

実習

フリーのX線吸収スペクトル計算ソフトFDMNESの紹介

中田謙吾
JASRI/SPRing-8



講習の流れ

- ▶ FDMNESの紹介
- ▶ FDMNESのインストール
- ▶ インストール後の設定
- ▶ PowerShellの起動方法
- ▶ PowerShellの使い方

インストールと操作

- ▶ Cu-foil の試し計算
- ▶ FDMNESの基本的な流れ
- ▶ 入力ファイルの解説 -基礎-
- ▶ 入力ファイルの解説 -構造情報の作成-
- ▶ 入力ファイルの解説 -クラスター半径-
- ▶ 出力ファイルの解説 -フェルミレベル-
- ▶ 出力ファイルの解説 -Convolution-
- ▶ Cu₂Oの計算(クラスター半径の違い等)
- ▶ Cu₂OのLDOS計算、出力ファイルの解説 -LDOS-
- ▶ BaTiO₃ の計算(Pm3-mとR3m)

基本的な計算と解説

- ▶ 時間があれば Appendix の解説

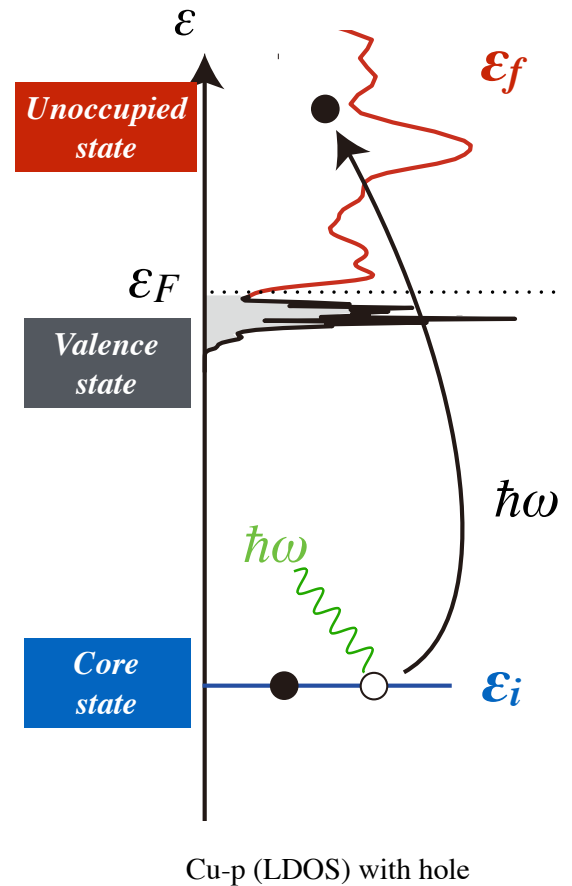
XANES スペクトル

遷移確率 フェルミの黄金律

$$W(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f \left| \langle f | \hat{F} | i \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_i + \hbar\omega - \varepsilon_f)$$

unoccupied state **core state**
終状態 始状態

電子状態の計算が出来れば
XANES スペクトルが求まる



XANES スペクトルのシミュレーションが出来るコード

第一原理計算

WIEN2k, CASTEP, Quantum ESPRESSO,,,

多重散乱理論

FEFF, GNXAS, MXAN,,,,

何が違うのか？

使い分けは？

今回紹介する**FDMNES** とは何者か？

固有値問題として Seq. をそのまま解く

第一原理計算

$$\sum_i^{occ.} \left[-\nabla^2 + v_{eff} \right] \psi_i^k = \sum_i^{occ.} \epsilon_i \psi_i^k$$

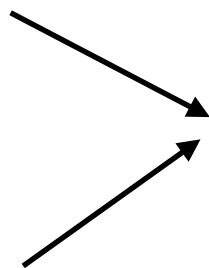
電子の散乱問題に置き換えて Seq. を解く

多重散乱理論 (KKR-Green関数法)

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H \right) G(r, r', t - t') = \delta(t - t') \delta(r - r')$$

$$n(r) = -\frac{1}{\pi} \int_C d\omega \operatorname{Im} G(r, r, \omega)$$

第一原理計算



どちらも同じく **第一原理計算**
同じ問題(Seq.)を解いている
同じ結果が得られる

多重散乱理論

解き方の違い

一電子シュレディンガー方程式を解く

$$\sum_i^{occ.} \left[-\nabla^2 + v_{eff} \right] \psi_i^k = \sum_i^{occ.} \epsilon_i \psi_i^k$$

一電子シュレディンガー方程式

$$\sum_i^{occ.} \left[-\nabla^2 + v_{eff} \right] \psi_i^k = \sum_i^{occ.} \epsilon_i \psi_i^k$$

交換相関項

local density approximation : LDA
Generalized gradient approximation : GGA

相対論効果

full-relativistic
semi-relativistic
non relativistic

基底関数

平面波/局在軌道

PW : Plane waves

LAPW : Linearized Augmented Plane Wave

LMTO : Linear Muffin-Tin Orbital

LCAO (for instance: tight-binding)

AO : Slater (STO), Gaussians (GTO)

NAO: Numerical Atomic Orbital

ポテンシャルの形状

コアの取り扱い

all-electron : Full potential

all-electron : Muffin-tin

pseudopotential

スピン

Non collinear

Spin polarized

non spin polarized

固体の記述

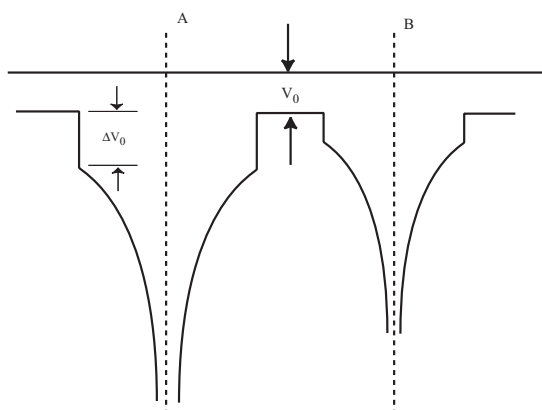
non-periodic

periodic

real-space

ポテンシャルの形状

Muffin-tin (MT) 近似



wikipedia



マフィンを焼くための容器(Muffin-Tin)

球対称ポテンシャル

$$v(|r - R|) = V_{00} Y_{00}$$

J.C. Slater, PR51(1937)846.

$$v(r) = \begin{cases} v(|r - R|) & |r - R| \in S \\ v_{MTZ} & |r - R| \ni S \end{cases}$$

ポテンシャルの形状

Full-potential

形状近似しない

$$v(|r - R|) = \sum_{lm}^G V_{MT}^{lm} Y_{lm}$$

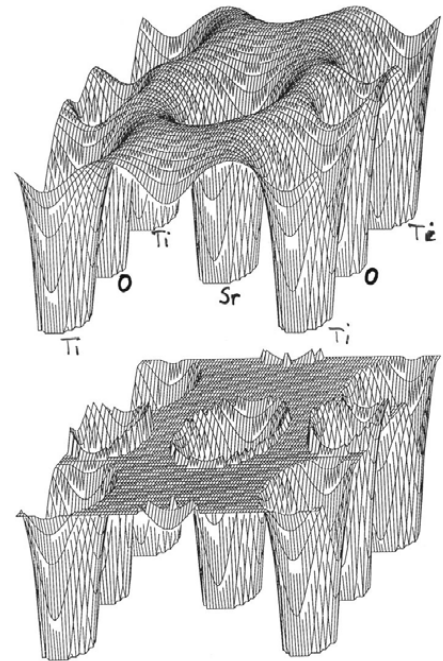
(inside MT)



Muffin-tin (MT) 近似

$$v(|r - R|) = V_{00} Y_{00}$$

球対称ポテンシャル



http://th.fhi-berlin.mpg.de/th/Meetings/FHlmd2003/Dtalks/FHI-WS2003-L11-Blaha-The_FP-LAPW_And_APW_Methods.pdf

一電子シュレディンガー方程式

$$\sum_i^{occ.} \left[-\nabla^2 + v_{eff} \right] \psi_i^k = \sum_i^{occ.} \epsilon_i \psi_i^k$$

交換相関項

local density approximation : LDA
Generalized gradient approximation : GGA

相対論効果

full-relativistic
semi-relativistic
non relativistic

一電子波動関数

平面波/局在軌道

PW : Plane waves

LAPW : Linearized Augmented Plane Wave

LMTO : Linear Muffin-Tin Orbital

LCAO (for instance: tight-binding)

AO : Slater (STO), Gaussians (GTO)

NAO: Numerical Atomic Orbital

ポテンシャルの形状 コアの取り扱い

all-electron : Full potential
all-electron : Muffin-tin
pseudopotential

スピン

Non collinear
Spin polarized
non spin polarized

固体の記述

non-periodic
periodic
real-space

シュレディンガー方程式を解く

$$\sum_i^{occ.} \left[-\nabla^2 + v_{eff} \right] \psi_i^k = \sum_i^{occ.} \varepsilon_i \psi_i^k$$

