



Estabilidad mecánica de actínidos alrededor de la transición ligeros-pesados

José Jorge Ríos Ramírez¹, Juan Francisco Rivas Silva¹, Antonio Flores Riveros¹
¹ Instituto de Física Luis Rivera Terrazas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.
Apdo. Postal J48, Col. San Manuel,
Puebla, Pue. C. P. 72570; México
e-mail: jríos@ifuap.buap.mx

A lo largo de la capa 5f, la adición de un electrón más, después del Plutonio, parece generar una respuesta diferente en el enlace químico. Esta marcada discontinuidad vuelve a los estados 5f similares a un comportamiento presentado por las tierras raras 4f, es decir, localización electrónica. Contrario a los estados itinerantes, encontrados al comienzo de esta misma serie, relacionados con electrones 3d. Este carácter electrónico dual divide a los actínidos en “ligeros” y “pesados”, con estructuras cristalinas de extraordinaria complejidad para los primeros casos y sistemas con alta simetría para los últimos. En el presente trabajo las estructuras FCC del δ -plutonio y β -americio son estudiadas por cálculos ab-initio DFT corregidos por dos aproximaciones de campo-medio-estático para alta correlación (DFT+U [1] and DFT+eece [2]) con acoplamiento espín-órbita. Ambas configuraciones magnéticas posibles son comparadas realizando los cálculos de las constantes elásticas cúbicas: C_{11} , C_{12} and C_{44} , por el método de deformaciones finitas, por medio de deformaciones isotrópicas y a volumen constante: tetragonales y monoclinicas. Los resultados, bajo este nivel de teoría, muestran que los estados 5f en actínidos pesados necesitan aproximaciones mayores a DFT estándar para ser modelados y determinar así la estabilidad mecánica de sus estructuras cristalinas en el estado no-magnético encontrado en mediciones experimentales [3].

Referencias

1. Anisimov, V. I.; Solovyev, I. V.; Korotin, M. A.; Czyżyk, M. T.; Sawatzky, G. A. Density-functional theory and NiO photoemission spectra. Phys. Rev. B. 1993, 48, 16929.
2. Tran, F.; Blaha, P.; Schwarz, K.; Novák, P. Hybrid exchange-correlation energy functionals for strongly correlated electrons: Applications to transition-metal monoxides. Phys. Rev. B. 2006, 74, 155108.
3. Lashley, J. C.; Lawaon, A.; McQuenney, R. J.; Lander, G. H. Absence of magnetic moments in plutonium. Phys. Rev. B. 2005, 72, 054416.