

Guía: Scripting - POSCAR

1. Determinar los vectores de la red de Bravais y las posiciones de los átomos de la base para describir al silicio cuando cristaliza en estructura diamante y HCP. Los parámetros de red experimentales son:

(a) diamante $a = 5.43 \text{ \AA}$.

(b) HCP $a = 2.5424 \text{ \AA}$ y $c/a = 1.64$

2. Describir la estructura cristalina del SrTiO_3 , la cual se muestra en la Figura 1. Es una perovskita de parámetro de red $a = 3.905 \text{ \AA}$.
3. Uno de los archivos de entrada necesario para correr el código VASP es el POSCAR. En este archivo se especifica la estructura cristalina del sistema en estudio. Damos un ejemplo de POSCAR para el Al en estructura FCC pensada como una red SC con 4 átomos en la base.

Al FCC	primer línea es un comentario
1	factor de escala para \vec{a}_i
4.00 0.00 0.00	vector de Bravais \vec{a}_1
0.00 4.00 0.00	vector de Bravais \vec{a}_2
0.00 0.00 4.00	vector de Bravais \vec{a}_3
4	número de átomos por especie, recordar el orden
direct o cartesian	coordenadas directas (fraccionales) o cartesianas (en este último caso son escaleadas por el factor de escala.)
0.00000000 0.00000000 0.00000000	posiciones de los átomos de la base
0.50000000 0.00000000 0.50000000	posiciones de los átomos de la base
0.50000000 0.50000000 0.00000000	posiciones de los átomos de la base
0.00000000 0.50000000 0.50000000	posiciones de los átomos de la base

Amar los POSCAR respectivos para los sistemas de los ítems anteriores. Visualizarlos con el VESTA.

4. Armar un script para generar distintos POSCAR variando el volumen.

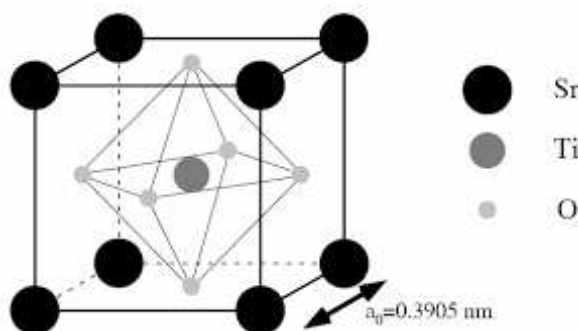


Figure 1: