

Winmostar - Quantum ESPRESSO Tutorial 5

Effective Screening Medium (ESM)法

V6.018

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2016/07/01

修正履歴

2016/07/01版

- 初版

Contents

- I. 結晶ビルダで初期座標の作成
- II. constant- N 計算
- III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算
- IV. ESM計算のチェック

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
 に従い、Quantum ESPRESSOをインストールする。

② 以下のURLよりAl.pbe-n-van.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

Admin PP Database
 More about pseudopotentials
 Naming convention for the pseudopotential
 PSLibrary
 Unified Pseudopotential Format

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)

Apply Filter

「Al」をクリック

Classification controlled by Andrea Dal Corso

Al.pbe-n-van.UPF

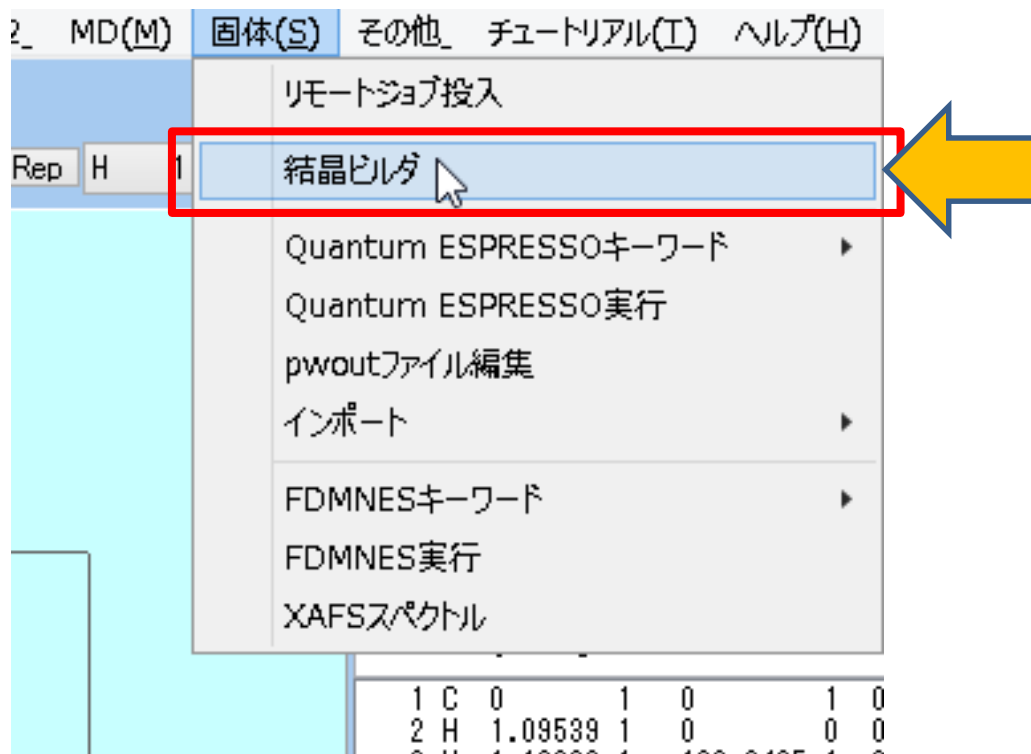
Pseudopotential type: ULTRASOFT
 Method: Vanderbilt ultrasoft
 Functional type: Perdew-Burke-Ernzerhof
 Nonlinear core correction
 scalar relativistic

Origin: Original QE PP library
 Generated by Vanderbilt code version 7.3.5
 More Information: [Al.pbe-n-van.txt](#)
 Uploaded by Erica Vidal
 Classification controlled by Paolo Giannozzi

「Al.pbe-n-van.UPF」を右クリックし保存

1. 結晶ビルダで初期座標の作成1

「固体>結晶ビルダ」から結晶ビルダを起動する。



1. 結晶ビルダで初期座標の作成2

結晶ビルダにて「Space Group」が「P1」の状態、格子定数にa=5.411, b=5.411を指定し、「Next」をクリックする。

Step 1/4 : Lattice

Lattice

Crystal System [001-230] : All Systems

Space Group 1 P 1

Setting 1

Lattice Constants

	a	b	c
Length(Å)	5.411000	5.411000	5.000000
Angle(°)	90.000000	90.000000	90.000000

