

Winmostar - Quantum ESPRESSO Tutorial 1

基礎編

V6.016

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2016/06/01

修正履歴

2016/4/1版

- 初版

2016/4/20版

- スクリーンショットを最新版に差し替え

2016/5/6版

- Primitive Cell変換、Band図、DOS計算追加

2016/6/1版

- 文章の微修正、動作環境設定を追加、Cubeファイル表示でBoundaryの設定を追加、V.6.016

Contents

- I. 結晶ビルダで初期座標の作成
- II. SCF計算
- III. Bands計算
- IV. DOS計算
- V. 電子密度表示

動作環境設定

Quantum ESPRESSOインストールマニュアル

https://winmostar.com/jp/QE_install_manual_jp_win.pdf

に従い、Quantum ESPRESSOをインストールする。

Windows 版 Quantum ESPRESSO インストールマニュアル

2016/5/12

1. Quantum ESPRESSO のインストール

① 以下のサイトにアクセスし、qe-5.2.1-64bit-mpich2.exe をダウンロードする。
http://www.qe-forge.org/gf/project/qe/frs/?action=FrsReleaseBrowse&frs_package_id=18

32bit 環境の場合は qe-5.2.1-32bit-mpich2.exe をダウンロードする。

Winmostar 上から MPI 並列で Quantum ESPRESSO を実行する場合は serial でなく mpich2 の方を用いる。

リリース名	リリース日	Filename	ファイルサイズ	ダウンロード
QE-5.2.1	2015-09-24 00:00:00+02	espresso-5.2.1.tar.gz		
		PHonon-5.2.1.tar.gz		
		qe-5.2.1-64bit-serial.exe		
		qe-5.2.1-64bit-mpich2.exe		
		qe-5.2.1-32bit-serial.exe	50 MB	5097
		atomic-5.3.0.tar.gz	2 MB	4044
		PWgnc-5.3.0.tar.gz	1 MB	1577
		Phonon-5.3.0.tar.gz	2 MB	5261
		spectra-5.3.0.tar.gz	4 MB	3766
		neb-5.3.0.tar.gz	345 KB	3556
		qe-5.3.0-64bit-serial.exe	72 MB	3652

