

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

圧電応力定数

V11.18.0

2026年10月5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。
- 本チュートリアルでは、AINの圧電応力定数 e_{33} を算出する手順を示します。
- i 方向のひずみ η_i を与えた際の α 方向の分極 P_α を用いると圧電応力定数 $e_{\alpha i}$ は次の式で与えられます。

$$e_{\alpha i} = \frac{\partial P_\alpha}{\partial \eta_i}$$

- 本チュートリアルでは、まず格子定数も含めた構造最適化計算を実施します。そして構造最適化後の構造に対しz方向にひずみを与えた構造を生成し、それらに対しBerry位相法を用いて分極を計算します。最後に、ひずみに対する分極のプロットから圧電応力定数を算出します。

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、smearing幅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

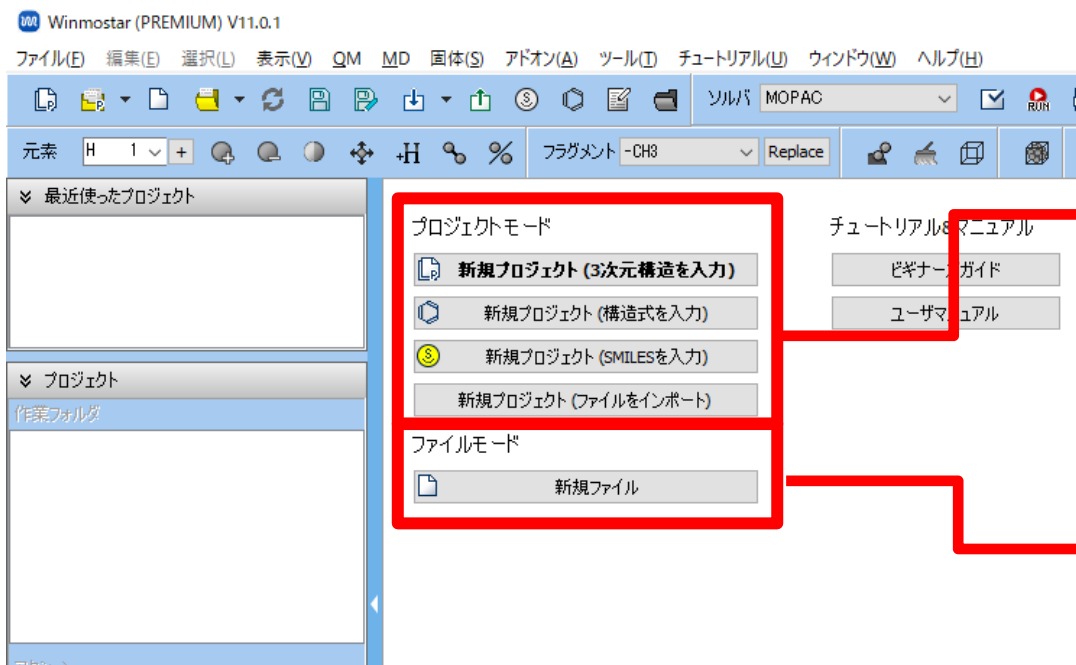
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
 - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum ESPRESSOが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のQuantum ESPRESSOを利用したい方は、別途[Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定](#)が必要です。

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。

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。

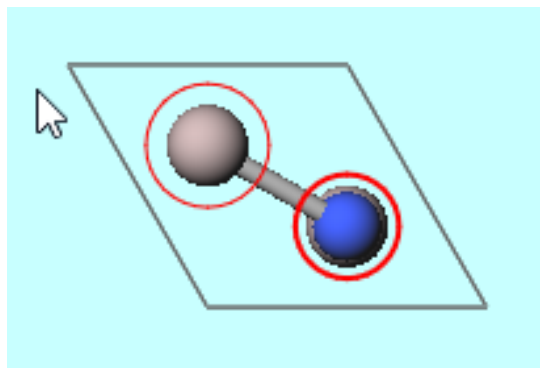
I. 系のモデリング（構造最適化）

基本的な操作方は[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「AlN_piezo」と入力し**保存**をクリックします。

