winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO NMR&EFG計算

V11.12.0

2024年4月30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。

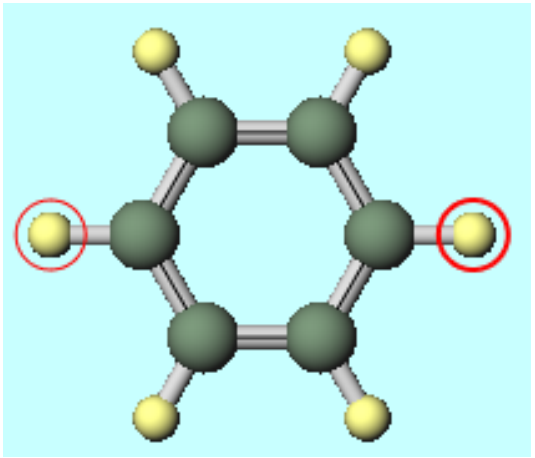
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

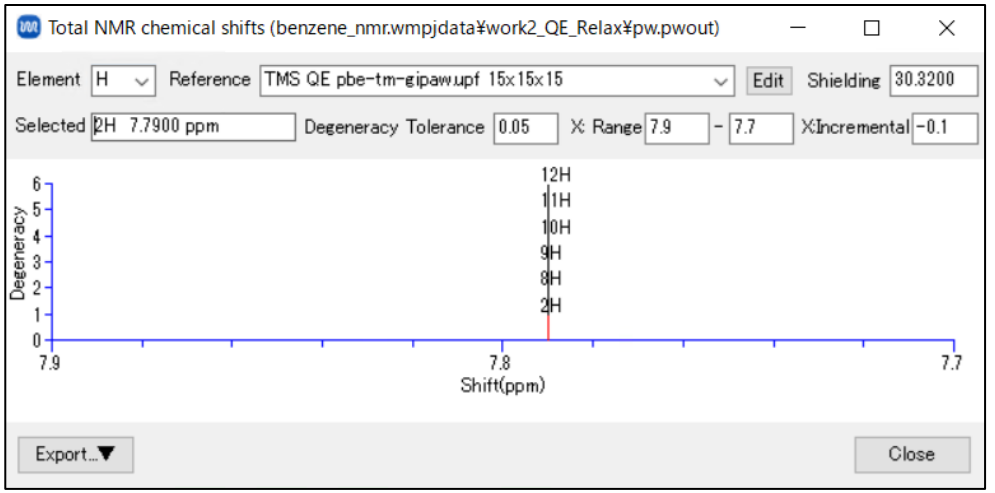
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - Winmostar導入講習会：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - Winmostar基礎講習会：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - 個別講習会：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まずよくある質問を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご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

- 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

- 本チュートリアルの実施にはWinmostar V11プロフェッショナル版エリートが必要です。
- PBE汎関数、ノルム保存型擬ポテンシャルを使ったベンゼン分子の構造最適化、NMR及びEFG計算の実施手順を示します。^{1}H及び^{13}C NMR化学シフト算出のため、基準物質のテトラメチルシランも計算します。NMR、EFG計算では、実行するGIPAWプログラム用の擬ポテンシャルファイルのみ使用可能です。





注意点：

- k点の取り方、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。本チュートリアルではすぐに結果を取得できるよう、精度を落とした設定を用います。
- 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

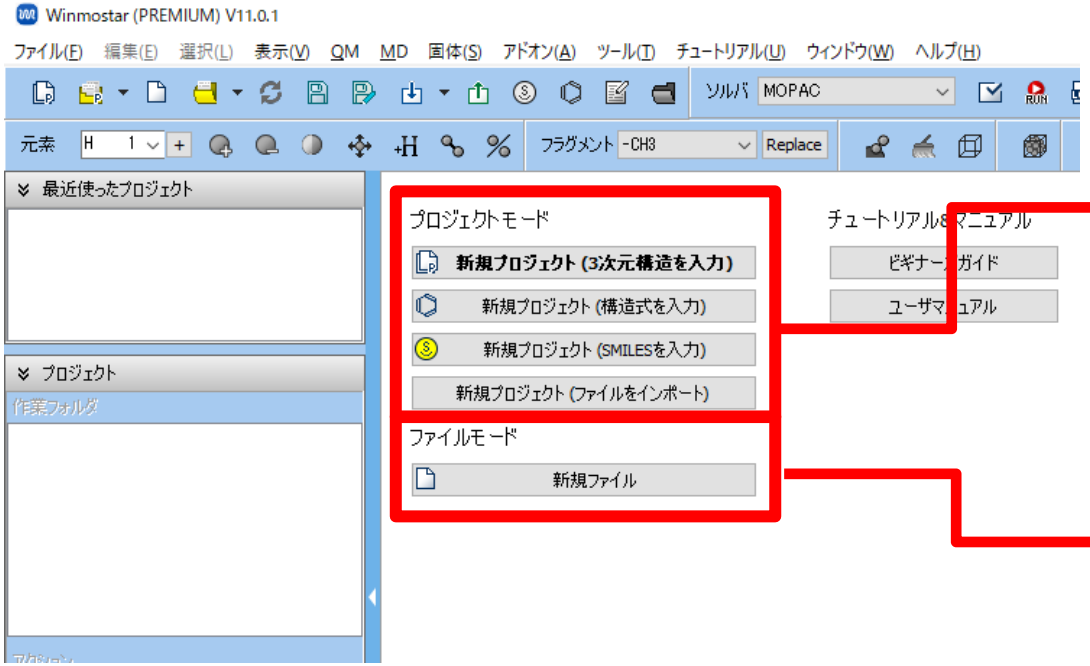
- Winmostar　V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM　2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum　ESPRESSOが同梱されています。

- 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。



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。

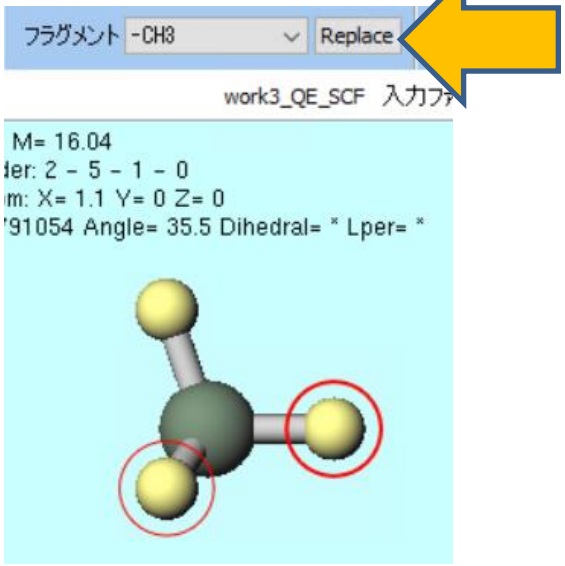
ファイルモード
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

