M winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO バンド・k点ごとの電荷密度

V11.12.0

2025年6月19日 株式会社クロスアビリティ

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



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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。



- 本チュートリアルでは、バンド・k点ごとの電荷密度可視化の手順を示す例としてルチル型TiO2 中における局所的なひずみを伴う分極場(スモールポーラロン)の計算・解析を取り上げます。 ルチル型TiO2のTiはバルク結晶中でTi4+状態にありますが、局所的なひずみを伴ってTi3+状態になります。その状態に由来する準位は状態密度とバンド・k点ごとの電荷密度から確認できます。 (参考文献: M. Reticcioli et al., Phys. Rev. B 98, 045306, (2018).)
- まず、ひずみのないバルク結晶の構造最適化計算を実行します。次にスーパーセルを作成し、 Ti³⁺状態にしたいサイトについてその周囲の酸素との結合距離を伸ばし局所的なひずみを与えま す。その後構造最適化計算を実行してTi³⁺状態における適切な原子配置を求め、Ti³⁺状態に由来 する部分状態密度と、そのバンドのΓ点における電荷密度を確認します。

注意点:

- ひずみのないバルク結晶状態ではTiのd軌道に電子がほとんど入らずオンサイトクーロン相互作用の寄与が小さいため、通常は+Uを使いません。一方、Ti³⁺状態ではd軌道に入る電子のオンサイトクーロン相互作用の寄与が無視できないため+Uが必須です。本書では歪みのないバルク結晶状態とひずみ付きスーパーセルの結果を直接比較したいためどちらも+Uで計算します。
- スーパーセルサイズは計算結果に影響を与えます。本書では計算時間を優先し小さいスーパーセルで計算しています。
- 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、Uパラメータは計算 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しい説明は、次の弊社記事をご覧くださ

 Winmostar copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.



- 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<u>推奨バージョン</u>以外のQuantum ESPRESSOを利用したい方は、別途<u>Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定</u>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。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(E) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



I. 系のモデリング(ひずみのないバルク結晶)

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_polaron_qe」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 | 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。
- 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。

II. 計算の実行(ひずみのないバルク結晶)

- 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、# of bandsを30 % more、Pseudo file をpbe-*van_ak.upfに変更し、PDOS/Lowdin charge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「Low」に変更します。
- 4. Detailsをクリックします。

🕺 Quantum	ESPRESSO Workflow Se	p			-		×
Preset Optimi	ze(Atom&Cell)] (ເ	modified)	# of Jo	bbs: +	1	
			Ena	ble parameter/stru	cture scan	Confi	g
1st job						+ -	
Task O	ptimize(Atom&Cell) 🗸 🗸	Cutoff energy [Ry] 35.0	Pressure [kbar]	0.0		
Charge [e]	0.	Manually spe	cify cutoff energy	Phonon (DFPT)	Disabled	~	
# of bands	30% more	آن آن	khorst-Pack 🗸 🗸 🗸	Use Bravais-la	attice index	:	
Spin	Non-polarized						
Pseudopote	ntial		Properties				
Туре	All 🗸		DOS	harge density	/ Phon	on DOS	
Functional	All	×	PDOS/Lowdin charge		Phon	on band	
Pseudo file	pbe-*van_ak.upf		Band structure		NMR		1
Precision	Medium ~	Metal		De	tails		

II. 計算の実行(ひずみのないバルク結晶)

- **1. Spin/DFT+U**タブで**Ida_plus_u**をチェックし、**Ti**の**Hubbard_U**の値を「4.0」に変更し **OK**をクリックします。
- 2. 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。



III.結果解析(部分状態密度)

(状態密度の確認が不要な場合は本ページの操作をスキップ)

- **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Projected Density of Statesをクリックします。
- グラフ左下のShow Settingをクリックし、X AxisのAutoscaleのチェックを外してMinを「-10」に変更、Y AxisのAutoscaleのチェックを外してMaxを「20」に変更し、バンドギャップ が現れてることを確認しCloseをクリックします。



- 1. アクションでCoordinate (Final) をクリックし、構造最適化後の構造を表示します。
- 2. **固体 | スーパーセルを作成**をクリックし、「…出力可能な形式に変更し編集を続行しますか?」と表示されたら**はい**をクリックします。
- 3. cを「3」に変更し、OKをクリックします。





- 1. 上部ツールバーのラベル/電荷を「番号」に変更します。
- 2. 下図のように10番のTiを中心に周囲の6つのOが見えるようにカメラの角度・倍率を適宜調整 します。





