winmostar チュートリアル

# Quantum ESPRESSO基礎編

V11.12.0

2025年5月9日　　株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# 本書について

- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。

- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - Winmostar導入講習会：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - Winmostar基礎講習会：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - 個別講習会：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まずよくある質問を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

# 概要

- Si結晶のバンド構造、状態密度、部分状態密度、電子密度の算出をQuantum ESPRESSOによる第一原理計算から取得します。

手順の概要：

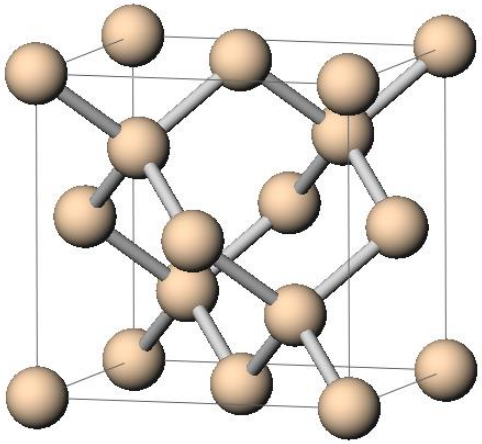
**I. 系のモデリング**

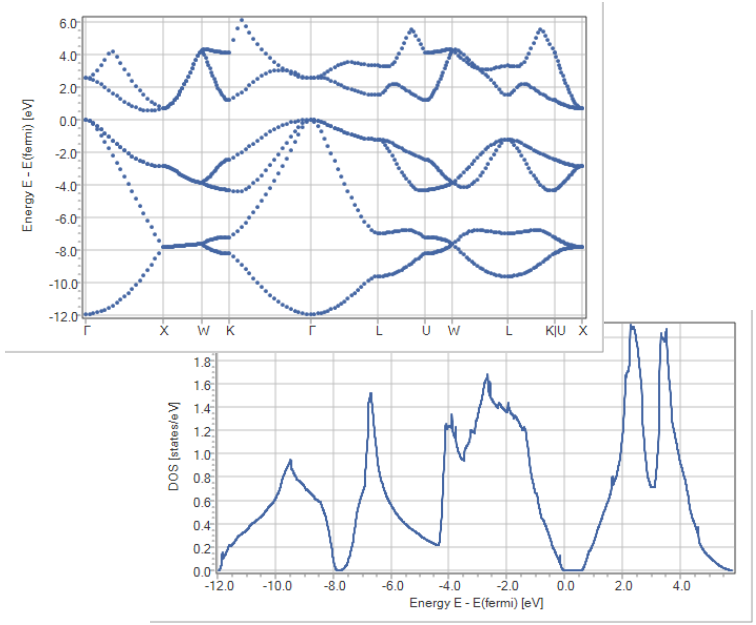
↓

**II. 計算の実行**

↓

**III. 結果解析**






◆ Quantum ESPRESSOの計算方法及び計算設定内容の詳しい説明は、次の弊社記事をご覧ください。https://qiita.com/xa_member


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# 動作環境設定

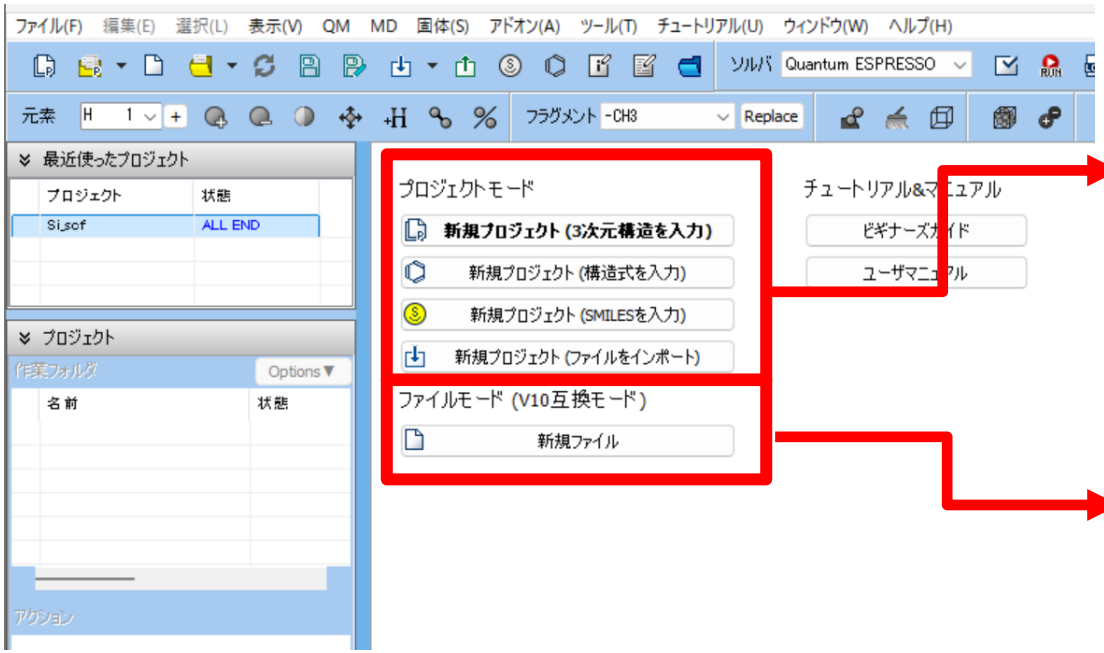
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum ESPRESSOが同梱されています。

- 上記に該当しない場合、または推奨バージョン以外のQuantum ESPRESSOを利用したい方は、別途Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定が必要です。


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# Winmostar V11の動作モード

V11には**プロジェクトモード**と**ファイルモード**の2つの動作モードが用意されています。
本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。
ファイルモードの操作方法はV10のQuantum ESPRESSOチュートリアルを参照してください。



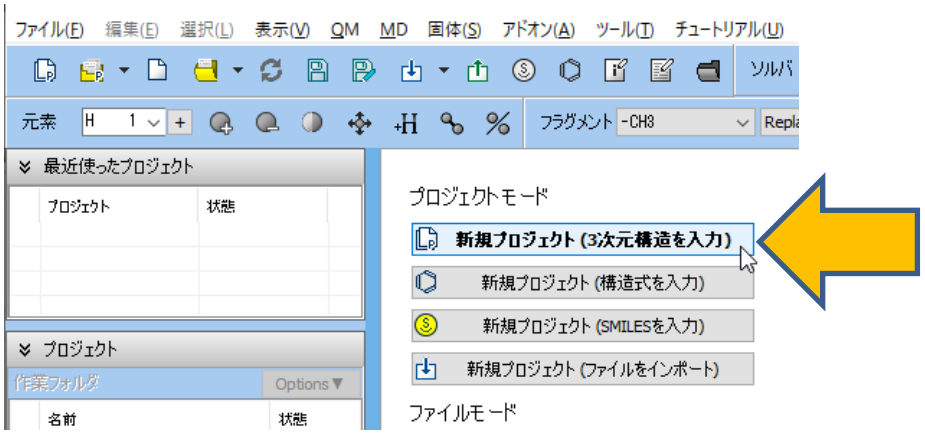

**プロジェクトモード** **V11新機能**
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。
基本的にこのモードを推奨します。

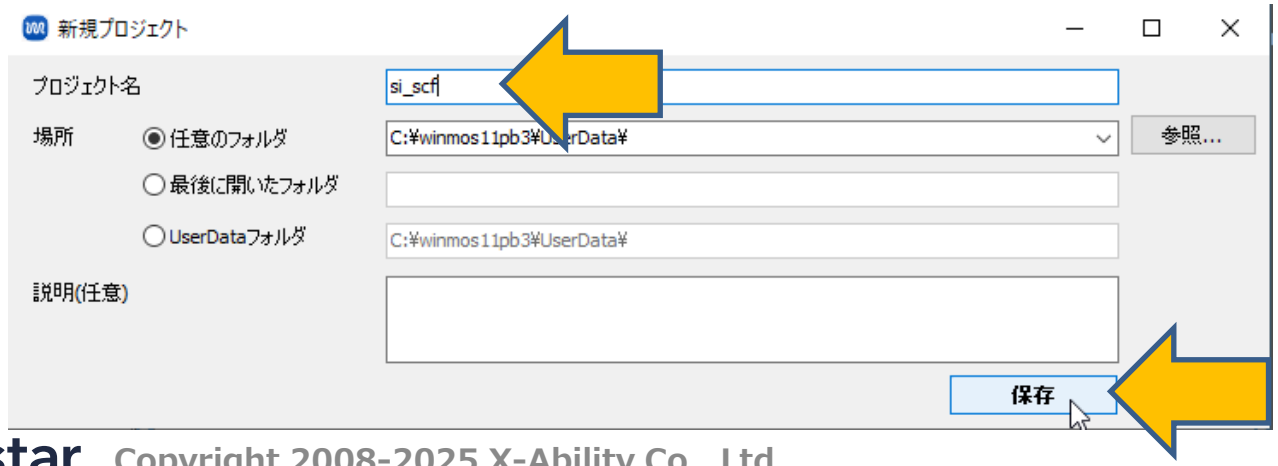
**ファイルモード**
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# I. 系のモデリング

1. Winmostarを起動し、**新規プロジェクト（3次元構造を入力）**をクリックします。（すでに起動している場合は先に**ファイル｜閉じる**をクリックします。）
2. **プロジェクト名**に「si_scf」と入力し**保存**をクリックします。



