

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模

# 材料模拟软件与方法简介 (II)

北京市计算中心 云平台事业部 姜骏

E-mail: [jiangjun@bcc.ac.cn](mailto:jiangjun@bcc.ac.cn)

北京科技大学

2024.04.11

# Outline

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示

例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

## 1 固体能带计算方法

- 耽势理论
- APW 与 LAPW 方法
- MTO 与 LMTO 方法
- PAW 方法

## 2 计算示例: Materials Studio 计算

- Materials Studio 的安装
- Materials Studio 的界面框架
- Materials Studio 建模

# 固体能带计算方法

## 常用的固体能带计算方法

- 平面波方法
- 正交平面波 (The orthogonalized plane wave, OPW) 和赝势 (Pseudo-potential, PP) 方法<sup>[1, 2, 3]</sup>
- 缀加平面波 (Augmented plane wave, APW) 方法
- MT 轨道 (Muffin-tin orbitals, MTO) 方法<sup>[4]</sup>
- 投影子缀加波 (Projector Augmented Wave, PAW) 方法<sup>[5, 6]</sup>

各种方法的主要区别: 势函数的处理与所选基函数类型不同

# 固体计算方法的计算量

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与

LAPW 方法

MTO 与

LMTO 方法

PAW 方法

计算示

例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials

Studio 的界面框架

Materials Studio  
建模

## Pseudo-Potential (PP)

$$\text{PAW} \quad \Psi_i^{PAW}(\vec{r}) = \tilde{\Psi}_i(\vec{r}) + \sum_j [\phi_j(\vec{r}) - \tilde{\phi}_j(\vec{r})] \langle \tilde{p}_{i,j}(r) | \tilde{\Psi}_i(\vec{r}) \rangle$$

### Ultra-Soft PP

$$\Delta Q = \int_0^{R_{cl}} [\phi_{l,m}(r) \phi_{l,m}^*(r) - \phi_{l,m}^{PS}(r) \phi_{l,m}^{PS}(r)] r^2 dr$$

$$\chi_{l,m}^{PS}(\vec{r}) = \left\{ \mathcal{E}_l - \left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{loc}(\vec{r}) \right] \right\} \phi_{l,m}^{PS}(\vec{r})$$

$$B_{ij} = \langle \phi_i^{PS} | \chi_j^{PS} \rangle \quad |\beta_i\rangle = \sum_j (B^{-1})_{ji} | \chi_j^{PS} \rangle$$

### Norm-Conserving PP

$$\int_0^{R_{cl}} \phi_{l,m}(r) \phi_{l,m}^*(r) r^2 dr = \int_0^{R_{cl}} \phi_{l,m}^{PS}(r) \phi_{l,m}^{PS}(r) r^2 dr$$

$$\chi_{l,m}^{PS}(\vec{r}) = \left\{ \mathcal{E}_l - \left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{loc}(\vec{r}) \right] \right\} \phi_{l,m}^{PS}(\vec{r})$$

$$\delta V_{NL}(\vec{r}) = \sum_{l,m} \frac{|\chi_{lm}^{PS}| |\chi_{lm}^{PS}|}{\langle \chi_{lm}^{PS} | \phi_{lm}^{PS} \rangle}$$

### Model Pseudo-Potential

$$\text{OPW} \quad \Phi_{\vec{q}}^{OPW}(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega} \left\{ e^{i\vec{k}_F \cdot \vec{r}} - \sum_c \langle \phi_c | \vec{q} \rangle \phi_c(\vec{r}) \right\}$$

### Plane-Wave

$$\Phi_{\vec{q}}^{PW}(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

$$\text{LAPW} \quad \Phi_{\vec{q}}^{LAPW}(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{\alpha,l,m} [A_{\alpha,lm}^0 U_l^\alpha(\mathcal{E}_l^0, r) + B_{\alpha,lm}^0 \dot{U}_l^\alpha(\mathcal{E}_l^0, r)] Y_{l,m}(\hat{r}) & r \leq R_{MT}^\alpha \\ e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} & r > R_{MT}^\alpha \end{cases}$$

$$\text{APW} \quad \Phi_{\vec{q}}^{APW}(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{\alpha,l,m} A_{\alpha,lm}^{\vec{q}} U_l^\alpha(\mathcal{E}_l, r) Y_{l,m}(\hat{r}) & r \leq R_{MT}^\alpha \\ e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} & r > R_{MT}^\alpha \end{cases}$$

$$\text{LMTO} \quad \Phi_{\vec{q}}^{\text{LMTO}}(\vec{r}) = \delta V_{loc}(\hat{r}) \begin{cases} i \ln(x, \hat{r}) + \text{atan}(\pi x) / (\pi(\hat{r} - x)) & r \leq R_{MT}^\alpha \\ x \ln(x, \hat{r}) & r > R_{MT}^\alpha \end{cases}$$

# 由 OPW 到赝势

## ■ 完全平面波基组

少数平面波就可以很好地描述波函数在原子间的行为，近核波函数则需要大量平面波展开

## ■ 正交平面波 (Orthogonalized plane wave, OPW) 方法

价电子用与芯层波函数正交的平面波展开

$$\phi_{\text{OPW}}^{\vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) = \phi_{\text{PW}}^{\vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) - \sum_c \langle \varphi_c | \phi_{\text{PW}}^{\vec{k} + \vec{G}} \rangle \varphi_c(\vec{r})$$

构造赝波函数

$$\tilde{\phi}_v(\vec{r}) = \phi_v(\vec{r}) + \sum_c \langle \varphi_c | \tilde{\phi}_v \rangle \varphi_c(\vec{r})$$

代入 Schrödinger 方程

$$\hat{H}|\tilde{\phi}_v\rangle - \sum_c \langle \varphi_c | \tilde{\phi}_v \rangle \hat{H}|\varphi_c\rangle = \varepsilon_v |\tilde{\phi}_v\rangle - \varepsilon_v \sum_c \langle \varphi_c | \tilde{\phi}_v \rangle |\varphi_c\rangle$$

可有

$$\hat{H}|\tilde{\phi}_v\rangle + V^R|\tilde{\phi}_v\rangle = \varepsilon_v |\tilde{\phi}_v\rangle$$

这里排斥势是

$$V^R(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_c (\varepsilon_v - \varepsilon_c) |\varphi_c(\vec{r}')\rangle \langle \varphi_c(\vec{r})|$$

# 由 OPW 到赝势

Phillips-Kleinman 指出, 蕴势 ( $V^{eff}$ )-赝波函数(可用  $\phi_{PW}^{\vec{k}+\vec{G}}$  展开)满足 Schrödinger 方程

$$\left( -\frac{1}{2}\nabla^2 + V^{eff} \right) |\tilde{\phi}_v\rangle = \varepsilon_v |\tilde{\phi}_v\rangle$$

其中  $V^{eff} = V(\vec{r}) + V^R$

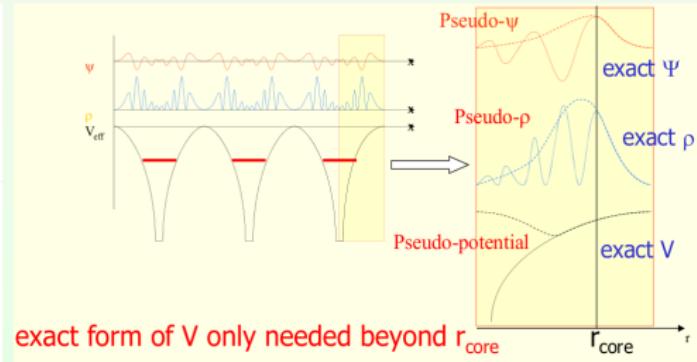
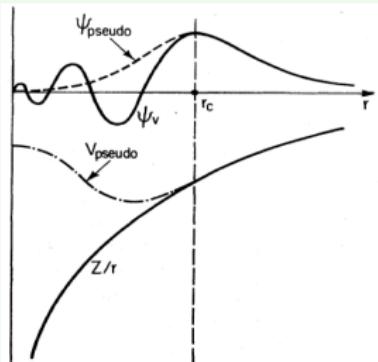
- 蕴势-赝波函数的本征值  $\varepsilon_v$  与真实体系的价电子能量本征值等价
- 蕴势  $V^{eff}$  比  $V(\vec{r})$  平滑得多, 并且  $V^R$  是非局域的排斥势

$$\begin{aligned} V^R f(\vec{r}) &= \sum_c (\varepsilon_v - \varepsilon_c) \varphi_c(\vec{r}) \int \varphi_c^*(\vec{r}') f(\vec{r}') d\vec{r}' \\ &= \int V^R(\vec{r}, \vec{r}') f(\vec{r}') d\vec{r}' \end{aligned}$$

# 赝势的评估

赝势 (Pseudo Potential, PP) 方法是在正交平面波的基础上发展起来的，构造出平缓的势函数代替核的强吸引作用和芯层电子的排斥作用，用平缓的函数取代波函数近核时的震荡。

- 蕴势-平面波方法，只需要少量平面波可展开赝波函数，大大提升了计算效率；但是赝波函数不能很好地反映与电子近核行为有关的性质。
- 蕴势的构造并不唯一，考核构造赝势的两大指标：“柔软程度” (Soft) 与 “可移植性” (transferability)



# 第一原理赝势

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

由第一原理求解出全电子波函数 (径向部分)  $P_{n,l}(r)$

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(\rho, r) \right] P_{n,l}(r) = \varepsilon_{n,l} P_{n,l}(r)$$

这里  $V(\rho, r)$  是自洽单电子势

$$V(\rho, r) = -\frac{Z}{r} + V_H(\rho, r) + V_{XC}^{\text{LDA}}(\rho(r))$$

$V_H(\rho, r)$  是 Hartree 势,  $V_{XC}^{\text{LDA}}(\rho(r))$  是交换-相关势  
由此构造赝波函数  $P_l^{\text{PP}}(r)$ , 满足

$$P_l^{\text{PP}}(r) = P_l^{\text{AE}}(r), \quad r > r_l^c$$

进而构造赝势  $V_{\text{src},l}^{\text{PP}}(r)$

$$V_{\text{src},l}^{\text{PP}}(r) = \varepsilon_l - \frac{l(l+2)}{2r^2} + \frac{1}{2P_l^{\text{PP}}(r)} \frac{d^2}{dr^2} P_l^{\text{PP}}(r), \quad r < r_l^c$$

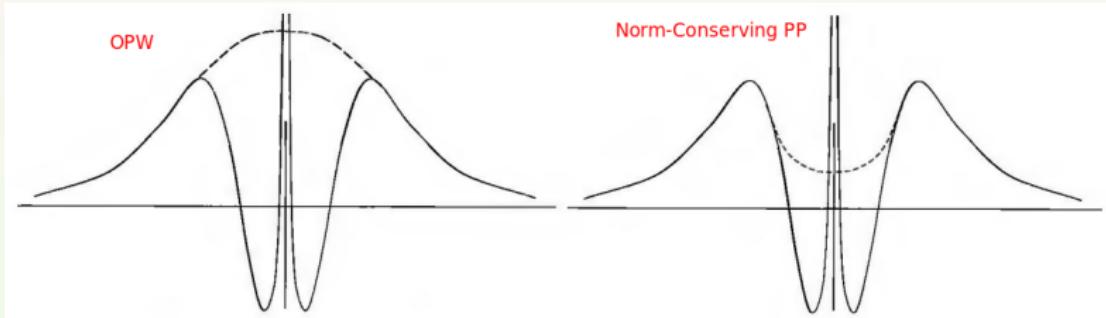
# 模守恒 (Norm-conserving) 条件

- 1** 价电子赝波函数的能量本征值与对应全电子波函数能量本征值相等:  $\varepsilon_l^{\text{PP}} = \varepsilon_l^{\text{AE}}$
- 2** 价电子赝波函数与真实电子波函数的径向部分在截断半径  $r_{c,l}$  外相同:  $\psi_l^{\text{PP}}(r) = \psi_l^{\text{AE}}(r), \quad r > r_l^c$
- 3** 价电子赝波函数与真实电子波函数的对数导数在截断半径  $r_{c,l}$  处相等:  $D_l^{\text{PP}}(r) = D_l^{\text{AE}}(r), \quad r \geq r_l^c$   
 这里  $D_l(\varepsilon, r) = r \frac{\psi'_l(\varepsilon, r)}{\psi_l(\varepsilon, r)} = r \frac{d}{dr} \ln \psi_l(\varepsilon, r)$
- 4** 价电子赝波函数与真实电子波函数在截断半径  $r_l^c$  内的积分电荷相等 (**模守恒条件**)

$$Q_l = \int_0^{r_l^c} dr r^2 |\psi_l^{\text{PP}}(r)|^2 = \int_0^{r_l^c} dr r^2 |\psi_l^{\text{AE}}(r)|^2$$

- 5** 价电子赝波函数与真实电子波函数的对数导数一阶能量导数  $dD_l(\varepsilon, r)/d\varepsilon$  在截断半径  $r_l^c$  处及以外相等

# 模守恒 (Norm-conserving) 条件



**Fig.:** Schematic example of a valence function that has the character of a 3s orbital near the nucleus and two examples of smooth functions (dashed lines) that equal the full wave-function outside the core region. Left: the smooth part of the valence function defined by OPW-like equation; Right: a smooth pseudo-function that satisfies the norm-conservation condition.

# 赝势去屏蔽

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法  
赝势理论  
APW 与  
LAPW 方法  
MTO 与  
LMTO 方法  
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装  
Materials Studio 的界面框架  
Materials Studio 建模

第一原理赝势建立了赝波函数与对应赝势的一一对应关系，但该赝势包含了电子屏蔽(原子、离子环境)信息，去屏蔽后的赝势对环境依赖更低，“可移植性”更好

$$V_{\text{ion},l}^{\text{PP}}(r) = V_{\text{src},l}^{\text{PP}}(r) - V_{\text{H},l}^{\text{PP}}(r) - V_{XC,l}^{\text{PP}}(r)$$

去屏蔽过程中，特别需要注意  $V_{XC,l}^{\text{PP}}(r)$  的处理

$$V_{XC,l}^{\text{PP}}(r) = V_{XC}^{\text{PP}}([n_l^{\text{PP}}], r) + [V_{XC}^{\text{PP}}([n_l^{\text{PP}} + n^{\text{core}}], r) - V_{XC}^{\text{PP}}([n_l^{\text{PP}}], r)]$$

# 超软赝势

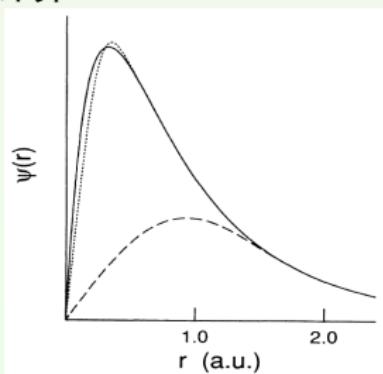
材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法  
赝势理论  
APW 与  
LAPW 方法  
MTO 与  
LMTO 方法  
PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装  
Materials  
Studio 的界面框架  
Materials Stu-  
dio 建模

- 蚍势构造的模守恒条件很好地解决了赝势可移植性问题，但对  $1s$ 、 $2p$ 、 $3d$  等轨道，模守恒方案构造的赝势过于“硬”，所需平面波基组依然非常大
- 超软 (Ultra-soft) 蚍势，解除模守恒条件，实现对第一、第二周期元素的高效计算

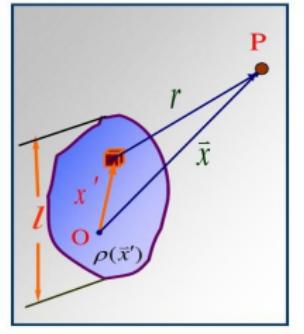


**Fig.:** Oxygen  $2 p$  radical wave function (solid), NC-pseudo-wave (dotted) and US-pseudo-wave (dashed).

# 补偿电荷与多极矩

根据电动力学定理:

如果球 S 内的电荷密度分布  $\rho(\vec{r})$ , 在球外某点  $\vec{r}$  产生的势是由电荷密度的多极矩确定:



$$V(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{4\pi}{2l+1} q_{lm} \frac{\hat{Y}_{lm}(\hat{\vec{r}})}{r^{l+1}}$$

其中多极矩  $q_{lm}$  由下式计算

$$q_{lm} = \int_S Y_{lm}^*(\hat{\vec{r}}) r^l \rho(\vec{r}) d^3r$$

# 超软赝势的构造

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

Vanderbilt 建议构造赝波函数时放弃模守恒约束条件, 只要求价电子赝波函数与真实电子波函数的径向部分在截断半径  $r_l^c$  外相同, 由此得到的赝势显然非 Hermitian, 但是通过构造  
**Hermitian 重叠算符**

$$\mathbf{S} = \mathbf{1} + \sum_{i,j} Q_{ij} |\beta_j\rangle\langle\beta_i|$$

以及**Hermitian 蕴势算符**

$$\tilde{V}^{\text{NL}} = \sum_{i,j} \mathbf{D}_{i,j} |\beta_j\rangle\langle\beta_i|$$

这里

$$\mathbf{D}_{ij} = B_{ij} + \varepsilon_i Q_{ij}$$

模守恒约束下的标准本征值方程将变成广义本征值方程

$$(T + V_{\text{loc}} + \tilde{V}^{\text{NL}} - \varepsilon \mathbf{S}) |\phi\rangle = 0$$

# 超软赝势的特点

Vanderbilt 的超软赝势构造方案最大的优点是

- **解除模守恒约束:** 有助于增加赝波函数的截断半径, 系统提高赝势的柔软程度
- **引入多个参考能量  $\varepsilon_l$ :** 使得模守恒条件下只在特定参考能量  $\varepsilon$  处成立的对数导数连续条件, 扩展到参考能量  $\varepsilon_l$  区间范围内, 这大大提高了赝势的适用范围 (可移植性)

相应的, 超软赝势计算中, 电子密度表达形式为

$$n(r) = \sum_n f_n |\phi_n(r)|^2 + \sum_{n,ij} f_n \langle \phi_n | \beta_j \rangle \langle \beta_i | \phi_n \rangle Q_{ij}(r)$$

这里补偿电荷  $Q_{ij}(r)$  定义为

$$Q_{ij}(r) = \phi_i^{\text{AE}}(r) \phi_j^{\text{AE}}(r)^* - \phi_i^{\text{US}}(r) \phi_j^{\text{US}}(r)^*$$

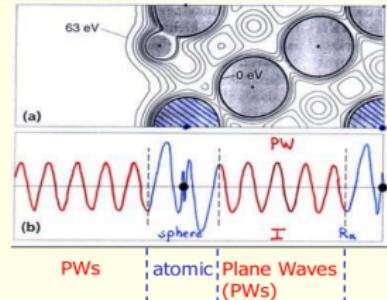
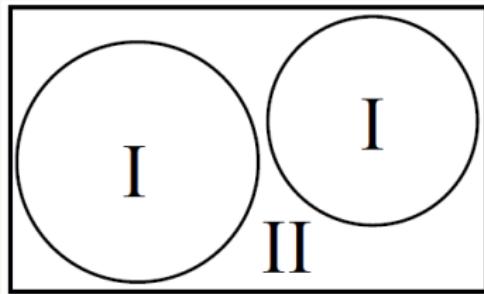
# APW 方法

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法  
赝势理论  
APW 与  
LAPW 方法  
MTO 与  
LMTO 方法  
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装  
Materials Studio 的界面框架  
Materials Studio 建模



**Fig.:** Partitioning of the unit cell into atomic spheres(I) and an interstitial region(II)

$$\varphi(\vec{k}_j, \vec{r}) = \begin{cases} \Omega^{-1/2} \exp[i\vec{k}_j \cdot \vec{r}], & |\vec{r} - \vec{r}_s| > R_{\text{MT}}^s \\ \sum_{lm} A_{lm} u_l(|\vec{r} - \vec{r}_s|, E) Y_{lm}(\widehat{\vec{r} - \vec{r}_s}), & |\vec{r} - \vec{r}_s| \leq R_{\text{MT}}^s \end{cases}$$

# 空间两部分函数在球面上的衔接

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架  
Materials Studio 建模

Huygens 原理: 平面波可以在各个原子球中心用球谐函数展开:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(|\vec{k}|r) Y_{lm}^*(\hat{\vec{k}}) Y_{lm}(\hat{\vec{r}})$$

其中  $j_l(|\vec{k}|r)$  是  $l$ -阶球 Bessel 函数,  $\hat{\vec{k}}$  和  $\hat{\vec{r}}$  分别是矢量  $\vec{k}$  和  $\vec{r}$  与直角坐标  $z$ -轴的夹角  $\theta$  和  $\varphi$

要求空间中不同区域函数在球面上连续, 可调参数  $A_{lm}^{\vec{k}}$  可为下式确定

$$A_{lm}^{\vec{k}} = 4\pi e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_s} i^l Y_{lm}^*(\hat{\vec{k}}) j_l(|\vec{k}|R_{MT}^s) / u_l(R_{MT}^s, E)$$

APW 的问题: 球面参数  $A_{lm}^{\vec{k}}$  对能量  $E$  依赖, 由此构造的久期方程<sup>1</sup>非线性的

---

<sup>1</sup> 久期方程 secular equation, secular 来自拉丁语 saeculum, 本意为一代人、一个时期、一个时代、一个世界等意思。其名词在拉丁语中就作为世纪讲。汉译 secular 为久期, 是取 long-term 的意思 (实为慢, slow in comparison to the annual motion 的意思), 与期待 (expectation) 无关。

# LAPW 方法

O. K. Andersen 提出 LAPW 方法<sup>[1]</sup>: 将  $u_l(r, E)$  在某一合适的  $E_l$  值附近对  $E$  的一阶微商  $\frac{du_l(r, E)}{dE} \Big|_{E_l} \equiv \dot{u}_l(r, E_l)$   
代入 APW 基函数中可得 LAPW 方法的基函数:

$$\varphi(\vec{k}_j, \vec{r}) = \begin{cases} \Omega^{-1/2} \exp[i\vec{k}_j \cdot \vec{r}], & |\vec{r} - \vec{r}_s| > R_{\text{MT}}^s \\ \sum_{lm} [A_{lm}^{k_j} u_l(|\vec{r} - \vec{r}_s|, E_l) + B_{lm}^{k_j} \dot{u}_l(|\vec{r} - \vec{r}_s|, E_l)] Y_{lm}(\widehat{\vec{r} - \vec{r}_s}), & |\vec{r} - \vec{r}_s| \leq R_{\text{MT}}^s \end{cases}$$

根据基函数在 MT 球面上连续到一阶, 确定系数  $A_{lm}^{k_j}$ ,  $B_{lm}^{k_j}$  的值。

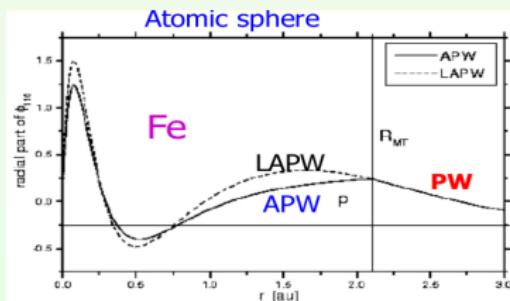


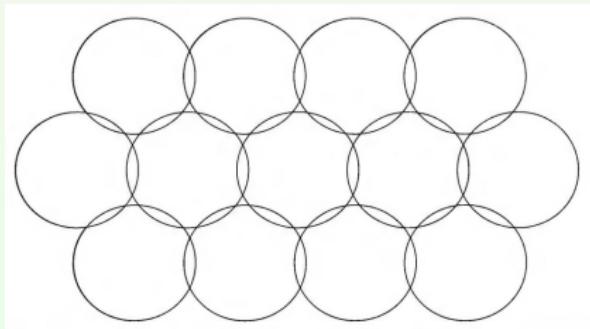
Fig.: Partitioning of the unit cell into atomic spheres(I) and an interstitial region(II)

# MTO 方法

MTO (Muffin-tin Orbital) 方法是 Andersen 于 1971 年提出的局域  
缀加基函数方案<sup>[7]</sup>

## 目的: 用最小基组方法解析电子结构

- **物理图像:** 和 APW 方法类似, 要求基函数在 MT 球内、外分  
区域表示, 并且在球面上连续
- **数学形式:** 基函数是最小优化基组



**Fig.:** Atomic sphere approximation (ASA) in which the MT spheres are chosen to have the same volume as the Wigner-Seitz cell, which leads to overlapping spheres.

# MTO 方法的基函数

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例:  
Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

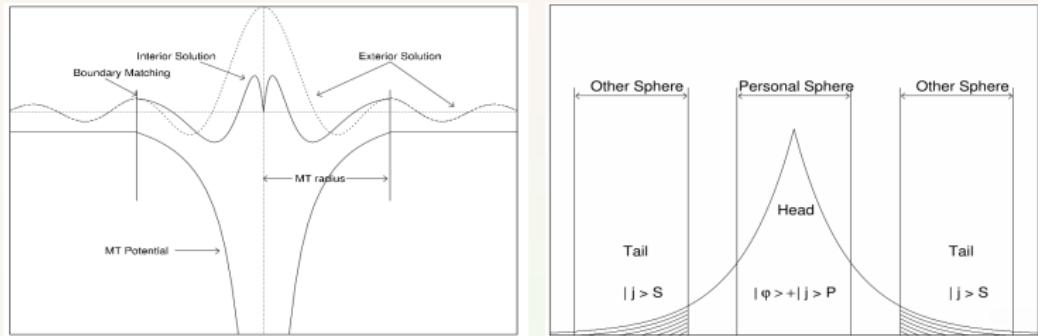


Fig.: The radial function of MTO expressed in different region.

