

 winmostar チュートリアル

VASP基礎編

V11.6.0

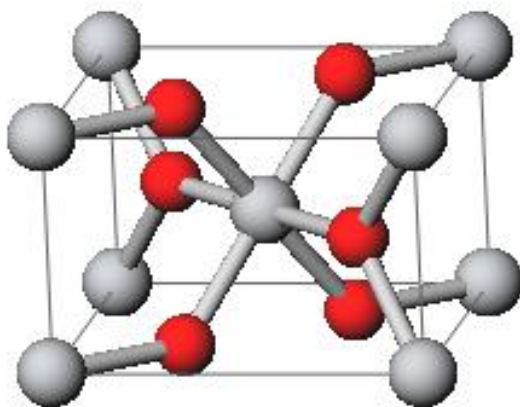
2024年7月2日 株式会社クロスアビリティ

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、ルチル型TiO₂結晶の構造最適化計算をVASPで実施します。セルと原子核位置の両方を同時に最適化します。



注意点：

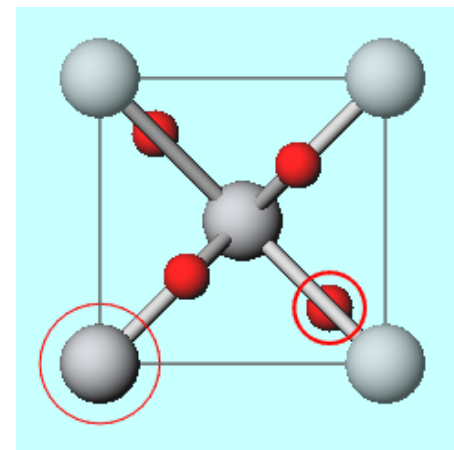
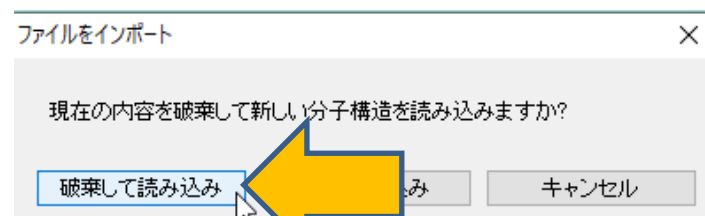
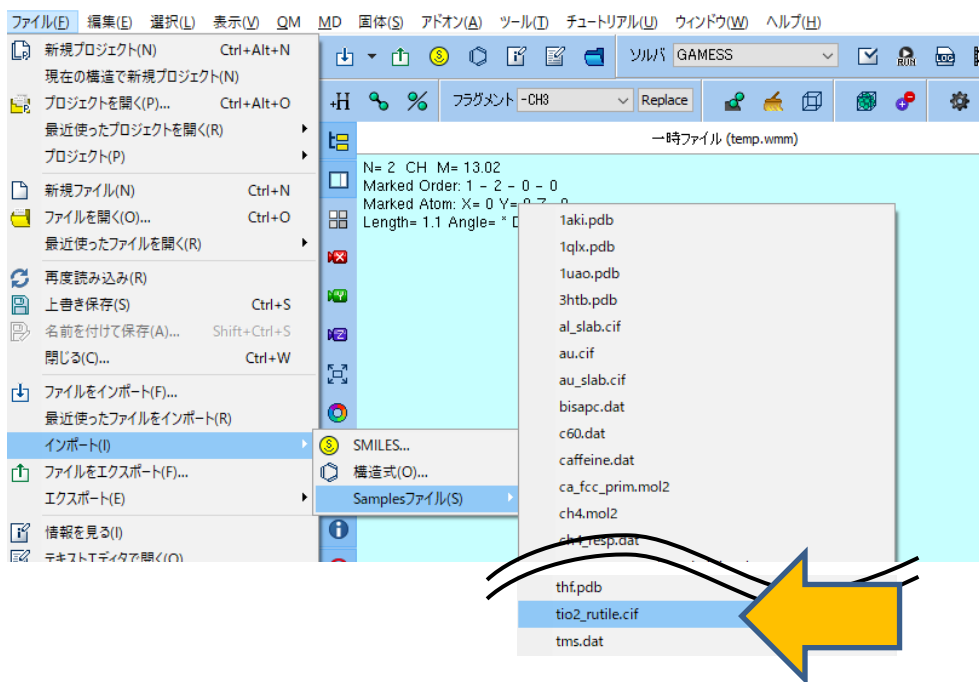
- k点の取り方、バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギーは計算結果に影響を与えます。
- Winmostar V11のVASP GUIはリモートジョブのみ対応しています。あらかじめリモートサーバ上でVASPの動作環境がセットアップ済みである必要があります。

