

Winmostar™ チュートリアル
Quantum ESPRESSO
誘電関数
V9.0.0

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Si結晶の誘電関数を取得します。



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に、精度を落とした設定を用います。

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

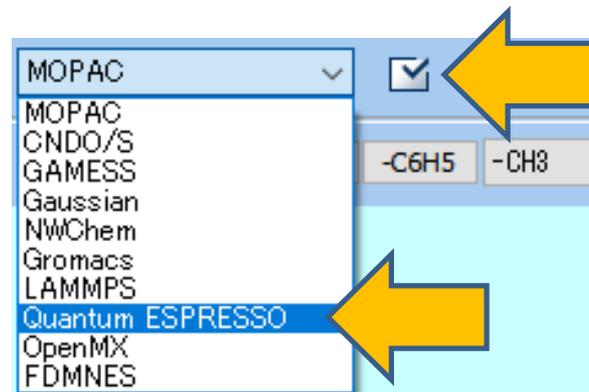
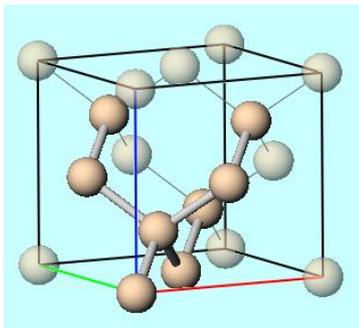
Crystal system: Cubic

Space group : Fd-3m (227)

Lattice constants : a=5.4309 Å

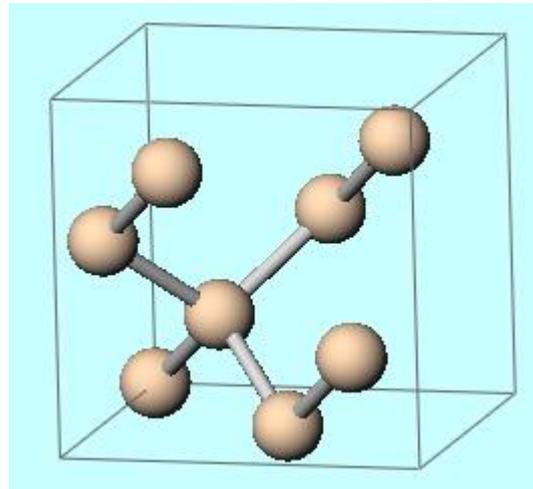
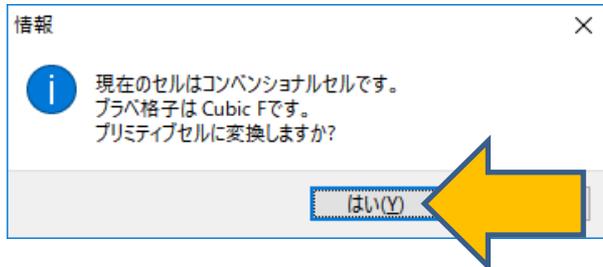
Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)

