

EK-4 Yeni başlayanlar için kılavuz

Bu bölümde Yüksek Lisans/Doktora çalışmalarını hesaplamalı bilimlerde ve özellikle Linux ortamında VASP paket programını kullanarak yapacak olan öğrenciler için temel bilgilerin verilmesi hedeflenmiştir. Öncelikle ön gereksinimlerden bahsedilecek ve gerekli yazılımların kurulumu anlatılacak. Daha sonra bilinmesi gereken Temel Linux Kullanımı anlatılacak. Son olarak da VASP paket programı için örnek giriş dosyaları ve hesaplama sonuçlarının derlenmesinden bahsedilecek.

Ön gereksinimler

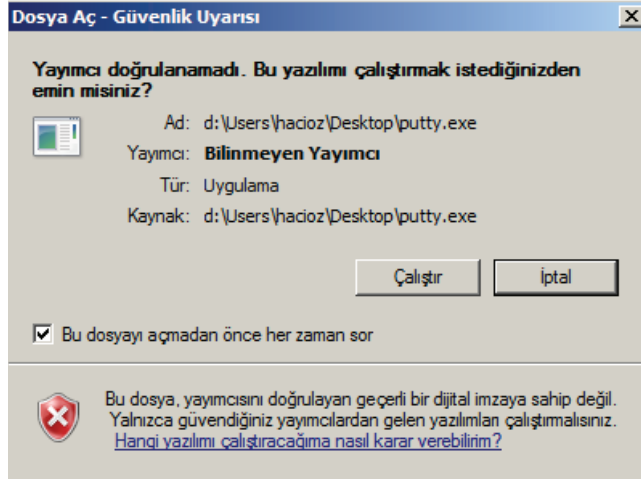
Bu kılavuzu kullanacak arkadaşların masaüstü bilgisayarlarında Windows İşletim Sistemi (Windows XP, Windows Vista, Windows 7 gibi) kurulu ve mevcut kullanıma hazır bir internet bağlantısının olduğunu varsayıyoruz. Bağlantı yapılacak Linux makinede tanımlı bir kullanıcı adı ve şifrenizde olmalıdır. Aşağıdaki örneklerde Linux makine IP'si *10.5.200.1* ve kullanıcı adı olarak da *havvaoz* kullanıldı. Kendinize ait kullanıcı hesap bilgilerinizi Sistem Yöneticisi ile iletişime geçerek alabilirsiniz. Bunları hatırlattıktan sonra masaüstü bilgisayarınızda bulunması gereken programları listeleyelim.

- Putty
- Secure File Transfer Client
 - Hesaplama sonrası kullanılan programlar (VESTA, Vaspview, Ghostview, Ghostscript)

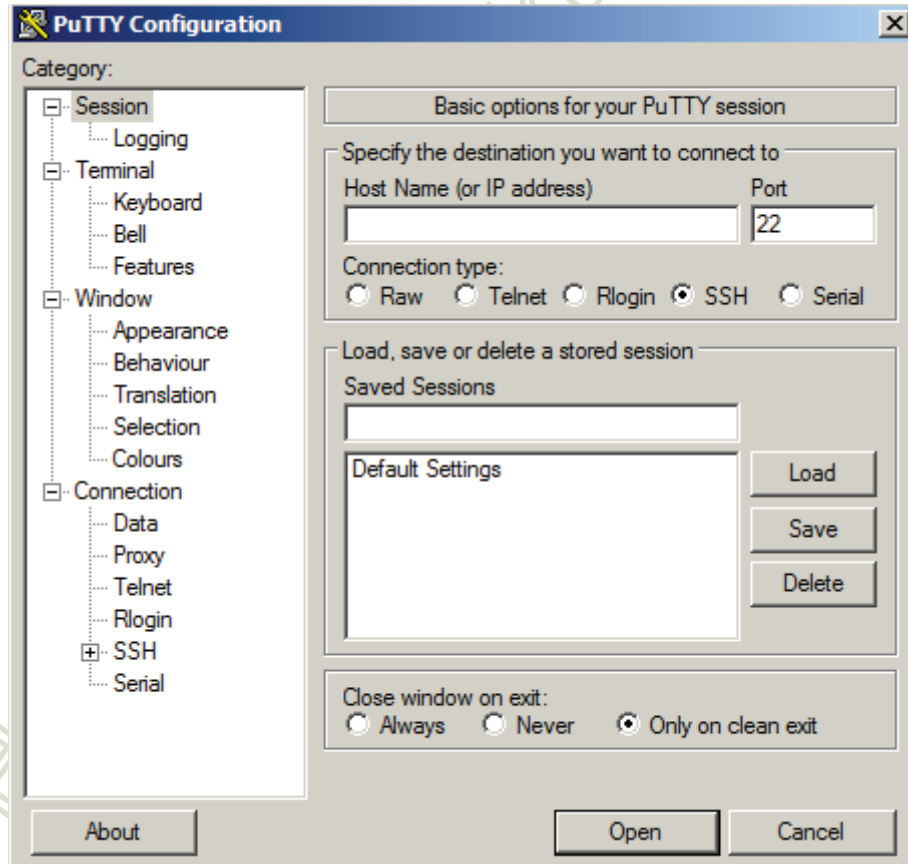
Putty

Bu program yardımı ile uzak makinelere komut satırında bağlanabilirsiniz. Programı direkt olarak <http://the.earth.li/~sgtatham/putty/latest/x86/putty.exe> adresinden indirebileceğiniz gibi Google arama motoruna “Putty Download” anahtar kelimelerini girerek çok rahat indirme sayfasına ulaşabilirsiniz. Program kurulum gerektirmeyen tek dosyadan oluşmaktadır. Windows masaüstüne programı kaydettikten sonra çift tıklayarak çalıştırabilirsiniz. İlk çalıştırdığınızda karşınıza aşağıdaki gibi bir ekran gelecektir.

