

# QFLOW

# 使用手册

北京龙讯旷腾科技有限公司

2023年1月9日

# 目录

- [1. Q-Flow 简介](#)
- [2. 登录系统](#)
- [3. 创建项目、 workflow、 导入晶体结构](#)
- [4. 组件](#)
  - [4.1. 结构优化组件](#)
  - [4.2. 自洽计算组件](#)
  - [4.3. 非自洽计算组件](#)
  - [4.4. 原子轨道投影、 振子强度计算组件](#)
  - [4.5. 分子动力学组件](#)
  - [4.6. 声子模式计算组件](#)
  - [4.7. 弹性常数计算组件](#)
  - [4.8. 过渡态计算组件](#)
  - [4.9. 含时密度泛函计算组件](#)
- [5. 模板](#)
  - [5.1. 能带结构](#)
  - [5.2. 态密度](#)
  - [5.3. 高频介电函数](#)
  - [5.4. 离子位移极化](#)
  - [5.5. 有效质量](#)
  - [5.6. 声子谱](#)
- [6. 计算示例](#)
  - [6.1. 结构优化](#)
  - [6.2. 计算能带结构](#)
  - [6.3. 计算态密度](#)
  - [6.4. 体材料及光学性质计算](#)
    - [6.4.1. 高频介电函数计算-普通插值](#)
    - [6.4.2. 高频介电函数计算-二阶插值](#)
  - [6.5. NEB 计算过渡态](#)
  - [6.6. 隐式溶剂效应下 OER 计算](#)
  - [6.7. 固定电势法计算 OER](#)

# 1. Q-Flow 简介

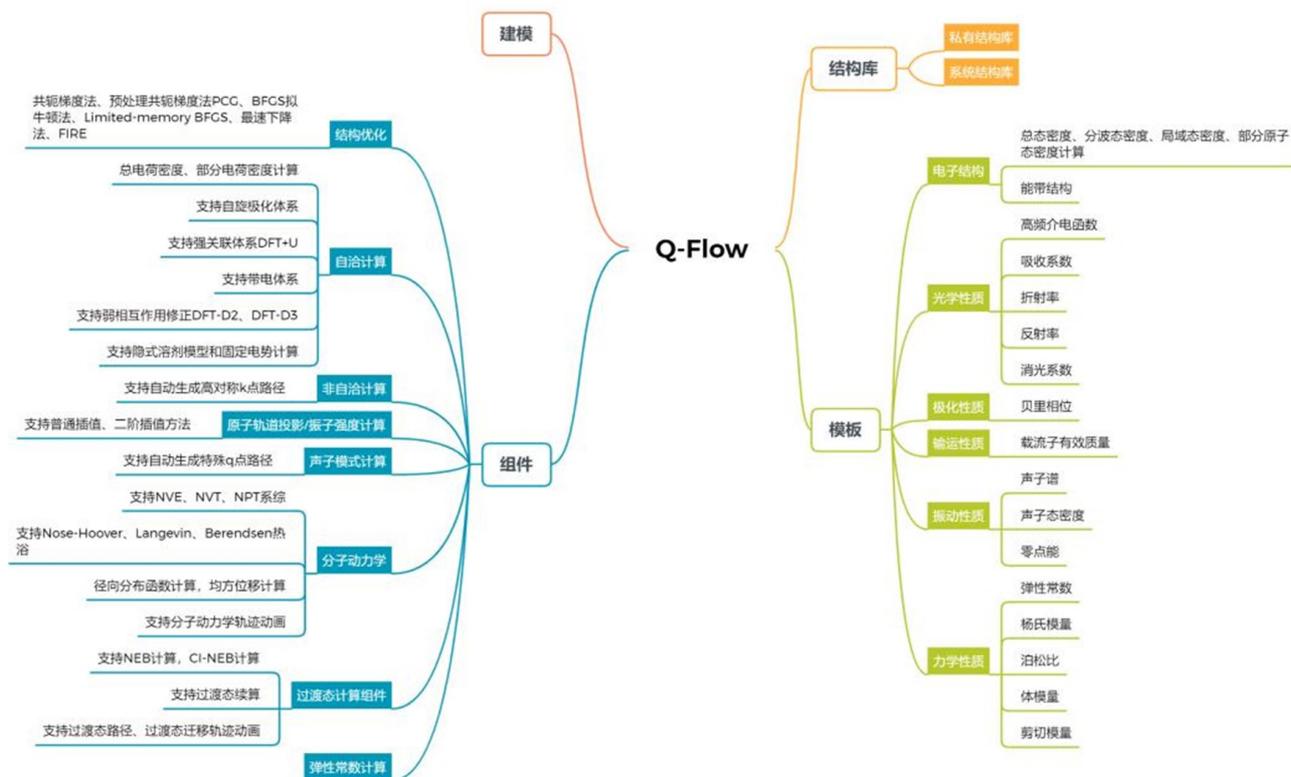
Q-Flow 是一款用于原子尺度材料性质模拟的云计算平台。平台采用浏览器-服务器架构，用户无需安装软件，通过网页登录即可进行科研和教学工作。

服务器端部署的材料计算软件为 PWmat，为龙讯旷腾自主知识产权软件，是一款运行在图形处理器（GPU）上的密度泛函理论(DFT)模拟计算软件，它使用平面波-赝势方法，支持电子结构、结构弛豫、从头算分子动力学、过渡态搜索、实时-含时密度泛函、非绝热分子动力学等多种基础计算功能。

PWmat 软件使用者以往在使用软件时需要通过 SSH 工具连接到服务器，并在命令行编辑提交作业，这对于初学者并不友好。为了解决这一问题，Q-Flow 将全部需要与服务器交互的流程部署在浏览器端，通过图形化界面大大降低了使用难度。

Q-Flow 支持包括 cif、pwmat、vasp 格式的晶体结构文件上传下载，支持从浏览器端查看、编辑结构、支持断点续算，过程中编辑计算模块参数、材料性质后处理、实时查看计算状态。

Q-Flow 可使用模板快捷计算电子结构、输运性质、光学性质、振动性质、极化性质、力学性质，如能带、态密度、介电常数、贝里相位、有效质量、声子谱、弹性常数等。



## 2. 登录系统

登录[龙讯超算云页面](#)，未注册的用户可以点击立即注册通过手机号注册账户。

点击 Q-Flow 图标进入 Q-Flow 登录界面。已注册过云计算平台账号的用户会自动补齐手机号及密码，点击登录进入 Q-Flow。

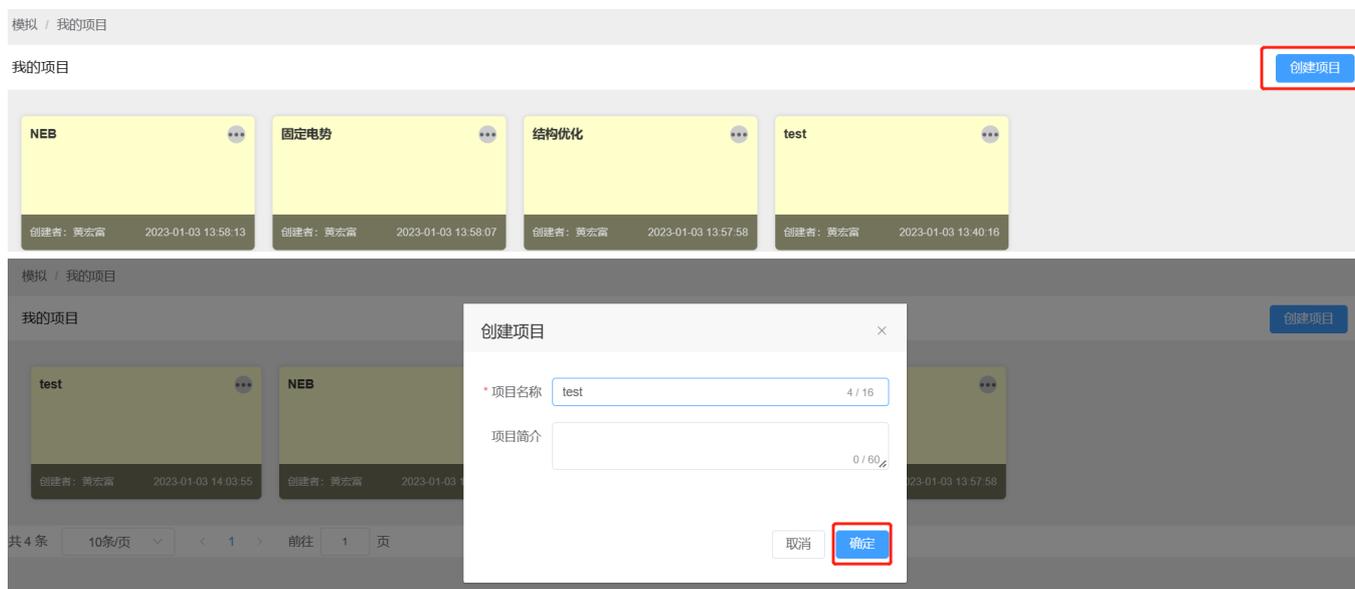


## 3. 创建项目、 workflow、 导入晶体结构

Q-Flow 采用项目管理模式。在模拟主界面，点击 **创建项目** → **输入项目名称** → **确定** → **点击新建的项目**，进入项目管理界面。

创建的项目会显示创建者、创建日期。项目可以修改名称、删除。

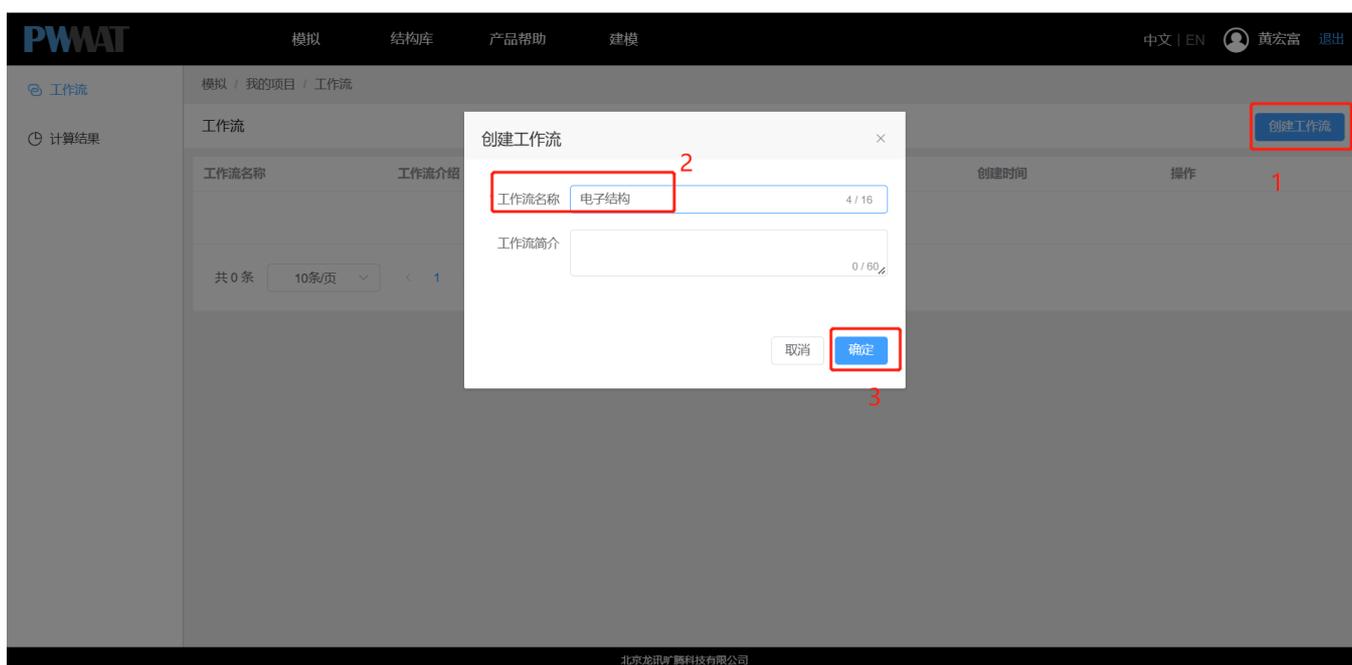
项目中一般包含不同体系的计算任务和结果，便于用户区分。





点击项目后进入项目管理界面，主要分为 workflow 和计算结果两部分。在 workflow 区域可以创建 workflow，一个项目内可以包含多个 workflow，workflow 主要为了区分对不同结构进行计算。

