

## Resistencia mecánica ideal de C, Si y Ge con estructura cúbica: un estudio de primeros principios

A. Bautista Hernández\* y M. Salazar Villanueva  
 Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Puebla,  
 Apartado Postal J-39, Puebla, Pue., 72570, México,  
 \*e-mail: alejandro.bautista@correo.buap.mx

F.L. Pérez Sánchez  
 Escuela de Ciencias, Universidad Autónoma “Benito Juárez” de Oaxaca,  
 Av. Universidad S/N, Ex Hacienda de Cinco Señores, Ciudad Universitaria, Oaxaca de Juárez, Oax., 68120, México.

O. Vázquez Cuchillo  
 Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Autónoma de Nuevo León,  
 Av. Universidad y Av. Fidel Velásquez S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza Nuevo León, 66451 México.

J.F. Sánchez Ramírez  
 Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y Tecnologías Avanzadas del Instituto Politécnico Nacional,  
 Av. Instituto Politécnico Nacional, 2580. Barrio Laguna Ticomán, México D.F. 07340, México.

Recibido el 8 de noviembre de 2010; aceptado el 26 de julio de 2011

Presentamos un estudio de la resistencia mecánica ideal a compresión de Carbono (C), Silicio (Si) y Germanio (Ge) con estructura cúbica (diamante), mediante cálculos de primeros principios. Parámetros de red, módulos de compresibilidad, de corte, Young y constantes de elasticidad son obtenidos como función del esfuerzo aplicado. Obtenemos buen acuerdo de los parámetros de red y constantes de elasticidad en ausencia de esfuerzo con respecto a reportes previos experimentales y teóricos. Mediante los criterios de Born-Wang y estabilidad fonónica estudiamos la resistencia mecánica ideal de cada elemento. Los valores de los esfuerzos máximos (773, 19.5 y 21.7 GPa para el C, Si y Ge, respectivamente) se explican en términos de la estructura de bandas, densidades de carga y poblaciones atómicas.

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

We present a study of the compressive ideal strength of Carbon (C), Silicon (Si) and Germanium (Ge) with cubic structure (diamond) by means of first principles calculations. Lattice parameters, bulk modulus, shear and Young modulus and elastic constants are obtained as a function of applied stress. The values obtained about lattice parameters and elasticity constants without stress are in according with previous experimental and theoretical reports. Based on the Born-Wang and phonon criteria we have studied the ideal strength of each element. The maximum stresses values (773, 19.5 and 21.7 GPa for C, Si and Ge, respectively) are explained in terms of the band structure, charge density and atomic populations.

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

PACS: 62.20.Fe; 62.20.Dc

### 1. Introducción

La resistencia mecánica ideal de elementos del grupo IV es de particular interés debido a que el diamante es el material más duro conocido en la naturaleza. Además, el silicio y el germanio son materiales muy estudiados a nivel experimental y teórico, debido a su importancia tecnológica [1]. En el caso del C es bien conocido que a presiones de varios gigapascals la fase cúbica (diamante) es la más estable [2]. Mientras que a temperatura y presión ambiente la fase cúbica es la más estable para Si y Ge. Desde el punto de vista teórico se han realizado varios estudios de la resistencia mecánica ideal del C, Si y Ge en algunas direcciones cristalográficas y en los principales sistemas de deslizamiento. Por ejemplo, Telling *et al.* realizaron un estudio del esfuerzo ideal del C diamante para poder explicar la preferencia del clivado en los planos (111) [3]. Roundy *et al.*, calcularon el esfuerzo ideal a corte y esfuerzo a tensión para estos elementos. El esfuerzo de corte fue aplicado en el sistema de deslizamiento

{111}[112] y reportan valores de 95, 6.5 y 4.5 GPa para C, Si y Ge, respectivamente. El esfuerzo a tensión fue aplicado en la dirección  $\langle 111 \rangle$  con valores de 95, 23 y 14 GPa para C, Si y Ge [1]. Por otro lado, Dubois *et al.* realizaron un estudio del esfuerzo ideal en Si a lo largo de varias direcciones cristalográficas tales como  $\langle 100 \rangle$  (26.4 GPa),  $\langle 110 \rangle$  (17 GPa),  $\langle 111 \rangle$  (21 GPa) y los sistemas de deslizamiento  $\{111\} \langle 1\bar{1}2 \rangle$  (11.4 GPa) y  $\{111\} \langle 1\bar{1}0 \rangle$  (8 GPa), donde los valores de los esfuerzos máximos están entre paréntesis [4]. Correa *et al.* estudian al C bajo presiones extremas y determinan su diagrama de fases presión vs temperatura [5]. Por otra parte, Unemo *et al.* reportan un estudio acerca de la influencia del esfuerzo normal en los valores del esfuerzo ideal de corte en cristales covalentes tales como C, Si, Ge y SiC [6]. Mas recientemente, R.G. Hennig *et al.* realizan un estudio de la transición de fase del Si de la fase cúbica a la fase metálica y obtienen una presión de transición (12.4 GPa) en excelente acuerdo con los datos experimentales (11.7 GPa) [7]. En la parte experimental Ocelli *et al.* determinan la ecuación de estado y frecuencias

de vibración del C bajo presión hidrostática a 140 GPa [8]. Por otro lado, Knudson *et al.* estudian al Carbono por medio de ondas de choque para dar evidencia del punto triple diamante-bc8-líquido en la frontera del punto de fusión [9]. En el caso del Ge la presión de transición de la fase cúbica a la fase metálica es a aproximadamente a 10.6 GPa [10].

