

Winmostar™ チュートリアル
Quantum ESPRESSO
Nudged Elastic Band法
V8.025

株式会社クロスアビリティ
2018/7/27

概要、注意点

- Cu(100)表面上のAg原子のホローサイト間のジャンプを計算します。
- 本チュートリアルでは、短時間で全体の流れを把握するという目的のため、スラブの表面構造の緩和などを省略し、システムサイズも小さく設定しています。NEB計算は収束するまで計算させず、指定した反復回数分しか計算させません。
- 同様に、電子状態計算と構造最適化計算の精度も落としています。

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

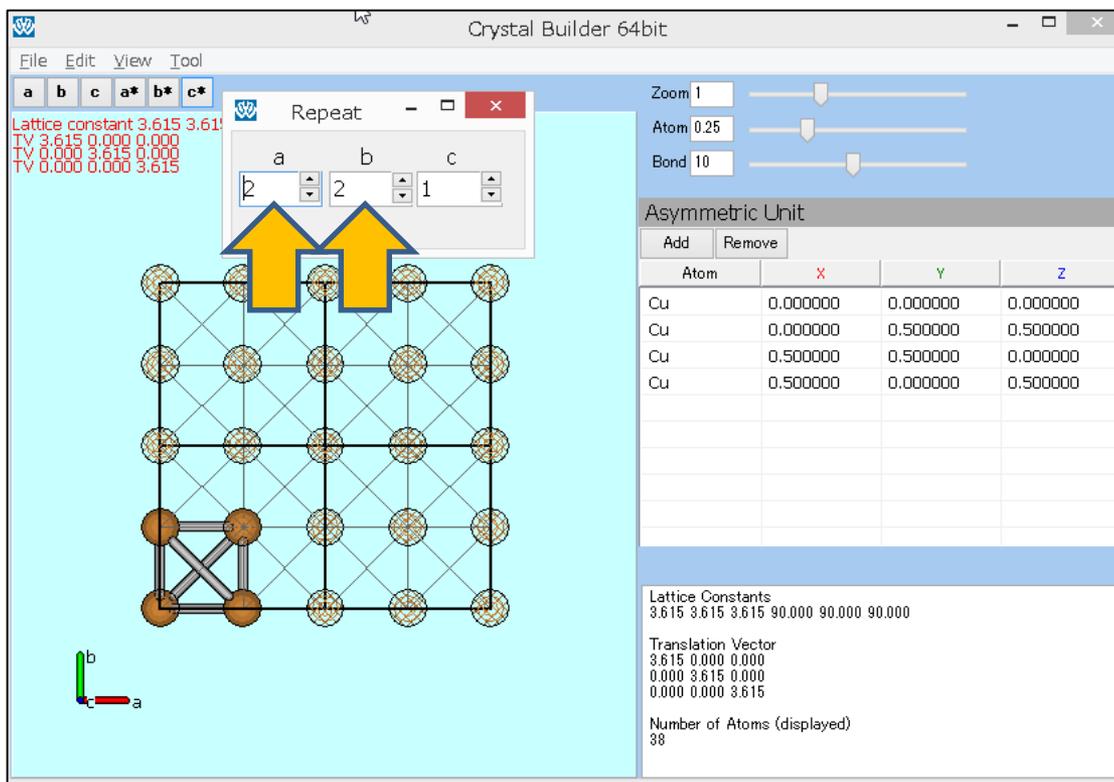
に従い、Quantum ESPRESSOをインストールする。

② 以下のURLよりCu.pbe-dn-rrkjus_psl.0.2.UPFとAg.pbe-dn-rrkjus_psl.0.1.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-espresso.org/pseudo-search-results>

I. 系の作成

- [固体]-[結晶ビルダ]を立ち上げる。
- [File]-[Open]からsamples¥cu.cifを開く。
- [Edit]-[Repeat]にて、a, b, cをそれぞれ2, 2, 1に設定しRepeatウィンドウを閉じる。



The screenshot shows the Crystal Builder 64bit interface. The main window displays a 3D crystal structure of copper (Cu) atoms. A 'Repeat' dialog box is open, showing the lattice constants (a, b, c) and the number of repeats for each axis. The values are set to a=2, b=2, and c=1. The 'Repeat' dialog box has a 'Repeat' title bar and a close button. The main window has a menu bar (File, Edit, View, Tool) and a toolbar with buttons for 'a', 'b', 'c', 'a*', 'b*', 'c*'. The status bar shows the lattice constants and translation vectors.

Crystal Builder 64bit

File Edit View Tool

a b c a* b* c*

Lattice constant 3.615 3.615 3.615
TV 3.615 0.000 0.000
TV 0.000 3.615 0.000
TV 0.000 0.000 3.615

Repeat

a b c
2 2 1

Zoom 1
Atom 0.25
Bond 10

Asymmetric Unit

Add Remove

Atom	X	Y	Z
Cu	0.000000	0.000000	0.000000
Cu	0.000000	0.500000	0.500000
Cu	0.500000	0.500000	0.000000
Cu	0.500000	0.000000	0.500000

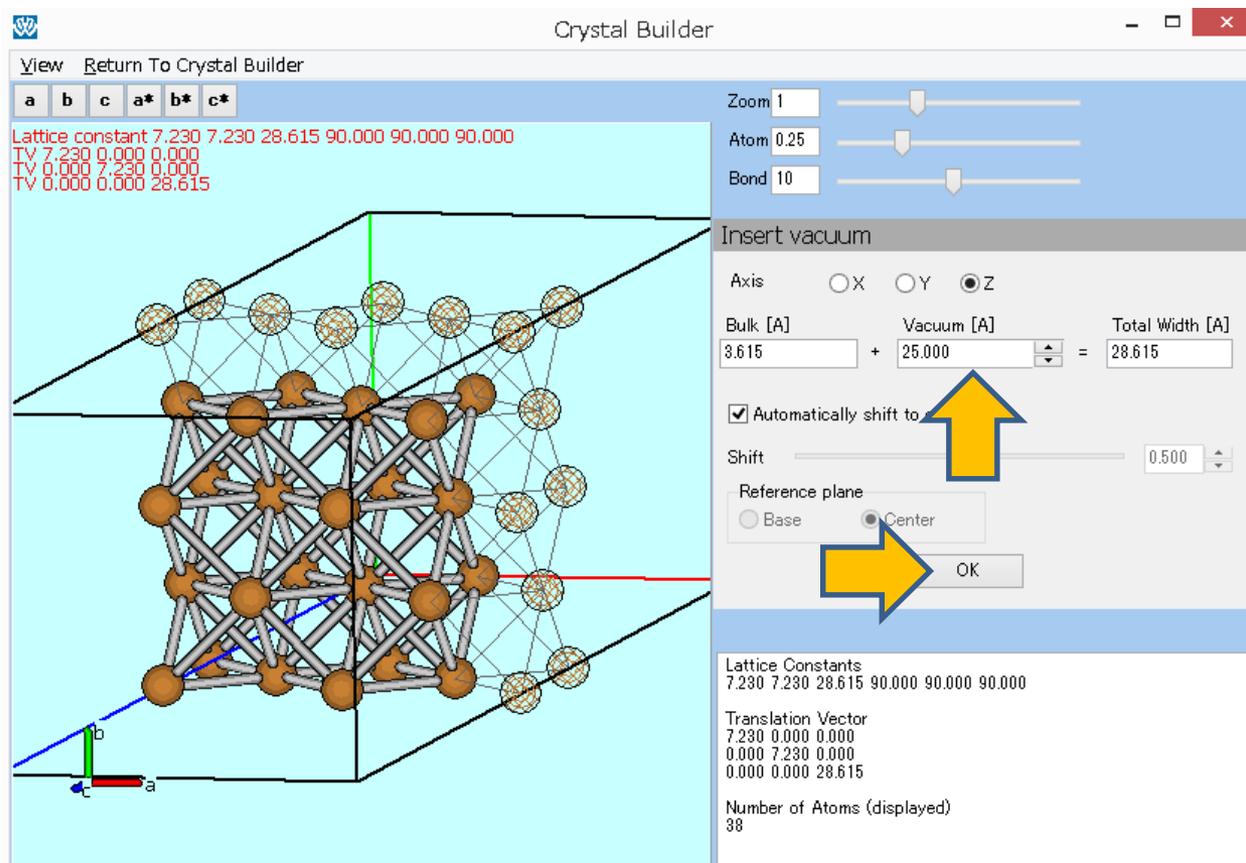
Lattice Constants
3.615 3.615 3.615 90.000 90.000 90.000

