



VASP
Vienna Ab-initio Simulation Package.

Miriam Marqués Arias

Centre for Science at Extreme Conditions, University of Edinburgh

Oviedo, 21 de Diciembre, 2009

Fundamento teórico

- Código que permite realizar cálculos mecanocuánticos ab-initio (energía total, dinámica molecular) a través del **método de ondas planas y pseudopotenciales**.
- Basado en la teoría del funcional de la densidad (**DFT**)

- Variable básica: densidad electrónica $\rho(\vec{r})$

$$E[\rho] = T_s[\rho] + \int \rho(\vec{r})v(\vec{r})d\vec{r} + \frac{1}{2} \int d\vec{r}d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + E_{xc}[\rho].$$

- E_{xc} no conocida \rightarrow Aproximaciones:

- Aproximación de densidad local (**LDA**)

- ◇ $E_{xc}^{LDA} = \int \varepsilon_{xc}(\rho(\vec{r}))\rho(\vec{r})d^3\vec{r}$

- Aproximación de gradiente generalizado (**GGA**)

- Resolución de las ecuaciones de Kohn-Sham (Formalismo: $\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N [\psi_i(\vec{r})]^2$)

$$\hat{h}_{KS}\psi_i = \varepsilon_i\psi_i, \quad \hat{h}_{KS} = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 + v_{\text{eff}}(\vec{r}), \quad \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}.$$

Problema de muchos electrones \rightarrow electrones no-interaccionantes que se mueven en un potencial efectivo.

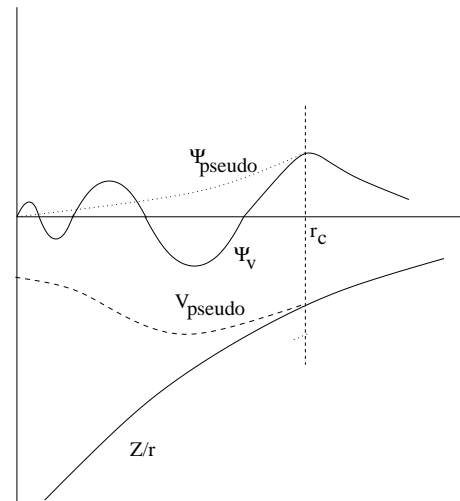
Fundamento teórico

- Cristales contienen 10^{23} átomos. IMPOSIBLE
- NO!!!!!! Usar simetría → CELDA UNIDAD
- Teorema de Bloch: $\Psi(r) = \sum_G c_{i,k+G} \exp[i(k+G)r]$
 - Transforma el problema de calcular un número infinito de funciones de onda electrónicas en el cálculo de un número finito de funciones de onda electrónicas en un infinito número de puntos k .
 - Pero $E(k)$ es suave, pocos puntos k .
- Ondas planas (PW): La base ideal. Ortogonal, completa, universal.
 - La energía de **cutoff** determina la base. (Convergencia bien definida).
 - **VENTAJAS**: ortogonalidad, simplicidad, manipulación algebraica, FFTs
 - **INCONVENIENTES**: GRANDE

Fundamento teórico

Aproximación de pseudopotencial

- Número prohibitivo de PWs para expandir los orbitales de core y reproducir el caracter nodal de las funciones de onda de valencia en la region de core.
- Las propiedades físicas de los sólidos dependen fundamentalmente de los **electrones de valencia**
- Sustitución del fuerte potencial iónico y los electrones de core por un **pseudopotencial** más suave que actúa sobre pseudofunciones de onda.



- Norm-conserving, ultrasoft, PAW.....

Características de VASP

- Librería de pseudopotenciales ultra-soft y potenciales PAW all-electron.
- Aproximación de gradiente generalizado (GGA) y densidad local (LDA).
- Cálculos spin-polarizados, semirelativistas, relativistas, magnetismo no-colinear, aproximación LDA (GGA)+U para sistemas correlacionados.
- Aplicable a sistemas cristalinos, superficies y moléculas (en geometría de supercelda).
- Cálculo de energías totales, fuerzas y el tensor de tensión.
- Esquema eficiente, robusto y rápido para el ciclo autoconsistente del funcional de Kohn-Sham. Utilización de esquemas de diagonalización de matriz iterativos rápidos (RMM-DIS, Davidson).
- Relajación simultánea de parámetros de red y posiciones atómicas.
- Dinámica molecular *ab initio*.

