

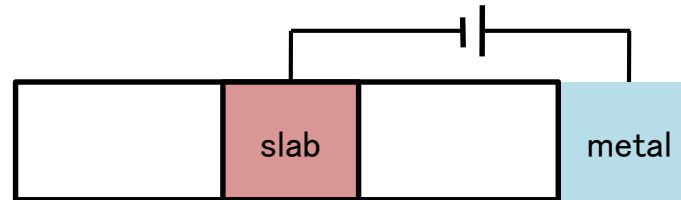
Winmostar™ チュートリアル  
Quantum ESPRESSO  
Effective Screening Medium (ESM) 法  
V8.007

株式会社クロスアビリティ

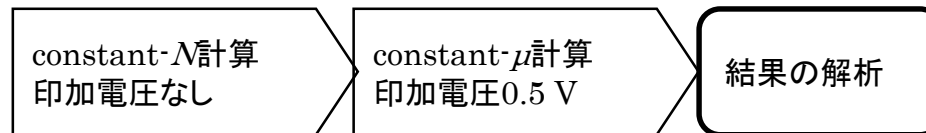
2018/07/27

# 概要

- AI単原子膜(スラブ)を電極として扱うESM法計算を実施します。ここでは Vacuum-slab-metal (bc3)を表す境界条件を使用します(下図)。  
※ QEのESMの実装の都合上、スーパーセルの端が下図の中央に位置します。



まず印加電圧なしのconstant- $N$ 計算を実施し、その後印加電圧0.5 Vの constant- $\mu$  計算を実施する。実施後、slab-仮想的な電極(metal)間に0.5 V の電位差が生じていることを確認する。



## 注意点:

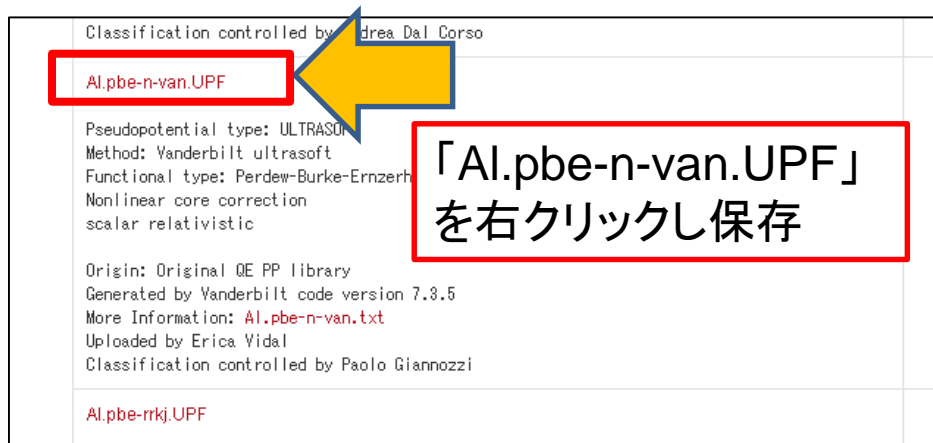
- k点の取り方、バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギー、smearing、系のサイズは計算結果に大きな影響を与えます。本チュートリアルではすぐに結果を取得できるように、精度を落とした設定を用います。
- ESM-RISM対応版QEを使用する場合は補足のページを確認してください。

# 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](https://winmostar.com/jp/QE_install_manual_jp_win.pdf)  
に従い、Quantum ESPRESSOをインストールする。

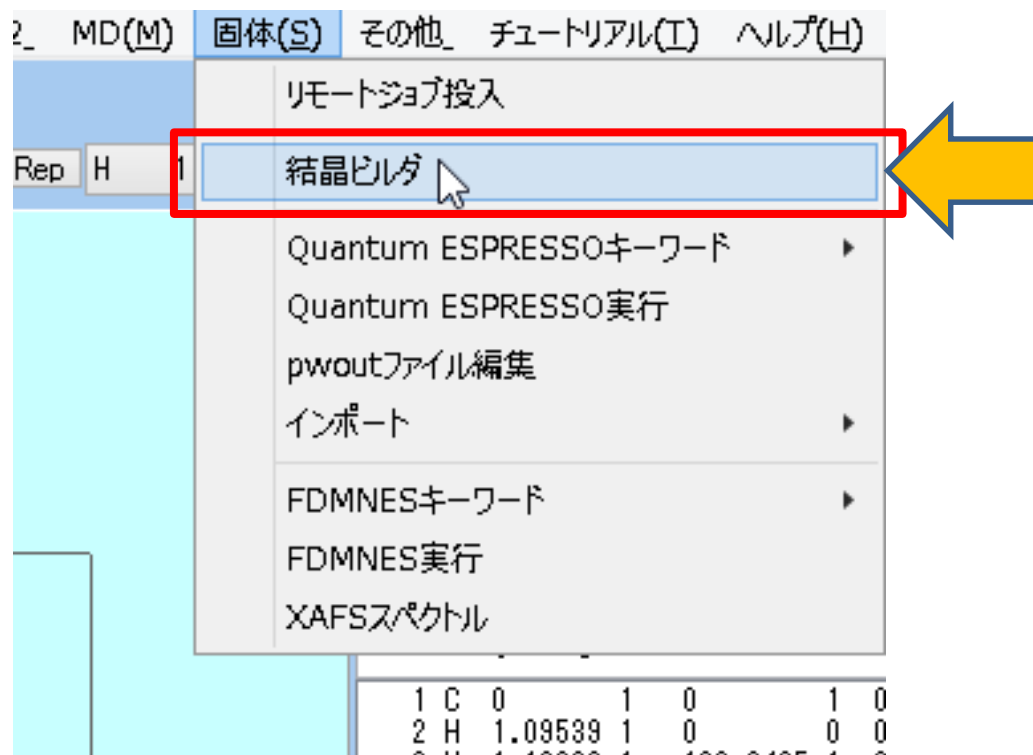
② 以下のURLよりAl.pbe-n-van.UPFを入手し、  
Quantum ESPRESSOインストールフォルダの下のpseudoフォルダに入れ  
Winmostarを再起動する。

