

Metody ab initio w fizyce ciała stałego

Laboratorium 1

Gabriel Kuderowicz

29.10.2025

1 Cel

- Omówienie zasad zaliczenia.
- Przypomnienie komend w systemach UNIX.
- Zalogowanie się na serwer obliczeniowy, szukanie informacji o strukturze krystalicznej materiału, wizualizacja komórki elementarnej.
- Zapoznanie się z pakietem obliczeniowym WIEN2k.

2 Logowanie

Obliczenia będą prowadzone na serwerach z systemem operacyjnym typu UNIX, do których można się dostać z sieci wydziałowej lub pośrednio przez Taurusa.

1. Logowanie z terminala

```
ssh -X kuderowiczg@172.20.207.115
```

Opcja `-X` pozwala korzystać z interfejsów graficznych, gabriel to moja nazwa użytkownika, a 172.20.207.115 to IP serwera.

Prowadzenie obliczeń równoległych w WIEN2k wymaga możliwości logowania się bez hasła ze swojego konta jeszcze raz na nie, dlatego należy wygenerować klucz ssh i dodać go do listy zaufanych. Nie będzie to istotne przy obliczeniach prostych układów jak aluminium.

```
ssh-keygen -t rsa  
ssh-copy-id -i ~/.ssh/id_rsa.pub ~/.ssh/authorized_keys
```

2. Logowanie z Windowsa wymaga dodatkowego programu, na przykład PuTTY (sam terminal) czy WinSCP (file commander). Do korzystania z interfejsów graficznych z Windowsa można skorzystać z programu MobaXterm.

3. Przydatne komendy w bashu z przykładami:

- `cp` - kopiowanie
kopiowanie pliku dane.dat do dane2.dat oraz kopiowanie całego folderu tmp do tmp2, opcja `-r` oznacza rekurencyjnie całą zawartość drzewa folderów

```
cp dane.txt dane2.txt
cp -r tmp tmp2
```

- rm - usuwanie

Uwaga, od razu działa i usuwa na zawsze! Nie ma zapytania czy na pewno chcemy coś usunąć oraz nie ma kosza!

```
rm dane.txt
```

- scp - wysyłanie pliku na inny komputer przez internet

przesłanie pliku dane.dat (jest w obecny w katalogu, z którego wywołujemy scp) na konto użytkownika kuderowicz na serwerze 172.20.207.115, do folderu /home/gabriel/Documents

```
scp dane.txt kuderowiczg@172.20.207.115:/home/staff/kuderowiczg/Documents
```

- scp - pobieranie pliku z innego komputera przez internet

pobranie pliku dane.dat (jest w obecny na koncie użytkownika gabriel na serwerze 172.20.207.115 w katalogu /home/staff/kuderowiczg/Documents) na komputer do folderu, w którym wywołano scp (kropka na końcu)

```
scp kuderowiczg@172.20.207.115:/home/staff/kuderowiczg/dane.txt .
```

- ls - wyświetl zawartość folderu

wyświetlenie zawartość obecnego folderu wraz z opcją -a pokazującą ukryte pliki, na przykład zaczynające się kropką

```
ls -a
```

- pwd - wyświetl adres obecnego folderu

- ps - pokaż działające programy

wyświetlenie procesów użytkownika gabriel

```
ps -au gabriel
```

- grep - wyszukaj tekst w pliku

Jest to jedno z najlepszych narzędzi do wyszukiwania konkretnych informacji w dużych plikach. wyświetlenie wierszy z pliku Al.scf, w których występuje wyrażenie :ENE

```
grep ":ENE" Al.scf
```

przekierowanie wyniku komendy z poprzedniego przykładu do pliku

```
grep ":ENE" Al.scf > ene.dat
```

dopisanie wyniku komendy z poprzedniego przykładu do końca pliku

```
grep ":ENE" Al.scf >> ene.dat
```

przekazania outputu do następnej komendy (pionowa kreska), na przykład do komendy tail -N, która wyświetli ostatnie N wierszy (tutaj 3 ostatnie); podobnie head do wyświetlania wierszy na początku pliku

```
grep ":ENE" Al.scf | tail -3
```

- chmod - zmień pozwolenia

nadanie skryptowi praw do wykonania się i jego wywołanie

```
chmod 755 run.sh
```

```
run.sh
```

- program ImageMagic zawiera użyteczne narzędzia do obróbki plików graficznych
wyświetl plik png

```
display image.png
```

konwersja do pdf

```
convert image.png image.pdf
```

przycięcie do wymiaru 600x600 (zwróci kilka plików z rozdzielonymi częściami)

```
convert image.png -crop 600x600 image2.png
```

