

Winmostar チュートリアル  
Quantum ESPRESSO  
フェルミ面  
V8.000

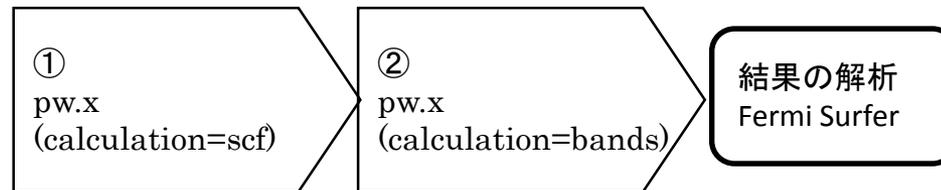
株式会社クロスアビリティ

[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2017/10/01

# 概要

- Cu結晶のSCF計算を実施し、その後各k点での電子状態を算出した上でフェルミ面の表示を行います。(Winmostar上では連続して実行されます)。



## 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の設定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](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](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
<b>QE-5.2.1</b>	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		
		<b>qe-5.2.1-64bit-mpich2.exe</b>		
		qe-5.2.1-32bit-serial.exe	50 MB	5097
		atonic-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
		espresso-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

1. [メニュー] > [開く]をクリック。
2. サンプルフォルダ内のcu.cifを開く。(デフォルトではC:\winmos8\samples\cu.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 の操作手順に従い、以下の情報を元に単位格子を作成する。

## Cu単位格子について

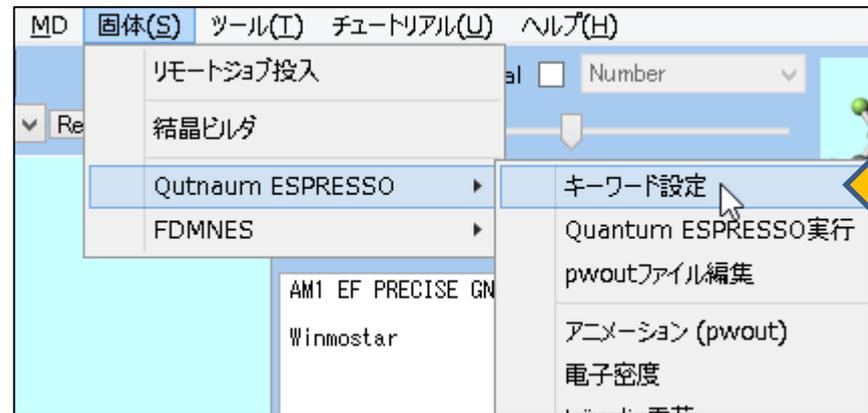
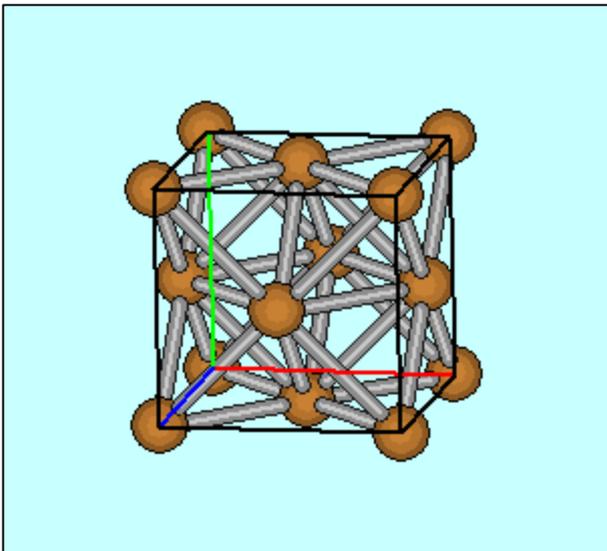
Crystal system: Cubic

Space group : Fm-3m (225)

