

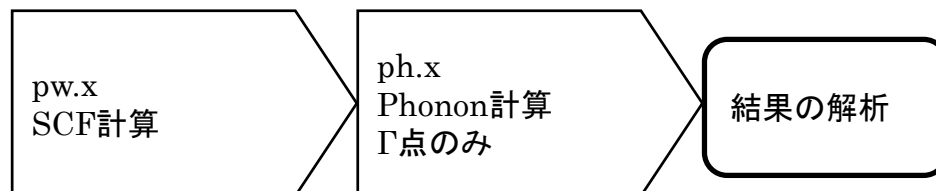
Winmostar™ チュートリアル  
Quantum ESPRESSO  
フォノン計算  
V9.2.0

株式会社クロスアビリティ

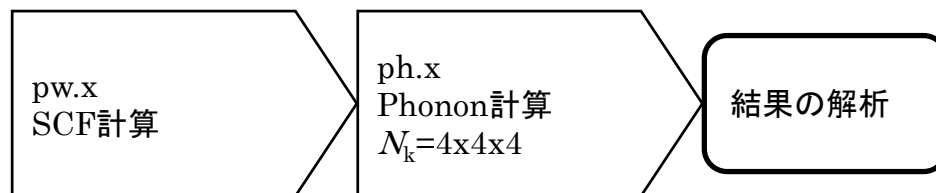
2019年7月26日

# 概要

- ① フォノン計算からSi結晶のIR、ラマンスペクトルを取得します。



- ② フォノン計算からSi結晶のフォノンバンド、フォノンDOSを取得します。



## 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、smearing幅は計算結果に影響を与えます。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¥Brrilouin_zonew.pdf`を参考に設定してください。
- GGA、Ultrasoftで計算したい場合は、別途Phonopyなどを使う必要があります。

# 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](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

1. メニュー | 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

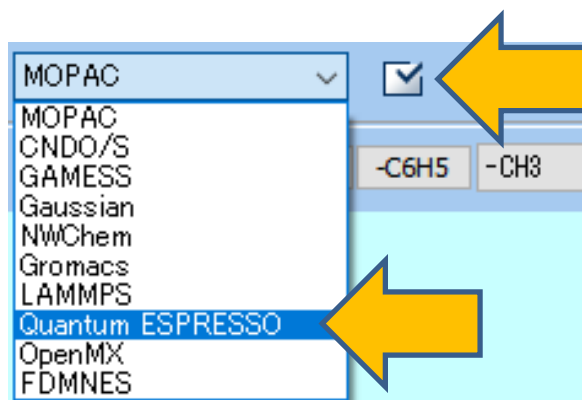
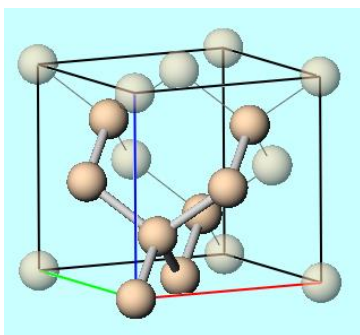
Crystal system: Cubic

Space group : Fd-3m (227)

Lattice constants : a=5.4309 Å

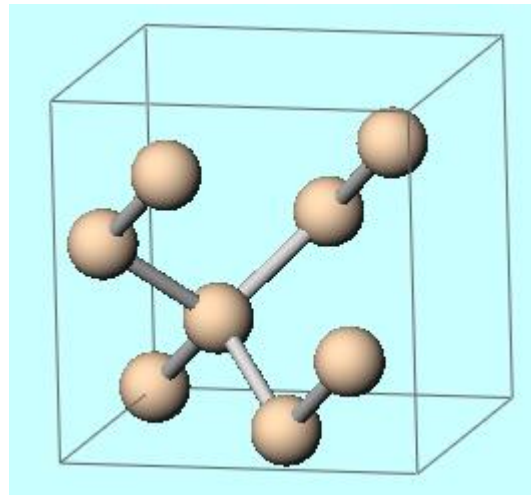
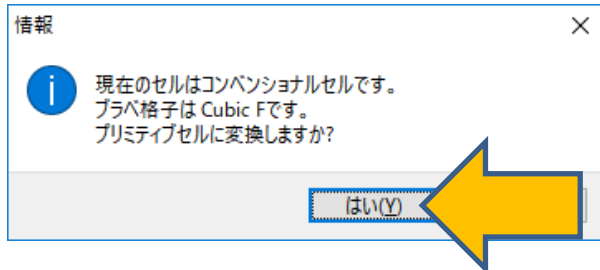
Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)

