

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO NMR&EFG計算

V11.6.0

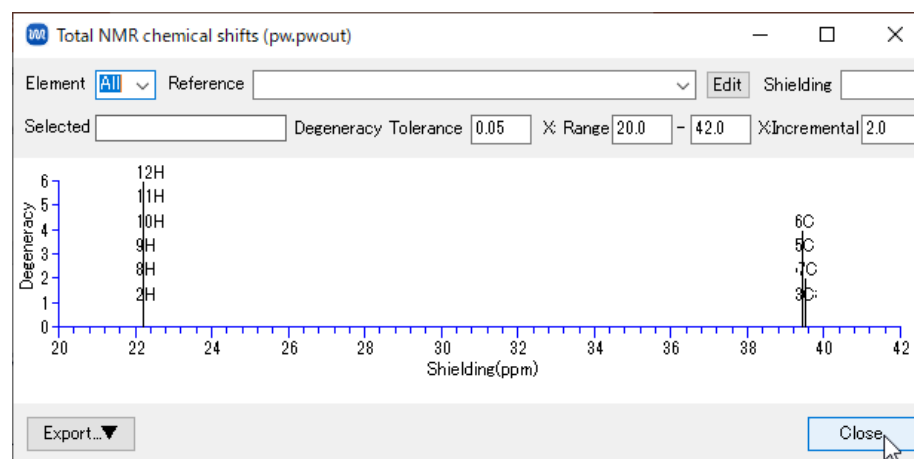
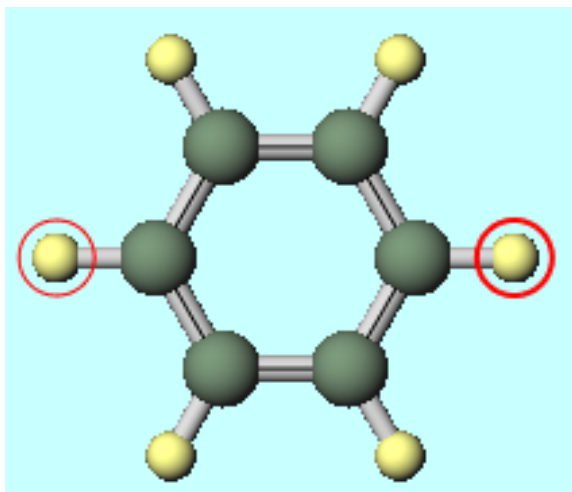
2023年10月2日 株式会社クロスアビリティ

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。
- 本書ではベンゼン分子のNMR、EFG計算の実施手順を示します。



注意点：

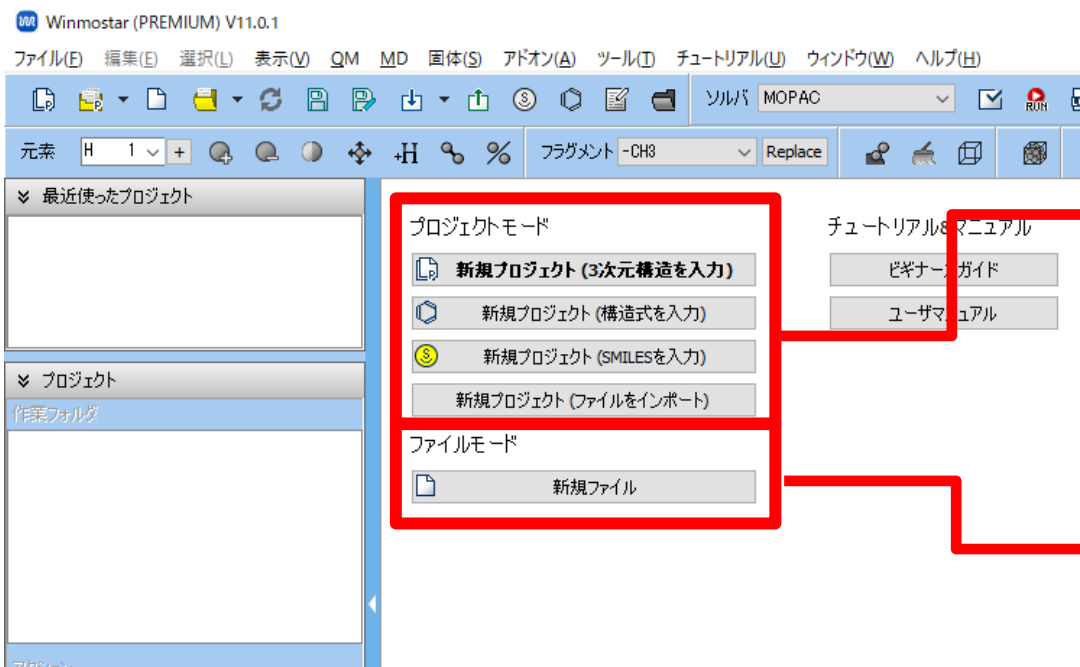
- k点の取り方、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギーは計算結果に影響を与えます。本チュートリアルではすぐに結果を取得できるように、精度を落とした設定を用います。
- Quantum ESPRESSOの計算方法及び計算設定内容の詳しい説明は、次の弊社記事をご覧ください。https://qiita.com/xa_member

