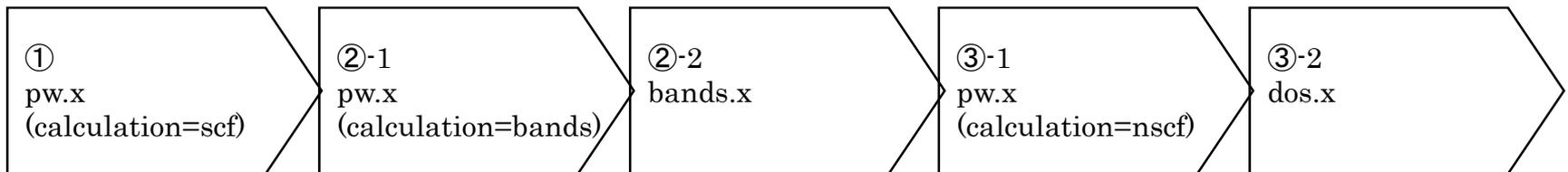


Winmostar™ チュートリアル
Quantum ESPRESSO
スピン分極計算
V8.025

株式会社クロスアビリティ
2018/7/27

概要

- Fe結晶のSCF計算を実施し、その後バンド構造、状態密度の算出を行います (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。
- 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¥brillouin_zones.pdf` を参考に設定してください。

動作環境設定

① 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。

② 以下のURLよりFe.pbe-nd-rrkjus.UPFを入手し、
Quantum ESPRESSOインストールフォルダの下のpseudoフォルダに入れ
Winmostarを再起動する。

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



I. モデルの作成

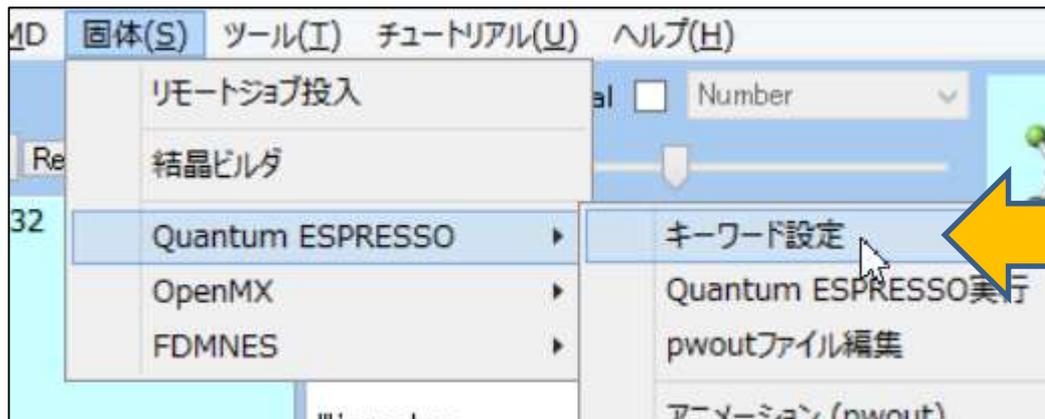
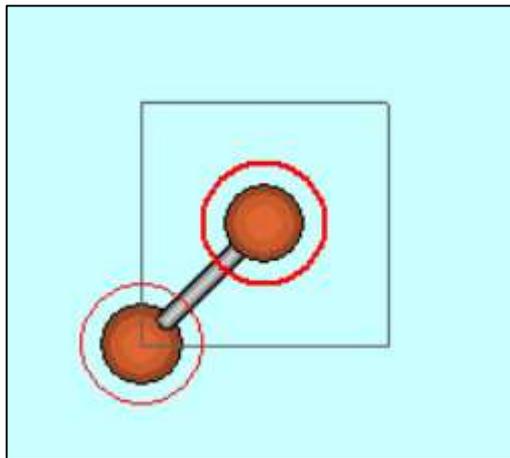
1. [メニュー] > [開く]をクリック。
2. サンプルフォルダ内のfe.cifを開く。(デフォルトではC:¥winmos8¥samples¥fe.cif)

