

Winmostar チュートリアル
Quantum ESPRESSO
スピン分極計算
V7.016

株式会社クロスアビリティ
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

① 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。

② 以下のURLよりFe.pbe-nd-rrkjus.UPFを入手し、
 Quantum ESPRESSOインストールフォルダの下のpseudoフォルダに入れ
 Winmostarを再起動する。
<http://www.quantum-esspresso.org/pseudopotentials/>

PSEUDOPOTENTIALS

Admin PP Database
 More about pseudopotentials
 Naming convention for the pseudopotential
 PSLibrary
 Unified Pseudopotential Format

Standard Solid State Pseudopotentials (SSSP), a collection of the best verified pseudopotentials, maintained by THEOS and MARVEL, can be found, together with tests, on the Materials Cloud (materialscloud.org).

PAW datasets for rare earths can be found on the web page of VLab at University of Minnesota.

More information about **pseudopotentials in general**, the **naming convention** adopted for pseudopotential files, the **Unified Pseudopotential Format**, and on other pseudopotential databases, can be found via the links of the menu at the left.

Important Note: although most of these pseudopotentials were published or used with satisfactory results in published work, we cannot give any warranty whatsoever that they fit your actual needs.

(last updated April 7, 2016)

ANY FUNCTIONAL: ANY TYPE: Apply Filter

OPTIONS:

「Fe」をクリック

The image shows a periodic table with the element Fe (Iron) highlighted in red. A yellow arrow points to the Fe element, and a red box contains the text 「Fe」をクリック.

Fe.pbe-nd-rrkjus.UPF

Pseudopotential type: ULTRASOFT
 Method: Rappe Rabe Kaxiras Joannopoulos
 Functional type: PBE
 Nonlinear core correction: none
 scalar relativistic: no

「Fe.pbe-nd-rrkjus.UPF」をクリック

Origin: Original
 Author: Andrea Dal Corso
 Generated by Andrea Dal Corso code (rrkjus)
 Uploaded by Erica Vidal
 Classification controlled by Paolo Giannozzi

Fe.pbe-nd-rrkjus.UPF

The image shows the details of the pseudopotential Fe.pbe-nd-rrkjus.UPF. A yellow arrow points to the filename, and a red box contains the text 「Fe.pbe-nd-rrkjus.UPF」をクリック.

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fe.cifを開く。(デフォルトではC:¥winmos7¥samples¥fe.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。

Fe単位格子について

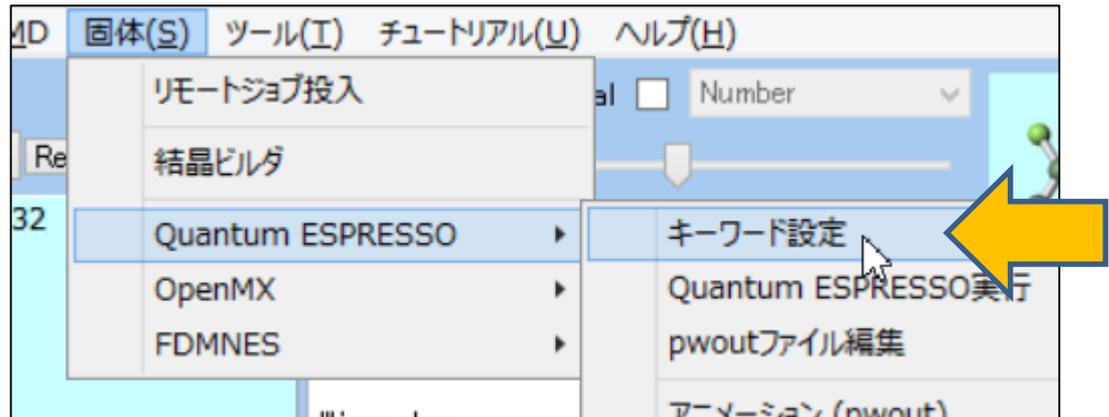
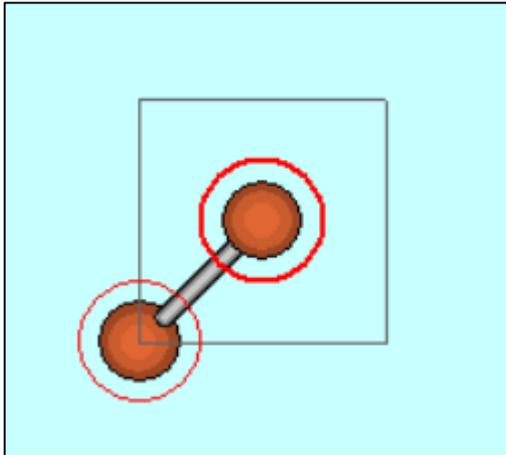
Crystal system: Cubic

Space group : Im-3m (229)

