### **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

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



- 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<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<u>よくある質問</u>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。



• 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。



 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。

### 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。

#### Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(D チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



### 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。

77	<u>ァイル(E)</u> 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM		D 固体( <u>S</u> ) アドオン( <u>A</u> ) ツ	ール(I) チュートリアル( <u>U</u> ) ウィンド	ウ( <u>W)</u> ヘルプ( <u>H</u> )			ファイルをインポート
C,	新規プロジェクト(N) Ctrl+Alt+N		🕁 🕶 🗴 🔕 🗘 [	👔 📑 УЛИХ GAME	ss 🗸 [	Y 🔒		27°17/2°127/0°12
	現在の構造で新規プロジェクト(N)						1	
5	プロジェクトを開く(P) Ctrl+Alt+O	•	H 💊 🔏 フラグメント	-CH3 ~ Replace	📽 🍝 🗐 🛛	🗊 🧬	僚	
	最近使ったプロジェクトを開く(R)	۲ I.		一時ファイル	(temp.wmm)			現在の内容を破棄して新しい分子構造を読み込みますか?
	プロジェクト(P)	۰ <b> </b> ۱	N= 2 CH M= 13.02					
	) 新規ファイル(N) Ctrl+N		Marked Order: 1 – 2 -	- 0 - 0				
-	ファイルを開く(O) Ctrl+O		Marked Atom: X= 0 Y:	_ 0 Z 0 [ 1aki.pdb				破棄して読み込み 🔨 👘 込み 👘 キャンセル 👘
_	- 最近使ったファイルを開く(R)	۰ L		1alx.pdb				
0	( 百庆诗 1, 3 1, (D)	- N	×	1uao.pdb				
	→ 円度読の込み(N) トカキ(円方(C) Challe Challe		2	3htb.pdb				
			_	al slab.cif				
	明じる(C) (たけ(A) Sinit+Cur+S	P	2	au.cif				
	1410 o(c)		n in the second s	au slab.cif				
ц.	] ファイルをインボート(F)			bisapc.dat				
	最近使ったファイルをインボート(R)		9	c60.dat				
	インボート(I)		) SMILES	caffeine.dat				
Ē	] ファイルをエクスボート(F)	C	】構造式(O)	ca fcc prim.mol2				
	エクスポート(E)		Samplesファイル(S)	ch4.mol2				
i"	2 情報を見る(1)		<b>D</b>	ch resp.dat				
1	~ テキストエディタで聞く(O)				<u> </u>			
				pio_ab.com	$\sim$			
				propylene.xyz	$\sim$	/ L		
				si.cif	<			
				thf.pdb				
	<b>n</b> winmos	+ -		abt 2000 20		:::N	Co	1 t d
		LC	соругі	gni 2008-20	ノンン メータリ	IIILY	' UO.	, LLU.

- 1. ツールバーのソルバからOpenMXを選択します。
- 2. **(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。

Ist job     Ist job       Task     Energy       Charge [e]     0.	can Config
1st job Task Energy V K points Monkhorst-Pack V Pressure [GPa] 0. Charge [e] 0.	+ -
Task     Energy     K points (5x5x5)     Monkhorst-Pack     Pressure [GPa]     0.       Charge [e]     0.	0
Charge [e] 0.	
energe [e]	
Spin Non-polarized V	d structure
Functional GGA-PBE V	tential
Precision Medium V Metal Details	

### (リモートジョブの場合は先に<u>こちら</u>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。

🚾 ジョブの設定		- 🗆	×
●このマシンでジョブを実行			
○リモートマシンでジョブを実行			
プロファイル 1	obs_gamess		
אווע נ	quantumespresso 🗸		
テンプレートスクリプト (	(Default) V New	Edit	
オブション	nodes=1:ppn=%WM_NUM_PROC%		~
	Test Connection		
接続情報			
ファイルの保存後ジョブを実行	しない		
並列数 # of MPI Procs 1 ~	# of Threads / MPI Proc 1 ~		
「「業フォルダ名」	vork		
L	<b>。</b> 実行		
ファノリをビ			IT

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。

D	📑 👻 🗅 🔅	- 1	S I	28	) <b>t</b>	• 6	tı 🧕	0	f f		УЛИХ Оре	nMX		~		RON	•	<b>–</b>	× 💌
元素	H 1 ~ +	Q,	. (	•	+H	۹.	%	フラグメン	F -CH3		✓ Replace	ď	<b>é</b>	ø	<b>S</b>	e	<b>\$</b>	무역 누모	
≫ 最近使ったプロジェクト					tB		work1_OMX_SCF 入力ファイル (mx.mxin)												
プロジェクト 状態 ● si_scf_openmx RUN(1)					N= 2 Marki Marki	= 2 Si2 M= 56.17 arked Order: 2 - 1 - 0 - 0 arked Atom: X= 1.357725 Y= 1.357725 Z= 1.357725													
					••• •••	Leng	th= 2.3	51649 Ar	ngle= * Dif	nedral=	= ^ Lper= ^								
★ プロジェクト					100														
作業フォルダ (si_scf_openmx) Options ▼			ns▼	R															
名前 状態				ات_٦															
• work1_0WX_SCF RUN				⊌⊔⊿															
					0														
					ф														
<																			
アクション (work1 OMX SCF)					0								/	/					

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(T) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)

- 1. 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。
- 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。

≥ 最近使ったプロジェクト					
	プロジェクト 状態				
0	si_scf_openmx				
♥ プロジェクト					
作業フォルダ (si_scf_openmx) Options V					
	名前 状態				
• work1_0MX_SCF RUN					
< >>					

- 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またはLog (stdout)クリックします。

♥ プロジェクト	🛛 😡 Extracted Log (C:\winmos11\UserData\calcs\si_scf_openmx.wmpjdata\work1_OMX_SCF\mx.mxo 🛛 🗖	$\times$
作業フォルダ (si_scf_openmx) Options▼	This calculation was performed by OpenMX Ver. 3.9.9 using 1 MPI processes and 1 OpenMP threads. r 21 09:27:42 2025	1
• work1_0MX_SCF END	**************************************	
アクション (work1_OMX_SCF) Coordinate (Initial) Coordinate (Final) Dog Log Log	Uele.       -2.410946842890         Ukin.       3.045952535562         UH0.       -145.999524092381         UH1.       0.031170024767         Una.       -3.386449162879         Unl.       1.240280570326         Uxc0.       -1.420836476853         Ucc1.       -1.420836476853         Ucc2.       0.0000000000         Uccs.       0.00000000000         Uccs.       0.00000000000         Usc1.       -8.214401745081         UpV.       0.0000000000         Ucct.       -8.214401745081         UpV.       0.0000000000         Uct.       -8.214401745081         Note:       .         Utot = Ukin+UH0+UH1+Una+Un1+Uxc0+Uxc1+Ucore+Uhub+Ucs+Uzs+Uzo+Uef+UvdW+Uch         Uele:       band energy         Ukin:       kinetic energy         Ukin:       kinetic energy         Ukin:       of energy	
🚾 Log (stdout)	UH1: difference electron-electron Coulomb energy Una: neutral atom potential energy	
Full stdout	Unl: non-local potential energy	
Animation	4	•
Density of States	Export	Close

### 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

- 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。





• 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。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>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<u>Winmostar基礎講習会</u> へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては<u>個別講習会</u>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<u>よくある質問</u>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