M winmostar チュートリアル Quantum ESPRESSO Effective Screening Medium (ESM) 法

V11.12.0

2025年4月30日 株式会社クロスアビリティ



- 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。



AI単原子膜(スラブ)を電極として扱うEffective Screening Medium(ESM)計算を実施します。
 ここではVacuum-slab-metal (bc3)を表す境界条件を使用します(下図)。
 ※QEのESMの実装の都合上、入力のスーパーセルの端が計算内では下図の中央に位置します。



PBE汎関数、ウルトラソフト型擬ポテンシャルを使い、まず印加電圧なしのconstant-N(電子数一定)計算、次に印加電圧0.5 Vのconstant-µ(化学ポテンシャル一定)計算を実施して、電圧印加時のAIスラブの電子状態及び電荷などを得ます。さらに、スラブ(slab)と仮想電極(metal)の間に0.5 V程度の電位差が生じていることを確認します。



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、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。 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。

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(D) 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 (constant-N計算)

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「al_esm」と入力し保存をクリックします。



I. 系のモデリング (constant-N計算)

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 | al_slab.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。(カメラを回転するとスラブ構造 を確認できます)



II. 計算の実行(constant-N計算)

- 1. ソルバからQuantum ESPRESSOを選択し、 IM (ワークフロー設定) をクリックします。
- 2. 「現在のセルはプリミティブセルに変換可能です…変換しますか?」と表示されたら**いいえ**を クリックします。
- 3. K pointsをMonkhorst-Pack(Slab)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。

4. Detailsをクリックします。	Quantum ESPRESSO Workflow Setup — □	>
	Preset SCF (modified) # of Jobs: + 1	
ソルバ Quantum ESPRESSO 🗸 💽	Enable parameter/structure scan Co	nfig
MOPAC CNDO/S	1st job +	-27
Campia GAMESS	Task Energy Cutoff energy [Ry] 50.0 Pressure [kbar] 0.0 (Suggest: 29 Ry)	
(IL (temp NWChem	Charge [e] 0. Manually specify cutoff energy Pronon (DFPT) Disabled	~
Gromacs	# of bands Default V K points Monkhorst-Pack(Slab)	
Quantum ESPRESSO	Spin Non-polarized V	
Z= 0	Pseudopotential Properties	
	Type All ~ DOS Charge density Phonon DO	s
	Functional All PDOS/Lowdin Potential/ Phonon bar Charge PDOS/Lowdin Potential/ Phonon bar	nd
	Pseudo file pbe-*rrkjus_psl.*.upf Band structure Dielectric func NMR	
	Precision Medium V Metal Details	
	Reset Import V Export OK C	ancel

II. 計算の実行(constant-N計算)

- **1. ESM**タブを選択し、assume_isolated = 'esm'にチェックを入れ、esm_bcをbc3に変更します。
- 2. OKをクリックします。
- 3. 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。

		Quantum ESPRESSO Keyword Setup
		Preset RISM (1) RISM (2) Others Preview Options Properties Pseudopotential Basic Advanced Spin/DFT+U Phonon NMR/EFG MD Dipole Corr ESM Image: solated = 'esm' Image: solated Image: solated
		Citation M. Otani and O. Sugino, PRB 73, 115407, (2006). N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugino and M. Otani, PRL 109, 266101, (2012).
M winmostar	Copyrig	Jht 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

III.系のモデリング (constant-µ計算)

- 1. 選択 | すべてをグループ選択をクリックします。
- 2. **2** グループ編集 | グループを固定/固定解除をクリックしFixをクリックします。
 - 電荷の最適化計算では構造最適化ルーチンを流用しているため、全原子に固定の最適化フラグを設定することで、構造は固定して電荷のみが最適化されます。



1. Constant-mu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。 (Winmostar V11.5.0以降を利用でQEのプログラムパスを変更していない(CygwinWMに同 梱されているQE7.1利用)場合は「7.1」、QE5.2.1の場合は「<6.8」)

