

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

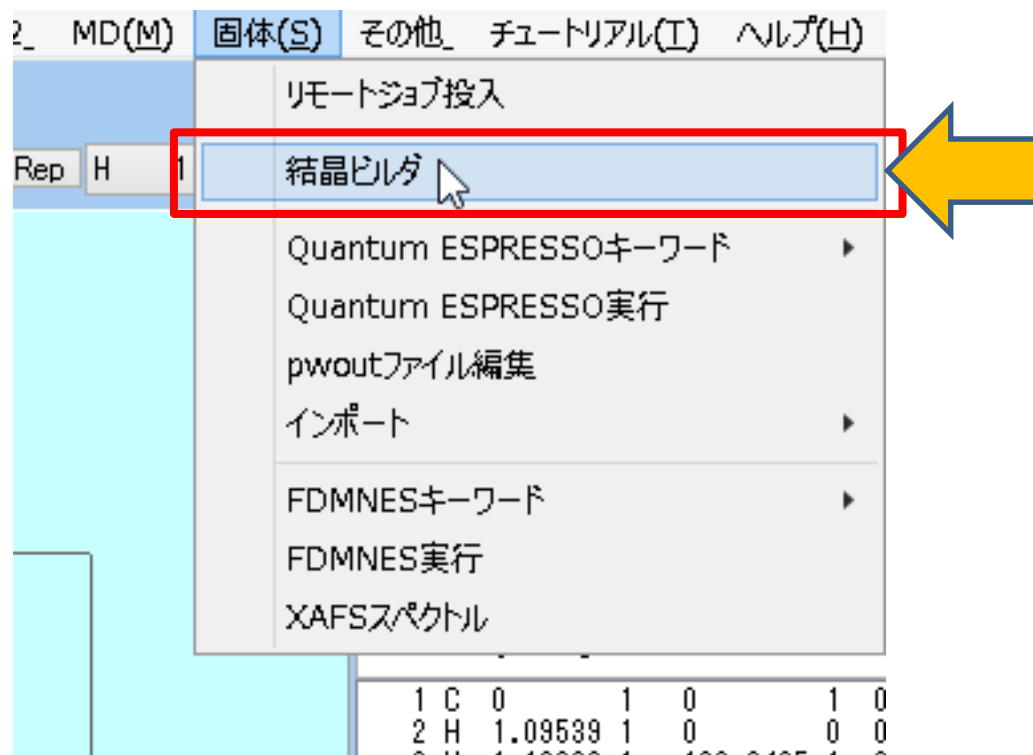
Pseudopotential type: ULTRASOFT
 Method: Vanderbilt ultrasoft
 Functional type: Perdew-Burke-Ernzerhof
 Nonlinear core correction
 scalar relativistic

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

1. 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 image shows a sequence of steps in the Crystal Builder software:

- Crystal Builder Interface:** The 'Tool' menu is open, and 'Insert Vacuum' is highlighted with a red box. A yellow arrow points from the 'a', 'b', and 'c' axis buttons to the 'Insert Vacuum' option.
- Warning Dialog:** A dialog box titled '警告' (Warning) asks: 'Symmetry must be discarded before inserting vacuum. Do you really want to discard symmetry?'. The 'はい(Y)' (Yes) button is highlighted with a red box and a yellow arrow.
- Insert Vacuum Panel:** The 'Insert vacuum' configuration panel is shown. It includes:
 - Axis selection: X, Y, Z
 - Dimensions: Bulk [A] = 5.000, Vacuum [A] = 0.000, Total Width [A] = 5.000
 - Options: Automatically shift to center, Shift = 0.500
 - Reference plane: Base, Center
 - Buttons: OK, << Back, Next >>
 - Summary: 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
- 3D View:** A 3D model of a crystal unit cell is shown with axes 'a', 'b', and 'c'.

A large blue arrow points from the warning dialog towards the 3D view, indicating the flow of the process.

