M winmostar チュートリアル

OpenMX 基礎編

V11.12.0

2025年04月30日 株式会社クロスアビリティ

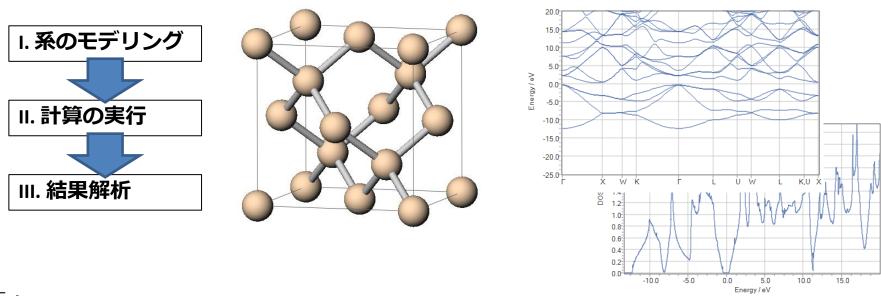
本書について

- 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<u>ビギナーズマニュアル</u>を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>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。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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、<u>お問合せフォーム</u>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

• Si結晶のバンド構造、状態密度、部分状態密度、電子密度の算出をOpenMXによる第一原理計算から取得します。



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、精度を落とした設定を 用います。

動作環境設定

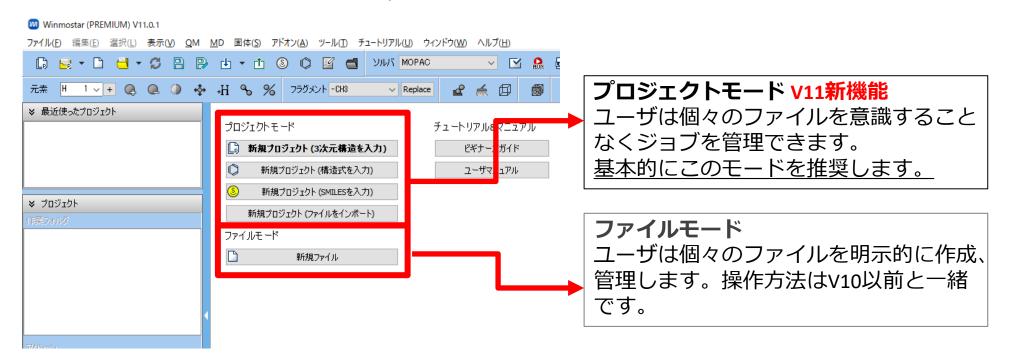
Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM 2023/04/05 <u>バージョン以降をインストール、環境設定</u>してください。

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。

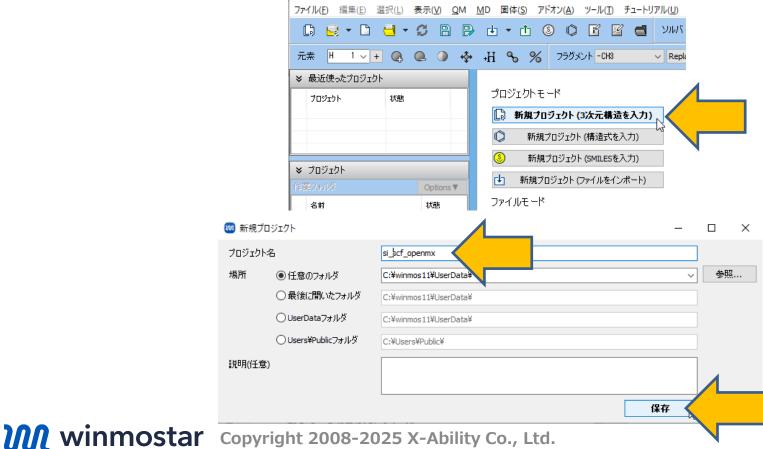
ファイルモードの操作方法はV10のOpenMXチュートリアルを参照してください。





I. 系のモデリング

- 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 scf openmx」と入力し保存をクリックします。

