

SIESTA

SIESTA – (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms) – программный пакет для выполнения расчетов электронной структуры молекул и твердых тел и решения задач молекулярной динамики.

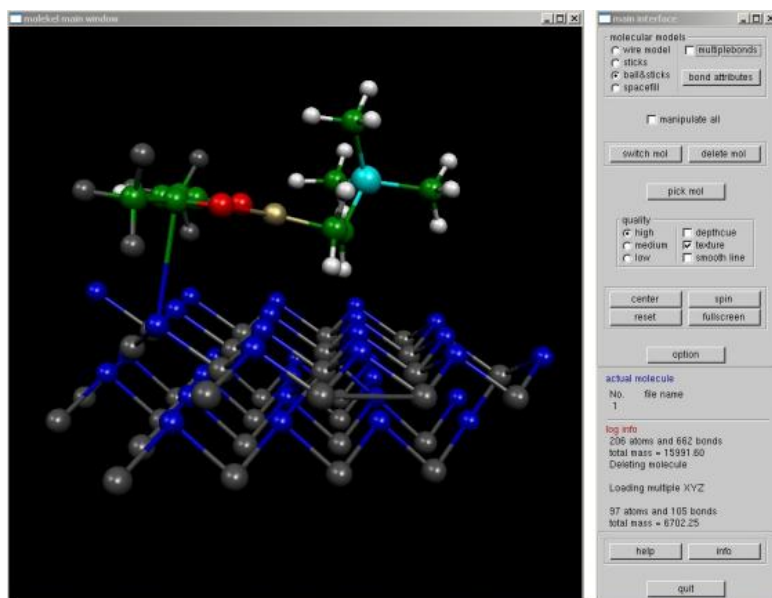


Рисунок 1. Пример визуализации результатов расчетов программного пакета SIESTA (иллюстрация взята из презентации https://personales.unican.es/junquera/javierjunquera_files/Metodos/MD/Verlet.pdf).

Место установки программы:
/opt/lib/siesta-4.1-b4/

Книги и статьи:

- Юрьев А. А., Гельчинский Б. Р., Ватолин Н. А. *Первопринципное молекулярно-динамическое моделирование особенностей температурной зависимости некоторых свойств жидкого висмута.* // Доклады Академии Наук, 2018, т. 479, № 1.
- Созыкин С. А., Бескачко В. П., Вяткин Г. П. *Выбор оптимальных параметров для моделирования атомной и электронной структуры углеродных нанотрубок в пакете SIESTA.* // Вестник ЮУрГУ, 2015, т. 7, № 3.
- Soler J. M., Artacho E., Gale J. D. et al. *The Siesta method for ab initio order-N materials simulation.* // Journal of Physics, 2002, vol. 14.

Сетевые ресурсы:

- SIESTA. <https://departments.icmab.es/leem/siesta>
- SIESTA github. <https://github.com/mf0hka/siesta>
- SIESTA pre- and post-processing tools. <http://www.home.uni-osnabrueck.de/apostnik/download.html>
- Basic introduction to SIESTA. <http://www.psi-k.org/Psik-training/Bristol-September%202009/Emilio/ArtachoBristolSiestaTut09-2.pdf>
- Molecular dynamics in the microcanonical (NVE) ensemble: the Verlet algorithm. https://personales.unican.es/junquera/javierjunquera_files/Metodos/MD/Verlet.pdf
- Molecular dynamics in Siesta. <https://departments.icmab.es/leem/siesta/zcam14/Talks/MVFdezSerra-MD.pdf>

Консультация по вопросам использования:
vtasks@jscc.ru