

Introducción a Quantum-ESPRESSO

**Plan
Proyecto.
Capacidades.
Nuevos desarrollos.
Ficheros de entrada.
Ficheros de salida.
Estructura cristalina.
Unidades.**

Quantum-ESPRESSO = Quantum opEn-Source Package for Research in Electronic Structure, Simulation and Optimization.

Quantum-ESPRESSO es una distribución de software para simulación atómica de materiales basada en DFT (*Density Functional Theory*), pseudopotenciales y bases de ondas planas.

Quantum-ESPRESSO es el resultado de una iniciativa del Centro Nacional de Simulación DEMOCRITOS (Italia) en colaboración con otras instituciones (ICTP, CINECA, EPF Lausana, Princeton, MIT).

Quantum-ESPRESSO se deriva de unificar un número de programas usados en investigación (PWSCF, PHONON, CP) en torno a un formato común de archivos de entrada y salida.

Información de actividades y desarrollo de programas



The screenshot shows a web browser window with the URL <http://www.democritos.it/>. The browser's address bar and search bar are visible. The website's header features a logo on the left consisting of a cluster of white and red dots with binary code (0s and 1s) interspersed. To the right of the logo, the word "DEMOCRITOS" is written in large red letters, followed by "DEmocritos MOdeling Center for Research In aTOMistic Simulation" in smaller text and "INFm" in large blue letters. Below this, a quote in italics reads: "By convention the sweet, by convention the bitter, by convention the cold, the hot, the color, in truth nothing but atoms and void" with the attribution "(Democritos, after Sextus Empiricus, DK 68 B 9)". A search bar with a magnifying glass icon and a "search" button is located in the top right corner. A vertical navigation menu on the right side of the page lists the following items: About, Partners, People, How to reach us, Contact us, Seminars, Events, Research, Publications, Education & Outreach, and Scientific software. Two arrows originate from the text "Información de actividades y desarrollo de programas" at the top of the slide. One arrow points to the "Seminars" link in the navigation menu, and the other points to the "Scientific software" link.

Most Visited ▾ Latest Headlines 📧 Apple Pedro Álvares Cabra... Yahoo! Google Maps YouTube Wikipedia Noticias ▾ Populares ▾

DEMOCRITOS
DEmocritos MOdeling Center for
Research In aTOMistic Simulation INFm

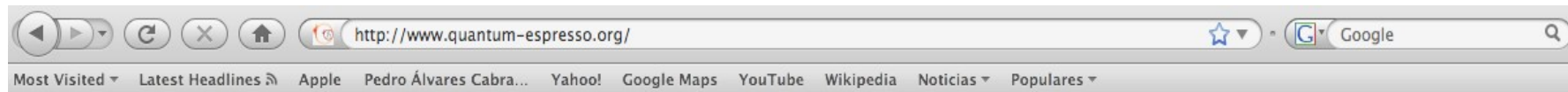
*By convention the sweet, by convention the bitter,
by convention the cold, the hot, the color,
in truth nothing but atoms and void*
(Democritos, after Sextus Empiricus, DK 68 B 9)

**DEMOCRITOS is the National Simulation Center of
the Italian *Istituto Nazionale per la Fisica della
Materia* (INFm), hosted by *Scuola Internazionale
Superiore di Studi Avanzati* (SISSA) in Trieste.**

- About
- Partners
- People
- How to reach us
- Contact us
- Seminars
- Events
- Research
- Publications
- Education & Outreach
- Scientific software

Información oficial de Quantum-ESPRESSO

<http://www.quantum-espresso.org>



QUANTUM ESPRESSO

[HOME](#) | [PROJECT](#) | [WHAT CAN QE DO](#) | [DOWNLOAD](#) | [LEARN](#) | [PSEUDO](#) | [TOOLS](#) | [QE WIKI](#)

More bug fixes for the 4.0 release of the Quantum ESPRESSO distribution are available for download (version-4.0.4)

15 September 2008

Bug fixes for the 4.0 release of the Quantum ESPRESSO distribution are available for download (version 4.0.2)

15 May 2008

Version 4.0 of the Quantum-Espresso distribution is available for download

Quantum ESPRESSO is an integrated suite of computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale. It is based on density-functional theory, plane waves, and pseudopotentials (both norm-conserving and ultrasoft).

Capacidades

- Cualquier estructura cristalina.
- Aisladores, metales y magnéticos, con varios tipos de *broadening* o método de tetraedros.
- Punto Γ o malla de puntos k-point. MD con ensembles, NEB.
- Pseudopotenciales de norma conservada, ultrasuaves o PAW.
- Casi todos los funcionales de LDA y GGA. (PW91, PBE, B88-P86, BLYP,...), DFT+U. **No B3LYP**. Otros funcionales híbridos en fase experimental.
- Magnetismo colineal y no colineal.
- Campos eléctricos a través de la fase de Berry.

Programas principales de Quantum-ESPRESSO

- PWscf: cálculo autoconsistente DFT de la estructura electrónica, relajación estructural, dinámica molecular (Born-Oppenheimer). Estados de transición (Nudged Elastic Bands)
- CP/FPMD: Dinámica molecular de Car-Parrinello.
- Phonon: Fonones, tensor dieléctrico, espectros Raman e infrarrojo. Density Functional Perturbation Theory.
- PP: Utilidades de postprocesamiento: bandas, densidades de estados, imágenes STM, densidad de carga.
- atomic: Programa de generación de pseudopotenciales.
- PWGui: Interfase gráfica.

Detalles en

<http://www.quantum-espresso.org/whatcanqedo.php>

Programas recientes de Quantum-ESPRESSO

- Pwcond: conductancia balística.
- GIPAW: Gauge-Independent PAW method for EPR and NMR chemical shifts
- W90: Funciones de Wannier maximalmente localizadas.

En versión CVS:

- XSpectra: Cálculo de X-ray near-edge adsorption spectra (XANES).

Pre-CVS:

- Time-Dependent Density-Functional Perturbation Theory (TD-DFPT)

Detalles en

<http://www.quantum-espresso.org/whatcanqedo.php>

Aspectos técnicos

- Escrito mayormente en Fortran 90/95.
- Use bibliotecas estandares (lapack, blas, fftw) para garantizar portabilidad. Se beneficia del uso de bibliotecas optimizadas para cada tipo de CPU.
- Opciones de preprocesamiento estilo C para compilar en multiples tipos de arquitecturas manteniendo una sola fuente.
- Parallelization via protocolo MPI .
- Instalación relativamente fácil usando el programa configure de GNU.

Documentación:

Macintosh:Doc eariel\$ pwd

/Users/eariel/ChemUtils/Espresso/espresso-4.0.4/Doc


Macintosh:Doc eariel\$ ls

```
BUGS          INPUT_GIPAW.html  INPUT_WFDD
ChangeLog-4.0 INPUT_GIPAW.txt   INPUT_pw_export.html
ChangeLog-4.0.html INPUT_Gamma      INPUT_pw_export.txt
ChangeLog.cp   INPUT_LD1.html  Makefile
ChangeLog.old  INPUT_LD1.txt   README
ChangeLog.pw   INPUT_PH.html   README.AUTOPILOT
INPUT_BANDS.html INPUT_PH.txt   constraints_HOWTO.pdf
INPUT_BANDS.txt INPUT_PP.html   constraints_HOWTO.tex
INPUT_CP       INPUT_PP.txt    developer_man.html
INPUT_CPPP.html INPUT_PROJWFC.html eps_man.pdf
INPUT_CPPP.txt INPUT_PROJWFC.txt eps_man.tex
INPUT_D3.html  INPUT_PW.html   nomefile.upf
INPUT_D3.txt   INPUT_PW.txt    user_guide.html
INPUT_DOS.html INPUT_PWCOND.html
INPUT_DOS.txt  INPUT_PWCOND.txt
```

Documentación (2):

Manual disponible también en la wiki

Most Visited ▾ Latest Headlines ▾ Apple Pedro Álvares Cabra... Yahoo! Google Maps YouTube Wikipedia Noticias ▾ Populares ▾

 **QUANTUM ESPRESSO**

[HOME](#) | [PROJECT](#) | [WHAT CAN QE DO](#) | [DOWNLOAD](#) | [LEARN](#) | [PSEUDO](#) | [TOOLS](#) | [QE WIKI](#)

More bug fixes for the 4.0 release of the Quantum ESPRESSO distribution are available for download (version-4.0.4)

Quantum ESPRESSO is an integrated suite of computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale. It is based on density-functional theory, plane waves, and pseudopotentials (both norm-conserving and ultrasoft).

15 September 2008
Bug fixes for the 4.0 release of the Quantum ESPRESSO distribution are available for download (version 4.0.2)

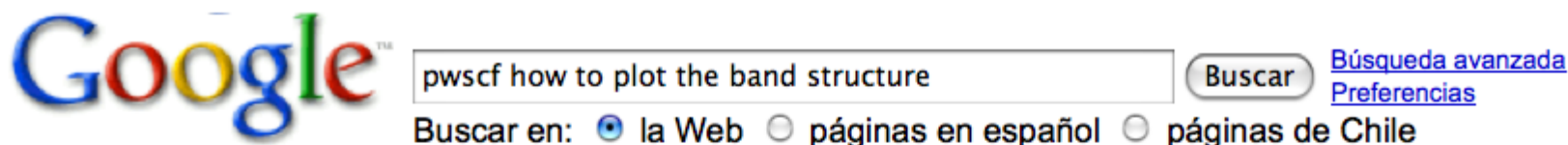
15 May 2008
Version 4.0 of the Quantum-Espresso distribution is available for download

Documentación (3): Página antigua: www.pwscf.org

Contiene un enlace al forum de discusión

http://www.democritos.it/mailman/listinfo/pw_forum

También es util **Googlear: pwscf <pregunta>**



La Web Resultados 1 - 10 de aproximadamente 2.240 de **pwscf how to plot the band structure**. (0,34 segundos)

[PDF] [Quantum-ESPRESSO PWSCF: first steps](#) - [[Traducir esta página](#)]

Formato de archivo: PDF/Adobe Acrobat - [Versión en HTML](#)

26 May 2006 ... How to run **PWscf** (pw.x) in self-consistent mode for Silicon. How to get the **band structure** of Silicon along the main. symmetry directions ...

www.vlab.msi.umn.edu/events/download/tutorial_pwscf_ex.pdf - [Páginas similares](#)

[Using PWscf](#) - [[Traducir esta página](#)]

18 Nov 2005 ... **band structure** calculation. First perform a SCF calculation as above; then do a non-SCF See Example 05 for a simple **band plot**. ...

www.pwscf.org/guide/3.0/html-chapter/node6.html - 21k - [En caché](#) - [Páginas similares](#)

[PWscf](#) - [[Traducir esta página](#)]

Set iswitch=0 (this is actually the default). **band structure** calculation. See Example 5 for a charge density plot. Example 8 for electronic Density of

Pregunta frecuente:

>Why the manual is not as clear as ABINIT in PWSCF????

because we made the choice to make the code better than the manual,
rather the the other way around ;-)

Axel Kohlmeyer

>

> Writing a good manual is not as difficult as writing a beautiful

> code.