※ 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。

Fe単位格子について

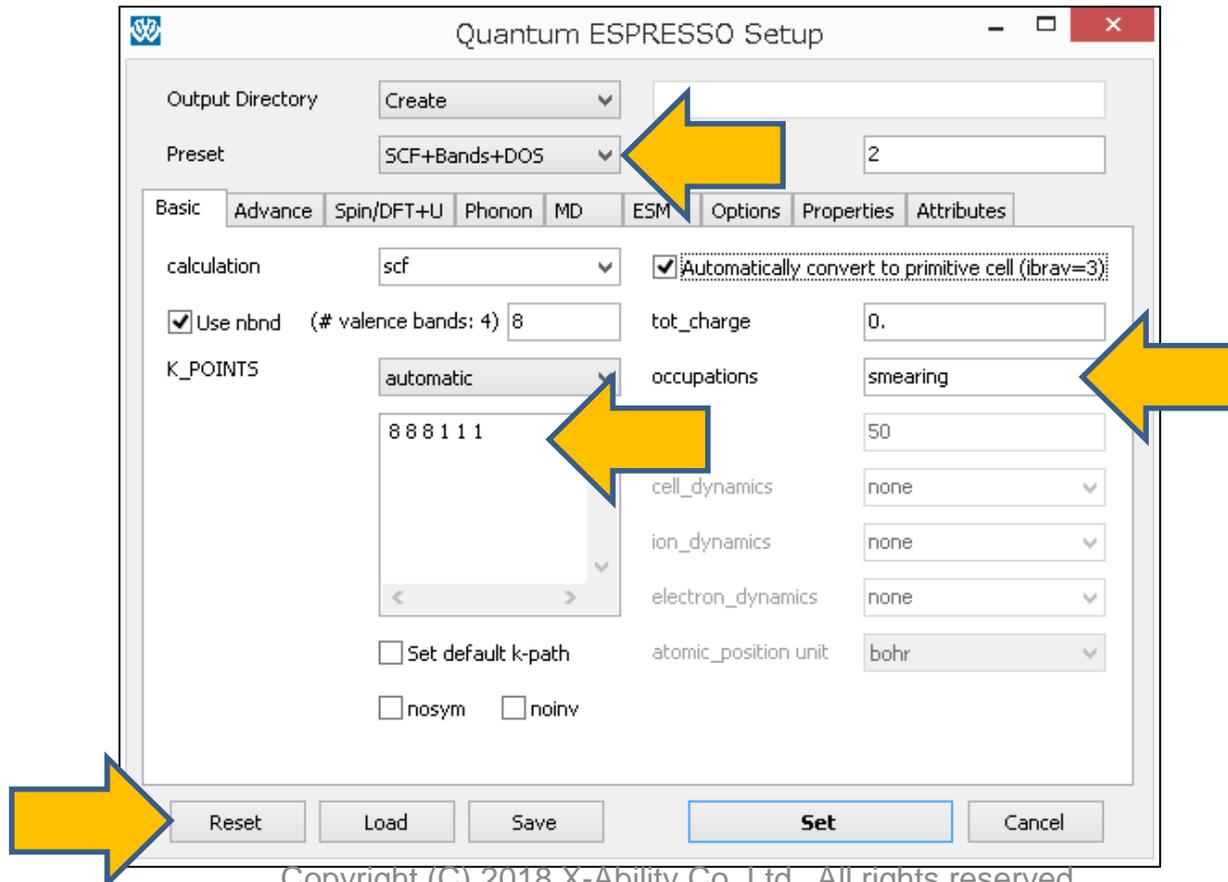
Crystal system: Cubic
Space group : Im-3m (229)
Lattice constants : a=2.8665 Å
Asymmetric unit: Fe (0.0 0.0 0.0)

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



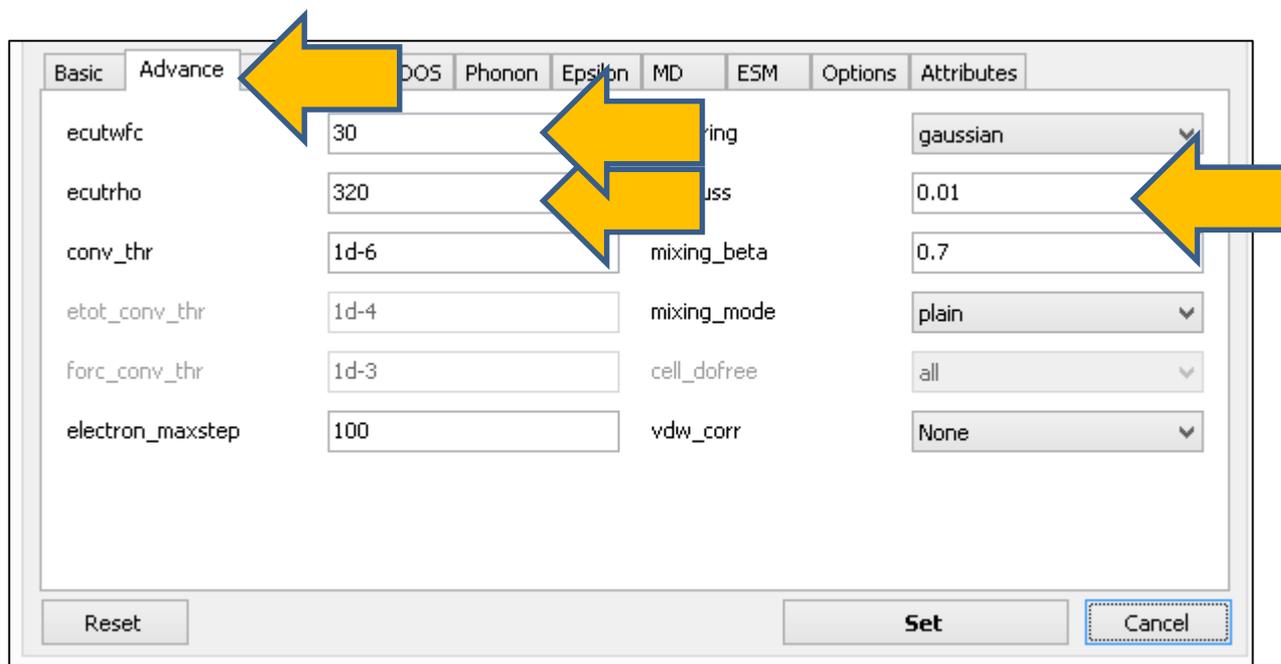
II. QEによる計算

1. [Reset]ボタンをクリックし、[Preset]に"SCF+Bands+DOS"を選択する。
2. [K Points]のテキストボックスに"8 8 8 1 1 1"(スペース区切り)と入力し、[occupations]に"smearing"を選択する。



