

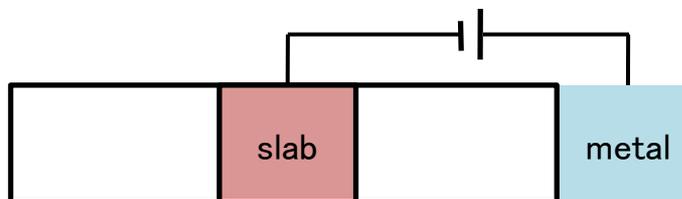
Winmostar™ チュートリアル
Quantum ESPRESSO
Effective Screening Medium (ESM) 法
V9.2.1

株式会社クロスアビリティ

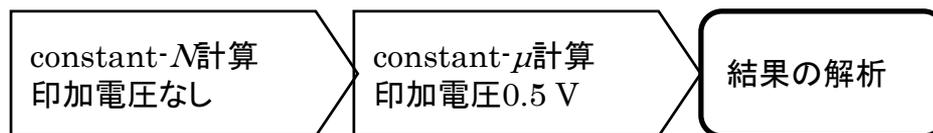
2019年7月26日

概要

- Al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- μ 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

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。

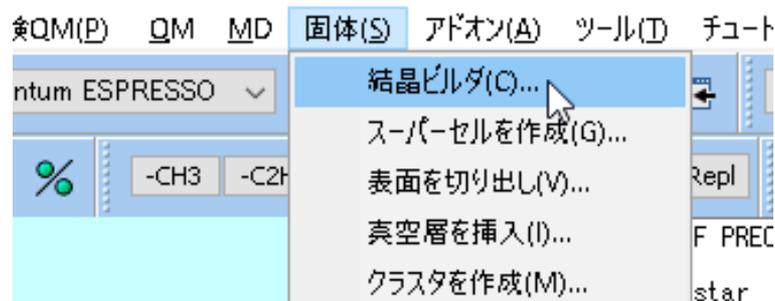
以下のURLより擬ポテンシャルファイルをダウンロードし、QEのインストールフォルダの下のpseudoフォルダに入れWinmostarを再起動する。

<https://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials/original-qe-pp-library/al>

「Al.pbe-n-van.UPF」をクリックする

1. 結晶ビルダで初期座標の作成

固体 | 結晶ビルダをクリックする。



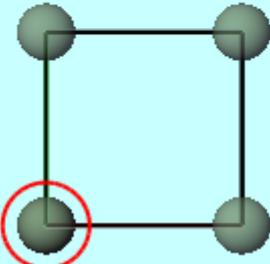
I. 結晶ビルダで初期座標の作成

Lattice ConstantsのLengthにおいてa, bを「2.8634」に変更する。

File Edit View

a b c a* b* c*

```
.lattice constant 2.863 2.863 5.000 90.000 90.000 90.000
V 2.863 0.000 0.000
V 0.000 2.863 0.000
V 0.000 0.000 5.000
```



Lattice

Crystal System [001-230] : All Systems

Space Group 1 P 1

Setting

Lattice Constants

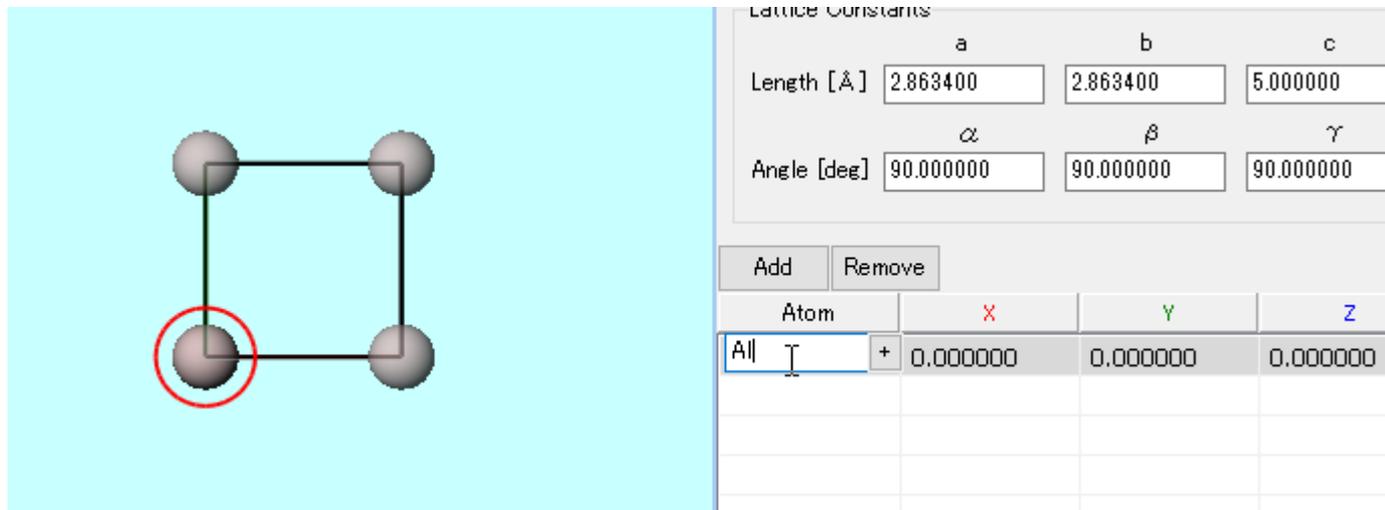
	a	b	c
Length [Å]	2.863400	2.863400	5.000000
Angle [deg]	α 90.000000	β 90.000000	γ 90.000000

Add Remove

Atom	X	Y	Z
C +	0.000000	0.000000	0.000000

I. 結晶ビルダで初期座標の作成

1番目の原子のAtomをCからAlに変更する。そして右下のOKボタンを押す。

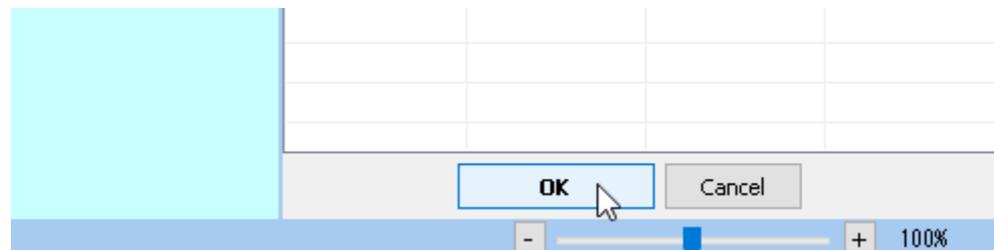


The screenshot shows a 3D model of a crystal structure on the left, with a red circle highlighting the first atom. On the right, a dialog box titled "Lattice Constants" is open, displaying the following parameters:

Lattice Constants			
	a	b	c
Length [Å]	2.863400	2.863400	5.000000
	α	β	γ
Angle [deg]	90.000000	90.000000	90.000000

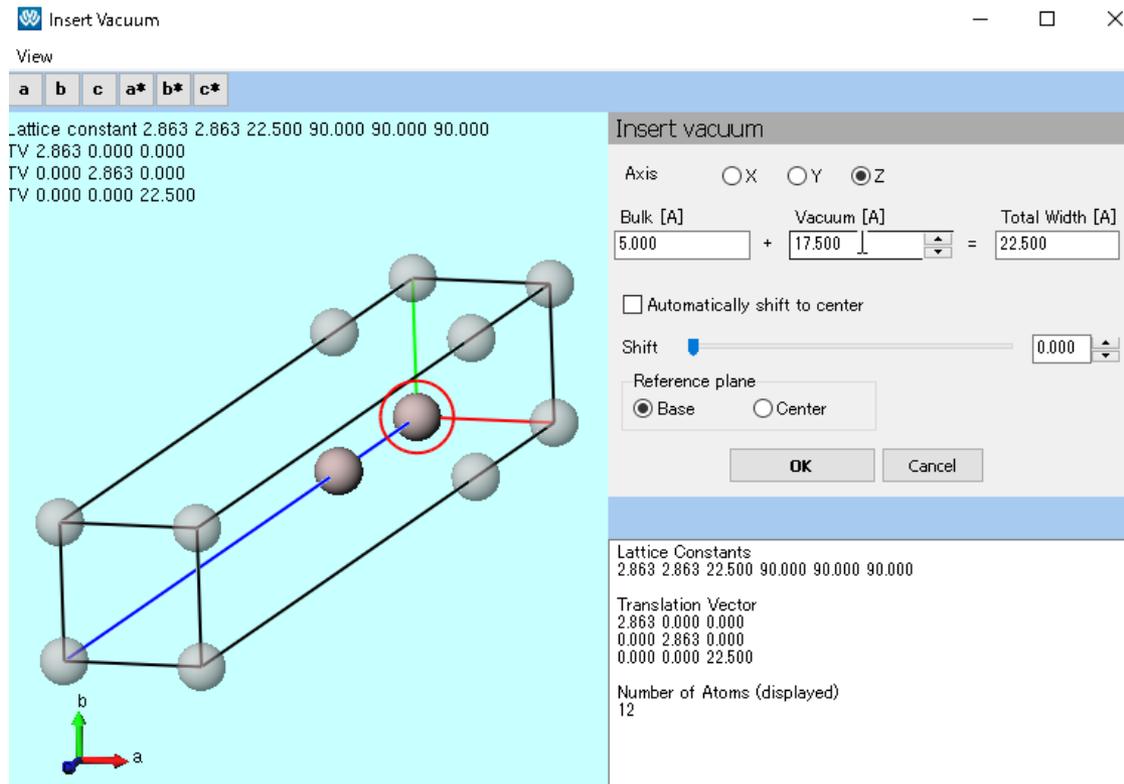
Below the lattice constants, there are "Add" and "Remove" buttons. A table below that shows the atom list:

Atom	X	Y	Z
Al	0.000000	0.000000	0.000000



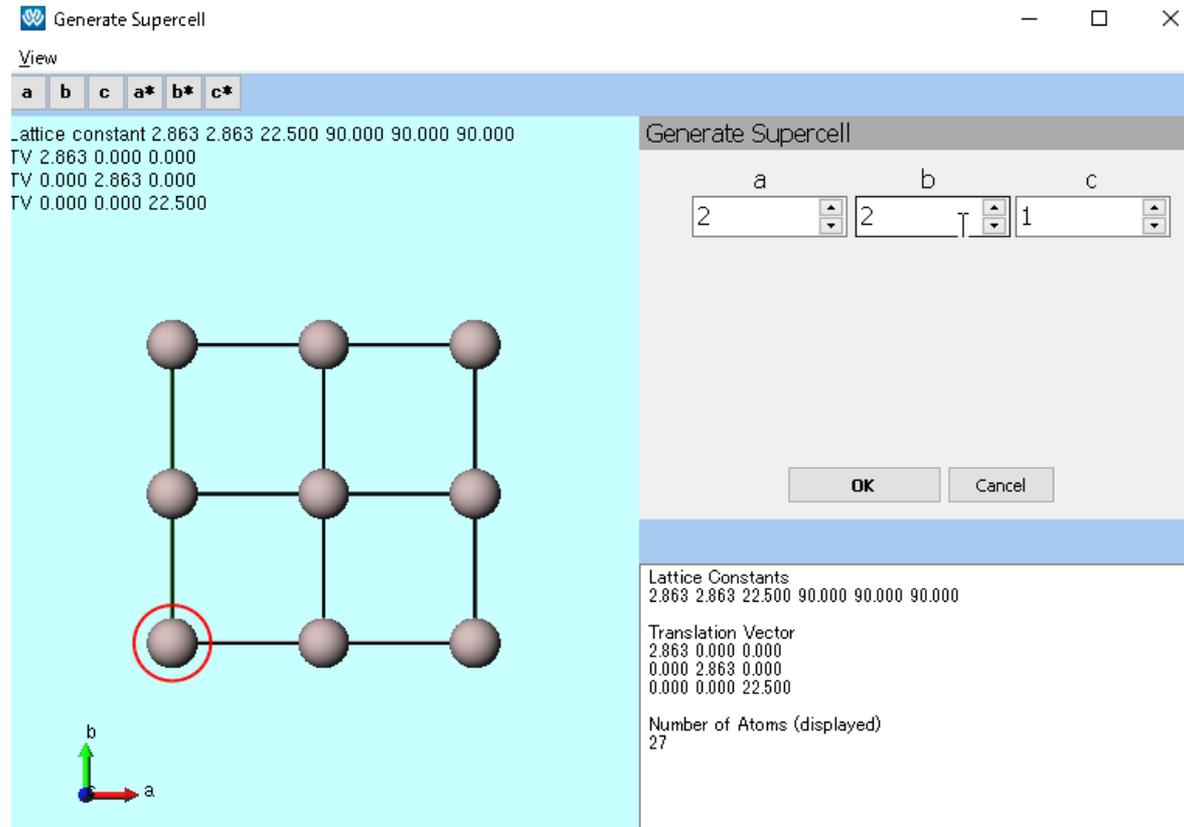
I. 結晶ビルダで初期座標の作成

メインウィンドウで固体 | 真空層を挿入をクリックし、Insert Vacuumウィンドウを開く。
 Insert Vacuumウィンドウで、Vacuumに「17.5」と入力する。
 Automatically shift to centerのチェックを外し、Reference planeのBaseに
 チェックを入れる。最後にOKボタンを押す。