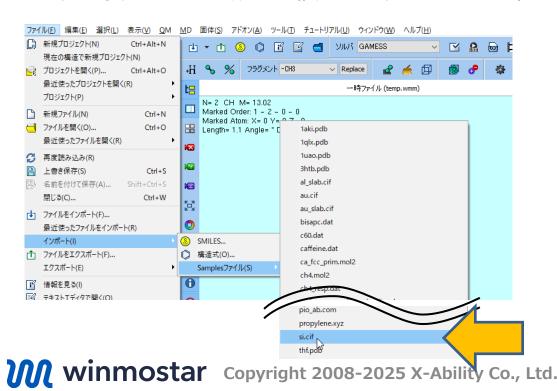


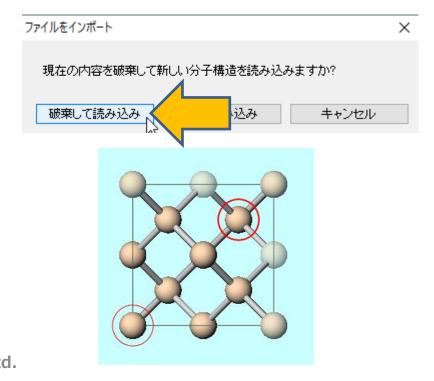


I. 系のモデリング

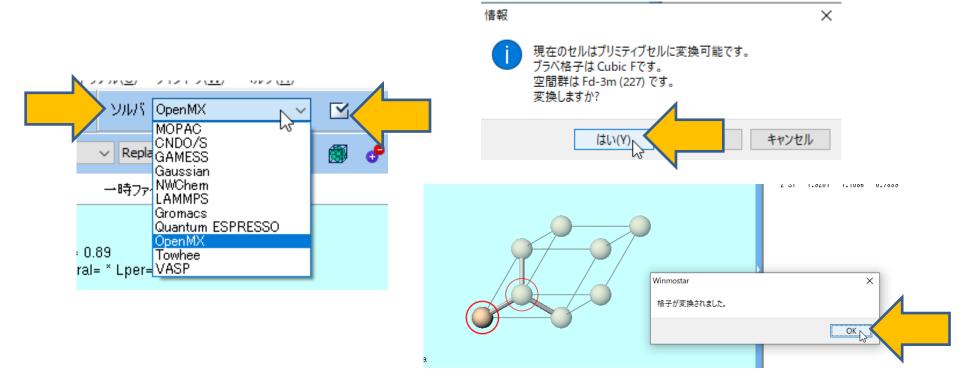
初期構造の作成方法の詳細はWinmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法を参照してください。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

- 1. 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。
- 2. 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。
- 3. 分子表示エリアに所望の構造が出現することを確認します。

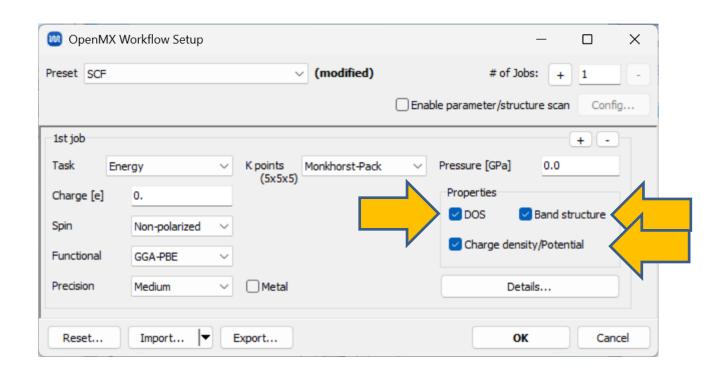




- 1. ツールバーの**ソルバ**から**OpenMX**を選択します。
- (ワークフロー設定)をクリックします。
- 3. 計算時間を短縮するため、プリミティブセルに変換するか聞かれたら**はい**をクリックします。 分子表示エリアには変換後の構造が出現します。「格子が変換されました」と表示されたら OKをクリックします。