Características de VASP

- Eficiente **código de simetría**: reconoce simetría de una configuración dada. Permite general las rejillas de Mohkhorst Pack.
- Integración de la energía en el espacio recíproco a través de métodos de **tetrahedron** o **smearing**
- Eficiente relación tiempo de cálculo-tamaño de sistema. Útil hasta un máximo de 4000 electrones de valencia.
- Paralelizable.

Historia

- Basado en un programa inicialmente escrito por Mike Payne (autor principal del código CASTEP).
- Julio de 1989: Jurgen Hafner lleva el código a Viena tras una estancia de medio año en Cambridge.
- Septiembre de 1991: Comienza el trabajo en el código VASP.
- Octubre de 1992: Se incluyen los pseudopotenciales ultrasoft en el código. Se mejora el ciclo de autoconsistencia para tratar metales eficientemente.
- Enero de 1993: J. Furthmuller se une al grupo. Escribe la primera versión del mezclado de la densidad Pulay/Broyden, el código de simetría, y 3D FFT.
- Febrero de 1995: VASP es ya una estable y versátil herramienta para cálculos *ab-initio*
- Septiembre de 1996: Conversión a Fortran 90. Paralelización MPI del código. J.M.Holender copió los kernels de comunicación de CASTEP a VASP.

Historia

- Julio de 1998: nuevo kernel de comunicación para eliminar “restos” de CETEP.
- Diciembre de 1999: Se implementa el método PAW .
- 2004: Comienza el desarrollo de vasp.5.X incluyendo Hartree-Fock, GW, teoría de respuesta linear.

Ficheros de input: POTCAR

- PAW_PBE O 08Apr2002

6.000000000000000000

parameters from PSCTR are:

VRHFIN =O: s2p4

LEXCH = PE

EATOM = 432.3788 eV, 31.7789 Ry

LULTRA = F use ultrasoft PP ?

POMASS = 16.000; ZVAL = 6.000

mass and valenz

RCORE = 1.520 outmost cutoff radius

RWIGS = 1.550; RWIGS = .820

wigner-seitz radius (au A)

ENMAX = 400.000; ENMIN = 300.000

eV

LPAW = T paw PP

EAUG = 605.392

- Tipo de potencial (US o PAW)
- Tipo de correlación y cambio (LEXCH)
- Masa atómica (POMASS)
- Número de electrones de valencia (ZVAL)
- Radio de core y Wigner-Seitz (RCORE, RWIGS)
- Cutoffs de energía (ENMAX, ENMIN, EAUG)
- Un único POTCAR. Concatenación de POTCARs de los diferentes átomos presentes.

Ficheros de input: POSCAR

- Cubic BN

3.57

0.0 0.5 0.5

0.5 0.0 0.5

0.5 0.5 0.0

1 1

Selective dynamics

Cartesian

0.00 0.00 0.00 T T F

0.25 0.25 0.25 F F F

1 1

Direct

0.00 0.00 0.00

0.25 0.25 0.25

- Información estructural: geometría de la red y posiciones atómicas.
- 2^a línea: “constante de red”: escala los vectores de base y las coordenadas atómicas.
- 3-5 líneas: vectores de base de la celda unidad.
- 6^a línea: número de átomos por cada especie atómica.
- 7^a línea: opcional S. Permite (T) o no (F) el cambio de la coordenada atómica durante la relajación iónica
- 8^a línea: coordenadas cartesianas o directas.
- siguientes líneas: coordenadas de los átomos.

Ficheros de input: KPOINTS

- átomos, moléculas:

Gamma-point only

1 ! one k-point

rec

0 0 0 1

- puntos k en línea de simetría

10 ! 10 intersecciones

Line-mode

rec

0 0 0 ! gamma

0.5 0.5 0 ! X

0.5 0.5 0 ! X

0.5 0.75 0.25 ! W

- superficies, cristales:

K-Points

0

Monkhorst Pack

11 11 11

0 0 0

- Sampling de la zona de Brillouin

- Determina los puntos k utilizados

- Construcción automática o puntos determinados (estructura de bandas)

Ficheros de input: INCAR

- SYSTEM= Superficie de Cu

Parámetros de inicialización

ISTART = 0; ICHARG = 2;