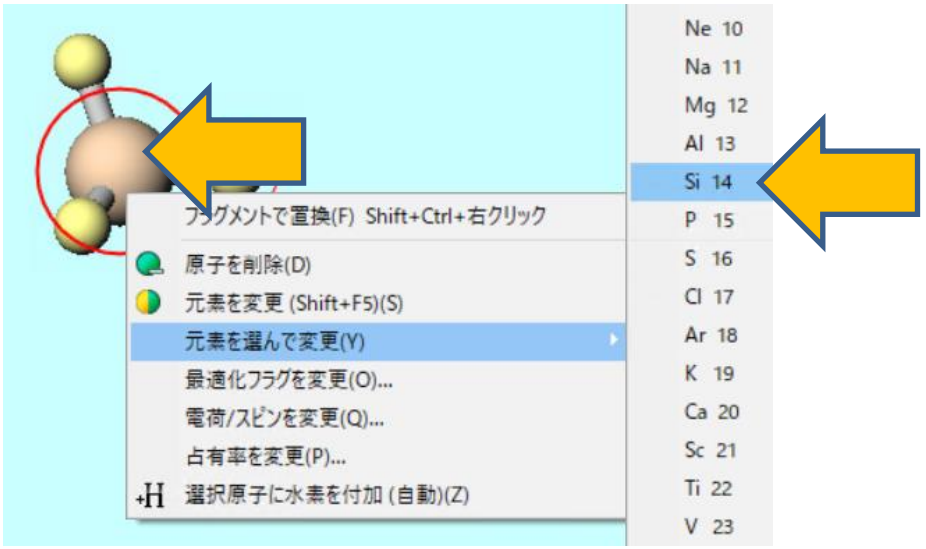
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

I. 系のモデリング（テトラメチルシラン）

- 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。
- 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。

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「benzene_nmr」と入力し**保存**をクリックします。
3. **フラグメント**を「-CH3」に変更し**Replace**をクリックしメタンを作成します。
4. 炭素原子を右クリックして、**元素を選んで変更｜Si 14**をクリックしシランを作成します。

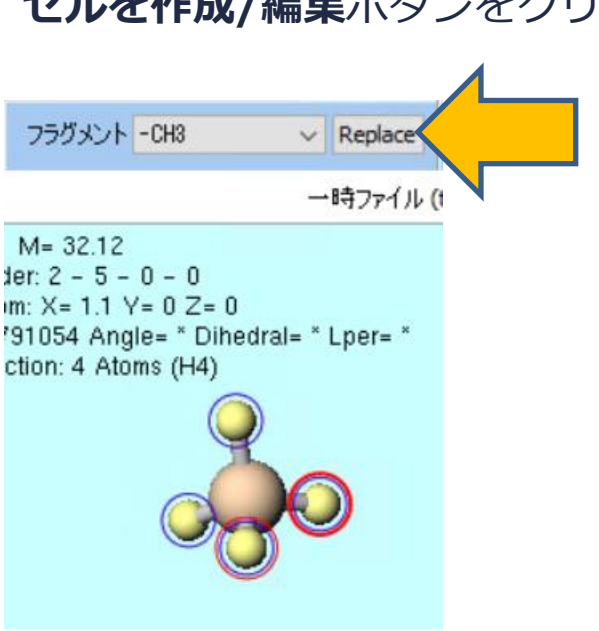


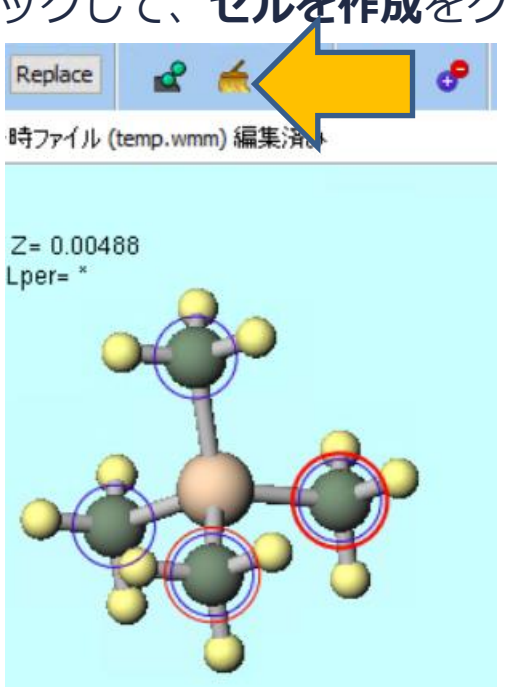


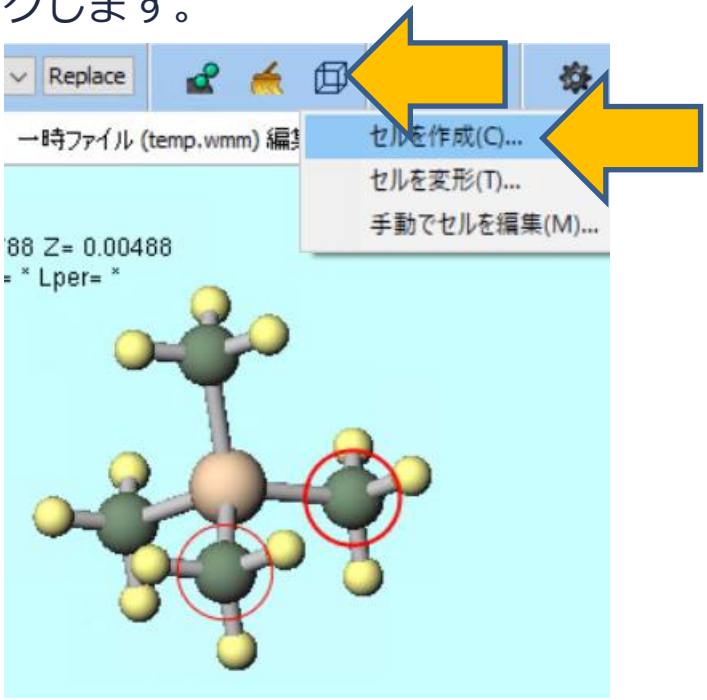
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

