

 winmostar チュートリアル

OpenMX

基礎編

V10.0.0

2020年3月2日

株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)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

- ダイヤモンドのSCF計算を実施し、その後バンド構造、状態密度の算出を行います（Winmostar上では連続して実行されます）。また、部分状態密度、電子密度の表示も行います。

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に、精度を落とした設定を用います。

動作環境設定

- 本機能を用いるためには、Cygwin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Cygwinの設定手順に従いセットアップします。

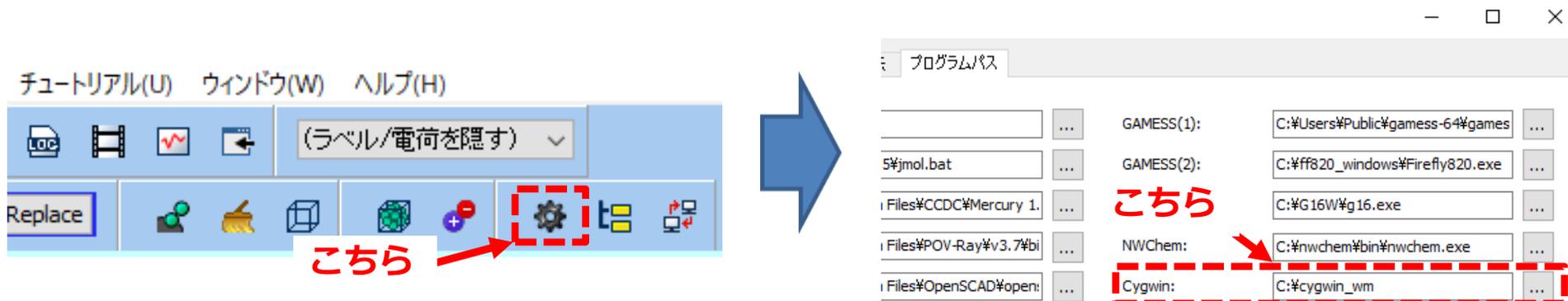
(6) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境 (cygwin_wmと呼びます) を構築します。

[ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合 \(推奨\)](#) ← **こちら**

[cygwin_wmをビルドする場合 \(非推奨、上級者向け\)](#)

[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合 \(ベータ版\)](#)

- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



I. モデルの作成

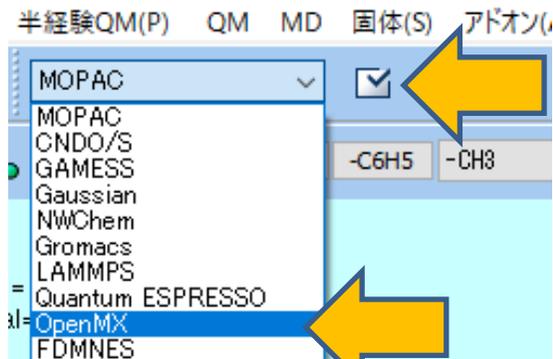
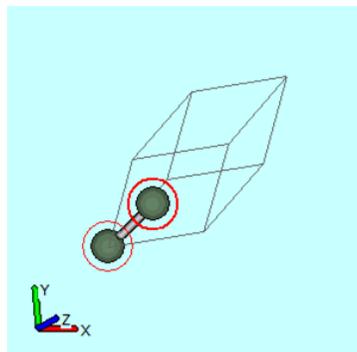
1. **ファイル | 開く**をクリックする。
2. サンプルフォルダ内の**dia.mol2**を開く。（デフォルトではC:\winmos9\samples\dia.mol2）
 - このCIFファイルは結晶ビルダを用いて作成することが可能である。
 - その際は結晶モデリングチュートリアルの手順に従い、以下の情報を元に単位格子を作成する。

ダイヤモンドの単位格子について

Crystal system : Cubic
Space group : Fd-3m (227)
Lattice constants : a=3.567 Å
Asymmetric unit : C (0.0 0.0 0.0)