Lattice constants : a=2.8665 Å

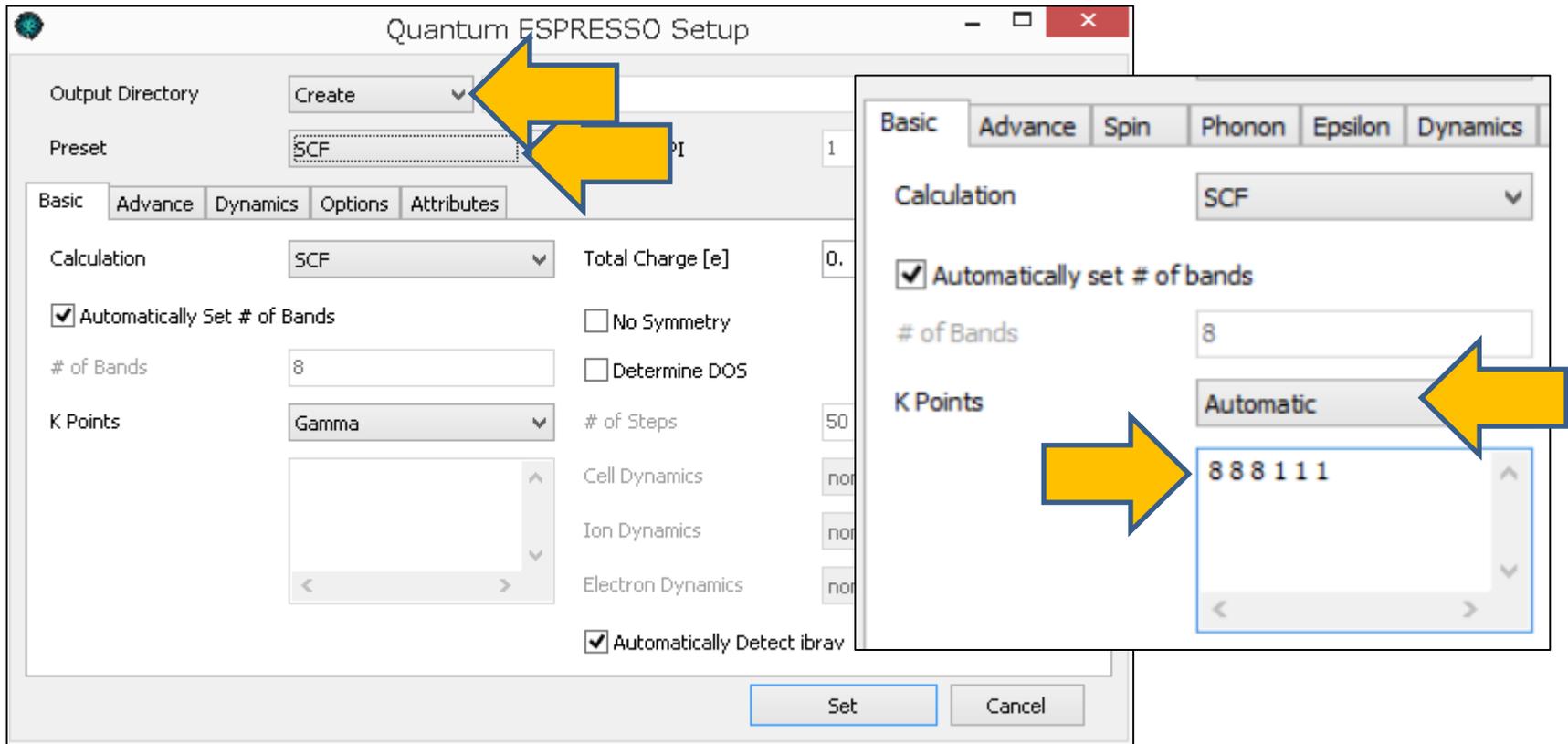
Asymmetric unit: Fe (0.0 0.0 0.0)

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



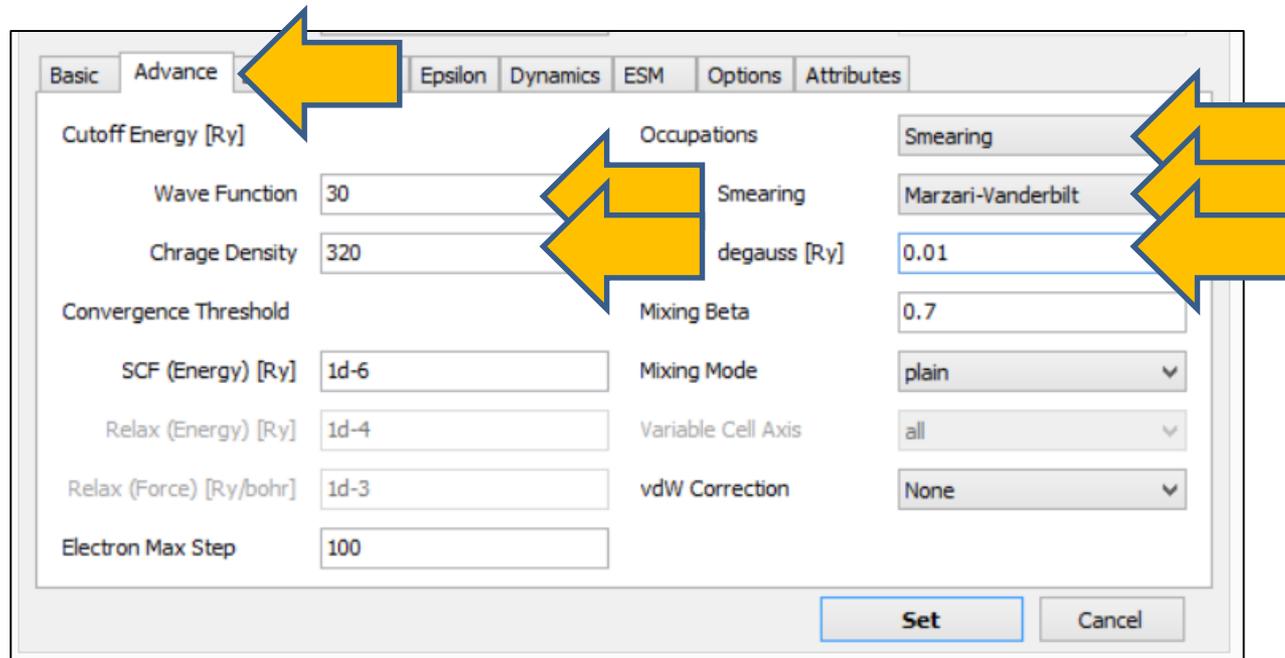
I. SCF計算

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”8 8 8 1 1 1”(スペース区切り)と入力する。



