

Winmostar チュートリアル
Quantum ESPRESSO
Car-Parrinello MD
V8.000

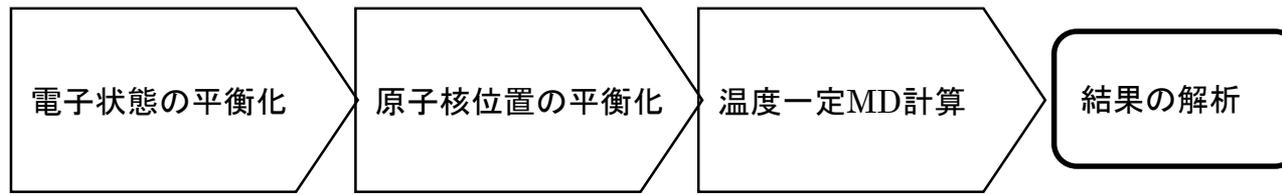
株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/10/01

概要

- メタン分子のCar-Parrinello (CP) MD計算をごく短時間実行します。計算が破たんしないよう電子と原子核それぞれを徐々に平衡化する手順を示します。



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。

バージョン	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		
		qe-5.2.1-32bit-serial.exe	50 MB	5097
		atomic-5.3.0.tar.gz	2 MB	4044
		FWgw-5.3.0.tar.gz	1 MB	1577
		Phonon-5.3.0.tar.gz	2 MB	5261
		spectra-5.3.0.tar.gz	4 MB	3766
		neb-5.3.0.tar.gz	345 KB	3556
		qe-5.3.0-64bit-serial.exe	72 MB	3652

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

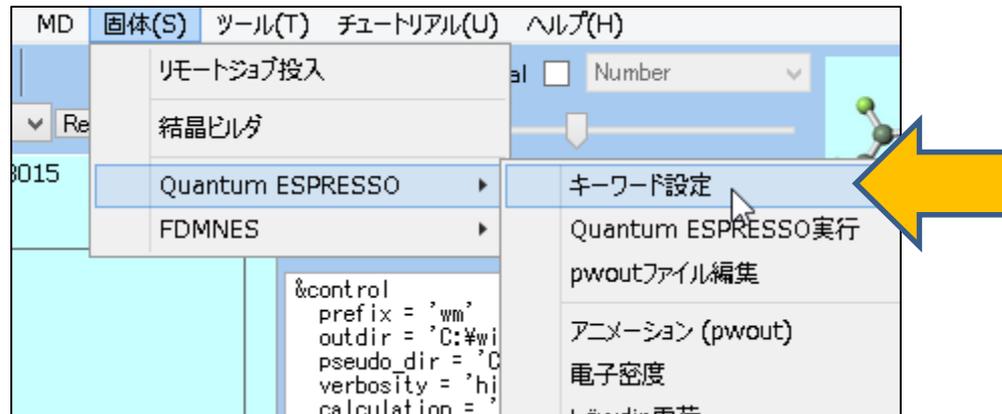
[編集]-[セルを作成/編集]にて[Create]をクリックし[OK]とすると、セルが作成される。

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

- Step 1:** The 'Edit' menu is open, and '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 has 'Width [A]' set to 5 and 'Axis' set to Z. The 'Boundary' section has 'Periodic' selected for V1, V2, and V3.
- Step 3:** The 'OK' button is highlighted with a yellow arrow. The resulting 3D model of a cell is shown in a window, with a yellow arrow pointing from the 'OK' button to it.

