

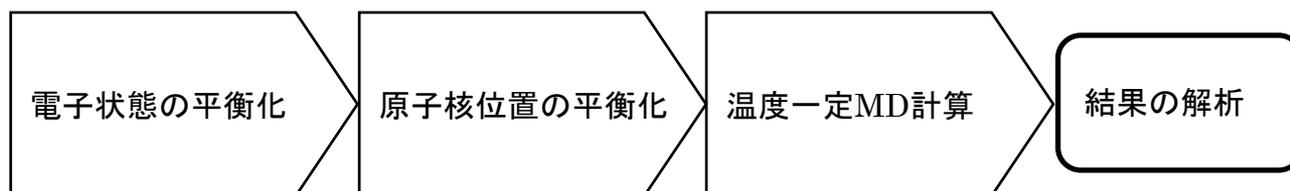
Winmostar™ チュートリアル
Quantum ESPRESSO
Car-Parrinello MD
V9.2.0

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Car-Parrinello (CP) MD計算をごく短時間実行します。計算が破たんしないよう電子と原子核それぞれを徐々に平衡化する手順を示します。



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）](#)

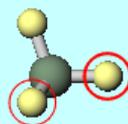
[cygwin_wmをビルドする場合（非推奨、上級者向け）](#)

[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

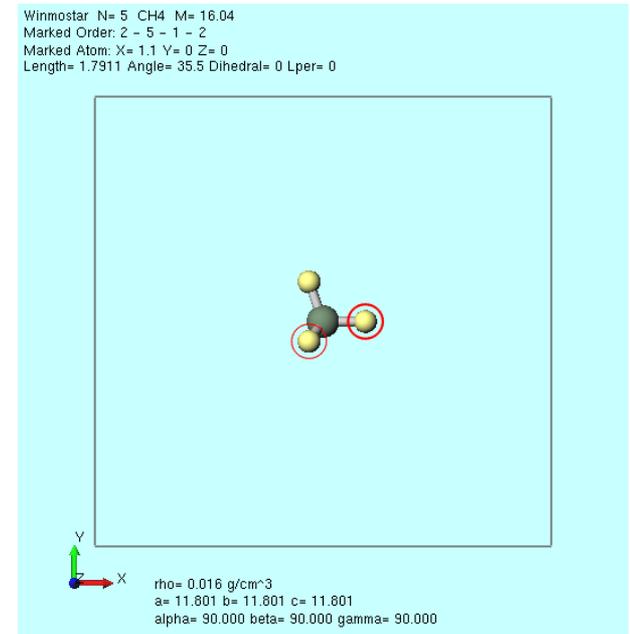
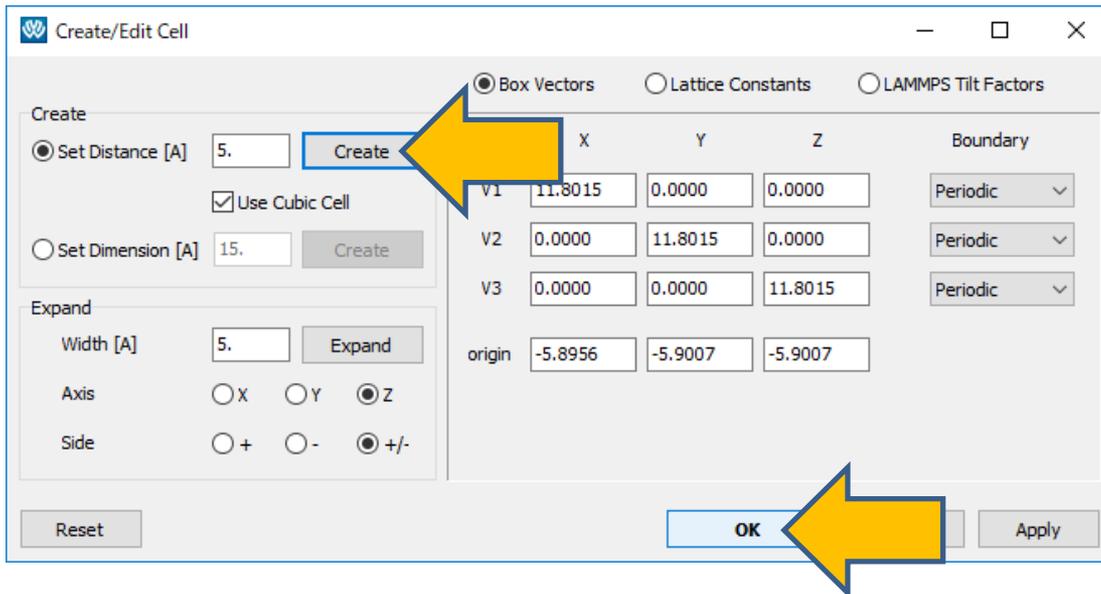
メイン画面上にてCH₄分子をモデリングする。

