

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO Van der Waals補正

V11.3.1

2022年10月31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

- 本書ではグラファイト結晶について、Grimme-D2法によるVan der Waals補正を用いた計算を実行する手順を示します。
 - グラファイトの層間の相互作用はVan der Waals力に由来する部分が大きく、Van der Waals補正の使用で安定構造、特に層間距離の予測精度が向上することが期待されます。

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

- 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。

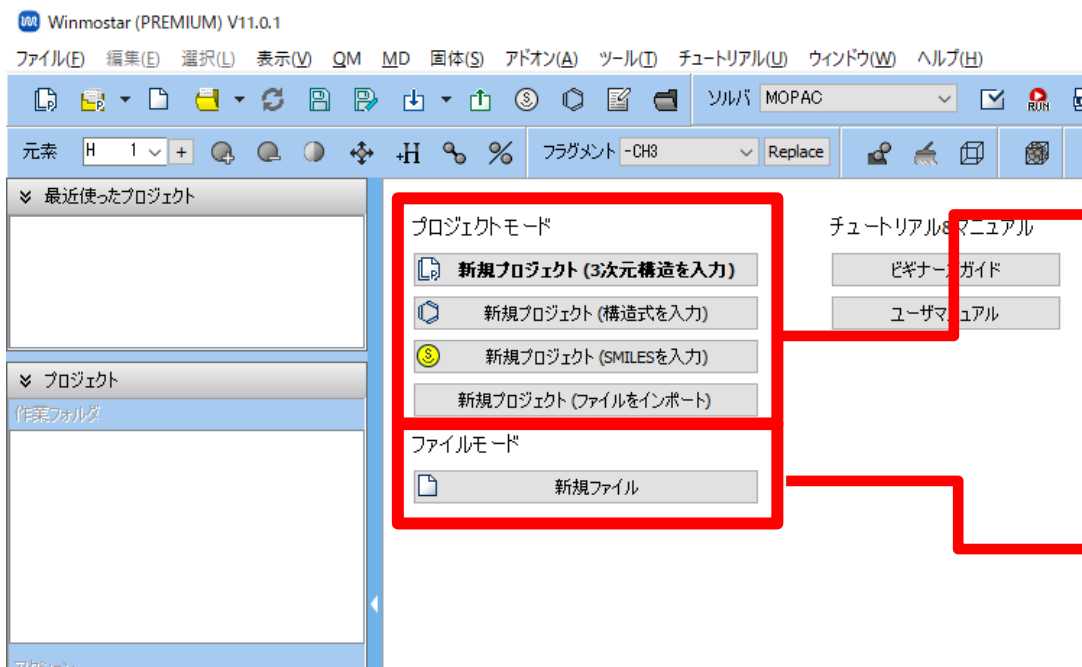
※ 最大原子数を拡張したMOPAC6を使う場合は[こちら](#)から入手してください（動作未保障）。

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**

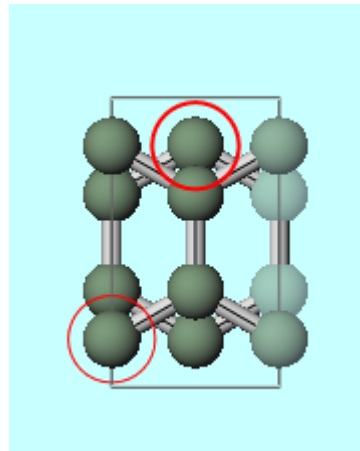
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。基本的にこのモードを推奨します。