II. 電子状態の平衡化

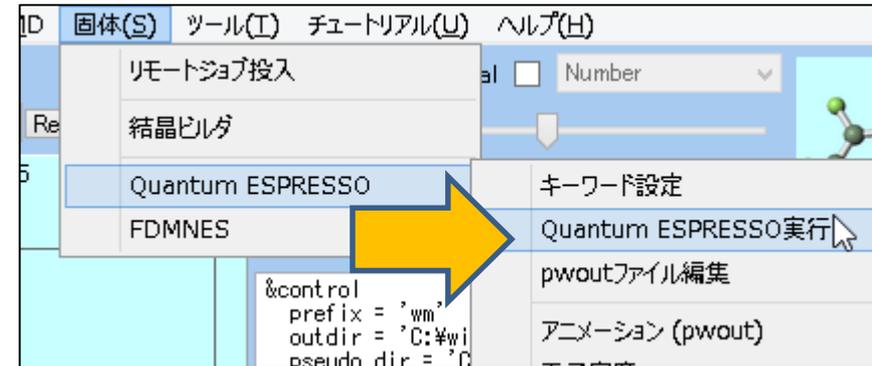
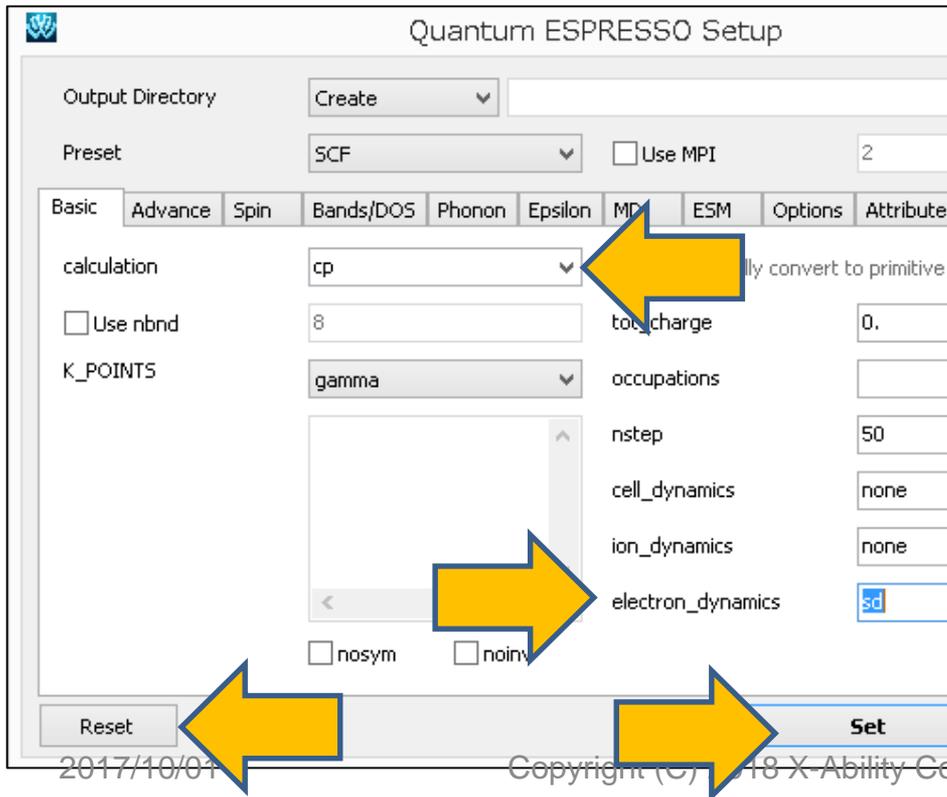
「固体>Quantum ESPRESSO>キーワード設定」を選択する。



