

欢迎使用 PWmat

本教程旨在帮助那些刚开始使用 PWmat 的用户快速上手,展开一些基本的计算。PWmat 博大精深,无法在此一一展开,对于更多的细节,请参考用户手册,对于一些更复杂的计算,可以参考官网的 module 模块,每个模块都有非常详细的介绍,这些计算通常也都是些普通计算的组合。因此,只要熟练掌握了以下这些计算,基本可以满足日常绝大部分的计算需求。如果计算中遇到一些问题,可以发送邮件到 support@pwm.com 邮箱,我们会有技术人员及时与您沟通,解决您的问题。

如何快速开始一个计算任务?

一个最简单的 PWmat 任务需要用户准备 3 个输入文件,分别是:atom.config (晶体结构文件)、etot.input (参数输入文件) 和 UPF (赝势文件)。

- 如何得到 atom.config 文件?

我们可以从各种晶体学数据库,比如 <https://www.materialsproject.org/> 等等,下载所需要的晶体结构格式文件,然后利用我们提供的丰富的格式转换脚本,将晶体结构转换成 atom.config 文件。例如可以用 poscar2config.x 脚本将 VASP 的 POSCAR 文件转换为 atom.config 文件,使用方法如下 poscar2config.x < POSCAR, 更多脚本介绍请参看 <http://www.pwm.com/utility-download> 这些脚本文件都不需要您下载编译,我们已经将这些脚本编译完后一起打包在您下载的 PWmat 安装包中(关于软件的更新,我们会在随后介绍),您只需敲相应的命令就行。当然如果您知道晶体的结构位置信息,您也可以手动书写一个 atom.config 文件,格式如下:

```
2 # 原子数目
Lattice # 晶格矢量标签
0.000000 2.826575 2.826575 # 第一个格矢
2.826575 -0.000000 2.826575 # 第二个格矢
2.826575 2.826575 0.000000 # 第三个格矢
Position # 原子位置标签
31 0.000 0.000 0.000 0 0 0 # 31: 原子序数, 0.0 0.0 0.0: 原子分数坐标
33 0.250 0.250 0.250 0 0 0
```

我们使用元素周期表中原子的序数来区分原子的种类,比如这里 31 代表 31 号元素 Ga,33 代表 33 号元素 As,所以这是一个 GaAs 的原胞结构,5,6,7 三列代表是否在 x,y,z 三个方向固定原子(常用于二维材料优化)。对于一些更复杂的计算,比如添加初始速度,初始磁矩,施加应力等,都可以在 atom.config 中添加相应的标签和参数实现,详细介绍请参看手册 atom.config 章节。

- 如何写一个 etot.input 文件?

etot.input 的关键词有几十个,但是普通的计算并不需要设置那么多参数,大部分参数我们都设定了默认值,一般情况下是不需要你去修改的,默认的参数可以在计算后得到的 REPORT 文件中查看。因为不同的计算需要设置不同的参数,下面我们以一个最简单的自洽计算(SCF)为例

来介绍:

```
l 4 #并行设置
job = scf #任务类型
in.atom = atom.config #晶体结构
in.psp1 = As.SG15.PBE.UPF #赝势 1
in.psp2 = Ga.SG15.PBE.UPF #赝势 2
mp_n123 = 8 8 8 0 0 0 # K 点选取
ECUT = 50 #截断能
XCFUNCTIONAL = PBE #交换关联泛函
```