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。

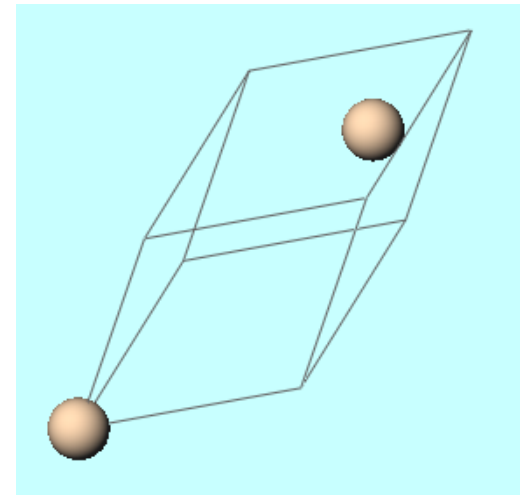


# I. モデルの作成2

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。



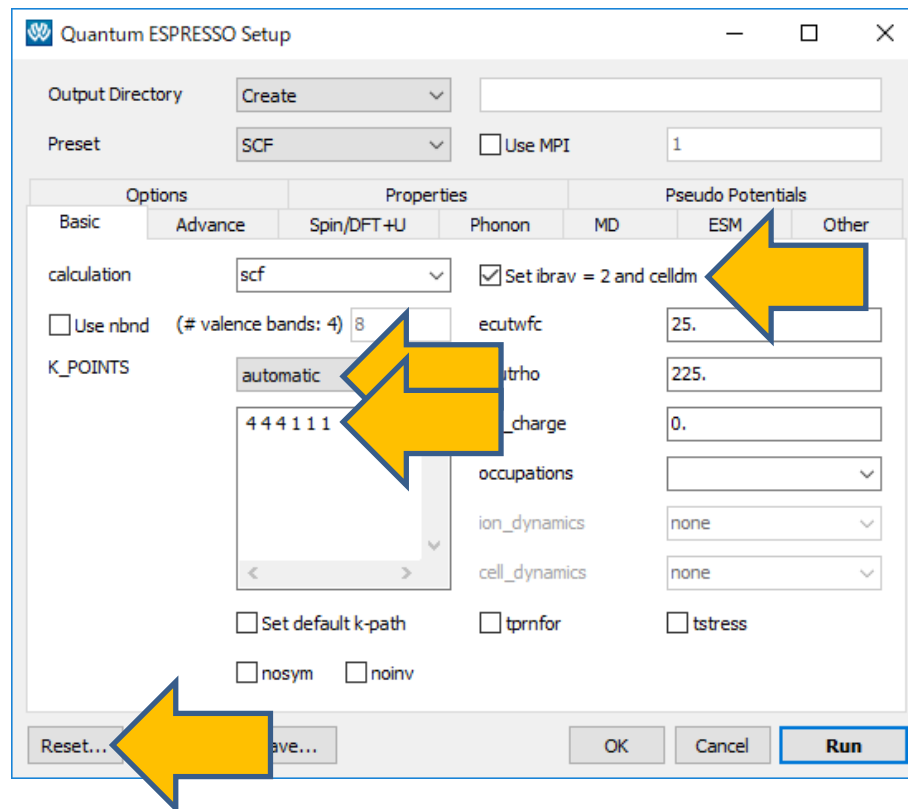
コンベンショナルセル



プリミティブセル

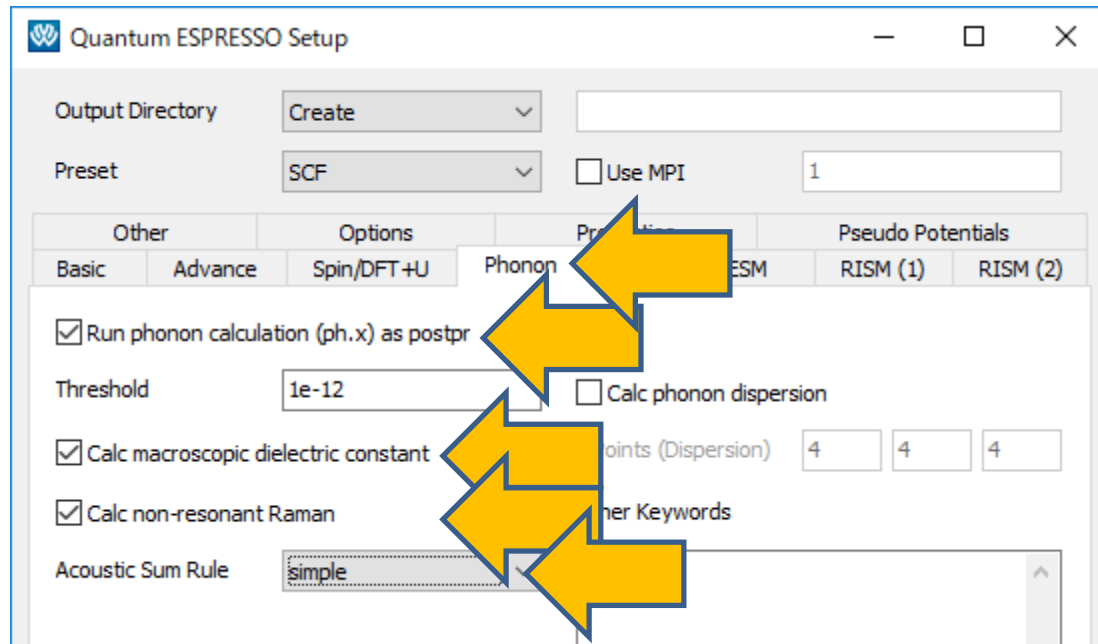
# I. IR、ラマンスペクトル

1. **Reset...**をクリックする。
