

Práctica 2.

Creación y visualización de estructuras.

Ubicación de la práctica

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

```
scp -r espresso@192.168.1.16:TutorialQ-E/Conferencias/c?.pdf .
```

Copie las slides de esta práctica, abralla con evince, y haga un directorio para esta práctica.

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

```
scp espresso@192.168.1.16:TutorialQ-E/Practicas/pract2.pdf .
```

```
evince pract2.pdf &
```

```
cd ..
```

```
scp -r espresso@192.168.1.16:TutorialQ-E/Practicas/Practica2 .
```

```
cd Practica2
```

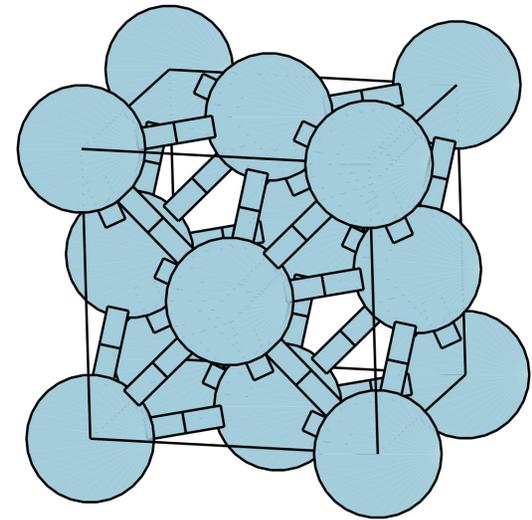
Generación de estructuras cristalinas: Cu

Arregle el archivo `cu.scf.cg.in` para poder visualizar la estructura del cobre. Cu (red fcc, $a = X$ angstroms). `ibrav = ?`

Debe arreglar algunas partes del archivo de entrada.

```
&system  
ibrav = x,  
celldm(1) = 6.73,  
nat = x,  
ntyp = x,
```

Para ayudarse, abra una terminal nueva y en esta, busque y visualice con `less`, el archivo `BLABLABLA/espresso-4.0.4/Doc/INPUT_PW.txt`



Visualice con : `xcrysden --pwi cu.scf.cg.in`

Generación de estructuras cristalinas: Fe

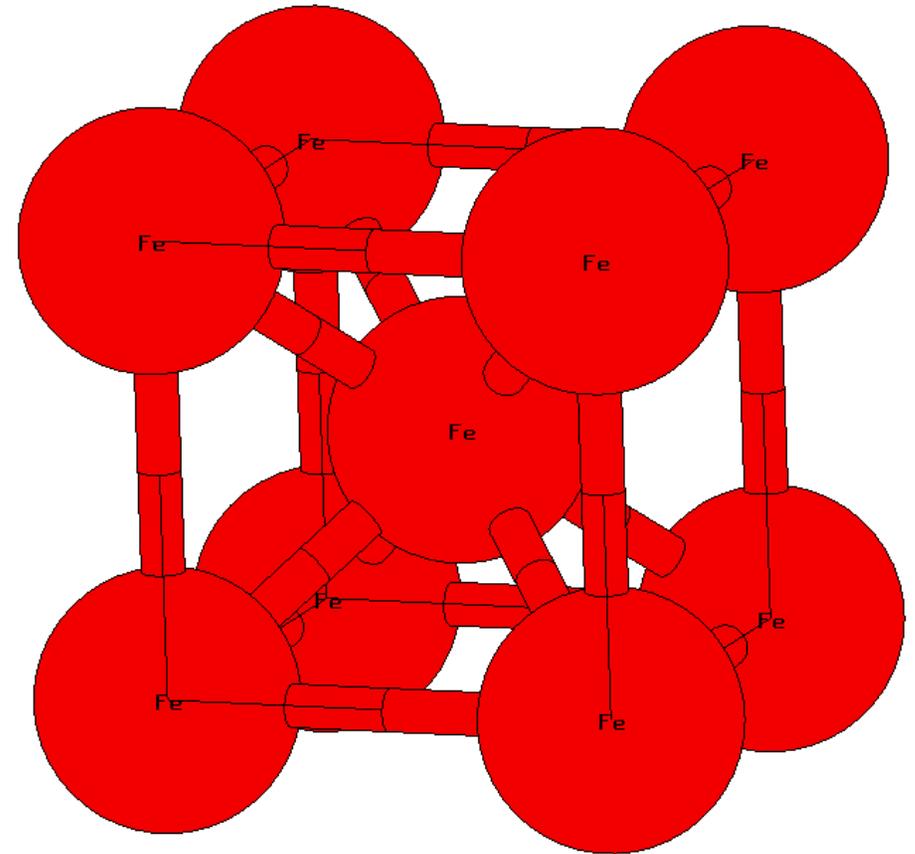
Hagamos el hierro, cuya red es tipo bcc. Copie el archivo del cu

cp cu.scf.cg.in fe.scf.in

y modifíquelo para que sirva para Fe.