当  $q_0 = 0$  时，构成最简单的 MTO 基函数

$$\chi_L^{\text{MTO}}(\varepsilon, 0, \vec{r}) = i^l Y_l(\hat{\vec{r}}) u_l(\varepsilon, S) \begin{cases} \frac{u_l(\varepsilon, r)}{u_l(\varepsilon, S)} - \frac{D_l(\varepsilon) + l + 1}{2l + l} \left(\frac{r}{S}\right)^l & r \leq S \\ + \frac{l - D_l(\varepsilon)}{2l + 1} \left(\frac{S}{r}\right)^{l+1} & r > S \end{cases}$$

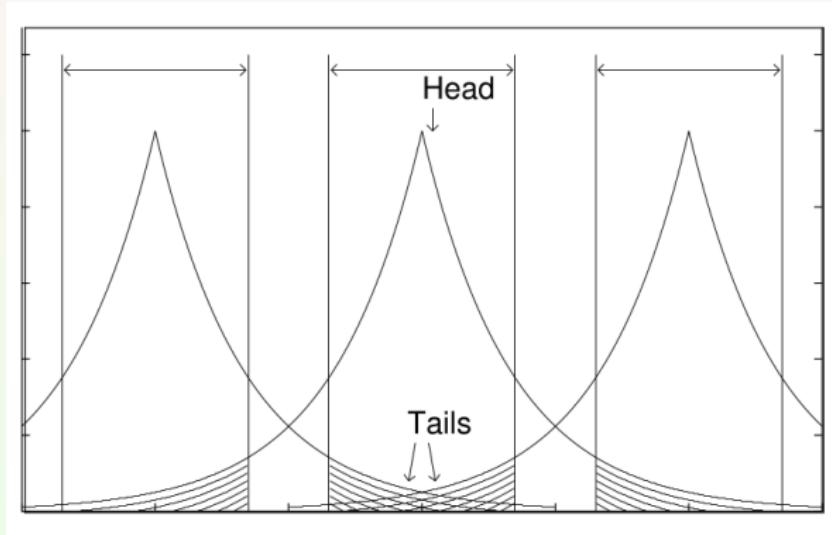
# MTO 轨道的“尾部抵消”

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法  
赝势理论  
APW 与  
LAPW 方法  
MTO 与  
LMTO 方法  
PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装  
Materials  
Studio 的界面框架  
Materials Stu-  
dio 建模



**Fig.:** The wavefunction in the sphere at the origin is the sum of the “head function” in that sphere plus the tails from neighboring spheres. The schematic illustration of the “tail cancellation” of the MTO.

# LMTO 方法

与 LAPW 方法类似, 在给定能量  $\varepsilon_v$  和衰减常数  $q_0$  附近, LMTO 的基函数球内部分用函数  $\psi_l(\varepsilon_v, r)$  及其对能量导数  $\dot{\psi}(\varepsilon_v, r)$  表示

**LMTO 与 MTO 基函数的区别**

- 球内部分的  $\psi(\varepsilon, r)$  是主要部分: 由  $\psi(\varepsilon_v, r)$  和  $\dot{\psi}(\varepsilon_v, r)$  线性组合
- 球内来自其它 MT 球的函数尾部贡献被  $\dot{\psi}(\varepsilon_v, r)$  的线性组合替代

由此根据物理直觉, 可以把 LMTO 基函数的形式表示成

$$\chi_L^{\text{LMTO}}(\varepsilon, q_0, \vec{r}) = i^l Y_L(\hat{\vec{r}}) \begin{cases} u_l(\varepsilon, r) - q_0 \cot(\eta_l(\varepsilon)) J_l(q_0 r) & r \leq S \\ q_0 N_l(q_0 r) & r > S \end{cases}$$

实际应用中, 选定函数  $J_l$  和  $N_l$  与球 Bessel 函数  $j_l$  和 Neumann 函数  $n_l$  相似

# LMTO .vs. LAPW

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio

Materials Stu-  
dio 建模

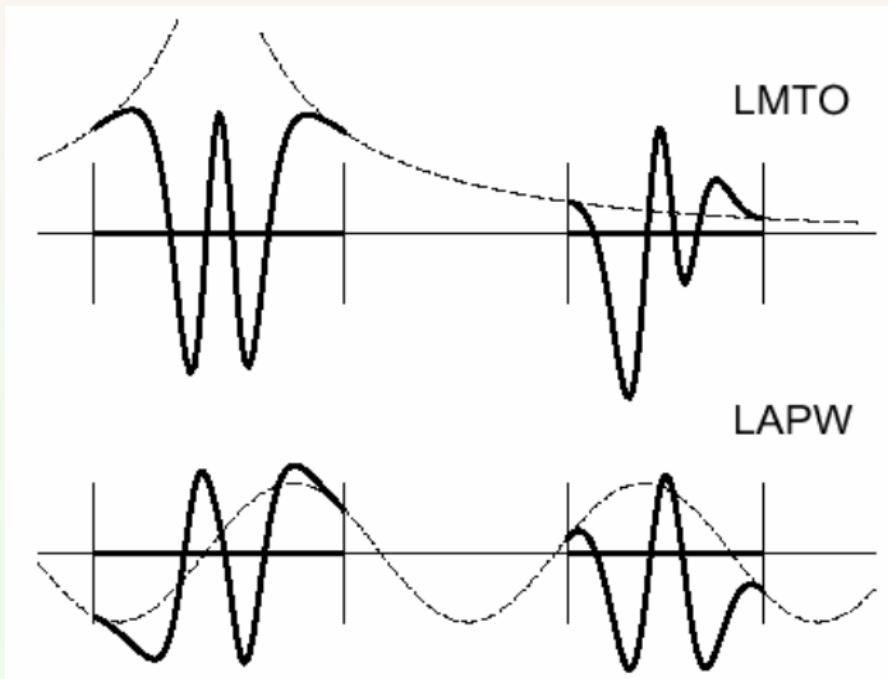


Fig.: Schematic illustration of LMTO vs LAPW.

# PAW 方法概要

- 与芯层态正交的全部价电子构成的 Hilbert 空间
- 作线性空间变换, 全电子波函数  $|\Psi\rangle$  与赝波函数  $|\tilde{\Psi}\rangle$  满足:

$$|\Psi\rangle = \tau |\tilde{\Psi}\rangle$$

- 在原子核附近的  $r_c$  范围内, 波函数用原子分波函数展开:

$$|\Psi\rangle = |\tilde{\Psi}\rangle + \sum_i (|\phi_i\rangle - |\tilde{\phi}_i\rangle) \langle \tilde{p}_i | \tilde{\Psi} \rangle$$

- 在  $r_c$  外  $|\tilde{\Psi}\rangle$  与  $|\Psi\rangle$  变换前后保持不变, 因此线性变换  $\tau$  可表示为:

$$\tau = \mathbf{1} + \sum_i (|\phi_i\rangle - |\tilde{\phi}_i\rangle) \langle \tilde{p}_i |$$

其中  $|\tilde{p}_i\rangle$  是 MT 球内的投影函数

$i$  表示原子位置  $\vec{R}$ 、原子轨道  $(l, m)$  和能级  $\epsilon_k$  的指标。

# PAW 方法的基本思想

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

$$|\psi\rangle = \underbrace{|\tilde{\psi}\rangle}_{\text{all-electron}} + \underbrace{\sum_{\alpha} |\phi_{\alpha}\rangle \langle \tilde{p}_{\alpha}| \tilde{\psi}\rangle}_{\text{pseudo}} - \underbrace{\sum_{\alpha} |\tilde{\phi}_{\alpha}\rangle \langle \tilde{p}_{\alpha}| \tilde{\psi}\rangle}_{\text{1-center, pseudo}}$$

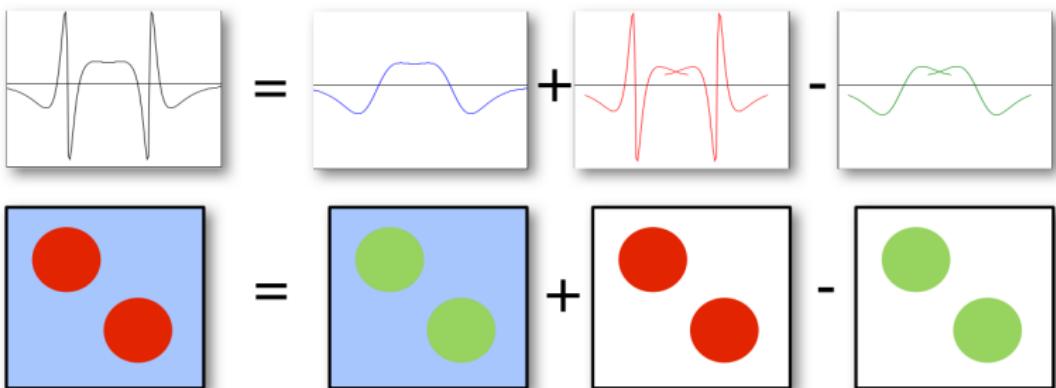


Fig.: The Augmentation of PAW.

# PAW 方法的基本思想

在赝波函数  $|\tilde{\Psi}\rangle$  表象下，算符期望值计算满足

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle = \langle \tilde{\Psi} | \tau^\dagger \mathbf{A} \tau | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \tilde{\Psi} | \tilde{A} | \tilde{\Psi} \rangle$$

■ 一般赝算符  $\tilde{A}$  表示为

$$\tilde{A} = \mathbf{A} + \sum_i |\tilde{p}_i\rangle (\langle \phi_i | \mathbf{A} | \phi_i \rangle - \langle \tilde{\phi}_i | \mathbf{A} | \tilde{\phi}_i \rangle) \langle \tilde{p}_i |$$

■ 蕴重叠算符  $\tilde{O}$  表示为

$$\tilde{O} = \mathbf{1} + \sum_i |\tilde{p}_i\rangle (\langle \phi_i | \phi_i \rangle - \langle \tilde{\phi}_i | \tilde{\phi}_i \rangle) \langle \tilde{p}_i |$$

# PAW 方法密度计算

在 PAW 框架下, 将密度算符  $|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|$  代入, 可知密度表达式为

$$n(\vec{r}) = \tilde{n}(\vec{r}) + n^1(\vec{r}) - \tilde{n}^1(\vec{r})$$

这里

$$\tilde{n}(\vec{r}) = \sum_n f_n \langle \tilde{\Psi}_n | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \tilde{\Psi}_n \rangle$$

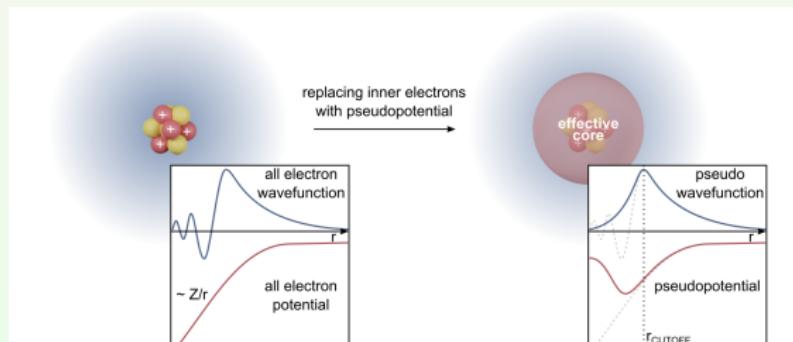
$$n^1(\vec{r}) = \sum_{n,(i,j)} f_n \langle \tilde{\Psi}_n | \tilde{p}_i \rangle \langle \phi_i | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \phi_j \rangle \langle \tilde{p}_j | \tilde{\Psi}_n \rangle$$

$$\tilde{n}^1(\vec{r}) = \sum_{n,(i,j)} f_n \langle \tilde{\Psi}_n | \tilde{p}_i \rangle \langle \tilde{\phi}_i | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \tilde{\phi}_j \rangle \langle \tilde{p}_j | \tilde{\Psi}_n \rangle$$

# 电荷密度的重新分解

PAW 方法提出后很长一段时间没有能够得到广泛应用, 直到 G. Kresse 等将 Blöchl 的原始方案中电荷密度计算方案重新组合后, 明确了 PAW 方法与 USPP 方法的内在联系。

- 芯层电荷与核电荷构成离子实电荷:  $n_{Zc} = n_Z + n_c$



**Fig.:** The difference of the electron-density distributing from P. Blöchl and from G. Kresse.

# 主要参考文献

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架  
Materials Stu-  
dio 建模

- [1] D. J. Singh. *Plane Wave, PseudoPotential and the LAPW method* (Kluwer Academic, Boston, USA, 1994)
- [2] D. Vanderbilt. *Phys. Rev. B*, **41** (1990), 7892
- [3] G. Kresse and J. Hafner. *J. Phys: Condens. Matter*, **6** (1994), 8245
- [4] H. Skriver. *The LMTO method* (Springer, New York, USA, 1984)
- [5] P. E. Blöchl. *Phys. Rev. B*, **50** (1994), 17953
- [6] G. Kresse and D. Joubert *Phys. Rev. B*, **59** (1999), 1758
- [7] O. K. Andersen. *Computational Methods in Band Theory* (Plenum, New York, USA, 1971)
- [8] V. V. Nemoshkalenko and V. N. Antonov. *Computational Methods in Solid State Physics* (Gordon and Breach Science Publisher, Amsterdam, The Netherlands, 1998)
- [9] 谢希德、陆栋 主编. 固体能带理论 复旦大学出版社, 上海, 1998
- [10] Richard. M. Martin. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2004)
- [11] J. M. Thijssen. *Computational Physics* (2nd Edition) (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2007)



# Materials Studio 的安装

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模

# MS 的界面框架

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

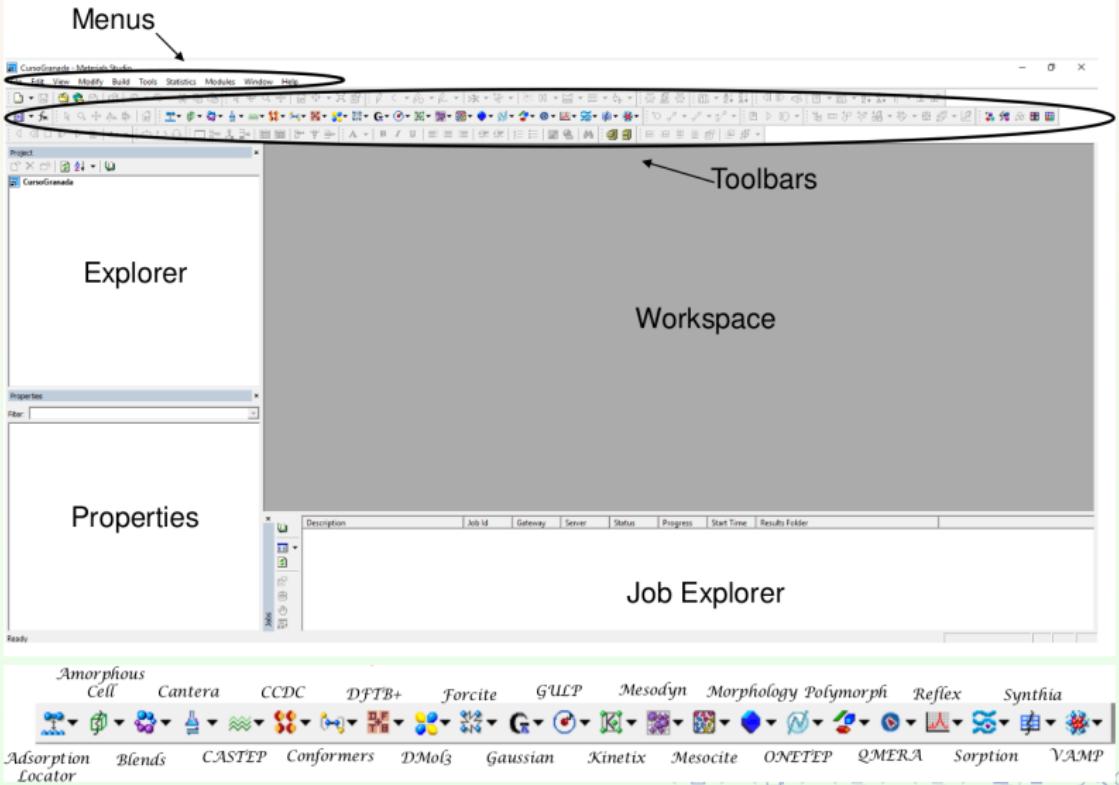
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模



# MS 的界面框架: Indigo

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

Properties

Property	Value
BondOrder	1
BondType	ChemicalType
IsVisible	Yes
Length	
MidPoint	
Name	
SpeciePosition	
Style	Ball and Stick
SymmetryDir	xy.z
SymmetryOrder	Identity
SymmetryOrient	xy.z
SymmetryOrientDeviation	1

Ready

材料模拟软件与方法简介 (II)

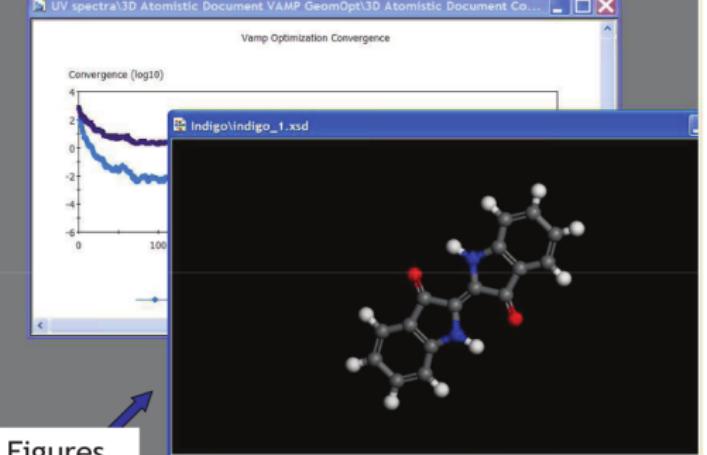
Files &  
Folders

new	UV spectra
└ 3D Atomicistic Document VAMP GeomOpt	
└ 3D Atomicistic Document - Calculation	
└ 3D Atomicistic Document.xsd	
└ 3D Atomicistic Document.Input	
└ Status.txt	
└ 3D Atomicistic Document Convergence.xcd	
└ 3D Atomicistic Document Energies.xls	
└ 3D Atomicistic Document.out	
└ 3D Atomicistic Document.xsd	
└ Indigo	
└ indigo_1 VAMP GeomOpt	
└ indigo_1 - Calculation	
└ indigo_1.xsd	
└ TS	

Property	Value
BondOrder	1
BondType	ChemicalType
IsVisible	Yes
Length	
MidPoint	
Name	
SpeciePosition	
Style	Ball and Stick
SymmetryDir	xy.z
SymmetryOrder	Identity
SymmetryOrient	xy.z
SymmetryOrientDeviation	1

Figures  
& Tables

Jobs  
running



Tools

Gateway

Server

Status

Progress

Start Time

Results Folder

..\Indigo\indigo\_1 VAMP ...

NUM

# MS: Quick Start-01

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials

Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

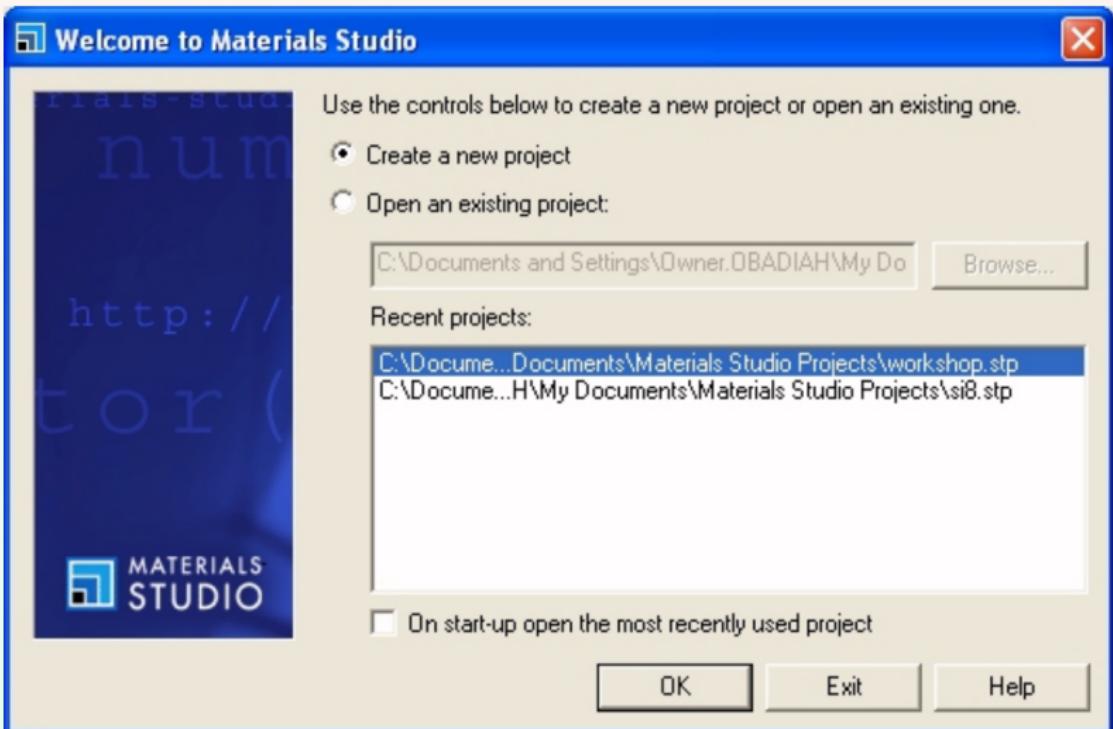


Fig. 1 Quick Start for Materials Studio Step 01

# MS: Quick Start-02

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模

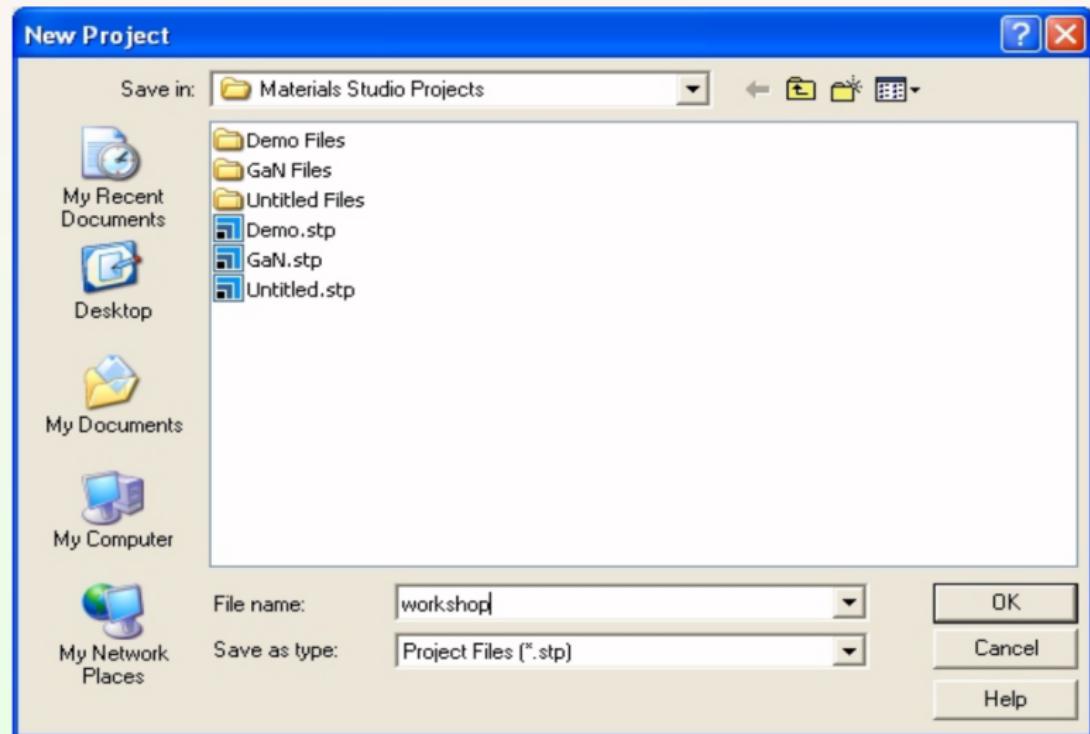


Fig.: Quick Start for Materials studio: Step-02.

# MS: Quick Start-03

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

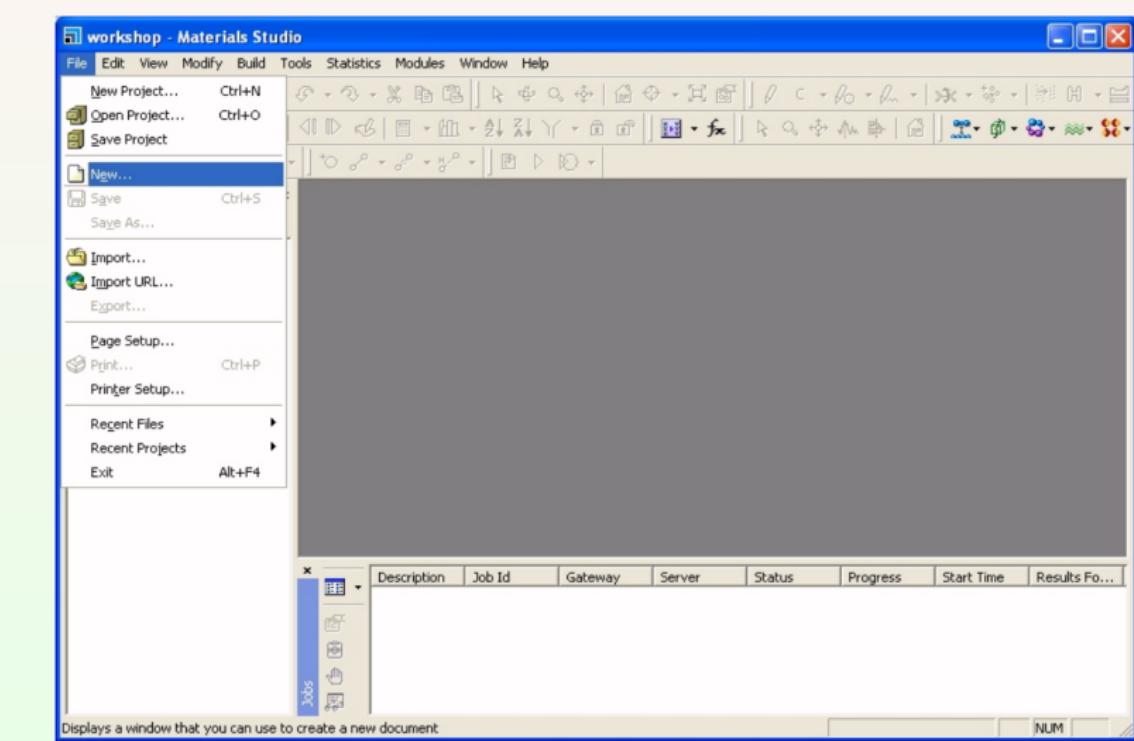


Fig.: Quick Start for Materials studio: Step-03.