I. 結晶ビルダで初期座標の作成

「固体>結晶ビルダ」から結晶ビルダを起動する。



I. 結晶ビルダで初期座標の作成

結晶ビルダにて「Cubic」>「227 Fd-3m」を選択。格子定数は5.4309に設定し、「Next」をクリックする。

Step 1/4 : Lattice

Lattice

Crystal System [195-230] : Cubic

Space Group 227 Fd-3m

Setting 1

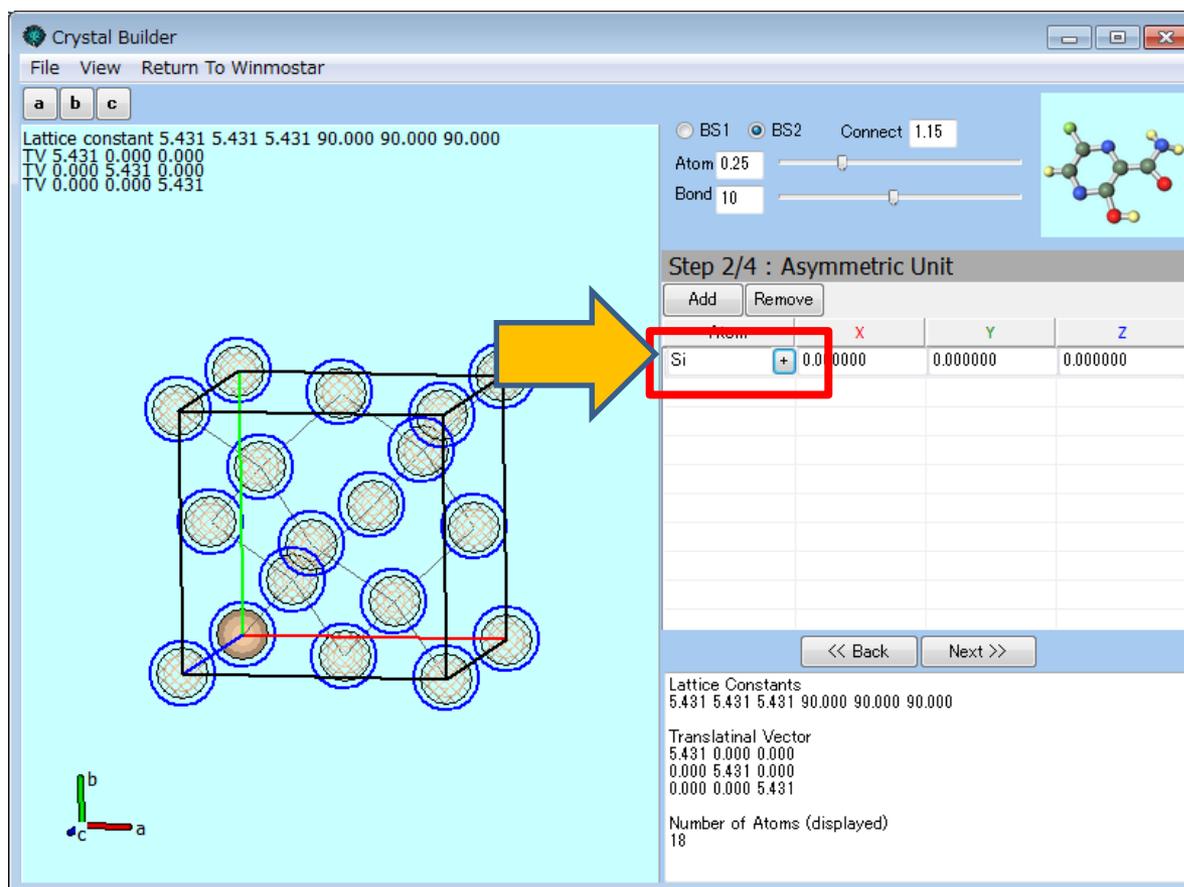
Lattice Constants

	a	b	c
Length(Å)	5.4309	5.000000	5.000000
Angle(°)	90.000000	90.000000	90.000000

<< Back Next >>

I. 結晶ビルダで初期座標の作成

原子種をCからSiに変更し、「Next」をクリックしてウィザードを進めCIF形式で保存する。



Crystal Builder

File View Return To Winmostar

a b c

Lattice constant 5.431 5.431 5.431 90.000 90.000 90.000
 TV 5.431 0.000 0.000
 TV 0.000 5.431 0.000
 TV 0.000 0.000 5.431

BS1 BS2 Connect 1.15

Atom 0.25

Bond 10

Step 2/4 : Asymmetric Unit

Add Remove

Atom	X	Y	Z
Si	+ 0.00000	0.000000	0.000000

<< Back Next >>

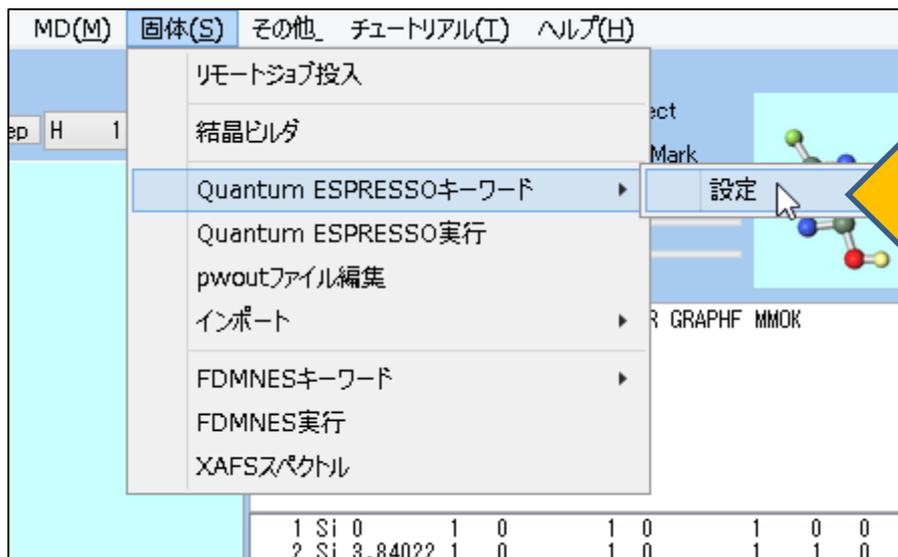
Lattice Constants
 5.431 5.431 5.431 90.000 90.000 90.000

