

## Windows 版 Quantum ESPRESSO インストールマニュアル

2022 年 5 月 11 日

### 1. Quantum ESPRESSO のインストール

- ① 以下のリンクの中から、使用する QE のインストーラをダウンロードする。

64 bit OS、MPICH による並列計算あり（通常はこちらを選択する）

[https://winmostar.com/wm/cygwin\\_wm/packages/qe-5.2.1-64bit-mpich2.exe](https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/qe-5.2.1-64bit-mpich2.exe)

64 bit OS、MPICH による並列計算なし

[https://winmostar.com/wm/cygwin\\_wm/packages/qe-5.2.1-64bit-serial.exe](https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/qe-5.2.1-64bit-serial.exe)

32 bit OS、MPICH による並列計算あり

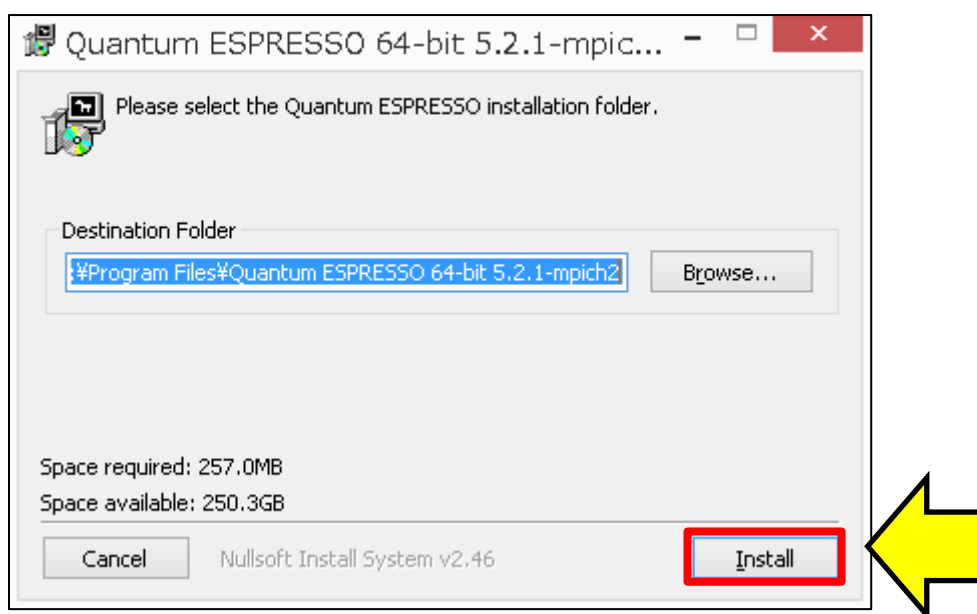
[https://winmostar.com/wm/cygwin\\_wm/packages/qe-5.2.1-32bit-mpich2.exe](https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/qe-5.2.1-32bit-mpich2.exe)

32 bit OS、MPICH による並列計算なし

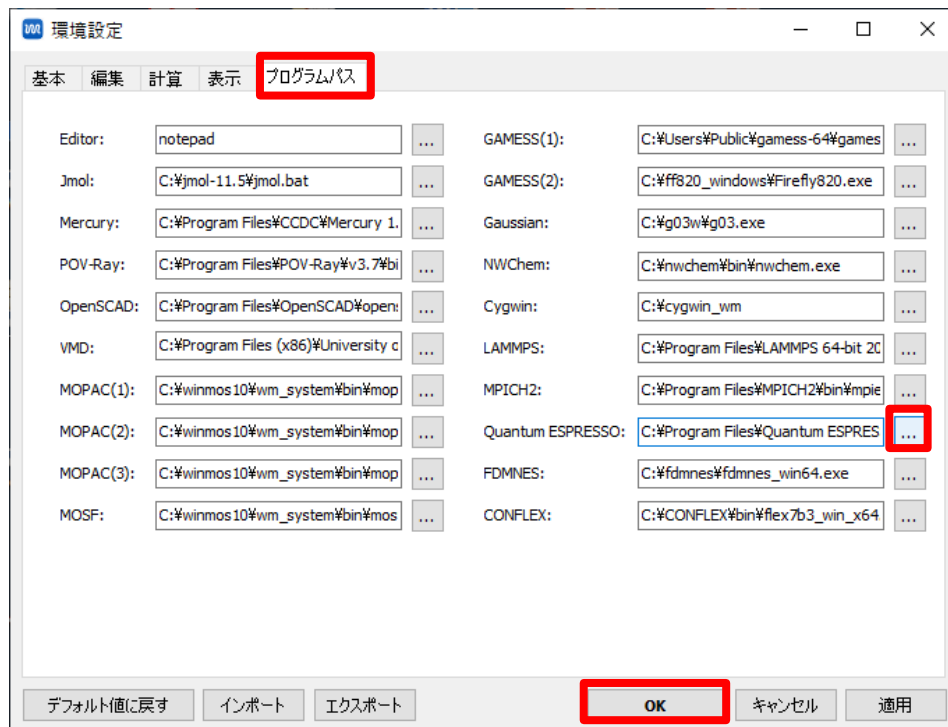
[https://winmostar.com/wm/cygwin\\_wm/packages/qe-5.2.1-32bit-serial.exe](https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/qe-5.2.1-32bit-serial.exe)

