

# ABINIT: una breve introducción

Javier López Solano, Eduardo Pérez González,  
Silvana Radescu, Andrés Mujica,  
Plácida Rodríguez Hernández, Alfonso Muñoz

Dpto. de Física Fundamental II, Universidad de La Laguna

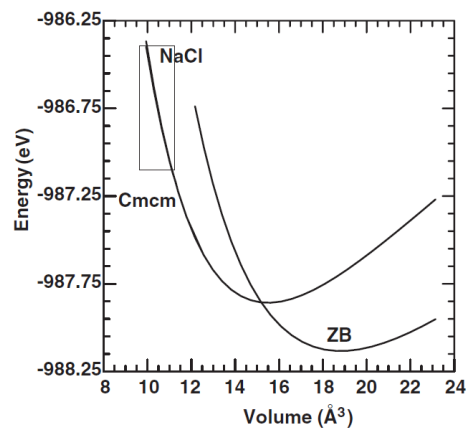


Universidad  
de La Laguna

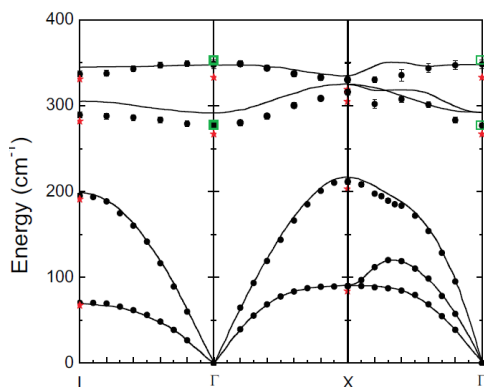




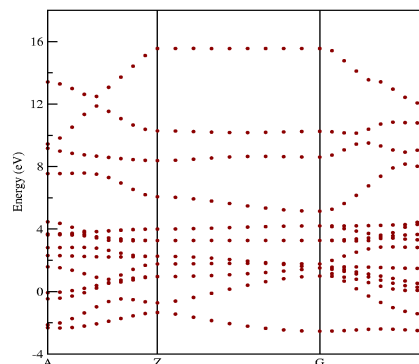
## 1. ABINIT



## 2. Energía total en zb-ZnS



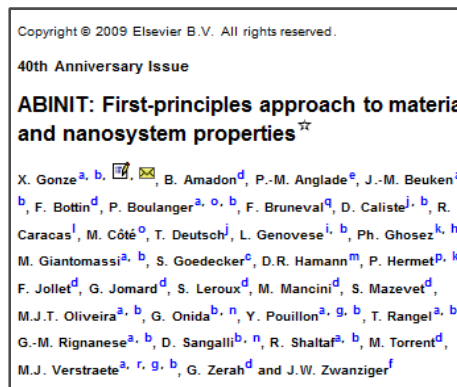
## 3. Fonones en zb-ZnS



## 4. Más ejemplos



## 5. ABINIT en MALTA



## 6. Algunas referencias

# 1. ABINIT

Algunos puntos destacados del proyecto:

- Iniciado en 1997
- ~50 desarrolladores de todo el mundo
- Licencia GNU GPL (“libre”)
- DFT + PW + PS
- Capacidades:
  - Cálculos estáticos de energía total, con optimización de celdas, cálculo de estructura de bandas, ...
  - Cálculos de respuesta lineal y no lineal (DFPT), para obtener frecuencias Raman e IR, propiedades termodinámicas, ...
  - Muchas más! Ver Gonze 2009



# 1. ABINIT (2)

www.abinit.org

The screenshot shows the abinit.org website homepage. At the top is the logo 'abinit.org' in blue. Below it is a navigation menu with links: Home, About, Downloads, Documentation, Community, Support, and Developers. A breadcrumb trail reads 'You are here: Home'. The main content area is divided into four columns: 'What is ABINIT?' with links for Presentation, Suggested acknowledgments, Partners/sponsors, and Legal information; 'Get ABINIT' with links for ABINIT package, Installation notes, ABINIT plugins, and Atomic data files; 'Learn ABINIT' with links for New user guide, Tutorials, Input variables, and FAQ; and 'Get in touch' with links for Contact information, Netiquette, Mailing lists, and Support the ABINIT Group.

The screenshot shows the 'Help Files for 5.8' page. On the left is a sidebar with a tree view of help files: BASIC, DEVELOPMENT, FILES HANDLING, GEOMETRY BUILDER + SYMMETRY RELATED, GROUND-STATE CALCULATION, GW, INTERNAL, PARALLELISATION, and PAW. The main content area is titled 'Main ABINIT code, input variables: Complete list.' and contains the following text: 'This document lists the names (keywords) of all input variables to be used in the main input file of the abinis code. The new user is advised to read first the [new user's guide](#), before reading the present file. It will be easier to discover the present file with the help of the [tutorial](#). When the user is sufficiently familiarized with ABINIT, the reading of the `~abinit/doc/users/tuning` file might be useful. For response-function calculations using abinis, please read [the response function help file](#). Copyright (C) 1998-2009 ABINIT group (DCA,XG,RC) This file is distributed under the terms of the GNU General Public License, see `~abinit/COPYING` or <http://www.gnu.org/copyleft/gpl.txt>. For the initials of contributors, see `~abinit/doc/developers/contributors.txt`.

Documentación  
extensa, incluidos  
tutoriales

Más ayuda: lista  
de correo

## Contents of lesson 1:

- [1.1](#). Computing the (pseudo) total energy, and some associated quantities.
- [1.2](#). Computation of the interatomic distance (first method)
- [1.3](#). Computation of the interatomic distance (second method)
- [1.4](#). Computation of the charge density
- [1.5](#). Computation of the atomisation energy
- [Answers to questions](#)

## Content of lesson RF1

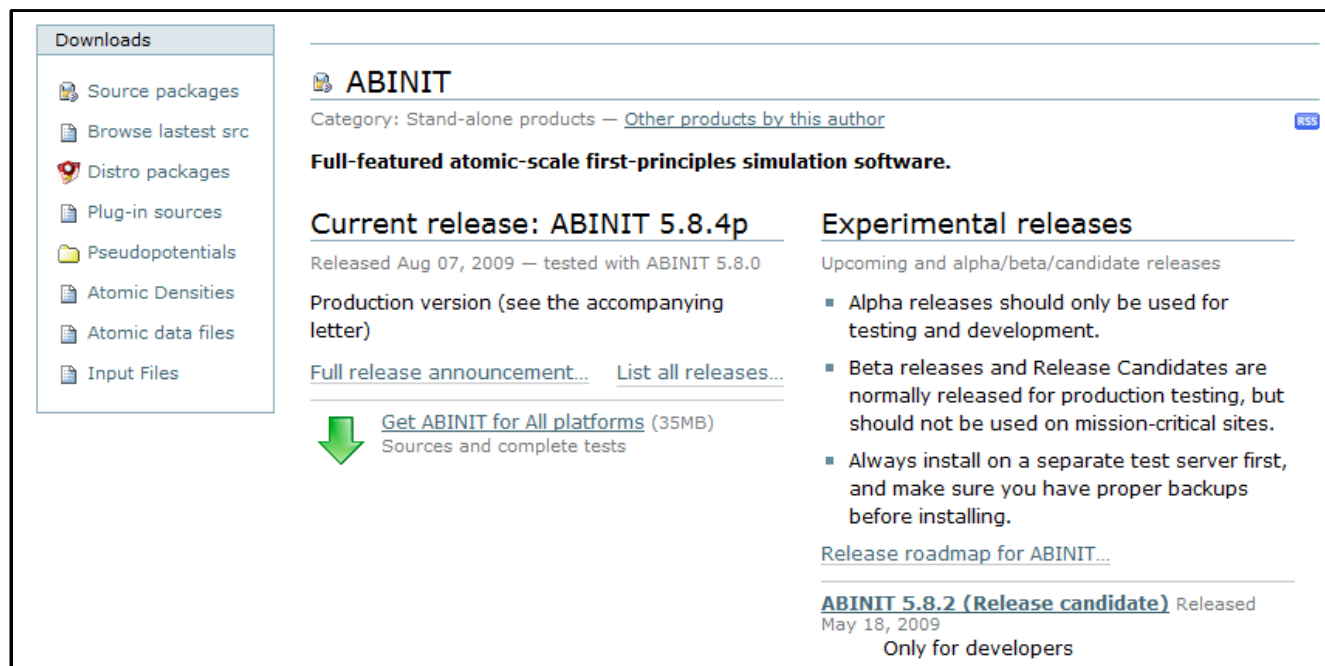
- [1](#) The ground-state geometry of AIs.
- [2](#) Frozen-phonon calculation of a second derivative of the total energy.
- [3](#) Response-function calculation of a second derivative of the total energy.
- [4](#) Response-function calculation of the dynamical matrix at Gamma.
- [5](#) Response-function calculation of the effect of an homogeneous electric field.
- [6](#) Response-function calculation of phonon frequencies at non-zero q.

# 1. ABINIT (3)

[www.abinit.org](http://www.abinit.org)



Código fuente, binarios  
([www.old.abinit.org](http://www.old.abinit.org))

(5.3 en los repositorios  
de Ubuntu)



The screenshot shows the ABINIT website interface. On the left is a 'Downloads' sidebar with links to source packages, latest source, distro packages, plug-in sources, pseudopotentials, atomic densities, atomic data files, and input files. The main content area features the ABINIT logo, category information, and a description: 'Full-featured atomic-scale first-principles simulation software.' It highlights the 'Current release: ABINIT 5.8.4p' (released Aug 07, 2009) and provides a link to 'Get ABINIT for All platforms (35MB)'. A section for 'Experimental releases' lists guidelines for alpha, beta, and release candidate versions, and includes a 'Release roadmap for ABINIT...' link. At the bottom, it mentions 'ABINIT 5.8.2 (Release candidate)' released May 18, 2009, for developers only.

## Pseudopotentials

- LDA pseudopotential files :
  - [Troullier-Martins pseudopotentials](#) for most of the elements in the periodic table, generated by A. Kheine and D.C. Allan
  - [Goedecker-Teter-Hutter pseudopotentials](#) for selected elements
  - [Hartwigsen-Goedecker-Hutter pseudopotentials](#) for most of the elements in the periodic table.
  - Another Web site with the  [Hartwigsen-Goedecker-Hutter pseudopotentials](#)
  - [Teter "extended norm-conserving" pseudopotentials](#) for selected elements
  - [Fritz-Haber-Institute \(FHI\) pseudopotentials](#) for selected elements (Troullier-Martins scheme)
  - [LDA core-hole pseudopotential files](#) for selected elements
- GGA (PBE) pseudopotential files :
  - [Fritz-Haber-Institute \(FHI\) pseudopotentials](#) for selected elements (Troullier-Martins scheme)
  -  [Hartwigsen-Goedecker-Hutter pseudopotentials](#) for more than 40 elements in the periodic table, from M. Krack, see Theor. Chem. Acc. 114, 145 (2005)
  - [Hartwigsen-Goedecker-Hutter pseudopotentials](#) for selected elements

PS (sobre todo  
conservadores de la norma,  
pero también algunos PAW  
[Torrent 2008])

Códigos de generación de  
PS

## 2.1. Energía total en zb-ZnS

A continuación se detallan los pasos para calcular la energía total del compuesto ZnS en forma cristalina de zincblenda (zb). Mediante cálculos de este tipo pueden determinarse, por ejemplo, módulos de volumen o presiones de transición a  $T=0$ .

ABINIT lee todas las variables que definen el cálculo (excepto los ps) de un sólo fichero, que habitualmente usa la extensión “.in”

```
# zns_zb.in
# calculo de energia total ZnS en zb

# definicion de la celda primitiva
## vectores de la red
acell 5.4 5.4 5.4 angstrom

rprim 0.0 0.5 0.5
      0.5 0.0 0.5
      0.5 0.5 0.0
```

El formato del fichero .in es libre (no importa el orden en el que se especifican las variables)

“#” o “!” se usan para indicar comentarios.

Por defecto se usan ua, aunque en algunas variables se pueden especificar otras unidades.

## 2.1.1. Definición de la celda

```
# definicion de la celda primitiva
chkprim 1
```

```
## vectores de la red
###acell1 acell2 acell3
acell 5.4 5.4 5.4 angstrom
```

```
rprim 0.0 0.5 0.5 #rprim1
      0.5 0.0 0.5 #rprim2
      0.5 0.5 0.0 #rprim3
```

```
## posiciones atomicas
natom 2
ntypat 2
znucl 30 16
typat 1 2
xred 0.0 0.0 0.0
     0.25 0.25 0.25
```

Por defecto hay que usar celdas primitivas. Si no, indicar “chkprim 0”

Los vectores de la red  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$  se definen usando “acell” y “rprim”:

$$a_1 = \text{acell1} \cdot \text{rprim1}$$

$$a_2 = \text{acell2} \cdot \text{rprim2}$$

$$a_3 = \text{acell3} \cdot \text{rprim3}$$

Para las posiciones atómicas hay que indicar

- número de átomos en la celda
- número de especies atómicas
- números atómicos de cada especie
- tipo de átomo en cada posición
- posiciones de cada átomo en la base de los vectores de la red (o en cartesianas con “xcart” o “xangst”)

## 2.1.2. Optimización de la celda

```
# optimizacion de la celda
```

```
## vectores de la red  
optcell 3
```

```
## posiciones atómicas  
ionmov 2
```

```
## criterio de parada  
tolmxf 5.0d-5
```

```
## número de pasos  
ntime 10
```

```
## smearing del cutoff  
ecutsm 5.0 d-5
```

En caso de que sea necesario, la celda se puede optimizar o relajar.

→ Optimización de los vectores de la red, a volumen constante (es recomendable realizar una optimización inicial a celda fija con “optcell 0”)  
→ Optimización de las posiciones atómicas.

→ Parada de la optimización cuando se llega a fuerzas por debajo de “tolmxf”. Las componentes del tensor de stress se tratan como fuerzas, escaladas por “strfact”.

→ Número máximo de pasos en la optimización.