Translation Vector
3.615 0.000 0.000
0.000 3.615 0.000
0.000 0.000 3.615

Number of Atoms (displayed)
38

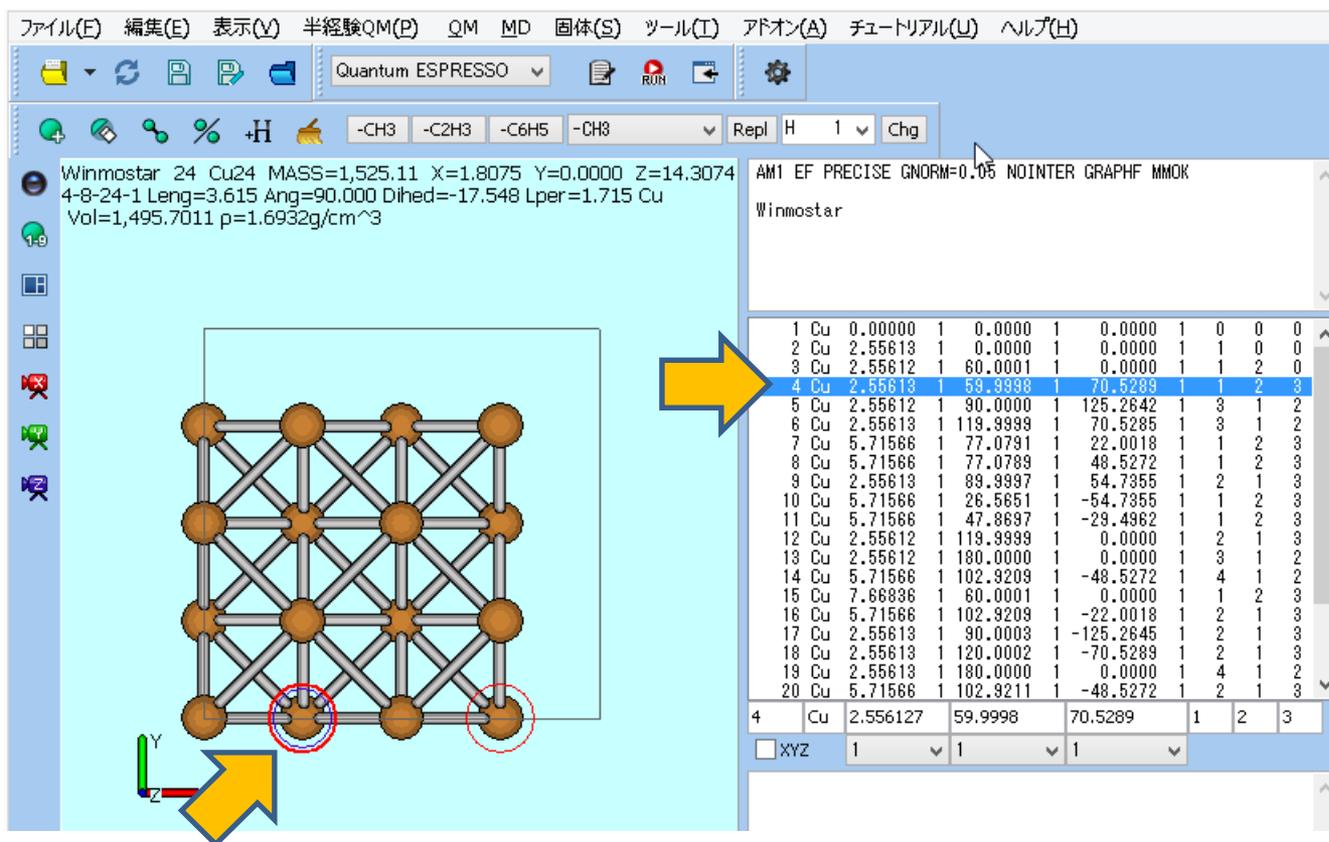
I. 系の作成

- [Tool]-[Insert Vacuum]を選択する。
- [Vacuum [A]]に「25」と入力し[OK]をクリックする。
- [File]-[Save As]にて、cu_slab.cifとして保存し、[File]-[Exit]とする。



I. 系の作成

- メインウィンドウにてcu_slab.cifを開く。
- 画面右のリストから4番目の原子を選択する。
- 画面左でその原子をCtrl+左クリックし青丸で選択された状態にする。



The screenshot shows the Quantum ESPRESSO interface. On the left, a 3D model of a copper slab is displayed with a coordinate system (X, Y, Z). Two atoms in the bottom row are circled in red, and a yellow arrow points to the 4th atom. On the right, a table of atomic coordinates is shown, with the 4th row highlighted in blue. A yellow arrow also points from the 3D model to this row.

Atom	Element	x	y	z	Occupancy	Charge	Group	Species
1	Cu	0.00000	1	0.0000	1	0.0000	1	0 0 0
2	Cu	2.55613	1	0.0000	1	0.0000	1	1 0 0
3	Cu	2.55612	1	60.0001	1	0.0000	1	1 2 0
4	Cu	2.55613	1	59.9998	1	70.5289	1	1 2 3
5	Cu	2.55612	1	90.0000	1	125.2642	1	3 1 2
6	Cu	2.55613	1	119.9999	1	70.5285	1	3 1 2
7	Cu	5.71566	1	77.0791	1	22.0018	1	1 2 3
8	Cu	5.71566	1	77.0789	1	48.5272	1	1 2 3
9	Cu	2.55613	1	99.9997	1	54.7355	1	2 1 3
10	Cu	5.71566	1	26.5651	1	-54.7355	1	1 2 3
11	Cu	5.71566	1	47.8697	1	-29.4962	1	1 2 3
12	Cu	2.55612	1	119.9999	1	0.0000	1	2 1 3
13	Cu	2.55612	1	180.0000	1	0.0000	1	3 1 2
14	Cu	5.71566	1	102.9209	1	-48.5272	1	4 1 2
15	Cu	7.66836	1	60.0001	1	0.0000	1	1 2 3
16	Cu	5.71566	1	102.9209	1	-22.0018	1	2 1 3
17	Cu	2.55613	1	90.0003	1	-125.2645	1	2 1 3
18	Cu	2.55613	1	120.0002	1	-70.5289	1	2 1 3
19	Cu	2.55613	1	180.0000	1	0.0000	1	4 1 2
20	Cu	5.71566	1	102.9211	1	-48.5272	1	2 1 3

