

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

体積弾性率

V11.3.0

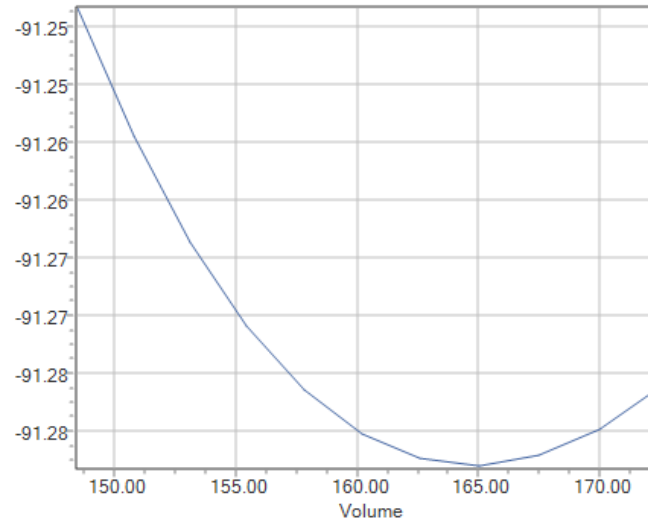
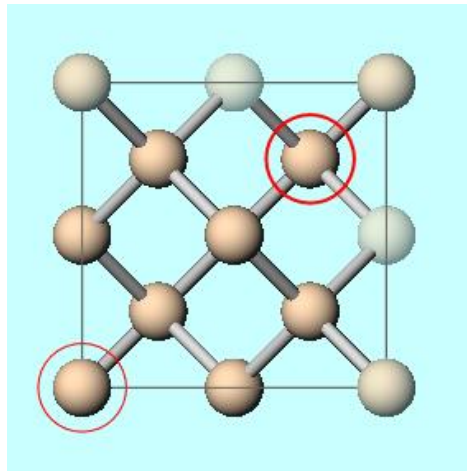
2022年11月27日 株式会社クロスアビリティ

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パラメータ・構造スキャンアドオンが必要です。
- 本書ではSi結晶について、体積を変えながら構造最適化計算を実施し、体積弾性率の推定に必要な体積-エネルギー線図を作成する手順を示します。



注意点：

- k点の取り方、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に、精度を落とした設定を用います。
- 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

- 本機能を用いるためには、Quantum ESPRESSOとCygwinWMのセットアップが必要です。
- <https://winmostar.com/jp/installation/>インストール方法のWindows用のQuantum ESPRESSOとCygwinWMの設定手順に従います。

(6) [こちらの手順](#)に従いWinmostar用のCygwin環境（CygwinWM）を構築します。

(7) WinmostarをインストールしたWindows PC（ローカルマシン）上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。リモートサーバでのみ計算を行う場合もインストールしてください。

量子化学計算を実行する方 : [GAMESS](#) [NWChem](#)

分子動力学計算を実行する方 : [LAMMPS](#)

固体物理計算を実行する方 : [Quantum ESPRESSO](#) [FDMNES](#)

Fragment ER（別売）を実行する方 : [NAMD](#)

※ Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは前の手順でインストールするCygwinに含まれます。