→ Al modificar la celda, los k cambian. Para un cutoff dado, esto produce cambios en el número de ondas planas y discontinuidades en las curvas E-V. ecutsm suaviza estas curvas.



## 2.1.3. Parámetros de convergencia

```
# parametros de convergencia
## cutoff de ondas planas

ecut 60 Ry

## grid de puntos k

ngkpt 8 8 8
nshiftk 1
shiftk 0.5 0.5 0.5
kptopt 1
```

Como en cualquier otro código de ondas planas, hay que especificar una energía de cutoff. Por defecto se usan Ha, pero también se aceptan eV, Ry y K.

Se pueden usar grids de puntos k del espacio recíproco del tipo Monkhorst-Pack especificando

- número de puntos en cada dirección
- origen desplazado
- vector de desplazamiento
- Eliminar los puntos equivalentes por simetría

Para determinar los valores adecuados de estas variables hay que realizar tests de convergencia, sobre la energía total, distancia de enlace, o cualquier otra magnitud que sea relevante en el problema tratado.

## 2.1.4. Otras variables importantes

```
# ciclo autoconsistente  
nstep 50
```

```
toldfe 1.0d-8
```

```
# ocupacion  
occopt 1
```

- Número máximo de pasos en el proceso de resolución autoconsistente de las ecuaciones de Kohn-Sham.
- Criterio de convergencia. Parada del proceso autoconsistente si se llega a una diferencia menor que “toldfe” entre dos pasos sucesivos dos veces.
- Ocupación de las bandas. 1 para semiconductores; 3 a 7 para metales, teniendo que definir el “suavizado” con la variable “tsmear”

---

Existen otras muchas variables, pero los valores por defecto suelen dar buenos resultados.

ABINIT normalmente se “queja” cuando falta algo importante, usando mensajes de error informativos.

## 2.1.5. El fichero zns\_zb.in

En resumen, el contenido del fichero que define el cálculo es

```
# zns_zb.in
# calculo energia total ZnS en zb

# definicion de la celda primitiva
chkprim 1
## vectores de la red
  #acell1 acell2 acell3
acell 5.4 5.4 5.4 angstrom
rprim 0.0 0.5 0.5 #rprim1
      0.5 0.0 0.5 #rprim2
      0.5 0.5 0.0 #rprim3
## posiciones atomicas
natom 2
ntypat 2
znucl 30 16
typat 1 2
xred 0.0 0.0 0.0
     0.25 0.25 0.25

# ciclo autoconsistente
nstep 50
toldfe 1.0d-8
```

```
# optimizacion de la celda
optcell 3 # vectores de la red a V cte
ionmov 2 # posiciones atomicas
tolmxf 5.0d-5 # F maxima
ntime 10 # numero maximo de pasos

ecutsm 5.0 d-5 # suavizado cutoff

# parametros de convergencia
## cutoff ondas planas
ecut 60 Ry

## grid de puntos k
ngkpt 8 8 8
nshiftk 1
shiftk 0.5 0.5 0.5
kptopt 1

# ocupacion semiconductor
occpt 1
```

## 2.2. El fichero .files

En un fichero con extension .files, por ejemplo “zns\_zb.files”, se debe indicar

zns\_zb.in

→ Nombre del fichero de entrada.

zns\_zb.out

→ Nombre del fichero de resultados principal. Si ya existe, se añade automáticamente una letra (.outA, .outB, ...)

zns\_zbi

→ Prefijo de otros ficheros que se puedan leer al inicio del cálculo, tales como funciones de onda previas.

zns\_zbo

→ Prefijo de otros ficheros de resultados.

zns\_zbtmp

→ Prefijo de ficheros temporales.

30zn.pspnc

→ Ficheros con los pseudopotenciales.

16s.pspnc

## 2.3. Ejecutar ABINIT

En una “máquina normal”, para ejecutar ABINIT basta con hacer

```
abinis < zns_zb.files >& zns_zb.log
```

Para correr en paralelo en el cluster MALTA, hay que lanzar un script similar al siguiente con “lsubmit”:

```
#!/bin/sh
#@ output      = output
#@ error       = error
#@ notification = never
#@ job_type    = mpich
#@ class       = psmall
#@ node        = 1
#@ tasks_per_node = 8
#@ queue
rsync -aHz --quiet $LL_WORKDIR/* $SCRATCH/.
cd $SCRATCH

/opt/mpich2/1.0.8/bin/mpirun -np $LOADL_TOTAL_TASKS \
  /opt/abinit/5.7/bin/abinip < zns_zb.files >& zns_zb.log

rsync -aHz --quiet $SCRATCH/* $LL_WORKDIR/.
```

- Tipo de cola
- Número de nodos
- Número de cores por nodo
- Copia el trabajo a un directorio temporal
- Ejecuta el trabajo
- Devuelve todo al directorio inicial

## 2.4. El fichero .out

Una vez acabado el proceso (para este ejemplo hay que esperar del orden de minutos), los resultados principales se encuentran en un fichero con extensión “.out”.

El fichero “zns\_zb.out” contiene:

→ Información de la versión, detalles del copyright, ...

```
.Version 5.8.3  of ABINIT
.(MPI version, prepared for a x86_64_linux_intel11.0 computer)

.Copyright (C) 1998-2009 ABINIT group .
ABINIT comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY.
It is free software, and you are welcome to redistribute it
under certain conditions (GNU General Public License,
see ~abinit/COPYING or http://www.gnu.org/copyleft/gpl.txt).

ABINIT is a project of the Universite Catholique de Louvain,
Corning Inc. and other collaborators, see ~abinit/doc/developers/contributors.txt
Please read ~abinit/doc/users/acknowledgments.html for suggested
acknowledgments of the ABINIT effort.
For more information, see http://www.abinit.org .
```

## 2.4. El fichero .out (2)

→ Ficheros usados, análisis de los recursos necesarios, valores de las variables

```
- input file      -> zns_zb.in
- output file     -> zns_zb.out
- root for input  files -> zns_zbi
- root for output files -> zns_zbo
Symmetries : space group F-4 3 m (#216); Bravais cF (face-center cubic)
=====
Values of the parameters that define the memory need of the present run
  intxc =          0  ionmov =          2  iscf =          7  xclevel =          1
  lnmmax =          6  lnmax =          6  mband =         10  mffmem =          1
P  mgfft =         50  mkmem =         10  mpssoang=          3  mpw =        5187
  mqgrid =       3001  natom =          2  nfft =      125000  nkpt =          10
  nloalg =          4  nspden =          1  nspinor =          1  nsppol =          1
  nsym =          24  nlxccc =          0  ntypat =          2  occopt =          1
=====
P This job should need less than          45.389 Mbytes of memory.
Rough estimation (10% accuracy) of disk space for files :
WF disk file :          7.917 Mbytes ; DEN or POT disk file :          0.956 Mbytes.
=====
-outvars: echo values of preprocessed input variables -----
  acell    1.0204521118E+01  1.0204521118E+01  1.0204521118E+01 Bohr
  amu      6.539000000E+01  3.206600000E+01
  ecut     5.500000000E+01 Hartree
```

