

 winmostar チュートリアル

# Quantum ESPRESSO

## 仕事関数

V10.4.3

2021年4月1日

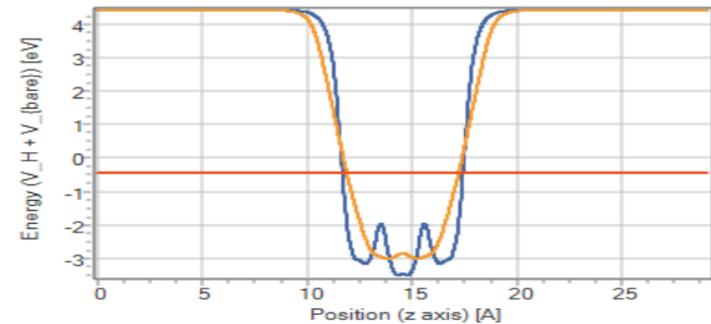
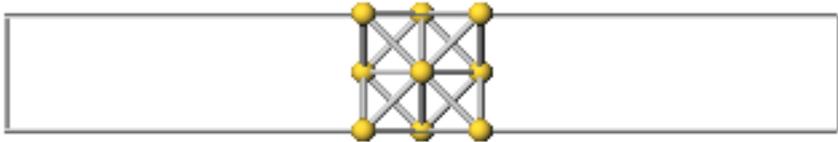
株式会社クロスアビリティ

# 本書について

- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)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

- スラブモデル内の疑似的な真空層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ため、これを用いてAuの仕事関数を算出します。
  - 仕事関数を計算する際には一般的に、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ものをポテンシャルエネルギーとして使います。



## 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に、精度を落とした設定を用います。
- 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](https://qiita.com/xa_member)

# 動作環境設定

- 本機能を用いるためには、Quantum ESPRESSOとCygwinWMのセットアップが必要です。
- <https://winmostar.com/jp/installation/>インストール方法のWindows用のQuantum ESPRESSOとCygwinWMの設定手順に従います。

(6) [こちらの手順](#)に従いWinmostar用のCygwin環境（CygwinWM）を構築します。

(7) WinmostarをインストールしたWindows PC（ローカルマシン）上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。リモートサーバでのみ計算を行う場合もインストールしてください。

量子化学計算を実行する方 : [GAMESS](#) [NWChem](#)

分子動力学計算を実行する方 : [LAMMPS](#)

固体物理計算を実行する方 : [Quantum ESPRESSO](#) [FDMNES](#)

Fragment ER（別売）を実行する方 : [NAMD](#)

※ Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは前の手順でインストールするCygwinに含まれます。

※ 最大原子数を拡張したMOPAC6を使う場合は[こちら](#)から入手してください（動作未保障）。

# 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より擬ポテンシャルファイルをダウンロードしてください。

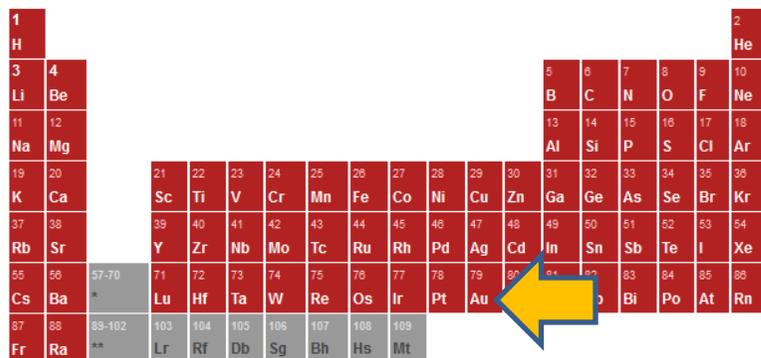
<https://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials/>

リンク先に表示される周期表の[Au]から[Au.pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPF]をQEのインストールフォルダの下pseudoフォルダに保存し、Winmostarを再起動してください。

## PSLIBRARY

Ready-to-use pseudopotentials from **PSlibrary** (recommended). For other ready-to-use tables, follow the links of the menu at the left. For more info, see [here](#).

Please cite the pseudopotentials used and give proper credit to their authors (see [this page](#) for a rather complete list of acknowledgments).



The image shows a standard periodic table with elements color-coded by groups. A yellow arrow points to the element Au (Gold) in the 6th period, 10th group.

