

# Winmostar チュートリアル

## Quantum ESPRESSO

### 構造最適化計算

V7.009

株式会社クロスアビリティ

[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2017/4/27

# Contents

- I. 分子のモデリング
- II. 構造最適化計算
- III. 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](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
<b>QE-5.2.1</b>	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		
		<b>qe-5.2.1-64bit-mpich2.exe</b>		
		qe-5.2.1-32bit-serial.exe	50 MB	5097
		atomic-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
		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. 分子のモデリング

メイン画面上にてH<sub>2</sub>O分子をモデリングする。  
例えば、初期状態で炭素原子を選択し、置換基に[-OH]を設定し[Repl]する。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main workspace displays a 3D ball-and-stick model of a water molecule (H<sub>2</sub>O) with a red oxygen atom and two white hydrogen atoms. The right-hand panel contains several controls and a data table.

Right-hand panel controls:

- BS1 (radio button), BS2 (radio button), 1.15 Connect
- Number (dropdown), All Atoms (checkbox), Mark (checkbox)
- Zoom 1 (slider), Atom 0.25 (slider), Bond 10 (slider)
- undo <-->

Command line text:

```
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK
Winmostar
```

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	0.96	1	101.7031	1	0	1	1	2	0

Bottom right panel:

2	H	1.1	0	0	1	0	0
Debug	1	1	1	1			

# I. 分子のモデリング

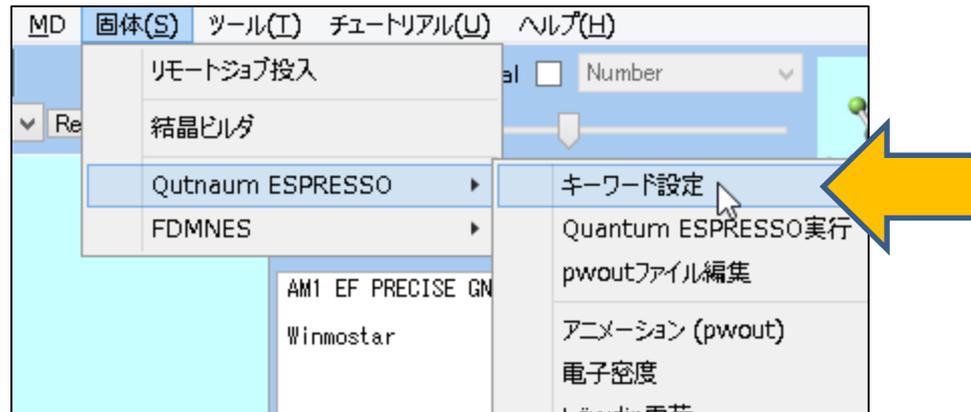
[編集]-[セルを作成/編集]にて[Create]をクリックし[OK]とすると、セルが作成される。

The image illustrates the steps to create a cell in the software:

- Step 1:** The user navigates to the **編集(E)** (Edit) menu and selects **セルを作成/編集** (Create/Edit Cell).
- Step 2:** The **Create/Edit Cell** dialog box is displayed. The **Create** button is highlighted, and the **OK** button is also highlighted.
- Step 3:** The final result is a 3D molecular model centered within a light blue rectangular cell.

