* = \frac{1}{3N} \left\langle \sum_i^N \mathbf{v}_i^* \cdot \mathbf{v}_i^* \right\rangle. \quad (3)$$

Con este escalamiento se alcanza en pocos pasos de integración, la energía alrededor de la cual se va a mantener el sistema fluctuando en el equilibrio. Para obtener las trayectorias de las partículas, se resuelven las ecuaciones de Newton con el algoritmo predictor-corrector de cuarto orden propuesto por Gear [9,10].

Para probar los parámetros utilizados durante la simulación, se calculó la variación de la energía con la temperatura (Fig.1), en la cual se puede observar la transición de sólido a líquido entre 1200 K y 1300 K. El valor experimental es de 1234 K [1,2]. El ancho de la discontinuidad en la curva calórica corresponde al calor latente de fusión, que experimentalmente tiene el valor de 11.95 kJ/mol [31], contra 12.032 kJ/mol que calculamos en la simulación. Adicionalmente, estos resultados nos aseguran que el intervalo de temperaturas en el cual se hacen los cálculos en la simulación corresponden a la fase líquida. Una manera más gráfica de observar esto es presentando las configuraciones tridimensionales de la celda unitaria para una temperatura por abajo y otra por arriba del punto de fusión, (Fig. 2a y 2b respectivamente).

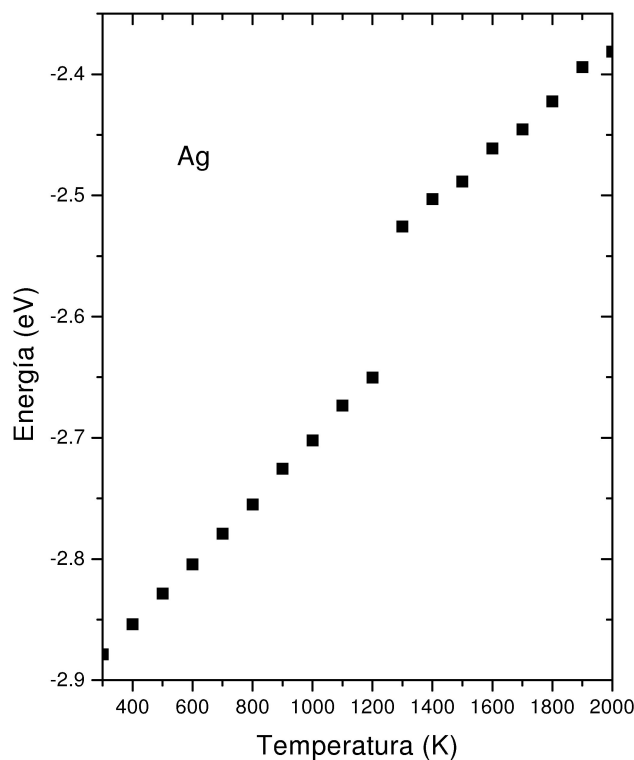


FIGURA 1. Curva calórica de la plata. Muestra la variación de la energía promedio por átomo como función de la temperatura. Se observa la transición de fase sólido-líquido alrededor de 1250 K.

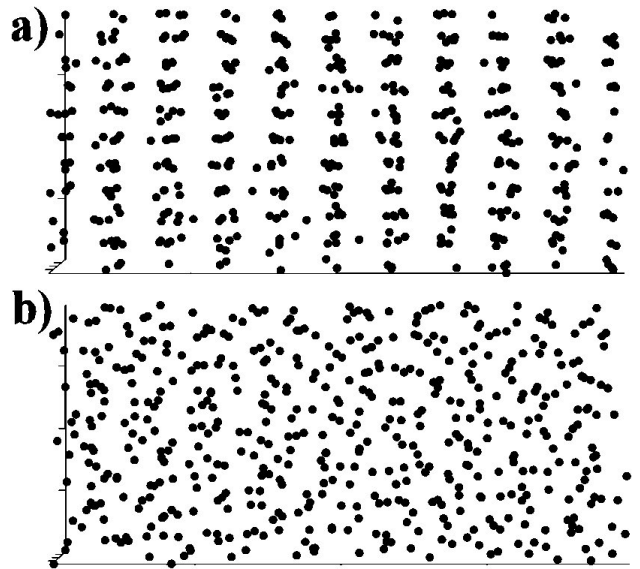


FIGURA 2. Configuraciones atómicas de Ag a dos temperaturas (a) 900 K y (b) 1273 K. Se observa el aumento del desorden con la temperatura en las configuraciones atómicas de Ag.

