

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

基礎編

V10.4.3

2020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

- Si結晶のSCF計算を実施し、その後バンド構造、状態密度、部分状態密度、電子密度の算出を行います（Winmostar™上ではpw.x、band.x、dos.xなどが連続して実行されます）。

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は計算結果に大きな影響を与えます。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。
- k点の経路（パス）は対象とする結晶構造に応じて設定し直す必要があります。各結晶構造における推奨のパスはQEのインストールディレクトリにあるDoc¥Brillouin_zones.pdfを参考に設定してください。
- ◆ 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](#)

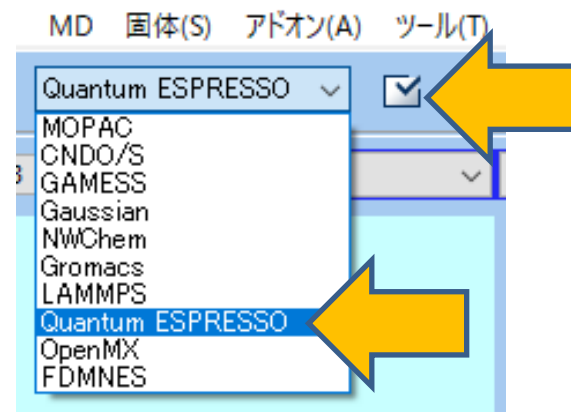
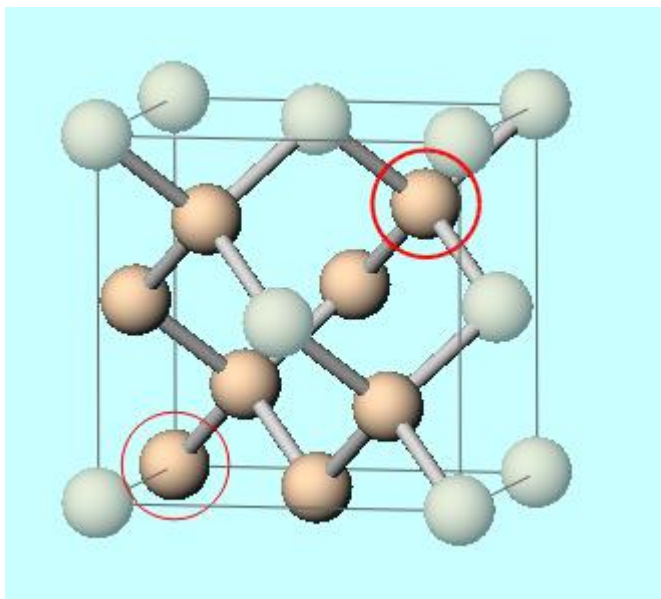
Fragment ER（別売）を実行する方 : [NAMD](#)

※ 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）。

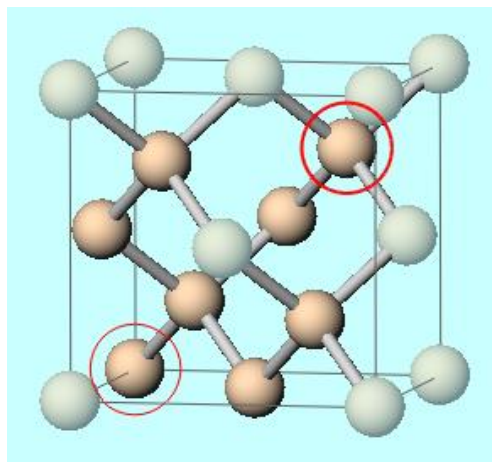
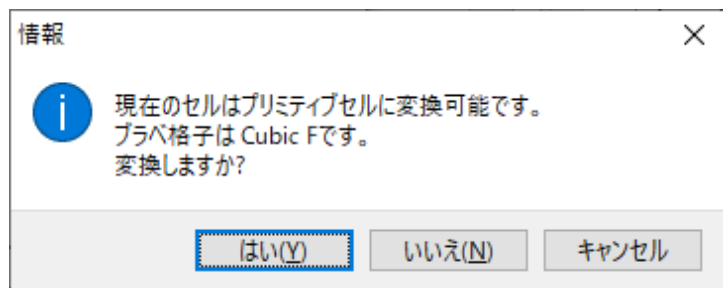
I. モデルの作成

1. **ファイル | 開く**をクリックする。
2. サンプルフォルダ内の**si.cif**を開く。（デフォルトでは**C:¥winmos10¥Samples¥si.cif**）
3. デフォルトの表示設定では、セル境界直上の原子は実体のみ不透明、他は半透明で表示される。全て不透明で表示したい場合は**表示 | 表示プリセット | Winmostar Report**を選ぶか、**ツール | 環境設定**で設定を調整する。
4. ツールバーの**ソルバー**一覧から、**Quantum ESPRESSO**を選択する。
5. (**キーワード設定**)をクリックする。

