

 winmostar チュートリアル

VASP基礎編

V11.10.0

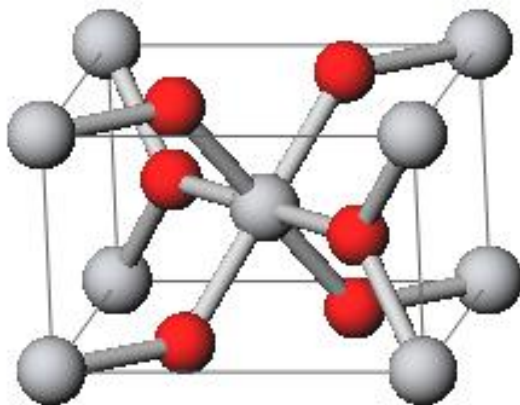
2024年10月21日 株式会社クロスアビリティ

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。

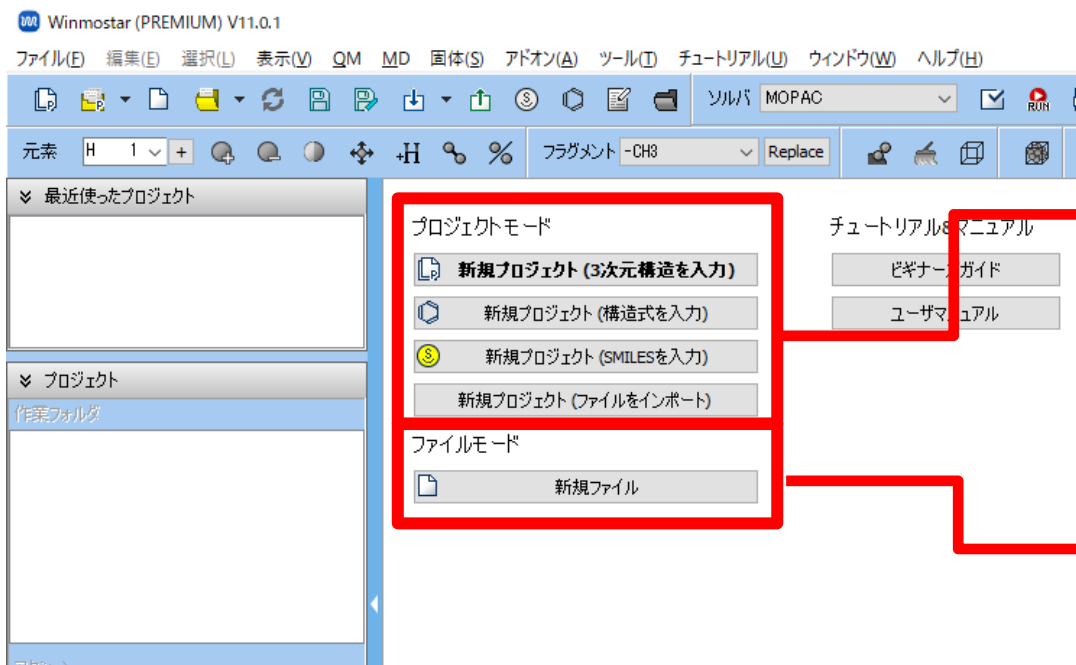


注意点：

- 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。

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。



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。

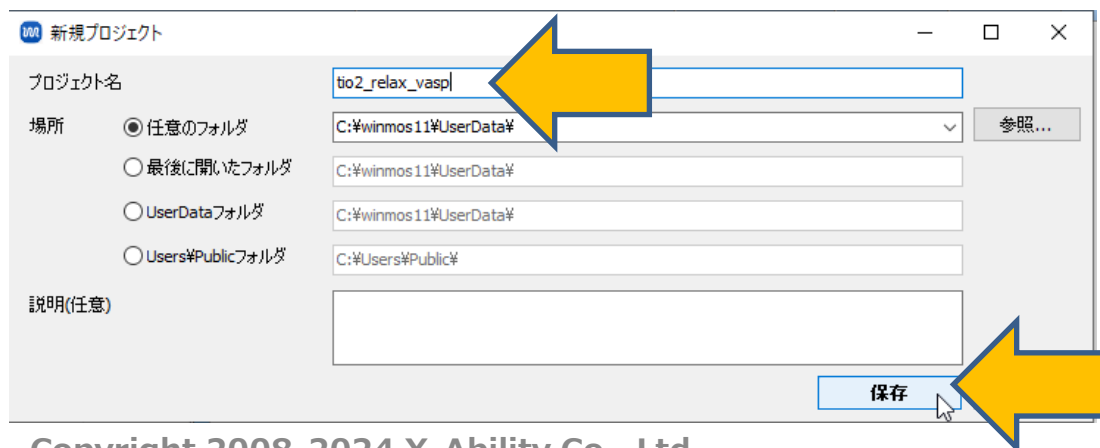
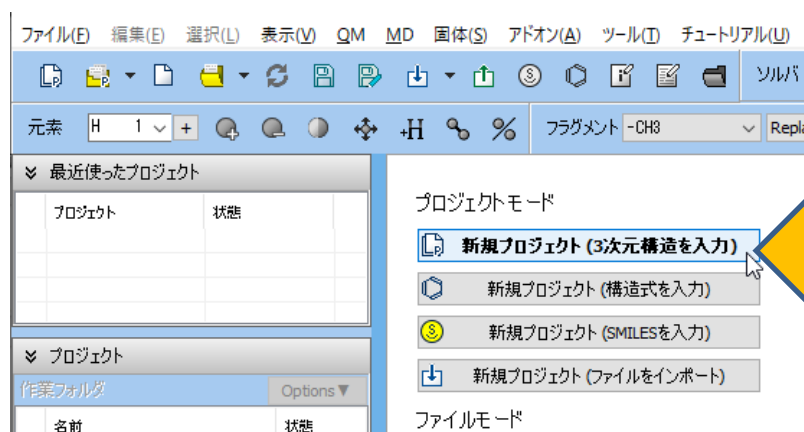
ファイルモード

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。

プロジェクトモードの場合

I. 系のモデリング

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「tio2_relax_vasp」と入力し**保存**をクリックします。



