

Winmostar チュートリアル  
Quantum ESPRESSO  
フェルミ面  
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. SCF計算
- II. Bands計算
- III. フェルミ面表示

# 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		
		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. SCF計算

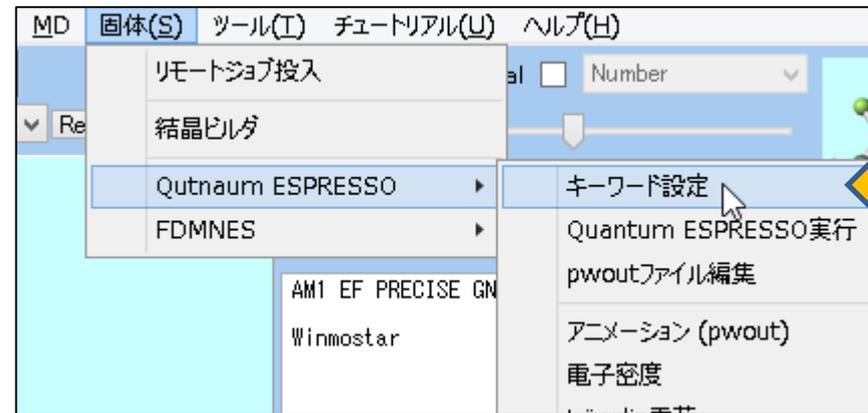
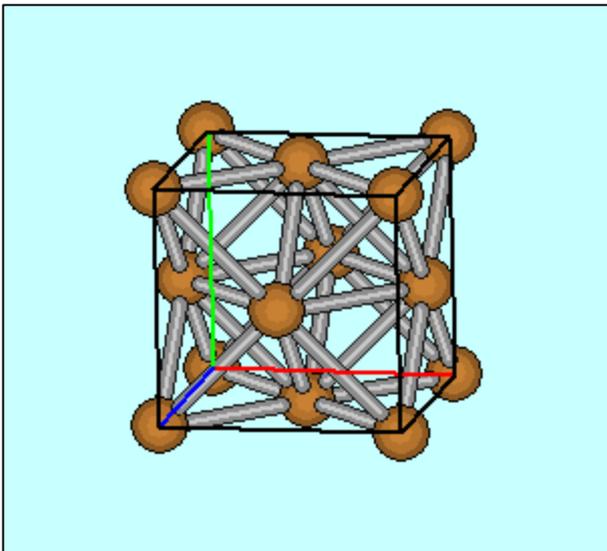
1. [メニュー] > [開く]をクリック。
2. サンプルフォルダ内のcu.cifを開く。(デフォルトではC:\winmos7\samples\cu.cif)

※ 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 の操作手順に従い、以下の情報を元に単位格子を作成する。

