

Winmostar™ チュートリアル

OpenMX

基礎編

V9.0.0

株式会社クロスアビリティ

2019年1月15日

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。

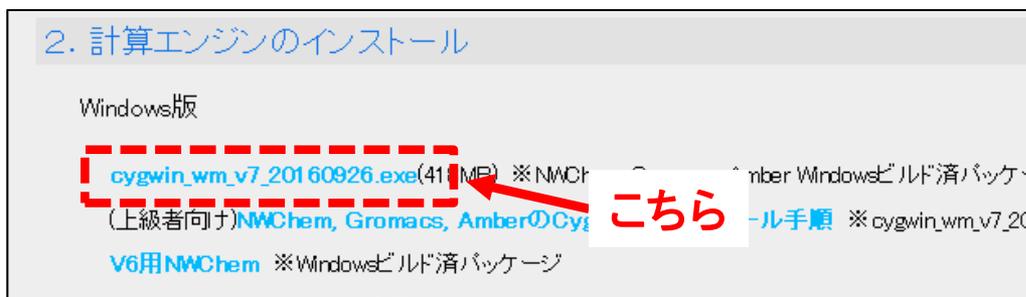
注意点:

- 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。

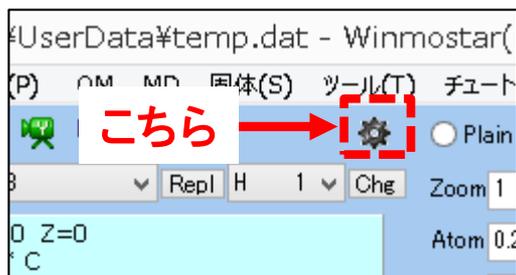
動作環境設定

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. ファイル | 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:\winmos9\samples\dia.mol2)

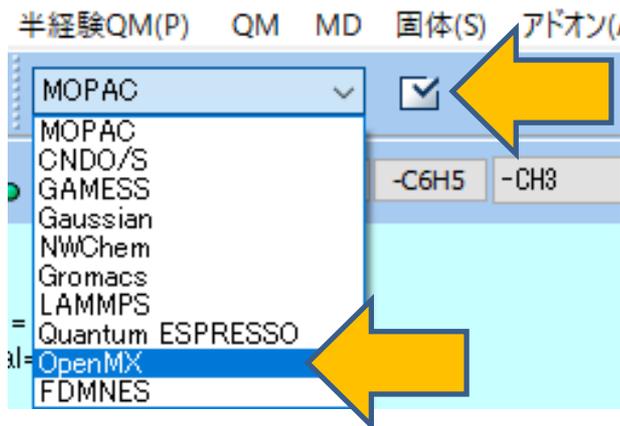
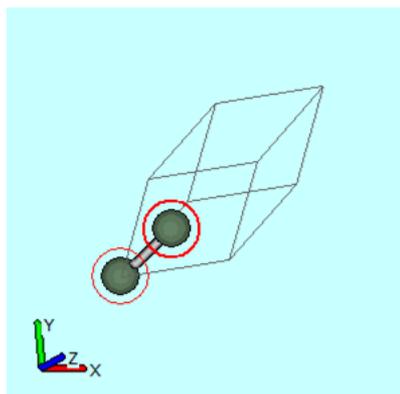
※このCIFファイルは結晶ビルダを用いて作成することが可能である。
その際は結晶モデリングチュートリアルの手順に従い、以下の情報を元に単位格子を作成する。

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)

