

Solubilidad del núcleo rocoso de Júpiter y exoplanetas gigantes

Felipe González Cataldo

<fgonzalez@lpmd.cl>

Grupo de Nanomateriales (www.gnm.cl)
Departamento de Física, Facultad de Ciencias
Universidad de Chile

11 de Julio, 2012

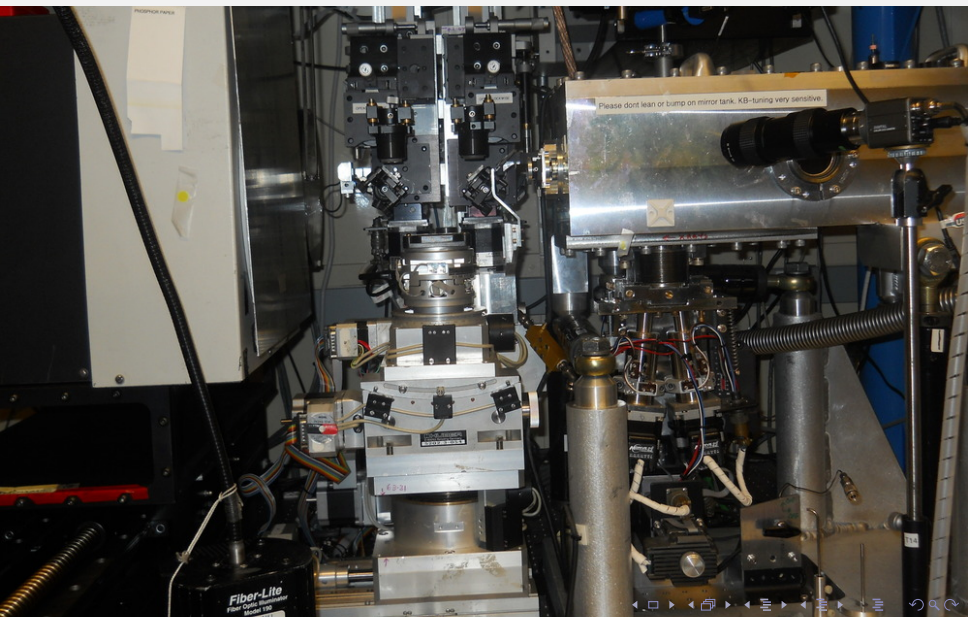
Berkeley



Berkeley



Berkeley

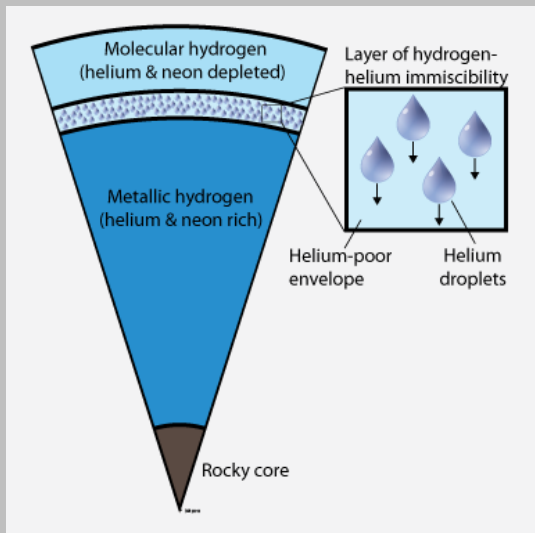


Berkeley

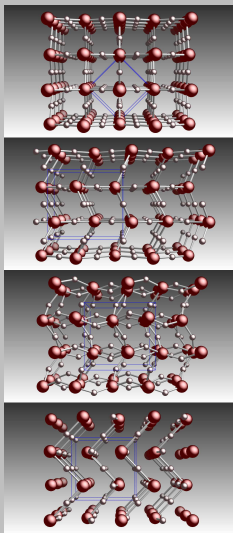


Why is neon missing from Jupiter's atmosphere?