一電子波動関数

1) 解析的な基底関数の線形結合

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$$

基底関数展開

2) 数値的な軌道関数

微分方程式(シュレディンガー方程式)の微分を差分
に置き換える近似(実空間Mesh 上で差分)で解く

数値的な軌道関数

1) 解析的な基底関数の線形結合

第一原理計算手法(汎用), Seq.直接解法
WIEN2K, CASTEP,,

第一原理計算手法(汎用), Seq.散乱問題
SPR-KKR, AKAI-KKR

第一原理的計算手法(XAFS特化), Seq.散乱問題
FEFF, FDMNES,,

2) 数値的な軌道関数 (FDM による Seq. の解法)

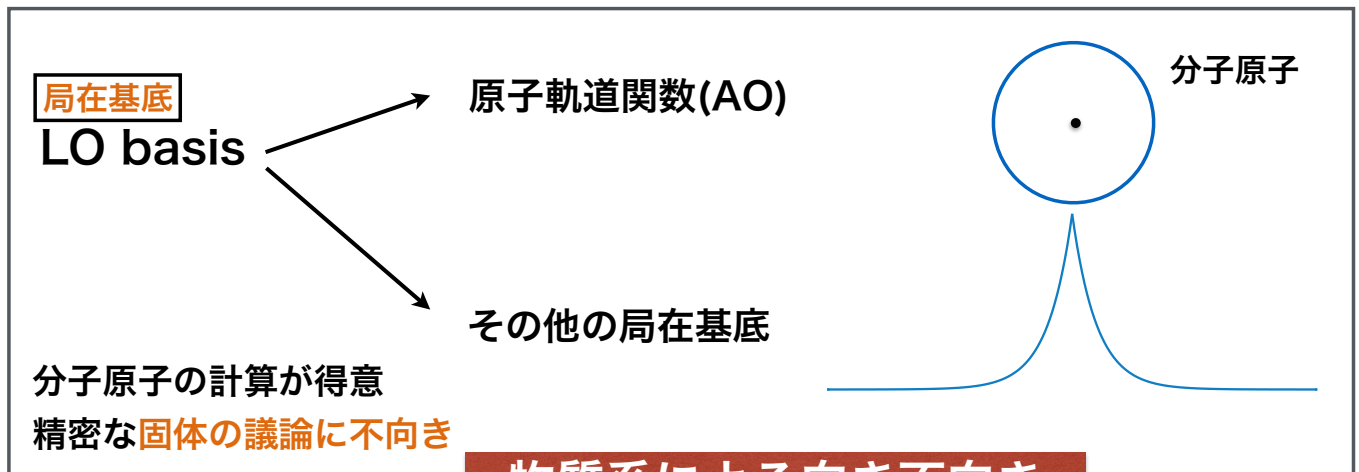
FDM Finite Difference Method (有限差分法)

微分方法定式を差分方程式に置き換える

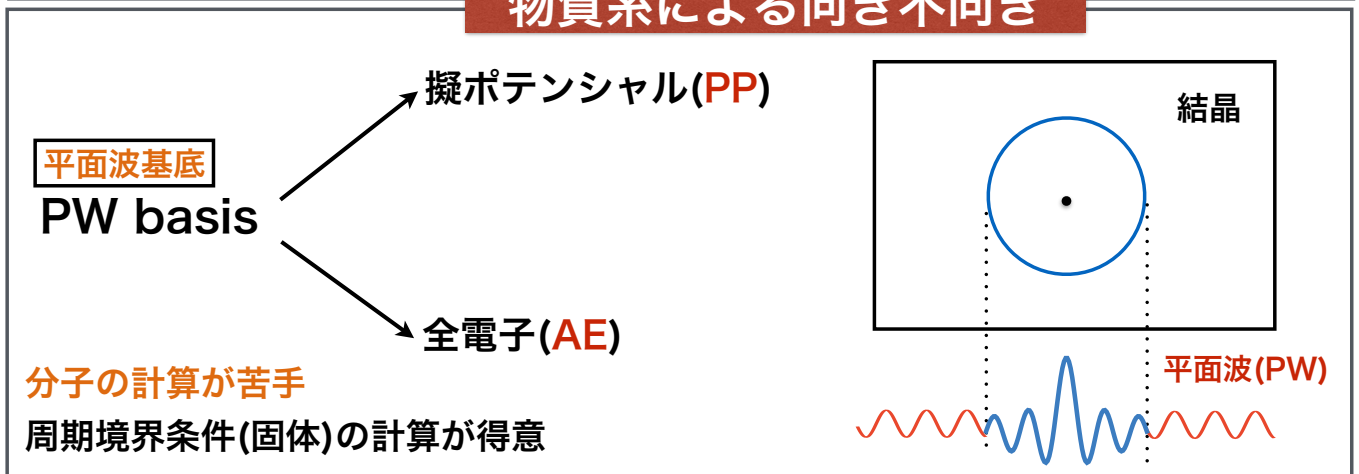
有限差分法を用いた第一原理計算

FDMNES (XAFS特化)

1) 解析的な基底関数の線形結合

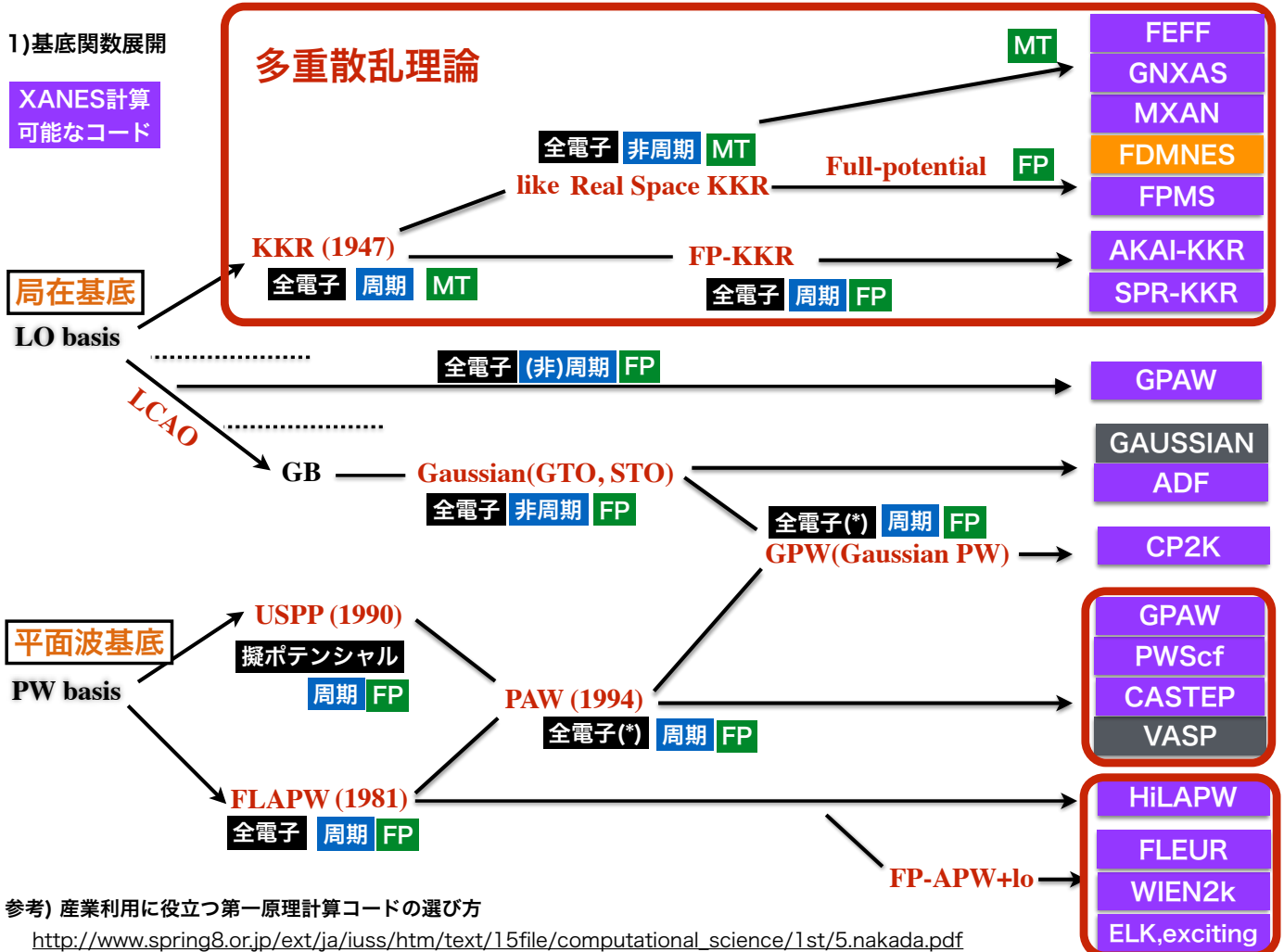


物質系による向き不向き



1) 基底関数展開

XANES計算
可能なコード



1)基底関数展開

局在基底
LO basis

平面波基底
PW basis

多重散乱	非周期	MT	Real Space KKR	FEFF GNXAS MXAN
	周期	FP	FP- Real Space KKR	FPMS
			KKR, FP-KKR	AKAI-KKR SPR-KKR
	非周期	FP	LCAO	GPAW
			Gaussian(GTO, STO)	ADF
	周期	FP	GPW(Gaussian PW)	CP2K GPAW PWScf CASTEP
			PAW	
			FLAPW	HiLAPW FLEUR WIEN2k ELK,exciting