INIWAV = 1

Relajación electrónica

ENCUT = 200.0 eV

IALGO = 18

NELM = 60; NELMIN = 0

EDIFF = 1E-04

Relajación iónica

EDIFFG = .1E-02

NSW = 9

ISIF = 4; IBRION = 2

Parámetros relacionados con la DOS

SIGMA = 0.4; ISMEAR = 1

- **Fichero fundamental:** controla qué hacer y cómo hacerlo
- Gran número de parámetros (valores por defecto adecuados)
- ENCUT: energía de cutoff (eV). $|\vec{G} + \vec{k}| < G_{cut}$, $E_{cut} = \frac{\hbar^2}{2m} G_{cut}^2$
- PREC:
Low—Medium—High—Normal—Accurate
- ISPIN: 1—2

Ficheros de input: INCAR

- **ISIF**: determina grados de libertad y cálculo del tensor de tension.

ISIF	calcula fuerza	calcula tension	relaja iones	cambia forma celda	cambia volumen de celda
0	SI	NO	SI	NO	NO
1	SI	traza	SI	NO	NO
2	SI	SI	SI	NO	NO
3	SI	SI	SI	SI	SI
4	SI	SI	SI	SI	NO
5	SI	SI	NO	SI	NO
6	SI	SI	NO	SI	SI
7	SI	SI	NO	NO	SI

Ficheros de input: INCAR

- **IBRION**: determina el movimiento de los iones (-1,0,1,2,3,5)
 - -1: Los átomos están fijos.
 - 0: Dinámica molecular.
 - 1: Relajación atómica a través de un algoritmo quasi-Newton.
 - 2: Relajación atómica a través de un algoritmo de gradientes conjugados.
- **EDIFF, EDIFFG**: determinan la convergencia de los ciclos de relajación electrónica e iónica, respectivamente.
- **NSW**: número de pasos iónicos. Dentro de cada paso iónico, se realizan NELM ciclos electrónicos autoconsistentes.
- **PSTRESS**: presión externa (kbar).
- **LELF=.TRUE.** genera la ELF.

Ficheros de input: INCAR

- **ISMEAR, SIGMA:** determinan cómo se incluyen las ocupaciones parciales y la amplitud del smearing en eV. (-5,-4,-3,-2,0,N)
 - $\frac{1}{\omega_{BZ}} \int_{\omega_{BZ}} \rightarrow \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \epsilon_{n\vec{k}} \Phi(\epsilon_{n\vec{k}} - \mu)$ converge muy lentamente con el número de puntos k para metales (las ocupaciones saltan de 1 a 0 al nivel de Fermi).
 - **SOLUCIÓN:** sustituir la función de escalón $\Phi(\epsilon_{n\vec{k}} - \mu)$ por una función suave para obtener una mejor convergencia (smearing).
 - Para semiconductores y aislante utilizar el método de tetrahedron (ISMEAR = -5) o si la celda es muy grande ISMEAR = 0
 - Para relajaciones en metales utilizar ISMEAR=1,2 y adecuados valores de SIGMA (término de entropía menor de 1meV por átomo).
 - Para calcular el DOS y cálculos muy precisos de la energía total utilizar el método del tetraedro (ISMEAR = -5).

Ficheros de output: OSZICAR

- N E dE d eps ncg rms rms(c)
- RMM: 1 0.274053587505E+03 0.27405E+03 -0.87440E+03 240 0.168E+03
- RMM: 2 0.766121195438E+02 -0.19744E+03 -0.19302E+03 240 0.382E+02
- RMM: 3 0.978448524510E+01 -0.66828E+02 -0.61865E+02 240 0.195E+02
-
- RMM: 19 -0.273115060423E+02 -0.76820E-06 -0.25777E-05 628 0.431E-02
0.379E-03
- RMM: 20 -0.273115058412E+02 0.20101E-06 -0.12028E-06 637 0.971E-03
0.274E-04
- RMM: 21 -0.273115058839E+02 -0.42622E-07 -0.89861E-08 656 0.194E-03
0.379E-04
- RMM: 22 -0.273115058804E+02 0.34495E-08 -0.34263E-09 520 0.411E-04
- 1 F= -.27311506E+02 E0= -.27311506E+02 d E =0.000000E+00

