

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

接着エネルギー計算

V11.14.0

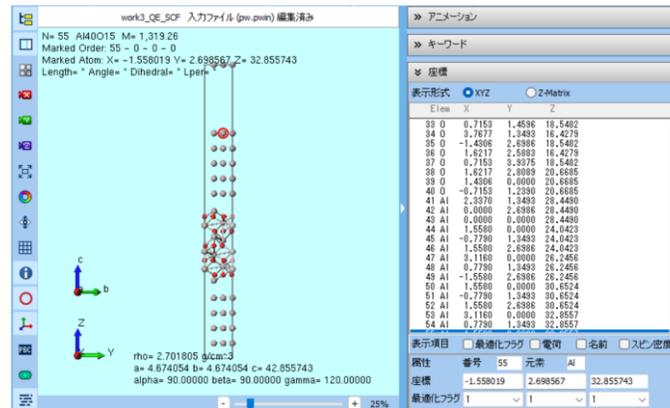
2025年10月8日 株式会社クロスアビリティ

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。
- 本書ではAl結晶とAl₂O₃結晶の接合面に発生する接着エネルギーを求めます。まず、バルクAl₂O₃およびスラブAl₂O₃(0001)を作成し、スラブのエネルギーを計算します。次にスラブAl(111)を作成し、エネルギーを計算します。最後にAl/Al₂O₃/Alの系を作成し、エネルギー計算を実行します。Al₂O₃スラブ、Alスラブ、Al/Al₂O₃/Alの各エネルギーより接着エネルギーが計算できます。



注意点 :

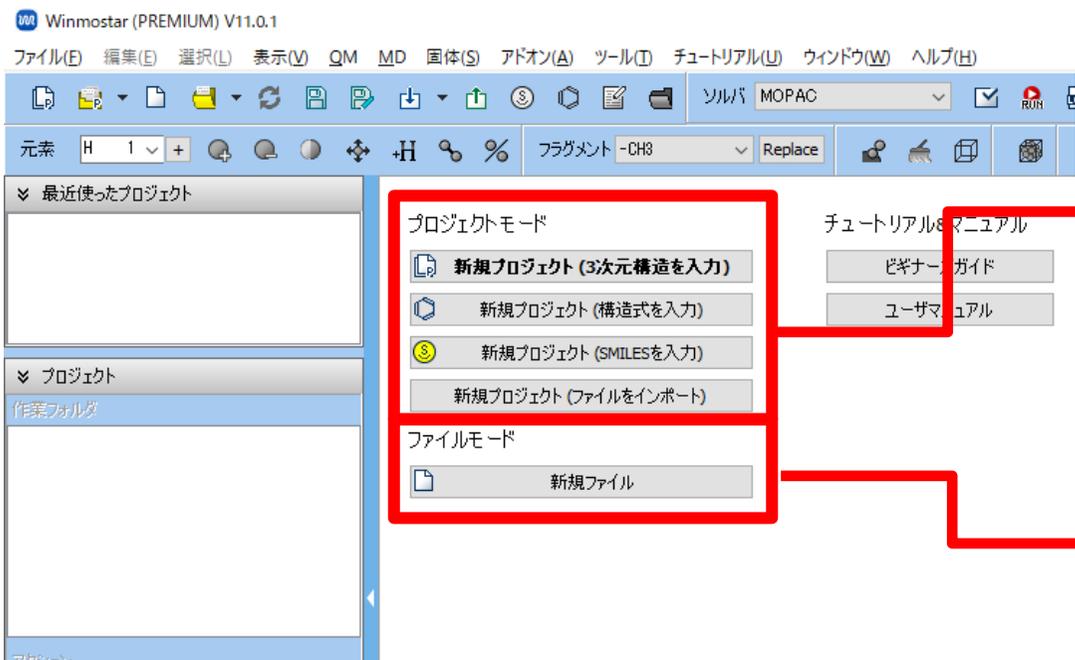
- k点の取り方、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギーは計算結果に影響を与えます。
- Quantum ESPRESSOの計算方法及び計算設定内容の詳しい説明は、次の弊社記事をご覧ください。 https://qiita.com/xa_member

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。

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。

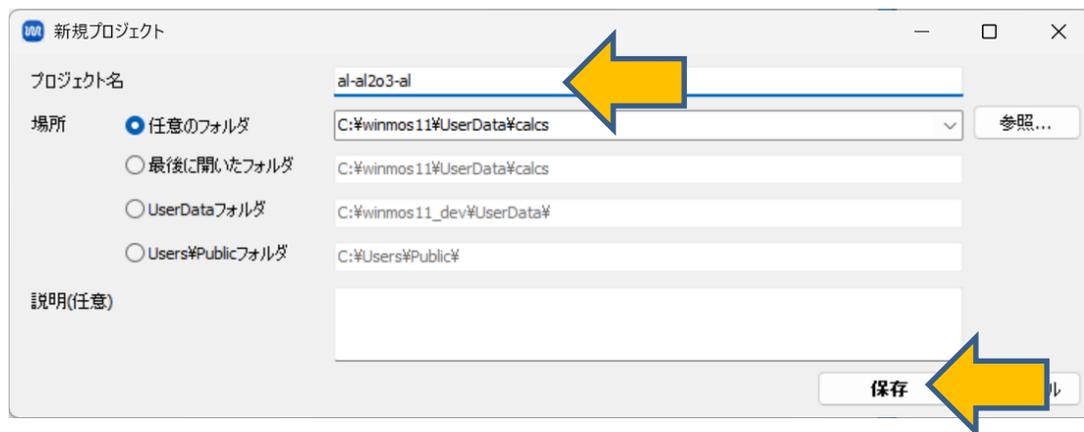
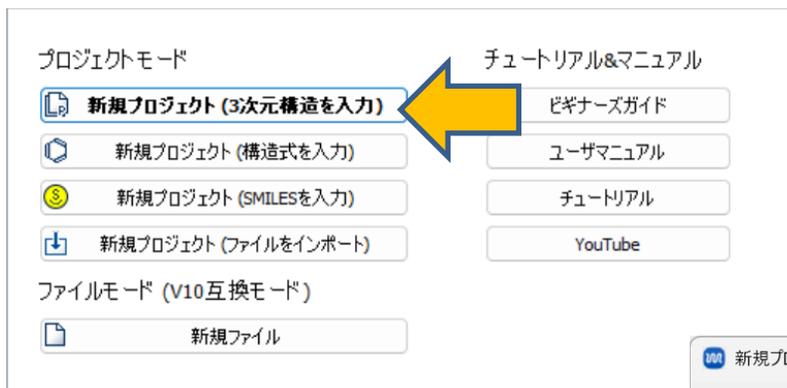


プロジェクトモード V11新機能
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。
基本的にこのモードを推奨します。

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 (Al₂O₃バルク)

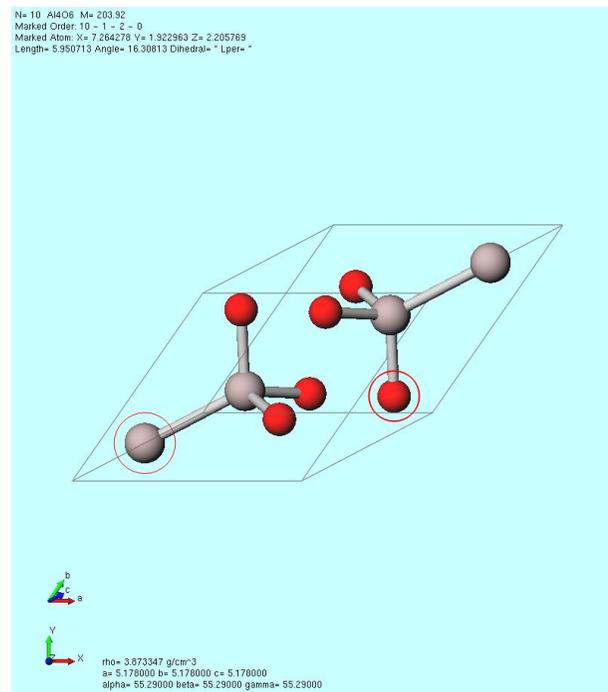
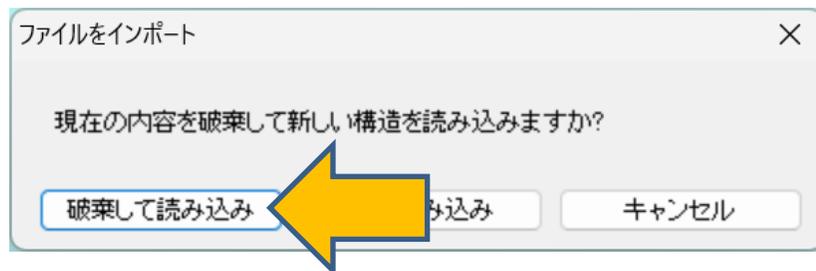
- 基本的な操作方法は[QE基礎編チュートリアル](#)を参照してください。
 - 初期構造の作成方法の詳細は[Winmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法](#)を参照してください。
1. Winmostarを起動し、**新規プロジェクト (3次元構造を入力)** をクリックします。(すでに起動している場合は先に**ファイル | 閉じる** をクリックします。)
 2. **プロジェクト名**に「al-al2o3-al」と入力し**保存**をクリックします。



I. 系のモデリング (Al₂O₃バルク)

Al₂O₃結晶構造を作成します。

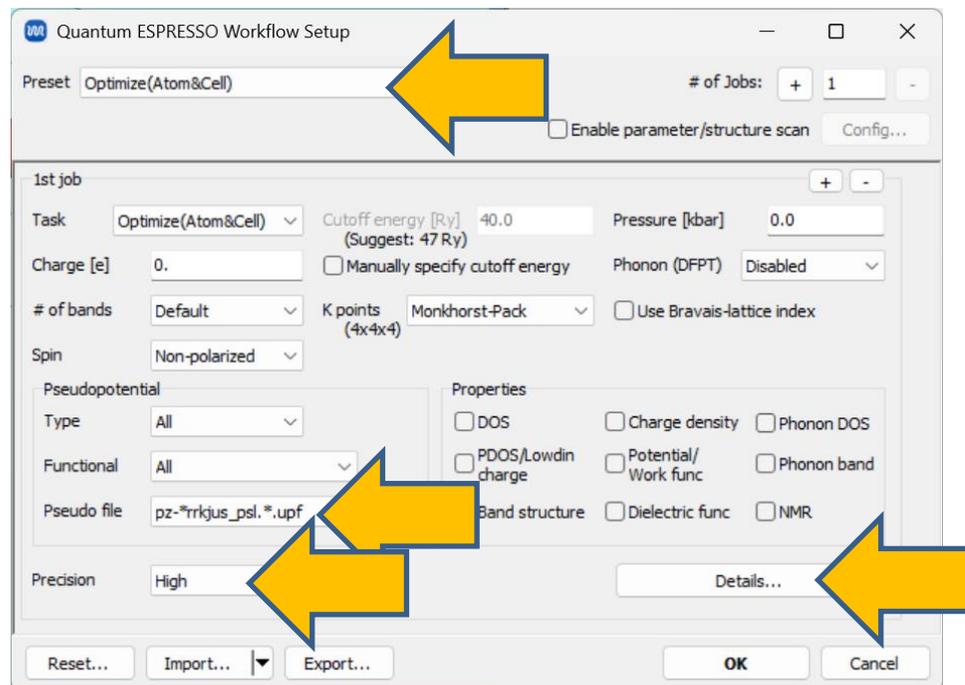
1. **ファイル | インポート | Sampleファイル**までカーソルを運びます。
2. サンプルファイル群の中から「al2o3.cif」を選択します。
3. **現在の内容を破棄して**・・・のウィンドウが出ますので、「破棄して読み込み」を選択します。
4. Al₂O₃のプリミティブセルがメインウィンドウに生成されます。



II. 計算の実行 (Al₂O₃バルク)

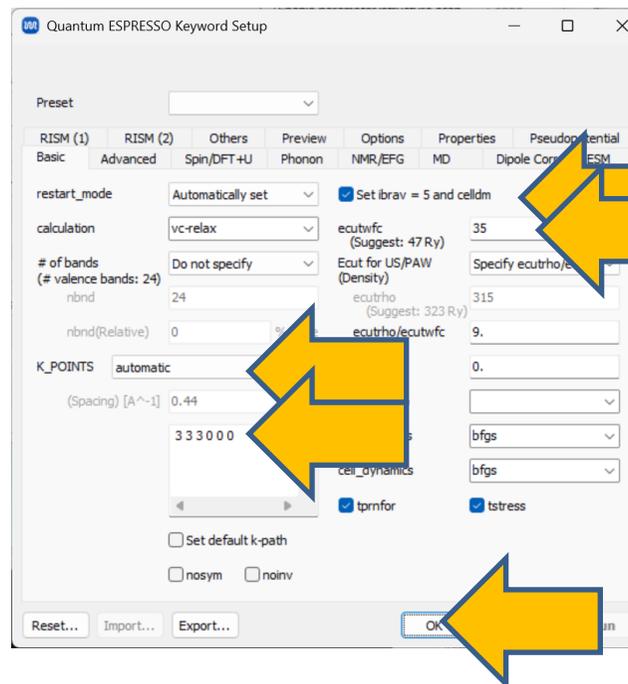
ここではAl₂O₃のバルク構造の構造最適化を実施します。

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)」に変更してから、**Pseudo file**を「pz-*rrkjus_psl*.upf」、**Precision**を「High」に変更します。
3. **Details**をクリックします。



II. 計算の実行 (Al₂O₃バルク)

4. Set **ibrav = 5** and **celldm**にチェックを入れ、下の**ecutwfc**は「35」としてください。
5. K_POINTS は **automatic** とし、2つ下のK点数とシフト値を記入する個所では「3 3 3 0 0 0」に書き換えてください。
6. 設定を終えたらOKをクリックし、Details画面から抜け出してください。
7. **Quantum ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウで**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。



II. 計算の実行 (Al₂O₃バルク)

8. work1_QE_Relaxの状態が**END**になったら、画面左下（左下図参照）の **Coordinate (Final)** をクリックしてください。構造最適化後の構造が反映されます（右下図参照）。

プロジェクト

作業フォルダ (al-al2o3-al) Options ▾

| 名前 | 状態 |
|----------------|-----|
| work1_QE_Relax | END |

アクション (work1_QE_Relax)

- Coordinate (Initial)
- Coordinate (Final)**
- Log
- Log (Extracted)
- SCF Energy Change
- Animation
- Show in Explorer

work1_QE_Relax 出力ファイル (pw.pwout)

