

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

有効質量

V11.17.0

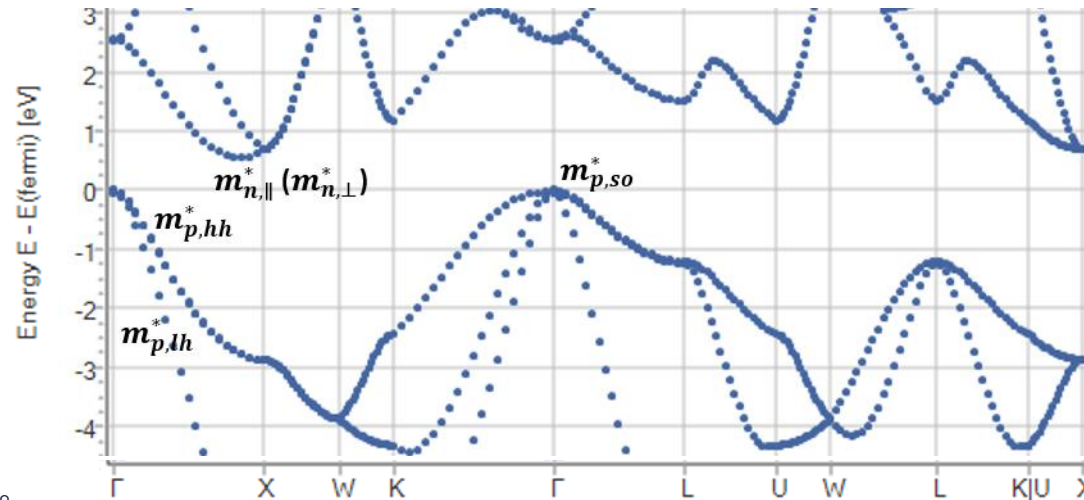
2026年7月14日 株式会社クロスアビリティ

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。
- 本書ではSi結晶の電子有効質量（以降、有効質量）をバンド分散の二次関数フィッティングから算出する手法を紹介します。
- Si結晶のバンド分散より Γ 点 $\rightarrow$ X点からheavy hole ($m_{p,hh}^*$), light hole ($m_{p,lh}^*$)の有効質量を、そして縦有効質量 ($m_{n,\parallel}^*$)、横有効質量 ($m_{n,\perp}^*$)を算出します。
- 相対論効果を露わに考慮することで Γ 点付近の3重縮退を解き (split off) $m_{p,so}^*$ を算出します。



注意点：

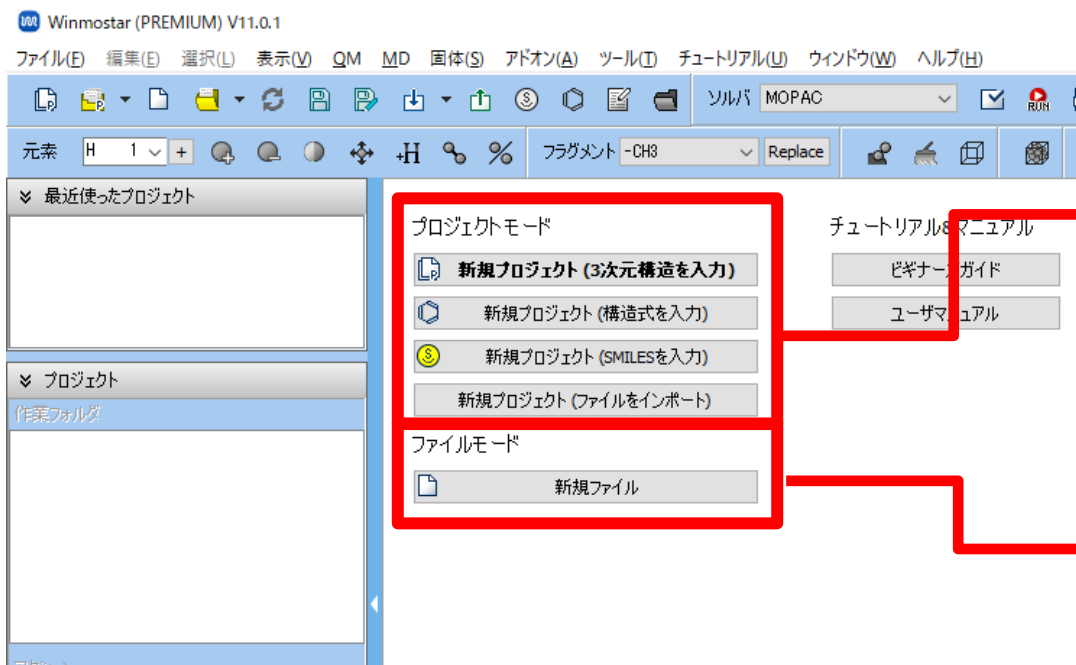
- k点の取り方、擬ポテンシャルの選択、バンド計算の精度は計算結果に影響を与えます。
- Quantum ESPRESSOの計算方法及び計算設定内容の詳しい説明は、次の弊社記事をご覧ください。
https://qiita.com/xa_member

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。



プロジェクトモード **V11新機能**

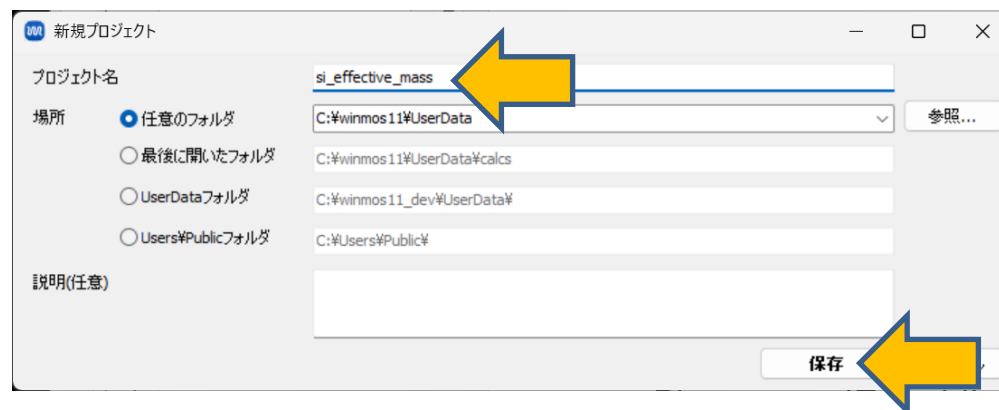
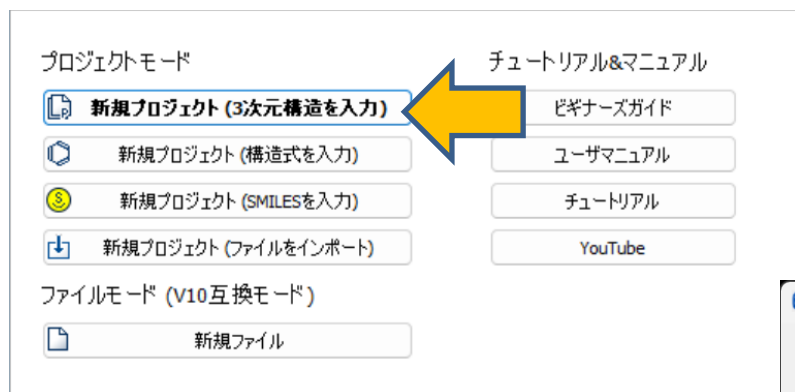
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。
基本的にこのモードを推奨します。

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 (Siバルク)

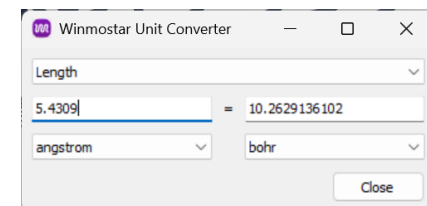
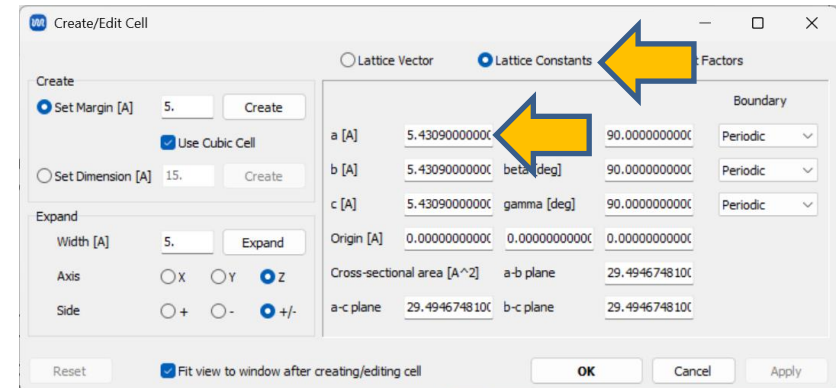
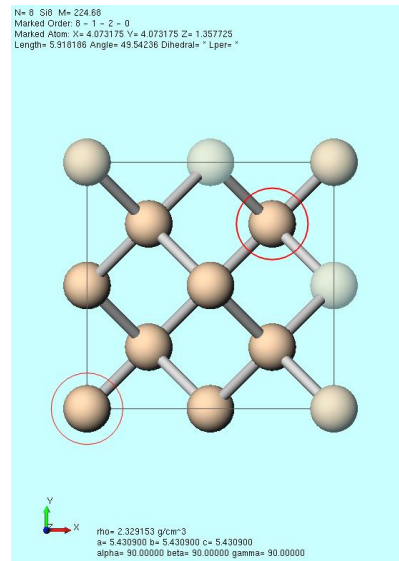
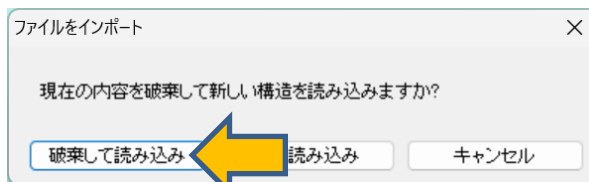
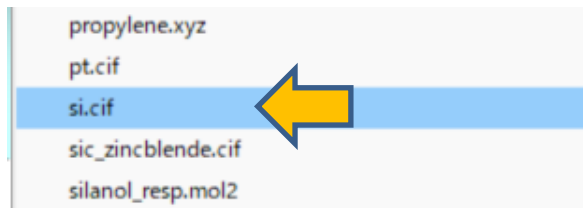
- 基本的な操作方法是QE基礎編チュートリアルを参照してください。
 - 初期構造の作成方法の詳細はWinmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法を参照してください。
- Winmostarを起動し、**新規プロジェクト (3次元構造を入力)** をクリックします。(すでに起動している場合は先に**ファイル | 閉じる**をクリックします。)
 - プロジェクト名に「`si_effective_mass`」と入力し保存をクリックします。



