

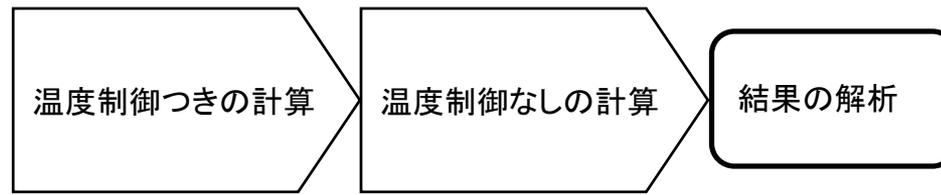
Winmostar™ チュートリアル
Quantum ESPRESSO
Born-Oppenheimer MD
V9.2.0

株式会社クロスアビリティ

2019年7月26日

概要

- メタン分子のBorn-Oppenheimer (BO) MD計算をごく短時間実行します。最初に300 Kで温度制御した状態で計算し、その後温度制御を外して計算し、エネルギー温度、アニメーションの可視化を行います。



注意点:

- 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に、精度を落とした設定を用います。
- 系のサイズも計算結果に影響を与えます。
- 平衡化に十分な時間をかけ、本計算も長時間実行することで再現性の高いデータを取得することができます。

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）](#)

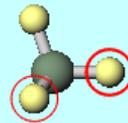
[cygwin_wmをビルドする場合（非推奨、上級者向け）](#)

[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

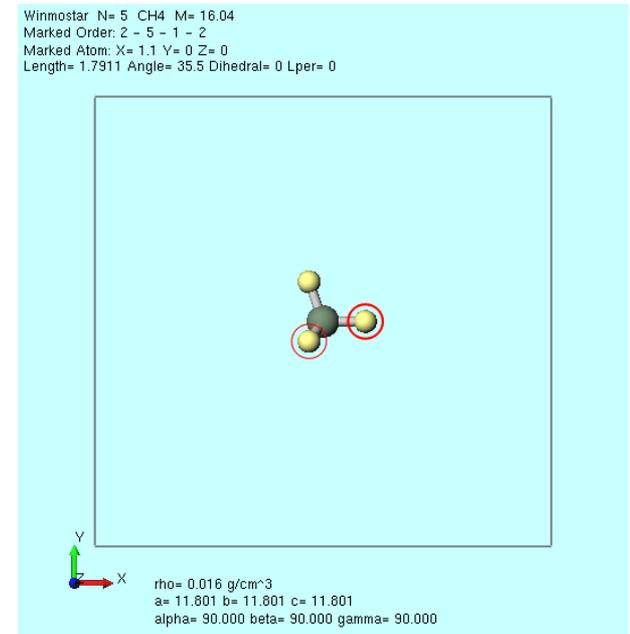
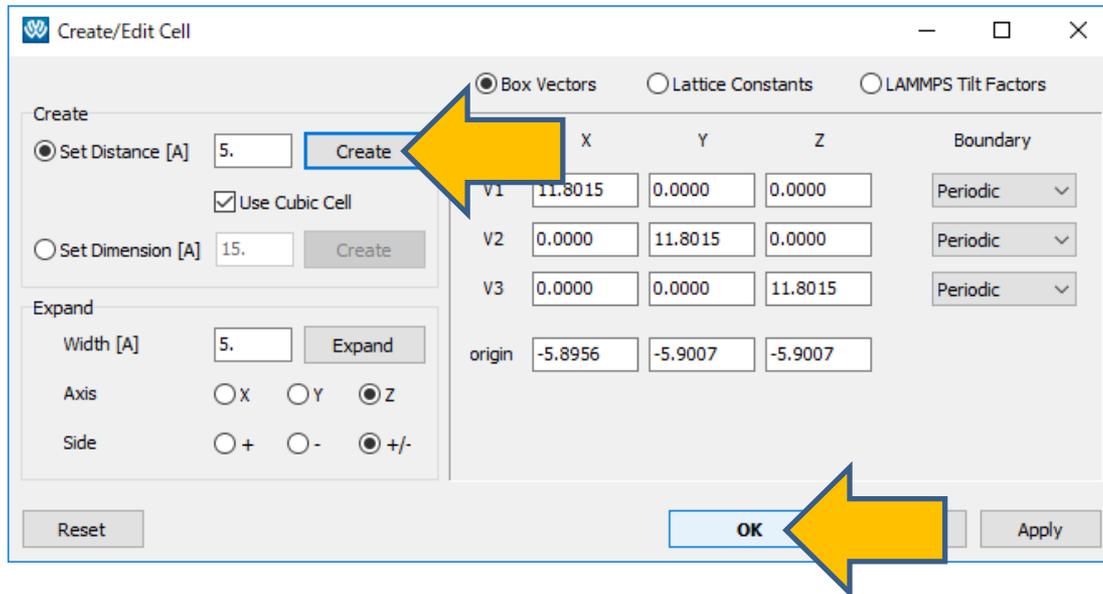
メイン画面上にてCH₄分子をモデリングする。