<http://www.quantum-espresso.org/pseudo-search-results>



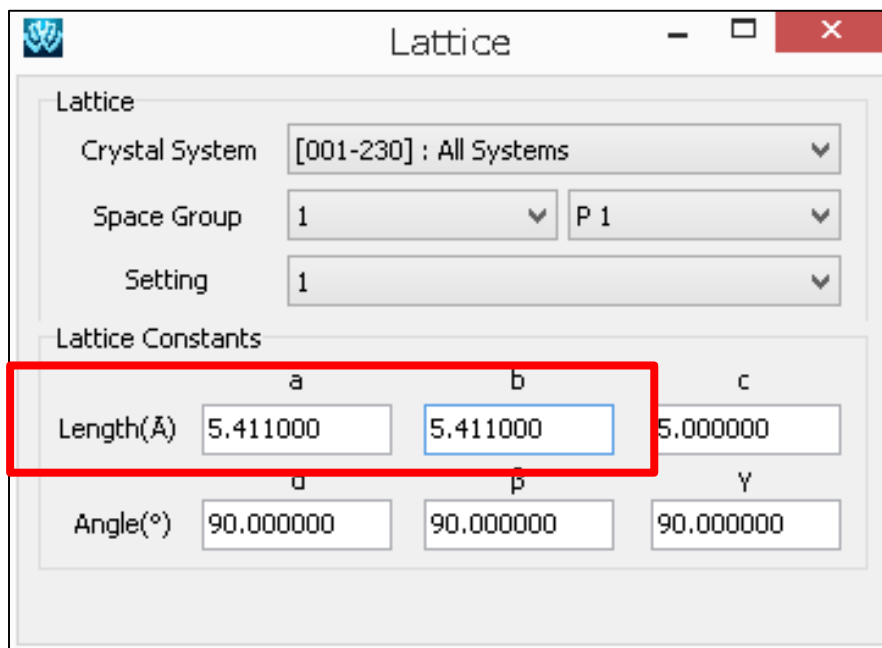
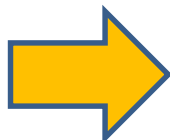
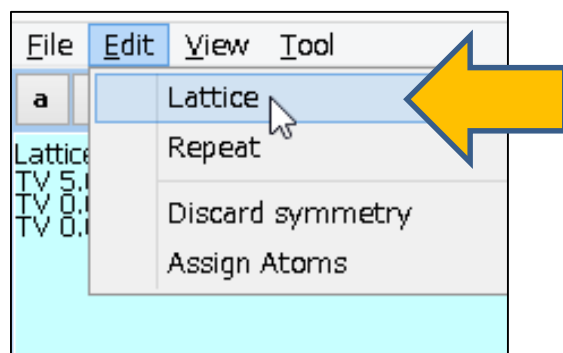
# 1. 結晶ビルダで初期座標の作成1

「固体>結晶ビルダ」から結晶ビルダを起動する。



# 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、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。)

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

- Top Left:** The 'Crystal Builder' window with the 'Tool' menu open. The 'Insert Vacuum' option is highlighted with a red box. A yellow arrow points from the 'b' axis button to this menu item.
- Warning Dialog:** A dialog box titled '警告' (Warning) with a yellow warning icon. The text reads: '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 points to it.
- Right Panel:** The 'Insert vacuum' configuration panel is shown. It includes options for 'Axis' (X, Y, Z), 'Bulk [A]', 'Vacuum [A]', and 'Total Width [A]'. The 'Automatically shift to center' checkbox is checked. A 3D model of a crystal unit cell is visible in the background.

A large blue arrow at the bottom indicates the flow from the warning dialog to the final configuration panel.

# 1. 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



# 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

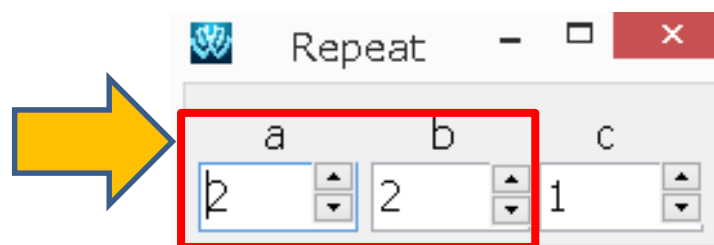
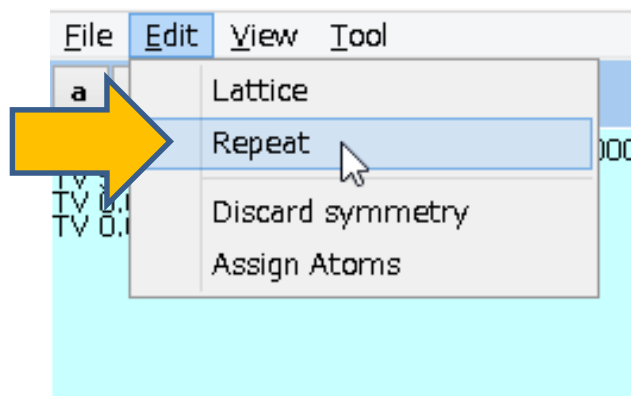
Lattice Constants  
5.411 5.411 22.500 90.000 90.000 90.000

