

# Desarrollo y caracterización de una aleación de alta entropía ligera MnNiCuAl fabricada por fusión oxiacetilénica

## Development and characterization of a lightweight MnNiCuAl high-entropy alloy fabricated by oxyacetylene melting

C. O. Hernández Chávez \*, J. Reyes Miranda , A. S. de Ita de la Torre , M. Molina Morales   
D. Flores Sánchez , A. Garrido Hernández 

<sup>a</sup> Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Departamento de Materiales, 02128, Alcaldía Azcapotzalco, CDMX, México.

### Resumen

En este trabajo se desarrolló una aleación ligera de alta entropía con una composición equiatómica, compuesta por cuatro elementos; manganeso, níquel, cobre y aluminio (MnNiCuAl) fabricada mediante fusión oxiacetilénica. Se realizaron los cálculos de los parámetros termodinámicos, estructurales y electrónicos correspondientes, obteniendo una entropía de 11.53 J/K·mol, un parámetro de estabilidad ( $\Omega$ ) de 1.52, una diferencia de radios atómicos ( $\delta$ ) de 5.23, una concentración de electrones de valencia (CEV) de 7.75 e/a y una diferencia de electronegatividad ( $\Delta\chi$ ) de 0.164. La aleación MnNiCuAl se caracterizó mediante diferentes técnicas; a través de microscopía óptica se evidenció la presencia de dos microconstituyentes dominantes, uno dendrítico y otro interdendrítico. Mediante difracción de rayos X se identificó la presencia de dos fases cristalinas, una FCC y otra BCC. Se confirmó la composición elemental mediante microscopía electrónica de barrido. Se registró una dureza promedio entre ambos microconstituyentes de 400 HV. Finalmente, la aleación presentó una densidad teórica de 6.51 g/cm<sup>3</sup>, valor que es inferior al de los aceros al carbono (7.84 g/cm<sup>3</sup>).

*Palabras Clave:* Alta entropía, fusión oxiacetilénica, microconstituyentes, densidad, dureza.

### Abstract

In this work, a lightweight high-entropy alloy with an equiatomic composition was developed, consisting of four elements: manganese, nickel, copper, and aluminum (MnNiCuAl), fabricated by oxyacetylene melting. The corresponding thermodynamic, structural, and electronic parameters were calculated, yielding an entropy value of 11.53 J/K·mol, a stability parameter ( $\Omega$ ) of 1.52, an atomic size difference ( $\delta$ ) of 5.23, a valence electron concentration (VEC) of 7.75 e/a, and an electronegativity difference ( $\Delta\chi$ ) of 0.164. The MnNiCuAl alloy was characterized by different techniques; optical microscopy revealed the presence of two dominant microconstituents, one dendritic and the other interdendritic. X-ray diffraction analysis confirmed the coexistence of two crystalline phases, FCC and BCC. Elemental composition was verified by scanning electron microscopy. An average hardness of 400 HV was recorded between both microconstituents. Finally, the alloy exhibited a theoretical density of 6.51 g/cm<sup>3</sup>, which is lower than that of carbon steels (7.84 g/cm<sup>3</sup>).

*Keywords:* High entropy, oxyacetylene melting, microconstituents, density, hardness.

### 1. Introducción

Las aleaciones de alta entropía (HEAs por sus siglas en inglés) en los últimos años han emergido como un campo de gran interés en la ciencia e ingeniería de materiales, aportando una clase de nuevos materiales con propiedades únicas.

A diferencia de las aleaciones convencionales, cuya base está definida por un elemento mayoritario con adiciones menores de otros elementos, las HEAs se diseñan a partir de la

mezcla equiatómica o casi equiatómica de cuatro a más componentes. Esta configuración genera una elevada aleatoriedad química que promueve la formación de soluciones sólidas estables y estructuras cristalinas simples, lo cual se traduce en un conjunto de propiedades particulares como alta dureza, alta resistencia al desgaste, estabilidad térmica y, en algunos casos buena resistencia a la corrosión (Yang & Zhang, 2012).

\*Autor para la correspondencia: coh@azc.uam.mx

Correo electrónico: coh@azc.uam.mx (Christian Omar Hernández-Chávez), joremi@azc.uam.mx (Joan Reyes-Miranda), add@azc.uam.mx (Antonio Silvio de Ita-de la Torre), al2242801012@azc.uam.mx (Mariana Molina-Morales), dfs@azc.uam.mx (Daniel Flores-Sánchez), agh@azc.uam.mx (Aristeo Garrido-Hernández).

