

Winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

Effective Screening Medium (ESM) 法

V7.016

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/4/5

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)

「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

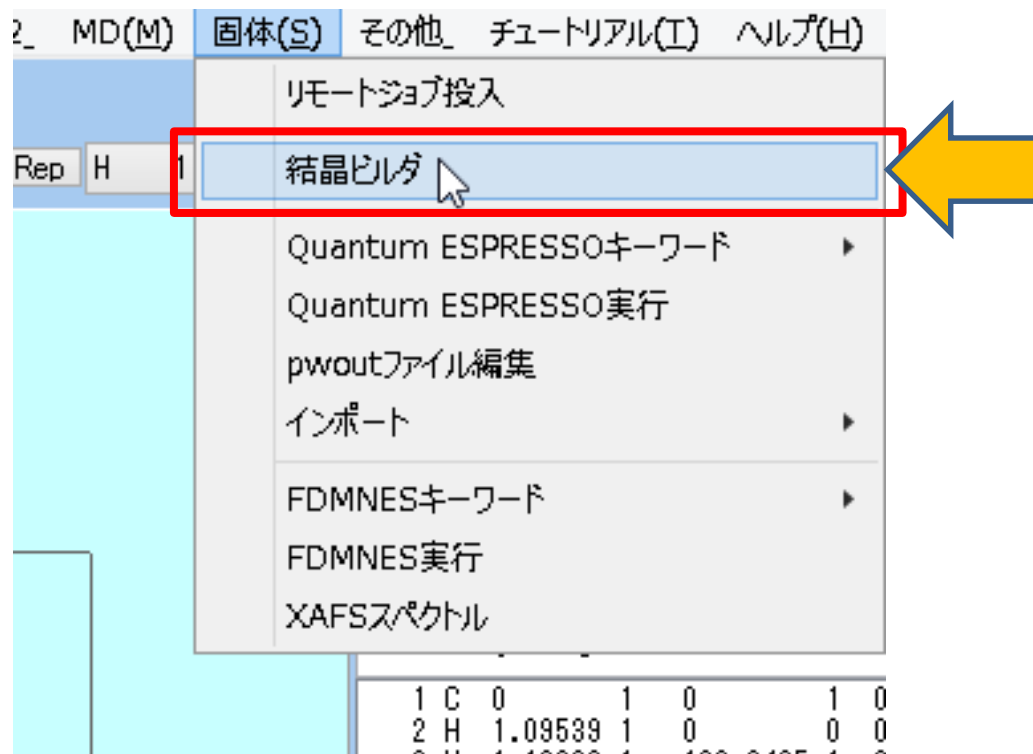
Origin: Original QE PP library
Generated by Vanderbilt code version 7.3.5
More Information: [Al.pbe-n-van.txt](#)
Uploaded by Erica Vidal
Classification controlled by Paolo Giannozzi

「Al.pbe-n-van.UPF」を右クリックし保存

Al.pbe-rrkj.UPF

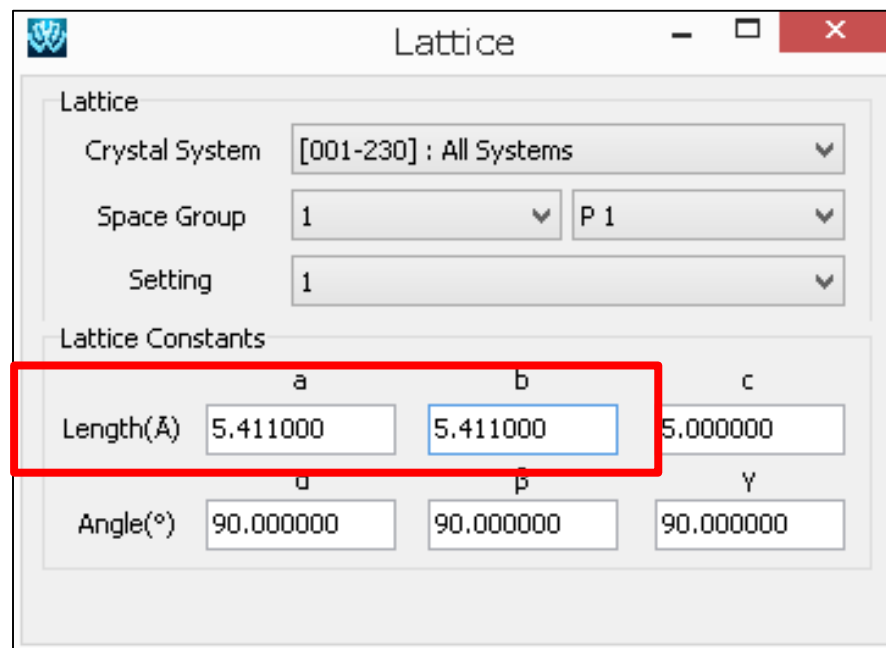
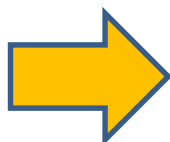
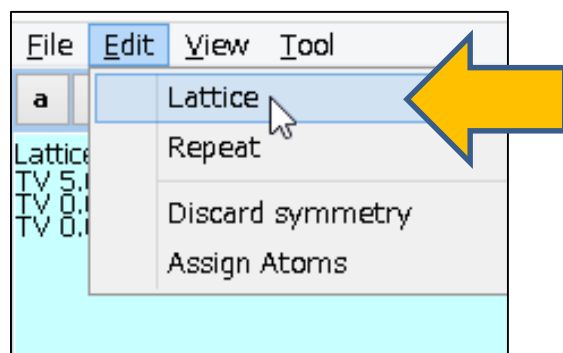
I. 結晶ビルダで初期座標の作成1

