

Winmostar™ チュートリアル
BoltzTraP
Quantum ESPRESSOとの連携
V9.0.0

株式会社クロスアビリティ

2019年1月15日

概要

- Quantum ESPRESSO(以降QE)により Mg_2Si 結晶のNSCF計算を行いアウトプットファイルを取得します。このアウトプットファイルを元にBoltzTraPの設定および計算を実施します。その後ゼーベック係数の可視化を行います。

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は計算結果に大きな影響を与えます。

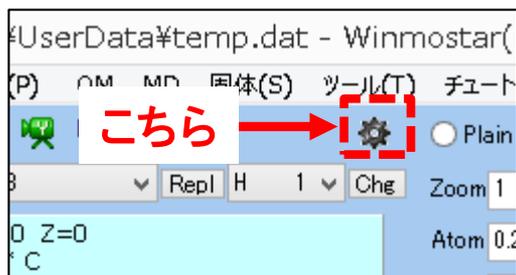
動作環境設定(BoltzTraP)

本機能を用いるためには、Cygwinのセットアップが必要です。

- https://winmostar.com/jp/manual_jp.htmlの「2. 計算エンジンのインストール」から、Cygwinの自己解凍書庫(exe)を入手し実行してください。

下記リンクから各パッケージがコンパイル済のCygwinのインストーラをダウンロードし、実行します。
[cygwin_wm_v8_20180510.exe\(687MB\)](#)
 これにより、GROMACS, Amber(sander)のインストール環境 (Cygwin,Acypypeなど) が全て整います。
 ※ダウンロードや実行が上手くいかない場合は **こちら** をお試しください。

- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



I. モデルの作成1

1. ファイル | 開くをクリックする。
2. サンプルフォルダ内のmg2si.cifを開く。(デフォルトではC:\winmos9\samples\si.cif)
3. ソルバー一覧から**Quantum ESPRESSO**を選択し、 (キーワード設定) をクリックする。

※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。

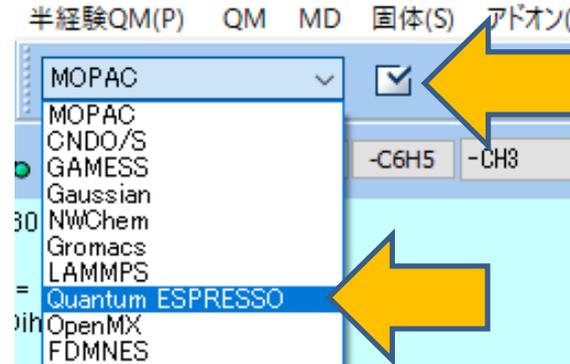
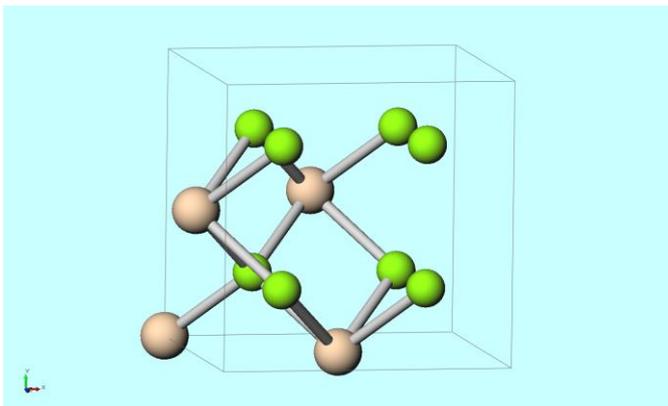
Mg₂Si単位格子について

Crystal system: Cubic

Space group : Fm-3m (225)