Para alcanzar el equilibrio se deja evolucionar al sistema 2×10^4 pasos temporales y después de esto, en la etapa de producción de la simulación, se toman configuraciones cada 50 pasos para calcular la $g(r)$, de acuerdo a

$$g(r) = \frac{n_{hist}(r)}{n^b \times V_c \times N \times N_c} \quad (4)$$

en donde $n_{hit}(r)$ es el histograma que almacena el número de átomos que se encuentran a una distancia r del átomo de referencia, n^b es densidad de bulto del sistema, V_c es el volumen del cascaron esférico centrado en r , N es el número de átomos y N_c el número de configuraciones consideradas en el cálculo para una apropiada normalización. Los resultados obtenidos son comparados con resultados experimentales disponibles que se muestran en la Fig. 3.

El cálculo del desplazamiento cuadrático medio (MSD) se realizó de acuerdo a las Refs. 9 y 10 cada 5 configuraciones con la siguiente expresión:

$$MSD(t) = \frac{1}{MN} \left\langle \sum_{k=0}^M \sum_{i=1}^N \|\mathbf{r}_i(t_k + t) - \mathbf{r}_i(t_k)\|^2 \right\rangle \quad (5)$$

en donde los corchetes representan el promedio en el ensamble, el índice i corre para el número total de partículas N y k contabiliza los orígenes temporales tomados para calcular la diferencia entre las posiciones del i -ésimo átomo. M es el número total de orígenes temporales tomados. El coeficiente de autodifusión D se calcula con la relación de Einstein [9,10,12-14]:

$$D = \frac{MSD(t)}{6t}, \quad (6)$$

y la función de autocorrelación de velocidades

$$C(t) = \frac{1}{MN} \left\langle \sum_{k=0}^M \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i^*(t_k + t) \cdot \mathbf{v}_i^*(t_k) \right\rangle. \quad (7)$$

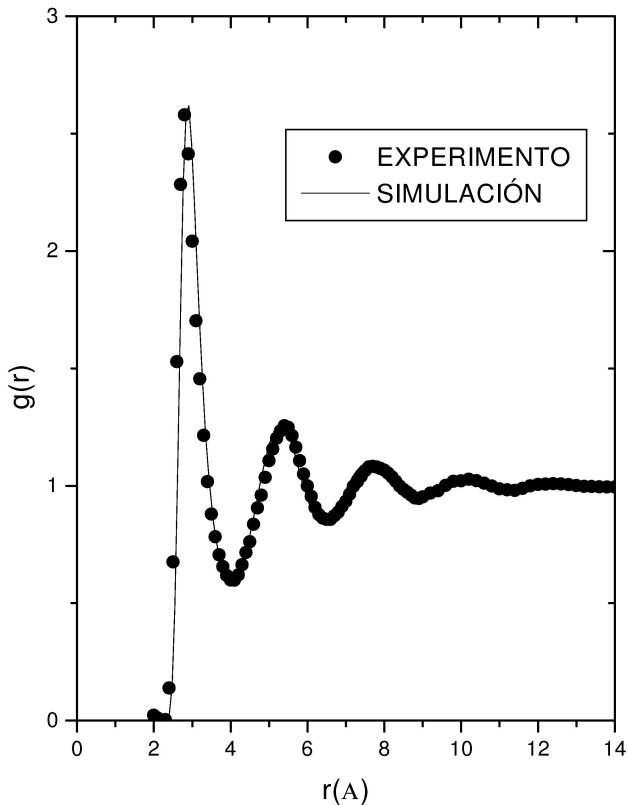


FIGURA 3. Comparación entre resultados experimentales [3] y de simulación de la función de distribución de pares $g(r)$ de Ag líquida a 1273 K.