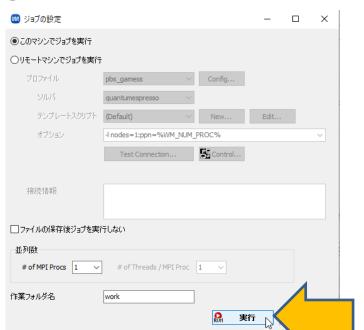


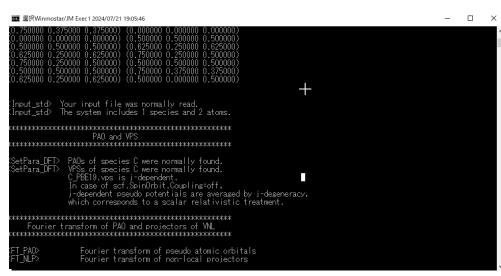
1. PropertiesのDOS、Band structure、Charge density/Potentialにチェックを入れます。



(リモートジョブの場合は先にこちらに進んでください。)

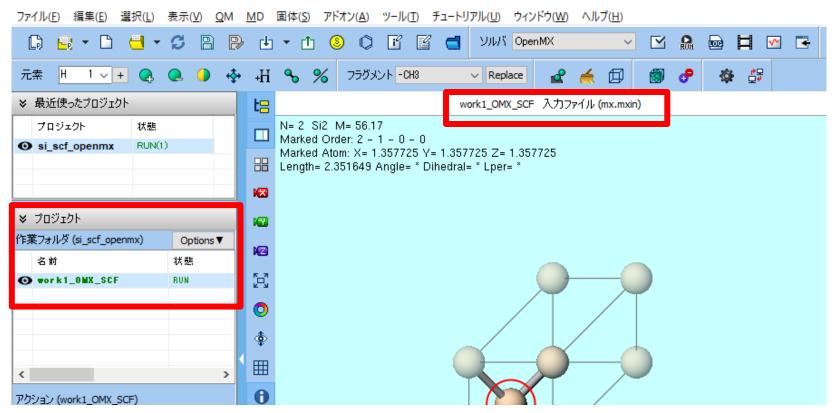
- 1. OpenMX Workflow Setupウィンドウ右下のOKをクリックします。
- 2. ジョブの設定ウィンドウで実行をクリックします。バックグラウンドでWinmostar Job Managerが起動し、右図のような黒いコンソールウィンドウが出現し、計算が開始されます。



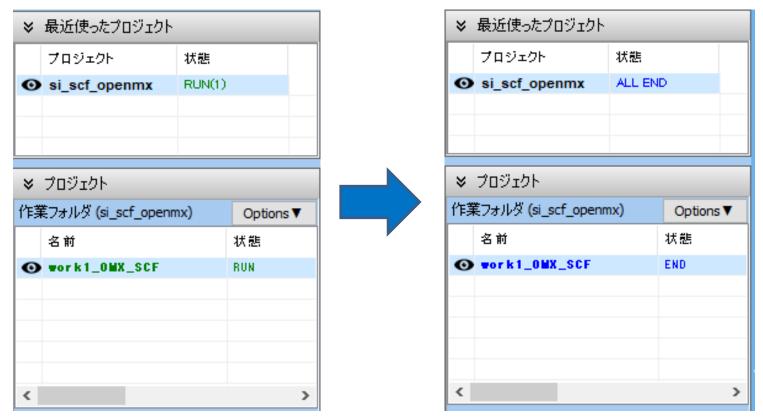


補足:入力ファイルを自分で修正したい場合や リモートサーバに自分でコピーして使用したい場合は、**ジョブの設定**ウィンドウで**ファイルの保存後ジョブを実行しない**にチェックを入れ**実行**をクリックします。保存後に計算を実行したい場合は**ファイル | プロジェクト | 選択された作業フォルダ | Run**をクリックします。