動作環境設定

- 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。



プロジェクトモード **V11新機能**

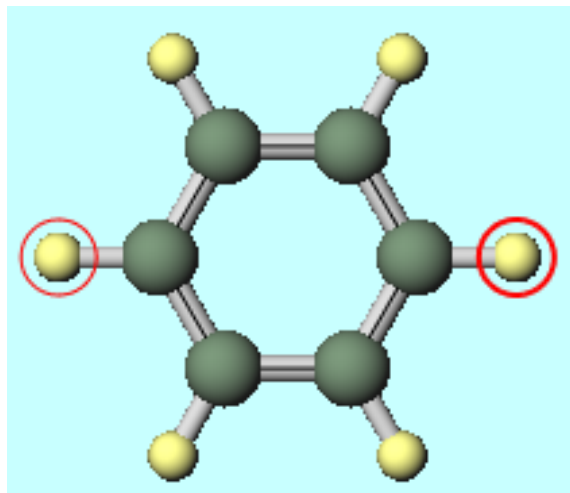
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。
基本的にこのモードを推奨します。

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。

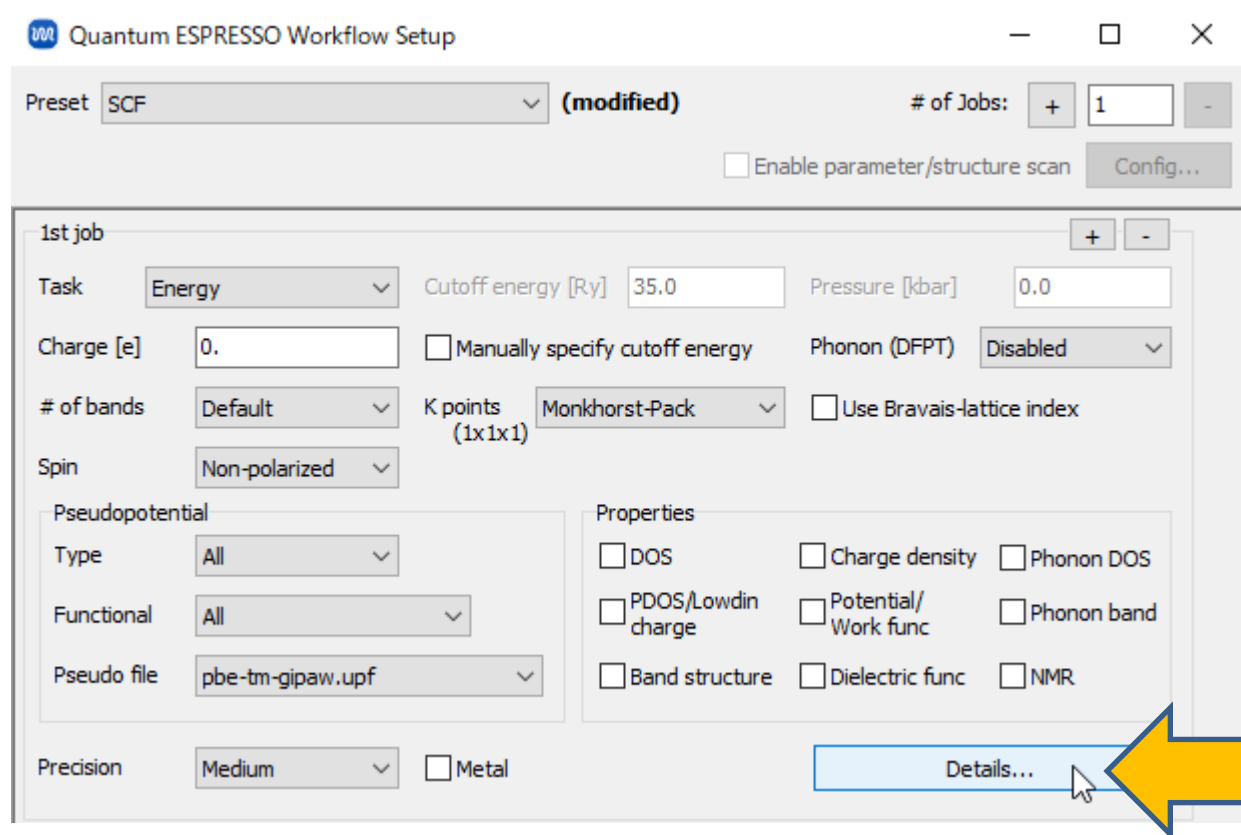
