

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO Nudged Elastic Band法

V10.4.3

2021年4月1日

株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)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

- Cu (100) 表面上のAg原子のホローサイト間のジャンプを計算します。
- 本チュートリアルでは、短時間で全体の流れを把握するという目的のため、スラブの表面構造の緩和などを省略し、システムサイズも小さく設定しています。NEB計算は収束するまで計算させず、指定した反復回数分しか計算させません。
- 同様に、電子状態計算と構造最適化計算の精度も落としています。
- ◆ Quantum ESPRESSOの計算方法及び計算設定内容の詳細な説明は、次の弊社記事をご覧ください。https://qiita.com/xa_member

動作環境設定

- 本機能を用いるためには、Quantum ESPRESSOとCygwinWMのセットアップが必要です。
- <https://winmostar.com/jp/installation/>インストール方法のWindows用のQuantum ESPRESSOとCygwinWMの設定手順に従います。

(6) [こちらの手順](#)に従いWinmostar用のCygwin環境（CygwinWM）を構築します。

(7) WinmostarをインストールしたWindows PC（ローカルマシン）上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。リモートサーバでのみ計算を行う場合もインストールしてください。

量子化学計算を実行する方 : [GAMESS](#) [NWChem](#)

分子動力学計算を実行する方 : [LAMMPS](#)

固体物理計算を実行する方 : [Quantum ESPRESSO](#) [FDMNES](#)

Fragment ER（別売）を実行する方 : [NAMD](#)

※ Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは前の手順でインストールするCygwinに含まれます。

※ 最大原子数を拡張したMOPAC6を使う場合は[こちら](#)から入手してください（動作未保障）。

擬ポテンシャルの用意

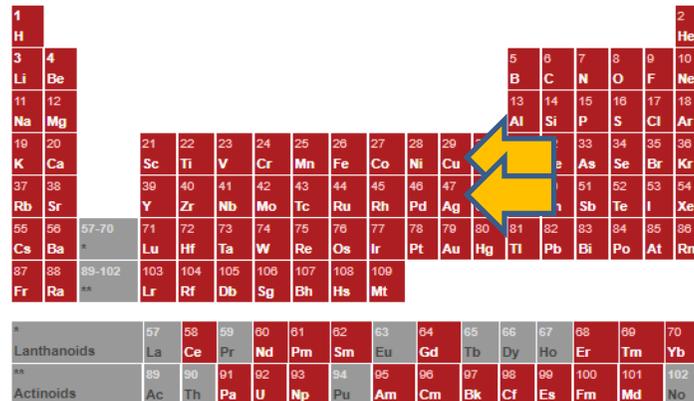
- 本チュートリアルの実施のために、擬ポテンシャルファイルの追加が必要な場合があります。
- 以下のURLより擬ポテンシャルファイルをダウンロードする。

<https://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials/>

リンク先に表示される周期表の[Cu]から[Cu.pbe-dn-rrkjus_psl.0.2.UPF]を、[Ag]から[Ag.pbe-dn-rrkjus_psl.0.1.UPF]をQEのインストールフォルダの下のpseudoフォルダに保存し、Winmostarを再起動する。

FHI PP FROM ABINIT WEB SITE

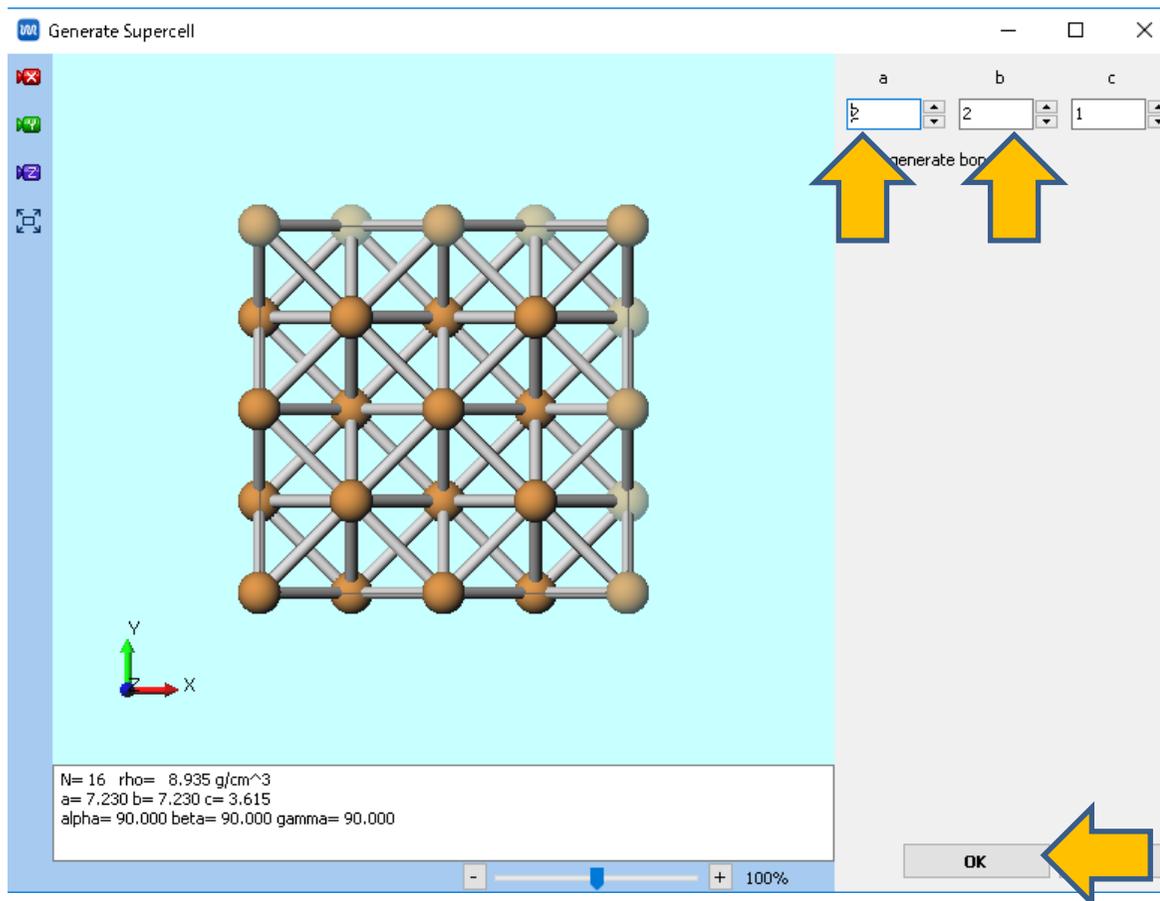
These pseudopotentials are not recommended - the table is kept for reference



1																	2	
H																	He	
3	4											5	6	7	8	9	10	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
11	12											13	14	15	16	17	18	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
55	56	57-70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba	*	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
87	88	89-102	103	104	105	106	107	108	109									
Fr	Ra	**	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt									
*		57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70			
Lanthanoids		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb			
**		89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102			
Actinoids		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No			

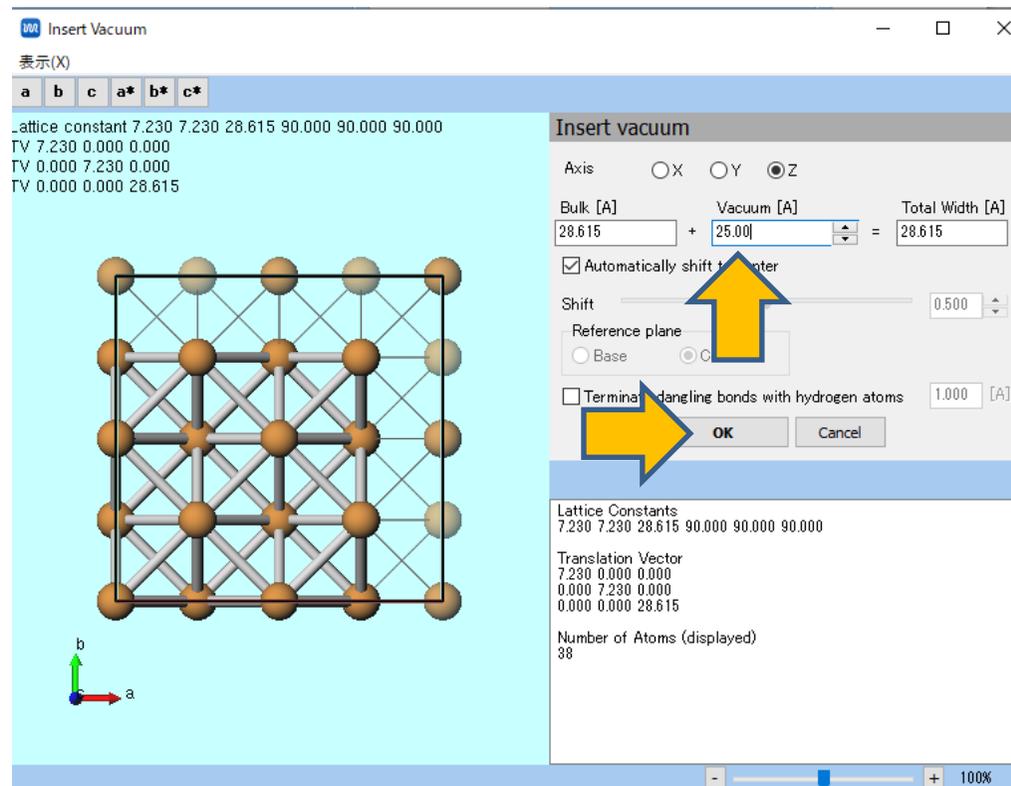
I. 系の作成

1. ファイル | 開くをクリックしC:¥winmos10¥Samples¥cu.cifを開く。
2. 固体 | スーパーセルを作成をクリックし、**a, b**を「2」に変更し、**OK**ボタンを押す。