2. **K\_POINTS**に**automatic**を指定し、**4 4 4 1 1 1**(スペース区切り)と入力する。
3. **Set ibrav = 2 and celldm**にチェックを入れる。



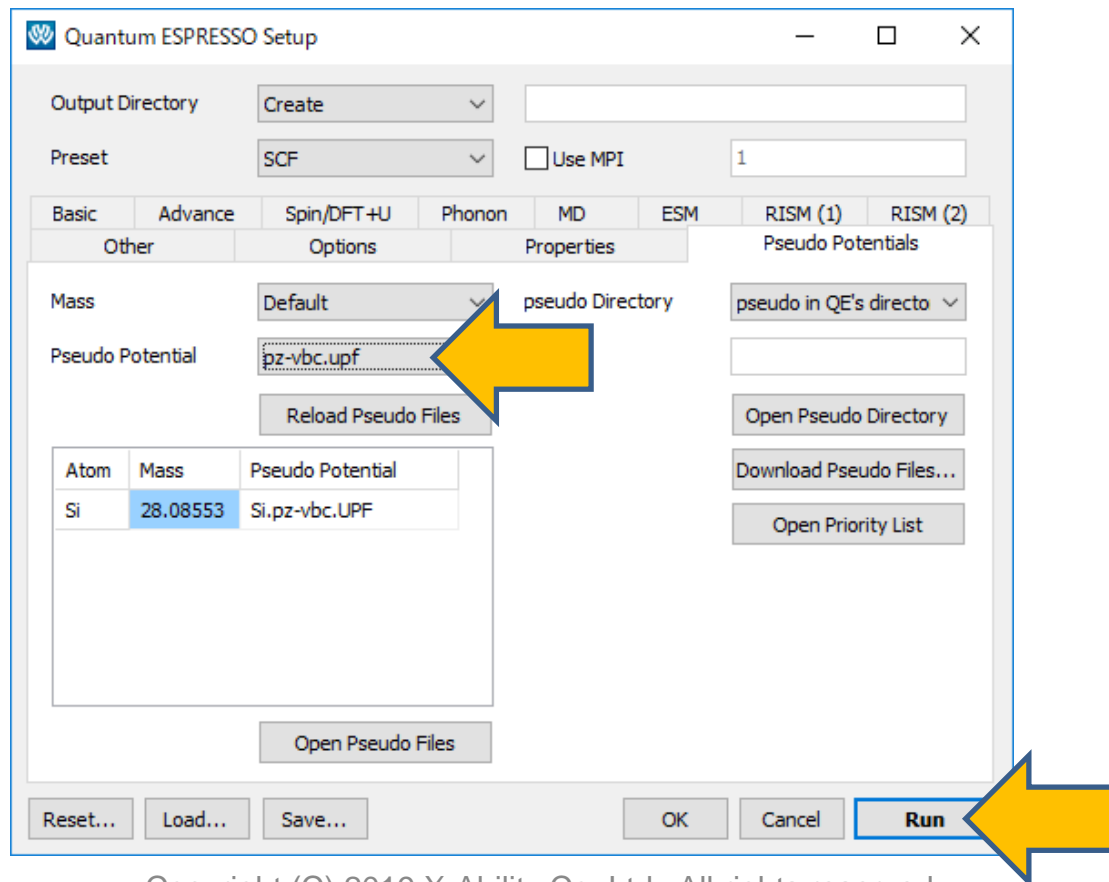
# I. IR、ラマンスペクトル

1. Phononタブを選択し、以下の3項目にチェックを入れる
  - ・Run phonon calculation (ph.x) as postprocess
  - ・Calc macroscopic dielectric constant
  - ・Calc non-resonant Raman
2. Acoustic Sum Ruleをsimpleにする。