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

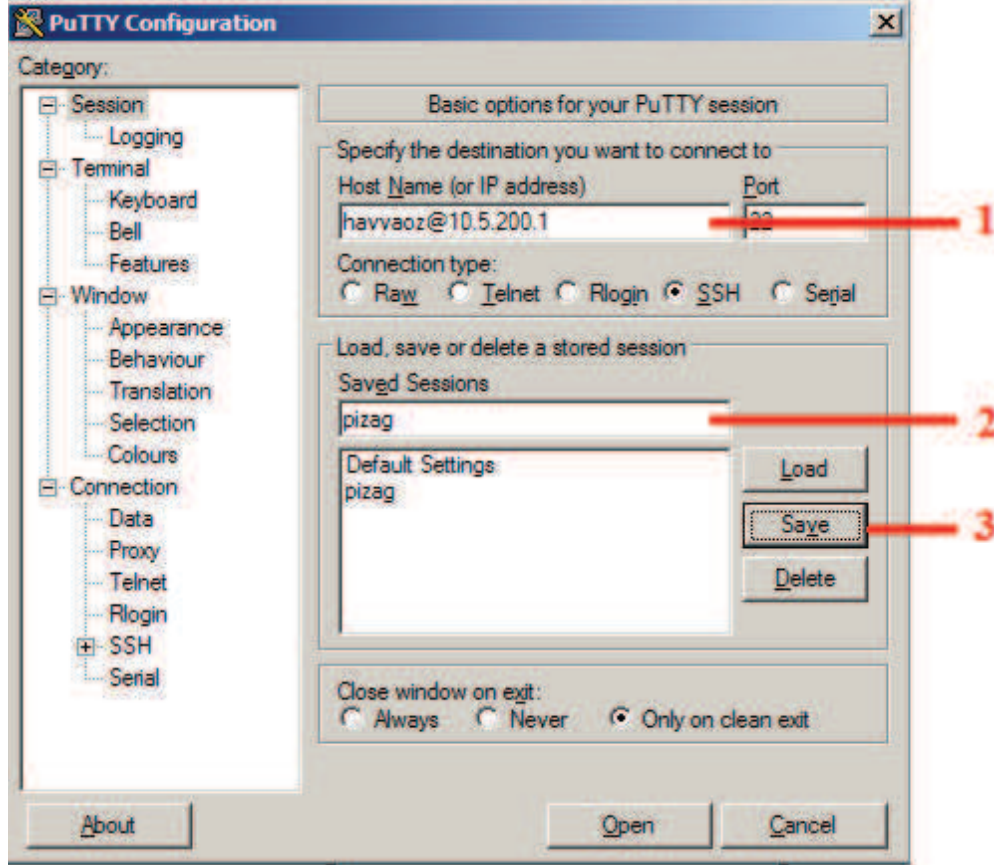


Bu güvenlik uyarısı ekranının tekrar çıkmaması için “Bu dosyayı açmadan önce her zaman sor” çentiğini kaldırmanız gerekmektedir. “Çalıştır” butonunu tıkladığınızda karşınıza aşağıdaki ekran gelir.



Burada bir defaya mahsus *kullanıcıadı@IP* bilgilerinizin aşağıdaki ekranda olduğu gibi girilip bir profil ismi (burada *pizag*) ile kaydetmeniz gerekmektedir.

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz



“Category” menüsünde “Colours” seçilerek “Use system colours” çentiği seçilerek Windows pencerenizin geri plan rengini beyaz yapabilirsiniz. Bu işlemin kalıcı olabilmesi için sırasıyla “Session” tıklanır “pizag” seçildikten sonra “save” tıklanır. Artık Putty kullanıma hazır. Profil ismi “pizag” çift tıklandıktan sonra şifre girilerek Linux komut satırına ulaşabilirsiniz. Şifre girilirken ekranda hiçbir şeyin gözükmemesi normaldir. `[havvaaz@pizag ~]$` komut satırı geldiğinde artık Linux komutlarını çalıştırabilirsiniz.

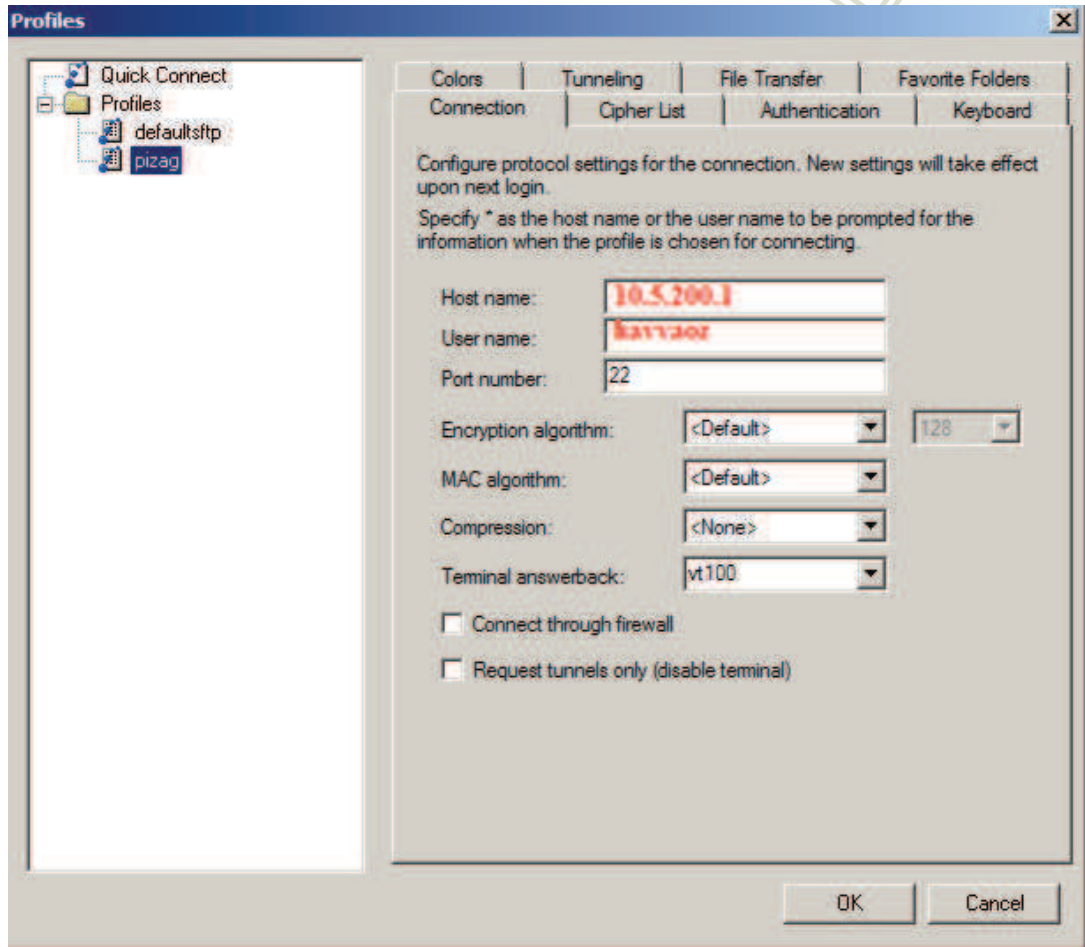
Secure File Transfer Client

Linux makineden Windows masaüstü makinenize dosya transfer etmek için bu programı kullanabilirsiniz. Programı indirmek için aşağıdaki adresi kullanabileceğiniz gibi Google arama motoruna “SSHSecureShellClient-3.2.9.exe” anahtar kelimesini yazarak indirebilirsiniz.

İndirme Linki: <ftp://sol.ccsf.org/pub/TCP/SSH/sshSecureShellClient-3.2.9.exe>

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

Program kurulum gerektirmektedir. Kurulum sonrası *Putty*'de olduğu gibi bir defaya mahsus profil ayarlarının yapılması gerekir. Bunun için “*Profiles-Add Profile...*” komutu verilir ve bir profil ismi girilir (burada *pizag*). Daha sonra “*Profiles-Edit Profiles...*” komutu ile aşağıda görüntüsü olan ekrana ulaşılır.