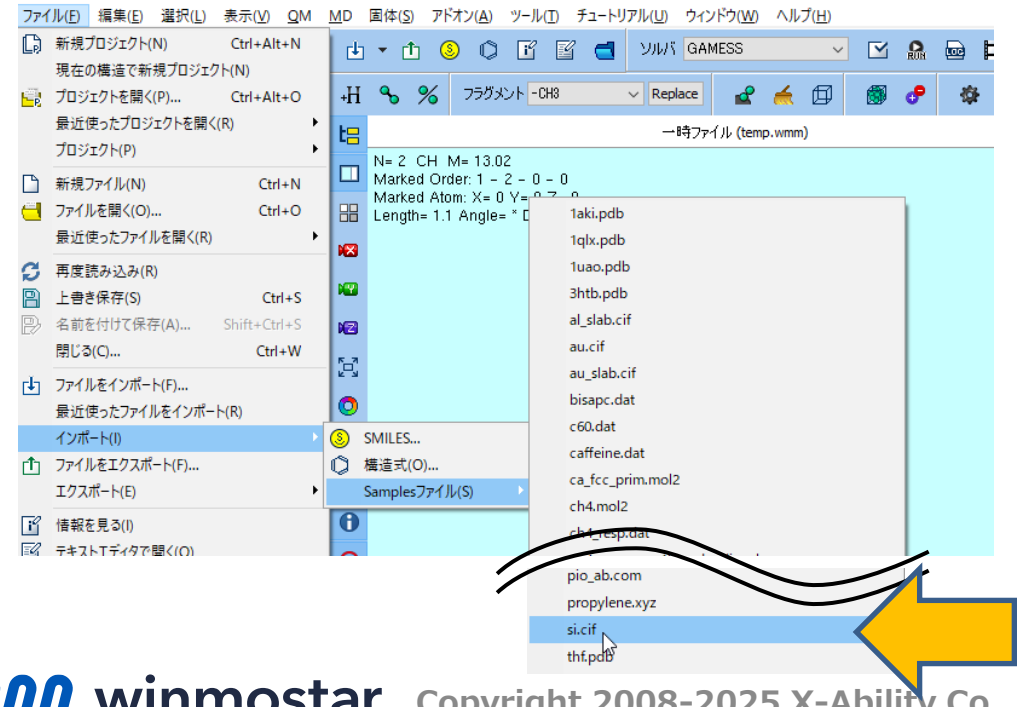


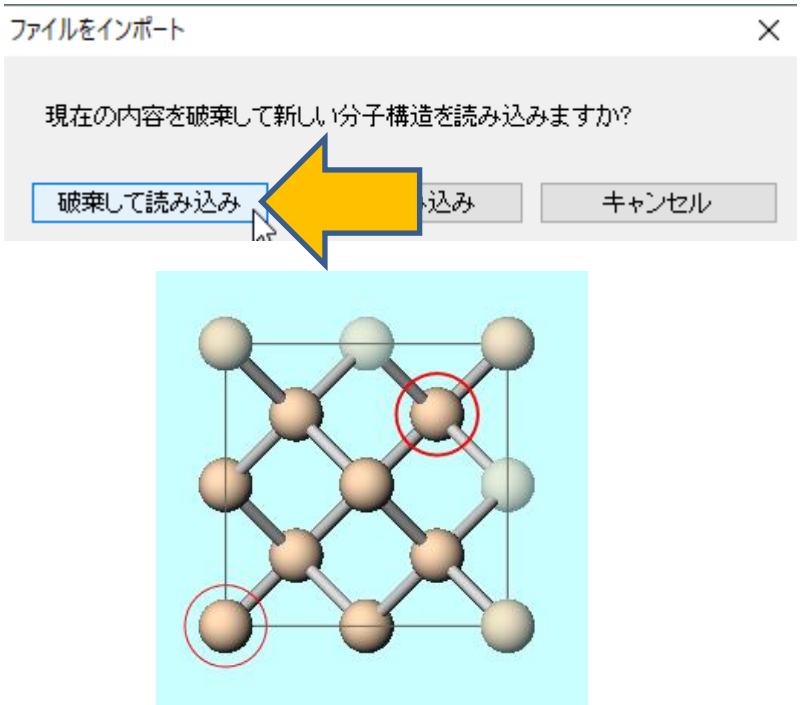
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# I. 系のモデリング

初期構造の作成方法の詳細は[Winmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法](#)を参照してください。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

1. **ファイル｜インポート｜Samplesファイル｜si.cif**をクリックします。
   - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル｜ファイルをインポート**を使います。
2. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。
3. 分子表示エリアに所望の構造が出現することを確認します。



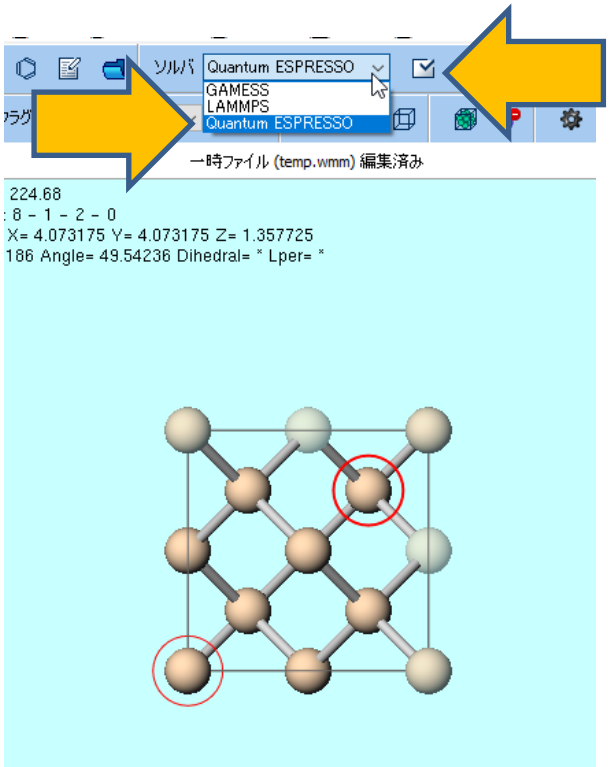



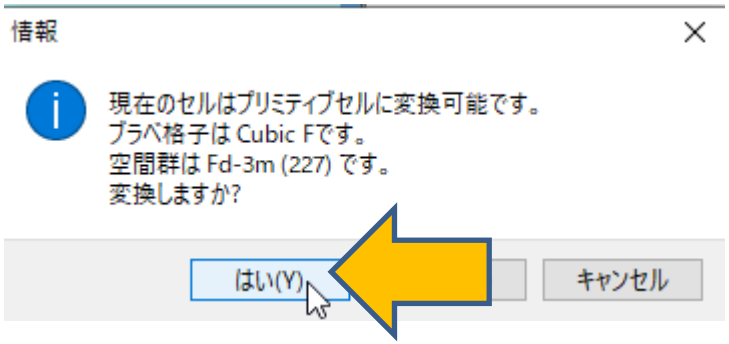


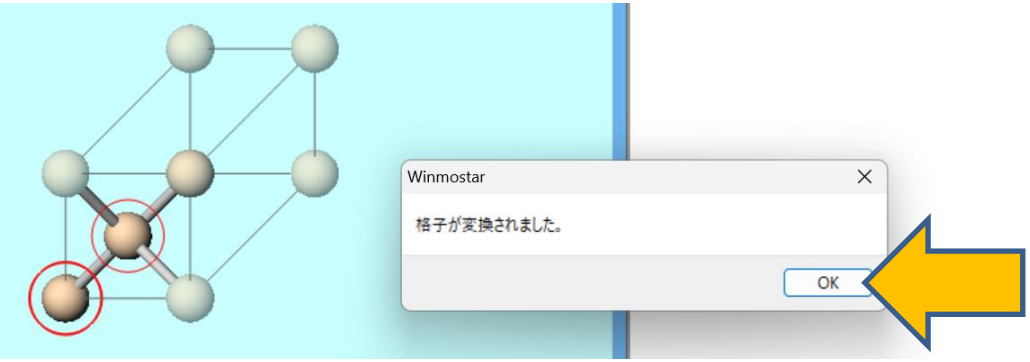
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# II. 計算の実行

1. ツールバーの**ソルバ**から**Quantum ESPRESSO**を選択します。
2. **(ワークフロー設定)** をクリックします。
3. 計算時間を短縮するため、プリミティブセルに変換するか聞かれたら**はい**をクリックします。分子表示エリアには変換後の構造が出現します。「格子が変換されました」と表示されたら**OK**をクリックします。



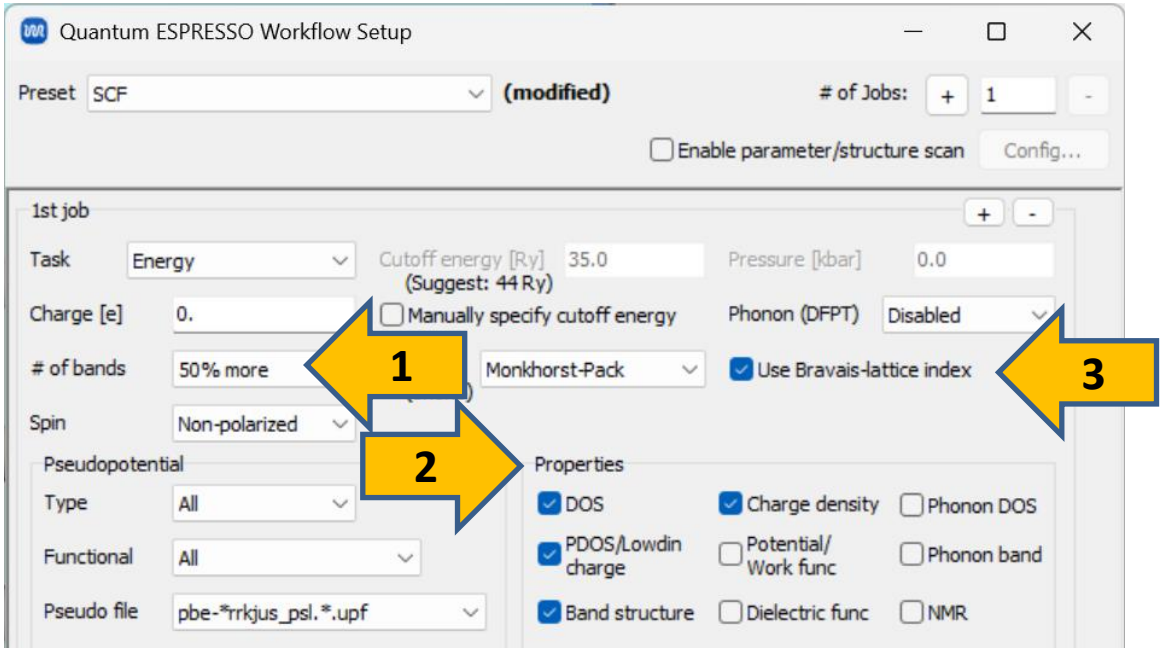





Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# II. 計算の実行

1. 伝導帯のバンド構造を出力するために**# of bands**を**50% more**に変更します。
2. **Properties**の**DOS**、**PDOS/Lowdin charge**、**Band structure**、**Charge Density**にチェックを入れます。
3. Winmostarでバンド構造を出力する際に必要なため、**Use Bravais-lattice index**にチェックをいれます。

