

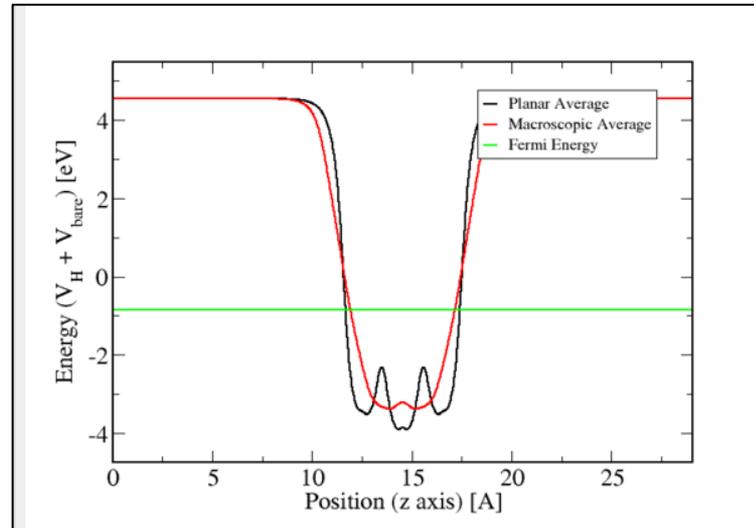
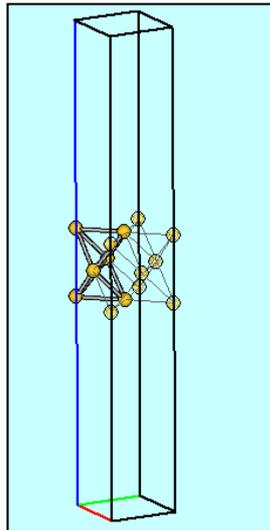
Winmostar™ チュートリアル  
Quantum ESPRESSO  
仕事関数  
V9.2.1

株式会社クロスアビリティ

2019年7月26日

# 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

本機能を用いるためには、Quantum ESPRESSOとCygwinのセットアップが必要です。

- [https://winmostar.com/jp/download\\_jp.html](https://winmostar.com/jp/download_jp.html)のインストール方法のWindows用のQuantum ESPRESSOとCygwinの設定手順に従います。

(6) Windows上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。

[GAMESS](#) [NWChem](#) [LAMMPS](#) [NAMD](#) [Quantum ESPRESSO](#) [FDMNES](#)

※ Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは(7)でインストールするcygwin\_wmに含まれます。

(7) MDまたはSolidパックの計算（およびその他の一部の処理）を実行する場合は、以下のいずれかのリンク先の手順でCygwinの環境を構築します。

[ビルド済みのcygwin\\_wmをインストールする場合（推奨）](#)

[cygwin\\_wmをビルドする場合（非推奨、上級者向け）](#)

[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合（ベータ版）](#)

# 擬ポテンシャルの用意

**本チュートリアルを実施するためには、追加の擬ポテンシャルファイルが必要です。**

以下のURLより擬ポテンシャルファイルをダウンロードし、QEの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。

<https://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials>

「Au.pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPF」をクリックする

# I. モデルの作成1

1. ファイル | 開くをクリックする。
2. サンプルフォルダ内のau\_slab.cifを開く。

※デフォルトではC:\winmos9\samples\au\_slab.cif

※このCIFファイルは結晶ビルダおよび真空層を挿入...を用いて作成することが可能である。

## Auスラブの作成

Crystal system: Cubic

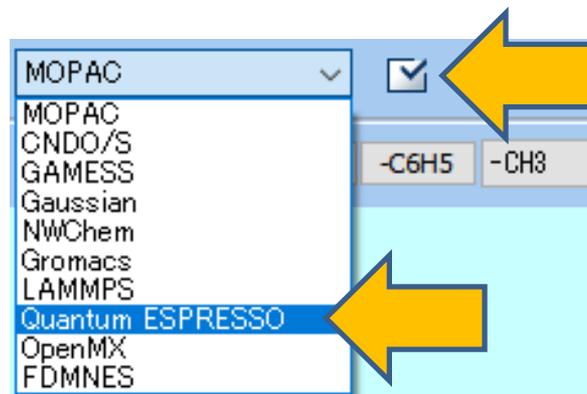
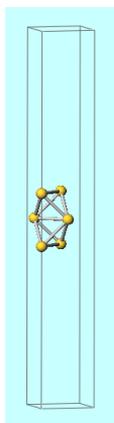
Space group : Fm-3m (225)

