

Winmostar™ チュートリアル  
Quantum ESPRESSO  
Nudged Elastic Band法  
V9.2.1

株式会社クロスアビリティ  
2019年7月26日

## 概要、注意点

- Cu(100)表面上のAg原子のホローサイト間のジャンプを計算します。
- 本チュートリアルでは、短時間で全体の流れを把握するという目的のため、スラブの表面構造の緩和などを省略し、システムサイズも小さく設定しています。NEB計算は収束するまで計算させず、指定した反復回数分しか計算させません。
- 同様に、電子状態計算と構造最適化計算の精度も落としています。

# 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](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

# 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](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）](#)

# 擬ポテンシャルの用意

**本チュートリアルを実施するためには、追加の擬ポテンシャルファイルが必要です。**

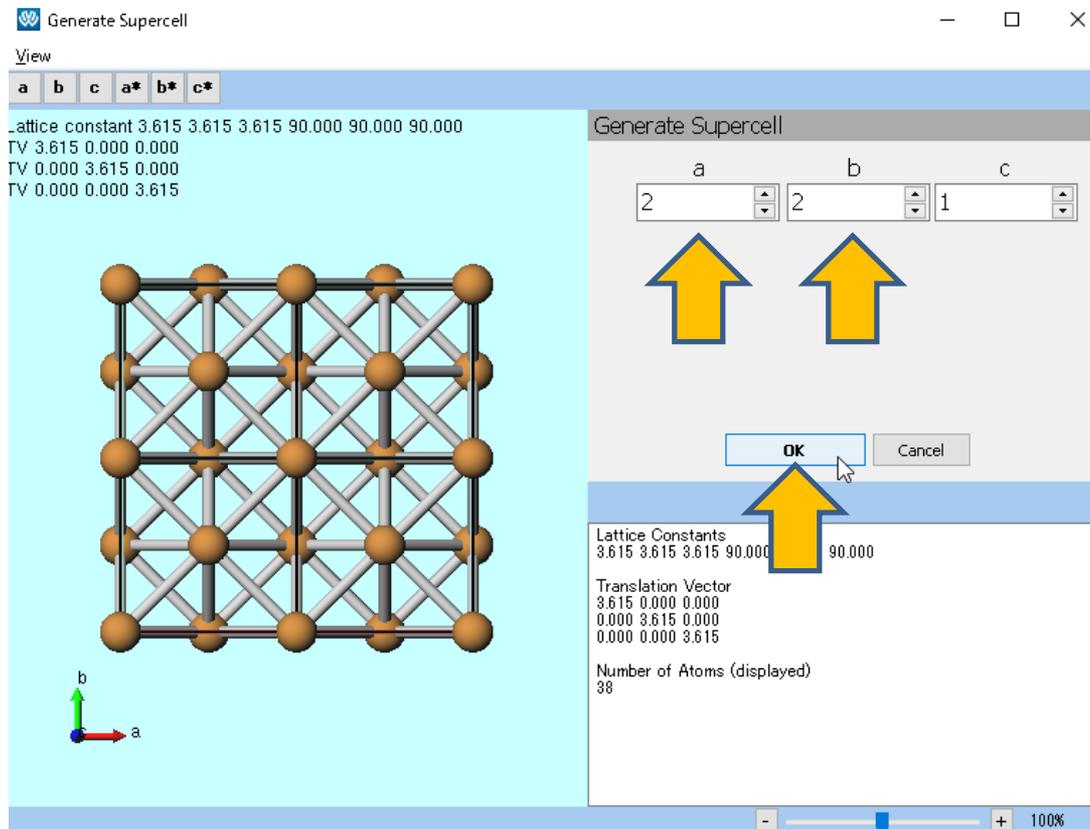
以下のURLより擬ポテンシャルファイルをダウンロードし、QEのインストールフォルダの下のpseudoフォルダに入れWinmostarを再起動する。

<https://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials/ps-library/>

- ・Cu原子のCu.pbe-dn-rrkjus\_psl.0.2.UPF
- ・Ag原子のAg.pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPF

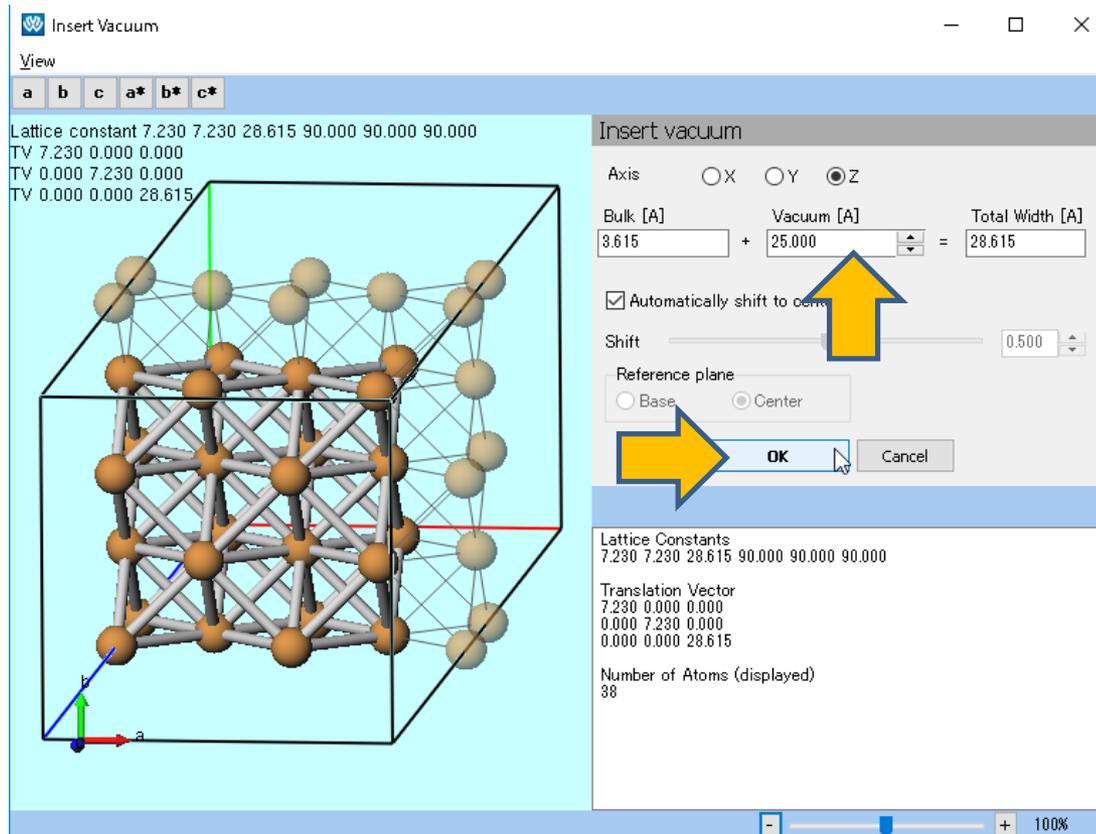
# I. 系の作成

- ファイル | 開くをクリックしC:¥winmos9¥samples¥cu.cifを開く。
- 固体 | スーパーセルを作成をクリックし、a, bを「2」に変更し、OKボタンを押す。