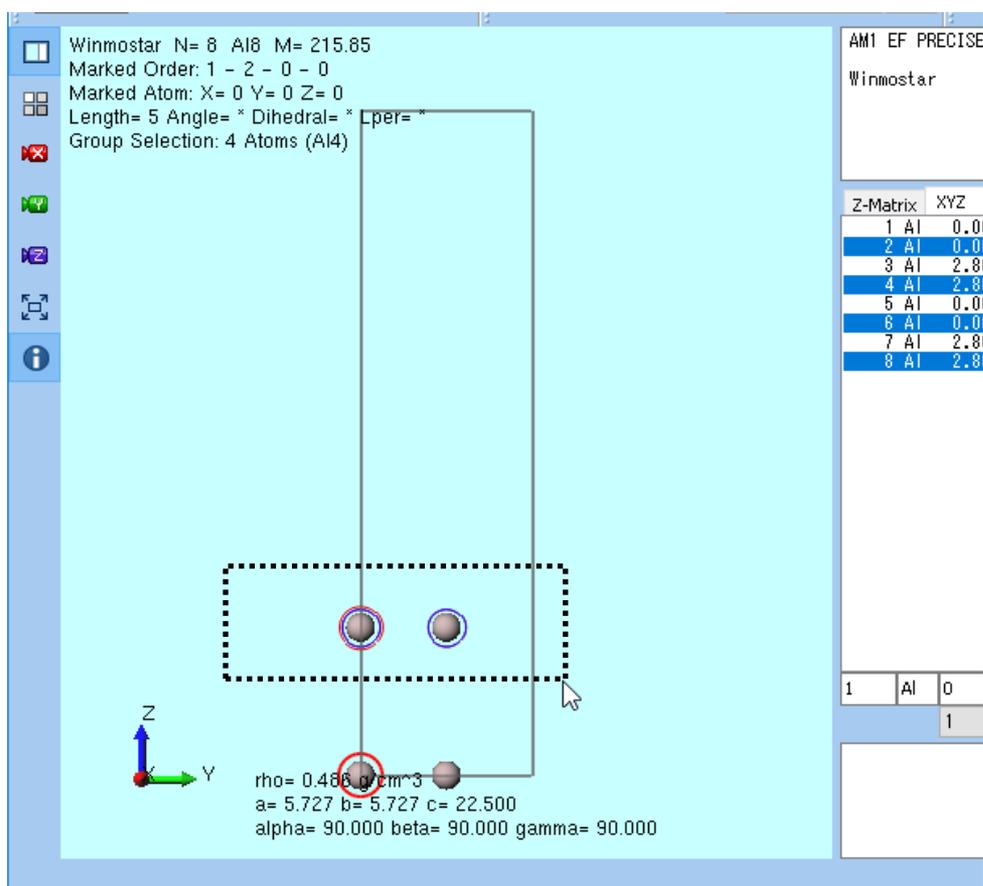
I. 結晶ビルダで初期座標の作成

メインウィンドウで固体 | スーパーセルを作成をクリックし、**Generate Supercell** ウィンドウを開く。**Generate Supercell**ウィンドウで、**a, b**の値を「2」に変更する。最後に**OK**ボタンを押す。



I. 結晶ビルダで初期座標の作成

メインウィンドウで  (X軸方向から表示) ボタンと  (ウィンドウに合わせる) ボタンをクリックする。分子表示エリアで下図のように2層目の原子をCtrl+ドラッグして囲い、グループ選択する。



Winmostar N= 8 Al8 M= 215.85
 Marked Order: 1 - 2 - 0 - 0
 Marked Atom: X= 0 Y= 0 Z= 0
 Length= 5 Angle= * Dihedral= * Cper= *
 Group Selection: 4 Atoms (Al4)

AMI EF PRECISE
 Winmostar

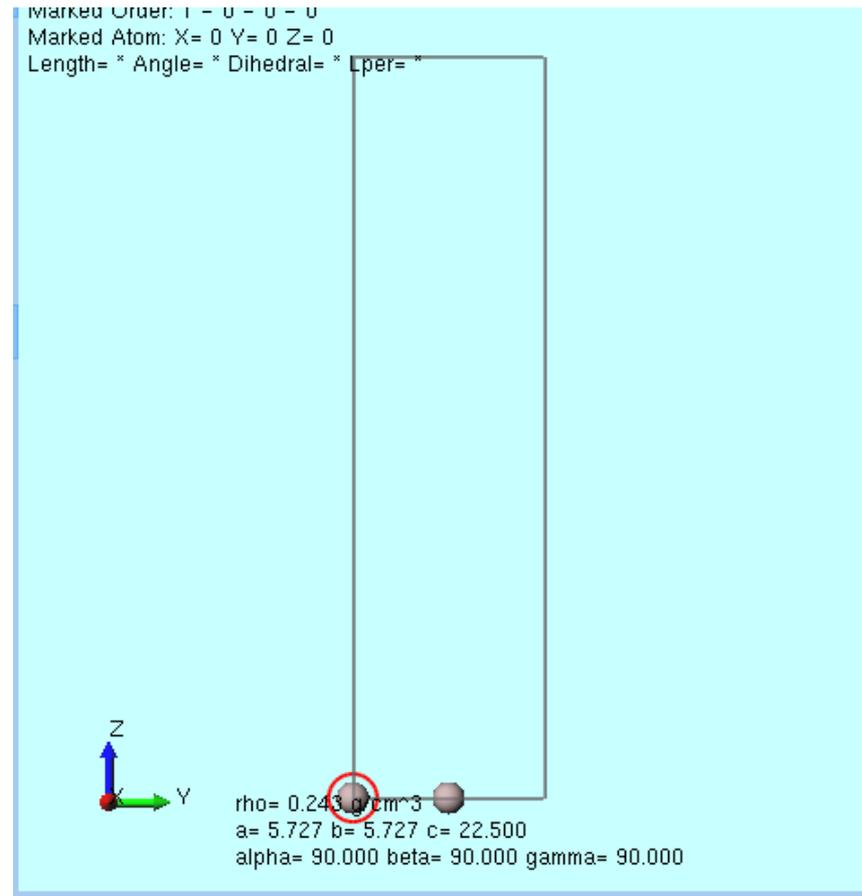
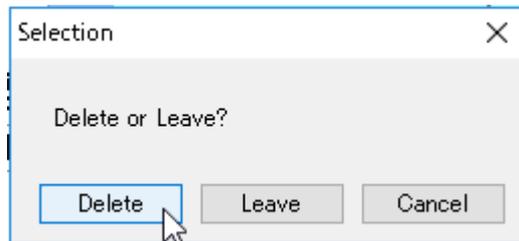
Z-Matrix	XYZ
1 Al	0.01
2 Al	0.01
3 Al	2.81
4 Al	2.81
5 Al	0.01
6 Al	0.01
7 Al	2.81
8 Al	2.81

