

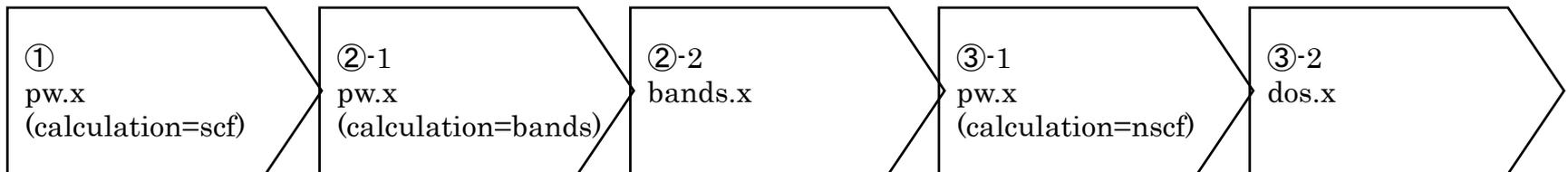
Winmostar™ チュートリアル  
Quantum ESPRESSO  
スピン分極計算  
V9.2.1

株式会社クロスアビリティ

2019年7月26日

# 概要

- Fe結晶のSCF計算を実施し、その後バンド構造、状態密度の算出を行います (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。
- 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¥brillouin\_zones.pdfを参考に設定してください。

# 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）](#)

# 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pseudoフォルダに入れWinmostarを再起動する。

<http://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials/original-qe-pp-library>

- Fe.pbe-nd-rrkjus.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fe.cifを開く。(デフォルトではC:¥winmos9¥samples¥fe.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。

## Fe単位格子について

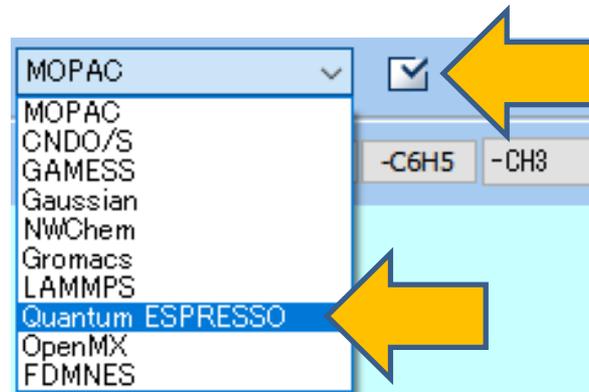
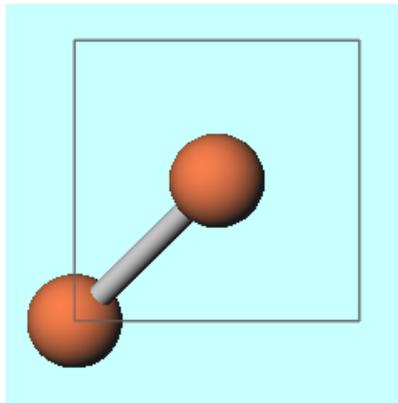
Crystal system: Cubic

Space group : Im-3m (229)

Lattice constants : a=2.8665 Å

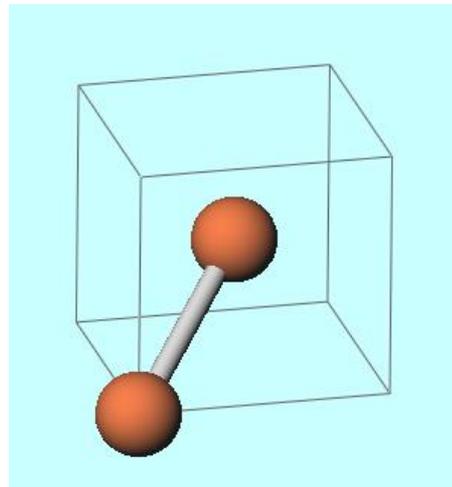
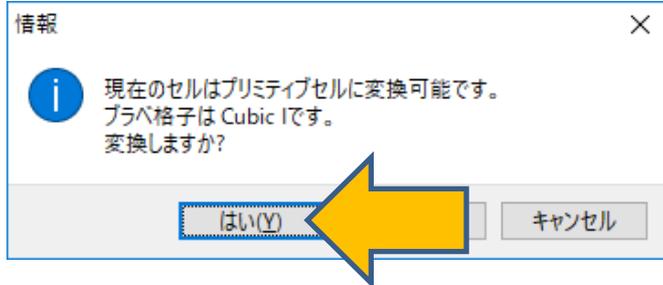
Asymmetric unit: Fe (0.0 0.0 0.0)