II. 電子状態の平衡化

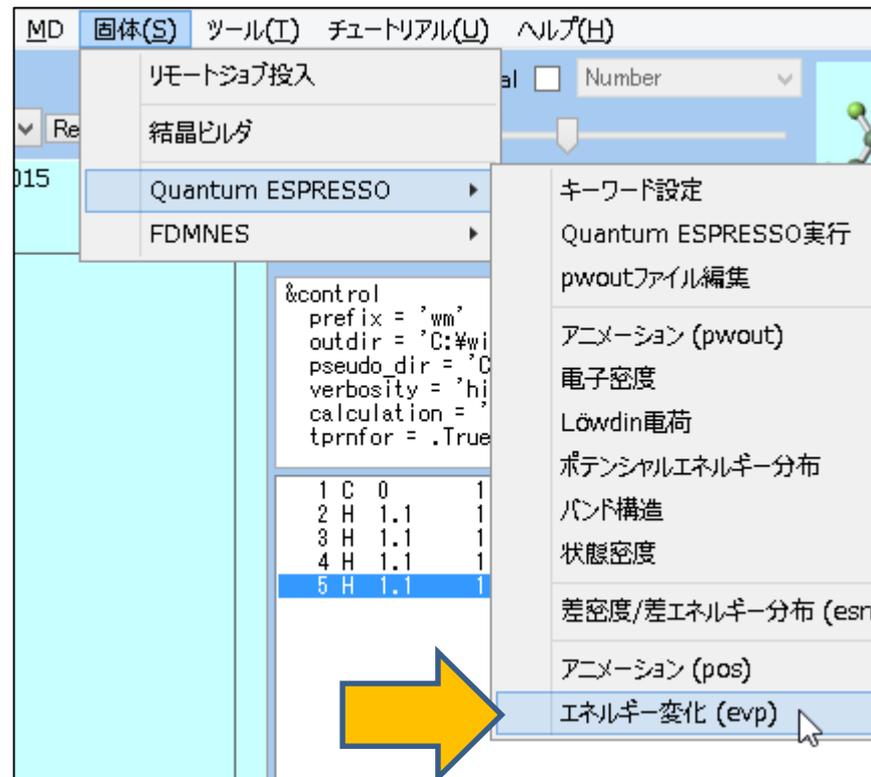
一旦「Reset」ボタンをクリックし、「calculation」に「cp」、「electron_dynamics」に「sd」を指定し、「Set」ボタンをクリックする。

