winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO
仕事関数・表面エネルギー

V11.13.2

2025年9月24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

- 本チュートリアルでは、Pt(111)面が真空に接した表面（スラブ）モデルにおいて、真空準位のポテンシャルエネルギーとフェルミエネルギーの差が仕事関数に相当することを用いてPtの仕事関数を算出します。また、スラブモデルの全エネルギーE_{slab}と単結晶（バルク）モデルの全エネルギーE_{bulk}（スラブとバルクモデルの原子数の比Nを掛けます）との差をスラブモデルの表面原子数N_{surface}で割ることにより、表面原子1つ当たりの表面エネルギーσを算出します。

$$\sigma = \frac{1}{N_{surface}}\left(E_{\mathrm{slab}} - NE_{\mathrm{bulk}}\right)$$

  - 構造最適化の過程で対称性を保持させるため、構造最適化はプリミティブセルで実行します。
  - 交換相関ポテンシャルエネルギーは真空中でゼロとなるため、Kohn-Sham有効ポテンシャルエネルギーから交換相関ポテンシャルエネルギーを除いた値より真空準位を取得します。
  - 参考文献：N. E. Singh-Miller and N. Marzari, Phys. Rev. B 80, 235407 (2009)

注意点：

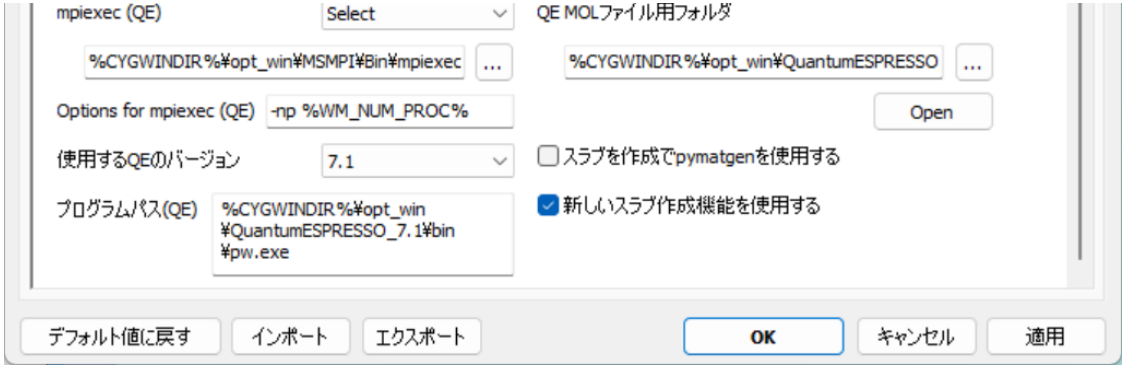
- k点の取り方、バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギー、smearing幅は計算結果に影響を与えます。
- スラブモデルおよび真空層のサイズも計算結果に影響を与えます。
- 上記の従来手法でなくESM法を用いて見積もる方法も最後に紹介します。

◆ 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

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

概要（つづき）

- Winmostar11.13.1以降でスラブ構造作成手順が変わりました。本書では「新しいスラブ作成機能を使用する」ことを想定して書かれています。



- 新しいスラブ作成機能を使用しない場合、スラブ構造操作が若干異なります。シートの右上に「ver. 11.13.1以前の操作」と明記して操作方法を述べています。

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

動作環境設定

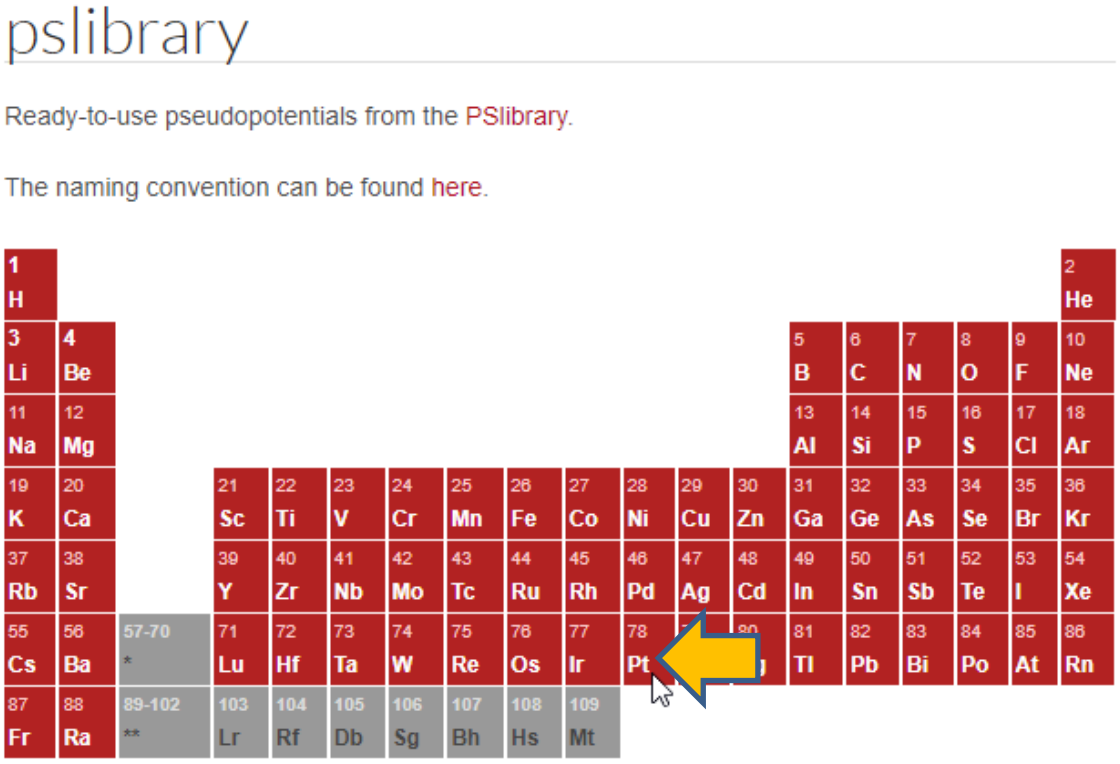
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum ESPRESSOが同梱されています。

