

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO スピン分極計算

V10.0.0

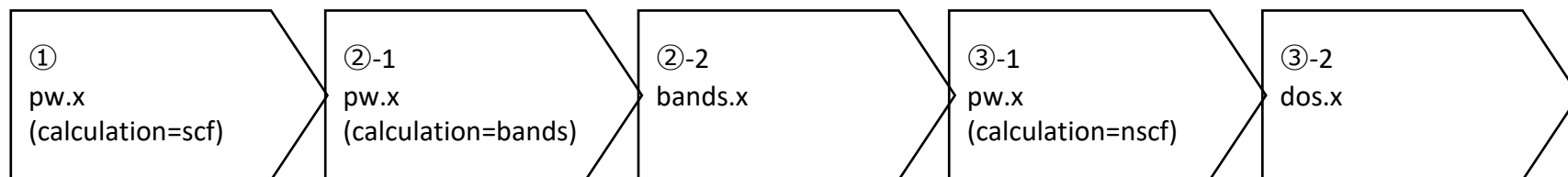
2020年3月17日 株式会社クロスアビリティ

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

- Fe結晶のSCF計算を実施し、その後バンド構造、状態密度の算出を行います（Winmostar上では連続して実行されます）。



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）。

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する。

<https://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials/original-qe-pp-library>

リンク先に表示される周期表の[Fe]から[Fe.pbe-nd-rrkjus.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を再起動する。

ORIGINAL QE PP LIBRARY

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	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			
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb			
** Actinoids			89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102			
			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No			

I. モデルの作成1

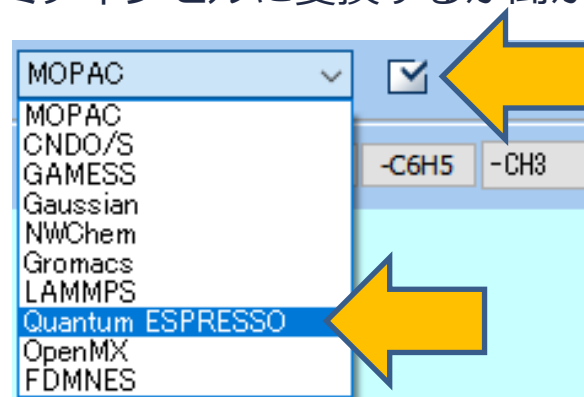
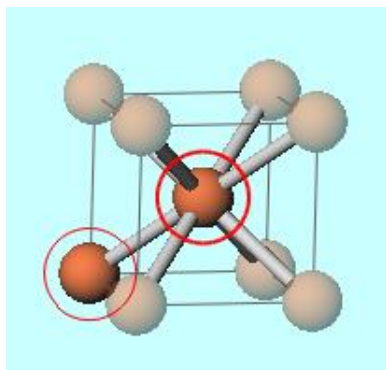
1. ファイルメニュー | 開くをクリックする。
2. サンプルフォルダ内のfe.cifを開く。（デフォルトではC:\winmos10\Samples\fe.cif）

