

Winmostar™ チュートリアル

Quantum ESPRESSO

Born-Oppenheimer MD

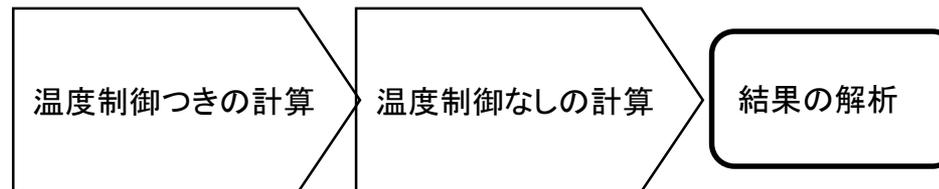
V8.025

株式会社クロスアビリティ

2018/07/21

概要

- メタン分子のBorn-Oppenheimer (BO) MD計算をごく短時間実行します。最初に300 Kで温度制御した状態で計算し、その後温度制御を外して計算し、エネルギー温度、アニメーションの可視化を行います。



注意点:

- 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に、精度を落とした設定を用います。
- 系のサイズも計算結果に影響を与えます。
- 平衡化に十分な時間をかけ、本計算も長時間実行することで再現性の高いデータを取得することができます。

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

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

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

メイン画面上にてCH₄分子をモデリングする。

1	C	0.00000	1	0.0000	1	0.0000	1	0	0	0
2	H	1.10000	1	0.0000	1	0.0000	1	1	0	0
3	H	1.10000	1	109.0000	1	0.0000	1	1	2	0
4	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	1	2	3
5	H	1.10000	1	109.0000	1	-120.0000	1	1	2	3

I. モデルの作成

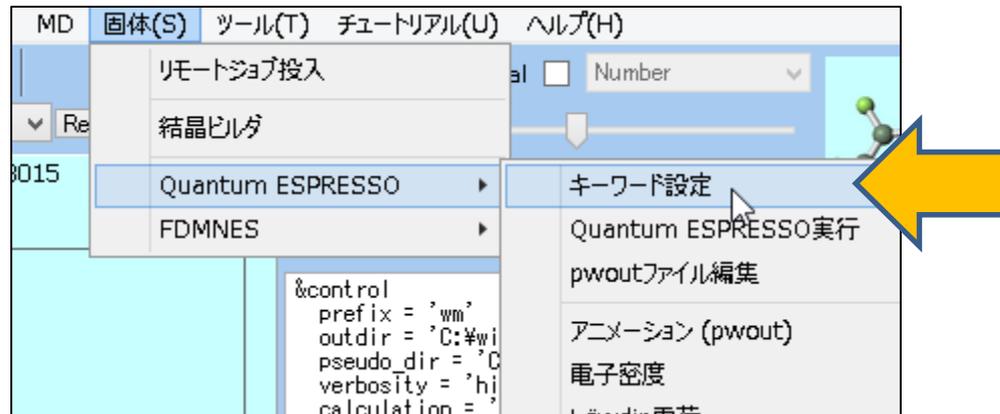
[編集]-[セルを作成/編集]にて[Create]をクリックし[OK]とすると、セルが作成される。

The image illustrates the steps to create a cell in the software:

- Step 1:** The 'Edit' menu is open, and the option 'セルを作成/編集' (Create/Edit Cell) is selected.
- Step 2:** The 'Create/Edit Cell' dialog box is shown. The 'Create' button is highlighted with a yellow arrow. The 'Distance [A]' field is set to 5. The 'Expand' section is also visible.
- Step 3:** The 'OK' button in the dialog box is highlighted with a yellow arrow. The final 3D model of the cell is shown in a window, with a yellow arrow pointing from the 'OK' button to it.