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。

The screenshot shows the Crystal Builder software interface. The 'File' menu is open, and the 'Save As' option is highlighted. A yellow arrow points to the 'Save As' option. Another yellow arrow points to the window's close button (X). The main window displays a 3D crystal structure with axes a, b, and c. The right panel shows 'Asymmetric Unit' and 'Lattice Constants'.

Atom	X	Y	Z
Al	0.000000	0.000000	0

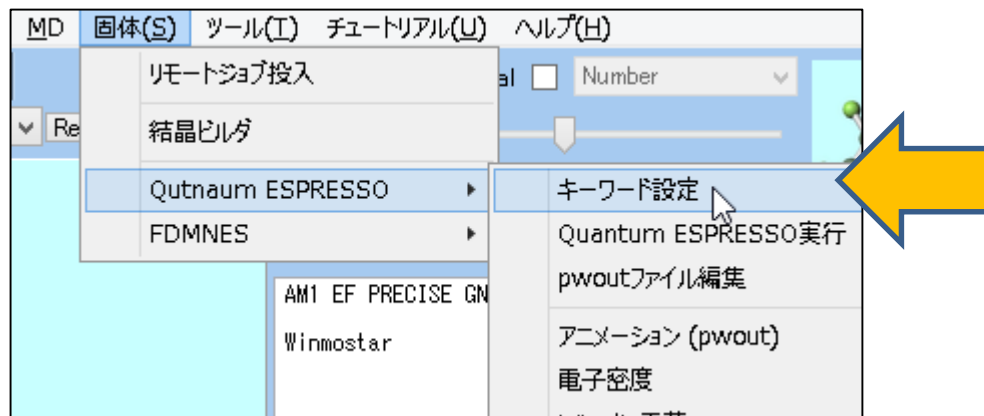
Lattice Constants  
5.411 5.411 22.500 90.000 90.000 90.000