I. 系の作成

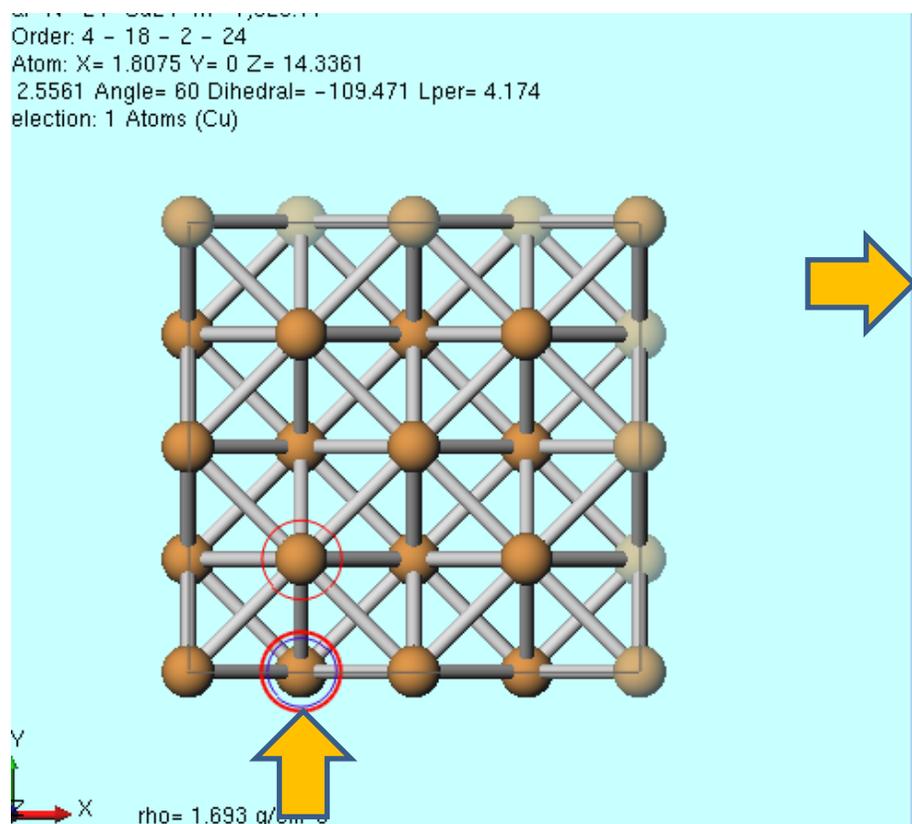
1. メインウィンドウにおいて**固体 | 真空層を挿入**をクリックする。
2. **Vacuum [A]**に「25」と入力し**OK**をクリックする。
3. その後**ファイル | 名前を付けて保存**をクリックし、「cu_slab.cif」として保存する。



I. 系の作成

1. メインウィンドウ右の**座標表示エリア**から4番目の原子を選択する。
2. **分子表示エリア**にて赤太丸で囲まれた原子をCtrl+クリックし青丸で選択された状態にする。

Order: 4 - 18 - 2 - 24
Atom: X= 1.8075 Y= 0 Z= 14.3361
2.5561 Angle= 60 Dihedral= -109.471 Lper= 4.174
election: 1 Atoms (Cu)



Winmostar

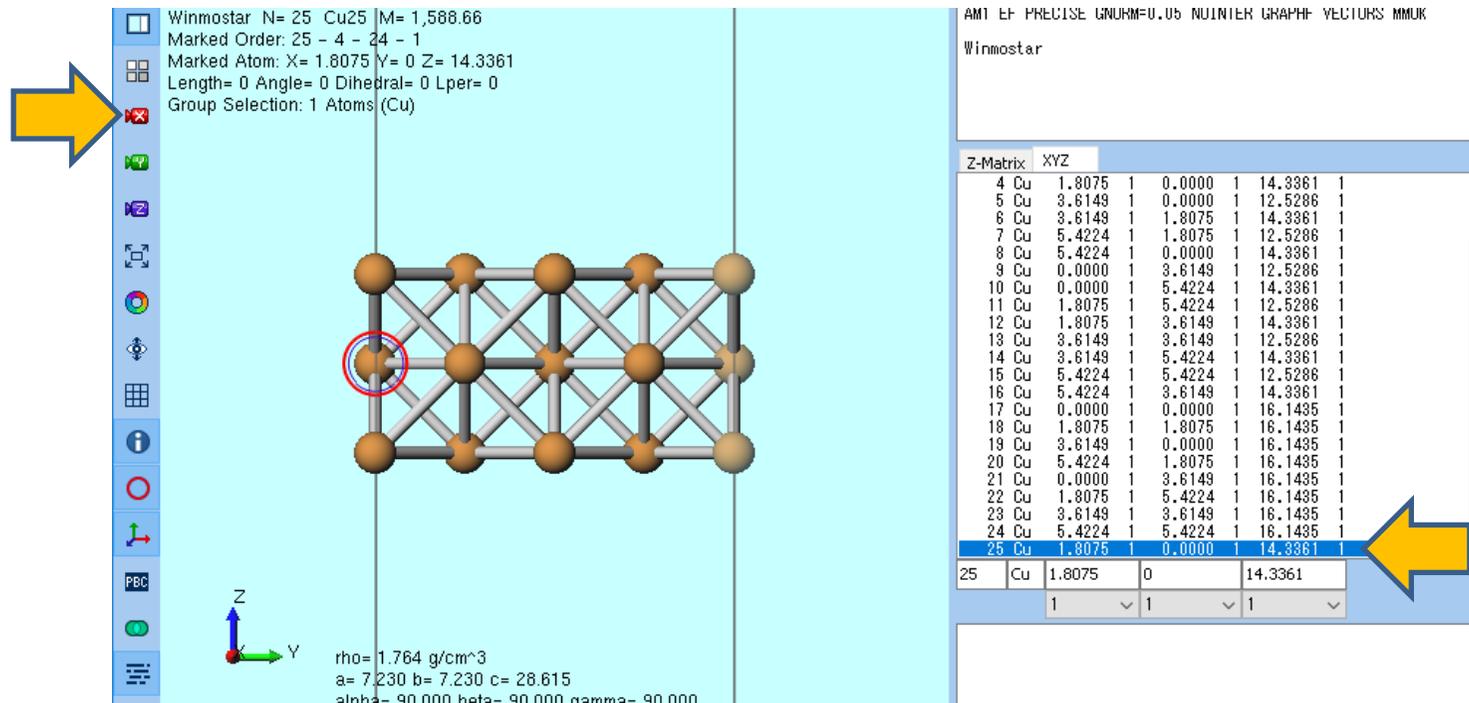
Z-Matrix	XYZ						
1	Cu	0.0000	1	0.0000	1	12.5286	1
2	Cu	0.0000	1	1.8075	1	14.3361	1
3	Cu	1.8075	1	1.8075	1	12.5286	1
4	Cu	1.8075	1	0.0000	1	14.3361	1
5	Cu	3.6149	1	0.0000	1	12.5286	1
6	Cu	3.6149	1	1.8075	1	14.3361	1
7	Cu	5.4224	1	1.8075	1	12.5286	1
8	Cu	5.4224	1	0.0000	1	14.3361	1
9	Cu	0.0000	1	3.6149	1	12.5286	1
10	Cu	0.0000	1	5.4224	1	14.3361	1
11	Cu	1.8075	1	5.4224	1	12.5286	1
12	Cu	1.8075	1	3.6149	1	14.3361	1
13	Cu	3.6149	1	3.6149	1	12.5286	1
14	Cu	3.6149	1	5.4224	1	14.3361	1
15	Cu	5.4224	1	5.4224	1	12.5286	1
16	Cu	5.4224	1	3.6149	1	14.3361	1
17	Cu	0.0000	1	0.0000	1	16.1435	1
18	Cu	1.8075	1	1.8075	1	16.1435	1
19	Cu	3.6149	1	0.0000	1	16.1435	1
20	Cu	5.4224	1	1.8075	1	16.1435	1
21	Cu	0.0000	1	3.6149	1	16.1435	1
22	Cu	1.8075	1	5.4224	1	16.1435	1