- 1. 10番のTiと8番のOを続けてクリックし、分子表示エリア左上の「Marked Order: 」に「8-10-…」と表示されるのを確認します。
- 2. 8番のOをCtrl+クリックし、分子表示エリア左上に「Group Selection: 1 Atoms (O) 」と表示されるのを確認します。
- 3. **グループ編集 | グループを並進移動(数値を指定)**をクリックし、**Two marked atoms** にチェックをいれ、その下のスライダーの右にあるテキストボックスに「0.1」と入力し**OK** 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。



🚾 Translate Group (N — 🗆 🗙
Definition Relative coordinate from original posi \checkmark
Direction
○ Coordinate Axis ○ Cel Vector
Two marked atoms
O Arbitrary Vector 1.0 0.0 0.0
0.1
0
Unit
Angstrom Fractional Coordinate
ок

- 1. 10番のTiと9番のOを続けてクリックし、分子表示エリア左上の「Marked Order: 」に「9-10-…」と表示されるのを確認します。
- 2. 9番のOをCtrl+クリックし、分子表示エリア左上に「Group Selection: 1 Atoms (O) 」と表示されるのを確認します。
- 3. **グループ編集 | グループを並進移動(数値を指定)**をクリックし、**Two marked atoms** にチェックをいれ、その下のスライダーの右にあるテキストボックスに「0.1」と入力し**OK** 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。



🞯 Translate Group (N — 🗆 🗙
Definition Relative coordinate from original posi
Direction
○ Coordinate Axis ○ Cell Vector
Two marked atoms
O Arbitrary Vector 1.0 0.0 0.0
0.1
0
Unit
Angstrom Fractional Coordinate
ок

- 1. 10番のTiと11番のOを続けてクリックし、分子表示エリア左上の「Marked Order: 」に 「11-10-…」と表示されるのを確認します。
- 2. 11番のOをCtrl+クリックし、分子表示エリア左上に「Group Selection: 1 Atoms (O) 」と 表示されるのを確認します。
- 3. **グループ編集 | グループを並進移動(数値を指定)**をクリックし、**Two marked atoms** にチェックをいれ、その下のスライダーの右にあるテキストボックスに「0.1」と入力し**OK** 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。



🚾 Translate Group (N — 🔲 🗙
Definition Relative coordinate from original pos \checkmark Direction
Coordinate Axis Cov Vector Two marked atoms
O Arbitrary Vector 1.0 0.0 0.0
0.1
0
Unit
Angstrom Fractional Coordinate OK

- 1. 10番のTiと12番のOを続けてクリックし、分子表示エリア左上の「Marked Order: 」に 「12-10-…」と表示されるのを確認します。
- 2. 12番のOをCtrl+クリックし、分子表示エリア左上に「Group Selection: 1 Atoms (O) 」と 表示されるのを確認します。
- 3. **♂ループ編集 | グループを並進移動(数値を指定)**をクリックし、**Two marked atoms** にチェックをいれ、その下のスライダーの右にあるテキストボックスに「0.1」と入力し**OK** 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。

N= 18 TI6O12 M= 479.19 Marked Order: 12 - 10 - 11 - 9 Marked Atom: X= 3.717488 Y= 0.902 Length= 1.990484 Angle= 180 Dihedr Group Selection: 1 Atoms (O)

- 1. 10番のTiと14番のOを続けてクリックし、分子表示エリア左上の「Marked Order: 」に 「14-10-…」と表示されるのを確認します。
- 2. 14番のOをCtrl+クリックし、分子表示エリア左上に「Group Selection: 1 Atoms (O) 」と 表示されるのを確認します。
- 3. **グループ編集 | グループを並進移動(数値を指定)**をクリックし、**Two marked atoms** にチェックをいれ、その下のスライダーの右にあるテキストボックスに「0.1」と入力し**OK** 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。



🚾 Translate Group (N — 🔲 🗙
Definition Relative coordinate from original pos V
Coordinate Axis
Two marked atoms
O Arbitrary Vector 1.0 0.0 0.0
0.1
0
0
Unit
Angstrom Fractional Coordinate
ок

- 1. 10番のTiと15番のOを続けてクリックし、分子表示エリア左上の「Marked Order: 」に 「15-10-…」と表示されるのを確認します。
- 2. 15番のOをCtrl+クリックし、分子表示エリア左上に「Group Selection: 1 Atoms (O) 」と 表示されるのを確認します。
- 3. **グループ編集 | グループを並進移動(数値を指定)**をクリックし、**Two marked atoms** にチェックをいれ、その下のスライダーの右にあるテキストボックスに「0.1」と入力し**OK** 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。



