M winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO 表面再構成

V11.12.0

2025年4月30日 株式会社クロスアビリティ

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



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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Si (0 0 1)面の構造最適化計算を実施し、表面再構成の様子を確認します。
- Si (0 0 1)の再構成された表面状態として様々な状態が知られており、本チュートリアルでは その中でも非対称ダイマーのp(2×2)構造を取得します。
- 予想される原子位置の変化が大きいので効率よく処理するために低精度→高精度、と段階的に 計算します。(系によっては低精度で構造最適化しない方が収束が早いことがあるため注意が 必要です)



注意点:

- 計算条件によっては、構造最適化計算の結果異なる表面構造に収束する場合もあります。
- k点の取り方、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。 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しい説明は、次の弊社記事をご覧くだ
 さい。<u>https://qiita.com/xa_member</u>



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

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。 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。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(I) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



I. 系のモデリング (バルク結晶)

- 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<u>Winmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法</u>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「si_surf」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 | si.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(バルク結晶)

- 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。
- 2. Presetを「Optimize(Atom&Cell)」に変更し、Pseudo fileを「pbe-n-van.upf」に変更し ます。
- 3. 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。

| | 🥺 Quantum ESPRESSO Workflow Setup | | | | | - 0 × |
|---------------|-----------------------------------|---------------------|---------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------|
| | Preset Optimize(Atom&Cell) | | | | # of Jo | obs: + 1 |
| | | | | | able parameter/stru | cture scan Config |
| | 1st job | | | | | + - |
| | Task (| Optimize(Atom&Cell) | ✓ Cutoff energy | ergy [Ry] 35.0 | Pressure [kbar] | 0.0 |
| | Charge [e] | 0. | Manual | lly specify cutoff energy | Phonon (DFPT) | Disabled \lor |
| | # of bands | Default | K points (5x5x5) | Monkhorst-Pack ~ | Use Bravais-la | attice index |
| | Spin | Non-polarized | ~ | | | |
| | Pseudopot | ential | | Properties | | |
| | Туре | All | ~ | DOS | Charge density | Phonon DOS |
| | Functional | All | ~ | PDOS/Lowdin charge | Potential/ Work func | Phonon band |
| | Pseudo file | pbe-n-van.upf | × | Band structure | | |
| | Precision | Medium | ∨ ⊡ Metal | | De | tails |
| | Reset | Import 🖛 | Export | | 0 | к |
| 🔰 winmostar 🗠 | pyrigh | t 2008-202 | 25 X-Abi | lity Co., Ltd. | | |

- 1. work1_QE_Relaxの**状態**がENDに変化したら**アクション**でCoordinate (Final)をクリックします。
- 2. **固体 | 格子を変換(Primitive<->Conventional)**(V11.10.X以前は**固体 | 格子を変換**)を クリックし、「…編集を続行しますか?」と表示されたら**はい**をクリックします。「…コンベ ンショナルセルに変換しますか?」と表示されたら**はい**をクリックします。
- 3. **固体 | スラブを作成**をクリックし、Minimum slab sizeのIn number of hkl planesの値 を「3」、Supercellのa-axisとb-axisをどちらも「2」に変更し(1) Generate Slabをク リックします。
- 4. Vacuumを「5」に変更し(2) OKをクリックします。



- 1. 🔞 X軸方向から表示をクリックしてから 🔀 ウィンドウに合わせるをクリックします。
- 3. 下図(中央)のように下1原子層をCtrl+ドラッグで矩形選択し、 Q. 原子を削除をクリックし、 Deleteをクリックします。



- 2. 選択 | グループ選択を解除をクリックします。



- 1. 分子表示エリアでドラッグし、下図(左)のように上の最表面の4原子がすべて見える位置に カメラを動かします。
- 2. 下図(左)のように上の最表面のうち1つの原子をCtrl+クリックし グループ編集 | グ ループを並進移動(数値を指定)をクリックし、Yの値を「0.5」に変更しOKをクリックしま す。
- 3. 選択 | グループ選択を解除をクリックします。