4 Cu 1.8075 0 14.3361
1 1 1

rho= 1.693 g/cm³

I. 系の作成

1.  (X軸方向から表示) ボタンをクリックする。
2. **Ctrl+C**(「Ctrl」キーと「C」キー)、**Ctrl+V**と入力し、キーボードのEnterキーを押す。
3. **座標表示エリア**において25番目の原子の行をクリックする。



Winmostar N= 25 Cu25 |M= 1,588.66
Marked Order: 25 - 4 - 24 - 1
Marked Atom: X= 1.8075 Y= 0 Z= 14.3361
Length= 0 Angle= 0 Dihedral= 0 Lper= 0
Group Selection: 1 Atoms (Cu)

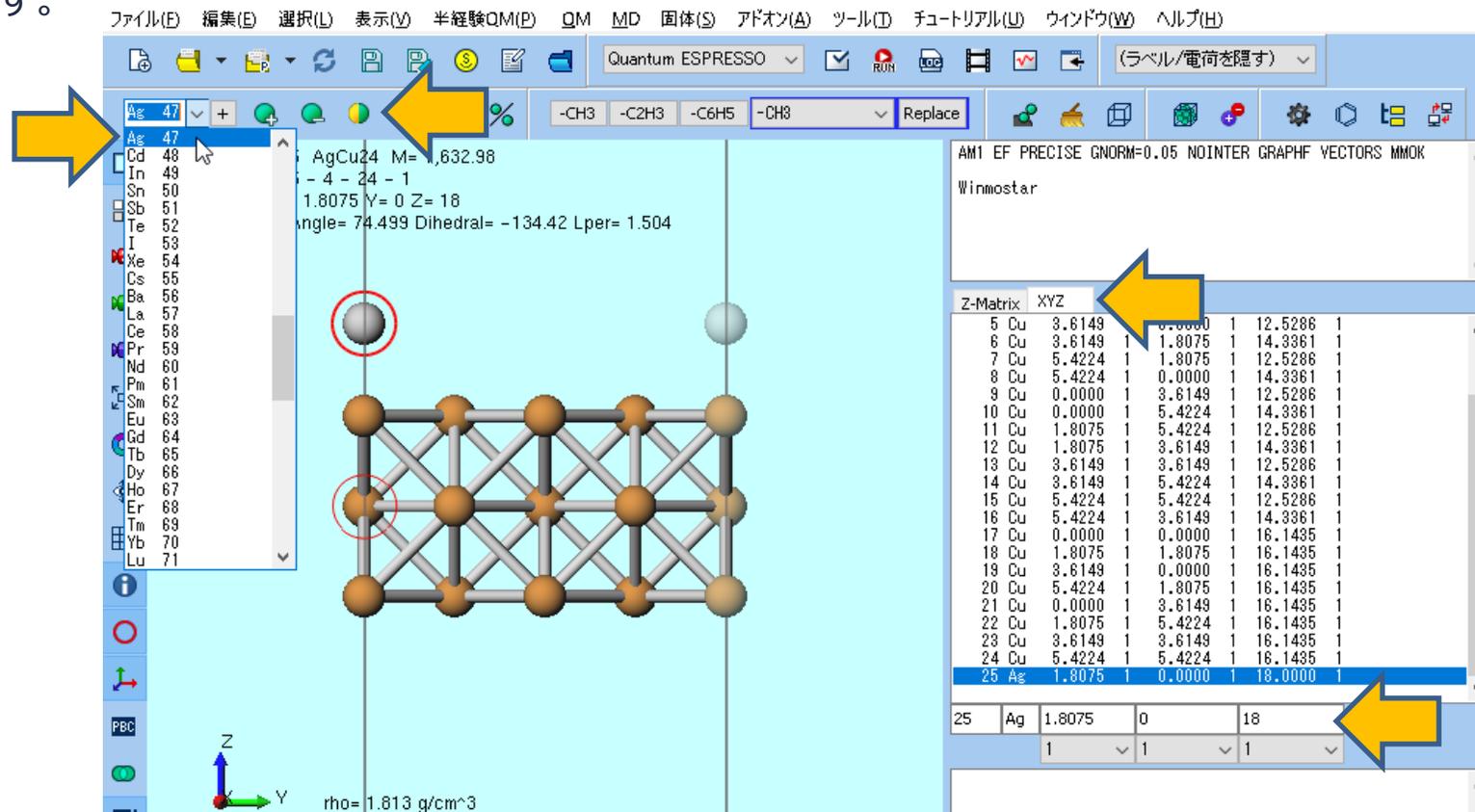
rho= 1.764 g/cm³
a= 7.230 b= 7.230 c= 28.615
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

AMT EF PRECISE GROUND=0.05 NOINTER GRAPHIC VECTORS MMUK
Winmostar

Z-Matrix:	XYZ
4 Cu	1.8075 0.0000 14.3361 1
5 Cu	3.6149 0.0000 12.5286 1
6 Cu	3.6149 1.8075 14.3361 1
7 Cu	5.4224 1.8075 12.5286 1
8 Cu	5.4224 0.0000 14.3361 1
9 Cu	0.0000 3.6149 12.5286 1
10 Cu	0.0000 5.4224 14.3361 1
11 Cu	1.8075 5.4224 12.5286 1
12 Cu	1.8075 3.6149 14.3361 1
13 Cu	3.6149 3.6149 12.5286 1
14 Cu	3.6149 5.4224 14.3361 1
15 Cu	5.4224 5.4224 12.5286 1
16 Cu	5.4224 3.6149 14.3361 1
17 Cu	0.0000 0.0000 16.1435 1
18 Cu	1.8075 1.8075 16.1435 1
19 Cu	3.6149 0.0000 16.1435 1
20 Cu	5.4224 1.8075 16.1435 1
21 Cu	0.0000 3.6149 16.1435 1
22 Cu	1.8075 5.4224 16.1435 1
23 Cu	3.6149 3.6149 16.1435 1
24 Cu	5.4224 5.4224 16.1435 1
25 Cu	1.8075 0.0000 14.3361 1

I. 系の作成

1. 座標表示エリアでXYZタブが開いた状態にする。
2. 25番目の原子のZ座標を「18」に変更する。
3. メインウィンドウ左上の編集操作向けの元素を選択で「Ag 47」を選び  元素変更ボタンを押す。

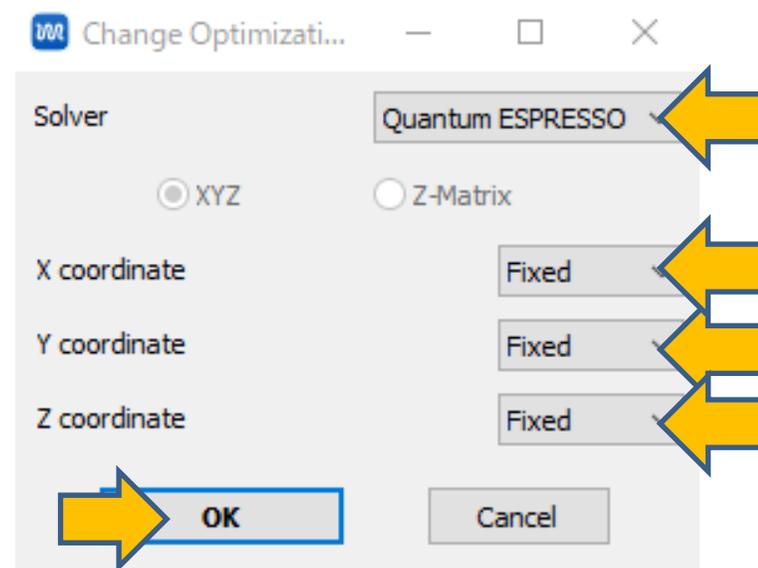
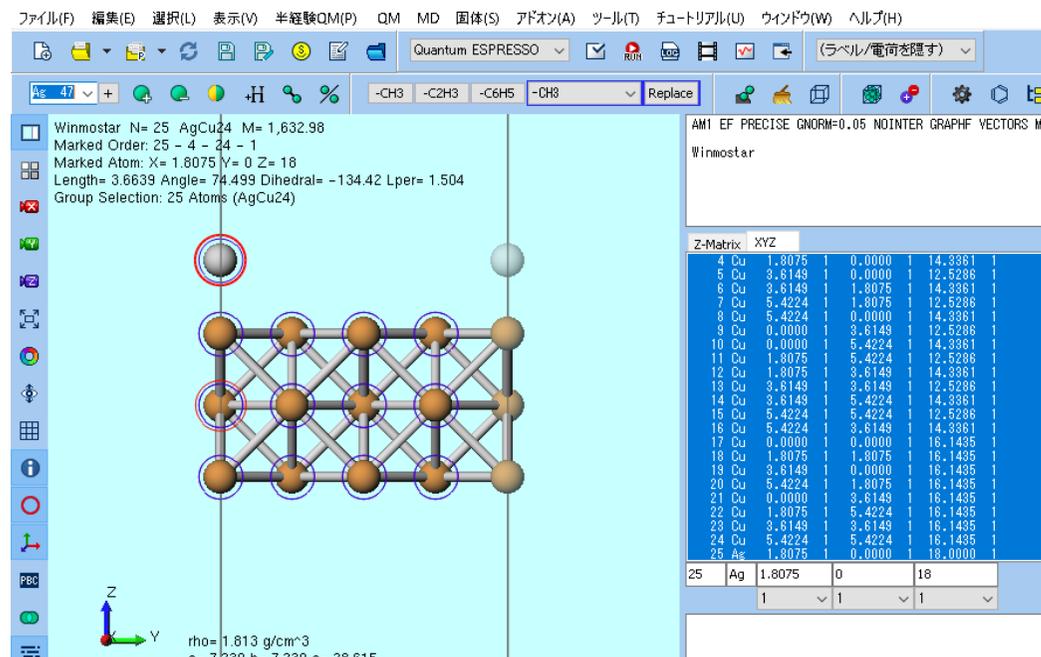