El esfuerzo ideal –en un cristal libre de defectos y a  $T=0\text{ K}$ – 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 fonónica) antes de este punto, el esfuerzo máximo corresponderá al esfuerzo ideal. Estas inestabilidades pueden obtenerse mediante el diagrama esfuerzo-deformación, los criterios de Born-Wang (BW) y fonones. El criterio de fonones se refiere a la inestabilidad de la red cristalina en el bulto [11] mientras que el criterio de BW se refiere a la inestabilidad de un bloque macroscópico de la red cristalina embebido en un fluido hidrostático y es con respecto a deformaciones de ese bloque macroscópico. Mas específicamente hablando, el criterio de BW se refiere a la posibilidad de un bloque de material a ser deformado plásticamente [12] de tal forma que este mecanismo puede activarse por medio de la temperatura, por ejemplo. Cabe señalar que los valores obtenidos del esfuerzo ideal no afectan las propiedades del bulto del material ni el diagrama de fases.

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 esfuerzo ideal se puede aproximar a situaciones reales en donde la densidad de defectos es muy baja, tales como en estudios de nanoindentación. 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 [13]. 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 [13].

En este trabajo estudiamos la resistencia mecánica ideal de los elementos C, Si y Ge con estructura cúbica. 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 C, Si y Ge con estructura cúbica, mediante la Teoría del Funcional de la

Densidad (TFD) [14]. Usamos los programas CASTEP [15] y ABINIT [16] los cuales utilizan una expansión de ondas planas para la función de onda. Para la energía de intercambio-correlación usamos la Aproximación de Gradiente Generalizado parametrizada por Perdew, Burke y Enzerhof [17] y la Aproximación Local de la Densidad en la parametrización de Perdew y Zunger [18]. Para la interacción electrón-ión usamos la aproximación de pseudopotenciales construidos en el esquema de Vanderbilt [19], Lin *et al.* [20] y Troullier-Martins [21]. Para la elección del funcional de intercambio-correlación, así como del pseudopotencial, 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. El procedimiento de la minimización de errores ha sido utilizado anteriormente en el estudio del esfuerzo ideal de elementos covalentes [6]. El muestreo en la zona de Brillouin fue realizado en el esquema de Monkhorst-Pack [22], usando en promedio mallas de  $8\times 8\times 8$  para las constantes elásticas y de  $10\times 10\times 10$  para las frecuencias de vibración. Se seleccionaron energías de corte y mallas de puntos  $k$  de tal forma que los cambios en la energía total sean menores a 1 meV/átomo, garantizando una buena convergencia. Por otro lado, las constantes de elasticidad fueron calculadas por el método de deformaciones finitas, el cual ha sido aplicado a varios semiconductores con estructura cúbica, obteniendo excelentes resultados [23]. Se realizaron un conjunto de deformaciones ( $\delta$ ) en el intervalo de  $-0.0036$  a  $0.0036$  en incrementos de  $0.006$ , calculando la energía total en cada deformación. Entonces se ajustaron los datos de  $\Delta E/V-\delta$  para cada elemento a un polinomio cuadrático y las constantes elásticas fueron obtenidas a partir de las relaciones (4-11) de la Ref. 23. Este procedimiento se realizó para cada esfuerzo aplicado. Adicionalmente, se tuvo especial atención en la convergencia de las constantes de elasticidad con respecto al mallado de puntos  $k$  y energías de corte, dando errores de 0.1 GPa.

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 [24]. Para que un cristal con esta simetría sea estable elásticamente se deben de cumplir los tres criterios de Born-Wang [25]:

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

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

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

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  $C_{44}$ .

TABLA I. Parámetros de red y constantes elásticas experimentales y teóricas para cada elemento en la estructura cúbica.