3. Resultados

3.1. Propiedades estructurales

En la Fig. 3 se comparan los resultados de la $g(r)$ obtenida por medio de simulación con DM utilizando el potencial de la Ec. (1), con datos experimentales disponibles [1]. Aquí se puede observar la excelente reproducción de la simulación de los resultados experimentales. Las curvas se ajustan no sólo en la forma sino también en la ubicación de los máximos y los mínimos. Otra cantidad que caracteriza a la estructura es la proporción entre la distancia de máximo acercamiento r_c y la posición del máximo r_m . De la simulación se obtiene $r_c/r_m = 2.281/2.859 \cong 0.8$, contra 0.83 reportado experimentalmente [2], esto es, una diferencia aproximada del 2%.

En la Fig. 2 (a) y (b) se muestran configuraciones atómicas a dos distintas temperaturas, una por debajo y otra por arriba de la temperatura de fusión. En la Fig. 2(b) puede observarse que se ha perdido por completo el orden cristalino como efecto de la temperatura. La $g(r)$ correspondiente a la Fig. 2(b) se presenta en la Fig. 3, que presenta el comportamiento típico de la estructura de un líquido con un primer máximo muy pronunciado, cuya posición corresponde aproximadamente a la distancia de primeros vecinos r_0 característica de la Ag sólida. Después se suaviza para tender al valor teórico de 1 para distancias muy lejanas a la partícula

de referencia. Esta cantidad es importante porque además de que se puede comparar con resultados experimentales se puede utilizar, entre otros cálculos, para implementar el análisis de vecinos comunes y estudiar el orden local del sistema utilizando la posición del primer mínimo como la distancia máxima a primeros vecinos [24].

En la Fig. 4 se presenta el comportamiento de la $g(r)$ con la temperatura y puede verse que la altura del primer máximo baja al aumentar la temperatura, mientras que los mínimos suben. Al aumentar la temperatura, aumenta la homogeneidad espacial de los átomos. Dado que tienen una mayor movilidad, éstos tienden a ocupar todo el espacio dentro del volumen [1,2]. Puesto que el primer máximo nos define la distancia a la cual es más probable encontrar primeros vecinos, el comportamiento de su altura con la temperatura es reportado experimentalmente [2]. En la Fig. 5 se observa que la simulación predice el descenso del primer máximo con el incremento en la temperatura, comportamiento muy similar al reportado por Takamichi y Guthrie [2]. Otro aspecto interesante por mencionar es el lugar donde se cruzan las distintas $g(r)$ después del primer máximo (Fig. 6). Puede verse que todas se cruzan aproximadamente a la misma distancia del origen; además, muestra también un comportamiento más simétrico con respecto al primer pico, muy parecido al reportado experimentalmente [2] para metales simples como el sodio y el plomo. Otros metales del grupo IVB, como el Sn, Ge, etc. muestran un hombro alrededor de esta posición [2].

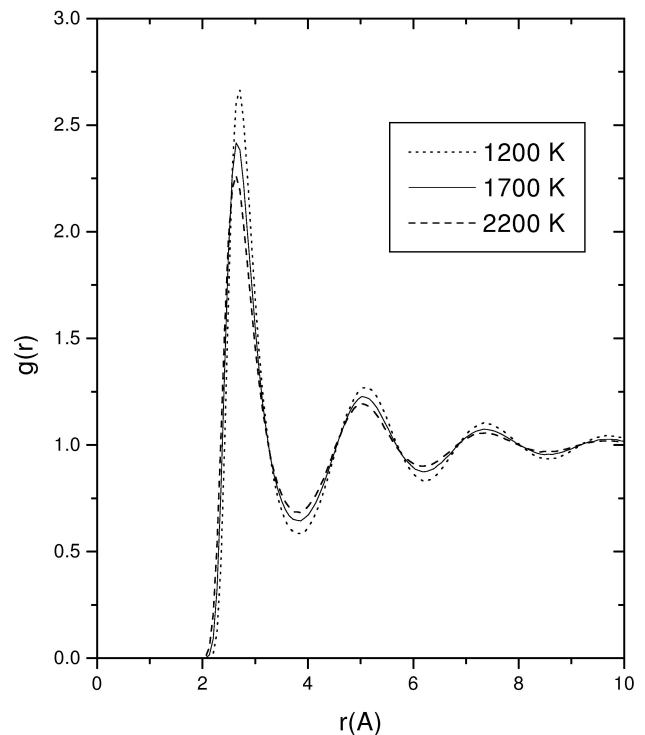


FIGURA 4. Comportamiento de la estructura como función de la temperatura a través del cálculo de la $g(r)$ de Ag líquida para diferentes temperaturas.