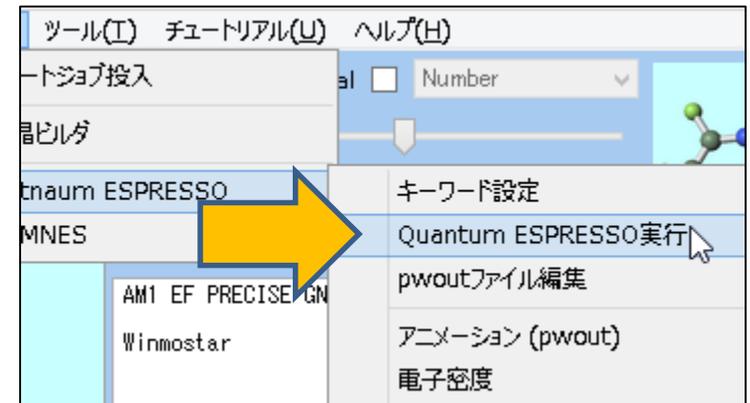
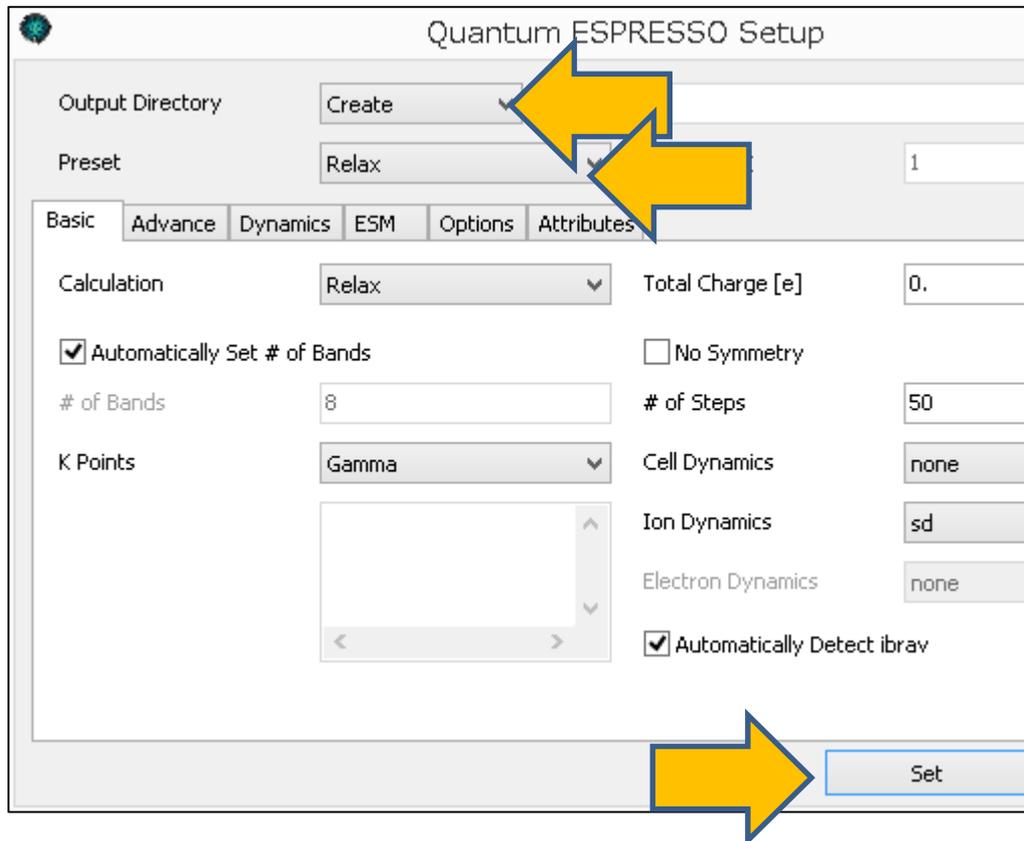
## II. 構造最適化計算

