

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

ハイブリッド汎関数

V11.3.0

2022年10月14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

- 本書ではSi結晶について、ハイブリッド汎関数の一つであるHSE06汎関数を用いた計算を実行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。

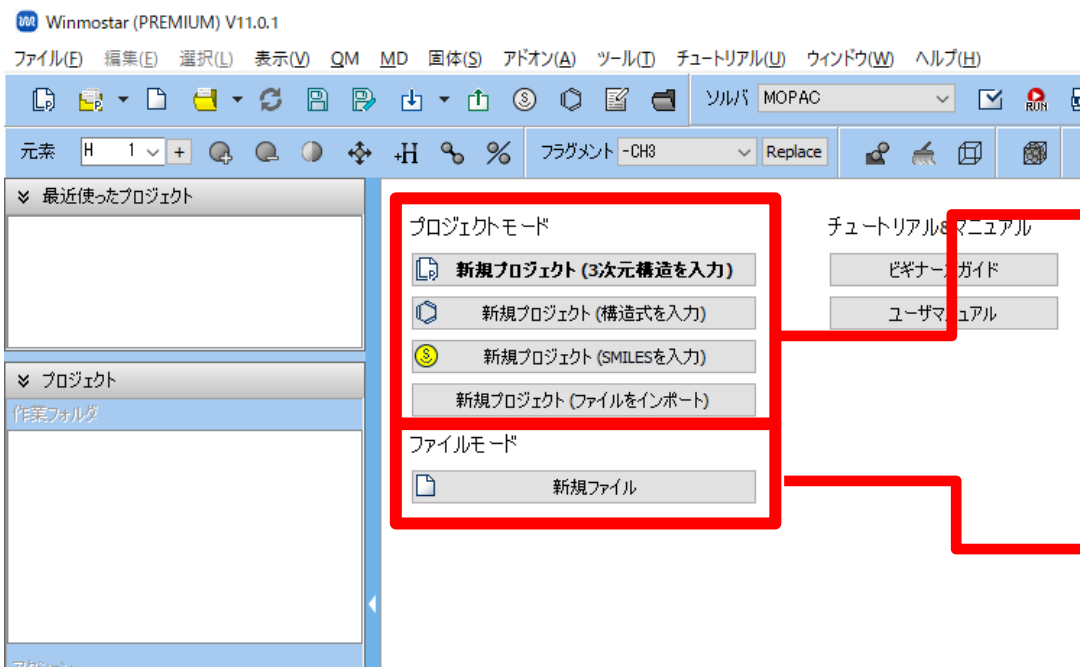
※ 最大原子数を拡張したMOPAC6を使う場合は[こちら](#)から入手してください（動作未保障）。

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**

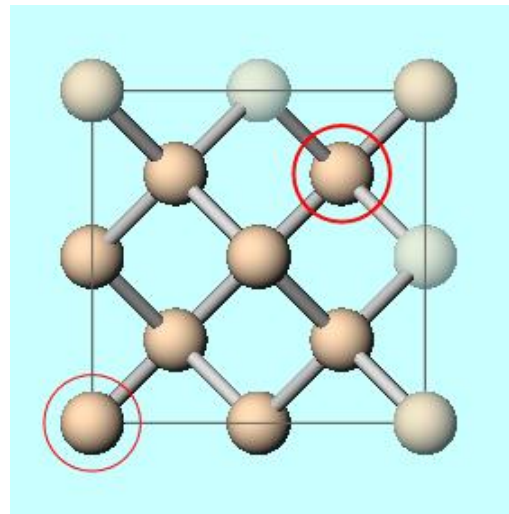
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。基本的にこのモードを推奨します。

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。

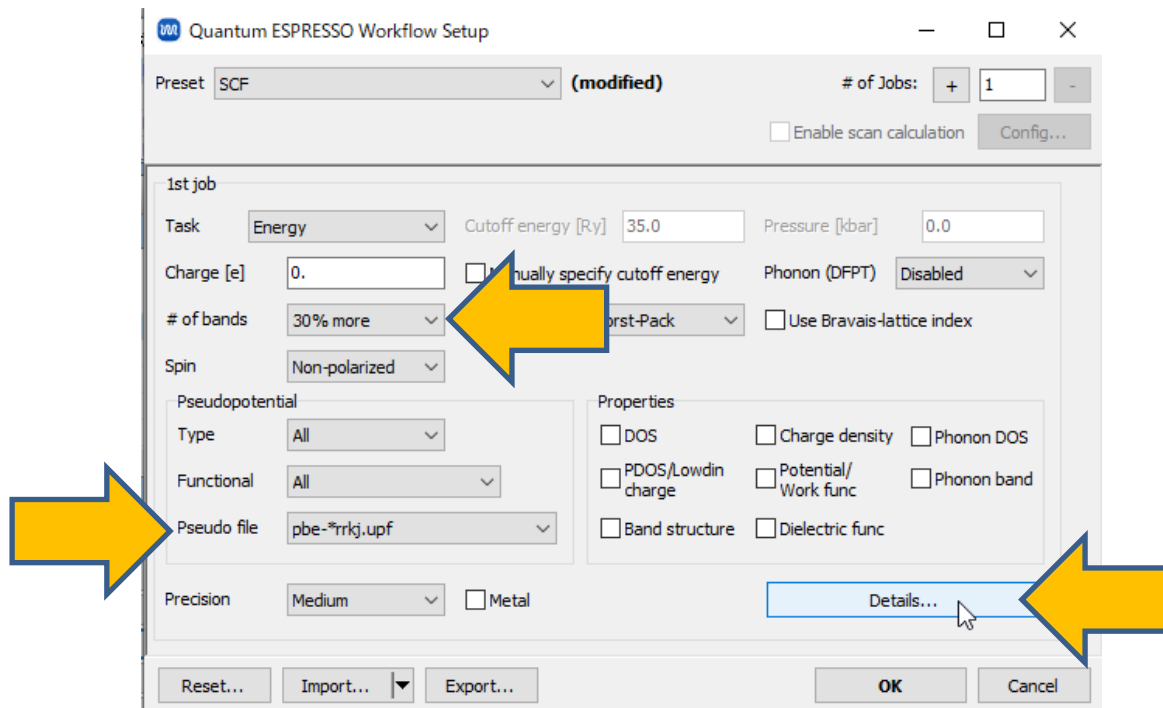
I. 系のモデリング

- 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_hse`」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。