Translatinal Vector
 5.431 0.000 0.000
 0.000 5.431 0.000
 0.000 0.000 5.431

Number of Atoms (displayed)
 18

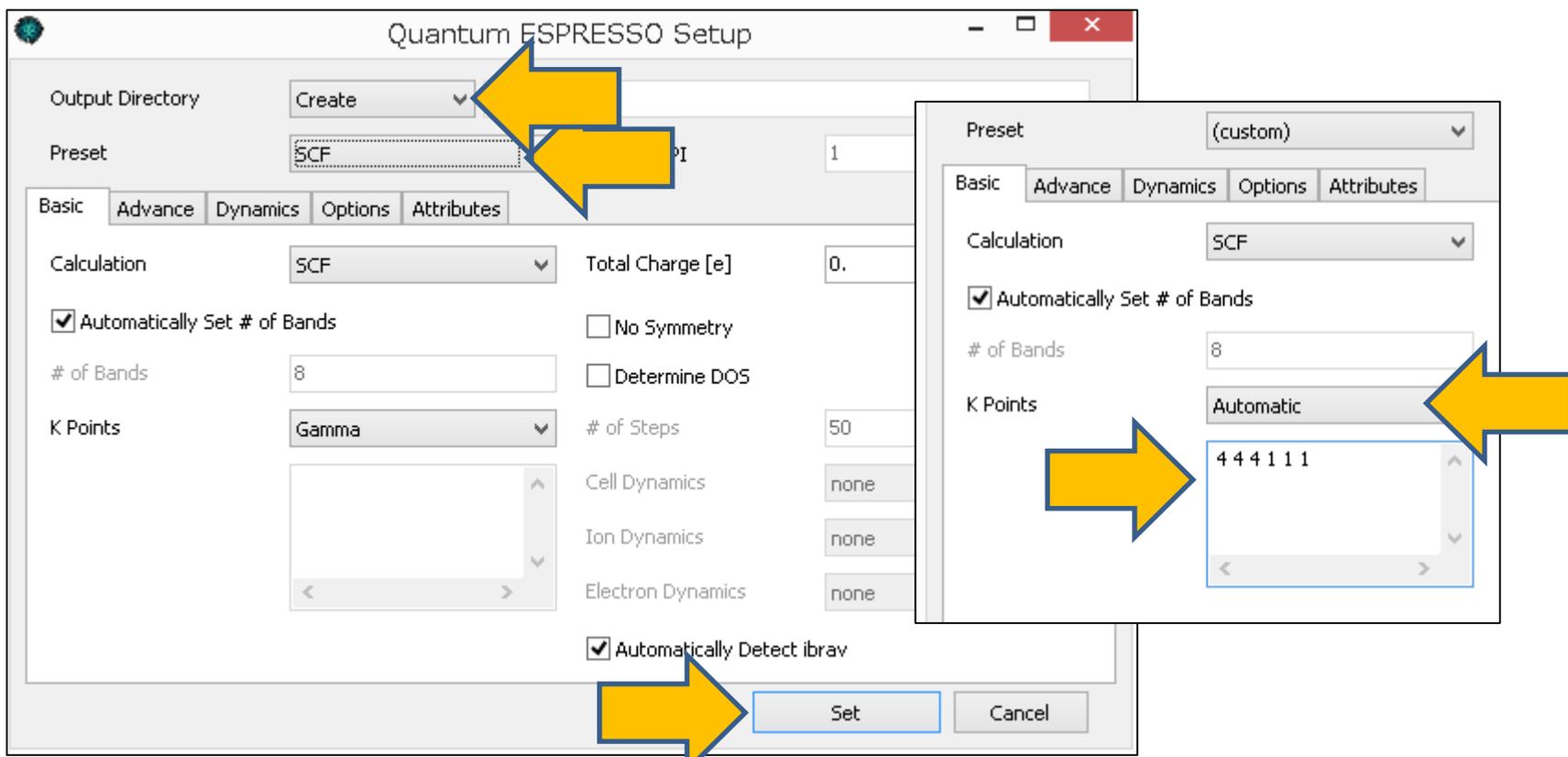
II. SCF計算

「固体>Quantum ESPRESSOキーワード>設定」を選択する。



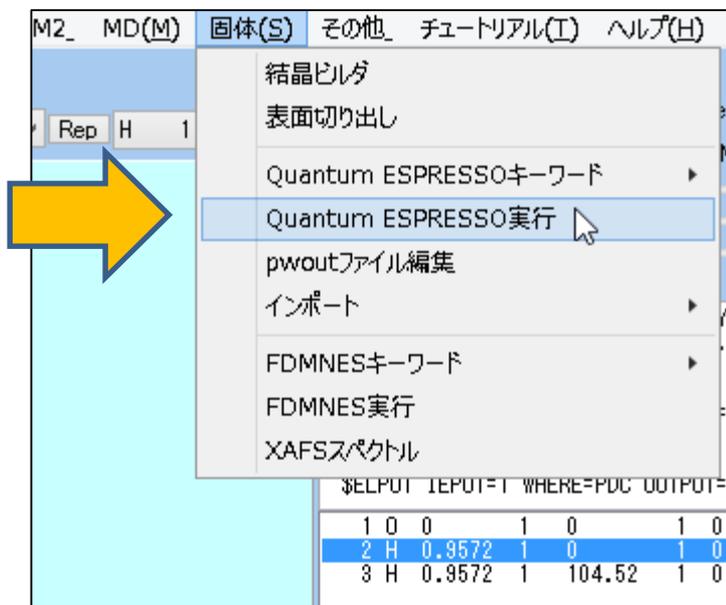
II. SCF計算

まず、「Output Directory」に「Create」、「Preset」に「SCF」を指定する。
次に「K Points」に「Automatic」を指定し、その下に「4 4 4 1 1 1」(スペース区切り)と入力する。最後に、右下の「Set」で設定する。