※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。

Fe単位格子について

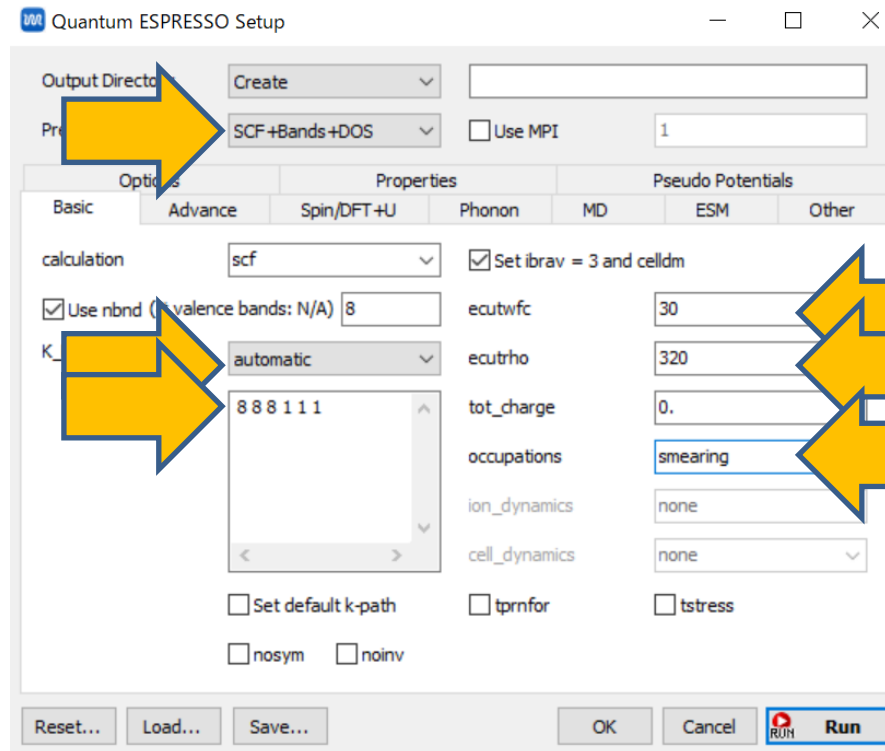
Crystal system: Cubic
Space group : Im-3m (229)
Lattice constants : a=2.8665 Å
Asymmetric unit: Fe (0.0 0.0 0.0)

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。



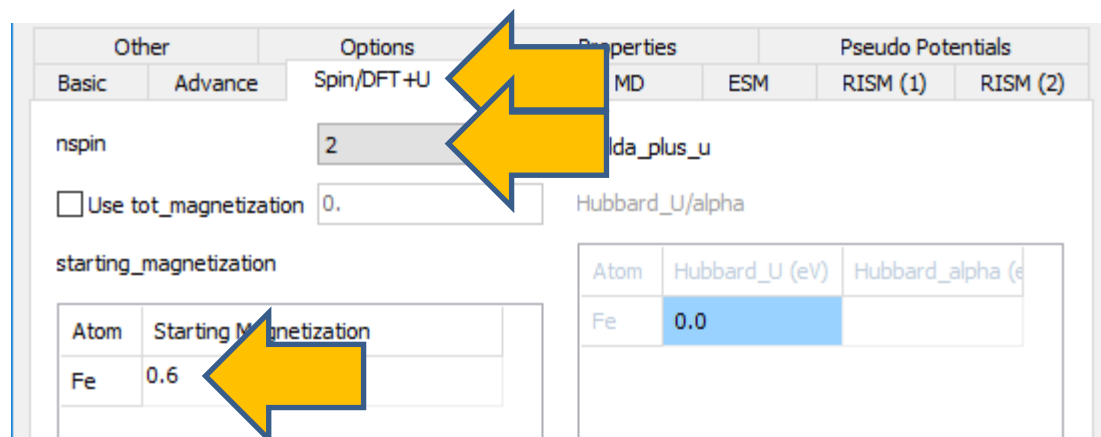
II. QEによる計算

1. **Reset...**をクリックし、**Preset**に**SCF+Bands+DOS**を選択する。
2. **K_POINTS**のテキストボックスに**8 8 8 1 1 1**（スペース区切り）と入力する。
3. **ecutwfc**に**30**、**ecutrho**に**320**と入力する。
4. **occupations**に**smearing**を選択する。