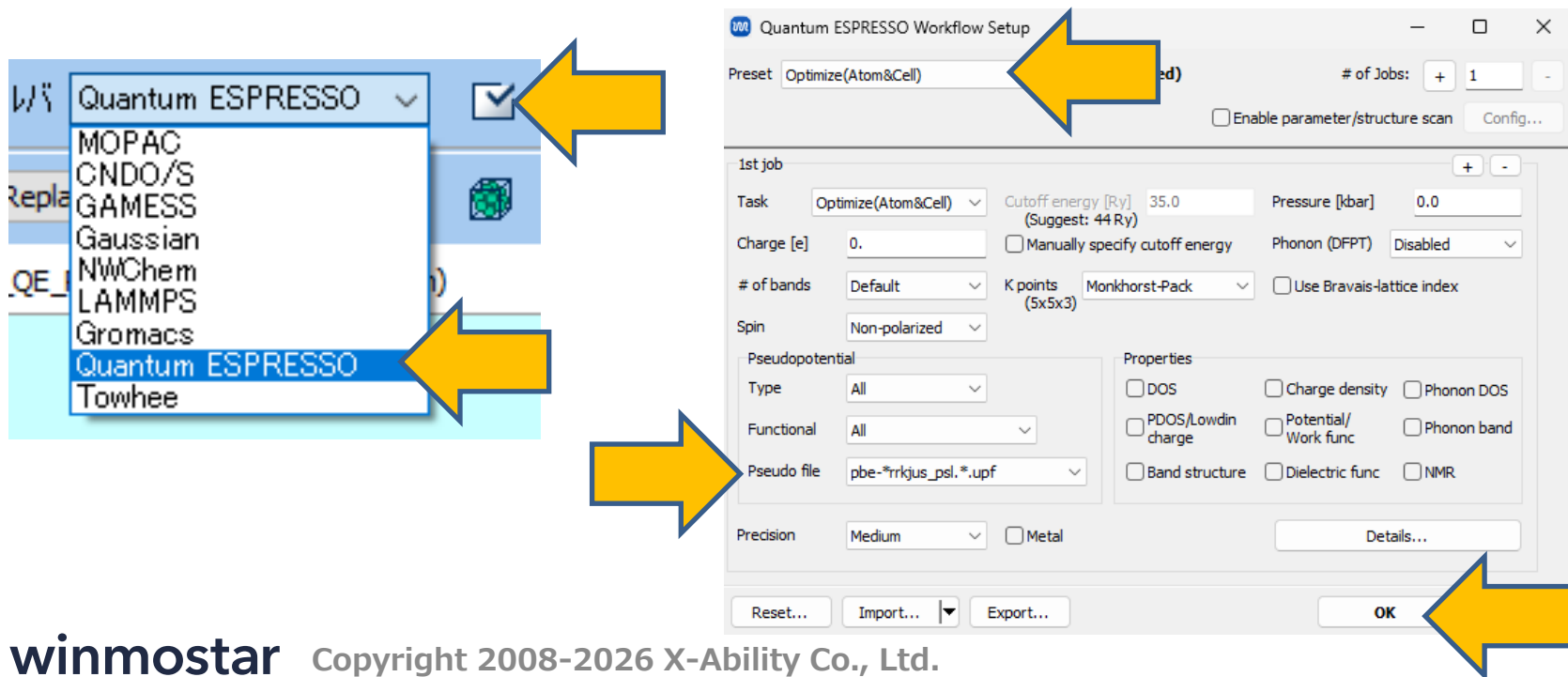
初期構造の作成方法の詳細は[Winmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法](#)を参照してください。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

3. **ファイル | インポート | Samplesファイル | AlN.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。