Elemento	a (Å)	C <sub>11</sub> (GPa)	C <sub>12</sub> (GPa)	C <sub>44</sub> (GPa)	B (GPa)	G (GPa)	E (GPa)
<b>C</b>							
Este trabajo (GGA-PV)	3.566 (0.02)	1052 (2.1)	119 (4.8)	566.7 (1.5)			
Este trabajo (LDA-PV)	3.526 (1.14)	1104 (2.6)	140 (12)	598.7 (3.9)			
Este trabajo (LDA-PL)	3.523 (1.23)	1099 (2.5)	134 (7.2)	591.6 (2.7)			
Este trabajo (LDA-PTM)	3.542 (0.19)	1080 (0.4)	141 (12.8)	582.5 (1.2)	454	575	1070
Exp. (Refs. 26,27)	3.567	1076	125	575.8	442	533.33	1141
<b>Si</b>							
Este trabajo (GGA-PV)	5.463 (0.6)	153.49 (7.4)	56.50 (11.6)	77.50 (2.6)			
Este trabajo (LDA-PV)	5.375 (0.9)	162.85 (1.7)	63.84 (0.1)	76.82 (3.5)			
Este trabajo (LDA-PL)	5.382 (0.8)	162.95 (1.7)	63.64 (0.4)	76.75 (3.6)			
Este trabajo (LDA-PTM)	5.398 (0.6)	160.67 (3.0)	63.84 (0.1)	76.45 (3.9)	96	82	127
Exp. (Refs. 26,27)	5.429	165.78	63.94	79.62	97.887	66.623	162.91
<b>Ge</b>							
Este trabajo (GGA-PV)	5.737 (1.5)	107.59 (16.2)	36.90 (23.5)	56.66 (15.1)			
Este trabajo (LDA-PV)	5.545 (1.8)	134.06 (4.3)	49.56 (2.7)	69.31 (3.7)			
Este trabajo (LDA-PL)	5.468 (3.2)	149.66 (16.4)	56.98 (18)	74.14 (10.9)			
Este trabajo (LDA-PTM)	5.532 (2.1)	134.11 (4.3)	52 (7.74)	67.59 (1.1)	79	70	118
Exp. (Refs. 26,27)	5.652	128.53	48.26	66.80	75.017	54.519	131.66

### 3. Resultados y discusión

Como se mencionó anteriormente, hemos usado dos tipos de funcionales y tres tipos de pseudopotenciales con el objetivo de minimizar los errores de las constantes elásticas para obtener los mejores valores de la resistencia mecánica. En la Tabla I se presentan los resultados de los parámetros de red y constantes elásticas experimentales [26,27] y teóricas, así como también los módulos de compresibilidad (B), de corte (G) y de Young (E), para los elementos C, Si y Ge en la estructura cúbica. Con respecto a los parámetros de red obtenemos un buen acuerdo con los datos experimentales, con errores máximos de 1.7%. Para las constantes de elasticidad calculamos los errores para cada funcional con los tres pseudopotenciales y promediamos los valores para los tres elementos, obteniendo un error global para poder elegir un solo funcional y pseudopotencial. Así tenemos que los errores son: GGA-PV= 9.4%, LDA-PV= 3.8%, LDA-PL= 7%, LDA-PTM= 3.8% [28]. Los errores mínimos los obtenemos con LDA-PV y LDA-PTM. Para elegir uno adicionalmente tomamos en cuenta el error en los parámetros de red (LDA-PV= 1.28% y LDA-PTM= 0.96%) y por lo tanto se elige el funcional LDA con pseudopotenciales Troullier-Martins. Por lo tanto, a partir de esta parte, los cálculos presentados serán con este funcional y pseudopotencial. Por otra parte, nuestros cálculos reproducen bien el comportamiento característico de los módulos de compresibilidad ( $B_C < B_{Si} < B_{Ge}$ ), de corte ( $G_C < G_{Si} < G_{Ge}$ ) y de Young ( $E_C < E_{Si} < E_{Ge}$ ), apoyando la validación de nuestros resultados.

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. De forma general para los tres elementos, el primer criterio crece linealmente y el en el caso del segundo y tercer criterio disminuyen como función del esfuerzo. A partir de un ajuste polinomial de segundo orden a los datos calculados obtenemos que los tres elementos se vuelven inestables por el segundo criterio de estabilidad a los esfuerzos de 773, 38.6 y 40 GPa para el C, Si y Ge respectivamente. Esto significa que con la aplicación de esfuerzos hidrostáticos estos elementos tienden a reducir su simetría. La secuencia de los valores de los esfuerzos máximos obtenidos es  $\sigma_C < \sigma_{Si} < \sigma_{Ge}$ . Para verificar este resultado repetimos los cálculos con LDA-PV y LDA-PL y obtenemos la misma secuencia.

Para explicar los cambios electrónicos presentados en los sistemas debidos a la aplicación de esfuerzos, hemos calculado la estructura de bandas para el C, Si y Ge (Figs. 2 y 3). Las características generales de la estructura de bandas han sido discutidas previamente y sólo resaltaremos las diferencias que se presentan bajo la aplicación de esfuerzo. Para cada figura hemos graficado la estructura de bandas a  $\sigma = 0$  GPa y al esfuerzo donde ocurre la inestabilidad elástica. Para el C (Figs. 4) podemos observar que la banda de energía prohibida aumenta en el esfuerzo máximo. Para examinar si este efecto tiene relación con la fuerza del enlace químico se realizaron cálculos adicionales en BN y SiC con estructura cúbica, que tienen una covalencia mayor que el Si y Ge. Se observó que estos dos materiales fallan también por el segundo criterio y en el esfuerzo donde ocurre la inestabilidad elástica (463 y