## Cu単位格子について

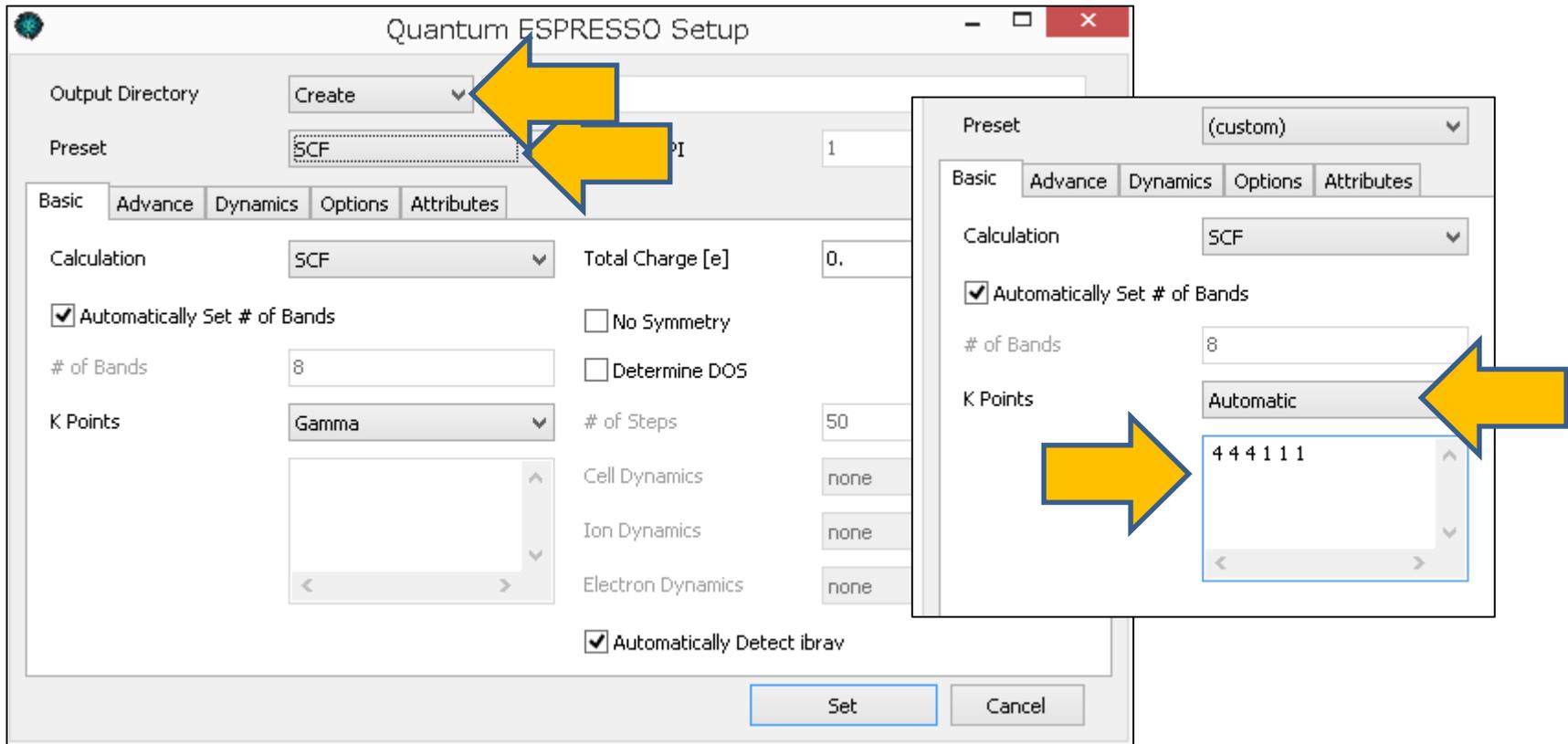
Crystal system: Cubic  
Space group : Fm-3m (225)  
Lattice constants : a=3.6149 Å  
Asymmetric unit: Cu (0.0 0.0 0.0)