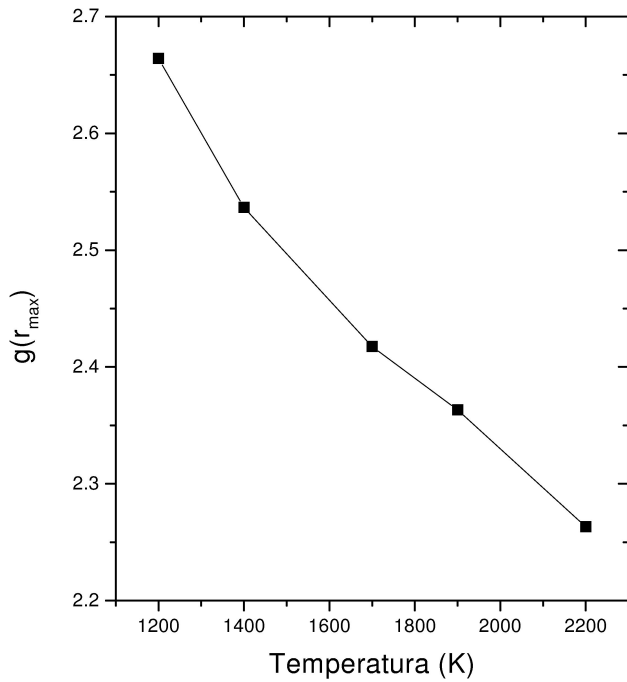


FIGURA 5. Comportamiento de la altura del primer pico de la $g(r)$ como función de la temperatura.

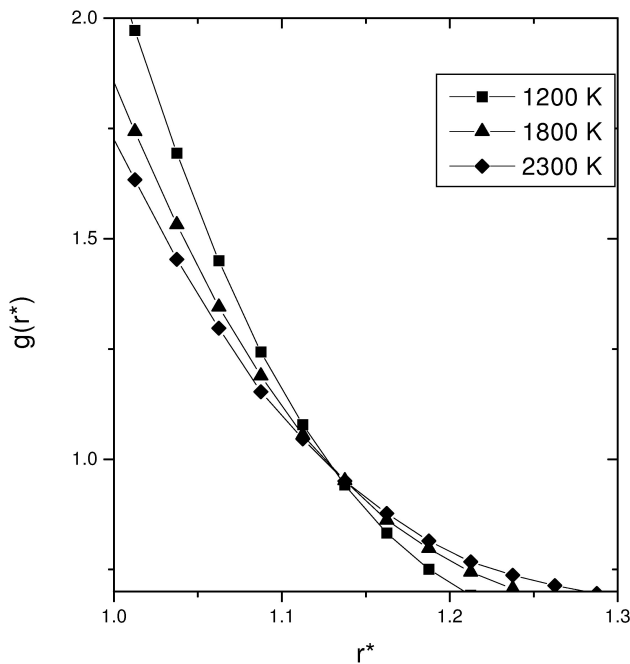


FIGURA 6. Comportamiento de la función de distribución de pares, de Ag líquida, a distintas temperaturas. Nótese el cruzamiento alrededor en un mismo punto; además no se observa el hombro que reporta Waseda [1] para Sn alrededor del punto de fusión.

3.2. Propiedades dinámicas

La Fig. 7 muestra la función de autocorrelación de velocidades normalizada ($C^*(t)$), donde puede observarse que la función toma valores negativos para tiempos cortos, comporta-

