

Winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

仕事関数

V7.016

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/4/5

Contents

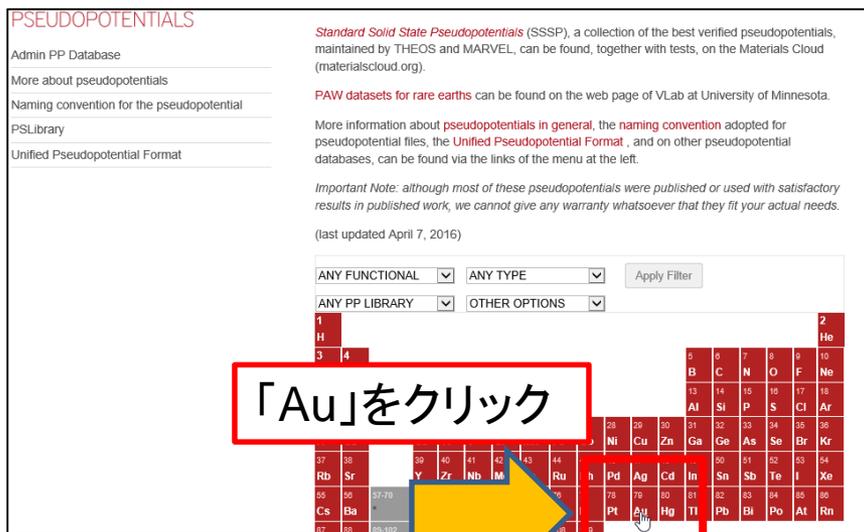
- I. SCF計算
- II. 仕事関数

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
 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-esspresso.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.

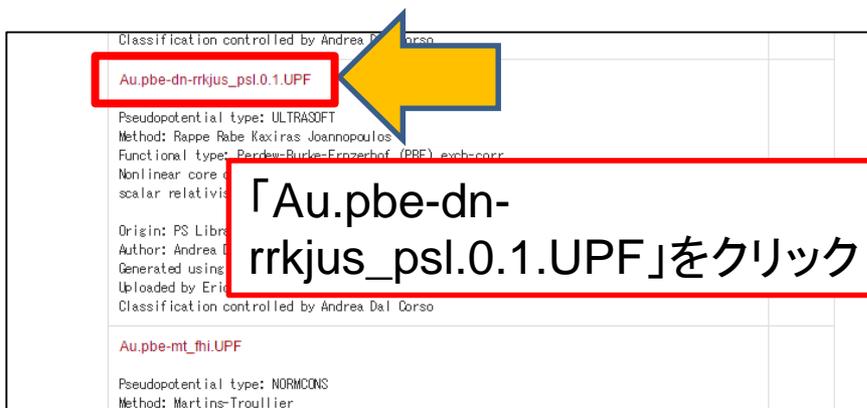
Important Note: although most of these pseudopotentials were published or used with satisfactory results in published work, we cannot give any warranty whatsoever that they fit your actual needs.

(last updated April 7, 2016)

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), exch-corr:
 Nonlinear core
 scalar relativistic

Origin: PS Libr
 Author: Andrea
 Generated using
 Uploaded by Eric

Classification controlled by Andrea Dal Corso

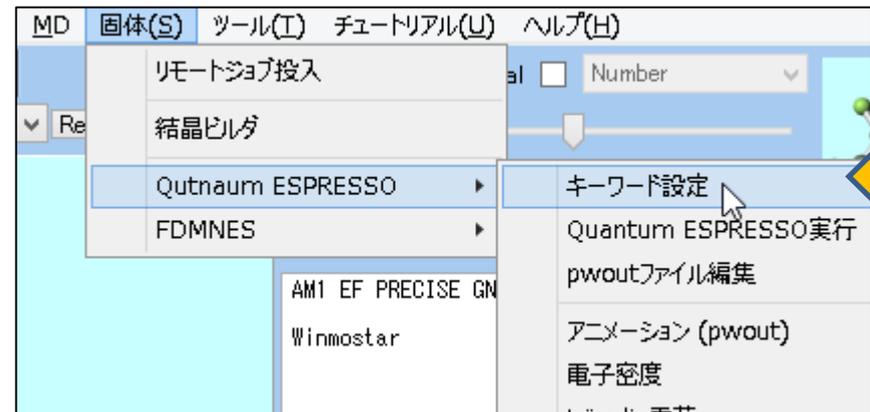
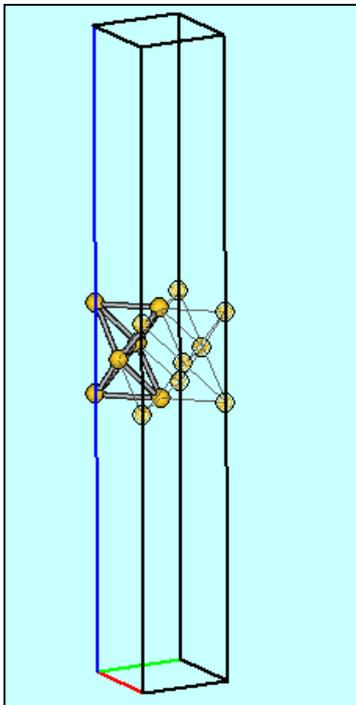
Au.pbe-ml_fhi.UPF

