

Winmostar™ チュートリアル

Quantum ESPRESSO

基礎編

V9.2.1

株式会社クロスアビリティ

2019年7月26日

概要

- Si結晶のSCF計算を実施し、その後バンド構造、状態密度、部分状態密度、電子密度の算出を行います (Winmostar™ 上ではpw.x、band.x、dos.xなどが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、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

本機能を用いるためには、Quantum ESPRESSOとCygwinのセットアップが必要です。

- https://winmostar.com/jp/download_jp.htmlのインストール方法のWindows用のQuantum ESPRESSOとCygwinの設定手順に従います。

(6) Windows上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。

[GAMESS](#) [NWChem](#) [LAMMPS](#) [NAMD](#) [Quantum ESPRESSO](#) [FDMNES](#)

※ Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは(7)でインストールするcygwin_wmに含まれます。

(7) MDまたはSolidパックの計算（およびその他の一部の処理）を実行する場合は、以下のいずれかのリンク先の手順でCygwinの環境を構築します。

[ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合（推奨）](#)

[cygwin_wmをビルドする場合（非推奨、上級者向け）](#)

[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合（ベータ版）](#)

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。

Si単位格子について

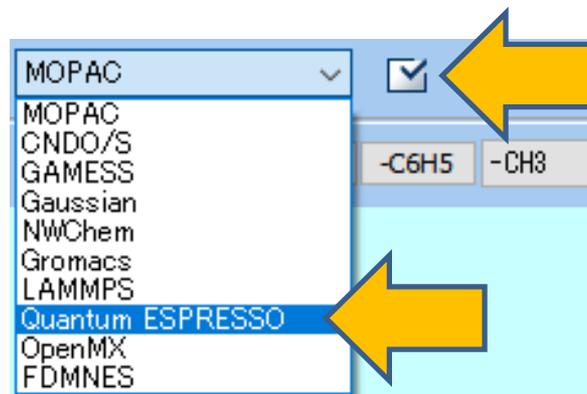
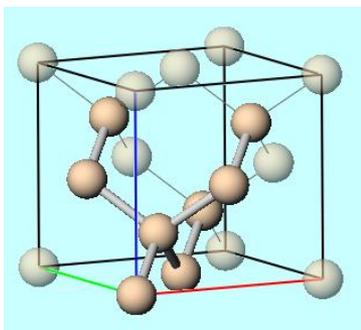
Crystal system: Cubic

Space group : Fd-3m (227)

Lattice constants : a=5.4309 Å

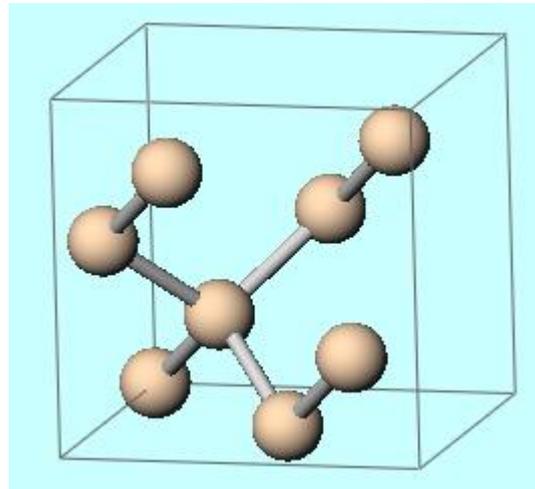
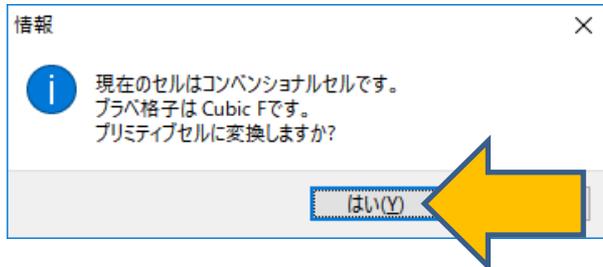
Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)