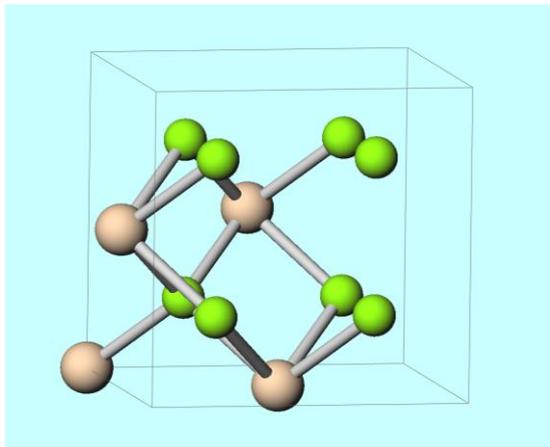
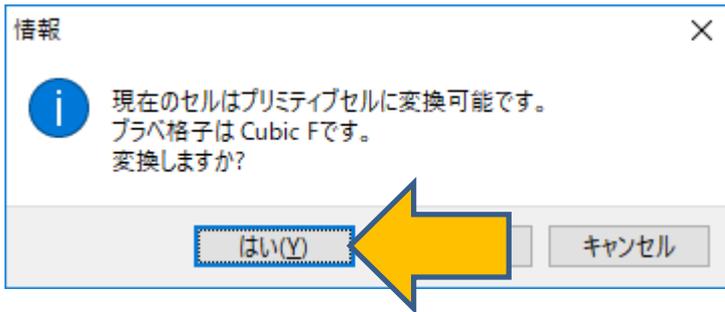
Lattice constants : a=6.351 Å

Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0), Mg (0.25 0.25 0.25)

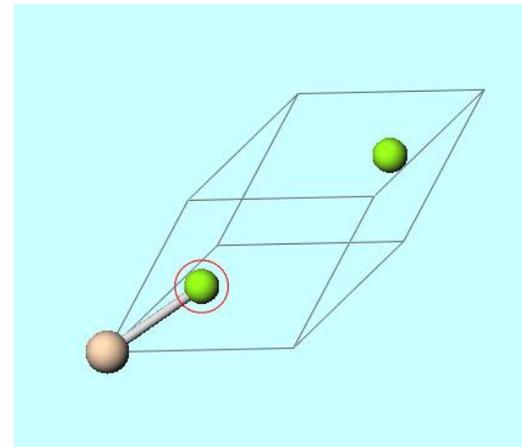


I. モデルの作成2

プリミティブセルに変換するか聞かれるのははいを選択する。
メイン画面上の単位格子がコンベンショナルセルからプリミティブセルに変換される。



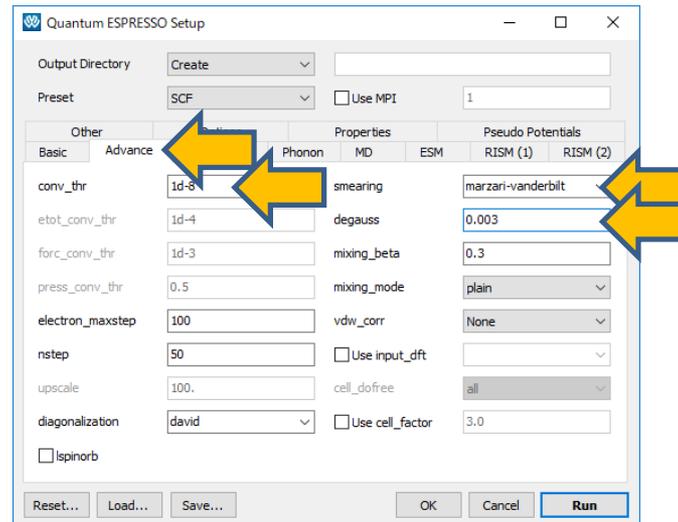
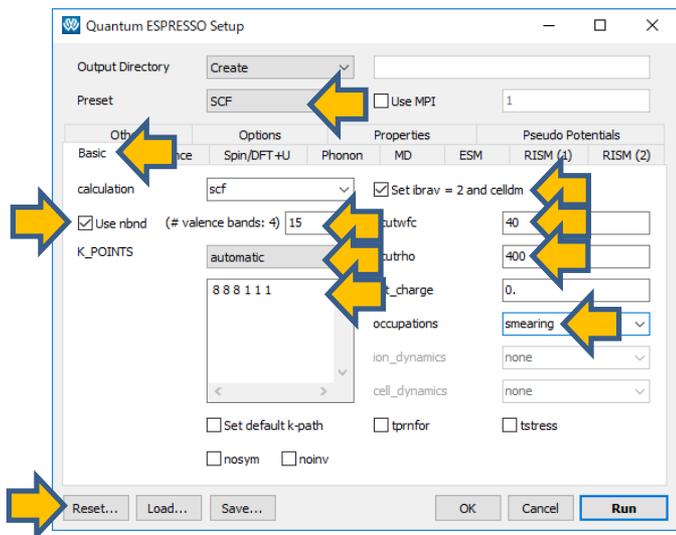
コンベンショナルセル



