

# Winmostar チュートリアル

## DCDFTBMD

### 構造最適化計算

V8.030

株式会社クロスアビリティ

[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2018/11/5

# Contents

- I. 分子のモデリング
- II. 構造最適化計算
- III. 構造最適化のアニメーション表示

# ソルバの入手に関して

本チュートリアルを実施するには別途DCDFTBMDのソルバ本体を入手する必要があります。

・アカデミック版は早稲田大学中井研究室より、無償で登録できます。

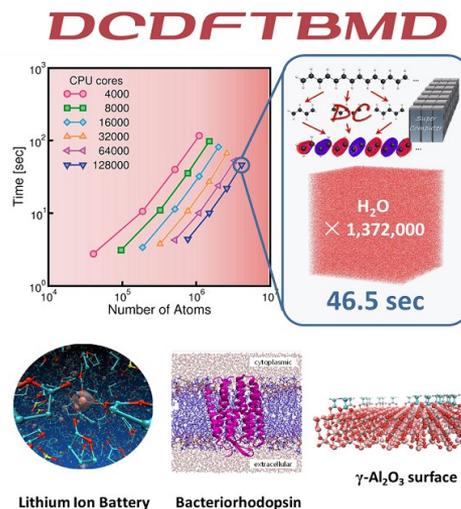
DCDFTBMD登録サイト

<http://www.chem.waseda.ac.jp/dcdftbmd/>

・商用版では以下のURLより購入可能です。

Winmostarウェブサイト

<https://winmostar.com/dftb/>



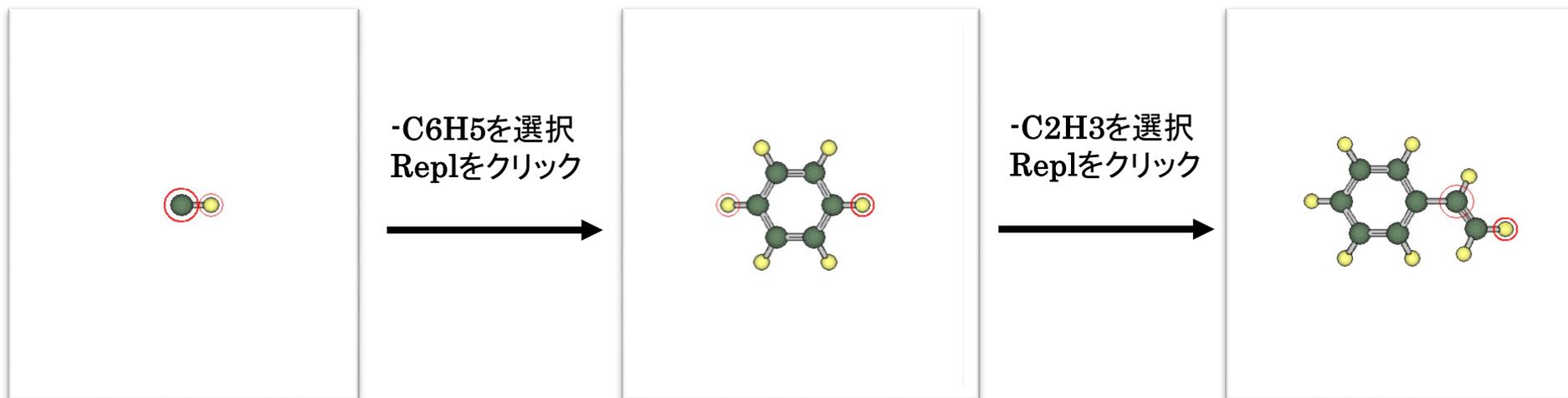
## Winmostarのライセンスについて

商用版ではソルバ本体及びWinmostarのDCDFTBMDライセンスを入手できます。本ライセンスでは、Winmostarを用いてDCDFTBMDのインプットの入出力、リモートサーバへのジョブ投入によるソルバの実行および計算結果の読込が可能です。

またWinmostarの学生版ライセンスでは、DCDFTBMDのインプットの入出力および計算結果の読込が可能です(ジョブ投入機能は使用できません)。ソルバ本体に関しては上記登録サイトより申請して下さい。