> I think any project assistant can do it.

writing a good manual is not easy: it requires a good knowledge
of what is going on, it takes a considerable amount of time, it is
much less fun than writing code, and nobody reads manuals
anyway ...

Paolo Giannozzi

Quantum-ESPRESSO está bajo licencia GPL

- El código fuente está disponible.
- Se puede hacer cualquier cosa con la fuente: incluso **modificarla y vender el programa que resulte** pero cualquier producto derivado se distribuyen bajo licencia GPL.
- Cualquiera, incluyendo empresas comerciales, pueden contribuir.
- Cualquiera puede contribuir a mejorar el manual.

Sistema de Unidades

Mayoritariamente, como en muchos programs ab-initio se usan unidades atómicas.

masa: $m =$ masa del electrón

Longitud: $\frac{\hbar^2}{m e^2} = 0.529177\dots$ angstrom = 1 bohr

Tiempo: $\frac{\hbar^3}{m e^4} = 0.024189$ fs

Unidades derivadas

Energía: $\frac{m e^4}{\hbar^2} = 1$ Ha = 2 Ry \sim 26.7 eV

Sistema de Unidades (2)

En los ficheros de entrada se usan frecuentemente otras unidades distintas a las atómicas.

Por ejemplo, en el INPUT_PW.txt se lee

Variable: dt

Type: REAL

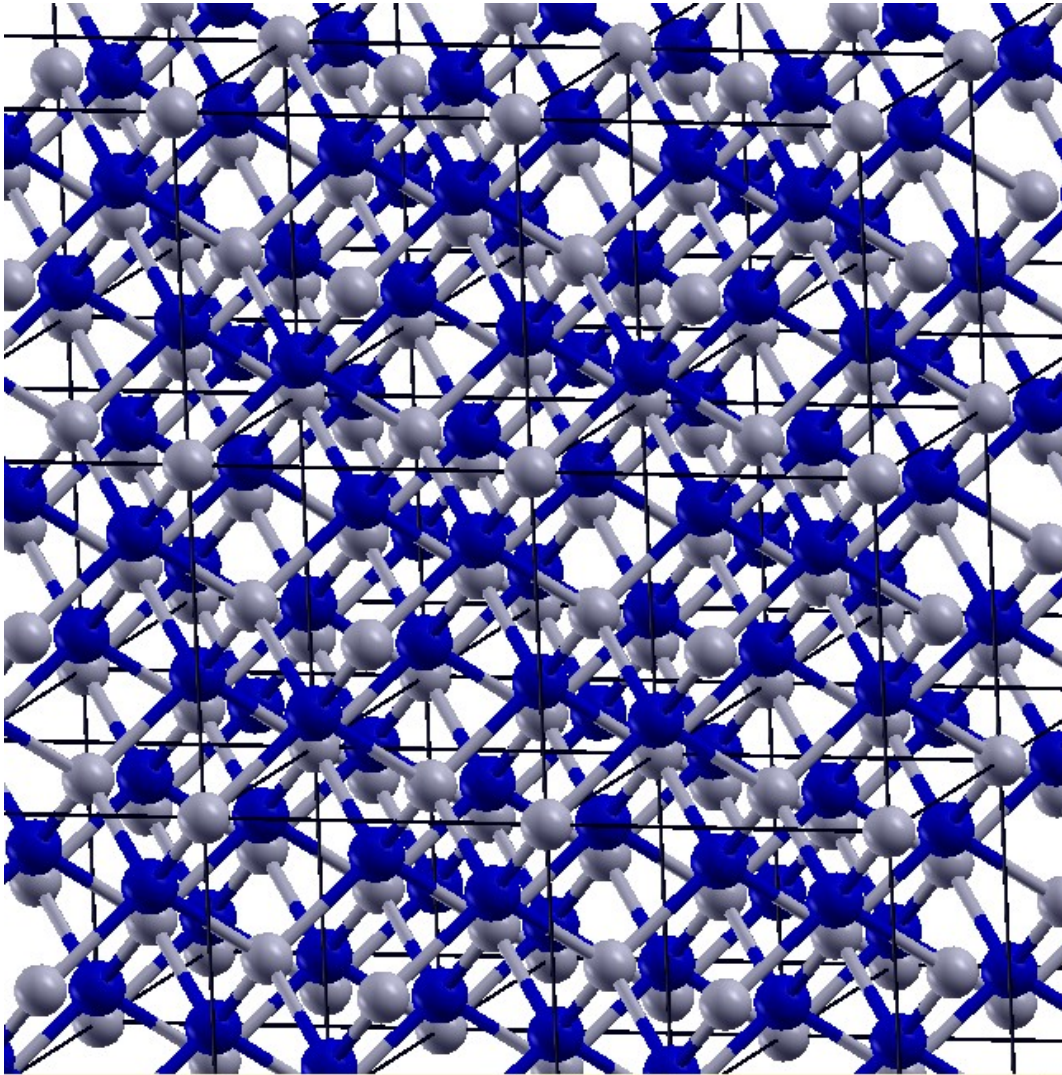
Default: 20.D0

Description: time step for molecular dynamics, in Rydberg atomic units
(1 a.u.= 4.8378×10^{-17} s : beware, CP and FPMD codes use Hartree atomic units, half that much!!!)

Todas las conversiones se definen en [Modules/constants.f90](#)

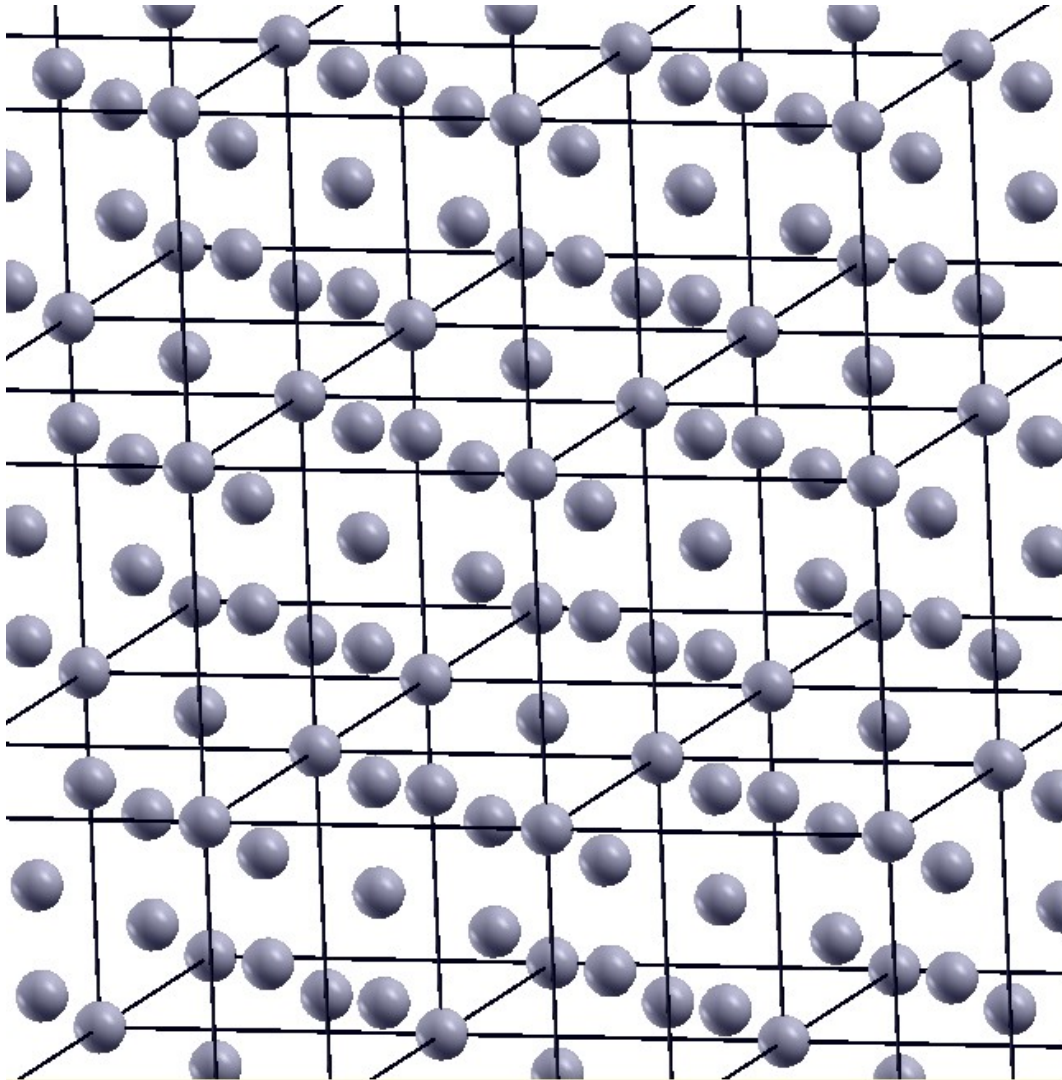
Estructura cristalina: Ejemplo del ZnS

Quantum-ESPRESSO es un programa para sistemas periódicos.