Host name: “10.5.200.1” ve User name “havvaaz” bilgileri girerek “OK” tıklanır. Bu aşamadan sonra bu yapılanların tekrar yapılmasına gerek yoktur. Artık program açıldıktan sonran *Profiles* dan profil adı (*pizag*) tıklanarak ve şifre girilerek dosya transfer programımız kullanıma hazırdır. Bu programa alternatif olarak “*WinSCP*” adlı programda kullanılabilir.

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

Diğer programlar

VESTA: Üç boyutlu kristal görünümünü, durum yoğunluğunu görselleştirmek için kullanabilirsiniz. http://www.geocities.jp/kmo_mma/crystal/download/VESTA.zip

Vaspview: Yine belli yüzeylerde yük yoğunluğu çizdirilebilen bir diğer program. *Vesta* tercih edilmelidir. *Vesta*'da miller indisleri ile istediğiniz yüzeyi tanımlarken *Vaspview*'de ise ilgilendiğiniz yüzeye karşılık gelen azimuthal ve polar açıları bilmek zorundasınız. <http://vaspview.sourceforge.net/>

Ghostview ve *Ghostsript*: EPS ve PS uzantılı grafik dosyalarını görüntülemek için kullanılır. Eğer grafiklerinizi Linux ortamında *gnuplot* kullanarak çizdirecekseniz bu programlara ihtiyaç duyacaksınız.

Ghostscript : <http://sourceforge.net/projects/ghostscript/files/latest/download>

Ghostview : <http://pages.cs.wisc.edu/~ghost/gsview/download/gsv50w32.exe>

Bunların dışında ayrıca *VMD*, *XCrysden* gibi programları da görselleştirme amaçlı kullanabilirsiniz.

Temel Linux Kullanımı

Linux işletim sisteminde kullanıcı dosyaları */home/kullaniciadi* klasöründe tutulur ve bu kullanıcı ana dizini EV (HOME) olarak anılır. Ayrıca *~* ve *\$HOME* gibi kısaltmalar ile temsil edilir. Dosya ve klasörlerin adreslenmesinde tek nokta (.) bulunduğunuz klasörü, iki nokta (..) ise bir üst klasörü temsil eder. Tüm örneklerimizde */home/havvaaz* ev dizini esas alınmıştır.

Linux'de pipe (|, boru) bir komutun çıktısını bir diğer komuta yönlendirmeye yarar. Örneğin: *ls -lrt | tail -1* gibi. Bir diğer söylenmesi gereken hususta linux'de tüm komutların çıktıları standart çıktı birimi dediğimiz ekrana

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

yazdırılır. Bir dosyaya yazdırmak istiyorsak yönlendirme (>, >>) işaretlerini kullanabiliriz. Mesela `ls -lrt > list.dat` gibi. Tek yönlendirme kullandığınız zaman daha önce dosya yoksa oluşturur ve içine yazar. Var ise eskisini siler, yeni verileri yazar. Eski verileri kaybetmek istemiyorsak çift yönlendirme kullanmanız gerekir. Mesela `ls -lrt >> list.dat` gibi.

Linux ortamında bilinmesi gereken *en temel komutlar* aşağıda listelenmiştir.

ls : Bulunduğunuz dizindeki dosya/klasörleri listeler. `ls -lrt` parametreleri ile en son değişiklik yapılan dosya en son satırda olacak şekilde ayrıntılı listeleme yapılabilir.

cp : Var olan bir dosyayı diğer bir dosyaya kopyalar. `cp dosyaadi1 dosyaadi2` gibi bulunduğunuz dizindeki bir dosyayı diğer bir dosyaya kopyalayabileceğiniz gibi adresi bilinen bir dosyayı bulunduğunuz dizine veya başka bir dizine kopyalayabilirsiniz:

- `cp ../POSCAR.` (bir üst klasördeki POSCAR dosyasını bulunduğunuz dizine kopyalar)
- `cp /home/havvaaz/MgO/POTCAR /home/havvaaz/MgO/B2/band`
- `cp ../../../../POTCAR band/2/`

cd : Klasör değiştirmek için kullanılır.

- **cd** (hangi klasörde olursanız olun ev dizininize dönersiniz)
- **cd ../** (bir üst klasöre geçiş yapar)
- **cd ~/MgO** (ev dizininizdeki MgO klasörüne geçiş yaparsınız)
- **cd B1** (bulunduğunuz klasördeki B1 klasörüne geçiş için kullanılır)

pwd : Bulunduğunuz klasörün yolunu (path) verir. Ev dizininizin yolu (/home/havvaaz) şeklindedir.

mkdir : Yeni bir klasör oluşturmak için kullanılır.

- **mkdir MgO** (bulunduğunuz dizinde MgO isimli bir klasör oluşturur)

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

- ***mkdir -p MgO/B1/band*** (bulunduğunuz dizindeki *MgO* içinde *B1* içinde *band* adında bir klasör oluşturur. Eğer *MgO* ve *B1* klasörleri yok ise *-p* parametresi kullandığımız için önce onları sonrada *band* klasörünü oluşturur.
- ***mkdir ../optik*** (bir üst klasörde *optik* adında klasör oluşturur)

rm : Dosya veya klasörleri silmek için kullanılır.

- ***rm a.out*** (bulunduğunuz dizindeki *a.out* adlı dosyayı siler)
- ***rm -r B1*** (bulunduğunuz dizindeki *B1* klasörünü siler)
- *-f* parametresi kullanıldığı zaman klasörü veya dosyayı silmek istiyor musunuz gibi uyarı gelmeden silme işlemi yapar. Bu yüzden *-f* parametresini kullanırken dikkat etmek lazım.

mv : Dosya veya klasörü taşımamıza veya yeniden adlandırmamıza yarar.

- ***mv a.out b.out*** (*a.out* dosyasını *b.out* dosyasına taşır, yani dosya adı değişir)
- ***mv B1 B1_yedek*** (*B1* klasörünün adını *B1_yedek* şeklinde değiştirir)
- ***mv B1 ../..*** (*B1* klasörü iki üst klasöre taşınır)

cat : Metin dosyalarının görüntülenmesine yarar.

- ***cat a.out*** (bulunduğunuz dizindeki *a.out* dosyasını görüntüler)
- ***cat a.out | more*** (dosyayı sayfa sayfa ekrana getirir)

less : *cat* ile aynı fonksiyona sahiptir ama “*cat a.out | more*” gibi davranır.

Aşağıda verilen *ek komutlar* ile işlerinizi daha hızlandırabilirsiniz.

tail* ve *head : Metin dosyalarının en son satırının veya ilk 10 satırının görüntülenmesini sağlar. Geçerli olarak 10 satırdır ama değiştirilebilir. Her iki komut beraber kullanılarak dosyada istediğiniz satır veya satırları yazdırabilirsiniz.

