

Winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

基礎編

V7.016

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/4/27

Contents

- I. SCF計算
- II. Bands計算
- III. DOS計算
- IV. 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
		PWgwr-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. SCF計算

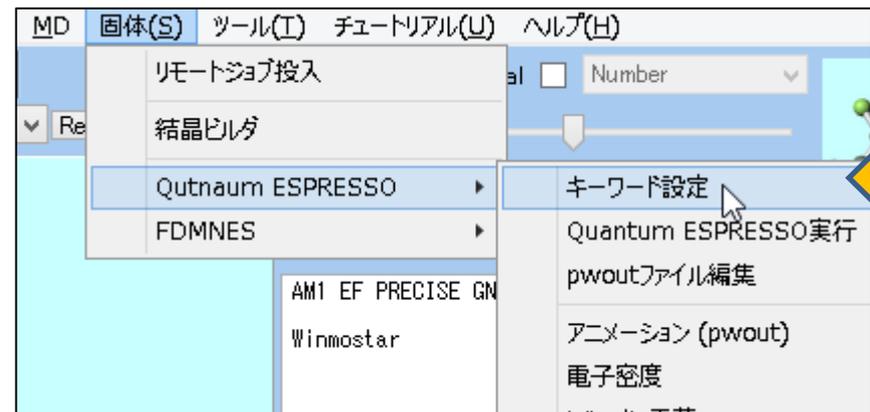
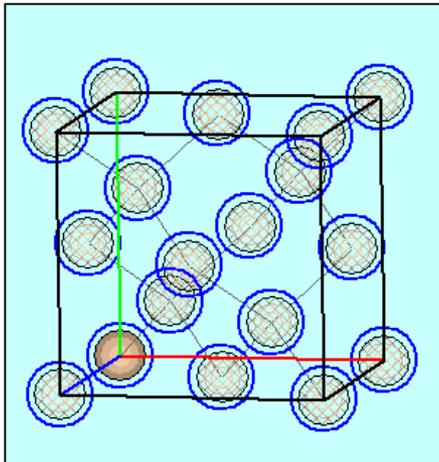
1. [メニュー] > [開く]をクリック。
2. サンプルフォルダ内のsi.cifを開く。(デフォルトではC:\winmos7\samples\si.cif)

※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

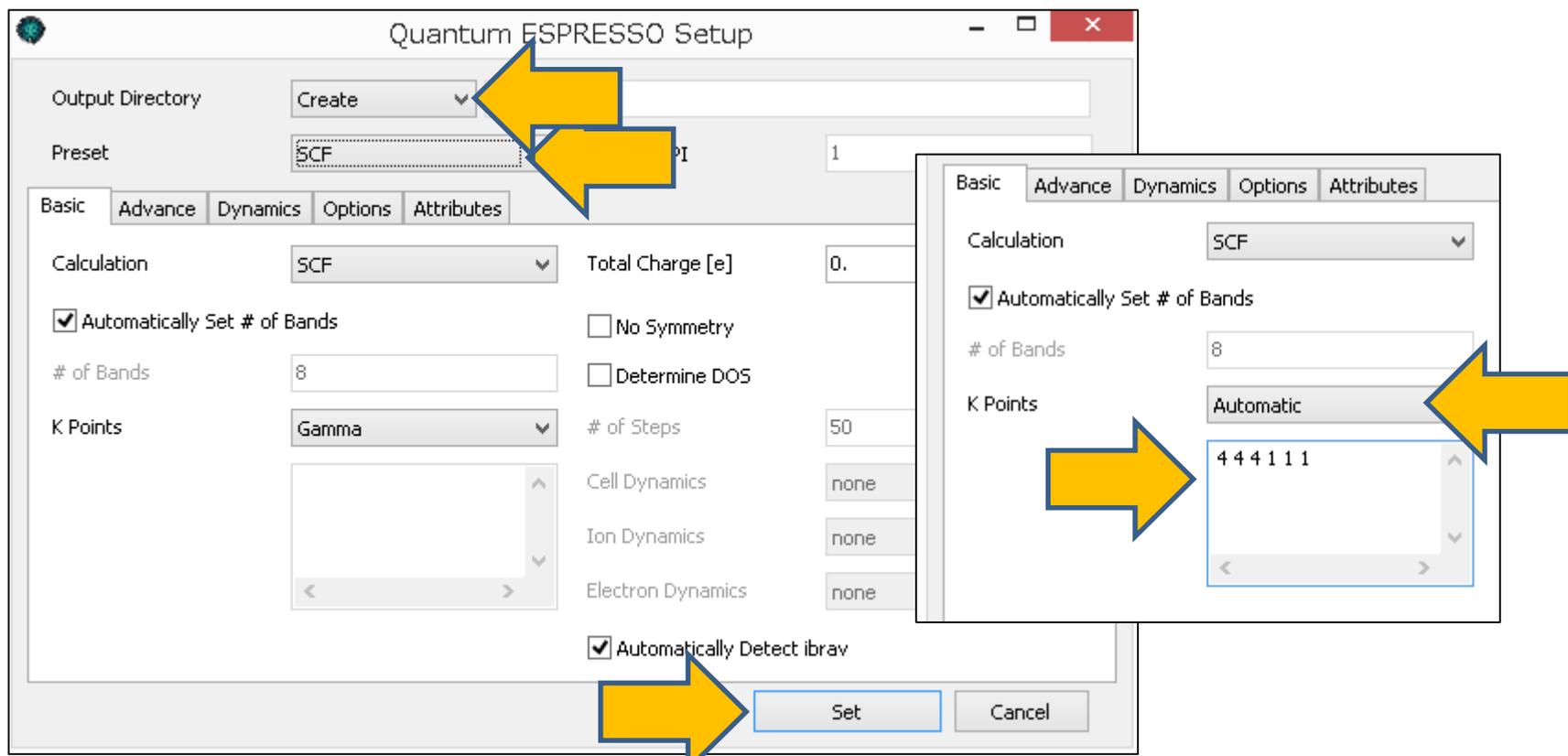
Crystal system: Cubic
Space group : Fd-3m (227)
Lattice constants : a=5.4309 Å
Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)