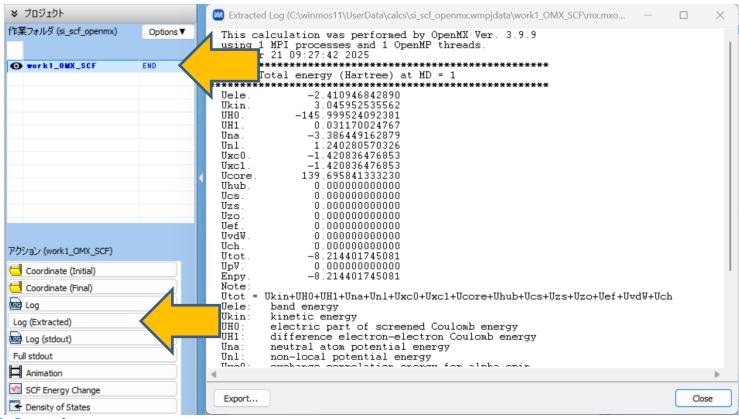
- 1. メインウィンドウに戻ると(計算実行中でも構いません)、**プロジェクト表示エリア**に**OpenMX** Workflow Setupウィンドウで設定したジョブの作業フォルダが表示されます。
- 2. 分子表示エリアには自動的に最初の作業フォルダ(work1 OMX SCF)の入力ファイルが開かれ ます。**分子表示エリア**の上部でもそのことを確認できます。



- 計算の進行状況に応じて、プロジェクト表示エリアの作業フォルダで各作業フォルダの状態が PEND(黒)→RUN(緑)→END(青)と変化します。
- 2. 全ての作業フォルダの状態が**END(青)**に変化するまで待ちます。この際**最近使ったプロジェクト**の「si_scf_openmx」の状態も**ALL END(青)**に変化します。



- 1. 各計算のログの主要な内容を見たい場合は、プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる計算の作業フォルダをクリックして選択し、アクションのLog (Extracted)をクリックします。(プロフェッショナル版プレミアム限定の機能です)
- 2. 完全なログを見たい場合はLog tstdout)クリックします。

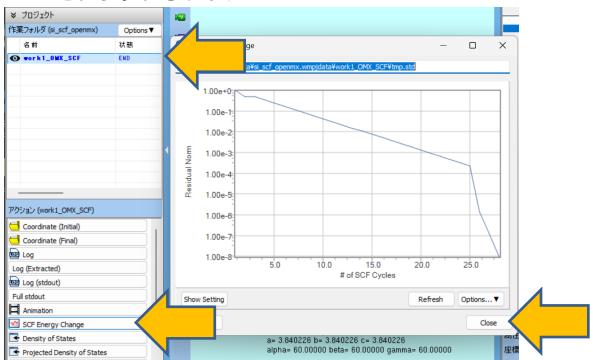




III.結果解析 SCFエネルギー変化

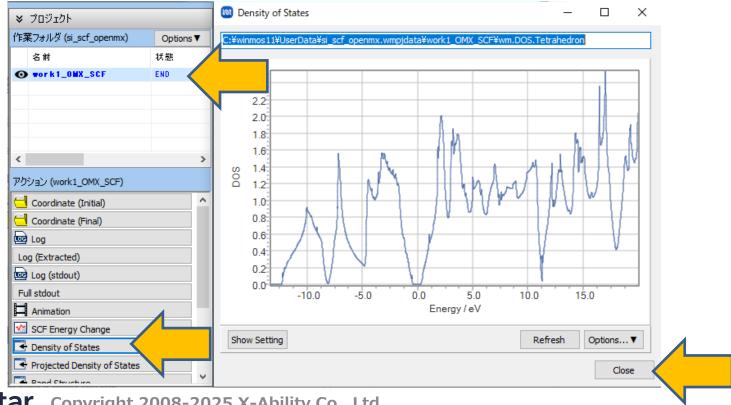
以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。

- 1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ(ここでは work1_OMX_SCFとします)をクリックします。
- 2. アクションでSCF Energy Changeをクリックすると、SCF Energy Changeウィンドウが開き、OpenMXのログ中の残差ノルムのプロットが出現します。
- 3. 確認したらCloseをクリックします。