1. 这里的第一行是并行参数设置，代表你需要使用到的 GPU 的数量，我们以一台标准的 4 卡 mstation 为例，机器一共有 4 块显卡。我们记两个数为 a_1 , a_2 ，在这里 $a_1=1$, $a_2=4$ ， a_1 表示波函数并行， a_2 表示 K 点并行， a_1 和 a_2 的乘积不能大于你总的 GPU 数量 4，并且 a_1 , a_2 必须取整数，也就是 a_1 和 a_2 的取值为 1、2、3、4 的组合，如果你有更多的 mstation，则可以取更大的整数。合理设置 a_1 , a_2 的值可以使计算更加高效，一个简单的设置原则是：大晶胞，少 K 点，使用波函数并行，例如 $a_1=4$, $a_2=1$ ；如果是小晶胞，K 点取的比较多，则使用 K 点并行，例如本例 $a_1=1$, $a_2=4$ 。还有几种特殊情况不能使用 K 点并行，比如进行杂化泛函 (HSE) 计算，或者使用插值法算 DOS (参看手册 DOS_DETAIL)。
2. 这里的第二行是任务类型，本例就是自洽计算 SCF，如果是其它类型的计算，设置成其它就行，参看手册 JOB 章节
3. 第三行代表你要读取的结构文件，文件名称可以自定义，只要保持一致就可以
4. 第 4 和第 5 行是需要用的赝势文件，每个元素单独一个赝势文件，如果结构包含多种元素，就写多行，不需要区分顺序
5. 第 6 行为 K 点取值，MP_N123 参数是使用 Monkhorst-Pack ("Special points for Brillouin-zone integrations" Hendrik J. Monkhorst and James D. Pack Phys. Rev. B 13, 5188 - Published 15 June 1976) 方法产生 K 点和对称性。前三位代表三个方向的 K 点密度，后三位是平移操作，默认不平移是 0，需要进行平移则为 1。如果你需要进行 HSE 计算，则 K 点的取值密度要比平时取得少一些，否则可能出现半天才跑一步的情况。
6. 第 7 行是平面波的截断能，这里的单位是 Ry， $1\text{Ry}=13.6\text{eV}$ ，这一行可以不设置，程序会自动从赝势文件中读取，一般默认值为 50
7. 第 8 行是需要使用的交换关联泛函，可以不设置，默认是使用 PBE 泛函，如果需要使用其它泛函比如 HSE，则在此处设置。

● 如何选择赝势文件？

我们官网有提供各种名目的赝势，实际上就是两种赝势，一种是模守恒赝势 (NCPP) 另一种是超软赝势 (SUPP)，目前我们推荐使用 NCPP 赝势，其中推荐优先使用 SG15 赝势，这种赝势非常精确和可靠，经过了大量的测试。我们自己开发的 PWM 模守恒赝势相比 SG15 有更小的截断能，因此也更节省计算资源，它可以很好的计算电子信息，但是非常不推荐用于结构优化！当然也可以使用一些第三方的赝势，比如 QE 的赝势或

者 <http://www.pseudo-dojo.org> 下载的赝势，但是需要注意的是：赝势必须是 UPF 格式，并且是 NCPP 或 SUPP，我们不支持 PAW 赝势！NCPP 赝势之间是可以混用的，比如 SG15 和 PD04 可以混用，但是 NCPP 和 SUPP 不可以混用！

- 如何提交任务？

Mstation 已经为大家安装好了 PBS 队列系统，队列脚本文件如下：

```
#PBS -N 512GaAs-RELAX # 作业名称，这里是一个 512 原子 GaAs 的弛豫计算
#PBS -l nodes=1:ppn=4 # 作业资源申请，这里是申请一个节点，4 个 GPU
#PBS -q batch # 提交的队列是 batch
#PBS -l walltime=24:00:00 # 作业申请最大时间是 24 小时
cd $PBS_O_WORKDIR # 切换到工作目录，也就是当前提交作业脚本的目录
mpirun -np 4 PWmat # 运行 PWmat
```

提交作业的命令为 `qsub job.pbs`

可以使用 `qstat` 命令查看自己提交的任务，或者使用 `showq` 命令查看 mstation 上的所有任务。如果你不使用队列系统，也可以直接敲 `mpirun -np 4 PWmat` 命令运行作业。如果想使用以前版本的 PWmat，则只要将 PWmat 的绝对路径写出即可。

在你取得一个晶体结构，想要计算它的一些基本电子结构性质前，首先要做的一件事是晶体结构优化，可以说这是整个计算最关键的一步，也是最难的一步（设置并不难），一定要仔细检查优化完的结构，再进行下一步计算，古语有云：欲速则不达！下面我们简单介绍如何设置结构优化的 `etot.input`，如果优化过程中遇到不收敛等问题，可以参考 <https://hongzhentian.github.io/PWmat-doc/#/PWmat/relaxtentips> 强烈建议在计算之前就好好学习一下这个 ppt。

