

Winmostar™ チュートリアル

Phonopy

基礎編

V9.3.0

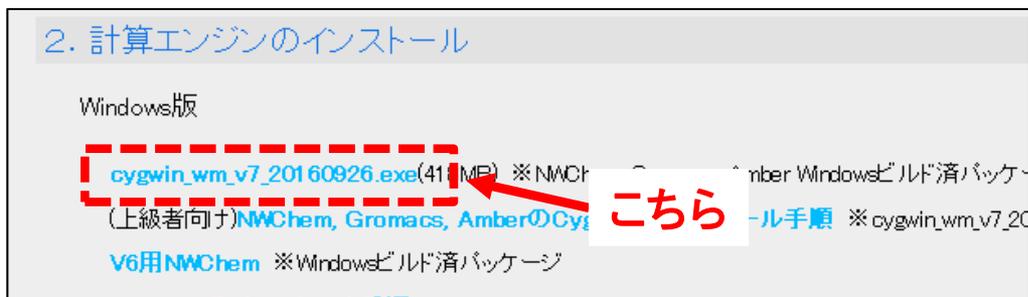
株式会社クロスアビリティ

2019年7月8日

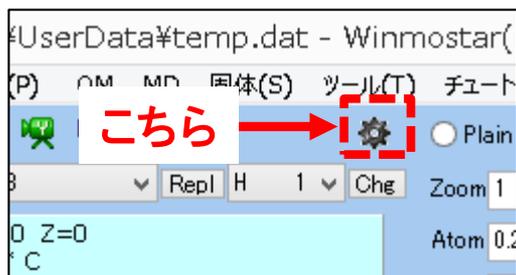
動作環境設定

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。



- 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

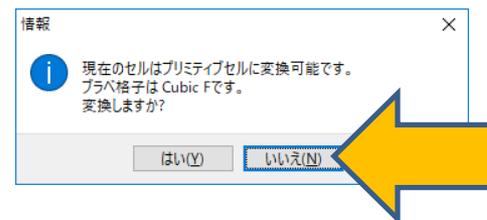
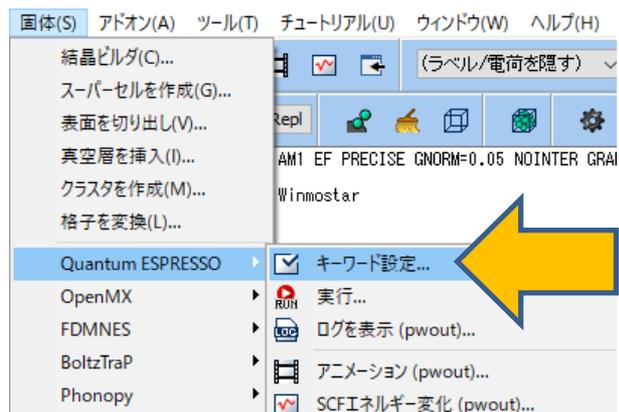
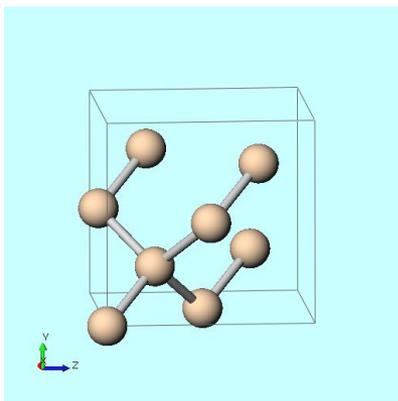
1. ファイル | 開くをクリックする。
2. サンプルフォルダ内の**si.cif**を開く。(デフォルトではC:\winmos9\samples\si.cif)