プリミティブセル

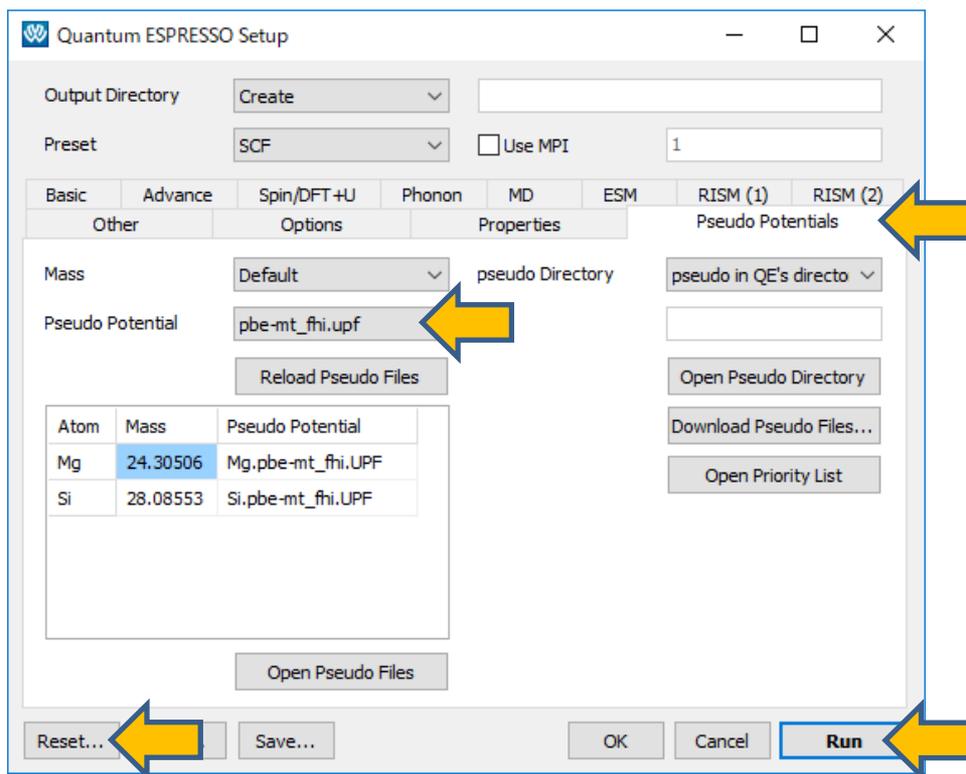
II. QEによるSCF計算1

1. **Reset**をクリックする。
2. **Basic**タブにて、
 - ・**Use nbnd**にチェックを入れ、その右のフォームに**15**と入力する。
 - ・**KPOINTS**から**automatic**を選択し、**8 8 8 1 1 1**と入力する。
 - ・**Set ibrav = 2 and celldm**にチェックを入れる。
 - ・**ecutwfc**を**40**, **ecutrho**を**400**と入力する。
 - ・**occupations**から**smearing**を選択する。
3. **Advance**タブにて、
 - ・**conv_thr**を**1d-8**と入力する。
 - ・**smearing**から**Marzari-vanderbilt**を選択し、**degauss**に**0.003**と入力する。