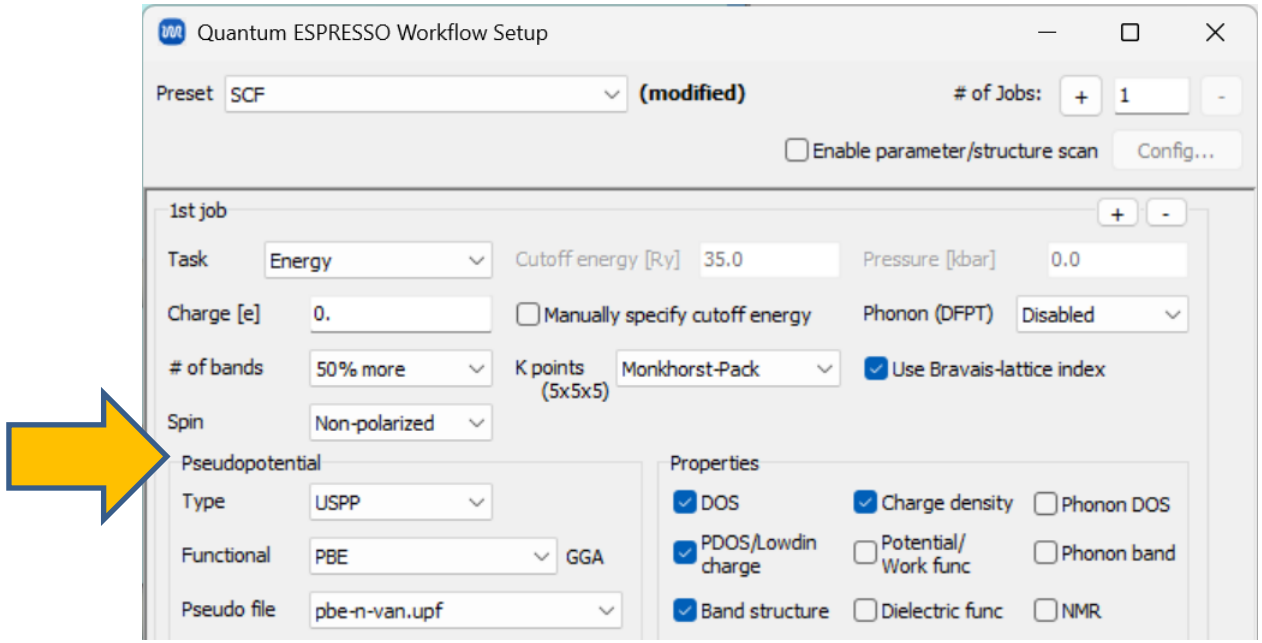




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# II. 計算の実行

1. **PseudopotentialのTypeをUSPP、FunctionalをPBE、Pseudo fileをpbe-n-van.upf**に変更します。
   - **Type**と**Functional**で**Pseudo fileの選択肢が絞られます。Pseudo fileの表記から擬ポテンシャルの種類と汎関数を類推できる方は直接Pseudo fileを選択してください。**
   - 擬ポテンシャルファイルの追加したい場合はインストール方法のQuantum ESPRESSOインストールマニュアルを参照してください。
2. 適宜計算条件を変更します。（本書では不要です）





Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

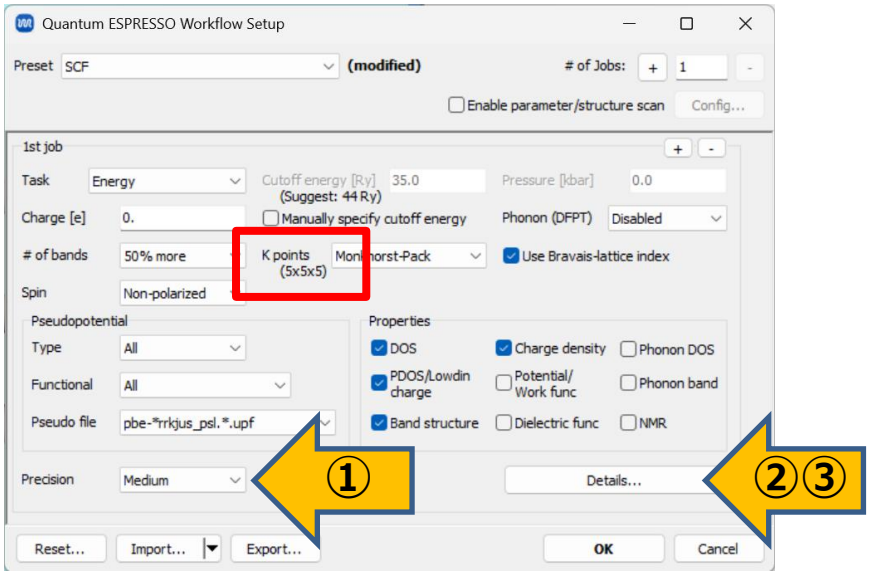
# 補足　k点数の調整

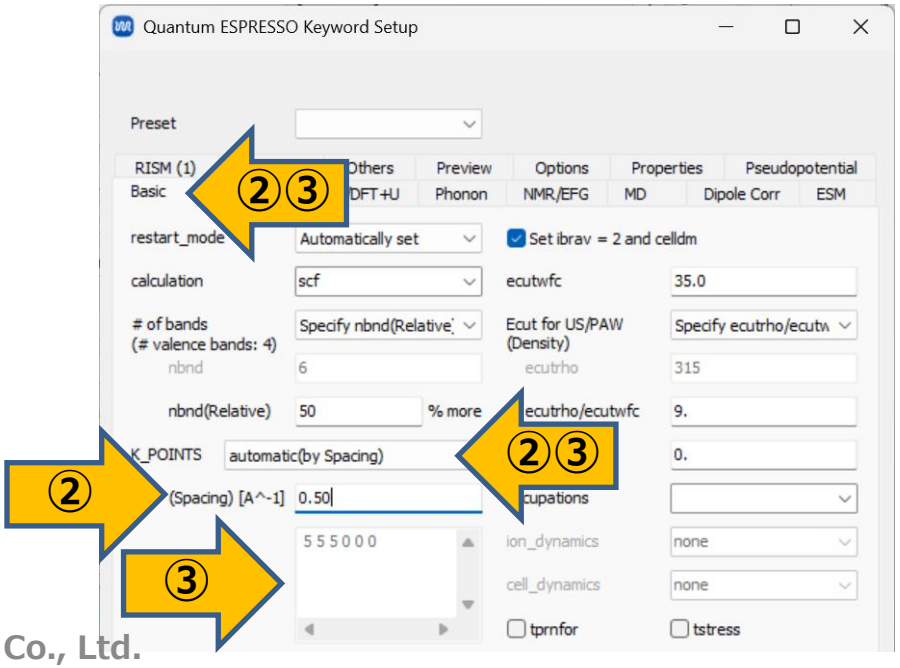
Brillouin ZoneのMonkhorst-Pack法による分割数を調整したい場合は以下の方法で操作する。

①大まかに調整したい場合：**Precision**を変更する。（**K points**の下に分割数が表示される。）

②細かく調整したい場合　：**Details**をクリックし、**Basic**タブの**K_POINTS**を「automatic (by Spacing)」に変更し、 **(Spacing)**の値を調整する。

③具体的に入力したい場合：**Details**をクリックし、**Basic**タブの**K_POINTS**を「automatic」に変更し、その2つ下の入力欄の値を調整する。





Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

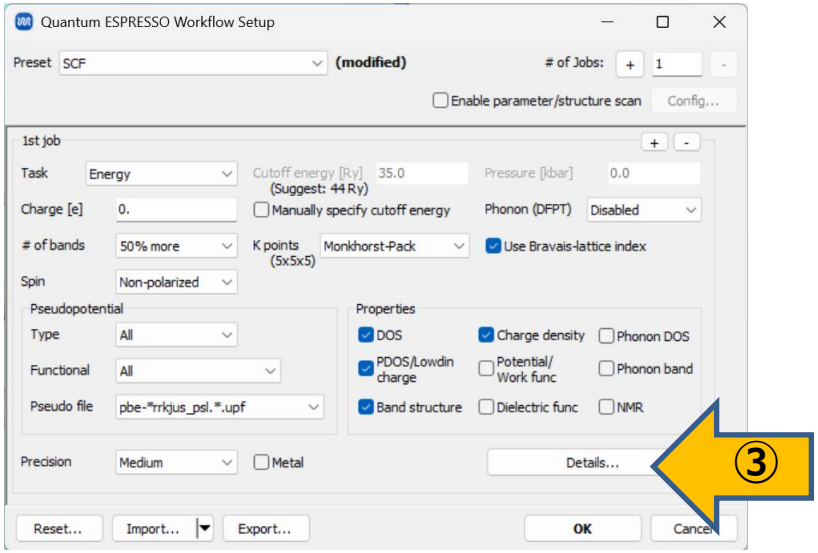
# 補足　各元素の擬ポテンシャルファイルが揃わない場合

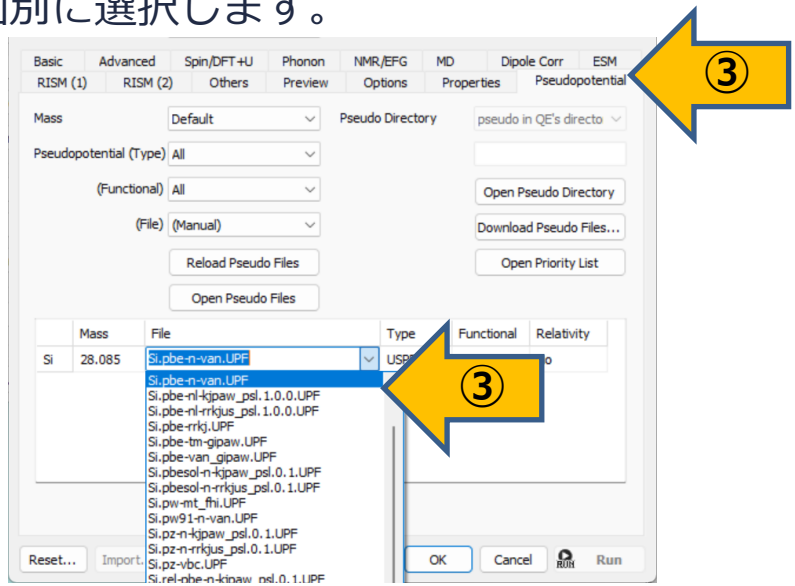
計算したい物質に含まれるすべての元素に共通する擬ポテンシャルファイルが揃わない場合は以下のいずれかの操作を実行します。

①　適切な擬ポテンシャルファイルを入手し、**ツール｜環境設定｜計算｜Open QE pseudo directory**をクリックし、開いたフォルダにファイルをコピーします。

②　適切な擬ポテンシャルファイルがあるにも関わらず微妙な名前の違いで共通するファイルが認識されない場合は、**ツール｜環境設定｜計算｜Open priority list**をクリックし、認識されるような形で項目を追加します。ワイルドカードとしてアスタリスク（*）を利用できます。

③　**Quantum ESPRESSO Workflow Setup** ウィンドウで **Details** をクリックし、**Pseudopotential**タブに移動し、各元素の**File**を個別に選択します。



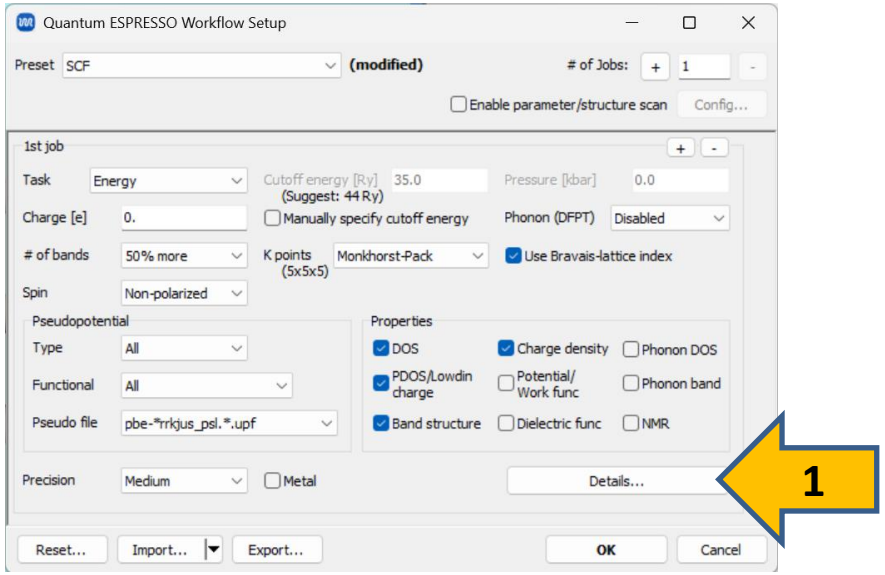


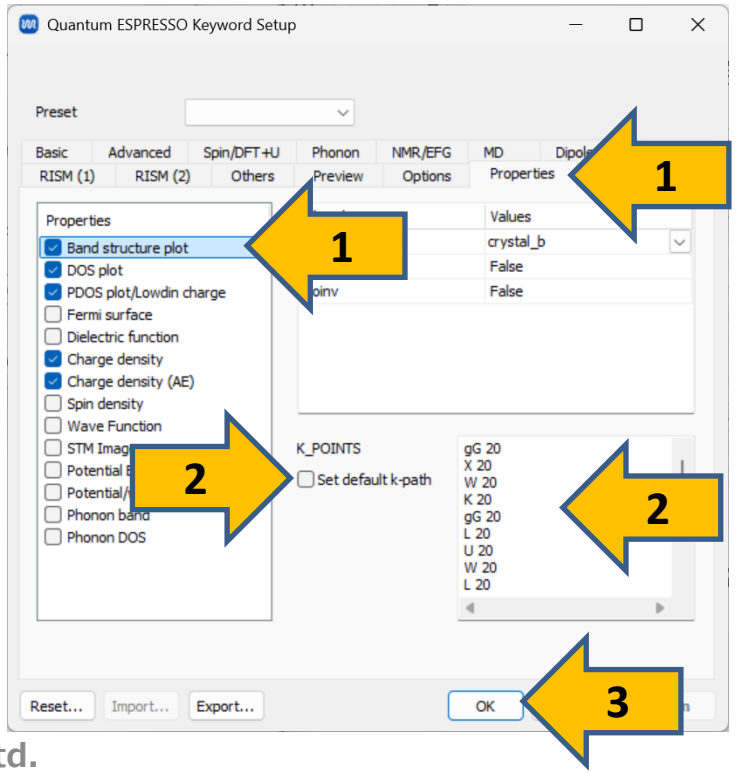
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# 補足　バンド構造のパスの編集

バンド構造のパスを編集する場合は以下のように操作します。（本書では不要です）

1. **Details**をクリックし、開いた**Quantum ESPRESSO Keywords Setup**ウィンドウで**Properties**タブをクリックし、**Properties**の**Band structure plot**の行をクリックします。
2. **Set default k-path**のチェックを外し、その右の欄でパスを編集します。書式はQuantum ESPRESSOのK_POINTSの書式に従います。特殊点のラベルはQuantum ESPRESSOのインストールフォルダのdoc¥Brillouin_zones.pdfに書かれています。
3. 編集後**OK**をクリックします。



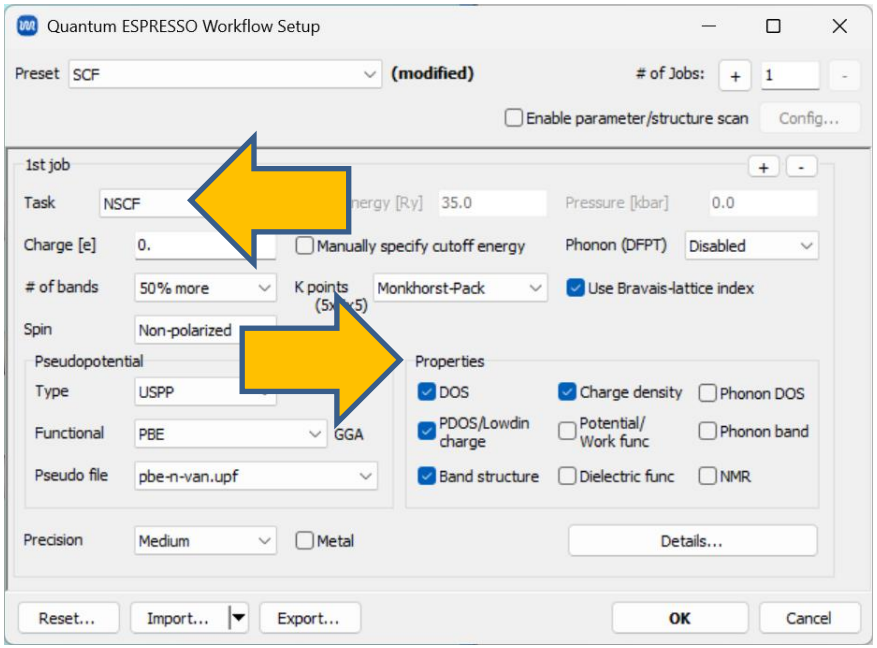


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# 補足　過去のジョブに対し後から物性を算出したい場合

過去に終了したSCF計算・構造最適化計算に関し、後から状態密度などを算出したい時は以下のように操作します。（本書では不要です）

1. **ワークフロー設定**をクリックし、「継続ジョブを実行しますか？」と表示されたら**はい**をクリックし、計算が終わったSCF計算または構造最適化計算の作業フォルダを選択し**OK**をクリックします。
2. **Task**を「NSCF」に変更し、**Properties**で算出したい項目にチェックを入れます。
3. **OK**をクリックし**ジョブの設定**ウィンドウで**実行**をクリックします。



