

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

DFT+U ・ 平衡電位

V11.5.0

2023年4月10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

- 本書ではLiCoO₂の平衡電位 E_{eq} を以下の方法で算出します。HubbardのUパラメータを使用したDFT+Uで各物質を計算します。

$$E_{\text{eq}} \sim E_0(\text{CoO}_2) + E_0(\text{Li}) - E_0(\text{LiCoO}_2) \quad (E_0 \text{は各物質の全エネルギー})$$

注意点：

- 本書ではCoO₂、LiCoO₂を非磁性体として計算していますが、実際には反強磁性体あるいは強磁性体として計算し、反強磁性体の場合は妥当なスピン構造の探索が必要です。
- 本書で紹介する平衡電位の計算手順は近似を含みます。

参考URL：

<https://mmnakayama.jimdofree.com/study/%E7%AC%AC%E4%B8%80%E5%8E%9F%E7%90%86%E8%A8%88%E7%AE%97%EF%BC%92/>

- Hubbard Uを用いて構造最適化計算を実行する際にQE 5系列ではエラーが出るため6系列を使用してください。
- 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。
- ◆ 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

- 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[推奨バージョン](#)以外のQuantum ESPRESSOを利用したい方は、別途[Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定](#)が必要です。

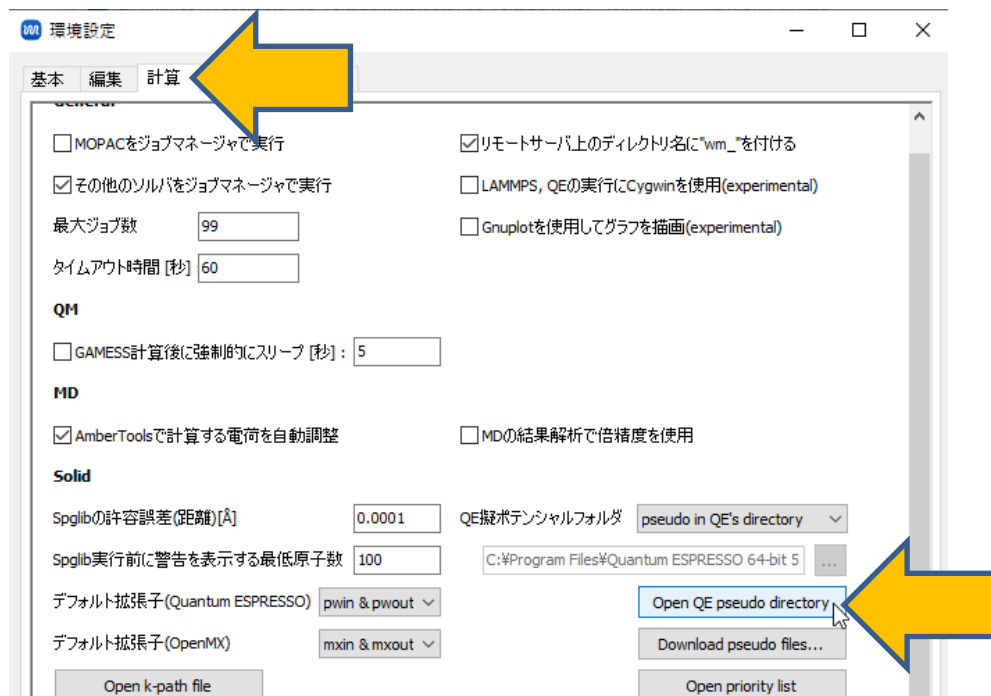
動作環境設定

- li_pbe_v1.4.uspp.F.UPF
- o_pbe_v1.2.uspp.F.UPF
- co_pbe_v1.2.uspp.F.UPF

を3つ以下のURLより入手し、**ツール | 環境設定 | 計算 | Solid | Open QE pseudo directory**をクリックして開いたフォルダにコピーしてください。