II. QEによる計算

5. Spin/DFT+Uタブを開き、nspinに2、FeのStarting Magnetizationに0.6を指定する。

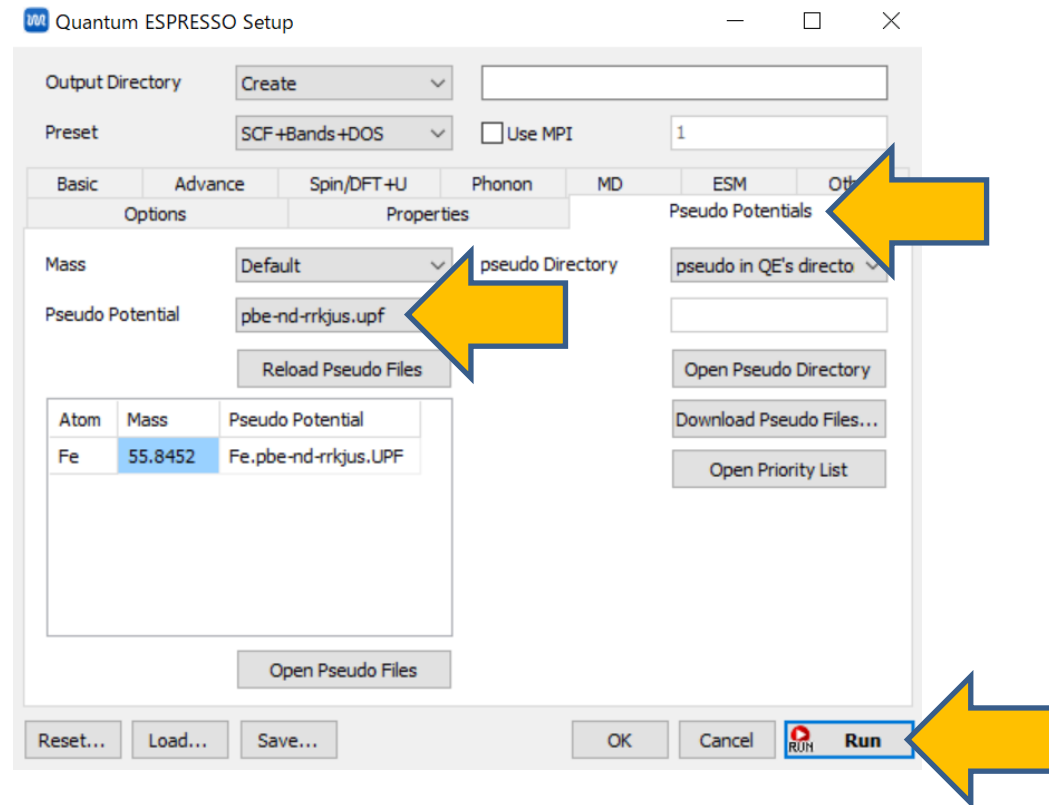


II. QEによる計算

6. **Pseudo Potentials**タブを選択し、**Pseudo Potential**に**pbe-nd-rrkjus.upf**を選ぶ。

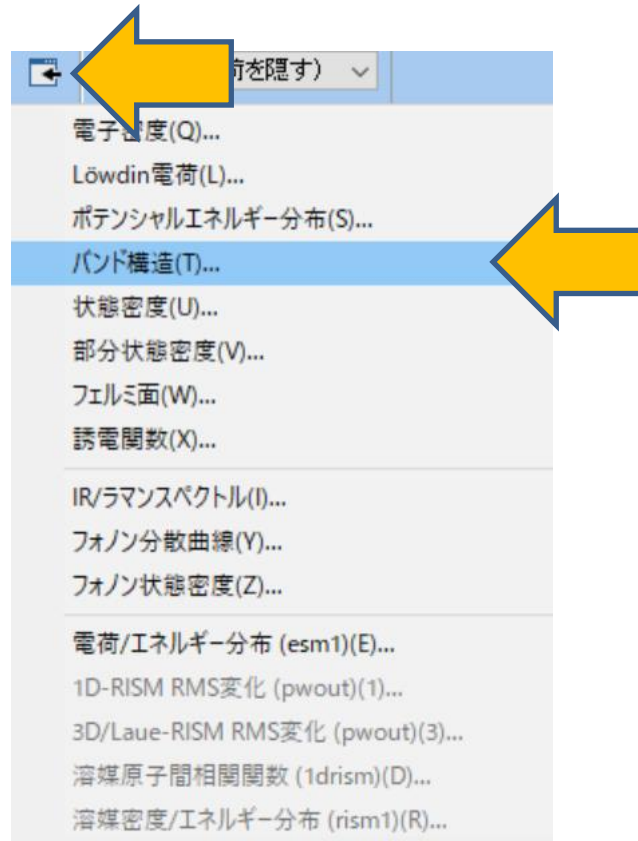
pbe-nd-rrkjus.upfが無い場合は、P.5の手順に従いファイルをpseudoフォルダに格納し、Reload pseudo Filesをクリックする。

