

Winmostar - Quantum ESPRESSO

Tutorial 2

構造最適化計算

V6.016

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2016/06/01

修正履歴

2016/04/01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

2016/6/1版

- 動作環境設定を追加、題名を変更、V 6.016対応

Contents

- I. 分子のモデリング
- II. 周期境界の作成
- III. 構造最適化計算
- IV. 構造最適化のアニメーション表示

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
		atonic-5.3.0.tar.gz	2 MB	4044
		FWgw-5.3.0.tar.gz	1 MB	1577
		Phonon-5.3.0.tar.gz	2 MB	5261
		espresso-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

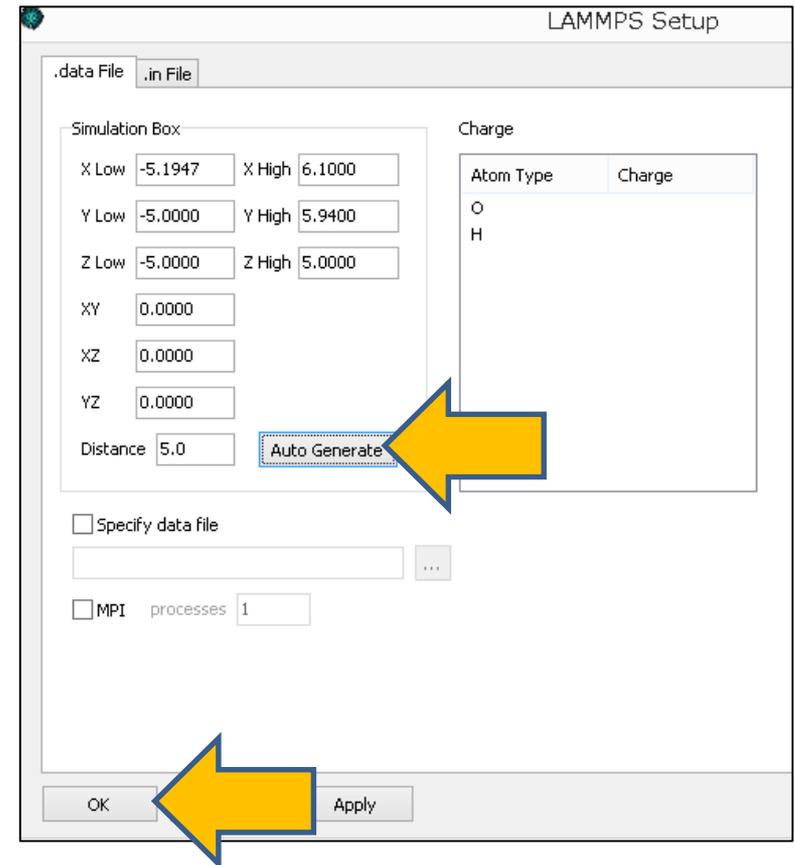
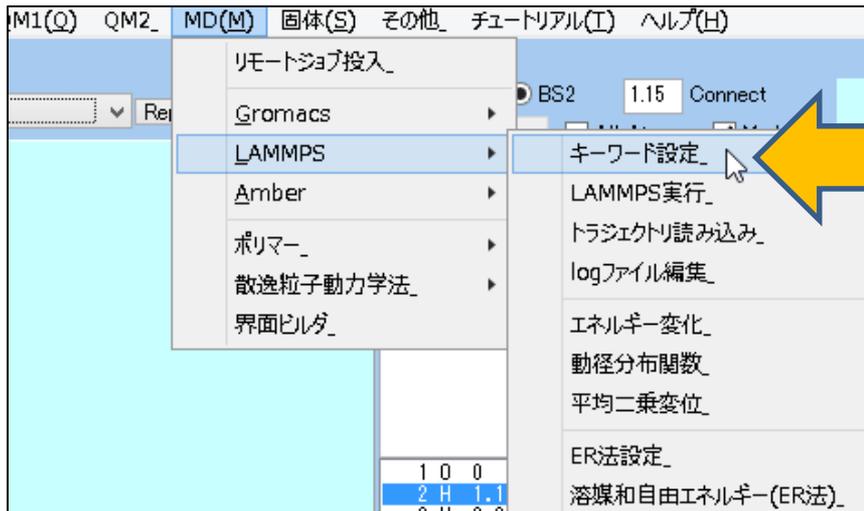
I. 分子のモデリング

