

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO Car-Parrinello MD

V10.4.3

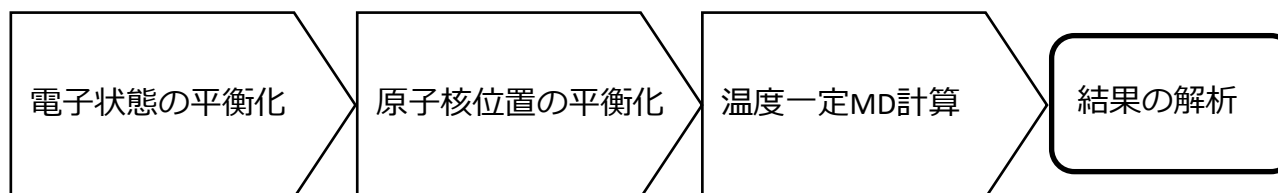
2021年4月1日 株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)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

- メタン分子のCar-Parrinello (CP) MD計算をごく短時間実行します。計算が破たんしないよう電子と原子核それぞれを徐々に平衡化する手順を示します。



注意点：

- 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。
- 系のサイズも計算結果に影響を与えます。
- 平衡化に十分な時間をかけ、本計算も長時間実行することで再現性の高いデータを取得することができます。
- ◆ 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](#)

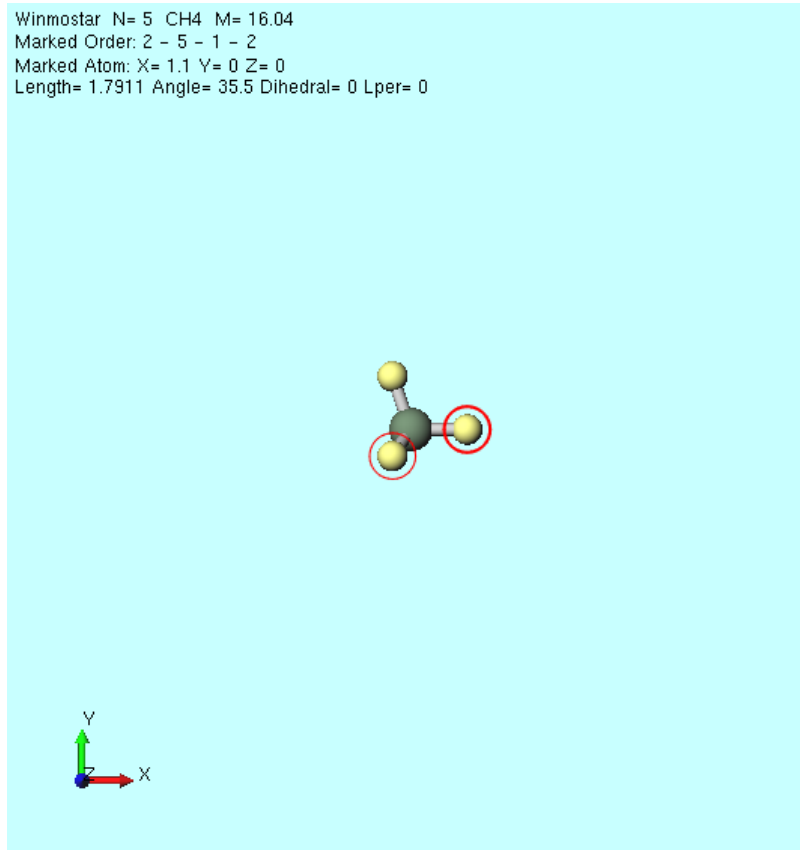
Fragment ER（別売）を実行する方 : [NAMD](#)

