winmostar チュートリアル

VASP基礎編

V11.10.0

2025年4月7日　　株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。

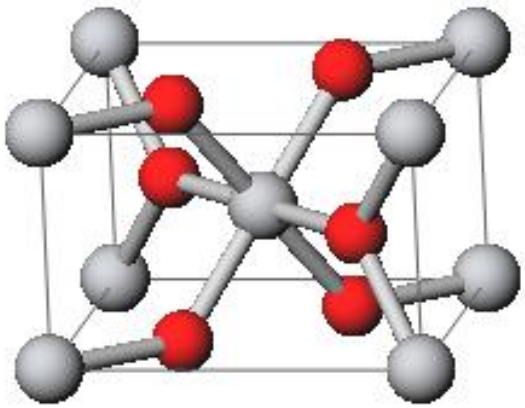
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

- 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。



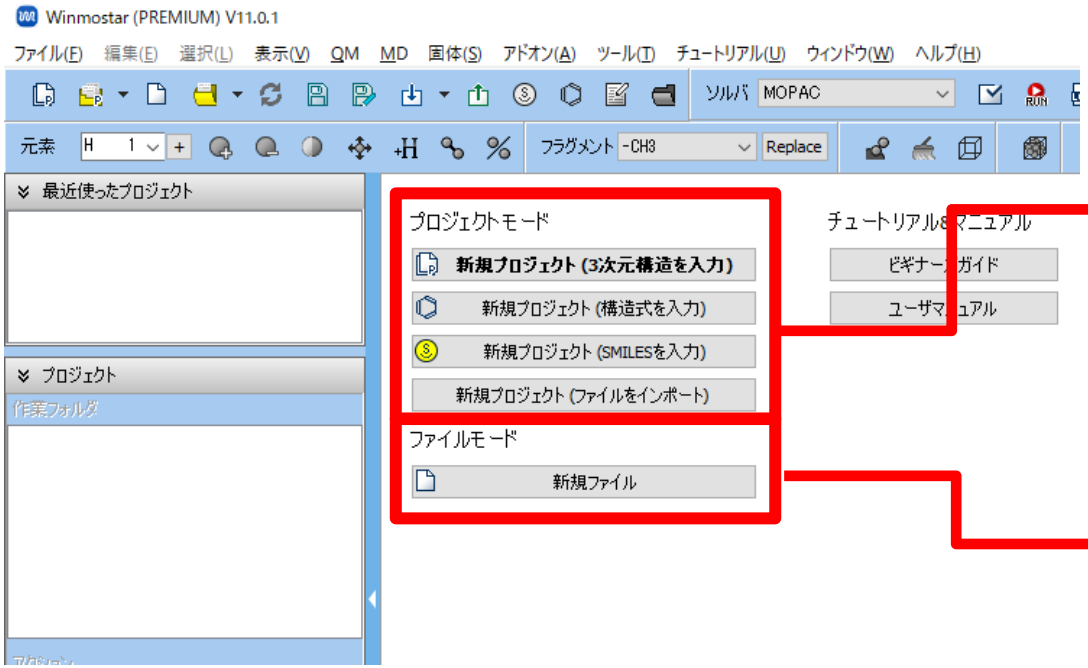
注意点：

- 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。

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。

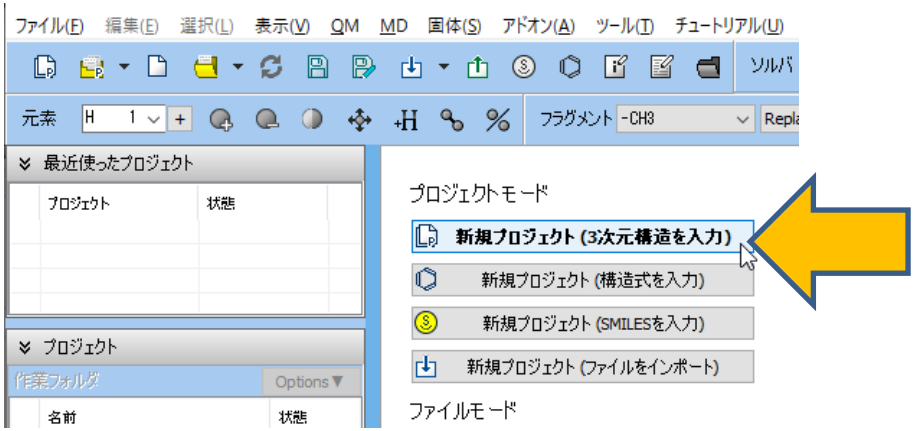
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