※ 各インストーラは Temple University の Axel Kohlmeyer 氏が作成。

- 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 上記の 64 bit OS、MPICH ありの Quantum ESPRESSO 5.2.1 以外をインストールした場合、またはデフォルトのインストールパス（C:\Program Files\Quantum ESPRESSO 64-bit 5.2.1-mpich2）以外にインストールした場合は、Winmostar を起動し、ツール | 環境設定をクリックする。プログラムタブを開き 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。



## 2. CygwinWM のインストール

下記リンクに記載された内容に従い、CygwinWM をインストールする。

(既に CygwinWM がインストール済みの場合は不要)

[https://winmostar.com/jp/gmx4wm\\_jp.html](https://winmostar.com/jp/gmx4wm_jp.html)

### 3. MPICH の入手とインストール

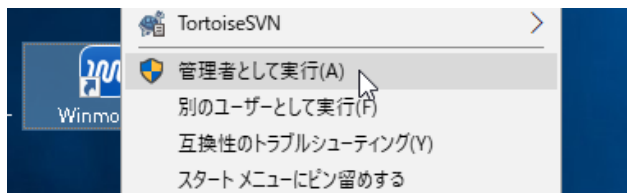
- ① [[mpich2-1.4.1p1-win-x86-64.msi](#)] (32 bit の場合は [[mpich2-1.4.1p1-win-ia32.msi](#)]) をダウンロードする。ダウンロードしたファイルの拡張子を変更された場合は「.msi」に戻す。インストールした Quantum ESPRESSO が 32-bit であれば、MPICH も 32-bit を選択し、同様に 64-bit の場合は 64-bit を選択する。
- ② 保存した msi ファイルをダブルクリックし指示に従う。  
(.NET Framework がインストールされていないためインストールに失敗した場合は、<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。  

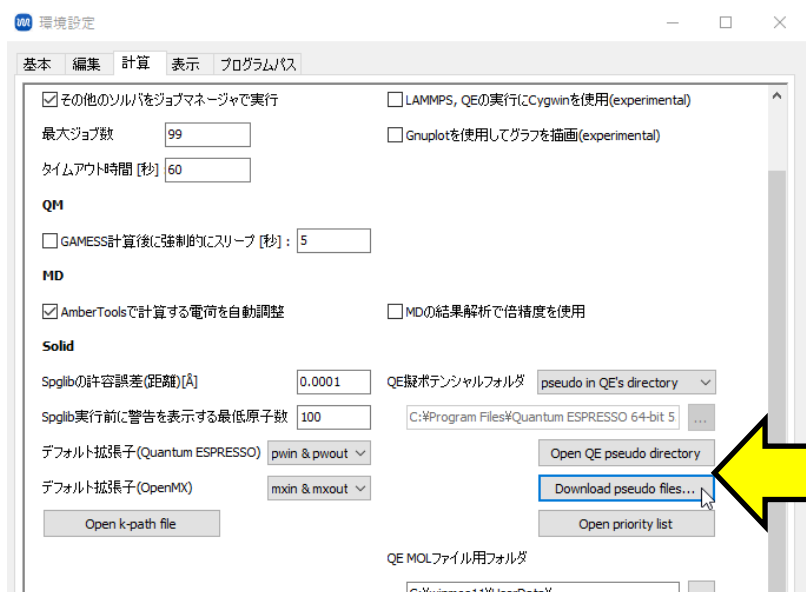
```
bin> smpd.exe -install
```
- ⑥ デフォルトのインストールパス (C:¥Program Files¥MPICH2) 以外にインストールした場合は、Winmostar を起動し、 **ツール | 環境設定** をクリックする。 **プログラム** タブを開き **MPICH2** の [...] ボタンをクリックする。MPICH のインストールフォルダの下にある bin フォルダの下の mpiexec.exe を登録し **OK** をクリックする。