## 2.4. El fichero .out (3)

→ Detalles de los procesos autoconsistente y de optimización estructural

```
=====
BROYDEN STEP NUMBER    0  -----
   iter  Etot(hartree)      deltaE(h)  residm    vres2    diffor    maxfor
ETOT   1  -66.204135821473  -6.620E+01  2.987E+00  1.652E+04  0.000E+00  0.000E+00
ETOT   2  -69.957748715965  -3.754E+00  2.027E-02  6.009E+02  8.444E-28  8.444E-28
ETOT   3  -69.977206816846  -1.946E-02  4.750E-03  5.252E+01  1.689E-27  1.900E-27
ETOT   4  -69.971662692247   5.544E-03  2.447E-03  1.203E+02  1.742E-27  1.583E-28
ETOT   5  -69.981364035617  -9.701E-03  1.229E-03  5.011E+01  1.979E-28  3.958E-29
ETOT   6  -69.986610013426  -5.246E-03  1.006E-04  1.541E+01  3.958E-29  0.000E+00
ETOT   7  -69.988994454885  -2.384E-03  9.410E-05  2.332E-02  0.000E+00  0.000E+00
ETOT   8  -69.989005538450  -1.108E-05  3.547E-06  2.162E-02  0.000E+00  0.000E+00
ETOT   9  -69.989008880824  -3.342E-06  3.177E-06  4.406E-04  0.000E+00  0.000E+00
ETOT  10  -69.989008958389  -7.757E-08  2.408E-07  1.430E-05  0.000E+00  0.000E+00
ETOT  11  -69.989008960337  -1.948E-09  2.230E-07  2.624E-08  0.000E+00  0.000E+00
```

At SCF step 11, etot is converged :

for the second time, diff in etot= 1.948E-09 < toldfe= 1.000E-06

Cartesian components of stress tensor (hartree/bohr<sup>3</sup>)

```
sigma(1 1)= 1.12695268E-02  sigma(3 2)= 0.00000000E+00
sigma(2 2)= 1.12695268E-02  sigma(3 1)= 0.00000000E+00
sigma(3 3)= 1.12695268E-02  sigma(2 1)= 0.00000000E+00
```



## 2.4. El fichero .out (4)

→ Energía total y presión calculadas

-----  
Components of total free energy (in Hartree) :

```
Kinetic energy = 8.57528553490948E+01
Hartree energy = 2.74802784414061E+01
XC energy      = -1.09428924429303E+01
Ewald energy   = -4.60949584103264E+01
PspCore energy = 1.26116542348569E+00
Loc. psp. energy= -7.33291971451614E+01
NL   psp energy= -5.41162601759051E+01
>>>>>>>> Etotal= -6.99890089603366E+01
```

Other information on the energy :

```
Total energy(eV)= -1.90449778880070E+03 ; Band energy (Ha)= -1.0992981868E+00
```

-----  
[...]

```
-Cartesian components of stress tensor (GPa)          [Pressure= -3.3156E+02 GPa]
- sigma(1 1)= 3.31560870E+02  sigma(3 2)= 0.000000000E+00
- sigma(2 2)= 3.31560870E+02  sigma(3 1)= 0.000000000E+00
- sigma(3 3)= 3.31560870E+02  sigma(2 1)= 0.000000000E+00
```

## 2.4. El fichero .out (5)

→ Estado de todas las variables al final del cálculo

```
== END DATASET(S) =====  
=====  
  
-outvars: echo values of variables after computation -----  
  acell    7.2156860810E+00  7.2156860810E+00  7.2156860810E+00 Bohr  
   amu     6.539000000E+01  3.206600000E+01  
   ecut    5.500000000E+01 Hartree  
  ecutsm   5.000000000E-05 Hartree  
  etotal   -6.9989008960E+01  
  fcart    0.0000000000E+00  0.0000000000E+00  0.0000000000E+00  
           0.0000000000E+00  0.0000000000E+00  0.0000000000E+00  
  ionmov      2  
   kpt      1.25000000E-01  1.25000000E-01  1.25000000E-01  
           3.75000000E-01  1.25000000E-01  1.25000000E-01  
           -3.75000000E-01  1.25000000E-01  1.25000000E-01  
           -1.25000000E-01  1.25000000E-01  1.25000000E-01  
           3.75000000E-01  3.75000000E-01  1.25000000E-01  
           -3.75000000E-01  3.75000000E-01  1.25000000E-01  
           -1.25000000E-01  3.75000000E-01  1.25000000E-01  
           -3.75000000E-01 -3.75000000E-01  1.25000000E-01
```

## 2.4. El fichero .out (6)

→ Sugerencias de referencias a incluir en artículos

=====

Suggested references for the acknowledgment of ABINIT usage.

The users of ABINIT have little formal obligations with respect to the ABINIT group (those specified in the GNU General Public License, <http://www.gnu.org/copyleft/gpl.txt>) However, it is common practice in the scientific literature, to acknowledge the efforts of people that have made the research possible.

In this spirit, please find below suggested citations of work written by ABINIT developers, corresponding to implementations inside of ABINIT that you have used in the present run.

Note also that it will be of great value to readers of publications presenting these results, to read papers enabling them to understand the theoretical formalism and details of the ABINIT implementation.

For information on why they are suggested, see also <http://www.abinit.org/about/?text=acknowledgments>.

[1] A brief introduction to the ABINIT software package.

X. Gonze, G.-M. Rignanese, M. Verstraete, J.-M. Beuken, Y. Pouillon, R. Caracas, F. Jollet, M. Torrent, G. Zerah, M. Mikami, Ph. Ghosez, M. Veithen, J.-Y. Raty, V. Olevano, F. Bruneval, L. Reining, R. Godby, G. Onida, D.R. Hamann, and D.C. Allan. Z. Kristallogr. 220, 558-562 (2005).

## 2.5. Múltiples cálculos con un único .in

```
# definicion de la celda primitiva
## vectores de la red
acell1 3*4.8 angstr
acell2 3*5.0 angstr
acell3 3*5.2 angstr
acell4 3*5.4 angstr
acell5 3*5.6 angstr
acell6 3*5.8 angstr

ndtset 5
jdtset 1 2 3 5 6

rprim 0.0 0.5 0.5 #rprim1
      0.5 0.0 0.5 #rprim2
      0.5 0.5 0.0 #rprim3

xred 0.0 0.0 0.0
     0.25 0.25 0.25
```

Para determinar, por ejemplo, el módulo de volúmen hace falta repetir el cálculo anterior a varios volúmenes. ABINIT permite especificar varios cálculos (“datasets”) en un único fichero .in

