

Winmostar™ チュートリアル

Quantum ESPRESSO

誘電関数

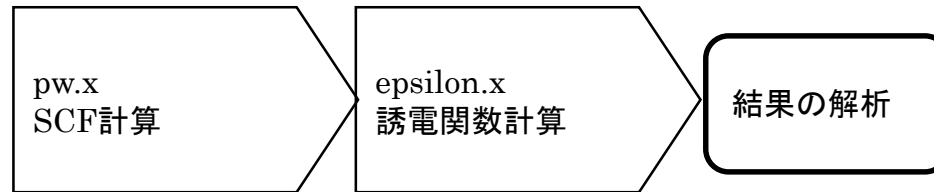
V8.017

株式会社クロスアビリティ

2018/4/4

概要

本チュートリアルではSi結晶の誘電関数を取得します。



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に、精度を落とした設定を用います。

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		
		qe-5.2.1-32bit-serial.exe	50 MB	5097
		atomic-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. SCF & 誘電関数計算

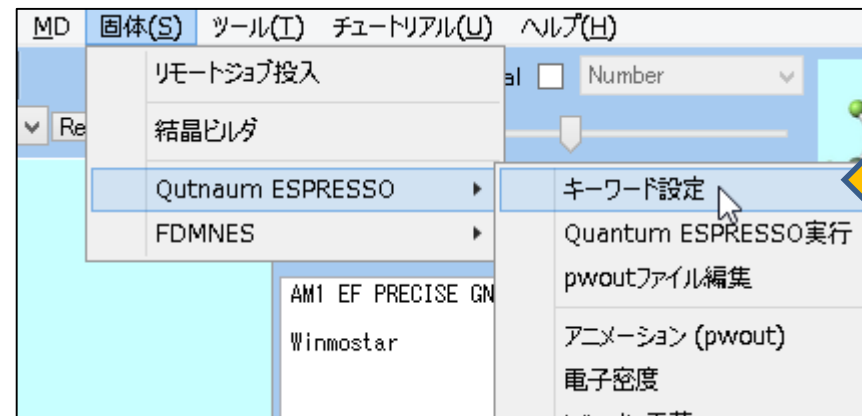
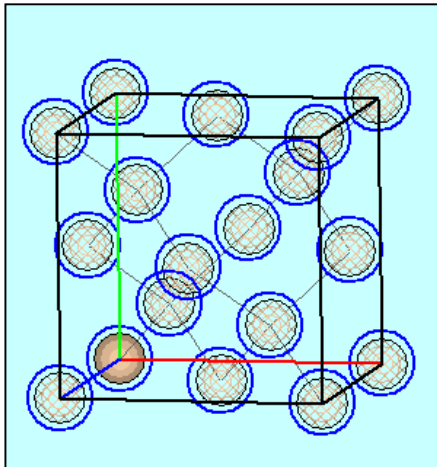
1. [メニュー] > [開く]をクリックする。
2. サンプルフォルダ内のsi.cifを開く。(デフォルトではC:\winmos8\samples\si.cif)