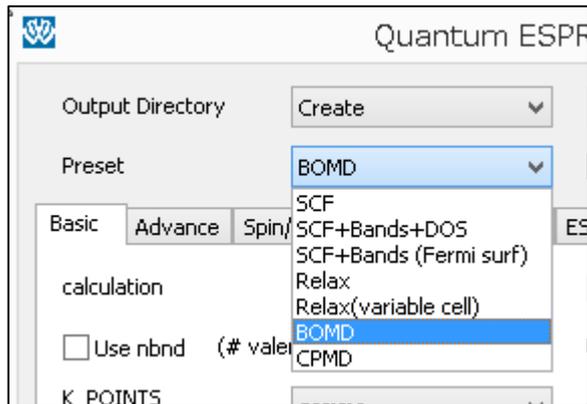
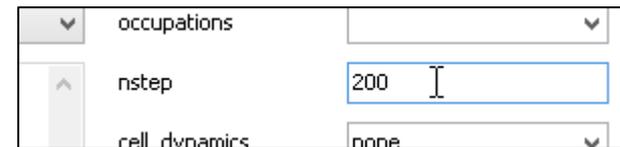
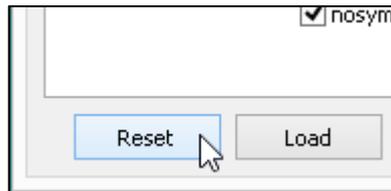
II. 温度制御つきのBOMD計算

「固体>Quantum ESPRESSO>キーワード設定」を選択する。



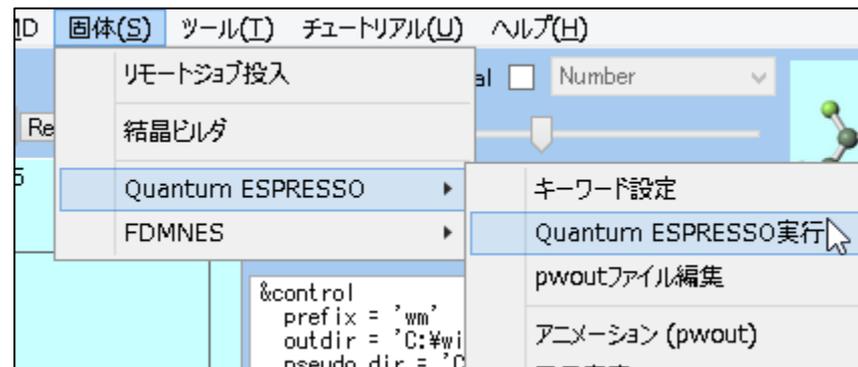
II. 温度制御つきのBOMD計算

一旦「Reset」ボタンをクリックし、「Preset」に「BOMD」、「nstep」に「200」を指定し、「Set」ボタンをクリックする。



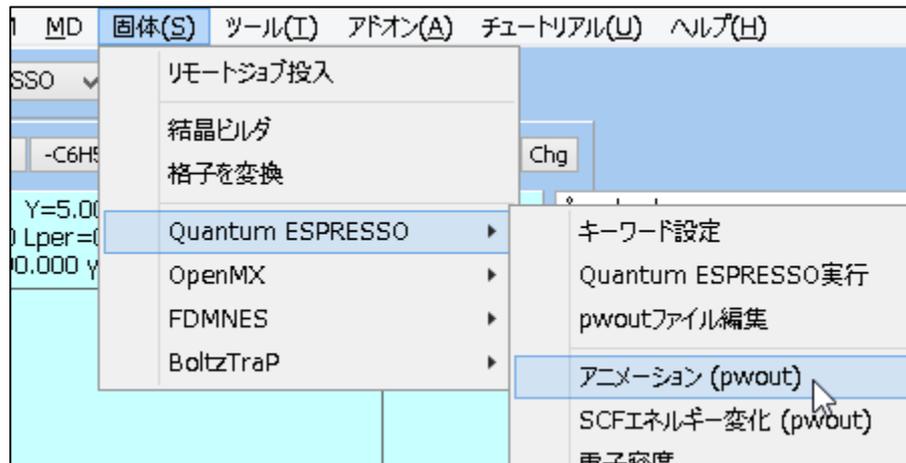
II. 温度制御付きのBOMD計算

「固体>Quantum ESPRESSO>Quantum ESPRESSO実行」を選択する。
保存するファイル名を聞かれるので、入力して保存すると、計算が開始される。