Estructura cristalina

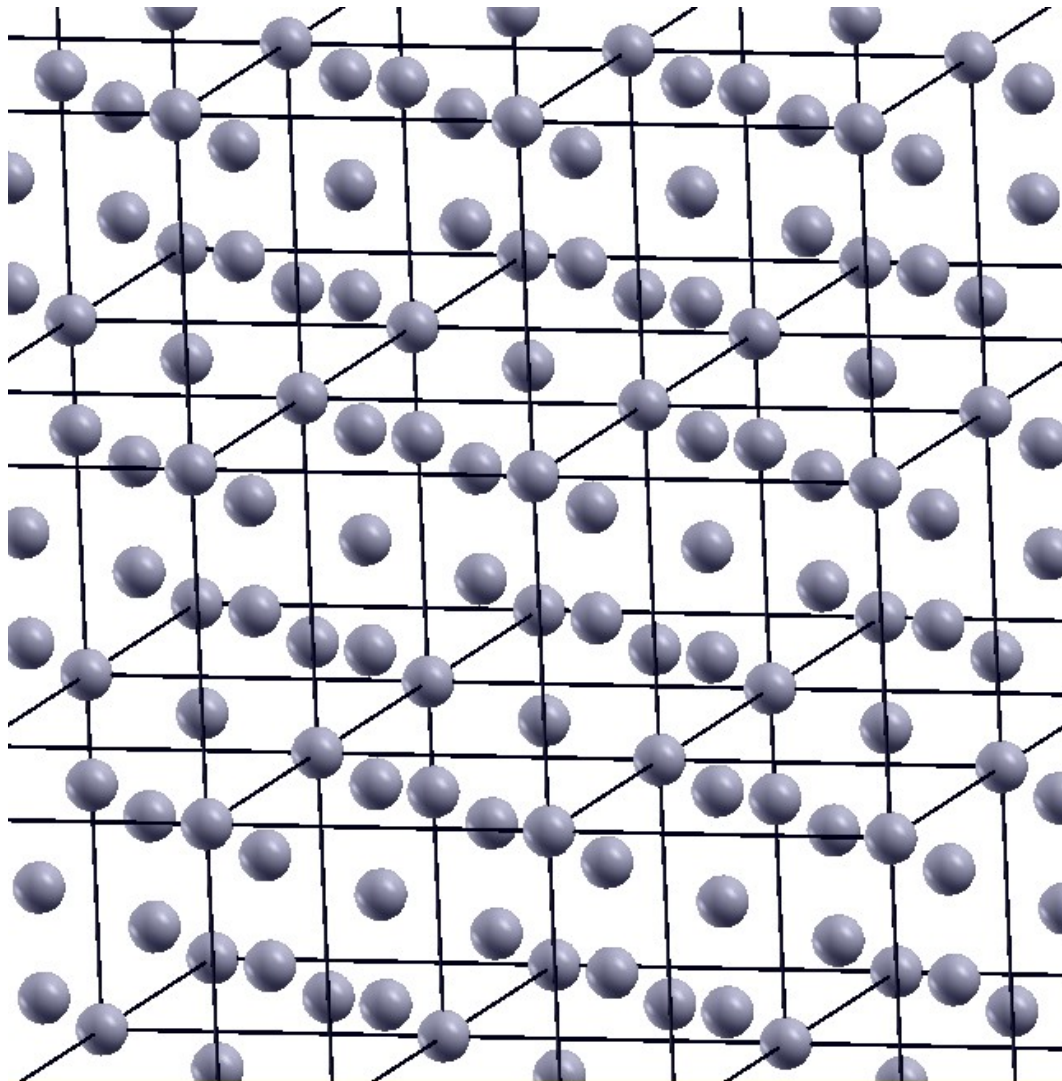
Red simple (red de Bravais)



$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$
$$n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

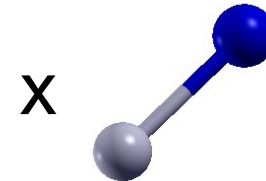
Estructura cristalina

Red de Bravais



x Base

$\vec{\tau}_a$ posición del átomo a
respecto al punto de la red



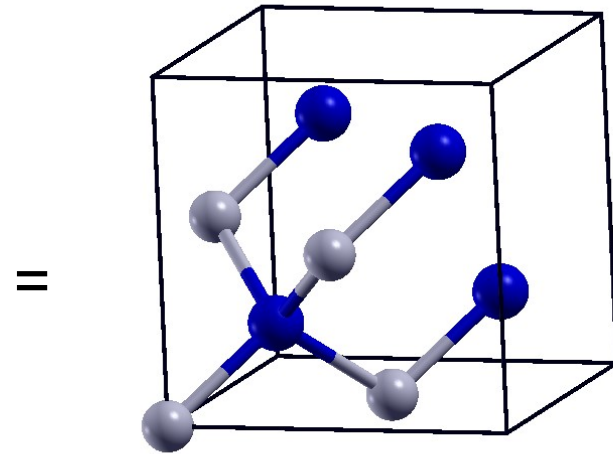
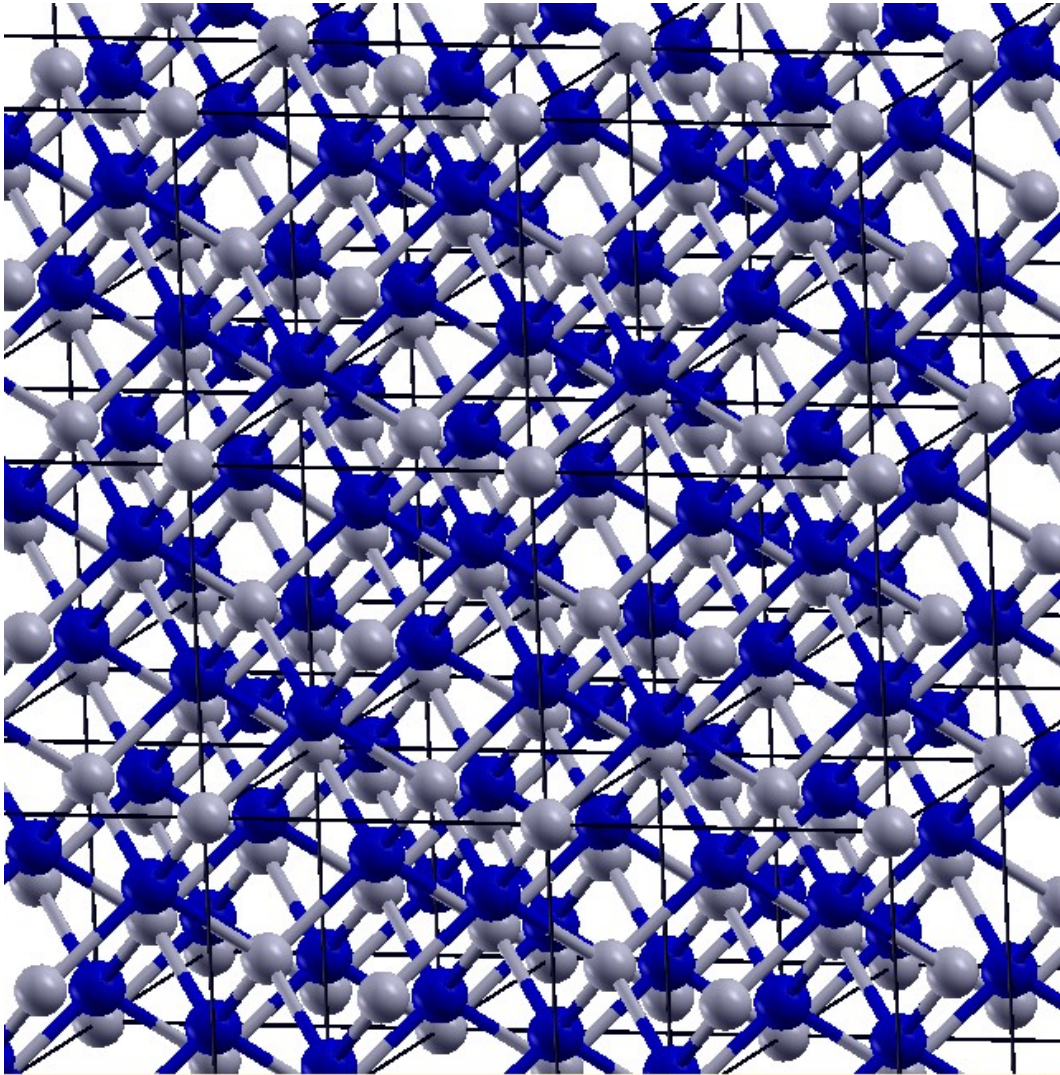
$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

$$n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

$$\vec{R}_{n_1, n_2, n_3, a} = \vec{R} + \vec{\tau}_a$$

Estructura cristalina

El cristal se obtiene replicando periódicamente la celda elemental



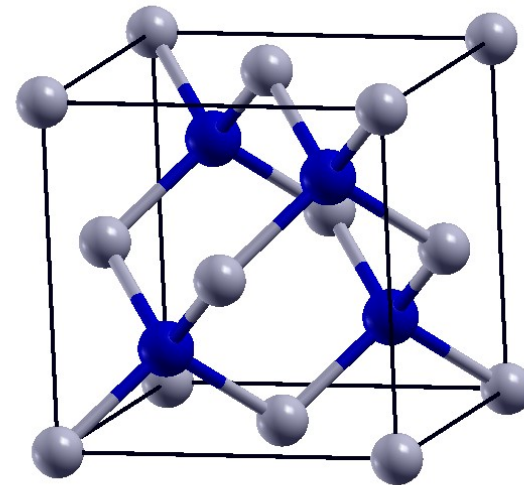
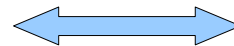
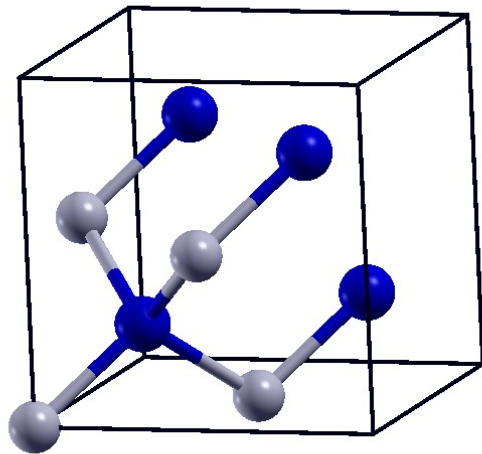
$$+n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

Estructura cristalina

En un programa de ondas planas como Q-E, la periodicidad es automática. Solamente hay que especificar