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。

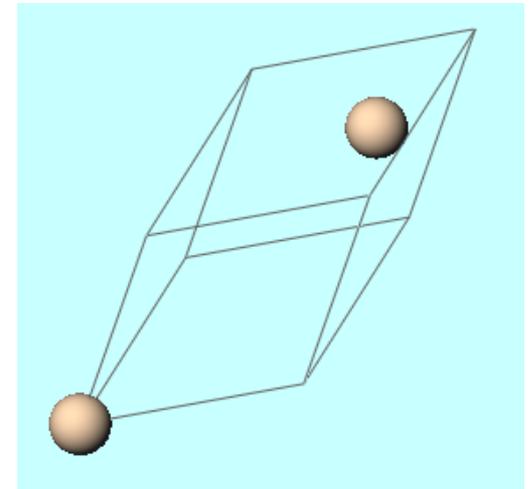


I. モデルの作成2

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。



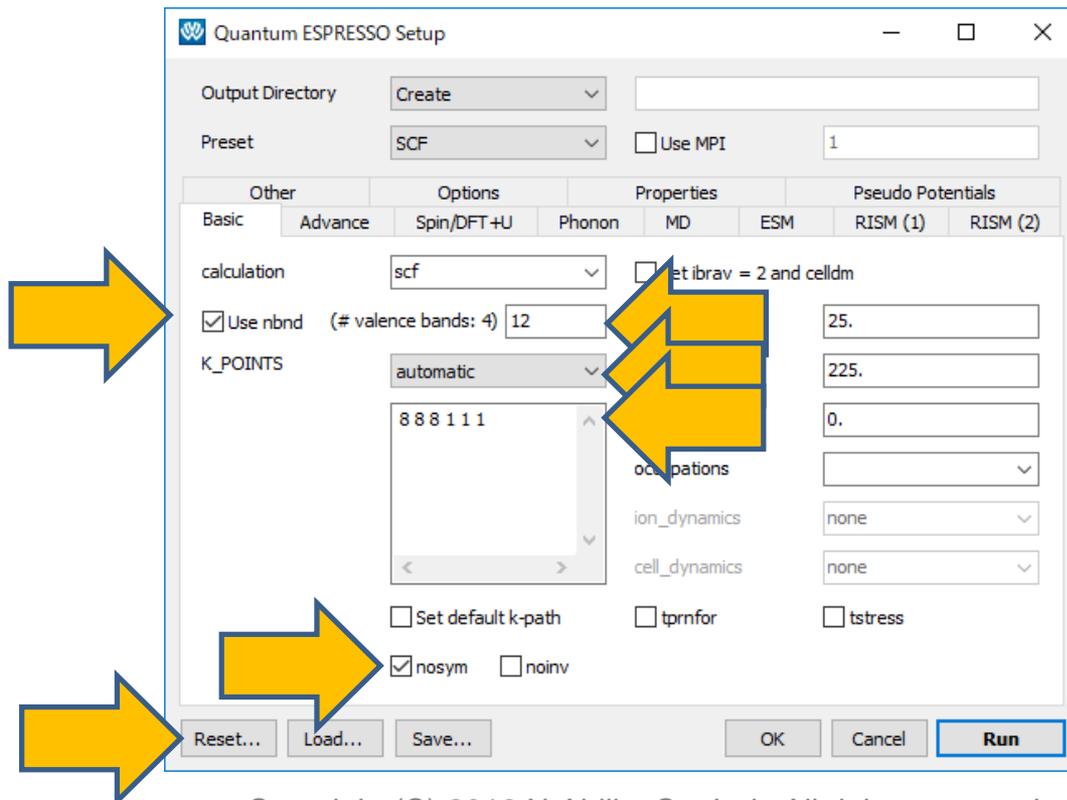
コンベンショナルセル