Translation Vector  
5.411 0.000 0.000  
0.000 5.411 0.000  
0.000 0.000 22.500

Number of Atoms (displayed)  
18

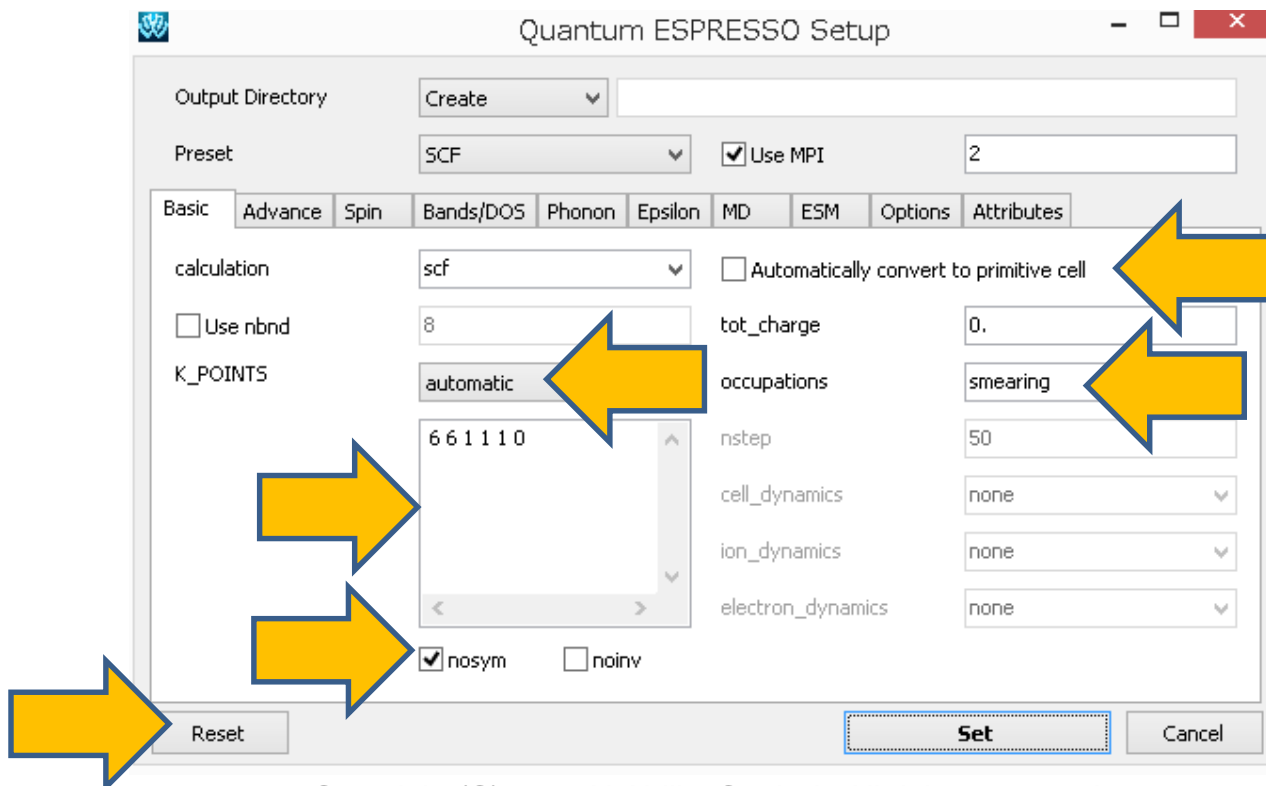
## II. constant- $N$ 計算1

「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、「Reset」ボタンを押す。「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。「nosym」にチェックを入れ、「Automatically Convert to Primitive Cell」のチェックを外し、「occupations」に「smearing」を指定する。



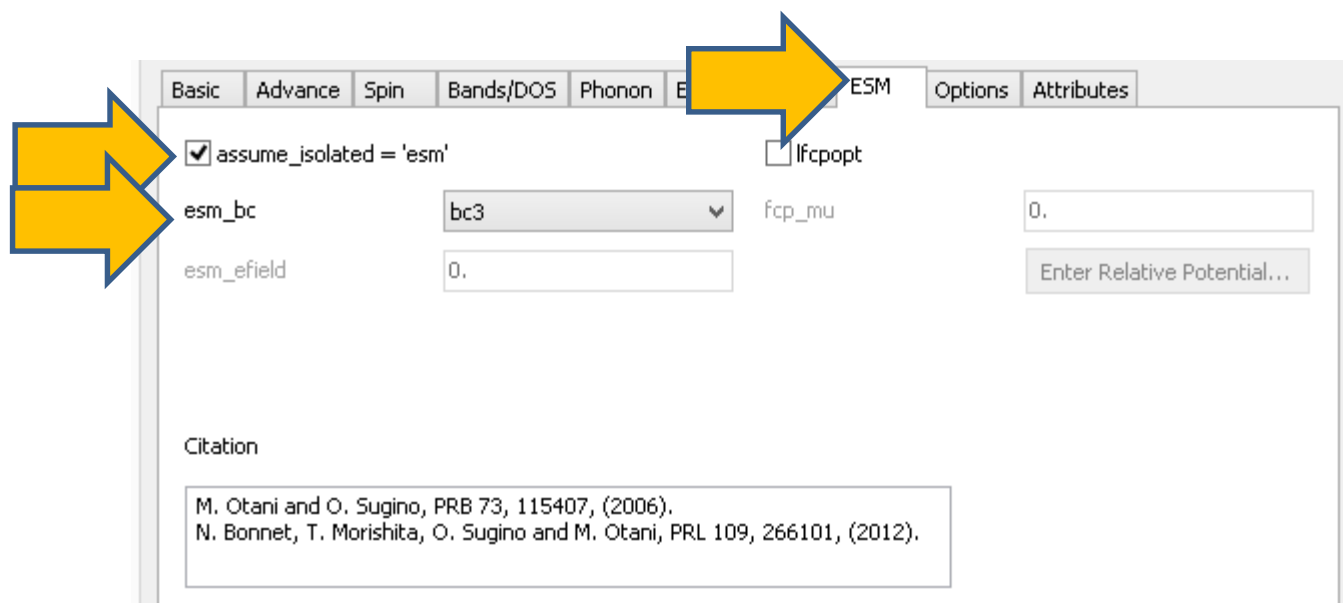
## II. constant- $N$ 計算3

「Advance」タブにて、「smearing」に「methfessel-paxton」、「degauss」に「0.03」、「mixing\_beta」に「0.3」を指定する。

Parameter	Value	Parameter	Value
ecutwfc	20.	smearing	methfessel-paxton
ecutrho	80.	degauss	0.03
conv_thr	1d-6	mixing_beta	0.3
etot_conv_thr	1d-4	mixing_mode	plain
forc_conv_thr	1d-3	cell_dofree	all
electron_maxstep	100	vdw_corr	None