- wyświetlanie pdf - evince lub okular

```
evince image.pdf
```

3 Struktura krystaliczna

Metody ab initio pozwalają wyznaczyć optymalną strukturę danego związku od zera, ale jeżeli to nie jest celem w samym sobie, punktem wyjścia do obliczeń najczęściej jest struktura znaleziona w eksperymencie dyfrakcji czy w bazach danych. Jedną z takich baz jest na przykład Materials Project, w której po zalogowaniu można wyszukać związek i pobrać plik .cif, który definiuje strukturę krystaliczną. W dodatku bazy mogą zawierać wyniki obliczeń struktury elektronowej, fononowej i innych własności.

Ponadto baza Bilbao Crystallographic Server zawiera wiele narzędzi do tworzenia i analizowania struktur. Na przykład można zobaczyć dozwolone pozycje atomowe czy punkty wysokiej symetrii w danej grupie przestrzennej.

Zdefiniowany plik wejściowy do programów warto podejrzeć, na przykład za pomocą programów XCrysDen czy VESTA i sprawdzić czy poprawnie zapisaliśmy strukturę.

Z powodu wielu różnych przybliżeń w obliczeniach w ramach DFT, struktura eksperymentalna często nie jest optymalna i użycie jej będzie prowadzić do pojawienia się stosunkowo dużych sił działających na atomy. Badanie subtelniejszych własności takich jak fonony czy nadprzewodnictwo wymaga zrelaksowania struktury, czyli zmiany objętości i pozycji atomowych tak, żeby zminimalizować siły i ciśnienie w komórce.

4 Obsługa pakietu WIEN2k

W WIEN2k są zaimplementowane metody all-electron i full-potential. Więcej informacji o pakiecie można znaleźć na stronie <http://www.wien2k.at/> i dokumentację pod [linkiem](#). Pakiet można obsługiwać za pomocą interfejsu graficznego w przeglądarce lub z terminala. Na pierwszych zajęciach skorzystamy z trybu graficznego i na kolejnych będziemy już pracować z terminala, ponieważ w praktyce najczęściej tak jest wygodniej lub serwer obliczeniowy w ogóle może nie wspierać wyświetlania grafiki.

1. Do trybu graficznego najpierw trzeba stworzyć środowisko graficzne komendą

```
w2web
```

Robimy to tylko raz w ciągu życia konta. Następnie otwiera się je w przeglądarce

```
firefox [link podany przez w2web]
```

Warto zapisać ten link.

2. Stworzenie projektu

Create new session → wpisujemy nazwę → Create New directory → wpisujemy nazwę → create
→ Select current directory

3. Definicja struktury → StructGen

- Ręcznie - należy podać typ struktury (P - prosta, F - ściennie centrowana, B -przestrzennie centrowana itd.), jednostkę stałych sieci (\AA lub a_B), stałe sieci i kąty oraz atomy nierównoważne (nazwa, liczba atomowa, pozycja i promień RMT).
- Za pomocą pliku .cif - upload → Browse (wybieramy ściągnięty plik) → Upload → kliknąć białą kropkę przy nazwie pliku → Use selected CIF

Dalej: Save Structure → set automatically RMT → do it → Save structure → save file and clean up.

Uwaga: RMT to promień sfery otaczającej atomy, wewnątrz których funkcja falowa jest rozwijana w bazie orbitali a poza nimi w bazie fal płaskich. RMT powinno być jak największe, ale sfery nie mogą się przekrywać. Porównywanie wielkości takich jak energia całkowita wymaga stosowania ustalonych wartości RMT. W przypadku optymalizacji struktury rozmiar komórki będzie zmieniać, więc przed optymalizacją trzeba zmniejszyć RMT o wybrany procent, żeby sfery nie przekryły się.

4. Plik wejściowy ze strukturą jest nazwany case.struct, gdzie case jest taki sam jak nazwa folderu, w którym są wykonywane obliczenia. Strukturę można zobaczyć na przykład w XCrysDen

```
xcrysden --wien_struct case.struct
```

lub wpisać w terminalu xcrysden bez parametrów i wybrać Open Wien2k File.