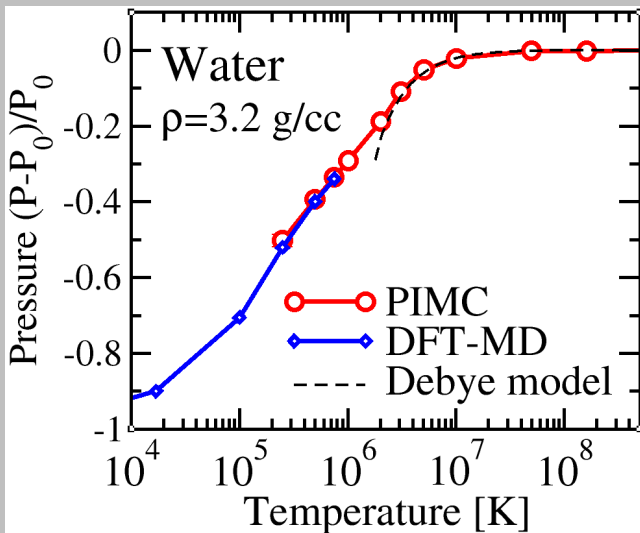
Indirect evidence of helium rain



Simulations predict water ice to become a metal at megabar pressures



New Path Integral Simulation Technique to Study Plasmas of Heavy Elements

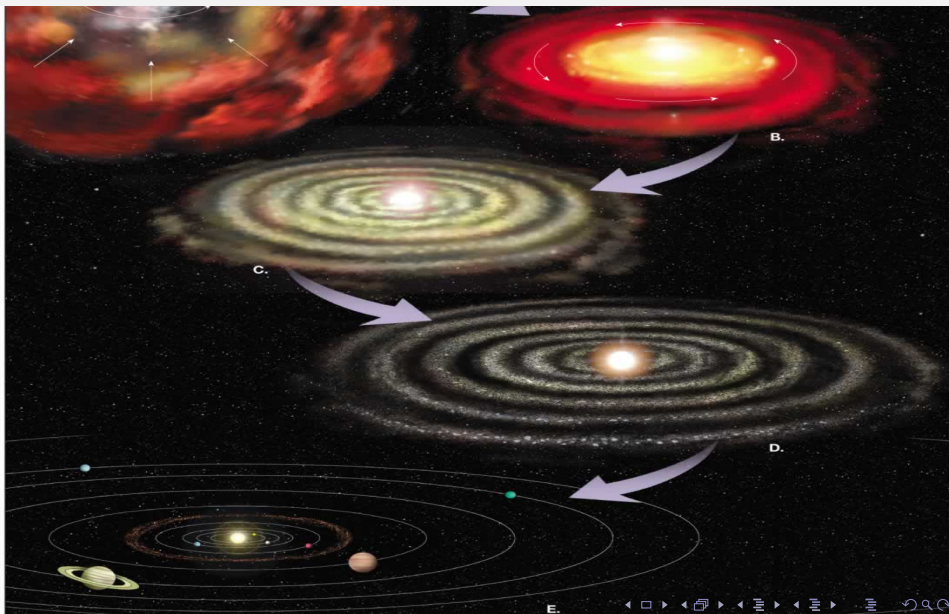


Esquema

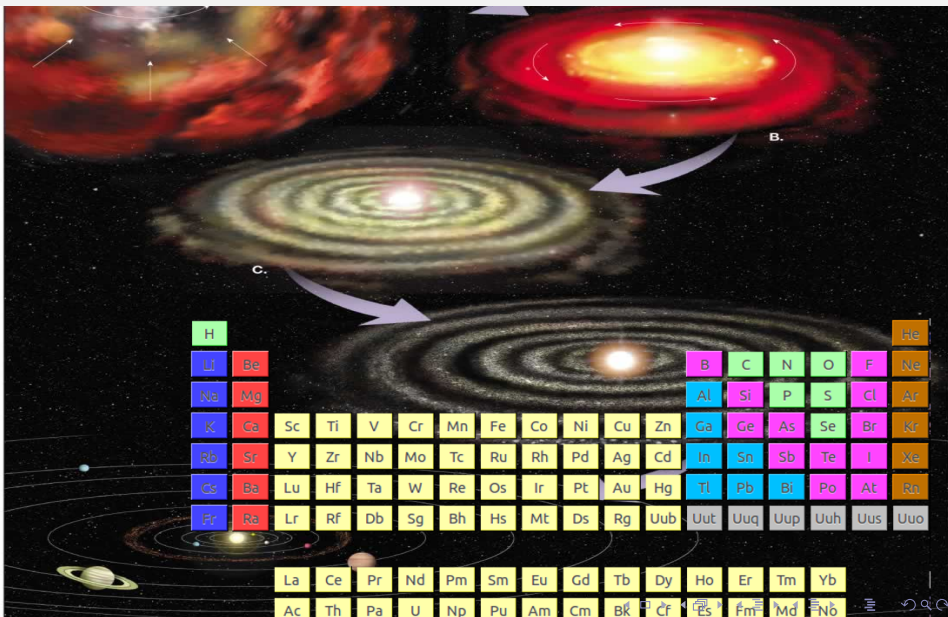
- 1 Introducción.
- 2 Cálculo de energía libre
- 3 Solubilidad.

- 1 **Introducción**
 - **Formación Planetaria**
 - Evidencia Materiales Existentes
 - Planetas Gigantes
- 2 Este estudio
 - ¿Qué sabemos?
 - Elementos representativos
 - Sílice
- 3 Solubilidad
 - Deteminación de Solubilidad
- 4 Integración Termodinámica
 - Cómo calcular F
 - Método
 - DFT
- 5 Resultados y conclusiones
 - Resultados
 - Conclusiones

Formación Planetaria



Formación Planetaria



- 1 **Introducción**
 - Formación Planetaria
 - **Evidencia Materiales Existentes**
 - Planetas Gigantes
- 2 Este estudio
 - ¿Qué sabemos?
 - Elementos representativos
 - Sílice
- 3 Solubilidad
 - Determinación de Solubilidad
- 4 Integración Termodinámica
 - Cómo calcular F
 - Método
 - DFT
- 5 Resultados y conclusiones
 - Resultados
 - Conclusiones

Evidencia Materiales Existentes

The Willamette Meteorite is the largest meteorite ever found in the U.S. and weighed 15.5 tons when it was found in 1902 in Oregon.

The majority of the meteorite can be found at the American Museum of Natural History in New York, although chunks of it have been traded and sold.

(American Museum of Natural History Photo)

Evidencia Materiales Existentes

STARDUST Mission



SiO_2 , MgO , Fe , C , H , He .

- 1 **Introducción**
 - Formación Planetaria
 - Evidencia Materiales Existentes
 - **Planetas Gigantes**

- 2 Este estudio
 - ¿Qué sabemos?
 - Elementos representativos
 - Sílice

- 3 Solubilidad
 - Deteminación de Solubilidad

- 4 Integración Termodinámica
 - Cómo calcular F
 - Método
 - DFT

- 5 Resultados y conclusiones
 - Resultados
 - Conclusiones

Formación de Planetas Gigantes

Modelo de acreción del núcleo:

- Núcleo sólido de roca y hielo acreta gas a su alrededor.
- Más de 200 exoplanetas de masa y composición similar a la de Júpiter.
- Entender la formación planetaria requiere un conocimiento de la naturaleza de los núcleos de planetas gigantes (Fe, Mg, Si, O). ¹
- Mediciones en Júpiter y Saturno (Misión Juno: campo gravitacional).
- Evidencias del núcleo sólido de Júpiter ²

¹ *Instability of a Gaseous Envelope Surrounding a Planetary Core and Formation of Giant Planets*, H. Mizuno, K. Nakazawa, and C. Hayashi, Prog. Theor. Phys. 60, 699 (1978).

