

Winmostar チュートリアル  
Quantum ESPRESSO  
フォノン計算  
V7.016

株式会社クロスアビリティ  
[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2017/4/5

# Contents

- I. IR、ラマンスペクトル
- II. フォノン分散(分散曲線・DOS)

# 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		
		qe-5.2.1-32bit-serial.exe	50 MB	5097
		atomic-5.3.0.tar.gz	2 MB	4044
		PWgnc-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. IR、ラマンスペクトル

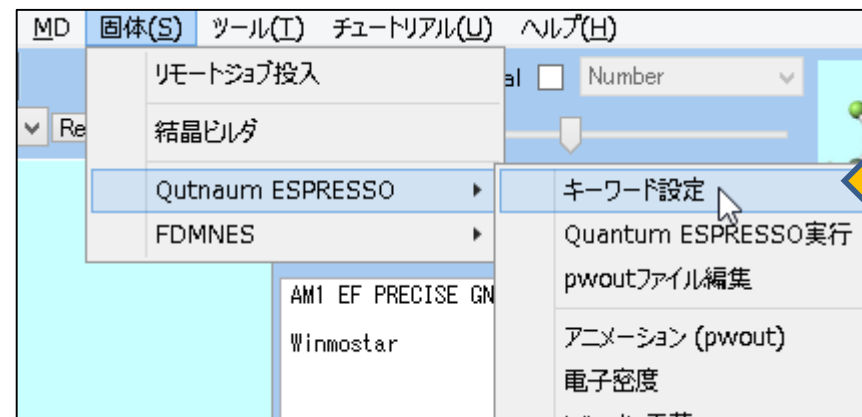
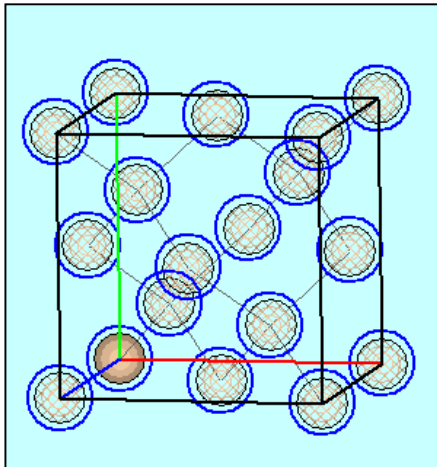
1. [メニュー] > [開く]をクリックする。
2. サンプルフォルダ内のsi.cifを開く。(デフォルトではC:\winmos7\samples\si.cif)

※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体格子を作成する。

## Si単体格子について

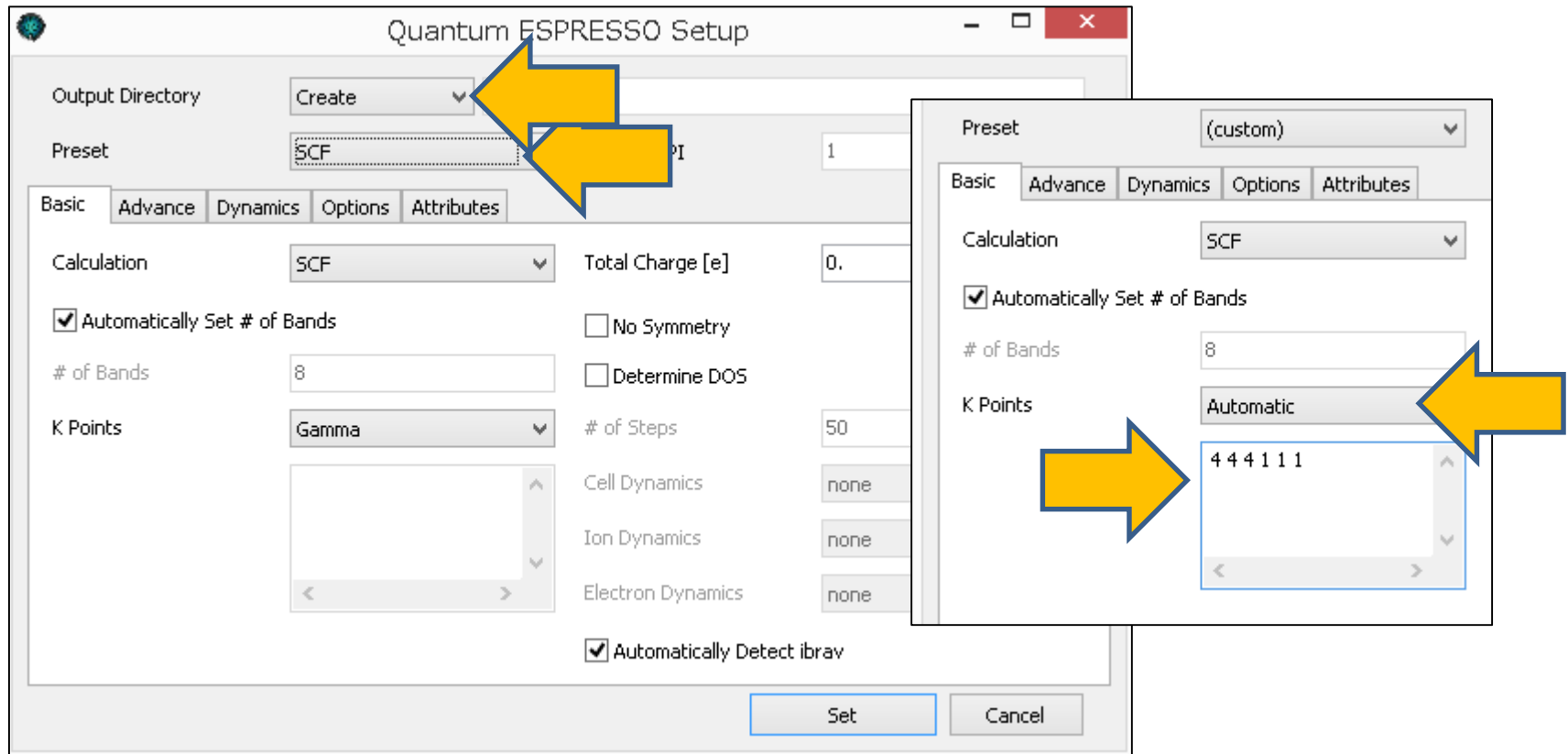
Crystal system: Cubic  
Space group : Fd-3m (227)  
Lattice constants : a=5.4309 Å  
Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)