`etot.input` 设置如下：

```
l 4 #并行设置
job = relax #任务类型
relax_detail = 1 100 0.02 1 0.01 #优化参数设置
in.atom = atom.config #晶体结构
in.psp1 = As.SG15.PBE.UPF #赝势 1
in.psp2 = Ga.SG15.PBE.UPF #赝势 2
mp_n123 = 8 8 8 0 0 0 # K 点选取
ECUT = 70 #截断能
XCFUNCTIONAL = PBE #交换关联泛函
```

相比于之前的 SCF，这里我们把第二行 JOB 的类型设置为 `relax`，具体控制 `relax` 的参数在第三行 `relax_detail` 设置。大部分的任务类型都有这么一个 `job_detail` 设置，这里五个数不做过多介绍，具体参看手册 `relax_detail` 章节，第一个数 1 是优化使用的方法，这里 1 是 CG 方法，你也可以选择其它，对于一些大体系不易收敛的结构，使用方法 4 或许有惊喜。第二个数 100 是结构优化的最大步数；第三个数 0.02 是最大原子受力；第 4 个数 1 代表晶格优化，如果你只想优化原子位置，则设为 0；最后一个数是晶格的残余应力。我们在做晶格优化时，非常需要小心的是截断能的选取，通常需要选取比普通计算更大的截断能，比如示例中的 70，这是因为你在优化晶胞的时候，晶胞的体积是在变化的，因此平面波

的数量也是变化的，但是程序在计算时是保持平面波数量不变的，这就会引起误差，截断能越大，则这个误差越小，如果你做一个测试，你会发现晶格大小会随着截断能的增大趋于一个固定值。当然如果你设置一个太大的阶段能就会需要更多的计算资源。为此，我们开发了另一种方法来修正这种误差，具体可以参看手册 STRESS_CORR 章节，这种方法可以以一个较小的截断能，得到一个准确的结果，缺点是需要多做两步自洽计算，步骤会更繁琐（我们以后可能会做一些优化，把步骤整合到程序中）。

如何计算电子态密度 (DOS) ?

首先需要进行 RELAX 和 SCF 计算，前面说过 PWmat 做 relax 和 scf 只需要 atom.config、etot.input 和 UPF 三个文件，这里算 DOS，需要额外的一个文件 IN.WG 文件和 OUT.EIGEN 文件，这两个文件由前面的 SCF 生成，SCF 会输出一个 OU.WG 文件，我们只需要将其拷贝成 IN.WG 即可，OUT.EIGEN 文件则不需要进行改名。然后计算 DOS 的具体 etot.input 文件如下：

```
l 4 #并行设置
job = DOS #任务类型
in.atom = atom.config #晶体结构
in.psp1 = As.SG15.PBE.UPF #赝势 1
in.psp2 = Ga.SG15.PBE.UPF #赝势 2
mp_n123 = 8 8 8 0 0 0 # K 点选取
ECUT = 70 #截断能
XCFUNCTIONAL = PBE #交换关联泛函
IN.WG = T #读取 SCF 的 WG 文件
```

需要注意的是由于读取了上一步的 WG 文件，因此，这里的并行设置，K 点选取和截断能都要和上一步 SCF 保持一致。特别需要注意的是如果使用 HSE 泛函，则还需要拷贝 HSE 泛函产生的 OUT.HSEWR*文件到计算目录下，etot.input 中第一行也不能再使用 K 点并行，要使用波函数并行 4 1，所以上一步 scf 就需要使用 4 1 并行。如果你打开是自旋 spin=2，则还需要拷贝 OUT.WG_2 为 IN.WG_2。计算完成后，系统会输出一个 DOS.totalspin 文件，使用 origin 等软件就可以作图。如果开了自旋，则会有 DOS.spinup 和 DOS.spindown 文件。特别需要注意的是这里输出的 DOS 文件并没有将费米能级归零，所以如果需要归零的话，可以从 REPORT 文件或 OUT.FERMI 文件读取费米能级的位置，在作图过程中进行处理。我们也提供了快速查看 DOS 图的脚本，plot_DOS.py，只要将 OUT.FEIMI 文件拷贝到当前目录，就可以快速得到费米能级归零的 DOS 图。如果您需要画投影态密度图，可以参看我们 module 页面下的第 15 个 module: fatband 模块，里面有详细的介绍。如果需要插值画更密的 K 点，则可以设置 dos_detail。

如何计算能带 (band) ?