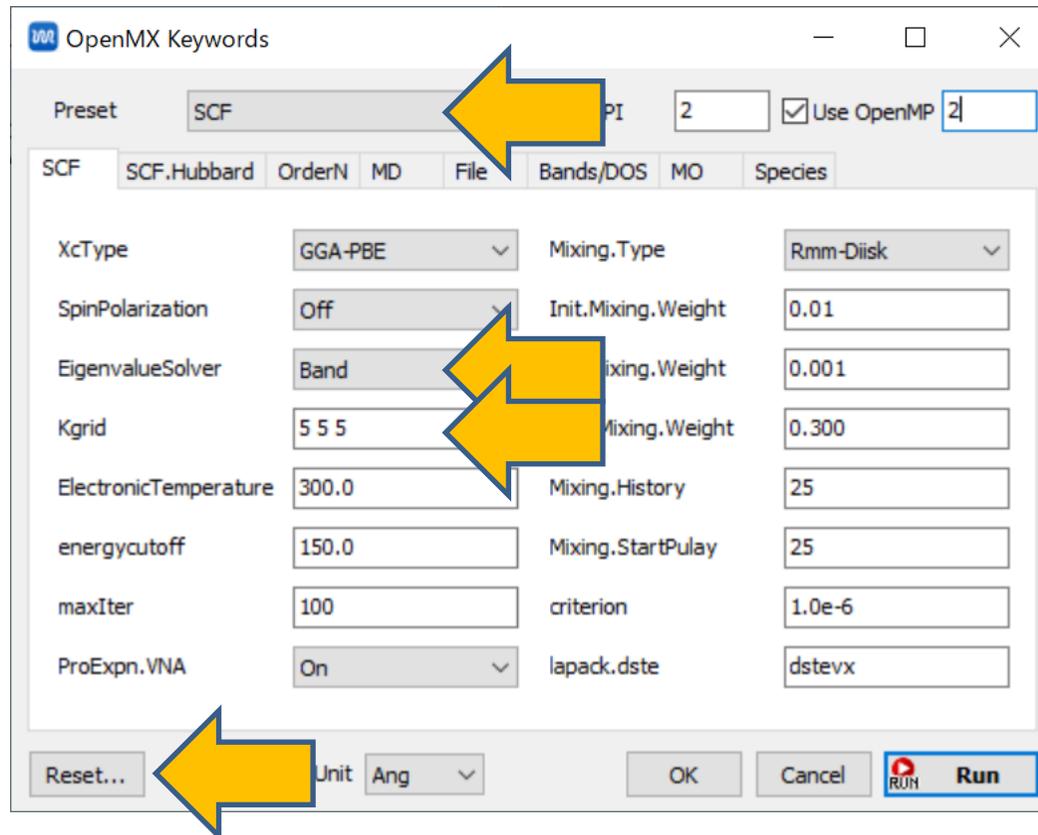
- cifファイルをメイン画面にて読み込み後、[固体] > [格子]を変換をクリックするとプリミティブセルに変換可能である。