- 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。

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

擬ポテンシャルの用意

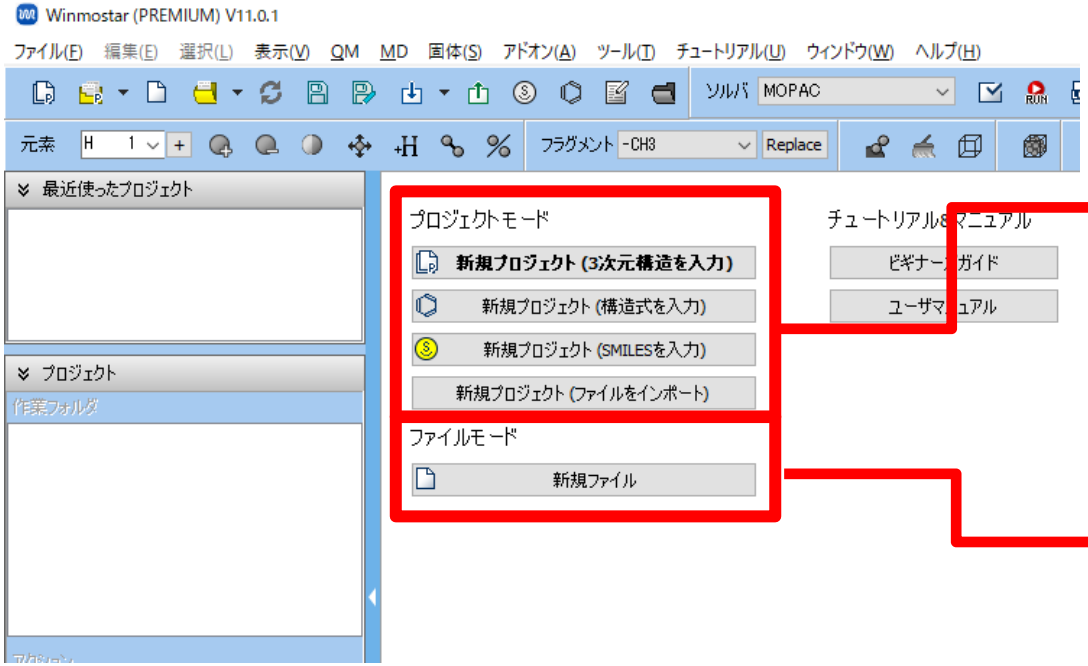
- 本チュートリアルの実施のために、擬ポテンシャルファイルの追加が必要な場合があります。
  以下のURLより周期表の[Pt]から[Pt.pbe-n-rrkjus_psl.0.1.UPF]をダウンロードします。
  http://pseudopotentials.quantum-espresso.org/legacy_tables
  そして**ツール｜環境設定**の**計算**タブの**Open QE pseudo directory**をクリックして開くフォルダに`Pt.pbe-n-rrkjus_psl.0.1.UPF`をコピーしてください。



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。
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。
ファイルモードの操作方法はV10のQuantum ESPRESSOチュートリアルを参照してください。



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.

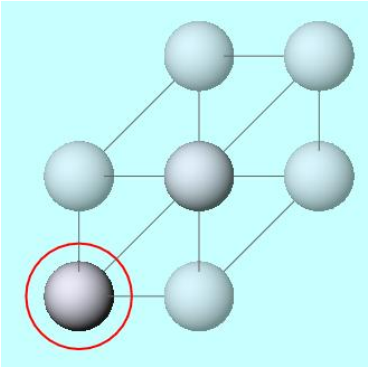
I. 系のモデリング（バルク結晶の構造最適化）

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。

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「`Pt_surface`」と入力し**保存**をクリックします。