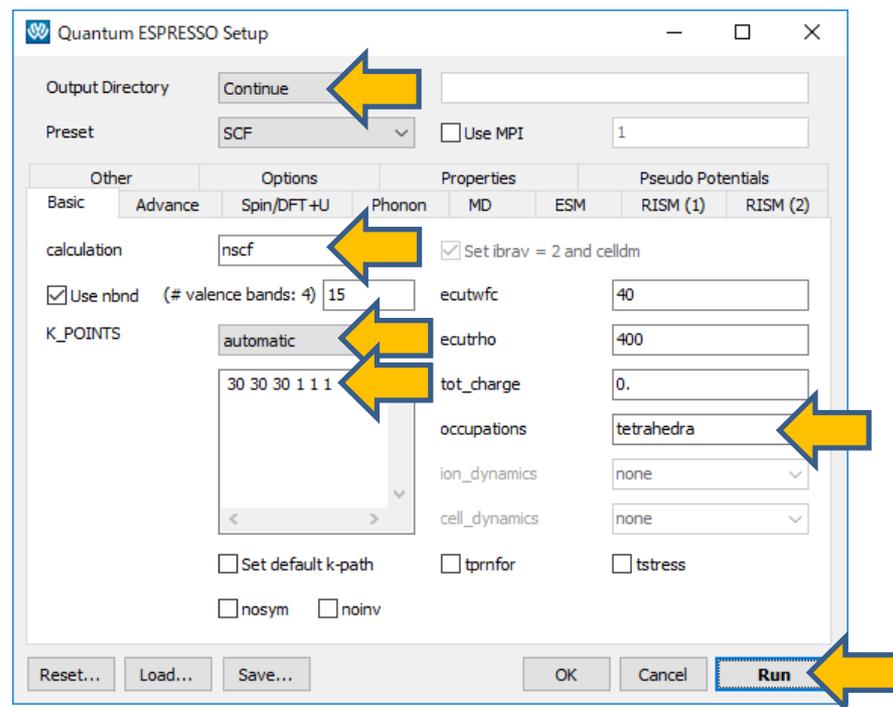
II. QEによるSCF計算2

1. **Pseudo Potentials**タブにて、
・**Pseudo Potential**から**pbe-mt_fhi.upf**を選択する。
2. **Run**をクリックし、ファイル名に**Mg2Si_scf.pwin**と入力し保存する。



III. QEによるNSCF計算

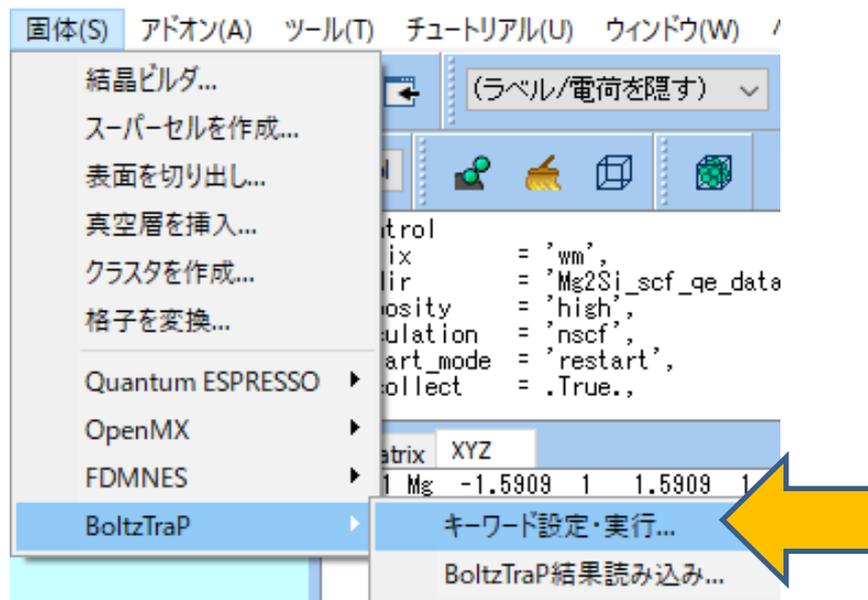
1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **Output Directory**から**Continue**を選択する。
3. **Basic**タブにて、以下を入力する。
 - ・**calculation=nscf**,
 - ・**K_POINTS=automatic, 30 30 30 1 1 1**
 - ・**occupation=tetrahedra**