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。

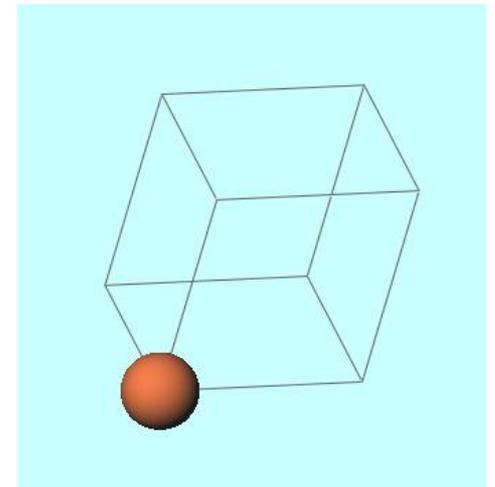


# I. モデルの作成2

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。



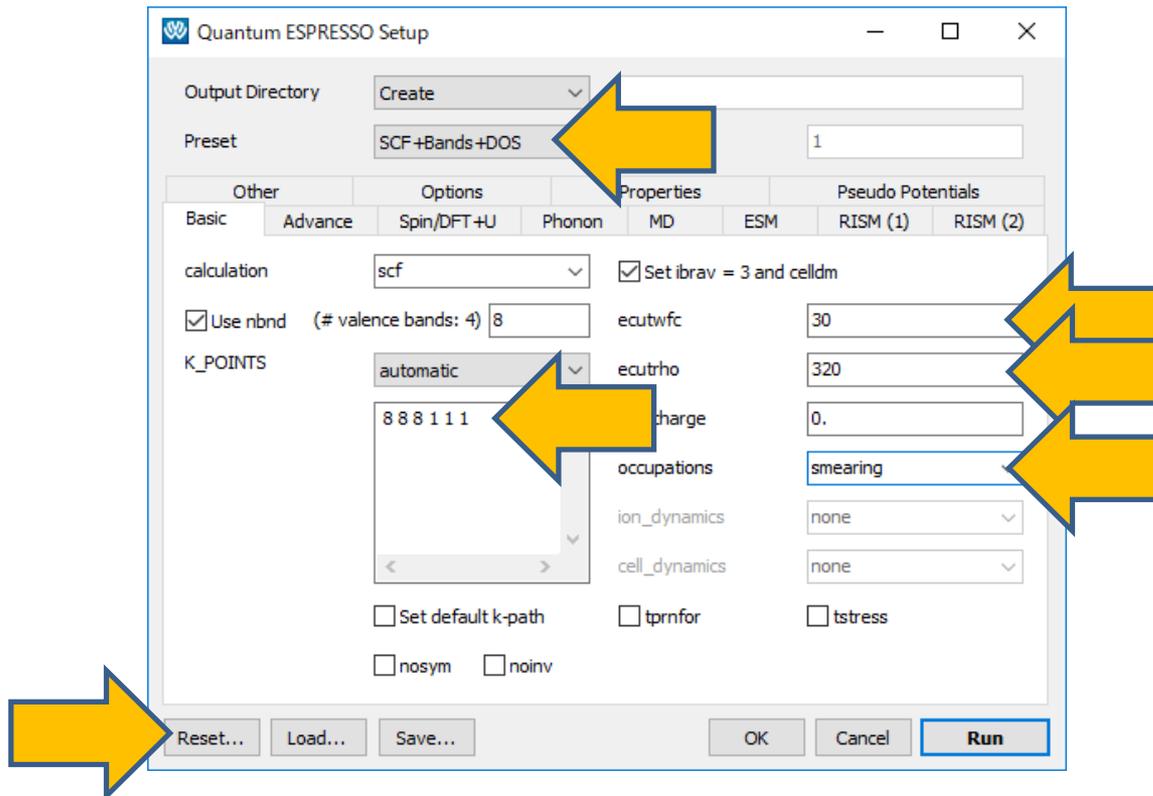
コンベンショナルセル



プリミティブセル

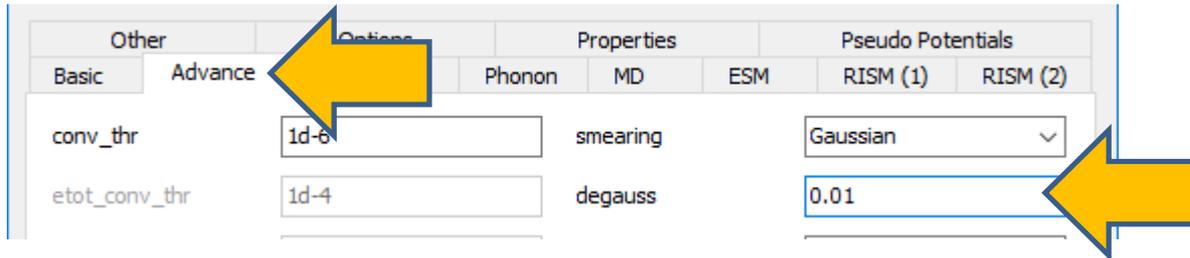
## II. QEによる計算

1. **Reset...**をクリックし、**Preset**に**SCF+Bands+DOS**を選択する。
2. **K Points**のテキストボックスに**8 8 8 1 1 1**（スペース区切り）と入力する。
3. **ecutwfc**に**30**、**ecutrho**に**320**と入力する。
4. **occupations**に**smearing**を選択する。