The screenshot shows the Winmostar software interface. The main window displays a 3D crystal structure of AgCu₂₄ with a density of $\rho = 1.813 \text{ g/cm}^3$. The Z-Matrix table is visible on the right side of the interface, showing the coordinates for 25 atoms. The 25th atom is highlighted in blue, and its Z-coordinate is 18.0000. The element selection menu on the left shows 'Ag 47' selected. The element change button is located in the top right corner of the main window.

Z-Matrix	XYZ			
5	Cu	3.6149	0.0000	12.5286
6	Cu	3.6149	1.8075	14.3361
7	Cu	5.4224	1.8075	12.5286
8	Cu	5.4224	0.0000	14.3361
9	Cu	0.0000	3.6149	12.5286
10	Cu	0.0000	5.4224	14.3361
11	Cu	1.8075	5.4224	12.5286
12	Cu	1.8075	3.6149	14.3361
13	Cu	3.6149	3.6149	12.5286
14	Cu	3.6149	5.4224	14.3361
15	Cu	5.4224	5.4224	12.5286
16	Cu	5.4224	3.6149	14.3361
17	Cu	0.0000	0.0000	16.1435
18	Cu	1.8075	1.8075	16.1435
19	Cu	3.6149	0.0000	16.1435
20	Cu	5.4224	1.8075	16.1435
21	Cu	0.0000	3.6149	16.1435
22	Cu	1.8075	5.4224	16.1435
23	Cu	3.6149	3.6149	16.1435
24	Cu	5.4224	5.4224	16.1435
25	Ag	1.8075	0.0000	18.0000

II. 始状態の構造最適化

1. 選択 | すべてをグループ選択をクリックする。
2. 編集 | 属性を変更 | 最適化フラグを変更をクリックし、SolverにQuantum ESPRESSOを選択し、X, Y, Z coordinateすべてをFixedに変更しOKを押す。



II. 始状態の構造最適化

1. 座標表示エリアにおいて25番目の原子の行をクリックして選択し、その下でZ成分の最適化フラグを0（固定）から1（可変）に変更する。

6639 Angle= 74.499 Dihedral= -134.42 Lper= 1.504
Action: 25 Atoms (AgCu24)

rho= 1.813 g/cm³
a= 7.230 b= 7.230 c= 28.615
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

Z-Matrix		XYZ					
4	Cu	1.8075	0	0.0000	0	14.3361	0
5	Cu	3.6149	0	0.0000	0	12.5286	0
6	Cu	3.6149	0	1.8075	0	14.3361	0
7	Cu	5.4224	0	1.8075	0	12.5286	0
8	Cu	5.4224	0	0.0000	0	14.3361	0
9	Cu	0.0000	0	3.6149	0	12.5286	0
10	Cu	0.0000	0	5.4224	0	14.3361	0
11	Cu	1.8075	0	5.4224	0	12.5286	0
12	Cu	1.8075	0	3.6149	0	14.3361	0
13	Cu	3.6149	0	3.6149	0	12.5286	0
14	Cu	3.6149	0	5.4224	0	14.3361	0
15	Cu	5.4224	0	5.4224	0	12.5286	0
16	Cu	5.4224	0	3.6149	0	14.3361	0
17	Cu	0.0000	0	0.0000	0	16.1435	0
18	Cu	1.8075	0	1.8075	0	16.1435	0
19	Cu	3.6149	0	0.0000	0	16.1435	0
20	Cu	5.4224	0	1.8075	0	16.1435	0
21	Cu	0.0000	0	3.6149	0	16.1435	0
22	Cu	1.8075	0	5.4224	0	16.1435	0
23	Cu	3.6149	0	3.6149	0	16.1435	0
24	Cu	5.4224	0	5.4224	0	16.1435	0
25	Ag	1.8075	0	0.0000	0	18.0000	1