II. SCF計算

「固体>Quantum ESPRESSO実行」を選択する。
実行前に、ファイルを保存するか聞かれるので「はい」とし、名前を付けて保存する。
ここでは仮に「si_tutor.pwin」とする。



III. Bands計算

SCF計算終了後、「固体>Quantum ESPRESSOキーワード>設定」にて、まず「Output Directory」に「Continue」を、「Preset」に「Bands」を選択する。次に、「K Points」に以下のように入力し、「Set」をクリックする。

Quantum ESPRESSO settings:

- Output Directory: Continue
- Preset: Bands
- Calculation: Bands

K Points input:

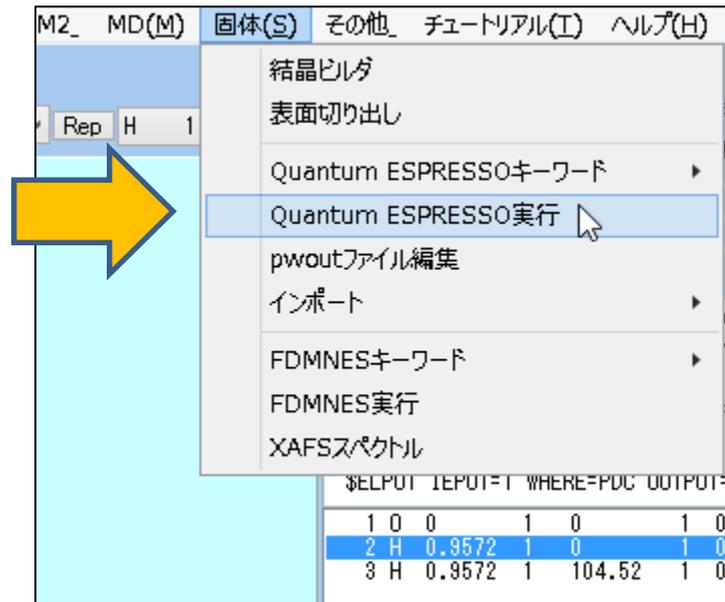
```
0.0 0.0 0.0 20
0.5 .25 .75 20
0.5 0.0 0.5 20
0.0 0.0 0.0 20
```

「K Points」の下のテキストボックスの内容

```
0.5 0.5 0.5 20
0.0 0.0 0.0 20
0.5 .25 .75 20
0.5 0.0 0.5 20
0.0 0.0 0.0 20
```