I. 系のモデリング

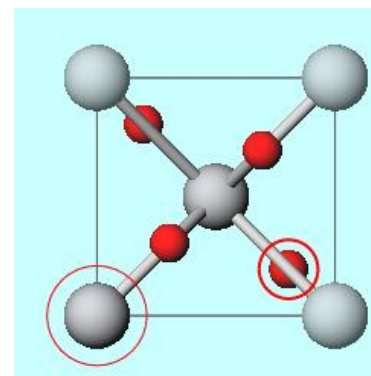
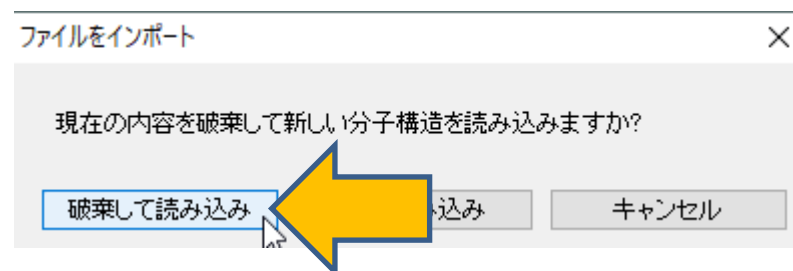
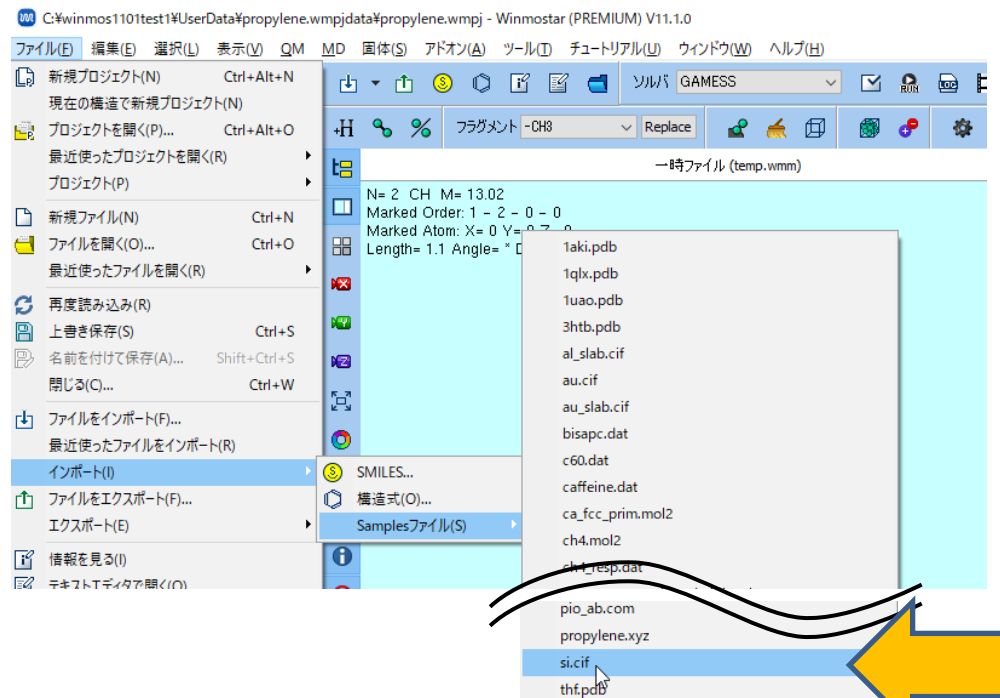
初期構造の作成方法の詳細は[Winmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法](#)を参照してください。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

1. **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。

– 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。

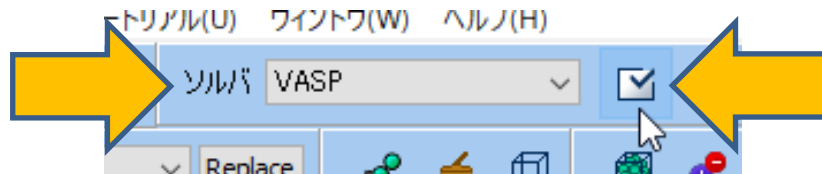
2. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。

3. 分子表示エリアに所望の構造が出現することを確認します。



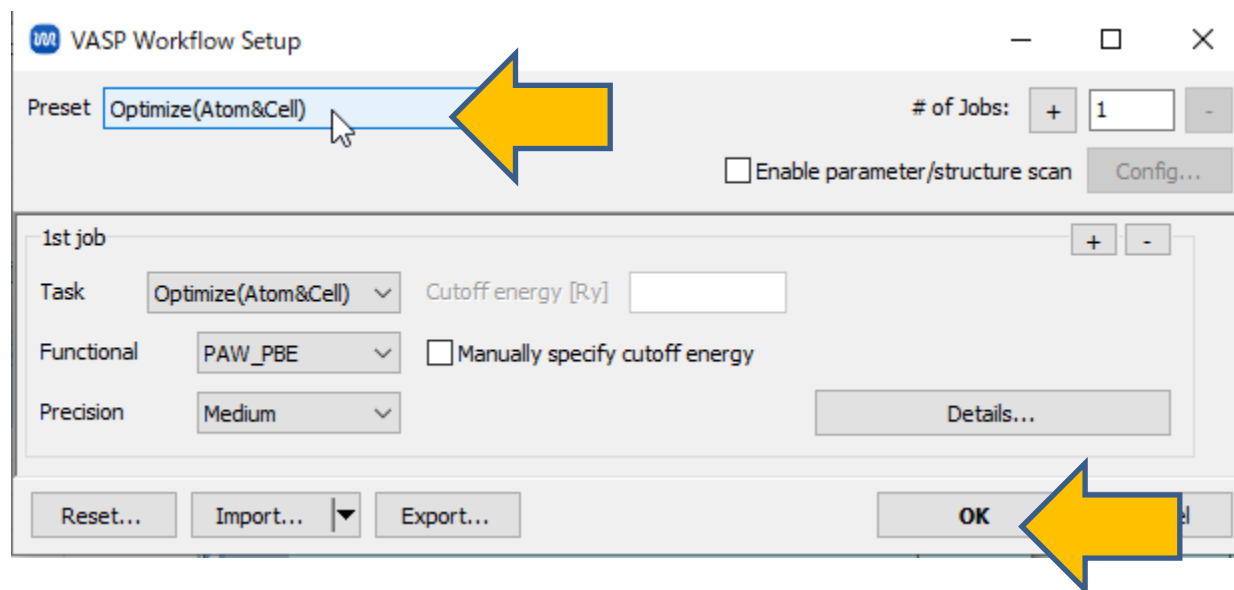
II. 計算の実行

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. ☒ (**ワークフロー設定**) をクリックします。



II. 計算の実行

1. **Preset**を「Optimize(Atom&Cell)」に変更し, **OK**をクリックします.