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



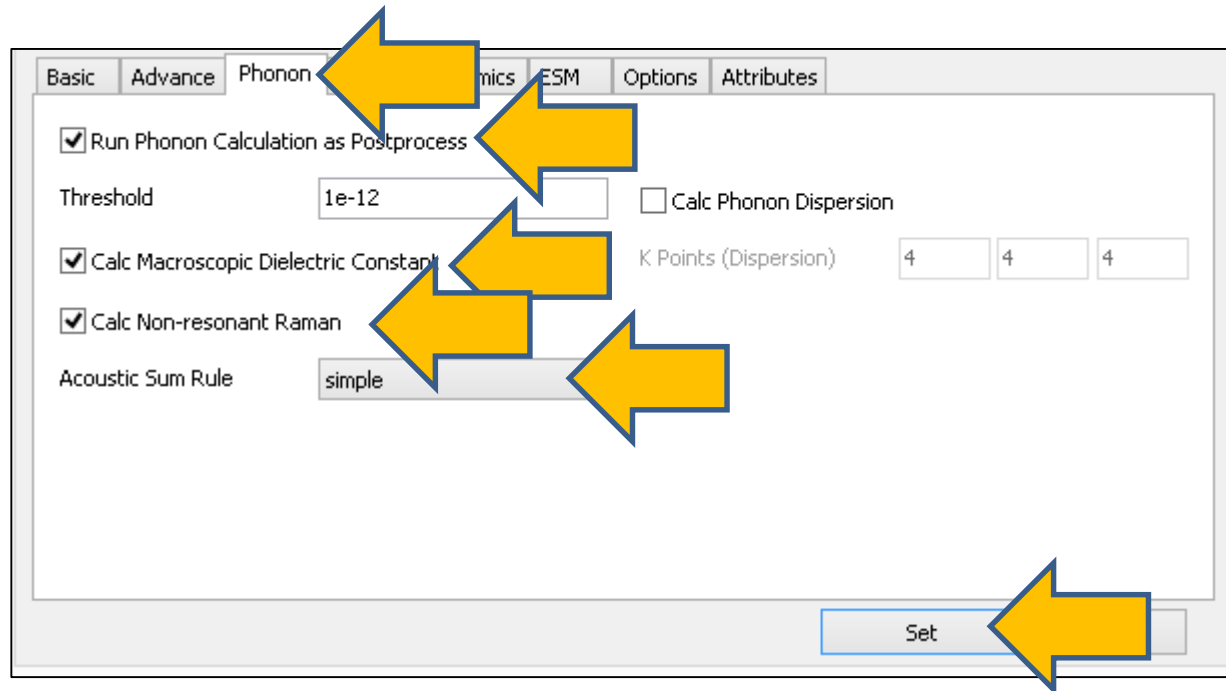
# I. IR、ラマンスペクトル

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。



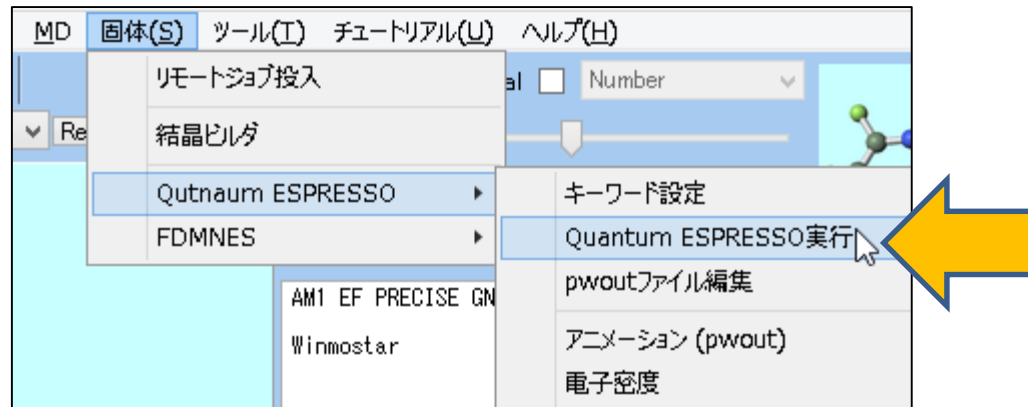
# I. IR、ラマンスペクトル

1. [Phonon]タブを選択し、[Run Phonon Calculation as Postprocess]、[Calc Macroscopic Dielectric Constant]、[Calc Non-resonant Raman]にチェックを入れ、[Acoustic Sum Rule]を"simple"にする。
2. [Set]する。



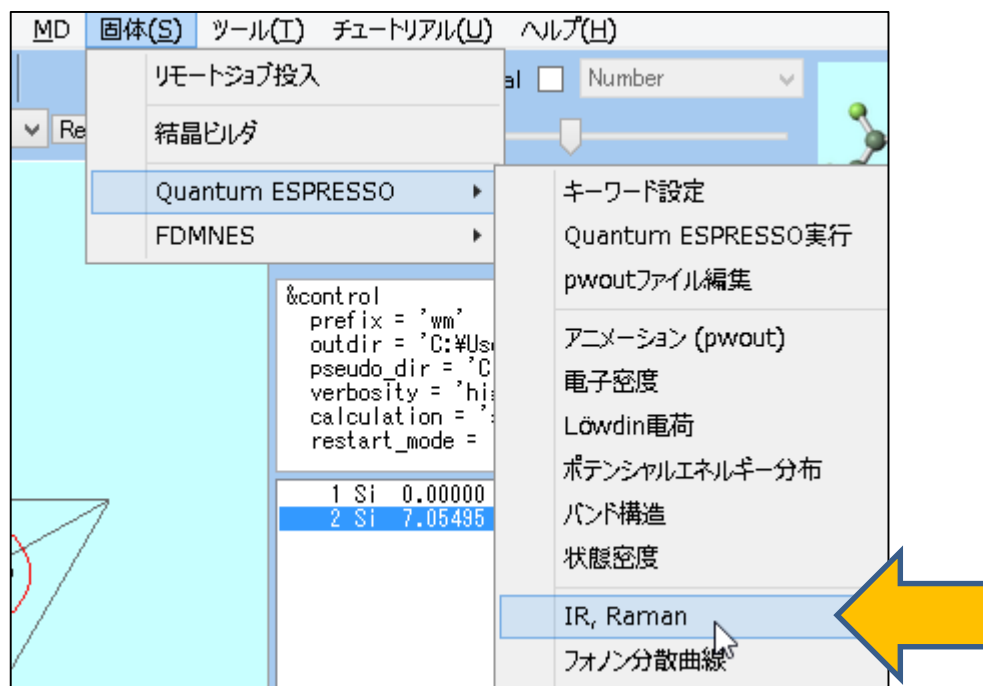
# I. IR、ラマンスペクトル

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [Quantum ESPRESSO実行]をクリックする。
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\_vib.pwin」とする。