III. Bands計算

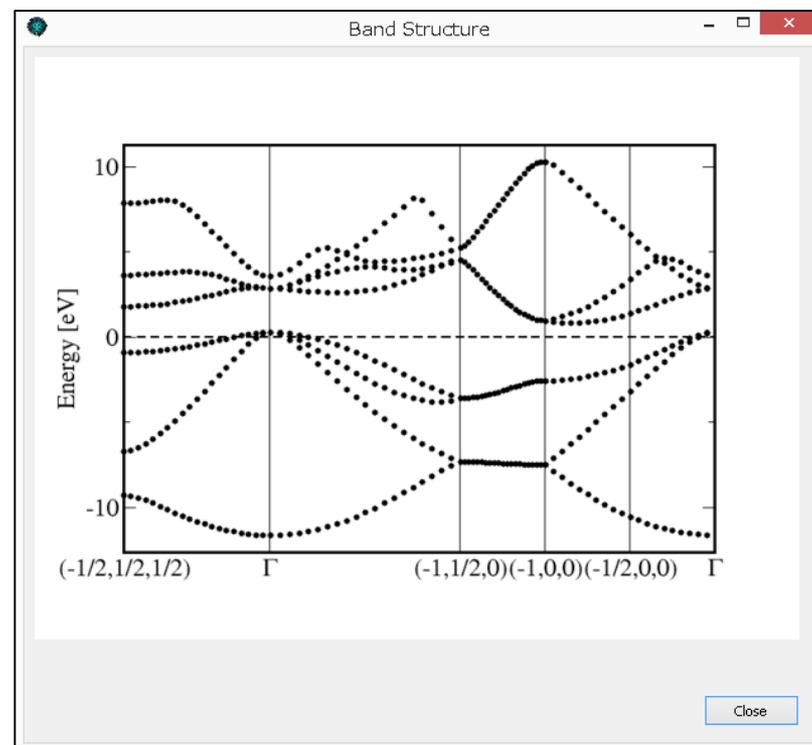
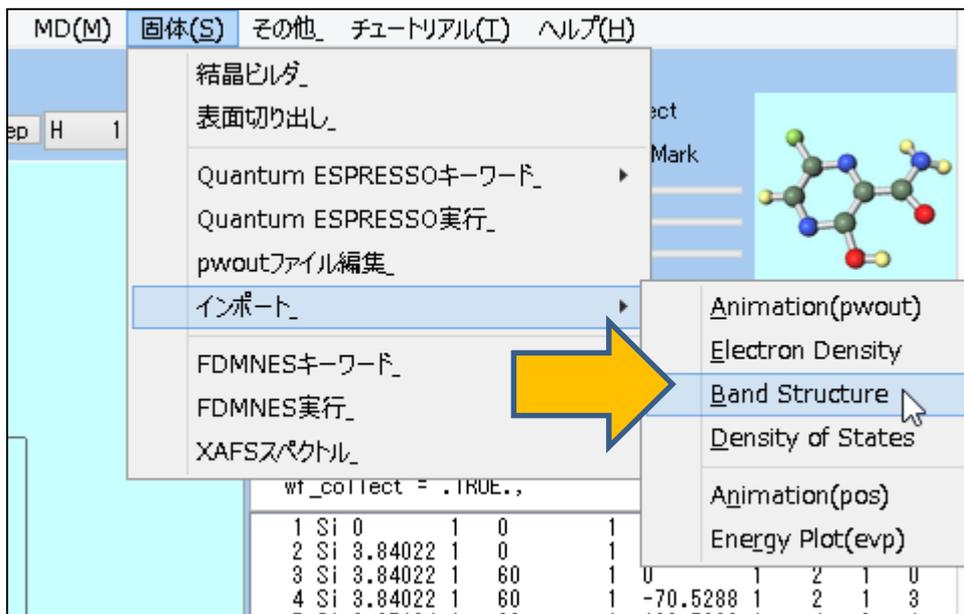
「固体>Quantum ESPRESSO実行」を選択する。
 ファイルを保存するか聞かれるので、名前を入力し保存する。
 ここでは仮に「si_tutor_bands.pwin」とする。



III. Bands計算

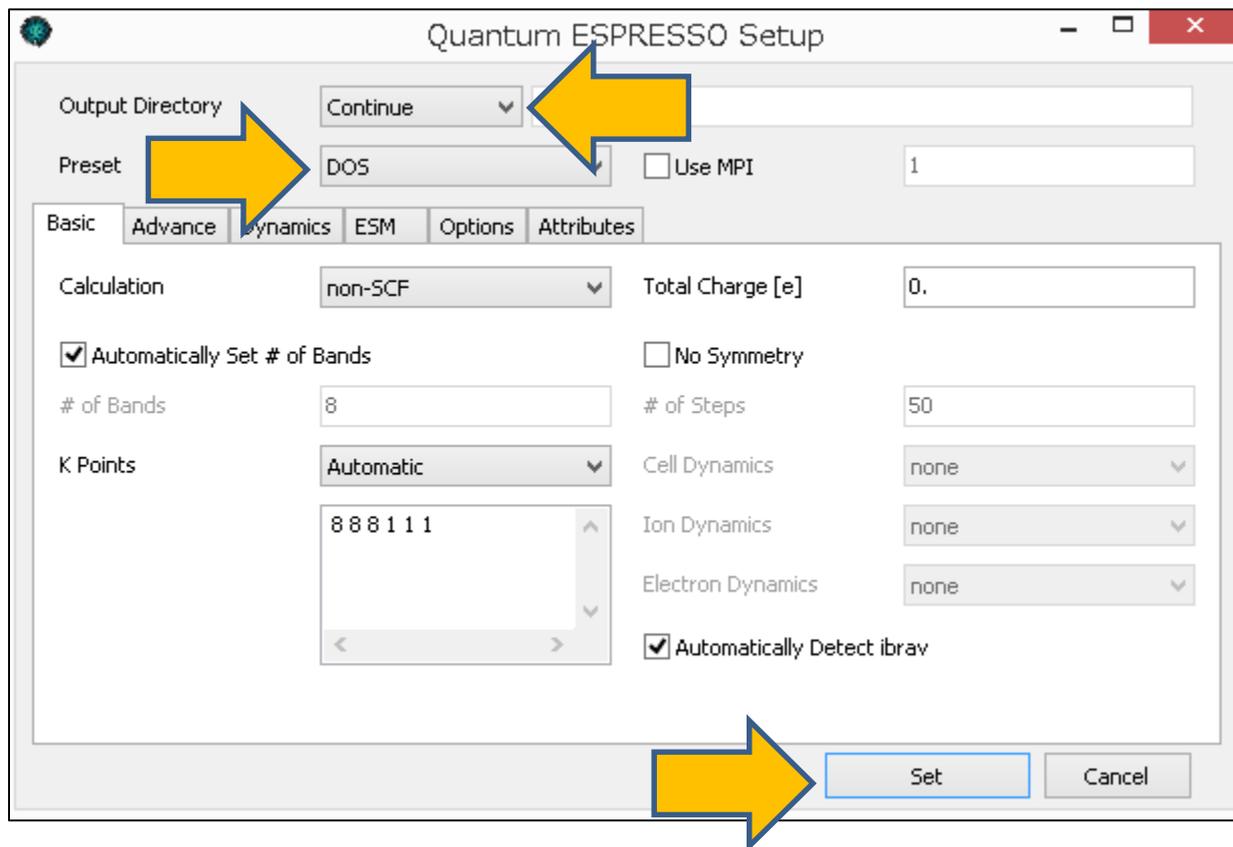
計算の終了後、「固体>インポート>Band Structure」を選択し、デフォルトで選ばれるフォルダを選択する。

