

Informe Proyecto SC16-1-S-79.

Enero de 2017

Manuel Quintana García

Proyecto Semilla.

El objetivo de este proyecto consistió en el aprendizaje de las herramientas del cómputo científico, en particular de los programas Siesta, Quantum Espresso y Orca. Como tal, era necesario:

- a) Conocer las características de los distintos tipos de archivos input para cada programa y cálculo.
- b) El estudio de las condiciones a la frontera o creación de “super cristales” para el estudio de vacancias, dislocaciones e impurezas.
- c) Determinar el tipo de cálculo adecuado para el análisis y su comparación con resultados experimentales.
- d) Estrategias para la convergencia en superestructuras.

En todos estos incisos ya hay avances; el trabajo fundamental se ha hecho en PC y pero ya se hicieron corridas (más de las 5410.59 horas-cpu) utilizando Quantum Espresso y Orca en la supercomputadora Miztli. Se ha trabajado principalmente, en la comparación entre los resultados obtenidos por ambos programas para sistemas simples (estructura hcp del Silicio).

Se empezó el estudio del sistema Hematita ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) y sus polimorfos como la Maghemita y estructuras con vacancias. Los resultados obtenidos indicaron que se requieren cálculos más complicados que los de campo auto consistente simple tanto en Quantum Espresso y Orca pues no se alcanza la convergencia. Para lograrla se requiere de la incorporación de la magnetización para lograrlo. Algo interesante, es que para obtener resultados cercanos a los experimentales se requiere un conocimiento adecuado de los estados de ocupación de los electrones d y un método en Quantum Espresso que funciona

bastante bien es el de un potencial perturbativo U de Hubbard. Para este efecto se propuso una perturbación de 4.3 eV (H. Guo y A. S. Barnard, Phys. Rev. B 83 (2011) 094112) con lo cual se obtiene una brecha de energía de 1.7 eV como se observa en la figura 1. Se hicieron los mismos cálculos para este sistema con una y dos vacancias de oxígeno en la celda unitaria (de 30 átomos) y se pudieron encontrar diferencias tanto en la magnetización como en la ΔE . Se hizo el cálculo de las energías de los modos normales de vibración de estos sistemas, con la subrutina Phonon.x de Quantum Espresso y se observan resultados interesantes al compararlas con el espectro Raman experimental de la Hematita (figura 2). Sin embargo, se requiere de cálculos más cuidadosos y sobre todo con más átomos (uso de super celdas) para obtener resultados más apegados a los experimentales.

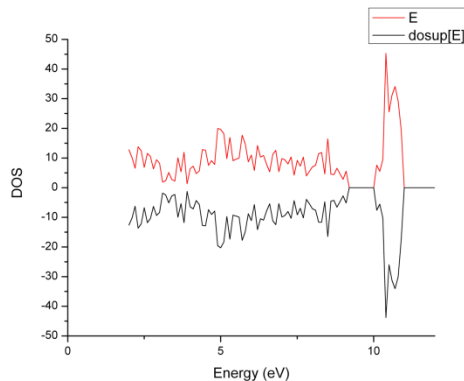


Figura 1 Densidad de Estados (DOS) para la Hematita por medio de DFT+U de Quantum Espresso.

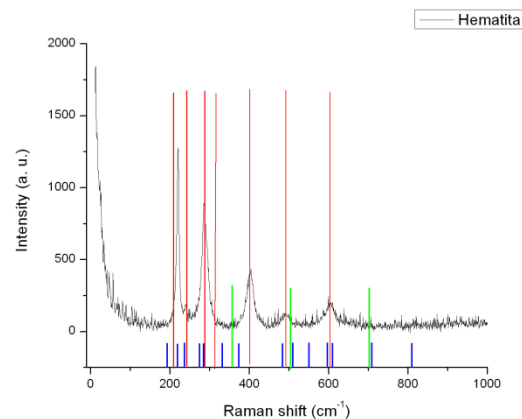


Figura 2 Modos normales de vibración de la Hematita (en rojo) y de la celda con una vacancia de oxígeno (azul) y dos vacancias de oxígeno (verde). En negro se aprecia el espectro Raman experimental.

Conclusiones:

Se requieren superceldas cada vez más grandes ($>3 \times 3 \times 3$) para lograr una mejor optimización geométrica.

Las vacancias de oxígeno desestabilizan el ordenamiento magnético.

El desorden en la estructura promueve la aparición de al menos 6 modos normales de vibración significativos.

Este trabajo se presentó en el LIX Congreso Nacional de Física, 2-7 de octubre de 2016, León, Gto., con el título **Transiciones de fase en los polimorfos de hierro (α - γ -Fe₂O₃) como consecuencia del ordenamiento de vacancias de oxígeno**, en la sesión M2A8.