※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。

シリコン結晶の単位格子について

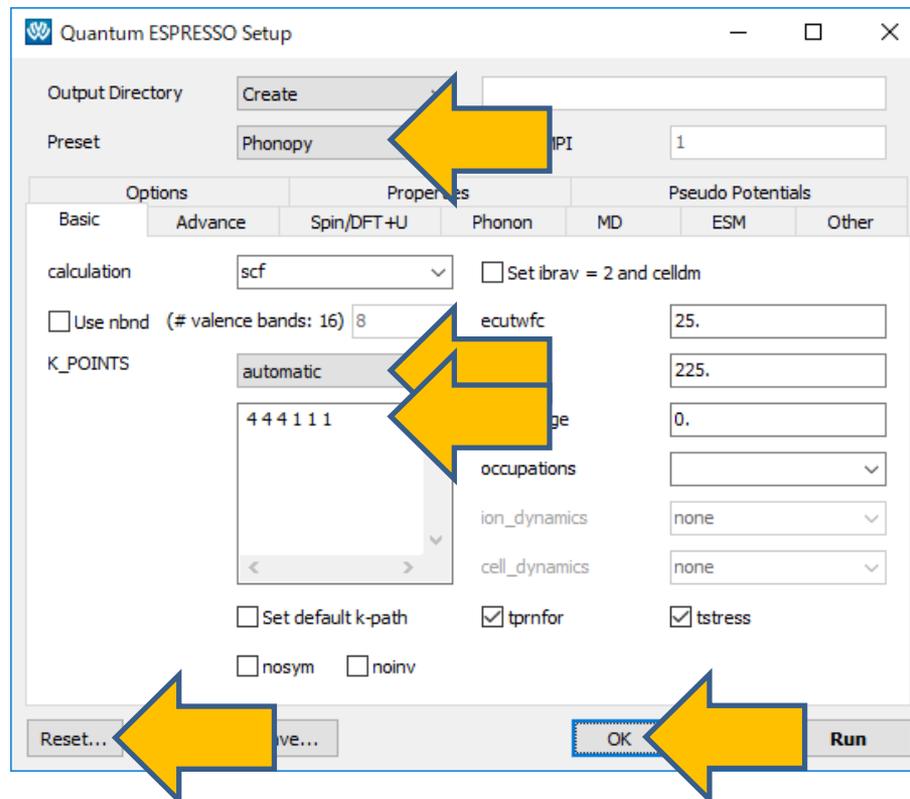
Crystal system: Cubic
Space group : Fd-3m (227)
Lattice constants : a=5.4309 Å
Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)

3. 固体 | **Quantum ESPRESSO** | キーワード設定をクリックする。
4. 格子を変換するか聞かれるので、いいえをクリックする。



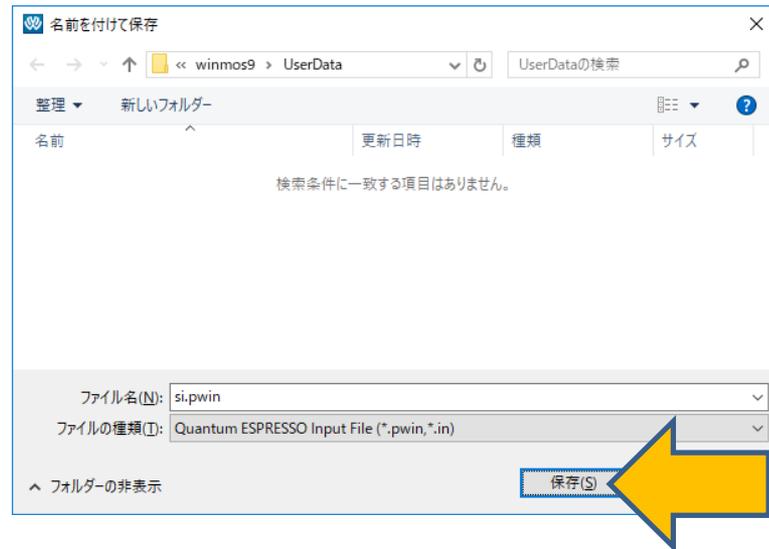
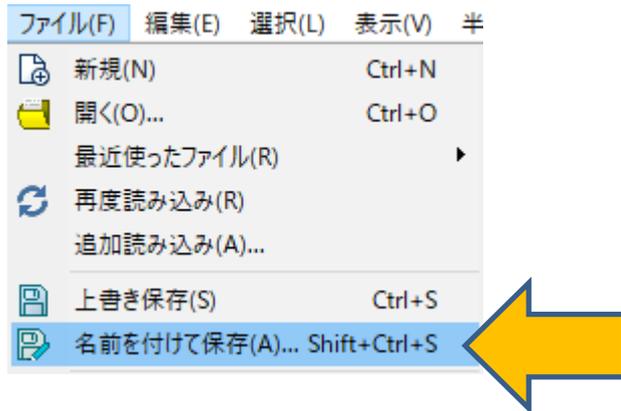
II. Quantum ESPRESSOの入力作成