Ficheros de output: OSZICAR

- **N**: número de iteración
- **E**: energía total
- **dE**: cambio de energía total
- **d eps**: cambio de los valores propios
- **ncg**: número de pasos de optimización $\mathbf{H}\Psi$
- **rms**: vector residual total $\sum_{nk} w_k f_{nk} (\mathbf{H} - \epsilon_{nk}) \Psi_{nk}$
- **rms (c)**: vector residual de la densidad de carga

Ficheros de output: OUTCAR

- Partes separadas por líneas
- Primera parte: lectura de los ficheros INCAR,POTCAR,POSCAR
- Análisis de simetría y distancias de primeros vecinos
- Información sobre parámetros del fichero INCAR
- Información sobre la red recíproca, puntos k .
- Información sobre la base (número de ondas planas)
- Información sobre el pseudopotencial
- Información sobre cada paso electrónico (una línea en el fichero OSZICAR)

Ficheros de output: OUTCAR

- eigenvalue-minimisations : 240

Free energy of the ion-electron system (eV)

alpha Z	PSCENC =	38.74406180
Ewald energy	TEWEN =	-756.90012215
-1/2 Hartree	DENC =	-182.05175901
-V(xc)+E(xc)	XCENC =	67.95107708
PAW double counting	=	495.12210808 -498.85751023
entropy T*S	EENTRO =	0.00000000
eigenvalues	EBANDS =	-107.83471998
atomic energy	EATOM =	914.65858869

free energy TOTEN = -29.16827572 eV

energy without entropy = -29.16827572 energy(sigma>0) = -29.16827572

Ficheros de output: OUTCAR

- valores propios k-point 1 : 0.0625 0.0625 0.0625

band No.	band energies	occupation
1	-18.7727	2.00000
2	-13.2195	2.00000
3	-3.6262	2.00000
4	-3.6262	2.00000
5	-3.1464	2.00000
6	2.0978	2.00000
7	2.6886	2.00000
8	2.6886	2.00000
9	10.2024	0.00000
10	13.8928	0.00000

- Información sobre la energía y el tensor de tensión

free energy TOTEN = -27.311506 eV

energy without entropy = -27.311506 energy(sigma>0) = -27.311506

FORCE on cell = -STRESS in cart. coord. units (eV/reduce length):

Direction	X	Y	Z	XY	YZ	ZX
Alpha Z	30.22	30.22	30.22			
Ewald	-258.65	-258.65	-258.65	0.00	0.00	0.00
Hartree	67.03	67.03	67.03	0.00	0.00	0.00
E(xc)	-73.72	-73.72	-73.72	0.00	0.00	0.00
Local	-126.96	-126.96	-126.96	0.00	0.00	0.00
n-local	-41.37	-43.84	-44.92	0.49	-0.57	0.01
augment	1.57	1.57	1.57	0.00	0.00	0.00
Kinetic	396.03	410.15	422.23	-2.84	4.00	0.42
Total	5.59	5.59	5.59	0.00	0.00	0.00
in kB	416.63	416.63	416.63	0.00	0.00	0.00
external	pressure =	416.63 kB	Pullay stress =	0.00 kB		

Si fcc

- *POTCAR*

Si fcc

3.9

0.0 0.5 0.5

0.5 0.0 0.5

0.5 0.5 0.0

1

Direct

0.0 0.0 0.0

- fcc cell, constante de red:3.9Å
- 1 átomo en la celda primitiva.