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

Add Remove

Atom	x	y	z
Al	0.000000		0.0

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。

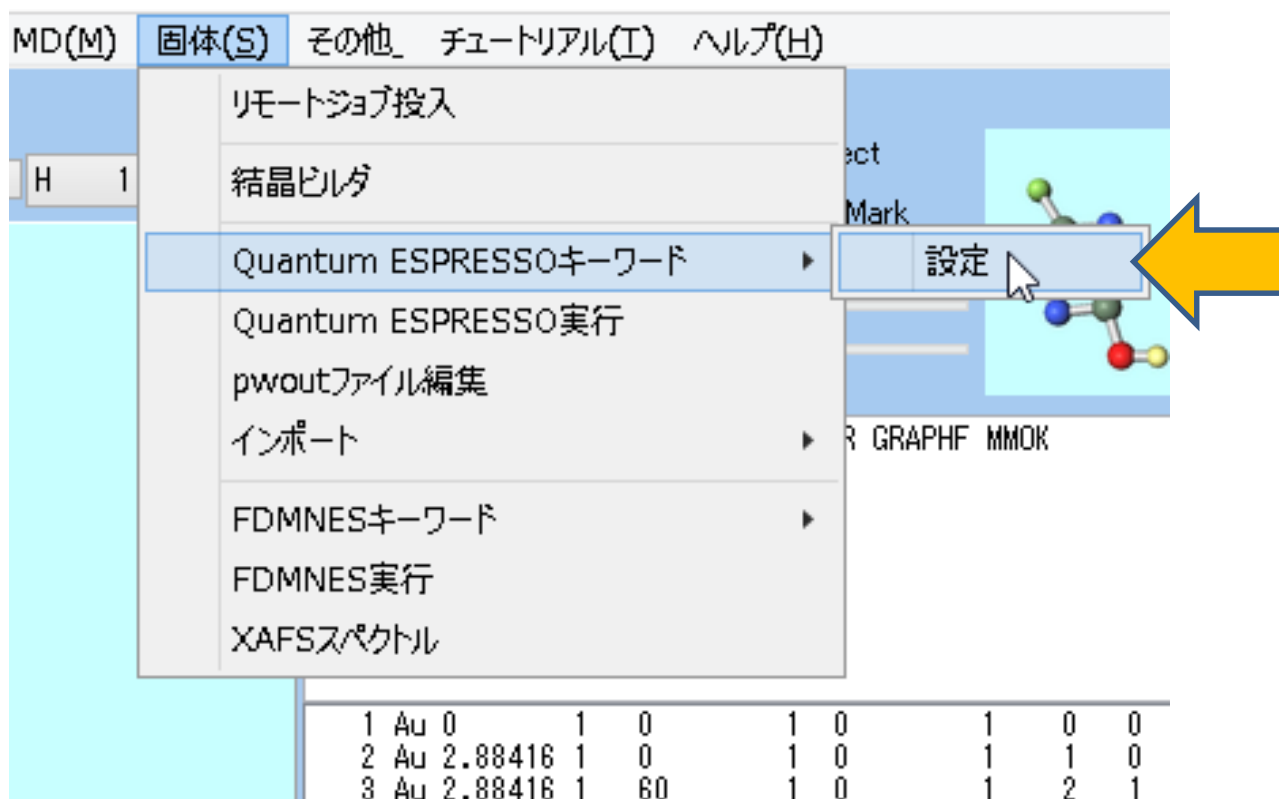
The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 3D model of a crystal structure with atoms represented by spheres and bonds by lines. The interface includes a menu bar (File, Edit, View, Tool, Return To Winmostar) and a toolbar with buttons for 'a', 'b', and 'c'. The left panel shows lattice constants and translation vectors:

```
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
```

The right panel shows a 'Step 4/4 : Save' dialog box. The 'Format' is set to 'CIF' and the 'Save as' field contains 'P1 CIF'. A yellow arrow points to the 'Save' button, which is highlighted with a red border. Below the dialog box, the 'Lattice Constants' and 'Translation Vector' are repeated, along with the 'Number of Atoms (displayed)' which is 18.