1. 系の作成

- 赤い「X」のカメラをクリックして視点を変える。
- Ctrl+C、Ctrl+Vと入力し、1回画面をクリックする(ドラッグしてはならない)。
- リストにおいて25番目の原子の行をクリックする。
- リスト下部左の枠(XYZのチェックの上)に25と表示されているのを確認する。

Winmostar 25 | Cu25 MASS=1,588.66 X=1.8075 Y=0.0000 Z=14.3074
 25-4-5-24 Leng=0.000 Ang=0.000 Dihed=0.000 Lper=0.000 Cu
 a=7.230 b=7.230 c=28.615 $\alpha=90.000$ $\beta=90.000$ $\gamma=90.000$
 Vol=1,495.7011 $\rho=1.7637\text{g/cm}^3$

AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMDK
 Winmostar

7	Cu	5.4224	1	1.8075	1	12.5000	1
8	Cu	5.4224	1	0.0000	1	14.3074	1
9	Cu	0.0000	1	3.6149	1	12.5000	1
10	Cu	0.0000	1	5.4224	1	14.3074	1
11	Cu	1.8075	1	5.4224	1	12.5000	1
12	Cu	1.8075	1	3.6149	1	14.3074	1
13	Cu	3.6149	1	3.6149	1	12.5000	1
14	Cu	3.6149	1	5.4224	1	14.3074	1
15	Cu	5.4224	1	5.4224	1	12.5000	1
16	Cu	5.4224	1	3.6149	1	14.3074	1
17	Cu	0.0000	1	0.0000	1	16.1149	1
18	Cu	1.8075	1	1.8075	1	16.1149	1
19	Cu	3.6149	1	0.0000	1	16.1149	1
20	Cu	5.4224	1	1.8075	1	16.1149	1
21	Cu	0.0000	1	3.6149	1	16.1149	1
22	Cu	1.8075	1	5.4224	1	16.1149	1
23	Cu	3.6149	1	3.6149	1	16.1149	1
24	Cu	5.4224	1	5.4224	1	16.1149	1
25	Cu	1.8075	1	0.0000	1	14.3074	1

25 | 75 | 0 | 14.3074
 XYZ | 1 | 1 | 1

I. 系の作成

- 画面右下の「XYZ」にチェックが入った状態にする。
- 25番目の原子のZ座標を「18」に変更する。
- 続けて原子種選択のプルダウンで“Ag 47”を選び[Chg]ボタンを押す。

Winmostar 25 AgCu24 MASS=1,632.98 X=1.8075 Y=0.0000 Z=18.00
25-4-8-24 Leng=3.693 Ang=89.999 Dihed=-71.565 Lper=5.422 Ag
Vol=1,495.7011 ρ=1.8129g/cm³

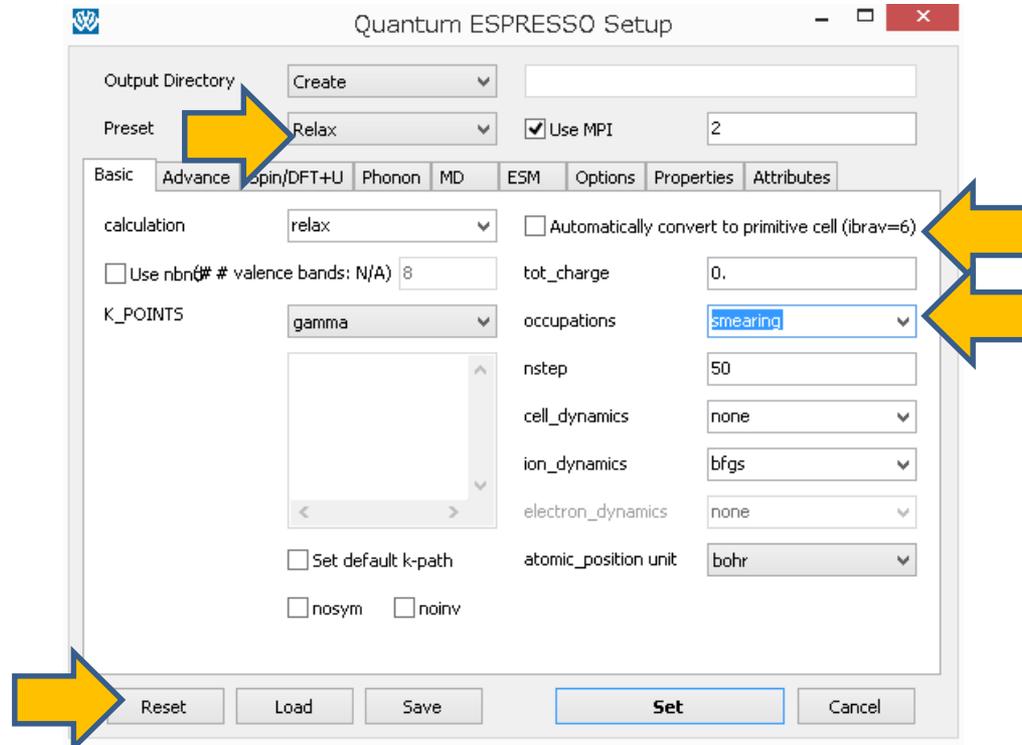
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK
Winmostar

7	Cu	5.4224	1	1.8075	1	12.5000	1
8	Cu	5.4224	1	0.0000	1	14.3074	1
9	Cu	0.0000	1	3.6149	1	12.5000	1
10	Cu	0.0000	1	5.4224	1	14.3074	1
11	Cu	1.8075	1	5.4224	1	12.5000	1
12	Cu	1.8075	1	3.6149	1	14.3074	1
13	Cu	3.6149	1	3.6149	1	12.5000	1
14	Cu	3.6149	1	5.4224	1	14.3074	1
15	Cu	5.4224	1	5.4224	1	12.5000	1
16	Cu	5.4224	1	3.6149	1	14.3074	1
17	Cu	0.0000	1	0.0000	1	16.1149	1
18	Cu	1.8075	1	1.8075	1	16.1149	1
19	Cu	3.6149	1	0.0000	1	16.1149	1
20	Cu	5.4224	1	1.8075	1	16.1149	1
21	Cu	0.0000	1	3.6149	1	16.1149	1
22	Cu	1.8075	1	5.4224	1	16.1149	1
23	Cu	3.6149	1	3.6149	1	16.1149	1
24	Cu	5.4224	1	5.4224	1	16.1149	1
25	Ag	1.8075	1	0.0000	1	18.0000	1