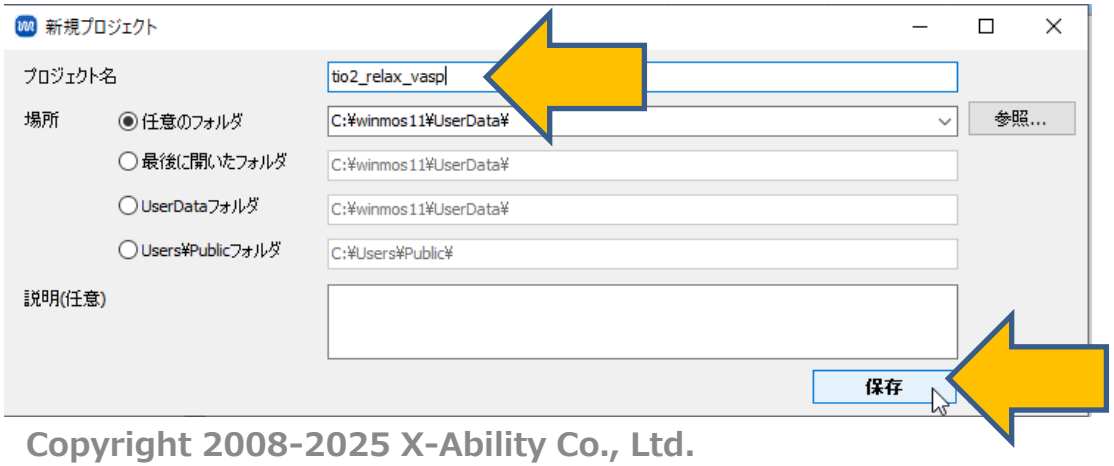
プロジェクトモードの場合

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。



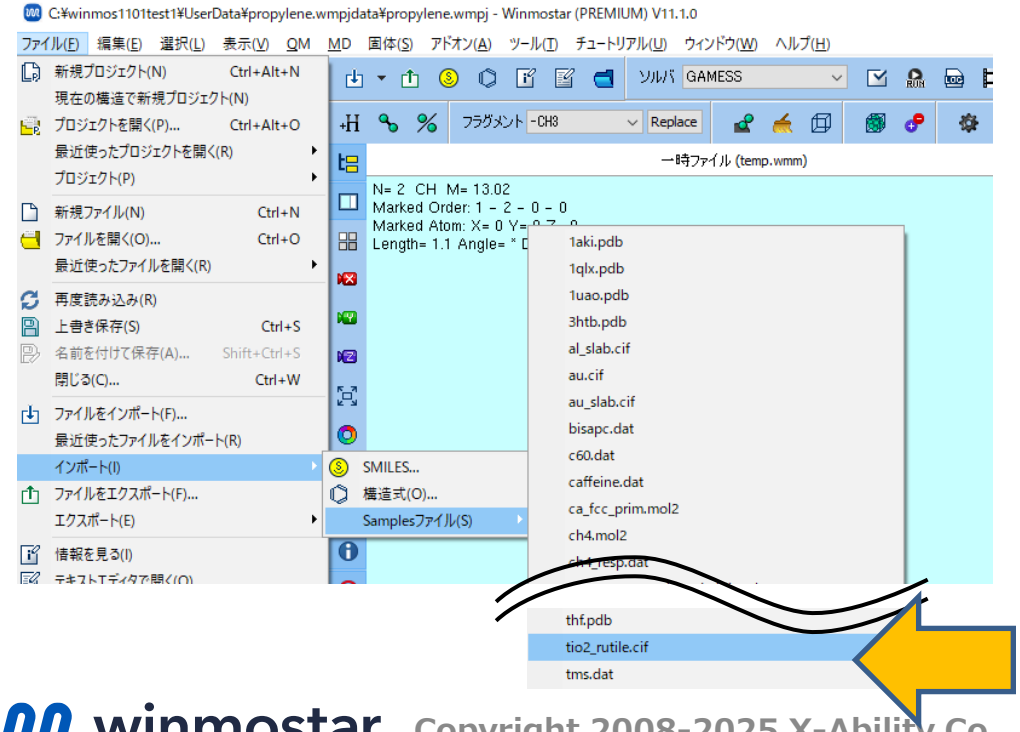


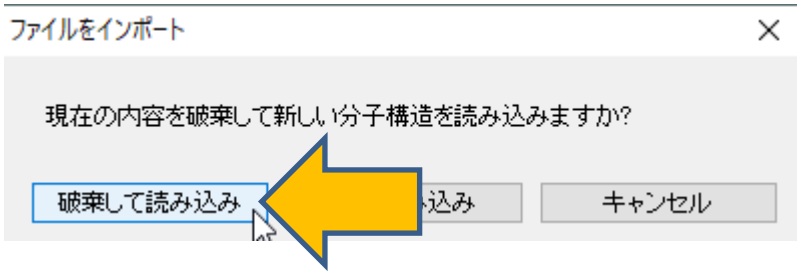
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

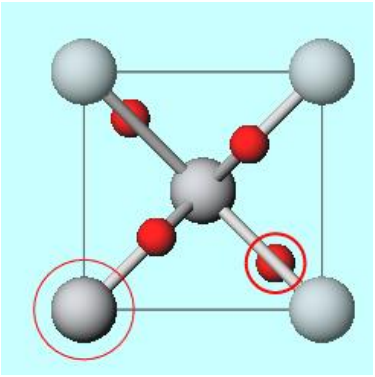
I. 系のモデリング

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。



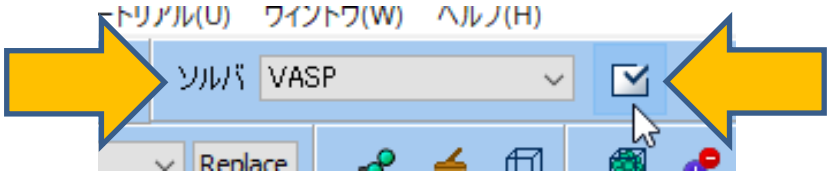




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行

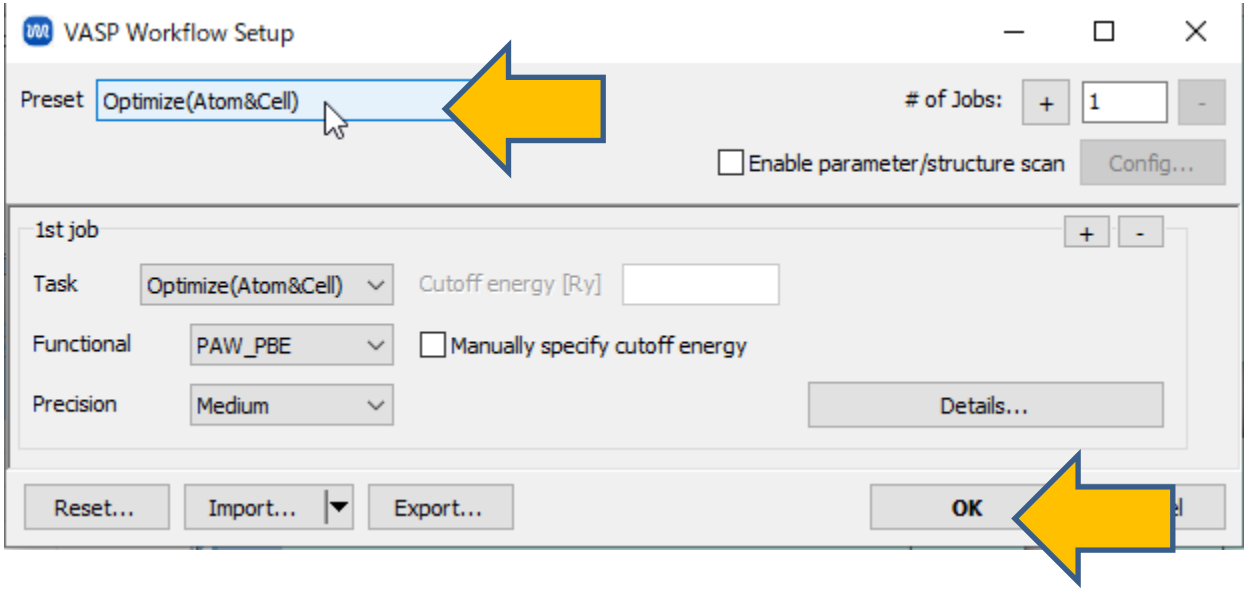
1. ツールバーの**ソルバ**から**VASP**を選択します。（Winmostar　V11プロフェッショナル版エリートのみ出現します）
2. **(ワークフロー設定)** をクリックします。



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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．



