

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

構造最適化計算

V10.4.3

2021年4月1日

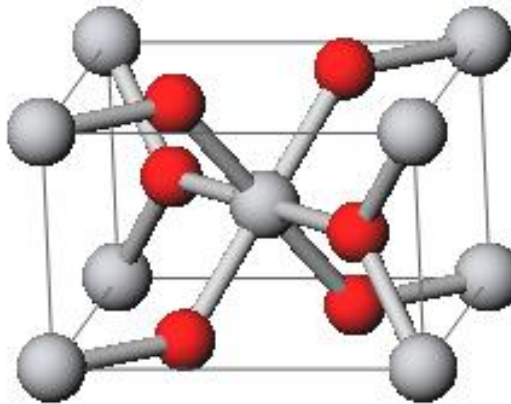
株式会社クロスアビリティ

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

- 本チュートリアルでは、ルチル型TiO₂結晶の構造最適化計算を実施します。セルと原子核位置の両方を同時に最適化します。



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。
- ◆ 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）。

擬ポテンシャルの用意

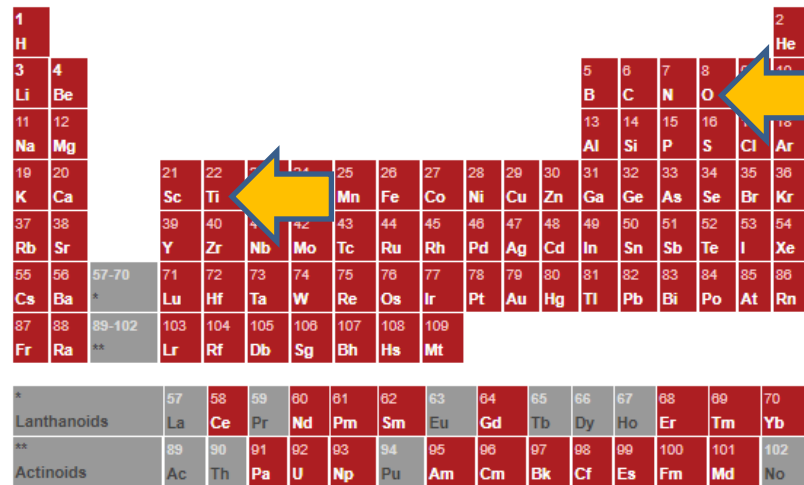
- 本チュートリアルの実施のために、擬ポテンシャルファイルの追加が必要な場合があります。
- 以下のURLより擬ポテンシャルファイルをダウンロードしてください。

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

リンク先に表示される周期表の[O]から[O.pw-mt_fhi.UPF]を、[Ti]から[Ti.pw-mt_fhi.UPF]をQEのインストールフォルダの下pseudoフォルダに保存し、Winmostarを再起動してください。

FHI PP FROM ABINIT WEB SITE

These pseudopotentials are not recommended - the table is kept for reference



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	P	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	57-70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba	*	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
87	88	89-102	103	104	105	106	107	108	109									
Fr	Ra	**	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt									
* Lanthanoids			57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70		
** Actinoids			89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102		
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb		
			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No		

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tio2_rutile.cifを開く。

(デフォルトではC:¥winmos10¥Samples¥tio2_rutile.cif)

※ 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 の操作手順に従い、以下の情報を元に単位格子を作成する。

ルチル型TiO₂単位格子について

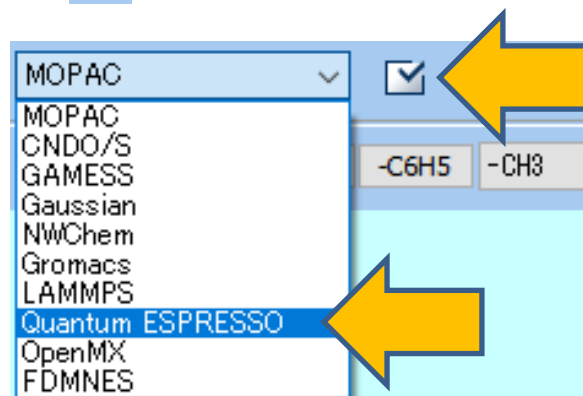
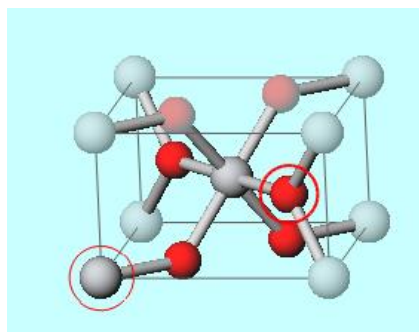
Crystal system : Tetragonal

