

Estudio *ab-initio* de la estabilidad de las propiedades estructurales y electrónicas del $\text{Bi}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$

Study *ab-initio* of the stability of the structural and electronic properties of $\text{Bi}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$

Gladys Patricia Abdel Rahim-Garzón
Ph.D. (c) Ciencia y Tecnología de Materiales
Docente Investigador Universidad Antonio Nariño
Bogotá, Colombia
ggabdelr@unal.edu.co

Jairo Arbey Rodríguez-Martínez
Ph. D. Física
Docente Universidad Nacional de Colombia
Bogotá, Colombia
jairoarbey@gmail.com

María Guadalupe Moreno-Armenta
Ph.D. Ciencias de Materiales
Centro de Nanociencias y Nanotecnología,
Docente Universidad Nacional Autónoma de México
Ensenada, BC, México
moreno@cryn.unam.mx

Resumen— Usando el método en primeros principios, hemos investigado las propiedades estructurales y electrónicas del compuesto $\text{Bi}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ con concentraciones, variando del 0%, 25%, 50%, 75% y 100% x del Bismuto en la fase NaCl. Los cálculos se realizaron en el marco de la teoría densidad funcional usando el método de ondas planas aumentadas y linealizadas (FP-LAPW), los efectos de intercambio y correlación se trataron usando la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA) implementado en el método Perdew - Burke- Ernzerhof [1].

Palabras claves— *Ab initio*, BiMgO y transición de fase.

Abstract— Using the method in first-principles, we have investigated the structural and electronic properties of the compound $\text{Bi}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ with concentrations varying of 0%, 25%, 50%, 75% and 100% x of bismuth in the phase NaCl. We have used the Full Potential Linearized Augmented Plane Wave Method (FP-LAPW). The exchange and correlation effects are treated using the Generalized Gradient Approximation (GGA) as it is implemented in the Perdew - Burke- Ernzerhof- method [1].

Key words— *Ab initio*, BiMgO and transition phase

1. INTRODUCCIÓN

El bismuto (Bi) es un interesante material para el que se ha encontrado varias aplicaciones en la tecnología debido a su bajo punto de fusión; su característica de semiconductor; sus cualidades diamagnéticas únicas con una exclusiva propiedad de transporte eléctrico; una baja densidad de portadores y una gran longitud de onda de Fermi de 40 nm. El Bi es usado como modelo para estudiar los efectos cuánticos en propiedades de

transporte eléctrico [2], [3]. Mientras que el óxido de magnesio (MgO) es un fuerte candidato en el contexto catálisis y espín electrónica [4], [5]. El MgO ha sido muy estudiado tanto teórico como experimentalmente, encontrando que el estado base de cristalización es la fase NaCl [6]-[9] con la posibilidad que se presente una transición a CsCl con una presión de transición de 227 GPa [10]; aunque varios estudios mecánico cuánticos predicen la transición a temperatura $T = 0$ K que puede ser más que 205 GPa [11] pero más alta que 1050 GPa [12]. Además, el MgO ha sido usado para la formación de nuevos tipos de materiales como MgO/Ag [13] o MgCaO [14].

En el presente trabajo se estudia la fase NaCl del BiMgO. Se presentará en detalle el estudio de su estabilidad estructural; se mostrarán los gráficos de energía contra el volumen a $T=0$ K, y de allí, se determinarán algunas propiedades termodinámicas y estructurales como: el módulo de volumen, la energía de cohesión, y el parámetro de red de la celda unitaria. En cuanto a las propiedades electrónicas, se estudiará la densidad de estados (DOS, por su sigla en inglés) y las curvas de energía contra el número de onda k o relaciones de dispersión. El artículo se estructurará así: primero se describirá el método usado; en la sección siguiente, se mostrará el estudio de las propiedades estructurales y electrónicas y por último, se plantearán algunas conclusiones acerca del BiMgO.

2. MÉTODO

Los cálculos se realizaron empleando el código WIEN2k [15]. El potencial de intercambio y correlación se trataron usando la aproximación del gradiente generalizado (GGA) de Perdew [1]. Los radios *muffin-tin* usados fueron 2.5, 1.65 y 1.6 Bohr, para los átomos de Bismuto (Bi), Magnesio (Mg) y Oxígeno (O) respectivamente; $l_{\text{máx}}=10$ es el factor que determina el máximo valor del momento angular dentro de la esfera *muffin-tin*. El límite para la energía de ondas planas $R_{\text{mt}} * K_{\text{máx}} = 8$, donde $K_{\text{máx}}$ la magnitud del mayor vector \mathbf{G} y R_{mt} es el radio *muffin-tin* más pequeño. Para el desarrollo en serie de Fourier del potencial, se usó como máximo valor $G_{\text{máx}} = 14$. Siendo \mathbf{G} un vector en el espacio recíproco. Se usó 42 puntos k para la parte irreducible de la zona de Brillouin. El cálculo auto-consistente (ciclo scf) se detuvo cuando la diferencia de energía entre ciclos consecutivos era inferior a 10^{-4}Ry . Para el material $\text{Bi}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ se calculó la energía de cohesión (energía total menos la energía de los átomos aislados) para diferentes volúmenes. Los datos fueron ajustados a la ecuación de estado de Murnaghan [16], donde E es la energía; $E(V_0)$ es la energía mínima; V es el volumen de la celda primitiva; V_0 es el volumen de equilibrio; B_0 es el módulo del volumen (módulo de bulk) y B_0' es la derivada; con respecto a la presión se calcula por el método de mínimos cuadrados; así, se puede calcular el volumen de equilibrio y el módulo de volumen.

$$E(V) = E(V_0) + \frac{B_0 V}{B_0'} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{B_0'}{B_0} + 1} - 1 \right] - \frac{B_0 V}{B_0' - 1} \quad (1)$$

Para las estructuras NaCl o sal de roca, se consideró una geometría tetragonal perfecta $c=2\sqrt{2}a$ compuesta por cuatro planos atómicos (001) con un átomo de Bi (o Mg) y un átomo de O. Para las otras concentraciones de Bi, se reemplazaron uno, dos, tres y todos los átomos de Bi con átomos de Mg para obtener las concentraciones de 0%, 25%, 50%, 75% y 100% de Bi. Las configuraciones electrónicas de cada uno de los elementos que conforman el compuesto BiMgO son: Bi: Xe 4f14 5d10 6s2 p3), Mg: Ne 3s2 y O: He 2s2 p4.