1 | Al | 0
 | | | 1

rho= 0.486 g/cm³
 a= 5.727 b= 5.727 c= 22.500
 alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

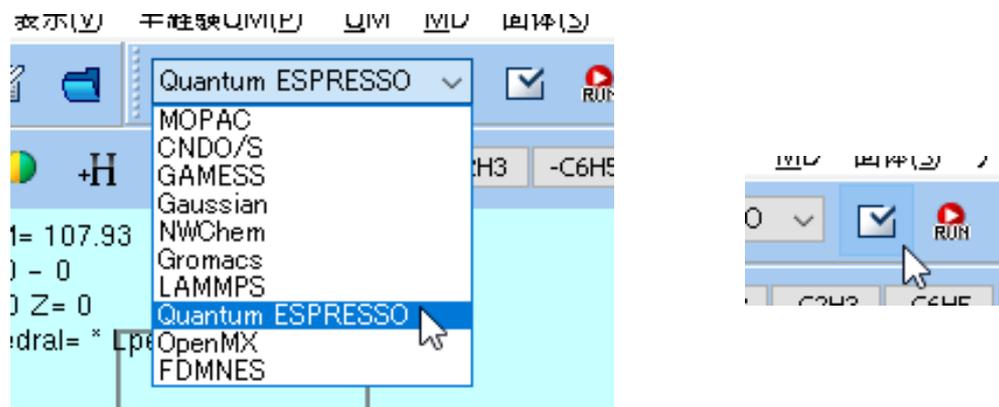
1. 結晶ビルダで初期座標の作成

編集 | グループ編集 | グループを削除をクリックする。ダイアログでDeleteボタンをクリックすると、2層目の原子が削除される。



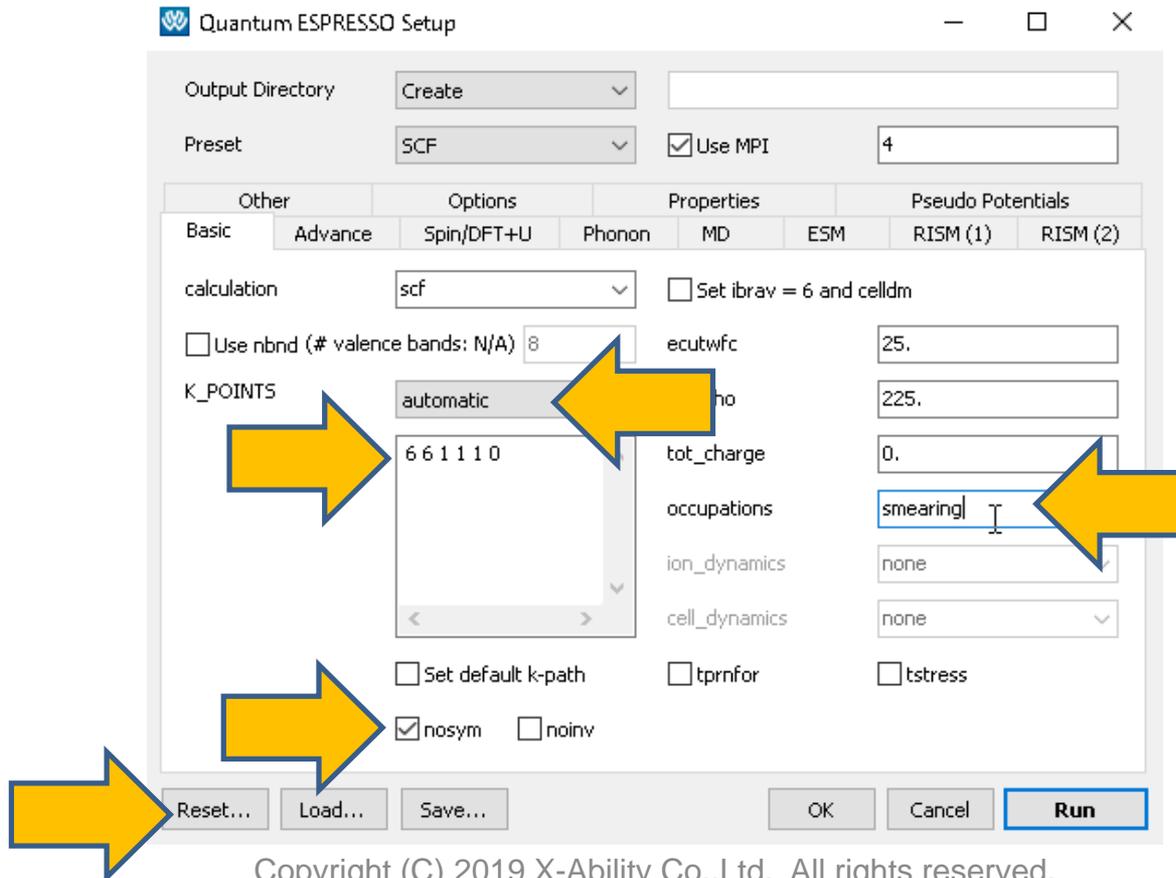
II. constant- N 計算

ソルバを選択メニューで**Quantum ESPRESSO**を選択し、キーワード設定ボタンをクリックする。



II. constant- N 計算

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、occupationsをsmearingに変更する。



II. constant- N 計算

Advanceタブにて、smearingをmethfessel-paxton、degaussを0.03に変更する。

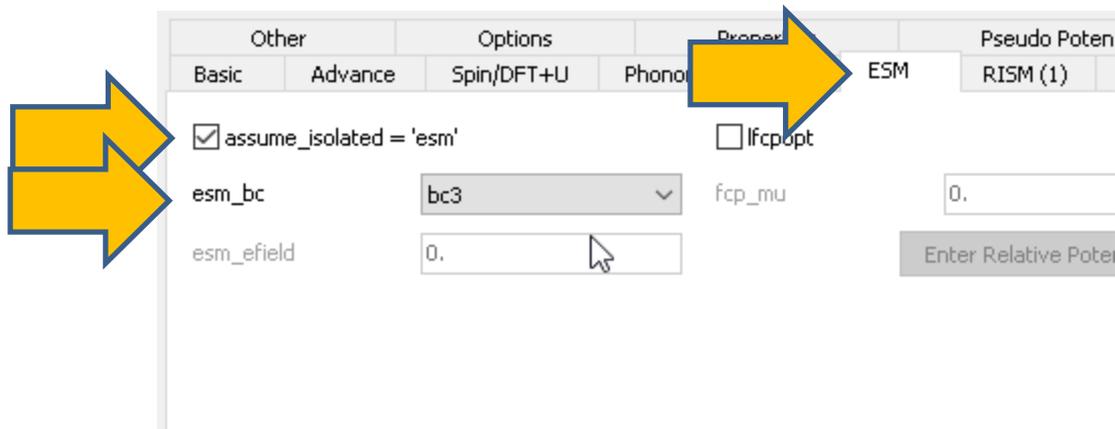
The screenshot shows a software interface with several tabs: 'Other', 'Options', 'Properties', and 'Pseudo Potentials'. The 'Options' tab is active, and within it, the 'Advance' sub-tab is selected. The interface is divided into columns: 'Basic', 'Phonon', 'MD', 'ESM', 'RISM (1)', and 'RISM (2)'. The 'Advance' sub-tab contains the following settings:

Parameter	Value	Parameter	Value
conv_thr	1d-6	smearing	methfessel-paxton
etot_conv_thr	1d-4	degauss	0.03
forc_conv_thr	1d-3	mixing_beta	0.3
press_conv_thr	0.5	mixing_mode	plain
electron_maxstep	100	vdw_corr	None
nstep	50	<input type="checkbox"/> Use input_dft	
upscale	100.	cell_dofree	all
diagonalization	david	<input type="checkbox"/> Use cell_factor	3.0
<input type="checkbox"/> lspinorb			

Yellow arrows in the image point to the 'Advance' tab and the 'degauss' input field.

II. constant- N 計算

ESMタブにて、`assume_isolated = 'esm'`にチェックを入れ、`esm_bc`を**bc3**に変更する。

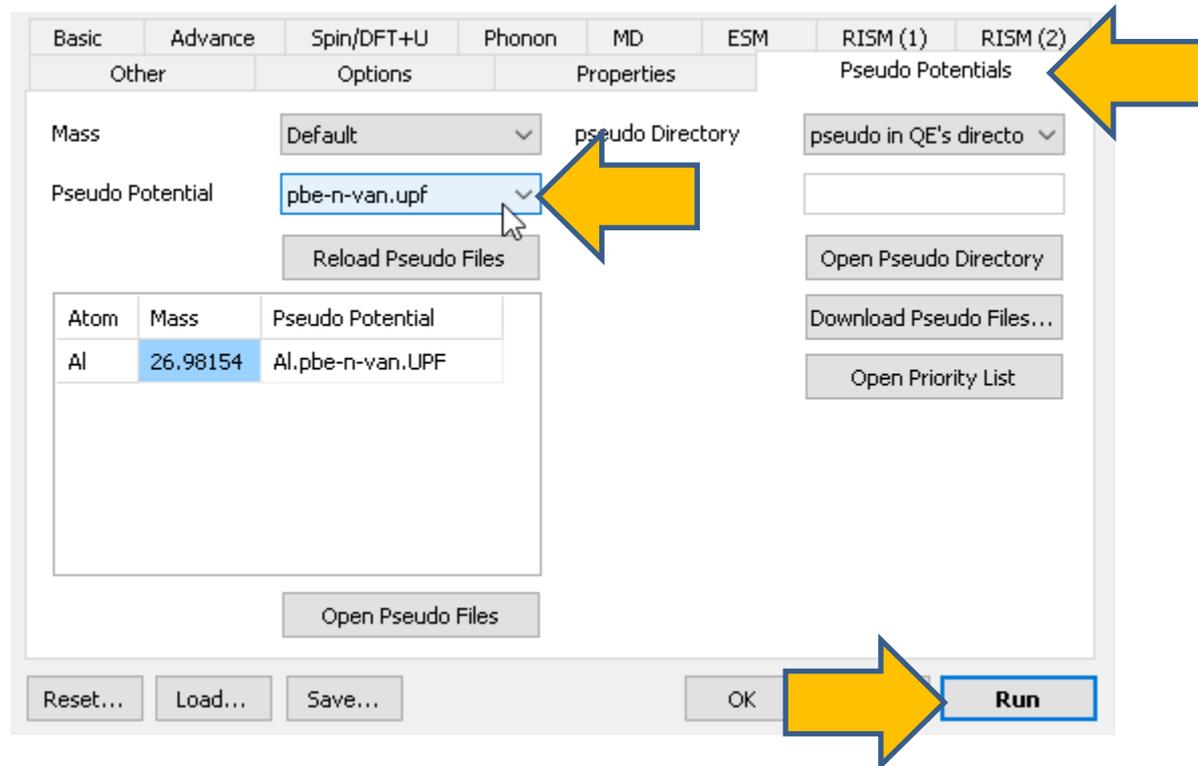


II. constant- N 計算

Pseudo Potentialsタブにて、**Pseudo Potential**に**pbe-n-van.upf**を選択する。

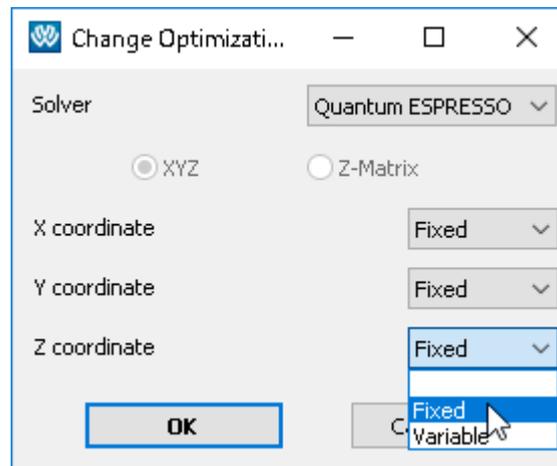
※ 「pbe-n-van.upf」が無い場合は、P. 4の手順に従いpseudoファイルをpseudoフォルダに格納し**Reload pseudo Files**をクリックする。