**Historial del manuscrito:** recibido el 21/09/2025, última versión-revisada recibida el 09/11/2025, aceptado el 09/11/2025, publicado el 12/12/2025 **DOI:** <https://doi.org/10.29057/icbi.v13iEspecial4.16080>



El estudio de estas aleaciones ha avanzado principalmente en sistemas basados en elementos de transición de alta densidad, los cuales, si bien presentan excelentes propiedades mecánicas, suelen estar limitados en aplicaciones donde el peso constituye un factor crítico (Kamal et al., 2024). En este contexto las aleaciones de alta entropía ligeras han cobrado relevancia, al integrar elementos de baja densidad como el aluminio, con el propósito de obtener materiales que combinen resistencia mecánica y reducción de peso (Bridges et al., 2023). Dichas características resultan altamente atractivas para sectores estratégicos como la industria aeroespacial, automotriz y de generación de energía, en donde la relación resistencia-peso es determinante para la eficiencia y el desempeño (Amiri & Shahbazian-Yassar, 2021).

Dentro de este marco, la investigación de nuevas rutas de fabricación se vuelve fundamental para explorar composiciones y microestructuras que potencialicen las propiedades de las HEAs ligeras. La fusión oxiacetilénica se presenta como una técnica alternativa de fabricación, ya que permite alcanzar temperaturas suficientemente elevadas para la completa fusión de los elementos constituyentes, favoreciendo la obtención de lingotes metálicos de una manera relativamente sencilla, económica y con mayor estabilidad térmica en comparación con métodos más sofisticados (Cadavid et al., 2016).

En particular, la aleación MnNiCuAl representa un sistema prometedor debido a que, además de conferir una densidad baja en comparación con aleaciones ferrosas, se puede inducir la formación de soluciones sólidas estables y microconstituyentes potenciales para incrementar significativamente la resistencia mecánica y la ductilidad respecto a otras aleaciones no ferrosas. Su estudio, por lo tanto, no solo contribuye a enriquecer el conocimiento sobre las HEAs ligeras, también abre la posibilidad de desarrollar materiales competitivos para aplicaciones donde la optimización de peso y propiedades estructurales es esencial.

Este trabajo tiene el objetivo de desarrollar y caracterizar la aleación MnNiCuAl fabricada mediante fusión oxiacetilénica, con la finalidad de aportar información valiosa sobre la viabilidad de este sistema como una nueva opción de aleaciones ligeras de alta entropía, debido al área de oportunidad que presenta esta aleación.

## 2. Metodología teórica y experimental

### 2.1. Cálculos Termodinámicos, estructurales y electrónicos

Para evaluar el comportamiento y propiedades de la aleación MnNiCuAl, se llevaron a cabo los cálculos termodinámicos, estructurales y electrónicos correspondientes, considerando además las reglas de Hume Rothery de manera estricta.

La entalpía de mezcla se determinó mediante el modelo *Miedema* para pares de elementos atómicos (A. Inoue, 2005) la entropía de mezcla ( $\Delta S$ ), el parámetro de estabilidad ( $\Omega$ ), la diferencia de radios atómicos ( $\delta$ ), la concentración de electrones de valencia (CEV), la diferencia de electronegatividad ( $\Delta\chi$ ) y la densidad ( $\rho$ ), se calcularon empleando las ecuaciones 1 a 6 respectivamente (S. Guo, 2011).

$$\Delta S_{mezcla} = -R \sum_{i=1}^n c_i \ln c_i \quad (1)$$

Donde  $R$  es la constante de los gases,  $c_i$  es el porcentaje atómico y  $n$  es el número total de elementos.

$$\Omega = \frac{T_f \Delta S_{mezcla}}{|\Delta H_{mezcla}|} \quad (2)$$

Donde  $T_f = \sum_{i=1}^n c_i (T_f)_i$ ,  $c_i$  es el porcentaje atómico y  $T_f$  es la temperatura de fusión.

$$\delta = \sqrt{\sum_{i=1}^n c_i \left(1 - \frac{r_i}{\bar{r}}\right)^2 * 100} \quad (3)$$

Donde  $\bar{r} = \sum_{i=1}^n c_i r_i$ ,  $c_i$  y  $r_i$  es el porcentaje y el radio atómico de todos los elementos, respectivamente y  $n$  es el número total de elementos.