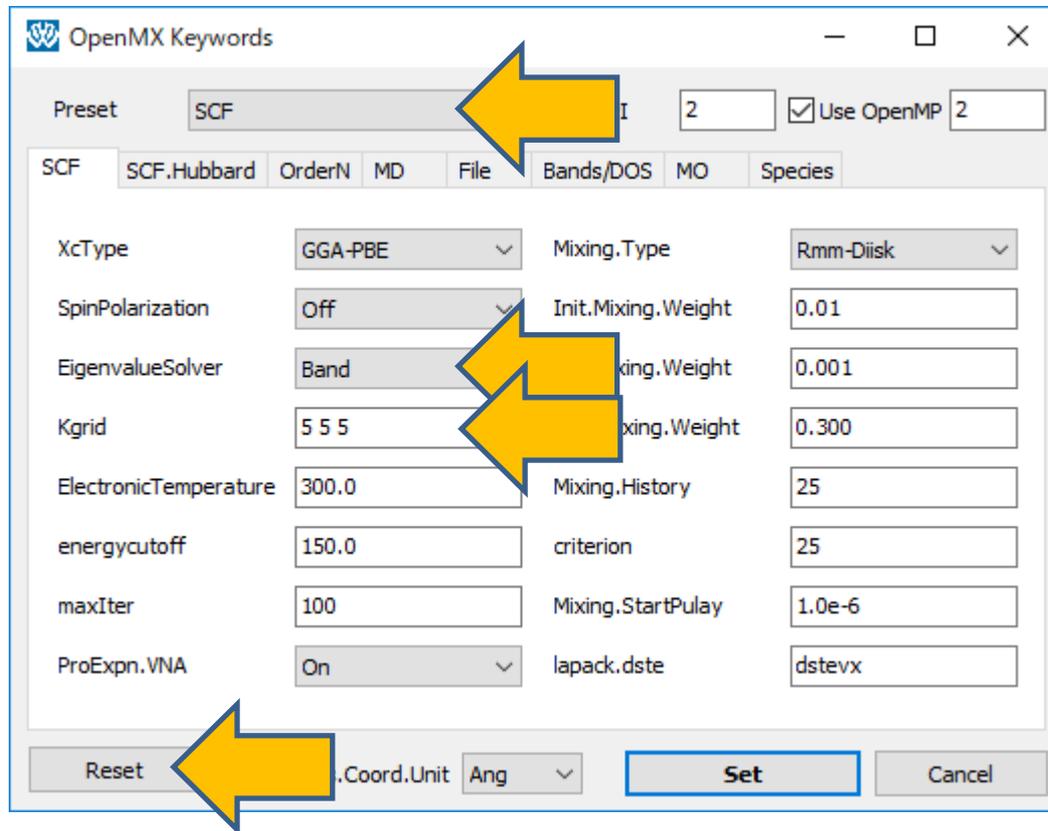
cifファイルをメイン画面にて読み込み後、[固体] > [格子]を変換をクリックするとプリミティブセルに変換可能である。

