



# Propiedades mecánicas de $\beta$ -MnO<sub>2</sub> por DFT

## *Mechanical properties of $\beta$ -MnO<sub>2</sub> by DFT*

María Alejandra Gómez Murillo<sup>ID</sup>, Balter Trujillo Navarrete\*<sup>ID</sup>

Tecnológico Nacional de México/IT de Tijuana/ Tecnológico de Tijuana, Blvd. Alberto Limón Padilla s/n Col. Otay Tecnológico, Tijuana, B.C. 22510, México.

**Autor de correspondencia:** Balter Trujillo Navarrete, Centro de Graduados e Investigación en Química. E-mail: [balter.trujillo@tectijuana.mx](mailto:balter.trujillo@tectijuana.mx). ORCID: [0000-0002-0196-1001](https://orcid.org/0000-0002-0196-1001).

**Recibido:** 2 de Junio del 2021

**Aceptado:** 21 de Septiembre del 2021

**Publicado:** 30 de Septiembre del 2021

**Resumen.** - Se sintetizaron nanovarillas de óxido de manganeso en fase cristalina beta ( $\beta$ -MnO<sub>2</sub>). Microscopía electrónica de barrido (SEM) y difracción de rayos-X (XRD) confirmaron la morfología y fase cristalina, respectivamente. Mediante la teoría del funcional de densidad (DFT), se calcularon las propiedades mecánicas teóricas de  $\beta$ -MnO<sub>2</sub> con el programa CASTEP. Se realizó una optimización de la geometría de la celda unitaria, determinándose las constantes elásticas  $C_{ij}$ , calculándose los valores del módulo de Young y de corte, y el coeficiente de Poisson, entre otros. Los resultados fueron comparados con los valores reportados en la literatura, encontrándose una significativa similitud en los parámetros analizados. Las relaciones de  $C_{ij}$  indicaron la aceptación de los criterios de Born, confirmando la estabilidad de la estructura cristalina de  $\beta$ -MnO<sub>2</sub>. La constante  $C_{44}$ , así como el módulo de volumen y de corte, mostraron valores grandes, lo que indica un material con considerable dureza. Este comportamiento fue confirmado con el valor obtenido de la razón del módulo de volumen entre el módulo de corte por la aproximación de Hill. El entendimiento de las propiedades calculadas en este estudio usando CASTEP permitirá obtener parámetros adicionales de propiedades ópticas, termodinámicas, entre otras, así como el desarrollo de modelaciones y simulaciones que permitan entender y aplicar los conocimientos adquiridos a aplicaciones reales (experimentales), p. ej., en la remoción de contaminantes.

**Palabras clave:** DFT; CASTEP; MnO<sub>2</sub>; Propiedades mecánicas; Constantes elásticas.

**Abstract.** - Beta manganese oxide nanorods ( $\beta$ -MnO<sub>2</sub>) were synthesized by the hydrothermal method. Scanning electron microscopy (SEM) and X-ray diffraction (XRD) confirmed the shape and crystalline phase, respectively. The theoretical mechanical properties were calculated by the density functional theory (DFT) using the CASTEP program. The optimization geometry of the unit cell was done, determining the elastic constants  $C_{ij}$ , calculating the values of Young's modulus and shear, and the Poisson's ratio, among others. The results were compared with the values reported in the literature, finding a significant similarity among the parameters analyzed. The  $C_{ij}$  relations indicated the acceptance of the Born criterion's, confirming the stability of the crystal structure of  $\beta$ -MnO<sub>2</sub>. The constant  $C_{44}$  and the volume and shear modulus showed large values, indicating a material with considerable hardness. This behavior was confirmed with the value obtained from the ratio of the volume modulus between the shear modulus by the Hill approximation. The understanding of the properties calculated in this study using CASTEP will allow obtaining additional parameters of optical and thermodynamic properties, among others, as well as the development of models and simulations that allow understanding and applying the acquired knowledge to real applications (experimental), e.g., in the removal of contaminants.

