

 winmostar チュートリアル

# Quantum ESPRESSO

## 構造最適化計算

V11.12.0

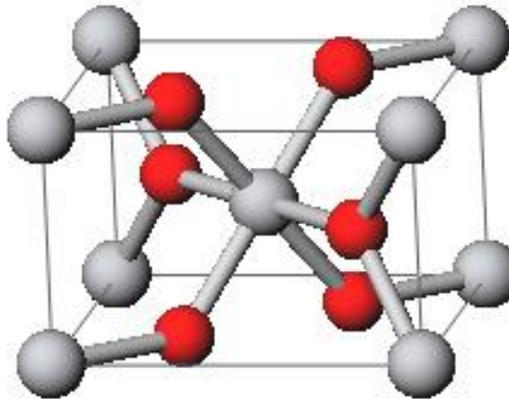
2025年4月30日 株式会社クロスアビリティ

# 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

- 本チュートリアルでは、ルチル型TiO<sub>2</sub>結晶の構造最適化計算を実施します。セルと原子核位置の両方を同時に最適化します。



注意点：

- k点の取り方、バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギーは計算結果に影響を与えます。
- ◆ 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](https://qiita.com/xa_member)

# 動作環境設定

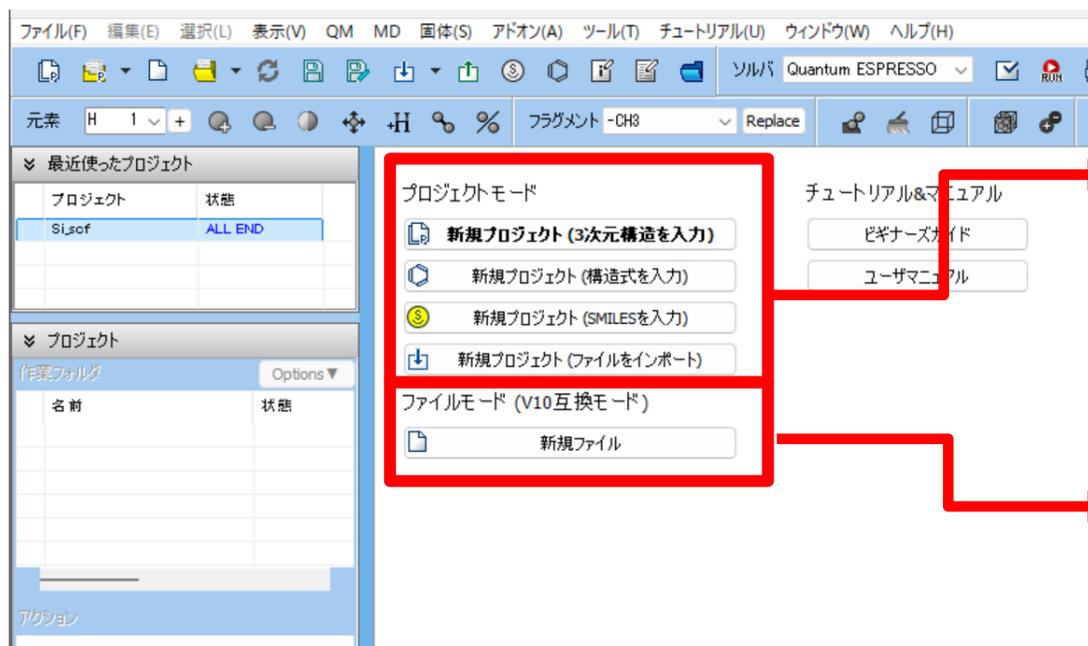
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum ESPRESSOが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のQuantum ESPRESSOを利用したい方は、別途[Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定](#)が必要です。