Datos: red bcc (**ibrav = ?**),
a= 2.76 angstroms **celldm(1)= ?**).

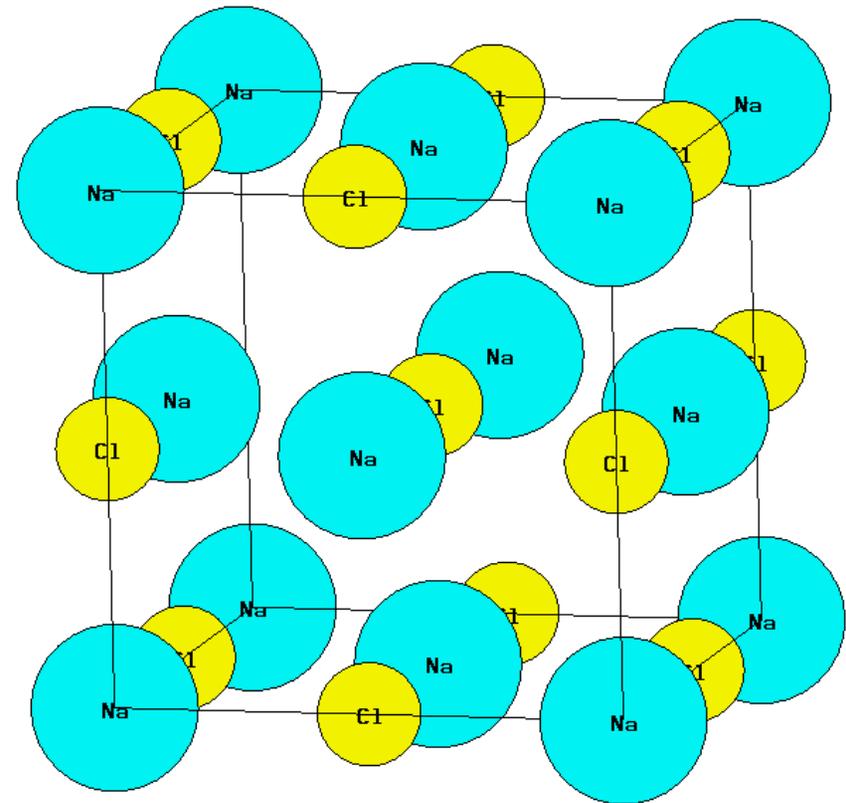
Visualice y genere una figura en algún formato de imagen (JPG, EPS, PNG, etc). Esto se hace a través del menú **File/Print Crystal** del xcrystden.



Tarea: Haga una imagen de la estructura de NaCl

NaCl (red fcc con base, $a=5.64$ angstrom) ibrav = ?

Intente hacerlo a partir del input para Cu. Si no puede, arregle el archivo temp/nacl.scf.in



Estructura a partir de una base de datos.