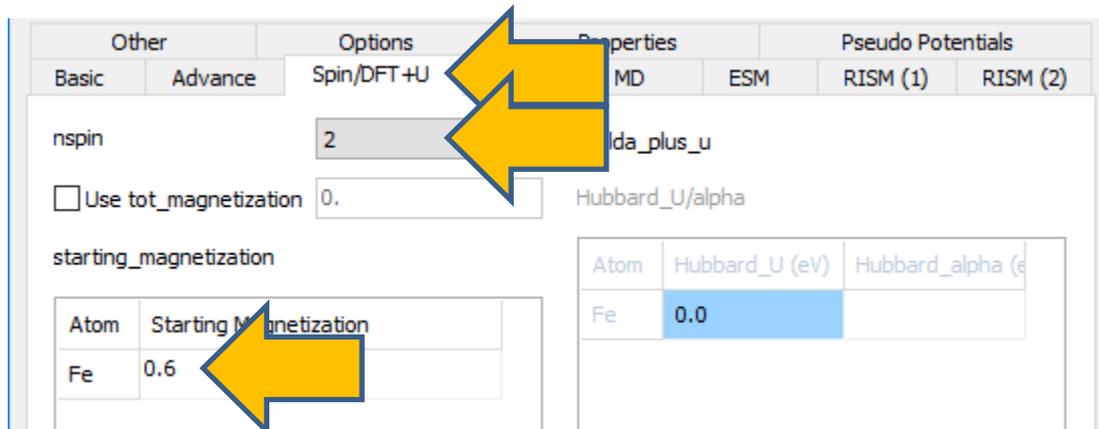


## II. QEによる計算

1. **Advance**タブを開き、**degauss**に**0.01**を指定する。

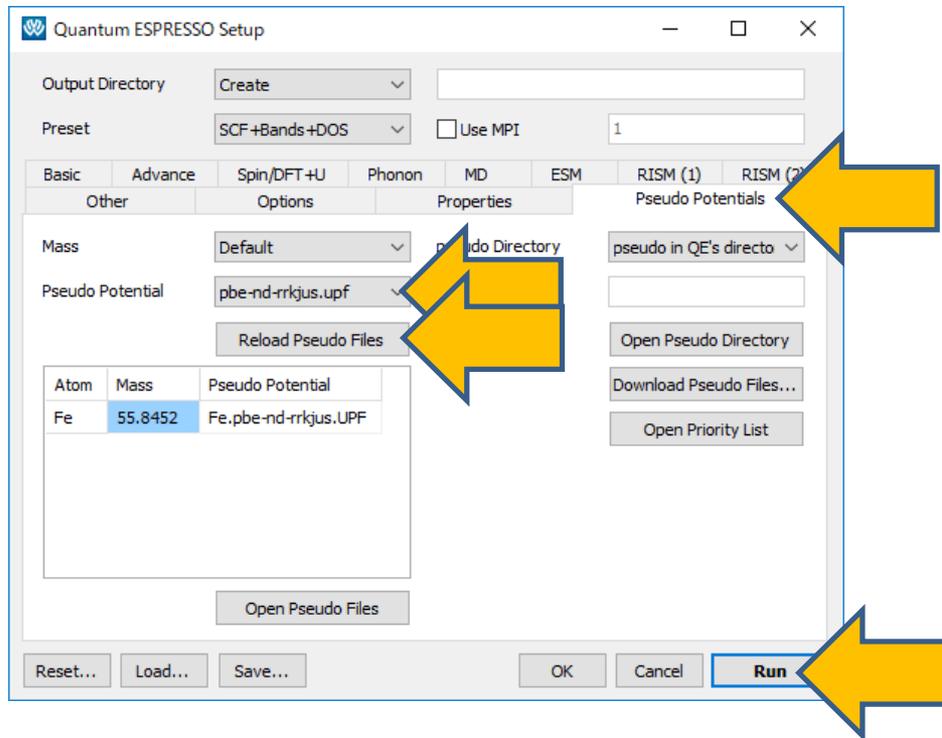


2. **Spin/DFT+U**タブを開き、**nspin**に**2**、**Fe**の**Starting Magnetization**に**0.6**を指定する。



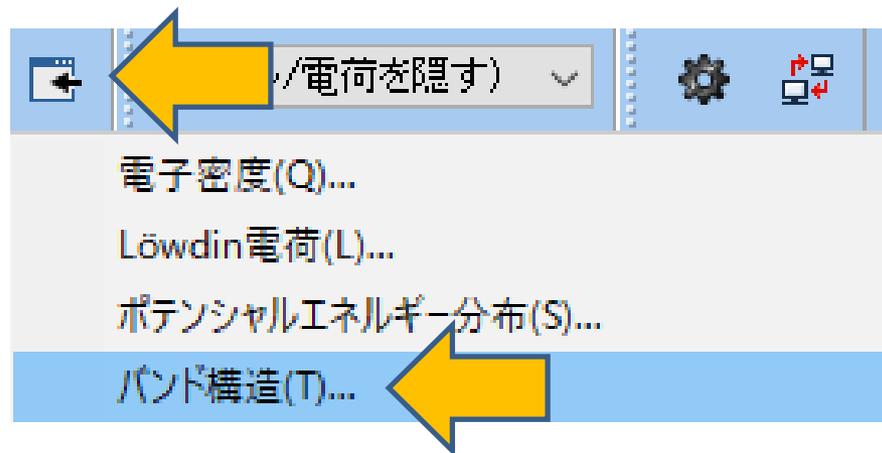
## II. QEによる計算

1. **Pseudo Potentials**タブを開き、  
**Pseudo Potential**に **pbe-nd-rrkjus.upf**指定する。  
pbe-nd-rrkjus.upfが無い場合は、P. 3の手順に従いファイルをpseudoフォルダに格納し、  
**Reload pseudo Files**をクリックする。
2. **Run**をクリックし、**ファイル名**を**fe\_tutor.pwin**とし、**保存**する。