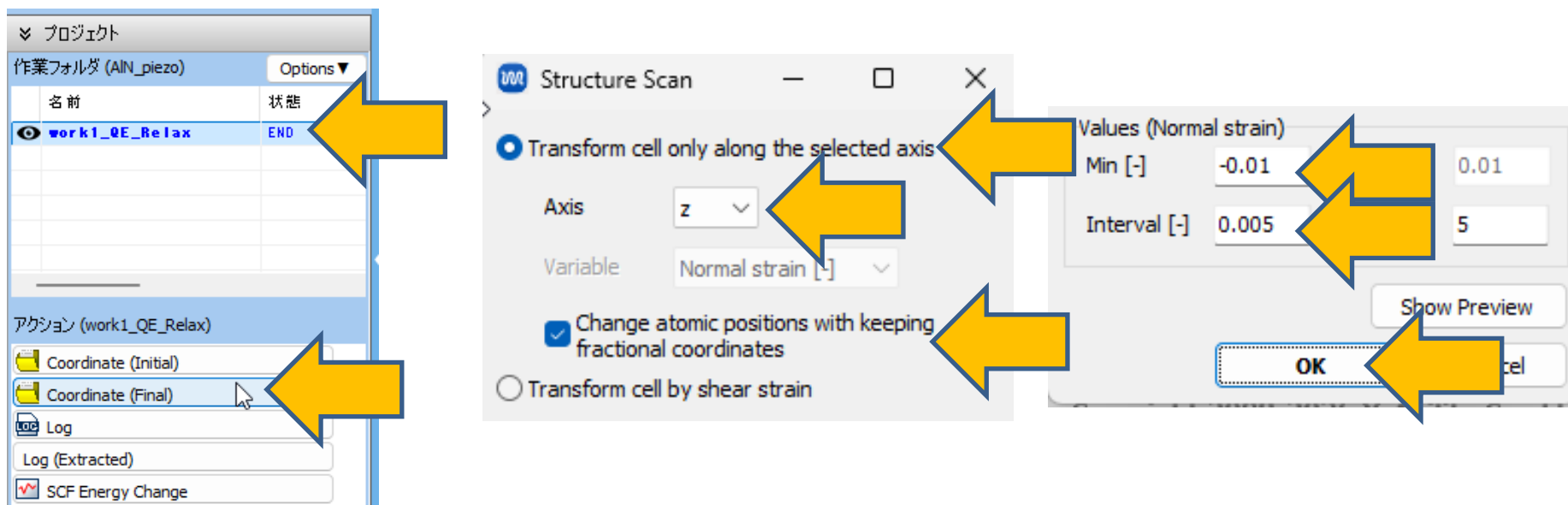
II. 計算の実行（構造最適化）

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をOptimize(Atom&Cell)に変更し、Pseudo fileをpbe-*rrkjus_psl.*.upfに変更します。
 - pbe-*rrkjus_psl.*.upf がない場合は[Windows版Quantum ESPRESSOインストールマニュアル](#)を参考に擬ポテンシャルファイルを入手します。
 - 精度を上げる場合はPrecisionは「High」以上にするか、適宜Detailsで設定を変更してください。
3. 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。



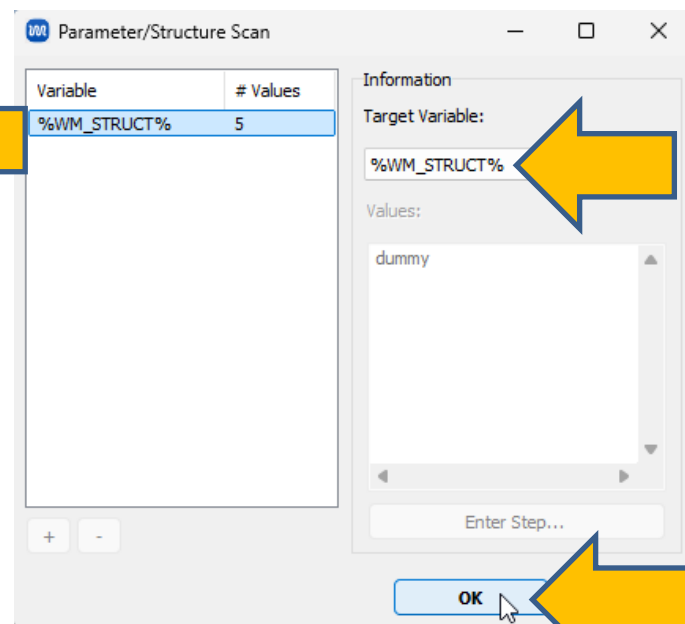
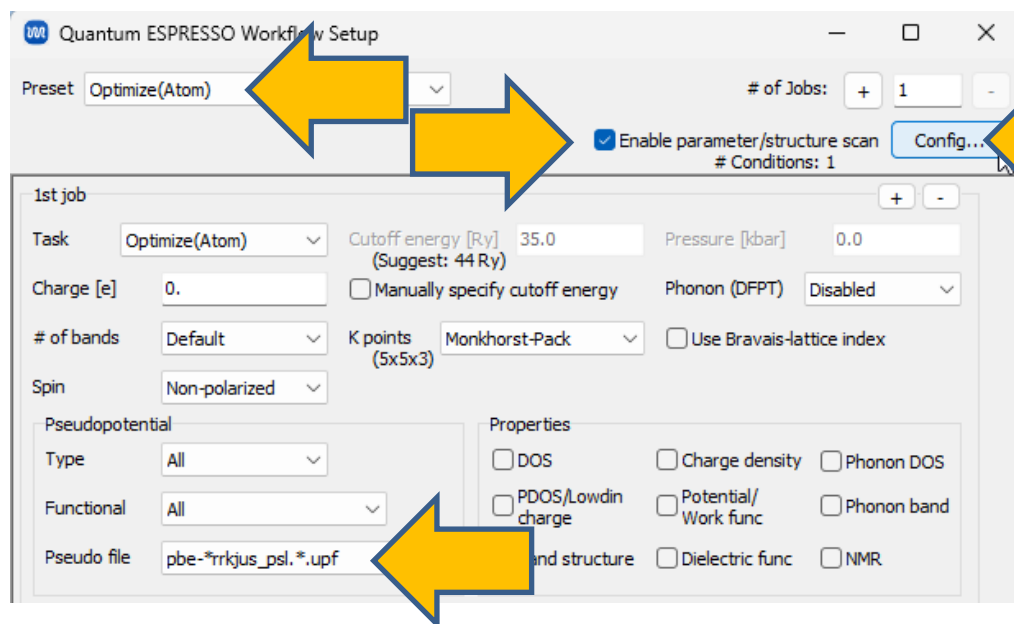
III.系のモデリング（各ひずみでの計算）

