winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO
吸着エネルギー計算

V11.12.0

2025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。

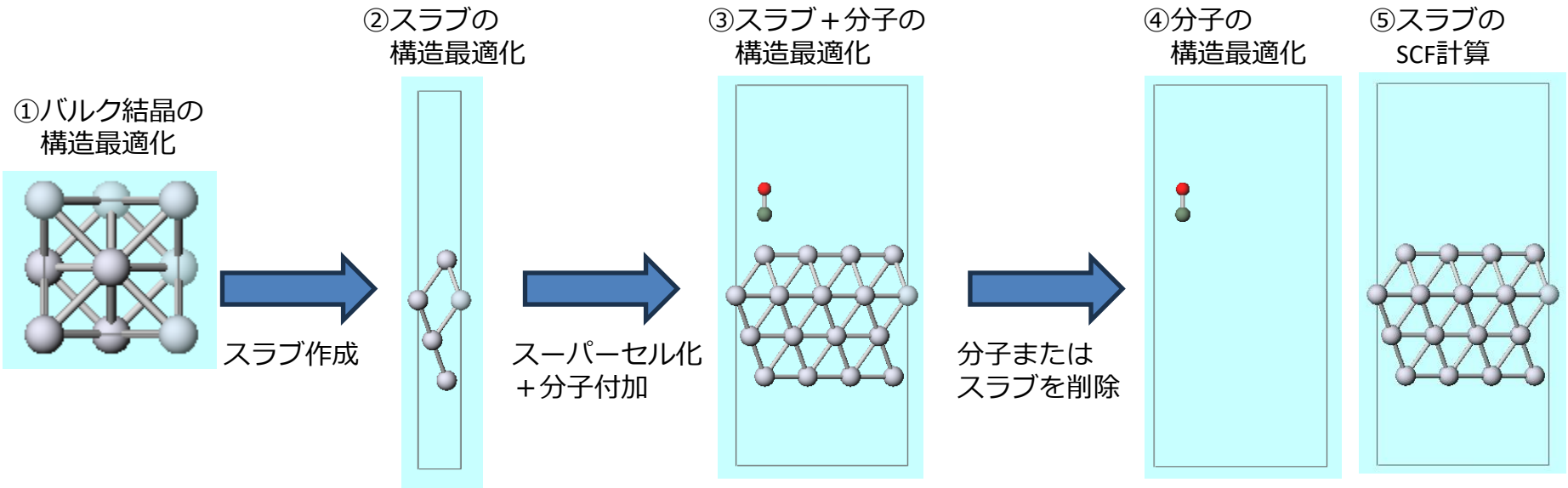
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

- 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

- 本チュートリアルでは、Pt（1 1 1)面のon-topサイトへのCO分子の吸着エネルギー計算を実施します。スラブのみ、分子のみ、スラブ＋分子の全エネルギーから吸着エネルギーを算出します。
- 本書では、まず①Ptバルク結晶の構造最適化を行った上で②Ptスラブモデルを作成して構造最適化を行います。次に、③CO分子を吸着させて構造最適化を行いスラブ＋分子の全エネルギーを取得します。最後に、④CO分子のみの構造最適化計算、⑤PtスラブのみのSCF計算（Ptスラブは②で構造最適化済み）を実行しそれぞれの全エネルギーを取得します。



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。

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

動作環境設定

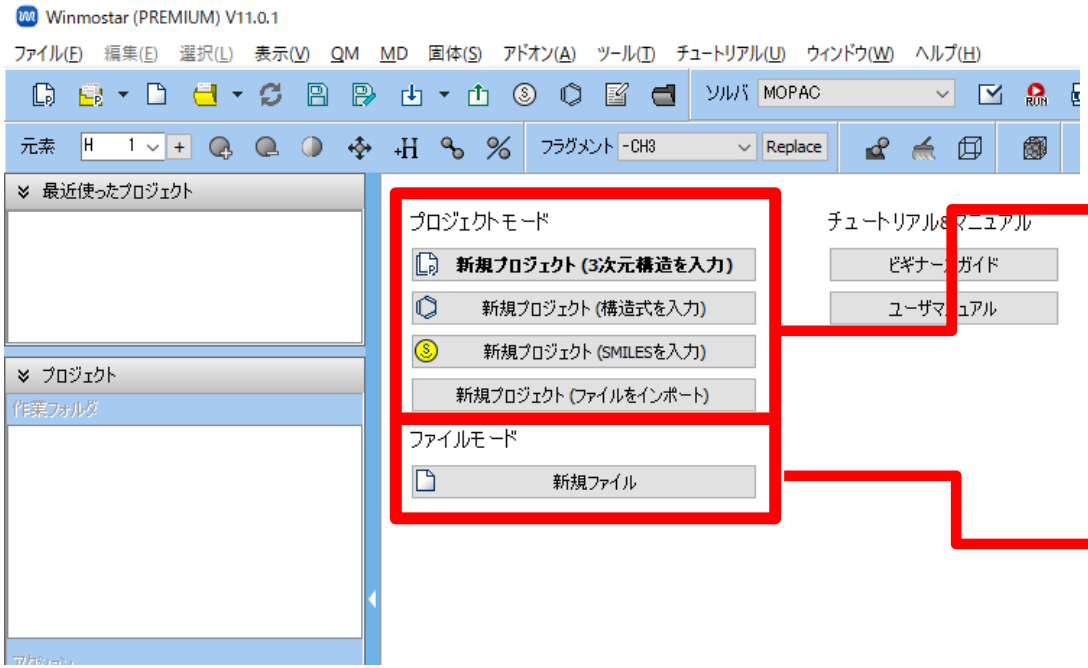
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum ESPRESSOが同梱されています。

- 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.

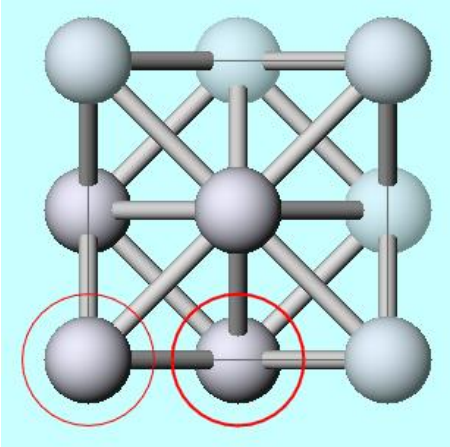
I. 系のモデリング

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「`Pt_CO_Ads`」と入力し**保存**をクリックします。

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。

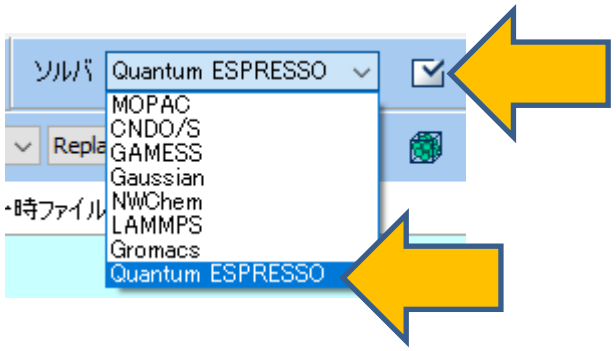
3. **ファイル｜インポート｜Samplesファイル｜pt.cif**をクリックします。
   - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル｜ファイルをインポート**を使います。
4. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。
5. 分子表示エリアに所望の構造が出現することを確認します。