25 Ag 1.8075 0 0 18

0 0 1

0

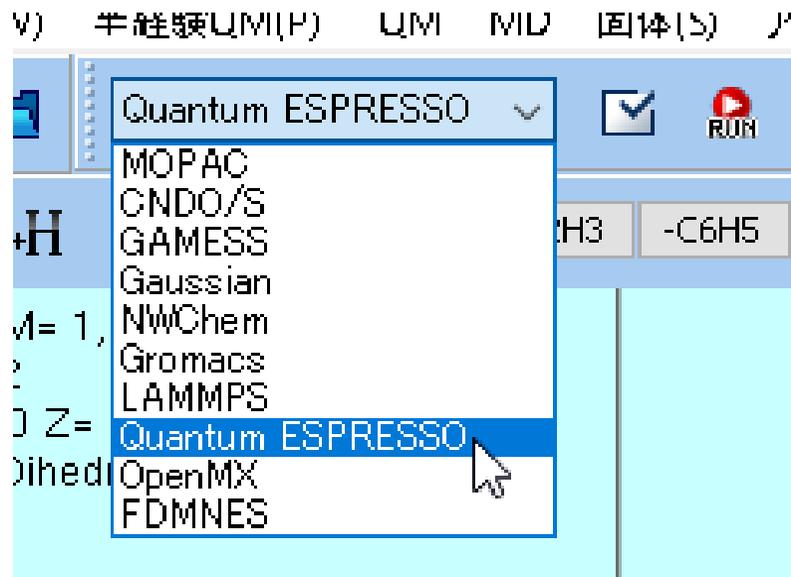
1

-1

T

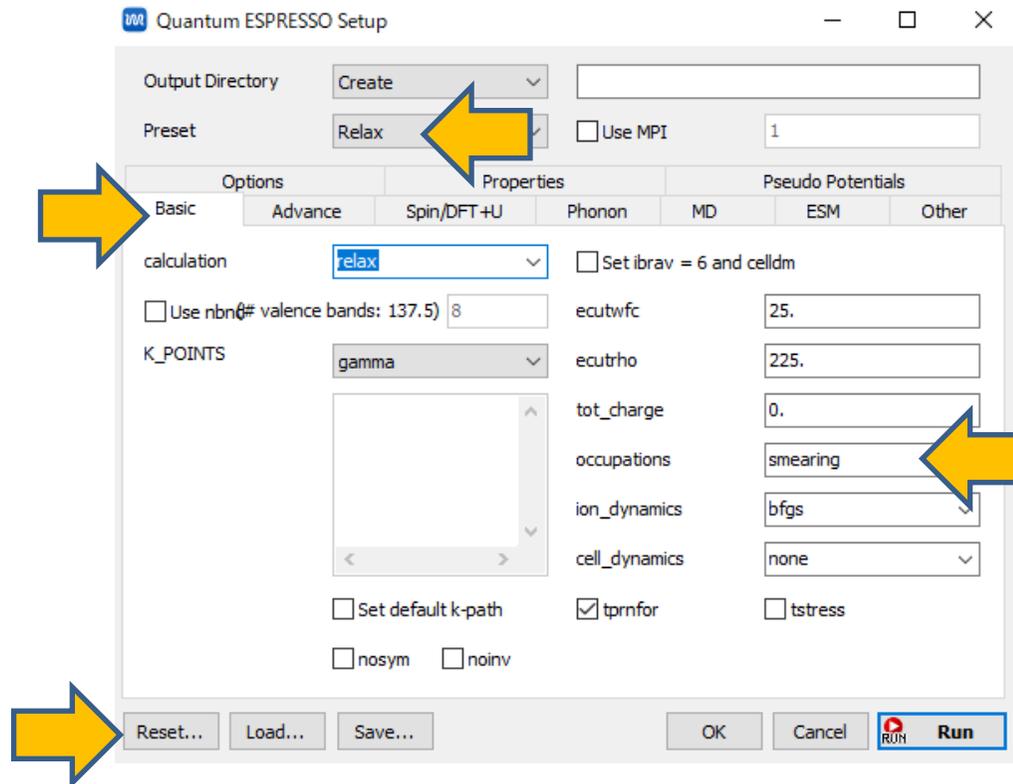
II. 始状態の構造最適化

1. ソルバを選択メニューにおいて**Quantum ESPRESSO**を選択する。
2. キーワード設定ボタンを押す。



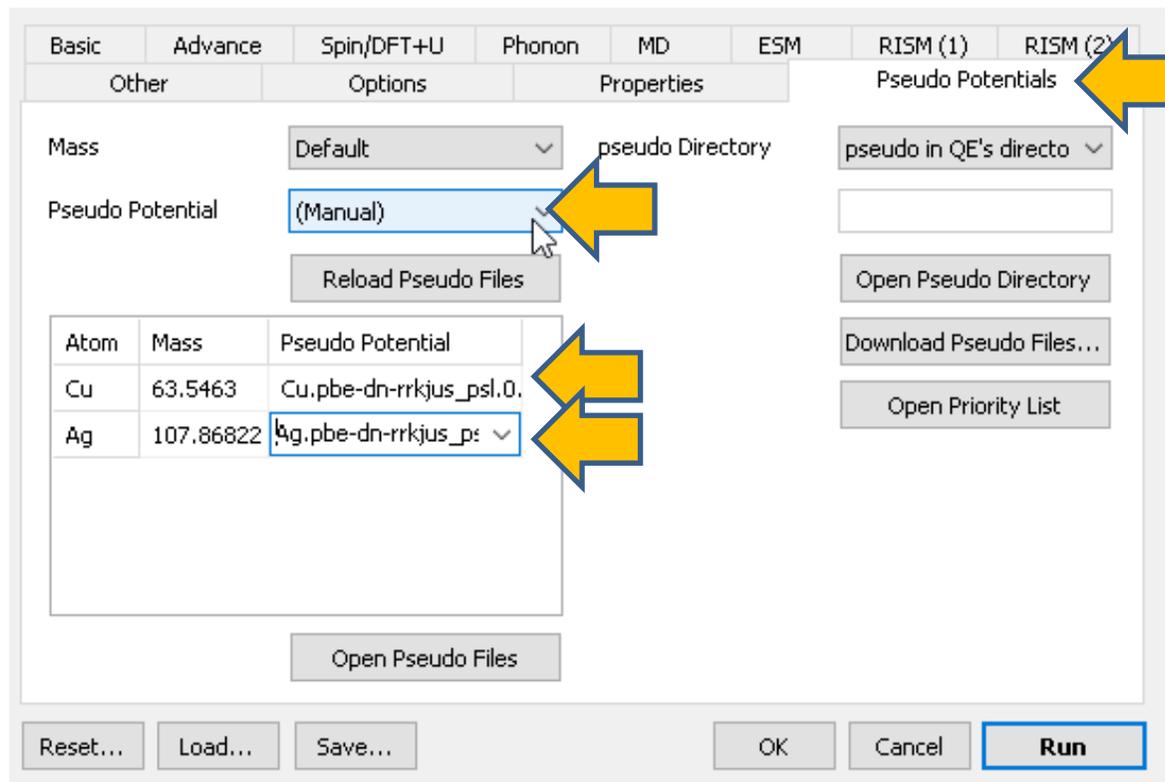
II. 始状態の構造最適化

1. Quantum ESPRESSO Setupウィンドウ左下のResetボタンをクリックする。
2. PresetにRelaxを選択する。
3. Basicタブのoccupationsをsmearingに変更する。



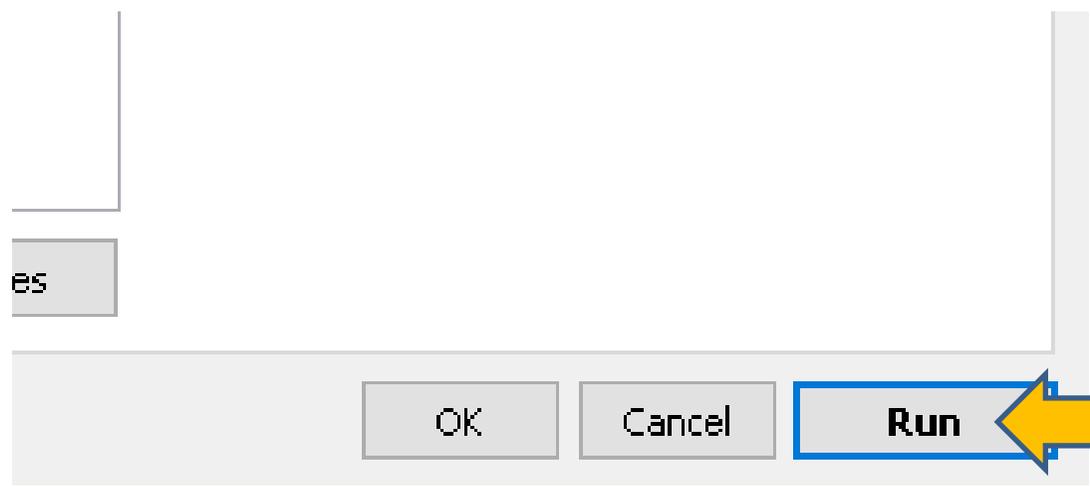
II. 始状態の構造最適化

1. Pseudo Potentialsタブの共通のPseudo Potentialを(Manual)に設定し、各原子種のPseudo PotentialにおいてCuは「Cu.pbe-dn-rrkjus_psl.0.2.UPF」、Agは「Ag.pbe-dn-rrkjus_psl.0.1.UPF」に設定する。
2. 上記のpseudoファイルがない場合はP.5の手順で入手する。



II. 始状態の構造最適化

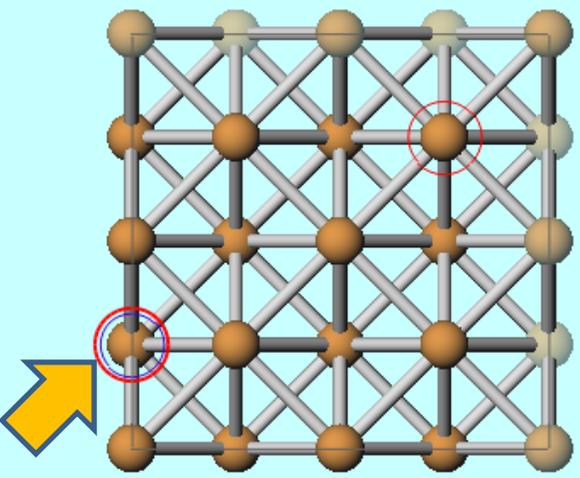
1. **Run**ボタンをクリックし、保存ダイアログでファイル名はcu_slab_firstとして保存し、計算を開始する。（25番目の原子のZ成分だけが動く構造最適化計算が走る）



III. 終状態の構造最適化

1. メインウィンドウの**ファイル | 開く**から先ほど保存した**cu_slab.cif**を開く。
2. **座標表示エリア**にて2番目の原子の行を左クリックし選択する。
3. **分子表示エリア**にて赤太丸で囲まれた原子をCtrl+クリックし青丸で選択された状態にする。

Winmostar N= 24 Cu24 M= 1,525.11
ked Order: 2 - 24 - 1 - 4
ked Atom: X= 0 Y= 1.8075 Z= 14.3361
gth= 6.7629 Angle= 14.381 Dihedral= -99.084 Lper= 1.659
up Selection: 1 Atoms (Cu)



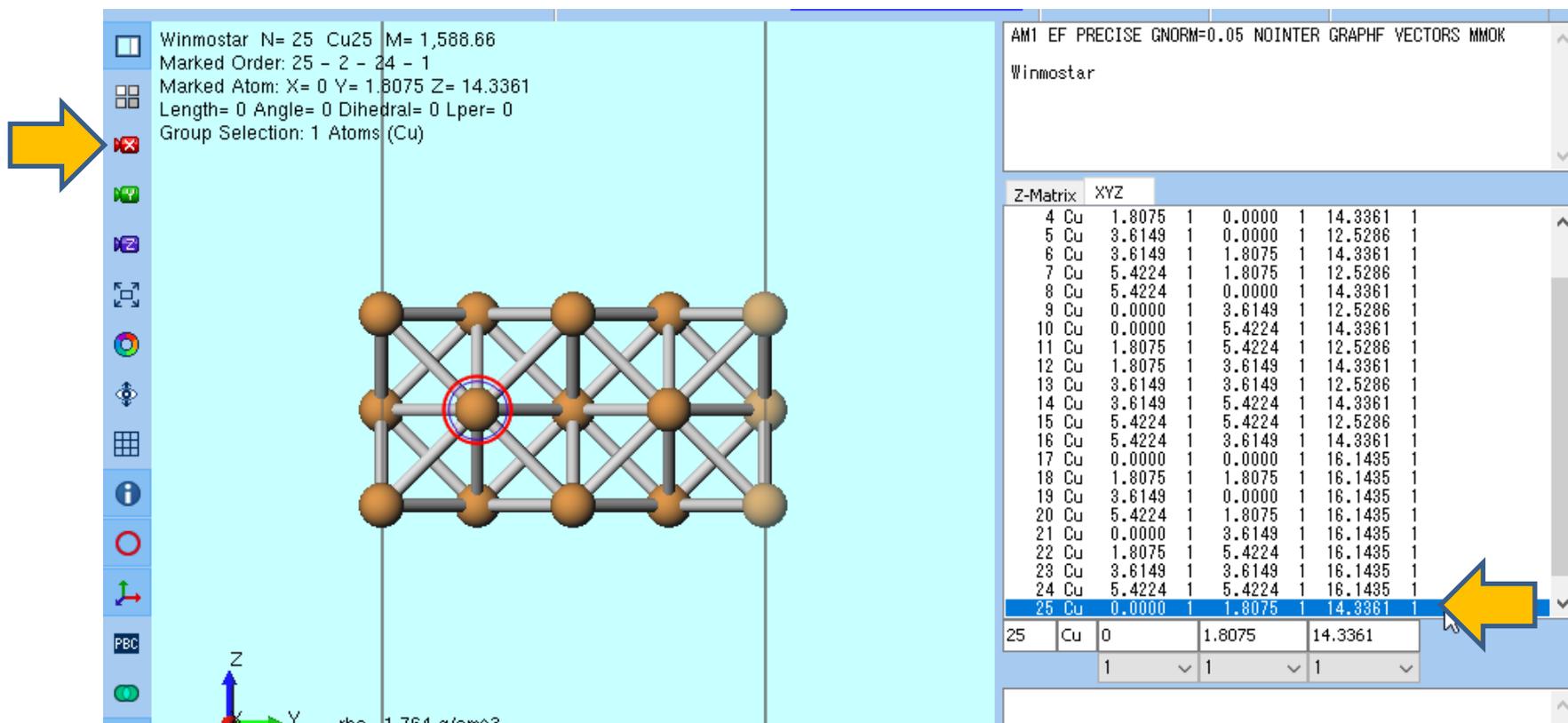
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK
Winmostar