I. 系のモデリング (Siバルク)

Si結晶構造を作成します。

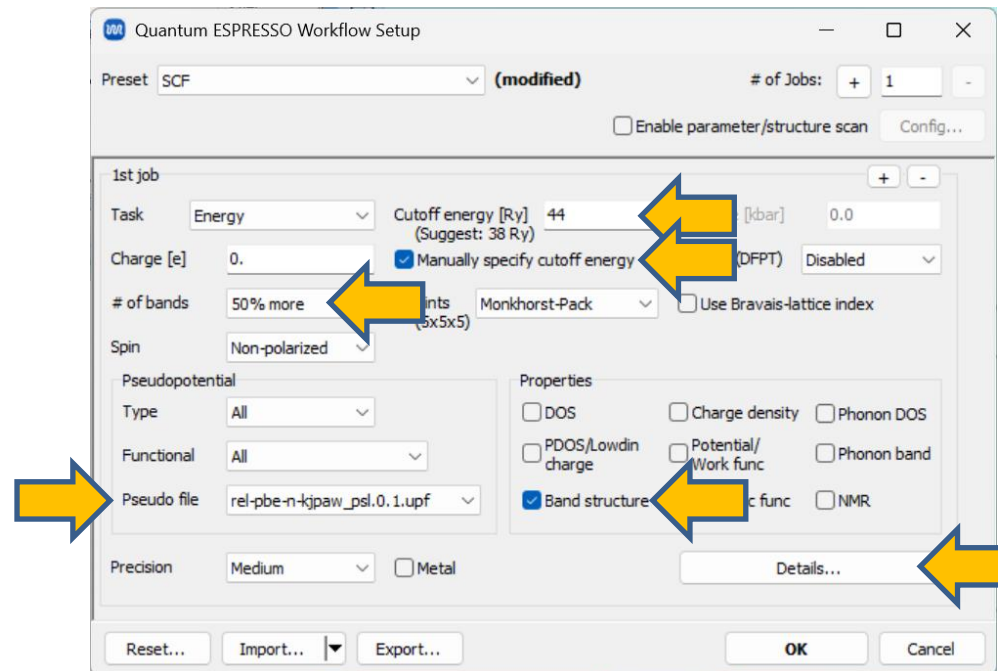
1. **ファイル | インポート | Sampleファイル**までカーソルを運びます。
2. サンプルファイル群の中から「**si.cif**」を選択します。
3. **現在の内容を破棄して**・・・のウィンドウが出ますので、「破棄して読み込み」を選択します。
4. Siのコンベンショナルセルがメインウィンドウに生成されます。
5. **編集 | セルを作成/編集 | 手動でセルを編集**をクリックし**Create/Edit Cell**ウィンドを開きます。**Lattice Constants**を選択しセル長さ **a [Å]**の値から**ツール | 単位を変換**を用いてBohr長さに変換し値をメモしておきます（ここでは変換後長さ： $L_a = 10.2629$ [Bohr]）。



II. 計算の実行（ $\Gamma \rightarrow X$ ）

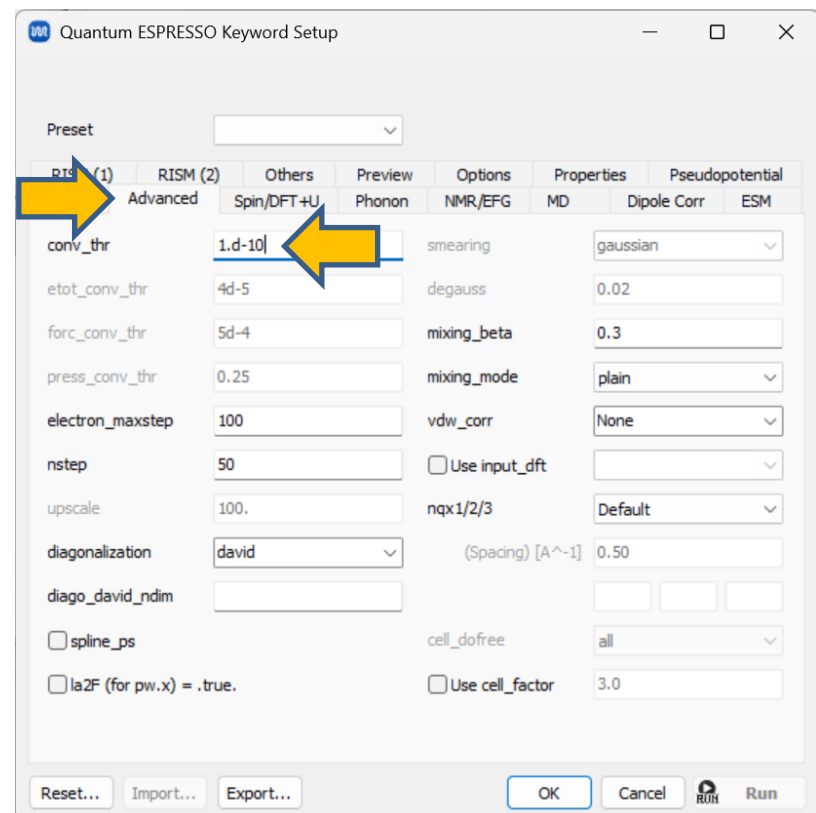
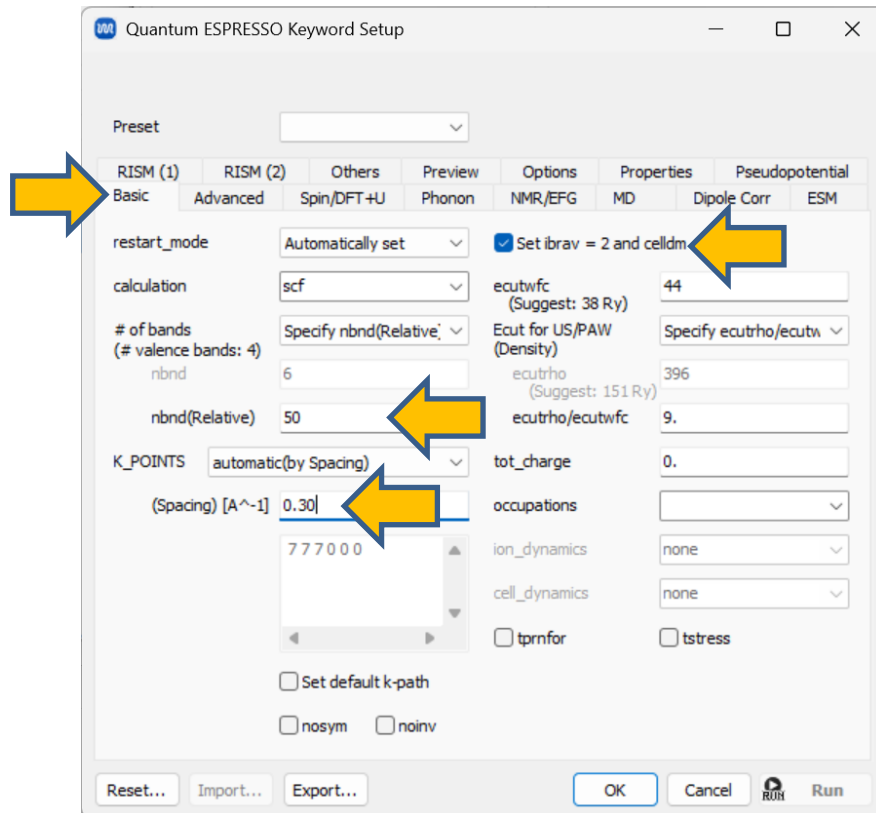
ここではSi結晶の Γ 点からX点までのバンド分散を計算します。

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。プリミティブセルへの変換については**はい**をクリックします。
2. **# of bands**を「50% more」に変更してから、**Pseudo file**を相対論効果を露わに考慮したPAWポテンシャルである「rel-pbe-n-kjpaw_psl.0.1.upf」に変更します。Manually specified cutoff energyにチェックを入れ値を「44」に変更します。
3. **Properties**の**Band structure**にチェックを入れ、**Details**をクリックします。



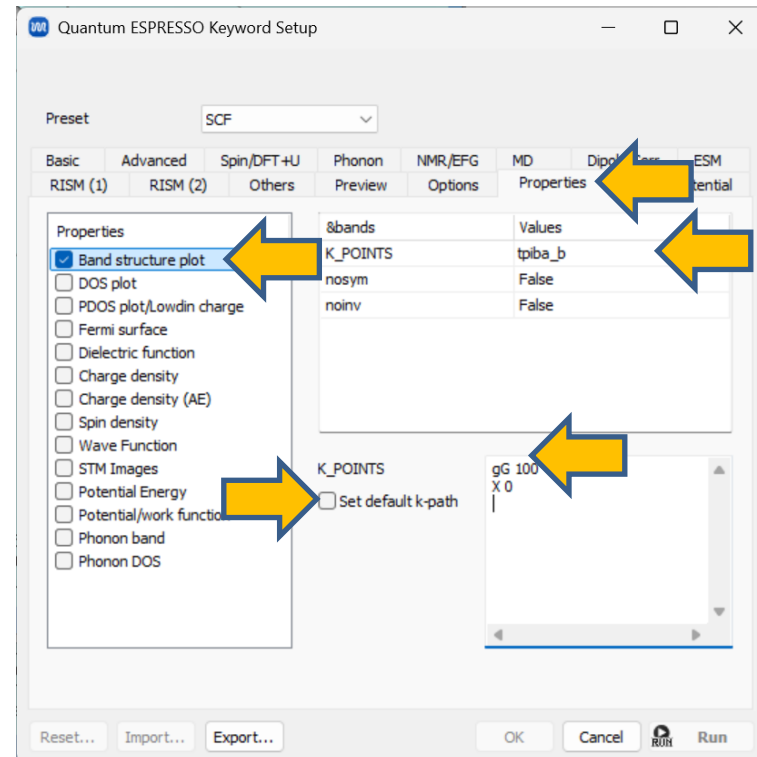
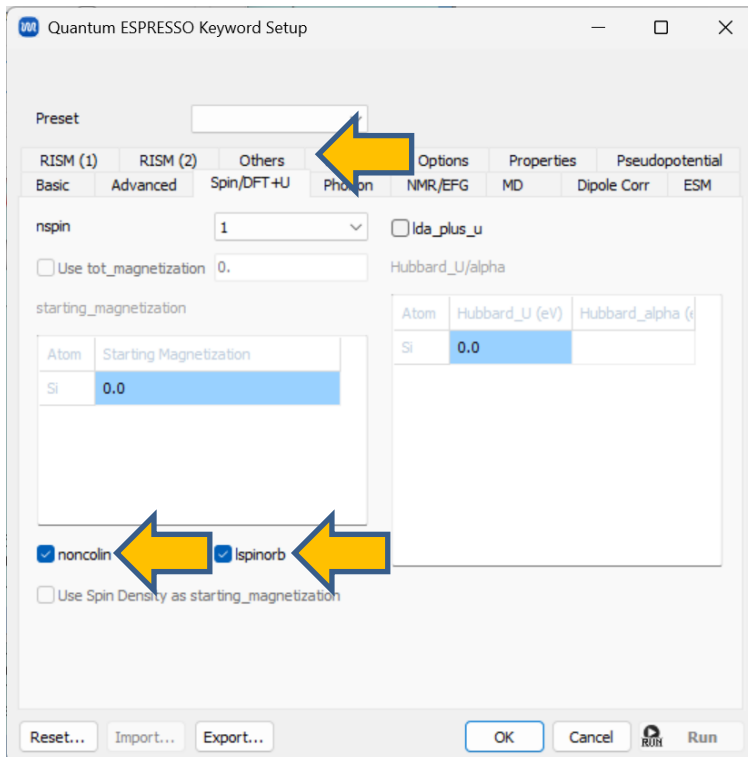
II. 計算の実行（ $\Gamma \rightarrow X$ ）