² *A Massive Core in Jupiter Predicted From First-Principles Simulations*, B. Militzer, W. B. Hubbard, J. Vorberger, I. Tamblyn, and S.A. Bonev, Astrophysical Journal Letters 688 (2008) L45, astro-ph/08074264.

Formación de Planetas Gigantes

Modelo de acreción del núcleo:

- Núcleo sólido de roca y hielo acreta gas a su alrededor.
- Más de 200 exoplanetas de masa y composición similar a la de Júpiter.
- Entender la formación planetaria requiere un conocimiento de la naturaleza de los núcleos de planetas gigantes (Fe, Mg, Si, O).¹
- Mediciones en Júpiter y Saturno (Misión Juno: campo gravitacional).
- Evidencias del núcleo sólido de Júpiter²

¹ *Instability of a Gaseous Envelope Surrounding a Planetary Core and Formation of Giant Planets*, H. Mizuno, K. Nakazawa, and C. Hayashi, Prog. Theor. Phys. 60, 699 (1978).

² *A Massive Core in Jupiter Predicted From First-Principles Simulations*, B. Militzer, W. B. Hubbard, J. Vorberger, I. Tamblin, and S.A. Bonev, Astrophysical Journal Letters 688 (2008) L45, astro-ph/08074264.

Formación de Planetas Gigantes

Modelo de acreción del núcleo:

- Núcleo sólido de roca y hielo acreta gas a su alrededor.
- Más de 200 exoplanetas de masa y composición similar a la de Júpiter.
- Entender la formación planetaria requiere un conocimiento de la naturaleza de los núcleos de planetas gigantes (Fe, Mg, Si, O). ¹
- Mediciones en Júpiter y Saturno (Misión Juno: campo gravitacional).
- Evidencias del núcleo sólido de Júpiter ²

¹ *Instability of a Gaseous Envelope Surrounding a Planetary Core and Formation of Giant Planets*, H. Mizuno, K. Nakazawa, and C. Hayashi, Prog. Theor. Phys. 60, 699 (1978).

² *A Massive Core in Jupiter Predicted From First-Principles Simulations*, B. Militzer, W. B. Hubbard, J. Vorberger, I. Tamblyn, and S.A. Boney, Astrophysical Journal Letters 688 (2008) L45, astro-ph/08074264.

Formación de Planetas Gigantes

Modelo de acreción del núcleo:

- Núcleo sólido de roca y hielo acreta gas a su alrededor.
- Más de 200 exoplanetas de masa y composición similar a la de Júpiter.
- Entender la formación planetaria requiere un conocimiento de la naturaleza de los núcleos de planetas gigantes (Fe, Mg, Si, O). ¹
- Mediciones en Júpiter y Saturno (Misión Juno: campo gravitacional).
- Evidencias del núcleo sólido de Júpiter ²

¹ *Instability of a Gaseous Envelope Surrounding a Planetary Core and Formation of Giant Planets*, H. Mizuno, K. Nakazawa, and C. Hayashi, Prog. Theor. Phys. 60, 699 (1978).

² *A Massive Core in Jupiter Predicted From First-Principles Simulations*, B. Militzer, W. B. Hubbard, J. Vorberger, I. Tamblyn, and S.A. Boney, Astrophysical Journal Letters 688 (2008) L45, astro-ph/08074264.

Formación de Planetas Gigantes

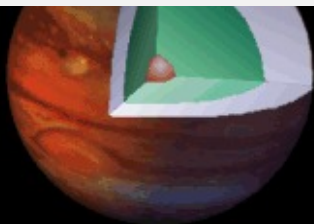
Modelo de acreción del núcleo:

- Núcleo sólido de roca y hielo acreta gas a su alrededor.
- Más de 200 exoplanetas de masa y composición similar a la de Júpiter.
- Entender la formación planetaria requiere un conocimiento de la naturaleza de los núcleos de planetas gigantes (Fe, Mg, Si, O). ¹
- Mediciones en Júpiter y Saturno (Misión Juno: campo gravitacional).
- Evidencias del núcleo sólido de Júpiter ²

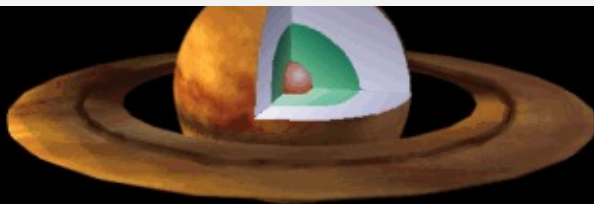
¹ *Instability of a Gaseous Envelope Surrounding a Planetary Core and Formation of Giant Planets*, H. Mizuno, K. Nakazawa, and C. Hayashi, Prog. Theor. Phys. 60, 699 (1978).

² *A Massive Core in Jupiter Predicted From First-Principles Simulations*, B. Militzer, W. B. Hubbard, J. Vorberger, I. Tamblyn, and S.A. Bonev, Astrophysical Journal Letters 688 (2008) L45, astro-ph/08074264.