# I. IR、ラマンスペクトル

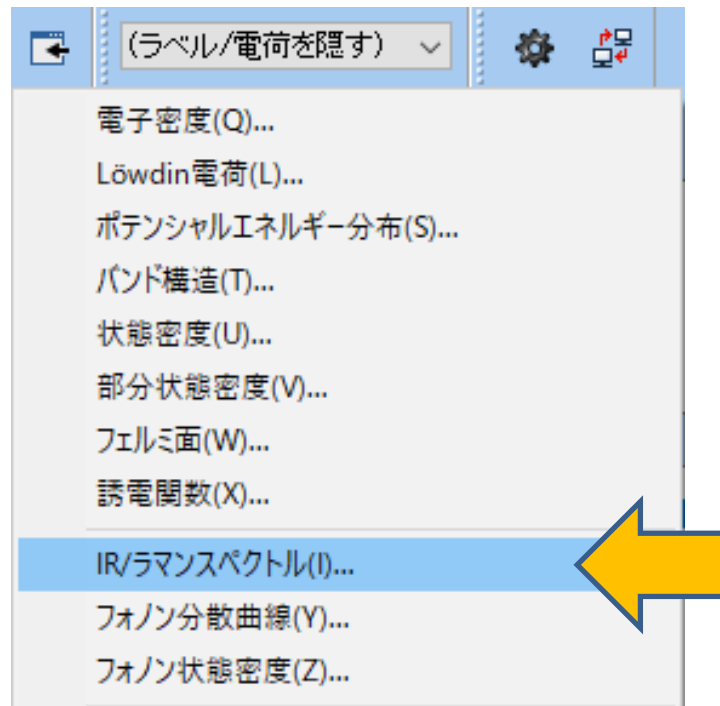
1. **Pseudo Potentials**タブを選択し、**Pseudo Potential**をpz-vbc.upfにする。  
(ph.xがGGA, Ultrasoftに対応していないため)
2. **Run**をクリックし、ファイル名にsi\_vib.pwinと入力し保存する。





# I. IR、ラマンスペクトル

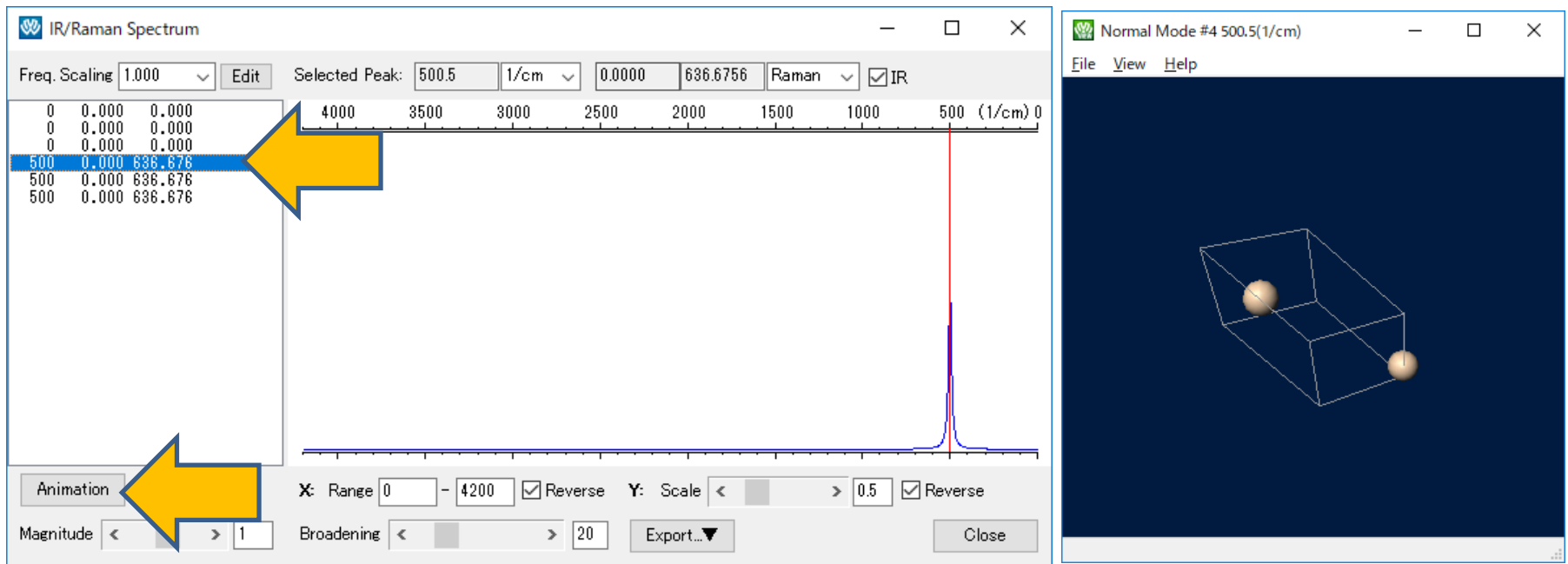
1.  (結果解析) | IR/ラマンスペクトル...をクリックする。
2. デフォルトで選択されたQEの作業ディレクトリと出力ファイルを選択する。