4. BasicタブにてSet **ibrav = 2 and celldm**にチェックを入れます。
5. **K_POINTS** は「automatic(by spacing)」とし、**(Spacing) [$\text{\AA}^{-1}$]**を「0.30」に変更します。
6. Advancedタブをクリックします。**conv_thr**の値を「1.d-10」と書換えます。



II. 計算の実行（ $\Gamma \rightarrow X$ ）

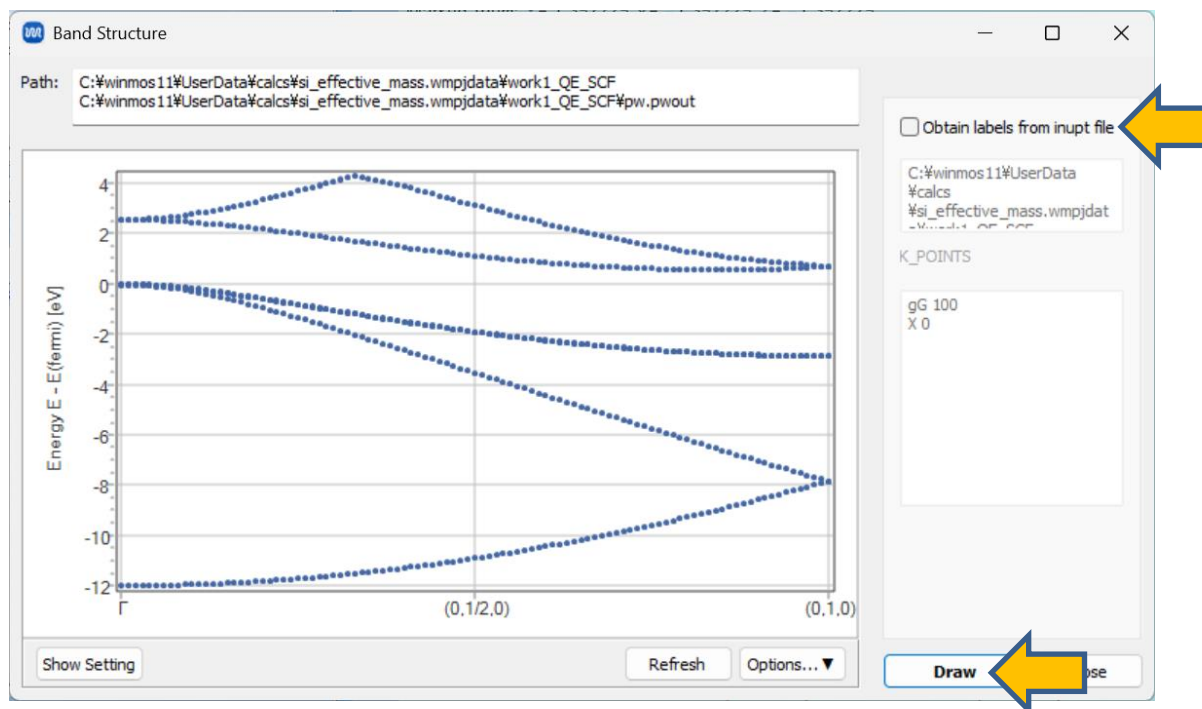
7. **Spin/DFT+U**タブをクリックし、**noncolin**と**lspinorb**にチェックを入れます。
8. **Preproperties**タブをクリックし、**K_POINTS**を「tpiba_b」に変更します。**Set default k-path**のチェックを外し、隣のボックスに記載を「gG 100」「X 0」に書換えます。
9. **OK**をクリックし詳細設定画面から抜けます。最後に **OK** を押します。Workflow Setup画面に移行するのでそこで再度**OK**を押すことで計算実行します。



III.バンド解析（ $\Gamma \rightarrow X$ ）

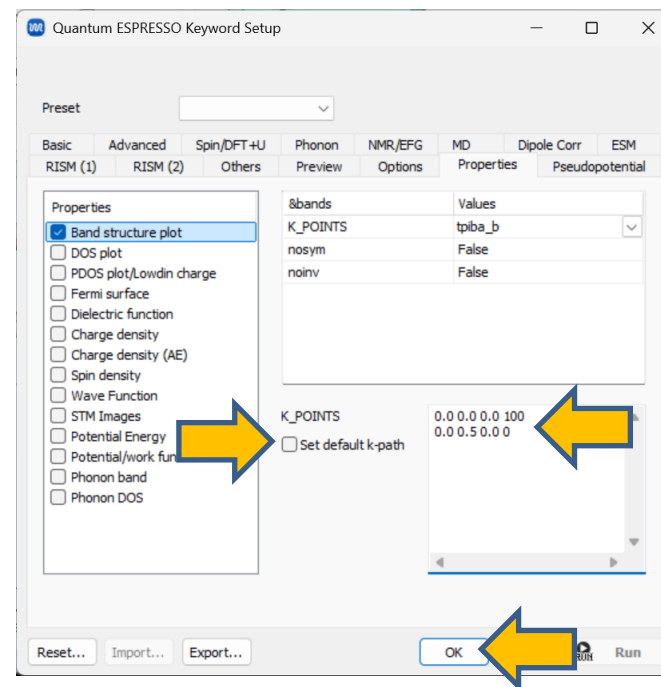
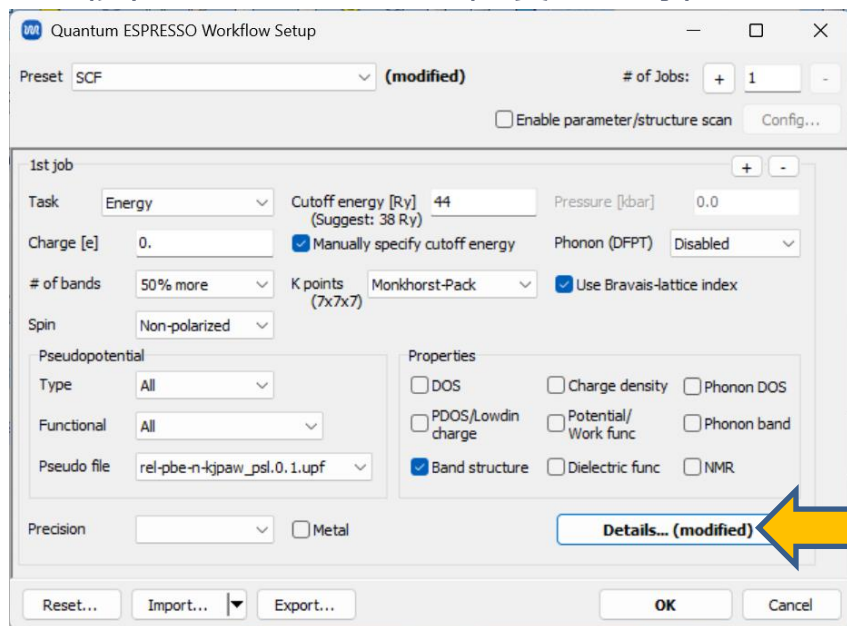
1. **アクション | Band structure**をクリックすることで、バンド構造が図示されます。**Obtain labels from input file**のチェックを外して**Draw**をクリックすると、バンド図の横軸の表記が変わり第一ブリルアンゾーン内座標で記載されます。

- $\Gamma(0\ 0\ 0) \rightarrow (0, 1/2, 0)$ から $m_{p,hh}^*$, $m_{p,lh}^*$ を計算し、 $(0, 1/2, 0) \rightarrow (0, 1, 0)$ から $m_{n,\parallel}^*$ を計算します。



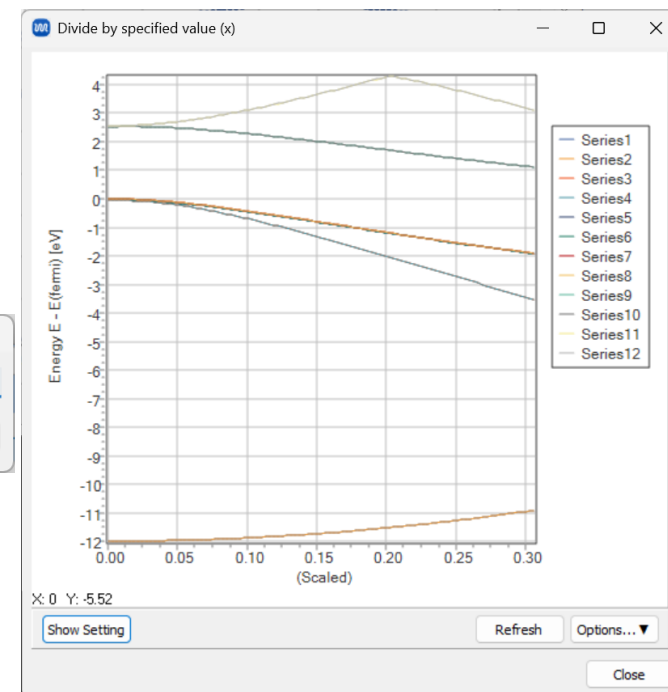
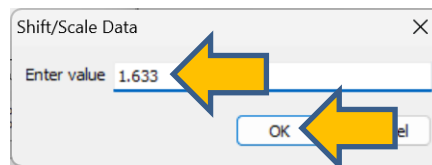
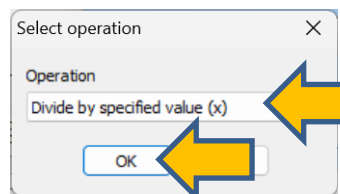
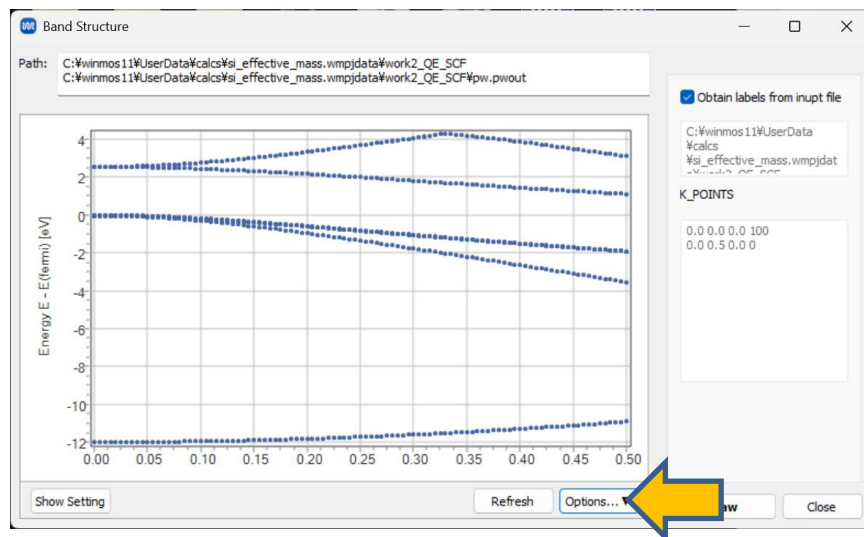
IV.計算の実行（ $(0,0,0) \rightarrow (0,1/2,0)$ ）