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。

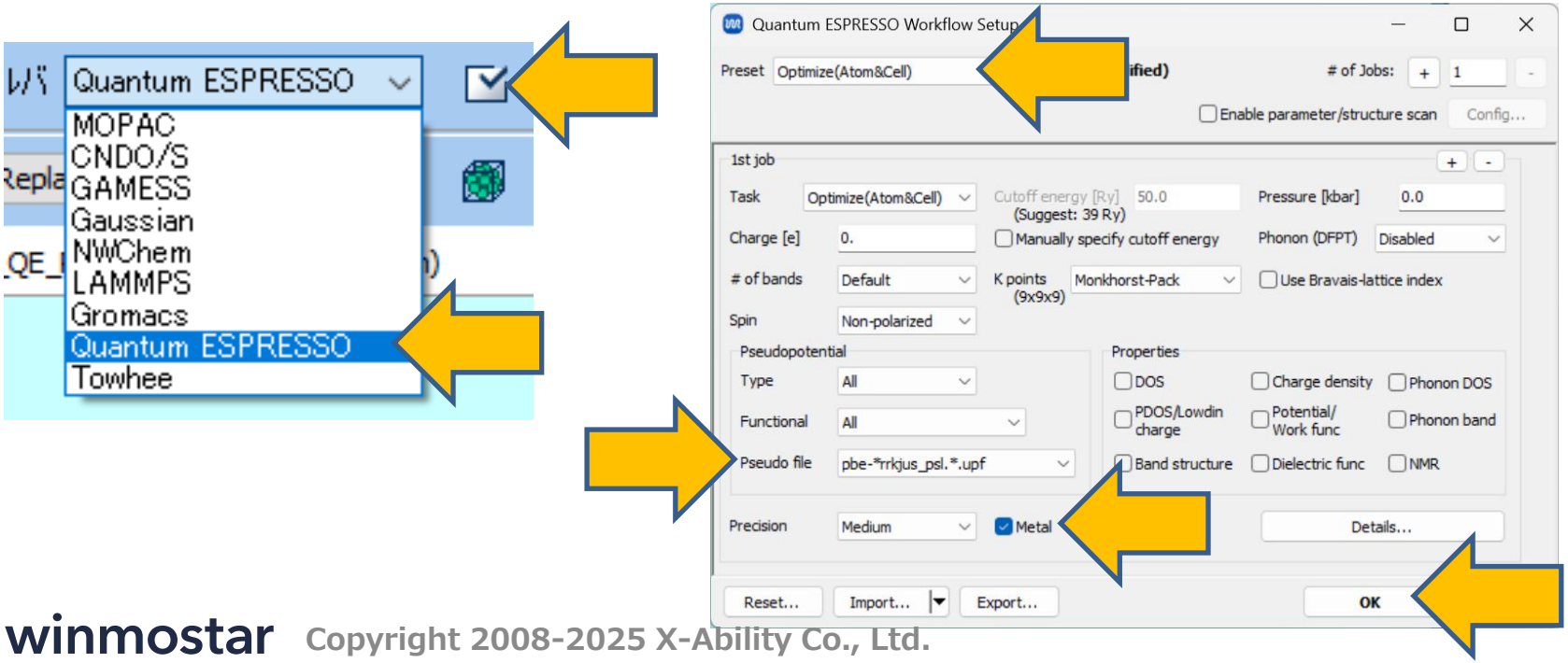
3. **ファイル｜インポート｜Samplesファイル｜pt.cif**をクリックします。
   - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル｜ファイルをインポート**を使います。
4. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。
5. **固体｜格子を変換(Primitive<->Conventional)**（V11.10.X以前は**固体｜格子を変換**）をクリックし、「…プリミティブセルに変換しますか？」と聞かれたら**はい**をクリックします。
6. 「格子が変換されました」と表示されたら**OK**をクリックします。（下図の構造が出現）



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

II. 計算の実行（バルク結晶の構造最適化）

1. **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。
2. **Preset**を**Optimize(Atom&Cell)**に変更し、**Metal**にチェックを入れ、**Pseudo file**を**pbe-*rrkjus_psl.*.upf**に変更します。
   - **pbe-*rrkjus_psl.*.upf** がない場合は[Windows版Quantum ESPRESSOインストールマニュアル]を参考に擬ポテンシャルファイルを入手します。
   - 精度を上げる場合は**Precision**は「High」以上にするか、適宜**Details**で設定を変更してください。
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。

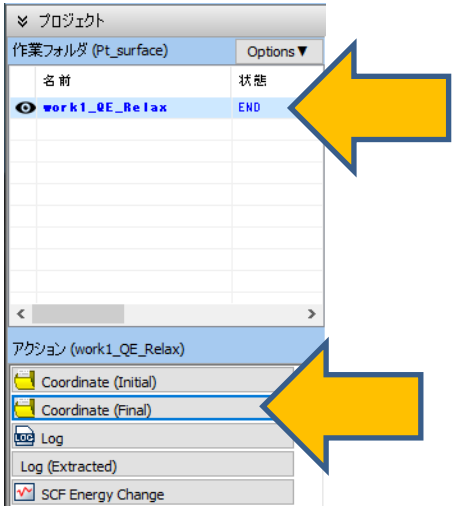


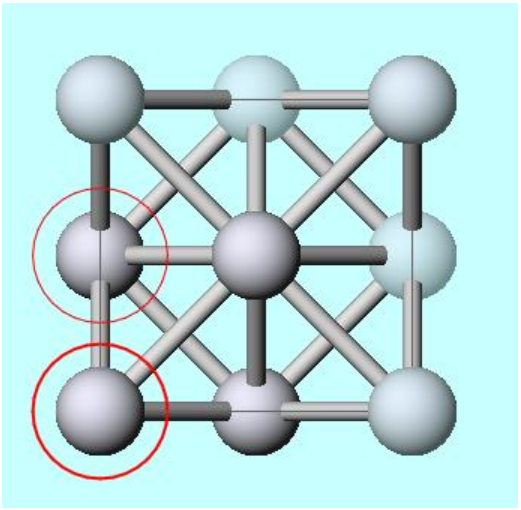
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

III.系のモデリング（スラブモデルの構造最適化）

スラブモデルの作成方法はスラブモデルチュートリアルを参照してください。

1. **作業フォルダ**で**work1_QE_Relaxの状態**が**END（青）**に変化した後、**作業フォルダ**でwork1_QE_Relaxをクリックし**アクション**で**Coordinate (Final)**をクリックし構造最適化後の構造を表示します。
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、「…出力可能なファイル形式に変更し編集を続行しますか？」と聞かれたら**はい**をクリックします。
3. 「…コンベンショナルセルに変換しますか？」と聞かれたら**はい**をクリックします。
4. 「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。（下右図の構造が出現）





