

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO Nudged Elastic Band法

V11.12.0

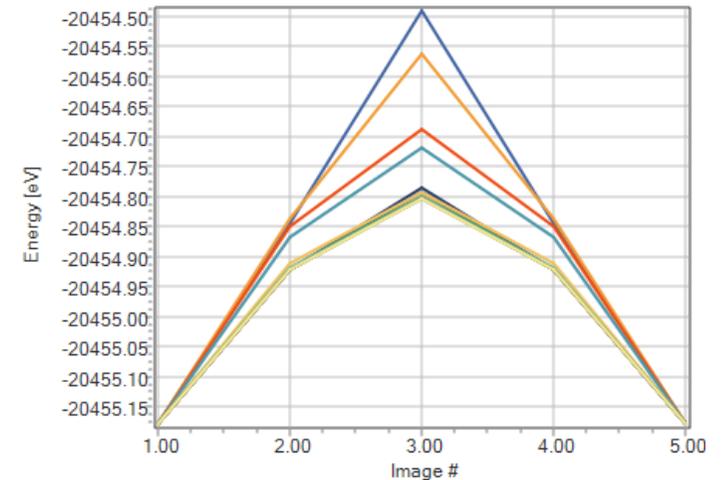
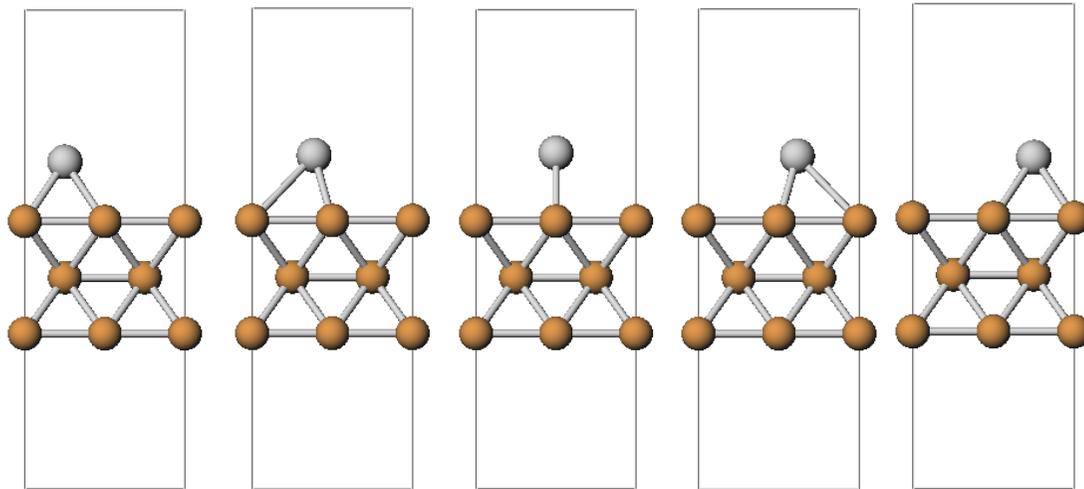
2025年4月30日 株式会社クロスアビリティ

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

- Cu (100) 表面上のAg原子のホローサイト間のジャンプのエネルギー変化をNEB(Nudged Elastic Band)法で計算します。本チュートリアルでは、5点のImageでジャンプの過程を扱います。



注意点：

- 本チュートリアルでは、短時間で全体の流れを把握するという目的のため、スラブの表面構造の緩和などを省略し、システムサイズも小さく設定しています。
- Quantum ESPRESSOの計算方法及び計算設定内容の詳細な説明は、次の弊社記事をご覧ください。https://qiita.com/xa_member

動作環境設定

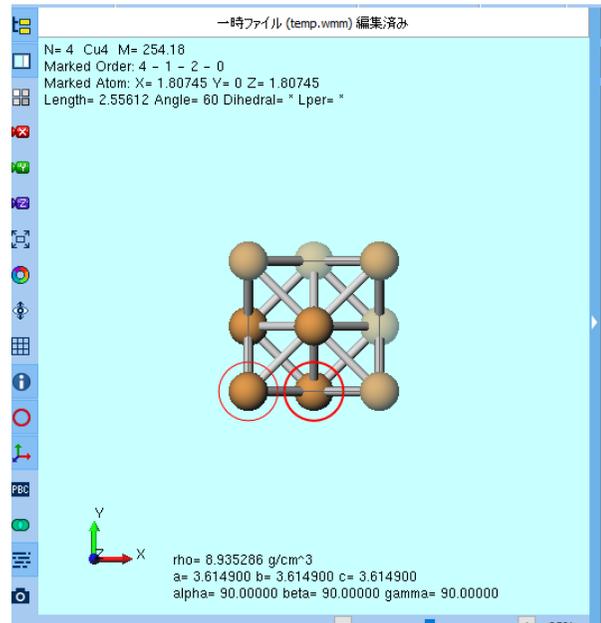
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
 - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum ESPRESSOが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のQuantum ESPRESSOを利用したい方は、別途[Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定](#)が必要です。

I. 系のモデリング (始状態)

基本的な操作方法は[QE基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

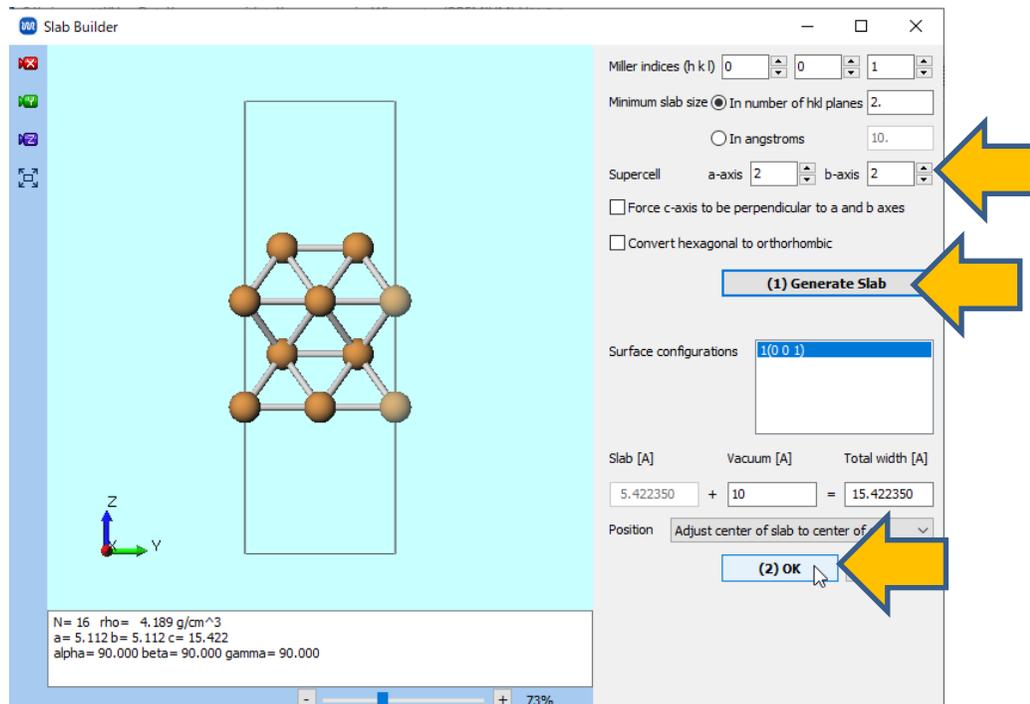
原子・分子吸着モデルの作成方法は[分子吸着モデルチュートリアル](#)を参照してください。