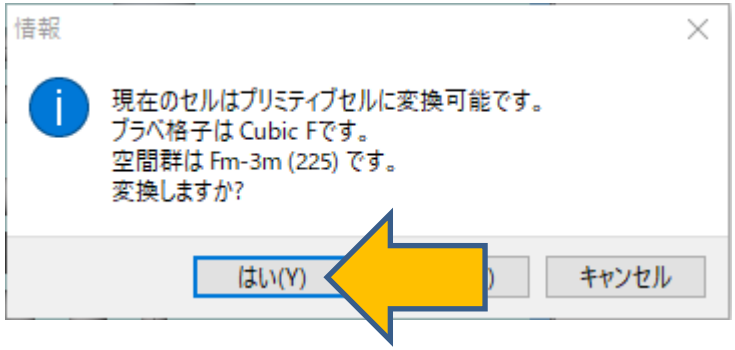


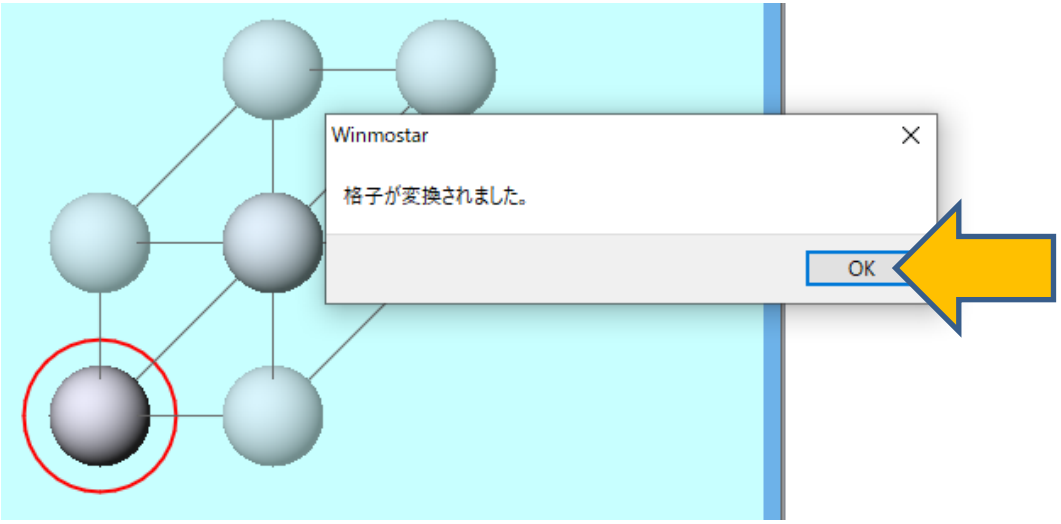
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行（Pt結晶）

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. コンベンショナルセルから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。
   「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。



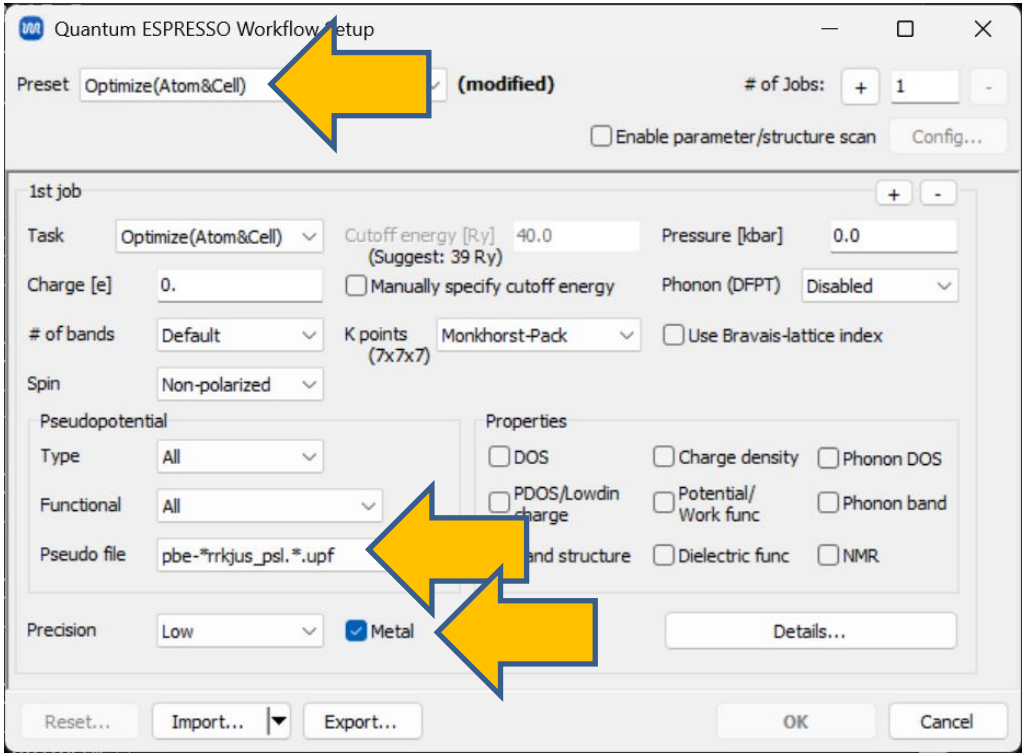




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行（Pt結晶）

1. **Preset**から**Optimize (Atom&Cell)**を選択します。
2. **Pseudo file**には**pbe-*rrkjus_psl.*.upf**を選択し、**Metal**にチェックを入れます。
3. 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**に変更します。
4. **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。