Basta con añadir un sufijo numérico a la(s) variable(s) y

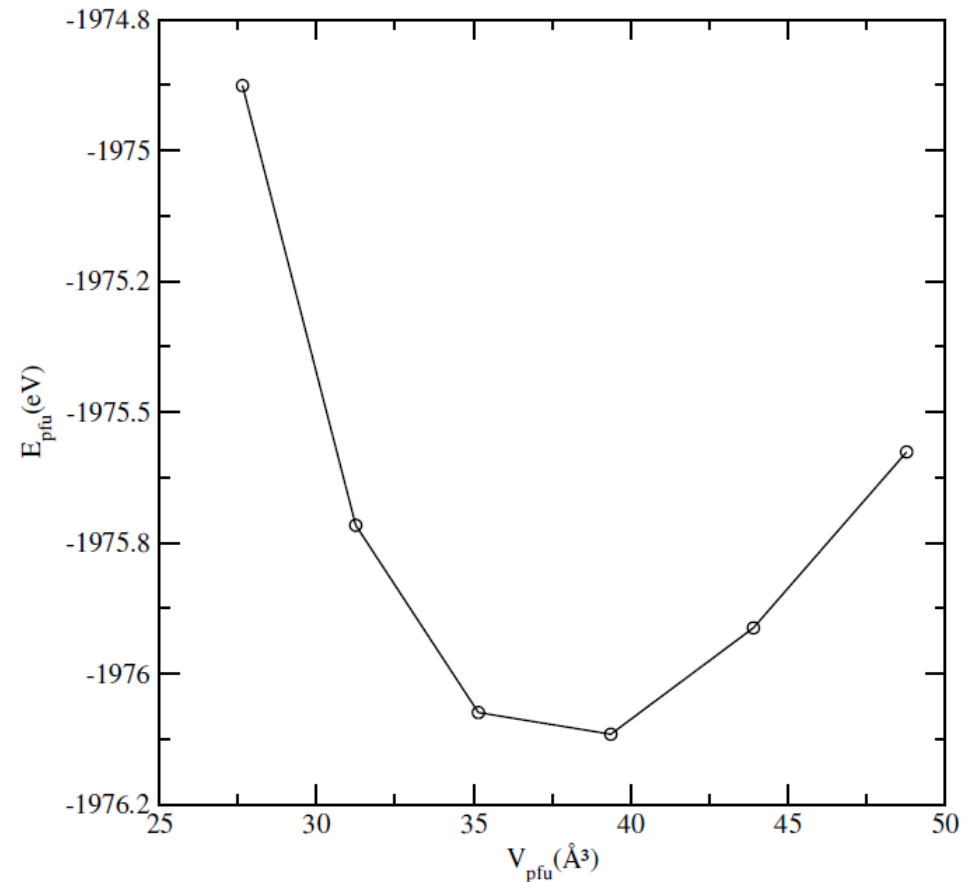
- definir el número de datasets
- especificar qué datasets se deben calcular (si se va a omitir alguno)

Las variables comunes no se modifican

## 2.6. Resultados

Con los 6 datasets anteriores se puede obtener una curva de energía total frente a volumen.

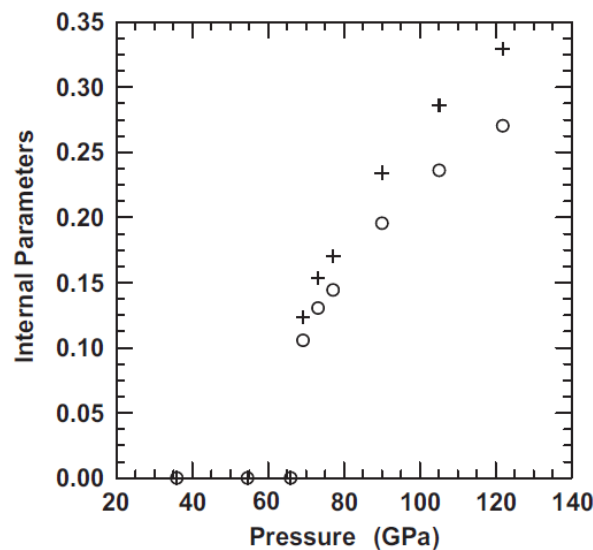
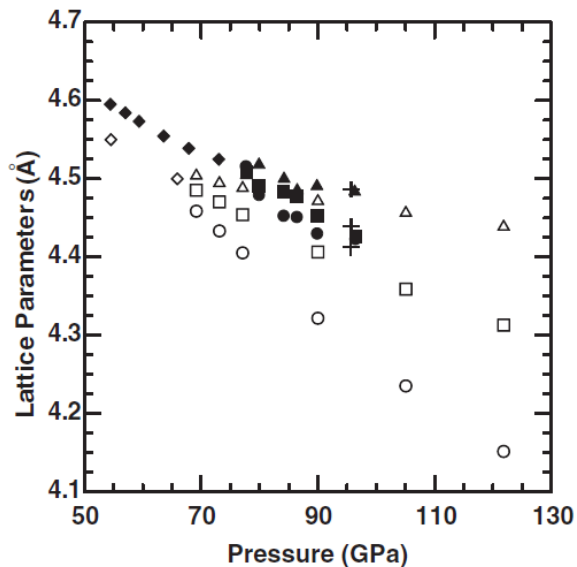
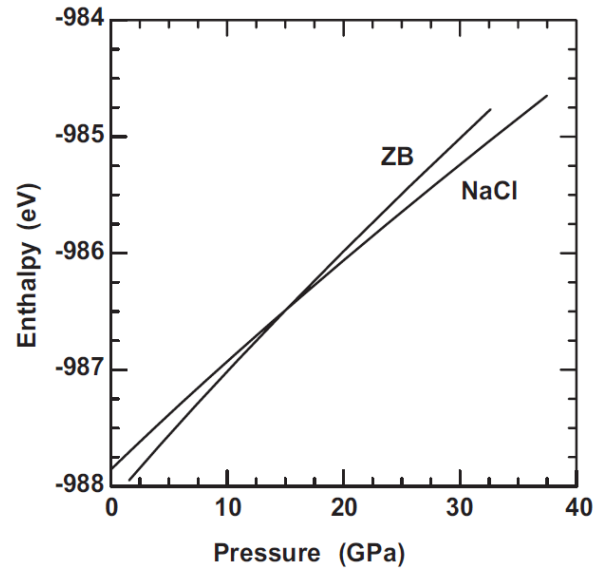
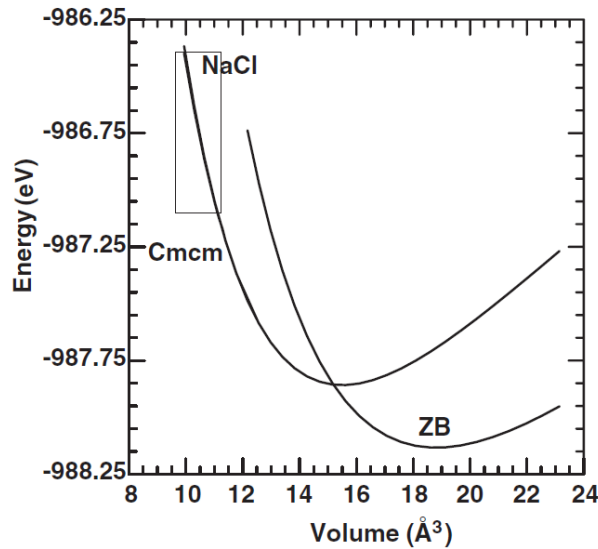
El mínimo de la curva corresponde al volumen de equilibrio ( $p=0$ ). En este caso se obtiene  $37.6 \text{ \AA}^3$  que esta en buen acuerdo con el valor experimental de  $38.9 \text{ \AA}^3$  [1]



