

 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

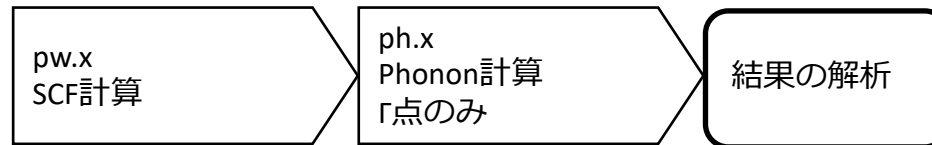
株式会社クロスアビリティ

本書について

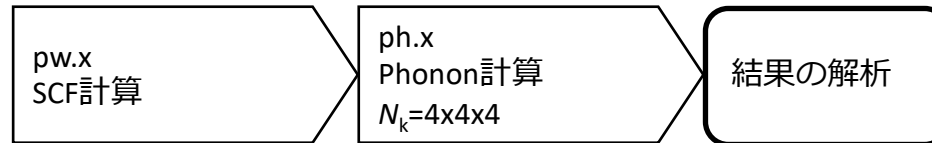
- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - [個別講習会](#)：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

- 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

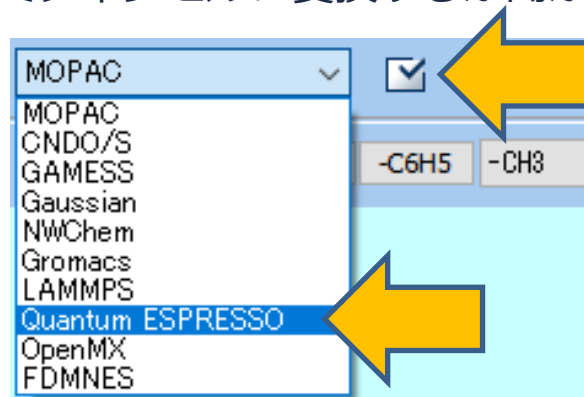
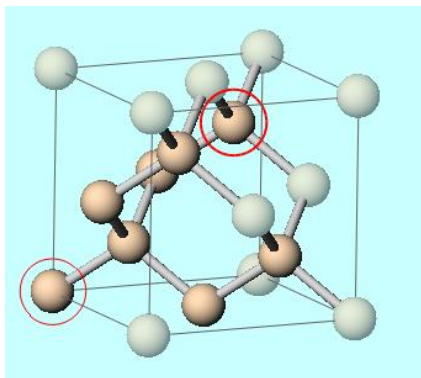
1. ファイルメニュー | 開くをクリックする。
2. サンプルフォルダ内のsi.cifを開く。（デフォルトではC:\winmos10\Samples\si.cif）