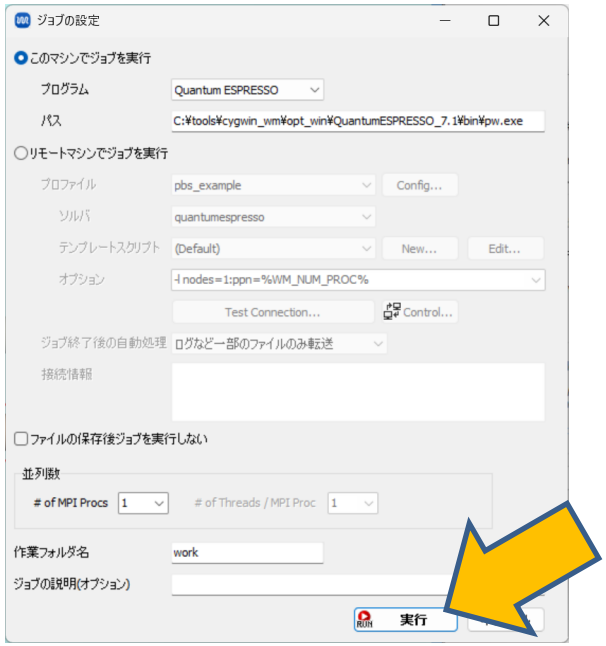


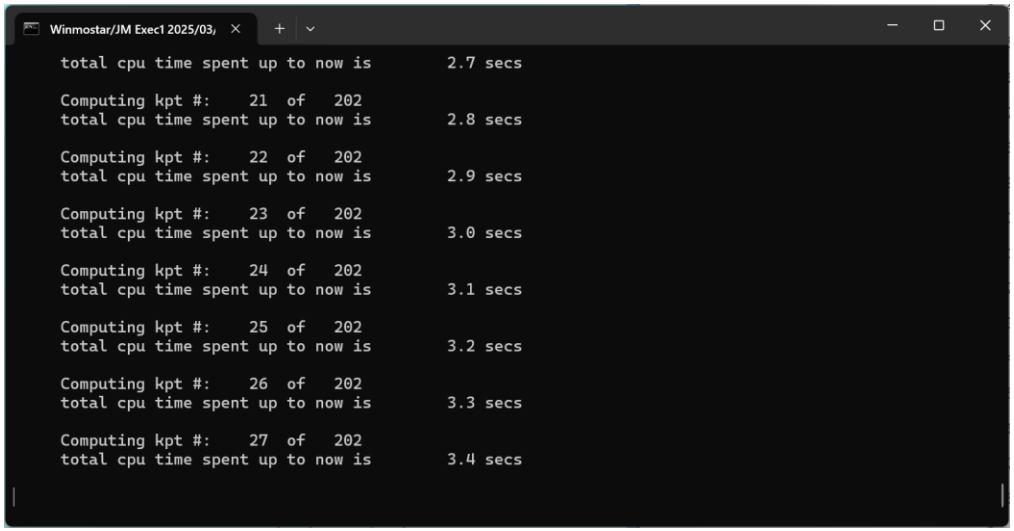
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# II. 計算の実行

（リモートジョブの場合は先にこちらに進んでください。）

1. **Quantum ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウ右下の**OK**をクリックします。
2. **ジョブの設定**ウィンドウで**実行**をクリックします。バックグラウンドで**Winmostar Job Manager**が起動し、右図のような黒いコンソールウィンドウが出現し、計算が開始されます。



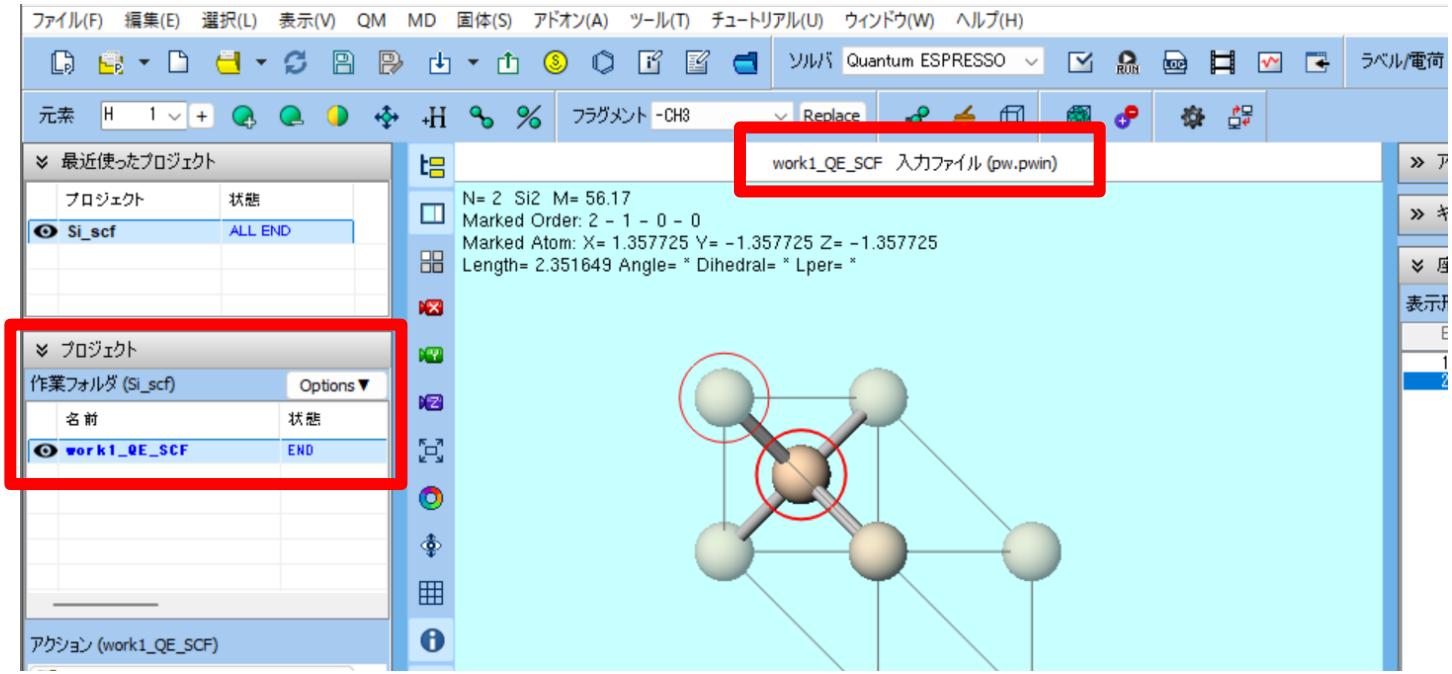




補足：入力ファイルを自分で修正したい場合やリモートサーバに自分でコピーして使用したい場合は、**ジョブの設定**ウィンドウで**ファイルの保存後ジョブを実行しない**にチェックを入れ**実行**をクリックします。保存後に計算を実行したい場合は**ファイル｜プロジェクト｜選択された作業フォルダ｜Run**をクリックします。


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# II. 計算の実行

1. メインウィンドウに戻ると（計算実行中でも構いません）、**プロジェクト表示エリア**に**Quantum ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウで設定したジョブの作業フォルダが表示されます。
2. 分子表示エリアには自動的に最初の作業フォルダ（work1_QE_SCF）の入力ファイルが開かれます。**分子表示エリア**の上部でもそのことを確認できます。

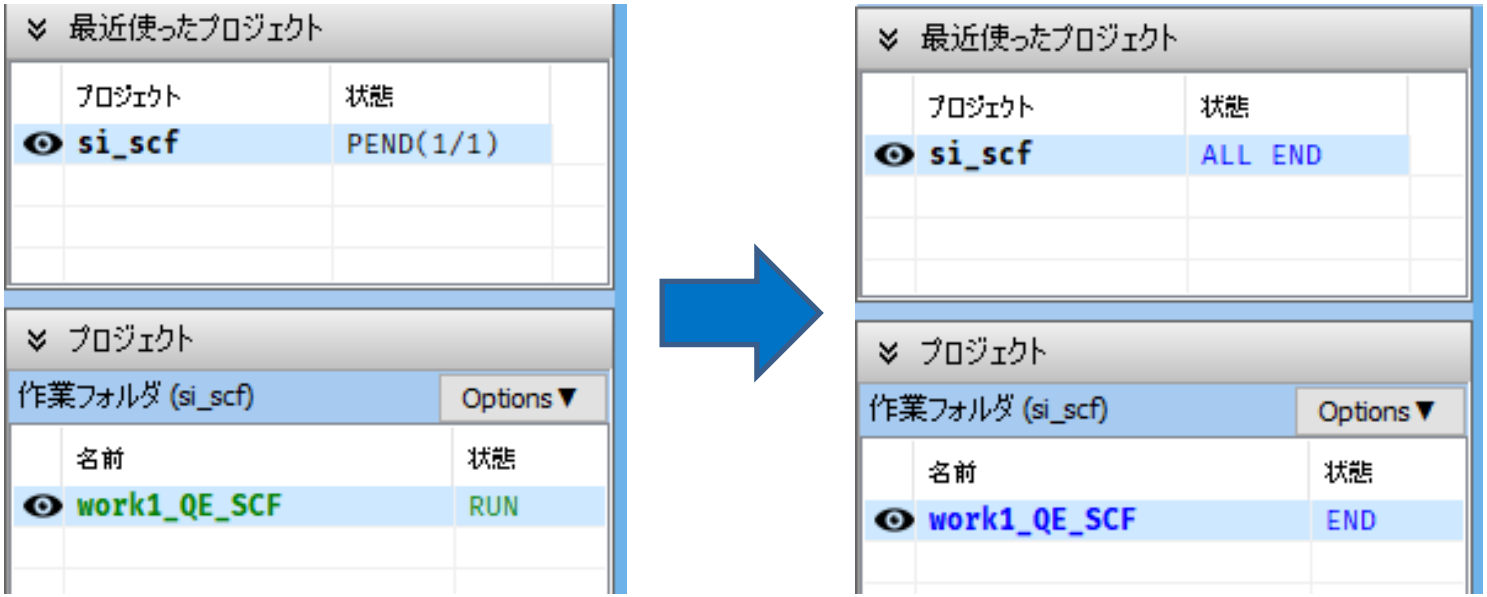




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# II. 計算の実行

1. 計算の進行状況に応じて、**プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で各作業フォルダの状態が**PEND（黒）**→**RUN（緑）**→**END（青）**と変化します。
2. 全ての作業フォルダの状態が**END（青）**に変化するまで待ちます。この際**最近使ったプロジェクト**の「si_scf」の状態も**ALL END（青）**に変化します。