# I. 系の作成

- メインウィンドウにおいて**固体 | 真空層を挿入**をクリックする。
- Vacuum [A]に「25」と入力しOKをクリックする。
- その後**ファイル | 名前を付けて保存**をクリックし、「cu\_slab.cif」として保存する。



# I. 系の作成

- メインウィンドウ右の座標表示エリアから4番目の原子を選択する。
- 分子表示エリアにて赤太丸で囲まれた原子をCtrl+左クリックし青丸で選択された状態にする。

Winmostar N= 24 Cu24 M= 1,525.11  
 Marked Order: 4 - 1 - 2 - 0  
 Marked Atom: X= 1.8075 Y= 0 Z= 14.3074  
 Length= 2.5561 Angle= 60 Dihedral= \* Lper= \*  
 Group Selection: 1 Atoms (Cu)

rho= 1.693 g/cm<sup>3</sup>  
 a= 7.230 b= 7.230 c= 28.615  
 alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

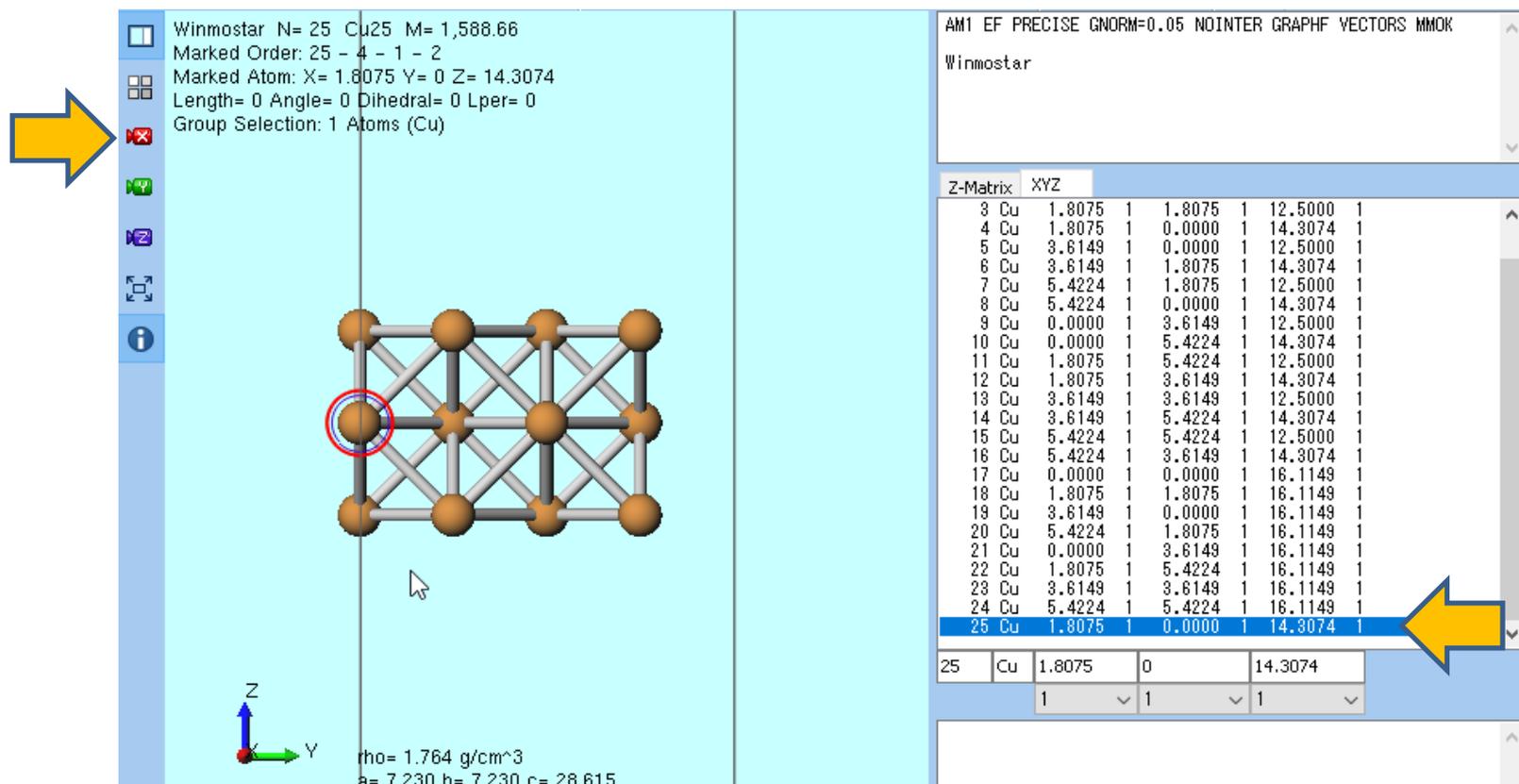
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK  
 Winmostar

Z-Matrix	XYZ
1 Cu	0.0000 1 0.0000 1 12.5000 1
2 Cu	0.0000 1 1.8075 1 14.3074 1
3 Cu	1.8075 1 1.8075 1 12.5000 1
4 Cu	1.8075 1 0.0000 1 14.3074 1
5 Cu	3.6149 1 0.0000 1 12.5000 1
6 Cu	3.6149 1 1.8075 1 14.3074 1
7 Cu	5.4224 1 1.8075 1 12.5000 1
8 Cu	5.4224 1 0.0000 1 14.3074 1
9 Cu	0.0000 1 3.6149 1 12.5000 1
10 Cu	0.0000 1 5.4224 1 14.3074 1
11 Cu	1.8075 1 5.4224 1 12.5000 1
12 Cu	1.8075 1 3.6149 1 14.3074 1
13 Cu	3.6149 1 3.6149 1 12.5000 1
14 Cu	3.6149 1 5.4224 1 14.3074 1
15 Cu	5.4224 1 5.4224 1 12.5000 1
16 Cu	5.4224 1 3.6149 1 14.3074 1
17 Cu	0.0000 1 0.0000 1 16.1149 1
18 Cu	1.8075 1 1.8075 1 16.1149 1
19 Cu	3.6149 1 0.0000 1 16.1149 1
20 Cu	5.4224 1 1.8075 1 16.1149 1
21 Cu	0.0000 1 3.6149 1 16.1149 1
22 Cu	1.8075 1 5.4224 1 16.1149 1
23 Cu	3.6149 1 3.6149 1 16.1149 1
24 Cu	5.4224 1 5.4224 1 16.1149 1