I. 系のモデリング

プロジェクトモードはVASPに対応していないため必ずファイルモードを使用してください。

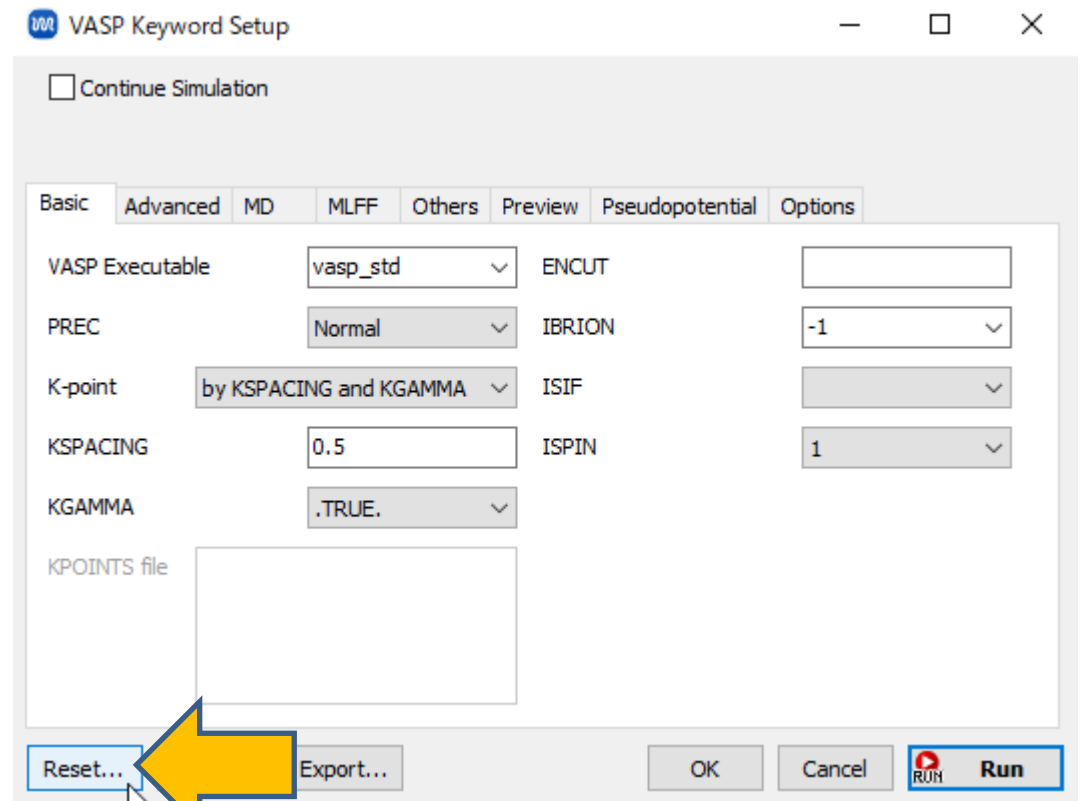
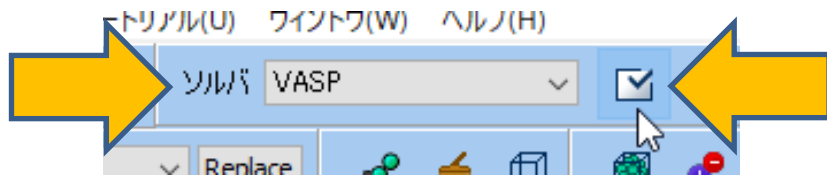
ファイル | 新規ファイルをクリックし、ファイル | インポート | Samplesファイル | tio2_rutile.cifをクリックします。破棄して読み込みをクリックします。