Fig. 1. ENERGÍA DE COHESIÓN vs. VOLUMEN PARA EL $\text{Bi}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ EN LA FASE NaCl

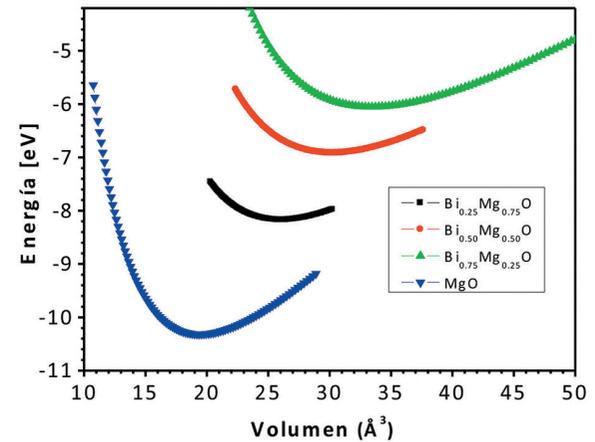
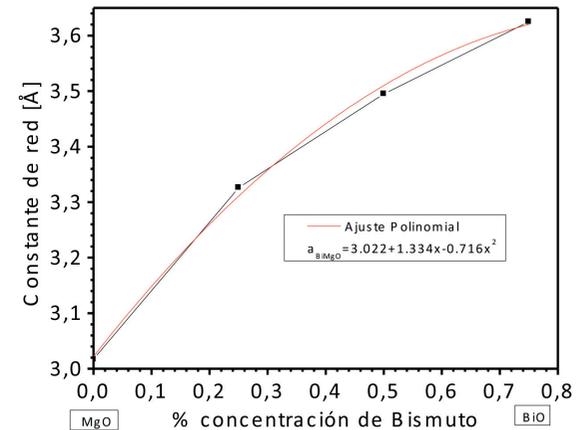


Fig. 2. CONSTANTE DE RED EN FUNCIÓN DE LAS DIFERENTES CONCENTRACIONES x DE BI EN LA FASE NaCl



3. PROPIEDADES ESTRUCTURALES

La Fig. 1 muestra los gráficos de energía de cohesión en función del volumen en la fase NaCl para concentraciones 0%, 25%, 50%, 75% y 100% x de Bi del compuesto $\text{Bi}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$. En esta se observa que existe un mínimo de energía y que por tanto, el material es estable (o al menos meta-estable) para cada una de las concentraciones x de Bi consideradas. El valor del volumen en el mínimo de energía corresponde al volumen de equilibrio y de allí, se deduce la constante de red. Ajustando estas gráficas a la ecuación de estado de Murnaghan determinamos los otros parámetros estructurales que se indican en la Tabla I.

TABLA I
PROPIEDADES ESTRUCTURALES CALCULADAS PARA $\text{Bi}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$.

Parámetro	MgO	$\text{Bi}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{O}$	$\text{Bi}_{0.50}\text{Mg}_{0.50}\text{O}$	$\text{Bi}_{0.75}\text{Mg}_{0.25}\text{O}$	BiO
a [Å]	3.017	3.326	3.495	3.625	3.705
V [Å ³]	19.433	26.025	30.206	33.682	35.975
E_o [eV]	-10.31	-8.170	-6.915	-6.052	-5.322
B_o [GPa]	141.91	117.08	107.96	97.74	99.76
B'	3.659	4.035	4.198	4.170	4.836

Al comparar la constante de red con las diferentes concentraciones x del Bi, observamos que al aumentar la concentración x de Bi, el parámetro de red aumenta. Para entender esto recordamos que el radio covalente del Bi es mayor que para el Mg y O (Bi: 1.46, Mg: 1.36 y O: 0.73).

En la Fig. 2, observamos que aumentar Bi la constante aumenta. Al realizar un ajuste polinomial, obtenemos:

$$a_{\text{BiMgO}} = xa_{\text{MgO}} + (1-x)a_{\text{BiO}} - \delta_a x(1-x)0.716x^2 \quad (2)$$

Donde el primero y el segundo término indican la dependencia lineal entre las constantes de red y la concentración pero el tercer término corresponde la desviación de la Ley de Vergard. Este término se llama parámetro de bowing y se determina mediante la relación

$$a_{\text{BiMgO}} = xa_{\text{MgO}} + (1-x)a_{\text{BiO}} - \delta_a x(1-x) \quad (3)$$

Para este caso se tiene $\delta = -0.5596\text{Å}$ que nos indica una desviación de la Ley lineal. El efecto físico de éste último término δ es debido a la presencia de los diferentes cationes (o aniones) que interactúan fuertemente con sus electrones.

Otros parámetros estructurales como la energía de cohesión (E_o), donde se encontró que aumenta al aumentar Bi. El módulo de volumen (B_o) con un valor superior a $\sim 97.74\text{GPa}$ y menor a $\sim 141.91\text{GPa}$; para efectos de comparación, recordemos que el módulo del volumen del Silicio puro en la estructura diamante es $\sim 88\text{GPa}$.