1. ワークフローセットアップをクリックします。継続ジョブを実行しますか？には「いいえ」を選択し、続くプリミティブセルに変換しますか？に「はい」を選択します。
2. **Details**をクリックし、**Properties**タブを選択します。**Set default k-path**のチェックが外れている事を確認し、隣のボックスに「0.0 0.0 0.0 100」「0.0 0.5 0.0 0」を入力します。
3. **OK**をクリックし詳細設定画面から抜けます。最後に **OK** を押します。Workflow Setup画面に移行するのでそこで再度**OK**を押すことで計算実行します。



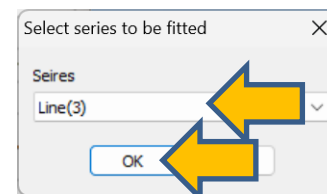
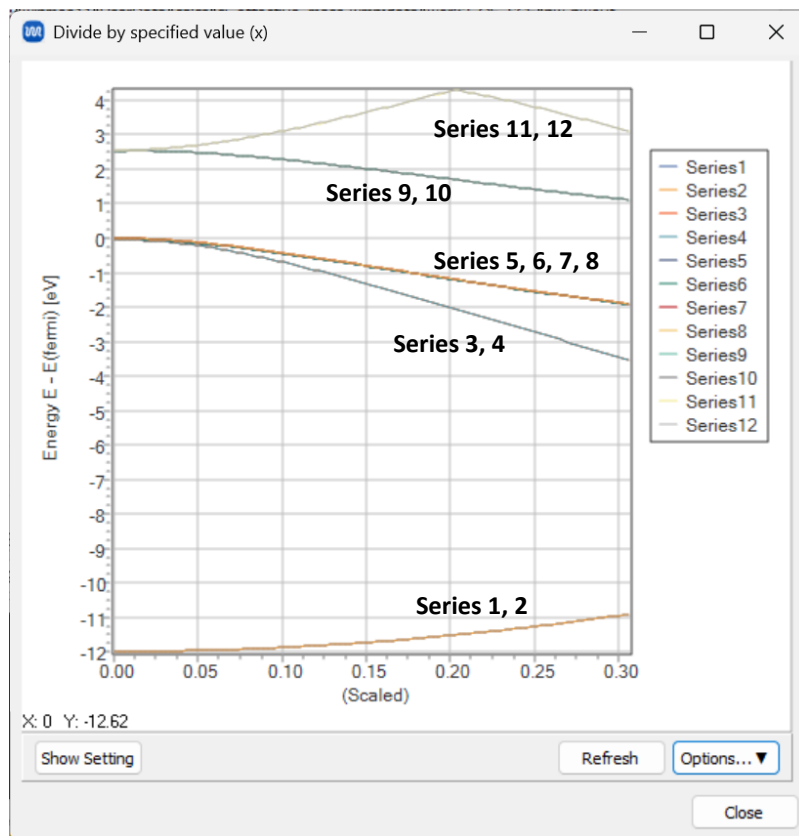
V. バンド解析 ($(0,0,0) \rightarrow (0,1/2,0)$)

1. **アクション | Band structure**をクリックしバンド図を表示します。**Option | Shift/Scale data**を選択します。横軸を $2\pi/L_a$ の単位に変換するため、**Operation**は「Divide by specified value (x)」を選択します。
2. 続いて割る値を入力しますが、ここでは $L_a/2\pi = 10.2629 [\text{Bohr}]/2\pi = 1.633$ を入力します。
 - L_a はSi結晶のセル長さ(コンベンショナルセル)です。p.7で単位変換したセル長さを用います。

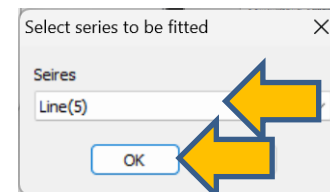


V. バンド解析 ($(0,0,0) \rightarrow (0,1/2,0)$)

3. 横軸が $2\pi/L_a$ でスケールされた新たなバンド図を用いて電子有効質量の導出を行います。**Options**をクリックし「Fit curve」を選択します。続いてフィッティングを適用するカーブを選択します。 $m_{n,lh}^*$ を導出する際は「Line(3)」あるいは「Line(4)」を、 $m_{n,hh}^*$ を導出する際は「Line(5)」 「Line(6)」 「Line(7)」 「Line(8)」のいずれか一つを選択します。



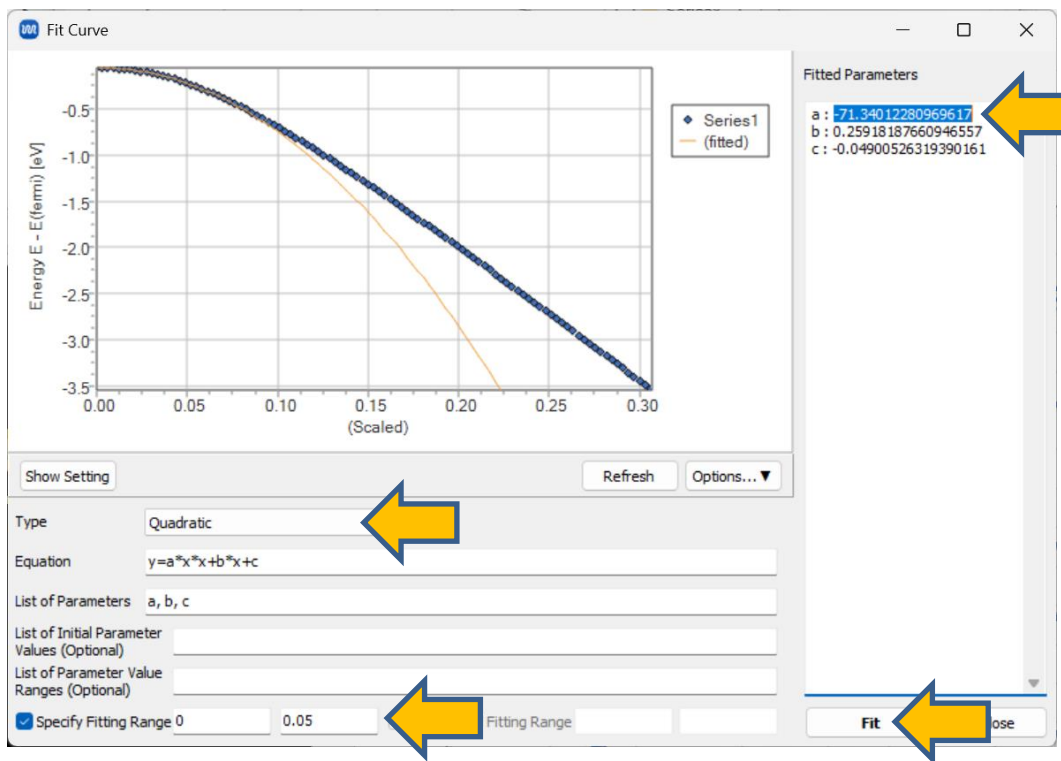
$m_{n,lh}^*$ の場合



$m_{n,hh}^*$ の場合

VI.有効質量の算出 ($m_{p,lh}^*$, $m_{p,hh}^*$)

1. **Fit curve** ウィンドウで **Type** を「Quadratic」を選択します。**Specify Fitting Range** にチェックを入れることで、でフィッティングを掛ける範囲を指定することができます。ここでは「0」から「0.05」の範囲とします。**Fit** をクリックすることでカーブフィッティングが実行されフィッティングパラメータが左側のボックスに出力されます。light-hole有効質量の計算に必要な数値は a : -71.34012280969617 です。



VI.有効質量の算出 ($m_{p,lh}^*$, $m_{p,hh}^*$)

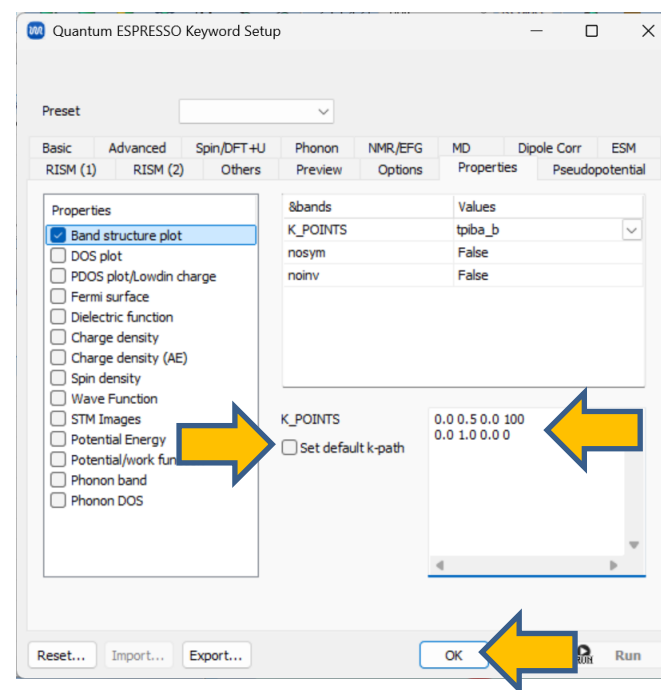
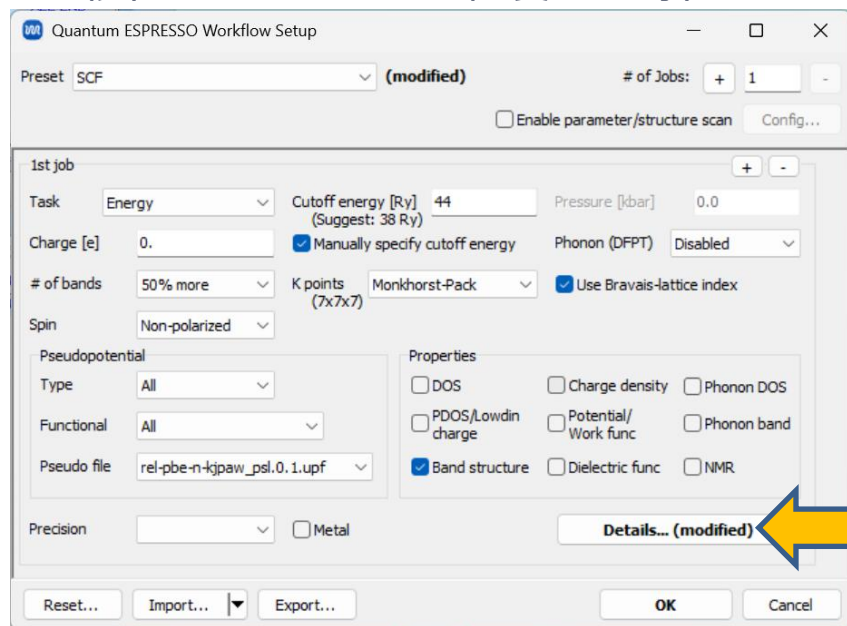
2. 有効質量は $m^* = 1/(a \times \langle \text{eV2Ry} \rangle)$ より算出できます。 a は前項で得られたフィッティングパラメータです。 eV2Ry は単位変換($\text{eV} \rightarrow \text{Ry}$)で値は0.073498586です。この値は**ツール | 単位を変換**から取得することができます。計算すると $m_{n,lh}^* = \frac{1}{(-71.34012280969617 \times 0.073498586)} = -0.1907m_e$ と算出されます。
3. p.15のLine(5)についてフィッティングを同じ条件で実行すると、フィッティングパラメータは $a = -48.051313027376096$ が得られました。この値を用いてheavy-hole側の有効質量は $m_{n,hh}^* = \frac{1}{(-48.051313027376096 \times 0.073498586)} = -0.2831m_e$ が得られます。先行研究と比較すると以下のようになり先行研究の結果を再現している事が分かります