# MS: Quick Start-Modelling-01

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

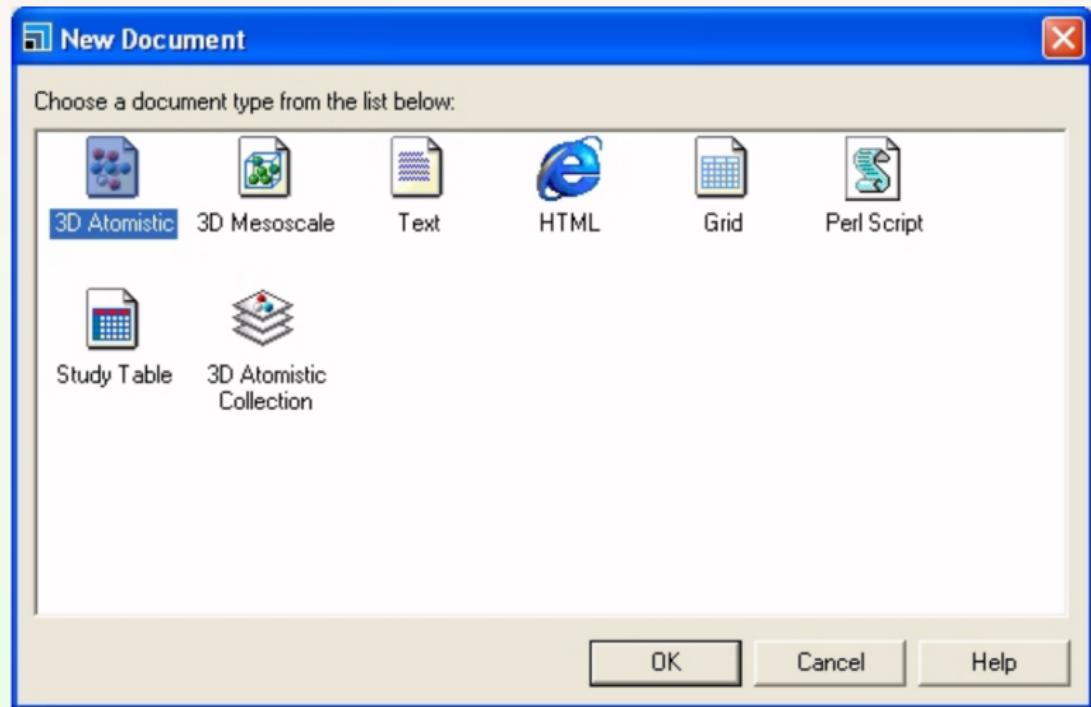


Fig.: Quick Start for Materials studio: Modelling-01.

# MS: Quick Start-Modelling-02

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

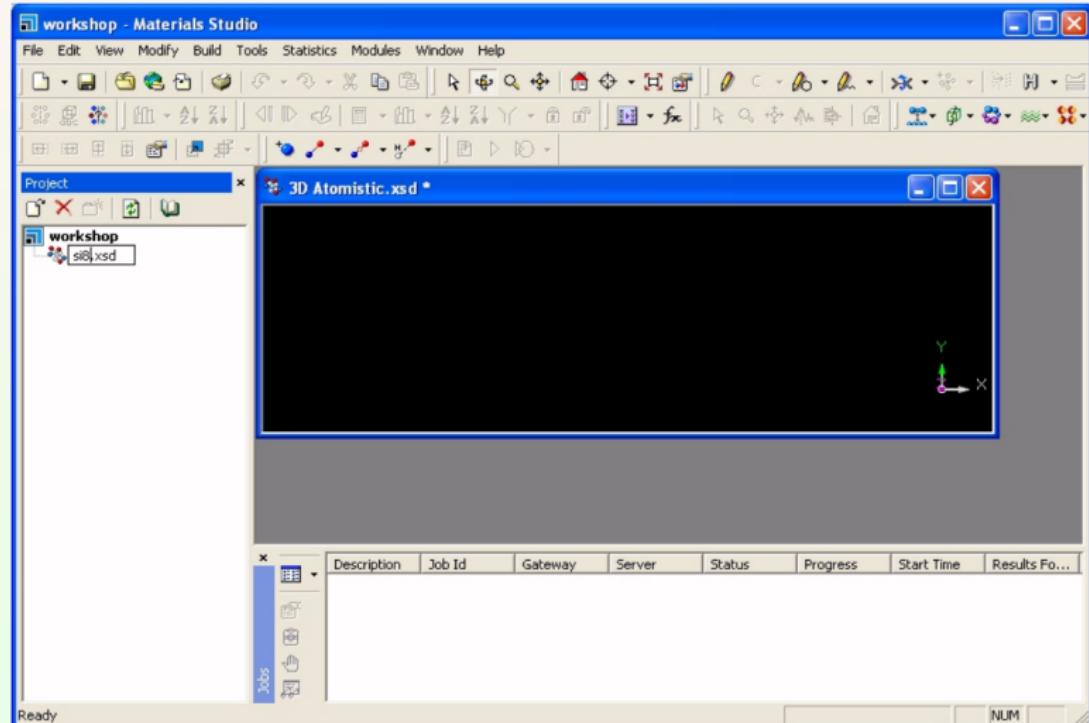


Fig.: Quick Start for Materials studio: Modelling-02.

# MS: Modelling Crystal-01

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

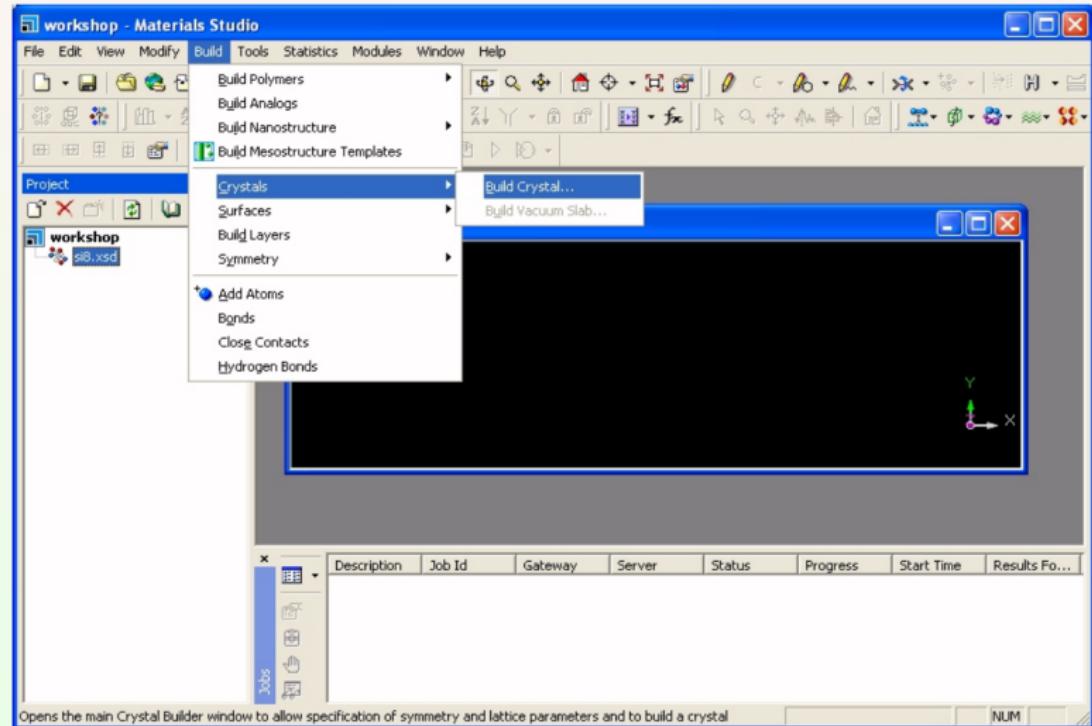


Fig.: Modelling crystal by Materials studio.

# MS: Modelling Crystal-02

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模

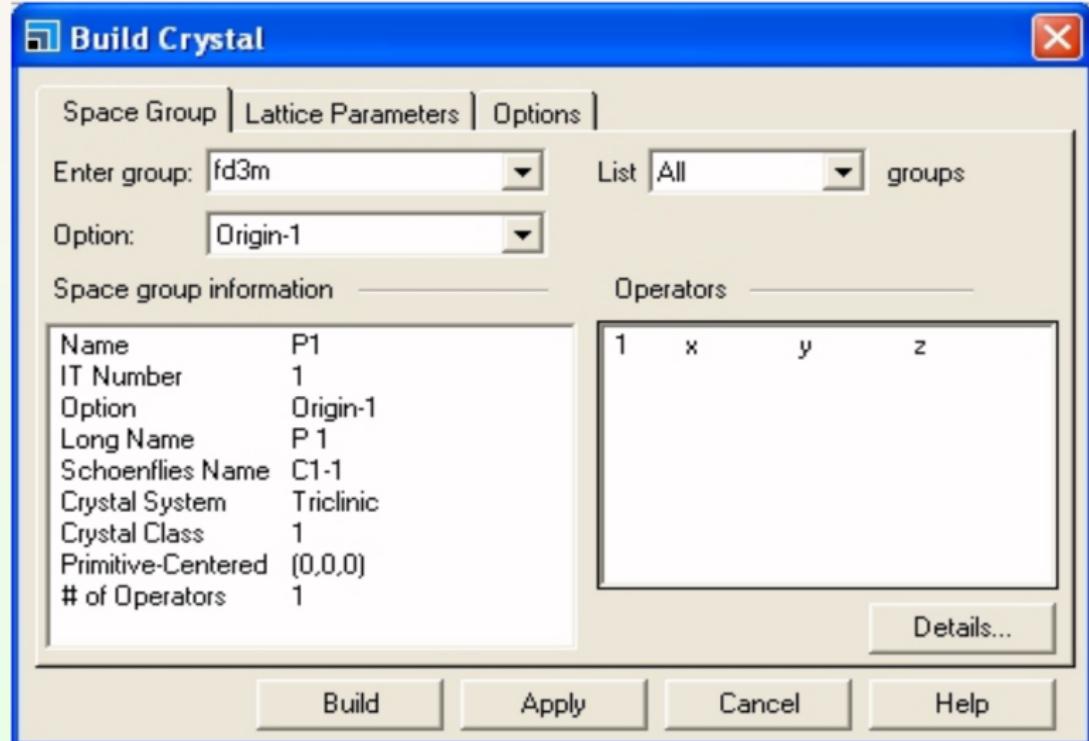


Fig.: Modelling crystal by Materials studio: Parameters.

# MS Modelling: Polymers

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials

Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

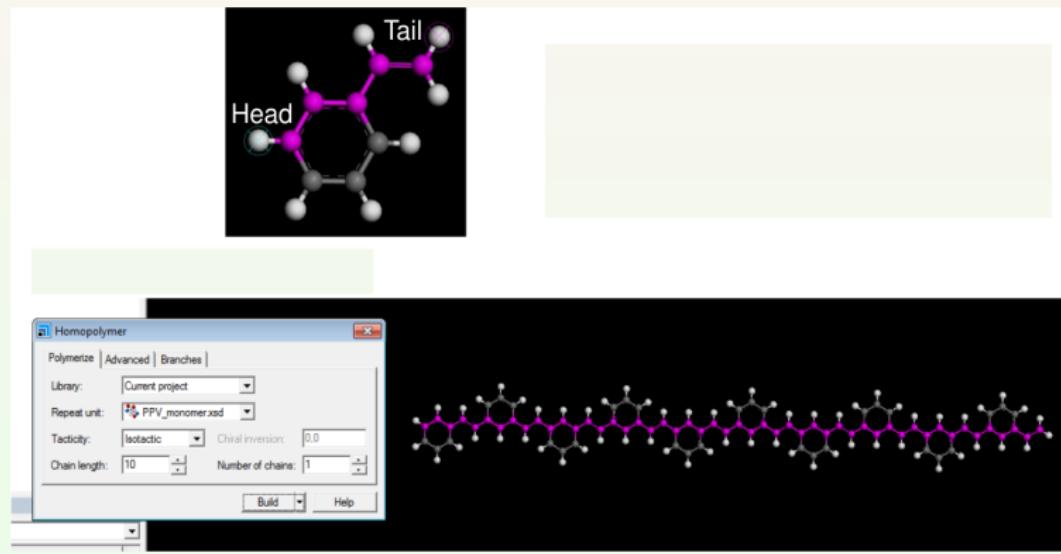


Fig.: Building homopolymer for Materials studio.

# MS Modelling: Polymers

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

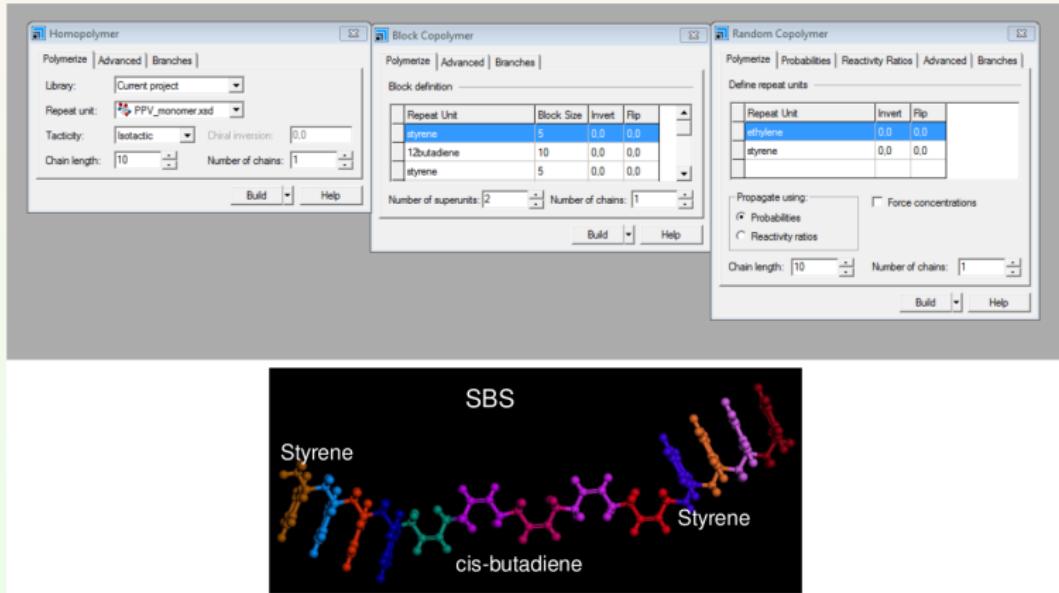


Fig.: Building multi-polymer for Materials studio.

# MS Modelling: amidoamine

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论  
APW 与  
LAPW 方法  
MTO 与  
LMTO 方法  
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装  
Materials Studio 的界面框架  
Materials Studio 建模

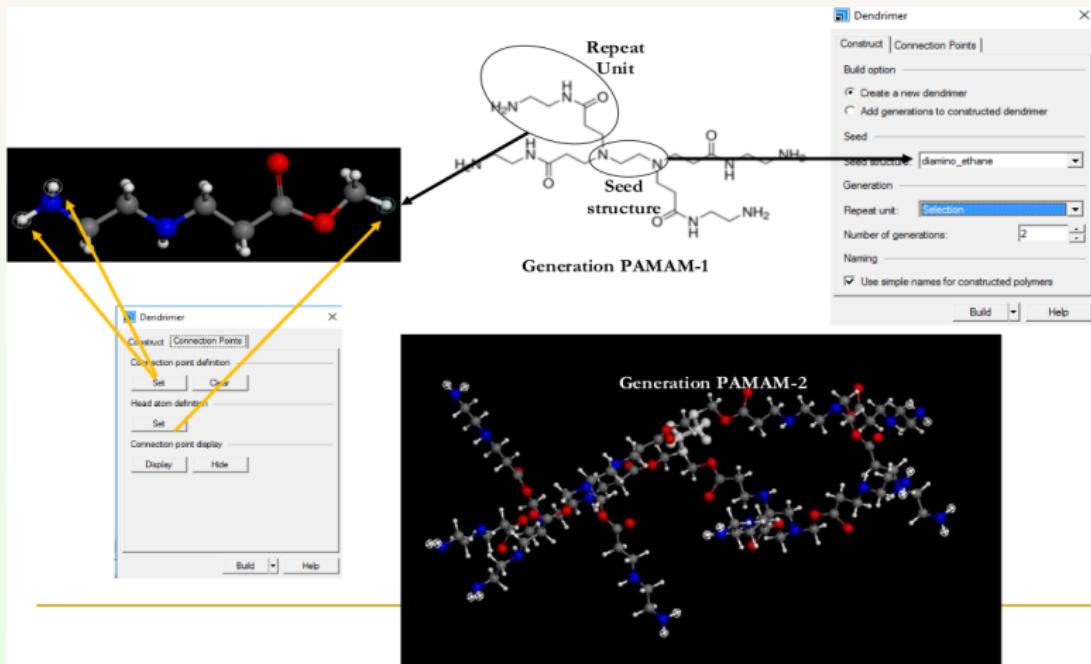


Fig.: Building Poly-amidoamine (PAMAM) for Materials studio.

# MS Modelling: from similar

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

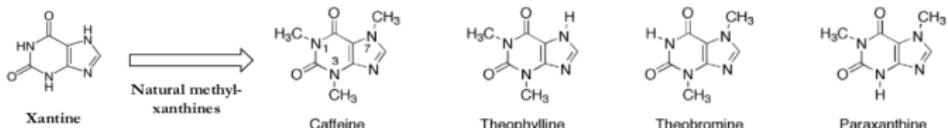
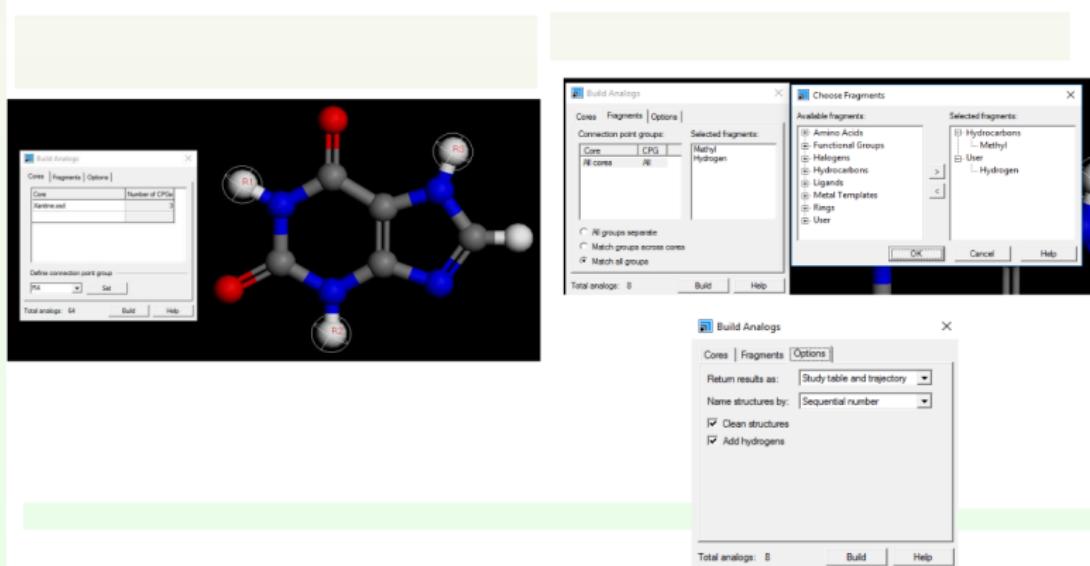
MTO 与  
LMTO 方法  
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

The screenshot shows the Materials Studio software interface for building analogs. On the left, a 3D ball-and-stick model of Caffeine is displayed, with atoms labeled R1 and R2. To the right of the model are three windows:

- Build Analogs**: Core tab selected. Shows 'Core' (R1) and 'Number of CPDs' (5). 'Define connection point group' dropdown is set to 'R1'. Buttons include 'Build' and 'Help'.
- Choose Fragments**: Shows available fragments like Amino Acids, Functional Groups, Halogens, etc., and selected fragments like Methyl and Hydrogen. Buttons include 'OK', 'Cancel', and 'Help'.
- Build Analogs**: Options tab selected. Shows 'Return results as: Study table and trajectory', 'Name structures by: Sequential number', 'Clean structures' (checked), and 'Add hydrogens' (checked). Buttons include 'Build' and 'Help'.

Fig.: Building from similar structure for Materials studio.

# MS Modelling: from similar

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

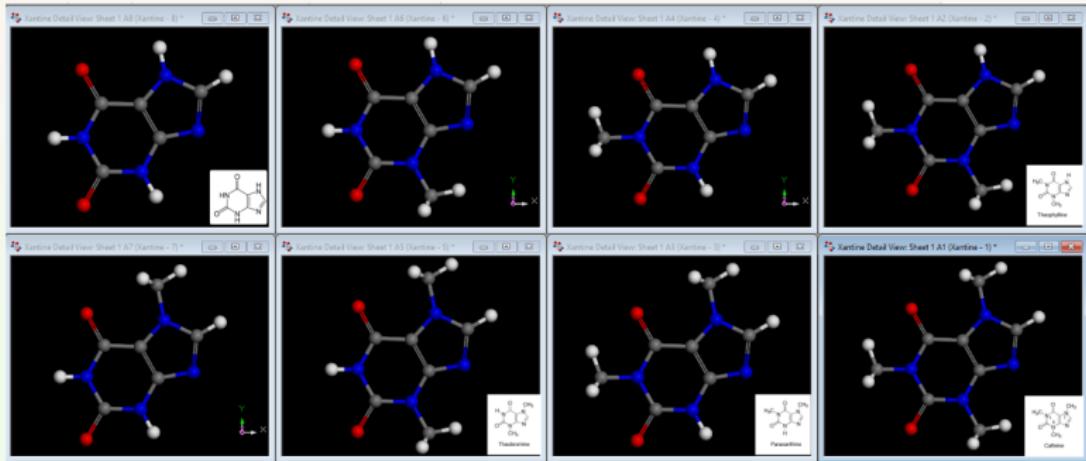


Fig.: The similar structures in Materials studio.

