winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO
Löwdin電荷/Bader電荷

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。

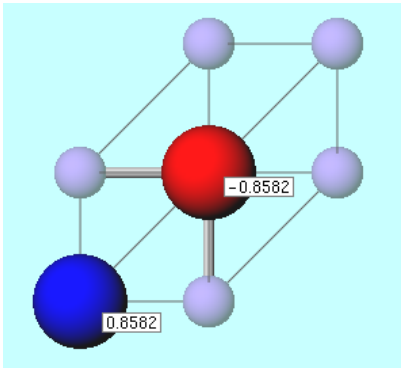
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

- 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

- 本チュートリアルにおけるBader電荷の算出にはWinmostar V11プロフェッショナル版エリートが必要です。Löwdin電荷の算出はエコノミー、プレミアムでも実施可能です。
- 本チュートリアルでは、NaCl結晶のSCF計算を実行し、ポピュレーション解析から得られるLöwdin電荷およびBader電荷を取得します。



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。
- 電子状態計算におけるポピュレーション解析には様々な手法があり、Löwdin電荷およびBader電荷はそれぞれ異なる設計思想に基づき算出されるので、両者が一致しないことに問題はありません。

◆ 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

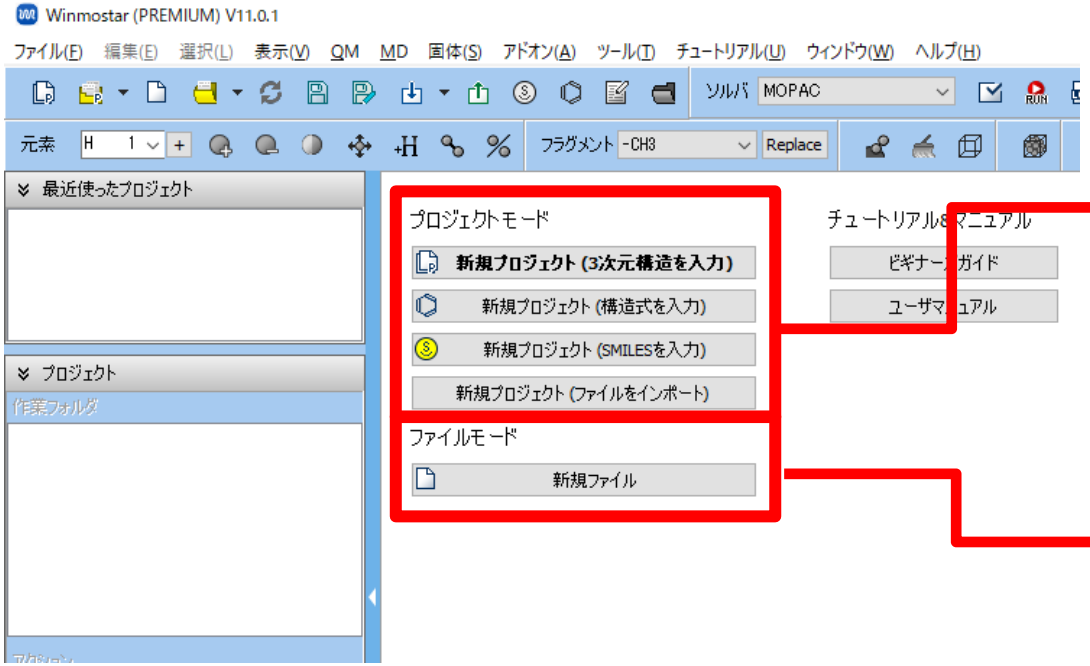
- Winmostar　V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM　2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum　ESPRESSOが同梱されています。

- 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.