<< Back Next >>

1. 結晶ビルダで初期座標の作成3

原子種をCからAlに変更し、座標を0, 0, 0.5に変更する。

File Edit View Tool Return To Winmostar

a b c

Lattice constant 5.411 5.411 5.000 90.000 90.000 90.000
 TV 5.411 0.000 0.000
 TV 0.000 5.411 0.000
 TV 0.000 0.000 5.000

BS1 BS2 Connect 1.15

Zoom 1

Atom 0.25

Bond 10

Step 2/4 : Asymmetric Unit

Add Remove

Atom	x	y	z
Al	0.000000	0.000000	0.5

<< Back Next >>

Lattice Constants
 5.411 5.411 5.000 90.000 90.000 90.000

Translation Vector
 5.411 0.000 0.000
 0.000 5.411 0.000
 0.000 0.000 5.000

Number of Atoms (displayed)
 4

I. 結晶ビルダで初期座標の作成4

「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 screenshot illustrates the process of inserting a vacuum layer in Crystal Builder. It shows the 'Tool' menu with 'Insert Vacuum' selected. A warning dialog box prompts the user to confirm discarding symmetry, with 'はい(Y)' (Yes) highlighted. The 'Insert Vacuum' dialog box is shown with a 3D model of a cube and settings for Bulk, Vacuum, and Total Width.

I. 結晶ビルダで初期座標の作成5

Vacuumの項目に17.5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。

View Return To Crystal Builder

a b c

Lattice constant 5.411 5.411 5.000 90.000 90.000 90.000
 TV 5.411 0.000 0.000
 TV 0.000 5.411 0.000
 TV 0.000 0.000 22.500

BS1 BS2 Connect 1.15

Zoom 0.65

Atom 0.25

Bond 10

Insert vacuum

Axis X Y Z

Build [Å] Vacuum [A] Total Width [A]
 5 17.500 = 22.500

Automatically shift to center

Shift 0.500

Reference plane Base Center

OK

<< Back Next >>

Lattice Constants
 5.411 5.411 5.000 90.000 90.000 90.000

Translation Vector
 5.411 0.000 0.000
 0.000 5.411 0.000
 0.000 0.000 5.000

Number of Atoms (displayed)
 4

1. 結晶ビルダで初期座標の作成6

結晶ビルダにてNextを押し、2/4 Stepまで進む。
原子のz座標を0に変更し、Nextを押し。

File Edit View Tool Return To Winmostar

a b c

Lattice constant 5.411 5.411 22.500 90.000 90.000 90.000
 TV 5.411 0.000 0.000
 TV 0.000 5.411 0.000
 TV 0.000 0.000 22.500

○ BS1 ● BS2 Connect 1.15

Zoom 0.65
 Atom 0.25
 Bond 10

Step 2/4 : Asymmetric Unit

Atom	z
Al	0.000000

Next >>

Lattice Constants
 5.411 5.411 22.500 90.000 90.000 90.000

Translation Vector
 5.411 0.000 0.000
 0.000 5.411 0.000
 0.000 0.000 22.500

Number of Atoms (displayed)
 8

I. 結晶ビルダで初期座標の作成7

Repeat数をa方向、b方向それぞれ2とし、Nextを押す。

File Edit View Tool Return To Winmostar

a b c

Lattice constant 5.411 5.411 22.500 90.000 90.000 90.000
 TV 5.411 0.000 0.000
 TV 0.000 5.411 0.000
 TV 0.000 0.000 22.500

○ BS1 ● BS2 Connect 1.15

Zoom 0.5
 Atom 0.25
 Bond 10

Step 3/4 : Options

Repeat
 a: - 2 + b: - 2 + c: - 1 +

Shift
 a: 0.000
 b: 0.000
 c: 0.000

Next >>

Lattice Constants
 5.411 5.411 22.500 90.000 90.000 90.000

Translation Vector
 5.411 0.000 0.000
 0.000 5.411 0.000
 0.000 0.000 22.500

Number of Atoms (displayed)
 18

I. 結晶ビルダで初期座標の作成7

Saveを押し、CIF形式で保存する。ここでは仮に、al_slab.cifという名前で保存する。

File Edit View Tool Return To Winmostar

a b c

Lattice constant 5.411 5.411 22.500 90.000 90.000 90.000
 TV 5.411 0.000 0.000
 TV 0.000 5.411 0.000
 TV 0.000 0.000 22.500

