

 winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO

表面再構成

V11.6.4

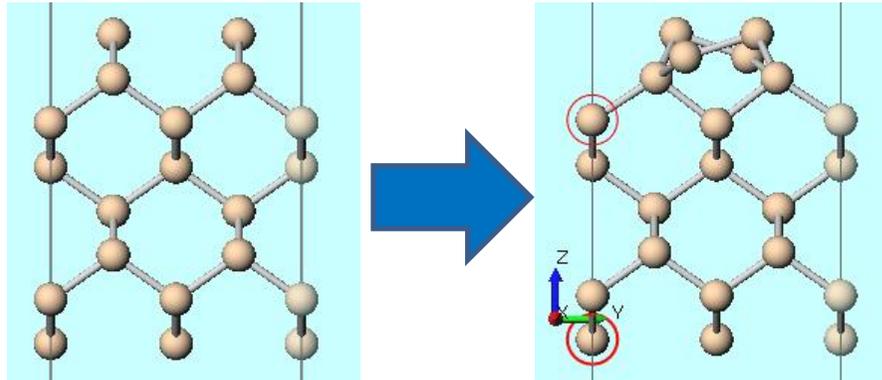
2024年3月15日 株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - [個別講習会](#)：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

概要

- 本書ではSi (0 0 1)面の構造最適化計算を実施し、表面再構成の様子を確認します。
- Si (0 0 1)の再構成された表面状態として様々な状態が知られており、本チュートリアルではその中でも非対称ダイマーの $p(2\times 2)$ 構造を取得します。
- 予想される原子位置の変化が大きいため効率よく処理するために低精度→高精度、と段階的に計算します。



注意点：

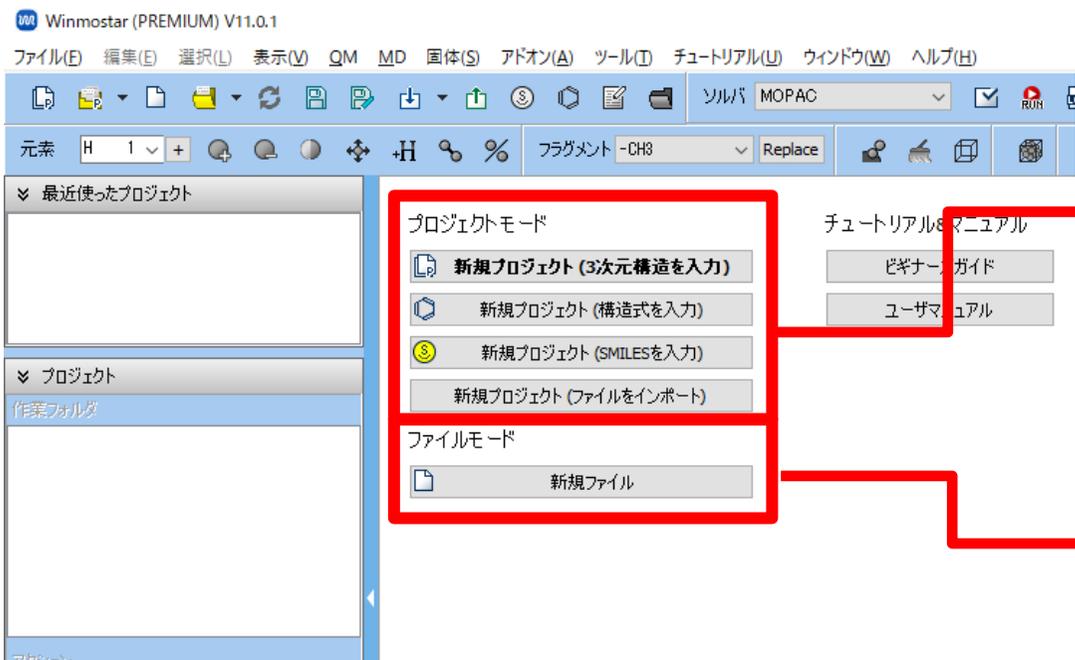
- 計算条件によっては、構造最適化計算の結果異なる表面構造に収束する場合があります。
- k点の取り方、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギーは計算結果に影響を与えます。本チュートリアルではすぐに結果を取得できるように、精度を落とした設定を用います。
- Quantum ESPRESSOの計算方法及び計算設定内容の詳細な説明は、次の弊社記事をご覧ください。https://qiita.com/xa_member

