

DETERMINACIÓN DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES, ELECTRÓNICAS Y ÓPTICAS DEL ÓXIDO DE ESTRONCIO MEDIANTE LA TEORÍA DE DENSIDAD FUNCIONAL

DETERMINATION OF THE STRUCTURAL, ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF STRONTIUM OXIDE FROM DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Gabriel A. Fonseca^{1*}, María A. Puerto¹, Wilmer Y. Córdoba¹, William O. Sosa^{1,2},
Jose Otálora¹, Jairo A. Rodríguez²

(1) Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Grupo Física de Materiales (GFM),
Tunja 15001000 - Colombia

(2) Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Física, Grupo de Estudio de Materiales (GEMA),
Bogotá 11001000 - Colombia

*autor de contacto (e-mail: blacksax18@gmail.com)

Recibido: 22/03/2011 - Evaluado: 19/04/2011 - Aceptado: 30/06/2011

RESUMEN

Se realizó un estudio de primeros principios de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del SrO en la fase cristalina Fm-3m por medio de la teoría de densidad funcional (DFT), utilizando el método de ondas planas aumentadas y linealizadas de potencial completo (FP-LAPW) junto con la aproximación de gradiente generalizado (GGA) para la energía de intercambio y correlación. Los parámetros estructurales optimizados se encuentran en gran acuerdo con los datos experimentales, constante de red $a=9,826$ Bohr, energía de cohesión $E_0 = -0,764$ Ry, modulo de volumen $B = 83$ GPa y su derivada con la presión $B' = 4,71$. Los cálculos de estructura electrónica revelan una brecha indirecta de 3,392 eV entre las direcciones Γ y X en la zona de Brillouin, finalmente se obtuvo la absorción, constante dieléctrica e índice de refracción en función de la energía, por medio de la aproximación de fase aleatoria.

ABSTRACT

It was performed a first-principle study of the structural, electronic, and optical properties of SrO in the crystallization phase Fm-3m by means of density functional theory (DFT), using the full potential linearized augmented plane wave method (FP-LAPW) along with the generalized gradient approximation (GGA) for the exchange-correlation energy. The relaxed structural parameters for the ground state are found to be in a good agreement with the experimental data, lattice constant $a = 9,826$ Bohr, cohesive energy $E_0 = -0,764$ Ry, bulk modulus $B = 83$ GPa and $B' = 4,71$. The calculated electronic structure yield an indirect band gap of 3,392 eV between Γ and X points in the Brillouin zone, finally it was obtained the absorption, dielectric constant and the refraction index spectrums as energy functions by means of the random phase approximation (RPA).

Palabras clave: óxido de estroncio; estructura de bandas; propiedades ópticas; teoría del funcional densidad
Keywords: strontium oxide; band structure; optical properties; density functional theory

INTRODUCCIÓN

El SrO es un óxido alcalinotérreo de gran importancia tecnológica y científica, en catálisis para procesos de óxido-reducción y absorción en superficies, tanto a nivel experimental (Mulla & Choudhary, 2004; Liu *et al.*, 2007) como a nivel teórico (Abdel & Shalabi, 2002; Abdel, 2007; Abdel *et al.*, 2008), así, como propiedades termodinámicas y elásticas a alta presión (Guo *et al.*, 2006), formación de defectos puntuales (Blake *et al.*, 1971; Abraham *et al.*, 1976), propiedades ópticas como fotoluminiscencia, emisión fotoeléctrica y emisión termoiónica en películas delgadas (Woods & Wright, 1954; Mee, 1963; Jones & Mee, 1968). El SrO es además uno de los óxidos precursores de alta pureza utilizados en el grupo GFM para la producción de materiales por medio del método estándar de reacción de estado sólido, sobre el cual no se encontró una caracterización teórica de sus propiedades ópticas, debido a esto se estudia teóricamente su fase de cristalización Fm-3m con el fin de permitir una caracterización más a fondo del comportamiento electrónico, estructural y su respuesta óptica, buscando un mayor aprovechamiento de sus propiedades. Al ser un sólido un sistema de muchas partículas de naturaleza cuántica, el problema que se obtiene no se puede resolver analíticamente, por lo cual se han desarrollado métodos y aproximaciones para resolver el sistema, entre los cuales la Teoría del Funcional Densidad (DFT) ofrece grandiosos resultados a partir de primeros principios; fue desarrollada por Hohenberg-Kohn en 1964 y Kohn-Sham en 1965, basándose en la densidad electrónica como variable fundamental, en vez de la función de onda multielectrónica, reduciendo drásticamente el número de variables, lo que se traduce en ahorro de tiempo computacional y la posibilidad de trabajar sistemas periódicos infinitos (Joubert, 1998).