在项目管理界面，点击 **workflow** → **创建工作流** → **输入 workflow 名称** → **确定** → 点击 **workflow 结构**，进入 workflow 设计界面。



workflow 创建后可以删除、编辑名称、编辑 workflow 结构操作，在初始创建后，workflow 会显示创建者、计算状态和创建时间。由于是初始创建，计算状态为未开始。

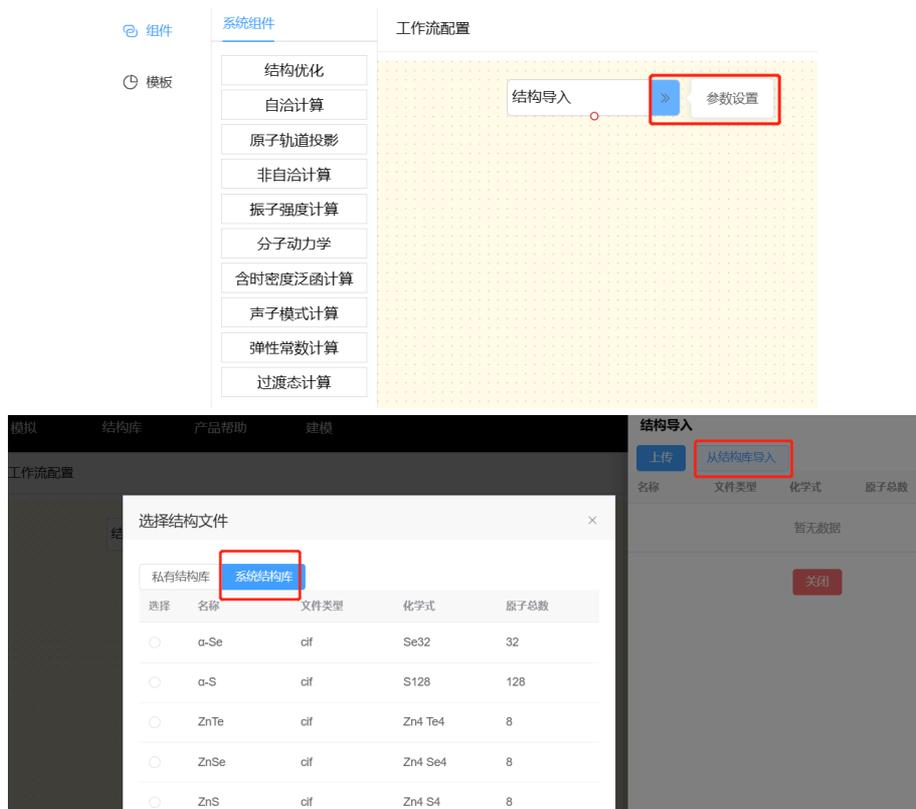
点击 workflow 结构，进入 workflow 设计界面，由组件与模板区域、workflow 配置区域构成。用户可以从左侧的组件与模板区域挑选计算模块并拖拽到右侧的 workflow 配置区域。



组件中包括结构优化、自治计算、原子轨道投影、非自治计算、振子强度计算、分子动力学、含时密度泛函计算、声子模式计算、弹性常数计算、过渡态计算组件。其详细细节请参考 [组件](#)。

在 workflow 配置界面初始化时便存在结构导入模块，用户需要自行选择计算哪一种晶体结构。在工

作流设计界面，点击 **结构导入** → **参数设置** → **从结构库导入** → **私有结构库** → **选中硅** → **确定** → **关闭**，完成晶体硅的结构导入。



结构导入可选择由本地计算机上传或从 Q-Flow 结构库导入，目前支持的结构文件格式为 **.cif**、**.pwmat**、**.vasp**。

在结构库分为私有结构库和系统结构库，其中私有结构库为用户上传结构，系统结构库为 Q-Flow 自带的常用晶体结构。

## 4. 组件

### 4.1. 结构优化组件

- 优化算法: 共轭梯度法 CG、预处理共轭梯度法 PCG、BFGS 拟牛顿法、Limited-memory BFGS、最速下降法 Steepest decent、FIRE。对于大多数问题, 我们建议直接使用 CG。
  - 相关选项: 最大优化步数、力的收敛标准、是否优化晶格以及晶格应力收敛标准, 收敛标准的数值越小, 表示精度越高, 收敛越难。
- 支持自旋极化体系: 主要针对磁性材料, 默认为关闭
  - 自旋:
- 支持强关联体系(DFT+U): 为指定元素的原子轨道添加 U 值, 可以从一些文章中获取
  - DFT+U:

元素	轨道	U值 (eV)
Ga	p	1.00
N	请选择	0.00

- 
- 支持带电体系: 体系增减电荷
  - 带电量 (e):
- 支持弱相互作用修正 DFT-D2、DFT-D3: 针对低维材料, 需要考虑范德华(vdW)相互作用
  - vdW:
- 支持隐式溶剂模型和固定电势计算: 当计算液体溶剂中溶质分子的能量时, 例如在电化学研究中, 隐式溶剂模型以连续介质表示溶剂的影响, 主要包括其对静电极化的影响。与显式溶剂分子和分子动力学相比, 隐式溶剂模型要快得多。需要设置溶剂的介电常数、溶质腔及离子浓度等, 默认为关闭。详细细节请查看 [Manual](#) 的 **IN.SOLVENT** 部分
  - 溶剂效应:
- 支持打开或关闭空间对称性、时间反演对称性

### 4.2. 自洽计算组件

- 电子结构计算: 获取体系基态时各种电学性质
- 总电荷密度、部分电荷密度计算及可视化: 计算完成后直接点击组件 [查看结果](#) 获取

总电荷密度

总电荷密度

部分电荷密度

溶剂效应模型

- 可视化电荷密度:

- 支持自旋极化体系: 主要针对磁性材料, 默认为关闭

自旋:

- 支持强关联体系 DFT+U: 为指定元素的原子轨道添加 U 值, 可以从一些文章中获取

DFT+U:

元素	轨道	U值 (eV)
Ga	p	1.00
N	请选择	0.00

○

- 支持带电体系: 体系增减电荷

带电量 (e):

○

- 支持弱相互作用修正 DFT-D2、DFT-D3: 针对低维材料, 需要考虑范德华(vdW)相互作用

vdW:

○

- 支持隐式溶剂模型和固定电势计算: 当计算液体溶剂中溶质分子的能量时, 例如在电化学研究中, 隐式溶剂模型以连续介质表示溶剂的影响, 主要包括其对静电极化的影响。与显式溶剂分子和分子动力学相比, 隐式溶剂模型要快得多。需要设置溶剂的介电常数、溶质腔及离子浓度等, 默认为关闭。详细细节请查看 [Manual](#) 的 IN.SOLVENT 部分

溶剂效应:

○

- 支持打开或关闭空间对称性、时间反演对称性

## 4.3. 非自洽计算组件

- 支持自动生成高对称 k 点路径

K点:  高对称点路径  k点网格

○

自动产生  手动输入

- 能带结构计算: 必须输入势函数, 通常来自之前的 SCF 计算, 即连接在自洽计算组件后面, 此时仅计算非自洽波函数的本征值, 不计算总能。结果处理设置中默认为打开

能带结构:

○

- 载流子有效质量计算: 选取特定 k 点坐标及特定能带进行计算, 结果处理设置中默认为关闭

有效质量:

k点坐标:

步长(1/bohr):

○

能带序号:

## 4.4. 原子轨道投影、振子强度计算组件

- k 点插值，支持普通插值、二阶插值方法：自洽计算组件中不能设置 k 点并行，并在原子轨道投影组件中设置是否插值

○ \* 是否插值:

- 态密度计算，包含总态密度、分波态密度、局域态密度、部分原子态密度：使用 k 点插值时，可以得到平滑的态密度曲线，此时原子轨道投影组件中设置为普通插值

- 高频介电函数、反射率、吸收系数、折射率、消光系数计算：计算光学性质，原子轨道投影组件使用普通插值；或者结合振子强度计算组件设置二阶插值，对介电函数进行修正

○ \* 是否插值:

- 贝里相位计算：一种计算离子钳位极化的方法，需要原子轨道投影组件结合振子强度计算组件，并在原子轨道投影组件中设置打开

○ 离子钳位极化:

## 4.5. 分子动力学组件

- 支持 NVE、NVT、NPT 系综：NVE 系综使用 *Verlet* 方法，此时恒定原子数  $N$ 、体积  $V$  和总能  $E$ ；NVT 系综可以使用的方法有三个 (*Berendsen*、*Langevin* 和 *Nose-Hoover*)，此时恒定原子数  $N$ 、体积  $V$  和温度  $T$ ；NPT 可以使用的方法有三个 (*Berendsen*、*Langevin* 和 *Nose-Hoover*)，此时恒定原子数  $N$ 、压强  $P$  和温度  $T$ 。除 NVE 外，体系的温度将随时间从初态温度调整到末态温度。对于 NVE，末态温度不起作用。

* 系综: <input type="text" value="NVE"/>	* 系综: <input type="text" value="NVT"/>	* 系综: <input type="text" value="NPT"/>
模拟步数: <input type="text" value="1000"/>	* 热浴: <input type="text" value="Nose-Hoover"/>	* 热浴: <input type="text" value="Langevin"/>
时间步长(fs): <input type="text" value="1.00"/>	模拟步数: <input type="text" value="1000"/>	压强(GPa): <input type="text" value="0.000"/>
初态温度(K): <input type="text" value="300.0"/>	时间步长(fs): <input type="text" value="1.00"/>	模拟步数: <input type="text" value="1000"/>
末态温度(K): <input type="text" value="300.0"/>	初态温度(K): <input type="text" value="300.0"/>	时间步长(fs): <input type="text" value="1.00"/>
	末态温度(K): <input type="text" value="300.0"/>	初态温度(K): <input type="text" value="300.0"/>
		末态温度(K): <input type="text" value="500.0"/>

- 支持 Nose-Hoover、Langevin、Berendsen 热浴：用于 NVT 和 NPT，如上。

- 支持自旋极化体系：主要针对磁性材料，默认为关闭

○ 自旋:

- 支持强关联体系 DFT+U：为指定元素的原子轨道添加  $U$  值，可以从一些文章中获取

DFT+U:

元素	轨道	U值 (eV)
Ga	<input type="text" value="p"/>	<input type="text" value="1.00"/>
N	<input type="text" value="请选择"/>	<input type="text" value="0.00"/>

- 支持带电体系：体系增减电荷

。 带电量 (e):

- 支持弱相互作用修正 DFT-D2、DFT-D3: 针对低维材料, 需要考虑范德华(vdW)相互作用

。 vdW:

- 支持打开或关闭时间反演对称性
- 径向分布函数计算

。 径向分布函数:

- 均方位移计算

。 均方位移:

- 支持分子动力学轨迹动画

## 4.6. 声子模式计算组件

- 支持自动生成特殊 q 点路径

。 特殊q点路径:  自动产生  手动输入

- 声子谱计算

。 声子谱:

- 声子态密度计算

- 零点能计算

。 零点能:

## 4.7. 弹性常数计算组件

- 体材料弹性常数、杨氏模量、泊松比、体模量、剪切模量计算: 力学性质的计算, 使用该组件时设置默认打开。

- 二维材料弹性常数、杨氏模量、泊松比计算

。 材料类型:  力学性质:

## 4.8. 过渡态计算组件

- 优化算法: 共轭梯度法 CG、预处理共轭梯度法 PCG、BFGS 拟牛顿法、Limited-memory BFGS、最速下降法 Steepest decent、FIRE: NEB 计算时推荐使用LBFGS和FIRE, 首选LBFGS

- 弹性带类型: 首先可以直接尝试使用 original 或 regular 方法。如果收敛不好, 那么可以尝试使用 conventional 方法, 弹性系数设置为 1 进行计算。conventional 方法容易收敛, 但是算出的势垒误差

较大(弹性系数越大, 误差越大), 因此还需要再使用小的弹性系数(或者用 original 或 regular 方法) 进行续算。

- NEB 计算, 包括 original、conventional 和 regular 方法。
- CI-NEB 计算, 包括 original、conventional 和 regular 方法。不要在一开始就使用 CI-NEB 方法, 将会非常难收敛。建议先进行 NEB 计算并保证收敛, 然后在续算时选择 CI-NEB 方法。
- 弹性系数: 推荐设置在 0.1 到 1 之间。弹性系数越大, 收敛越容易, 但是误差也越大(特别是对于 conventional 方法的情况)。

◦ 弹性系数 (eV/Å<sup>2</sup>):

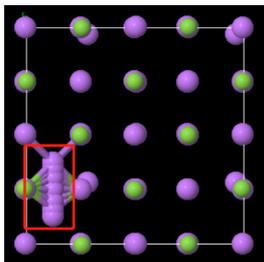
- 支持过渡态续算
- 支持自旋极化体系: 主要针对磁性材料, 默认为关闭
- 自旋:
- 支持弱相互作用修正 DFT-D2、DFT-D3: 针对低维材料, 需要考虑范德华(vdW)相互作用

◦ vdW:

- 支持打开或关闭时间反演对称性

◦ 时间反演对称性:

- 支持过渡态路径展示、过渡态迁移轨迹动画: 计算完成后从过渡态计算组件中 [查看结果](#) 获取



◦

## 4.9. 含时密度泛函计算组件

- 支持 NVE 系综: NVE 系综使用 *Verlet* 方法, 此时恒定原子数  $N$ 、体积  $V$  和总能量  $E$
- 支持绝热窗口自动/手动设置: 常用设置是  $m1$  设置为 1 或其他较深能级,  $mstate$  设置为最高占据态 (也可大于电子数/2),  $m2$  设置为电子有可能激发到的最高态 (可略小于总能量带数, 以保证计算能够较好的收敛)。关于含时密度泛函计算更多的细节请参考 [Manual-TDDFT DETAIL 部分](#)

绝热窗口:  默认  手动设置

◦  $m1$    $m2$    $mstate$

- 支持外场

外场设置:

空间形式:  实空间  倒空间

时间维度:  静态  衰减积分

A:  t0:  t1:

○  $f_{TD-DFT}(t) = \int_0^t [Ae^{-(x-t_0)^2/t_1^2}] dx$

- 支持自旋极化体系: 主要针对磁性材料, 默认为关闭

○ 自旋:

- 支持弱相互作用修正 DFT-D2、DFT-D3: 针对低维材料, 需要考虑范德华(vdW)相互作用

○ vdW:

- 支持强关联体系 DFT+U: 为指定元素的原子轨道添加 U 值, 可以从一些文章中获取

DFT+U:

元素	轨道	U值 (eV)
Ga	<input type="text" value="p"/>	<input type="text" value="1.00"/> <input type="button" value="↑"/> <input type="button" value="↓"/>
N	<input type="text" value="请选择"/>	<input type="text" value="0.00"/> <input type="button" value="↑"/> <input type="button" value="↓"/>

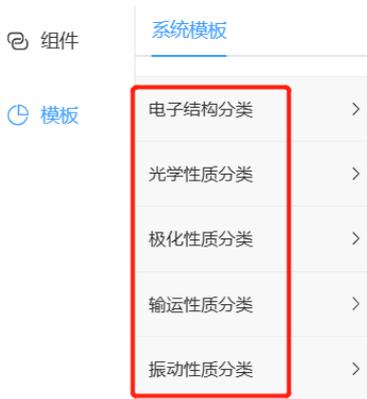
○

- 支持带电体系: 体系增减电荷

○ 带电量 (e):

## 5. 模板

模板是由相应组件组成针对特定计算的大组件。



### 5.1. 能带结构

能带结构模板由自治计算组件->非自治计算组件构成，各组件参数的设置参考[组件部分](#)。



### 5.2. 态密度

态密度模板由自治计算组件->原子轨道投影组件构成，各组件参数的设置参考[组件部分](#)。



### 5.3. 高频介电函数

高频介电函数模板由自洽计算组件->原子轨道投影组件 (-> 振子强度组件) 构成，各组件参数的设置参考[组件部分](#)。



### 5.4. 离子钳位极化

离子钳位极化模板由自洽计算组件->原子轨道投影组件构成，各组件参数的设置参考[组件部分](#)。



## 5.5. 有效质量

有效质量模板由自治计算组件->非自治计算组件构成，各组件参数的设置参考[组件部分](#)。



## 5.6. 声子谱

声子谱模板由结构优化组件->声子模式组件，各组件参数的设置参考[组件部分](#)。



## 6. 计算示例

### 6.1. 结构优化

完成结构优化需要进行 **结构导入** → **组件** → 从 **系统组件** 中拖拽 **结构优化** 组件到 workflow 区域 → 添加从 **结构导入** 到 **结构优化** 的连线。

全部组件采用默认参数即可提交计算，用户也可以打开组件参数设置配置详细参数。



结构优化时可以设置的基础参数有 GPU 卡数、是否 k 点并行、赝势类型、泛函类型、截断能、k 点网格、原子弛豫的算法、控制弛豫的步数及收敛条件等参数。

如果需要进行一些特殊的计算，如 DFT+U、vdW、带电体系等，可以在高级参数中进行设置。

### 结构优化

**基础参数**

\* GPU卡数:

截断能 (Ryd):

赝势:

泛函:

**K点网格**

精度

密度  1/Å

自定义

K1  K2  K3

优化方法:

最大优化步数:

力收敛标准 (eV/Å):

优化晶格:

晶格应力收敛标准 (eV/Natom):

**高级参数**

\* k点并行:

### 结构优化

**基础参数**

收敛精度:

准确度:

自旋:

带电量 (e):

DFT+U:

vdW:

费米展宽(eV):

增加空带:

时间反演对称性:  空间对称性:

对称性精度:

最大电子步数:  最小电子步数:

**高级参数**

溶剂效应:

读取数据

势函数:

电荷密度:

设置完成后点击页面右上角**提交运算**，Q-Flow 会进行结构检查、生成组件参数、生成计算文件、上传文件到服务器、提交作业并排队等操作。经过一段时间的加载，页面会自动跳转至 workflow 计算结

果页面。

在计算进行的过程中可以退出 workflow 计算结果页面，编辑其他项目或 workflow，也可以退出浏览器，而不影响计算任务在服务器端执行。

此时如果返回项目管理界面，点击计算结果可以看到项目内所有已经提交运算的 workflow，workflow 可能处于排队、计算中、完成、失败等状态中。对于排队、计算中状态的 workflow 可以点击查看重新返回 workflow 计算结果界面。

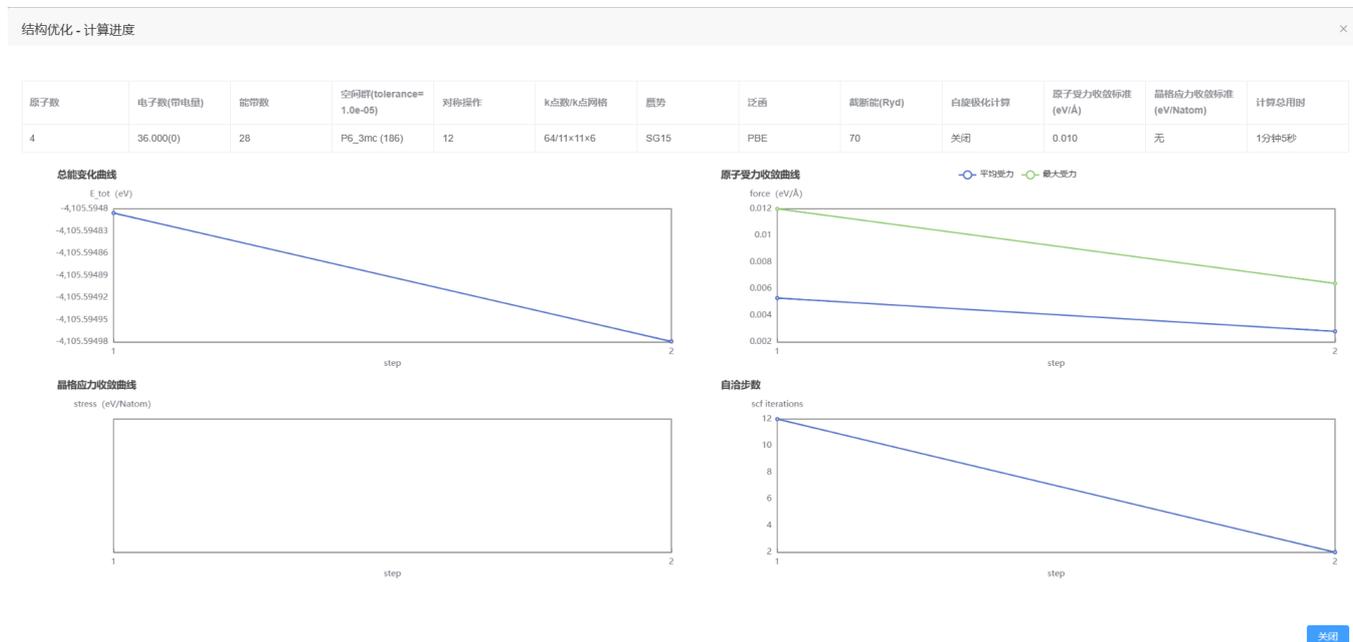
对于已完成、失败状态的 workflow 除了可以点击查看重新返回 workflow 计算结果界面，也可以点击编辑再次进入 workflow 配置界面，在之前计算的基础上进行新的 workflow 设计和提交运算。

