

Winmostar™ チュートリアル

Quantum ESPRESSO

仕事関数

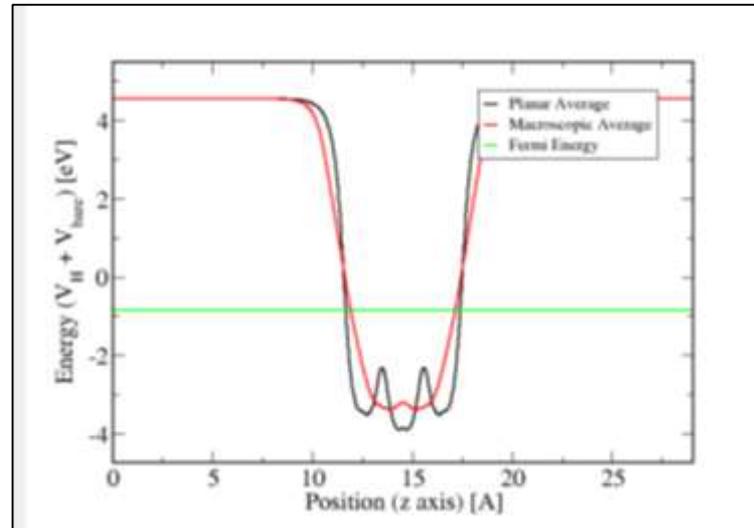
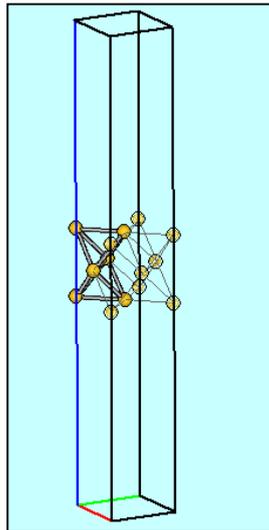
V8.000

株式会社クロスアビリティ

2018/727

概要

- Auの仕事関数をスラブモデルのポテンシャルエネルギー分布から取得します。



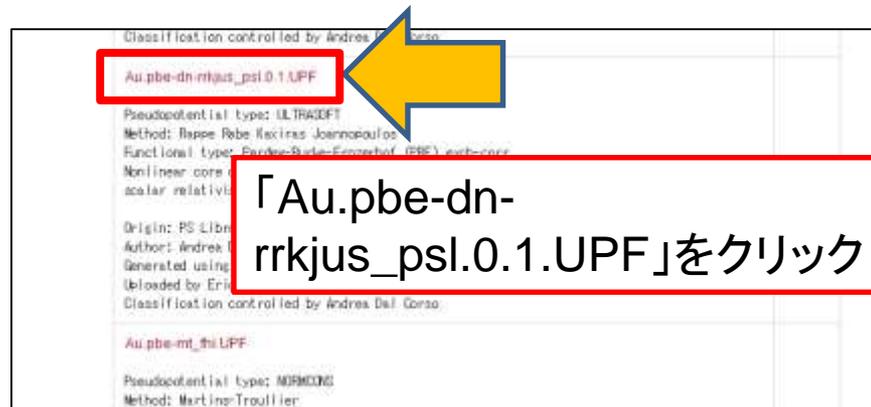
注意点:

- k点の取り方、バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギー、smearing幅は計算結果に影響を与えます。本チュートリアルではすぐに結果を取得できるよう、精度を落とした設定を用います。
- スラブモデルおよび真空層のサイズも計算結果に影響を与えます。
- 上記の従来手法でなくESM法を用いて見積もる方法も最後に紹介します。

