

Trabajo Práctico DFT

Esta guía de trabajos prácticos contiene una serie de cálculos aplicando la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) con el software *Quantum-Espresso*.

1. Calcular la energía del aluminio FCC para distintos parámetros de red, $3,6\text{\AA} < a < 4,5\text{\AA}$ ¹. Hallar el parámetro de red del Al a partir de una curva E vs a. Utilizar una grilla de 6 x 6 x 6 puntos k en el espacio recíproco.
2. Obtener la estructura de bandas del Al, recorriendo el espacio recíproco según el siguiente esquema: $K \rightarrow W \rightarrow \Gamma \rightarrow X \rightarrow W \rightarrow L$.
Comparar con el diagrama del Al dado en la clase.
 $\Gamma = (0, 0, 0)$ $K = (0,75, 0,75, 0)$ $W = (1, 0,5, 0)$ $X = (1, 0, 0)$ $L = (0,5, 0,5, 0,5)$
3. Obtener la estructura de bandas del Si (Diamante), recorriendo el espacio recíproco según el mismo esquema que el punto anterior y compare con el diagrama del Si dado en la clase.
4. Obtener las densidades de estados de las estructuras de los items anteriores.

¹En QE hay que ponerlo en Bohr. Entonces la relación quedaría $6.8 \text{ Bohr} < a < 8.5 \text{ Bohr}$

Principales variables en el input de pwscf

calculation= scf / relax

ibrav= 1 (cubica simple), 2 (fcc), 8 (ortorrombica)

celldm(1), celldm(2), celldm(3): tamaño de la celda en bohr (celldm(2) y (3) son relativas a (1)).

nat=numero de atomos ; ntyp= tipos de atomos

ecutwfc = cutoff ondas planas

Instrucciones para un calculo de estructura de bandas y DOS

1. Correr calculo "scf" luego "nscf"barriendo los puntos k del espacio reciproco
2. Generar archivo xxxx con el siguiente contenido:

```
&inputpp
prefix = ssss
outdir = './'
filband = 'yyyy.data'
/
```

y ejecutar bands.x:

```
/opt/espresso/bin/bands.x < xxxx > xxxx.out
```

Esto producira el archivo yyyy.data

3. Generar input zzzz.in

```
yyyy.data
E_min E_max
qqqq.dat
qqq.ps
E_fermi
1.0 E_fermi
```

y ejecutar plotband.x

```
/opt/espresso/bin/plotband.x < zzzz.in > zzzz.out
```

En qqqq.dat estaran los datos para visualizar en xmgrace y en qqqq.ps el postscript.

4. Para la densidad de estados, preparar archivo zz.in

```
&inputpp
outdir='./'
prefix='al'
Emin=-4.0, Emax=25.0, DeltaE=0.1
ngauss=1, degauss=0.02
/
```

y correr

```
/opt/espresso/bin/projwfc.x <zz.in > zz.o
```