※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

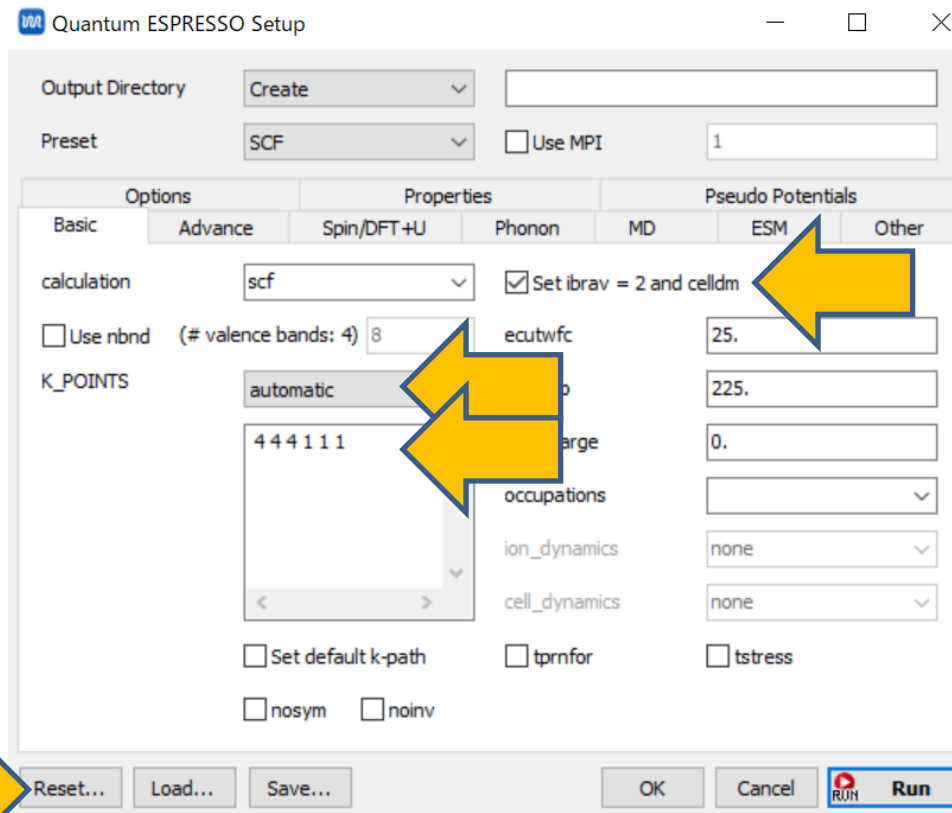
Crystal system : Cubic
Space group : Fd-3m (227)
Lattice constants : a=5.4309 Å
Asymmetric unit : Si (0.0 0.0 0.0)

3. ツールバーのソルバー一覧から、**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。



II. IR・ラマンスペクトル

1. **Reset...**ボタンをクリックする。
2. **K_POINTS**に**automatic**を指定し、**4 4 4 1 1 1**（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。

