## **M** winmostar チュートリアル

# Quantum ESPRESSO BoltzTraP

V11.12.0

2025年4月30日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.



- 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<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<u>よくある質問</u>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。



Quantum ESPRESSO(以降QE)によりMg2Si結晶のNSCF計算を行い全状態密度を取得します。
 そして、このQEの出力ファイルをもとにBoltzTraPによりボルツマン方程式に従って輸送係数
 を算出します。

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は計算 結果に大きな 影響を与えます。



- 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<u>Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定</u>が必要です。



以下のURLよりSi.pbe-mt-fhi.UPF, Mg.pbe-mt-fhi.UPFを入手し、 Quantum ESPERSSOインストールフォルダの下のpseudoフォルダに入れ Winmostarを再起動する。

http://pseudopotentials.quantum-espresso.org/legacy\_tables/fhi-pp-from-abinit-web-site



#### FHI PP FROM ABINIT WEB SITE

### 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。

#### Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(Y) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(I) チュートリアル(U) ウィンドウ(M) ヘルプ(H)



# 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「boltztrap\_qe」と入力し保存をクリックします。

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。

- 3. ファイル | インポート | Samplesファイル | mg2si.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。



# II. 計算の実行

- 1. ソルバからQuantum ESPRESSOを選択し、 C (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…」と表示されたらはいをクリックします。
- **3. # of bands**を「100 % more」、**Pseudo file**を「pbe-mt\_fhi.upf」、**Precision**を「High」 (計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は「Medium」)に変更し、 **Metal**と**DOS**にチェックを入れます。
- 4. # of Jobsの+を1回クリックします。
- 5. 2<sup>nd</sup> jobのTaskを「NSCF」に変更しDetailsをクリックします。
- **6. K\_POINTS**の(Spacing)を「0.05」(計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は 「0.1」)、occupationsを「tetrahedra」に変更し**OK**をクリックします。
- 7. 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

- 作業フォルダでwork2\_QE\_NSCFの状態がENDに移行したら固体 | Quantum ESPRESSO
  | BoltzTraP | 設定・実行をクリックします。
- 2. Create .instransをクリックし、work2\_QE\_NSCFフォルダのpw.pwoutを選択し開きます。
- 3. Tmaxを「1200」に変更しStart BoltzTraPをクリックします。コンソールウィンドウが立ち上がり、BoltzTraPの処理がしばらく流れます。



# III.結果解析

- BoltzTraPの処理が終了しコンソールウィンドウが閉じた後、**固体 | Quantum ESPRESSO |** BoltzTraP | 結果読み込みをクリックし、work2\_QE\_NSCFフォルダの下のpwフォルダを選択し OKをクリックします。
- 2. 右上のリストで**Seebek Coefficient**をクリックし、その下のリストで**250, 300, 350**をCtrl+ クリックで複数選択します。
- 3. Drawをクリックすると、グラフが表示されます。





• 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。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>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<u>Winmostar基礎講習会</u> へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては<u>個別講習会</u>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<u>よくある質問</u>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