※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

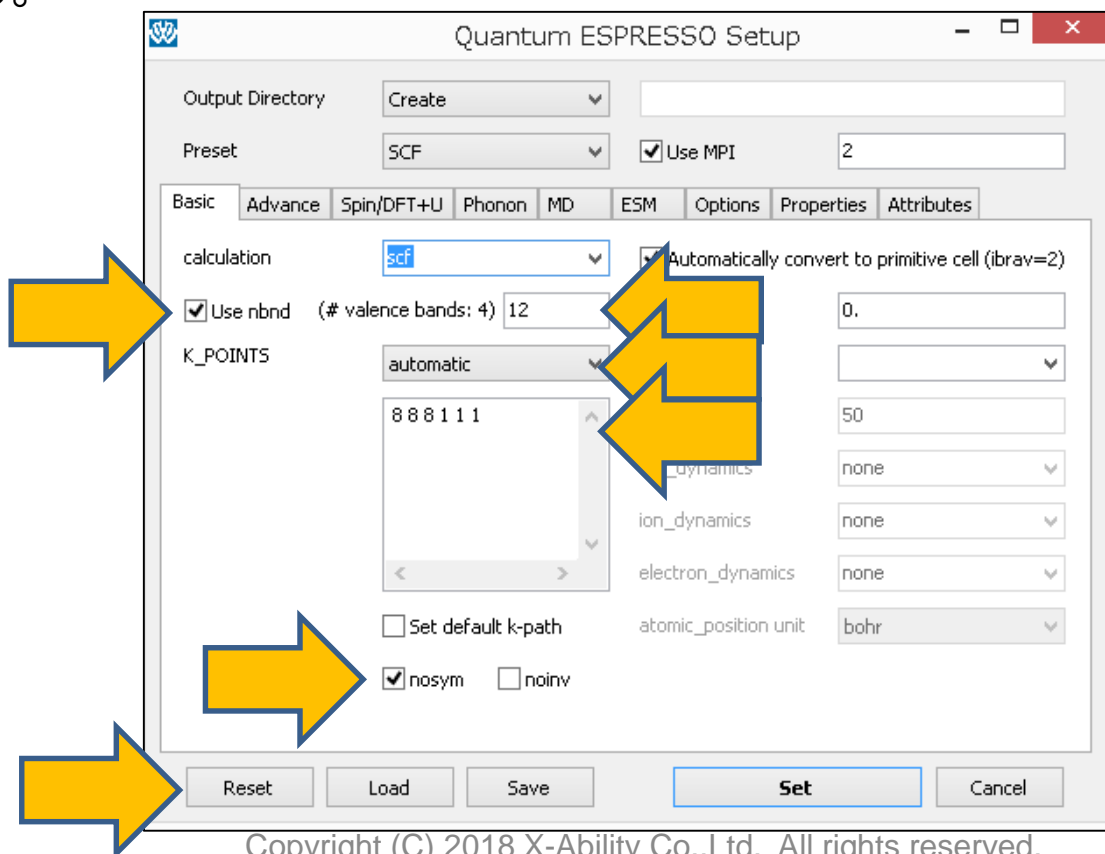
Crystal system: Cubic
Space group : Fd-3m (227)
Lattice constants : a=5.4309 Å
Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)