25	Ag	1.8075	0	18
<input checked="" type="checkbox"/>	XYZ	1	1	1

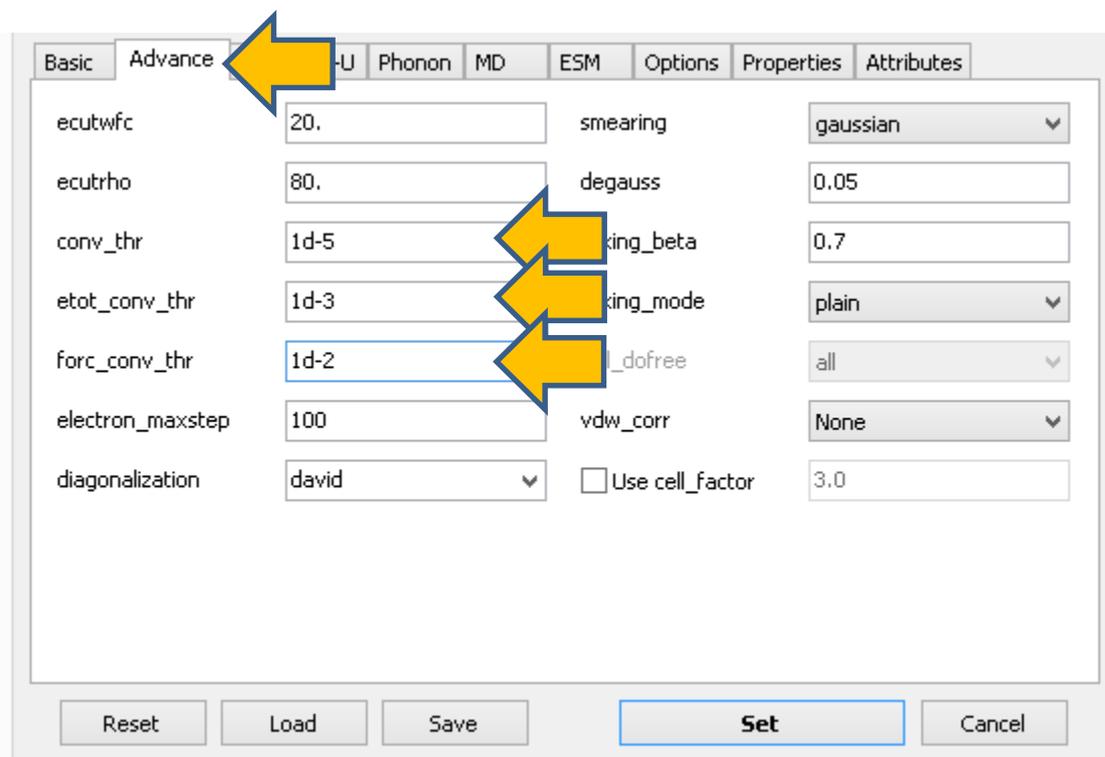
II. 始状態の構造最適化

- [固体]-[Quantum ESPRESSO]-[キーワード設定]をクリックし、まず[Reset]ボタンをクリックする。
- [Preset]にRelaxを選択する。
- [Basic]タブの[Automatically convert to primitive cell]のチェックを外し [occupations]を[smearing]に変更する。



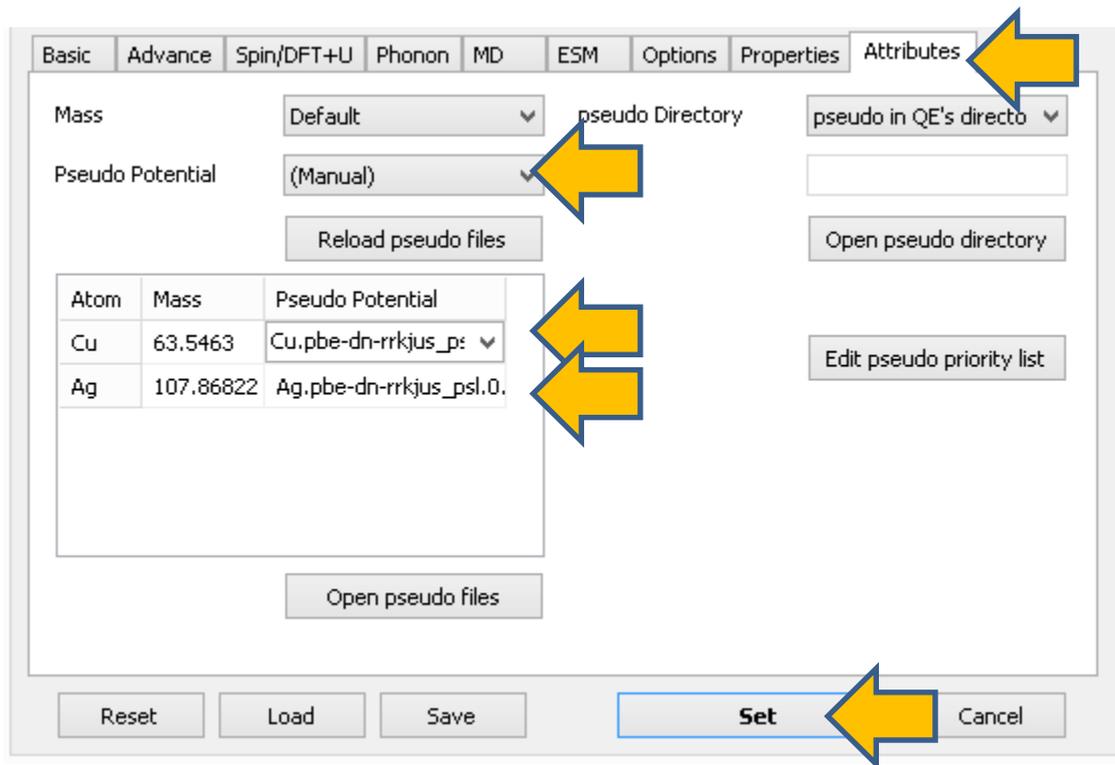
II. 始状態の構造最適化

- [Advance]タブの「conv_thr」を「1d-5」、「etot_conv_thr」を「1d-3」、「forc_conv_thr」を「1d-2」に変更する。



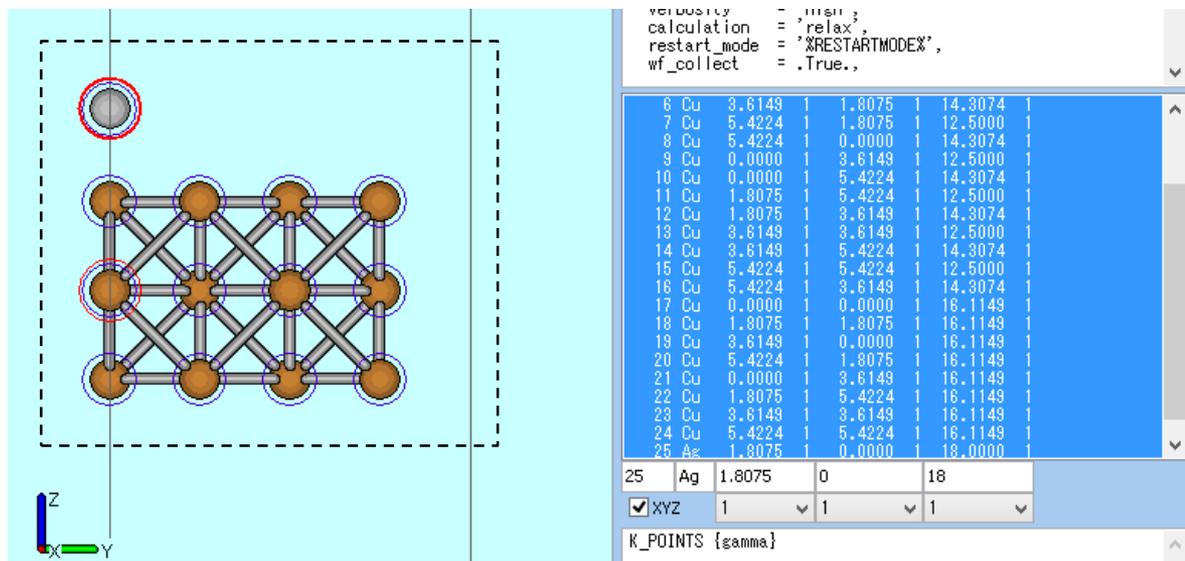
II. 始状態の構造最適化

- [Attributes]タブの共通の[Pseudo Potential]を(Manual)に設定し、各原子種の[Pseudo Potential]を「Cu」は「Cu.pbe-dn-rrkjus_psl.0.2.UPF」、「Ag」は「Ag.pbe-dn-rrkjus_psl.0.1.UPF」に設定し、[Set]ボタンを押す。
- 上記のpseudoファイルがない場合はP.3の手順で入手する。