Winmostar N= 5 CH4 M= 16.04
Marked Order: 2 - 5 - 1 - 2
Marked Atom: X= 1.1 Y= 0 Z= 0
Length= 1.7911 Angle= 35.5 Dihedral= 0 Lper= 0



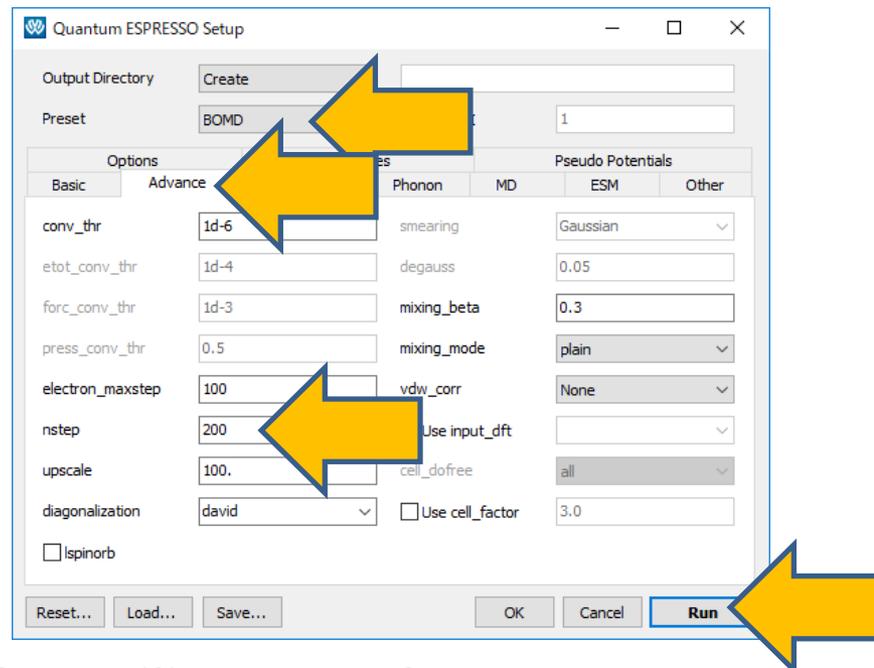
I. モデルの作成

1.  (セルを作成/編集)をクリックする。
2. **Create**をクリックし、**OK**をクリックすると、セルが作成される。



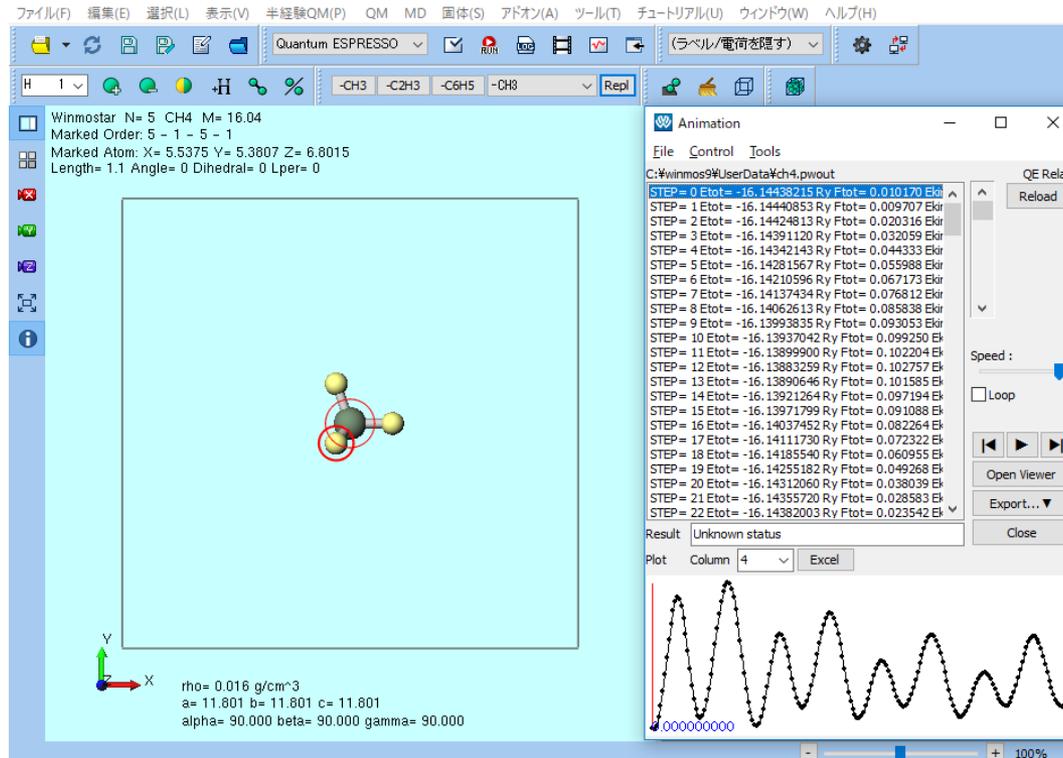
II. 温度制御付きのBOMD計算

1. ソルバー一覧から**Quantum ESPRESSO**を選択する。
2. (キーワード設定)をクリックする。
3. **Reset**をクリックする。
4. **Preset**から**BOMD**を選択する。
5. **Advance**タブにて**nstep**に**200**を指定する。
6. **Run**ボタンをクリックし、ファイル名を**ch4.pwin**として保存する。