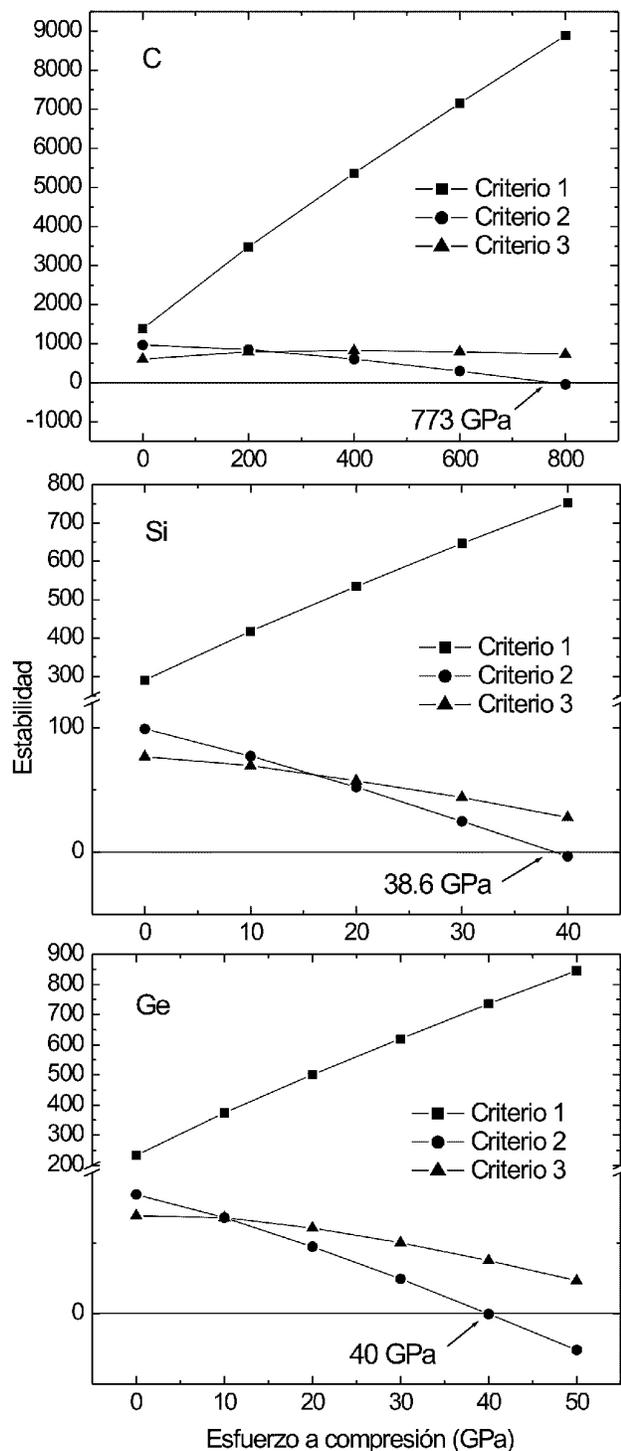


FIGURA 1. Criterios de Born-Wang como función del esfuerzo aplicado para C, Si y Ge.

117 GPa para BN y SiC) la banda de energía prohibida también aumenta. Para explicar este comportamiento, en la Fig. 3 se muestran las densidades de carga para C, BN y SiC con isosuperficies de  $0.02 \text{ eV}/\text{\AA}^3$ . Como se puede observar, en ausencia de esfuerzo el C y BN muestran una carga localizada que le da un carácter covalente. El SiC muestra una carga covalente y una pequeña proporción de carga en los vértices

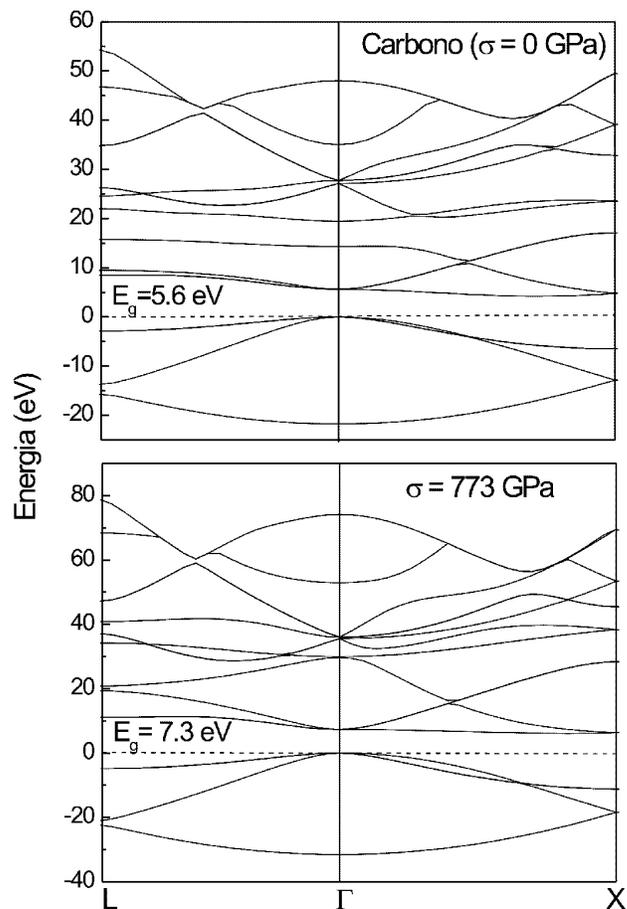


FIGURA 2. Estructura de bandas para C, a  $\sigma = 0 \text{ GPa}$  y en el esfuerzo máximo ( $\sigma_{\text{max}}$ ).