miento típico de los fluidos densos [15,17,18], mientras que para tiempos largos tiende a tomar el valor de cero. Esto se debe al cambio de dirección en el movimiento de los átomos, lo cual está asociado a los choques con sus vecinos. La partícula quedará atrapada en una caja formada por sus vecinos para después de un cierto tiempo salir de ella. Este efecto es conocido como la "caja de rebotes". La forma de $C^*(t)$ es similar a la reportada para Ni y Al [17,18] y para metales líquidos alcalinos [15], para temperaturas alrededor del punto de fusión, calculadas con diferentes métodos (EAM, cálculos *ab initio* y potenciales pares), en los cuales también se observa un segundo mínimo menos pronunciado. Las diferencias de la profundidad del primer mínimo, para las temperaturas cerca del punto de fusión de cada metal, se puede asociar al mínimo de la energía potencial, es decir, a la intensidad de las interacciones entre los átomos [15]. Si comparamos los valores de la energía de cohesión en el bulto de cada material [23] tenemos que la menor es la de la plata (2.96 eV), 3.339 eV para el Al y el más alto es del Ni con 4.435 eV. En las figuras de la $C^*(t)$ de las Refs.17 y 18, se puede observar cómo el mínimo del Ni es el más profundo en tanto que el menos profundo corresponde a la Ag. Otra característica de cada material es el tiempo en el que se pierde la correlación. Los átomos más pesados tienen tiempos de relajación mayores, esto es, se quedan más tiempo atrapados en la caja de rebotes como se puede observar en la Fig. 7 de la Ref. 15. Para la Ag es de alrededor de 0.5 ps (1200 K), mientras que de 0.3 y 0.25 ps aproximadamente para Ni y Al alrededor del punto de fusión [17,18]. Por otro lado, el comportamiento de la $C^*(t)$ con la temperatura (Fig. 7) es el esperado, ya que

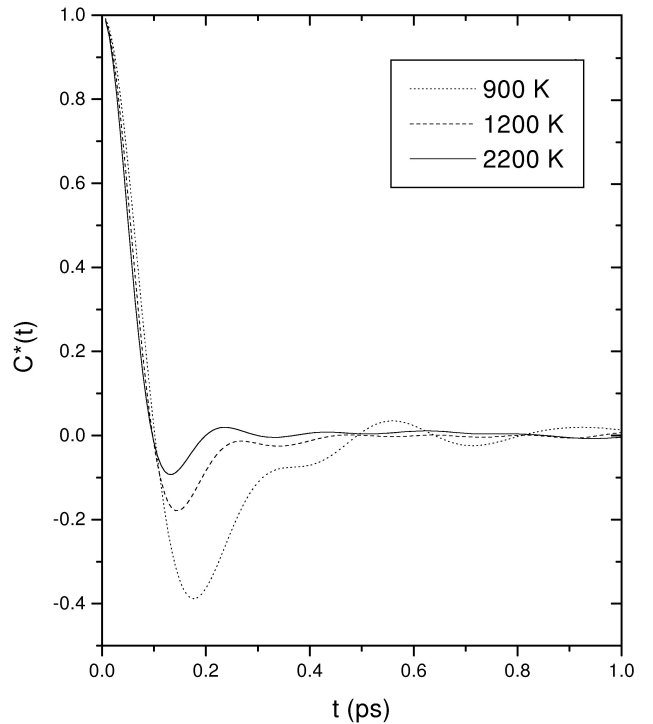


FIGURA 7. Función de autocorrelación de velocidades normalizada como función de la temperatura.

al aumentar la temperatura aumenta la movilidad atómica y la energía cinética de los átomos va tomando más relevancia en las interacciones atómicas. La simulación muestra que el mínimo va subiendo, haciéndose menos profundo, y por lo mismo el tiempo de relajación también disminuye debido al incremento de la temperatura.

Los resultados del desplazamiento cuadrático medio (MSD^*), el asterisco indica que es una cantidad adimensional, se presentan en la Fig. 8. Aquí se puede observar el comportamiento lineal del MSD^* para tiempos largos, lo cual justifica el empleo de la relación de Einstein [Ec. (6)] [12-15,17,18] para calcular el coeficiente de auto-difusión D , cantidad que puede compararse con datos experimentales. También se observa que la pendiente de la recta aumenta conforme aumenta la temperatura.

En la Fig. 9 se presenta el comportamiento de D como función de la temperatura. El valor de D en 1250 K es $0.3071 \text{ \AA}^2/\text{ps}$. El calculado por Mie [12] con EAM a 1227 K es de $0.302 \text{ \AA}^2/\text{ps}$ y el valor experimental [2] es de $0.256 \text{ \AA}^2/\text{ps}$ a 1234 K. La medición experimental presenta complicaciones adicionales con respecto a la simulación, al existir efectos físicos (convectivos o gravitatorios, por ejemplo) que afectan el comportamiento atómico, además de los inherentes debido a la interacción del sistema con el contenedor. Por tal razón, sólo es de esperarse que la simulación reproduzca el comportamiento cualitativo.