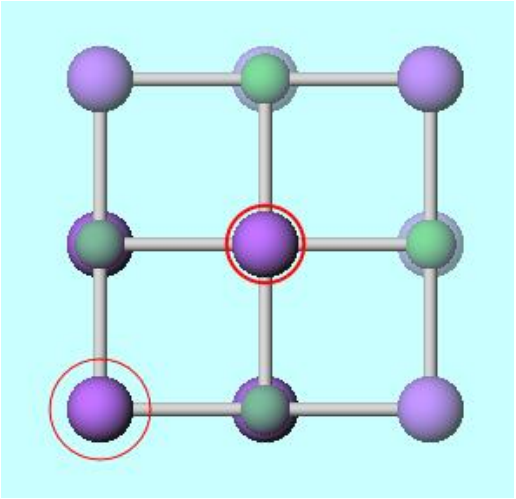
I. 系のモデリング

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「`qe_nacl_charge`」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。

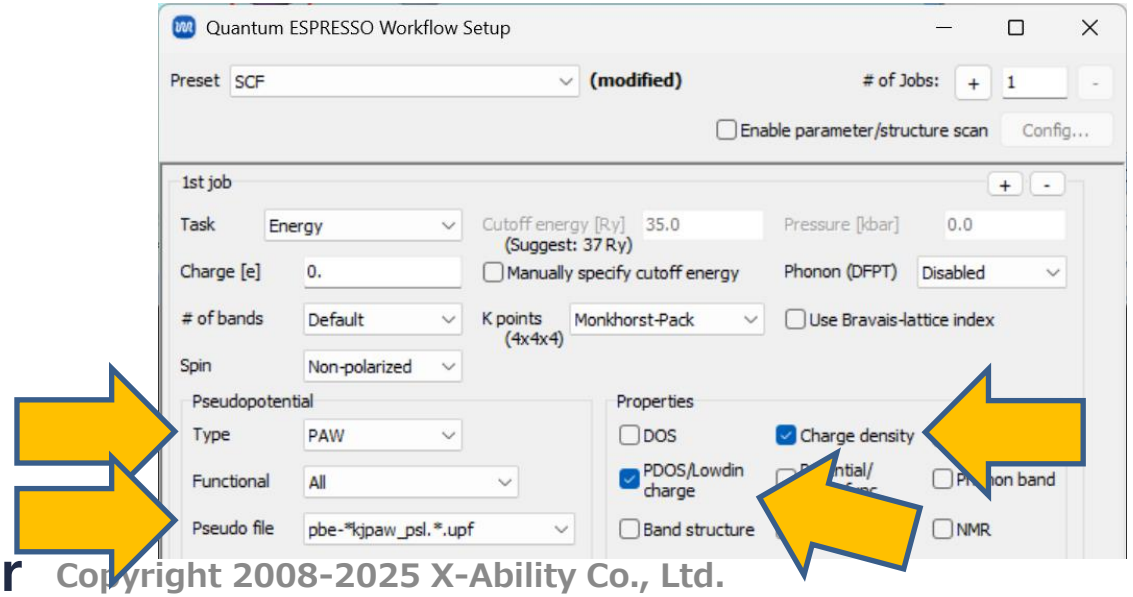
3. **ファイル | インポート | Samplesファイル | nacl.cif**をクリックします。
   - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。
4. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。



