

Estructura Electrónica de Materias: Cálculo desde primeros principios

Guía Práctica N°4

A. Resultados para Fe con estructura BBC y pseudopotenciales GGA:

(1) Caso magnético:

Convergencia en KPOINTS:

| K | Energía total |
|----|---------------|
| 4 | -4.085001 |
| 6 | -4.108849 |
| 8 | -4.121582 |
| 10 | -4.121930 |
| 12 | -4.121572 |

Convergencia en ENCUT.

| ENCUT | Energía total |
|-------|---------------|
| 300 | -4.121582 |
| 350 | -4.119746 |
| 400 | -4.117555 |
| 450 | -4.117370 |
| 500 | -4.117559 |

(2) Caso no magnético:

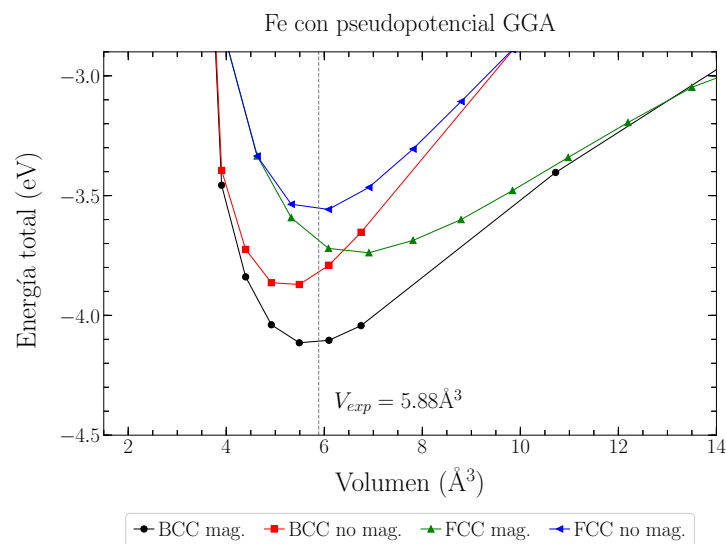
Convergencia en KPOINTS:

| K | Energía total |
|----|---------------|
| 4 | -3.797970 |
| 6 | -3.847494 |
| 8 | -3.822858 |
| 10 | -3.828644 |
| 12 | -3.825857 |
| 14 | -3.826873 |

Convergencia en ENCUT.

| ENCUT | Energía total |
|-------|---------------|
| 300 | -3.830041 |
| 350 | -3.828032 |
| 400 | -3.825857 |
| 450 | -3.825617 |
| 500 | -3.825819 |

5. Para los casos estudiados anteriormente, la convergencia de la energía total a la variación del parámetro de red se muestra en la siguiente figura:



6. Resultados para Fe con estructura BCC y pseudopotenciales LDA:

(1) Caso magnético:

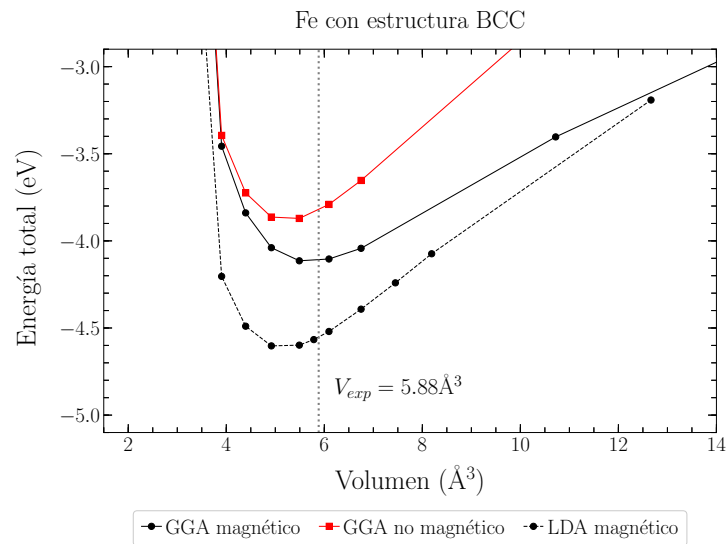
Convergencia en KPOINTS:

| K | Energía total |
|----|---------------|
| 4 | -4.513904 |
| 6 | -4.543464 |
| 8 | -4.553608 |
| 10 | -4.554087 |

Convergencia en ENCUT:

| ENCUT | Energía total |
|-------|---------------|
| 240 | -4.531648 |
| 270 | -4.553569 |
| 300 | -4.557551 |
| 330 | -4.557006 |
| 360 | -4.555172 |
| 380 | -4.554126 |
| 400 | -4.553608 |

En la siguiente figura se comparan los resultados obtenidos del cálculo de Fe con estructura BCC utilizando los pseudopotenciales GGA (línea sólida negra) y LDA (línea discontinua negra).



7. Ajustamos la energía total en función del volumen del Fe-bcc con la ecuación de estado Birch–Murnaghan para los resultados obtenidos con los pseudopotenciales GGA y LDA. Nuevamente, implementando el paquete `curve_fit` de `scipy` integrado en `python`, los parámetros de ajuste encontrados fueron:

Parámetros de BCC GGA magnético:

$E_0 = -4.1136$

$B_0 = 1.0410$

$V_0 = 5.7612$

$B_0' = 4.5862$

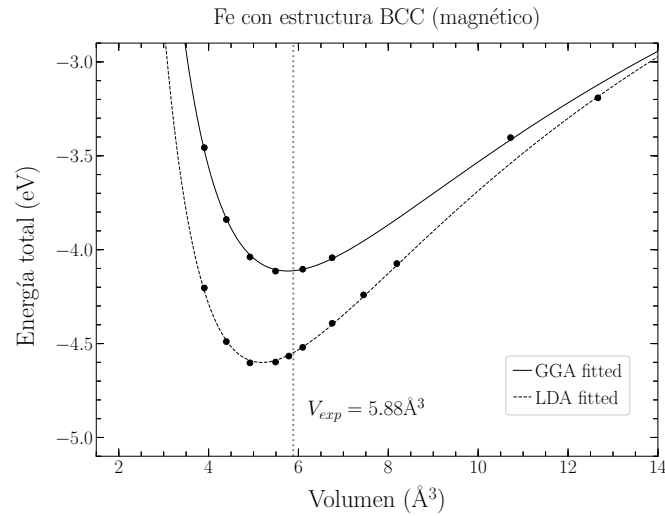
Parámetros de BCC LDA magnético:

$E_0 = -4.6005$

$B_0 = 1.4034$

$V_0 = 5.1892$

$B_0' = 4.6272$



Calculando el parámetro de red a partir de los valores encontrados de V_0 , tenemos:

$a_{GGA} = 2.8457$

$a_{LDA} = 2.7482$

Por lo tanto, el cálculo que permite reproducir el valor experimental del parámetro de red ($a_{exp} = 2.866 \text{ \AA}$) es el cálculo de estructura BCC con un pseudopotencial con correcciones de gradiente GGA.