

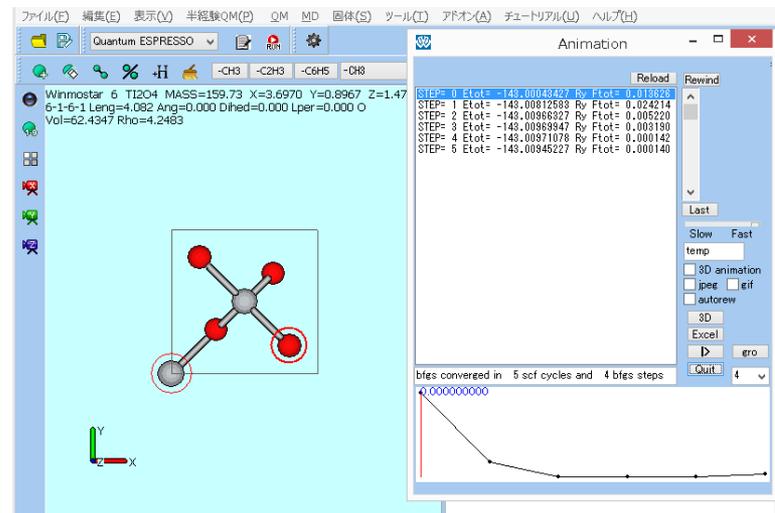
Winmostar™ チュートリアル
Quantum ESPRESSO
構造最適化計算
V9.2.1

株式会社クロスアビリティ

2019年7月26日

概要

- 本チュートリアルでは、ルチル型TiO₂結晶の構造最適化計算を実施します。セルと原子核位置の両方を同時に最適化します。



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。
- 構造最適化計算中のDFT計算のパラメータは初期構造で調整されるため、最終構造が初期構造から大きく異なる場合は、最適化後の構造を用いて再度構造最適化計算を実行することをお勧めします。

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）](#)

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/fhi-pp-from-abinit-web-site/>

- ・O原子のO.pw-mt_fhi.UPF
- ・Ti原子のTi.pw-mt_fhi.UPF

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**tio2_rutile.cif**を開く。
(デフォルトではC:¥winmos9¥samples¥tio2_rutile.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 の操作手順に従い、以下の情報を元に単位格子を作成する。

ルチル型TiO₂単位格子について

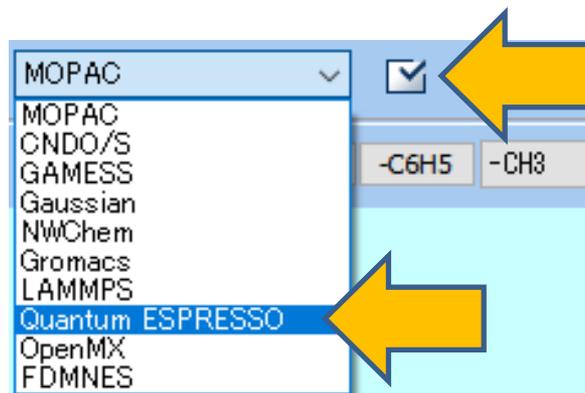
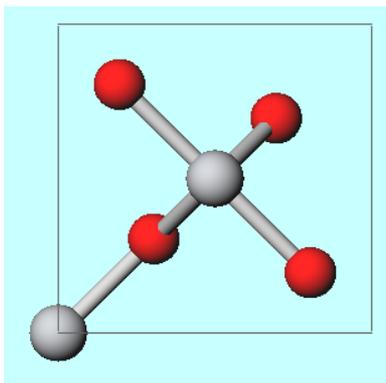
Crystal system: Tetragonal

Space group : P4₂/mnm (136)