I. 系のモデリング

- 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「benzene_nmr」と入力し**保存**をクリックします。
 3. **フラグメント**を「-C6H5」に変更し**Replace**をクリックしベンゼンを作成します。



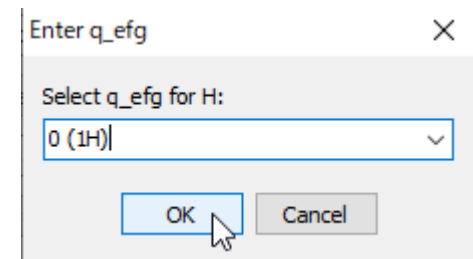
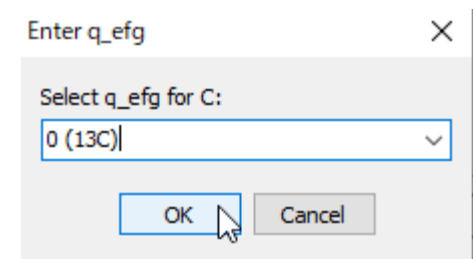
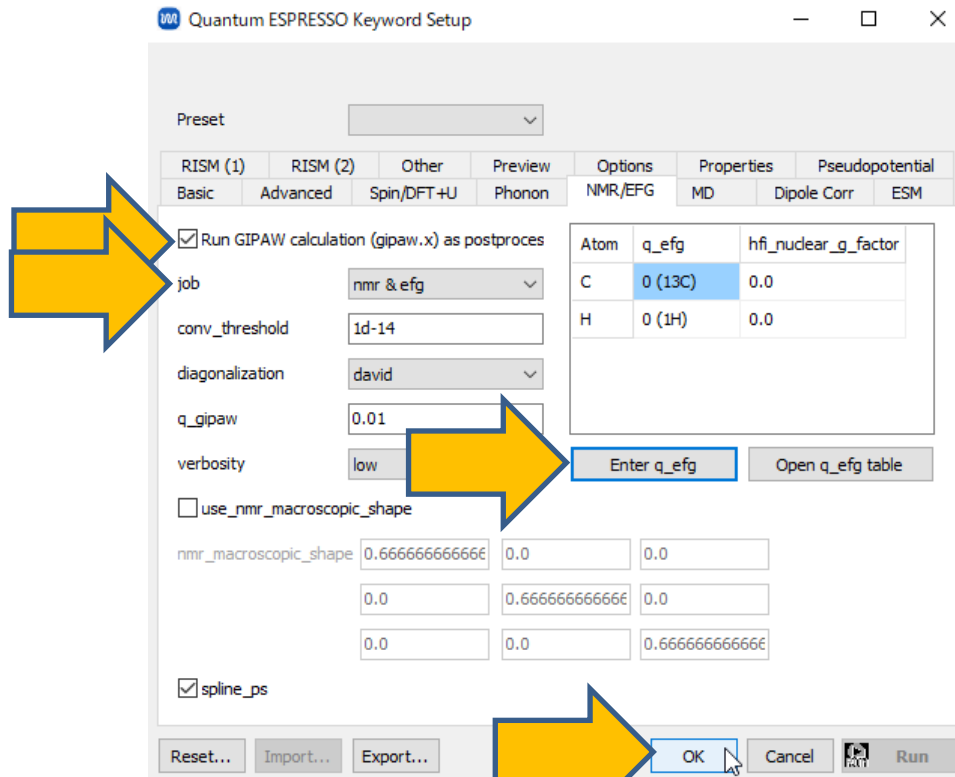
II. 計算の実行