#### 4. 擬ポテンシャルの入手とインストール

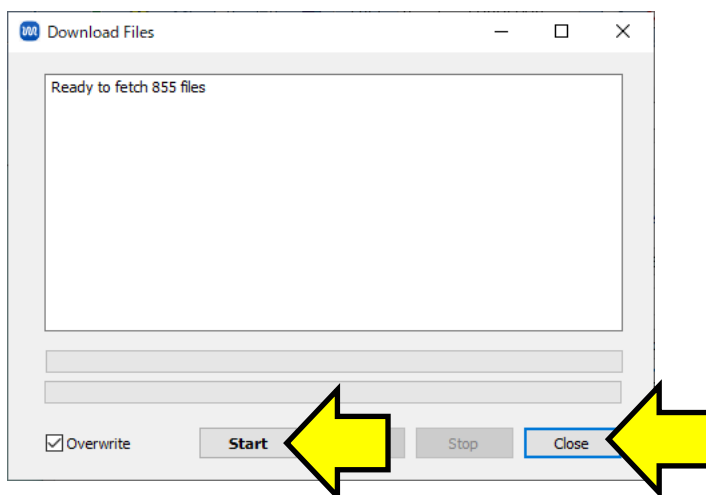
- ① Winmostar (ショートカットまたは本体) のアイコンを右クリックし、**管理者として実行**をクリックする。



- ② ツール | **環境設定**をクリックし、**計算**タブをクリックする。
- ③ インターネットに繋がない環境では、⑥に進む。
- ④ **Solid** の **QE 擬ポテンシャルフォルダ**までスクロールし **Download Pseudo Files** をクリックする。

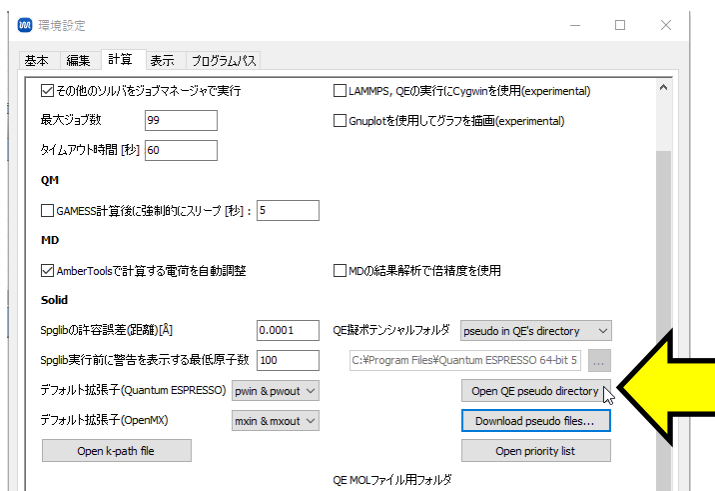


- ⑤ **Download Files** ウィンドウで **Start** をクリックする。処理が完了したら **Close** をクリックする。



⑤以外の擬ポテンシャルファイルが必要な場合は、⑥-⑨の操作を行う。

- ⑥ 必要な擬ポテンシャルファイルを 1 つずつインストールする。まず、**Open Pseudo Directory** をクリックし、エクスプローラで pseudo フォルダを開く。



- ⑦ Quantum ESPRESSO 公式 HP の [元素ごとの Pseudopotential](#) のページに進む。デフォルトで推奨されている PSlibrary 以外を使用する場合は、ページ左側の使用したい PP table のページに進む。

home pseudopotentials

switch table

PSlibrary

Hartwigesen-Goedecker-Hutter PP table

FHI PP table from Abinit web site

Legacy QE PP table

pslibrary

Ready-to-use pseudopotentials from the **PSlibrary**.

The naming convention can be found [here](#).

1																	2														
H																	He														
3	4															5	6	7	8	9	10										
Li	Be															B	C	N	O	F	Ne										
11	12															13	14	15	16	17	18										
Na	Mg															Al	Si	P	S	Cl	Ar										
19	20															21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca															Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr

- ⑧ PSlibrary を使う場合は、上記のページ内で、周期表の中から計算したい元素のクリックする。そして、下図のように拡張子 UPF の Pseudopotential File を右クリックし、名前を付けてリンク先を保存する。ちなみに、Pseudopotential type, Functional type は計算したい物質に登場する全ての元素で同じとなるように選択する。

