

1. Nesta prática, veremos como as forças e tensões podem ser calculadas pela DFT, sem custo adicional, pelo método quase-Newton, e como ela pode ser usada pelo QE.

H2O - Para isso utilizaremos a molécula da água em sua geometria linear.

Abra o arquivo H2O-relax.in e visualize a estrutura no VESTA (busque as informações das posições atômicas).

- Submeta o input ao QE utilizando pw.x
- Analise os steps da sua simulação
- Monte as últimas coordenadas da estrutura molecular com o VESTA
- Abra o arquivo de saída utilizando o xcrysden
- Faça um gif com os steps da simulação para mostrar a dinâmica da relaxação da sua molécula
- Mude o parâmetro ecutwf e veja o que acontece com as posições atômicas no arquivo de saída

	Referência	Cálculo QE	Erro (%)
Distância (O-H)	95.34 pm		
Ângulo (H-O-H)	104,45°		

2. Independentemente do tipo de sistema em que você está olhando, é necessário verificar a convergência do resultado (seja qual for o seu cálculo) em relação ao corte de energia das ondas planas.

Al - Um exemplo que mostra a convergência total de energia com relação ao corte de energia está no diretório Al/. Já configuramos um script feito em shell para criar os arquivos de entrada que são todos idênticos, exceto que aumentamos sistematicamente o valor de ecutwfc.

- Antes de executar o script ecutwfc.sh, rode o Al.scf.in com pw.x
- Utilize o comando grep
- Execute o script ecutwfc.sh
- Plote os resultados utilizando plot-ecutwfc.gp
- Faça o mesmo procedimento para os k-points
- Execute o Al.nscf.in com o pw.x
- Execute o Al.dos.in com o dos.x
- Agora plote o arquivo de saída utilizando o dos.plt
- Execute pp.al.chdens.in com o plotrho.x

- Compare com a estrutura no VESTA e tente interpretar o desenho
3. O grafeno, uma única camada de grafite formada por uma rede hexagonal repetitiva, despertou recentemente amplo interesse da comunidade científica mundial desde que foi obtida com sucesso em 2004. O grafeno é de valor significativo para os estudos fundamentais de matéria condensada e quantum física. As principais técnicas de simulação de grafeno baseadas na teoria funcional da densidade (DFT)

Grafeno - O grafeno é um semicondutor com gap zero, porque suas bandas de condução e valência se encontram nos pontos de Dirac.

- Partindo do pressuposto que os testes de convergência foram feitos tente executar SCF
- Gere os kpoints para formar os caminhos na BZ. Concatene os arquivos gerados no arquivo bands.in, depois execute com o pw.x
- Utilize os script Qe-Bands.sh com a energia de Fermi e utilize plot-band.plt
- Tente por conta gerar uma DOS.