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。**セルを作成**ダイアログが表示されたら「3」と入力し**OK**をクリックします。
2. **Pseudo file**を「pbe-tm-gipaw.upf」に変更します。
3. **Details**をクリックします。



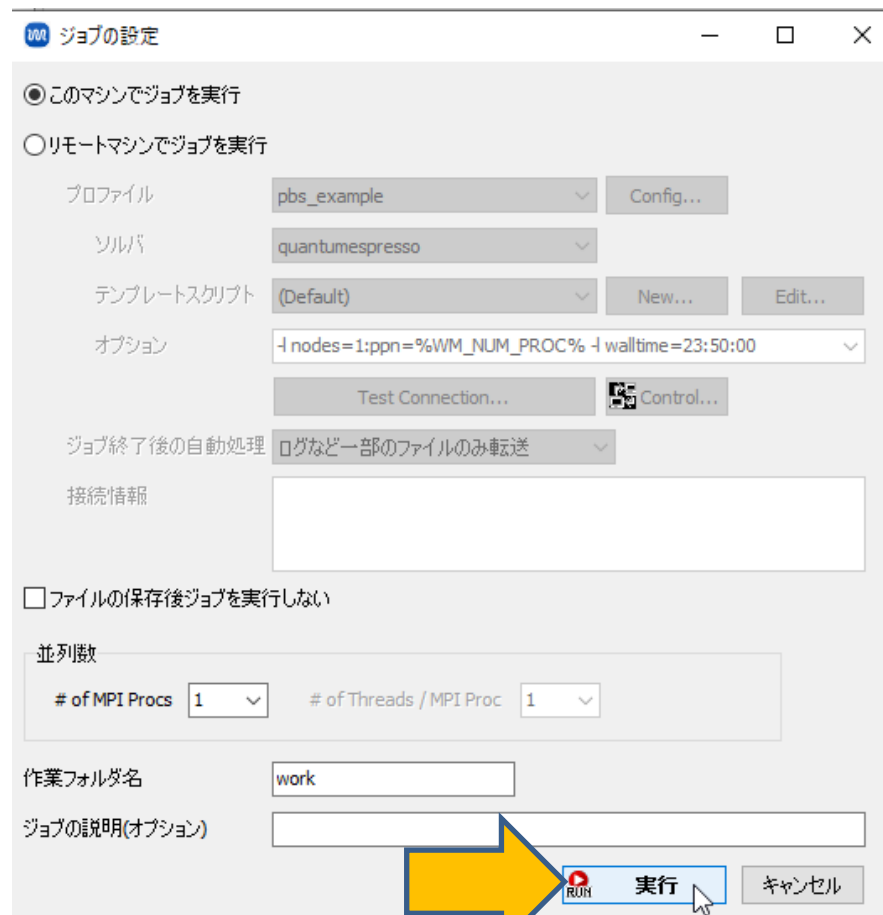
II. 計算の実行

1. **NMR/EFG**タブに移動し、**Run GIPAW...**をチェックします。
2. **job**を「nmr & efg」に変更します。
3. **Enter q_efg**をクリックします。「Select q_efg for C」と表示されたらプルダウンで「0 (13C)」を選択し**OK**をクリックします。「Select q_efg for H」と表示されたらプルダウンで「0 (1H)」を選択し**OK**をクリックします。