動作環境設定

- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
 - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum ESPRESSOが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のQuantum ESPRESSOを利用したい方は、別途[Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定](#)が必要です。

Winmostar V11の動作モード

V11には**プロジェクトモード**と**ファイルモード**の2つの動作モードが用意されています。
本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。

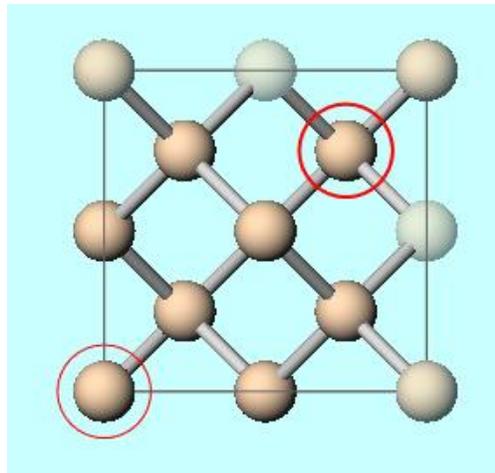


プロジェクトモード V11新機能
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。
基本的にこのモードを推奨します。

ファイルモード
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

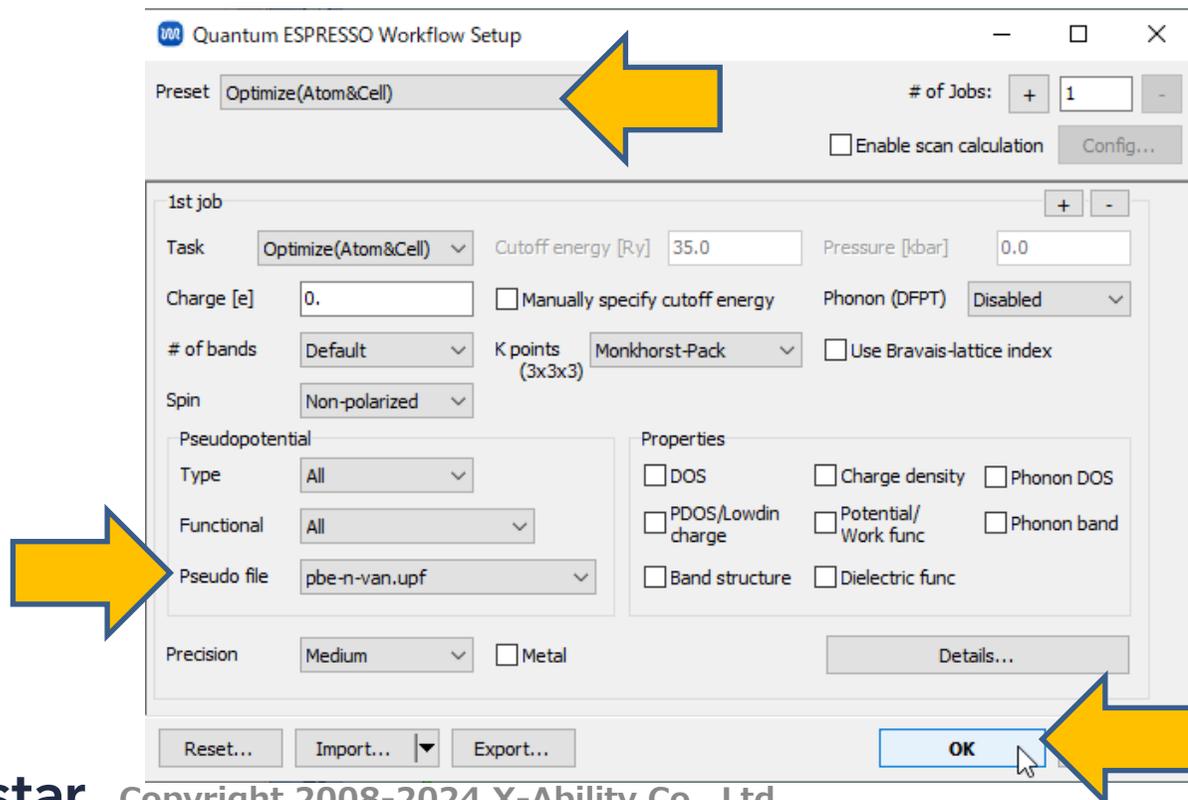
I. 系のモデリング（バルク結晶）

- 基本的な操作方法は[QE基礎編チュートリアル](#)を参照してください。
 - 初期構造の作成方法の詳細は[Winmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法](#)を参照してください。
1. Winmostarを起動し、**新規プロジェクト（3次元構造を入力）**をクリックします。（すでに起動している場合は先に**ファイル | 閉じる**をクリックします。）
 2. **プロジェクト名**に「`si_surf`」と入力し**保存**をクリックします。
 3. **ファイル | インポート | Samplesファイル | si.cif**をクリックします。
 - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。
 4. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。