3. [固体] > [Quantum ESPRESSO キーワード設定]をクリック。



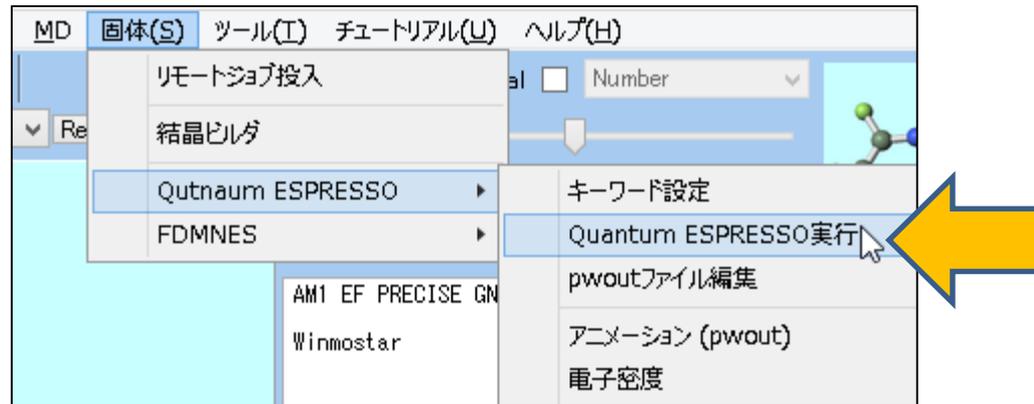
I. SCF計算

1. [Output Directory]に”Create”, [Preset]に”SCF”を指定する。
2. [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。
3. [Set]をクリック。