「固体＞結晶ビルダ」から結晶ビルダを起動する。



I. 結晶ビルダで初期座標の作成2

結晶ビルダにて「Edit>Lattice」を選び、「Space Group」が「P1」の状態で、格子定数に $a=5.411$, $b=5.411$ を指定し「Lattice」ウインドウは閉じる。



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 >>

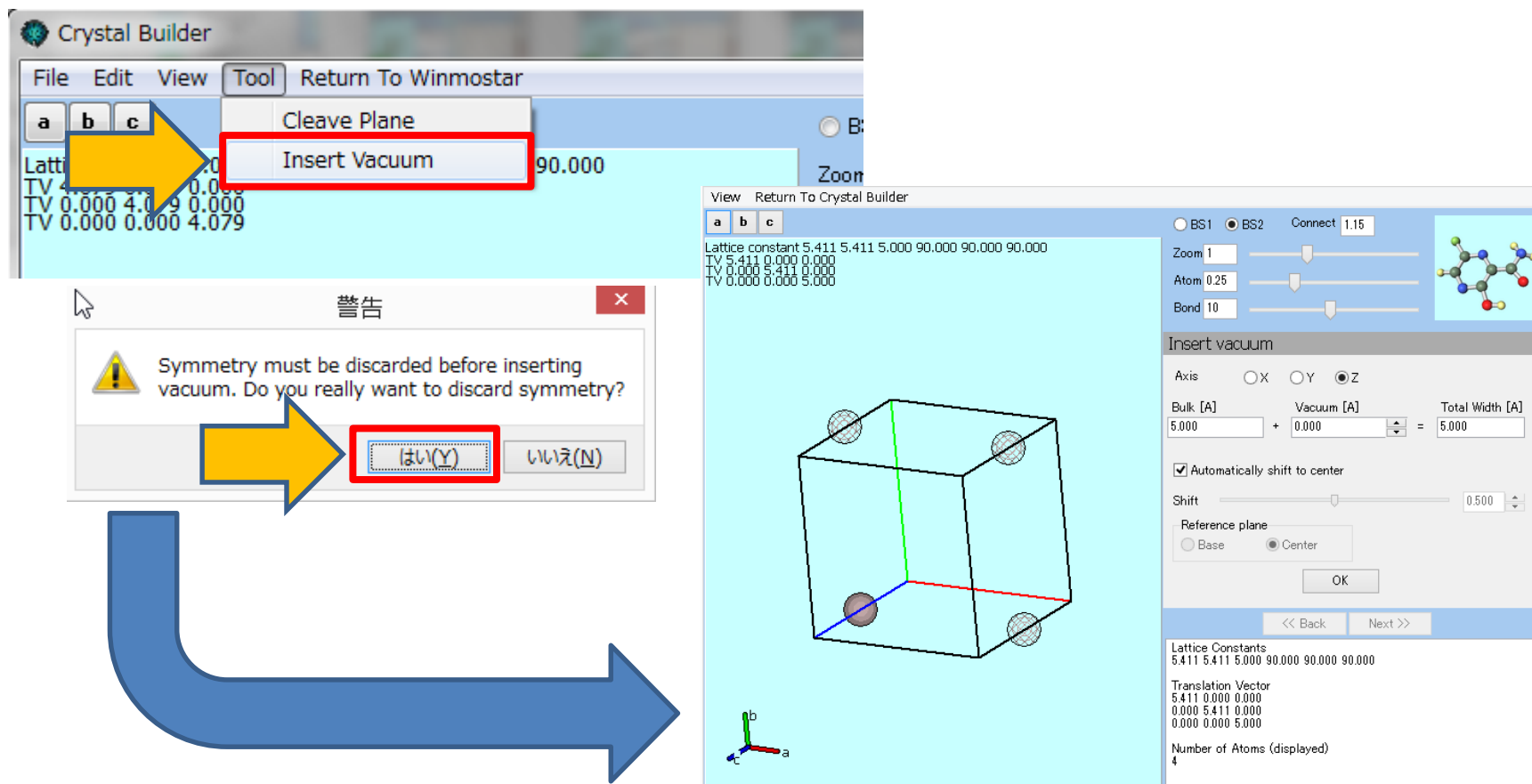
Lattice Constants
 5.411 5.411 5.000 90.000 90.000 90.000

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。)



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

Built-in Vacuum [Å] 17.500 Total Width [Å] 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

I. 結晶ビルダで初期座標の作成6

Al原子のz座標を0に変更する。

File Edit View Tool

a b c 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

Plain Normal

Zoom 0.6

Atom 0.25

Bond 10

Asymmetric Unit

Add Remove

Atom	x	y	z
Al	0.000000		0

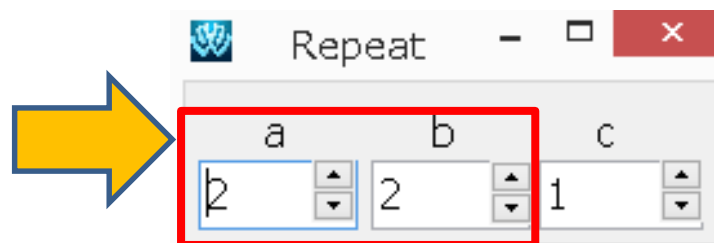
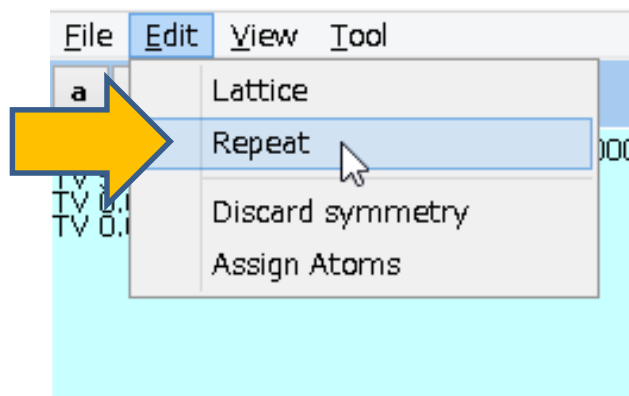
Lattice Constants
5.411 5.411 22.500 90.000 90.000 90.000