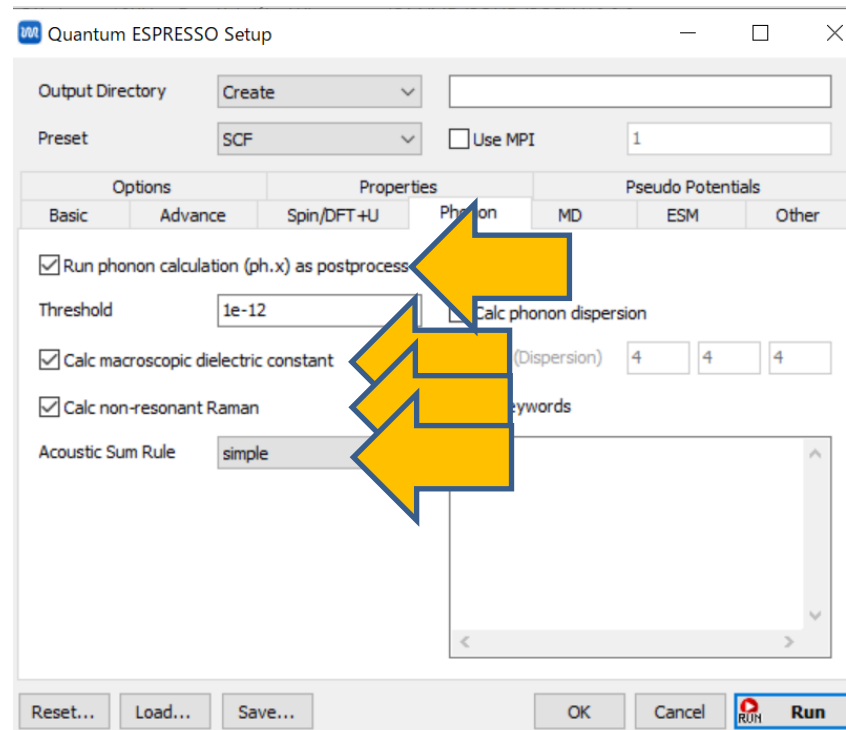


II. IR・ラマンスペクトル

4. Phononタブを選択し、以下の3項目にチェックを入れる。

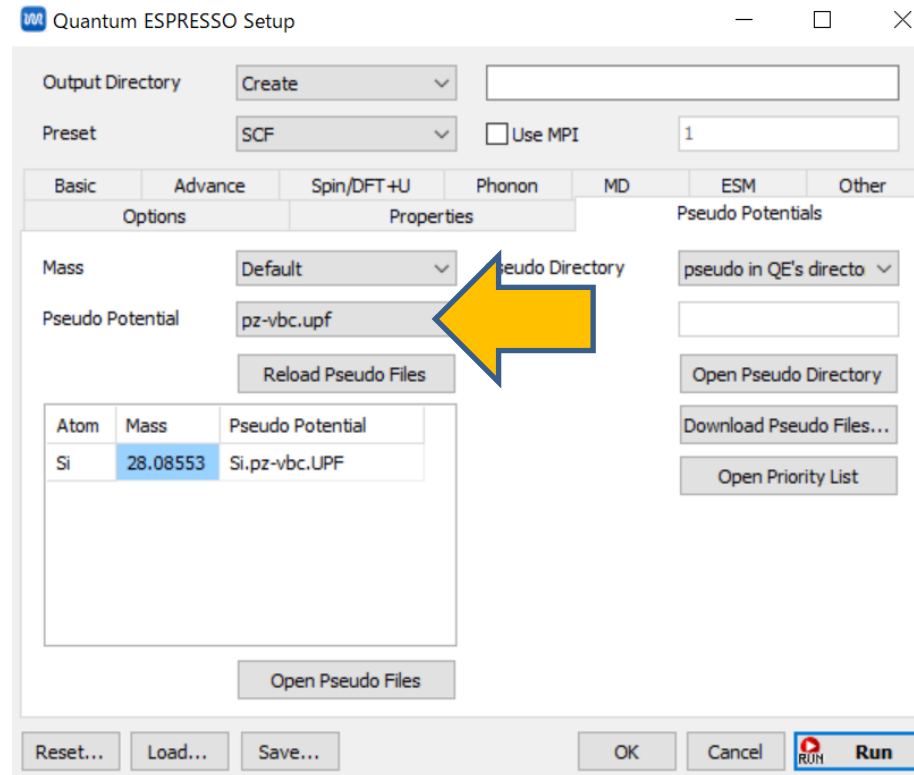
- Run phonon calculation (ph.x) as postprocess
- Calc macroscopic dielectric constant
- Calc non-resonant Raman

5. Acoustic Sum Ruleをsimpleにする。



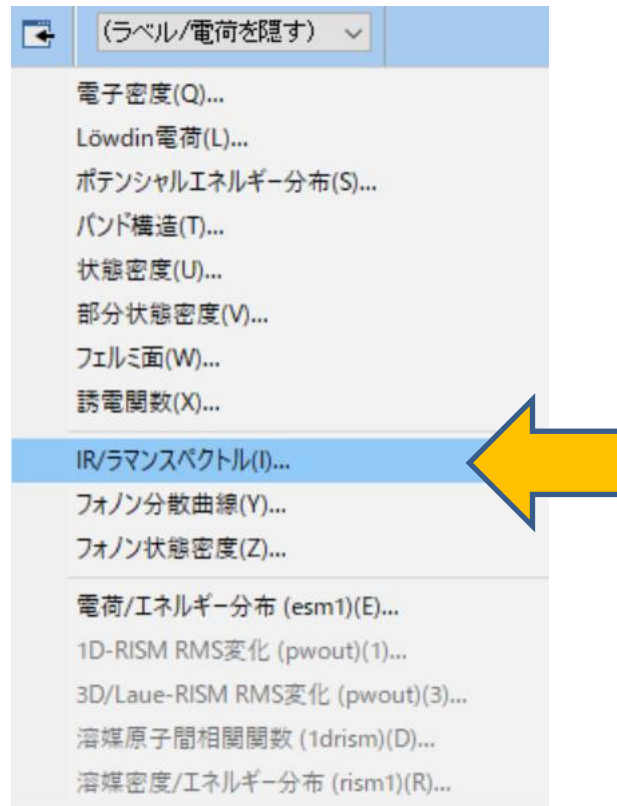
II. IR・ラマンスペクトル

6. **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)
7. **Run**をクリックし、ファイル名を**si_vib**として**保存**する。