# 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。

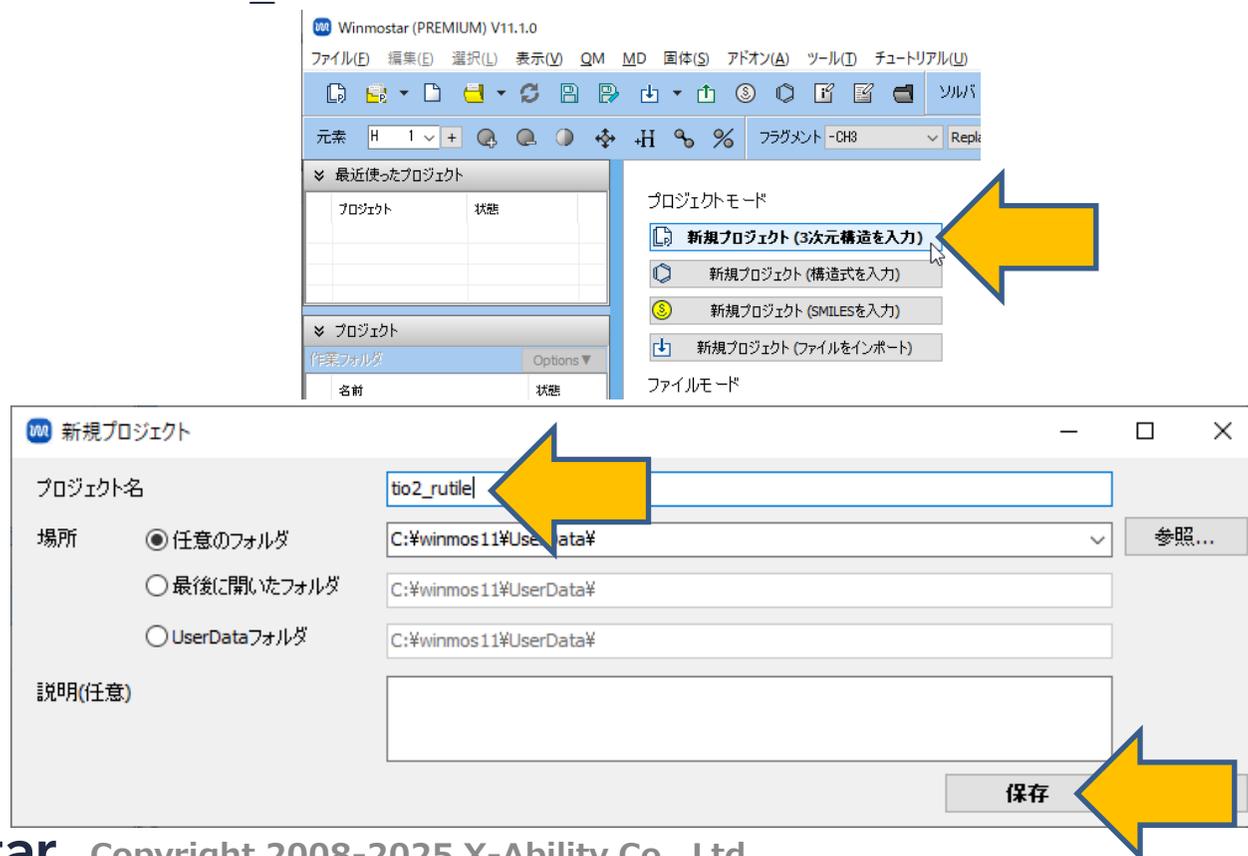
## ファイルモード

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。

# I. 系のモデリング

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。

