M winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO 強磁性体、反強磁性体

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。



• 強磁性体の例としてFe結晶、反強磁性体の例としてNiOのSCF計算を実施し、その後バンド構造、状態密度の算出を行います(Winmostar上では連続して実行されます)。



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。本チュートリアルではすぐに結果を取得できるよう、精度を落とした 設定を用います。
- k点の経路(パス)は対象とする結晶構造に応じて設定し直す必要があります。各結晶構造における推奨のパスはQEのインストールディレクトリにあるDoc¥brillouin_zones.pdfを参考に設定してください。
- ◆ 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。<u>https://qiita.com/xa_member</u>



- 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。

擬ポテンシャルの用意

本チュートリアルの実施のために、擬ポテンシャルファイルの追加が必要な場合があります。
 以下のURLより周期表の[Fe]から[Fe.pbe-nd-rrkjus.UPF]をダウンロードします。

<u>http://pseudopotentials.quantum-espresso.org/legacy_tables/original-qe-pp-library/</u> そして**ツール | 環境設定の計算**タブの**Open QE pseudo directory**をクリックして開くフォ ルダにFe.pbe-nd-rrkjus.UPFをコピーしてください。



ORIGINAL QE PP LIBRARY

NiとOの擬ポテンシャルファイルは<u>インストールマニュアル</u>の**Download Pseudo Files**機能 で入手してください。

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(D) 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 (Fe)

- 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。
- 初期構造の作成方法の詳細は<u>Winmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法</u>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「fe scf」と入力し**保存**をクリックします。
- 3. ファイル | インポート | Samplesファイル | fe.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。



I. 系のモデリング (Fe)

- 1. 選択 | すべてをグループ選択をクリックします。
- 2. 編集 | 原子の属性を変更 | 電荷/スピンを変更をクリックします。
- **3. TypeをSpin Density**に変更しActionのOverwriteの横に「0.5」と入力しOKをクリックします。この値はWinmostarでQE実行時にstarting_magnetizationとして解釈されます。
- 4. 分子表示エリア下に「Charges Available: Spin (Rtot=1.00, Qrms…」と表示され、Spin Densityが設定されていることを確認します。





II. 計算の実行(Fe)

- 1. ツールバーの**ソルバ**からQuantum ESPRESSOを選択し 区 (ワークフロー設定) をクリックします。
- 2. 計算時間を短縮するため、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。 分子表示エリアには変換後の構造が出現します。「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。
- 3. Quantum ESPRESSO Workflow Setupウィンドウで以下のように変更します。
 - # of bandsを50% moreに変更
 - SpinをPolarizedに変更
 - Use Bravais-lattice indexをチェック
 - Pseudo fileをpz-nd-rrkjus.upfに変更
 - PropertiesのDOS、PDOS/Lowdin charge、Band structure、Charge Densityを チェック
 - Metalをチェック
- 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。

III.結果解析(Fe) 状態密度

- 作業フォルダでwork1_QE_SCFの状態がEND(育)に変化した後、作業フォルダで work1_QE_SCFをクリックしアクションからDensity of Statesをクリックします。
- 2. グラフの横軸を変更したいときはSpecify rangeにチェックを入れ、Rangeの(from)と(to) を適宜変更してからDrawをクリックしてください。



III.結果解析(Fe) 部分状態密度、バンド構造

 作業フォルダでwork1_QE_SCFの状態がEND(育)に変化した後、作業フォルダで work1_QE_SCFをクリックしアクションからProjected Density of StatesまたはBand Structureをクリックします。



IV.系のモデリング(NiO)

- 1. ファイル | 閉じるをクリックし、新規プロジェクト(3次元構造を入力)をクリックします。
- 2. プロジェクト名に「nio_scf」と入力し保存をクリックします。
- 3. ファイル | インポート | Samplesファイル | nio.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。



IV.系のモデリング(NiO)

1. 固体 | スーパーセルを作成をクリックし、a, b, cをそれぞれ「2」にしOKをクリックします。
 2. 選択 | 元素によるグループ選択をクリックし、「Ni」の行をクリックしCloseをクリックします。



IV.系のモデリング (NiO)

- 1. 編集 | 原子の属性を変更 | 電荷/スピンを変更をクリックし、Spin Densityにチェックを入れ Overwriteの右に「0.5」と入力しOKをクリックします。
- 2. 🛛 X軸方向から表示をクリックします。
- 3. 表示 | 表示方向を変更 | ミラー指数を入力をクリックし、h, k, lをそれぞれ「1」「1」「2」 に変更して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。



IV.系のモデリング(NiO)

- 1. 下図のように3か所を連続でCtrl+ドラッグで矩形選択し、分子表示エリア左上に「Group Selection: 16 Atoms」と表示されるのを確認します。
- 2. 編集 | 原子の属性を変更 | 電荷/スピンを変更をクリックし、Spin Densityにチェックを入れ Overwriteの右に「-0.5」と入力しOKをクリックします。
- 3. 分子表示エリア下に「Charges Available: Spin (Qtot=0,…)」と表示されるのを確認します。





IV.系のモデリング(NiO)

1. 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、Spin Densityにチェックを入れ「プリミティブセルに変換しますか?」と表示 されたらはいをクリックします。



V. 計算の実行(NiO)

1. Hubbard U計算の設定キーワードはQEのバージョンに依存するため、 ⁽²⁾ (環境設定)をク リックし、計算タブの使用するQEのバージョンを適切に設定し、OKをクリックします。 (QE5.2.1の場合は「<6.8」、CygwinWMに同梱されているQE7.1の場合は「7.1」)