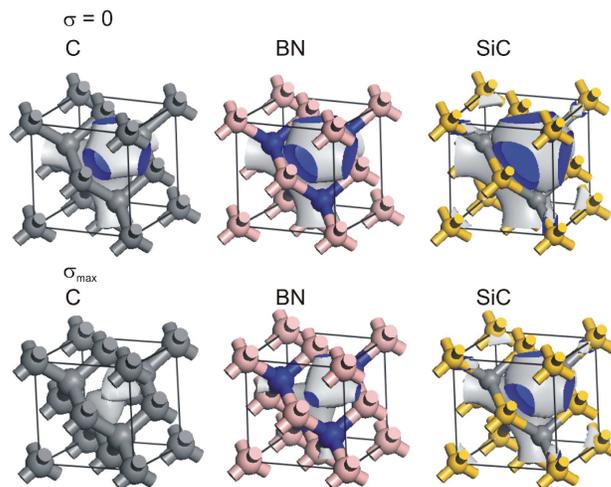


FIGURA 3. Densidades de carga para C, BN y SiC con estructura cúbica, en ausencia de esfuerzo y en el esfuerzo máximo.

de los átomos, que le da un ligero carácter iónico, a ese nivel de isosuperficie. En el esfuerzo máximo se observa una mayor localización de la carga en el C y en menor grado en BN y SiC. Esta mayor localización de carga implica una mayor energía de amarre para un electrón en dicha carga, en los orbitales más externos. Este fenómeno de redistribución de la

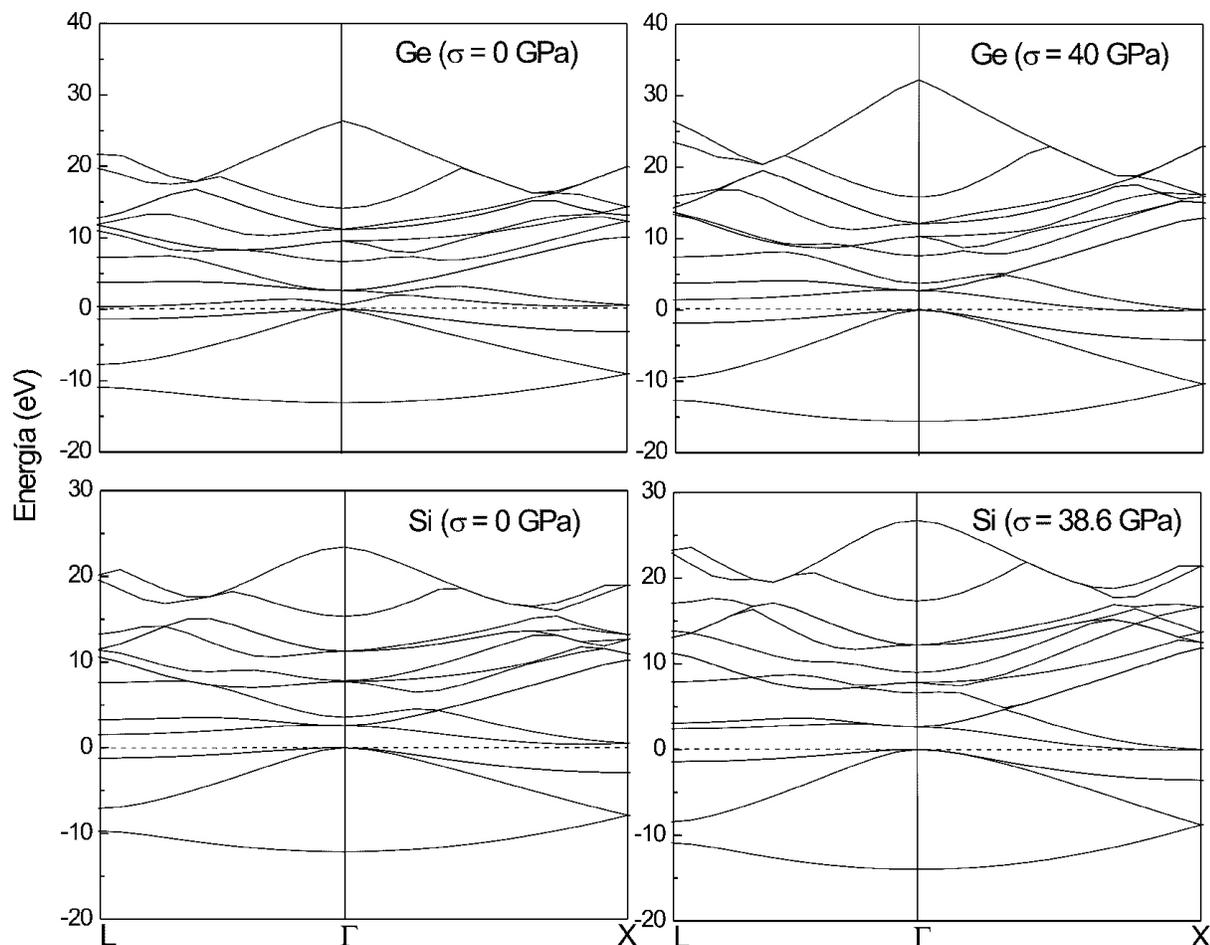


FIGURA 4. Estructura de bandas para C, Si y Ge a  $\sigma = 0$  GPa y en el esfuerzo máximo ( $\sigma_{\max}$ ).

