

Winmostar™ チュートリアル
BoltzTraP
Quantum ESPRESSOとの連携
V8.025

株式会社クロスアビリティ
2018/07/24

概要

- Quantum ESPRESSO(以降QE)により Mg_2Si 結晶のNSCF計算を行いアウトプットファイルを取得します。このアウトプットファイルを元にBoltzTraPの設定および計算を実施します。その後ゼーベック係数の可視化を行います。

注意点:

- k 点の取り方、バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギーは計算結果に大きな影響を与えます。

動作環境設定(Quantum ESPRESSO)

① Quantum ESPRESSOインストールマニュアル

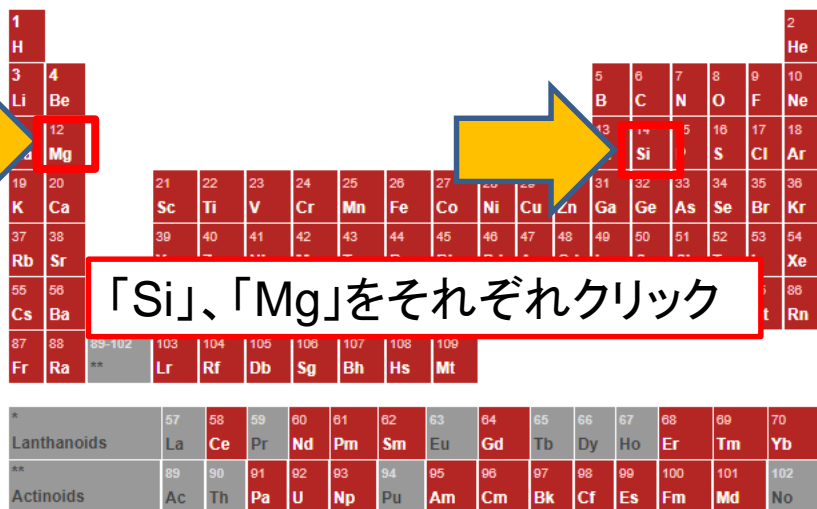
https://winmostar.com/jp/QE_install_manual_jp_win.pdf

に従い、Quantum ESPRESSOをインストールする。

② 以下のURLよりSi.pbe-mt-fhi.UPF, Mg.pbe-mt-fhi.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/fhi-pp-from-abinit-web-site>

FHI PP FROM ABINIT WEB SITE



「Si」、「Mg」をそれぞれクリック

1	H																	2	He																
3	Li	4	Be											5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne										
11	Na	12	Mg											13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar										
19	K	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr
37	Rb	38	Sr	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe
55	Cs	56	Ba	57	La	58	Ce	59	Pr	60	Nd	61	Pm	62	Sm	63	Eu	64	Gd	65	Tb	66	Dy	67	Ho	68	Er	69	Tm	70	Yb				
87	Fr	88	Ra	89-102	Lr	103	Rf	104	Db	105	Sg	106	Bh	107	Hs	108	Mt	109																	
				57	La	58	Ce	59	Pr	60	Nd	61	Pm	62	Sm	63	Eu	64	Gd	65	Tb	66	Dy	67	Ho	68	Er	69	Tm	70	Yb				
				89	Ac	90	Th	91	Pa	92	U	93	Np	94	Pu	95	Am	96	Cm	97	Bk	98	Cf	99	Es	100	Fm	101	Md	102	No				

Pseudopotential File

Si.pbe-mt_fhi.UPF

Pseudopotential type: NONMCONS
Method: Martins-
Functional type: scalar relativistic

「Si.pbe-mt-fhi.UPF」をクリック

Mg.pbe-mt_fhi.UPF

Pseudopotential type: NONMCONS
Method: Martins-Troullier
Functional type: scalar relativistic
Nonlinear core c

「Mg.pbe-mt-fhi.UPF」をクリック

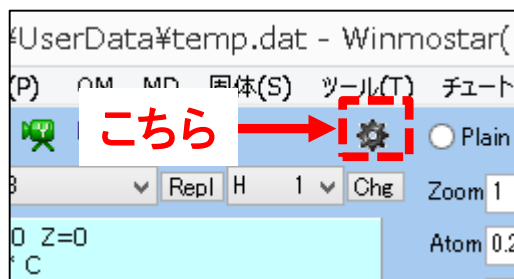
動作環境設定(BoltzTraP)