5. Inicjalizacja obliczeń → initialize calc

- RMT reduction - jak wspomniano powyżej, zazwyczaj 0.
- VXC - potencjał wymiennie-korelacyjny. Najczęściej stosuje się PBE, który jest typu GGA (generalized gradient approximation).
- energy separation between core/valence. W strukturze pasmowej będzie widać tylko pasma elektronów, których energia jest powyżej tej wartości, zazwyczaj domyślna wartość -6Ry.
- RKMAX - definiuje liczbę funkcji bazy fal płaskich. Im mniejsze sfery tym większy RKMAX powinno się wybrać, więcej [info](#).
- TEMP - parametr rozmycia w liczeniu całek zawierających deltę Diraca metodą smearingu. Alternatywnie można je liczyć metodą tetraedrów, która nie wymaga tego parametru.
- use X kpoints in full BZ - obliczenia prowadzi się na zadanej siatce punktów sieci odwrotnej (tzw. punkty \mathbf{k}). Program wykorzysta symetrię układu i zredukuje ich liczbę. Zazwyczaj do cyklu samouzgodnionego potrzeba kilkudziesięciu do kilkuset punktów, a do gęstości stanów rząd wielkości więcej. W zasadzie powinno się wykonać serię obliczeń z różną liczbą punktów i wybrać taką, powyżej której interesujące nas własności przestają się zmieniać. W ogólności im większa komórka w przestrzeni prostej tym mniejsza komórka w przestrzeni odwrotnej, zatem do jej opisu potrzeba mniej punktów.

Możemy wpisać te wartości lub kliknąć RUN BATCH INITIALISATION jeśli zgadzamy się z sugerowanymi wartościami. W przypadku Al tak właśnie jest. Klikamy znowu RUN BATCH INITIALISATION, a następnie view STDOUT żeby zobaczyć, czy inicjalizacja przebiegła pomyślnie. Jeśli tak, to wrócmy do poprzedniej strony i kliknijmy w Individual mode we wszystkie "view output...", aby zobaczyć, co program zrobił w kolejnych krokach. Tam klikamy po kolei opcje: x nn (dystanse między sąsiednimi atomami, by sprawdzić, czy sfery się nie nakrywają), x sgroup (sprawdzamy czy strukturę da się sprowadzić do mniejszej komórki lub do takiej o

wyższej symetrii), view outputsgroup (klikamy Yes), x symmetry (sprawdzamy, czy struktura spełnia wszystkie symetrie), x lstart i Execute (to tutaj obliczane są energie poziomów energetycznych i definiowane jest, które są walencyjne), x kgen (ustalamy liczbę punktów tak jak opisano powyżej - możemy zdefiniować liczbę punktów lub wymiary siatki w każdym kierunku), x dstart (tu obliczana jest startowa gęstość do dalszych obliczeń).

6. Cykl samouzgodniony (SCF od self-consistent field) - rozwiązywanie równań Kohna-Shama, w wyniku czego uzyskuje się gęstość elektronową, funkcje falowe i energie stanów elektronowych $E(\mathbf{k})$.

Aby uruchomić cykl, wracamy na stronę główną naszego projektu i klikamy refresh w prawym górnym rogu. Następnie w lewym panelu wybieramy run SCF. Tu wyskakuje lista opcji, z czego najważniejsze to:

- spin-polarized - Do liczenia układów magnetycznych. Wtedy należy włączyć także podczas inicjalizacji.
- spin-orbit - Sprzężenie spin-orbita. Zaleca się najpierw obliczyć cykl SCF bez spin-orbit i następnie z uwzględnieniem go. To oddziaływanie jest ważne szczególnie w ciężkich pierwiastkach.
- parallel - Zrównoleglenie na wielu procesorach, niekoniecznie na jednej maszynie. Aby to zrobić, należy stworzyć w plik .machines (bez nazwy case na początku) w folderze, w którym prowadzimy obliczenia. Przykładowy plik .machines dla dwóch (lub trzech) procesorów:

```
1:localhost:1
1:localhost:1
residue:localhost
```

Program podzieli siatkę punktów \mathbf{k} na N równych części (N to liczby wierszy 1:adres), a jeśli liczba punktów nie jest podzielna przez N , to reszta umiesci na jeszcze jednym procesorze (zdefiniowanym przez residue).

- parametry zbieżności: energii, gęstości ładunkowej i sił (przy optymalizacji).

Następnie klikamy start SCF cycle i Show STDOUT żeby podejrzeć, jak idą obliczenia. Z pliku SCF wyciągniemy energie całkowite z każdego kroku cyklu:

```
grep ":ENE" *.scf >> ene.dat
```

i wyrysujemy zależność Energia(numer cyklu), na przykład w gnuplot.