3. ツールバーのソルバー一覧から、**Quantum ESPRESSO**を選択する。
4. (キーワード設定)をクリックする。

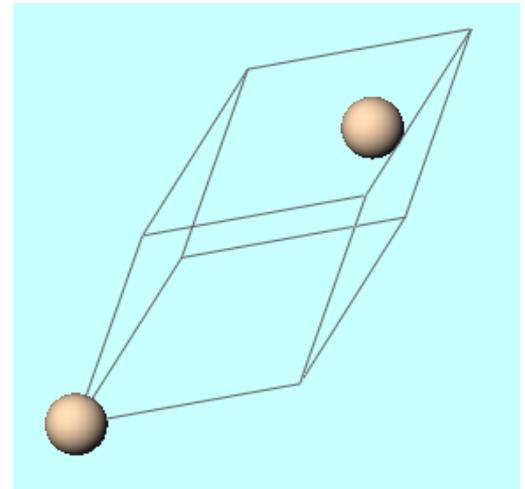


I. モデルの作成

5. プリミティブセルに変換するか聞かれるのではいを選択する。
コンベンショナルセルからプリミティブセルに構造が変換され、
キーワード設定画面が表示される。



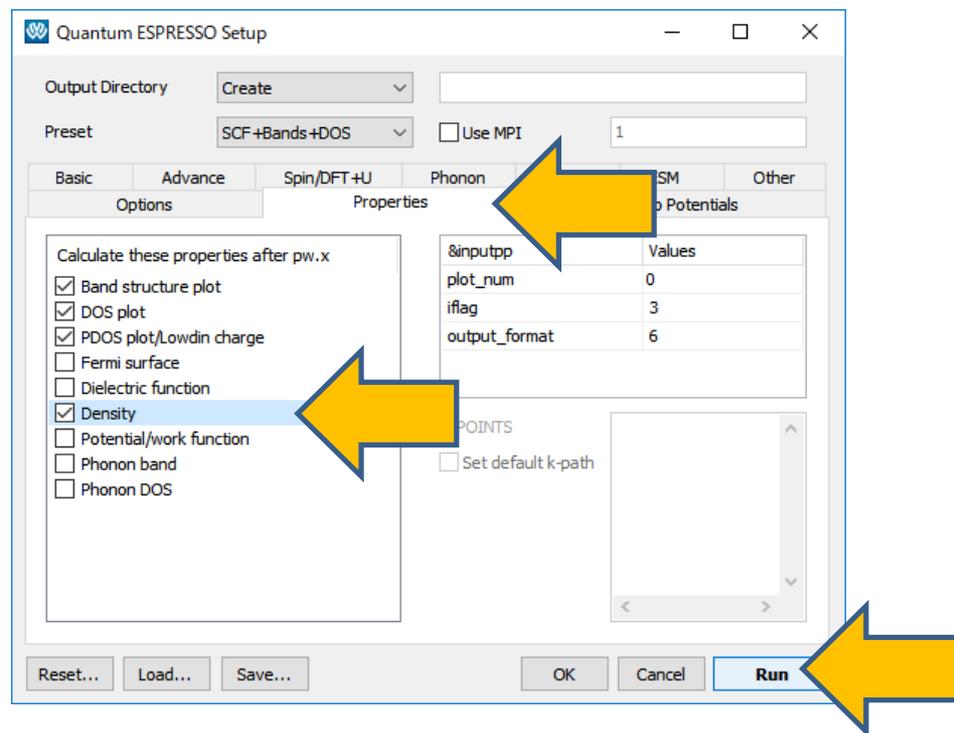
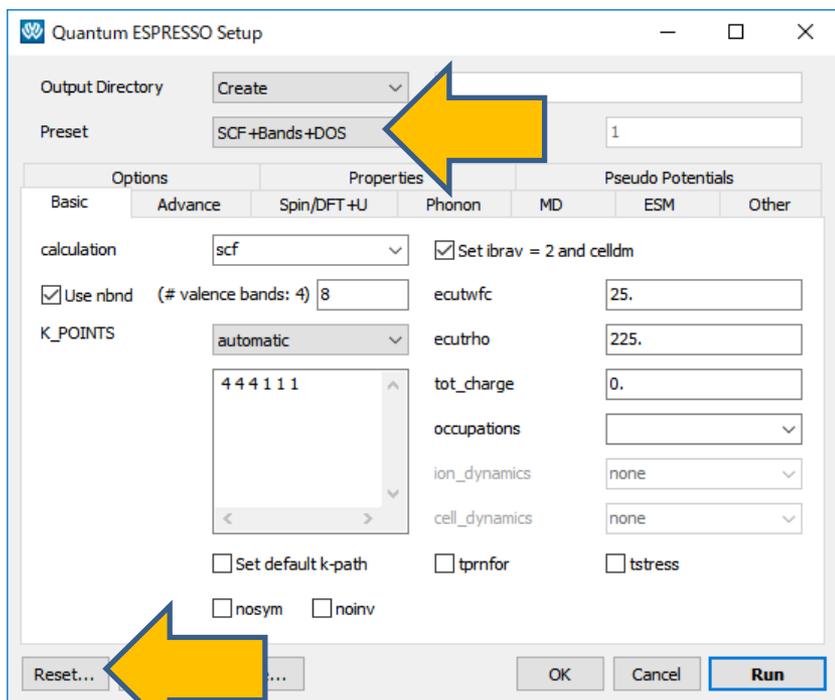
コンベンショナルセル



