

INTRODUCCIÓN A VASP PARA ANÁLISIS DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

Para uso en el cluster LNS-Knights Landing

Fernando Robles Morales
Judith Percino Zacarías

ISBN: 978-607-525-722-8



9 786075 257228



BUAP

Primera edición 2020
ISBN: 978-607-525-722-8

D.R. © Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

4 sur 104, Col. Centro, Puebla, México. C.P. 72000

Teléfono 01 (222) 2295500

www.buap.mx

Dirección General de Publicaciones

2 norte 1404, Col. Centro, Puebla, México. C.P. 72000

Teléfono 01 (222) 2295500 Ext. 5768

www.publicaciones.buap.mx

Este libro fue sometido a un riguroso proceso de dictaminación a doble ciego, por dos dictaminadores externos a la BUAP.

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

Rector: Alfonso Esparza Ortiz

Secretaría General: Guadalupe Grajales y Porras

Director General de Publicaciones: Hugo Vargas Comsille

INTRODUCCIÓN A VASP PARA ANÁLISIS DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

Para uso en el cluster LNS-Knights Landing

Fernando Robles Morales
Judith Percino Zacarías

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

2 0 2 0

CONTENIDO


Presentación	6
Introducción	8
Uso de VASP en cluster KNL	11
Preparación de moléculas por analizar	11
Uso de CIF2CELL	12
Definir cálculos AB INITIO	14
Edición archivo INCAR	15
Edición archivo KPOINTS	19
Someter trabajo de cálculo DFT en Sistema de Colas Torque	20
Edición script Torque	20
Visualizar resultados en P4VASP	23
Conclusiones	29
Referencias	30

USO DE VASP EN CLUSTER KNL

El software **Vienna Ab Initio Simulation Package** (VASP por sus siglas en inglés) desarrollado en el lenguaje de programación FORTRAN, se utiliza para modelación, para caracterizar materiales mediante métodos Ab Initio. Los sistemas cristalinos que pueden ser modelados con VASP resuelven la ecuación de Schrödinger por medio de teoría de la densidad funcional (DFT) o Hartree-Fock (HF), de esta forma se puede calcular el estado fundamental electrónico de cualquier sistema cristalino.

En este libro se describen los pasos básicos para realizar cálculos Ab Initio utilizando VASP.

PREPARACIÓN DE MOLÉCULAS POR ANALIZAR

Para realizar el cálculo, se necesita de un archivo de cristalografía en formato CIF, es decir con extensión .cif.

USO DE CIF2CELL

En el cluster HPC KNL, se cuenta con el script **cif2vasp.sh**, para convertir el archivo de cristalografía extensión **.cif** en los archivos de entrada para VASP que son los archivos **POSCAR**, **POTCAR**, **INCAR**, **KPOINTS**.

Utilizaremos como ejemplo el compuesto C_8H_5O como se muestra en la **Figura 1**.

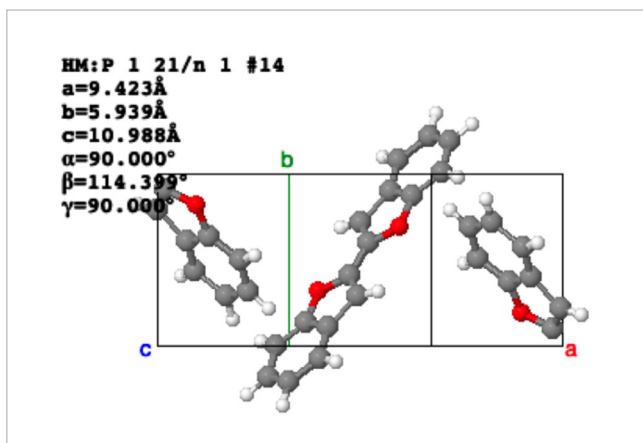



Figura 1.
Cristal C_8H_5O .

Una vez iniciada la sesión en el cluster KNL  en la terminal **>**, para convertir el archivo **.cif** se ejecutan el script como que se muestra a continuación:

```
user@rogueone ~]$cif2vasp.sh C8H50.cif
```