

 winmostar チュートリアル

# Quantum ESPRESSO BoltzTraP

V10.0.5

2020年4月6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

- Quantum ESPRESSO(以降QE)によりMg<sub>2</sub>Si結晶のNSCF計算を行い全状態密度を取得します。そして、このQEの出力ファイルをもとにBoltzTraPによりボルツマン方程式に従って輸送係数を算出します。

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は計算結果に大きな影響を与えます。

# 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）。

# 動作環境設定

以下のURLよりSi.pbe-mt-fhi.UPF, Mg.pbe-mt-fhi.UPFを入手し、Quantum ESPRESSOインストールフォルダの下のpseudoフォルダに入れWinmostarを再起動する。

<http://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials/fhi-pp-from-abinit-web-site>

## FHI PP FROM ABINIT WEB SITE

1																	2														
H																	He														
3	4											5	6	7	8	9	10														
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne														
11	12											13	14	15	16	17	18														
Na	Mg											Al	Si	S	Cl	Ar															
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36														
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr														
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54														
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe														
55	56															57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70		
Cs	Ba															* Lanthanoids	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	
87	88	89-102	103	104	105	106	107	108	109											111	112	113	114	115	116	117	118				
Fr	Ra	**	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt											Cn	Fl	Mc	Lv	Tl	Pb	Bi	Po	At	Oh	Ts	Og
** Actinoids		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No																

### Mg.pbe-mt\_fhi.UPF

Pseudopotential  
Method: Mg  
Functional type: Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) exchange correlation functional  
Nonlinear core correction  
scalar relativistic

### Si.pbe-mt\_fhi.UPF

Pseudopotential  
Method: Si  
Functional type: Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) exchange correlation functional  
scalar relativistic

# 動作環境設定

**本機能を用いるためには、Cygwinのセットアップが必要です。**

- [https://winmostar.com/jp/download\\_jp.html](https://winmostar.com/jp/download_jp.html)のインストール方法のCygwinの設定手順に従います。

(7) MDまたはSolid/バックの計算（およびその他の一部の処理）を実行する場合は、以下のいずれかのリンク先の手順でCygwinの環境を構築します。

[ビルド済みのcygwin\\_wmをインストールする場合（推奨）](#)

[cygwin\\_wmをビルドする場合（非推奨、上級者向け）](#)

[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合（ベータ版）](#)

# I. モデルの作成1

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**mg2si.cif**を開く。  
(デフォルトではC:\¥winmos10¥Samples¥mg2si.cif)
3. ソルバー一覧から**Quantum ESPRESSO**を選択し、 **(キーワード設定)** をクリックする。

※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。

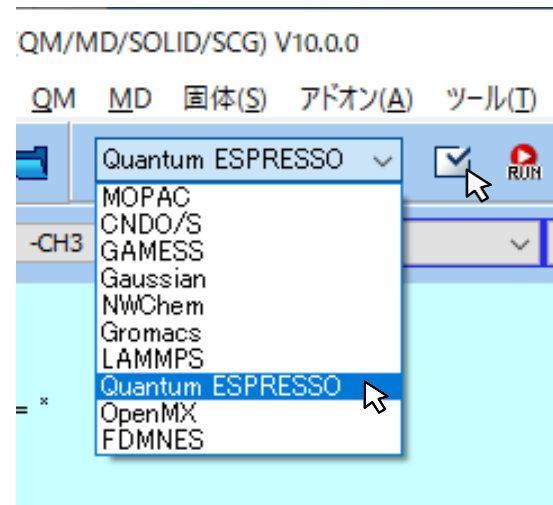
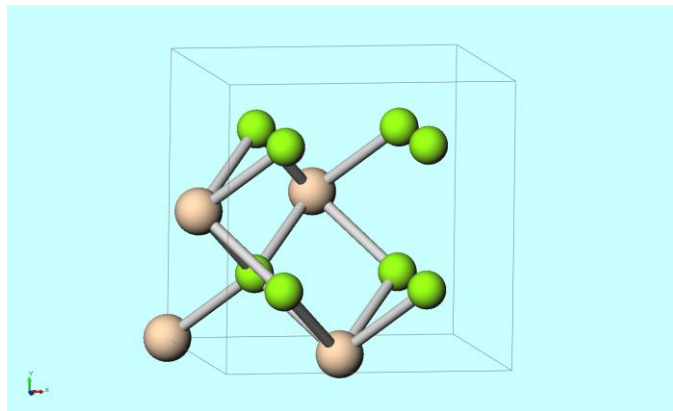
## Mg<sub>2</sub>Si単位格子について