MD,構造最適化

○固体
△,○表面
△,○分子

×

◎固体
x,△表面
x,△分子

×

x固体
x表面
◎分子

×

◎固体
○表面
○分子

◎

◎固体
x表面
x分子

×

2)有限差分

FDM

非周期	FP	FDM	FDMNES GPAW
-----	----	-----	----------------

○固体
○表面
○分子

×

Full-potential

(*)公開版の話

多重散乱	非周期			
	周期	FP	FP- Real Space KKR	FPMS
	非周期	FP	LCAO	GPAW
			Gaussian(GTO, STO)	ADF
	周期	FP	GPW(Gaussian PW)	CP2K GPAW PWScf CASTEP
			PAW	
			FLAPW	HiLAPW FLEUR WIEN2k ELK,exciting
	非周期	FP	FDM	FDMNES GPAW

MD,構造最適化

○固体
○表面
○分子

×

x固体
x表面
◎分子

×

◎固体
○表面
○分子

◎

◎固体
x表面
x分子

×

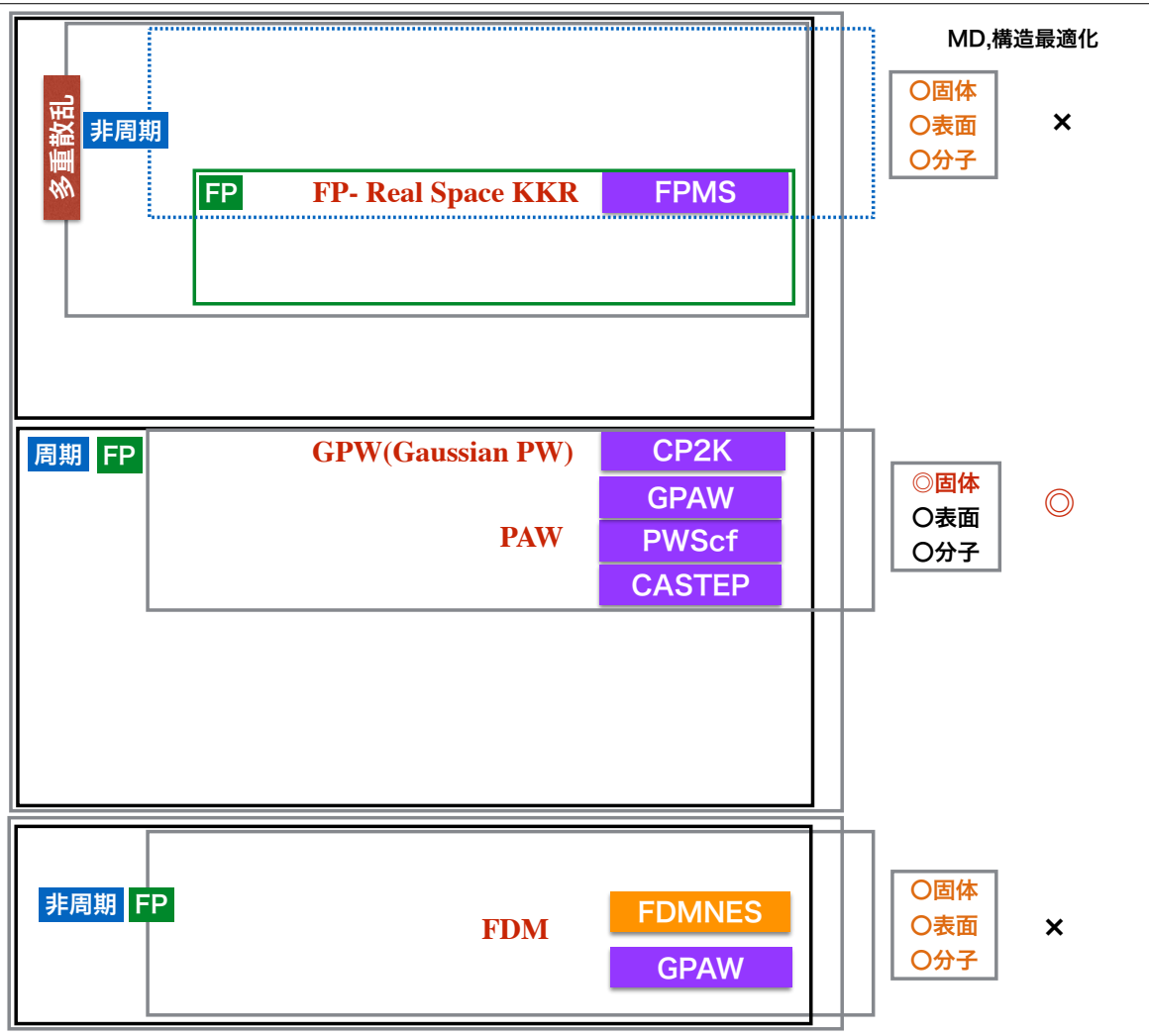
○固体
○表面
○分子

×

Full-potential

(*)公開版の話

分子/表面/固体



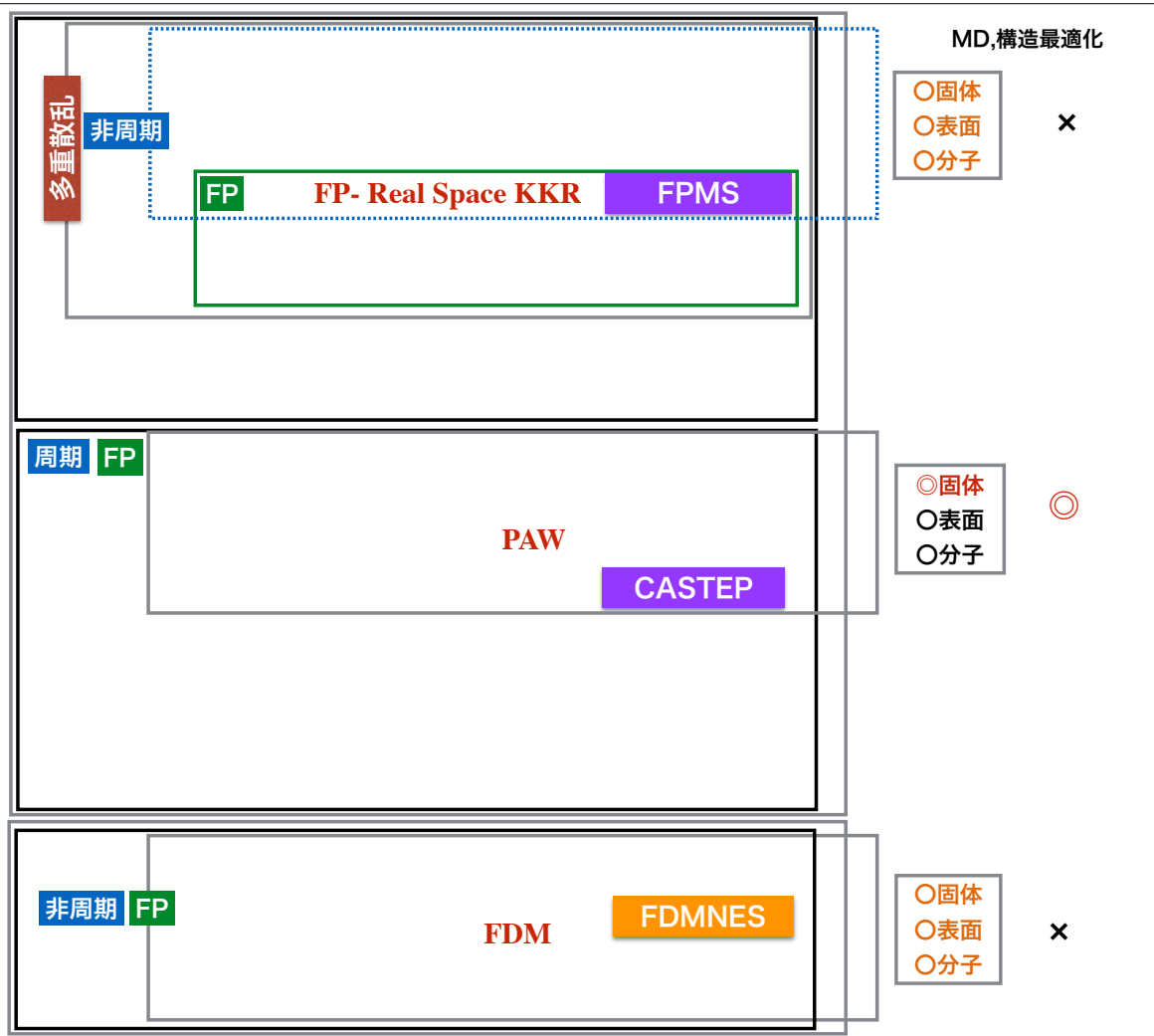
Full-potential

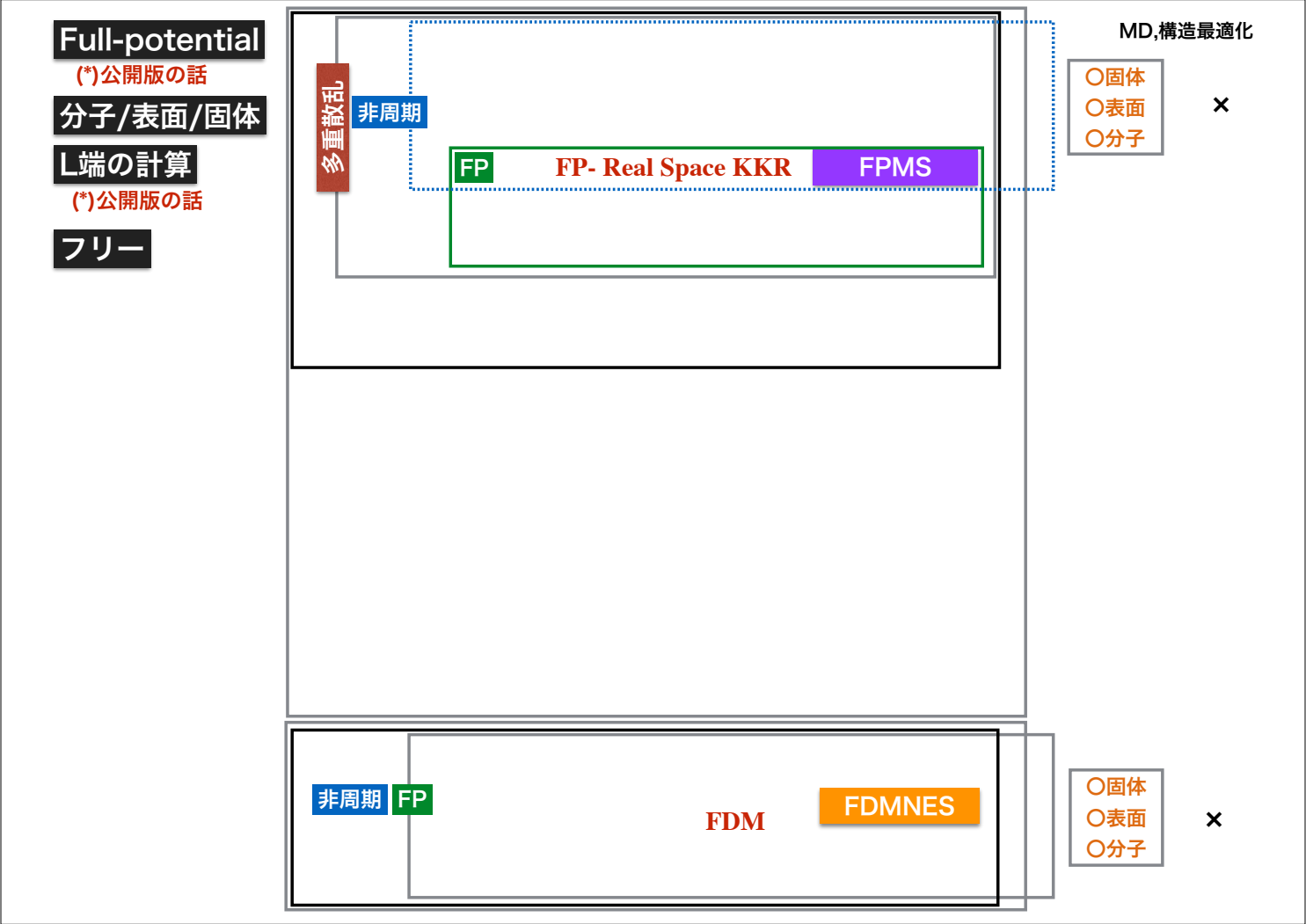
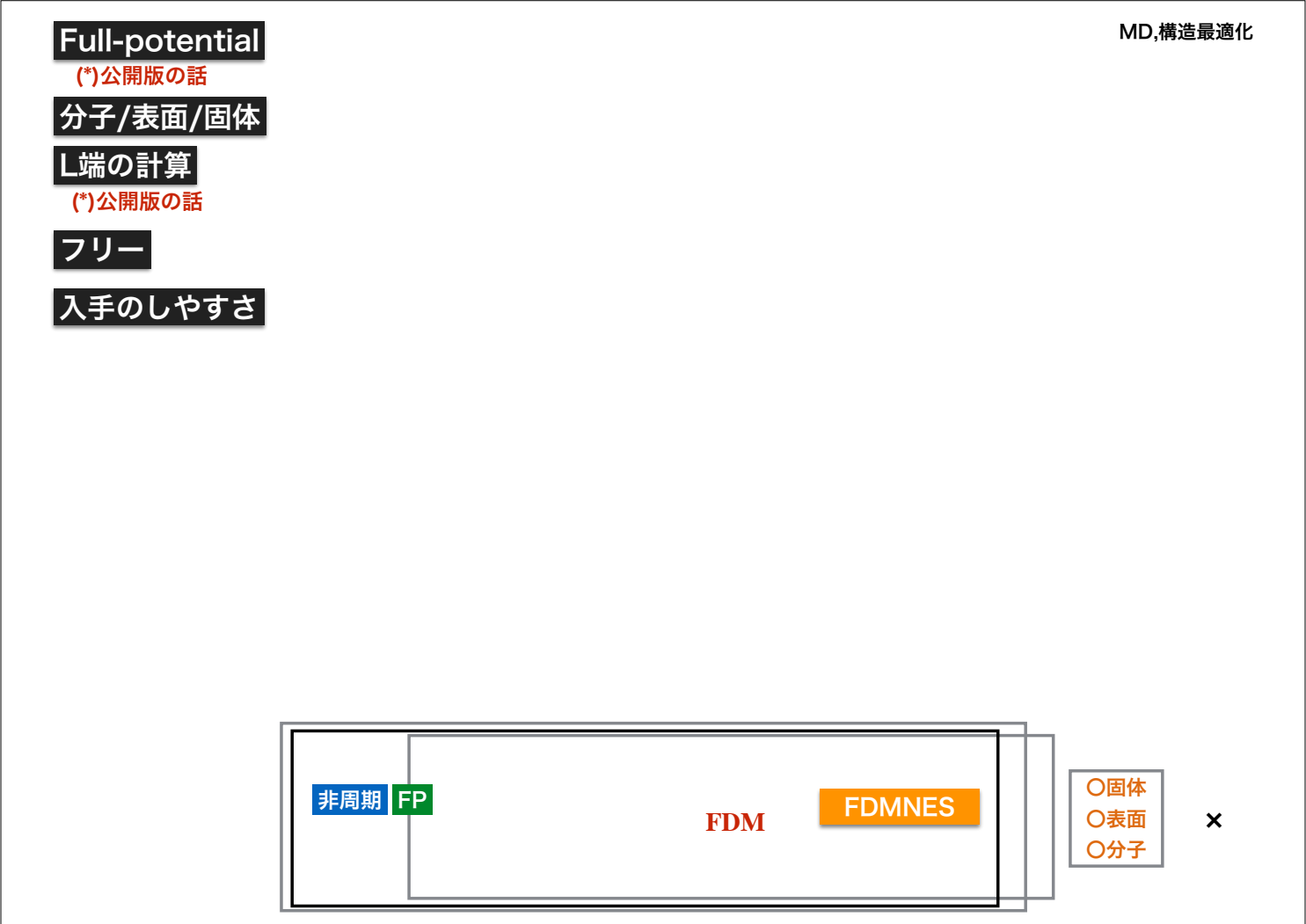
(*)公開版の話

分子/表面/固体

L端の計算

(*)公開版の話





基底関数の大ざっぱな特徴

	(FDM) 有限差分	(LO basis) 局在基底	(PW basis) 平面波基底
メモリ消費	large	small	medium
計算速度(小規模系)	slow	fast	fast
計算速度(大規模系)	fast	very fast	slow
収束性	easy	complicated	very easy

*) メモリは今回の実習では1Gも使いません

参考) 産業利用に役立つ第一原理計算コードの選び方

http://www.spring8.or.jp/ext/ja/iuss/htm/text/15file/computational_science/1st/5.nakada.pdf

FDMNES

Y.Joly, PRB 63,125120(2001)

Finite Difference Method for Near-Edge Structure

<http://neel.cnrs.fr/spip.php?rubrique1007&lang=en>



Prof. Y.Joly
1959年4月24日生まれ



The FDMNES project

Permanent staff : Yves Joly
Former PhD student: Oana Bunau

The last generation of synchrotron and the free electron lasers make possible the recording of data up to now unattainable. The interpretation of these data is of fundamental interest for the understanding of the phenomena in play. It is also of high importance for the description of the characteristics of the analyzed materials.

The aim of the FDMNES project is to supply to the community a user friendly code to simulate x-ray spectroscopies, linked to the real absorption (XANES, XMCD) or resonant scattering (RXD) of the synchrotron radiation. This *ab initio* approach, wants to eliminate all the methodological parameters. First mainly mono-electronic, using the functional density theory (DFT), it includes now multi-electronics advances with the use of the time dependant DFT (TD-DFT) for a better taking into account of the excited states linked to the photon-matter interaction. It includes also the Hubbard correction (LDA+U) for a better description of the so called correlated materials.