在 workflow 计算结果页面，处于正在计算状态的组件会呈现加载状态，运算中的 workflow 可以停止运算，也可以随时点击查看计算进度。



在 workflow 计算结果页面，处于正在计算状态的组件会呈现加载状态，运算中的 workflow 可以停止运算，也可以随时点击查看计算进度。

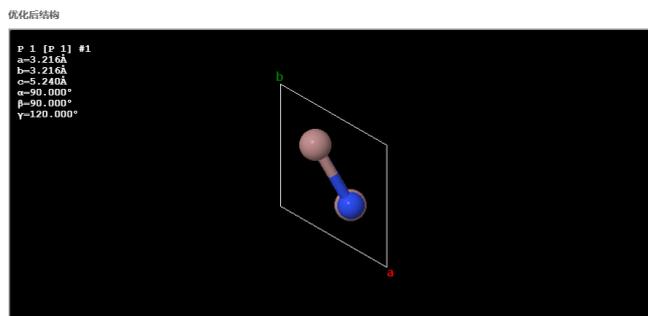
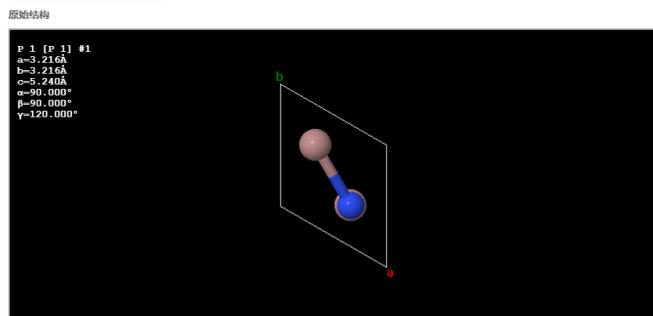
计算进度栏内包含一些图表数据，用以判断结构优化的收敛情况。



计算完成后，组件会变为已完成状态，此时可以点击结构优化组件查看结果，并导出结构到结构库中进行编辑或者后续其他运算。

总能 (eV)	费米能 (eV)	带隙 (eV)	类型	CBM本征能组 (eV)	CBM位置	VBM本征能组 (eV)	VBM位置
-4105.59497930	4.64329943	1.7773	Direct	6.2148	第 19 条能带 第 1 个k点	4.4375	第 18 条能带 第 1 个k点

优化后结构



## 6.2. 计算能带结构

要完成能带结构计算有两种方式。

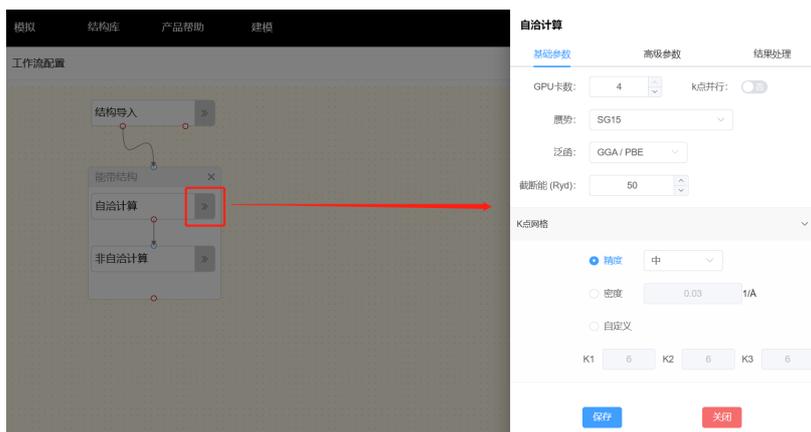
**方式一：** 点击 **组件** → **系统组件** → 拖拽 **自洽计算**、**非自洽计算** 组件到 workflow 区域 → 添加从 **结构导入** 到 **自洽计算** 再到 **非自洽计算** 的连线。

**方式二：** 点击 **模板** → **系统模板** → **电子结构分类** → 拖拽 **能带结构** 模板到 workflow 区域 → 添加从 **结构导入** 到 **能带结构** 的连线。



全部组件采用默认参数即可提交计算，用户也可以打开组件参数设置配置详细参数。对于自洽计算组件可以设置的参数有 GPU 卡数、是否 k 点并行、赝势类型、泛函类型、截断能、k 点网格等参数。

自洽计算，仅进行一步自洽场迭代计算过程，一般常见说法称之为一个离子步，也即单点能计算。自洽计算确定体系的电荷密度，可以输出总能等信息，不会移动原子。



对于非自洽计算，在计算能带结构时，Q-Flow 会根据结构自动生成高对称点路径、k 点等参数，无需用户设置，感兴趣的用户可以打开组件参数面板自行查看。  
非自洽计算，通常用于计算能带结构，必须输入势函数，通常来自之前的 SCF 计算，此时仅计算非自洽波函数的本征值，不计算总能。

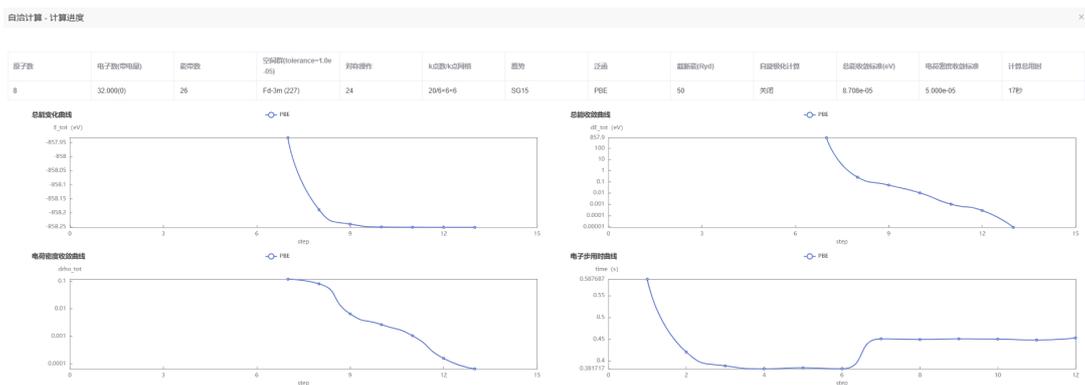


在工作流计算结果页面，处于正在计算状态的组件会呈现加载状态，运算中的工作流可以停止运算，也可以随时点击查看计算进度。



计算进度栏内包含一些图表数据，表格内会给出体系的总原子数、电子数、能带数、空间群、对称操作、k 点数、k 点网格、赝势、泛函、截断能、自旋极化计算、总能收敛标准、电荷密度收敛标准、计算总用时。

下方 4 张图分别代表总能变化曲线、总能收敛曲线、电荷密度收敛曲线、电子步用时曲线。



计算完成后，组件会变为已完成状态，此时可以点击查看计算结果。点击自治计算结果可以查看总能、费米能、带隙、带隙类型、CBM 本征能量、VBM 本征能量、CBM 位置、VBM 位置、总电荷密度、部分电荷密度。

自治计算 - 计算结果

总能 (eV)	费米能 (eV)	带隙 (eV)	类型	CBM本征能量 (eV)	CBM位置	VBM本征能量 (eV)	VBM位置
-858.25187044	7.48467562	0.5593	Indirect	7.7972	第 17 条能带 第 2 个k点	7.2378	第 16 条能带 第 1 个k点

总电荷密度

min/max/ave: 0.001329/0.084802/0.029380

auto Isosurface: 0.070210

```

P 1 [P 1] #1
a=5.431Å
b=5.431Å
c=5.431Å
α=90.000°
β=90.000°
γ=90.000°
  
```

根据结果可知使用PBE泛函得到的晶体硅带隙为0.56 eV，带隙类型为间接带隙。

根据 VBM 位置可以画出 VBM 的实空间部分电荷密度。

自治计算 - 计算结果

总能 (eV)	费米能 (eV)	带隙 (eV)	类型	CBM本征能量 (eV)	CBM位置	VBM本征能量 (eV)	VBM位置
-858.25187044	7.48467562	0.5593	Indirect	7.7972	第 17 条能带 第 2 个k点	7.2378	第 16 条能带 第 1 个k点

部分电荷密度

K点: 1 能带范围: 16 - 16 提交处理

min/max/ave: 0.000000/0.006501/0.000913

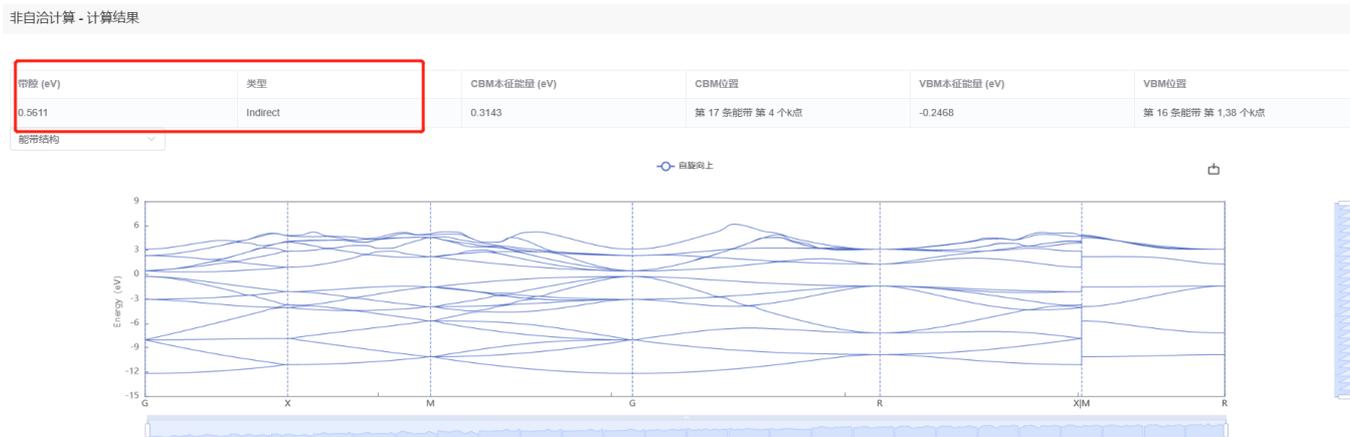
auto Isosurface: 0.003293

k点/能带范围(当前展示结果): 1/16

```

P 1 [P 1] #1
a=5.431Å
b=5.431Å
c=5.431Å
α=90.000°
β=90.000°
γ=90.000°
  