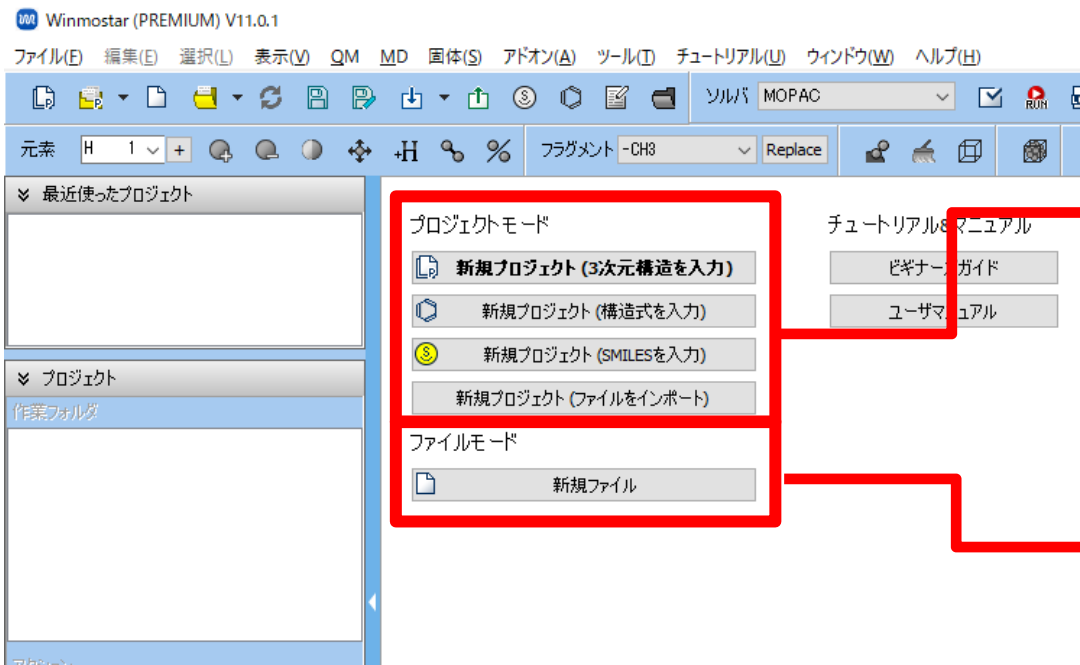
※ 最大原子数を拡張したMOPAC6を使う場合は[こちら](#)から入手してください（動作未保障）。

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。

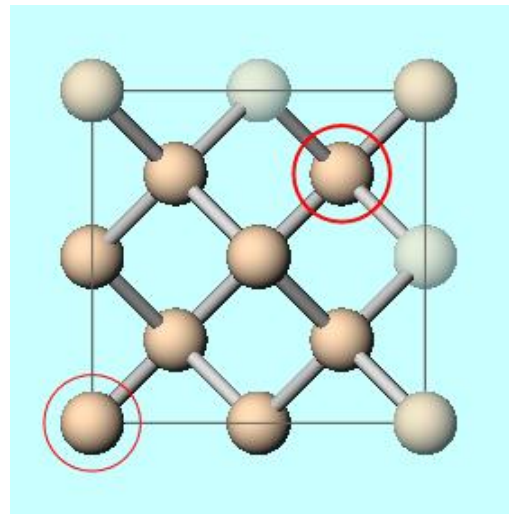


プロジェクトモード V11新機能
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。基本的にこのモードを推奨します。