TABLA II. Poblaciones atómicas de Mulliken a  $\sigma = 0$  GP y  $\sigma_{\max}$  (valores en paréntesis) para C, Si y Ge.

Elemento	s	p	Total	$\Delta_{ps}$	% $\Delta_{ps}$
C	1.07 (0.83)	2.93 (3.17)	4	1.86 (2.34)	148 (152)
Si	1.36 (1.26)	2.64 (2.74)	4	1.28 (1.48)	102 (96)
Ge	1.37 (1.23)	2.63 (2.77)	4	1.26 (1.54)	100 (100)

densidad electrónica en los átomos de la celda unitaria puede ser el principal causante de que la energía de banda prohibida aumenta con el esfuerzo aplicado.

Resultados para Si y Ge, se muestran en la Fig. 4 donde se comparan las estructuras de bandas en ausencia de esfuerzo y con esfuerzo aplicado. En el Si no hay cambio considerable en el valor de la banda prohibida de energía, resultados que coinciden con Gaál-Nagy *et al.* [30], quienes estudian al Si a presiones de 0-15.8 GPa. Por otro lado, en el Ge se observa un aumento en la banda de energía prohibida, comportamiento que ha sido observado a nivel experimental [31]. Este aumento de la banda de energía prohibida en el punto Gamma explica la mayor resistencia mecánica que se obtiene para Ge. De forma similar, otros autores [32] han explicado que

los electrones 3d adicionales del Ge generan una repulsión interatómica adicional con los electrones del carozo, provocando valores mayores para transiciones de fase con respecto al Si.

De forma cuantitativa se explica la tendencia obtenida en los valores de los esfuerzo máximos a partir de las poblaciones atómicas de Mulliken calculadas con el formalismo reportado por Segall *et al.* [33]. Para los tres elementos (C, Si y Ge) tenemos 4 electrones de valencia y en la Tabla II se muestran la contribución de poblaciones atómicas de los niveles *s* y *p*. Haciendo la diferencia de las poblaciones de los niveles *p* con respecto a los niveles *s* ( $\Delta_{ps}$ ) y normalizando al 100% ( $\Delta_{ps}$ ) para el Ge, tenemos los valores de 102 y 148% para Si y C, a  $\sigma=0$  GPa (Tabla II). Sin embargo, en el esfuerzo máximo estos valores cambian a 96 y 152% (valores entre paréntesis, Tabla II). Esto significa una mayor transferencia de carga en Ge (con respecto al Si) contribuyendo a un enlace químico más fuerte y por lo tanto se explica la tendencia del Ge a tener una mayor resistencia mecánica.

De acuerdo a la definición de esfuerzo ideal, la primera inestabilidad que se presente a cierto valor de esfuerzo, elástica o fonónica, corresponderá al esfuerzo máximo ideal. Verificamos la estabilidad fonónica del C en el esfuerzo máximo

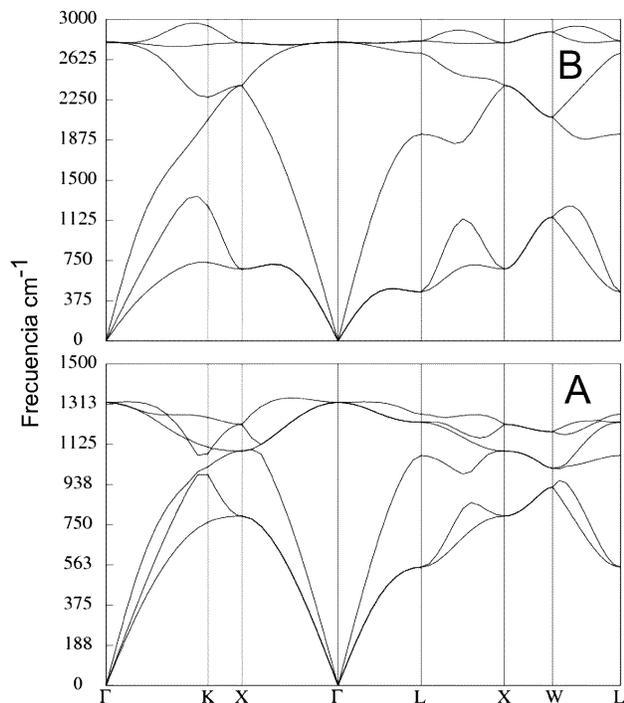


FIGURA 5. Relaciones de dispersión para el carbono en la estructura diamante. En ausencia de esfuerzo (A) y 1500 GPa (B).