## II. constant- $N$ 計算4

「ESM」タブにて、「assume\_isolated = 'esm'」にチェックを入れ、「esm\_bc」に「bc3」を指定する。

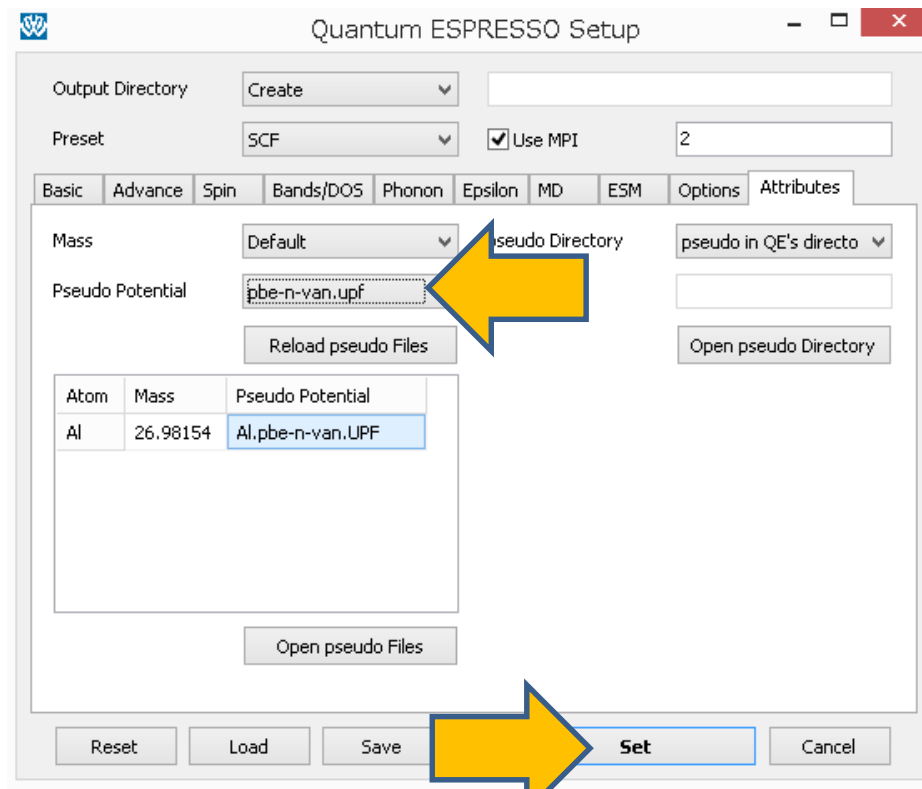


## II. constant- $N$ 計算5

「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。

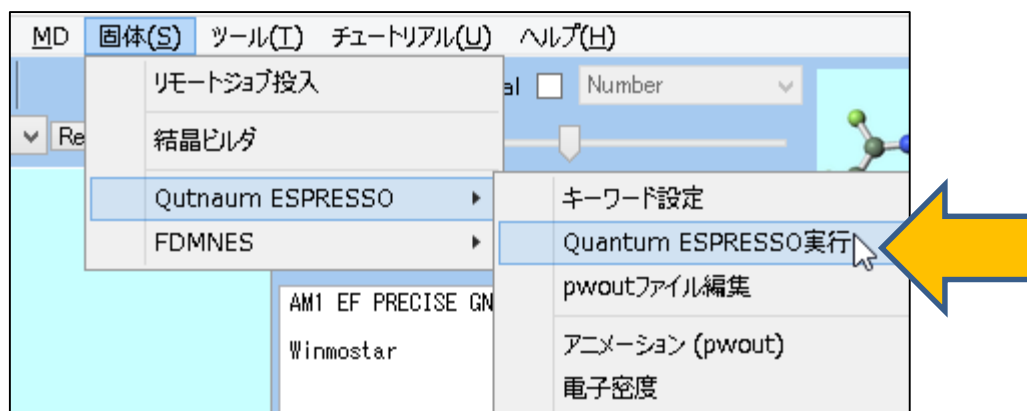
最後に、右下の「Set」で設定する。





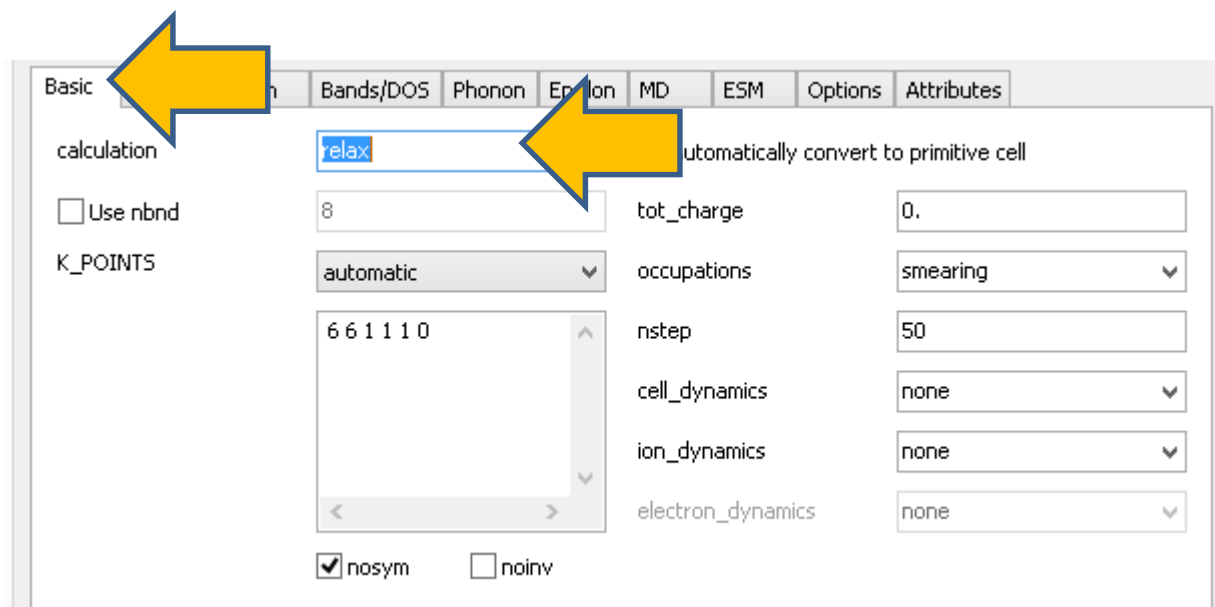
## II. constant- $N$ 計算6

「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- $\mu$ 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- $\mu$ 計算2