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



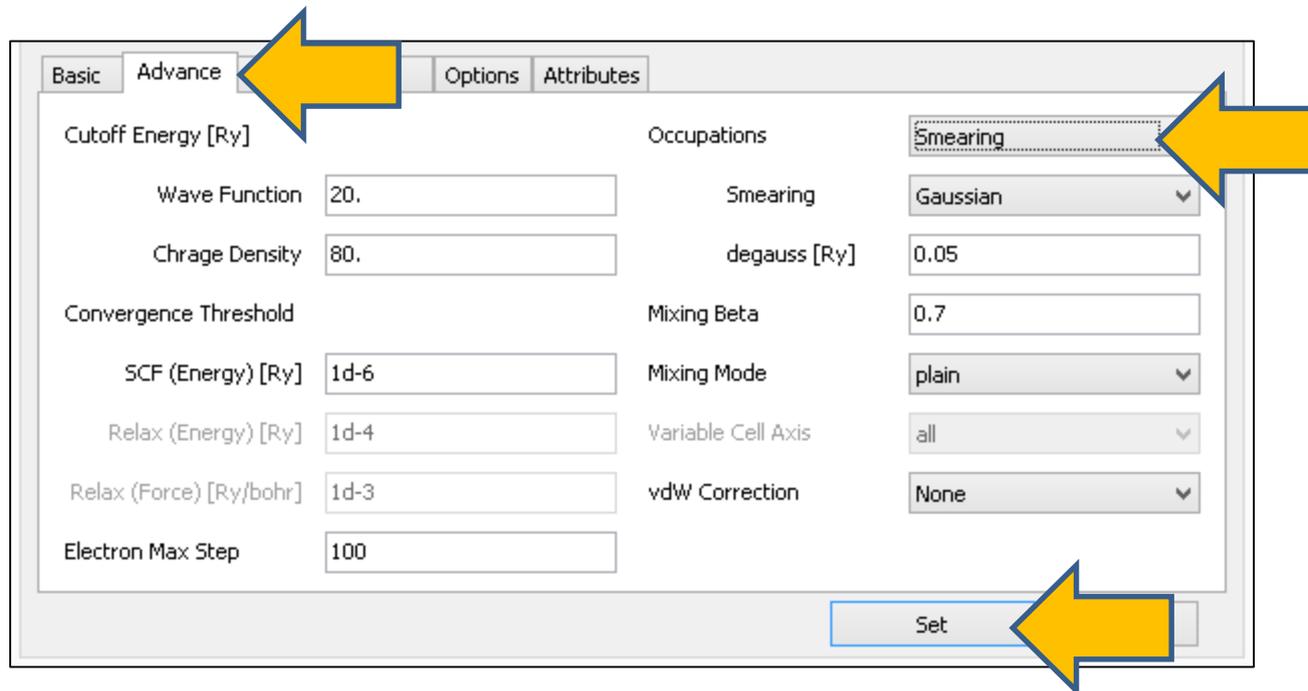
# I. SCF計算

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。



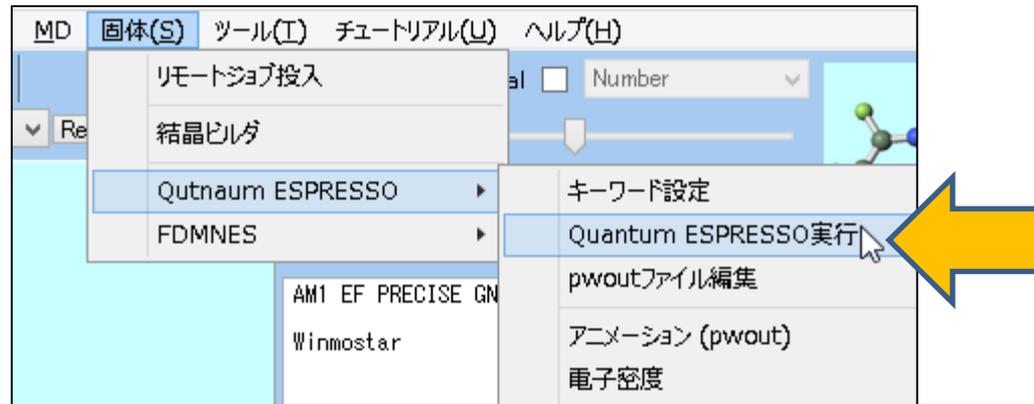
# I. SCF計算

[Advance]タブを開き、[Occupations]に"Smearing"を指定し、[Set]する。



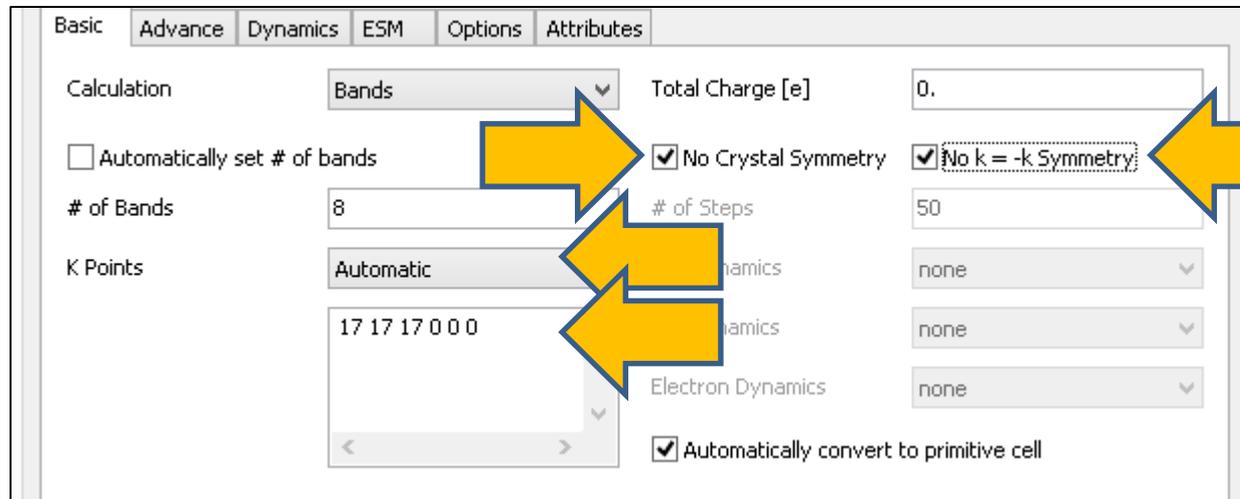
# I. SCF計算

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「cu\_scf.pwin」とする。



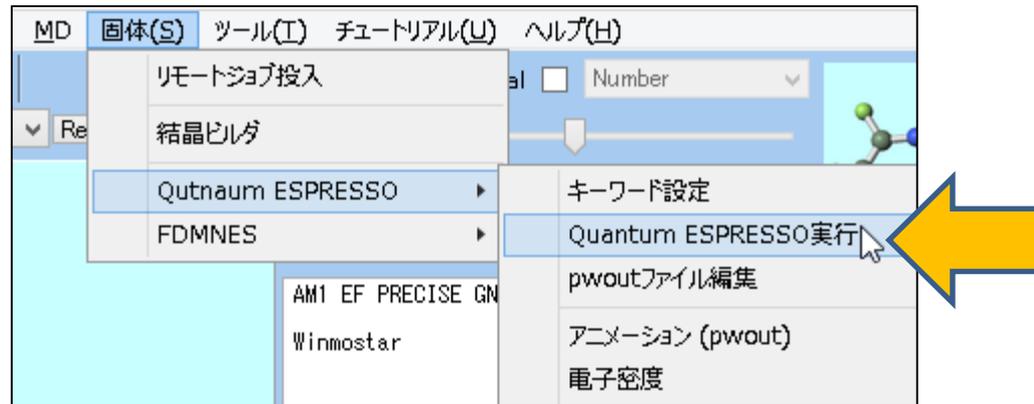