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



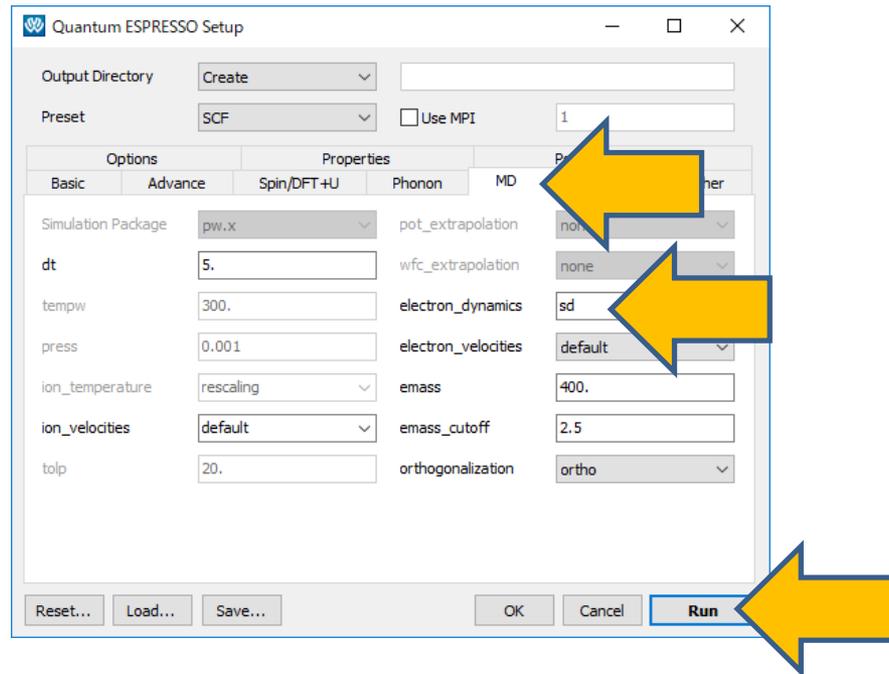
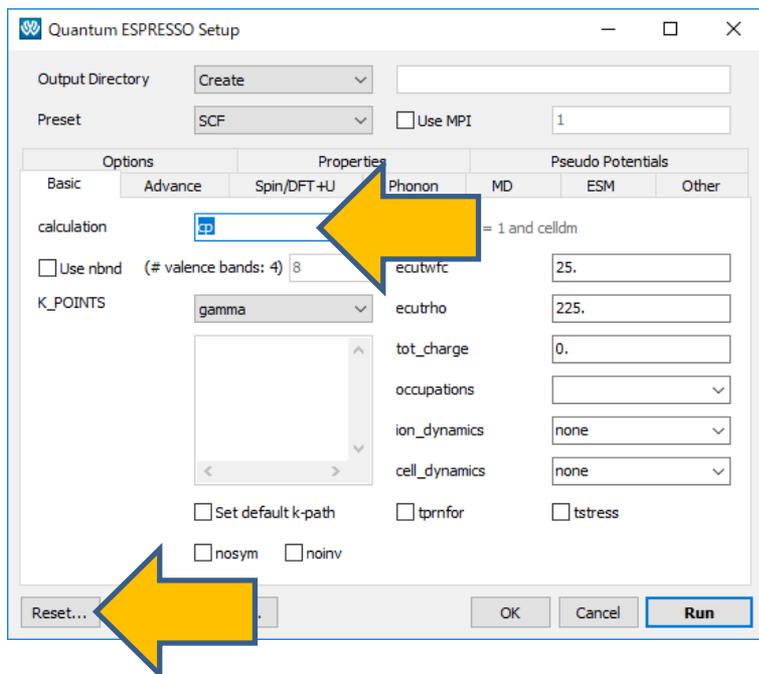
I. モデルの作成