N= 10 A#O6 M= 203.92
Marked Order: 10 - 1 - 0 - 0
Marked Atom: X= 0.906381 Y= -1.349284 Z= -5.300758
Length= 5.770731 Angle= ° Dihedral= ° Lper= °

| Atom | X | Y | Z |
|------|---------|---------|----------|
| 1 Al | 0.0000 | 0.0000 | -10.8378 |
| 2 Al | 0.0000 | 0.0000 | -9.2449 |
| 3 Al | 0.0000 | 0.0000 | -4.4769 |
| 4 Al | 0.0000 | 0.0000 | -1.8840 |
| 5 O | -0.3064 | 1.3493 | -7.4211 |
| 6 O | -1.8217 | -0.1103 | -5.3008 |
| 7 O | -0.7153 | -1.4596 | -7.4211 |
| 8 O | 0.7153 | 1.4596 | -5.3008 |
| 9 O | 1.8217 | 0.1103 | -7.4211 |
| 10 O | 0.3064 | -1.3493 | -5.3008 |

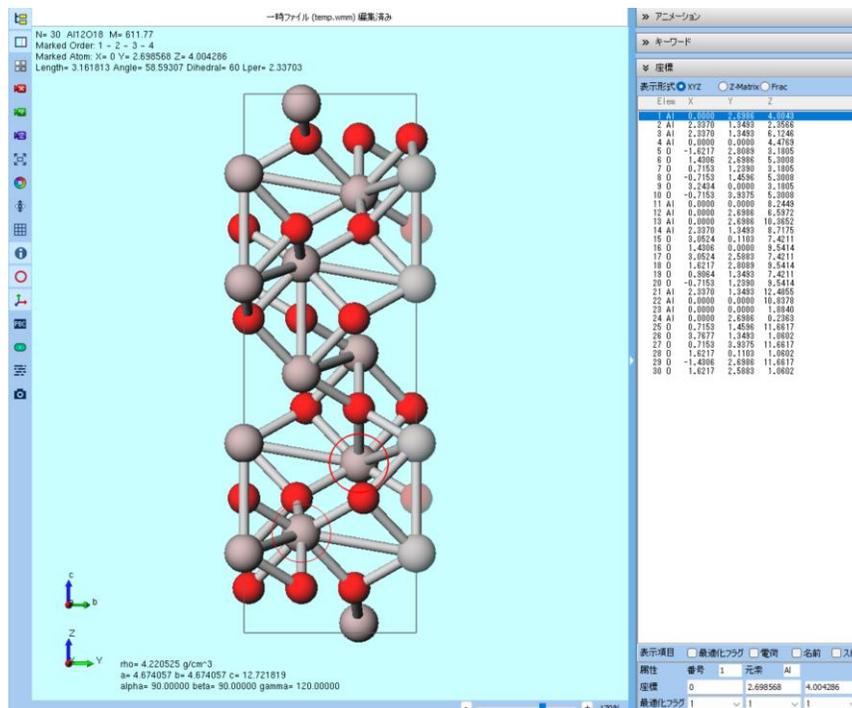
表示項目 最適化フラグ 電荷 名前 スピン

| 属性 | 番号 | 10 | 元素 | O |
|--------|----------|-----------|-----------|---|
| 座標 | 0.906381 | -1.349284 | -5.300758 | |
| 最適化フラグ | 1 | 1 | 1 | 1 |

III. 系のモデリング (Al₂O₃(0001)スラブ)

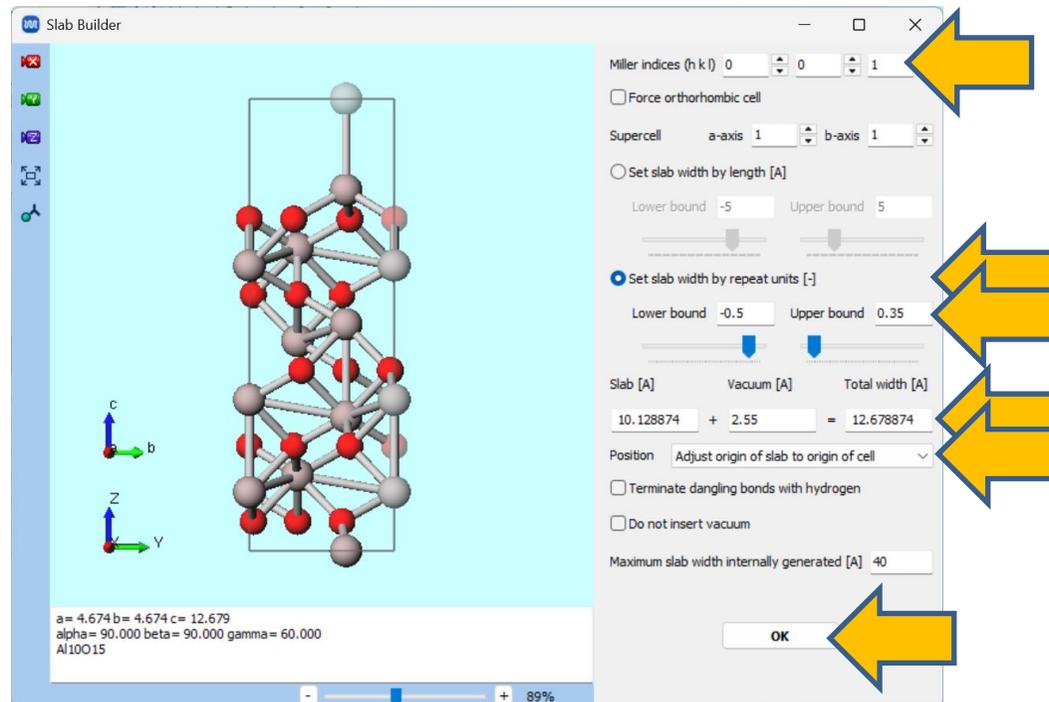
ここでは、接着エネルギーの計算に用いるAl₂O₃ (0001) スラブを作成します。

1. **Coordinate (Final)**が選ばれた状態で、**固体 | 格子を変換** を選択し、コンベンショナルセルに変換してください。変換するとユニットセルの格子ベクトルの長さが、構造の下に記載されます。(ここでは、a: 4.674057、b: 4.674057、c: 12.721819 (単位: Å))
2. x軸からの視点にするため、下左図の**赤丸のボタン**(X軸方向から表示)を押してください。
3. 構造表示は下右図のようになります。



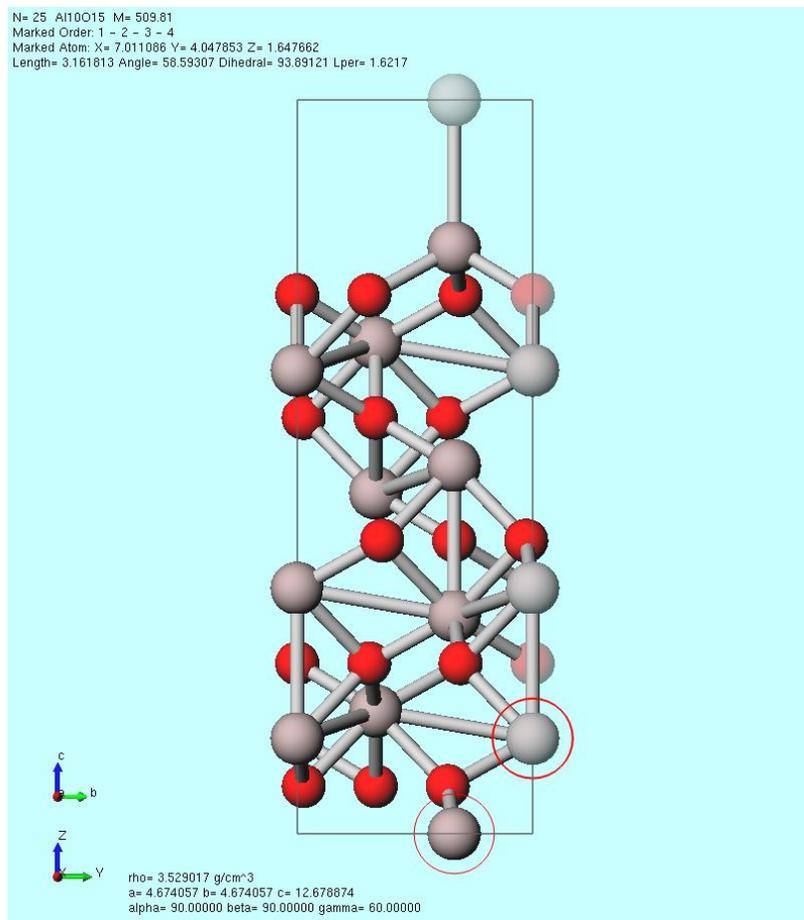
III. 系のモデリング (Al₂O₃(0001)スラブ)

4. 固体 | スラブを作成 で、Miller indices (h k l) を「0 0 1」とし、Set slab width by repeat units を選択します。Lower boundには「-0.5」 Upper boundには「0.35」を入力します。
5. Vacuum [A]に「2.55」 [Al₂O₃のAl原子とAl(111)表面間の距離 (文献値)]を入力します。Positionは「Adjust origin of slab to origin of cell」 を選択しOKをクリックします



III. 系のモデリング (Al₂O₃(0001)スラブ)

6. ファイル | ファイルをエクスポート を選び、mol2形式で保存してください。ここでは「al2o3.mol2」とします。このファイルは後ほど接着面の計算で使用します。



III. 系のモデリング (Al₂O₃(0001)スラブ)

4. メニューから **選択 | すべてをグループ選択** を選び、**編集 | グループ編集 | グループを並進移動(数値を指定)** を選んで+z方向に微小移動 (ここでは0.1) させます。

一時ファイル (temp.wmm) 編集済み

N= 30 Al12O18 M= 611.77
Marked Order: 1 - 2 - 3 - 4
Marked Atom: X= 2.337027 Y= 1.349283 Z= 0.214865
Length= 3.767931 Angle= 58.59342 Dihedral= 64.66349 Lper= 2.33703

rho= 4.234663 g/cm³
a= 4.674054 b= 4.674054 c= 12.678841
alpha= 90.00000 beta= 90.00000 gamma= 120.00000

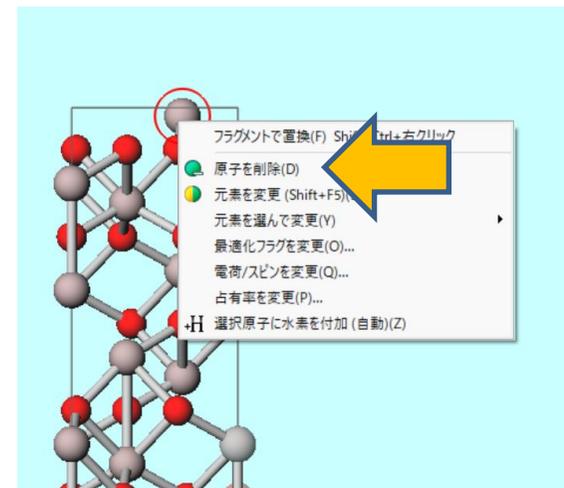
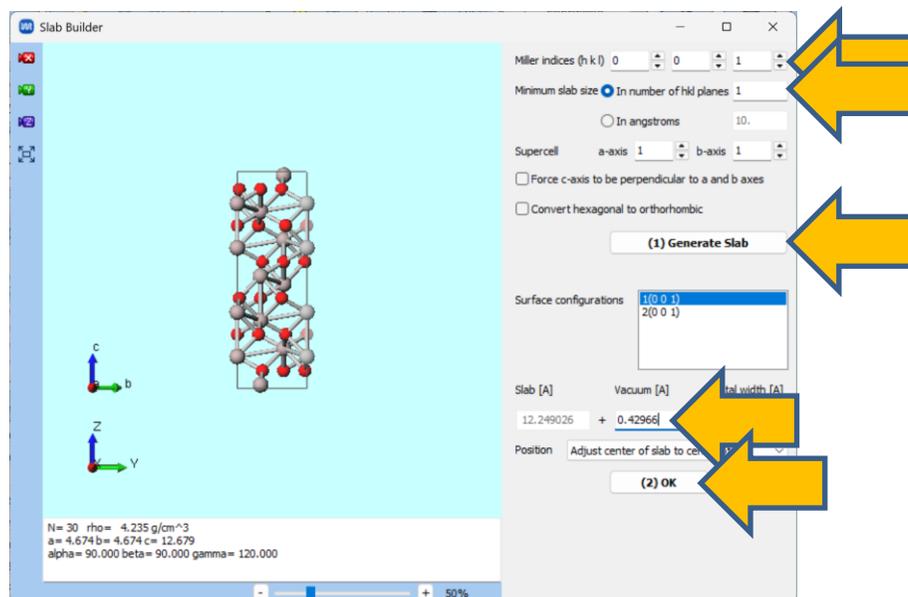
| Elem | X | Y | Z |
|-------|---------|--------|---------|
| 1 Al | 2.3370 | 1.3493 | 0.2149 |
| 2 Al | 2.3370 | 1.3493 | 3.9828 |
| 3 Al | 0.0000 | 2.6986 | 2.3952 |
| 4 Al | 0.0000 | 0.0000 | 1.8625 |
| 5 Al | 2.3370 | 1.3493 | 10.3437 |
| 6 Al | 0.0000 | 2.6986 | 8.6960 |
| 7 Al | 0.0000 | 2.6986 | 12.4640 |
| 8 Al | 0.0000 | 0.0000 | 10.8163 |
| 9 Al | 0.0000 | 2.6986 | 6.1031 |
| 10 Al | 0.0000 | 0.0000 | 4.4555 |
| 11 Al | 0.0000 | 0.0000 | 8.2234 |
| 12 Al | 2.3370 | 1.3493 | 6.5757 |
| 13 O | 0.7153 | 3.3375 | 7.3996 |
| 14 O | 3.0523 | 2.5883 | 11.6402 |
| 15 O | 1.6217 | 2.8089 | 9.5199 |
| 16 O | 3.0523 | 0.1103 | 11.6402 |
| 17 O | 1.4306 | 0.0000 | 9.5199 |
| 18 O | 0.9064 | 1.3493 | 11.6402 |
| 19 O | -0.7153 | 1.2390 | 9.5199 |
| 20 O | 1.6217 | 2.5883 | 5.2793 |
| 21 O | -1.4306 | 2.6986 | 7.3996 |
| 22 O | 3.7677 | 1.3493 | 5.2793 |
| 23 O | 0.7153 | 1.4548 | 7.3996 |

| 属性 | 番号 | 1 | 元素 | Al |
|--------|----|----------|----------|----------|
| 座標 | | 2.337027 | 1.349283 | 0.214865 |
| 最適化フラグ | 1 | 1 | 1 | 1 |

これは、セル下方の周期境界近傍に位置するAl原子が後のスラブ構造作成時にセル上方に移動してしまう可能性があることから、それを回避するための操作です。

III. 系のモデリング (Al₂O₃(0001)スラブ)

5. 固体 | スラブを作成 で、Miller indices (h k l) を0, 0, 1, in number of hkl planesを1に設定し、(1) Generate Slab をクリック、次に Vacuum [Å] に「0.42966」と入力し (上の元素を削除後の真空層が2.55 Å [Al₂O₃のAl原子とAl(111)表面間の距離 (文献値)] になるようにしている、2.55 - ([Alのz座標で最大値 = 12.58544] - [セル上方3層目Alのz座標値 = 10.4651]) = 0.42966)、OK をクリック。(左下図)
6. スラブ作成後、座標の大きいもの5つ(Al×2, O×3)を削除。ここではz座標10.8163以上のものを削る。削除したい原子を選択し、マウスの右クリックをします。メニューが表示されますので、その中の原子を削除を選択することで削除できます。(右下図)