5. **Run**をクリックし、ファイル名に**Mg2Si_nscf.pwin**と入力して保存する。

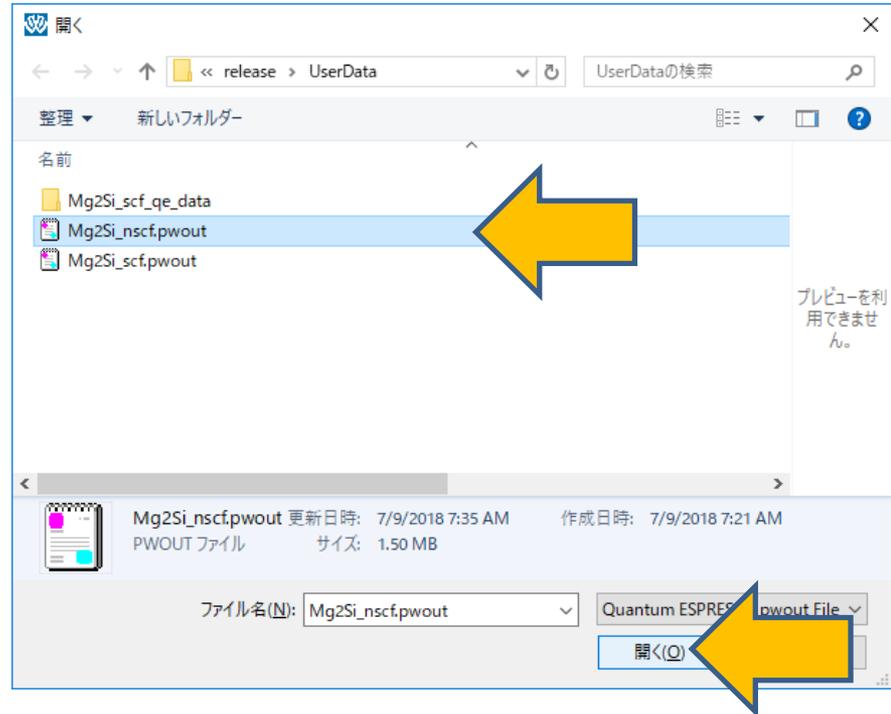
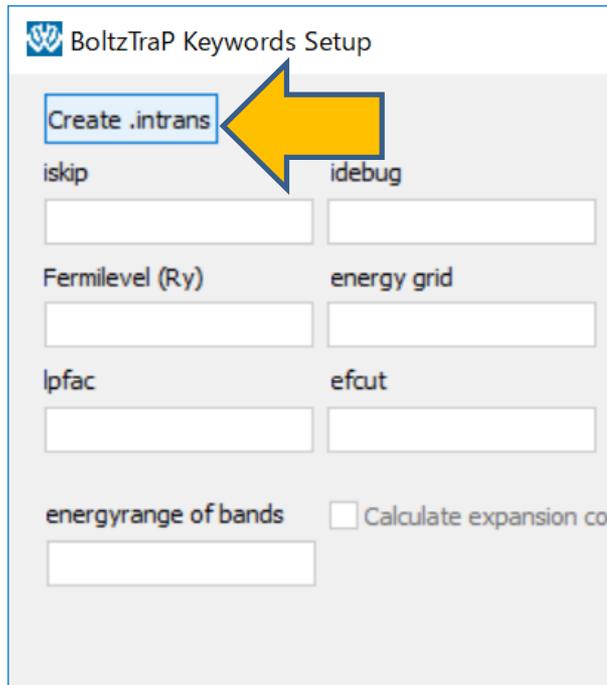
IV. intransファイルの作成1

1. Quantum ESPRESSOの計算終了後、
固体 | BoltzTraP | キーワード設定・実行をクリックする。



IV. intransファイルの作成2

1. **Create .intrans**をクリックする。
2. ダイアログ上で**Mg2Si_nscf.pwout**を選び、**開く**をクリックする。
.intransファイルが作成され、フォームに読み込まれる。