y 1500 GPa permaneciendo estable (Fig. 5) [34], en buen acuerdo con Correa *et al.* [5]. Por lo tanto, el valor que nosotros obtenemos mediante los criterios de estabilidad elástica (773 GPa) corresponde al valor del esfuerzo máximo ideal del C. En este sentido, de acuerdo al significado físico de los criterios de estabilidad elástica existe la posibilidad de que el C pueda ser deformado plásticamente a este valor de esfuerzo a temperaturas muy bajas. Resultados similares han sido reportados [12] en los cuales el C podría ser deformado plásticamente a un valor de 300 GPa a temperatura ambiente. Por otro lado, para el Si y Ge obtenemos el esfuerzo máximo a partir de inestabilidades fonónicas de 19.5 GPa y 21.7 GPa, para modos acústicos transversales en el punto X de alta simetría (ver Fig. 6). Estos valores están cercanos a los valores reportados por Wu [35]. Debido a que el criterio de fonones se refiere a la inestabilidad de la red cristalina en el bulto, la aplicación de esfuerzos hidrostáticos provocarán una transición de fase, mientras que en el C el esfuerzo máximo provocará una deformación plástica antes que una transición de fase.

#### 4. Conclusiones

Se realizó un estudio de la resistencia mecánica ideal de C, Si y Ge mediante cálculos de primeros principios. A partir de los criterios de estabilidad elástica de Born-Wang y estabilidad fonónica se obtiene la secuencia de esfuerzos máximos de  $\sigma_C < \sigma_{Ge} < \sigma_{Si}$ . Estos valores fueron explicados en términos de un aumento de la banda de energía prohibida para C

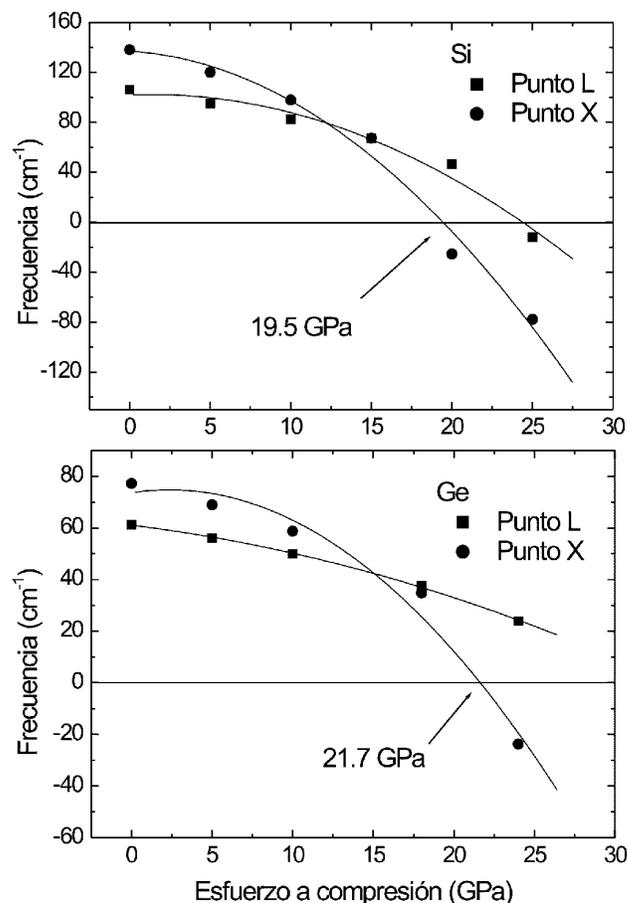


FIGURA 6. Frecuencias de vibración para Si y Ge en los puntos X y L de alta simetría como función del esfuerzo aplicado. Los puntos (cuadrados y círculos) son datos calculados sin interpolación. Las líneas continuas son ajustes cuadráticos.

y Ge provocado por una concentración de la densidad de carga, así como también de una mayor transferencia de carga, bajo la aplicación de esfuerzos mecánicos. Por otro lado, en el C el esfuerzo máximo es debido a inestabilidades elásticas mientras que en el Si y Ge a inestabilidades fonónicas. Estos comportamientos sugieren la posibilidad de deformar plásticamente al C mientras que el Si y Ge el esfuerzo máximo provocará una transición de fase.

#### Agradecimientos

Los autores agradecen los excelentes comentarios del árbitro anónimo que hicieron mejorar sustancialmente este trabajo. Este trabajo fue parcialmente apoyado por la VIEP-BUAP (Proyecto No. BAHA-ING11-I), FI-BUAP y Conacyt. Se agradece el tiempo de trabajo al Centro Nacional de Supercomputo (CNS-IPICYT, México).