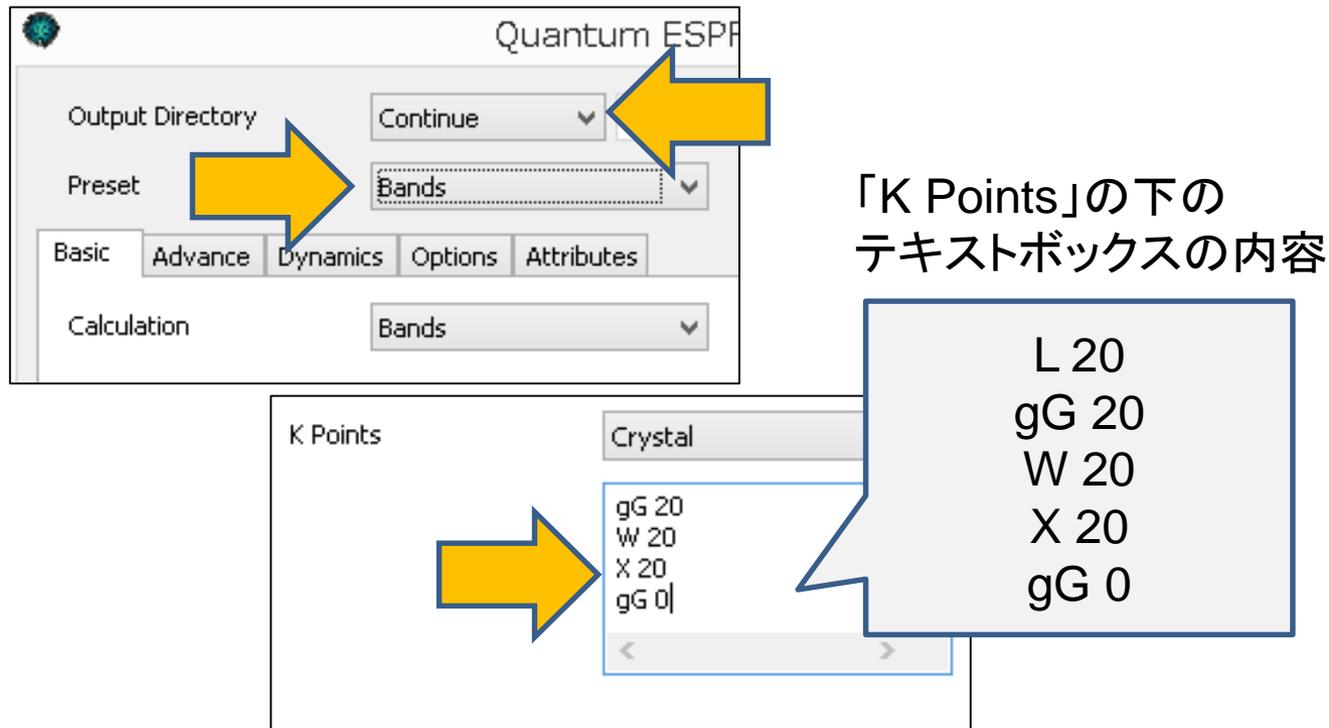
I. SCF計算

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO]>[Quantum ESPRESSO実行]をクリック。
2. 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。



II. Bands計算

1. SCF計算終了後、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [キーワード設定]をクリック。
2. [Output Directory]に”Continue”を、[Preset]に”Bands”を選択する。
3. 次に、[K Points]に以下のように入力し、[Set]をクリックする。