Crystal system : Cubic

Space group : Fm-3m (225)

Lattice constants : a=6.351 Å

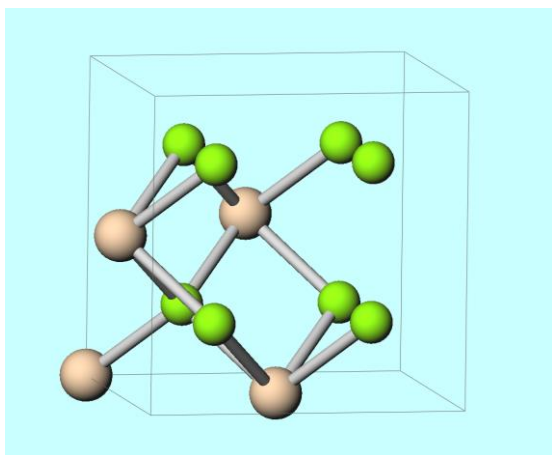
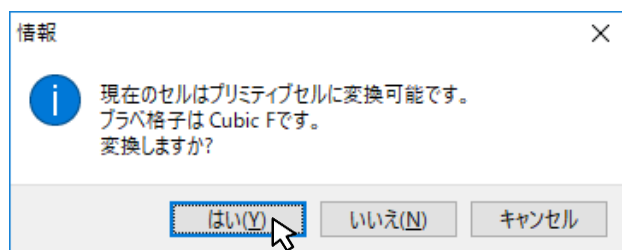
Asymmetric unit : Si (0.0 0.0 0.0), Mg (0.25 0.25 0.25)