プリミティブセル

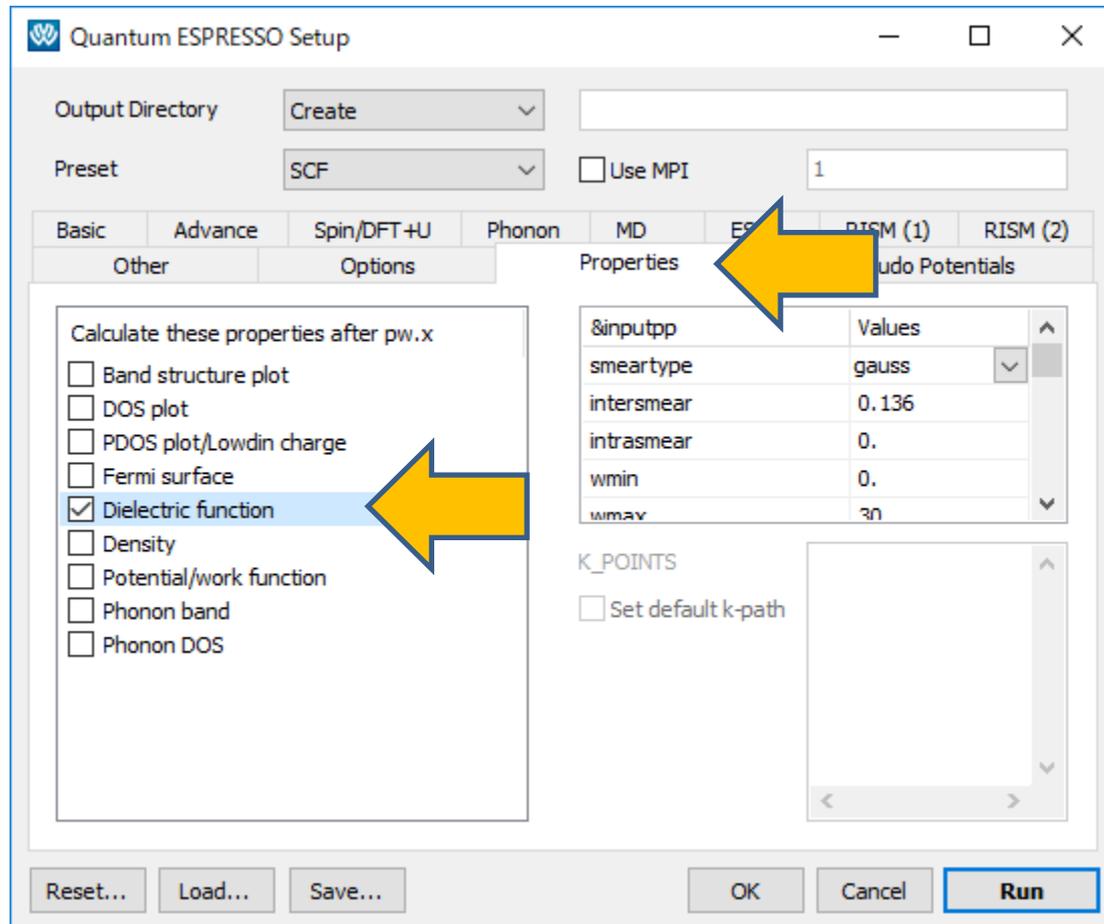
I. SCF & 誘電関数計算

1. **Reset...**ボタンをクリックする。
2. **Use nbnd**にチェックを入れ**12**と入力する。
3. **K_POINTS**に**automatic**を指定し、**8 8 8 1 1 1**(スペース区切り)と入力する。
4. **nosym**にチェックを入れる。