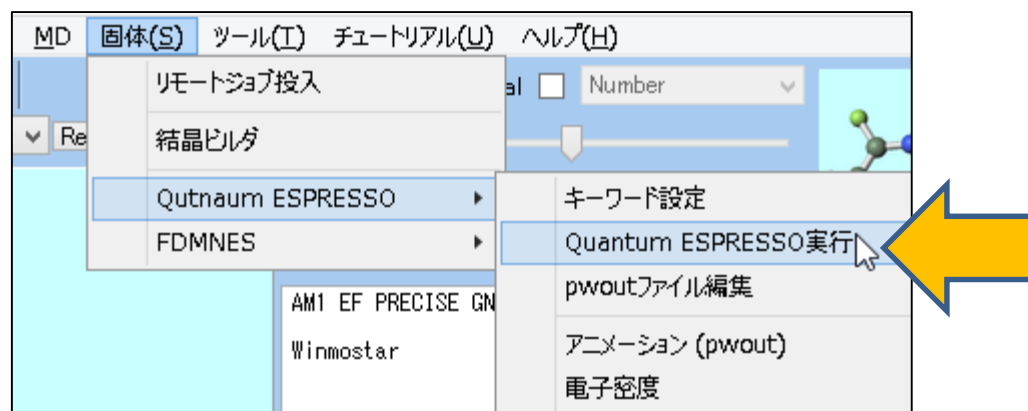
「ESM」タブにおいて「lfcopt」にチェックを入れ、「Enter Relative Potential...」ボタンを押す。基準 (0.0 V) とする計算の出力ファイルを聞かれるので、デフォルトで選択される先ほどの出力ファイル (al\_slab\_v0.pwout) を指定し、「Relative Potential」に "0.5" と入力する。設定内容を確認するダイアログが出現するので「はい」をクリックし、「Set」を押す。

The figure illustrates the steps to set up a constant- $\mu$  calculation with an applied voltage of 0.5 V. It consists of three sequential screenshots:

- ESM Tab Configuration:** The 'ESM' tab is selected. The checkbox for 'assume\_isolated = 'esm'' is checked. The 'lfcopt' checkbox is also checked. The 'esm\_bc' dropdown is set to 'bc3'. The 'fcp\_mu' field is set to '-0.18633'. The 'Enter Relative Potential...' button is highlighted with a yellow arrow.
- Enter Relative Potential Dialog:** A dialog box titled 'Enter Relative Potential' is shown. The 'Relative Potential [V]:' field contains '0.5'. The 'OK' button is highlighted with a yellow arrow.
- Information Dialog:** An information dialog box titled '情報' (Information) is displayed. It contains the text: 'The reference Fermi energy and relative potential would be set to -3.035 eV and 0.500 V, respectively.' The 'はい(Y)' (Yes) button is highlighted with a yellow arrow.

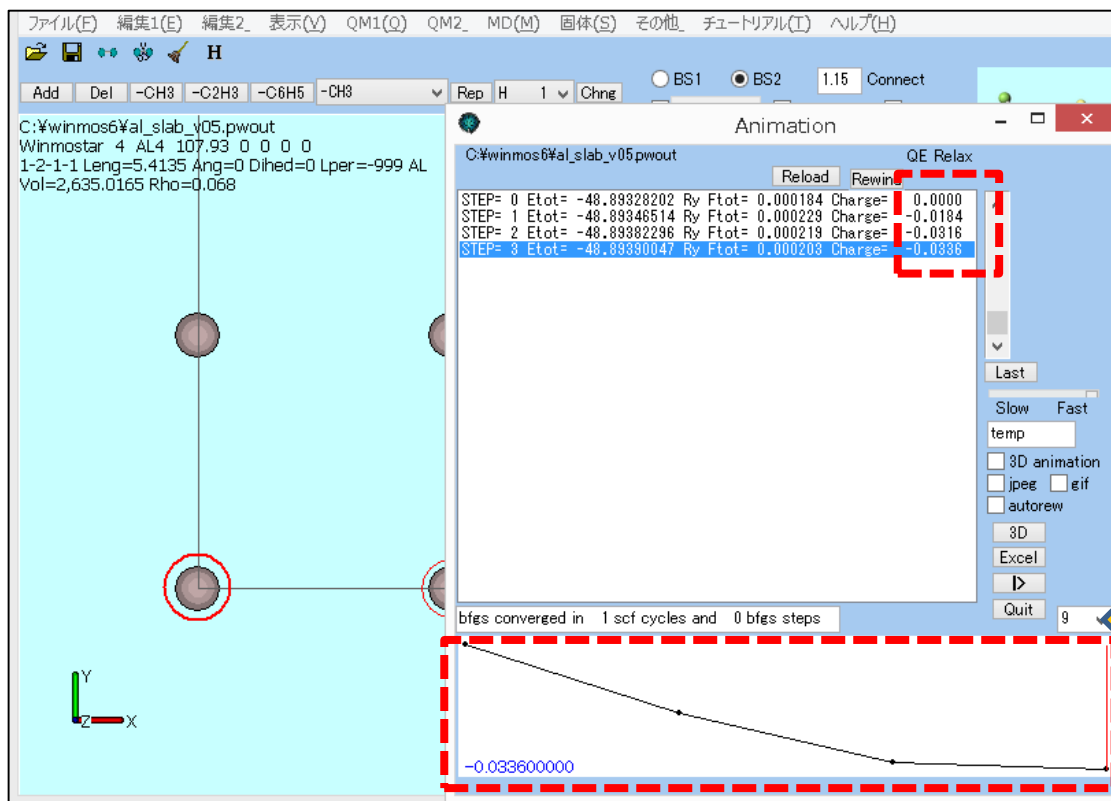
### III. 印加電圧0.5 Vのconstant- $\mu$ 計算3

「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- $\mu$ 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。