🥢 環境設定	- 🗆 ×
基本 編集 計算 表示 プログラムパス	
Options for mpiexec -localonly %WM_NUM_PROC% (NWChem) MD	^
✓ AmberToolsで計算する電荷を自動調整 □ MDの結果解析で行	音精度を使用
mpiexec (LAMMPS) Select 〜 LAMMPSポテンジャルフ	オルク Potentials in LAMMPS direct ~
%CYGWINDIR%¥opt_win¥MSMPI¥Bin¥mpiexec C:¥cygwin_wm¥o	pt_win¥LAMMPS_29Sep2021¥
Options for mpiexecnp %WM_NUM_PROC%	Open potential directory
Solid	
Spglibの許容誤差(距離)[Å] 0.0001 QE擬ポテンシャルフォル	以 pseudo in QE's directory 🛛 🗸
Spglib実行前に警告を表示する最低原子数 10000 C:¥cygwin_wm¥o	pt_win¥QuantumESPRESSO_7
デフォルト拡張子(Quantum ESPRESSO) pwin & pwout ~	Open QE pseudo directory
デフォルト拡張子(OpenMX) mxin & mxout ~	Download pseudo files
Open k-path file	Open priority list
mpiexec (QE) Select V QE MOLファイル用フォル	νø
%CYGWINDIR%¥opt_win¥MSMPI¥Bin¥mpiexec %CYGWINDIR%¥	opt_win¥QuantumESPRESSO
Options for mpiexec (QE) -np %WM_NUM_PROC%	Open
使用するQEのバージョン 7.1 マ	v .
50.8 6.X(EIS) デフォルト値に定す インポート6.8 to 7.0	OK キャンセル 適用
7.1	

- 1. 作業フォルダでwork1_QE_SCFの状態がEND(青)に変化した後、 (ワークフロー設 定)をクリック「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。
- 2. 「現在のセルはプリミティブセルに変換可能です…変換しますか?」と表示されたら**いいえ**を クリックします。
- 3. PresetをOptimize(Atom)に変更します。constant-N計算の設定がリセットされます。
- 4. K pointsをMonkhorst-Pack(Slab)に変更し、Metalにチェックを入れます。
- 5. Detailsをクリックします。

eset Optimiz	ze(Atom)		(modified)	# of Jol	bs: +	1	
			En	able parameter/struc	ture scan	Confi	g
1st job						+ -	
Task Op	otimize(Atom) V	Cutoff ener	rgy [Ry] 50.0	Pressure [kbar]	0.0		
Charge [e]	0.	Manual	y specify cutoff energy	Pb on (DFPT)	Disabled	~	
# of bands	Default \vee	K points	Monkhorst-Pack(Slab)		tice index	t,	
Spin	Non-polarized 🗸	(10.10.2)					
Pseudopoter	ntial		Properties				
Туре	All ~		DOS	Charge density	Phon	on DOS	
Functional	All	~	PDOS/Lowdin charge	Potential/ Work func	Phon	on band	
Pseudo file	pbe-*rrkjus_psl.*.upf	· · ·	Band structure				
Precision	Medium 🗸	Metal		Det	ails		

- **1. ESM**タブでassume_isolated = 'esm'にチェックを入れ、esm_bcをbc3に変更します。
- 2. lfcoptをチェックし、Enter Relative Potentialをクリックします。
- 3. 基準電圧とする計算の出力ファイルを聞かれるので、constant-N計算の作業フォルダのログ ファイル(work1_QE_SCF¥pw.pwout)を開きます。次に、「0.5」(印加電圧)を入力し OKをクリックします。「The reference Fermi energy…」と表示されたらはいをクリックし ます。最後にfcp_muに設定された値(本書では「-0.27132」)をメモ帳などに記録します。

Quantum ESPRESSO Keyword	Setup —			
Preset	~		Enter Relative Potential	×
RISM (1) RISM (2) Oth Basic Advanced Spin/DF Image: Spin and	Preview Options Properties Ps Phonon NMR/EFG Dirole C Ifcpopt	eudopotential prr ESM Potential	Relative Potential [V]: 0.5	OK Cancel
		1	Winmostar	×
Citation M. Otani and O. Sugino, PRB 73, N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugin	115407, (2006). o and M. Otani, PRL 109, 266101, (2012).		The reference Fermi energy, relative pote energy (fcp_mu) would be set to -4.191 ((-0.2713 Ry), respectively.	ential and target Fermi eV, 0.500 V and -3.691 eV
				ОК
winmostar Co	OK Cancel	Ability Co., Ltd.		