# MS Modelling: Single-wall Nanotubes

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算 方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

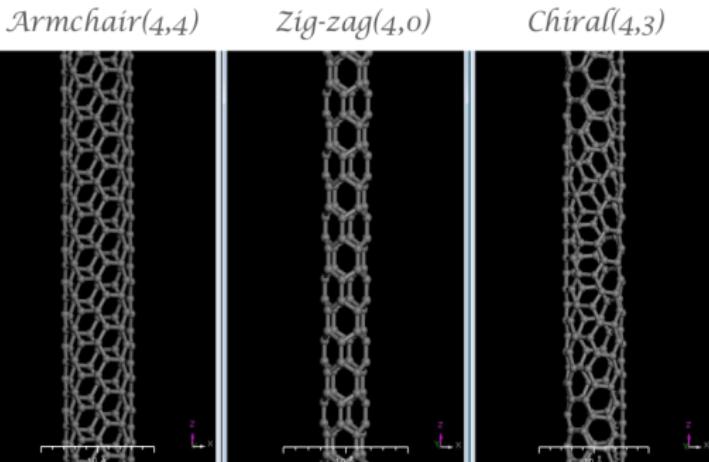
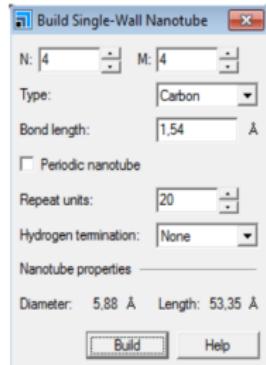
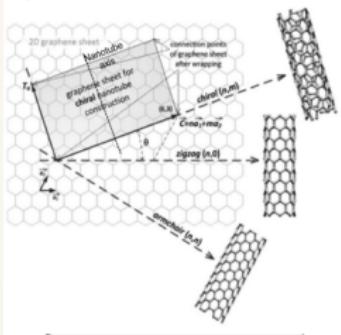
PAW 方法

### 计算示 例: Materials Studio 计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模



**Fig.:** Building Single-wall Nanotubes for Materials studio.

# MS Modelling: Single-wall Nanotubes

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

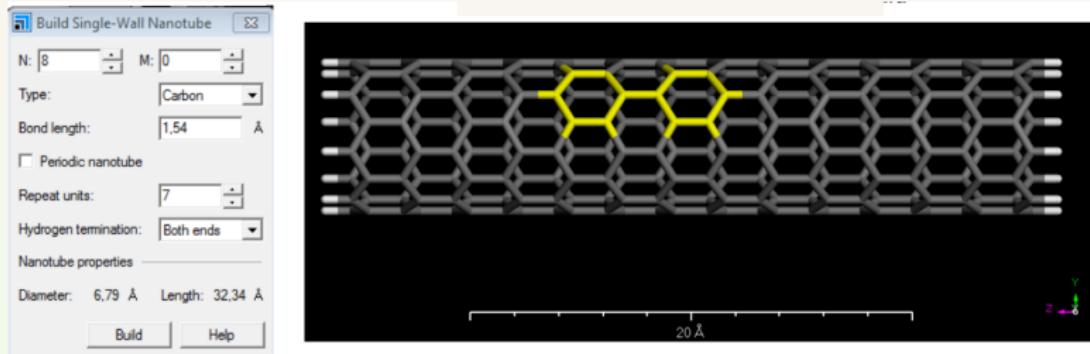
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模



**Fig.: Building Single-wall Nanobubes: Select atoms for Materials studio.**

# MS Modelling: Multi-wall Nanotubes

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

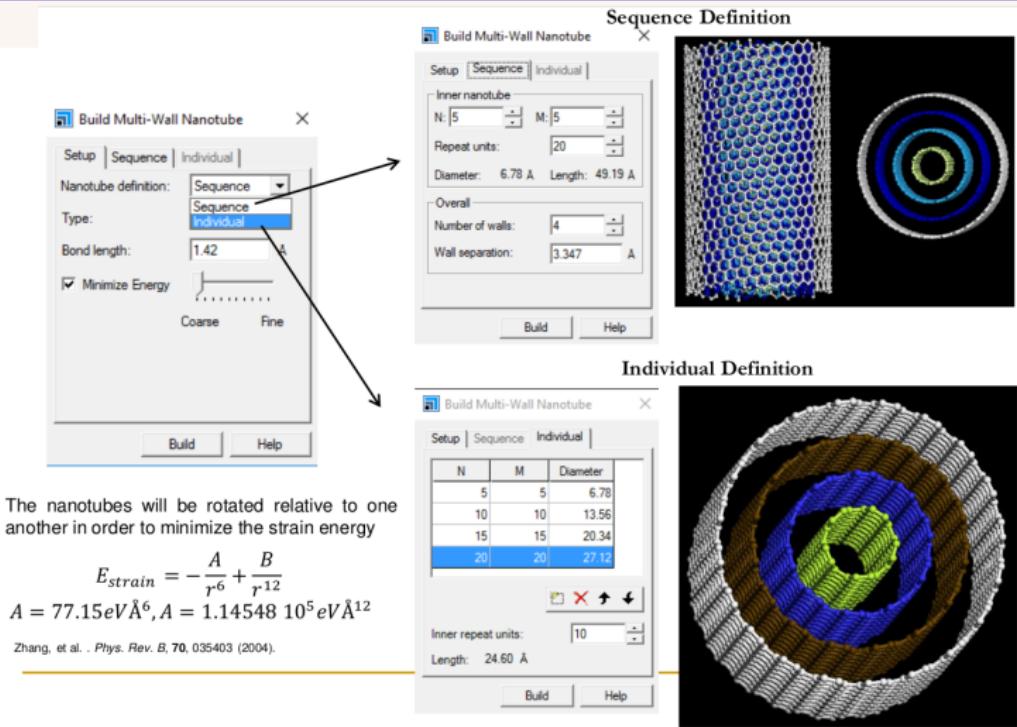
MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架  
Materials Studio  
建模



The screenshot shows two dialog boxes from Materials Studio:

- Sequence Definition**: This dialog is open and shows parameters for building a multi-wall nanotube. It includes fields for 'Inner nanotube' (N: 5, M: 5), 'Repeat units': 20, 'Diameter': 6.78 Å, 'Length': 49.19 Å, 'Overall Number of walls': 4, and 'Wall separation': 3.347 Å. A preview image shows a cross-section of a multi-wall nanotube with four concentric layers.
- Individual Definition**: This dialog shows a table of parameters for different wall configurations. The selected row is for N: 20, M: 20, Diameter: 27.12 Å. A preview image shows a multi-wall nanotube with four concentric layers, each colored differently (blue, green, yellow, orange).

A large arrow points from the 'Sequence' tab in the main dialog to the 'Sequence Definition' dialog. Another arrow points from the 'Individual' tab in the main dialog to the 'Individual Definition' dialog.

**Text below the dialogs:**

The nanotubes will be rotated relative to one another in order to minimize the strain energy

$$E_{strain} = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}}$$

$$A = 77.15 eV\text{\AA}^6, A = 1.14548 \times 10^5 eV\text{\AA}^{12}$$

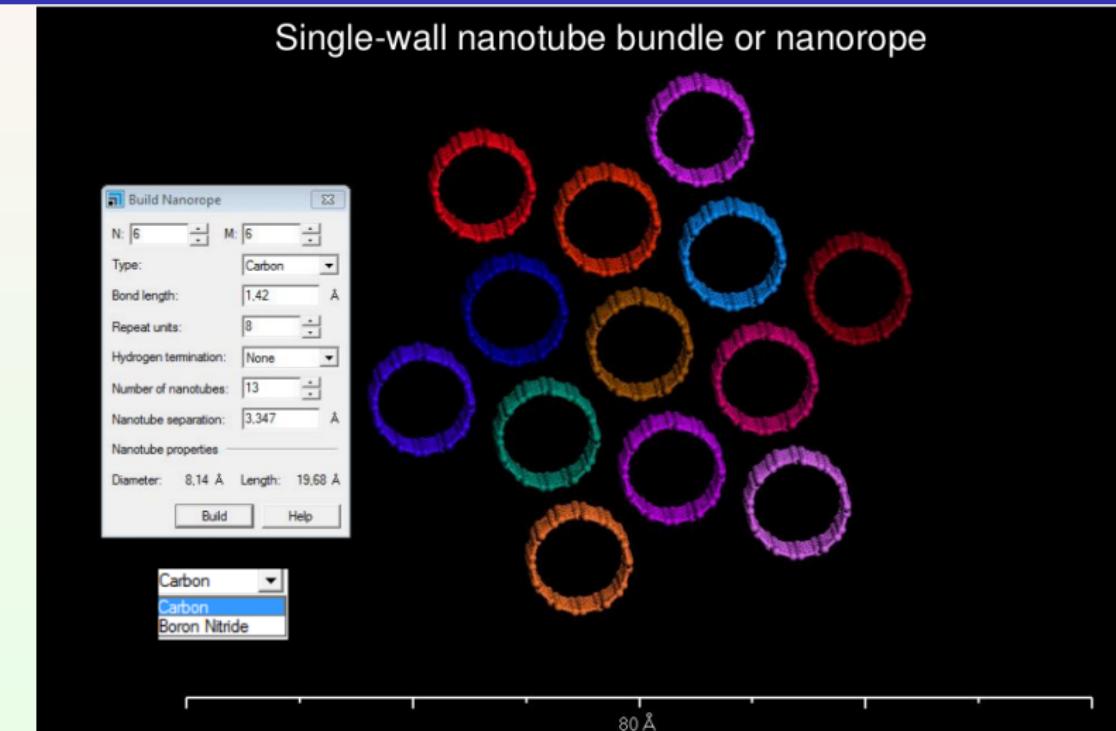
Zhang, et al. . Phys. Rev. B, 70, 035403 (2004).

Fig.: Building Multi-wall Nanotubes for Materials studio.

MS Modelling: Single-wall Nanotubes bundle



Materials Studio 建模



**Fig.:** Building Single-wall Nanotube bundle or nanorope for Materials studio.

# MS Modelling: Construction of Nanocluster



材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

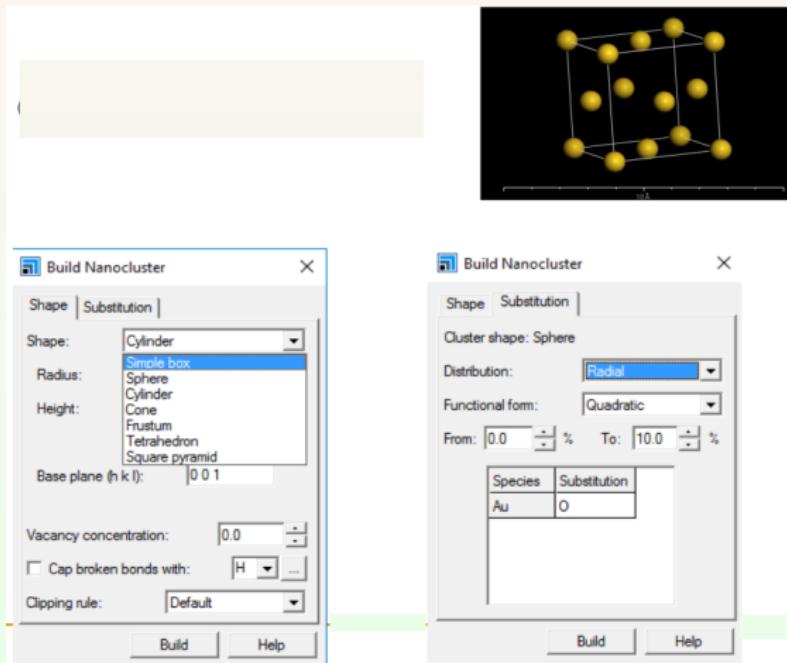


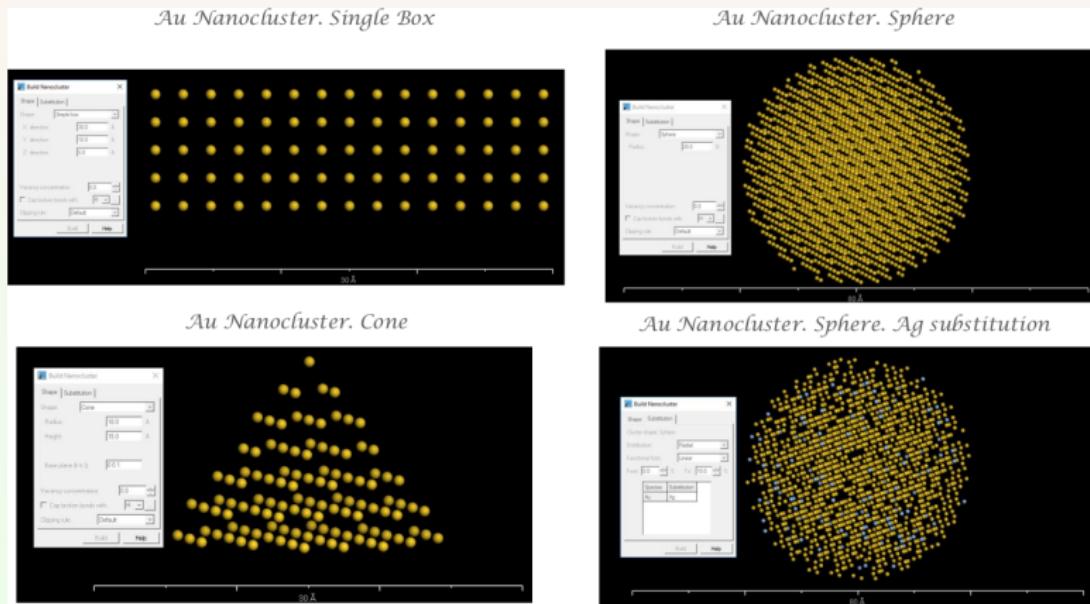
Fig.: Building of Nanocluster for Materials studio.

# MS Modelling: Construction of Nanocluster

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

固体能带计算方法  
赝势理论  
APW 与 LAPW 方法  
MTO 与 LMTO 方法  
PAW 方法

计算示例: Materials Studio 计算  
Materials Studio 的安装  
Materials Studio 的界面框架  
Materials Studio 模建



**Fig.:** The Nanocluster structures in Materials studio.

# MS Modelling: Meso-molecules

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法  
赝势理论  
APW 与  
LAPW 方法  
MTO 与  
LMTO 方法  
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算  
  
Materials Studio 的安装  
Materials Studio 的界面框架  
Materials Studio 建模

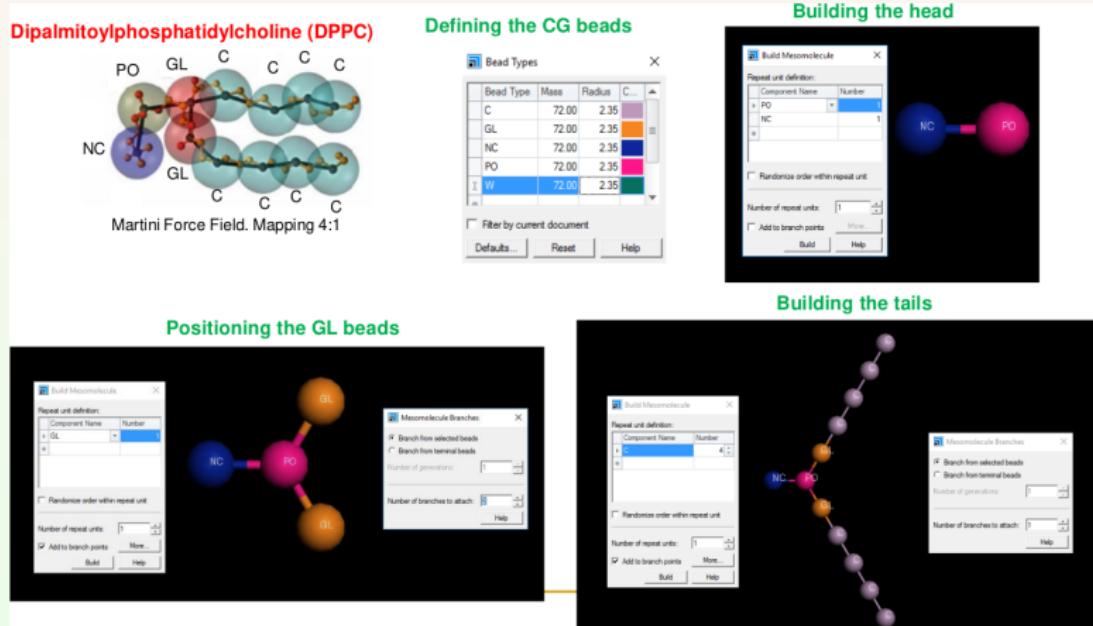


Fig.: Building Meso-molecule structure for Materials studio.

# MS Modelling: Meso-molecules by template

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算 方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio 建模

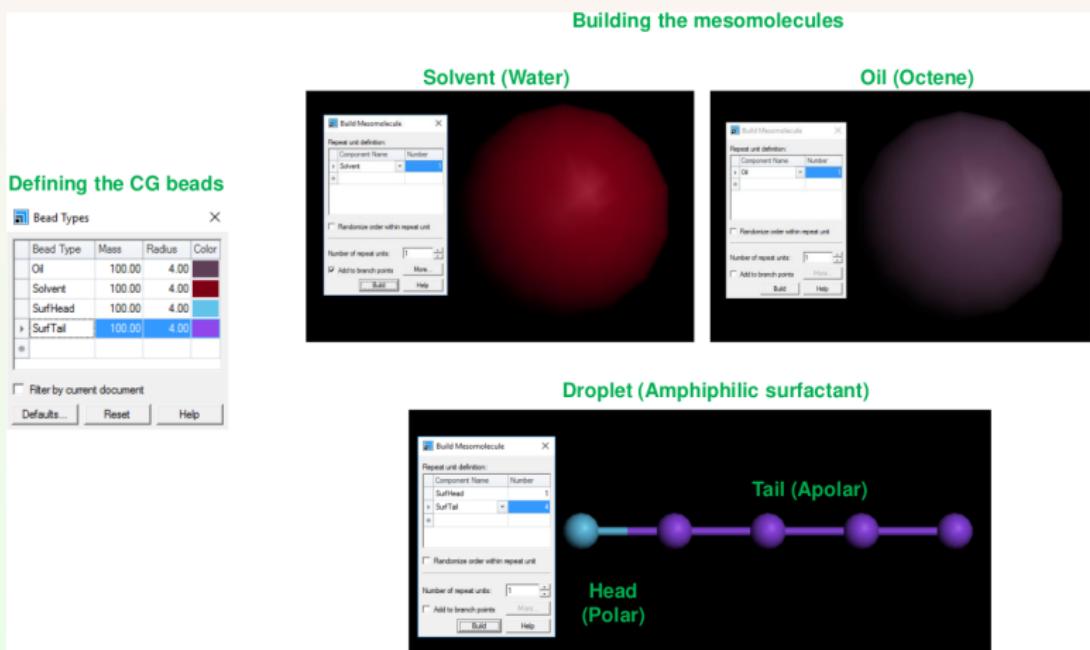


Fig.: Building Meso-molecule by temlapte for Materials studio.

# MS Modelling: Meso-molecules by template

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

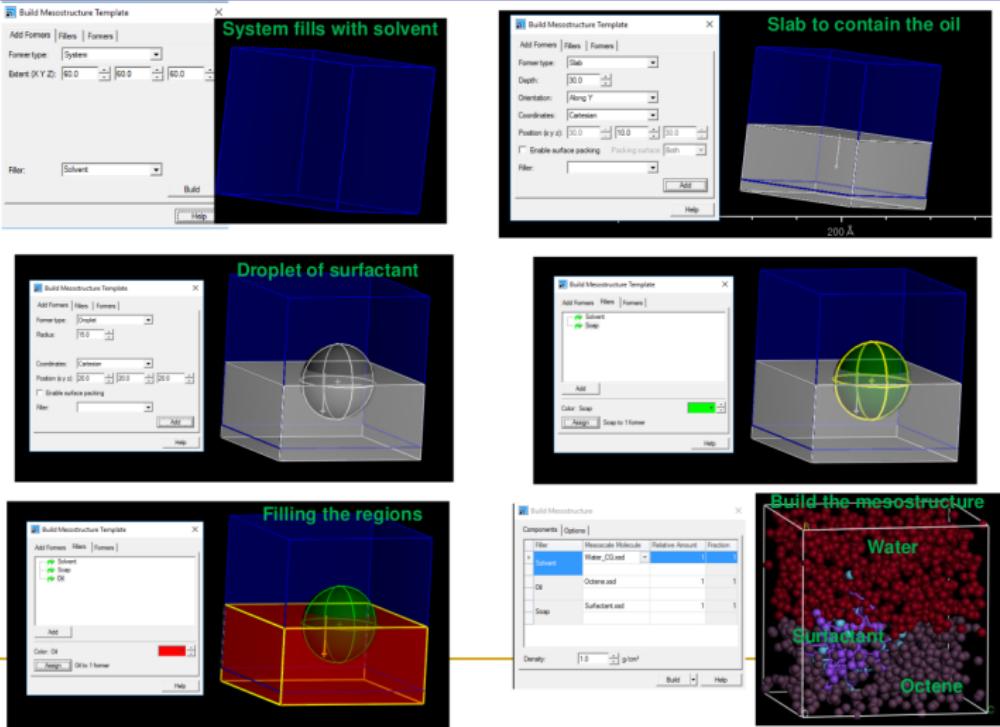


Fig.: Building Meso-molecule by template for Materials studio.

# MS Modelling: MOF Crystals

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算 方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

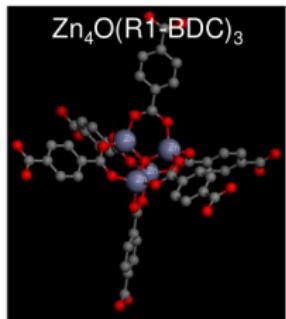
计算示  
例:  
Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

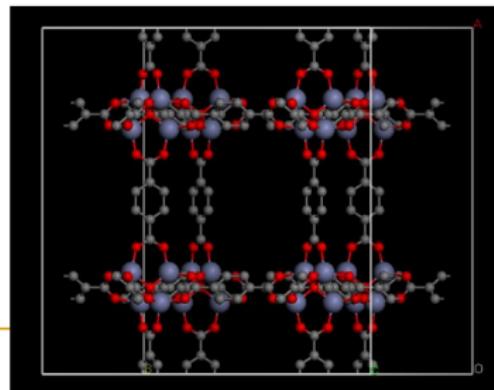
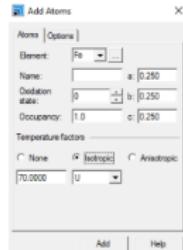
Materials Studio 建模

### Metal Framework Organic (MOF) as prototypes of porous materials



Space Group : Fm(-3)m  
Lattice : 25.8320 Å

	x	y	z	U(eq)
Zn	2934(1)	2066(1)	2066(1)	42(1)
O(1C)	2500	2500	2500	31(2)
O(1)	2819(2)	2181(2)	1340(2)	78(2)
C(1)	2500	2500	1113(3)	70(3)
C(2)	2500	2500	538(3)	75(3)
C(3)	2829(3)	2171(3)	269(3)	106(4)



Mohamed Eddaoudi et al. "Systematic Design of Pore Size and Functionality in Isoreticular MOFs and Their Application in Methane Storage", *Science*, 2002, 295, 469-472

**Fig.: Building Metal Framework Organic (MOF) for Materials studio.**

# MS Modelling: Miller Planes in Crystals

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算方法

赝势理论

APW 与 LAPW 方法

MTO 与 LMTO 方法

PAW 方法

### 计算示例: Materials Studio 计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

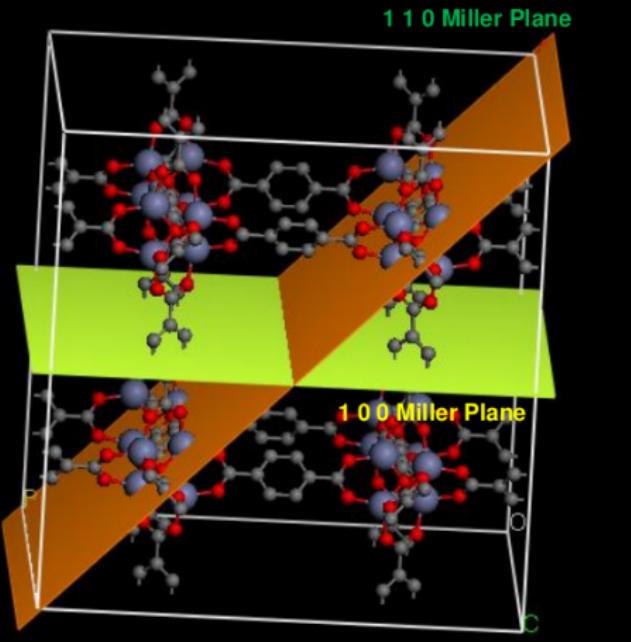
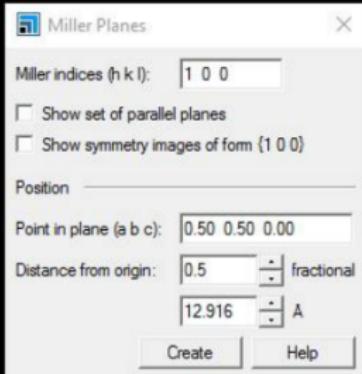


Fig.: Building Miller Planes in crystals for Materials studio.