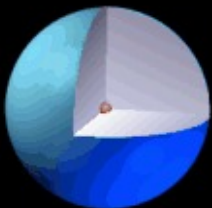
Formación de Planetas Gigantes



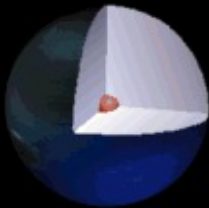
Jupiter



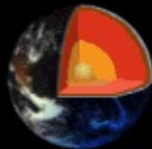
Saturn



Uranus



Neptune



Earth

Cross-section Key

- Lower mantle
- Outer core
- Hydrogen (H₂)
- Metallic hydrogen (H)
- Rock core
- Inner core (solid)

- 1 Introducción
 - Formación Planetaria
 - Evidencia Materiales Existentes
 - Planetas Gigantes
- 2 Este estudio
 - ¿Qué sabemos?
 - Elementos representativos
 - Sílice
- 3 Solubilidad
 - Deteminación de Solubilidad
- 4 Integración Termodinámica
 - Cómo calcular F
 - Método
 - DFT
- 5 Resultados y conclusiones
 - Resultados
 - Conclusiones

¿Qué sabemos?

- Existen modelos de composición interna EOS.
- Existen mediciones in-situ (Galileo Entry Probe, 1995).
- Existen mediciones de los momentos gravitacionales

$$J_n \equiv \frac{1}{MR^n} \int_0^R \int_0^\pi r^n P_n(\cos \theta) \rho(r, \cos \theta) 2\pi r^2 \sin \theta d\theta dr$$

- Enriquecimiento de materiales pesados en atmósferas de planetas gigantes.
- Disociación de materiales: ³



$P \sim 1100 \text{ GPa}$, $T \sim 15000 \text{ K}$.

³K. Umemoto, R. M. Wentzcovitch, and P. B. Allen, Science 311, 983 (2006).

Objetivo

Problema abierto:

- 1 ¿Es el núcleo estable?
- 2 ¿Se puede disolver completa o parcialmente en H metálico?

Consecuencias:

- Enriquecimiento de materiales pesados en atmósferas de planetas gigantes.
- Redistribución de masa puede afectar cambios en el tamaño.

- 1 Introducción
 - Formación Planetaria
 - Evidencia Materiales Existentes
 - Planetas Gigantes

- 2 Este estudio
 - ¿Qué sabemos?
 - **Elementos representativos**
 - Sílice

- 3 Solubilidad
 - Deteminación de Solubilidad

- 4 Integración Termodinámica
 - Cómo calcular F
 - Método
 - DFT

- 5 Resultados y conclusiones
 - Resultados
 - Conclusiones

Elementos representativos

Basados en los resultados de Umemoto et. al., dividimos el problema en dos partes:

- 1 Solubilidad de MgO en H metálico ⁴.
- 2 Solubilidad de SiO₂ en H metálico.

⁴ *Rocky Core Solubility in Jupiter and Giant Exoplanets*, Hugh F. Wilson¹ and Burkhard Militzer, PHYSICAL REVIEW LETTERS, PRL 108, 111101 (2012)

- 1 Introducción
 - Formación Planetaria
 - Evidencia Materiales Existentes
 - Planetas Gigantes

- 2 **Este estudio**
 - ¿Qué sabemos?
 - Elementos representativos
 - **Sílice**

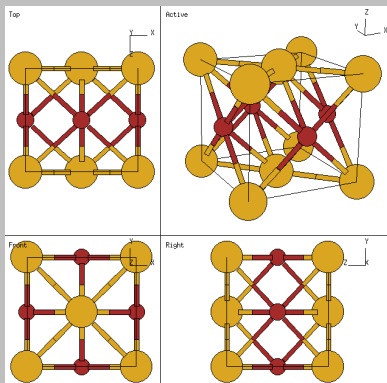
- 3 Solubilidad
 - Deteminación de Solubilidad

- 4 Integración Termodinámica
 - Cómo calcular F
 - Método
 - DFT

- 5 Resultados y conclusiones
 - Resultados
 - Conclusiones

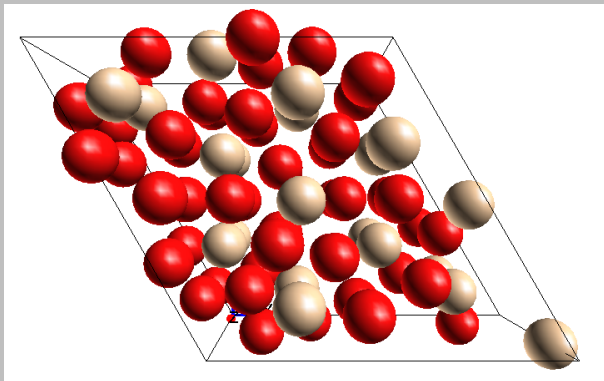
Sílice

- SiO_2 , sílice, dióxido de silicio (cuarzo, stichovita)
- Stichovita: Estructura del rutilo (TiO_2): Tetragonal, Grupo 123 ($P4/mmm$)



Sílice

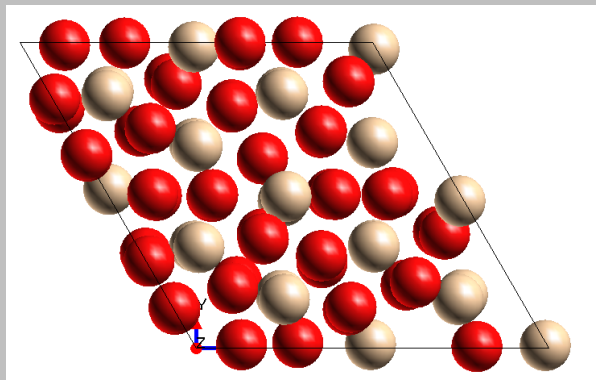
SiO_2 ($P \sim 700$ GPa, 15000K): Hexagonal, Grupo 189 ($P\bar{6}2m$)⁵



⁵ Prediction of a hexagonal SiO_2 phase affecting stabilities of MgSiO_3 and CaSiO_3 at multimegabar pressures., Tsuchiya T, Tsuchiya J., Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA, 2011 Jan 25;108(4):1252-5.

