

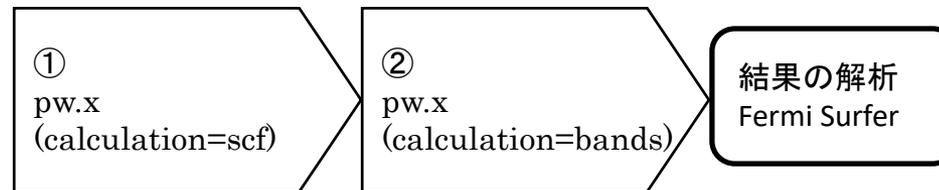
Winmostar™ チュートリアル
Quantum ESPRESSO
フェルミ面
V9.0.0

株式会社クロスアビリティ

2019年7月26日

概要

- Cu結晶のSCF計算を実施し、その後各k点での電子状態を算出した上でフェルミ面の表示を行います。(Winmostar上では連続して実行されます)。



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の設定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

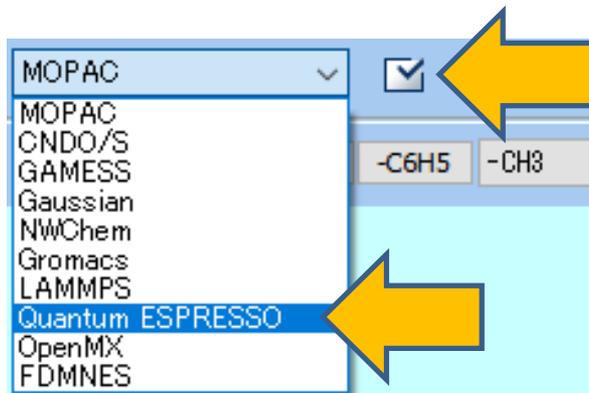
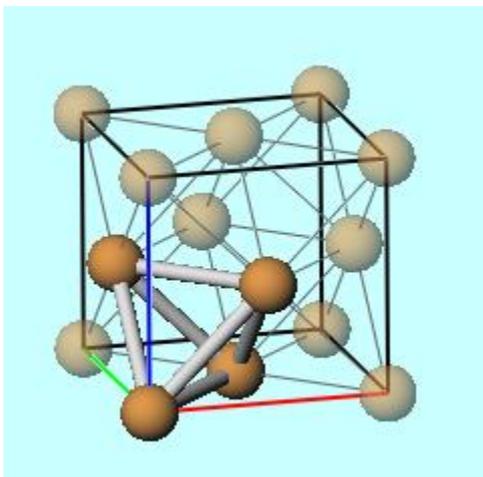
1. **ファイル | 開く**をクリックする。
2. サンプルフォルダ内の**cu.cif**を開く。(デフォルトではC:\winmos9\samples\cu.cif)

※ 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。

Cu単位格子について

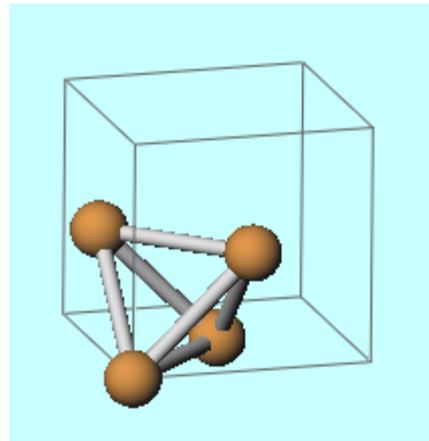
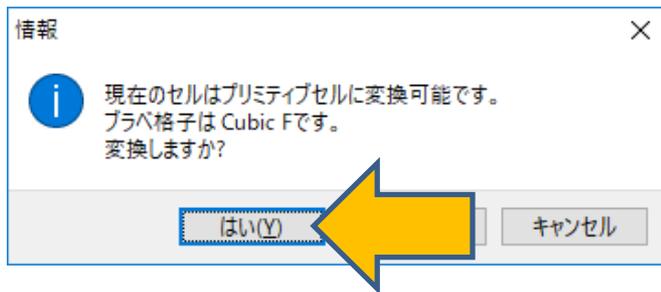
Crystal system: Cubic
Space group : Fm-3m (225)
Lattice constants : a=3.6149 Å
Asymmetric unit: Cu (0.0 0.0 0.0)