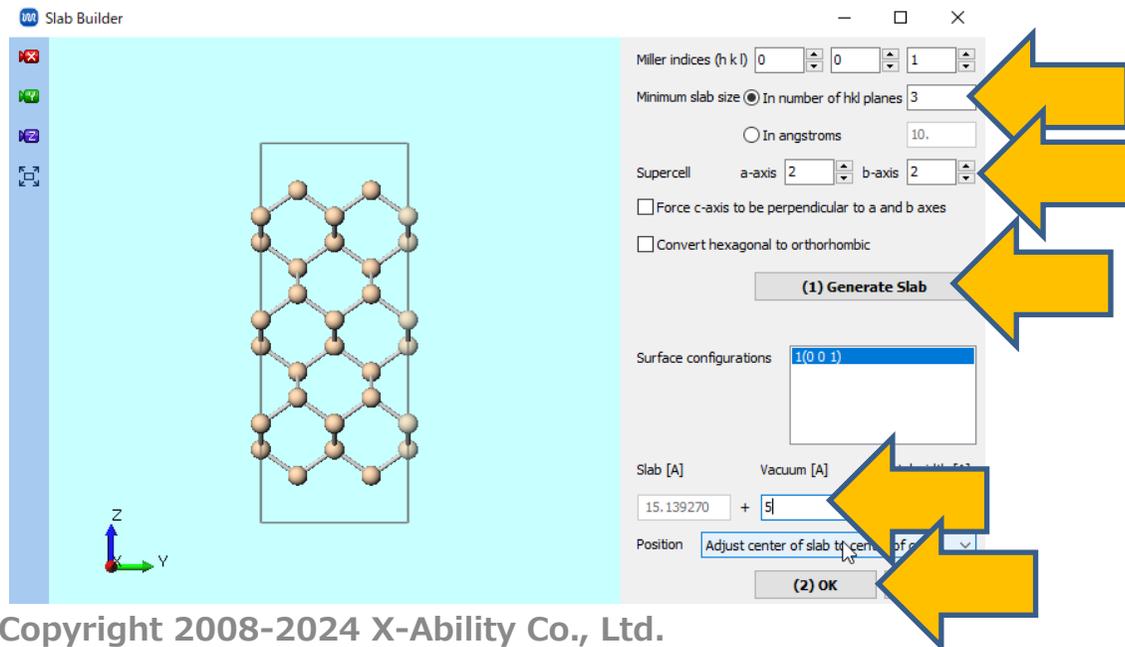
II. 計算の実行（バルク結晶）

1. ツールバーのソルバから**Quantum ESPRESSO**を選択し  (**ワークフロー設定**) をクリックします。プリミティブセルに変換するか聞かれたら**はい**をクリックします。
2. **Preset**を「Optimize(Atom&Cell)」に変更し、**Pseudo file**を「pbe-n-van.upf」に変更します。
3. **OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。



