

课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2018.02.02-03

课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

1 2017 年的工作进展

2 2018 年的工作计划

2017 年工作的进展



课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

- VASP 软件的对称性判断模块与功能
- \vec{k} -path 路径自动生成
- 程序模块

对称性模块与电子结构计算

- 第一原理计算中，材料的初始结构经过结构弛豫会导致晶胞参数和原子坐标发生改变，对称性也将发生变化。
- 材料的电子能带结构表示与体系的对称性密切关联

高通量自动流程中的对称性模块

- 高通量计算中，利用对称性可以在保证计算精度的同时，有效地降低计算量
- 没有完整的材料结构数据库支持，第一原理“结构弛豫-静态计算-能带表示”自动流程闭环必须有对称性模块支持

VASP 软件的对称性判断



课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

```
Analysis of symmetry for initial positions (statically):
=====
Subroutine PRICEL returns:
Original cell was already a primitive cell.

Routine SETGRP: Setting up the symmetry group for a
face centered cubic supercell.

Subroutine GETGRP returns: Found 48 space group operations
(whereof 24 operations were pure point group operations)
out of a pool of 48 trial point group operations.

The static configuration has the point symmetry T_d .
The point group associated with its full space group is O_h .
```

Figure: Analysis of symmetry in VASP.

VASP 软件的对称性判断与功能解析



课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

VASP 软件的对称性判断，确定体系的点群对称性

■ 模块 **LATTYP**: 晶胞结构的标准化

- 1 根据 POSCAR 给定的晶体原始矢量，确定晶体所属 Bravais 格子和晶胞参数
- 2 搜索最小的晶格矢量: 必要的时候，程序会自动调整矢量的顺序

■ 模块 **PRICEL**: 确定初基原胞 (primitive cell)

- 1 根据晶格中原子的坐标，确定原子数最少的原子类型和数目
- 2 以原子数最少的第一个原子为参考，确定其他各原子与第一个原子的“平移矢量”关系
- 3 根据晶格矢量 $\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3$ 和三个方向最小矢量，确定初基原胞的三个矢量 $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3$
- 4 应用 **LATTYP**，实现初基原胞的标准化

VASP 软件的对称性判断与功能解析



课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

VASP 软件的对称性判断，确定体系的点群对称性

■ 模块CHKSYM: 确定体系的对称操作

- 1 依次检查点群对称元素是否是有效的对称操作
- 2 判断对称操作是否属于对应的点群:
 - 所有的原子位置可重合 (纯粹的点群操作)
 - 点群对称操作, 须外加滑移对称性 (空间群操作)
 - 原子位置无法重合 (不允许的对称操作)
- 3 每个许可的对称操作必须执行必须对全部原子都适用, 否则不能构成有效的对称操作

传统能带计算的问题

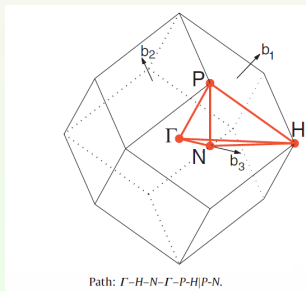
课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

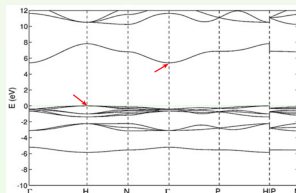
2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

对称性相同的材料电子结构表现出明显的相似性，但传统能带计算和表示的 \vec{k} 点路径 (\vec{k} -Path) 选择有着明显的人为性和任意性



(a) Brillouin Zone of BCC lattice



(b) Band structure of GeF_4

利用对称性模块实现能带表示路径 \vec{k} -path “标准化”，对于高通量材料电子结构数据挖掘有着重要意义

标准化 \vec{k} -path 路径

课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

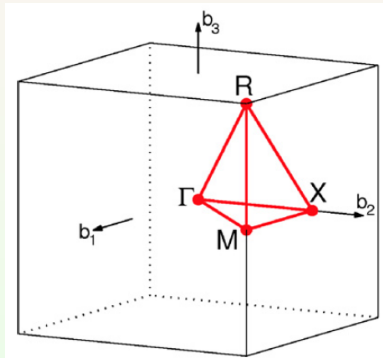


Figure: Brillouin Zone of Cubic lattice.