# I. IR、ラマンスペクトル

IR/Ramanスペクトル表示ウィンドウが表示される。

1. 画面左のスペクトル表示欄で可視化したいスペクトルを選択する。
2. **Animation**をクリックすると、アニメーションが表示される。



# I. IR、ラマンスペクトル

IR、ラマンスペクトルの計算と並行して算出された誘電率は、**si\_vib.pwin**を保存した場所にある**si\_vib\_qe\_data**フォルダの**ph.out**に出力される。

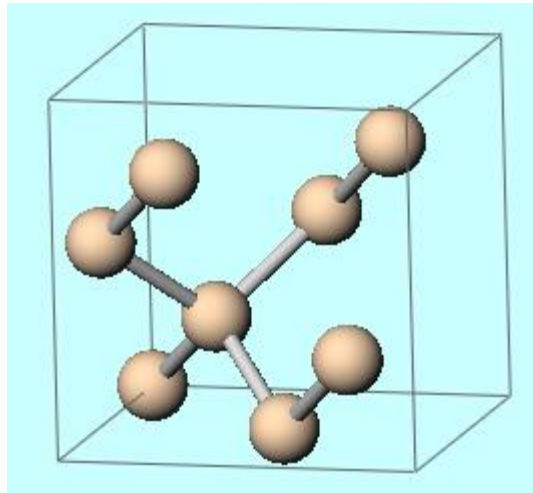
```

287 End of self-consistent calculation ←
288
289 Convergence has been achieved ←
290
291 Number of q in the star = 1 ←
292 List of q in the star: ←
293 1 0.000000000 0.000000000 0.000000000 ←
294
295 Dielectric constant in cartesian axis ←
296
297 ( 13.948484934 0.000000000 0.000000000 ) ←
298 ( 0.000000000 13.948484934 0.000000000 ) ←
299 ( 0.000000000 0.000000000 13.948484934 ) ←
300
301 -----
302 Effective charges (d Force / dE) in cartesian axis ←
303
304 atom 1 SI ←
305 Ex ( -0.07609 -0.00000 0.00000 ) ←
306 Ey ( -0.00000 -0.07609 -0.00000 ) ←
307 Ez ( 0.00000 -0.00000 -0.07609 ) ←
308
309 atom 2 SI ←
310 Ex ( -0.07609 0.00000 0.00000 ) ←
311 Ey ( 0.00000 -0.07609 -0.00000 ) ←
312 Ez ( -0.00000 -0.00000 -0.07609 ) ←

```

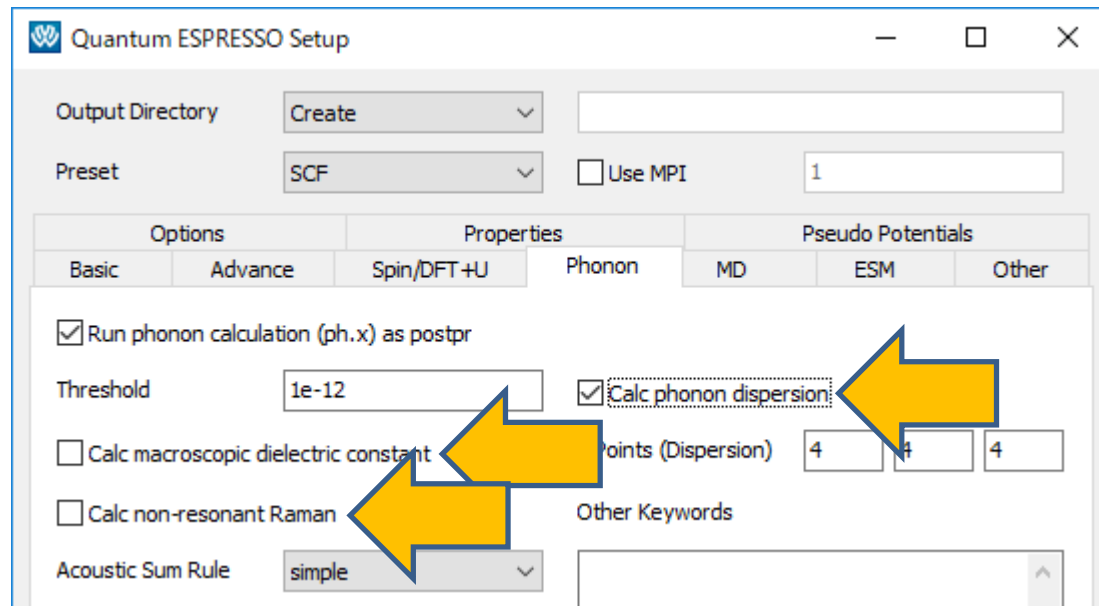
## II. フォノン分散

1. 初期状態のSi結晶 (**si.cif**)をメイン画面で開き直す。
2.  (キーワード設定)をクリックする。
3. 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。




