

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

2023 年 4 月 27 日

Winmostar V11.5.0 以降を利用、64bit 環境を利用、CygwinWM 2023/04/23 バージョン以降を利用、推奨バージョンの Quantum ESPRESSO を利用予定、の全てに該当する方は本書手順の実行が全て不要です。

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

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

32 bit OS、MPICH による並列計算あり

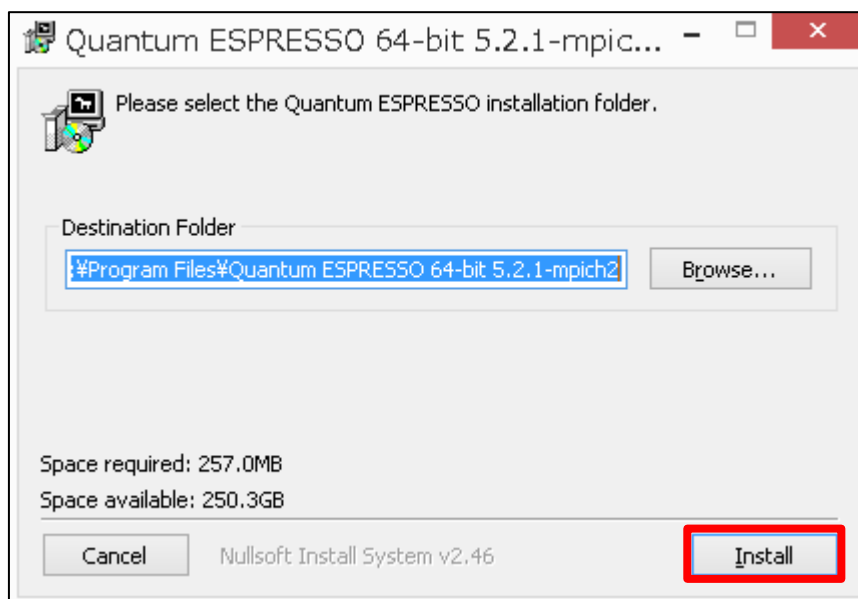
https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/qe-5.2.1-32bit-mpich2.exe

32 bit OS、MPICH による並列計算なし

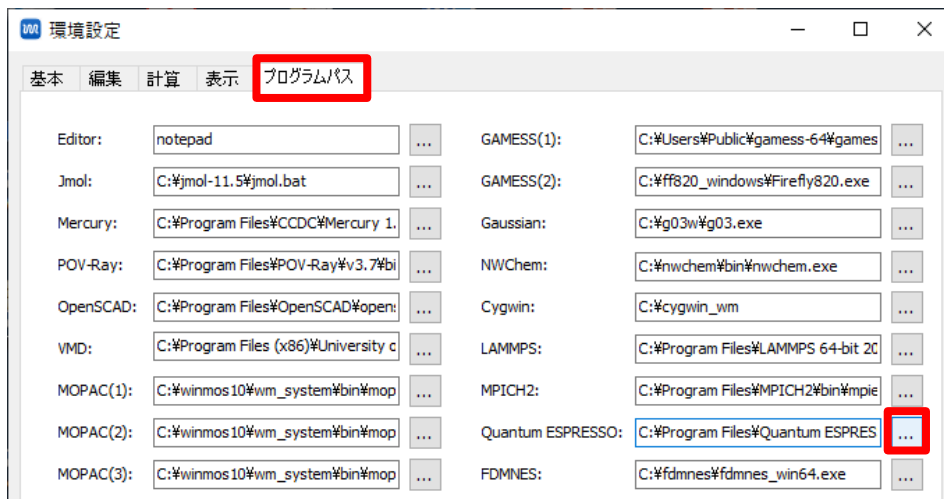
https://winmostar.com/wm/cygwin_wm/packages/qe-5.2.1-32bit-serial.exe