Lattice constants : a=4.65327231 Å, c = 2.96920288 Å

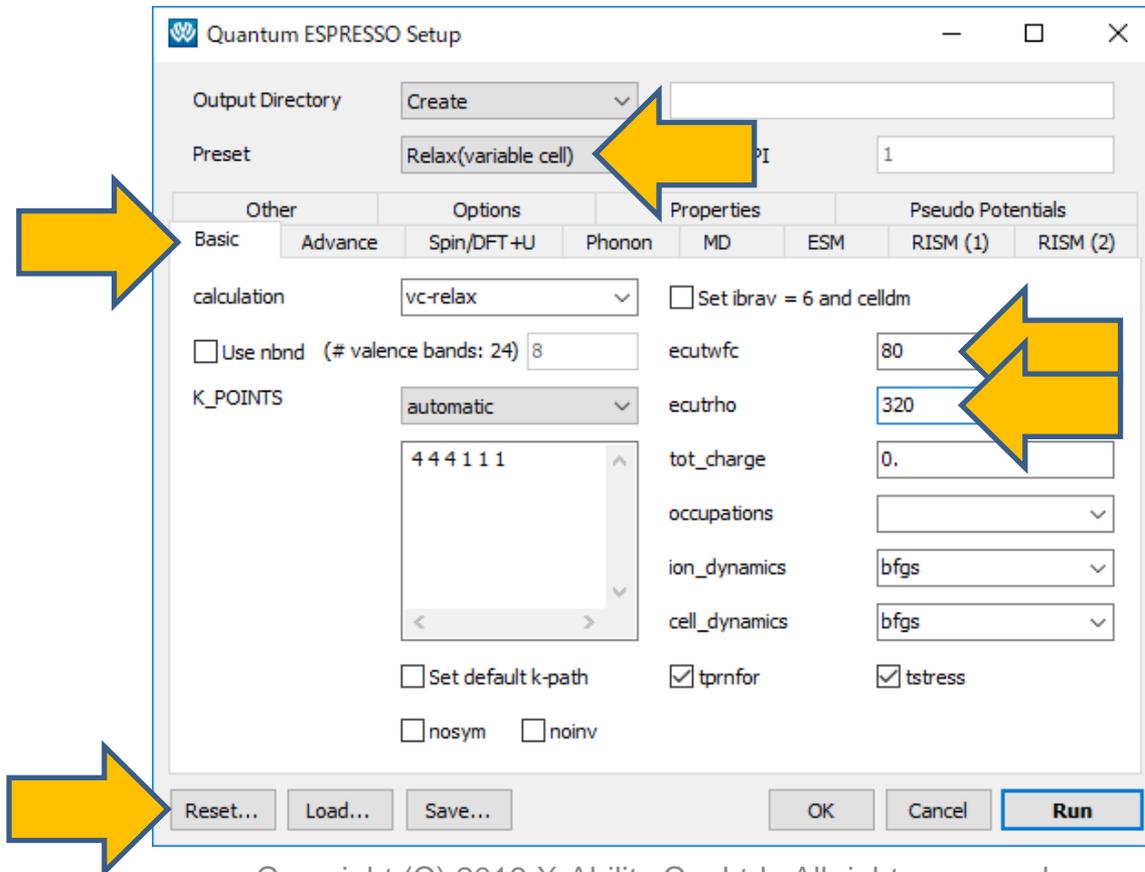
Asymmetric unit: Ti (0.00000 0.00000 0.00000), O (0.19542 0.80458 0.50000)