メイン画面上にてH2O分子をモデリングする。

1	0	0	1	0	1	0	1	0	0	0
2	H	1.1	1	0	1	0	1	1	0	0
3	H	0.98	1	101.7031	1	0	1	1	2	0

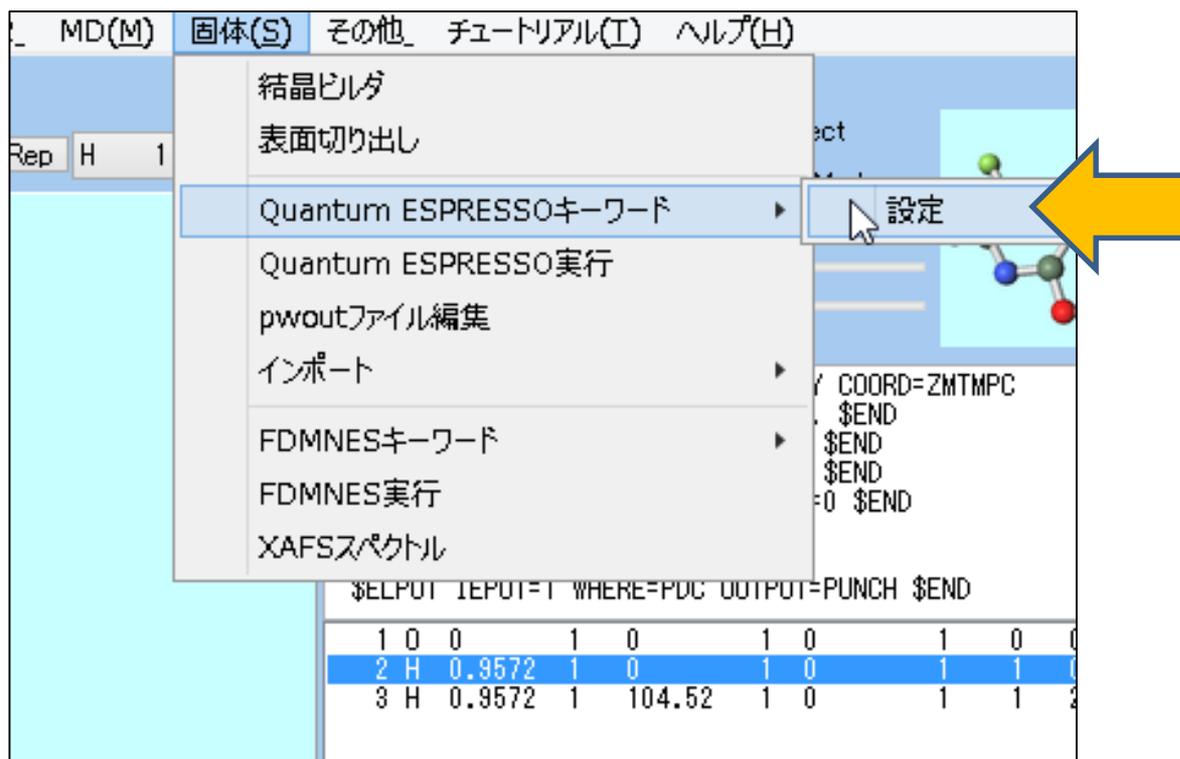
II. 周期境界の作成