Space group : P4₂/mnm (136)

Lattice constants : a=4.65327231 Å, c = 2.96920288 Å

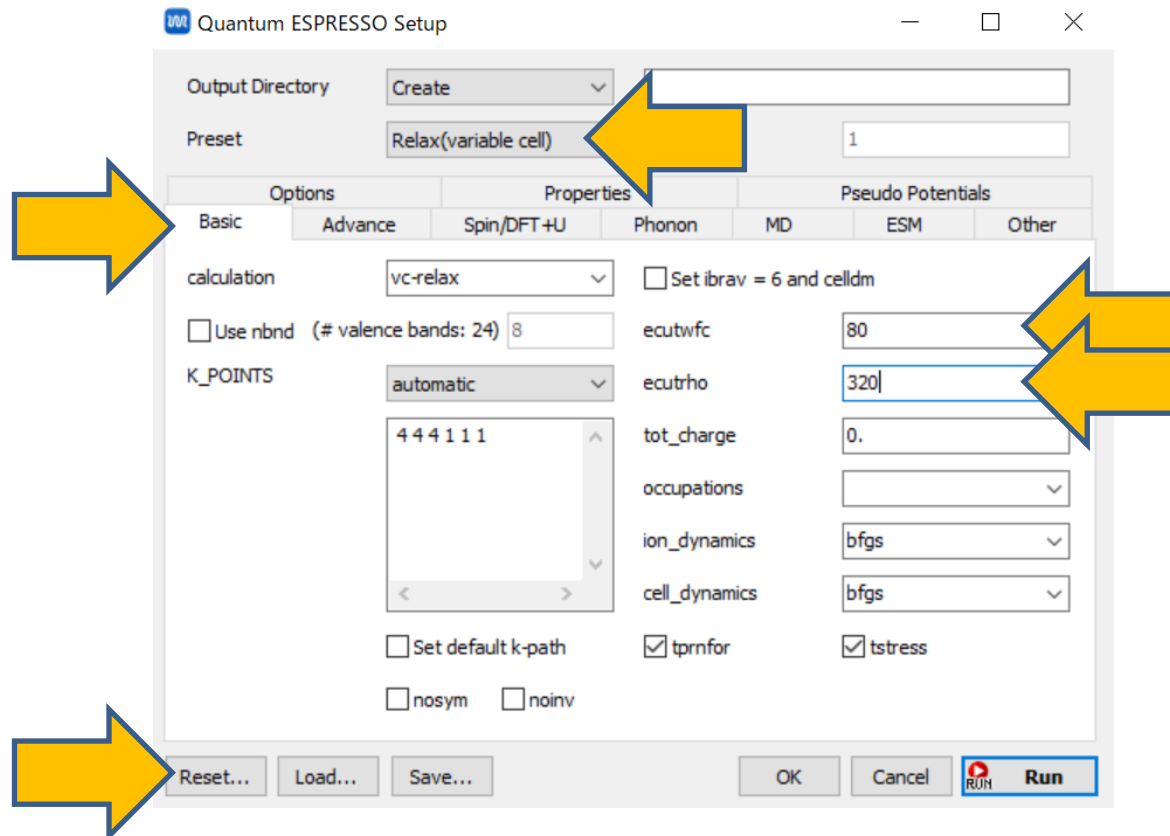
Asymmetric unit : Ti (0.00000 0.00000 0.00000), O (0.19542 0.80458 0.50000)