Según la DFT la energía alcanza un mínimo para la densidad del estado base a través de principios variacionales (Sancho, 2001) y cualquier observable para el estado base del sistema electrónico en estado estacionario se puede calcular de forma exacta a partir de la densidad electrónica como un funcional de esta. Kohn y Sham (1965), aproximan un sistema de electrones fuertemente interactuantes a un sistema artificial de electrones no interactuantes, que se encuentran bajo la acción de un potencial efectivo generado por los electrones restantes de modo que las densidades del estado base coinciden y el funcional de energía se expresa como:

$$E_{KS}[\rho(\mathbf{r})] = T_0[\rho(\mathbf{r})] + E_H[\rho(\mathbf{r})] + E_{ext}[\rho(\mathbf{r})] + E_{xc}[\rho(\mathbf{r})] \quad (1)$$

Donde el primer término es la energía cinética del sistema no interactuante, el segundo término es la repulsión coulombiana entre los electrones, el tercer término es la energía debida a la interacción electrón-ión y el último término es la energía de intercambio y correlación que incluye los efectos no clásicos de la interacción coulombiana y la diferencia de energías entre el sistema real interactuante y el sistema que se considera. Los efectos no clásicos que se consideran son debidos al intercambio electrónico que surge de la separación espacial entre dos electrones del mismo espín (principio de exclusión de Pauli) y a la correlación, asociada a la dependencia espacial del movimiento de los electrones que interactúan coulombianamente. Los estados electrónicos se conocen como los orbitales de Kohn-Sham, $\psi_i(\mathbf{r})$ con energía E_i y son la solución de las ecuaciones de Kohn-Sham:

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_H(\mathbf{r}) + v_{xc}(\mathbf{r}) + v_{ext}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = E_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (2)$$

Estas ecuaciones describen a un electrón moviéndose bajo el potencial efectivo generado por los iones y los demás electrones. La densidad electrónica del estado base está relacionada con la función de onda como:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) \quad (3)$$

Así los potenciales que dependen de la densidad electrónica a su vez dependen de las funciones de onda $\psi_i(\mathbf{r})$ que se quieren encontrar. Las ecuaciones (2), definen un problema autoconsistente en el que se utiliza una densidad inicial para encontrar v_H y v_{xc} luego se resuelve la ecuación orbital de Kohn-Sham (2) y finalmente se

calcula la nueva densidad electrónica con los valores de las ψ_i halladas anteriormente, el ciclo se repite hasta cumplir la convergencia del estado base, obteniéndose una densidad $\rho(\mathbf{r})$ que está de acuerdo con la densidad inicial y que minimiza el funcional de energía $E_s = \sum_i E_i$ (Armiento, 2005).

Si se conociera la forma de cada funcional en las ecuaciones de Kohn-Sham el problema se podría solucionar completamente, pero no se conoce la forma exacta del funcional de intercambio-correlación, debido al comportamiento cuántico de la interacción electrónica. Aún así, se han desarrollado aproximaciones para este término. Las dos aproximaciones principales para la E_{xc} son la aproximación de densidad local de espín (LSD) y la aproximación de gradiente generalizado (GGA), siendo esta última más exacta, ya que considera la dependencia con la densidad electrónica y adicionalmente con gradiente de dicha densidad:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho, |\Delta\rho|] = \int \rho(\mathbf{r}) F_{xc}(\rho, |\Delta\rho|) d\mathbf{r}, \quad (4)$$

existen varias parametrizaciones para el funcional F_{xc} . La más exitosa ha sido la PBE-96 (Perdew *et al.*, 1996) donde se dice que la GGA mejora la descripción de las propiedades físicas de los átomos, moléculas y sólidos hechas con LSD y se presenta una manera sencilla de hacer GGA a partir de constantes fundamentales. Ésta es la parametrización usada en el cálculo. Otra parametrización es PW91 (Perdew & Wang, 1992).

Los orbitales de Kohn-Sham deben ser expandidos en términos de ciertas funciones base, en este trabajo se utiliza para ello el método de ondas planas aumentadas y linealizadas de potencial completo FP-LAPW (Persson & Ambrosch-Draxl, 2007), el cual consiste en expandir en términos de armónicos esféricos dentro de la esfera atómica definida por el radio muffin-tin y en términos de ondas planas en las regiones intersticiales, por lo cual es más exacto que otros métodos como los pseudopotenciales.

