

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO フォノン計算(Phonopy)

V10.0.0

2020年3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 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。

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

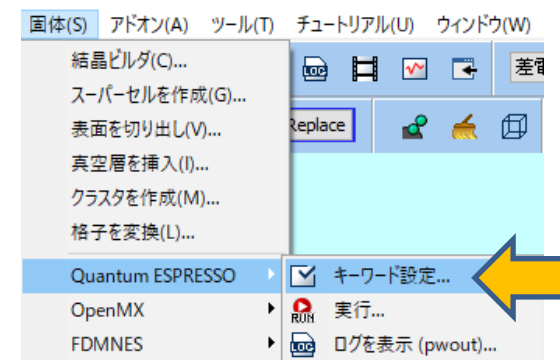
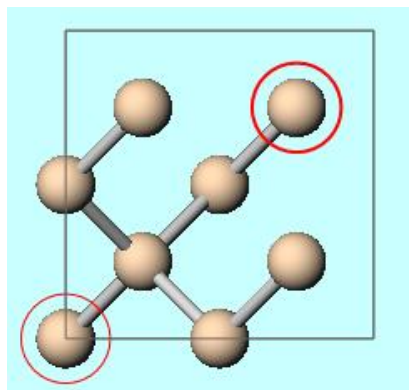
1. ファイルメニュー | 開くをクリックする。

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)

注意点：

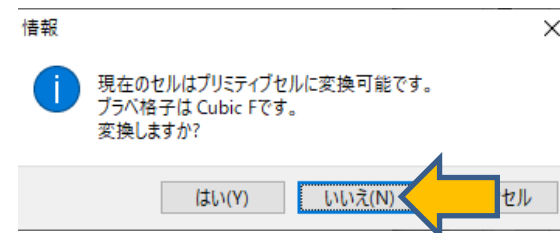
- このCIFファイルは結晶ビルダを用いて作成することが可能である。
- その際は結晶モデリングチュートリアルの手順に従い、以下の情報を元に単位格子を作成する。

シリコン結晶の単位格子について
Crystal system: Cubic
Space group: Fd-3m (227)
Lattice constants: $a=5.4309 \text{ \AA}$
Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)



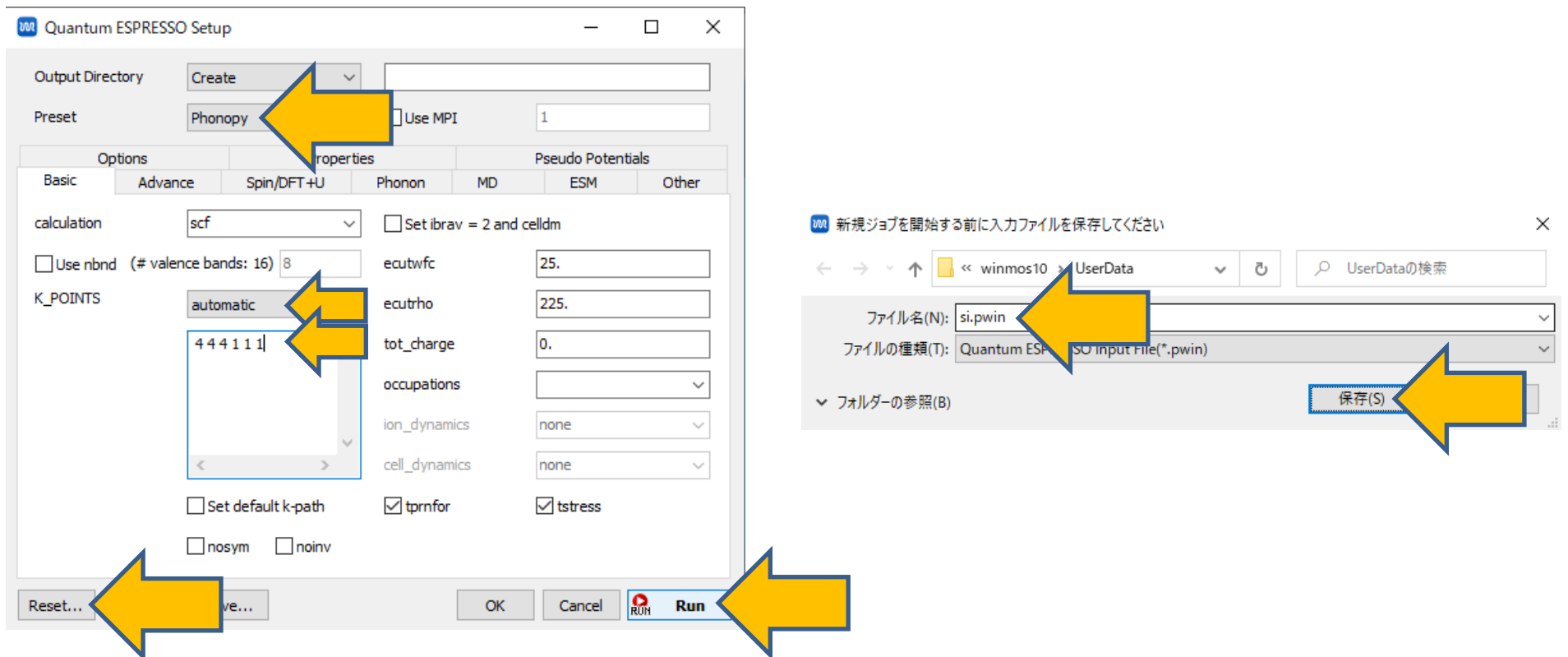
3. 固体 | Quantum ESPRESSO | キーワード設定をクリックする。