**Keywords:** DFT; CASTEP; MnO<sub>2</sub>; Mechanical properties; Elastic constants.



## 1. Introducción

Actualmente, se conocen seis óxidos estequiométricos del manganeso dentro de los cuales se encuentra el óxido de manganeso ( $\text{MnO}_2$ ). [1] En esta proporción atómica, el  $\text{MnO}_2$  puede asumir seis fases cristalinas, como lo son  $\alpha\text{-MnO}_2$ ,  $\beta\text{-MnO}_2$ ,  $\gamma\text{-MnO}_2$ ,  $\delta\text{-MnO}_2$ ,  $\eta\text{-MnO}_2$ ,  $\varepsilon\text{-MnO}_2$ . [2] El polimorfo  $\beta\text{-MnO}_2$  destaca entre los demás por su desempeño catalítico mejorado y alta selectividad, el cual es fácil de sintetizar, purificar, y con bajo costo de producción. [3]

Comúnmente,  $\beta\text{-MnO}_2$  es sintetizado a partir de la reducción de permanganato ( $\text{Mn(VII)}$ ) [1] vía hidrotermal. Sin embargo, existen diversos métodos reportados y reproducidos en la literatura, con lo que es posible la obtención de nanoestructuras, p. ej., cables, tubos, flores, esferas, mesoporosas, estrellas y varillas. [4] [5] Esta última forma es de gran interés por sus propiedades fisicoquímicas, antiincrustantes y mecánicas. [6]

En las últimas décadas, el uso de  $\beta\text{-MnO}_2$  ha ido en aumento en diversas aplicaciones, p. ej., supercapacitores, [7] baterías de pila seca (p. ej., alcalinas), sensores de gas, [8] fotodetección y catálisis. [5] Conjuntamente, las propiedades fisicoquímicas se han estudiado mediante técnicas de caracterización, p. ej., microscopía electrónica de barrido (SEM), análisis termogravimétrico (TGA), espectroscopía Raman, espectroscopía infrarroja (IR), espectroscopía de UV-VIS reflectancia difusa (DR-UV-VIS), difracción de rayos-X (XRD), y espectrometría de emisión óptica de plasma acoplado inductivamente (ICP-OES).

Recientemente, el uso de la teoría del funcional de densidad (DFT) para el modelado molecular ha representado una alternativa para realizar estimaciones de propiedades fisicoquímicas que

no son posibles mediante la ecuación de Schrödinger debido a su complejidad, ayudando a describir el comportamiento cuántico de átomos y moléculas.

A pesar de que los inicios de DFT datan desde hace décadas, la ejecución de la técnica ha mejorado mediante el uso de ecuaciones de mayor exactitud como las de Kohn-Sham. Sin embargo, al no tener un funcional de intercambio electrónico y de correlación de mayor exactitud, ha sido inevitable el uso de aproximaciones. [9] Aunado a esto, los avances en sistemas computacionales han mejorado significativamente el uso de esta técnica, permitiendo calcular valores teóricos de sistemas extremos, limitado por su costo de implementación y el tiempo de cálculo alto. [10]

Un programa para DFT ampliamente usado es CASTEP (originalmente CAMbridge Serial Total Energy Package). El cual se creó a finales de las décadas de los 80's, principios de los 90's, pero desde finales de los 90's el código ha sido actualizado y mejorado añadiendo funciones mejoradas de cálculo. Donde las modelaciones y simulaciones implementadas de moléculas optimizadas permiten calcular parámetros de propiedades fisicoquímicas, p. ej., mecánicas, ópticas, termodinámicas y electrónica. [11]

En el caso de los estudios de óxidos semiconductores por DFT usando CASTEP, [12], [13] contrariamente a lo esperado se han reportado pocos trabajos de procesamiento teórico de alotropismos de  $\text{MnO}_2$ . En el presente trabajo de investigación, se sintetizaron nanovarillas de  $\beta\text{-MnO}_2$ , las cuales fueron caracterizadas por diversas técnicas fisicoquímicas, y complementado el análisis de sus propiedades mecánicas por DFT usando CASTEP. Esto permitirá comprender sus



fortalezas y limitaciones en aplicaciones ambientales.

## 2. Metodología

### 2.1 Síntesis de nanomateriales

Los reactivos utilizados fueron adquiridos con el proveedor de la marca Sigma-Aldrich®, sin modificar las condiciones originales de estos para su uso: permanganato de potasio ( $\text{KMnO}_4$ , 99.9%), sulfato de manganeso ( $\text{MnSO}_4$ , 99.9%), metanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ , 99.8%). Las soluciones se prepararon con agua calidad MilliQ® (18  $\text{M}\Omega\cdot\text{cm}^{-1}$ , Millipore®) utilizando el desionizador Thermo Scientific™.