吸収微細構造

XANES, MCD

異常散乱微細構造

DAFS, DANES,
(RXS, RXD)

基本的な電子状態計算

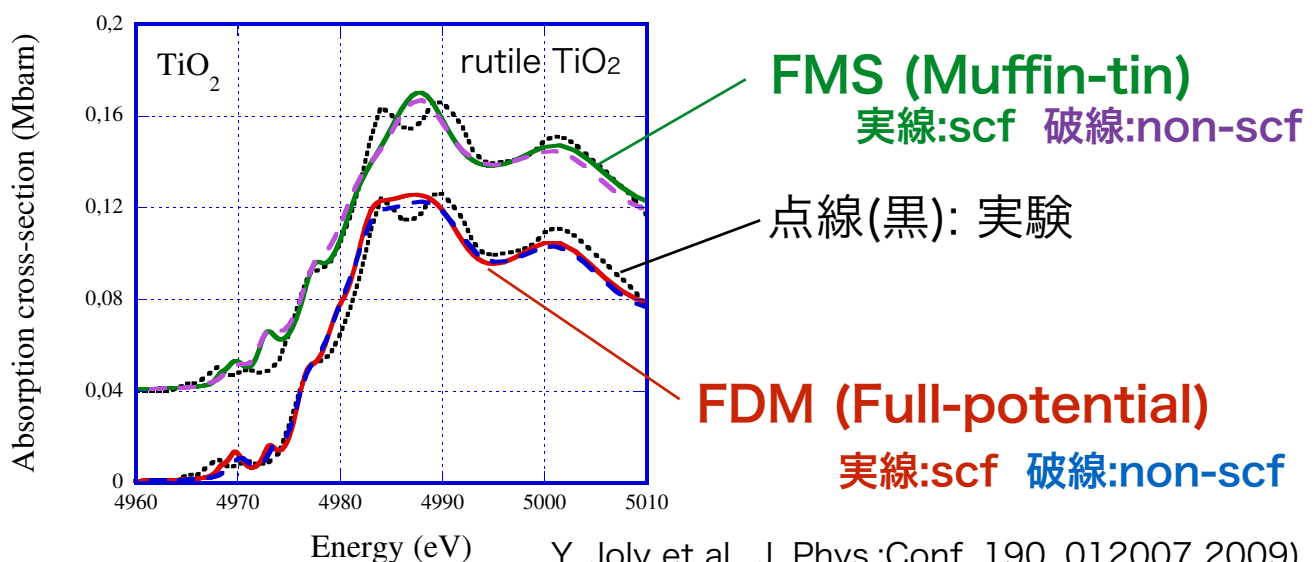
- ☐ DFT-LDA
- ☐ magnetism (LSDA)
- ☐ LDA+U (Hubbard collection)
- ☐ TDDFT (3d-metal)
- ☐ with spin-orbit
- ☐ Self-consistent
- ☐ FDM および FMS(Full-Multi-Scattering)

- ☐ 双極子転移(E1)
- ☐ 四極子転移(E2)
- ☐ 八極子転移(E3)
- ☐ 磁気双極子(M1)
- ☐ 様々な交差 (E1E1, E1E2, E2E2, E1E3, M1M1,...)

DipoleQuadrupole

☐ FDM および FMS(Full-Multi-Scattering)

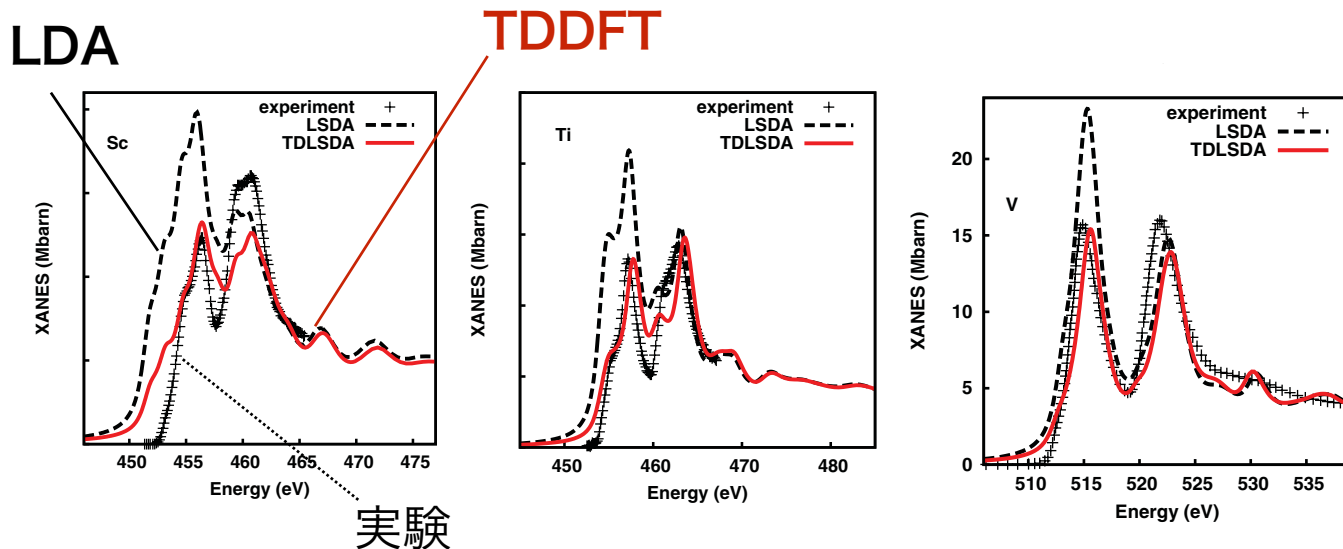
- ▶ **FDM (full-potential)** → 低対称性の計算に力を発揮
- ▶ FDM (Muffin-tin)
- ▶ **FMS (Muffin-tin)** → FEFF 相当の手法
非常に高速な計算



▶ L端の計算も出来るフリーのスペクトル計算ソフト

▶ L端の計算には**多体効果**は必須

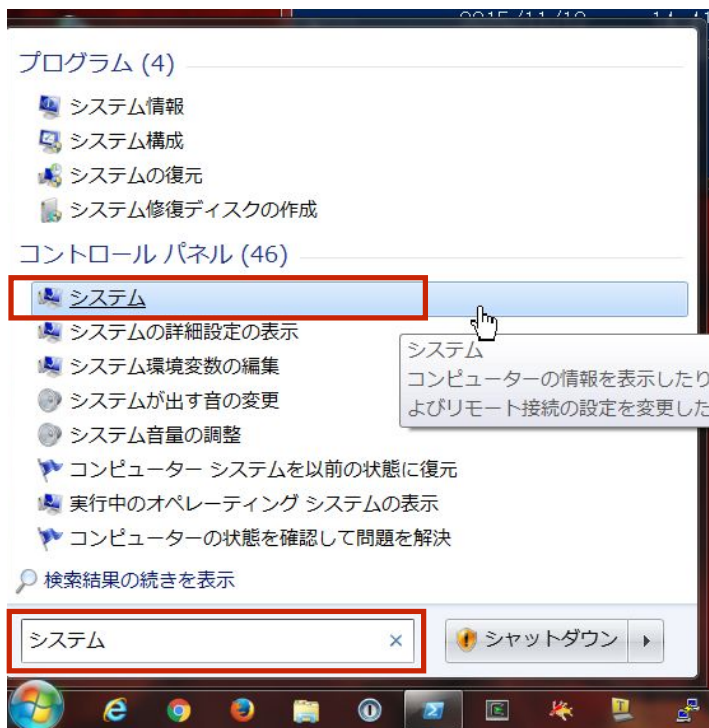
TDDFTで多体効果を取り込む



O.Baunau and Y.Joly, PRB 85, 155121 (2012)

FDMNES インストール

実習の前に確認すること
自分の windows が**64bit 版**なのか？ **32bit版**なのか？



windows7

- 1) スタートメニューから検索
- 2) **システム**と入力
- 3) **システム**をクリック

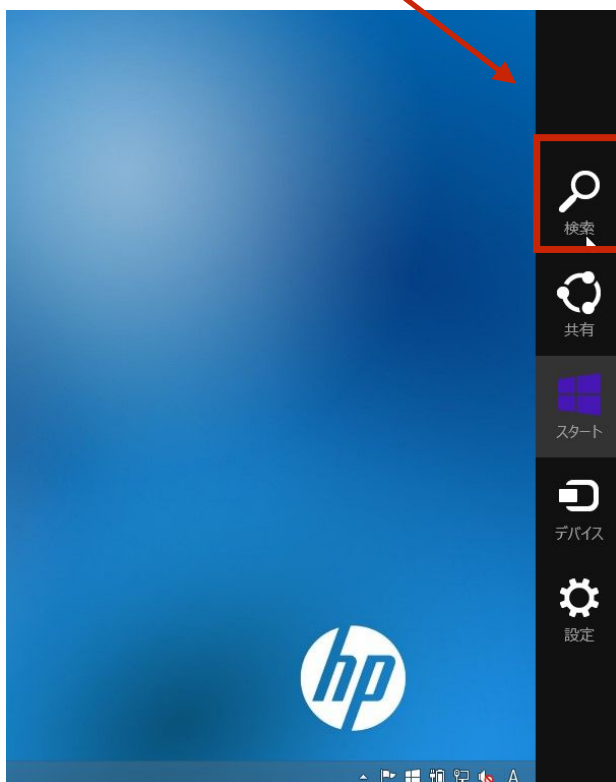
windows キー



+ C

Windows8

チャームを開く



- 0) チャームを開く
- 1) **検索**をクリック
- 2) **システム**と入力
- 3) **システム**をクリック

コントロール パネル > すべてのコントロール パネル項目 > システム

コントロール パネル ホーム

- デバイス マネージャー
- リモートの設定
- システムの保護
- システムの詳細設定

コンピューターの基本的な情報の表示

Windows Edition

Windows 7 Professional

Copyright © 2009 Microsoft Corporation. All rights reserved.