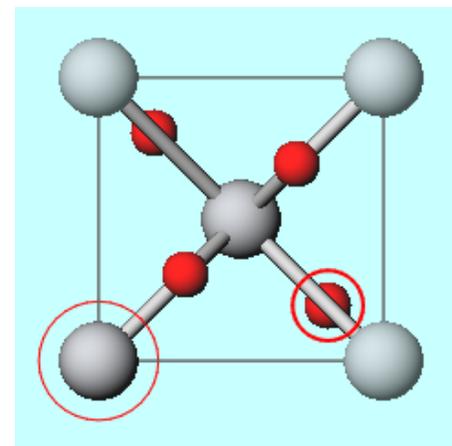
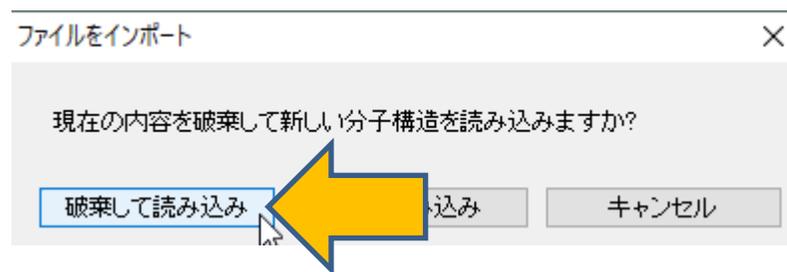
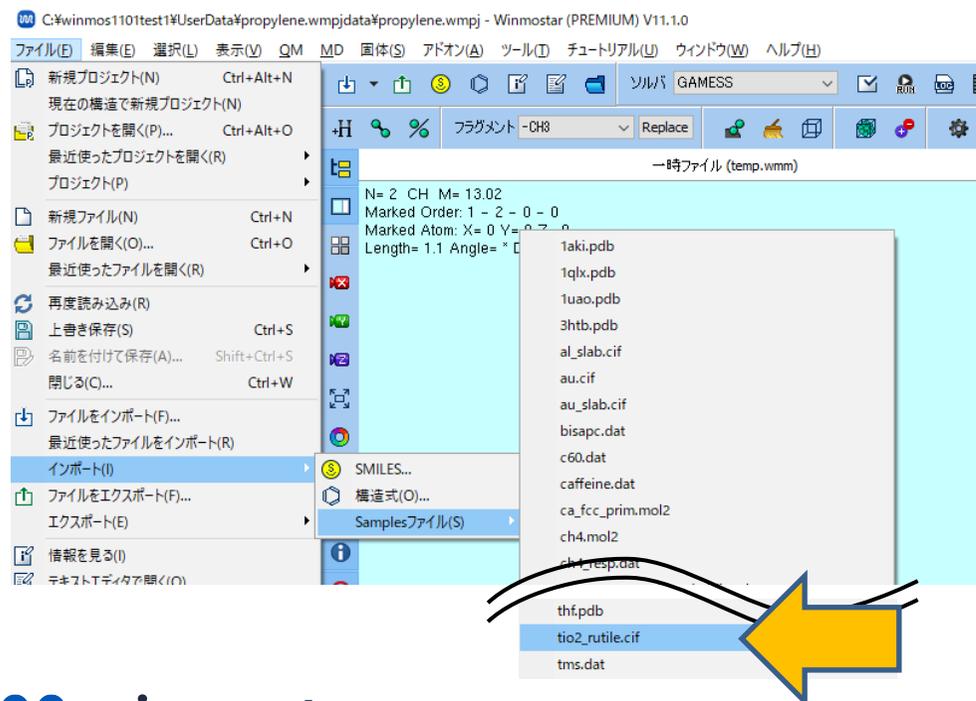
1. Winmostarを起動し、**新規プロジェクト（3次元構造を入力）**をクリックします。（すでに起動している場合は先に**ファイル | 閉じる**をクリックします。）
2. **プロジェクト名**に「tio2\_rutile」と入力し**保存**をクリックします。