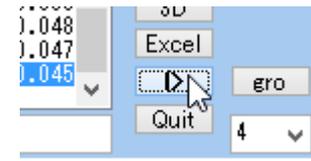
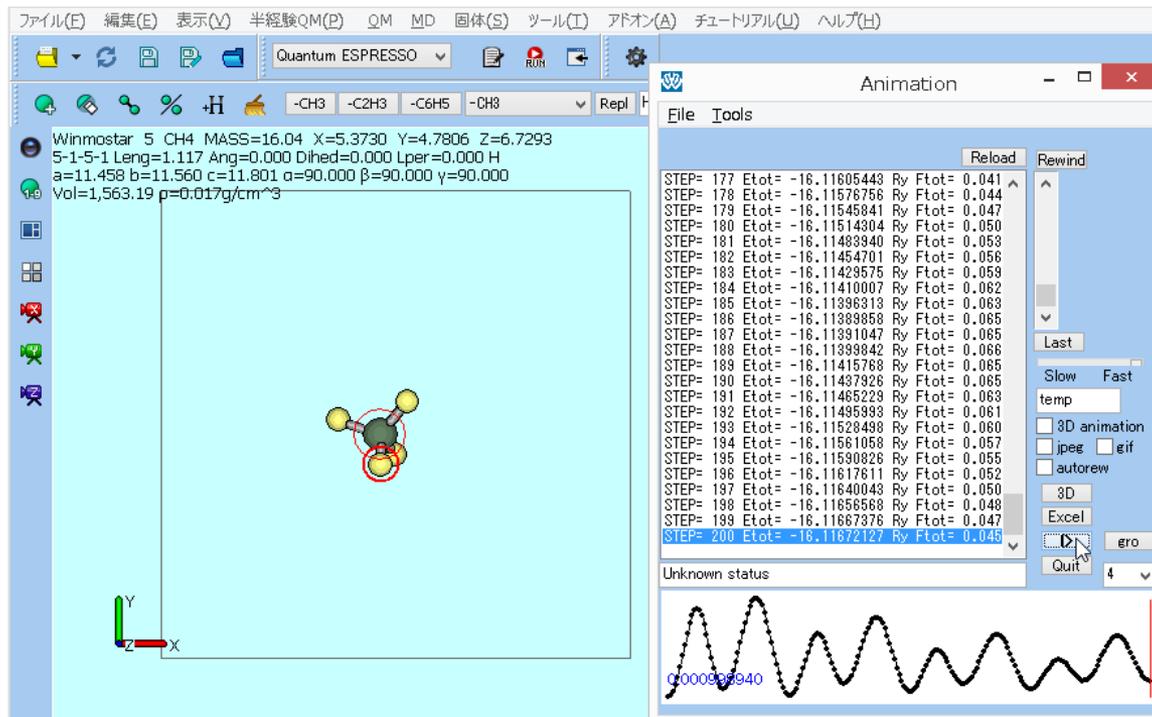
II. 温度制御付きのBOMD計算

