

Winmostar™ チュートリアル  
Quantum ESPRESSO  
基礎編  
V8.021

株式会社クロスアビリティ  
2018/05/14

# 概要

- Si結晶のSCF計算を実施し、その後バンド構造、状態密度、部分状態密度、電子密度の算出を行います (Winmostar™ 上ではpw.x、band.x、dos.xなどが連続して実行されます)。

## 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。本チュートリアルではすぐに結果を取得できるよう、精度を落とした設定を用います。
- k点の経路(パス)は対象とする結晶構造に応じて設定し直す必要があります。各結晶構造における推奨のパスはQEのインストールディレクトリにあるDoc¥Brillouin\_zonew.pdfを参考に設定してください。

# 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		

# I. モデルの作成

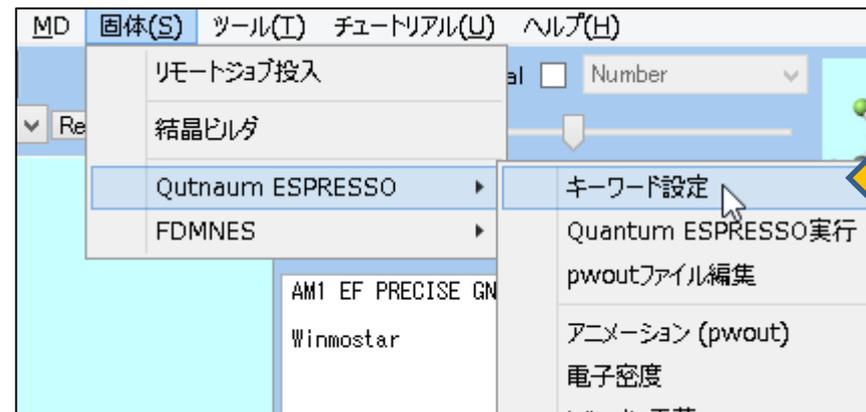
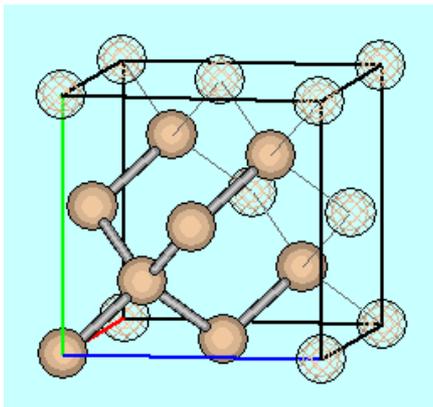
1. [メニュー] > [開く]をクリック。
2. サンプルフォルダ内のsi.cifを開く。(デフォルトではC:\winmos8\samples\si.cif)