※ 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）。

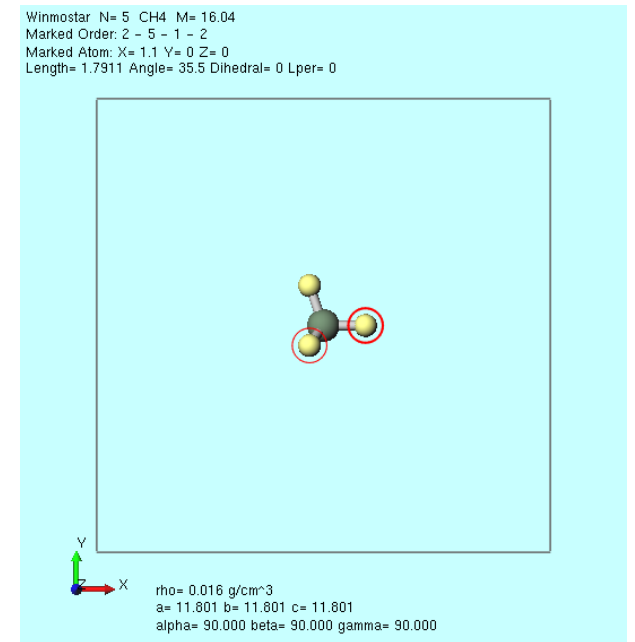
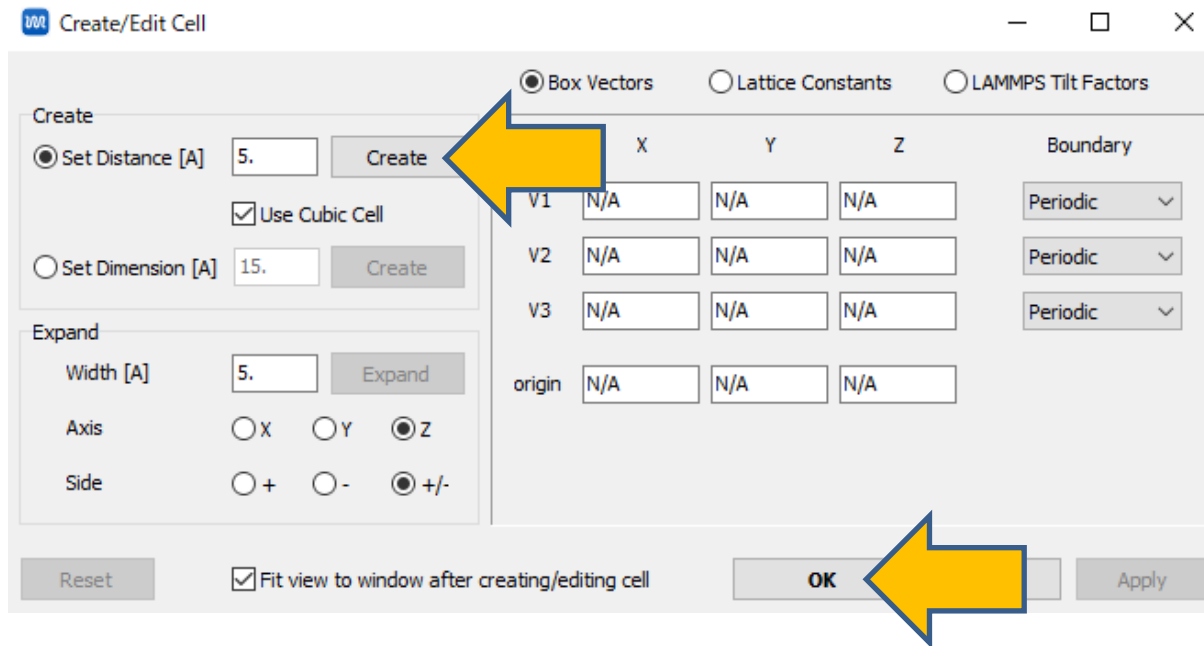
I. モデルの作成