MÉTODO COMPUTACIONAL

Los cálculos de propiedades electrónicas, estructurales y ópticas del SrO se realizaron solucionando las ecuaciones de Kohn-Sham dentro de un esquema autoconsistente, usando el método FP-LAPW dentro del formalismo de la teoría del funcional densidad (DFT), junto con la aproximación de gradiente generalizado (GGA) usando la parametrización PBE-96 para la energía de intercambio y correlación E_{xc} , como es implementado en el código Wien2k (Schwarz, 2001). Las posiciones atómicas son las de una red FCC cuya base atómica consiste de el Sr en la posición (0, 0, 0) y el O en la posición (0, 0, 1/2). Los cálculos se desarrollaron con 5000 puntos-k en la primera zona de Brillouin y un parámetro $RK_{max}=7,00$ siendo R el menor radio muffin-tin y K_{max} el vector de onda de corte de la base de ondas planas, éste parámetro determina la convergencia de los cálculos en términos de la energía. Los radios de muffin-tin seleccionados fueron $R_{MT}(Sr) = 2,00$ Bohr, $R_{MT}(O) = 1,60$ Bohr, basados en los radios iónicos de cada elemento, ya que éste es el tipo de enlace que se espera, de modo que los cálculos presentaran convergencia, sin afectar apreciablemente la exactitud. Los parámetros de convergencia fueron la energía $\delta E = 0,0001$ Ry y la carga $\delta Q = 0,0001$ e, el ciclo concluye cuando se alcanzan estos criterios para tres iteraciones consecutivas. La separación entre los estados de Core y de Valencia se escogió como $-6Ry$. El sistema se soluciona para diferentes valores de la constante de red, obteniendo así el gráfico de energía vs. volumen que se ajusta a la ecuación de estado de Murnaghan (Murnaghan, 1944), permitiendo determinar el comportamiento estructural del estado base. Una vez obtenido el estado de equilibrio se soluciona el sistema para esta configuración, encontrando la estructura de bandas de energía en función del vector k a través de los autovalores de las ecuaciones de Kohn-Sham y la densidad de estados (DOS) usando el método del tetraedro modificado de Blöchl para la integración en la primera zona de Brillouin (Blöchl *et al.*, 1994).

La componente imaginaria del tensor dieléctrico puede ser calculada por medio del conocimiento de la estructura de bandas electrónicas en el límite de la óptica lineal y dentro del formalismo de la aproximación de fase aleatoria (RPA) donde se obtiene la expresión (Bohm & Pines, 1953):

$$\text{Im}\epsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{4\pi e^2}{m^2\omega^2} \sum_{c,v} \int dk \langle c_k | p^\alpha | v_k \rangle \langle v_k | p^\beta | c_k \rangle \delta(\epsilon_{ck} - \epsilon_{vk} - \omega) \quad (5)$$

Para esto se necesita una malla densa de puntos-k en la primera zona de Brillouin, por lo que se utilizaron 40000 puntos-k para solucionar las ecuaciones de Kohn-Sham, la componente real del tensor dieléctrico se obtiene apartir de la Ec.6 mediante las relaciones de Kramers-Kronig (Kittel, 1966):

$$\text{Re}\epsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \text{Im}\epsilon_{\alpha\beta}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (6)$$

La determinación del tensor dieléctrico complejo permite la obtención de los espectros ópticos, que describen la respuesta del sistema respecto a la propagación de una onda electromagnética a través del material, el índice de refracción $n(\omega)$, el coeficiente de extinción $\kappa(\omega)$ y el coeficiente de absorción $A_{ii}(\omega)$ son obtenidos a partir de las relaciones:

$$n_{ii} = \sqrt{\frac{|\epsilon_{ii}(\omega)| + \text{Re}\epsilon_{ii}(\omega)}{2}} \quad (7)$$

$$n_{ii} = \sqrt{\frac{|\epsilon_{ii}(\omega)| - \text{Re}\epsilon_{ii}(\omega)}{2}} \quad (8)$$

$$A_{ii}(\omega) = \frac{2\omega\kappa(\omega)}{c} \quad (9)$$

Estos cálculos ópticos se realizaron con el paquete OPTIC incluido en el código Wien2k (Ambrosch-Draxl & Sofo, 2006).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Con los cálculos DFT se obtiene el valor de la energía total del sistema y de la densidad de carga. Con esas dos cantidades físicas se deducen otras propiedades de los sólidos, como es por ejemplo, la energía de cohesión del sistema, definida como $E_{coh} = E_{total(DFT)} - \sum_i N_i E_i^{\text{átomo aislado}}$, donde N_i es el número de átomos de la especie i . Ésta energía da cuenta de la estabilidad de las estructuras cristalinas, ya que expresa la energía que se debe emplear para separar los átomos constitutivos del cristal, llevarlos hasta el infinito y dejarlos allí en reposo. Por ello, entre mayor sea esa energía más difícil se hará "desbaratar" el sólido.