La síntesis de nanovarillas de  $\beta\text{-MnO}_2$  se realizó por el método de hidrotermal. En un vaso de politetrafluoroetileno (i.e., PTFE, conocido con el nombre comercial como teflón), se depositaron 2.5 mmol de  $\text{MnSO}_4$  y 1 mmol de  $\text{KMnO}_4$  en 30 ml de agua, los cuales se mantuvieron en agitación constante hasta obtener una mezcla homogénea. Posteriormente, el vaso se colocó en el interior de un reactor tipo autoclave, dejándose en un horno de convección a  $120^\circ\text{C}$  por 12 horas. El producto final fue un precipitado de color marrón, el cual fue separado por centrifugación a 5,000 rpm, y secados y almacenados a  $60^\circ\text{C}$  en el mismo horno.

### 2.2 Caracterización fisicoquímica

Las nanovarillas de  $\beta\text{-MnO}_2$  se confirmaron por SEM, usando un microscopio electrónico de barrido (Tescan®, Vega) operado a 12 kV en modo alta resolución. Además, la fase cristalina se corroboró con un difractor de rayos-X (Bruker®, D8 ADVANCE) operado a 40 kV y 35 mA. Los espectros fueron corridos de 10 a 80 de

$2\theta$  ( $^\circ$ ), con un paso de medición de  $0.01(^\circ)$  y un tiempo de 6 s.

### 2.3 Computacional

Los valores teóricos de las propiedades mecánicas de  $\beta\text{-MnO}_2$  fueron calculados vía DFT, usando el software CASTEP de Materials Studio® (2017). Se utilizó la aproximación de gradiente generalizado (GGA) con el funcional Perdew, Burke, y Ernzerhof para sólidos (PBESOL) y una energía de corte fina de 571.4 eV para la optimización de geometría; el pseudopotencial seleccionado fue OTFG-ultra-soft (del inglés On-The-Fly-Generated) para la interacción entre los electrones de valencia y los núcleos de iones, con un tratamiento relativista Koelling-Harmon. Se usaron los orbitales de valencia del O:  $2s^2 2p^4$  y Mg:  $3d^5 4s^2$ . Por último, se utilizó la misma energía de corte y similares parámetros para el cálculo del tensor de las constantes elásticas ( $C_{ij}$ ). Las cuales fueron usadas para el cálculo de las propiedades mecánicas.

## 3. Resultados y discusión

En la **Figura 1**, se muestra la micrografía de los materiales obtenidos, en ella se puede confirmar que la estructura obtenida corresponde a la esperada, es decir, nanovarillas. Conjuntamente, el resultado de la técnica de difracción de rayos-X confirmó que las nanovarillas coinciden con la fase  $\beta\text{-MnO}_2$ , con grupo espacial  $P4_2/mnm$  (136, ID:mp-510408), coincidiendo con lo reportado en la literatura. [14] [15]

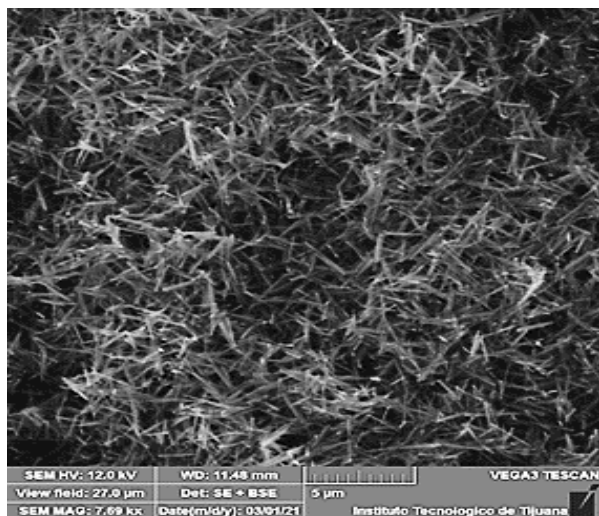


Figura 1. Micrografía MEB de nanovarillas de  $\beta$ -MnO<sub>2</sub>.