國 Translate Group (N — 🗆 🗙	
Definition Relative coordinate from original pos	
○ Coordinate Axis ○ Cell Vector	
Two marked atoms	
O Arbitrary Vector 1.0 0.0 0.0	
0.1	
0	
Angstrom Fractional Coordinate	
ОК	

V. 計算の実行(ひずみ付きスーパーセル)

- 1. **〇 (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?」と表示されたらいいえを クリックします。
- 2. PresetからOptimize (Atom)に変更します。
- 3. Chargeを「-1」、# of bandsを30 % more、SpinをPolarized、 Pseudo fileをpbe-*van_ak.upfに変更し、MetalとPropertiesのPDOS/Lowdin charge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「Low」に変更します。
 - 4並列でPrecision=Mediumでは1時間程度、Precision=Lowでは15分程度掛かります。
- 5. Detailsをクリックします。



V. 計算の実行(ひずみ付きスーパーセル)

- **1. Spin/DFT+U**タブで**Use tot_magnetization**にチェックを入れその右に「1」と入力しま す。
- **2. Ida_plus_u**をチェックし、**Ti**の**Hubbard_U**の値を「4.0」に変更し**OK**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。

		Quantum ESPRESSO Keyword Setup	– 🗆 ×
		Preset	ew Options Properties Pseudopotential on NMR/EFG MD Dipole Corr ESM
		starting_magnetization	Atom Hubbard_U (eV)
		Atom Starung Magnetization Ti 0.0 O 0.0	0 0.0
		Use spin Density as starting_magnetization	
		Reset Import Export	
M winmostar	Copyrigh	t 2008-2025 X-Abili	ty Co., Ltd.

VI.結果解析(部分状態密度)

(状態密度の確認が不要な場合は本ページの操作をスキップ)

- **1. 作業フォルダでwork2_QE_Relax**の状態がEND(青)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でProjected Density of Statesをクリックします。
- **2. Check atom using viewport**をクリックし、セル中心にあるTiをクリックしたら**OK**をクリックします。
- 3. BandでTotalにチェックをいれDrawをクリックします。



VI.結果解析(部分状態密度)

(状態密度の確認が不要な場合は本ページの操作をスキップ)

- グラフ左下のShow Settingをクリックし、X AxisのAutoscaleのチェックを外してMinを 「-10」に変更、Y AxisのAutoscaleのチェックを外してMinを「-20」、Maxを「20」に 変更し、バンドギャップ間に歪み中心のTiのd軌道に由来した準位が出現しているのを確認し ます。
- 2. Closeをクリックします。



ログから可視化したいk点の番号(F点)とバンドの番号(Ef付近のバンド)とを調べます。

- 1. **アクション**でLogをクリックします。
- ログの「number of k points= …」の行の下に各k点の逆空間上の座標が書かれている箇所を探します。「k(1) = (0.00000000 0.00000000 0.00000000), …」とあるので、 1番目のk点がΓ点であると判断します。



🥘 pw.pwout - 义モ帳		
ファイル(F) 編集(E) 書式(O)) 表示(V) ヘルプ(H)	
17 18	0 tau(17) = (0.1953502 0.8046498 0.8333333) 0 tau(18) = (0.8046498 0.1953502 0.8333333)	
number of k poi	ints= 24 Gaussian smearing, width (Ry)= 0.0200 🛛 🖊	
k(1) = (cart. coord. in units 201/alat (0.0000000 0.0000000 0.0000000). wk = 0.0133333	
k(2) = ((0.0000000 0.0000000 0.1735707), wk = 0.0266667	
k(3) = ((0.0000000 0.2000000 0.0000000), wk = 0.0533333	

1. ログの中で最後に「End of self-consistent calculation」と出現する箇所を探し (構造最適化計算の最後のSCF計算の情報)、その次に「occupation numbers」と書かれ る箇所を探します(F点における各バンドの占有数のリスト)。ここで占有数が1から0に変わ る直前の箇所を探し、それが左上から数えて何番目であるかを数えます。(ここでは73番 目)これがEf付近のバンドの番号です。

End of self-consistent calculation

---- SPIN UP -----|

k = 0.0000 0.0000 0.0000 (7819 PWs) bands (ev):