PATH: Γ -X-M- Γ -R-X|M-R

标准化 \vec{k} -path 路径

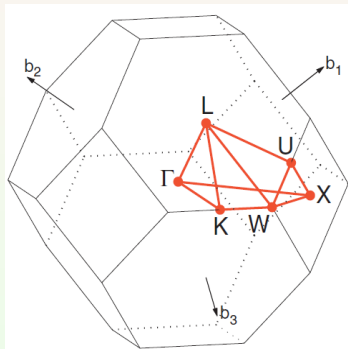


Figure: Brillouin Zone of FCC lattice.

PATH: Γ -X-W-K- Γ -L-U-W-L-K|U-X

标准化 \vec{k} -path 路径

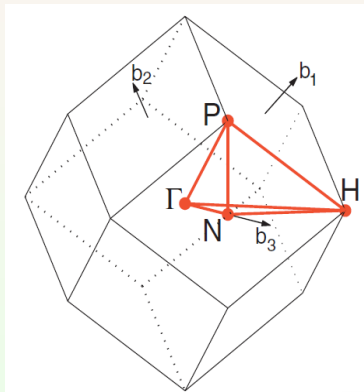


Figure: Brillouin Zone of BCC lattice.

PATH: Γ -H-N- Γ -P-H|P-N

已经完成的代码

课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

- 基于 POSCAR 的对称性分析
- 标准化 \vec{k} -path 路径的自动生成 (部分)

```

.....check lattice and generate symmetry operations
call latsyn(nsym,amat,atrans,nat)
allocate (iatnr(NAT),spos(3,nat*48*16))
allocate ( pos(3,nat*48*16),index1(nat),index2(nat))
allocate ( name(nat),mult(nat),mult0(nat),iatom(nat*48*16))
.....read POSCAR file
rewind 20
call rstruc(title,lattice,nat,a,alpha,index2,iatom, &
index1,pos,mult,mult0,name,iatnr)

gmax=12.d0
rewind 20
.....START READING/writing FILE STRUCT (first 4 lines)
do 5 i=1,4
  READ(20,1510) TITLE
  write(21,1510) TITLE
5
1510 FORMAT(A79)

  read(17,*,end=778)
  read(17,*,end=778)
  read(17,*,end=778)
778 continue
  noper1=noper
  if(lattice(1:1).eq.'H') noper1=24
  if(lattice(1:1).eq.'R') noper1=24
  nbas=Index2(nat)
  nbas=Index
  write(*,*) alpha
  write(6,199) nbas
  do 777 im=1,nbas
    write(6,*) im, iatom(im),(im(k,im),k=1,3)
  777
  tol=1.e-3
  pl=4.d0*atan(1.d0)

```

(a) Procedure for Point-Group

北京市计算中心 姜骏

```

/* decompositions of primitive vectors over vectors of elem. cell */
/* 1 vector is 1 column, ... */
int get_Telpr(int lat, double Telpr[3][3])
{
  switch( lat ) {
    case CUBIC_P:
    case HEXAGONAL:
    case TETRAGONAL_P:
    case ORTHOROMBIC_P:
    case MONOCLINIC_P:
    case TRICLINIC:
      Telpr[0][0]= 1.; Telpr[0][1]= 0.; Telpr[0][2]= 0.;
      Telpr[1][0]= 0.; Telpr[1][1]= 1.; Telpr[1][2]= 0.;
      Telpr[2][0]= 0.; Telpr[2][1]= 0.; Telpr[2][2]= 1.;
      break;

    case CUBIC_I:
    case TETRAGONAL_I:
    case ORTHOROMBIC_I:
      Telpr[0][0]=-0.5; Telpr[0][1]= 0.5; Telpr[0][2]= 0.5;
      Telpr[1][0]= 0.5; Telpr[1][1]=-0.5; Telpr[1][2]= 0.5;
      Telpr[2][0]= 0.5; Telpr[2][1]= 0.5; Telpr[2][2]=-0.5;
      break;

    case CUBIC_F:
    case ORTHOROMBIC_F:
      Telpr[0][0]= 0.0; Telpr[0][1]= 0.5; Telpr[0][2]= 0.5;
      Telpr[1][0]= 0.5; Telpr[1][1]= 0.0; Telpr[1][2]= 0.5;
      Telpr[2][0]= 0.5; Telpr[2][1]= 0.5; Telpr[2][2]= 0.0;
      break;

    case ORTHOROMBIC_C:
      Telpr[0][0]= 0.5; Telpr[0][1]= 0.5; Telpr[0][2]= 0.0;
      Telpr[1][0]=-0.5; Telpr[1][1]= 0.5; Telpr[1][2]= 0.0;
      Telpr[2][0]= 0.0; Telpr[2][1]= 0.0; Telpr[2][2]= 1.0;
      break;
  }
}