Lattice constants : a=3.6149 Å

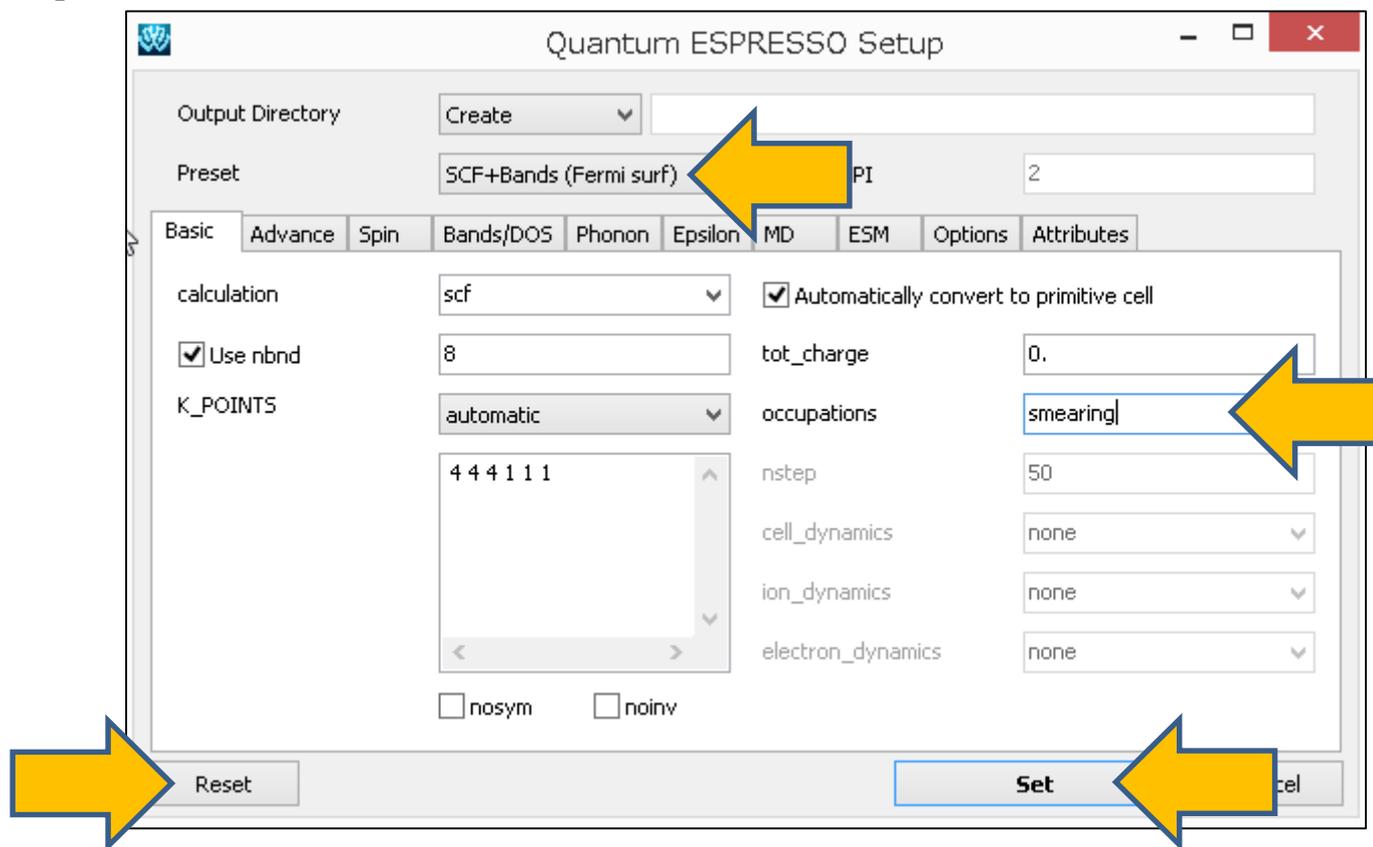
Asymmetric unit: Cu (0.0 0.0 0.0)

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



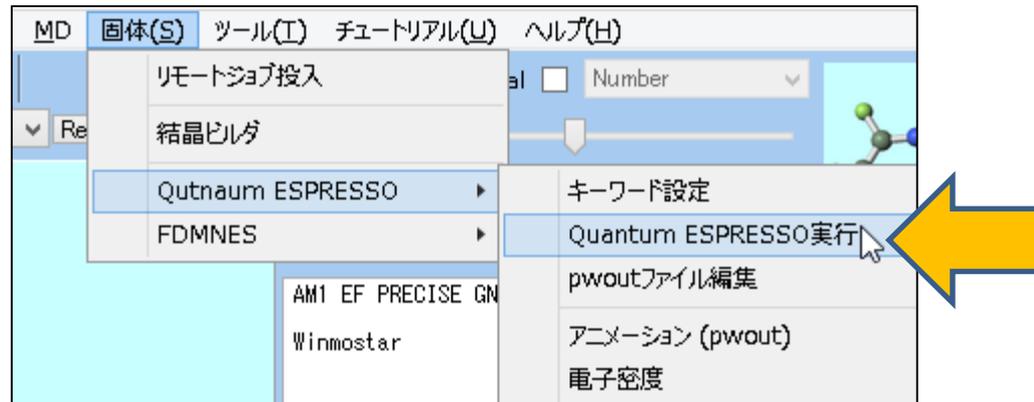
## II. QEによる計算

1. [Reset]ボタンを押す。
2. [Preset]に"SCF+Bands (Fermi surf)"、[occupations]に"smearing"を選択し、[Set]ボタンを押す。