```

点击非自治计算结果可以查看带隙、带隙类型、CBM 本征能量、VBM 本征能量、CBM 位置、VBM 位置、能带结构图。

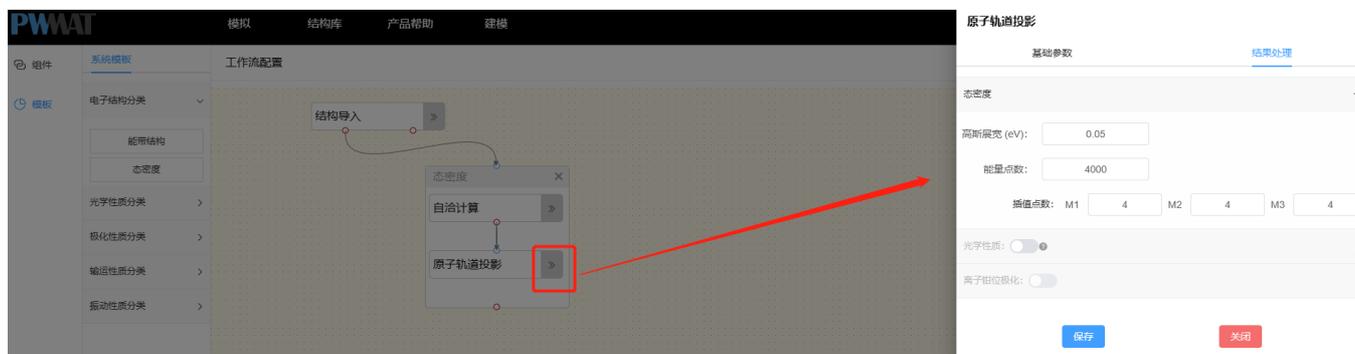


## 6.3. 计算态密度

要完成态密度计算有两种方式。

**方式一：** 点击 **组件** → **系统组件** → 拖拽 **自治计算**、**原子轨道投影** 组件到 workflow 区域 → 添加从 **结构导入** 到 **自治计算** 再到 **原子轨道投影** 的连线。

**方式二：** 点击 **模板** → **系统模板** → **电子结构分类** → 拖拽 **态密度** 模板到 workflow 区域 → 添加从 **结构导入** 到 **态密度** 的连线。



原子轨道投影组件，需要对波函数做原子轨道投影，所以可以计算分波态密度，例如不同的原子的不同轨道的投影态密度。必须输入波函数和本征能量，通常来自之前的自治计算。原子轨道投影作为一个独立组件的原因一方面是因为该步骤中的 nonlocal potential projector 与非自治计算和自治计算不同，另一方面是因为可以设置使用 k 点插值方法，该方法只需很少的 k 点就能得到平滑的 DOS 曲线。

点击提交运算，计算状态中的原子轨道投影组件可以查看计算进度。计算进度页面显示插值方法、计算进度等参数。

原子数	电子数(带电荷)	赋值方法	计算进度	计算总用时
8	32.000(0)	普通赋值	100.000%	19秒

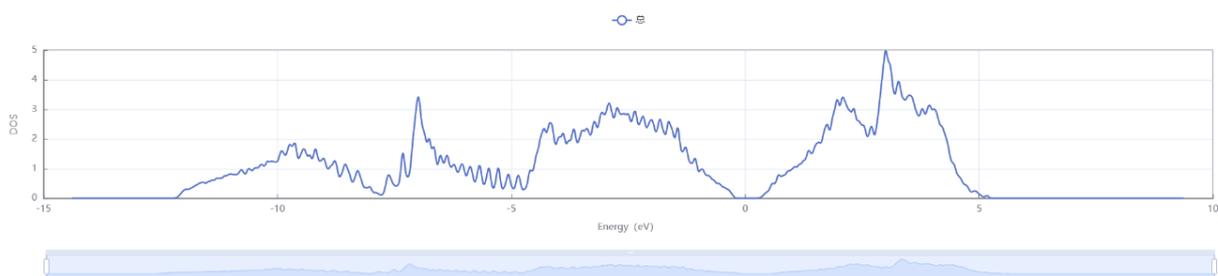
计算完成后点击原子轨道投影组件查看结果，可以查看态密度计算结果。  
在结果页面，包含总态密度、分波态密度、局域态密度结果。

电子态密度

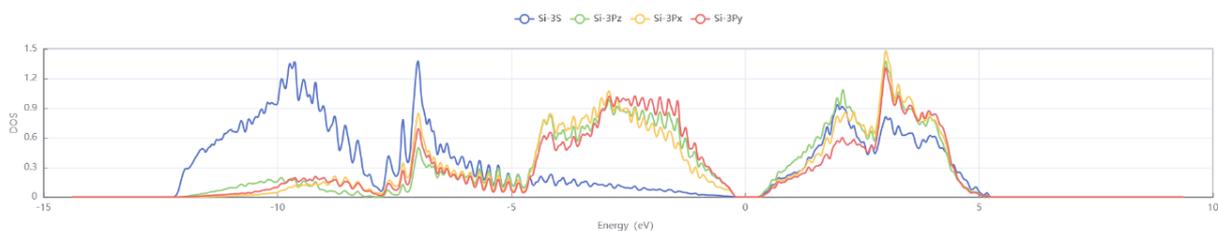
从结构文件中选择原子

选中原子数(当前展示结果)	选中原子序号(当前展示结果)
全部	1-8

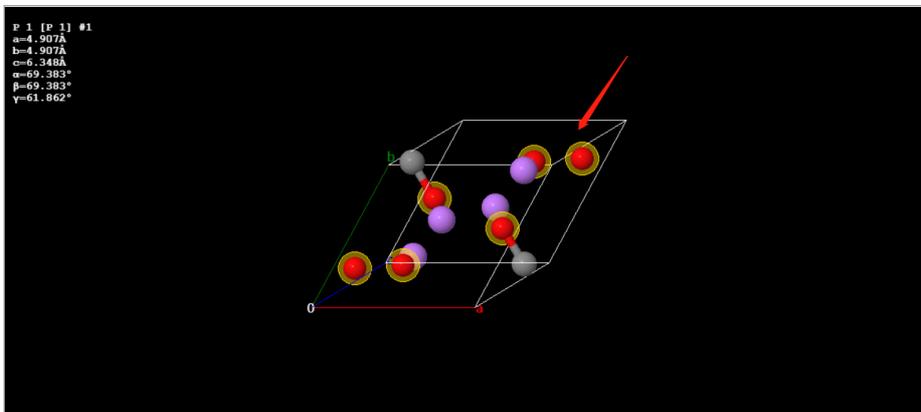
总态密度



分波态密度



另外，点击 [从结构文件中选择原子](#)，进入原子选择界面，直接点击或者框选原子后确定选择，并 [提交处理](#) 从而获得部分原子的态密度结果。



## 6.4. 体材料及光学性质计算

### 6.4.1. 高频介电函数计算-普通插值

**方式一：** 点击 **组件** → **系统组件** → 拖拽 **结构优化**、**自洽计算**、**原子轨道投影** 组件到 workflow 区域 → 添加从 **结构导入** 到 **结构优化** 到 **自洽计算** 再到 **原子轨道投影** 的连线。

**方式二：** 点击 **组件** → **系统组件** → 拖拽 **结构优化** 组件到 workflow 区域 → 点击 **模板** → **系统模板** → **光学性质分类** → 拖拽 **高频介电函数 (RPA)** 模板到 workflow 区域 → 添加从 **结构导入** 到 **结构优化** 再到 **高频介电函数 (RPA)** 的连线。

计算光学性质时需要使用比较密的 K 点，对原子轨道投影组件基础参数设置使用 K 点插值，并在结果处理中打开光学性质，同时根据需要适当增加能量点数和插值点数。

#### 原子轨道投影

**基础参数** 结果处理

---

\* 是否插值: 普通插值

保存 关闭

**原子轨道投影**

基础参数 结果处理

---

态密度 ▼

高斯展宽 (eV):

能量点数:

插值点数: M1  M2  M3

**光学性质:**  ▼

高斯展宽 (eV):

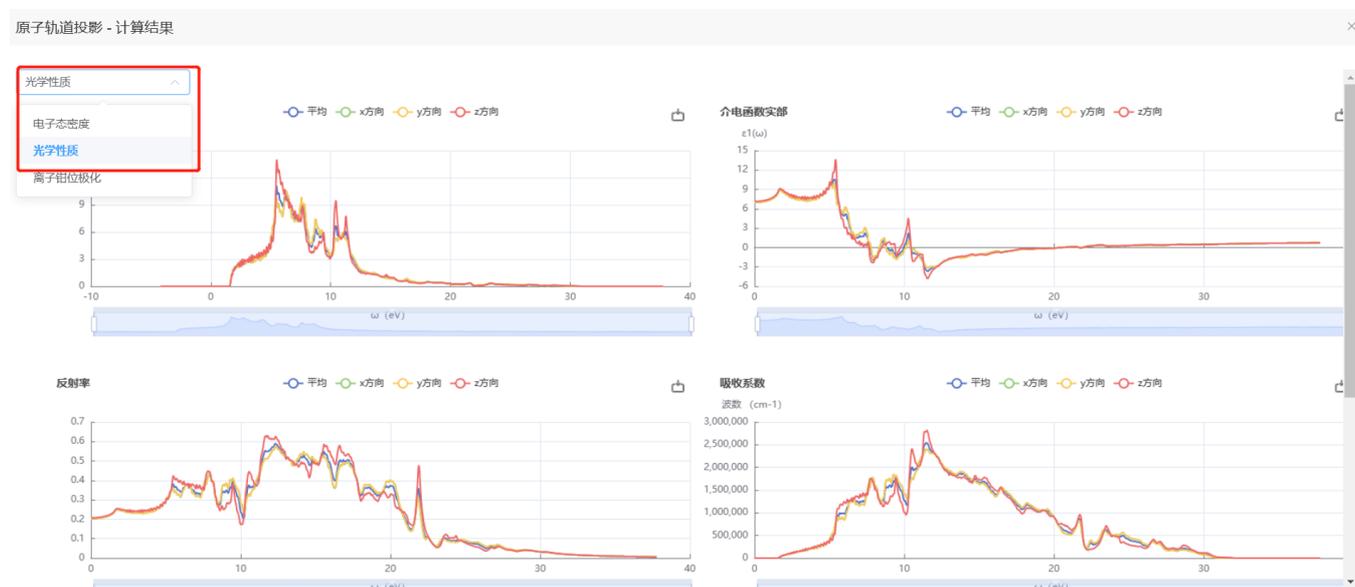
能量点数:

插值点数: M1  M2  M3

保存后点击提交运算，计算状态中的原子轨道投影组件可以查看计算进度。计算进度页面显示插值方法、计算进度等参数。

计算完成后点击原子轨道投影组件查看结果，可以查看光学性质计算结果。

在结果页面，包含介电函数虚部、介电函数实部、反射率、折射率、吸收系数和消光系数。相应的光学性质可与结果中的态密度进行对比。



## 6.4.2. 高频介电函数计算-二阶插值

使用二阶插值，并修正了非局域势对介电函数的影响。

**方式一：** 点击 **组件** → **系统组件** → 拖拽 **结构优化**、**自洽计算**、**原子轨道投影**、**振子强度计算** 组件到 workflow 区域 → 添加从 **结构导入** 到 **结构优化** 到 **自洽计算** 再到 **原子轨道投影** 的连线。