- ***tail a.out*** (*a.out* dosyasının son 10 satırını görüntüler)

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

- **head a.out** (a.out dosyasının ilk 10 satırını görüntüler)
- **tail -2 a.out** (a.out dosyasının son 2 satırını görüntüler)
- **head -2 a.out** (a.out dosyasının ilk 2 satırını görüntüler)
- **tail -2 a.out | head -1** (dosyanın sondan 2. satırını yazdırır)
- **head -2 a.out | tail -1** (dosyanın baştan 2. satırını yazdırır)

grep : Metin dosyaları içinde kelime veya kelime dizinlerini aramamızı ve sadece aranan kritere uyan satırları görüntülememizi sağlar.

- **grep E0 a.out** (a.out dosyasında E0 geçen satırları ekrana yazdırır)
- **grep "volume of cell :" OUTCAR** ("volume of cell :" dizininin olduğu satırları görüntüler).

bc -l : Komut satırında kullanabileceğiniz hesap makinesi

- +, -, *, / dört işlem operatörleri
- ^ üs alma (sadece tam sayı üsleri alır)
- s(x), c(x) sin ve cos fonksiyonları. X değerleri radyan cinsinden.
- e(x) e^x
- sqrt(x) x değerinin karekökünü bulur.
- <, >, == mantıksal sınama (2<1 sonucu 0, 2>1 sonucu 1 verir)

awk : Satır ve sütun temelli çalışan gelişmiş bir programdır. Birçok işlemi basitleştirebilir, gelişmiş scriptler yazmak için kullanılabilir.

- **awk '\$4=="E0"' {print \$5}' OSZICAR** (OSZICAR dosyasında 4. Sütunu "E0=" olan satırların 5. Sütunlarını ekrana yazdırır.

sort : Sayıları sıralamamıza yarar. Genelde bir önceki komutun ürettiği sayıları işlemekte kullanışlıdır. Diyelim ki *band.dat* dosyasında 10 sütunluk bir data var ve 10. sütun enerjisi en yüksek olan fonon dalı. Fonon frekansının maksimum değerini bulmak için awk ile son sütunu sort komutuna yönlendirip sıralayabiliriz.

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

- `awk '{print $10}' band.dat | sort -nr | tail -1`

seq : Sıralı sayı dizileri üretmek için kullanılır. Formatı *seq başlangıç_değeri, artış_miktarı, son_değer* şeklindedir.

- `seq 1 1 20` (1'den 20'ye kadar tam sayıları üretir)
- `seq 0 0.1 20` (0'den 20'ye kadar 0.1 artırarak sayılar üretir)

Bu komut ve programlara ek olarak veri işlemede kullanılan birçok program vardır. Bunların bazıları: *python, sed, perl*

Not 1: Yukarıda anlattığımız komutları alias komutu ile kısaltarak işinizi daha da kolaylaştırabilirsiniz. Mesela *alias ll='ls -lrt'* gibi.

Not 2: Linux işletim sisteminde çalışmaya yeni başlayanlar için metin tabanlı dosyaları işlemek için en basit programlardan biride “*nano*” dur. Biz genelde “*vi*” editörünü kullandık. Aşağıdaki internet sitelerinden bu editörlerle ilgili detaylı bilgi alınabilir.

vi editörü kullanım kılavuzu: <http://www.belgeler.org/lis/archive-tlkg-lis-7.2.html>

vi ve *nano* editörü kullanım kılavuzu: <http://www.bidb.itu.edu.tr/?d=867>

VASP Paket Programı

Vasp temel olarak 4 adet input dosyası kullanır. Bunlar aşağıda tanımlanmıştır.

POSCAR

Bu dosya örgü geometrisini ve atomik koordinatları içerir.

Cubic BN	→ Açıklama Satırı
3.60	→ Çarpan (Örgü parametresi)
0.0 0.5 0.5	→ Birim hücreyi tanımlayan Örgü vektörleridir.
0.5 0.0 0.5	
0.5 0.5 0.0	
1 1	→ Her bir elementten kaç tane olduğu
Direct	→ D (direk) ve C (Kartezyen) koordinatlar
0.00 0.00 0.00	→ 1. atomun koordinatı
0.25 0.25 0.25	→ 2. atomun koordinatı

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

Vasp5 ile birlikte örgü vektörleri ile türlerin atom sayıları arasına bir satır daha eklenerek bu kısma elementlerin adları da eklenmeye başlandı. Aşağıdaki gibi...

```
Cubic BN
3.60
0.0 0.5 0.5
0.5 0.0 0.5
0.5 0.5 0.0
B N
1 1
Direct
0.00 0.00 0.00
0.25 0.25 0.25
```

Eğer 2. satırdaki değer negatif ise Vasp girilen değeri hücrenin hacmi olarak algılar ve örgü parametresini girilen örgü vektörleri yardımıyla hesaplar.

Burada dikkat edilmesi gereken en önemli husus verilen atom sayıları kadar koordinatları içeren satırı "Direct" satırından sonra eklemektir. Enerji minimizasyonundan sonra örgü parametrelerini hesaplamak için ek hesap yapmamak adına 2. Satırdaki çarpanı örgü vektörlerine yansıtmak daha pratikdir. Aşağıda verilen örnekte olduğu gibi:

```
Cubic BN
1.00
0.0 1.8 1.8
1.8 0.0 1.8
1.8 1.8 0.0
B N
1 1
Direct
0.00 0.00 0.00
0.25 0.25 0.25
```

POSCAR oluşturulduktan sonra doğruluğunu kontrol etmek gerekir. Bunun için kullanabileceğimiz iki program mevcuttur: *fropho* ve *phonopy*.

1. `echo "find_symmetry" | fropho`

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

```
fropho 1.3.4
***** Parse INPHON *****
Start symmetry check.
***** Parse POSCAR *****
atom_name: B N
***** Check input cell symmetry *****
Space group: No. 216, F-43m (Td^2)
```

2. *phonopy --symmetry | head -2*

```
phonopy_version: 1.4
space_group_type: F-43m (216)
```

POSCAR dosyamızı tanımladıktan ve doğrulamayı öğrendikten sonra, bu dosyayı değişik yapılar için nasıl oluşturabileceğimizden bahsedelim.

