

Winmostar™ チュートリアル
DCDFTBMD
構造最適化計算
V9.3.0

株式会社クロスアビリティ

2019年5月10日

ソルバの入手方法

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。

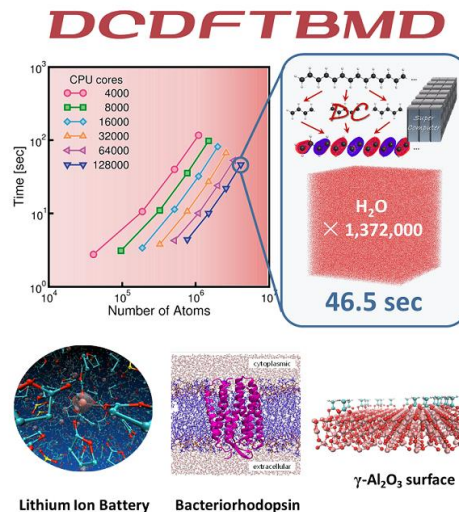
DCDFTBMD登録サイト

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

・商用版は以下のURLより購入可能です。

Winmostarウェブサイト

<https://winmostar.com/>



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。

パラメータの入手方法

<http://www.dftb.org/parameters/download/3ob/3ob-3-1-cc/> のDownloadに置かれている [3ob-3-1.tar.xz](#) を保存し、適当なフォルダにて解凍してください。解凍には、例えば、7-zipとLhaplusなどを使用します。この場合は、7-zipでxzを解凍した後、続けてLhaplusでtarを解凍します。

Download

SK-files	3ob-3-1.tar.xz
STO coefficients	wfc.3ob-3-1.hsd

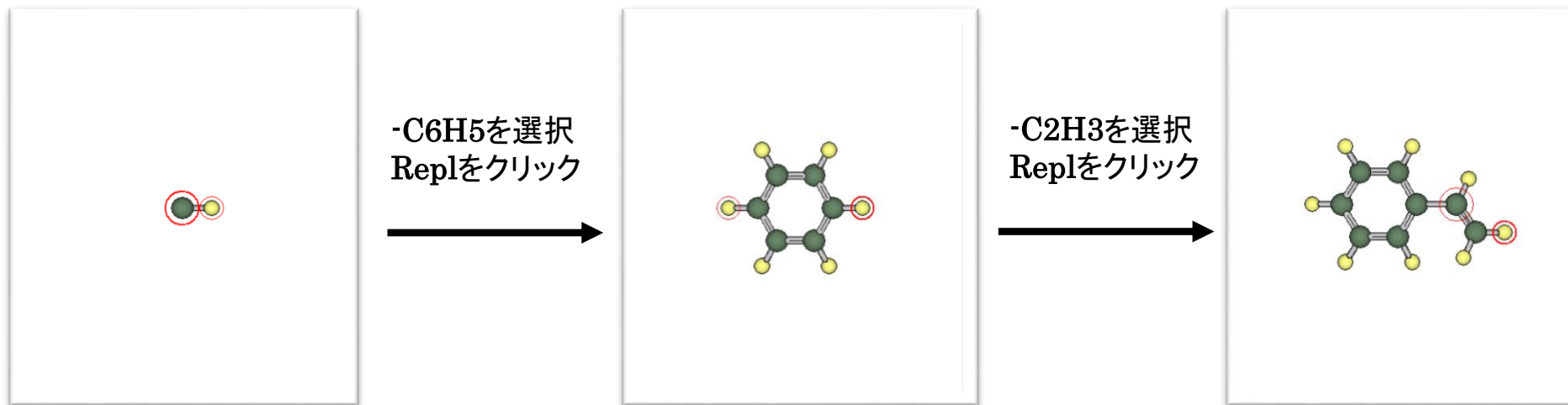
その後、生成された3ob-3-1フォルダの中にskfファイルが含まれていることを確認してください。



名前	更新日時	種類	サイズ
Br-Br.skf	2015/07/21 20:47	SKF ファイル	354 KB
Br-C.skf	2015/07/21 20:47	SKF ファイル	305 KB
Br-Ca.skf	2015/07/21 20:47	SKF ファイル	365 KB
Br-Cl.skf	2015/07/21 20:47	SKF ファイル	329 KB
Br-Fl.skf	2015/07/21 20:47	SKF ファイル	325 KB