計算終了後、「固体>Quantum ESPRESSO>アニメーション (pwout)」を選択し、デフォルトで選ばれるファイルを選択する。



II. 温度制御付きのBOMD計算

開いたAnimationウインドウの右下にあるPlayボタンをクリックするとアニメーションがメインウインドウに表示される。



II. 温度制御つきのBOMD計算

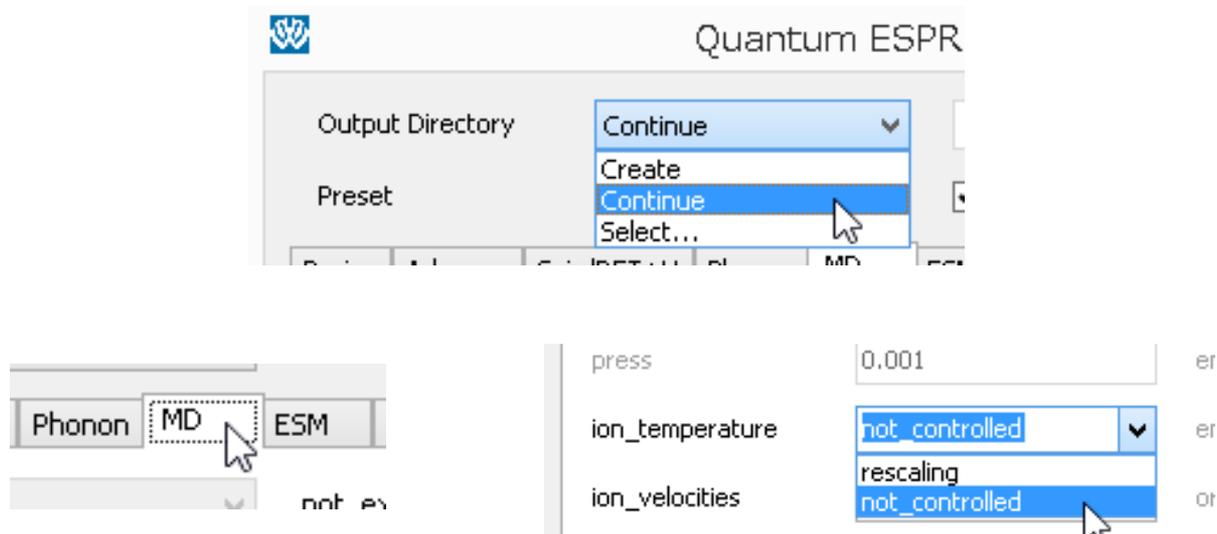
値のリストを見やすくするため、Animationウインドウを横に広げる。リストの12列目にはTemp(温度)が表示され、300 K前後で推移していることを確認する。Animationウインドウ右下のプルダウンから「12」を選択すると、Animationウインドウ下部に温度の時間変化が表示される。300 Kから外れると温度が制御されジャンプしていることがわかる。

The screenshot shows the Animation software interface. On the left, there is a control panel with buttons for 'Excel', 'Quit', and a dropdown menu with '12' selected. The main window displays a table of simulation data for steps 177 to 200. The 12th column, 'Temp', shows values fluctuating around 300 K. Below the table, a graph plots the temperature over time, showing a sawtooth pattern where the temperature rises to a peak and then drops sharply, indicating control jumps. On the right side of the interface, a vertical list of temperature values is shown, with the current value 'Temp= 314.08142692 K' highlighted in blue.

STEP	Temp (K)
177	297.75067242
178	290.16732935
179	281.99055693
180	273.72549611
181	291.49854692
182	283.85965127
183	277.27659462
184	294.52430197
185	290.90408034
186	289.21738337
187	289.53011758
188	291.82684905
189	296.00965024
190	301.86093955
191	309.04610018
192	317.12365341
193	325.72515043
194	308.08276322
195	315.90331694
196	322.86987182
197	305.49207693
198	309.84887536
199	312.76352230
200	314.08142692

