

Winmostar チュートリアル

OpenMX

基礎編

V8.017

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2018/04/10

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。

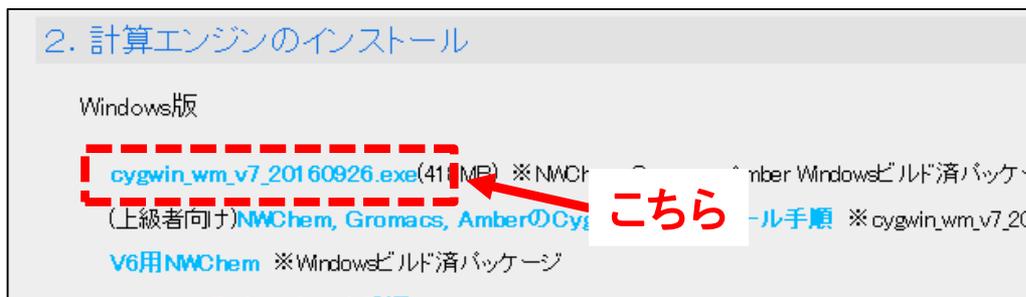
注意点:

- 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。

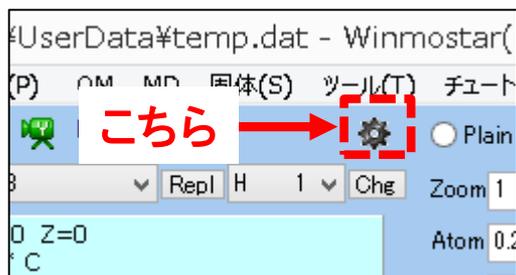
動作環境設定

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/manual_jp.htmlの「2. 計算エンジンのインストール」から、Cygwinの自己解凍書庫(exe)を入手し実行してください。



- 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. [メニュー] > [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:\winmos8\samples\dia.mol2)

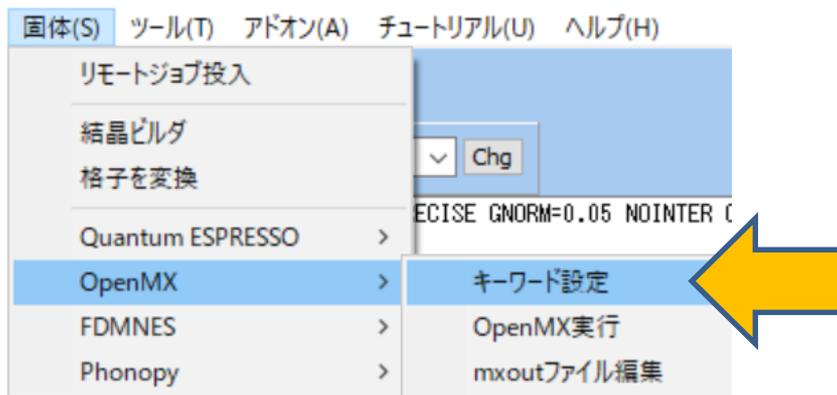
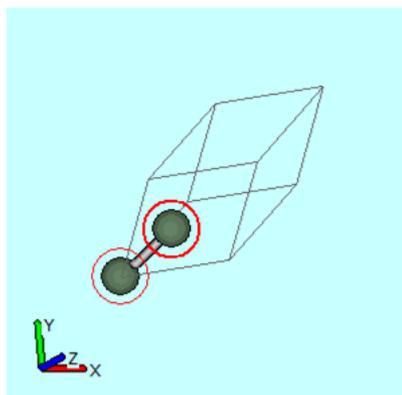
※このCIFファイルは結晶ビルダを用いて作成することが可能である。
その際は結晶モデリングチュートリアルの手順に従い、以下の情報を元に単位格子を作成する。

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)

