

# Winmostar - Quantum ESPRESSO

## Tutorial 4

仕事関数

V6.016

株式会社クロスアビリティ

[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2016/06/01

# 修正履歴

2016/6/1版

- 初版

# Contents

- I. 結晶ビルダで初期座標の作成
- II. SCF計算
- III. 仕事関数

# 動作環境設定

① Quantum ESPRESSOインストールマニュアル  
[https://winmostar.com/jp/QE\\_install\\_manual\\_jp\\_win.pdf](https://winmostar.com/jp/QE_install_manual_jp_win.pdf)  
 に従い、Quantum ESPRESSOをインストールする。

② 以下のURLよりAu.pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPFを入手し、  
 Quantum ESPRESSOインストールフォルダの下のpseudoフォルダに入れ  
 Winmostarを再起動する。  
<http://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials/>

**PSEUDOPOTENTIALS**

Standard Solid State Pseudopotentials (SSSP), a collection of the best verified pseudopotentials, maintained by THEOS and MARVEL, can be found, together with tests, on the Materials Cloud (materialscloud.org).

PAW datasets for rare earths can be found on the web page of VLab at University of Minnesota.

More information about pseudopotentials in general, the naming convention adopted for pseudopotential files, the Unified Pseudopotential Format, and on other pseudopotential databases, can be found via the links of the menu at the left.

Important Note: although most of these pseudopotentials were published or used with satisfactory results in published work, we cannot give any warranty whatsoever that they fit your actual needs.

(last updated April 7, 2016)

ANY FUNCTIONAL ANY TYPE Apply Filter

ANY PP LIBRARY OTHER OPTIONS

「Au」をクリック

Classification controlled by Andrea Dal Corso

**Au.pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPF**

Pseudopotential type: ULTRASOFT  
 Method: Rappe Rabe Kaxiras Joannopoulos  
 Functional type: Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) exchange-correlation  
 Nonlinear core correction: scalar relativistic

Origin: PS Lib  
 Author: Andrea Dal Corso  
 Generated using: PseudopotentialGenerator  
 Uploaded by: Eric Schwegler

