

Estructura Electrónica de Materias: Cálculo desde primeros principios

Guía Práctica N°2

1. (a) Las posiciones de los átomos de la base del silicio en estructura diamante son:

$$\mathbf{B}_1 = (0, 0, 0) \quad y \quad \mathbf{B}_2 = \frac{a}{4}(1, 1, 1), \quad (1)$$

donde $a = 5,43\text{\AA}$. Los vectores de la red de Bravais están dados por:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(0, 1, 1)\text{\AA}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 1)\text{\AA}, \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, 0)\text{\AA}. \quad (2)$$

(b) Las posiciones de los átomos de la base del silicio en estructura hcp son:

$$\mathbf{B}_1 = (0, 0, 0) \quad y \quad \mathbf{B}_2 = a\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right)\text{\AA}, \quad (3)$$

donde $a = 2,5424\text{\AA}$. Los vectores de la red de Bravais están dados por:

$$\mathbf{a}_1 = a(1, 0, 0), \quad \mathbf{a}_2 = a\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right), \quad \mathbf{a}_3 = c(0, 0, 1), \quad (4)$$

y $c = 4,1695\text{\AA}$.

2. La estructura cristalina del SrTiO_3 es simple cúbica y se puede describir como una red fcc con iones de Sr^{2+} y O^{2-} con iones de Ti^{4+} en los huecos octaédricos creados por los iones de oxígeno. En la unidad cúbica, los iones de Sr, Ti y O se ubican, respectivamente, en:

$$\mathbf{B}_1 = (0, 0, 0)\text{\AA} \quad \mathbf{B}_2 = \frac{a}{2}(1, 1, 1)\text{\AA} \quad \mathbf{B}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, 0)\text{\AA} \quad (5)$$

donde $a = 3,905\text{\AA}$.

3. (a) Archivo POSCAR de la estructura diamante del Si:

```
Si - Diamond
5.43
0.00 0.50 0.50
0.50 0.00 0.50
0.50 0.50 0.00
2
Cartesian
0.00 0.00 0.00
0.25 0.25 0.25
```

(b) Archivo POSCAR de la estructura hcp del Si:

```
Si - hcp
2.5424
1.000000000 0.000000000 0.000000000
-0.500000000 0.866025404 0.000000000
0.000000000 0.000000000 1.640000000
2
Cartesian
0.000000000 0.000000000 0.000000000
0.333333333 0.666666667 0.500000000
```

(c) Archivo POSCAR de la estructura del SrTiO₃:

```
perovskita SrTiO3
3.905
1.0  0.0  0.0
0.0  1.0  0.0
0.0  0.0  1.0
1 1 3
Cartesian
0.0  0.0  0.0
0.5  0.5  0.5
0.0  0.5  0.5
0.5  0.0  0.5
0.5  0.5  0.0
```

4. Script en bash para variar el volumen en el archivo POSCAR:

```
ini=4.4
fin=6.6
step=0.2

for a in `seq $ini $step $fin`
do

mkdir vol_$a
cp KPOINTS POTCAR INCAR vol_$a/
cat > POSCAR <<!
diamond Si
$a
0.0 0.5 0.5
0.5 0.0 0.5
0.5 0.5 0.0
2
Cartesian
0.0  0.0  0.0
0.25 0.25 0.25
!
```

donde *ini* y *fin* son los valores mínimo y máximo a evaluar del parámetro de red *a* y *step* es el espaciado entre los valores a evaluar.