3. ソルバー一覧から**OpenMX**を選択し、 **(キーワード設定)** をクリックする。



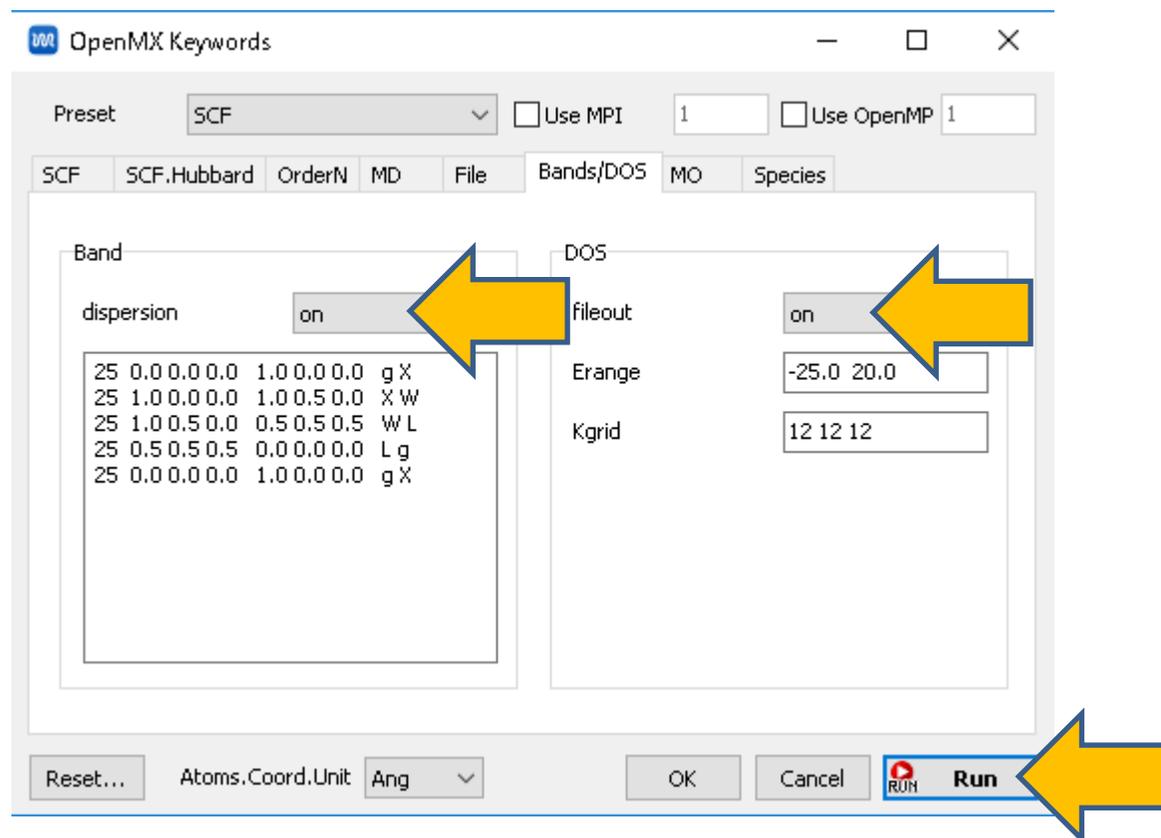
II. OpenMXによる計算

1. **Reset**をクリックし、**Preset**に**SCF**を指定する。
2. **EigenvalueSolver**から**Band**を選択し、**Kgrid**に**5 5 5**と入力する。



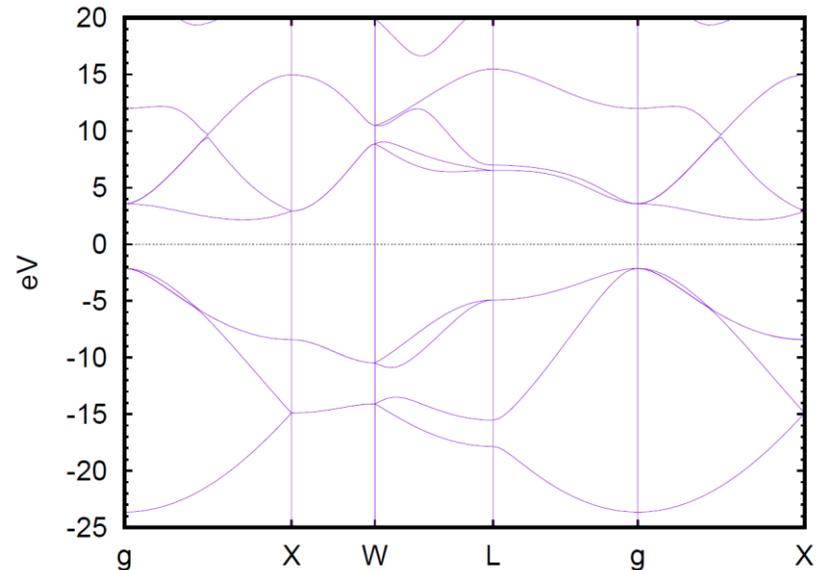
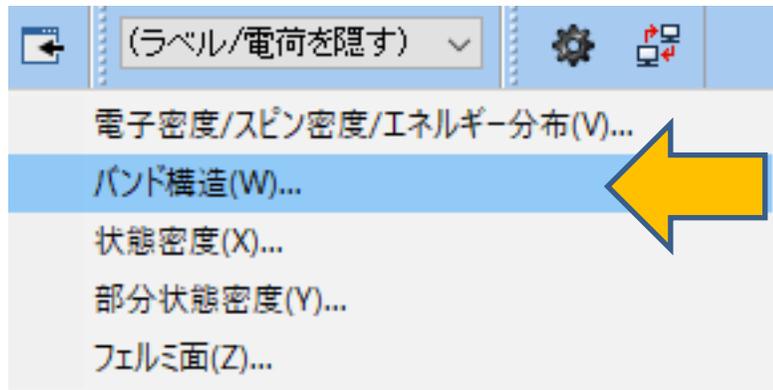
II. OpenMXによる計算