3. ソルバー一覧から**OpenMX**を選択し、 (キーワード設定) をクリックする。



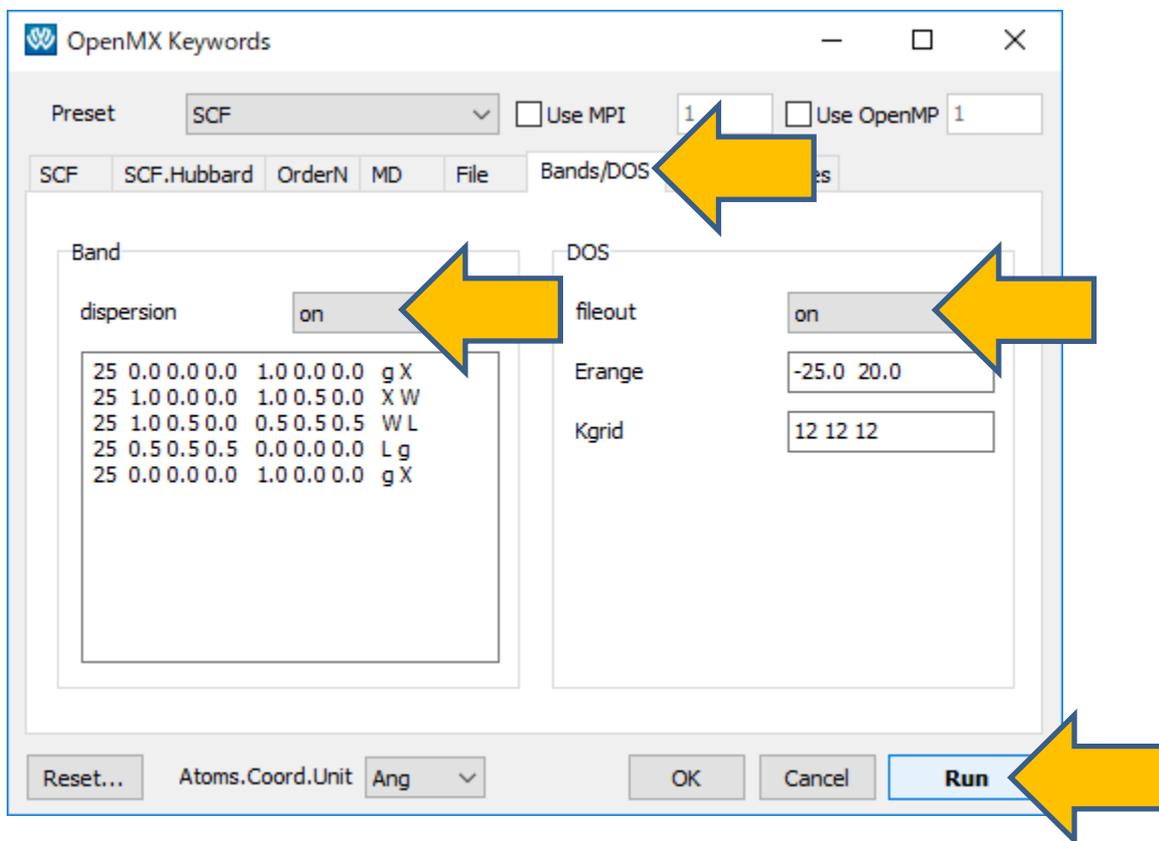
II. OpenMXによる計算

1. **Reset**をクリックし、**Preset**に**SCF**を指定する。
2. **EigenvalueSolver**から**Band**を選択し、**Kgrid**に**5 5 5**と入力する。



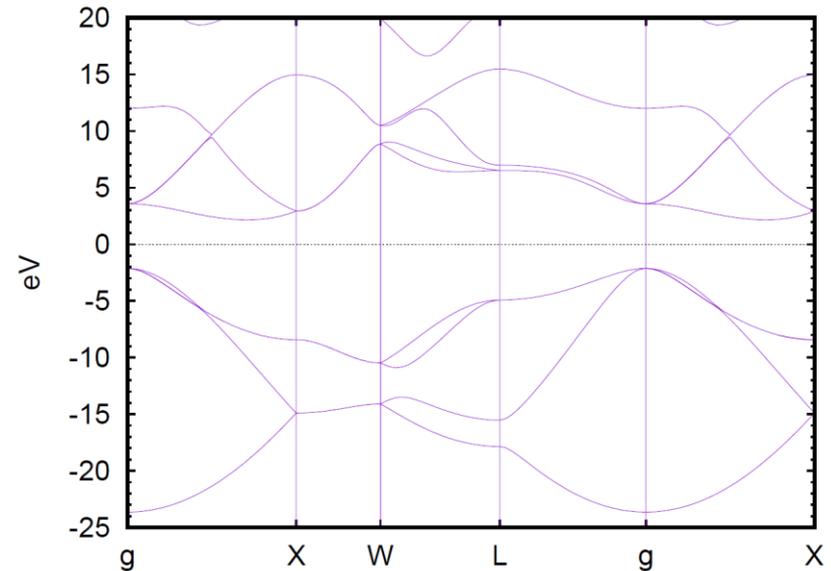
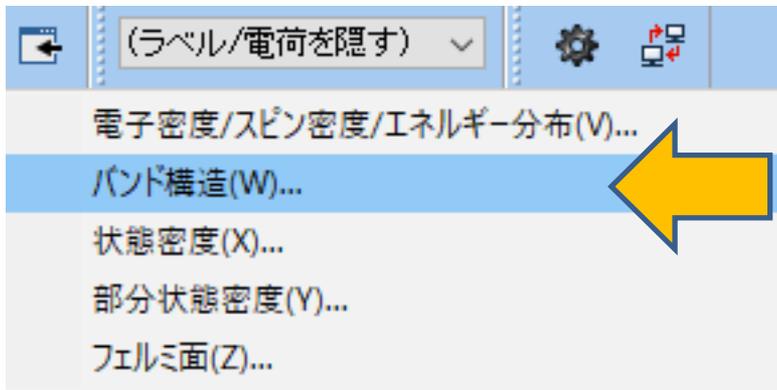
II. OpenMXによる計算

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. **Run**をクリックし、ファイル名に**dia_tutor.mxin**と入力し、保存する。