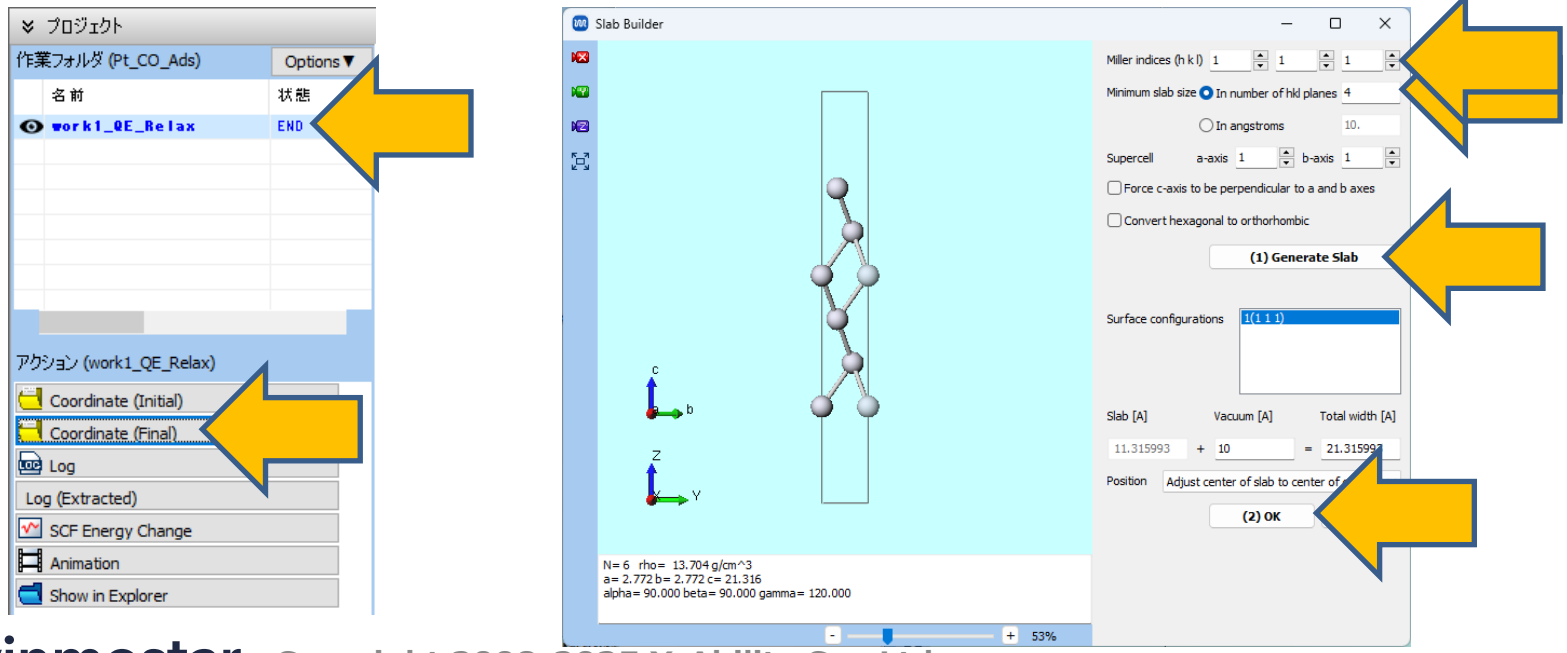


注) 本例題では、PrecisionをLowで選択

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

III.系のモデリング（Ptスラブ）

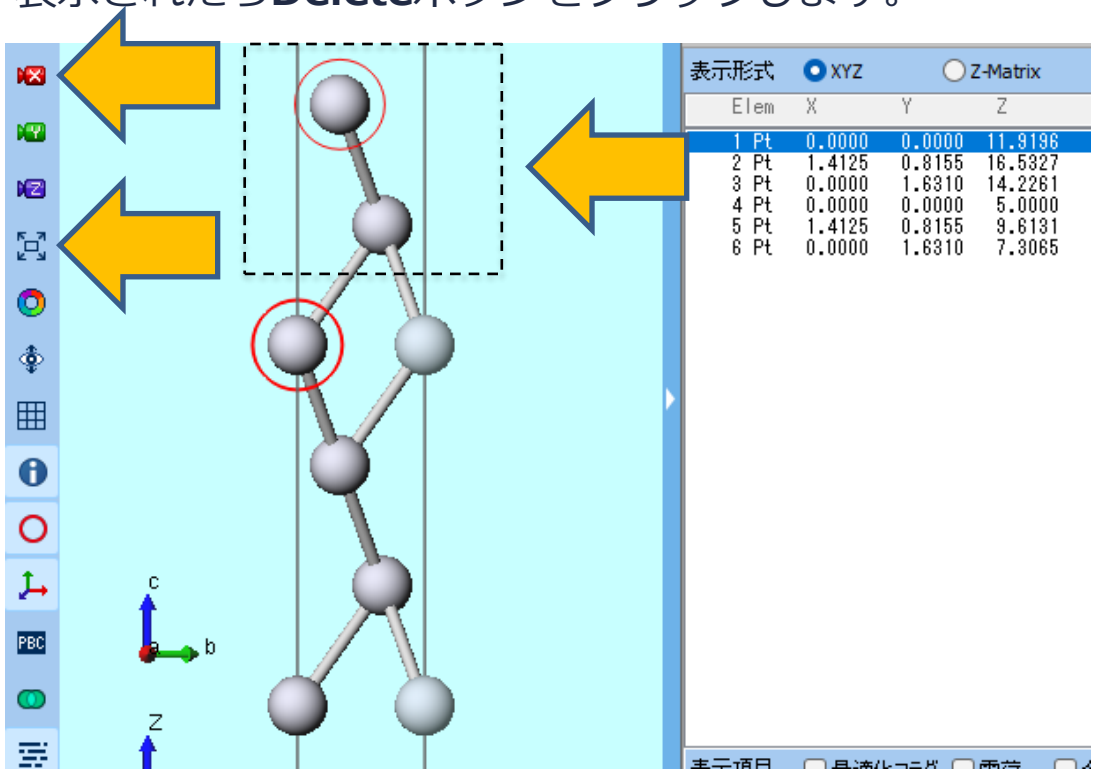
1. **作業フォルダ**の**work1_QE_Relax**の**状態**が**END**に変化した後、**作業フォルダ**で**work1_QE_Relax**をクリックし、**アクション**の**Coordinate (Final)**をクリックします。
2. **固体｜格子を変換(Primitive<->Conventional)**（V11.10.X以前は**固体｜格子を変換**）をクリックし、コンベンショナルセルに戻します。このとき、「現在のファイル形式では…」と表示されたら、**はい**をクリックします。
3. **固体｜スラブを作成**をクリックし、**Miller indices (h k l)**をそれぞれ「1」に、**Minimum slab size**の**In number of hkl planes**の値を「4」に変更し、**(1) Generate Slab**ボタンをクリックします。続けて**OK**をクリックします。

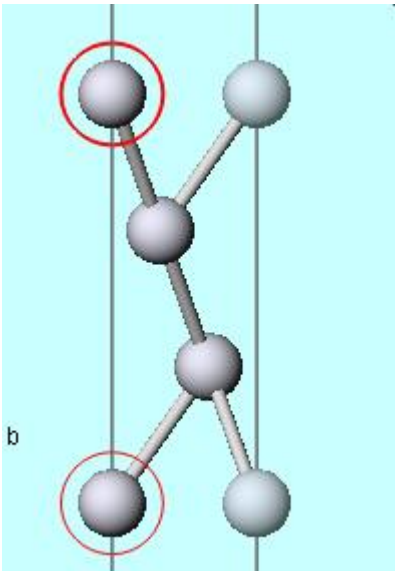


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

III.系のモデリング（Ptスラブ）

1. **ツールバー**の **X軸方向から表示**をクリックしてから **ウィンドウに合わせる**をクリックします。
2. **Ctrlキー**を押しながらドラッグして上2層の原子を矩形選択します。
3. **ツールバー**の **原子を削除**をクリックし、「Do you want to delete or leave group?」と表示されたら**Delete**ボタンをクリックします。