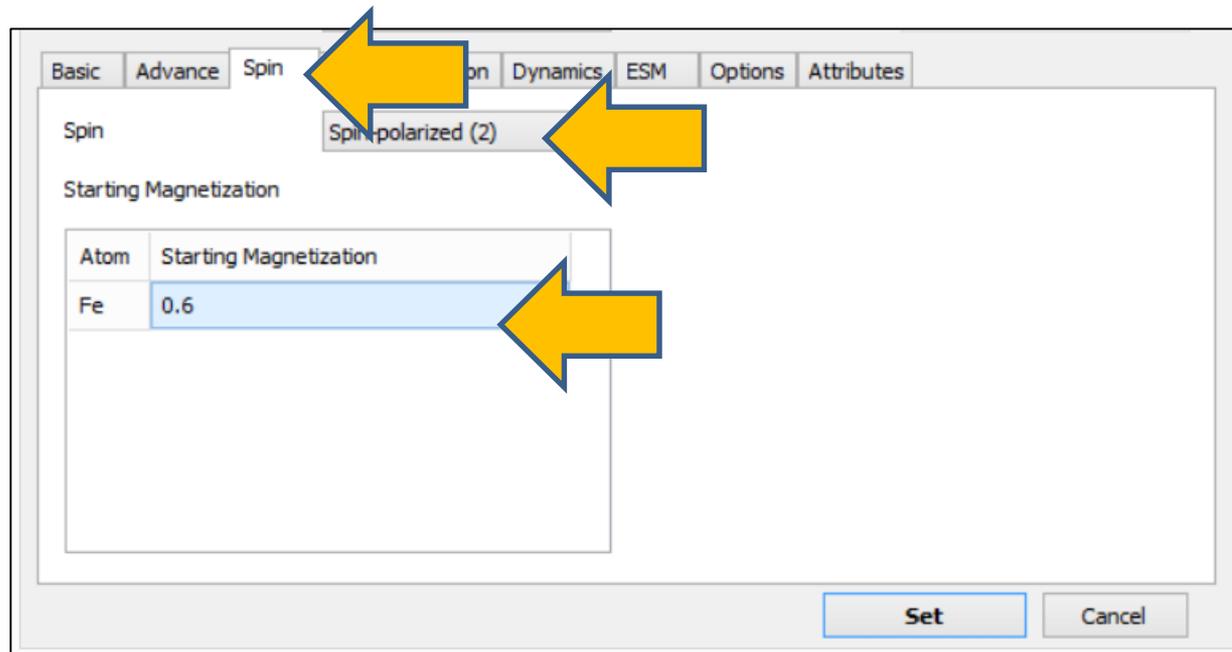
I. SCF計算

[Advance]タブを開き、[Cutoff Energy]の[Wave Function]に"30"、[Charge Density]に"320"、[Occupations]に"Smearing"、[Smearing]に"Marzari-Vanderbilt"、[degauss]に"0.01"を指定する。



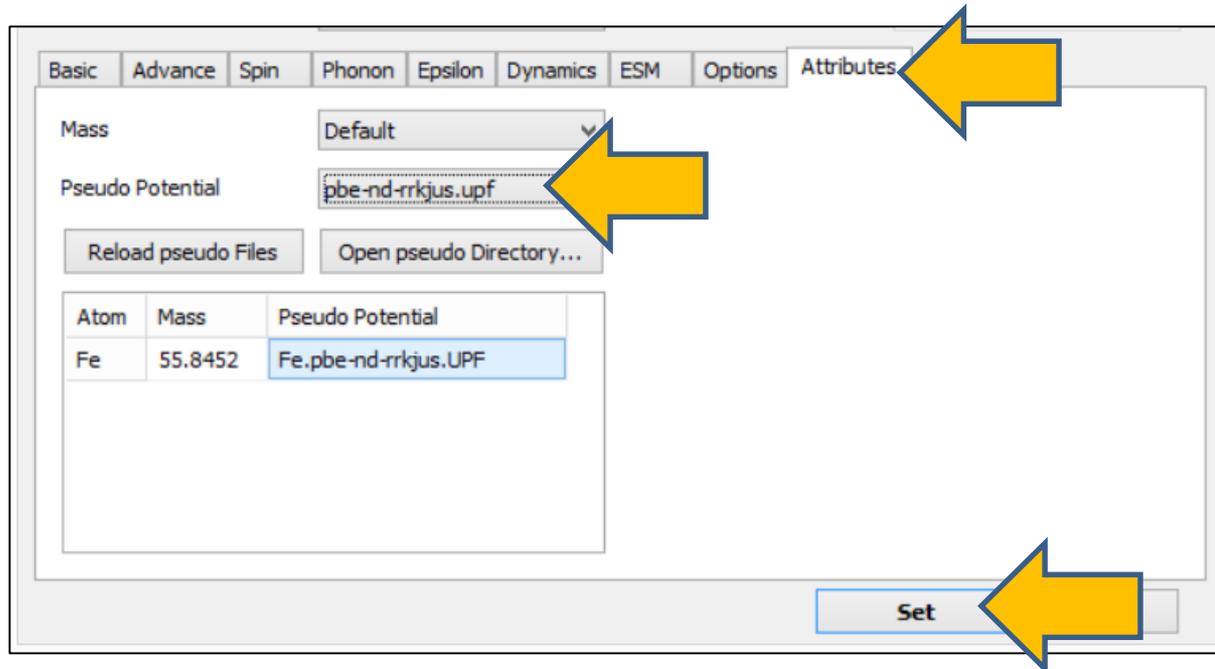
I. SCF計算

[Spin]タブを開き、[Spin]に"Spin-polarized (2)"、Feの[Starting Magnetization]に"0.6"を指定する。



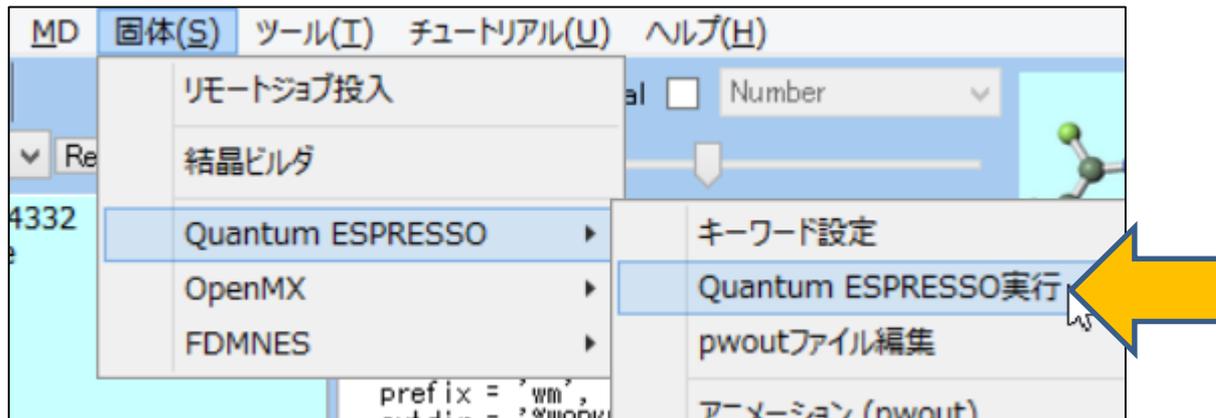
I. SCF計算

[Attributes]タブを開き、[Pseudo Potential]に "pbe-nd-rrkjus.upf" 指定し、[Set]する。"pbe-nd-rrkjus.upf"が無い場合は、P. 3の手順に従いファイルをpseudoフォルダに格納し[Reload pseudo Files]ボタンを押す。