II. IR・ラマンスペクトル

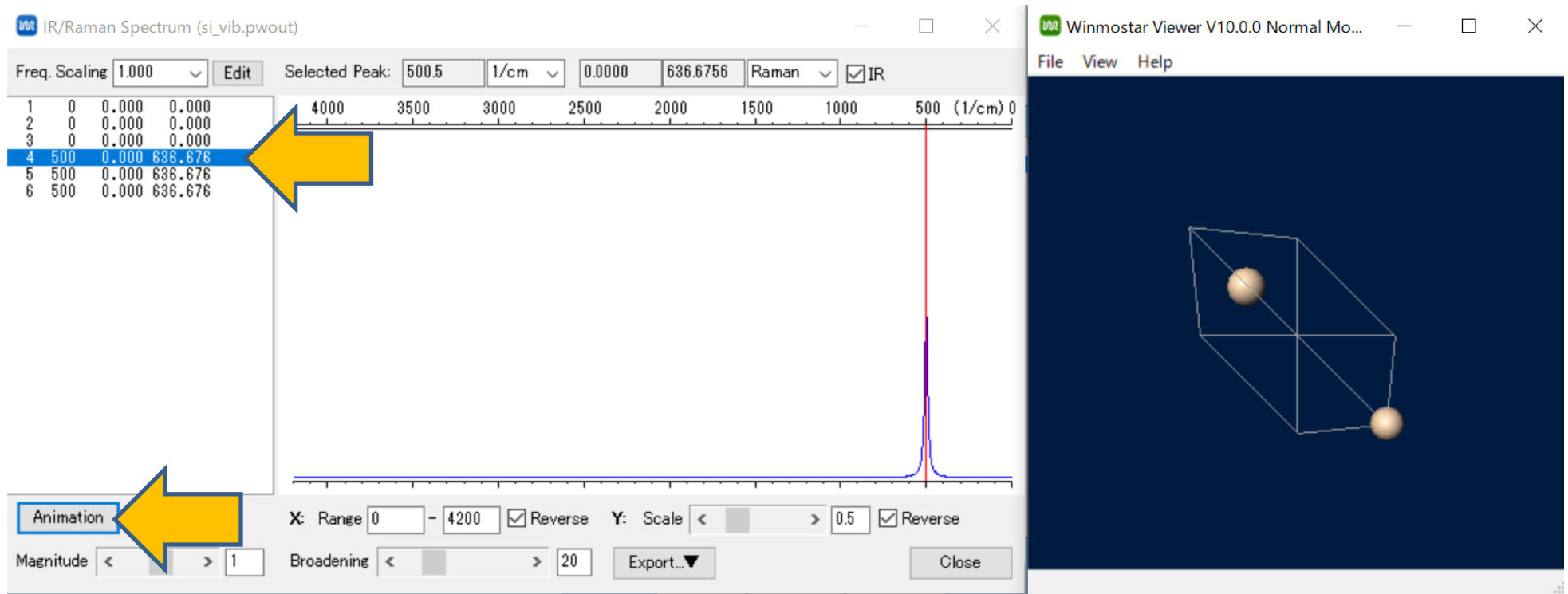
8.  (結果解析) | IR/ラマンスペクトル...をクリックする。
9. デフォルトで選択されたQEの作業ディレクトリと出力ファイルを選択する。