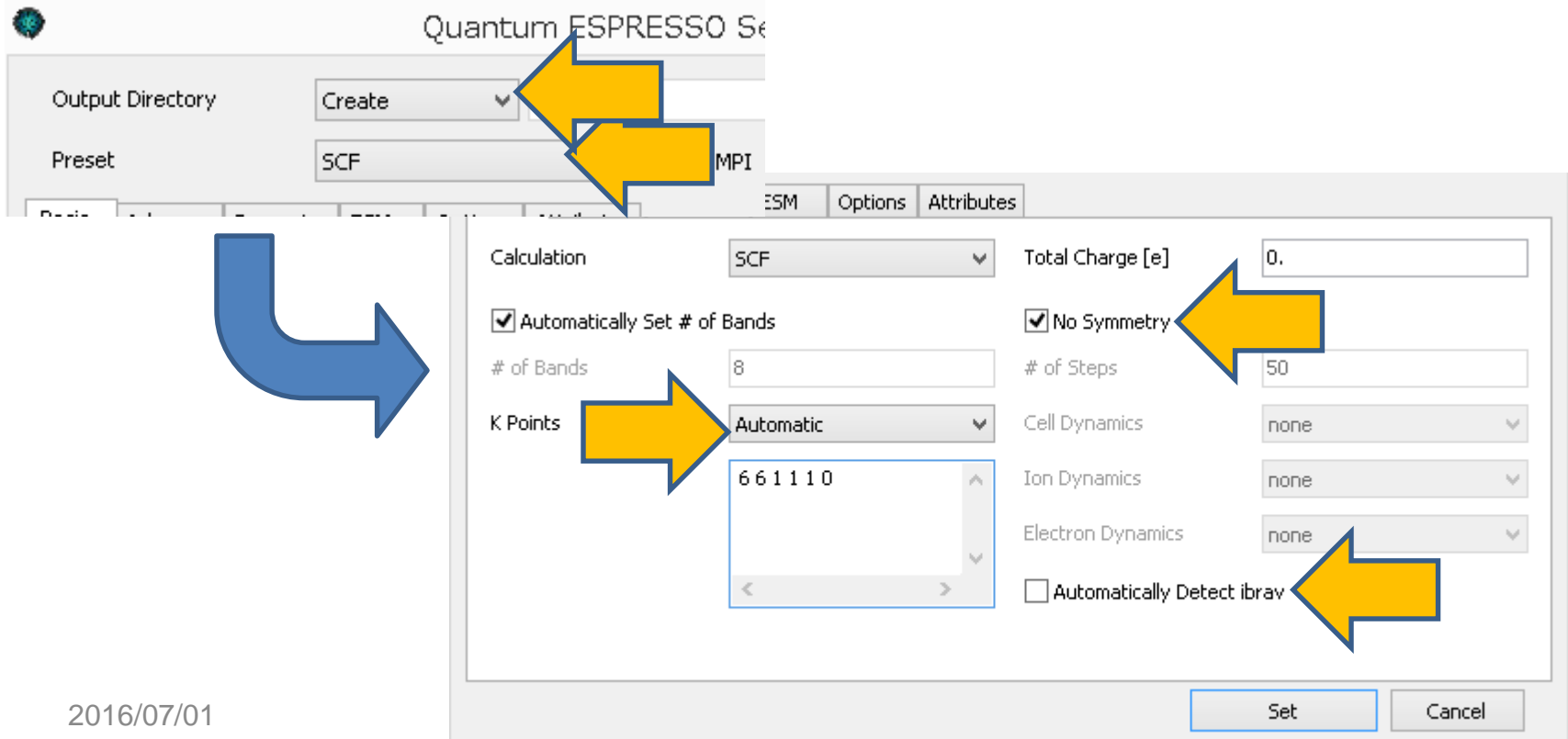
II. constant- N 計算1

「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	
Wave Function	20.	Smearing		Methfessel-Paxton	
Charge Density	80.	degauss [Ry]		0.03	
Convergence Threshold		Mixing Beta		0.3	
SCF (Energy) [Ry]	1d-6	Mixing Mode		plain	
Relax (Energy) [Ry]	1d-4	Variable Cell Axis		all	
Relax (Force) [Ry/bohr]	1d-3	vdW Correction		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