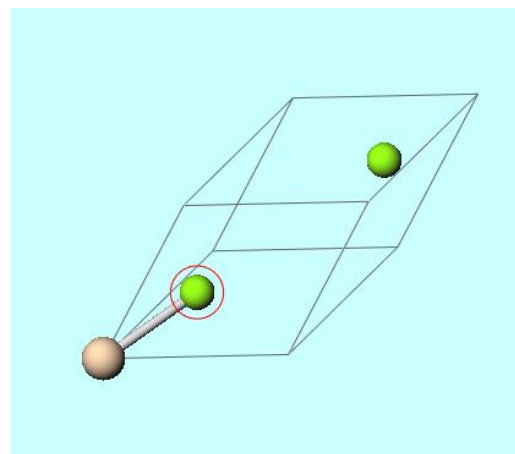
# I. モデルの作成2

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。

メイン画面上の単位格子がコンベンショナルセルからプリミティブセルに変換される。



コンベンショナルセル

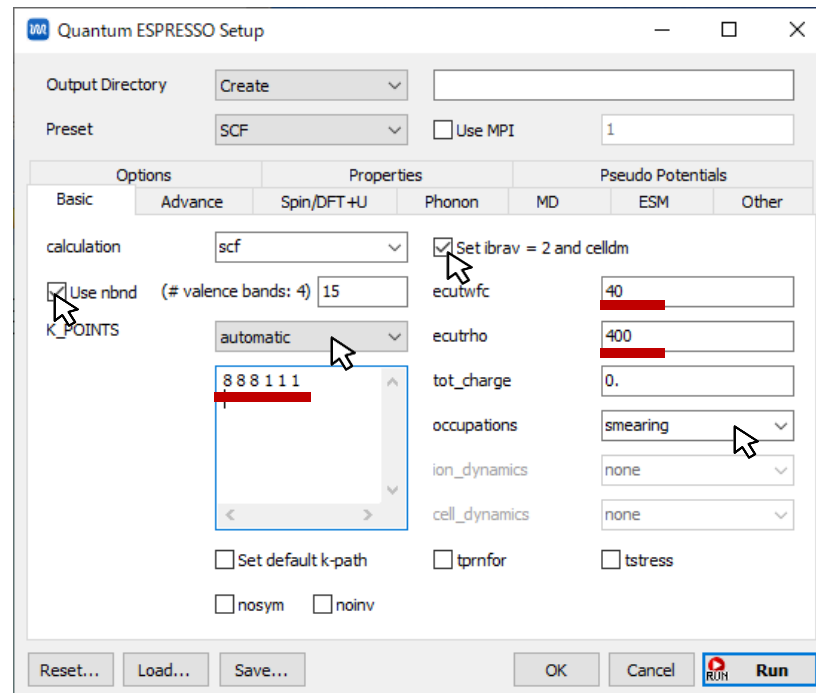


プリミティブセル



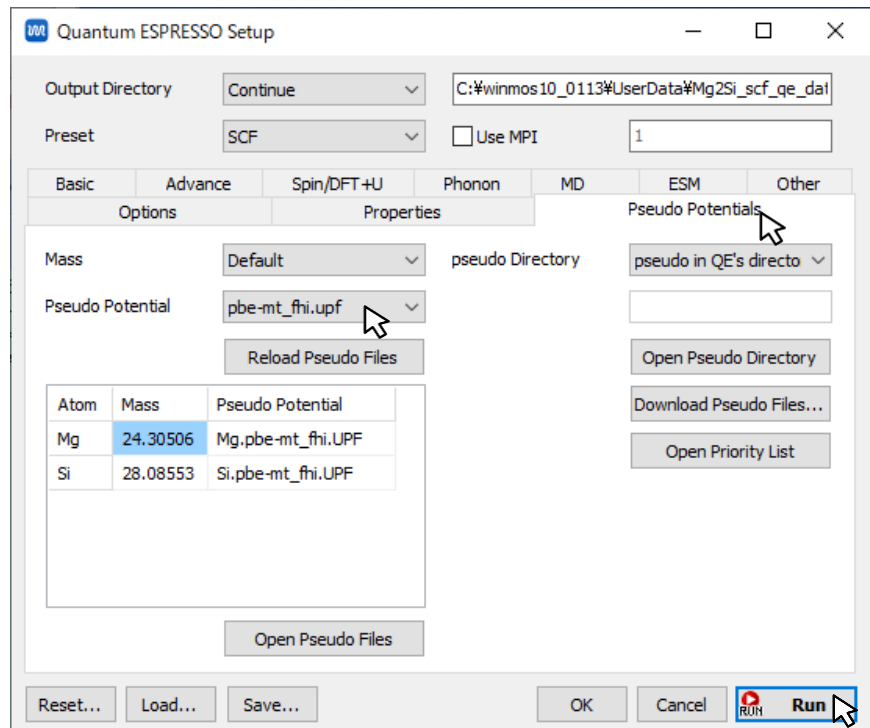
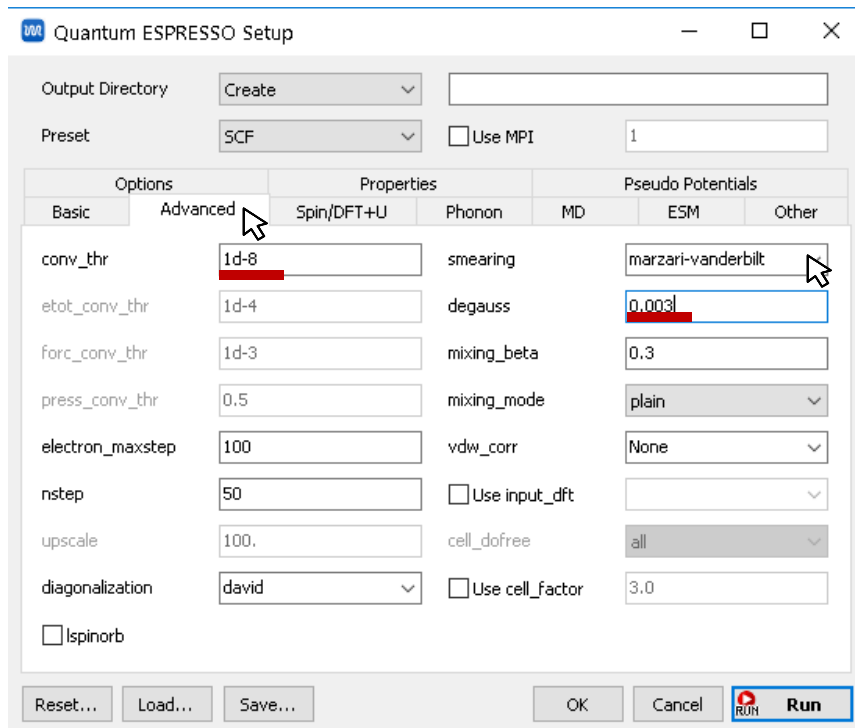
## II. QEによるSCF計算