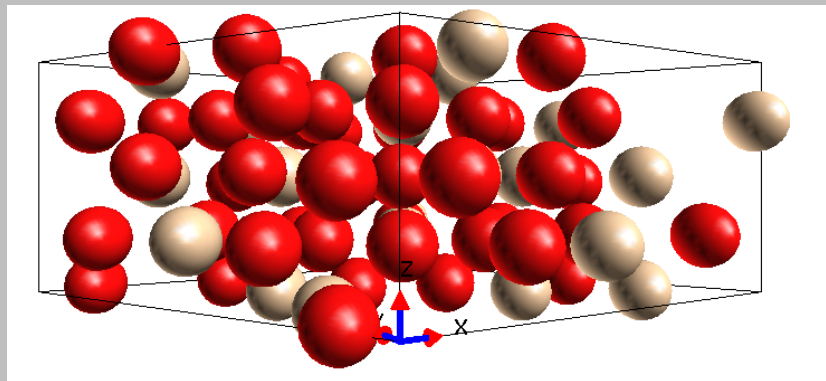
Sílice

SiO_2 ($P \sim 700$ GPa, 15000K): Hexagonal, Grupo 189 ($P\bar{6}2m$)



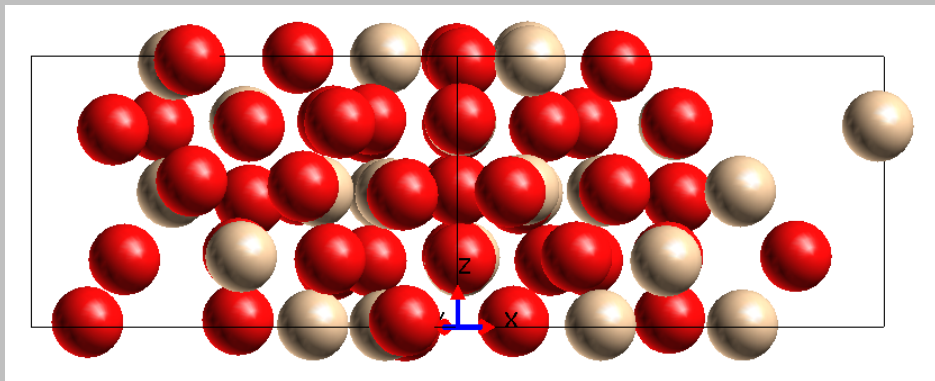
Sílice

SiO_2 ($P \sim 700$ GPa, 15000K): Hexagonal, Grupo 189 ($P\bar{6}2m$)



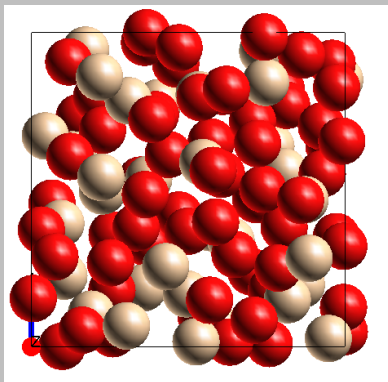
Sílice

SiO_2 ($P \sim 700$ GPa, 15000K): Hexagonal, Grupo 189 ($P\bar{6}2m$)



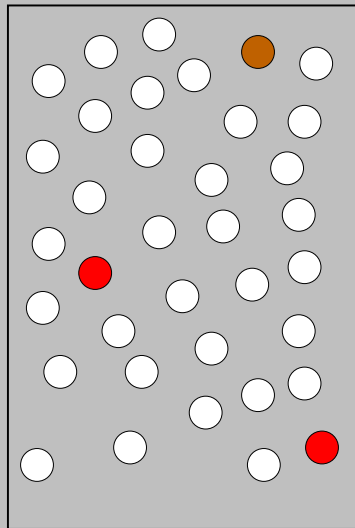
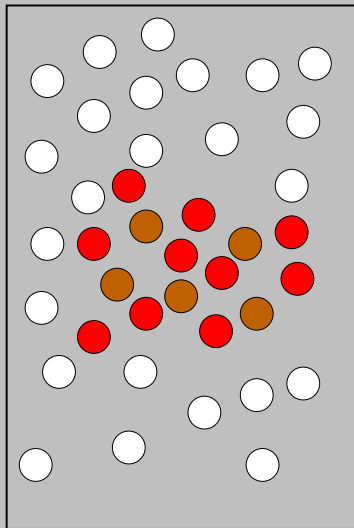
Sílice

SiO₂ líquido.



- 1 Introducción
 - Formación Planetaria
 - Evidencia Materiales Existentes
 - Planetas Gigantes
- 2 Este estudio
 - ¿Qué sabemos?
 - Elementos representativos
 - Sílice
- 3 Solubilidad
 - **Determinación de Solubilidad**
- 4 Integración Termodinámica
 - Cómo calcular F
 - Método
 - DFT
- 5 Resultados y conclusiones
 - Resultados
 - Conclusiones

Determinación de Solubilidad



Determinación de Solubilidad

- $\text{MgO} + 2 \text{H}_{127} \Leftrightarrow \text{H}_{127}\text{Mg} + \text{H}_{127}\text{O}$.
- $\text{SiO}_2 + 3 \text{H}_{127} \Leftrightarrow \text{H}_{127}\text{Si} + 2 \text{H}_{127}\text{O}$.

