

# **Practica: Instalación de Quantum-ESPRESSO y otros programas útiles**

## Hagamos un directorio para el tutorial y obtengamos las fuentes de los programas

```
cd
mkdir TutorialQ-E
mkdir TutorialQ-E/ChemUtils
mkdir TutorialQ-E/Conferencias
mkdir TutorialQ-E/Practicas
cd TutorialQ-E/ChemUtils
scp espresso@192.168.1.16:Fuentes/*
(el password es espresso)
cd ~/TutorialQ-E
cd -r espresso@192.168.1.16:TutorialQ-E/Practicas .
ls
```

### Deberá ver algo como esto

```
ls
SERIAL-11-nov-2007  espresso-4.0.4.tar.gz
l_mkl_p_10.0.2.018.tgz
SERIAL-feb-2009    l_cprof_p_11.0.081.tgz
l_mkl_p_10.1.1.019.tar.gz
download.sh        l_fc_p_10.1.015.tar.gz
```

## Compilación de Quantum-ESPRESSO

Verifique que tiene un compilador de Fortran 95, dando el comando gfortran

Si tiene gfortran instalado, verá algo como esto  
Macintosh:ChemUtils eariel\$ gfortran  
gfortran: no hay ficheros de entrada

Si no lo tiene instalado, vere algo como  
Macintosh:ChemUtils eariel\$ gfortran  
-bash: gfortran: command not found

Si no tiene gfortran, pruebe con f95, g95, ifort. Si todo da negativo, debe instar uno de esos compiladores. En ubuntu la instalación es muy facil, se usa el comando

```
sudo apt-get install gfortran
```

## Compilación de Quantum-ESPRESSO

```
cd $HOME/TutorialQ-E/ChemUtils
tar zxf espresso-4.0.4.tar.gz
cd espresso-4.0.4
./configure --disable-parallel
make pw
ls bin
```

Debe ver varios archivos, entre ellos pw.x. Ejecutelo

```
bin/pw.x
```

Si en pantalla aparece algo como

```
Program PWSCF          v.4.0.4  starts ...
Today is 12Feb2009 at 12:32:40
```

```
For Norm-Conserving or Ultrasoft (Vanderbilt)
Pseudopotentials or PAW
```

Entonces funciona. De Ctrl+C y de el comando

```
make all
```

## Compilación de Quantum-ESPRESSO

La compilación toma un rato. Mientras ocurre, abra otra ventana de terminal y continúe la práctica.

Agregue el directorio de los ejecutables de ESPRESSO a la variable PATH

```
cd
```

```
PATH=$PATH:$HOME/TutorialQ-E/ChemUtils/espesso-4.0.4/bin
```

Verifique si funciona `pw.x`

```
pw.x
```

Si no funciona es que usted tiene `pw.x` en un directorio que no se llama exactamente igual que en este ejemplo.

Para hacer permanente el cambio agregue la línea

```
PATH=$PATH:$HOME/TutorialQ-E/ChemUtils/espesso-4.0.4/bin
```

al final del archivo `$HOME/.bashrc`. Para que tenga efecto, deberá abrir otro terminal o dar el comando

```
source $HOME/.bashrc
```

## Instalar el visualizador de estructuras. XCRYSDEN

```
cd $HOME/TutorialQ-E/ChemUtils  
ls
```

Verifique que tiene el archivo XcrySDen-1.5.17-bin-semishared.tar.gz

```
tar xzf XcrySDen-1.5.17-bin-semishared.tar.gz  
cd XcrySDen-1.5.17-bin-semishared  
./xcConfigure
```

Siga las instrucciones. A la pregunta de si tiene CRYSTAL instalado responda no.

```
source ~/.bashrc
```

Ahora ejecute

```
xcrysdn
```

Si aparece una ventana con una aplicacion, todo esta OK. Salga del xcrysdn a traves del Menu File/Exit.

## Instalar el visualizador de estructuras. XCRYSDEN

```
cd $HOME/TutorialQ-E  
mkdir Practical
```

Con su editor de texto preferido haga el siguiente archivo con el nombre CO.scf.in

```
&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}
```

## Visualizar una estructura con XCRYSDEN

Ahora escriba el comando

```
xcrysden
```

y abra la estructura usando los menus

File/Open Pwscf/Open Pwscf Input File, y de click en OK. ¿Que significa este OK?

Salga con el Menu File/Exit. Ahora vuelva a visualizar la estructura usando el comando

```
xcrysden --pwi CO.scf.in
```

¿Cual es la diferencia?