※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位格子を作成する。

## Si単位格子について

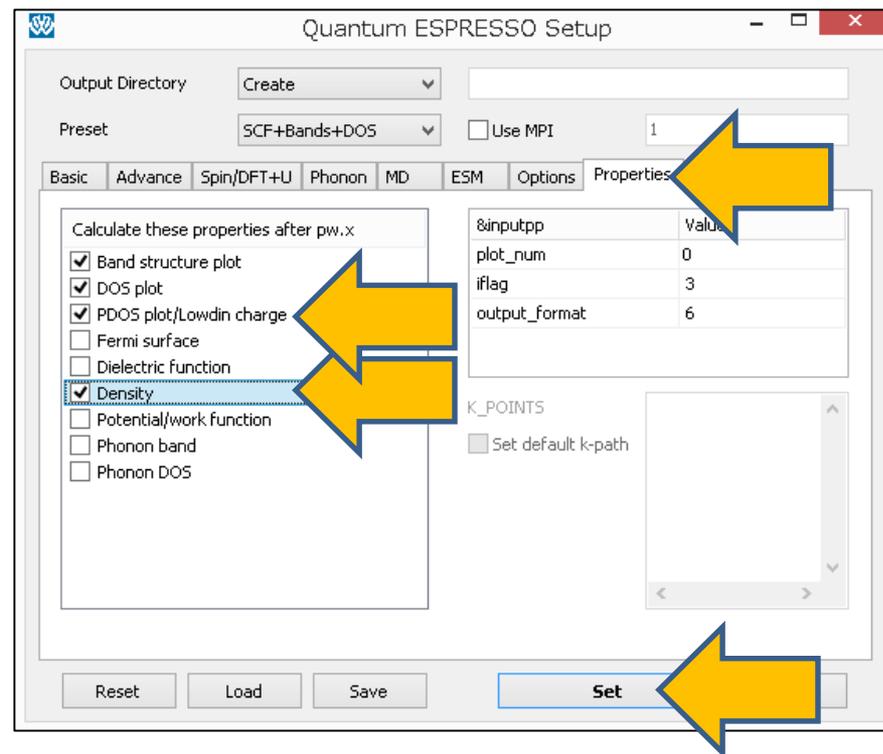
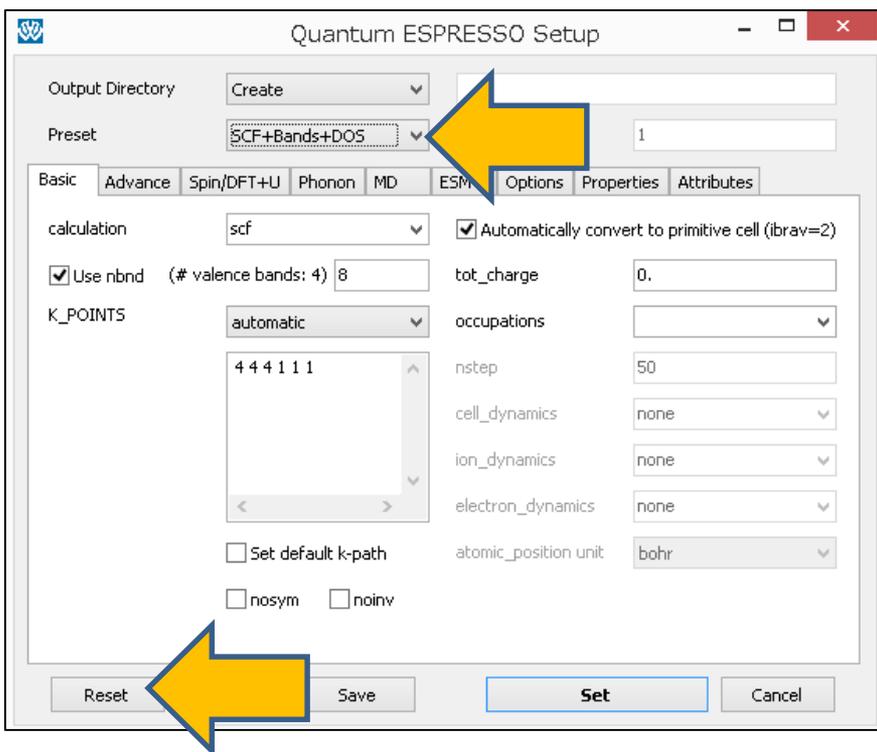
Crystal system: Cubic  
Space group : Fd-3m (227)  
Lattice constants : a=5.4309 Å  
Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)

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



## II. QEによる計算

1. [Reset]ボタンをクリックし、[Preset]に”SCF+Bands+DOS”を指定する。
2. [Properties]タブの[PDOS plot/Lowdin charge]と[Density]にチェックを入れる。
3. [Set]をクリックする。