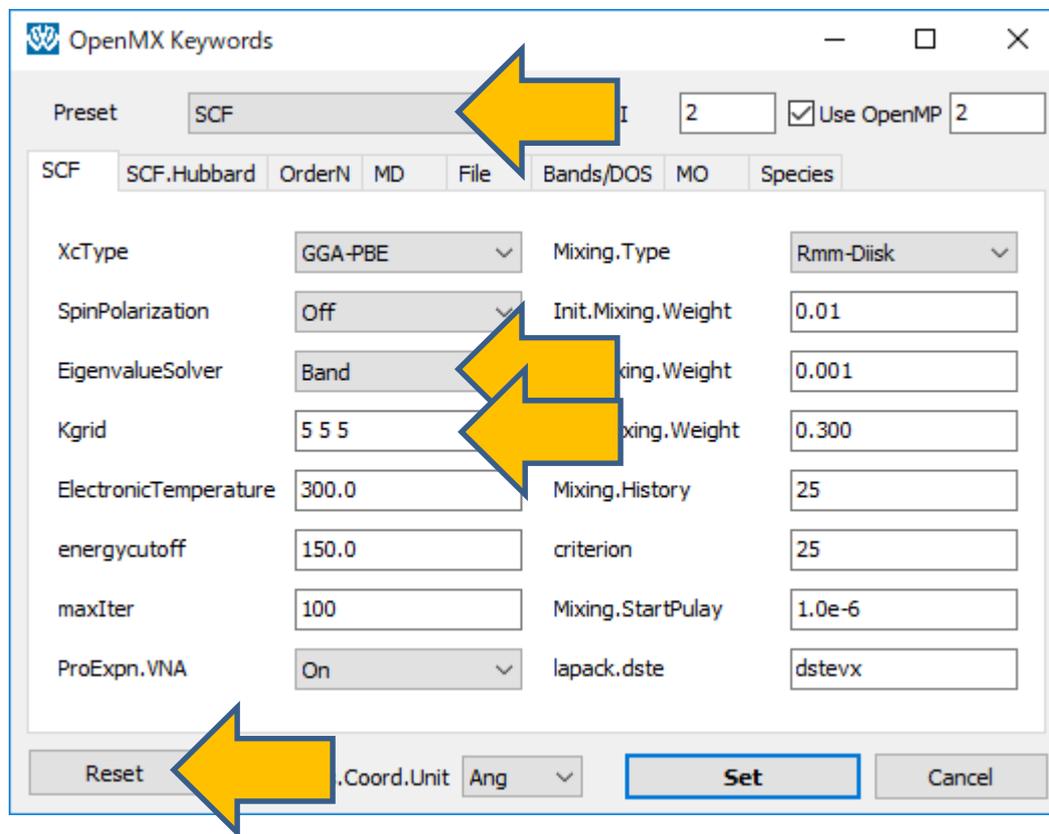
cifファイルをメイン画面にて読み込み後、[固体] > [格子]を変換をクリックするとプリミティブセルに変換可能である。