BS1 BS2 Connect 1.15

Zoom 0.5

Atom 0.25

Bond 10

Step 4/4 : Save

Format: CIF

Save as P1 CIF

Save

<< Back Next >>

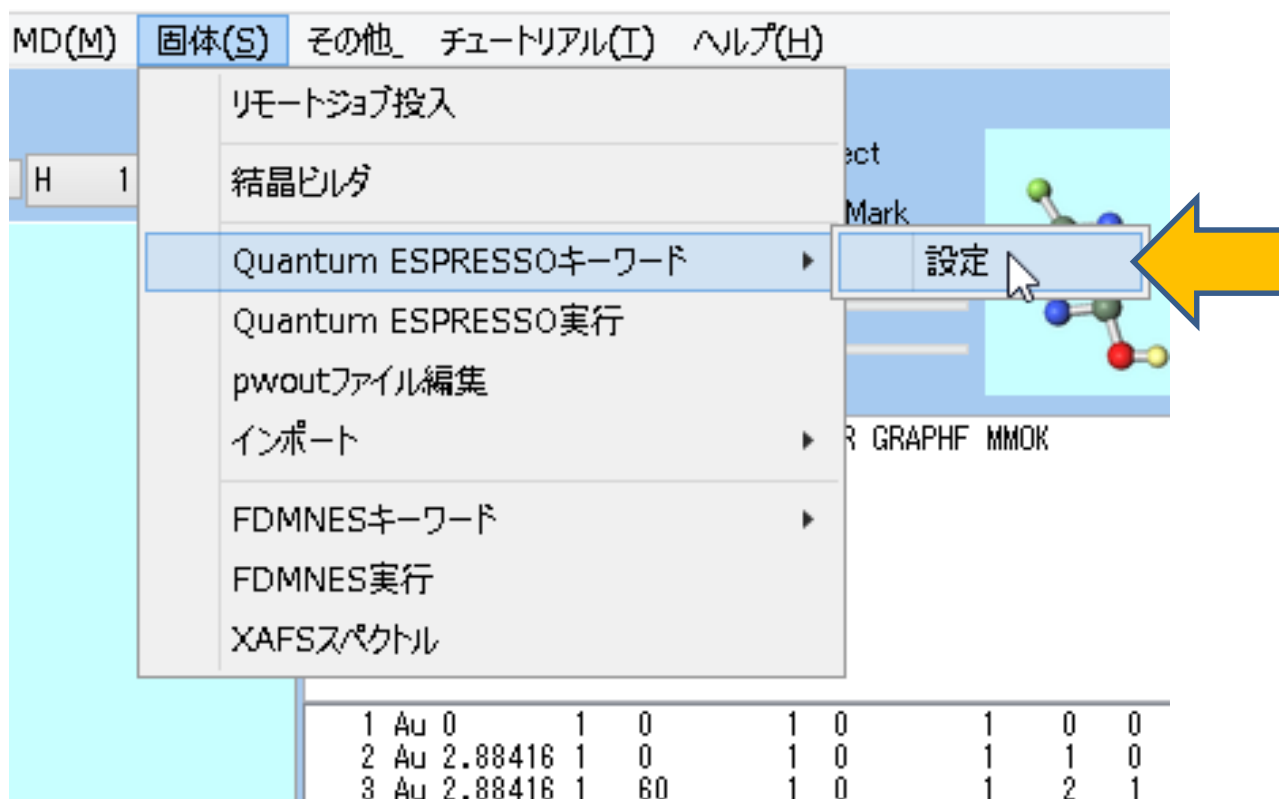
Lattice Constants
 5.411 5.411 22.500 90.000 90.000 90.000