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。

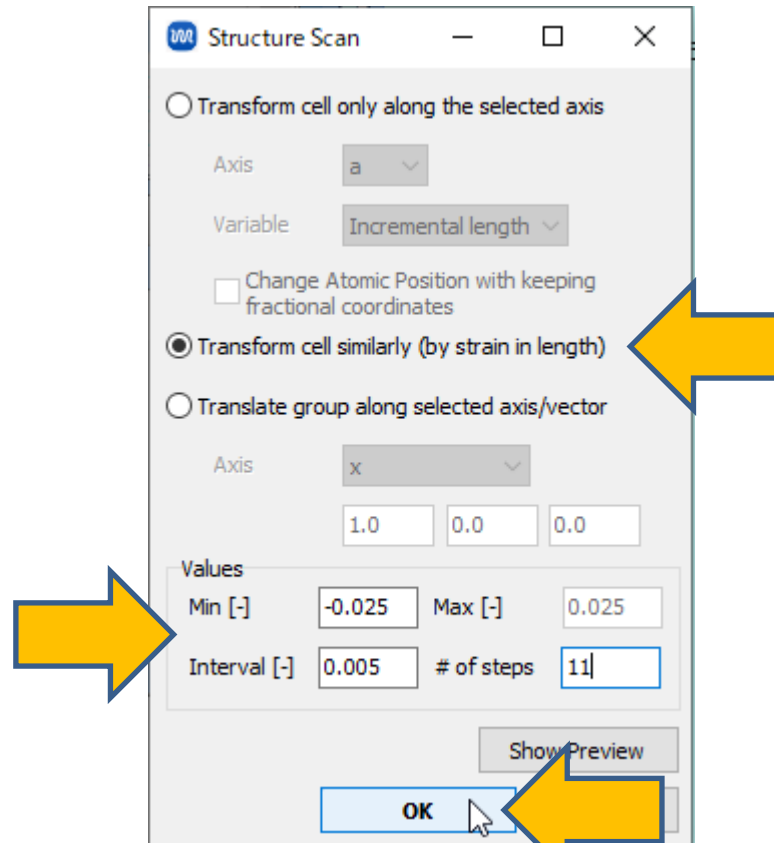
I. 系のモデリング

- 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_eos`」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。
 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。



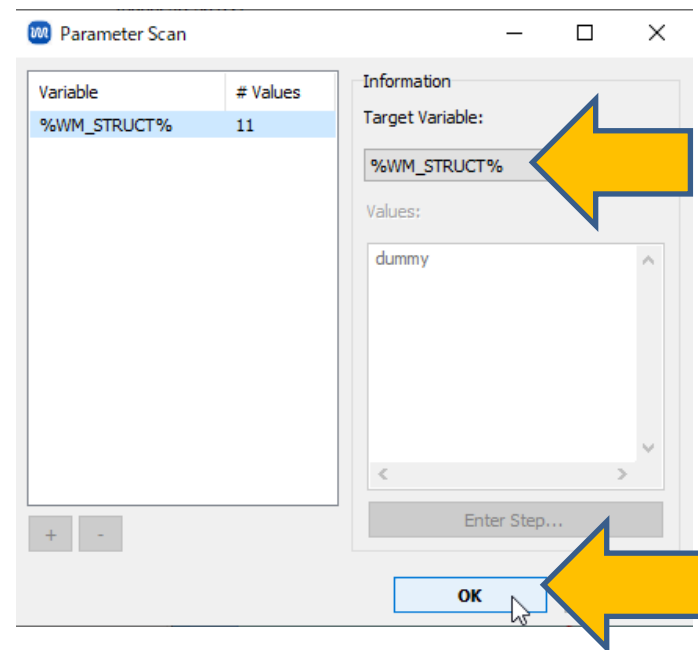
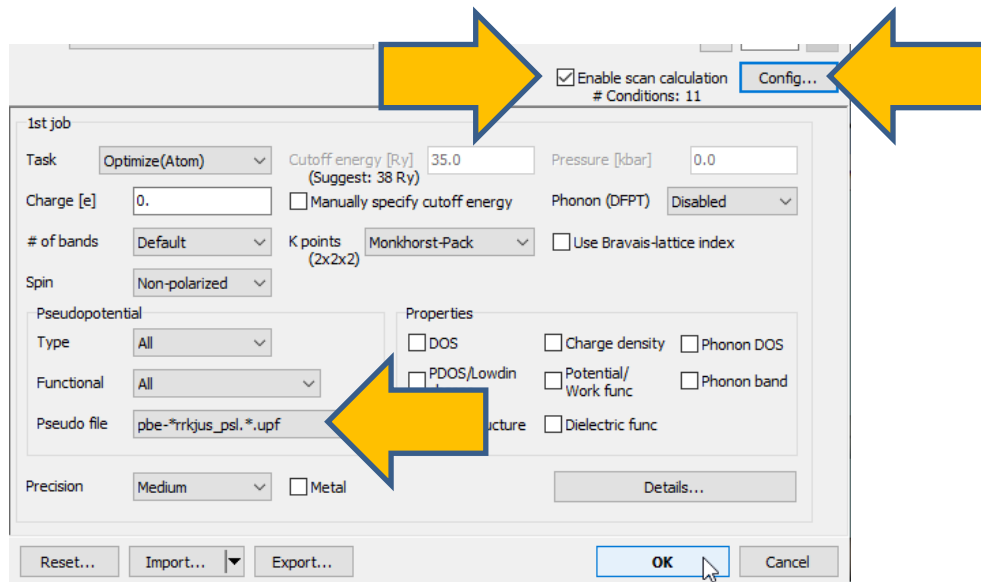
I. 系のモデリング