III. 系のモデリング (Al₂O₃(0001)スラブ)

- 一番下の原子のz座標を0にするよう全ての原子を並進移動させます。メニューから **選択 | すべてをグループ選択** を選び、**編集 | グループ編集 | グループを並進移動(数値を指定)** を選んでください。zに、一番下の原子のz座標にマイナスをつけた値 (ここでは-0.2149)を入れ、他は変えずに **OK** を押してください。ここまでの手順を行うと以下の図のようになります。
- ファイル | ファイルをエクスポート** を選び、mol2形式で保存してください。ここでは「al2o3.mol2」とします。このファイルは後ほど接着面の計算で使用します。

一時ファイル (temp.wmm) 編集済み

N= 25 Al10O15 M= 509.81
 Marked Order: 9 - 10 - 4 - 2
 Marked Atom: X= 2.337027 Y= 1.349283 Z= 10.128847
 Length= 3.161804 Angle= 121.40673 Dihedral= 0 Lper= 0

rho= 3.529053 g/cm³
 a= 4.674054 b= 4.674054 c= 12.678764
 alpha= 90.00000 beta= 90.00000 gamma= 120.00000

| Elem | X | Y | Z |
|-------|---------|--------|---------|
| 1 Al | 0.0000 | 0.0000 | 1.6477 |
| 2 Al | 2.3370 | 1.3493 | 0.0000 |
| 3 Al | 2.3370 | 1.3493 | 3.7680 |
| 4 Al | 0.0000 | 2.6986 | 2.1203 |
| 5 Al | 0.0000 | 2.6986 | 5.8882 |
| 6 Al | 0.0000 | 0.0000 | 4.2406 |
| 7 Al | 0.0000 | 0.0000 | 8.0085 |
| 8 Al | 2.3370 | 1.3493 | 6.3609 |
| 9 Al | 2.3370 | 1.3493 | 10.1288 |
| 10 Al | 0.0000 | 2.6986 | 8.4812 |
| 11 O | -0.7153 | 1.4596 | 0.8238 |
| 12 O | -1.6217 | 2.8089 | 2.9441 |
| 13 O | 1.4306 | 2.6986 | 0.8238 |
| 14 O | 3.2434 | 0.0000 | 2.9441 |
| 15 O | -0.7153 | 3.9375 | 0.8238 |
| 16 O | 0.7153 | 1.2390 | 2.9441 |
| 17 O | 1.6217 | 0.1103 | 5.0644 |
| 18 O | 0.7153 | 1.4596 | 7.1847 |
| 19 O | 3.7877 | 1.3493 | 5.0644 |
| 20 O | -1.4306 | 2.6986 | 7.1847 |
| 21 O | 1.6217 | 2.5883 | 5.0644 |
| 22 O | 0.7153 | 3.9375 | 7.1847 |

表示形式 XYZ Z-Matrix

表示項目 最適化フラグ 電荷 名前 スピン密度

属性 番号 9 元素 Al

座標 2.337027 1.349283 10.128847

最適化フラグ 1 1 1

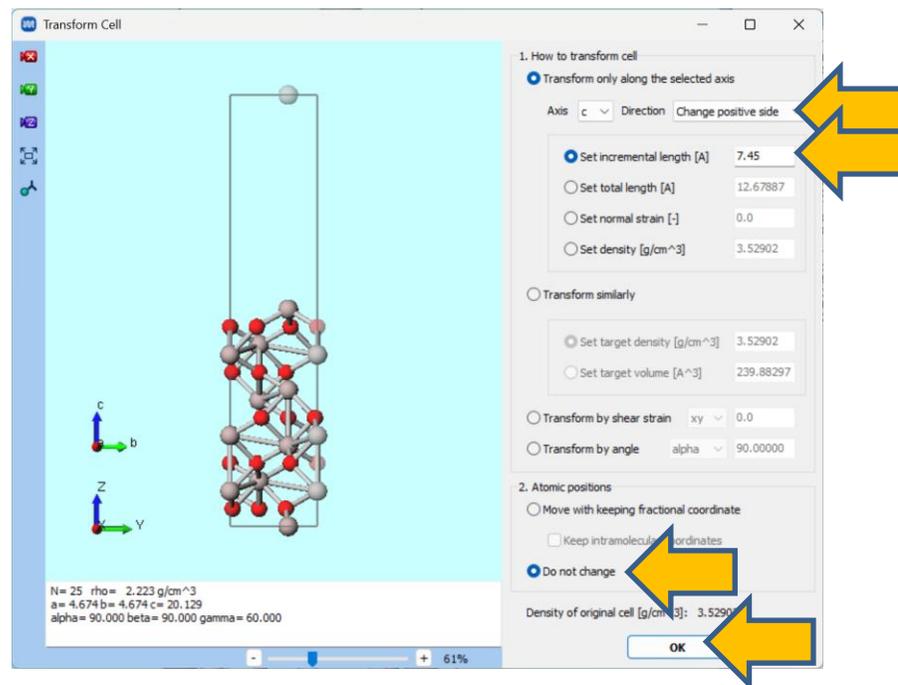
IV. 計算の実行 (Al₂O₃(0001)スラブ)

スラブ構造が求まった所で、この系の全エネルギーを計算します。

まず、作成したスラブ構造にz方向で孤立した系を作成するため、任意厚みの真空層を用意します。ここでは真空層を計算コストも勘案して10 Åとします。

1. **編集 | セル作成/編集 | セルを変形** を選択します。
2. **1. How to transform cell** の **Set incremental length [A]** に「7.45」（先ほど真空層2.55の構造を作っているので、10-2.55=7.45だけc軸の長さを増やす）を入力します。
3. **2. Atomic positions** で、**Do not change** にチェックを入れます。
4. **1. How to transform cell**に戻りAxis c の隣にある**Direction**で「Change positive side」を選ぶ。
5. 最後に **OK** を押します。

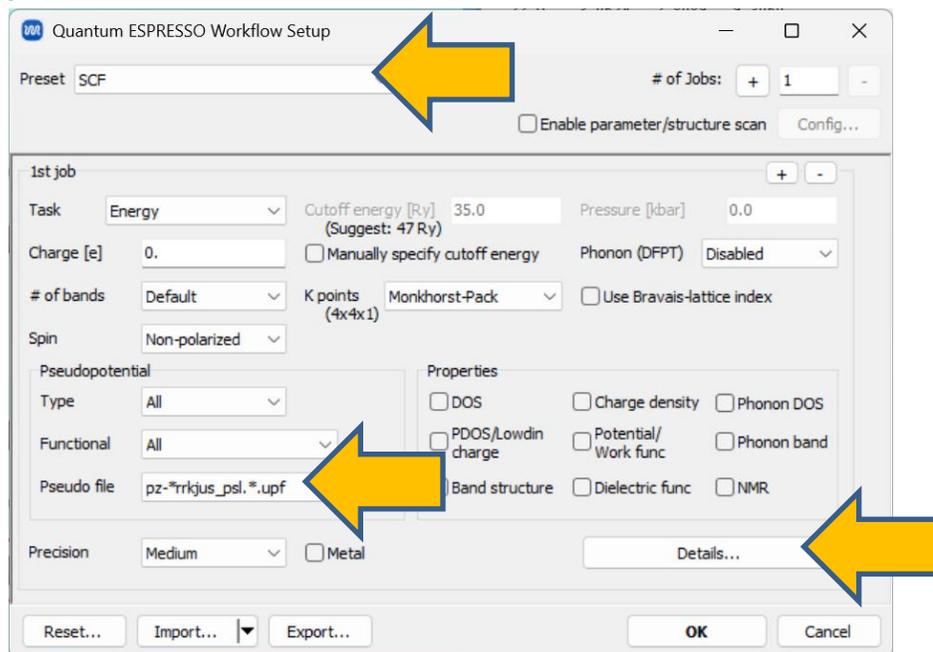
これで真空層10 Åのスラブ構造が完成しました。



IV. 計算の実行 (Al₂O₃(0001)スラブ)

続いてSCF計算を実施します。

6. **ワークフローの設定のボタン** をクリックします。**継続ジョブを実行しますか**にはいいえを選択し、**プリミティブセルに変換しますか**にもいいえを選択します。Quantum ESPRESSO Workflow Setupのポップアップメニューが開きます。
7. **Preset** を「SCF」に変更してください。
8. **Pseudo file**に「pz-*rrkjus_psl.*.upf」が選ばれていることを確認してください。
9. **Details**をクリックします。

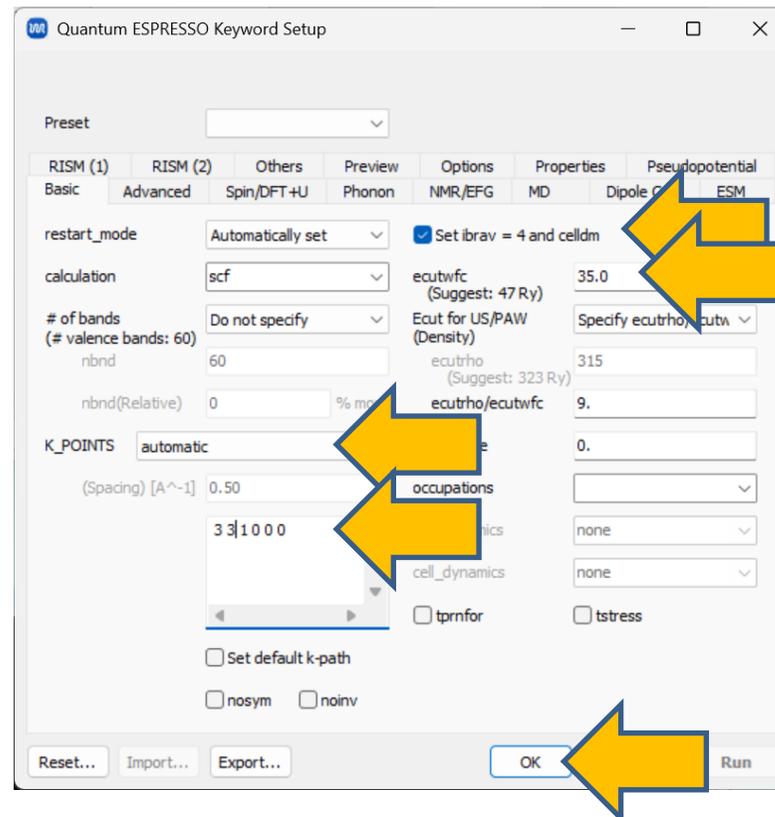


IV. 計算の実行 (Al₂O₃(0001)スラブ)

10. **Details** を押し、**Set ibrav = 4 and celldm** にチェックを入れ、下の**ecutwfc**は「35」としてください。

11. **K_POINTS** は**automatic**とし「3 3 1 0 0 0」と書換えます。

12. 最後に **OK** を押します。Workflow Setup画面に移行するのでそこで再度**OK**を押すことで計算実行します。



IV. 計算の実行 (Al₂O₃(0001)スラブ)

結果は下図 ログの表示 から見る事ができます。ファイルはpw.pwoutを選択します



ログの中で最後に書かれた total energy の行が求めたいスラブの全エネルギー (参考: ここでは-561.15151424 Ry) となります。

接着エネルギーの計算に用いるのでメモしておいてください。

```
highest occupied level (ev):      3.0097
! total energy                    = -561.15151424 Ry
  estimated scf accuracy          < 3.1E-09 Ry

The total energy is the sum of the following terms:
one-electron contribution = -3928.19576665 Ry
hartree contribution      = 2030.34074537 Ry
xc contribution           = -164.43968574 Ry
ewald contribution        = 1501.14319278 Ry

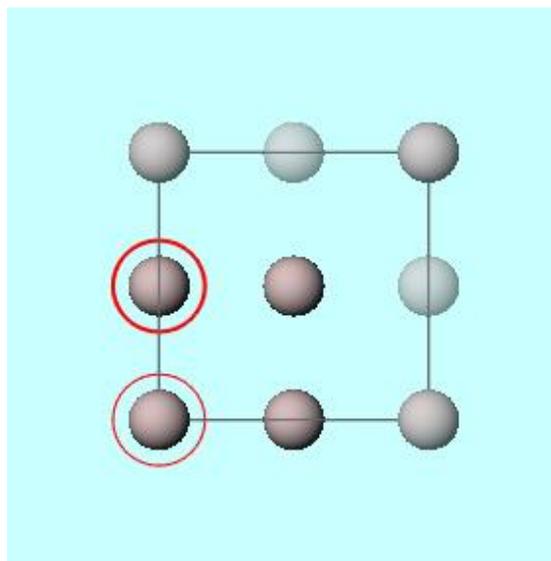
convergence has been achieved in 21 iterations

writing all to output data dir .\wm.save\
```

