

Electrões no silício.

5.1 Um pseudopotencial empírico (não blindado) para o silício tem a seguinte forma

$$V_{\text{pseudo}}(r) = -\frac{4}{r}\text{erf}(r/R) + A(\sqrt{\pi}R)^{-3}\exp(-r^2/R^2)$$

com os parâmetros $A = 16\pi/1.48^2$ e $R = 0.9$ em unidades atómicas.

- Qual é a sua transformada de Fourier?
- Faça a blindagem do pseudopotencial com um modelo de Thomas-Fermi com $k_{\text{TF}} = 0.35$ em unidades atómicas. Use de novo a transformada de Fourier para ter o potencial blindado no espaço r .
- Desenhe o pseudo-potencial antes e depois da blindagem.
- Calcule os estados ligados do pseudopotencial blindado para $\ell = 0$ e $\ell = 1$. Tente comparar com dados experimentais.

5.2 Nesta secção vai encontrar um notebook que permite calcular a estrutura de bandas do silício com o potencial empírico da pergunta anterior.

- Calcule os valores próprios em Γ , $\vec{k} = (0, 0, 0)$. Qual é a largura da banda ocupada e o hiato directo nesse ponto. Compare com valores da literatura.
- Calcule a estrutura de bandas na direcção Γ -X, $\vec{k} = (q, 0, 0)$. Sabendo que o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução se encontram nessa direcção, qual é o hiato calculado para o Si?
- Guarde a matriz hamiltoniana calculada para o ponto Γ . Aplique o método iterativo de Lanczos e verifique as propriedades de convergência das energias mais baixas.
- Usando essa mesma matriz hamiltoniana, aplique o método de filtragem de Chebyshev e verifique as propriedades de convergência das energias mais baixas.

Dinâmica molecular, Monte Carlo para o modelo Lennard-Jones

5.3 O potencial de Lennard-Jones (LJ)

$$V_{\text{LJ}}(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

representa razoavelmente a interação entre átomos de gases raros, e pela sua simplicidade permite testar algoritmos de dinâmica molecular e Monte-Carlo a baixo custo computacional.

Na página da cadeira encontra uma subrotina que calcula a energia e força para um agregado finito de partículas de LJ. Está escrita em Fortran, uma linguagem com 60 anos, considerada arcaica por muitos, mas que ainda é bastante usada em “High performance computing”. A Intel tem compiladores para duas linguagens: C e Fortran. Código escrito em Fortran pode ser chamado a partir de C ou python. Como primeiro passo aprenda a chamar código Fortran a partir da sua linguagem favorita.

Para iniciar o sua simulação disponha 13 átomos de LJ numa estrutura “fcc”, um átomo central rodeado dos seus 12 primeiros vizinhos à distância $\sqrt[6]{2}\sigma$. Para quebrar a simetria desloque um desses átomos de um vértice e coloque-o num ponto em que esteja a essa mesma distância de 3 outros átomos. Finalmente desloque ligeiramente o átomo central para que as forças iniciais não sejam todas quase nulas.

- Integre a equação de Newton com os algoritmos RK4 e Verlet. Qual deles conserva melhor a energia total? Passe a usar esse algoritmo. Determine a temperatura do sistema a partir da energia cinética média.
- Para “aquecer” ou “arrefecer” o seu sistema, use o método drástico de parar a simulação quando já tem uma boa estimativa da sua temperatura, multiplicar todas as velocidades por uma constante, e recomeçar uma nova simulação com essas condições iniciais. Obviamente que pode também, codificar a interação do sistema com um termostato. Aqueça o sistema até observar um comportamento “líquido”. Registe a temperatura aproximada em que o sistema ficou líquido.
- Depois de ter o agregado líquido diminua a sua temperatura até solidificar. Continue a arrefecer até chegar a um mínimo de energia. Registe a temperatura aproximada em que o sistema ficou sólido. Qual foi a estrutura que encontrou.
- Implemente o algoritmo de Metropolis Monte-Carlo, deslocando à vez cada átomo numa distância aleatória (mas pequena). Faça ciclos de aumento e diminuição de temperatura, cada vez com maior amplitude até conseguir obter uma nova estrutura depois de arrefecer. Registe a temperatura aproximada em que isso ocorreu. Qual foi a estrutura que encontrou.