Service Pack 1

Windows 7 の新しいエディションの追加機能の取得

64bit Windows ならば

システム

評価: 5.5 お使いのコンピューターの Windows エクスペリエンス インデックスを最新の情報に更新する必要があります。

プロセッサ: Intel(R) Core(TM) i5-4288U CPU @ 2.60GHz 2.60 GHz

実装メモリ (RAM): 3.00 GB

システムの種類: 64 ビット オペレーティング システム

ペンとタッチ: このディスプレイでは、ペン入力とタッチ入力は利用できません

コンピューター名、ドメインおよびワークグループの設定

コンピューター名: selenium

フル コンピューター名: selenium

コンピューターの説明: nakada-win7 on VMWare

ワークグループ: WORKGROUP

Windows ライセンス認証

Windows はライセンス認証されています。

プロダクト キーの変更

ask for genuine Microsoft software

オンラインで詳細情報を表示する...

事前にダウンロードしていますか？

GNUPlot ☒ ダウンロード

FDMNES ☒ ダウンロード

GNUPlot は事前にインストールしてますか？

GNUPlot (*) 実習でインストール可能です
☒ インストール

FDMNES は実習でインストールします

FDMNES 実習でインストールします

FDMNES のダウンロードファイル（とバージョン）

・
・

fdmnes_2015_01_05.zip

fdmnes_2015_07_03.zip

J. Chem. Theory Comput. 11, 4512 (2015)

MUMPS 導入

fdmnes_2015_09_01.zip

J. D. Bourke, C. T. Chantler, Phys. Rev. Lett. 104, 206601 (2010).

fdmnes_2015_10_06.zip

FDMX 導入

fdmnes_2015_10_28.zip

fdmnes_2015_12_16.zip

bug fix

fdmnes_2016_01_06.zip

fdmnes_2016_01_08.zip

cif file 読み込み機能実装

*) 実習の範囲では 2015/7/3 以降のバージョンならばどれも同じです。

インストールした自分の GNUPLOT が
64bit 版か **32版**かご存じですか？

64 windows のとき

インストール先ディレクトリ

C:¥Program Files (x86)¥gnuplot

32版 GNUPLOT

C:¥Program Files¥gnuplot

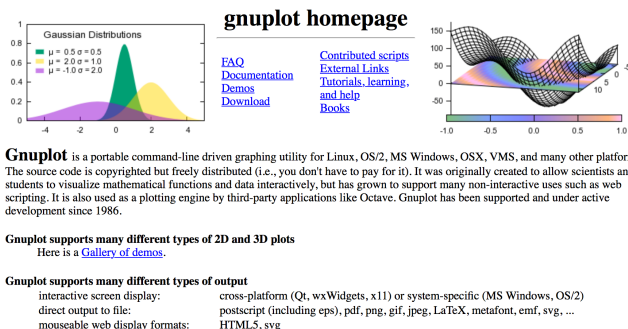
64版 GNUPLOT

32 windows のとき

C:¥Program Files¥gnuplot

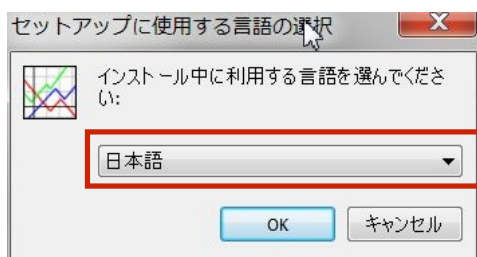
32版 GNUPLOT

GNU PLOT インストール



英語でも問題ありません

(1) 言語選択



インストール先を覚えておく

(3) インストール先 デフォルトで良い

(2) セットアップスタート



コンポーネントの選択

インストールコンポーネントを選択してください。



インストールするコンポーネントを選択してください。インストールする必要のないコンポーネントはチェックを外してください。続行するには「次へ」をクリックしてください。

カスタムインストール

☒	gnuplot の必要最小限のコンポーネント	46.7 MB
☒	gnuplot 付属文書	3.7 MB
☒	gnuplot サンプルデモスクリプト	0.9 MB
☒	使用する外部ライブラリ等のライセンス群	0.5 MB
☒	日本語対応	1.1 MB

現在の選択は最低 54.0 MBのディスク空き領域を必要とします。

< 戻る(B)

次へ(N) >

キャンセル

**日本語対応のチェックを入れて無くても問題ないです
(デフォルトではチェックは入っていません)**

あとで設定可能（ここで設定しておくともう少し楽）

gnuplot セットアップ

追加タスクの選択

実行する追加タスクを選択してください。

gnuplot インストール時に実行する追加タスクを選択して、「次へ」をクリックしてください。

☒ GNUTERM 環境変数を変更しない

Other tasks:

☒ ファイルの関連づけを行う:

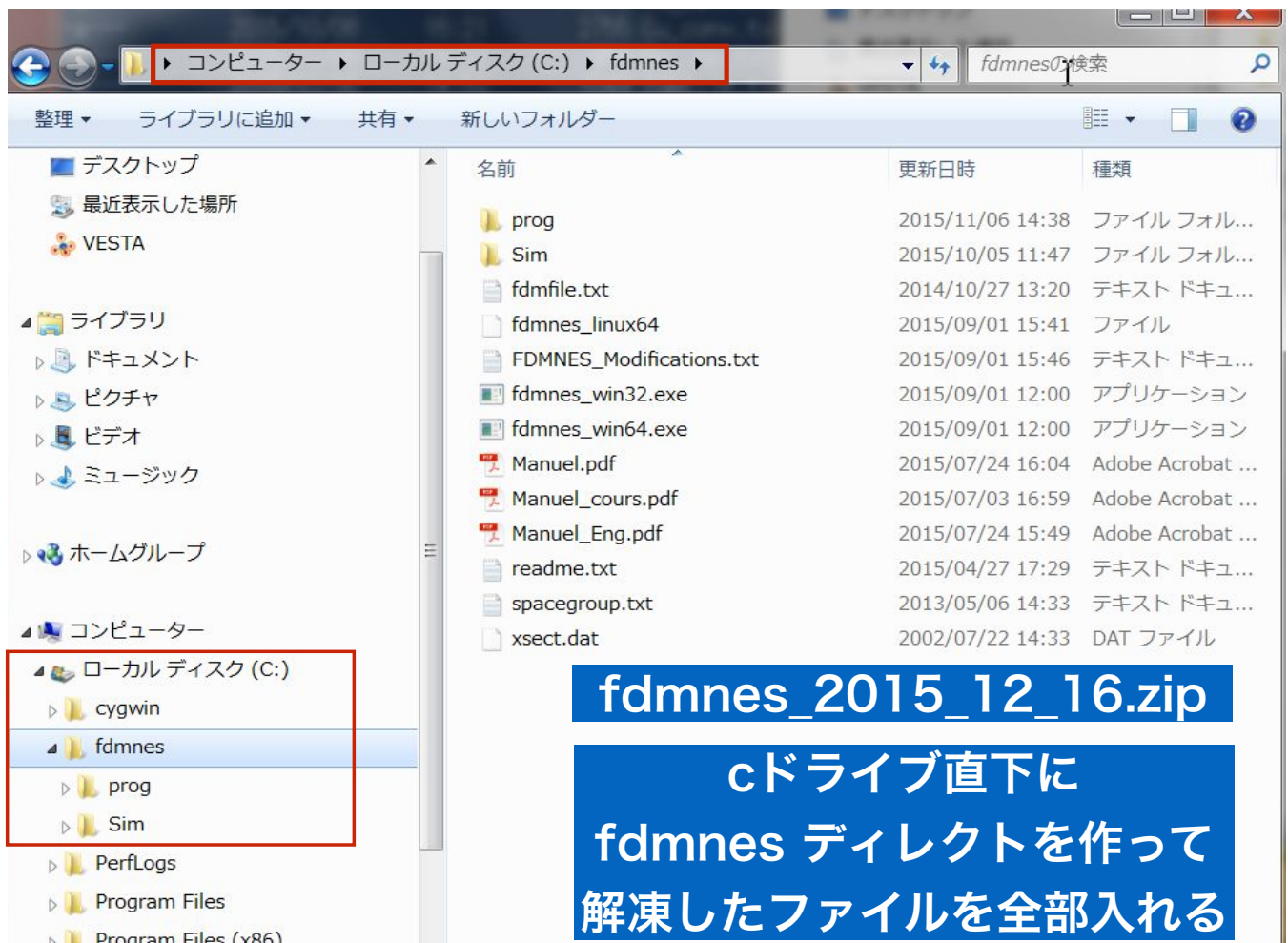
- ☒ .plt ファイル拡張に gnuplotを関連付けます。
- ☒ .gp ファイル拡張に gnuplotを関連付けます。
- ☒ .gpl ファイル拡張に gnuplotを関連付けます。
- ☐ .dem ファイル拡張に gnuplotを関連付けます。