Ajustando una EOS de Birch-Murnaghan de 4<sup>o</sup> orden a los puntos (E,V) se obtiene  $B_0=87.7 \text{ GPa}$  y  $B'_0=4.5$ , que se compara razonablemente con los valores experimentales de  $B_0=79.5 \text{ GPa}$  y  $B'_0=4$  [1]

[1]: Desgreniers, PRB **61**, 8726 (2000)

## 2.6. Resultados (2)



Con este mismo tipo de cálculos se puede obtener la evolución de los parámetros de celda con la presión, y presiones de transición (a través del corte de curvas de entalpía frente a presión o de la evolución de los parámetros de celda)

Curvas E-V, H-p, y evolución estructural en la transición de 2º orden NaCl  $\rightarrow$  Cmcm (símbolos vacíos: ABINIT, resto: datos experimentales). Tomado de L-S 2003

### 3. Fonones en zb-ZnS

ABINIT es capaz de calcular la respuesta del sistema a diferentes perturbaciones mediante DFPT (Gonze 1997)

```
# Fonones ZnS zb  
ndtset 2
```

```
# calculo GS inicial  
kptopt1 1  
tolDFE1 1.0d-12
```

```
# desplazamientos atomicos  
rfphon2 1  
rfatpol2 1 2  
rfdir2 1 1 1
```

```
nqpt2 1  
qpt2 0 0 0
```

```
getwfk2 -1
```

```
kptopt2 2  
tolDFE2 1.0d-12
```

→ Hace falta un cálculo inicial del tipo ya visto, que genera funciones de onda iniciales para el verdadero cálculo de fonones.

→ Cálculo de fonones

→ Desplazar todos los átomos  
→ en todas las direcciones

→ Sólo punto Gamma

→ Usar las funciones de onda del dataset anterior

(Por supuesto, falta por definir el cutoff, grid de k, celda...)

## 3.1. Resultados

Hace falta más precisión (encut, ngkpt) para obtener buenos resultados, pero en todo caso el proceso es rápido (con esta celda!)

→ ngkpt 8 8 8 | nkpt2 256 | 8 cpus, tiempo/cpu = 156s

```
Phonon wavevector (reduced coordinates) : 0.00000 0.00000 0.00000
Phonon frequencies in cm-1 :
- -2.392234E+01 1.222981E+01 1.653484E+01 2.903676E+02 2.915872E+02
- 2.917959E+02
```

→ ngkpt 12 12 12 | nkpt2 864 | 8 cpus, tiempo/cpu = 286s

```
Phonon wavevector (reduced coordinates) : 0.00000 0.00000 0.00000
Phonon frequencies in cm-1 :
- -6.012859E+00 3.060188E+00 4.144173E+00 2.912786E+02 2.913454E+02
- 2.913569E+02
```

→ ngkpt 16 16 16 | nkpt2 2048 | 8 cpus, tiempo/cpu = 854s

```
Phonon wavevector (reduced coordinates) : 0.00000 0.00000 0.00000
Phonon frequencies in cm-1 :
- -2.118501E+00 -1.567058E+00 3.064132E+00 2.913308E+02 2.913323E+02
- 2.913413E+02
```



## 3.2. Splitting LO-TO

La degeneración de los modos ópticos se debe a no haber tenido en cuenta el campo eléctrico entre los iones. ABINIT puede incorporarlo como una perturbación más.

```
# Fonones ZnS zb
ndtset 3

# calculo GS inicial
kptopt1 1
toldefe1 1.0d-12

# respuesta a cambios en
#+el vector de ondas k ("ddk")
rfelld2 2
rfdird2 1 1 1
nqpt2 1
qpt2 0.0 0.0 0.0

getwfk2 -1
kptopt2 2
iscf2 -3 # este calculo no es
          #+autoconsistente
tolwfr2 1.0d-22
```

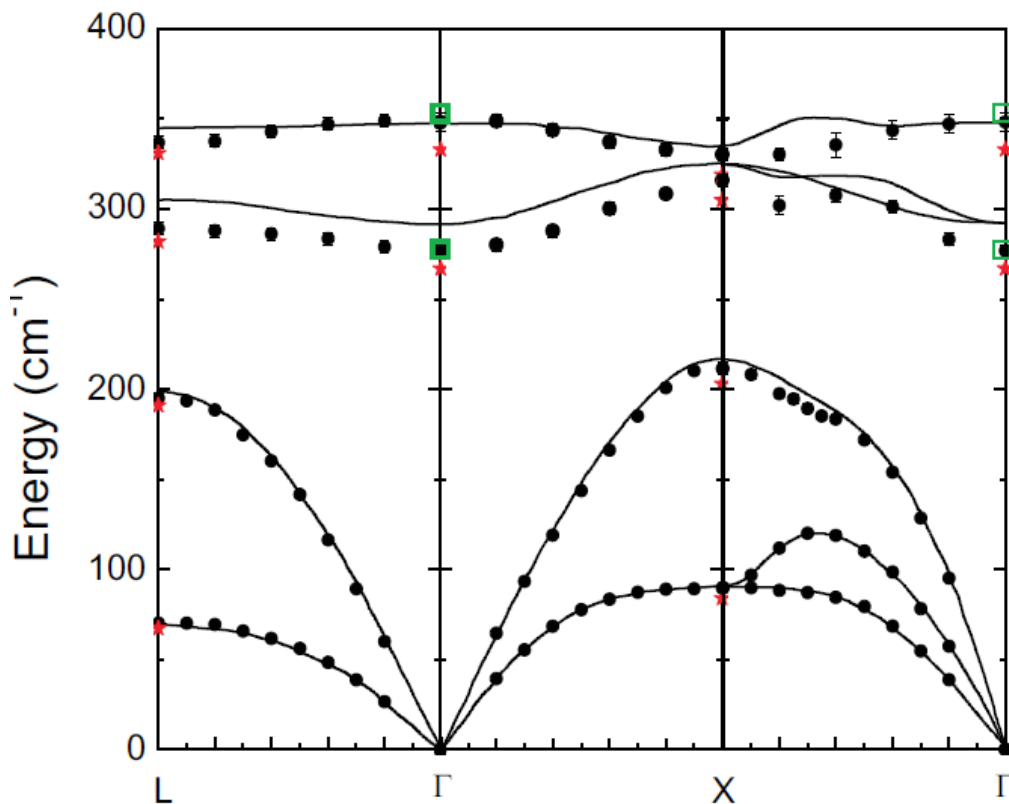
```
# respuesta a desplazamientos
#+atomicos
rfphon3 1 # fonones
rfelld3 3 # campo electrico
rfatpol3 1 2
rfdird3 1 1 1
nqpt3 1
qpt3 0 0 0

kptopt3 2
toldefe3 1.0d-12
getwfk3 -2
getddk3 -1
```

### 3.3. Resultados con splitting LO-TO

→ ngkpt 12 12 12 (8 cpus, tiempo/cpu = 1349s)

```
Phonon wavevector (reduced coordinates) : 0.00000 0.00000 0.00000
Phonon frequencies in cm-1      :
- -6.012512E+00  3.060203E+00  4.144500E+00  2.912900E+02  2.913454E+02
-  3.476253E+02
```



El acuerdo con otros valores teóricos (en rojo en la figura de la izquierda) y experimentales (en verde) es razonable.