1. En pratik metot “Navy Crystal Lattice Structure, <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/>” sitesinden yararlanmaktır. “Prototype” bağlantısından gelen tabloda aradığınız prototipi bularak sonra ilk sütundaki prototip ismi tıklanır. Gelen sayfada “download the coordinates of the atoms in these pictures” bağlantısı açıldıktan sonra tüm metin seçilerek kopyalanır.

```
18
ZnS(Zincblende)&Fm(-3)m-T_d^2 #216&cF8&B3&Wyckoffvp108-110
Zn 5.40930000 0.00000000 0.00000000
Zn 0.00000000 0.00000000 0.00000000
S 1.35232500 1.35232500 1.35232500
Zn 2.70465000 2.70465000 0.00000000
S 4.05697500 4.05697500 1.35232500
Zn 5.40930000 5.40930000 0.00000000
Zn 2.70465000 0.00000000 2.70465000
S 4.05697500 1.35232500 4.05697500
Zn 5.40930000 2.70465000 2.70465000
Zn 5.40930000 0.00000000 5.40930000
Zn 0.00000000 5.40930000 0.00000000
Zn 0.00000000 2.70465000 2.70465000
S 1.35232500 4.05697500 4.05697500
Zn 2.70465000 5.40930000 2.70465000
Zn 0.00000000 0.00000000 5.40930000
Zn 2.70465000 2.70465000 5.40930000
Zn 5.40930000 5.40930000 5.40930000
Zn 0.00000000 5.40930000 5.40930000
*****
Primitive vectors
a(1) = 0.00000000 2.70465000 2.70465000
a(2) = 2.70465000 0.00000000 2.70465000
a(3) = 2.70465000 2.70465000 0.00000000
Volume = 39.56974149
Reciprocal vectors
b(1) = -0.18486680 0.18486680 0.18486680
b(2) = 0.18486680 -0.18486680 0.18486680
b(3) = 0.18486680 0.18486680 -0.18486680
Basis Vectors:
Atom Lattice Coordinates Cartesian Coordinates
Zn 0.00000000 0.00000000 0.00000000 0.00000000 0.00000000 0.00000000
S 0.25000000 0.25000000 0.25000000 1.35232500 1.35232500 1.35232500
```

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

Yukarıdaki siyah ve italik yazan bloklar alınarak geri kalan kısım silinir. Aşağıda gösterildiği gibi 2. Satıra “1.0” çarpanı, 6. Satıra atom sayılar (CsCl (B3) yapı için 1 adet Zn, 1 adet S) ve 7. Satıra da “D” harfi eklenir.

```
ZnS (Zincblende) &Fm(-3)m-T_d^2#216 &cF8&B3&WyckoffvIp108-110
1.0
0.00000000 2.70465000 2.70465000
2.70465000 0.00000000 2.70465000
2.70465000 2.70465000 0.00000000
1 1
D
0.00000000 0.00000000 0.00000000
0.25000000 0.25000000 0.25000000
```

2. Diğer bir yöntem ise “Bilbao Crystallographic Server, <http://www.cryst.ehu.es>” sitesinin online programlarından biri olan “WPASSIGN, <http://www.cryst.ehu.es/cryst/wpassign.html>” yazılımını kullanmaktır. Bu site açıldığında bir örnek input dosyası mevcuttur.

```
# Space Group ITA number
221
# Lattice parameters
5.0 5.0 5.0 90 90 90
# Number of independent atoms in the asymmetric unit
3
# [atom type] [number] [WP] [x] [y] [z]
Ba 1 - 0.0 0.0 0
Ti 2 - 0.5 0.5 0.5
O 3 - 0.5 0.0 0.5
```

Bu input dosyasında # ile başlayan satırlar açıklama satırlarıdır. Sırasıyla

```
221 (Uzay grubu no)
5.0 5.0 5.0 90 90 90 (a, b, c, alfa, beta, gama)
3 (birim hücredeki bağımsız koordinatlı atom sayısı)
# [atom tipi] [no'su] [WP] [x] [y] [z]
Ba 1 - 0.0 0.0 0
Ti 2 - 0.5 0.5 0.5
O 3 - 0.5 0.0 0.5
```

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

şeklinde girilmelidir. “Show” butonu tıklandığında gelen ekranda “Atomic Orbit” olarak isimlendirilen son sütun atomik koordinatlardır. Örgü vektörleri de birinci örnek yardımı ile uzay grubu aynı olan bir prototipten alınabilir.

INCAR

Vasp paket programında hesaplama türünü ve gerekli parametreleri içeren dosyadır. Bu dosyada en sık kullanılan parametreler aşağıda listelenmiştir hepsi büyük harfle yazılmalıdır. # karakterini açıklama yapmak ve parametreyi kapatmak için kullanabilirsiniz.

SYSTEM : İş tanımlanır

```
SYSTEM = Kubik_BN
PREC = H
ICHARG = 2

EDIFF = 1.E-08
EDIFFG = -1.E-06
LREAL = F
LWAVE = F
LCHARG = F
ENCUT=500

IBRION = 2
ISIF = 3
NSW = 50
```

PREC: Low | Medium | High | Normal | Accurate | Single değerlerinden birini alabilir. Hesaplamanın duyarlılığı ile ilgilidir. Enerji minimizasyonu için “High” uygundur.

ICHARG: Yük yoğunluğu davranışını belirler. Bu parametre band yapısı hesaplamalarının 2. aşaması dışında değiştirmeye gerek yoktur. Geçerli değeri kullanılabilir.

EDIFF: Enerji minimizasyonunda her bir öz uyumlu alan teorisi (SCF) iterasyonu içinde (elektronik) enerji yakınsama değerini ifade eder. Son 2 basamak arasındaki toplam enerji değişimi girilen sayı boyutunda ise iterasyon tamamlanır. Teorik çalışmalarda toplam enerjideki duyarlılığın 1 meV olması yeterlidir (EDIFF= 1.E-03). Ama simetriye göre bu değeri daha düşük almak hesaplamaların hassasiyeti açısından önemlidir. Kübik yapılarda (1.E-08), hekzagonal, ortorombik, trigonal ve rombohedral yapılarda (1.E-07) ve monoklinik yapılarda (1.E-06) mertebesinde almak uygundur.

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

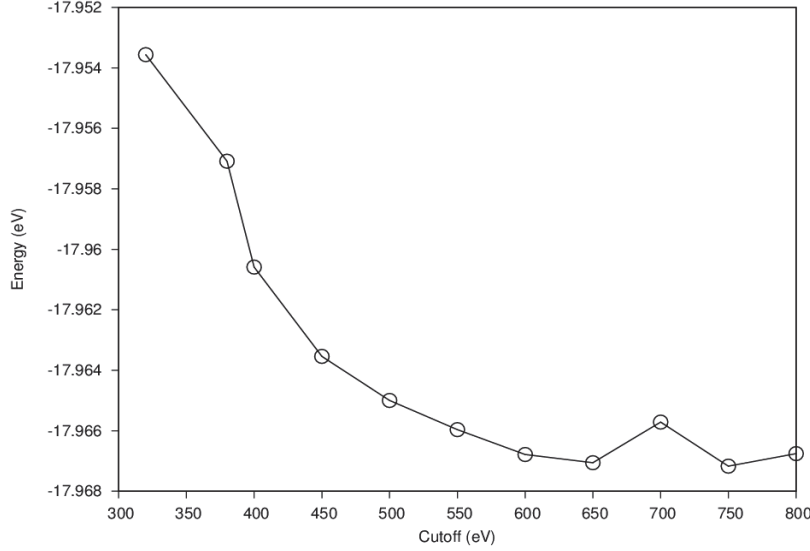
EDIFFG: Bir öncekinin aksine 2 SCF iterasyonu arasındaki enerji değişimindeki yakınsamayı ifade eder. Eğer en son 2 SCF iterasyonu arasındaki enerji farkı verilen değer mertebesinde ise enerji minimizasyonu sonlandırılır. Eğer bu parametreye negatif değer verilirse kuvvetteki yakınsamayı ifade eder ve sistemdeki tüm kuvvetler verilen değerden küçük oluncaya kadar enerji minimizasyonu devam eder. Biz çalışmalarımızın tamamında bu değeri negatif ve EDIFF ile verilen değer 100 katı olarak aldık.