$$CEV = \sum_{i=1}^n c_i (CEV)_i \quad (4)$$

Donde  $CEV$  es la concentración de electrones de valencia, destacando que es el cociente de electrones por átomo, e/a,  $c_i$  es el porcentaje atómico y  $n$  es el número total de elementos.

$$\Delta\chi = \sqrt{\sum_{i=1}^n c_i (\chi_i - \bar{\chi})^2} \quad (5)$$

Donde  $\chi_i$  es la electronegatividad de Pauling,  $c_i$  es el porcentaje atómico y  $n$  es el número total de elementos.

$$\rho = \frac{\sum c_i M.A._i}{\sum \frac{c_i M.A._i}{\rho_i}} \quad (6)$$

Donde  $c_i$ ,  $M.A._i$ , y  $\rho_i$  son el porcentaje atómico, la masa atómica y la densidad de los elementos de la aleación, respectivamente.

Para obtener una masa de 100 gramos de la aleación MnNiCuAl, considerando un porcentaje atómico de 25% de cada elemento se empleó la ecuación 7.

$$\%masa = \frac{\%atómico * M.A.}{\sum_{i=1}^n \%atómico * M.A.} * 100 \quad (7)$$

Donde  $M.A.$ , es la masa atómica y  $n$  es el número total de elementos.

Los valores en masa de cada elemento para fabricar 100 gramos de la aleación MnNiCuAl se presentan en la Tabla 1, destacando que cada elemento contribuye con  $2.95 \times 10^{23}$  átomos.

Tabla 1. Composición química para 100 gramos de la aleación MnNiCuAl.

Mn	Ni	Cu	Al
26.91 g	28.75 g	31.13 g	13.22 g

## 2.2. Procedimiento experimental

Una vez determinada la masa de cada elemento se procedió a pesar individualmente cada uno para obtener una masa total de solo 25 gramos, es decir, la cuarta parte de la composición mostrada en la Tabla 1, destacando que los 4 elementos se adquirieron en forma de peletes con una pureza del 99.99%.

Con lo anterior se obtuvo la siguiente relación en peso de los elementos; 6.73 g de Mn, 7.19 g de Ni, 7.78 g de Cu y 3.31 g de Al. El proceso de fusión se realizó por oxicombustión, generando un sistema de calentamiento que constó de un horno tipo fragua, un crisol de carburo de silicio, un tanque de oxígeno y uno de acetileno. Con el sistema listo para obtener la aleación se llevó a cabo la fusión en etapas para garantizar una homogeneidad de la muestra a una temperatura promedio de 1600°C. Es importante mencionar que la aleación se caracterizó en estado de colada.

El lingote de la aleación resultante se cortó en una cortadora metalográfica METKON para obtener secciones y caracterizarla, tanto microestructural como mecánicamente. De esta manera una de las secciones fue sometida a un proceso metalográfico bajo la norma ASTM E3.

Para finalizar el proceso metalográfico, la muestra fue sometida a un ataque químico secuencial con dos reactivos diferentes, de la siguiente manera; primero se empleó reactivo Villela, de acuerdo con lo reportado por (Saucedo-Muñoz et al., 2023) sumergiendo la muestra durante 15 segundos, con posterior enjuague en agua durante 5 segundos. El segundo reactivo fue una solución férrea clorhídrica, se realizó frotando la superficie de la muestra con algodón impregnado de la solución por 2 segundos, con posterior enjuague en agua durante 5 segundos. La composición química del reactivo Villela fue de 30 ml de etanol, 1.5 ml de ácido clorhídrico y 0.3 g de ácido pícrico, la composición de la solución férrea clorhídrica fue de 50 ml de etanol, 1 ml de ácido clorhídrico y 2.6 g de cloruro férrico.

Para analizar la microestructura de la aleación MnNiCuAl se empleó un microscopio metalográfico OLYMPUS PMG3, recopilando evidencia fotográfica a diferentes aumentos 50x y 100x.

Se cortó una sección de la aleación en cuestión con un disco de diamante para obtener una muestra de 2 mm x 5 mm x 10 mm para analizarla mediante difracción de rayos X con ayuda de un difractómetro SIEMENS D500 empleando una radiación CuK $\alpha$  (1.5406 Å) dentro de un intervalo de ángulos 2 $\theta$  de 20 a 80° y una velocidad de 2°/min.