En la **Figura 2**, se muestra el difractograma de la nanoestructura sintetizada. En la figura, se observa la indexación de los picos de intensidad representativos del sistema cristalino en 28.35 (1 1 0), 37.03 (1 0 1), 42.50 (1 1 1), 56.34 (2 1 1), 59.02 (2 0 0), 71.96 (3 0 1) de  $2\theta$  (°).

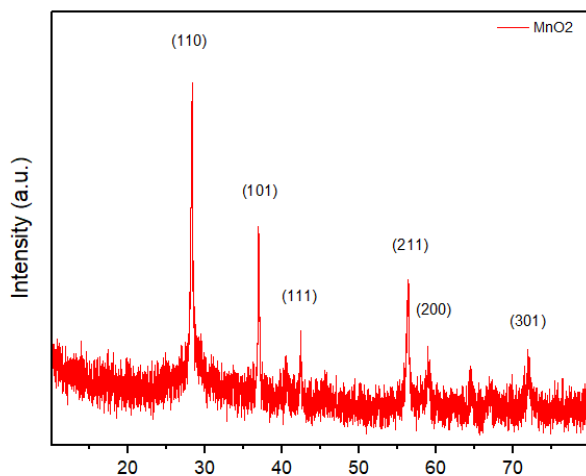


Figura 2. Difractograma XRD de las nanovarillas de  $\beta$ -MnO<sub>2</sub>.

En la **Figura 3**, se muestra la celda unitaria  $\beta$ -MnO<sub>2</sub> a partir de la cual se realizó la optimización de geometría, permitiendo obtener resultados más consistentes de las propiedades mecánicas. [16] En la **Tabla 1**, se enlistan los

parámetros de la red cristalina después de la optimización de geometría, estos valores se compararon con los valores reportados por Shenggui Ma, [17] usando el paquete de simulación Vienna Ab initio (VASP) con el propósito de comprobar la confiabilidad de la estimación realizada usando el software de CASTEP. Se puede notar la similitud en los resultados obtenidos, indicando la reproducibilidad del sistema  $\beta$ -MnO<sub>2</sub>.

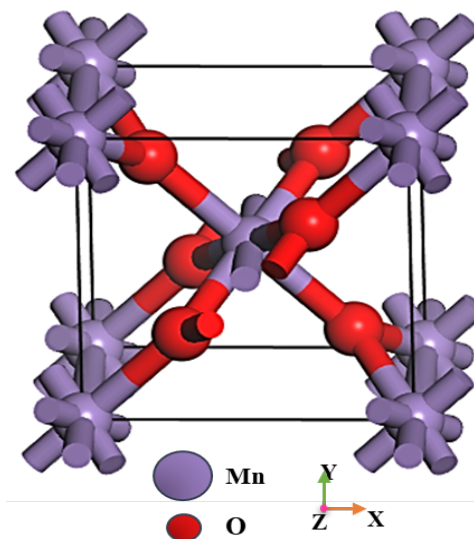


Figura 3. Celda unitaria  $\beta$ -MnO<sub>2</sub>.

**Tabla 1.** Se muestran los parámetros de red obtenidos después de la optimización de geometría. (Cal. se refiere a los calculados en este estudio y Ref. corresponden a los de Shenggui [17]).

Parámetros de red cristalina	Cal. (Å)	Ref. (Å)
a	4.398	4.461
c	2.731	2.959



En la **Tabla 2**, se muestra la matriz simétrica 6 x 6 conformada por las constantes elásticas  $C_{ij}$  calculadas, esta matriz se forma por los componentes de tensión y deformación existentes característicos de la red cristalina. Sin embargo, es posible reducir la cantidad de componentes. En el caso específico del  $\beta$ -MnO<sub>2</sub>, se reduce a seis componentes [18] [19], los cuales se muestran en la **Tabla 3**. También, en el sistema tetragonal, se cumplen las relaciones de  $C_{ij}$  para la estabilidad indicada en los Criterios de

Born:  $C_{11} > 0, C_{44} > 0, C_{66} > 0, C_{11} - C_{12} > 0$  y  $C_{33} > (C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2 < 0$ , [20] por lo que, al permanecer sin la influencia de una presión externa, se considera una estructura cristalina estable. Como se puede muestra en la tabla,  $C_{33} > C_{11}$ , los valores de estas constantes están relacionados con la resistencia en la dirección lineal de los parámetros de celda  $a$  y  $c$ , respectivamente, por lo tanto, el material es menos compresible en la dirección  $c$ . [21]

