

## 1. Quantum ESPRESSO のインストール

- ① 以下のサイトにアクセスし、qe-5.2.1-64bit-mpich2.exe をダウンロードする。

<http://rpm.lammps.org/qe4win/release/index.html>

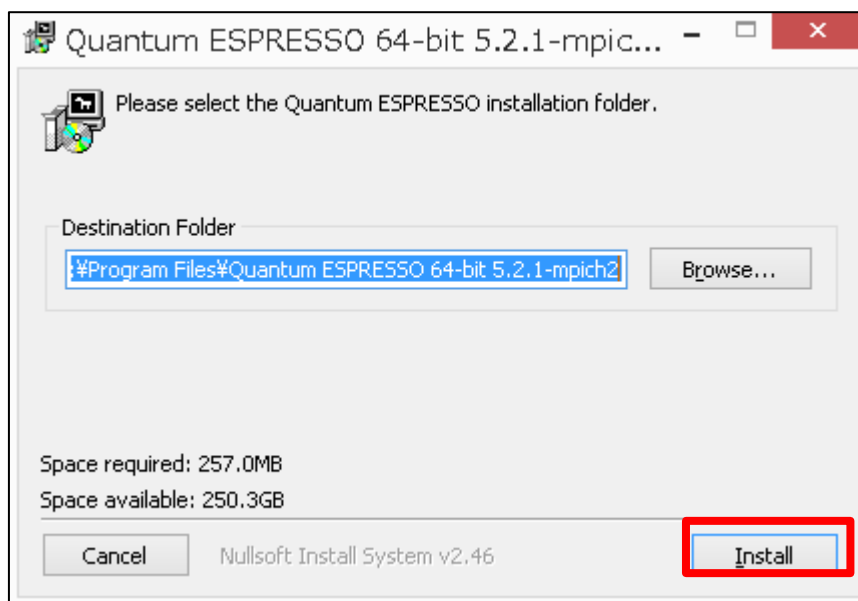
稀にサーバのメンテナンス等でつながらないことがあるが、概ね数日～1週間程度で復旧する。

32bit 環境の場合は qe-5.2.1-32bit-mpich2.exe をダウンロードする。

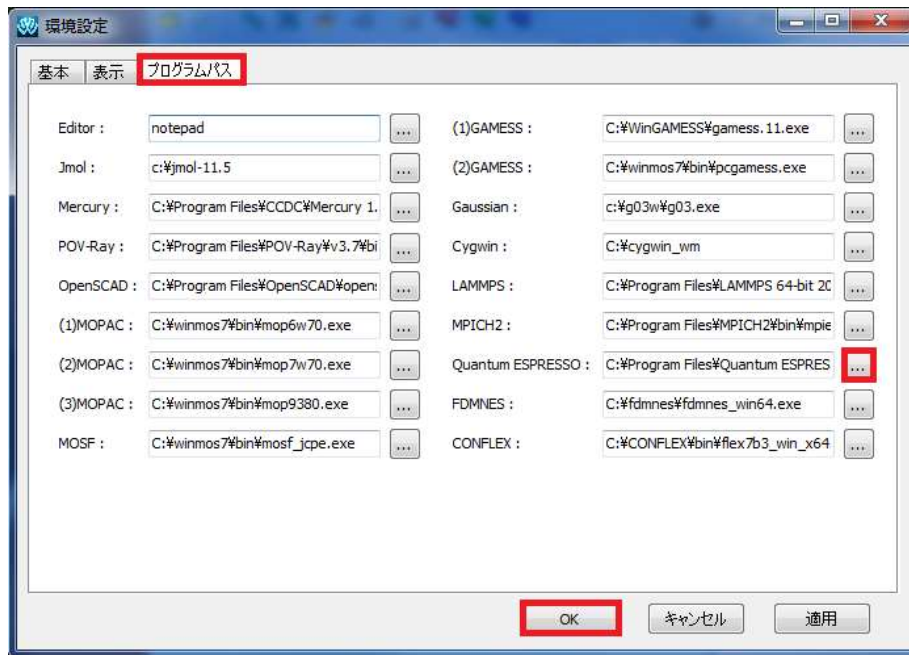
Winmstar 上から MPI 並列で Quantum ESPRESSO を実行する場合は serial でなく mpich2 の方を用いる。



- ② ダウンロードした exe ファイルをダブルクリックし、「Install」を押す。



- ③ Winmostar が Quantum ESPRESSO を呼び出せるようにパスを設定する。Winmostar の[ツール]→[環境設定]をクリックして環境設定パネルを開く。環境設定パネル[プログラムパス]タブを開き [Quantum ESPRESSO]の[...]ボタンをクリックする。Quantum ESPRESSO のインストールフォルダの下にある「bin」フォルダの下の「pw.exe」を登録し[OK]をクリックする。



※ デフォルトで「C:\Program Files\Quantum ESPRESSO 64-bit 5.2.1-mpich2\bin\pw.exe」と表示されるが、32 ビット版を使用する場合は「C:\Program Files\Quantum ESPRESSO 32-bit 5.2.1-mpich2\bin\pw.exe」などに変更する。