## II. Bands計算

1. キーワード設定画面を開き、[Output Directory]に”Continue”, [Preset]に”Bands”を指定する。[K Points]に”Automatic”を指定し、その下に”17 17 17 0 0 0”(スペース区切り)と入力する。また、[No Crystal Symmetry]と[No k=-k Symmetry]をチェックする。
2. 再び[Advance]タブの[Occupations]に”Smearing”を指定し[Set]する。



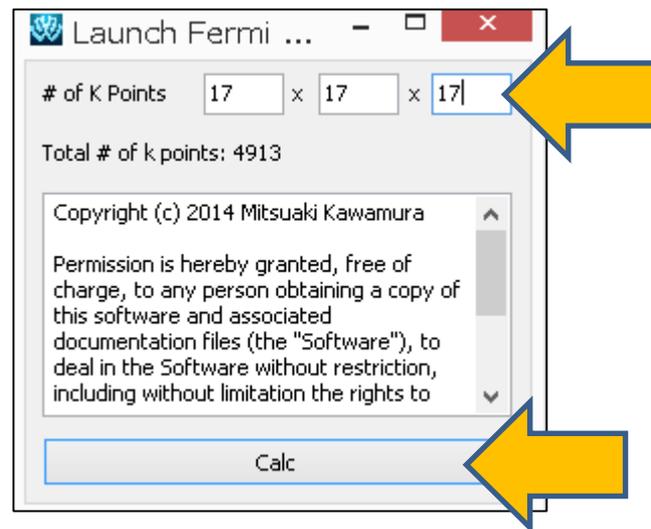
## II. Bands計算

[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [Quantum ESPRESSO実行]をクリックする。  
ファイル名は「cu\_bands.pwin」とする。



