

# Winmostar - Quantum ESPRESSO

## Tutorial 3

第一原理MD

V6.016

株式会社クロスアビリティ

[question@winmostar.com](mailto: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、V. 6.016対応

# Contents

- I. 分子のモデリング
- II. 周期境界の作成
- III. 電子状態のエネルギー極小化計算
- IV. エネルギーの時間変化の表示
- V. 原子核の構造最適化計算
- VI. 温度一定のMD計算
- VII. 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](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](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		

# I. 分子のモデリング

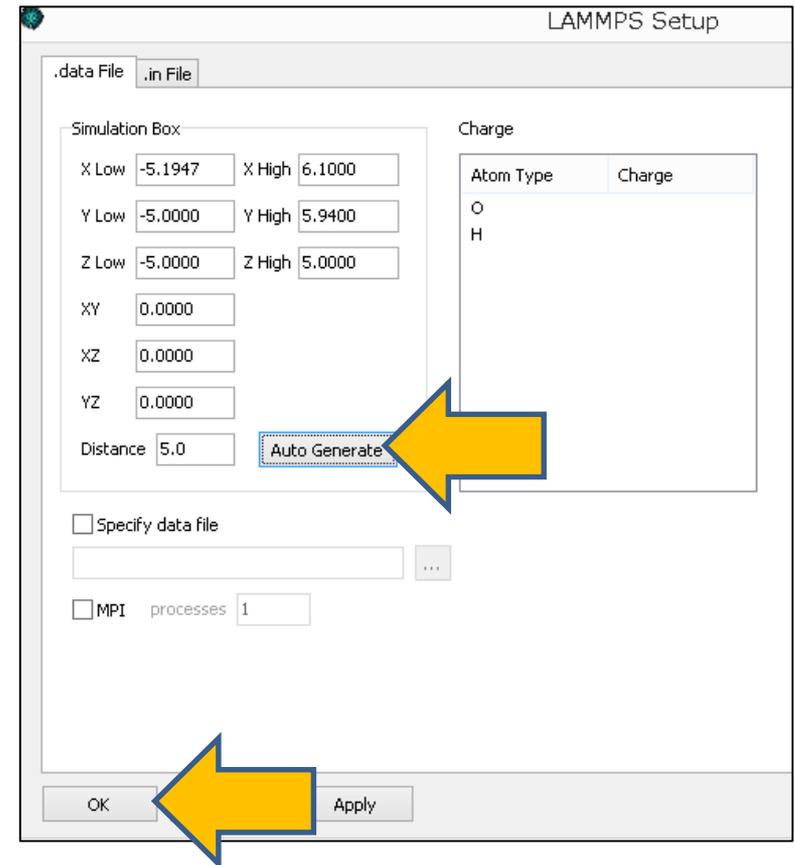
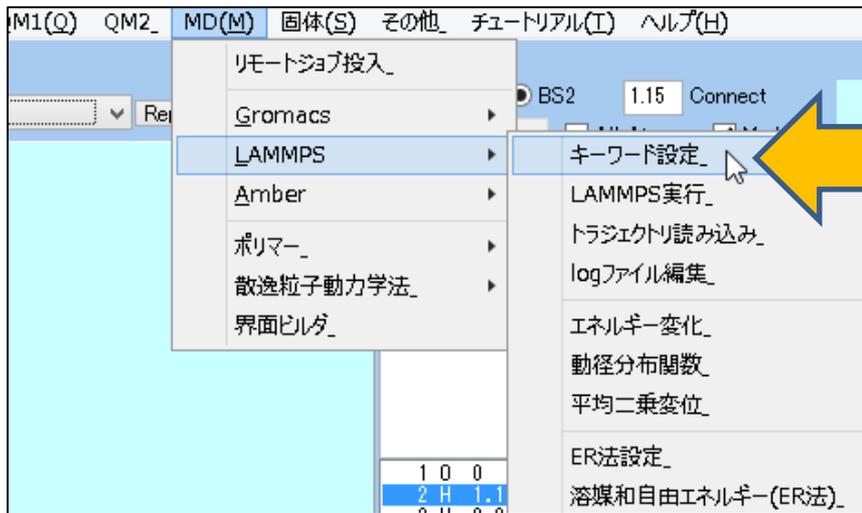
メイン画面上にてCH<sub>4</sub>分子をモデリングする。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main workspace displays a 3D ball-and-stick model of a CH<sub>4</sub> molecule. The interface includes a menu bar at the top with options like 'ファイル(F)', '編集1(E)', '編集2', '表示(V)', 'QM1(Q)', 'QM2', 'MD(M)', '固体(S)', 'その他', 'チュートリアル(T)', and 'ヘルプ(H)'. Below the menu bar is a toolbar with icons for file operations and editing. The right-hand panel contains several controls: radio buttons for 'BS1' and 'BS2', a 'Connect' button with a value of '1.15', a 'Number' dropdown, 'All Atoms' checkbox, and a checked 'Mark' checkbox. There are also sliders for 'Zoom' (set to 1), 'Atom' (set to 0.25), and 'Bond' (set to 10). Below these controls is an 'undo' button and a text area containing the text 'AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK' and 'Winmostar'. At the bottom of the right panel is a data table with 5 rows and 10 columns. The first row is highlighted in blue. Below the table is a 'Debug' section with three dropdown menus, each set to '1'. A small 3D coordinate system is visible in the bottom-left corner of the workspace.