「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。



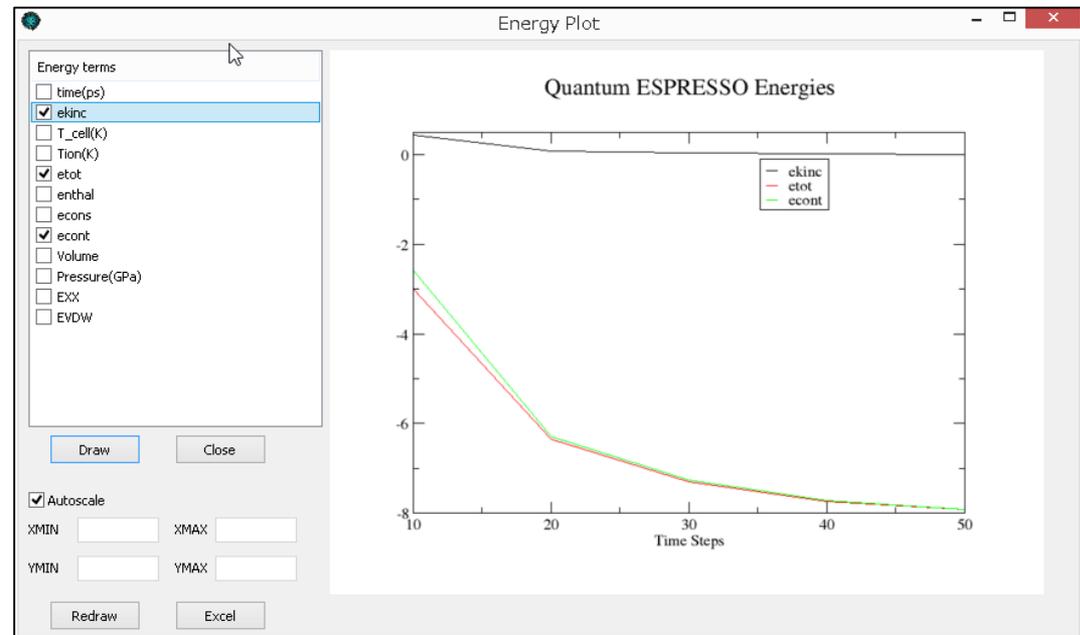
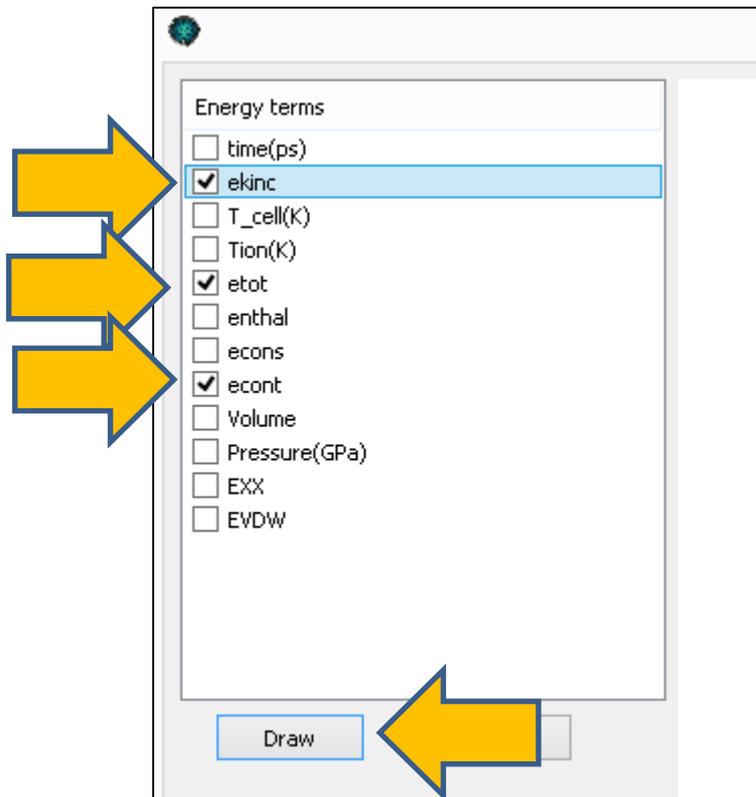
II. 電子状態の平衡化