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。



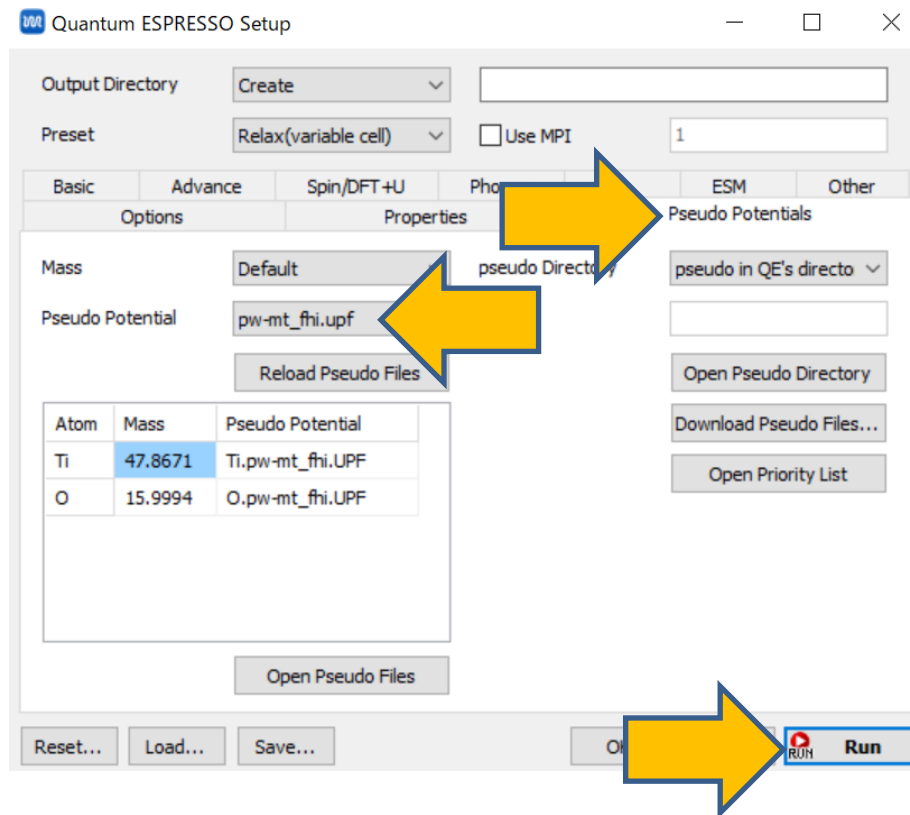
II. 構造最適化計算

1. **Reset...**をクリックする。
2. **Preset**に**Relax(variable cell)**を選択する。
3. **Basic**タブを開き、**ecutwfc**に**80**、**ecutrho**に**320**と入力する。



II. 構造最適化計算

1. Pseudo PotentialsタブでPseudo Potentialにpw-mt_fhi.upfを選択する。
pw-mt.fhi.upfがない場合は4ページの「動作環境設定」に従って設定する。
2. Runをクリックする。ファイル名をtio2_rutile_relaxをとして保存する。
(計算時間は2コアで約2分)