4. PROPIEDADES ELECTRÓNICAS

En esta sección se examinará la densidad de estados (DOS) y la estructura de bandas, para cada una de las concentraciones x del Bi en la fase NaCl. Para cada concentración x del Bi, las propiedades electrónicas se calcularon utilizando las constantes de red correspondientes al volumen que minimiza la energía de cohesión (Tabla I).

Para todas las figuras correspondientes a la estructura de bandas, el tamaño de los círculos indicarán el grado de contribución de cada de los orbitales; entre mayor es el círculo, mayor es su contribución. El eje vertical se encuentra la energía en eV y en el eje horizontal el número de onda k a lo largo de algunas direcciones de alta simetría de la primera zona de Brillouin (PZB). El cero de la energía se ha colocado en el nivel de Fermi (NF). Por debajo del NF se encuentran la bandas de valencia y por encima, se encuentran las bandas de conducción; los cálculos se realizaron a $P=0$.

En cada estructura de bandas se colocó al lado derecho la correspondiente DOS que verifica la contribución electrónica de las bandas. En general, para todas las figuras la DOS el cero de energía se ha colocado en el NF. En este nivel se dividen las bandas de valencia y de conducción. Al lado izquierdo del NF, se encuentran las bandas de valencia y al lado derecho del NF, se encuentran las bandas de conducción. En cada una de estas figuras mostramos la DOS parcial y total para los orbitales de cada uno de los átomos que constituyen el compuesto BiMgO.

4.1. Propiedades electrónicas para $\text{Bi}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{O}$ en la fase NaCl

Las Figs. 3, 4 y 5 muestran las estructuras de bandas y las Figs. 6, 7 y 8 la DOS para el $\text{Bi}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{O}$. En relación con la dispersión, en estas figuras observamos tres regiones principales: la primera debajo de $\sim -11\text{eV}$; la segunda se ubica entre $\sim -9.6\text{eV}$ y $\sim -2\text{eV}$; la tercera arriba de $\sim -2\text{eV}$. El nivel de Fermi (NF) se encuentra en esta última banda, evidenciando un comportamiento metálico para este material.

Fig. 3. ESTRUCTURA DE BANDAS PARA $\text{Bi}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{O}$ CONTRIBUCIONES DEL BISMUTO

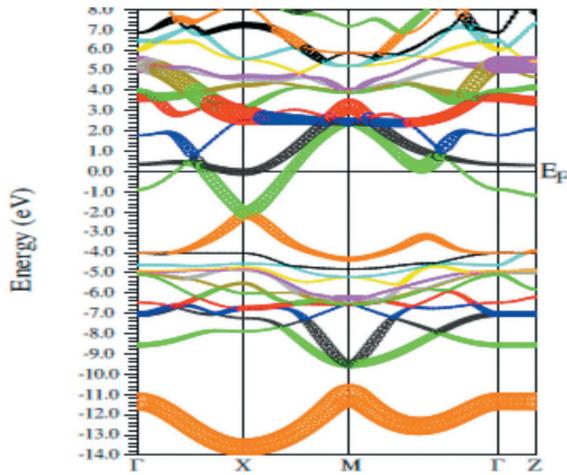


Fig. 4. ESTRUCTURA DE BANDAS PARA $\text{Bi}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{O}$ CONTRIBUCIONES DEL MAGNESIO

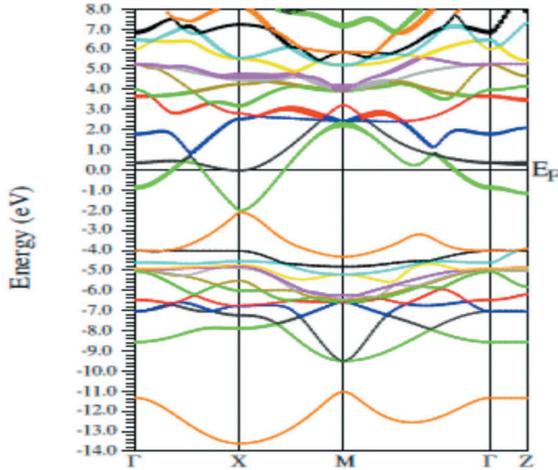


Fig. 5. ESTRUCTURA DE BANDAS PARA $\text{Bi}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{O}$ CONTRIBUCIONES DEL OXÍGENO

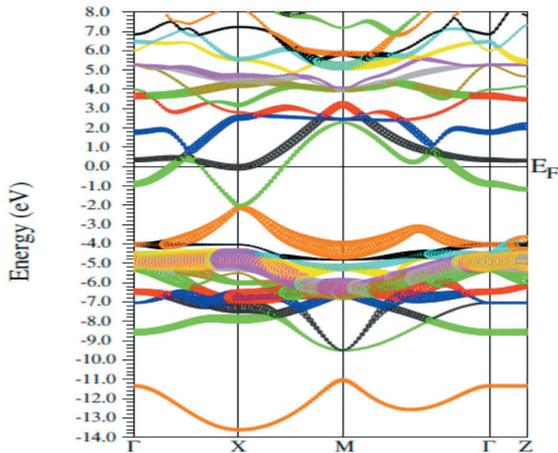
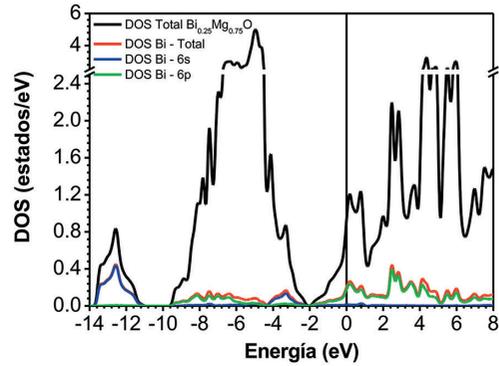


Fig. 6. DENSIDAD DE ESTADOS PARA $\text{Bi}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{O}$ EN LA FASE NaCl EN EL MÍNIMO DE ENERGÍA



En la segunda región, se observa que tiene principalmente estados provenientes de los orbitales p del O (Fig. 8) y en menor medida, por los orbitales s y p del Bi y del Mg (Figs. 6 y 7). En esta región vemos que en el punto Γ contamos 12 bandas. La tercera región (arriba de $\sim -2eV$) se compone de un gran número de bandas provenientes principalmente de los orbitales p del Bi y O (Figs. 6 y 8) y una menor contribución s y p del Mg, como se indica en la Fig. 8. Es posible que existan hibridaciones en las dos regiones anteriores de tipo $sp-pp$.