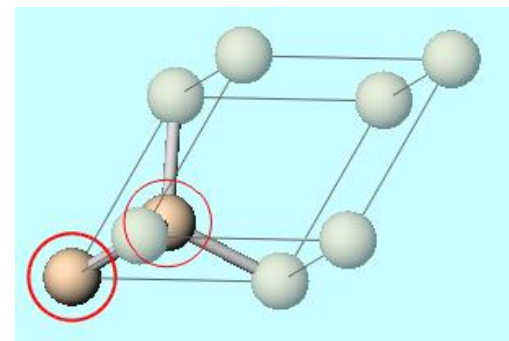


I. モデルの作成

1. プリミティブセルに変換するか聞かれるので **はい** を選択する。コンベンショナルセルからプリミティブセルに構造が変換され、**Quantum ESPRESSO Ssetup**ウィンドウが表示される。



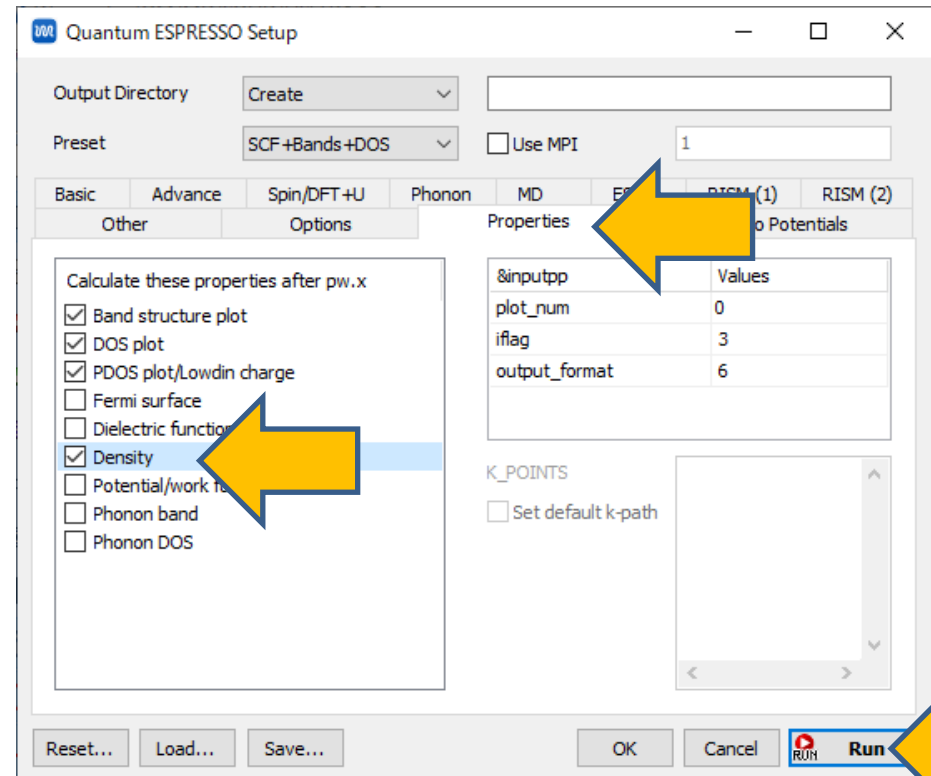
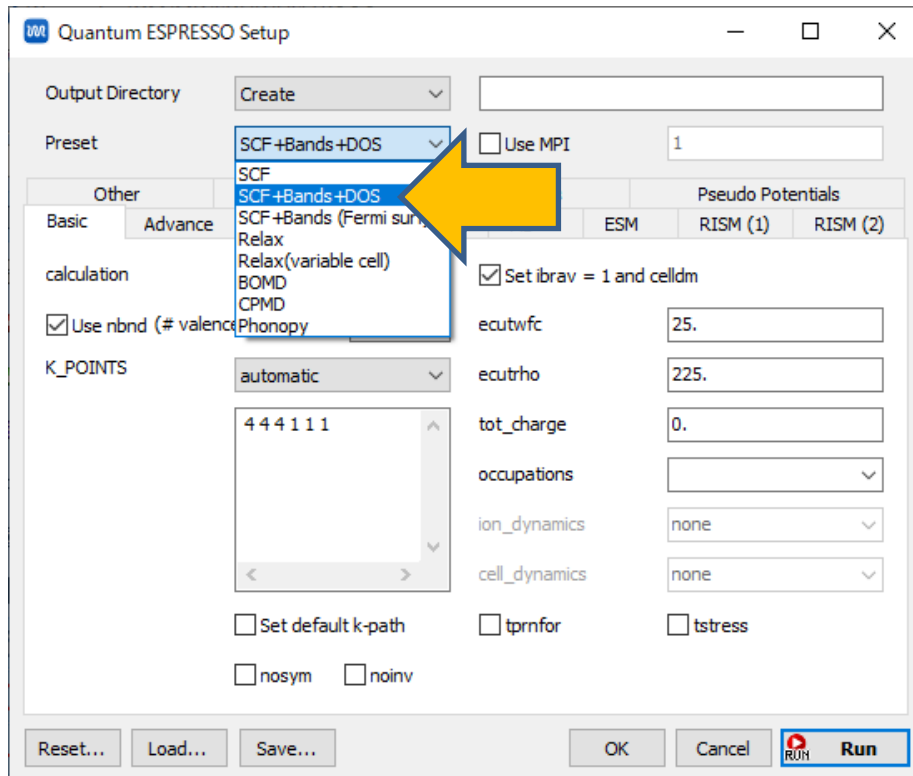
コンベンショナルセル