1	C	0	1	0	1	0	1	0	0	0
2	H	1.1	1	0	1	0	1	1	0	0
3	H	1.1	1	109	1	0	1	1	2	0
4	H	1.1	1	109	1	120	1	1	2	3
5	H	1.1	1	109	1	-120	1	1	2	3

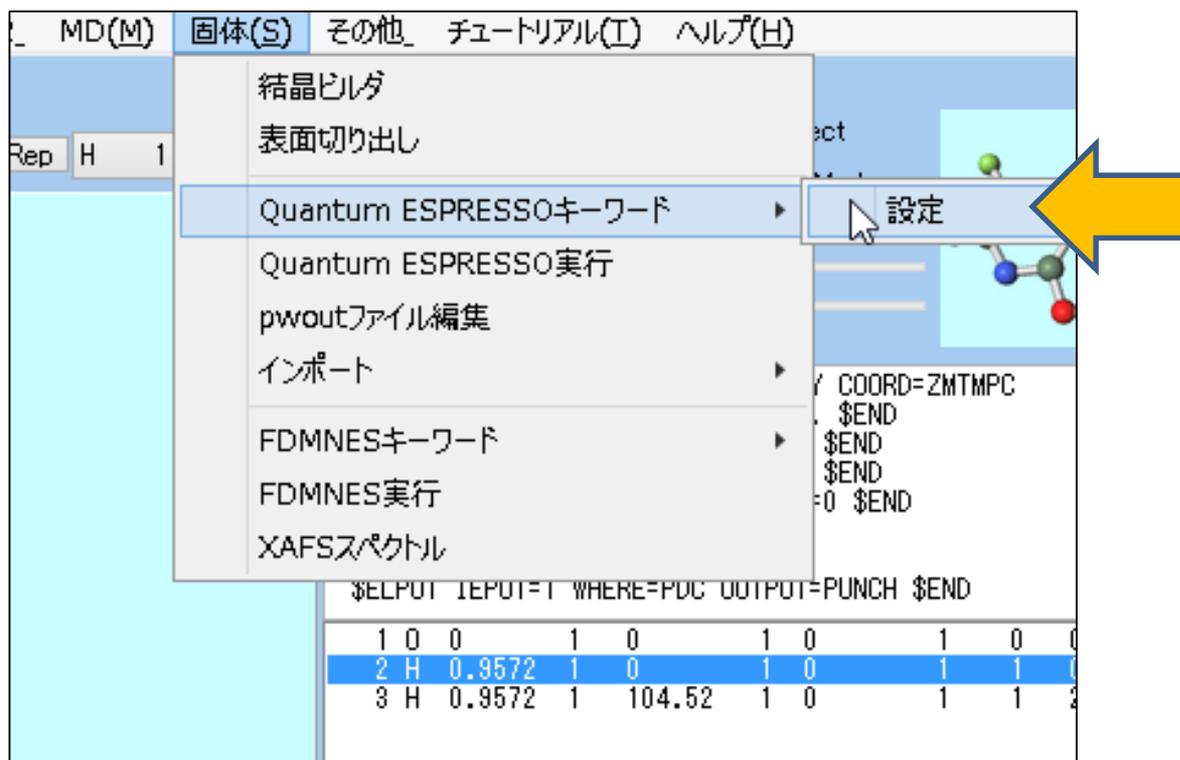