Se obtuvo la gráfica de energía vs. volumen (Figura 1), ajustada con la ecuación de estado de Murnaghan, donde el punto de equilibrio corresponde a presión cero y la concavidad de la curva da cuenta del módulo de volumen, inverso de la compresibilidad. En la Tabla 1 se registran los valores de los parámetros estructurales para la configuración de mínima energía, parámetro de red a_0 , energía de cohesión E_0 , módulo de volumen isotérmico B_0 y su primera derivada con la presión B'_0 , también se registran datos experimentales que muestran la gran exactitud de nuestros cálculos y validan los resultados (Madelung, 2004). Una vez obtenidos los parámetros para el estado de mínima energía se calculó la estructura de bandas de energía y densidad de estados (DOS) para esta configuración. En la Figura 2 se presenta la estructura de bandas del SrO con un gap indirecto entre las direcciones Γ y X de 3,392 eV y En la Tabla 2 se presentan los resultados de nuestros cálculos LAPW y valores experimentales (Madelung, 2004) de los gaps en las direcciones de alta simetría y el Gap mínimo, donde se observa una diferencia apreciable. Sin embargo, es bien sabido que la GGA subestima el valor del Gap de energía (Yakovkin & Dowben, 2007), lo cual es un hecho sistemático en los métodos ab-initio, y una característica intrínseca de la DFT dado su carácter de teoría del estado base, mientras que las bandas de conducción corresponden a estados excitados, así,

la importancia radica realmente en la parte cualitativa de las bandas, en cuanto a forma y ordenamiento de los niveles de energía lo cual es de gran importancia y predice con gran acuerdo la GGA.

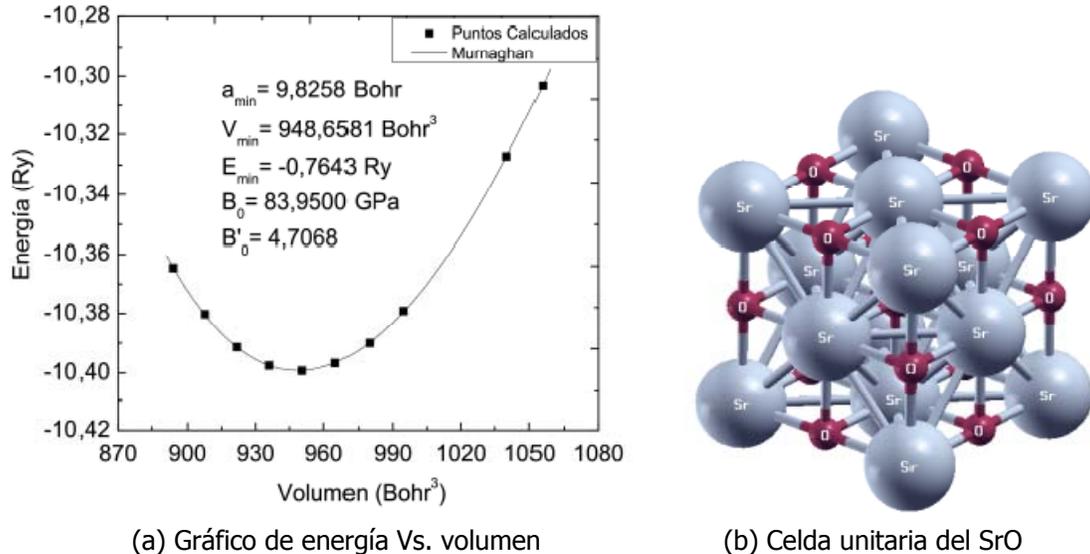


Fig. 1: Gráfico de energía Vs. volumen ajustado con la ecuación de estado de Murnaghan (a) Para la fase Fm-3m del SrO (b).

Tabla 1: Comparación de los parámetros estructurales de la fase Fm-3m del SrO obtenidos a partir de la DFT y los experimentales.

Parámetros	Calculados	Experimentales (Madelung, 2004)	Error porcentual
$a_{\min}(\text{bohr})$	9,826	9,749	0,78%
$V_{\min}(\text{Bohr}^3)$	948,658	926,603	2,32%
$E_{\min}(\text{Ry})$	-0,764	0,768	0,50%
B_0 (GPa)	83	88	4,82%
B'_0	4,707	-	-

Tabla 2: Comparación entre los valores para los gap de energía calculados y los experimentales, entre varios caminos de alta simetría.

