



Basic1

Tchapet Njafa

Objectifs

Obtention de la
(pseudo)
énergie totale

Calcul de la
distance
interatomique

Calcul de la
densité de
charge

Calcul de
l'énergie
d'atomisation

Tutoriel sur les bases n° 1

Tchapet Njafa

jean-pierre.tchapet-njafa@univ-maroua.cm

avril 2023





Objectif

Obtention des variables physiques

Basic1

Tchapet Njafa

Objectifs

Obtention de la
(pseudo) énergie totale

Calcul de la
distance
interatomique

Calcul de la
densité de
charge

Calcul de
l'énergie
d'atomisation

- la (pseudo) énergie totale
- la longueur de liaison
- la densité de charge
- l'énergie d'atomisation

Fichiers de pseudopotentiels

- <https://www.abinit.org/downloads/atomic-data-files>
- <http://www.pseudo-dojo.org/>

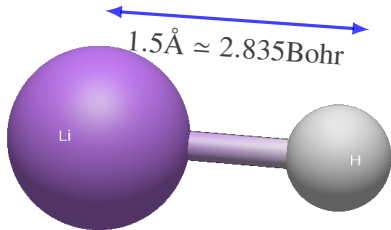


Figure – Molécule de LiH



Rappel sur l'exécution du code

Basic1

Tchapet Njafa

Objectifs

Obtention de la
(pseudo)
énergie totale

Calcul de la
distance
interatomique

Calcul de la
densité de
charge

Calcul de
l'énergie
d'atomisation

Soit **run.abi** le fichier d'entrée.

- Par défaut : `abinit run.abi >& log`
- En background : `abinit run.abi >& log &`
- En séparant le fichier de sortie standard du fichier d'erreurs :
`abinit run.abi > log 2> err &`



(Pseudo) énergie totale

Conception du fichier d'entrée

Basic1

Tchapet Njafa

Objectifs

Obtention de la
(pseudo)
énergie totale

Calcul de la
distance
interatomique

Calcul de la
densité de
charge

Calcul de
l'énergie
d'atomisation

- 1 `cd ~/TutoAbinit/LiH/t1`
- 2 `abinit LiH_t1.abi > log 2> err &`

Si AbiPy visualiser le fichier log

```
1 abiopen.py log -p
2
```

- 3 Explorer le fichier de sortie LiH_t1.abo
chkinp: Checking input parameters for consistency.



(Pseudo) énergie totale

Exploration du fichier de sortie

Basic1

Tchapet Njafa

Objectifs

Obtention de la
(pseudo)
énergie totale

Calcul de la
distance
interatomique

Calcul de la
densité de
charge

Calcul de
l'énergie
d'atomisation

- 1 Combien de cycles SCF ont été nécessaires pour satisfaire le critère `toldfe` ?

Si AbiPy est installé on peut visualiser le nombre de cycles SCF.

```
1 abiopen.py LiH_t1.abo --expose --seaborn
2
```

- 2 L'énergie converge-t-elle plus que `toldfe` ?
- 3 Quelle est la valeur de la force sur chaque atome (en Ha/Bohr) ?
- 4 Quelle est la différence d'énergie entre 2 états électroniques ?
1^e et 2^e : 1.639 32Ha 1^e et 3^e : 1.777 2Ha 2^e et 3^e : 0.137 88Ha
- 5 Paramétrer `prtvol` à 2, exécuter et donner la valeur de la densité électronique (en el/Bohr^3)

- 1 `cd ~/TutoAbinit/LiH/t2`

- 2 `abinit LiH_t2.abi > log 2> err &`



Calcul de la distance interatomique

Méthode 1

Basic1

Tchapet Njafa

Objectifs

Obtention de la
(pseudo)
énergie totale

Calcul de la
distance
interatomique

Calcul de la
densité de
charge

Calcul de
l'énergie
d'atomisation

Tracer et visualiser la courbe d'énergie pour distance de 2.5Bohr à 3.5Bohr

- 1 `cd ~/TutoAbinit/LiH/t3`
- 2 `abinit LiH_t3.abi > log 2> err &`
- 3 Explorer le fichier de sortie LiH_t3.abo