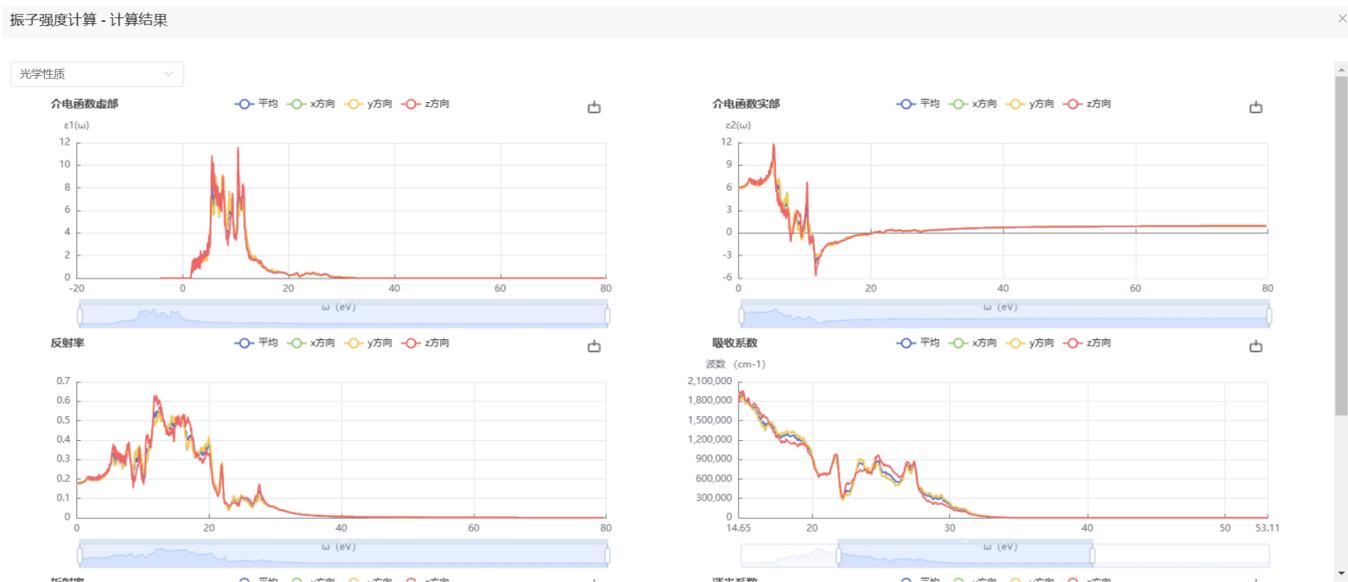
**方式二：** 点击 **组件** → **系统组件** → 拖拽 **结构优化** 组件到 workflow 区域 → 点击 **模板** → **系统模板** → **光学性质分类** → 拖拽 **高频介电函数(RPA二阶插值)** 模板到 workflow 区域 → 添加从 **结构导入** 到 **结构优化** 再到 **高频介电函数(RPA二阶插值)** 的连线。

计算光学性质时需要使用比较密的 K 点，对原子轨道投影组件基础参数设置使用二阶插值，并在结果处理中打开光学性质，同时根据需要适当增加能量点数和插值点数。



计算完成后点击振子强度计算组件查看结果，可以查看光学性质计算结果。

在结果页面，包含介电函数虚部、介电函数实部、反射率、折射率、吸收系数和消光系数。



## 6.5. NEB 计算过渡态

整个计算流程有以下几步：

step1: 得到稳定的初末态结构；

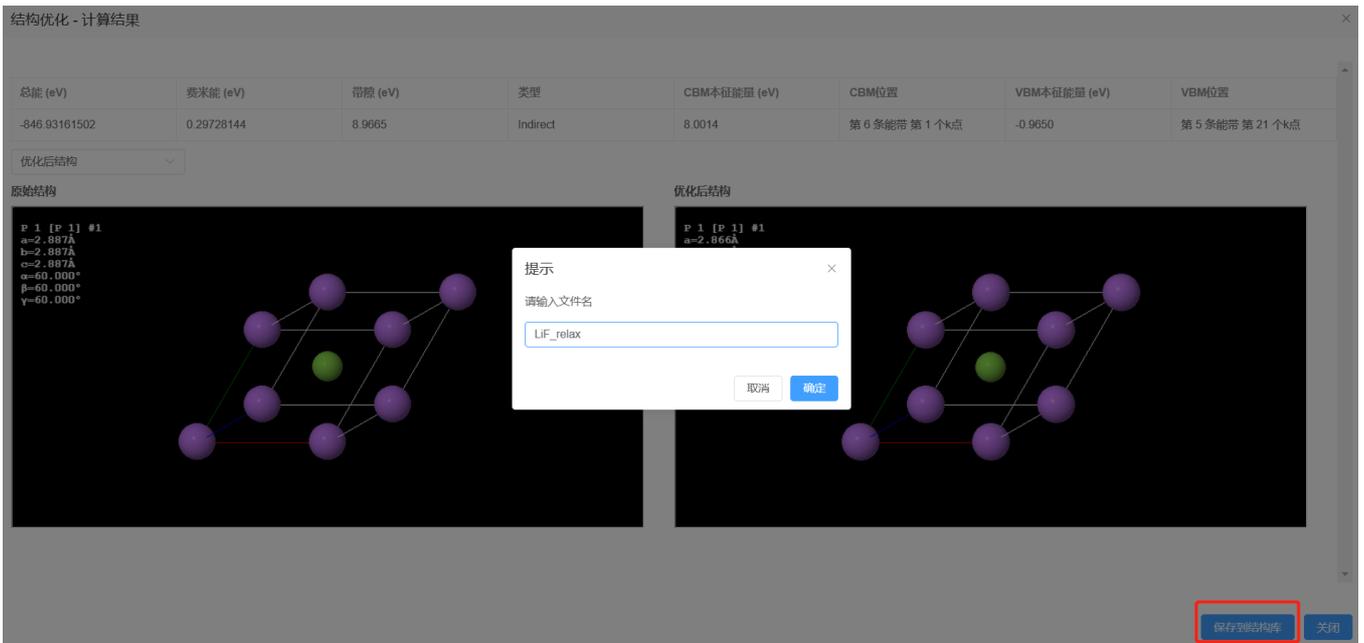
step2: 自治计算得到初态能量与末态能量；

step3: 过渡态计算。

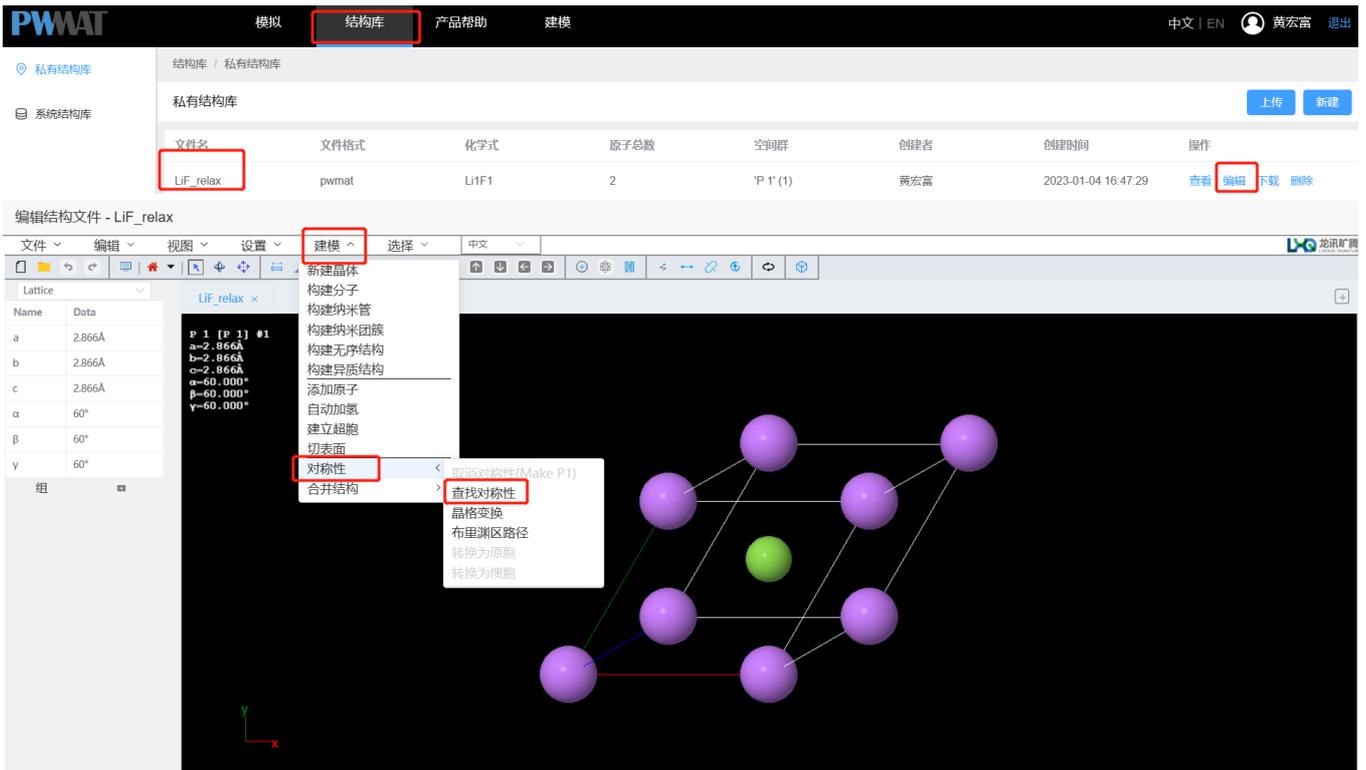
**NOTE:** 初末态计算的参数设置要完全一致

以 Li 在 LiF 中的间隙运输为例子。建模准备 LiF 原胞,分别进行晶格优化+原子位置优化, 如何进行优化参考[结构优化部分](#)。

优化完成后点击结构优化组件查看结果，并导出结构到结构库中。



从结构库中找到刚才保存的结构，并点击编辑进行结构操作：因为之前优化时使用的是原胞，需要寻找对称性变成惯用晶胞再进行扩胞。



然后为 LiF 构建超胞及 Li 间隙的初末态结构。

初末态结构准备后，再次进入 Q-Flow 设置 workflow 分别进行结构优化及自治计算，此时只需要进行原子位置优化。即点击 **组件** → **系统组件** → 拖拽 **结构优化**、**自治计算** 组件到 workflow 区域 → 添加从 **结**

构导入 到 结构优化 再到 自洽计算 的连线。同样在优化完成后点击结构优化组件查看结果，并导出结构到结构库中。

最后是过渡态的计算：点击 组件 → 系统组件 → 拖拽 过渡态计算 组件到 workflow 区域 → 添加从 结构导入 到 过渡态计算 的连线。其中 结构导入 组件中导入的是初态优化后的结构。

The screenshot shows the PWAT software interface. On the left, there is a sidebar with '系统组件' (System Components) and '模板' (Templates). The '系统组件' list includes '结构优化', '自洽计算', '原子轨道投影', '非自洽计算', '振子强度计算', '分子动力学', '含时密度泛函计算', '声子模式计算', '弹性常数计算', and '过渡态计算'. The main area shows a workflow configuration with '结构导入' and '过渡态计算' components connected by a red arrow. On the right, the '过渡态计算' (Transition State Calculation) settings panel is open, showing '基础参数' (Basic Parameters) and '高级参数' (Advanced Parameters). The '基础参数' section includes: GPU卡数: 4, k点并行: 3, 赝势: SG15, 泛函: GGA/PBE, 截断能 (Ryd): 50. The '高级参数' section includes: K点网格: 精度 (中), 密度 (0.03), 1/A, 自定义, K1: 4, K2: 4, K3: 4, 优化方法: LBFGS, 最大优化步数: 100, 力收敛标准 (eV/Å): 0.01, 弹性系数 (eV/Å²): 1, 弹性带类型: original NEB, 过渡态续算: 导入未态结构.