II. IR・ラマンスペクトル

10. IR/Ramanスペクトル表示ウィンドウにおいて、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。



II. IR・ラマンスペクトル

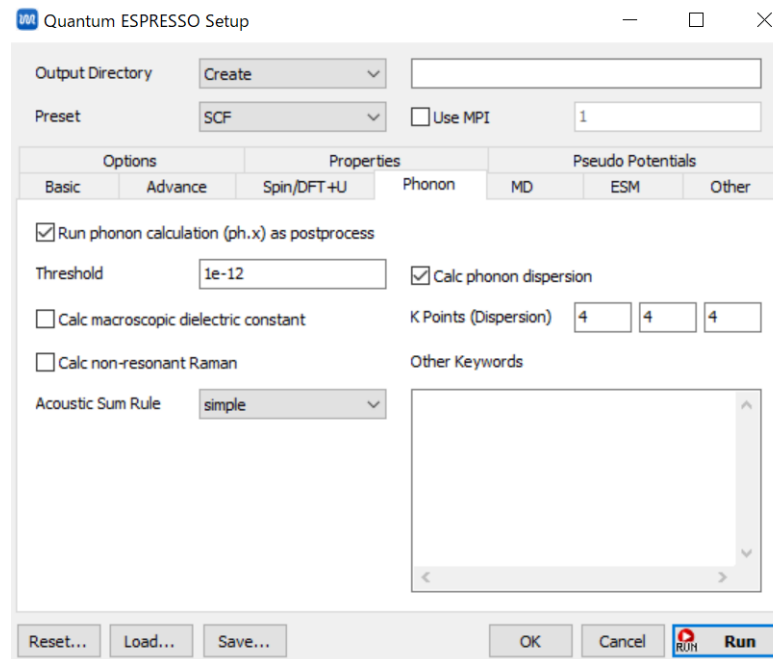
12. IR、ラマンスペクトルの計算と並行して算出された誘電率は、**si_vib.pwin**を保存した場所にある**si_vib_qe_data**フォルダの**ph.out**に出力される。

```
289 | Convergence has been achieved ↓
290 | ↓
291 | Number of q in the star = 1 ↓
292 | List of q in the star: ↓
293 | 1 0.000000000 0.000000000 0.000000000 ↓
294 | ↓
295 | Dielectric constant in cartesian axis ↓
296 | ↓
297 | ( 13.948484934 0.000000000 0.000000000 ) ↓
298 | ( 0.000000000 13.948484934 0.000000000 ) ↓
299 | ( 0.000000000 0.000000000 13.948484934 ) ↓
300 | ↓
301 | Effective charges (d Force / dE) in cartesian axis ↓
302 | ↓
303 | atom 1 SI ↓
304 | Ex ( -0.07609 -0.00000 0.00000 ) ↓
305 | Ey ( -0.00000 -0.07609 -0.00000 ) ↓
306 | Ez ( 0.00000 -0.00000 -0.07609 ) ↓
307 | atom 2 SI ↓
308 | Ex ( -0.07609 0.00000 0.00000 ) ↓
309 | Ey ( 0.00000 -0.07609 -0.00000 ) ↓
310 | Ez ( -0.00000 -0.00000 -0.07609 ) ↓
311 | .
```