Te4O9: Estructura de la base ICSD

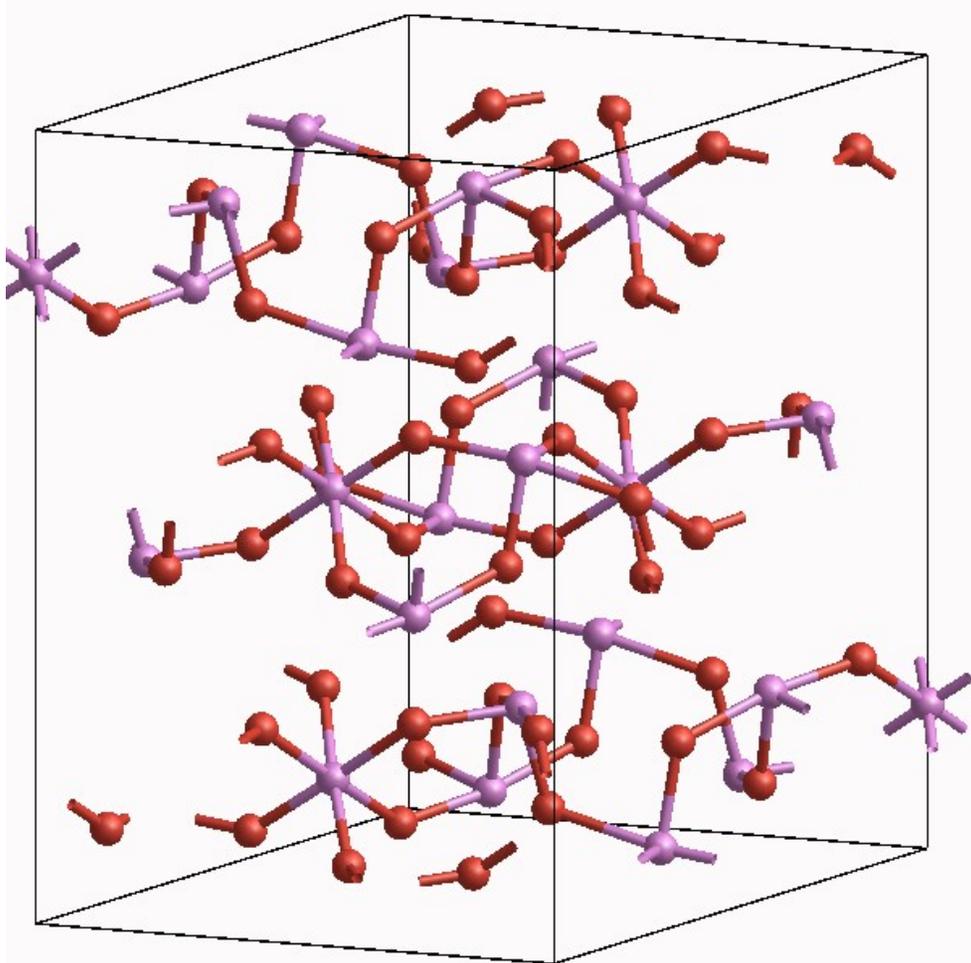
```
N 1885 1 TRITELLURIUM TELLURIUM(VI) OXIDE
F 1885 1 TE4 O9
U 1885 1 The crystal structure of Te$/4 O$/9
Q 1885 1 75ACBCAR 31 1255 1259
A 1885 1 Lindqvist O
A 1885 2 Mark W
A 1885 3 Moret J
E 1885 1 9.320+5 9.320+5 14.486+5 90. 90. 120. 6 5.9
R 1885 1 R3-H Esto parece ser el grupo 148
P 1885 1 Te 1 6. 6c .3333 .6667 .48473+8 B
P 1885 2 Te 2 4. 18f .73555+7 .02099+8 .42020+4 B
P 1885 3 O 1 -2. 18f .365+1 .8458+10 .5667+6 B
P 1885 4 O 2 -2. 18f .8218+10 .3153+11 .5928+5 B
P 1885 5 O 3 -2. 18f .2581+11 .0282+10 .4543+5 B
```

Debe usar un programa para generar todas las coordenadas de la celda. Podemos usar gdis, un visualizador/builder que esta en las distribuciones de Linux. Para esto usaremos el archivo te4o9.gin con el contenido

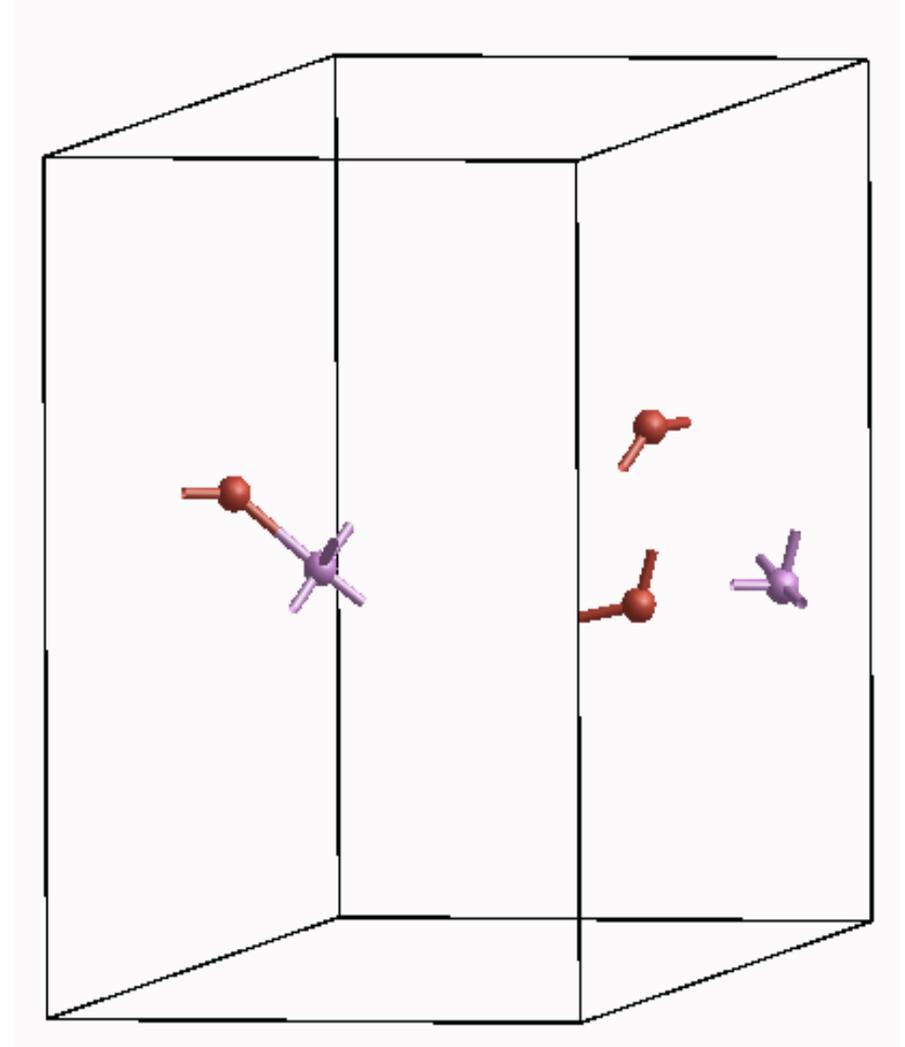
```
single
cell
9.320 9.320 14.486 90. 90. 120.
frac
Te1 0.33333333 0.66666667 0.48473
Te2 0.73555 0.02099 0.42020
O 0.365 0.8458 0.5667
O 0.8218 0.3153 0.5928
O 0.2581 0.0282 0.4543
space
148
```