Classification controlled by Andrea Dal Corso

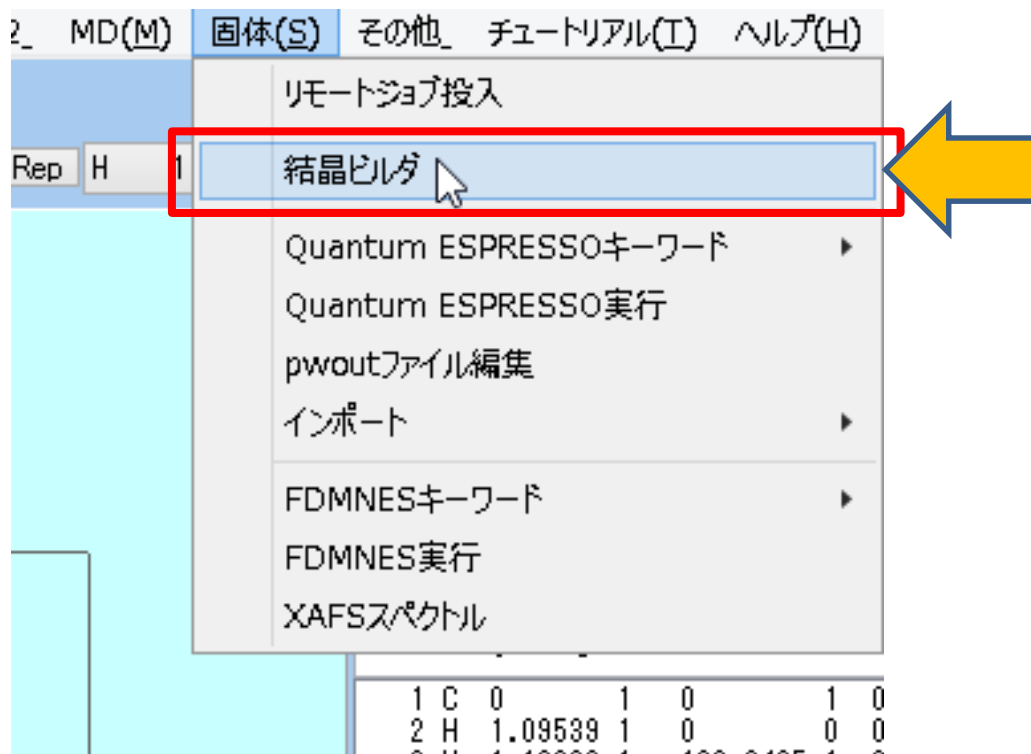
Au.pbe-ml\_fhi.UPF

Pseudopotential type: NORMCONS  
 Method: Martins-Troullier

「Au.pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPF」をクリック

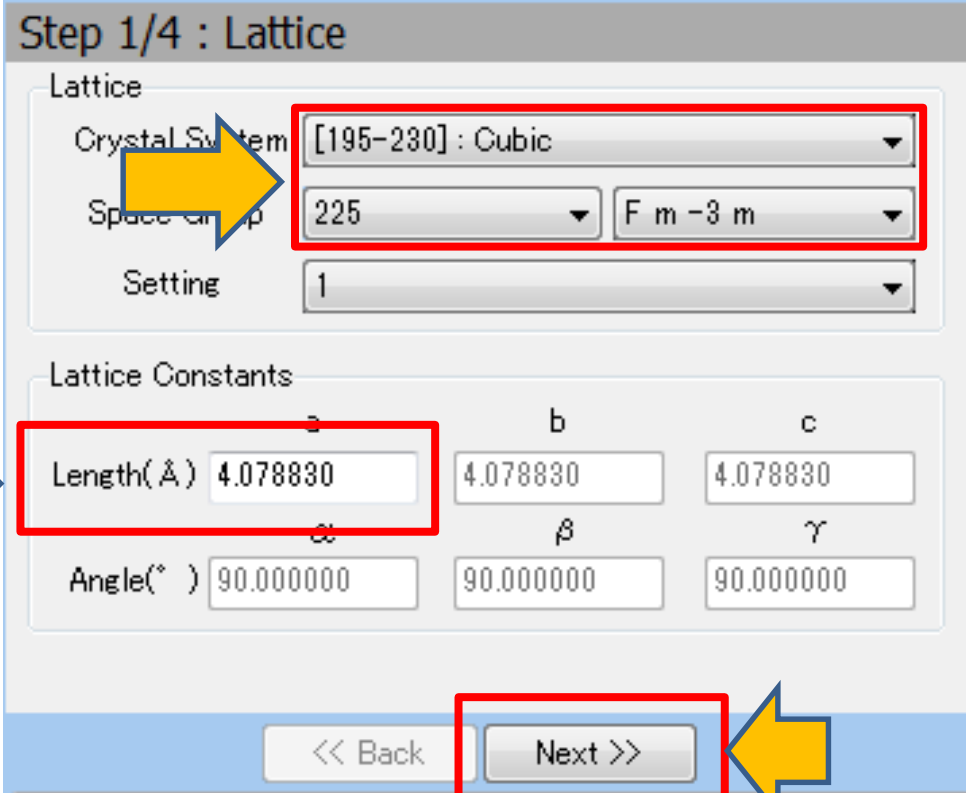
# 1. 結晶ビルダで初期座標の作成

「固体>結晶ビルダ」から結晶ビルダを起動する。



# I. 結晶ビルダで初期座標の作成

結晶ビルダにて「Cubic」>「225 Fm-3m」を選択。格子定数は4.078830に設定し、「Next」をクリックする。



Step 1/4 : Lattice

Lattice

Crystal System [195-230] : Cubic

Space group 225 F m - 3 m

Setting 1

Lattice Constants

	a	b	c
Length(Å)	4.078830	4.078830	4.078830
Angle(°)	90.000000	90.000000	90.000000

<< Back Next >>

# I. 結晶ビルダで初期座標の作成

原子種をCからAuに変更する。

Crystal Builder

File Edit View Tool Return To Winmstar

a b c

Lattice constant 4.079 4.079 4.079 90.000 90.000 90.000  
 TV 4.079 0.000 0.000  
 TV 0.000 4.079 0.000  
 TV 0.000 0.000 4.079

BS1 BS2 Connect 1.15

Zoom 1  
 Atom 0.25  
 Bond 10

Step 2/4 : Asymmetric Unit

Add Remove

Atom		X	Y	Z
Au	+	0.000000	0.000000	0.000000

<< Back Next >>

Lattice Constants  
 4.079 4.079 4.079 90.000 90.000 90.000

Translation Vector  
 4.079 0.000 0.000  
 0.000 4.079 0.000  
 0.000 0.000 4.079

Number of Atoms (displayed)  
 14

# I. 結晶ビルダで初期座標の作成

「Tool>Insert Vacuum」を選択する。警告には「はい」を選択する。  
(結晶ビルダから真空層挿入モードに遷移する。)