本機能を用いるためには、Cygwinのセットアップが必要です。

- https://winmostar.com/jp/manual_jp.htmlの「2. 計算エンジンのインストール」から、Cygwinの自己解凍書庫(exe)を入手し実行してください。

下記リンクから各パッケージがコンパイル済のCygwinのインストーラをダウンロードし、実行します。
[cygwin_wm_v8_20180510.exe\(687MB\)](#)
 これにより、GROMACS, Amber(sander)のインストール環境 (Cygwin,Acypypeなど) が全て整います。
 ※ダウンロードや実行が上手くいかない場合は **こちら** をお試しください。

- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



I. モデルの作成

1. [ファイル] > [開く]をクリックする。
2. サンプルフォルダ内のmg2si.cifを開く。(デフォルトではC:\winmos8\samples\si.cif)
3. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [キーワード設定]をクリックする。

※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位格子を作成する。

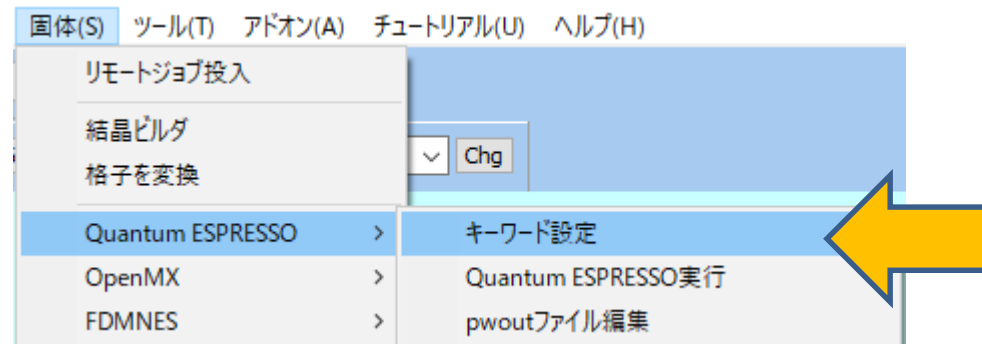
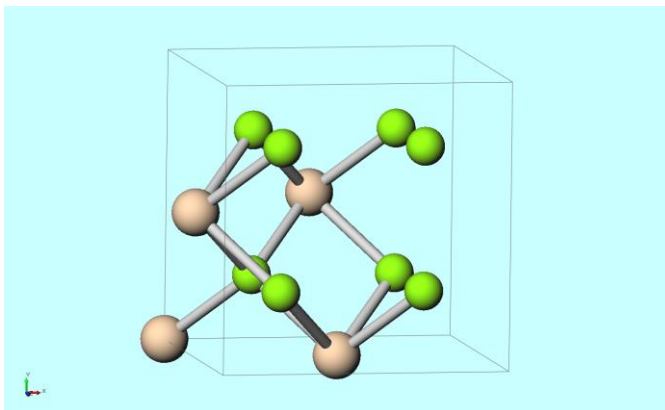
Mg₂Si単位格子について

Crystal system : Cubic

Space group : Fm-3m (225)