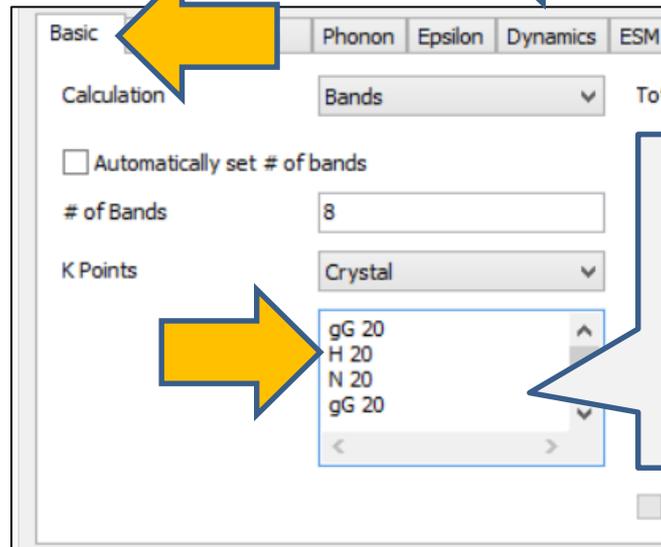
I. SCF計算

[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [Quantum ESPRESSO実行]をクリックする。
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"fe_scf.pwin"とする。



II. Bands計算

SCF計算終了後、キーワード設定画面を開き、[Output Directory]に”Continue”, [Preset]に”Bands”を指定する。[Basic]タブを開き、[K Points]に下図のように入力する。