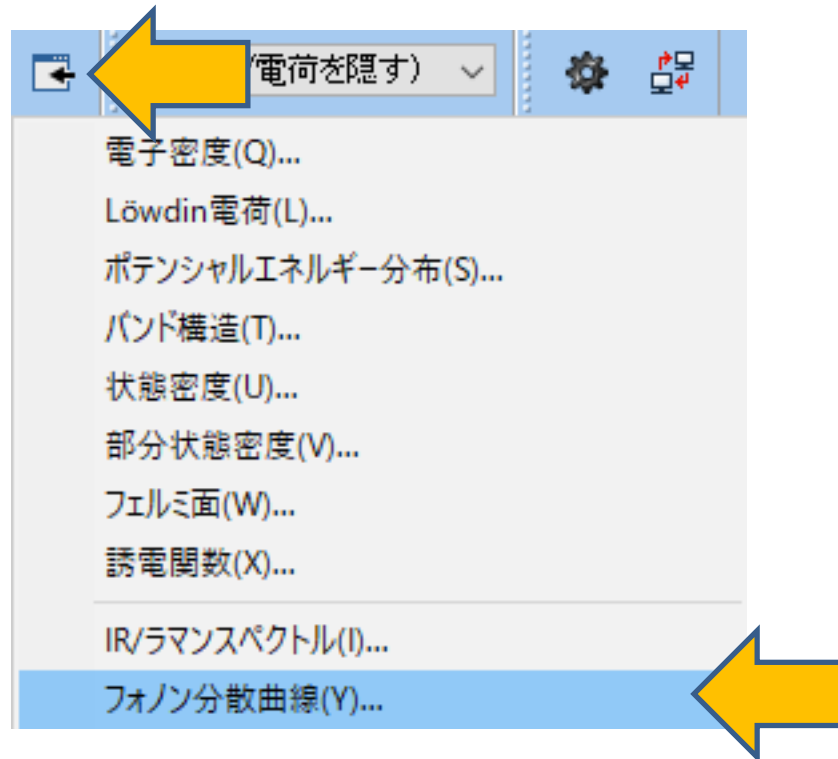
## II. フォノン分散

1. **Phonon**タブの、以下の2項目からチェックを外す。
  - ・**Calc macroscopic dielectric constant**と
  - ・**Calc non-resonant Raman**
2. **Calc phonon dispersion**にチェックを入れる。
3. **Run**をクリックする。ファイル名に**si\_disp.pwin**と入力し、保存する。