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。



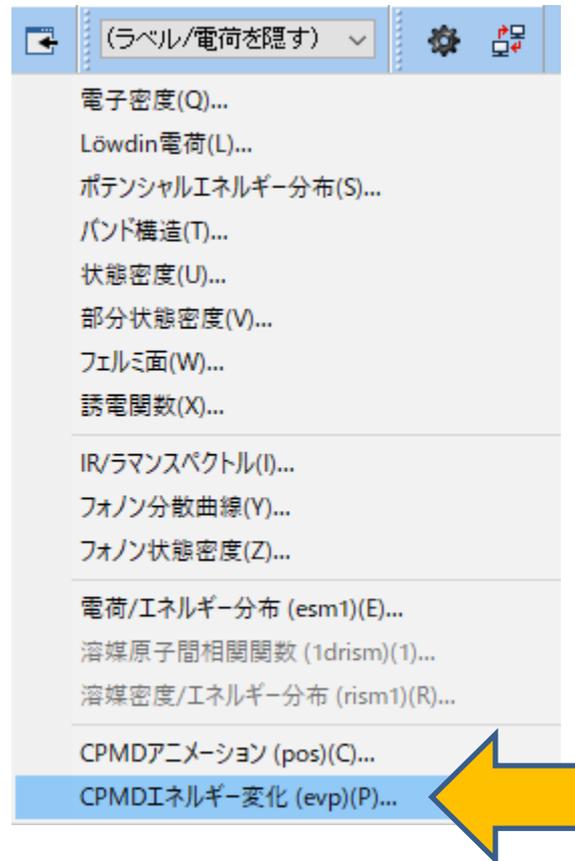
II. 電子状態の平衡化

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**ボタンをクリックする。
4. **Basic**タブにて、**calculation**に**cp**を指定する。
5. **MD**タブにて、**electron_dynamics**に**sd**を指定する。
6. **Run**ボタンをクリックする。ファイル名を**ch4_cp1.pwin**として保存する。