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

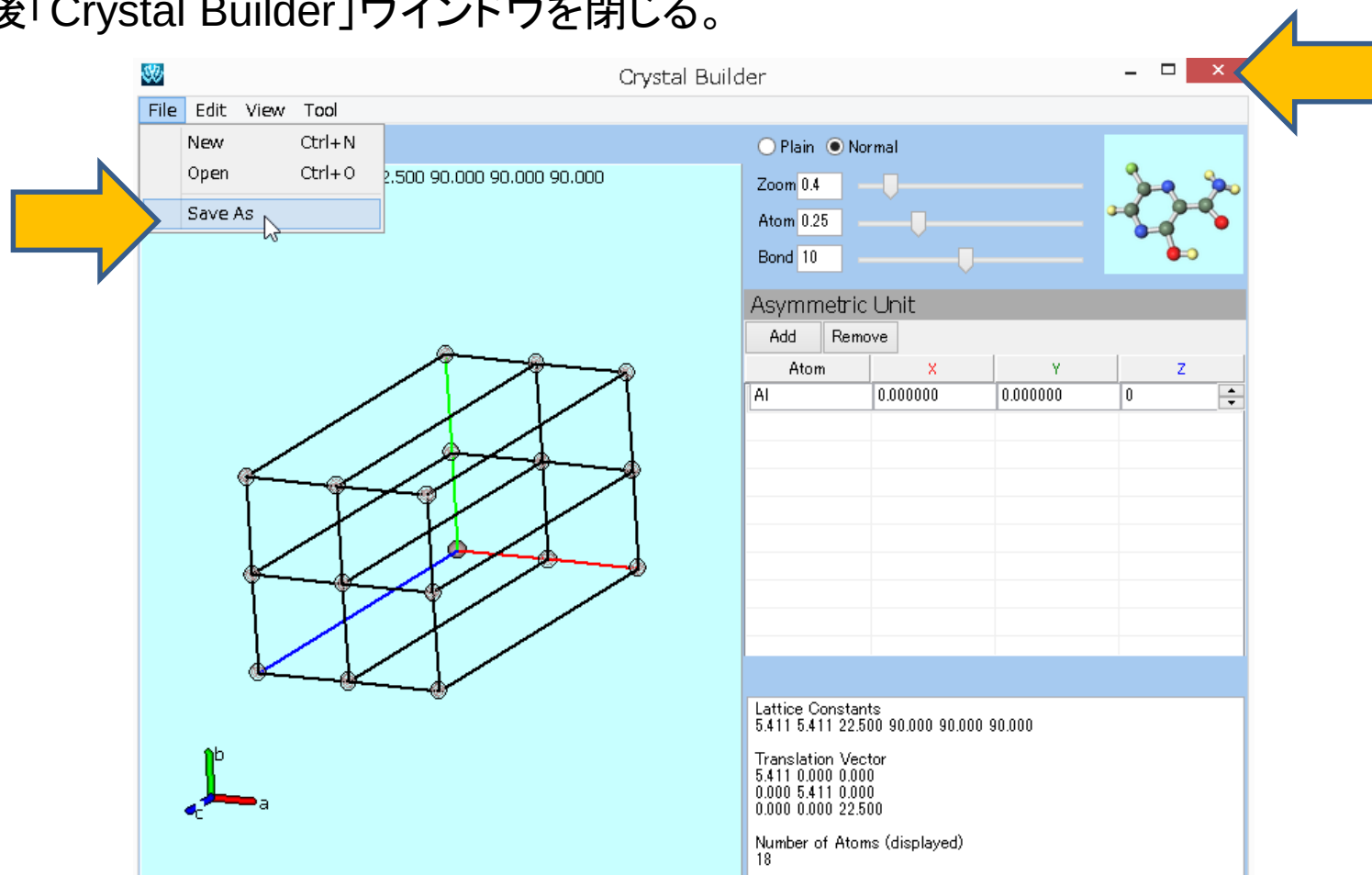
I. 結晶ビルダで初期座標の作成7

「Edit>Repeat」にて、Repeat数をa方向、b方向それぞれ2とし、「Repeat」ウィンドウを閉じる。



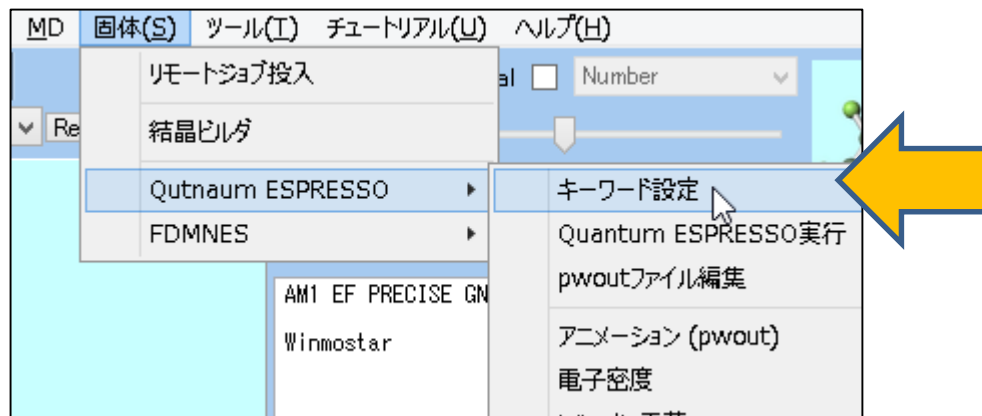
I. 結晶ビルダで初期座標の作成7

「File>Save As」にて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。
その後「Crystal Builder」ウインドウを閉じる。



