

Winmostar チュートリアル
Quantum ESPRESSO
第一原理MD
V7.009

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2016/12/29

Contents

- I. 分子のモデリング
- II. 電子状態のエネルギー極小化計算
- III. エネルギーの時間変化の表示
- IV. 構造最適化計算
- V. 温度一定のMD計算
- VI. 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
		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CH₄分子をモデリングする。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a methane (CH₄) molecule. The central carbon atom is grey, and the four hydrogen atoms are white. The molecule is positioned in a 3D coordinate system with X, Y, and Z axes. The interface includes a menu bar at the top with options like 'ファイル(F)', '編集(E)', '表示(V)', '半経験QM(P)', 'QM', 'MD', '固体(S)', 'ツール(T)', 'チュートリアル(U)', and 'ヘルプ(H)'. Below the menu is a toolbar with various icons for file operations and editing. A status bar at the top of the main window shows 'Winmostar 5 CH4 MASS=16.04 X=1.1 Y=0 Z=0 2-5-1-2 Leng=1.7911 Ang=35.5 Dihed=0 Lper=0 H'. On the right side, there are controls for 'Zoom 1', 'Atom 0.25', and 'Bond 10'. Below these are settings for 'AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK' and 'Winmostar'. At the bottom right, there is a table showing the molecular data:

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

At the bottom of the interface, there are additional controls for 'XYZ' and '1'.

I. 分子のモデリング

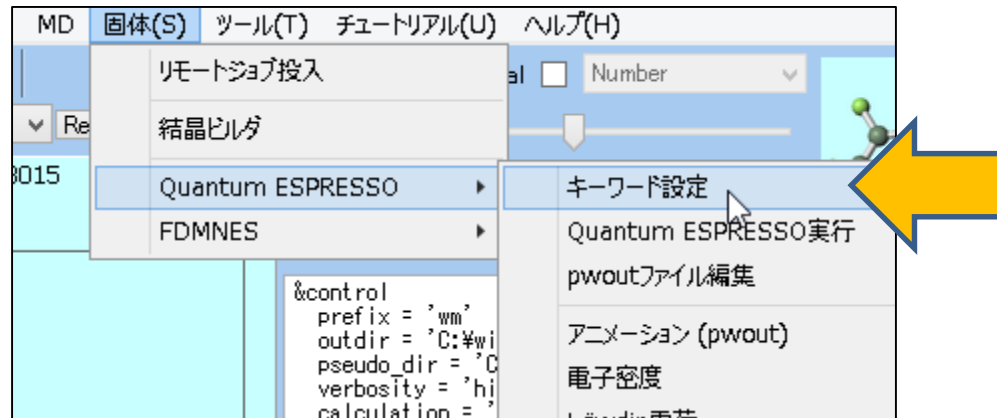
[編集]-[セルを作成/編集]にて[Create]をクリックし[OK]とすると、セルが作成される。

The image illustrates the workflow for creating a cell in X-Ability. It consists of three sequential screenshots:

- First Screenshot:** The 'Edit' menu is open, showing various options. The option 'セルを作成/編集' (Create/Edit Cell) is highlighted with a yellow arrow.
- Second Screenshot:** The 'Create/Edit Cell' dialog box is displayed. The 'Create' button is highlighted with a yellow arrow. The 'Distance [A]' field is set to 5. The 'Expand' section shows 'Width [A]' set to 5 and 'Axis' set to Z. The 'Boundary' section shows 'Periodic' for all three axes (V1, V2, V3).
- Third Screenshot:** The resulting 3D molecular model is shown in a window. The model consists of a central black atom (Carbon) bonded to four yellow atoms (Hydrogen). The window title bar shows the coordinates and other parameters: 'Winmostar 5 CH4 MASS=16.04 X=1.1 Y=0 Z=0 P=5-1-2 Leng=1.7911 Ang=35.5 Dihed=0 Lper=0 H Vol=1,563.1869 Rho=0.017'.