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

II. 計算の実行

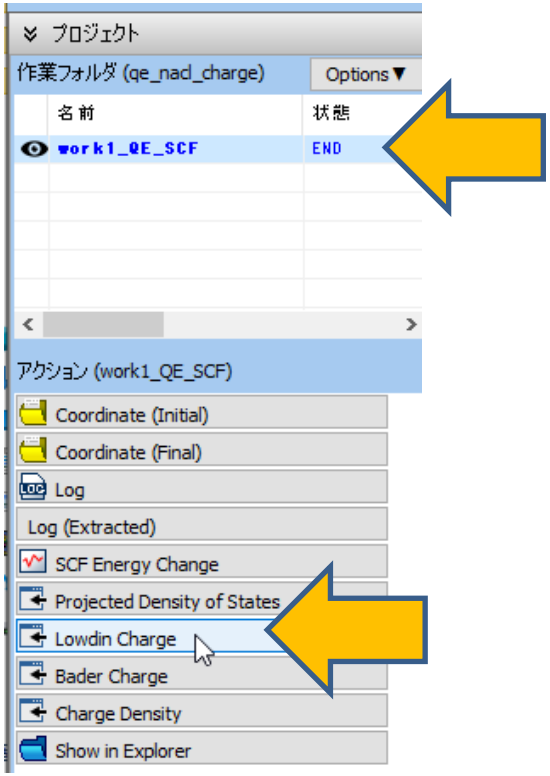
1. **ソルバ**から**Quantum ESPRESSO**を選択し **(ワークフロー設定)** をクリックします。
2. 「現在のセルはプリミティブセルに変換可能です…変換しますか？」と表示されたら**はい**をクリックします。
3. Bader電荷の算出がPAWにしか対応していないため、**Pseudopotential**の**Type**を**PAW**に変更します。そして**Pseudo file**を**pbe-*kjpaw_psl.*.upf**に変更します。
   - 計算したい元素のPAW擬ポテンシャルが出現しない場合はこちらの手順で擬ポテンシャルを追加します。
4. **Properties**の**PDOS/Lowdin charge**と**Charge density**（**Charge density**はBader電荷の算出に必要）にチェックを入れます。
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。

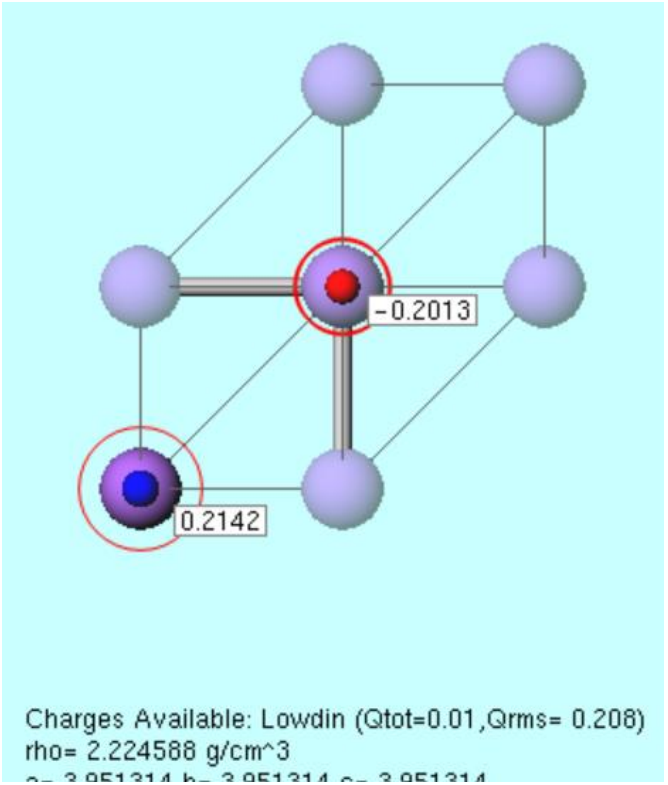


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

III.結果解析（Löwdin電荷）

1. work1_QE_SCF の作業フォルダの**状態**が**END**または**END(-)**に変化したら、「work1_QE_SCF」をクリックし、**アクション**で**Lowdin Charge**をクリックします。
2. 分子表示エリアに算出されたLowdin電荷が表示されます。表示されない場合はツールバー1段目右の**ラベル/電荷**を「Lowdin電荷」に変更します。分子表示エリア下部には電荷の合計値（**Qtot**）と二乗平均平方根（**Qrms**）が表示されます。