# I. 系のモデリング

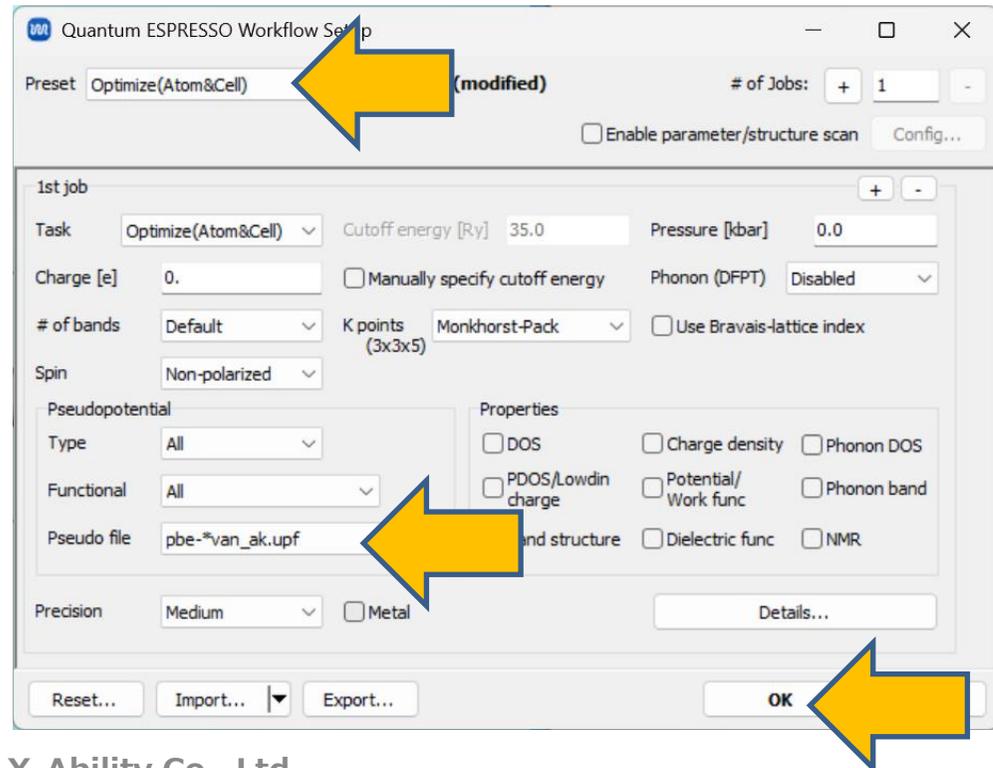
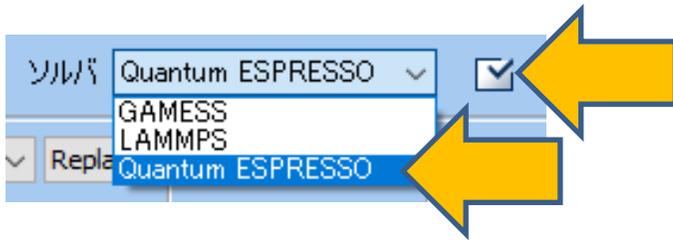
初期構造の作成方法の詳細は[Winmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法](#)を参照してください。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