Explore el menu Display, en particular marque Crystal Cells.

Presionando el boton izquierdo del raton y arrastrando puede rotar la estructura.

## Visualizar una estructura con XCRYSDEN

Explore los controles de la barra lateral derecha: Zoom+, Rot +X, etc.

Explore los controles de la barra inferior. En particular, identifique el control que permite mostrar o esconder los átomos equivalentes por simetría traslacional (en los vértices de la celda).

Explore el menú Modify/Number of units drawn.

El sitio web del XCRYSDEN es <http://www.xcrysden.org>

Ahi encontrara manuales y otras informaciones.

## Estructura el input file

Exploremos el archivo CO.scf.in y trate de entender su sintaxis. Lo repito aqui con comentarios (**pw.x entiende como comentario todo lo que esta en un linea desde ! hasta el final**).

```
&CONTROL
pseudo_dir='./',
! directorio donde estan los pseudopotenciales
/
&SYSTEM
ibrav=1, ! red de Bravais cubica simple
nat=2,   ! 2 atomos en la celda
ntyp=2,  ! 2 tipos de atomos
celldm(1)=20.0, ! constante de la red en bohrs
ecutwfc=24.D0,ecutrho =144.D0, ! energias de corte
/
```

Continua en la proxima pagina

## Estructura del input file

```
&ELECTRONS
/
ATOMIC_SPECIES
O 1.00 O.pz-rrkjus.UPF
    ! relaciona elemento O con el pseudopotencial
C 1.00 C.pz-rrkjus.UPF    ! idem para el C

ATOMIC_POSITIONS {bohr}
C 2.256 0.0 0.0
    ! coordenadas cartesianas x,y,z en bohrs
O 0.000 0.0 0.0
K_POINTS {Gamma}    ! calculo con punto gamma.
                    ! la sintaxis se explica en
                    ! espresso-4.0.4/Doc/INPUT_PW.txt
```

### Abra un terminal nuevo y

```
cd TutorialQ-E/ChemUtils/espresso-4.0.4/Doc
less INPUT_PW.txt
```

## Corriendo pw.x

En este punto podemos verificar como correr el programa pw.x con el archivo de entrada.

```
pw.x < CO.scf.in |tee CO.scf.out
```

Note que el comando “tee” saca la salida por pantalla y a la vez lo escribe en el archivo CO.scf.out . Si no quiere ver la salida en pantalla, reemplaze “|tee “ por “>” .

Examine la salida ¿Por que dio error? ¿Que falta?

Vea la pagina siguiente

## Corriendo pw.x: Encontrando el error

```
Program PWSCF      v.4.0.4  starts ...
  Today is 16Feb2009 at 10:46:40
```

```
  For Norm-Conserving or Ultrasoft (Vanderbilt)
Pseudopotentials or PAW
```

```
Current dimensions of program pwscf are:
Max number of different atomic species (ntypx) = 10
Max number of k-points (npx) = 40000
Max angular momentum in pseudopotentials (lmaxx) = 3
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```
from readpp : error #      29
file ./O.pz-rrkjus.UPF not found
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```
stopping ...
```

## Corriendo pw.x: Arreglar input file

Corrija el problema modificando la linea `pseudo_dir` o copiando los pseudopotenciales en el directorio `./`

Encontrara los pseudopotenciales en el directorio  
BLABLABLA/espresso-4.0.4/pseudo

## Uso de la interface gráfica

PWGUI = Plane Wave Graphical User Interface

Ahora veamos si funciona PWGUI

```
cd $HOME/TutorialQ-E/ChemUtils/espresso-4.0.4/PWgui-4.0.1
./pwgui
```

Si no funciona, siga los comentarios aparecidos en pantalla. Si no basta, el archivos README e INSTALL.

hay que instalar

```
Tcl + Tk >=8.3    (usar la 8.3, no la 8.5)
Itcl+Itk >=3.1
Iwidgets >=3.0 (con la 4 funciona)
```

En Ubuntu se instala con el comando

```
sudo apt-get install tcl8.3 tk8.3 itcl3.1 itk3.1
iwidgets4
```

Ahora ejecute.

```
./pwgui
```

## Uso de la interface gráfica

Si PWGUI funcionó con

```
./pwgui
```

entonces agregue el directorio BLABLABLA/PWgui-4.0.1 a la variable PATH y pongalo en el ~/.bashrc como se ha hecho antes. Con eso podra llamar a pwgui desde cualquier directorio.