LREAL : Auto / True / False değerlerini alır. True gerçek uzayda, False ise ters uzay manasına gelir. Auto'da ise program kendisi belirler. Hücrede çok atom var veya süper hücre ise T, diğer durumlarda F kabul eder.

LWAVE ve *LCHARG*: True ve False değerlerini alır. True ise orbitaller WAVECAR dosyasına ve yük yoğunluğu CHGCAR ve CHG dosyalarına yazdırılır. F ise yazılmaz. Bazı sistemler için üretilen WAVECAR dosyası 10-20 GB boyutlarında olabilmektedir. Bizim çalışmalarda band hesabı dışında CHGCAR dosyasına ihtiyaç duyulmamaktadır. Bu yüzden band hesabı dışındaki tüm hesaplamalarda üç parametre (LREAL, LWAVE ve LCHARG) False olarak alınmıştır.

ENCUT : Kesilim enerjisi değeridir. Herhangi bir değer atamadığınızda POTCAR dosyasında bulunan en yüksek değeri alır. Her bir atom için potansiyel üretilirken kullanılan kesilim enerjisi değeri POTCAR dosyasında ENMAX parametresinde verilmiştir. Hesaplamaları $PREC = H$ ile yapıyorsanız en yüksek geçerli değer 1,25 ile çarpılarak ENCUT değeri bulunur.

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz



Uygun olan ise en yüksek geçerli değerden başlayarak değişik ENCUT değerleri için enerji minimizasyonu yapmak ve elde edilen grafikte enerji farkının 1 meV dan az olanı almaktır. Yukarıdaki grafikte verilen sonuçlara göre ENCUT 550-650 arası alınabilir. Alabileceğiniz en düşük değeri almak hesaplama zamanını kısaltır.

IBRION : -1 | 0 | 1 | 2 | 3 | 5 | 6 | 7 | 8 değerlerinden birini alır. İyonların hangi algoritmaya göre yer değiştirileceği belirlenir. Moleküler dinamik hesaplamalarında (0), RMM-DIIS algoritması (1), konjugate gradyant algoritması (2), Damped moleküler dinamik (3) değeri ile belirlenir. 5 ve 6 sonlu yerdeğiştirme (finite difference), 7 ve 8 ise Yoğunluk Fonksiyoneli pertürbasyon teorisi (DFPT) için kullanılır. Bu çalışmalarda enerji minimizasyonunda $IBRION = 2$ (CG), elastik sabitleri hesabında $IBRION = 6$ kullanıldı. Fonon hesaplamaları için ise $IBRION = 8$ kullanmak mümkündür.

ISIF ve **NSW** : ISIF Enerji minimizasyonu sırasında izin verilen serbestlik derecesini (iyon koordinatları, hücre hacmi, hücre şekli) ifade eder. Aşağıdaki tabloda aldığı değerlere göre davranışı listelenmiştir.

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

ISIF	Kuvveti hesapla	stress tensorünü hesapla	İyonların koordinatlarını değiştir	Hücre şeklini değiştir	Hücre hacmini değiştir
0	Evet	Hayır	Evet	hayır	hayır
1	Evet	sadece izle	Evet	hayır	hayır
2	Evet	Evet	Evet	hayır	hayır
3	Evet	Evet	Evet	evet	evet
4	Evet	Evet	Evet	evet	hayır
5	Evet	Evet	hayır	evet	hayır
6	Evet	Evet	hayır	evet	evet
7	Evet	Evet	hayır	hayır	evet

En genel optimizasyon metodu ISIF= 3 tür. Bu değeri kullandığımızda bile Vasp verilen geometri ve atomik koordinatları tanıdığından değişmemesi gerekenleri sabit tutar. Bu da hesaplamalarda büyük pratiklik sağlar. NSW ise enerji minimizasyonu sırasında maksimum SCF sayısını belirtir. Optimizasyon aşamasında iş iki durumda sonlandırılır: i) Verilen enerji ve kuvvet değerlerine ulaşılması veya ii) verilen maksimum NSW değerine ulaşılması. 50-100 gibi değerler uygundur. Band ve optik hesaplamalarında NSW =1 alınır.

POTCAR

Hesaplamalarda kullanılan her bir atom çeşidi için kullanılan pseudo-potansiyellerin tutulduğu dosyadır. Oluşturulurken dikkat edilmesi gereken birkaç husus vardır.

- Tanımlanan birim hücrede kaç çeşit atom varsa POSCAR dosyasındaki sırasına göre hepsi POTCAR dosyasında aşağıda verilen örnekteki gibi birleştirilmelidir.

Kübik BN için:

```
cat /share/apps/ptpaw_PBE/B/POTCAR /share/apps/ptpaw_PBE/N/POTCAR > POTCAR
```

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

- ii. Tüm potansiyeller aynı XC (LDA, GGA, PBE) tipinden seçilmeli. Yukarıda tüm potansiyeller PBE klasörlerinden alınmıştır.
- iii. Vasp kullanım kılavuzunda hangi elementler için kaç tane potansiyel türetildiği ve bunların hangi durumlarda kullanılması gerektiği detaylı olarak anlatılmaktadır. Örneğin lantanit elementlerin oluşturduğu bileşiklerde 3 değerlikli potansiyeller (XX_3) kullanılırsa magnetik özellikler doğru tahmin edilememektedir. Magnetik özellik çalışmak için standart potansiyelleri kullanmak gerekir. Detaylı bilgi

http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/Pseudopotentials_supplied_with_VASP_package.html

sitesinde mevcuttur.