## II. QEによる計算

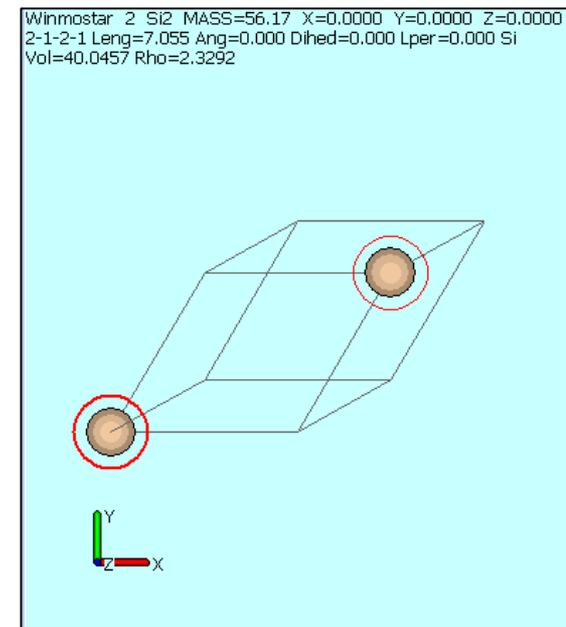
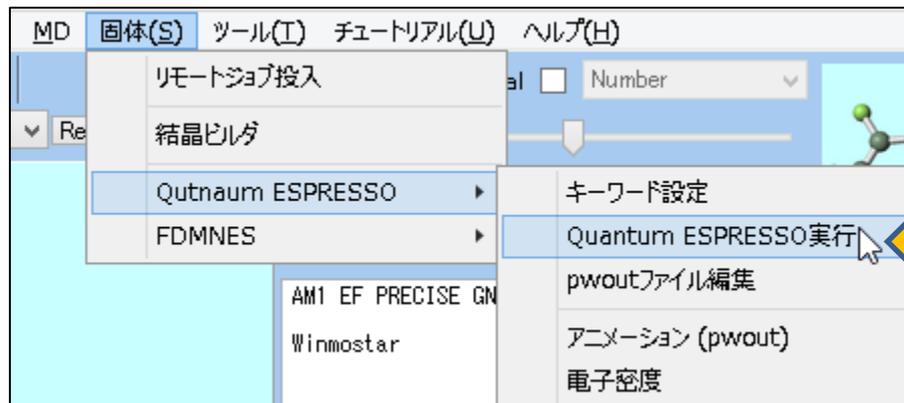
1. [固体] > [Quantum ESPRESSO]>[Quantum ESPRESSO実行]をクリック。

2. 実行前に、名前を付けて保存する。ここでは仮に「si\_tutor.pwin」とする。

※ 保存後、結晶構造が下の右図のようにPrimitive Cellへと変換される。

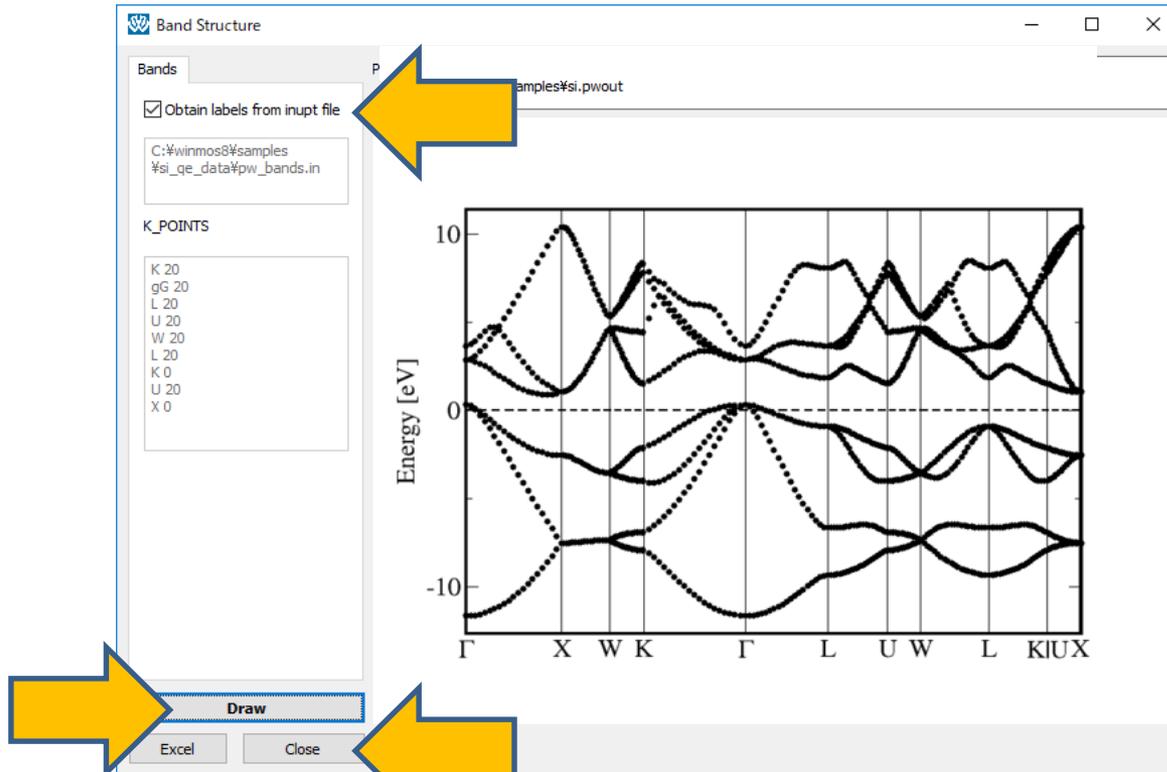
変換の有無は

[Quantum ESPRESSOキーワード設定]>[Automatically convert to primitive cell]  
で切り替えることができる。