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



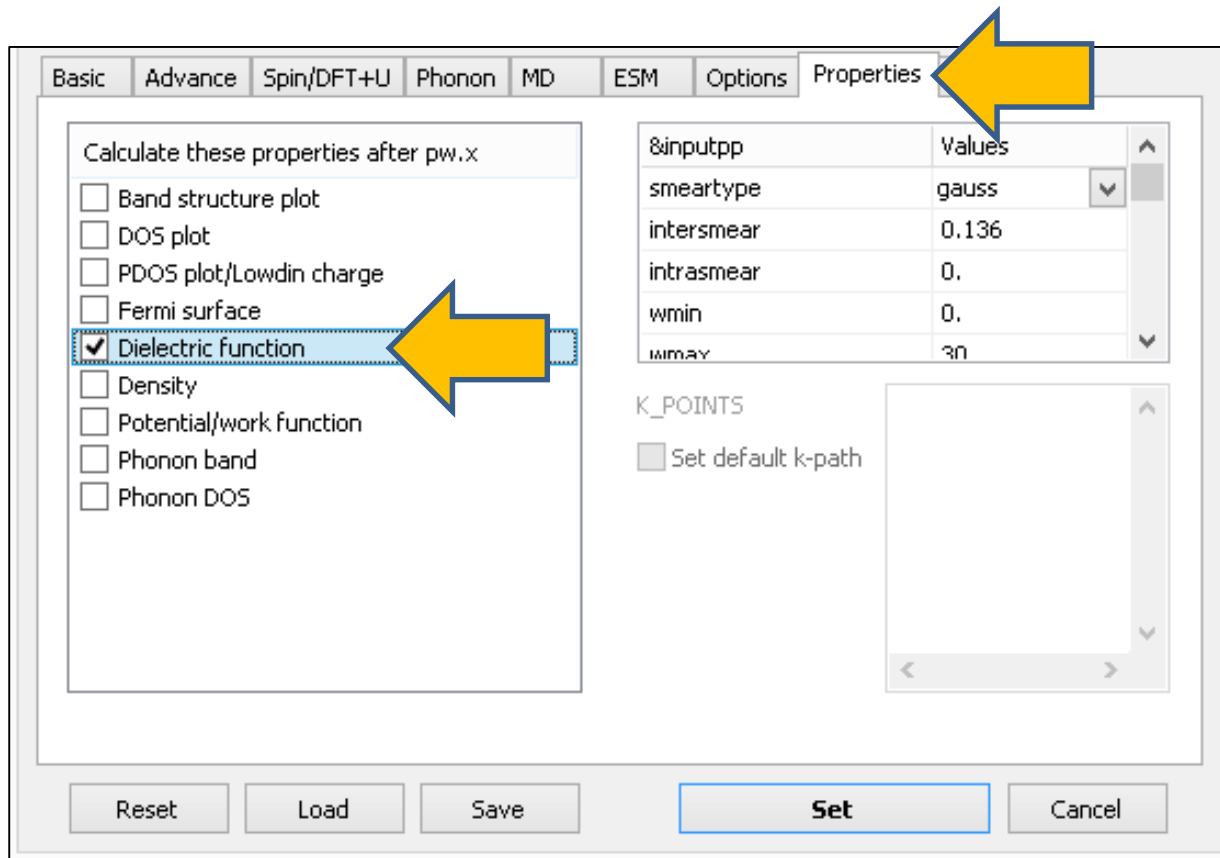
I. SCF & 誘電関数計算

1. まず[Reset]ボタンを押す。
2. [Use nbnd]にチェックを入れ"12"と入力し、[K_POINTS]に“automatic”を指定し、その下に”8 8 8 1 1 1”(スペース区切り)と入力する。また、[nosym]にチェックを入れる。