**Tabla 2.** Matriz simétrica 6 x 6 constituida por las constantes elásticas calculadas.

217.18643	192.29031	76.89805	0.00000	0.00000	0.00000
192.29031	217.18643	76.89805	0.00000	0.00000	0.00000
76.89805	76.89805	319.16614	0.00000	0.00000	0.00000
0.00000	0.00000	0.00000	171.07398	0.00000	0.00000
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	171.07398	0.00000
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	214.62571

**Tabla 3.** Valores de las constantes elásticas con sus respectivos índices.

i	j	$C_{ij}$
1	1	217.18643 +/- 43.003
3	3	319.16614 +/- 18.388
4	4	171.07398 +/- 6.046
6	6	214.62571 +/- 20.190
1	2	192.29031 +/- 131.041
1	3	76.89805 +/- 57.806
1	6	0.00000 +/- 0.000

A partir de los valores obtenidos de las constantes elásticas  $C_{ij}$ , se calcularon los valores del módulo de volumen ( $K$ ) módulo de Young ( $E$ ), módulo de corte o cizalla ( $G$ ), coeficiente de Poisson ( $\nu$ ) por medio de las aproximaciones de Voigt-Reuss-Hill, donde el modelo de Voigt ( $V$ ) y

Reuss ( $R$ ) asumen una deformación uniforme que representan los limites superior e inferior elástico, y el modelo de Hill ( $H$ ) asume dichos límites y establece el valor promedio. [22] En la **Tabla 4**, se enlistan los valores de cada



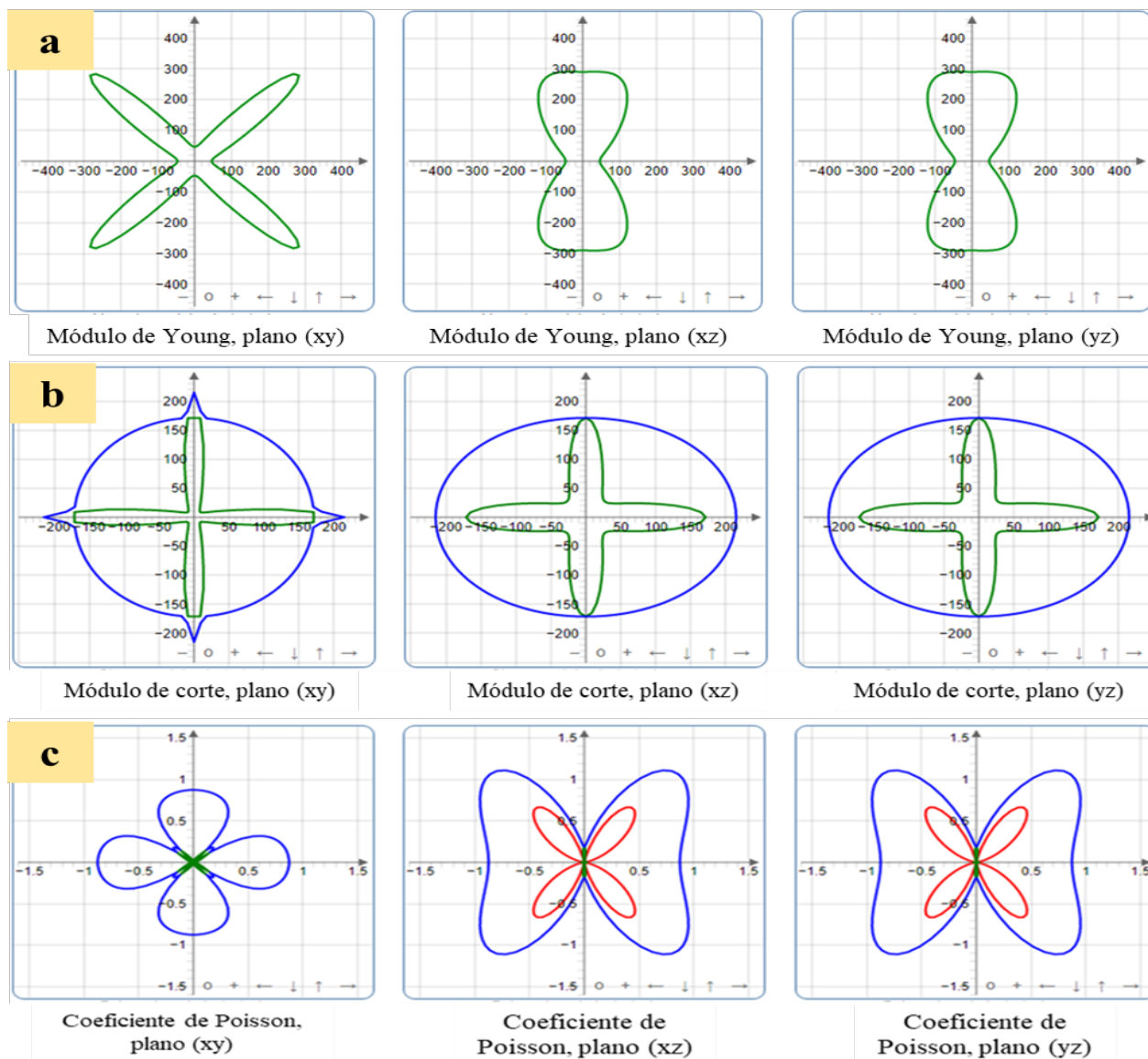
parámetro y el comparativo con los valores reportados por Shenggui.