プリミティブセル

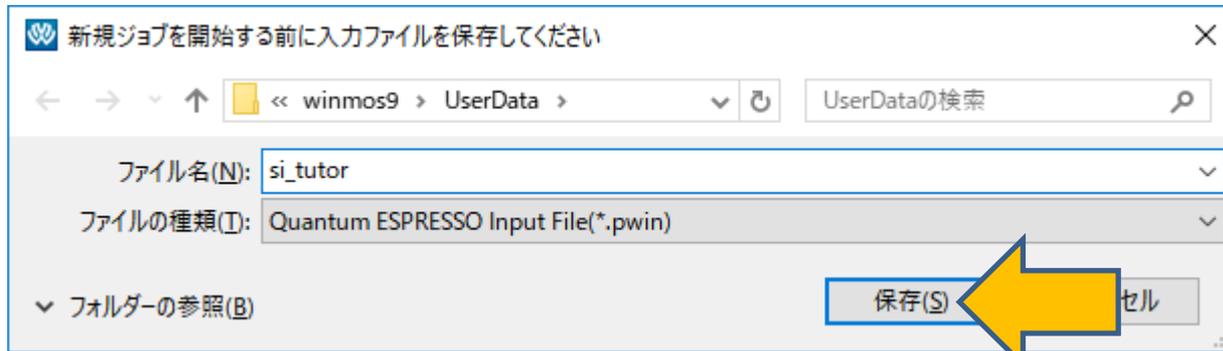
II. QEによる計算

1. **Reset...**をクリックし、**Preset**に**SCF+Bands+DOS**を指定する。
2. **Properties**タブの**Density**にチェックを入れる。
3. **Run**をクリックする。



II. QEによる計算

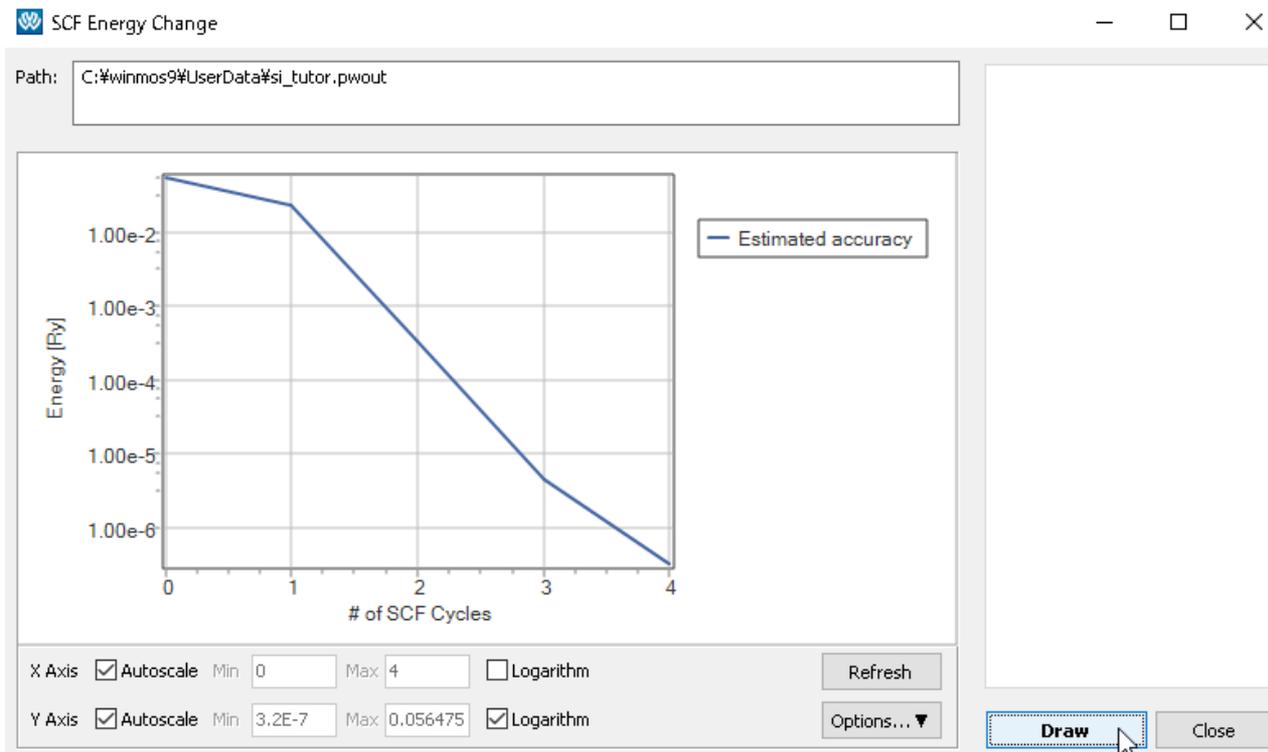
実行前に、名前を付けて保存する。ここでは仮に「si_tutor.pwin」とする。
入力ファイルが作成され、計算が始まる。



```
Winmostar/JM 20190108_152601 C:\winmos9\UserData\si_tutor.bat
*****
** Quantum ESPRESSO Start **
*****
C:\winmos9\UserData>cd /d "C:\winmos9\UserData"
C:\winmos9\UserData>set ESPRESSO_PSEUDO=C:\winmos9\UserData\si_tutor_qe_data
C:\winmos9\UserData>set OMP_NUM_THREADS=1
C:\winmos9\UserData>"C:\Program Files\Quantum ESPRESSO 64-bit 5.2.1-mpich2\bin\pw.exe" 0<"C:\winmos9\UserData\si_tutor.pwin" | "C:\winmos9\wm_system\bin\xtee" "C:\winmos9\UserData\si_tutor.pwout"
```