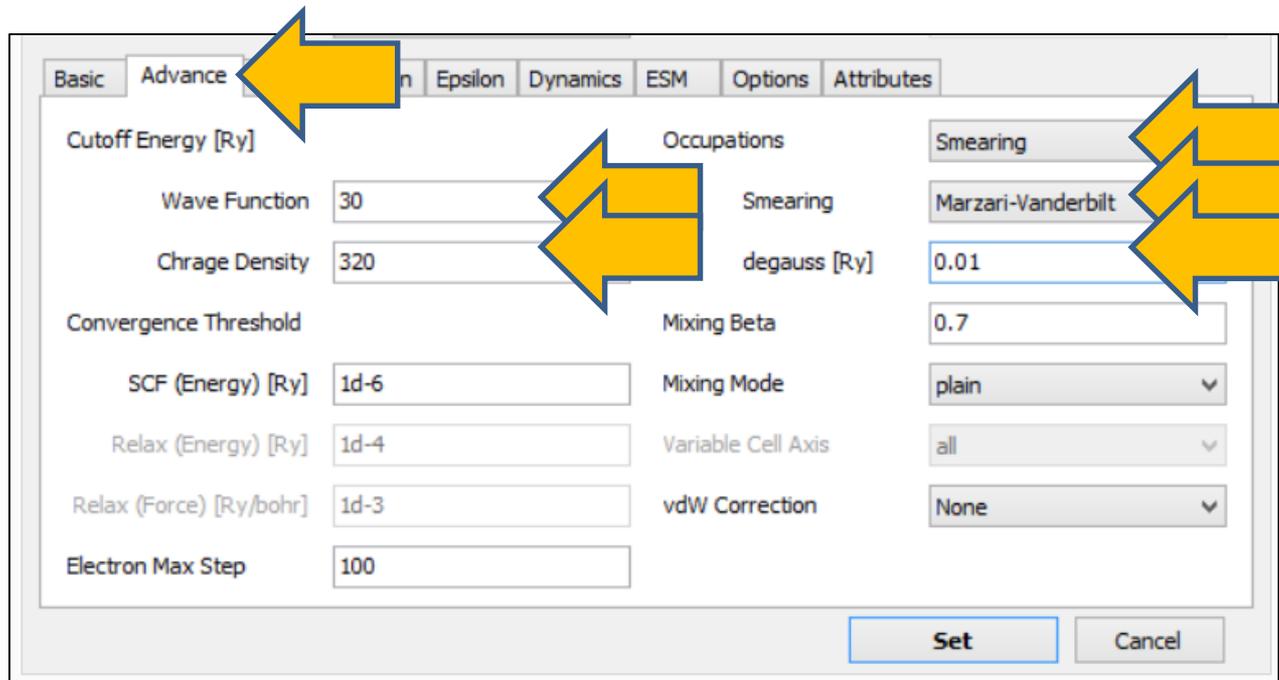


「K Points」の下の
テキストボックスの内容

```
gG 20
H 20
N 20
gG 20
P 0
```

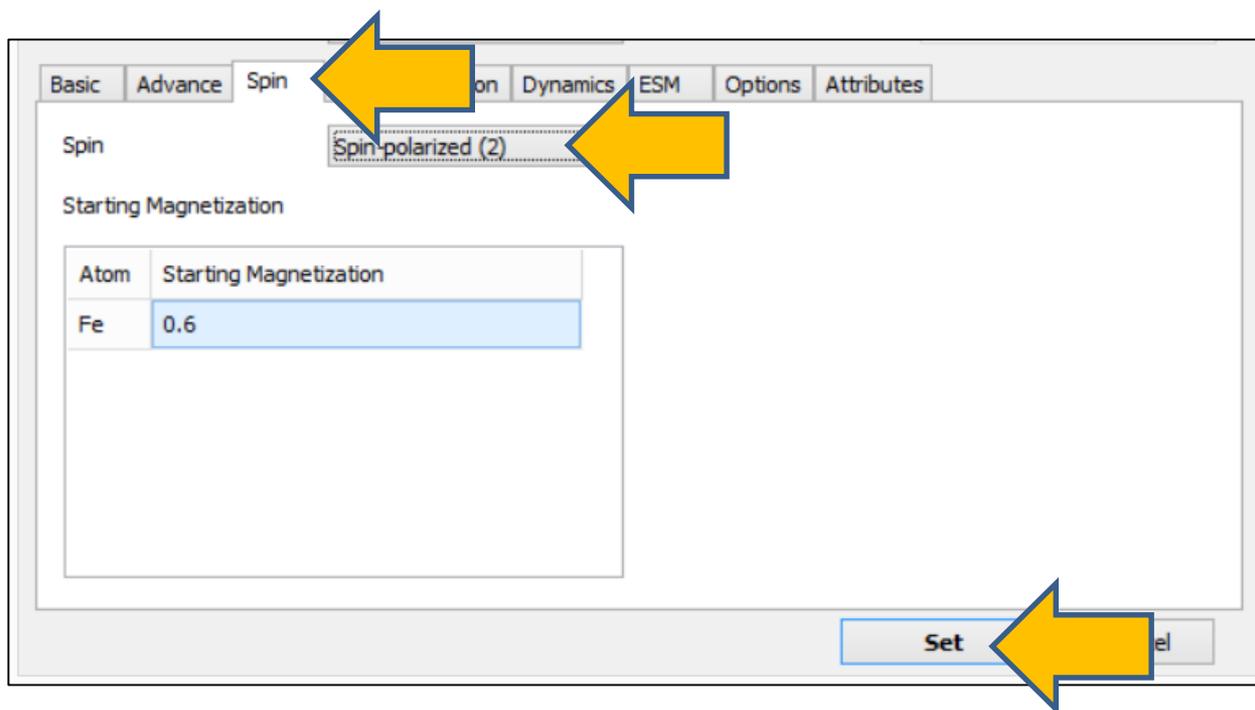
II. Bands計算

[Advance]タブを開き、[Cutoff Energy]の[Wave Function]に"30"、[Charge Density]に"320"、[Occupations]に"Smearing"、[Smearing]に"Marzari-Vanderbilt"、[degauss]に"0.01"を指定する。