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行

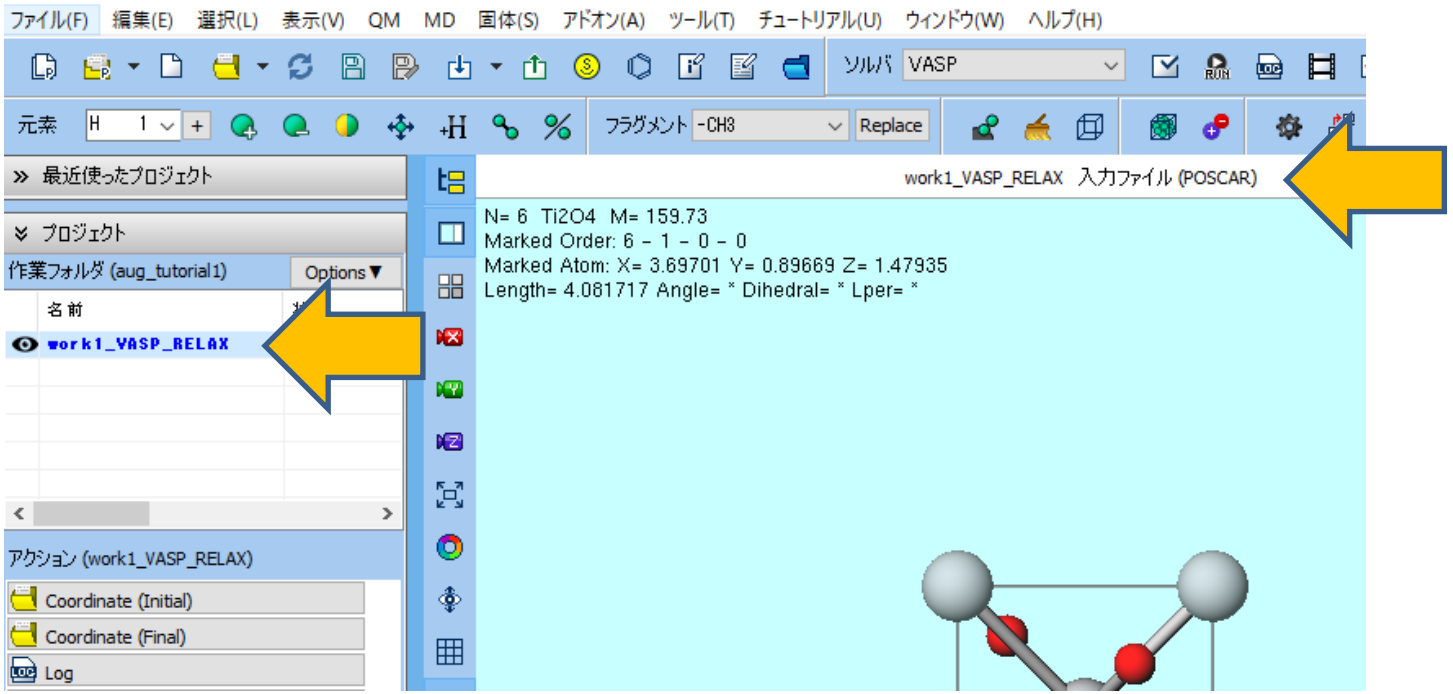
- VASPはリモートジョブのみサポートしているため、こちらでリモートジョブの設定・操作を行ってください。テンプレートスクリプトの編集時には、「`# Insert commands here`」と「`# Do not modify the followings`」の間に、`vasp_std`などの実行ファイルのためのパスの設定（`export PATH=…`）を追加し、POTCARファイルがインストールされているディレクトリを`PATH_POTCAR_PAW_*`（PAW-PBEの場合は`PATH_POTCAR_PAW_PBE`）に代入します。

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。

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行

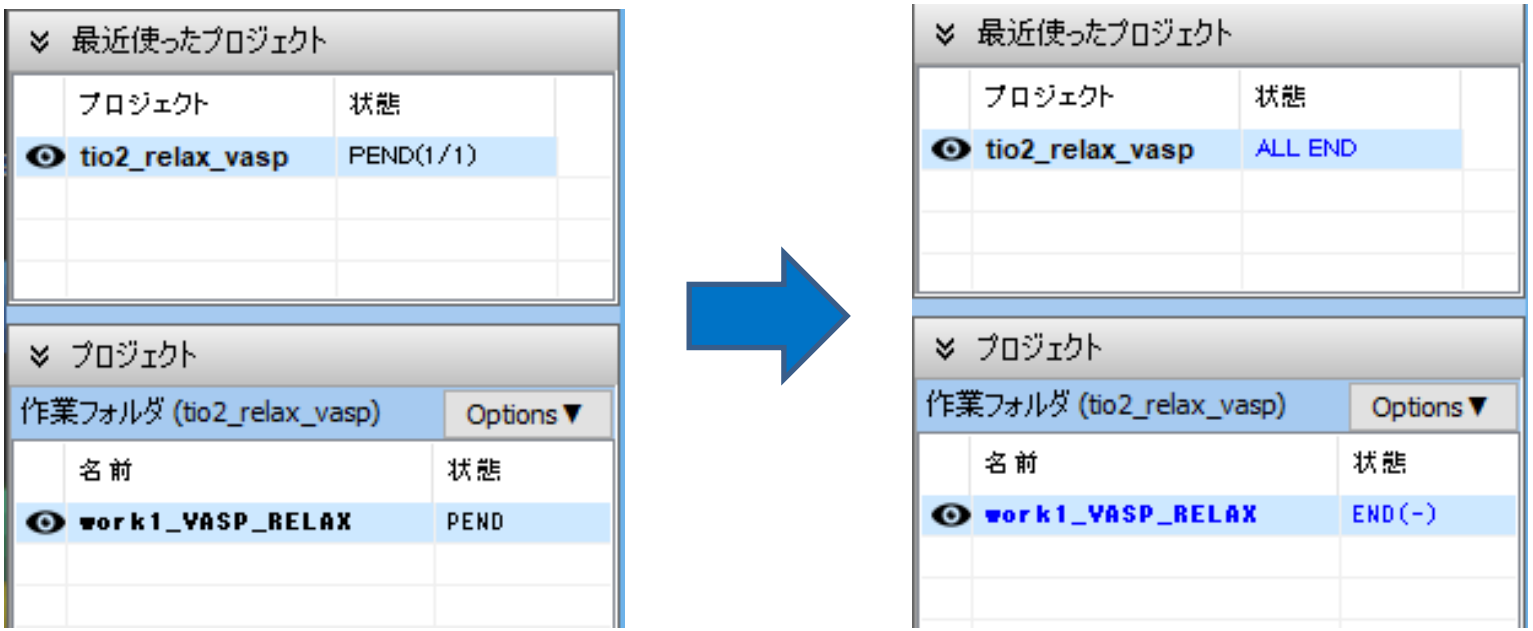
1. メインウィンドウに戻ると（計算実行中でも構いません）、**プロジェクト表示エリア**に**VASP ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウで設定したジョブの作業フォルダが表示されます。
2. 分子表示エリアには自動的に最初の作業フォルダ（work1_VASP_Relax）の入力ファイルが開かれます。**分子表示エリア**の上部でもそのことを確認できます。