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**Coordinate (Final)**をクリックし構造最適化後の構造を表示します。
2. ツール | 構造スキャンをクリックし、「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、「変更を上書き保存しますか？」と表示されたら**はい**をクリックします。
3. **Axis**を「z」に変更し**Change atomic positions with keeping fractional coordinates**にチェックを入れ、**Min**を「-0.01」、**Interval**を「0.005」に変更し**OK**をクリックします。



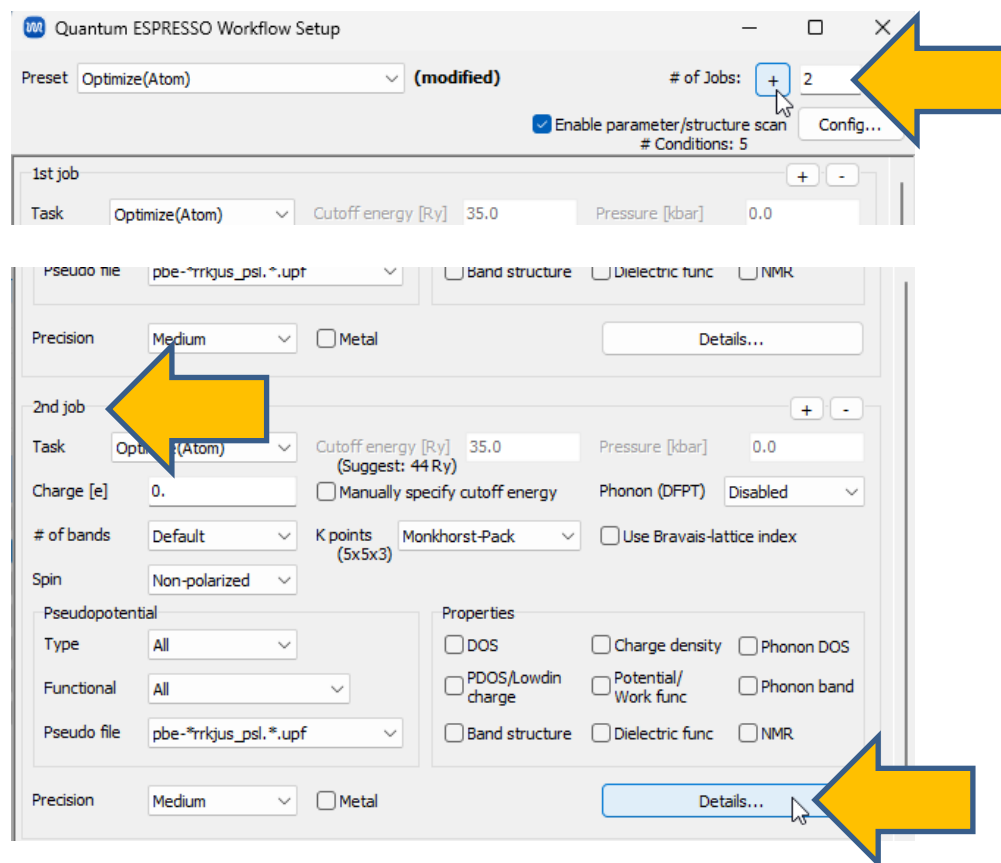
IV.計算の実行（各ひずみでの計算）