右下の**Run**ボタンを押し、ファイル名「**al_slab_v0.pwin**」として保存して計算を開始する。



III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算

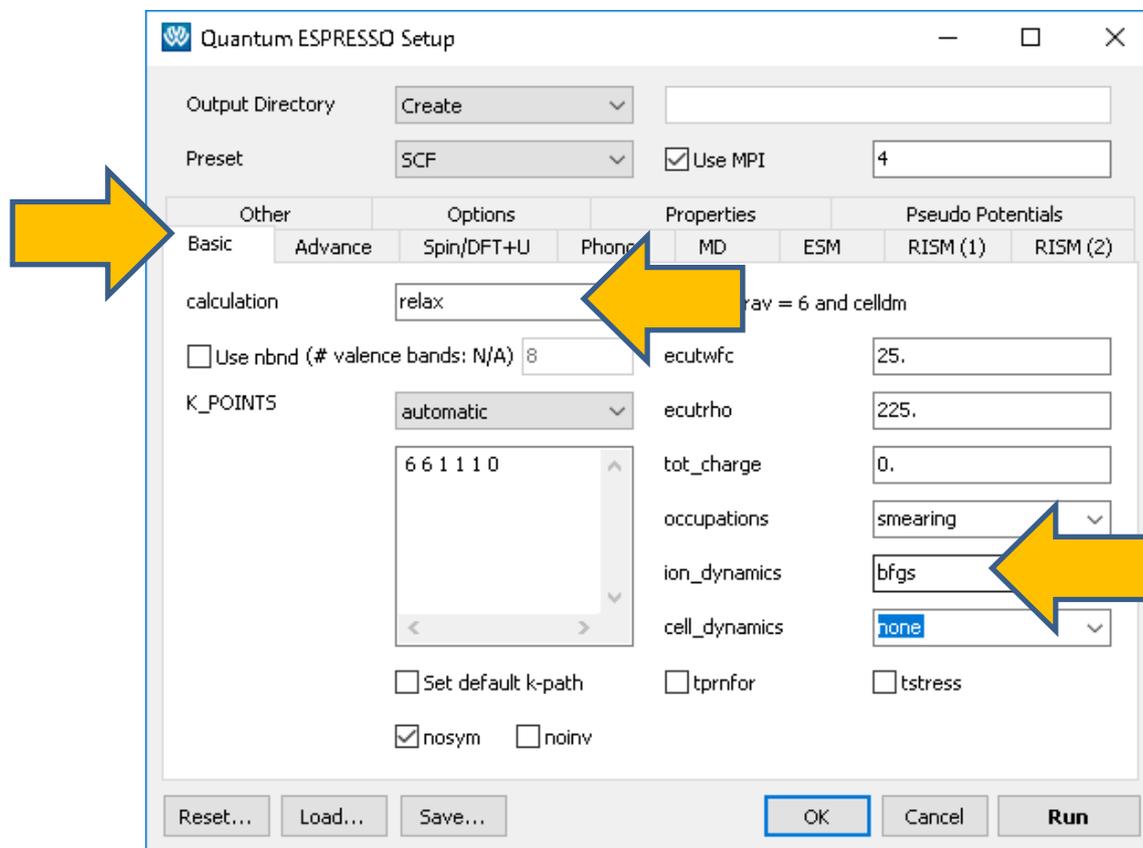
計算終了後、**選択 | 全てをグループ選択**をクリックする。次に、**編集 | 属性を変更 | 最適化フラグを変更**をクリックする。開いた**Change Optimization ...**ウィンドウで**X, Y, Z coordinate**をすべて**Fixed**に変更し、**OK**をクリックする。



III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算

再び (キーワード設定) ボタンを押す。

Basic タブで **calculation** を **relax** に、**ion_dynamics** を **bfgs** に変更する。



III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算

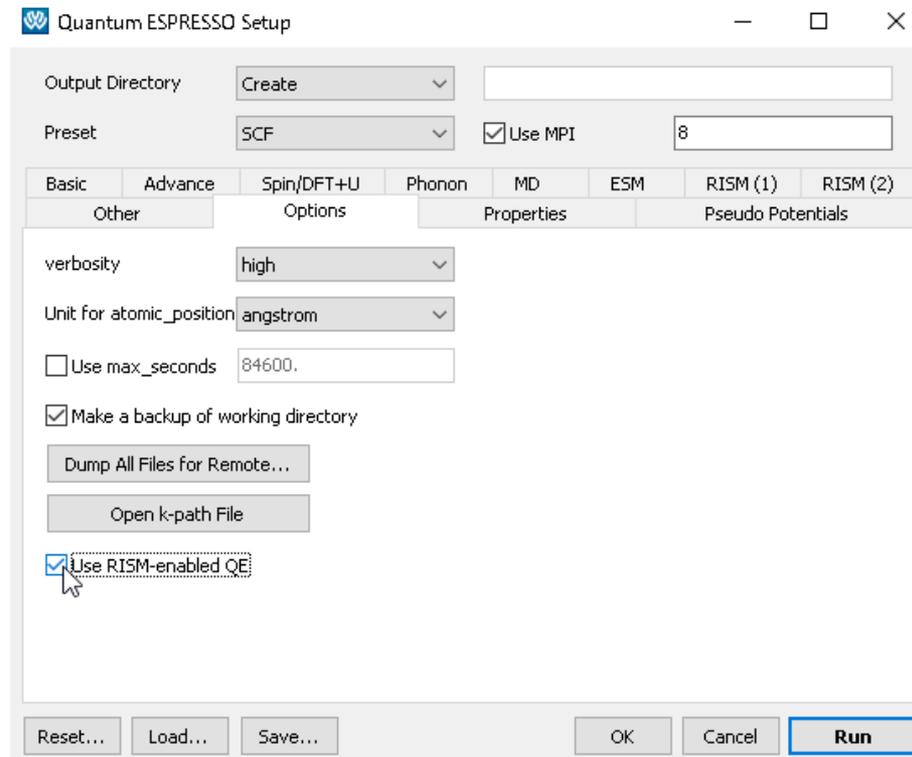
ESMタブにおいてIfcoptにチェックを入れ、Enter Relative Potential.ボタンを押す。基準(0.0 V)とする計算の出力ファイルを聞かれるので、デフォルトで選択される先ほどの出力ファイル(al_slab_v0.pwout)を指定する。Enter Relative Potentialダイアログでは「0.5」と入力する。情報ダイアログでははいを押す。

The screenshot illustrates the workflow for setting up a constant- μ calculation. In the main window, the 'ESM' tab is selected. The 'assume_isolated' checkbox is checked and set to 'esm'. The 'Ifcopt' checkbox is also checked. The 'fcp_mu' field is set to '-0.27550'. The 'Enter Relative Potential...' button is highlighted with a yellow arrow. A blue arrow points from this button to the 'Enter Relative Potential' dialog box, where '0.5' is entered in the 'Relative Potential [V]' field. Another blue arrow points from the 'OK' button in this dialog to the '情報' (Information) dialog box, which displays the message: 'The reference Fermi energy and relative potential would be set to -4.248 eV and 0.500 V, respectively.' The 'はい(Y)' (Yes) button is highlighted with a mouse cursor.