III. 温度制御なしのBOMD計算

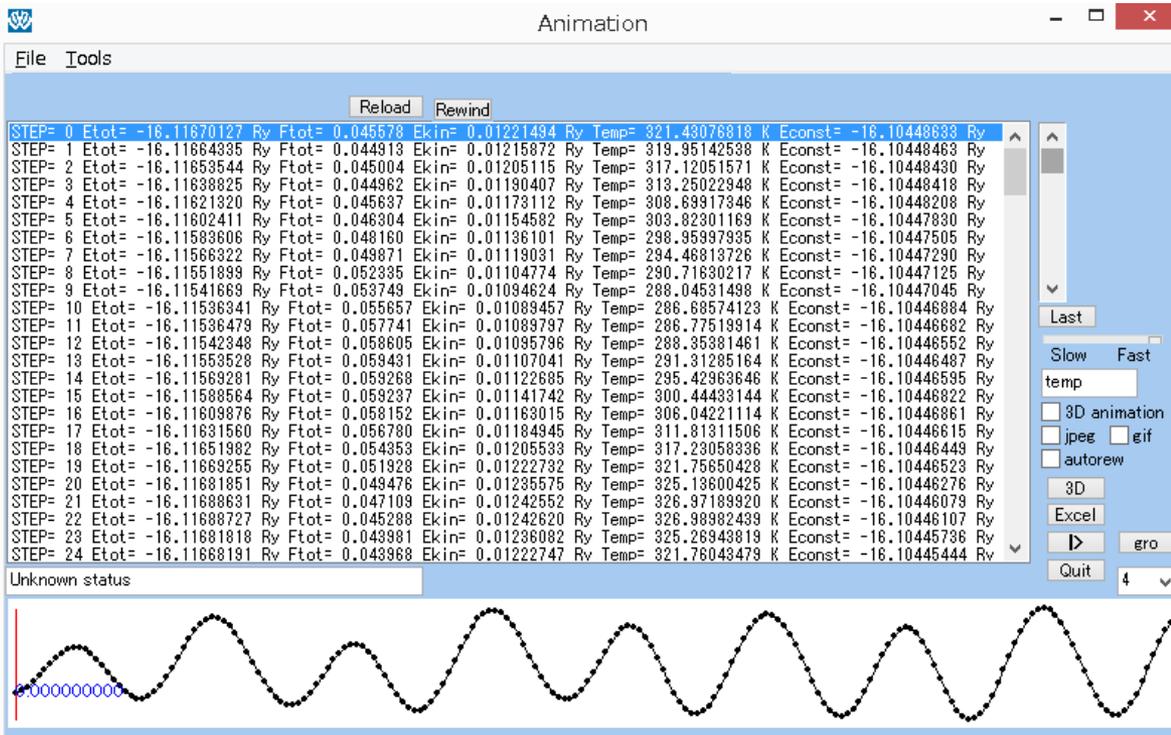
「固体>Quantum ESPRESSO>キーワード設定」にて、
「Output Directory」に「Continue」を指定し、「MD」タブに移動した後、
「ion_temperature」に「not_controlled」を指定し、「Set」をクリックする。
その後「固体>Quantum ESPRESSO>Quantum ESPRESSO実行」から
計算を実施する。



