

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO フォノン計算(Phonopy)

V11.3.1

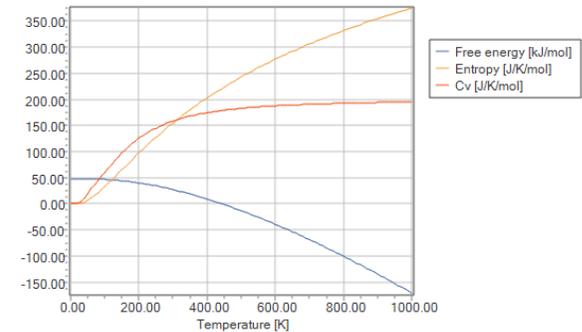
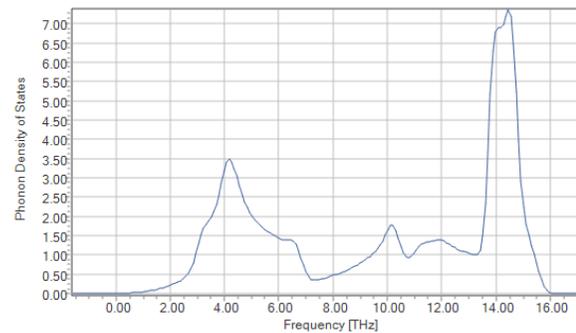
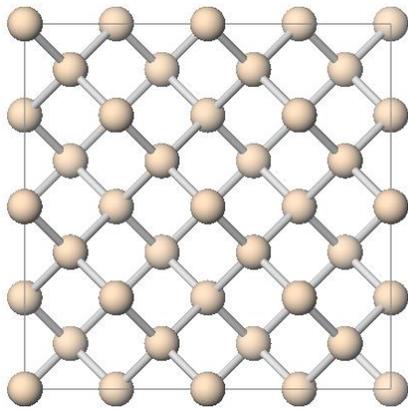
2022年10月1日 株式会社クロスアビリティ

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[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 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。
- 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。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：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、[お問合せフォーム](#)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

- 本チュートリアルの実施にはWinmostar V11プロフェッショナル版エリートが必要です。
- Si結晶のフォノン計算の手順を示します。本チュートリアルではPhonopyを用いたスーパーセル法を使用します。フォノン計算からフォノン状態密度、フォノンバンド構造、自由エネルギー、エントロピー、比熱を取得します。



注意点：

- k点の取り方、バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギー、smearing幅は計算結果に影響を与えます。
- フォノン計算の前に、十分な精度で構造最適化計算を実施する必要があります。
- ◆ Quantum ESPRESSOの計算方法及び計算設定内容の詳細な説明は、次の弊社記事をご覧ください。https://qiita.com/xa_member

動作環境設定

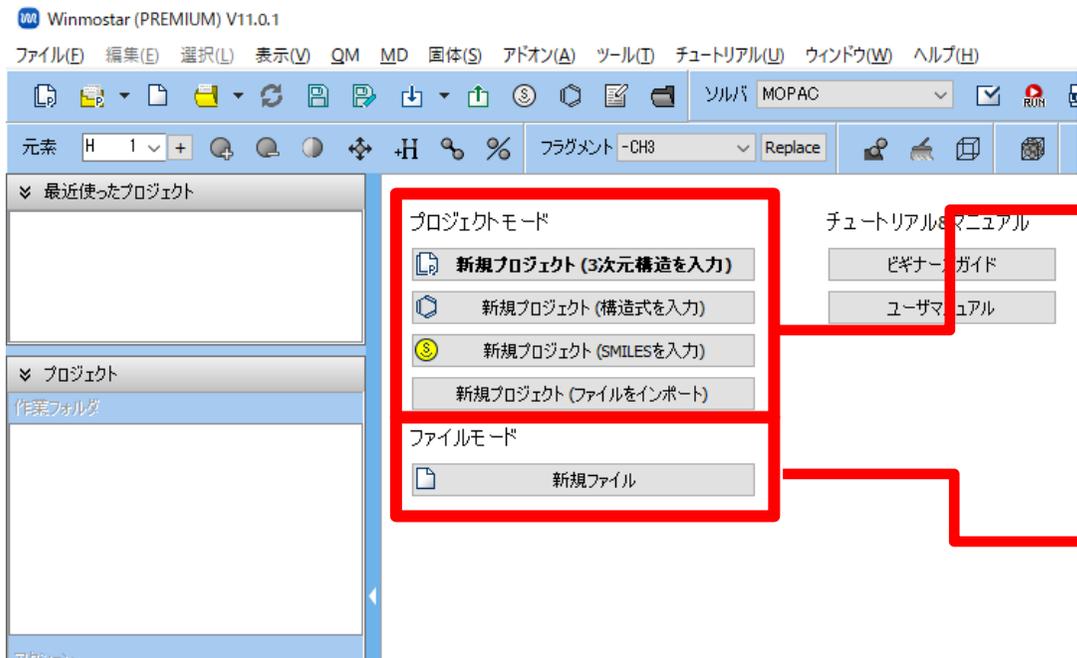
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
 - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum ESPRESSOが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のQuantum ESPRESSOを利用したい方は、別途[Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定](#)が必要です。