Au.pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPF   
Origin: PS Library  
Author: ADC  
Generated using "atomic" code by A. Dal Corso v.5.0.2 svn rev. 9415

Pseudopotential type: USPP  
Functional type: PBE  
Non Linear Core Correction  
Scalar relativistic

# I. モデルの作成1

1. **ファイル | 開く**をクリックする。
2. サンプルフォルダ内の**au\_slab.cif**を開く。

※デフォルトではC:\winmos10\Samples\au\_slab.cif

※このCIFファイルは結晶ビルダおよび真空層を挿入...を用いて作成することが可能である。

## Auスラブの作成

Crystal system: Cubic

Space group : Fm-3m (225)

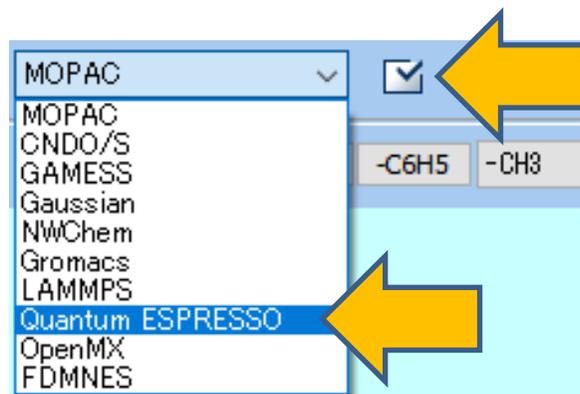
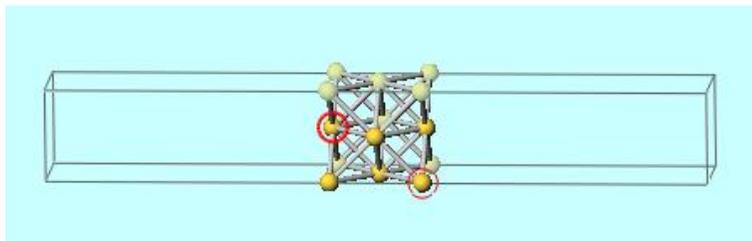
Lattice constants : a= 4.078830 Å

Asymmetric unit: Au (0.0 0.0 0.0)

真空層厚み: 25 Å

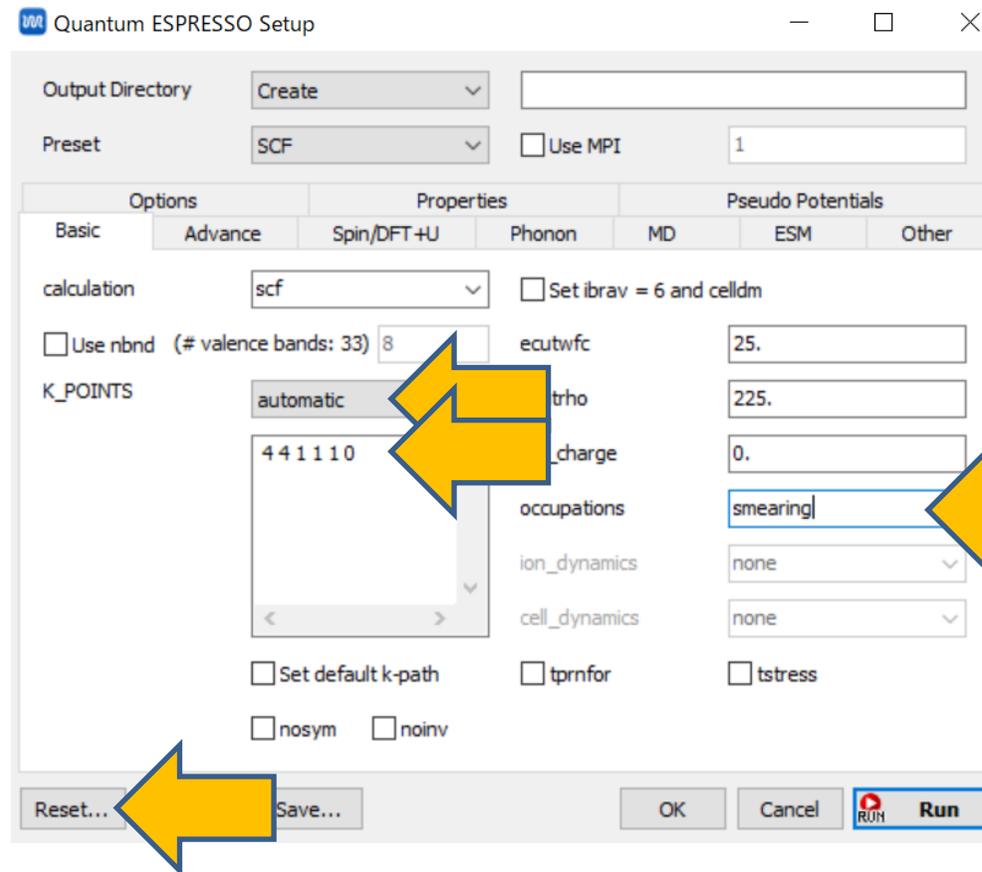
ミラー指数:(100)