1. Bands/DOSタブをクリックする。
2. BandのdispersionとDOSのfileoutをonに変更する。
3. Runをクリックし、ファイル名にdia_tutor.mxinと入力し、保存する。



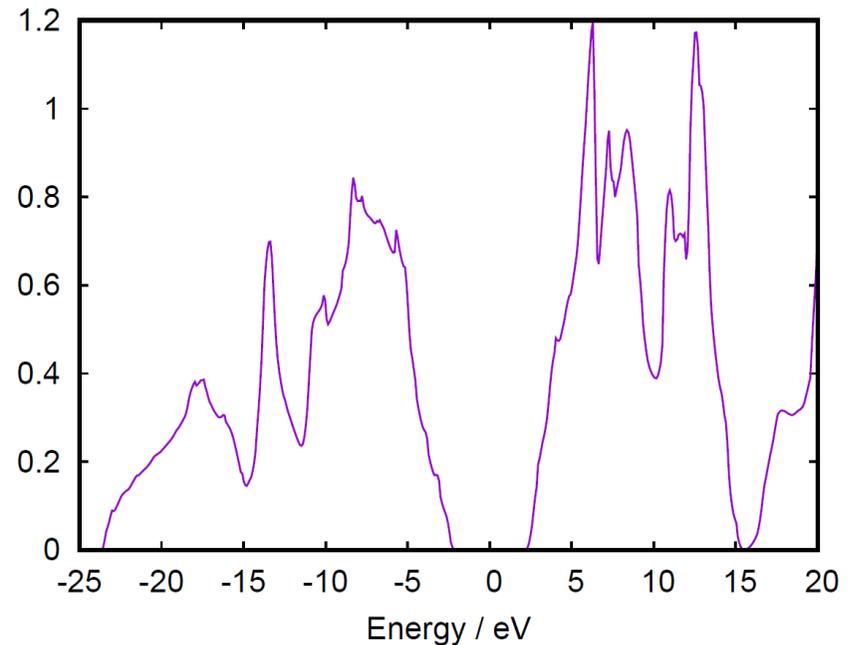
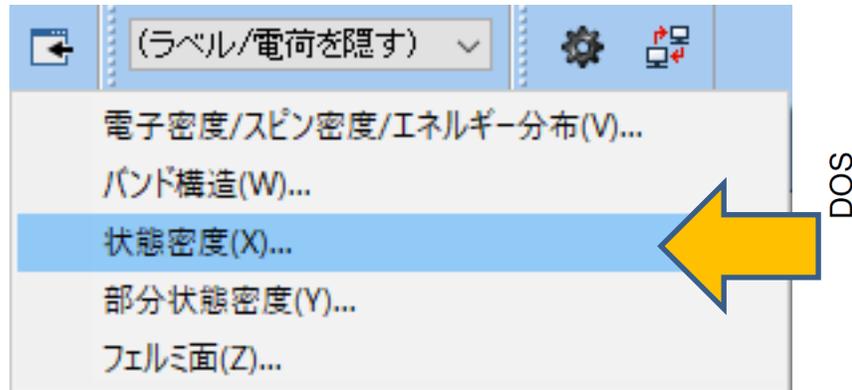
III. 結果解析

1. 計算終了後、  (結果解析) | バンド構造をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダを選択する。