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。

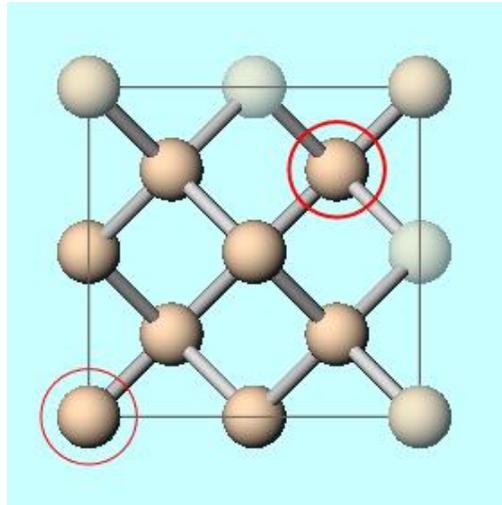


プロジェクトモード V11新機能
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。基本的にこのモードを推奨します。

ファイルモード
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

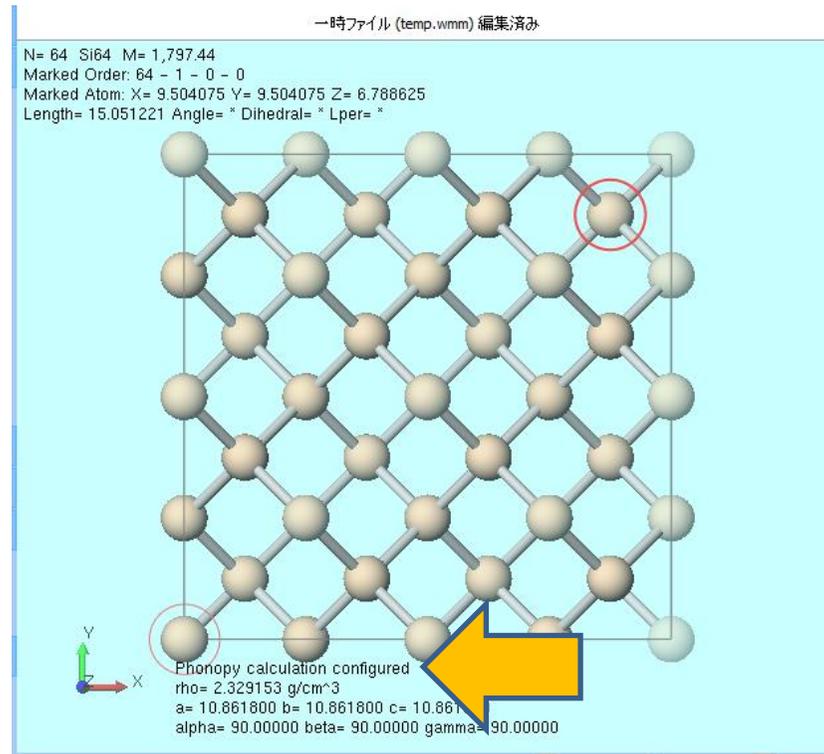
I. 系のモデリング

- 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。
 - 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。
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「si_phonopy」と入力し**保存**をクリックします。
 3. **ファイル | インポート | Samplesファイル | si.cif**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。
 4. **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。