V. AI (111) スラブの作成

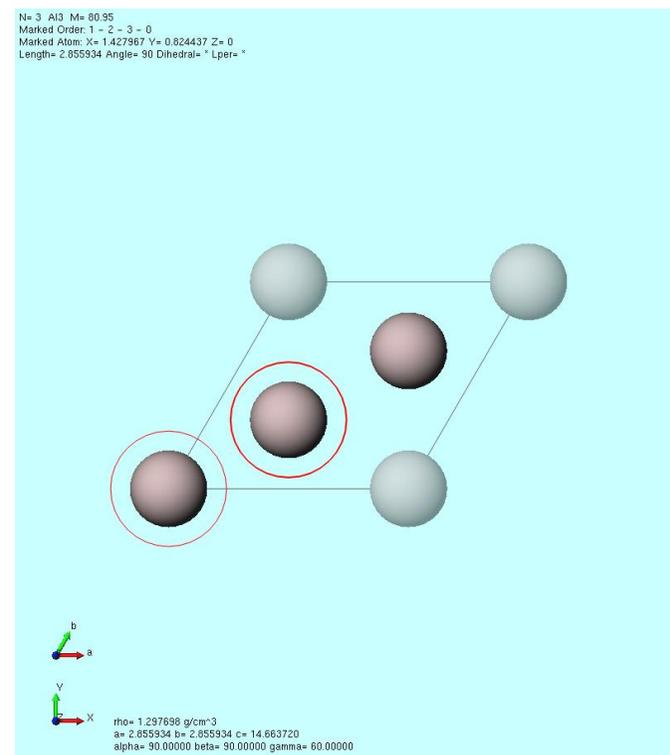
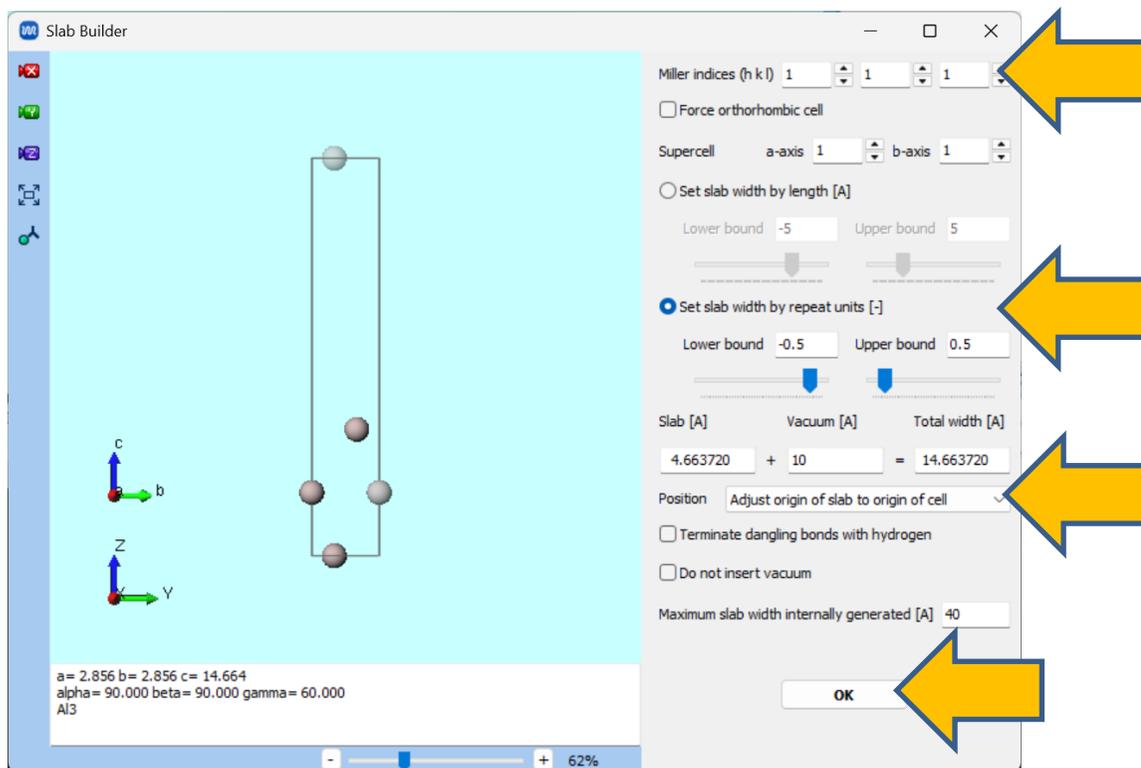
ここではAI(111)の $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 構造のスラブを作成します。

1. **ファイル | インポート | Samplesファイル** から「al.cif」を選びます。「現在の内容を破棄して～」のダイアログが出ますので、**破棄して読み込み** を選択してください。すると下図のようなコンベンショナルセルが表示されます。



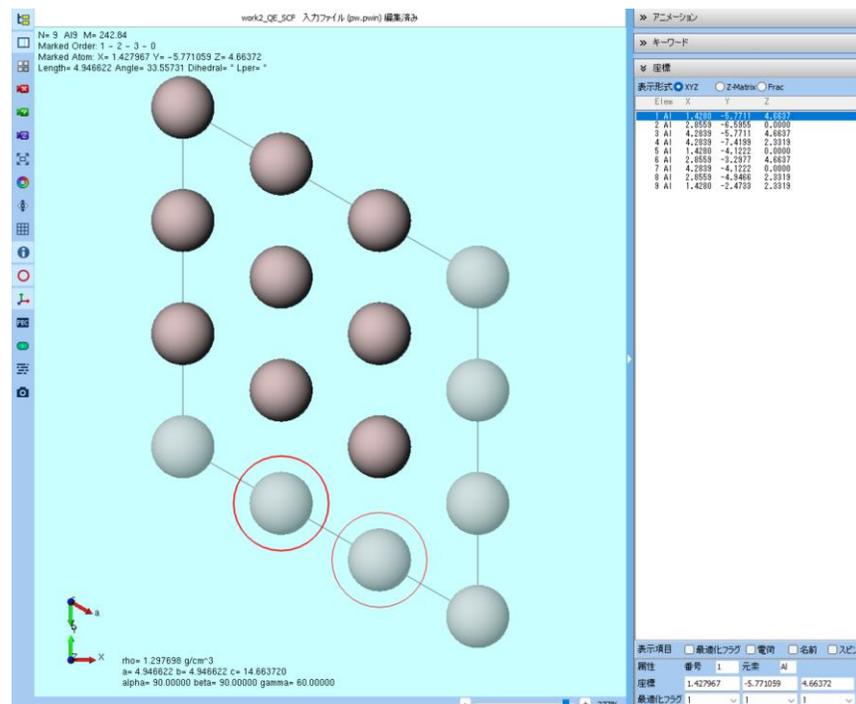
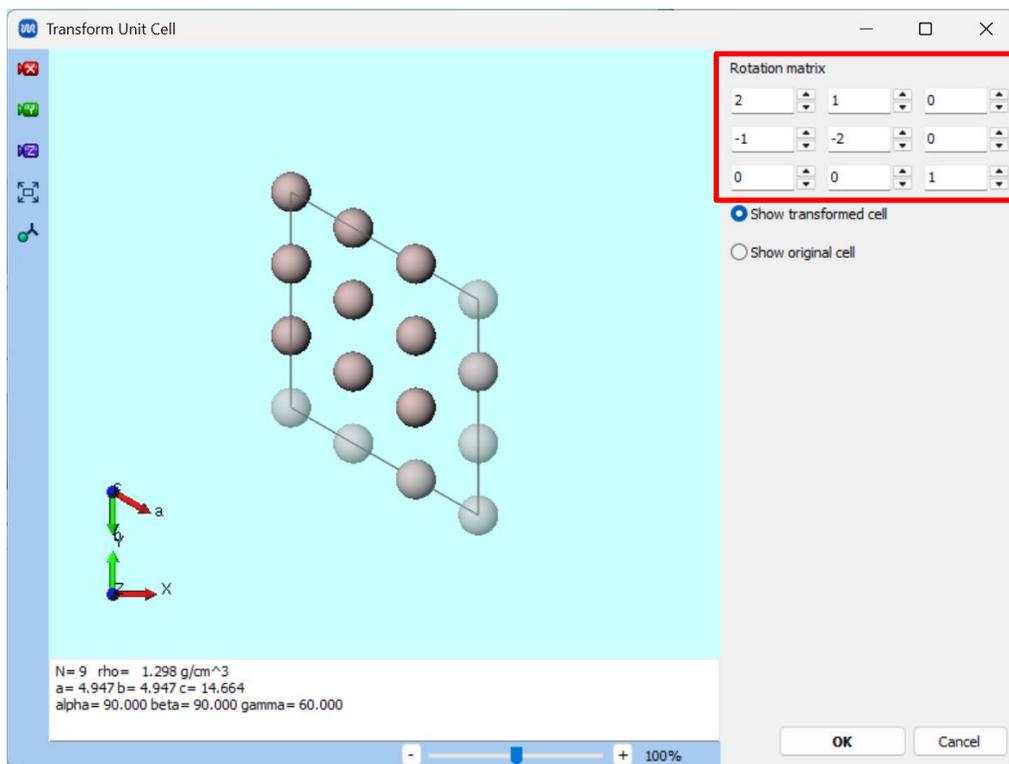
V. Al (111) スラブの作成

2. **固体 | スラブを作成** を選択します。Slab Builderが立ち上がるので、Miller indices(h k l)に「1 1 1」を入力し、**Set slab width by repeat units [-]**を選択します。
3. **Position**はAdjust origin of slab to origin of cellを選択した後**OK**をクリックします。実行後は下右図のようになります。



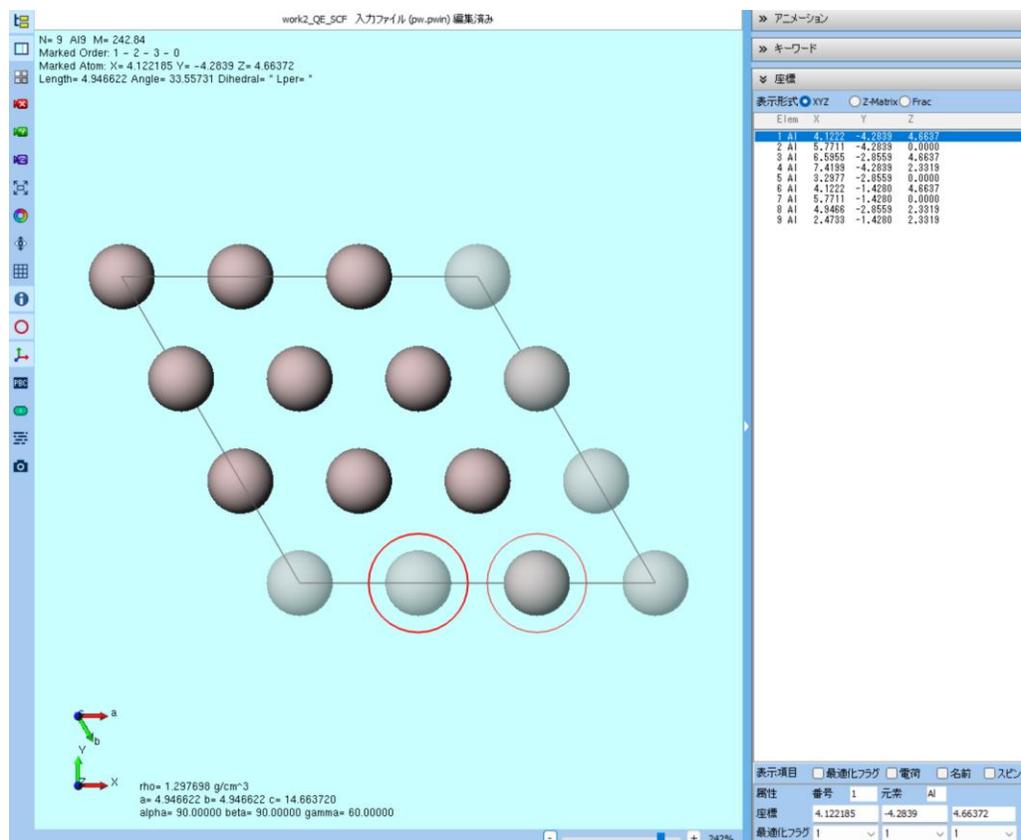
V. Al (111) スラブの作成

4. Z軸方向から表示 のボタンを押してください。
5. 固体 | 単位格子を変換 を選択します。ウィンドウ（左図）が立ち上がるので、**Rotation matrix**には図の通り値を入力し **OK** をクリックしてください。メインウィンドウには右図のように表示されます。



V. Al (111) スラブの作成

6. ユニットセルを30度回転させ、格子ベクトルの方向を Al_2O_3 のものと一致させます。まず **Z方向からの表示** のボタンを押します。次に **表示 | 回転 | 視線周りで回転(数値を指定)** を選択し、**Angle(CW) [deg]** に「-30」を入力して **OK** を押します。その後、**編集 | 座標軸の取り直し | カメラ座標系に設定** を押します。

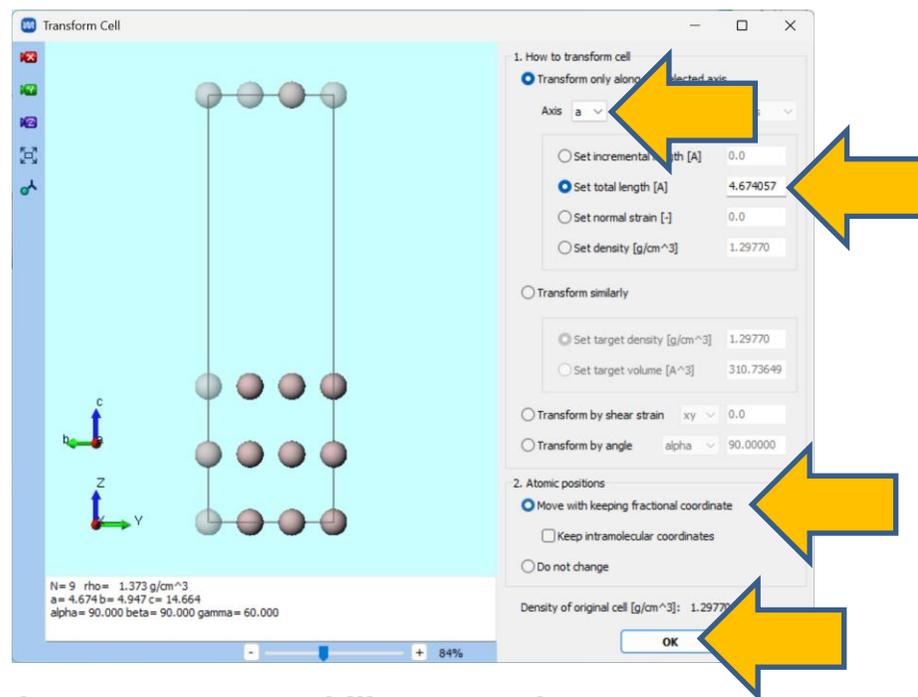


V. Al (111) スラブの作成

格子ベクトルのa, b方向の長さを Al_2O_3 と揃え、それに合わせてc軸方向の長さも変更します。

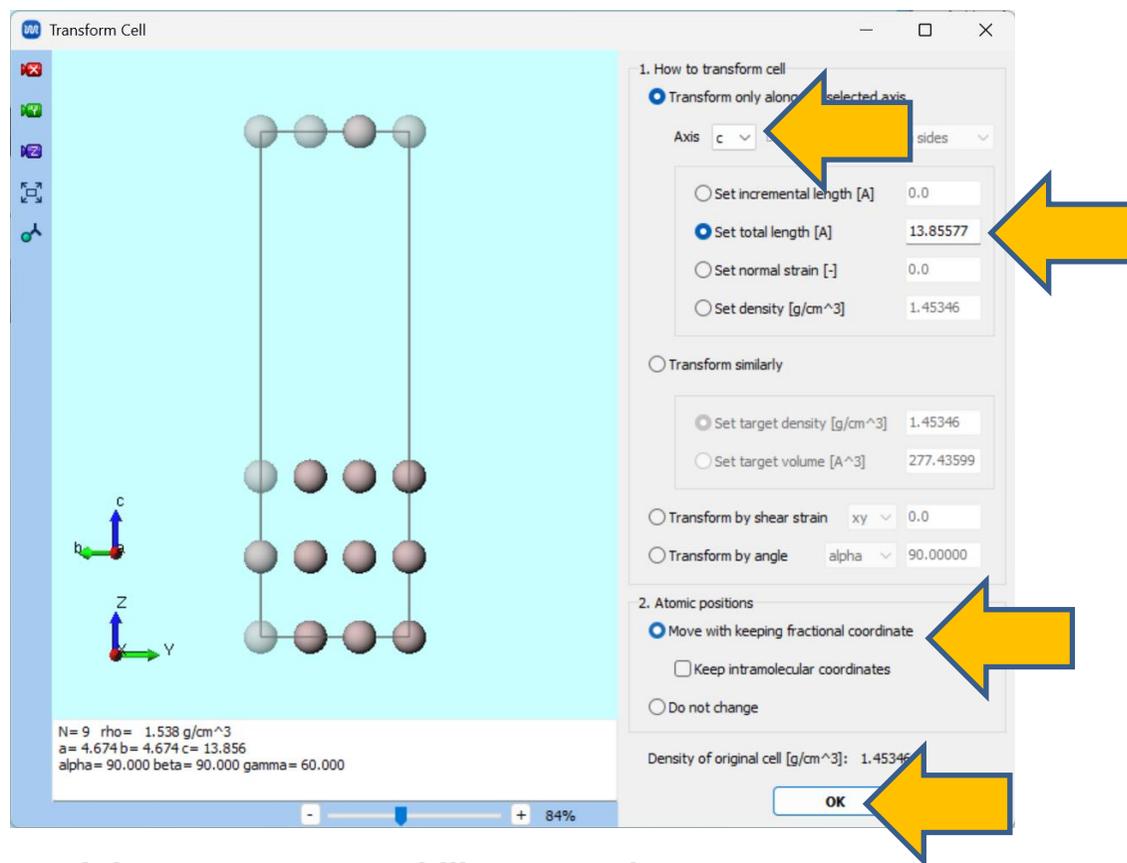
7. **編集 | セルを作成/編集 | セルを変形** を選択します。

8. **Axis** に「a」を選択し **Set total length [A]** に「4.674057」（ Al_2O_3 のa,b方向の長さ）を入力します。今回は原子位置を縮尺させたいので、**2. Atomic positions** は **Move with keeping fractional coordinate** から変えません。最後に **OK** を押します。同様の事をb軸に対して繰り返します。



