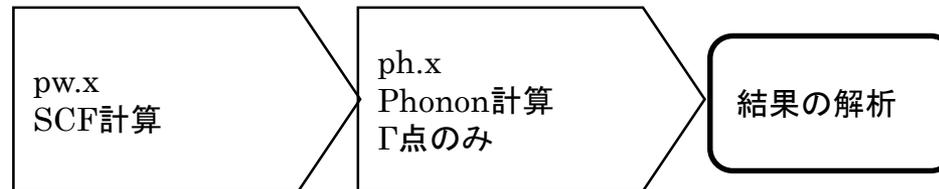


Winmostar™ チュートリアル
Quantum ESPRESSO
フォノン計算
V8.017

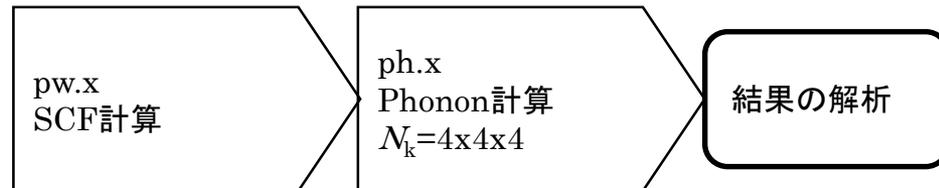
株式会社クロスアビリティ
2018/4/4

概要

- ① フォノン計算からSi結晶のIR、ラマンスペクトルを取得します。



- ② フォノン計算からSi結晶のフォノンバンド、フォノンDOSを取得します。



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、smearing幅は計算結果に影響を与えます。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¥Brrilouin_zonew.pdf` を参考に設定してください。
- GGA、Ultrasoftで計算したい場合は、別途Phonopyなどを使う必要があります。

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
		atonic-5.3.0.tar.gz	2 MB	4044
		PWgnc-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. IR、ラマンスペクトル

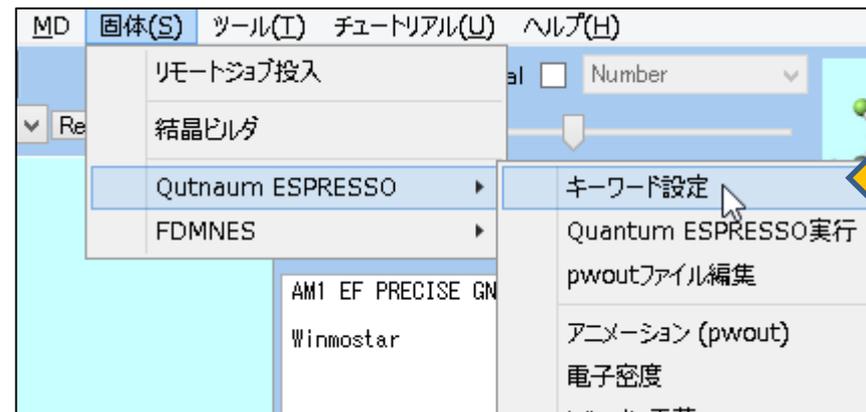
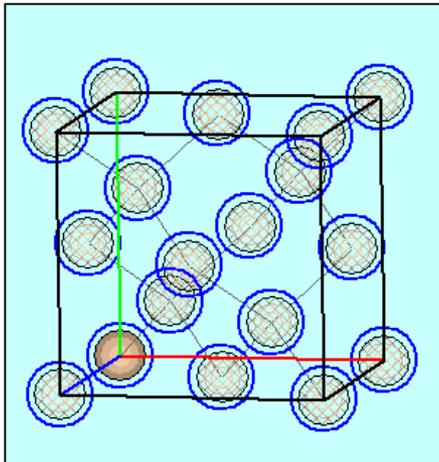
1. [メニュー] > [開く]をクリックする。
2. サンプルフォルダ内のsi.cifを開く。(デフォルトではC:\winmos8\samples\si.cif)