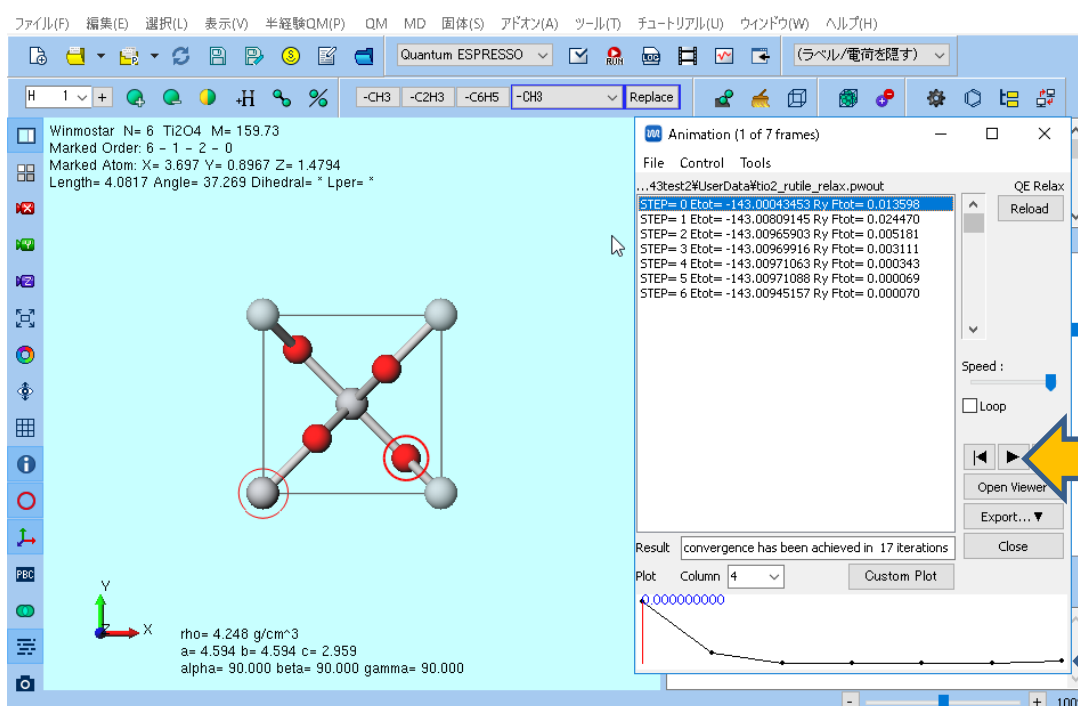
III.結果の表示

1. 計算の終了後、 (構造最適化/BOMD (pwout)) をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるファイルを選択する。



III. 結果の表示

1. Animationウィンドウの  をクリックするとアニメーションが開始される。メイン画面にセルと原子位置の両方が構造最適化される様子を確認できる。

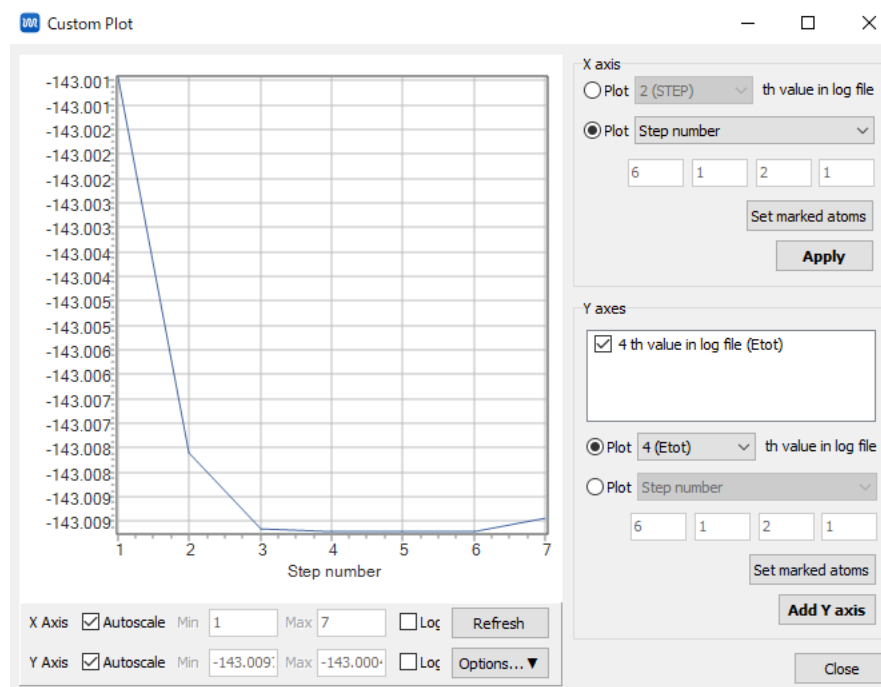
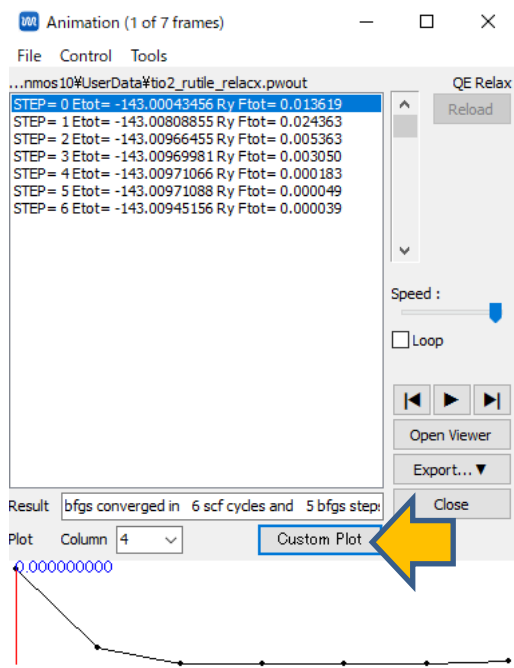