4. 格子を変換するか聞かれるので、いいえをクリックする。



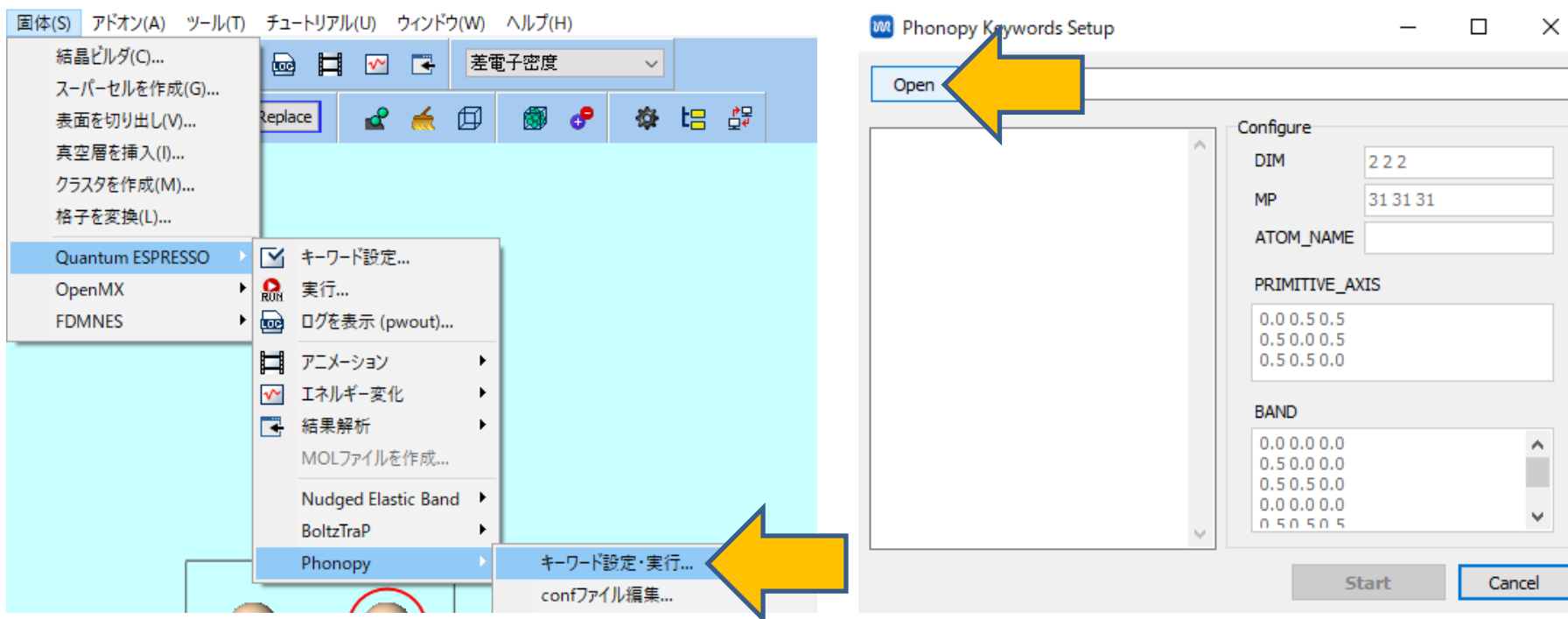
II. Quantum ESPRESSOの入力作成

1. **Reset**をクリックする。
2. **Preset**から**Phonopy**を選択する。
3. **K_POINTS**に**automatic**を選択し、**4 4 4 1 1 1**と入力する。