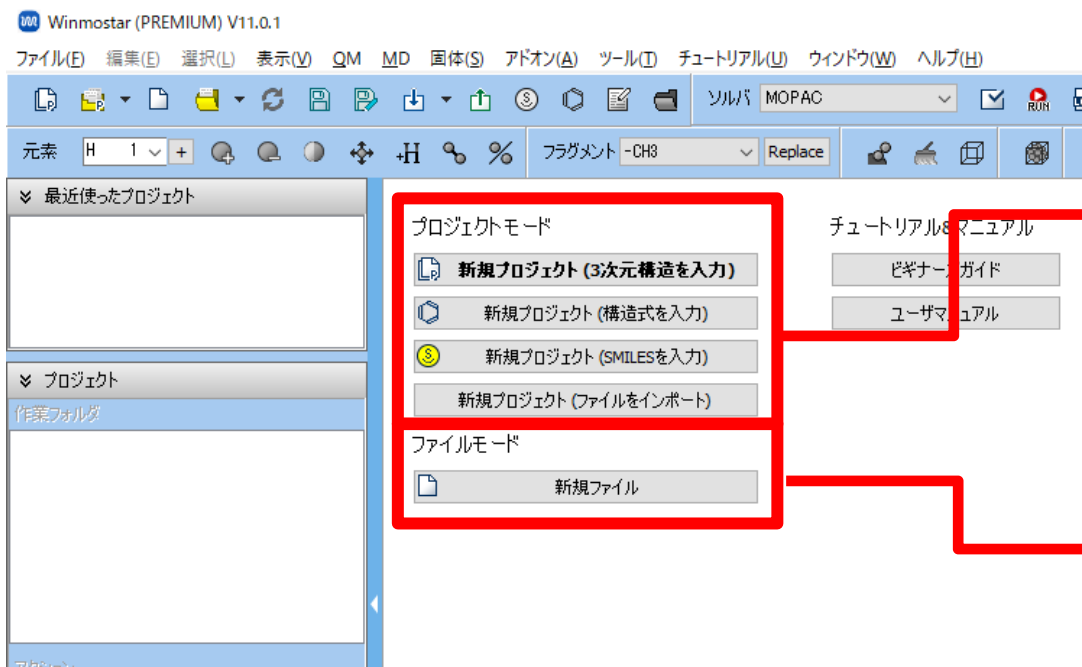
<https://www.physics.rutgers.edu/gbrv/>

Element	Generation Files	PBE QE UPF	PBE
01 - H - Hydrogen	001-H	h_pbe_v1.4.uspp.F.UPF	h_pbe_v1
02 - He - Helium	002-He		
03 - Li - Lithium	003-Li	li_pbe_v1.4.uspp.F.UPF	
04 - Be - Beryllium	004-Be	be_pbe_v1.4.uspp.F.UPF	be_pbe_v1
05 - B - Boron	005-B	b_pbe_v1.4.uspp.F.UPF	b_pbe_v1
06 - C - Carbon	006-C	c_pbe_v1.2.uspp.F.UPF	c_pbe_v1
07 - N - Nitrogen	007-N	n_pbe_v1.2.uspp.F.UPF	n_pbe_v1
08 - O - Oxygen	008-O	o_pbe_v1.2.uspp.F.UPF	
...
26 - Fe - Iron	026-Fe	fe_pbe_v1.5.uspp.F.UPF	f
27 - Co - Cobalt	027-Co	co_pbe_v1.2.uspp.F.UPF	c



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。



プロジェクトモード **V11新機能**

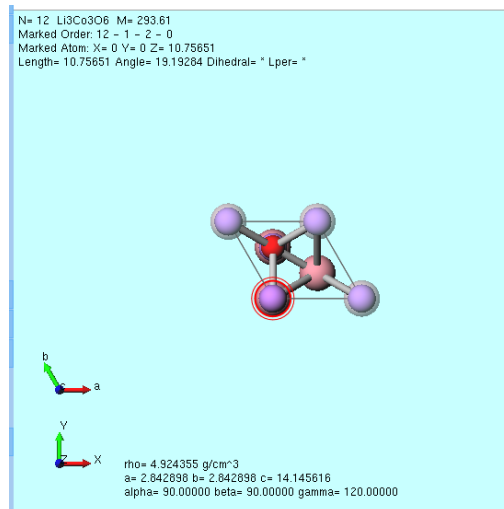
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。
基本的にこのモードを推奨します。