※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

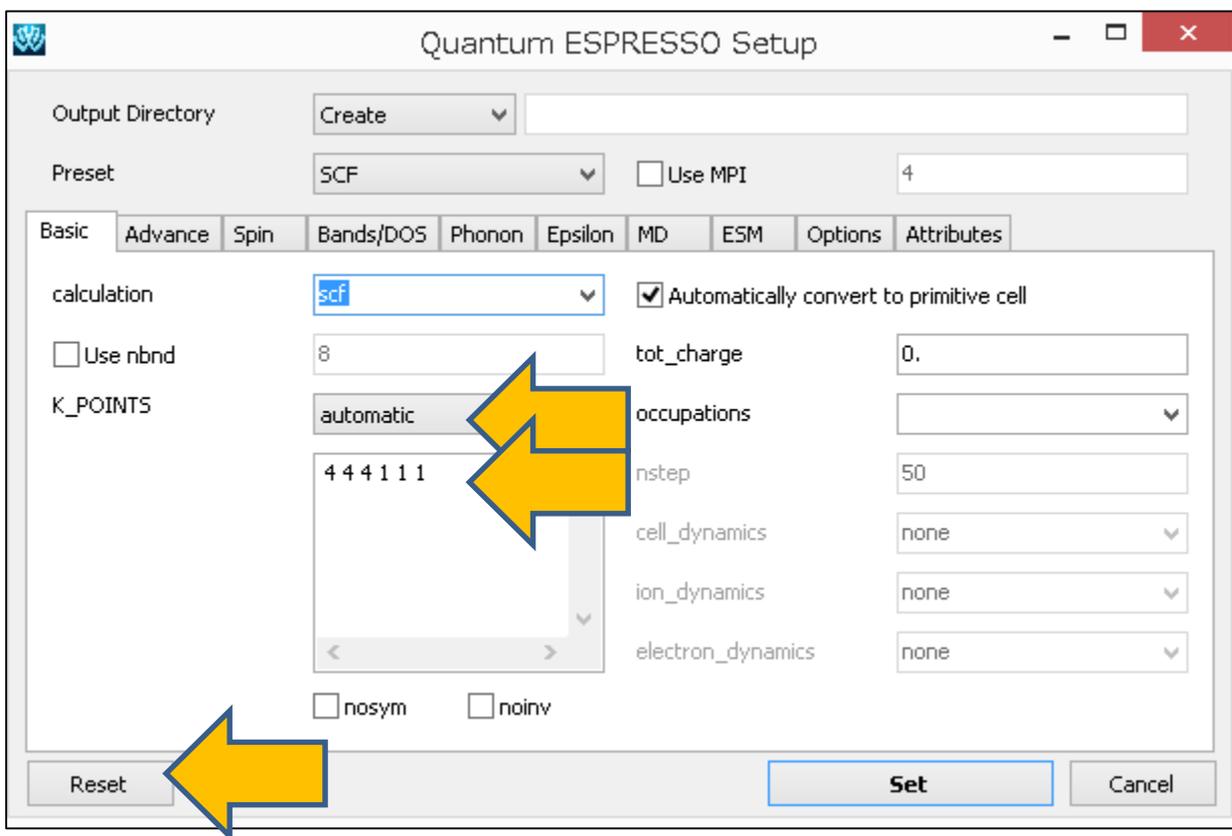
Crystal system: Cubic
Space group : Fd-3m (227)
Lattice constants : a=5.4309 Å
Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)

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



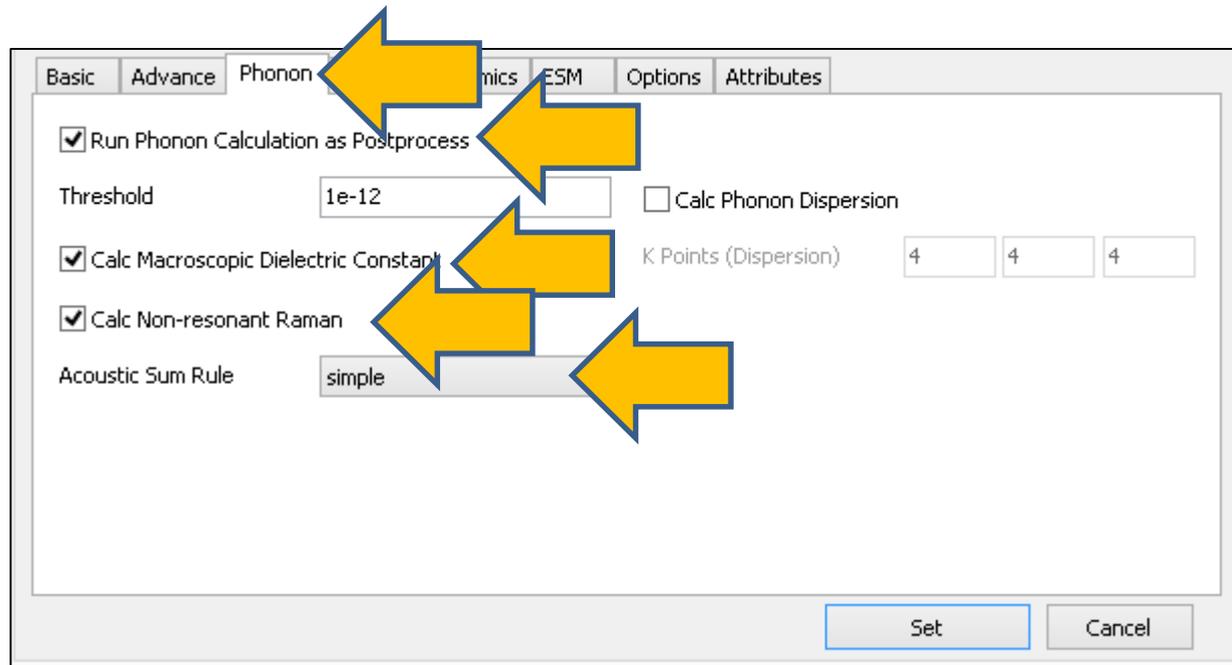
I. IR、ラマンスペクトル

1. [Reset]ボタンをクリックする。
2. [K_POINTS]に“automatic”を指定し、その下に”4 4 4 1 1 1”(スペース区切り)と入力する。