プリミティブセル

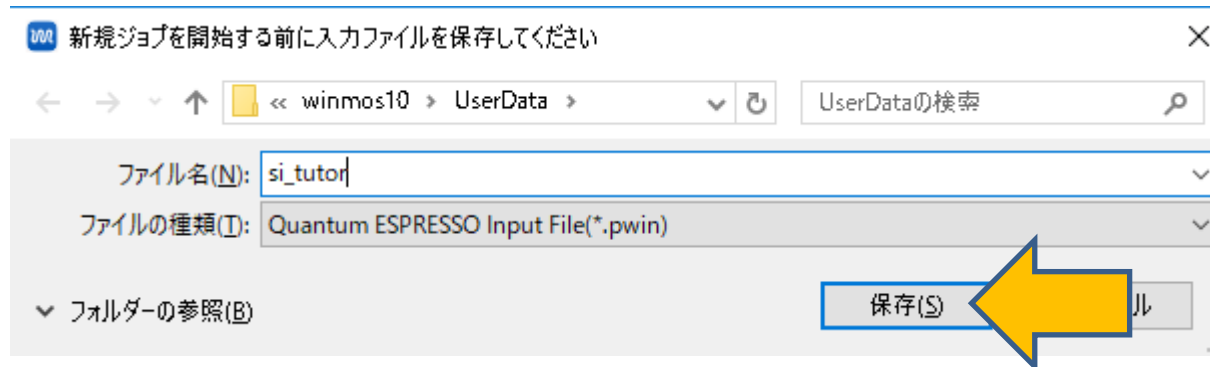
II. QEによる計算

1. **Reset...**をクリックし「はい」をクリックする。
2. **Preset**に**SCF+Bands+DOS**を指定する。
3. **Properties**タブの**Density**にチェックを入れる。
4. **Run**をクリックする。



II. QEによる計算

1. 実行前に、名前を付けて保存する。ここでは仮に「**si_tutor**」とする。入力ファイルが作成され、黒いウィンドウが自動で出現し計算が始まる。このウィンドウは計算が終了すると自動で消える。
2. 計算の実行中にWindows Defenderなどのセキュリティ警告が表示されたら「アクセスを許可する」や「無視」ボタンをクリックする。セキュリティ警告は複数出ることがある。



```
Winmostar/M 20201110_152201 C:\winmos10\UserData\si_tutor.bat
Info: using nr1, nr2, nr3 values from input
IMPORTANT: XC functional enforced from input :
Exchange-correlation = PZ (1 1 0 0 0 0)
Any further DFT definition will be discarded
Please, verify this is what you really want

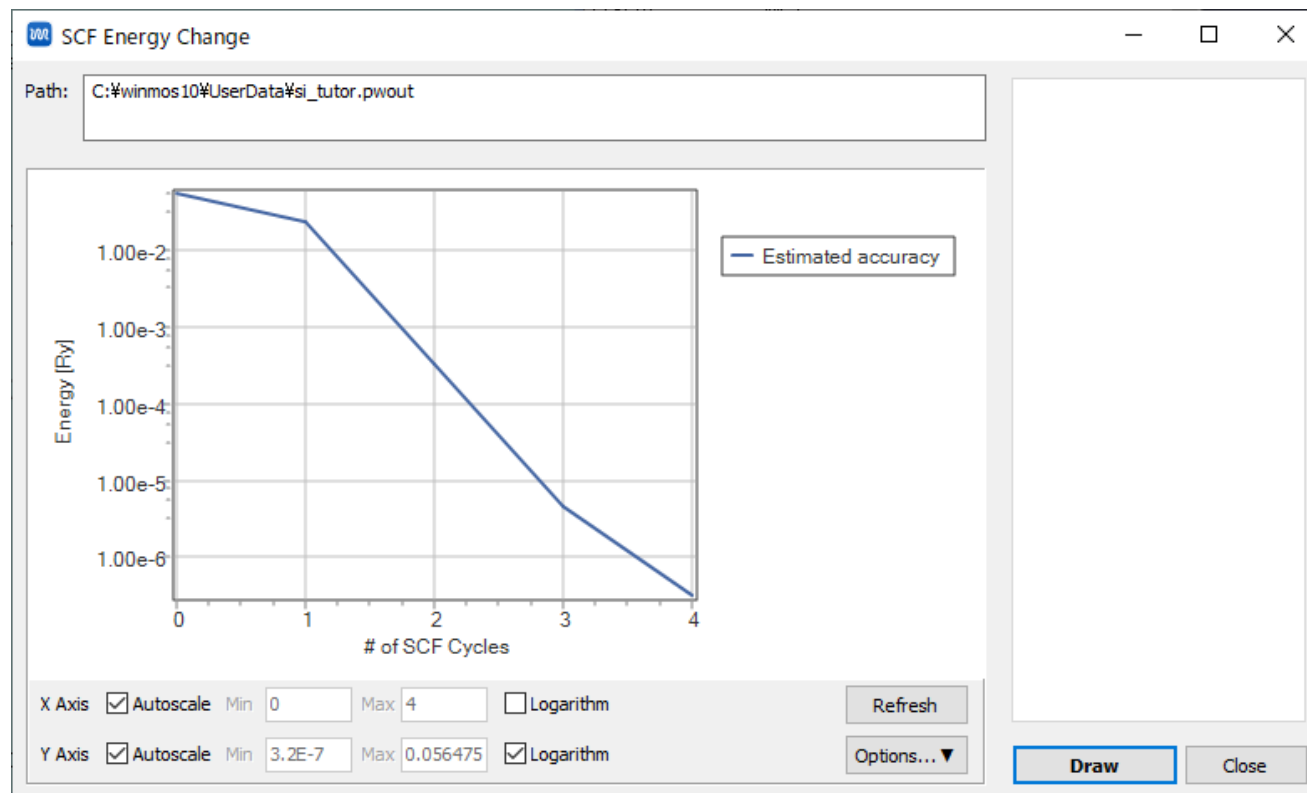
G-vector sticks info
-----
sticks: dense smooth PW G-vecs: dense smooth PW
Sum      823   361   121      15473   4573   869

high-symmetry point: 0.0000 0.0000 0.0000 x coordinate 0.0000
high-symmetry point: 0.0000 1.0000 0.0000 x coordinate 1.0000
high-symmetry point: 0.5000 1.0000 0.0000 x coordinate 1.5000
high-symmetry point: 0.7500 0.7500 0.0000 x coordinate 1.8536
high-symmetry point: 0.0000 0.0000 0.0000 x coordinate 2.3142
high-symmetry point: 0.5000 0.5000 0.5000 x coordinate 3.7802
high-symmetry point: 0.2500 1.0000 0.2500 x coordinate 4.3826
high-symmetry point: 0.5000 1.0000 0.0000 x coordinate 4.7462
high-symmetry point: 0.5000 0.5000 0.5000 x coordinate 5.4533
high-symmetry point: 0.7500 0.7500 0.0000 x coordinate 6.0656
high-symmetry point: 0.2500 1.0000 0.2500 x coordinate 6.0656
high-symmetry point: 0.0000 1.0000 0.0000 x coordinate 6.4182


Plottable bands (eV) written to file bands.dat.gnu
Bands written to file bands.dat
```