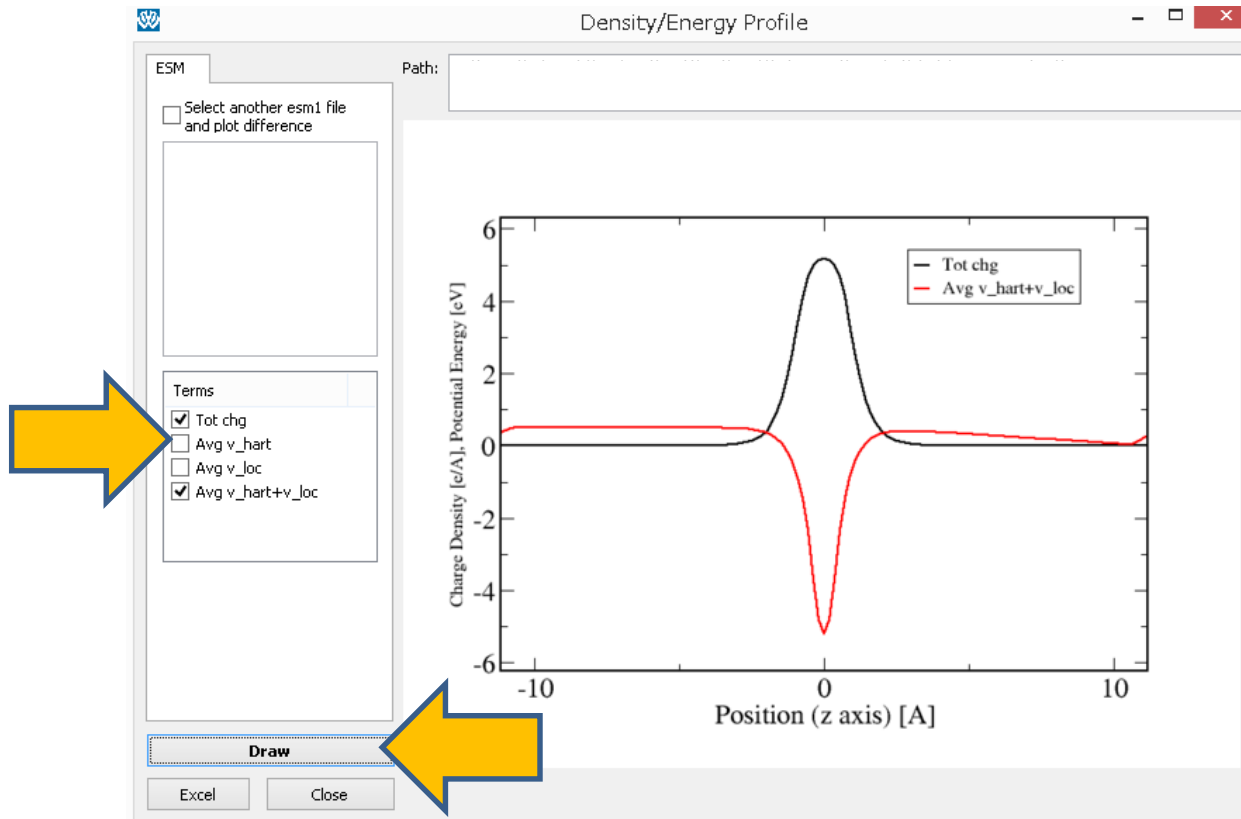
The screenshot shows the Animation window in X-Ability. The main window displays a 3D model of a slab structure. The Animation window is open, showing a table of simulation data. The table has 9 columns, with the 9th column (Total Charge) highlighted in blue. A red dashed box highlights the table and the '9' option in the dropdown menu. A yellow arrow points to the dropdown menu.

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

Below the table, a graph shows the Total Charge (Charge) versus Step. The y-axis is labeled with the value -0.033600000. The graph shows a decreasing trend in charge over the steps.