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。

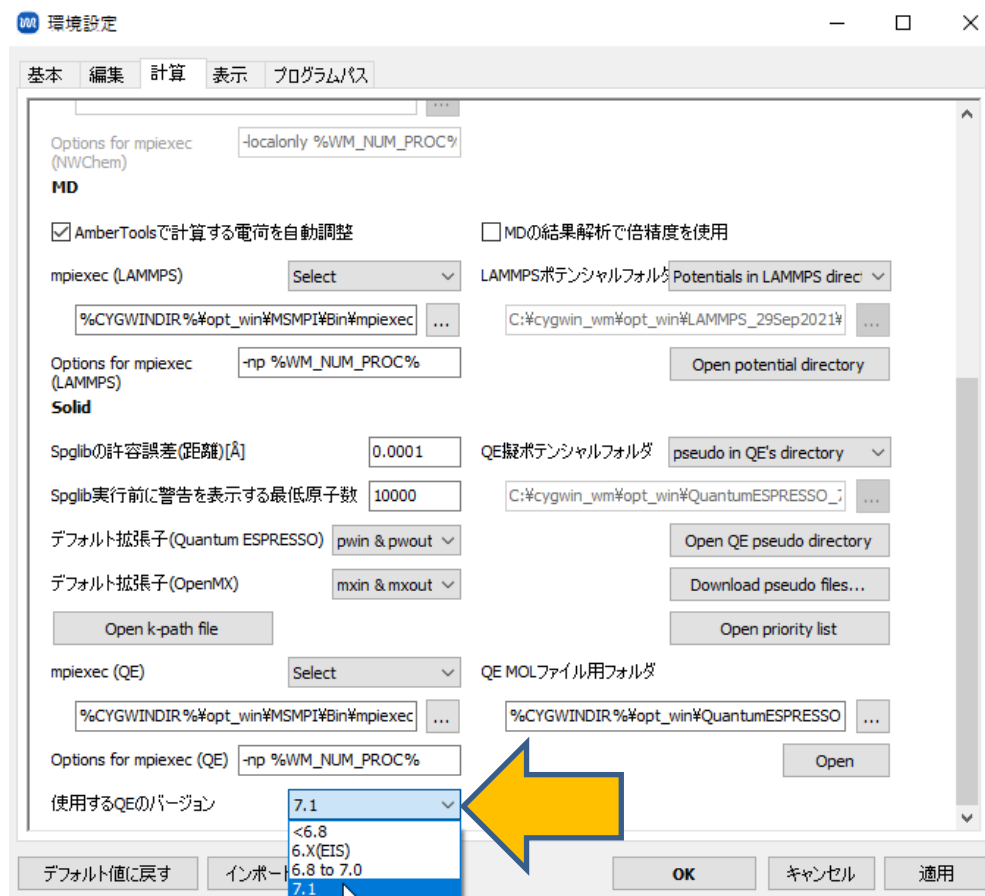
I. 系のモデリング (LiCoO₂)

- 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[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。
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「`lco_eq`」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 | licoo2.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。




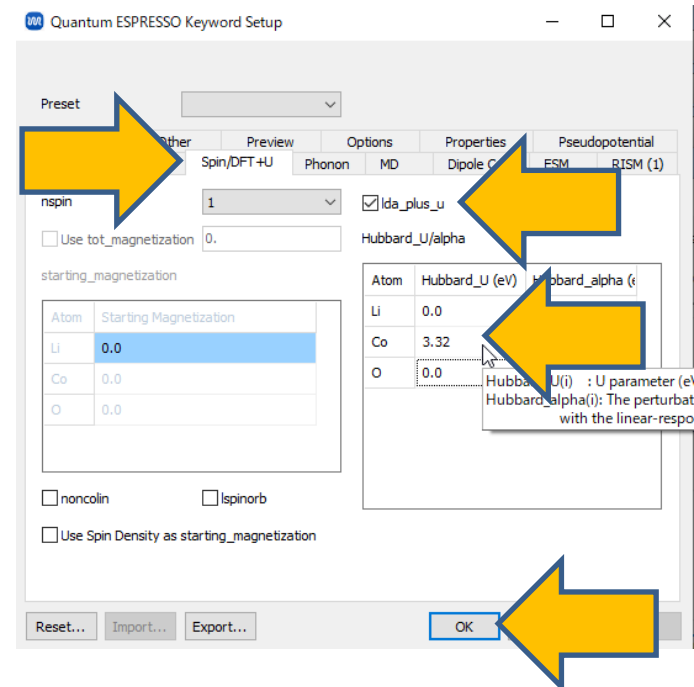
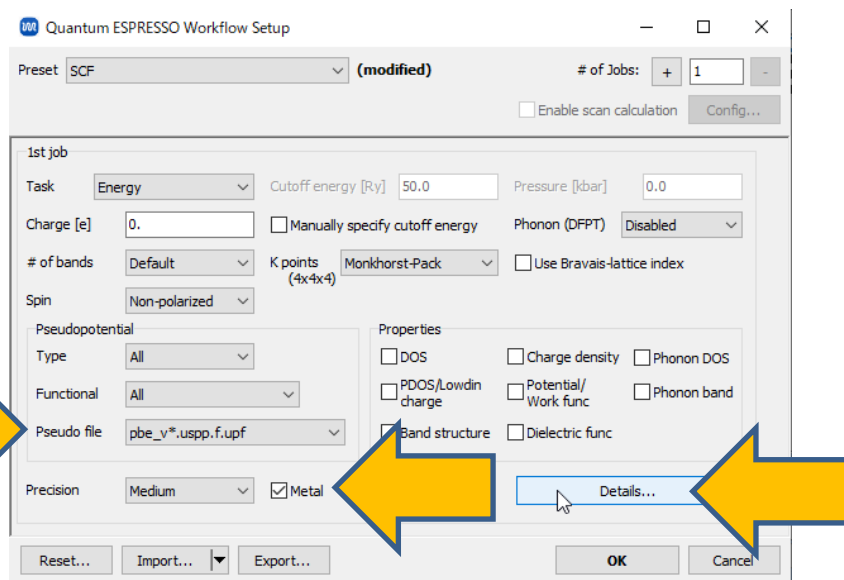
II. 計算の実行 (LiCoO2)

