

Do ORCA ao VASP

Por que mudar de pacote, e o que muda quando o sistema vira um cristal

Aula de Estrutura Eletrônica

Ilum — CNPEM



Onde nós estamos



ORCA

o terreno conhecido

- Moléculas isoladas no vácuo
- Bases gaussianas centradas nos átomos
- Geometria em coordenadas cartesianas
- Um único arquivo de entrada (.inp)
- Sem amostragem do espaço recíproco



VASP

o próximo passo

- Sólidos cristalinos, superfícies, interfaces
- Base de ondas planas
- Célula unitária periódica em 3D
- Quatro arquivos de entrada separados
- Amostragem em pontos-k

E se eu quisesse simular um cristal?

Um cristal não é só uma molécula muito grande

Cristal real:

$\approx 10^{23}$ átomos arranjados periodicamente

Tentar tratá-los explicitamente seria absurdo

Mas há uma simetria que podemos explorar:

a estrutura se repete.

10²³

átomos num pedacinho de silício

vs

2

átomos na célula primitiva

A grande virada conceitual

Condições periódicas de contorno (PBC)

Em vez de simular 10^{23} átomos...

simulamos uma célula pequena

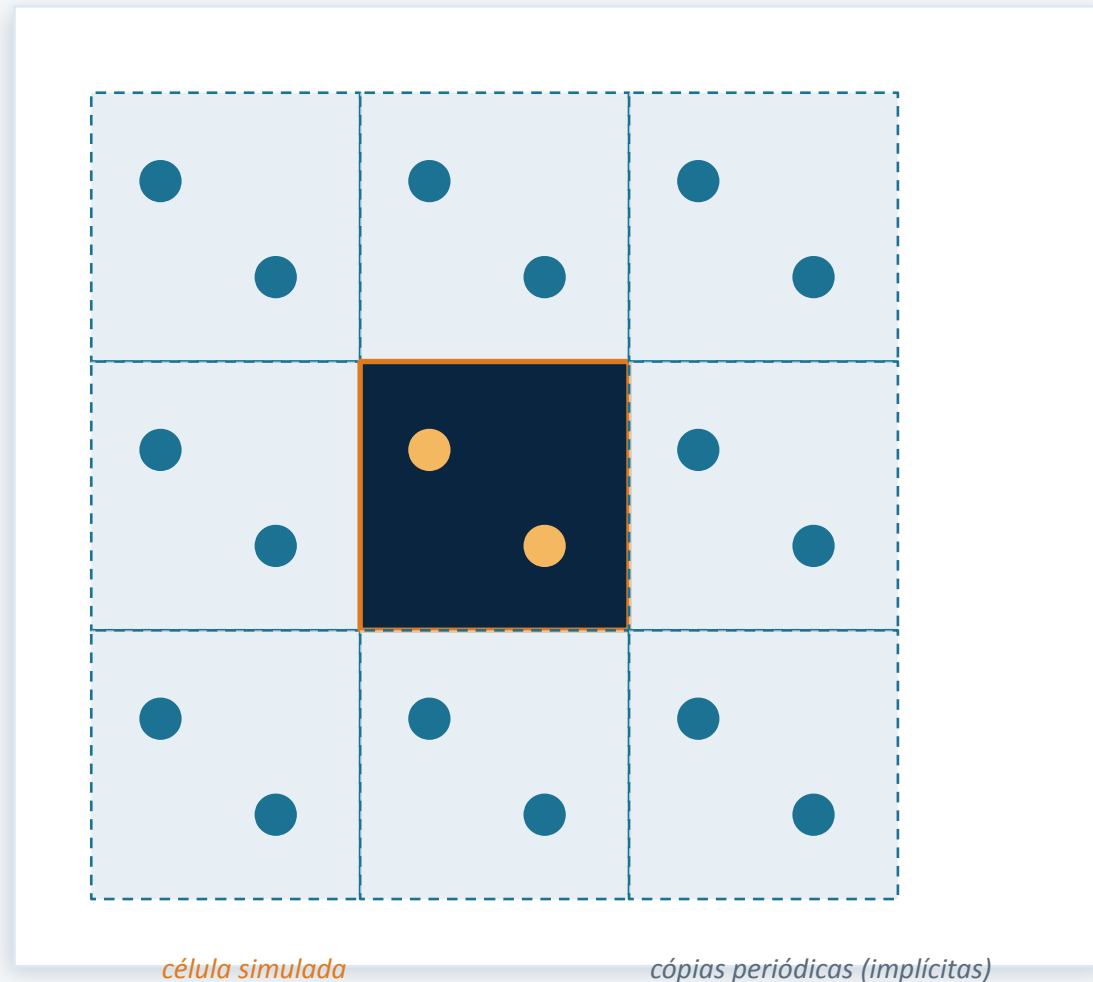
e dizemos ao programa:

“ela se repete infinitamente nas três direções”

Essa decisão

muda absolutamente tudo:

o tipo de base, a sintaxe, os arquivos,
a forma de pensar o problema.



Duas filosofias diferentes

Pensar como químico



Base: funções gaussianas

centradas em cada átomo

A base "segue" os átomos

Eficiente para regiões com densidade concentrada perto dos núcleos

Natural para moléculas no vácuo

Mais funções na base → mais preciso

Pensar como físico do estado sólido



Base: ondas planas

$\exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ — naturalmente periódicas

A base preenche a célula uniformemente

Não está presa a nenhum átomo

Natural para sistemas periódicos

Mais alta a energia de corte → mais preciso

Comparação direta

As diferenças que vocês vão notar imediatamente

Aspecto	ORCA	VASP
Sistemas-alvo	Moléculas isoladas, clusters	Cristais, superfícies, interfaces
Contorno	Não periódico (vácuo)	Periódico (PBC) em 3D
Base	Gaussianas atômicas	Ondas planas + PAW
Parâmetro de qualidade	Tamanho do conjunto de base	ENCUT (energia de corte)
Amostragem	Apenas o ponto Γ	Malha de pontos-k
Elétrons de caroço	All-electron ou ECP	Sempre pseudopotenciais PAW
Arquivo de entrada	Um único .inp	INCAR + POSCAR + KPOINTS + POTCAR

Três conceitos novos para internalizar



Pontos-k

amostrar a zona de Brillouin

Como o sistema é periódico, os estados são rotulados por um vetor k . Em vez de integrar sobre toda a zona, amostramos em pontos discretos.



ENCUT

controlar a qualidade da base

A energia de corte das ondas planas é o equivalente a aumentar o tamanho da base. Mais alto = mais preciso e mais caro.



PAW

pseudopotenciais sempre

Elétrons de caroço são congelados em um potencial efetivo (POTCAR). Só os de valência entram no cálculo explicitamente.

Calma — a física é a mesma

Muito do que vocês já sabem continua valendo



A escolha do funcional

PBE no VASP é a mesma aproximação que PBE no ORCA. As limitações dos GGA e a vantagem dos híbridos transferem direto.



O ciclo SCF

Mesma lógica iterativa: convergir a densidade autoconsistente. Os truques de convergência (mixing, smearing) também aparecem aqui.



As análises

Otimização de geometria, frequências, densidade de estados, estrutura eletrônica — tudo isso existe nos dois pacotes.



As boas práticas

Testar convergência, documentar parâmetros, comparar com experimento, manter os dados reproduzíveis.

Por que aprender VASP agora?

o que essa ferramenta abre para vocês



Novos

sistemas periódicos
antes inacessíveis



Top 1

pacote de DFT
para estado sólido



Padrão

na indústria de
materiais e dispositivos

Semicondutores, baterias, catálise, materiais 2D, supercondutores...

é o ferramental que a comunidade de matéria condensada usa todo dia.

Próximos passos



Vídeo tutorial

a parte técnica detalhada

- Os quatro arquivos de entrada
- Como montar o POTCAR
- Submissão no Heisenberg via SLURM
- Interpretação dos arquivos de saída



Aula prática

o silício bulk, do começo ao fim

- Estrutura diamante, célula primitiva
- Convergência de ENCUT e pontos-k
- Otimização do parâmetro de rede
- Comparação com o experimento