Parámetros	Calculados	Experimentales (Madelung, 2004)	Error porcentual
$E_{\text{gap}}[\Gamma_{8v} - \Gamma_{6xc}](\text{eV})$	3,802	5,896	55,08%
$E_{\text{gap}}[X_{7v} - X_{7c}](\text{eV})$	3,469	6,280	33,12%
$E_{\text{gap}}[L_{3v} - L_{2c}](\text{eV})$	7,520	5,970	20,61%
$E_{\text{gap}}[\text{min}](\text{eV})$	3,392	5,220	53,91%

La DOS (Figura 3) se obtiene a través del método del tetraedro modificado de blöchl para la integración en la primera zona de brillouin. La estructura de bandas con las DOS parciales muestran que los estados de core están en su mayoría conformados por estados p del Sr y en menor grado por s del O, las bandas de valencia están conformadas casi en su totalidad por la contribución de los estados p del O y una débil contribución de

estados p del Sr, además se observa que no hay contribuciones por parte de orbitales s . en cuanto a las bandas de conducción los estados predominantes son los d del Sr y en menor grado los p por parte del O, se presentan en esta zona débiles contribuciones por parte de los orbitales s de ambos átomos. De esto se infiere que el SrO es un sólido iónico en el que los dos electrones de valencia del Sr ($5s^2$) llenan la capa del O ($2p^4$) quedando los electrones restantes, estados $4p$ del Sr, fuertemente ligados a éste y por ende conforman los estados del core y no la banda de valencia, esta ultima estará habitada por los electrones de valencia del O ($2p$), finalmente los orbitales $4d$ del Sr que son los que continúan a los $5s$ de valencia, conforman las bandas de conducción junto con orbitales p del O ya que en el átomo aislado los orbitales $2p$ se encuentran parcialmente desocupados.

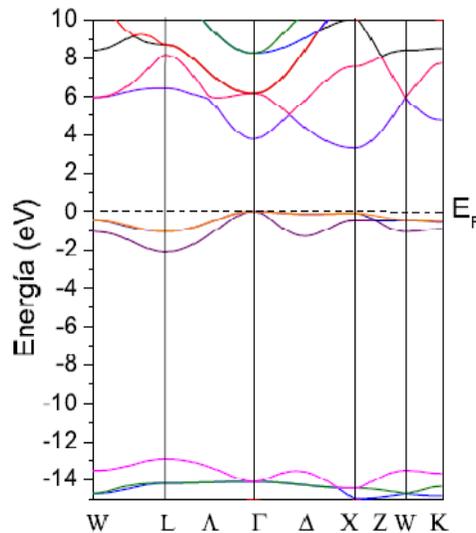


Fig. 2: Cálculo FP-LAPW de la estructura de bandas de energía del SrO.

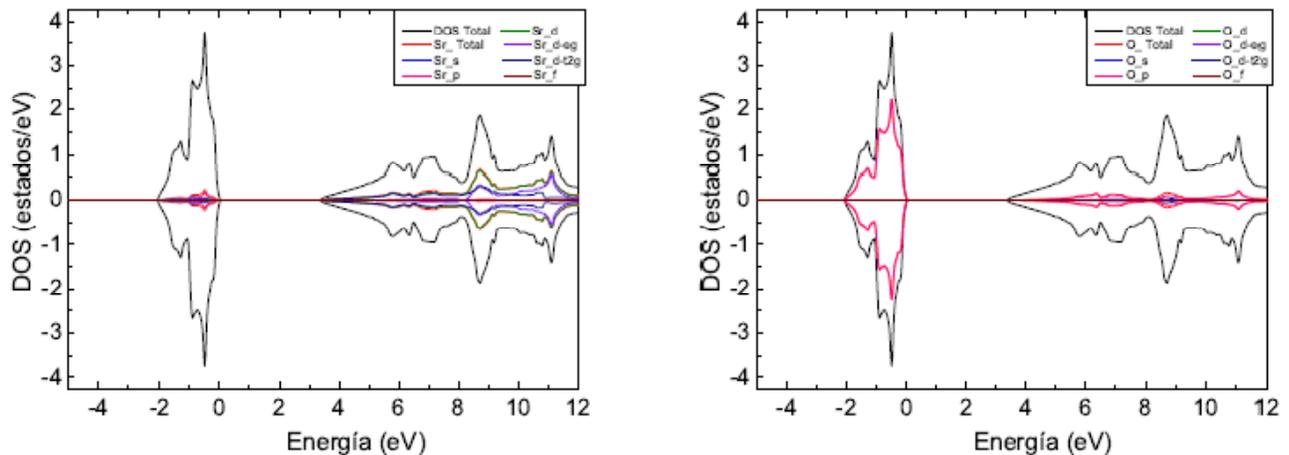
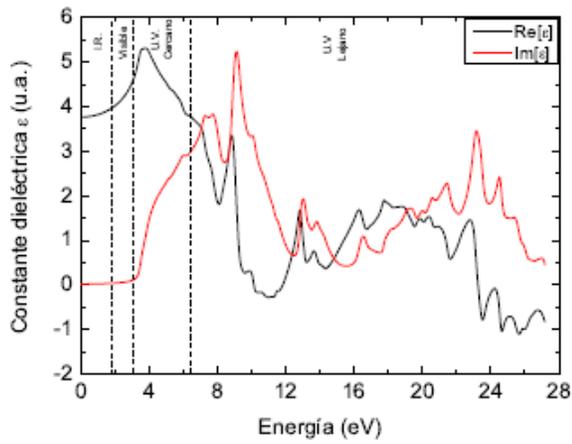
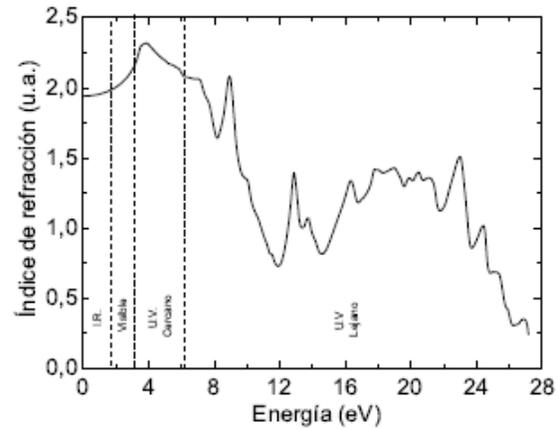