1. **ファイル | 新規プロジェクト**をクリックし、**プロジェクト名**に「cu_ag」と入力して**保存**をクリックします。
2. **ファイル | インポート | Samplesファイル | cu.cif**をクリックし**破棄して読み込み**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。



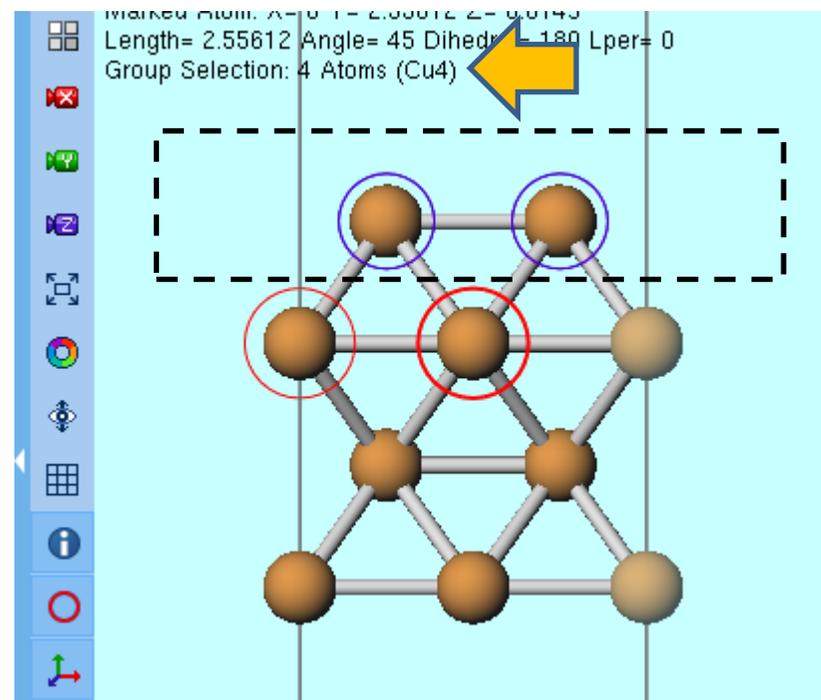
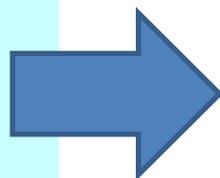
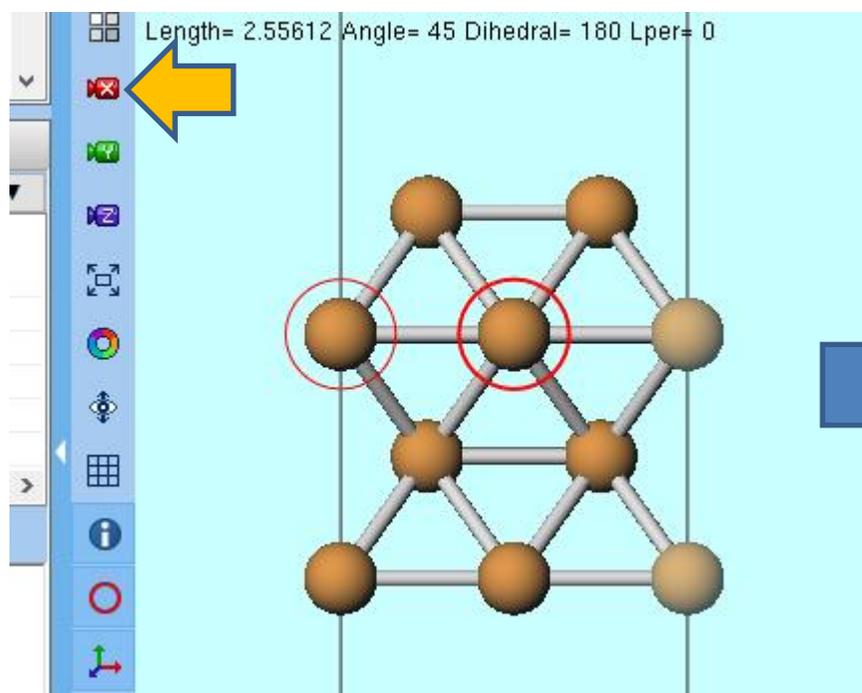
I. 系のモデリング (始状態)

1. 固体 | スラブを作成をクリックします。
2. Supercellのa-axisとb-axisを「2」に変更し、**(1) Generate Slab**をクリックします。
 - 本来、a-axisとb-axisはより大きい値であることが望ましいです
3. **(2) OK**をクリックします。
4. 「正常にスラブが作成されました」と表示されたら**OK**をクリックします。