☒ 実行ファイルのディレクトリを PATH 環境変数に追加する

< 戻る(B) 次へ(N) > キャンセル

FDMNES インストール

cドライブ直下にfdmnesというディレクトリを作り
そこにzipファイルを解凍した中身をすべて入れる



fdmnes ディレクトリの中身

名前	更新日時	種類	サ
prog	2015/10/06 7:47	ファイル フォル...	
Sim	2015/10/05 11:47	ファイル フォル...	
fdmfile.txt		テキスト ドキュ...	
fdmnes_linux64	2015/09/01 15:41	ファイル	
FDMNES_Modifications.txt	2015/09/01 15:46	テキスト ドキュ...	
fdmnes_win32.exe		アプリケーション	
fdmnes_win64.exe		アプリケーション	
Manuel.pdf	2015/07/24 16:04	Adobe Acrobat ...	
Manuel_cours.pdf	2015/07/03 16:59	Adobe Acrobat ...	
Manuel_Eng.pdf	2015/07/24 15:49	Adobe Acrobat ...	
readme.txt	2015/04/27 17:29	テキスト ドキュ...	
spacegroup.txt	2013/05/06 14:33	テキスト ドキュ...	
xsect.dat			

ソースコード (prog)

サンプル (Sim)

FDMNES入力ファイル指定 (fdmfile.txt)

windows 版32bit バイナリ (fdmnes_win32.exe)

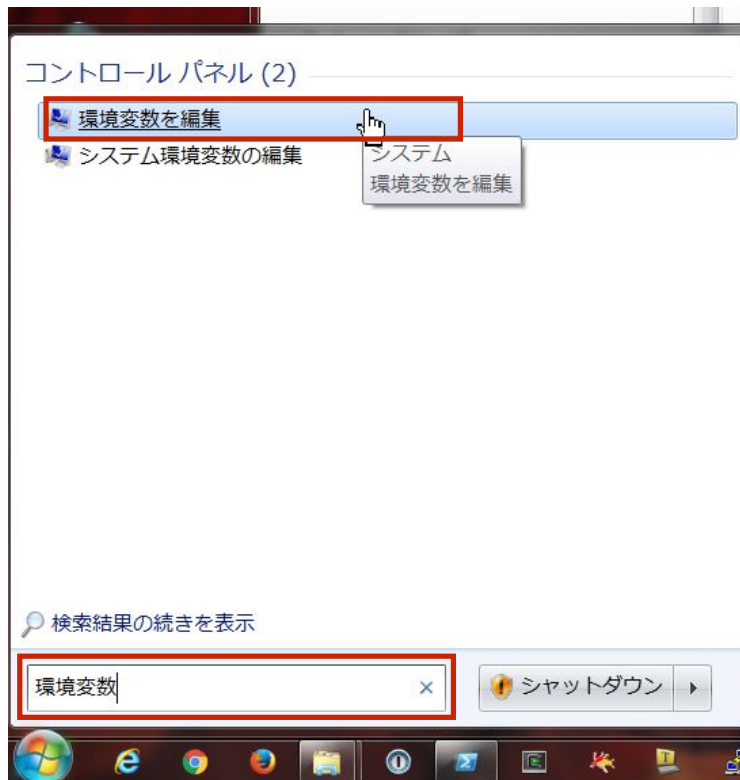
windows 版64bit バイナリ (fdmnes_win64.exe)

空間群の情報などのデータベース (spacegroup.txt, xsect.dat)