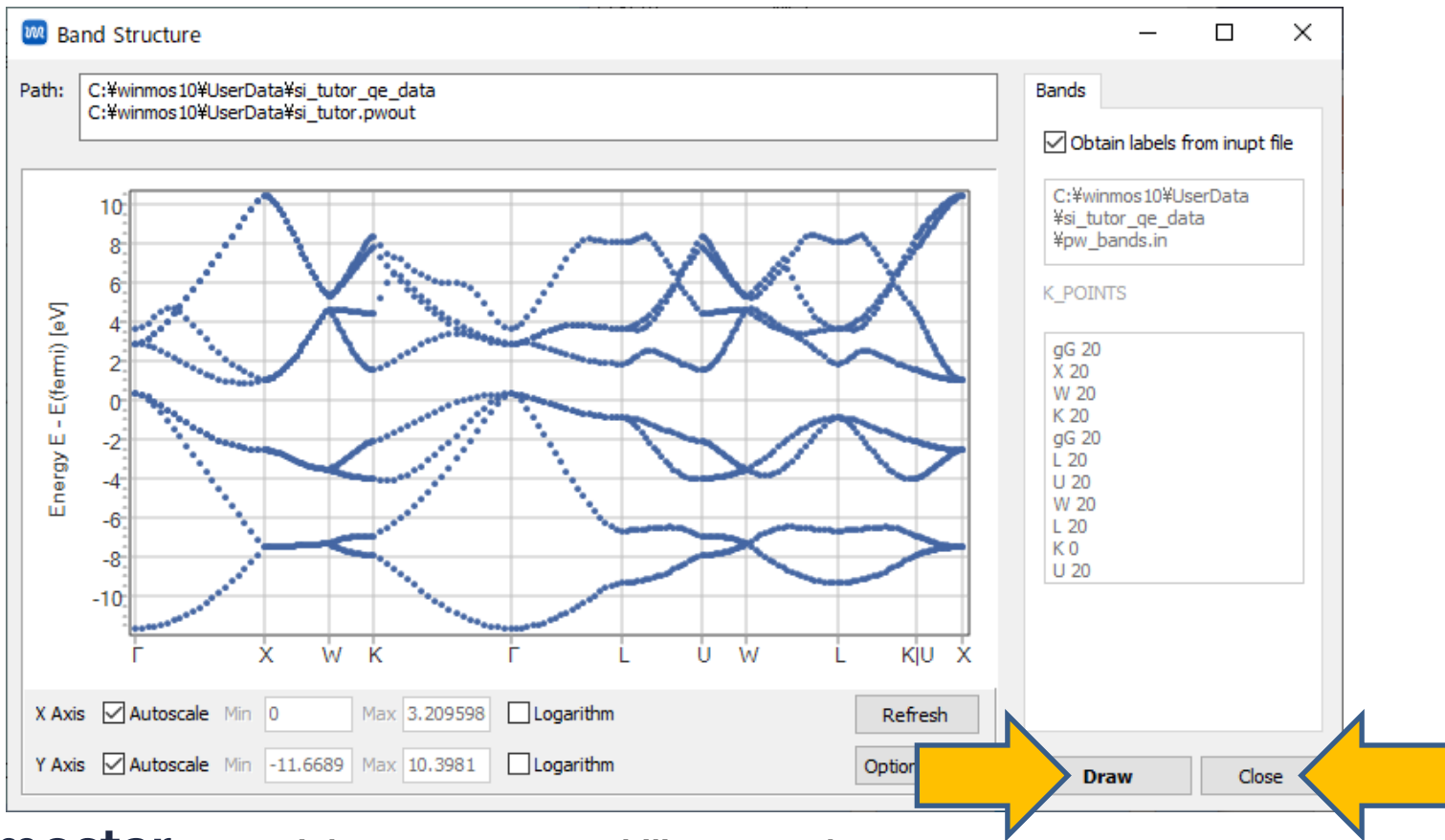

II. QEによる計算

1. 実行中または実行後、 (エネルギー変化) | SCFエネルギー変化(pwout)をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルを開く。
2. SCF計算中のエネルギーの変化を確認できる。