I. 系のモデリング（テトラメチルシラン）

1. 分子の近くを左クリックしたままマウスを動かして、全ての水素原子が確認できるように回転させます。
2. **Ctrl**キーを押しながら全ての水素原子を左クリックして、青丸のグループ選択状態にします。
3. **Replace**をクリックしテトラメチルシランを作成します。
4. **簡易構造最適化**ボタンをクリックして、構造を調整します。
5. **セルを作成/編集**ボタンをクリックして、**セルを作成**をクリックします。



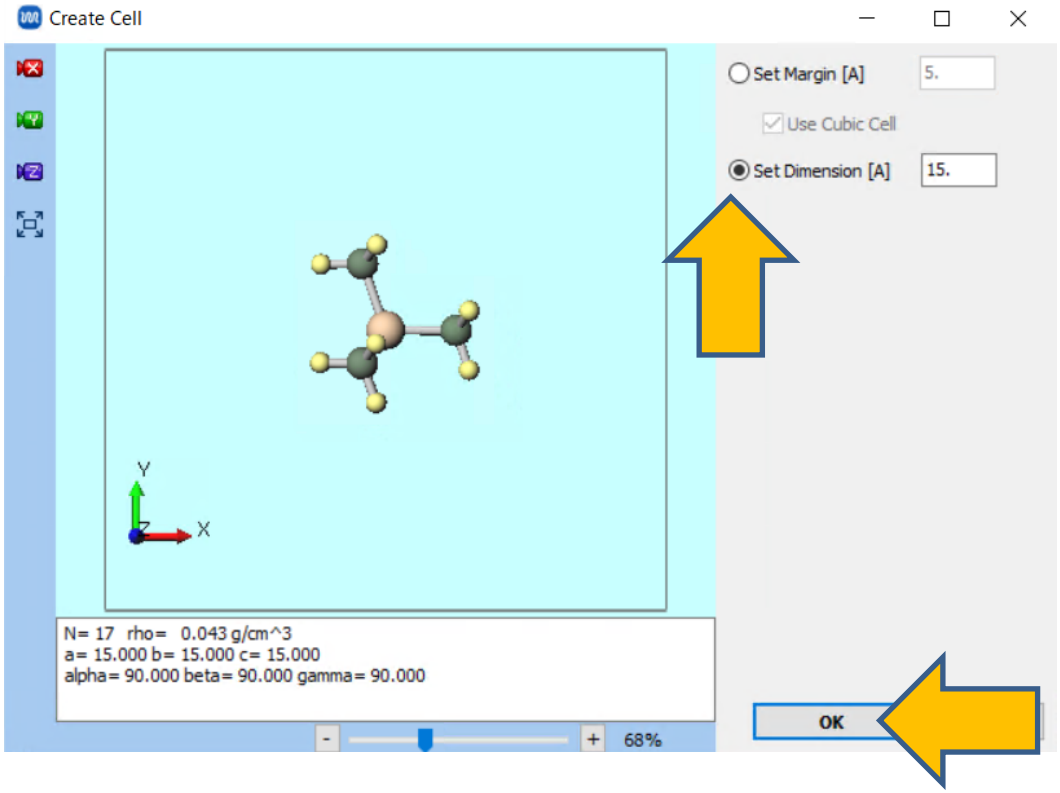


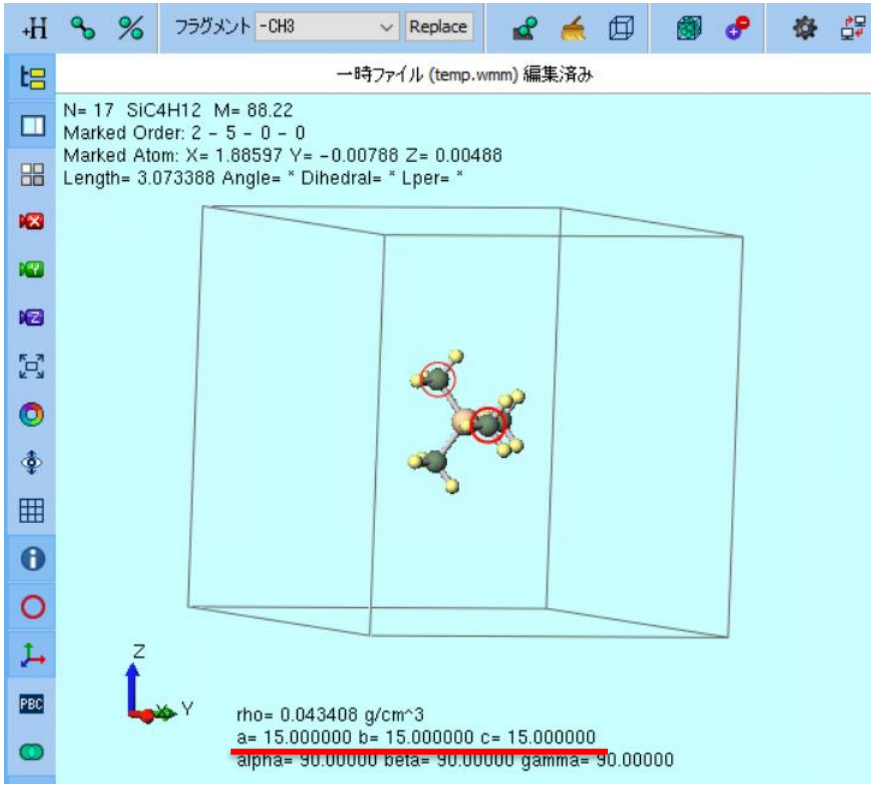


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

I. 系のモデリング（テトラメチルシラン）

1. **Create Cell**ウィンドウの**Set Dimension**を選択して、**OK**ボタンをクリックします。
2. 15Åx15Åx15Åのセルが作成されていることを確認します。