新しいウィンドウが立ち上がり、右図のようなバンド図が得られる。



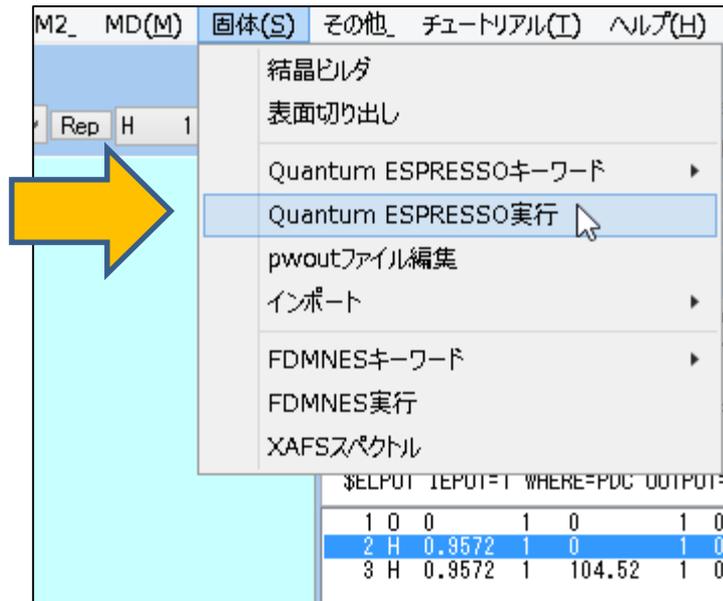
IV. DOS計算

「固体>Quantum ESPRESSOキーワード>設定」にて、
「Output Directory」に「Continue」を、「Preset」に「DOS」を選択し、「Set」する。