KPOINTS

Hesaplamalar için gerekli k-noktalarının üretme metodunu belirler. Genel formatı

Automatic mesh	
0	! number of k-points = 0 ->automatic generation scheme
G	! generate a Gamma centered grid
4 4 4	! subdivisions N_1, N_2 and N_3 along recipr. l. vectors
0. 0. 0.	! optional shift of the mesh (s 1, s 2, s 3)

Üçüncü satırdaki *G* harfi gama merkezli k-noktaları üretileceğini ifade eder. Bu satır *M* ise “*Monkhorst-Pack (MP)*” algoritmasına göre k-noktaları üretilir. K-noktası sayısı çok fazla olursa hesaplamalar çok uzun sürer, çok az olur ise hassasiyet azalır. Optimum k-noktası sayısı kesilim enerjisinde olduğu gibi farklı değerler için hesaplamalar yapılarak bulunabilir.

Örnek Hesaplama

Bu kısımda kübik BN (Boron Nitrat) bileşiğinin B3 (ZnS) yapıda yapısal, elektronik ve elastik özelliklerini hesaplayacağız. Gerekli çalışma klasörlerimizi

oluşturalım:

mkdir BN
cd BN
mkdir B3
cd B3

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

Gerekli potansiyel dosyamızı oluşturalım.

```
cat /share/apps/potpaw_PBE/B/POTCAR /share/apps/potpaw_PBE/N/POTCAR>POTCAR
```

Bir editörü kullanarak POSCAR, INCAR ve KPOINTS dosyalarımızı oluşturalım.

POSCAR

```
Cubic BN
1.00
0.0 1.8 1.8
1.8 0.0 1.8
1.8 1.8 0.0
B N
1 1
Direct
0.00 0.00 0.00
0.25 0.25 0.25
```

INCAR

```
SYSTEM = Kubik_BN
PREC = H
ICHARG = 2
EDIFF = 1.E-08
EDIFFG = -1.E-06
LREAL = F
LWAVE = F
LCHARG = F
ENCUT=500
IBRION = 2
ISIF = 3
NSW = 50
```

KPOINTS

```
A
0
G
8 8 8
0.0.0.
```

Artık ~/BN/B3 klasöründe POSCAR, POTCAR, KPOINTS, INCAR dosyalarımız hazır. PIZAG paralel sistemine işi göndermek için bir PBS betik dosyasına

```
#!/bin/sh
#PBS -q default
#PBS -N BN_B3
#PBS -l nodes=1:ppn=8
#PBS -V
cd $PBS_O_WORKDIR
mpirun -np 4 vasp6 > a.out
```

ihtiyacımız var. Bu dosyanın genel formu yandaki gibidir.

BN_B3 yazan satır işin adını içeriyor. Bu ismi değiştirerek tüm hesaplamalarınızda bu dosyayı kullanabilirsiniz. Dosya adı olarak “*kuyruk.pbs*” kullanabilirsiniz. İşi kuyruğa

vermek için ise “*qsub kuyruk.pbs*” komutunu kullanabilirsiniz.

PBS komutları

- ✓ *qsub* betikadi : İşi kuyruğa verir
- ✓ *qstat -a* : Kuyruktaki işleri görüntüler
- ✓ *qdel is_id* : Kuyruktaki bir işi sonlandırır.
- ✓ *qstat -q* : Özet bilgi verir.
- ✓ *qstat -u havvaaz* : Sadece *havvaaz* kullanıcısının işlerini listeler

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

İşi çalıştırdıktan sonra sonuç geometri yapısını CONTCAR dosyasında ve toplam enerji değerini de OSIZICAR dosyasından alabilirsiniz. CONTCAR dosyası POSCAR ile aynı yapıdadır ve bundan sonra yapılacak hesaplamalarda bu dosya kullanılmalıdır.

```
cp CONTCAR POSCAR
cat CONTCAR
```

```
Cubic BN
1.0000000000000000
0.0000000000000000 1.8127277365751981 1.8127277365751981
1.8127277365751981 0.0000000000000000 1.8127277365751981
1.8127277365751981 1.8127277365751981 0.0000000000000000
B N
1 1
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
0.2500000000000000 0.2500000000000000 0.2500000000000000
```

Yukarıdan da anlaşıldığı gibi optimize örgü parametremiz $a_0=3.6255$ 'dir. Enerji değerini de

```
grep E0 OSZICAR
```

```
15 F= -.17421638E+02 E0= -.17421665E+02 d E =-.631558E-02
16 F= -.17421638E+02 E0= -.17421665E+02 d E =-.631558E-02
17 F= -.17421638E+02 E0= -.17421665E+02 d E =-.631558E-02
18 F= -.17415322E+02 E0= -.17415348E+02 d E =0.171087E-08
```

Her zaman en son satırdan bir önceki satırda bulunan değeri almak daha sağlıklıdır.

$E_0 = -17.421665$ eV dur.

Elastik özellikler

```
mkdir elastic
cp CONTCAR elastic/POSCAR
cp kuyruk.pbs POTCAR KPOINTS INCAR elastic
cd elastic
nano INCAR
```

INCAR dosyasında $IBRION=2$ yerine $IBRION=6$ yazıp CTRL+X, Yes ile kaydedip çıkarız. *kuyruk.pbs* dosyasında da iş adını *BN_B3_elastic* yapabilirsiniz.

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

```
qsub kuyruk.pbs
qstat -a
tail -f a.out
```

İş bitince

```
tail a.out
DAV: 4 -0.174195654465E+02 0.28288E-07 -0.11950E-04 1568 0.130E-01 0.249E-02
DAV: 5 -0.174195623484E+02 0.30981E-05 -0.12483E-05 1912 0.371E-02 0.181E-03
DAV: 6 -0.174195624554E+02 -0.10696E-06 -0.58790E-07 1640 0.913E-03 0.144E-03
DAV: 7 -0.174195624404E+02 0.15034E-07 -0.29685E-08 1552 0.174E-03 0.248E-04
DAV: 8 -0.174195624413E+02 -0.97640E-09 -0.38728E-09 760 0.639E-04
17 F= -.17419562E+02 E0= -.17419584E+02 d E =0.649998E-04
Finite differences progress:
Degree of freedom: 8/ 8
Displacement: 2/ 2
Total: 16/ 16
```

nano OUTCAR
CTRL+W
TOTAL ELASTIC MODULI

TOTAL ELASTIC MODULI (kBar)						
Direction	XX	YY	ZZ	XY	YZ	ZX
XX	7828.2835	1716.4452	1716.4452	0.0000	0.0000	0.0000
YY	1716.4452	7828.2835	1716.4452	0.0000	0.0000	0.0000
ZZ	1716.4452	1716.4452	7828.2835	0.0000	0.0000	0.0000
XY	0.0000	0.0000	0.0000	4450.2985	0.0000	0.0000
YZ	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	4450.2985	0.0000
ZX	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	4450.2985

Elastik sabitleri $C_{11}=782.8$ GPa, $C_{12}=171.6$ GPa ve $C_{44}=445.0$ GPa şeklindedir.