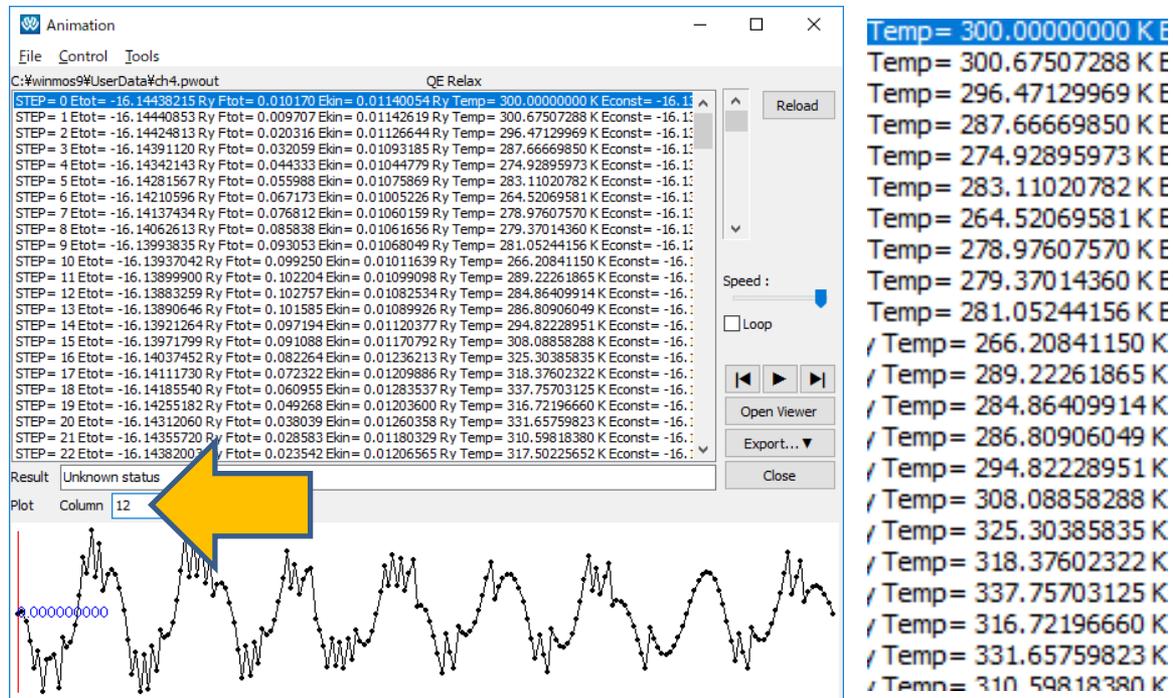
II. 温度制御つきのBOMD計算

1. 計算終了後、 (アニメーション) をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルをクリックする。
2. Animationウィンドウの  (再生ボタン) をクリックすると、アニメーションがメインウィンドウに表示される。