1. **Reset**をクリックする。
2. **Preset**から**Phonopy**を選択する。
3. **K_POINTS**に**Automatic**を選択し、**4 4 4 1 1 1**と入力する。
4. **OK**をクリックする。



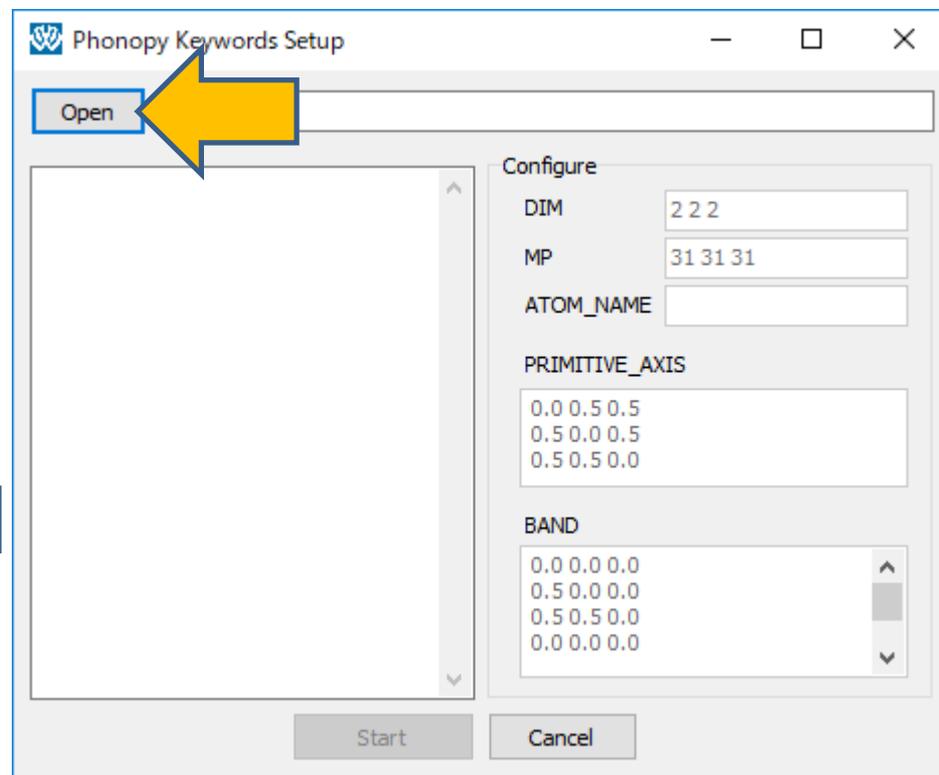
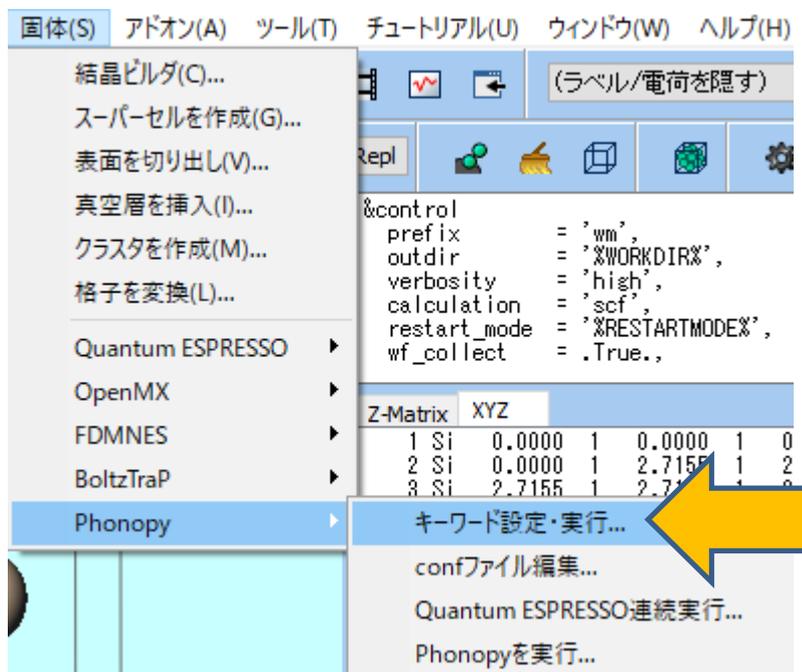
II. Quantum ESPRESSOの入力作成