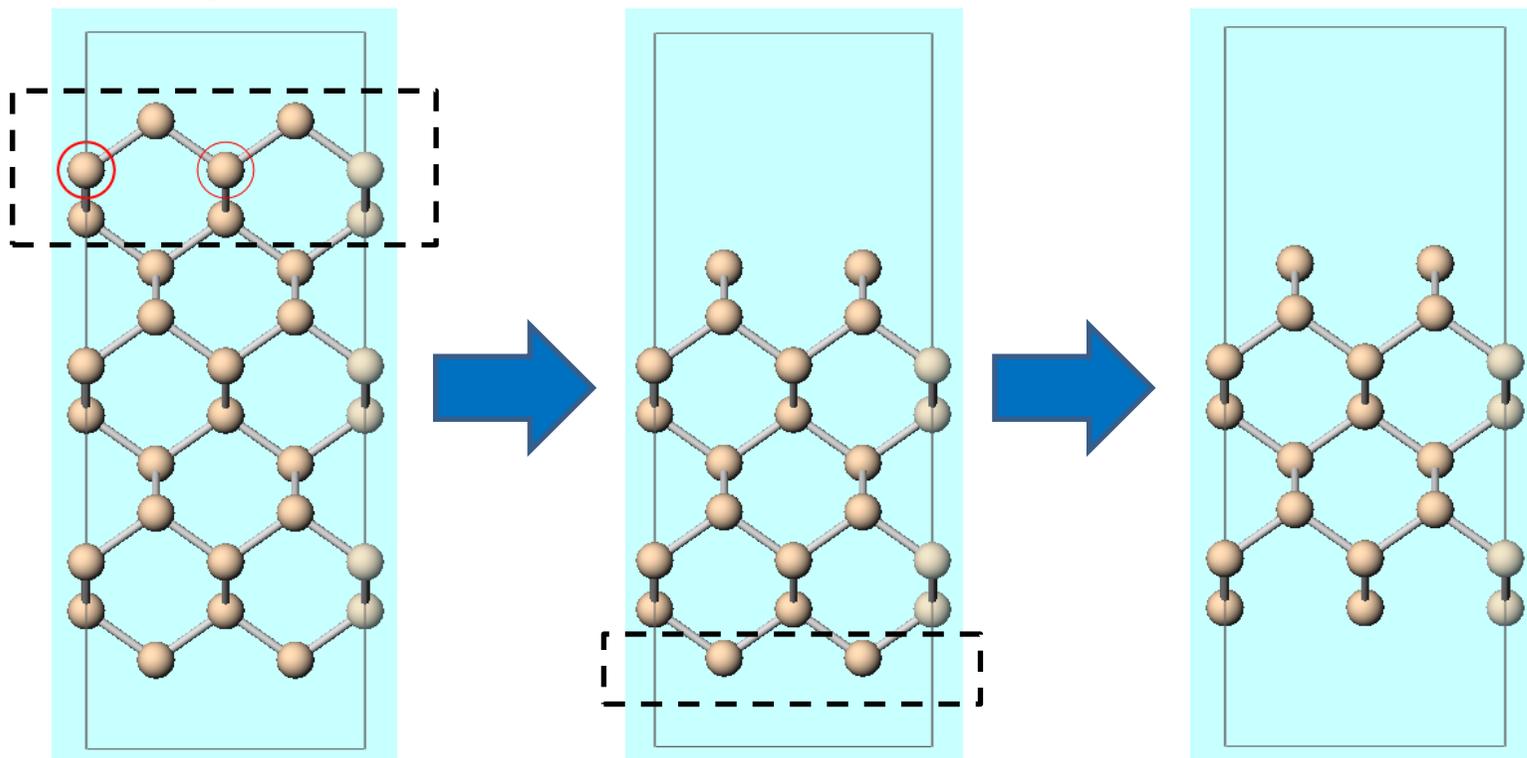
III.系のモデリング (スラブ)

1. work1_QE_Relaxの状態が**END**に変化したら**アクション**で**Coordinate (Final)**をクリックします。
2. **固体 | 格子を変換**をクリックし、「…編集を続行しますか？」と表示されたら**はい**をクリックします。「…コンベンショナルセルに変換しますか？」と表示されたら**はい**をクリックします。
3. **固体 | スラブを作成**をクリックし、**Minimum slab size**の**In number of hkl planes**の値を「3」、**Supercell**の**a-axis**と**b-axis**をどちらも「2」に変更し**(1) Generate Slab**をクリックします。
4. **Vacuum**を「5」に変更し**(2) OK**をクリックします。



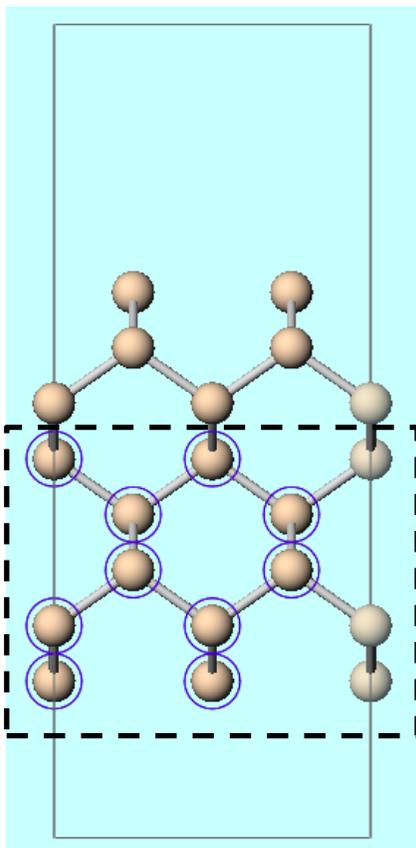
III.系のモデリング (スラブ)