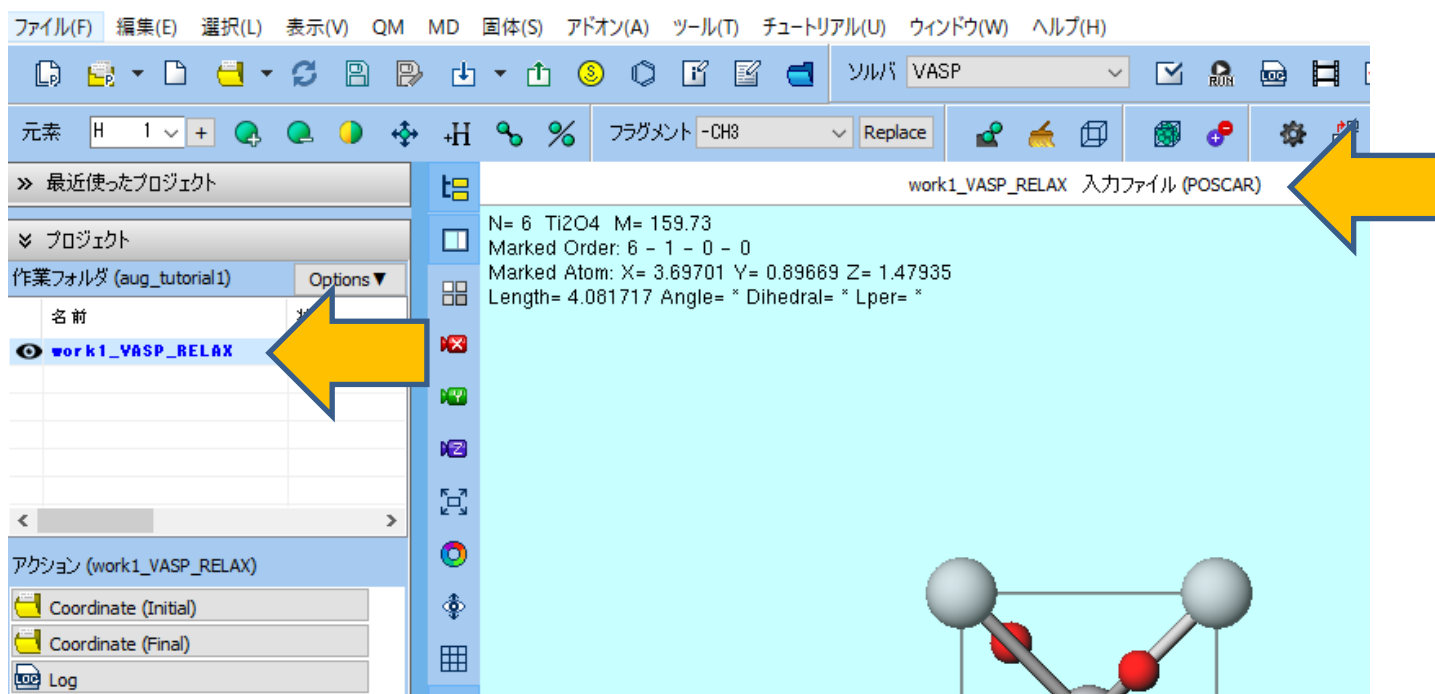
II. 計算の実行

- VASPはリモートジョブのみサポートしているため、[こちら](#)でリモートジョブの設定・操作を行ってください。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。

補足：入力ファイルを自分で修正したい場合やリモートサーバに自分でコピーして使用したい場合は、**ジョブの設定**ウィンドウで**ファイルの保存後ジョブを実行しない**にチェックを入れ**実行**をクリックします。保存後に計算を実行したい場合は**ファイル | プロジェクト | 選択された作業フォルダ | Run**をクリックします。

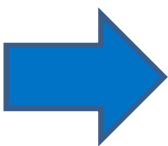
II. 計算の実行

1. メインウィンドウに戻ると（計算実行中でも構いません）、**プロジェクト表示エリア**に**VASP ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウで設定したジョブの作業フォルダが表示されます。
2. 分子表示エリアには自動的に最初の作業フォルダ（work1_VASP_Relax）の入力ファイルが開かれます。**分子表示エリア**の上部でもそのことを確認できます。



II. 計算の実行

1. 計算の進行状況に応じて、プロジェクト表示エリアの作業フォルダで各作業フォルダの状態が **PEND (黒)** → **RUN (緑)** → **END (青)** と変化します。
2. 全ての作業フォルダの状態が **END (青)** に変化するまで待ちます。この際最近使ったプロジェクトの「tio2_relax_vasp」の状態も **ALL END (青)** に変化します。