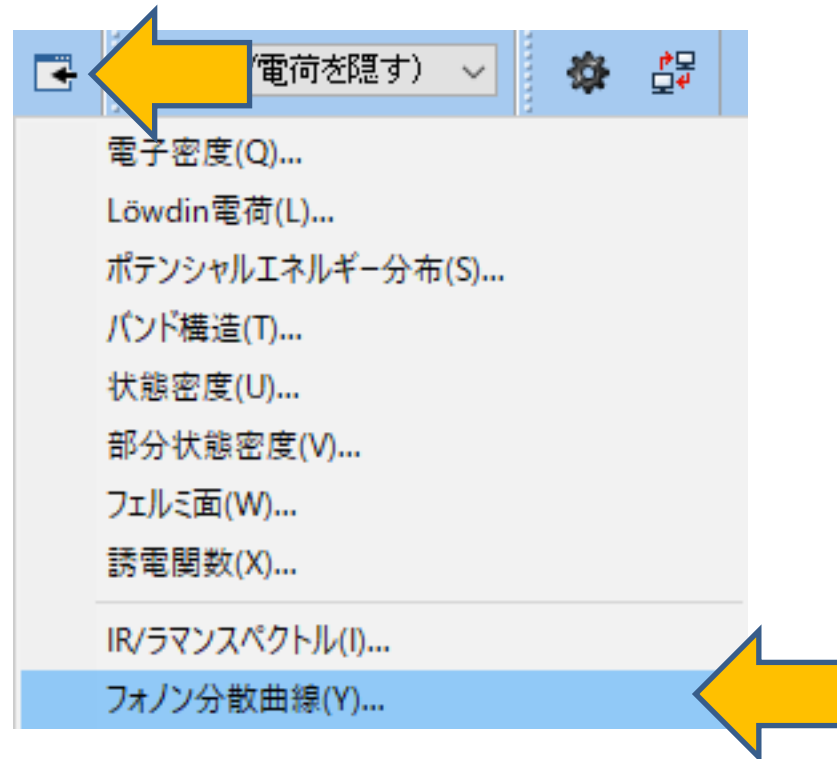
III.フォノン分散

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。



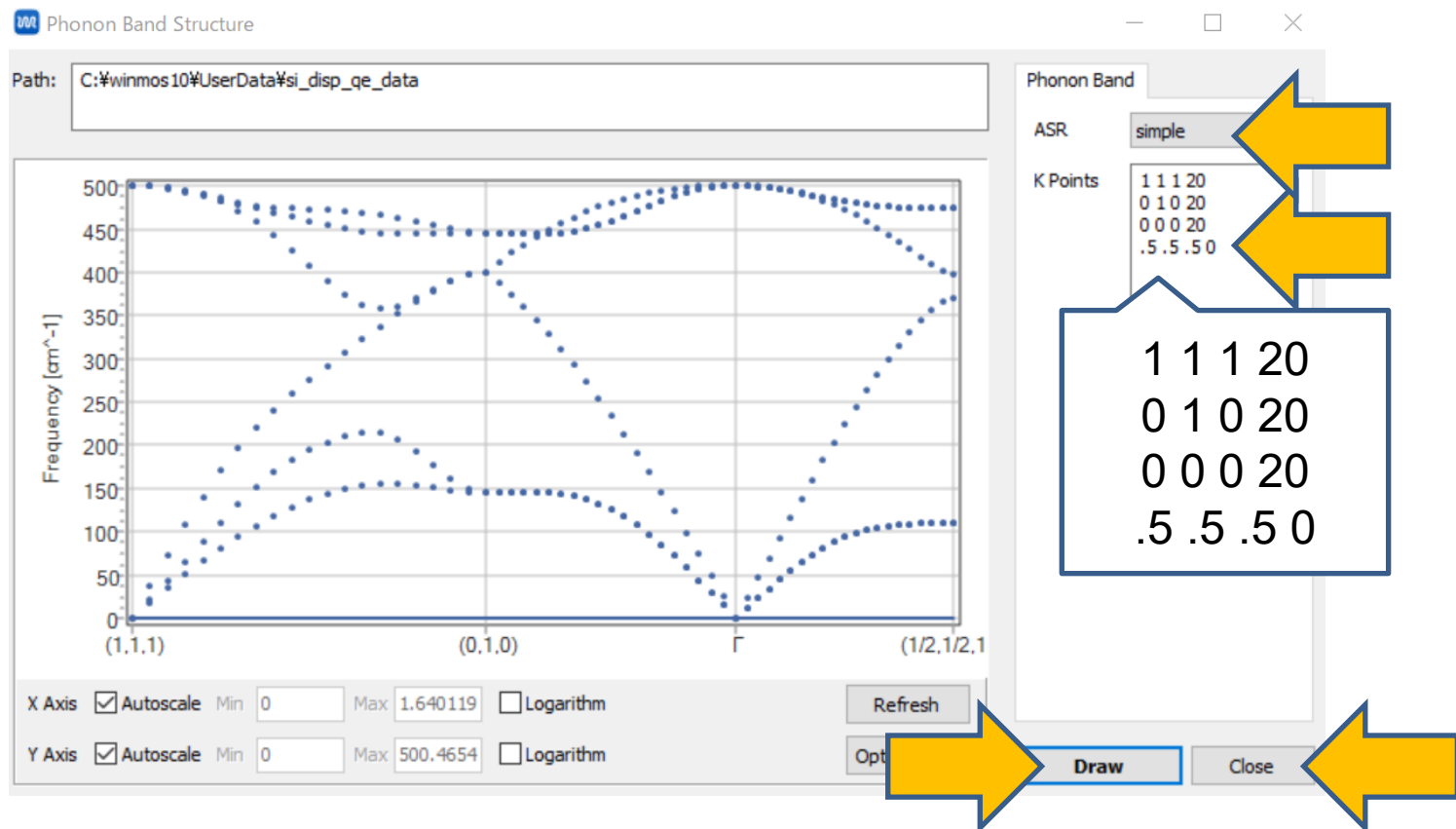
III.フォノン分散