### III. 結果解析

1. 計算終了後、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [バンド構造]をクリック。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。
3. [Obtain labels from input file]をクリックしデフォルトで選ばれるファイルを選択する。
4. Drawボタンを押すとバンド図が得られる。確認後[Close]ボタンを押す。



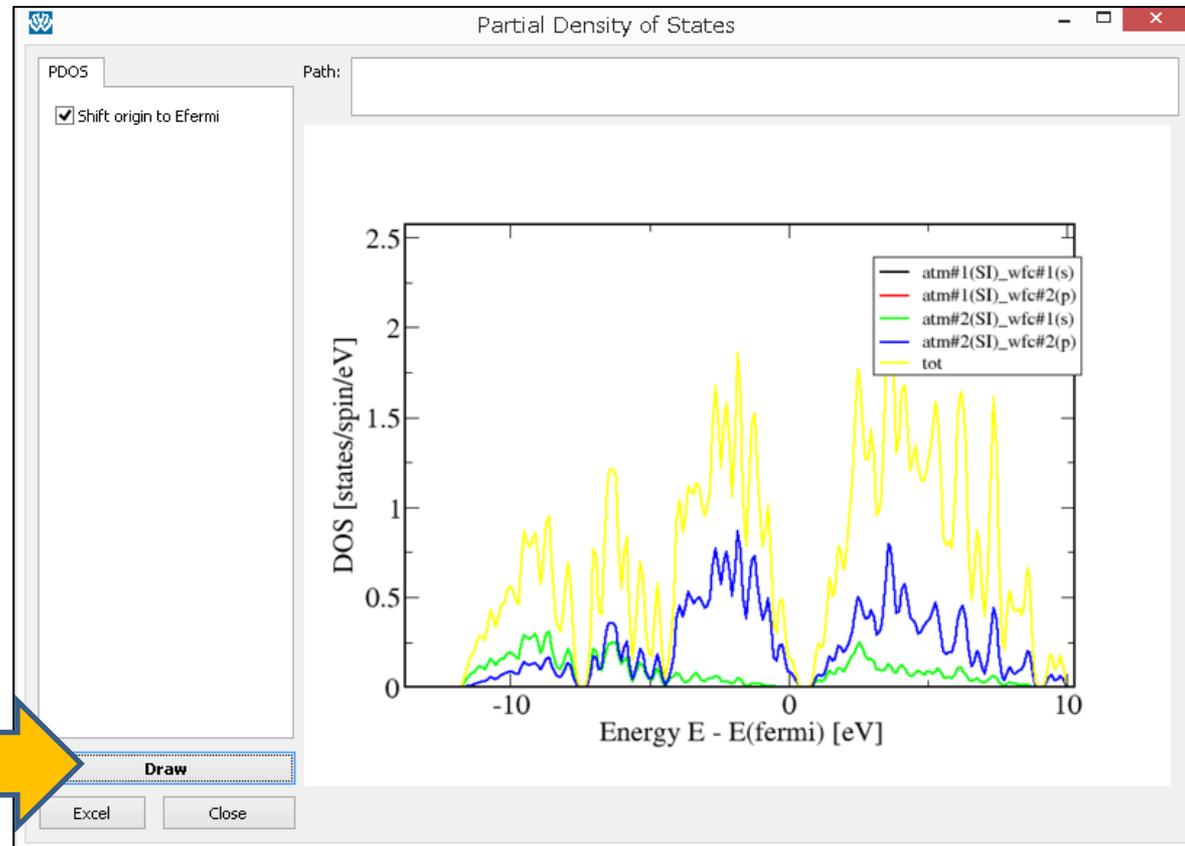
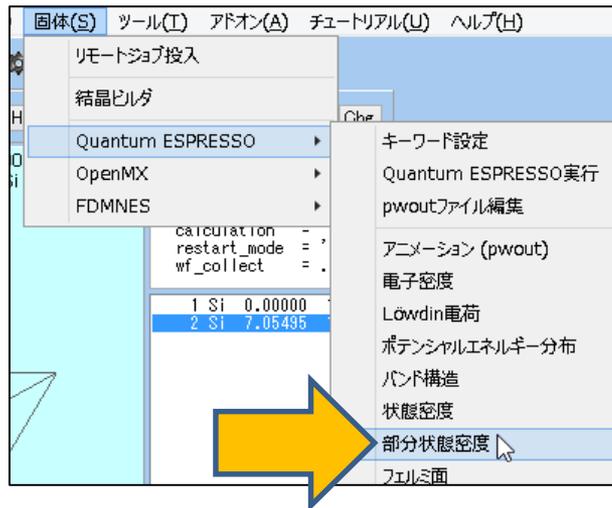
## III. 結果解析