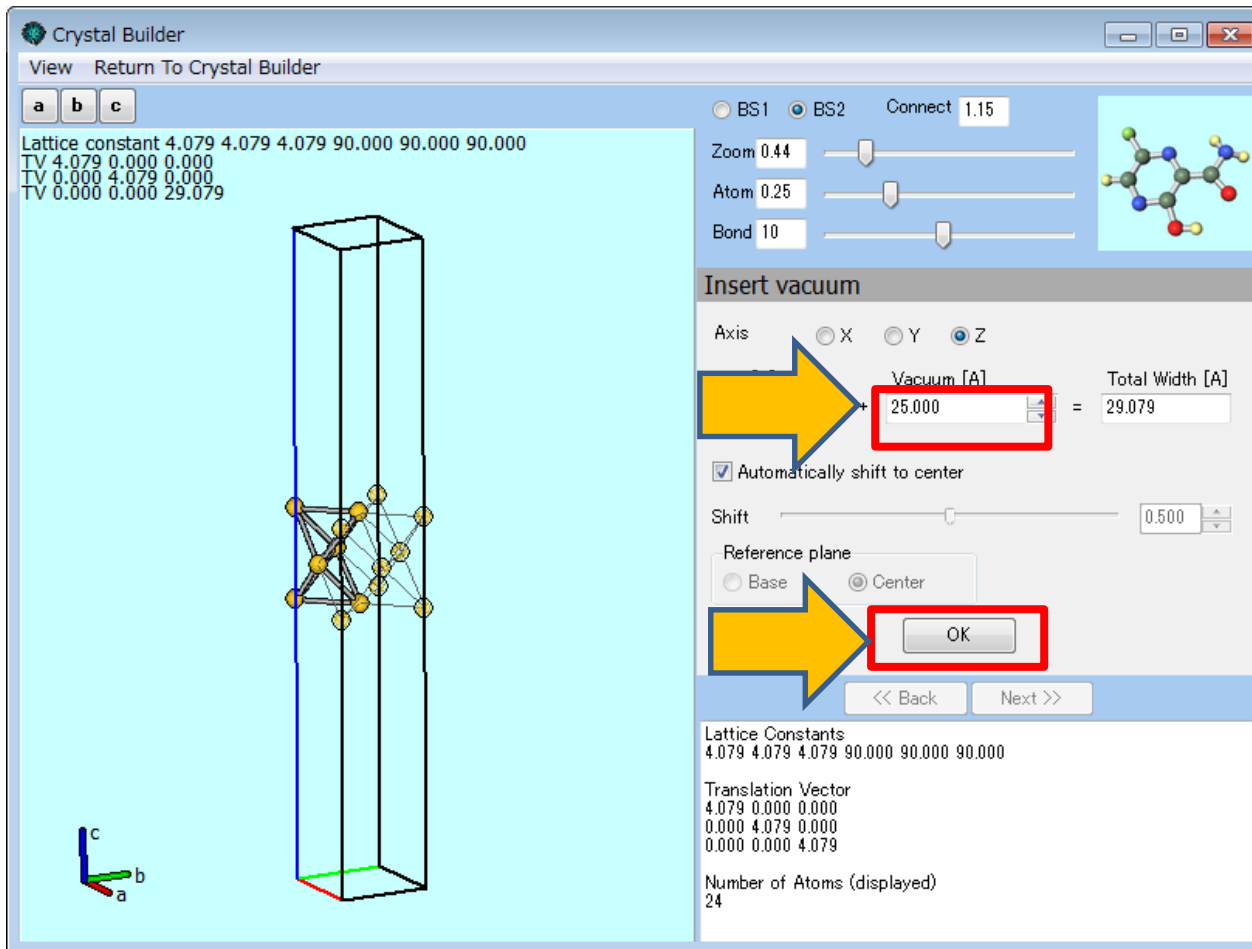
The image shows two screenshots of the Crystal Builder software interface. The left screenshot shows the 'Tool' menu with 'Insert Vacuum' highlighted in a red box. A yellow arrow points from the 'Tool' menu to the 'Insert Vacuum' option. Below this, a warning dialog box is displayed with the text: '[Insert Vacuum] requires to discard symmetry. Do you discard symmetry?'. The 'はい(Y)' (Yes) button is highlighted in a red box, with a yellow arrow pointing to it. A large blue arrow points from the dialog box towards the right screenshot. The right screenshot shows the 'Insert vacuum' dialog box with various settings: Axis (Z selected), Bulk [A] (4.079), Vacuum [A] (0.000), Total Width [A] (4.079), Shift (0.500), Reference plane (Center selected), and OK button. The main window shows a 3D model of a crystal structure with axes labeled a, b, and c.