**Tabla 4.** Valores obtenidos para el módulo de volumen, módulo de Young, módulo de corte y el coeficiente de Poisson por medio de las aproximaciones de Voigt, Reuss y Hill. En la última fila se presentan los resultados obtenidos por Shenggui. [17] La última columna muestra la razón del módulo de volumen entre el módulo de corte.

	Módulo de volumen ( $K$ )	Módulo de Young ( $E$ )	Módulo de corte ( $G$ )	Coficiente Poisson ( $\nu$ )	de $K/G$
<b>Voigt (V)</b>	$K_V = 160.63$ GPa	$E_V = 322.78$ GPa	$G_V = 138.52$ GPa	$\nu_V = 0.1651$	$K_V/G_V = 1.159$
<b>Reuss (R)</b>	$K_R = 160.58$ GPa	$E_R = 130.24$ GPa	$G_R = 47.713$ GPa	$\nu_R = 0.36482$	$K_R/G_R = 3.365$
<b>Hill (H)</b>	$K_H = 160.61$ GPa	$E_H = 234.1$ GPa	$G_H = 93.116$ GPa	$\nu_H = 0.25706$	$K_H/G_H = 1.725$
<b>Shenggui (VASP)</b>	188.13	229.81	88.64	0.30	2.122

Los resultados sugieren que al presentar  $C_{44}$  un valor grande, al igual que módulo de volumen y de corte, se puede suponer que el material presenta considerable dureza. [23] Además, la literatura establece que cuando el cociente del módulo de volumen entre el módulo de corte usando el modelo de Hill es mayor a 1.75 ( $K_H/G_H > 1.75$ ), se tiene un material dúctil; [24] en este caso no se cumple, ya que la relación es  $160.61$  GPa/  $93.116$  GPa = 1.725, lo cual confirma la suposición de dureza del material mencionada

anteriormente. Sin embargo, este resultado contradice lo reportado en la referencia, [17] donde  $K_H/G_H$  sí es mayor a 1.75 y establecen el  $\beta$ - $MnO_2$  como un material dúctil. Como se puede observar en la tabla, los valores calculados por Shenggui (VASP) difieren a los obtenidos en este estudio, siendo los valores del modelo de Hill más cercanos [18] [25] En la **Figura 4**, se observan las gráficas de deformación del módulo de Young, módulo de corte y coeficiente de Poisson en los planos  $xy$ ,  $xz$  y  $yz$ . [17], [26]



**Figura 4.** Se muestran los gráficos de deformación en las direcciones xy, xz y yz, respectivamente: a) Módulo de Young, b) Módulo de corte, c) Coeficiente de Poisson.

#### 4. Conclusiones

En el presente trabajo, se logró confirmar, gracias a las técnicas fisicoquímicas de caracterización, que los materiales obtenidos eran los esperados. Las propiedades mecánicas fueron calculadas, indicando una estructura estable. A partir del análisis de las constantes elásticas, se puede

concluir que el material presenta cierta dureza. Con las propiedades calculadas en este estudio se podrán obtener otros parámetros teóricos, además de realizar simulaciones adicionales para entender los fenómenos superficiales y de energía molecular y atómica de los materiales de manganeso en aplicaciones reales, como remoción de contaminantes.