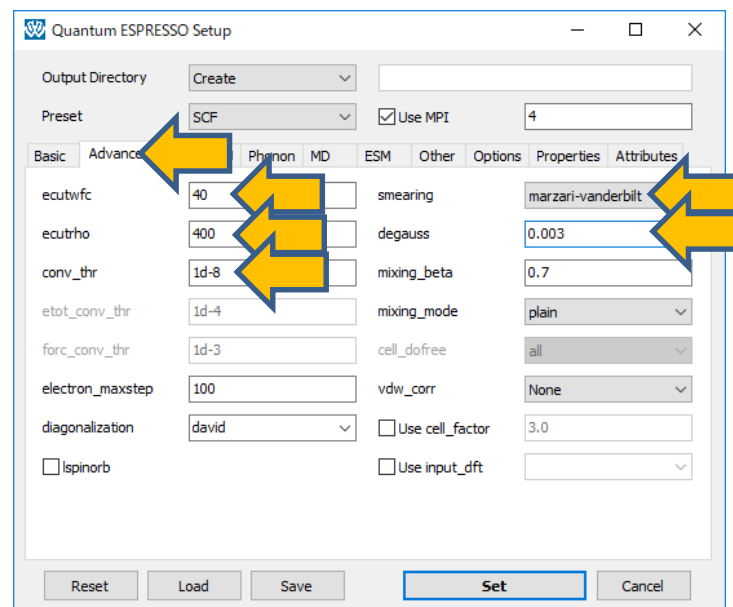
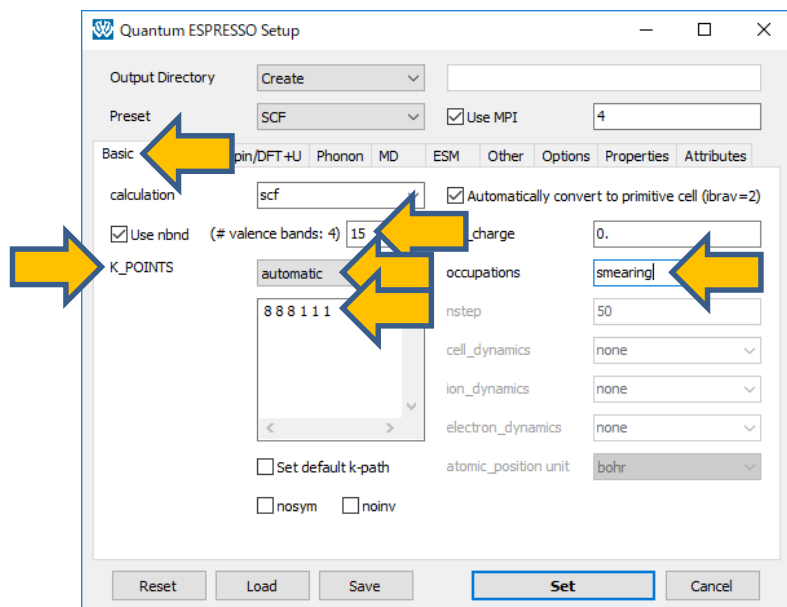
Lattice constants : a=6.351 Å

Asymmetric unit : Si (0.0 0.0 0.0), Mg (0.25 0.25 0.25)



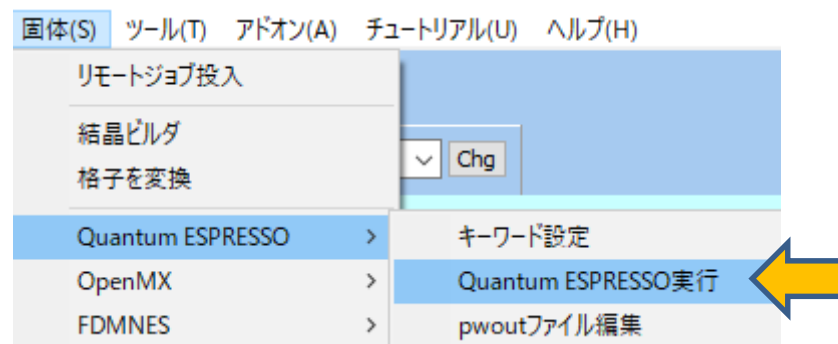
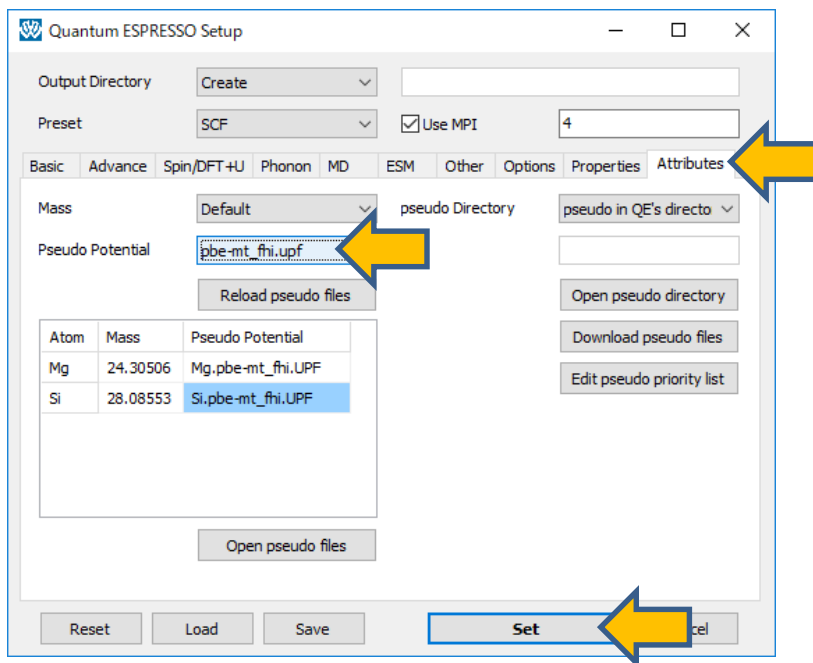
II. QEによるSCF計算1