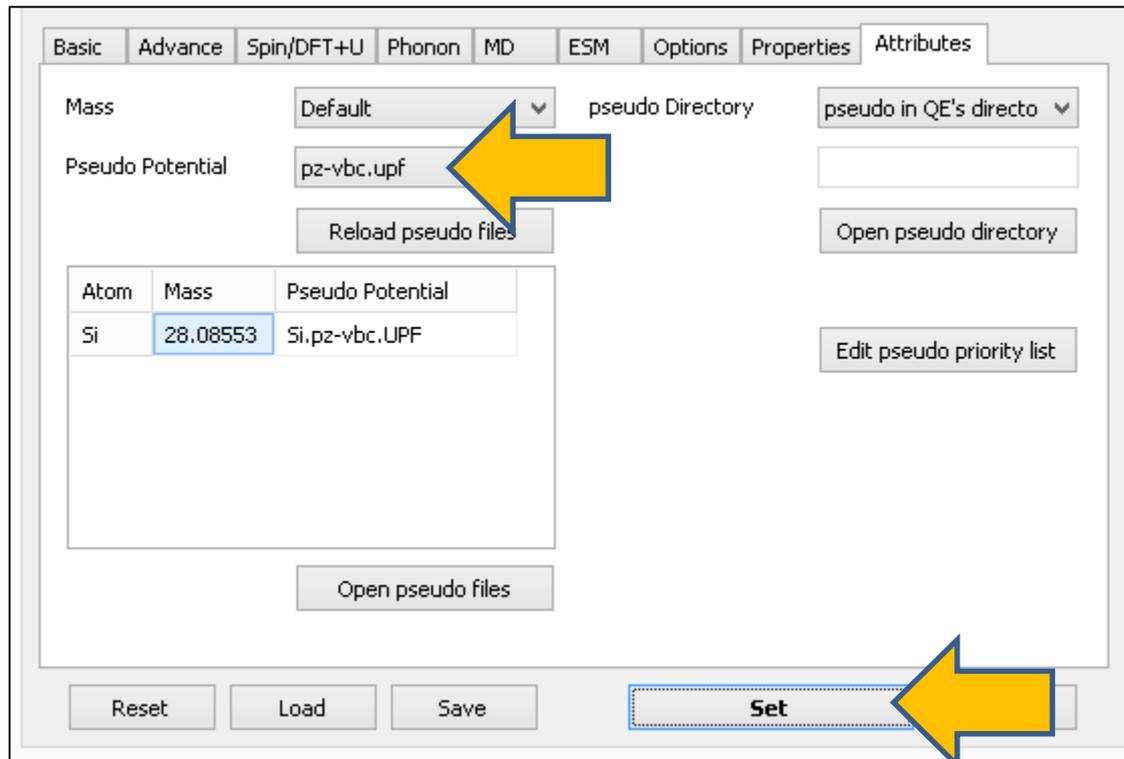
I. IR、ラマンスペクトル

1. [Phonon]タブを選択し、[Run Phonon Calculation as Postprocess]、[Calc Macroscopic Dielectric Constant]、[Calc Non-resonant Raman]にチェックを入れ、[Acoustic Sum Rule]を"simple"にする。



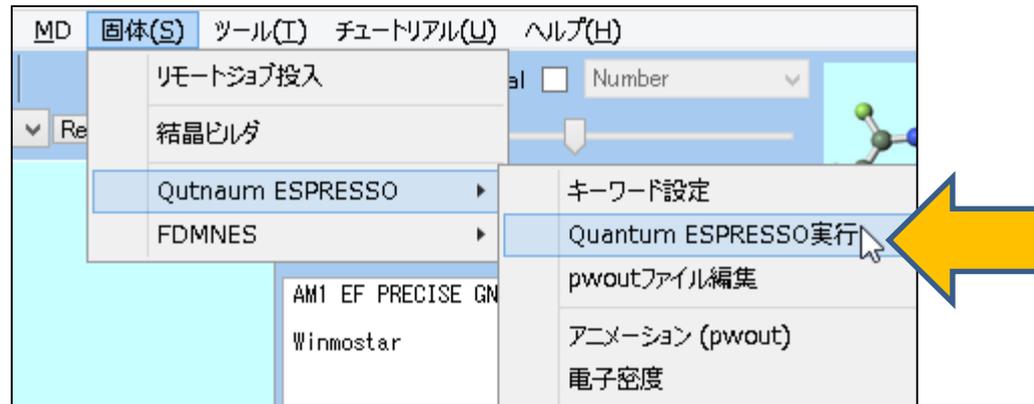
I. IR、ラマンスペクトル

1. [Attributes]タブを選択し、[Pseudo Potential]を"pz-vbc.upf"にする。(ph.xがGGA, Ultrasoftに対応していないため)
2. [Set]する。