1.  X軸方向から表示をクリックしてから  ウィンドウに合わせるをクリックします。
2. 下図 (左) のように上3原子層をCtrl+ドラッグで矩形選択し、 原子を削除をクリックし、Deleteをクリックします。
3. 下図 (中央) のように下1原子層をCtrl+ドラッグで矩形選択し、 原子を削除をクリックし、Deleteをクリックします。



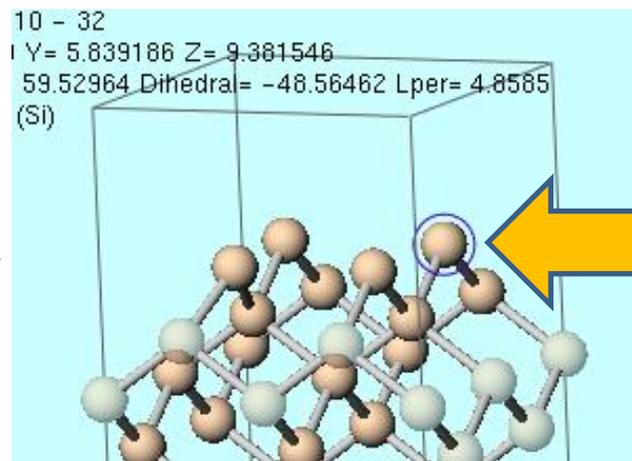
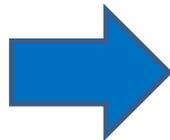
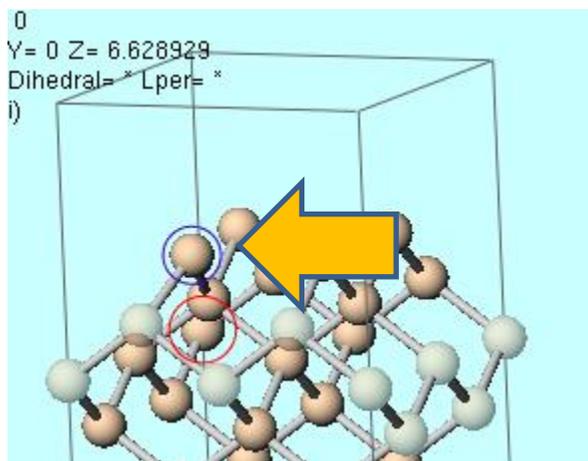
III.系のモデリング (スラブ)

1. 下図 (左) のように下5原子層をCtrl+ドラッグで矩形選択し、 **グループ編集 | グループを固定/固定解除**をクリックし**Fix**をクリックします。
2. **選択 | グループ選択を解除**をクリックします。



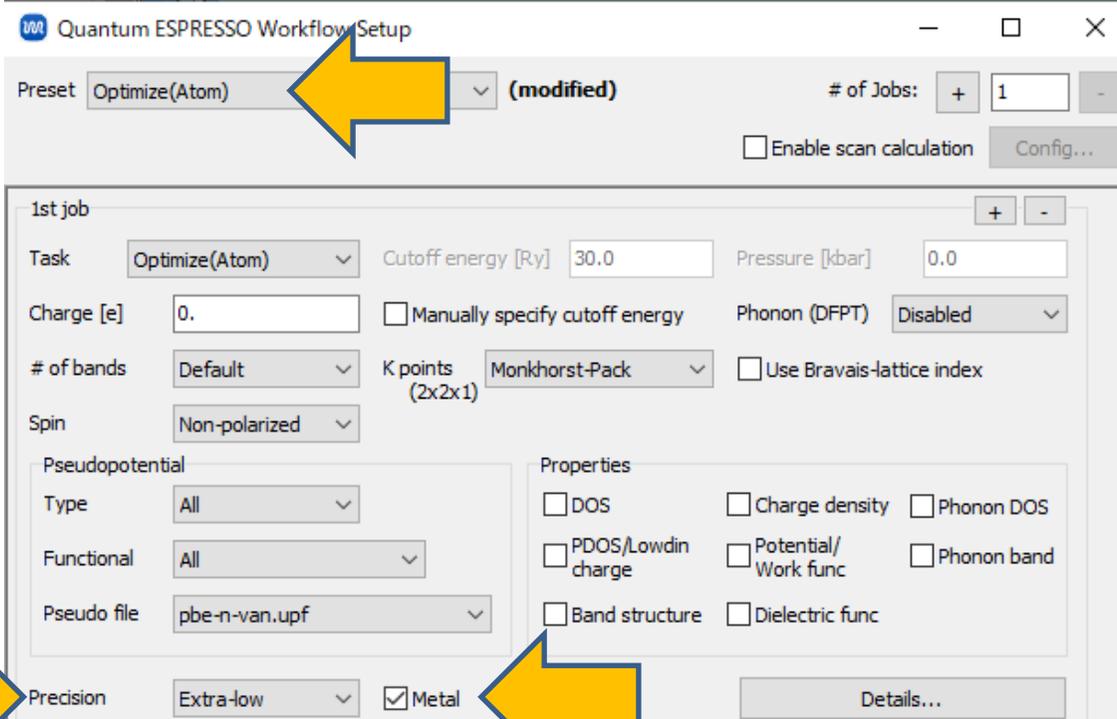
III.系のモデリング (スラブ)