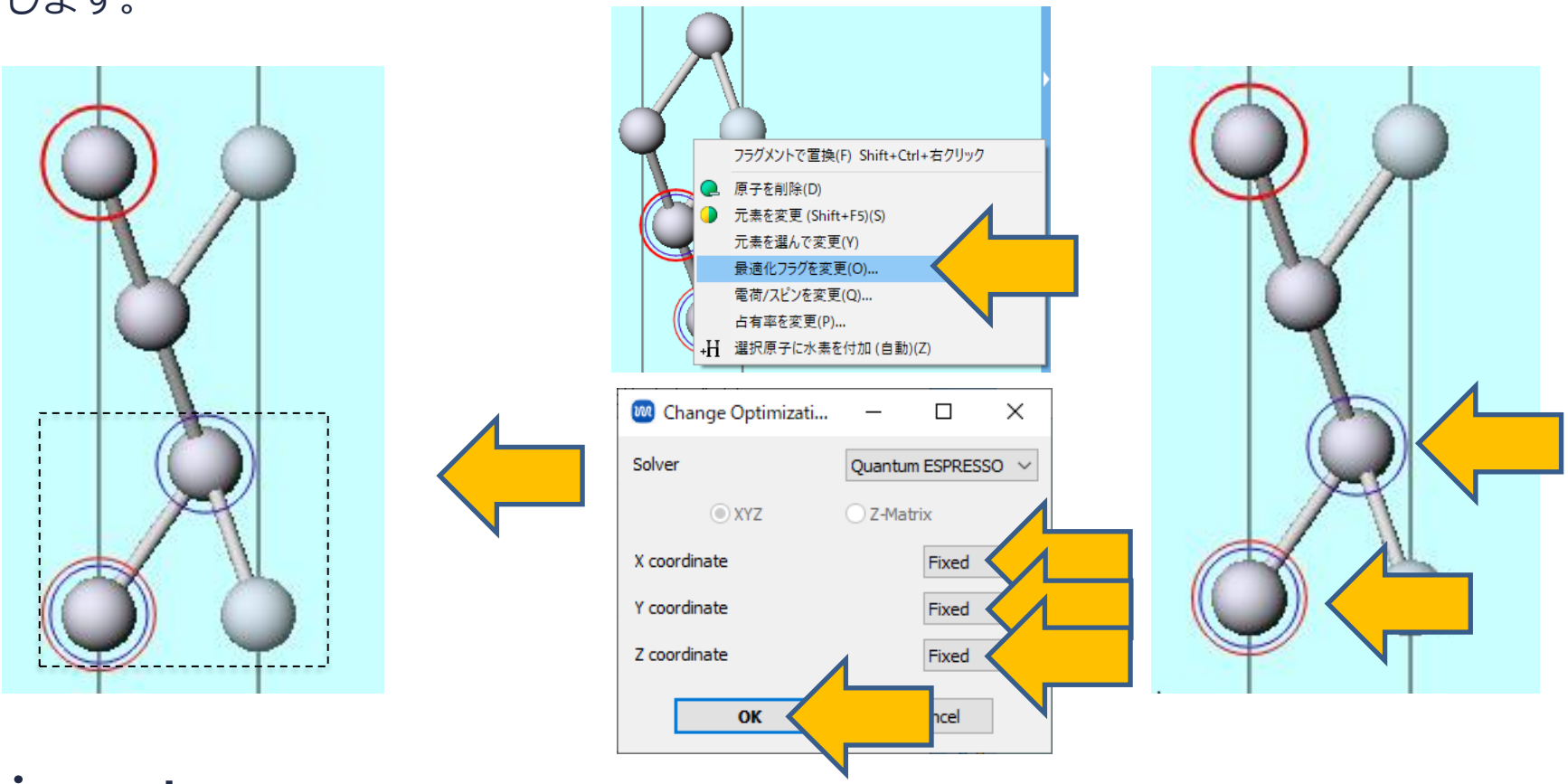




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

III.系のモデリング（Ptスラブ）

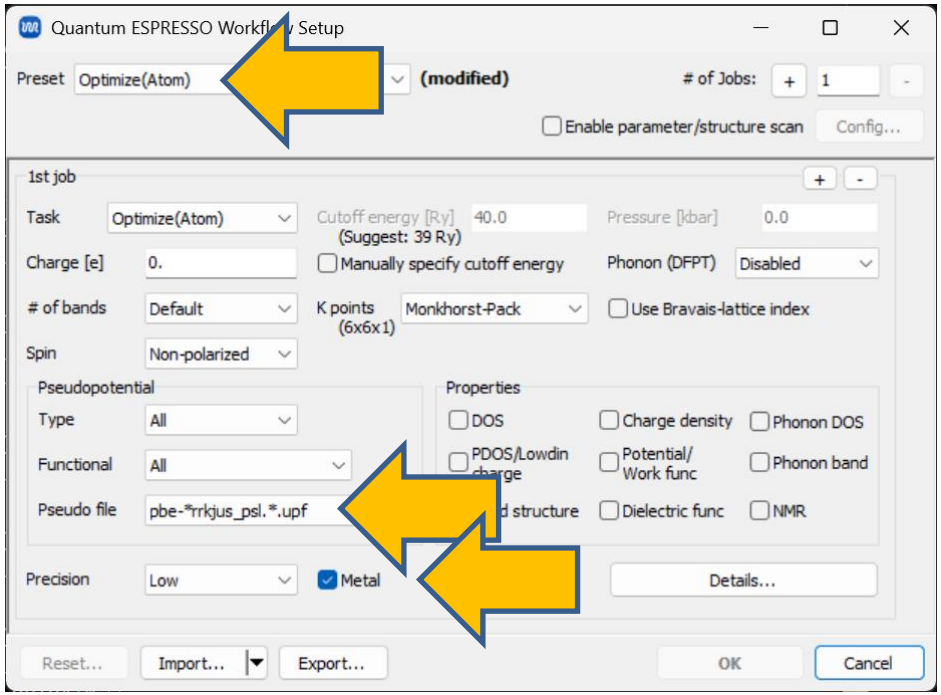
1. **Ctrlキー**を押しながらドラッグして、下2層の原子を矩形選択します。
2. 選択した原子上で右クリックし、**最適化フラグを変更**をクリックします。
3. 最適化フラグ変更画面で**X、Y、Z**座標についてそれぞれ**Fixed**を選択し、**OK**ボタンをクリックします。



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

IV.計算の実行（Ptスラブ）

1. **ワークフロー設定**ボタンをクリックします。「継続ジョブを実行しますか？…」と表示されたら、**いいえ**をクリックします。
2. **Preset**から**Optimize (Atom)**を選択します。
3. **Pseudo file**には**pbe-*rrkjus_psl.*.upf**を選択し、**Metal**にチェックを入れます。
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**Extra-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。