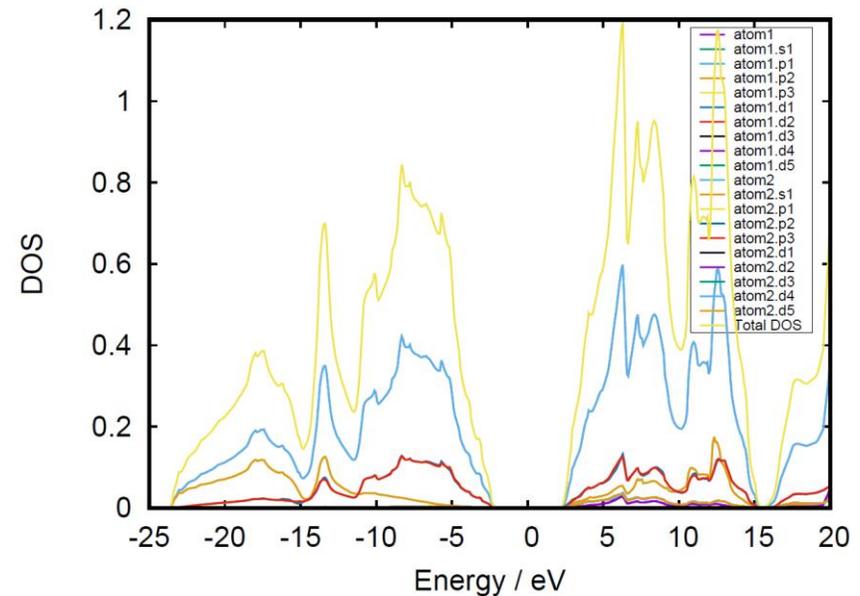
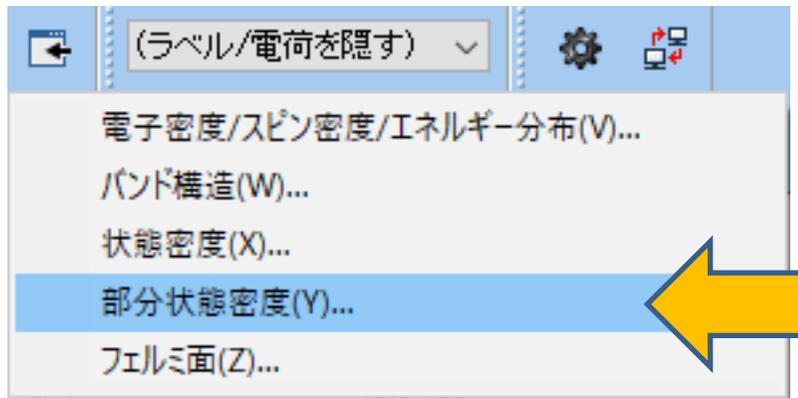
III. 結果解析

1.  (結果解析) | 状態密度をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダを選択する。



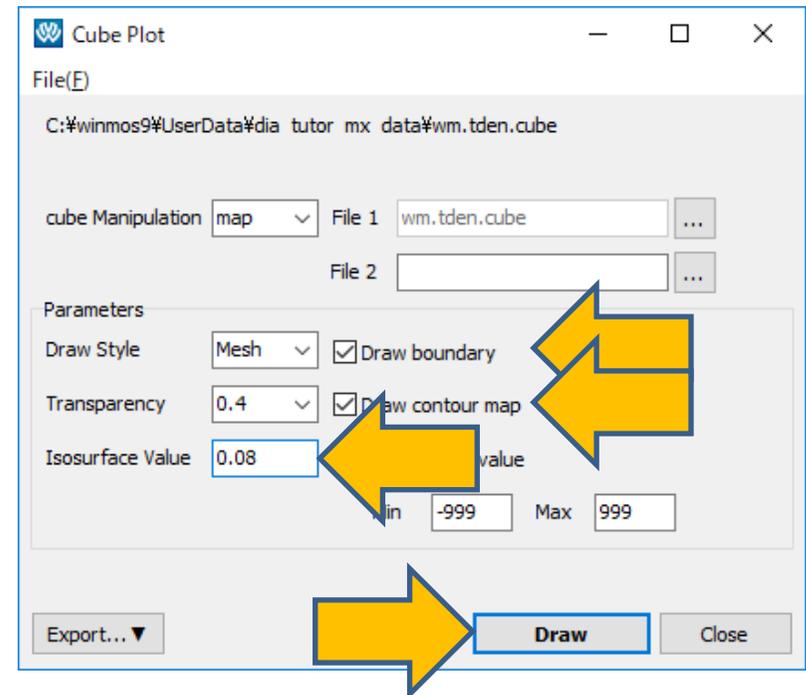
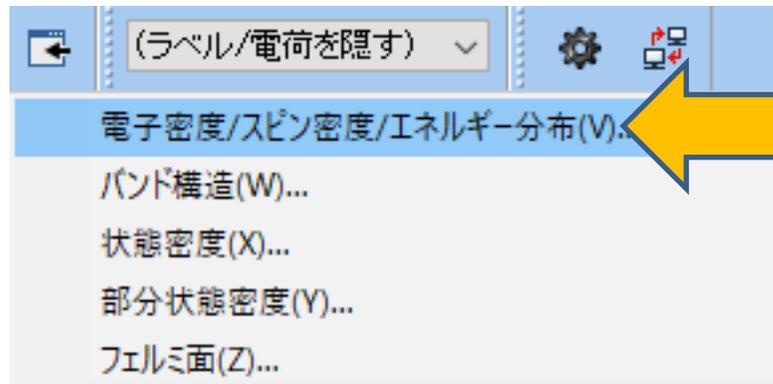
III. 結果解析