计算 band 与 DOS 类似，首先都需要进行 scf 计算，计算 band 需要读取 scf 产生的 OUT.VR 文件，需要将其拷贝成 IN.VR 文件。同时计算 band 需要指定特殊的 K 点高对称点路径，因此我们需要额外准备一个 IN.KPT 文件（稍后介绍如何得到 IN.KPT 文件）。具体的 etot.input 设置如下：

```
l 4 #并行设置
job = NONSCF #任务类型，这里并不是 band
```

```

in. atom    = atom.config    #晶体结构
in. psp1    = As.SG15.PBE.UPF #赝势 1
in. psp2    = Ga.SG15.PBE.UPF #赝势 2
ECUT        = 70            #截断能
XCFUNCTIONAL = PBE          #交换关联泛函
IN.VR = T      #读取 SCF 的 VR 文件
IN.KPT = T     #读取 K 点路径文件

```

需要注意的是我们不能在 `etot.input` 里再设置 `mp_n123` 了，这个参数的优先级高于 `IN.KPT`，所以如果你设置了 `mp_n123`，则软件不会去读取 `IN.KPT` 文件。使用 `HSE` 或者打开 `spin` 同 `dos` 一样。画投影能带也可以参考 `fatband` 模块。下面我们介绍下如何生成 `IN.KPT` 文件：

首先需要准备一个高对称路径文件 `gen.kpt` (名字可以随便取)，将高对称点及插入的点数写入其中，格式如下：

```

Band                # 标识行，必须有这一行
10                  # 高对称点 X、R 之间插入的点数
0.500 0.000 0.000 X # 高对称点坐标，标签用于后处理，必须有
0.500 0.500 0.500 R
10                  # 高对称点 R、M 之间插入的点数
0.500 0.500 0.500 R
0.500 0.500 0.000 M
10                  # 高对称点 M、G 之间插入的点数
0.500 0.500 0.000 M
0.000 0.000 0.000 G
10                  # 高对称点 G、R 之间插入的点数
0.000 0.000 0.000 G
0.500 0.500 0.500 R

```

这些高对称点可以参考文献，也可以通过其它软件比如 `MatStudio` 找到，或者到一些晶体学网站查找，比如 <http://www.cryst.ehu.es>，先准备好 `gen.kpt` 文件之后，使用 `split_kp.x gen.kpt` 命令即可以得到 `IN.KPT` 文件。我们也提供了一个 `sumo` 的 `python` 小程序，可以直接通过 `atom.config` 文件生成 `IN.KPT` 文件，具体使用方法参见：

<https://hongzhentian.github.io/PWmat-doc/#/PWmat/kpointspath>

任务运行完成后，运行 `plot_band_structure.x` 即可产生能带的文件 `bandstructure_1.txt`，导入 `origin` 等画图软件作图即可，如果再运行脚本前准备好了 `OUT.FERMI` 文件，则输出的能带数据是自动将费米能级归零的，这点与 `DOS` 稍有不同。

如何进行分子动力学模拟 (MD) ?

普通的 `MD` 计算不需要准备额外的输入文件，与 `relax` 和 `scf` 相同，只需要 `atom.config`，`etot.input`，`UPF` 三种文件。`MD` 需要的 `etot.input` 如下：

```

1 4            #并行设置
job           = md #任务类型
md_detail    = 1 100 1 2000 2000 #md 参数设置
in. atom     = atom.config    #晶体结构

```

```

in.psp1 = As.SG15.PBE.UPF #赝势 1
in.psp2 = Ga.SG15.PBE.UPF #赝势 2
mp_n123 = 8 8 8 0 0 0 2 # K点选取
ECUT = 50 #截断能
XCFUNCTIONAL = PBE #交换关联泛函