3. 確認後Closeボタンを押してSCF Energy Changeウィンドウを閉じる。




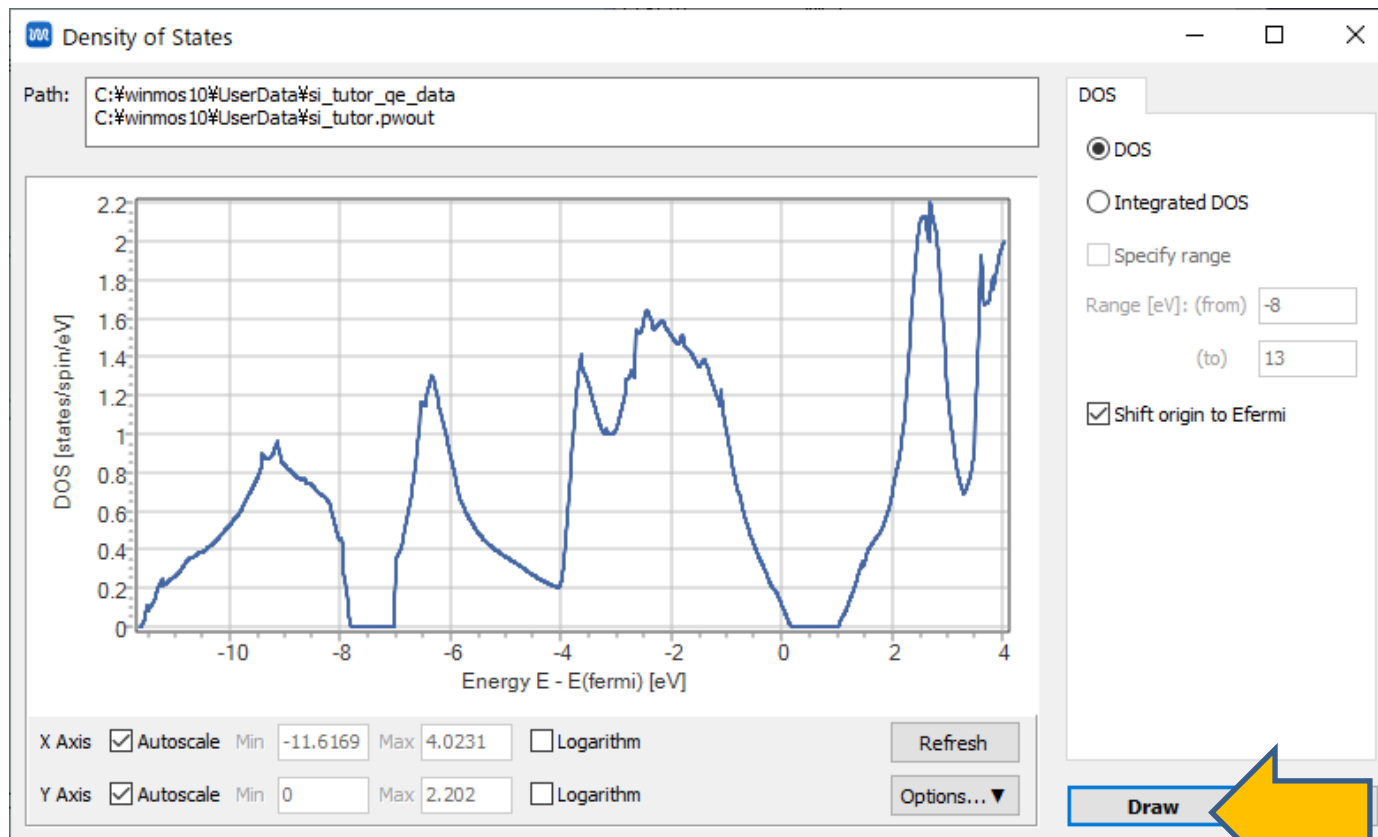
III.結果解析

1. 計算終了後、 (結果解析)| バンド構造をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。
3. **Draw**をクリックするとバンド図が得られる。確認後**Close**をクリックする。