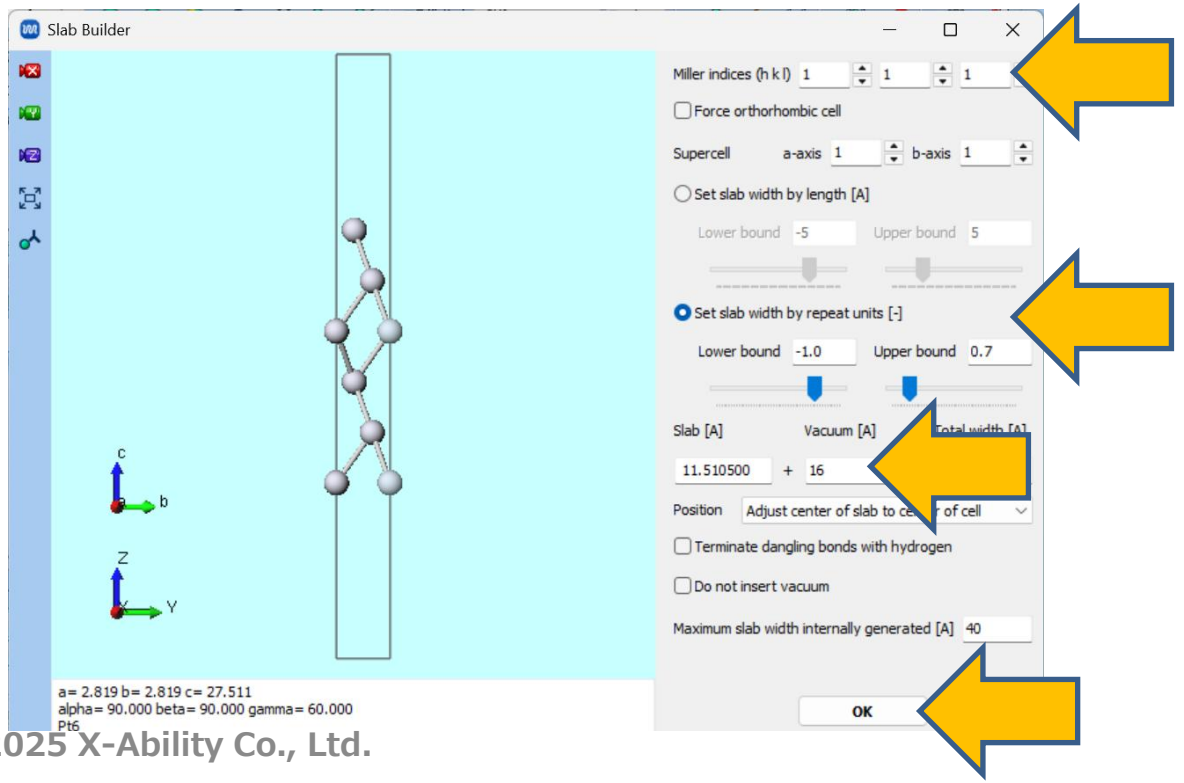
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

III.系のモデリング（スラブモデルの構造最適化）

Winmostar V11.12.X以前または**環境設定｜計算｜新しいスラブ作成機能を使用する**にチェックが入っていない場合はP.12に進みます。

1. **固体｜スラブを作成**をクリックし、**Miller indices**を「1」「1」「1」、**Set slab width by repeat units [-]**を選択し**Lower bound**を「-1」に**Upper bound**を「0.7」に変更します。
2. **Vacuum**を「16」に変更してから**(2) OK**をクリックします。

Winmostar V11.13.0以降で**環境設定｜計算｜新しいスラブ作成機能を使用する**にチェックが入っている場合はP.13に進みます。



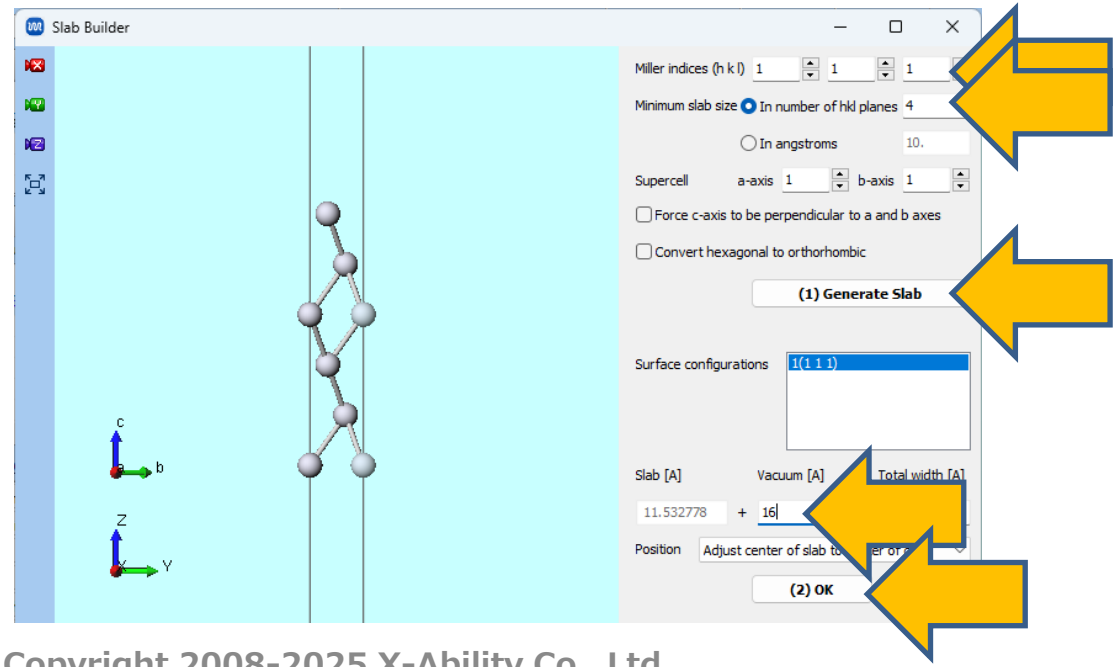
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