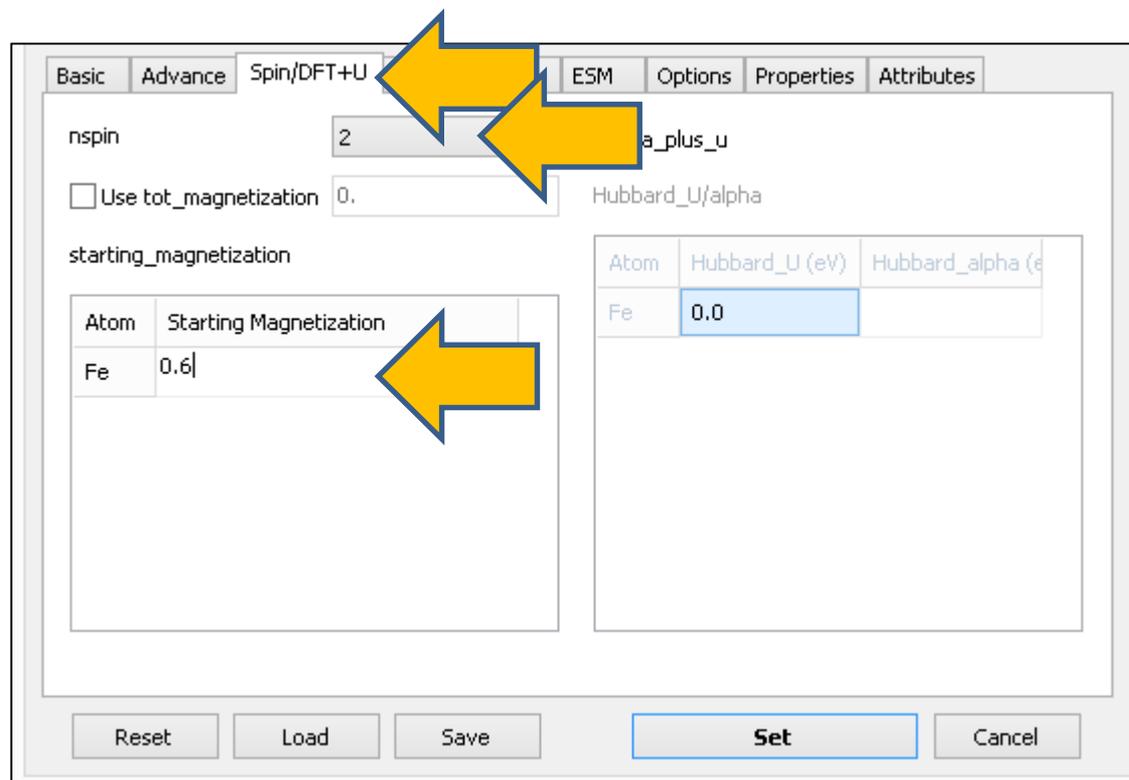
II. QEによる計算

[Advance]タブを開き、[ecutwfc]に"30"、[ecutrho]に"320"、[degauss]に"0.01"を指定する。



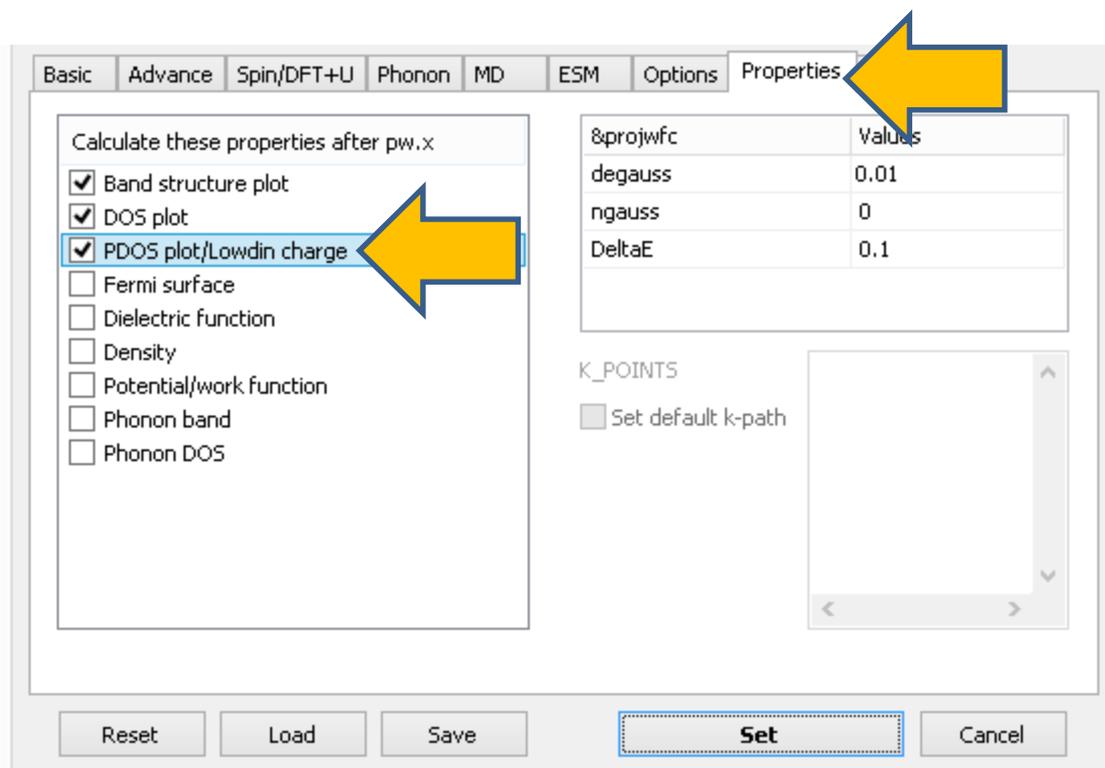
II. QEによる計算

[Spin/DFT+U]タブを開き、[nspin]に"2"、Feの[Starting Magnetization]に"0.6"を指定する。