Mediante un procedimiento similar se pueden calcular los fonones en otros puntos del espacio recíproco.

Figura tomada de Cardona 2009

## 4. Más ejemplos

TABLE I. Characteristics of  $\text{CuAlO}_2$  normal modes, including wave numbers, pressure coefficients, and Grüneisen parameters. The Grüneisen parameter is defined as  $\gamma_i = B/\sigma_i \partial\sigma_i/\partial P$ , where we have used  $B = 200 \pm 10$  GPa. Wave numbers are in  $\text{cm}^{-1}$ , and pressure in GPa.

Mode	$\sigma$	$\partial\sigma/\partial P$	$\gamma$
$E_u^\downarrow(\text{TO})$	Calc. $144 \pm 2$	$-0.8 \pm 0.1$	$-1.1 \pm 0.2$
$E_u^\downarrow(\text{LO})$	Calc. $149 \pm 2$	$-0.4 \pm 0.1$	$-0.5 \pm 0.3$
$E_g$	Calc. $433 \pm 4$	$2.7 \pm 0.1$	$1.2 \pm 0.1$
	Expt. $418.1 \pm 0.2$	$2.72 \pm 0.07$	$1.3 \pm 0.1$
$A_{2u}^\downarrow(\text{TO})$	Calc. $474 \pm 5$	$3.2 \pm 0.1$	$1.35 \pm 0.09$
$A_{2u}^\downarrow(\text{LO})$	Calc. $474 \pm 5$	$3.3 \pm 0.1$	$1.39 \pm 0.09$
$E_u^\uparrow(\text{TO})$	Calc. $532 \pm 5$	$5.1 \pm 0.2$	$1.9 \pm 0.1$
$E_u^\uparrow(\text{LO})$	Calc. $645 \pm 6$	$4.7 \pm 0.1$	$1.46 \pm 0.08$
$A_{2u}^\uparrow(\text{TO})$	Calc. $737 \pm 7$	$5.0 \pm 0.1$	$1.36 \pm 0.08$
$A_{2u}^\uparrow(\text{LO})$	Calc. $874 \pm 9$	$5.2 \pm 0.1$	$1.19 \pm 0.08$
$A_{1g}$	Calc. $770 \pm 8$	$4.8 \pm 0.1$	$1.25 \pm 0.08$
	Expt. $767.2 \pm 0.3$	$4.96 \pm 0.12$	$1.3 \pm 0.1$

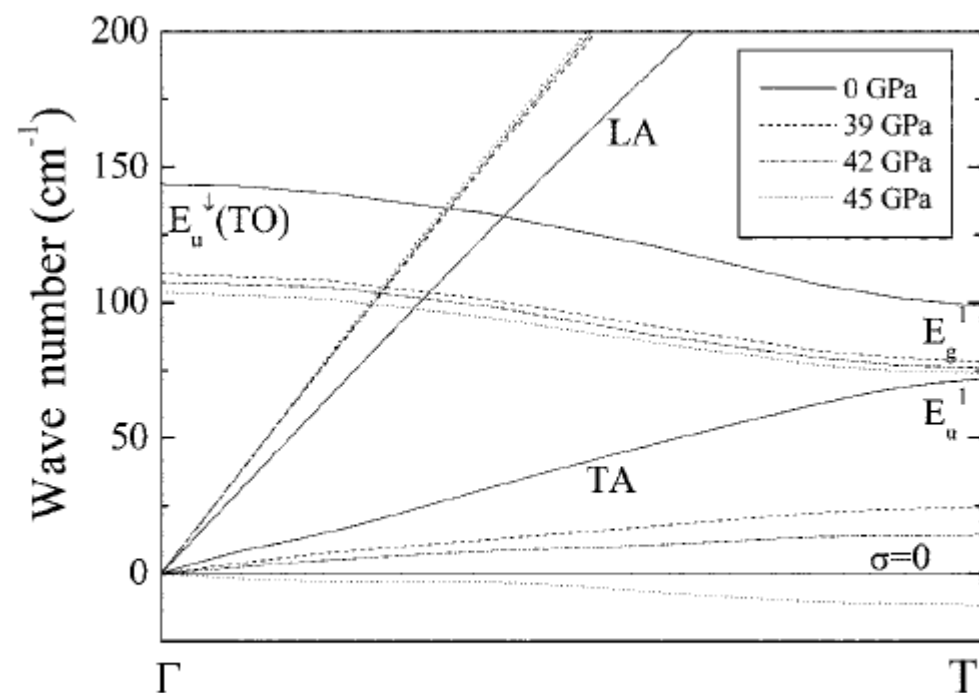
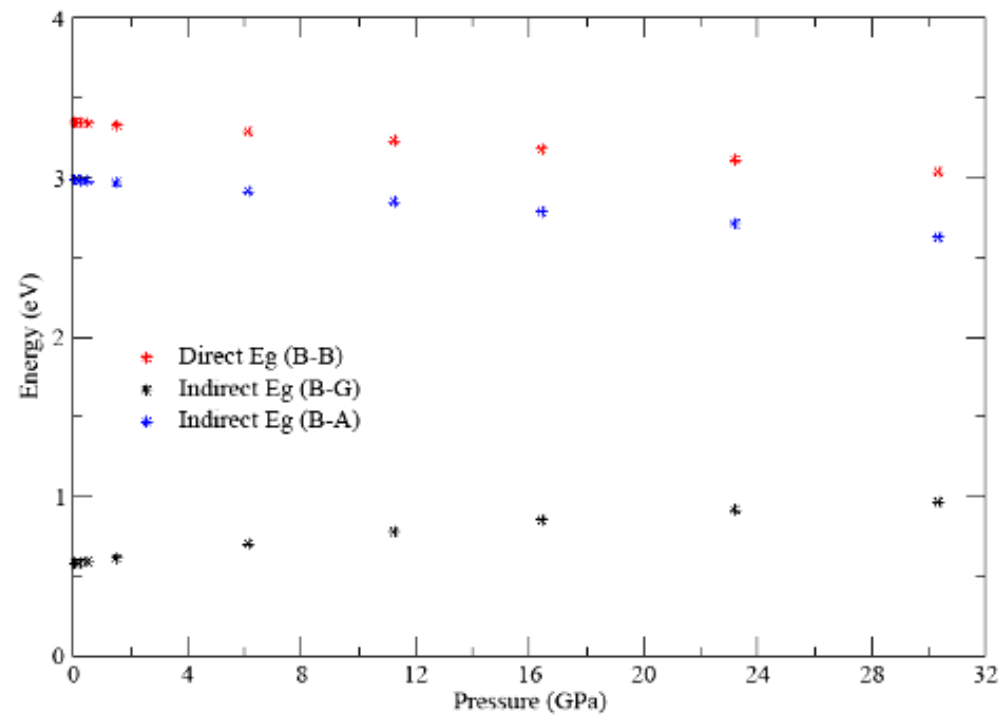
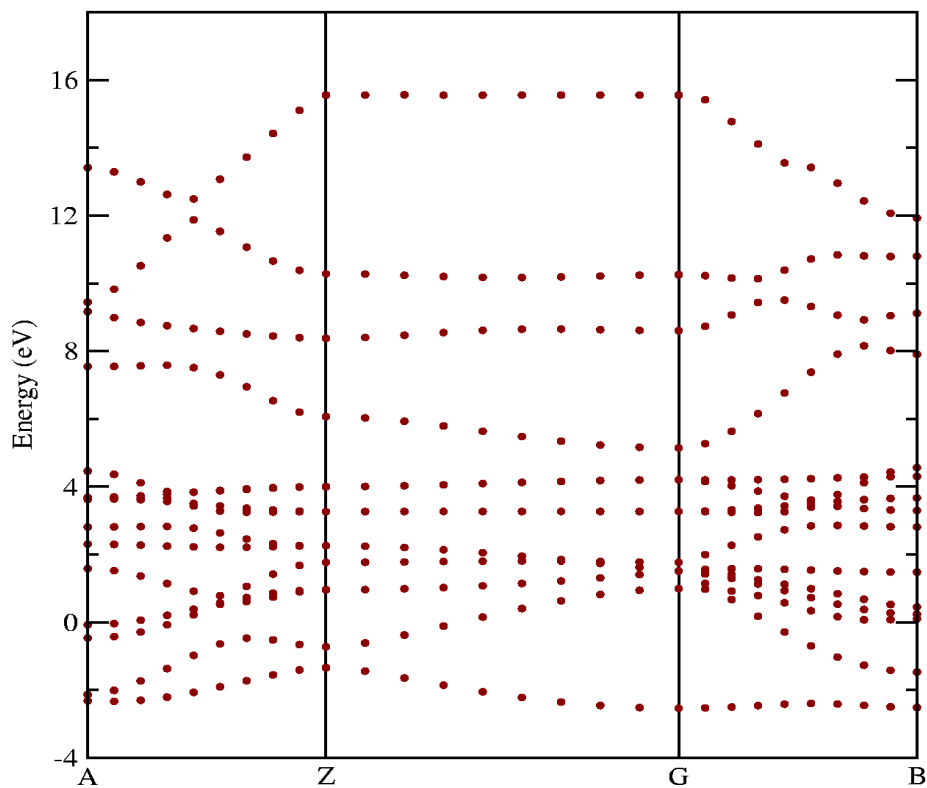