Lattice constants : a= 4.078830 Å

Asymmetric unit: Au (0.0 0.0 0.0)

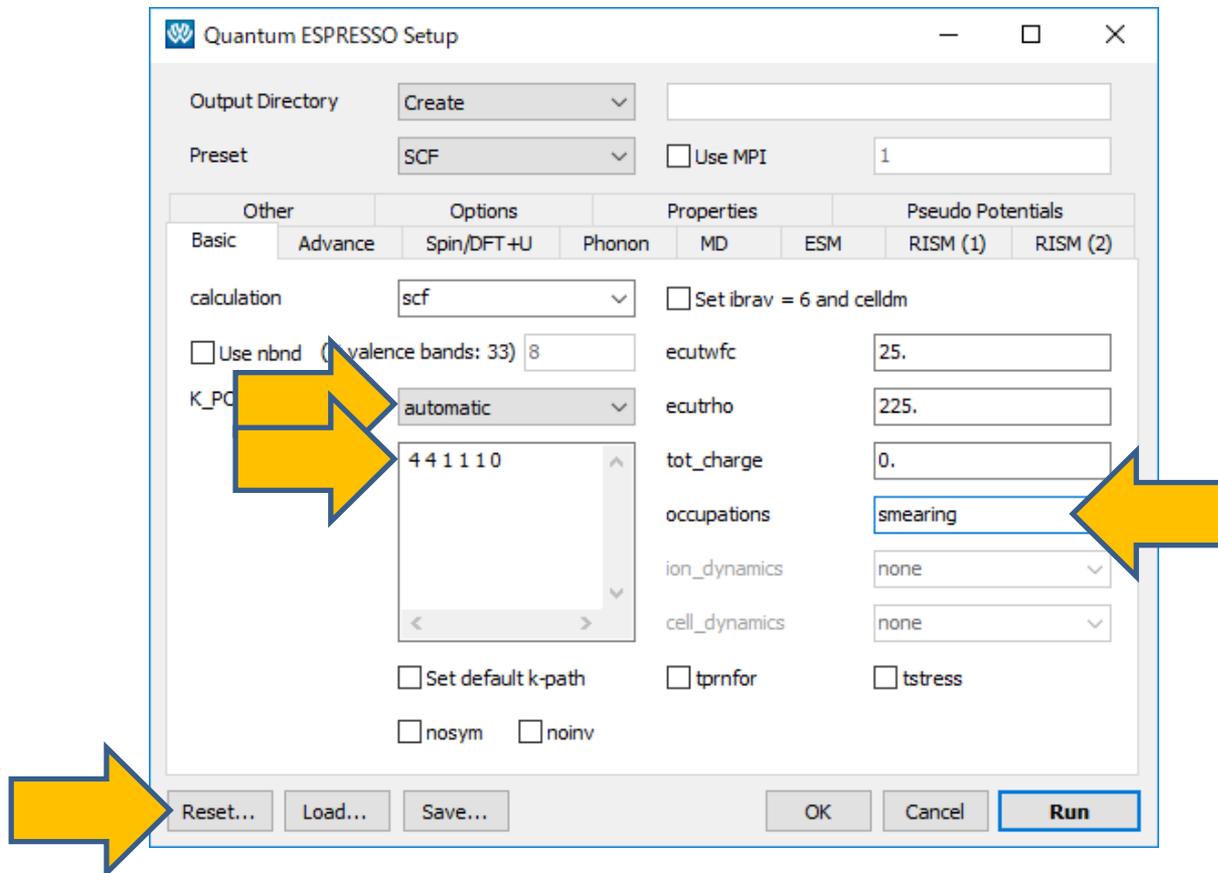
真空層厚み: 25 Å

3. ツールバーのソルバー一覧から、Quantum ESPRESSOを選択する。
4.  (キーワード設定)をクリックする。



# I. SCF計算

1. **Reset**をクリックする。
2. **K\_POINTS**に**automatic**を指定し、**4 4 1 1 1 0**(スペース区切り)と入力する。
3. **occupations**に**smearing**を指定する。