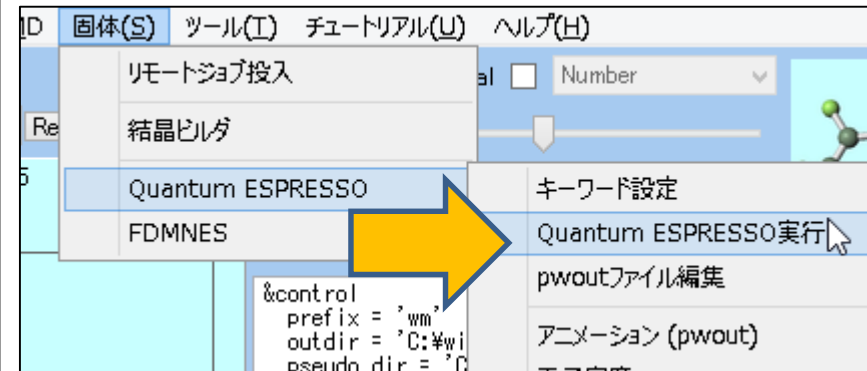
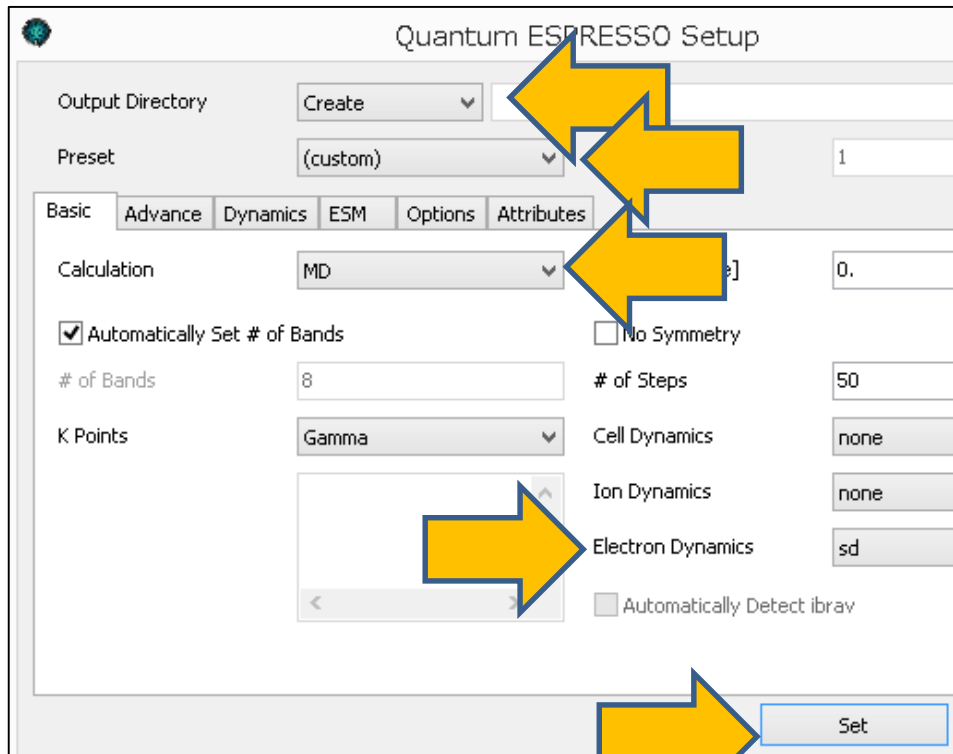
II. 電子状態のエネルギー極小化計算1