V11.12.X以前の操作

III.系のモデリング（スラブモデルの構造最適化）

以下はWinmostar V11.12.X以前または**環境設定｜計算｜新しいスラブ作成機能を使用する**にチェックが入っていない場合の手順です。

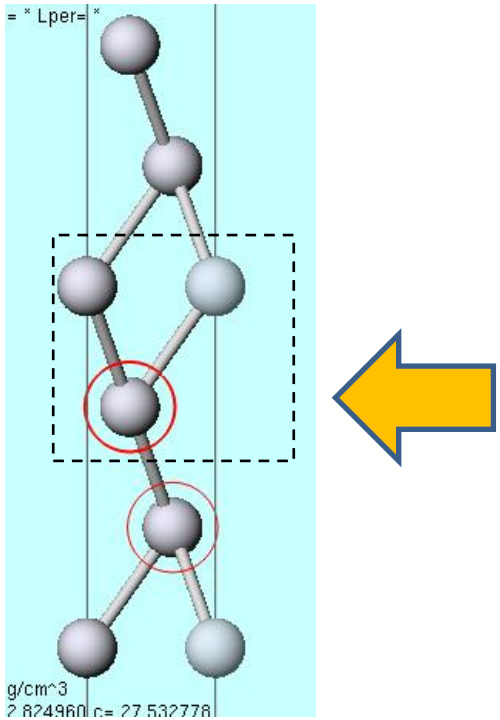
1. **固体｜スラブを作成**をクリックします。
2. **Miller indices**を「1」「1」「1」、**Minimum slab size｜In number of hkl planes**を「4」に変更してから**(1) Generate Slab**をクリックします。
3. **Vacuum**を「16」に変更してから**(2) OK**をクリックします。
4. 「正常にスラブが作成されました」と表示されたら**OK**をクリックします。

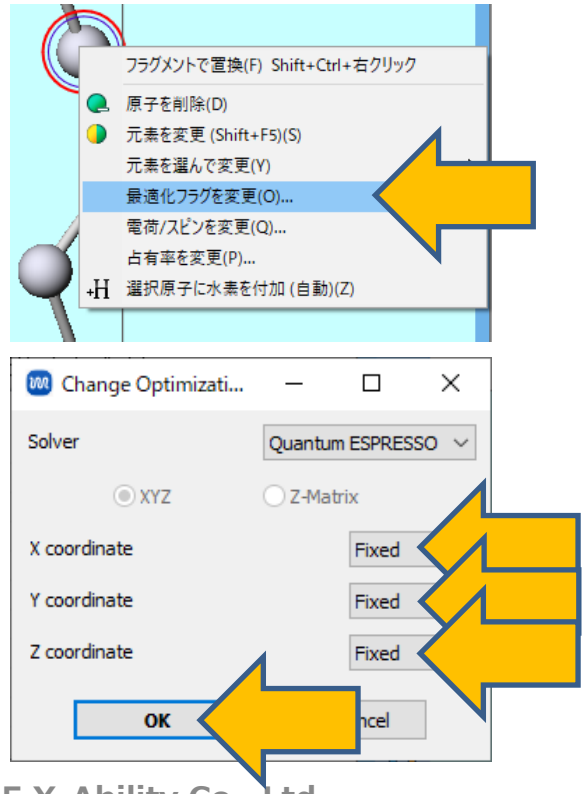


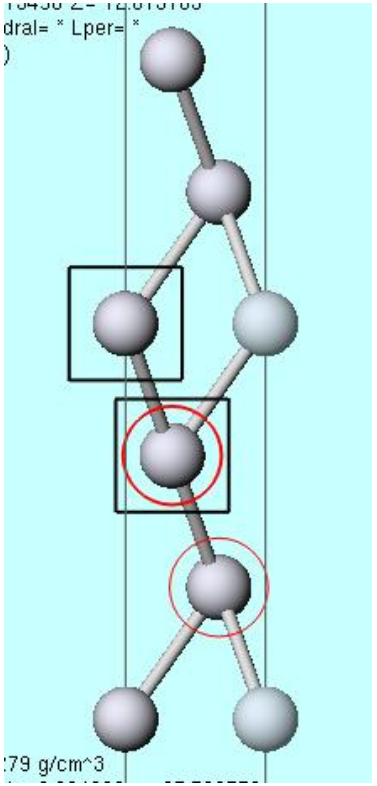
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

III.系のモデリング（スラブモデルの構造最適化）

1. ツールバーの **X軸方向から表示**をクリックします。
2. **Ctrlキー**を押しながらマウスをドラッグし、中間2層に相当する原子を**グループ選択**します。
3. 選択した原子上で右クリックし、**最適化フラグを変更**をクリックします。
4. 最適化フラグ変更画面で**X、Y、Z**座標についてそれぞれ**Fixed**を選択し、**OK**ボタンをクリックします。