Translation Vector
 5.411 0.000 0.000
 0.000 5.411 0.000
 0.000 0.000 22.500

Number of Atoms (displayed)
 18

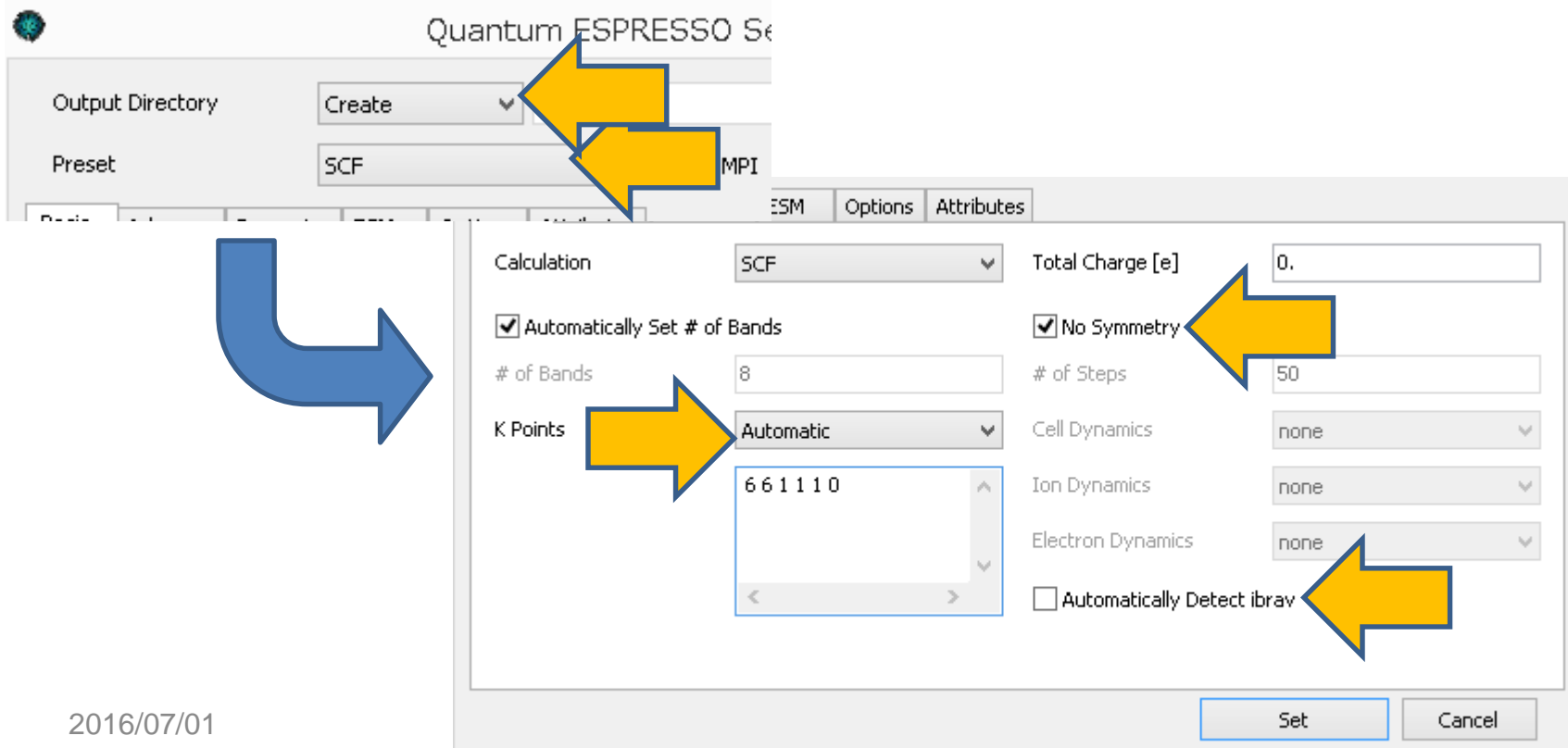
II. constant- N 計算1

「固体>Quantum ESPRESSOキーワード>設定」を選択する。



II. constant-*N*計算2

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「6 6 1 1 1 0」
(スペース区切り)と入力する。(この時点で「Preset」の表示は「(custom)」に変わる)
「No Symmetry」にチェックを入れ、「Automatically Convert to Primitive Cell」のチェック
を外す。



II. constant-N計算3

「Advance」タブにて、「Occupations」に「Smearing」、
「Smearing」に「Methfessel-Paxton」、「degauss」に「0.03」、
「Mixing Beta」に「0.3」を指定する。

Basic		Advance	Dynamics	ESM	Options	Attributes
Cutoff Energy [Ry]		Occupations		Smearing		Smearing
Wave Function	20.	Smearing		Methfessel-Paxton		Methfessel-Paxton
Charge Density	80.	degauss [Ry]		0.03		0.03
Convergence Threshold		Mixing Beta		0.3		0.3
SCF (Energy) [Ry]	1d-6	Mixing Mode		plain		plain
Relax (Energy) [Ry]	1d-4	Variable Cell Axis		all		all
Relax (Force) [Ry/bohr]	1d-3	vdW Correction		None		None
Electron Max Step	100					

II. constant- μ 計算4

「ESM」タブにて、「Enable ESM Method」にチェックを入れ、
「Boundary Condition」に「Vacuum-slab-metal (bc3)」を指定する。

Basic Advance Dynamics **ESM** Options Attributes

Enable ESM Method Enable Constant- μ

Boundary Condition Vacuum-slab-metal (bc3) Target Fermi Energy [Ry] 0.