Quantum ESPRESSO

Output Directory: Continue

Preset: Bands

Basic | Advance | Dynamics | Options | Attributes

Calculation: Bands

K Points

Crystal

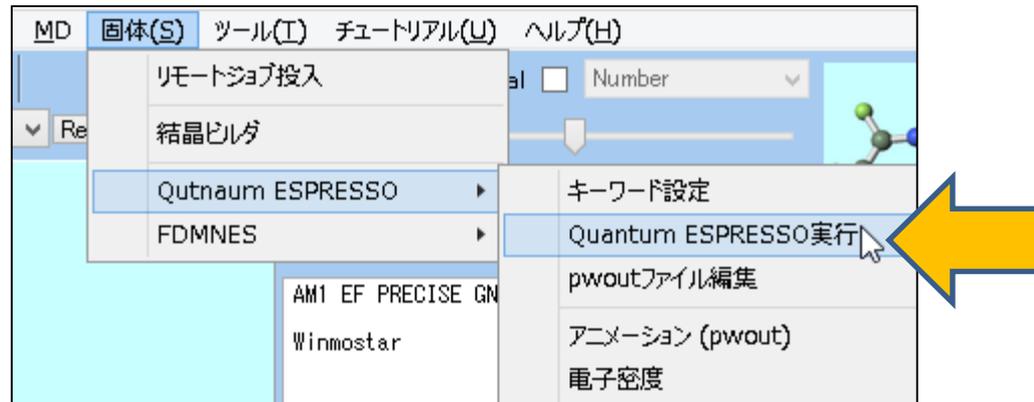
```
gG 20  
W 20  
X 20  
gG 0
```

「K Points」の下の
テキストボックスの内容

```
L 20  
gG 20  
W 20  
X 20  
gG 0
```

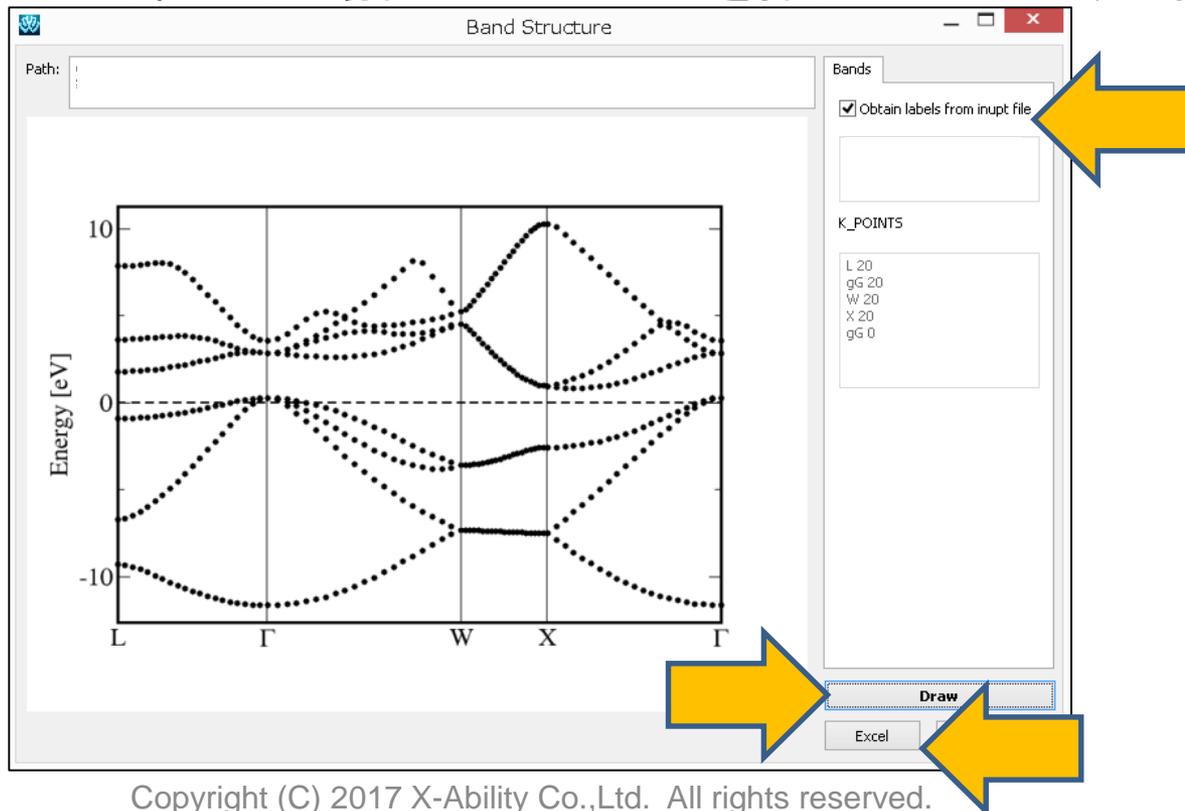
II. Bands計算

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [Quantum ESPRESSO実行]をクリック。
2. 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。