4.2. Propiedades electrónicas para $\text{Bi}_{0.50}\text{Mg}_{0.50}\text{O}$ en la fase NaCl

Las Figs. 9, 10 y 11 muestran la estructura de bandas y las Figs. 12, 13 y 14 la DOS del $\text{Bi}_{0.50}\text{Mg}_{0.50}\text{O}$, en la fase NaCl. Al comparar las bandas con $\text{Bi}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{O}$, observamos un desplazamiento hacia arriba de toda las bandas; tanto de las bandas valencia como las de conducción que disminuyen notablemente la brecha de energía entre las diferentes regiones.

Fig. 7. DENSIDAD DE ESTADOS PARA $\text{Bi}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{O}$ EN LA FASE NaCl EN EL MÍNIMO DE ENERGÍA

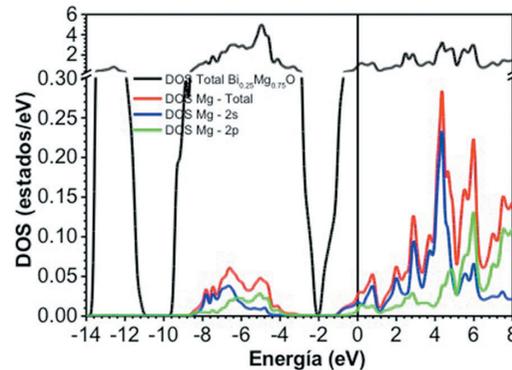


Fig. 8. DENSIDAD DE ESTADOS PARA $\text{Bi}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{O}$ EN LA FASE NaCl EN EL MÍNIMO DE ENERGÍA

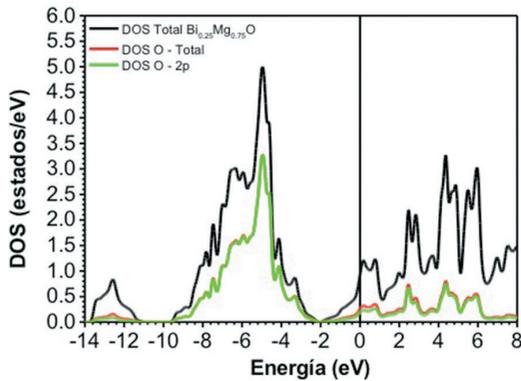


Fig. 9. ESTRUCTURA DE BANDAS PARA $\text{Bi}_{0.5}\text{Mg}_{0.5}\text{O}$ CONTRIBUCIONES DEL BISMUTO

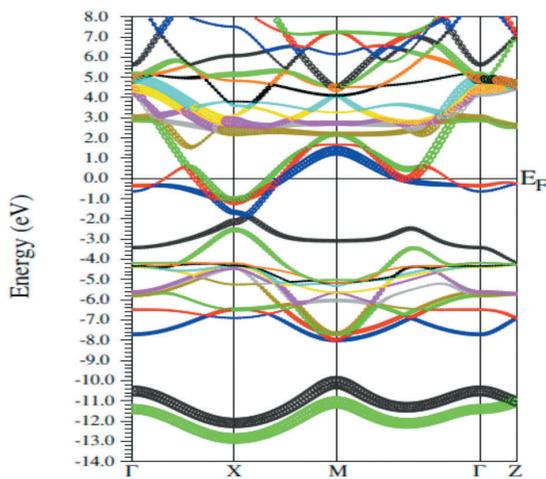
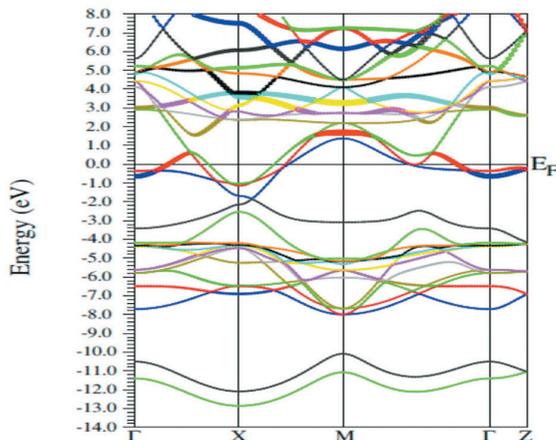


Fig. 10. ESTRUCTURA DE BANDAS PARA $\text{Bi}_{0.5}\text{Mg}_{0.5}\text{O}$ CONTRIBUCIONES DEL MAGNESIO



Lo primero que se observa en las Figs. 9, 10 y 11 es que hay un traslapamiento de las bandas en el NF, evidenciando un comportamiento metálico. Además, se evidencia que en la parte profunda de la banda de valencia hay

dos bandas que se encuentran entre $\sim -13\text{eV}$ y $\sim -10\text{eV}$; generadas principalmente por los orbitales s del Bi como se indica en la figura 12.