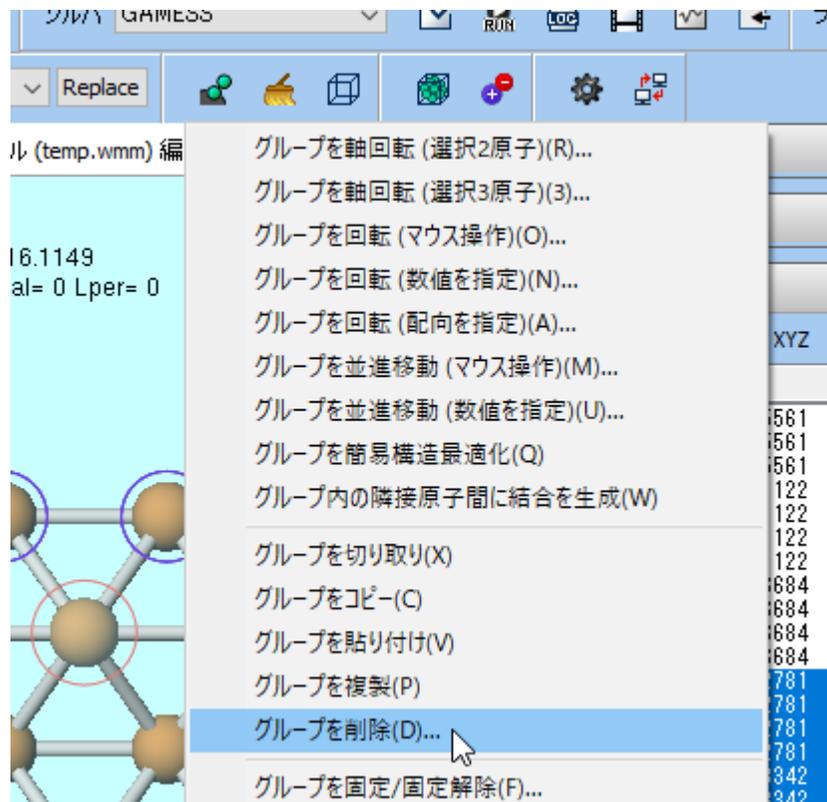
I. 系のモデリング (始状態)

1.  X軸方向から表示をクリックします。
2. スラブの上の1層をCtrl+ドラッグで矩形選択します。
3. 分子表示エリア上部に「Group Selection: 4 Atoms (Cu4)」と表示されるのを確認します。



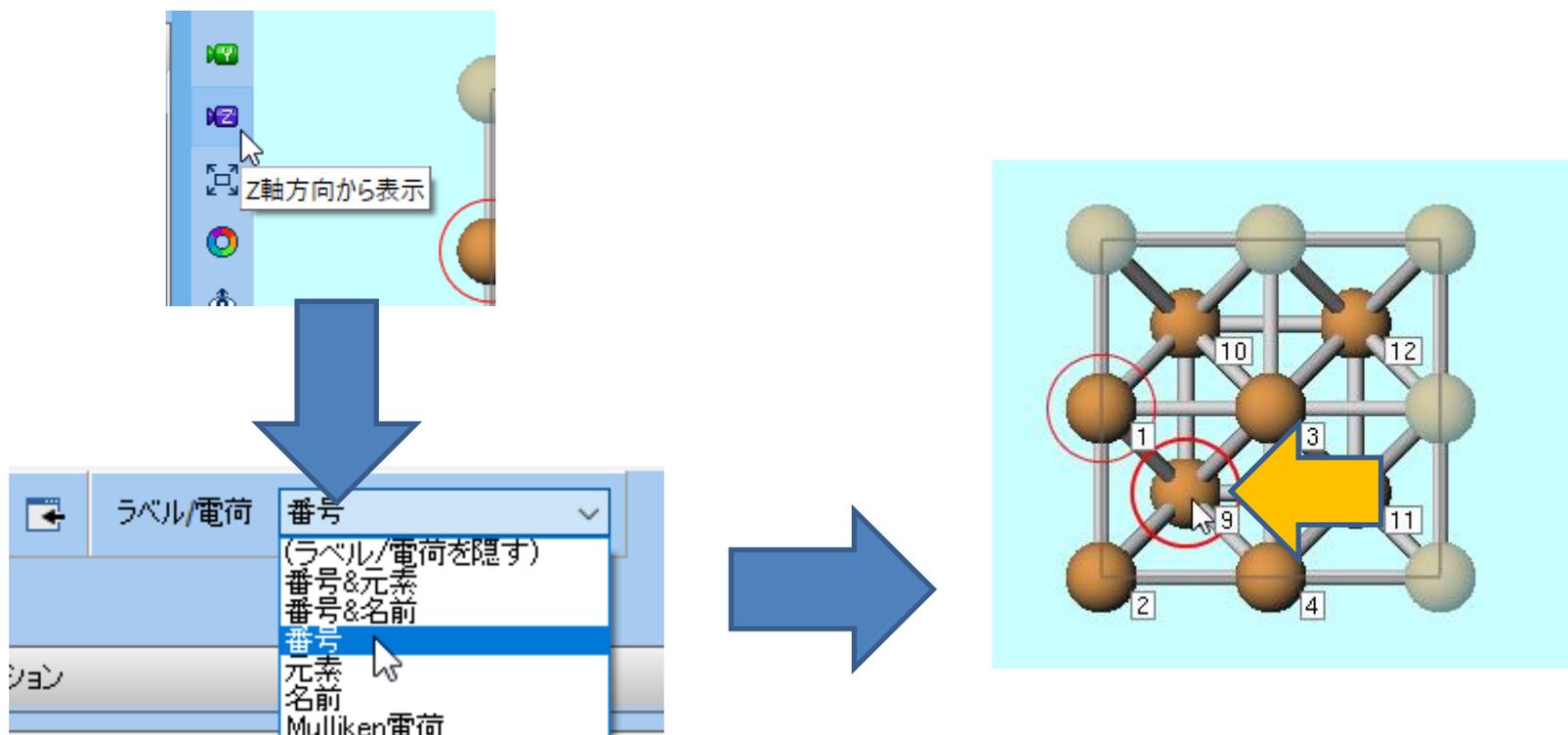
I. 系のモデリング (始状態)