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行

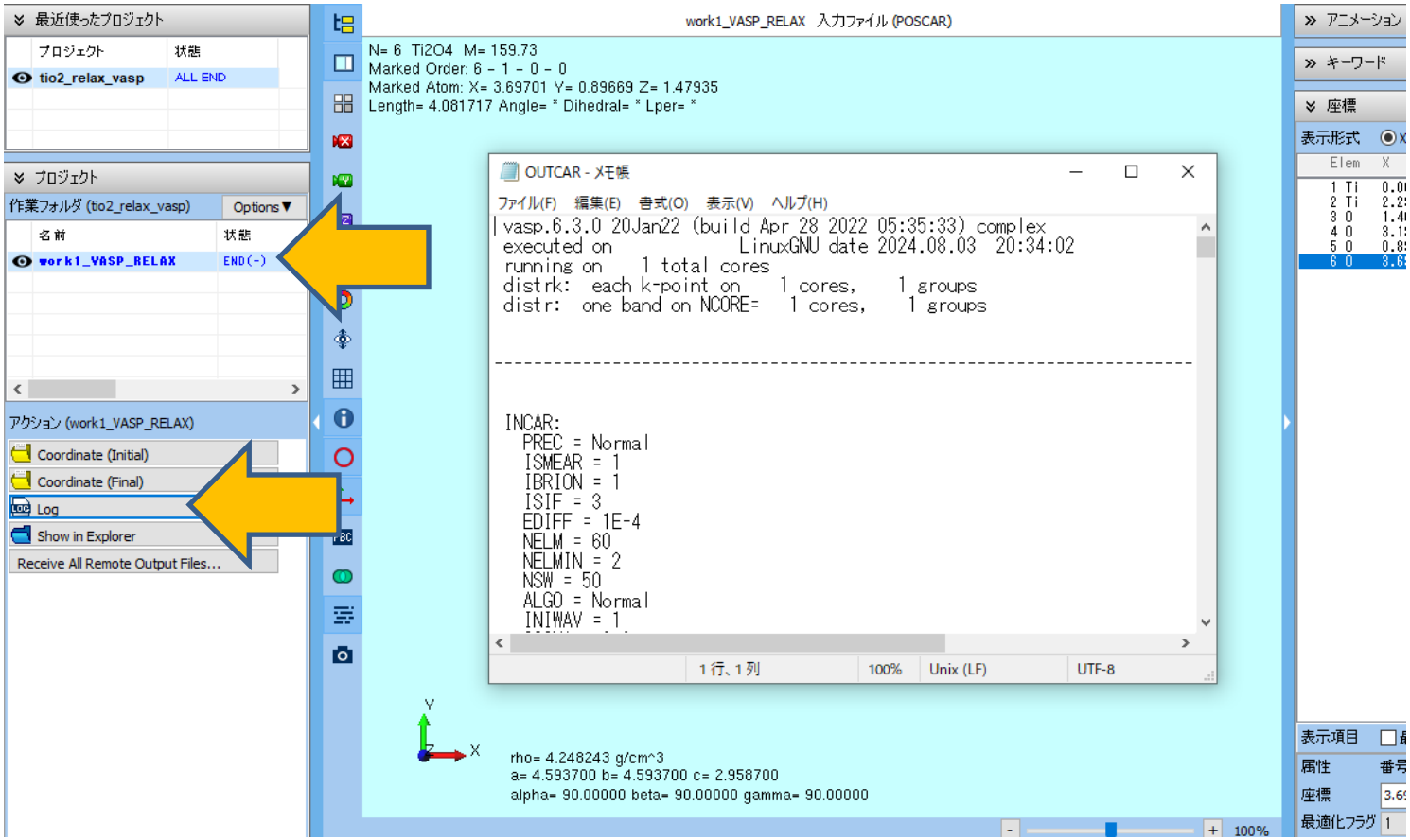
1. 計算の進行状況に応じて、**プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で各作業フォルダの状態が**PEND（黒）**→**RUN（緑）**→**END（青）**と変化します。
2. 全ての作業フォルダの状態が**END（青）**に変化するまで待ちます。この際**最近使ったプロジェクト**の「tio2_relax_vasp」の状態も**ALL END（青）**に変化します。



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行

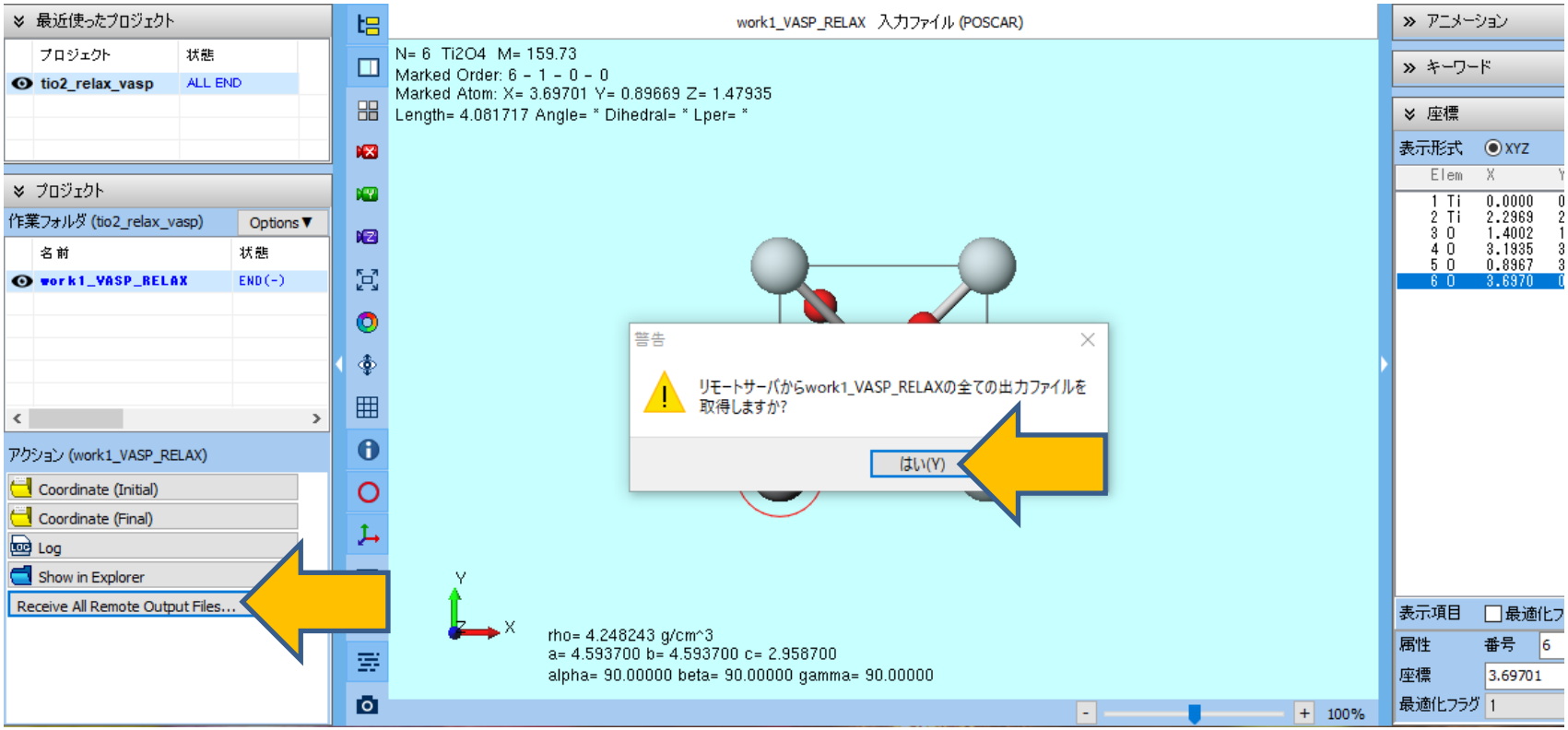
1. 各計算のログを見たい場合は、**プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で対象となる計算の作業フォルダをクリックして選択し、**アクション**の**Log**をクリックします。



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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.