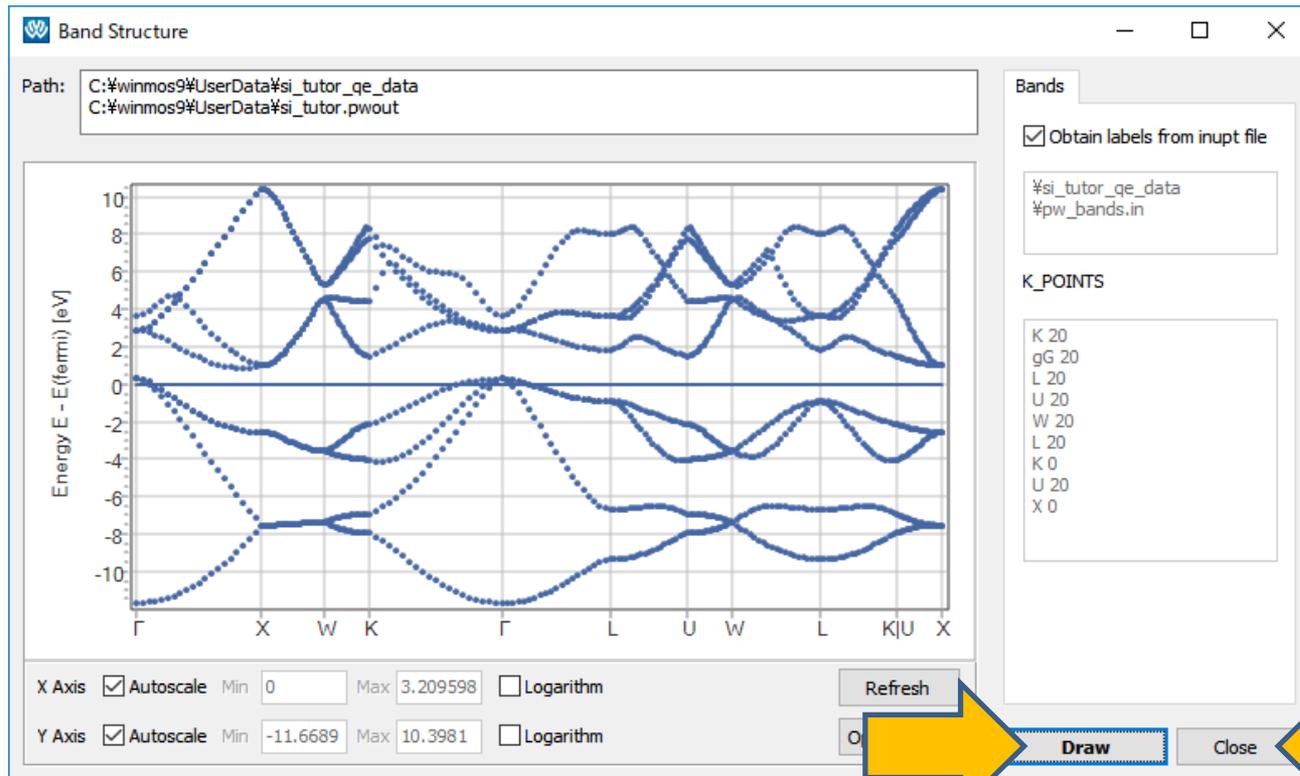
II. QEによる計算

1. 実行中または実行後、 エネルギー変化ボタンをクリックし、デフォルトで選ばれるファイルを開く。
2. **Draw**ボタンを押すとSCF計算中のエネルギーの変化を確認できる。
3. 確認後**Close**ボタンを押して**SCF Energy Change**ウィンドウを閉じる。