	Winmostar	先行研究[1]	
		実験	計算
$m_{p,lh}^*$	-0.191	-0.171	-0.193
$m_{p,hh}^*$	-0.283	-0.46	-0.267

[1] Phys. Rev. B **106**, 045204 (2022)

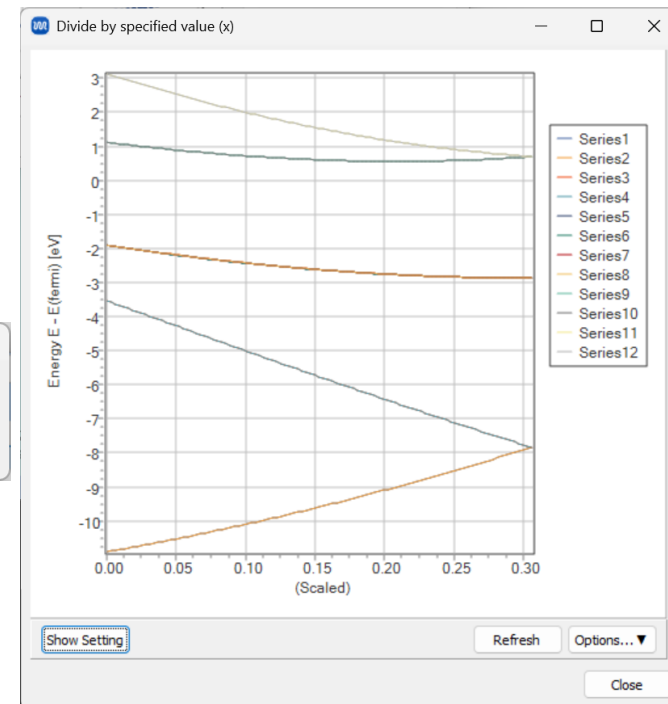
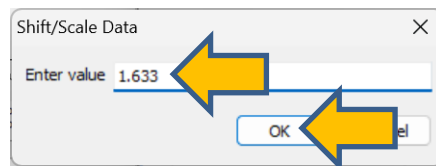
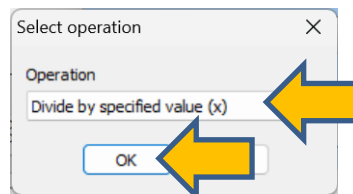
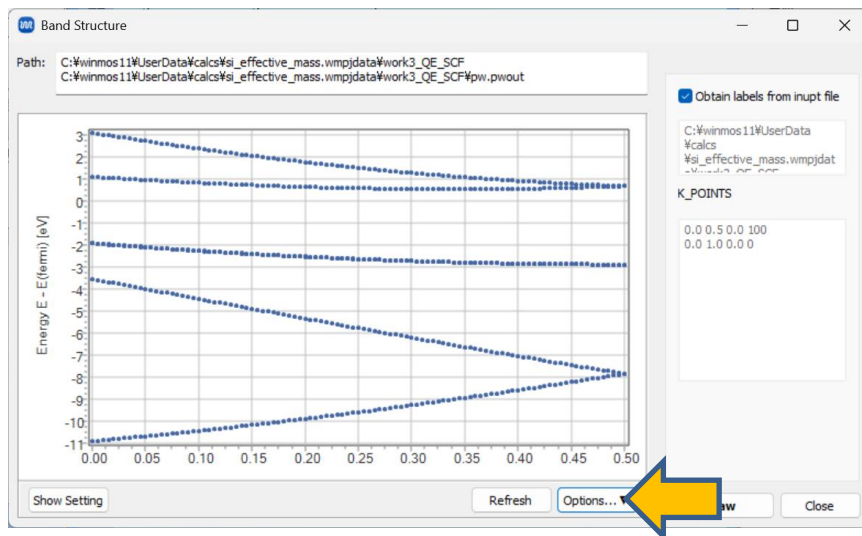
VII.計算の実行（ $(0,1/2,0) \rightarrow (0,1,0)$ ）

1. ワークフローセットアップをクリックします。継続ジョブを実行しますか？には「いいえ」を選択し、続くプリミティブセルに変換しますか？に「はい」を選択します。
2. **Details**をクリックし、**Properties**タブを選択します。**Set default k-path**のチェックが外れている事を確認し、隣りのボックスに「0.0 0.5 0.0 100」「0.0 1.0 0.0 0」を入力します。
3. **OK**をクリックし詳細設定画面から抜けます。最後に **OK** を押します。Workflow Setup画面に移行するのでそこで再度**OK**を押すことで計算実行します。



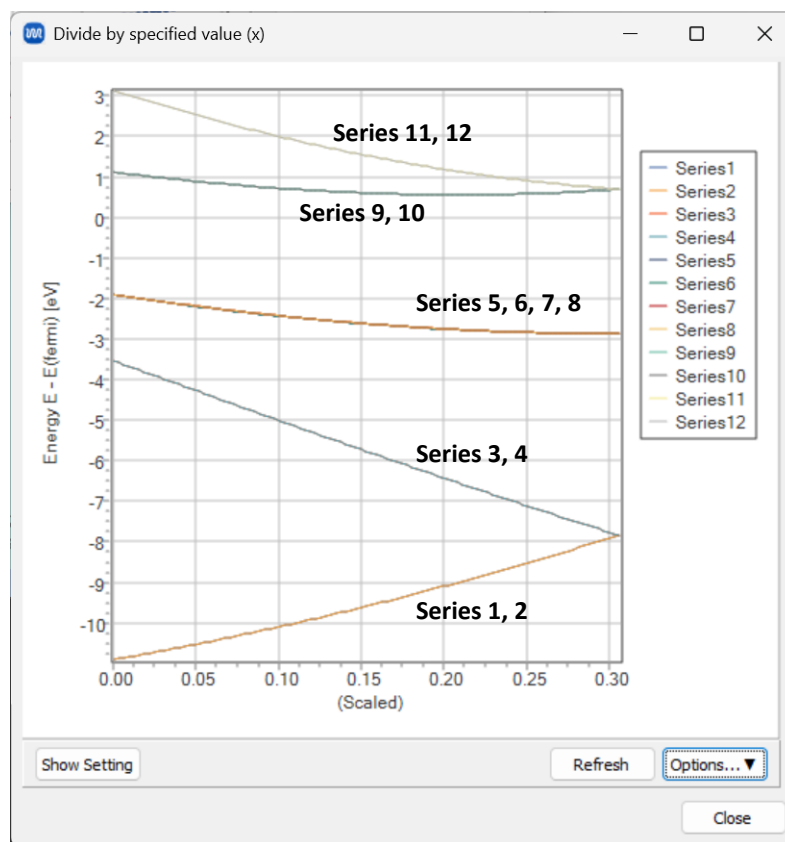
VIII.バンド解析 ($(0,1/2,0) \rightarrow (0,1,0)$)

1. **アクション | Band structure**をクリックしバンド図を表示します。**Option | Shift/Scale data**を選択します。横軸を $2\pi/L_a$ の単位に変換するため、**Operation**は「Divide by specified value (x)」を選択します。
2. 続いて割る値を入力しますが、ここでは $L_a/2\pi = 10.2629 [\text{Bohr}]/2\pi = 1.633$ を入力します。
 - L_a はSi結晶のセル長さ(コンベンショナルセル)です。 p.7で単位変換したセル長さを用います。



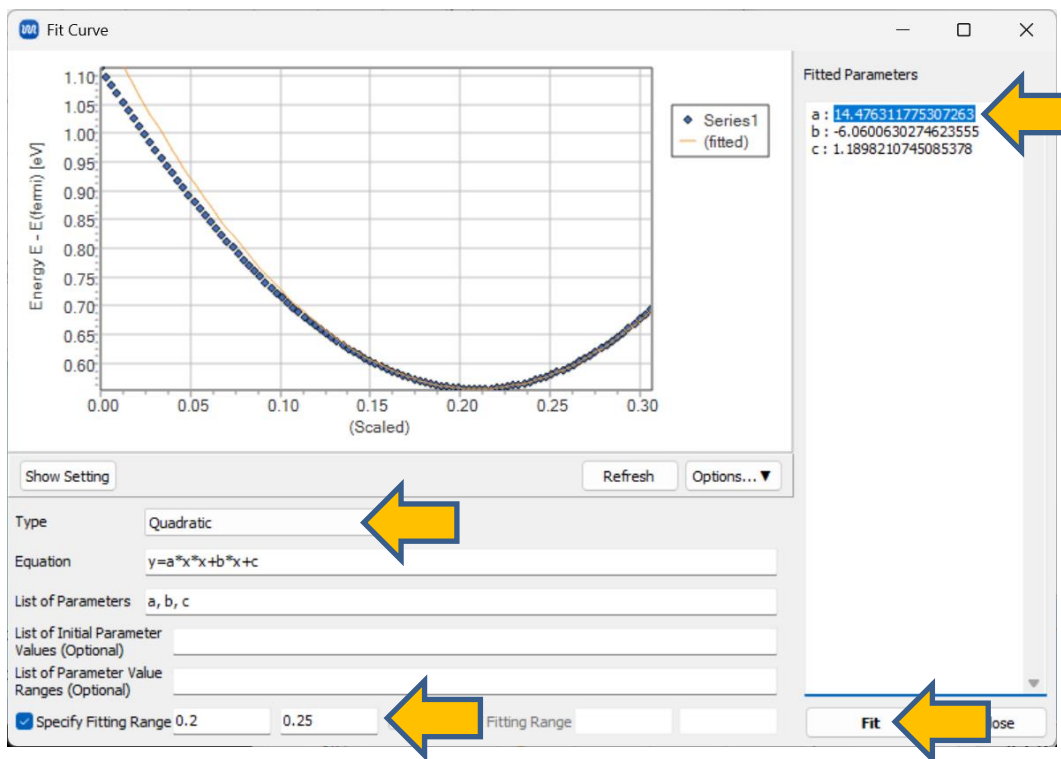
VIII.バンド解析 ($(0,1/2,0) \rightarrow (0,1,0)$)