1. メイン画面上にてCH₄分子をモデリングする。



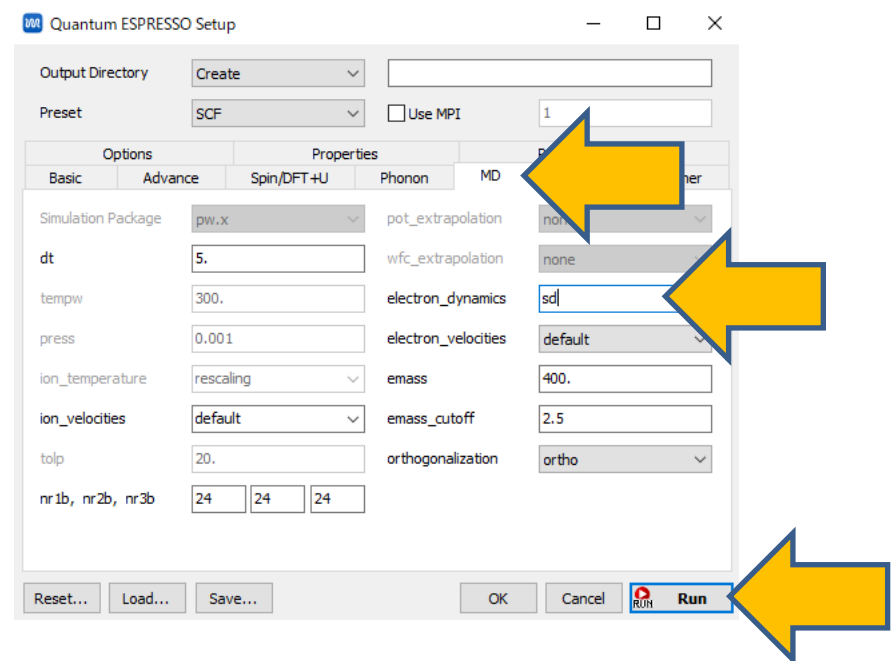
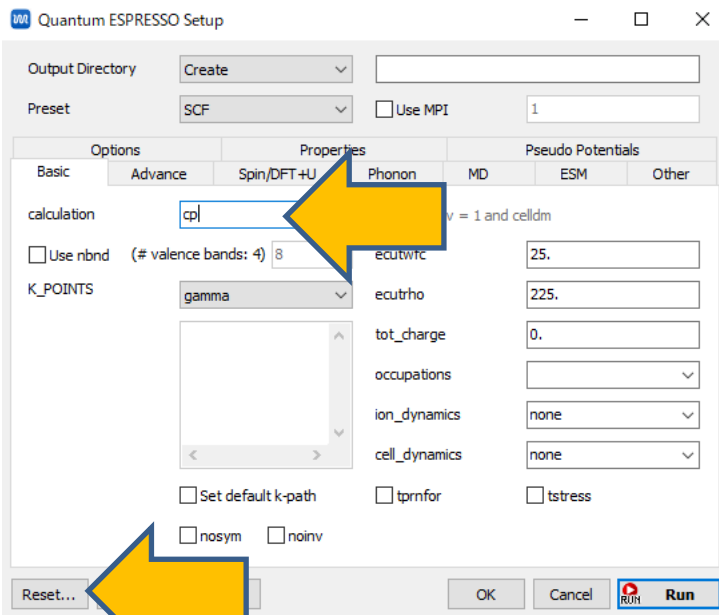
I. モデルの作成