II. 始状態の構造最適化

- メインウィンドウ上で全ての原子をCtrl+ドラッグで選択する。
- [編集]-[原子]-[最適化フラグ変更]をクリックし、SolverにQuantum ESPRESSOを選択し、X, Y, Z coordinateすべてをFixedに変更し[OK]ボタンを押す。



```

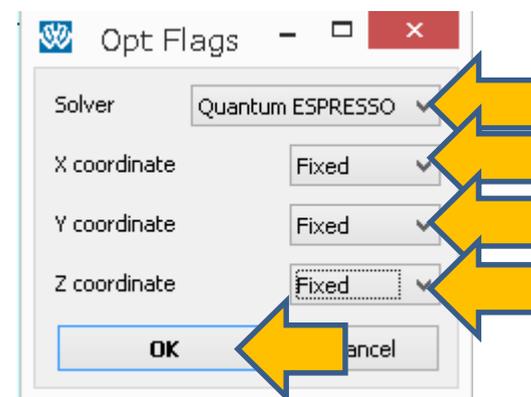
  verbosity = 'high';
  calculation = 'relax';
  restart_mode = '$RESTARTMODEX';
  wf_collect = .True.;
  
```

6	Cu	3.6149	1.8075	14.3074	1
7	Cu	5.4224	1.8075	12.5000	1
8	Cu	5.4224	0.0000	14.3074	1
9	Cu	0.0000	3.6149	12.5000	1
10	Cu	0.0000	5.4224	14.3074	1
11	Cu	1.8075	5.4224	12.5000	1
12	Cu	1.8075	3.6149	14.3074	1
13	Cu	3.6149	3.6149	12.5000	1
14	Cu	3.6149	5.4224	14.3074	1
15	Cu	5.4224	5.4224	12.5000	1
16	Cu	5.4224	3.6149	14.3074	1
17	Cu	0.0000	0.0000	16.1149	1
18	Cu	1.8075	1.8075	16.1149	1
19	Cu	3.6149	0.0000	16.1149	1
20	Cu	5.4224	1.8075	16.1149	1
21	Cu	0.0000	3.6149	16.1149	1
22	Cu	1.8075	5.4224	16.1149	1
23	Cu	3.6149	3.6149	16.1149	1
24	Cu	5.4224	5.4224	16.1149	1
25	Ag	1.8075	0.0000	18.0000	1

25 Ag 1.8075 0 18

XYZ 1 1 1

K_POINTS {gamma}



Opt Flags

Solver: Quantum ESPRESSO

X coordinate: Fixed

Y coordinate: Fixed

Z coordinate: Fixed

OK Cancel

II. 始状態の構造最適化

- メインウィンドウ右のリストで再度25番目の原子の行を選択し、その下のZ成分の最適化フラグを0(固定)から1(可変)に変更する。
- [固体]-[Quantum ESPRESSO]-[Quantum ESPRESSO実行]をクリックし、ファイル名はcu_slab_first.pwinとして保存し計算を開始する。(25番目の原子のZ成分だけが動く構造最適化計算が走る)

Winmostar 25 AgCu24 MASS=1,632.98 X=1.8075 Y=0.0000 Z=18.000
 25-17-25-19 Leng=2.612 Ang=0.000 Dihed=0.000 Lper=0.000 Ag
 a=7.230 b=7.230 c=28.615 $\alpha=90.000$ $\beta=90.000$ $\gamma=90.000$
 Vol=1,495.7011 $\rho=1.8129\text{g/cm}^3$

```

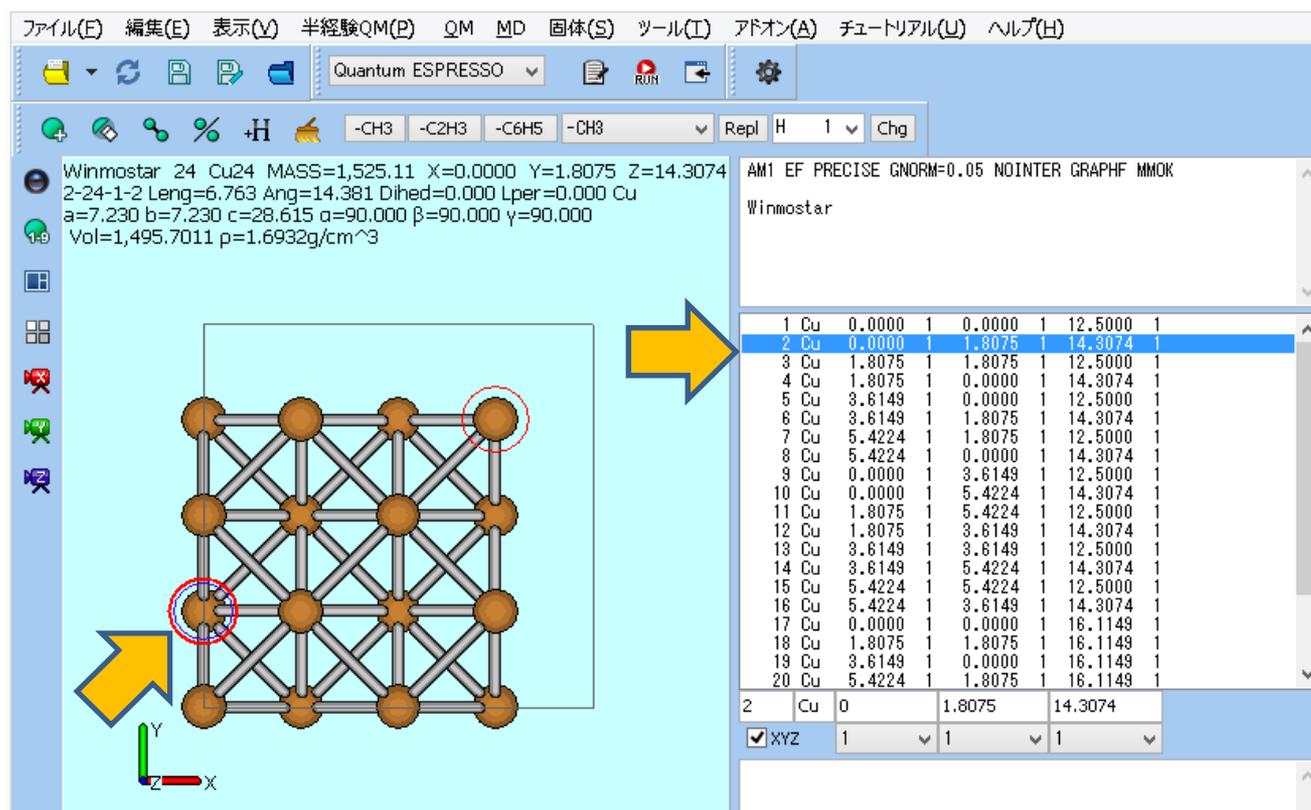
&control
  prefix      = 'wm',
  outdir      = '%WORKDIR%',
  verbosity   = 'high',
  calculation = 'relax',
  restart_mode = '%RESTARTMODE%',
  wf_collect  = .True.,
  