3. 横軸が $2\pi/L_a$ でスケールされた新たなバンド図を用いて電子有効質量の導出を行います。**Options**をクリックし「Fit curve」を選択します。続いてフィッティングを適用するカーブを選択します。 $m_{n,\parallel}^*$ を導出する際は「Line(9)」あるいは「Line(10)」を選択します。



IX. 縦有効質量の算出 ($m_{n,\parallel}^*$)

1. **Fit curve** ウィンドウで **Type** を「Quadratic」を選択します。**Specify Fitting Range** にチェックを入れることで、でフィッティングを掛ける範囲を指定することができます。ここでは「0.20」から「0.25」の範囲とします。**Fit** をクリックすることでカーブフィッティングが実行されフィッティングパラメータが左側のボックスに出力されます。縦有効質量の計算に必要な数値は a : 14.476311775307263 です。

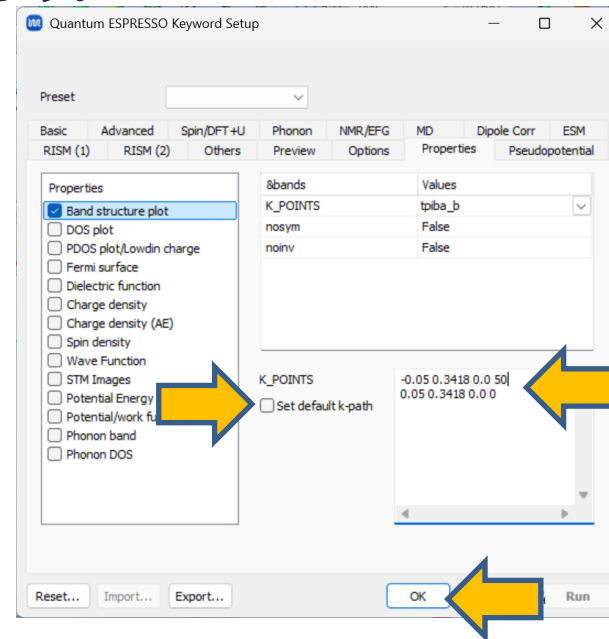
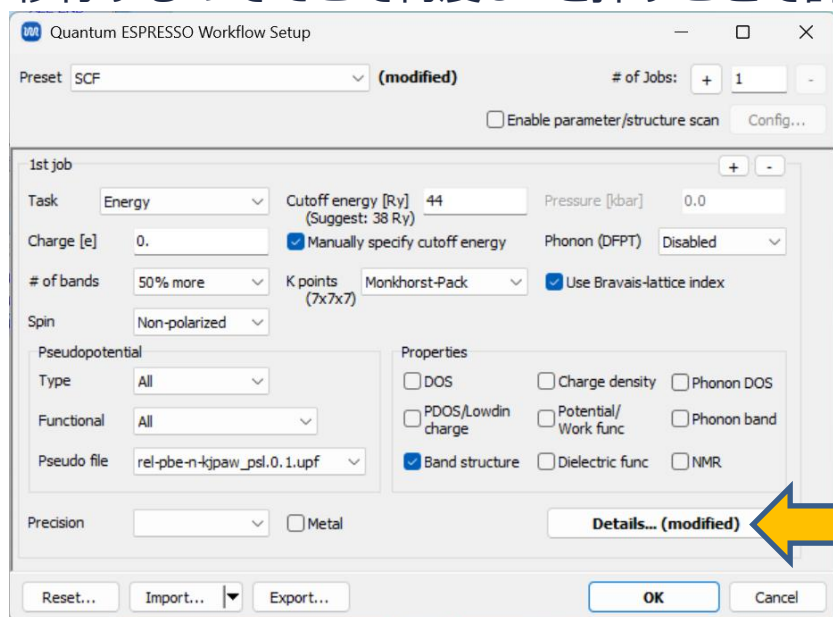


IX. 縦有効質量の算出 ($m_{n,\parallel}^*$)

- 有効質量は $m^* = 1/(a \times \langle \text{eV}^2 \text{Ry} \rangle)$ より算出できます。 a は前項で得られたフィッティングパラメータです。 $\text{eV}^2 \text{Ry}$ は単位変換 ($\text{eV} \rightarrow \text{Ry}$) で値は 0.073498586 で **ツール | 単位を変換** から値を取得することができます。計算すると $m_{n,lh}^* = \frac{1}{(14.476311775307263 \times 0.073498586)} = 0.9399m_e$ と算出されます。
- フィッティングで得られた二次関数の最小値は伝導帯最低部 (Conduction Band minimum: CBM) に当たります。その時の x 軸 (scale) の値は 0.20931 でした。スケールする前の x 軸の値は 0.3418 であり、続いて計算する $m_{n,\perp}^*$ を導出する際に必要な値です。
 - 「 Γ 点 $\rightarrow$ X 点の間にある CBM の点 (Λ 点とします) に直行するバンド方向の有効質量 (横有効質量) $m_{n,\perp}^*$ を計算する際に必要となるため、ここで Λ 点の位置を把握します。

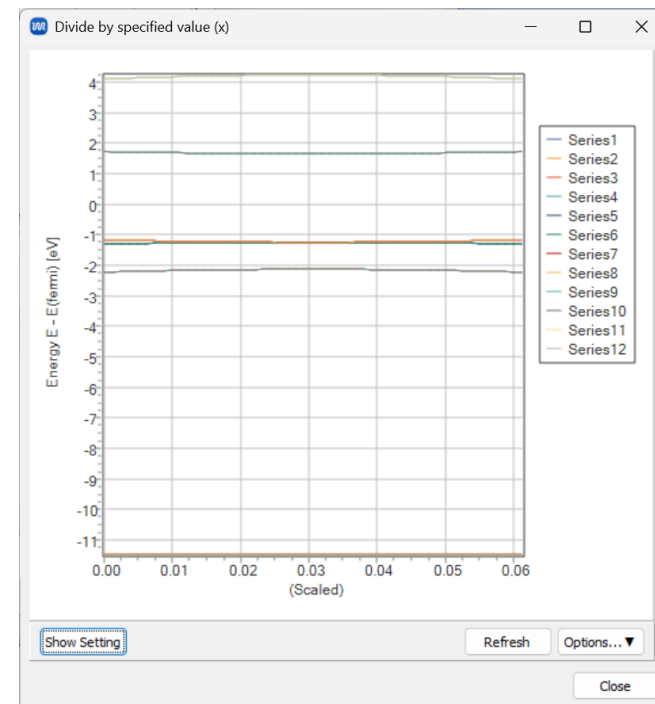
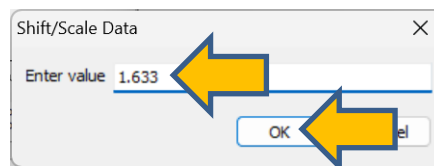
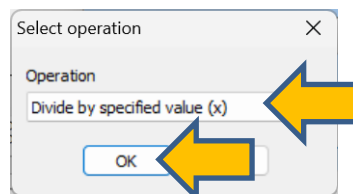
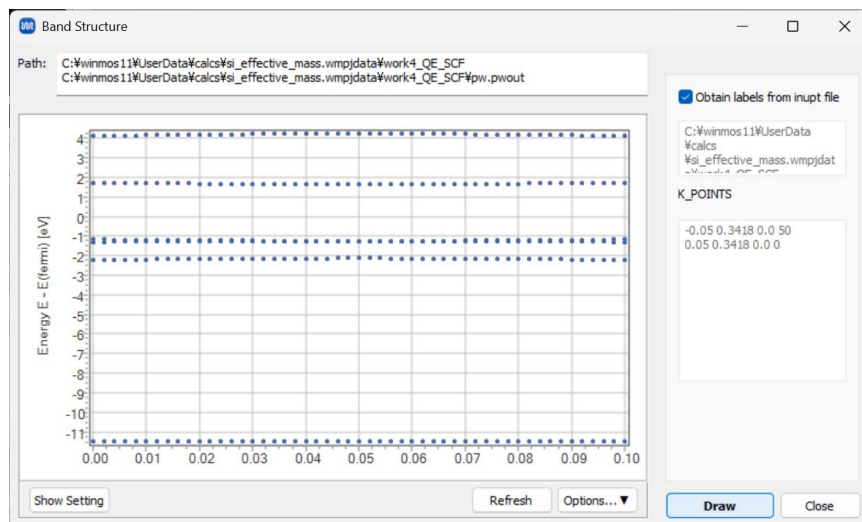
X. 計算の実行 ($(+\delta, \Lambda, 0) \rightarrow (-\delta, \Lambda, 0)$)

1. ワークフローセットアップをクリックします。継続ジョブを実行しますか？には「いいえ」を選択し、続くプリミティブセルに変換しますか？に「はい」を選択します。
2. **Details**をクリックし、Propertiesタブを選択します。**Set default k-path**のチェックが外れている事を確認し、隣のボックスに先に把握した Λ 点の位置に対して直行するように $\pm\delta$ に値を設定します。ここでは「-0.05 0.3418 0.0 50」「0.05 0.3418 0.0 0」を入力します。
3. **OK**をクリックし詳細設定画面から抜けます。最後に **OK** を押します。Workflow Setup画面に移行するのでそこで再度**OK**を押すことで計算実行します。