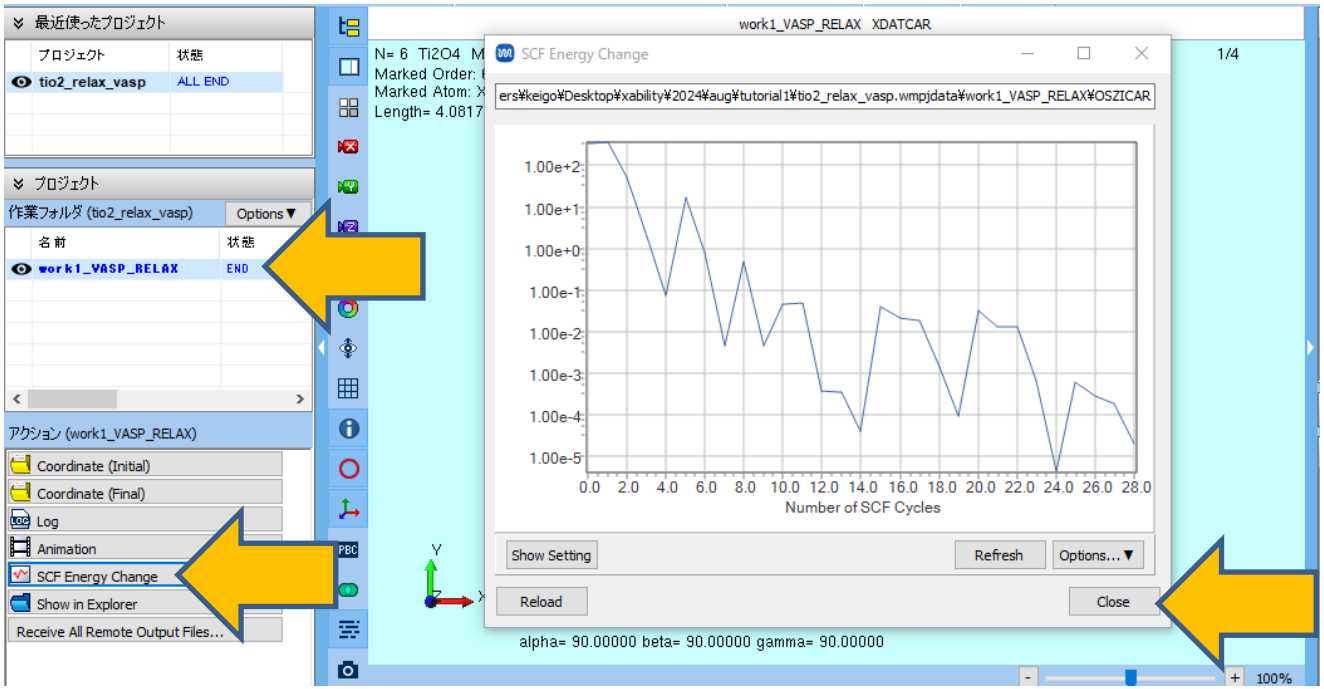


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。

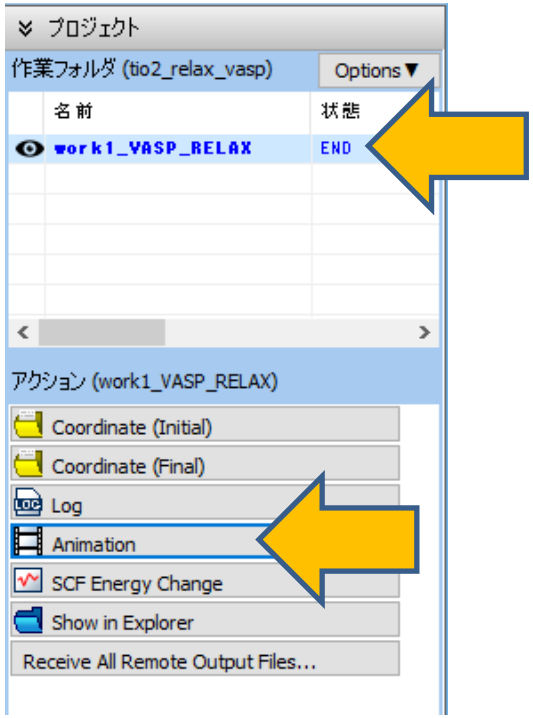
1. **プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で対象となる作業フォルダ（ここではwork1_VASP_Relaxとします）をクリックします。
2. **アクション**で**SCF Energy Change**をクリックすると、**SCF Energy Change**ウィンドウが開き、エネルギー変化のプロットが出現します。
3. 確認したら**Close**をクリックします。