# I. 結晶ビルダで初期座標の作成

Vacuumの項目に25と入力し、真空層の厚さを定義する。

OKを押すと真空層挿入モードは終了し、結晶ビルダ画面に遷移する。



# I. 結晶ビルダで初期座標の作成

結晶ビルダにてNextを押し、4/4 Stepまで進む。  
Saveボタンを押してCIFとして保存する。

Crystal Builder

File Edit View Tool Return To Winmostar

a b c

Lattice constant 4.079 4.079 29.079 90.000 90.000 90.000  
 TV 4.079 0.000 0.000  
 TV 0.000 4.079 0.000  
 TV 0.000 0.000 29.079

BS1 BS2 Connect 1.15

Zoom 0.46  
 Atom 0.25  
 Bond 10

Step 4/4 : Save

Format: CIF  
 Save as P1 CIF

Save

<< Back Next >>

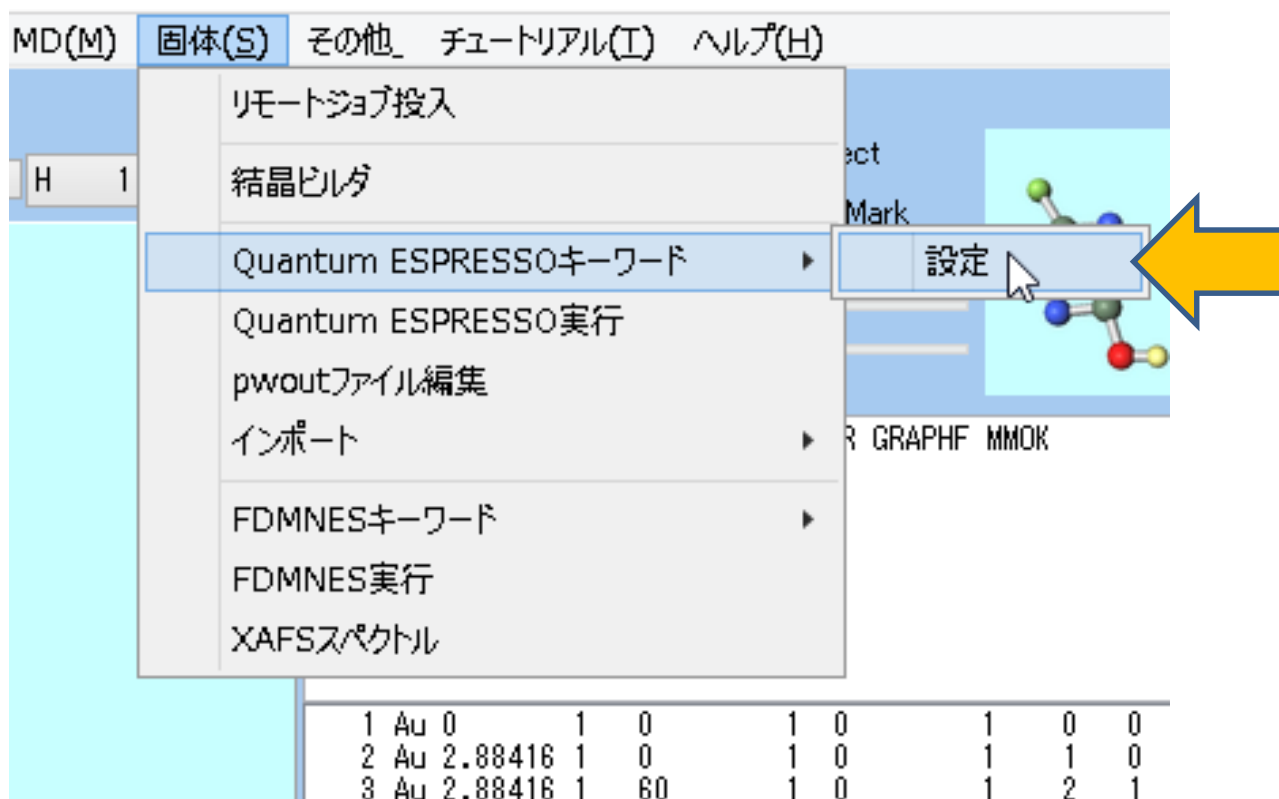
Lattice Constants  
 4.079 4.079 29.079 90.000 90.000 90.000