1.  グループ編集 | グループを削除をクリックしDeleteをクリックします。



I. 系のモデリング (始状態)

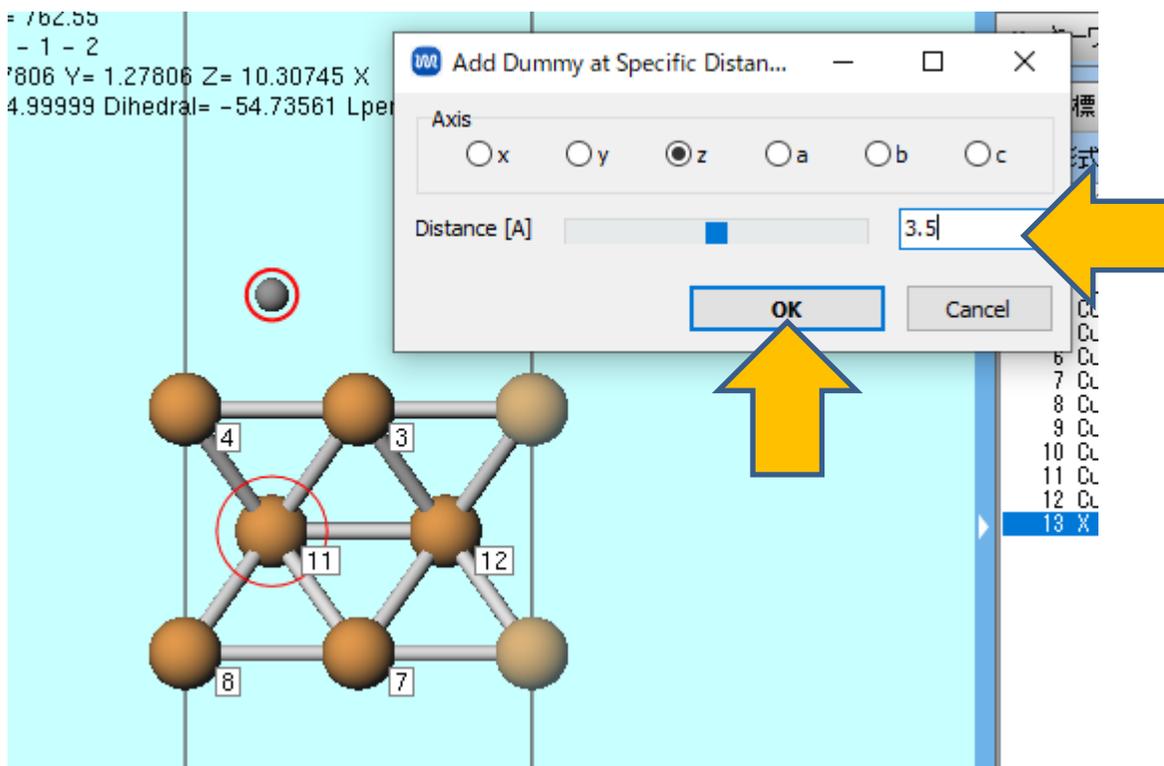
1.  Z軸方向から表示をクリックします。
2. ツールバーのラベル/電荷で「番号」を選択します。
3. 「9」と書かれた原子をクリックします。



I. 系のモデリング (始状態)

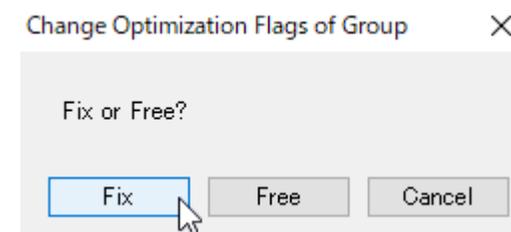
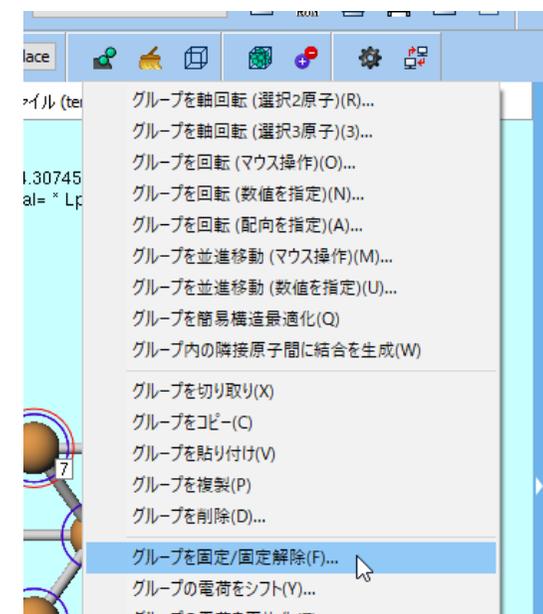
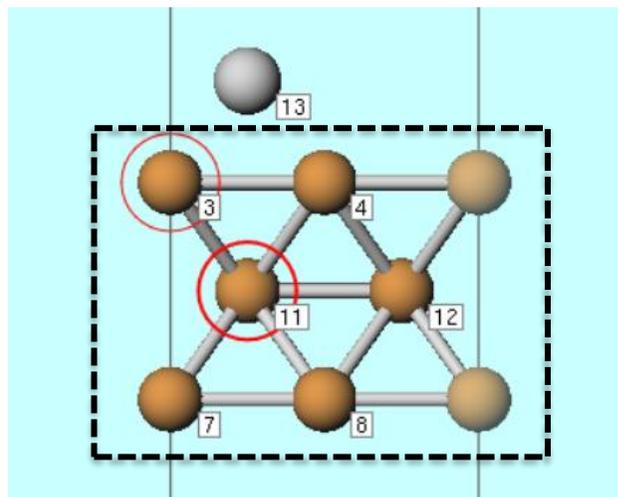
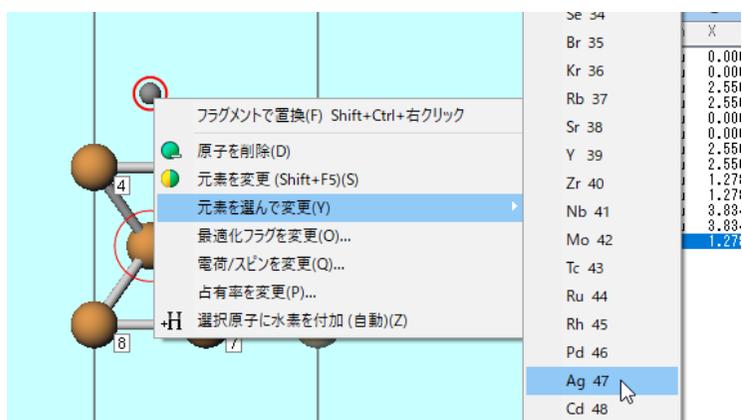
1.  X軸方向から表示をクリックします。
2. 編集 | 原子を追加 | ダミー原子を指定距離に追加をクリックします。
3. Distanceに「3.5」と入力しOKをクリックします。

※任意の分子を吸着させたい場合はこの後MD | 分子を置換を使用します。(本書では不要)



I. 系のモデリング (始状態)

1. 下図の原子 (ダミー原子) を右クリックし**元素を選んで変更** | **Ag 47**をクリックします。
2. Cu3層全てをCtrl+ドラッグで矩形選択して、グループ選択をします。
3.  (グループ編集) | **グループを固定/固定解除**をクリックし**Fix**をクリックします。
4. **選択** | **グループ選択を解除**をクリックします。



I. 系のモデリング (始状態)

1. 座標表示エリアの表示形式のXYZにチェックを入れ、表示項目の最適化フラグにチェックを入れ、13番目の原子 (Ag) のみ「1」でそれ以外は「0」となっていることを確認します。

The screenshot shows a software window with a coordinate table and optimization settings. A yellow arrow points to the 'XYZ' radio button, and another yellow arrow points to the '最適化フラグ' checkbox.