1. ツール | 構造をスキャンをクリックします。「変更を上書き保存しますか？」と表示されたらいいえをクリックします。
2. **Transform cell similarly (by strain in length)** にチェックを入れ **Value** の **Min** に「-0.025」、**Interval** に「0.005」、**# of steps** に「11」と入力し **OK** をクリックします。



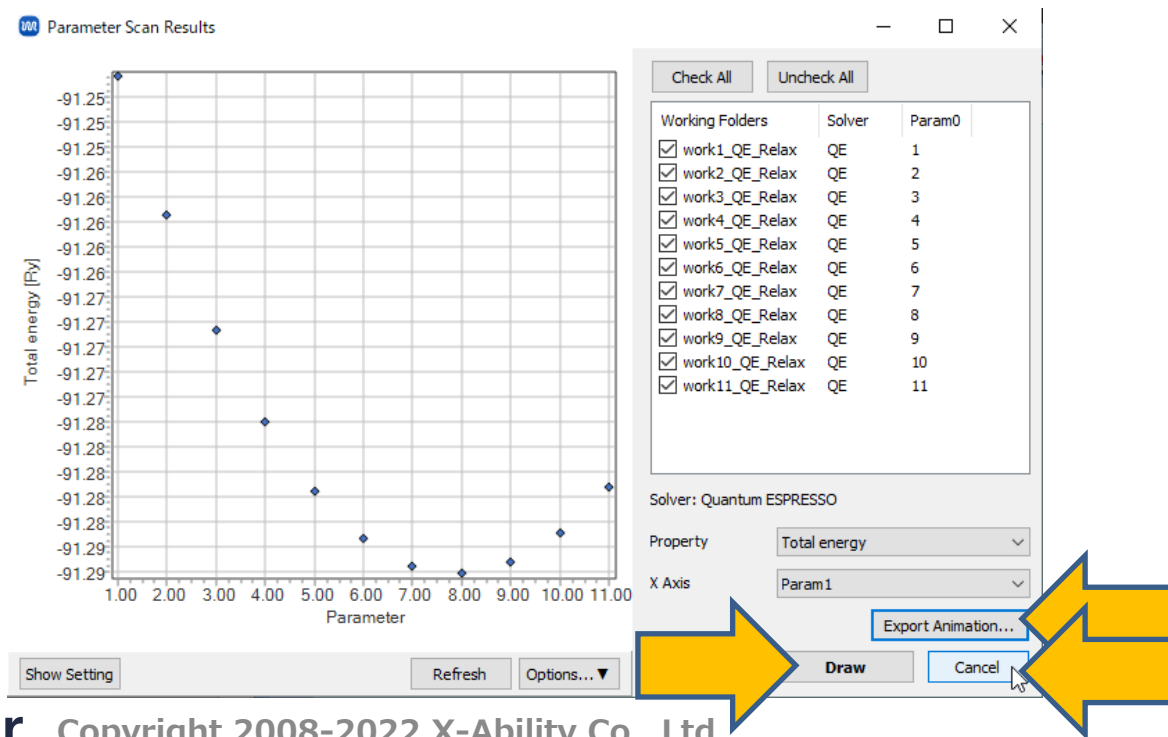
II. 計算の実行

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ら**いいえ**をクリックします。
2. **Pseudo file**に「pbe-*rrkjus_psl*.upf」を選択します。
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。



