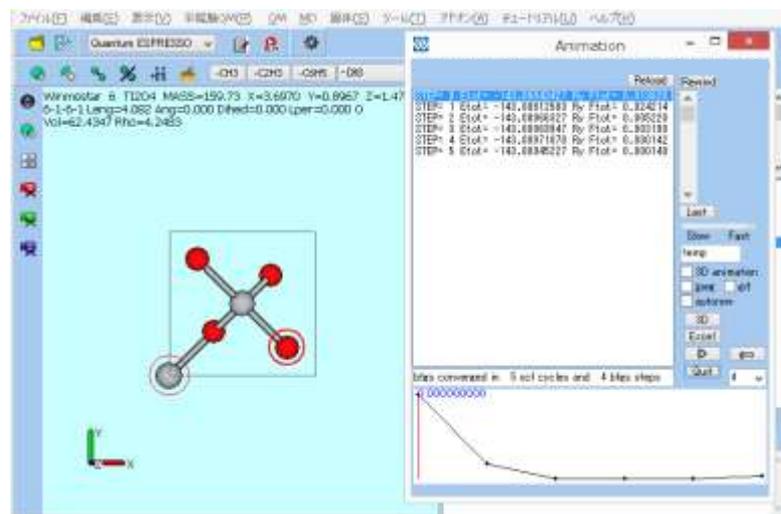


Winmostar™ チュートリアル
Quantum ESPRESSO
構造最適化計算
V8.002

株式会社クロスアビリティ
2018/7/27

概要

- 本チュートリアルでは、ルチル型TiO₂結晶の構造最適化計算を実施します。セルと原子核位置の両方を同時に最適化します。



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。
- 構造最適化計算中のDFT計算のパラメータは初期構造で調整されるため、最終構造が初期構造から大きく異なる場合は、最適化後の構造を用いて再度構造最適化計算を実行することをお勧めします。

動作環境設定

① Quantum ESPRESSO (以下、QE) インストールマニュアルに従い、QEをインストールする。 https://winmostar.com/jp/QE_install_manual_jp_win.pdf



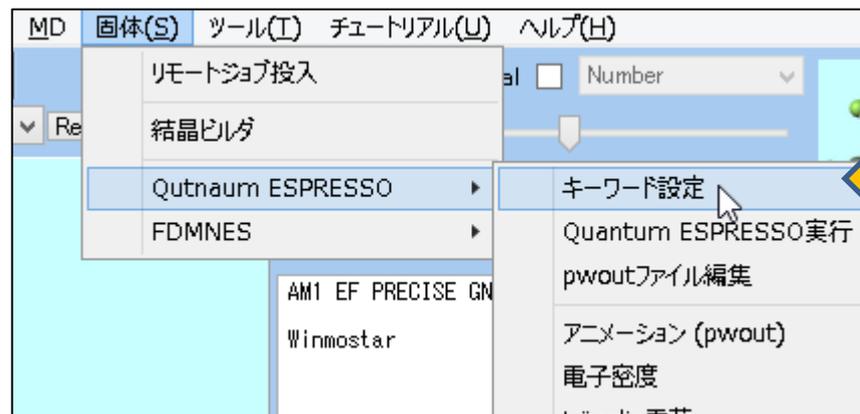
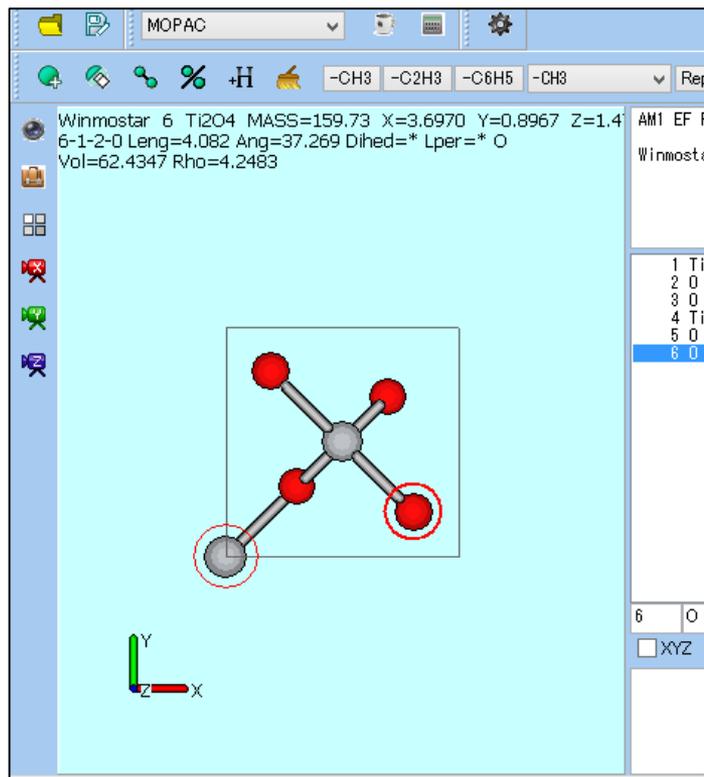
② 以下のURLより擬ポテンシャルファイルをダウンロードし、QEのインストールフォルダの下pseudoフォルダに入れWinmostarを再起動する。