動作環境設定

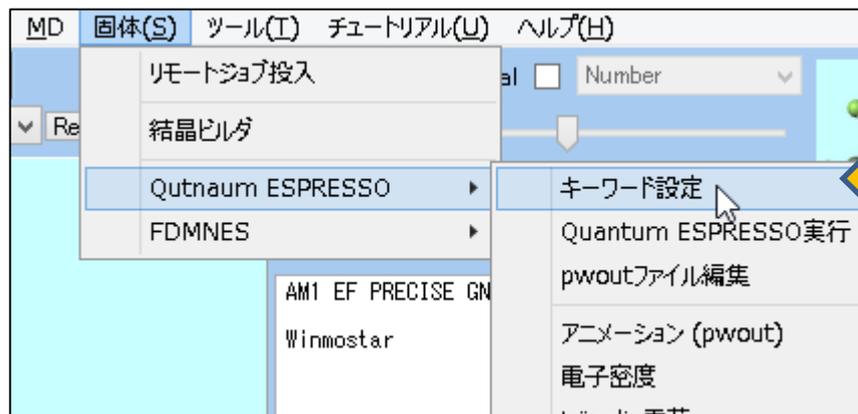
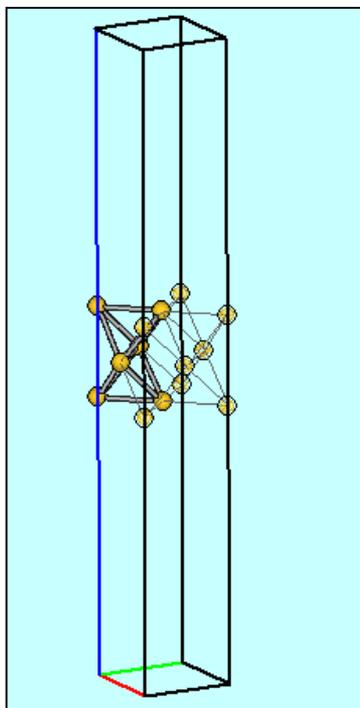
① Quantum ESPRESSOインストールマニュアル
https://winmostar.com/jp/QE_install_manual_jp_win.pdf
に従い、Quantum ESPRESSOをインストールする。