「MD>LAMMPS>キーワード設定」を選択する。
Auto Generateをクリックし、OKをクリックする。



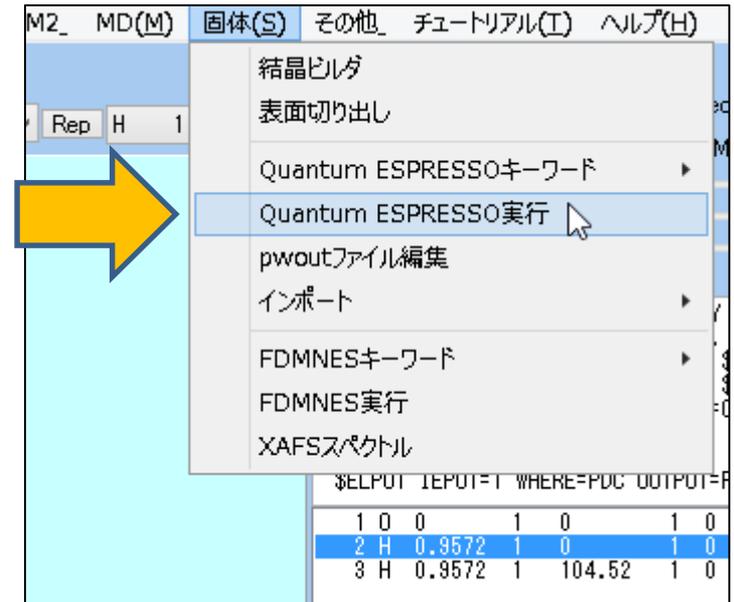
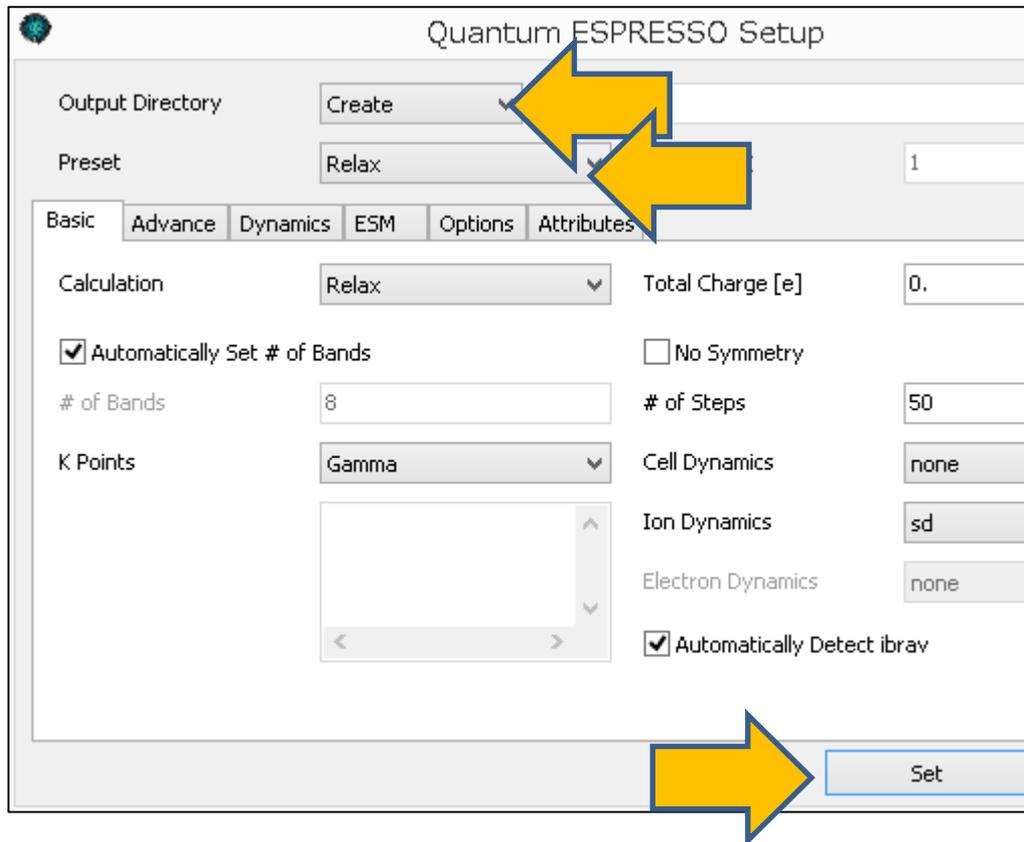
III. 構造最適化計算