III. 温度制御なしのBOMD計算

計算終了後、「固体>Quantum ESPRESSO>アニメーション (pwout)」を選択し、デフォルトで選ばれるファイルを選択する。

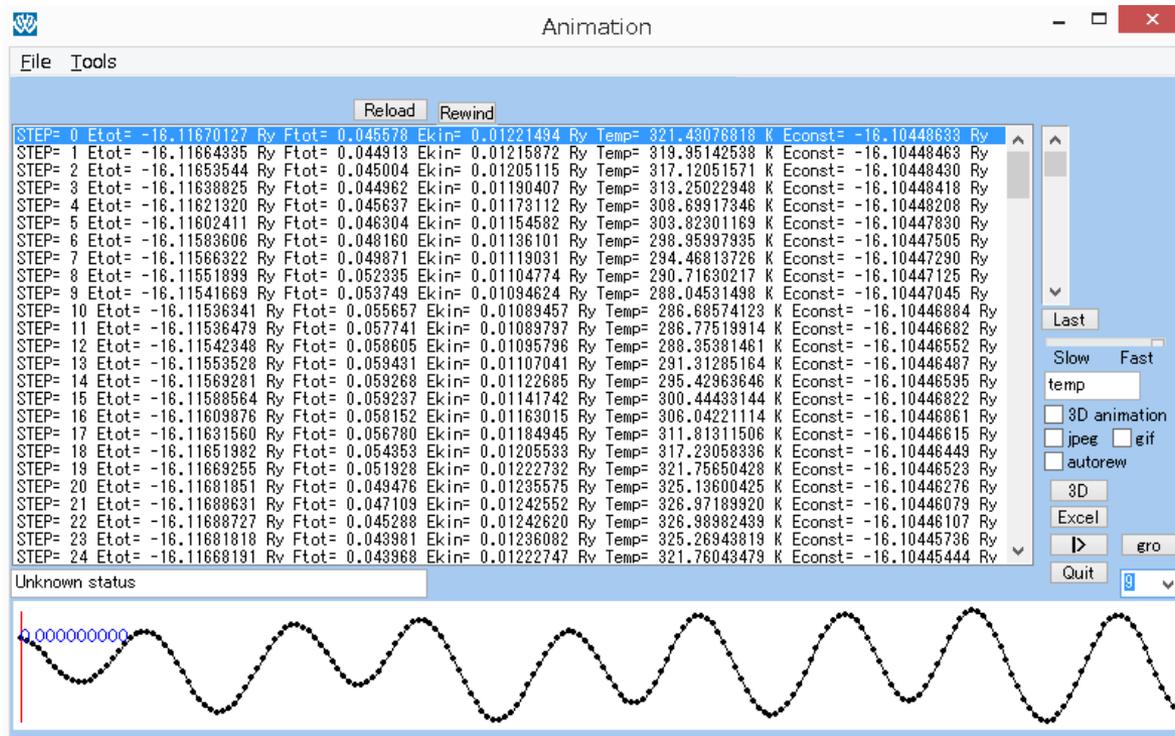
Animationウインドウの4列目のポテンシャルエネルギーが0.001 Ry程度の値の変化を持っていることを確認する。



0	Etot=	-16.11421777	Ry
1	Etot=	-16.11440380	Ry
2	Etot=	-16.11455545	Ry
3	Etot=	-16.11466885	Ry
4	Etot=	-16.11474141	Ry
5	Etot=	-16.11477425	Ry
6	Etot=	-16.11477146	Ry
7	Etot=	-16.11474037	Ry
8	Etot=	-16.11469396	Ry
9	Etot=	-16.11464383	Ry
10	Etot=	-16.11460472	Ry
11	Etot=	-16.11459226	Ry
12	Etot=	-16.11461751	Ry
13	Etot=	-16.11468920	Ry
14	Etot=	-16.11481194	Ry
15	Etot=	-16.11498396	Ry
16	Etot=	-16.11519813	Ry
17	Etot=	-16.11544289	Ry
18	Etot=	-16.11569993	Ry
19	Etot=	-16.11594933	Ry
20	Etot=	-16.11617147	Ry
21	Etot=	-16.11634603	Ry
22	Etot=	-16.11645640	Ry
23	Etot=	-16.11649045	Ry
24	Etot=	-16.11644023	Ry