計算終了後、「固体>Quantum ESPRESSO>エネルギー変化 (evp)」を選択し、
デフォルトで選ばれるフォルダを選択する。



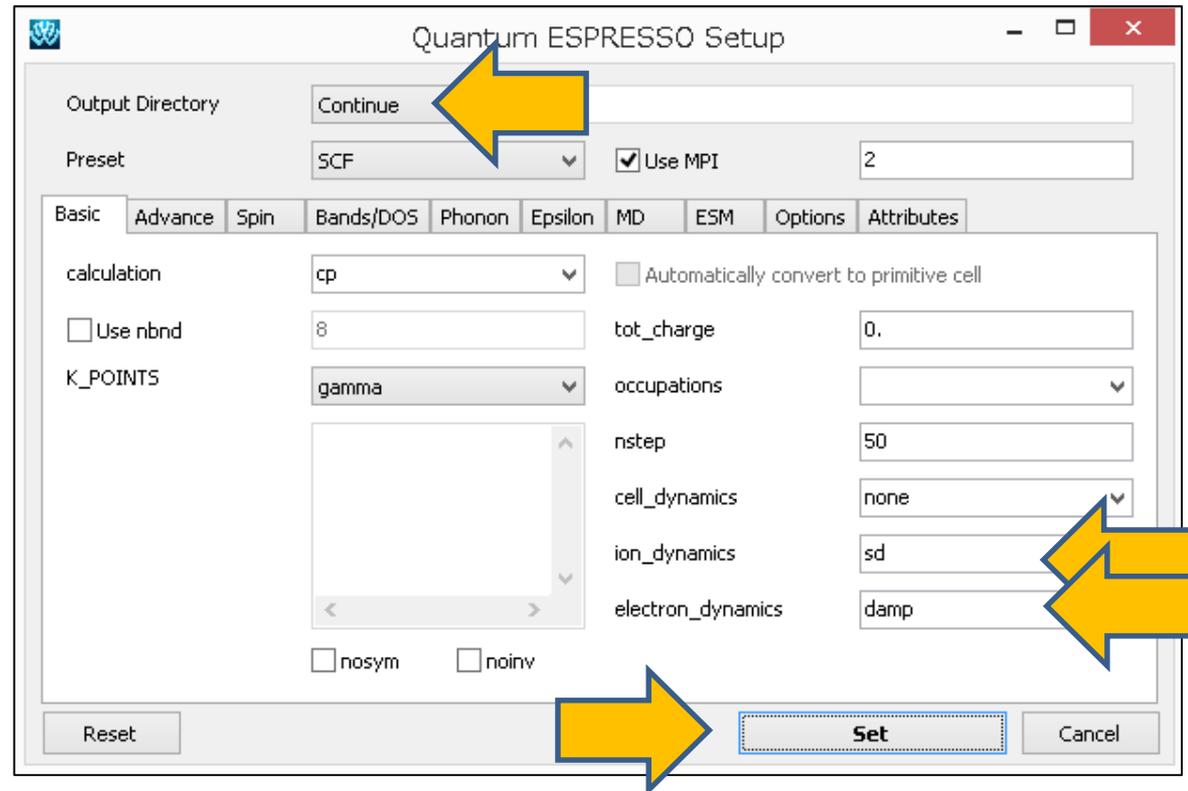
II. 電子状態の平衡化

Energy Plotウインドウでekinc(電子の仮想運動エネルギー)、etot(電子の静電ポテンシャルエネルギー)、econt(全エネルギー)にチェックを入れ、Drawをクリックし、右図のようにエネルギーが低下する様子を取得する。