# Practica: Instalación de Quantum-ESPRESSO y otros programas útiles

## Hagamos un directorio para el tutorial y obtengamos las fuentes de los programas

```
cd
mkdir TutorialQ-E
mkdir TutorialQ-E/ChemUtils
mkdir TutorialQ-E/Conferencias
mkdir TutorialQ-E/Practicas
cd TutorialQ-E/ChemUtils
scp espresso@192.168.1.16:Fuentes/*
(el password es espresso)
cd ~/TutorialQ-E
cd -r espresso@192.168.1.16:TutorialQ-E/Practicas .
ls
```

## Deberá ver algo como esto

```
ls
SERIAL-11-nov-2007  espresso-4.0.4.tar.gz
l_mkl_p_10.0.2.018.tgz
SERIAL-feb-2009    l_cprof_p_11.0.081.tgz
l_mkl_p_10.1.1.019.tar.gz
download.sh        l_fcp_10.1.015.tar.gz
```

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

## Compilación de Quantum-ESPRESSO

Verifique que tiene un compilador de Fortran 95, dando el comando gfortran

Si tiene gfortran instalado, verá algo como esto  
Macintosh:ChemUtils eariel\$ gfortran  
gfortran: no hay ficheros de entrada

Si no lo tiene instalado, vere algo como  
Macintosh:ChemUtils eariel\$ gfortran  
-bash: gfortran: command not found

Si no tiene gfortran, pruebe con f95, g95, ifort. Si todo da negativo, debe instar uno de esos compiladores. En ubuntu la instalación es muy facil, se usa el comando

```
sudo apt-get install gfortran
```

## Compilación de Quantum-ESPRESSO

```
cd $HOME/TutorialQ-E/ChemUtils
tar xzf espresso-4.0.4.tar.gz
cd espresso-4.0.4
./configure --disable-parallel
make pw
ls bin
```

Debe ver varios archivos, entre ellos pw.x. Ejecutelo

```
bin/pw.x
```

Si en pantalla aparece algo como

```
Program PWSCF      v.4.0.4  starts ...
Today is 12Feb2009 at 12:32:40
```

```
For Norm-Conserving or Ultrasoft (Vanderbilt)
Pseudopotentials or PAW
```

Entonces funciona. De Ctrl+C y de el comando

```
make all
```

## Compilación de Quantum-ESPRESSO

La compilación toma un rato. Mientras ocurre, abra otra ventana de terminal y continúe la práctica.

Agregue el directorio de los ejecutables de ESPRESSO a la variable PATH

```
cd
PATH=$PATH:$HOME/TutorialQ-E/ChemUtils/espresso-
4.0.4/bin
```

Verifique si funciona `pw.x`

```
pw.x
```

Si no funciona es que usted tiene `pw.x` en un directorio que no se llama exactamente igual que en este ejemplo.

Para hacer permanente el cambio agregue la línea

```
PATH=$PATH:$HOME/TutorialQ-E/ChemUtils/espresso-
4.0.4/bin
```

al final del archivo `$HOME/.bashrc`. Para que tenga efecto, deberá abrir otro terminal o dar el comando

```
source $HOME/.bashrc
```

Eduardo Menendez, Grupo de Nanomaterials

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

## Instalar el visualizador de estructuras. XCRYSDEN

```
cd $HOME/TutorialQ-E/ChemUtils  
ls
```

Verifique que tiene el archivo XcrySDen-1.5.17-bin-semishared.tar.gz

```
tar xzf XcrySDen-1.5.17-bin-semishared.tar.gz
```

```
cd XcrySDen-1.5.17-bin-semishared
```

```
./xcConfigure
```

Siga las instrucciones. A la pregunta de si tiene CRYSTAL instalado responda no.

```
source ~/.bashrc
```

Ahora ejecute

```
xcrysdn
```

Si aparece una ventana con una aplicacion, todo esta OK. Salga del xcrysdn a traves del Menu File/Exit.

### Instalar el visualizador de estructuras. XCRYSDEN

```
cd $HOME/TutorialQ-E
```

```
mkdir Practical
```

Con su editor de texto preferido haga el siguiente archivo con el nombre CO.scf.in

```
&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}
```

Eduardo Menendez, Grupo de Nanomaterials

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

### Visualizar una estructura con XCRYSDEN

Ahora escriba el comando

```
xcrysdn
```

y abra la estructura usando los menus

File/Open Pwscf/Open Pwscf Input File, y de click en OK. ¿Que significa este OK?