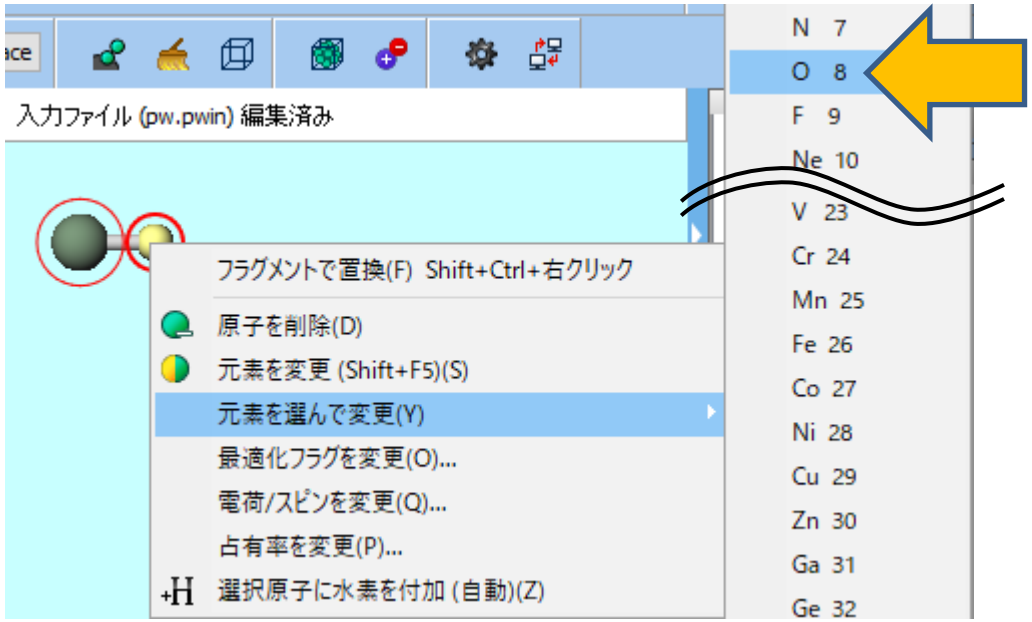


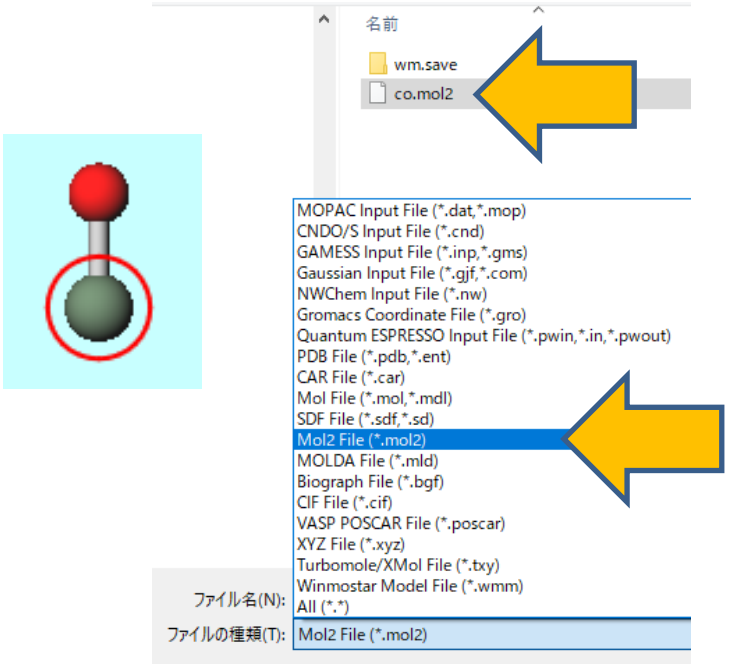
注) 本例題では、PrecisionをLowで選択

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

V. 系のモデリング（Pt+CO）

1. **編集｜構造をリセット**をクリックし**ツールバー**の **Z軸方向から表示**をクリックします。
2. 水素原子（黄色い原子）を右クリックし、**元素を選んで変更**から「**O　8**」をクリックします。
3. **編集｜座標軸の取り直し｜座標軸を交換(XYZ→ZXY)**をクリックします。
4. **ファイル｜ファイルをエクスポート**をクリックし、ファイルの種類に「**Mol2 File (*.mol2)**」を選択して「`co.mol2`」というファイル名で保存します。