1. 分子表示エリアでドラッグし、下図 (左) のように上の最表面の4原子がすべて見える位置にカメラを動かします。
2. 下図 (左) のように上の最表面のうち1つの原子をCtrl+クリックし、 **グループ編集 | グループを並進移動 (数値を指定)** をクリックし、**Y**の値を「0.5」に変更し**OK**をクリックします。
3. 選択 | グループ選択を解除をクリックします。
4. 下図 (右) のように2で選んだ原子に対し対角線上の原子をCtrl+クリックし、 **グループ編集 | グループを並進移動 (数値を指定)** をクリックし、**Y**の値を「-0.5」に変更し**OK**をクリックします。



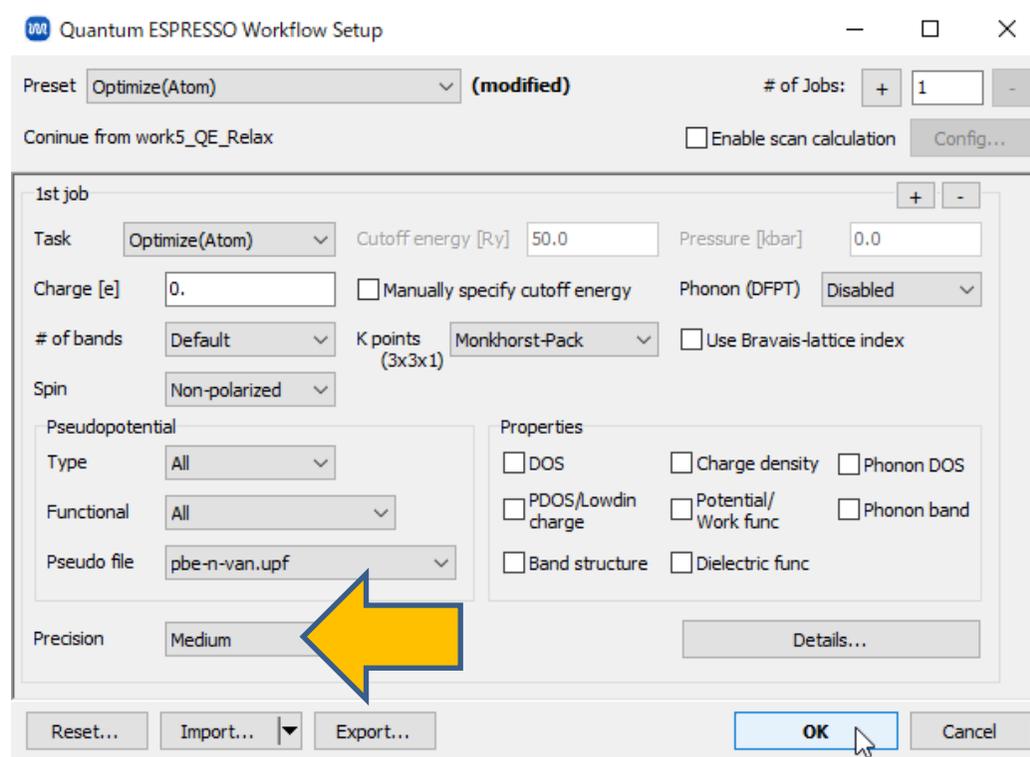
IV.計算の実行（スラブ、低精度）

1. (ワークフロー設定) をクリックし「継続ジョブを実行しますか？」と表示されたらいいえをクリックします。
2. **Preset**を「Optimize(Atom)」に変更し、**Precision**を「Extra-Low」に変更し、**Metal**にチェックを入れます。
 - バンドギャップに出現する表面準位がSCFの収束性を悪くするのでMetalにしてsmearingを適用します
3. **OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。