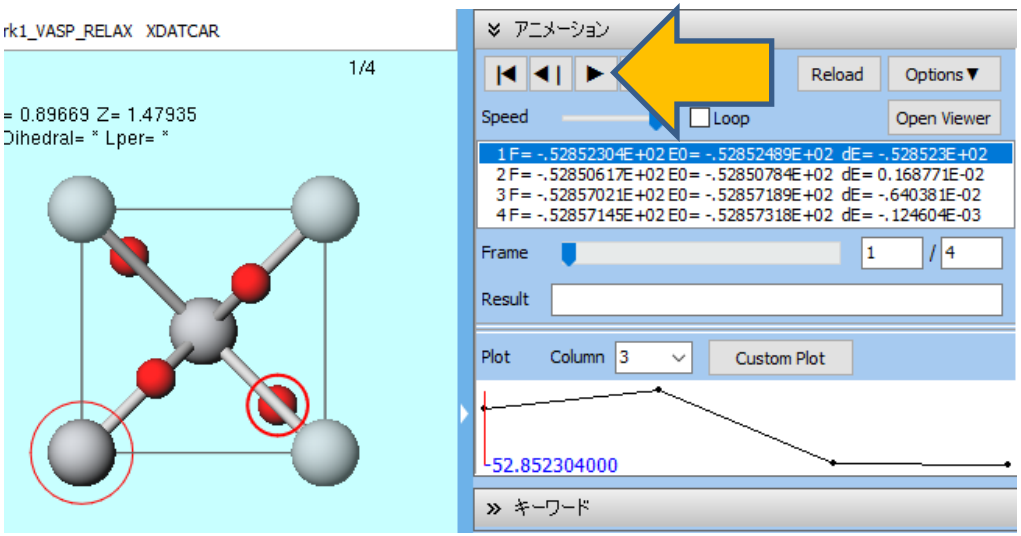


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。





Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

ファイルモードの場合

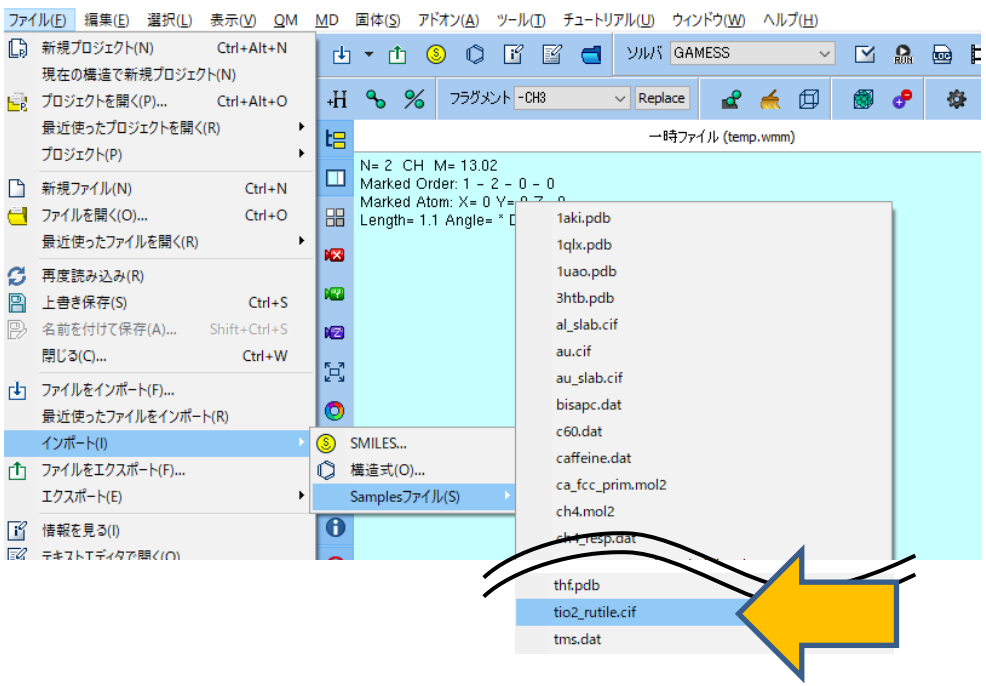
Winmostar V11.11.0以降では、
操作・設定方法の利便性からプロジェクトモードの利用を
強く推奨します。

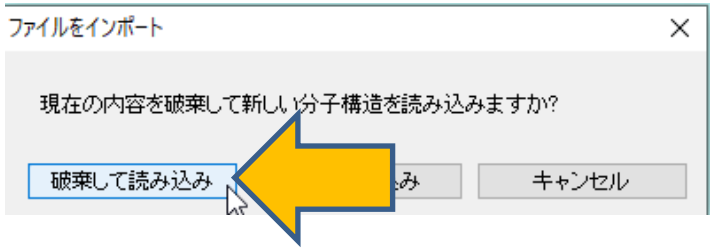
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