# I. IR、ラマンスペクトル

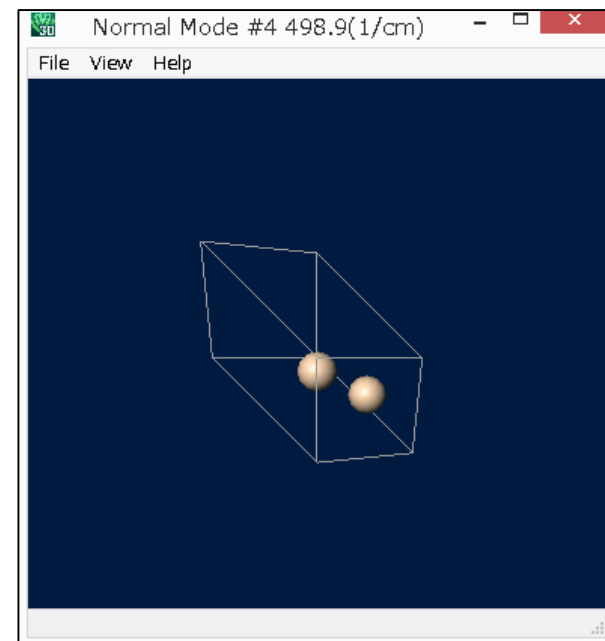
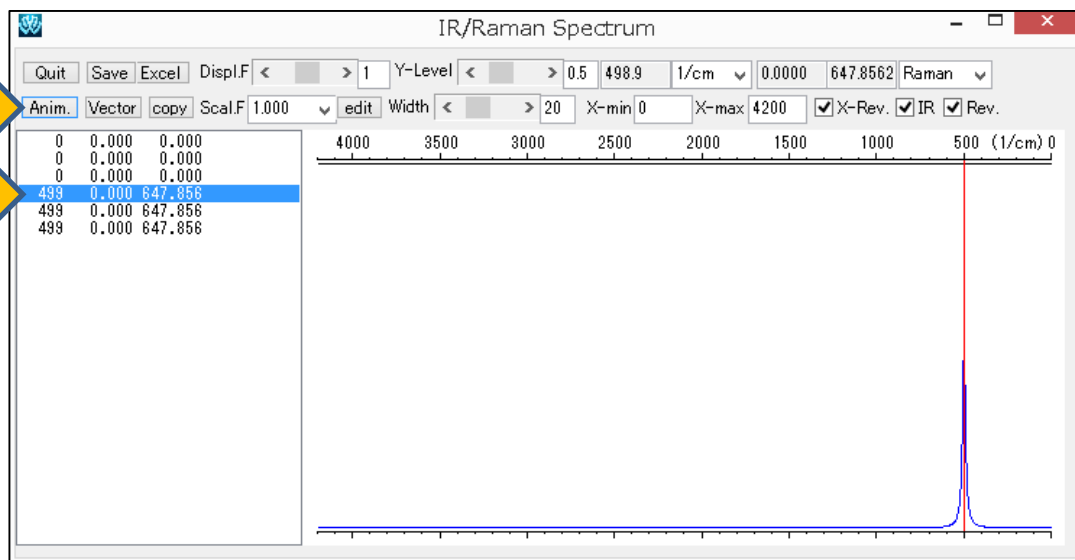
1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [IR, Raman]をクリックする。
2. QEの作業ディレクトリと出力ファイルを選択する。ここでは、どちらもデフォルトで選択されたものを選択する。





# I. IR、ラマンスペクトル

IR/Ramanスペクトル表示ウィンドウが出現する。画面左のスペクトル表示欄で可視化したいスペクトルを選択し、[Anim.]ボタンをクリックすると、アニメーションが表示される。



# I. IR、ラマンスペクトル

IR、ラマンスペクトルの計算と並行して算出された誘電率は、si\_vib.pwinを保存した場所にあるsi\_vib\_qe\_dataフォルダのph.outに出力される。