1.  (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？…」と聞かれたらいいえをクリックします。「現在のプロジェクトで…」と表示されたら**閉じる**をクリックします。
2. Presetを**Optimize(Atom)**に変更し、Pseudo fileを**pbe-*rrkjus_psl.*.upf**に変更します。
 - 精度を上げる場合は**Precision**は「High」以上にするか、適宜**Details**で設定を変更してください。
3. **Enable parameter/structure scan**にチェックを入れ、**Config**をクリックします。
4. **Target Variable**を「%WM_STRUCT%」に変更し**OK**をクリックします。



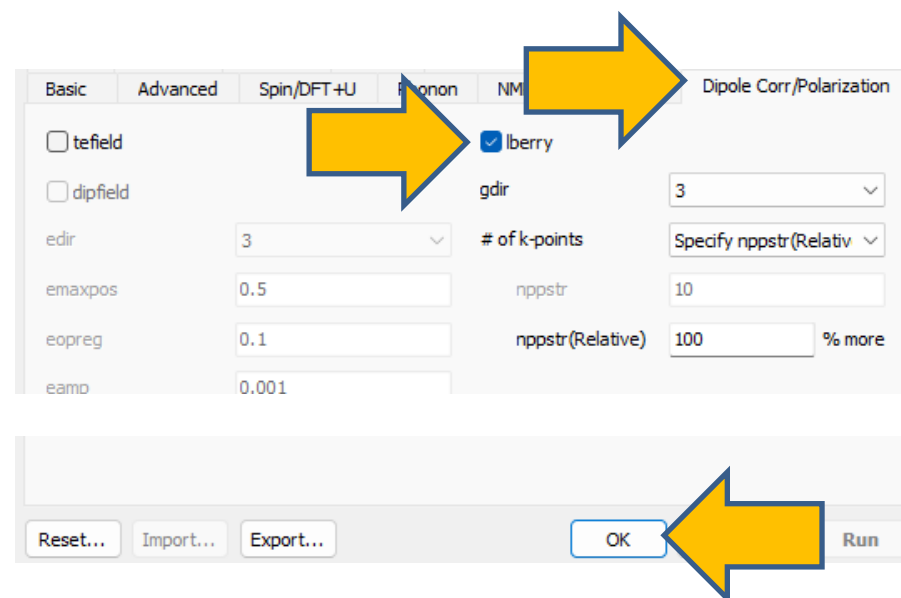
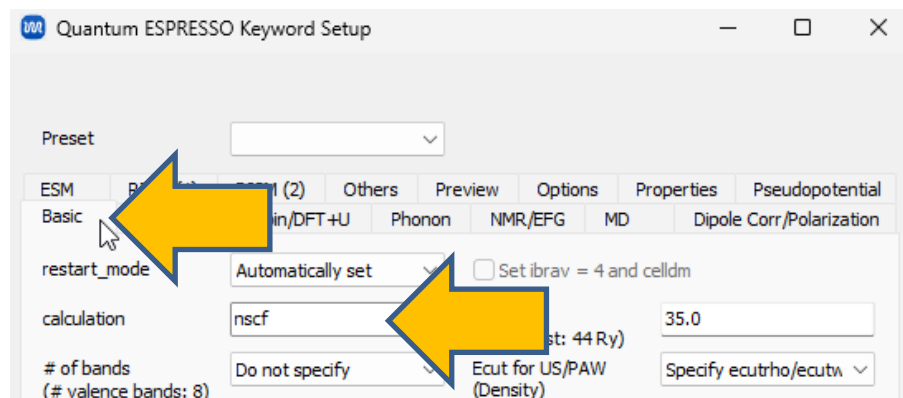
IV.計算の実行（各ひずみでの計算）