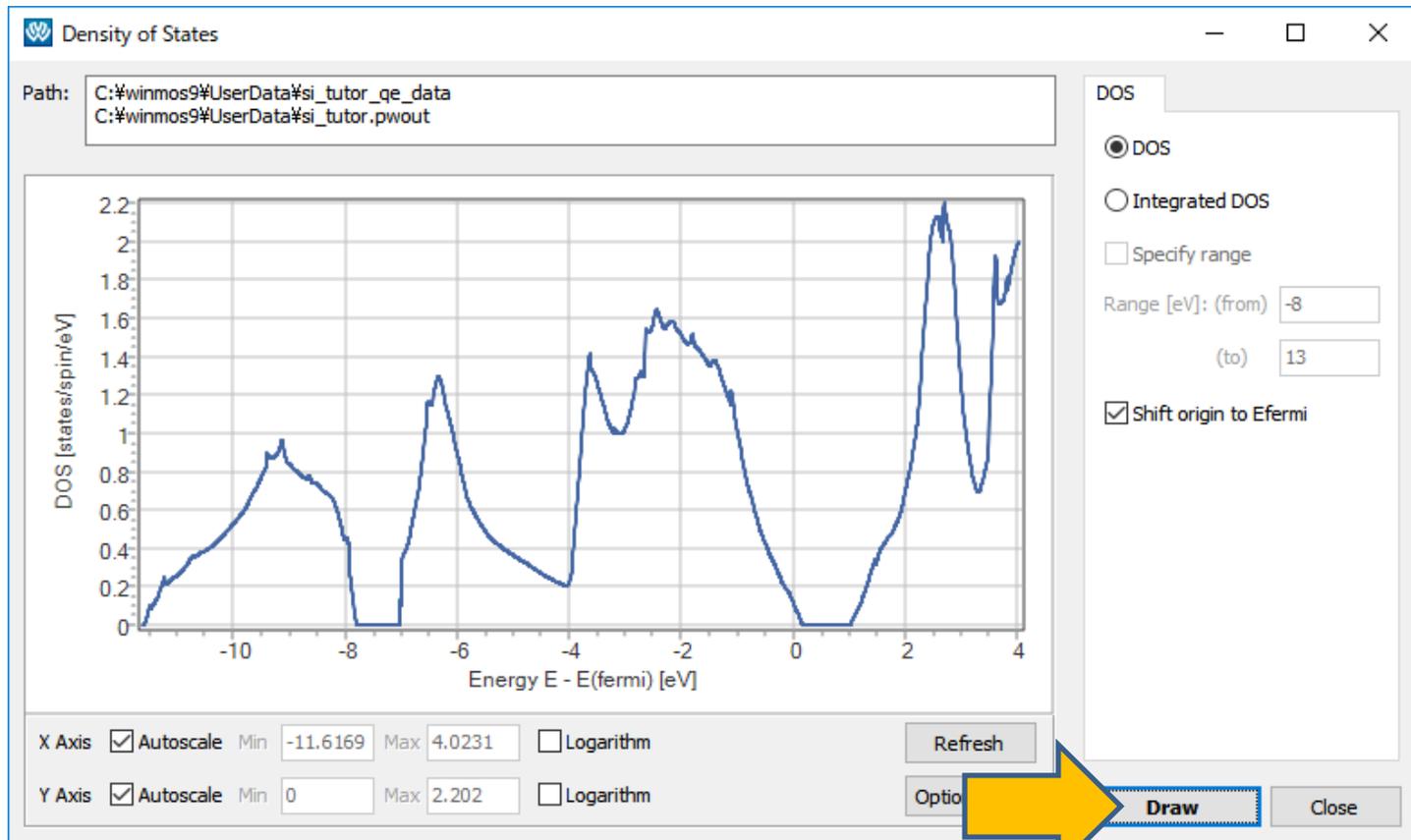
III. 結果解析

1. 計算終了後、 (結果解析) | バンド構造をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。
3. **Draw**をクリックするとバンド図が得られる。確認後**Close**をクリックする。