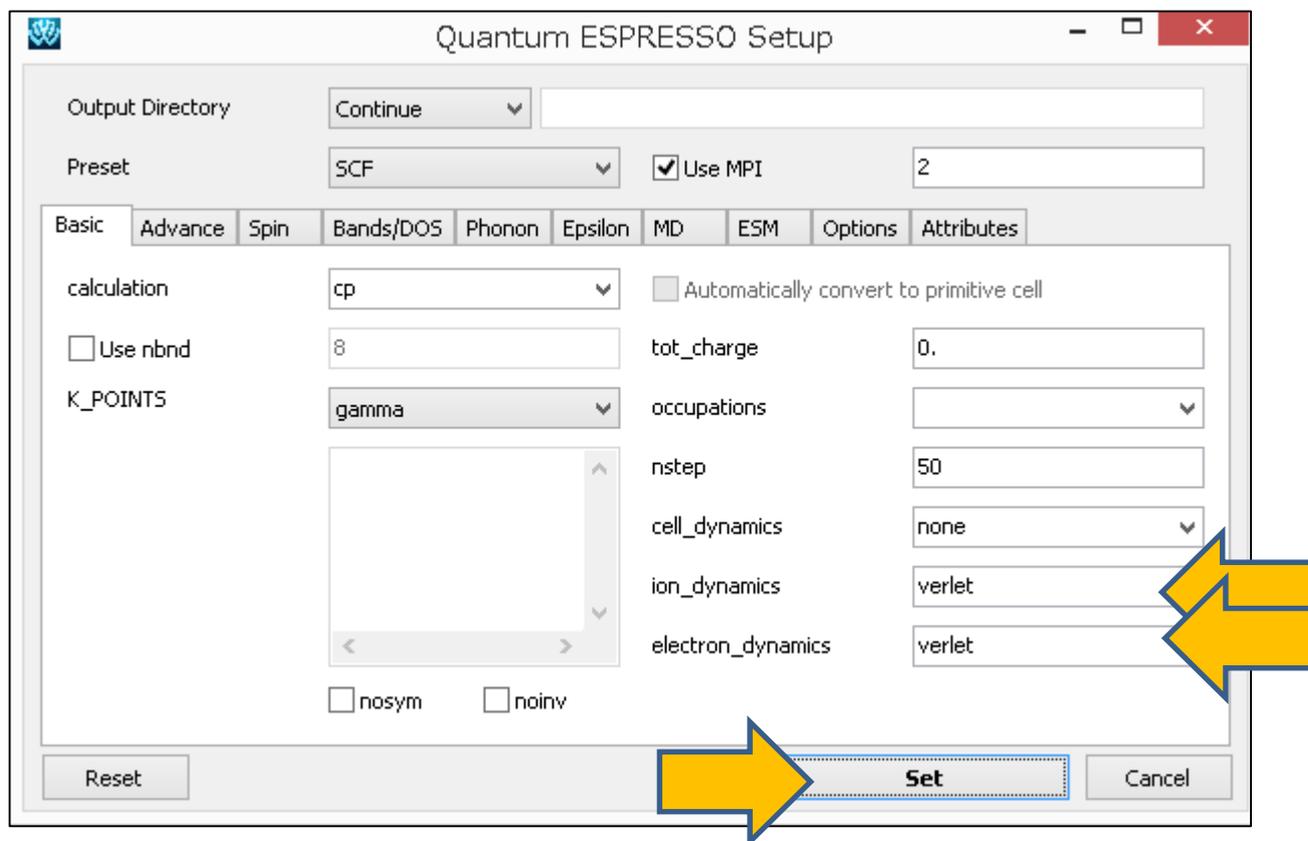
III. 原子核位置の平衡化

「固体>Quantum ESPRESSO>キーワード設定」にて、
 「Output Directory」に「Continue」、「Ion Dynamics」に「sd」、
 「Electron Dynamics」に「damp」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。



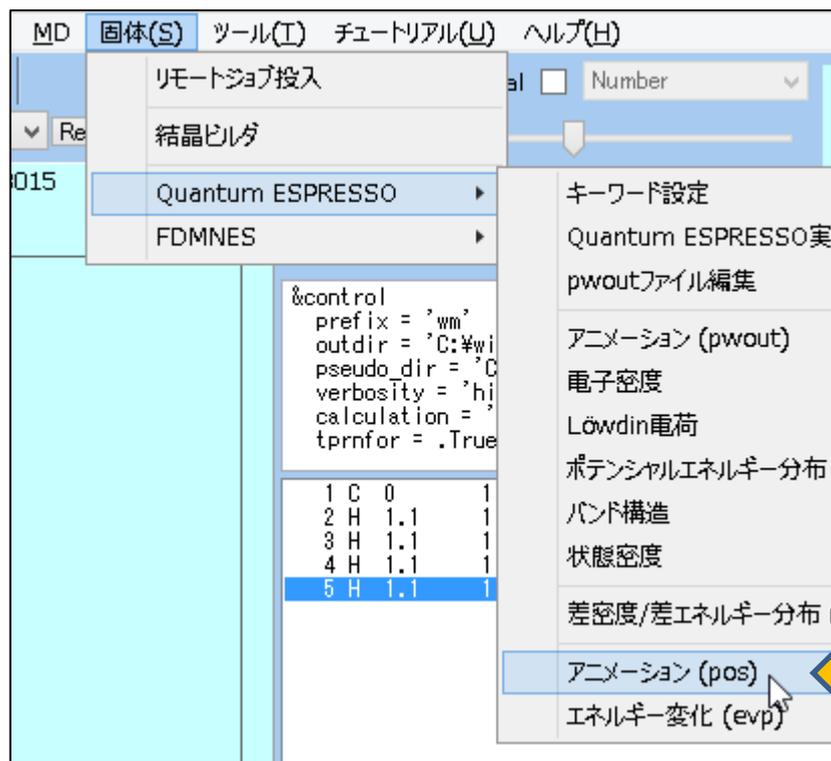
IV. 温度一定のMD計算

「固体>Quantum ESPRESSO>キーワード設定」にて、
「Ion Dynamics」と「Electron Dynamics」に「verlet」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。