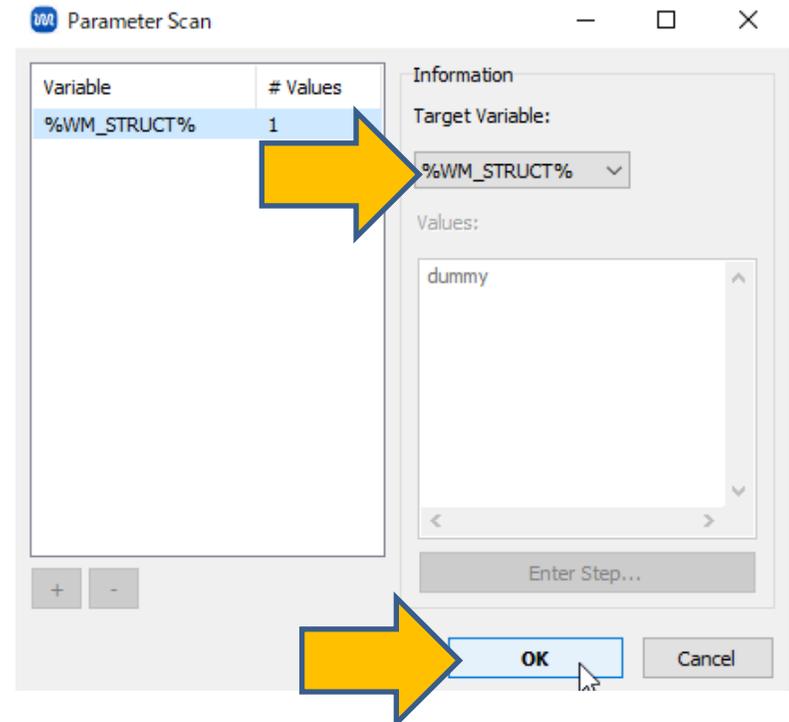
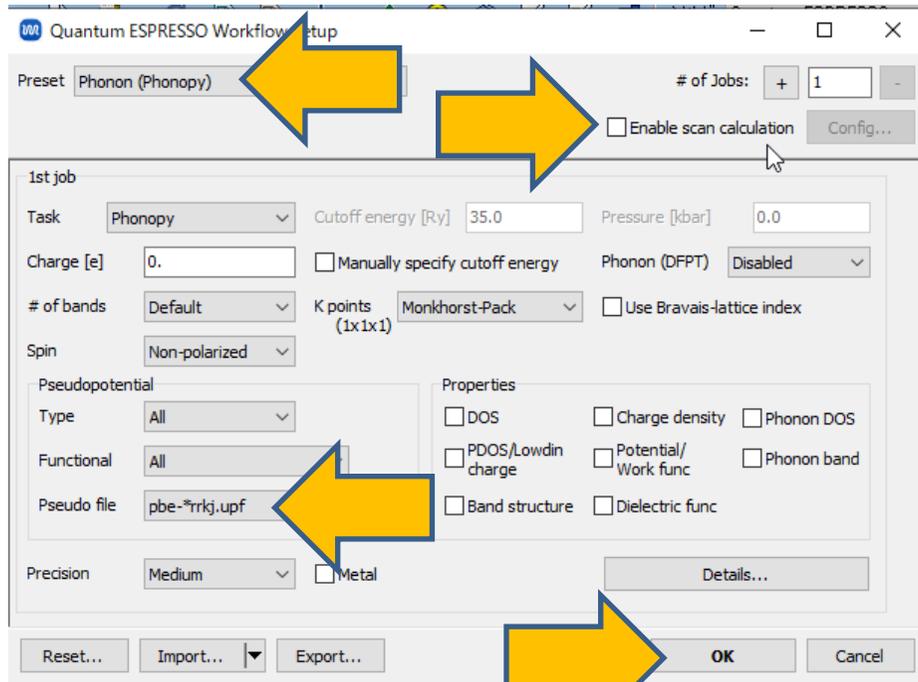
I. 系のモデリング

1. 固体 | Quantum ESPRESSO | Phonopy | スーパーセルを作成をクリックします。ダイアログが出現しNa、Nb、Ncの値を聞かれたらデフォルト値でいずれも**OK**をクリックします。
2. コンソールウィンドウが起動し数秒処理が流れた後「Successfully generated.」と表示されたら**OK**をクリックします。結晶の種類によってはここで複数の構造が生成されます。
3. 分子表示エリアの下部に「Phonopy calculation configured」と表示されるのを確認します。