Atom	X	Opt	Y	Opt	Z	Opt
1 Cu	0.0000	0	0.0000	0	8.6149	0
2 Cu	0.0000	0	2.5561	0	8.6149	0
3 Cu	2.5561	0	0.0000	0	8.6149	0
4 Cu	2.5561	0	2.5561	0	8.6149	0
5 Cu	0.0000	0	0.0000	0	5.0000	0
6 Cu	0.0000	0	2.5561	0	5.0000	0
7 Cu	2.5561	0	0.0000	0	5.0000	0
8 Cu	2.5561	0	2.5561	0	5.0000	0
9 Cu	1.2781	0	1.2781	0	6.8074	0
10 Cu	1.2781	0	3.8342	0	6.8074	0
11 Cu	3.8342	0	1.2781	0	6.8074	0
12 Cu	3.8342	0	3.8342	0	6.8074	0
13 Ag	1.2781	1	1.2781	1	10.3074	1

属性: 最適化フラグ 電荷 名前 スピン密度

属性: 番号 13 元素 Ag

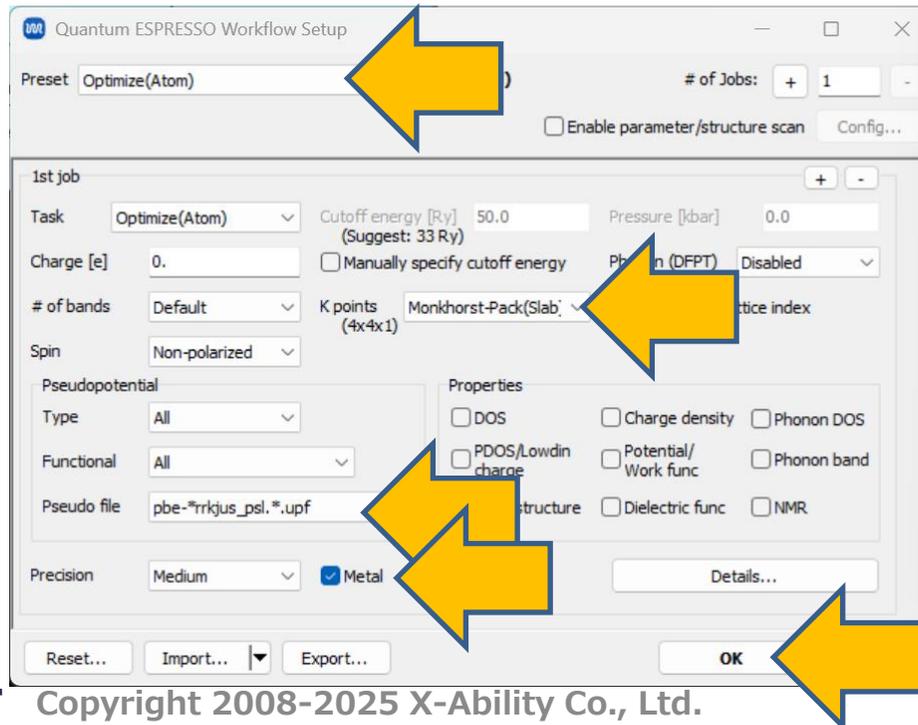
II. 計算の実行（始状態）

1. ソルバでQuantum ESPRESSOを選択します。
2. ワークフロー設定ボタンをクリックします。



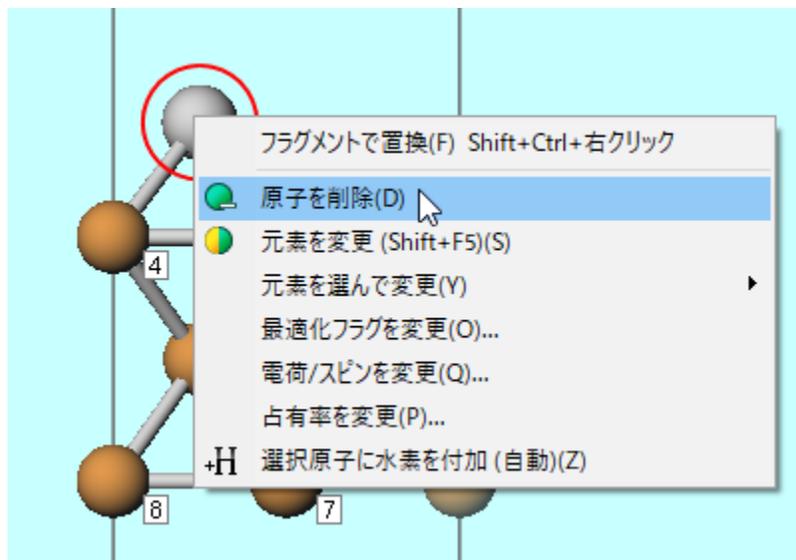
II. 計算の実行（始状態）

1. **Preset**を「Optimize(Atom)」に変更し、**Pseudo file**を「pbe-*rrkjus_psl.*.upf」に変更し、**Metal**にチェックを入れます。**K points**を「Monkhorst-Pack(Slab)」に変更します。
 - **Pseudo file**の選択肢に「pbe-*rrkjus_psl.*.upf」がない場合はP.5の手順で擬ポテンシャルファイルを入手します。
- (計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**Precision**を「Extra-low」、**K points**を「Gamma」に変更します。)
2. **OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。