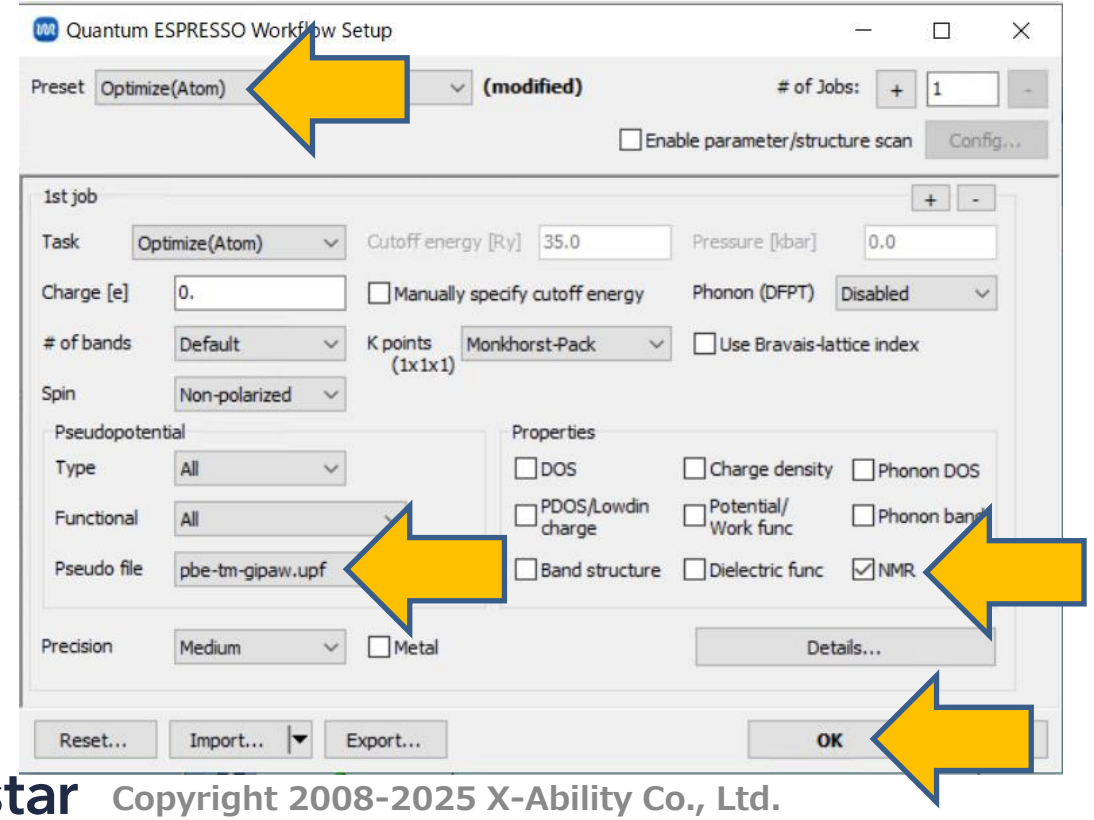




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行（テトラメチルシラン）

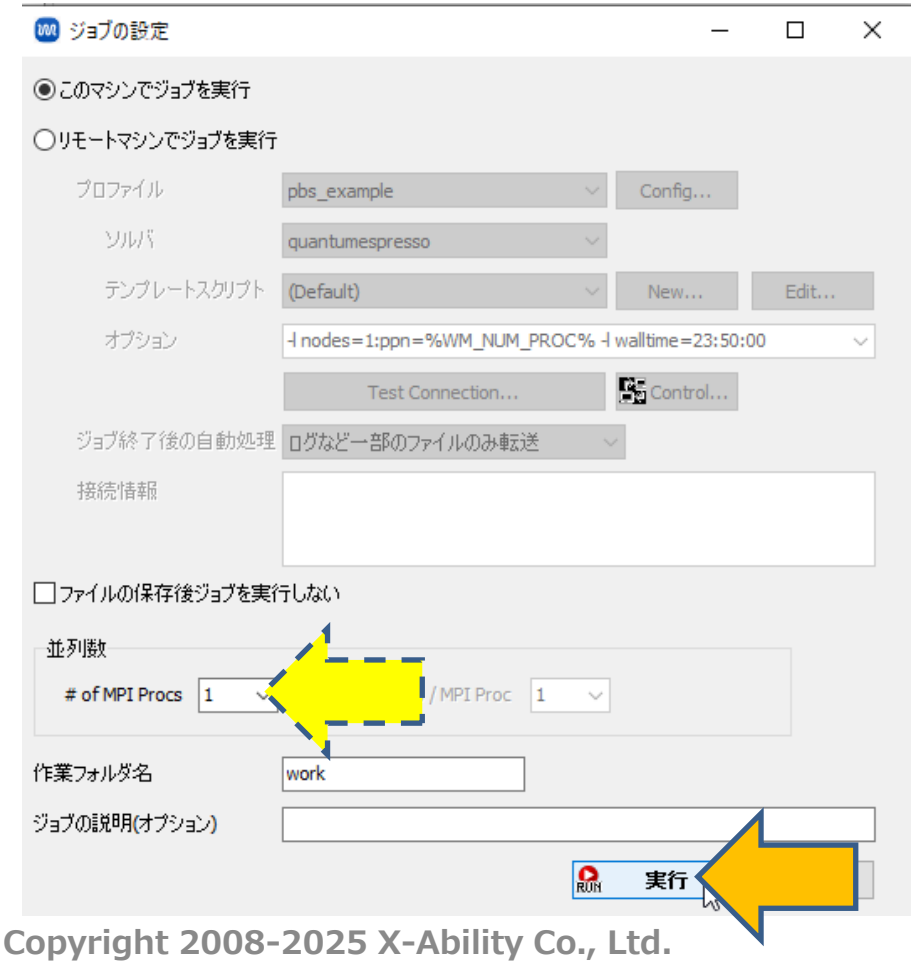
1. ツールバーの**ソルバ**から**Quantum ESPRESSO**を選択し **(ワークフロー設定)** をクリックします。
2. **Preset**を「Optimze(Atom)」に、目的の物質と同じ計算条件にするため**Pseudo file**を「pbe-tm-gipaw.upf」に変更します。
1. **Properties**欄の**NMR**にチェックを入れて、**OK**をクリックします。