1.  (セルを作成/編集) | 手動でセルを編集をクリックする。
2. **Create**をクリックし、**OK**をクリックすると、セルが作成される。



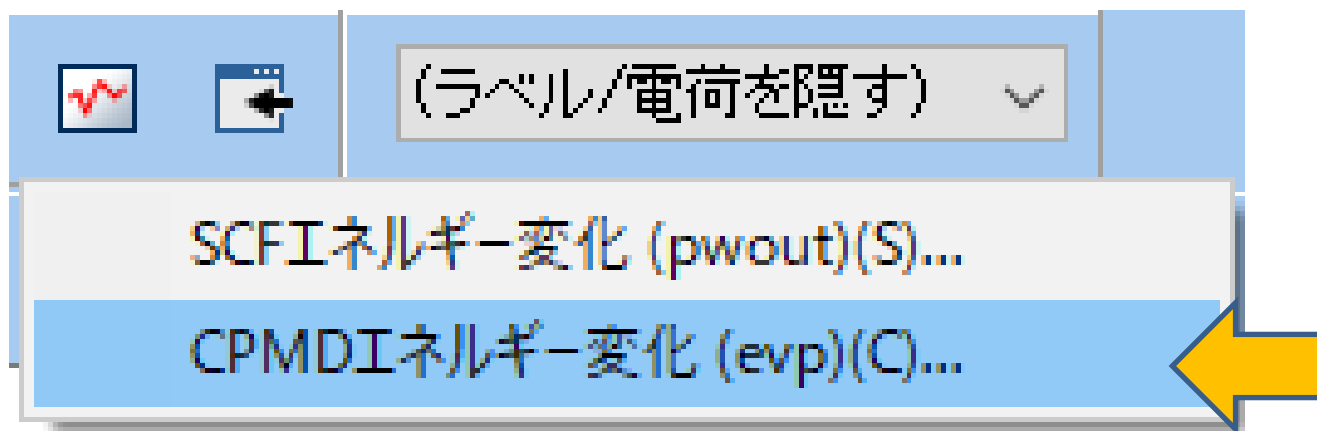
II. 電子状態の平衡化

1. ソルバー一覧から**Quantum ESPRESSO**を選択する。
2. **(キーワード設定)** をクリックする。
3. **Reset...** ボタンをクリックする。
4. **Basic** タブにて、**calculation** に **cp** を指定する。
5. **MD** タブにて、**electron_dynamics** に **sd** を指定する。
6. **Run** ボタンをクリックする。ファイル名を **ch4_cp1** として**保存**する。