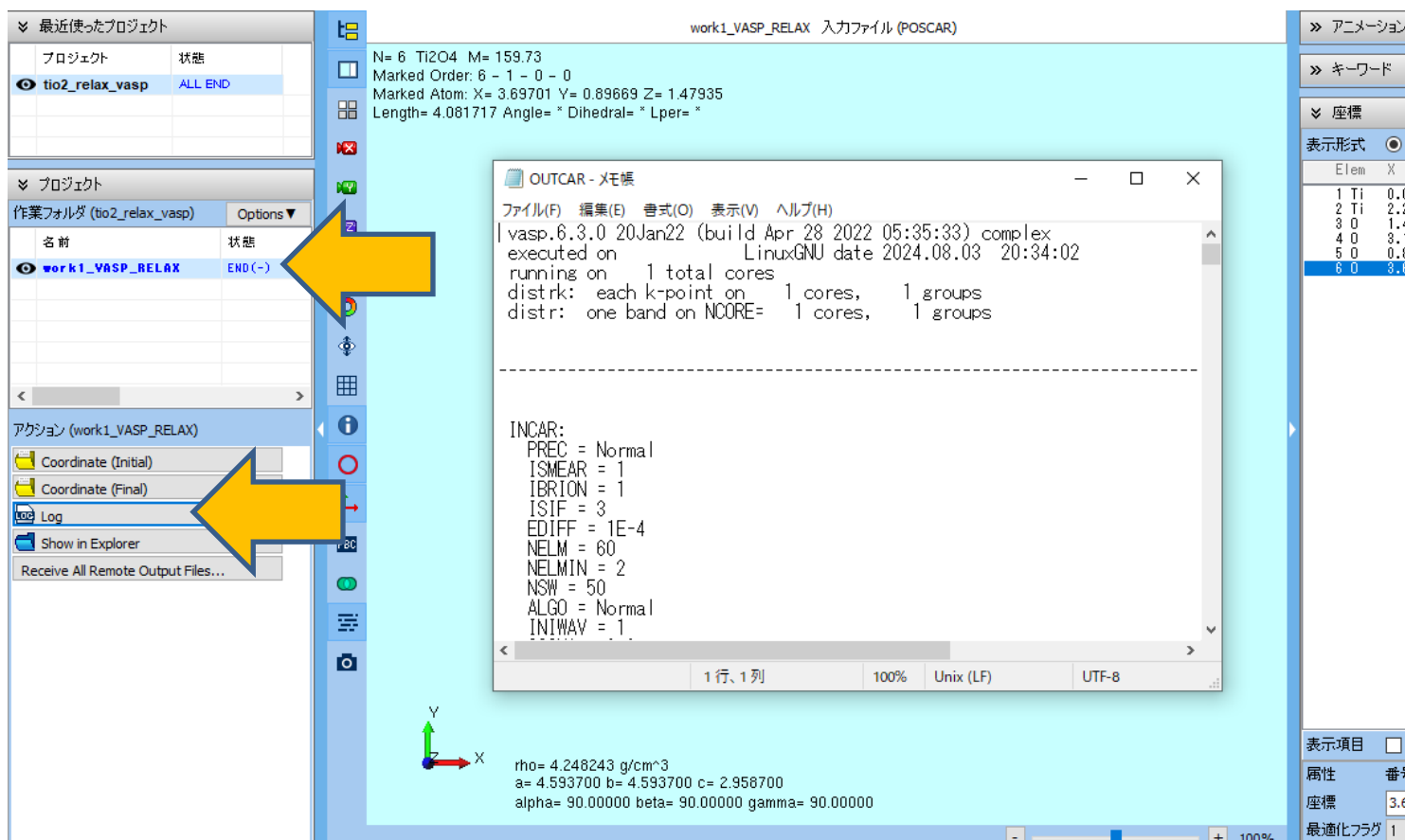


最近使ったプロジェクト	
プロジェクト	状態
tio2_relax_vasp	PEND(1/1)
プロジェクト	
作業フォルダ (tio2_relax_vasp) Options ▼	
名前	状態
work1_VASP_RELAX	PEND

最近使ったプロジェクト	
プロジェクト	状態
tio2_relax_vasp	ALL END
プロジェクト	
作業フォルダ (tio2_relax_vasp) Options ▼	
名前	状態
work1_VASP_RELAX	END(-)

II. 計算の実行

1. 各計算のログを見たい場合は、**プロジェクト表示エリアの作業フォルダ**で対象となる計算の作業フォルダをクリックして選択し、**アクションのLog**をクリックします。



III.結果解析

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ（ここでは work1_VASP_Relaxとします）をクリックします。
2. アクションでReceive All Remote Output Filesをクリックし、はいをクリックします。

The screenshot displays the winmostar software interface. On the left, the '最近使ったプロジェクト' (Recently used projects) list shows 'tio2_relax_vasp' with status 'ALL END'. Below it, the 'プロジェクト' (Project) section shows the '作業フォルダ (tio2_relax_vasp)' (Working folder) with 'work1_VASP_RELAX' selected, status 'END (-)'. The 'アクション (work1_VASP_RELAX)' (Action) list on the left includes 'Coordinate (Initial)', 'Coordinate (Final)', 'Log', 'Show in Explorer', and 'Receive All Remote Output Files...'. A yellow arrow points to the 'Receive All Remote Output Files...' action. In the center, a 3D molecular model of TiO2 is shown. A dialog box titled '警告' (Warning) is displayed, asking 'リモートサーバからwork1_VASP_RELAXの全ての出力ファイルを取得しますが?' (Do you want to download all output files from the remote server for work1_VASP_RELAX?). A yellow arrow points to the 'はい(Y)' (Yes) button. The right panel shows the 'アニメーション' (Animation) and 'キーワード' (Keywords) sections, and a table of coordinates for the 6 atoms.