IV.計算の実行(スラブ、低精度)

- 1. **〇 (ワークフロー設定)** をクリックし「継続ジョブを実行しますか?」と表示されたらいいえ をクリックします。
- 2. Presetを「Optimize(Atom)」に変更し、Precisionを「Extra-Low」に変更し、Metalに チェックを入れます。
 - バンドギャップに出現する表面準位がSCFの収束性を悪くするのでMetalにしてsmearingを適用します
- 3. 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。

| | 2 Quantum ESPRESSO Workflow Setup | | | | | - 🗆 > | |
|----------|-----------------------------------|------------------------|-----------------|-----------------------|-------------------------|-------------------|--|
| | Preset Optimize | e(Atom) | (modified) | | # of Jobs: + 1 - | | |
| | | | | | Enable scan ca | alculation Config | |
| | 1st job | | | | | + - | |
| | Task Op | timize(Atom) 🗸 🗸 | Cutoff energy [| Ry] 30.0 | Pressure [kbar] | 0.0 | |
| | Charge [e] | 0. | Manually spe | cify cutoff energy | Phonon (DFPT) | Disabled \lor | |
| | # of bands | Default \lor | K points Mor | khorst-Pack 🗸 🗸 🗸 | Use Bravais-lat | ttice index | |
| | Spin | Non-polarized \sim | () | | | | |
| | Pseudopoten | tial | | Properties | | | |
| | Туре | All \sim | | DOS | Charge density | Phonon DOS | |
| | Functional | All | \sim | PDOS/Lowdin charge | Potential/ Work func | Phonon band | |
| <u>,</u> | Pseudo file | pbe-n-van.upf | ~ | Band structure | Dielectric func | | |
| | Precision | Extra-low \checkmark | ☑ Metal | | Det | ails | |
| winmosta | Copyrig | ht 2008-202 | 5 X-Abilit | Co., Ltd. | | | |

IV.計算の実行(スラブ、高精度)

- 1. work2_QE_Relaxの状態がENDに変化したら **(ワークフロー設定)** をクリックし「継続 ジョブを実行しますか?」と表示されたら**はい**をクリックします。
- 2. 「ジョブの継続元の作業フォルダを選択」でwork2_QE_Relaxを選択しOKをクリックします。
- 3. K pointsを「Monkhorst-Pack(Slab)」に変更します。
- 4. Precisionを「Medium」に変更し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。

| Preset | Opti | mize(Atom) | , | (modified) | # of Jo | bs: + | 1 | | |
|------------------------------|---------|------------------|------------|--------------------------|--------------------------|-----------|----------|---|--|
| Continue from work2_QE_Relax | | | □ En | able parameter/struc | parameter/structure scan | | | | |
| 1st job | | | | | | (| + - |) | |
| Task | | Optimize(Atom) ~ | Cutoff ene | rgy [Ry] 50.0 | Pressure [kbar] | 0.0 | | | |
| Charge | e [e] | 0. | Manual | ly specify cutoff energy | Phone (DFPT) | Disabled | ~ | | |
| # of ba | ands | Default ~ | K points | Monkhorst-Pack(Slab) ~ | | ice index | c | | |
| Spin | | Non-polarized ~ | (3X3X1) | A. | | | | | |
| Pseud | dopo | tential | | Properties | | | | | |
| Туре | | All ~ | | DOS | Charge density | Phon | ion DOS | | |
| Funct | tional | All | ~ | PDOS/Lowdin charge | Potential/ Work func | Phon | ion band | | |
| Pseud | do file | e pbe-n-van.upf | Ň | Band structure | Dielectric func | | | | |
| Precisio | n | Medium ~ | Medium | | | Details | | | |
| | | | | _ | | | | | |

V. 結果解析

- 1. work3_QE_Relaxの状態がENDに変化したらアクションのCoordinate (Final)をクリックします。
- 2.
 田 三面図を表示をクリックします。分子表示エリアでShift+ドラッグし、適宜表示範囲を調整します。三面図を取り消すときは再度 田 三面図を表示をクリックします。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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