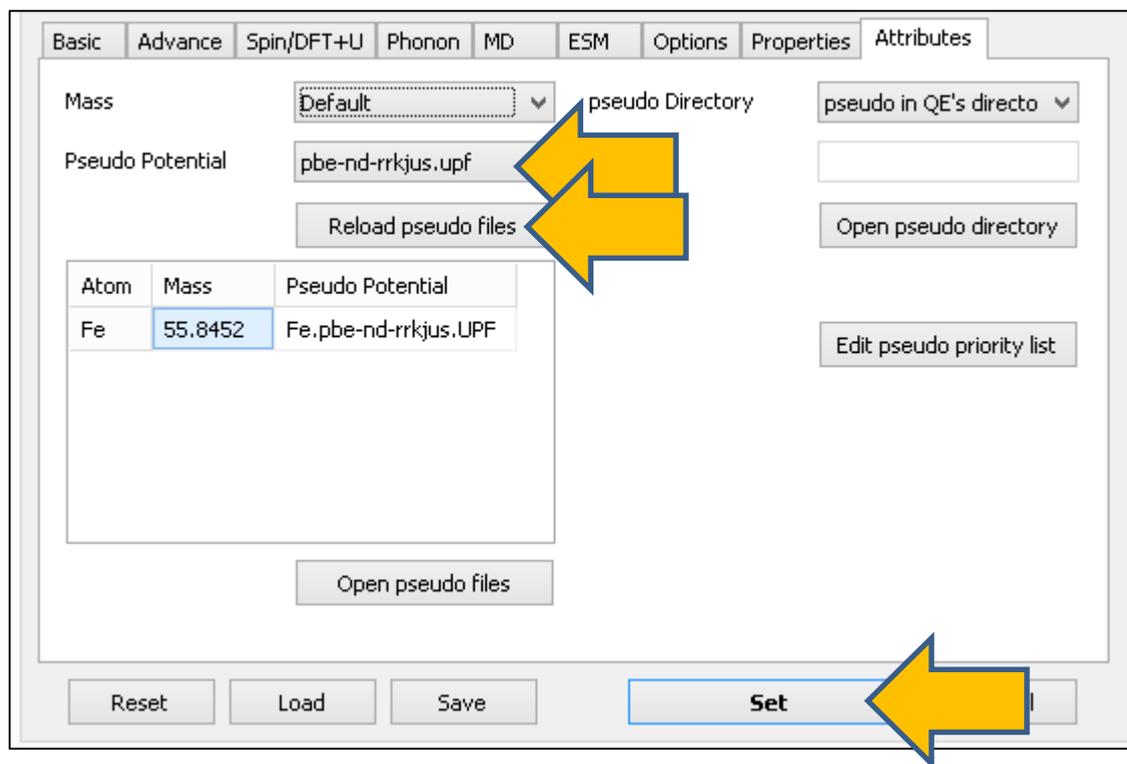
II. QEによる計算

[Properties]タブを開き、[PDOS plot/Lowdin charge]にチェックを入れる。



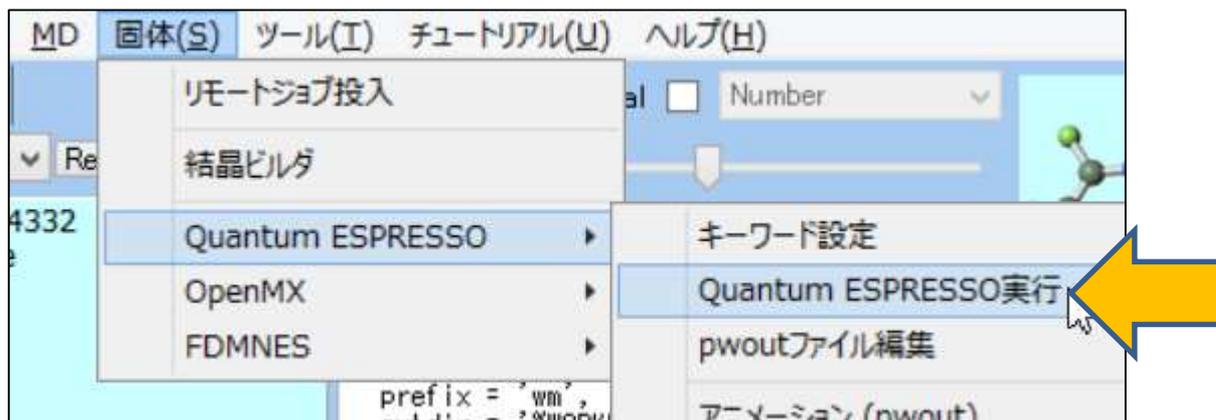
II. QEによる計算

[Attributes]タブを開き、[Pseudo Potential]に "pbe-nd-rrkjus.upf" 指定し、[Set]する。"