Visualizamos el archivo anterior con el comando

```
gdis t4o9.gin
```



Celda convencional



Parte asimétrica

Visualice
la parte
asimétrica

The screenshot shows the 'GTK Display Interface for S' window. The main view is a 3D unit cell with axes labeled 'a', 'b', and 'c'. Inside the cell, several atoms are visible, represented by red and purple spheres with sticks. A 'normal' label is at the bottom right of the cell. On the left, a panel titled 'model_0' contains a 'Symmetry' section with the following data:

Model : Symmetry	
space group	R-3
system	Trigonal
a	9.3200
b	9.3200
c	14.4860
alpha	90.00
beta	90.00
gamma	120.00
volume	1089.71

Below the symmetry data are two checkboxes: 'Guess Pointgroup' and 'Asymmetric unit', both currently unchecked. At the bottom of the panel is a 'Select : Atoms' dropdown menu.

Para generar todas las posiciones, salve con formato SIESTA y extension fdf. Examine el archivo resultante. Note que gdis salva la celda convencional, y esto en ciertos casos resulta en un calculo muy costoso. Para generar la celda primitiva (menos atomos) es necesario otro programa como GULP.

Ejemplos en la distribución de Quantum-ESPRESSO

Los ejemplos de espresso barren la mayor parte de las capacidades del paquete.

Cambiase al directorio de Quantum-ESPRESSO y

```
cd BLABLABLA/espresso-4.0.4  
ls  
cd examples/  
less README
```

Lea rapidamente el README. Ahora vamos a correr el ejemplo 01.

Ejemplo 01

```
cd example01
less README      (infórmese del contenido del ejemplo)
./run_example
```

#Entendamos lo que hizo run_example

```
less run_example
```

run_example es un archivo de comandos (script) del shell sh

Ver en especial las secciones

```
..../environment_variables
```

```
# required executables and pseudopotentials
```

```
# check for executables
```

```
for diago in david cg ; do
```

```
    cat > si.scf.$diago.in << EOF
```

```
$PW_COMMAND < si.scf.$diago.in > si.scf.$diago.out
```

Examinemos lo que hizo run_example. Para esto abra una nueva terminal

y desde el directorio example01 haga

```
cd results
```

```
less si.scf.david.in
```

Opcional: Vea en el archivo INPUT_PW.txt la explicacion de cada una de las keywords utilizadas.

#Visualizacion de la estructura

```
xcrysden --pwi si.scf.david.in
```

Si no se ven los enlaces Si-Si, ir al menu Modify/Atomic radius y aumentar

chemical connectivity factor a 1.5.

Jugar un poco con la estructura

#Veamos como un mínimo error (frecuente) del input cambia la estructura.

```
gedit si.scf.david.in
```

Cambiar **ATOMIC_POSITIONS** -> **ATOMIC_POSITIONS bohr**
visualizar de nuevo. ¿Cual es el error?

```
ls $HOME/tmp/ # Vea lo que hay en el directorio outdir
```

6) Editemos si.scf.david.in, borremos bohr para dejarlo en el estado original y cambiemos : **outdir='.'**,

Visualicemos con xcrysden para asegurarnos.

Ahora corramos manualmente pw.x

```
pw.x <si.scf.david.in >si.scf.david.out2 &
```

El signo & permite correr el background. Inspeccione la salida

```
less si.scf.david.out2
```