- Basicタブにて、
 - ・Use nbndにチェックを入れ、その右のフォームに15と入力する。
 - ・KPOINTS=automaticを選択し、8 8 8 1 1 1と入力する。
 - ・occupations=smearingを選択する。
- Advanceタブにて、
 - ・ecutwfc=40, ecutrho=400, conv_thr=1d-8と入力する。
 - ・smearing=Marzari-vanderbiltを選択し、degauss=0.003と入力する。



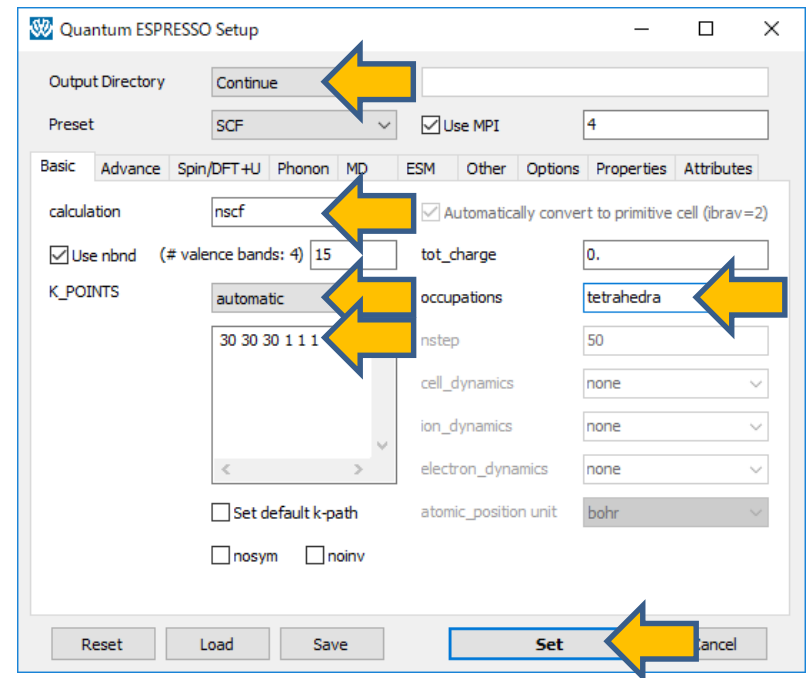
II. QEによるSCF計算2

- Attributesタブにて、
・Pseudo Potential=pbe-mt_fhi.upf
を選択する。
- Setをクリックし、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [Quantum ESPRESSO実行]をクリックする。
保存するファイル名を聞かれるのでMg2Si_scf.pwinとして保存する。



III. QEによるNSCF計算

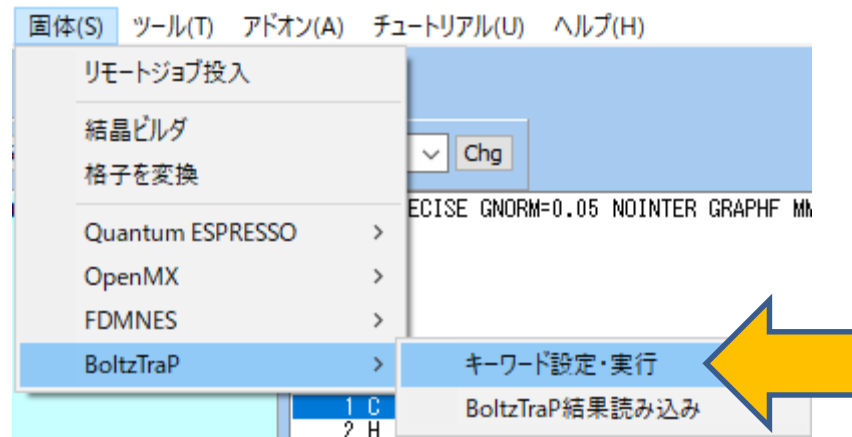
1. 計算終了後、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [キーワード設定]をクリックする。
2. Output Directory=Continueをクリックする。
3. Basicタブにて、以下を入力する。
 - calculation=nscf,
 - K_POINTS=automatic, 30 30 30 1 1 1
 - occupation=tetrahedra



5. [Set]をクリックし、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [Quantum ESPRESSO実行]をクリックする。
保存するファイル名を聞かれるのでMg2Si_nscf.pwinとして保存する。