OUTCAR dosyasındaki sonuçlar *kBar* biriminde olduğundan 10 ile bölünerek *GPa* elde edildi. Elastik sabitlerine bağlı diğer özellikler Bölüm 3’de verilen formüllerle

hesaplanır. Polikristal özellikler:

B	G	E	N	G/B	B/G	θ_D	v_l	v_t	v_m
375.3	383.4	858.0	0.12	1.021	0.978	1893.6	16011	10529	11530

Elastik anizotropi:

A_1	A_2	A_3	A_B	A_G
1.460	1.460	1.460	0	1.721

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

Band Yapısı

```
cd ~/BN
mkdir band
cp CONTCAR band/POSCAR
cp kuyruk.pbs POTCAR KPOINTS INCAR band
cd band
nano INCAR
```

INCAR aşağıdaki şekilde değiştirilmelidir.

```
SYSTEM = Kubik_BN
PREC = H
ICHARG = 2
EDIFF = 1.E-08
EDIFFG = -1.E-06
LREAL = F
LWAVE = F
LCHARG = T
ENCUT=500
IBRION = 2
#ISIF = 3
#NSW = 50
```

```
qsub kuyruk.pbs
#iş bittikten sonra
mkdir 2
cp kuyruk.pbs POSCAR POTCAR INCAR 2/
cp CHGCAR 2/
cd 2/
nano INCAR
```

INCAR ve KPOINTS dosyasını aşağıdaki gibi değiştirin

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

SYSTEM = Kubik_BN	FCC (face-centered cubic) G-X-W-K-G-L-U-W-L-K
PREC = H	32 ! 32 grids
ICHARG = 11	Line-mode
LORBIT = 10	reciprocal
EDIFF = 1.E-08	0.000 0.000 0.000 ! G
EDIFFG = -1.E-06	0.500 0.000 0.500 ! X
LREAL = F	0.500 0.250 0.750 ! W
LWAVE = F	0.500 0.250 0.750 ! W
LCHARG = T	0.375 0.375 0.750 ! K
ENCUT=500	0.375 0.375 0.750 ! K
IBRION = 2	0.000 0.000 0.000 ! G
#ISIF = 3	0.000 0.000 0.000 ! G
#NSW = 50	0.500 0.500 0.500 ! L
	0.500 0.500 0.500 ! L
	0.500 0.500 0.500 ! L
	0.625 0.250 0.625 ! U
	0.625 0.250 0.625 ! U
	0.500 0.250 0.750 ! W
	0.500 0.250 0.750 ! W
	0.500 0.500 0.500 ! L
	0.500 0.500 0.500 ! L
	0.375 0.375 0.750 ! K

Yukarıda Brillouin bölgesi için verilen yüksek simetri noktalarını “Bilbao Crystallographic Server” sitesinin KVEC programını kullanarak oluşturabilirsiniz.

http://www.cryst.ehu.es/cryst/get_kvec.html.

Artık “*qsub kuyruk.pbs*” ile işi kuyruğa verebilirsiniz. İş bittikten sonra PROCAR dosyasında tüm enerji-band, DOS ve parçalı DOS bilgileri mevcuttur. Bu dosyayı aşağıdaki komutlar ile grafik çizdirilebilir hale getirebilirsiniz.

```
split_dos
```

Oluşan DOS0 dosyası toplam DOS, DOS1 POSCAR’daki 1. Atomun, DOS2 ise 2. Atomun yük yoğunluğu bilgilerini içerir. Eğer her bir atomdan birden fazla varsa aşağıdaki komut kullanılarak türlere göre toplamalar bulunur.

```
sum_dos_np 0 1 1
sum_dos_np 0 2 2
sum_dos_np 0 1 2
```

Oluşan DOS.SUM.1.to.1, DOS.SUM.1.to.2 ve DOS.SUM.2.to.2 dosyalarının yapıları polarize olmayan sistemler için aşağıdaki gibidir. Eğer f-elektronları varsa ek olarak bir sütun daha oluşacaktır.

EK-4 (Devam) Yeni başlayanlar için kılavuz

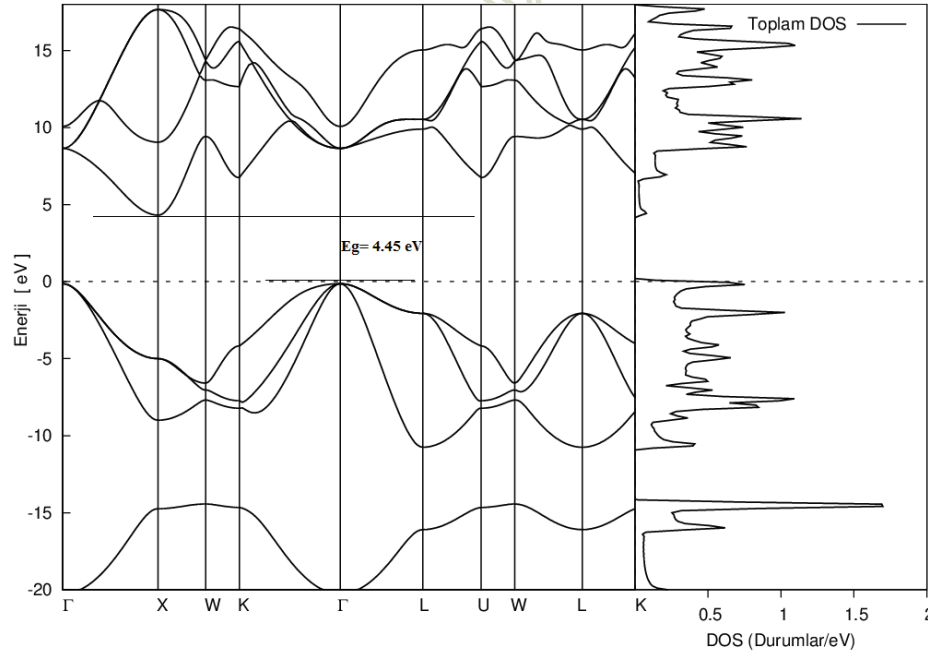
#Enerji	s	p	d	Toplam
-20.87160000	-0.00001326	0.00000000	0.00000000	-0.00001326
-20.73260000	-0.00042830	-0.00000018	0.00000000	-0.00042848
-20.59260000	-0.00425300	-0.00000278	0.00000000	-0.00425578
-20.45260000	-0.00445700	-0.00001249	0.00000000	-0.00446949
-20.31260000	0.06477000	0.00001563	0.00000000	0.06478563
-20.17360000	0.17500000	0.00019940	0.00000000	0.17519940

Bandları çizdirilebilir hale getirmek için ise “*band-procar*” programı kullanılabilir.

```
band-procar
Spin polarized calculation? (no=1,yes=2):
1
Enter the range of energy to plot:
-20 18
```

Oluşan “band.dat” dosyasını bir grafik programı yardımı ile çizdirebilirsiniz.

Aşağıda kübik BN için sonuç band ve DOS eğrilerimiz mevcuttur.



Grafiktende görüldüğü gibi G'dan X noktasına 4.45 eV indirekt band aralığı mevcuttur.