1.  (結果解析) | 部分状態密度をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるフォルダとファイルを選択する。



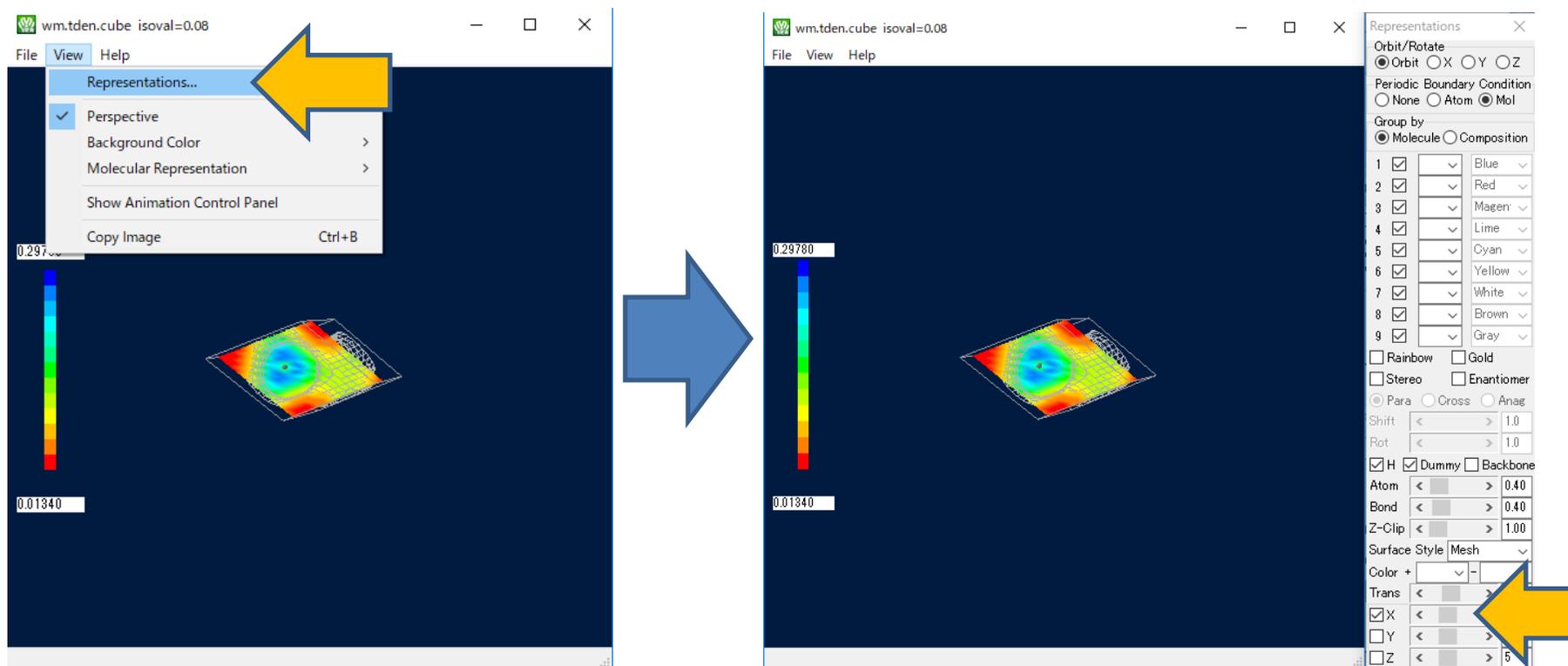
III. 結果解析

1.  (結果解析) | 電子密度/スピン密度/エネルギー分布をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるファイルをクリックする。
3. **Draw contour map**と**Draw boundary**にチェックを入れる。
4. **Isosurface Value**を**0.08**に設定する。
5. **Draw**をクリックする。



III. 結果解析

1. 起動したWinmostar Viewerにて、**View | Representations...**をクリックする。
2. **X、YまたはZ**のスライダーを動かし、等高線マップを表示する面を選択する。



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、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、[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