4	Cu	1.8075	0	14.3074
		1	1	1

# I. 系の作成

-  (X軸方向から表示) ボタンをクリックする。
- Ctrl+C、Ctrl+Vと入力し、1回分子表示エリアをクリックする(ドラッグしてはならない)。
- 座標表示エリアにおいて25番目の原子の行をクリックする。



Winmostar N= 25 Cu25 M= 1,588.66  
Marked Order: 25 - 4 - 1 - 2  
Marked Atom: X= 1.8075 Y= 0 Z= 14.3074  
Length= 0 Angle= 0 Dihedral= 0 Lper= 0  
Group Selection: 1 Atoms (Cu)

AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK  
Winmostar

Z-Matrix	XYZ						
3	Cu	1.8075	1	1.8075	1	12.5000	1
4	Cu	1.8075	1	0.0000	1	14.3074	1
5	Cu	3.6149	1	0.0000	1	12.5000	1
6	Cu	3.6149	1	1.8075	1	14.3074	1
7	Cu	5.4224	1	1.8075	1	12.5000	1
8	Cu	5.4224	1	0.0000	1	14.3074	1
9	Cu	0.0000	1	3.6149	1	12.5000	1
10	Cu	0.0000	1	5.4224	1	14.3074	1
11	Cu	1.8075	1	5.4224	1	12.5000	1
12	Cu	1.8075	1	3.6149	1	14.3074	1
13	Cu	3.6149	1	3.6149	1	12.5000	1
14	Cu	3.6149	1	5.4224	1	14.3074	1
15	Cu	5.4224	1	5.4224	1	12.5000	1
16	Cu	5.4224	1	3.6149	1	14.3074	1
17	Cu	0.0000	1	0.0000	1	16.1149	1
18	Cu	1.8075	1	1.8075	1	16.1149	1
19	Cu	3.6149	1	0.0000	1	16.1149	1
20	Cu	5.4224	1	1.8075	1	16.1149	1
21	Cu	0.0000	1	3.6149	1	16.1149	1
22	Cu	1.8075	1	5.4224	1	16.1149	1
23	Cu	3.6149	1	3.6149	1	16.1149	1
24	Cu	5.4224	1	5.4224	1	16.1149	1
25	Cu	1.8075	1	0.0000	1	14.3074	1

25 Cu 1.8075 0 14.3074  
1 1 1

rho= 1.764 g/cm<sup>3</sup>  
a= 7.230 b= 7.230 c= 28.615

# I. 系の作成

- 座標表示エリアでXYZタブが開いた状態にする。
- 25番目の原子のZ座標を「18」に変更する。
- 続けて元素を選択するメニューで「Ag 47」を選び元素を変更ボタンを押す。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The top toolbar includes a dropdown menu set to 'Ag 47' and a 'Repl' button. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a crystal structure with a highlighted atom. The right panel shows a 'Z-Matrix' table with columns for 'Z-Matrix' and 'XYZ'. The table contains 25 rows of data for atoms 3 through 25. The 25th row is highlighted in blue, showing '25 Ag 1.8075 1 0.0000 1 18.0000 1'. A yellow arrow points to the 'Z' coordinate field (18.0000) in this row. Another yellow arrow points to the 'Z-Matrix' tab header. A third yellow arrow points to the 'Ag 47' dropdown menu.

Z-Matrix	XYZ
3 Cu	1.8075 1 1.8075 1 12.5000 1
4 Cu	1.8075 1 0.0000 1 14.3074 1
5 Cu	3.6149 1 0.0000 1 12.5000 1
6 Cu	3.6149 1 1.8075 1 14.3074 1
7 Cu	5.4224 1 1.8075 1 12.5000 1
8 Cu	5.4224 1 0.0000 1 14.3074 1
9 Cu	0.0000 1 3.6149 1 12.5000 1
10 Cu	0.0000 1 5.4224 1 14.3074 1
11 Cu	1.8075 1 5.4224 1 12.5000 1
12 Cu	1.8075 1 3.6149 1 14.3074 1
13 Cu	3.6149 1 3.6149 1 12.5000 1
14 Cu	3.6149 1 5.4224 1 14.3074 1
15 Cu	5.4224 1 5.4224 1 12.5000 1
16 Cu	5.4224 1 3.6149 1 14.3074 1
17 Cu	0.0000 1 0.0000 1 16.1149 1
18 Cu	1.8075 1 1.8075 1 16.1149 1
19 Cu	3.6149 1 0.0000 1 16.1149 1
20 Cu	5.4224 1 1.8075 1 16.1149 1
21 Cu	0.0000 1 3.6149 1 16.1149 1
22 Cu	1.8075 1 5.4224 1 16.1149 1
23 Cu	3.6149 1 3.6149 1 16.1149 1
24 Cu	5.4224 1 5.4224 1 16.1149 1
25 Ag	1.8075 1 0.0000 1 18.0000 1

## II. 始状態の構造最適化

- **選択** | **すべてをグループ選択**をクリックする。
- **編集** | **属性を変更** | **最適化フラグを変更**をクリックし、**Solver**にQuantum ESPRESSOを選択し、**X, Y, Z coordinate**すべてをFixedに変更しOKを押す。

Winmostar N= 25 AgCu24 M= 1,632.98  
 Marked Order: 25 - 4 - 1 - 2  
 Marked Atom: X= 1.8075 Y= 0 Z= 18  
 Length= 3.6926 Angle= 135 Dihedral= 54.736 Lper= 1.807  
 Group Selection: 25 Atoms (AgCu24)

AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMC  
 Winmostar

Z-Matrix	XYZ
2 Cu	0.0000 0 1.8075 0 14.3074 0
3 Cu	1.8075 0 1.8075 0 12.5000 0
4 Cu	1.8075 0 0.0000 0 14.3074 0
5 Cu	3.6149 0 0.0000 0 12.5000 0
6 Cu	3.6149 0 1.8075 0 14.3074 0
7 Cu	5.4224 0 1.8075 0 12.5000 0
8 Cu	5.4224 0 0.0000 0 14.3074 0
9 Cu	0.0000 0 3.6149 0 12.5000 0
10 Cu	0.0000 0 5.4224 0 14.3074 0
11 Cu	1.8075 0 5.4224 0 12.5000 0
12 Cu	1.8075 0 3.6149 0 14.3074 0
13 Cu	3.6149 0 3.6149 0 12.5000 0
14 Cu	3.6149 0 5.4224 0 14.3074 0
15 Cu	5.4224 0 5.4224 0 12.5000 0
16 Cu	5.4224 0 3.6149 0 14.3074 0
17 Cu	0.0000 0 0.0000 0 16.1149 0
18 Cu	1.8075 0 1.8075 0 16.1149 0
19 Cu	3.6149 0 0.0000 0 16.1149 0
20 Cu	5.4224 0 1.8075 0 16.1149 0
21 Cu	0.0000 0 3.6149 0 16.1149 0
22 Cu	1.8075 0 5.4224 0 16.1149 0
23 Cu	3.6149 0 3.6149 0 16.1149 0
24 Cu	5.4224 0 5.4224 0 16.1149 0
25 Ag	1.8075 0 0.0000 0 18.0000 0

25	Ag	1.8075	0	18
		0	0	0

**Change Optimizati...** [Close]

Solver: **Quantum ESPRESSO**

XYZ  Z-Matrix

X coordinate: Fixed

Y coordinate: Fixed

Z coordinate: Fixed

**OK** Cancel

## II. 始状態の構造最適化

- 座標表示エリアにおいて25番目の原子の行を選択し、その下でZ成分の最適化フラグを0(固定)から1(可変)に変更する。

Section: 25 Atoms (AgCu24)

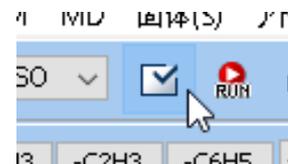
rho= 1.813 g/cm<sup>3</sup>  
a= 7.230 b= 7.230 c= 28.615  
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

Z-Matrix		XYZ					
3	Cu	1.8075	0	1.8075	0	12.5000	0
4	Cu	1.8075	0	0.0000	0	14.3074	0
5	Cu	3.6149	0	0.0000	0	12.5000	0
6	Cu	3.6149	0	1.8075	0	14.3074	0
7	Cu	5.4224	0	1.8075	0	12.5000	0
8	Cu	5.4224	0	0.0000	0	14.3074	0
9	Cu	0.0000	0	3.6149	0	12.5000	0
10	Cu	0.0000	0	5.4224	0	14.3074	0
11	Cu	1.8075	0	5.4224	0	12.5000	0
12	Cu	1.8075	0	3.6149	0	14.3074	0
13	Cu	3.6149	0	3.6149	0	12.5000	0
14	Cu	3.6149	0	5.4224	0	14.3074	0
15	Cu	5.4224	0	5.4224	0	12.5000	0
16	Cu	5.4224	0	3.6149	0	14.3074	0
17	Cu	0.0000	0	0.0000	0	16.1149	0
18	Cu	1.8075	0	1.8075	0	16.1149	0
19	Cu	3.6149	0	0.0000	0	16.1149	0
20	Cu	5.4224	0	1.8075	0	16.1149	0
21	Cu	0.0000	0	3.6149	0	16.1149	0
22	Cu	1.8075	0	5.4224	0	16.1149	0
23	Cu	3.6149	0	3.6149	0	16.1149	0
24	Cu	5.4224	0	5.4224	0	16.1149	0
25	Ag	1.8075	0	0.0000	0	18.0000	1