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。



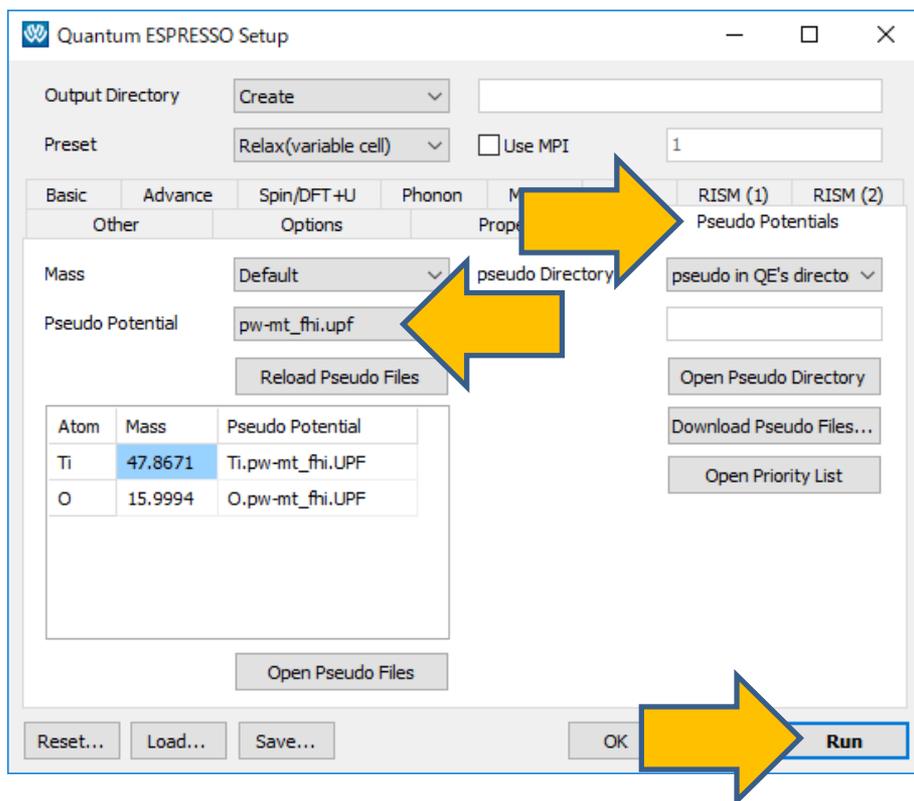
II. 構造最適化計算

1. **Reset...**をクリックする。
2. **Preset**に**Relax(variable cell)**を選択する。
3. **Basic**タブを開き、**ecutwfc**に**80**、**ecutrho**に**320**と入力する。



II. 構造最適化計算

1. **Pseudo Potentials**タブで**Pseudo Potential**に**pw-mt_fhi.upf**を選択する。
pw-mt.fhi.upfがない場合は「動作環境設定」のページに従って設定する。
2. **Run**をクリックする。ファイル名を**tio2_rutile_relax.pwin**として保存する。



(計算時間は2コアで約2分)