4. **Run**をクリックし、表示されたウィンドウで**si.pwin**として入力ファイルを保存する。



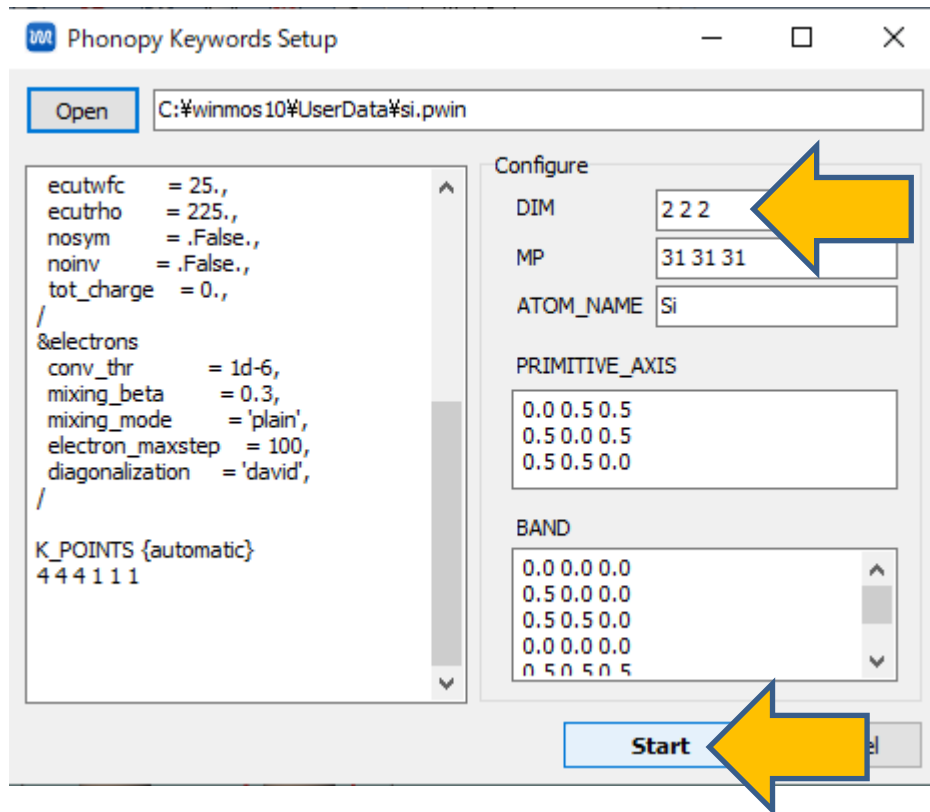
III.スーパーセルの作成

1. 計算終了後、**固体 | Quantum ESPRESSO | Phonopy | キーワード設定・実行**をクリックする。
2. **Open**をクリックし、さきほど保存した**si.pwin**を選択する。