25	Ag	1.8075	0	18
		0	0	1
				0
				1
				-1
				T

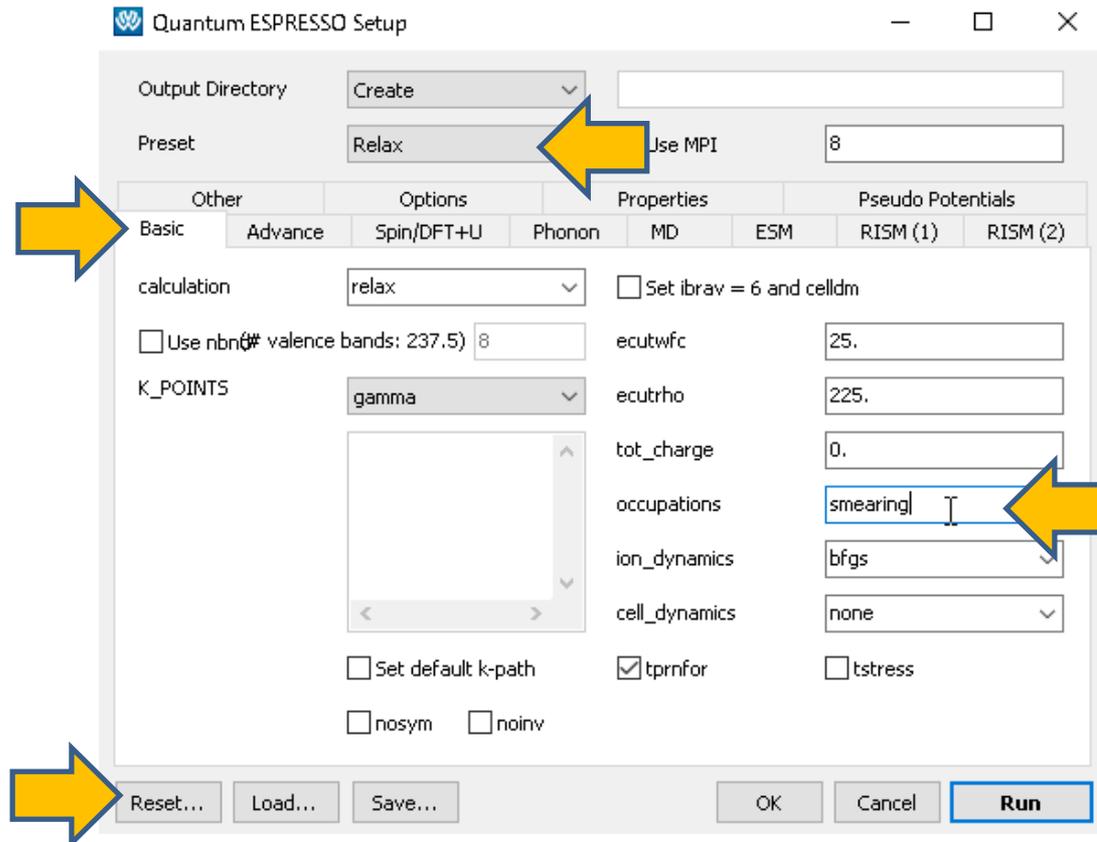
## II. 始状態の構造最適化

- ソルバを選択メニューにおいてQuantum ESPRESSOを選択する。
- キーワード設定ボタンを押す。



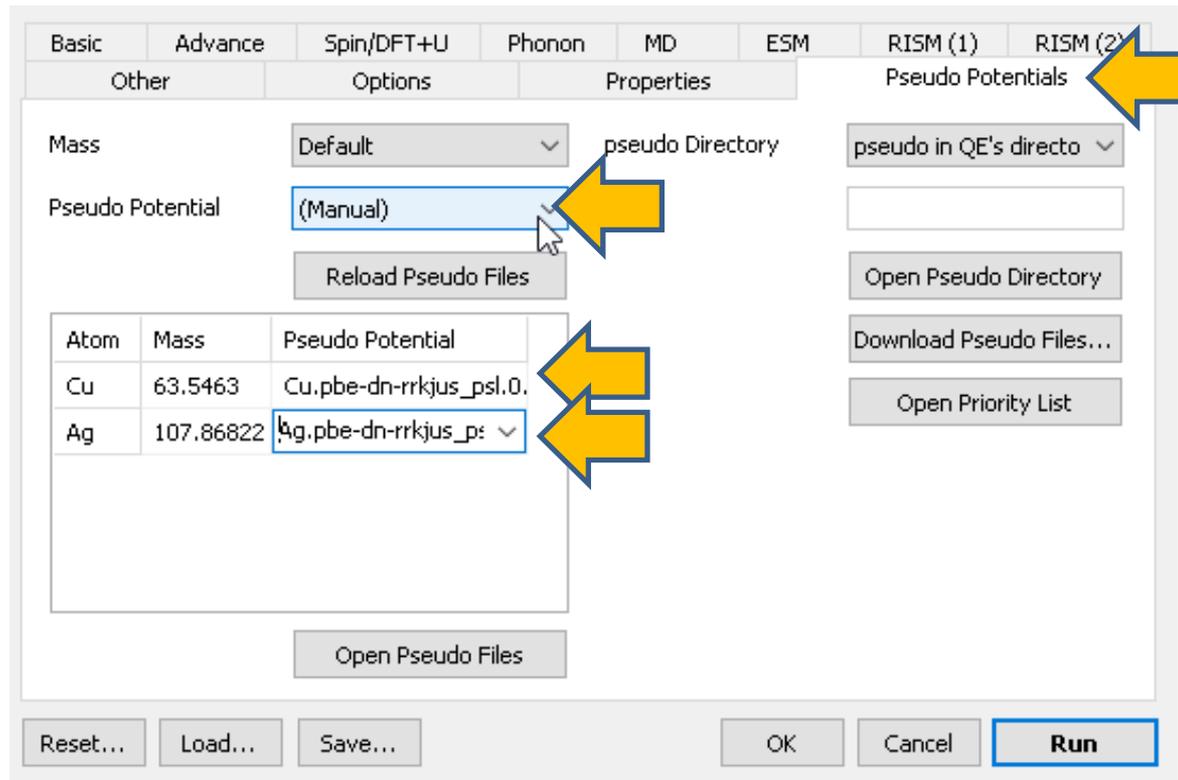
## II. 始状態の構造最適化

- まずQuantum ESPRESSO Setupウィンドウ左下のResetボタンをクリックする。
- PresetにRelaxを選択する。
- Basicタブのoccupationsをsmearingに変更する。



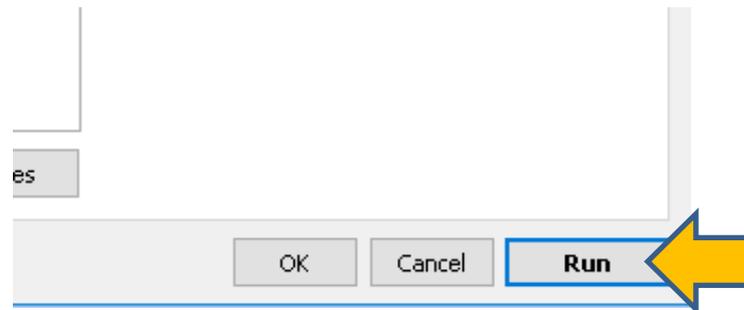
## II. 始状態の構造最適化

- Pseudo Potentialsタブの共通のPseudo Potentialを(Manual)に設定し、各原子種のPseudo PotentialにおいてCuは「Cu.pbe-dn-rrkjus\_psl.0.2.UPF」、Agは「Ag.pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPF」に設定する。
- 上記のpseudoファイルがない場合はP.3の手順で入手する。



## II. 始状態の構造最適化

- Runボタンをクリックし、保存ダイアログでファイル名はcu\_slab\_first.pwinとして保存し、計算を開始する。(25番目の原子のZ成分だけが動く構造最適化計算が走る)



### III. 終状態の構造最適化

- メインウィンドウにて先ほど保存したcu\_slab.cifを開く。
- 座標表示エリアにて2番目の原子の行を左クリックし選択する。
- 分子表示エリアにて赤太丸で囲まれた原子をCtrl+左クリックし青丸で選択された状態にする。

Winmostar N= 24 Cu24 M= 1,525.11  
 Marked Order: 2 - 24 - 1 - 24  
 Marked Atom: X= 0 Y= 1.8075 Z= 14.3074  
 Length= 6.7629 Angle= 14.361 Dihedral= 0 Lper= 0  
 Group Selection: 1 Atoms (Cu)

rho= 1.693 g/cm<sup>3</sup>  
 a= 7.230 b= 7.230 c= 28.615  
 alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOI

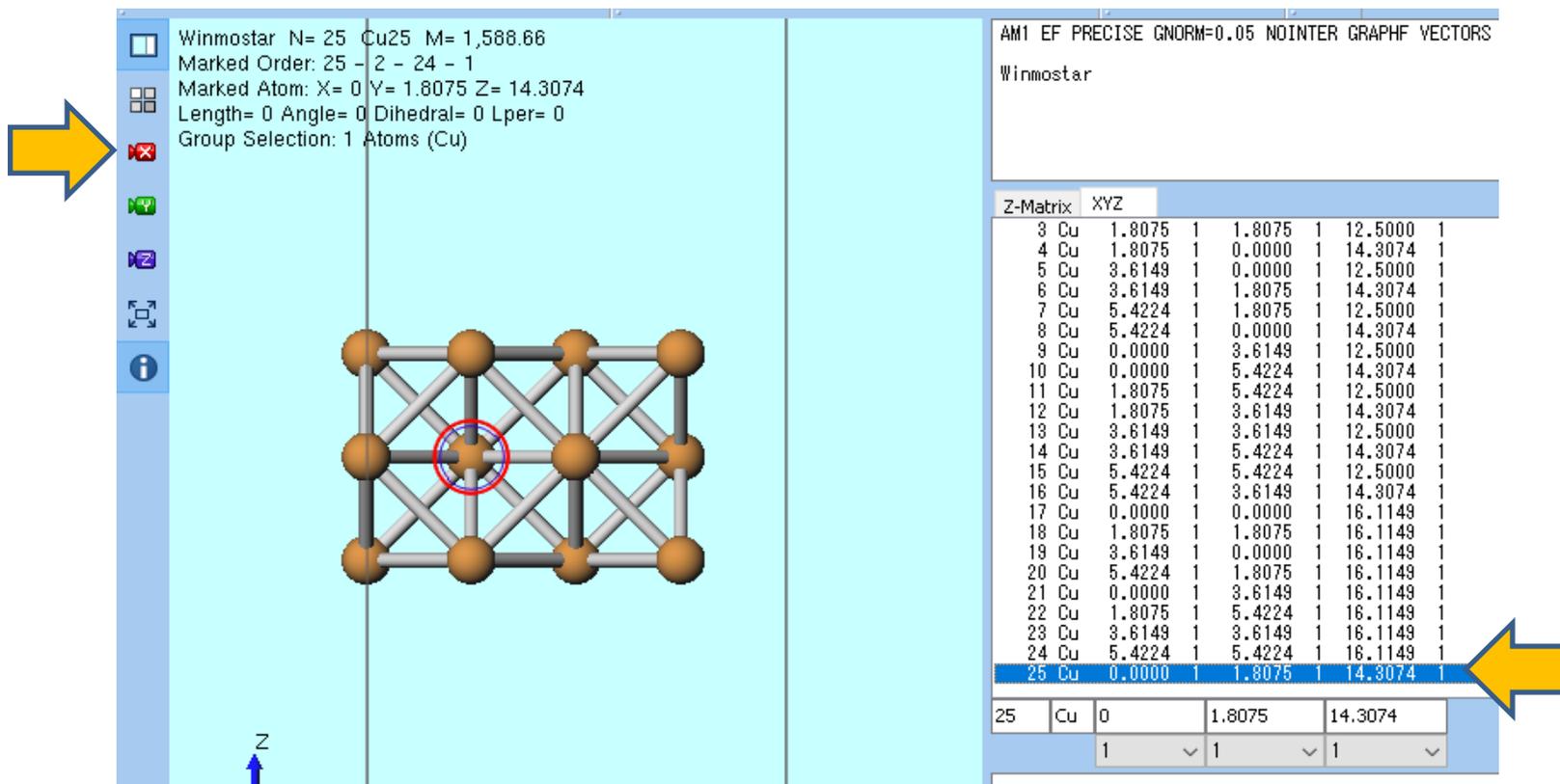
Winmostar

Z-Matrix	XYZ
1 Cu	0.0000 1 0.0000 1 12.5000 1
2 Cu	0.0000 1 1.8075 1 14.3074 1
3 Cu	1.8075 1 1.8075 1 12.5000 1
4 Cu	1.8075 1 0.0000 1 14.3074 1
5 Cu	3.6149 1 0.0000 1 12.5000 1
6 Cu	3.6149 1 1.8075 1 14.3074 1
7 Cu	5.4224 1 1.8075 1 12.5000 1
8 Cu	5.4224 1 0.0000 1 14.3074 1
9 Cu	0.0000 1 3.6149 1 12.5000 1
10 Cu	0.0000 1 5.4224 1 14.3074 1
11 Cu	1.8075 1 5.4224 1 12.5000 1
12 Cu	1.8075 1 3.6149 1 14.3074 1
13 Cu	3.6149 1 3.6149 1 12.5000 1
14 Cu	3.6149 1 5.4224 1 14.3074 1
15 Cu	5.4224 1 5.4224 1 12.5000 1
16 Cu	5.4224 1 3.6149 1 14.3074 1
17 Cu	0.0000 1 0.0000 1 16.1149 1
18 Cu	1.8075 1 1.8075 1 16.1149 1
19 Cu	3.6149 1 0.0000 1 16.1149 1
20 Cu	5.4224 1 1.8075 1 16.1149 1
21 Cu	0.0000 1 3.6149 1 16.1149 1
22 Cu	1.8075 1 5.4224 1 16.1149 1
23 Cu	3.6149 1 3.6149 1 16.1149 1
24 Cu	5.4224 1 5.4224 1 16.1149 1

2	Cu	0	1.8075	14.3074
		1	1	1

### III. 終状態の構造最適化

-  (X軸方向から表示) ボタンをクリックする。
- Ctrl+C、Ctrl+Vと入力し、1回分子表示エリアをクリックする(ドラッグしてはならない)。
- 座標表示エリアにおいて25番目の原子の行をクリックする。



Winmostar N= 25 Cu25 M= 1,588.66  
Marked Order: 25 - 2 - 24 - 1  
Marked Atom: X= 0 Y= 1.8075 Z= 14.3074  
Length= 0 Angle= 0 Dihedral= 0 Lper= 0  
Group Selection: 1 Atoms (Cu)

AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS  
Winmostar

Z-Matrix	XYZ
3 Cu	1.8075 1 1.8075 1 12.5000 1
4 Cu	1.8075 1 0.0000 1 14.3074 1
5 Cu	3.6149 1 0.0000 1 12.5000 1
6 Cu	3.6149 1 1.8075 1 14.3074 1
7 Cu	5.4224 1 1.8075 1 12.5000 1
8 Cu	5.4224 1 0.0000 1 14.3074 1
9 Cu	0.0000 1 3.6149 1 12.5000 1
10 Cu	0.0000 1 5.4224 1 14.3074 1
11 Cu	1.8075 1 5.4224 1 12.5000 1
12 Cu	1.8075 1 3.6149 1 14.3074 1
13 Cu	3.6149 1 3.6149 1 12.5000 1
14 Cu	3.6149 1 5.4224 1 14.3074 1
15 Cu	5.4224 1 5.4224 1 12.5000 1
16 Cu	5.4224 1 3.6149 1 14.3074 1
17 Cu	0.0000 1 0.0000 1 16.1149 1
18 Cu	1.8075 1 1.8075 1 16.1149 1
19 Cu	3.6149 1 0.0000 1 16.1149 1
20 Cu	5.4224 1 1.8075 1 16.1149 1
21 Cu	0.0000 1 3.6149 1 16.1149 1
22 Cu	1.8075 1 5.4224 1 16.1149 1
23 Cu	3.6149 1 3.6149 1 16.1149 1
24 Cu	5.4224 1 5.4224 1 16.1149 1
25 Cu	0.0000 1 1.8075 1 14.3074 1

25 Cu 0 1.8075 14.3074  
1 1 1

### III. 終状態の構造最適化

- 座標表示エリアでXYZタブが開いた状態にする。
- 25番目の原子のZ座標を「18」に変更する。
- 続けて元素を選択するメニューで「Ag 47」を選び元素を変更ボタンを押す。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The top toolbar includes a dropdown menu for element selection, currently set to 'Ag 47'. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a molecule with a grid of atoms. A red circle highlights one of the atoms. The right panel shows the 'Z-Matrix' table with columns for 'XYZ' and 'Repl'. The table lists coordinates for 25 atoms, with the 25th atom (Ag) highlighted in blue. A red circle highlights the Z-coordinate field for the 25th atom, which contains the value '18'. A yellow arrow points to the 'Ag 47' dropdown menu, another yellow arrow points to the 'XYZ' tab in the Z-Matrix table, and a third yellow arrow points to the Z-coordinate input field for the 25th atom.

Z-Matrix	XYZ	Repl
3 Cu	1.8075 1 1.8075 1	12.5000 1
4 Cu	1.8075 1 0.0000 1	14.3074 1
5 Cu	3.6149 1 0.0000 1	12.5000 1
6 Cu	3.6149 1 1.8075 1	14.3074 1
7 Cu	5.4224 1 1.8075 1	12.5000 1
8 Cu	5.4224 1 0.0000 1	14.3074 1
9 Cu	0.0000 1 3.6149 1	12.5000 1
10 Cu	0.0000 1 5.4224 1	14.3074 1
11 Cu	1.8075 1 5.4224 1	12.5000 1
12 Cu	1.8075 1 3.6149 1	14.3074 1
13 Cu	3.6149 1 3.6149 1	12.5000 1
14 Cu	3.6149 1 5.4224 1	14.3074 1
15 Cu	5.4224 1 5.4224 1	12.5000 1
16 Cu	5.4224 1 3.6149 1	14.3074 1
17 Cu	0.0000 1 0.0000 1	16.1149 1
18 Cu	1.8075 1 1.8075 1	16.1149 1
19 Cu	3.6149 1 0.0000 1	16.1149 1
20 Cu	5.4224 1 1.8075 1	16.1149 1
21 Cu	0.0000 1 3.6149 1	16.1149 1
22 Cu	1.8075 1 5.4224 1	16.1149 1
23 Cu	3.6149 1 3.6149 1	16.1149 1
24 Cu	5.4224 1 5.4224 1	16.1149 1
25 Ag	0.0000 1 1.8075 1	18.0000

### III. 終状態の構造最適化

- P.9-13の手順を繰り返し構造最適化計算を実施する。しかし、ファイル名は `cu_slab_last.pwin` とする。

## IV. NEB計算

- 固体 | Quantum ESPRESSO | NEBキーワード設定をクリックする。
- FIRST\_IMAGEの欄に計算終了後のcu\_slab\_first.pwoutを、LAST\_IMAGEの欄にcu\_slab\_last.pwoutをドラッグアンドドロップする。
- # of Imagesに「5」、# of ionic & electronic stepsに「5」を入力し、OKボタンを押す。

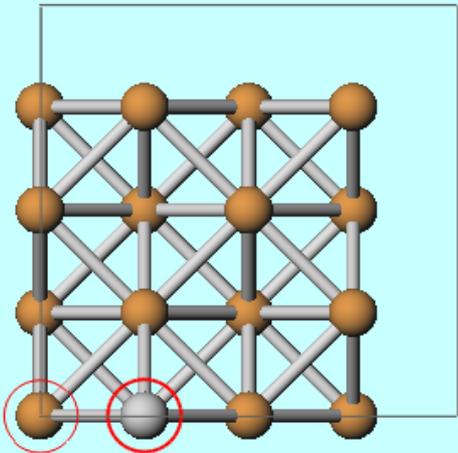
The screenshot shows the 'Nudged Elastic Band' dialog box with the following settings:

- Coordinates:**
  - FIRST\_IMAGE: C:\winmos9\UserData\cu\_slab\_first.pwout
  - LAST\_IMAGE: C:\winmos9\UserData\cu\_slab\_last.pwout
- Reorder atomic indices
- Atom Moving Along Reaction Coordinate at FIRST\_IMAGE: 1
- at LAST\_IMAGE: 1
- # of Images: 5
- Threshold [eV/Å]: 0.05
- # of Ionic & Electronic Steps: 5
- Optimization Scheme: quick-min
- Climbing Image Scheme: no-CI
- Buttons: Reset..., OK, Cancel

## IV. NEB計算

- 座標表示エリアにて25番目の原子の行を選択し、X,Y成分の最適化フラグも1(可変)に設定する。(それ以外の粒子はX,Y,Z全成分0にしておく)
- キーワード表示エリアにQEのキーワードが設定されていない場合は  キーワード設定ボタンを押し、構造最適化時と同等の設定を行い、OKボタンを押す。

```
25 AgCu24 M= 1,632.98
25 - 1 - 25 - 1
X= 1.8075 Y= 0 Z= 18
4 Angle= 0 Dihedral= 0 Lper= 0
```