- *POTCAR*

- Si PAW PBE Si 05Jan2001
Si: s2p2, ENMAX = 245.345;
EAUG = 322.069

- *KPOINTS*

K-Points

0

Monkhorst Pack

11 11 11

0 0 0

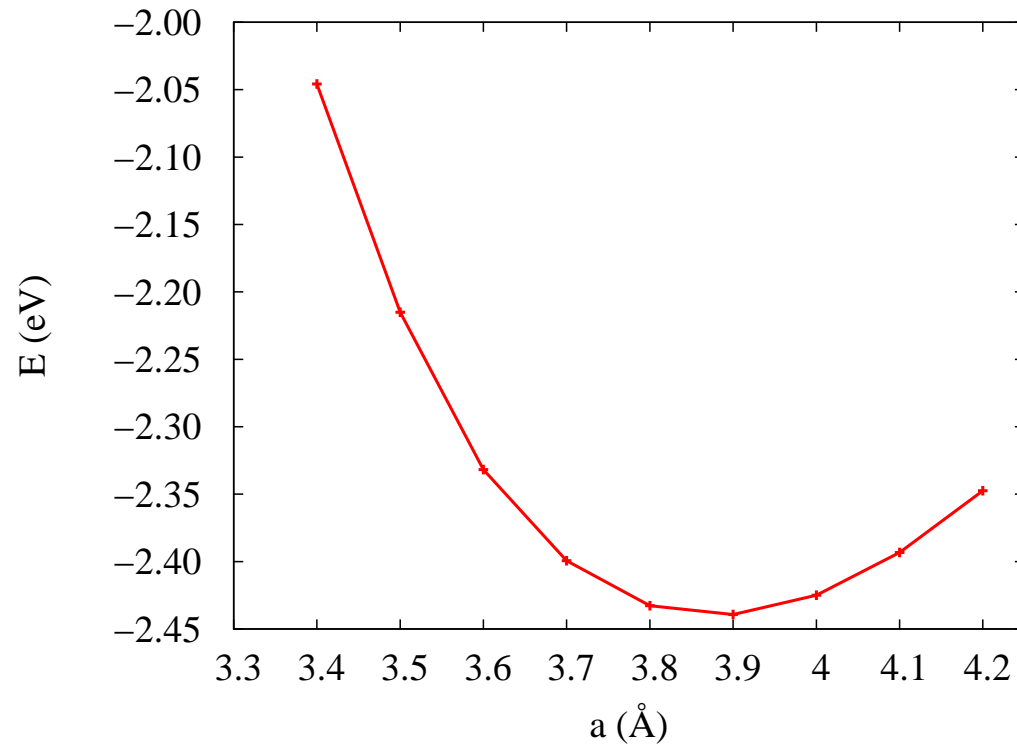
- rejilla impar → centrada en Γ
- 56 puntos k in el IBZ

Si fcc

- `INCAR`
System = fcc Si
ISTART = 0 ; ICHARG=2
ENCUT = 245
ISMEAR = -5;
 - trabajo nuevo, densidad de carga inicial desde átomos solapantes.
 - energía de *cutoff* del POTCAR.
 - Cálculo de energía para diferentes parámetros de red
 - Ajuste a ecuaciones de estado → volumen de equilibrio
- # bin/csh
foreach i (3.5 3.6 3.7 3.8 3.9 4.0 4.1)
cat >POSCAR <<!
Si fcc:
0.5 0.5 0.0
0.0 0.5 0.5
0.5 0.0 0.5
1
direct
0 0 0
!
set E='tail -1 OSZICAR'
echo \$i \$E >>SUMMARY.fcc

Si fcc

- 3.4 1 F= -.40916606E+01 E0= -.40915302E+01 d E =-.260877E-03
- 3.5 1 F= -.44301421E+01 E0= -.44278642E+01 d E =-.455582E-04
- 3.6 1 F= -.46635511E+01 E0= -.46621165E+01 d E =-.286909E-04
- 3.7 1 F= -.47986983E+01 E0= -.47966436E+01 d E =-.410940E-04



Optimización geométrica

■ Volumen fijo

- Cuando existen grados de libertad (ej. c/a)

IBRION=2. Relajación atómica.

ISIF=4. Permite cambio de parámetros internos y forma de la celda.

NSW= 60. 60 pasos iónicos

■ Presión fija

- simple, pero menos preciso. Relajar todos los grados de libertad, incluido el volumen.
- **ISIF**=3. Cambiar parámetros internos, forma y volumen.
- Aumentar E_{cutoff} un 25-30 % (**ENMAX**).
- Utilizar pequeños valores de **EDIFF** y **EDIFFG**.