北京龙讯矿研科技有限公司

K1 4 K2 4 K3 4

优化方法: LBFGS

最大优化步数: 100

力收敛标准 (eV/Å): 0.01

弹性系数 (eV/Å²): 1

弹性带类型: original NEB

① 移除垂直于弹性带切线方向上的弹性力

过渡态续算:  [导入未态结构](#)

名称	文件类型	化学式	原子总数	操作
LiF_Li_final_relax	pwmat	Li33F32	65	<a href="#">查看</a>

插点数 (images): 5

初态总能 (eV): -27273.92839571

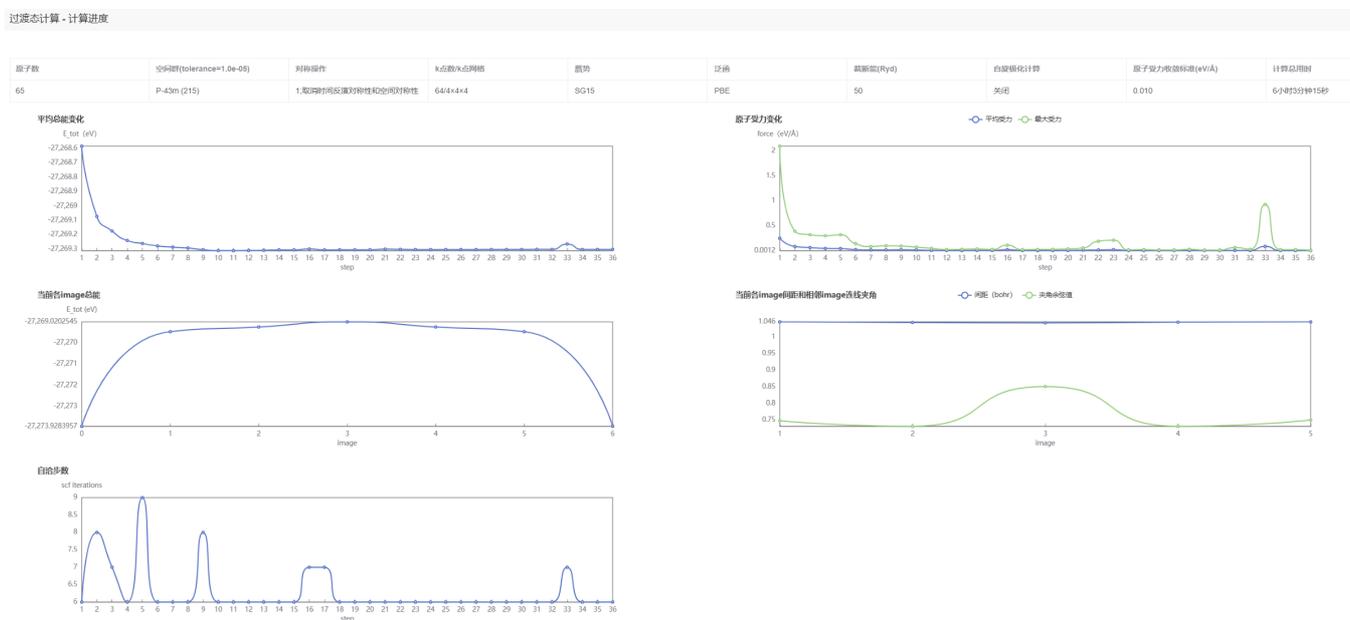
未态总能 (eV): -27273.92752940

[保存](#) [关闭](#)

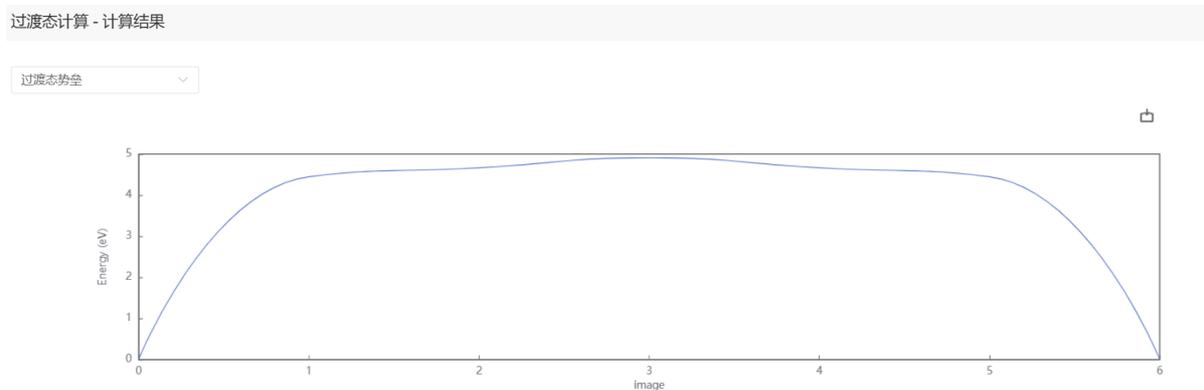
过渡态计算可以设置的基础参数除了有常规的 GPU 卡数、是否 k 点并行、赝势类型、泛函类型、截断能、k 点网格、原子优化算法、控制弛豫的步数及收敛条件等参数。还有一些对 NEB 计算的收敛标准、方法设置等。并在该组件中导入优化好的末态结构。其中初末态总能从前面 [自洽计算组件](#) 的结果中获取。

自洽计算 - 计算结果		自洽计算 - 计算结果	
总能 (eV)	费米能 (eV)	总能 (eV)	费米能 (eV)
-27273.92839571	8.39864345	-27273.92752940	8.39499328
总电荷密度		总电荷密度	

计算进度栏内包含一些图表数据，表格内会给出体系的基本参数。图里给出了平均总能变化、原子受力变化、各 image 总能、各 image 间距及自洽步数等。



计算完成后点击过渡态计算组件查看结果，可以查看过渡态势垒。



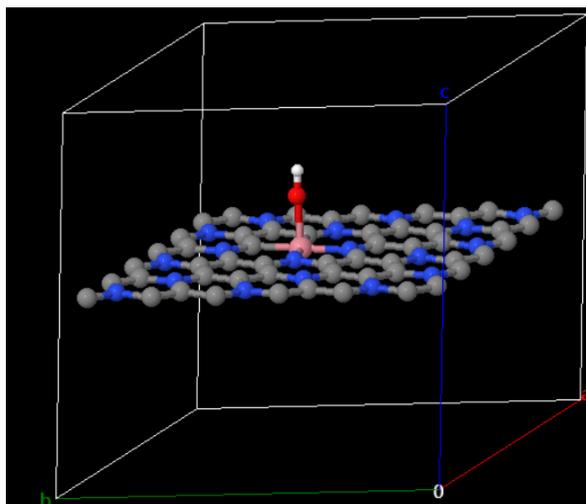
## 6.6. 隐式溶剂效应下 OER 计算

关于溶剂化模型的[视频教程](#)可以从官网获取。

整个计算流程有以下几步：

step1: 催化剂模型构建+结构优化（晶格优化+原子弛豫） → 隐式溶剂模型自洽计算 → 总能；  
step2: 中间体模型构建+结构优化（原子弛豫） → 隐式溶剂模型自洽计算 → 总能 + 零点能计算；  
step3: 气体分子模型构建+结构优化（原子弛豫） → 自洽计算 → 总能 + 零点能计算；  
step4: 查表得到熵值（例如[NIST-JANAF Thermochemical Tables](#)）；  
step5: 计算吉布斯自由能  $G_x = E_x(\text{总能}) + ZPE_x(\text{零点能}) - TS_x(\text{熵})$ 。

以 C3N 掺杂 Co 原子吸附 OH- 为例子。构建吸附模型结构并进行后续计算，点击 **组件** → **系统组件** → 拖拽 **结构优化** 和 **自洽计算** 组件到 workflow 区域 → 添加从 **结构导入** 到 **结构优化** 再到 **自洽计算** 的连线。其中 **结构导入** 组件中导入的是 C3N 掺杂 Co 原子吸附 OH- 的结构。自洽计算时考虑溶剂效应，并进行一些设置。



关于溶剂效应需要注意的几个点：

- 介电常数设置，介电常数通过电荷密度来区分溶质和溶剂，支持三种模型。
  - 中性原子电荷密度表示使用赝势文件中的电荷密度（推荐使用）；
  - 带修正项的中性原子电荷密度表示对赝势中的电荷密度增加一个指数项；
  - 自洽电荷密度表示使用自洽计算得到的电荷密度进行设置。

介电常数设置

模型: 中性原子电荷密度

介电常数  $\rho_e(r) =$

溶剂介电常数: 78.0

溶剂介电常数判据: 0.00010

溶质介电常数判据: 0.005

ⓘ  $\rho_e$ 小于0.0001的区域介电常数为78,  $\rho_e$ 大于的区域介电常数为1

- 其中  $f$  列表示对应元素的权重，溶剂化效应强的元素，或电荷密度权重大时，设置大的值；溶剂介电常数默认为水的介电常数（78）；溶剂介电常数判据和溶质介电常数判据为设置的电荷密度区间，电荷密度小于溶剂介电常数时为溶剂，电荷密度大于溶质介电常数时为溶质。计算完成后可视化溶剂化模型查看结果，检查判据设置是否合理，即能区分溶剂和溶质。

元素	$f$	元素	$f$	$g(\text{bohr}/e^3)$	$h(\text{bohr})$
Co	1.0	Co	1.0	1.0	1.0
H	1.0	H	1.0	1.0	1.0
C	1.0	C	1.0	1.0	1.0
N	1.0	N	1.0	1.0	1.0
O	1.0	O	1.0	1.0	1.0

- 溶质腔设置，参数的设置影响溶剂化能量，表面张力和压强的参数设置依据文章或者实验值；体积判据使用了自洽计算的电荷密度区分溶质腔和溶剂。

溶质腔(solute cavity)设置

表面张力(dyn/cm): 50.0

压强(GPa): -0.35

体积判据: 0.005

表面厚度判据: 0.00010

ⓘ 自洽电荷密度大于0.005的区域为空腔

ⓘ 自洽电荷密度0.0001-0.005的区域为空腔表面

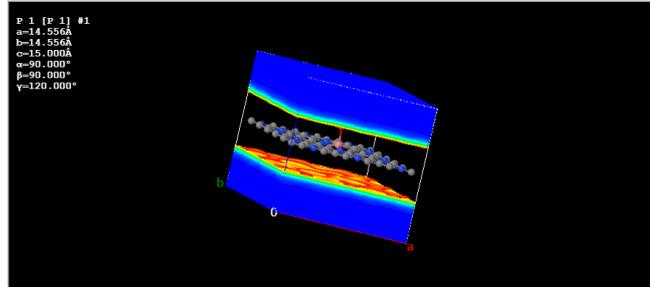
计算完成后点击自洽计算组件查看结果，可以查看溶剂效应模型。结果中可以区分出溶剂区、固液界面过渡区、溶质腔以及溶质区。如果溶质部分存在较大的孔洞，说明介电常数设置不合理，需要调整电荷密度区间或选择带修正项的中性原子电荷密度模型。

自洽计算 - 计算结果

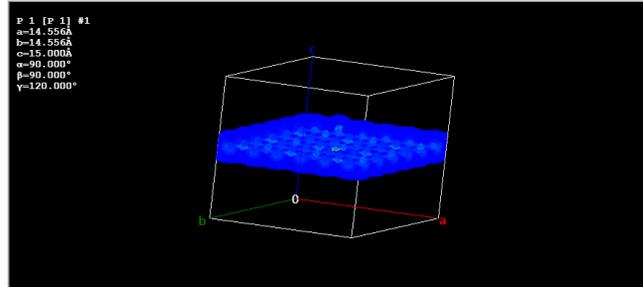
总能 (eV)	费米能 (eV)	电子数(带电荷)	带隙 (eV)	类型	CBM本征能组 (eV)	CBM位置	VBM本征能组 (eV)	VBM位置	总磁矩 (e)	自旋向上电子 (e)	自旋向下电子 (e)	局域差分电子 (e)
-17059.97469240	-6.22000000	316.669(-5.331)	0.4369	Direct	-5.6424	自旋向上 第 162 条能带 第 1 个K点	-6.0793	自旋向上 第 161 条能带 第 1 个K点	0.0001693712	158.3348138312	158.3346444600	0.0005177631