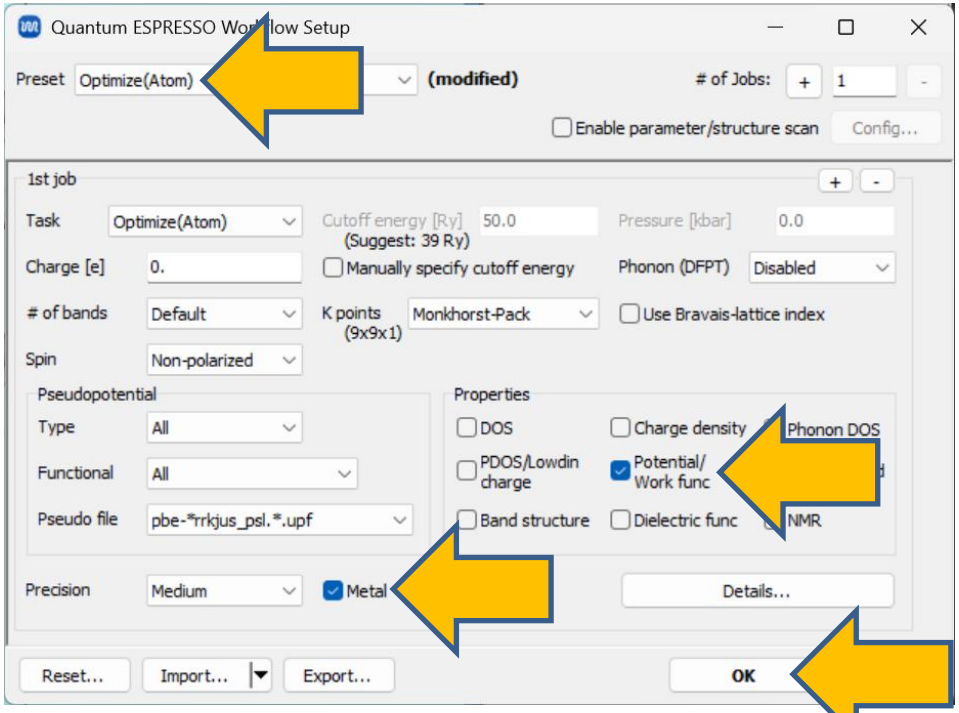




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

IV.計算の実行（スラブモデルの構造最適化）

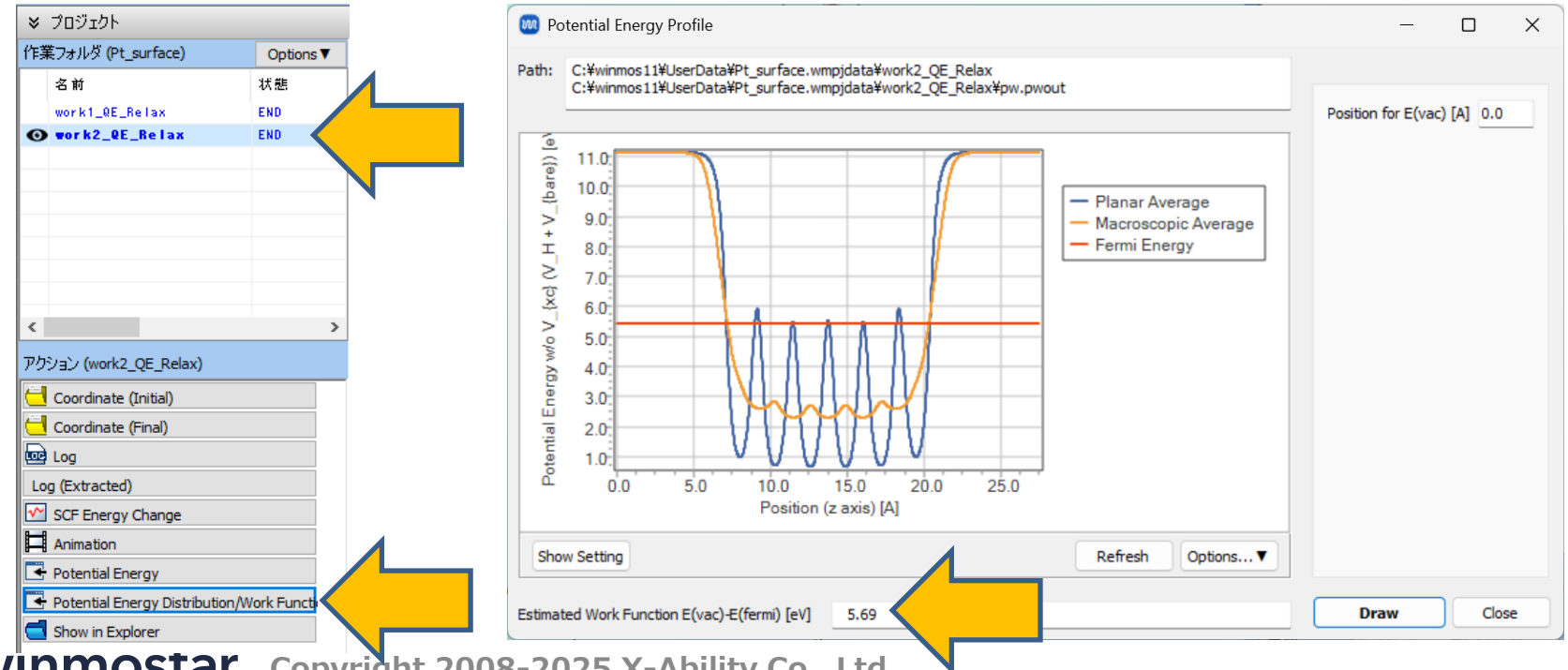
1. **(ワークフロー設定)** をクリックし、「継続ジョブを実行しますか？…」と聞かれたら**いいえ**をクリックします。「現在のプロジェクトで…」と表示されたら**閉じる**をクリックします。
2. **Preset**を**Optimize(Atom)**に変更し、**Metal**と**Properties**の**Potential/Work func**にチェックを入れます。
   - 精度を上げる場合は**Precision**は「High」以上にするか、適宜**Details**で設定を変更してください。
3. **OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。