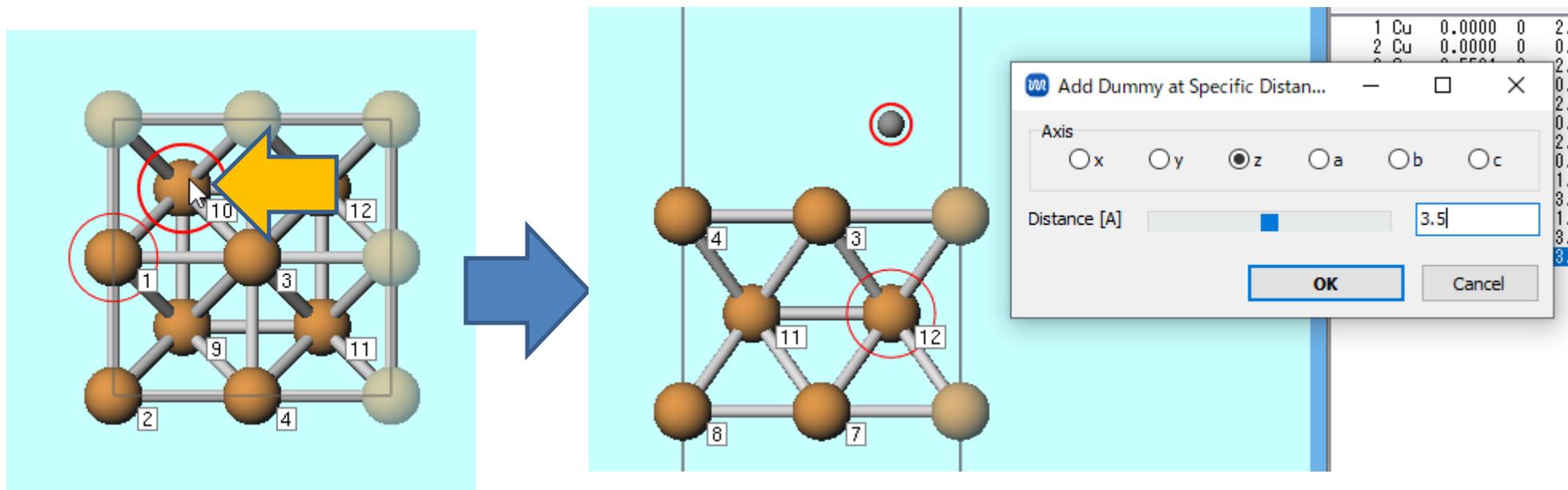
III.系のモデリング (終状態)

1. 始状態の計算途中でも構わないので、メインウィンドウに戻り、13番目のAg原子を右クリックし、**原子を削除**をクリックします。
2. 「Are you sure you want to delete 13Ag?」と聞かれたら**はい**をクリックします。



III.系のモデリング（終状態）

1.  Z軸方向から表示をクリックします。
2. 「10」と書かれた原子をクリックします。
3.  X軸方向から表示をクリックします。
4. 編集 | 原子を追加 | ダミー原子を指定距離に追加をクリックします。
5. Distanceに「3.5」と入力しOKをクリックします。



III.系のモデリング (終状態)

1. 下図の原子 (ダミー原子) を右クリックし元素を選んで変更 | Ag 47をクリックします。

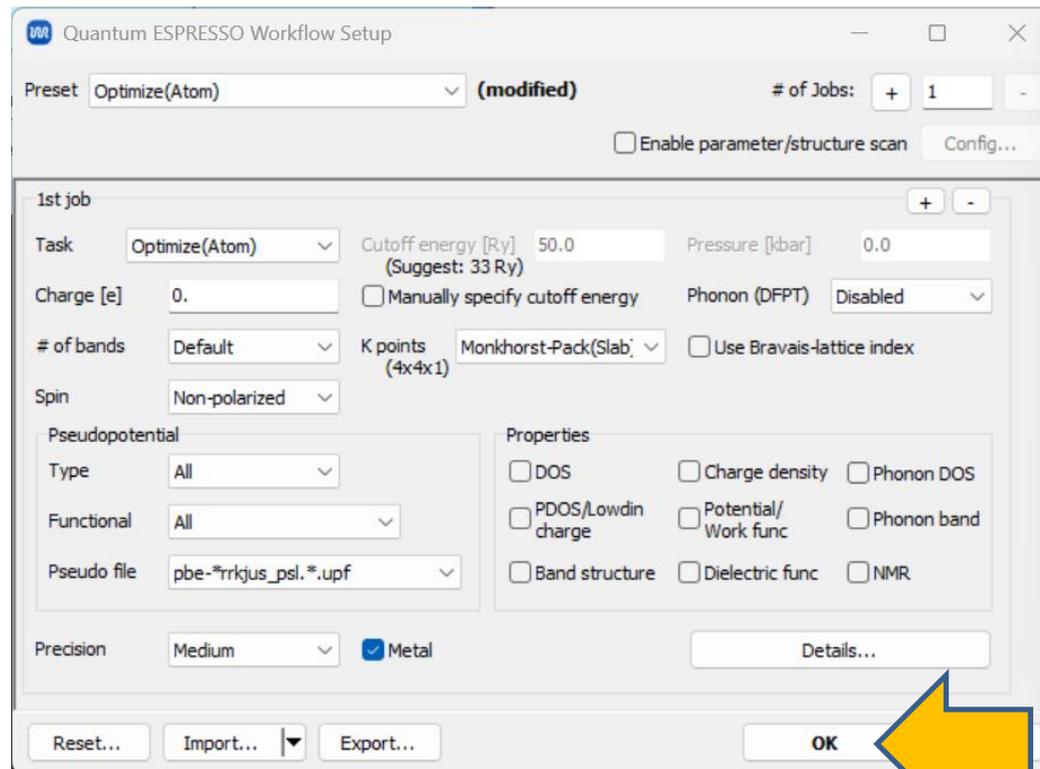
Context menu options:

- フラグメントで置換(F) Shift+Ctrl+右クリック
- 原子を削除(D)
- 元素を変更 (Shift+F5)(S)
- 元素を選んで変更(Y)
- 最適化フラグを変更(O)...
- 電荷/スピンを変更(Q)...
- 占有率を変更(P)...
- +H 選択原子に水素を付加 (自動)(Z)