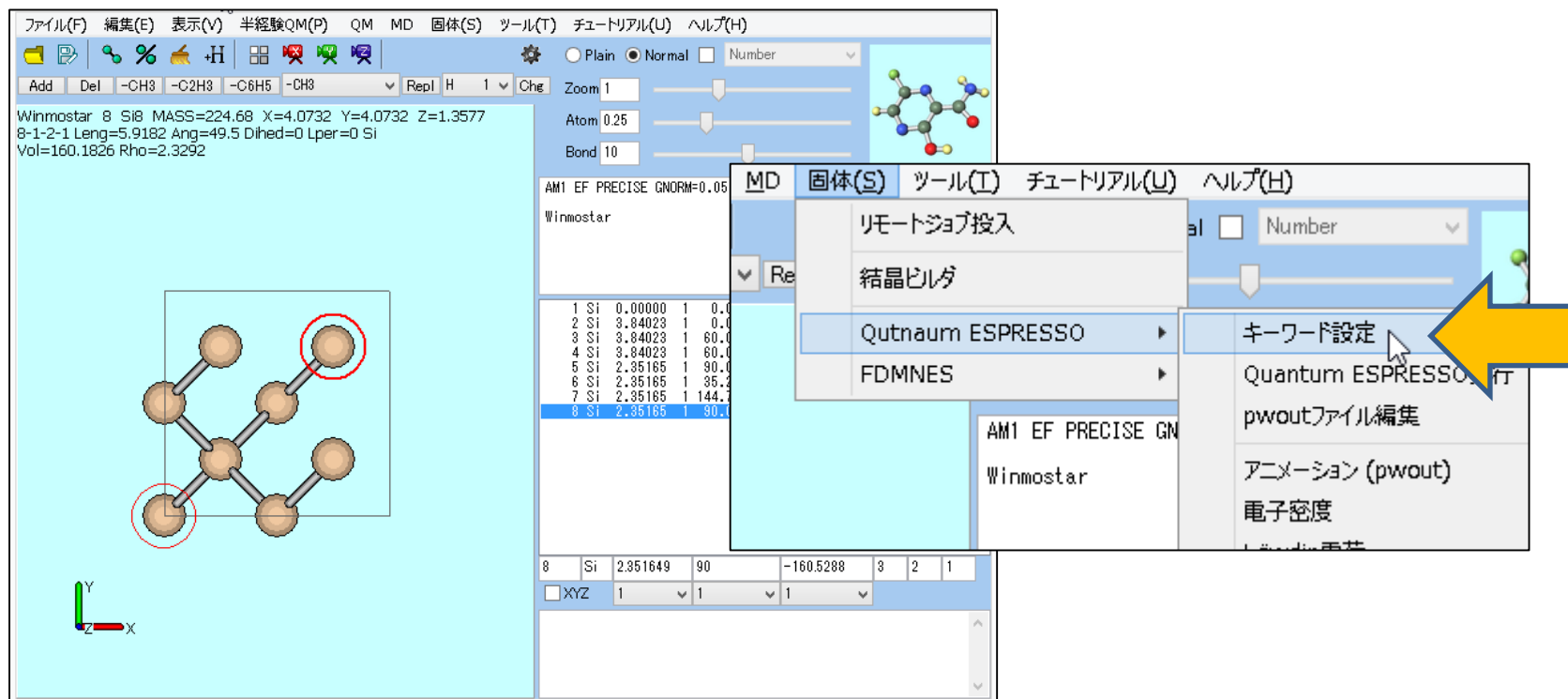
```

289 ←
290 ← End of self-consistent calculation ←
291 ←
292 ← Convergence has been achieved ←
293 ←
294 ← Number of q in the star = 1 ←
295 ← List of q in the star: ←
296 ← 1 0.000000000 0.000000000 0.000000000 ←
297 ←
298 ← Dielectric constant in cartesian axis ←
299 ←
302 ← ( 13.959743499 -0.000000000 0.000000000 ) ←
303 ← ( -0.000000000 13.959743499 -0.000000000 ) ←
304 ← ( 0.000000000 -0.000000000 13.959743499 ) ←
305 ←
306 ← Effective charges (d Force / dE) in cartesian axis ←
307 ←
308 ← atom 1 SI ←
309 ← Ex ( -0.07869 0.00000 -0.00000 ) ←
310 ← Ey ( 0.00000 -0.07869 -0.00000 ) ←
311 ← Ez ( 0.00000 -0.00000 -0.07869 ) ←
312 ←
313 ← atom 2 SI ←
314 ← Ex ( -0.07869 0.00000 0.00000 ) ←
315 ← Ey ( 0.00000 -0.07869 0.00000 ) ←
316 ← Ez ( 0.00000 0.00000 -0.07869 ) ←
317 ←
318 ← Diagonalizing the dynamical matrix ←
319 ←
320 ← q = ( 0.000000000 0.000000000 0.000000000 ) ←
321 ←