3. [固体] > [OpenMX] > [キーワード設定]をクリックする。



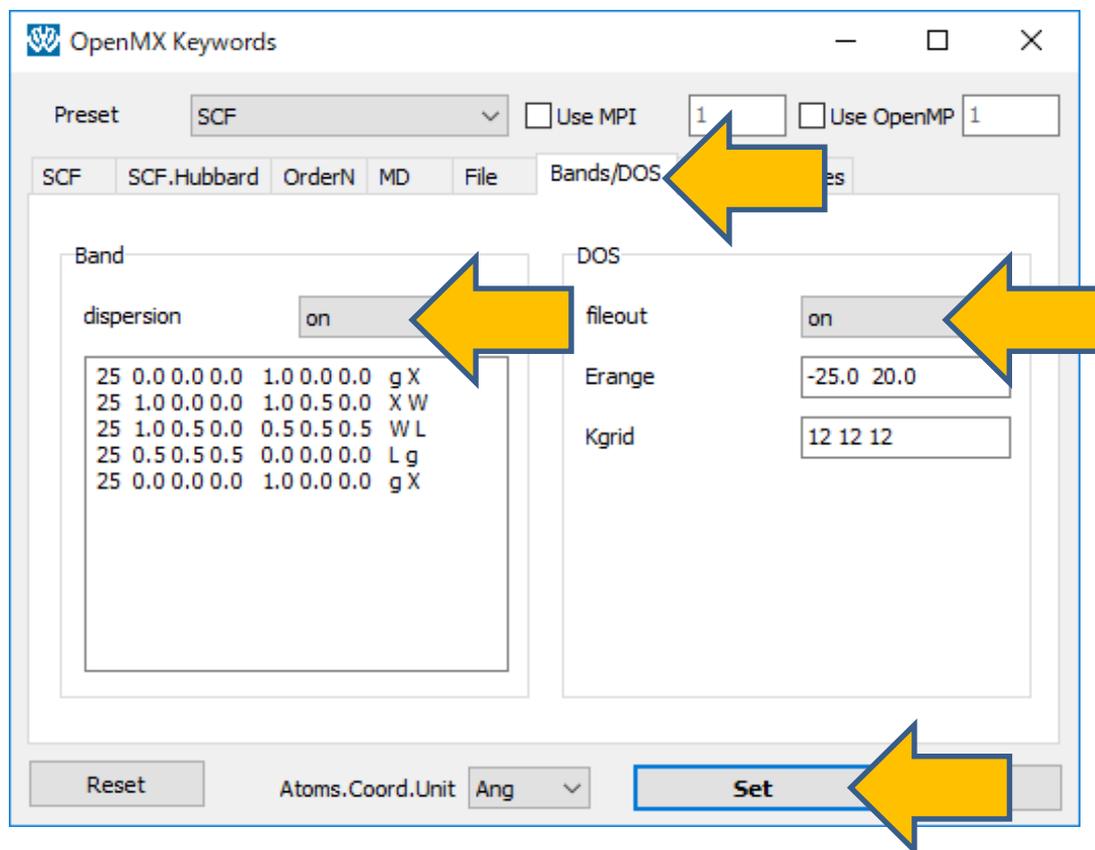
II. OpenMXによる計算

1. [Reset]ボタンをクリックし、[Preset]に”SCF”を指定する。
2. EigenvalueSolver=Bandを選択し、Kgrid=5 5 5と指定する。