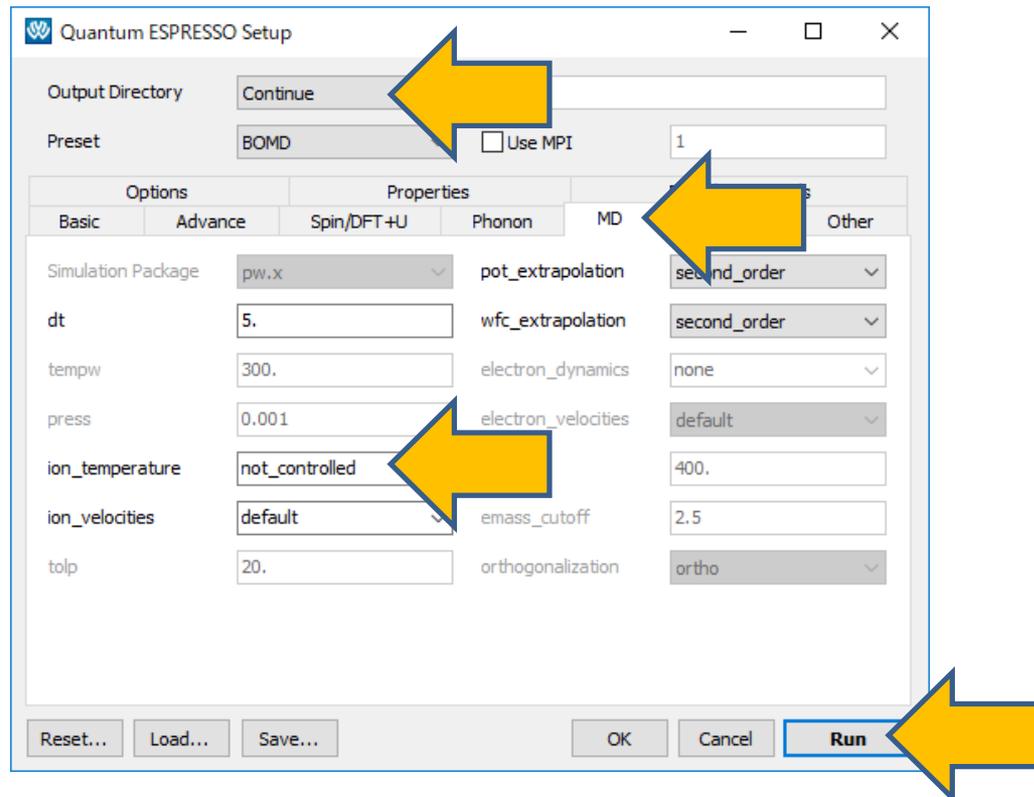
II. 温度制御つきのBOMD計算

1. 値のリストを見やすくするため、**Animation**ウィンドウを横に広げる。
リストの12列目には**Temp**(温度)が表示され、**300 K**前後で推移していることを確認する。
2. **Animation**ウィンドウ右下のプルダウンから**12**を選択すると、**Animation**ウィンドウ下部に温度の時間変化が表示される。**300 K**から外れると温度が制御されジャンプしていることがわかる。