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

II. 計算の実行（テトラメチルシラン）

1. **Quantum ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウで**OK**をクリックします。
2. **ジョブの設定**ウィンドウで並列数の# of MPI Procsを必要に応じて設定して、**実行**をクリックします。



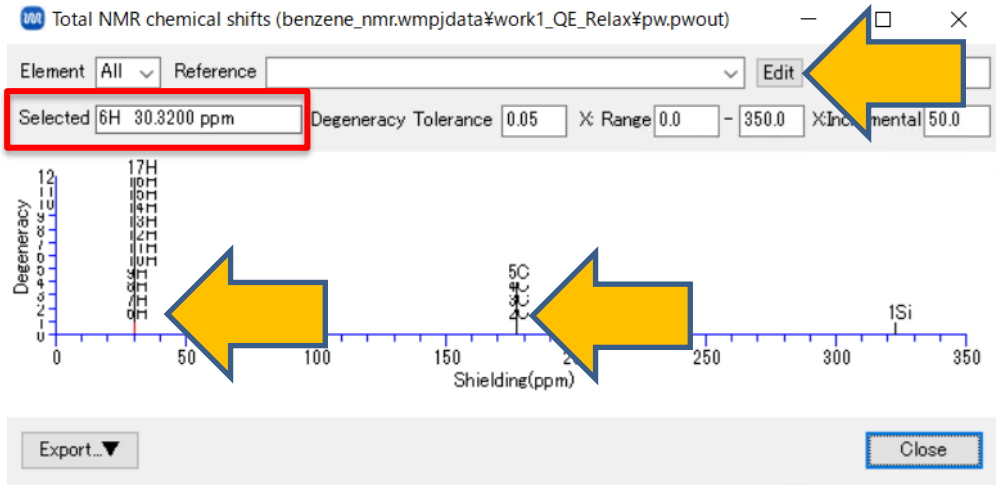
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

III.結果解析（テトラメチルシラン）

1. work1_QE_Relaxの**状態**が**END**に変化後、**アクション**で**NMR**をクリックするとNMR化学シフトウィンドウが表示されます。
2. HとCのピークをクリックして、Selectedの欄に表示される値(H 30.32 ppm、C 177.19 ppm)を確認します。
3. **Reference**横の**Edit**をクリックして、開いた基準物質のデータを記載したファイルwm_nmr.refに次の2行を追加して保存して、NMR化学シフトウィンドウを閉じます。""の中の文字は任意です。

   C　177.19　"TMS QE pbe-tm-gipaw.upf 15x15x15"

   H　30.32　"TMS QE pbe-tm-gipaw.upf 15x15x15"

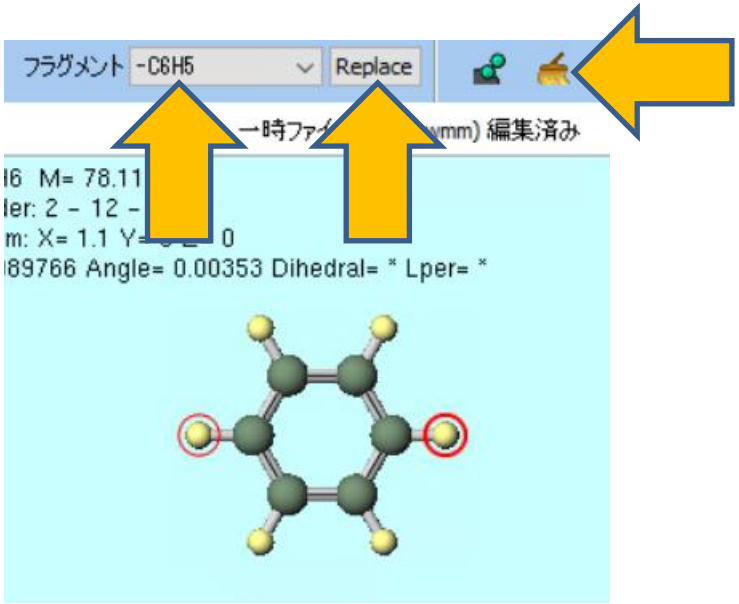


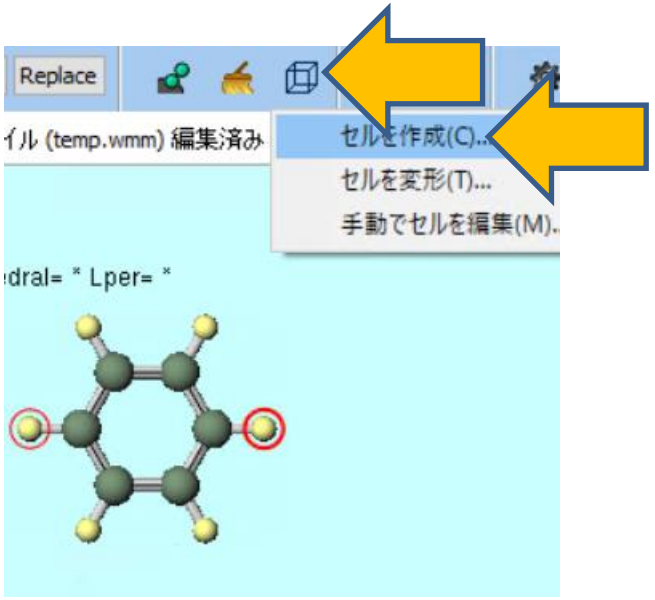

```
# NMR Shielding
C    177.19    "TMS QE pbe-tm-gipaw.upf 15x15x15"
H     30.32    "TMS QE pbe-tm-gipaw.upf 15x15x15"
C    200.003   "TMS HF/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
C    192.618   "TMS HF/6-311+G(2d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
C    189.696   "TMS B3LYP/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
C    182.502   "TMS B3LYP/6-311+G(2d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(
C    249.429   "TMS HF/STO-3G GIAO//HF/STO-3G"
C    199.049   "CH4 HF/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
#
H     32.597   "TMS HF/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
H     32.073   "TMS HF/6-311+G(2d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
```


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

IV.系のモデリング（ベンゼン）

1. **編集｜構造をリセット**を選択します。「現在のファイル形式(pwout)では…」と警告が出たら、「**はい**」をクリックします。
2. **フラグメント**を「-C6H5」に変更し**Replace**をクリックして、ベンゼンを作成します。
3. **簡易構造最適化**ボタンをクリックして、構造を調整します。
4. **セルを作成/編集**ボタンをクリックして、**セルを作成**をクリックします。