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/pseudo-search-results>



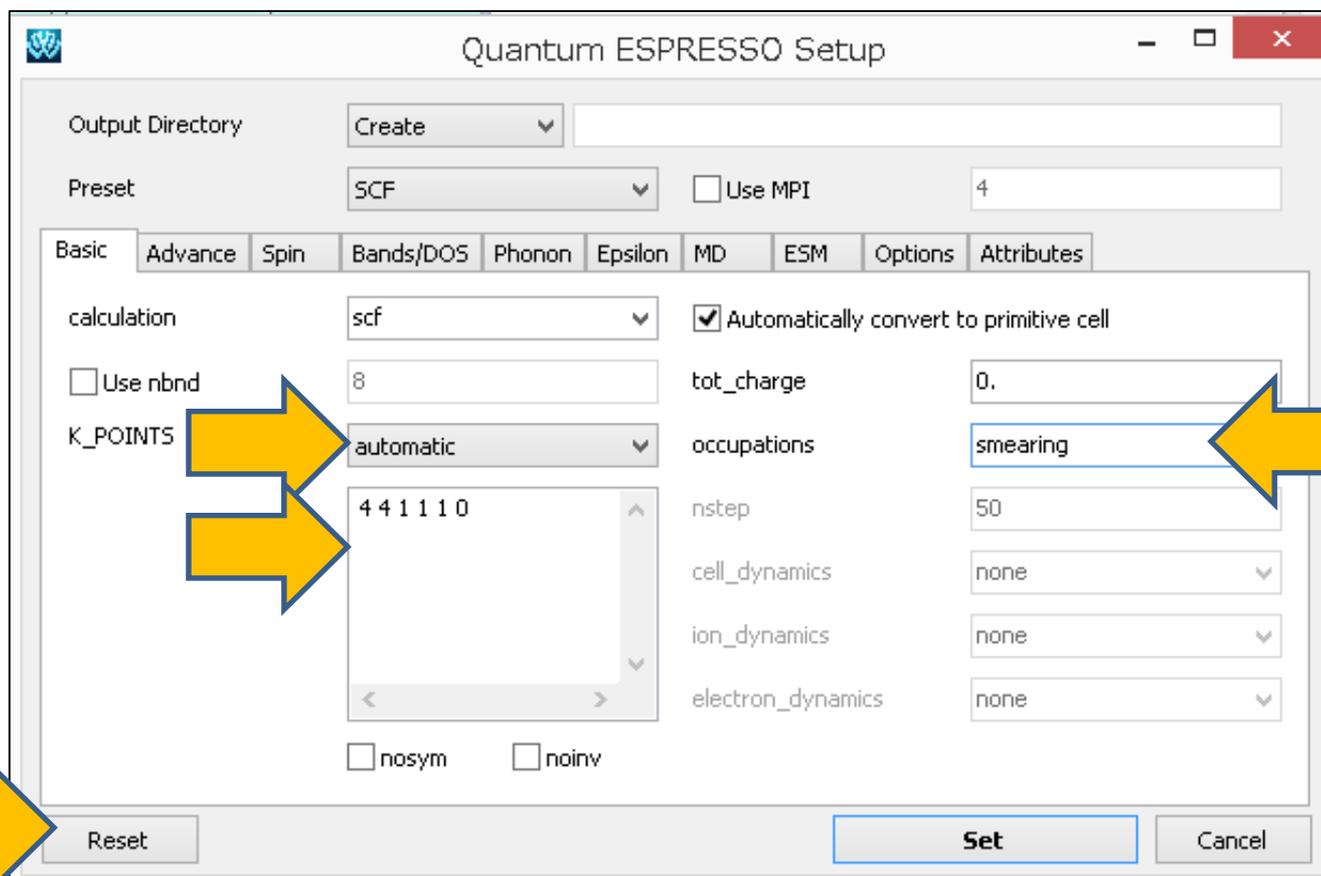
I. SCF計算

「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:\winmos8\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、「Reset」ボタンを押す。次に、「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)と入力し、「occupations」に「smearing」を指定する。