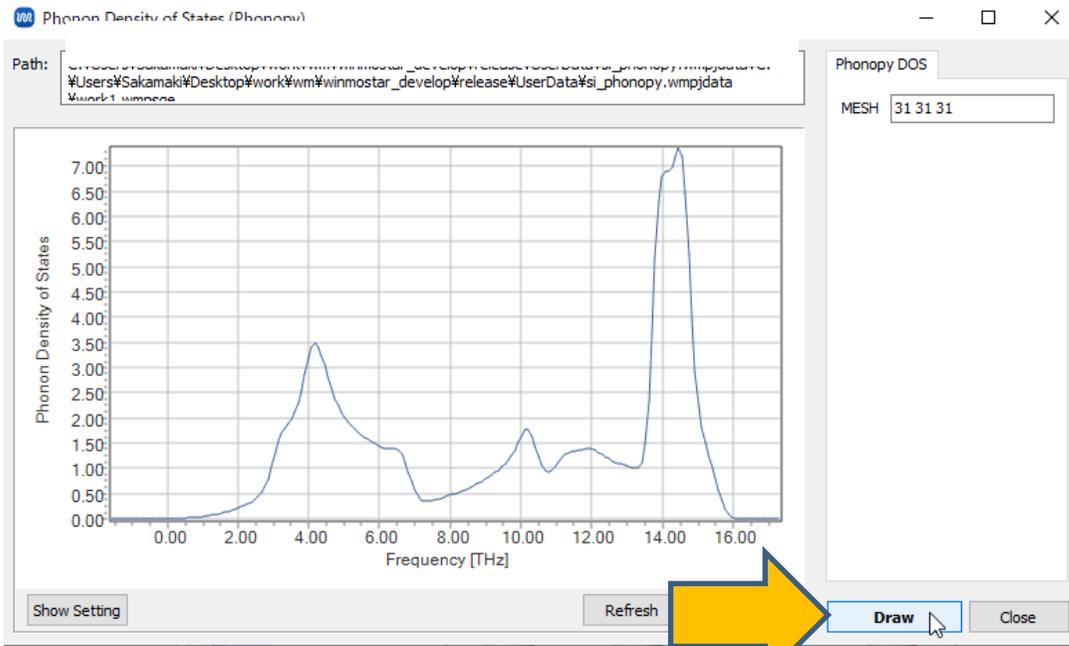
II. 計算の実行

1. ツールバーのソルバから**Quantum ESPRESSO**を選択し  (**ワークフロー設定**) をクリックします。プリミティブセルに変換するか聞かれた場合は**いいえ**をクリックします。
2. **Preset**を「Phonon (Phonopy)」に、**Pseudo file**を**pbe-*rrkj.upf**に変更します。
3. **Enable scan calculation**にチェックを入れ、**Config**をクリックします。
4. **Target Variable**を「%WM_STRUCTURE%」に変更し**OK**をクリックします。
5. **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。

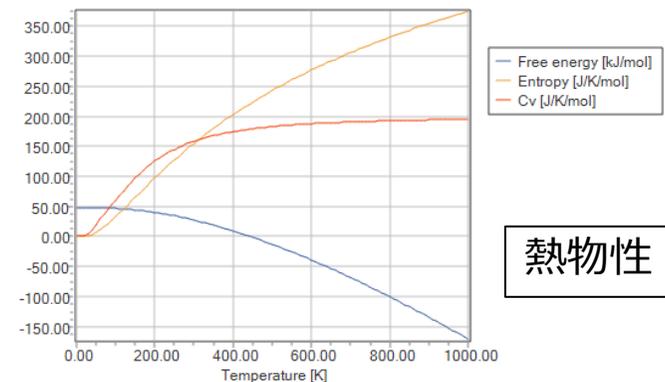
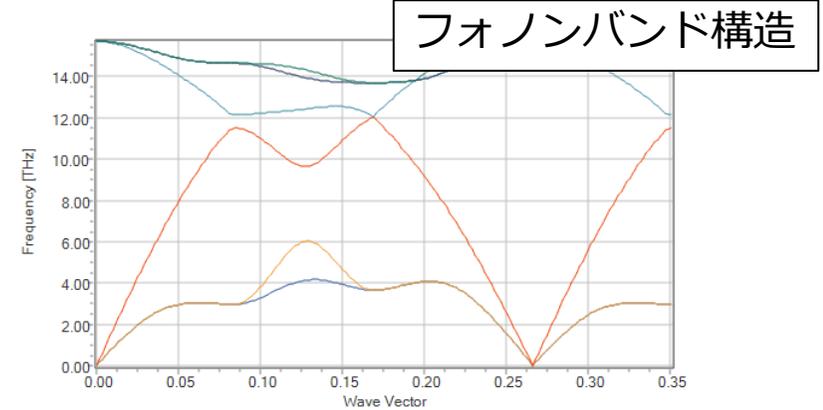


III. 結果解析

1. 全ての計算が終了した後、**固体 | Quantum ESPRESSO | Phonopy**の**バンド構造**、**状態密度**、**熱物性**のいずれかをクリックします。
2. 「Select one of working directories…」と聞かれたら**OK**をクリックします。
3. ウィンドウ右側でオプションを設定した後**Draw**をクリックするとグラフが出現します。
 - バンド構造の場合はk点の経路を直接入力する必要があります。



フォノン状態密度



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、基礎編チュートリアルについては[Winmostar基礎講習会](#)へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては[個別講習会](#)のご依頼をご検討ください。
- 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、[お問合せフォーム](#)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