

### Guía 3: Transformación estructural del Si bajo presión

En esta guía estudiaremos desde primeros principios, realizando cálculos con el código VASP, la transformación estructural del Si de la estructura diamante a la estructura  $\beta$ -Sn al aplicar presión. Además confirmaremos que la estructura cristalina del estado fundamental es la diamante.

Para el Si en estructura diamante:

- 1) Para el valor experimental del parámetro de red, estudiar la convergencia de la energía total en el número de puntos k de la zona de Brillouin. Determinar el número a partir del cual se logra el criterio de convergencia en el rango de 0.001 eV.
- 2) Para el KPOINTS óptimo encontrado en el punto anterior, estudiar la convergencia de la energía total en ondas planas variando la variable ENCUT del archivo INCAR. Determinar el valor a partir del cual la energía total varía dentro del rango de 0.001 eV.
- 3) Calcular la energía total en función del volumen, variando el parámetro de red desde un valor de un 20 % inferior al valor experimental hasta un 20 % superior. Recordar aumentar el ENCUT encontrado en el inciso anterior un 30% para los cálculos de volumen variable.

Para las estructuras HCP y  $\beta$ -Sn:

- 4) Usando un valor de ENMAX= 450 y una grilla 6x6x6 de puntos k en ambas estructuras, calcular la energía total en función del volumen. En ambos casos, definir la variable ISIF=4 en el archivo INCAR, la cual permitirá para cada volumen (determinado en el POSCAR) variar la relación c/a hasta encontrar aquella que minimice la energía total en cada volumen.

- 5) Graficar las tres curvas E vs V, obtenidas en los puntos 3 y 4). Fitear la siguiente ecuación de estado de Birch-Murnaghan para la diamante y la  $\beta$ -Sn:

$$E(V) = a_0 + 0.5625 \cdot a_1 \cdot a_2 \cdot (a_3 \cdot ((a_2/x)^{2/3} - 1.0)^3 + ((a_2/x)^{2/3} - 1.0)^2 \cdot (6.0 - 4.0 \cdot (a_2/x)^{2/3}))$$

Siendo  $a_0 = E_0$  (energía mínima obtenida),  $a_1 = B_0$  (módulo de volumen),  $a_2 = V_0$  (volumen de equilibrio),  $a_3 = B_p$  (derivada del  $B_0$  en función del V).

- 6) Siendo  $P = -dE/dV$  y  $G = E + PV$  (a  $T=0K$ ), determinar la presión teórica para la cual ocurrirá la transición estructural de la estructura diamante a la  $\beta$ -Sn.