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

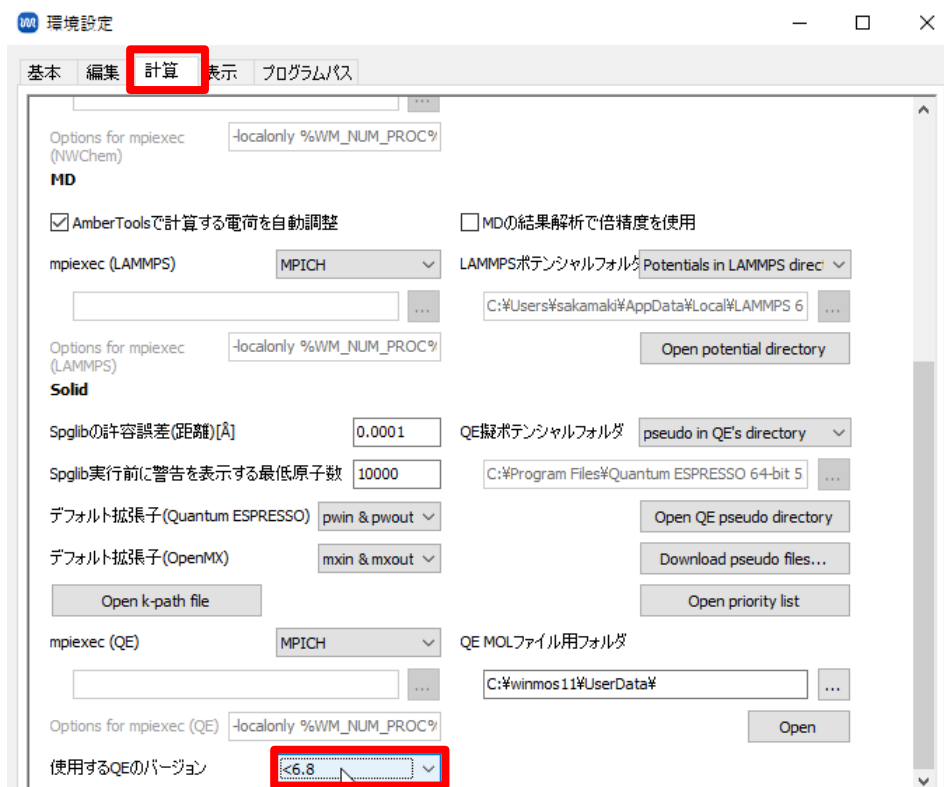
- ② ダウンロードした exe ファイルをダブルクリックする。「この不明な発行元からのアプリがデバイスに変更を加えることを許可しますか？」と聞かれたら**はい**をクリックする。
- ③ 下図の画面が出現したら **Install** をクリックする。処理が完了したら **Close** をクリックする。



- ④ 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 を開く。



- ⑤ (Winmostar V11.5.0 以降のみ) 計算タブを開き使用する QE のバージョンを適宜変更する(項目が出現しない場合は下までスクロールする)。①~③の通り Quantum ESPRESSO 5.2.1 をインストールした場合は「<6.8」を選択する。



- ⑥ 最後に**環境設定**ウィンドウ右下の **OK** ボタンをクリックする。

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

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が変更された場合は「.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、インストールする。設定は基本的にデフォルトで問題ない。

なお、.NET Framework 3.5 がインストールされていないと先に進めないため、その場合は、別途 <https://www.microsoft.com/ja-jp/download/details.aspx?id=21> から .NET Framework 3.5 のインストーラ (dotNetFx35setup.exe) をダウンロードしてインストールする。

dotNetFx35setup.exe を起動して反応がない場合でも処理が完了しているので先に進む。

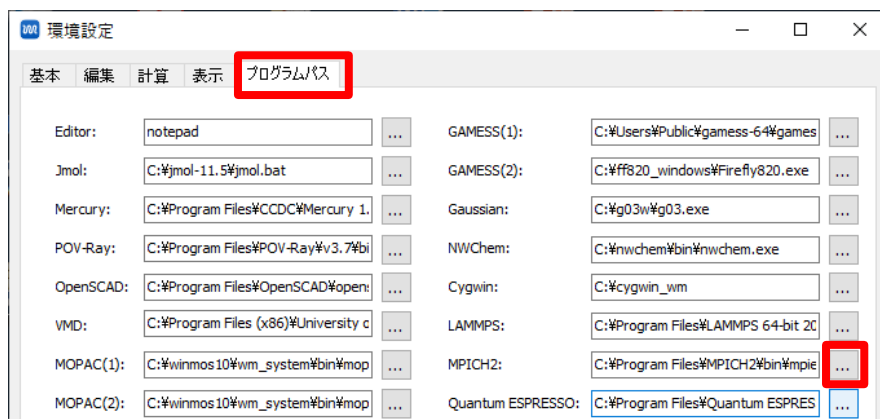
- ③ スタートメニューなどから **コマンドプロンプト** を **管理者権限** で立ち上げる。
- ④ 以下のコマンドを実行し、MPICH をインストールしたフォルダに移動する。

```
c:> cd "c:\Program Files\MPICH2\bin"
```