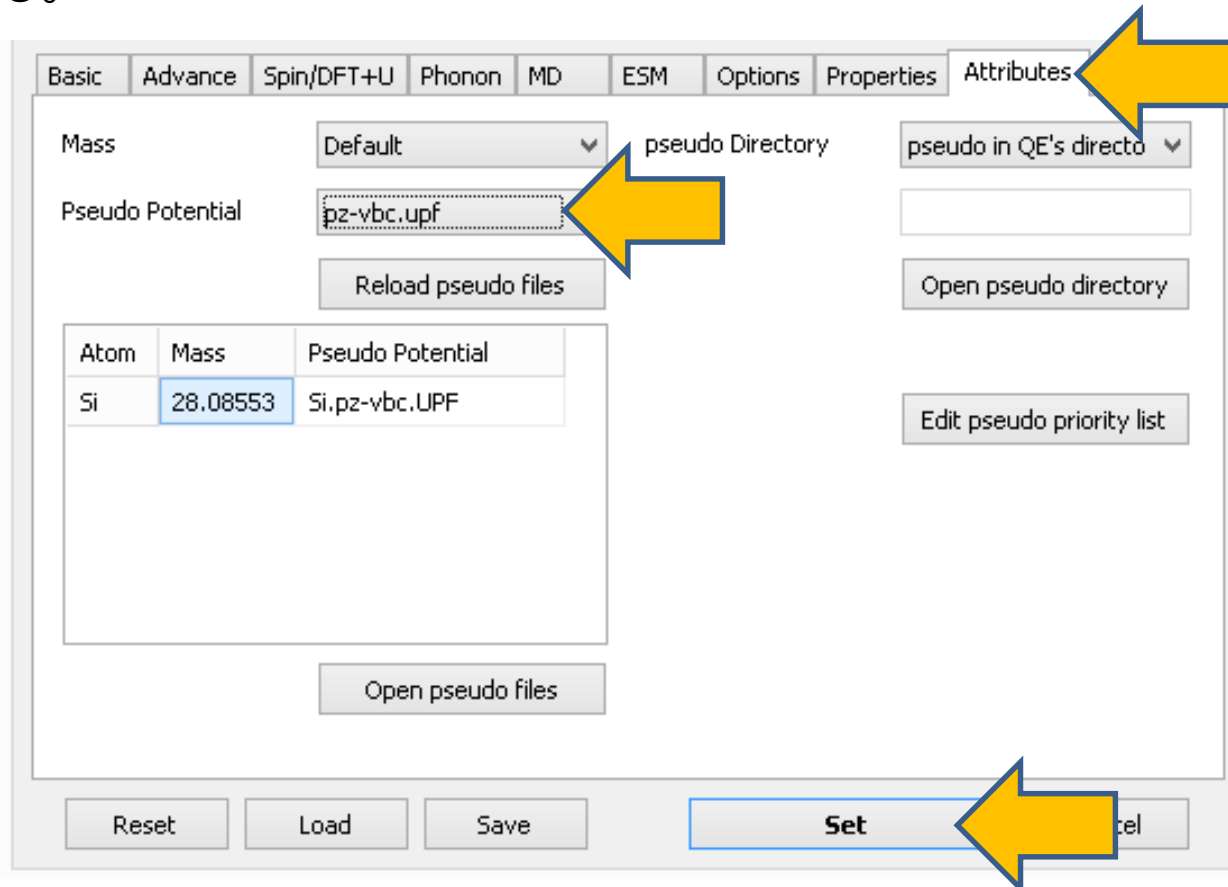
I. SCF & 誘電関数計算

1. [Properties]タブを選択し、[Dielectric Function]にチェックを入れる。



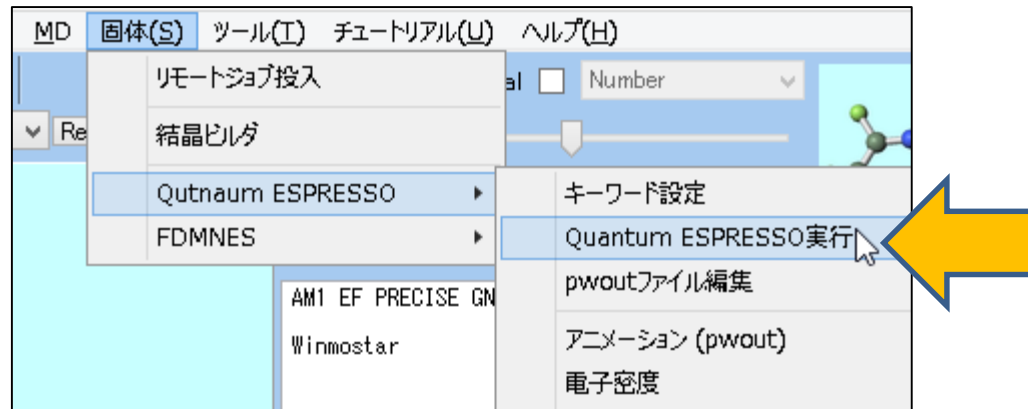
I. SCF & 誘電関数計算

1. [Attributes]タブを選択し、[Pseudo Potential]に[pz-vbc.upf]を選ぶ。
2. [Set]する。



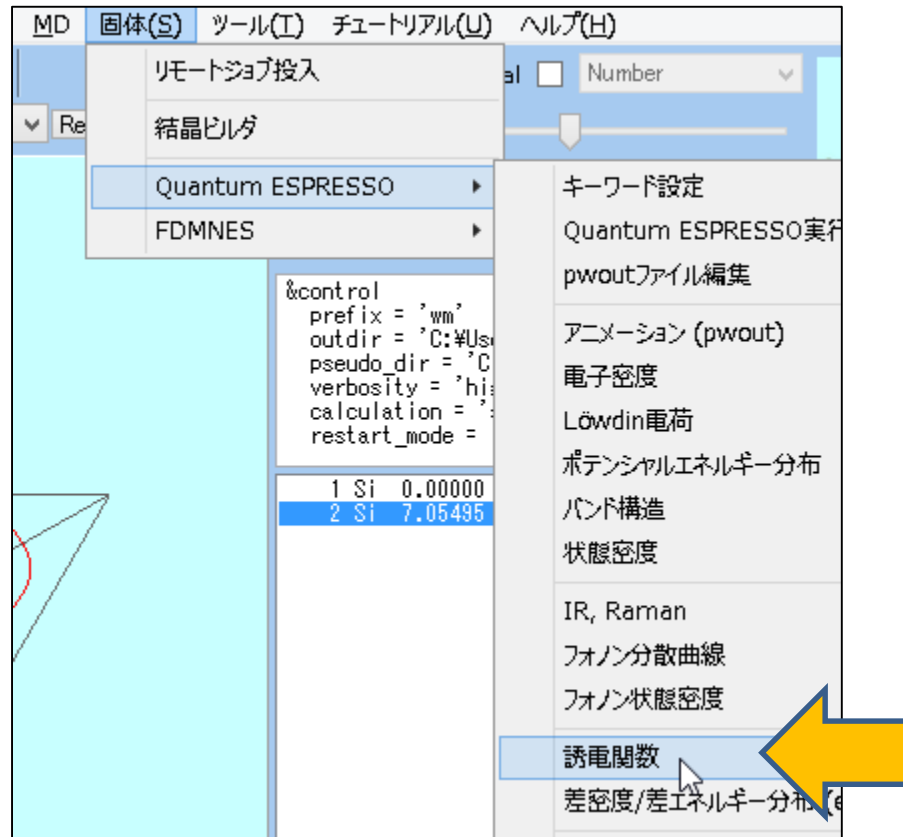
I. SCF & 誘電関数計算

