M winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO Born-Oppenheimer MD

V11.12.0

2025年4月30日 株式会社クロスアビリティ

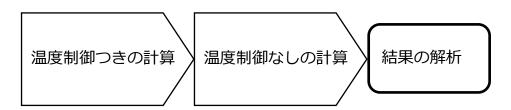
本書について

- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は<u>ビギナーズマニュアル</u>を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - Winmostar導入講習会:基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>:理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - 個別講習会:ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まずよくある質問を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、<u>お問合せフォーム</u>に、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾な く、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。



概要

• メタン分子のBorn-Oppenheimer (BO) MD計算をごく短時間実行します。最初に300 Kで温度制御した状態で計算し、その後温度制御を外して計算し、エネルギー温度、アニメーションの可視化を行います。



注意点:

- バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギーは計算結果に影響を与えます。本 チュートリアルではすぐに結果を取得できるよう、精度を落とした設定を用います。
- 系のサイズも計算結果に影響を与えます。
- 平衡化に十分な時間をかけ、本計算も長時間実行することで再現性の高いデータを取得することができます。
- ◆ Quantum ESPRESSOの計算方法及び計算設定内容の詳しい説明は、次の弊社記事をご覧ください。https://qiita.com/xa_member

動作環境設定

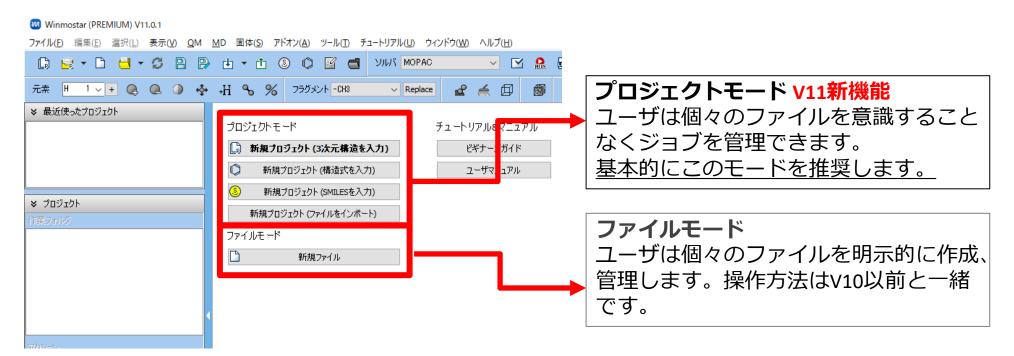
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM 2023/04/05 バージョン以降をインストール、環境設定してください。
 - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum ESPRESSOが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または<u>推奨バージョン</u>以外のQuantum ESPRESSOを利用したい方は、 別途Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定が必要です。

Winmostar V11の動作モード

V11にはプロジェクトモードとファイルモードの2つの動作モードが用意されています。

本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。

ファイルモードの操作方法はV10のQuantum ESPRESSOチュートリアルを参照してください。



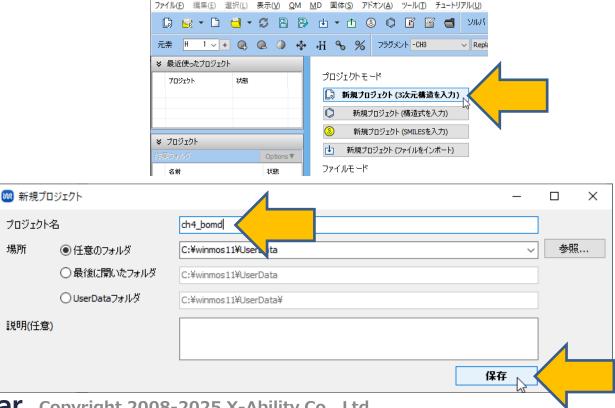


I. 系のモデリング

基本的な操作方法はQE基礎編チュートリアルを参照してください。

- 1. Winmostarを起動し、**新規プロジェクト(3次元構造を入力)**をクリックします。(すでに起動している場合は先に**ファイル | 閉じる**をクリックします。)
- 2. プロジェクト名に「ch4 bomd」と入力し保存をクリックします。

