M winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO フォノン計算(DFPT法)

V10.4.3

2021年4月1日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.



- 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<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。



• フォノン計算からSi結晶のIR、ラマンスペクトルを取得します。



• フォノン計算からSi結晶のフォノンバンド、フォノンDOS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。
- 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。<u>https://qiita.com/xa_member</u>

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。
- <u>https://winmostar.com/jp/installation/</u>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)ごちらの手順に従い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 : <u>GAMESS</u> <u>NWChem</u>
分子動力学計算を実行する方: <u>LAMMPS</u>
固体物理計算を実行する方 : <u>Quantum ESPRESSO</u> <u>FDMNES</u>
Fragment ER(別売)を実行する方: <u>NAMD</u>
※ 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 <u>こちら</u> 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)

※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。

Si単位格子について Crystal system: Cubic Space group: Fd-3m (227) Lattice constants: a=5.4309 Å Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)

- 3. ツールバーのソルバー覧から、Quantum ESPRESSOを選択する。
- 4. ☑ (キーワード設定)をクリックする。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。





- 1. Reset…ボタンをクリックする。
- **2.** K_POINTSにautomaticを指定し、444111(スペース区切り)と入力する。
- 3. Set ibrav = 2 and celldmにチェックを入れる。

	🚾 Quantum ES	SPRESSO Setu	qu			—	\Box \times
	Output Directo	Crea	ite ~				
	Preset	SCF	~	Use MPI		1	
	Optic	ons	Properti	es		Pseudo Potentia	als
	Basic	Advance	Spin/DFT+U	Phonon	MD	ESM	Other
	calculation	scf	~	Set ibrav	/ = 2 and c	elldm	
	Use nbnd	(# valence b	ands: 4) 8	ecutwfc		25.	
	K_POINTS	auto	matic	P		225.	
		44	4111	arge		0.	
				occupations	1		~
				ion_dynamic	CS	none	\sim
		<	>	cell_dynami	CS	none	~
		Se Se	et default k-path	tprnfor		tstress	
			osym noinv				
	Reset	oad Sa	we	[ОК	Cancel	Run
M winmostar	Copyright 20	08-202	1 X-Ability	Co., Ltd			

- 4. Phononタブを選択し、以下の3項目にチェックを入れる。
 - \cdot Run phonon calculation (ph.x) as postprocess
 - · Calc macroscopic dielectric constant
 - · Calc non-resonant Raman
- 5. Acoustic Sum Ruleをsimpleにする。

Quantum	ESPRESSO) Setup					_		
Output Direc	tory	Create		~					
Preset		SCF		∨ Us	e MPI	1			
Op	tions		Properties		Ps		eudo Potentials		
Basic	Advan	ce	Spin/DFT+U	Phe or	MD		ESM	Oth	er
Run phor Run phor	non calcula	tion (ph. 1e-12	x) as postproce		lc phonon dis	persion			
Calc mac	roscopic di	electric c	onstant		(Dispersior	n) 4	4	4	
Calc non	resonant f	Raman		∕	ywords				
Acoustic Sur	n Rule	simple							^
								>	~
	Land				01			0 .	

 Pseudo Potentialsタブを選択し、Pseudo Potentialにpz-vbc.upfを選ぶ。 (QEのph.exeによるラマンスペクトル計算がGGAまたはUltrasoftに対応していないため)
Runをクリックし、ファイル名をsi_vibとして保存する。

🔊 Quanti	um ESPRESS	SO Setu	р			—		×
Output [Directory	Crea	te	~]
Preset		SCF		V Use Mi	ы	1		
Basic	Adva	nce	Spin/DFT+U	Phonon	MD	ESM	Other	
	Options		Prope	erties		Pseudo Potent	tials	
Mass		Defa	ult	pseudo in QE's directo $$				
Pseudo F	Potential	pz-vł	oc.upf	$\langle \rangle$				
		Re	load Pseudo Files		-	Open Pseud	o Directory	
Atom	Mass	Pseude	Potential			Download Pse	eudo Files	
Si	28.08553	Si.pz-\	bc.UPF			Open Pric	ority List	
			- 1 -1	_				
		C	pen Pseudo Files					
Reset	Load	Sa	/e		OK	Cancel	RUN Run	

- 8. 🔁 (結果解析) | IR/ラマンスペクトル…をクリックする。
- 9. デフォルトで選択されたQEの作業ディレクトリと出力ファイルを選択する。



10.IR/Ramanスペクトル表示ウインドウにおいて、画面左のスペクトル表示欄で可視化したい スペクトルを選択する。

11.Animationをクリックすると、アニメーションが表示される。



12.IR、ラマンスペクトルの計算と並行して算出された誘電率は、**si_vib.pwin**を保存した場所に ある**si_vib_qe_data**フォルダの**ph.out**に出力される。



- 1. (**キーワード設定**)をクリックする。
- 2. Phononタブの、以下の2項目からチェックを外す。
 - · Calc macroscopic dielectric constant
 - · Calc non-resonant Raman
- **3. Calc phonon dispersion**にチェックを入れる。
- 4. Runをクリックする。 ファイル名にsi_dispと入力し、保存する。

Quantum ESPRESS	SO Setup				—	\Box \times
Output Directory	Create	~				
Preset	SCF	~	Use MP	I	1	
Options		Propert	ties		Pseudo Potent	ials
Basic Adva	nce Spin	/DFT+U	Phonon	MD	ESM	Other
Run phonon calcu	ation (ph.x) as	postprocess				
Threshold	1e-12		Calc ph	onon disper	sion	
Calc macroscopic o	dielectric consta	nt	K Points (D	ispersion)	4 4	4
Calc non-resonant	Raman		Other Key	words		
Acoustic Sum Rule	simple	~				~
						\sim
			<			>
Reset Load	Save			ОК	Cancel	RUN Run

I. ➡ (結果解析) | フォノン分散曲線をクリックする。
デフォルトで選択されたディレクトリを選択する。



- **1. ASR**にSimple、K Pointsに下図のように入力する。
- 2. Drawをクリックすると、以下のようなフォノン分散曲線が得られる。
- 3. 確認後Closeをクリックする。



- 1. 【 (結果解析) | フォノン状態密度をクリックする。
- 2. デフォルトで選択されたディレクトリを選択する。

MD	固体	ヾ <u>(S)</u> ツール	「(土)							
リモートジョブ投入					Number 🗸					
✓ Re		結晶じルダ			, }_					
		Quantum	ESPRESSO	キーワード設定						
		FDMNES	•		Quantum ESPRESSO実行					
&cont rol				P	woutファイル編集					
7		7 prefix = wm outdir = 'C:¥Usy pseudo_dir = 'C verbosity = 'hi calculation = ' restart_mode = 1 Si 0.00000 2 Si 7.05495		フ 正 ガ ノ オ	Pニメーション (pwout) 電子密度 Löwdin電荷 ポテンシャルエネルギー分布 (ンド構造 状態密度 R. Raman					
					7オノン分散曲線 7オノン状態密度					
				1	い 「 「 「 「 「 「 」 「 」 「 」 「 」 「 」 「 」 「 」					

- 1. ASRにsimpleを指定する。
- 2. Drawをクリックするとフォノン状態密度が描画される。





• 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