

 winmostar チュートリアル

FDMNES XANESスペクトル

V11.1.0

2022年4月20日 株式会社クロスアビリティ

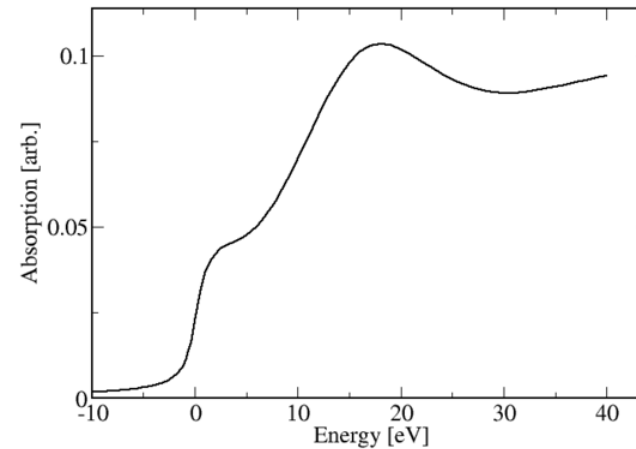
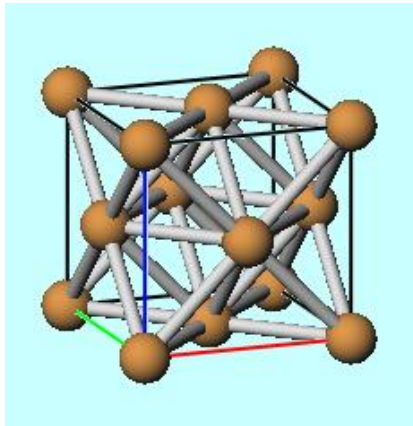
注：本書の一部操作はV10で作成されています。
V11に完全対応したチュートリアルを現在準備中です。
V10からV11の変更点は[移行ガイド](#)および[更新履歴](#)を参照してください。

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

- このチュートリアルでは、X線スペクトルの算出に特化したフリーウェアであるFDMNESを用いてCu結晶のXANESスペクトルを算出します。



注意点：

- 構造最適化はQuantum ESPRESSO, OpenMXなどの他のソフトで実行する必要があります。
- クラスタ半径や計算手法は計算結果に影響を与えます。
- 計算手法、波動関数の基底が異なるシミュレーションから算出されたXANESスペクトルと比較する際には注意が必要です。

動作環境設定

- 本機能を用いるためには、FDMNESのセットアップが必要です。
- <https://winmostar.com/jp/installation/> インストール方法のWindows用のFDMNESの設定手順に従います。

(7) WinmostarをインストールしたWindows PC（ローカルマシン）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](#)

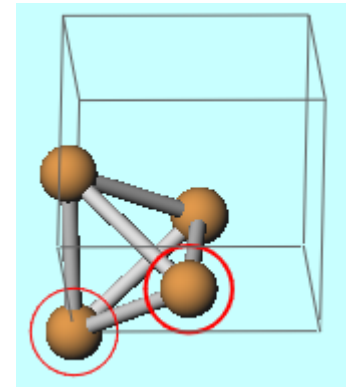
※Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは前の手順でインストールするcygwin_wmに含まれます。

I. FDMNESの設定&実行

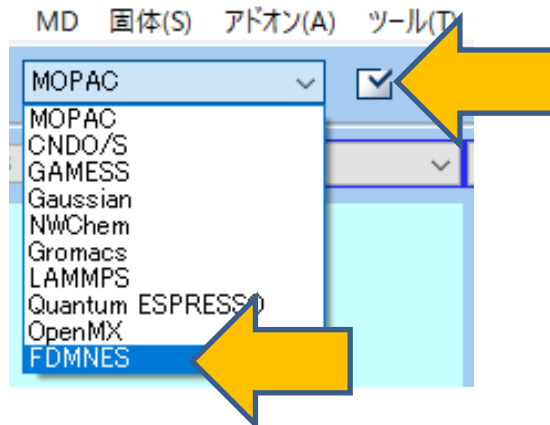
1. **ファイル | 開く**をクリックする。
2. サンプルフォルダ内の**cu.cif**を開く。（デフォルトでは**C:\winmos10\samples\cu.cif**）

