

Quantum Espresso

Moduli

Quantum Espresso je preveden s Intel 2019 i MVAPICH2 2.2.

Dostupne verzije su:

Verzija	Modul
5.4.0	quantum-espresso/5.4.0
6.3	quantum-espresso/6.3
6.3	quantum-espresso/6.3-nfilemax50
6.6	quantum-espresso/6.6
6.7	quantum-espresso/6.7
6.8 *	quantum-espresso/6.8
7.1 *	quantum-espresso/7.1

* modul uključuje i [thermo_pw](#) paket.



U modulu quantum-espresso/6.3-nfilemax50 napravljena je izmjena u kodu gdje se parametar nfilemax povećao na 50.

```
PP/src/chdens_module.f90: INTEGER, PARAMETER :: nfilemax = 50
```

Korištenje

Izračun optičkog spektra benzena koristeći vremensko-ovisni pristup teorije funkcionala gustoće (Time-Dependent Density Functional Theory, TDDFT).

Prije samog izračuna potrebno je skinuti knjižnicu pseudopotencijala (za potrebe ovog izračuna potrebni su C i H pseudopotencijali) odabirući sljedeće parametre (NC SR(ONCVPSP v0.4), PBE, stringent, upf) s web stranice <http://www.pseudo-dojo.org/index.html>. U svim input datotekama zadati put do direktorija u kojem se knjižnica nalazi.

Posljednja geometrija u output datoteci predstavlja početnu geometriju u idućoj input datoteci.

Primjer skripte za opis poslova:

run.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N qe
#$ -cwd
#$ -pe p28-mpi 2
#$ -j y

module load quantum-espresso/6.7

mpirun -np 2 /apps/qe/6.7/mvapich2-intel-2.2/bin/turbo_lanczos.x -inp benzene_t1.in > benzene_t1.out
```

Primjer pw.x input datoteke:

pw.x

```
&CONTROL
  calculation = 'vc-relax'
  prefix = 'benzene'
  outdir = './outdir'
  pseudo_dir = '/home/user/nc-sr-04_pbe_stringent_upf'
  etot_conv_thr = 1e-5
  forc_conv_thr = 1e-4
/
&SYSTEM
 ibrav = 6,
  celldm(1) = 32.0,
  celldm(3) = 0.83,
  nat = 12,
  ntyp = 2,
  ecutwfc = 30,
/
&ELECTRONS
  conv_thr = 1.0d-8
/
&IONS
/
&CELL
/

ATOMIC_SPECIES
C 12.0107 C.upf
H 1.00784 H.upf

ATOMIC_POSITIONS angstrom
C 5.633200899 6.320861303 5.000000000 1 1 0
H 6.847051545 8.422621957 5.000000000 1 1 0

K_POINTS gamma
```

1. Izračun relaksacije molekule s ciljem ispravljanja neprirodne i/ili nepogodne geometrije poput nepravilnih duljina veza i vrijednosti kutova

```
pw.x -inp benzene_relax.in > benzene_relax.out
```

2. Izračun konvergencije, odnosno stanja sustava gdje su sile unutar sustava esencijalno jednake 0

```
pw.x -inp benzene_scf.in > benzene_scf.out
```

Primjer turbo_lanczos.x input datoteke:

```
&LR_INPUT
prefix = 'benzene'
outdir = './outdir'
/

&LR_CONTROL
itermax = 500
ipol = 4
/
```

3. Izračun vrijednosti β , γ i z rekursijskih koeficijenata polarizabilnosti pomoću Lanczos-ovog algoritma

```
turbo_lanczos.x -inp benzene_t1.in > bezneze_t1.out
```

4. Izračun polarizabilnosti apsorpcijskog spektra na temelju koeficijentata izračunatih u prethodnom koraku

```
turbo_spectrum.x -inp benzene_ts.in > benzene_ts.out
```

Primjer gnuplot skripte:

```
set autoscale          # scale axes automatically
unset log              # remove any log-scaling
unset label            # remove any previous labels
set xtic auto          # set xtics automatically
set ytic auto          # set ytics automatically
set title "title"
set xlabel "energy/eV"
set ylabel "absorption"
plot 'benzene.dat' u 1:2 title 'light absorption: benzene' with linespoints
pause -1 "Hit any key to continue\n"    #the code doesn't exit automatically
```

5. Grafički prikaz spektra sustava

```
gnuplot benzene.gnu
```

[blocked URL](#)

Više informacija dostupno na web stranici: <https://www.quantum-espresso.org/documentation/>.