「固体>Quantum ESPRESSO>キーワード設定」を選択する。



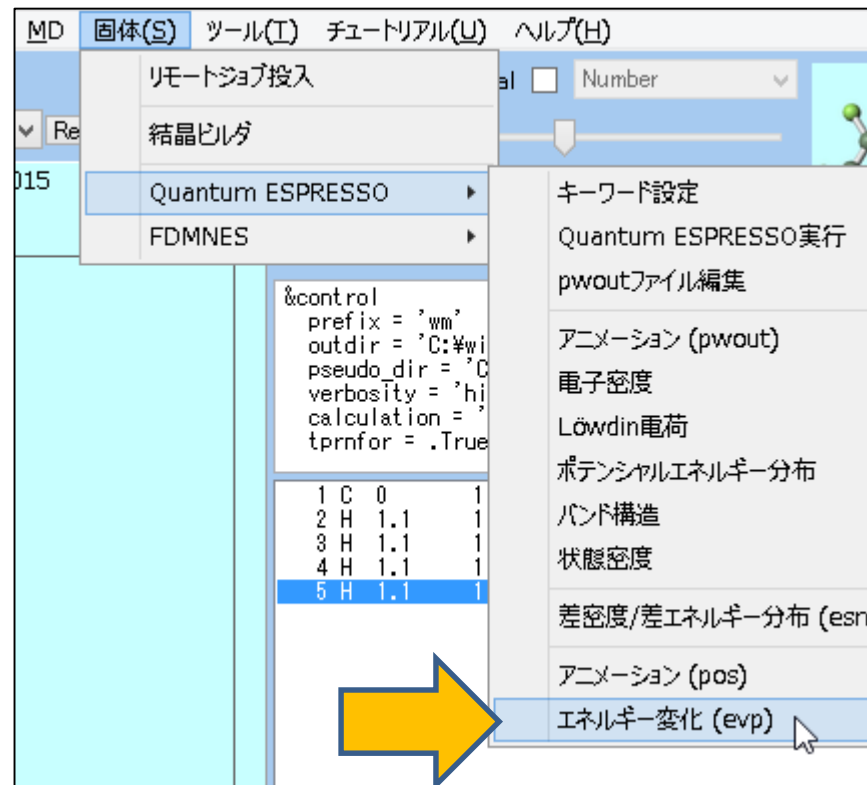
II. 電子状態のエネルギー一極小化計算2

「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>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。