Optimización geométrica

- *POSCAR*
potassium I41/amd
ACELL
-0.5000000 0.5000000000 C2A
0.50000000 0.5000000000 C2A
0.50000000 0.5000000000 -C2A
2
Direct
0.875 0.125 0.75
0.125 0.875 0.25
- *INCAR*
ISM EAR = 1
SIGMA = 0.3
IBRION = 2
ISIF = 4
NSW = 140
ALGO = Normal
EDIFFG = 1E-7
EDIFF = 1E-6
ENCUT = 390

Optimización geométrica

POSITION			TOTAL-FORCE (eV/Angst)		
0.00000	1.96648	1.22732	0.000000	0.000000	0.000000
1.31099	-0.65549	3.68195	0.000000	0.000000	0.000000
total drift:			0.000000	0.000000	0.000000

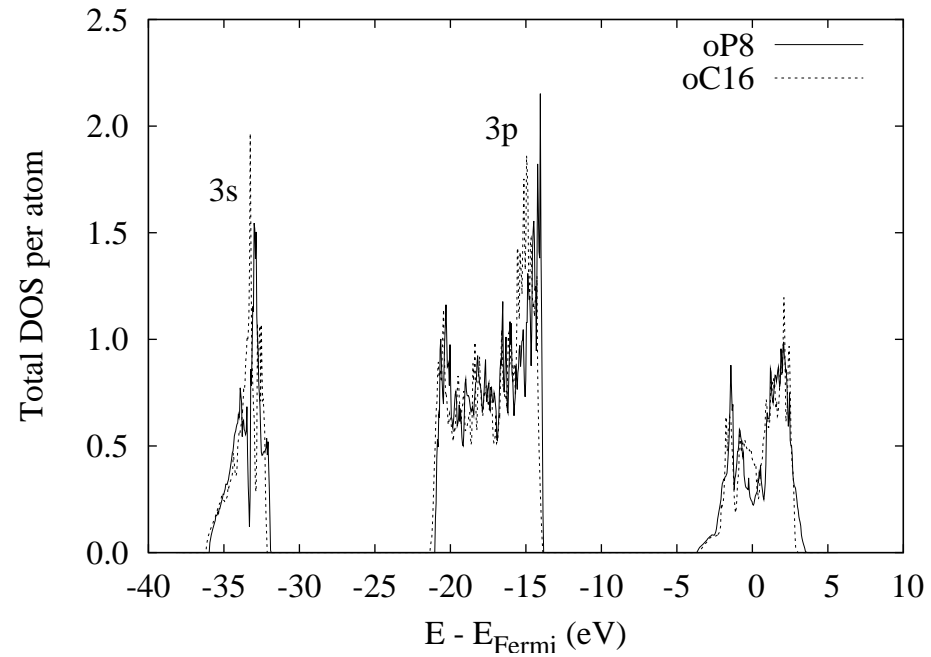
- **OUTCAR**: contiene información sobre las etapas electrónicas e iónicas.
- **CONTCAR**: contiene la estructura del último paso iónico. (Importante para reiniciar o proseguir una relajación).

DOS y estructura de bandas

- Cálculo estático autoconsistente (`NSW=0`, `IBRION=-1`) → DOS en `DOSCAR`
- Sistema grande y estructura de bandas
 - V_{eff} y densidad de carga convergen rápidamente con el número de puntos k
 - Cálculo autoconsistente con un número pequeño de puntos k .
 - Cálculo no autoconsistente con la densidad de carga (`CHGCAR`) del paso autoconsistente anterior.
`ICHARG=11`. densidad de carga y potencial fijos. Trata todos los puntos k independientemente.
`LORBIT`. Opcional. Determina la proyección de las funciones de onda sobre armónicos esféricos centrados en las posiciones de los átomos.