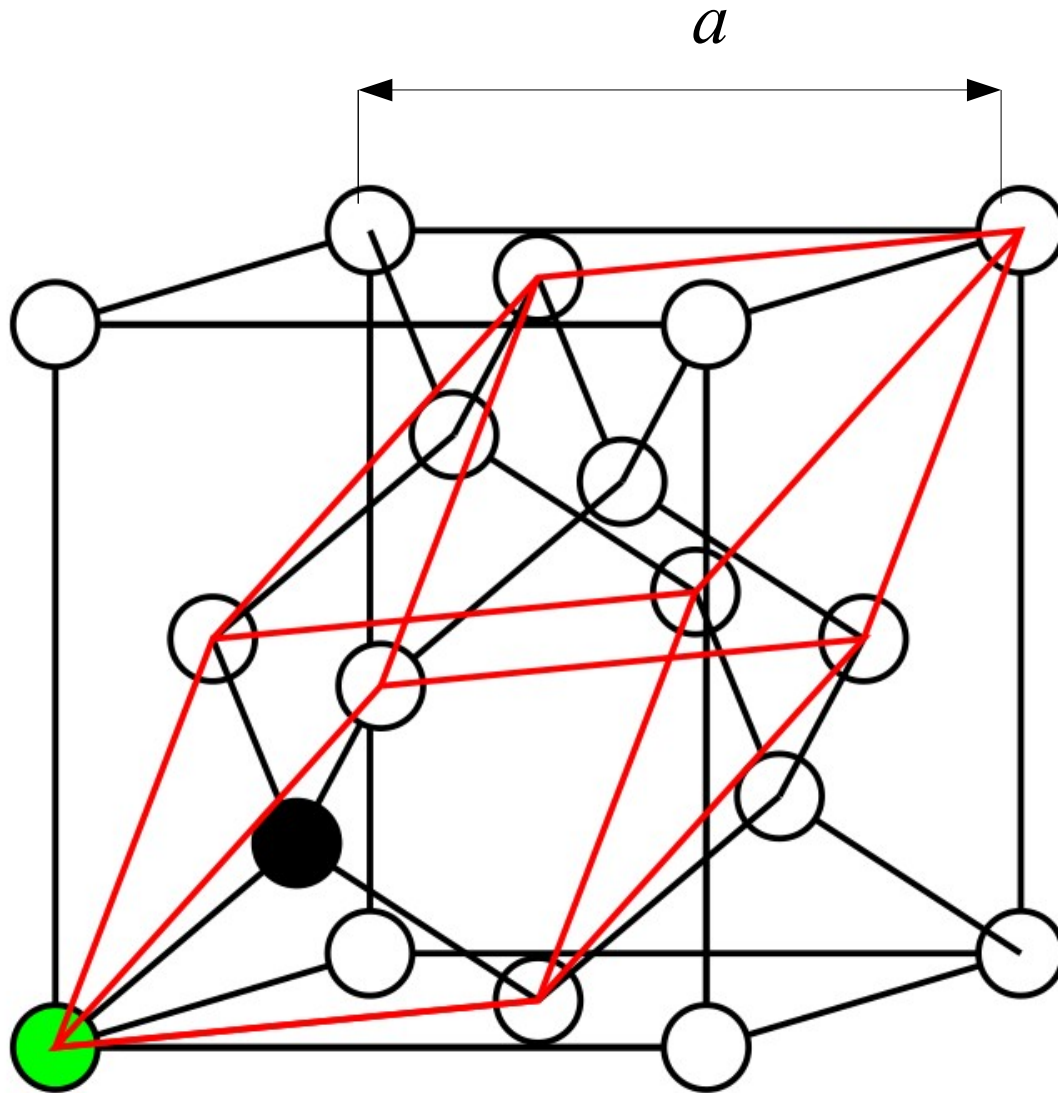
Vectores de la red: $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

y $\vec{\tau}_a$ para todos los átomos de la celda elemental



Representación redundante.
Todos los átomos de los
vértices son equivalentes.
También los de las caras.

Celda primitiva vs celda convencional: ZnS



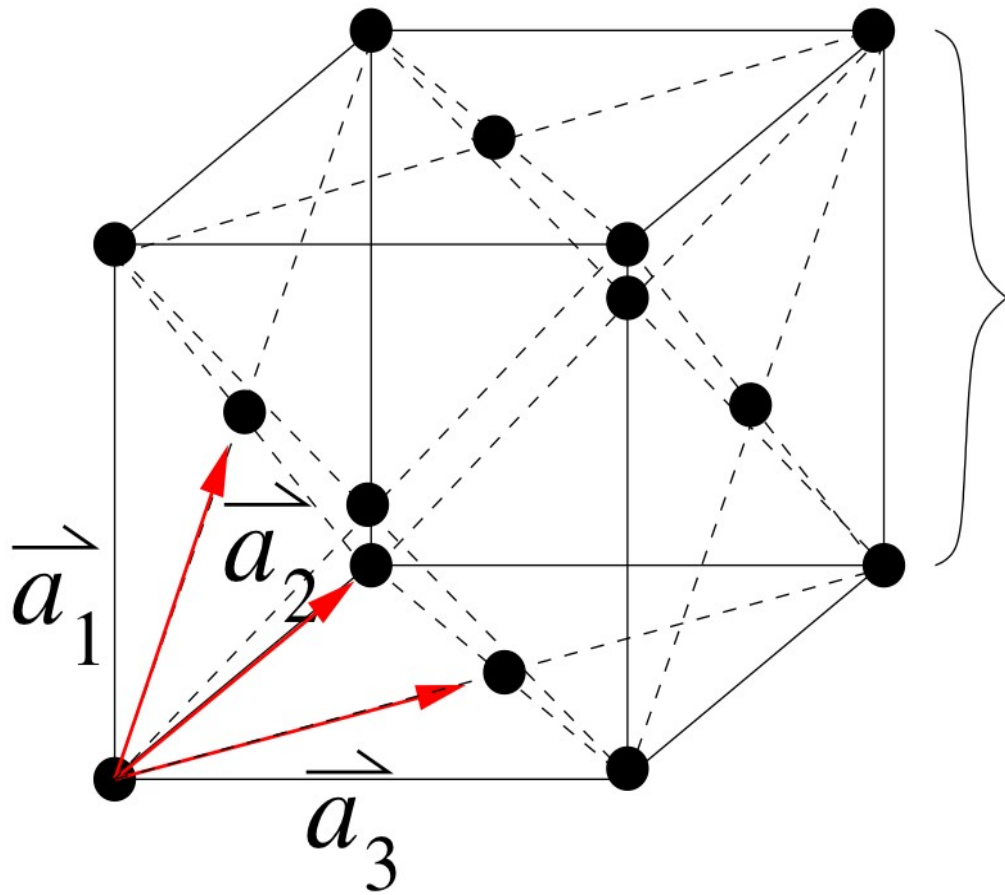
La celda demarcada por líneas rojas es la celda primitiva. Sólo contiene 2 átomos, indicados por la bola verde y la negra.

Coordenadas cartesianas

$$\vec{\tau}_1 = (0, 0, 0)$$

$$\vec{\tau}_2 = (a/4, a/4, a/4)$$

Vectores de la red con la celda primitiva



Vectores primitivos
Red fcc
(coordenadas cartesianas)

$$\vec{a}_1 = \left(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right)$$

$$\vec{a}_2 = \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}\right)$$

$$\vec{a}_3 = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right)$$

Coordenadas cristalinas (o directas o fraccionarias)

$$\vec{r} = x \vec{a}_1 + y \vec{a}_2 + z \vec{a}_3 = X \vec{i}_1 + Y \vec{j}_2 + Z \vec{k}_3$$

donde $\vec{i}_1 = (1, 0, 0)$, $\vec{i}_2 = (0, 1, 0)$, $\vec{i}_3 = (0, 0, 1)$.

X , Y , Z son coordenadas cartesianas, en angstrom o bohrs

En Q-ESPRESSO se definen asi

ATOMIC_POSITIONS {bohr} ! en bohrs

ATOMIC_POSITIONS {alat} ! en unidades de celldm(1)

ATOMIC_POSITIONS {angstrom} ! en angstrom

x , y , z son las coordenadas cristalinas. Son numeros entre 0 y 1

ATOMIC_POSITIONS {crystal}

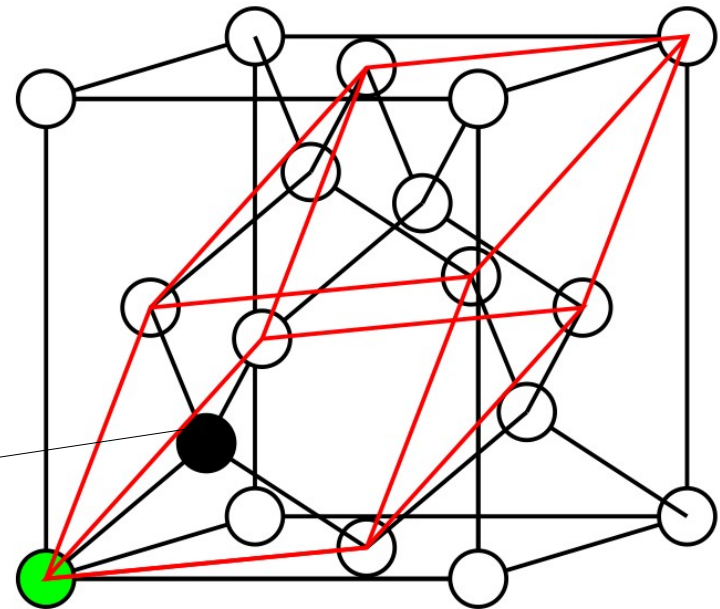
Definición de la estructura en Q-E

ZnS: red fcc --_> ibrav = 2

5.65 Å = 10.68 bohrs

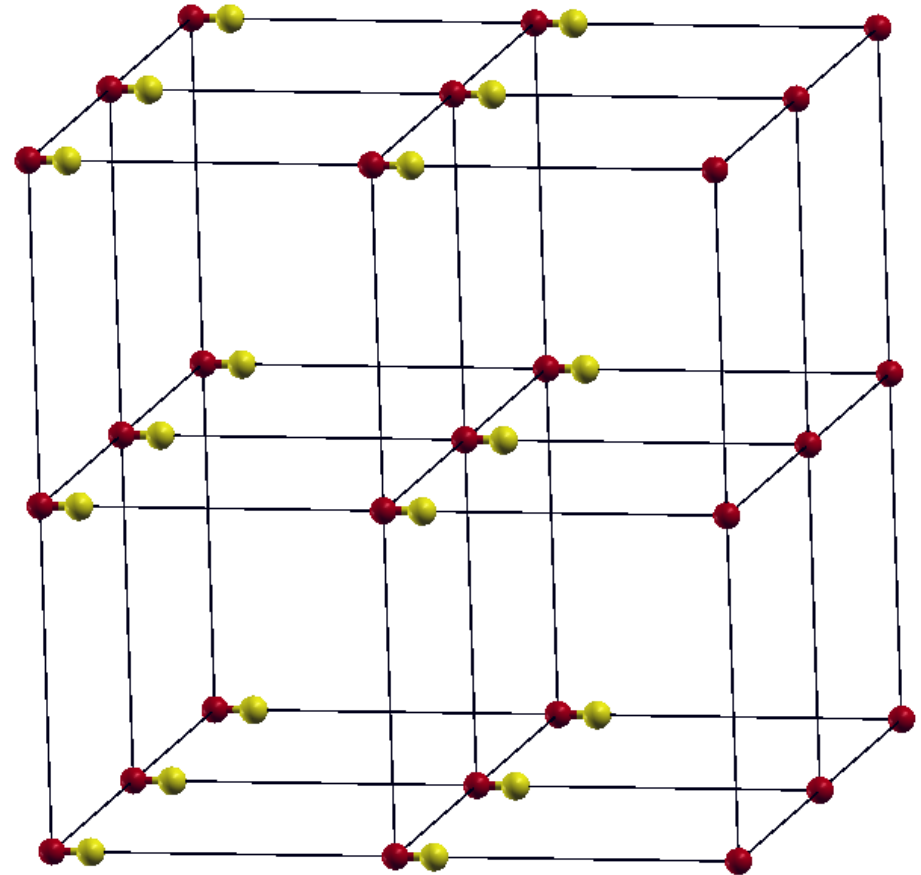
Especificación en el fichero de entrada:

```
&SYSTEM
  ntyp=2, nat=2, ibrav=2,
  celldm(1)=10.68,
  /
...
ATOMIC_SPECIES
Zn 1. Zn.UPF
S  1. S.UPF
ATOMIC_POSITIONS
Zn 0.0 0.0 0.0
S  0.25 0.25 0.25
```