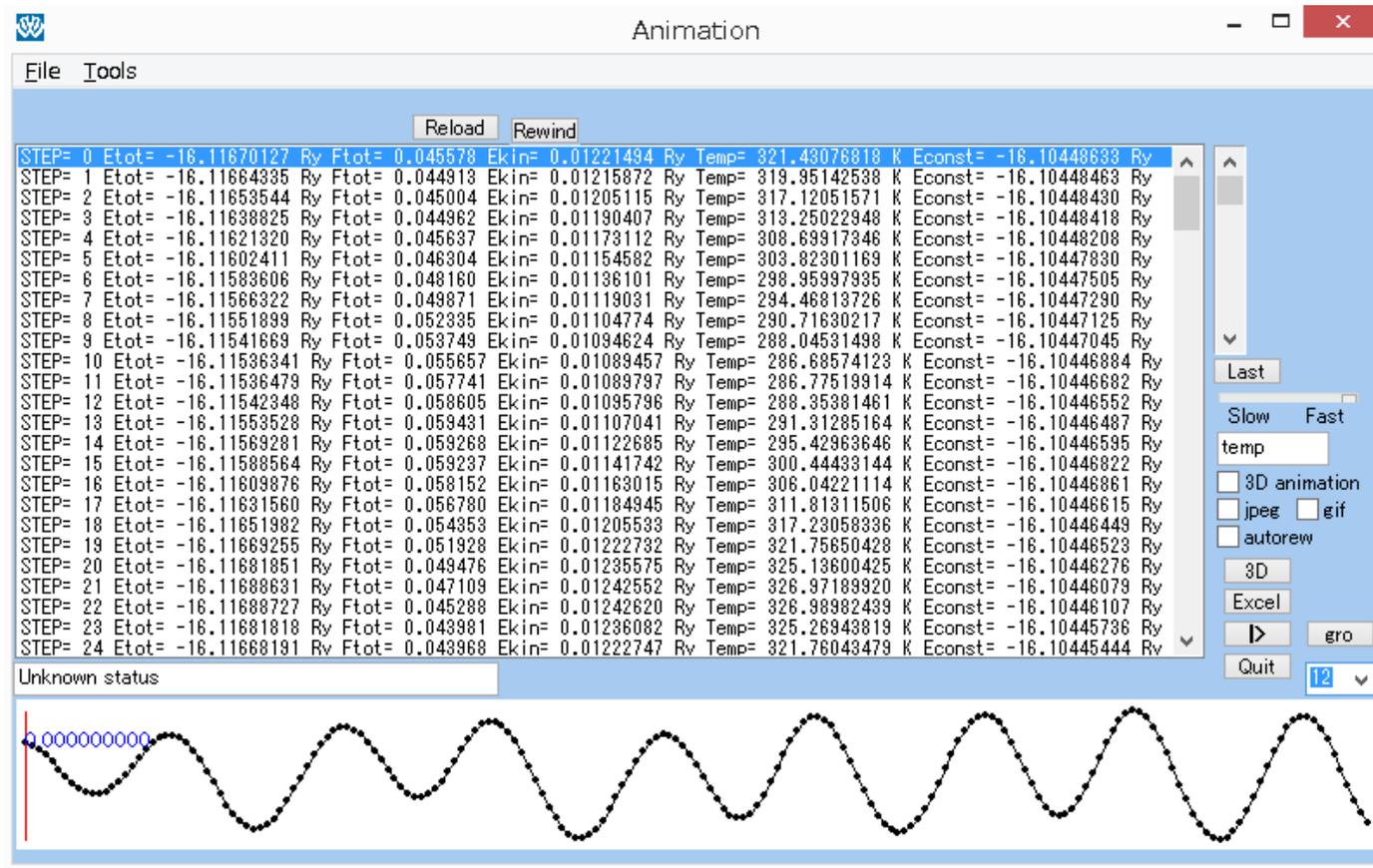
III. 温度制御なしのBOMD計算

Animationウインドウの右下のプルダウンで9を選択し運動エネルギー(Ekin)を表示し、全エネルギー(運動エネルギー+ポテンシャルエネルギー)が保存するように、運動エネルギーがポテンシャルエネルギーと逆方向に変動していることを確認する。実際に全エネルギーが保存する様子はこの先で確認する。