## II. 周期境界の作成

「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。



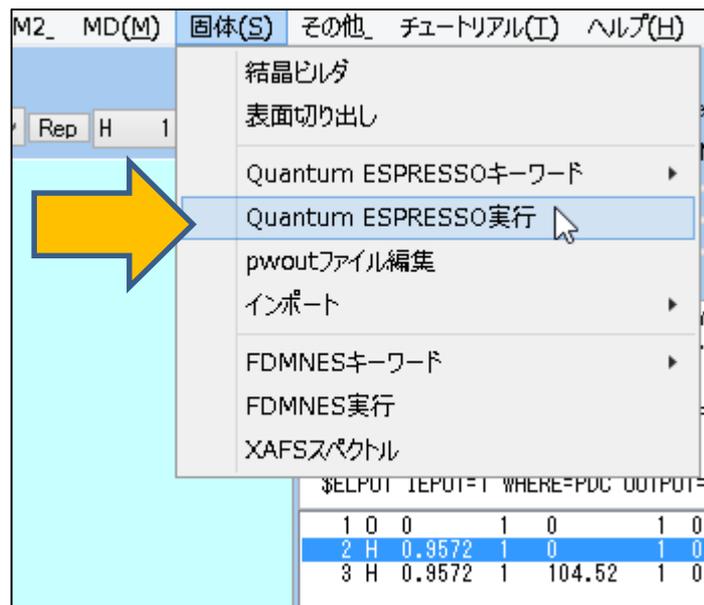
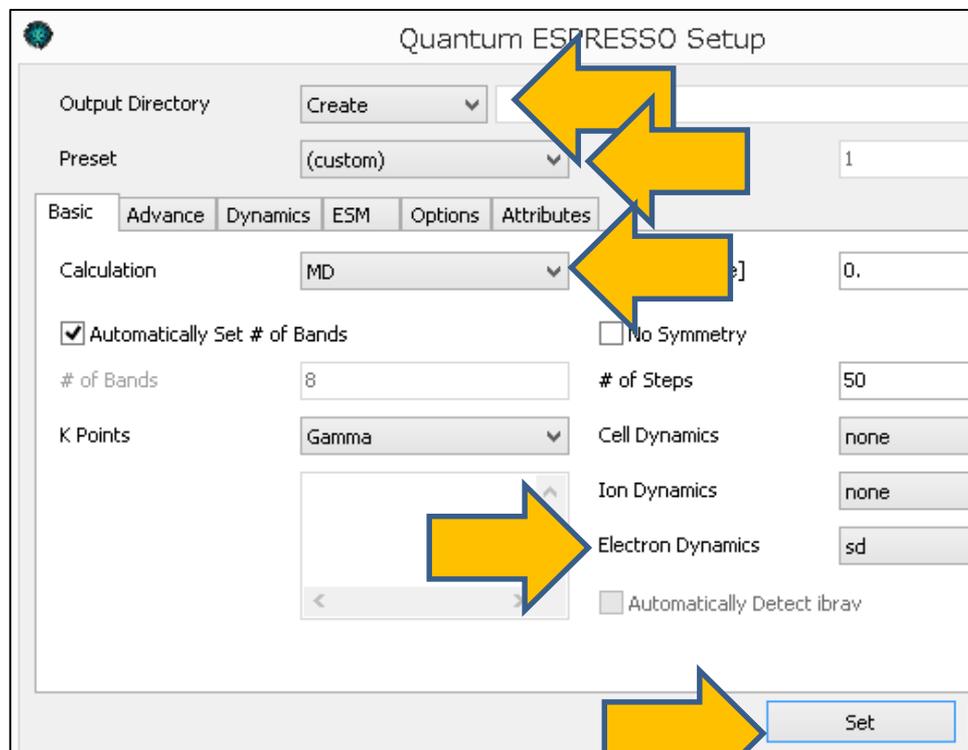
# III. 電子状態のエネルギー極小化計算1