Más arriba, se extiende una segunda banda que va desde $\sim -8\text{eV}$ hasta $\sim -2\text{eV}$; formada principalmente por los orbitales p del O (Fig.14) y una muy pequeña contribución de los electrones s y p del Bi y Mg (Figs. 12 y 13). Al comparar el ancho de esta región con la del 25% del Bi, se ve que esta es $\sim 3\text{eV}$ más angosta y las bandas presentan menos dispersión que en el 25% de Bi. Finalmente, en la tercera región que van de los $\sim -2\text{eV}$ hacia arriba, donde la contribución electrónica es mayor por parte de los orbitales p del Bi y del O, con una pequeñas contribuciones de los orbitales s y p del Mg (Figs. 12, 13 y 14).

Fig. 11. ESTRUCTURA DE BANDAS PARA $\text{Bi}_{0.5}\text{Mg}_{0.5}\text{O}$ CONTRIBUCIONES DEL OXÍGENO

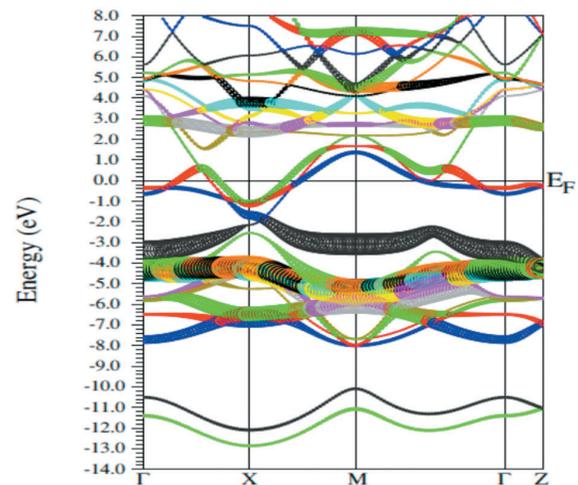


Fig. 12. DENSIDAD DE ESTADOS PARA $\text{Bi}_{0.5}\text{Mg}_{0.5}\text{O}$ EN LA FASE NaCl EN EL MÍNIMO DE ENERGÍA

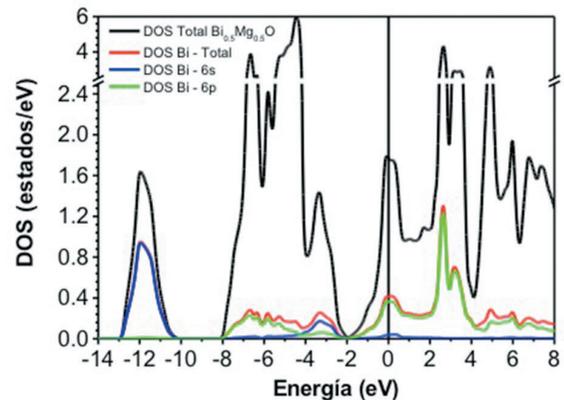
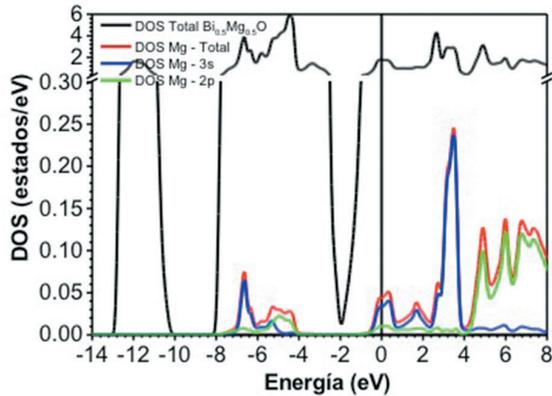
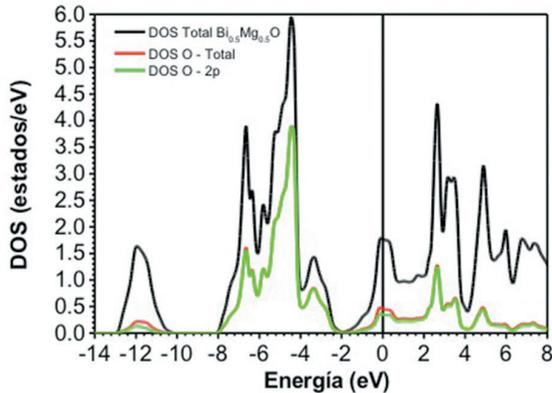


Fig.13. DENSIDAD DE ESTADOS PARA $\text{Bi}_{0.5}\text{Mg}_{0.5}\text{O}$ EN LA FASE NaCl EN EL MÍNIMO DE ENERGÍAFig. 14. DENSIDAD DE ESTADOS PARA $\text{Bi}_{0.5}\text{Mg}_{0.5}\text{O}$ EN LA FASE NaCl EN EL MÍNIMO DE ENERGÍA

4.3. Propiedades electrónicas para $\text{Bi}_{0.75}\text{Mg}_{0.25}\text{O}$ en la fase NaCl

Las Figs. 15, 16 y 17 muestran la relación de dispersión y las Figs. 18, 19 y 20 la DOS del $\text{Bi}_{0.75}\text{Mg}_{0.25}\text{O}$ en el mínimo de energía. Lo primero que se nota, al igual que en los dos casos anteriores, es un traslapamiento de bandas en las alrededores del NF, lo cual indica el comportamiento metálico de este compuesto.

En la parte profunda de estas bandas hay unas tres bandas con un ancho de $\sim 2\text{eV}$, cuya curvatura es menor que para los dos compuestos anteriores, indicando una alta localización de los electrones s del Bi (Fig. 18). Más arriba se observa una brecha de energía interbanda o interna del orden de $\sim 2\text{eV}$.