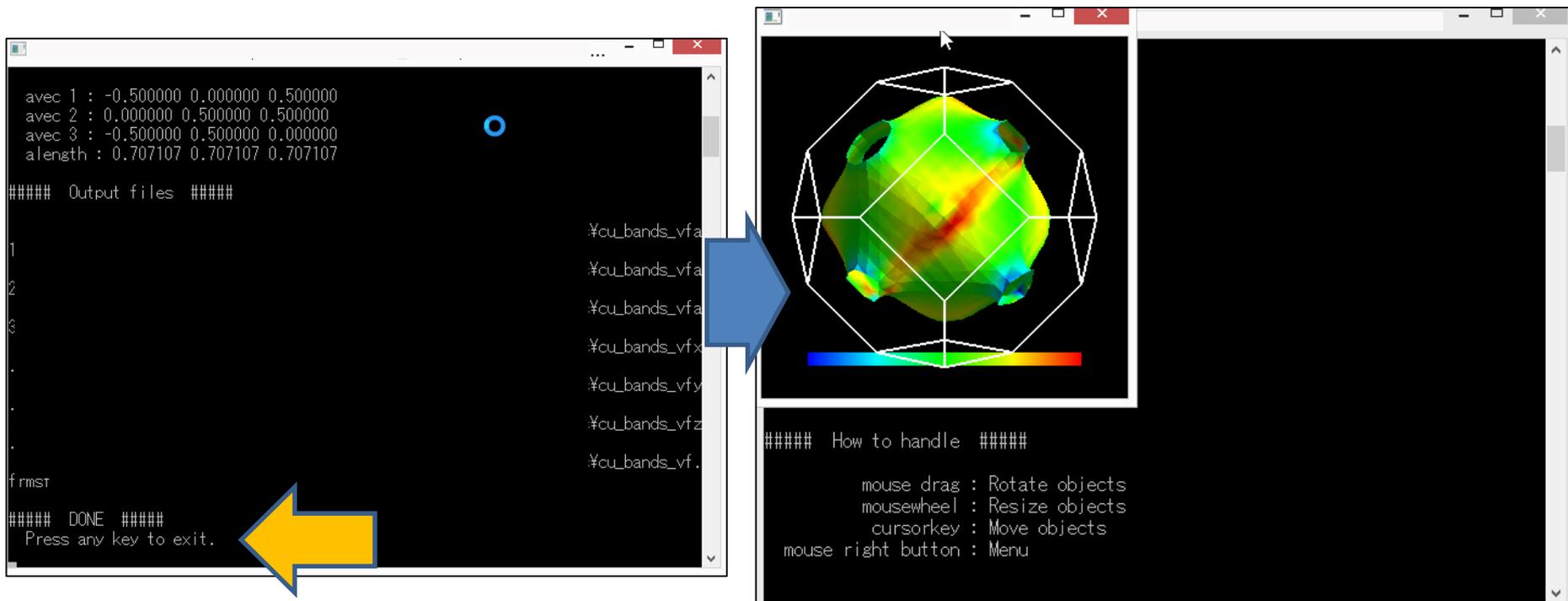
### III. フェルミ面表示

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [フェルミ面]をクリックする。
2. 先にSCF計算のログファイルを聞かれるのでcu\_scf.pwoutを指定する。次にbands計算のログファイルを聞かれるのでcu\_bands.pwoutを指定する。
3. 表示されたウインドウで[# of K Points]に"17" "17" "17"と入力し、[Calc]をクリックする。
4. 出力ファイル名を入力する。



### III. フェルミ面表示

1. コマンドプロンプトに"Press any key to exit"と表示されたら何かキーを押す。
2. 表示用アプリ(FermiSurfer)が起動し、フェルミ面が表示される。



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!