pbe-nd-rrkjus.upf"が無い場合は、P. 3の手順に従いファイルをpseudoフォルダに格納し[Reload pseudo Files]ボタンを押す。



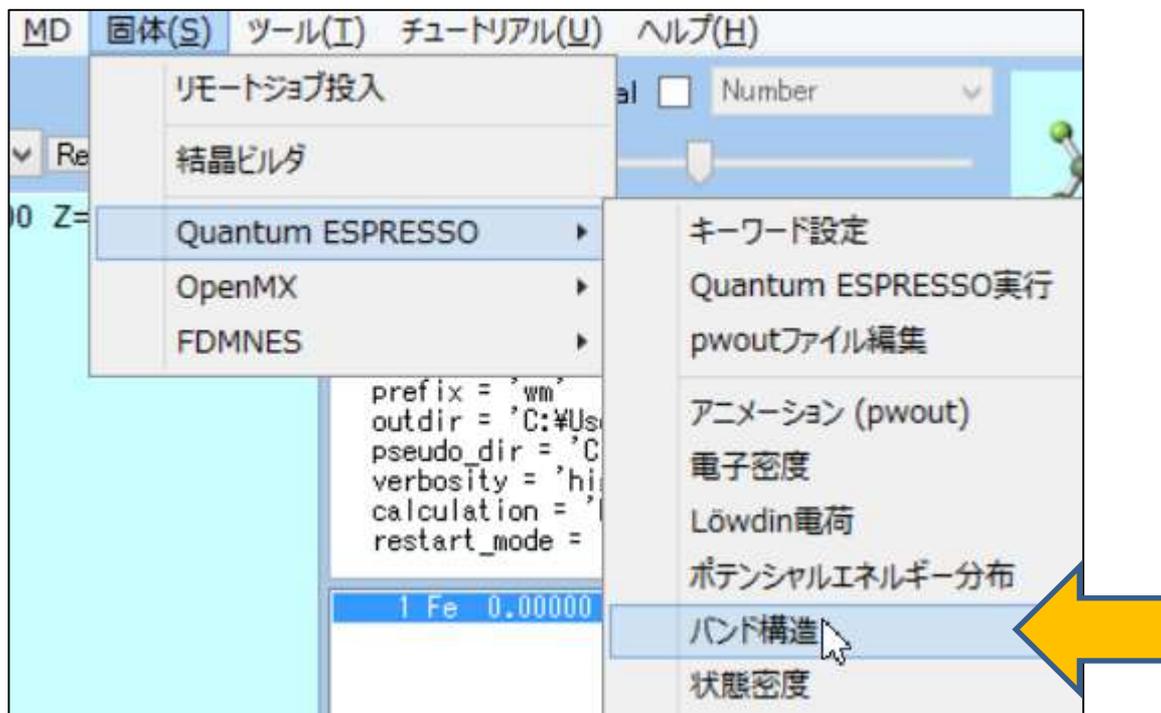
II. QEによる計算

[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [Quantum ESPRESSO実行]をクリックする。
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"fe_tutor.pwin"とする。