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**はい**をクリックします。
2. **# of bands**を「30% more」、**Pseudo file**を「pbe-*rrkjus.upf」に変更します。
3. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**Precision**を「Extra-low」、**K points**を「Gamma」に変更します。
4. **Details**をクリックします。

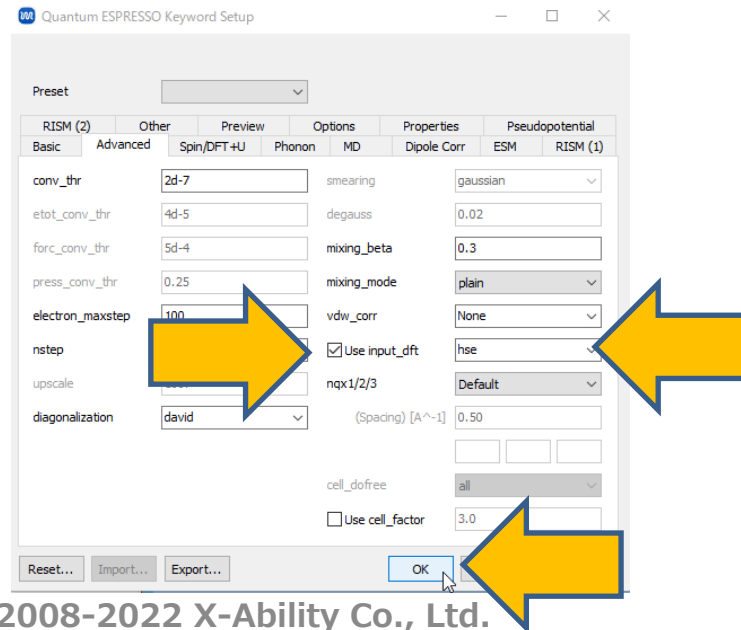


II. 計算の実行

1. **Advanced**タブに移動し、**Use input_dft**にチェックを入れ値を「hse」に変更し**OK**をクリックします。

- HSE06は、PBEに対し交換項の短距離成分にHF交換項を混合させた汎関数のため、前のページでPBEの擬ポテンシャルファイルを選んだ上でこのように設定します。
- その他のハイブリッド汎関数の設定方法はQEのソースコードのModules/funct.f90を参照してください。
- 適宜HF交換項のk点数を**nqx1/2/3**で設定し精度と計算速度を調整します。

2. **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 バンドギャップ

1. 作業フォルダで `work1_QE_SCF` の状態が **END (青)** に変化した後、作業フォルダで `work1_QE_SCF` をクリックし **アクション** から **Log (Extracted)** をクリックします。
2. 一番最後の「highest occupied, lowest unoccupied level」の行の2つの値の差からバンドギャップ ($7.2932 - 5.9400 = 1.3532$ eV) を取得します。
 - 本書ではk点やカットオフエネルギーを調整していないのであくまで参考値になりますが、本書の計算ではPBEでの値より ($7.0474 - 6.3298 = 0.7176$ eV) よりHSEでの値の方が実験値 (1.17 eV付近[1]) に近づきました。

```
Extracted Log (C:\winmos11\UserData\si_hse.wmpjdata\work3_QE_SCF\pw.pwout)
Program PWSCF v.5.2.1 (svn rev. 11758) starts on 14Oct2022 at 21:58:56
Parallel version (MPI), running on 6 processors
highest occupied, lowest unoccupied level (ev): 6.3305 7.0474
convergence has been achieved in 6 iterations
highest occupied, lowest unoccupied level (ev): 5.9659 7.2757
convergence has been achieved in 4 iterations
highest occupied, lowest unoccupied level (ev): 5.9432 7.2919
convergence has been achieved in 3 iterations
highest occupied, lowest unoccupied level (ev): 5.9400 7.2932
convergence has been achieved in 1 iterations
total energy = -15.70253734 Ry
est. exchange err (dexc) = 0.00000005 Ry
- averaged Fock potential = 1.68491603 Ry
+ Fock energy = -0.84249755 Ry
EXX self-consistency reached
PWSCF : 38.83s CPU 40.34s WALL
This run was terminated on: 21:59:37 14Oct2022
```

PBEで計算した場合

```
Program PWSCF v.5.2.1 (svn rev. 11758) starts on 14Oct2022 at 21:59:28
Parallel version (MPI), running on 2 processors
highest occupied, lowest unoccupied level (ev): 6.3298 7.0474
total energy = -15.69674766 Ry
estimated scf accuracy < 0.00000001 Ry
The total energy is the sum of the following terms:
one-electron contribution = 4.78591825 Ry
hartree contribution = 1.15332332 Ry
xc contribution = -4.83982947 Ry
ewald contribution = -16.79615977 Ry
convergence has been achieved in 7 iterations
PWSCF : 1.50s CPU 1.70s WALL
This run was terminated on: 21:59:30 14Oct2022
```

[1] <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Tables/Semgap.html>

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