※ このCIFファイルは結晶ビルダを用いて作成することが可能である。
その際は結晶モデリングチュートリアル¹の操作手順に従い、以下の情報を元に単位格子を作成する。

Cu単位格子について
Crystal system : Cubic
Space group : Fm-3m (225)
Lattice constants : a=3.6149 Å
Asymmetric unit : Cu (0.0 0.0 0.0)

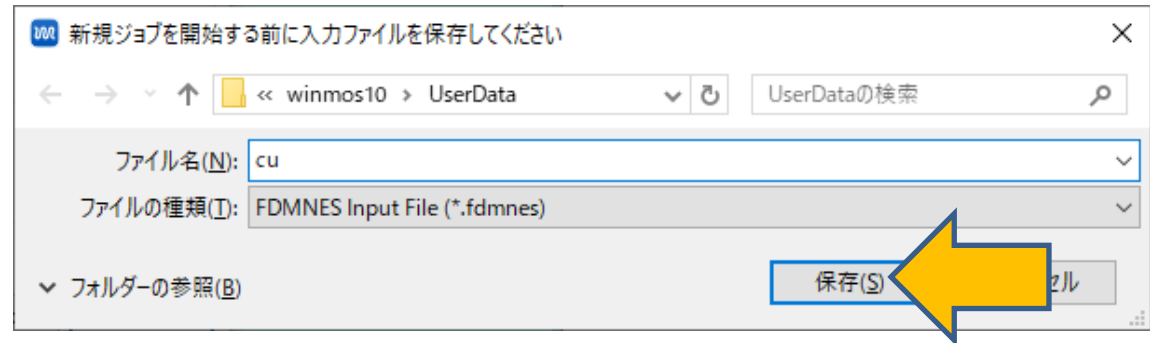
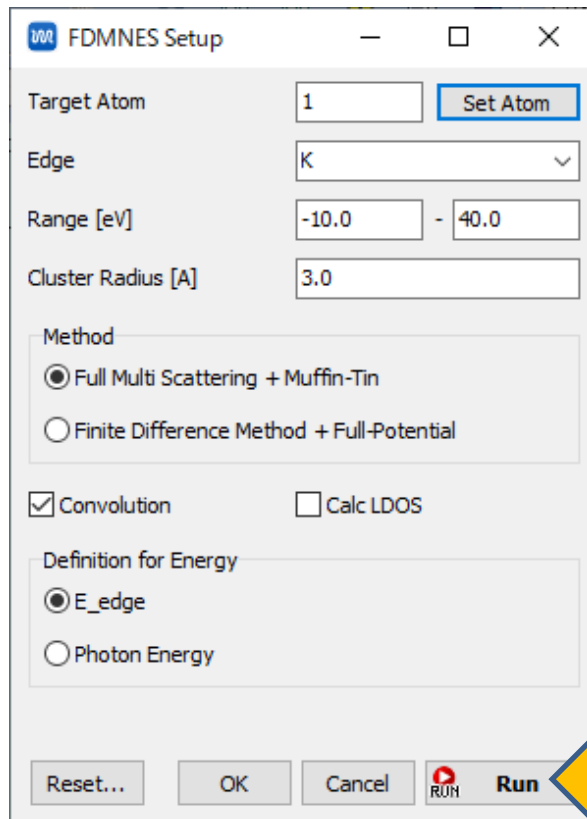


