

Cálculos AB-Initio

Idioma Sin definir

Investigadores:

- **Javier Sánchez Montero**. [Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja](#) [1]. [CSIC](#) [2].
- **Pedro L. de Andrés**. [Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja](#) [1]. [CSIC](#) [2].

Objetivos:

- Existe evidencia de la variación de parámetros mecánicos, pero la fragilización por hidrógeno no está explicada teóricamente. En este sentido, varios modelos tratan de explicar la propagación de la fisura por la presencia en el metal de átomos de hidrógeno.
- Generalmente se asume que el hidrógeno se genera electroquímicamente en la superficie del material y difunde hasta la zona en proceso de fractura. Para explicar el proceso por el cual el hidrógeno fragiliza el material existen varias teorías:
 - Cambio estructural o de fase producido por el hidrógeno.
 - Plastificación producida por el Hidrógeno o **hydrogen-enhanced localized plasticity (HELP)**.
 - Reducción de la energía cohesiva por el efecto del hidrógeno.

Metodología:

Los cálculos de **Ab-Initio** o por **Primeros Principios** se basan en el formalismo del **Funcional de la Densidad**, la teoría de pseudo-potenciales y el teorema de Bloch. Se va a definir una base de ondas planas para representar las funciones de onda de **Kohn-Sham**.

En esta aproximación, la precisión de los cálculos viene determinada básicamente por dos parámetros:

- la máxima energía de corte ("cut off").
- el número de puntos usados en espacio recíproco para representar las funciones de onda ("puntos k").

El problema del canje y la correlación electrónica se representa a través de un funcional de canje y correlación aproximado calculado con correcciones de gradientes y se utilizarán pseudopotenciales ultra-suaves.

Para resolver auto-consistentemente este problema, se empleará el código de ordenador **CASTEP** [3], donde se implementará un método iterativo basado en las ideas de **Carr y Parrinello**.

En una segunda aproximación se pretenden realizar cálculos de **Dinámica Molecular Ab-Initio** empleando el mismo programa **CASTEP** [3].

En estos cálculos se considerará la aproximación de **Born-Oppenheimer** que aplica los principios de la mecánica clásica a los iones. Las funciones de onda de **Kohn-Sham** se desarrollarán en una base de ondas planas.

URL del envío: <http://www.cenits.es/proyectos/calculos-ab-initio>

Enlaces

[1] <http://www.ietcc.csic.es/>

[2] <http://www.csic.es/web/guest/home>

[3] <http://www.castep.org/>