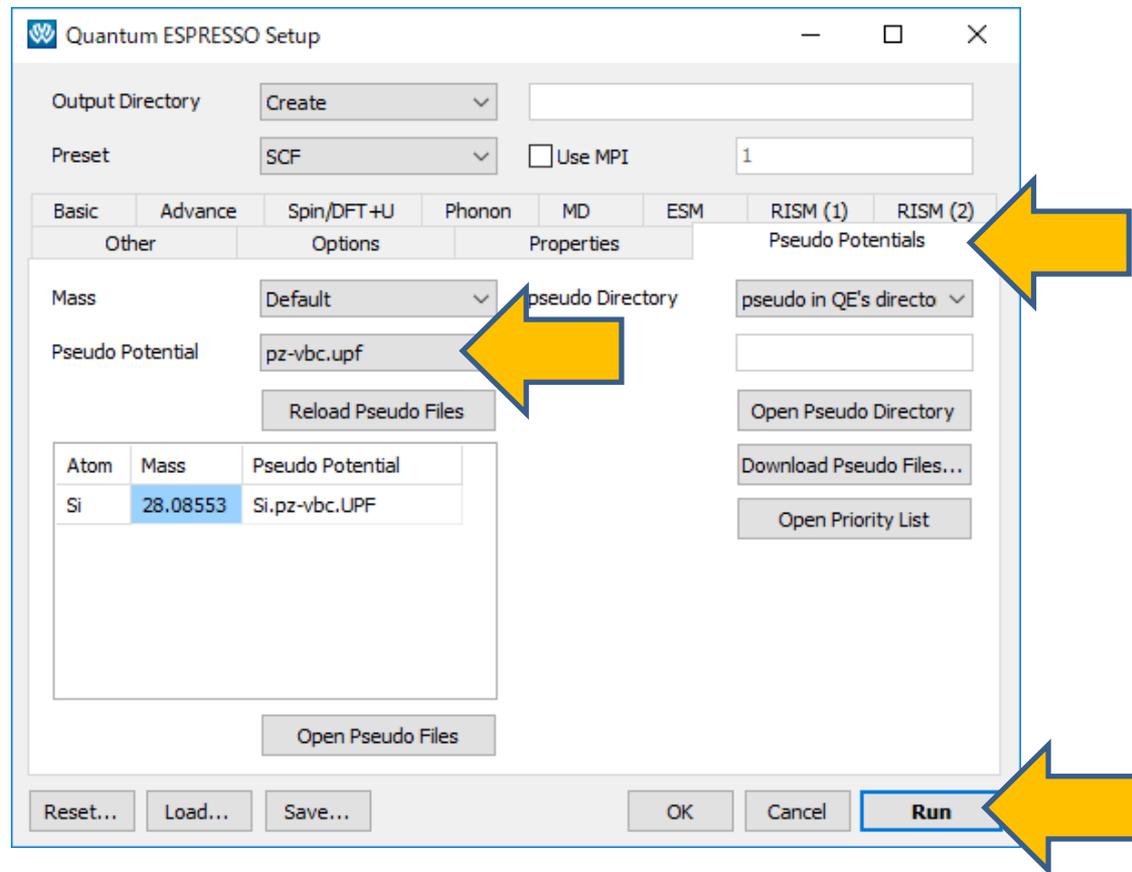
I. SCF & 誘電関数計算

Propertiesタブを選択し、Dielectric Functionにチェックを入れる。



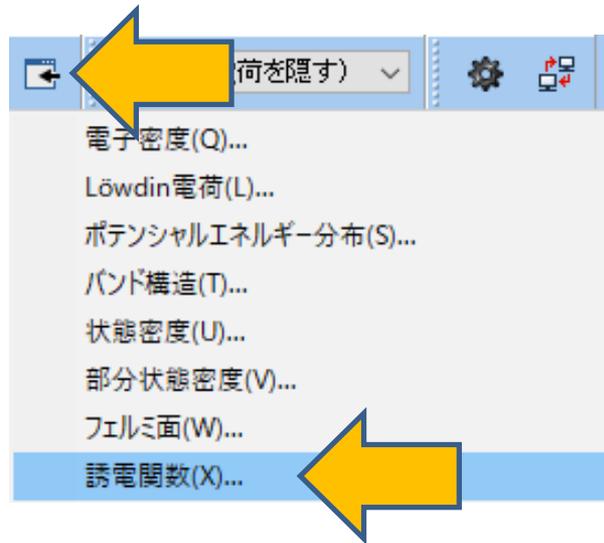
I. SCF & 誘電関数計算

1. **Pseudo Potentials**タブを選択し、**Pseudo Potential**に**pz-vbc.upf**を選ぶ。
2. **Run**をクリックし、ファイル名を**si_eps.pwin**として保存する。