III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算

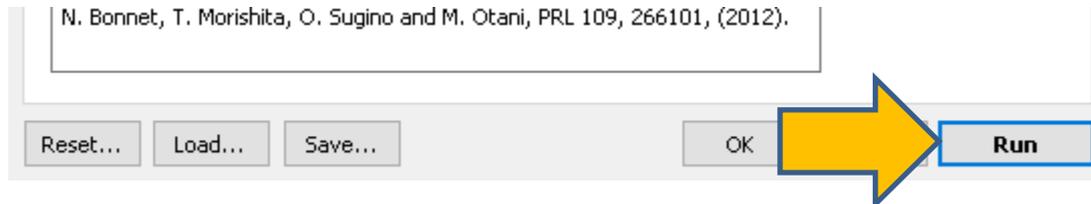
通常に配布されているQuantum ESPRESSOを使用する場合は次のページに進む。

ESM-RISM対応版QEを使用し、RISMを使わずconstant- μ 計算を実行する場合は、**Options**タブで**Use RISM-enabled QE**にチェックを入れる。これによりESM-RISM対応版QEの仕様に合わせてキーワードが設定される。



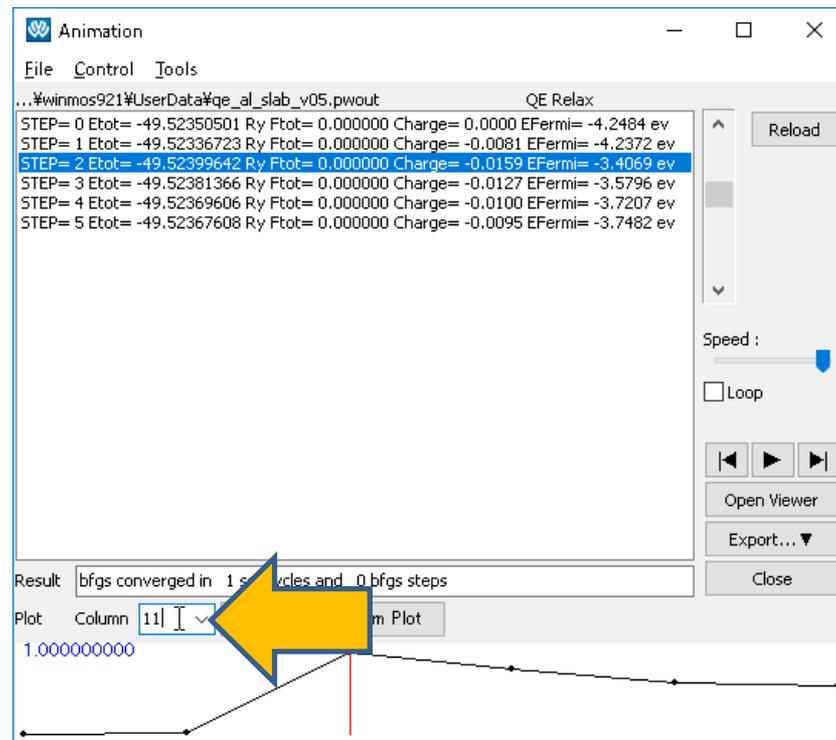
III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算

最後に、右下のRunボタンを押し、ファイル名「al_slab_v05.pwin」として保存し計算を開始する。



III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算

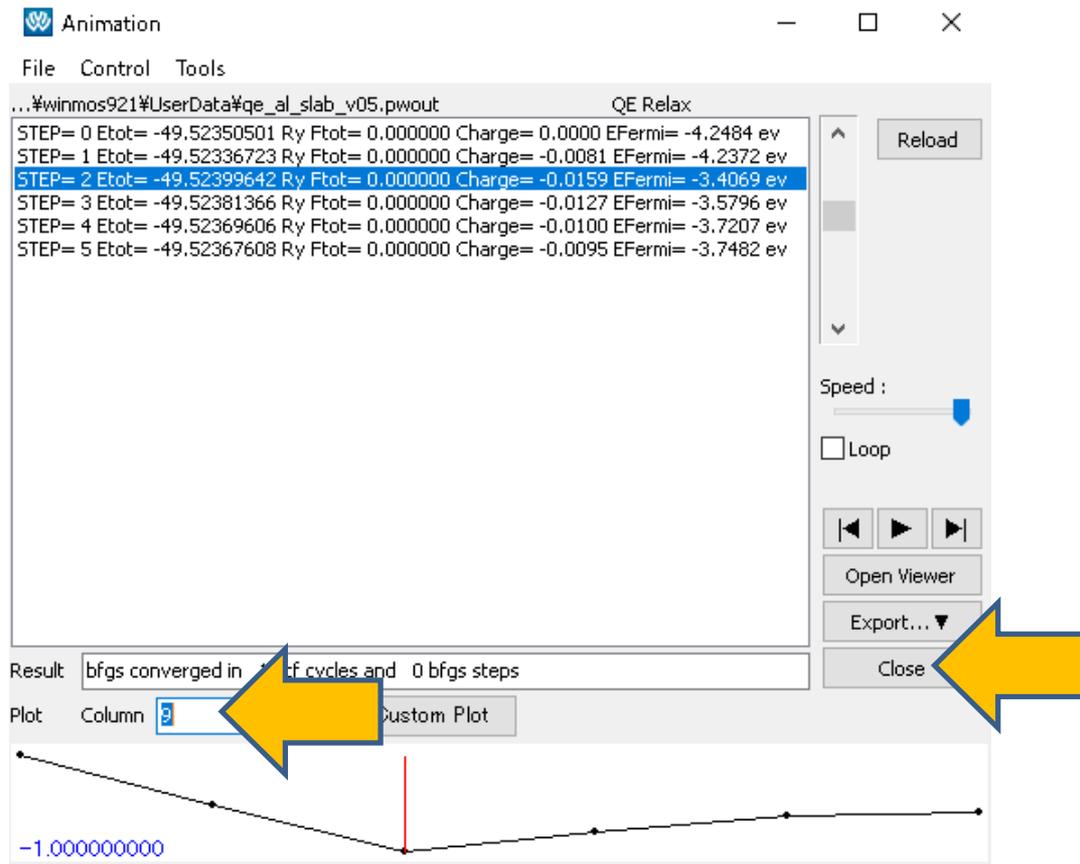
計算終了後、 (アニメーション) ボタンをクリックする。デフォルトで選ばれるファイルを開くとAnimationウィンドウが開く。ウィンドウ下部のColumnを「11」に変更するとフェルミエネルギーの変化がグラフ化される(ウィンドウ上部のリストの11列目がフェルミエネルギーのため)。ESM-RISM対応QEの場合は「9」にする。**fcp_mu**の値(-0.27550 Ryd= -3.748 eV)の付近にフェルミエネルギーが収束していることを確認する。