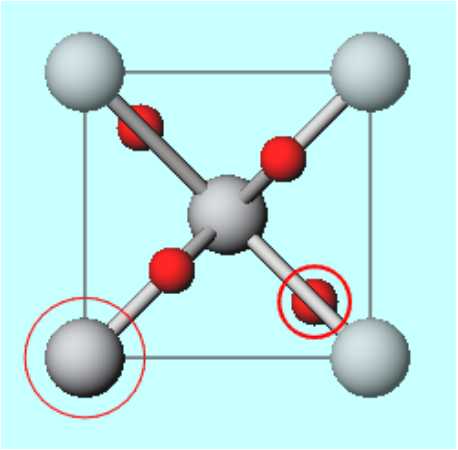
I. 系のモデリング

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。



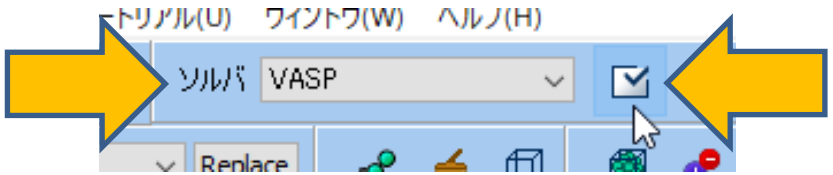


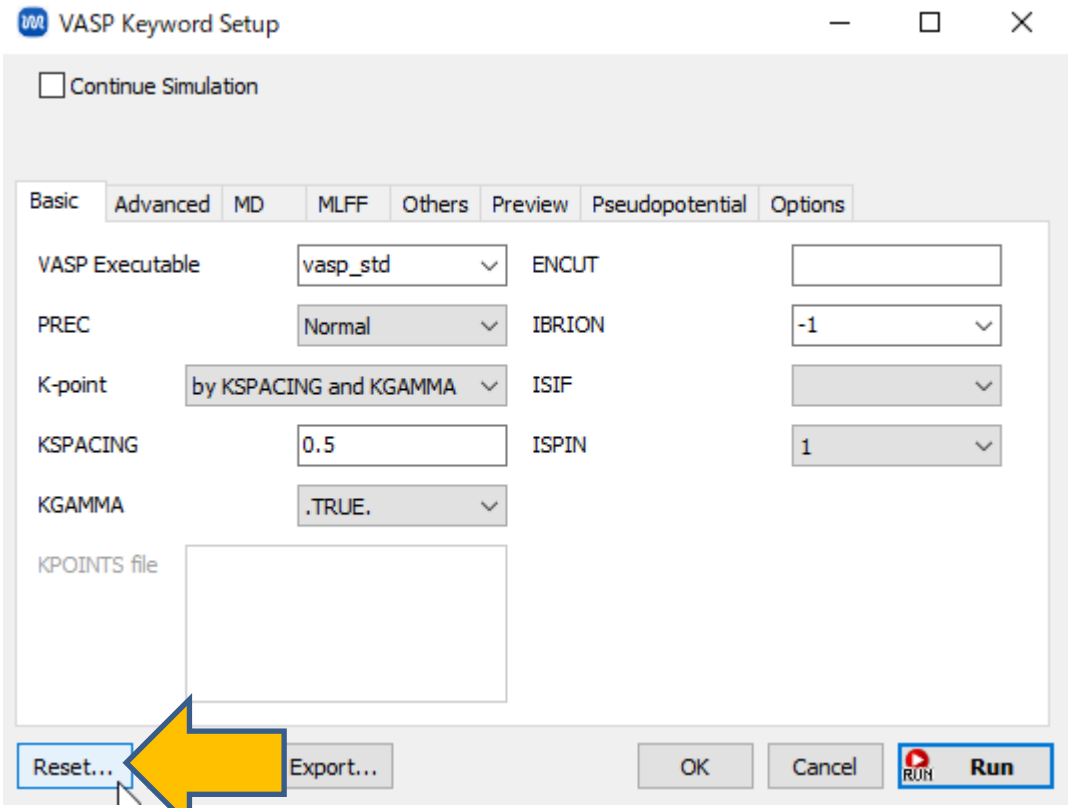


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。

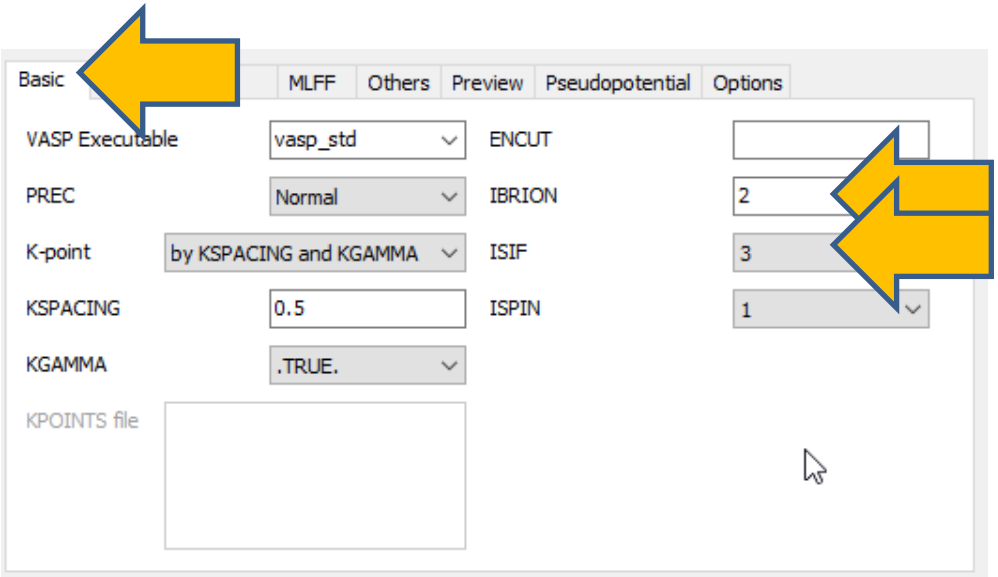


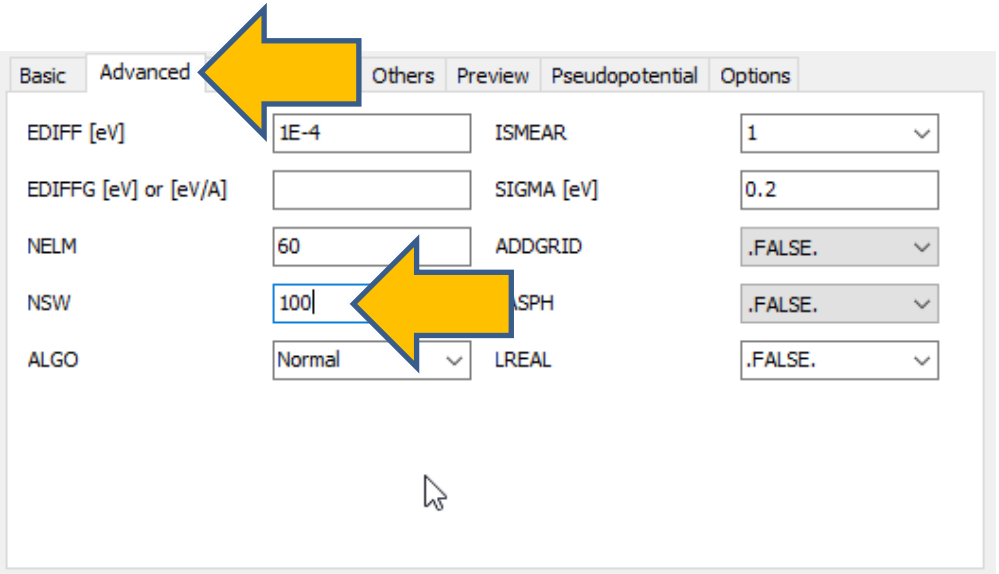


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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）