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



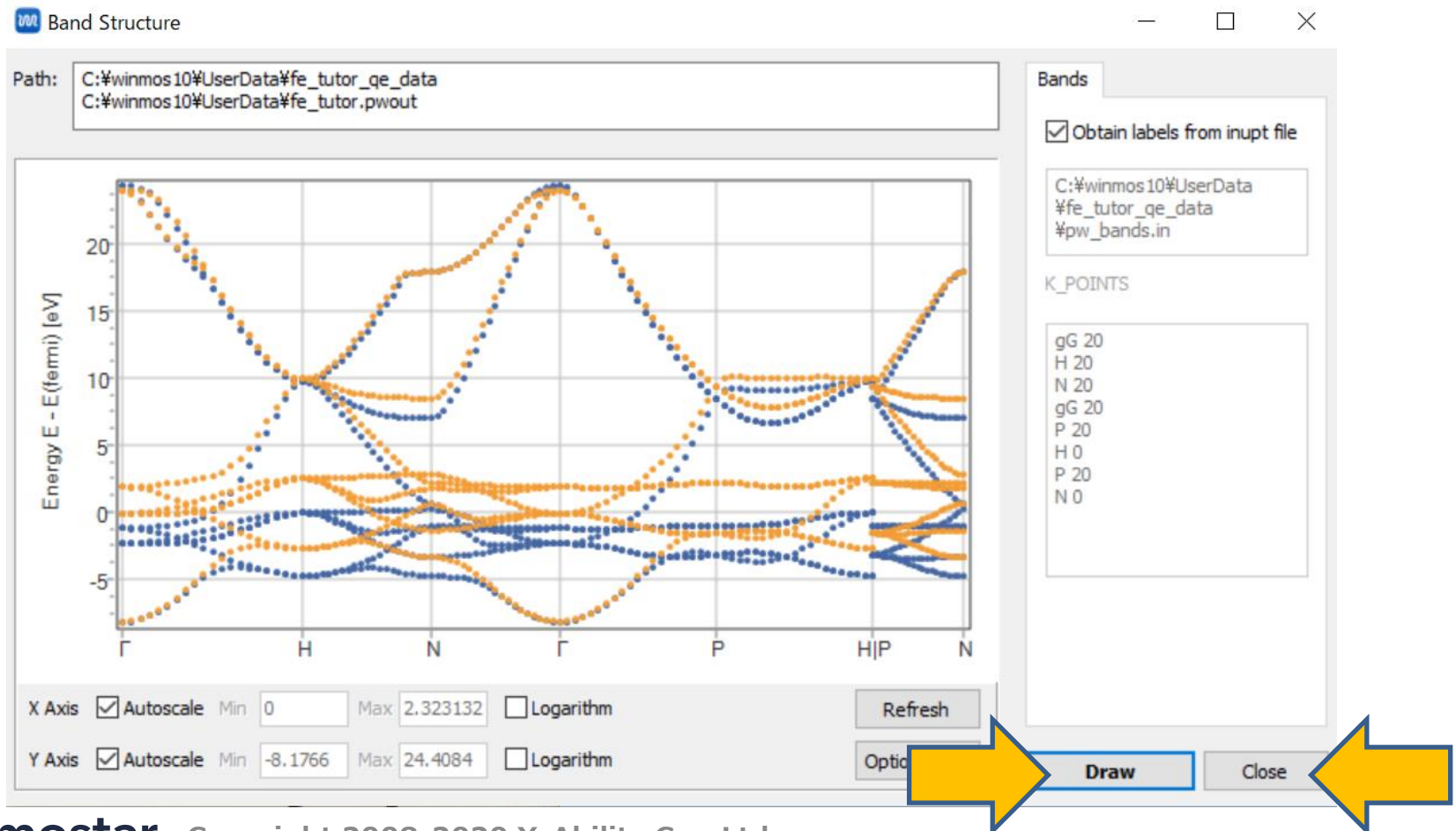
III.結果解析

1.  (結果解析) | バンド構造…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。