```

(b) Procedure for \vec{k} -path generation

课题一任务汇报

标准化结构参数的数据存储子模块

课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

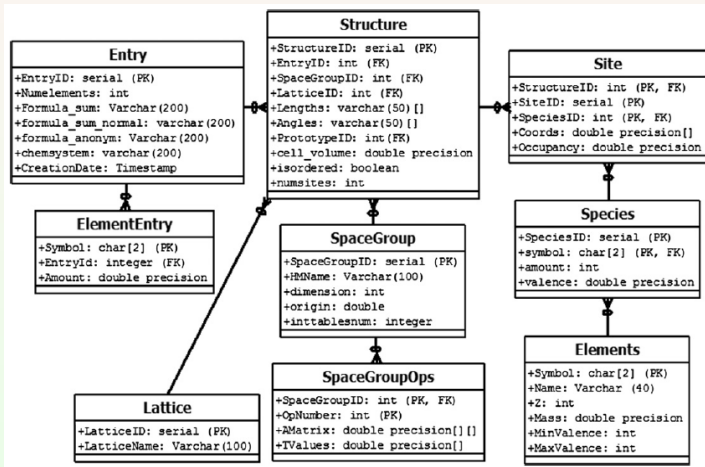


Figure: Basic database schema for storing periodic crystal structures. Ref[7]

2018 年工作计划



课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

- \vec{k} -path 路径与 Pymatgen 结构分析模块整合
- 自动纠错模块的开发
- VASP 软件代码解析

自动纠错

课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划

高通量计算错误的主要来源

- 硬件与系统软件层次
- 核心软件层次
- 应用层次

解决方案

- 专家经验程序化，重点围绕核心计算参数的优化选择
- 物理模型与计算参数可能引起的错误
- 计算过程中可能出现的问题预设
- 计算作业重启

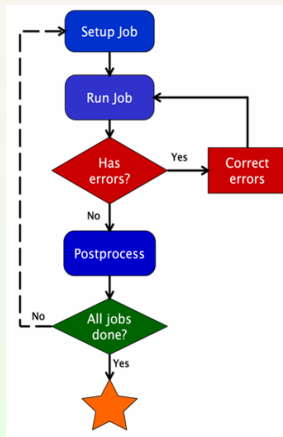


Figure: Schematic representation of the Custodian of Materials Project.

主要参考文献

课题一任务汇报

北京市计算中心 姜骏

2017 年的工作进展

2018 年的工作计划



D. Gunter, S. Cholia, A. Jain, M. Kocher, K. Persson, L. Ramakrishnan, S. P. Ong and G. Ceder. *Community Accessible Datastore of High-Throughput Calculations: Experiences from the Materials Project* (unpublished)



S. Curtarolo, W. Setyawan, S. Wang, J. Xue, K. Yang, R. H. Taylor, L. J. Nelson, G. L. Hart, S. Sanvito, M. Buongiorno-Nardelli, N. Mingo and O. Levy *Comp. Mater. Sci.*, **58** (2012), 227



S. P. Ong, S. Cholia, A. Jain, M. Brafman, D. Gunter, G. Ceder and K. A. Persson. *Comp. Mater. Sci.*, **97** (2015), 209



<http://www.qmip.org/qmip.org/Welcome.html>



J. Hachmann, R. Olivares-Amaya, S. Atahan-Evrenk, C. Amador-Bedolla, R. S. Sánchez-Carrera, A. Gold-Parker, L. Vogt, A. M. Brockway and A. Aspuru-Guzik *J. Phys. Chem. Lett.*, **2** (2011), 2241



W. Setyawan and S. Curtarolo *Comp. Mater. Sci.*, **49** (2010), 299



A. Jain, G. Hautier, C. J. Moore, S. P. Ong, C. C. Fischer, T. M. Kristin, K. A. Persson and G. Ceder *Comp. Mater. Sci.*, **50** (2011), 2295