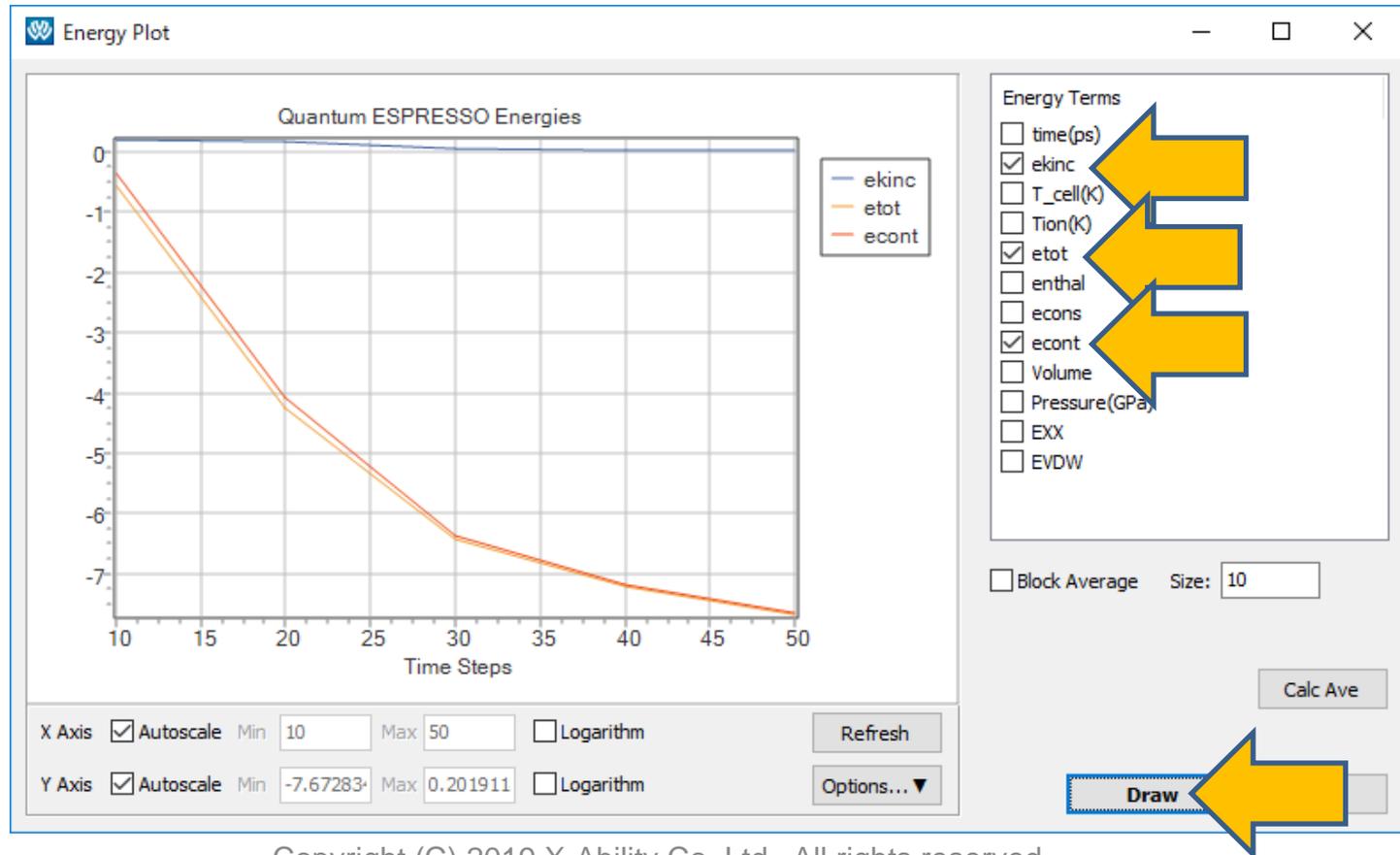
II. 電子状態の平衡化

計算終了後、 (結果解析) | CPMDエネルギー変化 (evp)をクリックし、デフォルトで選ばれるフォルダを選択する。



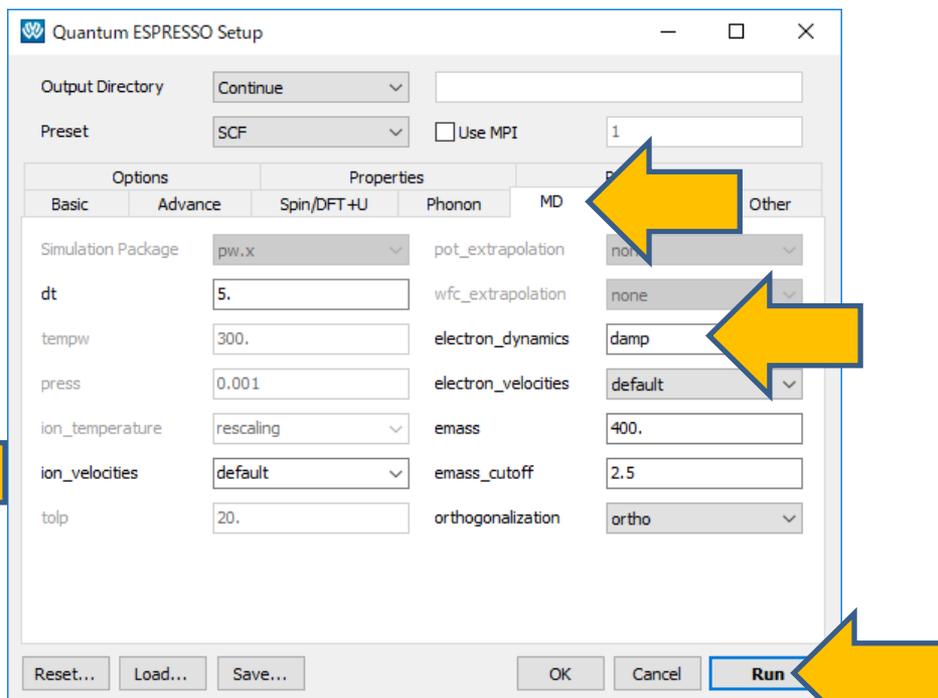
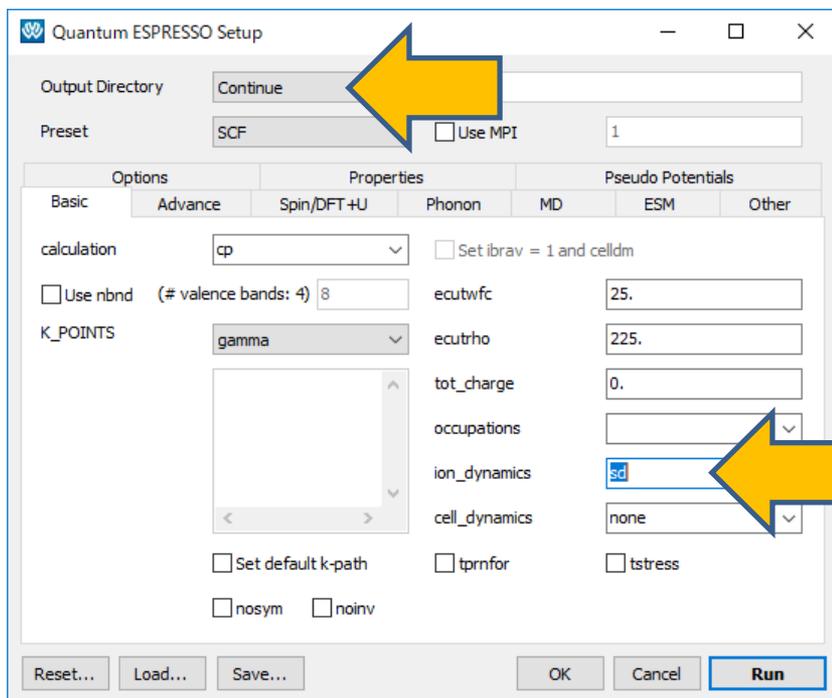
II. 電子状態の平衡化

1. **Energy Plot** ウィンドウで **ekinc** (電子の仮想運動エネルギー)、**etot** (電子の静電ポテンシャルエネルギー)、**econt** (全エネルギー) にチェックを入れる。
2. **Draw** をクリックし、右図のようにエネルギーが低下する様子を取得する。