	$\begin{array}{c} -48.9600\\ -25.2269\\ -25.0406\\ -9.2569\\ -7.6941\\ 4.3287\\ 5.0529\\ 6.3339\\ 7.4341\\ 9.4602\\ 12.0325\\ 12.9009 \end{array}$	-48.9387 -25.2068 -25.0228 -8.4459 -7.5235 4.4512 5.2070 6.7506 7.4424 11.3227 12.1712 13.1036	-48.9335 -25.1595 -25.0201 -8.3900 -7.5103 4.4717 5.4197 6.7866 7.8347 11.6029 12.2714 13.6703	-48.8365 -25.1579 -25.0172 -7.9814 -7.3655 4.9388 5.6055 6.8861 8.0223 11.6374 12.4401 13.7654	-48.8223 -25.1552 -24.9971 -7.8190 3.2488 4.9630 5.6675 6.9150 8.0996 11.6678 12.4591 13.8389	-47.6149 -25.1173 -24.0578 -7.7933 3.7245 5.0003 5.7944 7.0084 8.4247 11.6833 12.5246 14.0158	-25.3226 -25.1103 -23.8399 -7.7239 4.2736 5.0063 5.8941 7.3470 8.4287 11.7727 12.8280	-25.3083 -25.0644 -23.7012 -7.7056 4.2829 5.0214 6.2526 7.4109 8.9457 11.8989 12.8668
	occupat	ion numbe	ers					
	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
	1 0000	1 0000	1 0000	1 0000	1 0000	1 0000	1 0000	1 0000
	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
N	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
	1 0000		0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		

- 1. **〇 (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?」と表示されたら**はい** をクリックします。
- 2. work2_QE_Relaxをクリックし、OKをクリックします。
- 3. Details… (modified)をクリックします。
- **4. Basic**タブで**calculation**を「nscf」に変更します。

₩ 937 ジョブの新	の継続元の作業フォ	ルッを選択 ダを選択して	ください	_		~								
名前		状態	プロファイル	出力ファイ	ル場所	評別		Quantum ESPRESSO) Keyword Setup				— C	
work1_Q	E_Relax	END	pbs_e×ample	Local&Ren	note									
work2_Q	E_Relax	END	pbs_example	Local&Ren	note									
<				_		Ņ		Preset		\sim				
								RISM (1)	Others	Preview	Options	Properties	Pseudo	potential
				ок	\leq			Basic	Spin/DFT+U	Phonon	NMR/EFG	MD I	Dipole Corr	ESM
								restart_mode	Automatically set	Æ	Set ibrav =	9 and celldm		
 seudopotent	ial		Properties					calculation	nscf <		E	50.0		
ype	All 🗸		DOS	Charge density	Phono	n DOS		# of bands	Do not specify		Ecut for US/PA	W Spec	ify ecutrho/e	ecutw ~
Functional	All	\sim	PDOS/Lowdin charge	Potential/ Work func	Phono	n band		(# valence bands: 72) nbnd	72		(Density) ecutrho	450		
seudo file	pbe-*van_ak.upf	\sim	Band structure	Dielectric func	NMR		1	1 105 1 10 3	<u>~</u>					
ecision	Medium \vee	✓ Metal		Details	(modified) 🕞								

- **1.** PropertiesタブでPDOS/Lowdin chargeのチェックを外し、Wave Functionにチェック を入れます。
- **2. Wave Function**の行をクリックし、その右で**kpoint(1)**に「1」(Γ点)、**kband(1)**に 「73」(Ef付近のバンド)と入力し**OK**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。

	Properties	&inputpp	Values	
	Band structure plot DOS plot PDOS plot/Lowdin charge Fermi surface Dielectric function Charge density Charge density (AE)	kpoint(1)	1	
		kpoint(2)	0	
		kband(1)	73	
		kband(2)	0	-
		lsign	False	
		spin_component(1)	0	
		spin_component(2)	0	
	Spin density		-	
	Wave Function			
	STM Images	K_POINTS		
	Potential Energy Detection function	Set default k-path		
			1	
			*	
				_
-		Г		
F	eset Import Export		ОК	R

VIII.結果解析(バンド・k点ごとの電荷密度)

- 作業フォルダでwork3_QE_NSCFの状態がEND(青)に変化した後、作業フォルダで work3_QE_NSCFをクリックしアクションでWave Functionをクリックします。
 - Cube PlotウィンドウのIsosurface Valueを変更してDrawをクリックすることで、異なる等値面の作図が可能です。



Isosurface Value=0.0015の場合



• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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<u>よくある質問</u>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