「固体>Quantum ESPRESSOキーワード>設定」を選択する。



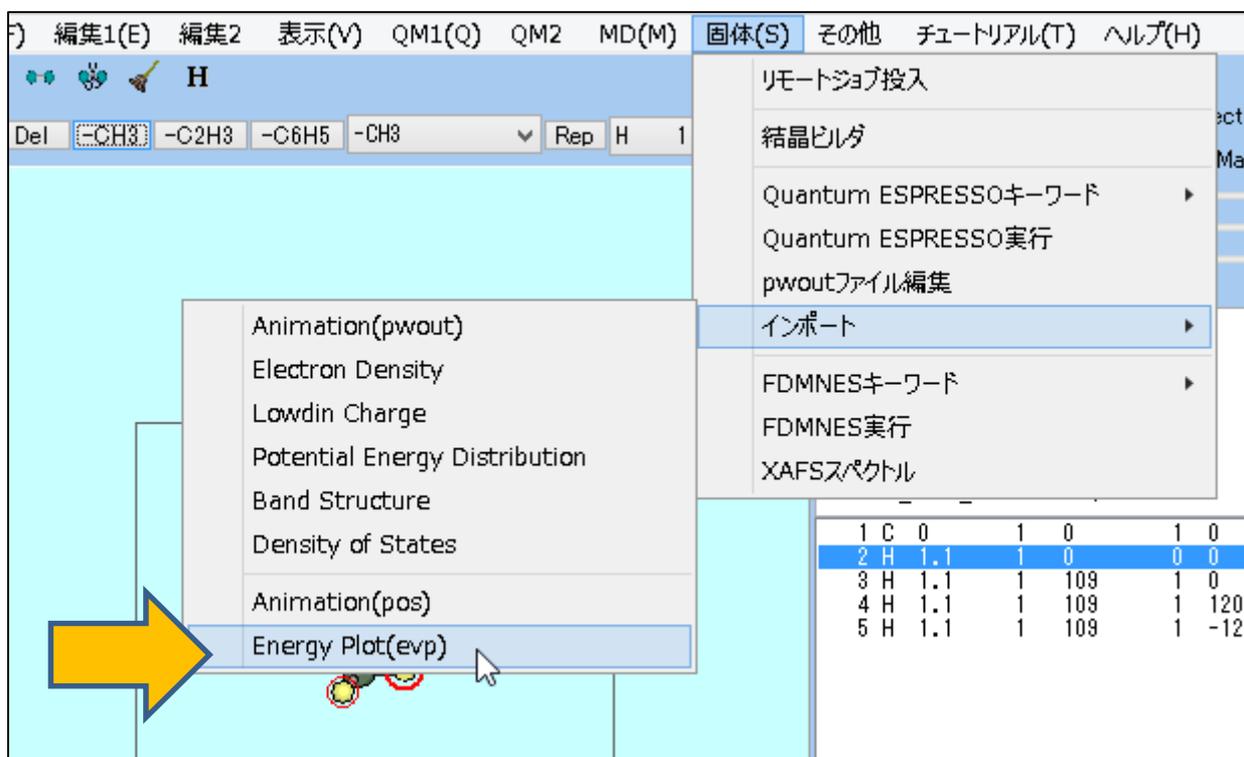
### III. 電子状態のエネルギー一極小化計算2

「Output Directory」に「Create」を選び、一旦「Preset」に「SCF」をセットした後、「Calculation」に「MD」、「Electron Dynamics」に「sd」を指定し、Setをクリックする。「固体>Quantum ESPRESSO実行」を選択する。  
保存するファイル名を聞かれるので、入力して保存すると、計算が開始される。