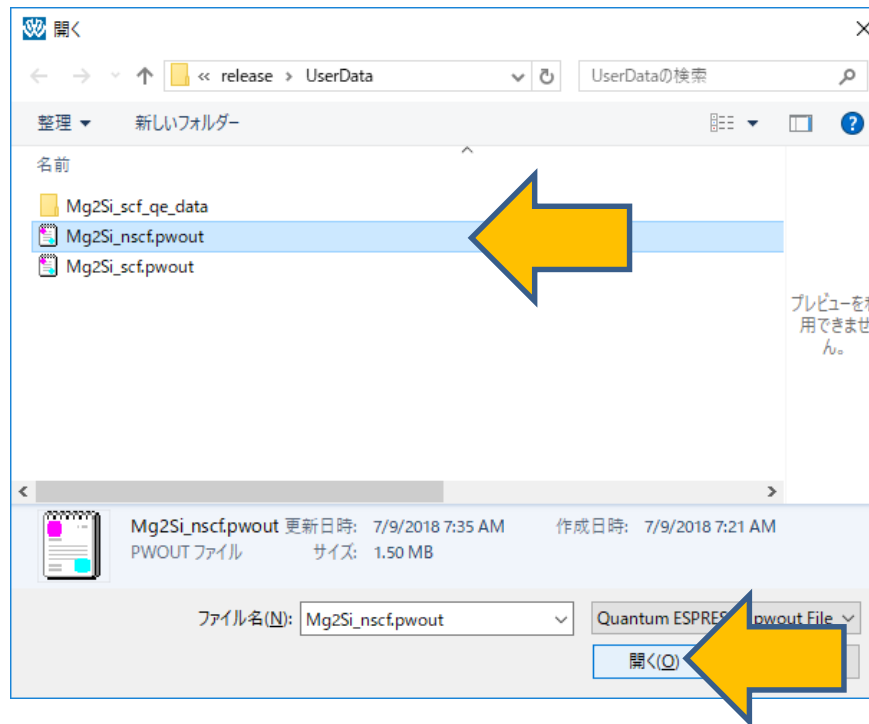
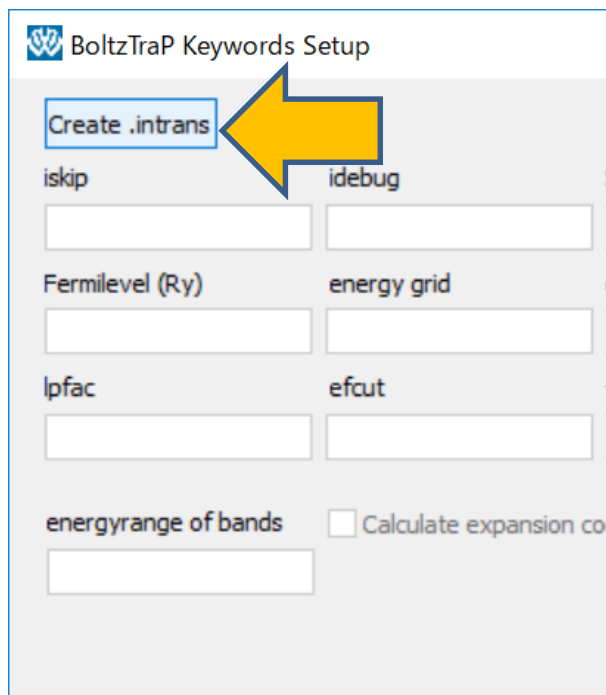
IV. intransファイルの作成1

1. [固体] > [BoltzTraP] > [キーワード設定・実行]をクリックする。



IV. intransファイルの作成2

1. [Create .intrans]ボタンをクリックする。
2. ダイアログ上でMg2Si_nscf.pwoutを選び[開く]をクリックする。
.intransファイルが作成され、フォームに読み込まれる。