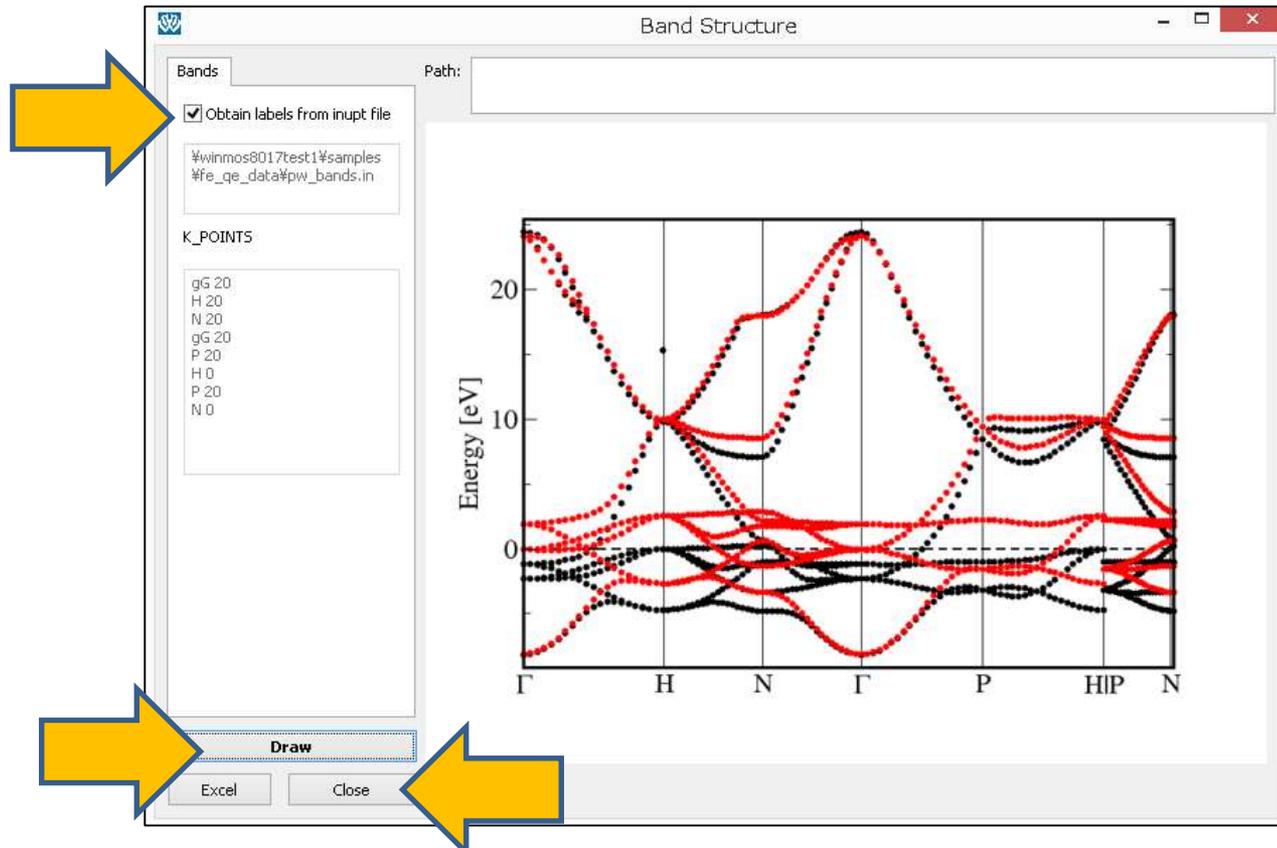
III. 結果解析

計算終了後、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [バンド構造]をクリックする。デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを開く。



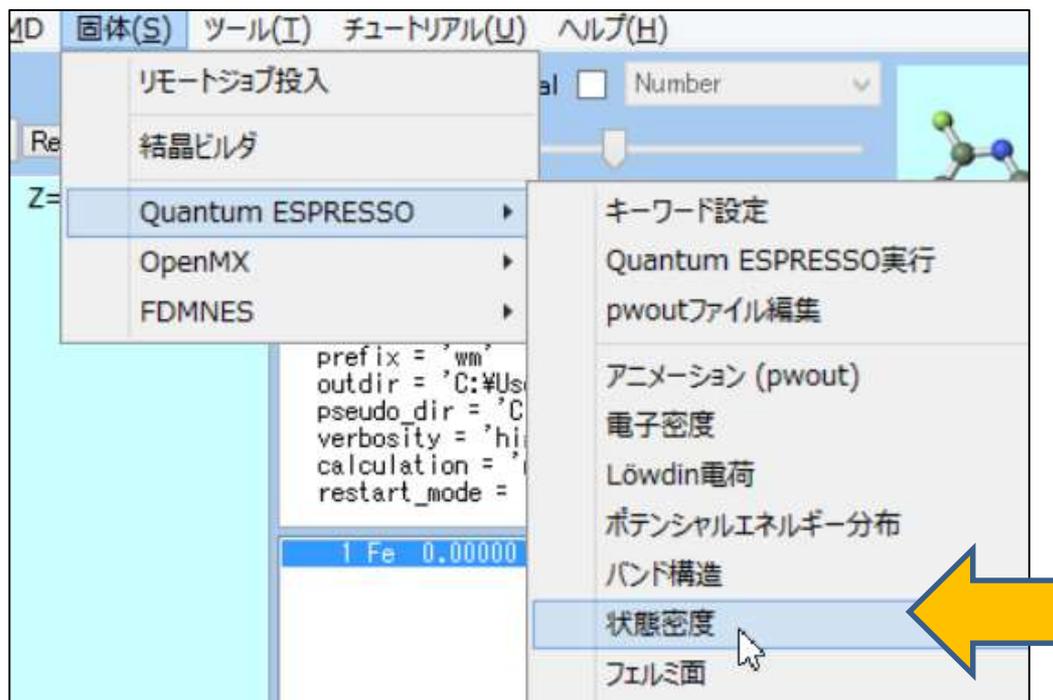
III. 結果解析

[obtain labels from input file]にチェックを入れ、デフォルトで選ばれているファイルを開く。その後[Draw]を押すとup, downスピンそれぞれのバンド構造が描画される。確認後[Close]ボタンを押す。