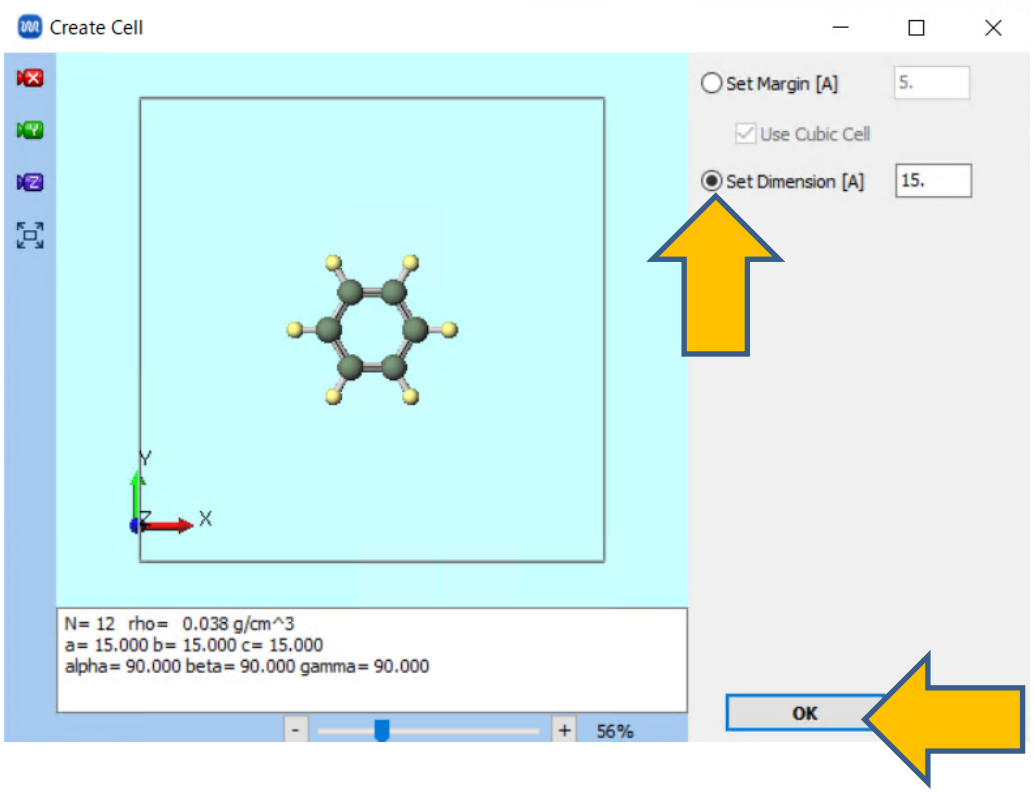


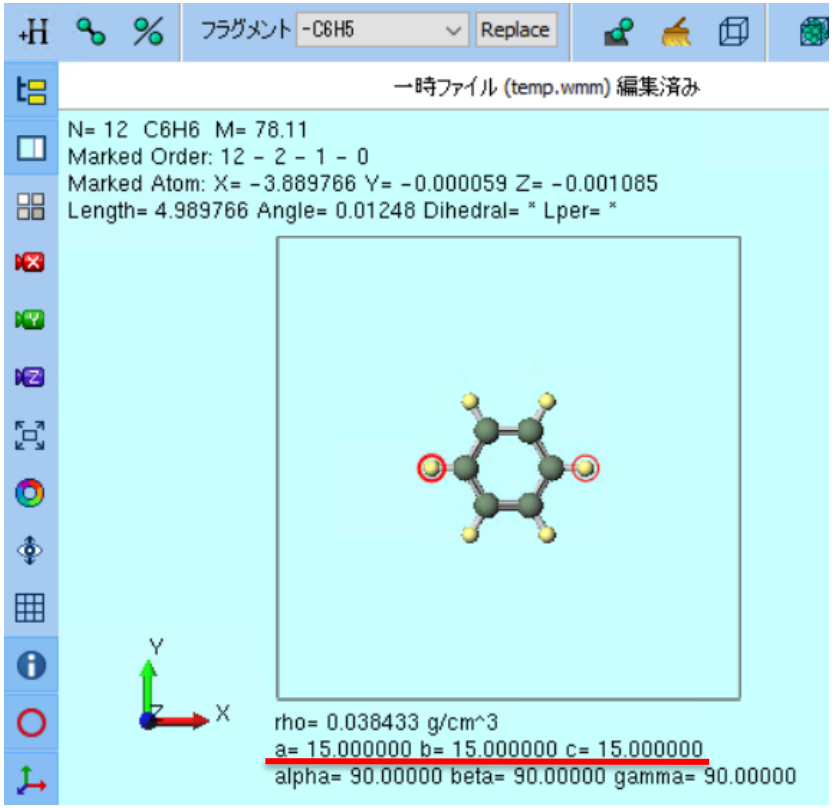


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

IV.系のモデリング（ベンゼン）

1. **Create Cell**ウィンドウの**Set Dimension**を選択して、**OK**ボタンをクリックします。
2. 15Åx15Åx15Åのセルが作成されていることを確認します。