# MS Modelling: surface from Crystals

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

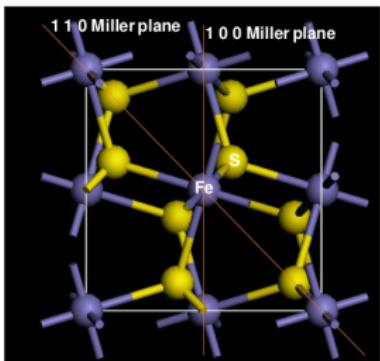
Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

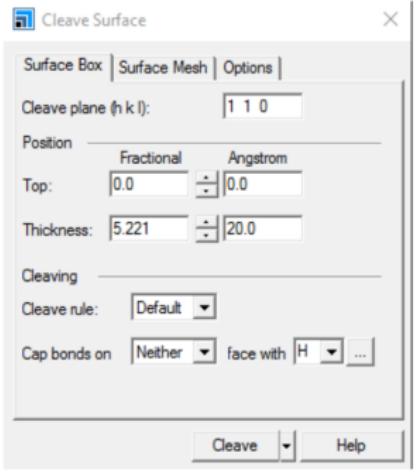
## 1) Build the crystal

Space Group: Pa-3  
 Lattice Parameter: 5.417 Å  
 Fract. Coordinates: Fe (0,0,0)  
 S (0.3851, 0.3851, 0.3851)

Bayliss P, "Crystal structure refinement of a weakly anisotropic pyrite cubic model" American Mineralogist 62 (1977) 1168-1172



## 2) Cleave surface



**Fig.:** Building surfaces from crystals for Materials studio.

# MS Modelling: surface in Crystals

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模

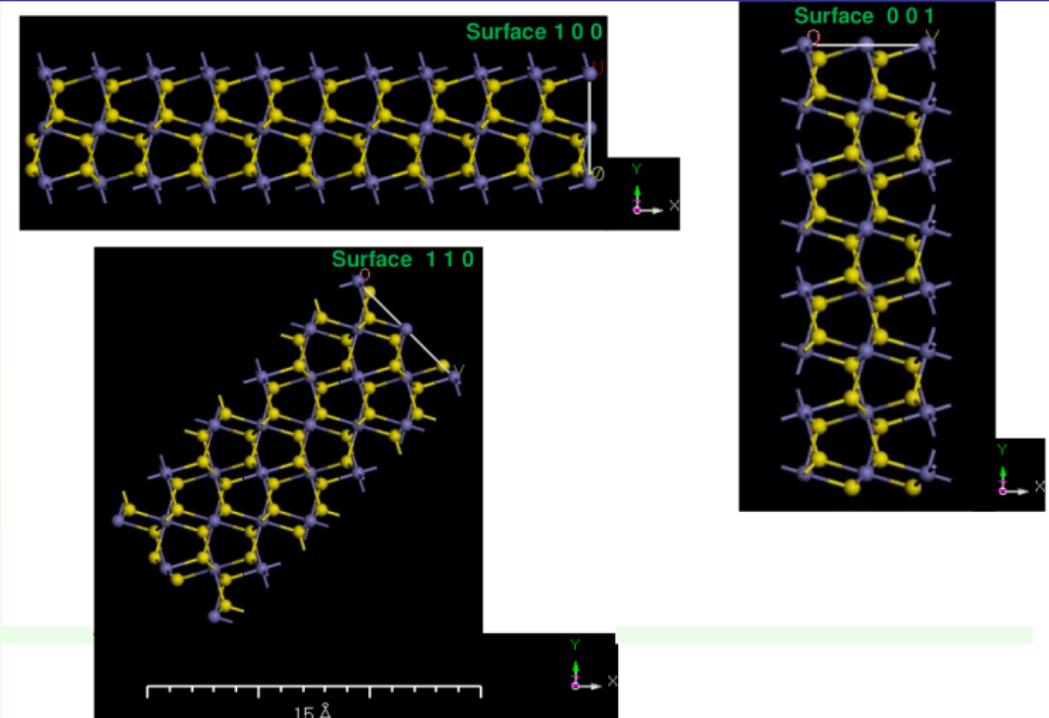
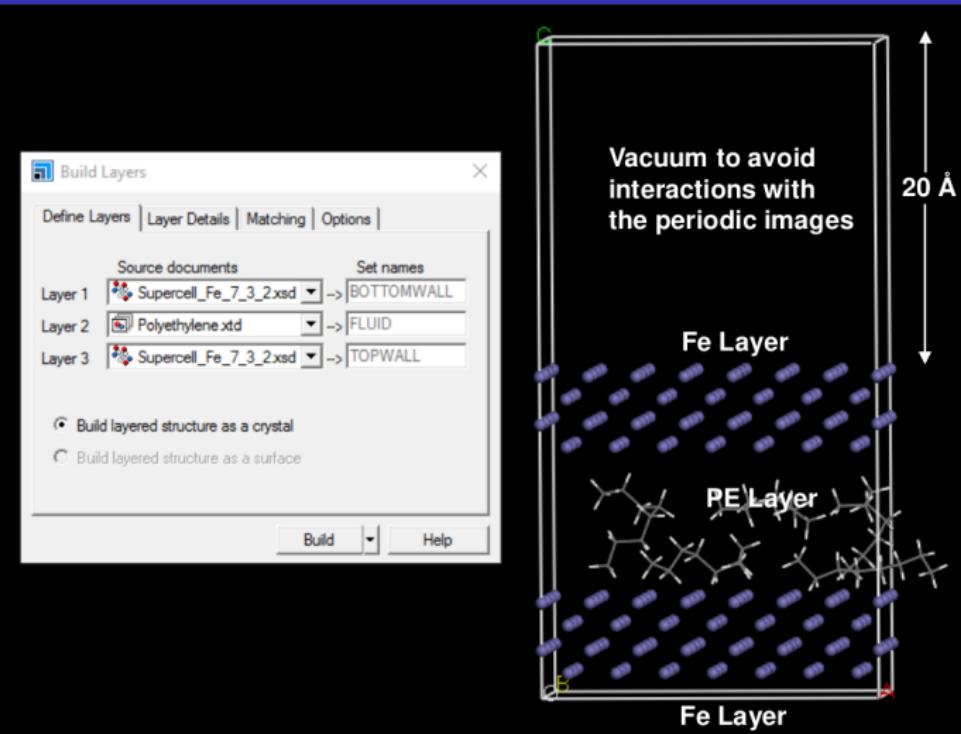


Fig.: Building surfaces in crystals for Materials studio.

MS Modelling: layers and vacuum



## Materials Studio 建模



**Fig.:** Building metal-polymer-metal by multi-layers and vacuum for Materials studio.

# Quantum simulation: Tools

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

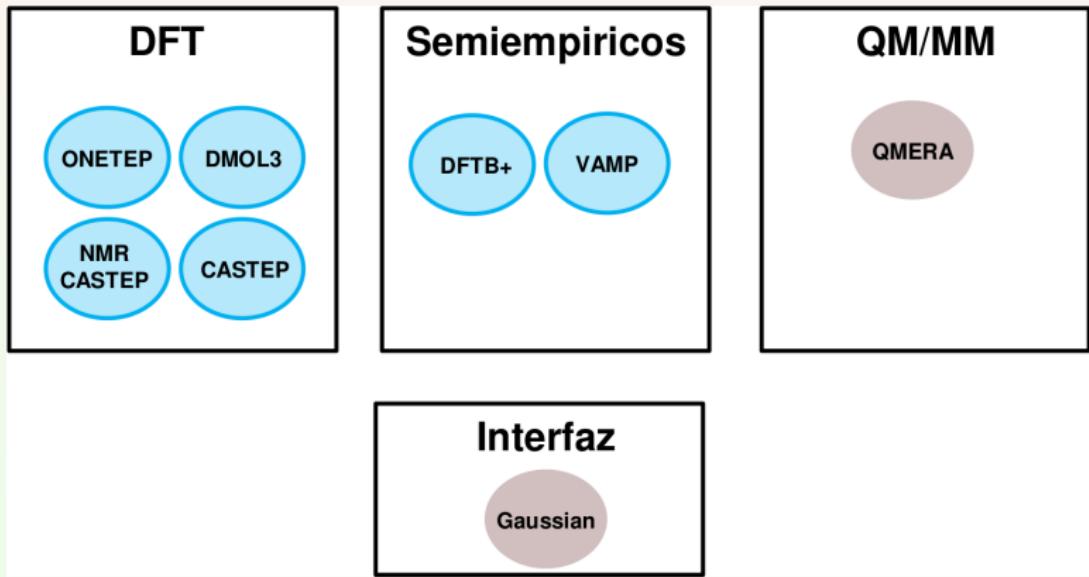
PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模



**Fig.:** Calculation modules for quantum simulation in Materials studio.

# Ms Calculation modules comparison

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

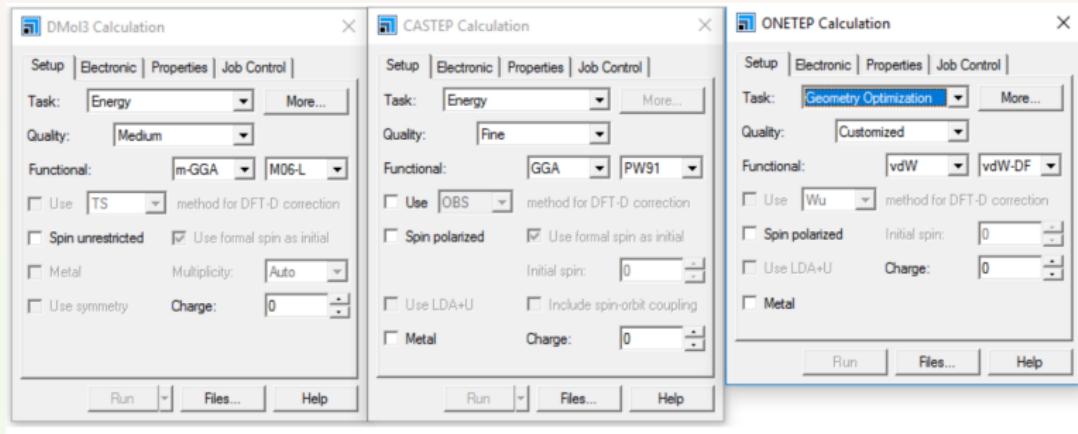


Fig.: Calculation parameters comparison in Materials studio.

# Ms xc functional comparison

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模

Functional	DMOL3	CASTEP	ONETEP
<b>LDA (Local Density Approximation)</b>			
1980 VWN (Vosko-Wilk-Nusair)	X	X	
1981 CA-PZ (Ceperley-Alder-Perdew-Zunger)		X	X
1992 PWC (Perdew-Wang)	X		
<b>GGA (Generalized Gradient Approximation)</b>			
1988 BP (Becke-Perdew)	X		
1988 BLYP (Becke, Lee-Yang-Parr)	X		X
1992 PW91 (Perdew-Wang)	X	X	X
1992 VWN-BP (Vosko-Wilk-Nusair, Becke-Perdew)	X		
1996 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof)	X	X	X
1998 REV PBE			X
1999 BOP	X		
1999 RPBE (Revised Perdew-Burke-Ernzerhof)	X	X	X
2001 HCTH	X		
2004 XLYP			X
2006 WC		X	X
2008 PBESOL	X	X	
<b>Hybrids</b>			
1993 B3LYP (Becke3, Lee-Yang-Par)	X	X	
1998 PBE0 (Perdew-Burke-Ernzerhof)	X		
2003 HSE03 (Heyd-Scuseria-Ernzerhof)	X		
2006 HSE06 (Heyd-Scuseria-Ernzerhof)	X		
<b>MetaGGA</b>			
2006 M06-L Minnesota 2006 meta-GGA functional (Zhao-Truhlar)	X		
2011 M11-L Minnesota 2011 meta-GGA functional (Peverati-Truhlar)	X		
1994 M50 meta-GGA made simple, version 0	X		
1994 M51 meta-GGA made simple, version 1	X		
2003 TIPSS Tao, Perdew, Staroverov and Scuseria functional	X		
2009 revTIPSS revised Tao, Perdew, Staroverov and Scuseria funct.	X		
<b>Non-local potentials</b>			
HF (exact exchange, no correlation)	X		
HF-LDA (exact exchange, LDA correlation)	X		
sX (screened exchange, no correlation)	X		
sX-LDA (screened exchange, LDA correlation)	X		
<b>VdW-DF (vdW from ab-initio, non-empirical corrections)</b>			
2004,2010 vdW-DF (Dion, Roman)	X		
2010 vdW-DF2 (Lee)	X		
2010 optPBE (Klimeš)	X		
2010 optB88 (Klimeš)	X		
2010 Vdw-DFK (Klimeš)	X		

## Dispersion corrections

Method for DFT-D correction	DMOL3	CASTEP	ONETEP
2009 TS Tkatchenko-Scheffler (PBE, BLYP y B3LYP)	X	X	
2006 Grimme (PBE, BLYP, B3LYP y TPSS)	X	X	
OBS (PW91 y LDA)	X	X	
1999 Moolj			X
2001 Elstner			X
2002 Wu			X

Fig.: XC functional comparison in Materials studio.

# Ms Calculation modules comparison

## Comparing DMol3, CASTEP and ONETEP

Tasks	DMOL3	CASTEP	ONETEP
Energy	X	X	X
Geometry optimization	X	X	X
Dynamics	X	X	X
Transition Structure Search	X	X	X
Transition Structure Optimization	X		
Transition Structure Confirmation	X	X	
Elastic Constants	X	X	
Reaction Kinetics	X		
Electron Transport	X		
Properties from other tasks		X	

Properties	DMOL3	CASTEP	ONETEP
Band structure	X	X	X
Density of states	X	X	X
Electron density	X	X	X
Electrostatics	X		X
Frequency	X		
Fukui function	X		
Optics	X		
Orbitals	X	X	X
Population analysis	X	X	X
Core level spectroscopy		X	
Electron localization function		X	

Fig.: Calculation modules comparison in Materials studio.

# MS Calculation: ONETEP

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模

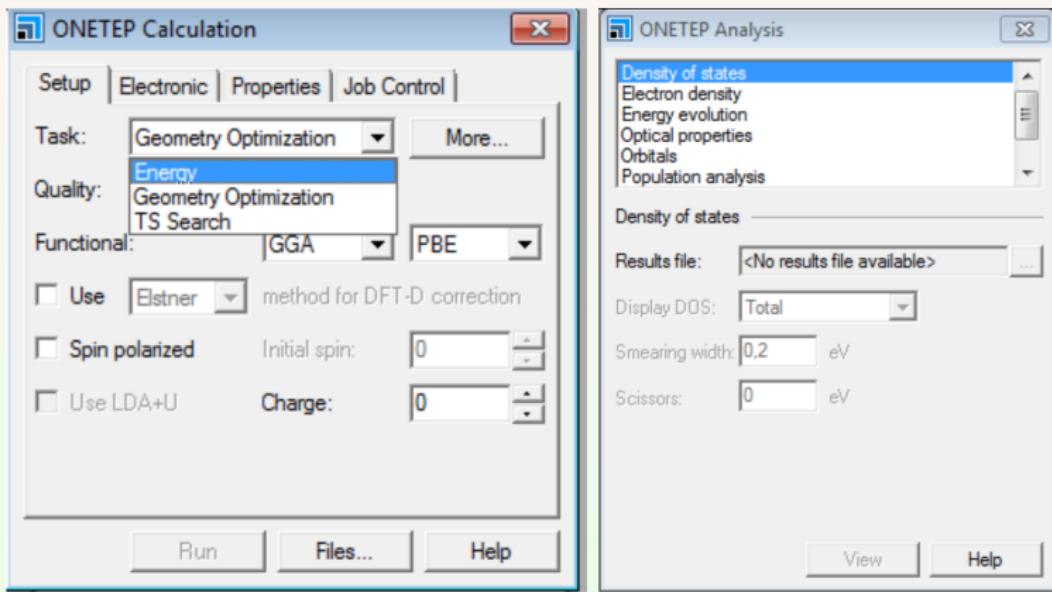


Fig.: Calculation module ONETEP in Materials studio.

# MS Calculation: DFTB+ & VAMP

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

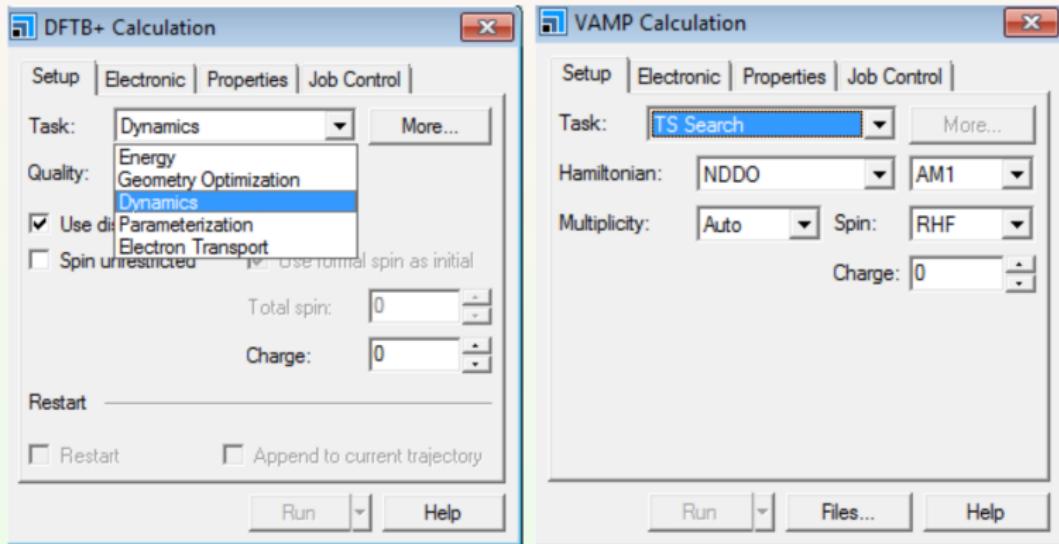


Fig.: Calculation parameters for module DFTB+ and VAMP in Materials studio.

# MS Calculation: QMERA

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法  
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

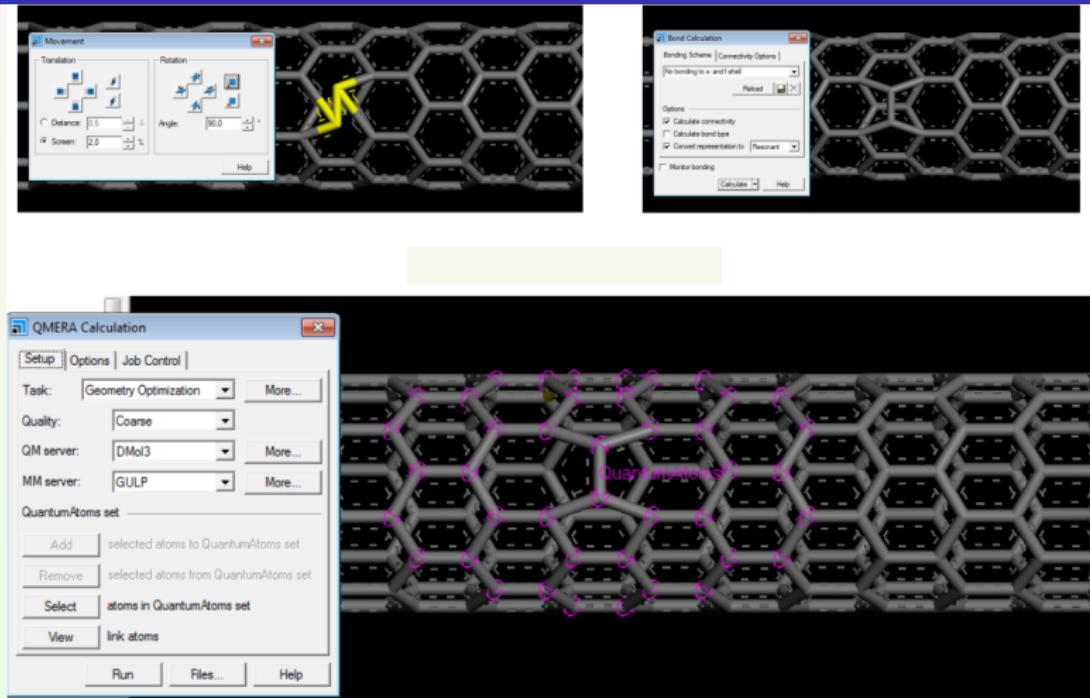


Fig.: Calculation parameters for module QMERA in Materials studio.

# Classical simulation: Tools

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

固体能带计算方法

赝势理论

APW 与 LAPW 方法

MTO 与 LMTO 方法

PAW 方法

计算示例:  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

### Molecular Mechanics (minimization) and Molecular Dynamics



### Monte Carlo



Fig.: Calculation modules for classical simulation in Materials studio.

# MS Calculation: Forcite Plus

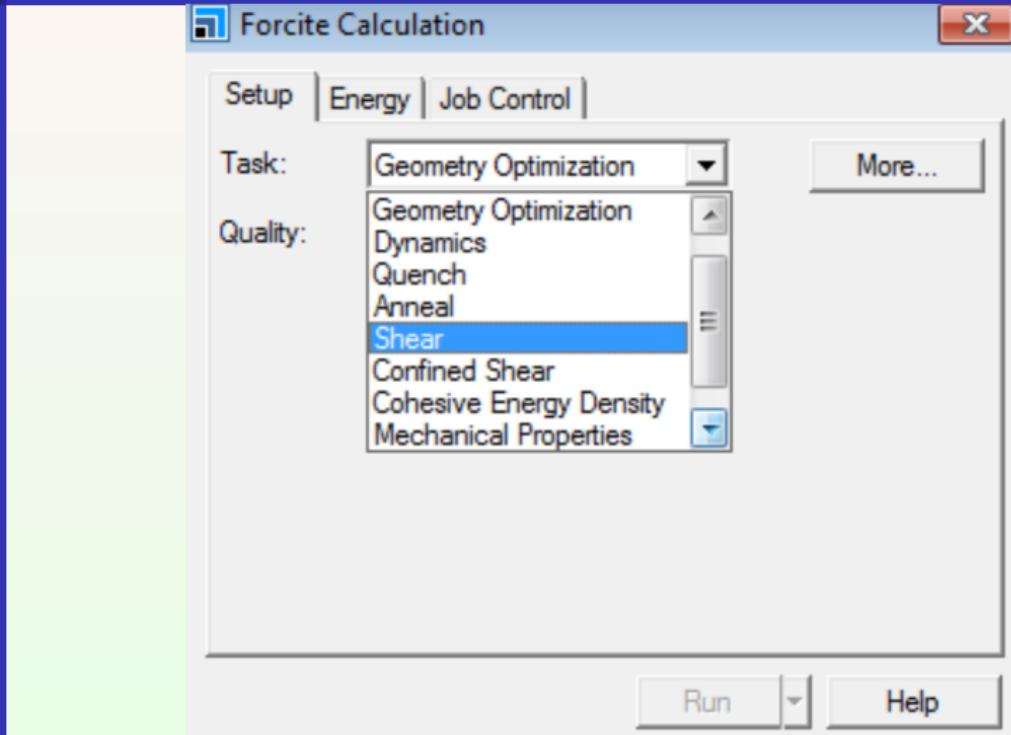


Fig.: Calculation modules Forcite in Materials studio.

# MS Calculation: Adsorption Lactor

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算方法

赝势理论

APW 与 LAPW 方法

MTO 与 LMTO 方法

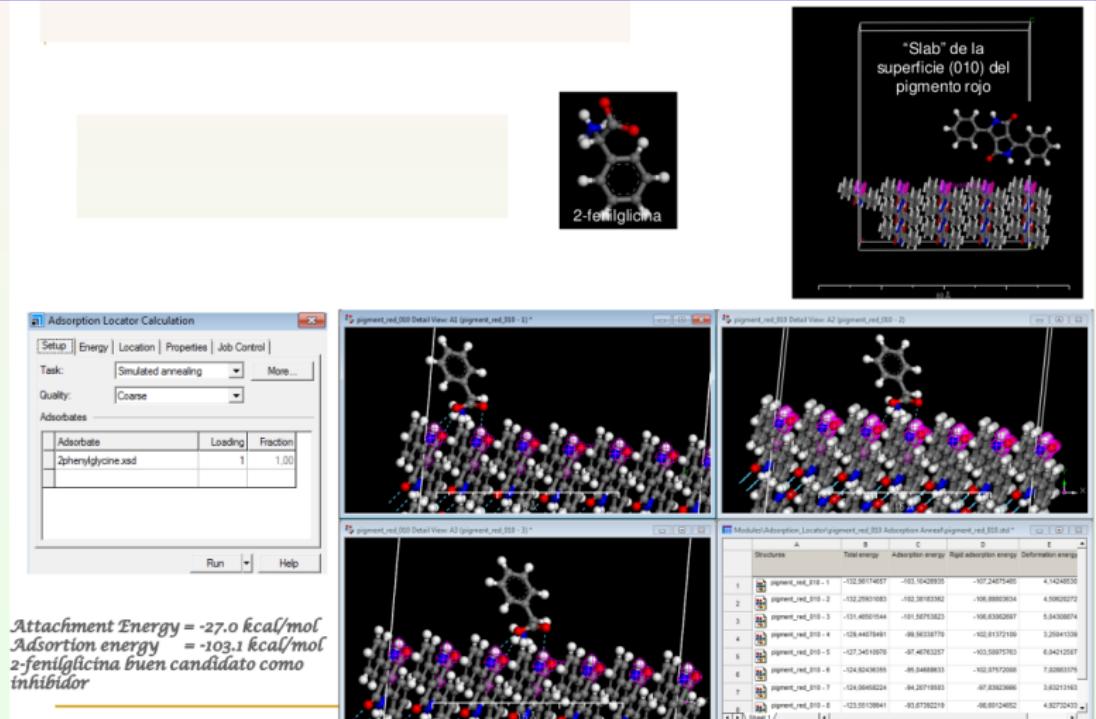
PAW 方法

**计算示例:** Materials Studio 计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模



**Fig.: Calculation modules Adsorption Lactor in Materials studio.**

# MS Calculation: Amorphous Cell

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模

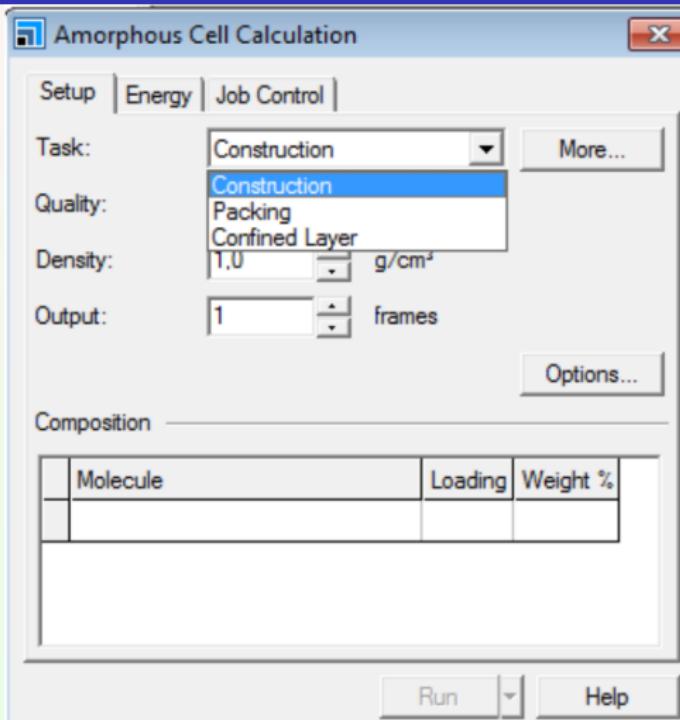


Fig.: Calculation modules Amorphous cell in Materials studio.

