

# Winmostar™ チュートリアル

FDMNES

XAFSスペクトル

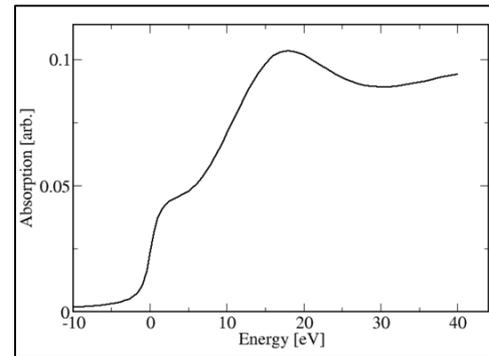
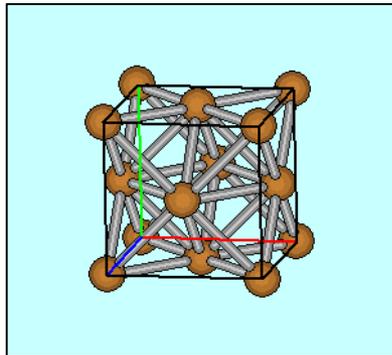
V8.025

株式会社クロスアビリティ

2018/07/23

# 概要

- このチュートリアルでは、XAFSスペクトルの算出に特化したフリーウェアであるFDMNESを用いてCu結晶のXAFSスペクトルを算出します。



## 注意点:

- 構造最適化はQuantum ESPRESSO, OpenMXなどの他のソフトで実行する必要があります。
- クラスタ半径や計算手法は計算結果に影響を与えます。
- 計算手法、波動関数の基底が異なるシミュレーションから算出されたXAFSスペクトルと比較する際には注意が必要です。

# I. FDMNESの設定 & 実行

1. [メニュー] > [開く]をクリック。
2. サンプルフォルダ内のcu.cifを開く。(デフォルトではC:\¥winmos8¥samples¥cu.cif)

※ 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<sup>1</sup>の操作手順に従い、以下の情報を元に単位格子を作成する。

## Cu単位格子について

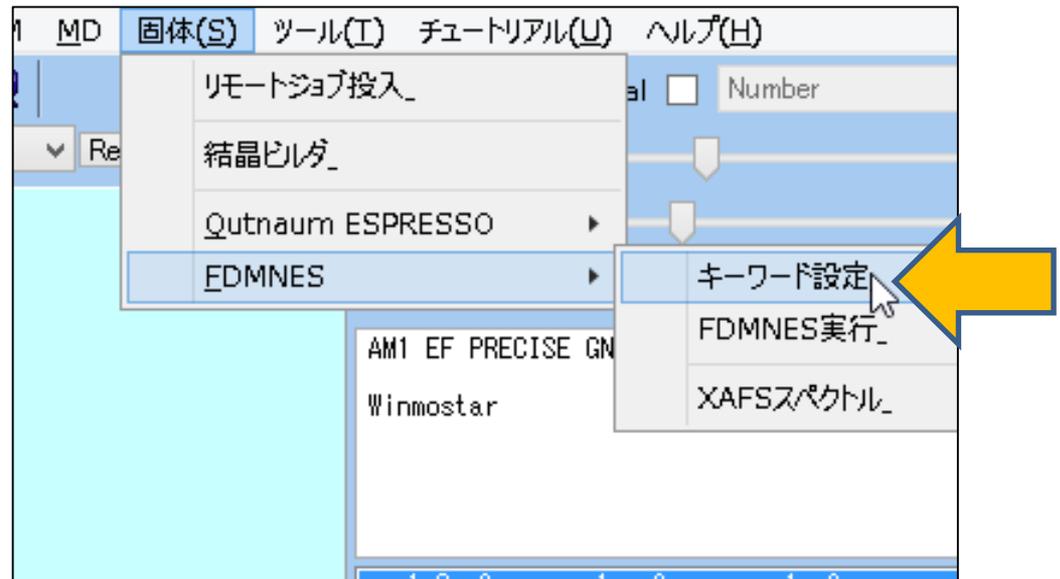
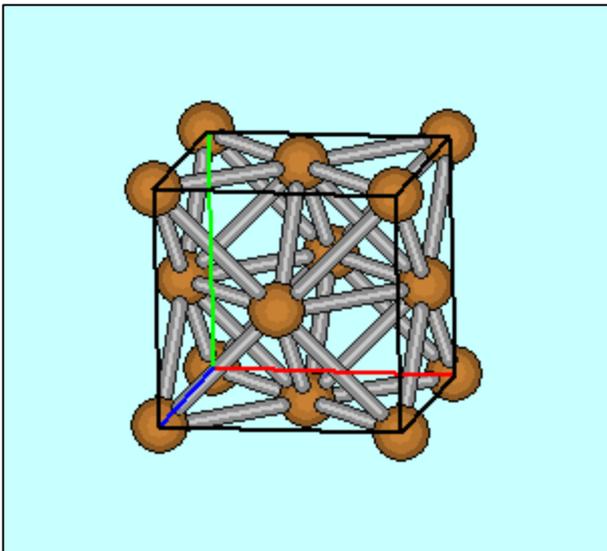
Crystal system: Cubic