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。

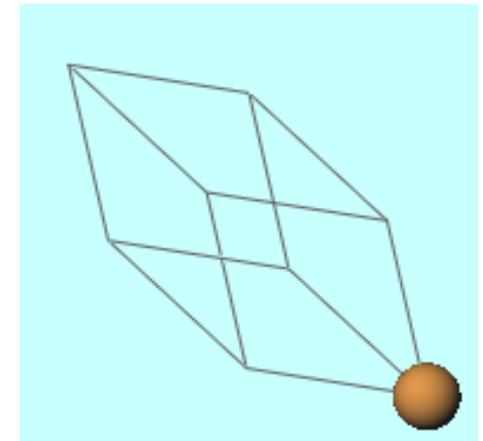


I. モデルの作成2

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。



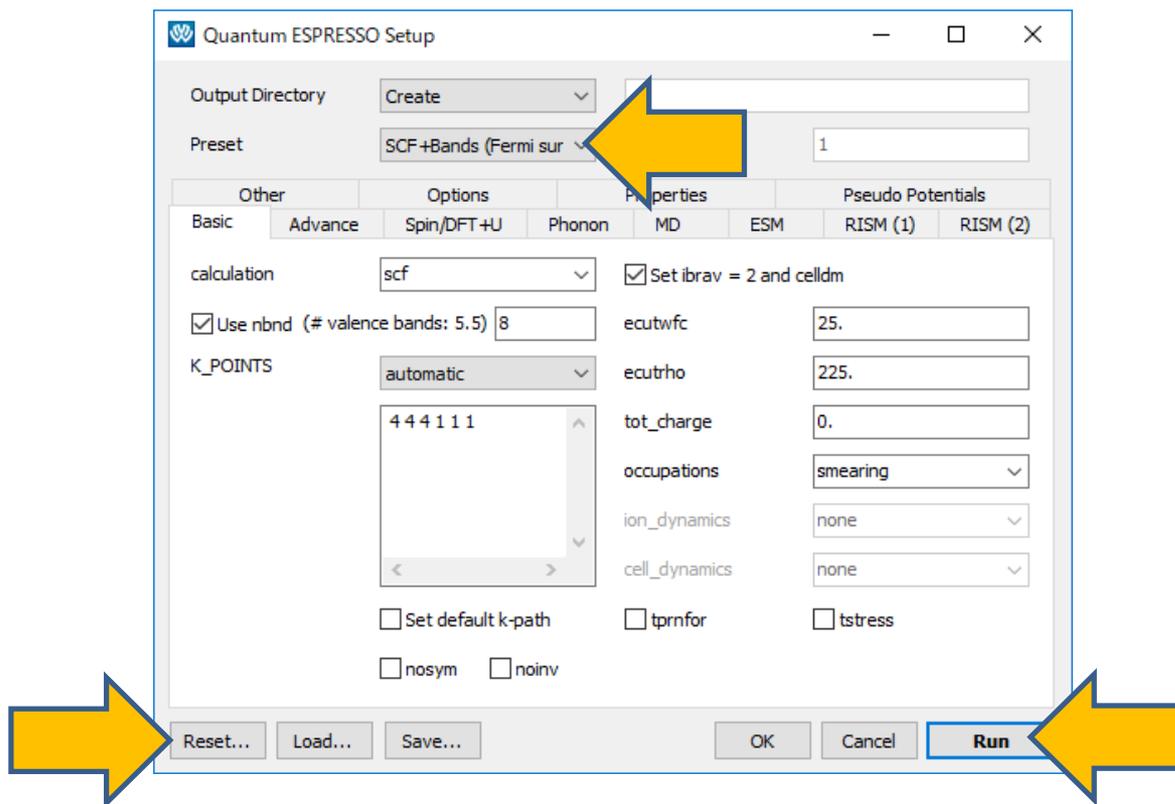
コンベンショナルセル



プリミティブセル

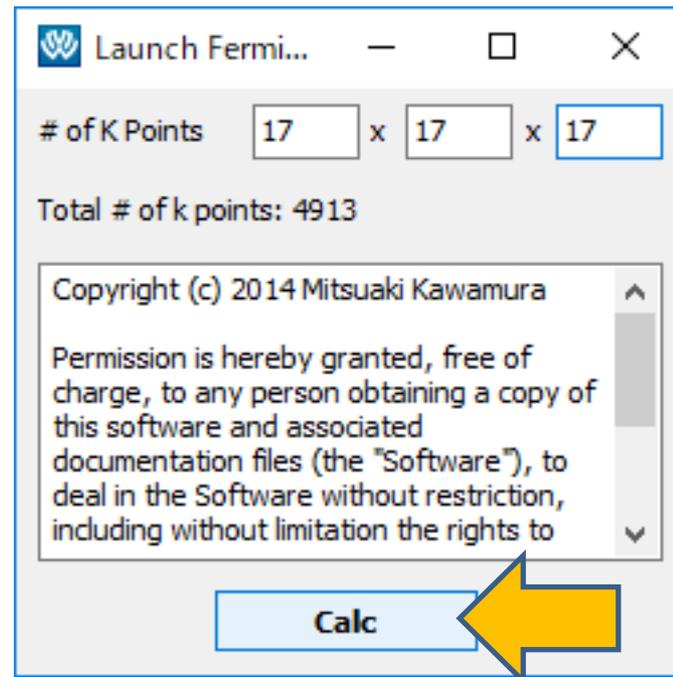
II. QEによる計算

1. **Reset...**ボタンを押す。
2. **Preset**に**SCF+Bands (Fermi surf)**を選択する。
3. **Run**をクリックし、ファイル名を**cu_fermi.pwin**として保存する。



III. フェルミ面表示

1. 計算終了後、 (結果解析) | フェルミ面をクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開く。
2. **Calc**ボタンをクリックし、保存する。



III. フェルミ面表示

1. コマンドプロンプトに**Press any key to exit**と表示されたら何かキーを押す。
2. 表示用アプリ(**FermiSurfer**)が起動し、フェルミ面が表示される。

```

  選択
  bvec 3 : -1.000000 1.000000 -1.000000
  Reading BAND: 1
  Reading BAND: 2
  Reading BAND: 3
  Reading BAND: 4