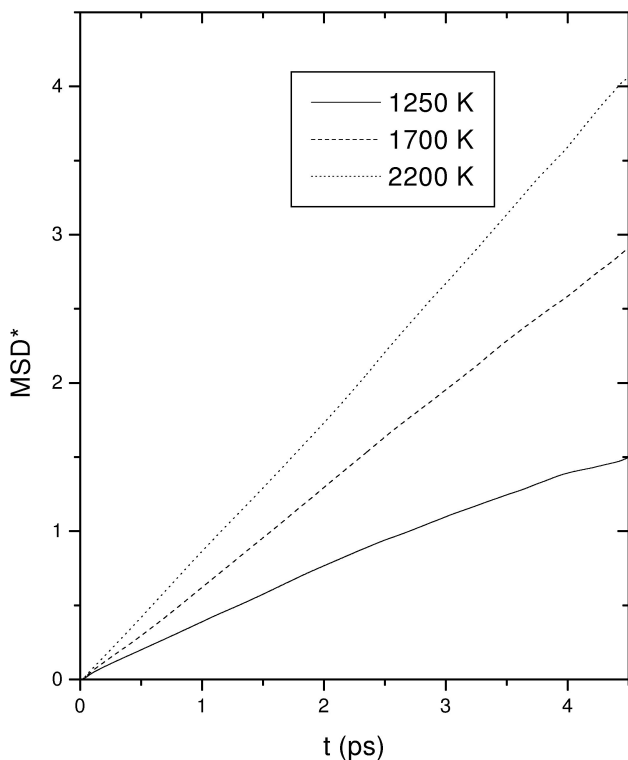


FIGURA 8. Comportamiento lineal del desplazamiento cuadrático medio como función de la temperatura.

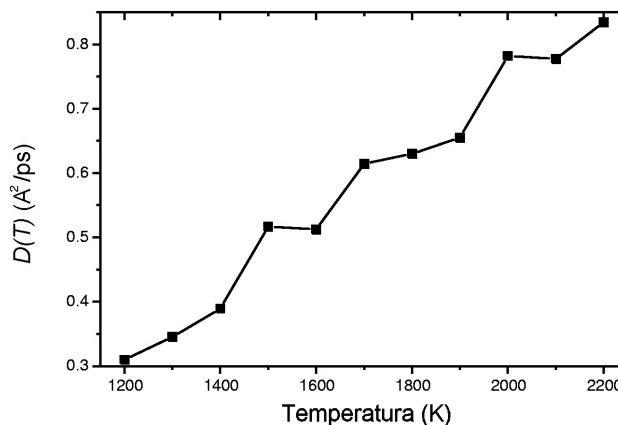


FIGURA 9. Comportamiento del coeficiente de auto-difusión a tiempos largos como función de la temperatura.

4. Conclusiones

Nuestro resultados de simulación con DM y el potencial TB-SMA han mostrado ser aceptables para reproducir propiedades estructurales como la $g(r)$; la altura y la ubicación de máximos y mínimos es bastante aproximada a las reportadas experimentalmente, además de que su comportamiento alrededor del punto de fusión es muy similar al de metales simples [2], dado que no muestra el hombro al lado derecho del primer máximo. También se reproduce el comportamiento de la $g(r)$ como función de la temperatura: los máximos bajan y los mínimos suben, lo que significa que el espacio tiende a homogenizarse más alrededor del átomo de referencia y la correlación se pierde a distancias más cortas como efecto del aumento de la temperatura.

Los resultados de las propiedades dinámicas nos indican que también se reproducen razonablemente bien desde un punto de vista cualitativo. Al aumentar la temperatura la movilidad aumenta y el comportamiento de la $C^*(t)$ es el esperado, así como el de D ; sin embargo, no se observa un aumento monótono en este último. Esto podría deberse a respuestas colectivas como la viscosidad, o como sugieren Cherné y Baskes en las conclusiones de la Ref. 19, a la conexión entre las propiedades dinámicas y los detalles de la estructura. Otros autores relacionan a las propiedades dinámicas del sistema con la movilidad de los átomos entre los mínimos y puntos silla de la superficie de la energía potencial (PES) [32-34], el estudio de la estructura de la PES se hace a través de las estructuras inherentes (IS) [6,24,34,35]. Sin embargo, nuestros resultados y los de EAM [12] son bastante cercanos. Desde un punto cuantitativo no tenemos resultados cercanos a los experimentales reportados, esto se debe muy probablemente a efectos físicos inherentes a la propia naturaleza del sistema al hacer las mediciones.