1. ファイル | 名前を付けて保存をクリックする。
2. **si.pwin**として保存する。



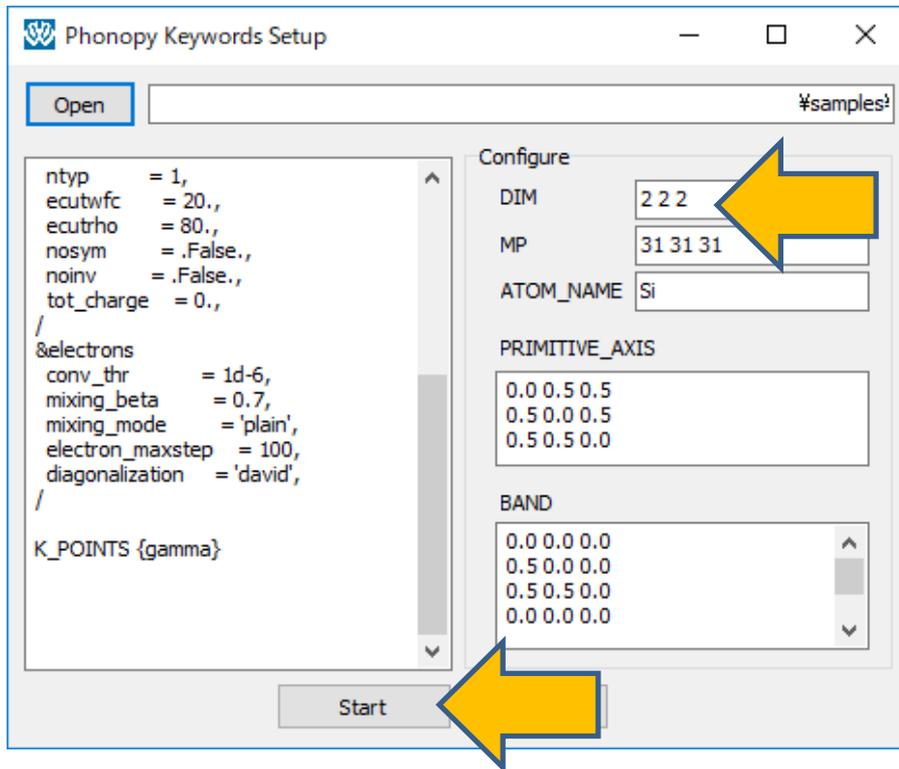
III. スーパーセルの作成

1. 計算終了後、**固体 | Phonopy | キーワード設定・実行...**をクリックする。
2. **開く**ボタンをクリックし、さきほど保存した**si.pwin**を選択する。