DOS

- *INCAR*
NSW = 0
ICHARG = 11
ISMEAR = -5
IBRION = -1
LORBIT = 10
NEDOS = 1000
EDIFF = 1E-7
ENCUT = 390



Estructura de bandas

- *POSCAR*

ACELL

$\frac{\sqrt{3}}{2}$ -0.5 0.0

0.0 1.0 0.0

0.0 0.0 CA

4

Direct

X1 Y1 Z1

X2 Y2 Z2

X3 Y3 Z3

X4 Y4 Z4

- *KPOINTS*

k-points along high symmetry lines

25 !25 intersecciones

Line-mode

rec

0.0 0.0 0.0 !gamma

0.5 0.0 0.0 !M

0.5 0.0 0.0 !M

0.33333333 0.33333333 0.0 !K

Estructura de bandas

- *INCAR*

NSW = 0

ICHARG = 11

ISMEAR = 0

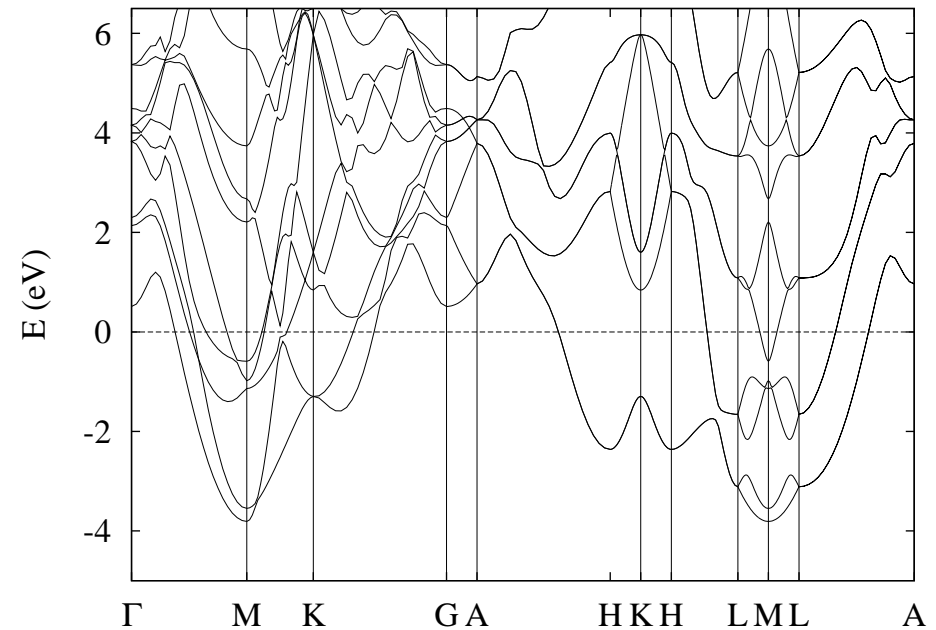
SIGMA = 0.1

IBRION = -1

EDIFF = 1E-7

ENCUT = 390

NBANDS = 26



hH/Ni(001)

- **POSCAR**
h-H / Ni(001)
3.52
0.50 0.50 0.00
-0.50 0.50 0.00
0.00 0.00 5.00
5 1
Selective dynamics
Direct
0.00 0.00 0.0000 F F F
0.50 0.50 0.1000 F F F
0.00 0.00 0.2029 T T T
0.50 0.50 0.3037 T T T
0.00 0.00 0.4085 T T T
0.50 0.50 0.4353 T T T
- Adsorción de un átomo de hidrógeno
- Ni(fcc). $a=3.53 \text{ \AA}$
- 1 átomo por capa de Ni
- 5 capas de Ni (3 relajadas: tipo “superficie”)
- inclusión de vacío: $(1 - 0.4085) * 5 * 3.52 = 10.41 \text{ \AA}$.
- **POTCAR**
Ni PAW PBE,
ENMAX = 269.533eV
. H PAW PBE, ENMAX = 250eV
.

hH/Ni(001)

- **INCAR**
SYSTEM=H/Ni(100)
ENCUT=270.0
ISTART =0 ; ICHARG=2
EDIFF=1e-04
ISMEAR= 1
ISPIN=2
IBRION=2
NSW=20
EDIFFG=-1e-03
- **KPOINTS**
K-Points
0
Monkhorst Pack
9 9 1
0 0 0
- **INCAR**
Trabajo nuevo, densidad de carga inicial de átomos solapantes
energía de *cutoff*: 270 eV (defecto)
MP-smearing (metal)
cálculo spinpolarizado
relajación iónica
- **KPOINTS**
rejilla equiespaciada
impar → centrada en Γ
15 puntos k en IBZ
1 en la dirección z.

hH/Ni(001)

OSZICAR

RMM: 1 -0.300681186245E+02 -0.30068E+02 -0.20975E-02 1980 0.795E-01 0.357E-02

RMM: 2 -0.300682035120E+02 -0.84887E-04 -0.15080E-04 1090 0.117E-01

20 F= -.30068204E+02 E0= -.30066463E+02 d E =-.234660E-03 mag= 2.7489

	POSITION		TOTAL-FORCE (eV/Angst)		
0.00000	1.76000	7.56582	0.000000	0.000000	-0.012030
0.00000	0.00000	0.00000	0.000000	0.000000	0.303134
0.00000	1.76000	1.76000	0.000000	0.000000	-0.311937
0.00000	0.00000	3.53204	0.000000	0.000000	0.009498
0.00000	1.76000	5.28743	0.000000	0.000000	-0.015800
0.00000	0.00000	7.10693	0.000000	0.000000	0.027135

hH/Ni(001)