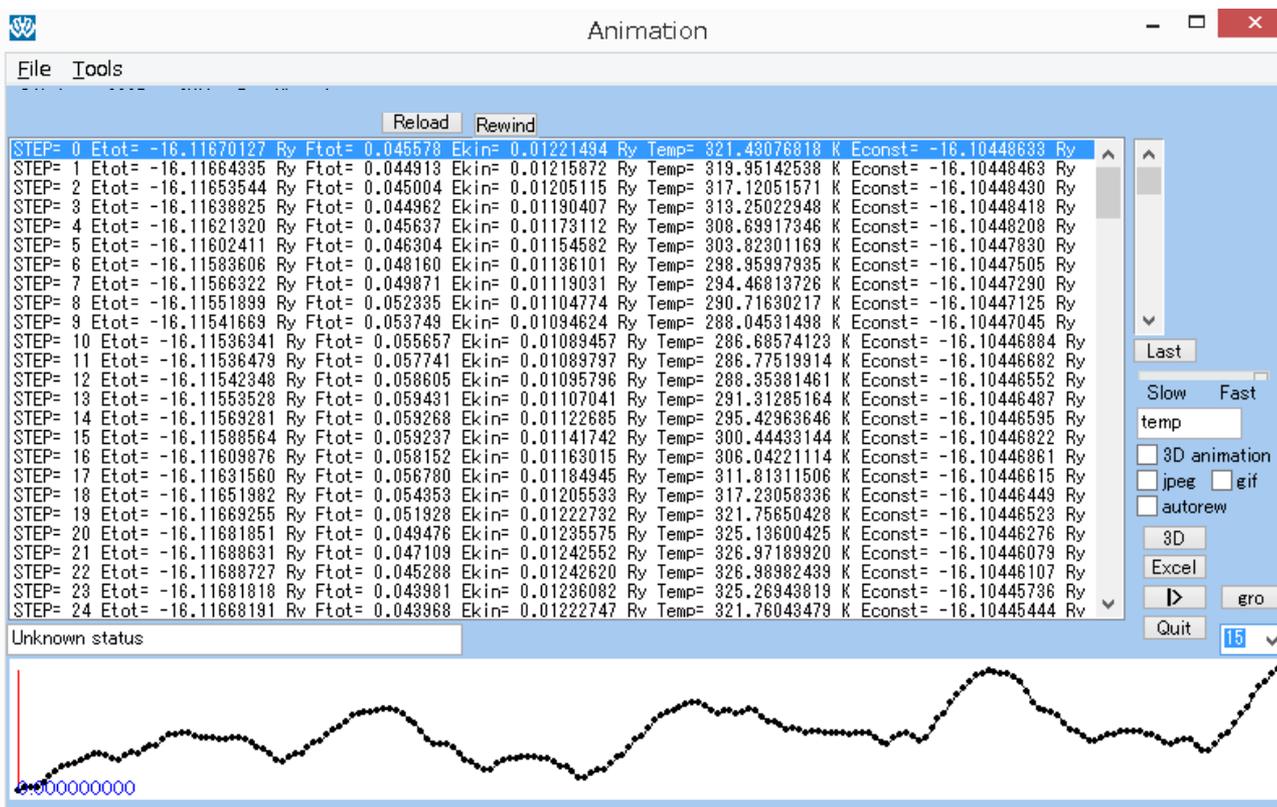
III. 温度制御なしのBOMD計算

Animationウインドウの右下のプルダウンで12を選択し温度を表示し、グラフから、先ほどの様に温度制御はされていないことを確認する。



III. 温度制御なしのBOMD計算

リストの15列目の全エネルギー(Econst)が、0.00001 Ry程度の変化で、ポテンシャルエネルギーよりも変化が小さいのを確認する。Animationウインドウの右下のプルダウンで15を選択して全エネルギーを表示し、保存している様子を確認する。



Econst= -16.10448633 Ry
Econst= -16.10448463 Ry
Econst= -16.10448430 Ry
Econst= -16.10448418 Ry
Econst= -16.10448208 Ry
Econst= -16.10447830 Ry
Econst= -16.10448208 Ry
Econst= -16.10447505 Ry
Econst= -16.10447290 Ry
Econst= -16.10447125 Ry
Econst= -16.10447045 Ry
Econst= -16.10446884 Ry
Econst= -16.10446882 Ry
Econst= -16.10446552 Ry
Econst= -16.10446487 Ry
Econst= -16.10446595 Ry
Econst= -16.10446822 Ry
Econst= -16.10446861 Ry
Econst= -16.10446815 Ry
Econst= -16.10446449 Ry
Econst= -16.10446523 Ry
Econst= -16.10446276 Ry
Econst= -16.10446079 Ry
Econst= -16.10446107 Ry
Econst= -16.10445736 Ry
Econst= -16.10445444 Ry

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!