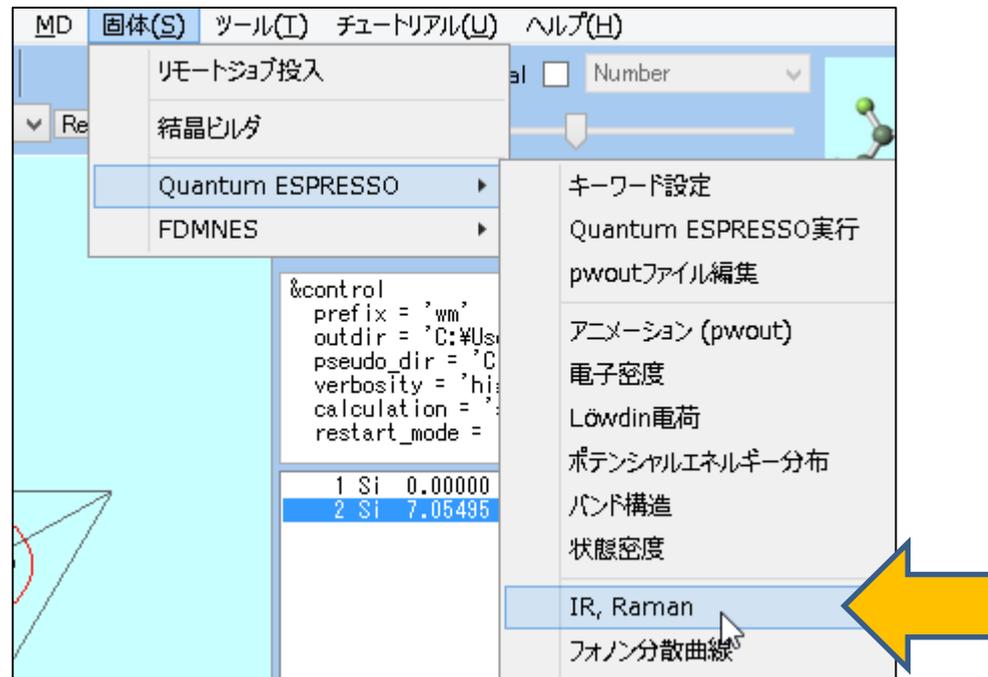
I. IR、ラマンスペクトル

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [Quantum ESPRESSO実行]をクリックする。
2. 実行前に、ファイルを保存するか聞かれるので「はい」とし、名前を付けて保存する。
ここでは仮に「si_vib.pwin」とする。