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




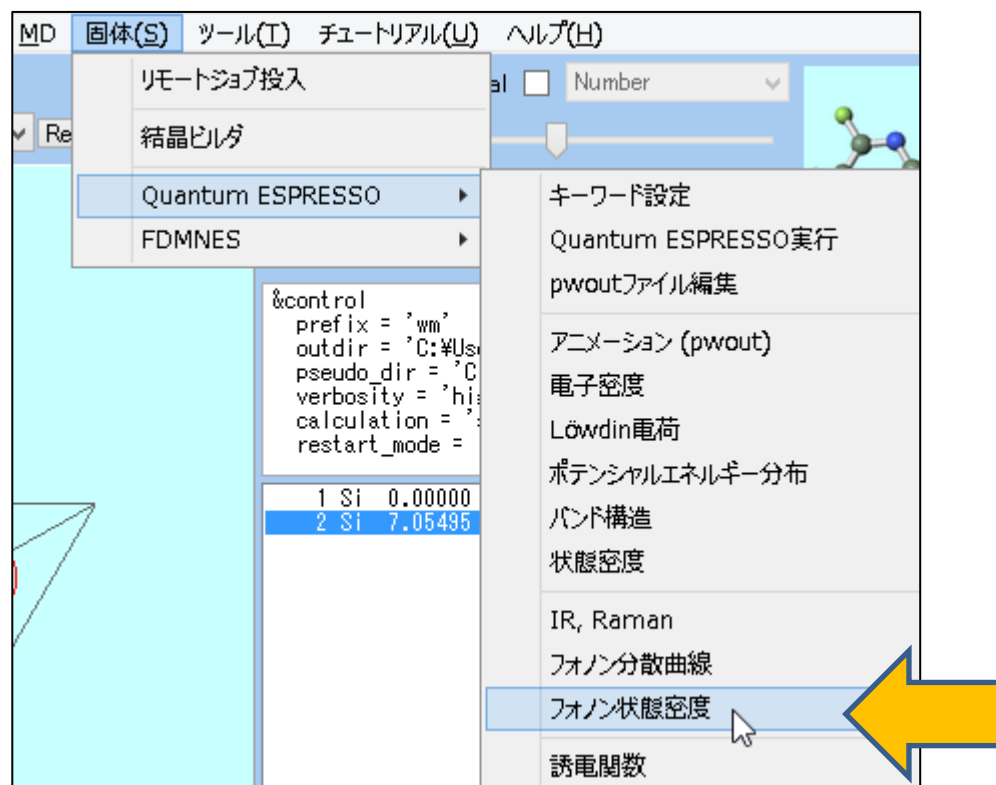
III.フォノン分散

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。



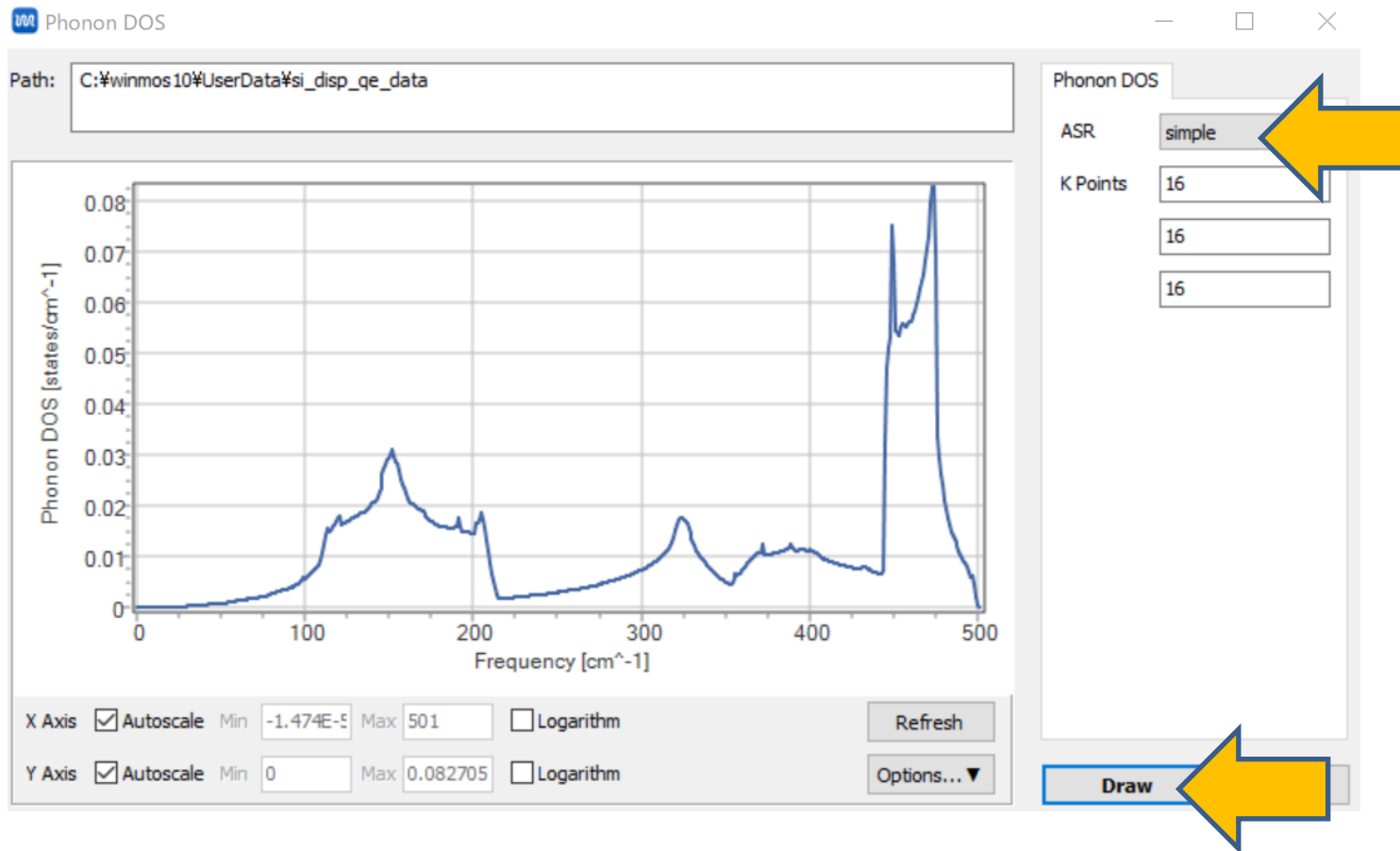
III.フォノン分散

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。



III.フォノン分散

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。



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