## 5. Reconocimiento de autoría

*María Alejandra Gómez Murillo*: Redacción del borrador original; metodología; análisis e investigación; y edición. *Balter Trujillo Navarrete*: Conceptualización y metodología; análisis e investigación; escritura; revisión; edición; supervisión; y administración de proyecto.

### Referencias

[1] H. Wang et al., "Release of deposited MnO<sub>2</sub> nanoparticles from aqueous surfaces," *J. Environ. Sci.*, vol. 90, no. December, pp. 234-243, Apr. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.jes.2019.12.011>.

[2] M. V. Curia, "Manganeso. Generalidades," in *Estudio fisicoquímico y catalítico del sistema Mn-O-V*, 2010, p. 209.

[3] Z. Yang, C. Zhou, W. Zhang, H. Li, and M. Chen, "β-MnO<sub>2</sub> nanorods: A new and efficient catalyst for isoamyl acetate synthesis," *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.*, vol. 356, no. 1-3, pp. 134-139, Mar. 2010. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2010.01.007>

[4] S. Kim, H. Yoon, D. Shin, J. Lee, and J. Yoon, "Electrochemical selective ion separation in capacitive deionization with sodium manganese oxide," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 506, pp. 644-648, Nov. 2017. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2017.07.054>

[5] B. Lan et al., "Multifunctional free-standing membrane from the self-assembly of ultralong MnO<sub>2</sub> nanowires," *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 5, no. 15, pp. 7458-7464, 2013. <https://doi.org/10.1021/am401774r>

[6] M. S. Selim, Z. Hao, Y. Jiang, M. Yi, and Y. Zhang, "Controlled-synthesis of β-MnO<sub>2</sub> nanorods through a γ-manganite precursor route," *Mater. Chem. Phys.*, vol. 235, no. June, p. 121733, Sep. 2019. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2019.12.1733>

[7] Y. Kumar, S. Chopra, A. Gupta, Y. Kumar, S. J. Uke, and S. P. Mardikar, "Low temperature synthesis of MnO<sub>2</sub> nanostructures for supercapacitor application," *Mater. Sci. Energy Technol.*, vol. 3, pp. 566-574, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.mset.2020.06.002>

[8] S. Balamurugan, A. Rajalakshmi, and D. Balamurugan, "Acetaldehyde sensing property of spray deposited β-MnO<sub>2</sub> thin films," *J. Alloys Compd.*, vol. 650, pp. 863-870, Nov. 2015. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.08.063>

[9] D. S. Sholl and J. A. Steckel, "What is Density Functional Theory?," in *Density Functional Theory*, 2009, pp. 1-33. <https://doi.org/10.1002/9780470447710>

[10] V. Milman et al., "Electron and vibrational spectroscopies using DFT, plane waves and pseudopotentials: CASTEP implementation," *J. Mol. Struct. THEOCHEM*, vol. 954, no. 1-3, pp. 22-35, Aug. 2010. <https://doi.org/10.1016/j.theochem.2009.12.040>

[11] S. J. Clark et al., "First principles methods using CASTEP," *Zeitschrift für Krist. - Cryst. Mater.*, vol. 220, no. 5/6, pp. 567-570, Jan. 2005. <https://doi.org/10.1524/zkri.220.5.567.65075>

[12] L. B. Shi, C. Y. Xu, and H. K. Yuan, "A CASTEP study on magnetic properties of C-doped ZnO crystal," *Phys. B Condens. Matter*, vol. 406, no. 17, pp. 3187-3191, Sep. 2011. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2011.05.022>





[13] M. Rizwan, Hajra, I. Zeba, M. Shakil, S. S. A. Gillani, and Z. Usman, "Electronic, structural and optical properties of BaTiO<sub>3</sub> doped with lanthanum (La): Insight from DFT calculation," *Optik (Stuttg.)*, vol. 211, no. February, p. 164611, Jun. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.164611>

[14] M. Musil, B. Choi, and A. Tsutsumi, "Morphology and Electrochemical Properties of  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -, and  $\delta$ -MnO<sub>2</sub> Synthesized by Redox Method," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 162, no. 10, pp. A2058-A2065, 2015. <https://doi.org/10.1149/2.0201510jes>

[15] D. Gangwar and C. Rath, "Structural, optical and magnetic properties of  $\alpha$ - and  $\beta$ -MnO<sub>2</sub> nanorods," *Appl. Surf. Sci.*, vol. 557, no. March, p. 149693, Aug. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.149693>

[16] M. Studio, "Modules Tutorials Materials Studio 2017," Tutorial. 2016.