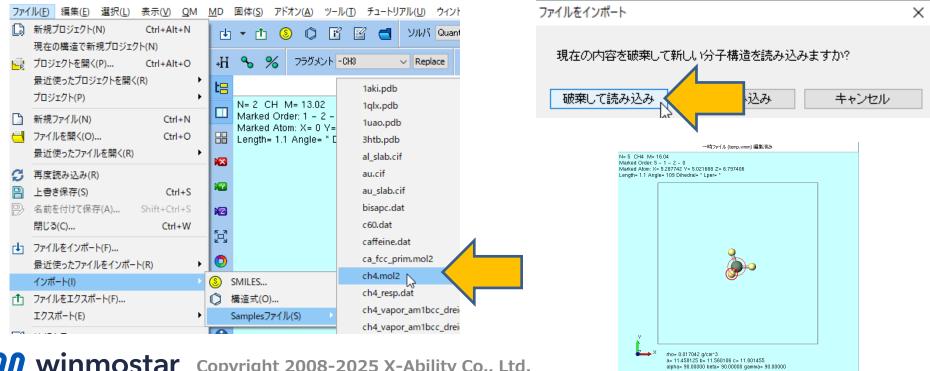
Winmostar (PREMIUM) V11.1.0



I. 系のモデリング

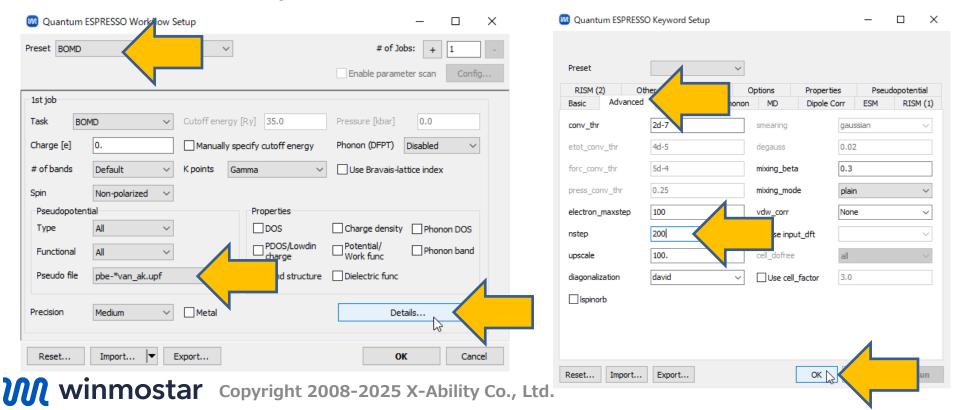
初期構造の作成方法の詳細はWinmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法を参照してくだ さい。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

- **1. ファイル | インポート | Samplesファイル | ch4.mol2**をクリックします。
 - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。
- **2. ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。
- 分子表示エリアに所望の構造が出現することを確認します。



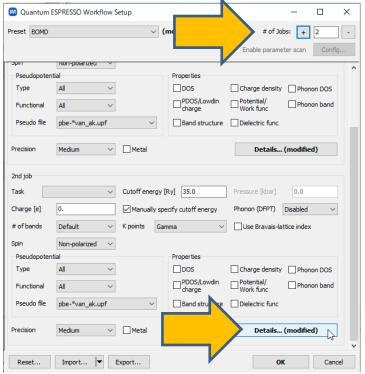
II. 計算の実行

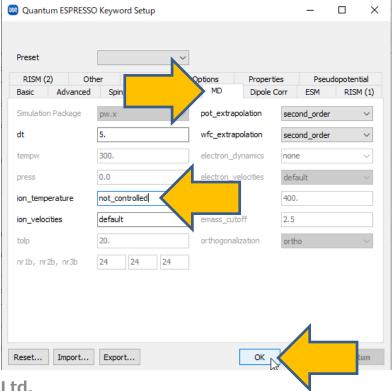
- 1. ソルバからQuantum ESPRESSOを選択し、 (ワークフロー設定) をクリックします。
- 2. 「現在のセルはプリミティブセルに変換可能です…変換しますか?」と表示されたらいいえを クリックします。
- 3. PresetでBOMDを選択してからPseudo fileでpbe-*van_ak.upfを選択します。
- 4. Detailsをクリックします。
- 5. Advancedタブのnstepを「200」に変更し、OKをクリックします。



II. 計算の実行

- 1. # of Jobsの+を1回クリックします。
- 2. ウィンドウを下にスクロールし2nd jobのDetails…(modified)をクリックします。
- 3. MDタブのion_temperatureを「not_controlled」に変更し、OKをクリックします。
- **4. Quantum ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウで**OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。



