

Variables d'entrée basiques de Abinit

Tchapet Njafa

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

janvier 2023



```

1  # H2 molecule in a big box
2  #Definition of the unit cell
3  acell 10 10 10
4  #rprim 1 0 0 0 1 0 0 0 1
5  #Definition of the atom types and pseudopotentials
6  ntypat 1
7  znucl 1
8  pp_dirpath "$ABI_PSPDIR"
9  pseudos "Pseudodojo_nc_sr_04_pw_standard_psp8/H.psp8"
10 #Definition of the atoms
11 natom 2
12 typat 1 1
13 xcart
14     -0.7 0.0 0.0
15     0.7 0.0 0.0
16 #Numerical parameters of the calculation : planewave basis set and k point grid
17 ecut 10.0
18 kptopt 0
19 nkpt 1
20
21 #Parameters for the SCF procedure
22 nstep 10
23 toldfe 1.0d-6
24 diemac 2.0

```

»»»» Caractéristique(s) : EVOLVING, LENGTH

acell
CELL lattice vector scalling

Type de variable : réelle ;
Valeur par défaut : 3*1

Dimensions : (3) ;

- Donne les échelles de longueur par lesquelles les translations primitives sans dimension (**rprim**) doivent être multipliées
- Unité par défaut : Bohr (1 Bohr = 0.529 177 210 8Å)

●●●●● Caractéristique(s) : EVOLVING

rprim

Real space **PRIM**itive translations

Type de variable : réelle; **Dimensions :** (3, 3);
Valeur par défaut : $[[1, 0, 0], [0, 1, 0], [0, 0, 1]]$

Donne les trois translations primitives sans dimension dans l'espace réel, qui doivent être redimensionnées par **acell** et **scalecart**.

```
1 rprim 1 2 3 4 5 6 7 8 9
```

```
1  rprim  1 2 3
2         4 5 6
3         7 8 9
```

»»»» Caractéristique(s) : NO_MULTI

ntypat

Number of **TY**pes of **AT**oms

Type de variable : entière ;

Dimensions : scalaire ;

Valeur par défaut : 1

- Donne le nombre de types d'atomes dans une cellule unitaire. Dans le code actuel (H₂) ntypat est 1
- Le code essaye de lire le même nombre dans les fichiers de pseudopotentiels. Le premier pseudopotentiel est assigné au numéro de type 1, ainsi de suite

Fichiers de pseudopotentiels

- Site pseudodojo : <http://www.pseudo-dojo.org/>
- Généré avec la fonction d'échange-corrélation LDA (PW=Perdew-Wang, ixc=-1012)

»»»» Caractéristique(s) : NO_MULTI

znuc1

charge **-Z-** of the **NUCLEus**

Type de variable : réelle ;

Dimensions : (**np****sp**) ;

Valeur par défaut : aucune

Donne la charge nucléaire de chaque type de pseudopotentiel, en ordre. Si znuc1 n'est pas en accord avec la charge nucléaire, tel que donné dans les fichiers de pseudopotentiels, le programme écrit un message d'erreur et s'arrête.

»»»» Caractéristique(s) : –

natom

Number of **ATOMs**

Type de variable : entière ;

Dimensions : scalaire ;

Valeur par défaut : 1

Donne le nombre total d'atomes dans une cellule unitaire. La valeur par défaut est 1, mais nous devons inclure cette valeur explicitement.

»»»» Caractéristique(s) : –

typat
TYPE of **AT**oms

Type de variable : entière; **Dimensions** : [3,**natrd**]
si **natrd** < **natom**, [3,**natom**] sinon;
Valeur **par** **défaut** :
1 **if** **natom** == 1, aucune sinon

- Tableau donnant un label entier à chaque atome dans une cellule unitaire pour symboliser leurs types
- Les différents types d'atomes sont construits à partir de fichiers de pseudopotentiels
- Il y a au plus **ntypat** types d'atomes

Exemple 7.1

BaTiO₃

Atome	Ba	Ti	O
Pseudopotiel	1	2	3

```
1 typat 1 2 3 3 3
```


»»»» Caractéristique(s) : EVOLVING, LENGTH

xcart

vectors **X** of atom position in
CARTesian coordinates

Type de variable : réelle ;

(3,**min**(**natom**,**natrd**);

Valeur par défaut : aucune

Dimensions :

- Donne les coordonnées cartésiennes des atomes dans les cellules unitaires
- Unité par défaut : Bohr (1 Bohr = 0.529 177 210 8Å)

»»»» Caractéristique(s) : ENERGY

ecut
Energy CUTOFF

Type de variable : réelle ; **Dimensions** : scalaire ;
Valeur par défaut : aucune

- Définit l'énergie cinétique de coupure qui contrôle le nombre d'ondes planes en un k point donné

Les ondes planes permises sont celles pour lesquelles l'énergie cinétique est inférieure à `ecut`

Contrainte sur le vecteur \vec{G} dans l'espace réciproque

$$\frac{1}{2}(2\pi)^2(\vec{k} + \vec{G})^2 < \text{ecut}. \quad (1)$$

- Unité : Ha (par défaut, 1Ha = 27.211 384 5 eV), Ry, eV ou en K
- **Ce seul paramètre peut avoir un impact énorme sur la qualité des calculs**

»»»» Caractéristique(s) : –

kptopt
KPoinT OPTion

Type de variable : entière ; **Dimensions** : scalaire ;
Valeur par défaut : 4 **if** **nspden** == 4, 1 **if** **not**

- Contrôle le paramétrage de la liste des k points
- **Objectif** : **initialiser** les variables d'entrée **kpt**, **kptnrm**, **nkpt** et, pour **iscf** /= 2, **wtk**
- **Valeurs** : 0, 1, 2, 3, 4 et des valeurs négatives

»»»» Caractéristique(s) : –

nkpt
Number of **K**-Points

Type de variable : entière ; **Dimensions** : scalaire ;
Valeur par défaut : 1 **if** kptopt == 0, 0 **if** not

Si différente de zéro, nkpt donne le nombre de k points dans le tableau k point **kpt**.

»»»» Caractéristique(s) : –

nstep

Number of (non-)self-
consistent field **STEPS**

Type de variable : entière ; **Dimensions** : scalaire ;
Valeur par défaut : 30

Donne le nombre maximum de cycles (ou “itérations”) dans une exécution SCF ou non-SCF.

Caractéristique(s) : ENERGY

toldfe

TOLerance on the
DiFference of total **E**nergy

Type de variable : réelle ;

Dimensions : scalaire ;

Valeur par défaut : 0.0

- Paramètre la tolérance des différences absolues de l'énergie totale qui, atteintes deux fois successivement, causeront l'arrêt d'un cycle SCF
- Unité : Ha (par défaut, 1Ha = 27.211 384 5 eV), Ry, eV ou en K
- **Efficace uniquement lorsque les cycle SCF sont terminés (*iscf* > 0)**



9.6.2

<https://docs.abinit.org/variables>