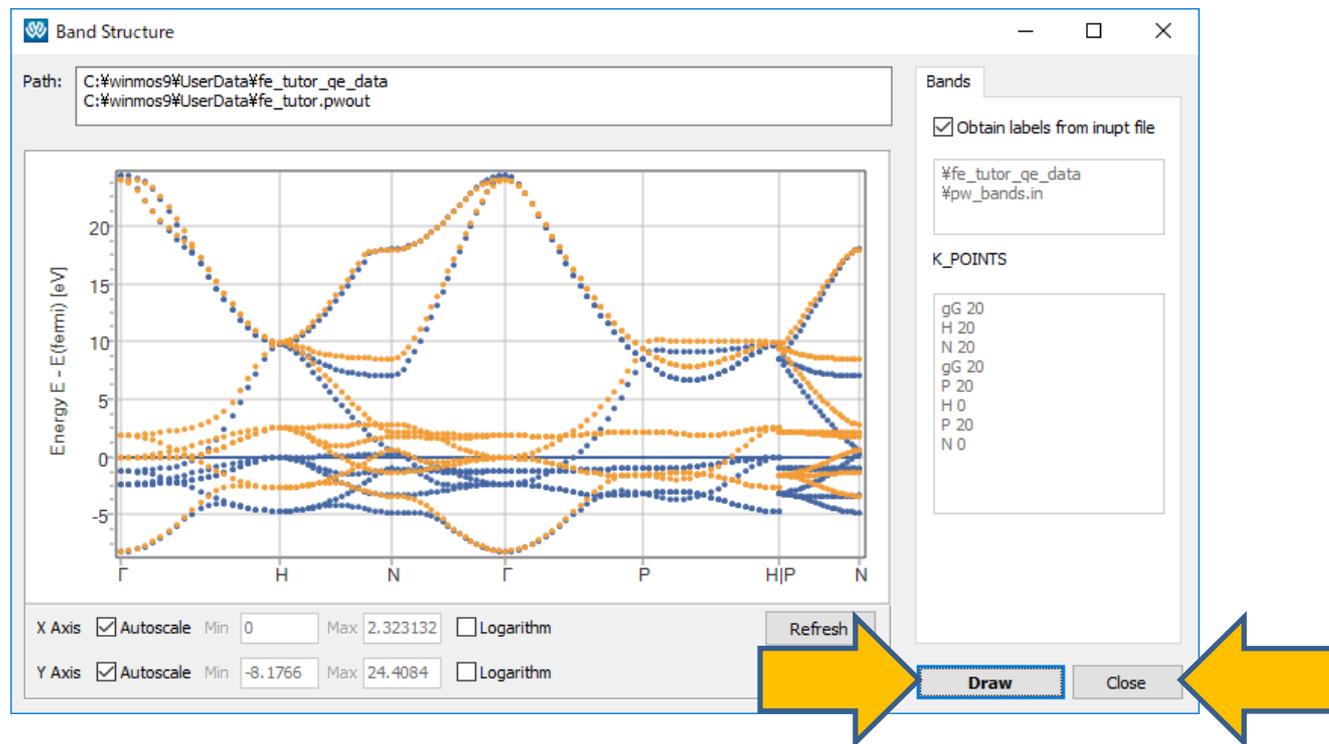
## III. 結果解析

1. 計算終了後、 (結果解析) | バンド構造...をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを開く。