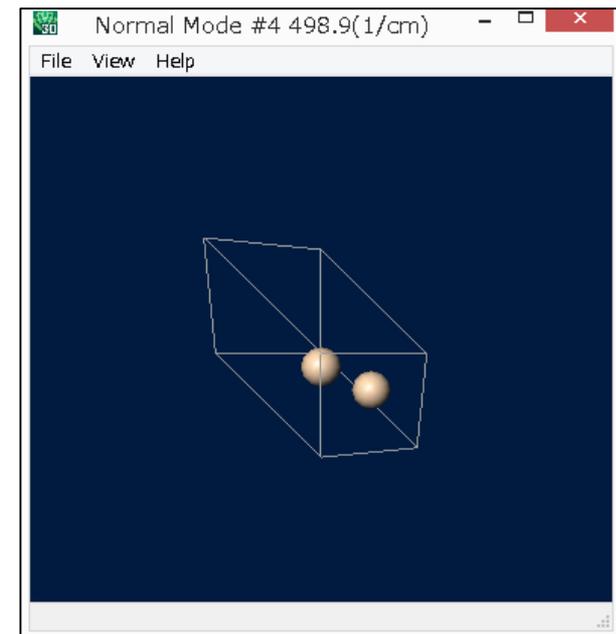
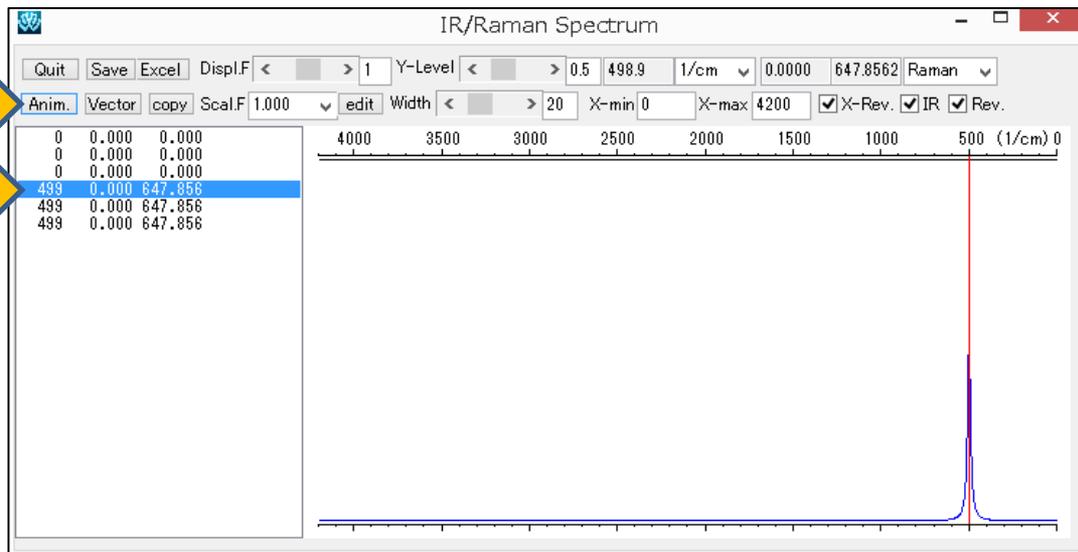
I. IR、ラマンスペクトル

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [IR, Raman]をクリックする。
2. QEの作業ディレクトリと出力ファイルを選択する。ここでは、どちらもデフォルトで選択されたものを選択する。



I. IR、ラマンスペクトル

IR/Ramanスペクトル表示ウィンドウが出現する。画面左のスペクトル表示欄で可視化したいスペクトルを選択し、[Anim.]ボタンをクリックすると、アニメーションが表示される。



I. IR、ラマンスペクトル

IR、ラマンスペクトルの計算と並行して算出された誘電率は、si_vib.pwinを保存した場所にあるsi_vib_qe_dataフォルダのph.outに出力される。

```

289 ←
290 ← End of self-consistent calculation ←
291 ←
292 ← Convergence has been achieved ←
293 ←
294 ← Number of q in the star = 1 ←
295 ← List of q in the star: ←
296 ← 1 0.000000000 0.000000000 0.000000000 ←
297 ←
298 ← Dielectric constant in cartesian axis ←
299 ←
302 ← ( 13.959743499 -0.000000000 0.000000000 ) ←
303 ← ( -0.000000000 13.959743499 -0.000000000 ) ←
304 ← ( 0.000000000 -0.000000000 13.959743499 ) ←
305 ←
306 ← Effective charges (d Force / dE) in cartesian axis ←
307 ←
308 ← atom 1 SI ←
309 ← Ex ( -0.07869 0.00000 -0.00000 ) ←
310 ← Ey ( 0.00000 -0.07869 -0.00000 ) ←
311 ← Ez ( 0.00000 -0.00000 -0.07869 ) ←
312 ←
313 ← atom 2 SI ←
314 ← Ex ( -0.07869 0.00000 0.00000 ) ←
315 ← Ey ( 0.00000 -0.07869 0.00000 ) ←
316 ← Ez ( 0.00000 0.00000 -0.07869 ) ←
317 ←
318 ← Diagonalizing the dynamical matrix ←
319 ←
320 ← q = ( 0.000000000 0.000000000 0.000000000 ) ←