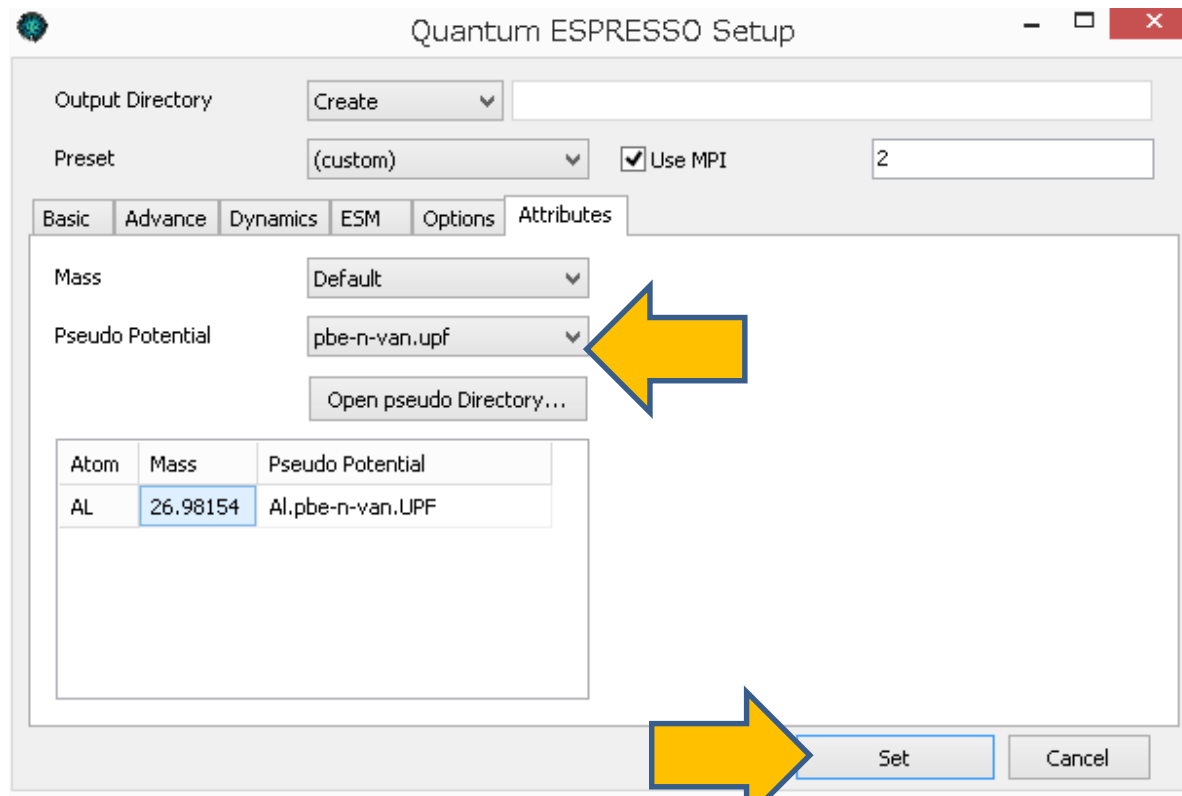
M. Otani and O. Sugino, PRB 73, 115407, (2006).
N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugino and M. Otani, PRL 109, 266101, (2012).

II. constant- N 計算5

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

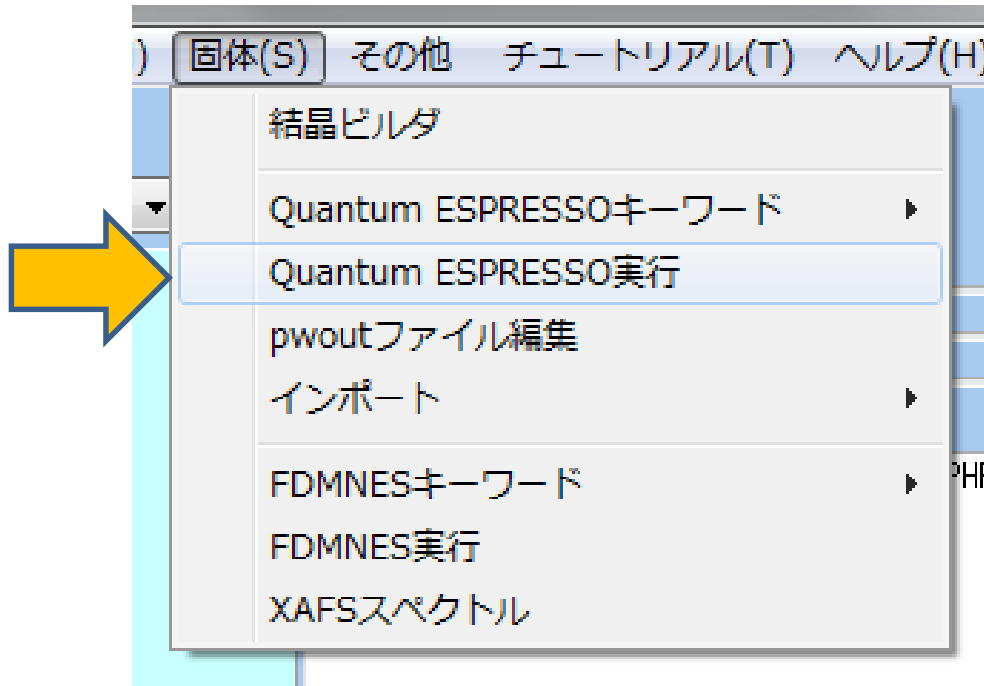
※ 無い場合は、P. 4の手順に従いpseudoファイルをpseudoフォルダに格納しWinmostarを再起動する。