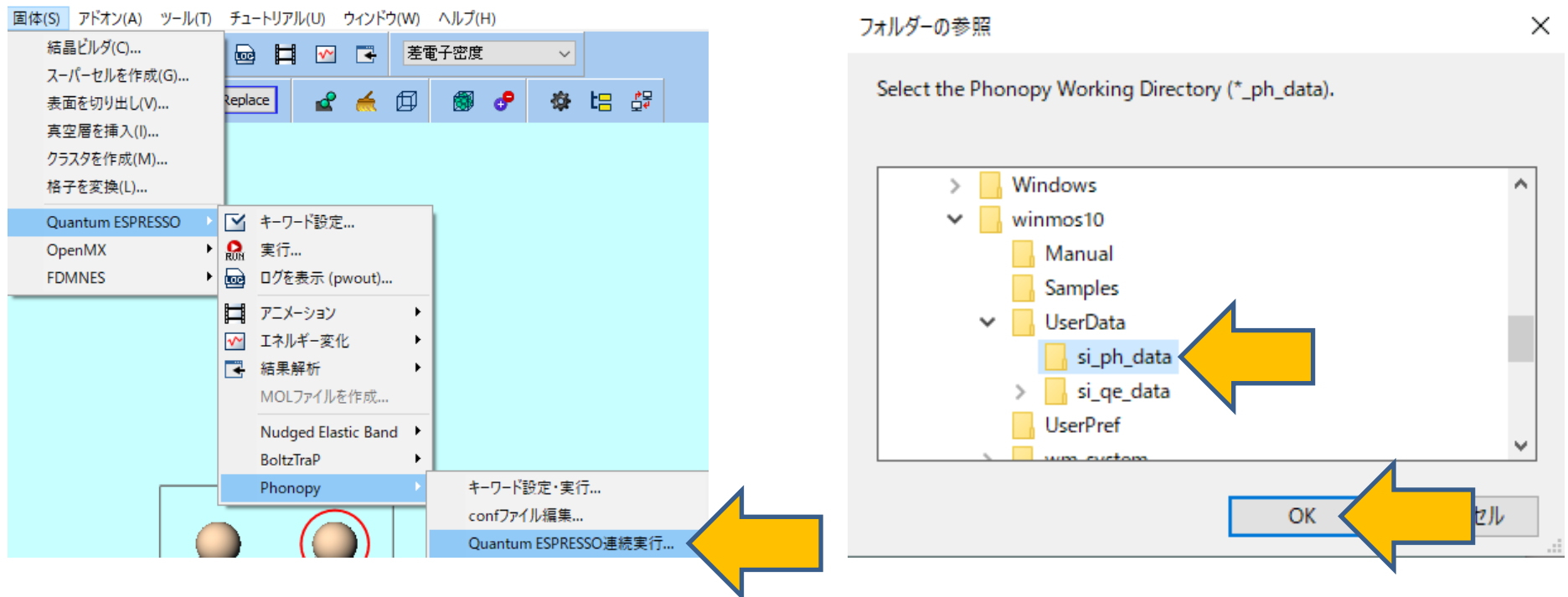
III.スーパーセルの作成

1. **DIM**に作成したいスーパーセルのリピート数を指定する。(今回は**2 2 2**のまま行う)
2. **Start**をクリックすると、スーパーセルの作成が始まる。