# MS Calculation: Blends

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

PAW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法  
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架  
Materials Studio 建模

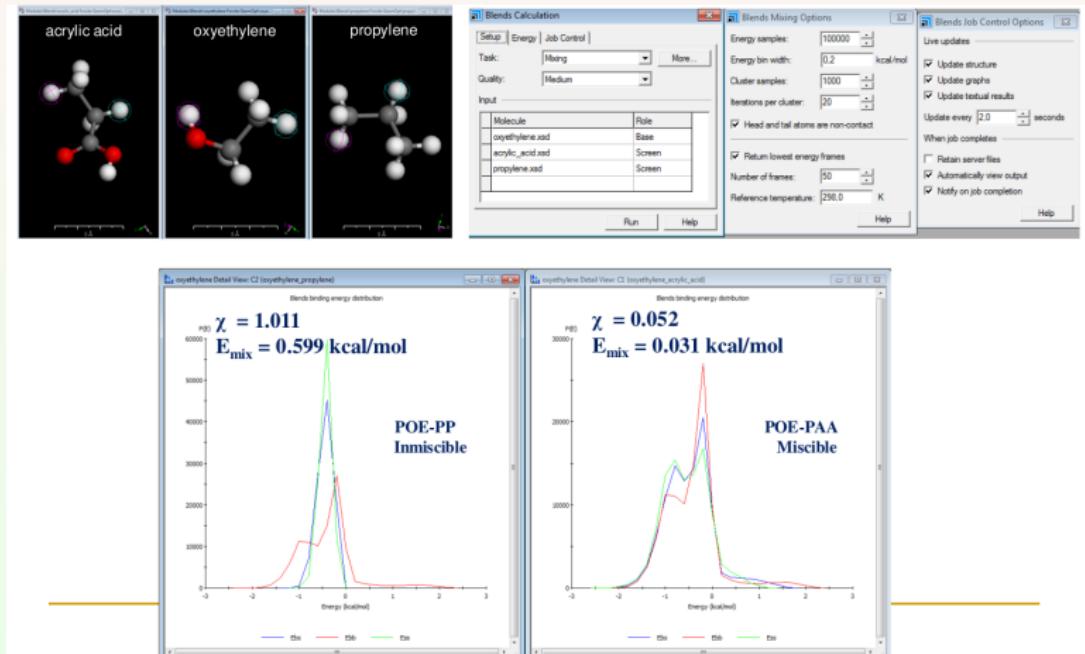


Fig.: Calculation modules Blends in Materials studio.

# MS Calculation: Conformers

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模

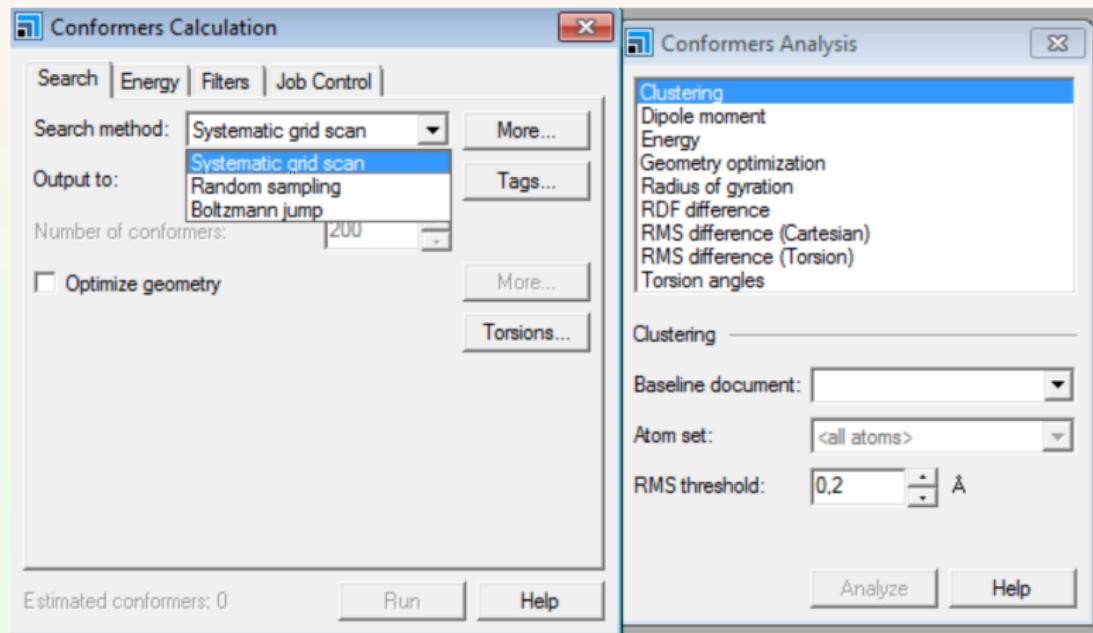


Fig.: Calculation modules Conformers in Materials studio.

# Mesoescale simulation: Tools

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

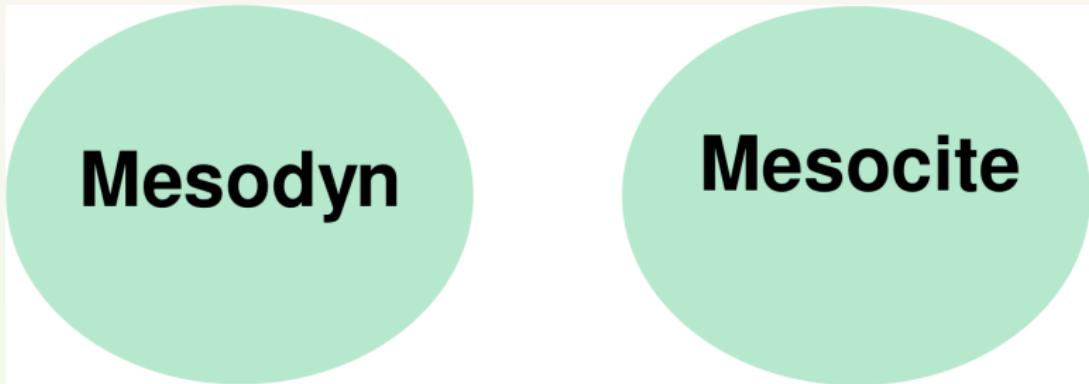
PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模



**Fig.:** Calculation modules for mesoescale simulation in Materials studio.

# MS Calculation: Mesocite

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

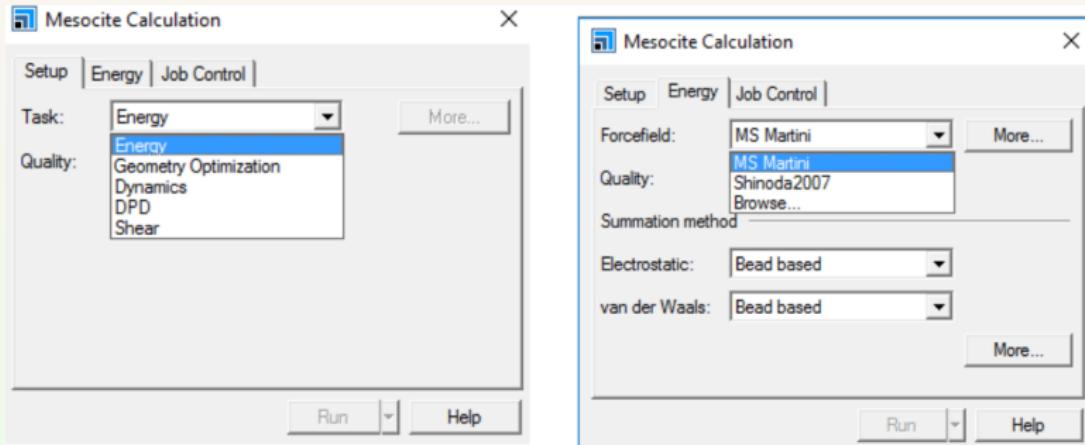
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模



**Fig.: Calculation modules Mesocite in Materials studio.**

# MS Analytical and crystallization tools

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模

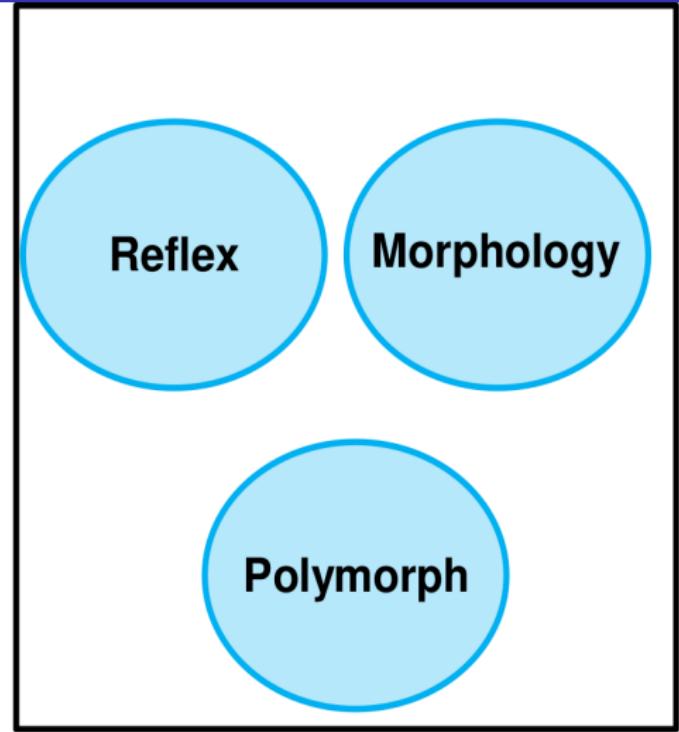


Fig.: Analytical and crystallization tools in Materials studio.

# MS Analysis: Reflex

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算方法

赝势理论

APW 与 LAPW 方法

MTO 与 LMTO 方法

PAW 方法

### 计算示例: Materials Studio 计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

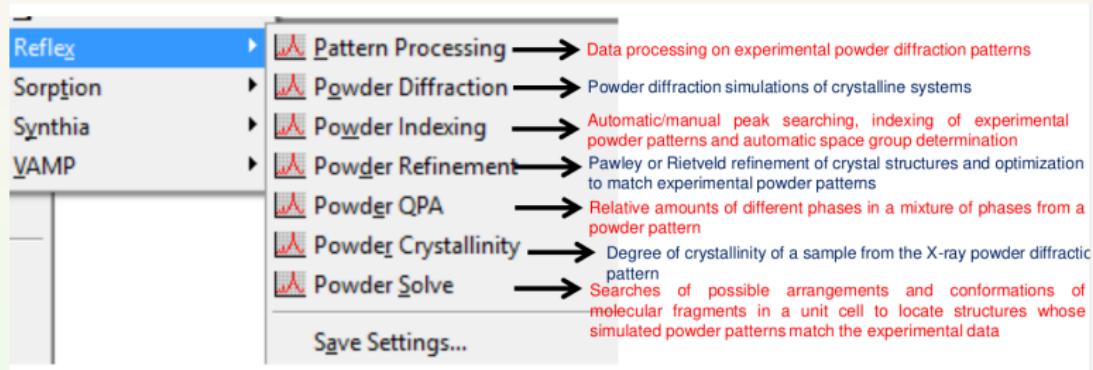


Fig.: Analysis module Reflex overview in Materials studio.

# MS Analysis: Reflex

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

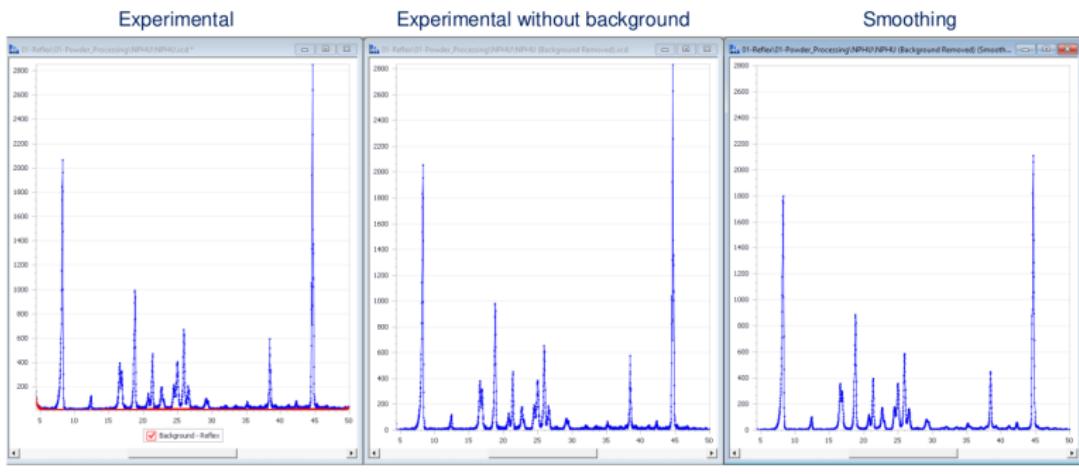
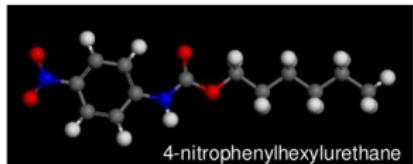
PAW 方法

计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio 的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模



**Fig.:** Reflex pattern processing in Materials studio.

# Reflex: Pattern Processing

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算 方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

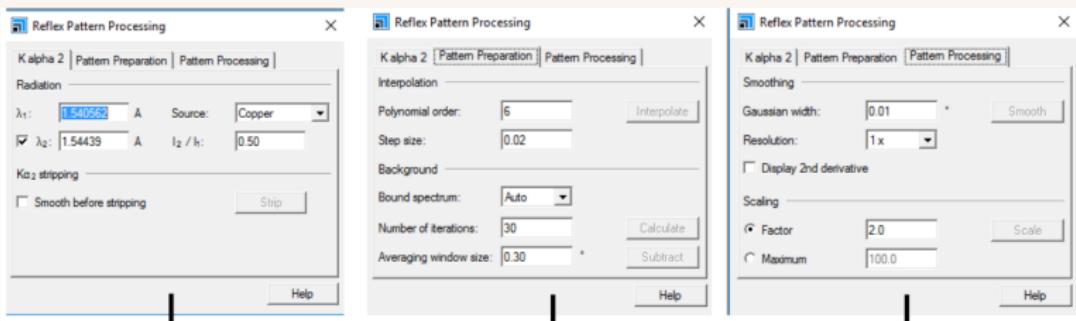
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio  
的安装

Materials Studio  
的界面框架

Materials Studio  
建模



Properties of the X-ray radiation used to obtain the experimental powder diffraction pattern and to strip K<sub>a2</sub> peaks from a pattern

To perform interpolation and to calculate and remove the background scattering contribution from an experimental powder diffraction pattern

Data smoothing algorithm and scaling on an experimental powder diffraction pattern

**Fig.: Pattern Processing parameters in Materials studio.**

# MS Analysis: Reflex

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

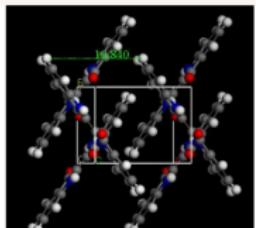
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

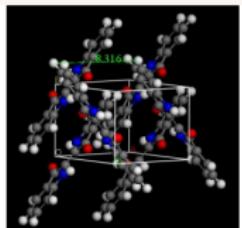
Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模



Indigo Polymorph A



Indigo Polymorph B

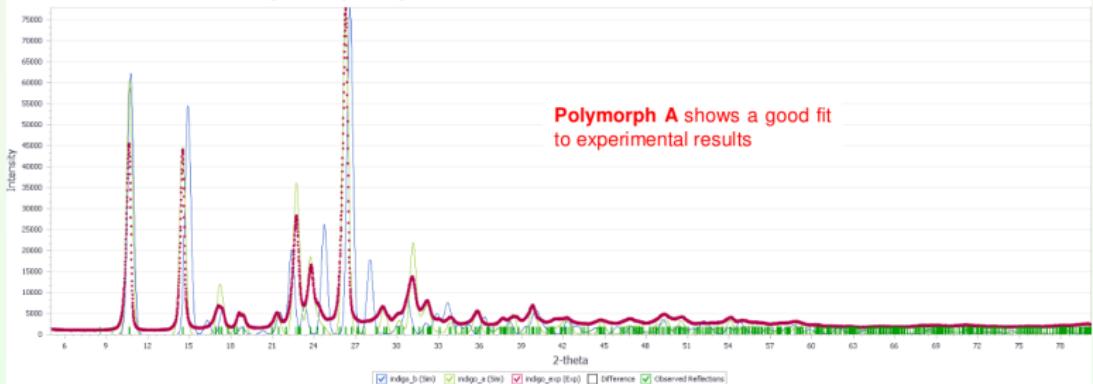


Fig.: Reflex powder diffraction in Materials studio.

# Reflex: Powder Diffraction

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算方法

赝势理论

APW 与 LAPW 方法

MTO 与 LMTO 方法

PAW 方法

### 计算示例

例: Materials Studio 计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

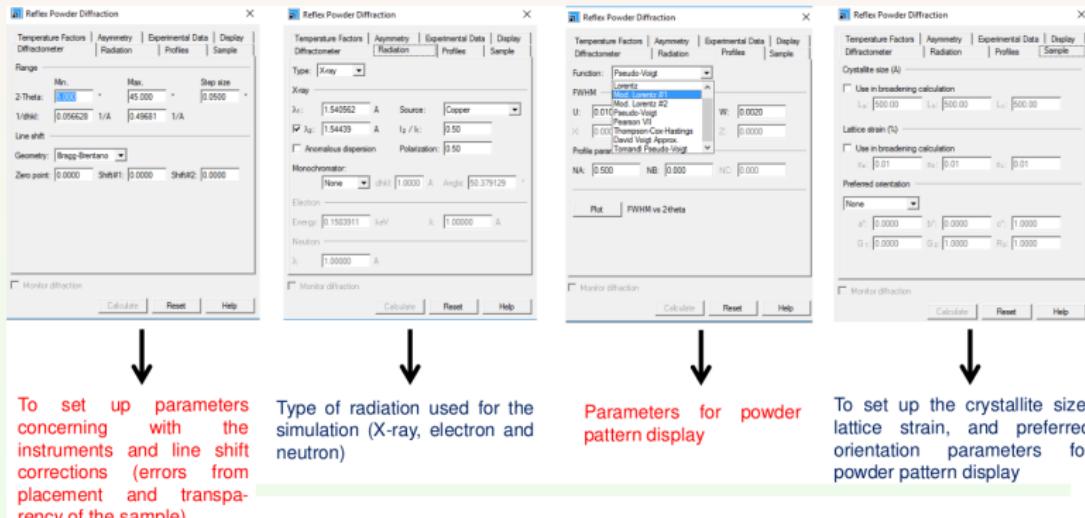


Fig.: Powder Diffraction parameters in Materials studio.

# Reflex: Powder Diffraction

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算方法

赝势理论

APW 与 LAPW 方法

MTO 与 LMTO 方法

PAW 方法

### 计算示例

例: Materials Studio 计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模

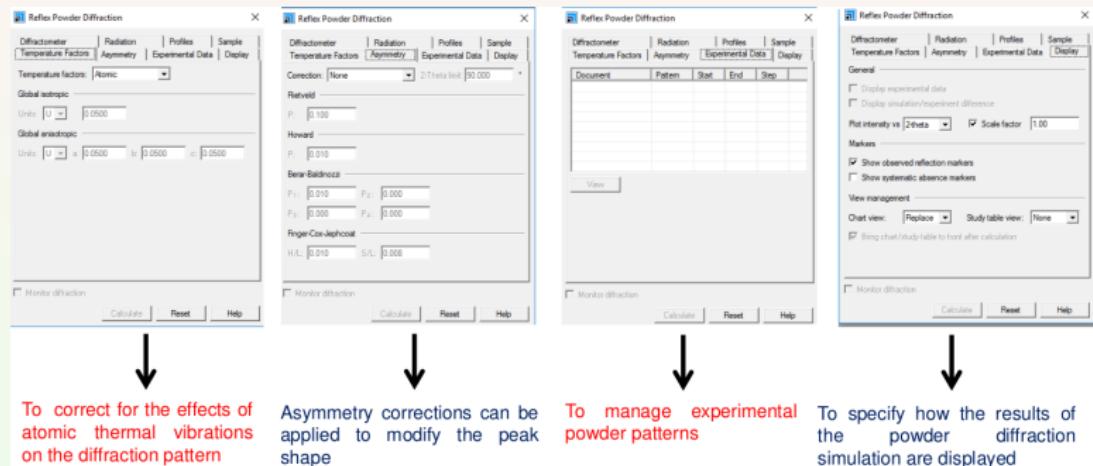


Fig.: Powder Diffraction parameters in Materials studio.

# Reflex: Powder Indexing

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算 方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

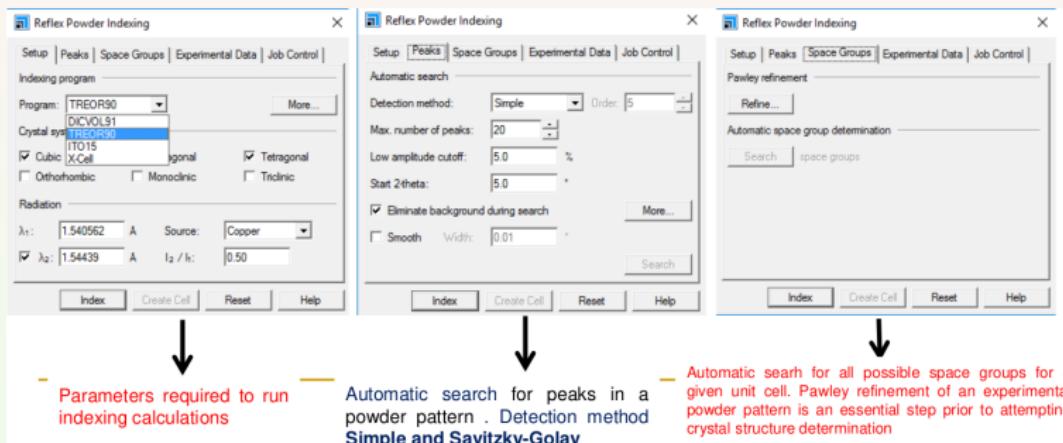
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模



**Fig.: Powder Indexing parameters in Materials studio.**

# Reflex: Powder Refinement

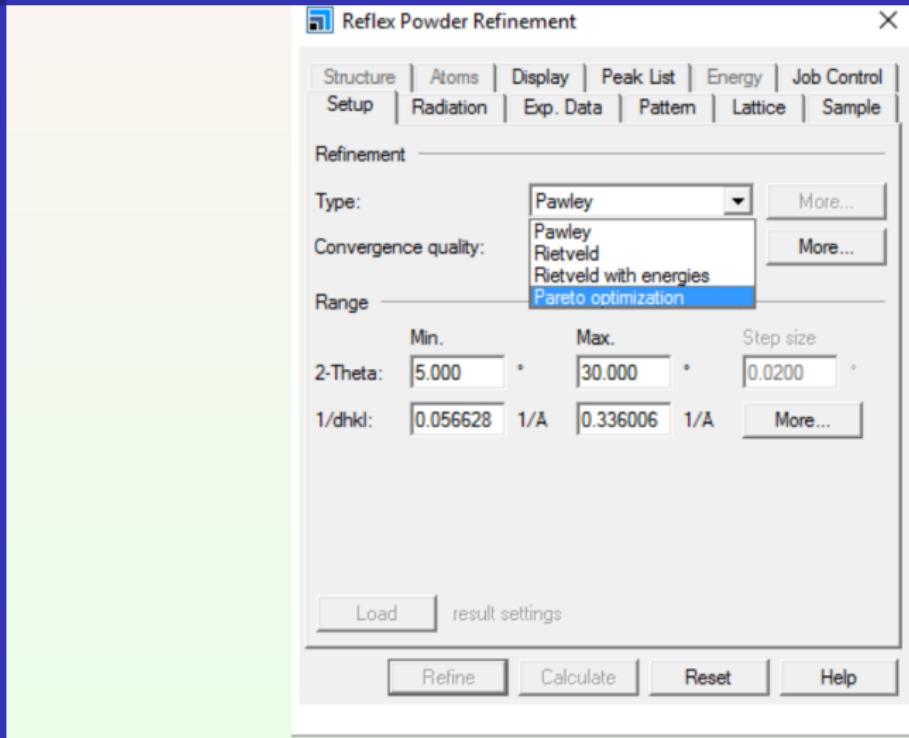


Fig.: Powder Refinement parameters in Materials studio.

# Reflex: Powder QPA

## 材料模拟软件与方法简介 (II)

### 固体能带计算 方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法

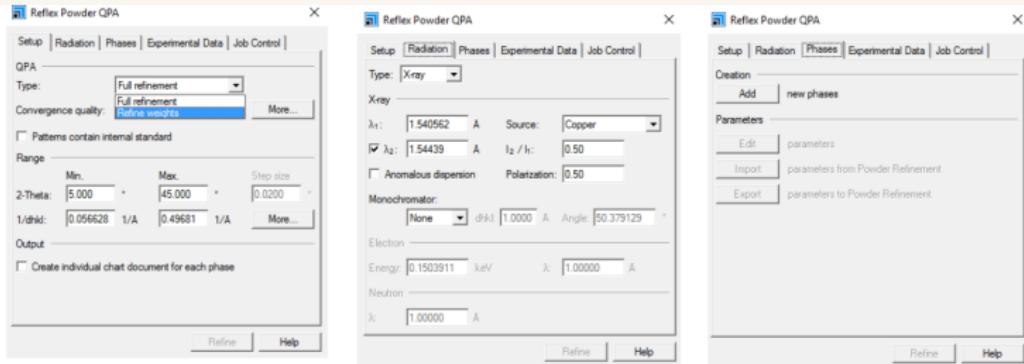
PAW 方法

计算示  
例: Materials Studio  
计算

Materials Studio 的安装

Materials Studio 的界面框架

Materials Studio 建模



- Type of refinement you wish to perform
- Modify the refinement control parameters
- Specify the range that will be used for the calculation of the measure of similarity between the simulated and experimental data



- Specify crystal structures or powder patterns for possible phases in the mixture
- Insert these documents into a study table for input to a Powder QPA calculation

**Fig.: Powder QPA parameters in Materials studio.**

# MS Analysis: Morphology

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

固体能带计算  
方法

赝势理论

APW 与  
LAPW 方法

MTO 与  
LMTO 方法  
PAW 方法

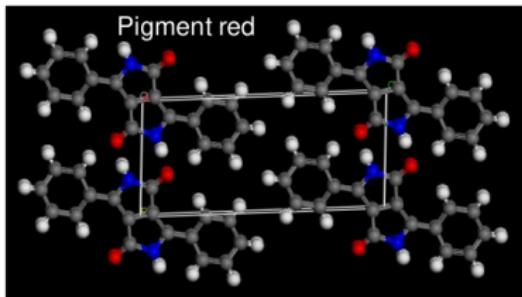
计算示  
例: Materi-  
als Studio  
计算

Materials Stu-  
dio 的安装

Materials  
Studio  
的界面框架

Materials Stu-  
dio 建模

➤ Geometry optimization of the crystal using FORCITE (COMPASS)



➤ Morphology Calculation → Growth Morphology using COMPASS force field

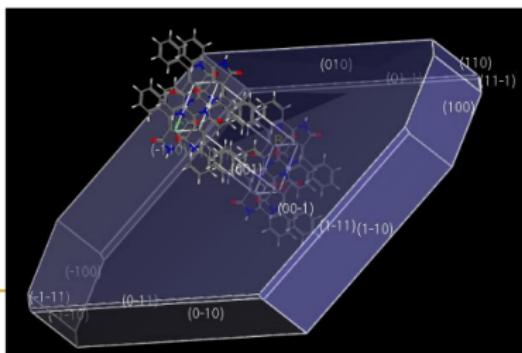


Fig.: Example: Morphology calculation in Materials studio.