1. # of Jobsの+をクリックし「2」に変更します。
2. Workflow Setupウィンドウを下までスクロールし、2nd jobのDetailsをクリックします。



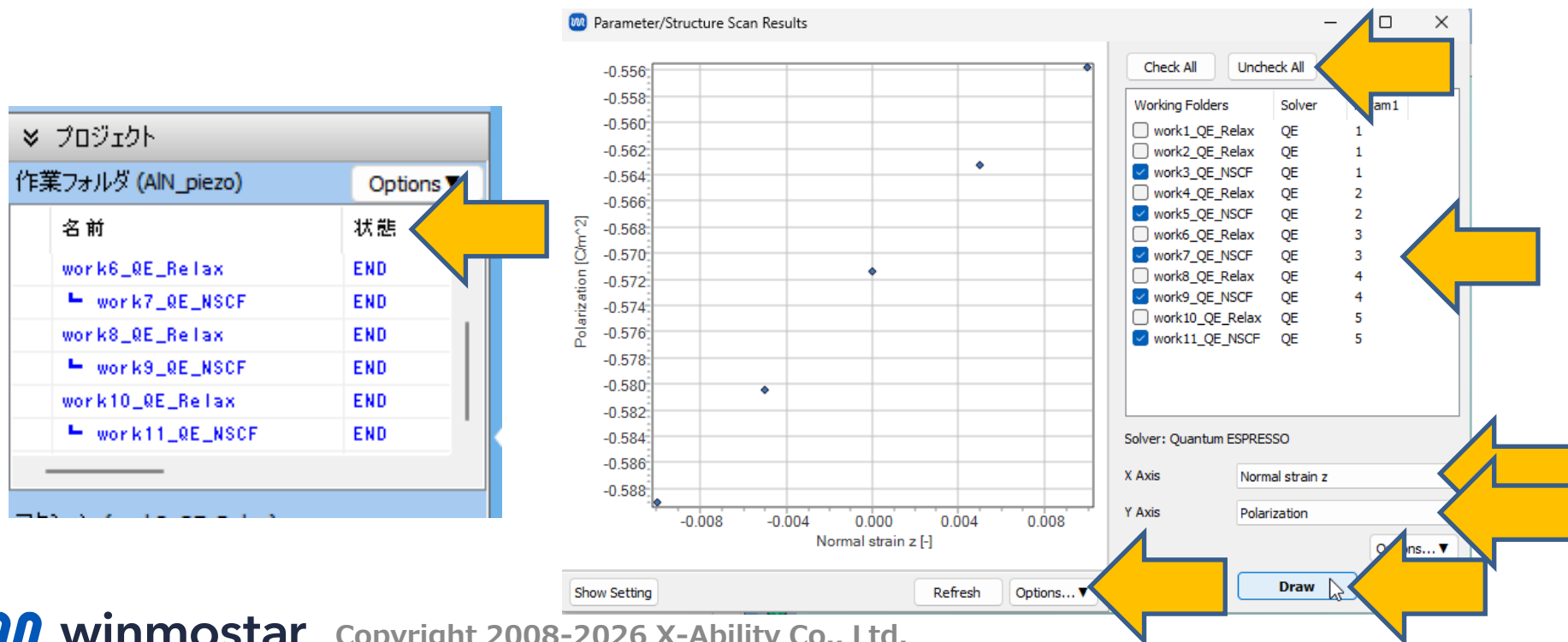
IV.計算の実行（各ひずみでの計算）

1. **Basic**タブを開き、**calculation**を「nscf」に変更します。
2. **Dipole Corr/Polarization**タブを開き、**lberry**にチェックを入れ、**OK**をクリックします。
3. **Quantum ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウに戻ったら**OK**をクリックします。
4. **ジョブの設定**ウィンドウで適宜並列数を変更し**実行**をクリックします。