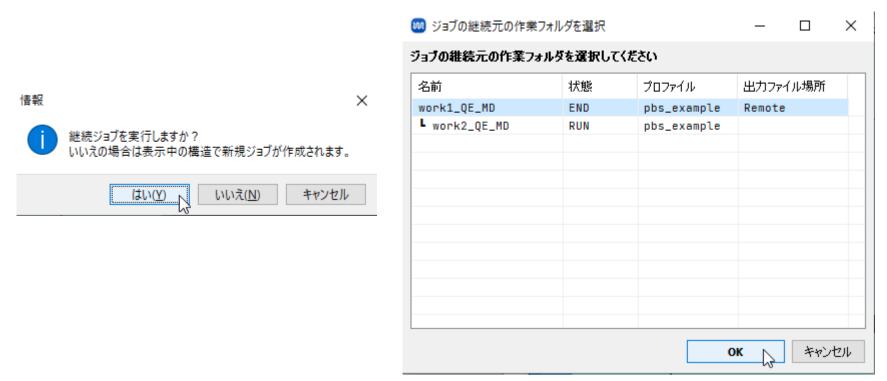




補足 計算の継続

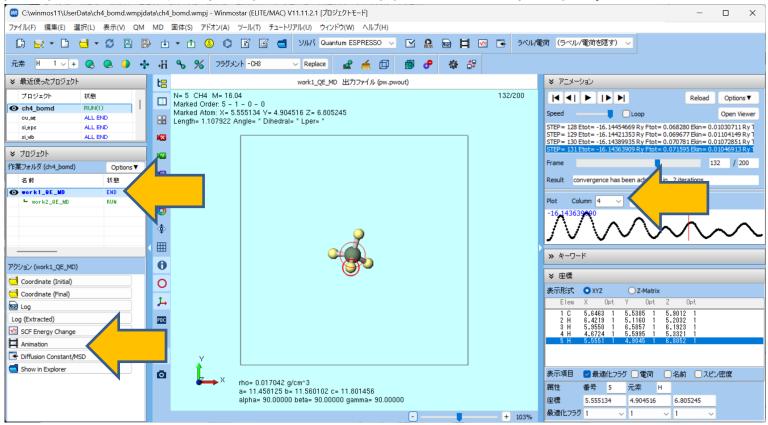
すでに終了したBOMD計算の最終状態を引き継いでBOMD計算を開始したい場合は、以下の手順で実行してください。

- 1. 🔼 **(ワークフロー設定)** をクリックします。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたら**はい**をクリックします。
- 3. 継続元の作業フォルダを選択し**OK**をクリックし最初のジョブと同様に計算条件を設定します。



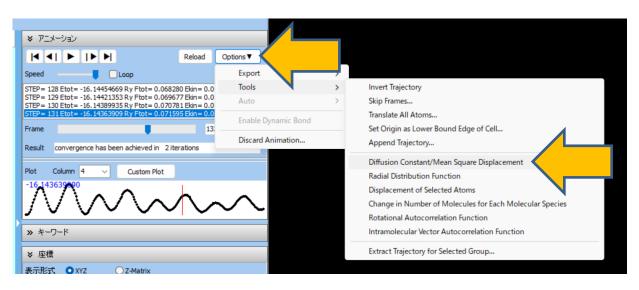
III.結果解析(アニメーション、エネルギー)

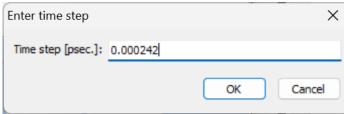
- **1. 作業フォルダでwork1_QE_MD**の**状態**が **END(青)**に変化した後、**作業フォルダ**でwork1_QE_MDをクリックし**アクション**で**Animation**をクリックします。
- 2. アニメーション操作エリアのColumnでグラフ化したい項目を選択します。($4 \rightarrow$ ポテンシャルエネルギー、 $9 \rightarrow$ 運動エネルギー、 $12 \rightarrow$ 温度、 $15 \rightarrow$ 全エネルギー)



III.結果解析(自己拡散係数)

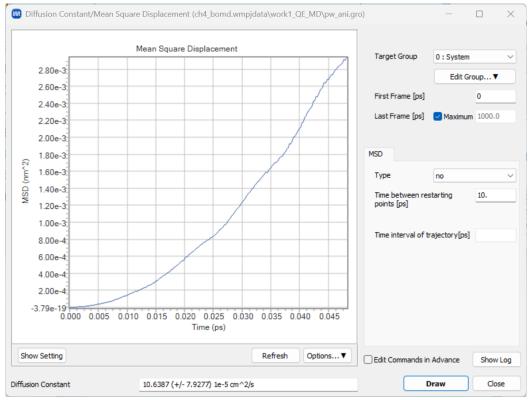
- 1. **アニメーション**操作エリアの Options | Tools | Diffusion Constant/Mean Square Displacementをクリックします。
- **1. 名前を付けて保存で保存**をクリックします。
- **2. Time step**に今回の計算の時間刻み「0.000242」を入力し**OK**をクリックします。
 - 時間刻みは**ワークフロー設定のDetails | MDタブ | dt**から確認できます
 - 単位の変換には**ツール | 単位を変換**を利用します





III.結果解析(自己拡散係数)

- 1. Drawをクリックすると平均二乗変位(グラフ)と自己拡散係数(グラフ下のDiffusion Constant)が出現します。
 - 詳細な使用方法はユーザマニュアルを参照してください。
 - 本書の計算は極めて短いステップ数かつ1分子の計算のため、ここで得られた平均二乗変位、自己拡散 係数には意味がありません。実際の計算では十分なステップ数、原子数の計算から算出してください。



最後に

• 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。



ユーザマニュアル



Winmostar 講習会の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会、Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>の受講をご検討ください。(詳細はP.2)
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まずよくある質問を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、<u>お問合せフォーム</u>に、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上