Electric Field [Ry/bohr] 0. Enter Relative Potential...

Citation

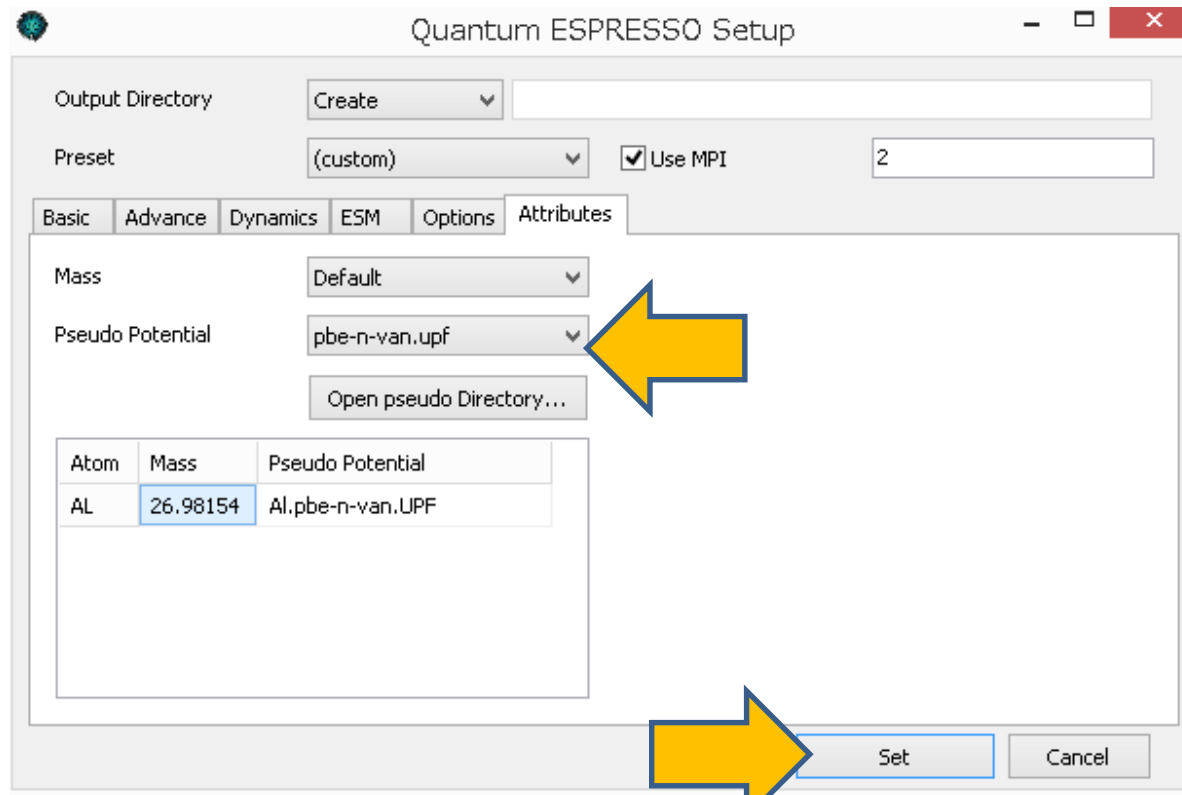
M. Otani and O. Sugino, PRB 73, 115407, (2006).
N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugino and M. Otani, PRL 109, 266101, (2012).