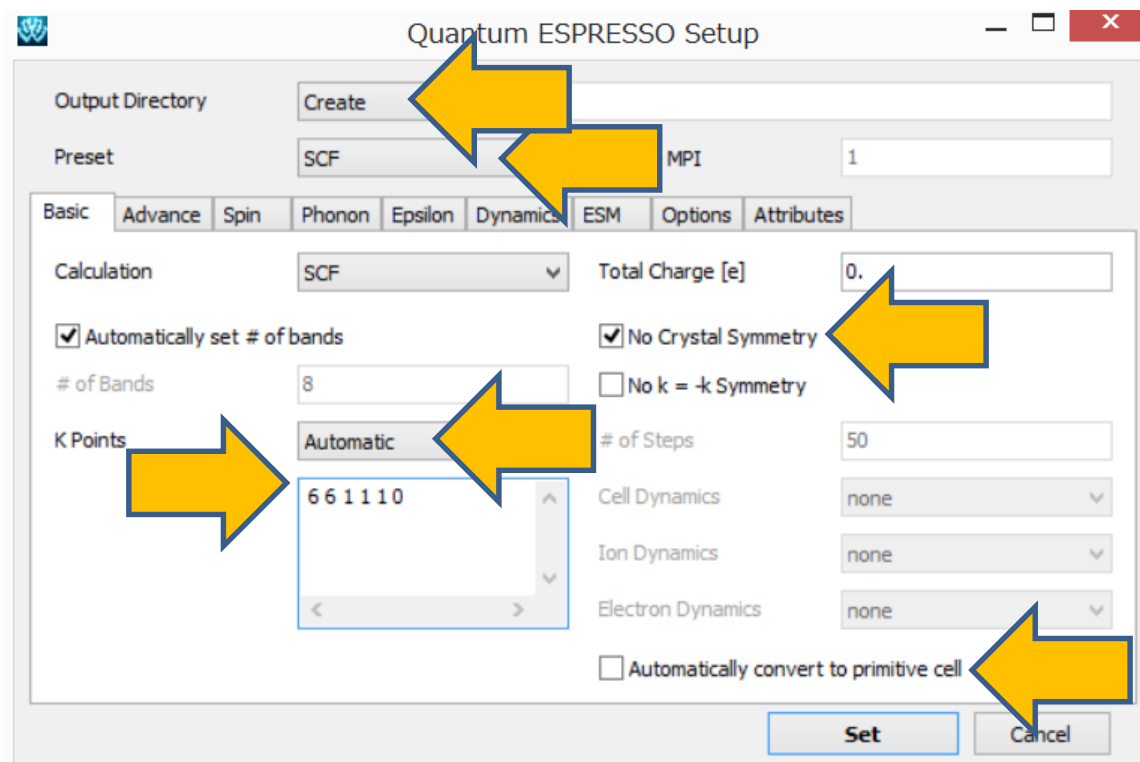
II. constant- N 計算1

「ファイル＞開く」から、先ほど作成したal_slab.cifを開く。
次に、「固体＞Quantum ESPRESSO＞キーワード設定」を選択する。



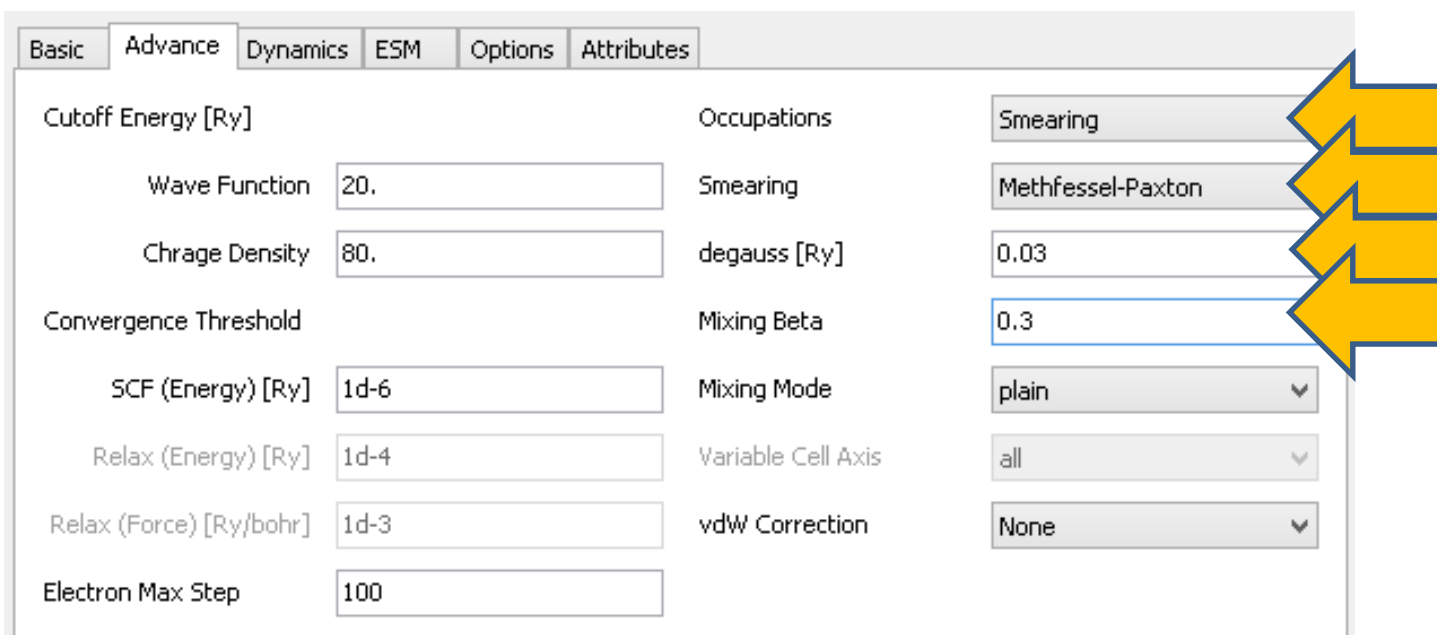
II. constant- N 計算2

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。
「No Crystal 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