3. ツールバーのソルバー一覧から、**Quantum ESPRESSO**を選択する。
4.  (キーワード設定)をクリックする。



# I. SCF計算

1. Reset…ボタンをクリックする。
2. K\_POINTSにautomaticを指定し、4 4 1 1 1 0（スペース区切り）と入力する。
3. occupationsにsmearingを指定する。



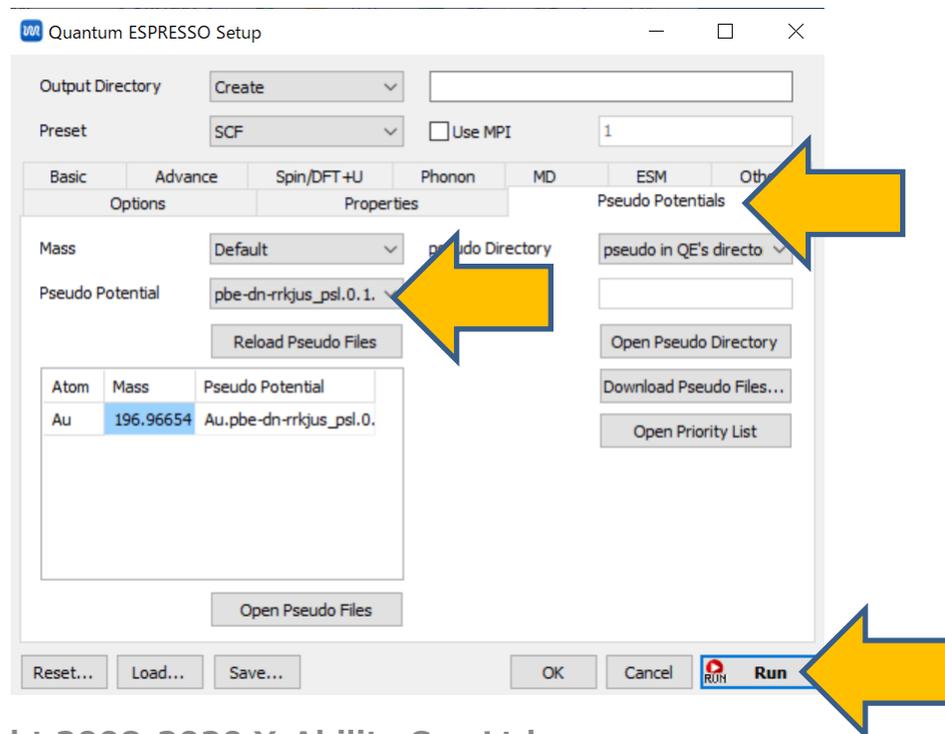
# I. SCF計算

1. Pseudo Potentialsタブにて、

Pseudo Potentialにpbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPFを指定する。

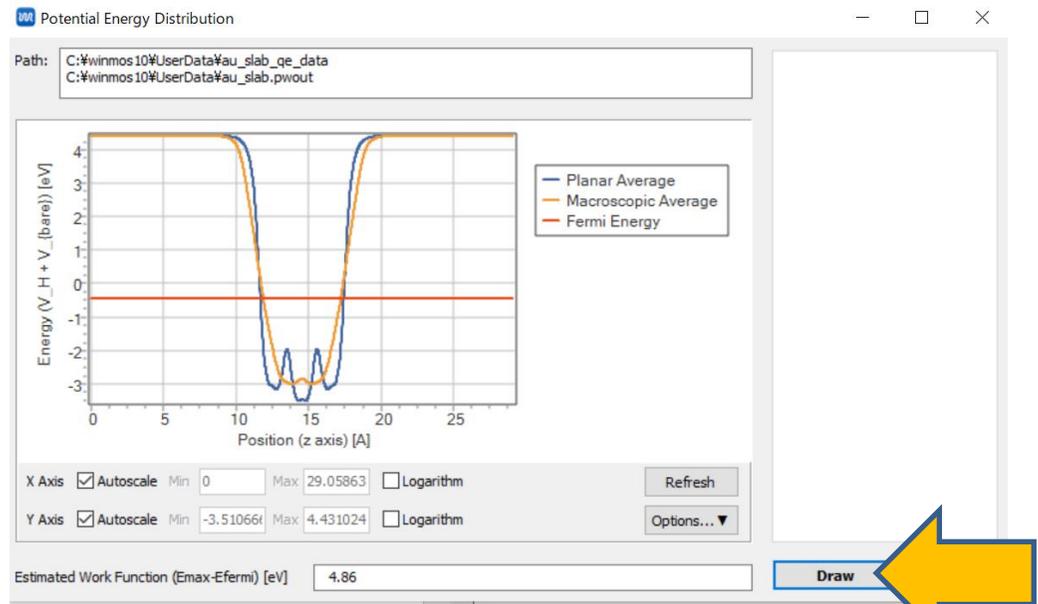
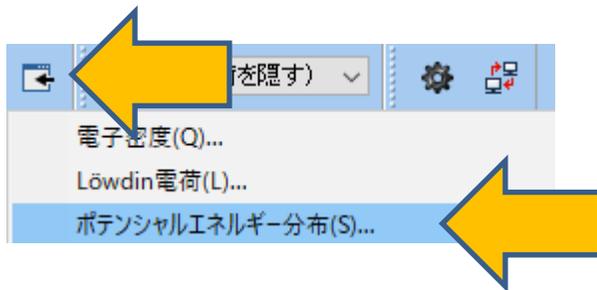
※ pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPFが無い場合は、P. 5の手順に従いpseudoファイルをpseudoフォルダに格納し、**Reload pseudo Files**をクリックする。