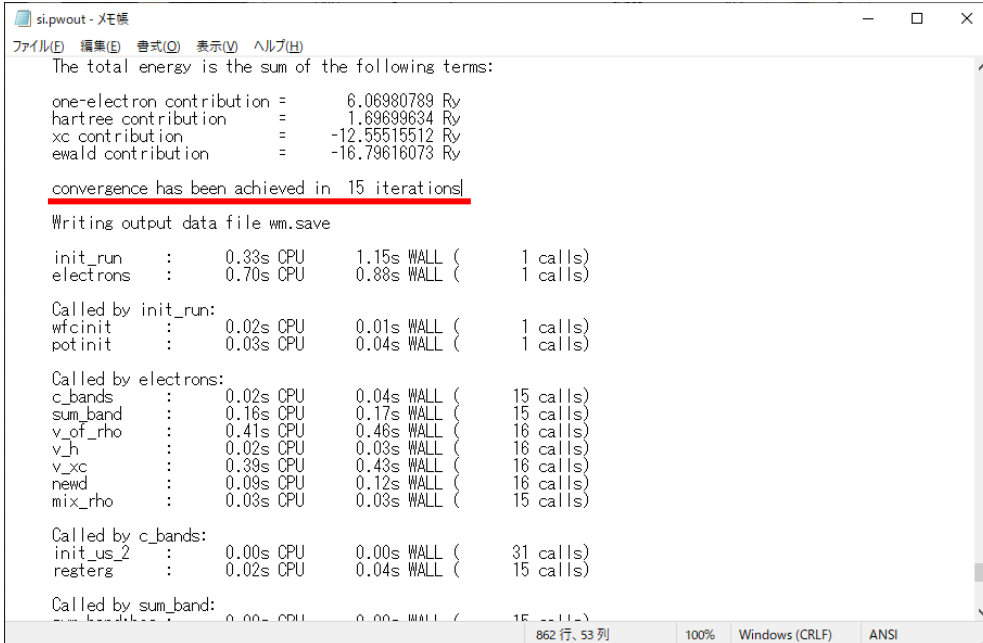
## PSEUDO SEARCH RESULTS



- ⑨ 保存した UPF ファイルを、先ほど④で開いた pseudo フォルダにコピーする。なお、ブラウザの都合で保存したファイルの拡張子が UPF 以外に変更されてしまった場合は UPF に変更しな
- おす。

## 5. 簡易的な動作確認

- ① Winmostar を起動しファイル | 新規ファイルをクリックする。
- ② ファイル | インポート | Samples ファイル | si.cif をクリックする。
- ③ 破棄して読み込みをクリックする。
- ④ 固体 | Quantum ESPRESSO | キーワード設定をクリックする。
- ⑤ 現在のセルはプリミティブセルに変換可能です。変換しますか?との質問にははいを選択する。
- ⑥ Quantum ESPRESSO Keyword Setup ウィンドウ右下の Run をクリックする。
- ⑦ 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ィンドウが開き、大量のメッセージが流れる。暫くすると処理が終わり、ターミナルウィンドウが閉じる。Windows Defender などのセキュリティ警告が出た場合は「アクセスを許可」や「無視」ボタンをクリックする。
- ⑧ 固体 | Quantum ESPRESSO | ログを表示をクリックし、デフォルトで選択されたファイルを開く。Quantum ESPRESSO が正常に実行された場合は、開かれたテキストファイルのほぼ最後に convergence has been achieved in ... と表示される。



```
si.pwout - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
The total energy is the sum of the following terms:
one-electron contribution = 6.06980789 Ry
hartree contribution = 1.69699634 Ry
xc contribution = -12.55515512 Ry
ewald contribution = -16.79616073 Ry

convergence has been achieved in 15 iterations
Writing output data file wm.save

init_run : 0.33s CPU 1.15s WALL ( 1 calls)
electrons : 0.70s CPU 0.88s WALL ( 1 calls)

Called by init_run:
wfcinit : 0.02s CPU 0.01s WALL ( 1 calls)
potinit : 0.03s CPU 0.04s WALL ( 1 calls)

Called by electrons:
c_bands : 0.02s CPU 0.04s WALL ( 15 calls)
sum_band : 0.18s CPU 0.17s WALL ( 15 calls)
v_of_rho : 0.41s CPU 0.46s WALL ( 16 calls)
v_h : 0.02s CPU 0.03s WALL ( 16 calls)
v_xc : 0.39s CPU 0.43s WALL ( 16 calls)
newd : 0.09s CPU 0.12s WALL ( 16 calls)
mix_rho : 0.03s CPU 0.03s WALL ( 15 calls)

Called by c_bands:
init_us_2 : 0.00s CPU 0.00s WALL ( 31 calls)
regsters : 0.02s CPU 0.04s WALL ( 15 calls)

Called by sum_band:
sum_band : 0.00s CPU 0.00s WALL ( 15 calls)

862 行、53 列 100% Windows (CRLF) ANSI
```

以上