Énergie minimale entre données 17 et 18 (entre 3.35Bohr et 3.4Bohr).

```
1 ...
2 etotal13 -7.6269166278E+00
3 etotal14 -7.6273195140E+00
4 etotal15 -7.6276101038E+00
5 etotal16 -7.6278019834E+00
6 etotal17 -7.6279076966E+00
7 etotal18 -7.6279386529E+00
8 etotal19 -7.6279050724E+00
9 etotal20 -7.6278159732E+00
10 etotal21 -7.6276792026E+00
11
```

```
1 ...
2 fcart17 -1.3309450681E-03 -0.0000000000E+00 -0.0000000000E+00
3 1.3309450681E-03 -0.0000000000E+00 -0.0000000000E+00
4 fcart18 5.7983929101E-05 -0.0000000000E+00 -0.0000000000E+00
5 -5.7983929101E-05 -0.0000000000E+00 -0.0000000000E+00
6
```



Calcul de la distance interatomique

Méthode 2

Basic1

Tchapet Njafa

Objectifs

Obtention de la
(pseudo)
énergie totale

Calcul de la
distance
interatomique

Calcul de la
densité de
charge

Calcul de
l'énergie
d'atomisation

Modification de LiH_t1.abi

- 1 `cd ~/TutoAbinit/LiH/t4`
- 2 `abinit LiH_t4.abi > log 2> err &`
- 3 Explorer le fichier de sortie LiH_t4.abo

Si AbiPy est installer on peut analyser visuellement la relaxation structurelle avec abiopen.

```
1 abiopen.py LiH_t4o_HIST.nc --expose --seaborn
2
```

```
1 etotal      -7.6279345013E+00
2 fcart       -4.7620118923E-04 -0.0000000000E+00 -0.0000000000E+00
3             4.7620118923E-04 -0.0000000000E+00 -0.0000000000E+00
4 ...
5 xcart       -2.4743772625E-01  0.0000000000E+00  0.0000000000E+00
6             3.0824377262E+00  0.0000000000E+00  0.0000000000E+00
```

Optimale
3.329 875 452 45 Bohr
≈
1.762 Å



Calcul de la densité de charge

Basic1

Tchapet Njafa

Objectifs

Obtention de la
(pseudo)
énergie totale

Calcul de la
distance
interatomique

Calcul de la
densité de
charge

Calcul de
l'énergie
d'atomisation

Modification de `LiH_t1.abi` avec la distance optimale (`xcart`) et impression de la densité de charge (`prtden=1`)

- 1 `cd ~/TutoAbinit/LiH/t5`
- 2 `abinit LiH_t5.abi > log 2> err &`
- 3 Explorer le fichier de sortie `LiH_t5o_DEN`
- 4 Utilisation de `cut3d` pour visualiser les isosurfaces de densité

Si `AbiPy` est installer on peut l'utiliser pour visualiser les isosurfaces de densité en invoquant `VESTA`.



Calcul de l'énergie d'atomisation

Basic1

Tchapet Njafa

Objectifs

Obtention de la
(pseudo)
énergie totale

Calcul de la
distance
interatomique

Calcul de la
densité de
charge

Calcul de
l'énergie
d'atomisation

Énergie nécessaire pour séparer une molécule en ses différents constituants.

$$E_{atom} = E_{LiH} - (E_{Li} + E_H) \quad (1)$$

- 1 `cd ~/TutoAbinit/LiH/t6`
- 2 `abinit H_t6.abi > logH 2> errH &`
- 3 Explorer le fichier de sortie `H_t6.abo`
- 4 `abinit Li_t6.abi > logLi 2> errLi &`
- 5 Explorer le fichier de sortie `Li_t6.abo`

E_{LiH}	etotal -7.6279345013E+00
E_H	etotal -4.8027186429E-01
E_{Li}	etotal -8.4786444598E+00
E_{atom}	5.6534286014E+00



Basic1

Tchapet Njafa

Objectifs

Obtention de la
(pseudo)
énergie totale

Calcul de la
distance
interatomique

Calcul de la
densité de
charge

Calcul de
l'énergie
d'atomisation

Les variables sont elles correctes ?

ecut
acell
ixc



Basic1

Tchapet Njafa

Objectifs

Obtention de la
(pseudo)
énergie totale

Calcul de la
distance
interatomique

Calcul de la
densité de
charge

Calcul de
l'énergie
d'atomisation



9.6.2

<https://docs.abinit.org>