```

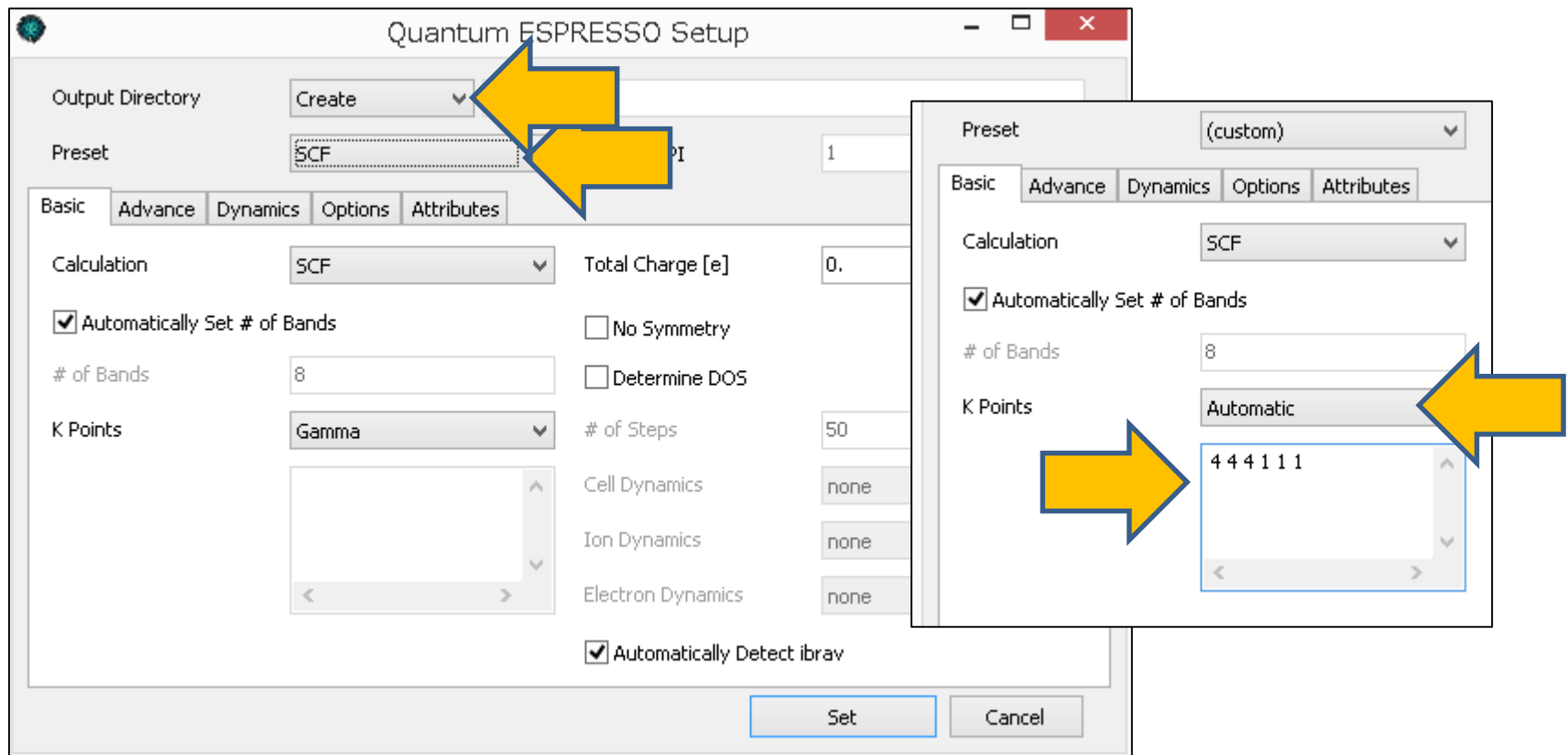
## II. フォノン分散

1. 再度、初期状態のSi結晶をメイン画面で開く。
2. [固体] > [Quantum ESPRESSO キーワード設定]をクリックする。



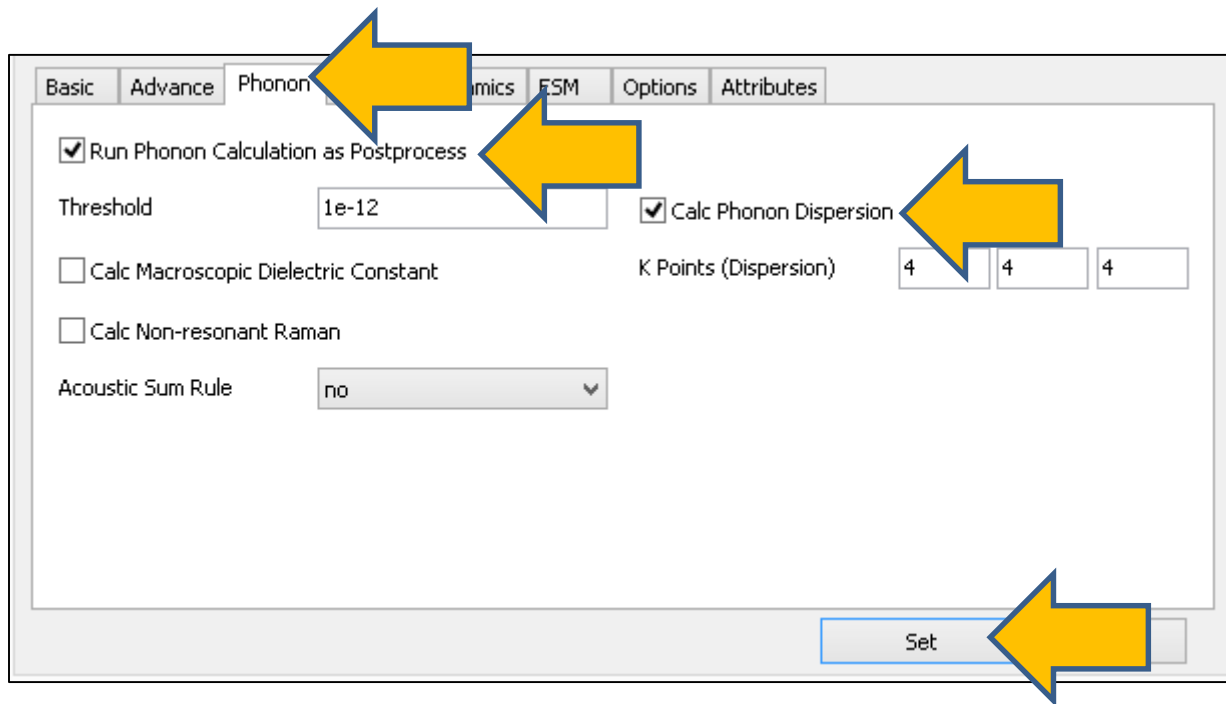
## II. フォノン分散

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。



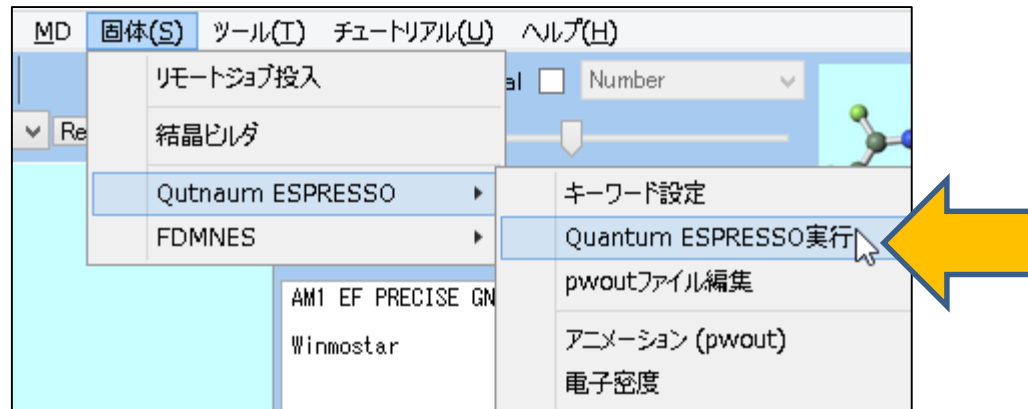
## II. フォノン分散

1. [Phonon]タブを選択し、[Run Phonon Calculation as Postprocess]、[Calc Phonon Dispersion]にチェックを入れる。
2. [Set]する。



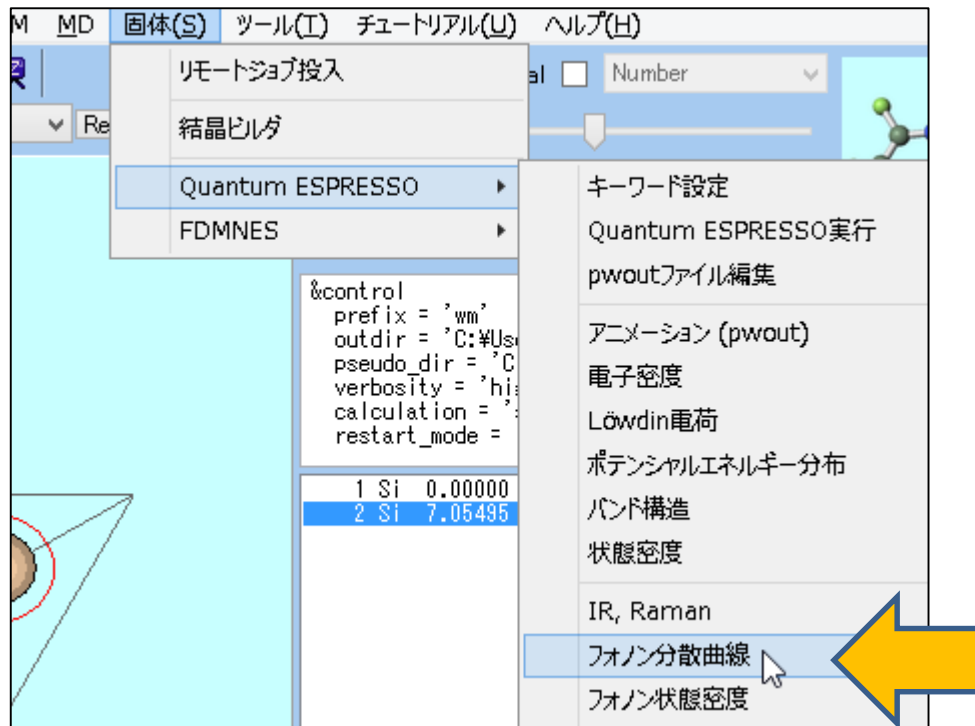
## II. フォノン分散

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [Quantum ESPRESSO実行]をクリックする。
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\_disp.pwin」とする。