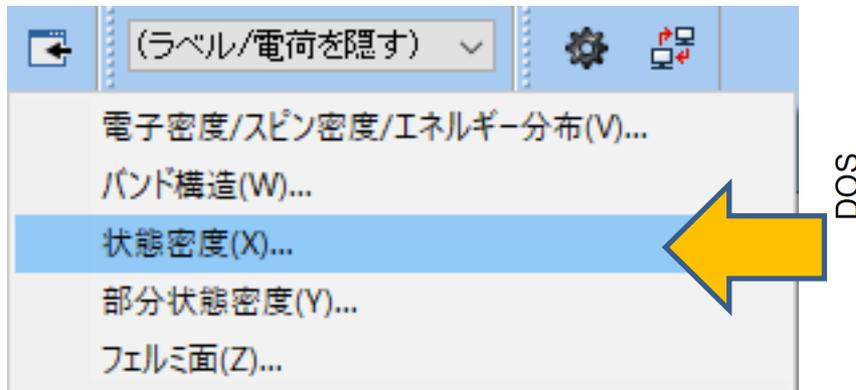
III. 結果解析

1. 計算終了後、 (結果解析) | 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。

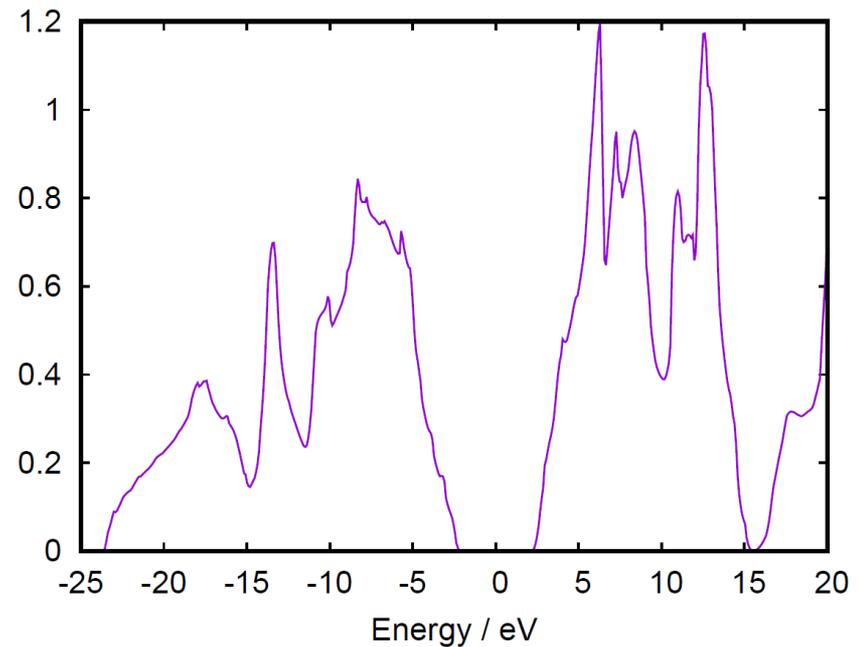


III. 結果解析

1.  (結果解析) | 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。

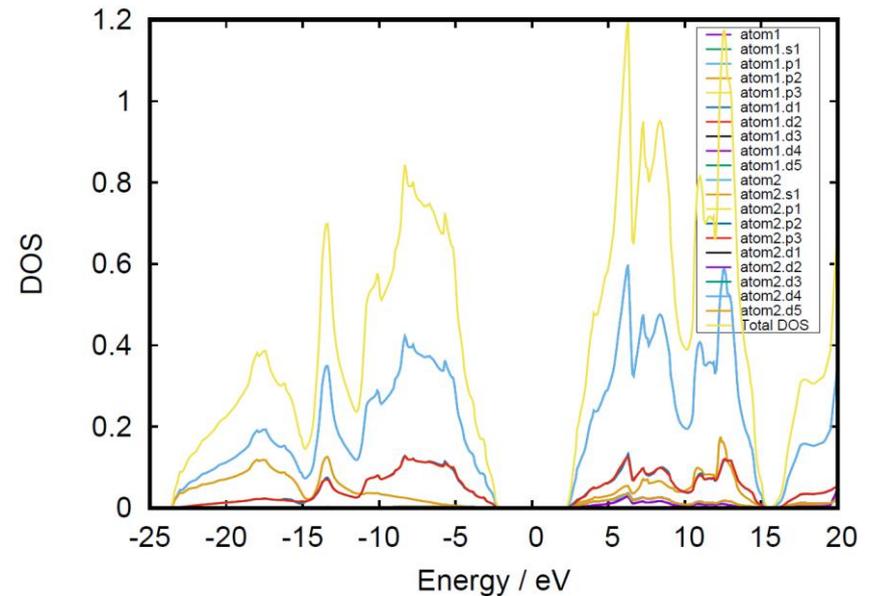
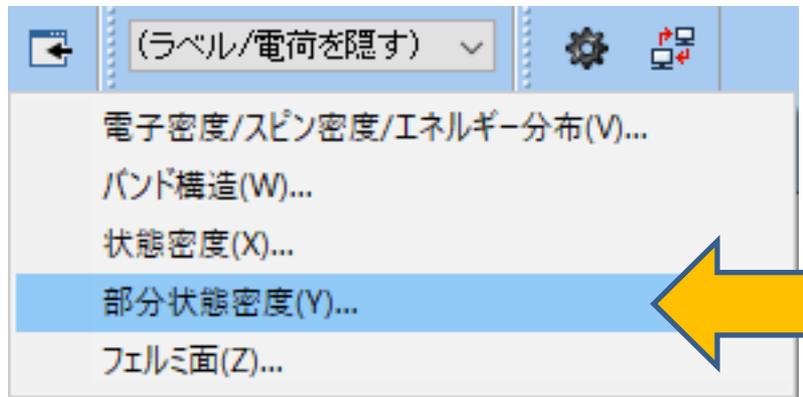