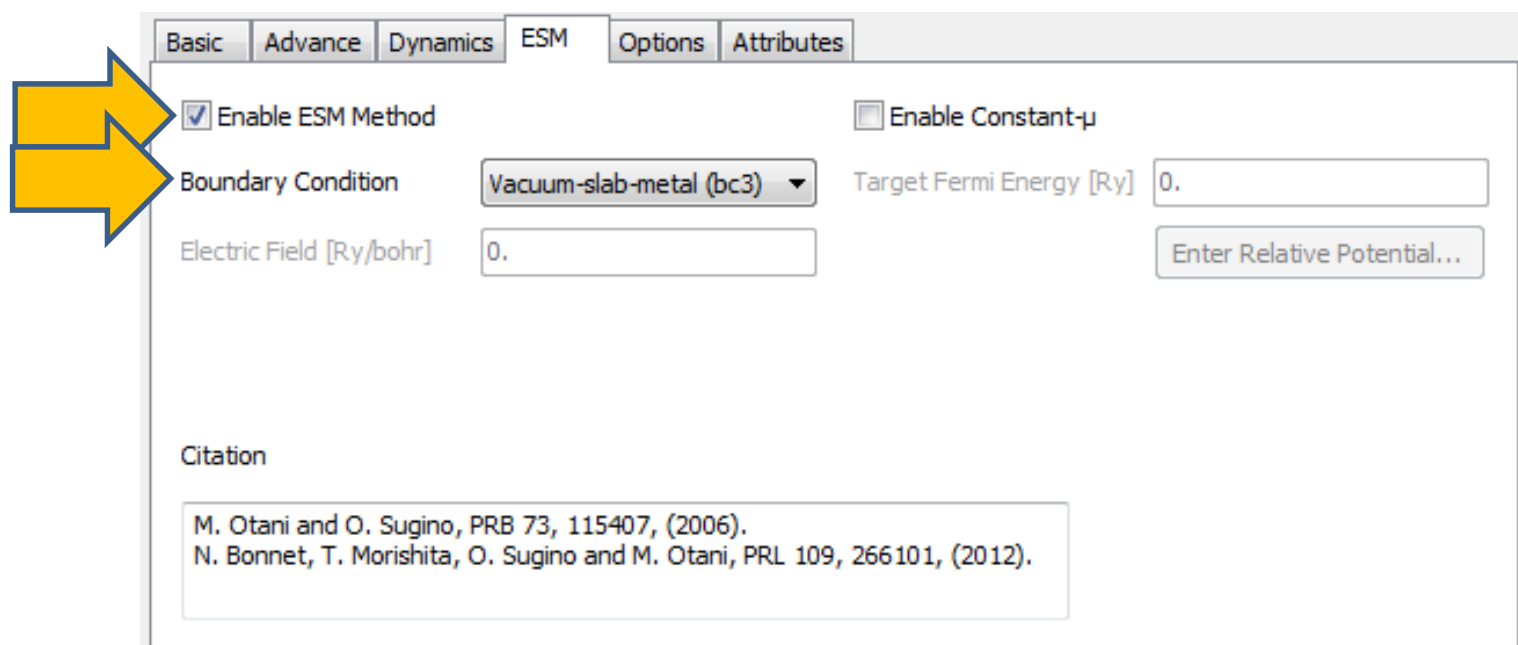
「Advance」タブにて、「Occupations」に「Smearing」、
「Smearing」に「Methfessel-Paxton」、「degauss」に「0.03」、
「Mixing Beta」に「0.3」を指定する。



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- N 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。



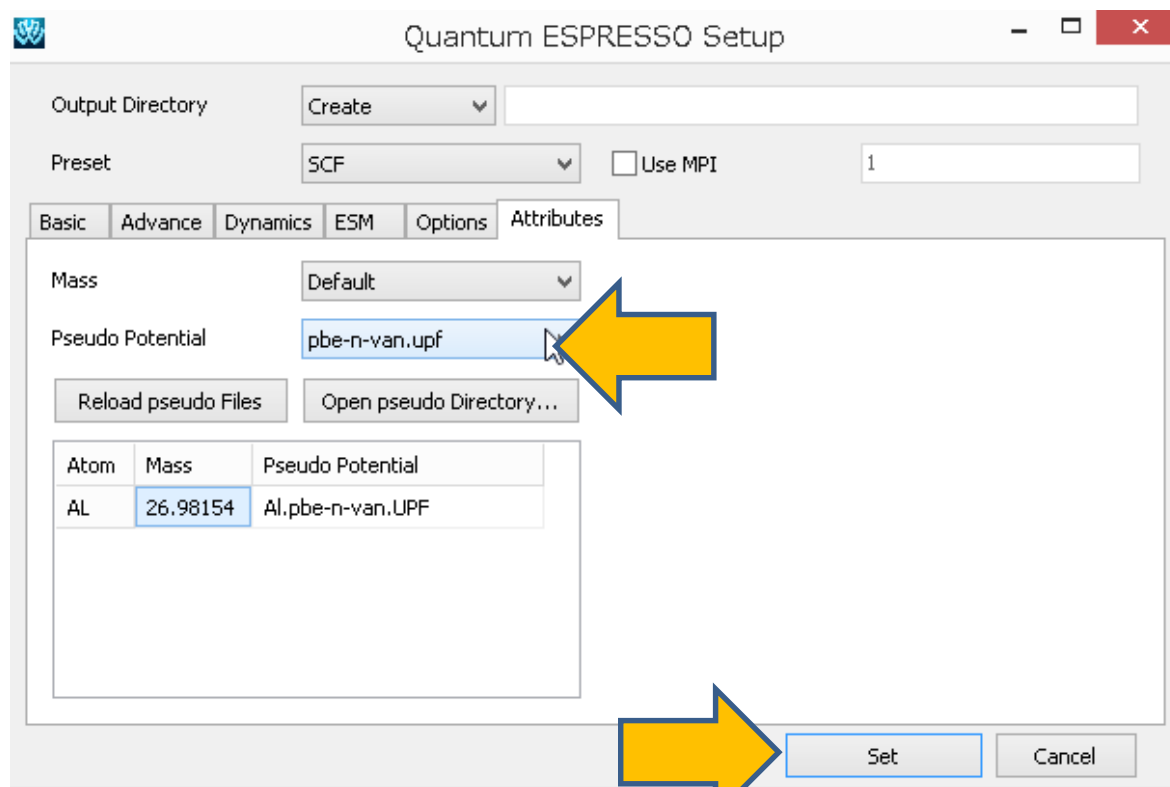
The screenshot displays the 'ESM' tab in the software interface. The 'Enable ESM Method' checkbox is checked. The 'Boundary Condition' dropdown menu is set to 'Vacuum-slab-metal (bc3)'. Other visible options include 'Enable Constant- μ ', 'Target Fermi Energy [Ry]' (set to 0.), 'Electric Field [Ry/bohr]' (set to 0.), and a button 'Enter Relative Potential...'. A 'Citation' section at the bottom lists references: M. Otani and O. Sugino, PRB 73, 115407, (2006). and 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。