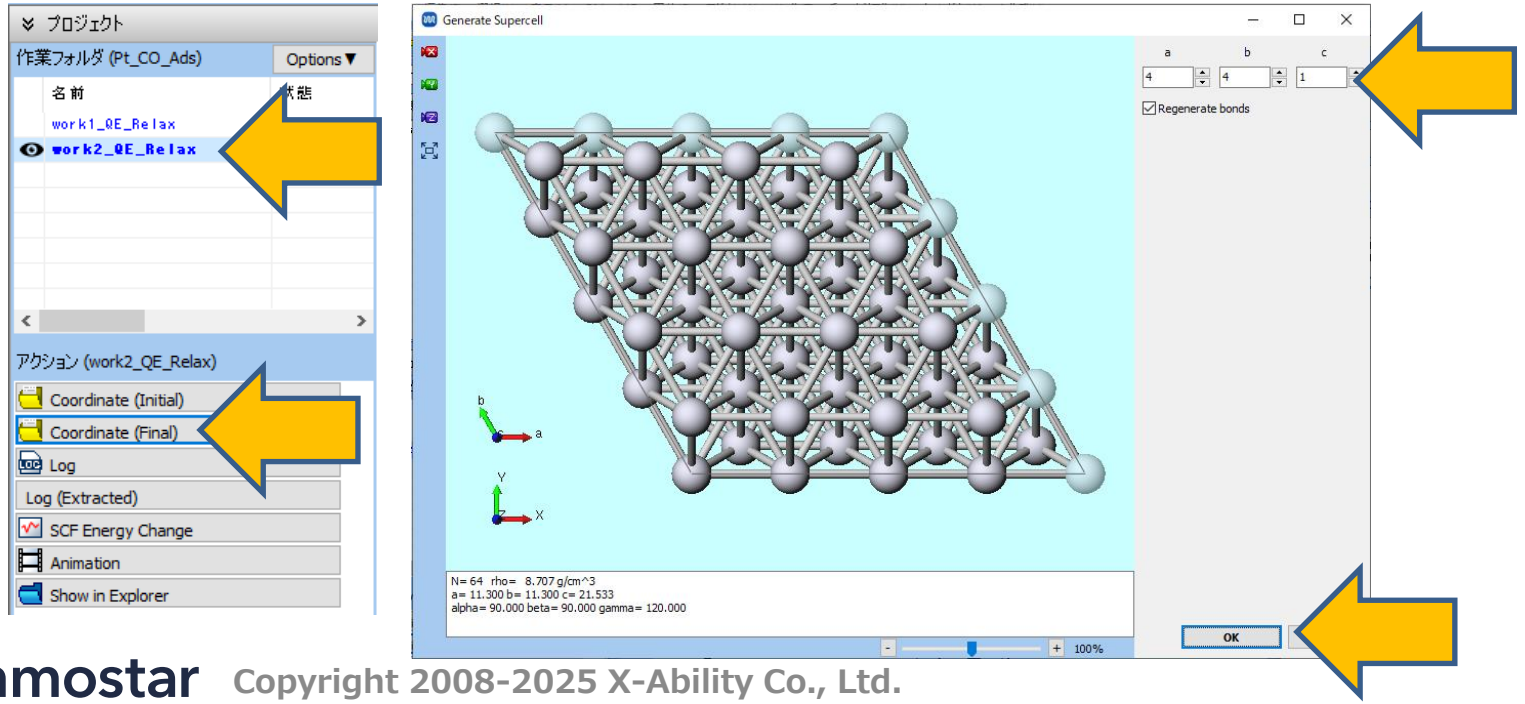




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

V. 系のモデリング（Pt+CO）

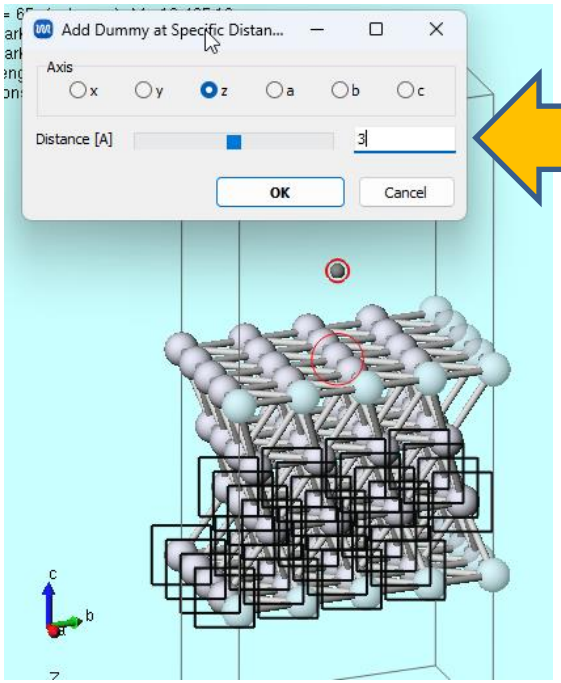
1. **作業フォルダ**の**work2_QE_Relax**の**状態**が**END**に変化した後、**作業フォルダ**で**work2_QE_Relax**をクリックし、**アクション**の**Coordinate (Final)**をクリックします。「変更を上書き保存しますか？」と表示されたら**いいえ**をクリックします。
2. **固体｜スーパーセルを作成**をクリックします。このとき、「現在のファイル形式では…」と表示されたら、**はい**をクリックします。
3. **Generate Supercell**ウィンドウの**a**と**b**に「**4**」（計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は「2」）と入力し、**OK**ボタンをクリックします。

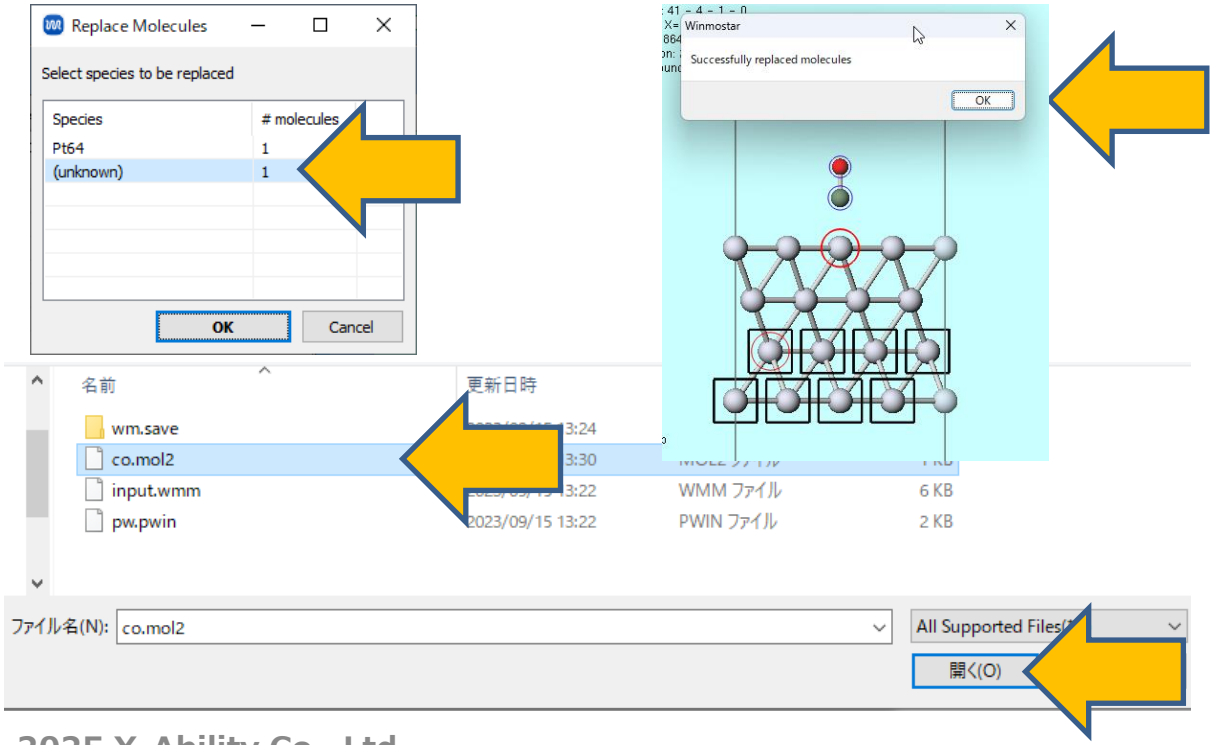


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

V. 系のモデリング（Pt+CO）

1. **X軸方向から表示**をクリックし、少し回転させて、一番上（一層目）の中央の原子をクリックし、**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。
2. **Distance [Å]**の数値に「**3**」を入力し、**OK**ボタンをクリックします。
3. **MD｜分子を置換**をクリックし、**Species**の **(unknown)** をクリック後、**OK**ボタンをクリックすると、配置する分子のファイルを指定するダイアログが表示されます。前の手順で保存した「`co.mol2`」ファイルを選択し、**開く**ボタンをクリックします。