# 与目录和文件有关的命令

## ■ mkdir: 创建目录

```
name@name-VirtualBox:~/TEST$  
name@name-VirtualBox:~/TEST$ mkdir test  
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll  
total 32  
drwxrwxr-x 3 name name 4096 7月 26 15:01 ./  
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月 26 14:31 ../  
drwxrwxr-x 2 name name 4096 7月 26 15:01 test/  
-rwx-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test1  
-rwx-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 12:05 test2  
-rwx-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3  
-rwx-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 14:30 test4  
-rwx-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test5  
lrwxrwxrwx 1 name name 5 7月 26 14:57 test6 -> test1  
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

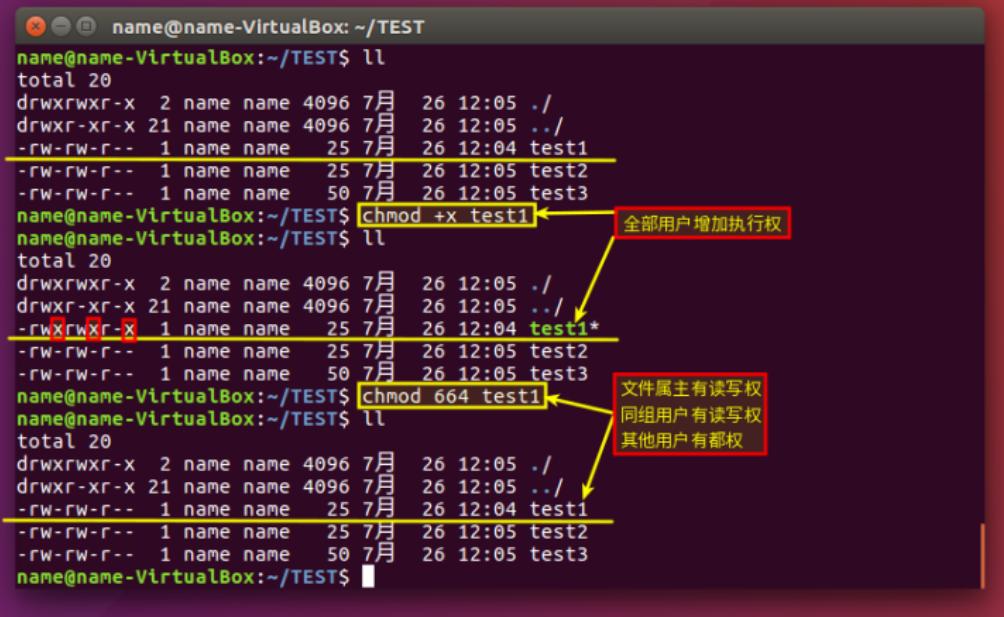
## ■ cd: 改变工作目录

```
name@name-VirtualBox:~$ cd TEST/  
name@name-VirtualBox:~/TEST$ cd /home/name/Softs/fftw-3.3.4  
name@name-VirtualBox:~/Softs/fftw-3.3.4$ cd ..  
name@name-VirtualBox:~/Softs$ cd ~  
name@name-VirtualBox:~$ cd ~
```

改变绝对路径  
返回上层目录  
返回home目录

# 与目录和文件有关的命令

## ■ chmod: 改变工作目录的权限



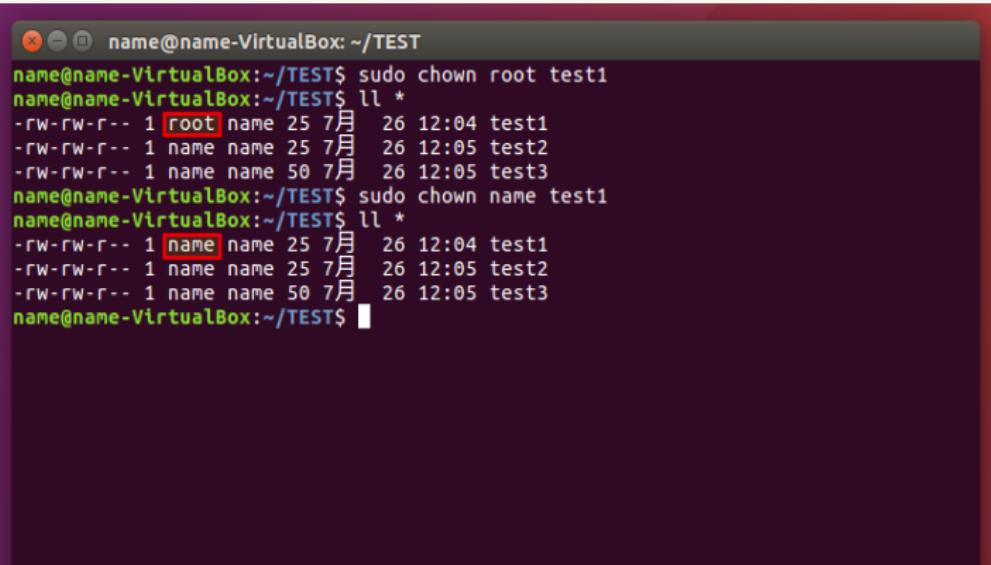
```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll
total 20
drwxrwxr-x  2 name name 4096 7月  26 12:05 .
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月  26 12:05 ..
-rw-rw-r--  1 name name  25 7月 26 12:04 test1
-rw-rw-r--  1 name name  25 7月 26 12:05 test2
-rw-rw-r--  1 name name  50 7月 26 12:05 test3
name@name-VirtualBox:~/TEST$ chmod +x test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll
total 20
drwxrwxr-x  2 name name 4096 7月  26 12:05 .
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月  26 12:05 ..
-rwxrwxr-x  1 name name  25 7月 26 12:04 test1*
-rw-rw-r--  1 name name  25 7月 26 12:05 test2
-rw-rw-r--  1 name name  50 7月 26 12:05 test3
name@name-VirtualBox:~/TEST$ chmod 664 test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll
total 20
drwxrwxr-x  2 name name 4096 7月  26 12:05 .
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月  26 12:05 ..
-rw-rw-r--  1 name name  25 7月 26 12:04 test1
-rw-rw-r--  1 name name  25 7月 26 12:05 test2
-rw-rw-r--  1 name name  50 7月 26 12:05 test3
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

全部用户增加执行权

文件属主有读写权  
同组用户有读写权  
其他用户有都权

# 与目录和文件有关的命令

## ■ chown: 改变文件的属主

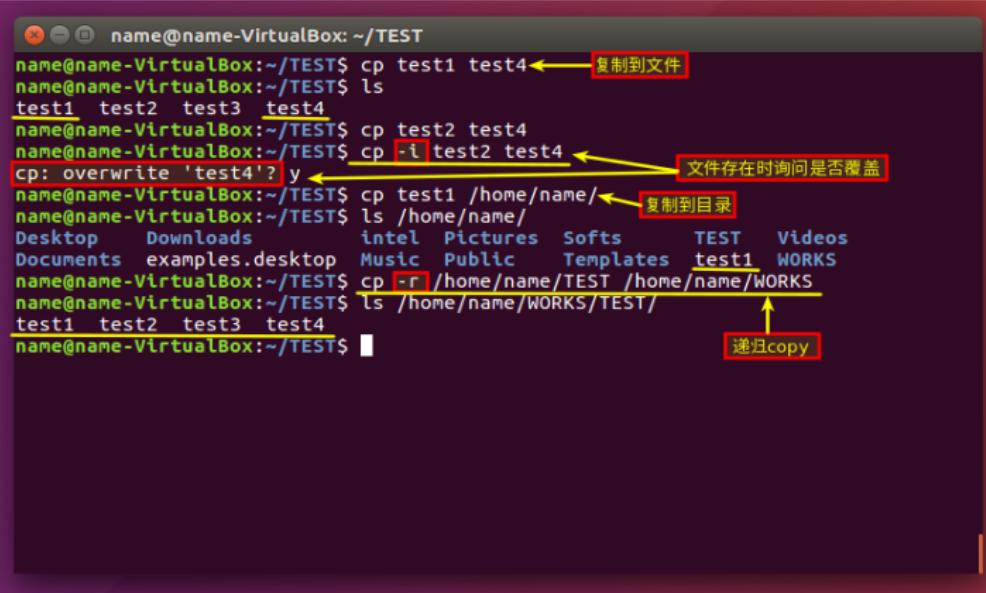


A screenshot of a terminal window titled "name@name-VirtualBox: ~/TEST". The terminal shows the user running the command "sudo chown root test1" followed by "ll \*". The output lists three files: test1, test2, and test3. The first file, test1, has its owner changed from "name" to "root". The second file, test2, has its owner changed from "name" to "name". The third file, test3, has its owner changed from "name" to "name". The terminal window has a dark background and light-colored text.

```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ sudo chown root test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll *
-rw-rw-r-- 1 root name 25 7月 26 12:04 test1
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 12:05 test2
-rw-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3
name@name-VirtualBox:~/TEST$ sudo chown name test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll *
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 12:04 test1
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 12:05 test2
-rw-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

# 与目录和文件有关的命令

## ■ cp: 将文件 copy 到另一个文件或另一目录



The screenshot shows a terminal window with the following session:

```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ cp test1 test4 ← 复制到文件
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ls
test1 test2 test3 test4
name@name-VirtualBox:~/TEST$ cp test2 test4
name@name-VirtualBox:~/TEST$ cp -i test2 test4 ← 文件存在时询问是否覆盖
cp: overwrite 'test4'? y
name@name-VirtualBox:~/TEST$ cp test1 /home/name/ ← 复制到目录
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ls /home/name/
Desktop Downloads intel Pictures Softs TEST Videos
Documents examples.desktop Music Public Templates test1 WORKS
name@name-VirtualBox:~/TEST$ cp -r /home/name/TEST /home/name/WORKS
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ls /home/name/WORKS/TEST/
test1 test2 test3 test4
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ↑ 递归copy
```

Annotations in red boxes with arrows point to specific parts of the terminal output:

- "复制到文件" points to the first command: `cp test1 test4`.
- "文件存在时询问是否覆盖" points to the confirmation prompt: `cp: overwrite 'test4'? y`.
- "复制到目录" points to the command: `cp test1 /home/name/`.
- "递归copy" points to the final command: `cp -r /home/name/TEST /home/name/WORKS`.

# 与目录和文件有关的命令

## ■ diff: 逐行比较两个文件, 列出不同

```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ diff test1 test2
1c1
< This is CONTENT of test1
...
> This is CONTENT of test2
name@name-VirtualBox:~/TEST$ diff -e test1 test2
1c1
This is CONTENT of test2
.
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

## ■ find: 搜索文件 (文件所在位置检索)

```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ find /opt/intel -name 'lapack' -print
/opt/intel/composer_xe_2013.0.079/examples/lapack
name@name-VirtualBox:~/TEST$ find /home/name/Softs/fftw-3.3.4/bin -user name -print
/home/name/Softs/fftw-3.3.4/bin
/home/name/Softs/fftw-3.3.4/bin/fftw-wisdom-to-conf
/home/name/Softs/fftw-3.3.4/bin/fftw-wisdom
```

# 与目录和文件有关的命令

## ■ grep: 按给定模式搜索文件 (文件所含内容搜索)

```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ grep 'CONTENT' test1
This is CONTENT of test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$ grep -v 'CONTENT' test1      显示不匹配模式的行
name@name-VirtualBox:~/TEST$ grep -c 'CONTENT' test1      显示匹配模式的行号
1
name@name-VirtualBox:~/TEST$ grep -l 'CONTENT' test1      仅显示包含匹配模式的文件名
test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$ grep -y 'CONTENT' test1      模式不区分大小写
This is CONTENT of test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

## ■ head: 显示指定文件前若干行

```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ head -3 ~/.bashrc
# ~/.bashrc: executed by bash(1) for non-login shells.
# see /usr/share/doc/bash/examples/startup-files (in the package bash-doc)
# for examples
name@name-VirtualBox:~/TEST$ head -7 ~/.bashrc
# ~/.bashrc: executed by bash(1) for non-login shells.
# see /usr/share/doc/bash/examples/startup-files (in the package bash-doc)
# for examples

# If not running interactively, don't do anything
case $- in
    *i*) ;;
esac
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

# 与目录和文件有关的命令

## ■ ln: 建立文件链接 (link)

```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ln test1 test5
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll
total 28
drwxrwxr-x 2 name name 4096 7月 26 14:57 .
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月 26 14:31 ..
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test1
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 12:05 test2
-rw-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 14:30 test4
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test5
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ln -s test1 test6
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll
total 28
drwxrwxr-x 2 name name 4096 7月 26 14:57 .
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月 26 14:31 ..
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test1
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 12:05 test2
-rw-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 14:30 test4
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test5
lrwxrwxrwx 1 name name 5 7月 26 14:57 test6 -> test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

**注意 1:** cp -r 会将链接文件 copy 成独立文件, 如果需要保护文件符号链接 (软链接) 属性, 建议用 tar 命令

**注意 2:** 不在同一文件系统 (如位于不同磁盘分区) 中的文件只能用符号链接, 不能用硬链接

# 与目录和文件有关的命令

## ■ ls: 列出目录中的内容

```
name@name-VirtualBox: ~/TEST
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ls
test1 test2 test3 test4 test5 test6
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ls -a
[.] [..] test1 test2 test3 test4 test5 test6
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ls -la
total 28
drwxrwxr-x 2 name name 4096 7月 26 14:57 .
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月 26 14:31 ..
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test1
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 12:05 test2
-rw-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 14:30 test4
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test5
lrwxrwxrwx 1 name name 5 7月 26 14:57 test6 -> test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ls -lta
total 28
lrwxrwxrwx 1 name name 5 7月 26 14:57 test6 -> test1
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test5
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 14:30 test4
-rw-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 12:05 test2
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test1
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月 26 14:31 ..
drwxrwxr-x 2 name name 4096 7月 26 14:57 .
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

列出了所有文件，包括隐藏文件

列出文件长格式列表

文件类型及许可机制

链接数

属主(用户名、组名)

字节长度

最后修改日期

文件名

用逆序列表

## 与目录和文件有关的命令



### ■ more: 分屏显示信息

```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ls /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/lib/ | more
libmpi.a
libmpi.la
libmpi_mpifh.a
libmpi_mpifh.la
libmpi_mpifh.so
libmpi_mpifh.so.2
libmpi_mpifh.so.2.5.0
libmpi.so
libmpi.so.1
libmpi.so.1.6.0
libmpi_usempif08.a
libmpi_usempif08.la
libmpi_usempif08.so
libmpi_usempif08.so.0
libmpi_usempif08.so.0.6.0
libmpi_usempif_ignore_tkr.a
libmpi_usempif_ignore_tkr.la
libmpi_usempif_ignore_tkr.so
libmpi_usempif_ignore_tkr.so.0
libmpi_usempif_ignore_tkr.so.0.1.0
libompitrace.a
libompitrace.la
libompitrace.so
libompitrace.so.0
-More--
```

- -c 清屏而非滚屏
  - -f 遇长行不折回
  - i 空格 显示后续 i 行
  - q 或 Q 退出more
  - = 显示当前行号
  - h 帮助信息

# 与目录和文件有关的命令

## ■ mv: 文件或目录的移动或更名

```
name@name-VirtualBox: ~/TEST
name@name-VirtualBox:~/TEST$ mv test2 test7
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll
total 32
drwxrwxr-x 3 name name 4096 7月 26 15:08 .
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月 26 14:31 ../
drwxrwxr-x 2 name name 4096 7月 26 15:01 test/
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test1
-rw-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 14:30 test4
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test5
lrwxrwxrwx 1 name name 5 7月 26 14:57 test6 -> test1
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 12:05 test7
name@name-VirtualBox:~/TEST$ mv test7 test
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll
total 28
drwxrwxr-x 3 name name 4096 7月 26 15:08 .
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月 26 14:31 ../
drwxrwxr-x 2 name name 4096 7月 26 15:08 test/
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test1
-rw-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 14:30 test4
-rw-rw-r-- 2 name name 25 7月 26 12:04 test5
lrwxrwxrwx 1 name name 5 7月 26 14:57 test6 -> test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll test
total 12
drwxrwxr-x 2 name name 4096 7月 26 15:08 .
drwxrwxr-x 3 name name 4096 7月 26 15:08 ../
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 12:05 test7
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

# 与目录和文件有关的命令

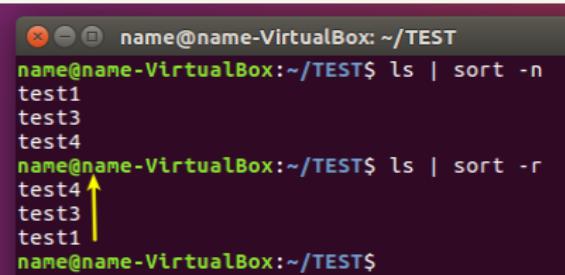
## ■ `pwd`: 显示当前目录绝对路径

```
name@name-VirtualBox: ~
name@name-VirtualBox:~/TEST$ pwd
/home/name/TEST
name@name-VirtualBox:~/TEST$ cd ~
name@name-VirtualBox:~$ pwd
/home/name
name@name-VirtualBox:~$
```

## ■ `rm`: 删除文件或目录

```
name@name-VirtualBox: ~/TEST
name@name-VirtualBox:~/TEST$ rm test5
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll
total 24
drwxrwxr-x  3 name name 4096 7月  26 15:10 .
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月  26 14:31 ../
drwxrwxr-x  2 name name 4096 7月  26 15:08 test/
-rw-rw-r--  1 name name   25 7月  26 12:04 test1
-rw-rw-r--  1 name name   50 7月  26 12:05 test3
-rw-rw-r--  1 name name   25 7月  26 14:30 test4
lrwxrwxrwx  1 name name     5 7月  26 14:57 test6 -> test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$ rm -i test6 ← 删除前询问确认
rm: remove symbolic link 'test6'? y
name@name-VirtualBox:~/TEST$ rm test
rm: cannot remove 'test': Is a directory
name@name-VirtualBox:~/TEST$ rm -r test ← 删除当前目录及其子目录及文件
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll
total 20
drwxrwxr-x  2 name name 4096 7月  26 15:11 .
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月  26 14:31 ../
-rw-rw-r--  1 name name   25 7月  26 12:04 test1
-rw-rw-r--  1 name name   50 7月  26 12:05 test3
-rw-rw-r--  1 name name   25 7月  26 14:30 test4
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

# 与目录和文件有关的命令



```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ls | sort -n
test1
test3
test4
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ls | sort -r
test4
test3
test1
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

A screenshot of a terminal window titled "name@name-VirtualBox: ~/TEST". It shows two commands being run. The first command, "ls | sort -n", sorts the files test1, test3, and test4 in ascending numerical order. The second command, "ls | sort -r", sorts them in descending order. A yellow arrow points from the text "按数字升序排列" to the "-n" option in the first command, and another yellow arrow points from the text "按当前顺序的逆序排序" to the "-r" option in the second command.

## ■ sort: 对指定文件按行排序

- **-b** 忽略开头的空格和制表符
- **-d** 仅字母、数字、空格按字典排序
- **-f** 不区分字母大小写
- **-n** 按数字升序排列
- **-r** 按当前顺序的逆序排序
- **-u** 忽略重复行
- **-o** 指定输出文件名

# 与目录和文件有关的命令

## ■ tail: 显示指定文件的最后部分

```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ tail -3 ~/.bashrc
export BERRYPI_PYTHON=/usr/bin/python2.7
alias berrypi="${BERRYPI_PYTHON} ${BERRYPI_PATH}/berrypi"
# --- BERRYPI END ---
name@name-VirtualBox:~/TEST$ tail -5 ~/.bashrc
# --- BERRYPI START ---
export BERRYPI_PATH=$WIENROOT/SRC_BerryPI/BerryPI
export BERRYPI_PYTHON=/usr/bin/python2.7
alias berrypi="${BERRYPI_PYTHON} ${BERRYPI_PATH}/berrypi"
# --- BERRYPI END ---
name@name-VirtualBox:~/TEST$ tail -10 ~/.bashrc
export PATH=$PATH:$WIENROOT:..
ulimit -s unlimited
alias octave="octave -p $OCTAVE_PATH"
#
# added by WIEN2k: END
# --- BERRYPI START ---
export BERRYPI_PATH=$WIENROOT/SRC_BerryPI/BerryPI
export BERRYPI_PYTHON=/usr/bin/python2.7
alias berrypi="${BERRYPI_PYTHON} ${BERRYPI_PATH}/berrypi"
# --- BERRYPI END ---
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

# 与目录和文件有关的命令

## ■ tar: 将若干文件存档或读取存档文件

```
name@name-VirtualBox:~/TEST/test
name@name-VirtualBox:~/TEST$ tar -cvzf test.tar.gz *
test1
test3
test4
name@name-VirtualBox:~/TEST$ ll
total 24
drwxrwxr-x 2 name name 4096 7月 26 15:25 .
drwxr-xr-x 21 name name 4096 7月 26 14:31 ..
-rw-rw-r-- 1 name name 173 7月 26 15:20 test1
-rw-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 14:30 test4
-rw-rw-r-- 1 name name 403 7月 26 15:25 test.tar.gz
name@name-VirtualBox:~/TEST$ mkdir test
name@name-VirtualBox:~/TEST$ mv test.tar.gz test
name@name-VirtualBox:~/TEST$ cd test/
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ tar -xvzf test.tar.gz
test1
test3
test4
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ ll
total 24
drwxrwxr-x 2 name name 4096 7月 26 15:26 .
drwxrwxr-x 3 name name 4096 7月 26 15:26 ..
-rw-rw-r-- 1 name name 173 7月 26 15:20 test1
-rw-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 14:30 test4
-rw-rw-r-- 1 name name 403 7月 26 15:25 test.tar.gz
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$
```

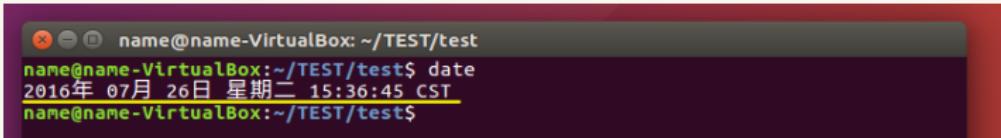
# 与目录和文件有关的命令

## ■ wc: 统计指定文件的行数、词数和字符数

```
name@name-VirtualBox:~/TEST/test
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ wc test4
 1 5 25 test4
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ wc -c test4          显示字符数
25 test4
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ wc -l test4          显示行数
1 test4
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ wc -w test4          显示词数
5 test4
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ ls -l
total 16
-rw-rw-r-- 1 name name 173 7月 26 15:20 test1
-rw-rw-r-- 1 name name 50 7月 26 12:05 test3
-rw-rw-r-- 1 name name 25 7月 26 14:30 test4
-rw-rw-r-- 1 name name 403 7月 26 15:25 test.tar.gz
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ ls -l | wc -l
5
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$
```

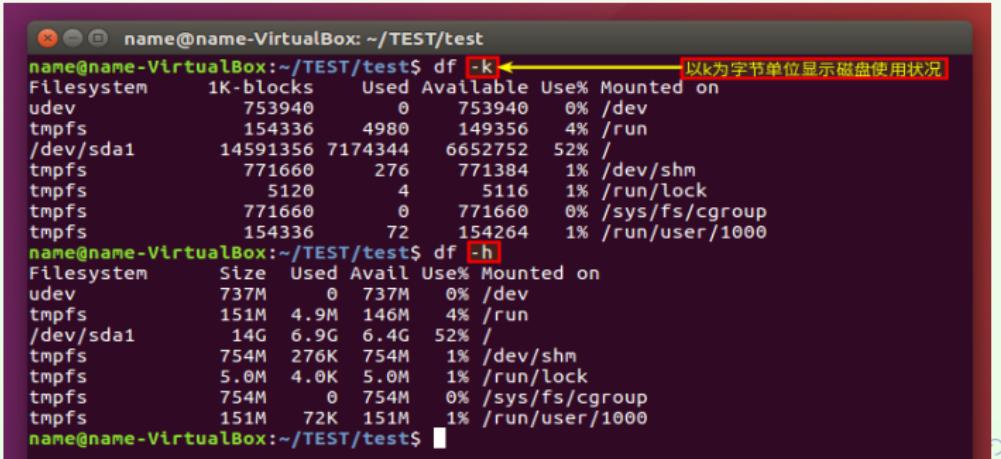
# 状态信息查询命令

## ■ date: 显示日期与时间



```
name@name-VirtualBox: ~/TEST/test
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ date
2016年 07月 26日 星期二 15:36:45 CST
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$
```