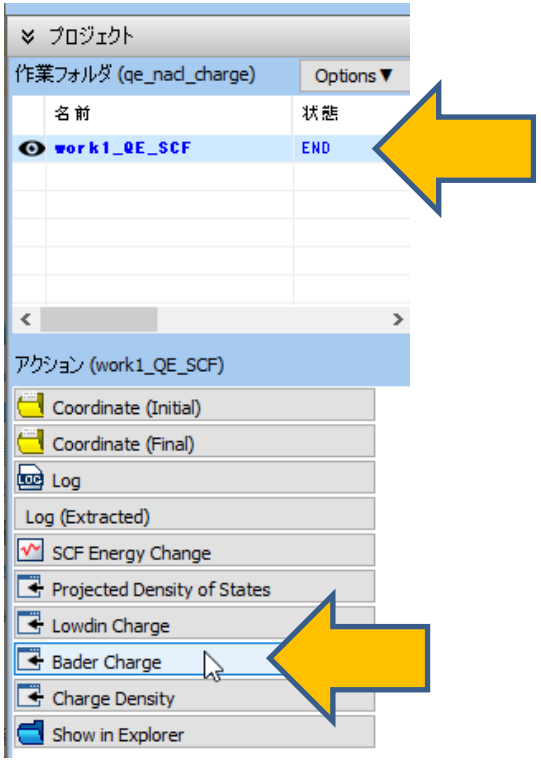


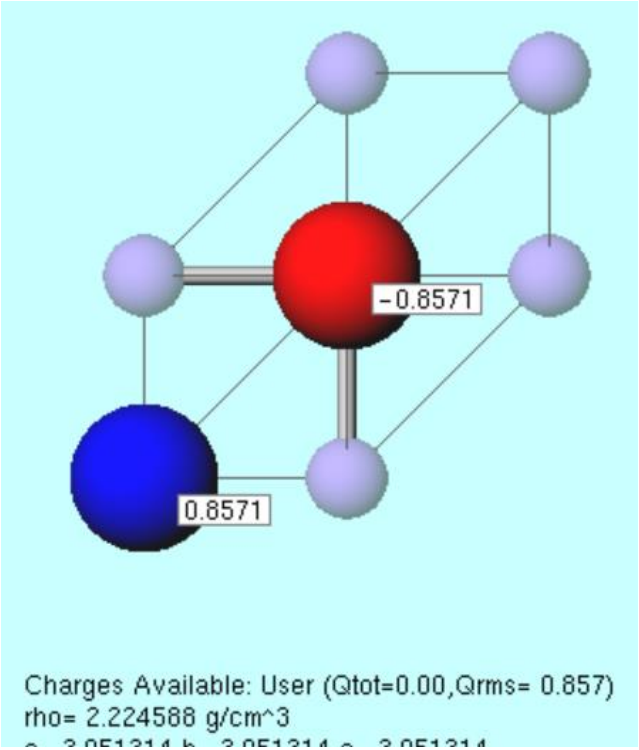


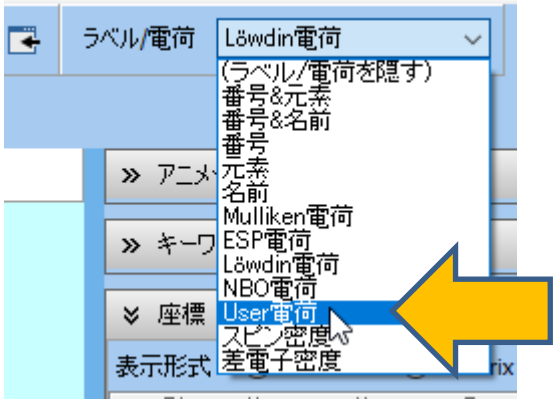
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

III.結果解析（Bader電荷）

1. **アクション**で**Bader Charge**をクリックします。（Winmostar V11プロフェッショナル版エリートのみ可能です）
2. 分子表示エリアに算出されたBader電荷が表示されます。表示されない場合はツールバー1段目右の**ラベル/電荷**を「User電荷」に変更します。分子表示エリア下部には電荷の合計値（**Qtot**）と二乗平均平方根（**Qrms**）が表示されます。







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.