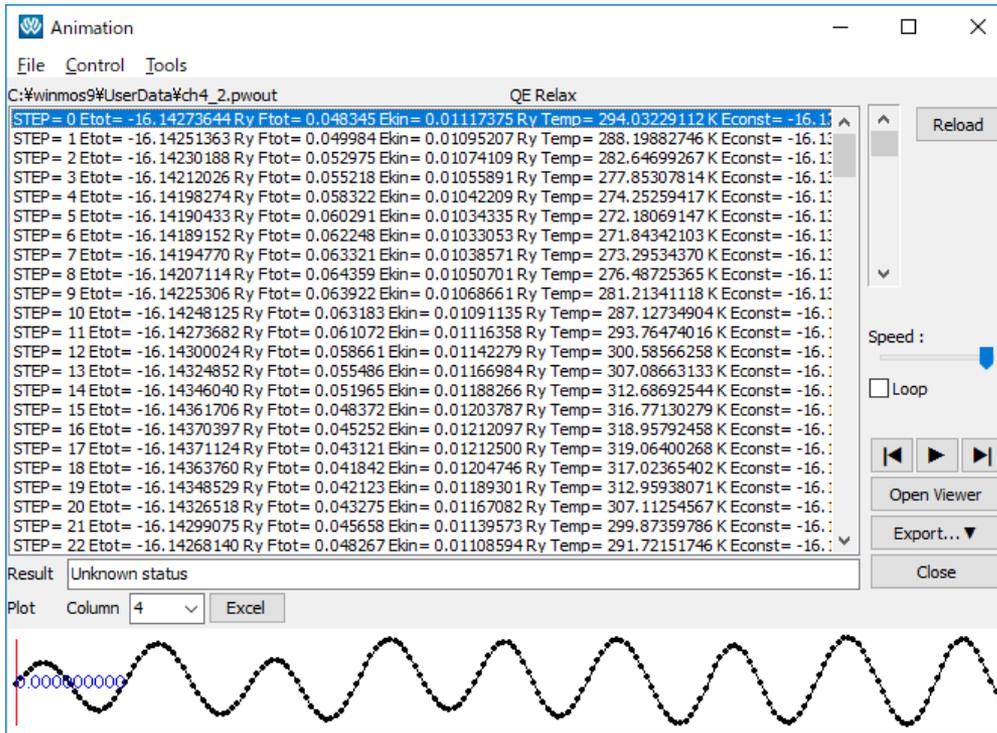
III. 温度制御なしのBOMD計算

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. **Output Directory**に**Continue**を指定する。
3. **MDタブ**にて、**ion_temperature**に**not_controlled**を指定する。
4. **Run**をクリックする。ファイル名は**ch4_2.pwin**として保存する。