Z-Matrix	XYZ				
1 Cu	0.0000	1	0.0000	1	12.5286
2 Cu	0.0000	1	1.8075	1	14.3361
3 Cu	1.8075	1	1.8075	1	12.5286
4 Cu	1.8075	1	0.0000	1	14.3361
5 Cu	3.6149	1	0.0000	1	12.5286
6 Cu	3.6149	1	1.8075	1	14.3361
7 Cu	5.4224	1	1.8075	1	12.5286
8 Cu	5.4224	1	0.0000	1	14.3361
9 Cu	0.0000	1	3.6149	1	12.5286
10 Cu	0.0000	1	5.4224	1	14.3361
11 Cu	1.8075	1	5.4224	1	12.5286
12 Cu	1.8075	1	3.6149	1	14.3361
13 Cu	3.6149	1	3.6149	1	12.5286
14 Cu	3.6149	1	5.4224	1	14.3361
15 Cu	5.4224	1	5.4224	1	12.5286
16 Cu	5.4224	1	3.6149	1	14.3361
17 Cu	0.0000	1	0.0000	1	16.1435
18 Cu	1.8075	1	1.8075	1	16.1435
19 Cu	3.6149	1	0.0000	1	16.1435
20 Cu	5.4224	1	1.8075	1	16.1435
21 Cu	0.0000	1	3.6149	1	16.1435
22 Cu	1.8075	1	5.4224	1	16.1435

2	Cu	0	1.8075	14.3361
		1	1	1

III. 終状態の構造最適化

1.  (X軸方向から表示) ボタンをクリックする。
2. **Ctrl+C**、**Ctrl+V**と入力し、1回**分子表示エリア**をクリックする (ドラッグしてはならない)
3. **座標表示エリア**において25番目の原子の行をクリックする。



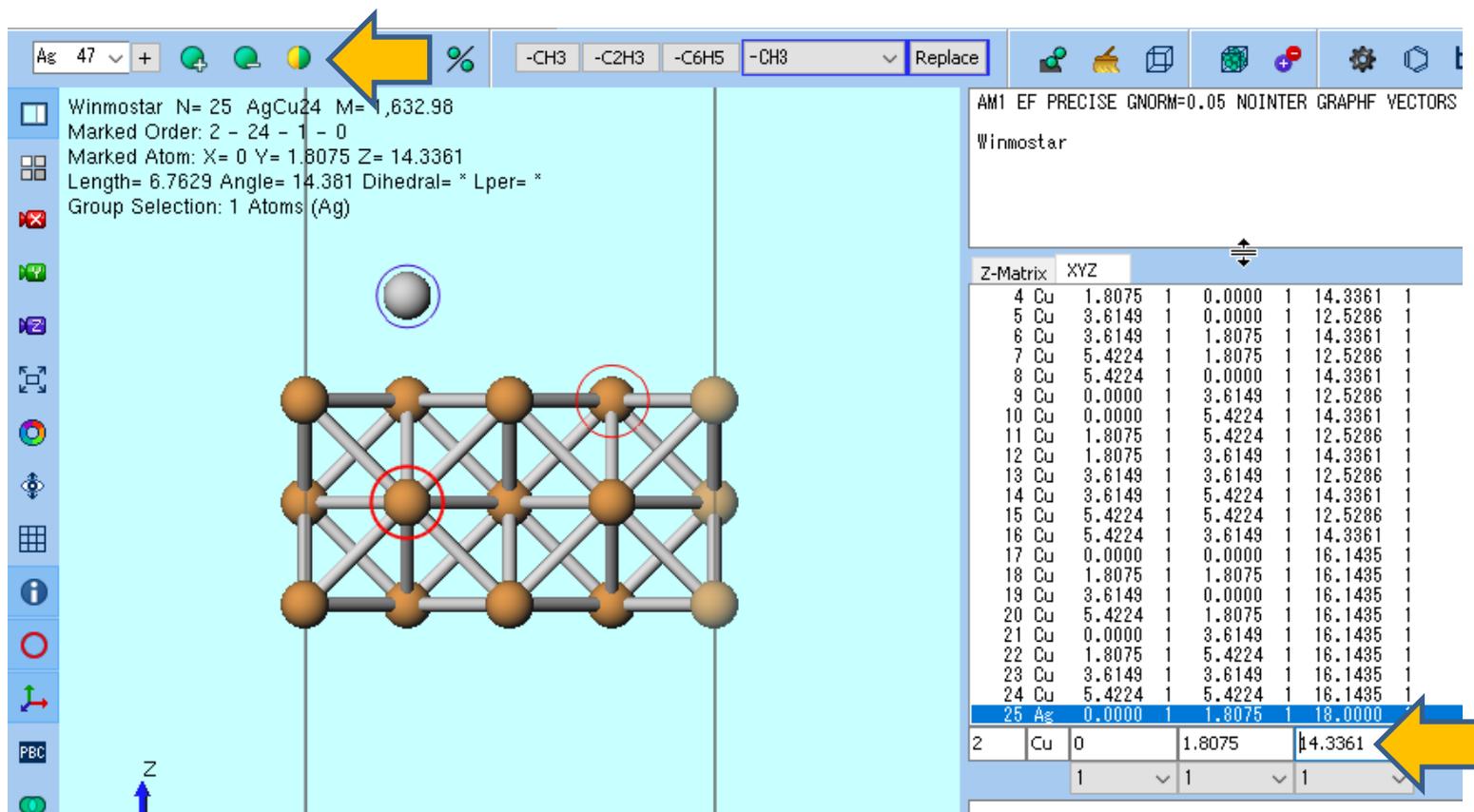
Winmostar N= 25 Cu25 M= 1,588.66
Marked Order: 25 - 2 - 24 - 1
Marked Atom: X= 0 Y= 1.8075 Z= 14.3361
Length= 0 Angle= 0 Dihedral= 0 Lper= 0
Group Selection: 1 Atoms (Cu)

Z-Matrix	XYZ
4 Cu	1.8075 1 0.0000 1 14.3361 1
5 Cu	3.6149 1 0.0000 1 12.5286 1
6 Cu	3.6149 1 1.8075 1 14.3361 1
7 Cu	5.4224 1 1.8075 1 12.5286 1
8 Cu	5.4224 1 0.0000 1 14.3361 1
9 Cu	0.0000 1 3.6149 1 12.5286 1
10 Cu	0.0000 1 5.4224 1 14.3361 1
11 Cu	1.8075 1 5.4224 1 12.5286 1
12 Cu	1.8075 1 3.6149 1 14.3361 1
13 Cu	3.6149 1 3.6149 1 12.5286 1
14 Cu	3.6149 1 5.4224 1 14.3361 1
15 Cu	5.4224 1 5.4224 1 12.5286 1
16 Cu	5.4224 1 3.6149 1 14.3361 1
17 Cu	0.0000 1 0.0000 1 16.1435 1
18 Cu	1.8075 1 1.8075 1 16.1435 1
19 Cu	3.6149 1 0.0000 1 16.1435 1
20 Cu	5.4224 1 1.8075 1 16.1435 1
21 Cu	0.0000 1 3.6149 1 16.1435 1
22 Cu	1.8075 1 5.4224 1 16.1435 1
23 Cu	3.6149 1 3.6149 1 16.1435 1
24 Cu	5.4224 1 5.4224 1 16.1435 1
25 Cu	0.0000 1 1.8075 1 14.3361 1

25 Cu 0 1.8075 14.3361
1 1 1

III. 終状態の構造最適化

1. 座標表示エリアで25番目の原子のZ座標を「18」に変更する。
2.  元素を変更ボタンを押す。



The screenshot shows the Winmostar software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a molecular structure. A yellow arrow points to the 'Replace' button in the top toolbar. The left sidebar shows the 'Winmostar' molecule information: N= 25, AgCu24, M= 1,632.98, Marked Order: 2 - 24 - 1 - 0, Marked Atom: X= 0 Y= 1.8075 Z= 14.3361, Length= 6.7629 Angle= 14.361 Dihedral= * Lper= *, Group Selection: 1 Atoms (Ag). The right sidebar shows the 'Z-Matrix' table with columns for 'XYZ' and 'XYZ'. The table contains 25 rows of coordinates for atoms 4 through 25. The 25th row is highlighted in blue, and a yellow arrow points to the Z-coordinate value '18.0000'.

