Template タブ(スイープ機能)につきまして

Template タブを使うことで、ある特定の変数をスイープ(掃引)させ、その計算結果を比較することが可能です。

使い方は、下記の通りです。ここではサンプルフォルダにございます DoubleQuantumWell_6nm_nnp.in (チュートリアルは <u>https://www.nextnano.com/nextnano3/tutorial/1Dtutorial_DoubleQW.htm</u>)を例 にご説明します。

| Input | Template Template (Beta) | Simulation Output | | | |
|-------|---|--------------------|--------------------------|---|------------|
| | 1. Choose | input file | | | |
| Tem | nplate file: 📙 C:\Users\takuma.sat | o\Documents\nextna | no\My input files\Sam | ple files\nextnano++ sample files\DoubleQuantumWell_ | 6nm_nnp.in |
| Vari | iables: | | | | |
| | Variable | Value | Unit | Description | |
| | QW_WIDTH | 6.0 | nm | widths of both quantum wells | |
| ► | QW_SEPARATION | 4.0 | nm | separation of the QWs | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| S | weep 2. Select sweep | variable | | 2. Charlet values | |
| (| Single simulation filename suffix | : _modified | | 5. Specify values | |
| (| Range of values variable: | | ~ | from: to: step: | |
| (| List of values variable: QV | SEPARATION | ~ | values: 1.0,2.0,3.0,4.0,5.0,6.0,7.0,8.0,9.0,10,15,20,30 |) |
| | | | | | |
| 0 | o o o cui 🕞 louis vi | | | | |
| (| Save to folder: C:\Users\ta | kuma.sato\Document | ts \nextnano \My input f | iles \Sample files \nextnano++ sample files | |
| (| Save to temporary folder and add to | batch list | | | |
| [| Include all modified variables in filen | ame | | | |
| | reate input files / Proce " | Create input | filos" 5 | Go to Pup tab and rup batch l | ict |
| P | estomosesing | create input | i nies – 5 | . Go to Run tab and full batch i | 151 |
| | A Number of selevant of | 2 | Maximum another of the | lus lines 2 6 Create file with combined | data |
| - | Select output data fil | ounn: 2 | Maximum number of va | and lines. 0 Proces this but | |
| 1. | Select output data fil | e 8. spec | city column a | ind lines 9. Press this but | ton |
| 1. | Template タブを選択し | 、スイープ機 | 能を適用したい | ハインプットファイルを、Template f | ile:隣の |
| | アイコンから選択します | Variables: 16 | 「選択可能た変 | 数一覧が表示されます 数 | |
| n | | | | フィープキルない本教を望がナナ | アアッル |
| ۷. | Sweep IL, LIST OF VALUES & | 医扒しより。 | variable · »6 | ヘィーノさせにい変数を迭ひます。 | ししでね |
| | 例として QW_SEPARATION | ーをスイープし | <i>、</i> ます。 | | |
| z | values: K スイープされ | トろ値 (複数) | を入力します | インプットファイルですでにスイ | ープ値を |

- 3. values: に、スイープさせる値(複数)を入力します。インプットファイルですでにスイープ値を 指定している場合には、自動的に値が表示されます。
- 4. **Create input files** ボタンを押すと、values:の各入力値に対するインプットファイルが自動的に生成されます。

5. Run タブに切り替えて、3 で生成したインプットファイルのリストを Run させます。計算が終わるまで待ちます。values:の各入力値に対する計算結果が、アウトプットフォルダ内に作られます。

Postprocessing を使ったスイープ計算結果の比較

アウトプットフォルダ内の*.dat ファイル内から、ある変数(計算結果)を選び、それを縦軸、各入力 値(スイープさせた値)を横軸にしたグラフを、プロットすることが可能です。

6. Output タブで、データの形状を確認します。左から2番目のボタンを押すと、gnuplot プロットで はなくデータ形式で表示させることができます(下図)。

| FILE | Edit Run | View lools | Help | |
|-------------|----------------|----------------------------|--------------|---------------------------|
| Input | Template | Template (Beta) | Simulation | Output |
| wf_en | ergy_spectrum_ | quantum_region_G | amma_0000.d | at 3- DoubleQuantum |
| 20.100 | Fnergyle | V1 | ane teaper a | |
| 110. | Duct dy [c | | | |
| 1 | 0.046556 | 343972 | | |
| 1 2 | 0.046556 | 343972 075000 | | |
| 1 2 3 | 0.046556 | 343972 075000 659258 | | |

ここでは例として、Quantum > wf_energy_spectrum_*dat の最初の2行のデータを考えます。これは二 重量子井戸中の固有状態のうち、結合性軌道の固有エネルギーに該当します。2つの量子井戸が離れ れば離れるほど、波動関数の空間的重なりは小さくなり、エネルギー差は小さくなります。

7. フォルダのアイコンを押して、比較したい変数を含む*.dat ファイルを選択します。

 Number of relevant column: で比較したい変数の列を選択します。 Maximum number of value lines:
で、比較したい行数を選択します。例えば、 Maximum number of value lines: 2 を選択すると*.dat ファ イル内の最初の2行の値が取り出されます。

9. Create file with combined data ボタンを押すと、

(インプットファイル名)_(スイープした変数名)_postprocessing というフォルダが作成され、その中に *.dat ファイルが作成されます。Output タブ内でそのファイルを選択すると、以下のように、横軸を スイープ変数としたプロットが表示されます。



赤線が1行目、青線が2行目のデータです。2つの量子井戸間の距離を大きくするにつれ、固有エネ ルギーの差が小さくなることを視覚的に確認することができます。