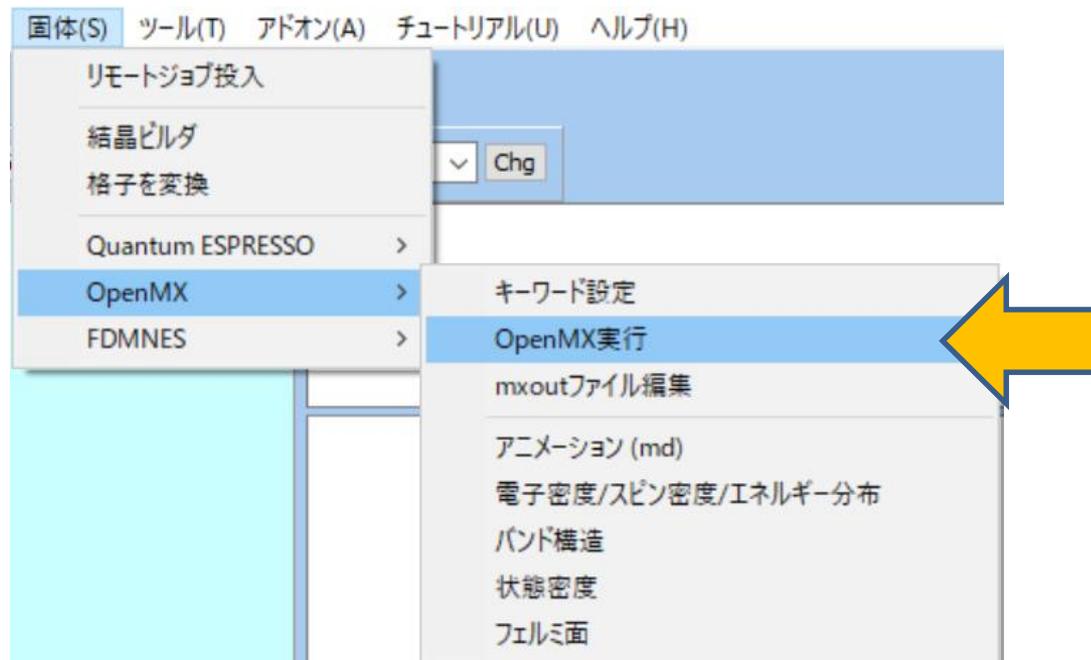
II. OpenMXによる計算

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. [Set]をクリックする。



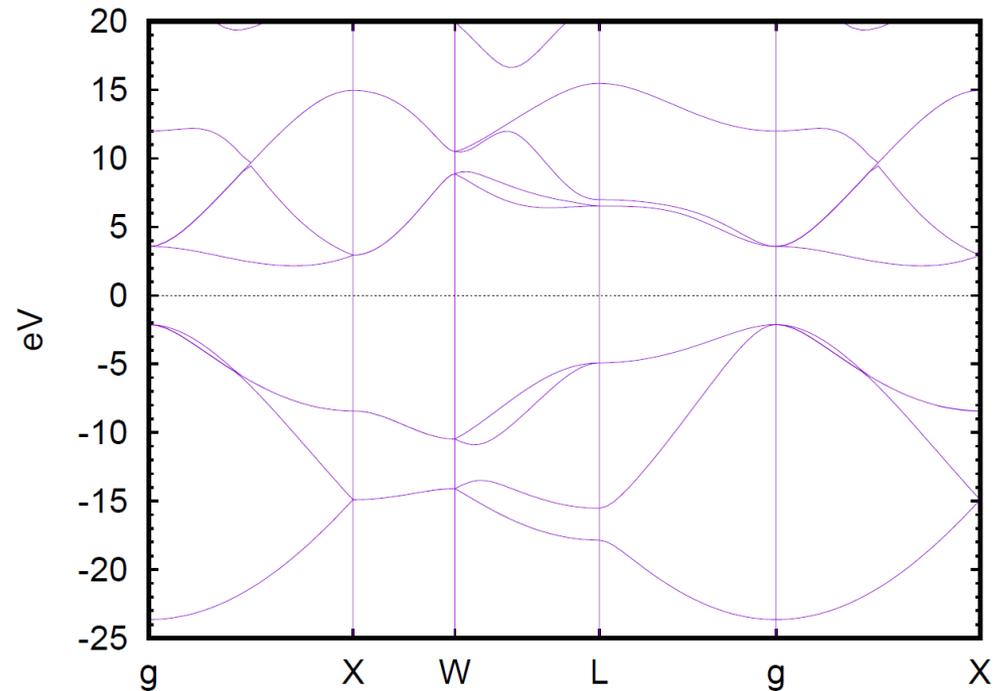
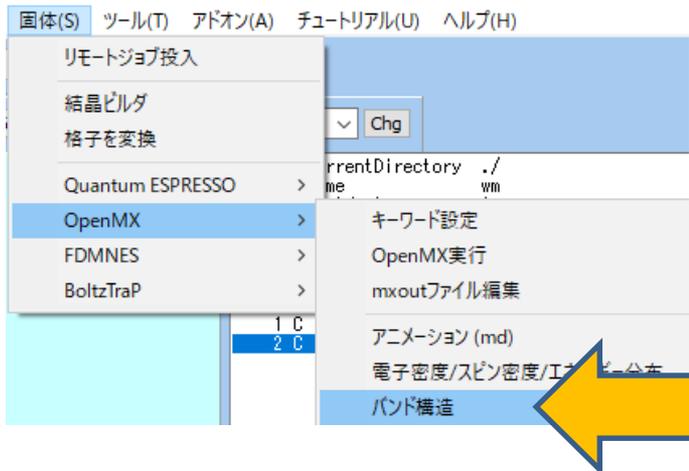
II. OpenMXによる計算

1. [固体] > [OpenMX]>[OpenMX実行]をクリックする。
2. 実行前に、ファイルを保存するか聞かれるので「はい」とし、名前を付けて保存する。
ここでは仮に「dia_tutor.mxin」とする。