- 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。



II. 計算の実行

1. ツールバーのソルバから**VASP**を選択します。（Winmostar V11プロフェッショナル版エリートのみ出現します）
2. (キーワード設定) をクリックします
3. **VASP Keyword Setup**ウィンドウ左下の**Reset**をクリックし、**はい**をクリックします。



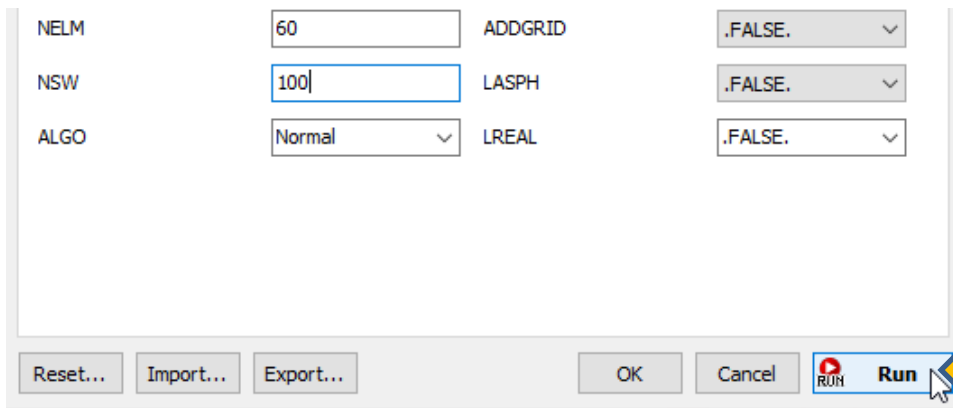
II. 計算の実行

1. **Basic**タブの**IBRION**を「2」（共役勾配法で構造最適化）、**ISIF**を「3」（原子配置、セル形状、セル体積を最適化）、**Advanced**タブの**NSW**を「100」に変更します。
2. その他INCARファイルのキーワードは**Basic**～**Others**タブで設定し、擬ポテンシャル・汎関数の種類は**Pseudopotential**タブで設定します。（本チュートリアルでは変更不要）

The image shows two screenshots of the VASP configuration interface. The left screenshot shows the 'Basic' tab with the following settings: VASP Executable (vasp_std), PREC (Normal), K-point (by KSPACING and KGAMMA), KSPACING (0.5), KGAMMA (.TRUE.), ENCIUT (empty), IBRION (2), ISIF (3), and ISPIN (1). A yellow arrow points to the 'Basic' tab, and another points to the IBRION and ISIF settings. The right screenshot shows the 'Advanced' tab with the following settings: EDIFF [eV] (1E-4), EDIFFG [eV] or [eV/A] (empty), NELM (60), NSW (100), ALGO (Normal), ISMEAR (1), SIGMA [eV] (0.2), ADDGRID (.FALSE.), LSPH (.FALSE.), and LREAL (.FALSE.). A yellow arrow points to the 'Advanced' tab, and another points to the NSW setting.

II. 計算の実行

1. **VASP Keywords Setup**ウィンドウ右下の**Run**をクリックします。（Winmostar V11のVASP GUIはリモートジョブしか対応していません。）
2. **Submit Remote Job**ウィンドウが開いたら、リモートサーバの設定を行います。ファイルモードにおけるリモートサーバの設定方法は[ユーザマニュアル](#)で確認できます。テンプレートスクリプトの編集時には、「# Insert commands here」と「# Do not modify the followings」の間に、`vasp_std`などの実行ファイルのためのパスの設定（`export PATH=...`）を追加し、POTCARファイルがインストールされているディレクトリを`PATH_POTCAR_PAW_*`（PAW-PBEの場合は`PATH_POTCAR_PAW_PBE`）に代入します。
3. **Submit Remote Job**ウィンドウの**Send & Submit**ボタンをクリックし、保存するファイル名を入力して（本書では「`tio2_relax_vasp`」とする）、**保存**をクリックします。
4. ジョブの終了後**Submit Remote Job**ウィンドウの**Get All Files**をクリックします。