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [状態密度]をクリック。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。
3. 新しいウィンドウが立ち上がり、Drawボタンを押すとDOSが得られる。

The image shows two screenshots from the X-Ability software. The left screenshot displays the main menu with '固体(S)' selected, and a sub-menu where 'Quantum ESPRESSO' is chosen, leading to '状態密度' (Density of States). A yellow arrow points to this option. The right screenshot shows the 'Density of States' window. It has a 'DOS' tab selected, with radio buttons for 'DOS' (selected), 'Integrated DOS', and 'Specify range'. Below these are input fields for 'Range [eV]: (from) -8' and '(to) 13', and a checked checkbox for 'Shift origin to Efermi'. A 'Draw' button is highlighted with a yellow arrow. The plot area shows the DOS [states/spin/eV] on the y-axis (0 to 2) versus Energy E - E(fermi) [eV] on the x-axis (-10 to 0). The plot shows several peaks, with the highest peak near 0 eV.

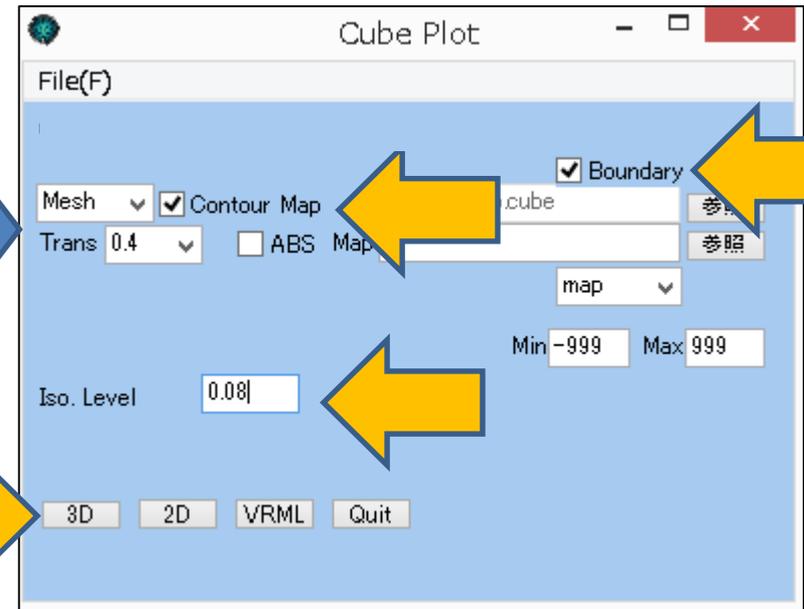
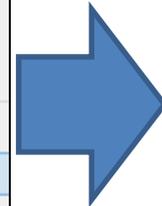
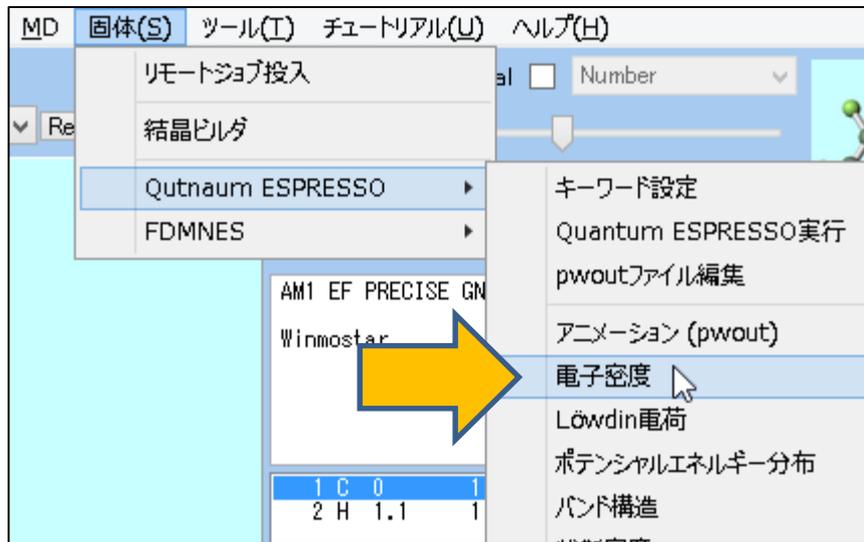
# III. 結果解析