```

最主要的设置都在第三行，一共有五个参数，手册上有每个参数详细的介绍，第一个参数是md使用的系宗，这里1是verlet方法(NVE)，目前PWmat支持NVE,NVT和NPT，暂时不支持NPE。第二个数是MD的步数，第三个数是步长，步数和步长的乘积是你要研究的时长。第4和5个数分别是起始温度和末态温度。并不是所有的MD方法，这两个温度都起作用。需要注意的一点是K点的选取，这里相比之前的scf或DOS等多了一个数2，这里的2指的是计算时关闭对称性，也就是说888的K点，总共要算512个K点，如果考虑对称性，则要少很多，之所以要关闭对称性，是因为在做MD的过程中，原子位置可能变化较大，中间结构可能会失去初始结构的一些对称操作，如果考虑对称性，程序就会找不到对应的对称原子，导致程序报错。MD的主要信息保存在MDSTEPS文件。

MD如何进行续算？比如我模拟了10ps，还想接着模拟5ps怎么办？

可以在当前目录下，将final.config文件拷贝成atom.config，然后修改etot.input中md_detail这一行，将第一个数1，改成11。如果你使用的是其它方法比如2，则改成22即可。当然你也可以修改in.atom=final.config，这样就可以不用copy了。

如何进行过渡态搜索 (NEB) ?

在做NEB之前，首先你需要准备好起始和末态的结构文件（比普通计算多一个结构文件），然后进行充分的结构优化并获得体系的总能量（注意能量可以从原子位置优化获得，或者scf获得，这两者是一样的，不能从晶胞优化的任务中读取能量）。准备完成后就是设置etot.input文件：

```

l 4 #并行设置
job = neb #任务类型
neb_detail = IMTH NSTEP FORCE_TOL NIMAGE AK TYPE_SPRING E0 EN ITYPE_AT2
ATOM2.CONFIG #neb 参数设置
in.atom = atom.config #晶体结构
in.psp1 = As.SG15.PBE.UPF #赝势 1
in.psp2 = Ga.SG15.PBE.UPF #赝势 2
mp_n123 = 8 8 8 0 0 0 2 # K点选取
ECUT = 50 #截断能
XCFUNCTIONAL = PBE #交换关联泛函

```

这里neb_detail的参数值比较多，并且没有默认，必须自己设置。其中IMTH表示采用的优化方法，NSTEP表示NEB步数，FORCE_TOL表示NBE收敛标准(eV/Å)，NIMAGE表示插入的构象数量，AK表示弹性力的大小，ITYPE_SPRING表示弹性力的类型，E0表示初态构象的能量，EN表示末态构象的能量，ITYPE_AT2表示是否是续算，ATOM2.CONFIG表示末态构象的结构文件。每一个参数这里不一一展开，具体可以参看手册，需要注意的是NEB通常不是一蹴而就的，往往需要跑几次，初始的force收敛精度不易过高，容易导致不收敛。NEB的续算通过ITYPE_AT2控制，ITYPE_AT2=2表示续算，如果是续算，则ATOM2.CONFIG包含了

之前所有的结构文件，也就是 NIMAGE+2 个结构文件（可以从 MOVEMENT 文件中拷贝）。如果需要 CI-NEB 计算，则需要修改 neb_detail 中的 IMTH 参数，比如你先前用的是 1，CI-NEB 则是 11，之前是 3，则是 33，以此类推。注意不能一开始就使用 CI-NEB，所以 CI-NEB 都是续算。同时需要注意的是做 NEB 时也需要关闭 K 点对称性，应为中间结构的对称性往往比初末结构低。计算完成后会输出时垒文件 NEB.BARRIER