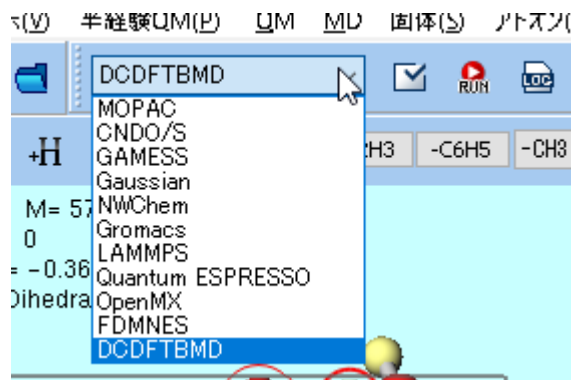
I. 分子のモデリング

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. 計算条件の設定

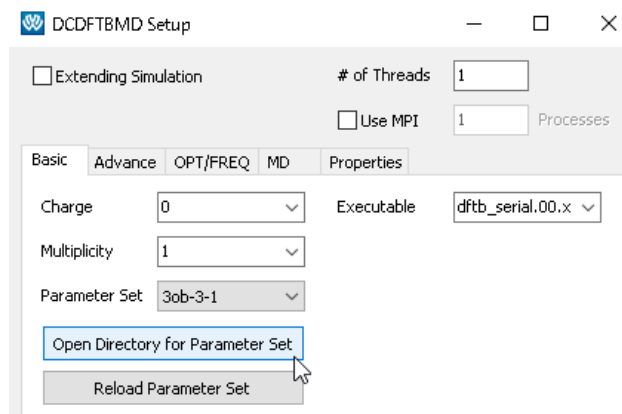
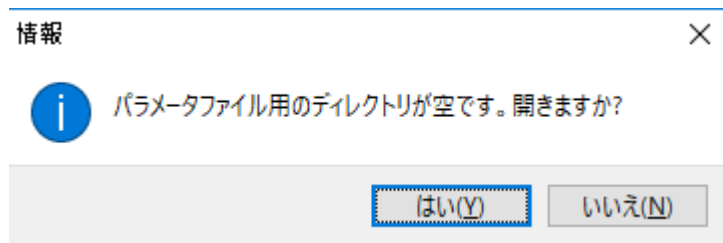
ソルバを選択 メニューからDCDFTBMDを選択する。次に、キーワード設定ボタンをクリックする。



II. 計算条件の設定

(このページの操作は2回目以降不要である)

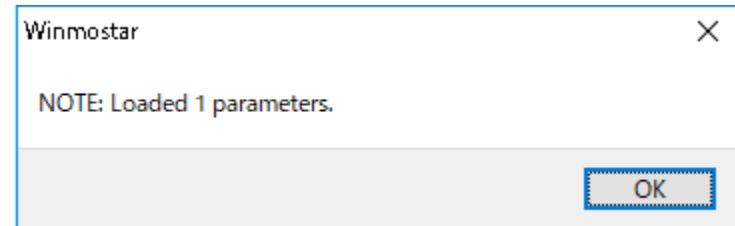
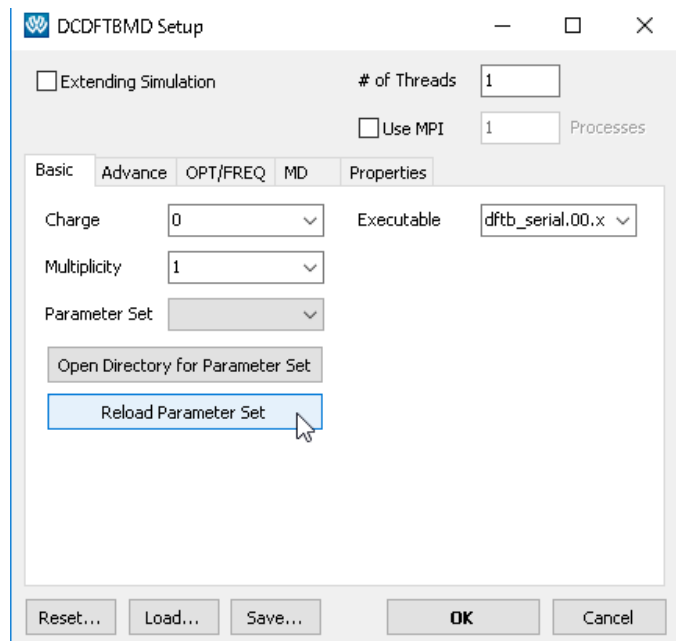
1. 「パラメータファイル用のディレクトリが空です...」と聞かれたらはいをクリックする。
聞かれなかった場合は**Open Directory for Parameter Set**ボタンを押す。
2. Winmostarのインストールフォルダ以下に**DFTBParam**フォルダが生成され、エクスプローラで開かれるので、そこに冒頭で解凍した**3ob-3-1**フォルダをコピーする。