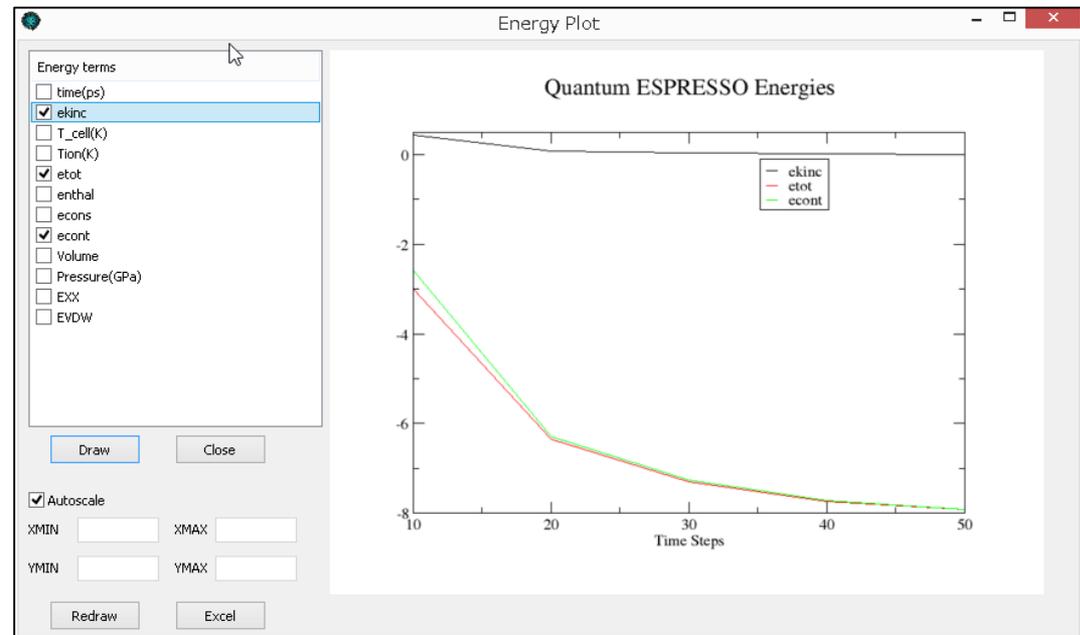
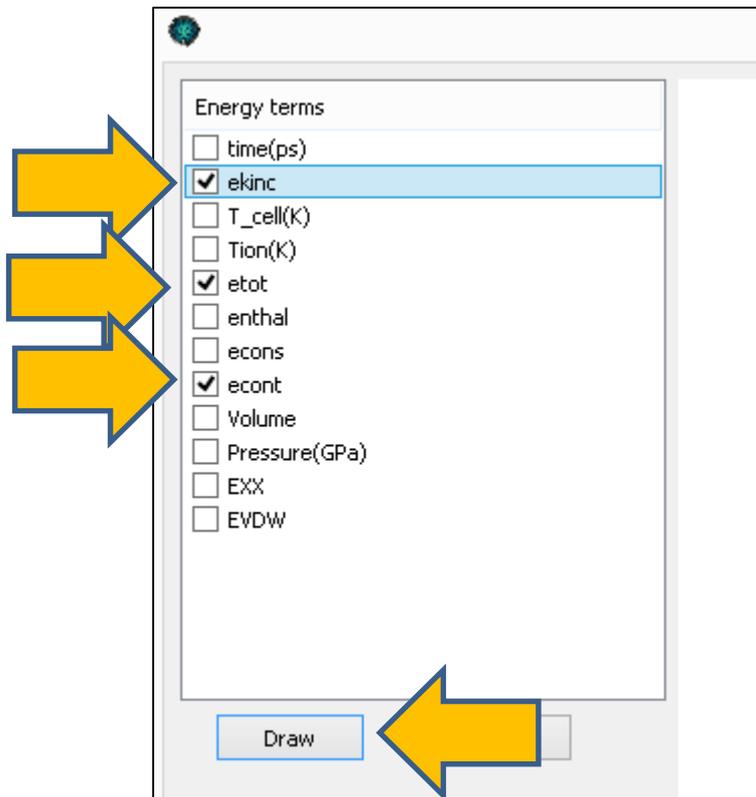
## IV. エネルギーの時間変化の表示1