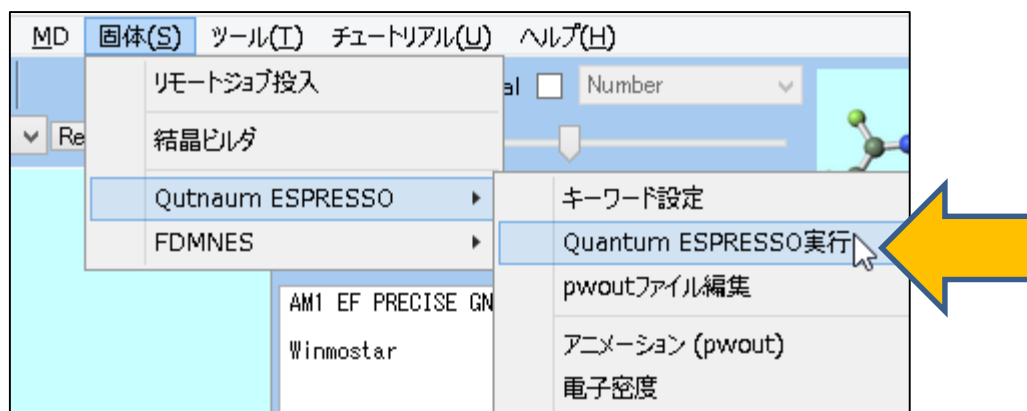
※ 「pbe-n-van.upf」が無い場合は、P. 4の手順に従いpseudoファイルをpseudoフォルダに格納し「Reload pseudo Files」をクリックする。

最後に、右下の「Set」で設定する。



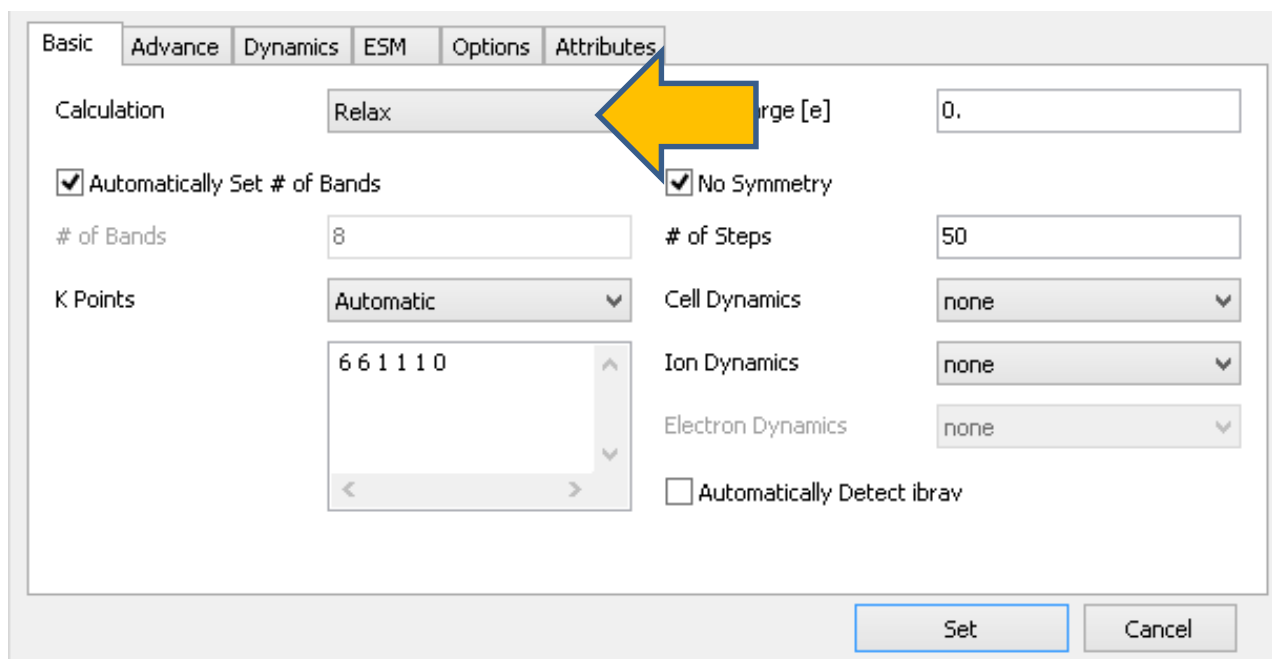
II. constant- N 計算6

「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「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。