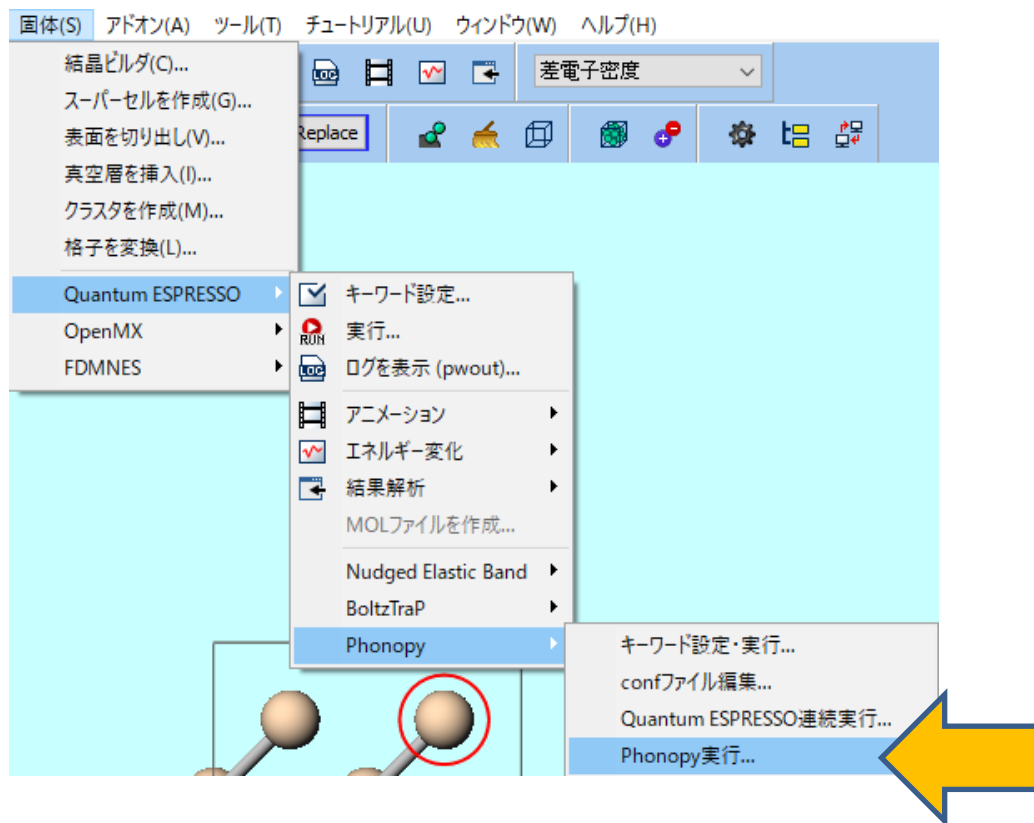
IV. QEの連続実行

1. スーパーセルの作成が終了したら、**固体 | Quantum ESPRESSO | Phonopy | Quantum ESPRESSO連続実行**をクリックする。
2. **si_ph_data**フォルダを選択し、**OK**をクリックすると、ジョブマネージャが起動し、Phonopyによって生成されたスーパーセルの個数分の計算ジョブが開始される。