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [部分状態密度]をクリック。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。
3. 新しいウィンドウが立ち上がり、Drawボタンを押すとPDOSが得られる。



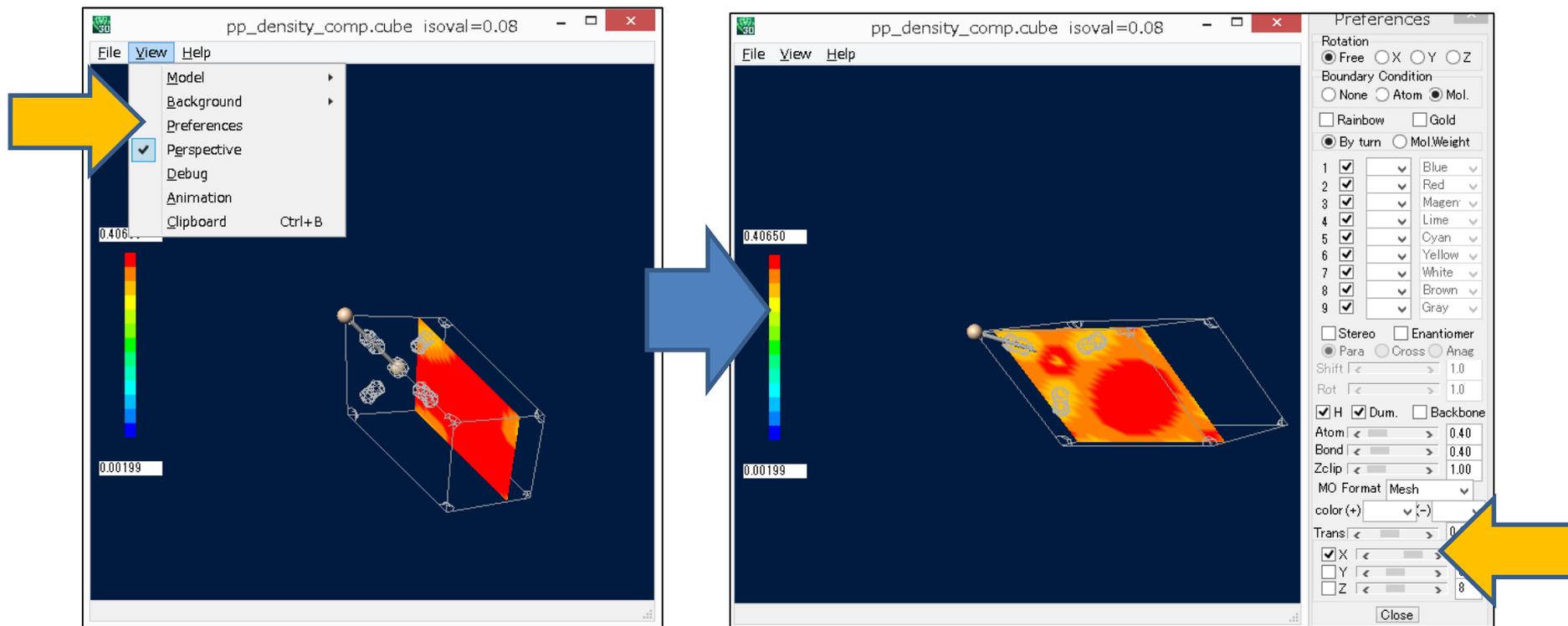
## III. 結果解析

1. 同様に、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [電子密度]をクリック。
2. デフォルトで選ばれるフォルダをクリック。
3. [Contour Map]と[Boundary]にチェックを入れ、[Iso. Level]を”0.08”に設定。
4. [3D]をクリック。



### III. 結果解析

1. 起動したWinmostar 3Dにて、[View] > [Preferences]をクリック。
2. X、YまたはZのスライダーを動かし、等高線マップを表示する面を選択する。



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!