100 環境設定	– 🗆 ×
基本 編集 計算 表示 プログラムパス	
Options for mpiexec -localonly %WM_NUM_PROC% (NWChem) MD	^
✓ AmberToolsで計算する電荷を自動調整 □ MDの結果解析で倍約	精度を使用
mpiexec (LAMMPS) Select ~ LAMMPSポテンジャルフォ	μ_{2}^{k} Potentials in LAMMPS direct $ \sim $
%CYGWINDIR%¥opt_win¥MSMPI¥Bin¥mpiexec C:¥cygwin_wm¥opt	win¥LAMMPS_29Sep2021¥
Options for mpiexec -np %WM_NUM_PROC% (LAMMPS) Solid	Open potential directory
Spglibの許容誤差(距離)[Å] 0.0001 QE擬ポテンシャルフォルタ Spglibの許容誤差(距離)[Å] 0.0001 QE擬ポテンシャルフォルタ	pseudo in QE's directory
デフォルト拡張子(Quantum ESPRESSO) pwin & pwout ~	Open QE pseudo directory
デフォルト拡張子(OpenMX) mxin & mxout ~	Download pseudo files
Open k-path file	Open priority list
mpiexec (QE) Select 〜 QE MOLファイル用フォル	ÿ
%CYGWINDIR%¥opt_win¥MSMPI¥Bin¥mpiexec %CYGWINDIR%¥o	pt_win¥QuantumESPRESSO
Options for mpiexec (QE) -np %WM_NUM_PROC%	Open
使用するQEのバージョン 7.1 ~	~
<6.8 6.X(EIS) デフォルト値に戻す インポート6.8 to 7.0	OK キャンセル 適用

V. 計算の実行 (NiO)

- 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。
- 2. Quantum ESPRESSO Workflow Setupウィンドウで以下のように変更します。
 - SpinをPolarizedに変更
 - Use Bravais-lattice indexをチェック
 - Pseudo fileをpbe-*rrkjus_psl.*.upfに変更
 - PropertiesのDOS、PDOS/Lowdin charge、Band structure、Charge densityを チェック
 - Metalをチェック

1st job					+ -
Task	Energy	 Cutoff energy (Suggest: 	/ [Ry] 50.0 43 Ry)	Pressure [kbar]	0.0
Charge [e]	0.	Manually s	pecify cutoff energy	Phonon (DFPT)	Disabled
# of bands	Default	K points	Ionkhorst-Pack ~	🖌 🔽 Use Bravais-la	attice index
Spin	Polarized				
Pseudopot	tential		Properties		
Туре	All	N	DOS	density	Phonon DOS
Functional	All		PDOS/Lowdin charge	Potential/ Work func	Phonon band
Pseudo file	e pbe-*rrkjus_ps	l.*.upf	Band structure	Dielectric func	
Precision	Medium	✓ Metal		De	tails
Reset	Import	Export		0	K Cancel

V. 計算の実行 (NiO)

- **1. Details**をクリックし、**Spin/DFT+U**タブで**Ida_plus_u**にチェックを入れ、**Ni**の **Hubbard_U**を「6.2」(<u>Materials Project</u>の値を参照)に変更し**OK**をクリックします。
- 2. 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。



Basic	Advanced	2	Ida	Plus u	Dipole Co	rr ESN
Use t	tot_magnetization	0.	Hubbar	d_U/alpha		
starting_	_magnetization		Atom	Hubbard_U (eV)	Hubb	aloha (r
Atom	Starting Magnet	ization	Ni	6.2		
Ni	0.0		0	0.0		
	0.0					
nonc	olin	Ispinorb				
Use S	Spin Density as sta	rting magnetization				

補足 初期値の調整

一部のケースではstarting_ns_eigenvalueを設定し初期値を調整することがあります。その場合 は、**Details**…の**Other**タブで下図のように入力します。starting_ns_eigenvalueの1,2番目の添 え字(m, ispin)は系に応じて設定し、3番目の添え字(ityp)は一度計算を実行して確かめてか ら設定します(同じ元素でもstarting_magnetizationが異なる場合に異なるtypとなるため)。

Quantum ESPRESSO Keyword Setup — □ >								\times		
Preset		(~					
Basic	Advar	nced	Spin/DFT+U	Pho	non	MD	Dipole Corr	ESM	RISM	(1)
RISM (RISM (2) Oth		Previ	view Op		otions	Properties	Pseudopotent		al
Other Pa &systen startir startir /	ng_ns_ei	genvalue(genvalue((3,2,2)=1.0, (3,1,3)=1.0,							^

VI.結果解析(NiO) SCFエネルギー変化

- **1. 作業フォルダ**でwork1_QE_SCFをクリックし**アクション**から**SCF Energy Change**をクリックします。
- 2. Propertyを適宜変更しSCF計算の収束の様子を確認します。



VI.結果解析(NiO) 部分状態密度

- 作業フォルダでwork1_QE_SCFの状態がEND(育)に変化した後、作業フォルダで work1_QE_SCFをクリックしアクションからProjected Density of Statesをクリックしま す。
- 2. 右側の項目のチェックを適宜変更しDrawをクリックします。



VI.結果解析(NiO) スピン密度

- **1. 作業フォルダでwork1_QE_SCFの状態**がEND(青)に変化した後、作業フォルダで work1_QE_SCFをクリックしアクションからSpin Densityをクリックします。
- 2. Winmostar Viewerが起動し、スピン密度が描画されます。





• 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