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

V. 結果解析 (仕事関数)

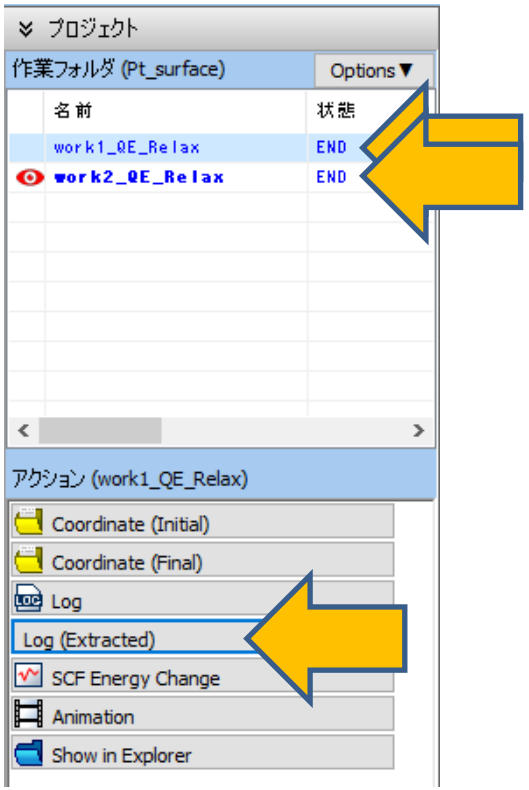
1. **作業フォルダ**で**work2_QE_Relaxの状態**が**END（青）**に変化した後、**作業フォルダ**でwork2_QE_Relaxをクリックし**アクション**で**Potential Energy Distribution/Work Function**をクリックします。
2. **Estimated Work Function**で仕事関数の推測値を確認します（本書では5.69 eV）。
   - **Planer Average**（青）は同一z平面内でポテンシャルエネルギーの平均値を算出したもので、**Macroscopic average**（橙）はPlaner Averageの値をz方向で局所的に平均化したものです。この計算では真空準位（z→±∞）の値しか見ず両者が概ね一致します。