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。

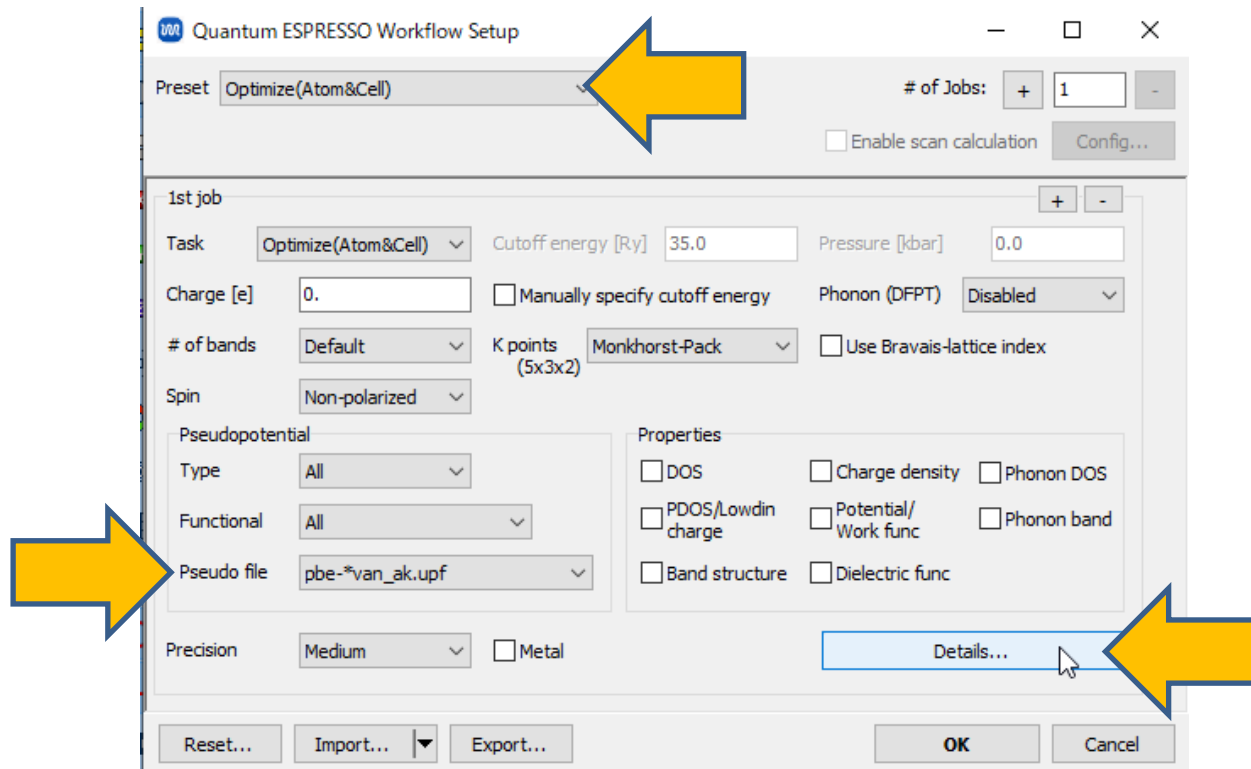
I. 系のモデリング

- 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「graphite_vdw」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 | graphite.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。



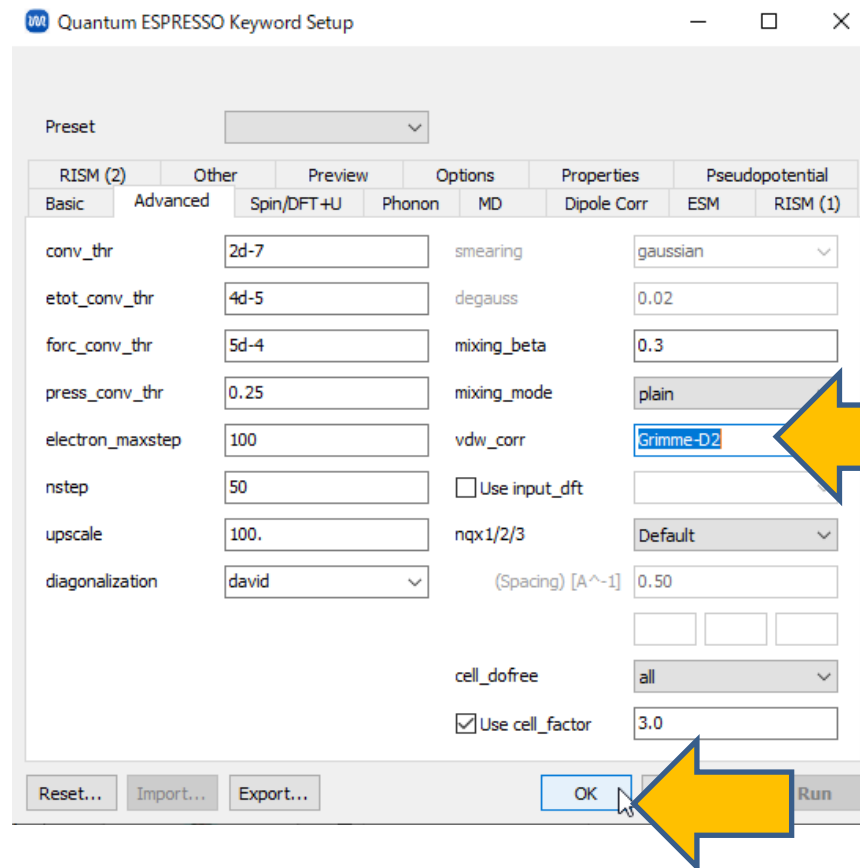
II. 計算の実行

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**いいえ**をクリックします。
2. **Preset**を「Optimize(Atom&Cell)」に変更し、**Pseudo file**を「pbe-*van_ak.upf」に変更します。
3. **Details**をクリックします。



II. 計算の実行

1. **Advanced**タブに移動し、**vdw_corr**を「Grimme-D2」に変更し**OK**をクリックします。
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**Coordinate (Final)** をクリックします。
2. 分子表示エリア下の「c=」の値から格子定数（層間距離の2倍）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Van der Waals補正を入れていない場合の値より実験値（6.70 Å 付近 [1]）に近づきました。

プロジェクト
作業フォルダ (graphite_vdw) Options ▼

名前	状態
work1_QE_Relax	END

アクション (work1_QE_Relax)

- Coordinate (Initial)
- Coordinate (Final)
- Log
- Log (Extracted)
- Animation
- SCF Energy Change
- Show in Explorer

rho= 2.301728 g/cm³
a= 2.469583 b= 4.265433 c= 6.580780
alpha= 90.00000 beta= 90.00000 gamma= 90.00000

Van der Waals補正なしの場合

rho= 1.980480 g/cm³
a= 2.473064 b= 4.273356 c= 7.623306
alpha= 90.00000 beta= 90.00000 gamma= 90.00000

[1] R. E. Nightingale, Nuclear Graphite, Academic Press, New York, (1962).など

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