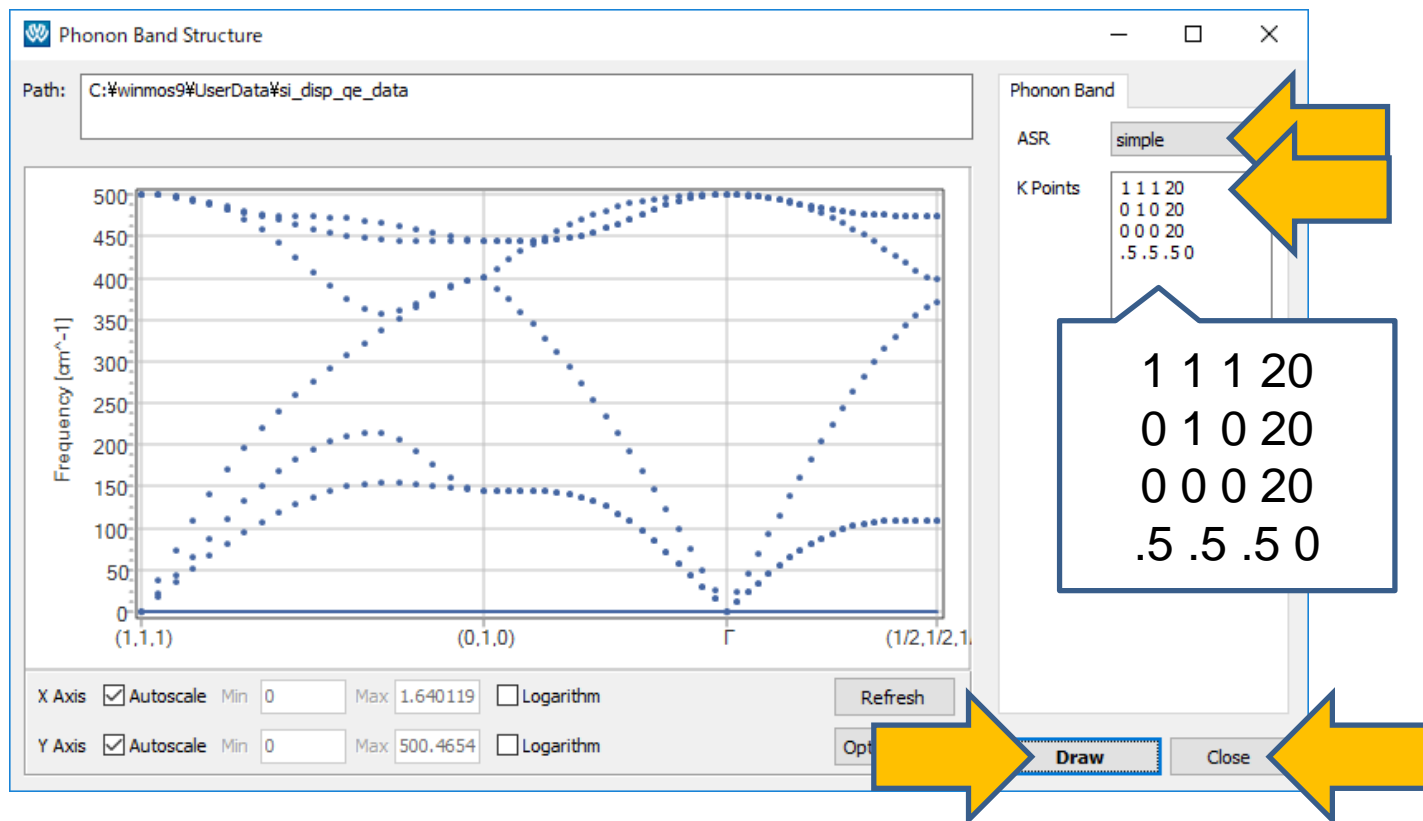
## II. フォノン分散

1.  (結果解析) | フォノン分散曲線をクリックする。
2. デフォルトで選択されたディレクトリを選択する。




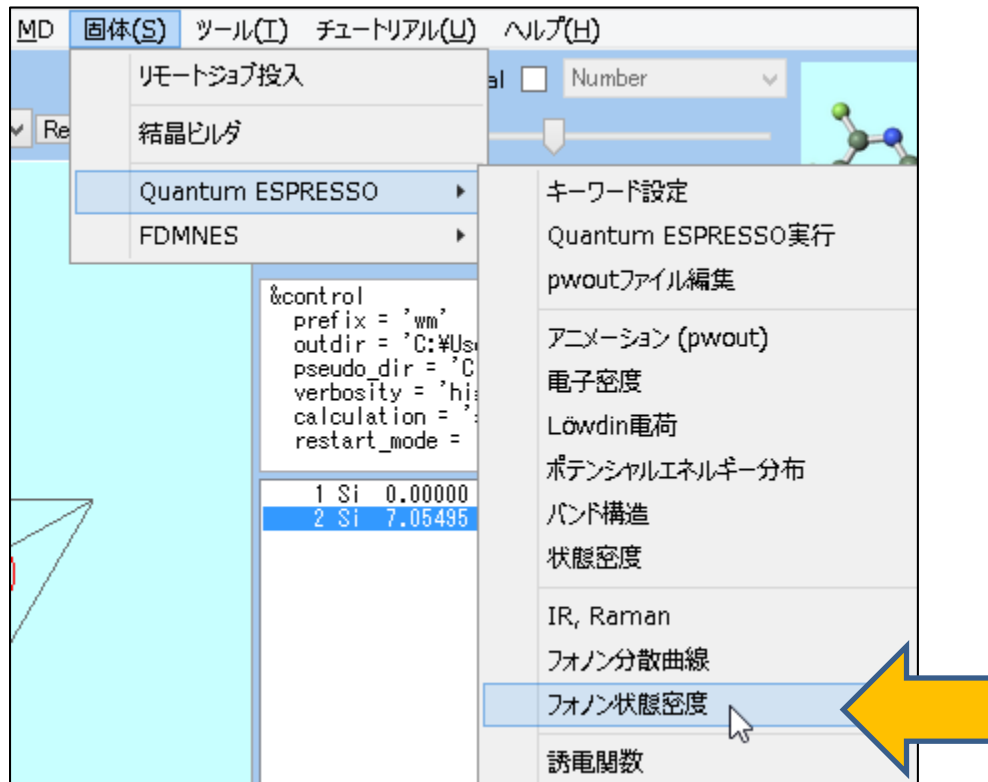
## II. フォノン分散

1. **ASR**に**Simple**、**K Points**に下図のように入力する。
2. **Draw**をクリックすると、以下のようなフォノン分散曲線が得られる。
3. 確認後**Close**をクリックする。