La aleación MnNiCuAl con preparación metalográfica se observó en un microscopio electrónico de barrido ZEISS Supra 55VP, obteniendo un mapeo elemental de Mn, Ni, Cu, Al mediante la técnica de espectroscopía de energía dispersiva (EDS).

Finalmente, la muestra fue sometida a ensayos de microdureza en un microdurómetro WILSON HARDNESS TUKON 1102, bajo la norma ASTM E384, registrando 15 mediciones aplicando una carga de 0.05 kgf.

## 3. Resultados

### 3.1. Valores para criterios de aleaciones de alta entropía

Después de realizar los cálculos termodinámicos, estructurales y electrónicos correspondientes de entalpia ( $\Delta H$ ) y entropía de mezcla ( $\Delta S$ ), parámetro de estabilidad ( $\Omega$ ), diferencia de radios atómicos ( $\delta_r$ ), concentración de electrones de valencia (CEV), diferencia de electronegatividad ( $\Delta \chi$ ) y densidad ( $\rho$ ) (S. Guo, 2011) se obtuvieron los valores mostrados en la Tabla 2.

Tabla 2. Valores obtenidos teóricamente de la aleación MnNiCuAl.

$\Delta H_{mez}$ (kJmol $^{-1}$ )	$\Delta S_{mez}$ (Jmol $^{-1}$ K $^{-1}$ )	$\delta$ (%)	$\Omega$	CEV (e/a)	$\Delta \chi$	$\rho$ (gcm $^{-3}$ )
-10.50	11.53	5.23	1.52	7.75	0.164	6.509

De acuerdo con (Yang & Zhang, 2012) los valores mostrados en la Tabla 2, la aleación MnNiCuAl se encuentra en una zona dentro del intervalo  $\Omega \geq 1.1$  y  $\delta \leq 6.6\%$  criterio que se propone para definir la formación de una solución sólida. Esta zona se caracteriza por una diferencia de radios atómicos relativamente pequeña y un valor del parámetro de estabilidad alto, lo que indica que la energía de formación provocada por la distorsión estructural es baja y por lo tanto el efecto de  $\Delta S_{mez}$  es suficientemente grande como para superar al de  $\Delta H_{mez}$  para la formación de la solución sólida, destacando que el valor de entropía en función de R fue de 1.4R.

Lo anterior indica que la solución sólida compleja obtenida en la aleación MnNiCuAl es estable y se forma fácilmente, debido a que los átomos se distribuyen aleatoriamente en toda la red cristalina.

El valor obtenido de concentración de electrones de valencia de la aleación mostrado en la Tabla 2, se encuentra dentro del intervalo  $6.87 \leq CEV \leq 8$ , lo que indica la presencia de dos fases; una cubica centrada en el cuerpo (BCC) y otra cubica centrada en las caras (FCC), de acuerdo con (Yang & Zhang, 2012).

El otro parámetro de gran relevancia que influye directamente en la formación de una solución sólida es la diferencia de electronegatividad, de esta manera cuando es menor a 0.2 se produce una alta miscibilidad, lo que favorece la formación de una solución sólida (Fang et al., 2003).

### 3.2. Caracterización microestructural

En la Figura 1 se muestra la microestructura de la aleación MnNiCuAl en estado de colada a 50x y 100x, obtenida mediante microscopía óptica. Se puede apreciar claramente una morfología columnar dendrítica con una cierta orientación muy posiblemente en la dirección de la extracción de calor indicando un bajo gradiente de temperatura, evidenciada por la presencia de dos regiones bien definidas, una de color claro y otra de color oscuro, las cuales corresponden a dos microconstituyentes, uno dendrítico y otro interdendrítico respectivamente (Saucedo-Muñoz et al., 2023), con posible segregación en algunas zonas.

De acuerdo con la microestructura observada a 100x se puede distinguir un porcentaje de fase prácticamente de 50-50 entre ambos microconstituyentes, mediante una segmentación binaria se obtuvieron los valores de 55.5 % para la región dendrítica y 44.5 % para la zona interdendrítica.