3. ツールバーの**ソルバー**一覧から、**FDMNES**を選択する。
4. **(キーワード設定)**をクリックする。



I. FDMNESの設定&実行

1. デフォルトの設定のまま**Run**をクリックする。
2. ファイル名はそのまま**保存**をクリックすると、入力ファイルが作成され計算が始まる。




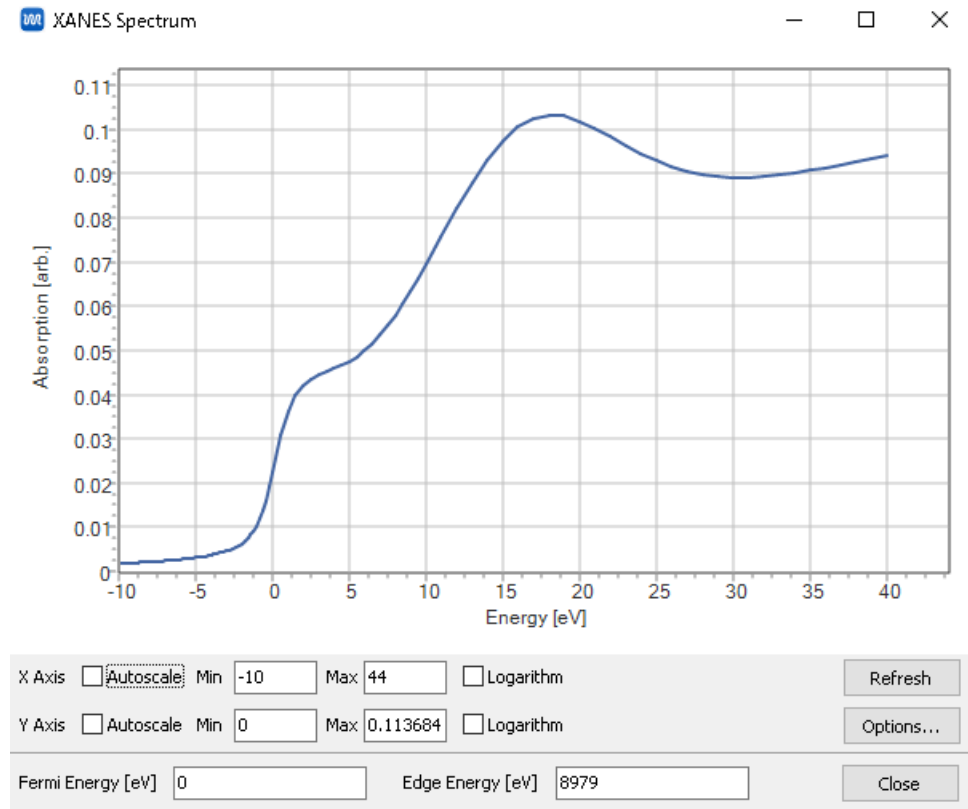
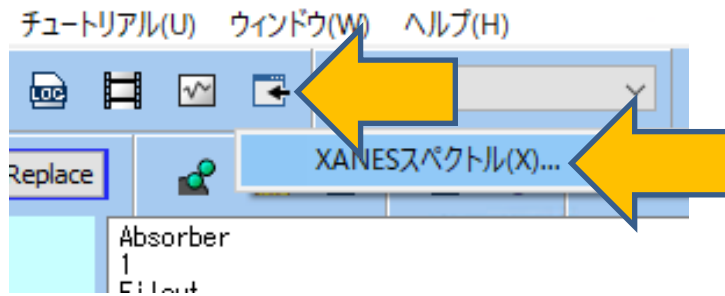
```
Winmostar/JM 20200109_184701 C:\winmos10\UserData\cu.bat
C:\winmos10\UserData>cd /d C:\winmos10\UserData
C:\winmos10\UserData>"C:\Program Files (x86)\fdmnes\fdmnes_win84.exe" | "C:\winmos10\win_system\bin\fxtee" "C:\winmos10\UserData\cu.bat"
FDMNES 11 program, Revision 20th of December 2019
Date = 08 01 2020
Time = 18 h 47 mn 12 s

absorbeur
range
edge
radius
green
crystal

Fillout: cu
Threshold: Copper K1 edge
Sequential calculation
Number of calculated non equivalent absorbing atom = 1
E_edge = 8979.00 eV
Cluster radius = 3.00 A, nb. of atom = 13
Point group : m3m (Oh )
Point group used : mmm (O2h )
```

II. XANESスペクトルの表示

1. 計算終了後、 (結果解析) | XANESスペクトルをクリックする。
 2. デフォルトで選ばれるファイルを選択し、計算されたXANESスペクトル (右図) を取得。
- 2016年6月23日以前のバージョンのFDMNESを使うと横軸がFermiエネルギーにシフトされていないので注意。



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