V. BoltzTraPによる計算

1. **Tmax**を**1200**と変更する。
2. **Start BoltzTraP**をクリックする。キーワード設定画面は閉じられ、コンソール画面が起動する。

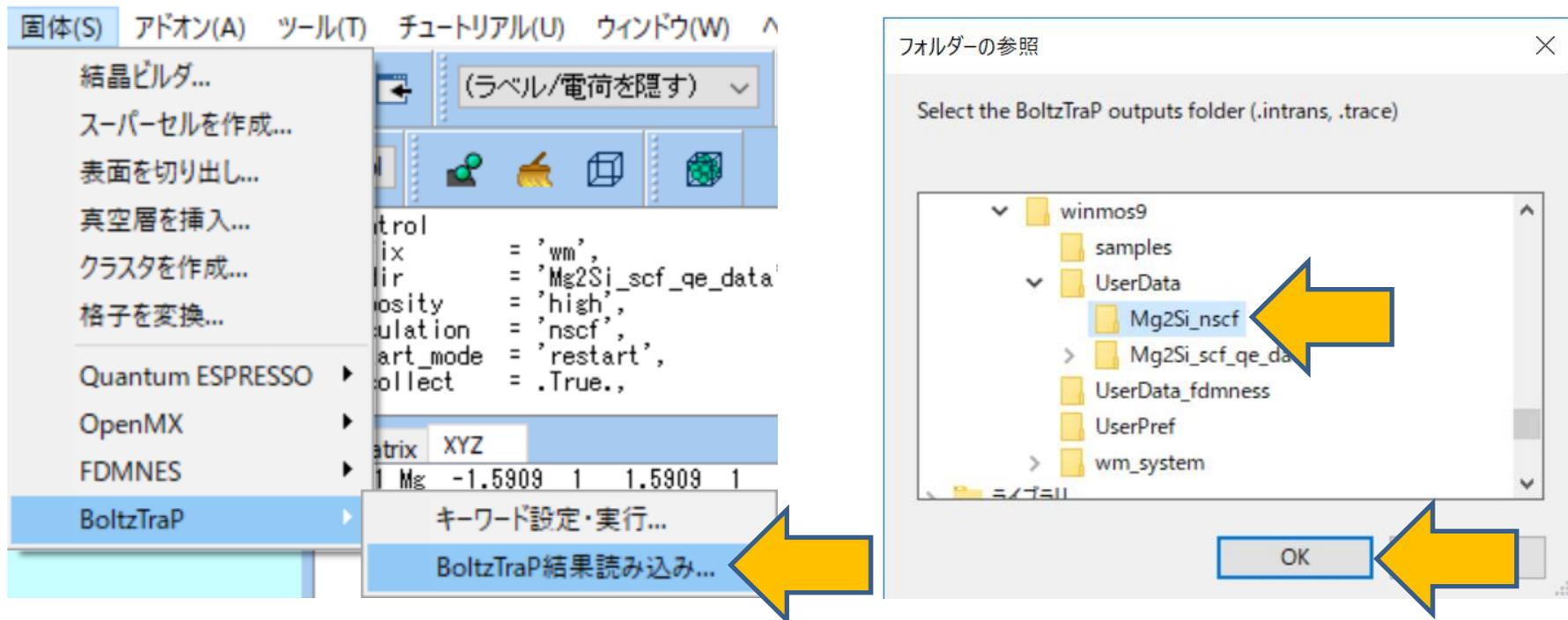
The screenshot shows the 'BoltzTraP Keywords Setup' dialog box with the following fields and values:

iskip	idebug	Setgap	shiftgap
0	0	0	0.0
Fermilevel (Ry)	energy grid	energy span	number of electrons
0.335219981632	0.0005	0.4	8.0
lpfac	efcut	Tmax	temperature grid
5	0.15	1200.0	50.0
energyrange of bands	<input checked="" type="checkbox"/> Calculate expansion coeff		
-1.0			