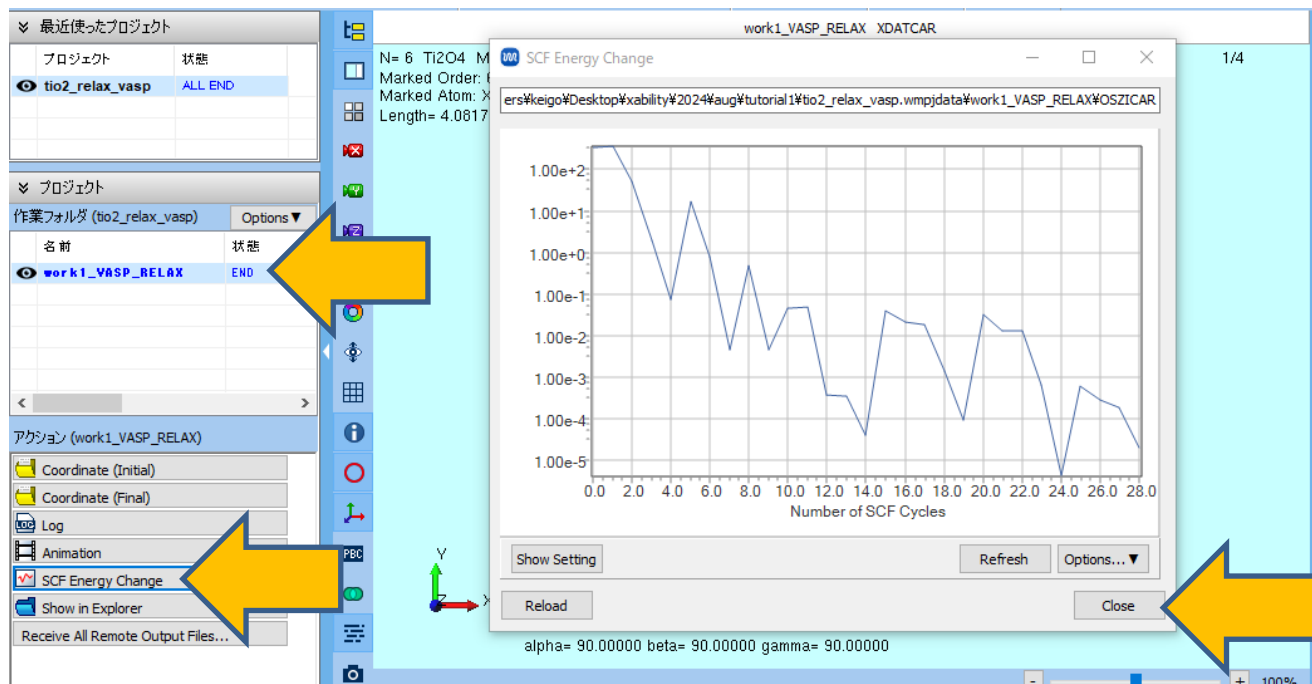
Elem	X	Y
1 Ti	0.0000	0
2 Ti	2.2989	2
3 O	1.4002	1
4 O	3.1935	3
5 O	0.8967	3
6 O	3.6970	0

Additional data shown in the interface includes: N= 6, Ti2O4, M= 159.73, Marked Order: 6 - 1 - 0 - 0, Marked Atom: X= 3.69701 Y= 0.89669 Z= 1.47935, Length= 4.081717 Angle= * Dihedral= * Lper= *, rho= 4.248243 g/cm^3, a= 4.593700 b= 4.593700 c= 2.958700, alpha= 90.00000 beta= 90.00000 gamma= 90.00000.


III.結果解析 SCFエネルギー変化

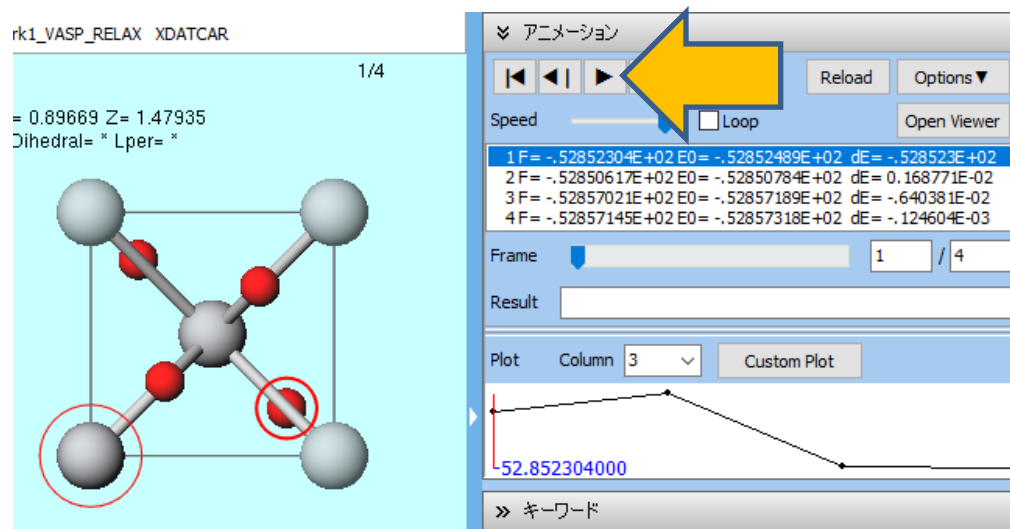
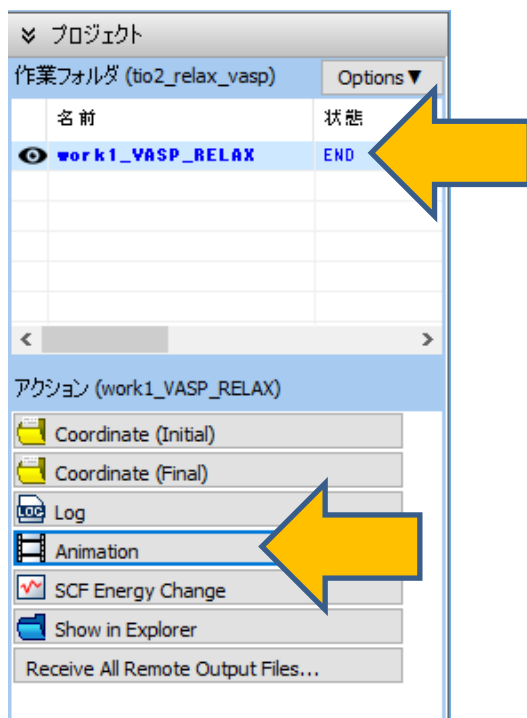
以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ（ここでは work1_VASP_Relaxとします）をクリックします。
2. アクションでSCF Energy Changeをクリックすると、SCF Energy Changeウィンドウが開き、エネルギー変化のプロットが出現します。
3. 確認したらCloseをクリックします。