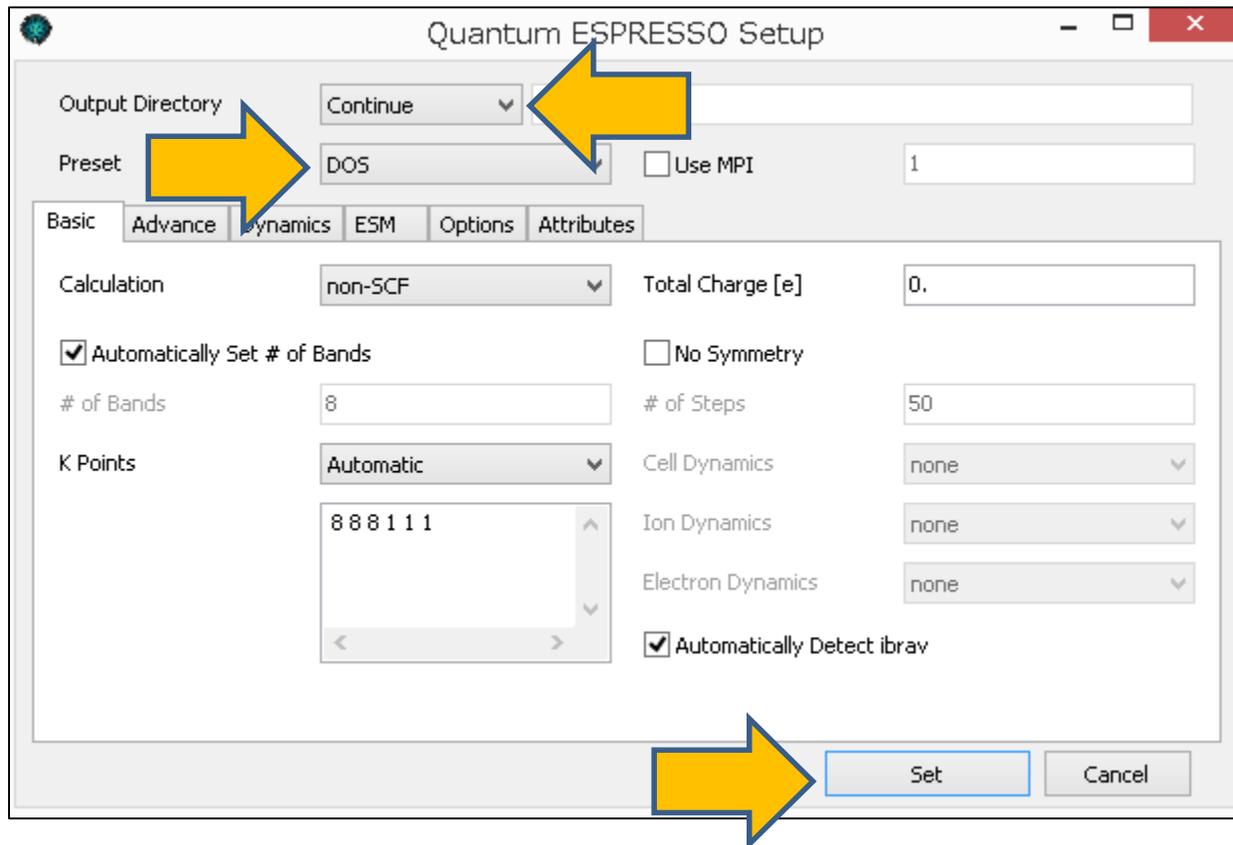
II. Bands計算

1. 計算の終了後、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [バンド構造]をクリック。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。
3. [Obtain labels from input file]をクリックしデフォルトで選ばれるファイルを選択する。
4. Drawボタンを押すとバンド図が得られる。
5. Excel等でプロットし直したい場合はExcelボタンを押しCSVで出力する。



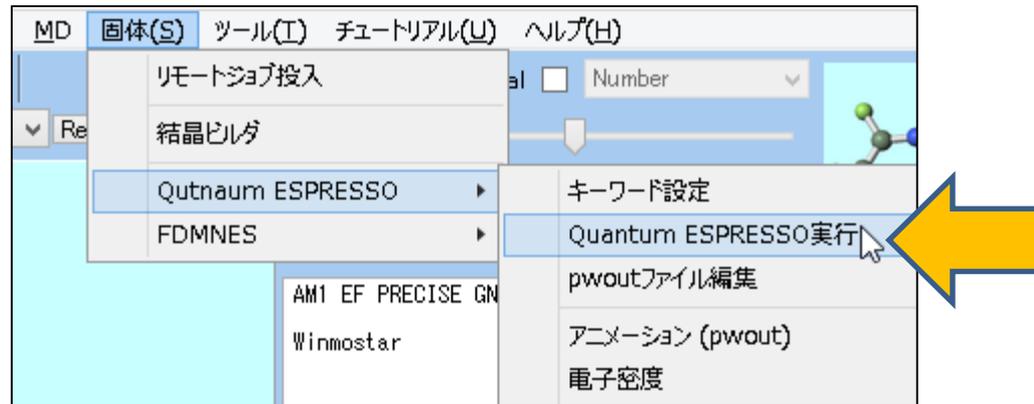
III. DOS計算

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [キーワード設定]をクリック。
2. [Output Directory] = "Continue", [Preset]="DOS"を選択する。
3. [Set]をクリック。