IV. DOS計算

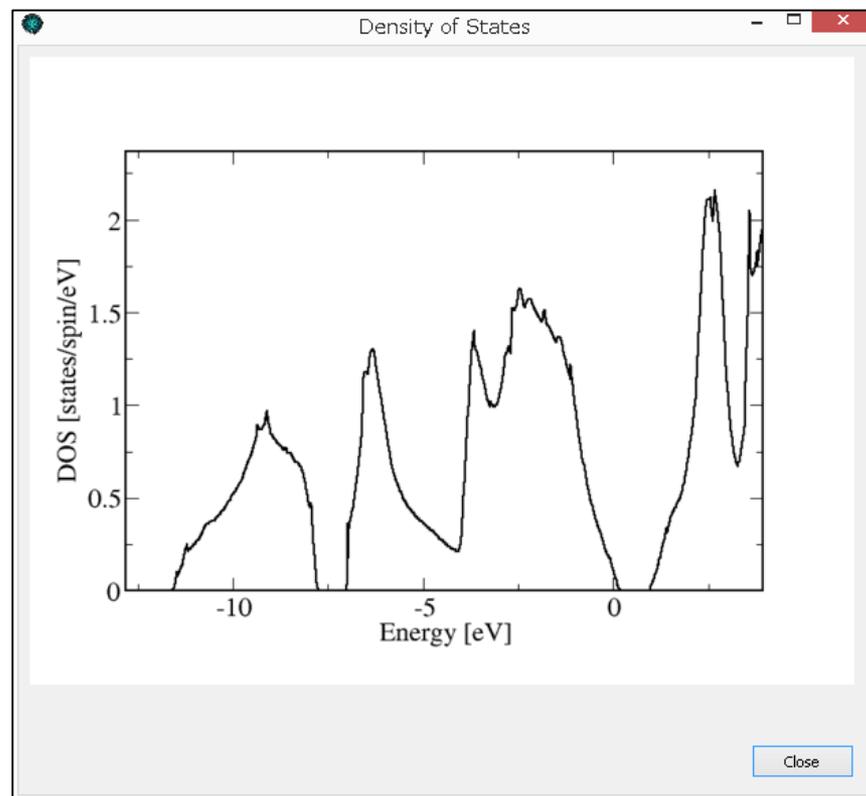
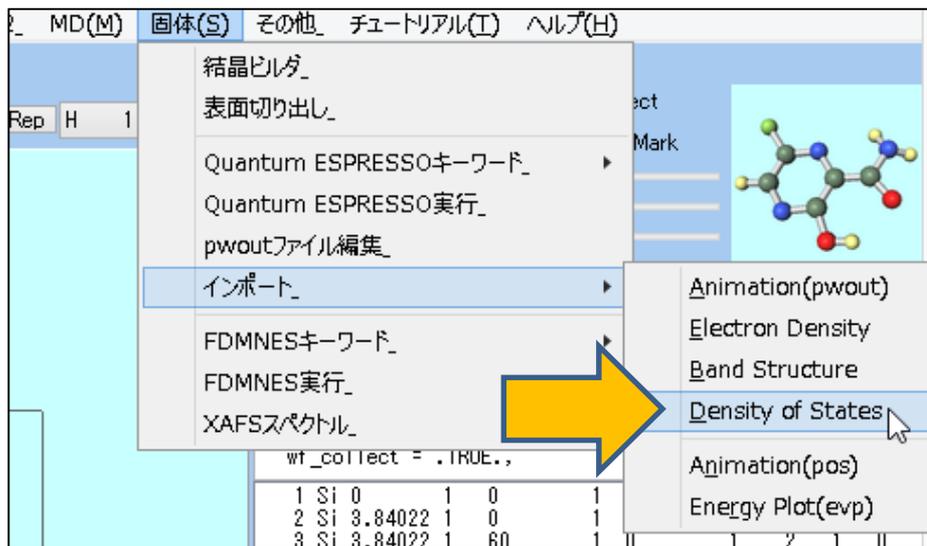
「固体>Quantum ESPRESSO実行」を選択する。
 ファイルを保存するか聞かれるので、名前を入力し保存する。
 ここでは仮に「si_tutor_dos.pwin」とする。



IV. DOS計算

計算の終了後、「固体>インポート>Density of States」を選択し、デフォルトで選ばれるフォルダを選択する。

新しいウィンドウが立ち上がり、右図のようなDOSのプロットが得られる。



V. 電子密度表示

同様に、「固体>インポート>Electron Density」を選択し、デフォルトで選ばれるフォルダを選択する。

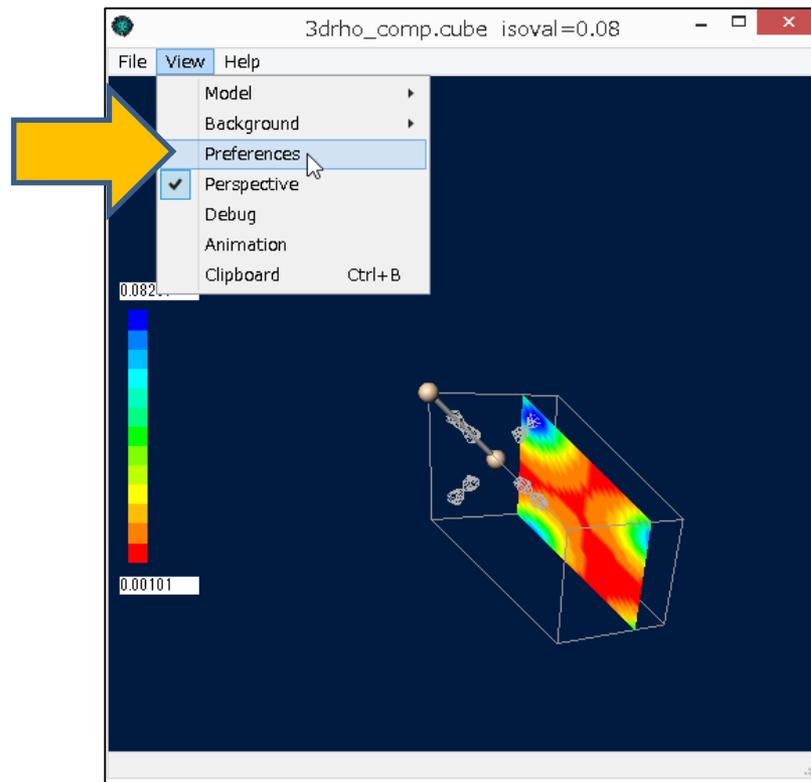
「Contour Map」と「Boundary」にチェックを入れ、「Iso. Level」を0.08にし、「3D」をクリックする。

The screenshot shows the 'Solid' menu with 'Import' selected. The 'Import' sub-menu is open, and 'Electron Density' is highlighted. The 'Cube Plot' dialog box is also shown, with 'Contour Map' and 'Boundary' checked, 'Iso. Level' set to 0.08, and the '3D' button highlighted.