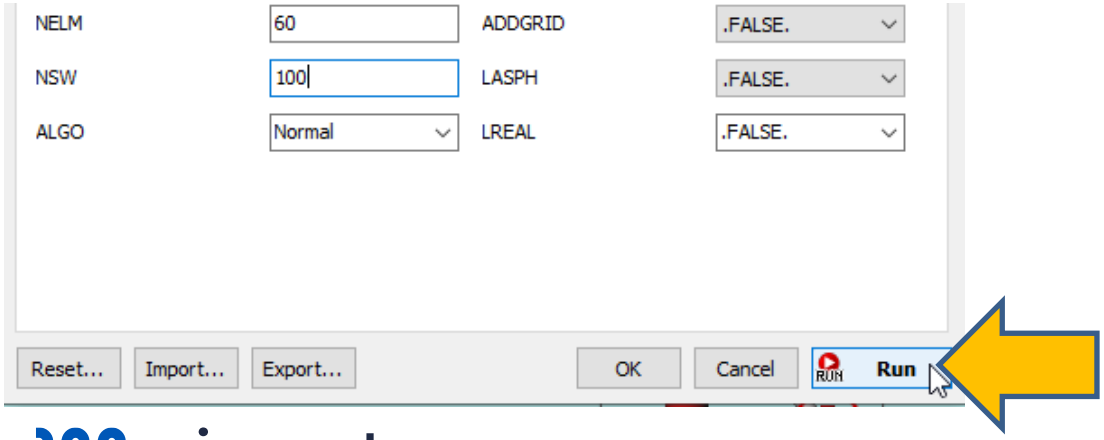




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。



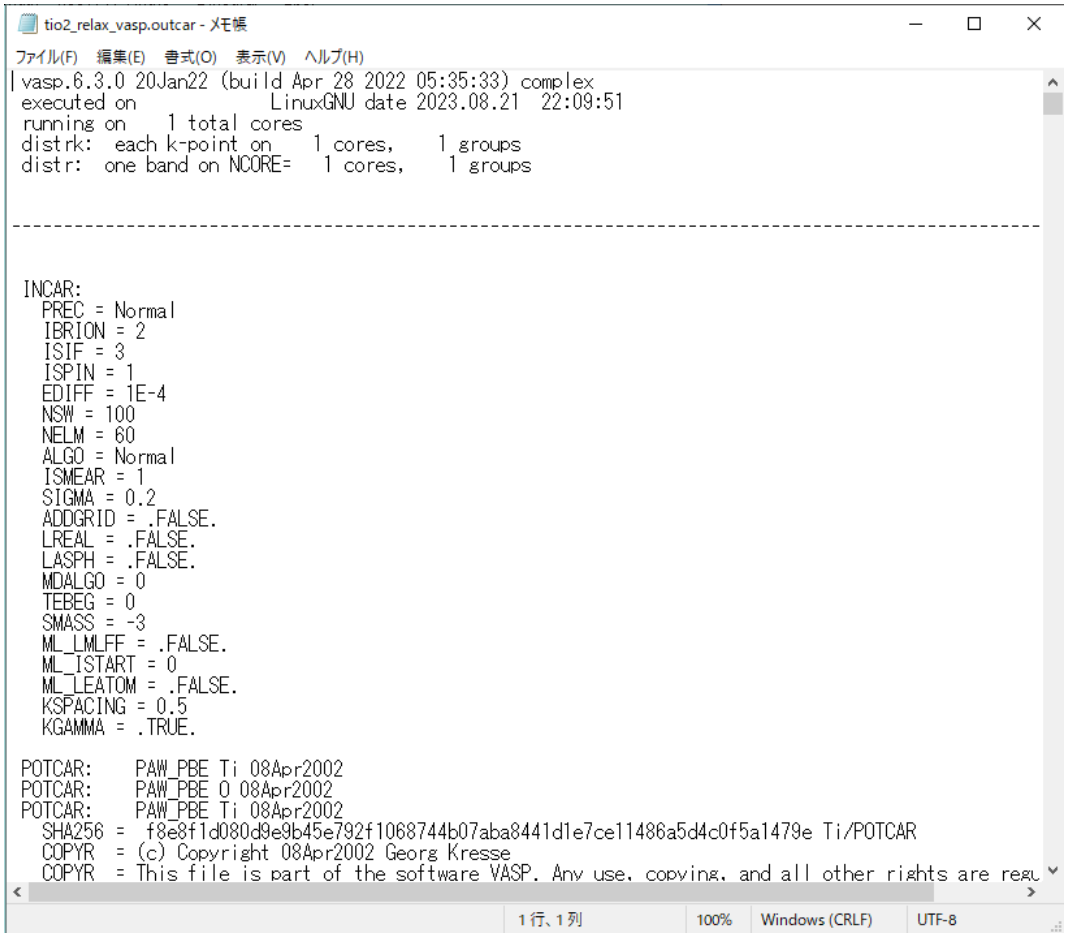

```
echo "*************************************************"
echo "***        Set user-defined variables         ***"
echo "*************************************************"
set -v
# Insert commands here

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


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。

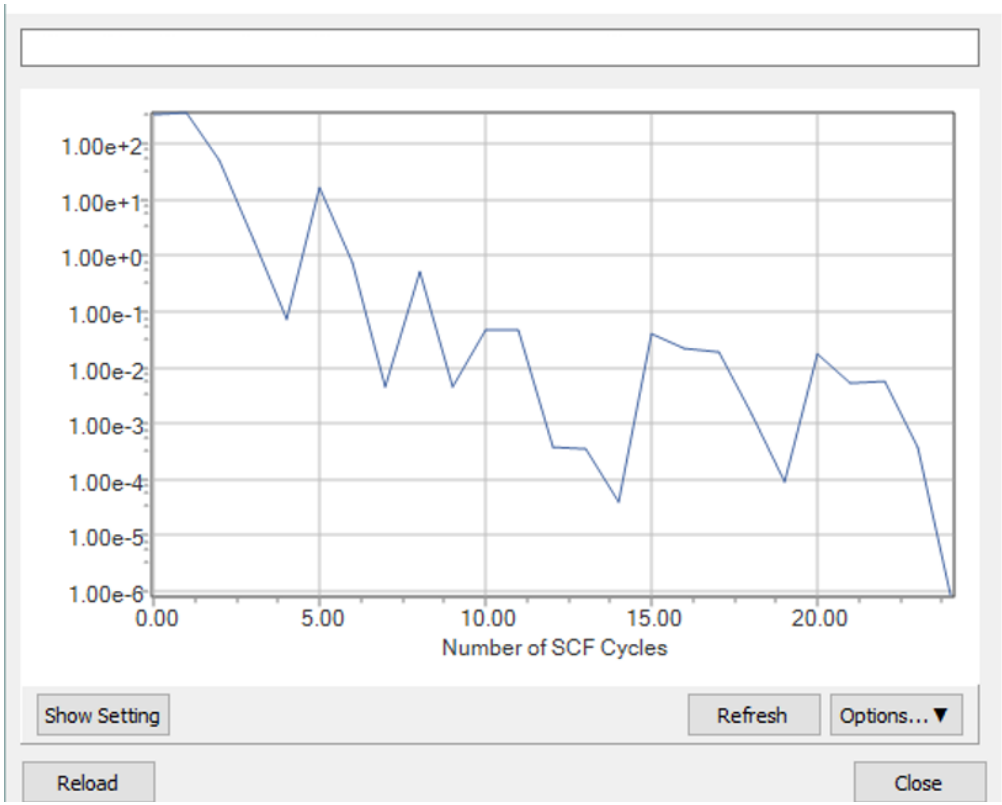


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。

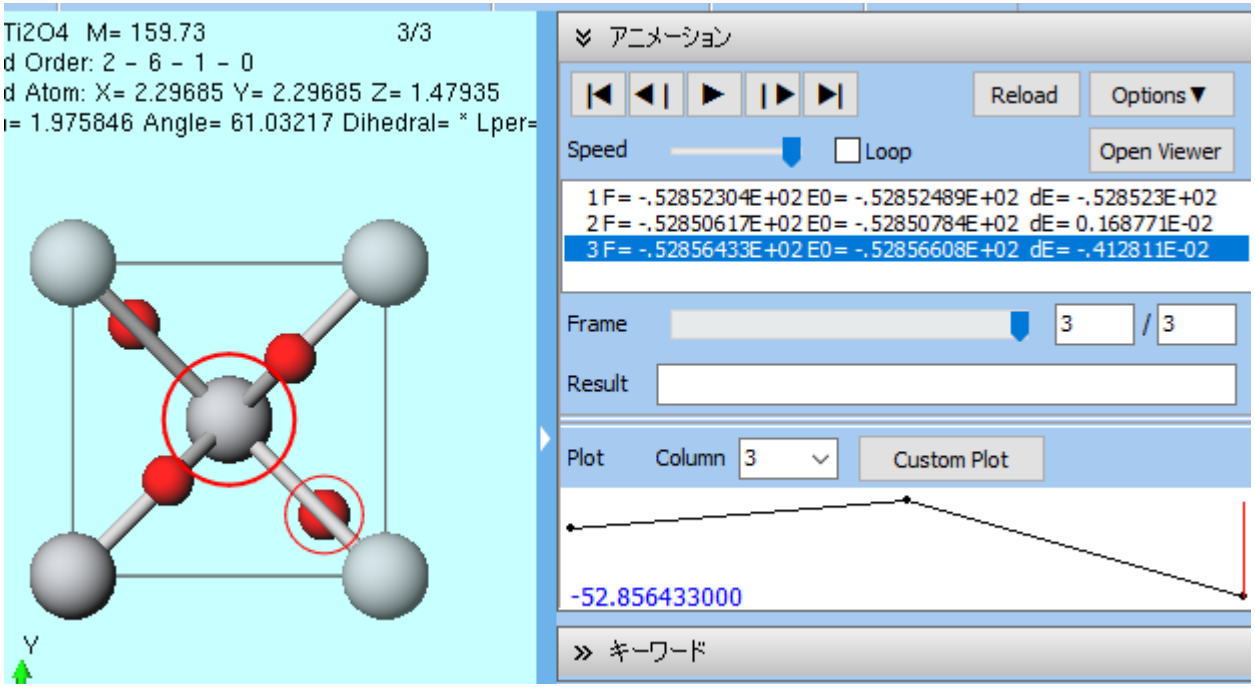
1. **エネルギー変化**ボタンをクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開くとSCF計算におけるエネルギーの変化のグラフを確認することができます。



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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（XDATCARとOSZICARの2回）、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。



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.