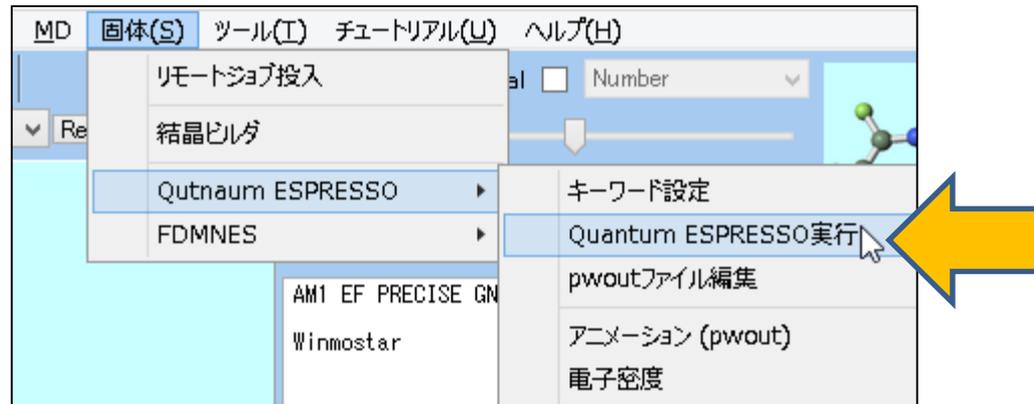
II. Bands計算

[Spin]タブを開き、[Spin]に"Spin-polarized (2)"を指定し、[Set]する。



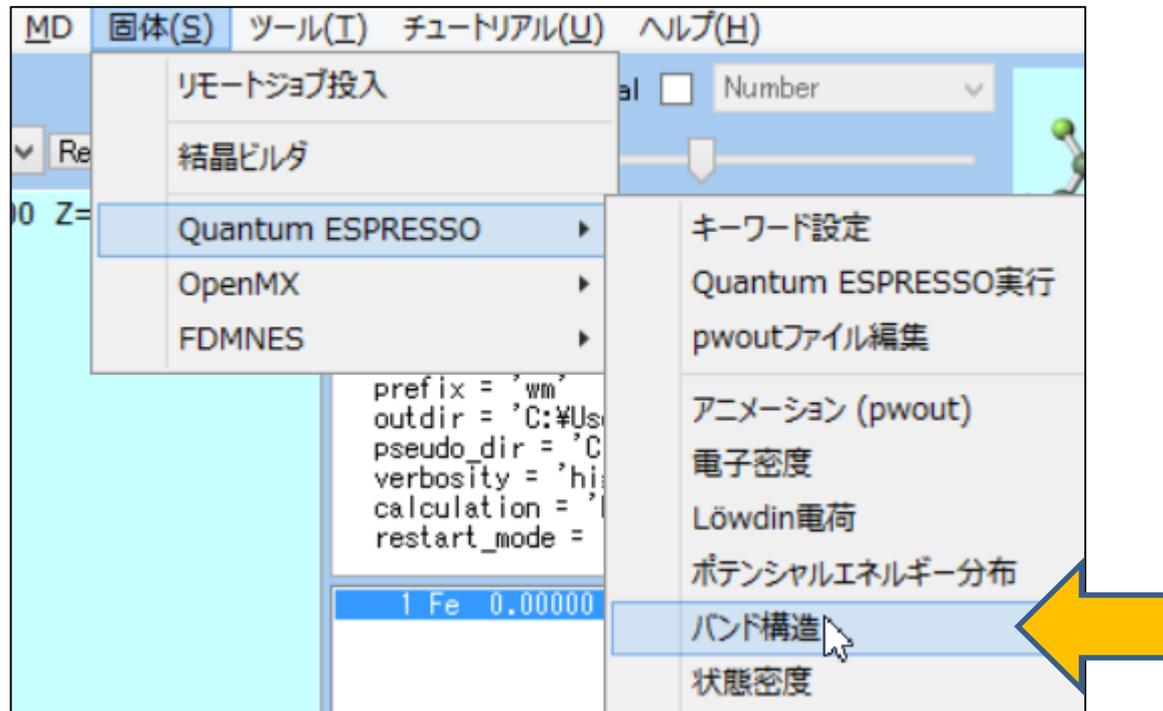
II. Bands計算

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



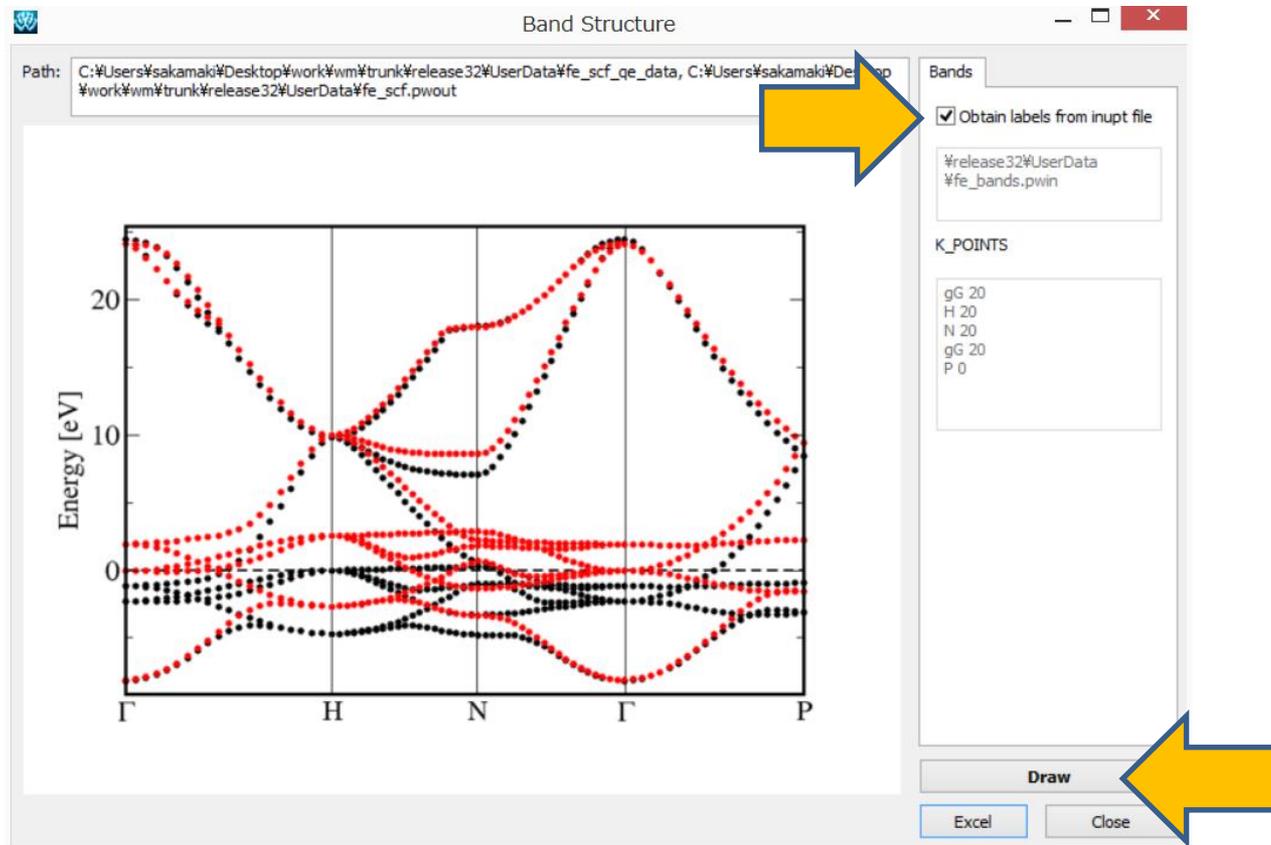
II. Bands計算

[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [バンド構造]をクリックする。まずoutput directoryを聞かれるので、デフォルトで選ばれている"fe_scf_qe_data"で[OK]する。また、SCF計算の出力ファイルを聞かれるので、デフォルトで選ばれる"fe_scf.pwout"を開く。