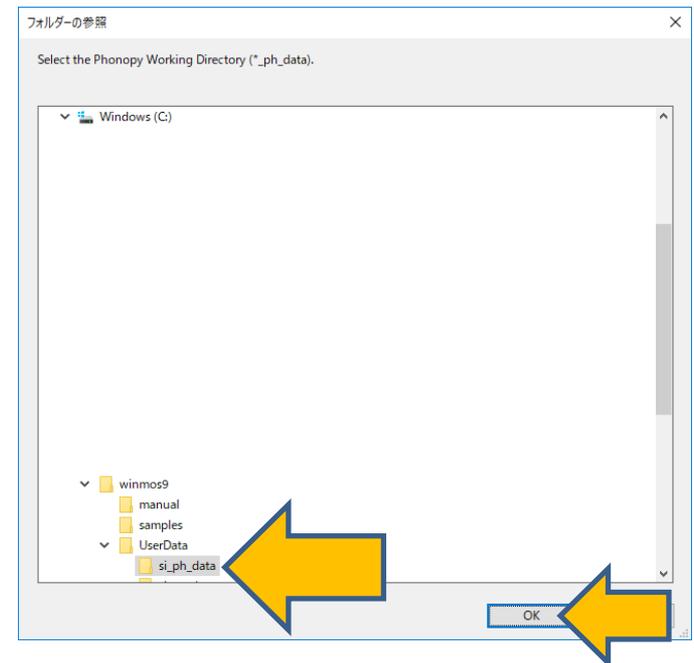
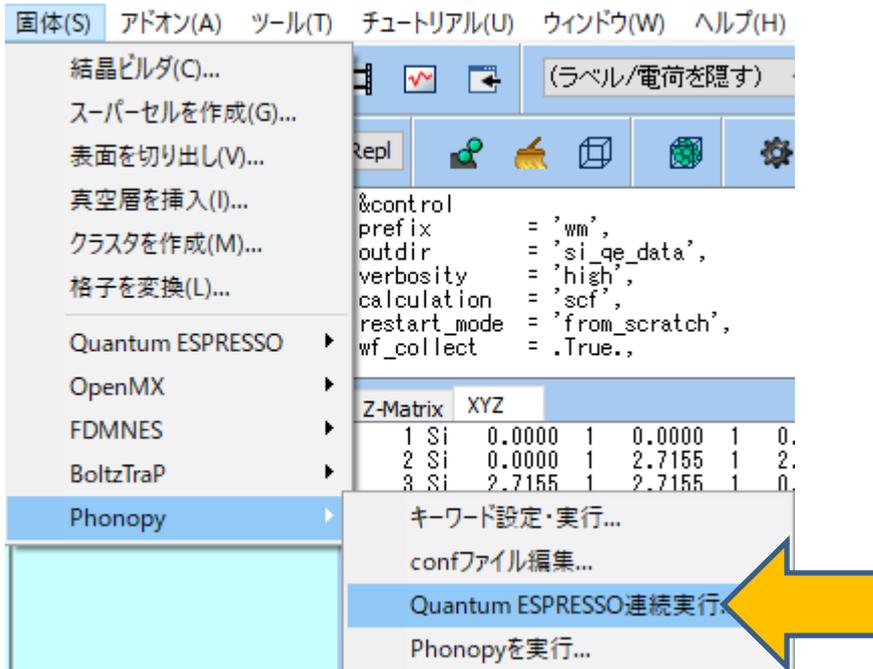
III. スーパーセルの作成

1. **DIM**に作成したいスーパーセルのリポート数を指定する。
(今回は**2 2 2**のまま行う。)
2. **Start**をクリックすると、スーパーセルの作成が始まる。