III. 温度制御なしのBOMD計算

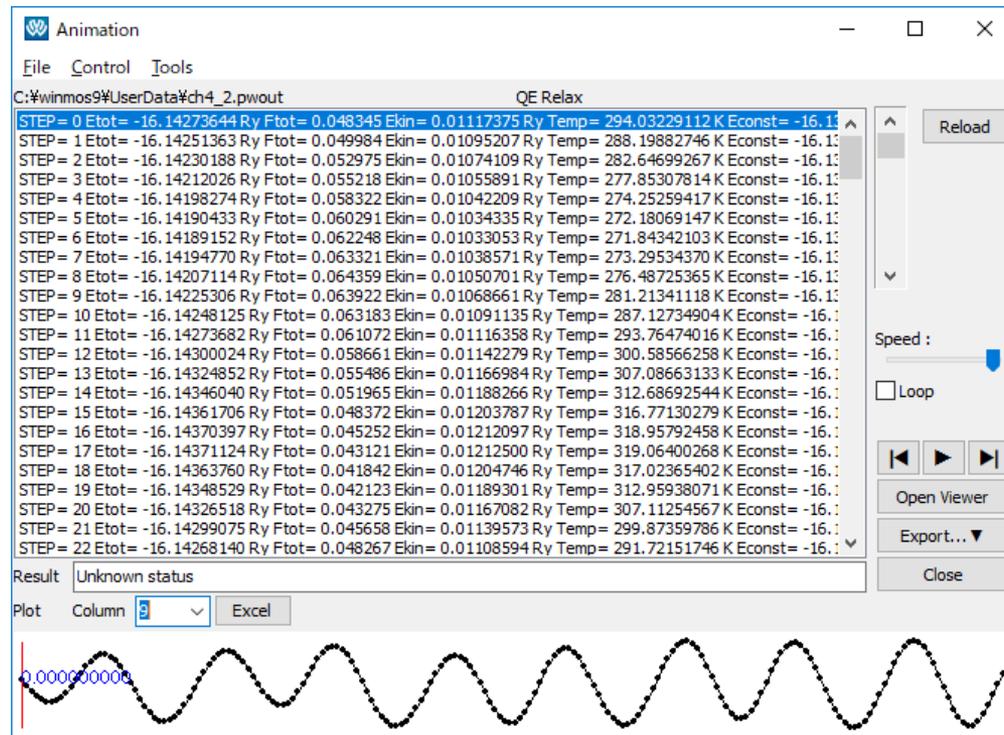
1. 計算終了後、 (アニメーション) をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルを選択する。
2. **Animation** ウィンドウの4列目のポテンシャルエネルギーが**0.001 Ry**程度の値の変化を持っていることを確認する。



Etot= -16.14273644 Ry F
 Etot= -16.14251363 Ry F
 Etot= -16.14230188 Ry F
 Etot= -16.14212026 Ry F
 Etot= -16.14198274 Ry F
 Etot= -16.14190433 Ry F
 Etot= -16.14189152 Ry F
 Etot= -16.14194770 Ry F
 Etot= -16.14207114 Ry F
 Etot= -16.14225306 Ry F
 Etot= -16.14248125 Ry F
 Etot= -16.14273682 Ry F
 Etot= -16.14300024 Ry F
 Etot= -16.14324852 Ry F
 Etot= -16.14346040 Ry F
 Etot= -16.14361706 Ry F
 Etot= -16.14370397 Ry F
 Etot= -16.14371124 Ry F
 Etot= -16.14363760 Ry F
 Etot= -16.14348529 Ry F
 Etot= -16.14326518 Ry F
 Etot= -16.14299075 Ry F
 Etot= -16.14268140 Ry F