- 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、 (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」)



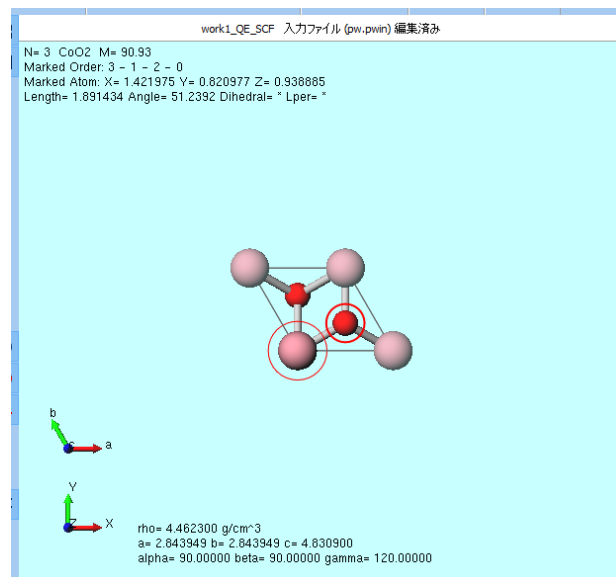
II. 計算の実行 (LiCoO2)

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。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。「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。
2. **Metal**にチェックをいれ、**Pseudo file**に「pbe_v*.uspp.f.upf」を選択します。ない場合はP.5の手順を実行します。
3. **Details**をクリックし、**Spin/DFT+U**タブの**lda_plus_u**にチェックを入れ、**Co**の**Hubbard_U**に「3.32」 ([Materials Project](#)の値を参照) と入力し、**OK**をクリックします。
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。



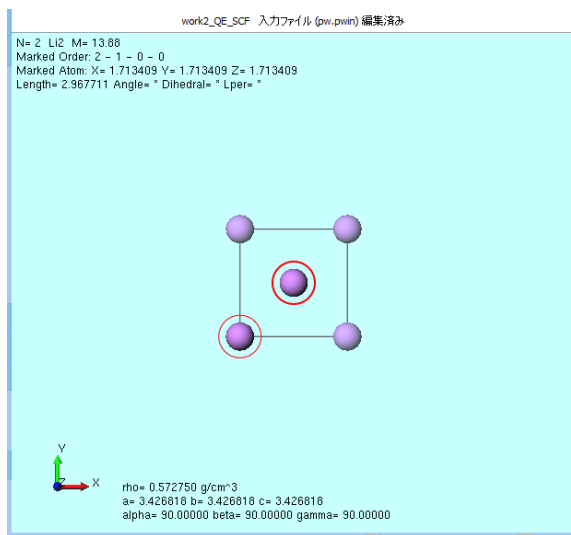
III.系のモデリング、計算の実行 (CoO2)

1. **ファイル | インポート | Samplesファイル | coo2.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. (**ワークフロー設定**) をクリックします。「**継続ジョブを実行しますか?**」と聞かれたら**いいえ**をクリックします。
4. **Details**をクリックし、**Spin/DFT+U**タブの**Co**の**Hubabrd_U**に「**3.32**」と入力し、**OK**をクリックします。
5. **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。