1. **ファイル | インポート | Samplesファイル | tio2\_rutile.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。



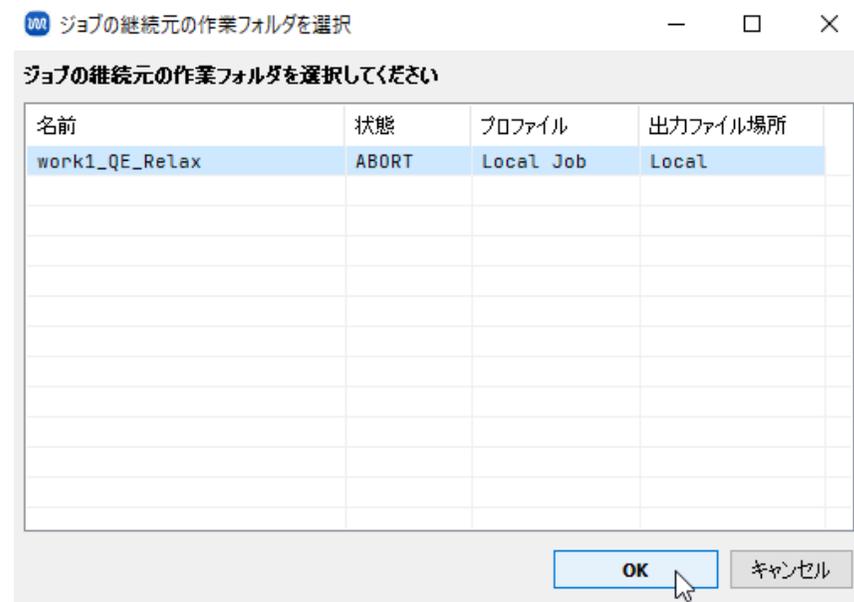
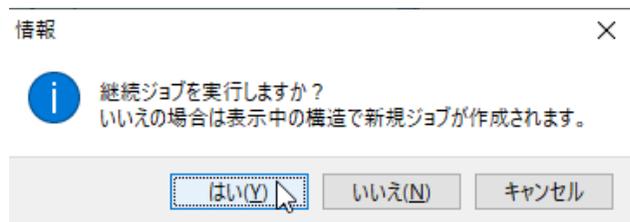
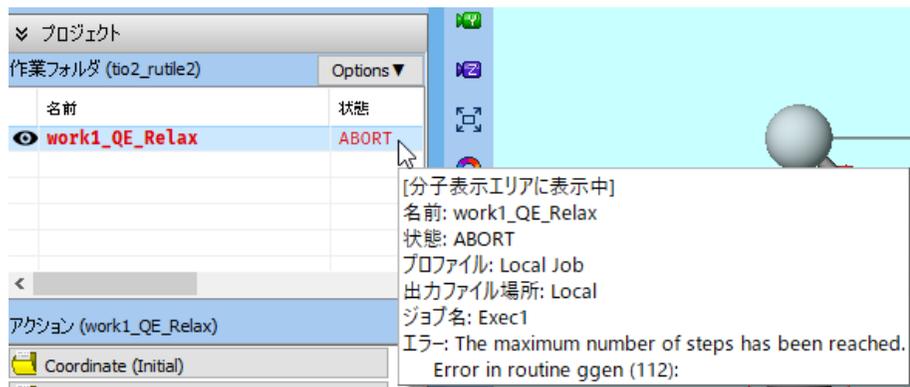
## II. 計算の実行