V. AI (111) スラブの作成

9. c軸方向にも縮小させます。a,b方向は $4.674057/4.946621=0.944899$ 倍に縮小されているので、同じ倍率でc方向も縮小させます。上記 2. と同様の手順で、**Axis**に「c」を選択し、**Set total length [A]**に「13.85577」(= $14.663762*0.944899$)を入力し、**OK**を押す。



V. Al (111) スラブの作成

Al/Al₂O₃/Al構造の作成に備えて、真空層2.55 Åを持つAlスラブ構造2つを作成、保存します。一番上の原子のz座標が4.406756 Åであるため、z軸方向のセルの長さを6.956756 Åとします。

10. **編集 | セルを作成/編集 | セルを變形** を選択します。

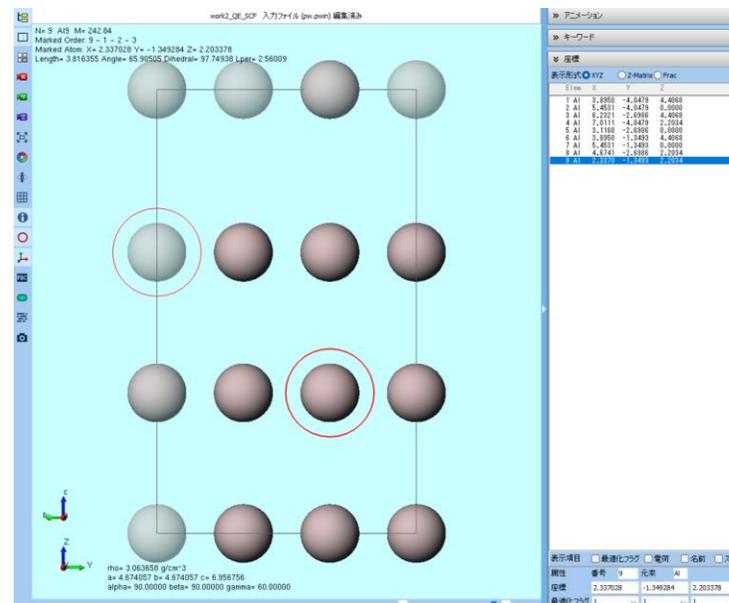
11. **1. How to transform cell** において、**Axis** に「c」を選択し **Set total length [Å]** に「6.956756」を入力します。

12. **2. Atomic positions** で、**Do not change** にチェックを入れます。

13. **1. How to transform cell** に戻り**Axis c** の隣にある **Direction** で「Change positive side」を選んでください。

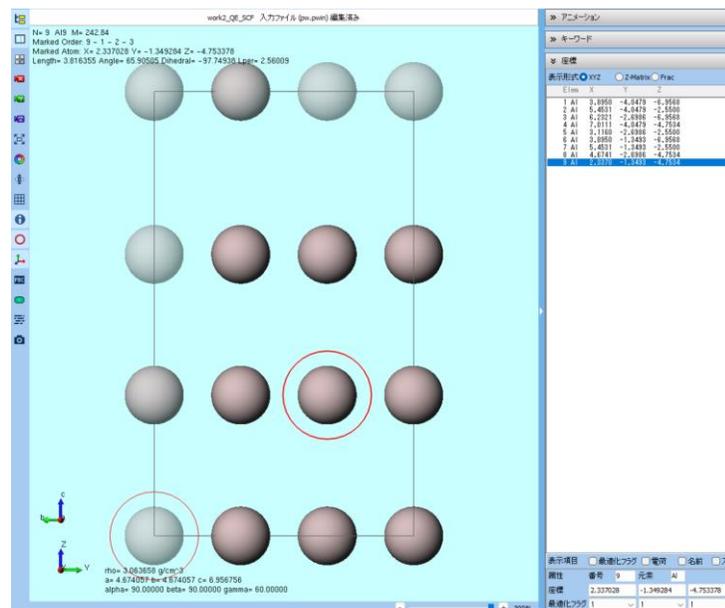
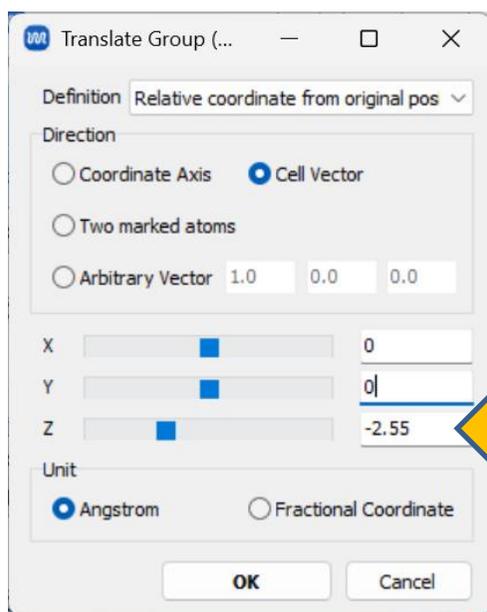
14. **OK** を押します。右図の構造ができます。

14. **ファイル | ファイルをエクスポート** を選び、mol2形式で保存します。ここでは「al111.mol2」とします。



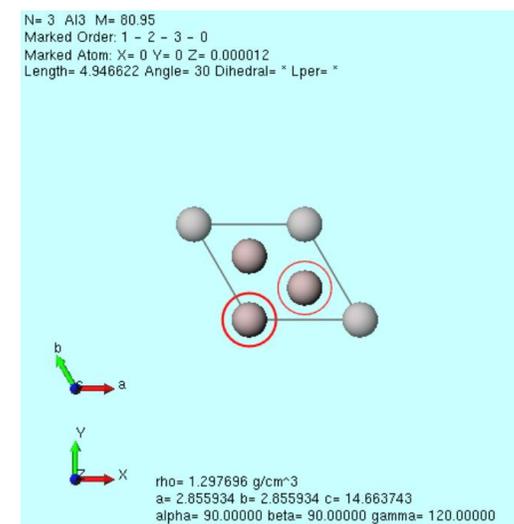
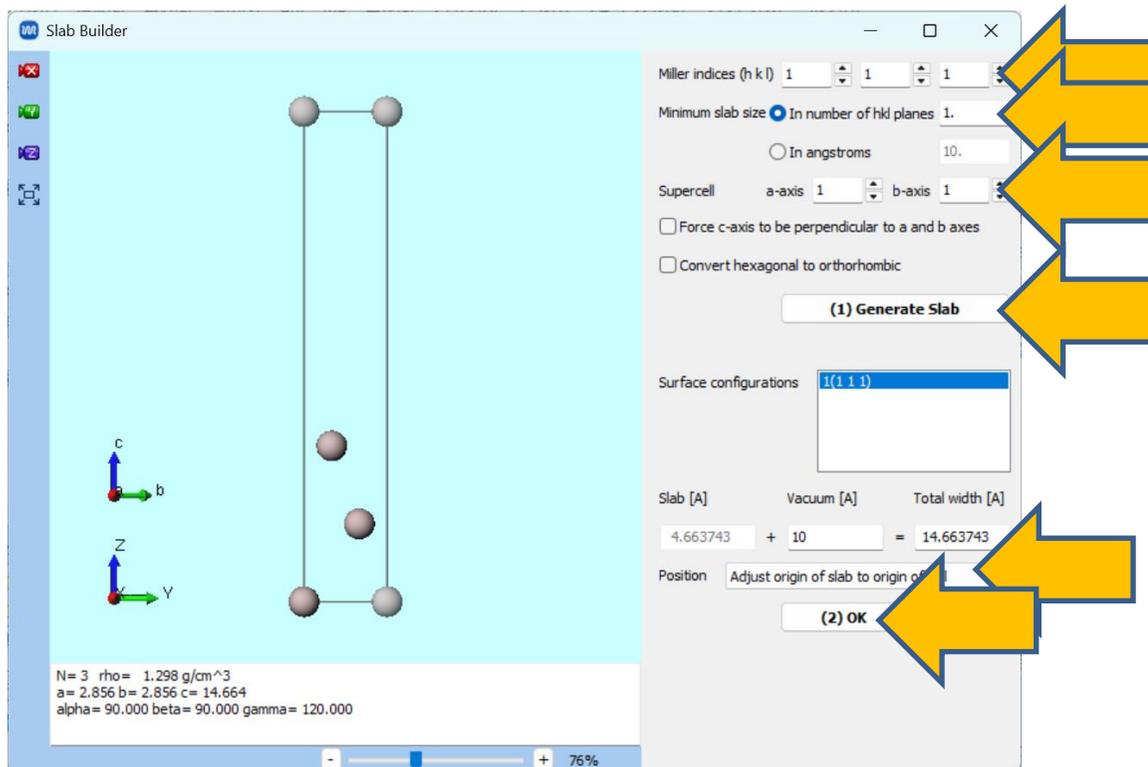
V. Al (111) スラブの作成

15. 編集 | 座標を反転/キラリティ | Z軸方向に座標を反転 を選択します
16. 選択 | すべてをグループ選択 で全原子を選択
17. 編集 | グループ編集 | グループを並進移動 (数値を指定) でz方向に「-2.55」を入力します
18. OKを押します。右下図の構造ができます。
19. ファイル | ファイルをエクスポート を選び、mol2形式で保存します。ここでは「al111-2.mol2」とします。



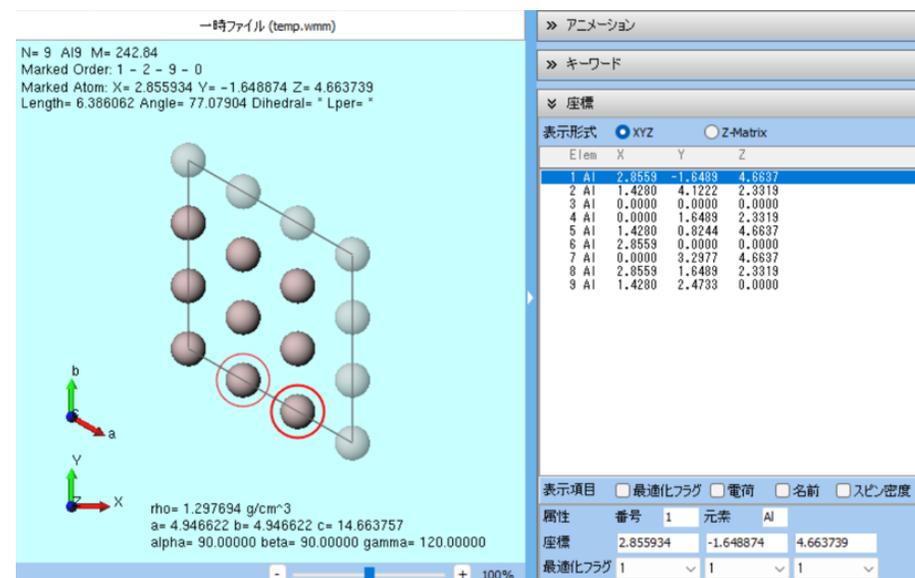
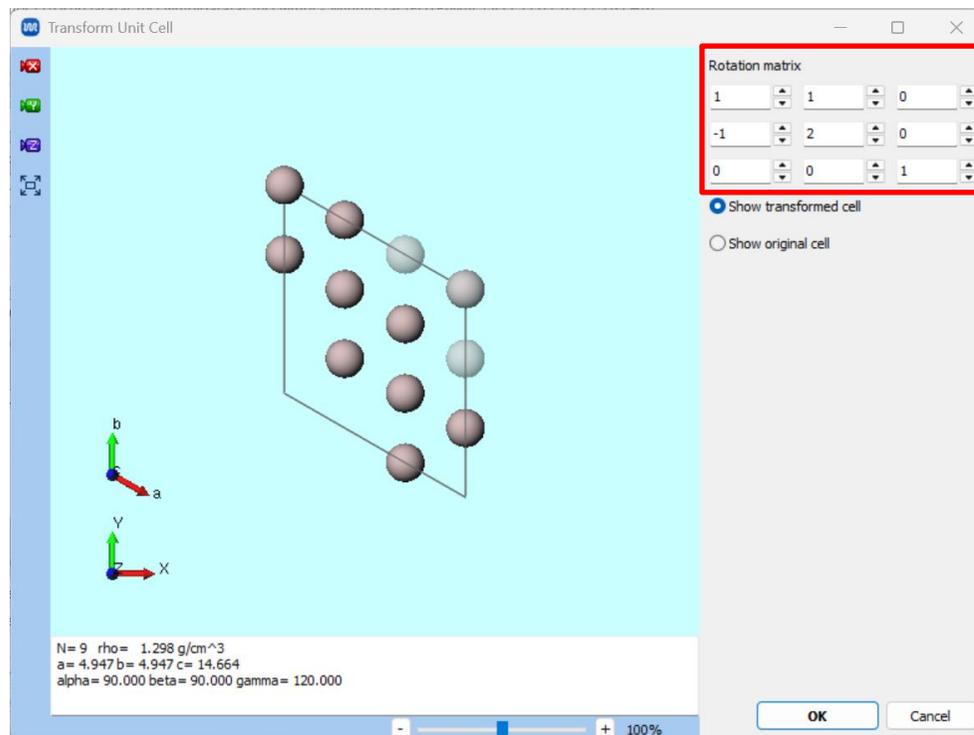
V. AI (111) スラブの作成