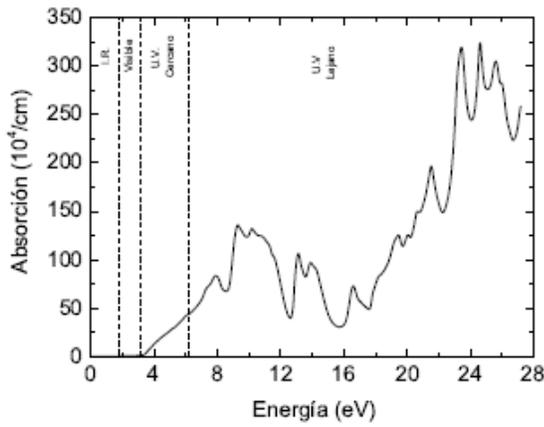
Fig. 3: Densidad de estados total y parcial del SrO incluyendo polarización de espín. Espín up con valores positivos y espín down con valores negativos.



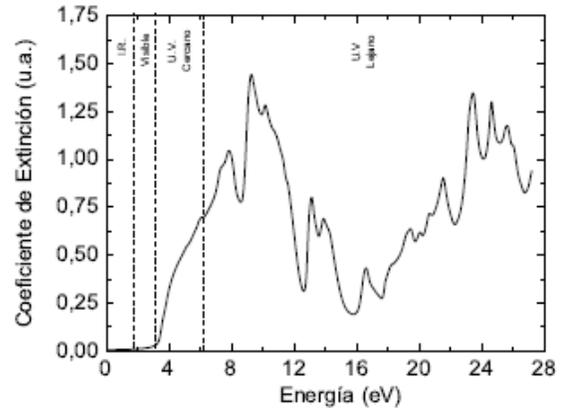
(a) Constante dieléctrica en función de la energía



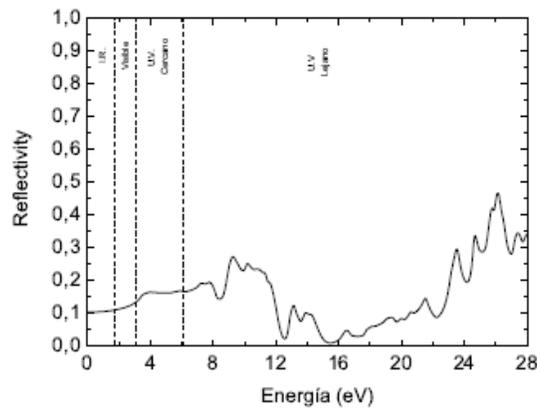
(b) índice de refracción (parte real)



(c) Espectro de absorción para el SrO



(d) coeficiente de extinción (parte compleja)



(e) Reflectividad

Fig. 4: Espectros ópticos del SrO Calculados a través de los orbitales de Kohn-Sham.

El tensor dieléctrico complejo, índice de refracción y coeficiente de absorción se calcularon para la configuración de equilibrio en un rango de energía de 0 a 28 eV, buscando la caracterización de las propiedades ópticas del sólido hasta el ultravioleta lejano. Para la interpretación de estos espectros ópticos es común considerar las transiciones entre las bandas ocupadas y desocupadas en la estructura de bandas de energía, especialmente en las direcciones de alta simetría de la zona de Brillouin. La parte absorptiva de la función dieléctrica $Im[\epsilon]$ se activa entre 3 y 4 eV en la Figura 4(a) esta activación es originada por el gap de energía en las direcciones $\Gamma - X$ y $X - X$, debidos a transiciones de los electrones O-p localizados en la parte superior de la banda de valencia, hacia bandas O-s y Sr-s en caso de Gap directo (muy débil) o a Sr-d en el Gap indirecto (fuerte) que dominan la parte inferior de la banda de conducción. El segundo pico corresponde a transiciones $\Gamma - \Gamma$, el tercero es debido a transiciones $W - W$, el cuarto lo conforman transiciones $X - X$ y el pico más alto es originado en la dirección $L - L$. Estos resultados, pueden ser útiles en la fabricación de instrumentos ópticos basados en monocristales, ya que se pueden obtener las energías que se absorben a lo largo de las diferentes caras del cristal.