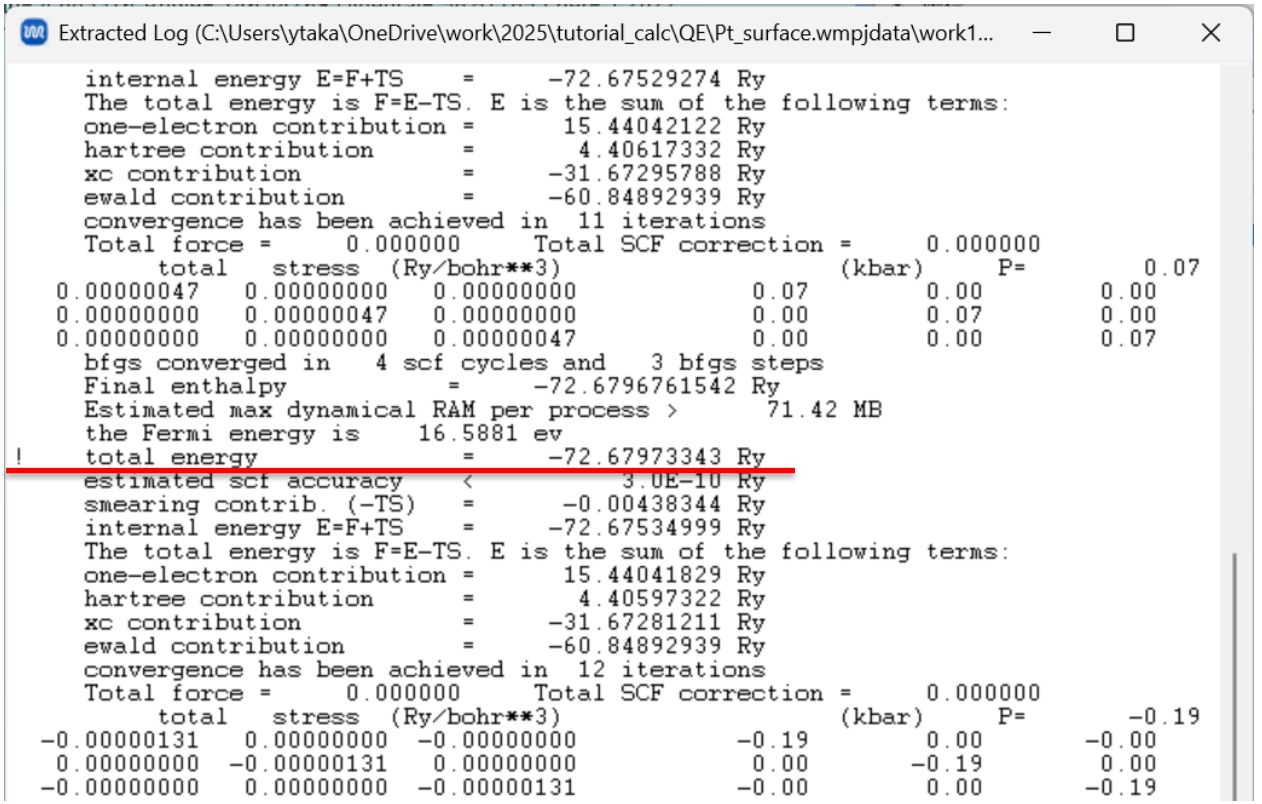


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

V. 結果解析 (表面エネルギー計算)

1. **work1**および**work2**の**作業フォルダ**の**アクション**の**Log(Extracted)**をクリックし（プロフェッショナル版エコノミーの場合は**Log**をクリック）、一番最後の**total energy**の値を抜き出します。





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

V. 結果解析 (表面エネルギー計算)

- P.14で取得した値を以下の式に代入し表面エネルギーを計算します。単位の変換には**ツール**｜**単位を変換**を利用します。

$$\sigma = \frac{1}{N_{\mathrm{surface}}}(E_{\mathrm{slab}} - NE_{\mathrm{bulk}})$$

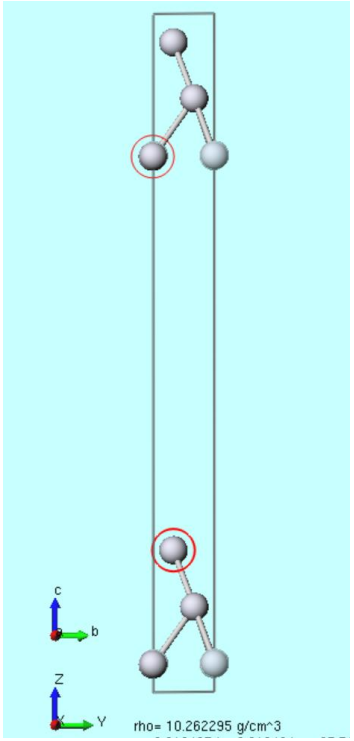
	意味	本書の場合
E_{bulk}	バルクモデルの全エネルギー （work1から取得した値）	-72.67973342 [Ry]
E_{slab}	スラブモデルの全エネルギー （work2から取得した値）	-435.97936103 [Ry]
N_{surface}	スラブモデルの表面原子数	2
N	バルクとスラブモデルの原子数の比	6
σ	**表面1原子当たりの表面エネルギー**	**(-435.979375 - 6 * (-72.679733))/2 ≈ 0.0495 [Ry/atom] ≈ 0.673 [eV/atom]**

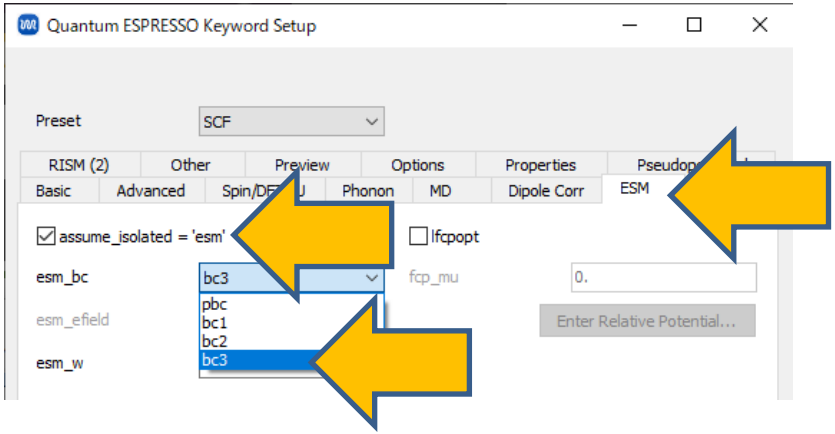
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

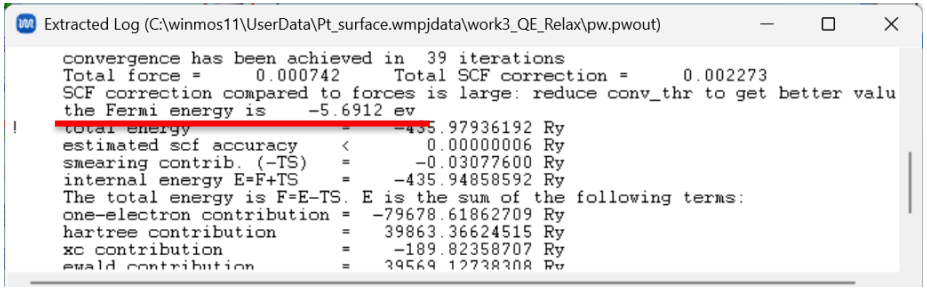
補足　ESM法による仕事関数算出方法

- スラブの重心をz=0に移動（グループ選択した後**編集｜グループ編集｜グループを並進移動**）
- **Details**ボタンをクリックして、**Keyword Setup**ウィンドウの**ESM**タブの**assume_isolated = 'esm'**にチェックを入れ、**esm_bc**を**bc3**に変更

とした上で計算を実行し、出力されるpwout（ログ）ファイルのFermiエネルギーの符号を反対にした値を(z軸の+方向の)仕事関数として考えることも可能です(ただし**tot_charge**は0とします)。







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.