2. **固体 | スラブを作成** を選択します。Slab Builderが立ち上がるので、**Miller indices(h k l)** に1 1 1を入力、**Minimum slab size** の **In number of hkl planes** に「1」を入力、Supercellの**a-axis**に「1」、**b-axis**に「1」を入力し、**(1) Generate Slab** を押します。その後、**Position**に **Adjust origin of slab to origin of cell** を選択し **(2) OK** を押す。実行後は下右図のようになります。



V. Al (111) スラブの作成

3. Z軸方向から表示 のボタンを押してください。
4. 固体 | 単位格子を変換 を選択します。ウィンドウ（左図）が立ち上がるので、図の通りに数字を入力し **OK** をクリックしてください。右図のように表示されます。

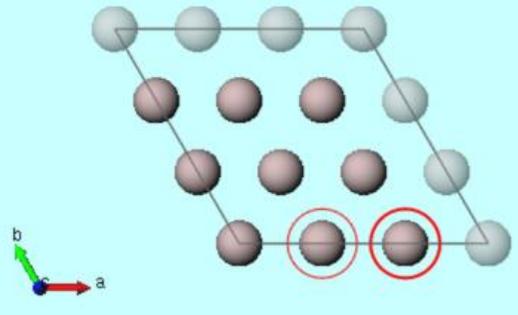


V. Al (111) スラブの作成

5. ユニットセルを30度回転させ、格子ベクトルの方向を Al_2O_3 のものと一致させます。まず、念のため **Z方向からの表示** のボタンを押します。次に **表示 | 回転 | 視線周りで回転(数値を指定)** を選択し、**Angle(CW) [deg]** に「-30」を入力して **OK** を押します。その後、**編集 | 座標軸の取り直し | カメラ座標系に設定** を押します。

一時ファイル (temp.wmm) 編集済み

N= 9 Al9 M= 242.84
 Marked Order: 1 - 2 - 9 - 0
 Marked Atom: X= 3.297748 Y= 0 Z= 4.663739
 Length= 6.386062 Angle= 77.07904 Dihedral= * Lper= *



rho= 1.297694 g/cm³
 a= 4.946622 b= 4.946622 c= 14.663757
 alpha= 90.00000 beta= 90.00000 gamma= 120.00000

表示形式 XYZ Z-Matrix

| Elem | X | Y | Z |
|------|---------|--------|--------|
| 1 Al | 3.2977 | 0.0000 | 4.6637 |
| 2 Al | -0.8244 | 4.2839 | 2.3319 |
| 3 Al | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 |
| 4 Al | -0.8244 | 1.4280 | 2.3319 |
| 5 Al | 0.8244 | 1.4280 | 4.6637 |
| 6 Al | 2.4733 | 1.4280 | 0.0000 |
| 7 Al | -1.6489 | 2.8559 | 4.6637 |
| 8 Al | 1.6489 | 2.8559 | 2.3319 |
| 9 Al | 0.0000 | 2.8559 | 0.0000 |

表示項目 最適化フラグ 電荷 名前 スピン密度

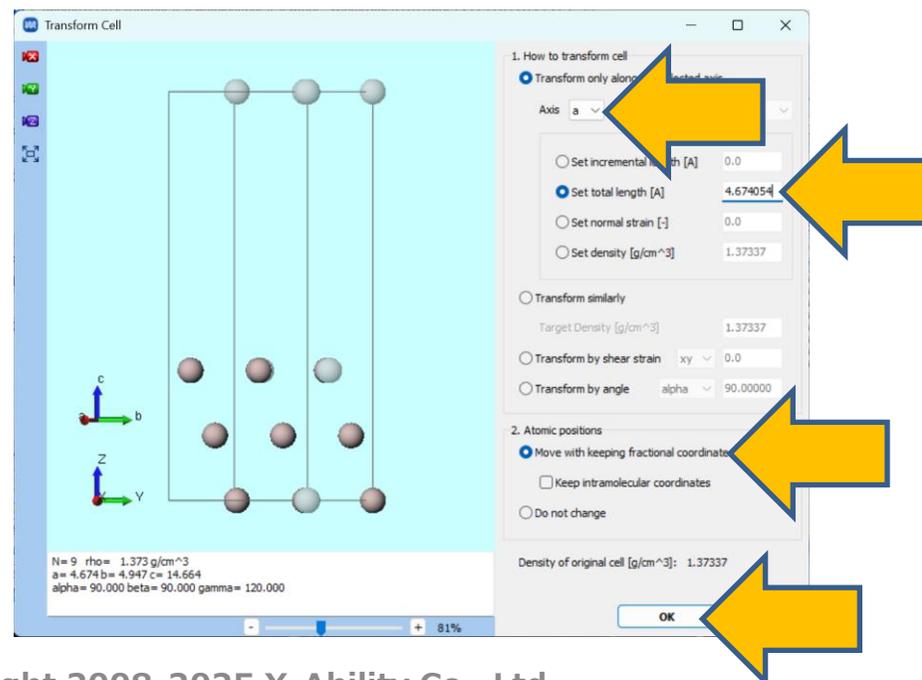
| 属性 | 番号 | 1 | 元素 | Al |
|--------|----|----------|----|----------|
| 座標 | | 3.297748 | 0 | 4.663739 |
| 最適化フラグ | | 1 | 1 | 1 |

V. Al (111) スラブの作成

格子ベクトルのa, b方向の長さをAl₂O₃のものと揃え、それに合わせてc軸方向の長さも変更します。

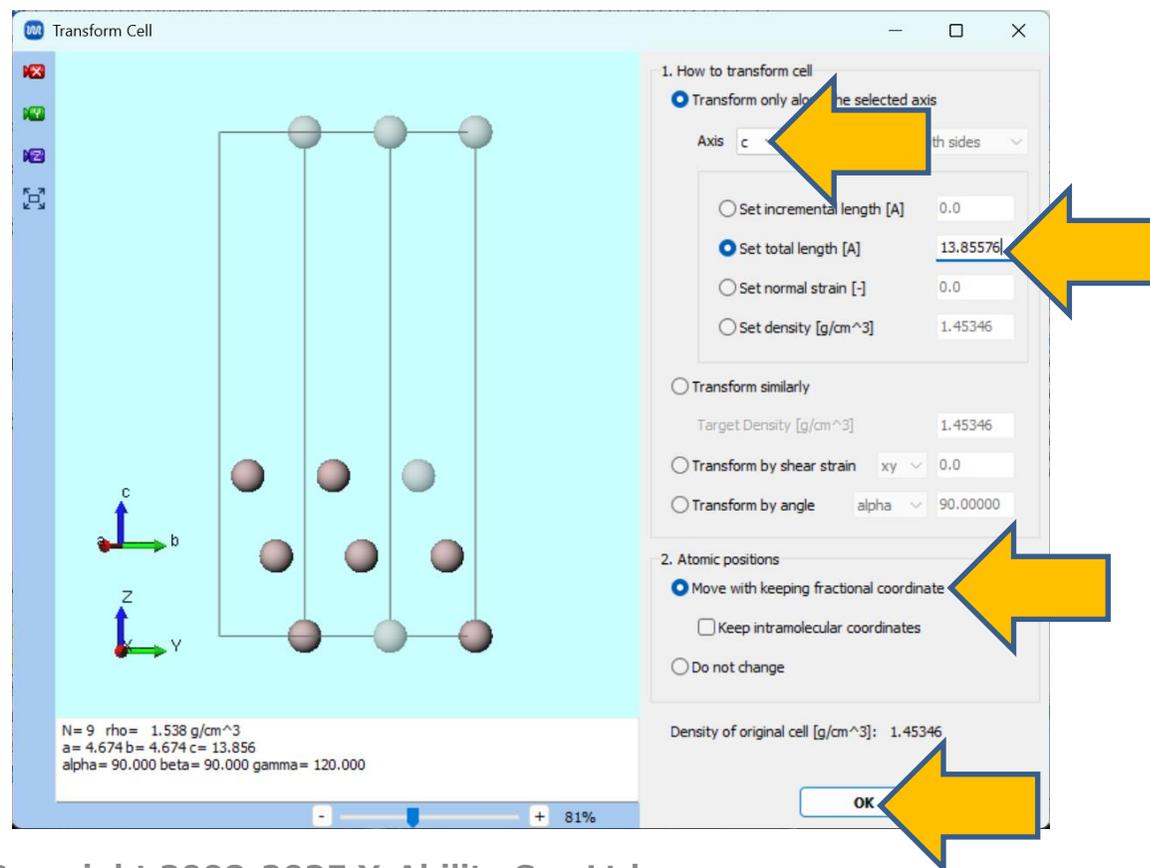
6. **編集 | セルを作成/編集 | セルを变形** を選択します。

7. **Axis** にaを選択し **Set total length [A]** に「4.674054」（Al₂O₃のa,b方向の長さ）を入力します。今回は原子位置を縮尺させたいので、**2. Atomic positions** は **Move with keeping fractional coordinate** から変えません。最後に **OK** を押します。同様の事をb軸に対して繰り返します。



V. Al (111) スラブの作成

8. c軸方向にも縮小させます。a,b方向は $4.674054/4.946621=0.944898$ 倍に縮小されているので、同じ倍率でc方向も縮小させます。上記 2. と同様の手順で、Axisにcを選択し、**Set total length [A]** に「13.85576」(= $14.66376*0.944898$)を入力し、**OK** を押す。



V. Al (111) スラブの作成

Al/Al₂O₃/Al構造の作成に備えて、真空層2.55 Åを持つAlスラブ構造2つを作成、保存します。一番上の原子のz座標が4.4068 Åであるため、z軸方向のセルの長さは6.9568 Åとなります。

9. **編集 | セルを作成/編集 | セルを变形** を選択します。

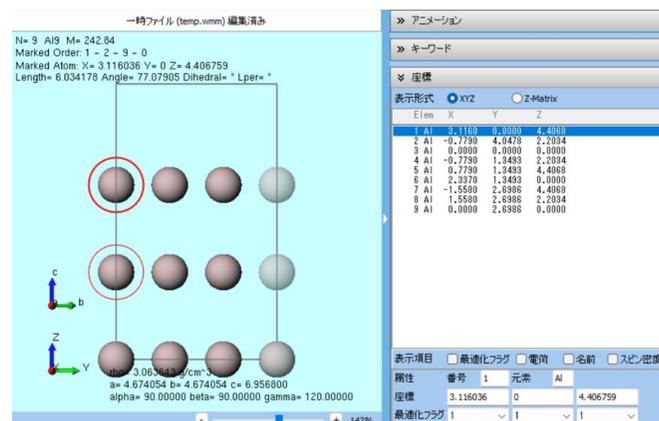
10. **1. How to transform cell** において、**Axis** に「c」を選択し **Set total length [Å]** に「6.9568」を入力します。

11. **2. Atomic positions** で、**Do not change** にチェックを入れます。

12. **1. How to transform cell** に戻りAxis c の隣にある **Direction** で **Change positive side** を選んでください。

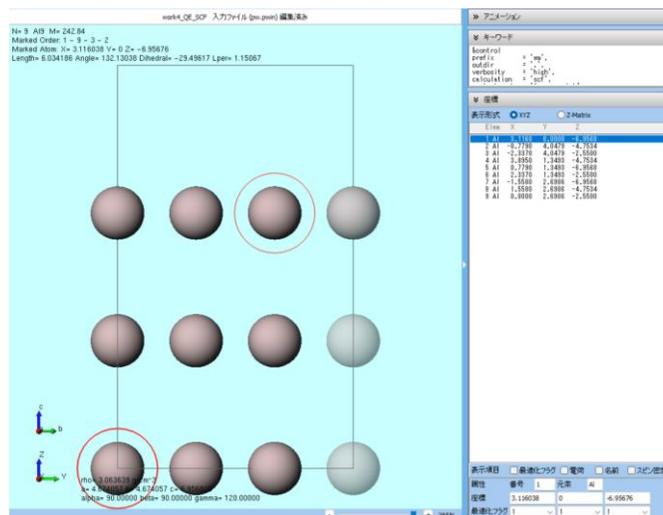
13. **OK** を押します。下図の構造ができます。

14. **ファイル | ファイルをエクスポート** を選び、mol2形式で保存します。ここでは「al111.mol2」とします。



V. AI (111) スラブの作成

15. 編集 | 座標を反転/キラリティ | Z軸方向に座標を反転 を選択します
16. 選択 | すべてをグループ選択 で全原子を選択
17. 編集 | グループ編集 | グループを並進移動 (数値を指定) でz方向に「-2.55」を入力します
18. OKを押します。下図の構造ができます。
19. ファイル | ファイルをエクスポート を選び、mol2形式で保存します。ここでは「al111-2.mol2」とします。

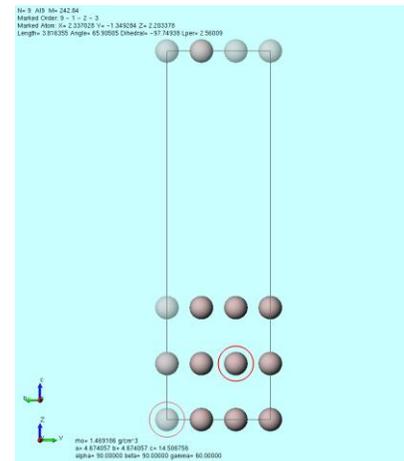
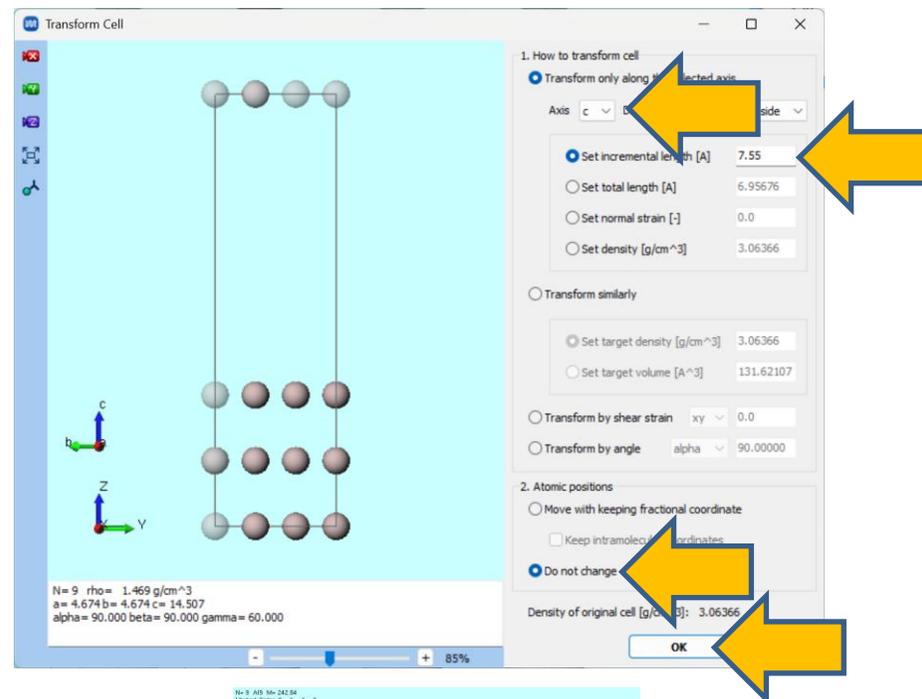