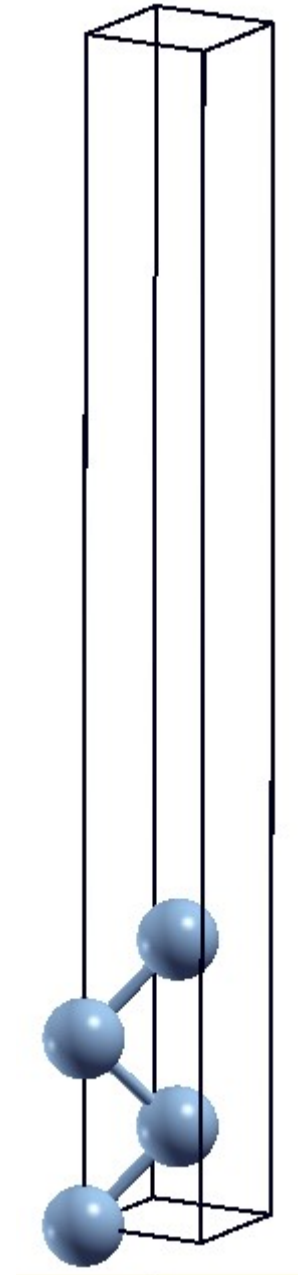
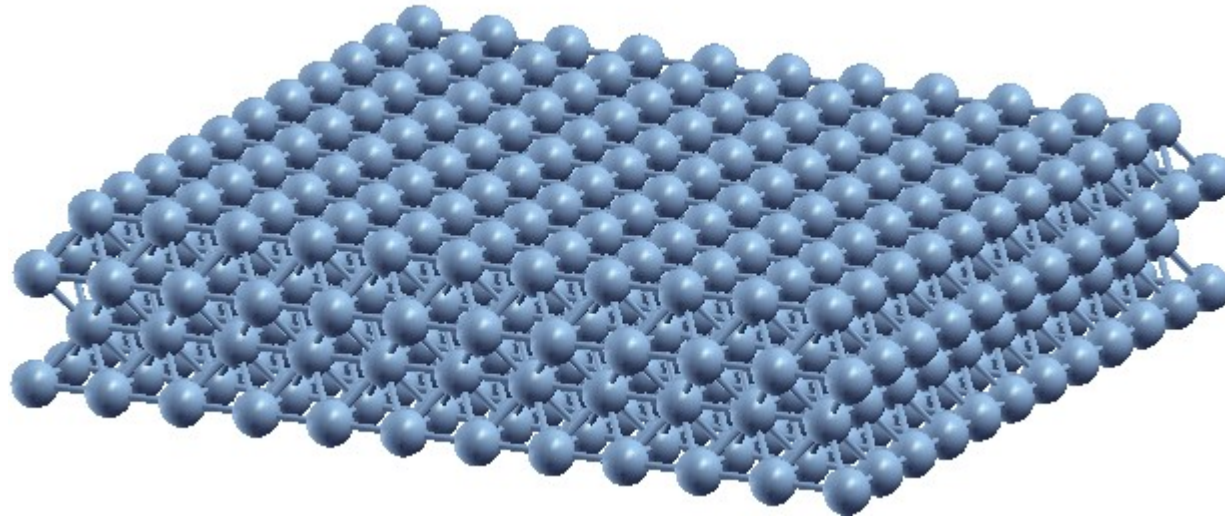
Moléculas aisladas

```
Especificación en el
archivo de entrada:
&CONTROL
pseudo_dir='./',
/
&SYSTEM
ibrav=1,nat=2,ntyp=2,
celldm(1)=20.0,
ecutwfc=24.D0,ecutrho =144.D0,
/
&ELECTRONS
/
ATOMIC_SPECIES
O 1.00 O.pz-rrkjus.UPF
C 1.00 C.pz-rrkjus.UPF
ATOMIC_POSITIONS {bohr}
C 2.256 0.0 0.0
O 0.000 0.0 0.0
K_POINTS {Gamma}
```

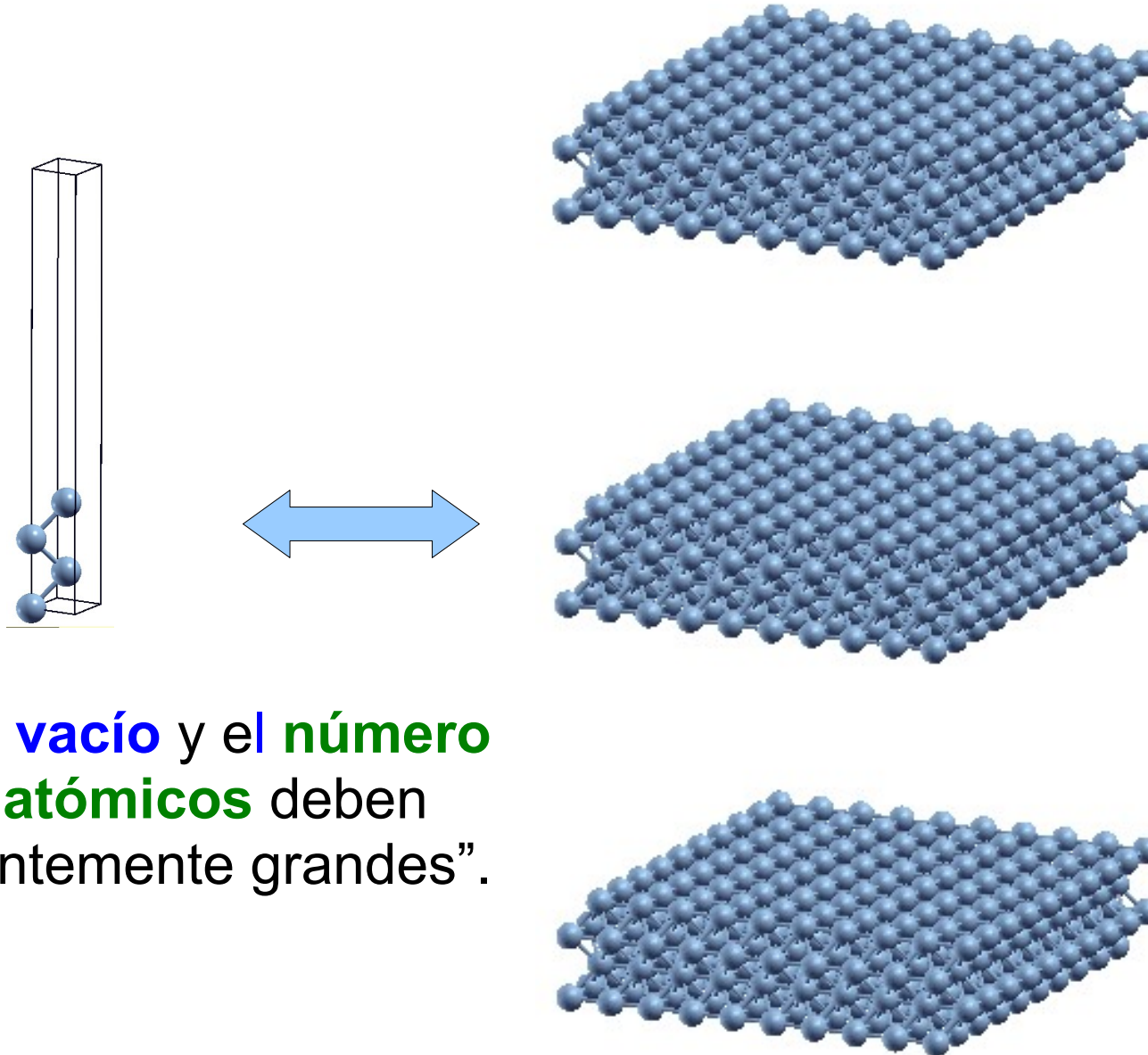


celldm(1) debe ser
"suficientemente grande"

Superficies



Sistema periódico realmente simulado en imitación de la superficie



El **espacio vacío** y el **número de planos atómicos** deben ser “suficientemente grandes”.

Celda primitiva vs unidad asimétrica

TRITELLURIUM TELLURIUM(VI) OXIDE

TE4 O9

The crystal structure of Te_4O_9

75ACBCAR 31 1255 1259

Lindqvist O, Mark W, Moret J

9.320+5 9.320+5 14.486+5 90. 90. 120.

