

Winmostar - FDMNES

Cu結晶

V6.012

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2016/04/01

修正履歴

2016/4/01版

- 初版

Contents

- I. 結晶ビルダで初期座標の作成
- II. FDMNESの設定 & 実行
- III. XAFSスペクトルの表示

I. 結晶ビルダで初期座標の作成

結晶ビルダにて「Cubic」>「225 Fm-3m」を選択。格子定数は3.6149に設定。

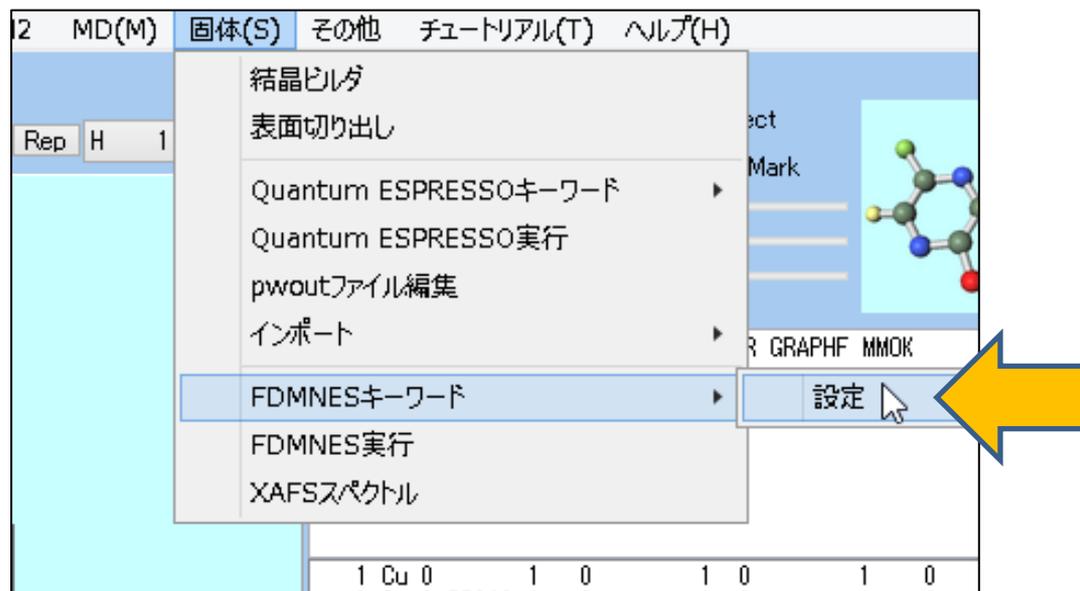
The screenshot shows the 'Lattice' and 'Lattice Constants' sections of a software interface. In the 'Lattice' section, the 'Crystal System' is set to '[195-230] : Cubic' and the 'Space Group' is set to '225' and 'F m -3 m'. In the 'Lattice Constants' section, the 'Length(Å)' for 'a' is set to '3.614900'. The angles are all set to '90.000000'.

Lattice			
Crystal System	[195-230] : Cubic		
Space Group	225	F m -3 m	
Setting	1		

Lattice Constants			
	a	b	c
Length(Å)	3.614900	3.614900	3.614900
	α	β	γ
Angle(°)	90.000000	90.000000	90.000000