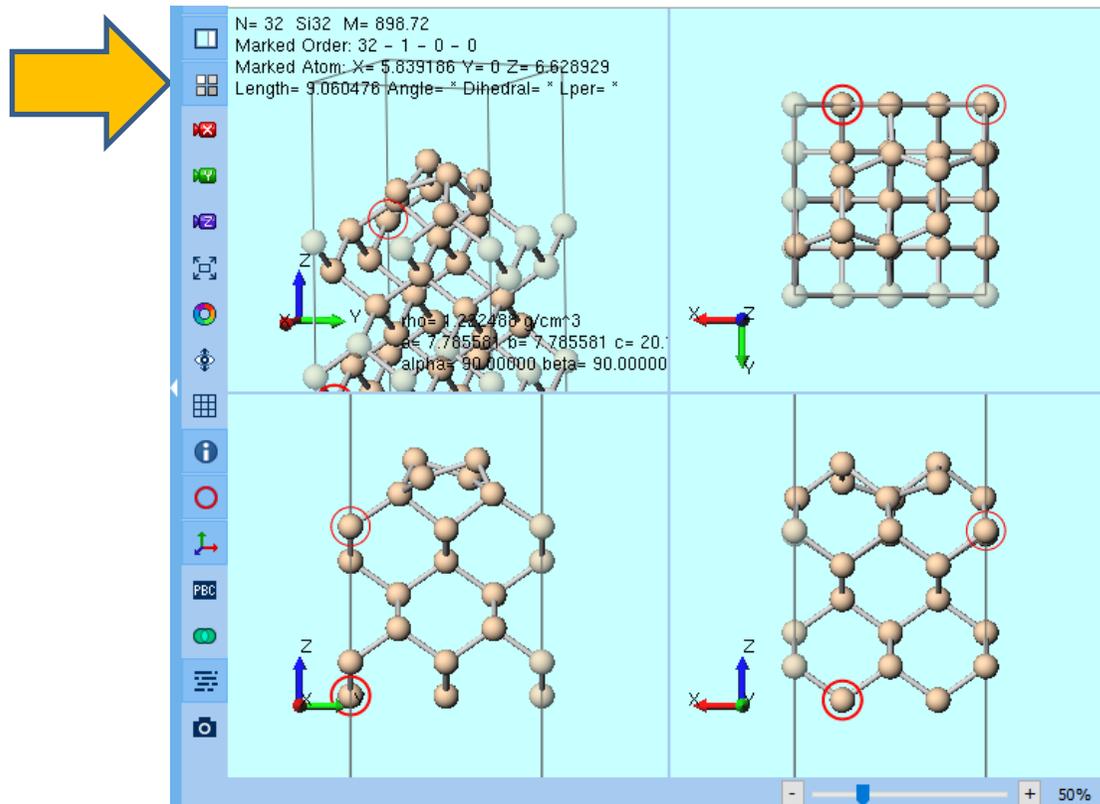
IV.計算の実行（スラブ、高精度）

1. work2_QE_Relaxの**状態がEND**に変化したら (ワークフロー設定) をクリックし「継続ジョブを実行しますか？」と表示されたら**はい**をクリックします。
2. 「ジョブの継続元の作業フォルダを選択」でwork2_QE_Relaxを選択し**OK**をクリックします。
3. **Precision**を「Medium」に変更し**OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。



V. 結果解析

1. work3_QE_Relaxの**状態がEND**に変化したらアクションの**Coordinate (Final)**をクリックします。
2.  **三面図を表示**をクリックします。分子表示エリアでShift+ドラッグし、適宜表示範囲を調整します。三面図を取り消すときは再度  **三面図を表示**をクリックします。



最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



[ユーザマニュアル](#)



[Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar 導入講習会](#)、[Winmostar 基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上