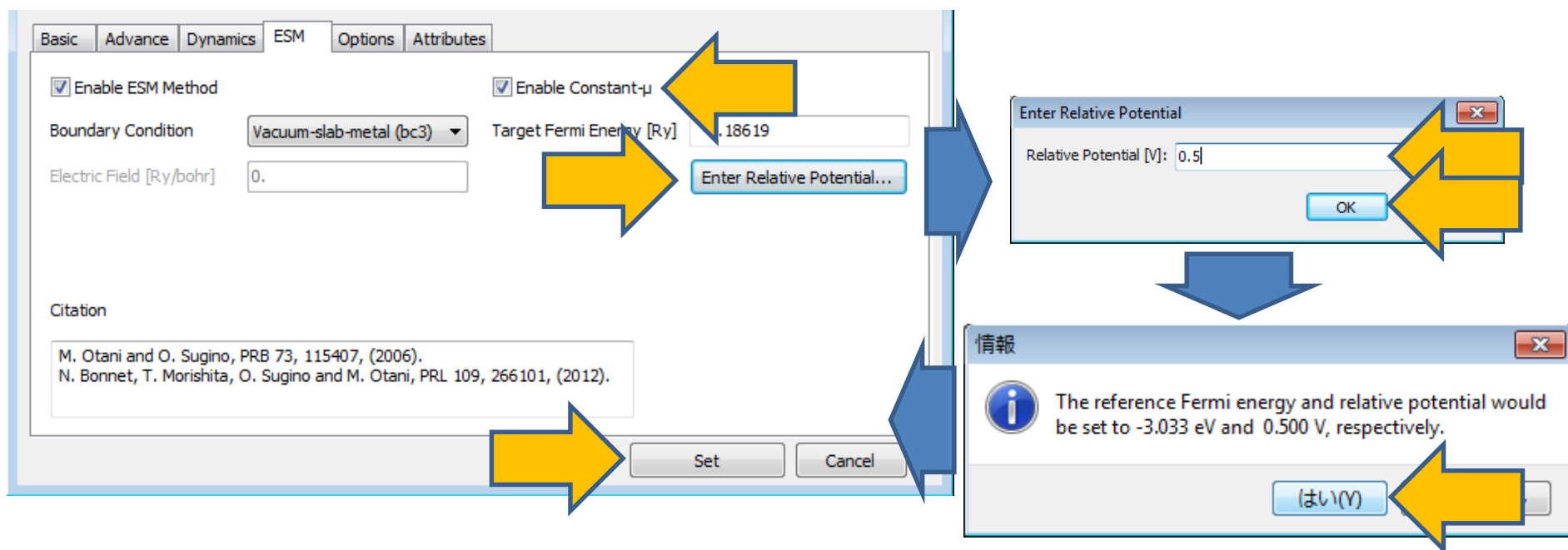


The screenshot shows the 'Basic' tab of the Quantum ESPRESSO settings window. The 'Calculation' dropdown menu is set to 'Relax', which is highlighted by a yellow arrow. Other settings include: '# of Bands' set to 8, 'K Points' set to Automatic (displaying 6 6 1 1 1 0), 'No Symmetry' checked, and 'Automatically Set # of Bands' checked. The 'Set' button at the bottom right is highlighted with a blue border.

III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算2

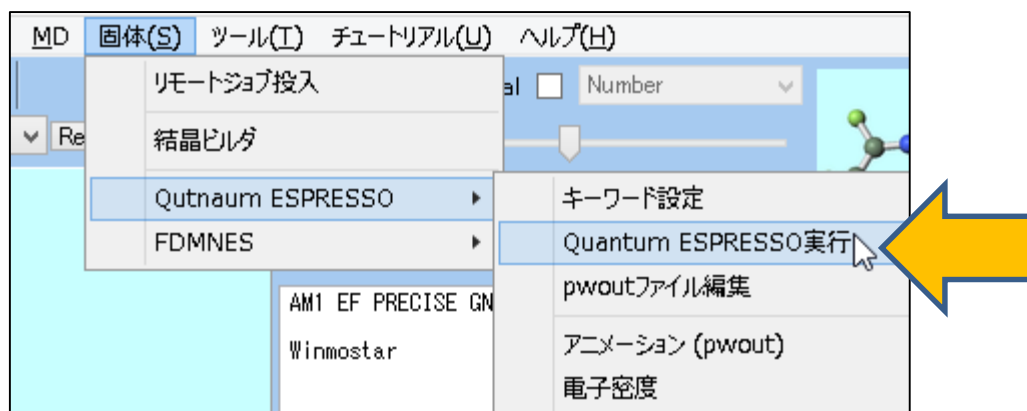
「ESM」タブにおいて「Enable Constant- μ 」にチェックを入れる。