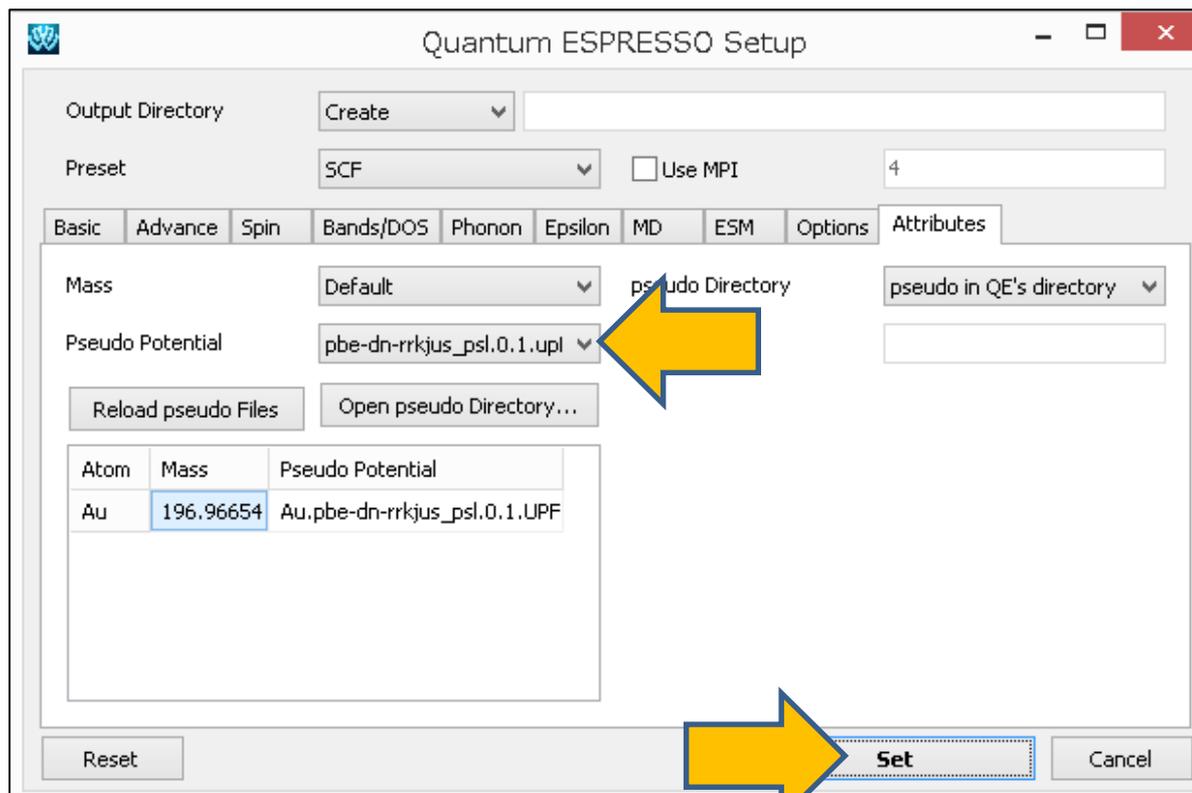


I. SCF計算

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

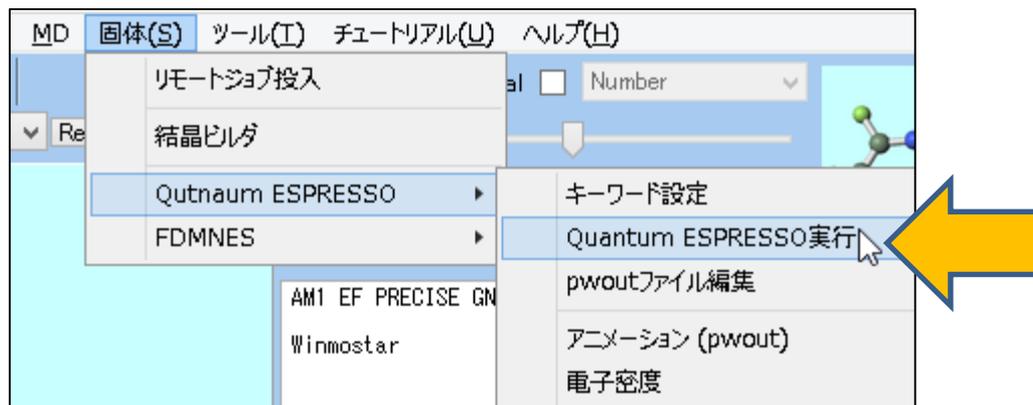
※ 「pbe-dn-rrkjus_psl.0.1.UPF」が無い場合は、P. 4の手順に従いpseudoファイルをpseudoフォルダに格納し「Reload pseudo Files」ボタンを押す。