1. ソルバからQuantum ESPRESSOを選択し  (ワークフロー設定) をクリックします。
2. PresetからOptimize (Atom&Cell)を選択します。
3. Pseudo fileをpbe-\*van\_ak.upfに変更します。
4. 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「Low」に変更します。
5. 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。



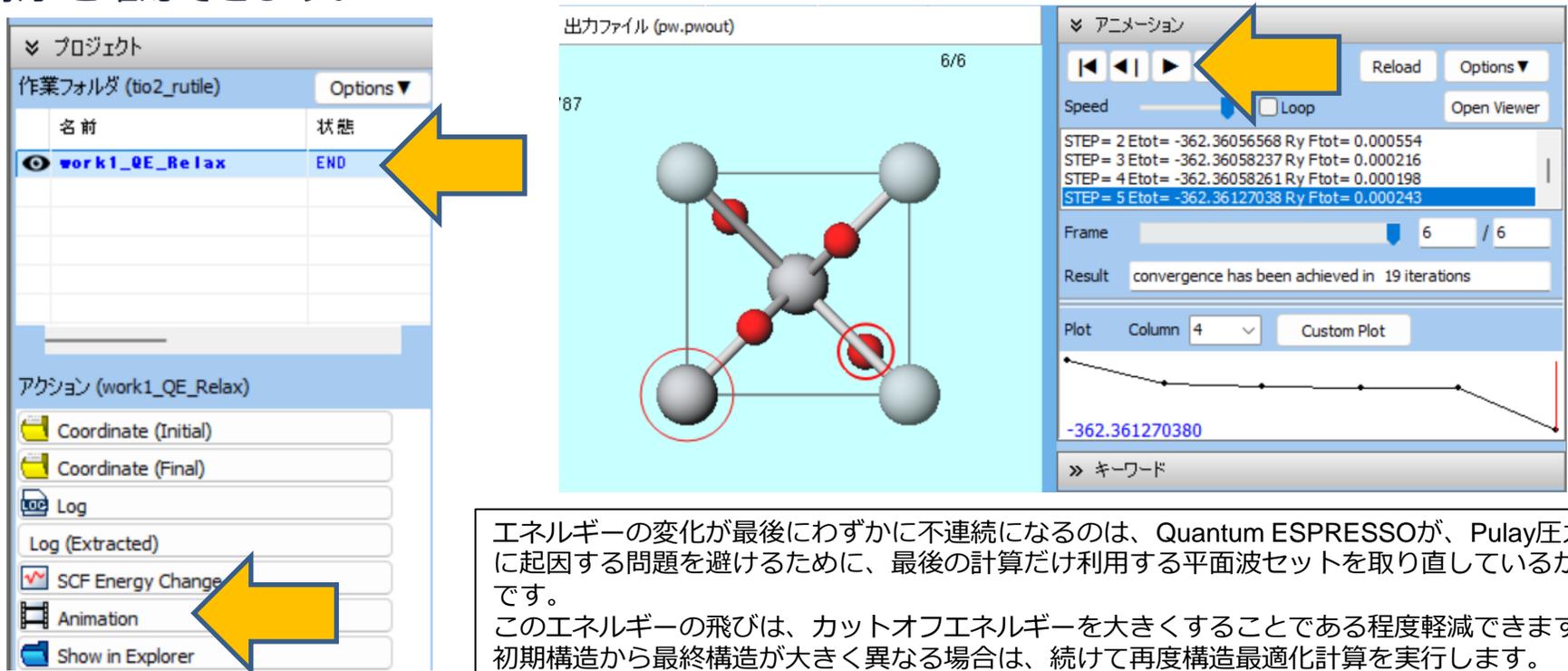
# 補足 構造最適化計算が収束せず継続する場合

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\_Relaxに重ねると「エラー：The maximum number of steps has been reached.」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。



# III.結果解析

1. 作業フォルダでwork1\_QE\_Relaxの状態が**END（青）**に変化した後、作業フォルダでwork1\_QE\_Relaxをクリックし**アクション**で**Animation**をクリックするとメインウィンドウ右側に**アニメーション操作エリア**が出現します。
2.  **（再生）** ボタンをクリックすると、メイン画面にセルと原子位置の両方が最適化される様子を確認できます。