Pseudopotential type: NORMCONS
 Method: Martins-Troullier

「Au.pbe-dn-rrkjus_psl.0.1.UPF」をクリック

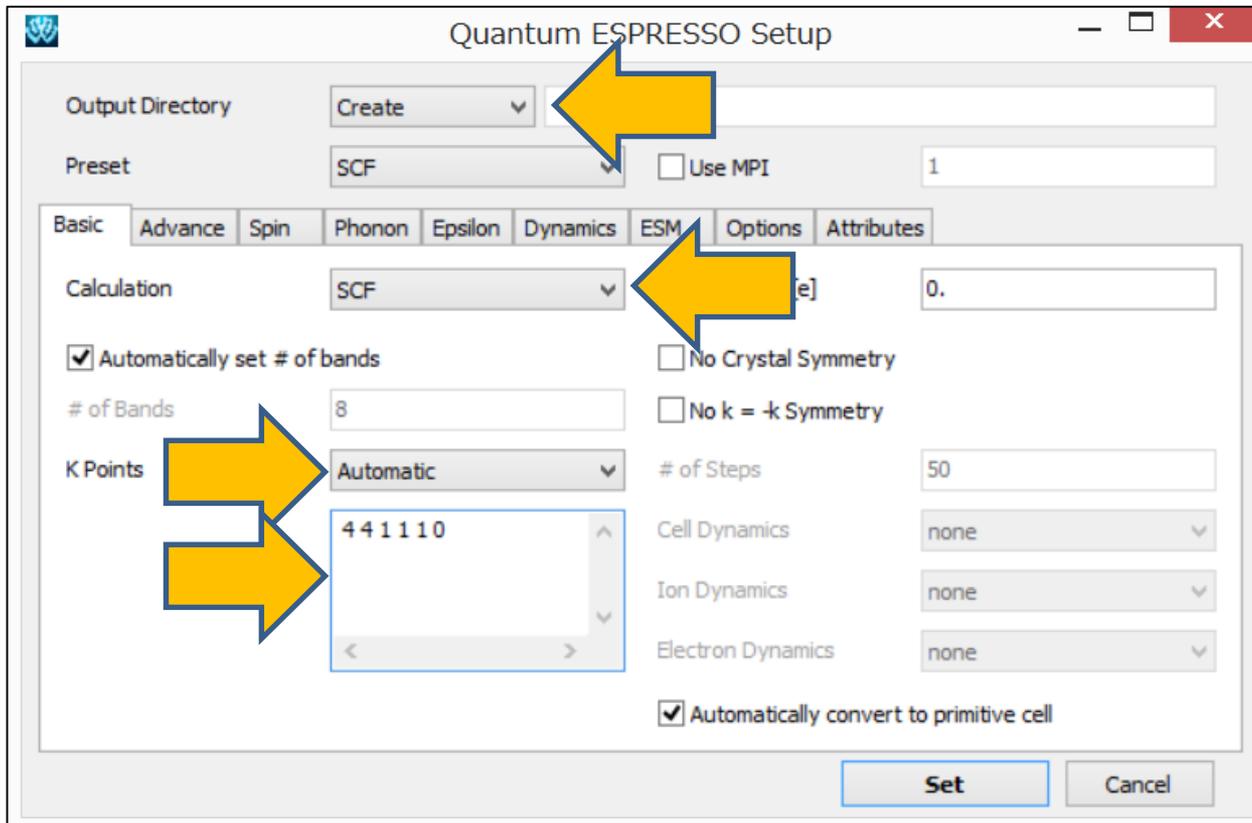
I. SCF計算

「メニュー＞開く」からWinmostarのインストールディレクトリの下のsample以下にあるau_slab.cifを開く。(デフォルトではC:\winmos7\samples\au_slab.cif) あるいは、「固体＞結晶ビルダ」にてCubic、空間群「225 Fm-3m」、格子定数 4.078830 Å、真空層厚み25 ÅのSi結晶を作成する。その後、「固体＞Quantum ESPRESSO＞キーワード設定」を選択する。



