

Taller de la Teoría de Pseudopotenciales

BUAP 6 de septiembre de 2018

Material en el archivo:

tallerf/casos

Casos de estudio:

tallerf/casos/euo

1) ****EuO*.

Tiene estructura NaCl. Véase euo.png. La propuesta del sitio /basis sets for crystal web page es trabajar con una base y ps con “f-inside core”, que no tiene electrones f explícitos, dejándo estos en el core. Por ello tampoco hay que preocuparse por el estado de spin. La propuesta trabaja bien.

Obtengase el parametro de celda a teórico y compárase con la a experimental. Lease las notas sobre-euo.

tallerf/casos/ceo2

2) ****CeO2 Fluorite*

a) En un manejo ingenuo, se puede intentar el cálculo con un parámetro igual al experimental de $a_{\text{exp}} = 5.41$, en una estructura fluorita, con spin 0 y con un sólo par de Ce y O en la celda unitaria. Se compara su DOS y bandas con la fig. 2 del artículo “investigation-of-electronic-structure-of-ceo2-first-principles-calculations.pdf”

b) Se puede optimizar así y sí converge, pero a un valor de parámetro mayor de 5.314 Å. (*tallerf/casos/ceo2/opt-sing*). En realidad se sabe que el estado base es antiferromagnético (AF) y por ello se necesita preparar la entrada con una estructura con más átomos (al menos dos pares). Una posibilidad es una con dos y dos dada en *tallerf/casos/ceo2/opt-AF*.

3) ****delta-UO3*
tallerf/casos/uo3

Estructura cúbica, cubica U(0,0,0) y O(0.5, 0,0), a
exp 4.165, grupo= 221.

Véase que la energía para cada opción de spin es:
(input y output en *tallerf/casos/uo3*)

s0 E=-7.025606200822E+02

s2 E=-7.024741730053E+02

s4 E=-7.022761849801E+02

s6 E=-7.020637255782E+02

Optimice la geometría suponiendo un spin 0.
(input en *uo3c-s0-opt*) (a teo=4.08). Véase el
artículo de Weller. El band gap exp es de 2.17 ev,
vease el artículo de heming. Compárese aquí con
3.0 usando HSO6, ver tabla 1.

4) *Ce metálico, estructura fcc.* *tallerf/casos/ce1*

La base y ps. usados en el caso 2 no converge. No se notan exponentes en las funciones f, d y p que sean tales que generen orbitales metálicos. Buscando opciones, se adaptan las funciones y ps. de gaussian tipo cep-121, véase ce.out

La adaptación más fuerte es de abandonar una de las bases d, para dejar sólo la más externa.

De esto, ello se manejan dos opciones, una en que se contraen todas las funciones f en una sola y otra donde se dejan las dos de la base dada. Se muestra que la primera guía a un estado aparentemente aislante (al menos así lo detecta Crystal) mientras que la segunda sí obtiene un carácter metálico!

Primera: tallerf/casos/ce1/ce-ais, segunda:
tallerf/casos/ce1/ce-met

Obtener su DOS y bandas. Compárese con las fig. 2 y 3 de Ivanova.

(En esta adaptación se pretende manejar el carácter dual de los electrones f observado en el Ce y otros

compuestos, donde es al mismo tiempo parcialmente localizado y parcialmente itinerante..)

5) ****PuO*,
tallerf/casos/puo

a) Estructura NaCl, con un Pu y un O, usando un α de 4.975 y spin = 0, se obtiene una convergencia en 126 pasos. Véase su DOS, compárese con fig. 2. art. Qiu.

b) Probar una estructura con 2 Pu y 2 O para probar si el estado es AF.

Ifuap, 2018.