En la Figura 4(b) se presenta la parte real del índice de refracción, donde se encontró un valor de 1,95 para $n(0)$, comparable con el valor experimental de 1,81 (Patnaik, 2002), a partir de $n(0)$ el índice de refracción se incrementa con la energía en la región de transparencia (no hay absorción en este intervalo) hasta alcanzar un pico en el ultravioleta cercano aproximadamente en 3,823 eV, luego decrece a un mínimo global en 28,830 eV. El coeficiente de extinción $\kappa(\omega)$ se presenta en la Figura 4(d), existe un máximo local correspondiente al cero de $Re[\epsilon](\omega)$ en 10,136 eV. El origen de la estructura de $Im[\epsilon]$ también explica la estructura de $n(\omega)$. La figura 4(c) revela absorción a lo largo de todo el espectro ultravioleta y ausencia de esta para energías por debajo del visible. La Figura 4(e) presenta la reflectividad en función de la energía del fotón incidente, se observa baja reflexión a lo largo de casi todo el espectro electromagnético, encontrando la mayor reflectividad en $\approx 26,11$ eV con un valor de 0,47 y anulándose completamente en ≈ 48 eV. Para la parte dispersiva del tensor dieléctrico $Re[\epsilon]$ Figura 4(a), el pico principal con un valor de 5,313 se ubica en $\approx 3,767$ eV, este es originado posiblemente por transiciones en la dirección Γ . Para la constante de red del equilibrio el valor de la constante dieléctrica estática $\epsilon(0)$ es de 3,768, cercano con los resultados experimentales reportados en (Madelung, 2004) entre 3,7 y 3,71 a 300 K.

Teniendo en cuenta que la GGA no representa correctamente los estados excitados, para mejorar los resultados ópticos se plantea el uso de la aproximación GW (Hedin, 1965), método que se basa en el uso de la función de Green para involucrar en el cálculo efectos de muchos cuerpos como la interacción electrón-electrón. Este método permite obtener la energía del estado base y la energía de los estados excitados. El método GW se basa en aproximar la auto energía del electrón como el producto de la función de Green (G) y el potencial de apantallamiento W o interacción apantallada de Coulomb. Otro método para mejorar los resultados ópticos es el Time-dependent Density Functional Theory de Gross (TDDFT), (Marques & Gross, 2004) el cual puede verse como una "extensión" de la DFT de Hohenberg-Kohn y de Khon-Sham e involucra un potencial externo que depende del tiempo. Según el teorema de Runge-Gross, se construye como una suma entre el potencial iónico estático y una perturbación externa dependiente del tiempo. La variable que se busca en este caso es la densidad de carga dependiente tanto de la posición \mathbf{r} como del tiempo t , $\rho(\mathbf{r}, t)$.

CONCLUSIONES

Se calcularon las propiedades estructurales electrónicas y ópticas del SrO mediante el método FP-LAPW dentro del formalismo de la DFT, con la aproximación GGA, encontrándose los parámetros estructurales $a = 9,826$ Bohr, $E_{\min} = 0,764$ Ry y $B = 83$ GPa por lo que es un sólido de alta compresibilidad, estos parámetros están en muy buen acuerdo con los reportes experimentales. Para el estado base, se obtuvo un gap indirecto entre las direcciones Γ y X de 3,392 eV, en las bandas de valencia predominan los estados O_p y en las de conducción los Sr_d . Se predice un índice de refracción estático de 1,81, absorción a lo largo de todo el espectro ultravioleta y reflexión baja en un rango amplio, de 0 a ≈ 48 eV. EL valor encontrado para $\epsilon(0)$ es de 3,768. Los espectros ópticos obtenidos son de gran utilidad para la fabricación de ventanas ópticas e instrumentos ópticos basados en monocristales, ya que

presentan las zonas de transparencia y absorbencia en función de la energía, así como el nivel de deflexión de la luz incidente gracias al comportamiento del índice de refracción en las diferentes zonas del espectro.