「固体>Quantum ESPRESSO>キーワード設定」を選択する。



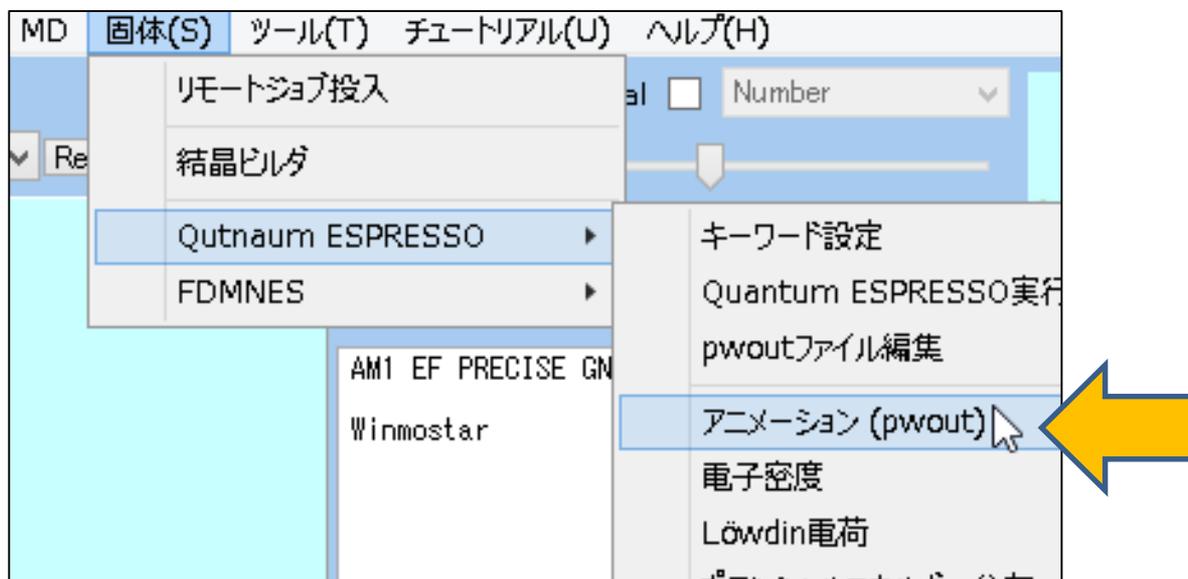
## II. 構造最適化計算

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



## III. 構造最適化のアニメーション表示

計算の終了後、「固体 > Quantum ESPRESSO > アニメーション(pwout)」を選択する。  
デフォルトで選ばれるファイルを選択する。



# III. 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 displays the X-Ability software interface. The main window shows a 3D ball-and-stick model of a water molecule (H<sub>2</sub>O) centered in a 3D coordinate system with X, Y, and Z axes. The text in the upper left corner of the window reads: "Polymer 3 H2O MASS=18.02 X=5 Y=5.94 Z=5 3-1-3-0 Leng=0.96 Ang=0 Dihed=\* Lper=\* H Vol=1,235.6475 Rho=0.0242".

On the right side, there is an "Animation" control panel. It features a table of optimization steps with columns for "STEP", "Etot", "Ry", and "Ftot". The table contains 18 rows of data. Below the table, there are several control buttons: "Reload", "Rewind", "Last", "Slow", "Fast", "temp", "3D animation", "jpeg", "gif", "autorew", "3D", "Excel", a play button (|>), and "Quit". A large yellow arrow points to the play button. At the bottom of the animation panel, a graph shows the convergence of the energy function, with the text "bfgs converged in 18 scf cycles and 16 bfgs steps" and a value of "0.000000000".

STEP	Etot	Ry	Ftot
STEP= 0	-34.16115974	Ry	Ftot= 0.222054
STEP= 1	-34.17867780	Ry	Ftot= 0.152241
STEP= 2	-34.18263727	Ry	Ftot= 0.058416
STEP= 3	-34.18339651	Ry	Ftot= 0.007551
STEP= 4	-34.18339531	Ry	Ftot= 0.007118
STEP= 5	-34.18340950	Ry	Ftot= 0.002610
STEP= 6	-34.18341739	Ry	Ftot= 0.002030
STEP= 7	-34.18342429	Ry	Ftot= 0.001776
STEP= 8	-34.18343134	Ry	Ftot= 0.001639
STEP= 9	-34.18343789	Ry	Ftot= 0.002104
STEP= 10	-34.18344453	Ry	Ftot= 0.002841
STEP= 11	-34.18345386	Ry	Ftot= 0.003761
STEP= 12	-34.18347311	Ry	Ftot= 0.004122
STEP= 13	-34.18350548	Ry	Ftot= 0.004857
STEP= 14	-34.18354003	Ry	Ftot= 0.008104
STEP= 15	-34.18355896	Ry	Ftot= 0.005083
STEP= 16	-34.18357012	Ry	Ftot= 0.003069
STEP= 17	-34.18357619	Ry	Ftot= 0.000606

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!