R3-H Esto parece ser el grupo 148

Te 1 6. 6c .3333 .6667 .48473+8

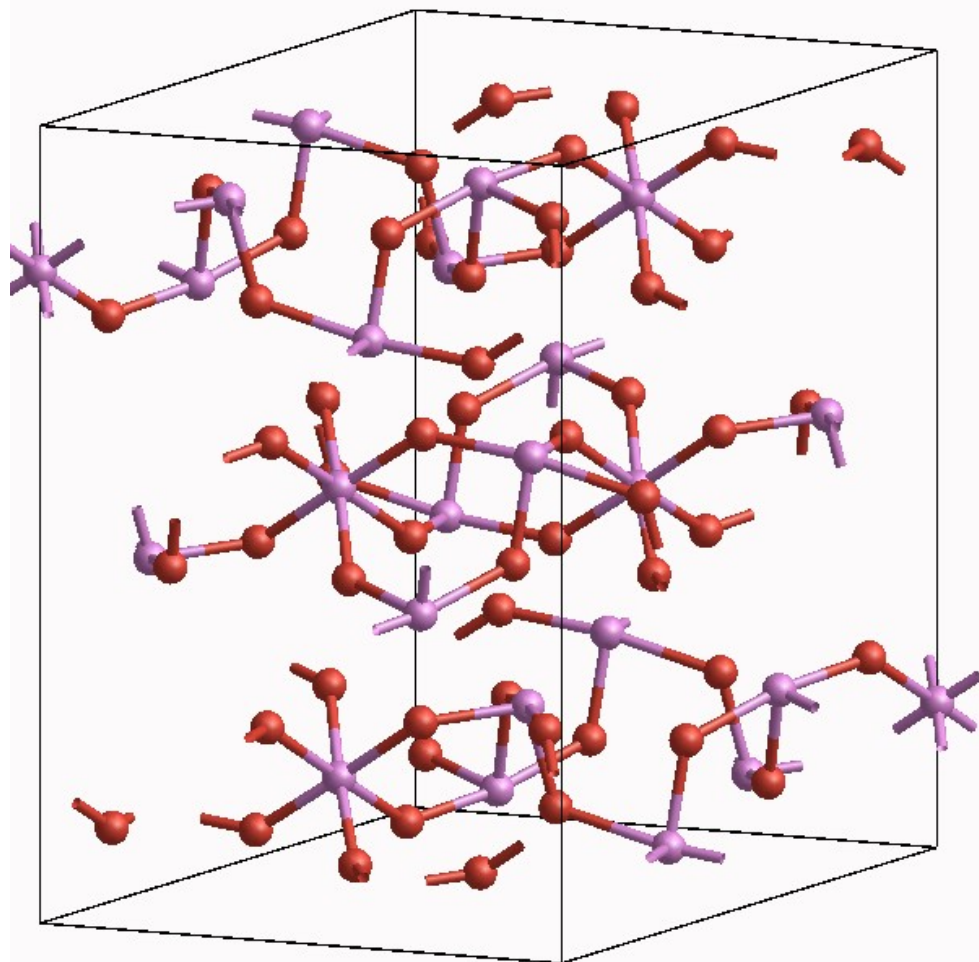
Te 2 4. 18f .73555+7 .02099+8 .42020+4

O 1 -2. 18f .365+1 .8458+10 .5667+6

O 2 -2. 18f .8218+10 .3153+11 .5928+5

O 3 -2. 18f .2581+11 .0282+10 .4543+5

Aparentemente sólo hay 5 átomos, sin embargo la celda elemental es la que se muestra a la derecha.



Celda primitiva vs unidad asimétrica

Bilbao Crystallographic Server → WYCKPOS → Wyckoff Positions

Te 1 6c .3333 .6667 .48473+8
 Te 2 18f .73555 .02099 .42020
 O 1 18f .365 .8458 .5667
 O 2 18f .8218 .3153 .5928
 O 3 18f .2581 .0282 .4543

Wyckoff Positions of Group 148 (R-3) [hexagonal ax

Multiplicity	Wyckoff letter	Site symmetry	Coordinates
			(0,0,0) + (2/3,1/3,1/3) + (1/3,2/3,2/3) + (x,y,z) (-y,x-y,z) (-x+y,-x,z) (-x,-y,-z) (y,-x+y,-z) (x-y,x,-z)
18	f	1	(x,y,z) (-y,x-y,z) (-x+y,-x,z) (-x,-y,-z) (y,-x+y,-z) (x-y,x,-z)
9	e	-1	(1/2,0,0) (0,1/2,0) (1/2,1/2,0)
9	d	-1	(1/2,0,1/2) (0,1/2,1/2) (1/2,1/2,1/2)
6	c	3.	(0,0,z) (0,0,-z)
3	b	-3.	(0,0,1/2)
3	a	-3.	(0,0,0)

Quantum-ESPRESSO no sabe esto, no usa la información del grupo espacial.

El usuario debe generar todas las posiciones de la celda primitiva.

If you want to see the Wyckoff position in other setting, click [here](#)

Tutorial Quantum-ESPRESSO, Chihuahua, Febrero 2009

Introducción a Quantum-ESPRESSO

Eduardo Menendez, Grupo de Nanomaterials
Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>

1

Plan
Proyecto.
Capacidades.
Nuevos desarrollos.
Ficheros de entrada.
Ficheros de salida.
Estructura cristalina.
Unidades.

Tutorial Quantum-ESPRESSO, Chihuahua, Febrero 2009

Quantum-ESPRESSO = Quantum opEn-Source Package for Research in Electronic Structure, Simulation and Optimization.

Quantum-ESPRESSO es una distribución de software para simulación atómica de materiales basada en DFT (*Density Functional Theory*), pseudopotenciales y bases de ondas planas.

Quantum-ESPRESSO es el resultado de una iniciativa del Centro Nacional de Simulación DEMOCRITOS (Italia) en colaboración con otras instituciones (ICTP, CINECA, EPF Lausana, Princeton, MIT).

Quantum-ESPRESSO se deriva de unificar un número de programas usados en investigación (PWSCF, PHONON, CP) en torno a un formato común de archivos de entrada y salida.

Tutorial Quantum-ESPRESSO, Chihuahua, Febrero 2009

Información de actividades y desarrollo de programas



Eduardo Menendez, Grupo de Nanomaterials

Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>

Tutorial Quantum-ESPRESSO, Chihuahua, Febrero 2009

Información oficial de Quantum-ESPRESSO <http://www.quantum-espresso.org>

Most Visited ▾ Latest Headlines ▾ Apple Pedro Álvares Cabra... Yahoo! Google Maps YouTube Wikipedia Noticias ▾ Populares ▾

 **QUANTUM ESPRESSO**

[HOME](#) | [PROJECT](#) | [WHAT CAN QE DO](#) | [DOWNLOAD](#) | [LEARN](#) | [PSEUDO](#) | [TOOLS](#) | [QE WIKI](#)

More bug fixes for the 4.0 release of the Quantum ESPRESSO distribution are available for download (version-4.0.4)

15 September 2008
Bug fixes for the 4.0 release of the Quantum ESPRESSO distribution are available for download (version 4.0.2)

15 May 2008
Version 4.0 of the Quantum-Espresso distribution is available for download

Quantum ESPRESSO is an integrated suite of computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale. It is based on density-functional theory, plane waves, and pseudopotentials (both norm-conserving and ultrasoft).

Eduardo Menendez, Grupo de Nanomaterials

Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>

Capacidades

- Cualquier estructura cristalina.
- Aisladores, metales y magnéticos, con varios tipos de *broadening* o método de tetraedros.
- Punto Γ o malla de puntos k-point. MD con ensembles, NEB.
- Pseudopotenciales de norma conservada, ultrasuaves o PAW.
- Casi todos los funcionales de LDA y GGA. (PW91, PBE, B88-P86, BLYP,...), DFT+U. **No B3LYP**. Otros funcionales híbridos en fase experimental.
- Magnetismo colineal y no colineal.
- Campos eléctricos a través de la fase de Berry.

Programas principales de Quantum-ESPRESSO

- PWscf: cálculo autoconsistente DFT de la estructura electrónica, relajación estructural, dinámica molecular (Born-Oppenheimer). Estados de transición (Nudged Elastic Bands)
- CP/FPMD: Dinámica molecular de Car-Parrinello.
- Phonon: Fonones, tensor dieléctrico, espectros Raman e infrarrojo. Density Functional Perturbation Theory.
- PP: Utilidades de postprocesamiento: bandas, densidades de estados, imágenes STM, densidad de carga.
- atomic: Programa de generación de pseudopotenciales.
- PWGui: Interfase gráfica.

Detalles en

<http://www.quantum-espresso.org/whatcanqedo.php>

Programas recientes de Quantum-ESPRESSO

- Pwcond: conductancia balística.
 - GIPAW: Gauge-Independent PAW method for EPR and NMR chemical shifts
 - W90: Funciones de Wannier maximalmente localizadas.
- En versión CVS:
- XSpectra: Cálculo de X-ray near-edge adsorption spectra (XANES).
- Pre-CVS:
- Time-Dependent Density-Functional Perturbation Theory (TD-DFPT)

Detalles en

<http://www.quantum-espresso.org/whatcanqedo.php>

Aspectos técnicos

- Escrito mayormente en Fortran 90/95.
- Use bibliotecas estandares (lapack, blas, fftw) para garantizar portabilidad. Se beneficia del uso de bibliotecas optimizadas para cada tipo de CPU.
- Opciones de preprocesamiento estilo C para compilar en multiples tipos de arquitecturas manteniendo una sola fuente.
- Parallelization via protocolo MPI .
- Instalación relativamente fácil usando el programa configure de GNU.

Documentación:

```
Macintosh:Doc eariel$ pwd
/Users/eariel/ChemUtils/Espresso/espresso-4.0.4/Doc
Macintosh:Doc eariel$ ls
BUGS          INPUT_GIPAW.html  INPUT_WFDD
ChangeLog-4.0 INPUT_GIPAW.txt   INPUT_pw_export.html
ChangeLog-4.0.html INPUT_Gamma      INPUT_pw_export.txt
ChangeLog.cp   INPUT_LD1.html   Makefile
ChangeLog.old  INPUT_LD1.txt    README
ChangeLog.pw   INPUT_PH.html    README.AUTOPILOT
INPUT_BANDS.html INPUT_PH.txt     constraints_HOWTO.pdf
INPUT_BANDS.txt INPUT_PP.html    constraints_HOWTO.tex
INPUT_CP       INPUT_PP.txt     developer_man.html
INPUT_CPPP.html INPUT_PROJWFC.html eps_man.pdf
INPUT_CPPP.txt INPUT_PROJWFC.txt eps_man.tex
INPUT_D3.html  INPUT_PW.html    nomefile.upf
INPUT_D3.txt   INPUT_PW.txt     user_guide.html
INPUT_DOS.html INPUT_PWCOND.html
INPUT_DOS.txt  INPUT_PWCOND.txt
```


Documentación (2):

Manual disponible también en la wiki

More bug fixes for the 4.0 release of the Quantum ESPRESSO distribution are available for download (version-4.0.4)

Quantum ESPRESSO is an integrated suite of computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale. It is based on density-functional theory, plane waves, and pseudopotentials (both norm-conserving and ultrasoft).