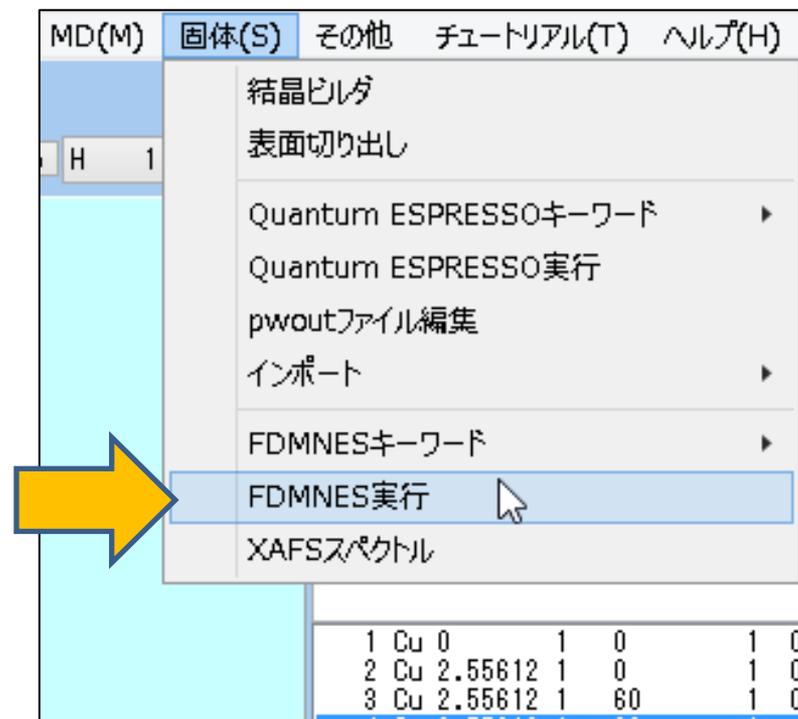
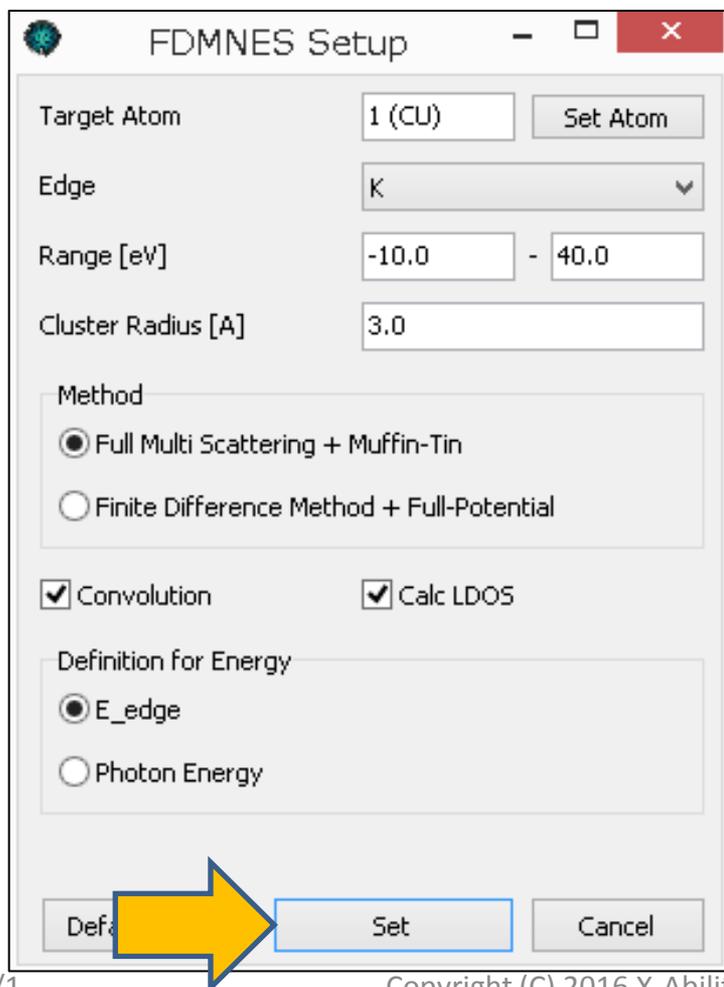
II. FDMNESの設定 & 実行