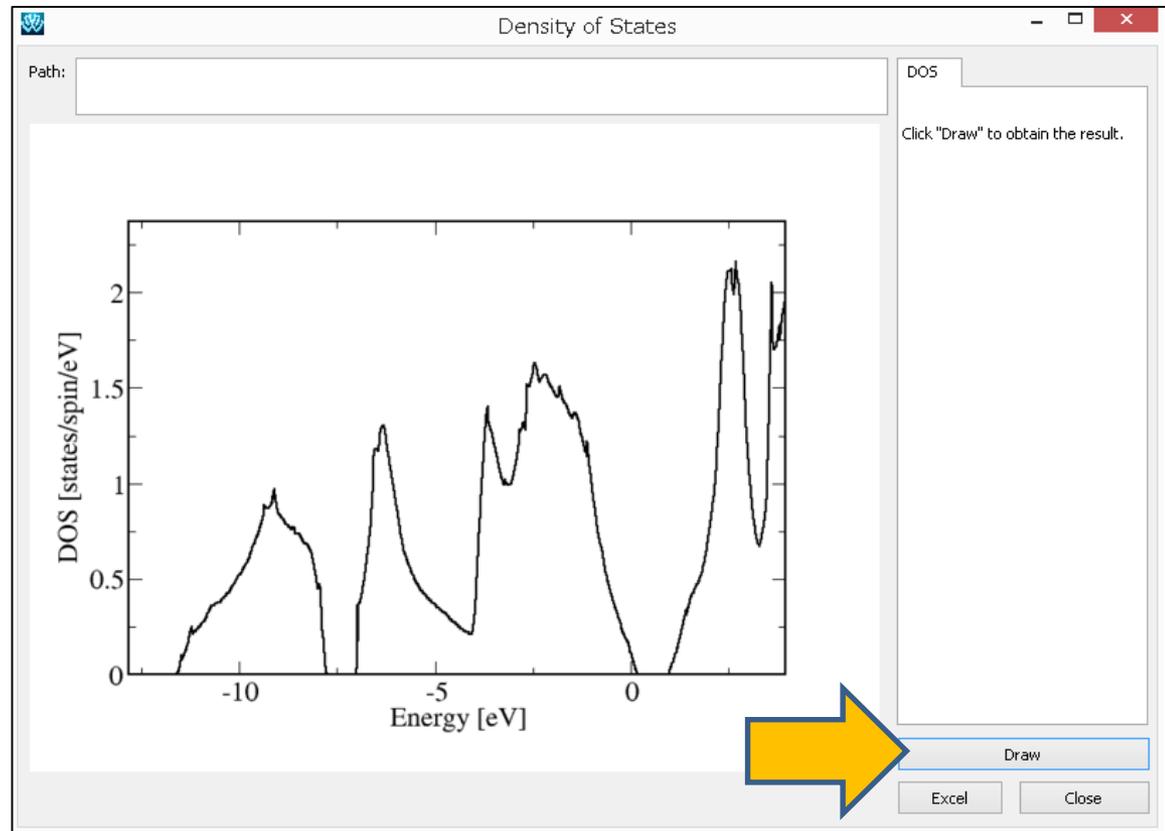
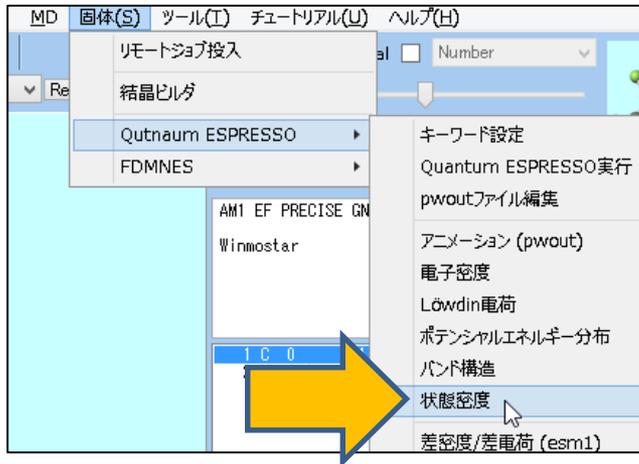
III. DOS計算

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [Quantum ESPRESSO実行]をクリック。
2. 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。