Translation Vector  
 4.079 0.000 0.000  
 0.000 4.079 0.000  
 0.000 0.000 29.079

Number of Atoms (displayed)  
 14

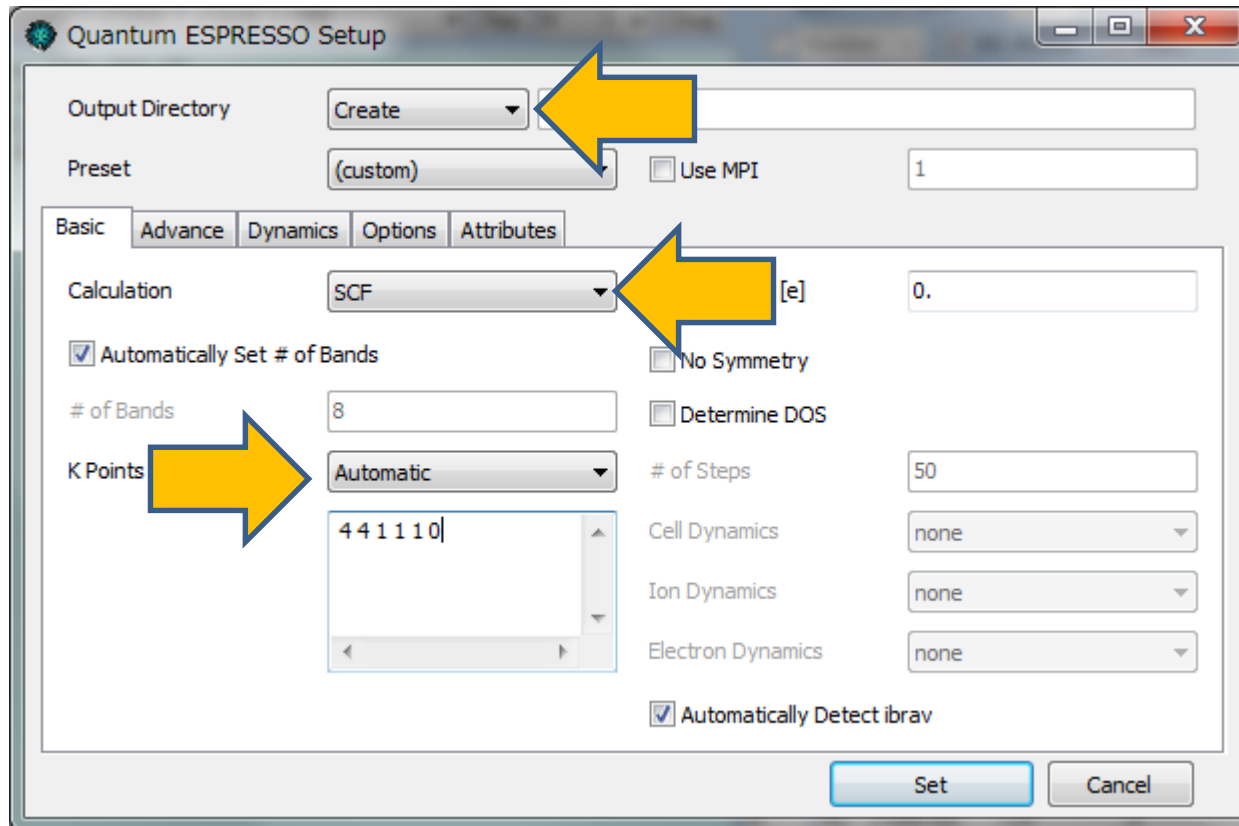
## II. SCF計算

「固体>Quantum ESPRESSOキーワード>設定」を選択する。



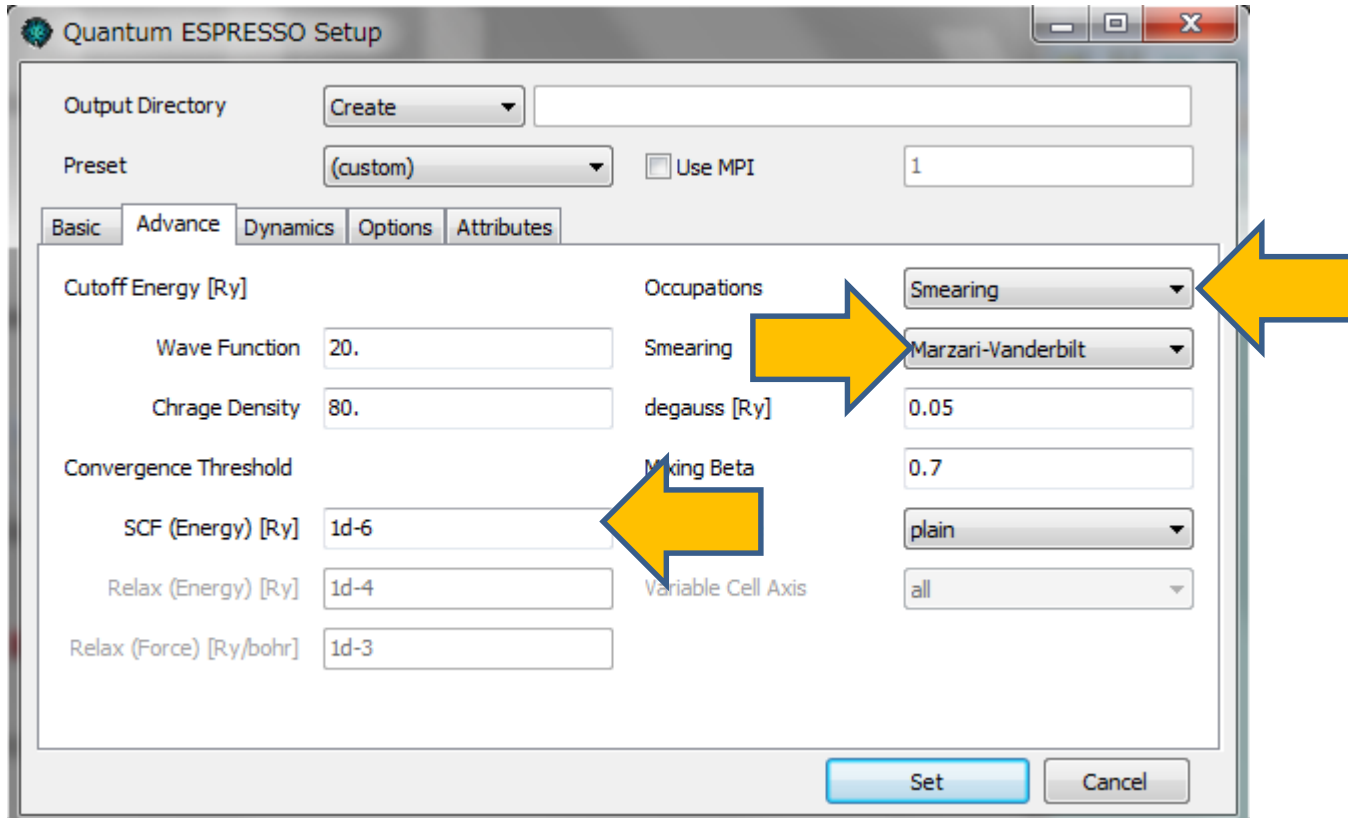
## II. SCF計算

まず、「Output Directory」に「Create」、「Preset」に「SCF」を指定する。  
次に「Basic」タブにて、「K Points」に「Automatic」を指定し、  
その下に「4 4 1 1 1 0」(スペース区切り)と入力する。



## II. SCF計算

「Advance」タブにて、「Occupations」に「Smearing」、  
「Smearing」に「Marzari-Vanderbilt」を指定する。  
次に「SCF (Energy)」に「1d-6」を指定する。