III.結果解析 アニメーション

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ（ここでは work1_VASP_Relaxとします）をクリックします。
2. アクションでAnimationをクリックする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。
3. （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。

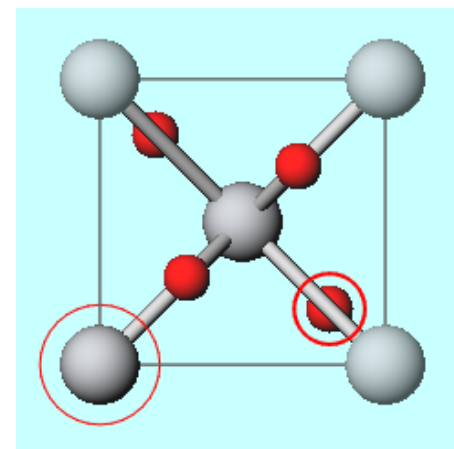
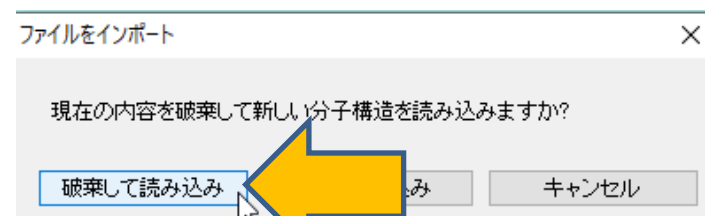
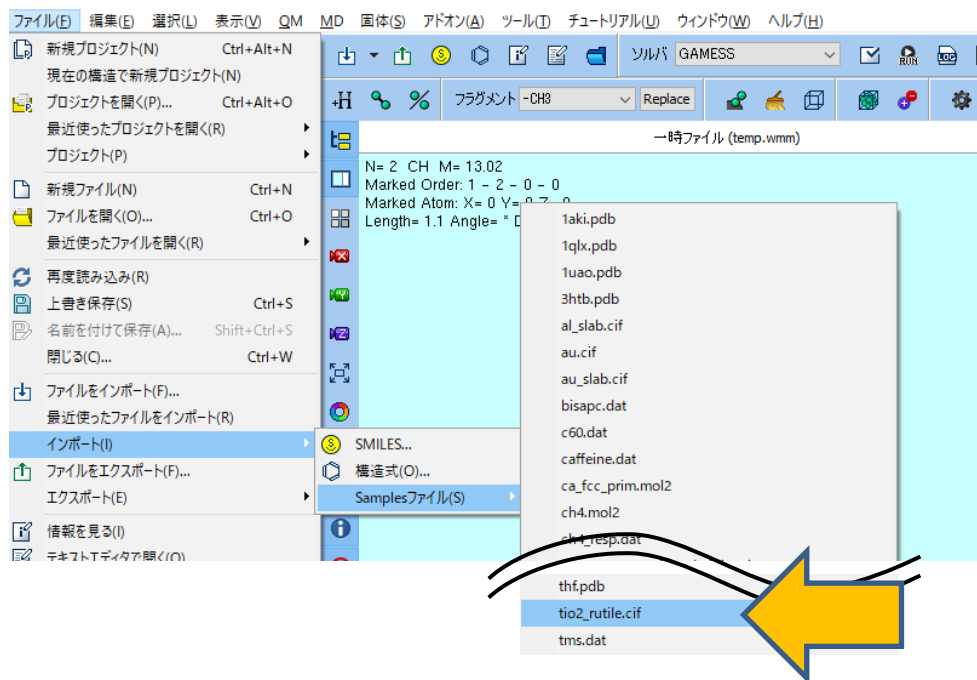


ファイルモードの場合

I. 系のモデリング

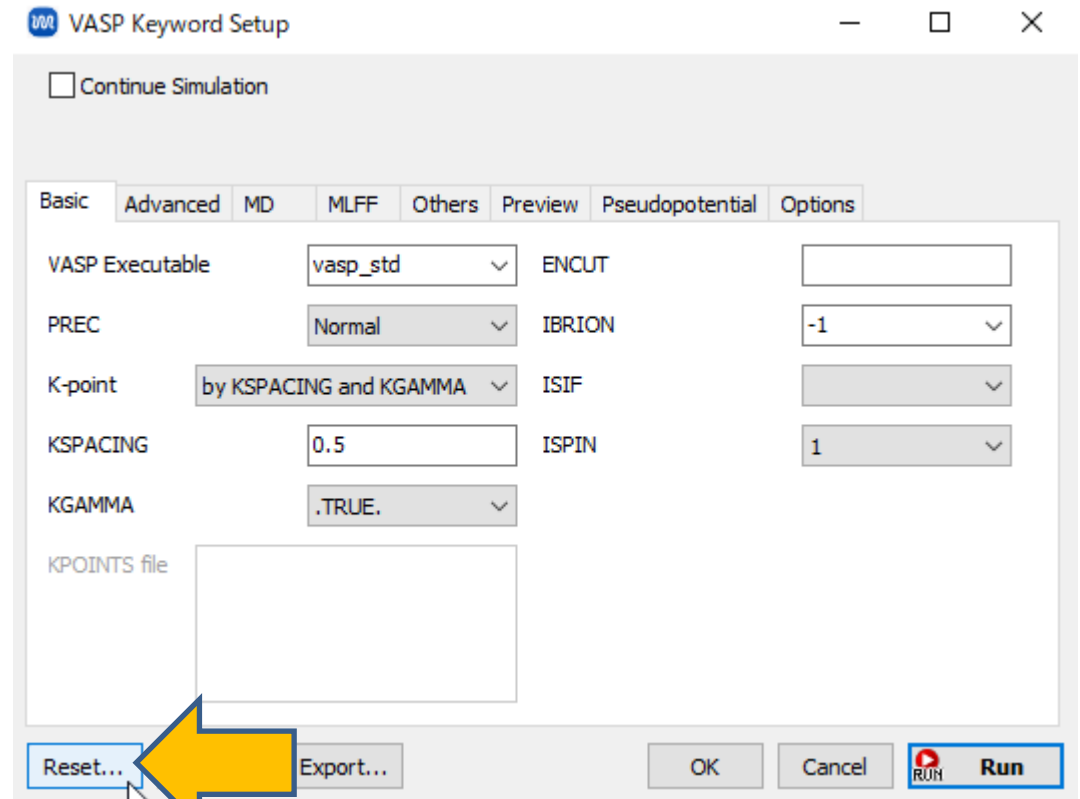
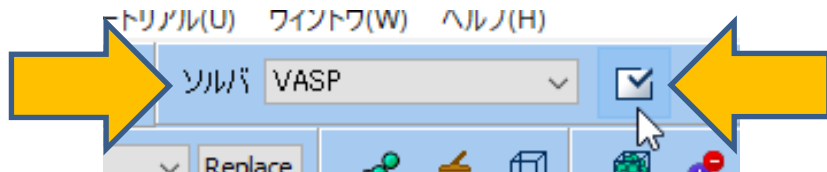
ファイル | 新規ファイルをクリックし、ファイル | インポート | Samples ファイル | tio2_rutile.cif をクリックします。破棄して読み込みをクリックします。