### III. 結果解析

1. **Draw**を押すとup, downスピンそれぞれのバンド構造が描画される。
2. **Close**をクリックする。



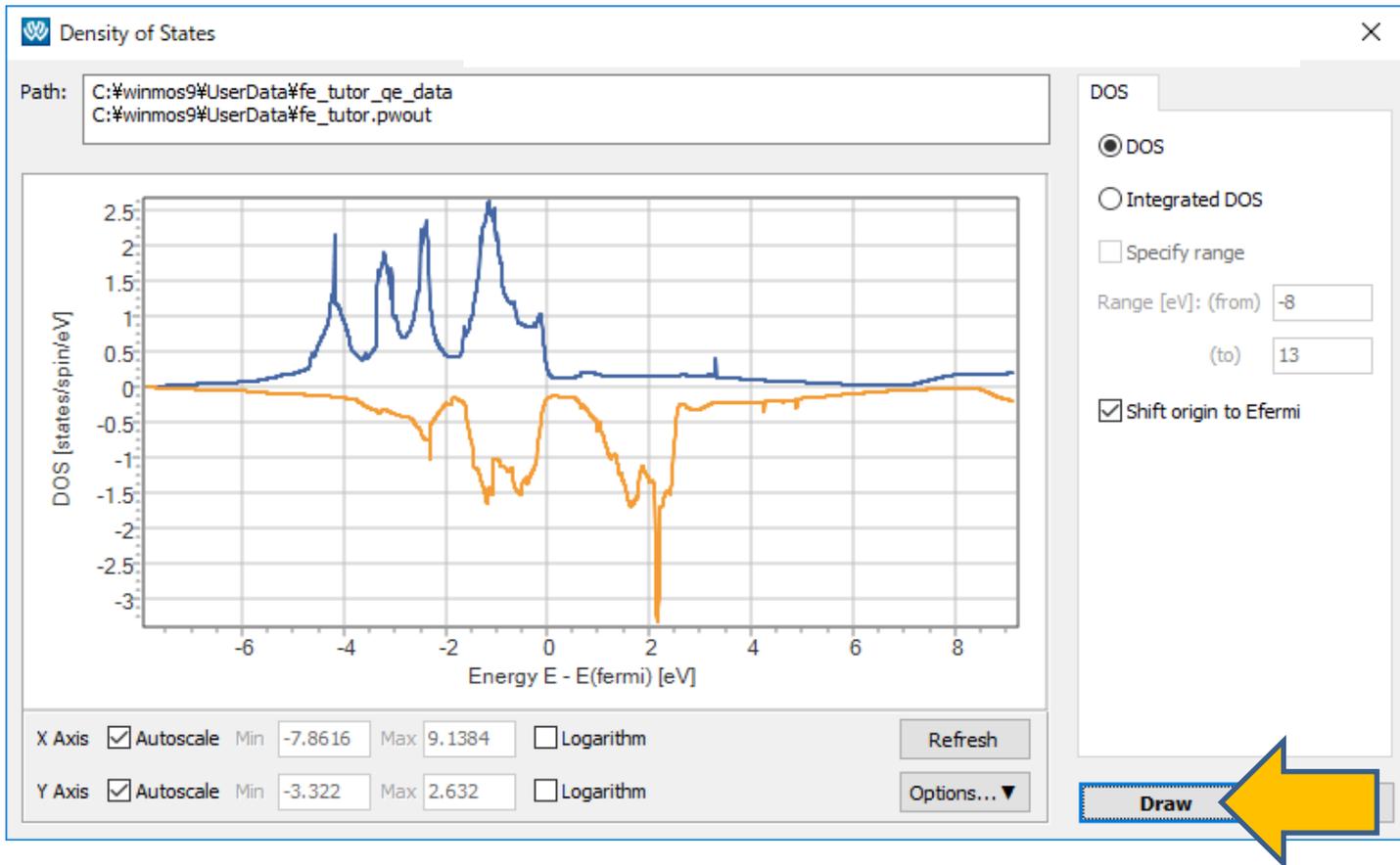
## III. 結果解析

1. 計算終了後、 (結果解析) | 状態密度...をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを開く。