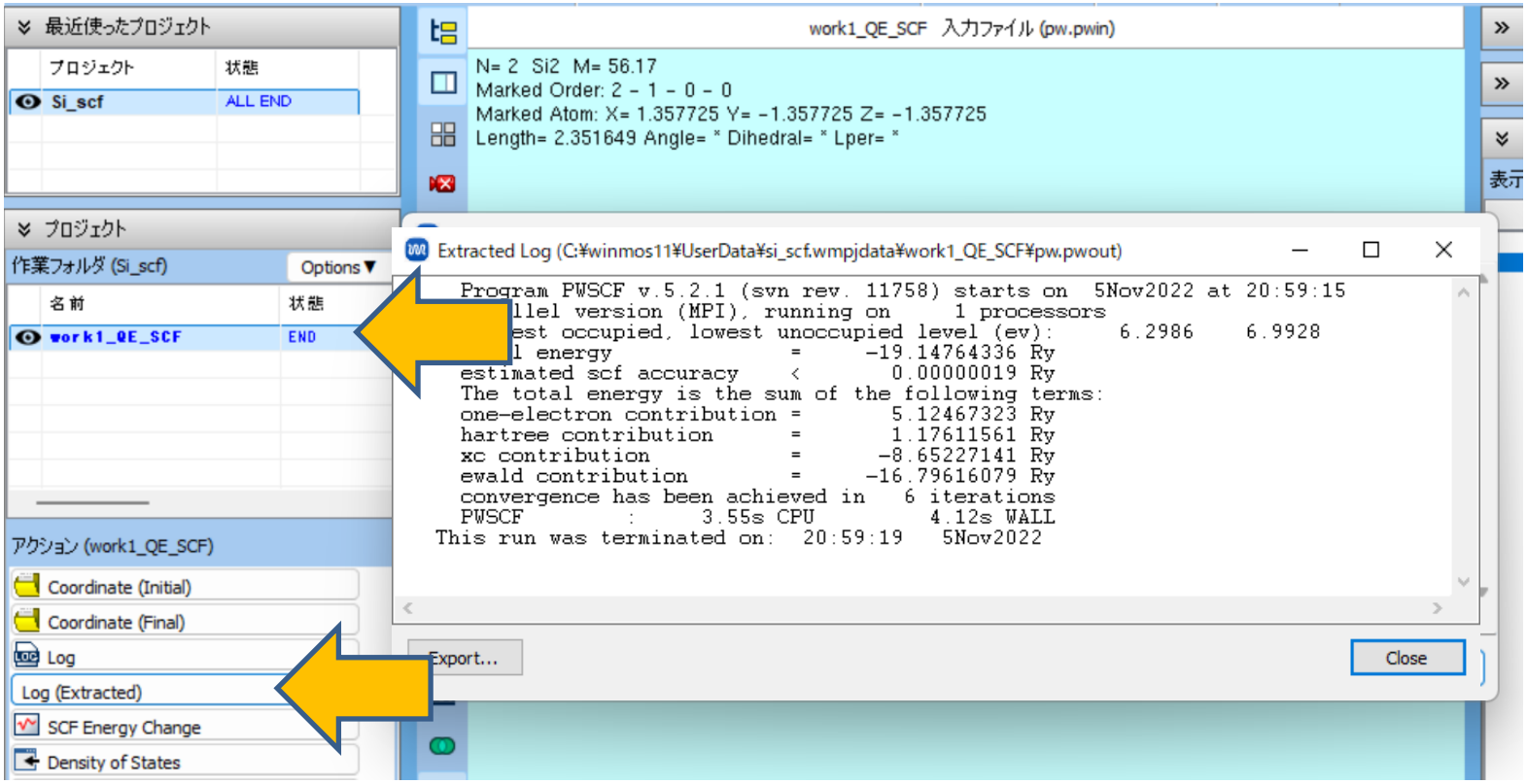




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# II. 計算の実行

1. 各計算のログの主要な内容を見たい場合は、**プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で対象となる計算の作業フォルダをクリックして選択し、**アクション**の**Log (Extracted)**をクリックします。（プロフェッショナル版エリート及びプレミアム限定の機能です）
2. 完全なログを見たい場合は**Log**をクリックします。

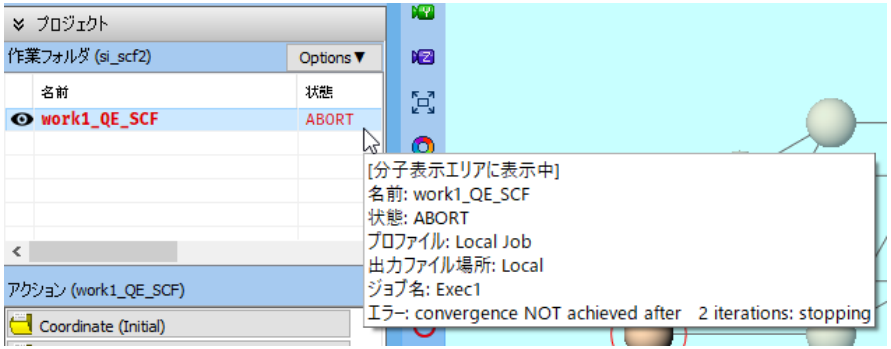


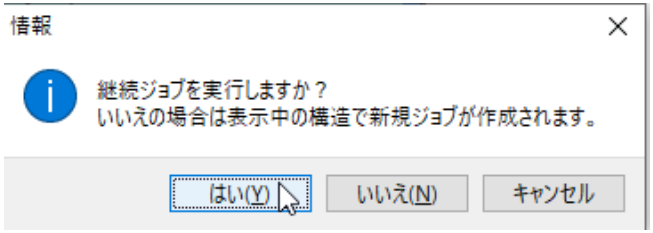


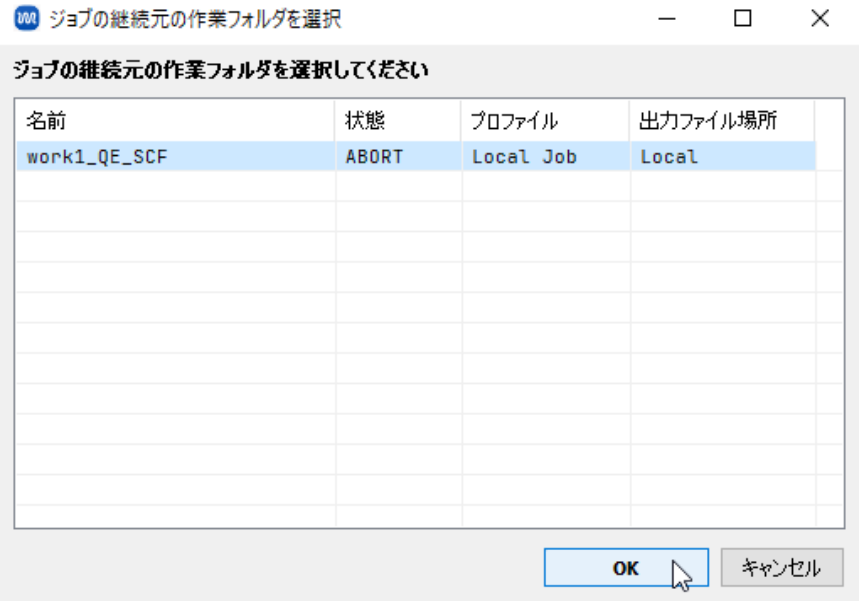
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# 補足　SCF計算が収束せず継続する場合

1. SCF計算が収束しない場合は**状態**に**ABORT**と表示されます。カーソルをwork1_QE_SCFに重ねると「エラー：convergence NOT achieved after ** iterations…」と表示されます。
2. **(ワークフロー設定)** をクリックし、「継続ジョブを実行しますか？」と聞かれたら**はい**をクリックします。
3. 「ジョブの継続元の作業フォルダを選択してください」と表示されたら継続元のジョブを選択し**OK**をクリックします。警告が表示されたら**はい**をクリックします。
4. 最初のジョブと同様にワークフロー設定ウィンドウで計算条件を調整しジョブを実行します。