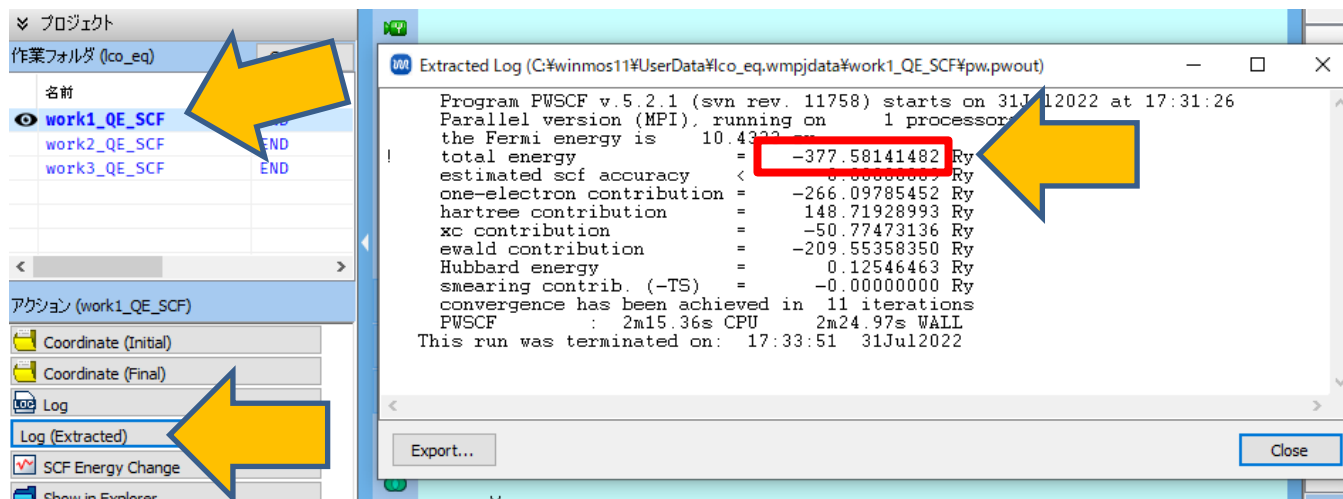
IV.系のモデリング、計算の実行 (Li)

1. **ファイル | インポート | Samplesファイル | li.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. (**ワークフロー設定**) をクリックします。「**継続ジョブを実行しますか?**」と聞かれたら**いいえ**をクリックします。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。「**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。
4. **Details**をクリックし、**Spin/DFT+U**タブの**lda_plus_u**のチェックを外し**OK**をクリックします。
5. **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。

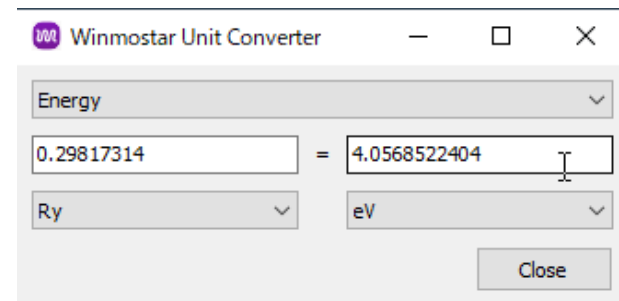


V. 結果解析

1. work1_QE_SCF (LiCoO2) の状態がENDになったら、プロジェクト表示エリアの**作業フォルダ**で「work1_QE_SCF」をクリックし、**アクション**で**Log (Extracted)**をクリックします。
2. **Extracted Log**ウィンドウで「! total energy = ...」の行の値 (下図の例では「-377.58141482」) をコピーしExcelやメモ帳にペーストします。
3. work2 (CoO2) 、 work3 (Li) についても同様に操作しtotal energyの値を取得します。
4. $E_{eq} \sim E_0(\text{CoO}_2) + E_0(\text{Li}) - E_0(\text{LiCoO}_2)$ の値を計算します。 **ツール | 単位を変換**でRyからeVに値を変換できます。



	A	B	C
1	LiCoO2	-377.5814148	Ry
2	CoO2	-362.810352	Ry
3	Li	-14.47288966	Ry
4	CoO2+Li-LiCoO2	0.29817314	Ry



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