DOS



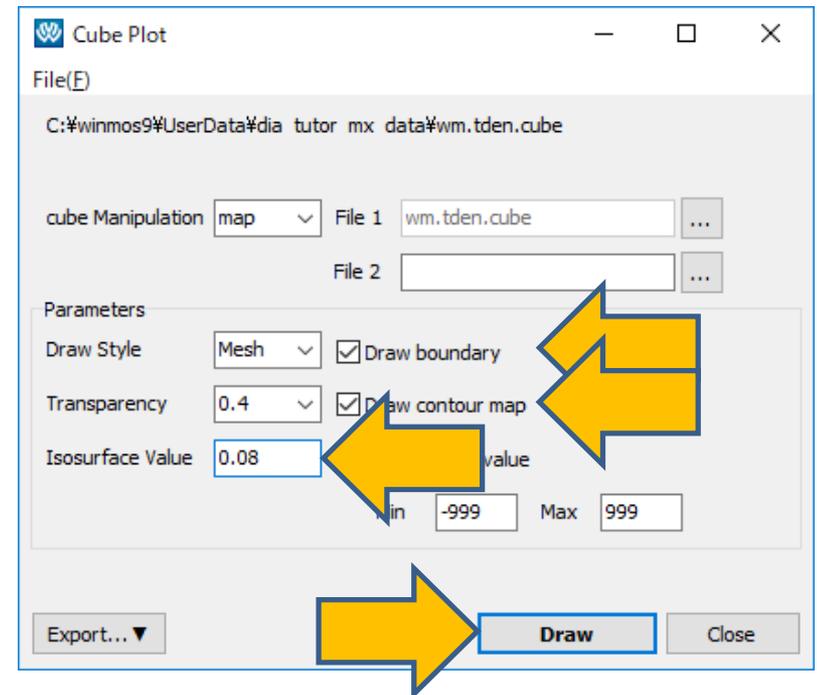
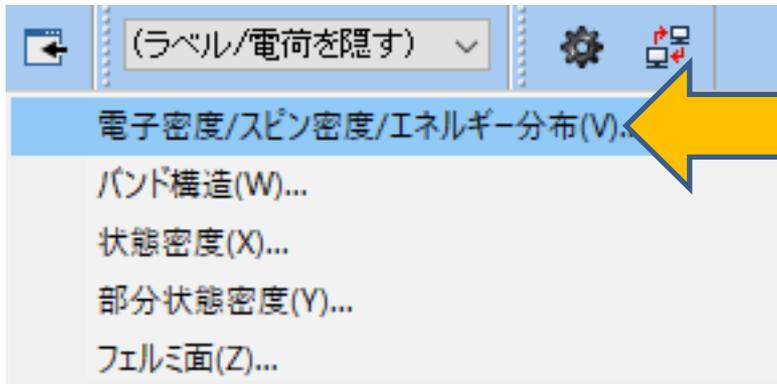
III. 結果解析