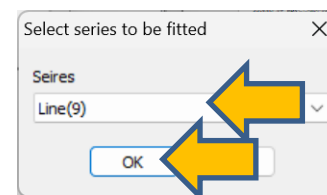
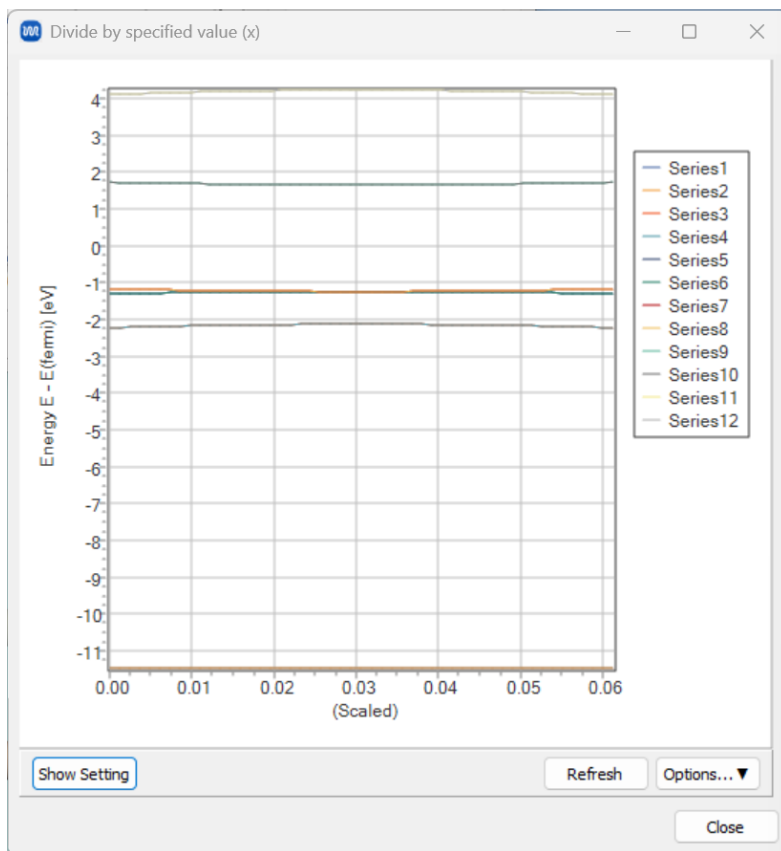
XI.バンド解析 ($(-\delta, \Lambda, 0) \rightarrow (\delta, \Lambda, 0)$)

1. **アクション | Band structure**をクリックしバンド図を表示します。**Option | Shift/Scale data**を選択します。横軸を $2\pi/L_a$ の単位に変換するため、**Operation**は「Divide by specified value (x)」を選択します。
2. 続いて割る値を入力しますが、ここでは $L_a/2\pi = 10.2629 [\text{Bohr}]/2\pi = 1.633$ を入力します。
 - L_a はSi結晶のセル長さ(コンベンショナルセル)です。 p.7で単位変換したセル長さを用います。



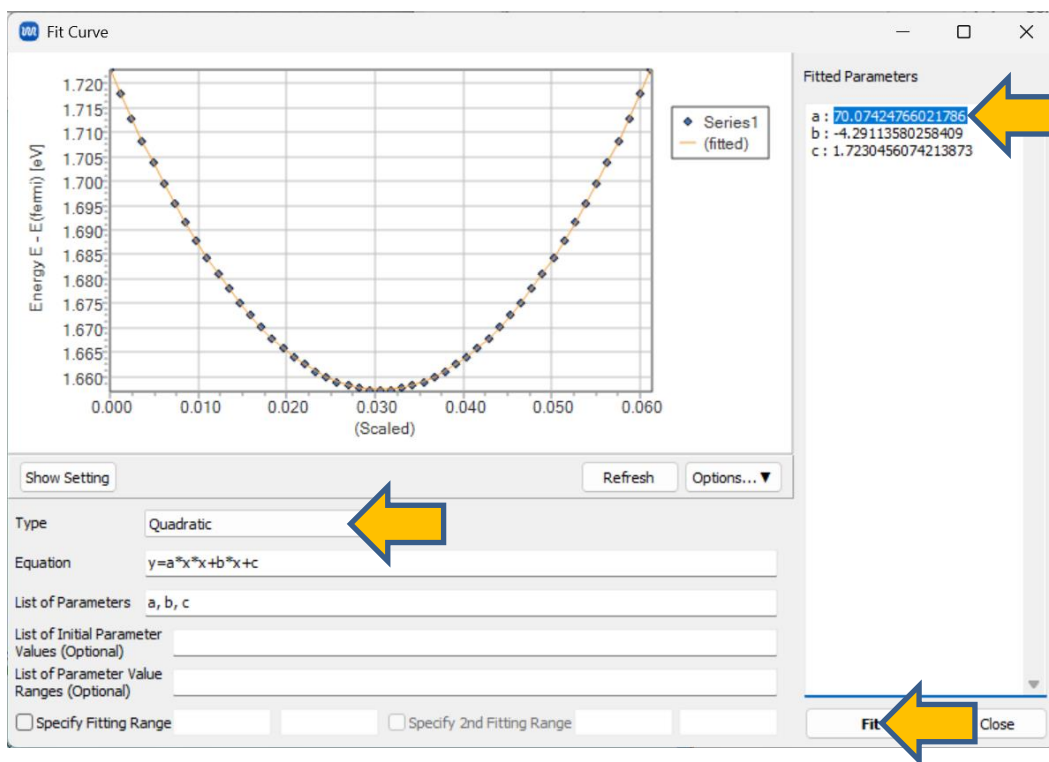
XI.バンド解析 ($(0,1/2,0) \rightarrow (0,1,0)$)

3. 横軸が $2\pi/L_a$ でスケールされた新たなバンド図を用いて電子有効質量の導出を行います。**Options**をクリックし「Fit curve」を選択します。続いてフィッティングを適用するカーブを選択します。 $m_{n,\parallel}^*$ を導出する際は「Line(9)」あるいは「Line(10)」を選択します。



XII.横有効質量の算出 ($m_{n,\perp}^*$)

1. **Fit curve**ウィンドウで**Type**を「Quadratic」を選択します。**Fit**をクリックすることでカーブフィッティングが実行されフィッティングパラメータが左側のボックスに出力されます。横有効質量の計算に必要な数値はa: 70.07424766021786です。



XII.横有効質量の算出 ($m_{n,\perp}^*$)

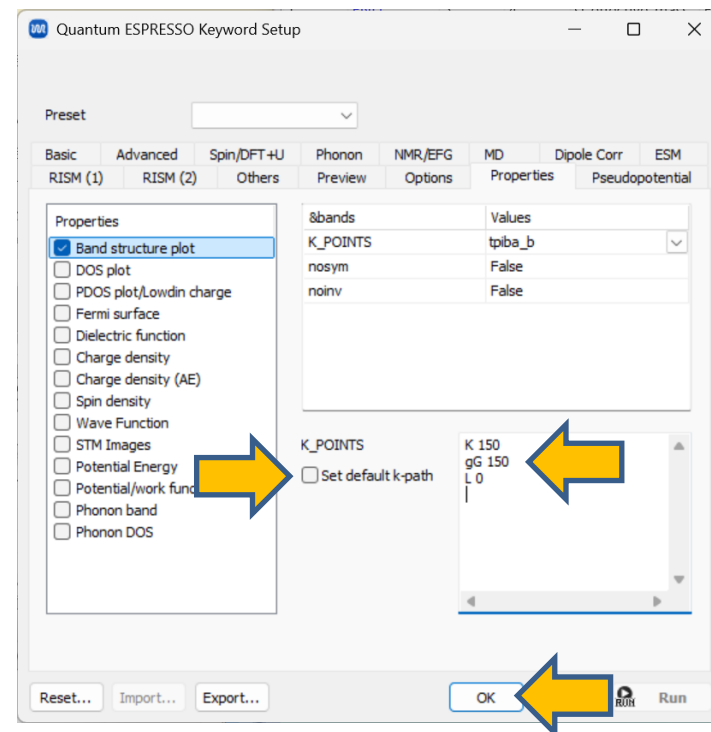
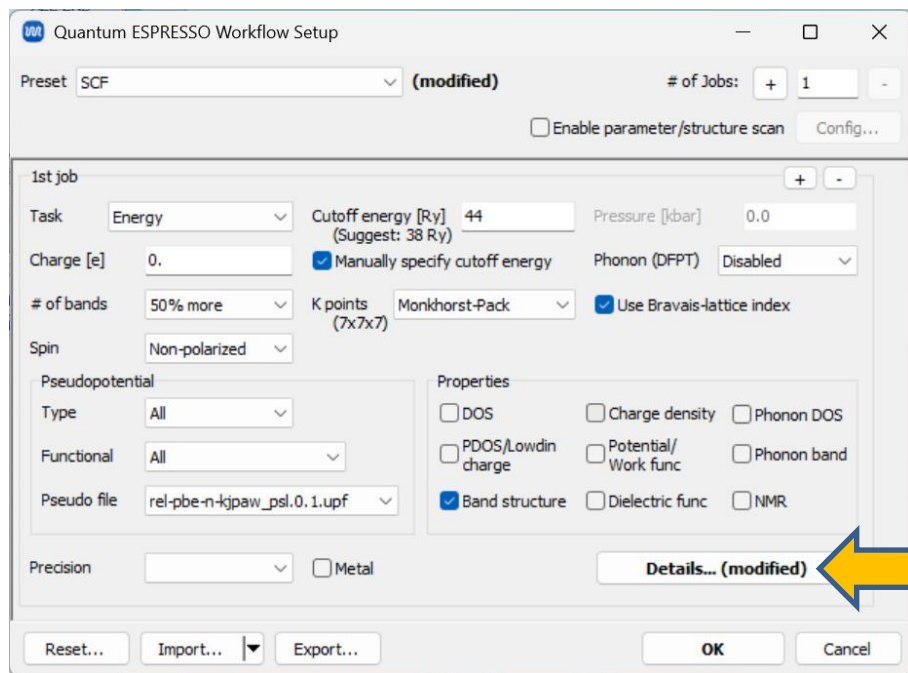
2. 有効質量は $m^* = 1/(a \times \langle \text{eV2Ry} \rangle)$ より算出できます。aは前項で得られたフィッティングパラメータです。eV2Ryは単位変換(eV→Ry)で値は0.073498586で**ツール | 単位を変換**から値を取得することができます。計算すると $m_{n,lh}^* = \frac{1}{(70.07424766021786 \times 0.073498586)} = 0.1942m_e$ と算出されます。先に導出した $m_{n,\parallel}^*$ と合わせて、先行研究と比較すると以下のようになり凡そ再現している事が分かります。

	Winmostar	先行研究[1]	
		実験	計算
$m_{n,\parallel}^*$	0.940	0.916	0.943
$m_{n,\perp}^*$	0.194	0.191	0.193

[1] Phys. Rev. B **106**, 045204 (2022)