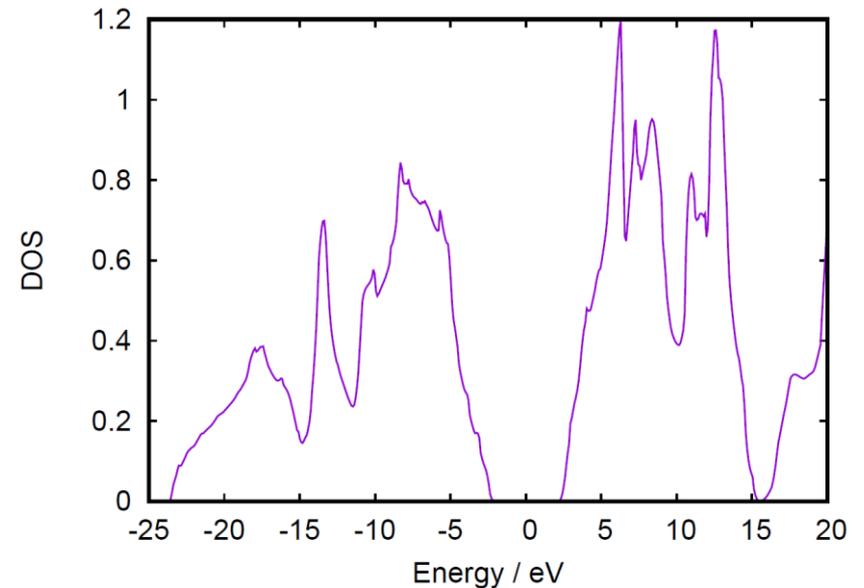
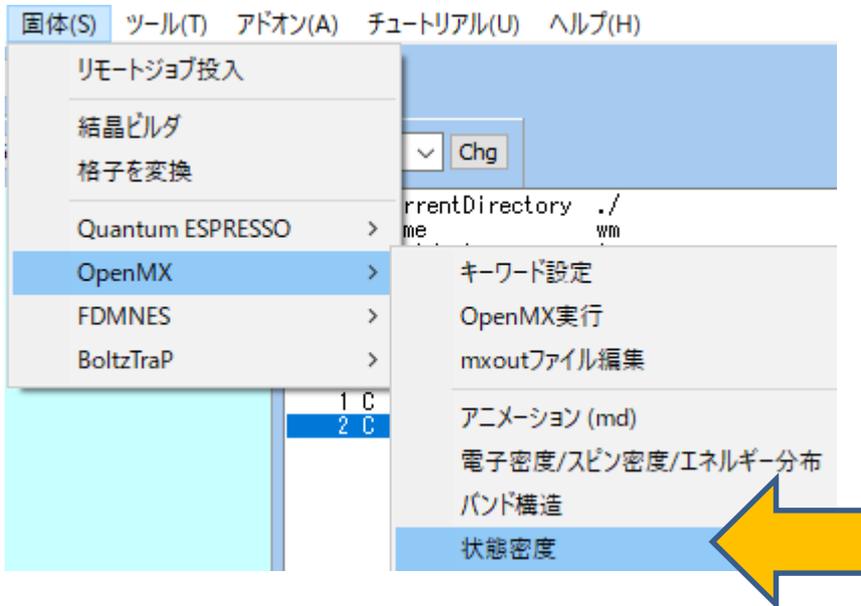
III. 結果解析

1. 計算終了後、[固体] > [OpenMX] > [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。



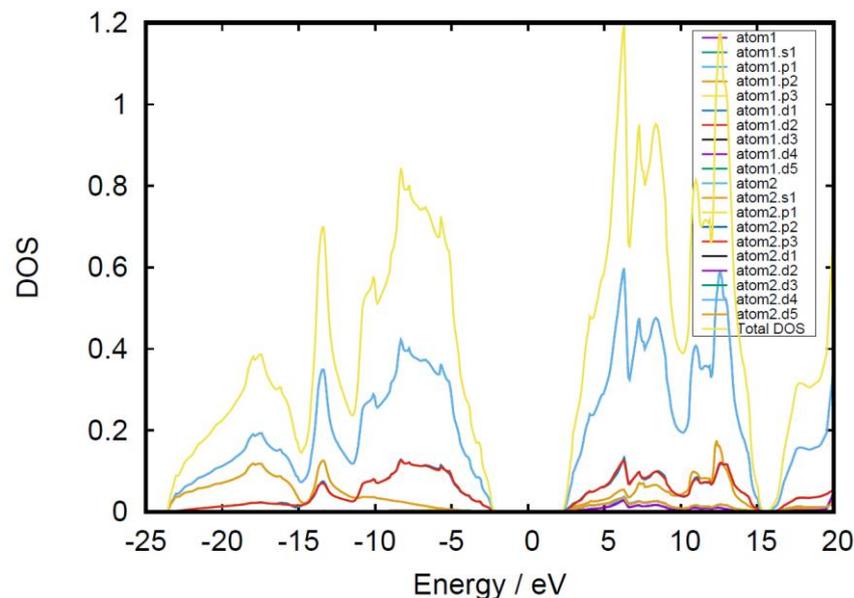
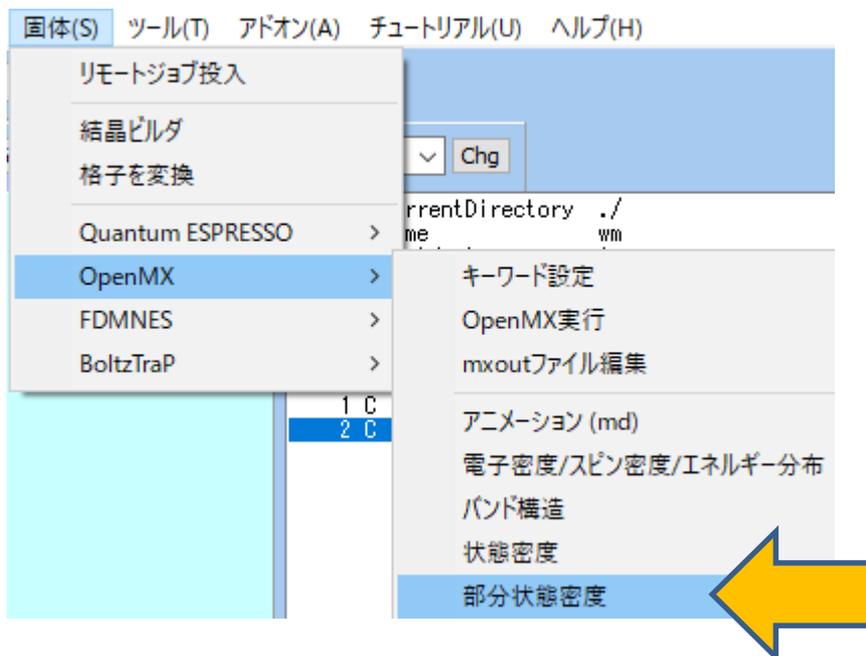
III. 結果解析