## ■ df: 查询磁盘空间使用情况



```
name@name-VirtualBox: ~/TEST/test$ df -k
Filesystem      1K-blocks    Used Available Use% Mounted on
udev             753940      0   753940  0% /dev
tmpfs            154336   4980   149356  4% /run
/dev/sda1        14591356 7174344   6652752  52% /
tmpfs            771660    276   771384  1% /dev/shm
tmpfs             5120      4   5116  1% /run/lock
tmpfs            771660      0   771660  0% /sys/fs/cgroup
tmpfs            154336     72   154264  1% /run/user/1000
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ df -h
Filesystem      Size  Used Avail Use% Mounted on
udev             737M    0   737M  0% /dev
tmpfs            151M  4.9M  146M  4% /run
/dev/sda1        14G  6.9G  6.4G  52% /
tmpfs            754M 276K  754M  1% /dev/shm
tmpfs             5.0M  4.0K  5.0M  1% /run/lock
tmpfs            754M    0   754M  0% /sys/fs/cgroup
tmpfs            151M  72K  151M  1% /run/user/1000
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$
```

# 状态信息查询命令

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

附录: Linux  
命令简介

## ■ du: 统计目录或文件所占磁盘空间的大小

```
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ du -h /home/name/ | more
8.0K  /home/name/Softs/fftw-3.3.4/lib/pkgconfig
1.6M  /home/name/Softs/fftw-3.3.4/lib
16K   /home/name/Softs/fftw-3.3.4/share/man/man1 ← 显示每个目录和文件的大小
20K   /home/name/Softs/fftw-3.3.4/share/man
384K   /home/name/Softs/fftw-3.3.4/share/info
408K   /home/name/Softs/fftw-3.3.4/share
1.2M   /home/name/Softs/fftw-3.3.4/bin
212K   /home/name/Softs/fftw-3.3.4/include
3.3M   /home/name/Softs/fftw-3.3.4
16K   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/etc
180K   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/lib/openmpi
24K   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/lib/pkgconfig
19M   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/lib
8.0K   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/share/openmpi/amca-param-sets
8.0K   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/share/openmpi/doc
452K   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/share/openmpi
40K   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/share/man/man7
264K   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/share/man/man1
1.9M   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/share/man/man3
2.2M   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/share/man
2.6M   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/share
344K   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/bin
12K   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/include/mpp
468K   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/include
22M   /home/name/Softs/openmpi-1.8.4
25M   /home/name/Softs
4.0K   /home/name/Public
20K   /home/name/intel/lsm/rm
24K   /home/name/intel/lsm
--More--
```

```
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ du -s /home/name/
69960  /home/name/ ← 统计name目录所占空间, 不显示子目录结果
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ du -sh /home/name/
68M   /home/name/
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$
```

# 状态信息查询命令

## ■ ps: 检查进程状态

```
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ ps
 PID TTY      TIME CMD
 1928 pts/4    00:00:01 bash
 3198 pts/4    00:00:00 ps
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ ps aux | grep bash
 name   1928  0.0  0.3  8836  5236 pts/4    Ss   12:03  0:01 bash
 name   3200  0.0  0.0  6856   892 pts/4    S+   15:52  0:00 grep --color=auto bash
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$
```

## ■ time: 统计程序或命令运行的时间

```
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ time ls
test1 test3 test4 test.tar.gz

real    0m0.003s
user    0m0.000s
sys     0m0.000s
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$
```

## ■ w: 检查状态

```
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ w
15:58:18 up 3:59, 1 user, load average: 0.00, 0.06, 0.11
USER TTY      FROM          LOGIN@ IDLE JCPU   PCPU WHAT
name  tty7 :0        12:00   3:59m  1:22   0.22s /sbin/upstart --user
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$
```

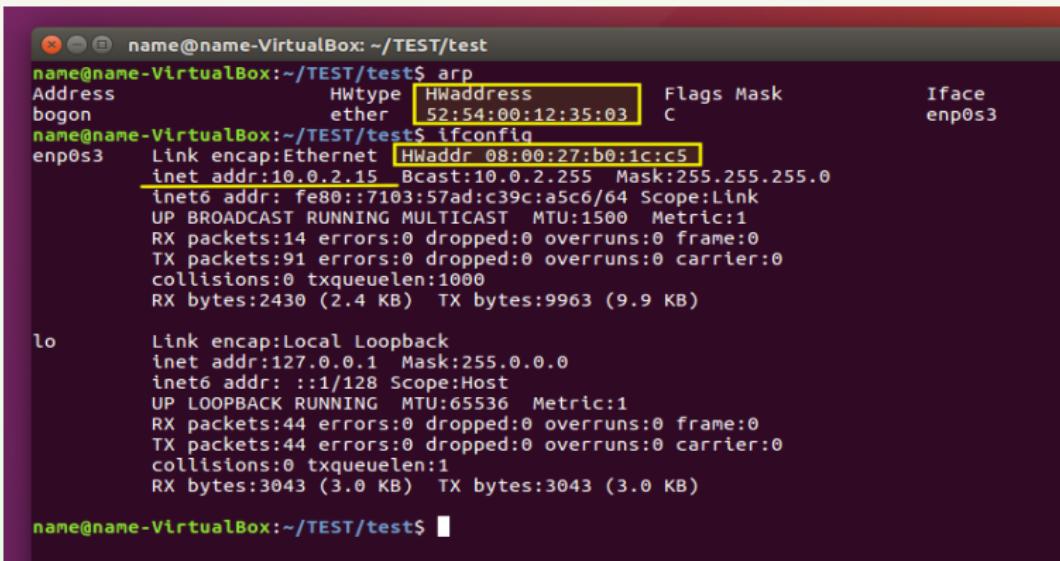
# 状态信息查询命令

- **whereis**: 确定命令位置
- **which**: 确定命令位置
- **who**: 列出正在使用系统的用户
- **whoami**: 显示正在使用本终端的用户名

```
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ whereis mpif90
mpif90: /home/name/Softs/openmpi-1.8.4/bin/mpif90
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ which mpif90
/home/name/Softs/openmpi-1.8.4/bin/mpif90
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ who
name      tty7          2016-07-26 12:00 (:0)
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ whoami
name
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$
```

# 网络查询命令

- **arp**: 网络和 IP 地址查询
- **ifconfig**: 网络和 MAC 地址查询



```
name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ arp
Address          HWtype Hwaddress          Flags Mask      Iface
bogon           ether   52:54:00:12:35:03  C          enp0s3

name@name-VirtualBox:~/TEST/test$ ifconfig
enp0s3    Link encap:Ethernet HWaddr 08:00:27:b0:1c:c5
          inet addr:10.0.2.15 Bcast:10.0.2.255 Mask:255.255.255.0
                  inet6 addr: fe80::7103:57ad:c39c:a5c6/64 Scope:Link
                      UP BROADCAST RUNNING MULTICAST MTU:1500 Metric:1
                      RX packets:14 errors:0 dropped:0 overruns:0 frame:0
                      TX packets:91 errors:0 dropped:0 overruns:0 carrier:0
                      collisions:0 txqueuelen:1000
                      RX bytes:2430 (2.4 KB)  TX bytes:9963 (9.9 KB)

lo      Link encap:Local Loopback
          inet addr:127.0.0.1 Mask:255.0.0.0
          inet6 addr: ::1/128 Scope:Host
                      UP LOOPBACK RUNNING MTU:65536 Metric:1
                      RX packets:44 errors:0 dropped:0 overruns:0 frame:0
                      TX packets:44 errors:0 dropped:0 overruns:0 carrier:0
                      collisions:0 txqueuelen:1
                      RX bytes:3043 (3.0 KB)  TX bytes:3043 (3.0 KB)

name@name-VirtualBox:~/TEST/test$
```

# 远程登录命令

## ■ ssh: 远程登录

```
name@name-VirtualBox: ~/TEST$ ssh cywang@192.168.30.15
The authenticity of host '192.168.30.15 (192.168.30.15)' can't be established.
RSA key fingerprint is SHA256:qaI1xBWSFqqpm5bYJFesseiBxt7L0TUX89TRAZHTBYk.
Are you sure you want to continue connecting (yes/no)? yes
Warning: Permanently added '192.168.30.15' (RSA) to the list of known hosts.
cywang@192.168.30.15's password:
Permission denied, please try again.
cywang@192.168.30.15's password:
Permission denied, please try again.
cywang@192.168.30.15's password:

name@name-VirtualBox: ~/TEST$ ssh jiangjun@192.168.30.15
jiangjun@192.168.30.15's password:
Last login: Thu Jul 28 11:49:19 2016 from 192.168.113.107

        Welcome to Beijing Computing Center!
        Any questions please contact your sales or supports.
        Site:      http://www.bcc.ac.cn
        -----
        Please download the latest mannuals from
        /share/software/doc
        -----
        command "myaccount" can be used to check user's ExpireDate.
        command "myquota" can be used to check user's Amount and Quota.
        -----
        Please login tyh-build1 to compile.
        -----

[jiangjun@tyh-login ~]$
```

# 远程无密码登录

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

附录: Linux  
命令简介

```

Terminal File Edit View Search Terminal Help
name@name-VirtualBox:~/.ssh/
name@name-VirtualBox:~/.ssh$ ssh-keygen -t rsa
Generating public/private rsa key pair.
Enter file in which to save the key (/home/name/.ssh/id_rsa):
Enter passphrase (empty for no passphrase):
Enter same passphrase again:
Your identification has been saved in /home/name/.ssh/id_rsa.
Your public key has been saved in /home/name/.ssh/id_rsa.pub.
The key fingerprint is:
SHA256:f1ps090kb30xUzCzcyxEl8dm7Nddhy5SQycdV0k name@name-VirtualBox
The key's randomart image is:
+---[RSA 2048]---+
| .+==+|
| .B+=.|
| . o*=o|
| . . E*|
| S o . oo|
| = o o=|
| .o o ...|
| .o+ . .|
|=+ . . |
+---[SHA256]----+
name@name-VirtualBox:~/.ssh$ scp id_rsa.pub jiangjun@192.168.30.15:~
jiangjun@192.168.30.15's password:
100% 462 0.4KB/s 00:00
name@name-VirtualBox:~/.ssh$ ssh jiangjun@192.168.30.15
jiangjun@192.168.30.15's password:
Last login: Thu Jul 28 12:02:35 2016 from 192.168.113.107

Welcome to Beijing Computing Center!
Any questions please contact your sales or supports.
Site: http://www.bcc.ac.cn
-----
Please download the latest manuals from
/share/software/doc

command "myaccount" can be used to check user's ExpireDate.
command "myquota" can be used to check user's Amount and Quota.
-----
Please login tyh-bullid to compile.
-----

[...]
[jiangjun@tyh-login ~]$ cat id_rsa.pub > ~/.ssh/authorized_keys
chmod 644 ~/.ssh/authorized_keys
chmod 700 ~/.ssh
[jiangjun@tyh-login ~]$ exit
logout
Connection to 192.168.30.15 closed.
name@name-VirtualBox:~/.ssh$ ssh jiangjun@192.168.30.15
jiangjun@192.168.30.15's password:
Last login: Thu Jul 28 12:08:25 2016 from 192.168.113.107

Welcome to Beijing Computing Center!
Any questions please contact your sales or supports.
Site: http://www.bcc.ac.cn
-----
Please download the latest manuals from
/share/software/doc

command "myaccount" can be used to check user's ExpireDate.
command "myquota" can be used to check user's Amount and Quota.
-----
Please login tyh-bullid to compile.
-----
```

# 远程传输命令

## ■ scp: 远程传输

```
name@name-VirtualBox:~/TEST$ scp jiangjun@192.168.30.15:~/WORKS/VASP_Cal/Si_MD_1/OUTCAR /home/name/WORKS/TEST/
jiangjun@192.168.30.15's password: download
OUTCAR                                              100%   160KB 159.9KB/s  00:00
name@name-VirtualBox:~/TEST$ scp /home/name/WORKS/TEST/test1 jiangjun@192.168.30.15:~/WORKS
jiangjun@192.168.30.15's password: upload
test1                                               100%    25     0.0KB/s  00:00
name@name-VirtualBox:~/TEST$
```

# 程序运行命令

## ■ echo: 参数回应至标准输出



```
name@name-VirtualBox: ~
name@name-VirtualBox:~$ echo $MKLROOT
/opt/intel/composer_xe_2013.0.079/mkl
name@name-VirtualBox:~$ echo test
test
name@name-VirtualBox:~$ echo /home/name/TEST/test1
/home/name/TEST/test1
name@name-VirtualBox:~$ echo /home/name/TEST
/home/name/TEST
name@name-VirtualBox:~$
```

Annotations in the screenshot:

- Line 1: \$MKLROOT - labeled "系统变量(参数)" (System Variable Parameter)
- Line 2: /opt/intel/composer\_xe\_2013.0.079/mkl - labeled "变量(参数)值" (Variable Value)

## ■ kill: 终止指定进程



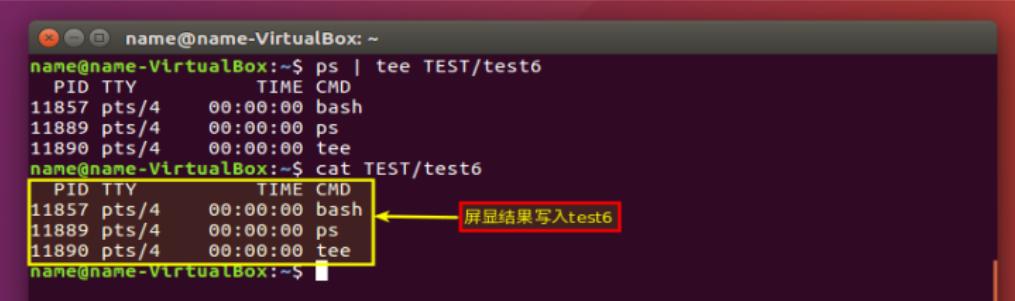
```
name@name-VirtualBox: ~
name@name-VirtualBox:~$ ps
 PID TTY      TIME CMD
 4325 pts/4    00:00:00 bash
 4345 pts/4    00:00:00 ps
name@name-VirtualBox:~$ kill -9 4325
```

Annotations in the screenshot:

- Line 1: PID - labeled "强制进程终止" (Force Process Termination)
- Line 2: 4325 - labeled "进程PID号" (Process PID Number)

# 程序运行命令

## ■ tee: 将标准输出同时复制到文件



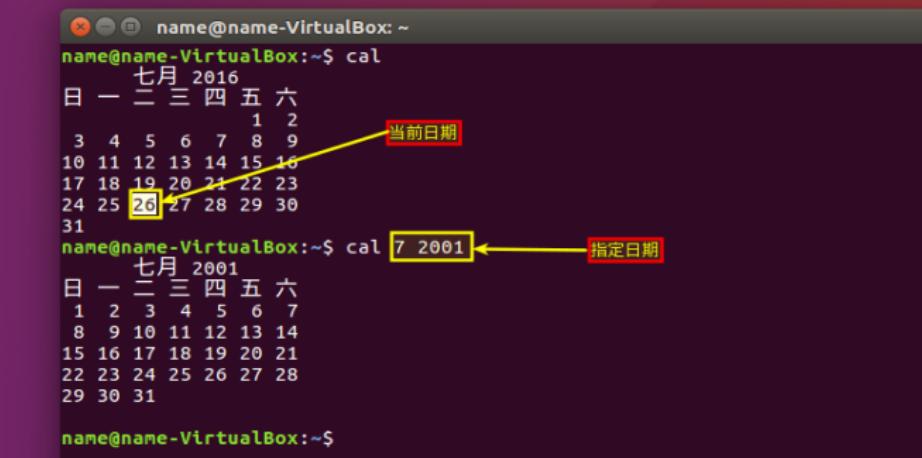
The screenshot shows a terminal window with the following session:

```
name@name-VirtualBox: ~
name@name-VirtualBox:~$ ps | tee TEST/test6
  PID TTY      TIME CMD
11857 pts/4    00:00:00 bash
11889 pts/4    00:00:00 ps
11890 pts/4    00:00:00 tee
name@name-VirtualBox:~$ cat TEST/test6
  PID TTY      TIME CMD
11857 pts/4    00:00:00 bash
11889 pts/4    00:00:00 ps
11890 pts/4    00:00:00 tee
name@name-VirtualBox:~$
```

A red box highlights the output of the 'cat' command, and an arrow points from it to the text '屏显结果写入test6'.

# 其它命令

## ■ cal: 打印日历

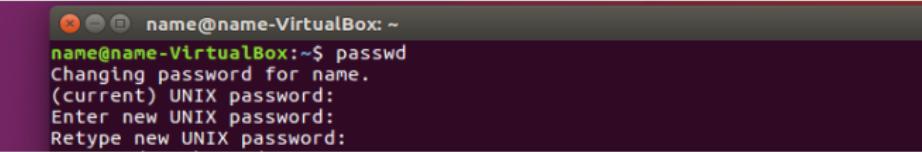


The screenshot shows a terminal window with the following content:

```
name@name-VirtualBox: ~
name@name-VirtualBox:~$ cal
                七月 2016
  日 一 二 三 四 五 六
                    1  2
  3  4  5  6  7  8  9
  10 11 12 13 14 15 16
  17 18 19 20 21 22 23
  24 25 26 27 28 29 30
  31
name@name-VirtualBox:~$ cal 7 2001
                七月 2001
  日 一 二 三 四 五 六
                    1  2
  3  4  5  6  7
  8  9 10 11 12 13 14
  15 16 17 18 19 20 21
  22 23 24 25 26 27 28
  29 30 31
name@name-VirtualBox:~$
```

A red box highlights the date "26" in the first calendar output, with a yellow arrow pointing to it labeled "当前日期" (Current Date). Another red box highlights the command "cal 7 2001", with a yellow arrow pointing to it labeled "指定日期" (Specified Date).

## ■ passwd: 变更当前账户的密码



The screenshot shows a terminal window with the following content:

```
name@name-VirtualBox: ~
name@name-VirtualBox:~$ passwd
Changing password for name.
(current) UNIX password:
Enter new UNIX password:
Retype new UNIX password:
```

# 其它命令

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

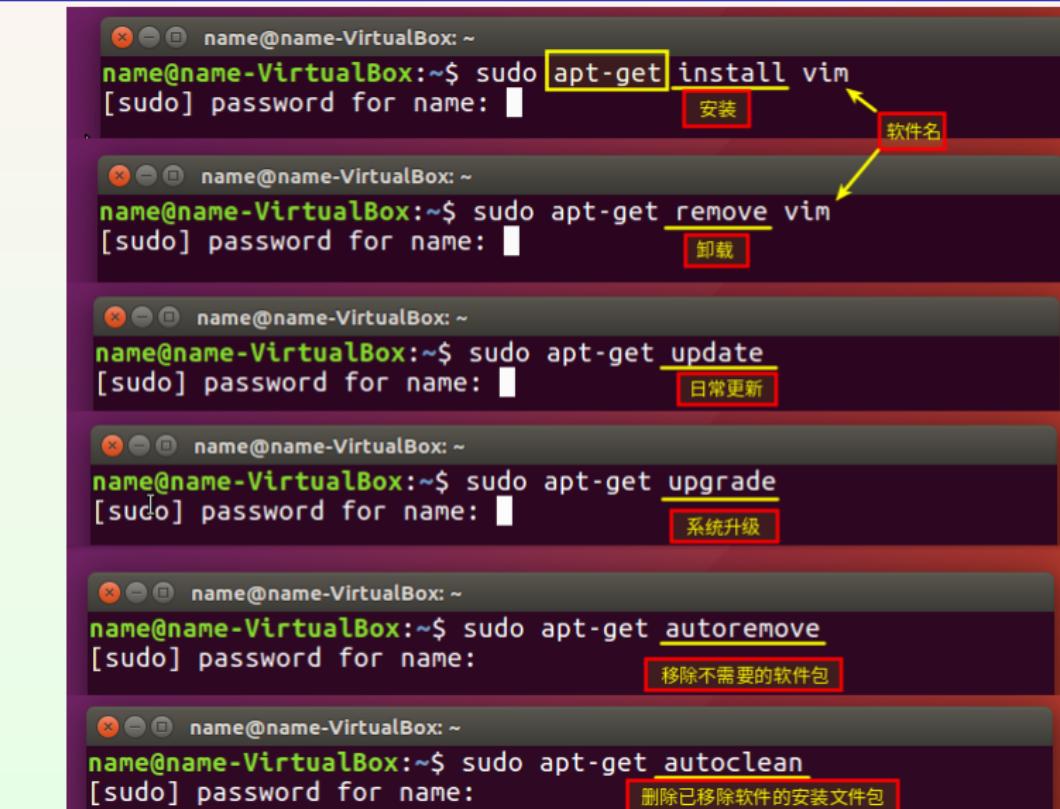
附录: Linux  
命令简介

```
■ man: 查询参考手册信息
name@name-VirtualBox:~$ man ls
LS(1)                                         User Commands                                         LS(1)
NAME
    ls - list directory contents
SYNOPSIS
    ls [OPTION]... [FILE]...
DESCRIPTION
    List information about the FILEs (the current directory by default). Sort entries alphabetically if none of -cftuvSUX nor --sort is specified.
    Mandatory arguments to long options are mandatory for short options too.
--all
    do not ignore entries starting with .
-A, --almost-all
    do not list implied . and ..
--author
    with -l, print the author of each file
-b, --escape
    print C-style escapes for nongraphic characters
--block-size=SIZE
    scale sizes by SIZE before printing them; e.g., '--block-size=M' prints sizes in units of 1,048,576 bytes; see SIZE format below
-B, --ignore-backups
    do not list implied entries ending with -
-c
    with -lt: sort by, and show, ctime (time of last modification of file status information); with -l: show ctime and sort by name; otherwise:
        sort by ctime, newest first
-C
    list entries by columns
--color[=WHEN]
    colorize the output; WHEN can be 'always' (default if omitted), 'auto', or 'never'; more info below
-d, --directory
    list directories themselves, not their contents
-D, --dired
    generate output designed for Emacs' dired mode
-f
    do not sort, enable -AU, disable -ls --color
Manual page ls(1) line 1 (press h for help or q to quit).
```

# Ubuntu 下的软件安装与系统更新

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

附录: Linux  
命令简介



The screenshot shows a terminal window with six examples of apt-get commands:

- `name@name-VirtualBox:~$ sudo apt-get install vim` (安装) - An annotation points to "vim" with the label "软件名".
- `name@name-VirtualBox:~$ sudo apt-get remove vim` (卸载) - An annotation points to "remove" with the label "卸载".
- `name@name-VirtualBox:~$ sudo apt-get update` (日常更新) - An annotation points to "update" with the label "日常更新".
- `name@name-VirtualBox:~$ sudo apt-get upgrade` (系统升级) - An annotation points to "upgrade" with the label "系统升级".
- `name@name-VirtualBox:~$ sudo apt-get autoremove` (移除不需要的软件包) - An annotation points to "autoremove" with the label "移除不需要的软件包".
- `name@name-VirtualBox:~$ sudo apt-get autoclean` (删除已移除软件的安装文件包) - An annotation points to "autoclean" with the label "删除已移除软件的安装文件包".



# 卖油翁：无他 但手熟尔

材料模拟软件  
与方法简介  
(II)

附录：Linux  
命令简介

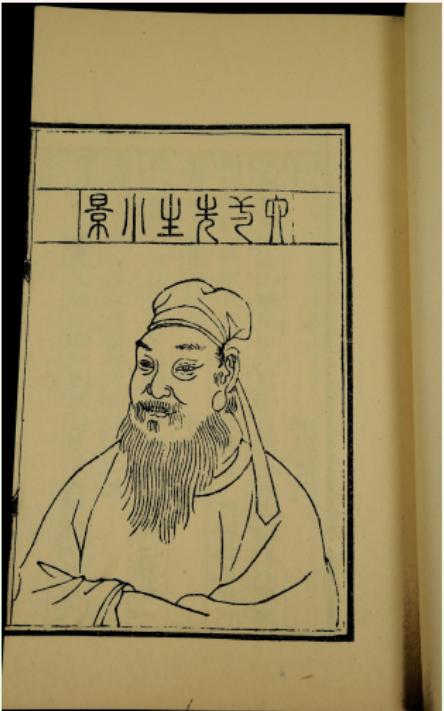
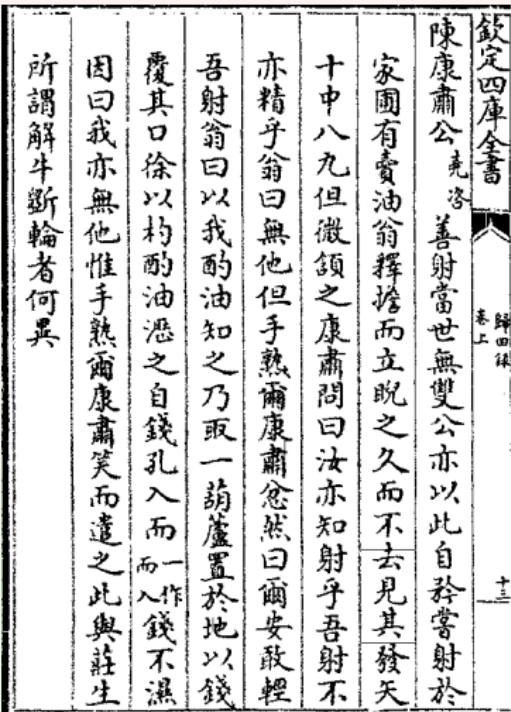


Fig.: 欧阳修 (1007-1072) 《欧阳文忠公文集·归田录》卷上

# 谢谢大家 !