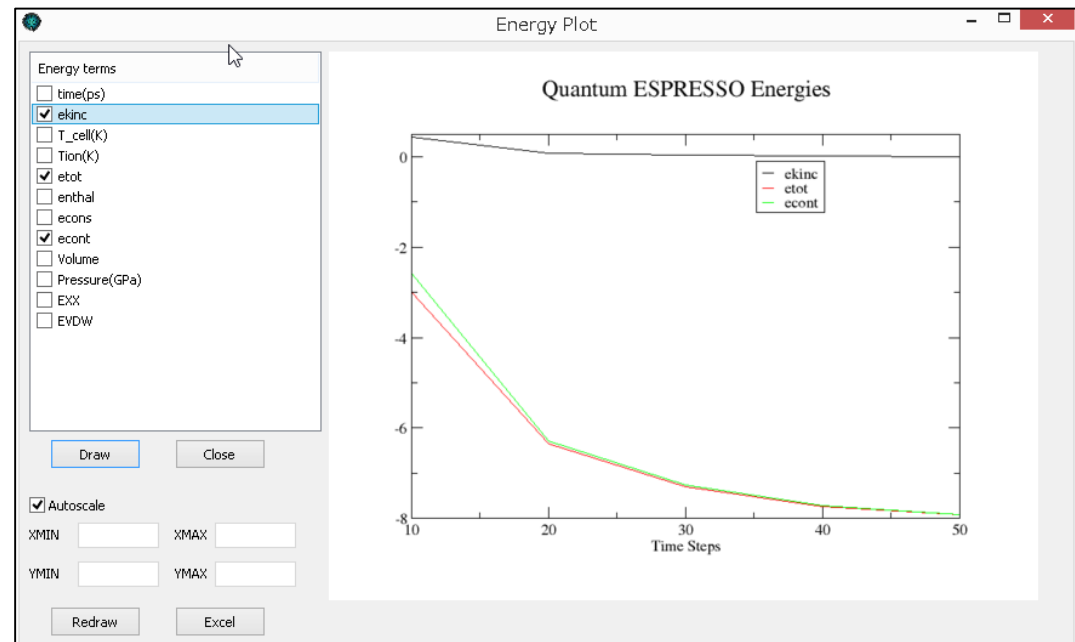
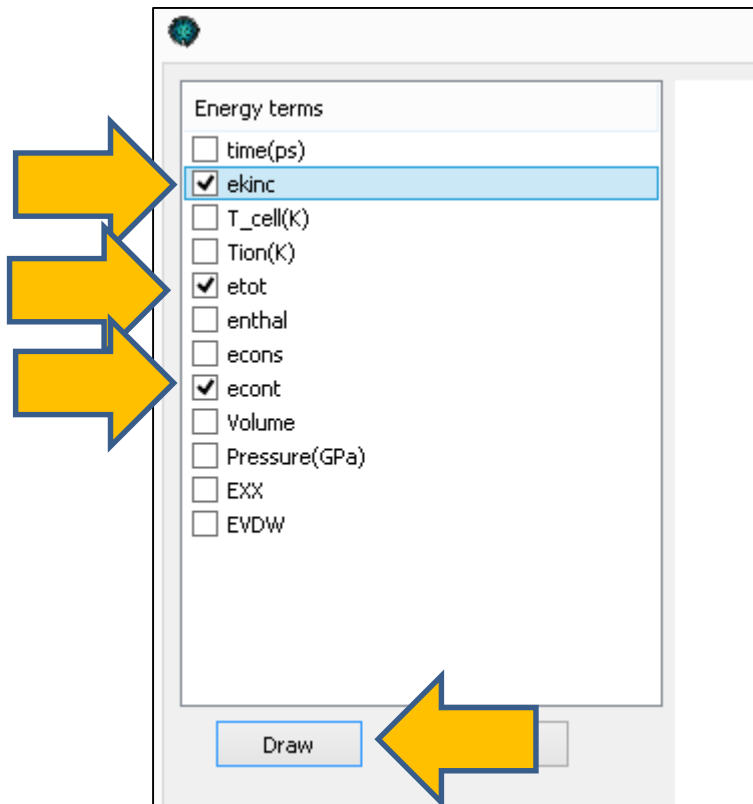
III. エネルギーの時間変化の表示1