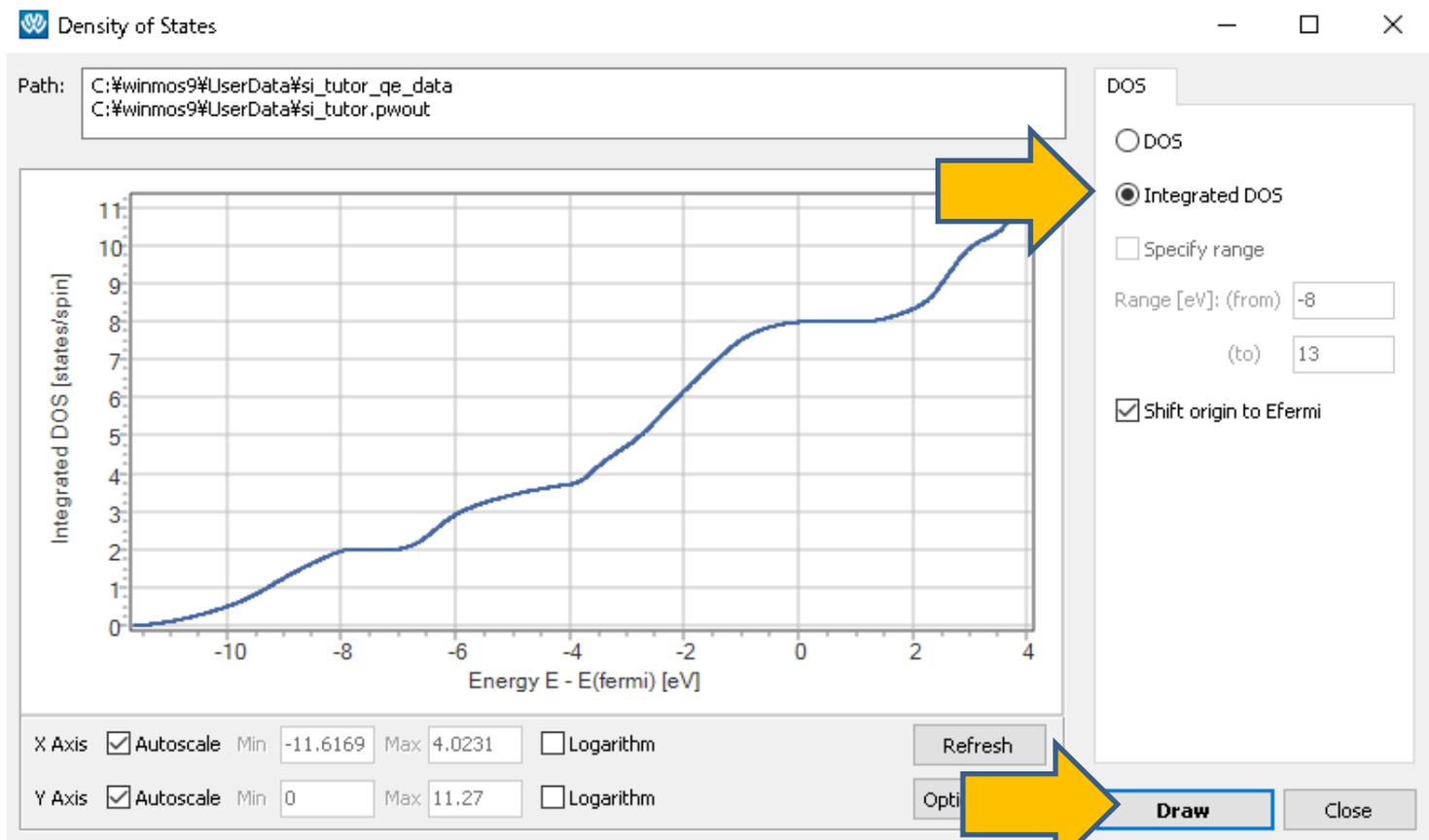
III. 結果解析

1.  (結果解析) | 状態密度をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。
3. 新しいウィンドウが立ち上がり、**Draw**をクリックするとDOSが得られる。