1. **Reset**をクリックする。
2. **Basic**タブにて、以下のように設定する。
  - **Use nbnd**にチェックを入れ、その右のフォームに**15**と入力する。
  - **K\_POINTS**から**automatic**を選択し、**8 8 8 1 1 1**と入力する。
  - **Set ibrav = 2 and celldm**にチェックを入れる。
  - **ecutwfc**を**40**, **ecutrho**を**400**と入力する。
  - **occupations**から**smearing**を選択する。



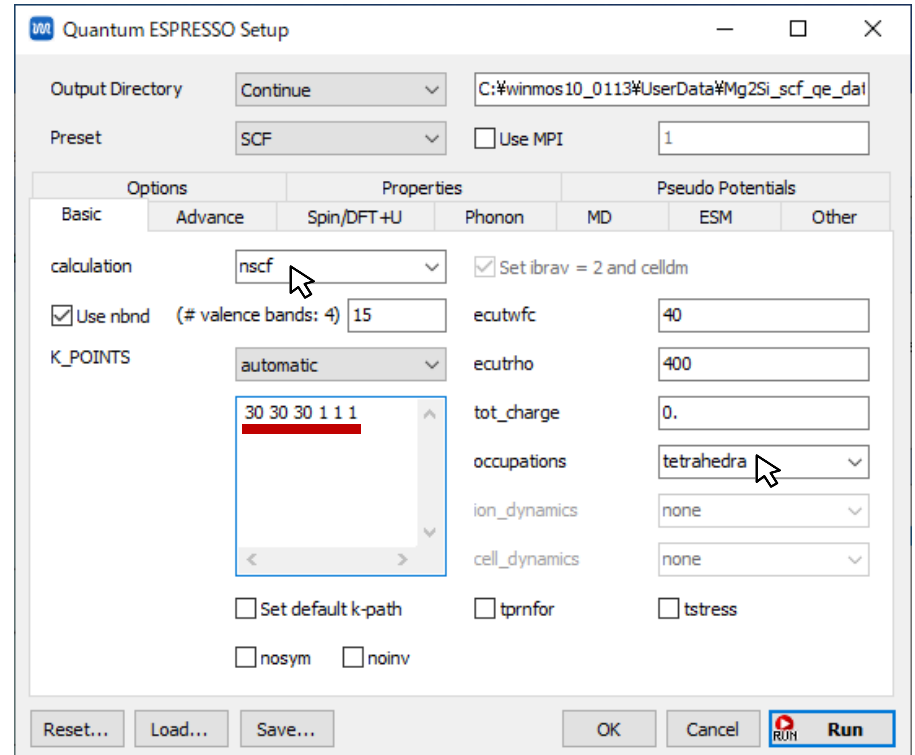
## II. QEによるSCF計算

1. **Advanced**タブにて、以下のように設定する。
  - **conv\_thr**を**1d-8**と入力する。
  - **smearing**から**marzari-vanderbilt**を選択し、**degauss**に**0.003**と入力する。
2. **Pseudo Potentials**タブにて、**Pseudo Potential**から**pbe-mt\_fhi.upf**を選択する。
3. **Run**をクリックし、ファイル名に**Mg2Si\_scf.pwin**と入力し保存する