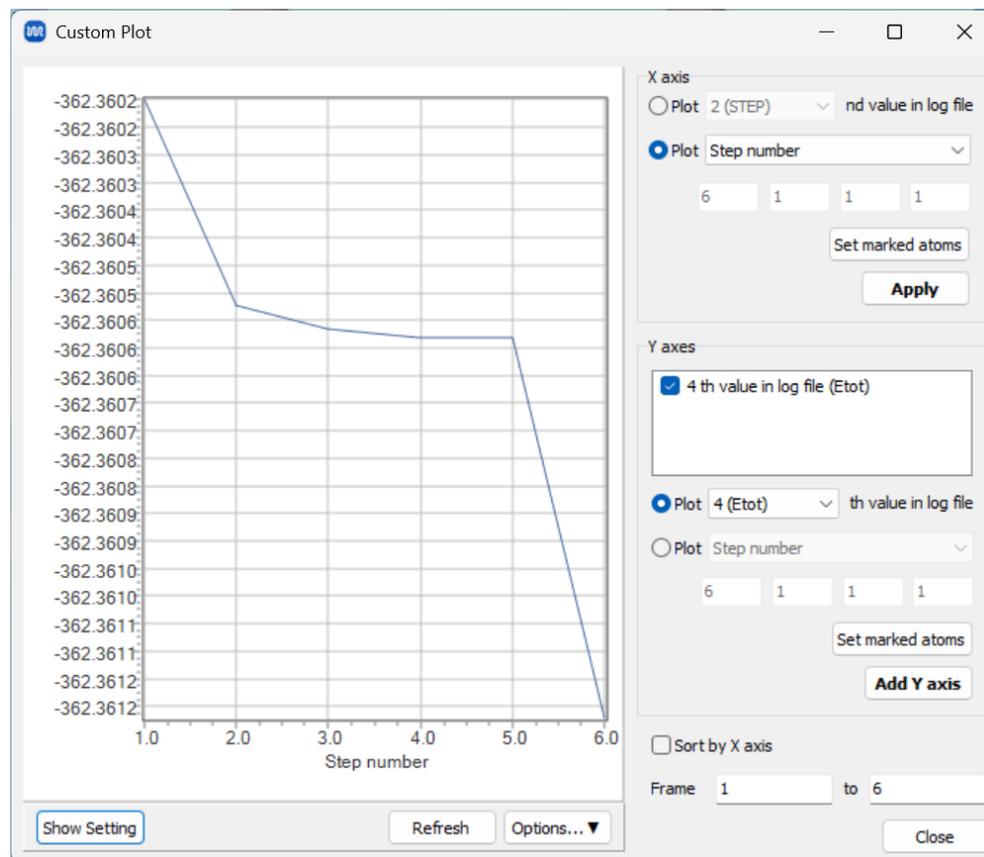
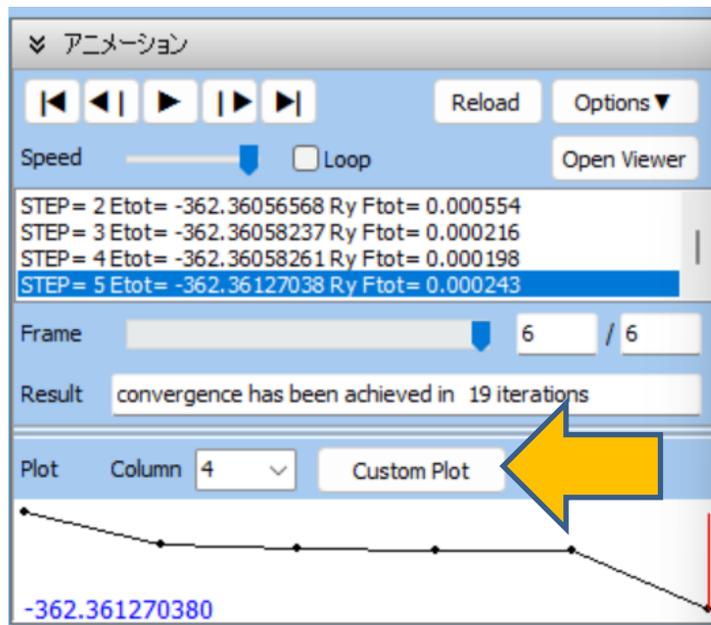
The screenshot displays the software interface. On the left, the 'プロジェクト' (Project) panel shows a table with columns '名前' (Name) and '状態' (Status). The entry 'work1\_QE\_Relax' is highlighted in blue and has the status 'END'. Below this, the 'アクション' (Action) panel for 'work1\_QE\_Relax' lists several options: 'Coordinate (Initial)', 'Coordinate (Final)', 'Log', 'Log (Extracted)', 'SCF Energy Change', 'Animation', and 'Show in Explorer'. A yellow arrow points from the 'Animation' button to the right. The central window, titled '出力ファイル (pw.pwout)', shows a 3D ball-and-stick model of a crystal structure with two atoms circled in red. The right panel, titled 'アニメーション' (Animation), contains playback controls (play, stop, refresh), a speed slider, a 'Loop' checkbox, and an 'Open Viewer' button. Below these are energy values for steps 2 through 5, a 'Frame' slider set to 6/6, and a 'Result' field stating 'convergence has been achieved in 19 iterations'. A plot area shows a line graph with a value of -362.361270380. A yellow arrow points from the play button in the animation panel to the left.

STEP	Etot	Ry	Ftot
2	-362.36056568		0.000554
3	-362.36058237		0.000216
4	-362.36058261		0.000198
5	-362.36127038		0.000243

エネルギーの変化が最後にわずかに不連続になるのは、Quantum ESPRESSOが、Pulay圧力に起因する問題を避けるために、最後の計算だけ利用する平面波セットを取り直しているからです。このエネルギーの飛びは、カットオフエネルギーを大きくすることである程度軽減できます。初期構造から最終構造が大きく異なる場合は、続けて再度構造最適化計算を実行します。