1. D. Roundy and M.L. Cohen, *Phys. Rev. B* **64** (2001) 212103.
2. F. Bundy, T. Hall, H.M. Strong, y R.H. Wentorf, (1955) *Nature* **176**, 51–54.
3. R. H. Telling, C. J. Pickard, M. C. Payne, and J. E. Field, *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 5160.
4. Y. Umeno and M. Cerný, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 100101 (R).
5. A.A. Correa, S.A. Bonev, and G. Galli, *PNAS* **103** (2005) 1204.
6. Y. Umeno and M. Èerný, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 100101 (R).
7. M. I. McMahon, R. J. Nelmes, N. G. Wright, and D. R. Allan, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 739.
8. F. Occelli, P. Loubeyre and R. Letoullec, *Nature* **2** (2003) 151.
9. M. D. Knudson, M. P. Desjarlais, D. H. Dolan, *Science* **322** (2008) 1822.
10. C. S. Menoni, J. Z. Hu, and I. L. Spain, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 362.
11. J. Li, K. J. Van Vliet, T. Zhu, S. Yip y S. Suresh, *Nature* **418** (2002) 307.
12. S. Ogata and J. Li, *J. Applied Physics* **106** (2009) 113534.
13. D. M. Clatterbuck, D. C. Chrzan, J. W. Morris Jr., *Scripta Materialia* **49** (2003) 1007.
14. P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136** (1964) B864; W. Kohn and L. Sham, *Phys. Rev.* **140** (1965) A1133.
15. S. J. Clark, M. D. Segall, C. J. Pickard, P. J. Hasnip, M. J. Probert, K. Refson, M. C. Payne, *Zeitschrift fuer Kristallographie* **220** (2005) 567.
16. X. Gonze, J.-M. Beuken, R. Caracas, F. Detraux, M. Fuchs, G.-M. Rignanese, L. Sindic, M. Verstraete, G. Zerah, F. Jollet, M. Torrent, A. Roy, M. Mikami, Ph. Ghosez, J.-Y. Raty, y D.C. Allan, *Computational Materials Science* **25** (2002) 478; X. Gonze, G.-M. Rignanese, M. Verstraete, J.-M. Beuken, Y. Pouillon, R. Caracas, F. Jollet, M. Torrent, G. Zerah, M. Mikami, Ph. Ghosez, M. Veithen, J.-Y. Raty, V. Olevano, F. Bruneval, *Z. Kristallogr.* **220** (2005) 558.
17. L. Reining, R. Godby, G. Onida, D.R. Hamann, and D.C. Allan, J. P. Perdew, K. Burke, M. Enzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.
18. J. P. Perdew, A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23** (1981) 5048.
19. D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **41** (1990) 7892.
20. J. S. Lin, A. Qteish, M. C. Payne, and V. Heine, *Phys. Rev. B* **47** (1993) 4174.
21. N. Troullier and José Luriaas Martins, *Phys. Rev. B* **43** (1991) 1993.
22. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **16** (1977) 1748.
23. S. Q. Wang, and H. Q. Ye, *Phys. Stat. Sol. (b)* **240** (2003) 45.
24. W. Voigt, *Annals of Physics*, (Leipzig) **33** (1889) 573; R. F. S. Hearmon, “An introduction to applied anisotropic elasticity”, (Oxford: University Press; 1961).
25. J. Wang, J. Li, S. Yip, S. Phillpot and D. Wolf, *Phys. Rev. B* **52** (1995) 12627.
26. J. Donohue, “The structure of elements” (Wiley New York, 1974).
27. M. Levi, H. E. Bass, R. R. Stern, “*Handbook of elastic properties of solids, liquids, and gases*”, Volume II, (Academic Press, 2001).
28. GGA-PV: Aproximación de Gradiente Generalizado, Pseudopotenciales Vanderbilt, LDA-PV: Aproximación Local de la Densidad, Pseudopotenciales Vanderbilt, LDA-PL: Aproximación Local de la Densidad, Pseudopotenciales de Lin, LDA-PTM: Aproximación Local de la Densidad, Pseudopotenciales Troullier-Martins
29. M. I. McMahon, R. J. Nelmes, N. G. Wright, and D. R. Allan, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 739
30. K. Gaál-Nagy, M. Schmitt, P. Pavone, D. Strauch, *Computational Materials Science* **22** (2001) 49.
31. K. J. Chang, and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 8581.
32. S. P. Lewis, and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **48** (1993) 16144.
33. M. D. Segall, C. J. Pickard, R. Shah y M. C. Payne, *Mol. Phys.*, **89** (1996) 571; M. D. Segall, R. Shah, C. J. Pickard y M. C. Payne, *Phys. Rev. B* **54** (1996) 16317.
34. Se calcularon las frecuencias de vibración para C, Si y Ge mediante la Teoría de Respuesta Lineal (X. Gonze and C. Lee, *Phys. Rev. B* **55** (1997) 10355) usando el código ABINIT. Se realizaron estudios de convergencias en puntos  $k$  y energías de corte como función de las frecuencias de vibración, donde se obtienen errores de  $1 \text{ cm}^{-1}$ . Se calcularon entonces las relaciones de dispersión para C, Si y Ge en ausencia de presión en toda la zona de Brillouin obteniendo un buen acuerdo con reportes previos: [P. Pavone, K. Karch, O. Schütt, D. Strauch, and W. Windl, *Phys. Rev. B* **48** (1993) 3156] para Carbono y [S. Wei, M. Y. Chou, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 2221] para Si y Ge. Por lo tanto, se calcularon las relaciones de dispersión para cada elemento como función del esfuerzo aplicado y se observó que para los elementos Si y Ge a cierto esfuerzo se obtenían frecuencias imaginarias en las direcciones X y L de alta simetría. Por lo tanto, para minimizar los errores debidos a las interpolaciones entre puntos de alta simetría, las frecuencias reportadas en la Figura 6 son calculadas sin interpolación.
35. B. R. Wu, *Chinese Journal of Physics* **44** (2006) 454.