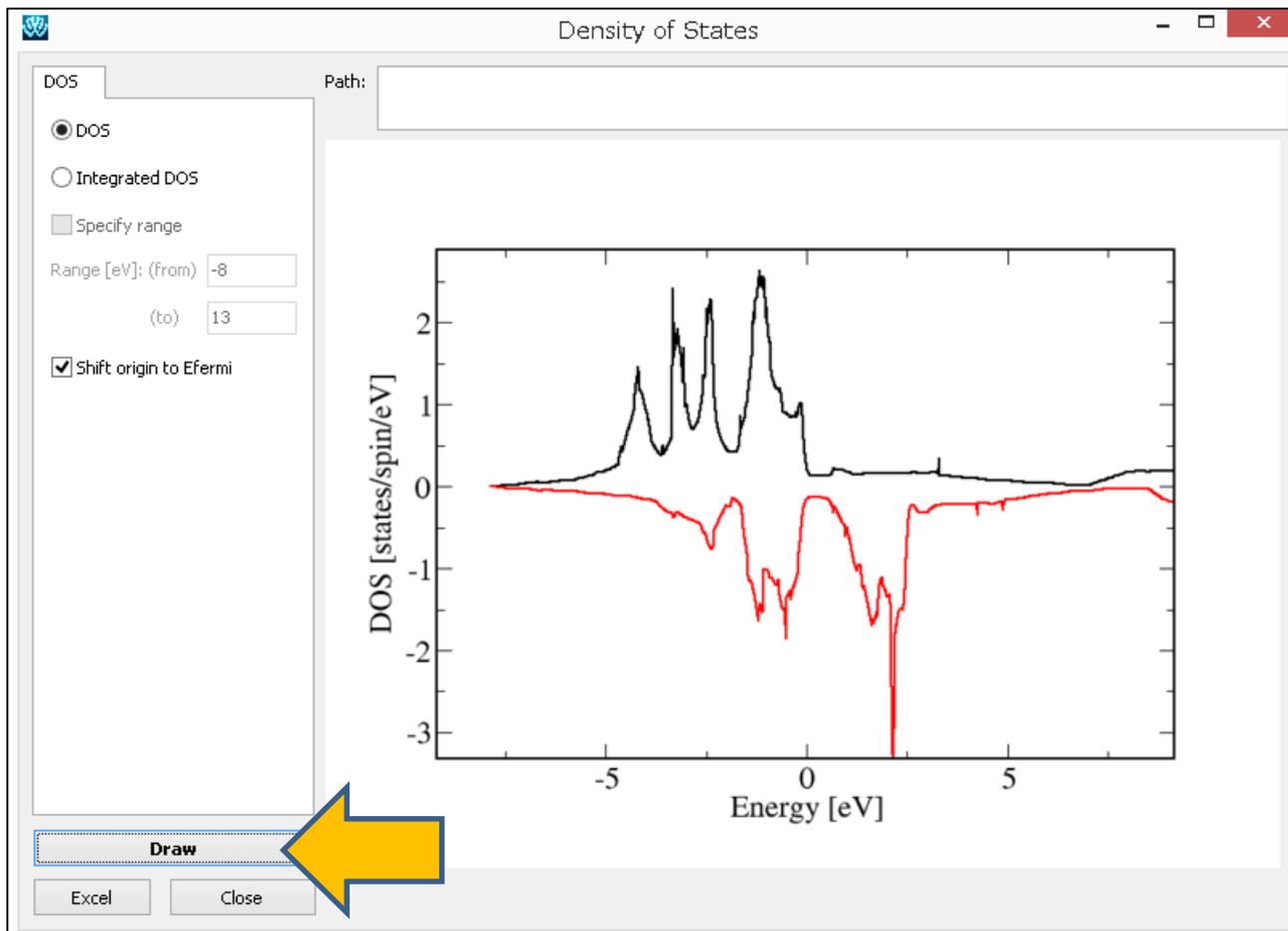
III. 結果解析

計算終了後、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [状態密度]をクリックする。
デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを開く。