II. constant- N 計算5

「Attributes」タブにて、「Pseudo Potential」に「pbe-n-van.upf」を指定する。

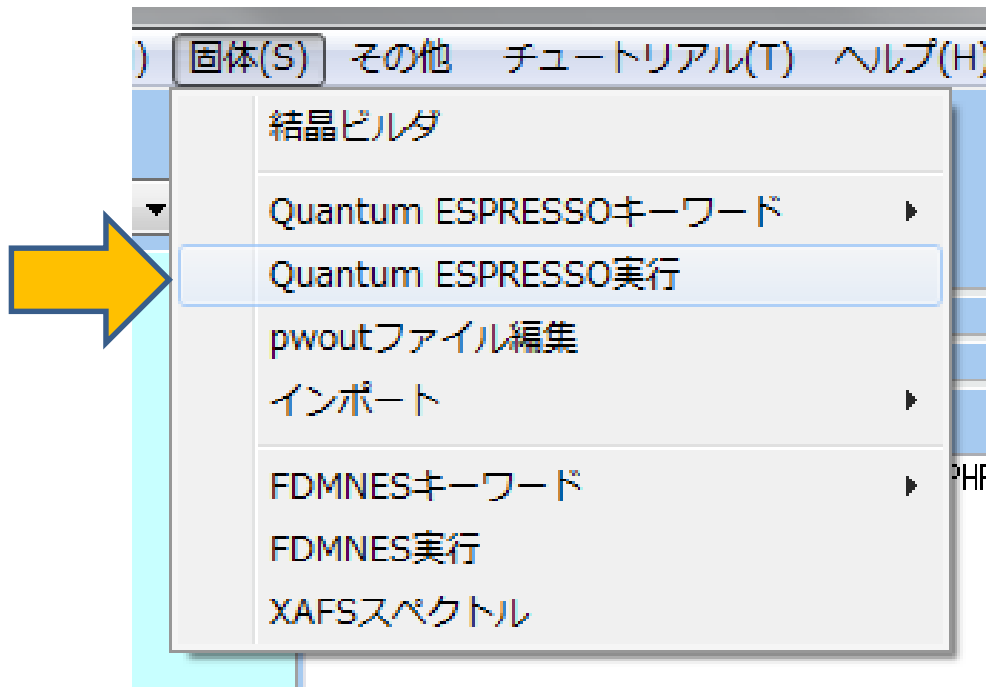
※ 無い場合は、P. 4の手順に従いpseudoファイルをpseudoフォルダに格納しWinmostarを再起動する。