# III. QEによるNSCF計算

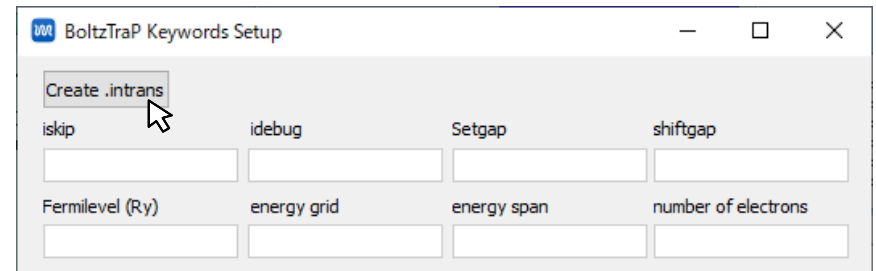
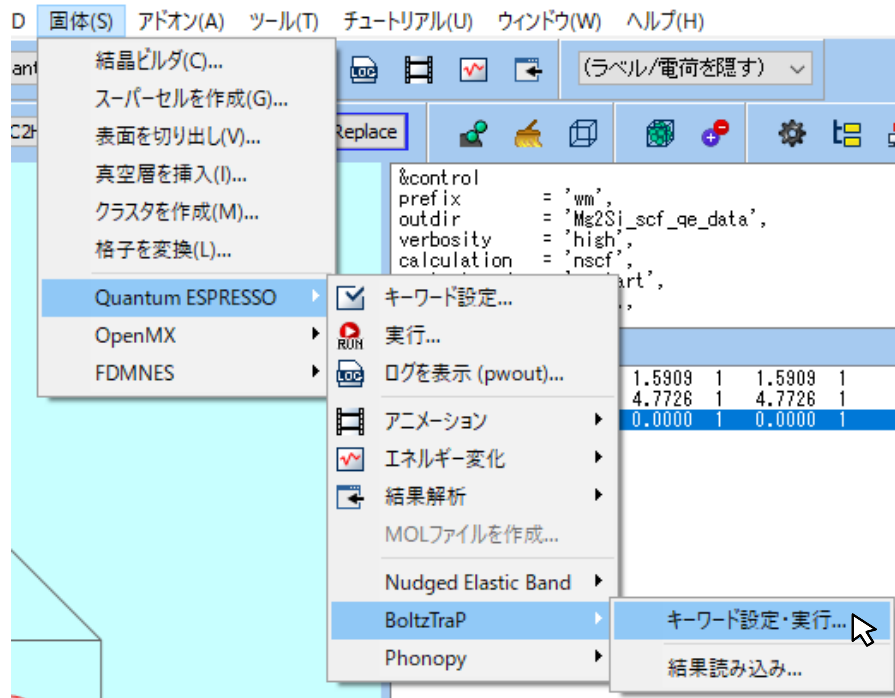
1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. Output DirectoryからContinueを選択する。
3. Basicタブにて、以下を入力する。
  - **calculation = nscf**
  - **K\_POINTS = automatic, 30 30 30 1 1 1**
  - **occupation = tetrahedra**