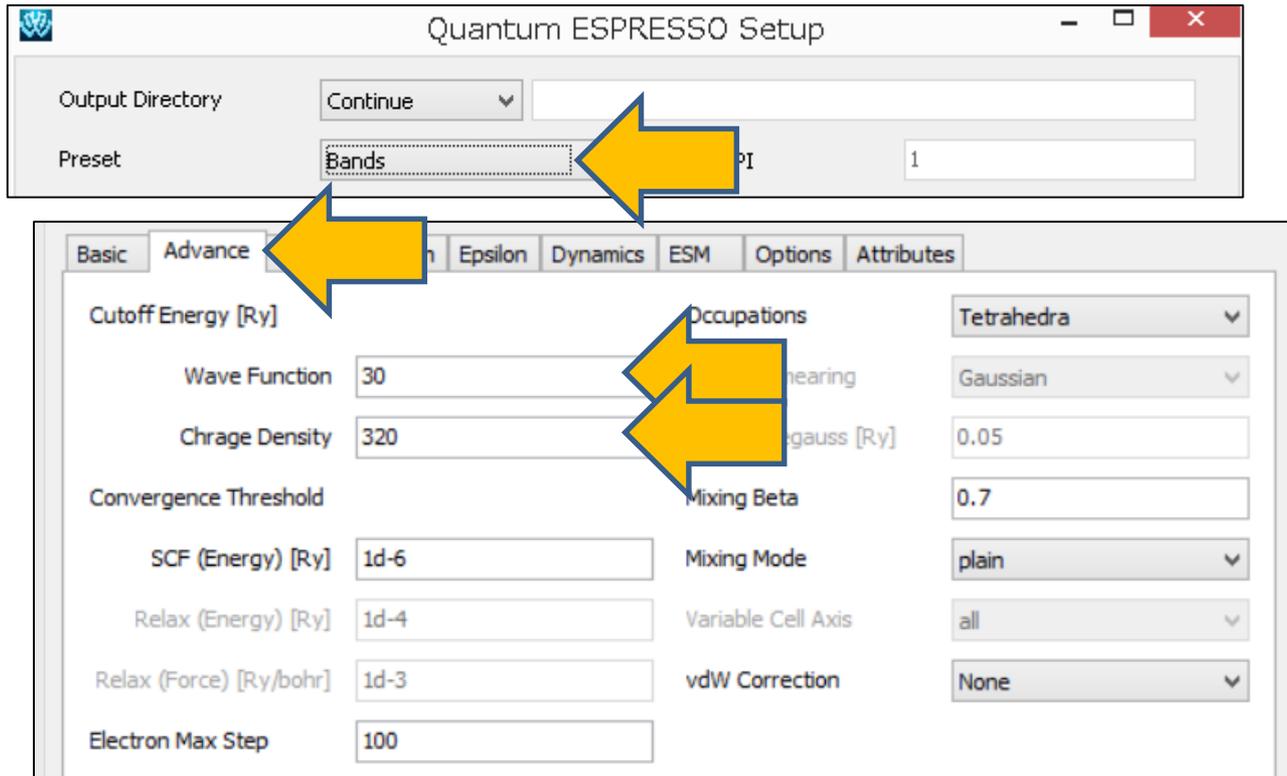
II. Bands計算

[obtain labels from input file]にチェックを入れるとbands計算の入力ファイルを聞かれるので、デフォルトで選ばれている"fe_bands.pwin"を開く。その後[Draw]を押すとup, downスピンそれぞれのバンド構造が描画される。



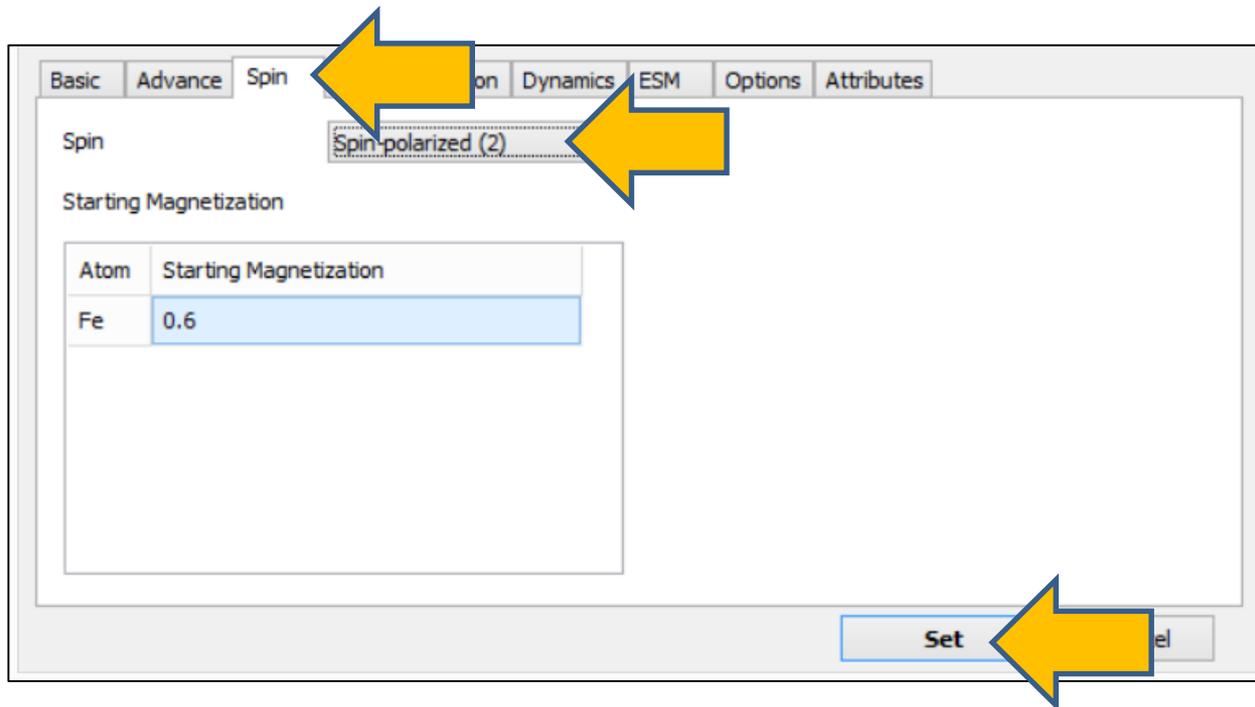
III. DOS計算

再度キーワード設定画面を開き、[Preset]に”DOS”を指定する。[Advance]タブを開き、[Wave Function]に”30”、[Charge Density]に”320”と指定する。