## IV. ESM計算のチェック

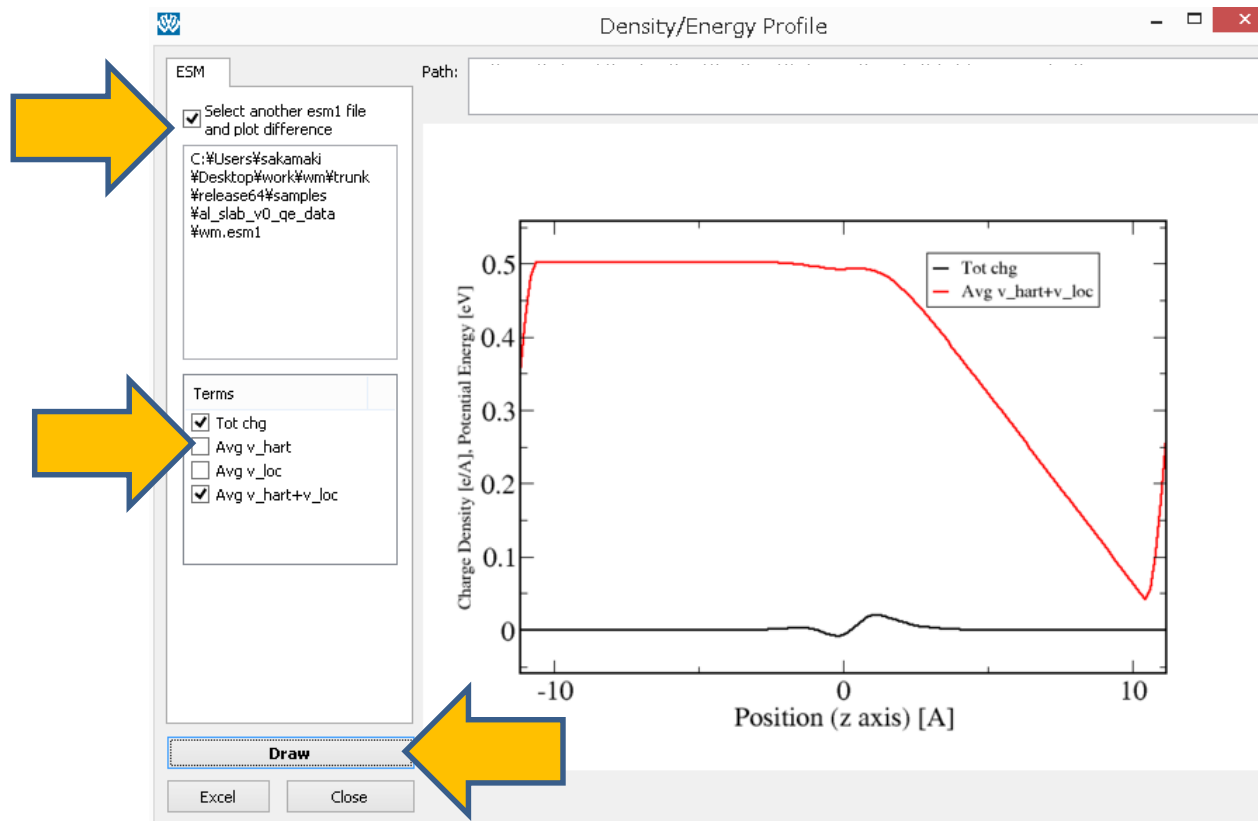
「固体>Quantum ESPRESSO>電荷/エネルギー分布 (esm1)」を選択し、2回目の計算の出力ファイル(al\_slab\_v05\_qe\_data/wm.esm1)を選択する。  
 「Terms」内の表示したい内容にチェックを入れ「Draw」を押すとグラフが表示される。  
 ここでは、 $z=0$ (スラブの位置)が中央に来るよう作図されている点に注意されたい。



## IV. ESM計算のチェック

「Select another esm1 file and plot difference」にチェックを入れ、1回目の計算の出力ファイル(al\_slab\_v0\_qe\_data/wm.esm1)を選択する。

「Terms」内の表示したい内容にチェックを入れ「Draw」を押すと、1回目と2回目の計算の差が表示される。



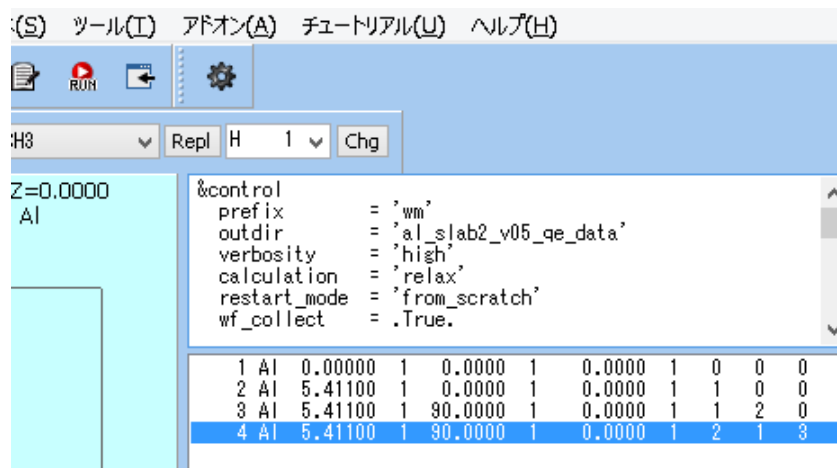
# 補足

ESM-RISM対応版QEを使用し、RISMを使わずconstant-mu計算を実行する場合は、キーワード設定ウインドウでキーワードをセットした後、メインウインドウ右上のキーワード欄で以下の様に変更する。RISMを有効にする場合は自動で設定されるため不要である。

- &controlの「lfcpt」を「lfc」に書き換える。
- &systemの「fcp\_mu = ...」の行をカットし、最後の行（「&ions」～「/」の後ろ）に、

```
&fcp
  fcp_mu = ...
/
```

として追加する。





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\\_au\\_detailpage\\_o00\\_s00...](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