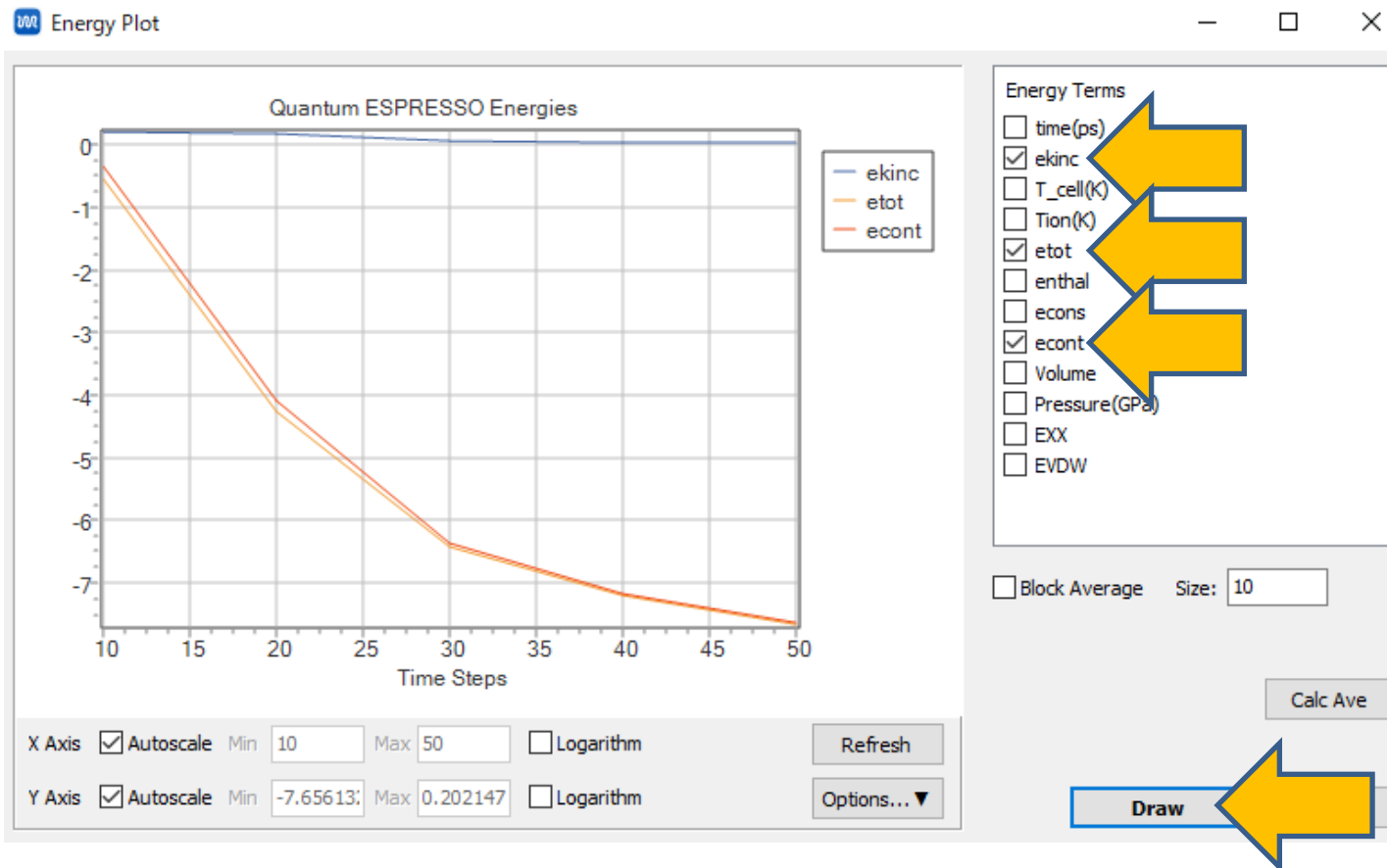
II. 電子状態の平衡化

1. 計算終了後、 (エネルギー変化) | CPMDエネルギー変化 (evp)をクリックし、デフォルトで選ばれるフォルダを選択する。



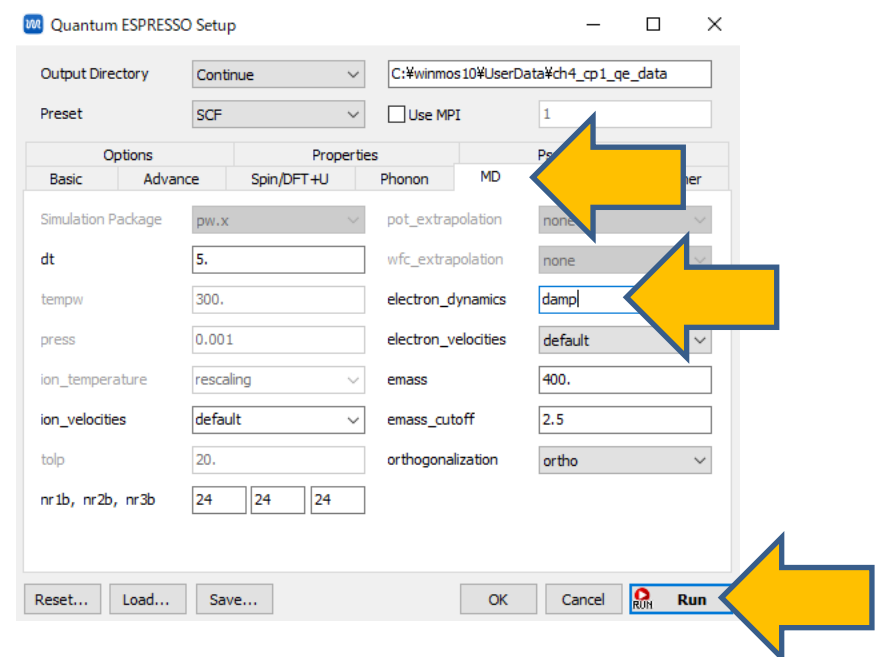
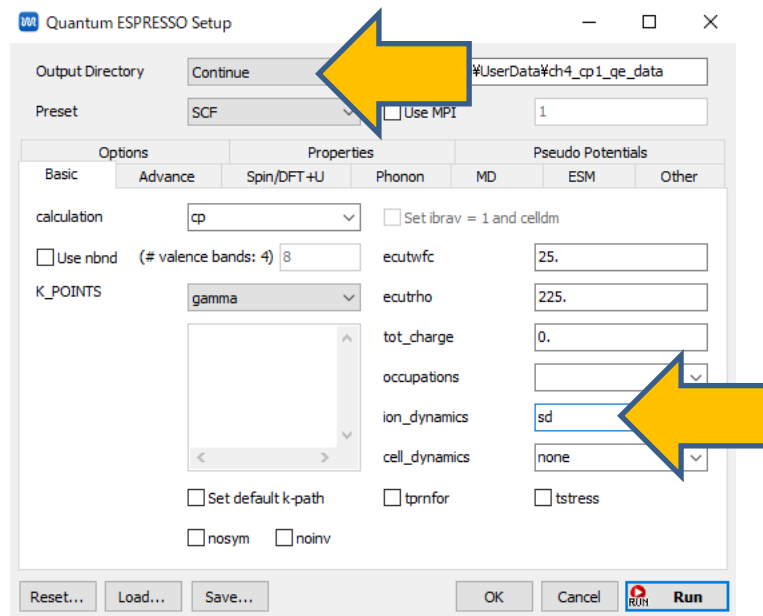
II. 電子状態の平衡化