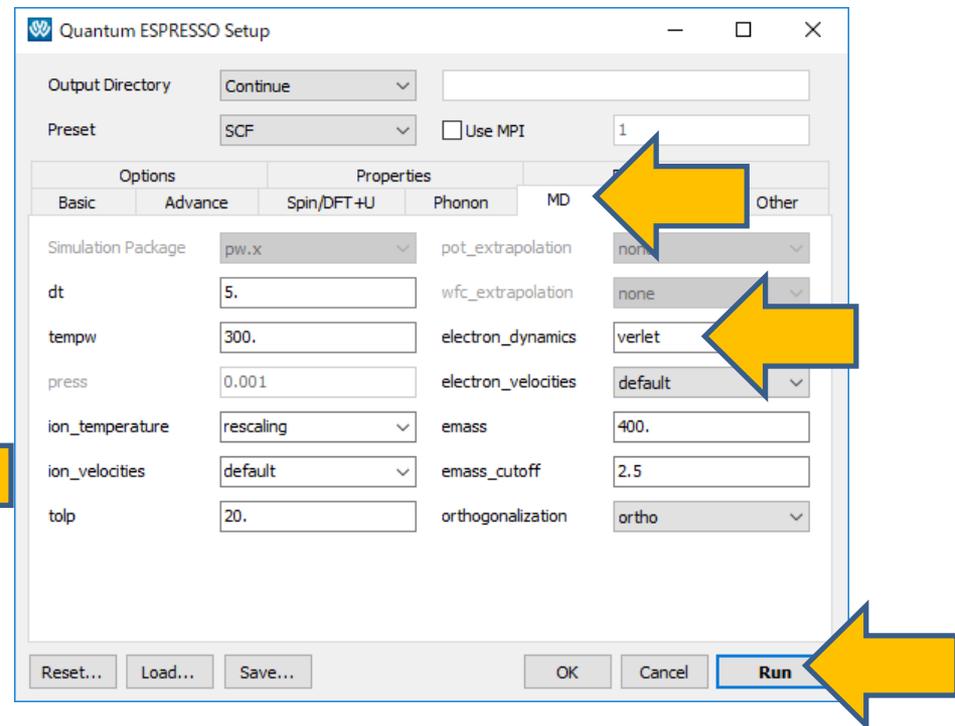
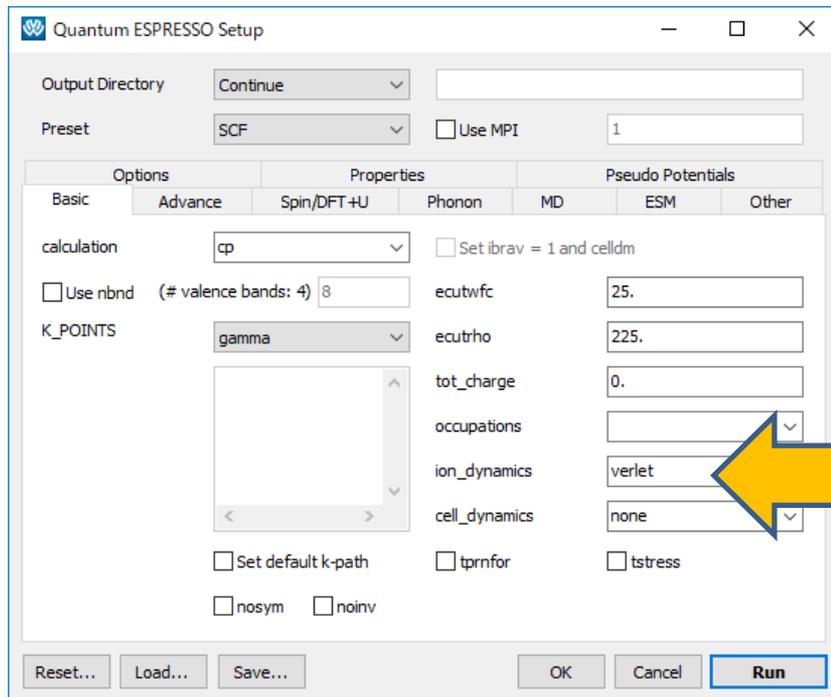
III. 原子核位置の平衡化

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. **Basic**タブにて**Ion Dynamics**にsdを指定する。
4. **MD**タブにて**Electron Dynamics**にdampを指定する。
5. **Run**をクリックする。ファイル名はch4_cp2.pwinとして保存する。



IV. 温度一定のMD計算

1. (キーワード設定) をクリックする。
2. **Basic**タブにて**Ion Dynamics**に**verlet**を指定する。
3. **MD**タブにて**Electron Dynamics**に**verlet**を指定する。
4. **Run**をクリックする。ファイル名は**ch4_cp3.pwin**として保存する。