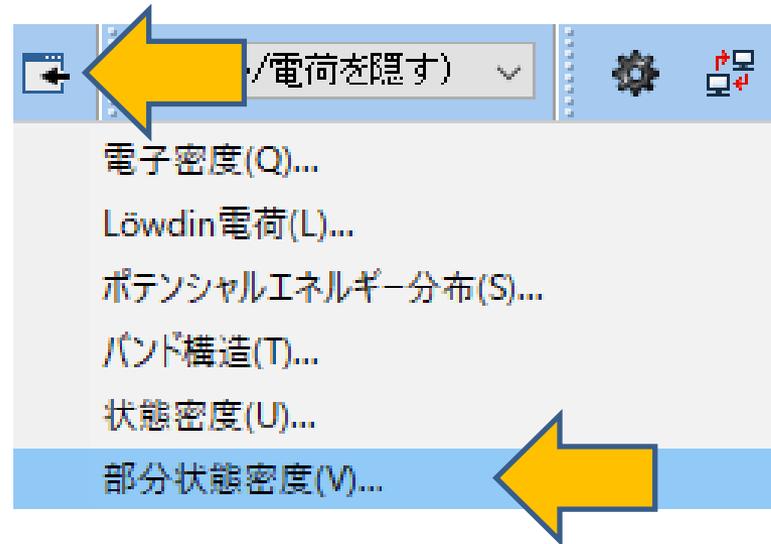
### III. 結果解析

Drawボタンを押すと、up, downスピンそれぞれのDOSが表示される。



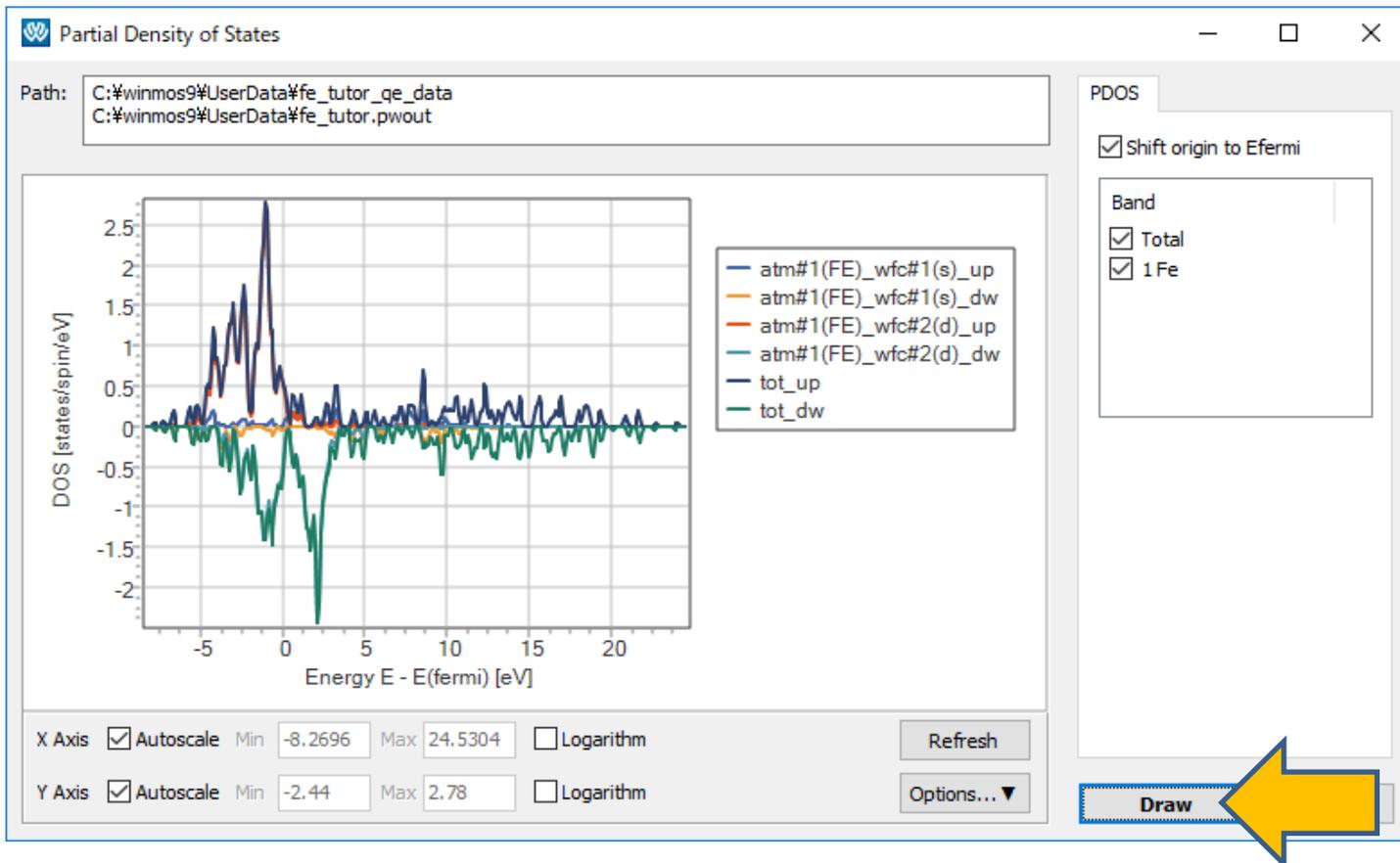
## III. 結果解析

1. 計算終了後、 (結果解析) | 部分状態密度をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを開く。



## III. 結果解析

Drawボタンをクリックすると、up, downスピンそれぞれのDOS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

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...](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