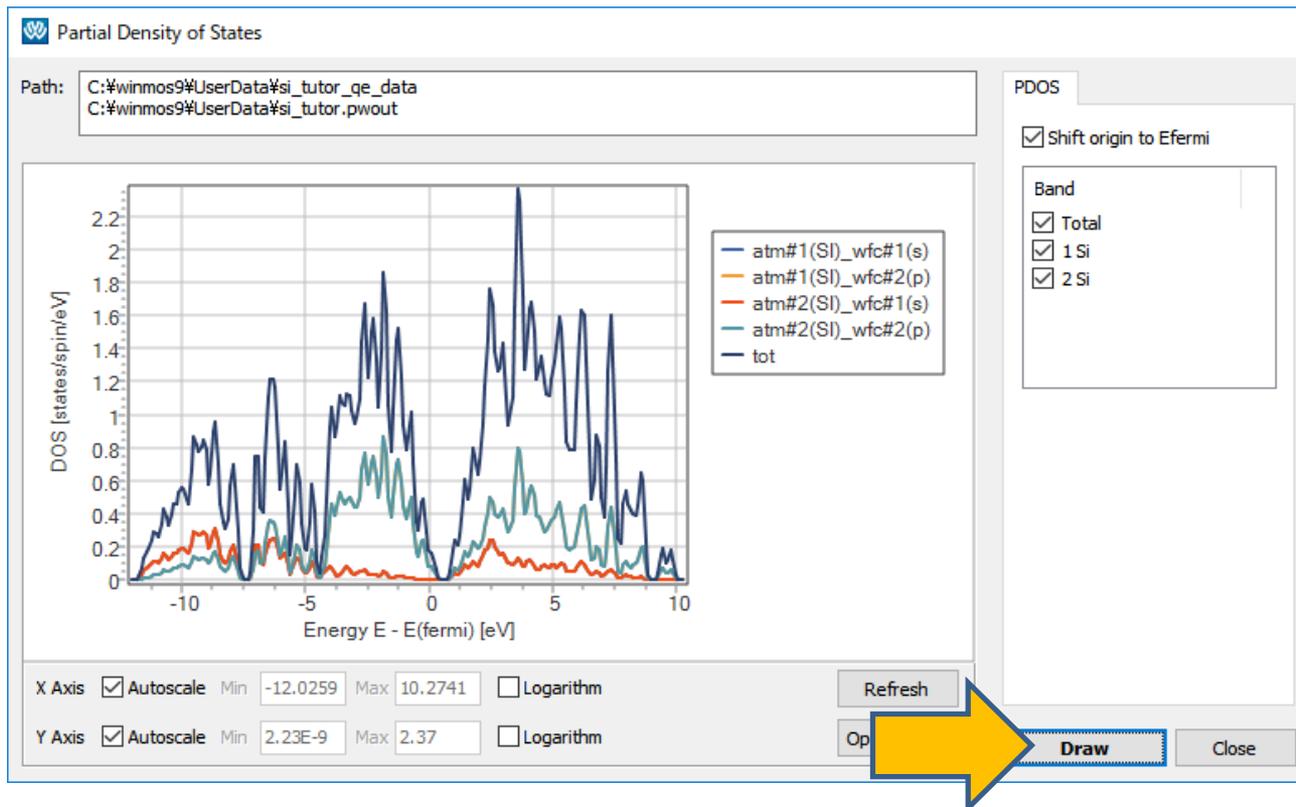
III. 結果解析

1. 続けてIntegrated DOSにチェックを入れる。
2. Drawボタンをクリックすると積算DOSが表示される。
3. Closeボタンを押してウィンドウを閉じる。



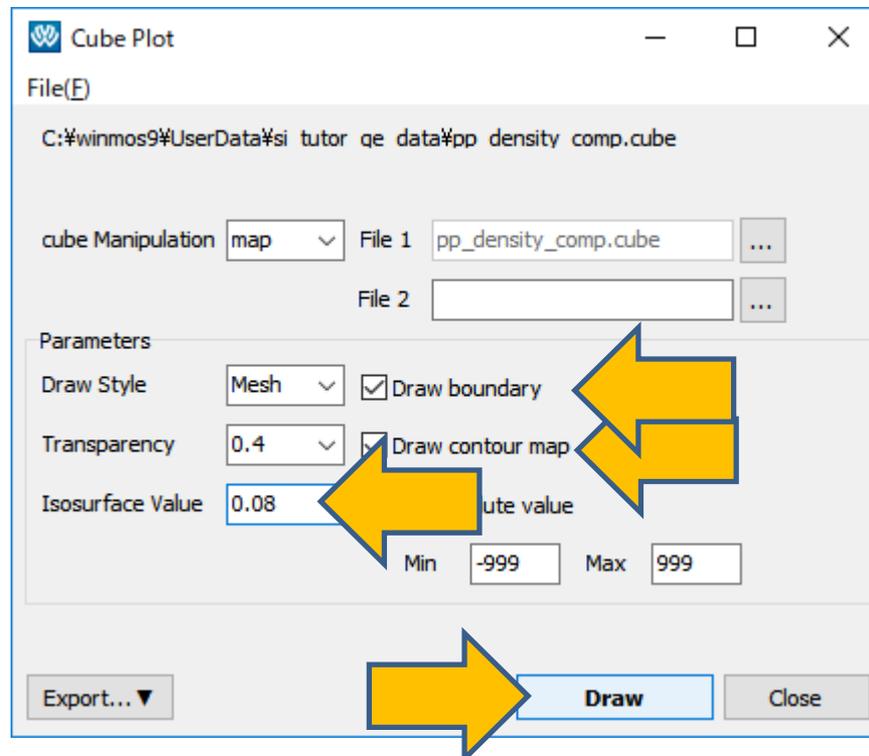
III. 結果解析

1.  (結果解析) | 部分状態密度をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。
3. 新しいウィンドウが立ち上がり、**Draw**を押すとPDOSが得られる。