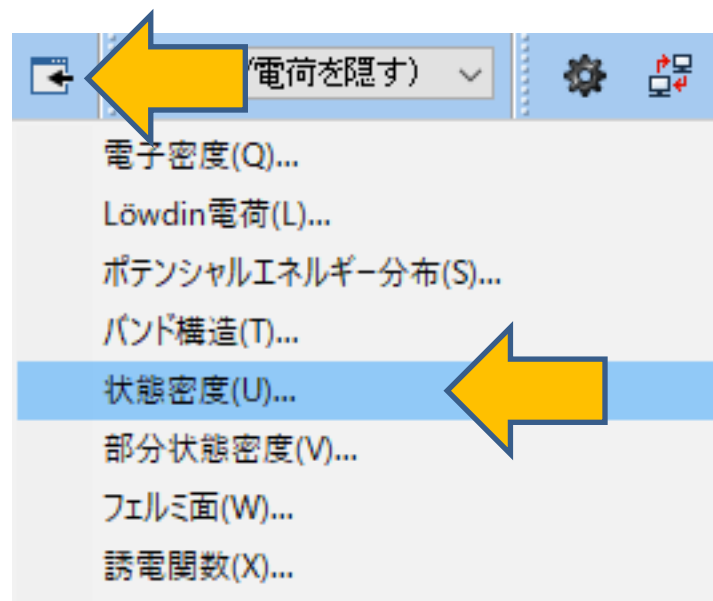
III.結果解析

1. **Draw**をクリックすると、up, downスピンそれぞれのバンド構造が描画される。
2. **Close**をクリックする。



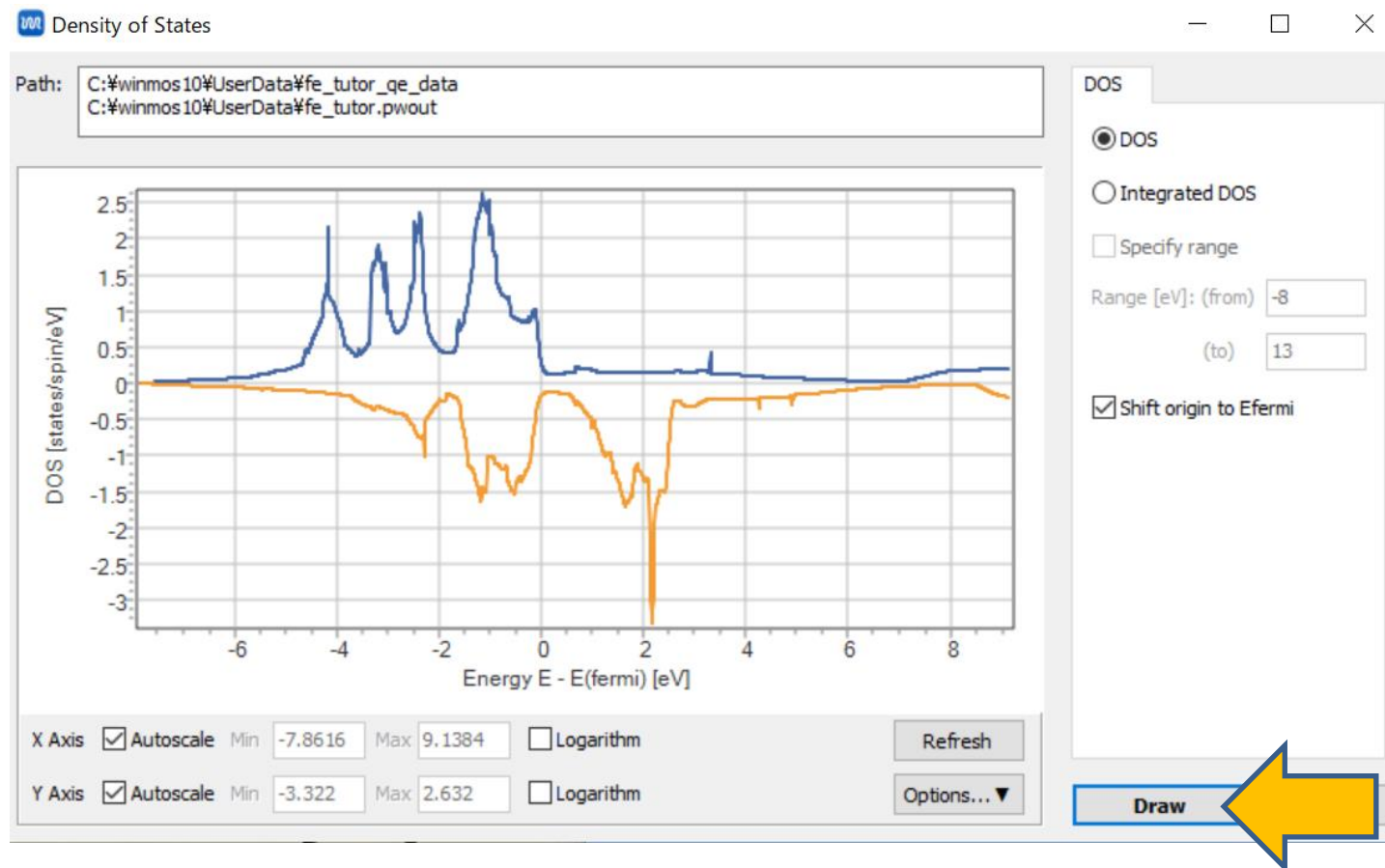
III.結果解析