III. 印加電圧0.5 Vのconstant- μ 計算

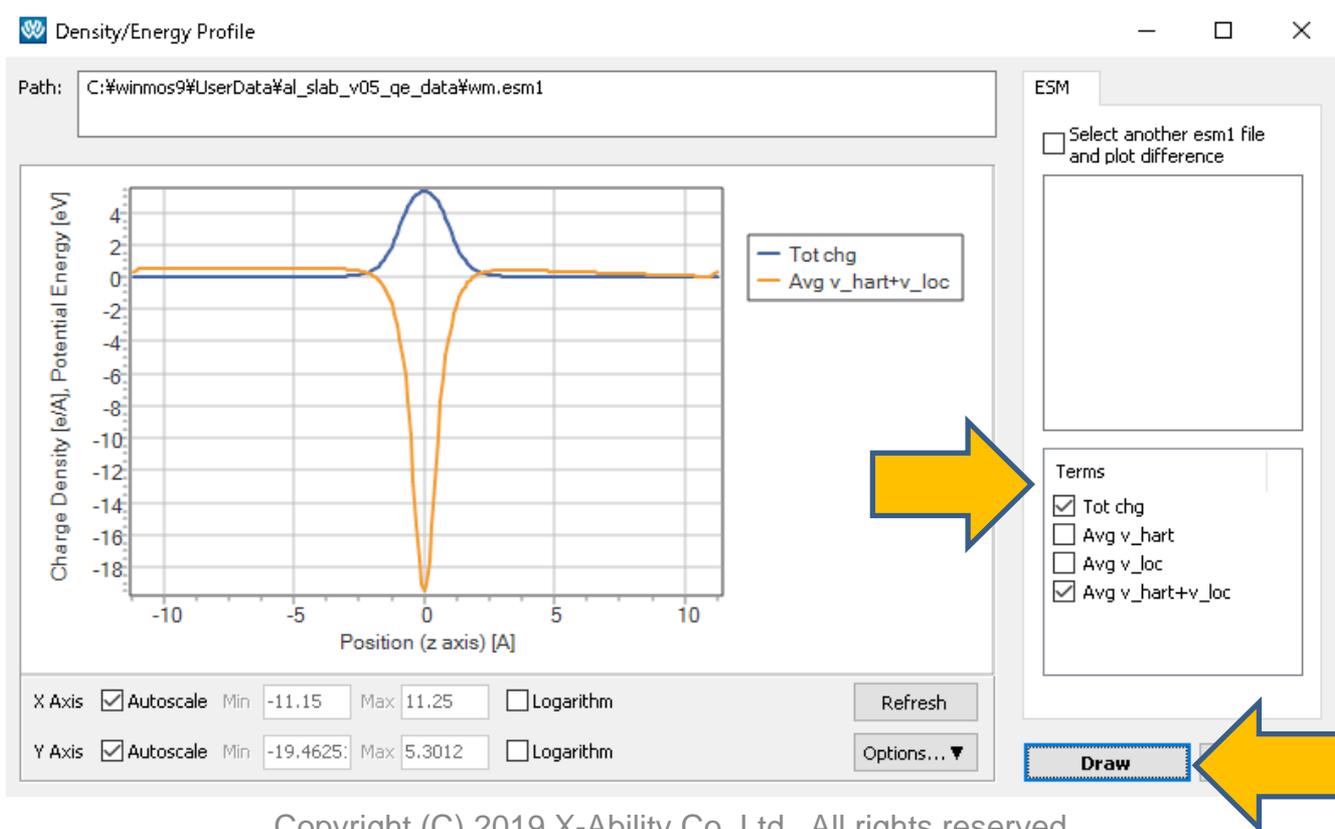
続けて**Column**を「9」に変更し、系全体の電荷の変化の様子も確認する。ESM-RISM対応QEの場合は「7」にする。

確認後、**Close**ボタンを押す。



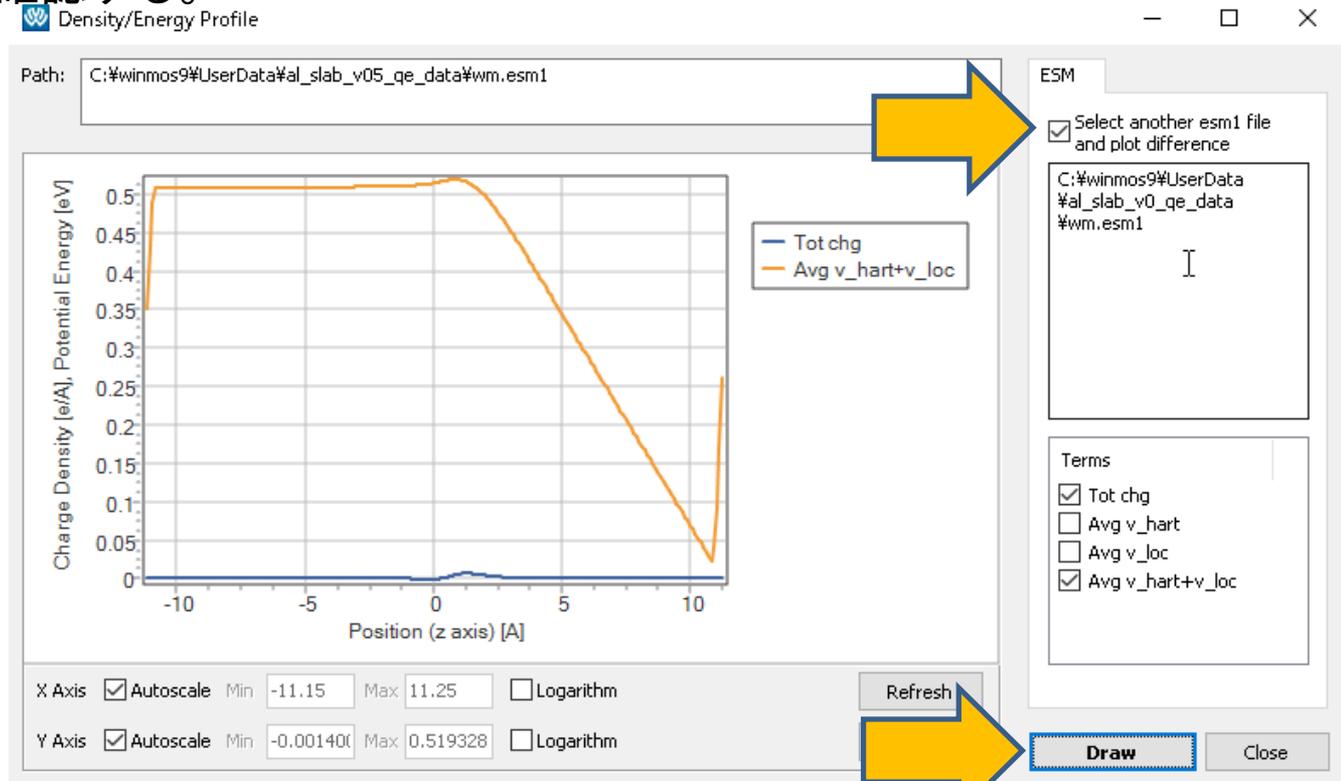
IV. ESM計算のチェック

固体 | Quantum ESPRESSO | 電荷/エネルギー分布 をクリックし、デフォルトで
 選択されるファイルを開く。TermsにてTot chgとAvg v_hart+v_locにチェックを入
 れてからDrawボタンを押すと、電荷とポテンシャルの分布がグラフ化される。
 ここで、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。**Draw**を押すと、1回目と2回目の計算の差が表示される。キーワード設定時に入力した**Relative Potential**の値の程度に、スラブとESMの位置(z=11.25)の間にエネルギー差が生じていることを確認する。



<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...

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