La banda que se encuentra por encima de los $\sim -8\text{eV}$ y se extiende hasta $\sim -2\text{eV}$ está conformada por 12 bandas (al igual que en $\text{Bi}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{O}$ y $\text{Bi}_{0.5}\text{Mg}_{0.5}\text{O}$) debido a los electrones p del O y en menor medida, por los orbitales s y p del Bi como

se muestran en las Figs. 18 y 20. Además, al observar el punto Γ se ven 12 bandas conformadas por: tres singletes con energías de $\sim -7.2\text{eV}$, -4.8eV y $\sim -4\text{eV}$; un doblete con energía de ~ -5.4 ; dos tripletes $\sim -4.6\text{eV}$ y $\sim -3.4\text{eV}$. El ancho de esta banda es de $\sim 6\text{eV}$; es 1,6 eV más angosta que la 25% y 1.4 eV más ancha que la del 50 % de Bi.

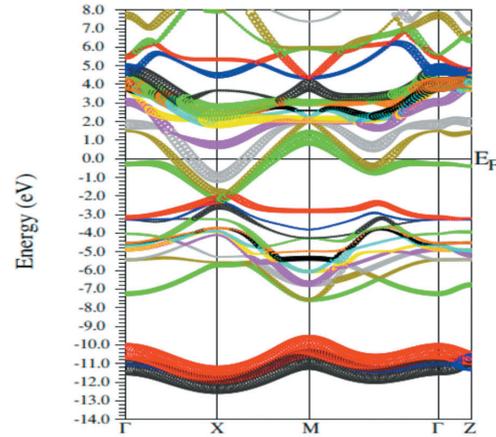
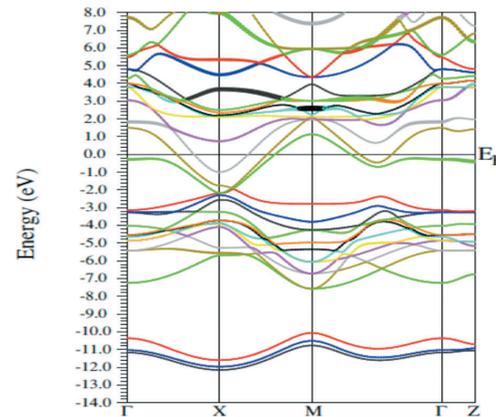
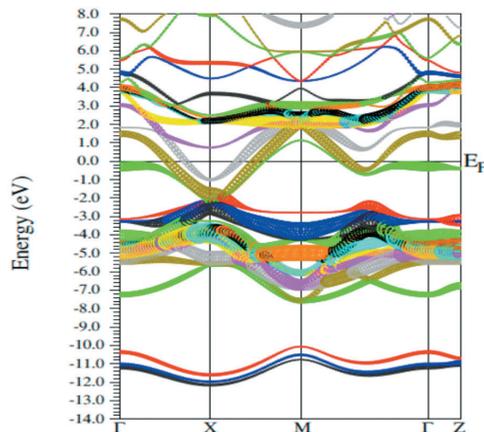
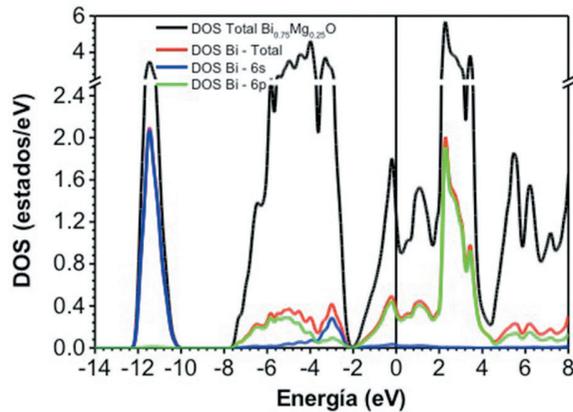
Fig. 15. ESTRUCTURA DE BANDAS PARA $\text{Bi}_{0.75}\text{Mg}_{0.25}\text{O}$ CONTRIBUCIONES DEL BISMUTOFig. 16. ESTRUCTURA DE BANDAS PARA $\text{Bi}_{0.75}\text{Mg}_{0.25}\text{O}$ CONTRIBUCIONES DEL MAGNESIOFig. 17. ESTRUCTURA DE BANDAS PARA $\text{Bi}_{0.75}\text{Mg}_{0.25}\text{O}$ CONTRIBUCIONES DEL OXÍGENO

Fig. 18. DENSIDAD DE ESTADOS PARA $\text{Bi}_{0.75}\text{Mg}_{0.25}\text{O}$ EN LA FASE NaCl EN EL MÍNIMO DE ENERGÍA

En la última región que va de $\sim -2\text{eV}$ hacia arriba, se observa un gran número de bandas dominadas principalmente de orbitales p del Bi y del O y pequeñas contribuciones de s y p del Mg; como se indican en las Figs. 18, 19 y 20. En las dos zonas anteriores es posible que existan, en cada una de ellas, hibridaciones del tipo sp - pp , ya que los electrones de conducción se muevan en estas bandas hibridadas.

4.4. Propiedades electrónicas para MgO en la fase NaCl

En las Figs. 21 y 22 se muestran la estructura de bandas y en las Figuras 23 y 24 la DOS para el MgO en la fase NaCl en el mínimo de energía. Lo primero que se nota es que hay una banda ancha de $\sim 4,4\text{eV}$ arriba del NF esto indica que el material se comporta como un aislante.