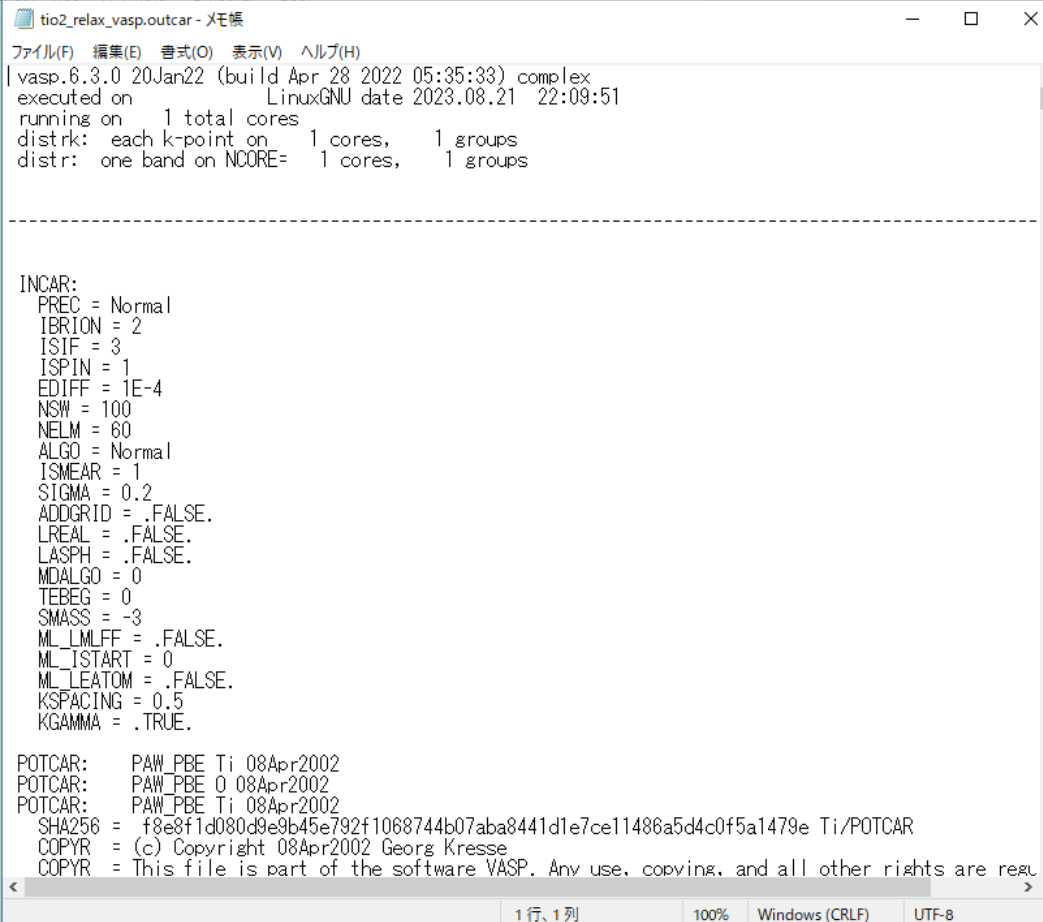


```
echo "*****"
echo "***      Set user-defined variables      ***"
echo "*****"
set -v
# Insert commands here

PATH_POTCAR_PAW_LDA=
PATH_POTCAR_PAW_GGA=
PATH_POTCAR_PAW_PBE=
# Do not modify the followings
set +v
echo "*****"
echo "***      Set internal variables      ***"
echo "*****"
```

II. 計算の実行

1.  ログを表示ボタンをクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開くと計算のログファイルが表示されます。