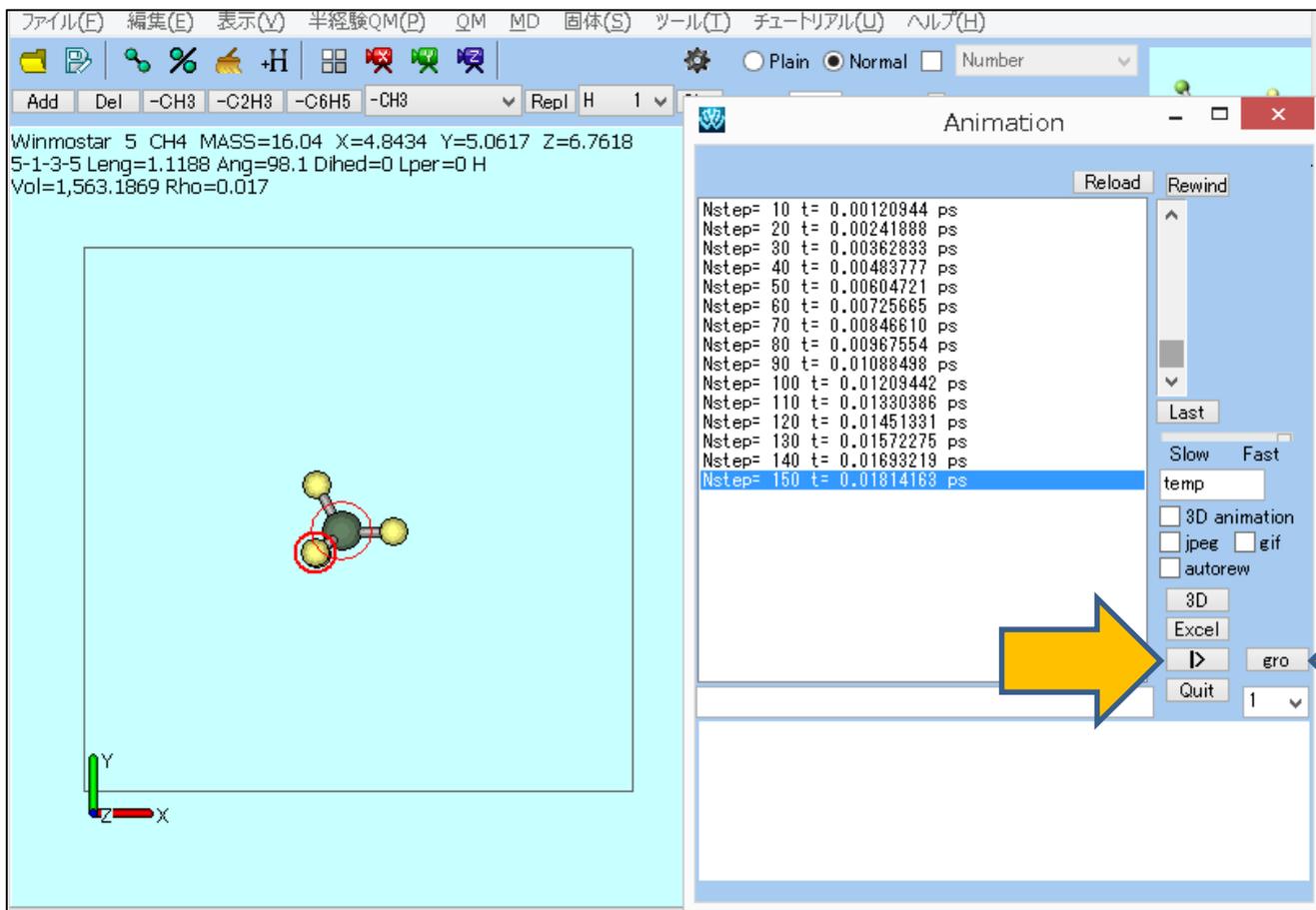
V. 結果解析

計算の終了後、「固体>Quantum ESPRESSO>アニメーション (pos)」を選択。
デフォルトで選ばれる3つのファイルを選択する。



V. 結果解析

再生ボタン(|>)をクリックし各ステップの様子を確認する。
VMD等外部ビューワで見たい場合は[gro]ボタンを押す。



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!