計算終了後、「固体>インポート>Energy Plot(esp)」を選択し、デフォルトで選ばれるフォルダを選択する。



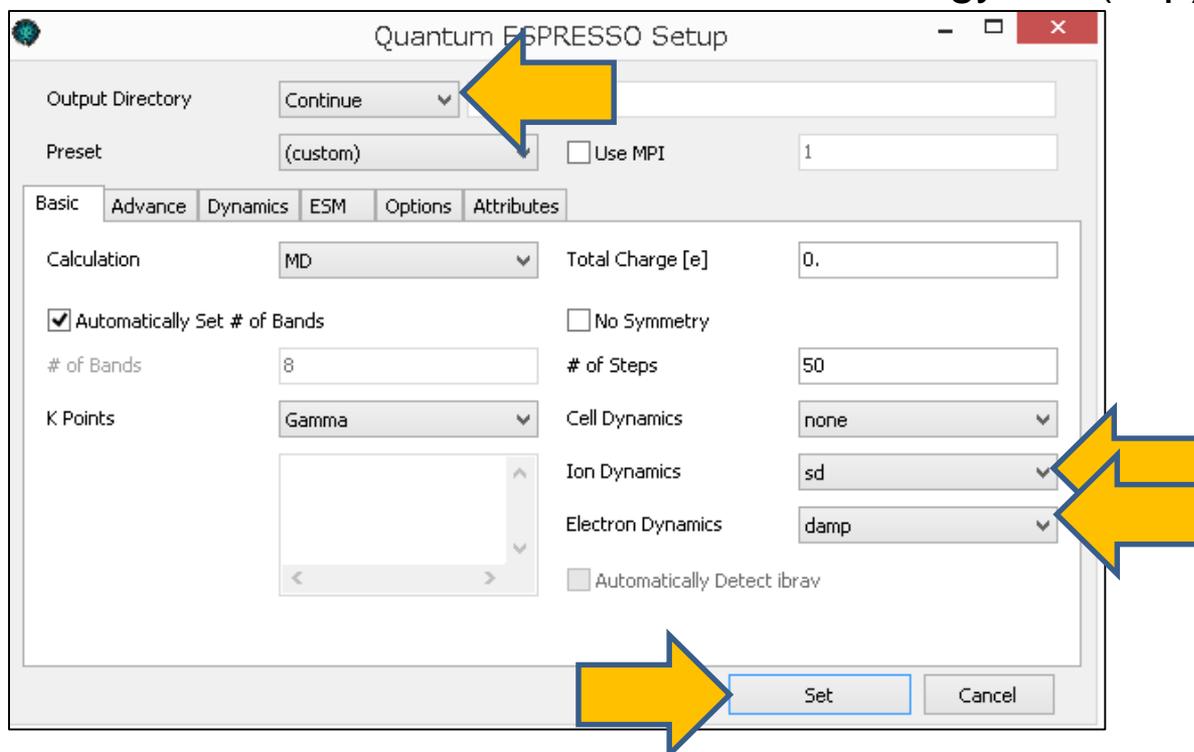
## IV. エネルギーの時間変化の表示2

Energy Plotウインドウでekinc(電子の仮想運動エネルギー)、etot(電子の静電ポテンシャルエネルギー)、econt(全エネルギー)にチェックを入れ、Drawをクリックし、右図のようにエネルギーが低下する様子を取得する。