計算終了後、「固体>Quantum ESPRESSO>エネルギー変化 (evp)」を選択し、デフォルトで選ばれるフォルダを選択する。



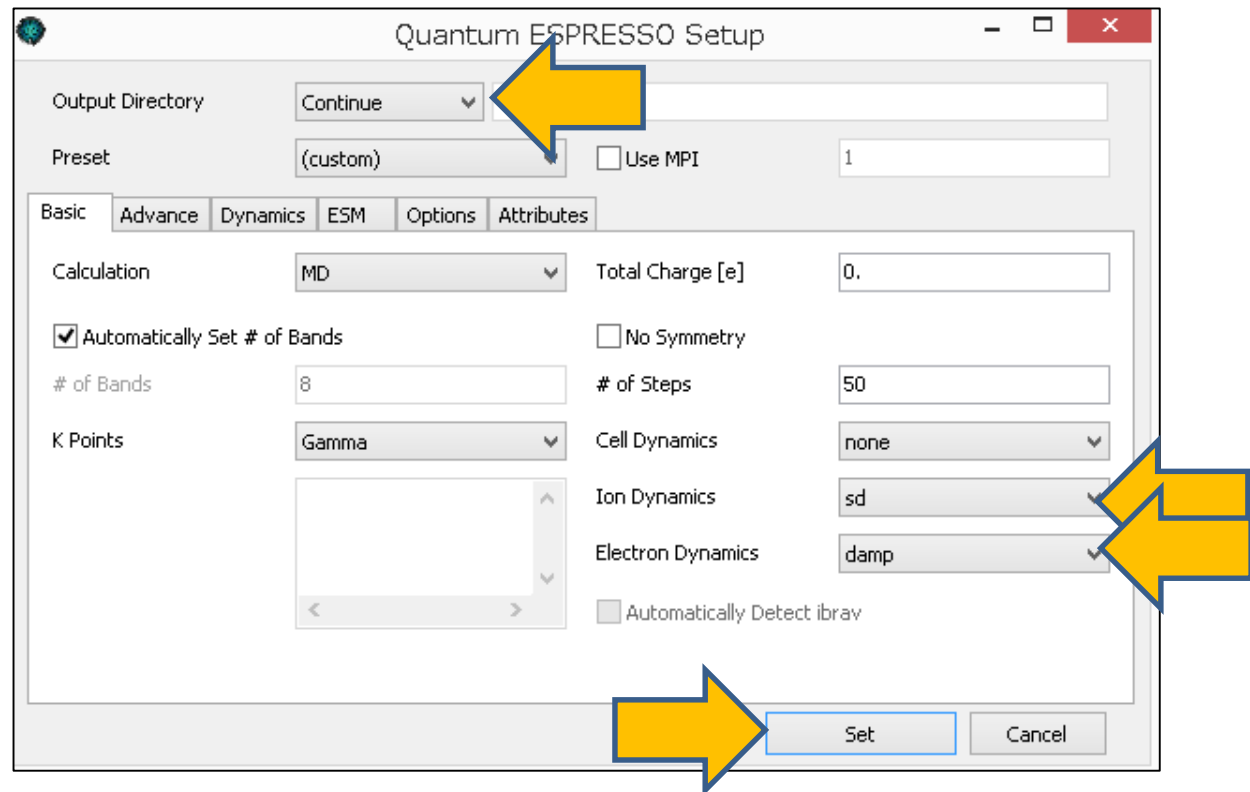
III. エネルギーの時間変化の表示2

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。



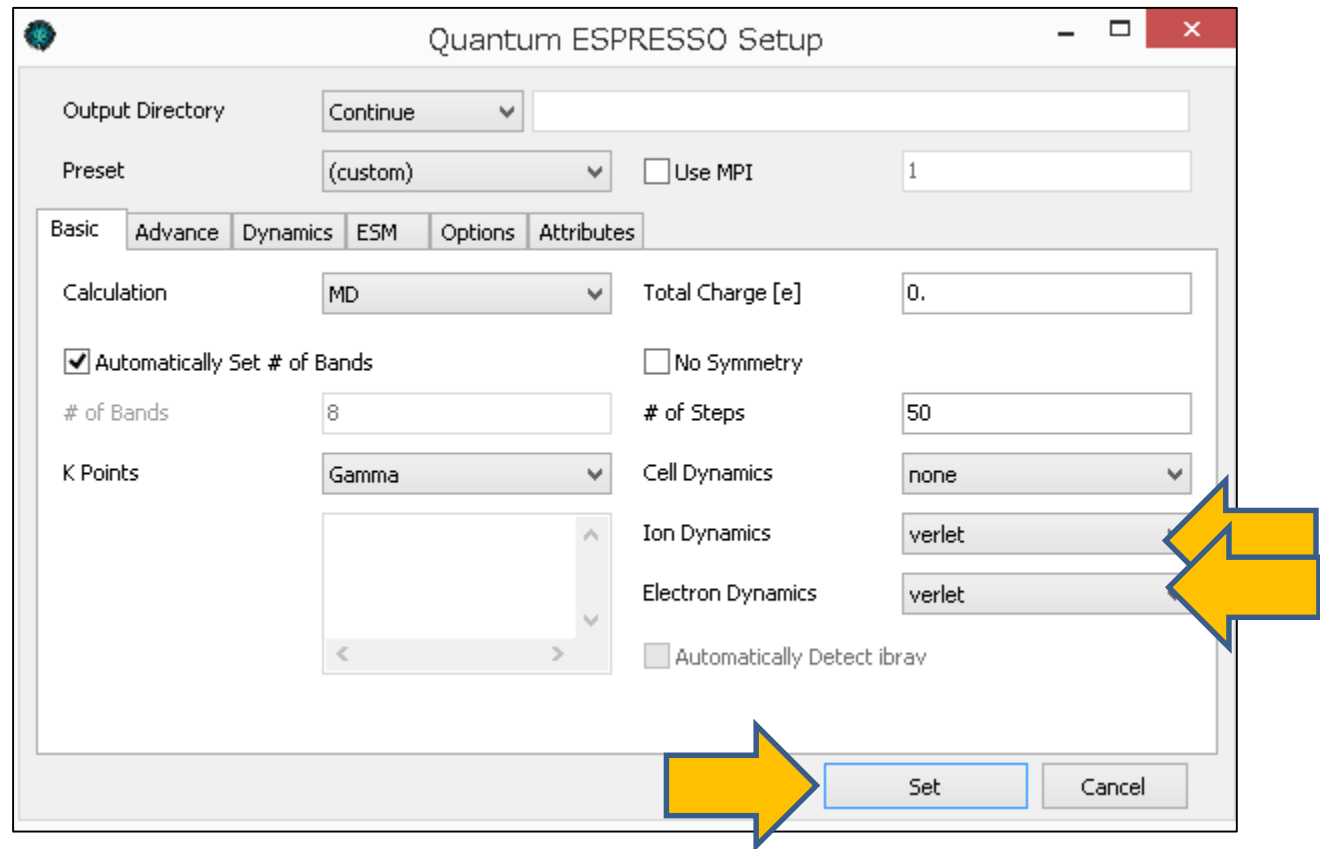
IV. 構造最適化計算