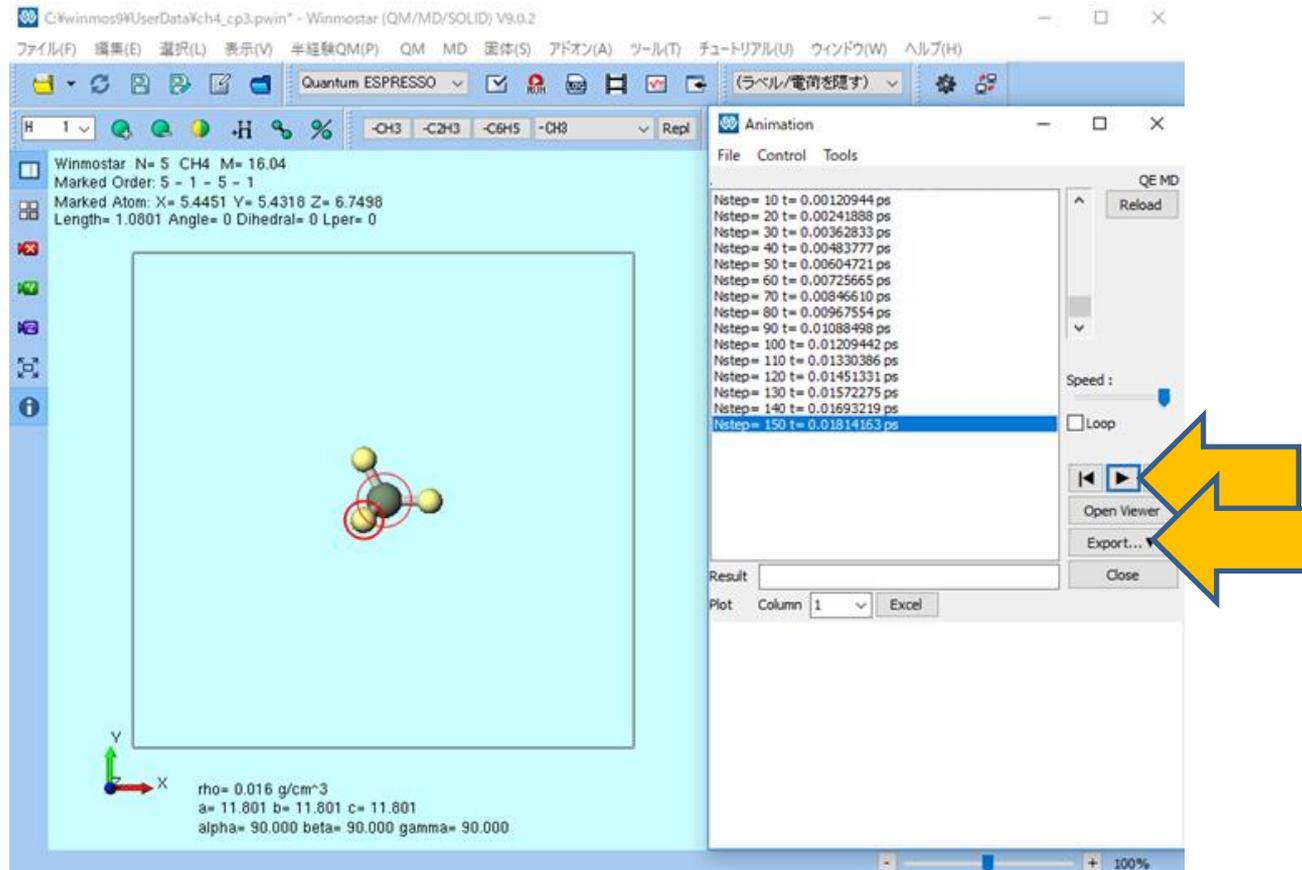
V. 結果解析

1. 計算の終了後、 (結果解析) | アニメーション (pos)」を選択。
2. デフォルトで選ばれる3つのファイルを選択する。



V. 結果解析

1.  (再生ボタン)をクリックし各ステップの様子を確認する。
2. VMD等外部ビューワで見たい場合は**Export | Animated GRO File**をクリックする。



<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! 138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