

# **Optimización de geometría y ecuación de estado, imágenes de STM**

## **Descargue la práctica usando el comando**

```
cd $HOME/TutorialQ-E/Practicas  
scp -r espresso@192.168.1.16:TutorialQ-E/Practicas/Practica4 .  
cd Practica4  
evince pract4.pdf
```

## **Tarea evaluativa para entregar el lunes (si quiere una evaluación)**

Realizar el calculo autoconsistente de la densidad de carga y la energia total para uno de los siguientes materiales simples:Al,Cu,Fe,Ag,Na,Ca,...

Debe realizar los siguientes pasos.

- 0) Busque el pseudopotencial para uno de los metales mencionados.
- 1) Busque la estructura cristalina del material en alguna fuente confiable: libro de fisica de solidos, [www.google.cl](http://www.google.cl), [www.webelements.com](http://www.webelements.com), base de datos cristalografica como ICSD, [prola.aps.org](http://prola.aps.org), [scholar.google.cl](http://scholar.google.cl), etc.
- 3) Haga el fichero de input, visualice la estructura.
- 4) Determine los parametros optimos para su cálculo, especialmente cutoffs de funcion de onda y de densidad, k-points.
- 5) Haga un grafico de energia vs volumen (+-20% alrededor del volumen experimental) y ajustelo con la ecuacion de Birch-Murnaghan.

$$E(V) = E_0 + \frac{9}{16} B_0 V_0 (6 - B'_0) - \frac{9}{16} B_0 V_0 \left[ (4 - B'_0) \frac{V_0^3}{V^3} - (14 - 3 B'_0) \frac{V_0^{7/3}}{V^{7/3}} + (16 - 3 B'_0) \frac{V_0^{5/3}}{V^{5/3}} \right]$$

- 6) Haga un reporte de sus resultados.

## Optimización de Geometría

example03: Geometria

```
cd BLABLABLA/espesso-4.0.4/examples/example03  
./run_example
```

Visualice las estructuras finales con xcrysden

```
xcrysden --pwo co.rx.out
```

**Utilice la opcion de reducir a 0D y vea la diferencia con no usarla.  
Haga animacion del proceso de relajacion estructural.**

```
xcrysden --pwo a1001.mm.out
```

Esto es una superficie. Utilice la opcion de reducir a 2D y vea las diferencias con no utilizarla. Haga una animacion del proceso de relajacion.

Vea las diferencias entre los dos metodos para relajar la geometria.

```
diff a1001.rx.in y a1001.mm.in
```

Vea los tiempos de calculo en la salida de pw.x.

## Ecuacion de estado

```
cd BLABLA/Practicas
```

```
scp -r espresso@192.168.1.16: TutorialQ-E/Practicas/Practica4 .
```

```
cd EoS
```

eos.sh es un driver que varia el parametro de red y hace un calculo scf con pw.x, y escribe volumen, energia y presion en el archivo SUMMARY

fit\_murn.gp es un archivo de comandos para gnuplot que lee volumen y energia de SUMMARY y ajusta la energia a la ecuacion de Birch. Luego plotea la presion derivada de la ecuacion de Birch y la presion escrita en SUMMARY

$$E(V) = E_0 + \frac{9}{16} B_0 V_0 (6 - B'_0) - \frac{9}{16} B_0 V_0 \left[ (4 - B'_0) \frac{V_0^3}{V^3} - (14 - 3 B'_0) \frac{V_0^{7/3}}{V^{7/3}} + (16 - 3 B'_0) \frac{V_0^{5/3}}{V^{5/3}} \right]$$

$$p(V) = \frac{3}{2}B_0 \left[ \left(\frac{V_0}{V}\right)^{7/3} - \left(\frac{V_0}{V}\right)^{5/3} \right] \left\{ 1 + \frac{3}{4}(B'_0 - 4) \left[ \left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3} - 1 \right] \right\}$$

Para usarlo de

**gnuplot**

debe aparecer el prompt

**gnuplot>**

Si no aparece hay que instalar el gnuplot con el comando (Ubuntu)

**apt-get install gnuplot**

**gnuplot> load "fit\_murn.gp"**

vea lo que reporta

para salir

**gnuplot>quit**

Edite el fit\_murn.gp y ponga

$V_0=150.0$ ,  $E_0=-550.0$

Vea lo que pasa. Examine los graficos y los valores ajustados de  $B_0$  y  $V_0$ . ¿Que encuentra malo?

## **Ejercicio Scanning Tunneling Microscopy (STM)**

```
cd BLABLABLA/Practica4/
```

```
evince 3-data-analysis.pdf &  
tar xzf 3-data-analysis.tar.gz  
cd Ex1-STM
```

Siga las instrucciones del PDF.

Vea despues el example16.

## **Ejercicio 4. Constantes elasticas**

Ver

BLABLA/Practica4/Celast

Correr runc11.sh

Este calculo demora bastante mas que los otros. La culpa es del material, que tiene pseudopotenciales mas complejos, son 8 atomos, y al deformar la celda baja la simetria.

## **Sistemas con degeneración. Efectos de entropía.**

Veamos example11: Corra el ejemplo y estúdielo. Luego haremos algunas modificaciones en el caso del átomo de oxígeno aislado.

Hagamos algunas modificaciones para permitir otras ocupaciones o para dejar que el programa encuentre las ocupaciones óptimas.

Si se usa smearing, lea lo siguiente

Lo correcto es hacer varios cálculos con distintos  $d_{\text{gauss}}$  y extrapolar al valor  $d_{\text{gauss}}=0$ . Se sugiere usar  $d_{\text{gauss}}=0.02, 0.01, 0.005$ , plotear las energías y extrapolar hasta 0. Una función lineal debe ser suficiente para extrapolar.

Veamos smearing contrib. (-TS) en la salida de pw.x.