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

Z-Matrix	XYZ
3 Cu	1.8075 0 1.8075 0 12.5000 0
4 Cu	1.8075 0 0.0000 0 14.3075 0
5 Cu	3.6149 0 0.0000 0 12.5000 0
6 Cu	3.6149 0 1.8075 0 14.3075 0
7 Cu	5.4224 0 1.8075 0 12.5000 0
8 Cu	5.4224 0 0.0000 0 14.3075 0
9 Cu	0.0000 0 3.6149 0 12.5000 0
10 Cu	0.0000 0 5.4224 0 14.3075 0
11 Cu	1.8075 0 5.4224 0 12.5000 0
12 Cu	1.8075 0 3.6149 0 14.3075 0
13 Cu	3.6149 0 3.6149 0 12.5000 0
14 Cu	3.6149 0 5.4224 0 14.3075 0
15 Cu	5.4224 0 5.4224 0 12.5000 0
16 Cu	5.4224 0 3.6149 0 14.3075 0
17 Cu	0.0000 0 0.0000 0 16.1149 0
18 Cu	1.8075 0 1.8075 0 16.1149 0
19 Cu	3.6149 0 0.0000 0 16.1149 0
20 Cu	5.4224 0 1.8075 0 16.1149 0
21 Cu	0.0000 0 3.6149 0 16.1149 0
22 Cu	1.8075 0 5.4224 0 16.1149 0
23 Cu	3.6149 0 3.6149 0 16.1149 0
24 Cu	5.4224 0 5.4224 0 16.1149 0
25 Ag	1.8075 1 0.0000 1 18.0000 1

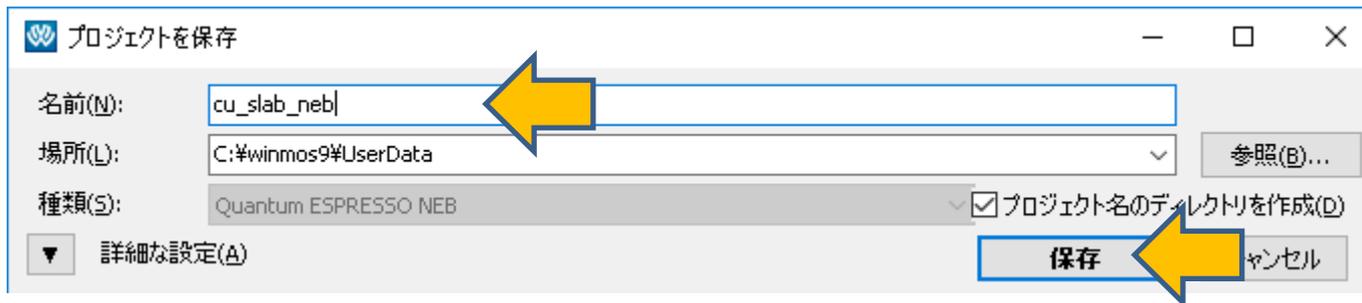
25	Ag	1.8075	0	18
		1	1	

K\_POINTS [c]

Copyright (C) 2019 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.

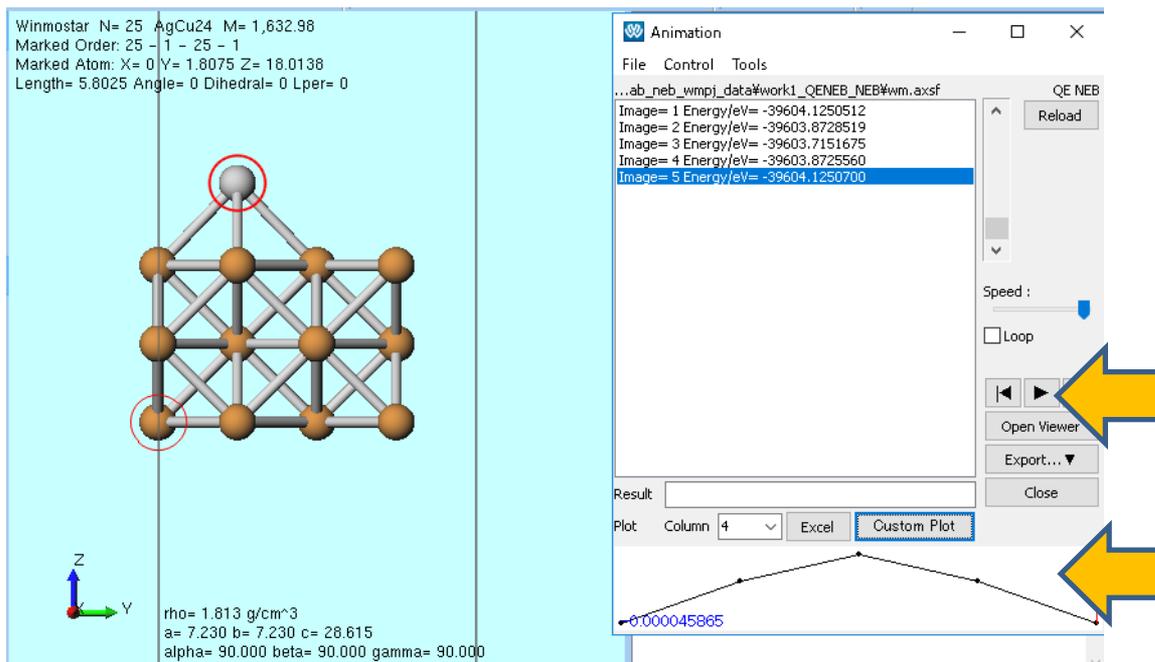
## IV. NEB計算

- **固体 | Quantum ESPRESSO | NEB実行をクリックし、プロジェクトを保存ウインドウで名前に「cu\_slab\_neb」と入力し、保存ボタンをクリックすると計算が開始される。**
- **リモートジョブの場合は固体 | Quantum ESPRESSO | NEB実行をクリックせず、ツール | リモートジョブ投入をクリックし、Solverにqe\_nebを指定してジョブを実行する。**



## IV. NEB計算

- 計算終了後、**固体 | Quantum ESPRESSO | 遷移状態 (NEB)**をクリックし、デフォルトで選択される2つのファイルを開く。(メインウィンドウで他のファイルを開いていた場合は、計算開始時に保存されたneb.inを一旦開く)
-  (X軸方向から表示)ボタンをクリックする。
- Animationウィンドウの  (Play/pause)ボタンをクリックすると各Imageの原子配置を確認できる。各ImageのエネルギーもAnimationウィンドウ下部で確認できる。



<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! 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...](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