```

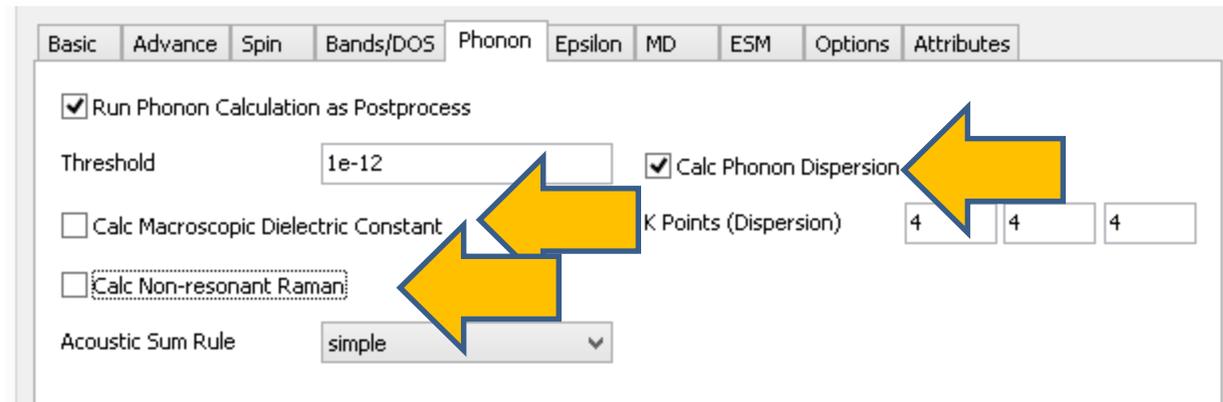
II. フォノン分散

1. 初期状態のSi結晶 (si.cif) をメイン画面で開き直す。
2. [固体] > [Quantum ESPRESSO キーワード設定] をクリックする。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a silicon crystal structure. The interface includes a menu bar at the top with options like 'ファイル(F)', '編集(E)', '表示(V)', '半経験QM(P)', 'QM', 'MD', '固体(S)', 'ツール(T)', 'チュートリアル(U)', and 'ヘルプ(H)'. Below the menu bar is a toolbar with various icons. The main display area shows the crystal structure with a coordinate system (X, Y, Z) at the bottom left. A table of atom coordinates is visible in the lower right, listing 8 Si atoms with their respective coordinates. A context menu is open over the '固体(S)' menu item, showing options such as 'リモートジョブ投入', '結晶ビルダ', 'Quantum ESPRESSO', 'FDMNES', 'AM1 EF PRECISE GNORM=0.05', and 'Winmostar'. The 'Quantum ESPRESSO' option is expanded, showing a sub-menu with 'キーワード設定', 'Quantum ESPRESSO実行', 'pwoutファイル編集', 'アニメーション (pwout)', and '電子密度'. A yellow arrow points to the 'キーワード設定' option.

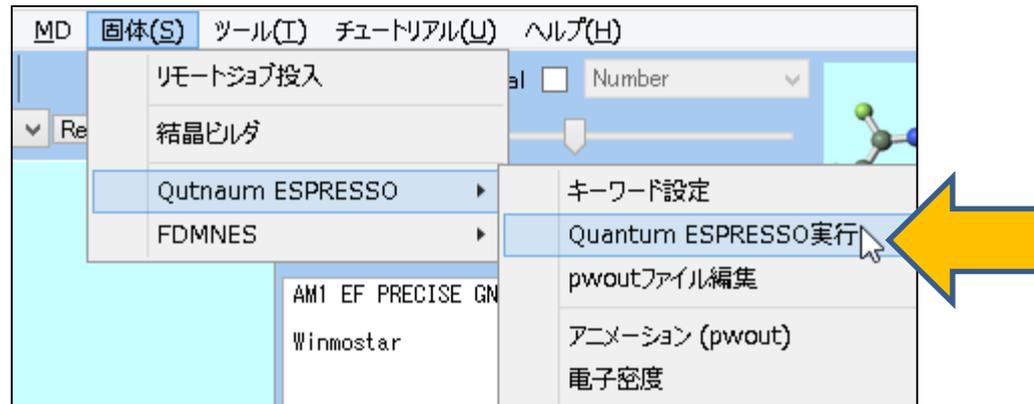
II. フォノン分散

1. [Phonon]タブの、[Calc Microscopic Dielectric Constant]と [Calc Non-resonant Raman]のチェックを外し、 [Calc Phonon Dispersion]にチェックを入れる。
2. [Set]する。