REFERENCIAS

1. Abdel, W.S., Abdel, S.; & Shalabi, A.S. (2008). Co adsorption on Pd atoms deposited on MgO, CaO, SrO and BaO surfaces: density functional calculations. *Thin Solid Films: 516*(12), 4360-4365.
2. Abdel, W.S. (2007). Co adsorption on MgO, CaO and SrO crystals periodic Hartree-Fock calculations. *Applied Surface Science: 253*(22), 8974-8980.
3. Abdel, W.S. & Shalabi, A.S. (2002). The stability of peroxide ion O_{22-} at (110), (210) and (001) surfaces of MgO, CaO and SrO periodic ab initio calculations. *Solid State Communications: 124*(1-2), 67-72.
4. Abraham, M.M., Chen, Y. & Rubio, J. (1976). Defects in hydrogenated SrO. *Physical Review B: 14*(6), 2603-2608.
5. Ambrosch-Draxl, C. & Sofo, J.O. (2006). Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method. *Computer Physics Communications: 175*(1), 1-14.
6. Armiento, R. (2005). The many-Electron energy in density functional theory, Ph.D. Thesis, KTH School of Engineering Sciences, Stockholm, Sweden. <http://www.theophys.kth.se/~rar/files/ArmientoThesis.pdf> (consultada: 19 de Mayo de 2011)
7. Blake, W.B.J., Gitelson, H.A. & Wertz, J.E. (1971). The VOH centre in strontium oxide. *Journal of Physics C: Solid State Physics: 4*(13), L261-L263.
8. Blöchl, P.E., Jepsen, O. & Andersen, O.K. (1994). Improved tetrahedron method for brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B: 49*(23), 16223-16233.
9. Bohm, D. & Pines, D.A. (1953). Collective description of electron interactions: III. coulomb interactions in a degenerate electron gas. *Phys. Rev.: 92*(3), 609-625.
10. Guo, Y.D., Cheng, X.L., Zhou, L.P., Liu, Z.J. & Yang, X.D. (2006). First-principles calculation of elastic and thermodynamic properties of MgO and SrO under high pressure. *Physica B: Condensed Matter: 373*(2), 334-340.
11. Hedin, L. (1965). New Method for Calculating the One-Particle Green's Function with Application to the Electron-Gas Problem. *Phys. Rev.: 139*, A796 -A823
12. Jones, M.D. & Mee, C.H.B. (1968). Photoluminescence, photoelectric emission and enhanced thermionic emission from strontium oxide. *Journal of Physics D: Applied Physics: 1*(4), 467-472.
13. Joubert, D. (1998). Density Functionals: Theory and Applications. Springer, 194 p.
14. Kittel, C. (1966). Introduction to Solid State Physics. 3rd edition. New York, John Wiley, 648 p.
15. Kohn, W. & Sham, L.J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.: 140*(4A), A1133-A1138.
16. Liu, X., He, H., Wang, Y. & Zhu, S. (2007). Transesterification of soybean oil to biodiesel using SrO as a solid base catalyst. *Catalysis Communications: 8*(7), 1107-1111.
17. Madelung, O. (2004). Semiconductors: Data Handbook. 3rd ed. Springer. Pag. 190-192.

18. Marques, M.A.L. & Gross, E.K.U. (2004). Time-Dependent Density Functional Theory. *Annual Review of Physical Chemistry: 55*, 427-455.
19. Mee, C.H B. (1963). Photoelectric emission from cathodes coated with strontium oxide. *British Journal of Applied Physics: 14*(1), 49-50.
20. Mulla, S.A.R. & Choudhary, V.R. (2004). Oxidative conversion of ethane to ethylene over supported SrO-promoted Er₂O₃ catalyst. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical: 223*(1-2), 259-262.
21. Murnaghan, F.D. (1944). The Compressibility of Media under Extreme Pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America: 30*(9), 244-247.
22. Patnaik, P. (2002). Handbook of Inorganic Chemicals. Mcgraw-hill Professional Publishing. Pag. 888.
23. Perdew, J.P., Burke K. & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical review letters: 77*(18), 3865-3868.
24. Perdew, J.P. & Wang, Y. (1992). Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Phys. Rev. B: 45*(23), 13244-13249.
25. Persson, C. & Ambrosch-Draxl, C. (2007). A full-band fp-lapw+k[dot operator] pmethod for solving the kohn-sham equation. *Computer Physics Communications: 177*(3), 280-287.
26. Sancho, J.C. (2001). La teoría del funcional densidad y las ecuaciones variacionales de Kohn-Sham: aportación de nuevos aspectos sobre sus posibilidades y limitaciones. Ph.D. Thesis, Universidad de Alicante, España. bvc.s3.dev.cervantesvirtual.com/.../0010c050-82b2-11df-acc7-002185ce6064.pdf (Consultada el 16 de Febrero de 2011).
27. Schwarz, K. (2001). An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties. Techn. Universitat Wien, Austria.
28. Woods, J. & Wright, D.A. (1954). The thermionic emission from thin films of barium and strontium oxide. *British Journal of Applied Physics: 5*(2), 74-76.
29. Yakovkin, I.N. & Dowben, P.A. (2007). The problem of the band gap in LDA calculations. *Surface Review and Letters (SRL): 14*(03), 481-487.