1. **Energy Plot**ウィンドウで**ekinc**（電子の仮想運動エネルギー）、**etot**（電子の静電ポテンシャルエネルギー）、**econt**（全エネルギー）にチェックを入れる。
2. **Draw**をクリックし、右図のようにエネルギーが低下する様子を取得する。



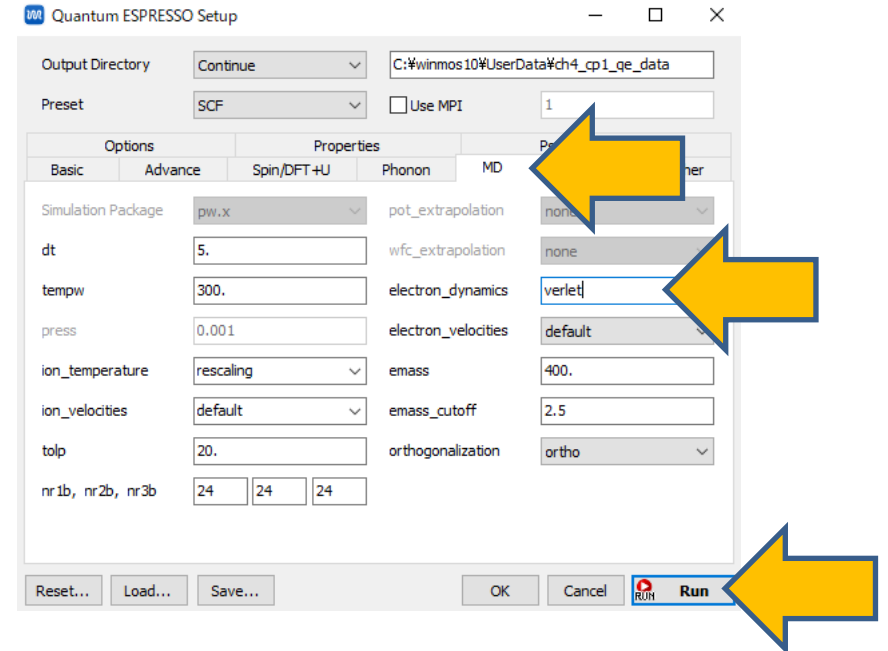
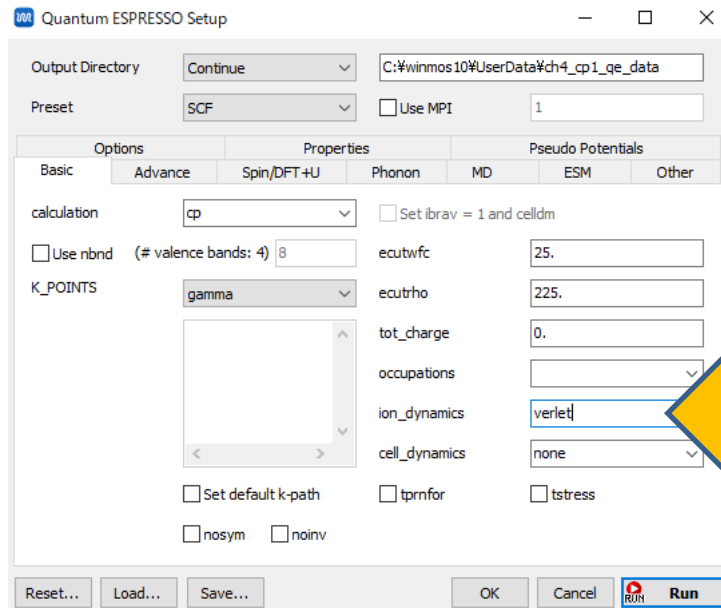
III.原子核位置の平衡化