- 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 side-by-side panels of the VASP INCAR configuration interface. The left panel is the 'Basic' tab, and the right panel is the 'Advanced' tab. Yellow arrows indicate the settings to be changed: IBRION to 2, ISIF to 3, and NSW to 100.

Basic Tab Settings:

- VASP Executable: vasp_std
- PREC: Normal
- K-point: by KSPACING and KGAMMA
- KSPACING: 0.5
- KGAMMA: .TRUE.
- KPOINTS file: [Empty text box]
- ENCUT: [Empty text box]
- IBRION: 2
- ISIF: 3
- ISPIN: 1

Advanced Tab Settings:

- EDIFF [eV]: 1E-4
- EDIFFG [eV] or [eV/A]: [Empty text box]
- NELM: 60
- NSW: 100
- ALGO: Normal
- ISMEAR: 1
- SIGMA [eV]: 0.2
- ADDGRID: .FALSE.
- SPH: .FALSE.
- LREAL: .FALSE.

II. 計算の実行

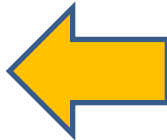
1. **VASP Keywords Setup**ウィンドウ右下の**Run**をクリックします。（Winmostar V11のVASP GUIはリモートジョブしか対応していません。）
2. **Submit Remote Job**ウィンドウが開いたら、リモートサーバの設定を行います。ファイルモードにおけるリモートサーバの設定方法は[ユーザマニュアル](#)で確認できます。テンプレートスクリプトの編集時には、「# Insert commands here」と「# Do not modify the followings」の間に、vasp_stdなどの実行ファイルのためのパスの設定（export 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。

NELM	60	ADDGRID	.FALSE.
NSW	100	LASPH	.FALSE.
ALGO	Normal	LREAL	.FALSE.

Reset... Import... Export... OK Cancel **Run**

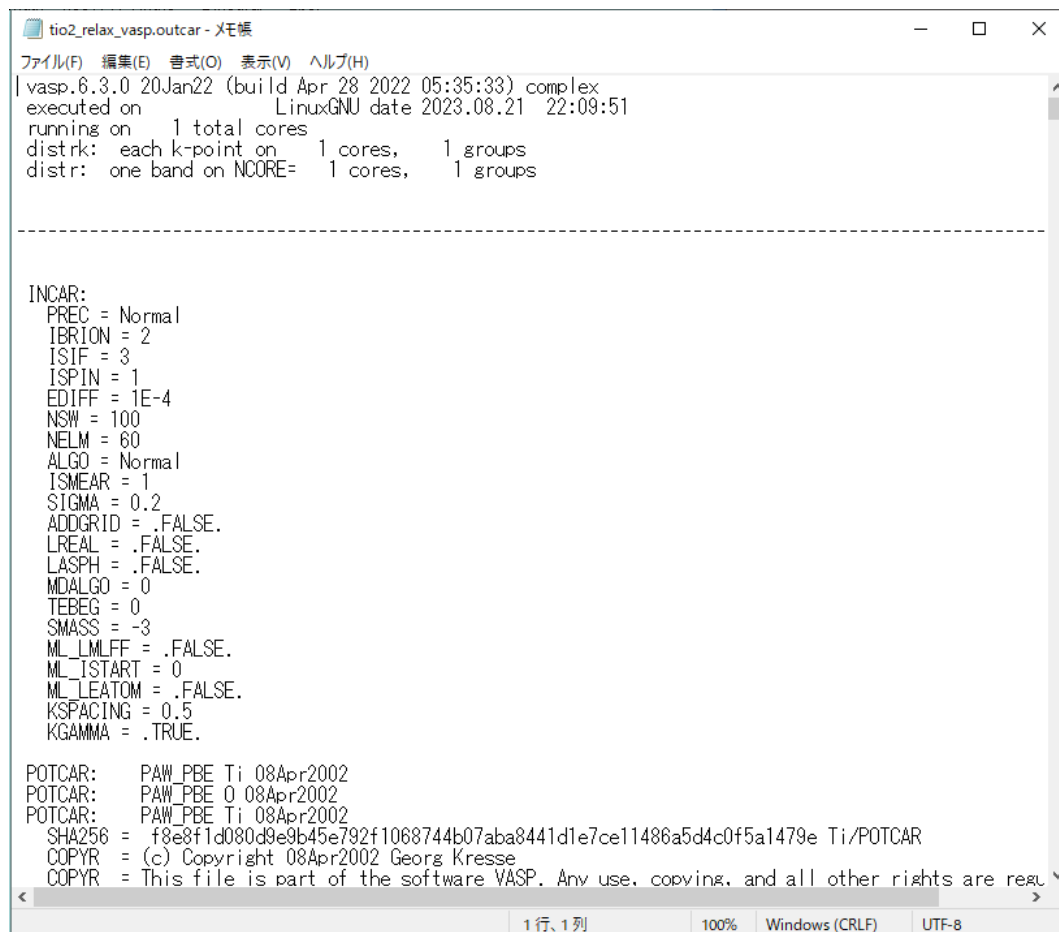
```
echo "*****"
echo "***      Set user-defined variables      ***"
echo "*****"
set -v
# Insert commands here

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。

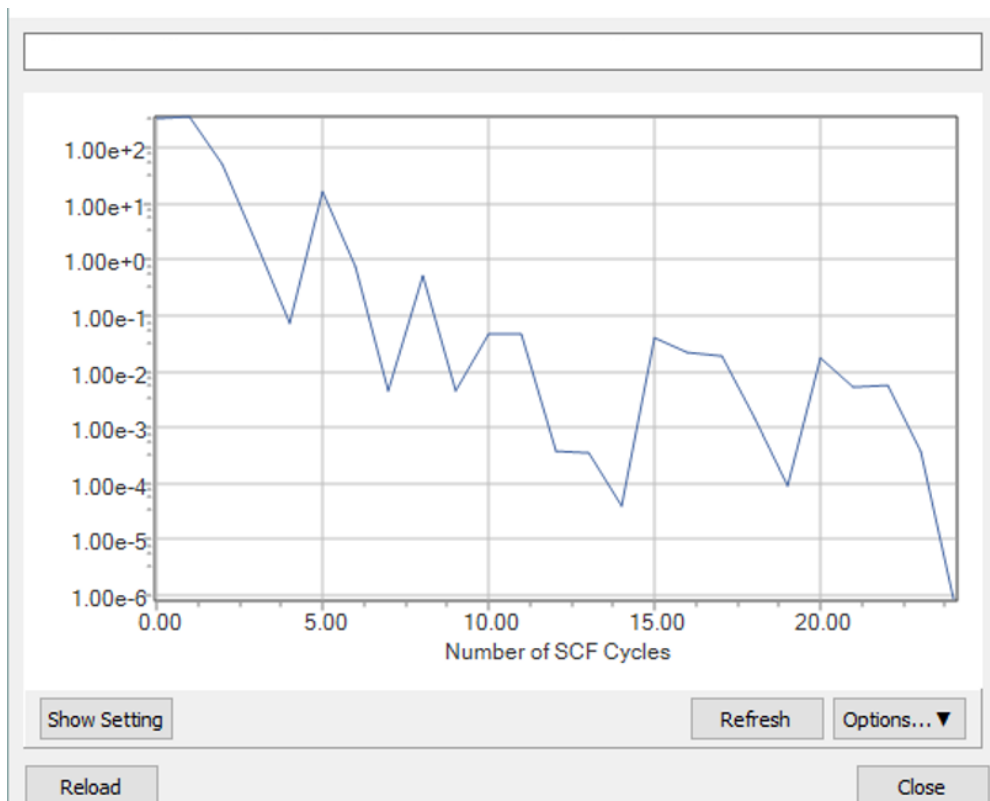