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_eps.pwin」とする。



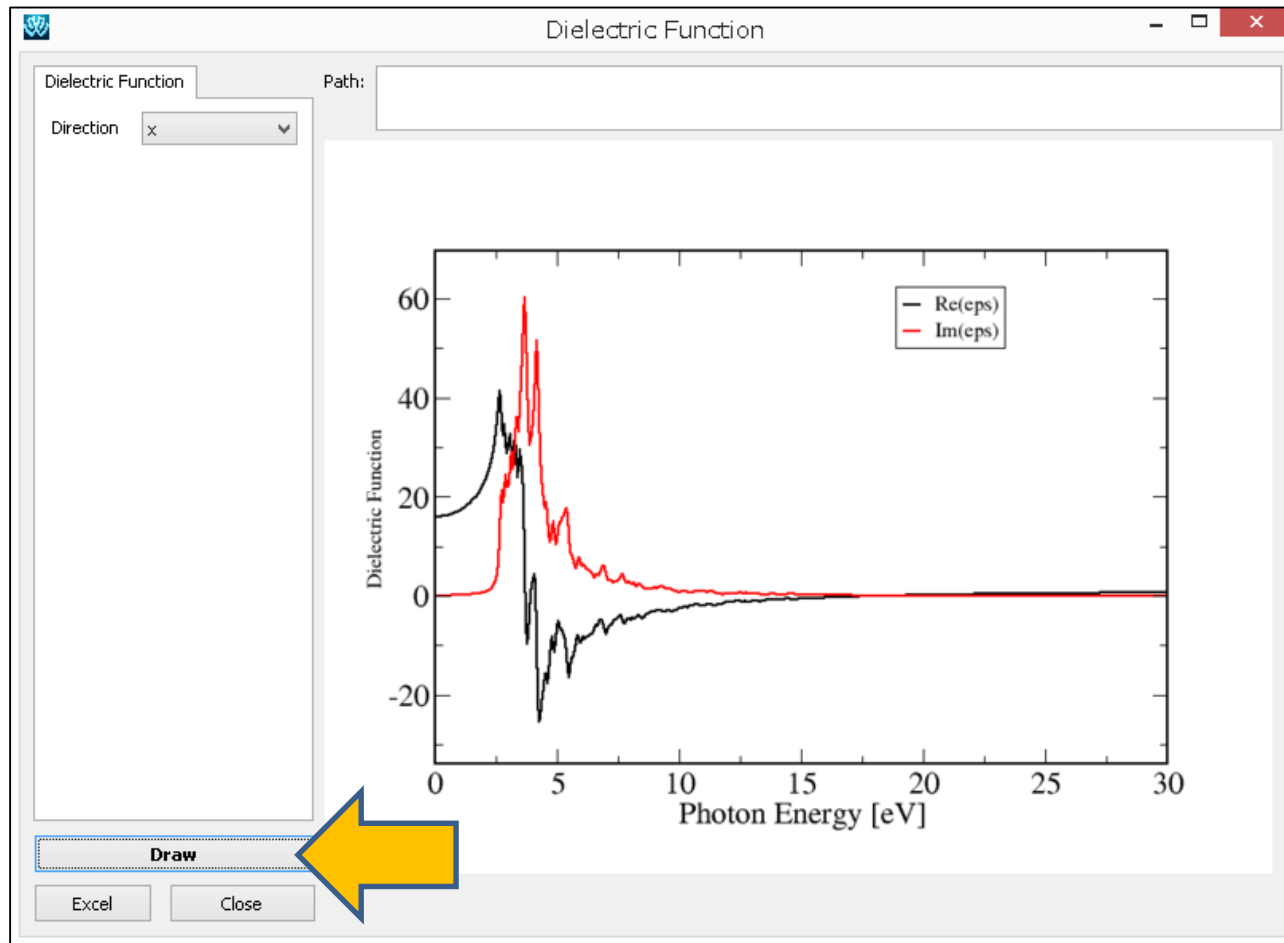
II. 結果の表示

1. [固体] > [Quantum ESPRESSO] > [誘電関数]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. 結果の表示

[Draw]ボタンを押すと、下図のように誘電関数のグラフが表示される。



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!