「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>Quantum ESPRESSO実行」から
計算を実施する。



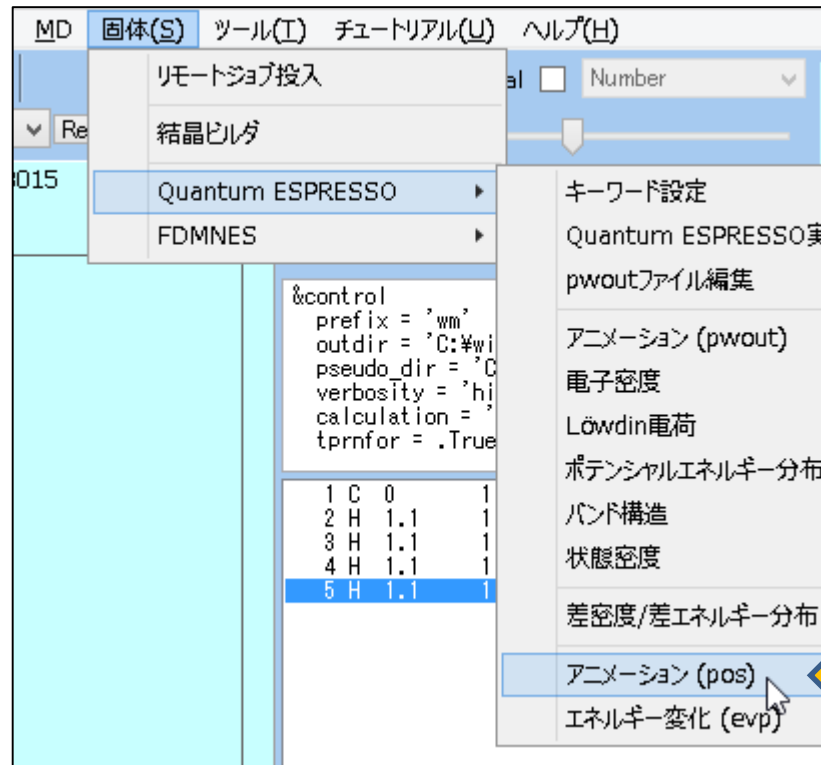
V. 温度一定のMD計算

「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> Quantum ESPRESSO実行」から計算を実施する。