Z-Matrix	XYZ	XYZ
4 Cu	1.8075	1 0.0000 1 14.3361 1
5 Cu	3.6149	1 0.0000 1 12.5286 1
6 Cu	3.6149	1 1.8075 1 14.3361 1
7 Cu	5.4224	1 1.8075 1 12.5286 1
8 Cu	5.4224	1 0.0000 1 14.3361 1
9 Cu	0.0000	1 3.6149 1 12.5286 1
10 Cu	0.0000	1 5.4224 1 14.3361 1
11 Cu	1.8075	1 5.4224 1 12.5286 1
12 Cu	1.8075	1 3.6149 1 14.3361 1
13 Cu	3.6149	1 3.6149 1 12.5286 1
14 Cu	3.6149	1 5.4224 1 14.3361 1
15 Cu	5.4224	1 5.4224 1 12.5286 1
16 Cu	5.4224	1 3.6149 1 14.3361 1
17 Cu	0.0000	1 0.0000 1 16.1435 1
18 Cu	1.8075	1 1.8075 1 16.1435 1
19 Cu	3.6149	1 0.0000 1 16.1435 1
20 Cu	5.4224	1 1.8075 1 16.1435 1
21 Cu	0.0000	1 3.6149 1 16.1435 1
22 Cu	1.8075	1 5.4224 1 16.1435 1
23 Cu	3.6149	1 3.6149 1 16.1435 1
24 Cu	5.4224	1 5.4224 1 16.1435 1
25 Ag	0.0000	1 1.8075 1 18.0000 1

III. 終状態の構造最適化

1. 選択 | すべてをグループ選択をクリックする。
2. 編集 | 属性を変更 | 最適化フラグを変更をクリックし、SolverにQuantum ESPRESSOを選択し、X, Y, Z coordinateすべてをFixedに変更しOKを押す。

Winmostar N= 25 AgCu24 M= 1,632.98
Marked Order: 2 - 24 - 1 - 0
Marked Atom: X= 0 Y= 1.8075 Z= 14.3361
Length= 6.7629 Angle= 14.381 Dihedral= " Lper= "
Group Selection: 25 Atoms (AgCu24)

Z-Matrix	XYZ
4 Cu	1.8075 1 0.0000 14.3361 1
5 Cu	3.6149 1 0.0000 12.5288 1
6 Cu	3.6149 1 1.8075 14.3361 1
7 Cu	5.4224 1 1.8075 12.5288 1
8 Cu	5.4224 1 0.0000 14.3361 1
9 Cu	0.0000 1 3.6149 12.5288 1
10 Cu	0.0000 1 5.4224 14.3361 1
11 Cu	1.8075 1 5.4224 12.5288 1
12 Cu	1.8075 1 3.6149 14.3361 1
13 Cu	3.6149 1 3.6149 12.5288 1
14 Cu	3.6149 1 5.4224 14.3361 1
15 Cu	5.4224 1 5.4224 12.5288 1
16 Cu	5.4224 1 3.6149 14.3361 1
17 Cu	0.0000 1 0.0000 16.1435 1
18 Cu	1.8075 1 1.8075 16.1435 1
19 Cu	3.6149 1 0.0000 16.1435 1
20 Cu	5.4224 1 1.8075 16.1435 1
21 Cu	0.0000 1 3.6149 16.1435 1
22 Cu	1.8075 1 5.4224 16.1435 1
23 Cu	3.6149 1 3.6149 16.1435 1
24 Cu	5.4224 1 5.4224 16.1435 1
25 Ag	0.0000 1 1.8075 18.0000 1

2 Cu 0 1.8075 14.3361
1 1 1

rho= 1.813 g/cm³
a= 7.230 b= 7.230 c= 28.615
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

Change Optimizati...

Solver: Quantum ESPRESSO

XYZ Z-Matrix

X coordinate: Fixed

Y coordinate: Fixed

Z coordinate: Fixed

OK Cancel

III. 終状態の構造最適化

1. 座標表示エリアにおいて25番目の原子の行をクリックして選択し、その下でZ成分の最適化フラグを0 (固定) から1 (可変) に変更する。

Winmostar N= 25 AgCu24 M= 1,632.98
Marked Order: 25 - 13 - 1 - 2
Marked Atom: X= 0 Y= 1.8075 Z= 18
Length= 6.8022 Angle= 55.69 Dihedral= 22.116 Lper= 0.833

rho= 1.613 g/cm³
a= 7.230 b= 7.230 c= 28.615
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

```
&control
prefix      = 'wm',
outdir      = 'cu_slab_last_oe_data',
verbosity   = 'high',
calculation = 'relax',
restart_mode = 'from_scratch',
```

Z-Matrix	XYZ	
5 Cu	3.6149 0 0.0000	0 12.5286 0 1
6 Cu	3.6149 0 1.8075	0 14.3361 0 1
7 Cu	5.4224 0 1.8075	0 12.5286 0 1
8 Cu	5.4224 0 0.0000	0 14.3361 0 1
9 Cu	0.0000 0 3.6149	0 12.5286 0 1
10 Cu	0.0000 0 5.4224	0 14.3361 0 1
11 Cu	1.8075 0 5.4224	0 12.5286 0 1
12 Cu	1.8075 0 3.6149	0 14.3361 0 1
13 Cu	3.6149 0 3.6149	0 12.5286 0 1
14 Cu	3.6149 0 5.4224	0 14.3361 0 1
15 Cu	5.4224 0 5.4224	0 12.5286 0 1
16 Cu	5.4224 0 3.6149	0 14.3361 0 1
17 Cu	0.0000 0 0.0000	0 16.1435 0 1
18 Cu	1.8075 0 1.8075	0 16.1435 0 1
19 Cu	3.6149 0 0.0000	0 16.1435 0 1
20 Cu	5.4224 0 1.8075	0 16.1435 0 1
21 Cu	0.0000 0 3.6149	0 16.1435 0 1
22 Cu	1.8075 0 5.4224	0 16.1435 0 1
23 Cu	3.6149 0 3.6149	0 16.1435 0 1
24 Cu	5.4224 0 5.4224	0 16.1435 0 1
25 Ag	0.0000 0 1.8075	0 18.0000 0 1

25	Ag	0	1.8075	18	
		0	0	0	

K_POINTS {gamma}

0
1
-1
T

III. 終状態の構造最適化

1. P.13-16の手順を繰り返し構造最適化計算を実施する。なお、ファイル名は**cu_slab_last**とする。

IV.NEB計算

1. 固体 | Quantum ESPRESSO | Nudged Elastic Band | キーワード設定をクリックする。
2. **FIRST_IMAGE**の欄に計算終了後のcu_slab_first.pwoutを、**LAST_IMAGE**の欄にcu_slab_last.pwoutをドラッグアンドドロップする。
3. **# of Images**に「5」、**# of ionic & electronic steps**に「5」を入力し、**OK**ボタンを押す。

The screenshot shows the 'Nudged Elastic Band' configuration window. The 'Coordinates' section has 'FIRST_IMAGE' set to 'C:\winmos10\UserData\cu_slab_first.pwout' and 'LAST_IMAGE' set to 'C:\winmos10\UserData\cu_slab_last.pwout'. Below this, there are checkboxes for 'Reorder atomic indices' and 'Atom Moving Along Reaction Coordinate at FIRST_IMAGE: 1' and 'at LAST_IMAGE: 1'. The 'Parameters' section includes '# of Images' (5), 'Threshold [eV/A]' (0.05), '# of Ionic & Electronic Steps' (5), 'Optimization Scheme' (broyden), 'Climbing Image Scheme' (no-CI), 'Optimize first & last configurations' (unchecked), 'Use minimum image' (unchecked), 'Optimisation Step Length [bohr]' (1.0), 'Elastic Constant [hartree]' (0.4 ~ 0.6), and 'Use optimisation flags defined on main window' (checked). The 'OK' button is highlighted with a yellow arrow.