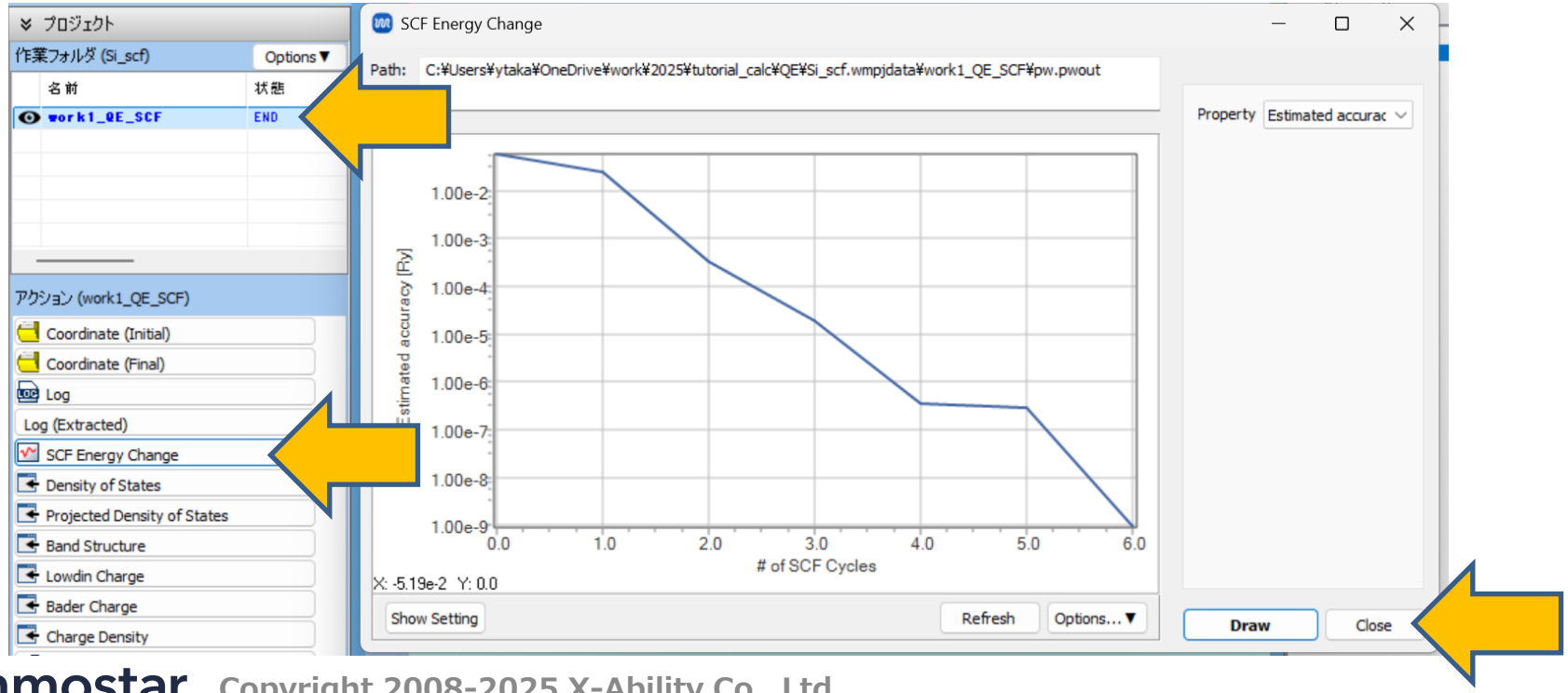


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# III.結果解析　SCFエネルギー変化

以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。

1. **プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で対象となる作業フォルダ（ここではwork1_QE_SCFとします）をクリックします。
2. **アクション**で**SCF Energy Change**をクリックすると、**SCF Energy Change**ウィンドウが開き、Quantum ESPRESSOのログ中のEstimated accuracyのプロットが出現します。
3. 確認したら**Close**をクリックします。

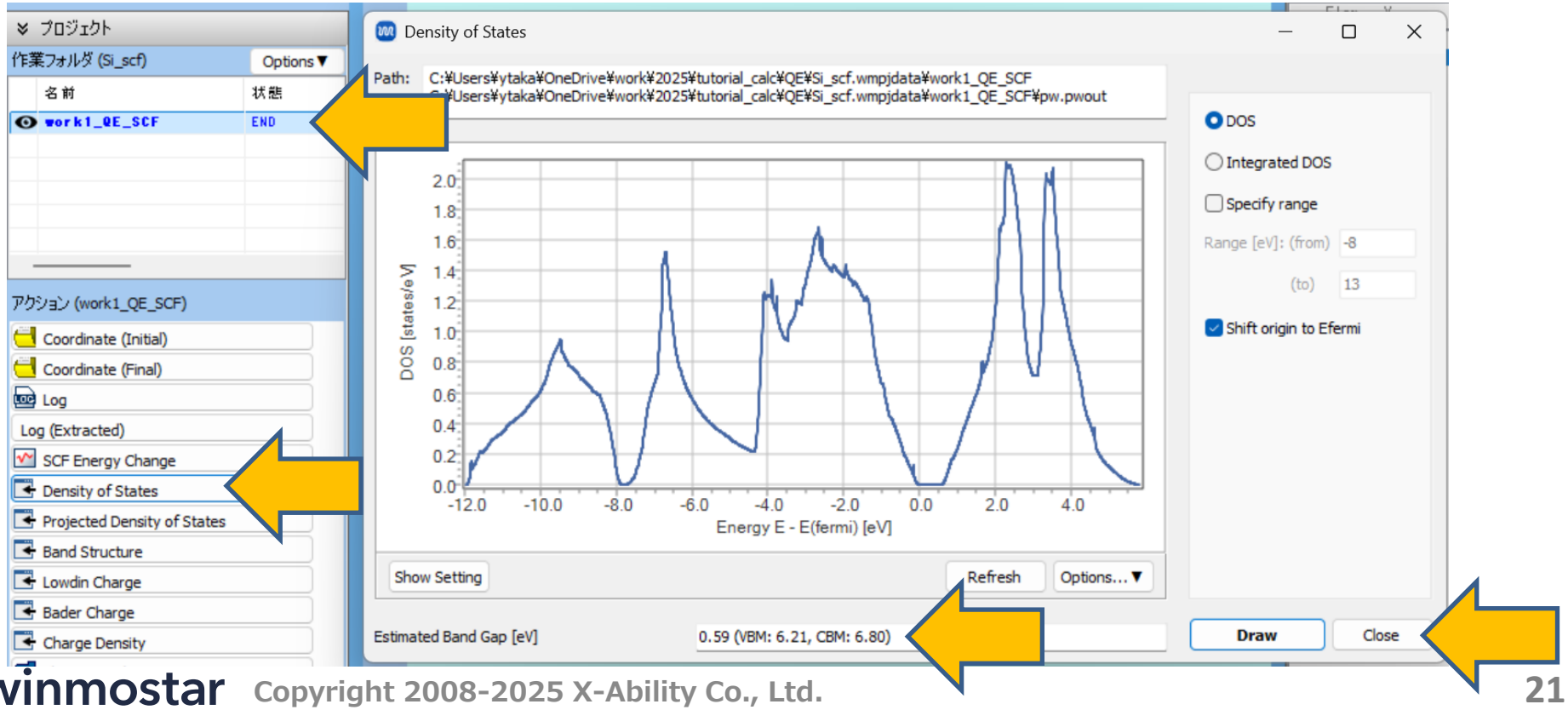




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# III.結果解析　状態密度、バンドギャップ

1. **プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で対象となる作業フォルダ（ここでは work1_QE_SCFとします）をクリックします。
2. **アクション**で**Density of States**をクリックすると、**Density of States**ウィンドウが開き、状態密度のプロットが出現します。バンドギャップもウィンドウ下部で確認できます。
3. 確認したら**Close**をクリックします。

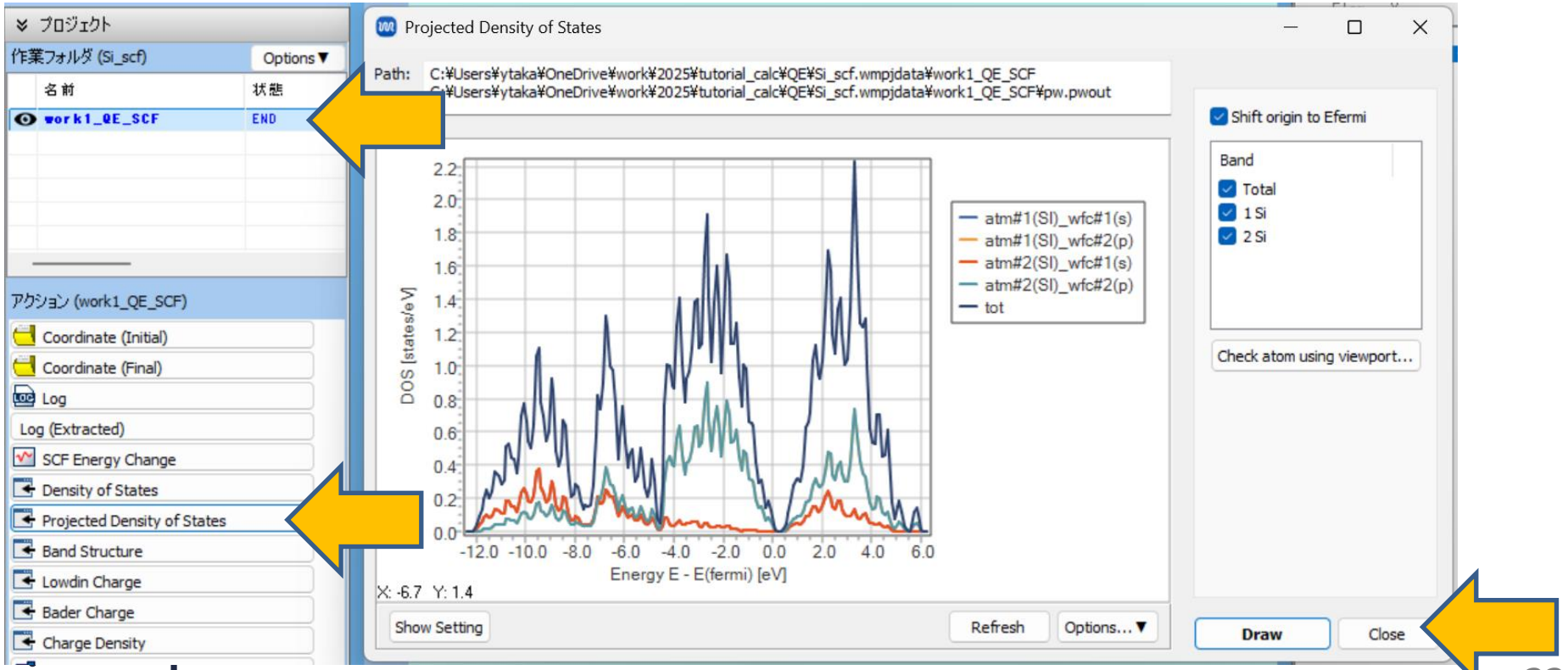




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# III.結果解析　部分状態密度

1. **プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で対象となる作業フォルダ（ここではwork1_QE_SCFとします）をクリックします。
2. **アクション**で**Projected Density of States**をクリックすると、**Projected Density of States**ウィンドウが開き、部分状態密度のプロットが出現します。
3. 確認したら**Close**をクリックします。