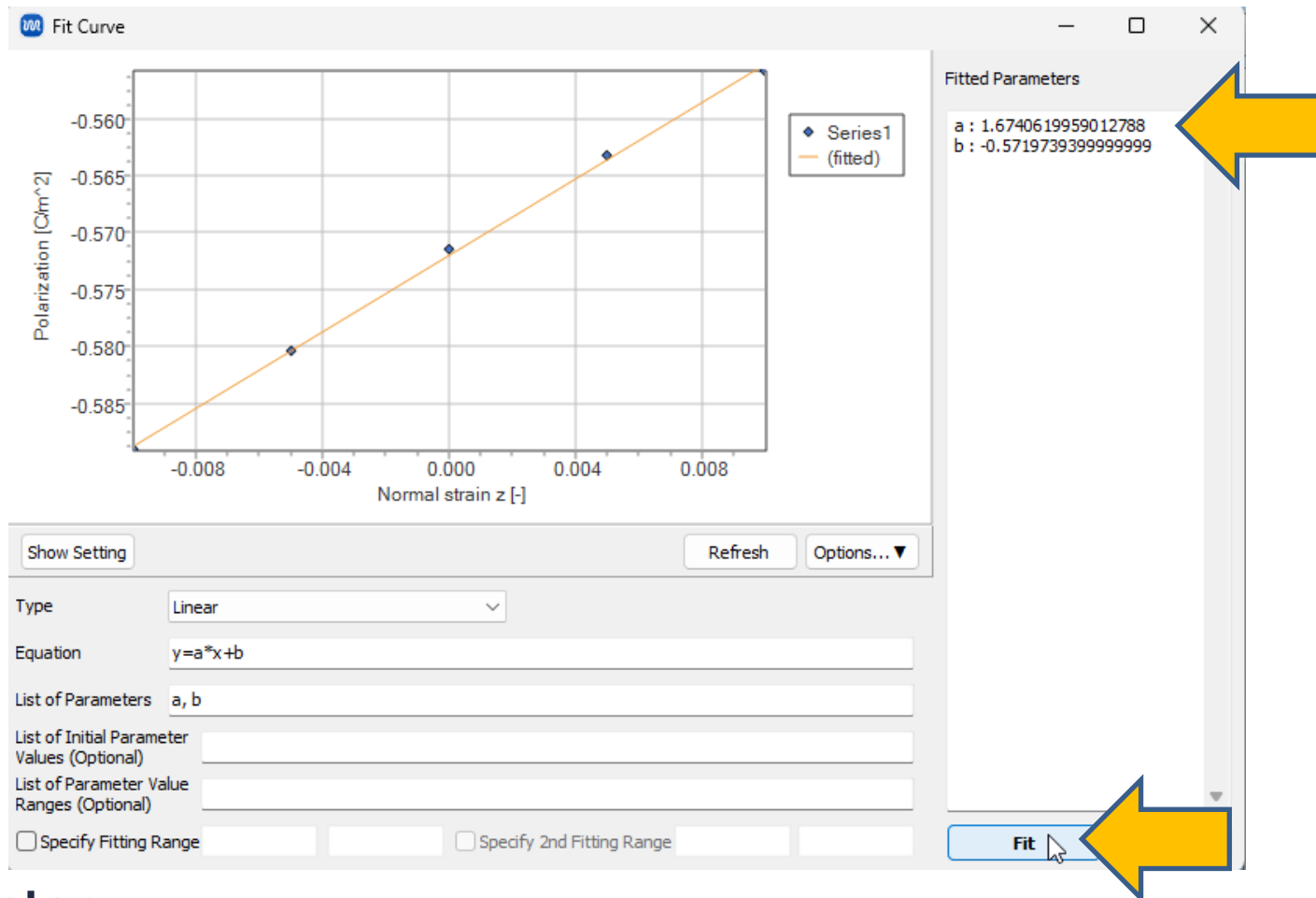
V. 結果解析

1. 作業フォルダでwork2～work11の状態が**END（青）**に変化するまで待ちます。
2. ファイル | プロジェクト | パラメータ/構造スキャン結果表示をクリックします。
3. **Uncheck All**をクリックすることで全てのチェックを外します。 **work3, 5, 7, 9, 11**にチェックを入れ、**X Axis**を「Normal strain z」、**Y Axis**を「Polarization」に変更し**Draw**をクリックします。
4. グラフ右下の**Options | Fit Curve**をクリックします。



V. 結果解析

1. **Fit**をクリックします。**Fitted Parameters**の「a:」の値が圧電応力定数（単位はC/m²）となります。（フィッティングの初期値に依存し値が変化することがあります）



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