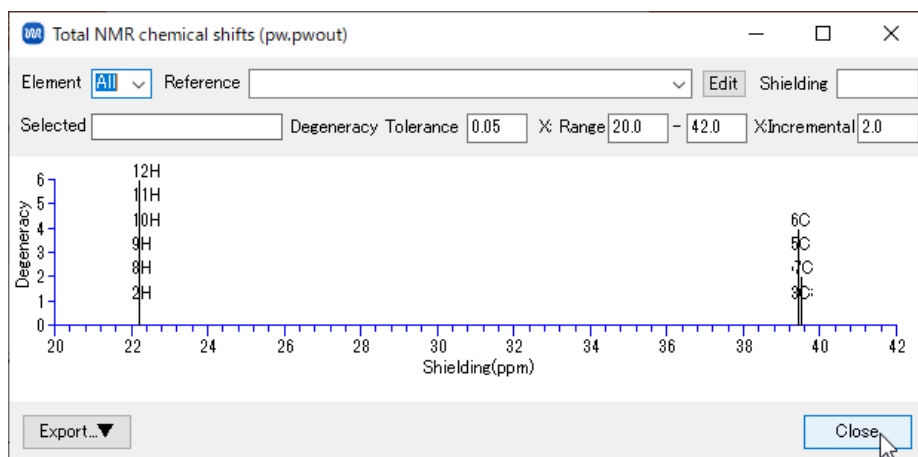
II. 計算の実行

1. Quantum ESPRESSO Workflow Setupウィンドウで**OK**をクリックします。
2. ジョブの設定ウィンドウで**実行**をクリックします。



III. 結果解析

1. work1_QE_SCFの状態が**END**に変化したら**アクション**で**NMR**をクリックするとNMRスペクトルが表示されます。
2. **アクション**で**Log (GIPAW2)** をクリックするとEFG計算のログが表示され、Cq、etaを確認することができます。



gipaw2.out - Xモジュール

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

H	12	0.000102	0.000014	-0.147016
---	----	----------	----------	-----------

NQR/NMR SPECTROSCOPIC PARAMETERS:

C	1	V _{xx} = -0.1299	axis=(1.000000 0.000015 -0.000011)
C	1	V _{yy} = -0.2088	axis=(-0.000015 1.000000 0.000173)
C	1	V _{zz} = 0.3386	axis=(0.000011 -0.000173 1.000000)
C	1	Q= 0.0000	1e-30 m ² Cq= 0.0000 MHz eta= 0.23304
H	2	V _{xx} = -0.1290	axis=(-0.000005 1.000000 -0.000265)
H	2	V _{yy} = -0.1467	axis=(0.000011 0.000265 1.000000)
H	2	V _{zz} = 0.2757	axis=(1.000000 0.000005 -0.000011)
H	2	Q= 0.0000	1e-30 m ² Cq= 0.0000 MHz eta= 0.06453
C	3	V _{xx} = -0.1302	axis=(0.499305 0.866426 0.000115)
C	3	V _{yy} = -0.2087	axis=(0.866426 -0.499305 -0.000094)
C	3	V _{zz} = 0.3390	axis=(0.000024 -0.000147 1.000000)
C	3	Q= 0.0000	1e-30 m ² Cq= 0.0000 MHz eta= 0.23167
C	4	V _{xx} = -0.1302	axis=(0.499447 -0.866344 0.000057)
C	4	V _{yy} = -0.2087	axis=(0.866344 -0.499447 -0.000025)
C	4	V _{zz} = 0.3390	axis=(0.000024 -0.000147 1.000000)
C	4	Q= 0.0000	1e-30 m ² Cq= 0.0000 MHz eta= 0.23167

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