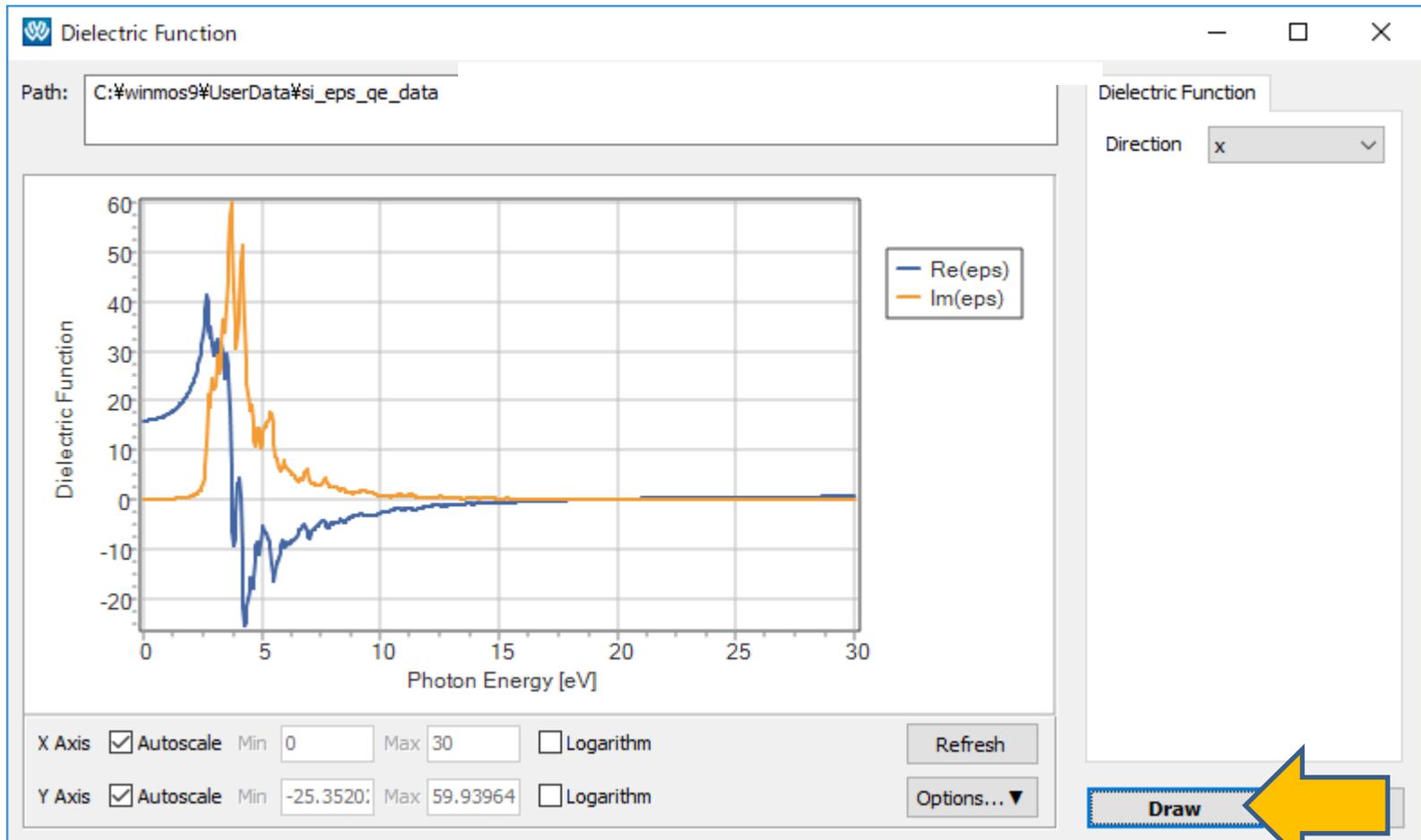
II. 結果の表示

1.  (結果解析) | 誘電関数をクリックする。
2. デフォルトで選択されたディレクトリを選択する。



II. 結果の表示

Drawをクリックすると、下図のように誘電関数のグラフが表示される。



<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! 138件

情報

http://x-ability.jp/

写真

山口 達明

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...

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