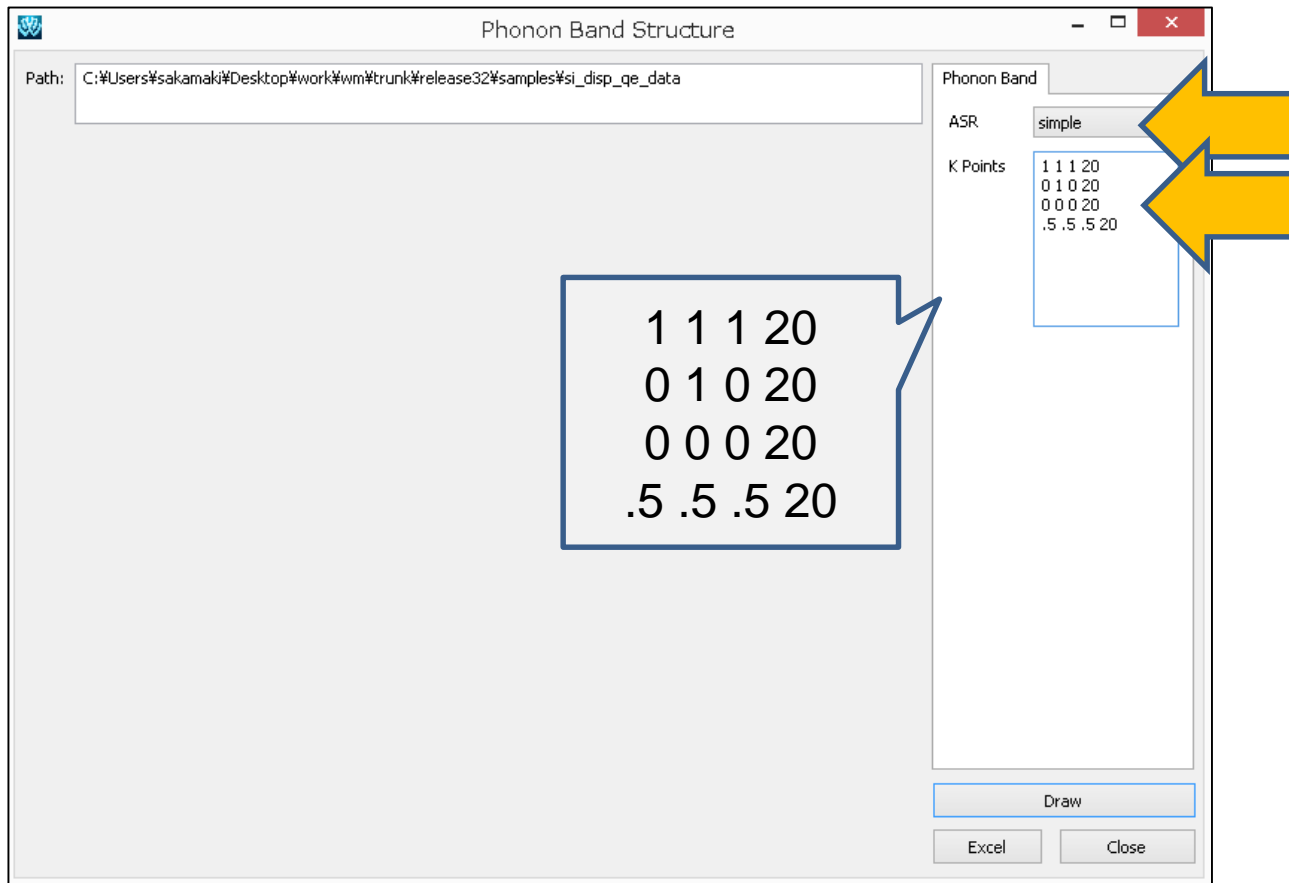
## II. フォノン分散

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [フォノン分散曲線]をクリックする。
2. QEの作業ディレクトリを選択する。ここでは、デフォルトで選択されたものを選択する。