1. [固体] > [OpenMX] > [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。



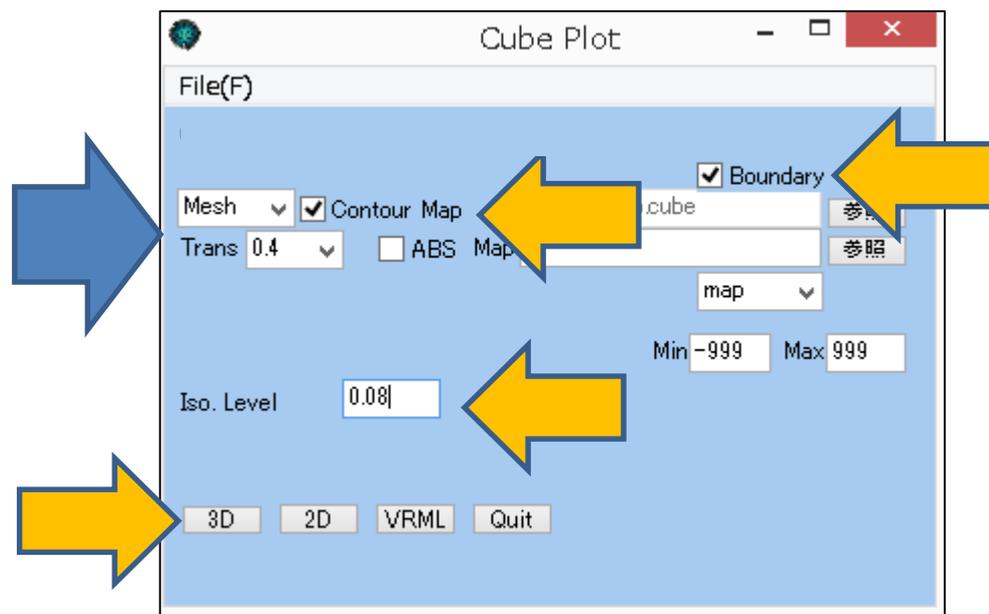
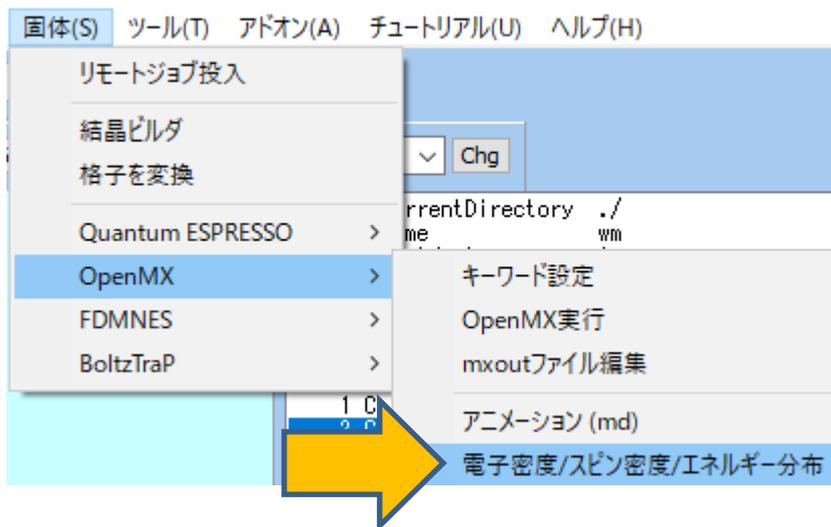
III. 結果解析