<http://www.quantum-espresso.org/pseudo-search-results>

- O原子のO.pw-mt_fhi.UPF
- Ti原子のTi.pw-mt_fhi.UPF

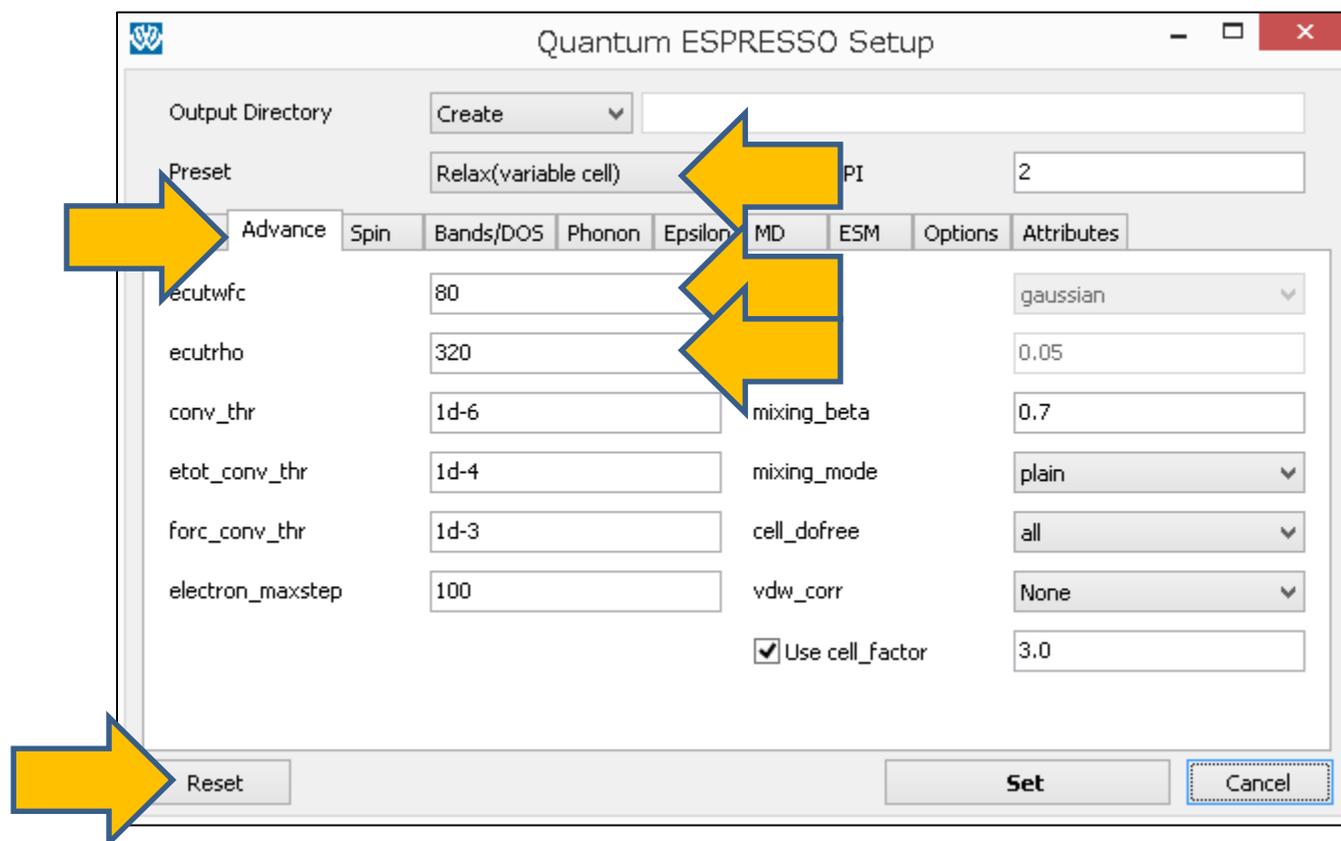
I. モデルの作成

「メニュー＞開く」からWinmostarのインストールディレクトリの下でのsample以下にあるrutile_tio2.cifを開く。(デフォルトではC:\¥winmos8¥samples¥rutile_tio2.cif)
その後、「固体＞Quantum ESPRESSO＞キーワード設定」を選択する。