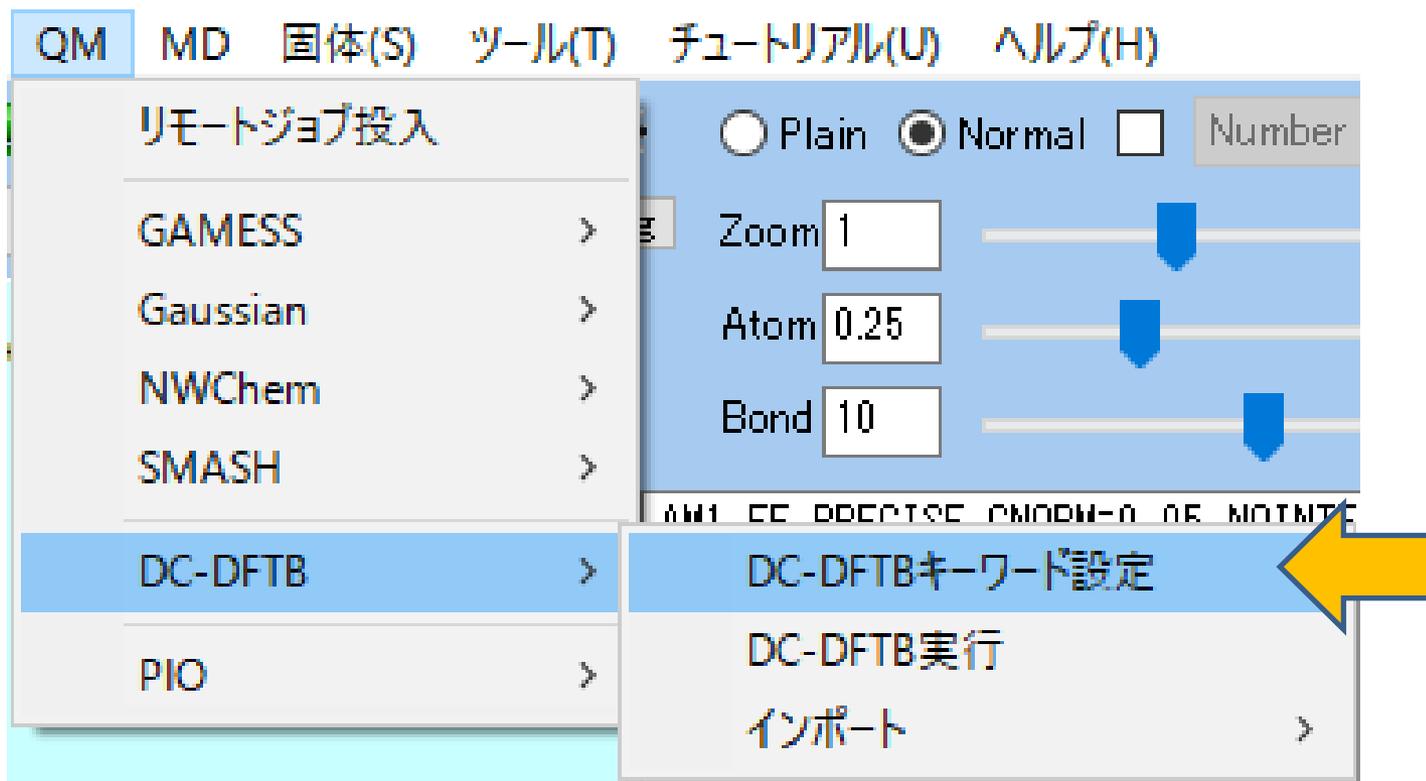
# I. 分子のモデリング

メイン画面上にて下記のようにスチレン分子をモデリングする。  
本チュートリアルでは、この構造を初期値として構造最適化の様子を確認する。



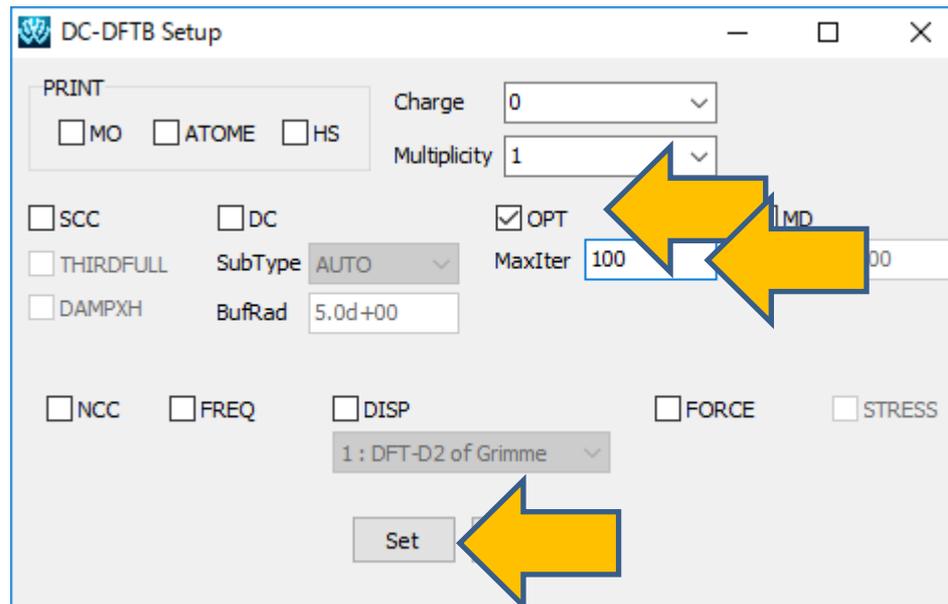
## II. 構造最適化計算

QM | DC-DFTB | キーワード設定 をクリックする。



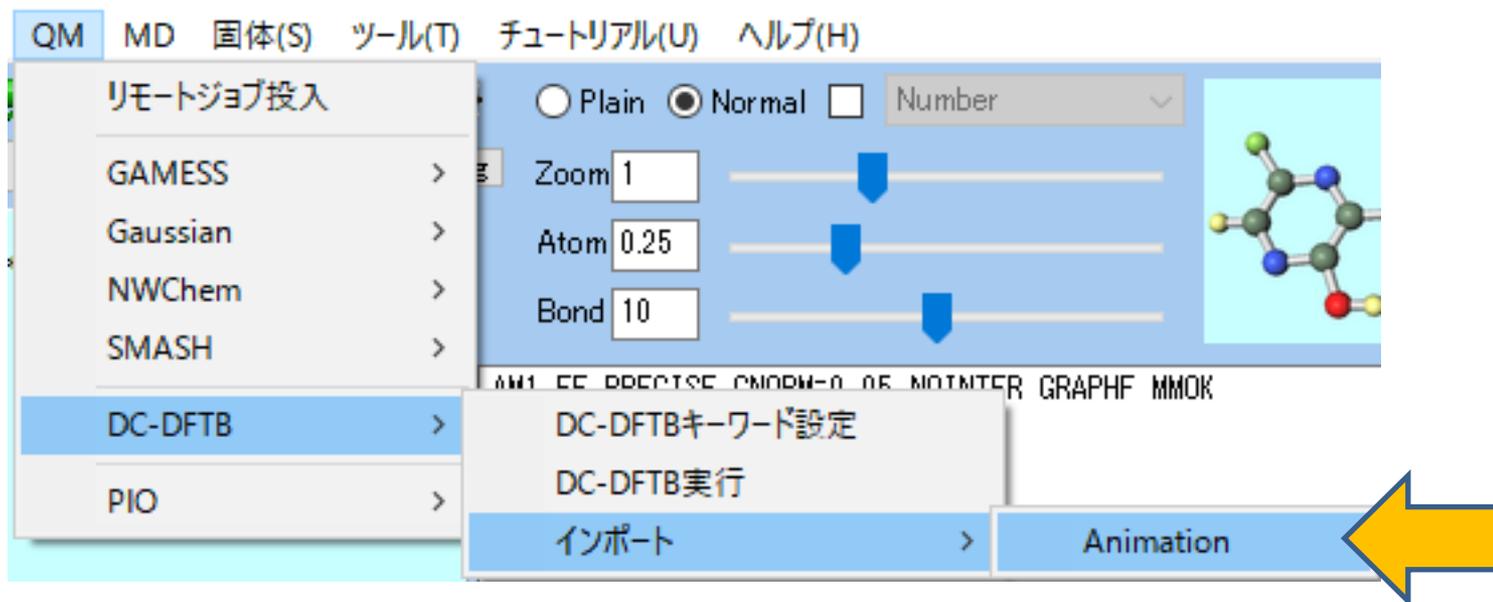
## II. 構造最適化計算

1. **OPT** にチェックを入れ、**MaxIter** に **100** と入力する。
2. **Set** をクリックする。
3. **QM | リモートジョブ投入** をクリックする。  
**Hostname, LoginID**等を適切に設定し、  
**Program**から**dcdftb**を選択



### III. 構造最適化のアニメーション表示

計算の終了後、**QM | DC-DFTB | インポート | Animation** を選択する。  
アウトプットファイルを選択する。(拡張子は.dco)



## III. 構造最適化のアニメーション表示

アニメーションウィンドウが表示され、各ステップの様子を確認できる。  
例えば、「|>」ボタンを押すとアニメーションが開始される。

The screenshot displays a software window with a menu bar (File, Edit, View, etc.) and a toolbar. The main area shows a 3D ball-and-stick model of a molecule with a red circle highlighting a specific atom. A coordinate system (X, Y, Z) is visible in the bottom left. On the right, an 'Animation' window is open, showing a list of search steps with energy (E) and gradient (Grad) values. A yellow arrow points to the 'Next' button (|>) in the animation control panel.

Search	E	Grad(max)
0	-16.7491278729	0.
1	-16.7481292819	0.
2	-16.7486630778	0.
3	-16.7501408283	0.
4	-16.7502007726	0.
5	-16.7507265633	0.
6	-16.7504879346	0.
7	-16.7506355811	0.
8	-16.7508942154	0.
9	-16.7505584856	0.
10	-16.7509434700	0.
11	-16.7507452462	0.
12	-16.7509781128	0.
13	-16.7503877597	0.
14	-16.7509582980	0.
15	-16.7509388679	0.
16	-16.7510486943	0.
17	-16.7510355471	0.
18	-16.7510565891	0.
19	-16.7510722370	0.
20	-16.7510518563	0.
21	-16.7510825729	0.
22	-16.7510632493	0.
23	-16.7511190779	0.
24	-16.7510867693	0.

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 · 公開

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\\_au\\_detailpage\\_o00\\_s00...](http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_au_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 · 公開

👍 いいね!