



Quelques remarques pour le nouvel utilisateur de Abinit

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

mars 2023





Pseudopotentiels

Remarques

Tchapet Njafa

Les fichiers de pseudopotentiels (dans les dossiers **Input** et **Refs** des vidéos précédentes) ne sont utilisés que pour des tests et ne sont pas recommandés pour des productions scientifiques.

Ce qui est recommandé :

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



Exécution du code

Remarques

Tchapet Njafa

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 &`



Paramètres

Remarques

Tchapet Njafa

Ce sont les entrées du code données à partir d'un fichier unique d'entrée.

Pour chaque paramètre :

Nom de la variable d'entrée  **Valeur(s) numérique(s)**

- On ne doit pas séparer le **un ou plusieurs espace(s)** il est appliqué
- On ne doit pas utiliser de **ou**
- Chaque ligne du fichier d'entrée doit contenir **un signe égal (=)** caractères
- On peut mettre plusieurs paramètres sur une ligne
- On n'introduit pas plus d'une fois un paramètre
- La case est non pertinente
- Fichier externe de paramètres : `include "geometry.inc"`



Paramètres

Remarques

Tchapet Njafa

Ce sont les entrées du code données à partir d'un fichier unique d'entrée.

Pour chaque paramètre :

Nom de la variable d'entrée

en fonction

- On ne doit pas séparer le signe moins du n
- On ne doit pas utiliser des tabulations
- Chaque ligne du fichier d'entrée doit avoir
- On peut mettre plusieurs paramètres sur un
- On n'introduit pas plus d'une fois un paramètre
- La case est non pertinente
- Fichier externe de paramètres : `include "geometry.inc"`

Valeur(s) numérique(s)

- entière
- réelle
- "chaîne de caractères"
- tableau de valeurs



Paramètres

Remarques

Tchapet Njafa

Ce sont les entrées du code données à partir d'un fichier unique d'entrée.

Pour chaque paramètre :

Nom de la variable d'entrée

Valeur(s) numérique(s)

- On ne doit pas séparer le signe **moins** du nombre auquel il est appliqué
- On ne doit pas utiliser des tabulations
- Chaque ligne du fichier d'entrée doit avoir **au plus** 132 caractères
- On peut mettre plusieurs paramètres sur une ligne
- **On n'introduit pas plus d'une fois un paramètre**
- **La case est non pertinente**
- Fichier externe de paramètres : **include "geometry.inc"**



Commentaires

Remarques

Tchapet Njafa

Tout commentaire doit s'écrire à droite de # ou !.

Toute chaîne de caractères (**sans variable Abinit**) est un commentaire.



Capacités de l'interpréteur

Remarques

Tchapet Njafa

Les capacités de l'interpréteur de Abinit sont limités.

Il peut

- 1 identifier `/` (sans espace) entre deux nombres (e.g. `3/4`)
- 2 identifier `sqrt(x)` ou `-sqrt(x)` (sans espace et $x \geq 0$) comme une racine carrée

Ne sont pas récursives.

- 3 concaténer deux chaînes de caractères // (sans espace entre les slashes)

- 4 accepter les variables `sqrt(3)/sqrt(4)` et `sqrt(3)/4` étant le nom de la variable

| NON | OUI |
|------------------------------|------------------------|
| <code>sqrt(3)/sqrt(4)</code> | <code>sqrt(3/4)</code> |
| <code>sqrt(3)/4</code> | <code>1.732/4</code> |
| <code>3/sqrt(4)</code> | <code>3/2</code> |
| <code>sqrt(sqrt(4))</code> | <code>sqrt(2)</code> |
| <code>3/(4/2)</code> | <code>3/2</code> |

Si `PSPDIR`

`$PSPDIR/Pseu`

“Input/Pseud

“Input” \Rightarrow

répertoire



Capacités de l'interpréteur

Remarques

Tchapet Njafa

Les capacités de l'interpréteur de Abinit sont limités.

Il peut

- 1 identifier **/** (sans espace) entre deux nombres (e.g. 3/4)
- 2 identifier **sqrt(x)** ou **-sqrt(x)** (sans espace et $x \geq 0$) comme une racine carrée
- 3 concaténer deux chaînes de caractères en utilisant l'opérateur **//** (sans espace entre les slashes)
- 4 accepter les variables d'environnement sous la forme **\$VAR**, VAR étant le nom de la variable

Si `PSPDIR` correspond au répertoire "Input" \Rightarrow
`$PSPDIR/PseudosHGH_pwteter` correspond au répertoire
"Input/PseudosHGH_pwteter"



Paramètres affectant la convergence et la qualité des résultats numériques

Remarques

Tchapet Njafa

Par ordre d'importance

- `ecut`
- `toldfe`, `toldff`, `tolwfr`, et `tolvrs` aussi bien que `nstep`
- `nkpt`
- `ngfft`
- `tolmxf`, aussi bien que `amu`, `dtion`, `vis`, `ntime`
- `acell` et `rprim`

La conception technique du pseudopotentiel affecte également la qualité des résultats.