II. 構造最適化計算

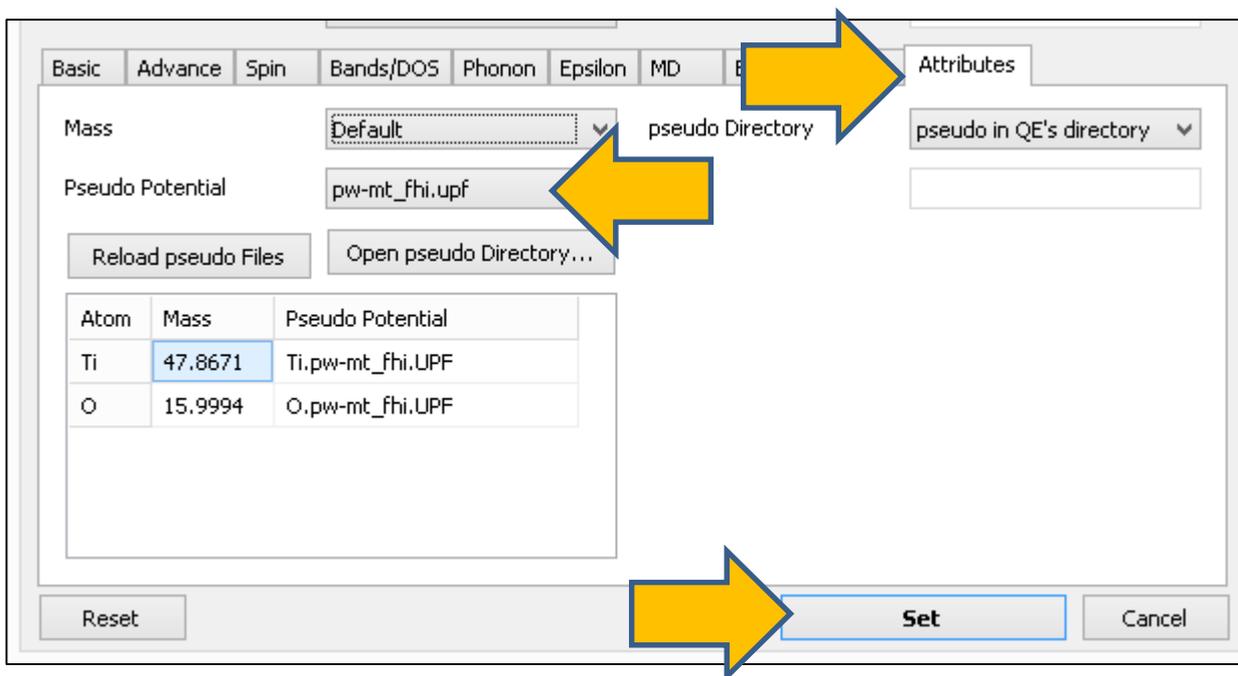
まず「Reset」ボタンを押し、「Preset」に「Relax(variable cell)」を選択する。「Advance」タブを開き、「ecutwfc」に「80」、「ecutrho」に「320」と入力する。



II. 構造最適化計算

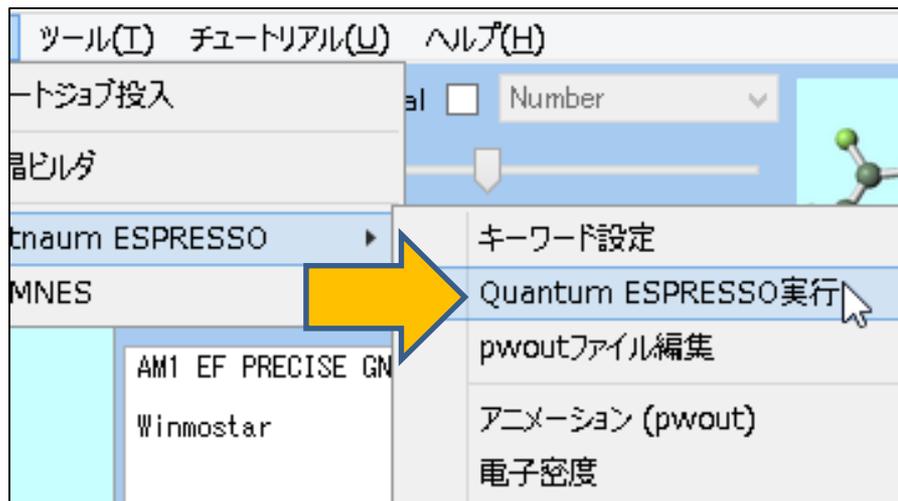
「Attributes」タブで「Pseudo Potential」に「pw-mt_fhi.upf」を選択し、
 「Set」ボタンを押す。