1. (キーワード設定) をクリックする。
2. Output Directoryにcontinueを指定する。
3. BasicタブにてIon Dynamicsにsdを指定する。
4. MDタブにてElectron Dynamicsにdampを指定する。
5. Runをクリックする。ファイル名はch4_cp2として保存する。



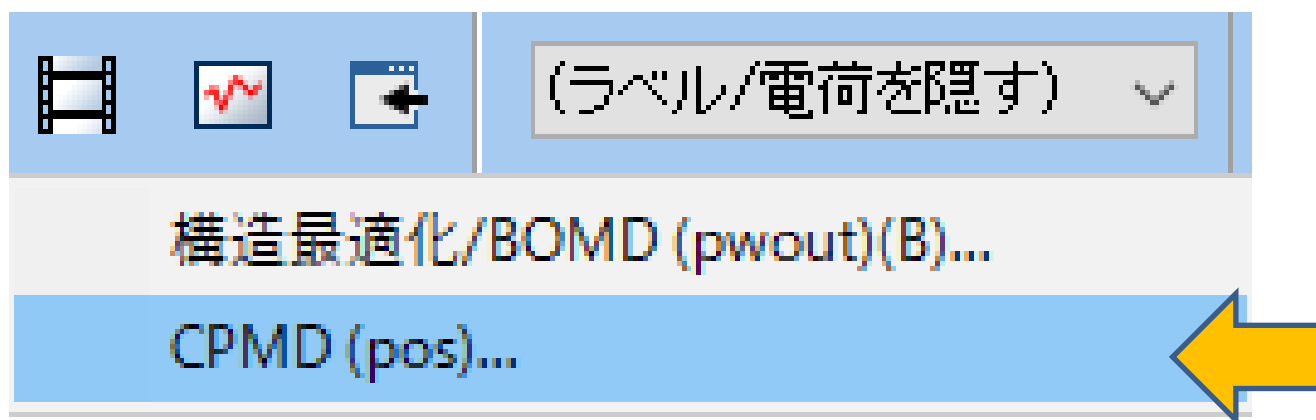
IV. 温度一定のMD計算

1. (キーワード設定) をクリックする。
2. **Basicタブ**にて**Ion Dynamics**に**verlet**を指定する。
3. **MDタブ**にて**Electron Dynamics**に**verlet**を指定する。
4. **Run**をクリックする。ファイル名は**ch4_cp3**として**保存**する。