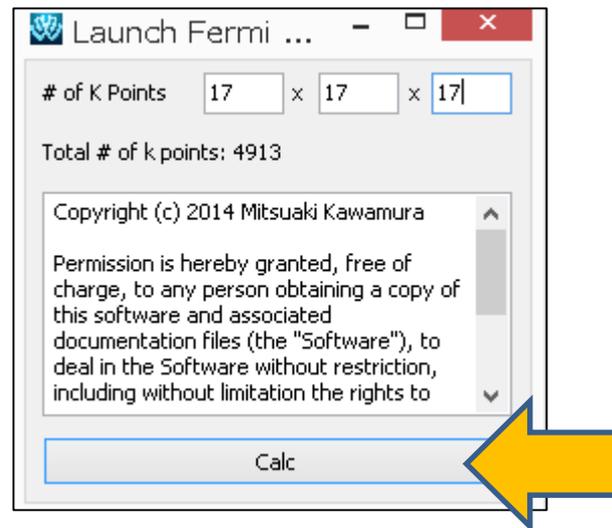
## II. QEによる計算

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「cu\_fermi.pwin」とする。



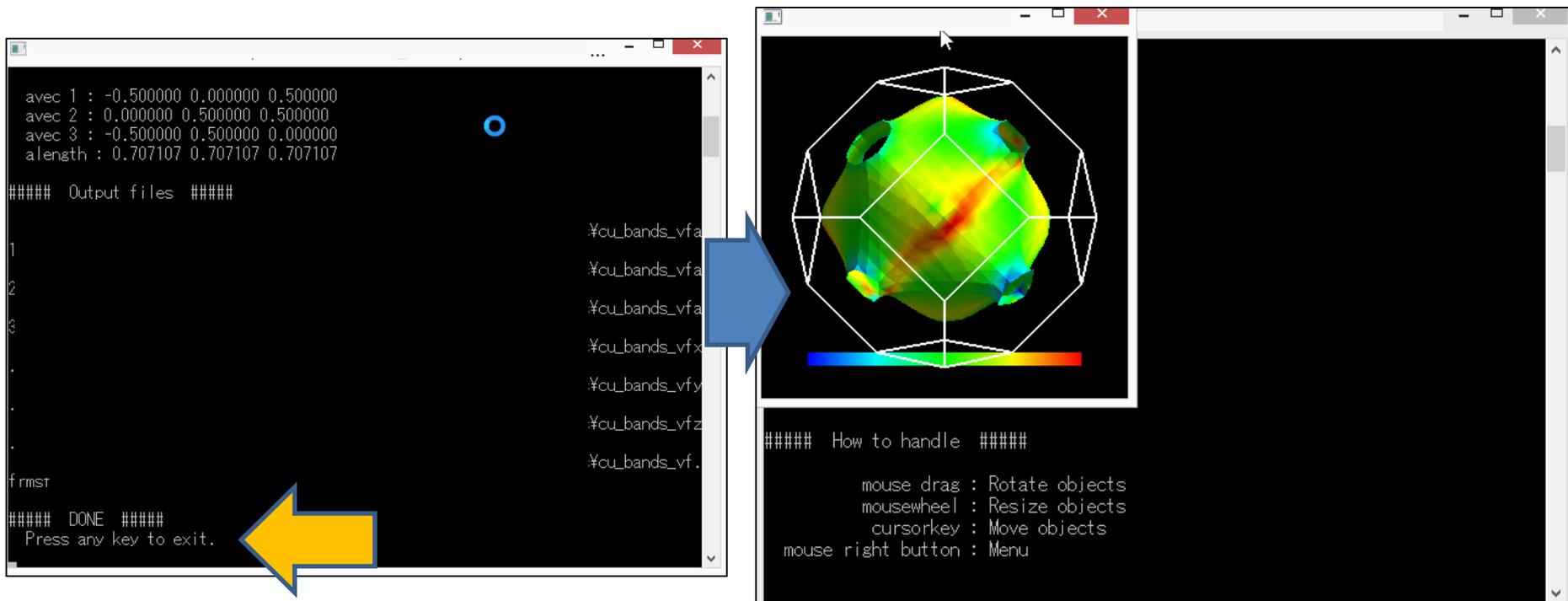
## III. フェルミ面表示

1. 計算終了後、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [フェルミ面]をクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開く。
2. [Calc]ボタンをクリックし、出力ファイル名を入力する。



### III. フェルミ面表示

1. コマンドプロンプトに"Press any key to exit"と表示されたら何かキーを押す。
2. 表示用アプリ(FermiSurfer)が起動し、フェルミ面が表示される。



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...](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!