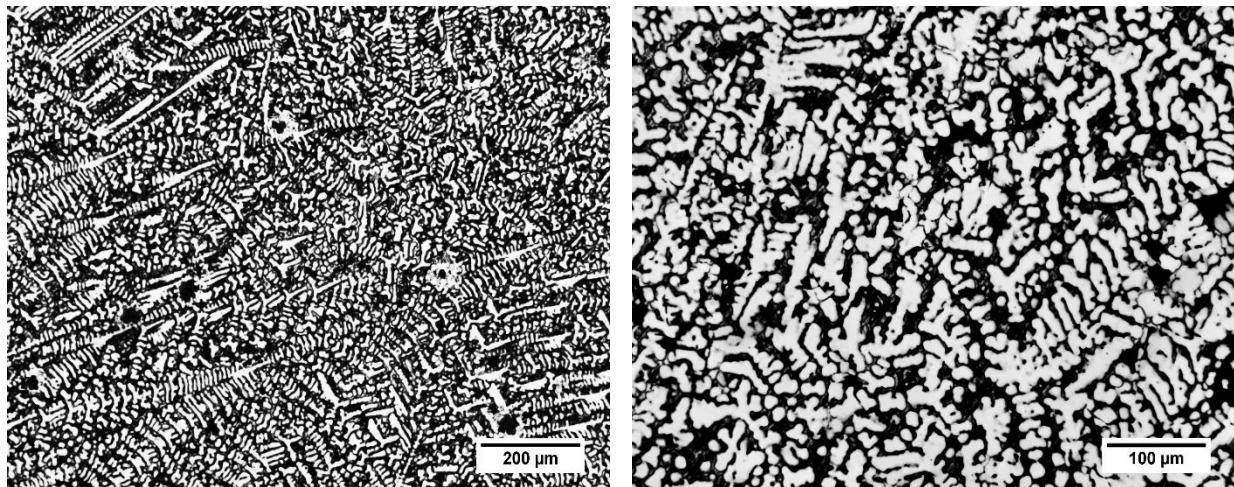


Figura 1. Microestructura de la aleación MnNiCuAl observada por MO. Aumentos 50x y 100x, barra de escala 200  $\mu\text{m}$  y 100  $\mu\text{m}$  respectivamente.

En la Figura 2 se observan las imágenes obtenidas mediante espectroscopía de energía dispersiva (EDS) de la aleación MnNiCuAl en estado de colada. La micrografía compuesta, evidencia los 4 elementos constituyentes, se aprecia que el Mn se encuentra distribuido uniformemente, lo que podría sugerir que este elemento se integra de forma preferente en una matriz principal. Por otro lado, el Ni y el Al se concentran en regiones específicas, finalmente el cobre de igual manera se aprecia distribuido uniformemente, presentando ligeras fluctuaciones de concentración, lo cual podría asociarse a una posible segregación parcial durante la solidificación.