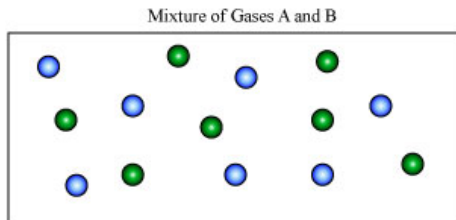
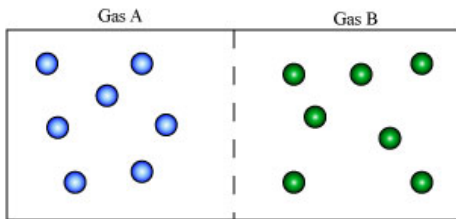
$$\Delta G_{\text{sol}}(\text{MgO} : 254\text{H}) = G(\text{H}_{254}\text{MgO}) - G(\text{H}_{254}) - G(\text{MgO}).$$

$$\Delta G_{\text{sol}}(\text{SiO}_2 : 381\text{H}) = G(\text{H}_{381}\text{SiO}_2) - G(\text{H}_{381}) - G(\text{SiO}_2).$$

$\Delta G \equiv$ Energía de solvatación que corresponde al cambio de energía libre cuando una unidad de MgO se disuelve en una solución que contiene MgO en una concentración de una parte en 254 átomos.

- $G(\text{H}_{254}\text{MgO}) \approx G(\text{H}_{127}\text{Mg}) + G(\text{H}_{127}\text{O}) - 2kT \ln(2)$.
- $G(\text{H}_{381}\text{SiO}_2) \approx G(\text{H}_{127}\text{Si}) + 2G(\text{H}_{127}\text{O}) - \alpha kT$.

Determinación de Solubilidad



Determinación de Solubilidad

Realizamos simulaciones de dinámica molecular *ab-initio*:

- 1 Obtenemos $G(\text{H}_{127}\text{O})$
- 2 Obtenemos $G(\text{H}_{127}\text{Si})$
- 3 Obtenemos $G(\text{SiO}_2)$
- 4 Calculamos ΔG .

- 1 Introducción
 - Formación Planetaria
 - Evidencia Materiales Existentes
 - Planetas Gigantes
- 2 Este estudio
 - ¿Qué sabemos?
 - Elementos representativos
 - Sílice
- 3 Solubilidad
 - Determinación de Solubilidad
- 4 Integración Termodinámica**
 - **Cómo calcular F**
 - Método
 - DFT
- 5 Resultados y conclusiones
 - Resultados
 - Conclusiones

Cómo calcular F

- $G = F + PV$
- $F = U - TS \leftarrow ???$
- Sea $U_\lambda = \lambda U_1 + (1 - \lambda)U_2$, $F = -k_B T \ln Z(T, V, N, \lambda)$.

$$\begin{aligned}
 \Delta F &= \int_0^1 dF \\
 &= \int_0^1 d\lambda \frac{\partial F}{\partial \lambda} \\
 &= - \int_0^1 d\lambda \frac{k_B T}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \lambda} \\
 &= - \int_0^1 d\lambda \frac{k_B T}{Z} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\sum_i e^{-\beta U_i} \right]
 \end{aligned}$$

Cómo calcular F

- $G = F + PV$
- $F = U - TS \leftarrow ???$
- Sea $U_\lambda = \lambda U_1 + (1 - \lambda)U_2$, $F = -k_B T \ln Z(T, V, N, \lambda)$.

$$\begin{aligned}
 \Delta F &= \int_0^1 dF \\
 &= \int_0^1 d\lambda \frac{\partial F}{\partial \lambda} \\
 &= - \int_0^1 d\lambda \frac{k_B T}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \lambda} \\
 &= - \int_0^1 d\lambda \frac{k_B T}{Z} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\sum_i e^{-\beta U_i} \right]
 \end{aligned}$$

Cómo calcular F

- $G = F + PV$
- $F = U - TS \leftarrow ???$
- Sea $U_\lambda = \lambda U_1 + (1 - \lambda)U_2$, $F = -k_B T \ln Z(T, V, N, \lambda)$.

$$\begin{aligned}
 \Delta F &= \int_0^1 dF \\
 &= \int_0^1 d\lambda \frac{\partial F}{\partial \lambda} \\
 &= - \int_0^1 d\lambda \frac{k_B T}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \lambda} \\
 &= - \int_0^1 d\lambda \frac{k_B T}{Z} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\sum_i e^{-\beta U_i} \right]
 \end{aligned}$$

Cómo calcular F

- $G = F + PV$
- $F = U - TS \leftarrow ???$
- Sea $U_\lambda = \lambda U_1 + (1 - \lambda)U_2$, $F = -k_B T \ln Z(T, V, N, \lambda)$.

•

$$\begin{aligned}
 \Delta F &= \int_0^1 dF \\
 &= \int_0^1 d\lambda \frac{\partial F}{\partial \lambda} \\
 &= - \int_0^1 d\lambda \frac{k_B T}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \lambda} \\
 &= - \int_0^1 d\lambda \frac{k_B T}{Z} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\sum_i e^{-\beta U_i} \right]
 \end{aligned}$$

Cómo calcular F

$$\begin{aligned}
 \Delta F &= - \int_0^1 d\lambda \frac{k_B T}{Z} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\sum_i e^{-\beta U_i} \right] \\
 &= \int_0^1 d\lambda \frac{k_B T \beta}{Z} \left[\sum_i \frac{\partial U_i}{\partial \lambda} e^{-\beta U_i} \right] \\
 &= \int_0^1 d\lambda \left\langle \frac{\partial U}{\partial \lambda} \right\rangle \\
 &= \int_0^1 d\lambda \langle U_1 - U_2 \rangle_\lambda
 \end{aligned}$$

Energía Libre:

$$F_1 = F_0 + \int_0^1 d\lambda \langle U_1 - U_2 \rangle_\lambda$$

- 1 Introducción
 - Formación Planetaria
 - Evidencia Materiales Existentes
 - Planetas Gigantes
- 2 Este estudio
 - ¿Qué sabemos?
 - Elementos representativos
 - Sílice
- 3 Solubilidad
 - Determinación de Solubilidad
- 4 Integración Termodinámica
 - Cómo calcular F
 - **Método**
 - DFT
- 5 Resultados y conclusiones
 - Resultados
 - Conclusiones

Algoritmo CCI

Algoritmo de integración por constante acoplada (coupling constant integration) de dos pasos: $F_0 \rightarrow F_{\text{clásico}}, F_{\text{clásico}} \rightarrow F_{\text{DFT}}$.