## II. フォノン分散

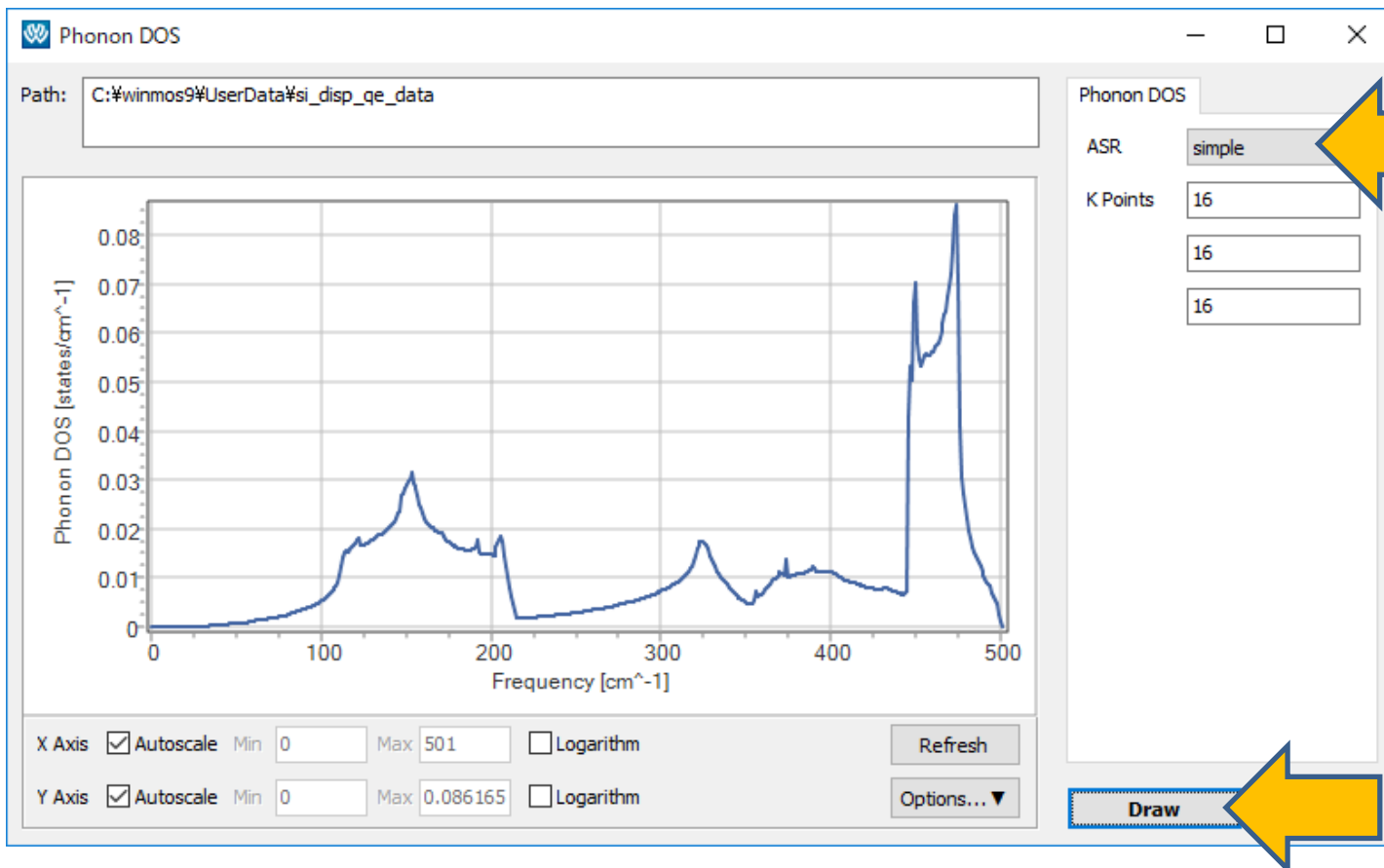
1.  (結果解析) | フォノン状態密度をクリックする。
2. デフォルトで選択されたディレクトリを選択する。





## II. フォノン分散

1. **ASR**に**simple**を指定する。
2. **Draw**をクリックするとフォノン状態密度が描画される。



<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

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