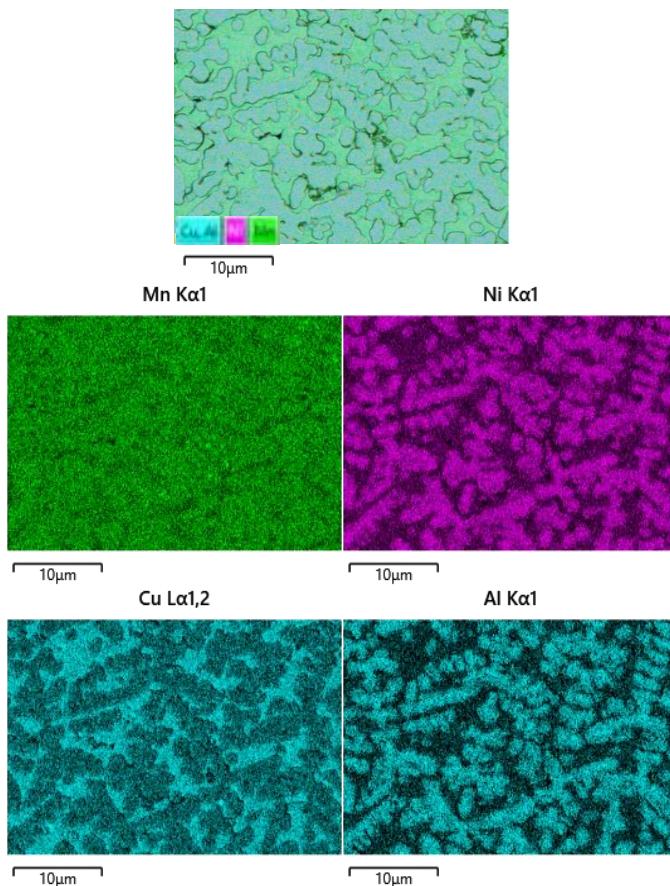


Figura 2. Mapeo elemental de la aleación MnNiCuAl

En la Figura 3 se muestra el difractograma de rayos X de la aleación MnNiCuAl en estado de colada, se observan reflexiones angostas bien definidas, lo que indica un comportamiento con alta cristalinidad, lo que a su vez se podría traducir en un arreglo cristalino con repetibilidad a corto y largo alcance. Se determinó un tamaño de cristalito de 39 nm, mediante la ecuación de Sherrer (Cullity, 1956) considerando un valor de  $K=0.89$ , una contribución gaussiana y lorentziana y valor de FWHM promedio de 0.315. Además, debido a que para esta aleación no se cuenta con información en base de datos de ICDD, se procedió a identificar las fases cristalinas FCC y BCC mediante coincidencias con los componentes de la aleación y las posibles interacciones binarias como se observa en la Figura 2, en donde se tiene la presencia de Ni y Al así como Mn y Cu, encontrando los patrones observados en la Figura 3.

Con lo anterior se comprueba lo obtenido teóricamente, relacionado a la coexistencia de dos fases cristalinas, las cuales confieren alta resistencia mecánica, así como alta ductilidad, en función de la presencia de la estructura BCC y FCC respectivamente.

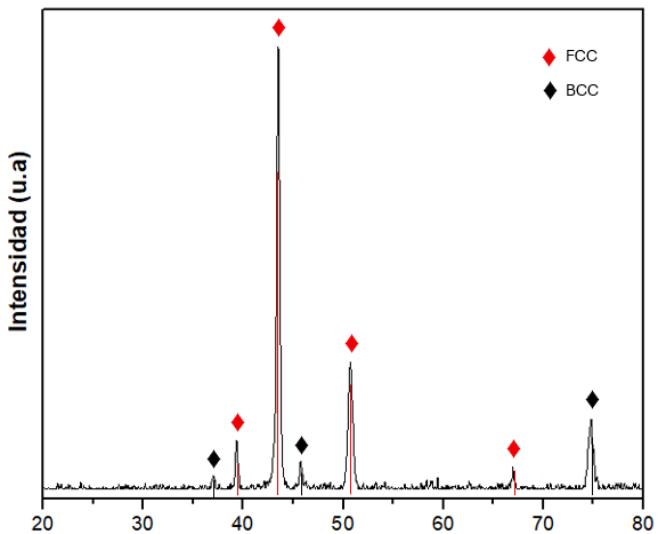


Figura 3. Difractograma de rayos X de la aleación MnNiCuAl.

### 3.3. Caracterización mecánica

Después de someter la aleación MnNiCuAl a ensayos de microdureza Vickers, se obtuvo una dureza promedio de 400 HV empleando una carga de 0.05 Kgf, destacando que este valor es un promedio entre ambas regiones mencionadas (Saucedo-Muñoz et al., 2023). Es importante puntualizar que la región interdendrítica es la que presentó valores más altos de dureza en comparación con la zona dendrítica.

Con la finalidad de comprar esta propiedades se muestran en la Tabla 3 valores típicos de dureza de aceros al carbono y algunas aleaciones de alta entropía de acuerdo con lo reportado con (Saucedo-Muñoz et al., 2023).

Tabla 3. Comparación de dureza de diferentes aleaciones convencionales y de alta entropía y la obtenida para la aleación MnNiCuAl.

Aleación	Dureza (HV)	Referencia
MnNiCuAl	400	Esta investigación
MnNiCuAl	359	(Saucedo-Muñoz et al., 2023)
Al32Co13Cr33Fe22	735.5	(Poonia et al., 2024)
Co10Cr20Fe30Ni40	126.5	(Poonia et al., 2024)
Co6W9Al36Mo38Ni11	725	(Poonia et al., 2024)
Al80.5Ni7.5Mn8.6Zr3.3	553.24	(Bouri et al., n.d.)
Acero bajo carbono (N)	100-150	(Callister & Rethwisch, 2014)
Acero medio carbono (N)	160-200	(Callister & Rethwisch, 2014)

Como se puede observar la dureza presentada por la aleación MnNiCuAl de esta investigación y la reportada por Saucedo y colaboradores es muy cercana, además es comparable con la de algunas aleaciones tanto convencionales, en este caso acero al carbono registrando valores superiores a los reportados por los aceros en estado de normalizado, como de alta entropía, en donde se sitúa en valores intermedios a los reportados en la Tabla 3.