「固体 > FDMNESキーワード > 設定」を選択。



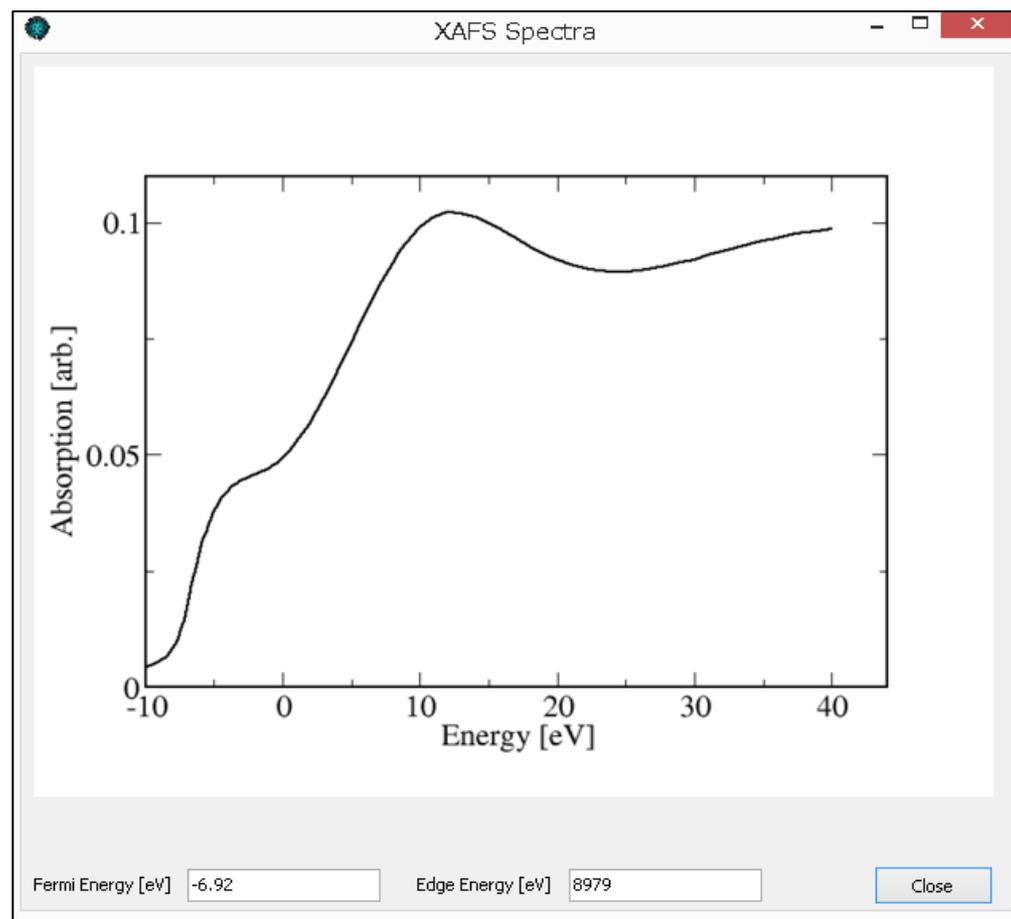
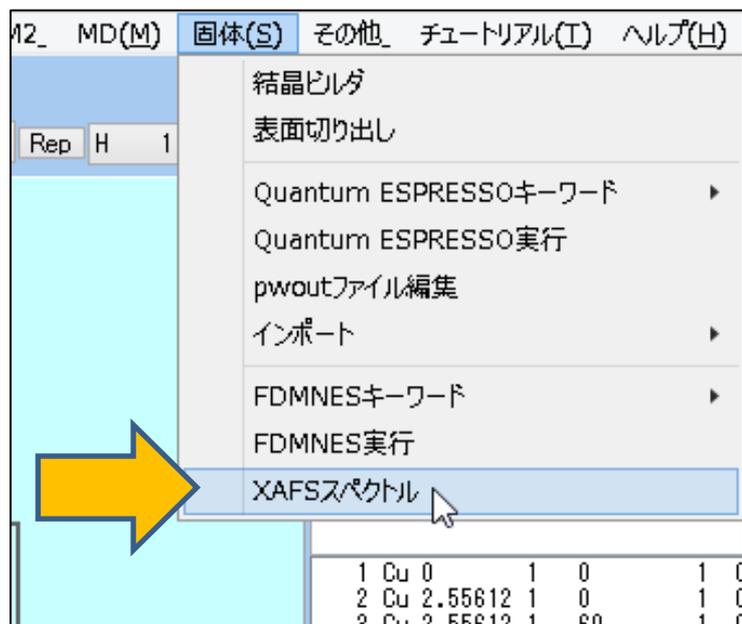
II. FDMNESの設定 & 実行

デフォルトの設定のままSetをクリック。「固体>FDMNES実行」を選択。



III. XAFSスペクトルの表示

「固体>XAFSスペクトル」を選択し、デフォルトで選ばれるファイルを選択し、計算されたXAFSスペクトル(右図)を取得。



facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38

👍 いいね!