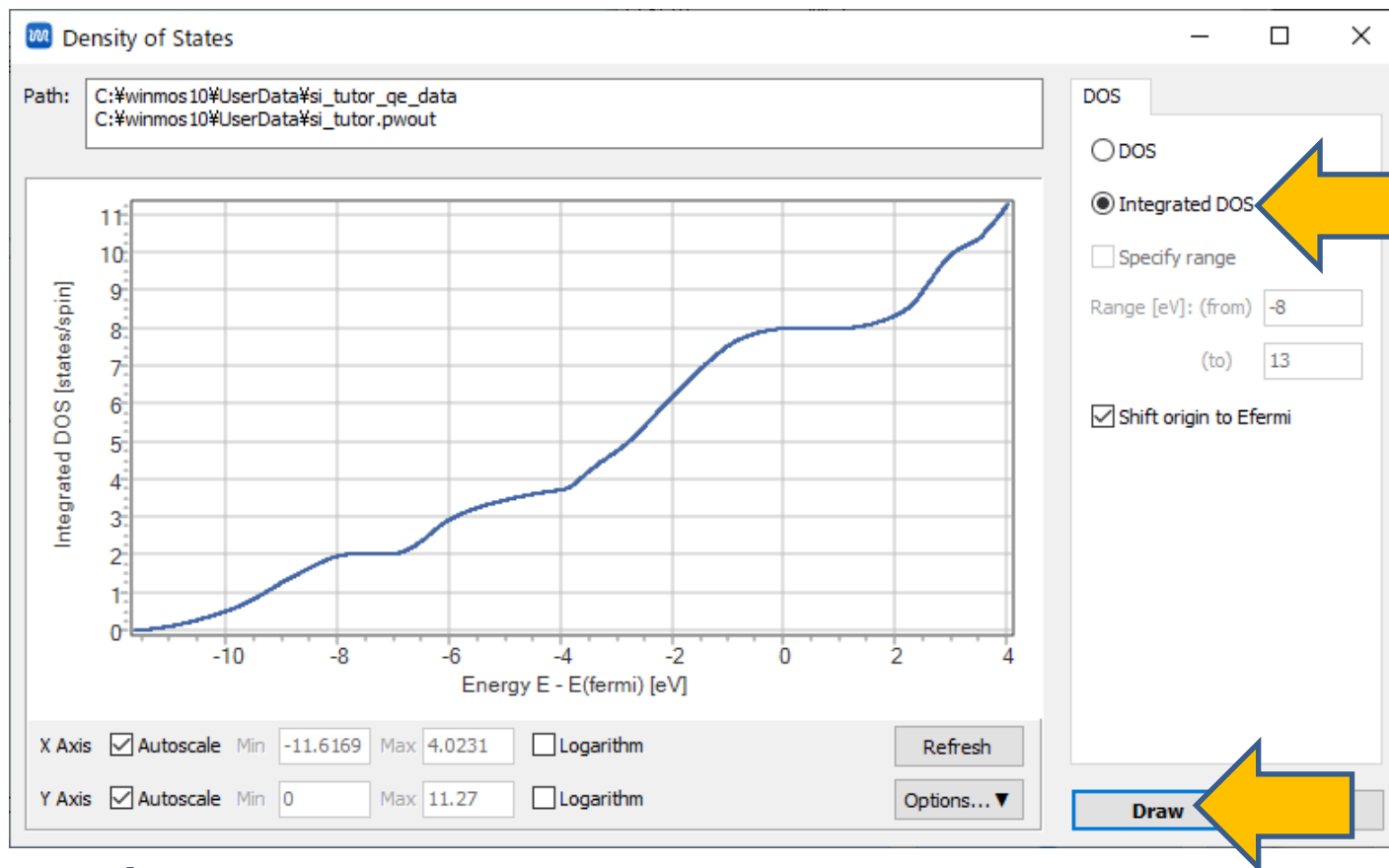
III. 結果解析

1.  (結果解析) | 状態密度をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。
3. 新しいウィンドウが立ち上がり、**Draw**をクリックするとDOSが得られる