II. 計算条件の設定

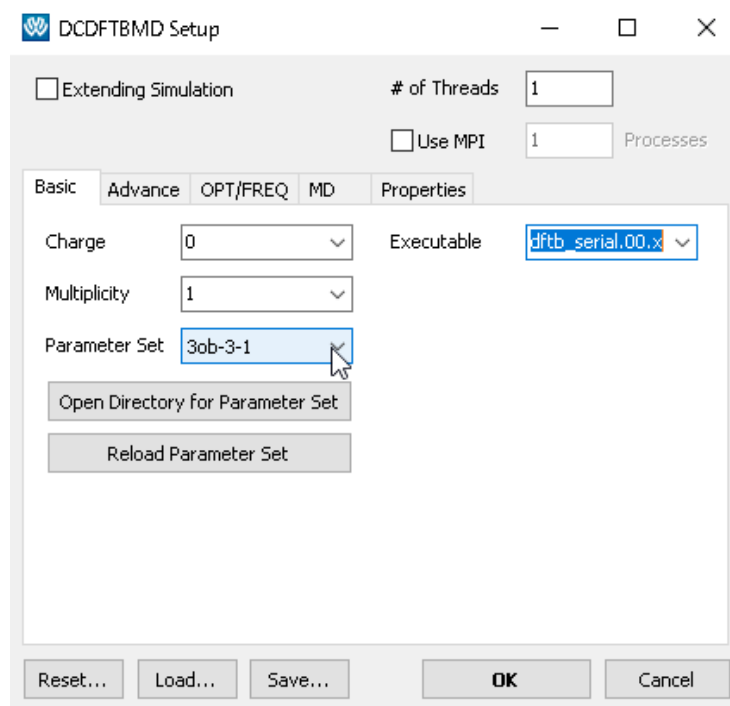
(このページの操作は2回目以降不要である)

1. Winmostarの**DCDFTBMD Setup**ウィンドウで**Reload Parameter Set**ボタンを押す。
2. 「NOTE: Loaded ** parameters.」と表示されたら**OK**ボタンを押す。



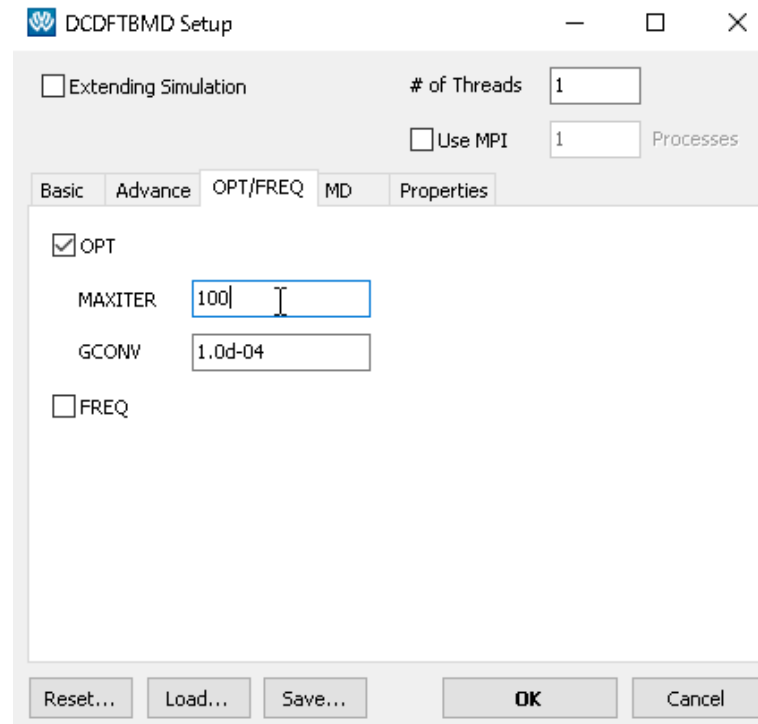
II. 計算条件の設定

1. **DCDFTBMD Setup**ウィンドウの**Basic**タブにて**Parameter Set**に**3ob-3-1**を選択する。
2. **Executable**には使用するバイナリの種類を選択する。2019年5月時点のシリアル実行バイナリである**dftb_serial.00.x**を指定する。