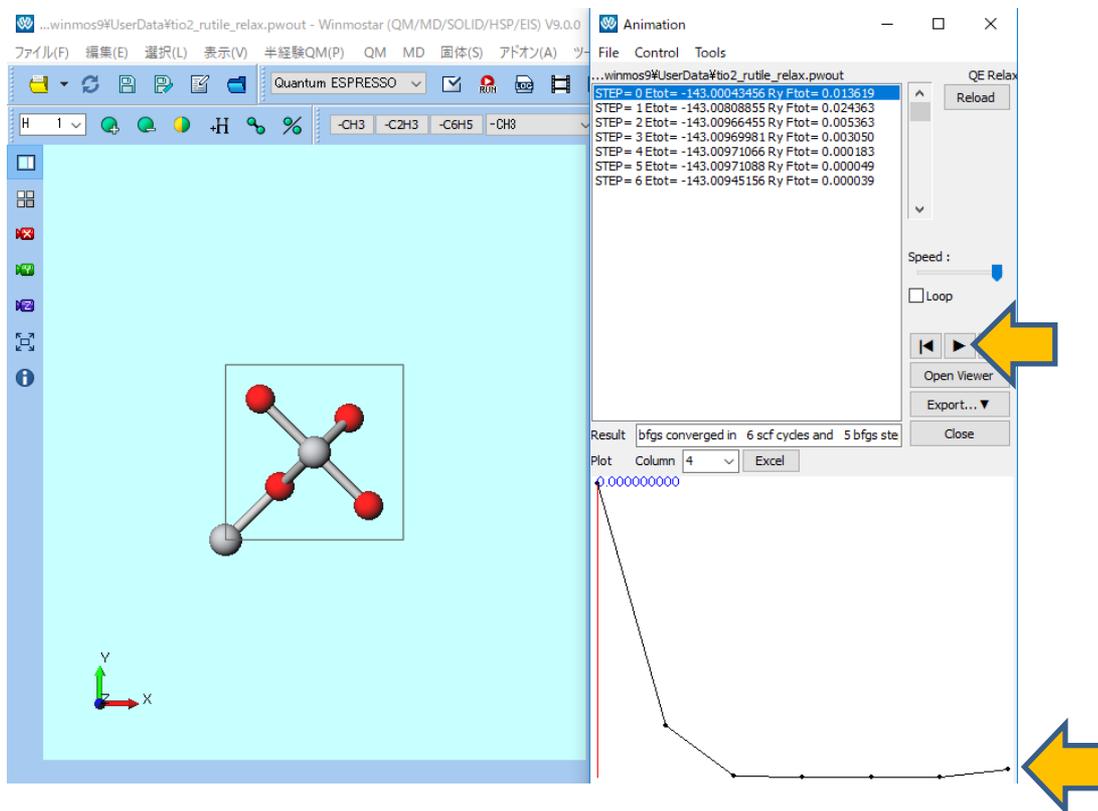
III. 結果の表示

1. 計算の終了後、 (アニメーション(pwout)) をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるファイルを選択する。



III. 結果の表示

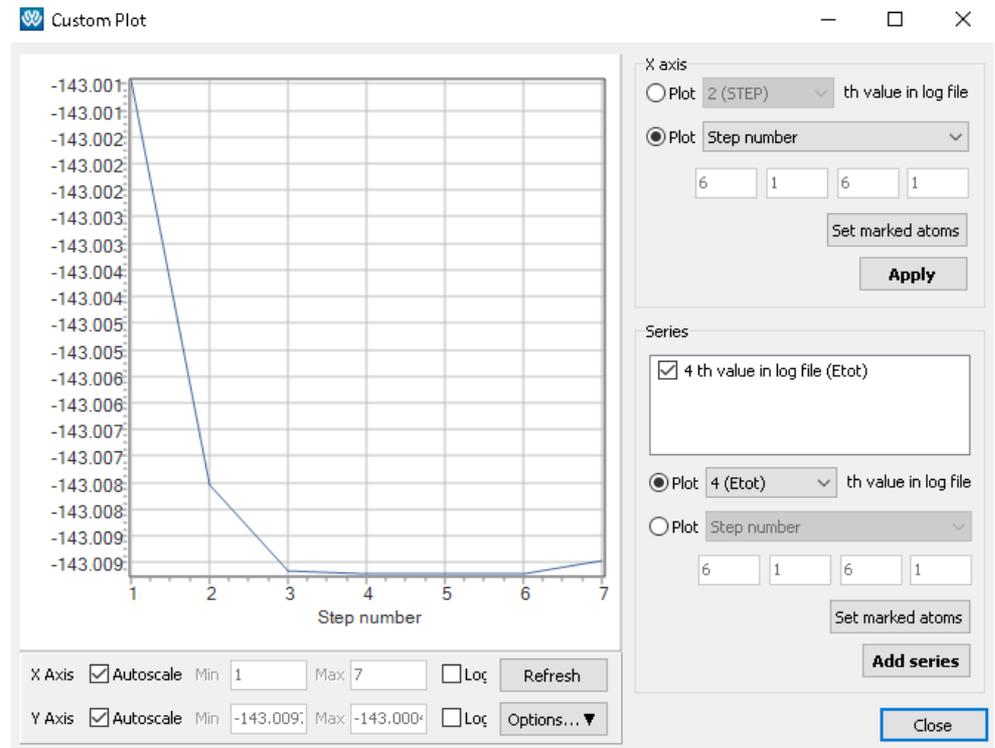
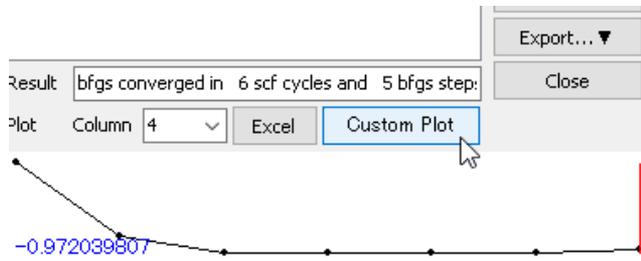
Animationウィンドウの▶をクリックするとアニメーションが開始される。
メイン画面にセルと原子位置の両方が構造最適化される様子を確認できる。