Rb 37	2.5561
	0.0000
Sr 38	2.5561
	0.0000
Y 39	2.5561
	0.0000
Zr 40	1.2781
	3.8342
Nb 41	1.2781
	3.8342
Mo 42	3.8342
Tc 43	
Ru 44	
Rh 45	
Pd 46	
Ag 47	
Cd 48	
In 49	

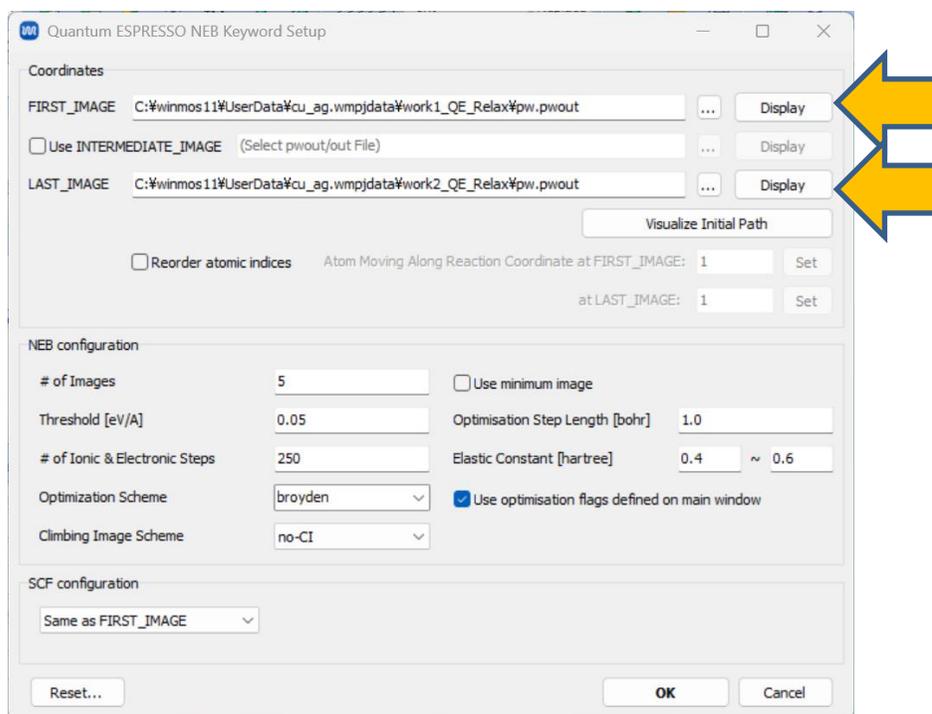
IV.計算の実行（終状態）

1. **ワークフロー設定**ボタンをクリックします。
2. 「継続ジョブを実行しますか？…」と聞かれたら**いいえ**をクリックします。
3. **Quantum ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウで**OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。



V. 計算の実行 (NEB計算)

1. 始状態、終状態の計算 (work1、work2) が終了して状態が**END**または**END(-)**に変化後、**固体 | Quantum ESPRESSO | Nudged Elastic Band | ワークフロー設定**をクリックします。
2. **FIRST_IMAGE**の…ボタンをクリックし、work1_QE_Relaxのpw.pwoutを開きます。
3. **LAST_IMAGE**の…ボタンをクリックし、work2_QE_Relaxのpw.pwoutを開きます。
4. **# of Images**を「5」に変更します。



V. 計算の実行（NEB計算）

- （計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は# of Imagesを「3」、Thresholdを「5」に変更します。精度を落とさない場合は数時間～日程度時間が掛かります。）
 - SCFの計算条件は、SCF configurationからFIRSTもしくはLAST IMAGEで選択した計算と同じ条件となります。
1. **OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。

Quantum ESPRESSO NEB Keyword Setup

Coordinates

FIRST_IMAGE C:\winmos11\UserData\cu_ag.wmpjdata\work1_QE_Relax\pw.pwout ... Display

Use INTERMEDIATE_IMAGE (Select pwout/out File) ... Display

LAST_IMAGE C:\winmos11\UserData\cu_ag.wmpjdata\work2_QE_Relax\pw.pwout ... Display

Visualize Initial Path

Reorder atomic indices Atom Moving Along Reaction Coordinate at FIRST_IMAGE: 1 Set
at LAST_IMAGE: 1 Set