Space group : Fm-3m (225)

Lattice constants : a=3.6149 Å

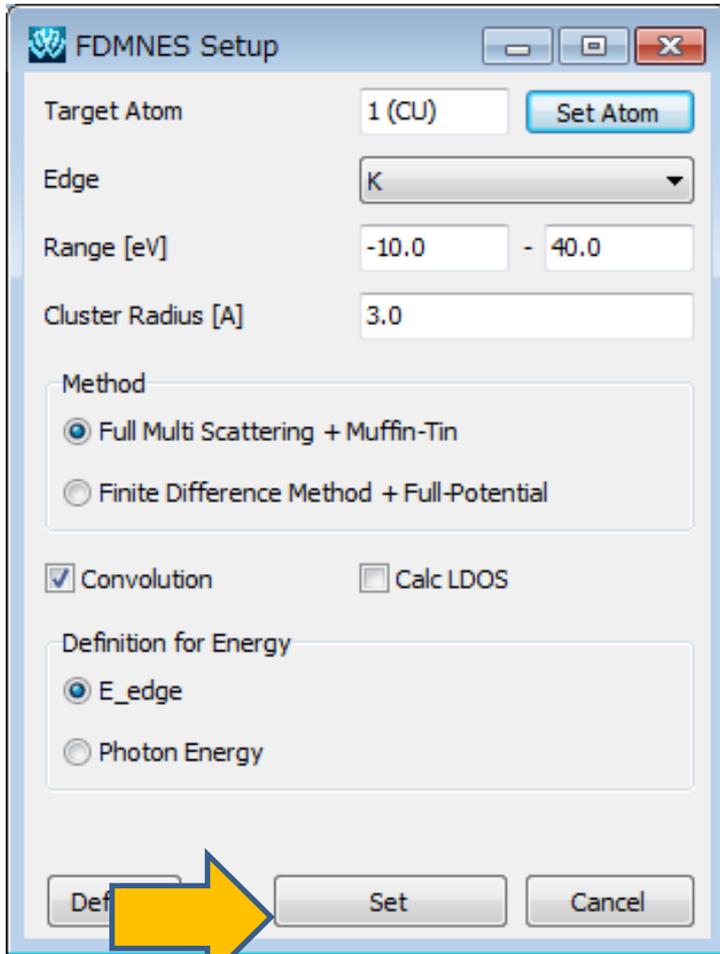
Asymmetric unit: Cu (0.0 0.0 0.0)