1. [固体] > [OpenMX] > [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。



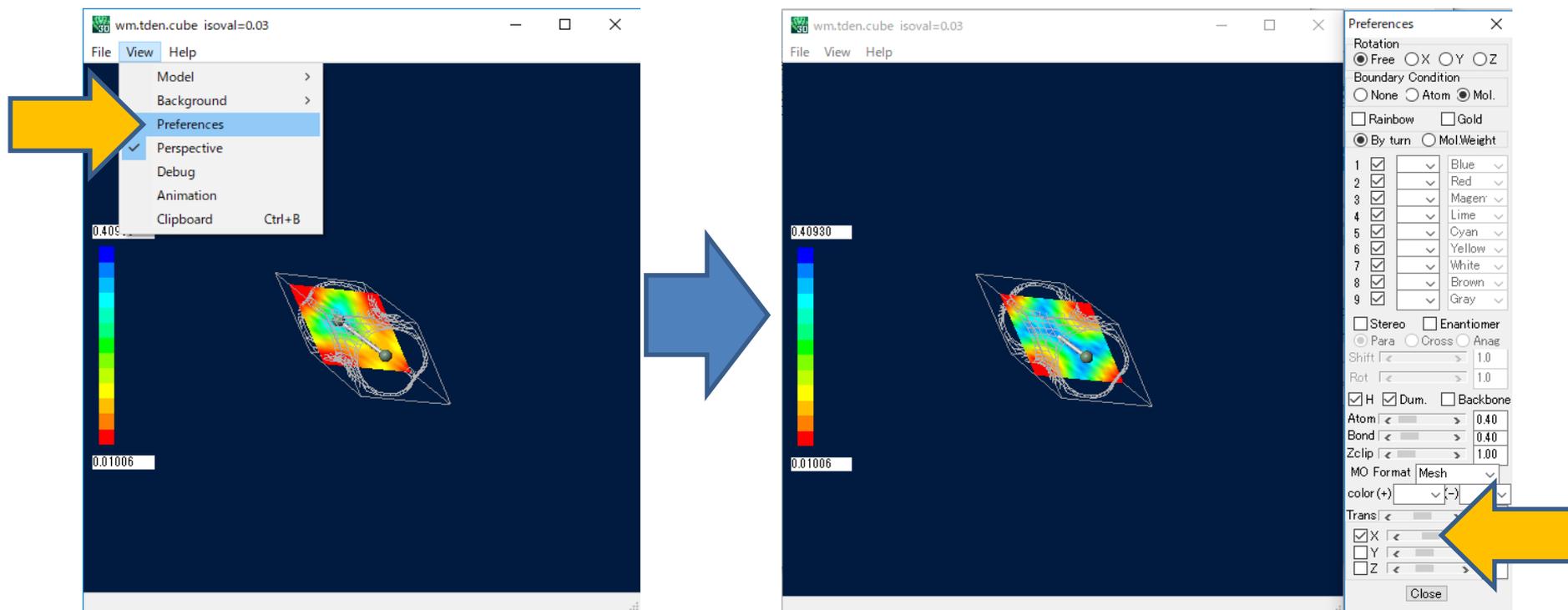
III. 結果解析

1. 同様に、[固体] > [OpenMX] > [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. [Contour Map]と[Boundary]にチェックを入れ、[Iso. Level]を”0.08”に設定する。
4. [3D]をクリックする。



III. 結果解析

1. 起動したWinmostar 3Dにて、[View] > [Preferences]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。



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!