2. **Run**をクリックし、ファイル名をau\_slabとし保存する。



## II. 仕事関数

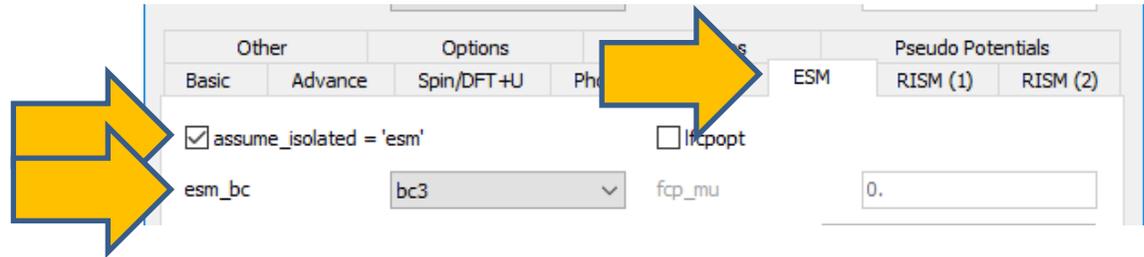
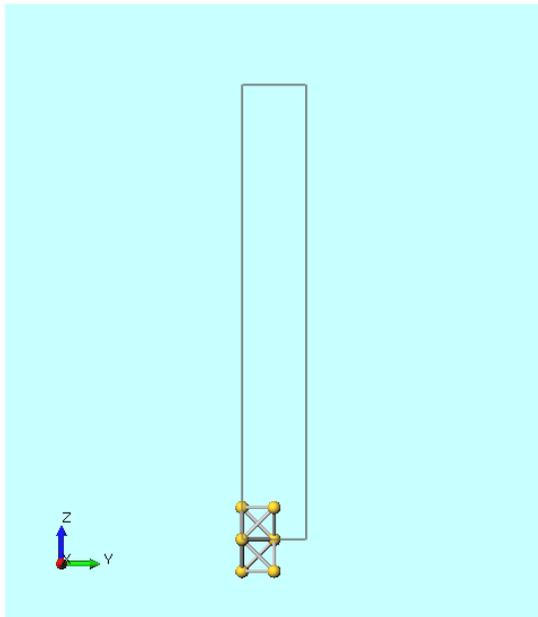
1. 計算の終了後、 (結果解析) | ポテンシャルエネルギー分布をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとpwoutファイルを選択する。
3. 新しいウィンドウが立ち上がり、**Draw**をクリックすると、ポテンシャルエネルギー分布曲線が得られる。仕事関数の推測値が下のテキストボックスに表示される。
  - Planer Average (青) は同一z平面内でポテンシャルエネルギーの平均値を算出したもので、Macroscopic average (橙) はPlaner Averageの値をz方向で局所的に平均化し滑らかにしたものである。今回の計算では真空準位 ( $z \rightarrow \pm\infty$ ) の値しか見ず、その場合は両者で違いがない。



# III.補足

- 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)
- `assume_isolated='esm'`をチェックし、`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エネルギーの負値を(電子をz軸の+方向の)仕事関数として考えることも可能である(ただし`tot_charge`は0とすること)。



```
au_slab_esm.pwout - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 0.9997
0.9991 0.2476 0.0352 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

k = 0.3750 0.3750 0.0000 ( 6926 PWs) bands (ev):
-12.0577 -11.5408 -11.5329 -11.4565 -10.7650 -10.2324 -10.0262 -9.9219
-9.9151 -9.8620 -9.6317 -9.3799 -9.2933 -9.2740 -9.2128 -9.1780
-9.1606 -8.7343 -8.7335 -8.2870 -8.1987 -7.9401 -7.7994 -7.6895
-7.6785 -7.5616 -7.3058 -7.1206 -7.1123 -7.0371 -7.0267 -6.5140
-4.7948 -4.7858 -3.9709 -3.2404 -2.8383 -2.3873 -1.5575 -0.8874

occupation numbers
1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000
1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000
1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000
1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 0.9986
0.2792 0.2729 0.0108 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

the Fermi energy is -5.0764 ev
```

# 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