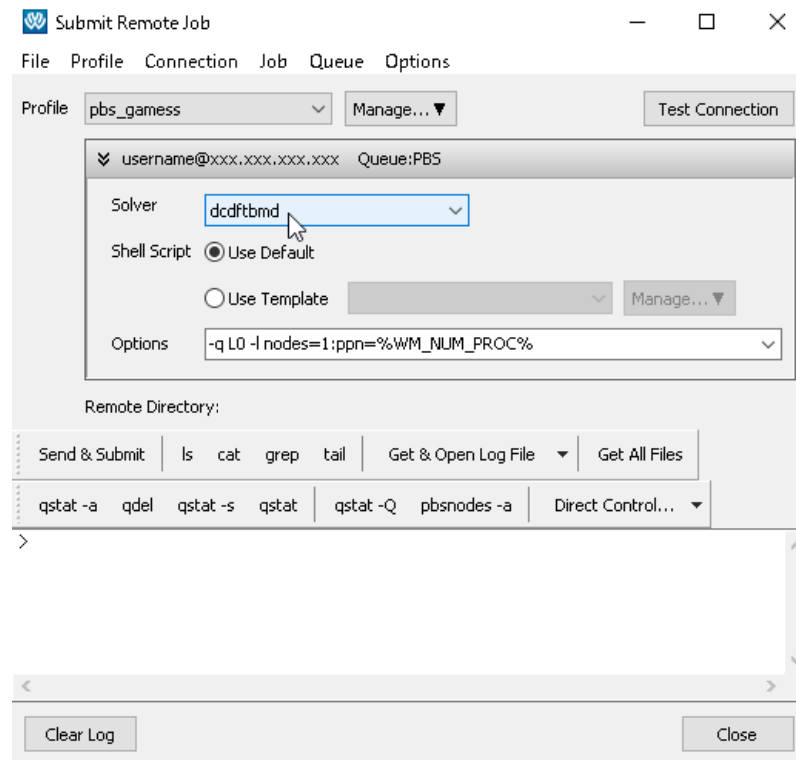
II. 計算条件の設定

1. 次に、**OPT/FREQ**タブにて**OPT**にチェックを入れ、**MAXITER**の**100**に変更する。
2. **OK**ボタンを押す。



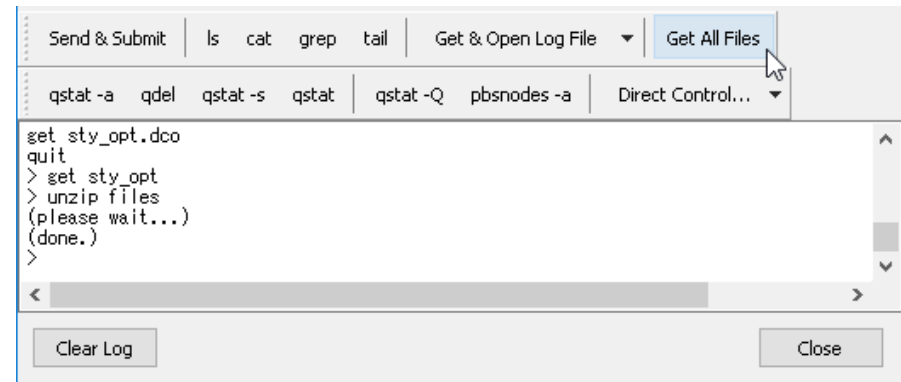
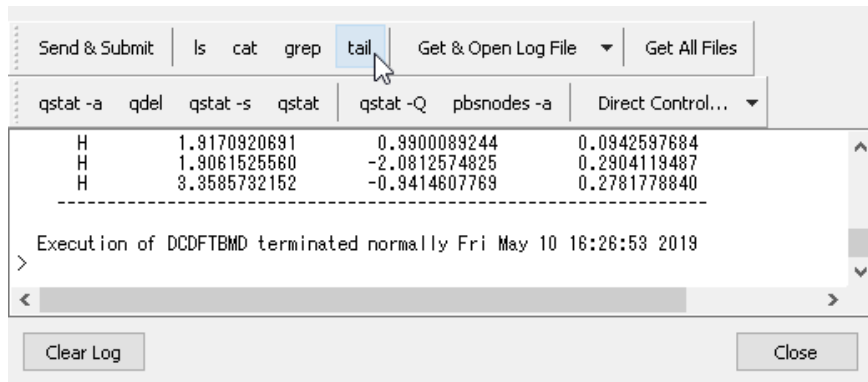
III. 計算の開始

