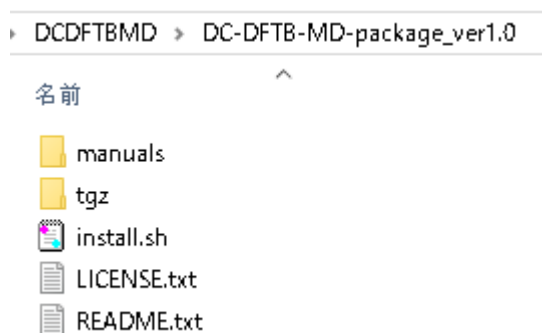


## DC-DFTB-MD-package\_ver1.0 のインストール手順

1. 以下のような内容の DC-DFTB-MD-package\_ver1.0 ディレクトリを、WinSCP 等でインストール先のサーバに転送する。



2. ターミナルでリモートサーバにログインし、コピーした DC-DFTB-MD-package\_ver1.0 ディレクトリに移動する。
3. 以下のコマンドを実行し、表示された内容に回答する。

```
$ bash install.sh
```

注意点：

- 2019年5月17日時点で、DCDFTBMD ver1.0 は MPICH3.2, OpenMPI3.1.2 でコンパイルしたものを配布しています。IntelMPI は使用して実行することはできません。

install.sh が完了したら以下のように表示される。

```
DC-DFTB-MD has been installed successfully !!
```

```
=====
```

```
1. To run DC-DFTB-MD, make sure your PATH and LD_LIBRARY_PATH  
are set appropriately by loading configure script file  
(e.g. source /home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0/dcdftbmd-config.bash).
```

```
2. To run sample programs (/home/xxxx/bin/ dc-dftb-md.1.0/samples),  
copy /home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0/samples/ to your own directory  
and run job scripts.
```

```
3. For further details, see manuals in  
/home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0/manuals/
```

```
Exit DC-DFTB-MD install wizard ...
```

4. install.sh の最後に表示されていた通りに、.bashrc を編集します。

```
$ vi ~/.bashrc
```

上記の例の場合は以下のように追記します。

```
source /home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0/dcdftbmd-config.bash
```

5. 以下のコマンドを実行し、.bashrc の変更内容を反映させます。

```
$ source ~/.bashrc
```

6. 以下のコマンドを実行し、インストールした DCDFBMD のパスが表示されるか確認します。

```
$ which dftb_serial.00.x
```

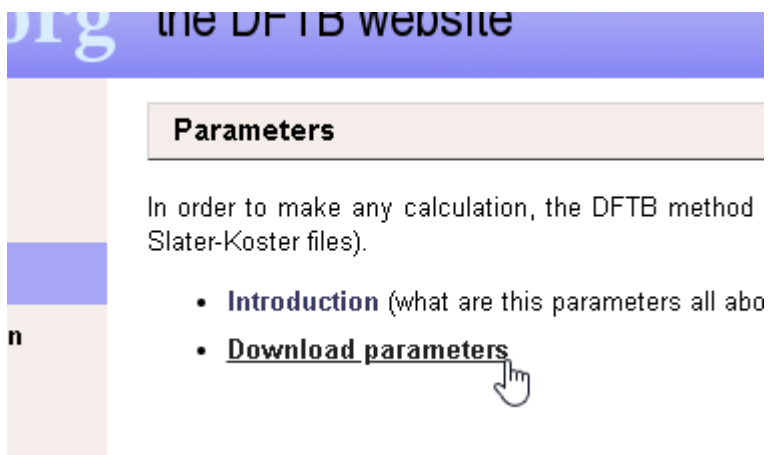
```
$ which dftb_mpiomp_mpich.00.x
```

インストールしたバイナリのテスト

1. <http://www.dftb.org/> にアクセスする。
2. Parameters をクリックする。



3. Download parameters をクリックする。



4. `mio` をクリックします。

### General purpose parameter sets

These sets were created to have a good performance over a wide range of applications. They have been thoroughly tested for a broad range of systems very different from those included in the

Name	Requires	Elements	
<b>3job</b>		Br-C-Ca-Cl-F-H-I-K-Mg-N-Na-O-P-S-Zn	DFT
<b>matsci</b>		Al-O-H   Al-Si-O-H   Cu-Si-Al-Na-O-H   Ti-P-O-N-C-H   O-N-C-B-H   Al-O-C-H   Si-P-N-O-C-H	Collprob the avail
<b>mio</b>		H - C - N - O - S - P	SCC
<b>ob2</b>		H-C-N-O	Long

5. ページ下部にある Download から Slater-Koster files の `mio-1-1.tar.xz` をダウンロードする。

### Download

Slater-Koster files	<a href="#"><u>mio-1-1.tar.xz</u></a>
Spin coupling constants	<a href="#"><u>mio-1-1.spinw.txt</u></a>
STO coefficients	<a href="#"><u>wfc.mio-1-1.hsd</u></a>

6. ダウンロードした `mio-1-1.tar.xz` を、DCDFTBMD をインストールしたサーバにコピーし、以下のコマンドで解凍する。

```
$ tar Jxf mio-1-1.tar.xz
```

7. 解凍してできた `mio-1-1` ディレクトリの中に `skf` ファイルが生成されていることを確認する。

```
$ ls mio-1-1
```

```
C-C.skf C-N.skf C-P.skf FITDES H-H.skf H-O.skf H-S.skf N-C.skf N-N.skf
N-P.skf O-C.skf O-N.skf O-P.skf P-C.skf P-N.skf P-P.skf README S-H.skf
S-O.skf S-S.skf
C-H.skf C-O.skf C-S.skf H-C.skf H-N.skf H-P.skf LICENSE N-H.skf N-O.skf
N-S.skf O-H.skf O-O.skf O-S.skf P-H.skf P-O.skf P-S.skf S-C.skf S-N.skf S-
P.skf
```

8. ここでは仮に mio-1-1 ディレクトリをホームディレクトリ以下に移動する。

```
$ mv mio-1-1 ~/
```

9. DCDFTBMD のインストールディレクトリ (今回の例では/home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0) に移動する。

```
$ cd /home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0
```

10. samples フォルダをコピーし、コピーしたほうに移動する。

```
$ cp -r samples samples_copy
```

```
$ cd samples_copy
```

11. sample01 に移動する。

```
$ cd sample01
```

12. mio-1-1 の skf ファイルを 4 つ sample01 以下にコピーする。

```
$ cp ~/mio-1-1/C-C.skf .
```

```
$ cp ~/mio-1-1/C-H.skf .
```

```
$ cp ~/mio-1-1/H-C.skf .
```

```
$ cp ~/mio-1-1/H-H.skf .
```

13. 比較用の出力ファイルをリネームする。

```
$ mv dftb.dat dftb.dat.ori
```

```
$ mv dftb.out dftb.dat.ori
```

14. DCDFTBMD を実行する。シリアル版をインストールした場合は以下のように実行する。

```
$ dftb_serial.00.x
```

15. 実行後、dftb.out と dftb.dat が生成していることを確認する。

```
$ ls
```

C-C.skf	C-H.skf	H-C.skf	H-H.skf	dftb.dat	dftb.dat.ori	dftb.inp	dftb.out
dftb.out.ori	zacaz	zszsz					

16. dftb.out の末尾に「… terminated normally …」と表示され、正常に計算が終了したことを確認する。