最後に、右下の「Set」で設定する。



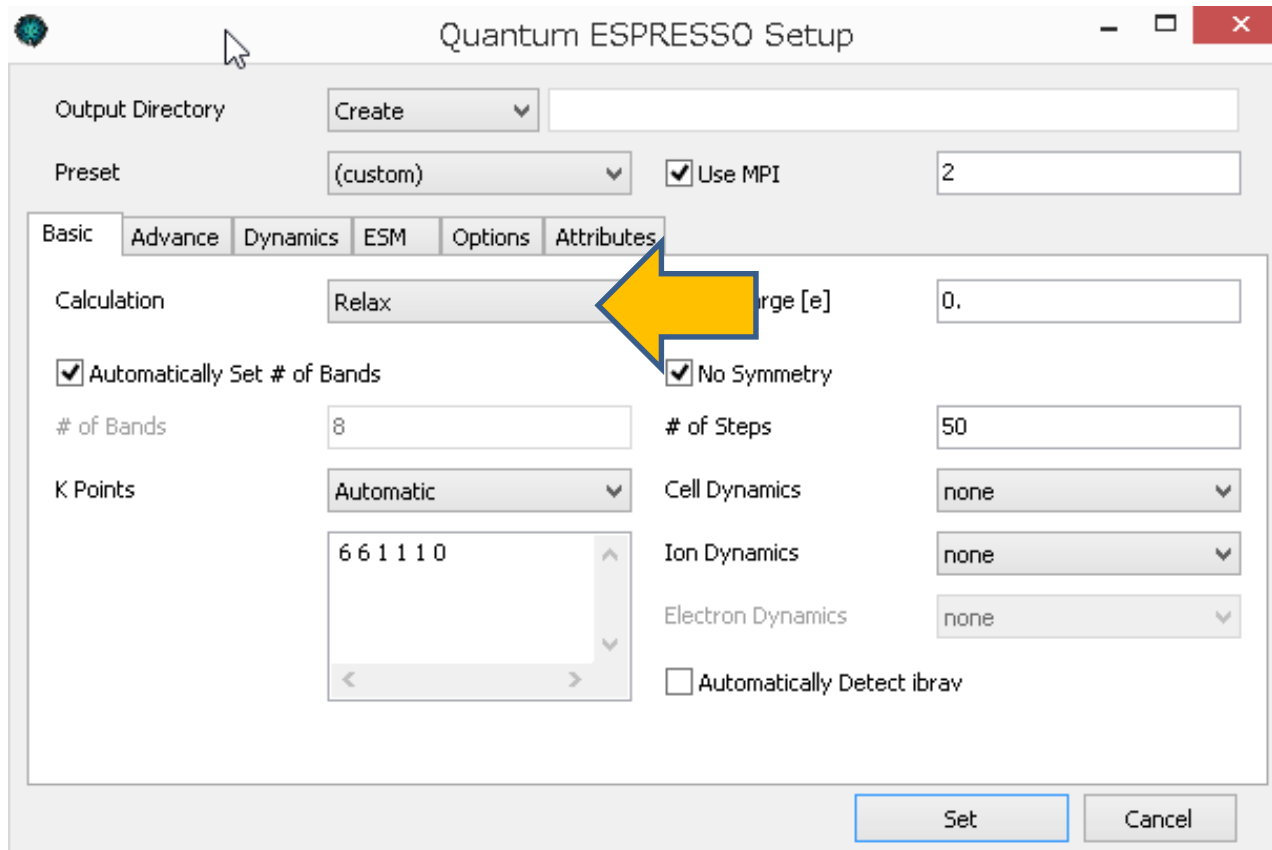
II. constant- N 計算6

「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「al_slab_v0.pwin」とする。



III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算1

計算終了後、「固体>Quantum ESPRESSOキーワード>設定」より、「Basic」タブにおいて「Calculation」に「Relax」を選ぶ。



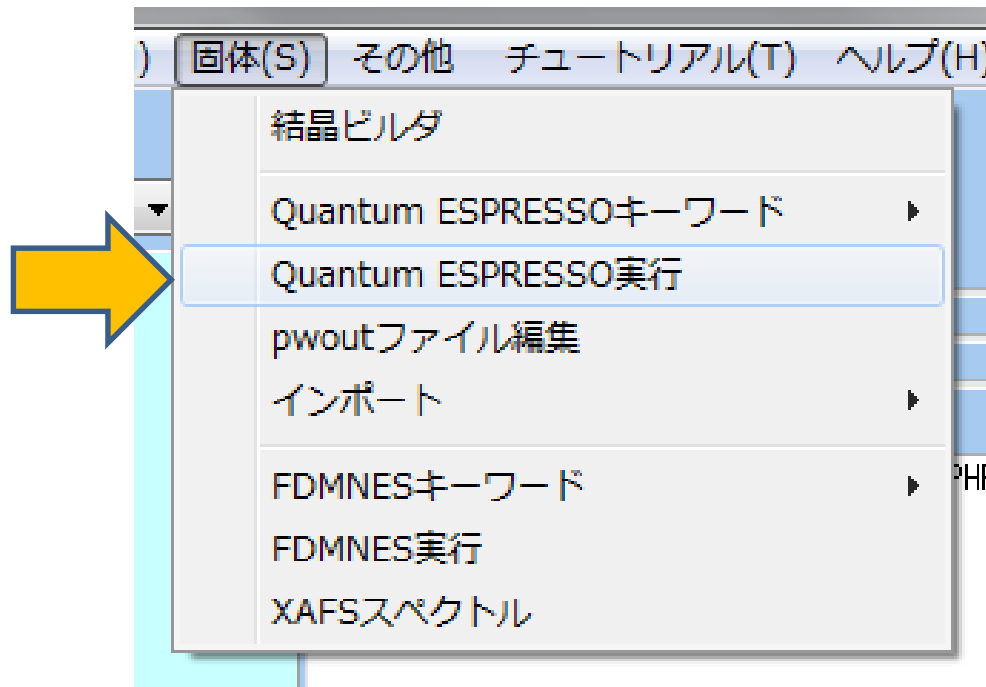
III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算2

「ESM」タブにおいて「Enable Constant- μ 」にチェックを入れる。
 「Enter Relative Potential...」を押す。基準(0.0 V)とする計算の出力ファイルを聞かれる。
 先ほどの「al_slab_v0.pwout」を指定し、「Relative Potential」に0.5 [V]を指定し、「OK」を押す。
 設定内容を確認するダイアログが出現するので「はい」をクリックし、「Set」を押す。