1. ツールボタンの  またはツール | リモートジョブ投入をクリックする。
2. [ユーザガイド](#)の内容に従いプロファイルの設定を行い、**Solver**には**dcdfbmd**を選択する。
3. **Send & Submit**ボタンを押してジョブを開始する。ファイル名は**sty_opt.dci**とする。





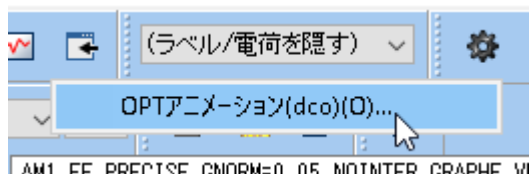
III. 計算の開始

1. **tail**ボタンを押すとリモートサーバ上の実行中のログファイルの末尾が表示される。
「Execution of DCDFTBMD terminated normally ...」と表示されていたら、DCDFTBMDが正常に終了したと判断できる。
2. その後、**qstat -a**ボタン等で、キューも終了したことを確認したら、**Get All Files**ボタンを押す。



IV. 構造最適化のアニメーション表示

1.  (結果解析)ツールボタン | OPTアニメーション(dco)を選択し、デフォルトで選ばれるファイルを選択する。(ツールボタンの  (アニメーション)ボタンはMD計算用のためここでは使わない)
2. Animationウィンドウが開き、構造最適化の様子を可視化することができる。



DCDFTBMD

WinMstar N= 16 C8H8 M= 104.15
Marked Order: 16 - 1 - 2 - 0
Marked Atom: X= 3.3284 Y= -1.0154 Z= 0.3624
Length= 3.4873 Angle= 17.882 Dihedral= " Lper= "

SCC(MAXITER=200 EDOMV=1.0d-09 DCONV=1.0d-06)
DC=FALSE
DC=FALSE
OPT(MAXITER=100 GDOMV=1.0d-04)

Animation

File Control Tools

...tar_develop@release\UserData\sty_opt.dco DCDFTBMD Animation

Search: 39 E= -16.6682602816 Grad(max)= 0.00407
Search: 40 E= -16.6682908277 Grad(max)= 0.00452
Search: 41 E= -16.6683128382 Grad(max)= 0.00385
Search: 42 E= -16.6683715471 Grad(max)= 0.00075
Search: 43 E= -16.6683730481 Grad(max)= 0.00073
Search: 44 E= -16.6683528177 Grad(max)= 0.00220
Search: 45 E= -16.6683734308 Grad(max)= 0.00159
Search: 46 E= -16.6683763250 Grad(max)= 0.00077
Search: 47 E= -16.6683805636 Grad(max)= 0.00167
Search: 48 E= -16.6683725736 Grad(max)= 0.00119
Search: 49 E= -16.6683454473 Grad(max)= 0.00404
Search: 50 E= -16.6683874341 Grad(max)= 0.00111
Search: 51 E= -16.6683913731 Grad(max)= 0.00108
Search: 52 E= -16.6683957206 Grad(max)= 0.00064
Search: 53 E= -16.6683930644 Grad(max)= 0.00288
Search: 54 E= -16.6683983879 Grad(max)= 0.00061
Search: 55 E= -16.6683837876 Grad(max)= 0.00159
Search: 56 E= -16.6684015666 Grad(max)= 0.00013
Search: 57 E= -16.6683891790 Grad(max)= 0.00142
Search: 58 E= -16.6684014422 Grad(max)= 0.00015
Search: 59 E= -16.6684017556 Grad(max)= 0.00014
Search: 60 E= -16.6684018345 Grad(max)= 0.00003

Result

Plot Column 4 Excel Custom Plot

-0.945941918

<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友

アカウント登録 ログイン

X-Ability
クロスアビリティ

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! 138件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ユーザー投稿

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...

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