## II. フォノン分散

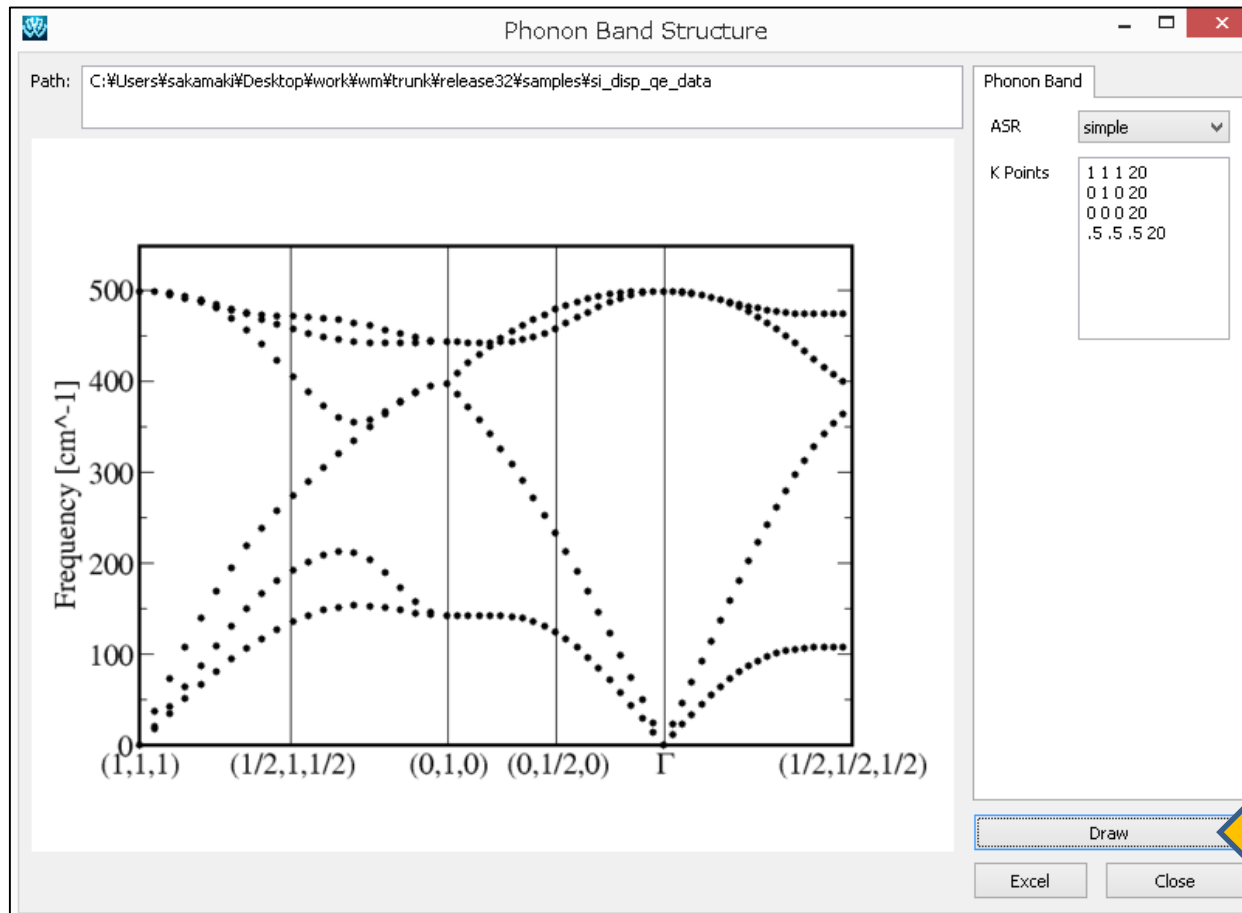
[ASR]に"Simple"、[K Points]に下図のように入力する。





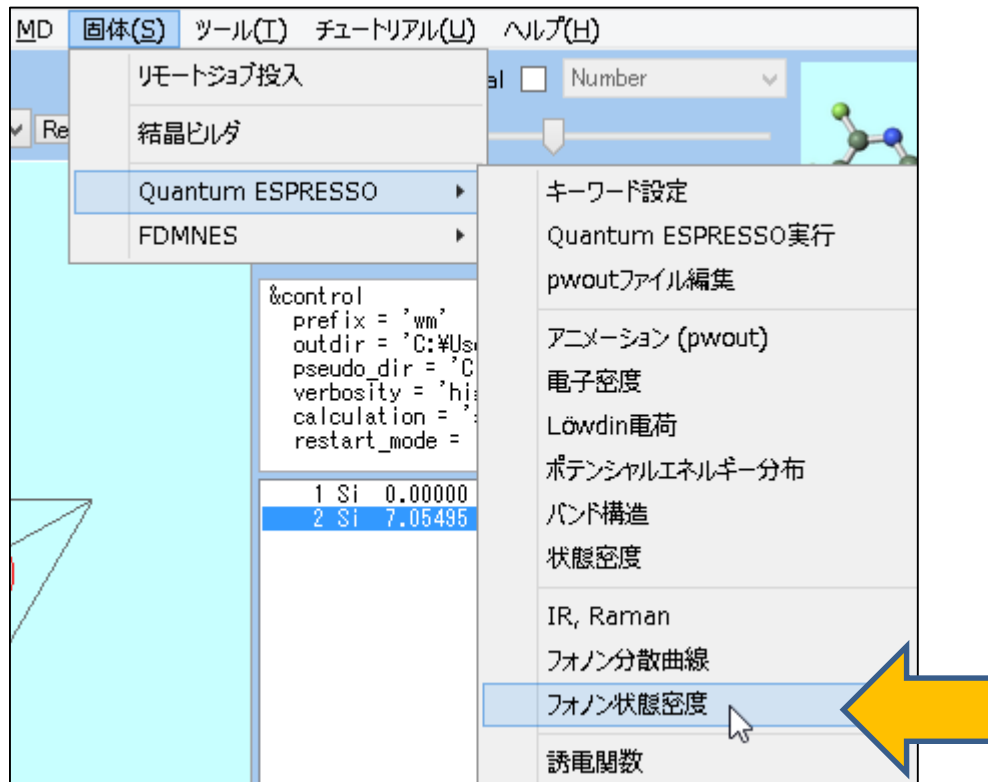
## II. フォノン分散

[Draw]をクリックすると、以下のようなフォノン分散曲線が得られる。



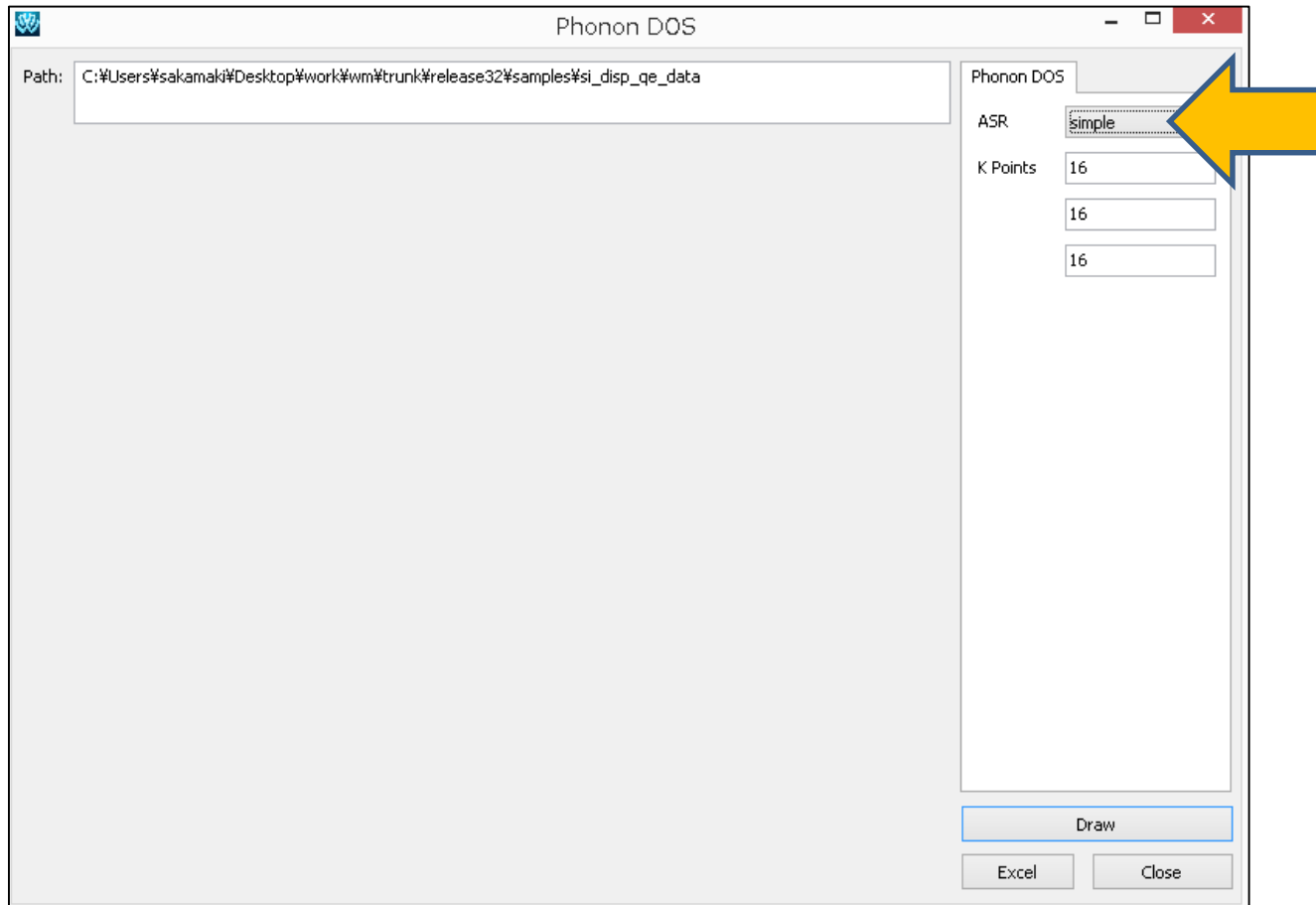
## II. フォノン分散

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [フォノン状態密度]をクリックする。