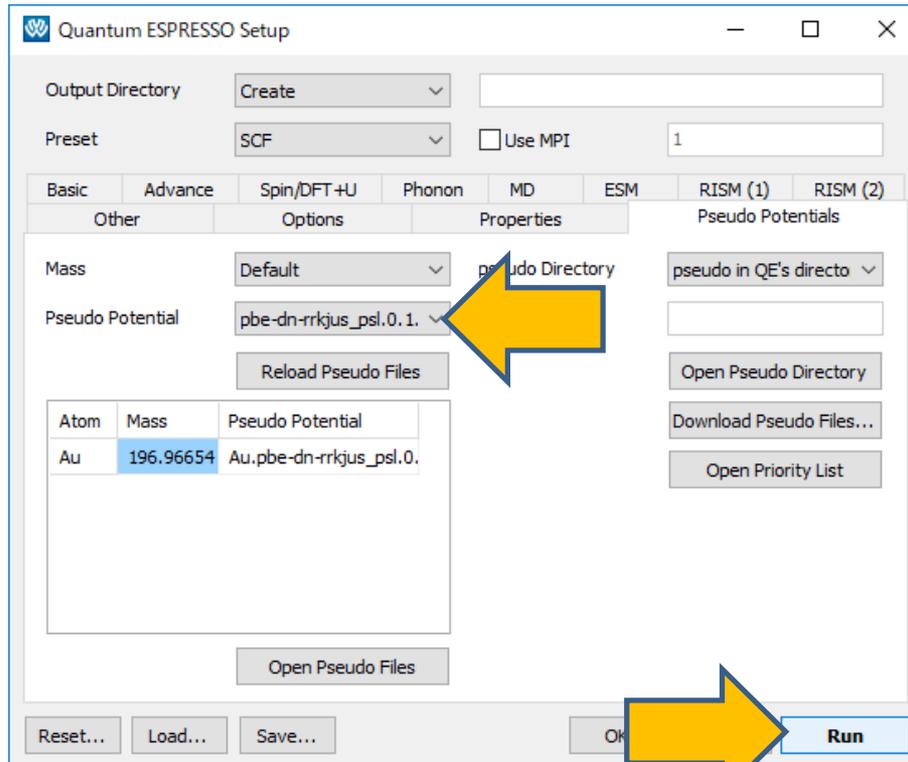
# I. SCF計算

1. Pseudo Potentialsタブにて、

**Pseudo Potentialにpbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPFを指定する。**

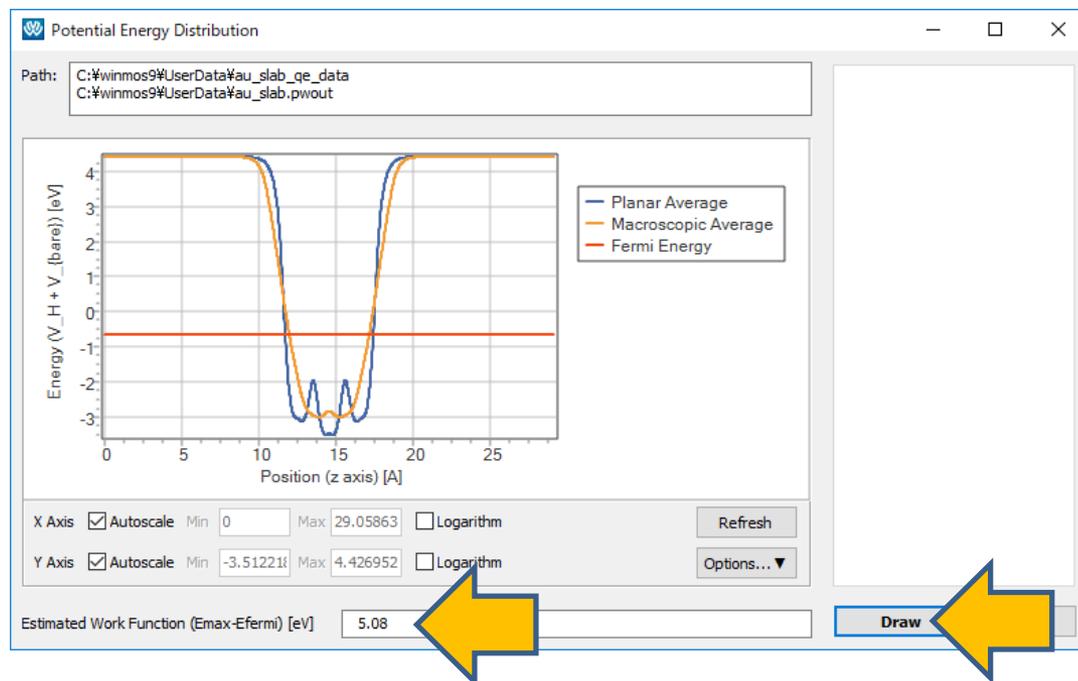
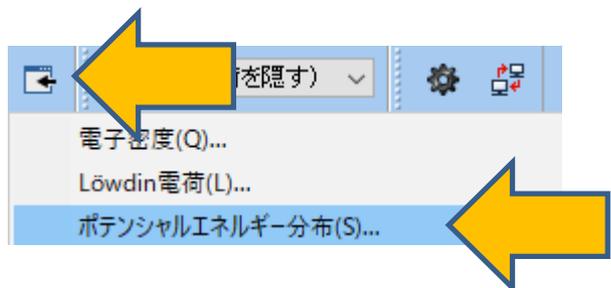
※ pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPFが無い場合は、P. 4の手順に従いpseudoファイルをpseudoフォルダに格納し、Reload pseudo Filesをクリックする。