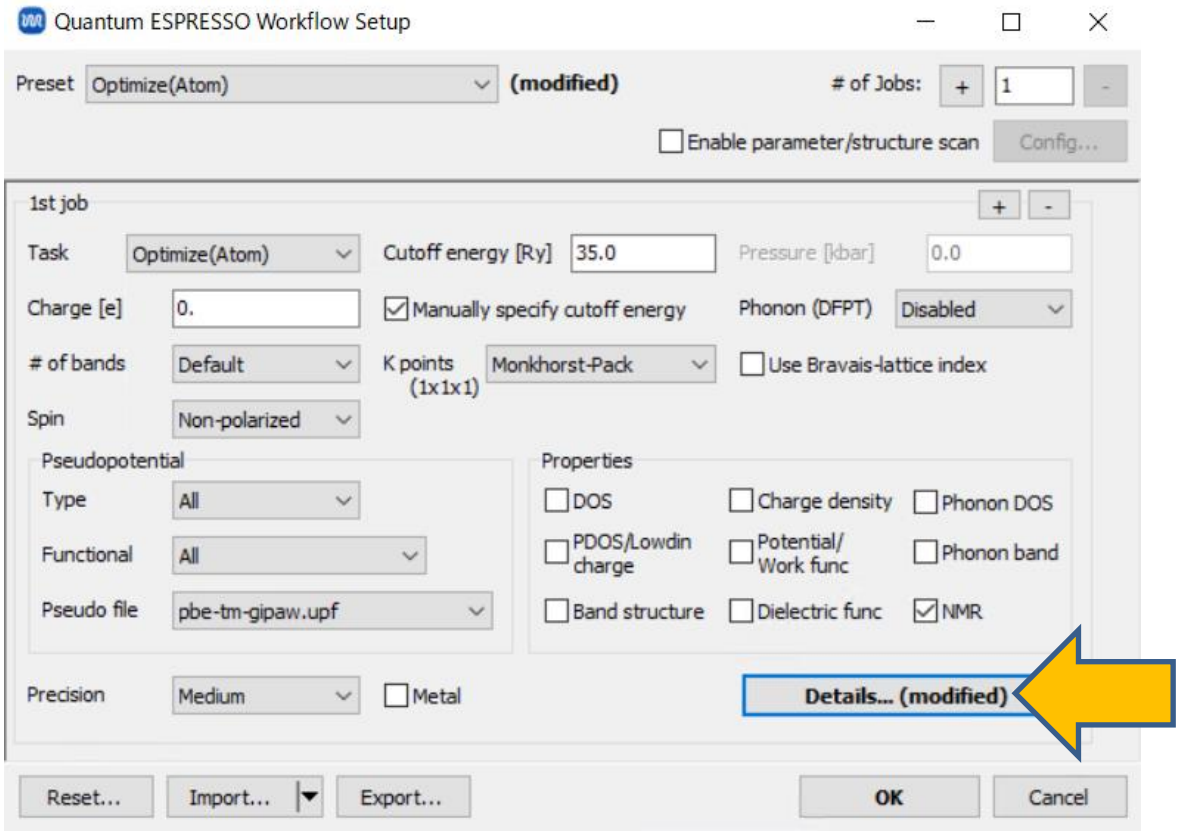




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

V. 計算の実行（ベンゼン）

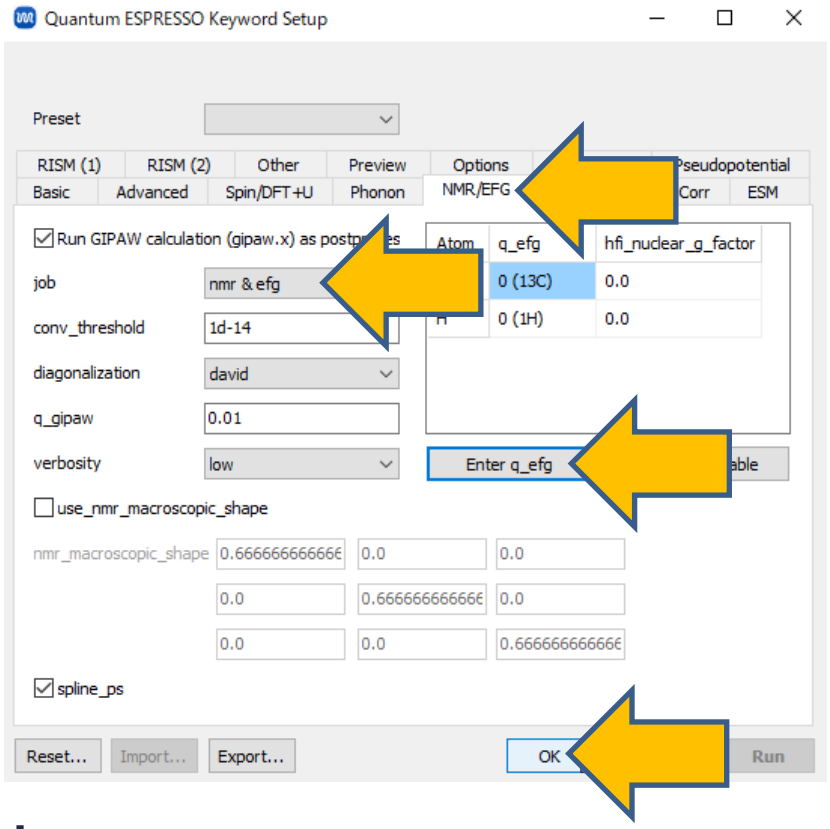
1. **(ワークフロー設定)** をクリックします。「継続ジョブを実行しますか？」の質問には、「いいえ」を選択します。
2. **Details**をクリックします。

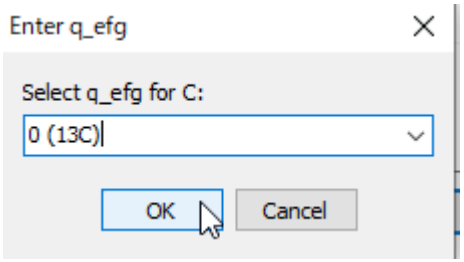


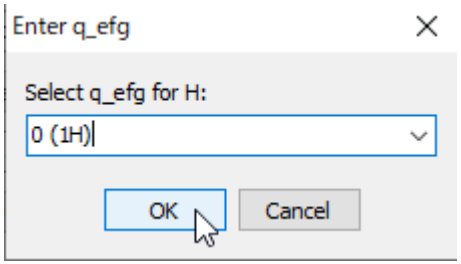
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

V. 計算の実行（ベンゼン）

1. **NMR/EFG**タブに移動し、**job**を「nmr & efg」に変更します。
2. **Enter q_efg**をクリックします。「Select q_efg for C」と表示されたらプルダウンで「0 (13C)」を選択し**OK**をクリックします。「Select q_efg for H」と表示されたらプルダウンで「0 (1H)」を選択し**OK**をクリックします。