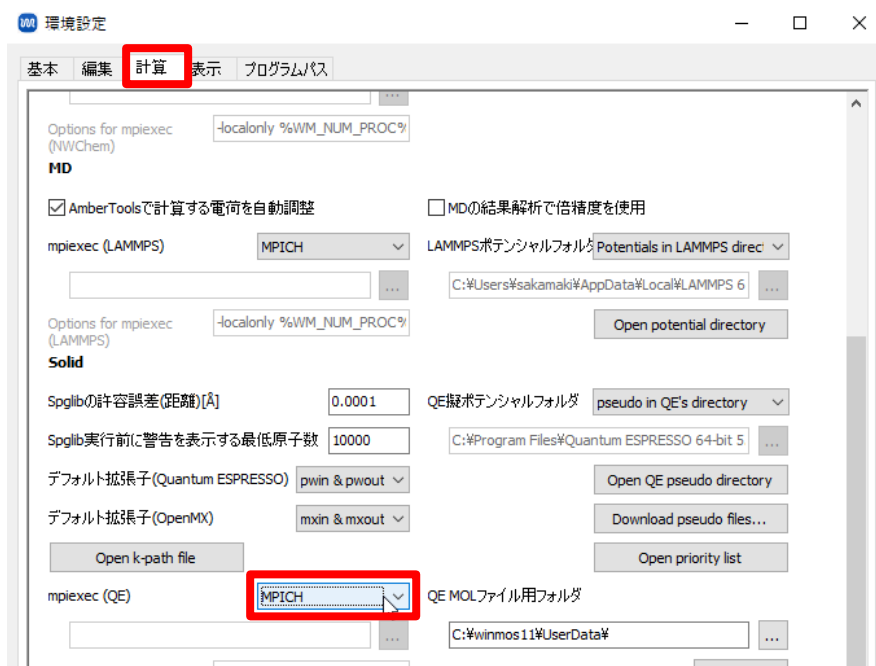
- ⑤ 以下のコマンドを実行し、「MPICH2 Process Manager, Argonne National Lab installed.」と表示されることを確認する。失敗する場合、OS を再起動すると成功することがある。

```
bin> smpd.exe -install
```

- ⑥ Winmostar を起動し、**ツール | 環境設定** をクリックする。**プログラムパス** 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 を開く。



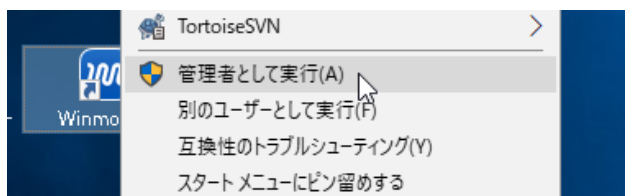
- ⑦ (Winmostar V11.3.0 以降のみ) 計算タブを開き **mpixec (QE)**を「MPICH」に変更する(項目が出現しない場合は下までスクロールする)。



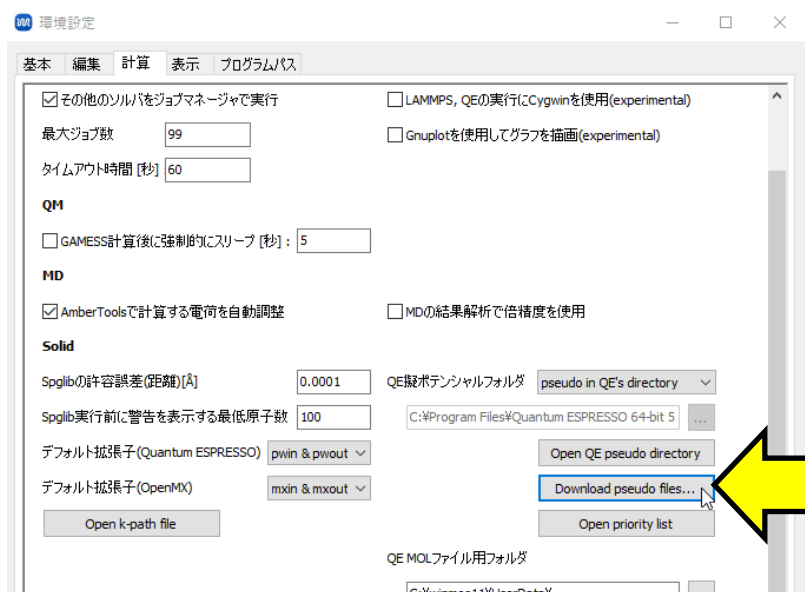
- ⑧ 最後に環境設定ウィンドウ右下の **OK** ボタンをクリックする。

4. 擬ポテンシャルの入手とインストール

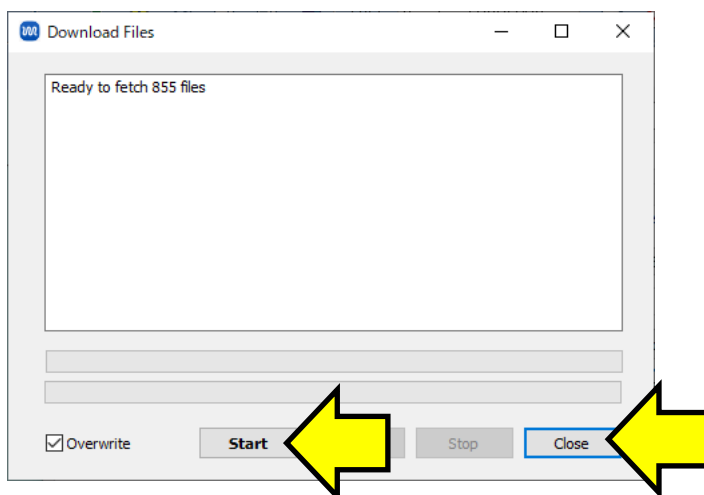
- ① Winmostar (ショートカットまたは本体) のアイコンを右クリックし、**管理者として実行**をクリックする。