Eduardo Menendez, Grupo de Nanomaterials

Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>

Documentación (3): Página antigua: www.pwscf.org

Contiene un enlace al forum de discusión
http://www.democritos.it/mailman/listinfo/pw_forum

También es util Googlear: **pwscf <pregunta>**



pwscf how to plot the band structure

Buscar

[Búsqueda avanzada](#)
[Preferencias](#)

Buscar en: la Web páginas en español páginas de Chile

La Web Resultados 1 - 10 de aproximadamente 2.240 de **pwscf how to plot the band structure**. (0,34 segundos)

[PDF] [Quantum-ESPRESSO PWSCF: first steps](#) - [[Traducir esta página](#)]

Formato de archivo: PDF/Adobe Acrobat - [Versión en HTML](#)

26 May 2006 ... How to run **PWscf** (pw.x) in self-consistent mode for Silicon. How to get the **band structure** of Silicon along the main. symmetry directions ...

www.vlab.msi.umn.edu/events/download/tutorial_pwscf_ex.pdf - [Páginas similares](#)

[Using PWscf](#) - [[Traducir esta página](#)]

18 Nov 2005 ... **band structure** calculation. First perform a SCF calculation as above; then do a non-SCF See Example 05 for a simple **band plot**. ...

www.pwscf.org/guide/3.0/html-chapter/node6.html - 21k - [En caché](#) - [Páginas similares](#)

[PWscf](#) - [[Traducir esta página](#)]

Set iswitch=0 (this is actually the default). **band structure** calculation. See Example 5 for a charge density plot. Example 8 for electronic Density of

Eduardo Menendez, Grupo de Nanomaterials

Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>

Pregunta frecuente:

>Why the manual is not as clear as ABINIT in PWSCF????

because we made the choice to make the code better than the manual,
rather the the other way around ;-)

Axel Kohlmeyer

>

> Writing a good manual is not as difficult as writing a beautiful

> code.

> I think any project assistant can do it.

writing a good manual is not easy: it requires a good knowledge
of what is going on, it takes a considerable amount of time, it is
much less fun than writing code, and nobody reads manuals
anyway ...

Paolo Giannozzi

Quantum-ESPRESSO está bajo licencia GPL

- El código fuente está disponible.
- Se puede hacer cualquier cosa con la fuente: incluso **modificarla y vender el programa que resulte** pero cualquier producto derivado se distribuyen bajo licencia GPL.
- Cualquiera, incluyendo empresas comerciales, pueden contribuir.
- Cualquiera puede contribuir a mejorar el manual.

Sistema de Unidades

Mayoritariamente, como en muchos programs ab-initio se usan unidades atómicas.

masa: $m =$ masa del electrón

Longitud: $\frac{\hbar^2}{m e^2} = 0.529177\dots$ angstrom = 1 bohr

Tiempo: $\frac{\hbar^3}{m e^4} = 0.024189$ fs

Unidades derivadas

Energía: $\frac{m e^4}{\hbar^2} = 1$ Ha = 2 Ry ~ 26.7 eV

Sistema de Unidades (2)

En los ficheros de entrada de usan frecuentemente otras unidades distintas a las atómicas.

Por ejemplo, en el INPUT_PW.txt se lee

Variable: dt

Type: REAL

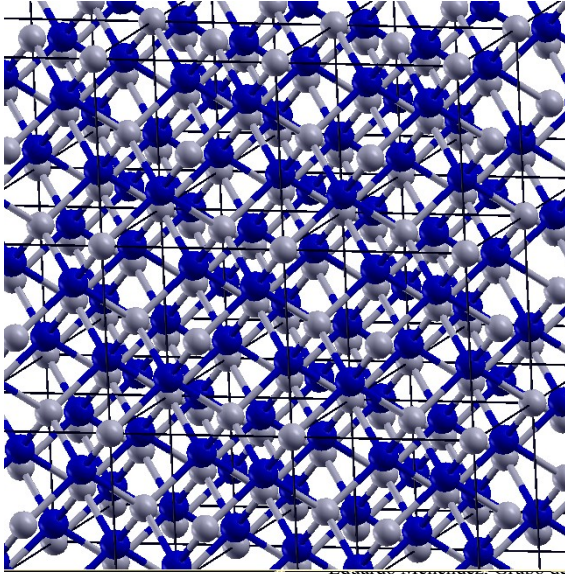
Default: 20.D0

Description: time step for molecular dynamics, in Rydberg atomic units
(1 a.u.= 4.8378×10^{-17} s : beware, CP and FPMD codes use
Hartree atomic units, half that much!!!)

Todas las conversiones se definen en [Modules/constants.f90](#)

Estructura cristalina: Ejemplo del ZnS

Quantum-ESPRESSO es un programa para sistemas periódicos.

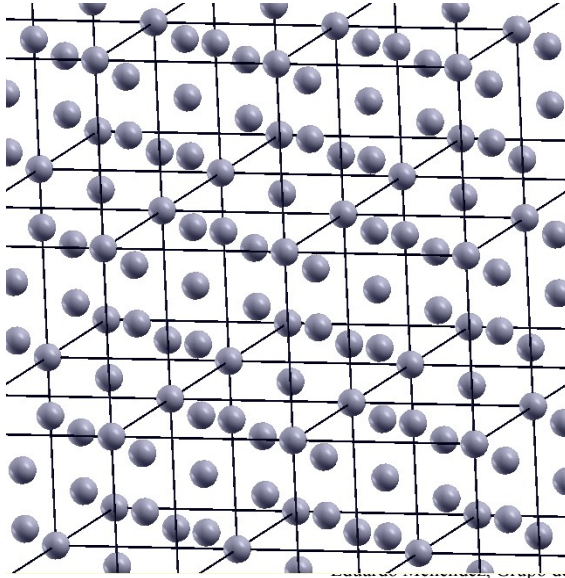


Nanomaterials

Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>

Estructura cristalina

Red simple (red de Bravais)



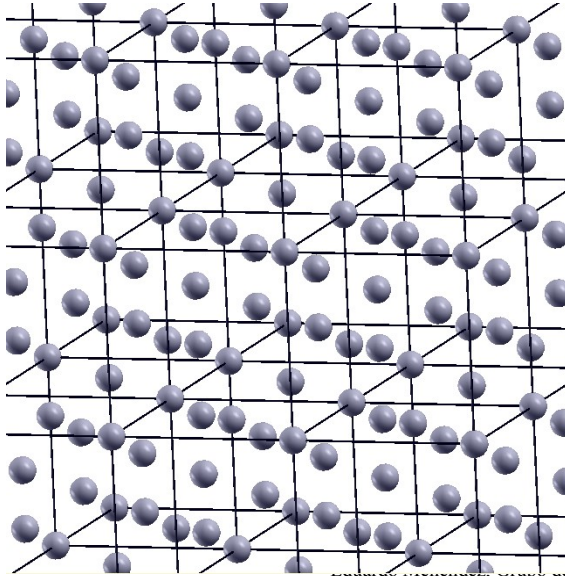
$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$
$$n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Nanomaterials

Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>

Estructura cristalina

Red de Bravais



x Base

$\vec{\tau}_a$ posición del átomo a respecto al punto de la red



$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

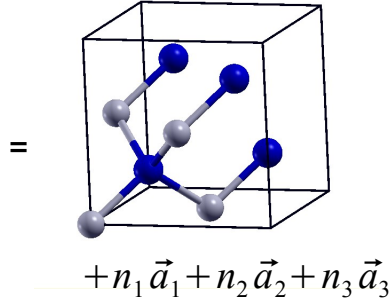
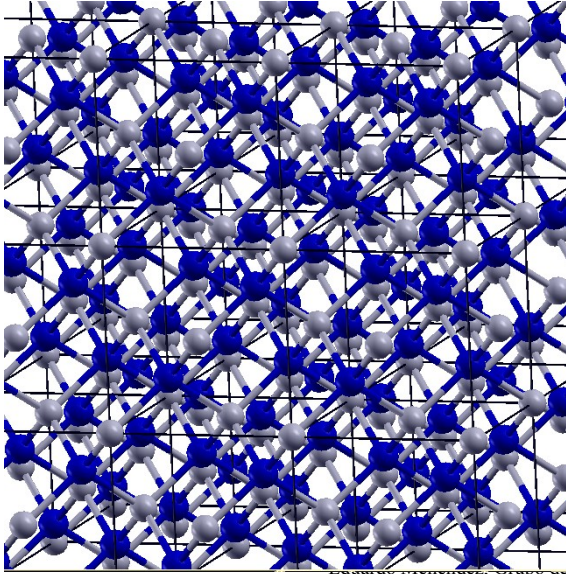
$$n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

$$\vec{R}_{n_1, n_2, n_3, a} = \vec{R} + \vec{\tau}_a$$

Nanomaterials

Estructura cristalina

El cristal se obtiene replicando periódicamente la celda elemental



Nanomaterials

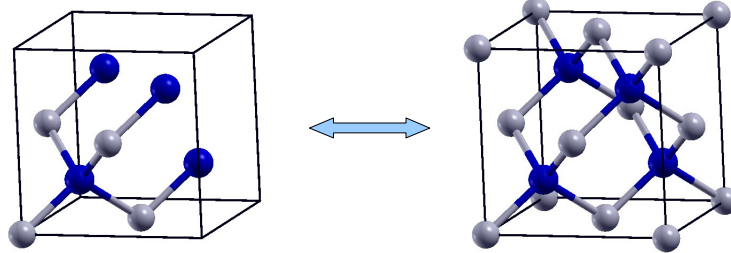
Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>

Estructura cristalina

En un programa de ondas planas como Q-E, la periodicidad es automática. Solamente hay que especificar

Vectores de la red: $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

y $\vec{\tau}_a$ para todos los átomos de la celda elemental

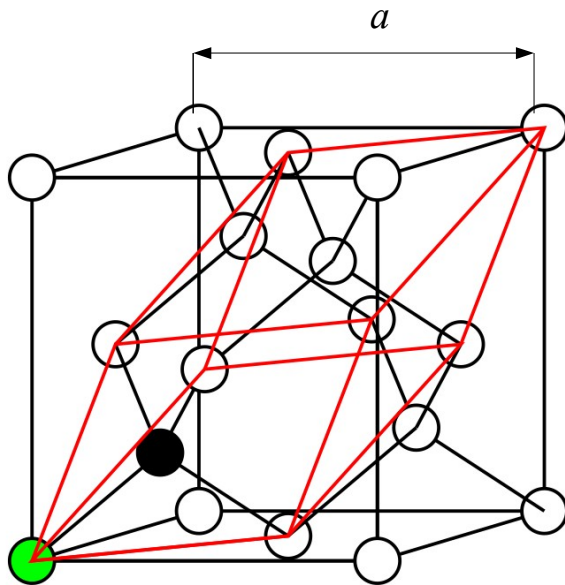


Representación redundante.
Todos los átomos de los
vértices son equivalentes.
También los de las caras.