The image shows a sequence of three windows from the Quantum ESPRESSO software interface. The first window is the 'Quantum ESPRESSO Setup' dialog, with the 'ESM' tab selected. In this tab, the 'Enable ESM Method' and 'Enable Constant- μ ' checkboxes are checked. The 'Target Fermi Energy [Ry]' is set to -3.033. A yellow arrow points to the 'Enter Relative Potential...' button. A blue arrow points from this button to the second window, 'Enter Relative Potential', where the 'Relative Potential [V]' is set to 0.5. A yellow arrow points to the 'OK' button in this dialog. A blue arrow points from the 'OK' button to the third window, '情報' (Information), which displays a message: 'The reference Fermi energy and relative potential would be set to -3.033 eV and 0.500 V, respectively.' A yellow arrow points to the 'はい(Y)' (Yes) button in this dialog. The 'Set' button in the first dialog is also highlighted with a yellow arrow.

III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算3

「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「al_slab_v05.pwin」とする。



III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算4

計算終了後、「固体>インポート>Animation(pwout)」を選択する。
デフォルトで直前の計算の出力 (al_slab_v05.pwout)が選ばれるのでそのまま開く。
Animationウインドウのリストの9カラム目にはTotal Chargeが表示されており、右下のプルダウンで「9」を選ぶとTotal Chargeの変化をグラフで確認することができる。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 3D model of a slab structure. The 'Animation' window is open, showing a table of simulation results. The table has 9 columns, with the 9th column labeled 'Charge'. The data for the first four steps is as follows:

STEP	Etot	Ry	Ftot	Charge
0	-48.89328202	0.000184	0.000184	0.0000
1	-48.89346514	0.000229	0.000229	-0.0184
2	-48.89382296	0.000219	0.000219	-0.0316
3	-48.89390047	0.000208	0.000208	-0.0336

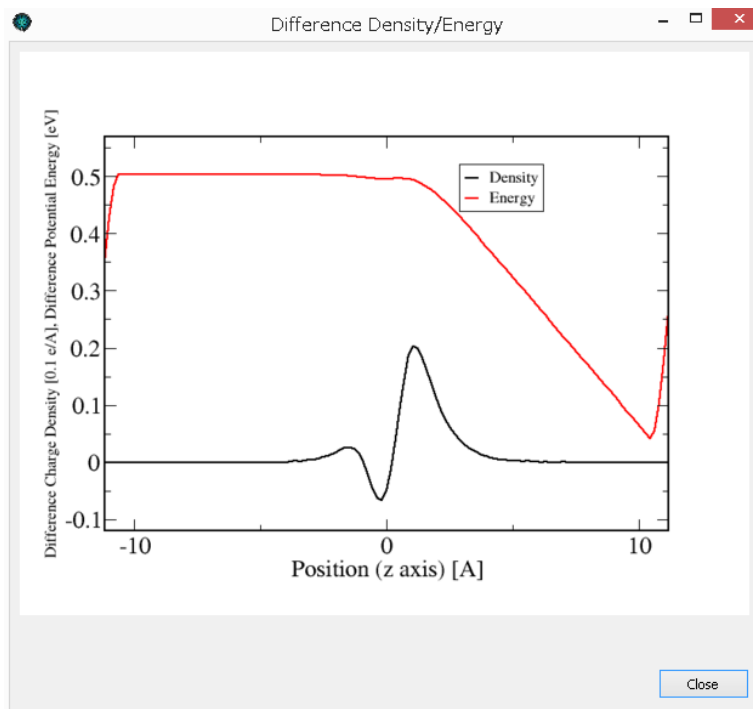
The 'Charge' column values are highlighted in blue in the original image. A red dashed box highlights the table and the '9' in the dropdown menu. A yellow arrow points to the dropdown menu.

IV. ESM計算のチェック

「固体＞インポート＞Difference Density/Energy(esm1)」を選択し、最初に計算したesm1ファイル(al_slab_v0_qe_data/wm.esm1)を、次に印加電圧0.5 Vのesm1ファイル(al_slab_v05_qe_data/wm.esm1)を選択する。

新しいウィンドウが立ち上がり、右図のような差電荷密度および、差エネルギー分布が得られる。

ここでは、 $z=0$ (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されたい。



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...

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!