「概要」に記載の通り、構造最適化中はDFT計算のパラメータが更新されず、最終ステップのみ最適化後の構造を用いてパラメータを更新しSCFを実行しているため、最終ステップのエネルギーはそれまでの値から外れることがある。この飛びは、カットオフエネルギーを大きくすることである程度軽減できる。

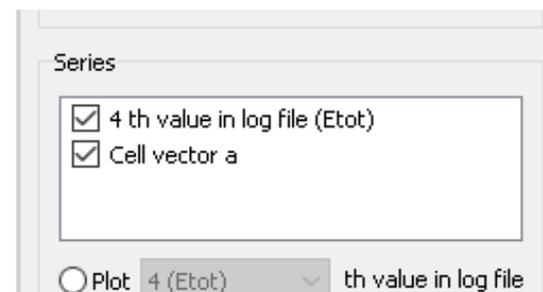
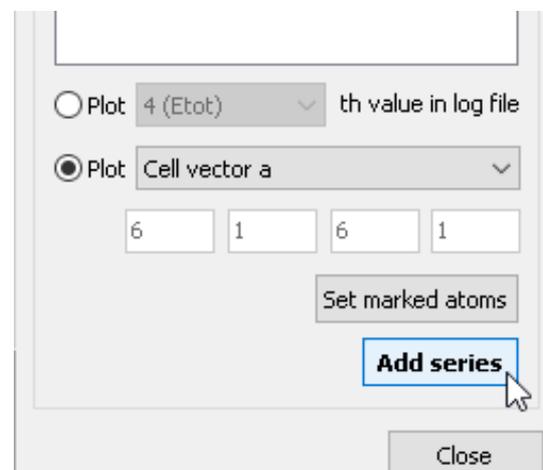
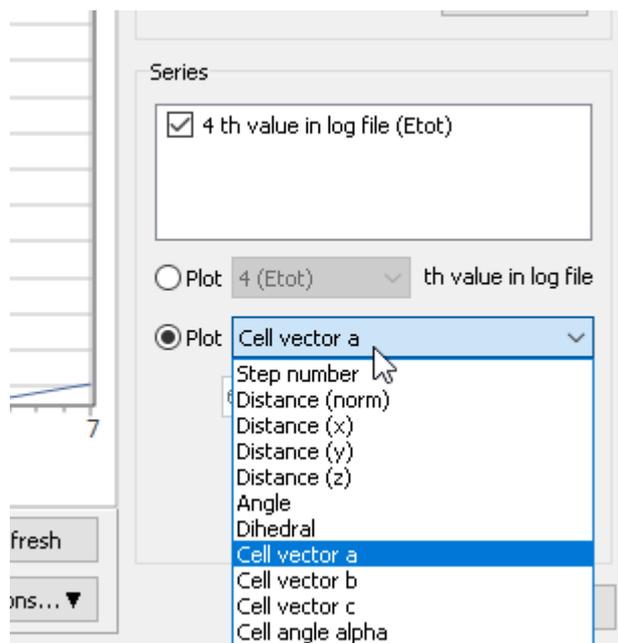
III. 結果の表示