Eduardo Menendez, Grupo de Nanomaterials

Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>

Celda primitiva vs celda convencional: ZnS



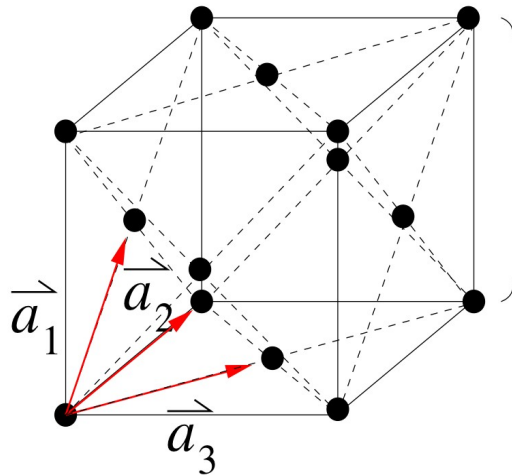
La celda demarcada por líneas rojas es la celda primitiva. Sólo contiene 2 átomos, indicados por la bola verde y la negra.

Coordenadas cartesianas

$$\vec{\tau}_1 = (0,0,0)$$

$$\vec{\tau}_2 = (a/4, a/4, a/4)$$

Vectores de la red con la celda primitiva



Vectores primitivos
Red fcc
(coordenadas cartesianas)

$$\vec{a}_1 = \left(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right)$$
$$\vec{a}_2 = \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}\right)$$
$$\vec{a}_3 = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right)$$

Coordenadas cristalinas (o directas o fraccionarias)

$$\vec{\tau} = x \vec{a}_1 + y \vec{a}_2 + z \vec{a}_3 = X \vec{i}_1 + Y \vec{j}_2 + Z \vec{k}_3$$

donde $\vec{i}_1 = (1, 0, 0)$, $\vec{i}_2 = (0, 1, 0)$, $\vec{i}_3 = (0, 0, 1)$.

X, Y, Z son coordenadas cartesianas, en angstrom o bohrs

En Q-ESPRESSO se definen asi

ATOMIC_POSITIONS {bohr} ! en bohrs

ATOMIC_POSITIONS {alat} ! en unidades de celldm(1)

ATOMIC_POSITIONS {angstrom} ! en angstrom

x, y, z son las coordenadas cristalinas. Son numeros entre 0 y 1

ATOMIC_POSITIONS {crystal}

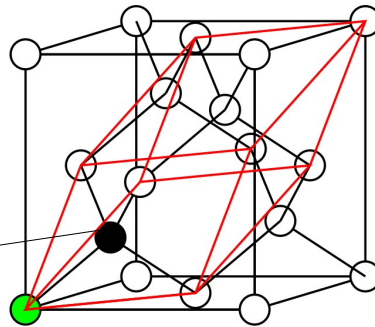
Definición de la estructura en Q-E

ZnS: red fcc --> ibrav = 2

5.65 Å = 10.68 bohrs

Especificación en el fichero de entrada:

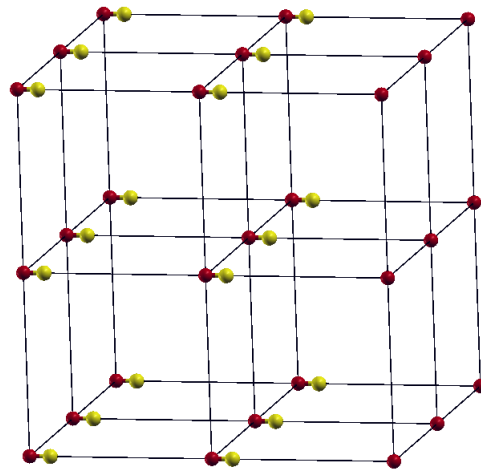
```
&SYSTEM
  ntyp=2, nat=2, ibrav=2,
  celldm(1)=10.68,
  /
...
ATOMIC_SPECIES
Zn 1. Zn.UPF
S 1. S.UPF
ATOMIC_POSITIONS
Zn 0.0 0.0 0.0
S 0.25 0.25 0.25
```



Moléculas aisladas

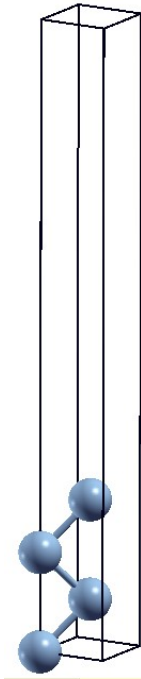
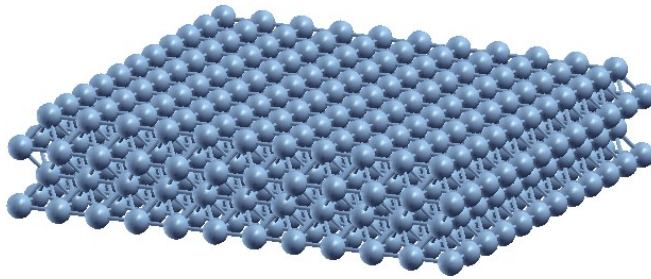
Especificación en el
fichero de entrada:

```
&CONTROL
pseudo_dir='./',
/
&SYSTEM
ibrav=1,nat=2,ntyp=2,
celldm(1)=20.0,
ecutwfc=24.D0,ecutrho =144.D0,
/
&ELECTRONS
/
ATOMIC_SPECIES
O 1.00 O.pz-rrkjus.UPF
C 1.00 C.pz-rrkjus.UPF
ATOMIC_POSITIONS {bohr}
C 2.256 0.0 0.0
O 0.000 0.0 0.0
K_POINTS {Gamma}
```



celldm(1) debe ser
"suficientemente grande"

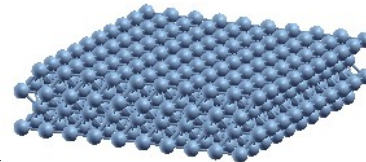
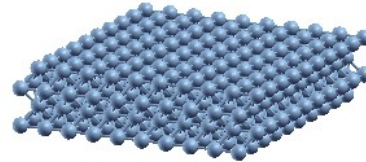
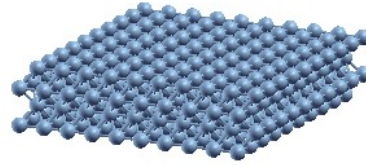
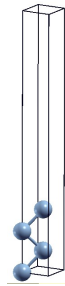
Superficies



Eduardo Menendez, Grupo de Nanomaterials

Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>

Sistema periódico realmente simulado en imitación de la superficie



El **espacio vacío** y el **número de planos atómicos** deben ser “suficientemente grandes”.

Eduardo Menendez, Grupo de Nanomateriales

Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>

Celda primitiva vs unidad asimétrica

TRITELLURIUM TELLURIUM(VI) OXIDE

TE4 O9

The crystal structure of Te₄O₉

75ACBCAR 31 1255 1259

Lindqvist O, Mark W, Moret J

9.320+5 9.320+5 14.486+5 90. 90. 120.

R3-H Esto parece ser el grupo 148

Te 1 6. 6c .3333 .6667 .48473+8

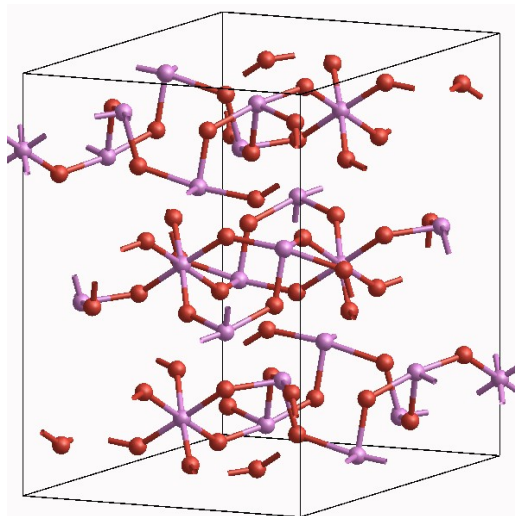
Te 2 4. 18f .73555+7 .02099+8 .42020+4

O 1 -2. 18f .365+1 .8458+10 .5667+6

O 2 -2. 18f .8218+10 .3153+11 .5928+5

O 3 -2. 18f .2581+11 .0282+10 .4543+5

Aparentemente sólo hay 5 átomos, sin embargo la celda elemental es la que se muestra a la derecha.



Celda primitiva vs unidad asimétrica

Bilbao Crystallographic Server → WYCKPOS → Wyckoff Positions

Te 1 6c .3333 .6667 .48473+8
 Te 2 18f .73555 .02099 .42020
 O 1 18f .365 .8458 .5667
 O 2 18f .8218 .3153 .5928
 O 3 18f .2581 .0282 .4543

Wyckoff Positions of Group 148 (R-3) [hexagonal ax

Quantum-ESPRESSO no sabe esto, no usa la información del grupo espacial.

El usuario debe generar todas las posiciones de la celda primitiva.

Multiplicity	Wyckoff letter	Site symmetry	Coordinates
			(0,0,0) + (2/3,1/3,1/3) + (1/3,2/3,2/3) + (x,y,z) (-y,x-y,z) (-x+y,-x,z) (-x,-y,-z) (y,-x+y,-z) (x-y,x,-z)
18	f	1	(x,y,z) (-y,x-y,z) (-x+y,-x,z) (-x,-y,-z) (y,-x+y,-z) (x-y,x,-z)
9	e	-1	(1/2,0,0) (0,1/2,0) (1/2,1/2,0)
9	d	-1	(1/2,0,1/2) (0,1/2,1/2) (1/2,1/2,1/2)
6	c	3.	(0,0,z) (0,0,-z)
3	b	-3.	(0,0,1/2)
3	a	-3.	(0,0,0)

If you want to see the Wyckoff position in other setting, click [here](#)

Bilbao Crystallographic Server
<http://www.cryst.ehu.es>

Eduardo Menendez, Grupo de Nanomaterials

30

Eduardo Menendez, GNM, Universidad de Chile. <http://www.gnm.cl>