[17] S. Ma, X. Ye, X. Jiang, W. Cen, W. Jiang, and H. Wang, "First principles calculation of mechanical, dynamical and thermodynamic properties of MnO<sub>2</sub> with four crystal phases," *J. Alloys Compd.*, vol. 852, p. 157007, Jan. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.157007>

[18] T. C. Linares Fuentes, C. J. A. Garrido Schaeffer, W. More, N. F. Cornejo, A. Tamayo, and J. Rubio, "Teoría del Funcional de la Densidad en cristales de silicato de potasio. Aplicación al cálculo de propiedades mecánicas y microdureza Vickers en vidrios," *Boletín la Soc. Española Cerámica y Vidr.*, pp. 1-14, Aug. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.bsecv.2020.08.001>

[19] M. I. Kholil and M. T. H. Bhuiyan, "A theoretical (DFT) study of structural, mechanical and thermodynamic properties of manganese arsenides CsMn<sub>4</sub>As<sub>3</sub> and RbMn<sub>4</sub>As<sub>3</sub>," *Comput. Condens. Matter*, vol. 26, p. e00526, Mar. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2020.e00526>

[20] M. Chepkoech, D. P. Joubert, and G. O. Amolo, "First principles calculations of the thermoelectric properties of  $\alpha$ -MnO<sub>2</sub> and  $\beta$ -MnO<sub>2</sub>," *Eur. Phys. J. B*, vol. 91, no. 12, p. 301, Dec. 2018. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2018-90321-4>

[21] D. A. J. Montero, "Estudio mecano-cuántico de materiales desde primeros principios: propiedades elásticas y estabilidad del EuVO<sub>4</sub>," Universidad de La Laguna, 2014.

[22] E. Scholtzová and D. Tunega, "Prediction of mechanical properties of grafted kaolinite - A DFT study," *Appl. Clay Sci.*, vol. 193, no. May, p. 105692, Aug. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.clay.2020.105692>

[23] H. Joshi, T. V. Vu, N. N. Hieu, R. Khenata, and D. P. Rai, "Mechanical and thermodynamical properties of Fe<sub>2</sub>CoAl a full-Heusler alloy under hydrostatic pressure: A DFT study," *Mater. Chem. Phys.*, vol. 270, no. March, p. 124792, Sep. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2021.124792>

[24] A. Benamrani, S. Daoud, M. M. Abdus Salam, and H. Rekab-Djabri, "Structural, elastic and thermodynamic properties of YRh: DFT study," *Mater. Today Commun.*, vol. 28, p. 102529, Sep. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2021.102529>

[25] C. M. Ruiz and J. M. Osorio-Gillén, "Estudio teórico de las propiedades elásticas de



los minerales  $\text{Cu}_3\text{TMSe}_4$  (TM = V, Nb, Ta) por medio de cálculos atomísticos de primeros principios," Ing. y Cienc. - ing.cienc., vol. 7, no. 13, pp. 131-150, 2011, [Online]. Available: <http://publicaciones.eafit.edu.co/index.php/ingciencia/article/view/404>.

[26] R. Gaillac, P. Pullumbi, and F.-X. Coudert, "ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors," J. Phys. Condens. Matter, vol. 28, no. 27, p. 275201, Jul. 2016. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/27/275201>



Este texto está protegido por una licencia [Creative Commons 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Usted es libre para Compartir —copiar y redistribuir el material en cualquier medio o formato— y Adaptar el documento —remezclar, transformar y crear a partir del material— para cualquier propósito, incluso para fines comerciales, siempre que cumpla la condición de:

Atribución: Usted debe dar crédito a la obra original de manera adecuada, proporcionar un enlace a la licencia, e indicar si se han realizado cambios. Puede hacerlo en cualquier forma razonable, pero no de forma tal que sugiera que tiene el apoyo del licenciante o lo recibe por el uso que hace de la obra.

[Resumen de licencia - Texto completo de la licencia](#)