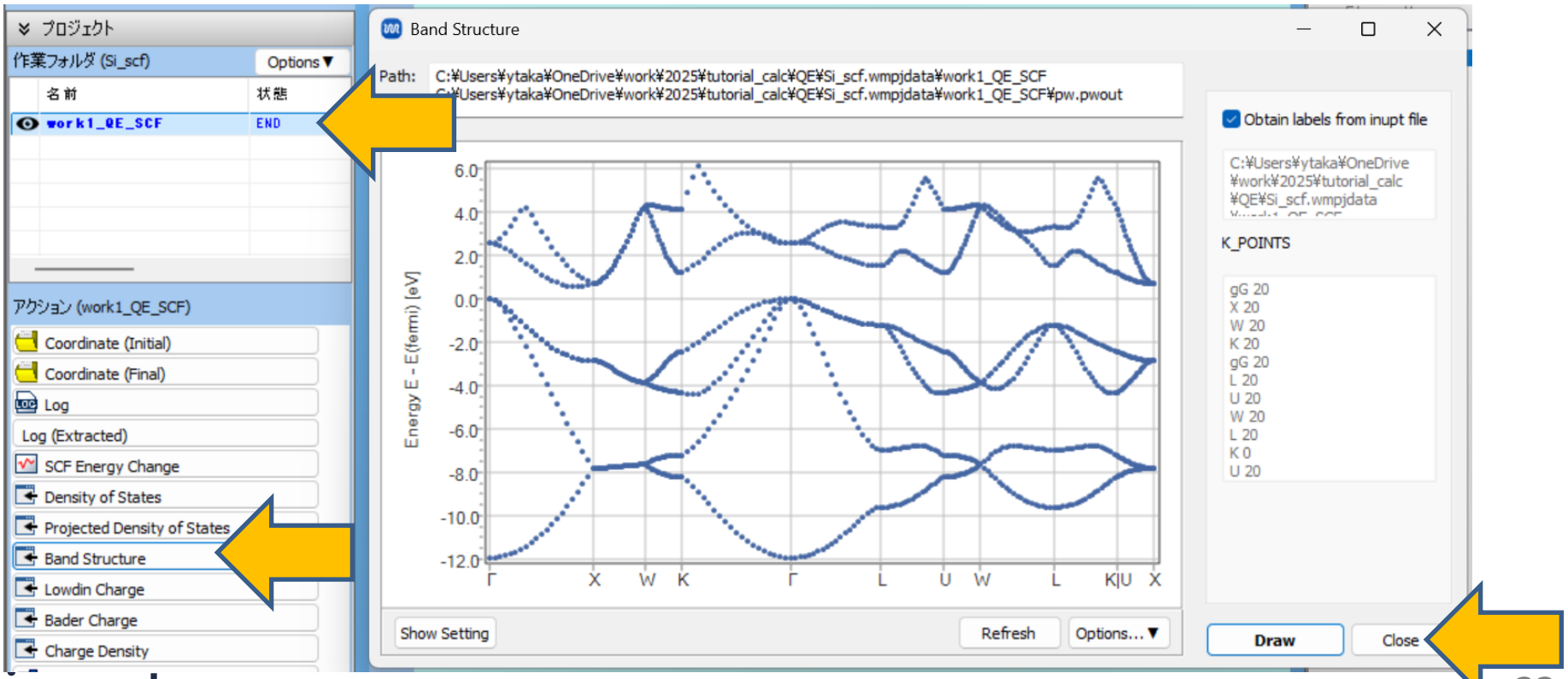




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# III.結果解析　バンド構造

1. **プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で対象となる作業フォルダ（ここではwork1_QE_SCFとします）をクリックします。
2. **アクション**で**Band Structure**をクリックすると、**Band Structure**ウィンドウが開き、バンド構造のプロットが出現します。
3. 確認したら**Close**をクリックします。

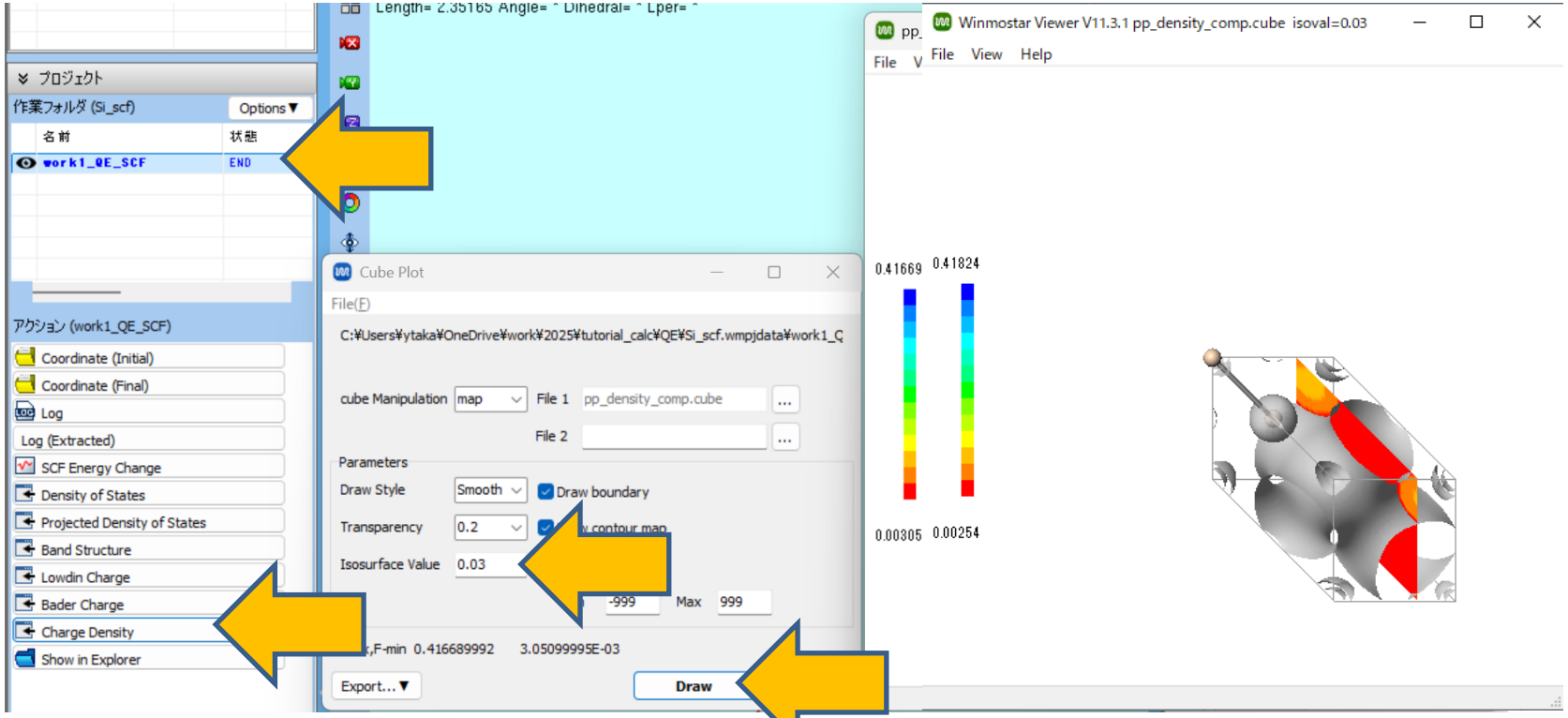




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# III.結果解析　電子密度

1. **プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で対象となる作業フォルダ（ここではwork1_QE_SCFとします）をクリックします。
2. **アクション**で**Charge Density**をクリックすると、自動処理が数秒流れたのち**Winmostar Viewer**が起動し電子密度が3次元表示されます。等高線の設定を変更したい場合は**Cube Plot**ウィンドウの**Isosurface Value**を変更し**Draw**をクリックします。



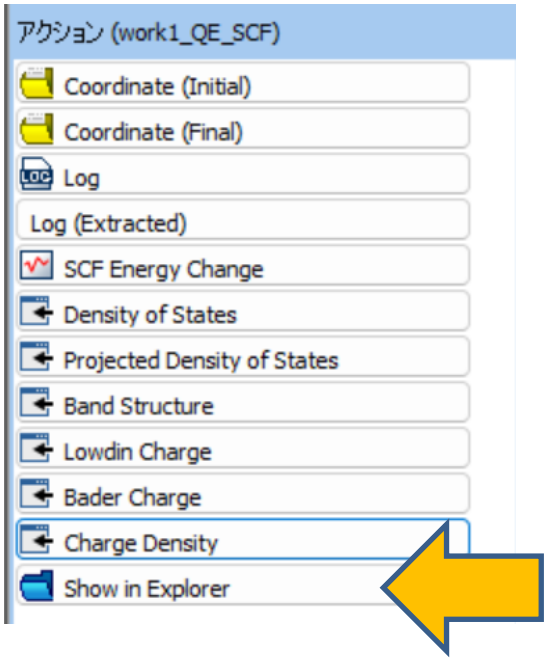


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# 補足　電子密度のWinmostar以外を使った可視化

VESTAなど他のプログラムを使用して電子密度を可視化することが可能です。

1. **ツール｜環境設定｜基本｜Cubeファイルの表示に外部ビューワを使用**にチェックを入れ、**プログラムパス｜Cube Viewer**でVESTAの実行ファイルを選択すると、P.24の手順でVESTAが開きます。
2. **アクション**の**Show in Explorer**をクリックし、作業フォルダ内の`pp_density_comp.cube`をVESTAなどで明示的に開きます。





Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

# 最後に

- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

ユーザマニュアル

Winmostar 講習会の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、Winmostar導入講習会、Winmostar基礎講習会、または個別講習会の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まずよくある質問を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.