VI. 計算の実行 (Al(111)スラブ)

接着エネルギーの計算で、Al(111)表面構造のスラブの全エネルギーが必要となるため、ここで計算を行います。

まず、先のAl₂O₃スラブと同様の理由で真空層を10 Åにするため、セルを変形します。

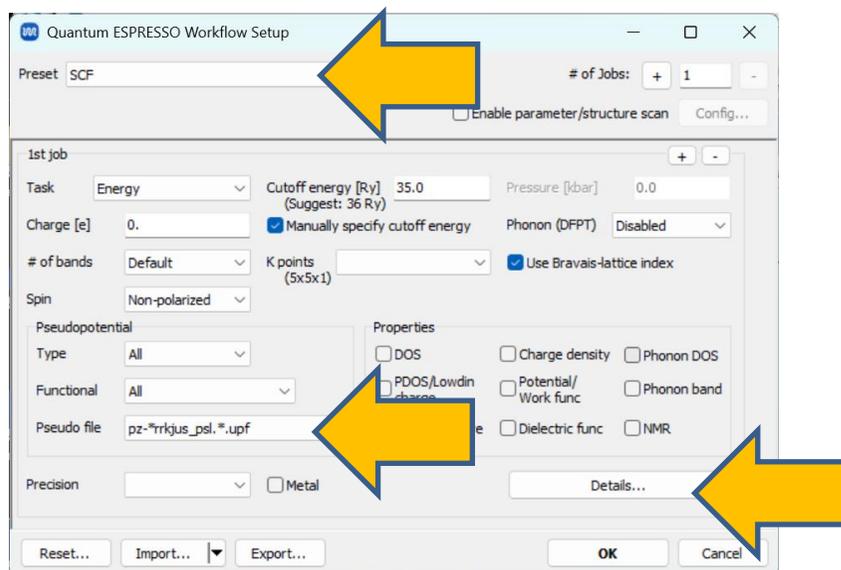
1. **編集 | セルを作成/編集 | セルを変形** を選択します。
2. **1. How to transform cell** において、**Axis** に「c」を選択し **Set incremental length [A]** に「7.45」（先ほど真空層2.55の構造を作っているため、 $10 - 2.55 = 7.45$ だけc軸の長さを増やす）を入力します。
3. **2. Atomic positions** で、**Do not change** にチェックを入れます。
4. **1. How to transform cell** に戻り **Axis c** の隣にある **Direction** に **Change positive side** を選びます。
5. **OK** を押します。右図の構造ができます。



VI. 計算の実行 (Al(111)スラブ)

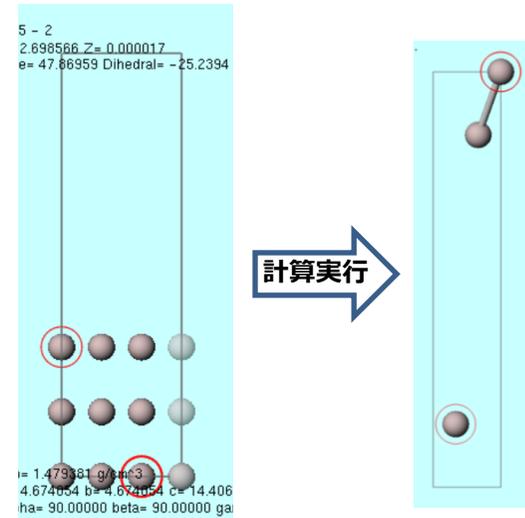
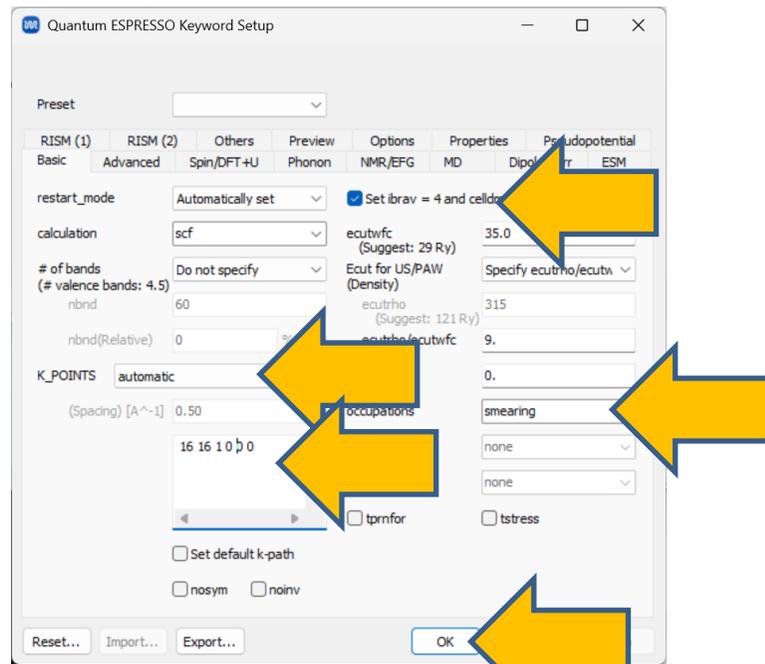
作成したスラブについてエネルギー計算を実行します。

6. ワークフローの設定のボタンを押すと、プリミティブセルに変換するかどうかを聞かれるので **はい** を選択します。(セルに3原子が含まれることになります。) その後 Quantum ESPRESSO Workflow Setupのポップアップメニューが開かれるので、Alが金属であることに注意し以下の手順で作業を行います。
7. **Preset** は「Scf」のままとします。
8. **Pseudo file** に「pz-*rrkjus_psl.*.upf」が選ばれていることを確認します。
9. **Details** をクリックします。



VI. 計算の実行 (AI(111)スラブ)

10. Set `ibrav = 4` and `celldm` にチェックを入れます。
11. `occupations` に「smearing」を選択します。
12. `K_POINTS` は「automatic」とし、2つ下の K点数とシフト値を記入する個所では「16 16 1 0 0 0」に書き換えてください。
13. 以上設定を終えたら、**OK** を押してDetailsから抜け出し、さらに **OK** を押します。そして **実行** を押して計算を開始します。



なお計算は、対称性が考慮され、これまで操作した構造の1/3サイズで等価な構造で行われます。(9原子 → 3原子)

VI. 計算の実行 (AI(111)スラブ)

結果は下図 ログの表示 から見る事ができます。ファイルはpw.pwoutを選択します



ログの中で最後に書かれた total energy の行が求めたいスラブの全エネルギー (参考: ここでは-16.40409377 Ry) となります。

接着エネルギーの計算に用いるのでメモしておいてください。

```
the Fermi energy is      2.3311 ev
! total energy           =      -16.40409377 Ry
  estimated scf accuracy <      0.00000009 Ry
  smearing contrib. (-TS) =      -0.00349592 Ry
  internal energy E=F+TS   =      -16.40059785 Ry

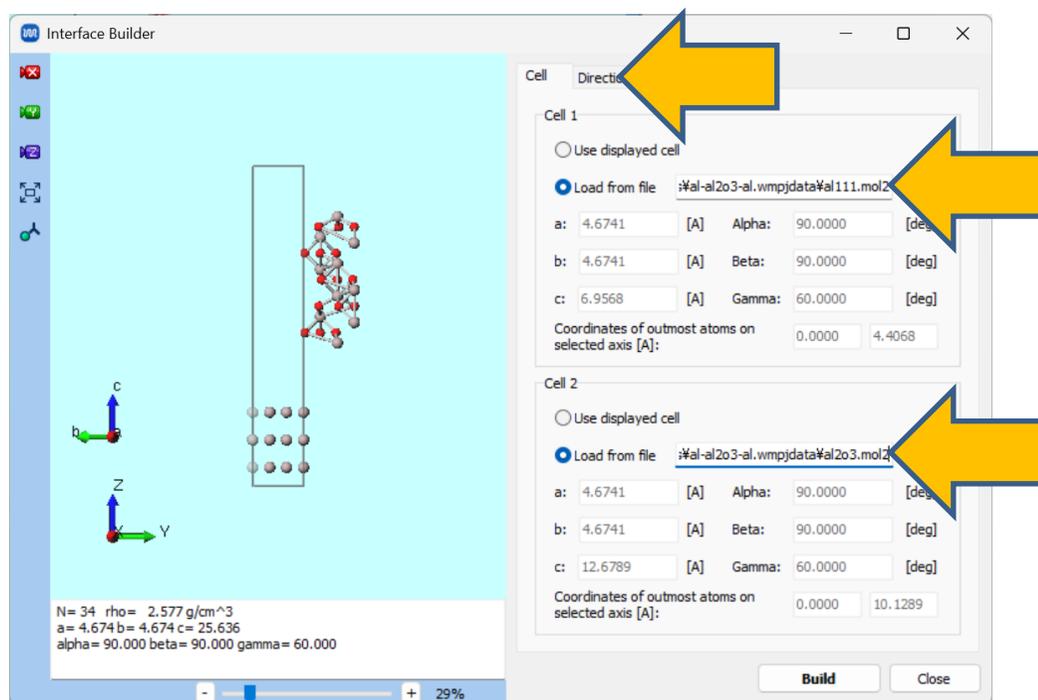
The total energy is F=E-TS. E is the sum of the following terms:
one-electron contribution =      -52.34341683 Ry
hartree contribution      =      28.83975677 Ry
xc contribution           =      -9.19910959 Ry
ewald contribution        =      16.30217181 Ry

convergence has been achieved in 11 iterations
```

VII. Al/Al₂O₃/Al 構造の作成

Al/Al₂O₃/Al構造を作成します。

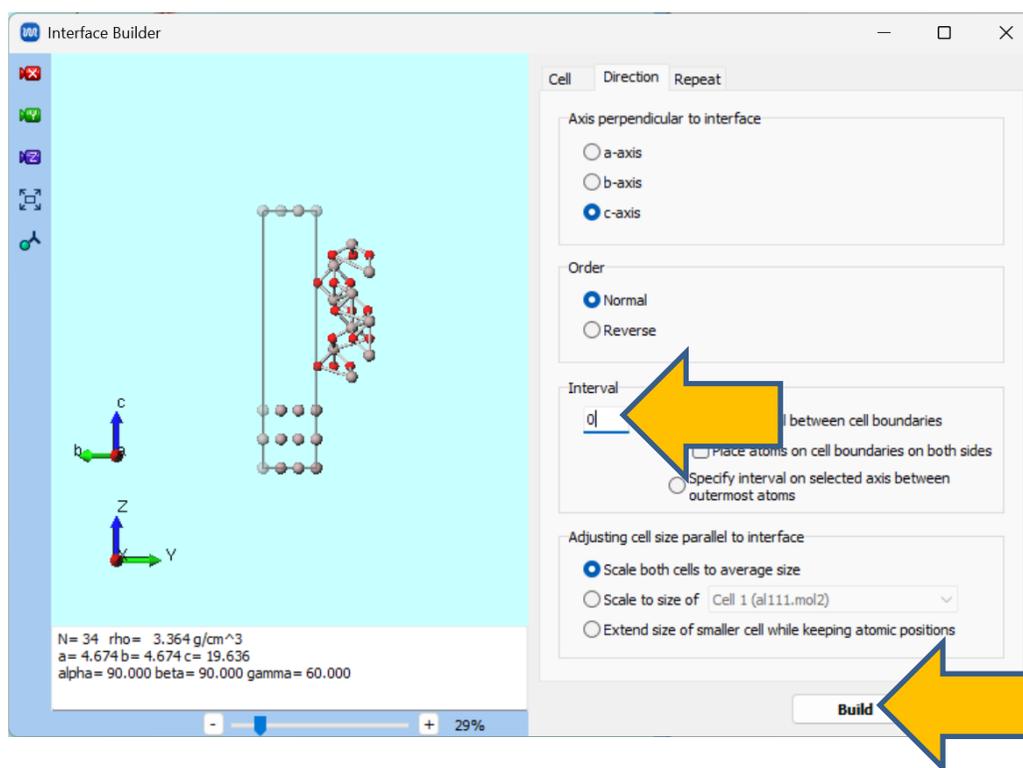
1. **MD | 界面ビルダ** を選択します。
2. **Cell 1** の **Load from file** に **V** で作成した「al111.mol2」を選択します。
3. **Cell 2** の **Load from file** に **III** で作成した「al2o3.mol2」を選択します。
4. 上部の **Direction** のタブを押します。



VII. Al/Al₂O₃/Al 構造の作成

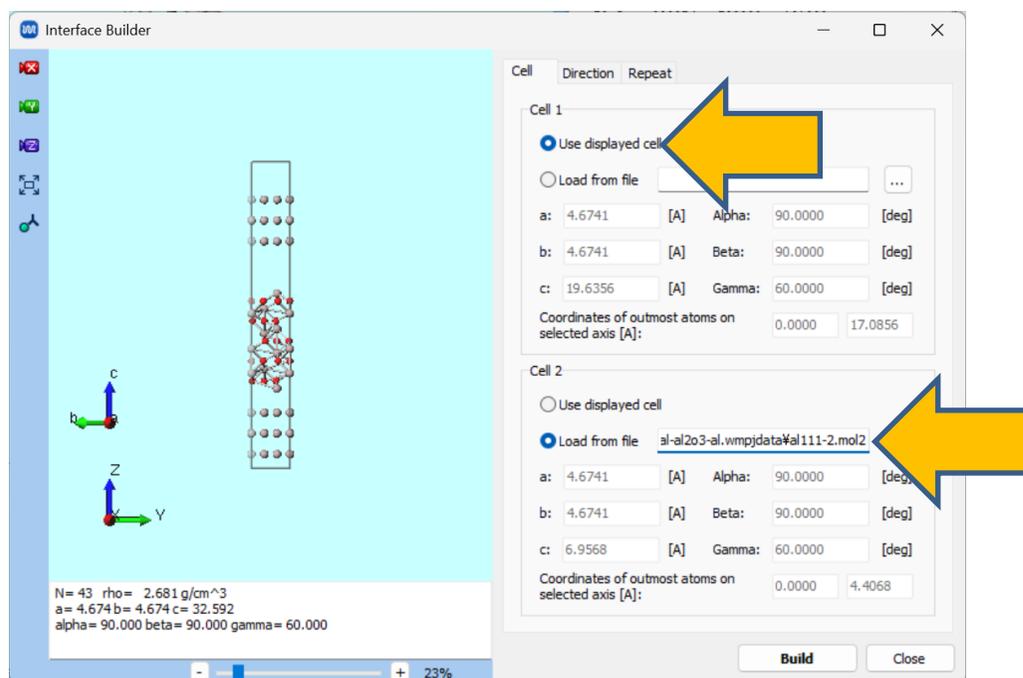
5. **Interval** に「0」 Aを指定します。

6. **Build** を押します。(「正常に系が作成されました。」というポップアップが表示されます)