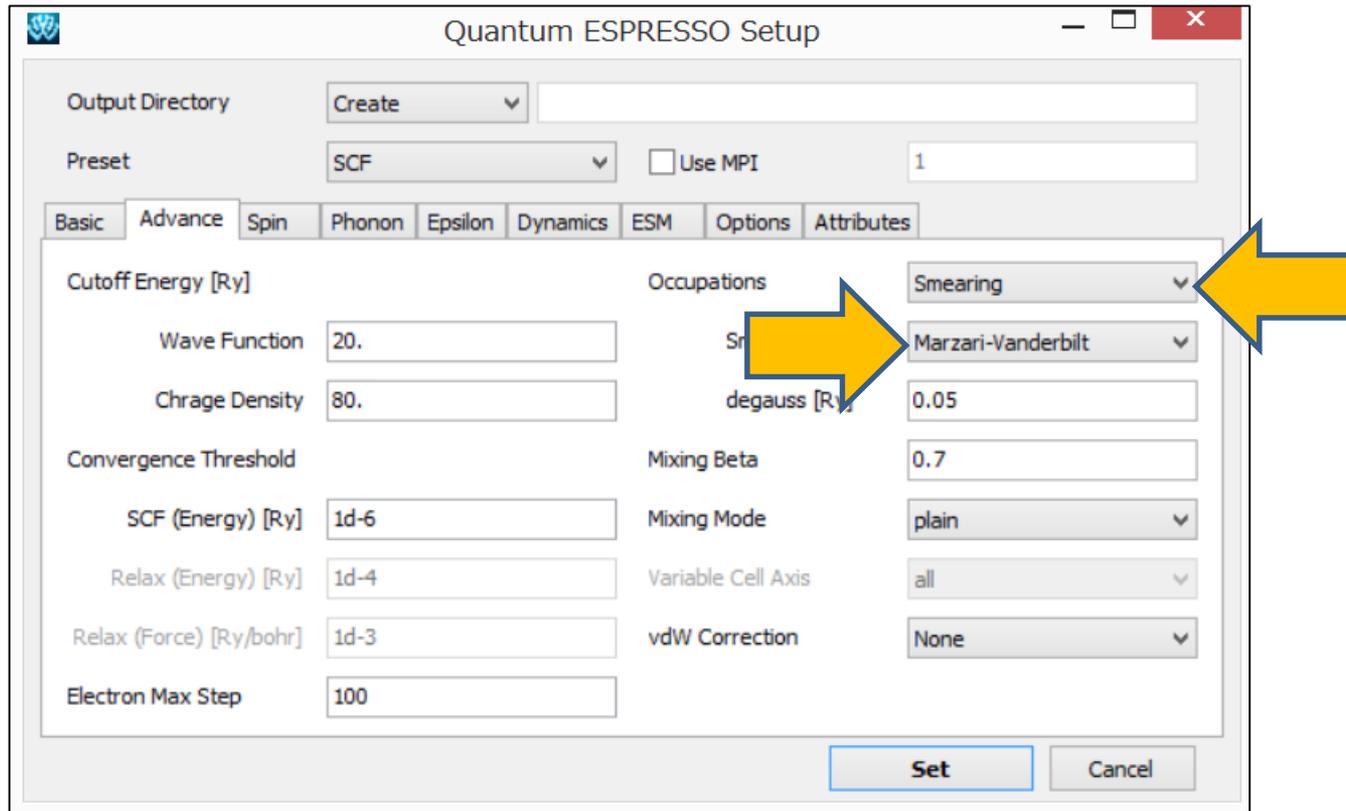
I. SCF計算

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。



I. SCF計算

「Advance」タブにて、「Occupations」に「Smearing」、
「Smearing」に「Marzari-Vanderbilt」を指定する。

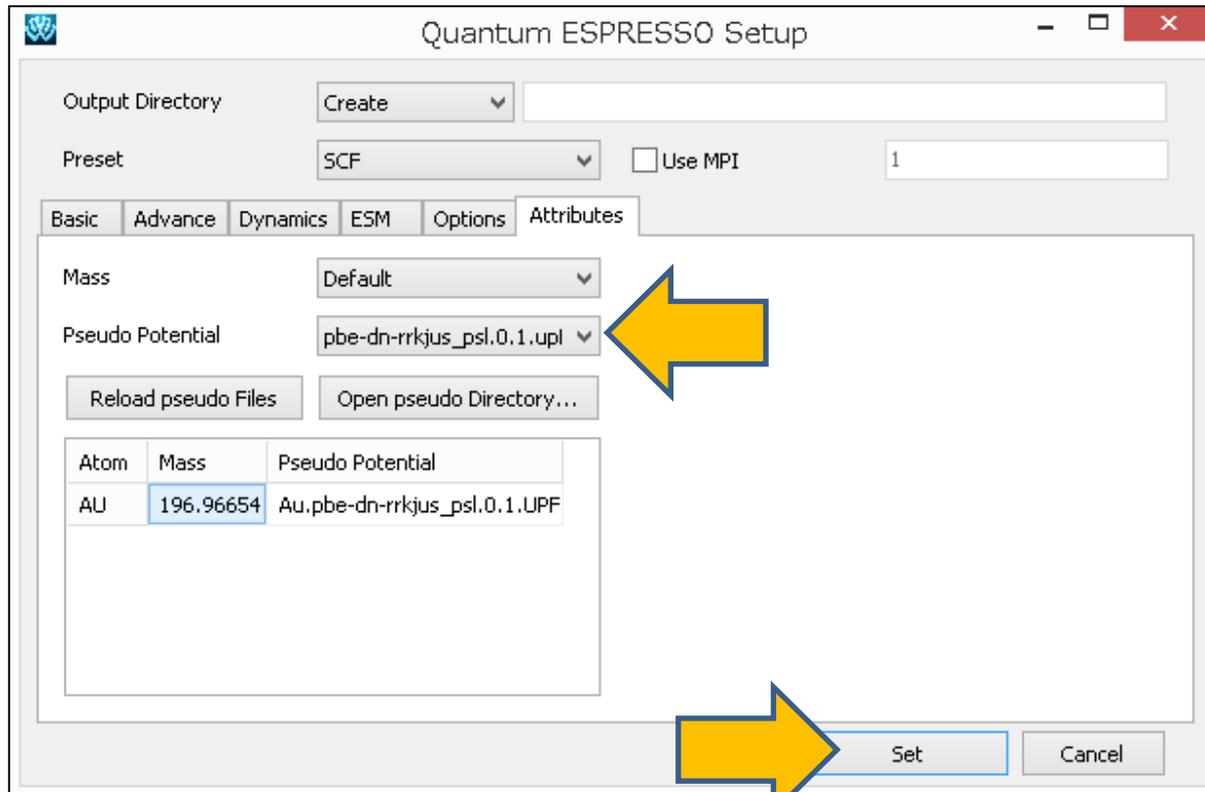


