

Quantum ESPRESSO

Quantum ESPRESSO – (PWscf, Plane-Wave self-consistent field) – программный пакет, построенный на базе теории функционала электронной плотности (DFT) и методе псевдопотенциала (PAW-метод). Представляет собой мощный инструмент для энергетических расчетов многоэлектронных систем и предназначен для моделирования на квантово-механическом уровне малых кластеров с числом атомов 10-100, определяющих существование возможных в материале фаз. Во многом является аналогом коммерческого квантово-химического ППП VASP. Описание моделируемого объекта строится на языке волновых функций и заданного гамильтониана системы. Целевыми функциями являются электронный энергетический спектр, собственные функции и плотность состояний изолированного кластера при фиксированном положении ядер, потенциальная энергия системы с учетом электронно-ядерных подсистем. С помощью ППП PWscf можно прогнозировать плотности электронных состояний произвольных кристаллических материалов и их свойств, исходя из основ квантовой теории строения вещества. Расчеты с применением ППП PWscf оптимизированы для использования сотен процессоров, поэтому большой интерес вызывает возможность использования этих пакетов на большом числе процессоров в грид-системах (на основе MPI). ППП PWscf распространяется в исходных текстах по лицензии GNU GPL, что позволяет свободно использовать его в качестве грид-сервиса.

Пакет Quantum ESPRESSO предназначен для работы в операционной системе Linux. Расчеты проводятся в базисе плоских волн с использованием сепарабельных сохраняющих норму (Гаманн-Шлютер-Чинг, Труллер-Мартинс и др. типов) или ультрамягких псевдопотенциалов, а также метода PAW. Предусмотрена возможность использования обменно-корреляционных функционалов различного вида: от приближения локальной плотности (LDA), до обобщенно-градиентного приближения (GGA) в работах разных авторов. Для работы с Quantum ESPRESSO существует обширная библиотека псевдопотенциалов различных атомов. Кроме того, псевдопотенциалы с необходимыми параметрами могут быть получены с использованием входящей в состав пакета программы `ld1`. Можно выделить следующие ключевые возможности программного пакета Quantum ESPRESSO:

- решение уравнений Кона-Шема и определение полной энергии многоэлектронных систем;
- расчет распределения электронной плотности;
- вычисление полной и парциальных плотностей состояний;
- расчет атомных зарядов по схеме Левдина;
- расчет межатомных сил, тензора напряжений и структурная оптимизация;
- исследование эволюции многоатомных систем методом молекулярной динамики;
- определение энергетических барьеров и путей реакций;
- расчет эффективных зарядов Борна и диэлектрической проницаемости;
- расчет фононных частот и векторов поляризации в рамках теории возмущения для функционала плотности (DFPT);
- вычисление силовых постоянных кристалла;
- расчет коэффициентов электрон-фононного взаимодействия для металлов.



Рисунок 1. В качестве визуализатора Quantum ESPRESSO может быть использована программа XCrySDen.

Место установки программы:

`/opt/lib/qe-6.5/`

Книги:

- Lee J. G. *Computational Materials Science: An Introduction*. // CRC Press, 2016.
- Rapaport D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. // Cambridge University Press, 2004.
- Leimkuhler B., Matthews C. *Molecular Dynamics: With Deterministic and Stochastic Numerical Methods*. // Springer, 2015.
- Marx D., Hutter J. *Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods*. // Cambridge Un. Press, 2009.
- Sholl D., Steckel J. A. *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. // Wiley-Interscience, 2009.

Сетевые ресурсы:

- *Quantum ESPRESSO*. <https://www.quantum-espresso.org>
- *Quantum Espresso Users*. <https://www.facebook.com/quantum.espresso.users>
- *Quantum ESPRESSO Summer School 2019*. <http://qe2019.ijs.si>
- *Quantum ESPRESSO*. <https://twitter.com/QuantumESPRESSO>

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jscc.ru