「固体>Quantum ESPRESSOキーワード>設定」を選択する。



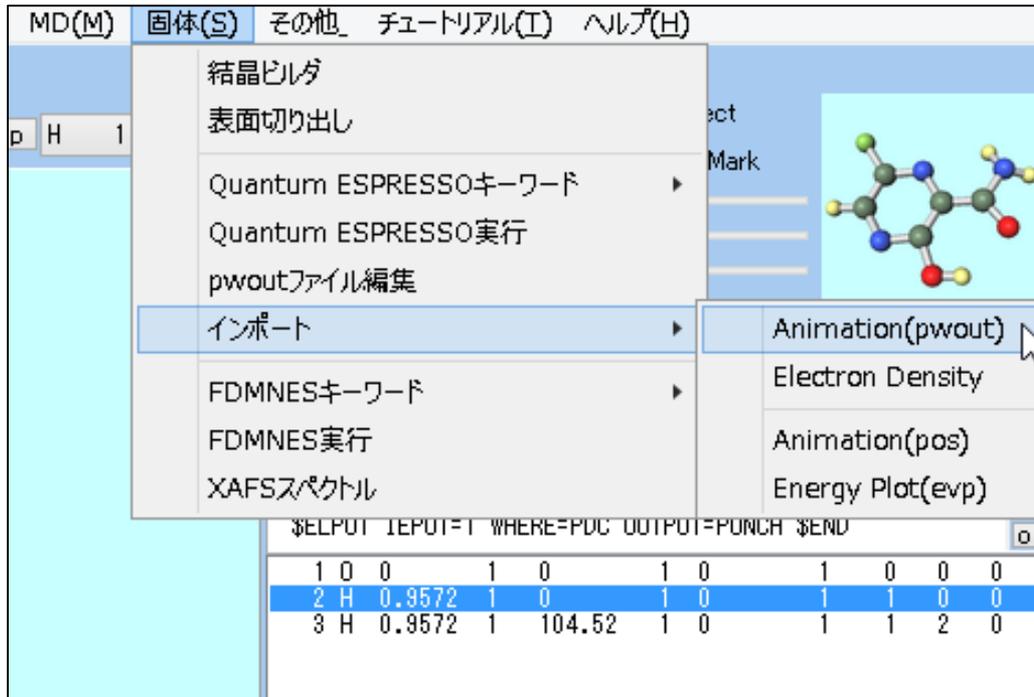
III. 構造最適化計算

「Output Directory」に「Create」、「Preset」に「Relax」を指定し、「Set」をクリックする。
「固体>Quantum ESPRESSO実行」を選択する。



IV. 構造最適化のアニメーション表示

計算の終了後、「固体>インポート>Animation」を選択する。
デフォルトで選ばれるファイルを選択する。



IV. 構造最適化のアニメーション表示

MOPAC計算などのアニメーション表示と同様の操作で、各ステップの様子を表示する。例えば、「|>」ボタンを押すとアニメーションが開始される。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a molecule with a red atom and two yellow atoms. The animation window on the right shows a list of steps from 0 to 12, with columns for Etot, Ry, and Ftot. A yellow arrow points to the play button (|>) in the animation window.

STEP	Etot	Ry	Ftot
STEP= 0	-34.18327292	Ry	Ftot= 0.2
STEP= 1	-34.18104719	Ry	Ftot= 0.1
STEP= 2	-34.18485234	Ry	Ftot= 0.0
STEP= 3	-34.18557830	Ry	Ftot= 0.0
STEP= 4	-34.18559489	Ry	Ftot= 0.0
STEP= 5	-34.18562319	Ry	Ftot= 0.0
STEP= 6	-34.18564611	Ry	Ftot= 0.0
STEP= 7	-34.18566478	Ry	Ftot= 0.0
STEP= 8	-34.18567913	Ry	Ftot= 0.0
STEP= 9	-34.18567893	Ry	Ftot= 0.0
STEP= 10	-34.18568902	Ry	Ftot= 0.
STEP= 11	-34.18569482	Ry	Ftot= 0.
STEP= 12	-34.18569863	Ry	Ftot= 0.

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!