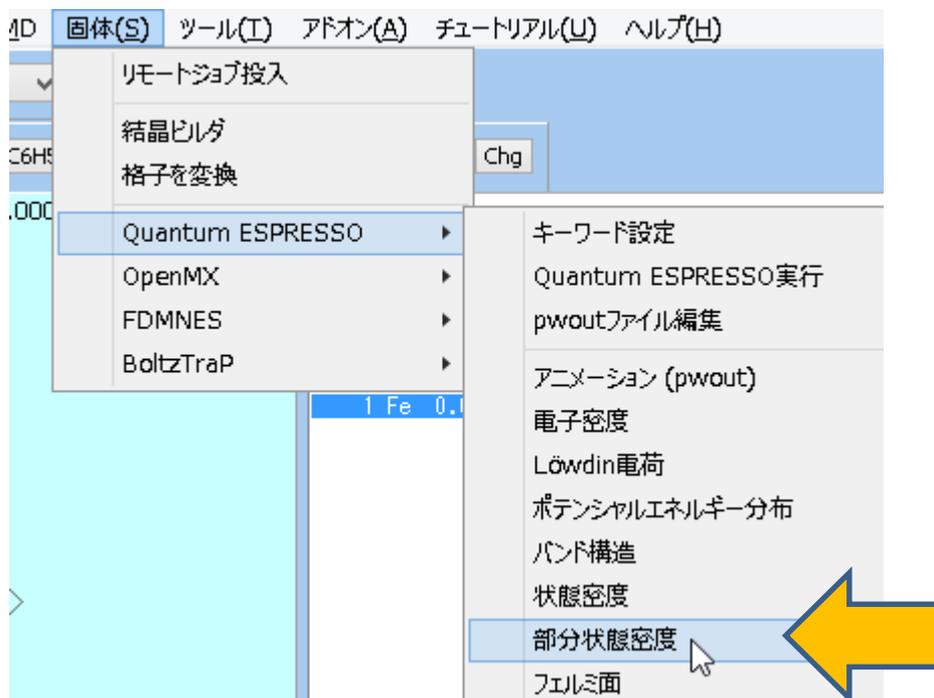
III. 結果解析

[Draw]ボタンを押すと、up, downスピンそれぞれのDOSが表示される。



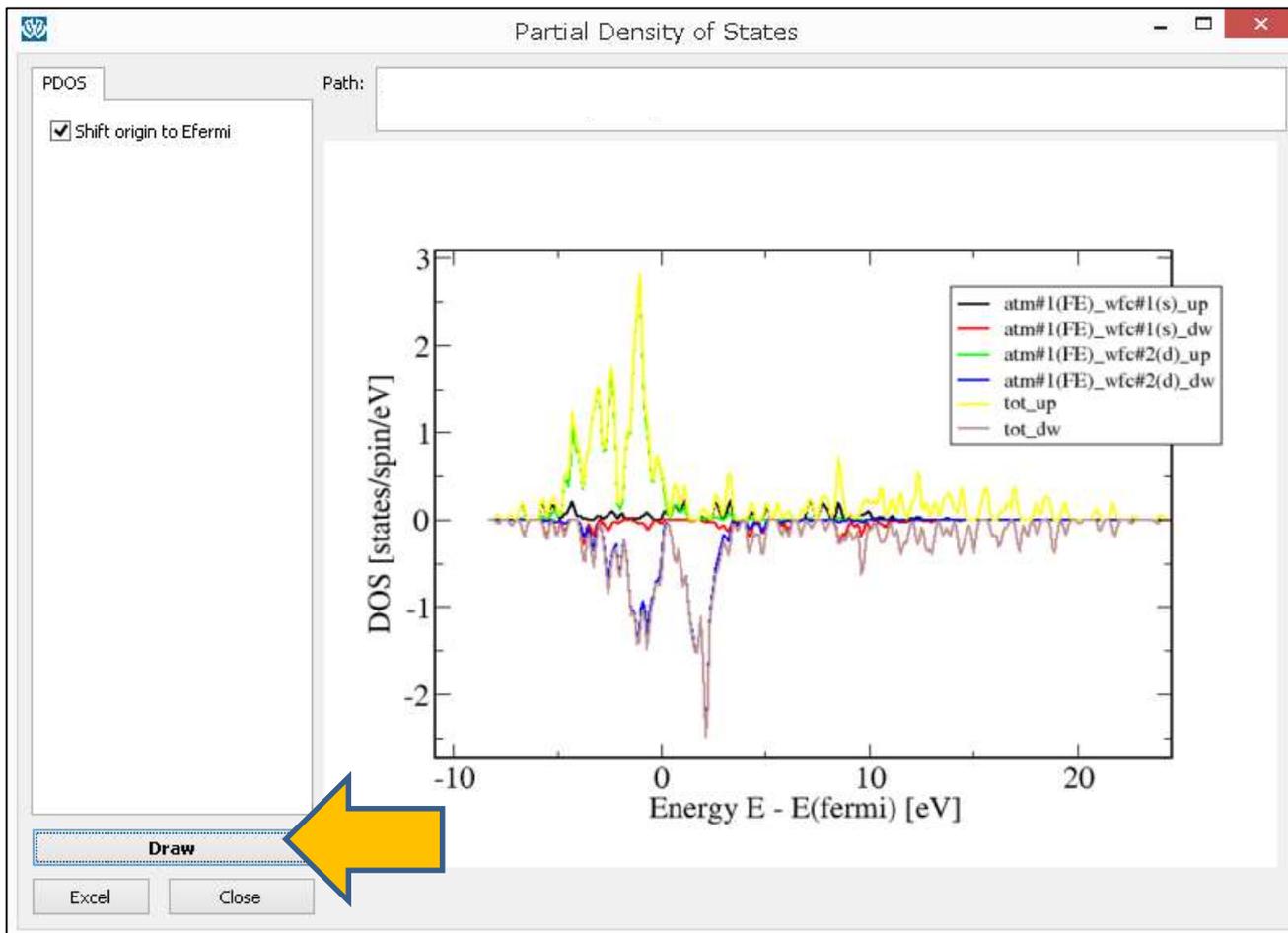
III. 結果解析

計算終了後、[固体] > [Quantum ESPRESSO] > [部分状態密度]をクリックする。デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを開く。



III. 結果解析

[Draw]ボタンを押すと、up, downスピンそれぞれのDOS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_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