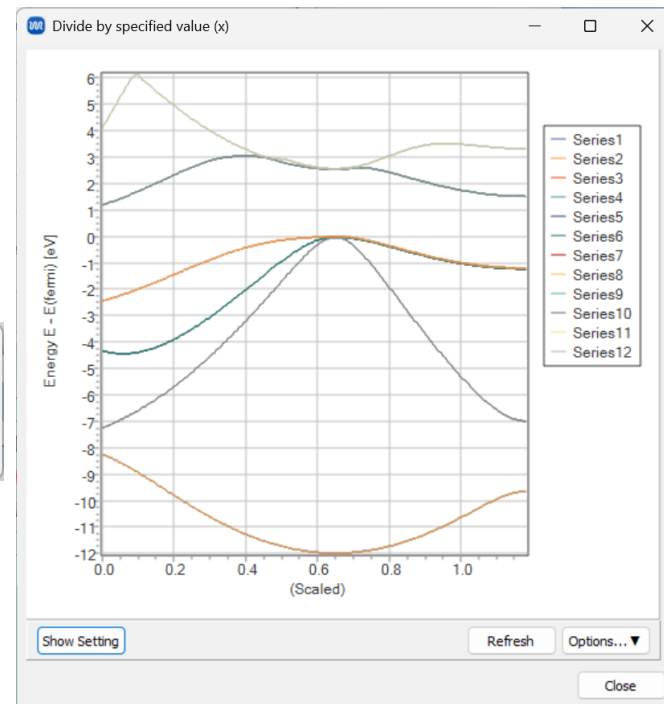
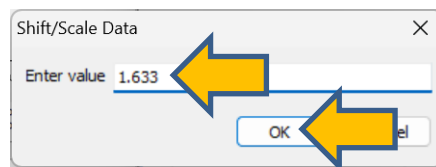
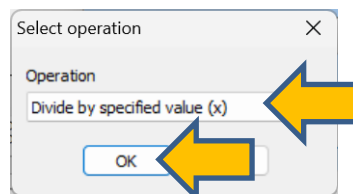
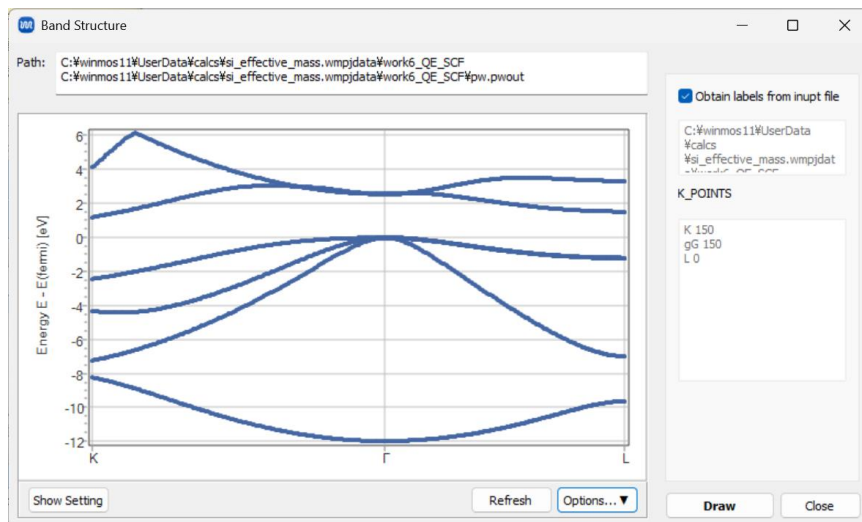
XII.計算の実行($K \rightarrow \Gamma \rightarrow L$)

1. ワークフローセットアップをクリックします。継続ジョブを実行しますか？には「いいえ」を選択し、続くプリミティブセルに変換しますか？に「はい」を選択します。
2. **Details**をクリックし、Propertiesタブを選択します。Set default k-pathのチェックが外れている事を確認し、隣りのボックスに「K 150」「gG 150」「L 0」を入力します。
3. **OK**をクリックし詳細設定画面から抜けます。最後に **OK** を押します。Workflow Setup画面に移行するのでそこで再度**OK**を押すことで計算実行します。



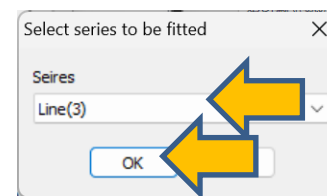
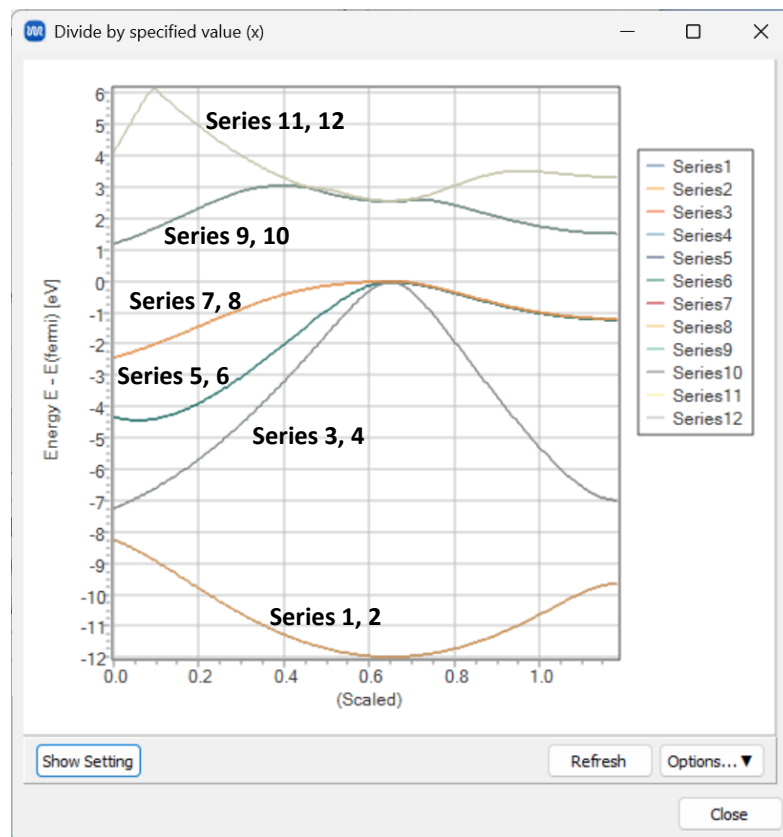
XIII.バンド解析 ($K \rightarrow \Gamma \rightarrow L$)

1. **アクション | Band structure**をクリックしバンド図を表示します。**Option | Shift/Scale data**を選択します。横軸を $2\pi/L_a$ の単位に変換するため、**Operation**は「Divide by specified value (x)」を選択します。
2. 続いて割る値を入力しますが、ここでは $L_a/2\pi = 10.2629 [\text{Bohr}]/2\pi = 1.633$ を入力します。
 - L_a はSi結晶のセル長さ(コンベンショナルセル)です。 p.7で単位変換したセル長さを用います。



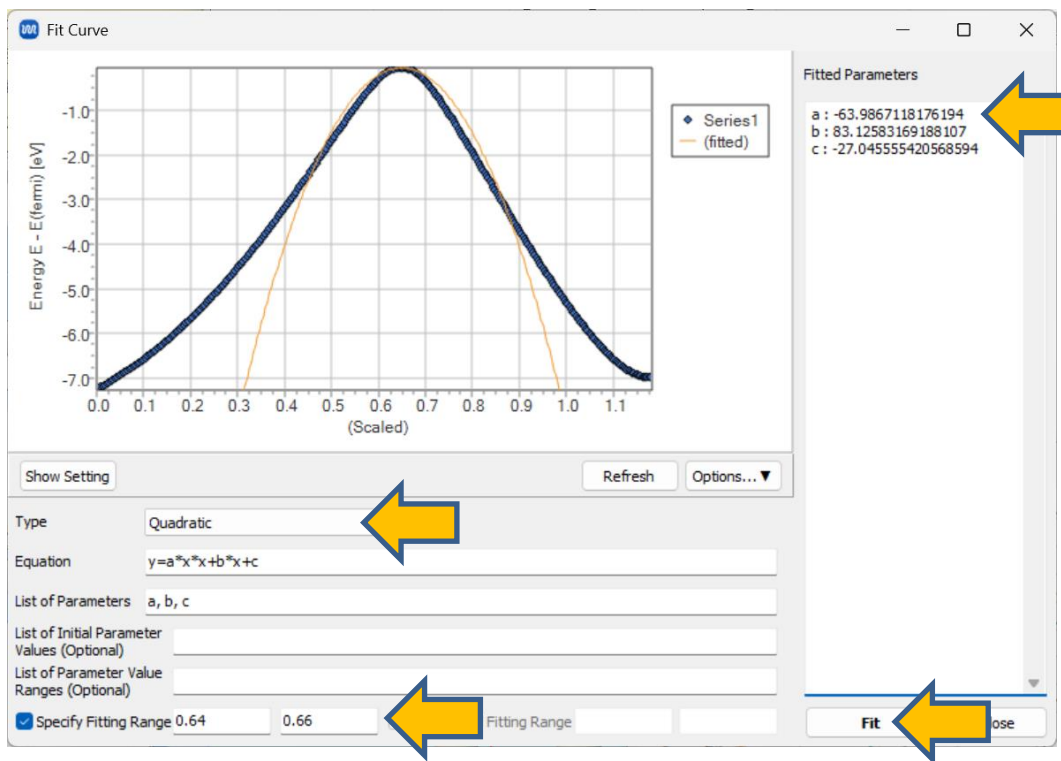
XIII.バンド解析 ($K \rightarrow \Gamma \rightarrow L$)

3. 横軸が $2\pi/L_a$ でスケールされた新たなバンド図を用いて電子有効質量の導出を行います。**Options**をクリックし「Fit curve」を選択します。続いてフィッティングを適用するカーブを選択します。 $m_{n,\parallel}^*$ を導出する際は「Line(3)」あるいは「Line(4)」を選択します。



XIV.有効質量の算出 ($m_{p,so}^*$)

1. **Fit curve** ウィンドウで **Type** を「Quadratic」を選択します。**Specify Fitting Range** にチェックを入れることで、でフィッティングを掛ける範囲を指定することができます。ここでは「0.64」から「0.66」の範囲とします。**Fit** をクリックすることでカーブフィッティングが実行されフィッティングパラメータが左側のボックスに出力されます。電子有効質量の計算に必要な数値は a: -63.9867118176194 です。



XIV.有効質量の算出 ($m_{p,so}^*$)

2. 有効質量は $m^* = 1/(a \times \langle \text{eV2Ry} \rangle)$ より算出できます。 a は前項で得られたフィッティングパラメータです。 eV2Ry は単位変換($\text{eV} \rightarrow \text{Ry}$)で値は0.073498586で**ツール | 単位を変換**から値を取得することができます。計算すると $m_{n,lh}^* = \frac{1}{(-63.9867118176194 \times 0.073498586)} = -0.2126m_e$ と算出されます。

これまで得られたSi結晶の電子有効質量を先行研究と比較したものが下表です。先行研究と概ね良い一致が得られています。

	Winmostar	先行研究[1]	
		実験	計算
$m_{p,lh}^*$	-0.191	-0.171	-0.193
$m_{p,hh}^*$	-0.283	-0.46	-0.267
$m_{n,\parallel}^*$	0.940	0.916	0.943
$m_{n,\perp}^*$	0.194	0.191	0.193
$m_{p,so}^*$	-0.213	-0.262	-0.230

[1] Phys. Rev. B **106**, 045204 (2022)

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