2. QEの作業ディレクトリを選択する。ここでは、デフォルトで選択されたものを選択する。



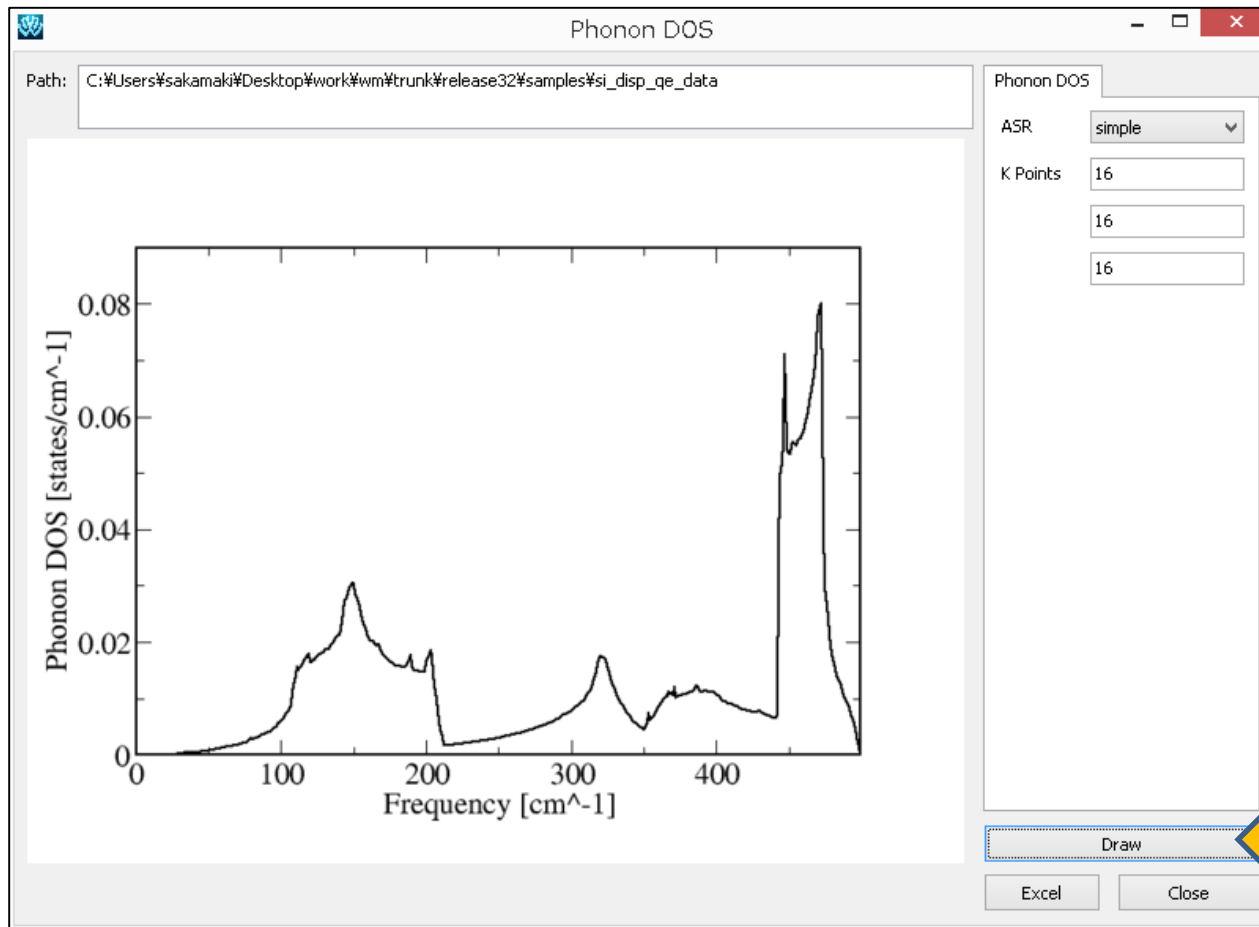
## II. フォノン分散

[ASR]に"simple"を指定する。



## II. フォノン分散

[Draw]をクリックすると、フォノン状態密度が描画される。



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...](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!