FIG. 6. Pressure dependence of the three lowest branches along  $\Gamma T$ . At 45 GPa, the structure is dynamically unstable.

$\text{CuAlO}_2$ : modos de vibración en  $\Gamma$  (izq) y evolución con la presión de los tres modos más blandos en la dirección  $\Gamma T$  (Pellicer-Porres 2002)

## 4. Más ejemplos (2)



CuInO<sub>2</sub>: estructura de bandas y evolución del gap con la presión  
(Pérez-González 2009)

## 5. ABINIT en MALTA

Los binarios serial (“abinis”) y paralelo (“abinip”) de la versión 5.7.3 de ABINIT se encuentran en /opt/abinit/5.7/bin

En /opt/abinit/5.7/doc hay copias locales de los tutoriales y ficheros de ayuda.

Para lanzar un trabajo, se puede usar el script de la sección 2.3

Existe un tutorial oficial de ABINIT sobre paralelización, con indicaciones sobre cómo sacarle el máximo partido:

[http://www.abinit.org/documentation/helpfiles/for-v5.8/tutorial/lesson\\_parallelism.html](http://www.abinit.org/documentation/helpfiles/for-v5.8/tutorial/lesson_parallelism.html)  
[/opt/abinit/5.7/doc/tutorial/lesson\\_parallelism.html](/opt/abinit/5.7/doc/tutorial/lesson_parallelism.html)

### 6. Taking benefit from the parallelism

#### Running a job

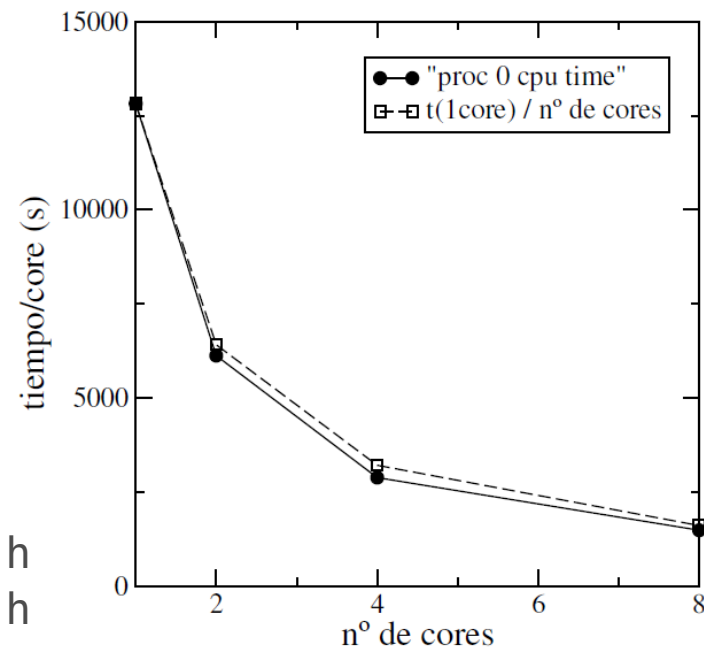
Before starting, you might consider working in a different subdirectory as for t

Copy the files file and the input file from the ~abinit/tests/tutorial directory to tpara\_1.files and tpara\_1.in. You can start immediately a sequential run, to t needs about one minute to be done.

Contrary to the sequential case, it is worth to have a look at the "files" file, and should avoid unnecessary network communications. If every node has its own this by providing a path to a local disk for the temporary files in abinit.files. Su

$$t(1 \text{ core}) = 12819 \text{ s} \sim 3.5 \text{ h}$$

$$t(8 \text{ cores}) = 1479 \text{ s} \sim 0.4 \text{ h}$$



## 6. Bibliografía

<http://www.abinit.org/documentation/helpfiles/for-v5.8/users/bibliography.html>

### ABINIT:

- X. Gonze et al., *Comp. Mater. Sci.* **25**, 478-492 (2002)
- X. Gonze et al., *Zeit. Kristallogr.* **220**, 558-562 (2005) (acceso libre desde la página de abinit, sección de bibliografía)
- X. Gonze et al., *Comp. Phys. Comm.* **180**, 2582-2615 (2009) (acceso libre: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2009.07.007>)

### DFPT:

- X. Gonze, *Phys. Rev. B* **55**, 10337 (1997)
- X. Gonze y C. Lee, *Phys. Rev. B* **55**, 10355 (1997)

### Algunos artículos donde se emplea ABINIT:

- (Fe con PAW) M. Torrent et al., *Comp. Mater. Sci.* **42**, 337-351 (2008)
- (ZnS HP) J. López-Solano et al., *Phys. Stat. Sol. (b)* **235**, 452 (2003)
- (fonones ZnS) M. Cardona et al., arxiv: 0911.5022v1
- (CuAlO<sub>2</sub>) J. Pellicer-Porres et al. *Phys. Rev. B* **74**, 184301 (2006)