The screenshot displays the Winmostar software interface. The main window shows a 3D ball-and-stick model of a crystal structure with atoms represented by spheres. The interface includes a menu bar at the top, a toolbar, and a status bar. The animation control window is open, showing a list of steps and their corresponding energy values. The energy values are: STEP= 0 Etot=-143.00043453 Ry Ftot= 0.013598; STEP= 1 Etot=-143.00809145 Ry Ftot= 0.024470; STEP= 2 Etot=-143.00965903 Ry Ftot= 0.005181; STEP= 3 Etot=-143.00969916 Ry Ftot= 0.003111; STEP= 4 Etot=-143.00971063 Ry Ftot= 0.000343; STEP= 5 Etot=-143.00971088 Ry Ftot= 0.000069; STEP= 6 Etot=-143.00945157 Ry Ftot= 0.000070. The animation control window also features a 'Speed' slider, a 'Loop' checkbox, and buttons for 'Open Viewer', 'Export...', and 'Close'. A yellow arrow points to the 'Play' button in the animation control window. Another yellow arrow points to the 'Plot' area, which shows a graph of energy versus step number. The graph shows a sharp increase in energy at the final step, indicating a discontinuity.

エネルギーの変化が最後にわずかに不連続になるのは、Quantum ESPRESSOが、Pulay圧力に起因する問題を避けるために、最後の計算だけ利用する平面波セットを取り直しているからである。このエネルギーの飛びは、カットオフエネルギーを大きくすることで程度軽減できる。初期構造から最終構造が大きく異なる場合は、続けて再度構造最適化計算を実行する。