3. [固体] > [FDMNESキーワード] > [設定]をクリック。

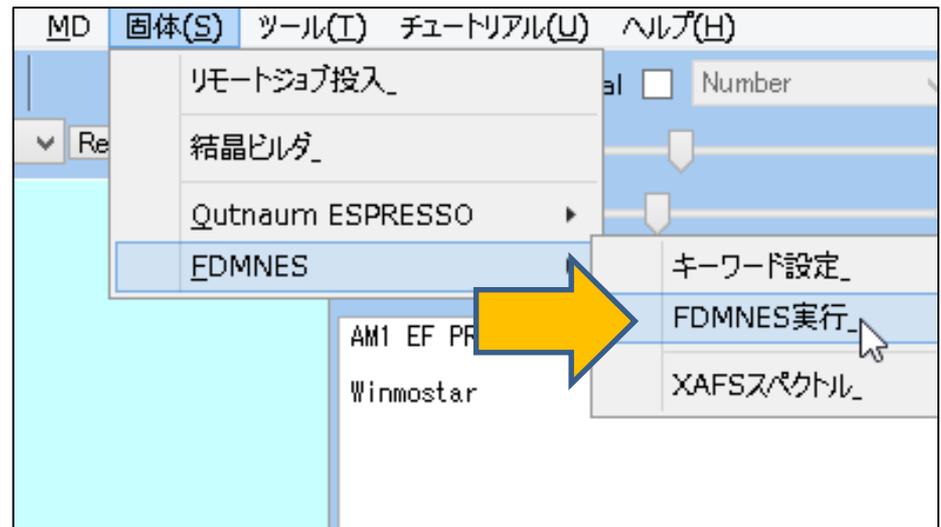


# I. FDMNESの設定 & 実行

1. デフォルトの設定のまま[Set]をクリック。

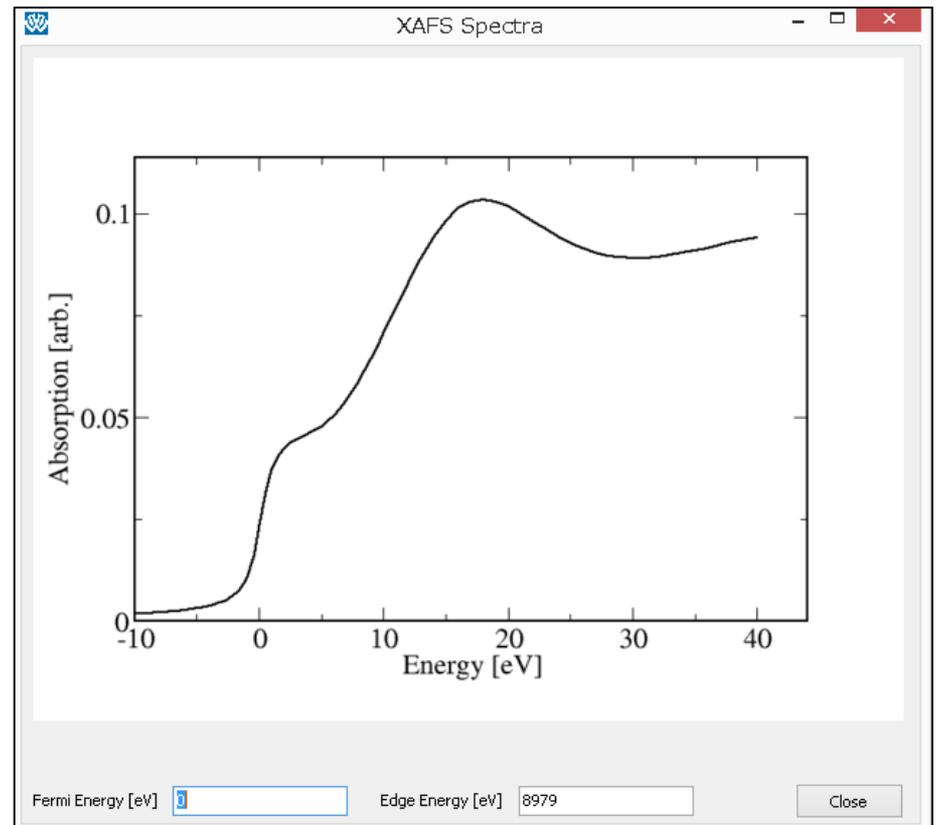
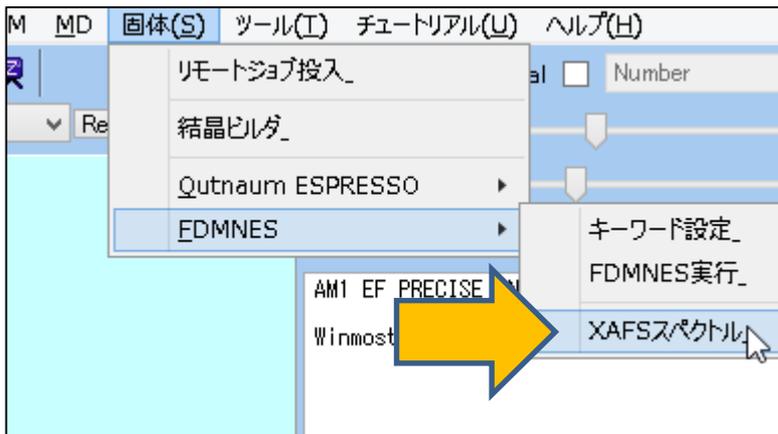


2. [固体] > [FDMNES実行]をクリック。



## II. XAFSスペクトルの表示

1. [固体] > [XAFSスペクトル]をクリック。
2. 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。  
※ 2016年6月23日以前のバージョンのFDMNESを使うと横軸がFermiエネルギーにシフトされていないので注意。



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...](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!