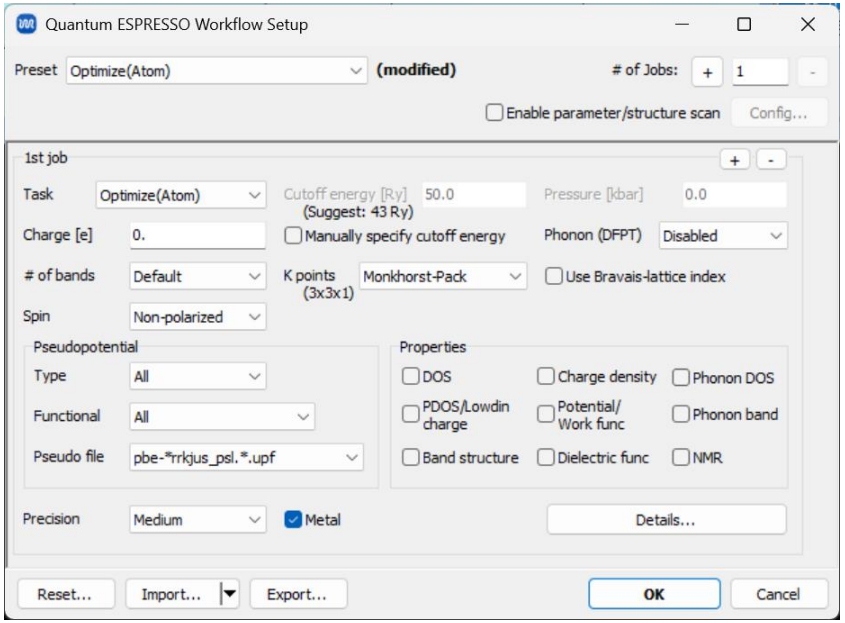




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

VI.計算の実行（Pt+CO）

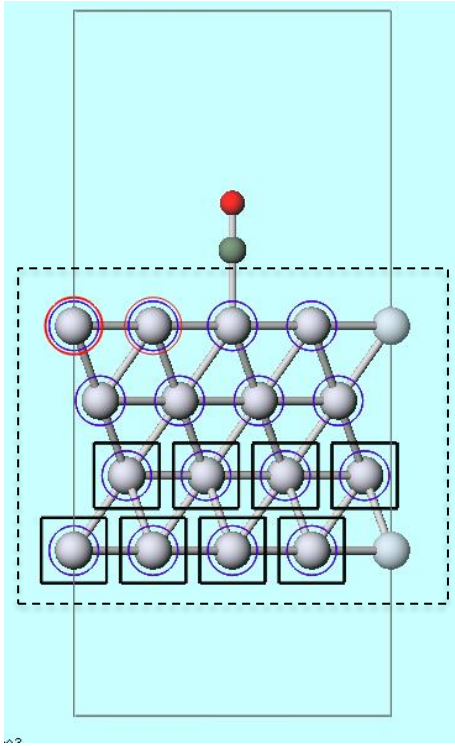
1. **ワークフロー設定**ボタンをクリックします。「継続ジョブを実行しますか？…」と表示されたら、**いいえ**をクリックします。
2. **work2**で設定した計算条件と同様であるため、そのままワークフロー設定画面の**OK**ボタンをクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後、**実行**をクリックします。本チュートリアルの設定で計算精度を落とさなかった場合は、8 CPUコアの環境で8時間程度かかり、またメモリの消費量も大きいため（20 GB程度、Precision「Low」で14 GB程度）、十分なメモリを搭載していないマシンで実行した場合はQuantum ESPRESSOが異常終了する場合があります。（その場合は全ての計算について**ワークフロー設定**で**Precision**を「Low」か「Extra-Low」に変更してください）

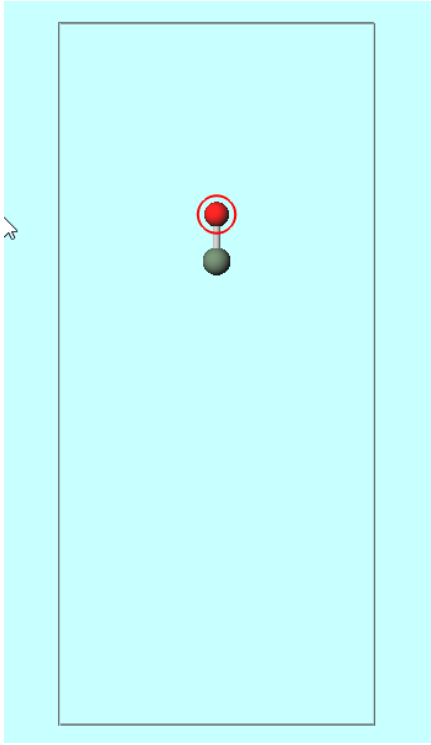


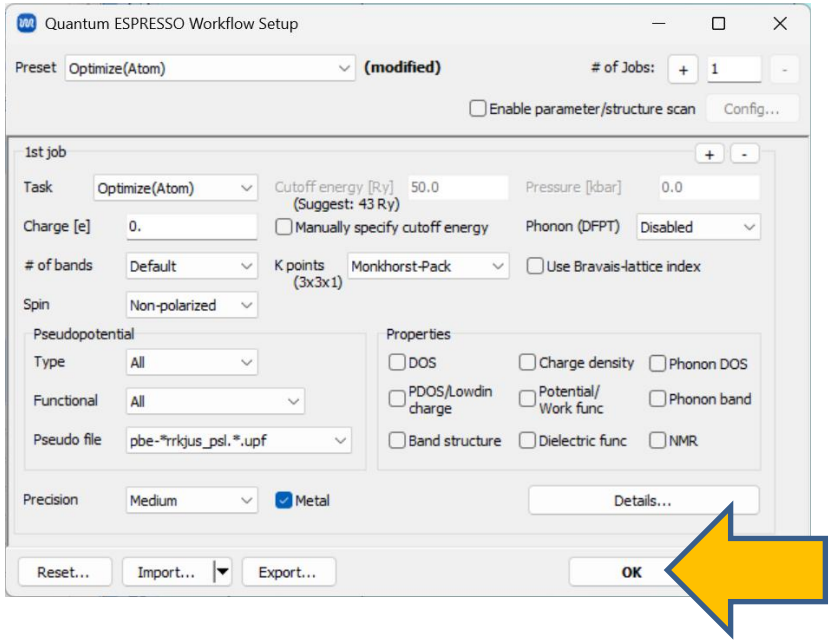
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

VII.モデリング、計算の実行（CO）

1. **Ctrlキー**を押しながらドラッグし、Pt原子すべてを矩形選択します。
2. **ツールバー**の **原子を削除**をクリック後、**Delete**ボタンをクリックます。
3. **ワークフロー設定**ボタンをクリックします。「継続ジョブを実行しますか？…」と表示されたら、**いいえ**をクリックし、ワークフロー設定画面の**OK**ボタンをクリック後、**実行**をクリックします。