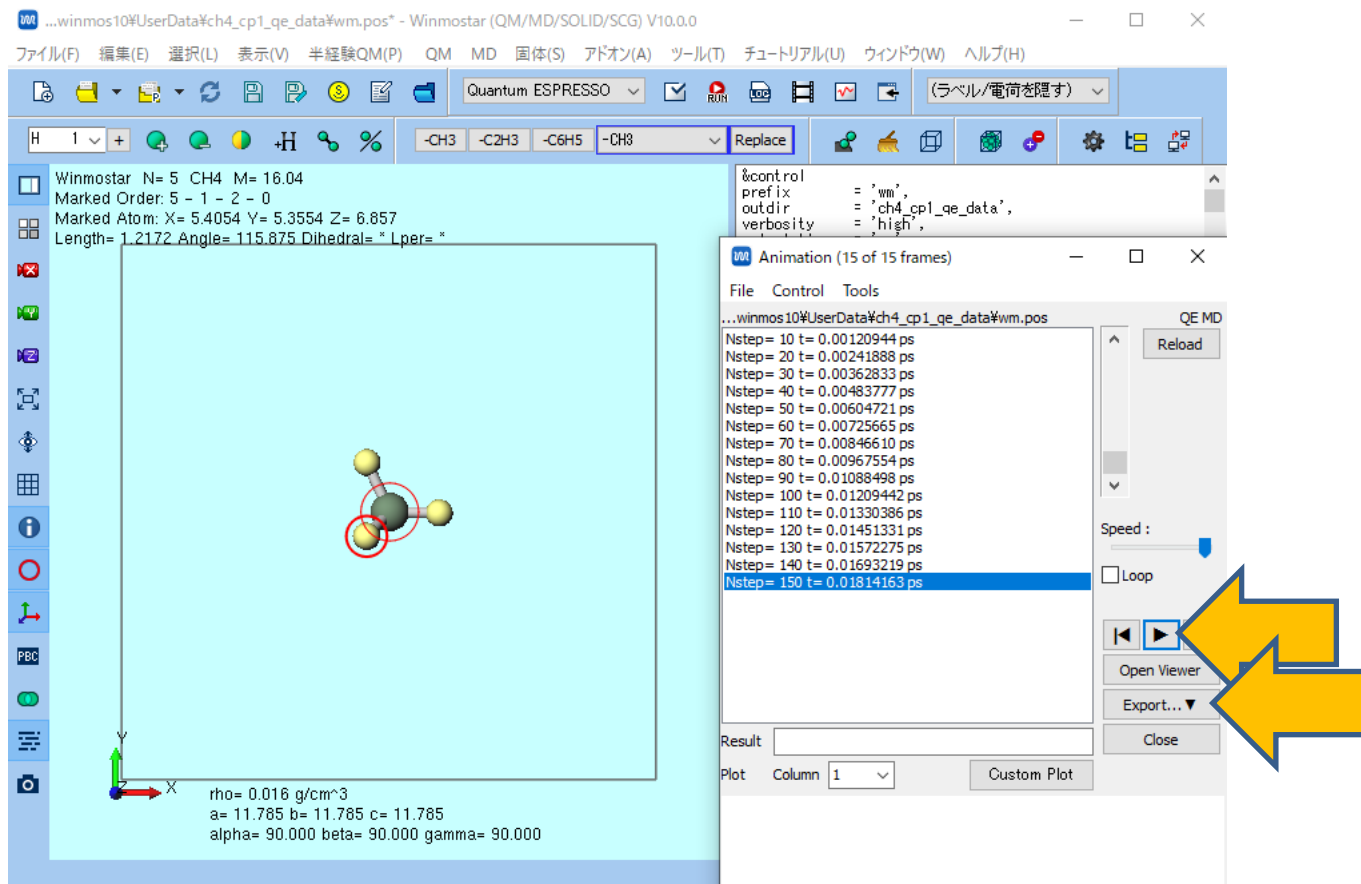
V. 結果解析

1. 計算の終了後、 (アニメーション) | CPMD (pos)を選択。
2. デフォルトで選ばれる3つのファイルを選択する。



V. 結果解析

1.  (再生ボタン)をクリックし各ステップの様子を確認する。
2. VMD等外部Viewerで見たい場合は**Export | Animated GRO File**をクリックする。



The screenshot displays the Winmostar software interface. The main window shows a 3D molecular model of a molecule with atoms represented by spheres and bonds by sticks. The interface includes a menu bar, a toolbar, and a status bar. The status bar displays the following information:

Winmostar N= 5 CH4 M= 16.04
Marked Order: 5 - 1 - 2 - 0
Marked Atom: X= 5.4054 Y= 5.3554 Z= 6.857
Length= 1.2172 Angle= 115.875 Dihedral= * Lper= *

rho= 0.016 g/cm³
a= 11.785 b= 11.785 c= 11.785
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

The right-hand side of the interface features an "Animation (15 of 15 frames)" control panel. This panel includes a list of simulation steps with their corresponding times in picoseconds (ps). The steps are:

Nstep	t
10	0.00120944 ps
20	0.00241888 ps
30	0.00362833 ps
40	0.00483777 ps
50	0.00604721 ps
60	0.00725665 ps
70	0.00846610 ps
80	0.00967554 ps
90	0.01088498 ps
100	0.01209442 ps
110	0.01330386 ps
120	0.01451331 ps
130	0.01572275 ps
140	0.01693219 ps
150	0.01814163 ps

The "150" step is highlighted in blue. Below the list, there is a "Speed" slider, a "Loop" checkbox, and a "Play" button (represented by a right-pointing triangle). Two large yellow arrows point to the "Play" button and the "Export..." button, indicating the actions described in the text.

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