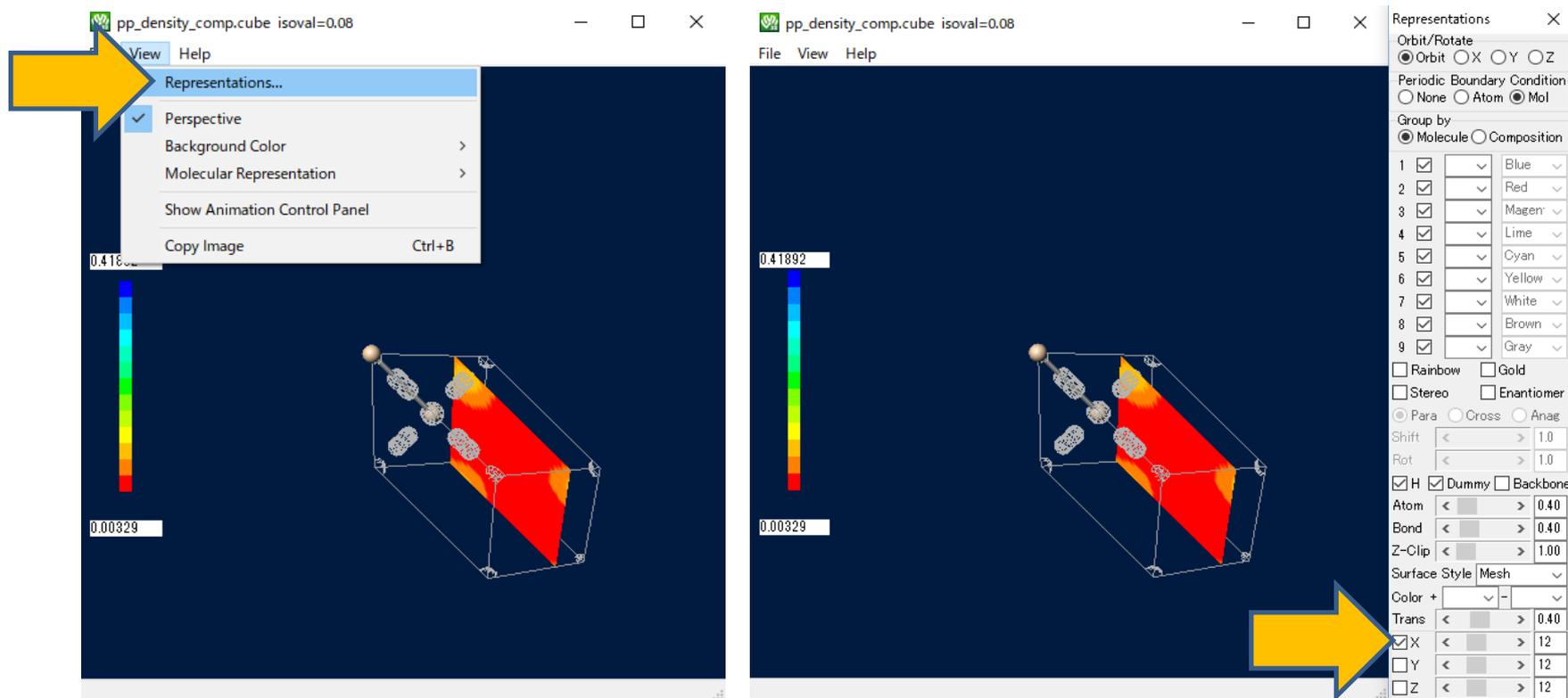
III. 結果解析

1. 同様に、 (結果解析) | 電子密度をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダをクリックする。
3. **Draw contour map**と**Draw boundary**にチェックを入れ、**Isosurface Value**を**0.08**に設定する。
4. **Draw**をクリックする。



III. 結果解析

1. Winmostar Viewerにて、View | Representationsをクリックする。
2. X、YまたはZのスライダーを動かし、等高線マップを表示する面を選択する。



<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! 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 · 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