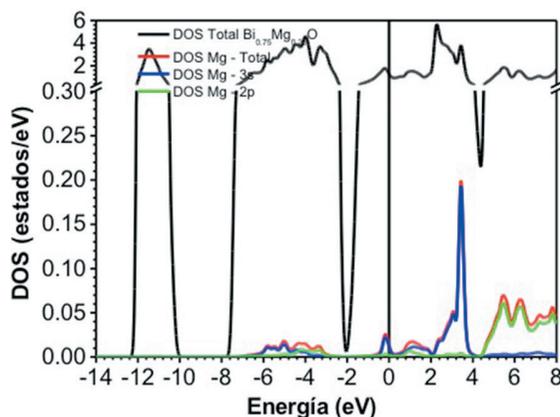
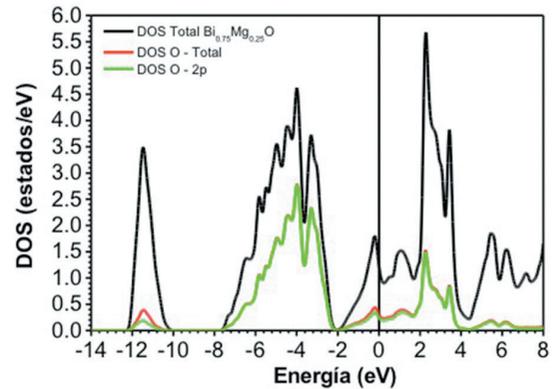
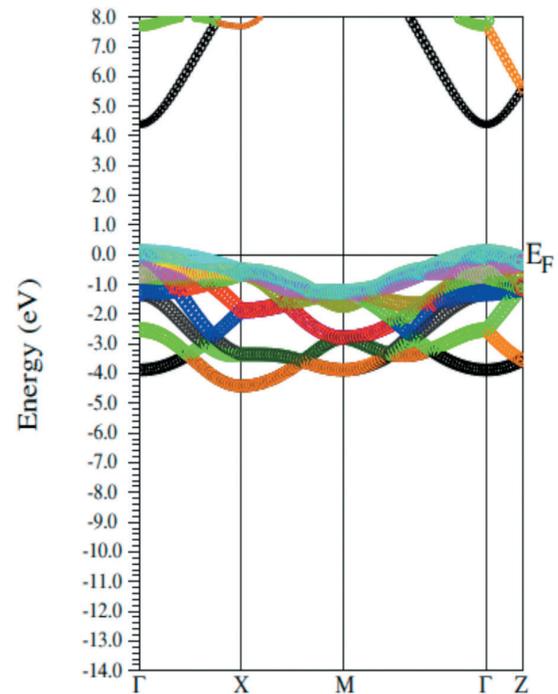
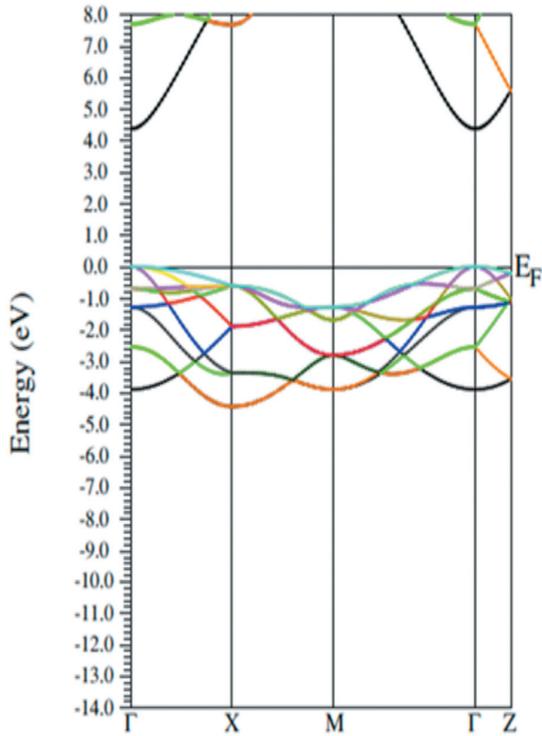
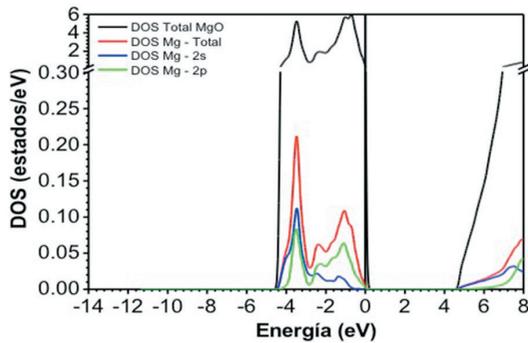
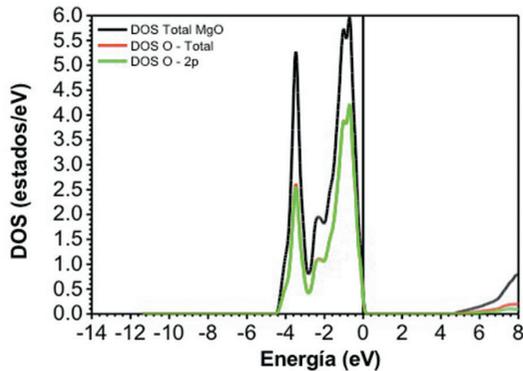
Fig. 19. DENSIDAD DE ESTADOS PARA $\text{Bi}_{0.75}\text{Mg}_{0.25}\text{O}$ EN LA FASE NaCl EN EL MÍNIMO DE ENERGÍAFig. 20. DENSIDAD DE ESTADOS PARA $\text{Bi}_{0.75}\text{Mg}_{0.25}\text{O}$ EN LA FASE NaCl EN EL MÍNIMO DE ENERGÍA

Fig. 21. ESTRUCTURA DE BANDAS PARA MgO CONTRIBUCIONES DEL OXÍGENO



En la banda de valencia abajo del NF se ve una banda de $\sim 4\text{eV}$ de ancha; debido principalmente a los electrones p del O y una muy pequeña contribución de s y p del Mg, como se indican en las Figs. 23 y 24. En el punto Γ se presenta un triplete con una energía de $\sim 0\text{eV}$; un doblete con una energía $\sim -1.2\text{eV}$ y dos singletes con energías de $\sim -2.4\text{eV}$ y $\sim -4\text{eV}$. El triplete corresponde a los orbitales $p_x + p_y$ y p_z del oxígeno y los dobletes y singletes corresponden posiblemente a pequeñas contribuciones de los orbitales del Mg.