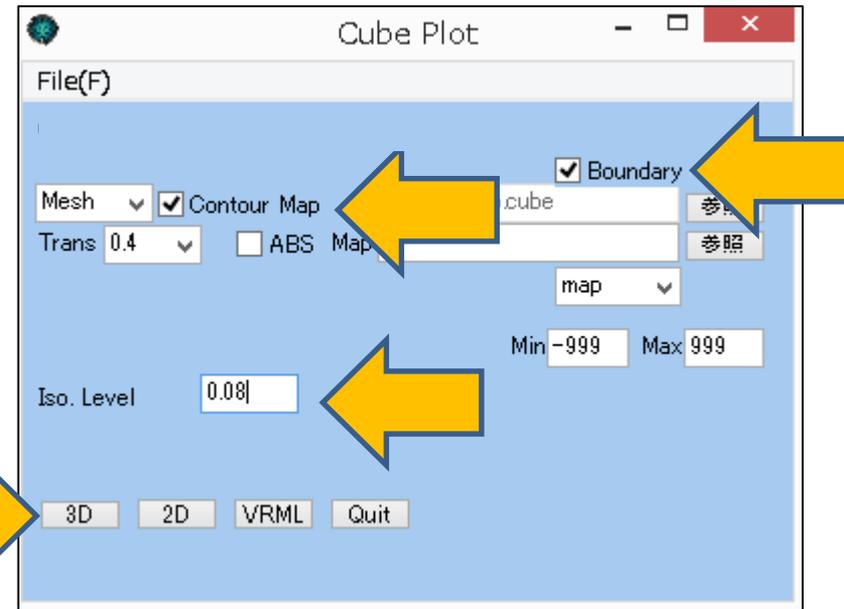
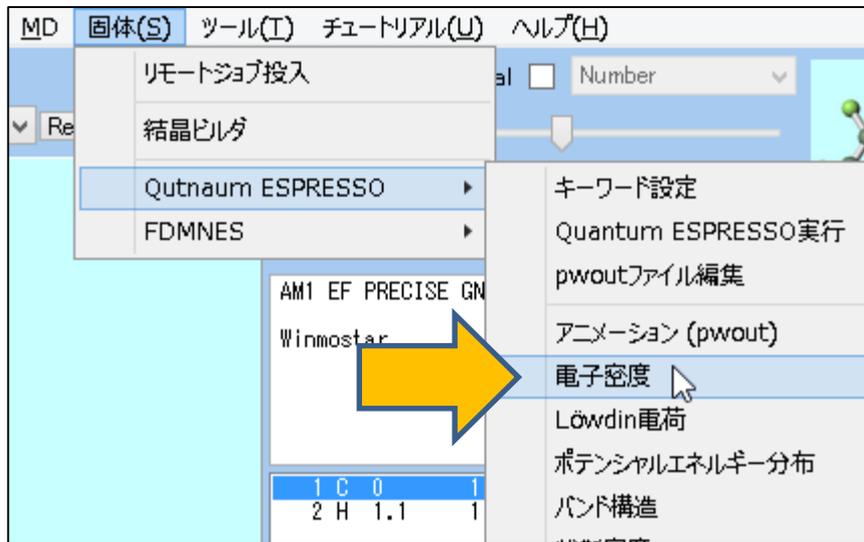
III. DOS計算

1. 計算の終了後、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [状態密度]をクリック。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。
3. 新しいウィンドウが立ち上がり、Drawボタンを押すとDOSが得られる。



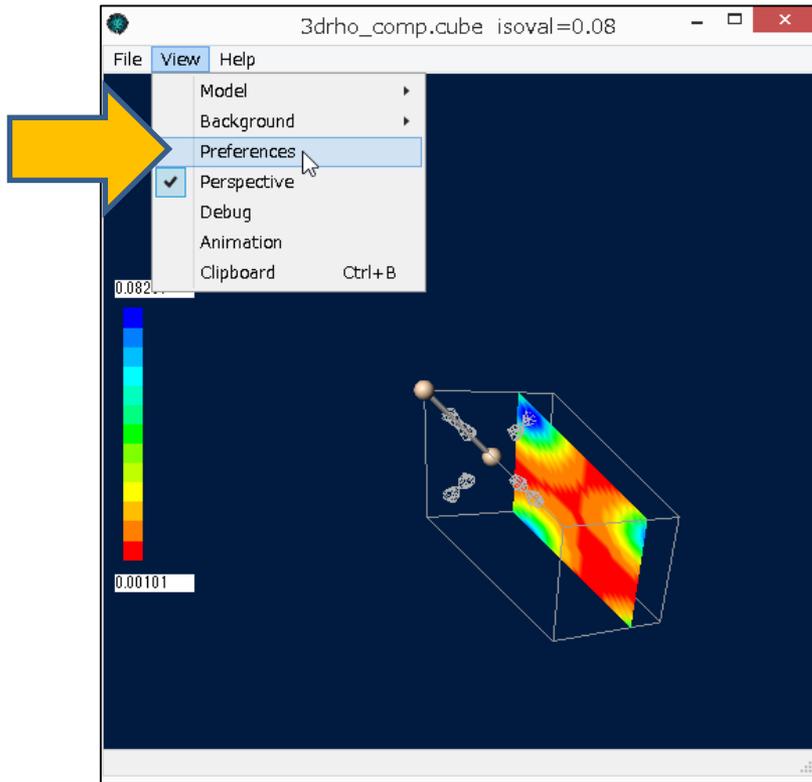
IV. 電子密度表示

1. 同様に、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [電子密度]をクリック。
2. デフォルトで選ばれるフォルダをクリック。
3. [Contour Map]と[Boundary]にチェックを入れ、[Iso. Level]を”0.08”に設定。
4. [3D]をクリック。