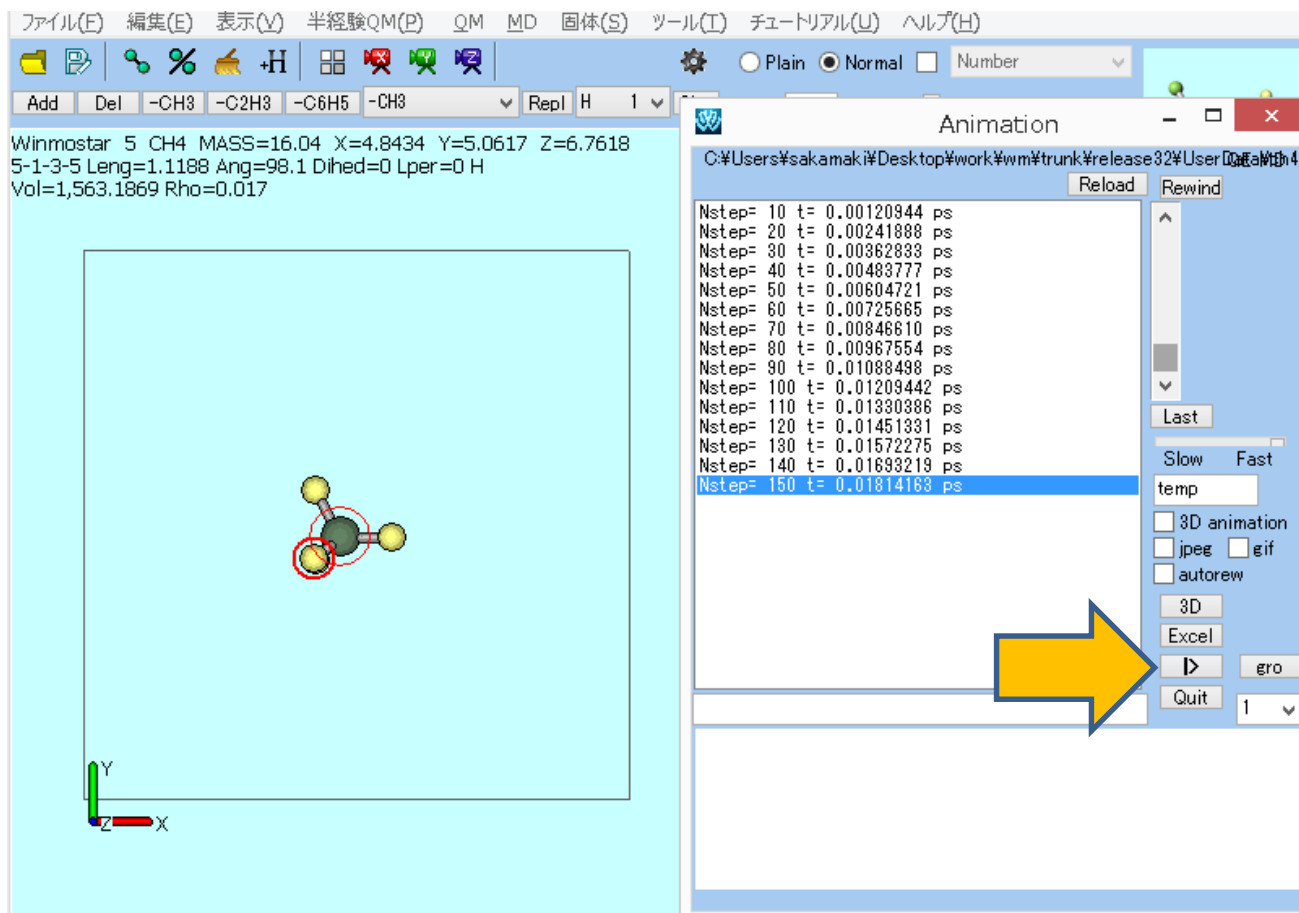
VI. アニメーション表示1

計算の終了後、「固体>Quantum ESPRESSO>アニメーション (pos)」を選択。
デフォルトで選ばれる3つのファイルを選択する。



VI. 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。
VMD等外部ビューワで見たい場合は[gro]ボタンを押す。



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!