1 Se elige un sistema de referencia con energía libre F conocida.

- Si el sistema es líquido, $F_0 = F_{\text{gas ideal}} (U_1 = 0, U_2 = U_2(r))$ ⁶.

$$F_0 = -NkT \left(1 + \ln \left(\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right) \right)$$

- Si el sistema es sólido, $F_0 = F_{\text{cristal Einstein}} (U_1 = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), U_2 = U_2(r))$.

$$F_0 = NkT \ln \left(2 \sinh \left(\frac{\hbar\omega}{2kT} \right) \right).$$

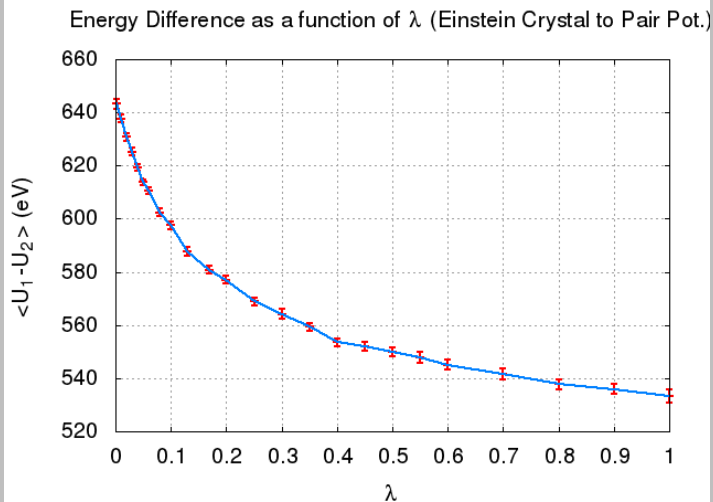
⁶S. Izvekov, M. Parrinello, C. J. Burnham, and G. A. Voth, J. Chem. Phys. 120, 10896 (2004).

Algoritmo CCI

- 1 Para cada λ , se simula el sistema de interés interactuando por el potencial $U_\lambda = \lambda U_1 + (1 - \lambda)U_2$ (6 a 15 hrs).
- 2 Se obtiene el valor de $\langle U_1 - U_2 \rangle_\lambda$.
- 3 Se calcula la integral $\int_0^1 d\lambda \langle U_1 - U_2 \rangle_\lambda$.
- 4 Se añade la energía de referencia F_0 para obtener F .
- 5 Ahora que se conoce $F_{\text{clásico}}$, se repite el proceso para obtener F_{DFT} .
- 6 Para obtener $G = F + PV$, basta añadir el término PV .

Algoritmo CCI

$P = 2000 \text{ GPa}$, $T = 10\,000 \text{ K}$



- 1 Introducción
 - Formación Planetaria
 - Evidencia Materiales Existentes
 - Planetas Gigantes
- 2 Este estudio
 - ¿Qué sabemos?
 - Elementos representativos
 - Sílice
- 3 Solubilidad
 - Determinación de Solubilidad
- 4 Integración Termodinámica
 - Cómo calcular F
 - Método
 - **DFT**
- 5 Resultados y conclusiones
 - Resultados
 - Conclusiones

Detalles DFT

- Se utilizó una versión especial de VASP 4.6 que permite fijar P (para obtener V).
- Se utilizó una versión VASP 4.6, modificado para entregar $(U_1 - U_2)$.
- Ensemble Canónico.
- Cutoff ondas planas (ENCUT): 900eV
- Grilla de k -points: 2x2x2

Detalles DFT

Condiciones (Mbar, K)	ρ_{SiO_2} (g/cm ³)	ρ_{H} (g/cm ³)
$P = 20, T = 20\,000$	11.18	2.27
$P = 20, T = 10\,000$	11.80	2.45
$P = 20, T = 5\,000$	11.94	2.55
$P = 10, T = 3\,000$	9.52	1.88
$P = 40, T = 3\,000$	15.54	3.63

- Tamaños celda H: 3.89 a 4.85 Å
- Tamaños celda SiO₂: 6.87 a 7.44 Å
- $r_{\text{min}} = 1.5$ Å.

$$\rho_{\text{cuarzo}} = 2.66 \text{ g/cm}^3.$$

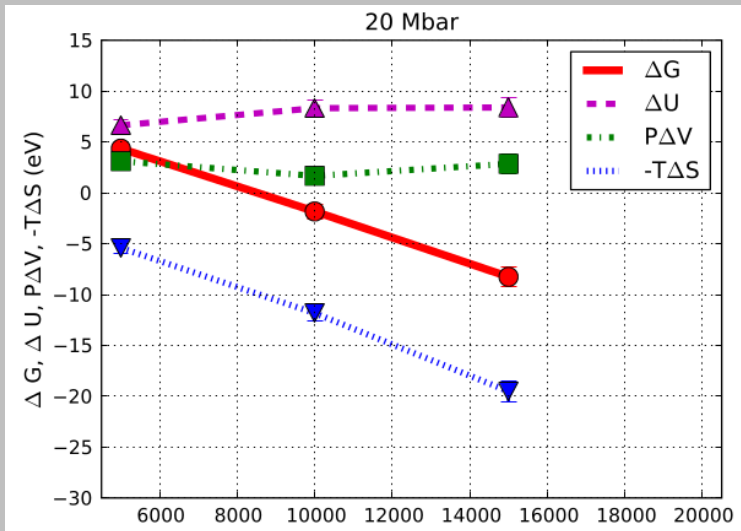
$$\rho_{\text{Si}} = 2.33 \text{ g/cm}^3.$$