最後に、右下の「Set」で設定する。



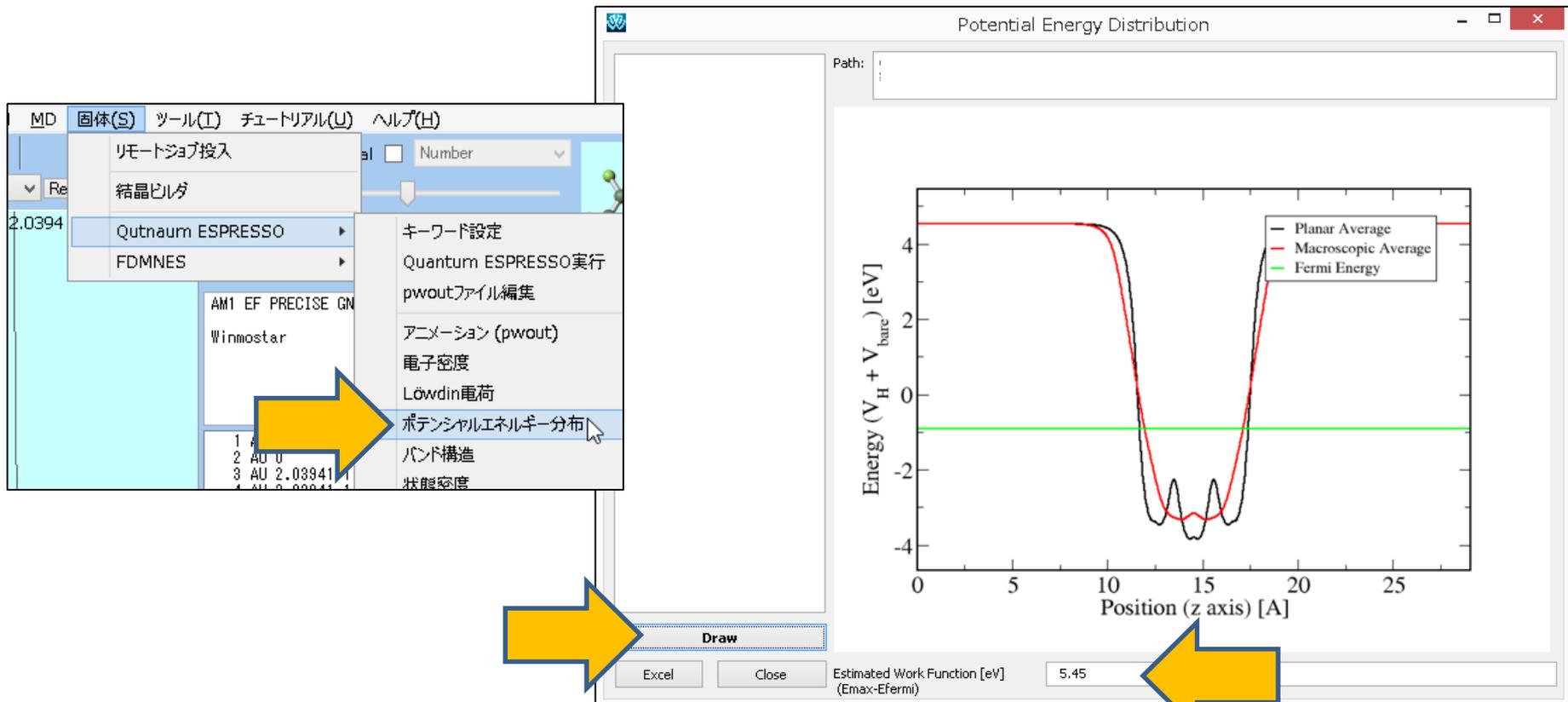
I. SCF計算

「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。



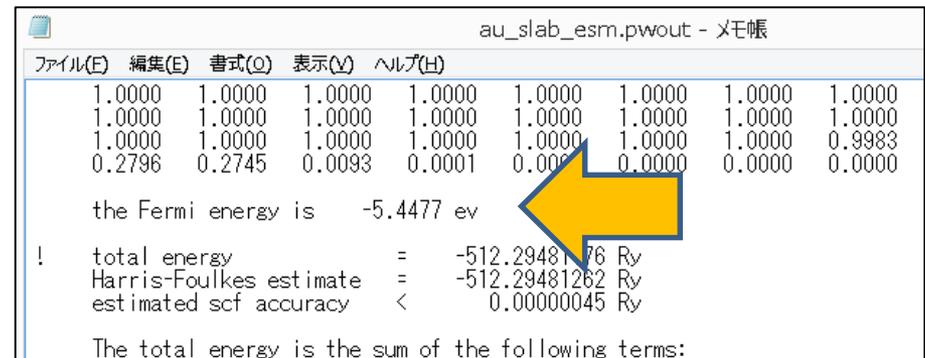
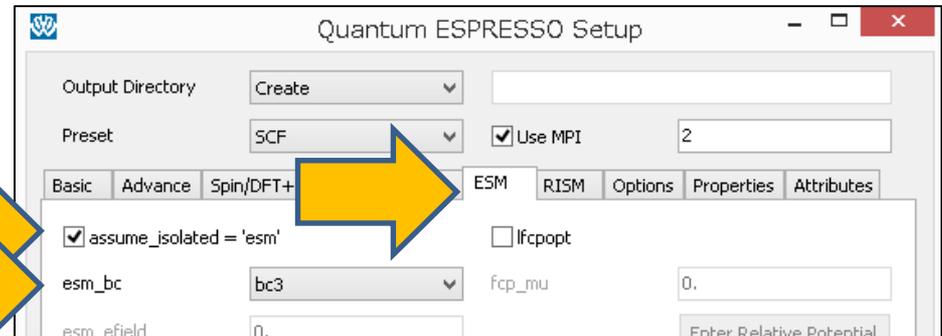
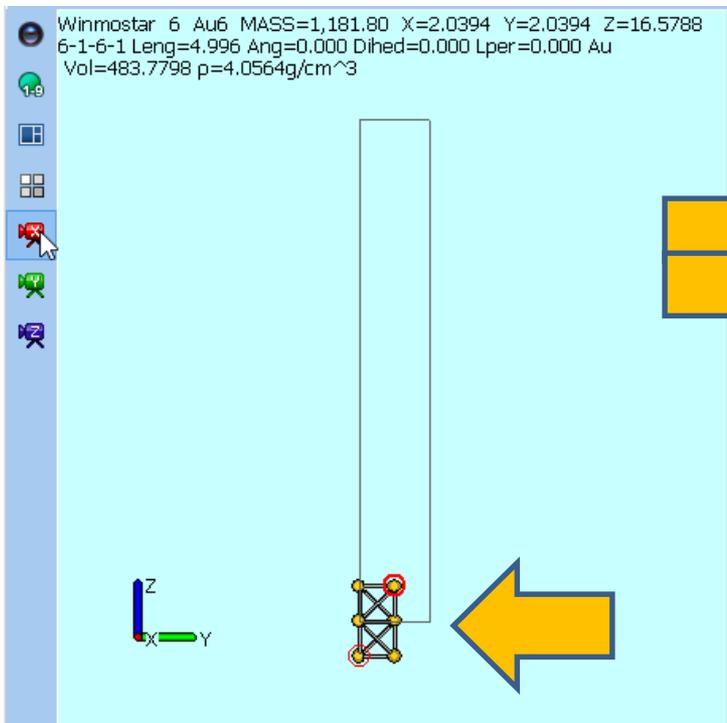
II. 仕事関数

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。



補足

- スラブの重心を $z=0$ に移動
 - ESM法を境界条件bc3で設定
- とした上で計算を実行し、出力されるpwout(ログ)ファイルのFermiエネルギーの負値を、(電子をz軸の+方向の)仕事関数として考えることも可能である。
(ただしtot_chargeは0とすること)



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 · 公開

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_au_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 · 公開

👍 いいね!