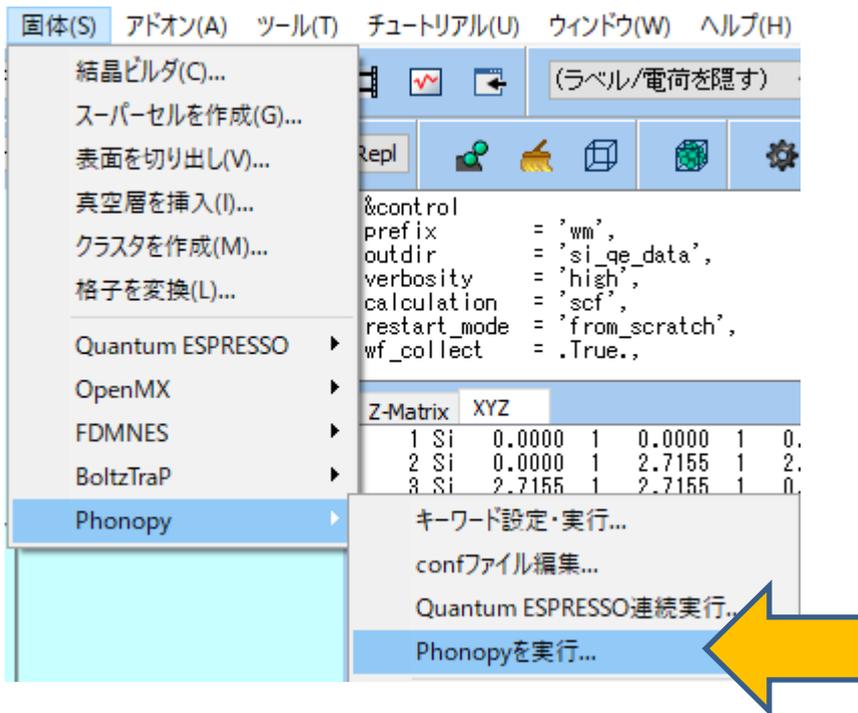
IV. QEの連続実行

1. スーパーセルの作成が終了したら、
固体 | Phonopy | Quantum ESPRESSO連続実行...をクリックする。
2. **si_ph_data**フォルダを選択し、**OK**をクリックすると、ジョブマネージャが起動し、Phonopyによって生成されたスーパーセルの個数分の計算ジョブが開始される。



V. Phonopyの実行

1. 固体 | Phonopy | Phonopy実行をクリックする。
2. si_ph_dataフォルダを選び、OKをクリックすると計算が始まる。



VI. 結果解析

固体 | Phonopyメニューにあるバンド構造、状態密度、熱物性をそれぞれクリックすると対応するグラフを表示できる。

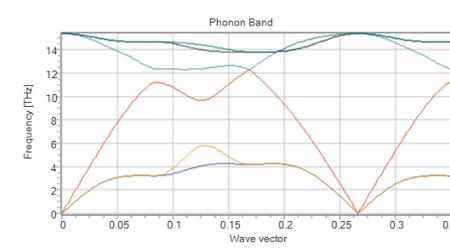
固体(S) アドオン(A) ツール(T) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)

結晶ビルダ(C)...
スーパーセルを作成(G)...
表面を切り出し(V)...
真空層を挿入(I)...
クラスタを作成(M)...
格子を変換(L)...
Quantum ESPRESSO ▶
OpenMX ▶
FDMNES ▶
BoltzTraP ▶
Phonopy ▶

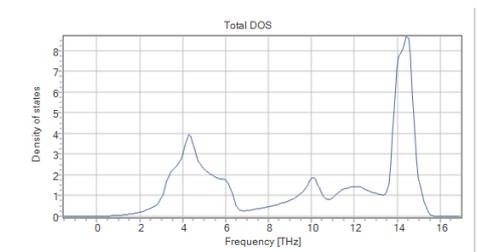
```
&control
prefix      = 'wm',
outdir      = 'si_qe_data',
verbosity   = 'high',
calculation = 'scf',
restart_mode = 'from_scratch',
wf_collect  = .True.,
```

Z-Matrix	XYZ
1 Si 0.0000 1 0.0000 1 0.	
2 Si 0.0000 1 2.7155 1 2.	
3 Si 2.7155 1 2.7155 1 0.	

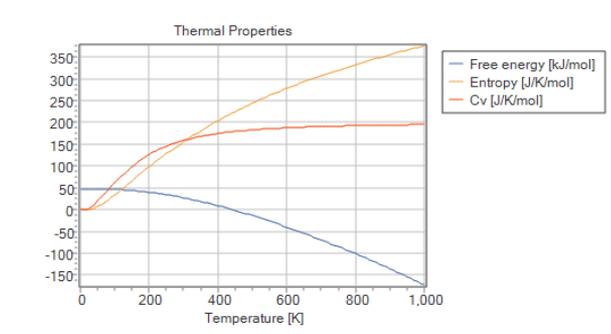
- キーワード設定・実行...
- confファイル編集...
- Quantum ESPRESSO連続実行...
- Phonopyを実行...
- バンド構造...
- 状態密度...
- 熱物性...



バンド構造



状態密度



熱物性

<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

山口 達明

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...

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