## 2. cygwin\_wm のインストール

下記リンクに記載された内容に従い、cygwin の自動解凍書庫を入手し、セットアップする。

(既に cygwin\_wm がセットアップ済みの場合は不要)

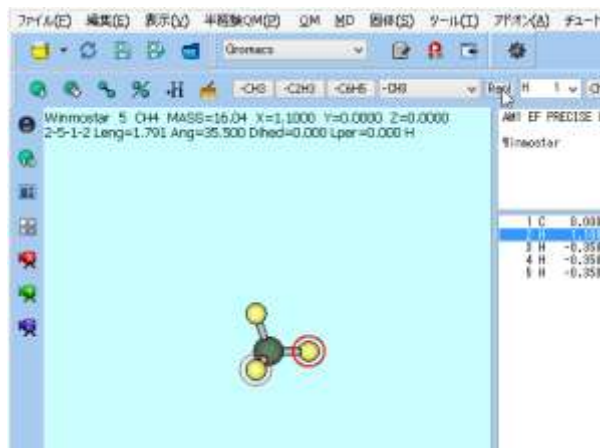
[https://winmostar.com/ip/gmx4wm\\_ip.html](https://winmostar.com/ip/gmx4wm_ip.html)

### 3. MPICH の入手とインストール

- ① [\[mpich2-1.4.1p1-win-ia32.msi\]](#)もしくは[\[mpich2-1.4.1p1-win-x86-64.msi\]](#)をダウンロードする。  
ダウンロードしたファイルの拡張子を変更された場合は「.msi」に戻す。インストールした Quantum ESPRESSO が 32-bit であれば、MPICH も 32-bit を選択し、同様に 64-bit の場合は 64-bit を選択する。
- ② 保存した msi ファイルをダブルクリックし指示に従う。  
(.NET Framework がインストールされていないためインストールに失敗した場合は、<https://www.microsoft.com/ja-jp/download/details.aspx?id=21> から .NET Framework 3.5 をダウンロードしてインストールする。Windows 8.1/10 には標準で .NET Framework 4.5 がインストールされているが、3.5 を別途インストールする必要がある)
- ③ スタートメニューなどから **コマンド プロンプト** を **管理者権限** で立ち上げる。
- ④ MPICH をインストールした directory に移動する。  
`c:> cd "c:\Program Files\MPICH2\bin"`
- ⑤ 以下のコマンドを実行する。  
`bin> smpd.exe -install`
- ⑥ Winmostar の [ツール] → [環境設定] をクリックして環境設定パネルを開く。環境設定パネル [プログラムパス] タブを開き [MPICH2] の [...] ボタンをクリックする。MPICH のインストールフォルダの下にある「bin」フォルダの下の「mpiexec.exe」を登録し [OK] をクリックする。

#### 4. 簡易的な動作確認

- ① Winmostar のメインメニューの [ファイル]-[新規]をクリックし、メインウインドウ上部の [Repl]ボタンをクリックすると、メタン分子が作成される。



- ② [固体]-[Quantum ESPRESSO]-[キーワード設定]をクリックし、[Run]ボタンをクリックする。

- ③ 「シミュレーションセルを作成しますか?」とダイアログで聞かれるので、[はい]ボタンを押す。
- ④ 「距離を入力」と書かれたダイアログが出現するので、デフォルトの値のまま[OK]ボタンを押す。
- ⑤ 保存ダイアログが開き、適当な名前前で保存すると黒いターミナルウインドウが開き、大量のメッセージが流れる。暫くすると処理が終わりターミナルウインドウが閉じる。
- ⑥ [MD]-[Quantum ESPRESSO]-[ログを表示]をクリックし、ダイアログにてデフォルトで選択されたファイルを開く。Quantum ESPRESSO が流れ SCF 計算が収束したたようであれば、開かれたテキストファイルの最後の方に、「convergence has been achieved in ...」などと表示される。

highest occupied level (ev): -9.2703

! total energy = -16.14438211 Ry  
Harris-Foulkes estimate = -16.14438240 Ry  
estimated scf accuracy < 0.00000077 Ry

The total energy is the sum of the following terms:

one-electron contribution = -42.91001684 Ry  
hartree contribution = 22.25475154 Ry  
xc contribution = -6.32862761 Ry  
ewald contribution = 10.83951080 Ry

convergence has been achieved in 11 iterations

Writing output data file wm.save

init\_run : 2.20s CPU 2.81s WALL ( 1 calls)  
electrons : 12.50s CPU 19.24s WALL ( 1 calls)

Called by init\_run:

wfcinit : 0.05s CPU 0.13s WALL ( 1 calls)  
potinit : 0.83s CPU 1.14s WALL ( 1 calls)

Called by electrons:

c\_bands : 0.69s CPU 1.07s WALL ( 11 calls)  
sum\_band : 3.27s CPU 5.57s WALL ( 11 calls)  
v\_of\_rho : 5.92s CPU 8.15s WALL ( 12 calls)  
v\_h : 0.41s CPU 0.72s WALL ( 12 calls)

以上