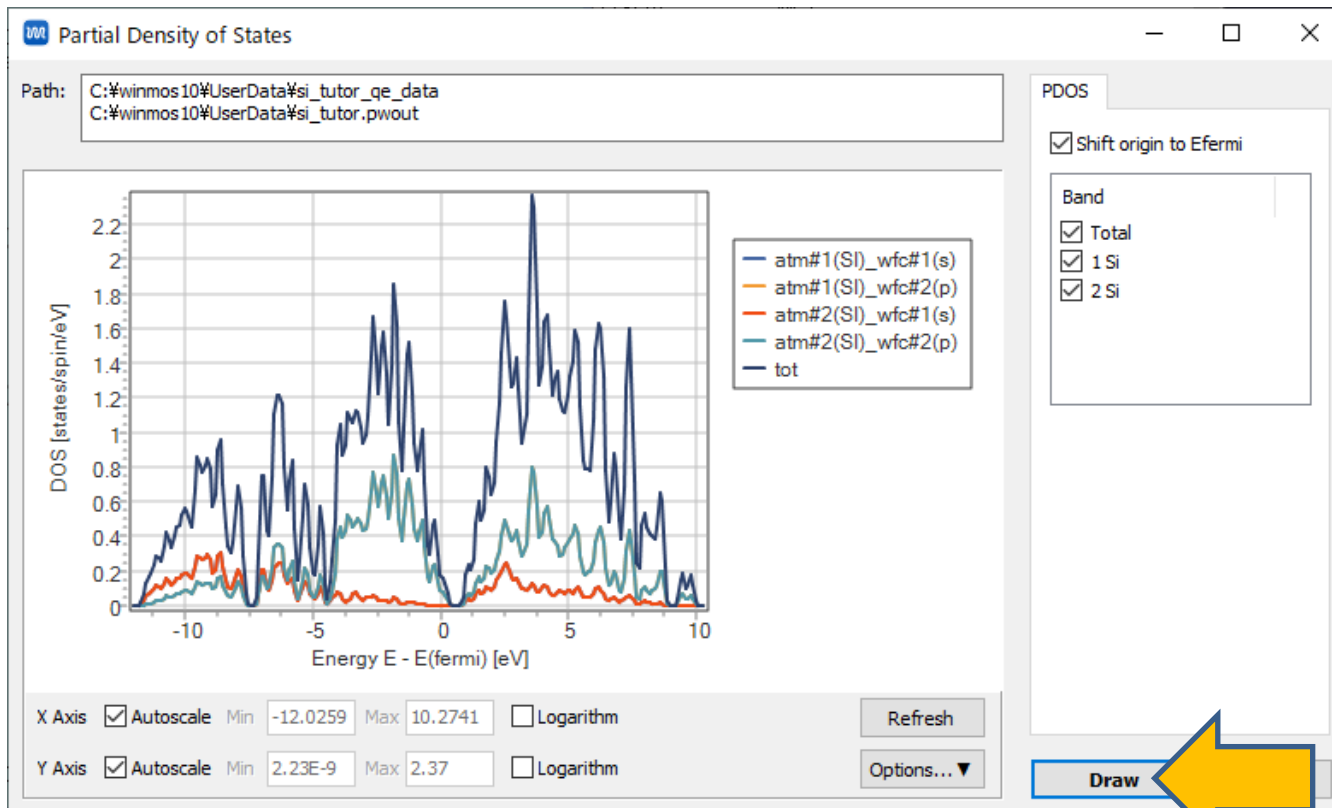
III.結果解析

1. 続けて**Integrated DOS**にチェックを入れる。
2. **Draw**ボタンをクリックすると積算DOSが表示される。
3. **Close**ボタンを押してウィンドウを閉じる。




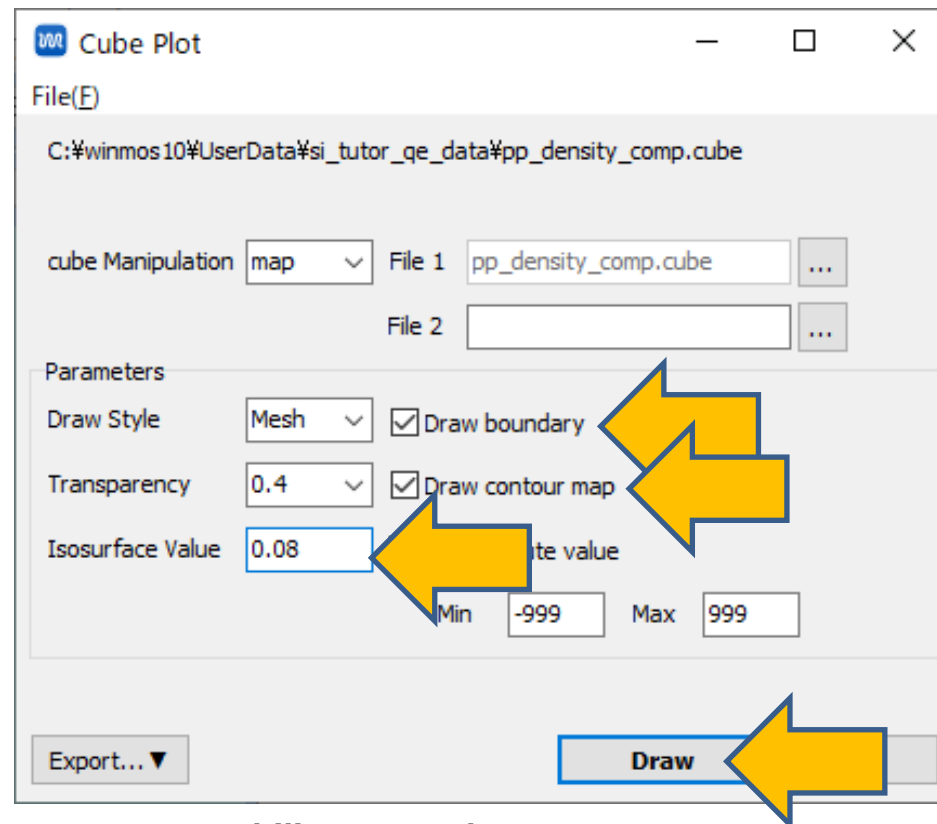
III. 結果解析

1.  (結果解析) | 部分状態密度をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。
3. 新しいウィンドウが立ち上がり、**Draw**を押すとPDOSが得られる。
4. **Close**ボタンを押してウィンドウを閉じる。



