

Taller de simulaciones, parte 1.

Simulación estructural y electrónico del **silicio**.

Objetivos:

- Optimización de $ecutwfc$
- Optimización de $ecutrho$
- Optimización de puntos k
- Optimización de parámetro de red

nota: El parámetro de red se utiliza un cálculo de tipo 'relax'.

Simulación estructural y electrónico del **siliceno**.

Objetivos:

- Optimización de puntos k
- Optimización de parámetro de red

Nota: para el siliceno se utilizarán los valores $ecutwfc$ y $ecutrho$ optimizados en el silicio.

Hacer una búsqueda en la literatura (artículos científicos) de los parámetros estructurales (parámetro de red, longitud de enlace, ángulos) y propiedades electrónicas (estructura de bandas electrónicas, densidad de Estados electrónicos) del silicio, siliceno y silicano.