- 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らない環境では、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。

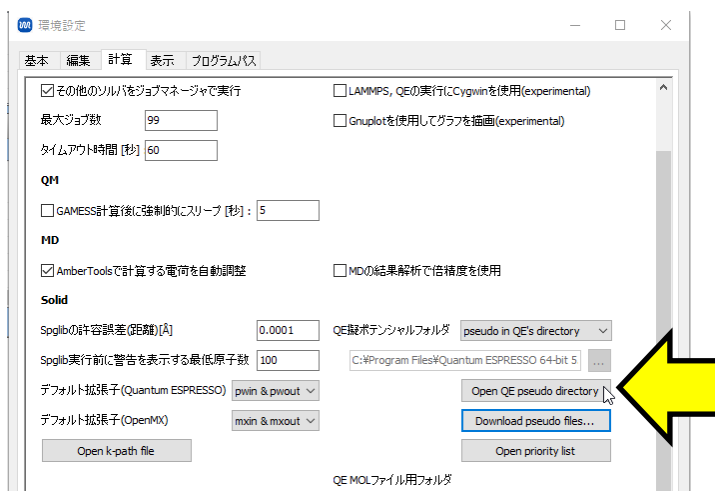


- ⑤ **Download Files** ウィンドウで **Start** をクリックする。処理が完了したら **Close** をクリックする。



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。

The screenshot shows the Quantum ESPRESSO Pseudopotentials website. The page title is "QUANTUM ESPRESSO PSEUDOPOTENTIALS". The navigation menu includes "home" and "pseudopotentials". The main content area is titled "pslibrary" and includes the text "Ready-to-use pseudopotentials from the PSlibrary." and "The naming convention can be found [here](#)." Below this, there is a list of available pseudopotential tables: "PSlibrary", "Hartwigesen-Goedecker-Hutter PP table", "FHI PP table from Abinit web site", and "Legacy QE PP table". At the bottom right, there is a periodic table with elements colored in red and white.

- 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。

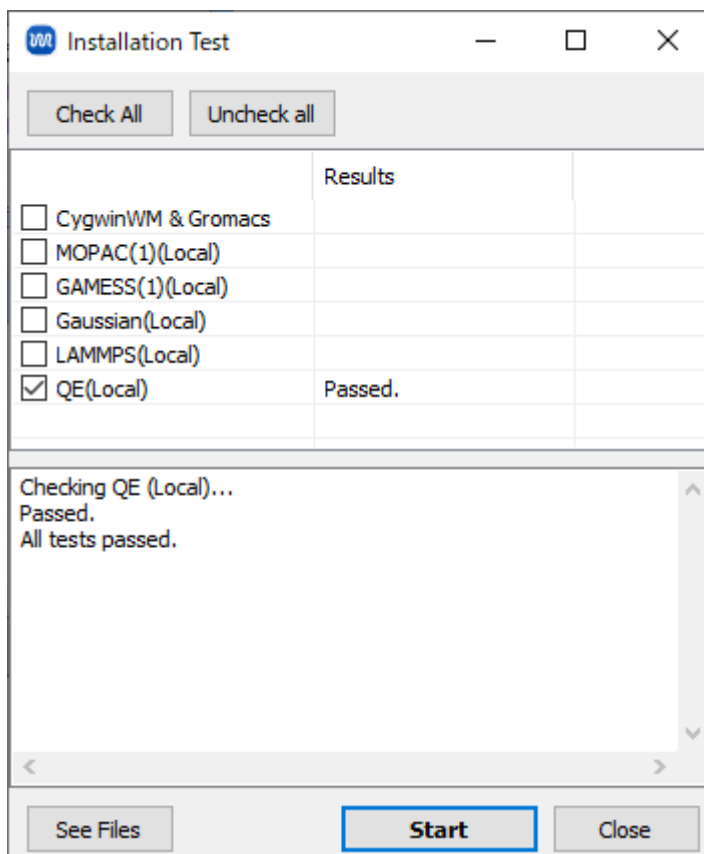
PSEUDO SEARCH RESULTS



- 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 のメインメニューのヘルプ | インストールテストをクリックする。
- ② 「QE (Local)」にチェックを入れ **Start** をクリックする。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** をクリックする。
- ③ 20~30 秒程度待ち「All tests passed.」と表示されることを確認する。



以上