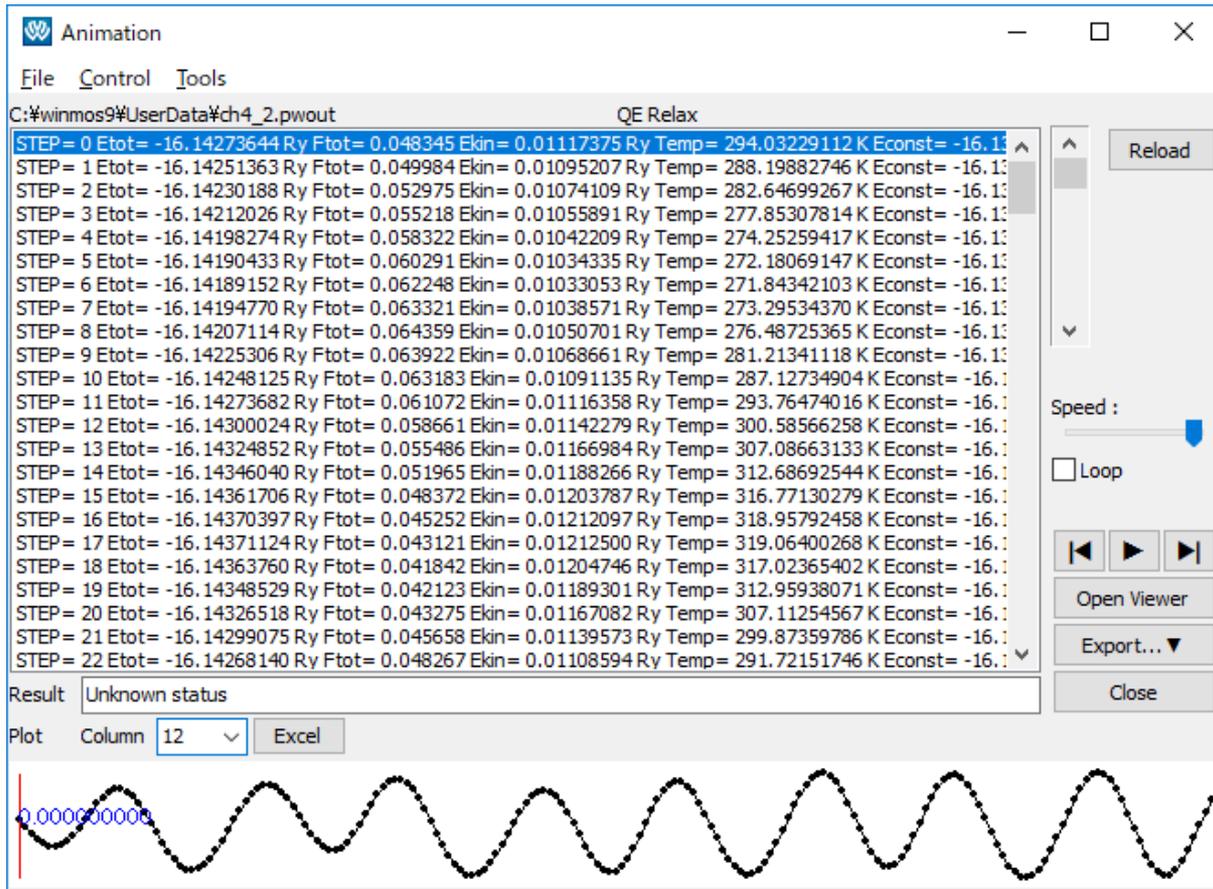
III. 温度制御なしのBOMD計算

1. Animationウインドウの右下のプルダウンで9を選択する。
2. 運動エネルギー (E_{kin}) を表示し、全エネルギー (運動エネルギー + ポテンシャルエネルギー) が保存するように、運動エネルギーがポテンシャルエネルギーと逆方向に変動していることを確認する。実際に全エネルギーが保存する様子はこの先で確認する。