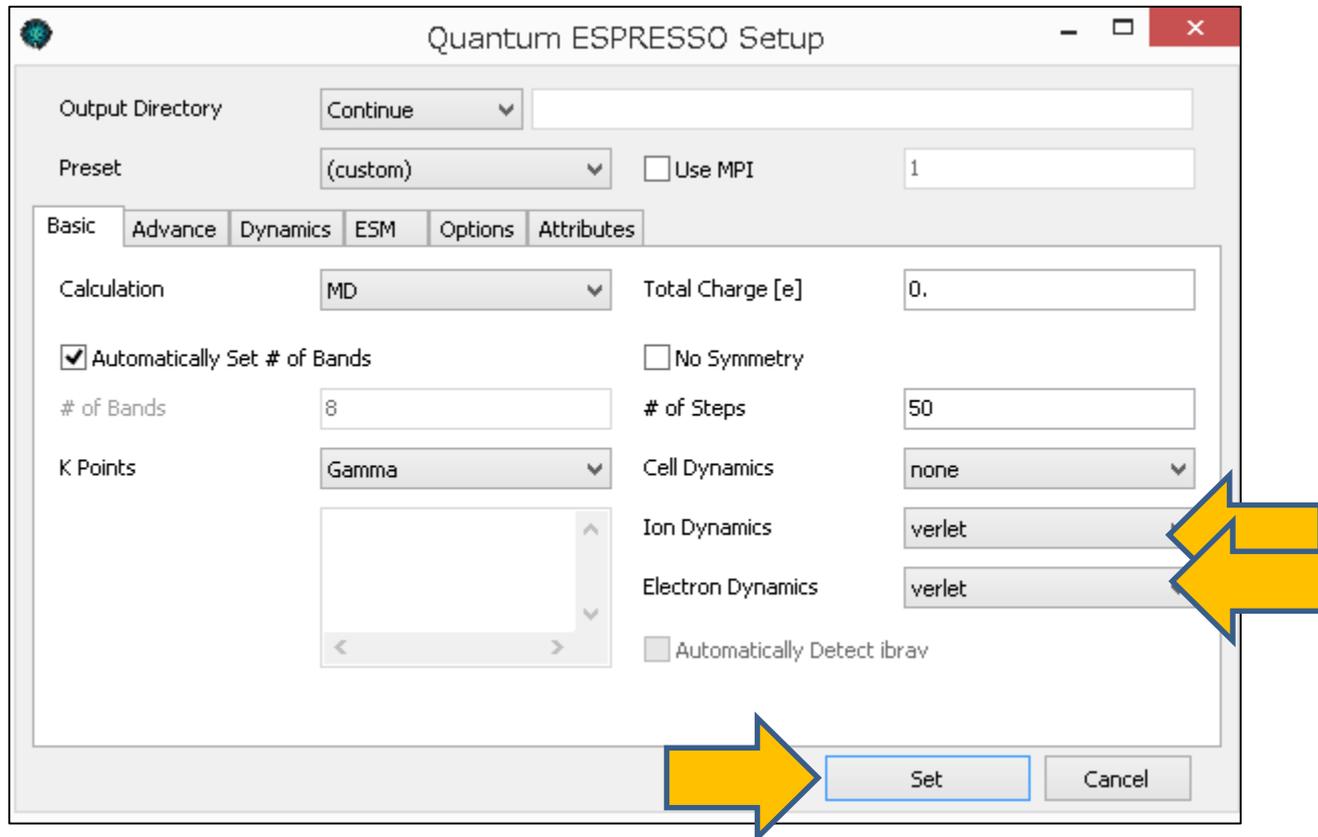
## V. 原子核の構造最適化計算

「固体>Quantum ESPRESSOキーワード>設定」にて、  
 「Output Directory」に「Continue」、「Ion Dynamics」に「sd」、  
 「Electron Dynamics」に「damp」を指定し、「Set」をクリックする。  
 その後「固体>Quantum ESPRESSO実行」から計算を実施する。  
 計算終了後、前スライド同様に「固体>インポート>Energy Plot(evp)」で確認する。