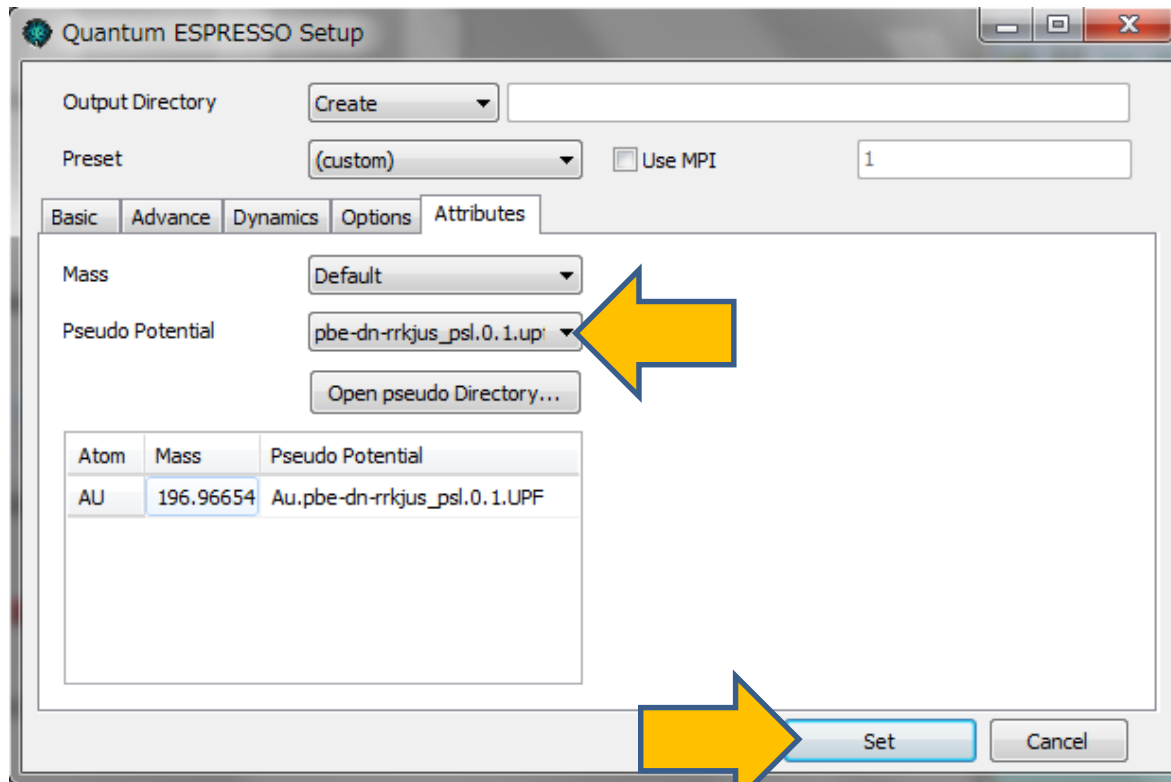


## II. SCF計算

「Attributes」タブにて、「Pseudo Potential」に「pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPF」を指定する。

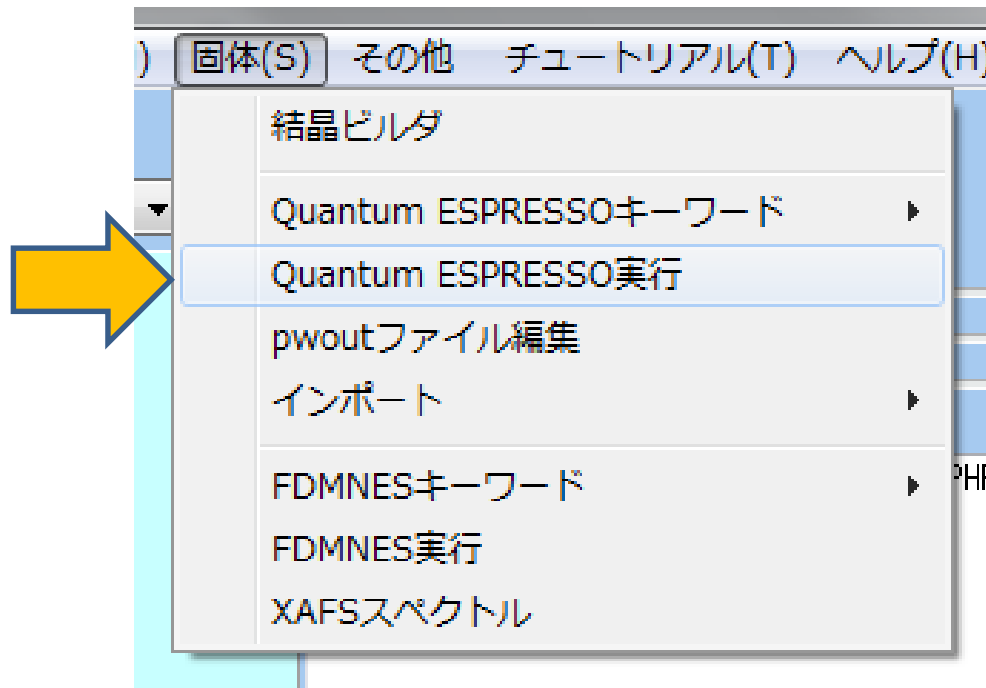
※ 無い場合は、P. 4の手順に従いpseudoファイルをpseudoフォルダに格納しWinmostarを再起動する。