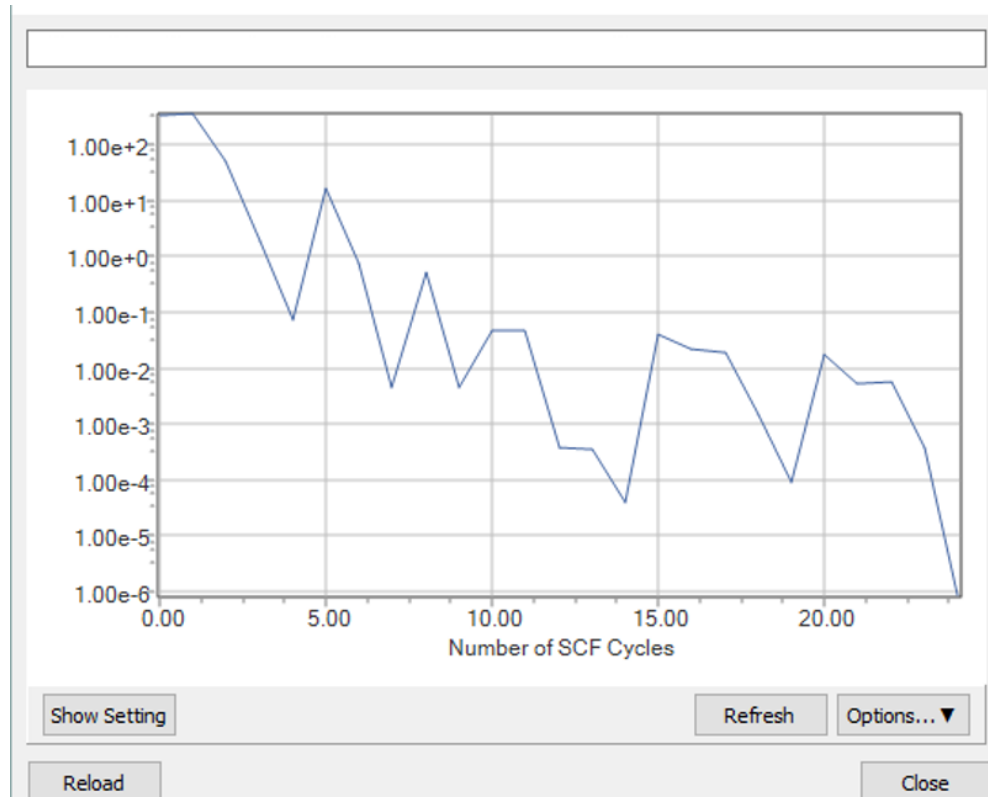
```
tio2_relax_vasp.outcar - Xモジュール
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
| vasp.6.3.0 20Jan22 (build Apr 28 2022 05:35:33) complex
| executed on LinuxGNU date 2023.08.21 22:09:51
| running on 1 total cores
| distrk: each k-point on 1 cores, 1 groups
| distr: one band on NCORE= 1 cores, 1 groups
-----
INCAR:
PREC = Normal
IBRION = 2
ISIF = 3
ISPIN = 1
EDIFF = 1E-4
NSW = 100
NELM = 60
ALGO = Normal
ISMEAR = 1
SIGMA = 0.2
ADDGRID = .FALSE.
LREAL = .FALSE.
LASPH = .FALSE.
MDALGO = 0
TEBEG = 0
SMASS = -3
ML_LMLFF = .FALSE.
ML_ISTART = 0
ML_LEATOM = .FALSE.
KSPACING = 0.5
KGAMMA = .TRUE.

POTCAR: PAW_PBE Ti 08Apr2002
POTCAR: PAW_PBE O 08Apr2002
POTCAR: PAW_PBE Ti 08Apr2002
SHA256 = f8a8f1d080d9e9b45e792f1068744b07aba8441d1e7ce11486a5d4c0f5a1479e Ti/POTCAR
COPYR = (c) Copyright 08Apr2002 Georg Kresse
COPYR = This file is part of the software VASP. Any use, copying, and all other rights are regu
< 1行、1列 100% Windows (CRLF) UTF-8
```