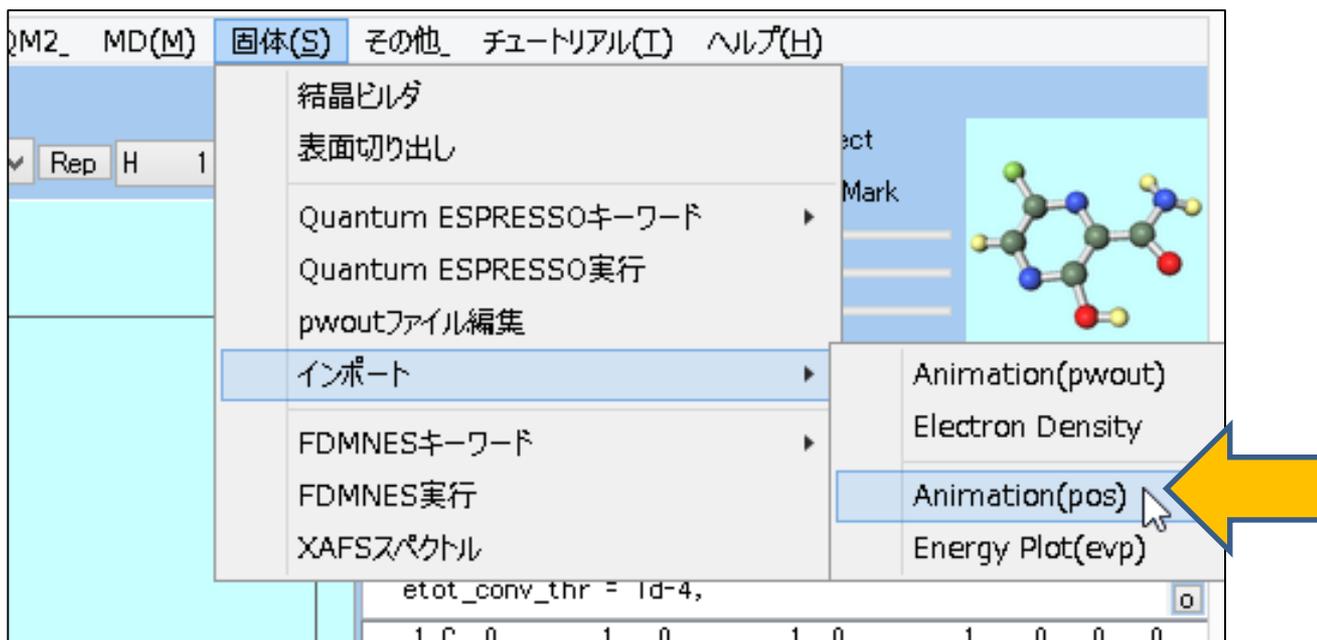
## VI. 温度一定のMD計算

「固体>Quantum ESPRESSOキーワード>設定」にて、  
「Ion Dynamics」と「Electron Dynamics」に「verlet」を指定し、「Set」をクリックする。  
その後、「固体>Quantum ESPRESSO実行」から計算を実施する。



## VII. アニメーション表示1

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



## VII. アニメーション表示2

再生ボタン(|>)をクリックし各ステップの様子を確認する。

The screenshot displays the X-Ability software interface. The main window shows a 3D ball-and-stick model of a molecule with a central grey atom and four surrounding yellow atoms. A red circle highlights one of the yellow atoms. The interface includes a menu bar at the top with options like 'ファイル(E)', '編集1(E)', '編集2', '表示(V)', 'QM1(Q)', 'QM2', 'MD(M)', '固体(S)', 'その他', 'チュートリアル(T)', and 'ヘルプ(H)'. Below the menu bar is a toolbar with icons for file operations and a toolbar with buttons for 'Add', 'Del', '-CH3', '-C2H3', '-C6H5', '-CH3', 'Rep', 'H', '1', and 'Chng'. The 'Animation' panel on the right contains a list of simulation steps with their corresponding time values in picoseconds (ps). A yellow arrow points to the 'Play' button (|>) in the animation control panel.

Nstep	t
10	0.00120944 ps
20	0.00241888 ps
30	0.00362833 ps
40	0.00483777 ps
50	0.00604721 ps
60	0.00725665 ps
70	0.00846610 ps
80	0.00967554 ps
90	0.01088498 ps
100	0.01209442 ps
110	0.01330386 ps
120	0.01451331 ps
130	0.01572275 ps
140	0.01693219 ps
150	0.01814163 ps

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...](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!