続けて**Custom Plot**ボタンをクリックすると**Custom Plot**ウィンドウが開く。



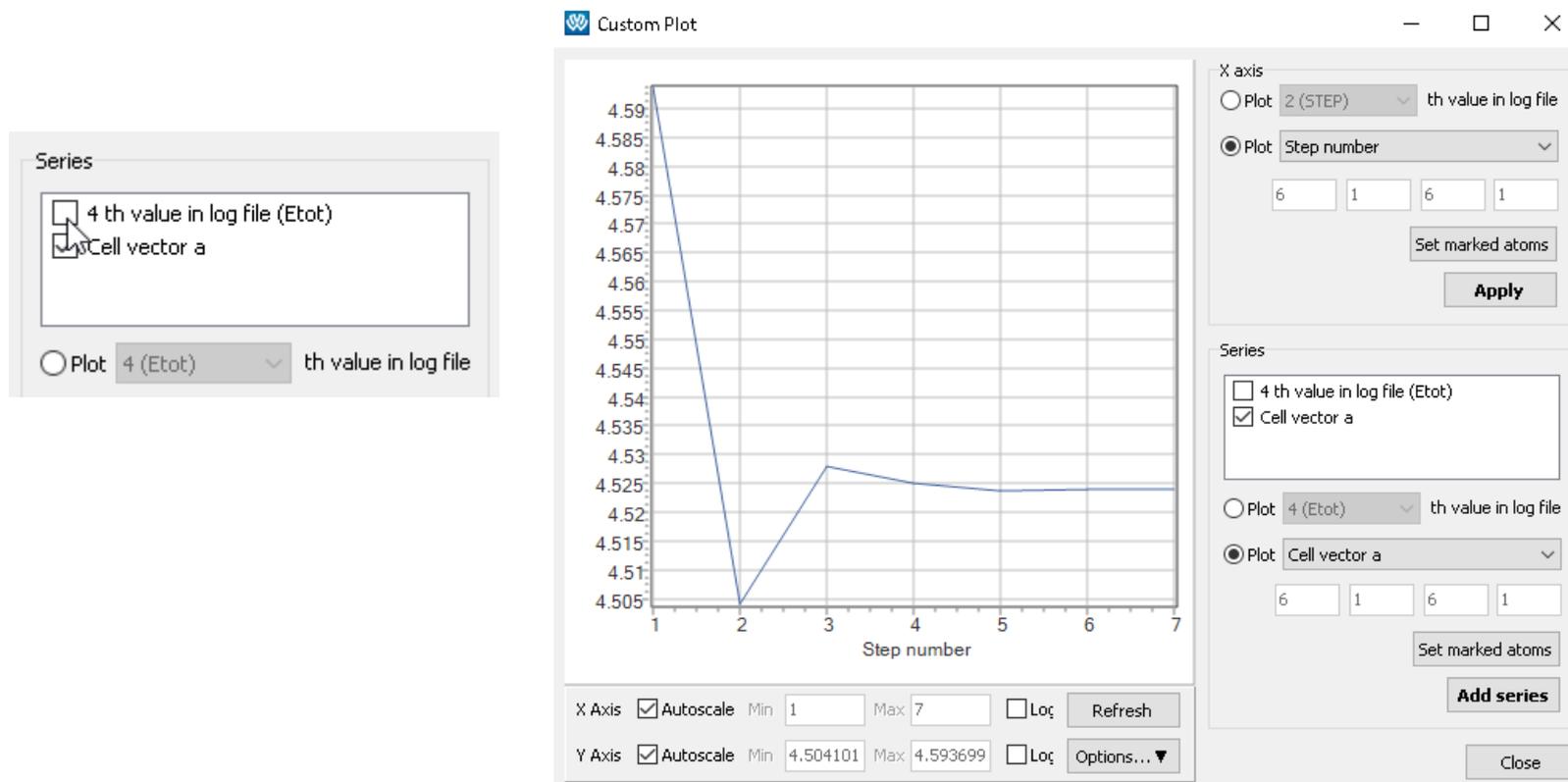
III. 結果の表示

Seriesの2番目のPlot...にチェックを入れ、プルダウンで**Cell vector a**を選択する。その後、**Add series**ボタンをクリックすると、**Series**のリストに**Cell vector a**が追加される。



III. 結果の表示

Seriesのリストのデフォルトでチェックが入っていた4 th value in log file (Etot)のチェックを外すと、a軸方向の格子定数が最適化されている様子がプロットされる。



<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

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