- Ejecutar con **LORBIT=11** en INCAR → momentos magnéticos en OUTCAR.

magnetization(x)

of ion	s	p	d	tot
1	-0.002	-0.001	0.000	-0.002
2	-0.002	-0.021	0.759	0.736
3	-0.009	-0.026	0.673	0.638
4	-0.007	-0.026	0.686	0.653
5	-0.006	-0.019	0.622	0.597
6	-0.003	-0.010	0.249	0.236

- La adsorción de H disminuye el momento magnético de Ni en la capa de la superficie ($0.713\mu_B \rightarrow 0.236 \mu_B$).
- $E_{ads} = E_{H/Ni} - (E_{Ni} + E_{1/2H_2}) = -0.5851 \text{ eV/atom} \rightarrow$ reacción **exotérmica**.

Programas de visualización y utilidades

■ Visualización:

- **P4VASP**: http://cms.mpi.univie.ac.at/odubay/p4vasp_site/
- **STRender**: <http://homepage.univie.ac.at/daniel.spisak/>
- **VESTA** http://www.geocities.jp/kmo_mma/crystal/en/vesta.html
- **VMD**: <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

■ Utilidades

- **GoVASP**: <http://www.govasp.com/> Interface gráfica para preparar, realizar y seguir cálculos con VASP. Permite evaluar y visualizar los datos calculados.
- <http://theory.cm.utexas.edu/vtsttools/scripts/> Colección de scripts (conversión de ficheros, densidad de carga, densidad de estados)
- **GaussView**: <http://www.nd.edu/~cwu4/> construcción de inputs (superficies), conversión de ficheros, visualización,

VASP en malta

- **Ejecutable:**

- /opt/vasp/4.6/bin/vasp
- /opt/vasp/5.2/bin/vasp

- **Manual:**

- /opt/vasp/4.6/doc
- /opt/vasp/5.2/doc

- **Pseudopotenciales:**

- /opt/vasp/version/potpaw_PBE
- /opt/vasp/version/potpaw_GGA
- /opt/vasp/version/potpaw
- /opt/vasp/version/pot_GGA

Aplicaciones

- **Publicaciones** en 2009: 377 en revistas de la APS
 - 287 PRB, 84 PRL, 5 PRE, 1PRA
- **Estructura cristalina y estabilidad de fases**
 - Elementos: formación de estructuras complejas (incommensuradas...) a alta presión. Li,Na: metal → aislante
 - Compuestos intermetálicos: correlación entre propiedades electrónicas y magnéticas y estructuras cristalinas. Ej: Al_{10}V .
 - Compuestos inorgánicos: transiciones de fase (cuarzo, cristobalita)
 - Sólidos moleculares: optimización de bases del ADN.
- **Propiedades mecánicas: elasticidad, resistencia.** Mecanismo de transformación estructural ante deformación no hidrostática. Ej: Al.
- **Propiedades dinámicas:** espectro de fonones a través del método directo. (bcc Mo, Nb), MgAl_2O_4 .

-
- **Líquidos y amorfos**: cálculos de dinámica molecular en metales de transición líquidos: Ni, Zr y aleaciones fundidas.
 - **Magnetismo y nanoestructuras magnéticas**: inesperado ordenamiento magnético en nanoestructuras. Ej: films de Fe on superficies de W(001)
 - **Superficies y catálisis**: Ej: adsorción de CO en superficies de metales nobles

Más información

J. Hafner, *Ab-Initio Simulations of Materials Using VASP: Density-Functional Theory and Beyond*, J. Comput. Chem. **29**, 2044 (2008)

Referencias

■ DFT

- Electronic Structure. Basic Theory and Practical Methods. Richard Martin. Cambridge University Press.
- M. C. Payne *et al*, *Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients*, Rev Mod. Phys, **64(4)**,1045 (1992).
- M. J. Gillan, *The virtual matter laboratory*, Contemporary Physics, **38(2)**, 115 (1997).
- The ABC of DFT. <http://dft.rutgers.edu/kieron/beta>

■ VASP

- Manual: <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/vasp.html>
- Tutorial: <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp-workshop/>

Gracias por la atención