VII. Al/Al₂O₃/Al 構造の作成

- 再び **MD | 界面ビルダ** を選択します。
- Cell 1** は **Use displayed cell** から変更を加えないようにします。
- Cell 2** の **Load from file** に **V** で作成した「al111-2.mol2」を選択します。
- 手順4.~6. を繰り返します。(「正常に系が作成されました。」というポップアップが表示されます)

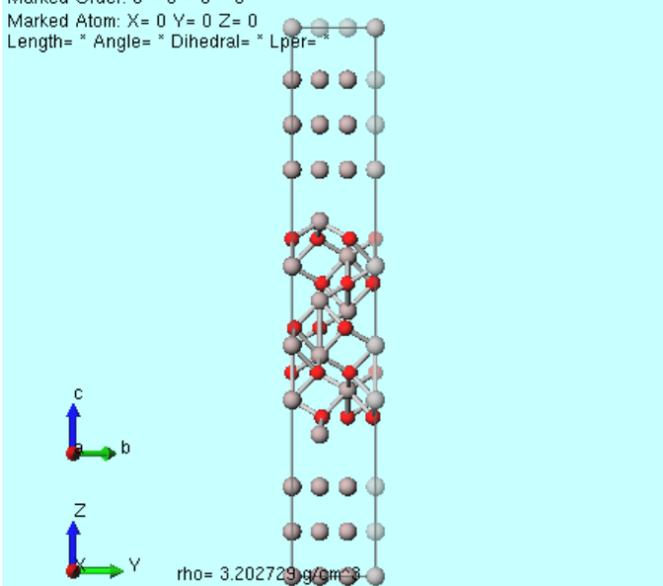


VII. Al/Al₂O₃/Al 構造の作成

ここまでの手順を終え、**X軸方向から表示** を押すと下図の構造ができます。

work4_QE_SCF 入力ファイル (pw.pwin) 編集済み

N= 43 Al28O15 M= 995.48
Marked Order: 0 - 0 - 0 - 0
Marked Atom: X= 0 Y= 0 Z= 0
Length= * Angle= * Dihedral= * Lper= *



rho= 3.20272990 m³
a= 4.706815 b= 4.706815 c= 26.901525
alpha= 90.00000 beta= 90.00000 gamma= 120.00000

41%

アニメーション

キーワード

座標

表示形式 XYZ Z-Matrix

| Elem | X | Y | Z |
|-------|---------|--------|---------|
| 1 Al | 3.1379 | 0.0000 | 4.4068 |
| 2 Al | -0.7845 | 4.0782 | 2.2034 |
| 3 Al | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 |
| 4 Al | -0.7845 | 1.3587 | 2.2034 |
| 5 Al | 0.7845 | 1.3587 | 4.4068 |
| 6 Al | 2.3534 | 1.3587 | 0.0000 |
| 7 Al | -1.5689 | 2.7175 | 4.4068 |
| 8 Al | 1.5689 | 2.7175 | 2.2034 |
| 9 Al | 0.0000 | 2.7175 | 0.0000 |
| 10 Al | 2.3534 | 1.3587 | 10.8366 |
| 11 Al | 0.0000 | 2.7175 | 9.1428 |
| 12 Al | 0.0000 | 2.7175 | 13.0226 |
| 13 Al | 0.0000 | 0.0000 | 11.3289 |
| 14 Al | 0.0000 | 0.0000 | 15.2087 |
| 15 Al | 2.3534 | 1.3587 | 13.5149 |
| 16 Al | 2.3534 | 1.3587 | 17.3947 |
| 17 Al | 0.0000 | 2.7175 | 15.7010 |
| 18 Al | 0.0000 | 0.0000 | 8.6505 |
| 19 Al | 2.3534 | 1.3587 | 6.9568 |
| 20 O | 1.6330 | 2.8285 | 9.9897 |
| 21 O | 3.0738 | 0.1110 | 12.1757 |
| 22 O | 1.4408 | 0.0000 | 9.9897 |
| 23 O | 0.9127 | 1.3587 | 12.1757 |

表示項目 最適化フラグ 電荷 名前 スピン密度

属性 番号 元素

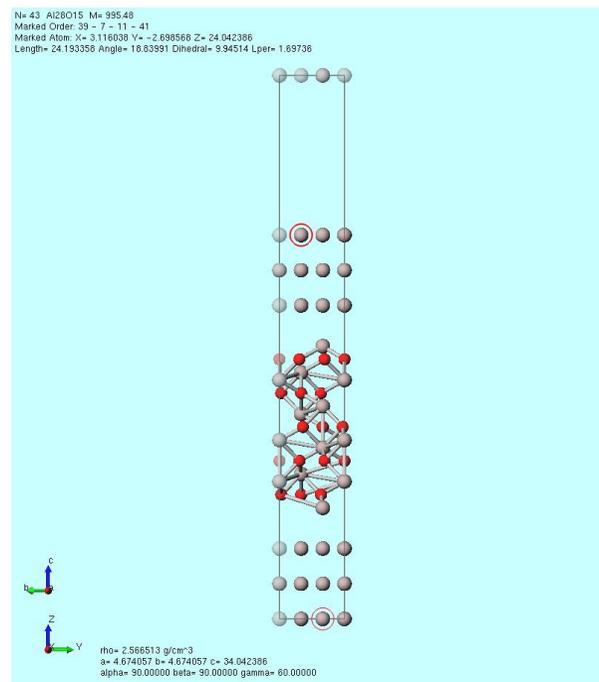
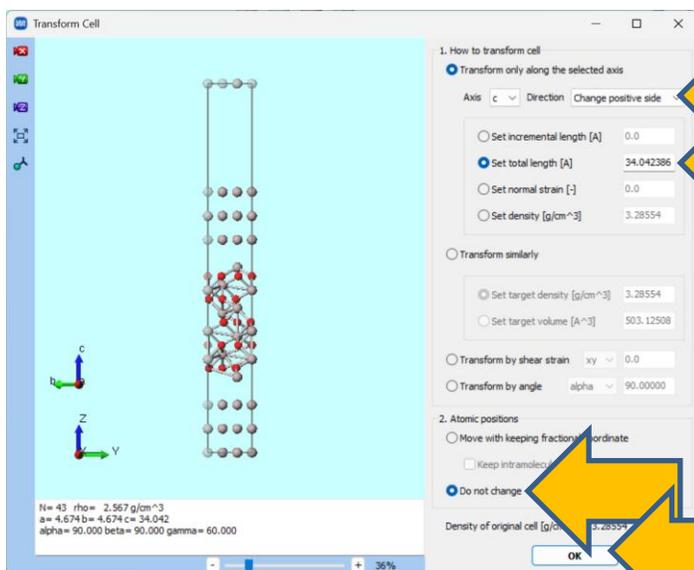
座標

最適化フラグ 1 1 1

VII. Al/Al₂O₃/Al 構造の作成

先のAl₂O₃スラブと同様の理由で真空層を10 Åにするため、セルを変形します。

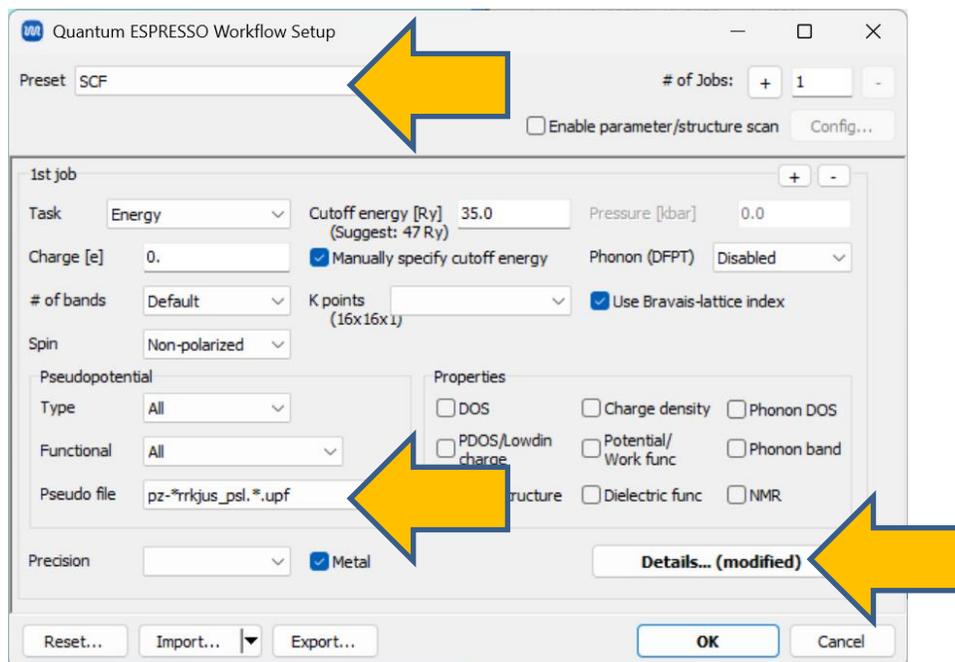
13. 編集 | セルの作成/編集 | セルの変形を選択し、**1. How to transform cell** において、**Axis** に「c」を選択し **Set total length [Å]** に「34.042386」を入力します。([原子の中で一番大きなz座標の値]+10により算出します。)
14. **2. Atomic positions** で、**Do not change** にチェックを入れます。
15. **1. How to transform cell** に戻りAxis c の隣にある **Direction** には「Change positive side」を選びます。
16. **OK** を押します。右図のようになります。



VIII. 計算の実行 (Al/Al₂O₃/Al 構造)

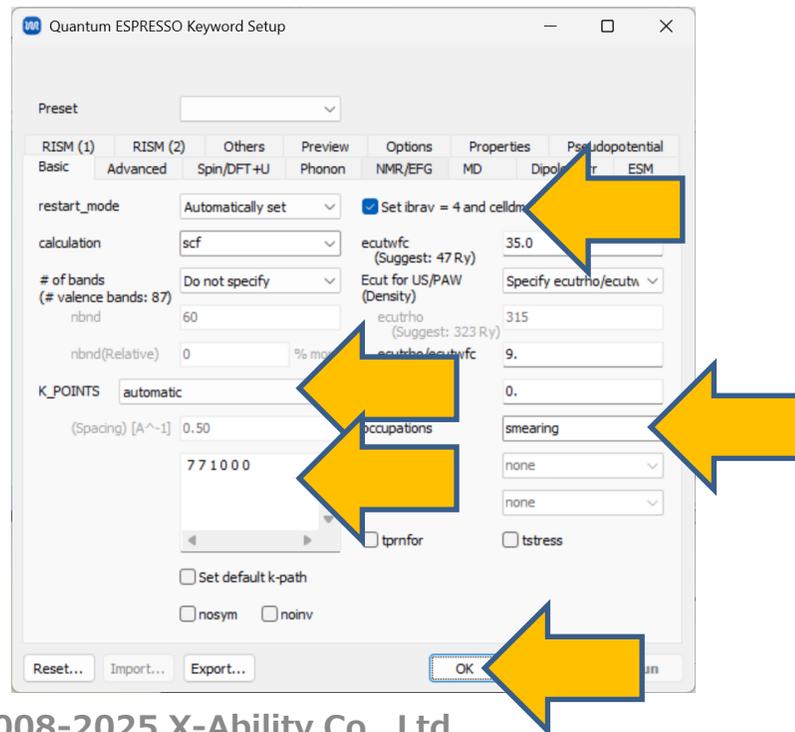
Al/Al₂O₃/Alの計算を行います。

1. ワークフローの設定のボタンを押すと「継続ジョブを実行しますか？」のポップアップが表示され「いいえ」を選択することで**Quantum ESPRESSO Workflow Setup** のポップアップメニューが開かれます。
2. **Preset** は「SCF」のままとします。
3. **Pseudo file** に「pz-*rrkjus_psl.*.upf」が選ばれていることを確認します。
4. **Details** をクリックします。



VIII. 計算の実行 (Al/Al₂O₃/Al 構造)

5. **Details** を押し、**Set ibrav = 4 and celldm** にチェックを入れます。
6. **occupations** に「smearing」を選択します。
7. **K_POINTS** は「automatic」とし、2つ下の **%KPOINTS_DENSITY%** と書かれた個所を「7 7 1 0 0 0」に書き換え、**occupations**は**smearing**のままにします。
8. 以上設定を終えたら、**OK** を押して **Details** から抜け出し、さらに **OK** を押します。そして **実行** を押して計算を開始します。



VIII. 計算の実行 (Al/Al₂O₃/Al 構造)

結果は下図 ログの表示 から見る事ができます。ファイルはpw.pwoutを選択します



ログの中で最後に書かれた total energy の行が求めたいスラブの全エネルギー (参考: ここでは-659.78060985 Ry) となります。

接着エネルギーの計算に用いるのでメモしておいてください。

```
the Fermi energy is      5.1857 ev
! total energy           = -659.78060985 Ry
estimated scf accuracy   <  0.00000001 Ry
smearing contrib. (-TS) = -0.03360001 Ry
internal energy E=F+TS   = -659.74700984 Ry

The total energy is F=E-TS. E is the sum of the following terms:
one-electron contribution = -10091.07600441 Ry
hartree contribution      =  5143.68228243 Ry
xc contribution           = -219.89848153 Ry
ewald contribution        =  4507.54519367 Ry

convergence has been achieved in  28 iterations
```

IX. 接着エネルギーの計算

ここまで計算した全エネルギーをまとめると下記のようになります。

| | 全エネルギー (Ry) |
|---------------------------------------|---------------|
| Al ₂ O ₃ スラブ | -561.15151424 |
| Al (111) スラブ | -16.40409377 |
| Al/Al ₂ O ₃ /Al | -659.78060985 |

接着エネルギーは下の式より計算できます。

$$\text{接着エネルギー} = (6 \times [\text{スラブAlの全エネルギー}] + [\text{スラブAl}_2\text{O}_3\text{の全エネルギー}] - [\text{Al/Al}_2\text{O}_3/\text{Al全エネルギー}]) / (2 \times [\text{セルの面積}])$$

係数の6は、Al₂O₃を挟む二つのAl(111)スラブは原子数1/3で計算されたことに由来し、係数2はAl₂O₃/Al(111)界面が系内に2つあることに由来しています。

計算の際には $1 \text{ Ry} = 2.179874 \times 10^{-18} \text{ J}$ である事にご注意ください。

IX. 接着エネルギーの計算

参考までに、前ページの計算式により接着エネルギーを計算すると、

$$1.18 \text{ J/m}^2$$

と求められます。

文献 D. J. Siegel et al., Phys. Rev. B **65** 085415 (2002) に記載された接着エネルギーは **1.14 J/m²** (fcc-stacking, Al-termination, unrelaxed, LDA) ですので今回の計算でよく再現できています。

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