溶剂效应模型

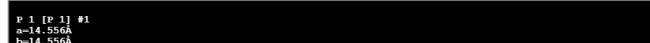
溶剂部分 (介电常数)



溶剂部分 (介电常数)



溶剂腔区域



其中总能从 **自洽计算组件** 的结果中获取。

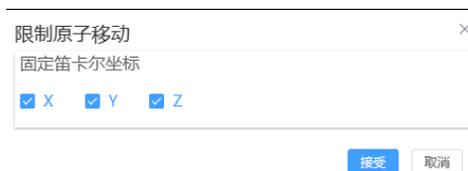
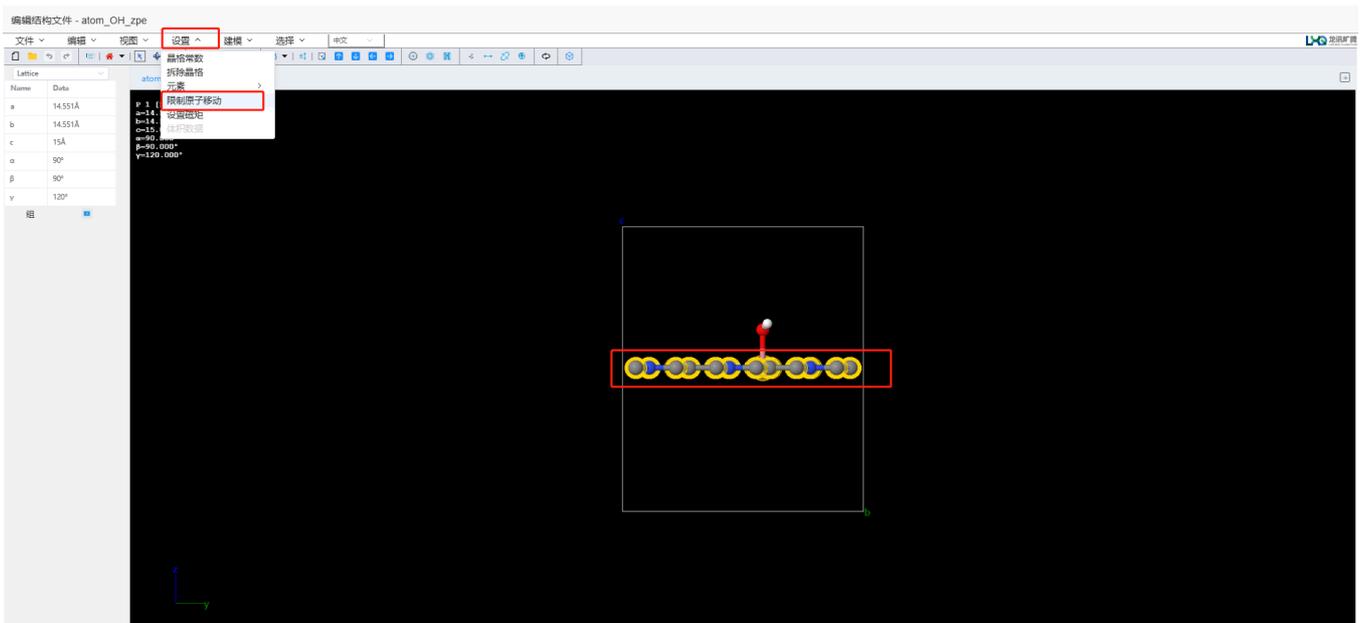
自洽计算 - 计算结果

总能 (eV)	费米能 (eV)
-27273.92839571	8.39864345

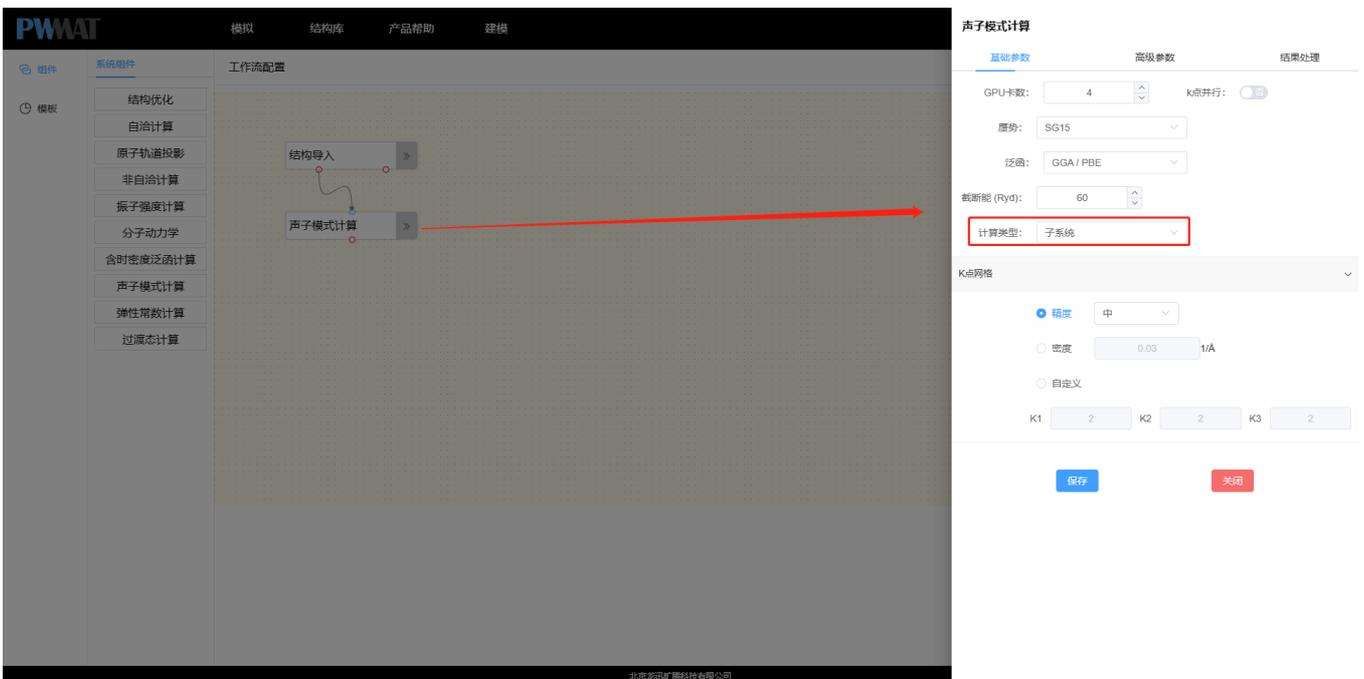
总电荷密度

零点能的计算，对于吸附体系，只计算吸附分子的零点能，不计算基体，即固定催化剂部分（在 Q-Studio 中限制原子移动）。

回到 **结构库** 中，选择刚才用于自洽计算的结构 → 点击 **编辑**，进入 Q-Studio，选择基体材料 → 点击 **设置** → **限制原子移动** → **导出结构**。



回到 **模拟** 中，并进入之前的项目 → **创建工作流** → 点击 **组件** → **系统组件** → 拖拽 **声子模式计算** 组件到工作流区域 → 添加从 **结构导入** 到 **声子模式计算** 的连线。其中声子模式计算的参数设置中，计算类型选择子系统，即只对没有固定的吸附原子进行计算。



计算完成后点击声子模式计算组件查看结果，即可获取吸附分子的零点能。

## 声子模式计算 - 计算结果

零点能

freq 1 =	5.279407 Thz	176.102073 cm-1	21.833886 meV
freq 2 =	5.279407 Thz	176.102073 cm-1	21.833886 meV
freq 3 =	18.385430 Thz	613.271925 cm-1	76.036069 meV
零点能 (ZPE) =	0.060 eV		

## 6.7. 固定电势法计算 OER

模拟恒电势的催化反应过程，需要配合[溶剂模型](#)使用。

更详细的[视频教程](#)可以从官网获取。

整个计算流程有以下几步：

### 方式一：

step1: 催化剂模型构建+固定电势法结构优化（晶格优化+原子弛豫） → 总能；

step2: 中间体模型构建+固定电势法结构优化（原子弛豫） → 总能 → 零点能计算；

step3: 气体分子模型构建+结构优化（原子弛豫） → 总能 → 零点能计算；

step4: 查表得到焓值（例如[NIST-JANAF Thermochemical Tables](#)）；

step5: 计算吉布斯自由能  $G_x = E_x(\text{总能}) + ZPE_x(\text{零点能}) - TS_x(\text{焓})$ 。

### 方式二：

step1: 催化剂模型构建+结构优化（晶格优化+原子弛豫） → 固定电势法自治计算 → 总能；

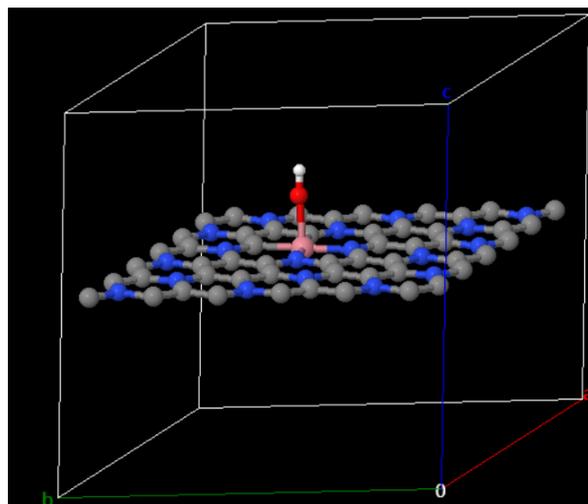
step2: 中间体模型构建+结构优化（原子弛豫） → 固定电势法自治计算 → 总能 + 零点能计算；

step3: 气体分子模型构建+结构优化（原子弛豫） → 自治计算 → 总能 + 零点能计算；

step4: 查表得到焓值；

step5: 计算吉布斯自由能。

以 C3N 掺杂 Co 原子吸附 OH-为例子（方式二-step2）。构建吸附模型结构并进行后续计算，点击 [组件](#) → [系统组件](#) → 拖拽 [结构优化](#) 和 [自治计算](#) 组件到 workflow 区域 → 添加从 [结构导入](#) 到 [结构优化](#) 再到 [自治计算](#) 的连线。其中 [结构导入](#) 组件中导入的是 C3N 掺杂 Co 原子吸附 OH-的结构。



自洽计算时考虑溶剂效应，并进行一些设置。在此基础上，还需要开启离子浓度设置和固定电势计算。

关于固定电势计算需要注意：

- 设置目标电极电势，这里是以标准氢电极为参考系，即相对标准氢电极的值；
- 收敛情况不好时可以适当增加 `mix_Q` 和 `drho_pulay` 值；

计算时可以拖拽多个自洽计算组件到工作流区，为不同的自洽计算组件分别设置不同的电极电势。后续的其他计算的操作，与**溶剂模型计算**中相同。

最后从各个组件中提取数据根据公式计算吉布斯自由能。