## 4. Conclusiones

De acuerdo con los cálculos termodinámicos estructurales y electrónicos, la aleación MnNiCuAl presenta una solución sólida con dos estructuras cristalinas, una BCC y otra FCC, exhibiendo la presencia de dos microconstituyentes dominantes, que son; una región dendrítica columnar en color claro y otra región interdendrítica en color oscuro, presentando una alta influencia de Ni y Al en la región dendrítica y una zona interdendrítica enriquecida en Cu y Mn. La dureza reportada, de igual manera compite con la dureza de ciertos aceros al carbono y aleaciones de alta entropía, destacando que la región rica en Mn y Cu presentó una dureza mayor a la zona rica en Ni y Al.

## Agradecimientos

Los autores agradecen los recursos e instalaciones proporcionados por la SECIHTI y la Universidad Autónoma Metropolitana para llevar a cabo la experimentación y caracterización de este trabajo.

## Referencias

- Amiri, A., & Shahbazian-Yassar, R. (2021). Recent progress of high-entropy materials for energy storage and conversion. *Journal of Materials Chemistry A*, 9(2), 782–823. <https://doi.org/10.1039/d0ta09578h>
- Bouri, R., Nair, M. R., & Roy, T. (n.d.). *From Data to Alloys : Predicting and Screening High - Entropy Alloys for High Hardness Using Machine Learning*.
- Bridges, D., Fieser, D., Santiago, J. J., & Hu, A. (2023). Novel Frontiers in High-Entropy Alloys. *Metals*, 13(7), 1–22. <https://doi.org/10.3390/met13071193>
- Cadavid, E., Parra, C., & Vargas-Galvis, F. (2016). Estudio termo-físico de llamas oxiacetilénicas utilizadas en la proyección térmica. *Revista Colombiana de Materiales*, 9(9), 15–26.
- Callister, W. D., & Rethwisch, D. G. (2014). *Materials science*.
- Cullity, B. . (1956). *X-RAY DIFFRACTION ADDISON-WESLEY METALLURGY SERIES*.
- Fang, S., Xiao, X., Xia, L., Li, W., & Dong, Y. (2003). Relationship between the widths of supercooled liquid regions and bond parameters of Mg-based bulk metallic glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 321(1–2), 120–125. [https://doi.org/10.1016/S0022-3093\(03\)00155-8](https://doi.org/10.1016/S0022-3093(03)00155-8)
- Guo S., C. T. L. (2011). Phase stability in high entropy alloys: Formation of solid-solution phase or amorphous phase. *Progress in Natural Science: Materials International*, 21(6), 433–446. [https://doi.org/10.1016/S1002-0071\(12\)60080-X](https://doi.org/10.1016/S1002-0071(12)60080-X)
- Inoue A., Takeuchi A. (2005). Classification of bulk metallic glasses by atomic size difference, heat of mixing and period of constituent elements and its application to characterization of the main alloying element. *Materials Transactions*, 46(12), 2817–2829. <https://doi.org/10.2320/matertrans.46.2817>
- Kamal, M. V., Ragunath, S., Hema Sagar Reddy, M., Radhika, N., & Saleh, B. (2024). Recent advancements in lightweight high entropy alloys – A comprehensive review. *International Journal of Lightweight Materials and Manufacture*, 7(5), 699–720. <https://doi.org/10.1016/j.ijlmm.2024.06.001>
- Poonia, A., Kishor, M., Prasada, K., & Ayyagari, R. (2024). Designing of high entropy alloys with high hardness : a metaheuristic approach. *Scientific Reports*, 1–13. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-57094-y>
- Saucedo-Muñoz, M. L., Miranda-López, V., Flores-López, O. A., Fabian-Flores, R., & López-Hirata, V. M. (2023). Caracterización microestructural y propiedades mecánicas de aleaciones de alta entropía MnNiCuAl. *Pädi Boletín Científico de Ciencias Básicas e Ingenierías Del ICBI*, 11(Especial5), 117–121. <https://doi.org/10.29057/icbi.v11iespecial5.11640>
- Yang, X., & Zhang, Y. (2012). Prediction of high-entropy stabilized solid-solution in multi-component alloys. *Materials Chemistry and Physics*, 132(2–3), 233–238. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2011.11.021>