```

7	Cu	5.4224	0	1.8075	0	12.5000	0
8	Cu	5.4224	0	0.0000	0	14.3074	0
9	Cu	0.0000	0	3.6149	0	12.5000	0
10	Cu	0.0000	0	5.4224	0	14.3074	0
11	Cu	1.8075	0	5.4224	0	12.5000	0
12	Cu	1.8075	0	3.6149	0	14.3074	0
13	Cu	3.6149	0	3.6149	0	12.5000	0
14	Cu	3.6149	0	5.4224	0	14.3074	0
15	Cu	5.4224	0	5.4224	0	12.5000	0
16	Cu	5.4224	0	3.6149	0	14.3074	0
17	Cu	0.0000	0	0.0000	0	16.1149	0
18	Cu	1.8075	0	1.8075	0	16.1149	0
19	Cu	3.6149	0	0.0000	0	16.1149	0
20	Cu	5.4224	0	1.8075	0	16.1149	0
21	Cu	0.0000	0	3.6149	0	16.1149	0
22	Cu	1.8075	0	5.4224	0	16.1149	0
23	Cu	3.6149	0	3.6149	0	16.1149	0
24	Cu	5.4224	0	5.4224	0	16.1149	0
25	Ag	1.8075	0	0.0000	0	18.0000	1

25 Ag 1.8075 0 18
 XYZ 0 0 1
 K_POINTS {gamma}

III. 終状態の構造最適化

- メインウィンドウにて再度cu_slab.cifを開く。
- 画面右のリストから2番目の原子を選択する。
- 画面左でその原子をCtrl+左クリックし青丸で選択された状態にする。



The screenshot shows the Quantum ESPRESSO software interface. The main window displays a 3D model of a copper slab structure. A yellow arrow points to the second atom in the structure, which is highlighted with a red circle. Another yellow arrow points from this atom to the corresponding entry in the atom list on the right.

The atom list on the right shows the following data:

Atom	Element	x	y	z	Occupancy
1	Cu	0.0000	1	0.0000	1
2	Cu	0.0000	1	14.3074	1
3	Cu	1.8075	1	1.8075	1
4	Cu	1.8075	1	0.0000	1
5	Cu	3.6149	1	0.0000	1
6	Cu	3.6149	1	1.8075	1
7	Cu	5.4224	1	1.8075	1
8	Cu	5.4224	1	0.0000	1
9	Cu	0.0000	1	3.6149	1
10	Cu	0.0000	1	5.4224	1
11	Cu	1.8075	1	5.4224	1
12	Cu	1.8075	1	3.6149	1
13	Cu	3.6149	1	3.6149	1
14	Cu	3.6149	1	5.4224	1
15	Cu	5.4224	1	5.4224	1
16	Cu	5.4224	1	3.6149	1
17	Cu	0.0000	1	0.0000	1
18	Cu	1.8075	1	1.8075	1
19	Cu	3.6149	1	0.0000	1
20	Cu	5.4224	1	1.8075	1

The interface also shows the following information in the top left:

```

Winmostar 24 Cu24 MASS=1,525.11 X=0.0000 Y=1.8075 Z=14.3074
2-24-1-2 Leng=6.763 Ang=14.381 Dihed=0.000 Lper=0.000 Cu
a=7.230 b=7.230 c=28.615 α=90.000 β=90.000 γ=90.000
Vol=1,495.7011 ρ=1.6932g/cm³
  
```

III. 終状態の構造最適化

- 赤い「X」のカメラをクリックして視点を変える。
- Ctrl+C、Ctrl+Vと入力し、1回画面をクリックする(ドラッグしてはならない)。
- リストにおいて25番目の原子の行をクリックする。
- リスト下部左の枠(XYZのチェックの上)に25と表示されているのを確認する。

Winmostar 25 Cu25 MASS=1,588.66 X=0.0000 Y=1.8075 Z=14.3074
 25-2-24-1 Leng=0.000 Ang=0.000 Dihed=0.000 Lper=0.000 Cu
 a=7.230 b=7.230 c=28.615 $\alpha=90.000$ $\beta=90.000$ $\gamma=90.000$
 Vol=1,495.7011 $\rho=1.7637\text{g/cm}^3$

AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK
 Winmostar

6	Cu	3.6149	1	1.8075	1	14.3074	1
7	Cu	5.4224	1	1.8075	1	12.5000	1
8	Cu	5.4224	1	0.0000	1	14.3074	1
9	Cu	0.0000	1	3.6149	1	12.5000	1
10	Cu	0.0000	1	5.4224	1	14.3074	1
11	Cu	1.8075	1	5.4224	1	12.5000	1
12	Cu	1.8075	1	3.6149	1	14.3074	1
13	Cu	3.6149	1	3.6149	1	12.5000	1
14	Cu	3.6149	1	5.4224	1	14.3074	1
15	Cu	5.4224	1	5.4224	1	12.5000	1
16	Cu	5.4224	1	3.6149	1	14.3074	1
17	Cu	0.0000	1	0.0000	1	16.1149	1
18	Cu	1.8075	1	1.8075	1	16.1149	1
19	Cu	3.6149	1	0.0000	1	16.1149	1
20	Cu	5.4224	1	1.8075	1	16.1149	1
21	Cu	0.0000	1	3.6149	1	16.1149	1
22	Cu	1.8075	1	5.4224	1	16.1149	1
23	Cu	3.6149	1	3.6149	1	16.1149	1
24	Cu	5.4224	1	5.4224	1	16.1149	1
25	Cu	0.0000	1	1.8075	1	14.3074	1

25 1.8075 14.3074
 XYZ 1 1 1

III. 終状態の構造最適化

- 画面右下の「XYZ」にチェックが入った状態にする。
- 25番目の原子のZ座標を「18」に変更する。
- 続けて原子種選択のプルダウンで“Ag 47”を選び[Chg]ボタンを押す。

Winmostar 25 AgCu24 MASS=1,632.98 X=0.0000 Y=1.8075 Z=18.0000
 25-2-24-1 Leng=3.693 Ang=74.499 Dihed=134.420 Lper=1.504 Ag
 a=7.230 b=7.230 c=28.615 $\alpha=90.000$ $\beta=90.000$ $\gamma=90.000$
 Vol=1,495.7011 $\rho=1.8129\text{g/cm}^3$

7	Cu	5.4224	1	1.8075	1	12.5000	1
8	Cu	5.4224	1	0.0000	1	14.3074	1
9	Cu	0.0000	1	3.6149	1	12.5000	1
10	Cu	0.0000	1	5.4224	1	14.3074	1
11	Cu	1.8075	1	5.4224	1	12.5000	1
12	Cu	1.8075	1	3.6149	1	14.3074	1
13	Cu	3.6149	1	3.6149	1	12.5000	1
14	Cu	3.6149	1	5.4224	1	14.3074	1
15	Cu	5.4224	1	5.4224	1	12.5000	1
16	Cu	5.4224	1	3.6149	1	14.3074	1
17	Cu	0.0000	1	0.0000	1	16.1149	1
18	Cu	1.8075	1	1.8075	1	16.1149	1
19	Cu	3.6149	1	0.0000	1	16.1149	1
20	Cu	5.4224	1	1.8075	1	16.1149	1
21	Cu	0.0000	1	3.6149	1	16.1149	1
22	Cu	1.8075	1	5.4224	1	16.1149	1
23	Cu	3.6149	1	3.6149	1	16.1149	1
24	Cu	5.4224	1	5.4224	1	16.1149	1
25	Ag	0.0000	1	1.8075	1	18.0000	1

