

Guía 4: Fe bcc vs Fe fcc

El potencial de intercambio y correlación LDA (*Local Density Approximation*) falla en la descripción del estado fundamental del Fe. En la naturaleza, a presión ambiente el Fe cristaliza en la estructura BCC y es ferromagnético. Esto motivó el desarrollo de mejoras en la funcional LDA y surgió el potencial conocido como GGA (*General Gradient Approximation*).

Utilizando los pseudopotenciales para GGA:

- 1) Realizar un estudio de convergencia de la energía total del Fe en la estructura BCC en ondas planas y puntos k considerando como parámetro de red el valor experimental 2.866 Å, para el caso magnético, iniciando con ISPIN= 2 y MAGMOM=4 en el INCAR.
- 2) Para los valores óptimos de ENCUT y número de puntos k encontrados en el ítem anterior, calcular E vs V para el caso magnético .
- 3) Calcular también el caso no magnético: ISPIN= 2 y MAGMOM=0 en el INCAR o bien ISPIN= 1, sin especificar MAGMOM.
- 4) Considerando el mismo ENCUT y número de puntos k que para la BCC, repetir el punto 2) y 3) pero para el Fe en la estructura FCC.
- 5) Graficar E vs V en todos los casos.

Ahora repetir los puntos 2) - 5) utilizando los pseudopotenciales para LDA.

- 6) Graficar E vs V y comprobar que la funcional GGA permite describir correctamente el estado fundamental de Fe.
- 7) Para la red BCC en el caso magnético, fiitear la curva E vs V obtenidas con LDA y GGA con la ecuación de estado Birch-Murnaghan. Comparar el parámetro de red obtenido con ambas funcionales con el valor experimental.