I. SCF計算

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

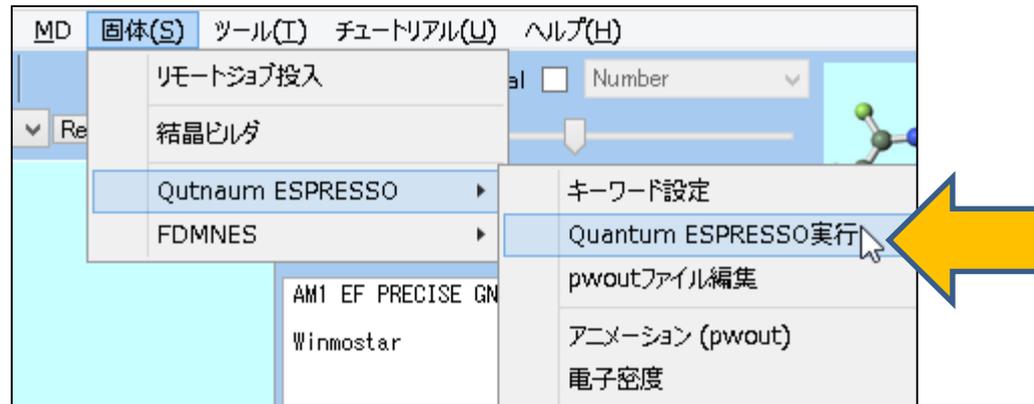
※ 「pbe-dn-rrkjus_psl.0.1.UPF」が無い場合は、P. 4の手順に従いpseudoファイルをpseudoフォルダに格納し「Reload pseudo Files」ボタンを押す。