Buttons: Create .intrans, Start BoltzTraP

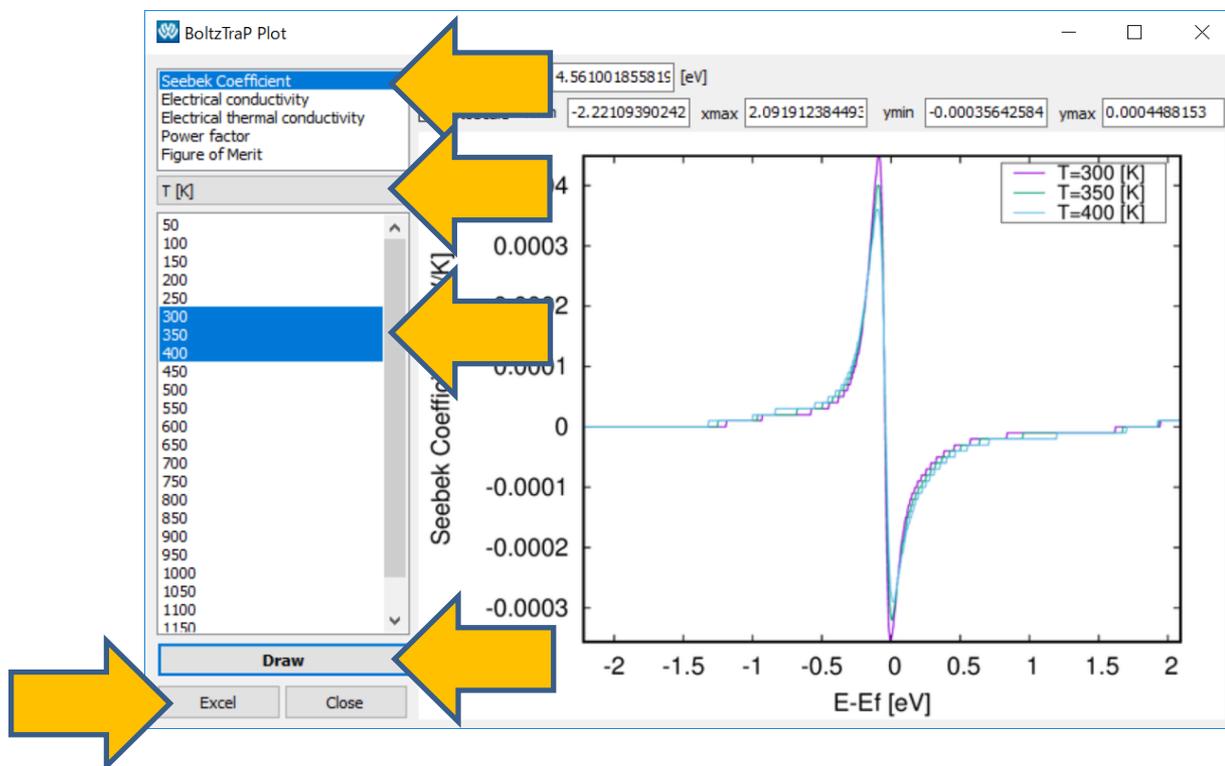
VI. traceファイルの可視化1

1. 計算終了後、**固体** | **BoltzTraP** | **BoltzTraP結果読み込み**をクリックする。
2. デフォルトで直前のジョブの作業ディレクトリが選択されているので、**OK**をクリックする。



VI. traceファイルの可視化2

1. 左のパネルの上から**Seebeck Coefficient**, **T [K]**, **250**, **300**, **350**※を選択する。
※リストからの複数選択の方法はctrlを押しながらクリック。
2. **Draw**をクリックすると、グラフが表示される。
このグラフはT=250, 300, 350 [K]の時のゼーベック係数のエネルギー依存性を示している。
左のパネルの**T [K]**を**E-Ef [eV]**と変更すると温度依存性グラフも描画できる。
3. **Excel**ボタンをクリックすると表示されているプロットをcsvで出力できる。



<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友

アカウント登録 ログイン

X-Ability
クロスアビリティ

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! 138件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ユーザー投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30 · 公開

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 · 公開