$$\rho_{\text{Fe}} = 7.87 \text{ g/cm}^3.$$

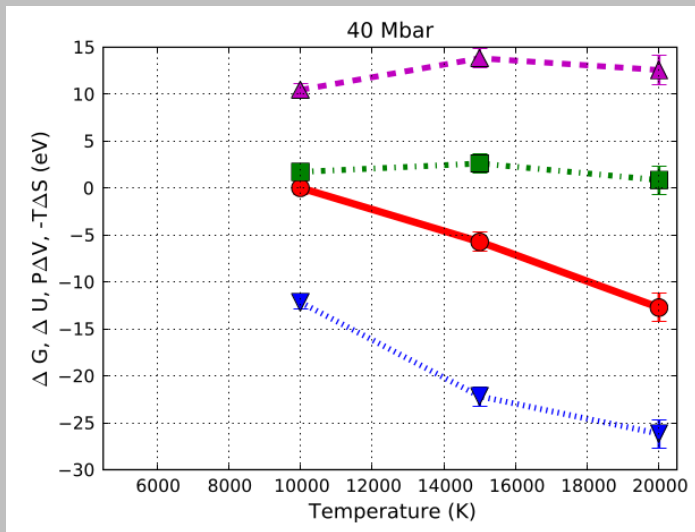
$$\rho_{\text{Pb}} = 11.35 \text{ g/cm}^3.$$

- 1 Introducción
 - Formación Planetaria
 - Evidencia Materiales Existentes
 - Planetas Gigantes
- 2 Este estudio
 - ¿Qué sabemos?
 - Elementos representativos
 - Sílice
- 3 Solubilidad
 - Deteminación de Solubilidad
- 4 Integración Termodinámica
 - Cómo calcular F
 - Método
 - DFT
- 5 **Resultados y conclusiones**
 - **Resultados**
 - Conclusiones

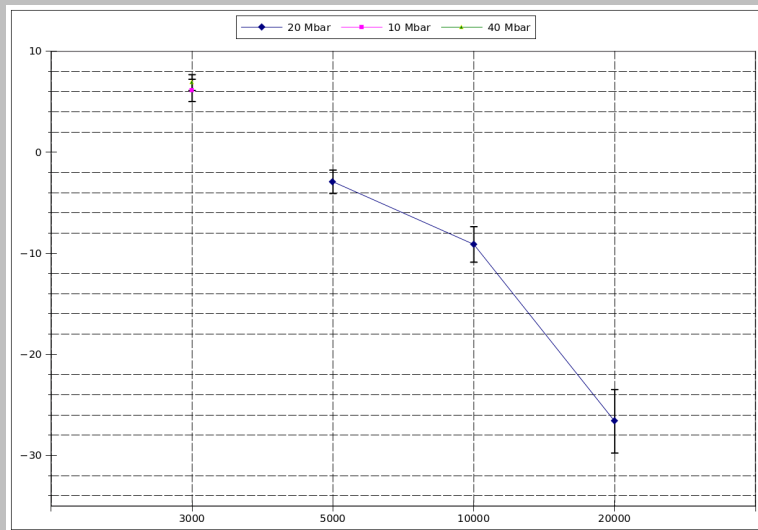
Resultados MgO



Resultados MgO



Resultados SiO₂



- 1 Introducción
 - Formación Planetaria
 - Evidencia Materiales Existentes
 - Planetas Gigantes
- 2 Este estudio
 - ¿Qué sabemos?
 - Elementos representativos
 - Sílice
- 3 Solubilidad
 - Deteminación de Solubilidad
- 4 Integración Termodinámica
 - Cómo calcular F
 - Método
 - DFT
- 5 **Resultados y conclusiones**
 - Resultados
 - **Conclusiones**

Conclusiones

- 1 El método de Force Matching (Izvekov & Parrinelo) permite ajustar potenciales.
- 2 El método de integración termodinámica es una herramienta útil para obtener energía libre.
- 3 Materiales como el SiO_2 y MgO se están disolviendo dentro de Júpiter y otros exoplanetas gaseosos.
- 4 La distribución no uniforme de materiales pesados puede poner límites a la tasa a la cual el calor puede ser transportado fuera del interior.
- 5 Esto tiene implicancias en la evolución termal y contracción radial de estos planetas.
- 6 Sugiere una propuesta alternativa al enriquecimiento de metales pesados en la atmósfera, explicado hasta el momento por la posterior llegada de planetesimales.

A photograph of the University of California gate, featuring a green metal fence with ornate scrollwork and a central sign that reads "UNIVERSITY OF CALIFORNIA" in gold lettering. The gate is flanked by two white stone pillars topped with spherical ornaments. In the background, there are large, dense evergreen trees under a clear blue sky. The word "Gracias!" is overlaid in large blue font, with a small superscript "7" to its right.

Gracias!⁷

⁷Agradecimientos a GONICYT y a la Universidad de Chile.

POTCAR H

PAW_PBE H_h 07Sep2000

1.000000000000000000

parameters from PSCTR are:

VRHFIN =H: ultrasoft test

LEXCH = PE

EATOM = 12.4943 eV, .9183 Ry

POTCAR Si

PAW_PBE Si 05Jan2001

4.000000000000000000

parameters from PSCTR are:

VRHFIN =Si: s2p2

LEXCH = PE

EATOM = 103.0669 eV, 7.5752 Ry

POTCAR O

PAW_PBE O 08Apr2002

6.000000000000000000

parameters from PSCTR are:

VRHFIN =O: s2p4

LEXCH = PE

EATOM = 432.3788 eV, 31.7789 Ry