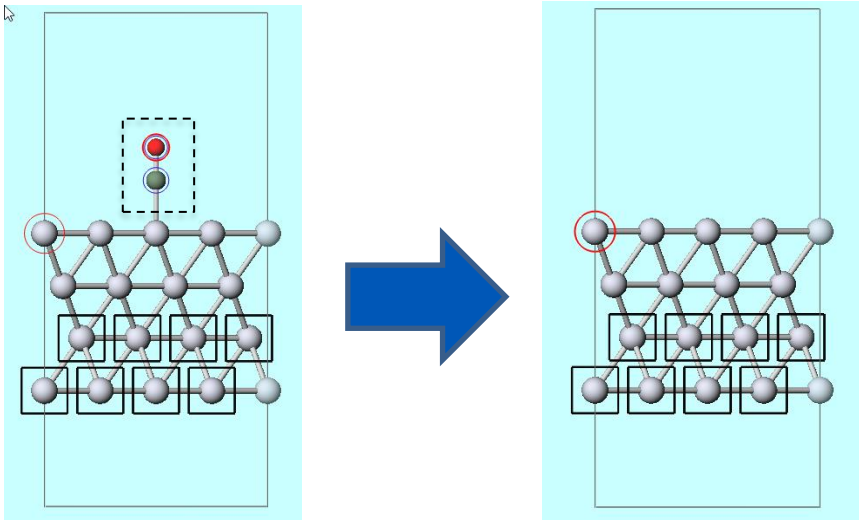


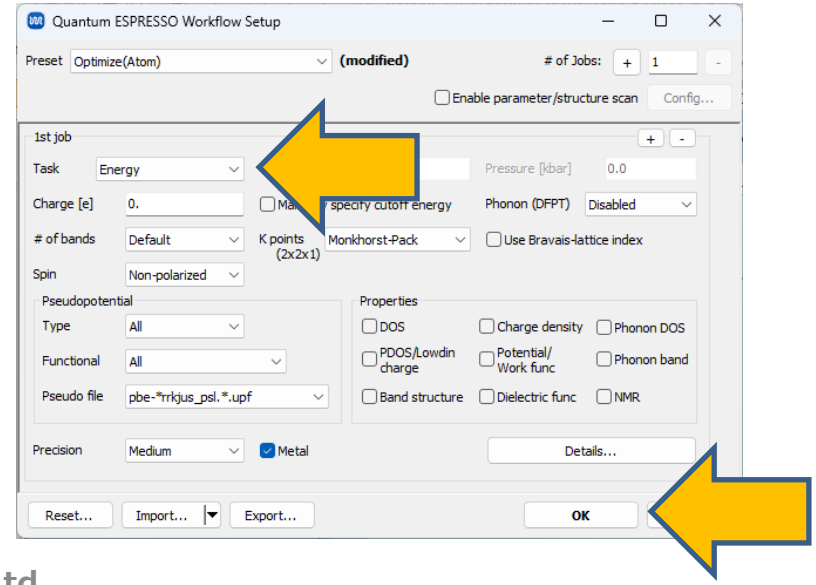


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

VIII.モデリング、計算の実行（Pt）

1. **作業フォルダ**で**work3_QE_Relax**をクリックし、**アクション**の**Coordinate（Initial)**をクリックします。
2. **Ctrlキー**を押しながらドラッグし、CO分子を矩形選択します。
3. **ツールバー**の**原子を削除**をクリック後、**Delete**ボタンをクリックます。
4. **ワークフロー設定**ボタンをクリックします。「継続ジョブを実行しますか？…」と表示されたら、**いいえ**をクリックします。「現在のセルはプリミティブセルに変換可能です。…変更しますか？」と表示されたら**いいえ**をクリックします。
5. **Task**を**Energy**に変更します。**OK**ボタンをクリック後、**実行**をクリックします。

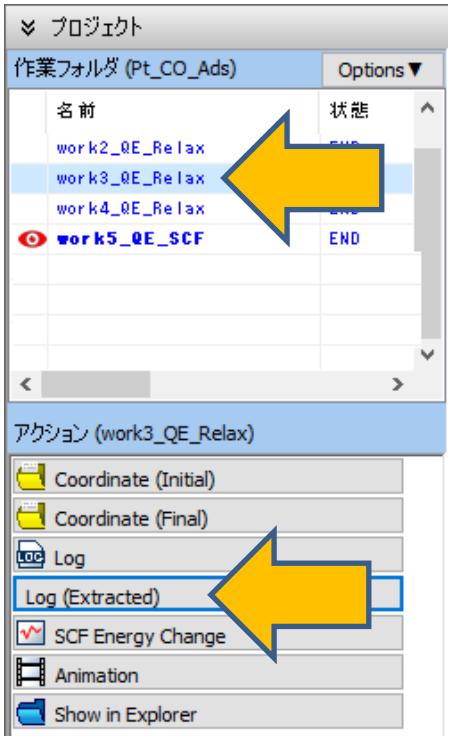


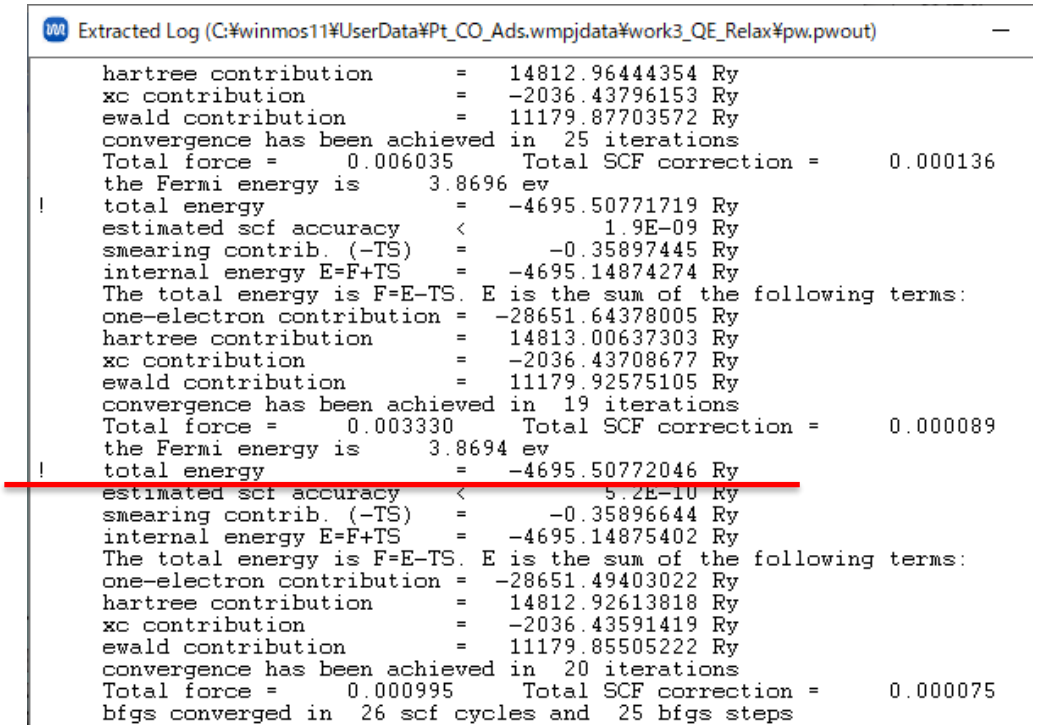


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

IX.結果解析

1. **作業フォルダ**の**work3_QE_Relax**の**状態**が**END**に変化した後、**作業フォルダ**で**work3_QE_Relax**をクリックし、**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コノミーの場合は**Log**をクリック）
2. 一番最後に出現した「!　　total energy …」の行の値をメモします。
3. 上記1と2を**work4_QE_Relax**、**work5_QE_SCF**についても同様に実施します。





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

IX.結果解析

- 先ほどメモした3つの値を下式に代入します。 $E_{\mathrm{Pt+CO}}$、E_{CO}、E_{Pt}はそれぞれwork3、work4、work5でメモした値です。

$$\Delta E_{\mathrm{ads}} = E_{\mathrm{Pt+CO}} - \left(E_{\mathrm{Pt}} + E_{\mathrm{CO}}\right)$$

	意味	本書の場合
$E_{\mathrm{Pt+CO}}$	Pt (1 1 1)面にCO分子が吸着した構造の全エネルギー	-4695.49122713 [Ry]
E_{Pt}	Pt (1 1 1)面孤立系の全エネルギー	-4649.83181654 [Ry]
E_{CO}	CO単分子孤立系の全エネルギー	-45.53637850 [Ry]
ΔE_{ads}	吸着エネルギー	-0.12303209 [Ry] = -1.67 [eV]

- 本書の手順ではΔE_{ads}は-1.67 eVとなりました（値が負は吸着を意味します）。単位の変換には**ツール｜単位を変換**を利用しました。精度を落として計算した場合は異なる値が得られます。なお、実験値として文献[1]では-1.76 eVが報告されています。

[1] Y.Y. Yeo et al., J. Chem. Phys. 106, 392 (1997)

 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.