IV.NEB計算

1. 座標表示エリアにて25番目の原子の行を選択し、X,Y成分の最適化フラグも**1(可変)**に設定する（それ以外の粒子はX,Y,Z全成分0にしておく）。
2. キーワード表示エリアにQEのキーワードが設定されていない場合は **キーワード設定ボタン**を押し、構造最適化時と同等の設定を行い、**OK**ボタンを押す。

Winmostar N= 25 AgCu24 M= 1,632.98
Marked Order: 25 - 1 - 2 - 24
Marked Atom: X= 0 Y= 1.8075 Z= 18
Length= 5.7622 Angle= 26.719 Dihedral= 103.263 Lper= 5.422

rho= 1.813 g/cm³
a= 7.230 b= 7.230 c= 28.615
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

```
%control  
prefix      = 'wm',  
outdir      = 'cu_slab_last_qe_data',  
verbosity   = 'high',  
calculation = 'relax',  
restart_mode = 'from_scratch',  
wf_collect  = .True.,
```

Z-Matrix	XYZ
4 Cu	1.8075 0 0.0000 0 14.3361 0 1
5 Cu	3.6149 0 0.0000 0 12.5286 0 1
6 Cu	3.6149 0 1.8075 0 14.3361 0 1
7 Cu	5.4224 0 1.8075 0 12.5286 0 1
8 Cu	5.4224 0 0.0000 0 14.3361 0 1
9 Cu	0.0000 0 3.6149 0 12.5286 0 1
10 Cu	0.0000 0 5.4224 0 14.3361 0 1
11 Cu	1.8075 0 5.4224 0 12.5286 0 1
12 Cu	1.8075 0 3.6149 0 14.3361 0 1
13 Cu	3.6149 0 3.6149 0 12.5286 0 1
14 Cu	3.6149 0 5.4224 0 14.3361 0 1
15 Cu	5.4224 0 5.4224 0 12.5286 0 1
16 Cu	5.4224 0 3.6149 0 14.3361 0 1
17 Cu	0.0000 0 0.0000 0 16.1435 0 1
18 Cu	1.8075 0 1.8075 0 16.1435 0 1
19 Cu	3.6149 0 0.0000 0 16.1435 0 1
20 Cu	5.4224 0 1.8075 0 16.1435 0 1
21 Cu	0.0000 0 3.6149 0 16.1435 0 1
22 Cu	1.8075 0 5.4224 0 16.1435 0 1
23 Cu	3.6149 0 3.6149 0 16.1435 0 1
24 Cu	5.4224 0 5.4224 0 16.1435 0 1
25 Ag	0.0000 1 1.8075 1 18.0000 1

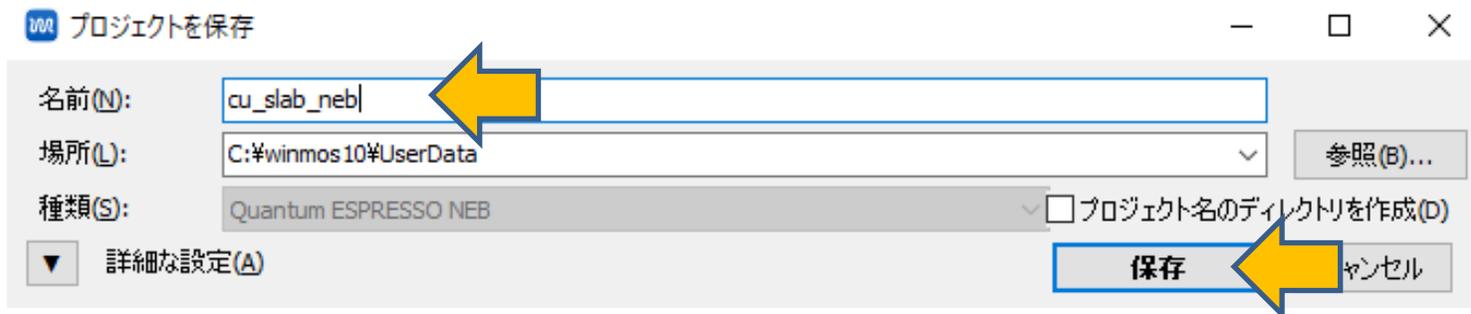
25 Ag 0 1.8075 18

K_POINTS {same}

Yellow arrows point to the control panel, the 25th row of the Z-Matrix table, and the K_POINTS section.

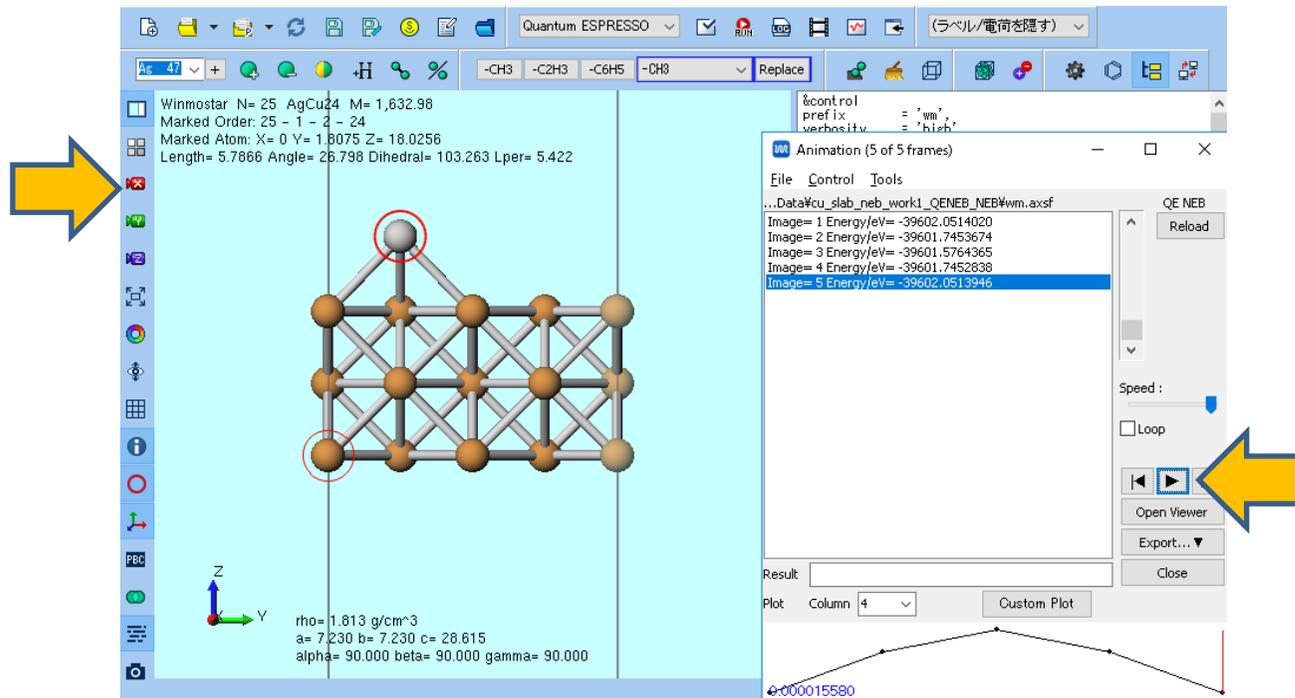
IV.NEB計算

1. 固体 | Quantum ESPRESSO | Nudged Elastic Band | 実行をクリックし、プロジェクトを保存ウィンドウで名前に「cu_slab_neb」と入力し、保存ボタンをクリックすると計算が開始される。
2. リモートジョブの場合は固体 | Quantum ESPRESSO | Nudged Elastic Band | 実行をクリックせず、ツール | リモートジョブ投入をクリックし、Solverにqe_nebを指定してジョブを実行する。



IV.NEB計算

1. 計算終了後、**固体 | Quantum ESPRESSO | Nudged Elastic Band | 遷移状態**をクリックし、デフォルトで選択される2つのファイルを開く。（メインウィンドウで他のファイルを開いていた場合は、計算開始時に保存された**neb.in**を一旦開く）
2.  (**X軸方向から表示**) ボタンをクリックする。
3. **Animation**ウィンドウの  (**Play/pause**) ボタンをクリックすると各Imageの原子配置を確認できる。各Imageのエネルギーも**Animation**ウィンドウ下部で確認できる。



Winmostar N= 25 AgCu24 M= 1,632.98
Marked Order: 25 - 1 - 2 - 24
Marked Atom: X= 0 Y= 1.8075 Z= 18.0256
Length= 5.7866 Angle= 26.798 Dihedral= 103.263 Lper= 5.422

rho= 1.813 g/cm³
a= 7.230 b= 7.230 c= 28.615
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

Animation (5 of 5 frames)

Image	Energy/eV
Image= 1	Energy/eV= -39602.0514020
Image= 2	Energy/eV= -39601.7453674
Image= 3	Energy/eV= -39601.5764365
Image= 4	Energy/eV= -39601.7452838
Image= 5	Energy/eV= -39602.0513946

Result:
Plot: Column 4 Custom Plot

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