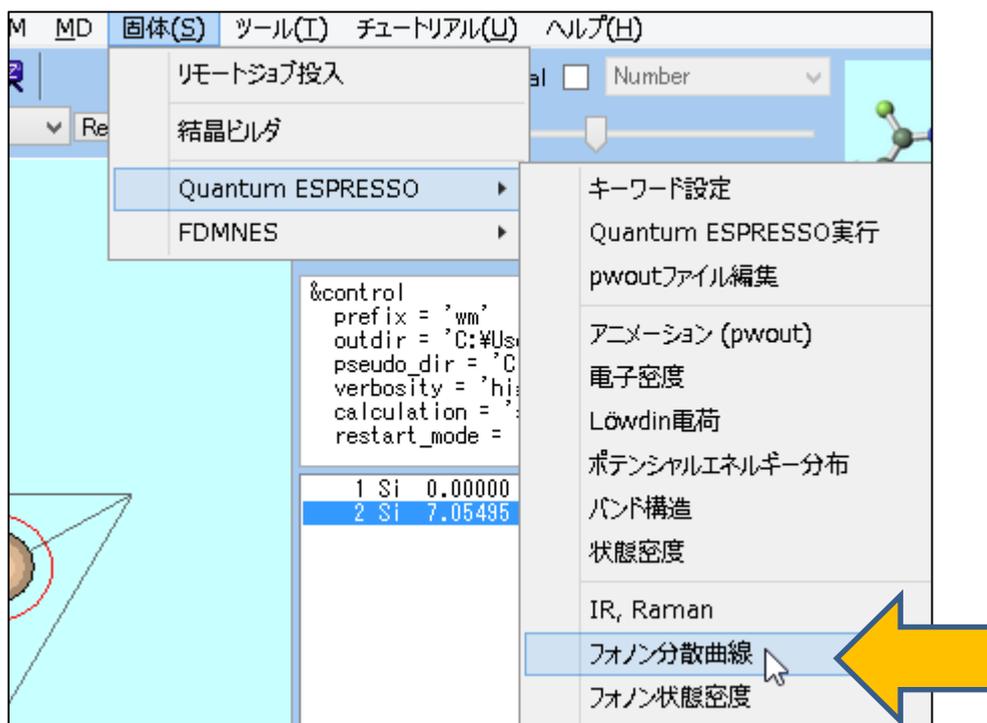
II. フォノン分散

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [Quantum ESPRESSO実行]をクリックする。
2. 実行前に、ファイルを保存するか聞かれるので「はい」とし、名前を付けて保存する。
ここでは仮に「si_disp.pwin」とする。



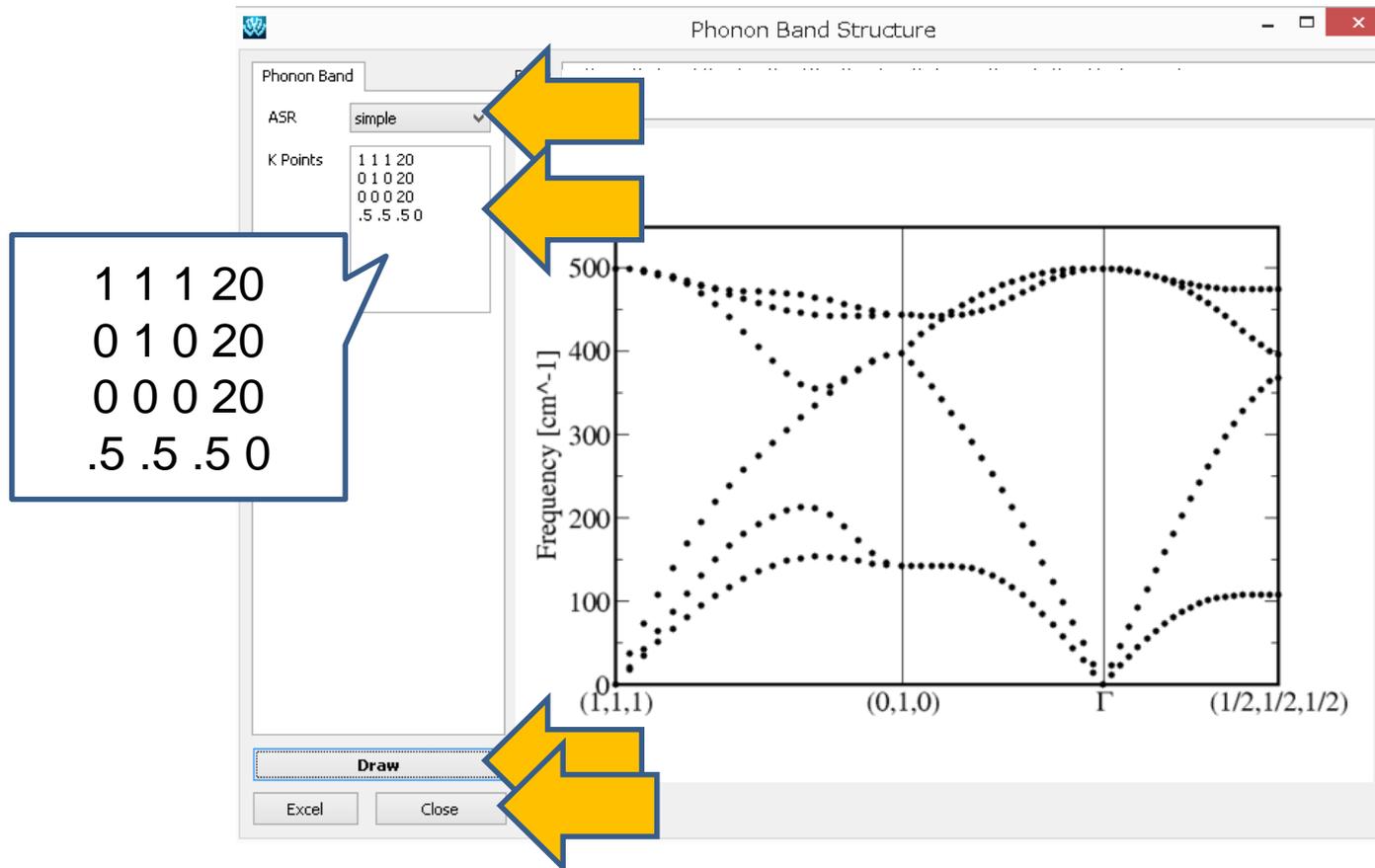
II. フォノン分散

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [フォノン分散曲線]をクリックする。
2. QEの作業ディレクトリを選択する。ここでは、デフォルトで選択されたものを選択する。