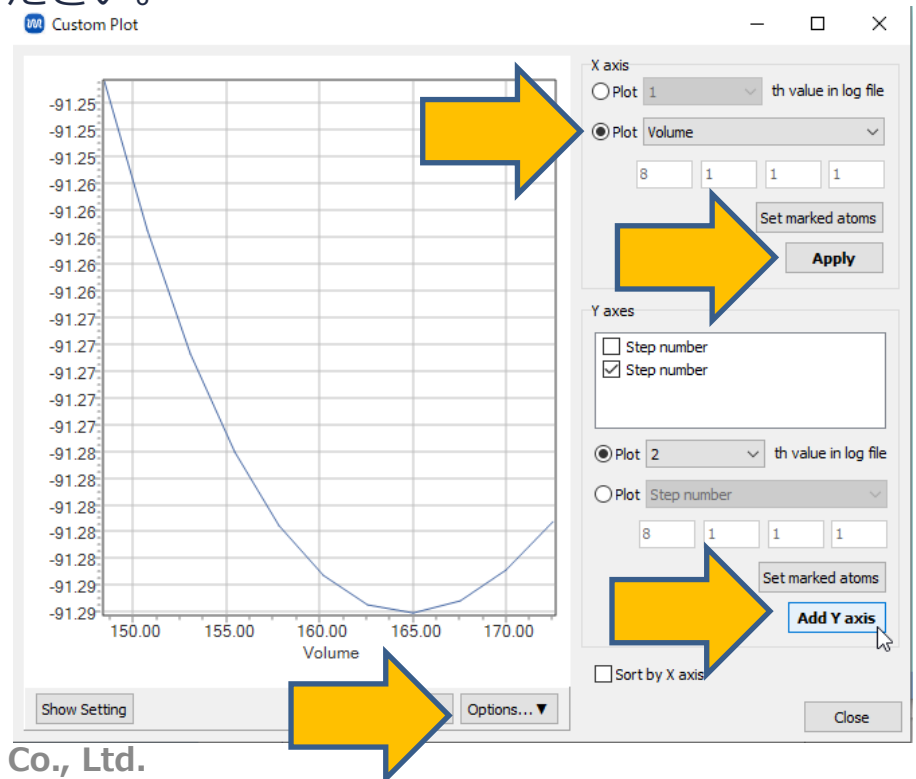
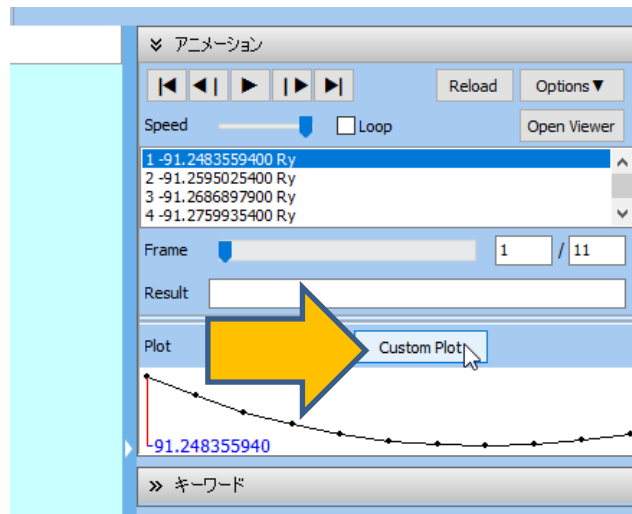
V. 結果解析

1. work1からwork9までの状態が**END**になったら、**ファイル | プロジェクト | スキャン結果表示**をクリックします。
2. **Draw**をクリックし各構造のTotal energyを表示します。
3. **Export Animation**をクリックし、wmmファイルを適当な場所に保存します。「Do you want to import ...?」と聞かれたら**はい**をクリックします。
4. **Cancel**をクリックします。



V. 結果解析

1. アニメーション操作エリアの**Custom Plot**をクリックします。
2. **X axis**の「Step number」を「Volume」に変更し**Apply**をクリックします。
3. **Y axis**の**Add Y axis**をクリックします。
4. グラフ下の**Options**をクリックし**Export csv**をクリックします。ここで保存したcsvファイルには体積-全エネルギー線図が含まれます。このデータに各種グラフ作成ソフトで状態方程式をフィッティングし体積弾性率を取得してください。



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、[Winmostar 導入講習会](#)、[Winmostar 基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)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、[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