最後に、右下の「Set」で設定する。



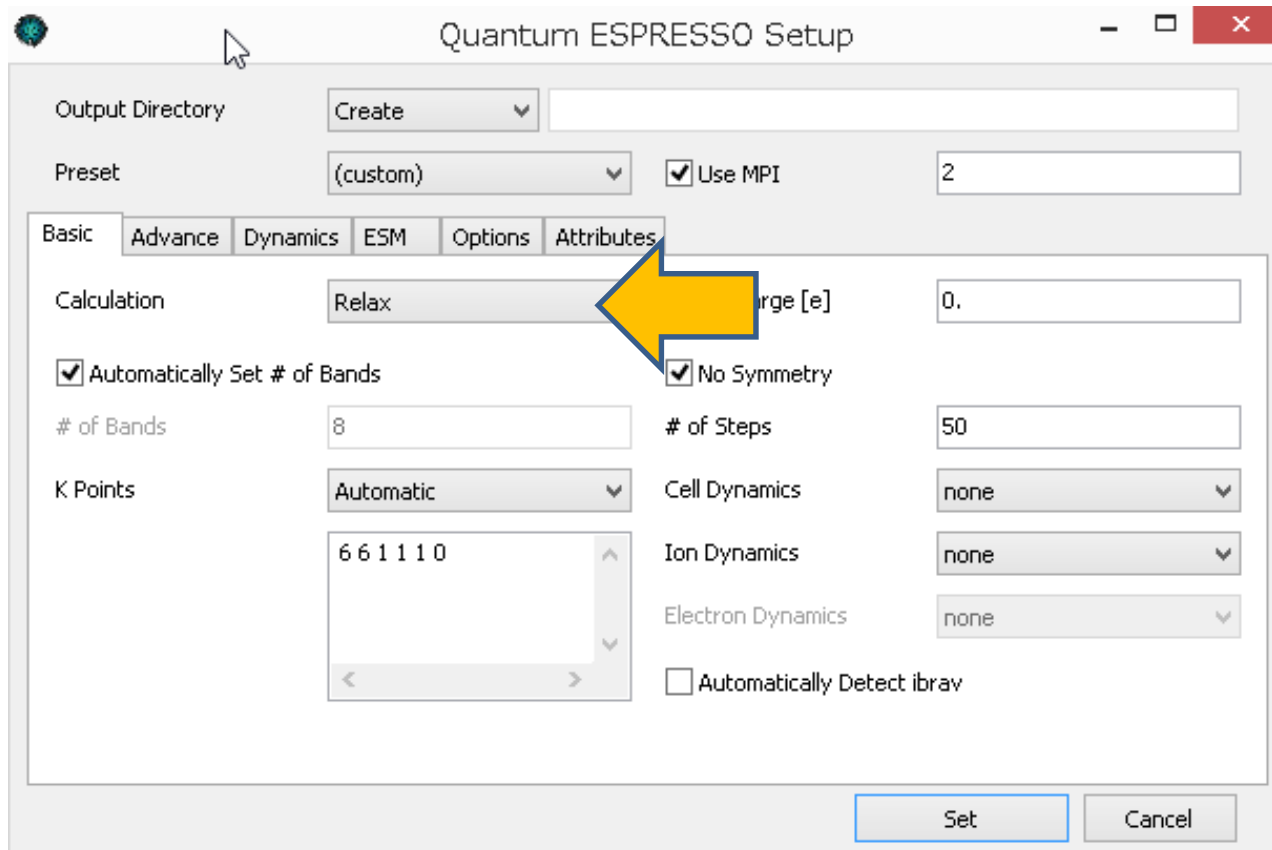
II. constant- N 計算6

「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。



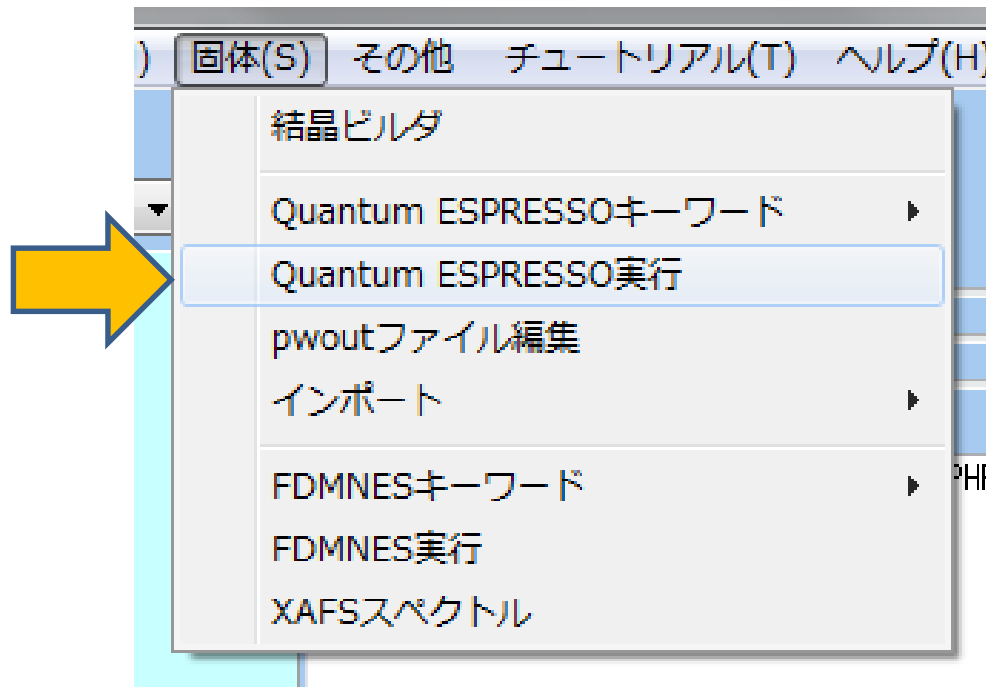
III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算2

「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 steps in the Quantum ESPRESSO Setup interface. In the main 'ESM' tab, the 'Enable Constant- μ ' checkbox is checked. A yellow arrow points to this checkbox. Another yellow arrow points to the 'Enter Relative Potential...' button. A blue arrow points from this button to a secondary dialog box titled 'Enter Relative Potential', where 'Relative Potential [V]: 