III.結果解析 状態密度

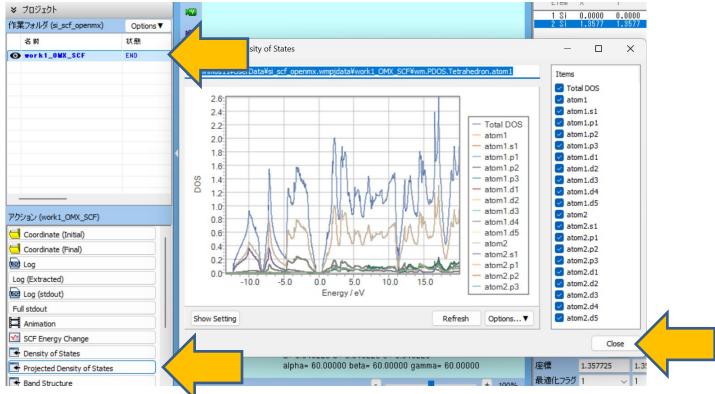
- 1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ(ここでは work1_OMX_SCFとします)をクリックします。
- 2. **アクション**で**Density of States**をクリックすると、**Density of States**ウィンドウが開き、 状態密度のプロットが出現します。
- 3. 確認したらCloseをクリックします。



III.結果解析 部分状態密度

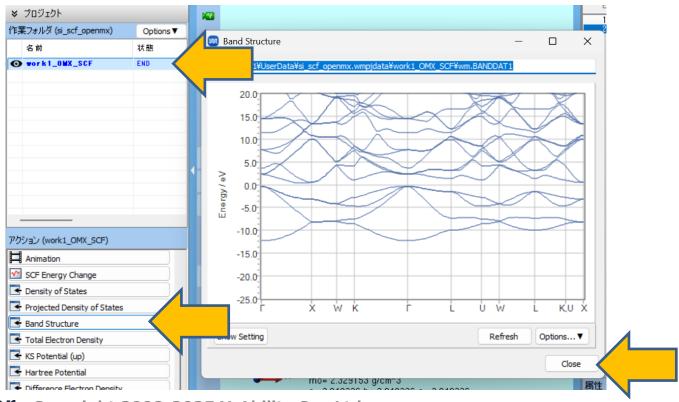
winmostar Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

- 1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ(ここでは work1_QE_SCFとします)をクリックします。
- 2. **アクション**でProjected Density of Statesをクリックすると、Projected Density of Statesウィンドウが開き、部分状態密度のプロットが出現します。
- 3. 確認したらCloseをクリックします。



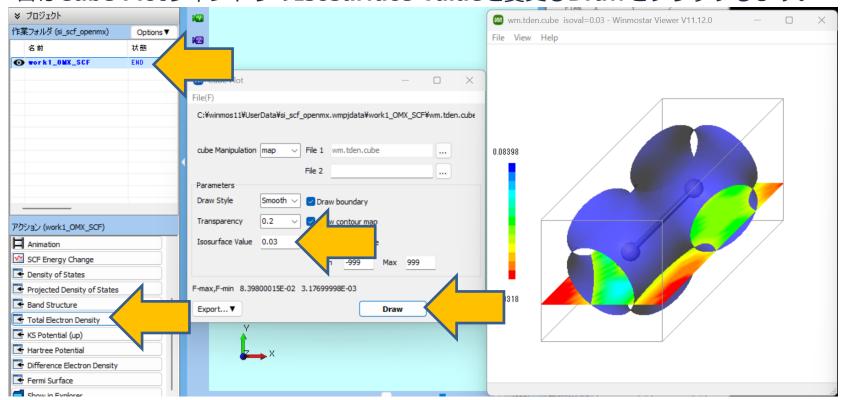
III.結果解析 バンド構造

- 1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ(ここでは work1_QE_SCFとします)をクリックします。
- 2. **アクション**でBand Structureをクリックすると、Band Structureウィンドウが開き、バンド構造のプロットが出現します。
- 3. 確認したらCloseをクリックします。



III.結果解析 電子密度

- 1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ(ここでは work1_OMX_SCFとします)をクリックします。
- 2. アクションでTotal Electron Densityをクリックすると、自動処理が数秒流れたのち Winmostar Viewerが起動し電子密度が3次元表示されます。等高線の設定を変更したい場合はCube PlotウィンドウのIsosurface Valueを変更しDraw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。



<u>ユーザマニュアル</u>



Winmostar 講習会の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、基礎編チュートリアルについてはWinmostar基礎講習会 へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては個別講習会のご依頼をご検討ください。
- 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、<u>お問合せフォーム</u>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