NEB configuration

of Images 5 Use minimum image

Threshold [eV/A] 0.05 Optimisation Step Length [bohr] 1.0

of Ionic & Electronic Steps 250 Elastic Constant [hartree] 0.4 ~ 0.6

Optimization Scheme broyden Use optimisation flags defined on main window

Climbing Image Scheme no-CI

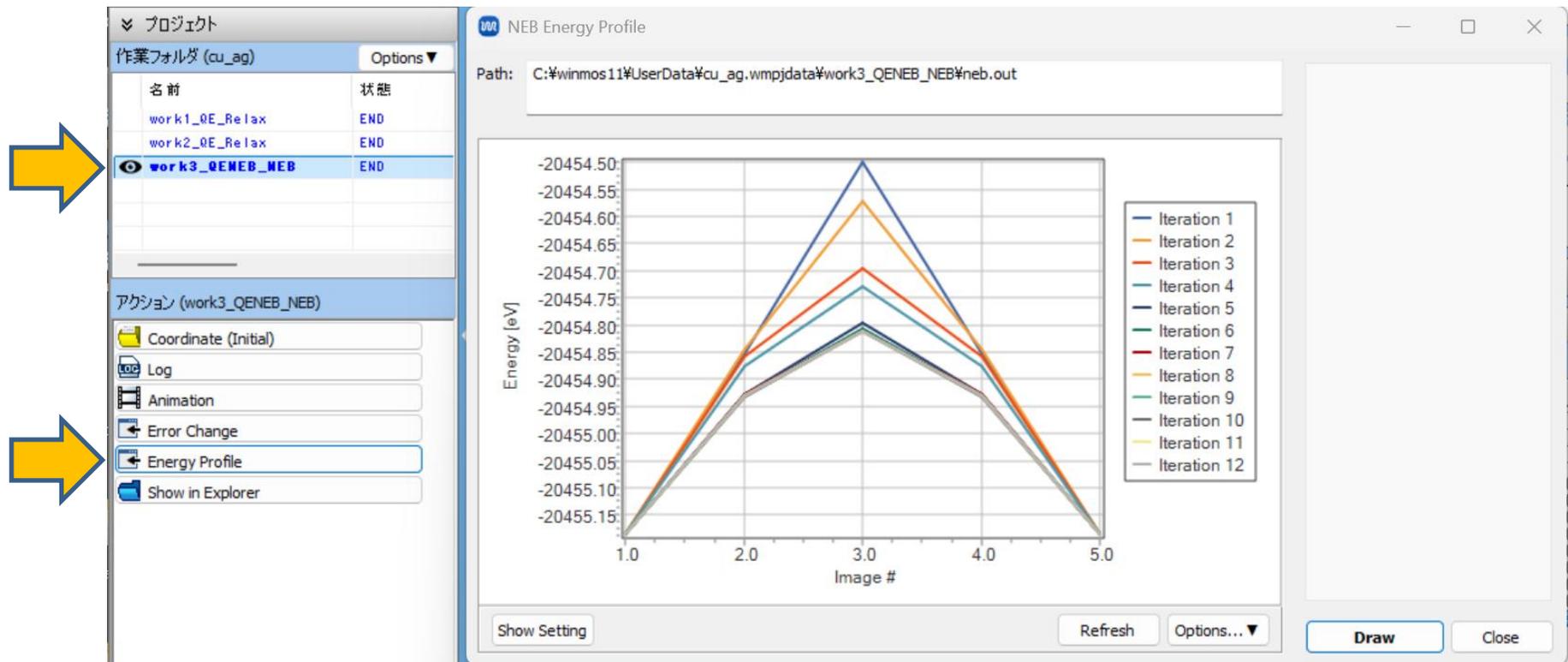
SCF configuration

Same as FIRST_IMAGE

Reset... OK

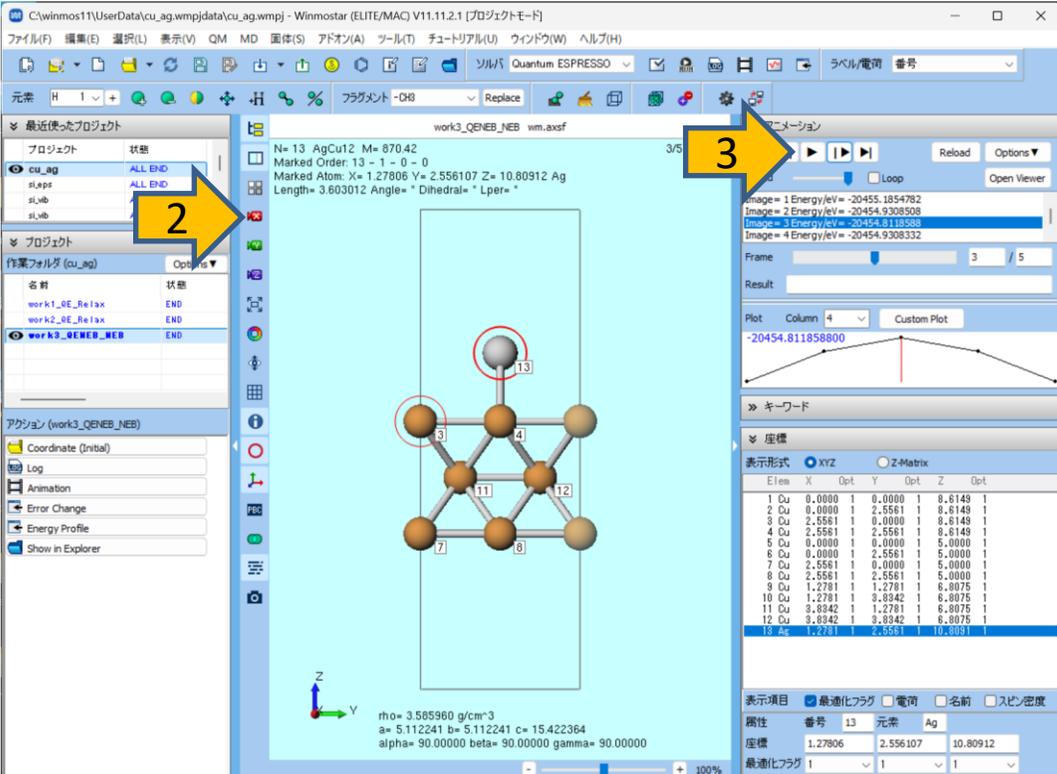
VI. 結果解析

1. NEB計算過程の各Iterationにおける各Imageのエネルギーを見たい場合は**作業フォルダ**で「work3_QENEB_NEB」をクリックし、**アクションのEnergy Profile**をクリックします。
2. 同様にNEB計算のエラーの変化を見たい場合は**アクションのError Change**をクリックします。



VI.結果解析

1. NEB計算（work3）が終了して状態が**END**または**END(-)**に変化後、**アクションのAnimation**をクリックします。
2. （X軸方向から表示）ボタンをクリックします。
3. アニメーション操作エリアの （Play/pause）をクリックするとNEB計算で最終的に得られた各Imageの原子配置を確認できます。



The screenshot shows the Winmostar software interface. On the left, the 'Action' panel has 'Animation' selected. A yellow arrow labeled '1' points to this button. In the center, a 3D ball-and-stick model of a Cu₁₃ cluster is shown in a perspective view. A yellow arrow labeled '2' points to the 'X-axis view' icon in the top toolbar. On the right, the 'Animation' control panel is visible, with a yellow arrow labeled '3' pointing to the play/pause button. Below the animation controls, a plot shows the energy profile of the NEB calculation, with a red vertical line indicating the current frame. At the bottom right, a table displays the coordinates of the atoms in the current frame.

Elem	X	Opt	Y	Opt	Z	Opt
1 Cu	0.0000	1	0.0000	1	8.6149	1
2 Cu	0.0000	1	2.5561	1	8.6149	1
3 Cu	2.5561	1	0.0000	1	8.6149	1
4 Cu	2.5561	1	2.5561	1	8.6149	1
5 Cu	0.0000	1	0.0000	1	5.0000	1
6 Cu	0.0000	1	2.5561	1	5.0000	1
7 Cu	2.5561	1	0.0000	1	5.0000	1
8 Cu	2.5561	1	2.5561	1	5.0000	1
9 Cu	1.2781	1	1.2781	1	6.8075	1
10 Cu	1.2781	1	3.8342	1	6.8075	1
11 Cu	3.8342	1	1.2781	1	6.8075	1
12 Cu	3.8342	1	3.8342	1	6.8075	1
13 Ag	1.2781	1	2.5561	1	10.8091	1

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