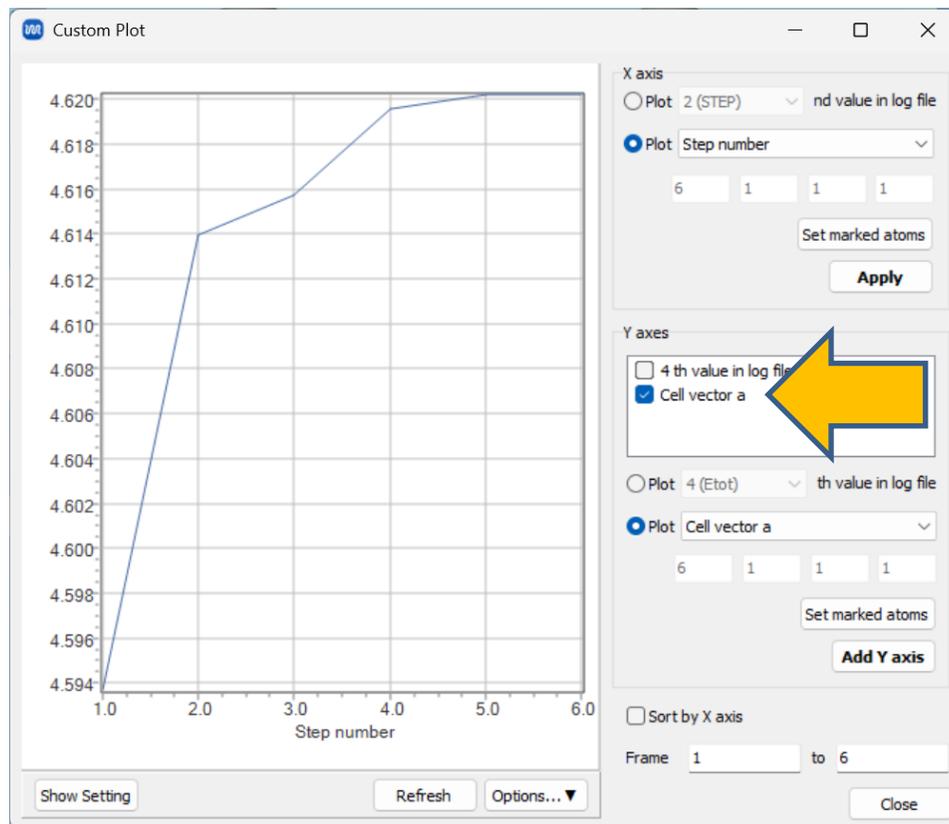
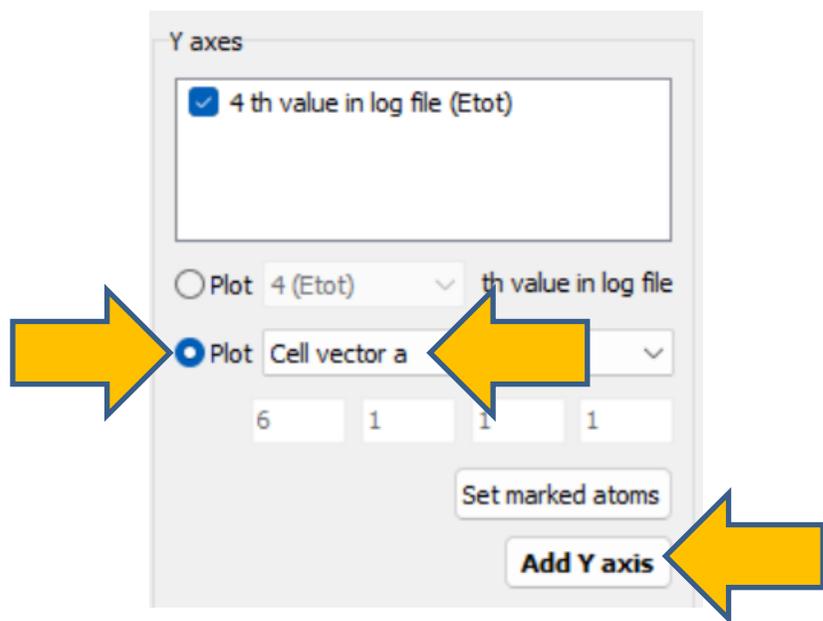
# III.結果解析

1. Custom PlotボタンをクリックするとCustom Plotウィンドウが開きます。



# III.結果解析

1. **Y axes**の2番目の**Plot**にチェックを入れ、プルダウンで**Cell vector a**を選択します。その後、**Add Y axes**ボタンをクリックすると、リストに**Cell vector a**が追加されます。
2. **Y axes**のリストのデフォルトでチェックが入っていた**4 th value in log file (Etot)**のチェックを外すと、a軸方向の格子定数が最適化されている様子がプロットされます。



# 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