M winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO 誘電関数

V11.12.0

2025年4月30日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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。



• 本チュートリアルではSi結晶の誘電関数を取得します。



注意点:

- k点の取り方、バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギー、smearing幅は計算 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、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。<u>https://qiita.com/xa_member</u>



- 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<u>推奨バージョン</u>以外のQuantum ESPRESSOを利用したい方は、 別途<u>Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定</u>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。 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。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(D) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



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。

- 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_eps」と入力し保存をクリックします。

 Winmostar (PREMIUM) V11.1.0 ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(Y) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(D チュートリアル(U) 								
C) 🔜 • 🗅 🚽 • 🞜 🕒 🔛 🕁 • 🖿 🎱 🔘 🗗 🖀 📹 אאע							
元素	素 H 1 - + 🔍 🔍 🧼 🕂 💊 🏏 75ガメント - CH3 🗸 Repla							
× 1	最近使ったプロジェクト							
	プロジェクトモード (次数) プロジェクトモード							
◆ - (作業)	プロジェクト コナルリグ Cotions Coti							
	名前 状態 ファイルモード							
🚾 新規プロジェクト	×							
ブロジェクト名	si_eps							
場所 ④ 任意のフォルダ	C:¥winmos11¥Us Data ~ 参照…							
○ 最後に開いたフォル	C:¥winmos11¥UserData							
○ UserDataフォルダ	C:¥winmos11¥UserData¥							
説明(任意)								
	【保存							

I. 系のモデリング

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。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

- 1. ファイル | インポート | Samplesファイル | si.cifをクリックします。
 - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりにファイル | ファイルをインポートを使います。
- 2. 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。
- 3. 分子表示エリアに所望の構造が出現することを確認します。

🞯 C:¥winmos1101test1¥UserData¥propylene.wmpjdata¥propylene.wmpj - Winmostar (PREMIUM) V11.1.0

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(T) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)





II. 計算の実行

- 1. ツールバーの**ソルバ**からQuantum ESPRESSOを選択します。
- 2. **(ワークフロー設定)** をクリックします。
- 3. 計算時間を短縮するため、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。 分子表示エリアには変換後の構造が出現します。「格子が変換されました」と表示されたら OKをクリックします。



II. 計算の実行

- **1.** PseudopotentialのTypeをNCPP、Pseudo fileをpbe-*rrkj.upfに変更します。(QEの epsilon.xがUltrasoftに対応していないため)
- **2.** PropertiesのDielectric funcにチェックを入れます。
- 3. Detailsをクリックします。

🚾 Quantum	ESPRESSO Workflow Setup			—		×
Preset SCF	~ (modified)	# of Jo	bs: +	1	-
			Enable parame	eter scan	Config	J
1st job						
Task En	ergy V Cutoff energy [Ry] 35.0	Pressure [kbar]	0.0		
Charge [e]	0. Manually spe	ecify cutoff energy	Phonon (DFPT)	Disabled	~	
# of bands	Default V K points (3x3x3)	nkhorst-Pack 🗸 🗸 🗸	Use Bravais-la	ttice index		
Spin	Non-polarized V					
Pseudopoten	tial	Properties				
Туре	NCPP	DOS	Charge density	Phone	on DOS	
Functional	Al	PDOS/Lowdin charge	Potential/ Work func	Phone	on band	
Pseudo file	pbe-*rrkj.upf	Band structure	Dielectric func	$\langle -$		
Precision	Medium ~ Metal		Det	tails		
Reset	Import 🔽 Export		O	ĸ	Cano	el

II.計算の実行

- 1. Basicタブで以下のように変更します。
 - 1. # of bandsをSpecify nbndに変更
 - **2. nbnd**に「12」と入力
 - 3. K_POINTSの(Spacing)に「0.2」と入力
 - **4. nosym**とnoinvをチェック
- 2. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合 は(Spacing)を「0.5」に変更します。
- 3. OKをクリックします。
- 4. Quantum ESPRESSO Workflow Setupウィ ンドウでOKをクリックし、ジョブの設定ウィン ドウで適官設定した後実行をクリックします。



III.結果解析

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**で**Dielectric Function**をクリックします。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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