

1. Resultados: Método de deformación general

NOTA: Todos los componentes del tensor de tensiones están dados en eV/Å³. En cada tabla se muestran los componentes del tensor de deformaciones aplicado y los componentes de la tensión calculada.

1.1. Aproximación GGA (PBE)

Deformación 1

ε	-0.020	0.015	0.010	-0.015	-0.010	0.005
σ	-0.006497	0.010441	0.009886	-0.004016	-0.000508	-0.007528

Deformación 2

ε	-0.010	0.005	0.020	-0.015	0.030	-0.025
σ	-0.005523	-0.002573	0.013204	-0.001396	0.004507	-0.010155

Deformación 3

ε	0.015	-0.025	-0.005	0.030	0.010	-0.020
σ	-0.004748	-0.028495	-0.019022	0.005001	0.000062	0.005142

Deformación 4

ε	-0.020	-0.030	0.025	0.005	-0.015	0.010
σ	-0.015600	-0.018454	0.009502	-0.000061	-0.002005	0.005813

Deformación 5

ε	0.025	0.020	0.030	-0.010	-0.005	-0.015
σ	0.021235	0.020225	0.028562	-0.002639	0.000479	-0.006132

Deformación 6

ε	0.025	-0.030	0.005	-0.010	-0.015	0.020
σ	0.011381	-0.010754	0.000501	-0.003105	-0.000501	0.016114

1.2. Aproximación LDA (PZ)

Deformación 1

ε	-0.020	0.015	0.010	-0.015	-0.010	0.005
σ	-0.009167	0.013520	0.008325	-0.003487	0.001972	-0.004603

Deformación 2

ε	-0.010	0.005	0.020	-0.015	0.030	-0.025
σ	-0.007766	-0.009789	0.011166	0.001469	0.006544	-0.010512

Deformación 3

ε	0.015	-0.025	-0.005	0.030	0.010	-0.020
σ	-0.001197	-0.033732	-0.011103	0.008724	-0.002338	-0.000779

Deformación 4

ε	-0.020	-0.030	0.025	0.005	-0.015	0.010
σ	-0.018272	-0.022954	0.006887	0.001408	-0.000605	0.004152

Deformación 5

ε	0.025	0.020	0.030	-0.010	-0.005	-0.015
σ	0.024947	0.021200	0.026043	0.000276	0.002055	-0.004430

Deformación 6

ε	0.025	-0.030	0.005	-0.010	-0.015	0.020
σ	0.015452	-0.008264	0.002673	-0.004455	-0.001912	0.014913