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

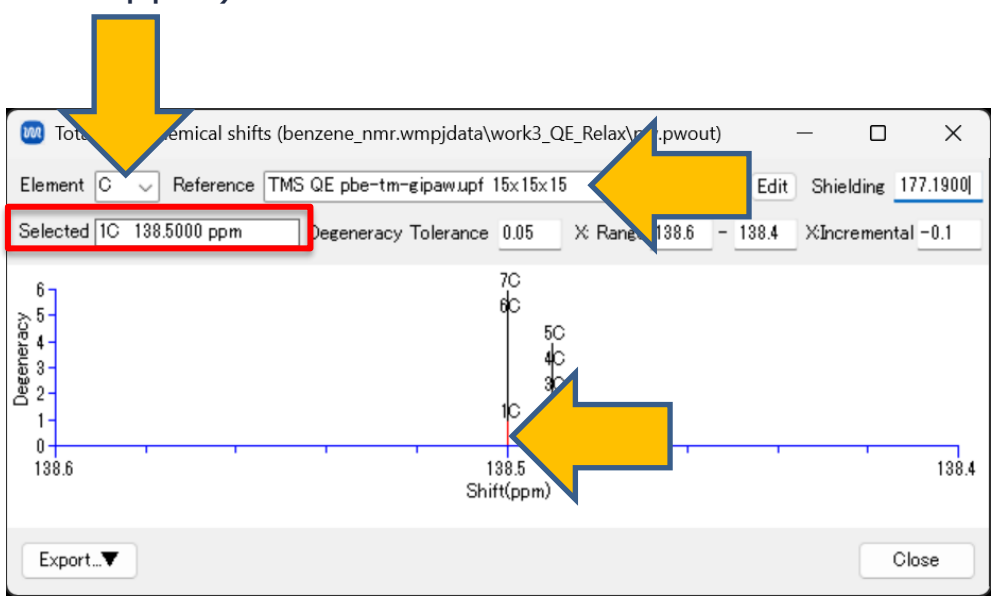
V. 計算の実行（ベンゼン）

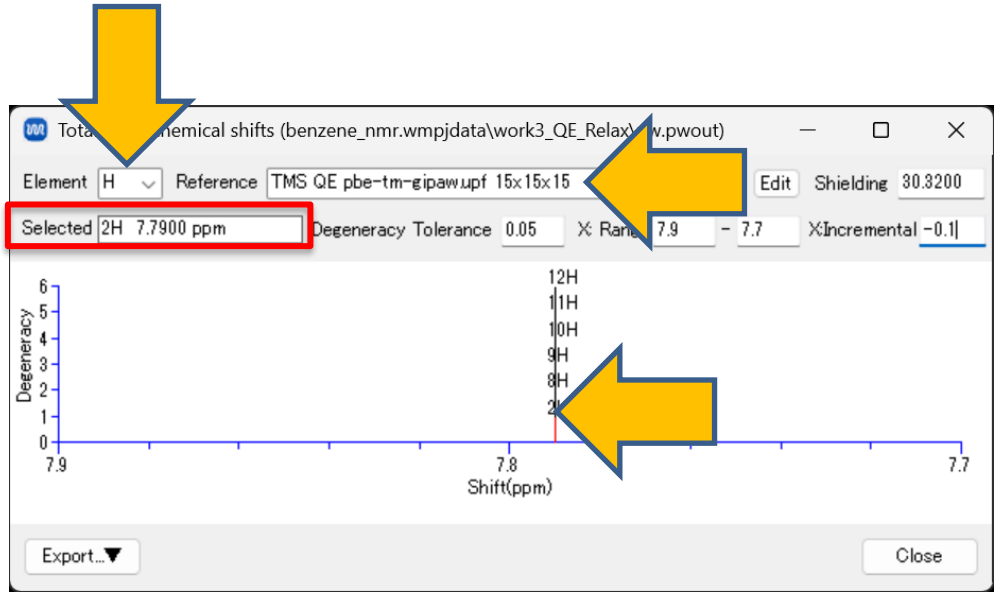
1. **Quantum ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウで**OK**をクリックします。
2. **ジョブの設定**ウィンドウで**実行**をクリックします。

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

VI.結果解析（ベンゼン）

1. work2_QE_Relaxの**状態**が**END**に変化後、**アクション**で**NMR**をクリックするとNMRスペクトルウィンドウが表示されます。
2. **Element**を**C**に、**Reference**を**TMS QE pbe-tm-gipaw.upf 15x15x15**に変更すると、^{13}C NMR化学シフトが表示され、ピークをクリックすると**Selected**に化学シフト値(138.50 ppm)が表示されます。
3. **Element**を**H**に、**Reference**を**TMS QE pbe-tm-gipaw.upf 15x15x15**に変更すると、^{1}H NMR化学シフトが表示され、ピークをクリックすると**Selected**に化学シフト値(7.79 ppm)が表示されます。





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

VI.結果解析（ベンゼン）

1. **アクション**で**Log (GIPAW2)** をクリックするとEFG計算のログが表示され、四極子結合定数(Cq)、非対称性因子 (eta)を確認することができます。

```
H    12         0.000210         0.000008        -0.151986


NQR/NMR SPECTROSCOPIC PARAMETERS:
C     1    Vxx=    -0.1394    axis=(  1.000000 -0.000001  0.000063)
C     1    Vyy=    -0.1976    axis=(  0.000001  1.000000  0.000137)
C     1    Vzz=     0.3369    axis=( -0.000063 -0.000137  1.000000)
C     1  Q=          0.0000 1e-30 m^2  Cq=          0.0000 MHz  eta= 0.17273

H     2    Vxx=    -0.1341    axis=( -0.000017  1.000000  0.000046)
H     2    Vyy=    -0.1520    axis=( -0.000011  0.000046 -1.000000)
H     2    Vzz=     0.2861    axis=( -1.000000 -0.000017  0.000011)
H     2  Q=          0.0000 1e-30 m^2  Cq=          0.0000 MHz  eta= 0.06239

C     3    Vxx=    -0.1393    axis=(  0.499207  0.866483  0.000138)
C     3    Vyy=    -0.1976    axis=( -0.866483  0.499207  0.000130)
C     3    Vzz=     0.3369    axis=(  0.000043 -0.000184  1.000000)
C     3  Q=          0.0000 1e-30 m^2  Cq=          0.0000 MHz  eta= 0.17280

C     4    Vxx=    -0.1393    axis=(  0.499377 -0.866385 -0.000040)
C     4    Vyy=    -0.1976    axis=(  0.866385  0.499377  0.000251)
C     4    Vzz=     0.3369    axis=( -0.000198 -0.000160  1.000000)
C     4  Q=          0.0000 1e-30 m^2  Cq=          0.0000 MHz  eta= 0.17280
```


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.