Variables d'entrée les plus importantes

Spécification de la géométrie du problème et des types d'atomes

Remarques

Tchapet Njafa

| Variable | Description |
|-----------------------|---|
| natom | Nombre total d'atomes par cellule unitaire |
| ntypat | Nombre de types d'atomes |
| typat(natom) | Tableau (ou séquence) d'entiers spécifiant le type de chaque atome (xcart ou xred doit être spécifié dans le même ordre) |
| rprim(3,3) | Translations primitives sans dimensions de cellule périodique |
| xcart(3,natom) | Coordonnées cartésiennes (Bohr) des atomes de la cellule unitaire (exclu xred) |
| xred(3,natom) | Coordonnées fractionnaires des positions atomiques (exclu xcart) |
| znucl(ntypat) | Charge nucléaire de chaque élément (doit correspondre à ce qu'on trouve dans les fichiers de pseudopotentiels) |



Variables d'entrée les plus importantes

Spécification de la géométrie du problème et des types d'atomes

Remarques

Tchapet Njafa

| Variable | Description |
|-----------------------|---|
| natom | Nombre total d'atomes par cellule unitaire |
| ntypat | Nombre de types d'atomes |
| typat(natom) | Tableau (ou séquence) d'entiers spécifiant le type de chaque atome (xcart ou xred doit être spécifié dans le même ordre) |
| rprim(3,3) | Translations primitives sans dimensions de cellule périodique |
| xcart(3,natom) | Coordonnées cartésiennes (Bohr) des atomes de la cellule unitaire (exclu xred) |
| xred(3,natom) | Coordonnées fractionnaires des positions atomiques (exclu xcart) |
| znucl(ntypat) | Charge nucléaire de chaque élément (doit correspondre à ce qu'on trouve dans les fichiers de pseudopotentiels) |



Variables d'entrée les plus importantes

Spécification de l'ensemble de base des ondes planes, échantillonnage du vecteur d'onde de la zone de Brillouin et occupation des bandes

Remarques

Tchapet Njafa

| Variable | Description |
|------------------|---|
| ecut | Énergie cinétique de coupure d'onde plane en Hartree |
| kptopt | Option spécifiant la grille des k points si kptopt , génération automatique, utilisant ngkpt et shiftk |
| ngkpt (3) | Dimensions de la grille tridimensionnelles des k points |
| occopt | Paramètre l'occupation des niveaux électroniques : =1 pour les semi-conducteurs, =3 ... 7 pour les métaux |



Variables d'entrée les plus importantes

Spécification du type de calcul à effectuer

Remarques

Tchapet Njafa

| Variable | Description |
|------------------|---|
| ionmov | Quand <ul style="list-style-type: none">• <code>ionmov = 0</code> : les ions et la forme de la cellule sont fixés• <code>ionmov = 2</code> : recherche de la géométrie d'équilibre• <code>ionmov = 6</code> : dynamiques moléculaires |
| iscf | Soit un nombre positif pour définir l'algorithme auto-cohérent (usuel), soit -2 pour la structure de bande dans un potentiel fixé |
| optdriver | Quand <code>==3</code> and 4 fera des calculs GW (théorie des perturbations à plusieurs corps) |
| rfelfd | Quand <code>/= 0</code> fera le calcul de la réponse au champ électrique |
| rfphon | Quand <code>= 1</code> fera le calcul de la réponse au déplacements atomiques |



Variables d'entrée les plus importantes

Spécification de la convergence numérique du calcul

Remarques

Tchapet Njafa

| Variable | Description |
|---------------|--|
| nstep | Nombre maximal de cycles auto-cohérents (de l'ordre de 20) |
| tolvrs | Tolérance sur la convergence auto-cohérente |
| ntime | Nombre de dynamiques moléculaires ou d'étapes de relaxation |
| tolmxf | Tolérance de force pour la relaxation structurelle en Hartree/Bohr |



Remarques

Tchapet Njafa



9.6.2

<https://docs.abinit.org>