V. Phonopyの実行

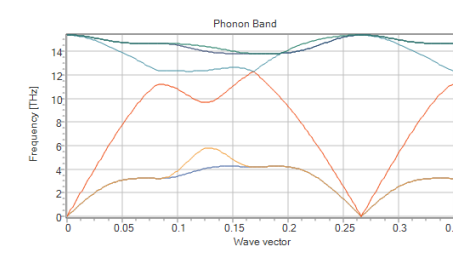
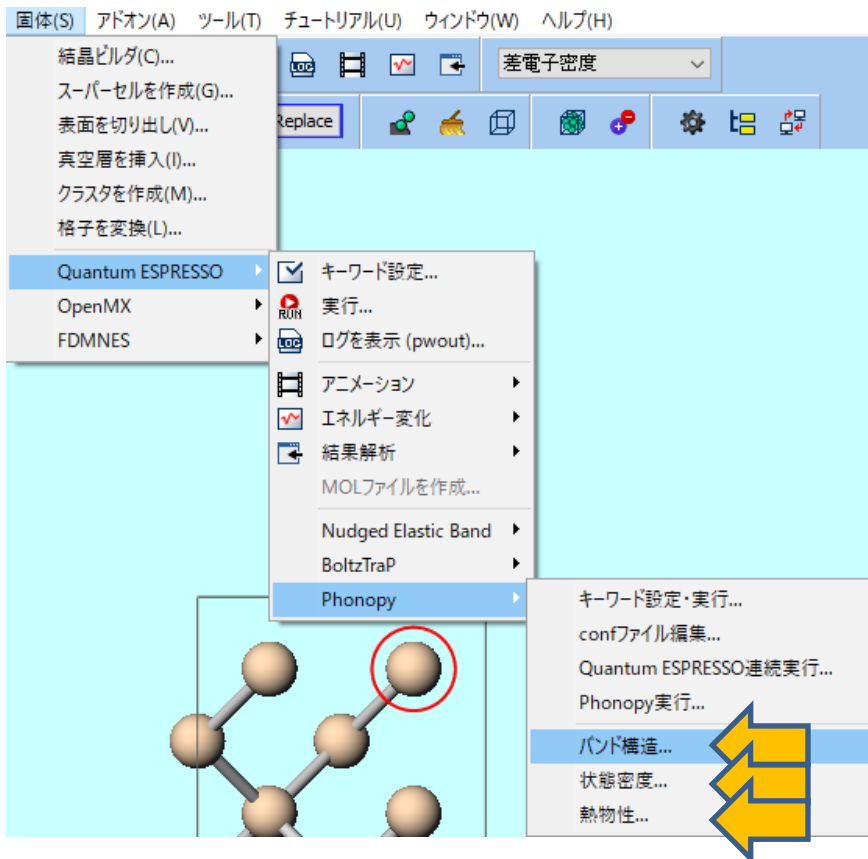
1. 固体 | Quantum ESPRESSO | Phonopy | Phonopyを実行をクリックする。
2. si_ph_dataフォルダを選び、OKをクリックすると計算が始まる。



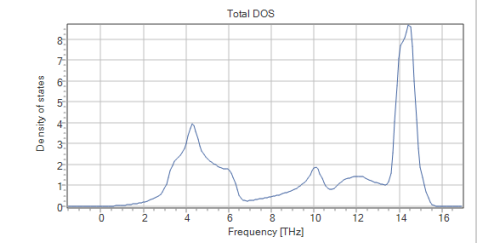
```
*****  
**   phonopy start   **  
*****  
phonopy --qe -f tmp-001.out  
  
1.12.6-r53  
  
1. Drift force of "tmp-001.out" to be subtracted  
0.00000000  -0.00000000  0.00000000  
FORCE_SETS has been created.  
  
phonopy --qe -p -s --dos mesh.conf
```

VI. 結果解析

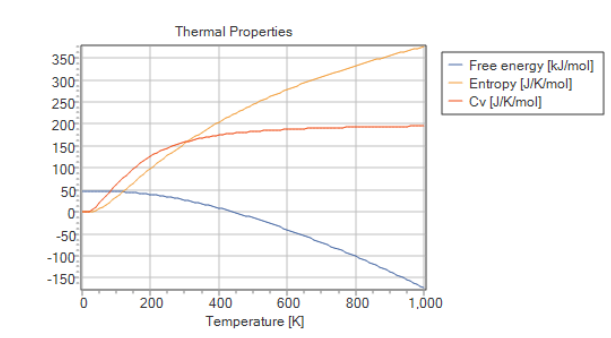
1. 固体 | Quantum ESPRESSO | Phonopyメニューにあるバンド構造、状態密度、熱物性のいずれかをクリックする。
2. si_ph_dataフォルダを選びOKをクリックすると、それぞれ対応するグラフが表示される。



バンド構造



状態密度



熱物性

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、基礎編チュートリアルについては[Winmostar基礎講習会](#)へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては[個別講習会](#)のご依頼をご検討ください。
- 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