25 Ag 0 1.8075 18

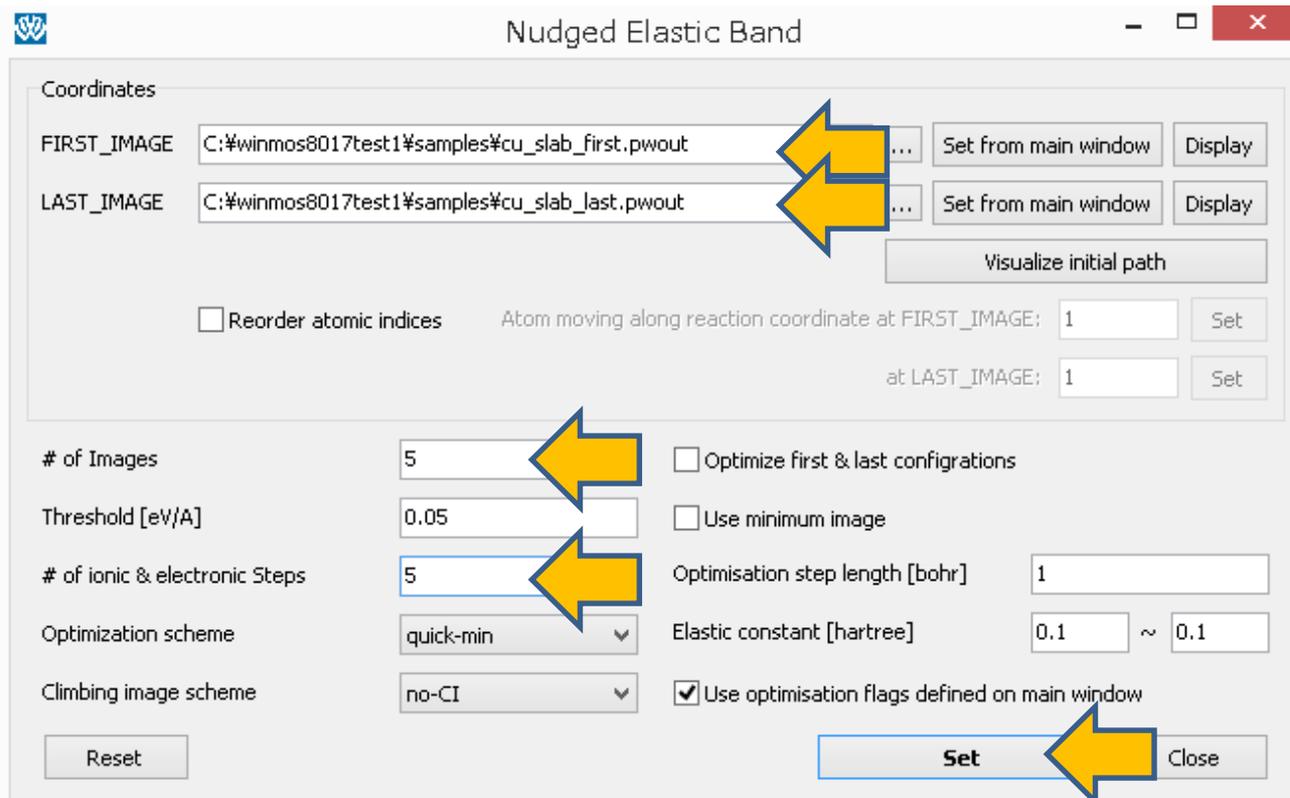
XYZ 1 1 1

III. 終状態の構造最適化

- P.9-13の手順を繰り返し構造最適化計算を実施する。しかし、ファイル名はcu_slab_last.pwinとする。

IV. NEB計算

- [固体]-[Quantum ESPRESSO]-[キーワード設定 (NEB)]をクリックする。
- FIRST_IMAGEの欄に計算終了後のcu_slab_first.pwoutを、LAST_IMAGEの欄にcu_slab_last.pwoutをドラッグアンドドロップする。
- [# of Images]に5、[# of ionic & electronic steps]に5を入力し、[Set]ボタンを押す。



Nudged Elastic Band

Coordinates

FIRST_IMAGE C:\winmos8017test1\samples\cu_slab_first.pwout ... Set from main window Display

LAST_IMAGE C:\winmos8017test1\samples\cu_slab_last.pwout ... Set from main window Display

Visualize initial path

Reorder atomic indices Atom moving along reaction coordinate at FIRST_IMAGE: 1 Set

at LAST_IMAGE: 1 Set

of Images 5

Threshold [eV/A] 0.05

of ionic & electronic Steps 5

Optimization scheme quick-min

Climbing image scheme no-CI

Optimize first & last configurations

Use minimum image

Optimisation step length [bohr] 1

Elastic constant [hartree] 0.1 ~ 0.1

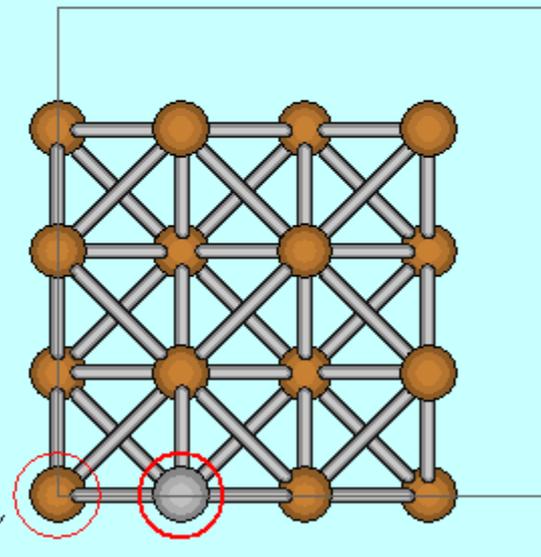
Use optimisation flags defined on main window

Reset Set Close

IV. NEB計算

- メイン画面右のリストで25番目の原子の行を選択し、X,Y成分の最適化フラグも1(可変)に設定する。(それ以外の粒子はX,Y,Z全成分0にしておく)
- メイン画面右上にQEのキーワードが設定されていない場合は[固体]-[Quantum ESPERSSO]-[キーワード設定]を開き、構造最適化時と同等の設定をする。

Winmostar 25 AgCu24 MASS=1,632.98 X=1.8075 Y=0.0000 Z=18.09
 25-1-25-1 Leng=5.882 Ang=0.000 Dihed=0.000 Lper=0.000 Ag
 a=7.230 b=7.230 c=28.615 $\alpha=90.000$ $\beta=90.000$ $\gamma=90.000$
 Vol=1,495.7009 $\rho=1.8129\text{g/cm}^3$