如何进行含时密度泛函计算（TDDFT）？

这部分内容由于比较新，所以在官方的手册中做了非常详细的说明，并且给出了大量的算例，也很难用几句话讲清楚，因此在这里不做过多赘述，这里只讲一些注意事项，首先还是列一个简单 etot.input 文件：

```
l 4 #并行设置
job = tddft #任务类型
md_detail = 1 100 0.05 2000 2000 #md 参数设置
tddft_detail = m1 m2 mstate #tddft 参数设置
in.atom = atom.config #晶体结构
in.psp1 = As.SG15.PBE.UPF #赝势 1
in.psp2 = Ga.SG15.PBE.UPF #赝势 2
mp_n123 = 8 8 8 0 0 0 2 # K 点选取
ECUT = 50 #截断能
XCFUNCTIONAL = PBE #交换关联泛函
TDDFT_SPACE = itype_space, N, a(1), ..., a(N) #外场空间相，默认为 0
TDDFT_TIME = itype_time, N, b(1), ..., b(N) #外场时间相，默认为 0
NUM_BAND = 50 #需要计算的能带数目
```

这里 tddft_detail 中，m1 和 m2 控制着你要研究的绝热窗口，mstate 是需要展开的波函数的个数。因为涉及到激发，通常程序默认给出的 band 数目是不够的，我们需要给导带再加一些空带，这可以通过 NUM_BAND 来设置。比如体系有 50 个电子，那么价带顶就是 25，这里我们设置 50，表示 25 个价带和 25 个导带。是否加外场可以通过 TDDFT_SPACE 和 TDDFT_TIME 两项控制，它们的乘积即是 t 时刻外场的强度。m1, m2 和 mstate 与设置的外场息息相关，如果不会设，则使用默认值，会把所有的 band 都展开，这会增加不必要的计算量，因为非常内层的电子通常不会有变化，变化主要集中在价带顶。简单理解就是 m1 要小于体系中电子数/2，m2 要大于 VBM, <=总的能带数，并且要包含所有激发态，mstate 要大于 VBM, <=m2。具体可以参看手册。

步长和温度控制通过 md_detail 实现，需要注意的是这里只支持方法 1，并且 tddft 的步长设置要远小于 md，我们支持的最大步长是 0.2fs，在实际计算中，我们建议使用比这个值更小的步长，比如 0.05fs。tddft 过程中如果打开对称性，同样也可能引起程序报错。

Tddft 的续算与 md 类似，通过修改 md_detail 实现，将 1 修改为 11 即表示续算，不同的是 tddft 的续算不需要你拷贝 final.config 文件为 atom.config 文件，软件会自动从 OUT.TDDOS 文件夹下读取最后的结构文件。

可以通过 plot_TDDFT.x 脚本处理 tddft 的结果。

如何进行非绝热分子动力学（NAMD）计算？

NAMD 和 tddft 计算非常相似，也是通过 TDDFT_SPACE 和 TDDFT_TIME 两项控制外场，通过 md_detail 控制时间步长，区别就是将 job 类型改为 NAMD，job_detail 为 namd_detail，NAMD 可以比 tddft 研究更大的体系，步长也可以使用 MD 的步长，etot.input 文件如下：

```
l 4 #并行设置
job = tddft #任务类型
md_detail = 1 100 1 2000 2000 #md 参数设置
namd_detail = m1 m2 nstep_out #namd 参数设置
in.atom = atom.config #晶体结构
in.psp1 = As.SG15.PBE.UPF #赝势 1
in.psp2 = Ga.SG15.PBE.UPF #赝势 2
mp_n123 = 8 8 8 0 0 0 2 # K 点选取
ECUT = 50 #截断能
XCFUNCTIONAL = PBE #交换关联泛函
TDDFT_SPACE = itype_space, N, a(1), ..., a(N) #外场空间相，默认为 0
TDDFT_TIME = itype_time, N, b(1), ..., b(N) #外场时间相，默认为 0
NUM_BAND = 50 #需要计算的能带数目
```

我们提供了 NAMD_psi.x 和 NAMD_Boltzman.x 后处理文件用于查看 NAMD 计算中的波函数和计算 boltzman 常数，需要注意的是，这里并没有考虑退相干效应，如果需要考虑退相干效应，可以参考 module 页的第 21 个 module boltzman-NAMD。

计算中遇到的一些常见问题可以参考 <http://www.pwmat.com/faq> 我们也有微信群和技术支持邮箱帮助解决您的问题，我们也非常欢迎您把问题放到我们的论坛上 (<http://bbs.pwmat.com>, 相比微信群更适合将问题描述清楚)，然后只要告诉我们链接，我们便会过去解答。