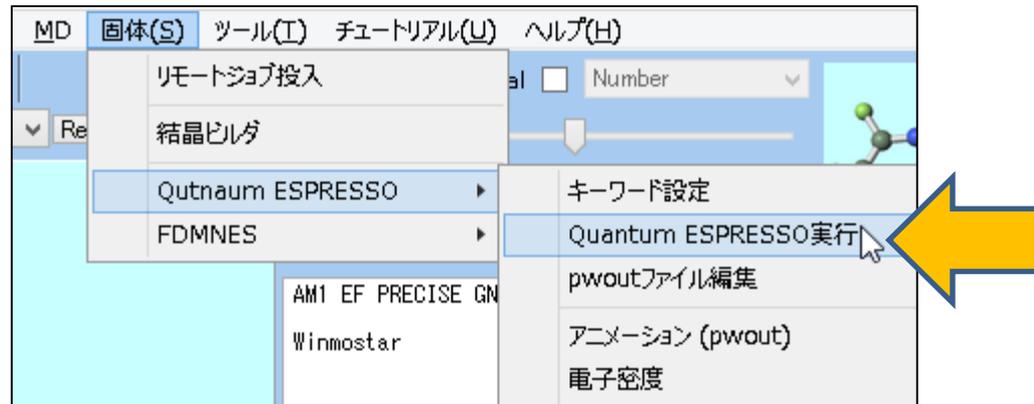
III. DOS計算

[Spin]タブを開き、[Spin]に"Spin-polarized (2)"を指定し、[Set]する。



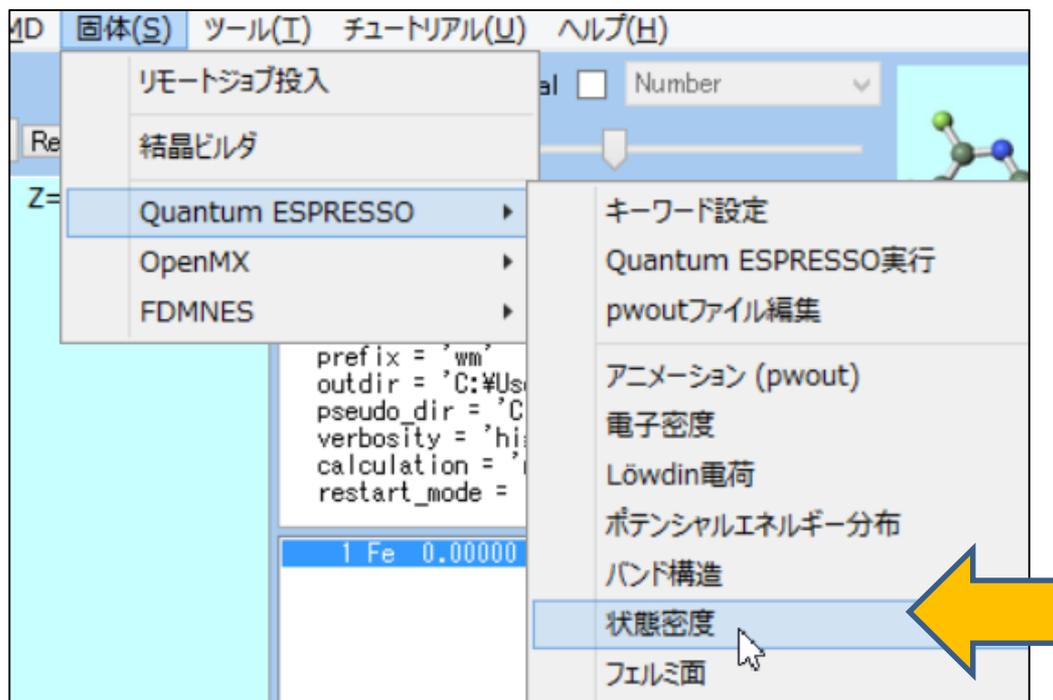
III. DOS計算

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



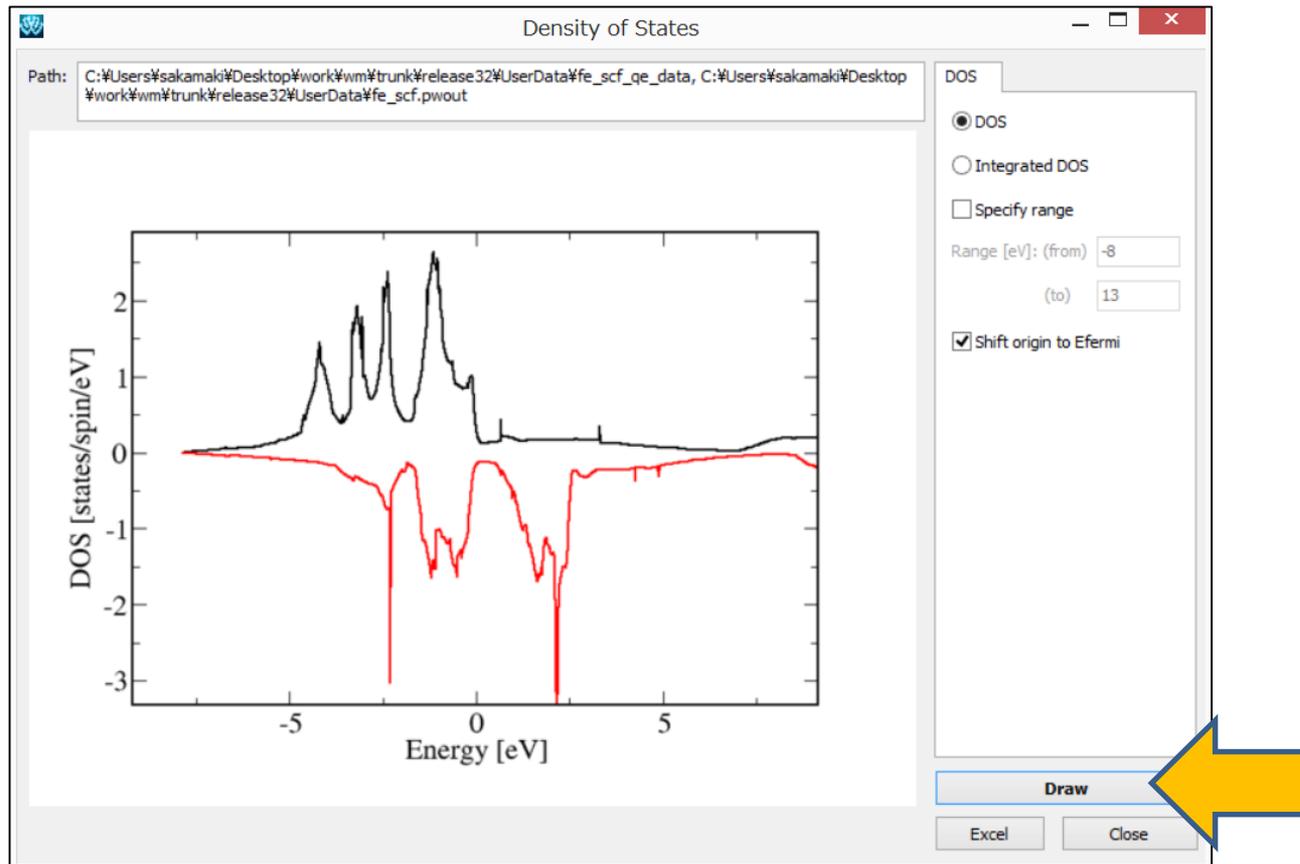
III. DOS計算

[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [バンド構造]をクリックする。まずoutput directoryを聞かれるので、デフォルトで選ばれている"fe_scf_qe_data"で[OK]する。また、SCF計算の出力ファイルを聞かれるので、デフォルトで選ばれる"fe_scf.pwout"を開く。



III. DOS計算

[Draw]ボタンを押すと、up, downスピンそれぞれのDOS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...

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!