

# Índice General

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Cálculo de estructura electrónica</b>	<b>11</b>
2.1	Teoría de la Funcional de la Densidad . . . . .	11
2.2	Método de ondas planas aumentadas . . . . .	13
2.3	WIEN97. . . . .	15
<b>3</b>	<b>Distribución de los hidrógenos en Mg<sub>2</sub>NiH<sub>4</sub></b>	<b>19</b>
3.1	Datos Conocidos . . . . .	19
3.2	Modelos y Resultados . . . . .	22
3.3	Propiedades electrónicas del Mg <sub>2</sub> NiH <sub>4</sub> . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Movimiento del hidrógeno en la matriz metálica</b>	<b>29</b>
4.1	Fonones del sistema Mg-H . . . . .	29
4.2	Movimiento localizado de hidrógeno en Mg <sub>2</sub> NiH <sub>4</sub> . . . . .	32
4.2.1	Información previa . . . . .	32
4.2.2	Modelos y Resultados . . . . .	33
4.2.3	Ancho de línea de la curva de NMR . . . . .	39
<b>5</b>	<b>Análisis de la estabilidad de Mg<sub>2</sub>NiH<sub>4</sub></b>	<b>47</b>
5.1	Estabilidad del Mg <sub>2</sub> NiH <sub>4</sub> en función del x <sub>H</sub> . . . . .	47
5.2	El Mg <sub>2</sub> NiH <sub>4</sub> como miembro de la familia de compuestos Mg <sub>2</sub> X . . . . .	49
<b>6</b>	<b>Compuestos del sistema Mg-Ni-Sn</b>	<b>53</b>
6.1	Mg <sub>2</sub> NiSn . . . . .	53
6.2	MgNi <sub>2</sub> Sn . . . . .	57
6.3	Mg <sub>2</sub> NiH <sub>4</sub> Sn . . . . .	59
<b>7</b>	<b>Conclusiones de la Parte Teórica</b>	<b>63</b>
<b>8</b>	<b>Técnicas experimentales</b>	<b>69</b>
8.1	Preparación de muestras: aleado mecánico . . . . .	69
8.1.1	ASI Uni-Ball-Mill-II . . . . .	71
8.1.2	Spex 8000 Shaker Mill . . . . .	71

8.2	Caracterización de las muestras . . . . .	72
<b>9</b>	<b>Aleaciones de Mg-Ni</b> . . . . .	<b>73</b>
9.1	Antecedentes . . . . .	73
9.2	Obtención del precursor de Mg <sub>2</sub> Ni . . . . .	75
9.2.1	<i>Spex 8000 Shaker Mill</i> . . . . .	75
9.2.2	<i>ASI Uni-Ball-Mill-II</i> . . . . .	82
9.3	Interacción del precursor con el hidrógeno . . . . .	85
9.3.1	<i>Spex 8000 Shaker Mill</i> . . . . .	85
9.3.2	<i>ASI Uni-Ball-Mill-II</i> . . . . .	87
9.4	Aleado mecánico bajo atmósfera de hidrógeno . . . . .	90
<b>10</b>	<b>Aleaciones de Mg-Ni-Sn</b> . . . . .	<b>93</b>
10.1	Motivación . . . . .	93
10.2	Aleaciones obtenidas bajo Argón . . . . .	93
10.3	Aleaciones obtenidas bajo Hidrógeno . . . . .	98
10.4	Ajuste Rietveld cualitativo de la fase cúbica nueva . . . . .	102
<b>11</b>	<b>Conclusiones de la Parte Experimental</b> . . . . .	<b>105</b>