II. フォノン分散

[ASR]に"Simple"、[K Points]に下図のように入力し、[Draw]をクリックすると、以下のようなフォノン分散曲線が得られる。確認後[Close]ボタンを押す。



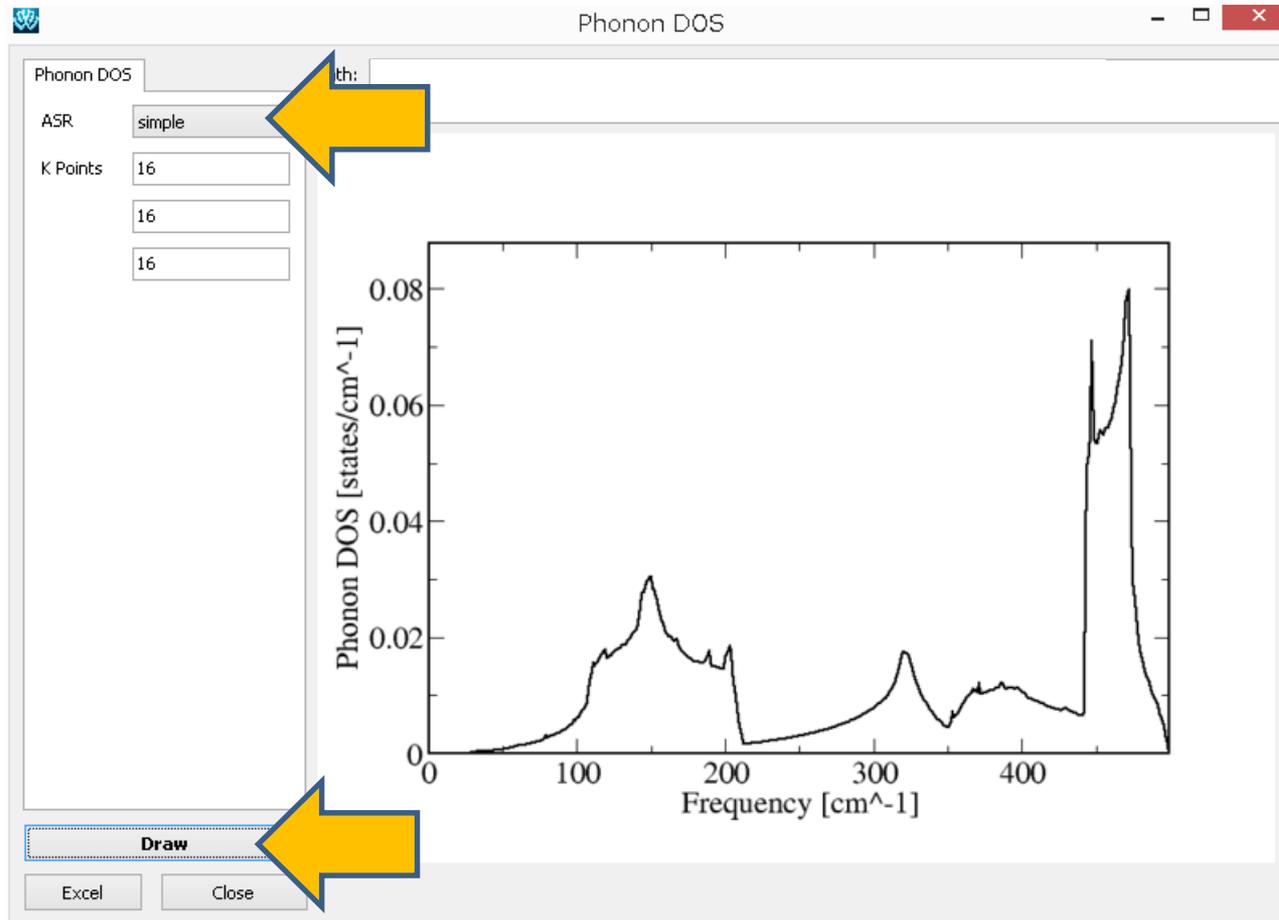
II. フォノン分散

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [フォノン状態密度]をクリックする。
2. QEの作業ディレクトリを選択する。ここでは、デフォルトで選択されたものを選択する。



II. フォノン分散

[ASR]に"simple"を指定し、[Draw]をクリックするとフォノン状態密度が描画される。



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...

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!