4. **Run**をクリックし、ファイル名に**Mg2Si\_nscf.pwin**と入力して保存する。

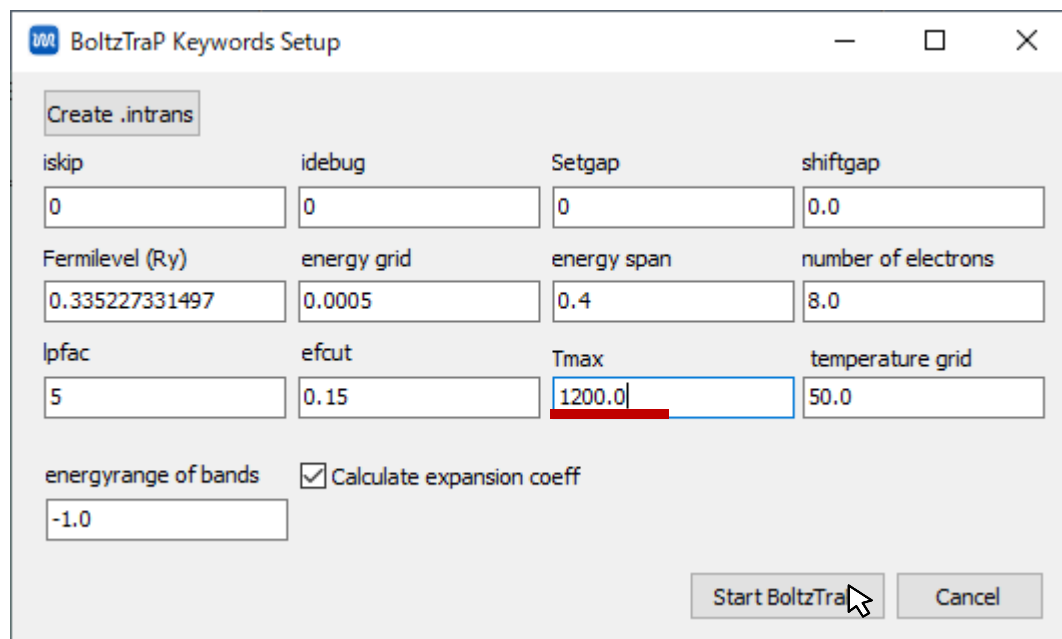
# IV. intransファイルの作成

1. Quantum ESPRESSOの計算終了後、**固体 | Quantum ESPRESSO | BoltzTraP | キーワード設定・実行**をクリックする。
2. **Create .intrans**をクリックする。
3. ダイアログ上で**Mg2 Si\_nscf.pwout**を選び、**開く**をクリックする。  
.intransファイルが作成され、フォームに読み込まれる。



## V. BoltzTraPによる計算

1. Tmaxを1200と変更する。
2. **Start BoltzTraP**をクリックする。キーワード設定画面は閉じられ、コンソール画面が起動する。

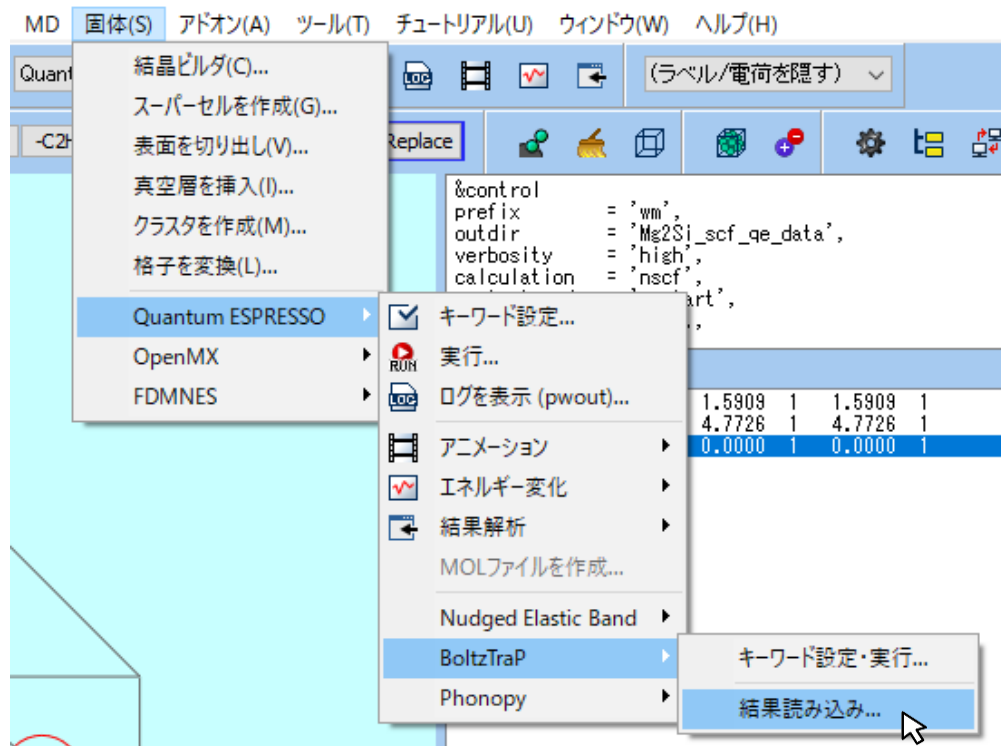


The screenshot shows the "BoltzTraP Keywords Setup" dialog box. The "Tmax" field is highlighted with a red underline and contains the value "1200.0". The "Start BoltzTraP" button is highlighted with a mouse cursor. The dialog box contains the following fields and values:

Field	Value
iskip	0
idebug	0
Setgap	0
shiftgap	0.0
Fermilevel (Ry)	0.335227331497
energy grid	0.0005
energy span	0.4
number of electrons	8.0
lpfac	5
efcut	0.15
Tmax	1200.0
temperature grid	50.0
energyrange of bands	-1.0
Calculate expansion coeff	<input checked="" type="checkbox"/>

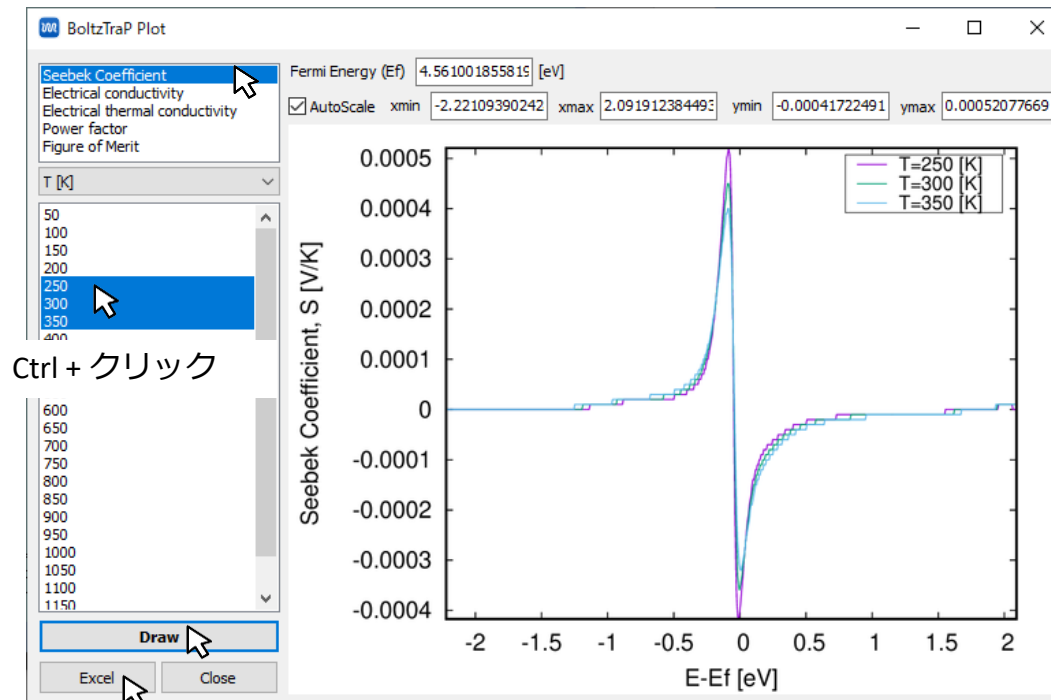
# VI. traceファイルの可視化1

1. 計算終了後、**固体 | Quantum ESPRESSO | BoltzTraP | 結果読み込み**をクリックする。
2. デフォルトで直前のジョブの作業ディレクトリが選択されているので、**OK**をクリックする。



## VI. traceファイルの可視化2

1. 左のパネルの上から**Seebeck Coefficient, T [K], 250, 300, 350**※を選択する。  
※リストからの複数選択の方法はctrlを押しながらクリック。
1. **Draw**をクリックすると、グラフが表示される。
2. このグラフはT=250, 300, 350 [K]の時のゼーベック係数のエネルギー依存性を示している。  
左のパネルのT [K]を**E-Ef [eV]**と変更すると温度依存性グラフも描画できる。
3. **Excel**ボタンをクリックすると表示されているプロットをcsvで出力できる



# 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、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