最後に、右下の「Set」で設定する。



## II. SCF計算

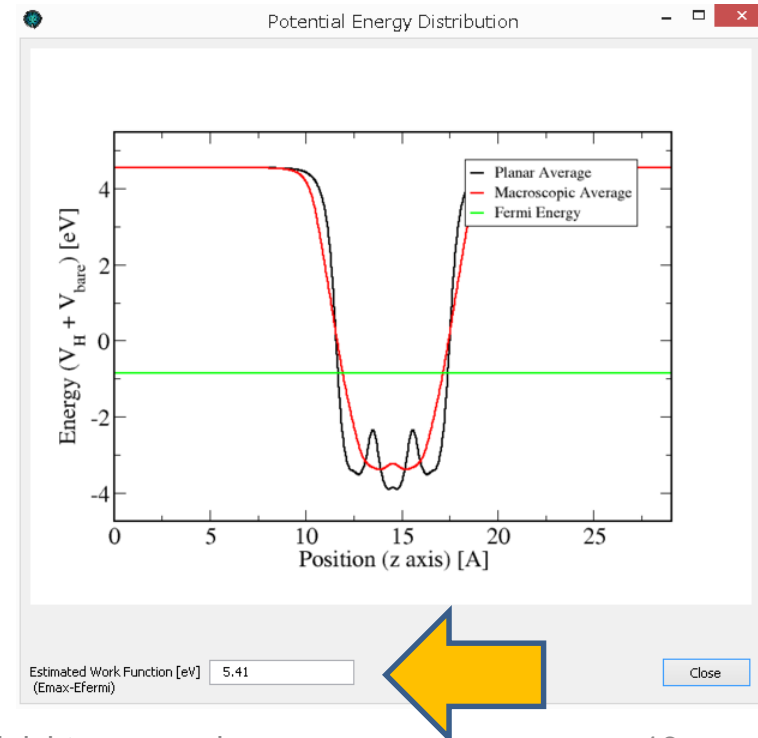
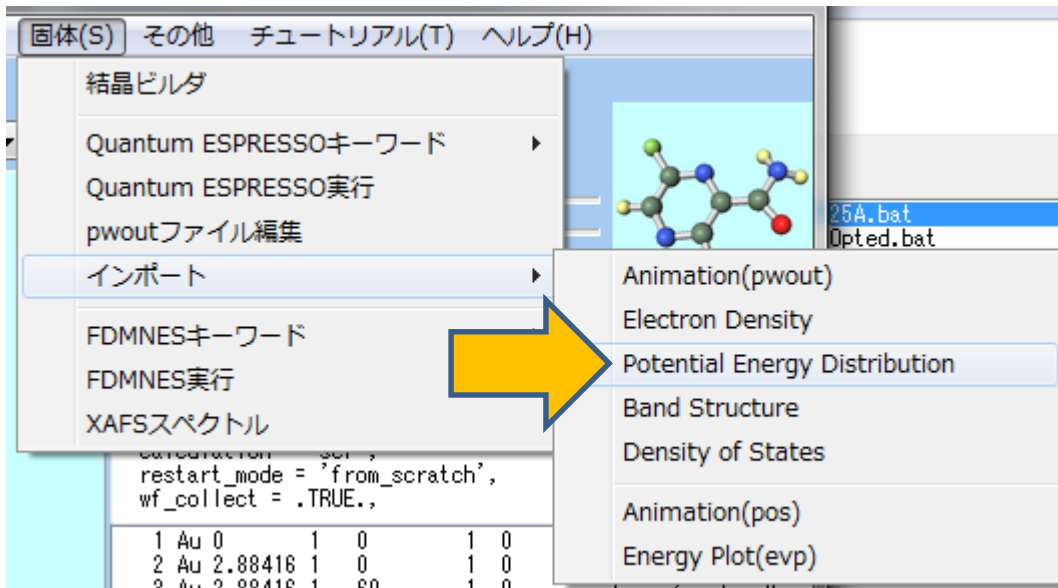
「固体>Quantum ESPRESSO実行」を選択する。  
実行前に、ファイルを保存するか聞かれるので「はい」とし、名前を付けて保存する。  
ここでは仮に「au\_slab.pwin」とする。



### III. 仕事関数

計算の終了後、「固体>インポート>Potential Energy Distribution」を選択し、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。

新しいウィンドウが立ち上がり、右図のような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。





facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.  
さんはFacebookを利用しています。  
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

**X-Ability Co.,Ltd.**  
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.  
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。  
[http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh\\_aui\\_detailpage\\_o00\\_s00...](http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...)

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程  
フロンティアオービタルによる新有機化学教程  
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)  
11月9日 21:38

いいね!