「pw-mt.fhi.upf」がない場合は「動作環境設定」のページに従って設定してください。



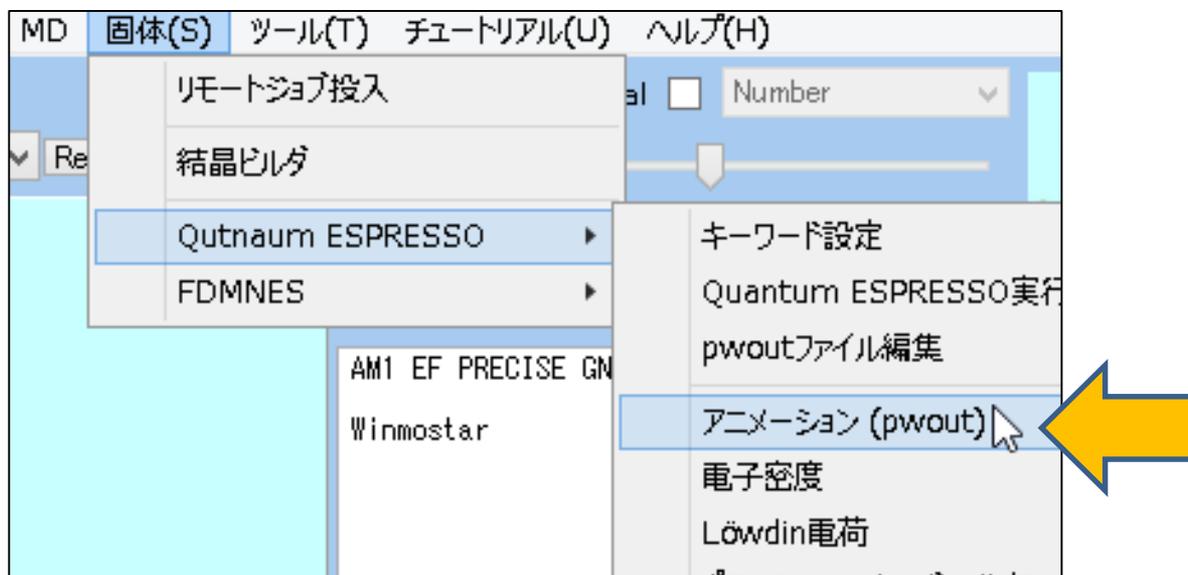
II. 構造最適化計算

「固体>Quantum ESPRESSO>Quantum ESPRESSO実行」を選択する。
保存ファイル名を指定した後計算が開始される。(2コアで約2分)



III. 結果の表示

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



III. 結果の表示

Animationウィンドウの「|>」ボタンを押すとアニメーションが開始される。メイン画面にセルと原子位置の両方が構造最適化される様子を確認できる。「概要」に記載の通り、構造最適化中はDFT計算のパラメータが更新されず、最終ステップのみ最適化後の構造を用いてパラメータを更新しSCFを実行しているため、最終ステップのエネルギーはそれまでの値から外れることがある。この飛びは、カットオフエネルギーを大きくすることである程度軽減できる。

The screenshot shows the Quantum ESPRESSO interface. The main window displays the molecular structure of Ti2O4 with the following parameters:

```

Winmostar 6 Ti2O4 MASS=159.73 X=3.6970 Y=0.8967 Z=1.47
6-1-6-1 Leng=4.082 Ang=0.000 Dihed=0.000 Lper=0.000 O
Vol=62.4347 Rho=4.2483
  
```

The Animation window shows the following data table:

STEP	Etot	Ry	Ftot
0	-143.00043427	0.018828	
1	-143.00812583	0.024214	
2	-143.00968327	0.005220	
3	-143.00969947	0.003190	
4	-143.00971078	0.000142	
5	-143.00945227	0.000140	

The Animation window also displays the text: "bfgs converged in 5 scf cycles and 4 bfgs steps" and a plot showing energy convergence over time.

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 · 公開

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_au_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 · 公開

👍 いいね!