  Reading BAND: 5
  Reading BAND: 6
  Reading BAND: 7
  Reading BAND: 8

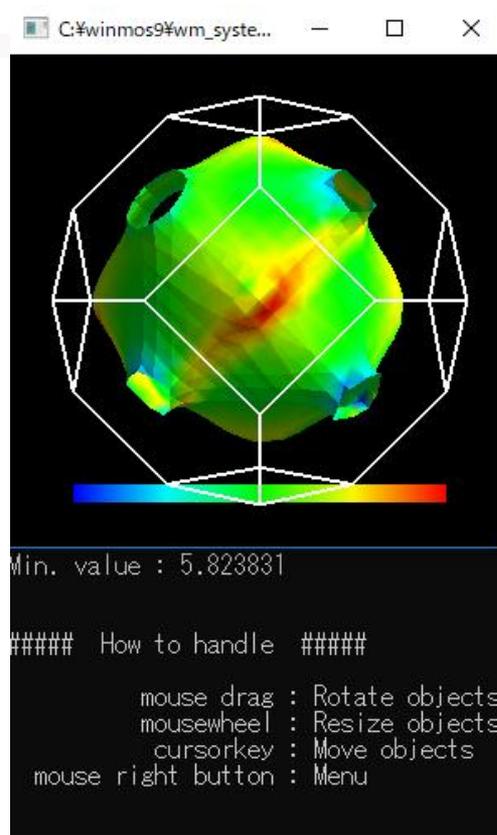
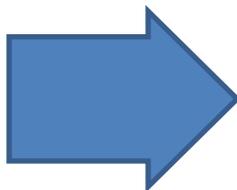
  ##### Compute the Fermi velocity #####

  avec 1 : -0.500000 0.000000 0.500000
  avec 2 : 0.000000 0.500000 0.500000
  avec 3 : -0.500000 0.500000 0.000000
  alength : 0.707107 0.707107 0.707107

  ##### Output files #####

  C:\winmos9\UserData\cu_fermi_vfa1.frmsf
  C:\winmos9\UserData\cu_fermi_vfa2.frmsf
  C:\winmos9\UserData\cu_fermi_vfa3.frmsf
  C:\winmos9\UserData\cu_fermi_vfx.frmsf
  C:\winmos9\UserData\cu_fermi_vfy.frmsf
  C:\winmos9\UserData\cu_fermi_vfz.frmsf
  C:\winmos9\UserData\cu_fermi_vf.frmsf

  ##### DONE #####
  Press any key to exit.
  
```



<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