Fig. 22. ESTRUCTURA DE BANDAS PARA MgO CONTRIBUCIONES DEL MAGNESIOFig. 23. DENSIDAD DE ESTADOS PARA MgO EN LA FASE NaCl EN EL MÍNIMO DE ENERGÍAFig. 24. DENSIDAD DE ESTADOS PARA MgO EN LA FASE NaCl EN EL MÍNIMO DE ENERGÍA

5. CONCLUSIONES

Se determinaron las propiedades estructurales y electrónicas con la concentración x del Bismuto en la estructura NaCl. Estas concentraciones corresponden al 0%, 25%, 50% y 75% de x del Bismuto.

Se encontró que $\text{Bi}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ es estable (o al menos meta-estable) para cada una de las concentraciones x de Bismuto consideradas. Además, que tanto la energía de cohesión como el parámetro de red, aumentan al aumentar la concentración x de Bismuto. Para todas las concentraciones se encontró que el material es rígido, un poco más que el Silicio en la estructura diamante. En la DOS, para las concentraciones del 25%, 50%, 75% del bismuto, se encontró un comportamiento electrónico muy similar en las tres regiones de bandas estudiadas, principalmente alrededor del nivel del Fermi que indican el comportamiento metálico; a diferencia de MgO que se comporta como un aislante. Para las concentraciones 25%, 50% y 75% se encontró que a medida que aumenta x del Bi, la región de valencia se mueve hacia el nivel de Fermi.

AGRADECIMIENTOS

Financiada por la, Facultad de Ciencias y la de Ingeniería - Ciencia y Tecnología de Materiales de la U. Nacional. M. G. Moreno-Armenta agradece soporte del proyecto DGAPA IN102714-3. Los cálculos se llevaron a cabo en el DGCTIC-UNAM Supercomputadora del Centro en México y el Cluster del grupo de estudio de materiales, GEMA, Dept. de Física, U. Nacional.

REFERENCIAS

- [1] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple," in *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, no. 18, pp. 3865-3868, 1996.
- [2] M. Kammler y M. Horn-von Hoegen, "Low energy electron diffraction of epitaxial growth of bismuth on Si (111)," in *Surface Science*, vol. 576, no. 1, pp. 56-60, 2005.
- [3] Leonitie, M.Caraman, M.Alexe, C.Harnagea. "Structural and optical characteristics of bismuth oxide thin films," in *Surface Science*, vol. 507, pp. 480-485, 2002.
- [4] Jhon E, Jaffe, James A, Snyder, Zijing Lin, and Anthony C. Hess, "LDA and GGA calculations for high-pressure phase transitions in ZnO and MgO ," in *Phys. Rev. B*, vol. 62, no. 3, pp. 1660-1665, 2000.

- [5] H. Baltache, R. Khenata, M. Sahnoun, M. Driz, B. Abbar, B. Bouhafs, "Full potential calculation of structural, electronic and elastic properties of alkaline earth oxides MgO, CaO and SrO," in *Physica B: Condensed Matter*, vol. 334, no. 1, pp. 334-342, 2004.
- [6] Yun-Dong Guo, Xin-Lu Cheng, Li-Ping Zhou, Zi-Jiang Liu, Xiang-Dong Yang, "First-principles calculation of elastic and thermodynamic properties of MgO and SrO under high pressure," in *Physica B*, vol. 373, no. 2, pp. 334-340, 2006.
- [7] R. González, J del C. Otalora, C.A. Parra, J. A. Rodríguez M, "Propiedades estructurales y electrónicas del MgO a alta presión," en *Revista Colombiana de Física*, vol. 4, no. 3, pp. 630 - 633, 2009.
- [8] Jian-Zhou Zhao, Lai-Yu Lu, Xiang-Rong Chen, Yu-Lin Bai, "First-principles for elastic properties of the rock-salt structure MgO," in *Physica B: Condensed Matter*, vol. 387, no. 1, pp. 245-249, 2007.
- [9] Seifollah Jalili, Roya Majidi, "The effect of impurities on the electronic properties of MgO," in *Physica B: Condensed Matter*, vol. 403, no. 19, pp. 3522-3526, 2008.
- [10] T.S. Duffy, R.J. Hemley, H.K. Mao, "Equation of state and shear strength at multimegabar pressures: magnesium oxide to 227 GPa," in *Phys. Rev. Lett.*, vol.74, no. 8, pp. 1371-1374, 1995.
- [11] M.T.S. Bukowinski, "First principles equations of state of MgO and CaO," in *Geophys. Res. Lett.*, vol. 12, no. 8, pp. 536-539, 1985.
- [12] K.J. Chang, M.L. Cohen, "High-pressure behavior of MgO: Structural and electronic properties," in *Phys. Rev. B*, vol. 30, no. 8, pp. 4774, 1984.
- [13] M. Sgroi, C. Pisani, M. Busso, "Ab initio density simulation of structural and electronic properties of MgO ultra-thin layers of the (001) Ag surface," in *Thin Solid Films*, vol. 400, no. 1, pp. 64-70, 2001.
- [14] S. Jalili, R. Majidi, "The effect of impurities on the electronic properties of MgO," in *Physica B: Condensed Matter*, vol. 403, no. 19, pp. 3522-3526, 2008.
- [15] P. Blaha, K. Schwarz, and J. Luitz, "WIEN97, a full potential linearized augmented plane wave package for calculating crystal properties," in *Vienna University of Technology, Vienna, Austria*, 1999.
- [16] F. D. Murnaghan, "On the theory of the tension of an elastic cylinder," in *Proc. Natl. Acad. Sci.*, vol. 30, no. 12, pp. 382-384, 1944.