IV. 電子密度表示

1. 起動したWinmostar 3Dにて、[View] > [Preferences]をクリック。

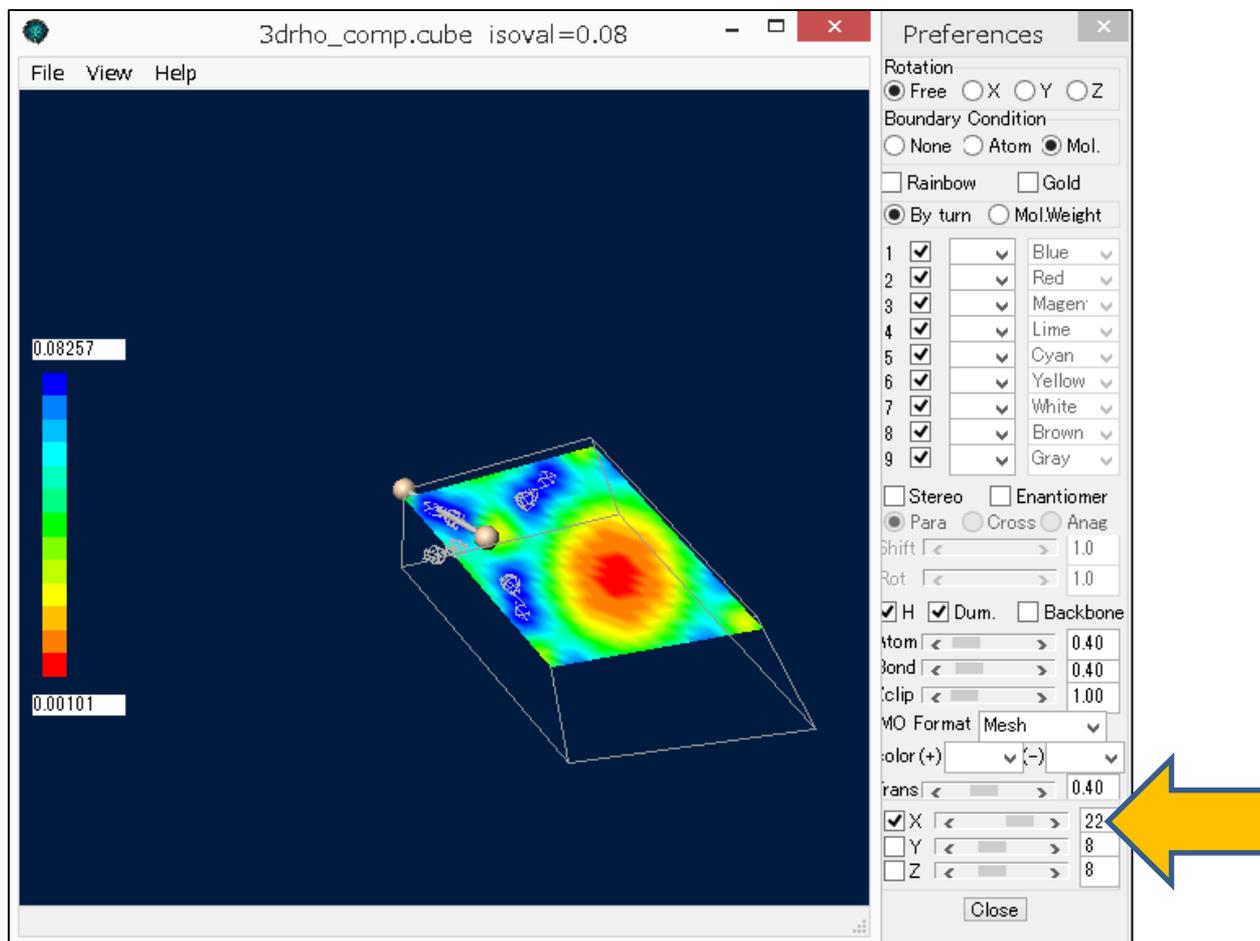


※ 画面上に2粒子しか表示されず、セルの形状が立方体でないのは、Winmostarが自動的に結晶構造をPrimitive Cellに変換したためである。

変換の有無は[Quantum ESPRESSOキーワード設定]
[Automatically Detect ibrav]で切り替えられる。

IV. 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!