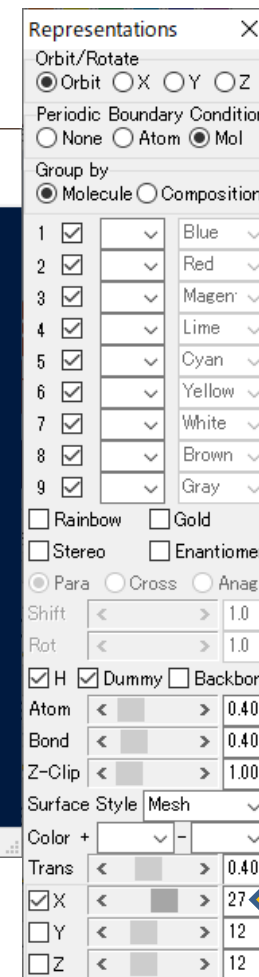
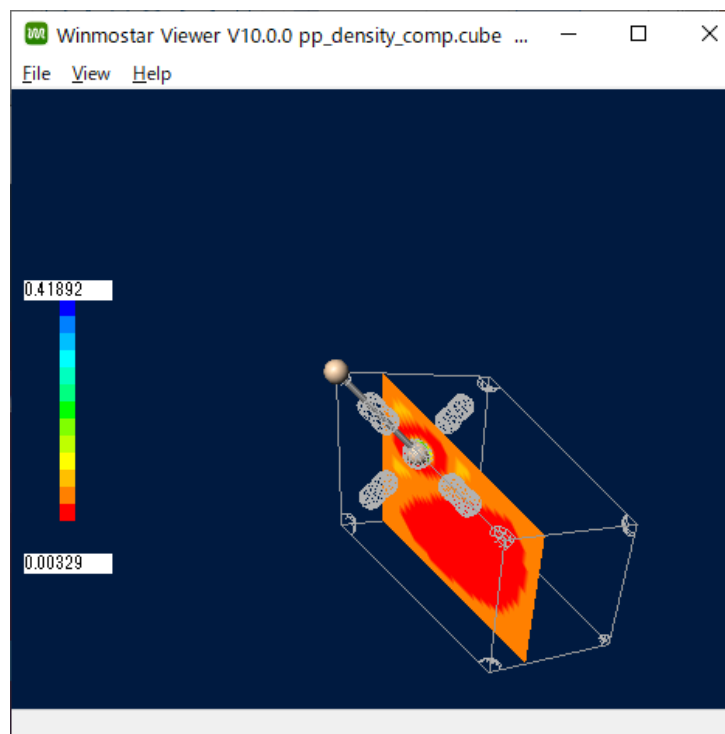
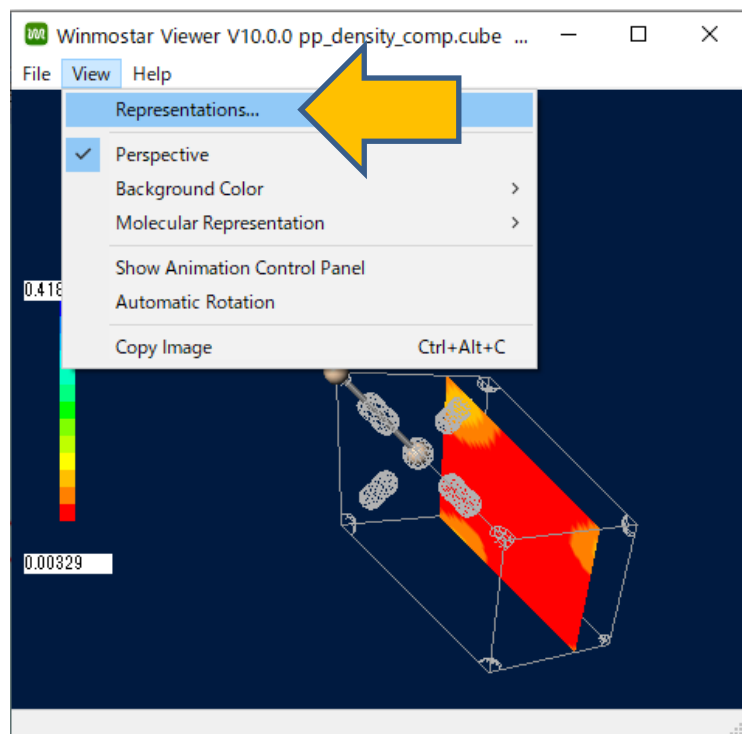
III.結果解析

1.  (結果解析) | 電子密度をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダをクリックする。
3. **Draw contour map**と**Draw boundary**にチェックを入れ、**Isosurface Value**を0.08に設定する。
4. **Draw**をクリックする。



III. 結果解析

1. Winmostar Viewerにて、View | Representationsをクリックする。
2. X、YまたはZのスライダーを動かして、等高線マップを表示する面を選択する。



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