Salga con el Menu File/Exit. Ahora vuelva a visualizar la estructura usando el comando

```
xcrysdn --pwi CO.scf.in
```

¿Cual es la diferencia?

Explore el menu Display, en particular marque Crystal Cells.

Presionando el boton izquierdo del raton y arrastrando puede rotar la estructura.

## Visualizar una estructura con XCRYSDEN

Explore los controles de la barra lateral derecha: Zoom+, Rot +X, etc.

Explore los controles de la barra inferior. En particular, identifique el control que permite mostrar o esconder los átomos equivalentes por simetría traslacional (en los vértices de la celda).

Explore el menú Modify/Number of units drawn.

El sitio web del XCRYSDEN es <http://www.xcrysden.org>

Ahi encontrara manuales y otras informaciones.

### Estructura el input file

Exploremos el archivo CO.scf.in y trate de entender su sintaxis. Lo repito aqui con comentarios (**pw.x entiende como comentario todo lo que esta en un linea desde ! hasta el final**).

```
&CONTROL
pseudo_dir='./',
! directorio donde estan los pseudopotenciales
/
&SYSTEM
ibrav=1, ! red de Bravais cubica simple
nat=2,   ! 2 atomos en la celda
ntyp=2, ! 2 tipos de atomos
celldm(1)=20.0, ! constante de la red en bohrs
ecutwfc=24.D0,ecutrho =144.D0, ! energias de corte
/
```

Continua en la proxima pagina

## Estructura del input file

```
&ELECTRONS
/
ATOMIC_SPECIES
O 1.00 O.pz-rrkjus.UPF
! relaciona elemento O con el pseudopotencial
C 1.00 C.pz-rrkjus.UPF ! idem para el C

ATOMIC_POSITIONS {bohr}
C 2.256 0.0 0.0
! coordenadas cartesianas x,y,z en bohrs
O 0.000 0.0 0.0
K_POINTS {Gamma} ! calculo con punto gamma.
! la sintaxis se explica en
! espresso-4.0.4/Doc/INPUT_PW.txt
```

### Abra un terminal nuevo y

```
cd TutorialQ-E/ChemUtils/espresso-4.0.4/Doc
less INPUT_PW.txt
```

## Corriendo pw.x

En este punto podemos verificar como correr el programa pw.x con el archivo de entrada.

```
pw.x < CO.scf.in |tee CO.scf.out
```

Note que el comando “tee” saca la salida por pantalla y a la vez lo escribe en el archivo CO.scf.out . Si no quiere ver la salida en pantalla, reemplaze “|tee “ por “>” .

Examine la salida ¿Por que dio error? ¿Que falta?

Vea la pagina siguiente

## Corriendo pw.x: Encontrando el error

```
Program PWSCF      v.4.0.4  starts ...  
Today is 16Feb2009 at 10:46:40
```

```
For Norm-Conserving or Ultrasoft (Vanderbilt)  
Pseudopotentials or PAW
```

```
Current dimensions of program pwscf are:  
Max number of different atomic species (ntypx) = 10  
Max number of k-points (npk) = 40000  
Max angular momentum in pseudopotentials (lmaxx) = 3
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```
from readpp : error #      29  
file ./O.pz-rrkjus.UPF not found
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```
stopping ...
```

**Corriendo pw.x: Arreglar input file**

Corrija el problema modificando la linea pseudo\_dir o copiando los pseudopotenciales en el directorio ./

Encontrara los pseudopotenciales en el directorio  
BLABLABLA/espresso-4.0.4/pseudo

## Uso de la interface gráfica

PWGUI = Plane Wave Graphical User Interface

Ahora veamos si funciona PWGUI

```
cd $HOME/TutorialQ-E/ChemUtils/espresso-4.0.4/PWgui-4.0.1
./pwgui
```

Si no funciona, siga los comentarios aparecidos en pantalla. Si no basta, el archivos README e INSTALL.

hay que instalar

Tcl + Tk >=8.3 (usar la 8.3, no la 8.5)

Itcl+Itk >=3.1

Iwidgets >=3.0 (con la 4 funciona)

En Ubuntu se instala con el comando

```
sudo apt-get install tcl8.3 tk8.3 itcl3.1 itk3.1
iwidgets4
```

Ahora ejecute.

```
./pwgui
```

## Uso de la interface gráfica

Si PWGUI funcionó con

```
./pwgui
```

entonces agregue el directorio BLABLABLA/PWgui-4.0.1 a la variable PATH y pongalo en el ~/.bashrc como se ha hecho antes. Con eso podra llamar a pwgui desde cualquier directorio.