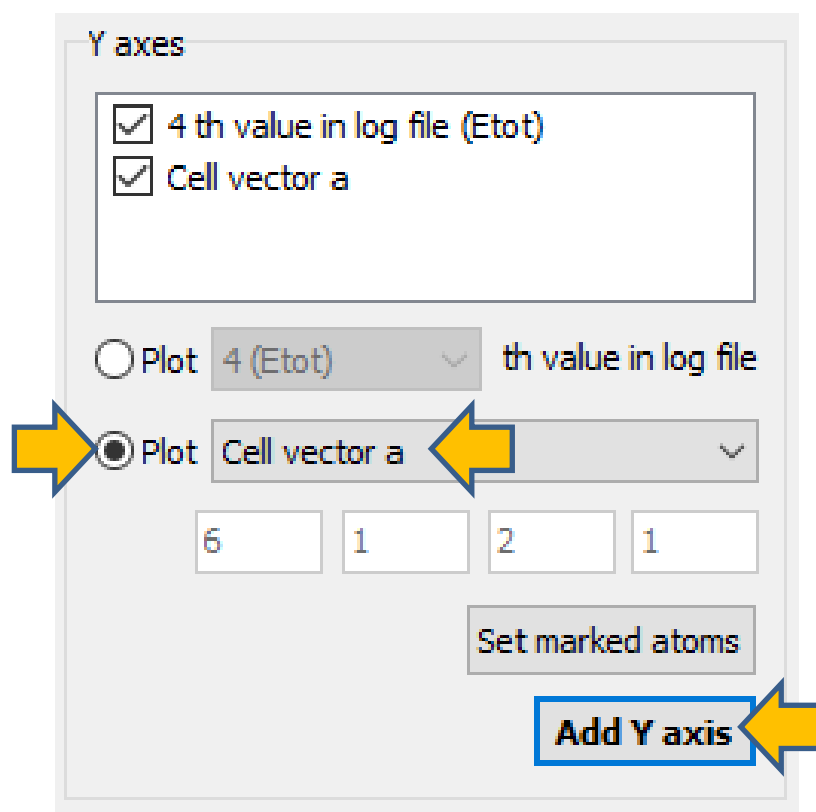
III. 結果の表示

1. 続けてCustom PlotボタンをクリックするとCustom Plotウィンドウが開く。



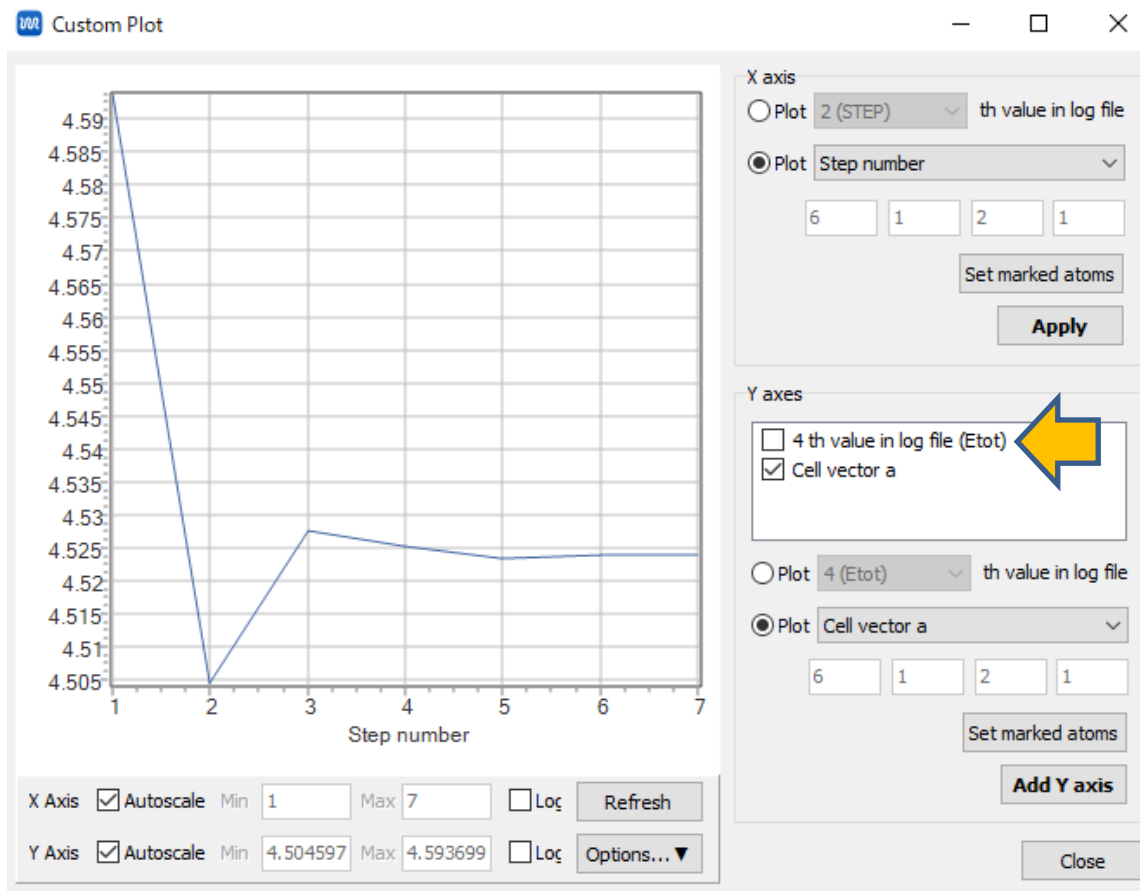
III.結果の表示

1. Y axesの2番目のPlot...にチェックを入れ、プルダウンでCell vector aを選択する。その後、Add Y axesボタンをクリックすると、リストにCell vector aが追加される。



III. 結果の表示

1. リストのデフォルトでチェックが入っていた**4 th value in log file (Etot)**のチェックを外すと、a軸方向の格子定数が最適化されている様子がプロットされる。



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