「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。



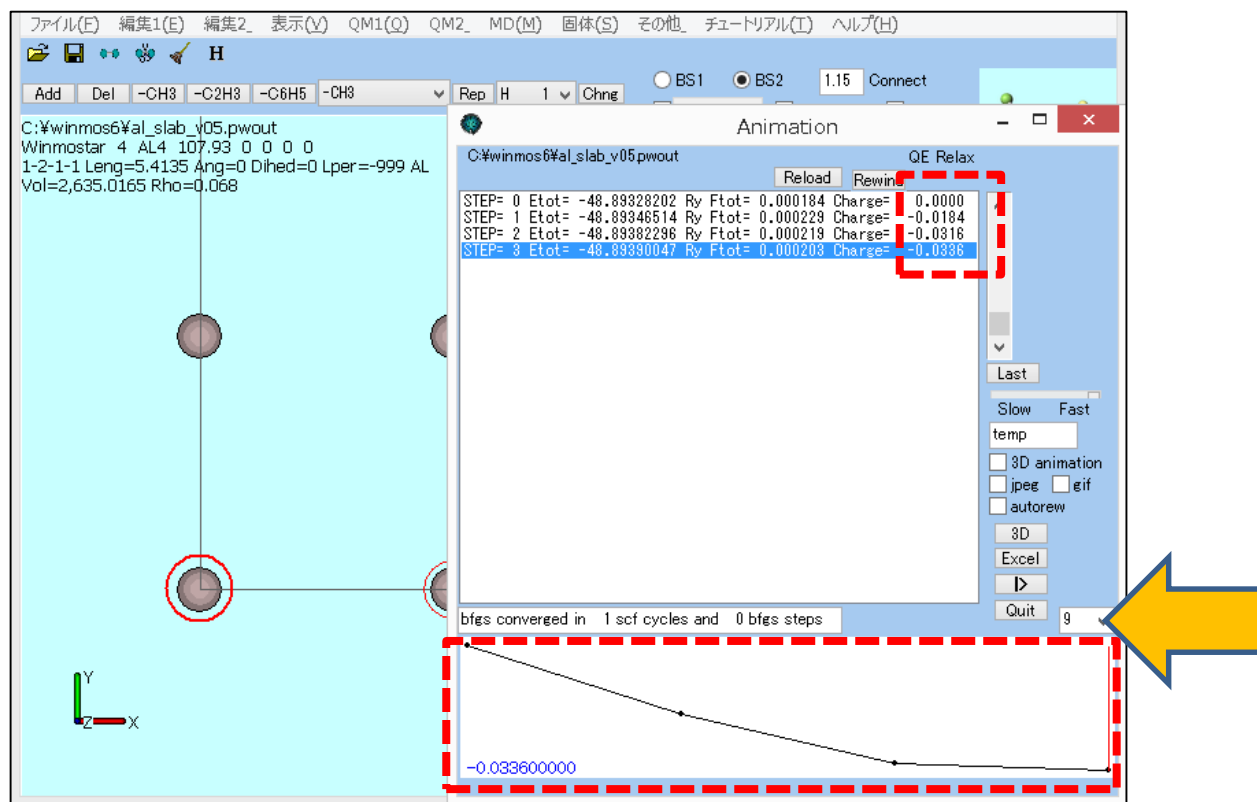
III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算3

「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「al_slab_v05.pwin」とする。



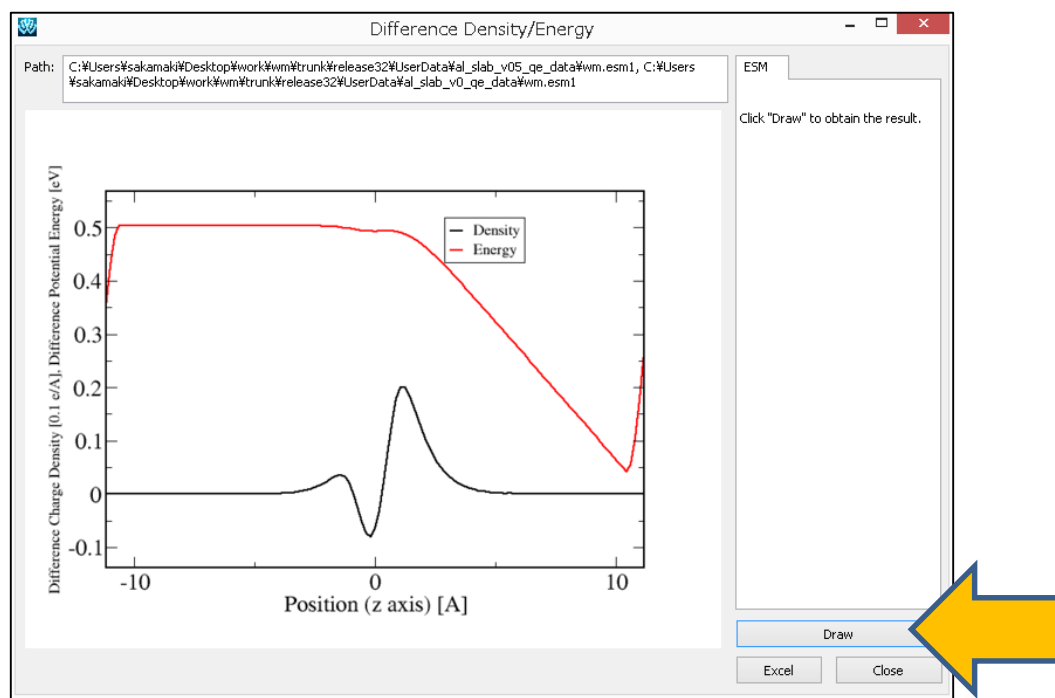
III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算4

計算終了後、「固体>Quantum ESPRESSO>アニメーション (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。



IV. ESM計算のチェック

「固体＞Quantum ESPRESSO＞差密度/差エネルギー分布 (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、[Draw]ボタンを押すと差電荷密度および、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。



The screenshot shows the Facebook profile of X-Ability Co., Ltd. The profile picture is the company logo, a stylized 'A' with 'X-Ability' and 'クロスアビリティ' below it. The cover photo features the same logo and text: 'X-Ability Co.,Ltd. コンピュータ・テクノロジー'. A callout bubble with a thumbs-up icon and the text 'いいね!' (Like!) points to the 'いいね!' tab in the navigation bar.

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 ☐ パスワードを記憶する

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 >

デジタル投稿 >

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 · 🌐