Agradecimientos

Al CONACyT por el apoyo otorgado a esta investigación mediante el proyecto 35224-E.

1. Y. Waseda, *The Structure of Non-Crystalline Materials, Liquids and Amorphous Solids*, (McGraw-Hill Inc. U.S.A., 1980).
2. T. Hda y R. I.L. Guthrie, *The Physical Properties of Liquid Metals*, (Oxford University Press, Oxford, 1988).
3. S. Krishnan, S. Ansell, J.J. Felten, K.J. Volin, and D.L. Price, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 586; S. Krishnan, S. Ansell, and D.L. Price, *J. Non-Cryst. Solids* **286** (1999) 250.
4. C. Landron, L. Hennes, T.E. Jenkins, G.N. Greaves, J.P. Coutures, and A.K. Soper, *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001) 4839.
5. H. Reichert *et al.*, *Nature* **408** (2000) 839.
6. A. Posada Amarillas, Tesis de Doctorado (1996).
7. A. Pasquarello, K. Laasonen, R. Car, C. Lee, and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992) 1982.
8. S.M. Foiles, *Phys. Rev. B* **32** (1985) 3409.
9. J.M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods* (JohnWiley & Sons, Inc., N. Y. 1992).
10. M.P. Allen, D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, (Oxford University Press, N.Y. 1992).
11. R.A. Johnson, *Phys. Rev. B* **37** (1988) 3924; *Phys. Rev. B* **39** (1989) 12554.
12. J. Mie, J.W. Davenport, *Phys. Rev. B* **42** (1985) 9682.
13. M.M. Alemany, C. Rey, and J.J. Gallego, *J. Chem. Phys.* **109** (1998) 5175.
14. M.M. Alemany, O. Diegues, C. Rey, and J.J. Gallego, *Phys. Rev. B* **60** (1999) 9208.
15. M.M. Alemany, J. Casas, C. Rey, L.E. González, and J.J. Gallego, *Phys. Rev. E* **56** (1997) 6818.
16. H. Teichler, *Phys. Rev. B* **59** (1999) 8473.
17. M.M. Alemany, C. Rey, and L.J. Gallego, *Phys. Rev. B* **58** (1998) 685.
18. D.J. González, L.E. González, and J.M. López, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 184201.
19. F.J. Cherne and M.I. Baskes, *Phys. Rev. B* **65** (2001) 24209.
20. F. Cyrot-Lckmann, *J. Phys. Chem. Solids* **29** (1968) 1235.
21. R.P. Gupta, *Phys. Rev. B* **23** (1981) 6265.
22. V. Rosato, M. Guillope, and B. Legrand, *Phil. Mag. A* **59** (1989) 321.
23. F. Cleri and V. Rosato, *Phys. Rev. B* **48** (1993) 22.
24. A. Posada-Amarillas, I.L. Garzón, *Phys. Rev. B* **53** (1996) 8363.
25. I.L. Garzón, A. Posada-Amarillas, *Phys. Rev. B* **54** (1996) 11796.
26. I.L. Garzón *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 1600.
27. K. Michaelian, N. Rendón, and I.L. Garzón, *Phys. Rev. B* **60** (1999) 2000.
28. J.M. Soler *et al.*, *Phys. Rev. B* **61** (2000) 5771.
29. L. Gómez, A. Dobry, and H.T. Diep, *Phys. Rev. B* **55** (1997) 6265.
30. F. Jona, *J. Phys. C* **11** (1978) 4271; J. Friedel, *Ann. Phys. (Paris)* **1** (1976) 257.
31. Handbook of Chemistry and Physics (C.R.C. press, 64th Edición, 1983-1984).
32. L. Angelani, R. Di Leonardo, G. Rucco, A. Scala, and F. Sciortino, *Phys. Rev. Lett.* **85** (2001) 5356.
33. P. Shah and C. Chakravarty, *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002) 255501.
34. F.H. Stillinger and Thomas A. Weber, *Science* **225** (1984) 983.
35. E. Urrutia-Bañuelos, A. Posada-Amarillas, I.L. Garzón, *Phys. Rev. B* **66** (2002) 144205.