- 1. Quantum ESPRESSO Keyword SetupウィンドウでOKをクリックして閉じます。
- 2. 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。

🔯 Quantum ESPRESSO Keyword Setup — 🗆 🗙	🔯 Quantum ESPRESSO Workflow Setup – 🗆 🗙
Preset	Preset Optimize(Atom) V (modified) # of Jobs: + 1
RISM (1) RISM (2) Others Preview Options Properties Pseudopotential Basic Advanced Spin/DFT+U Phonon NMR/EFG MD Dipole Corr ESM Image: Solated = 'esm' Ifcpopt Ifcp_mu -0.27132 -0.27132	Enable parameter/structure scan Config 1st job + - Task Optimize(Atom) Cutoff energy [Ry] 50.0 Pressure [kbar] 0.0 Charge [e] 0. Manually specify outoff energy Phonon (DEPT) Disabled V
esm_efield 0. Enter Relative Potential esm_w 0.0	# of bands Default K points (4x4x1) Monkhorst-Pack(Slab) Use Bravais-lattice index Spin Non-polarized Properties
Citation M. Otani and O. Sugino, PRB 73, 115407, (2006).	Type All DOS Charge density Phonon DOS Functional All DOS/Lowdin Potential/ Phonon band
	Pseudo file pbe-*rrkjus_psl.*.upf V Band structure Dielectric func NMR
	Precision Medium V Metal Details (modified)
Reset Import Export OK	Reset Import V Export

フェルミエネルギーの目標値(fcp_mu)が、入力ファイルではRyで書く一方、ログファイルに はeVで出力されるので、ここでeVでの値を把握しておきます。

- 1. ツール | 単位を変換をクリックします。
- 2. 物理量をEnergy、左の単位をRy、右の単位をeVに変更し、先ほどコピーしたfcp_muの値 を左の入力欄にペーストします。右に表示される値がconstant-µ計算におけるフェルミエネ ルギーの目標値です。

🥺 Winmostar Unit Conver	rter	_		×
Energy				~
-0.27132	=	-3.69149665	81	
Ry ~		eV		~
			Cle	ose

- 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Animationをクリックします。
- 2. アニメーション操作エリアのColumnを「9」に変更するとフェルミエネルギーの変化がグラ フ化されます。前ページで計算した値に漸近していることを確認します。





1. アニメーション操作エリアのColumnを「7」に変更すると電荷の変化がグラフ化されます。



1. 作業フォルダでwork2_QE_RelaxをクリックしアクションでLog(ログファイルの全文)またはLog (Extracted) (ログファイルの要約)をクリックし、ログファイルからAIスラブの 最終的なTotal energy、フェルミエネルギー等の数値を確認します。



- **1. 作業フォルダでwork2_QE_Relax**をクリックし**アクション**で**Charge/Energy Profile**をクリックします。
- **2. TermsでTot chg**(電荷)とAvg v_hart+v_loc(ポテンシャル)だけにチェックが入った 状態にしDrawをクリックします。
 - このグラフはz=0(スラブの位置)が中央に来るよう作図されている点に注意



- constant-N計算と-µ計算の間で電荷またはポテンシャルの差分を計算し表示したい場合は、
 Select another esm1 file and plot differenceにチェックを入れ、constant-N計算の作業フォルダのwm.esm1ファイル(work1 QE SCF¥wm.esm1)を選択します。
- 2. Draw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