V. BoltzTraPによる計算

1. Tmaxを1200と変更する。
2. Start BoltzTraPをクリックする。キーワード設定画面は閉じられ、コンソール画面が起動する。

BoltzTraP Keywords Setup

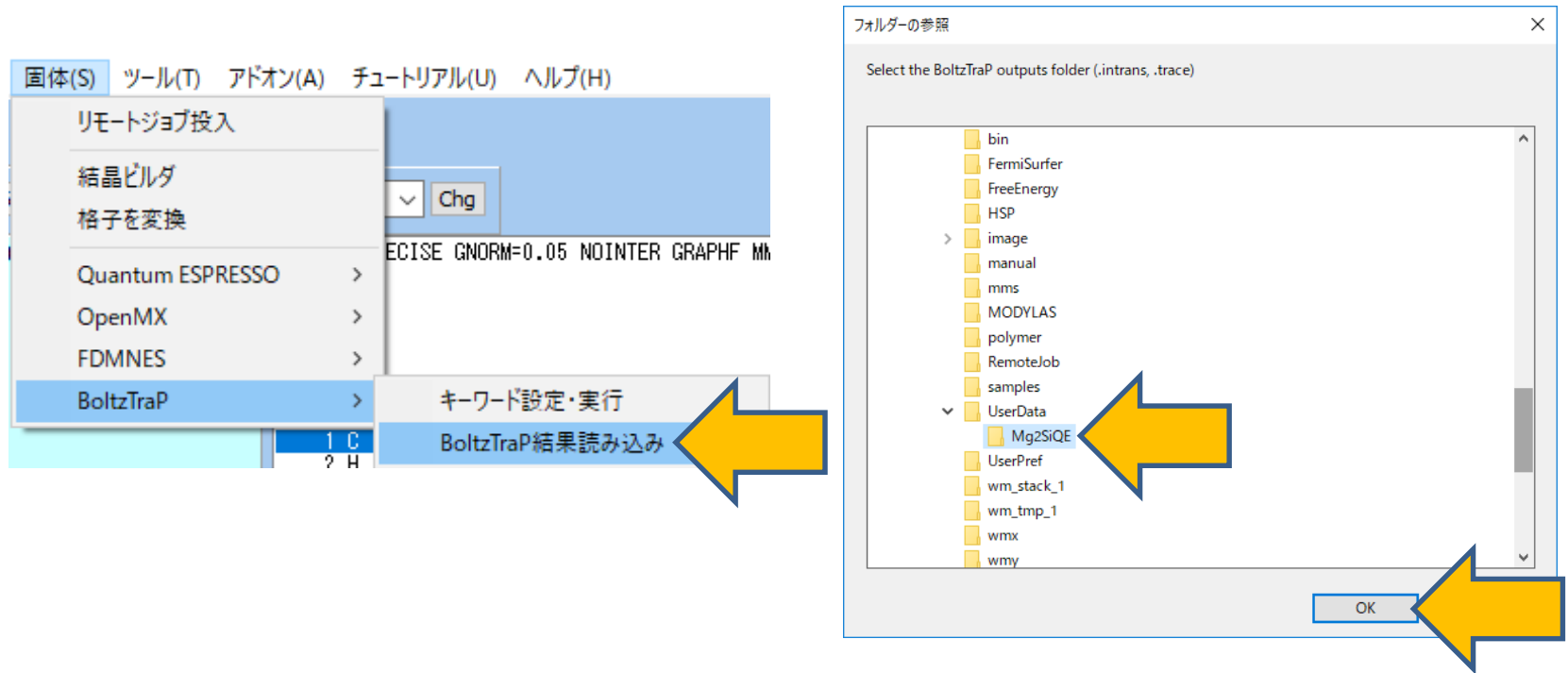
Create .intrans

iskip	idebug	Setgap	shiftgap
0	0	0	0.0
Fermilevel (Ry)	energy grid	energy span	number of electrons
0.335219981632	0.0005	0.4	8.0
lpfac	efcut	Tmax	temperature grid
5	0.15	1200.0	50.0
energyrange of bands	<input checked="" type="checkbox"/> Calculate expansion coeff		
-1.0			

Start BoltzTraP

VI. traceファイルの可視化1

1. 計算終了後、[固体] > [BoltzTraP] > [BoltzTraP結果読み込み]をクリックする。
2. デフォルトで直前のジョブの作業ディレクトリが選択されているので、OKをクリックする。



VI. traceファイルの可視化2

1. 左のパネルの上からSeebeck Coefficient, T[K], 250, 300, 350※を選択する。
※リストからの複数選択の方法はctrlを押しながらクリック。
2. Drawをクリックすると、グラフが表示される。
このグラフはT=250, 300, 350 [K]の時のゼーベック係数のエネルギー依存性を示している。
左のパネルのT [K]をE-Ef [eV]と変更すると温度依存性グラフも描画できる。
3. Excelボタンをクリックすると表示されているプロットをcsvで出力できる。