2. Runをクリックし、ファイル名をau\_slab.pwinとし保存する。



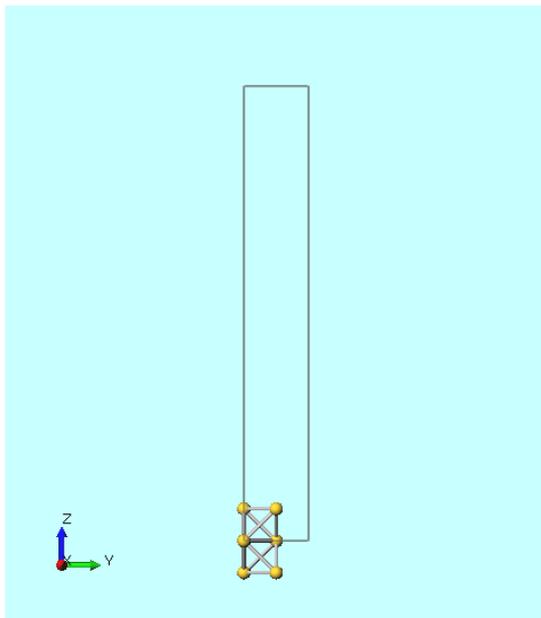
## II. 仕事関数

1. 計算の終了後、 (結果解析) | ポテンシャルエネルギー分布をクリックする。
2. 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。
3. 新しいウィンドウが立ち上がり、**Draw**をクリックすると、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)



Quantum Espresso Options window:

- Other: Basic, Advance, Spin/DFT+U, Pseudopotentials
- Options: ESM, RISM (1), RISM (2)
- assume\_isolated = 'esm'
- ifcpopt
- esm\_bc: bc3
- fcp\_mu: 0.

Terminal output (au\_slab\_esm.pwout):

```

k = 0.3750 0.3750 0.0000 ( 6926 PWs) bands (ev):
-12.0577 -11.5408 -11.5329 -11.4565 -10.7650 -10.2324 -10.0262 -9.9219
-9.9151 -9.8620 -9.6317 -9.3799 -9.2933 -9.2740 -9.2128 -9.1780
-9.1606 -8.7343 -8.7335 -8.2670 -8.1987 -7.9401 -7.7994 -7.6895
-7.6785 -7.5616 -7.3058 -7.1206 -7.1123 -7.0371 -7.0267 -6.5140
-4.7948 -4.7858 -4.7858 -3.9709 -3.2404 -2.8383 -2.3873 -1.5575 -0.8874

occupation numbers
1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000
1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000
1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000
1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 0.9986
0.2792 0.2729 0.0108 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

the Fermi energy is -5.0764 ev
  
```

<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友  
アカウント登録 ログイン

**X-Ability**  
クロスアビリティ

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...](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