1.  (結果解析) | 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。



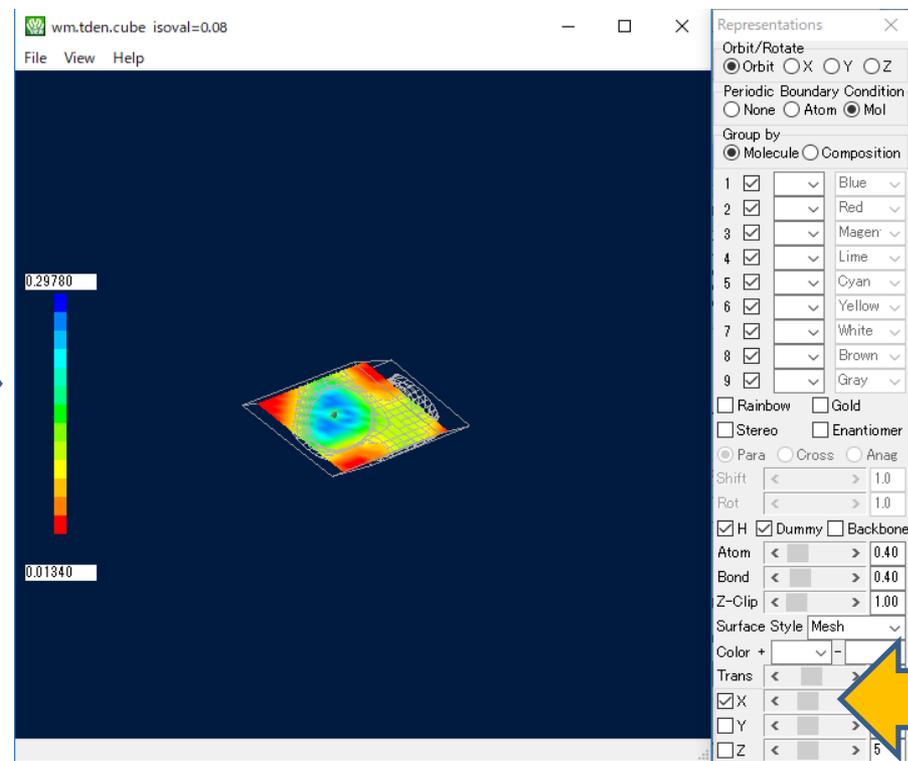
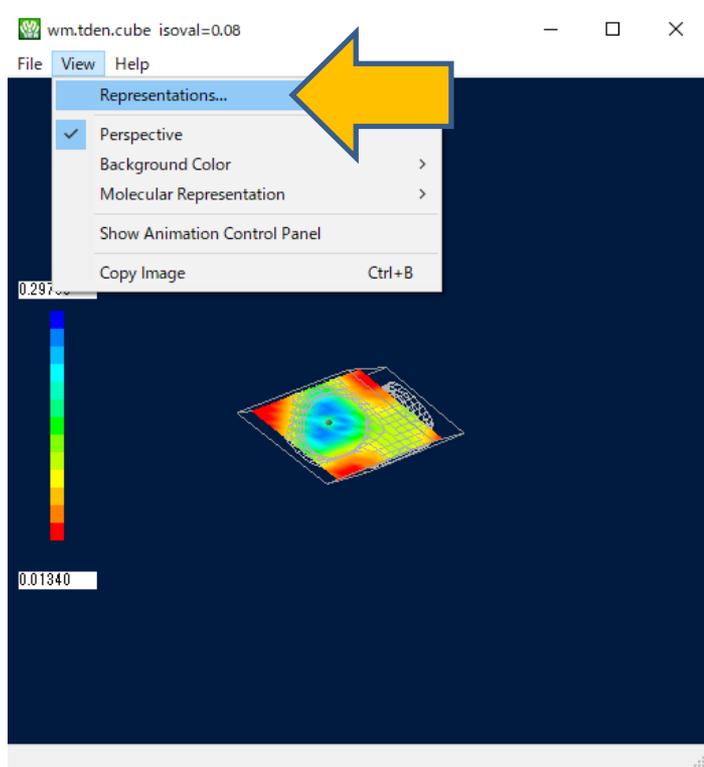
III. 結果解析

1.  (結果解析) | 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. **Draw contour map**と**Draw boundary**にチェックを入れる。
4. **Isosurface Value**を**0.08**に設定する。
5. **Draw**をクリックする。



III. 結果解析

1. 起動したWinmostar Viewerにて、**View | Representations...**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。



<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 · 🌐

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 · 🌐