1.  (結果解析) | 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。



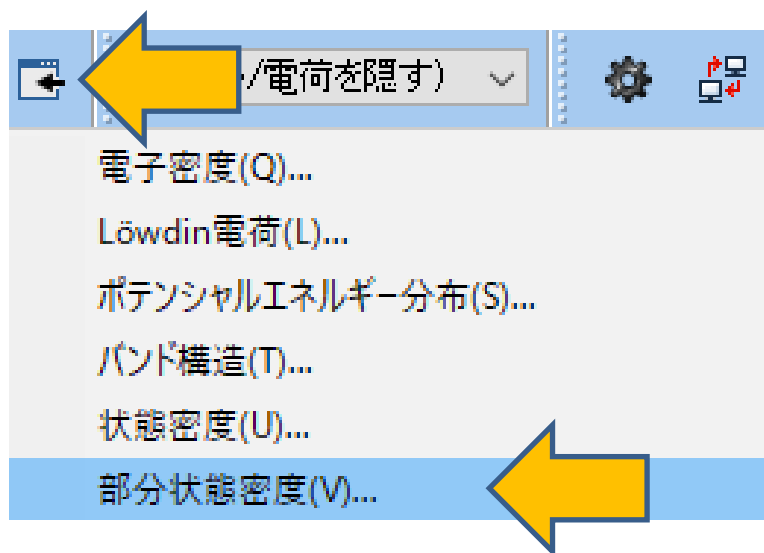
III. 結果解析

1. **Draw**をクリックすると、up, downスピンそれぞれのDOSが表示される。



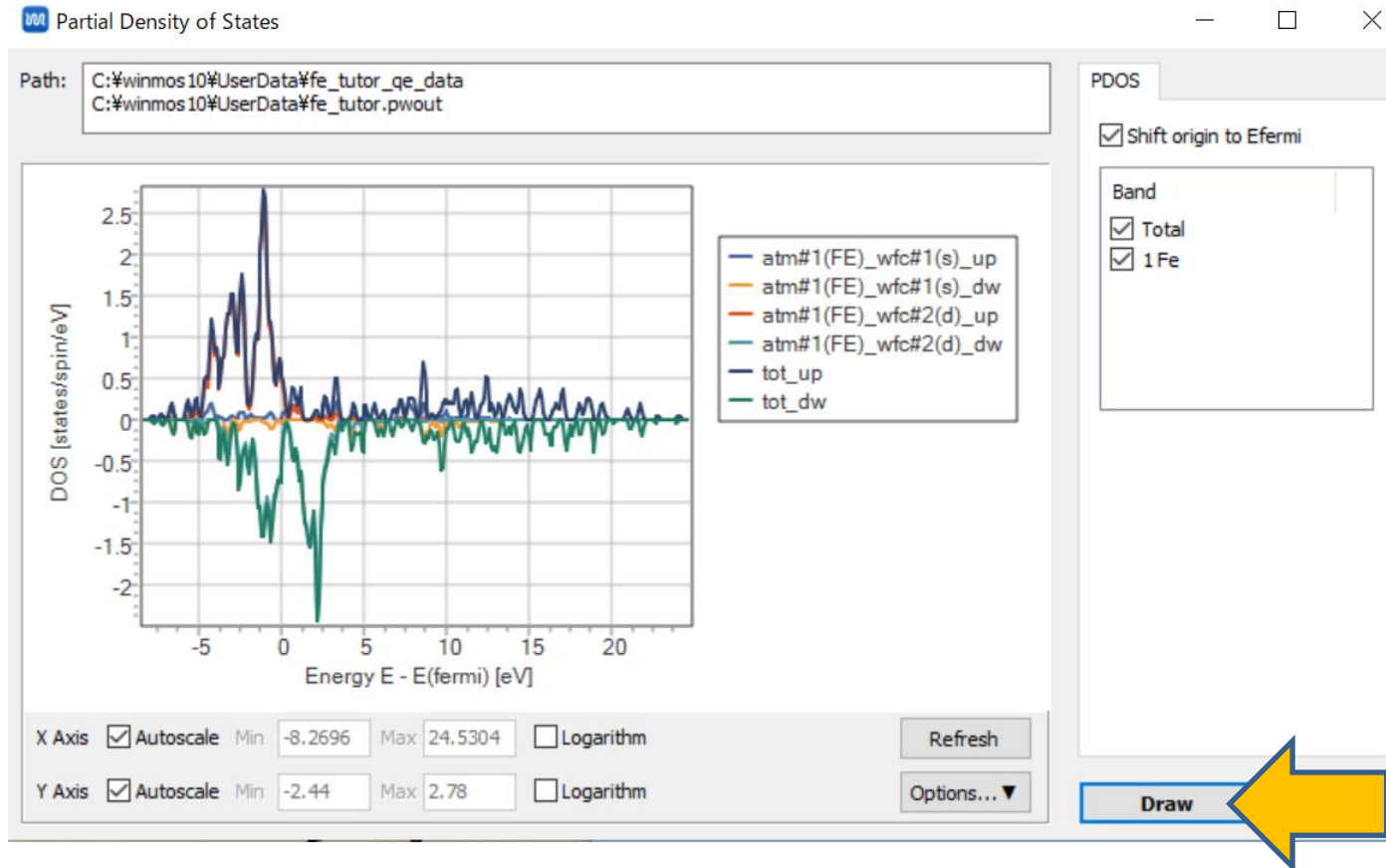
III.結果解析

1.  (結果解析) | 部分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.結果解析

1. **Draw**をクリックすると、up, downスピンそれぞれのDOSが表示される。



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