

Winmostar™ チュートリアル

FDMNES

XAFSスペクトル

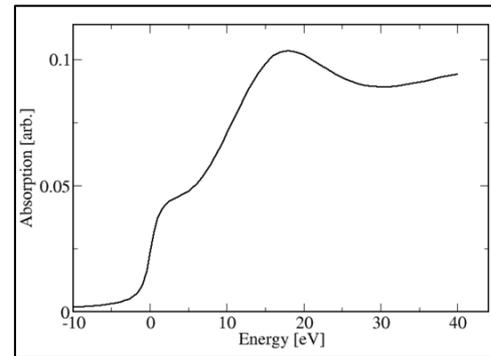
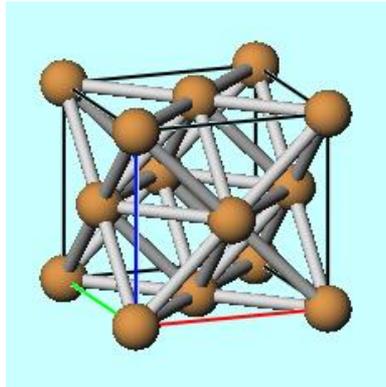
V9.0.0

株式会社クロスアビリティ

2019年1月15日

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。

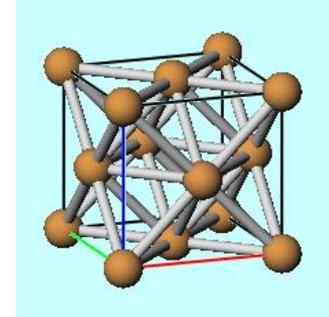
I. FDMNESの設定 & 実行

1. ファイル | 開くをクリックする。
2. サンプルフォルダ内の**cu.cif**を開く。(デフォルトではC:\winmos9\samples\cu.cif)

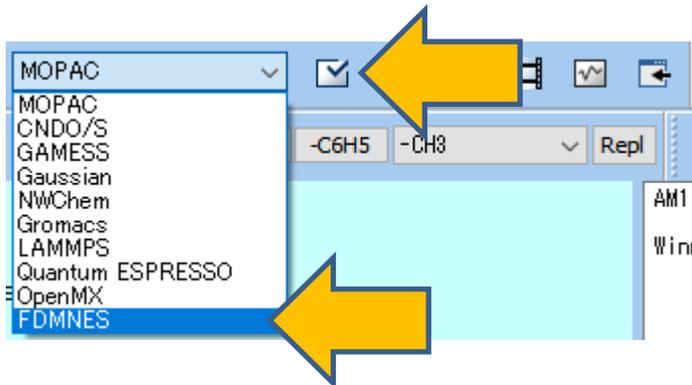
※ このCIFファイルは結晶ビルダを用いて作成することが可能である。
その際は結晶モデリングチュートリアル of 操作手順に従い、以下の情報を元に単位格子を作成する。

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)

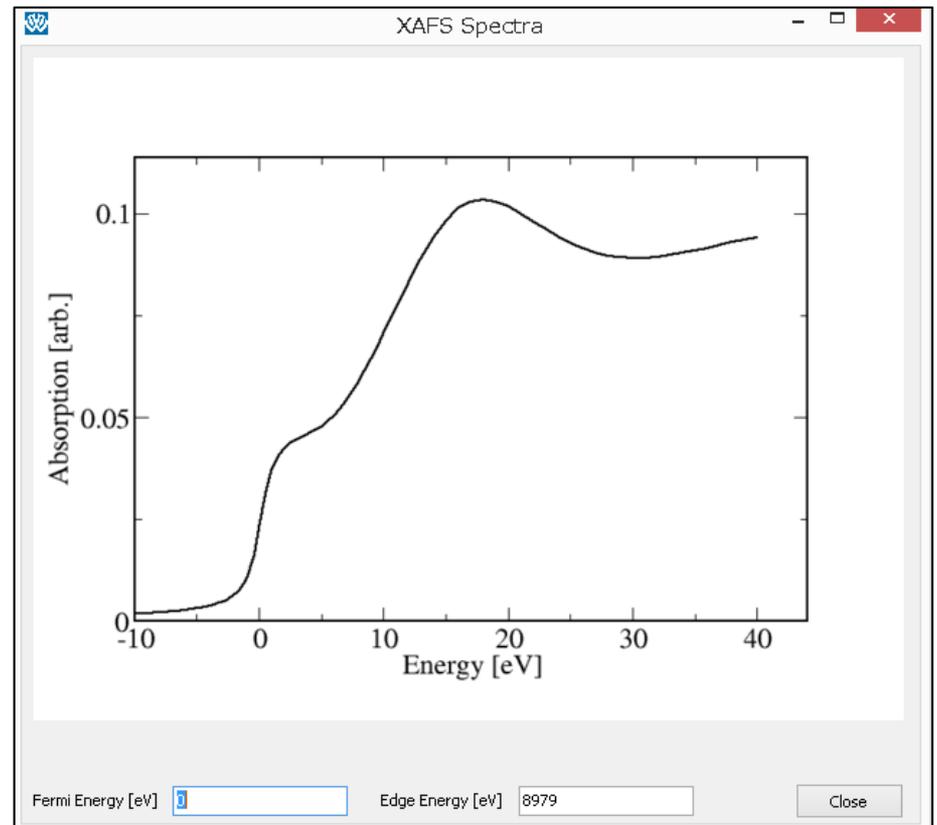
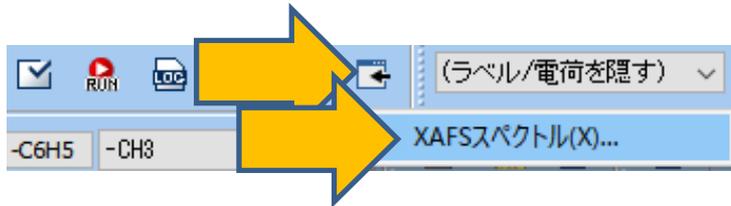


3. ツールバーのソルバー一覧から、**FDMNES**を選択する。
4. (キーワード設定)をクリックする。



II. XAFSスペクトルの表示

1. 計算終了後、 (結果解析) | XAFSスペクトルをクリックする。
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。



<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! 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...

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