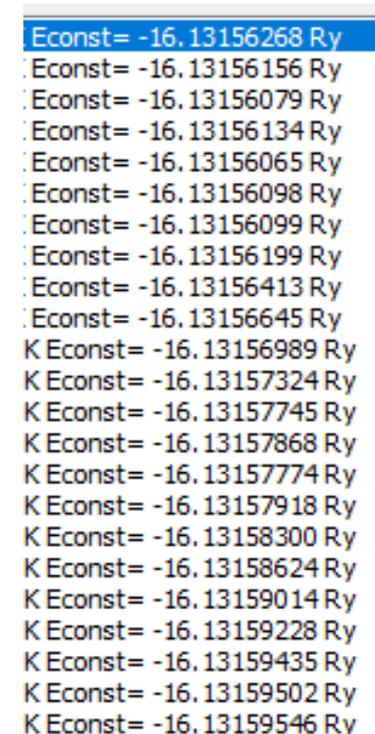
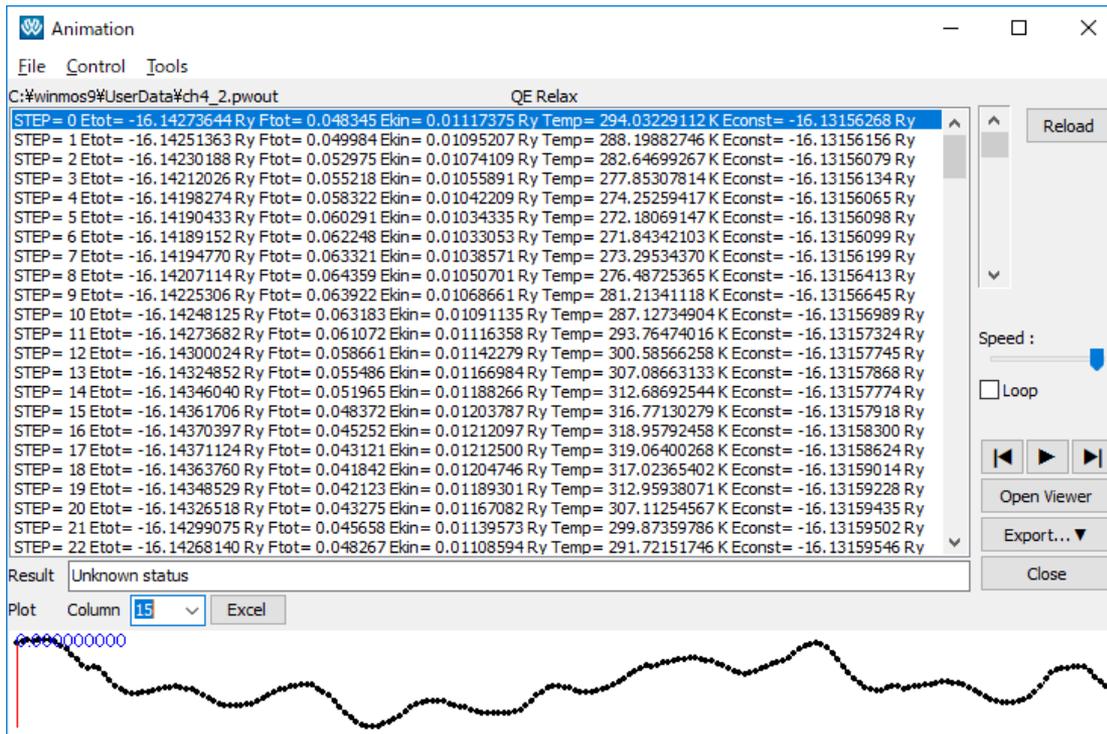
III. 温度制御なしのBOMD計算

1. Animationウインドウの右下のプルダウンで12を選択し温度を表示する。
2. グラフから、先ほどの様に温度制御はされていないことを確認する。



III. 温度制御なしのBOMD計算

1. リストの15列目の全エネルギー(Econst)が、**0.00001 Ry**程度の変化で、ポテンシャルエネルギーよりも変化が小さいのを確認する。
2. **Animation**ウインドウの右下のプルダウンで**15**を選択して全エネルギーを表示し、保存している様子を確認する。



<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