III.結果解析 SCFエネルギー変化

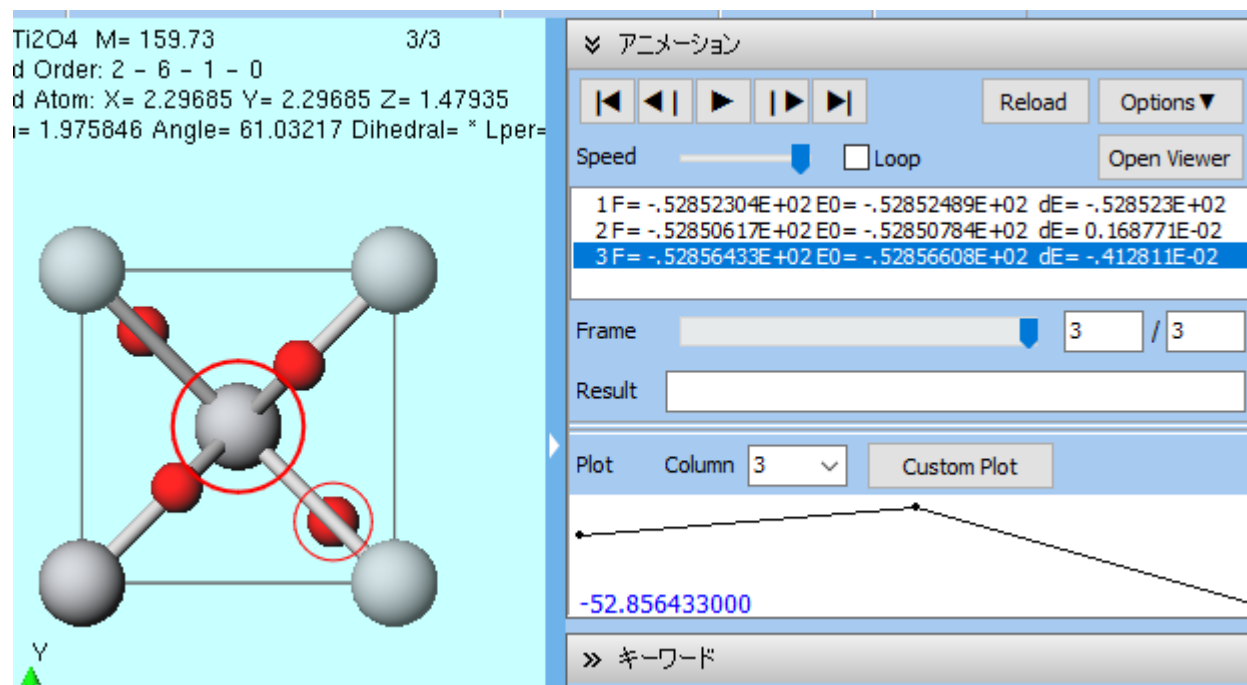
以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。

1.  エネルギー変化ボタンをクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開くとSCF計算におけるエネルギーの変化のグラフを確認することができます。



III.結果解析 アニメーション

1.  アニメーションをクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開くと、メインウィンドウ右側に**アニメーション操作エリア**が出現します。
2.  **(再生)** ボタンをクリックすると、メイン画面にセルと原子位置の両方が最適化される様子を確認できます。



The screenshot displays the software interface for molecular simulation. On the left, a 3D ball-and-stick model of a Ti₂O₄ molecule is shown within a unit cell. The central titanium atom is highlighted with a red circle. The right side of the interface features an 'アニメーション' (Animation) control panel. This panel includes playback controls (stop, play, next, previous), a 'Reload' button, and an 'Options' dropdown. Below these are a 'Speed' slider and a 'Loop' checkbox, along with an 'Open Viewer' button. A table of energy values is displayed, with the third row highlighted in blue:

1 F=	-5.2852304E+02	E0=	-5.2852489E+02	dE=	-5.28523E+02
2 F=	-5.2850617E+02	E0=	-5.2850784E+02	dE=	0.168771E-02
3 F=	-5.2856433E+02	E0=	-5.2856608E+02	dE=	-.412811E-02

Below the table, the 'Frame' is set to 3 / 3. A 'Result' field is empty. The 'Plot' section shows 'Column 3' selected and a 'Custom Plot' button. A line graph shows a downward trend, with the value -52.856433000 displayed at the bottom. At the very bottom, there is a 'キーワード' (Keyword) field.

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