最後に、右下の「Set」で設定する。



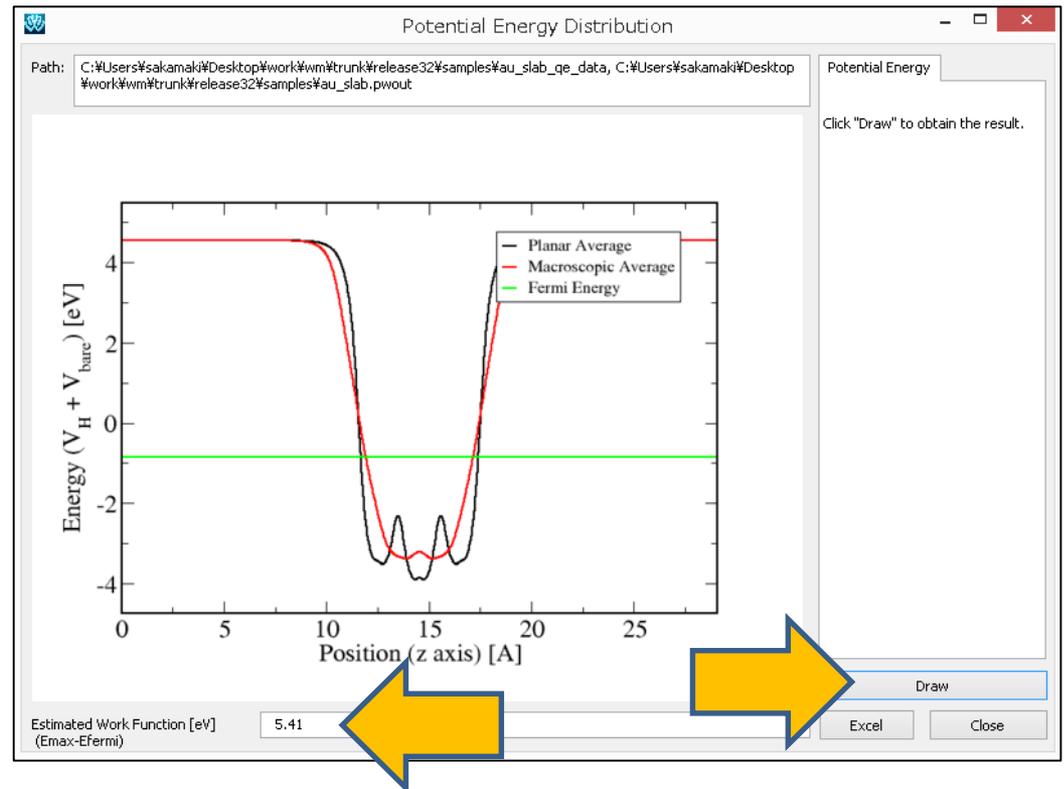
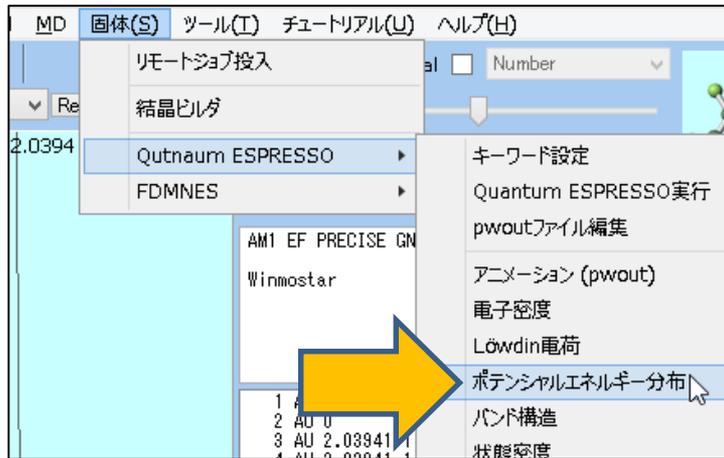
I. SCF計算

「固体>Quantum ESPRESSO>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。



II. 仕事関数

計算の終了後、「固体>Quantum ESPRESSO>ポテンシャルエネルギー分布」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、[Draw]ボタンを押すと、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。



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!