```
tio2_relax_vasp.outcar - Xモジュール
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
| vasp.6.3.0 20Jan22 (build Apr 28 2022 05:35:33) complex
| executed on LinuxGNU date 2023.08.21 22:09:51
| running on 1 total cores
| distrk: each k-point on 1 cores, 1 groups
| distr: one band on NCORE= 1 cores, 1 groups
|
|-----|
| 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 = f8e8f1d080d9e9b45e792f1068744b07aba8441d1e7ce11486a5d4c0f5a1479e 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

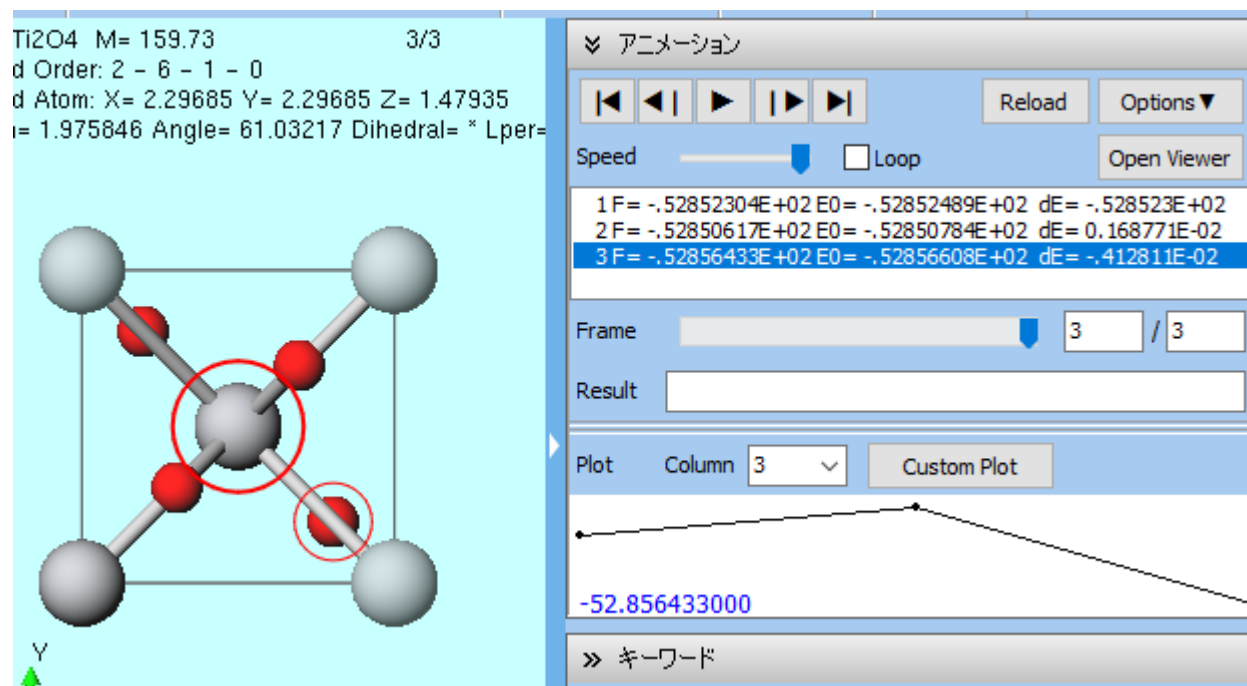
以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。

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。



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