0.5' is entered and the 'OK' button is highlighted with a yellow arrow. A blue arrow points from the 'Set' button in the main dialog to an '情報' (Information) dialog box. This dialog box contains the 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 box.

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 Animation window with the following data table:

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

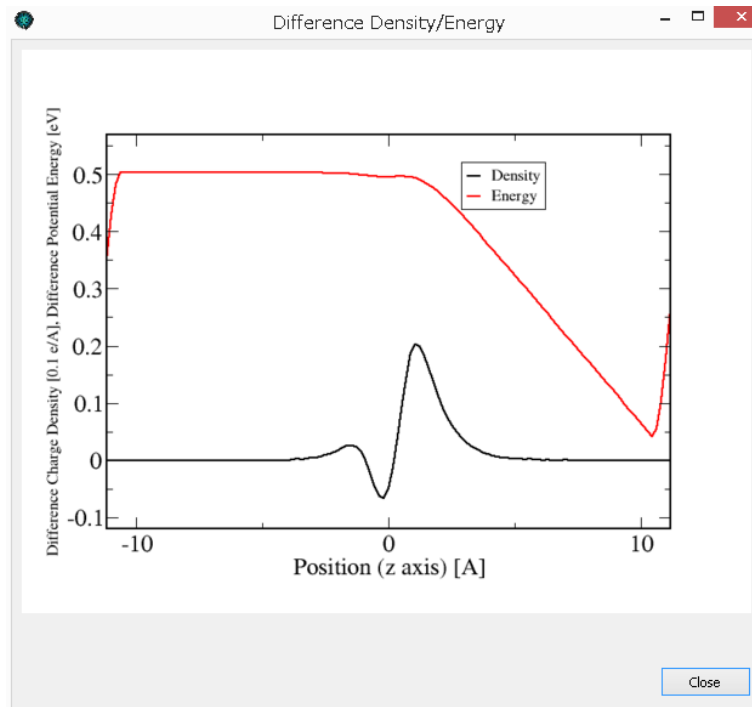
The dropdown menu at the bottom right is set to '9', and a graph below it shows the Total Charge decreasing from 0.0000 to -0.033600000 over the steps.

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!