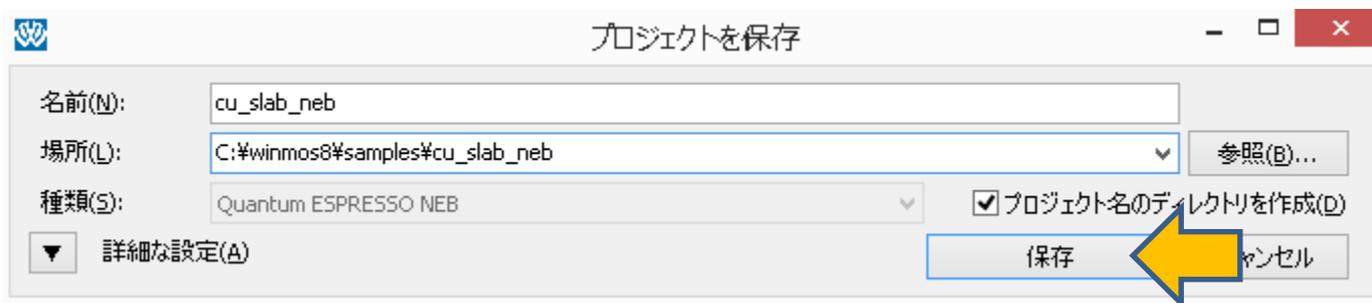
```
&control
prefix      = 'wm',
outdir      = '%WORKDIR%',
verbosity   = 'high',
calculation = 'relax',
restart_mode = '%RESTARTMODE%',
wf_collect  = .True.,
```

6	Cu	3.6149	0	1.8074	0	14.3075	0
7	Cu	5.4224	0	1.8074	0	12.5000	0
8	Cu	5.4224	0	0.0000	0	14.3075	0
9	Cu	0.0000	0	3.6149	0	12.5000	0
10	Cu	0.0000	0	5.4224	0	14.3075	0
11	Cu	1.8074	0	5.4224	0	12.5000	0
12	Cu	1.8074	0	3.6149	0	14.3075	0
13	Cu	3.6149	0	3.6149	0	12.5000	0
14	Cu	3.6149	0	5.4224	0	14.3075	0
15	Cu	5.4224	0	5.4224	0	12.5000	0
16	Cu	5.4224	0	3.6149	0	14.3075	0
17	Cu	0.0000	0	0.0000	0	16.1149	0
18	Cu	1.8074	0	1.8074	0	16.1149	0
19	Cu	3.6149	0	0.0000	0	16.1149	0
20	Cu	5.4224	0	1.8074	0	16.1149	0
21	Cu	0.0000	0	3.6149	0	16.1149	0
22	Cu	1.8074	0	5.4224	0	16.1149	0
23	Cu	3.6149	0	3.6149	0	16.1149	0
24	Cu	5.4224	0	5.4224	0	16.1149	0
25	Ag	1.8075	1	0.0000	1	18.0969	1

25	Ag	1.8075	0		18.0969
<input checked="" type="checkbox"/>	XYZ	1	1	1	

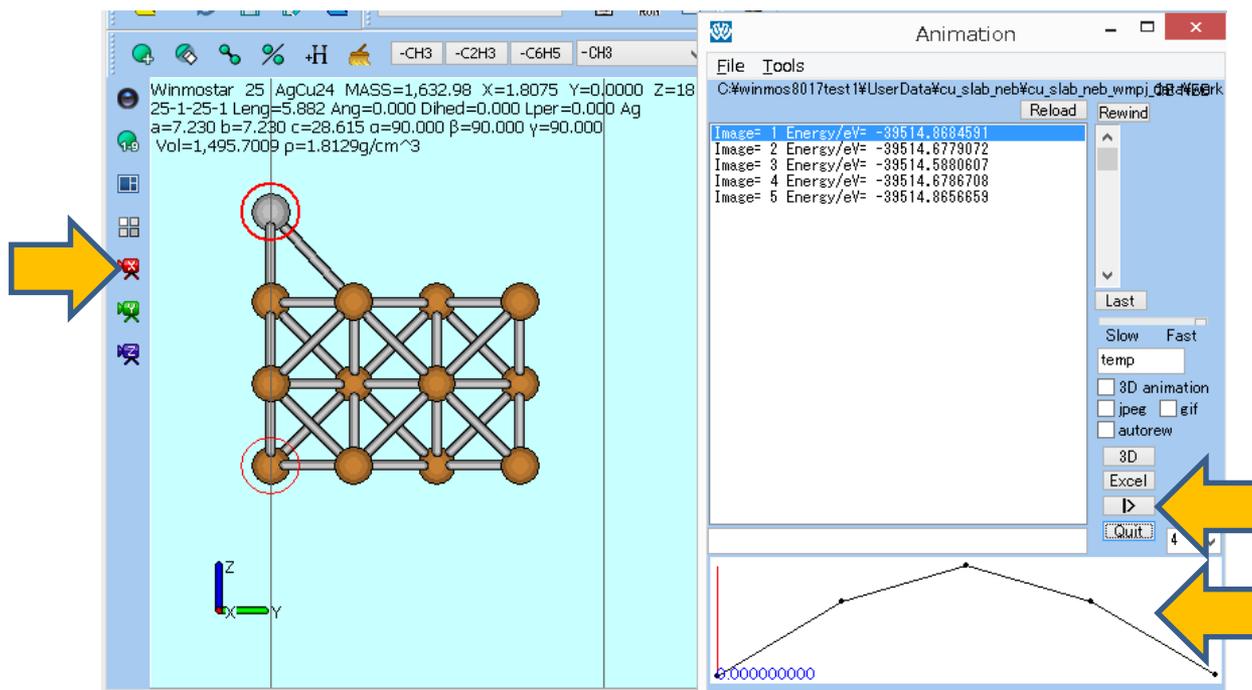
IV. NEB計算

- [固体]-[Quantum ESPRESSO]-[NEB実行]をクリックし、[プロジェクトを保存]ウインドウで[名前]にcu_slab_nebと入力し、[保存]ボタンをクリックすると計算が開始される。
- ※ リモートジョブの場合は補足を参照する。



IV. NEB計算

- 計算終了後、[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[遷移状態 (NEB)]をクリックし、デフォルトで選択される2つのファイルを開く。(メインウィンドウで他のファイルを開いていた場合は、計算開始時に保存されたneb.inを一旦開く)
- メインウィンドウで赤いX軸のカメラをクリックする。
- Animationウィンドウの再生ボタン(|>)をクリックすると各Imageの原子配置を確認できる。各ImageのエネルギーもAnimationウィンドウ下部で確認できる。



補足 リモートジョブ

- [固体]-[リモートジョブ投入]をクリックする。
- リモートジョブ投入チュートリアルに従い設定を行う。
[https://winmostar.com/jp/tutorials/V8/RemoteJob_tutorial_1\(Basic\)V8.pdf](https://winmostar.com/jp/tutorials/V8/RemoteJob_tutorial_1(Basic)V8.pdf)
- [Program]にはqe_nebを選択、またはスクリプトをカスタマイズする場合にはqe_neb.inから始まる文字列を入力する。
- [sendsub]ボタンでファイル生成・転送・サブミットを行い、ジョブ終了後は[get]ボタンを押す。

Submit Job

Profile: New [New] [Copy] [Rename] [Delete]

Hostname: xxx.xxx.xxx.xxx Queue: PBS Timeout: 15 Port: 22 [Putty]

LoginID: hoge LocalID: sakamaki Key: [Browse]

Passwd: [View] IDdir: sakamaki Admin. mode: ON

Program: qe_neb RemoteDir: []

Method: []

Advance Server: OFF Test: sftp

[stat-a] [sendsub] [ls] [get] [qdel] [Import] [Quit] [Clear]