V. 電子密度表示

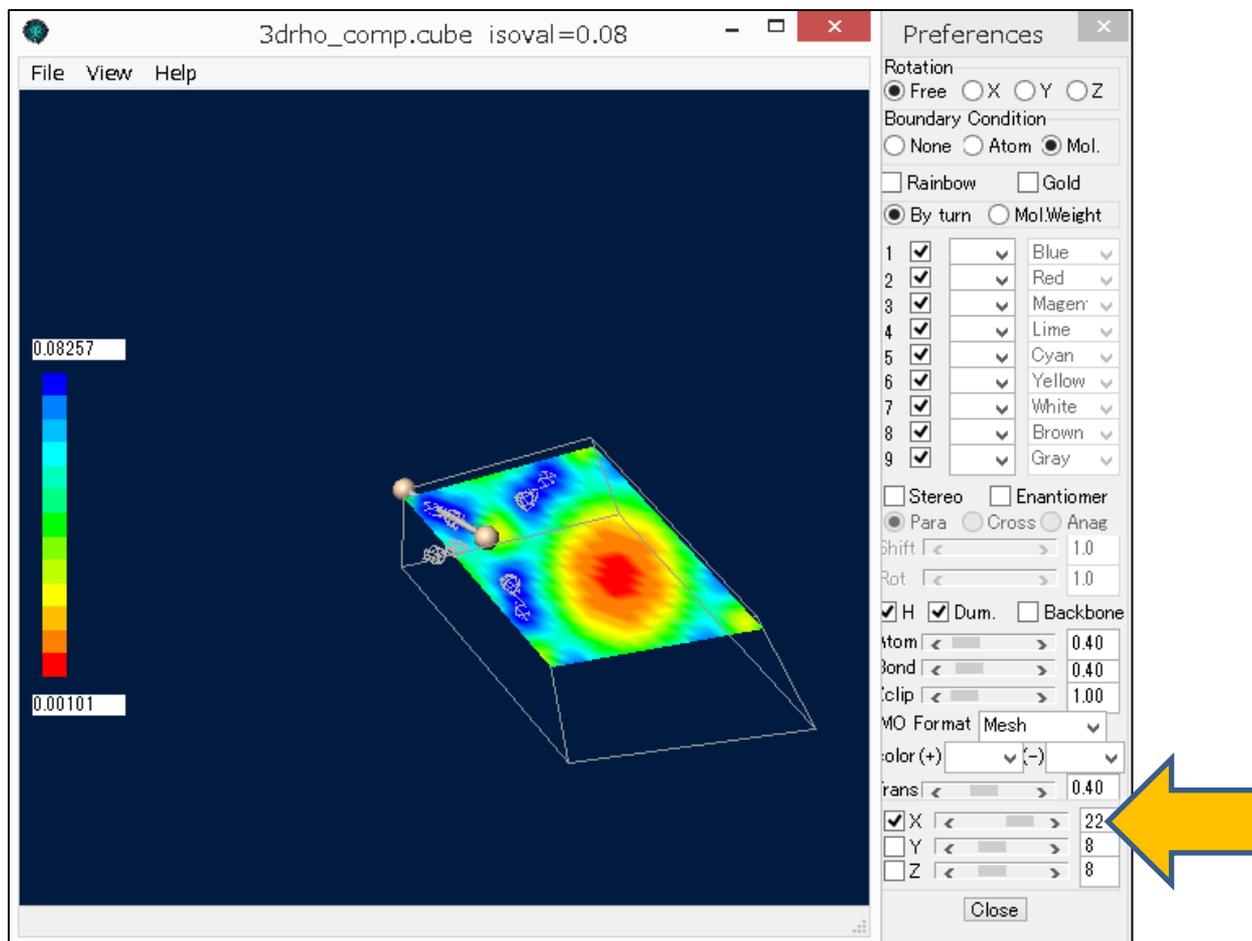
起動したWinmostar 3Dにて、「View>Preferences」を選択する。

※ 画面上に2粒子しか表示されず、セルの形状が立方体でないのは、Winmostarが自動的に結晶構造をPrimitive Cellに変換したためである。変換の有無は「Quantum ESPRESSOキーワード>設定」にて「Automatically Detect ibrav」で切り替えられる。



V. 電子密度表示

X、YまたはZのスライダーを動かし、等高線マップを表示する面を選択する。



facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38

いいね!