インストール後の設定

GNU PLOT 及び FDMNES 用の環境変数の設定

環境変数設定画面を出す



windows7

- 1) スタートメニューから検索
- 2) 環境変数と入力
- 3) 環境変数を編集

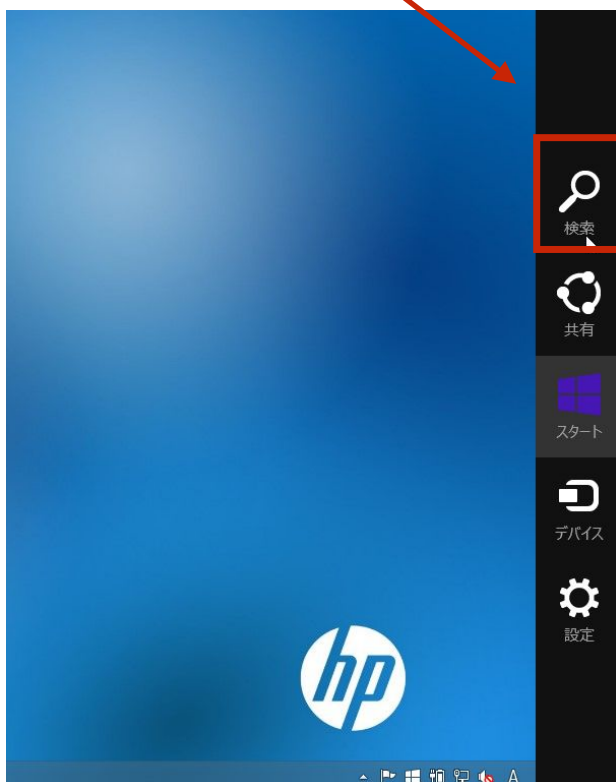
windows キー



+ C

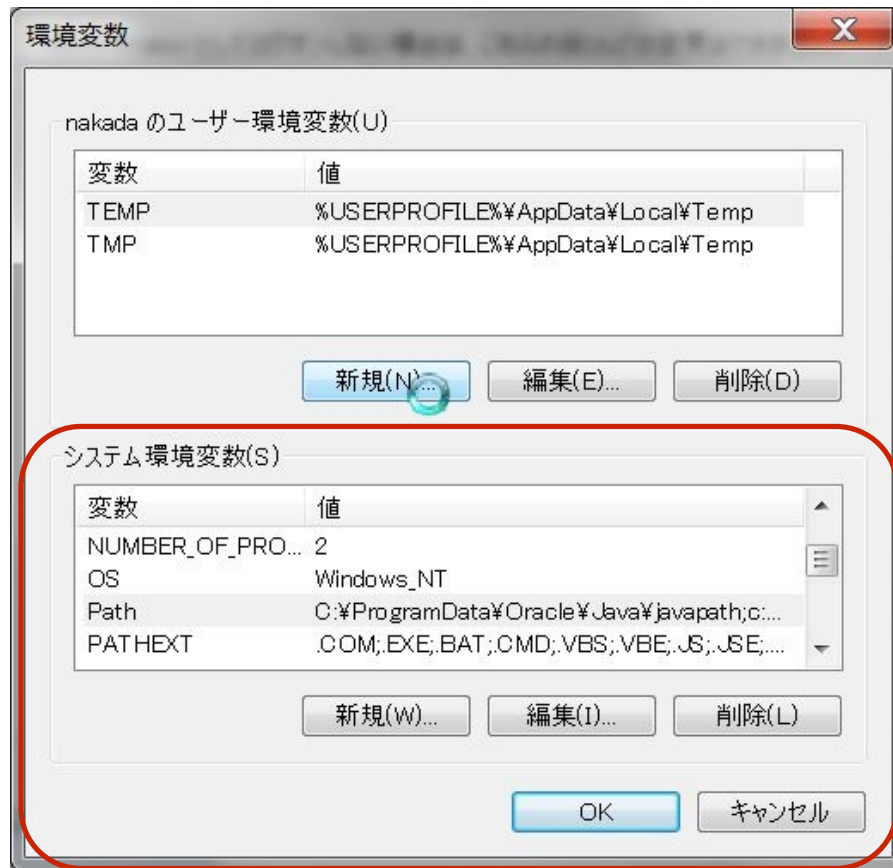
Windows8

チャームを開く



- 0) チャームを開く
- 1) 検索をクリック
- 2) 環境変数と入力
- 3) 環境変数を編集

環境変数

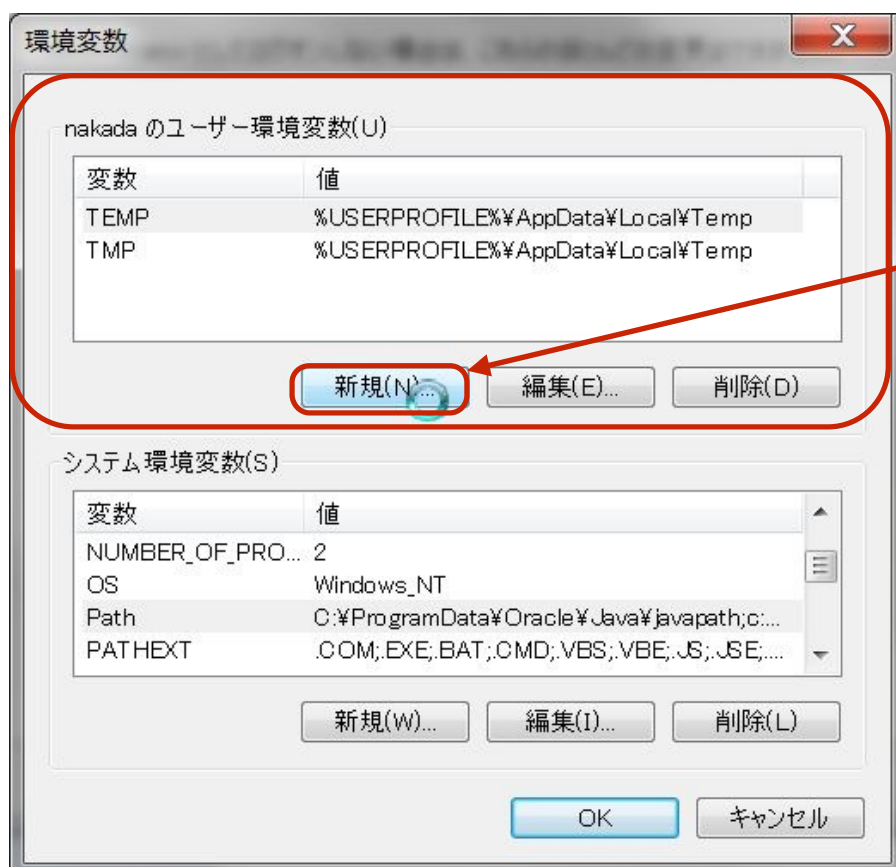


慣れない人が書き間違えると酷いことになる

ここはいじらない

ユーザー環境変数 Path を編集

変数に Path が存在しない人



新規

64bit版 GNUPLOT on 64bit windows

32bit版 GNUPLOT on 32bit windows

変数名(N): Path

変数値(V): C:¥Program Files¥gnuplot¥bin;C:¥fdmnes

↑
コロン:

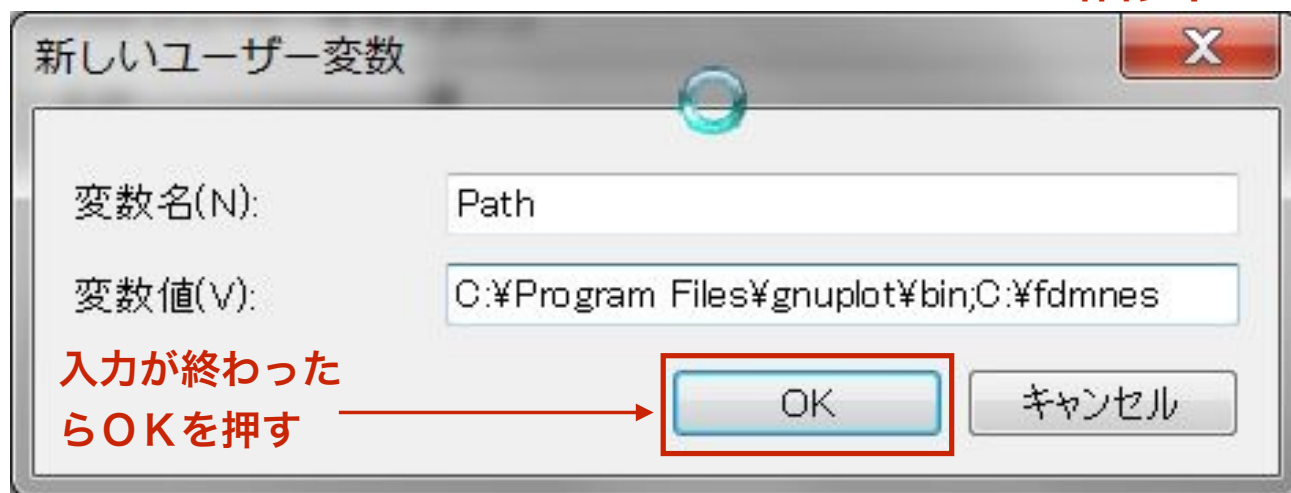
↑
スペース

↑
GNUPLOT をインストールした先

↑
セミコロン;

↑
コロン:

大文字小文字の区別なし



インストールした GUNPLOT が 32bit か 64bit か?
で変わるので注意

32bit GNUPLOT on 64bit windows

変数名(N): Path

変数値(V): C:¥Program Files (x86)¥gnuplot¥bin;C:¥fdmnes

↑
コロン:

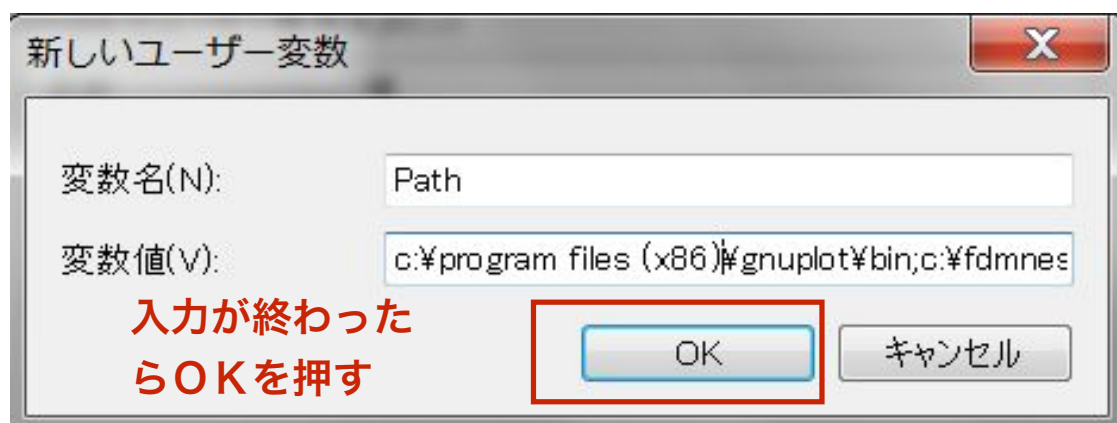
↑
スペース

↑
スペース

↑
半角の括弧

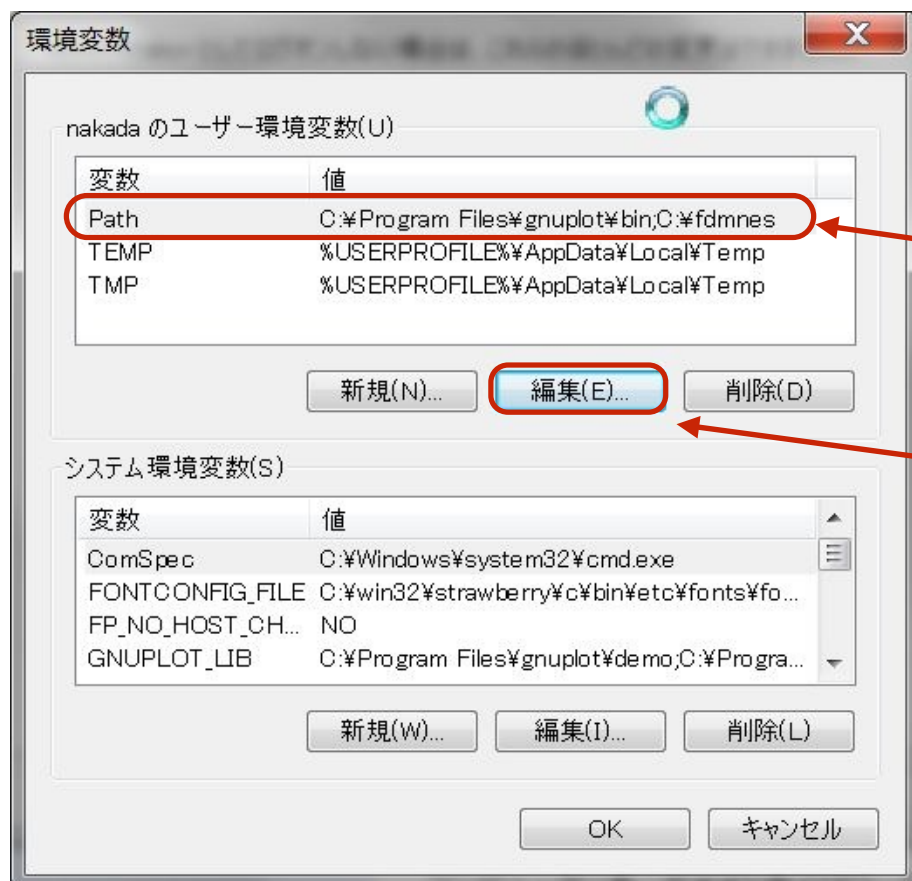
↑
セミコロン;

↑
コロン:



ユーザ環境変数 Path を編集

変数に **Path**
が存在する人

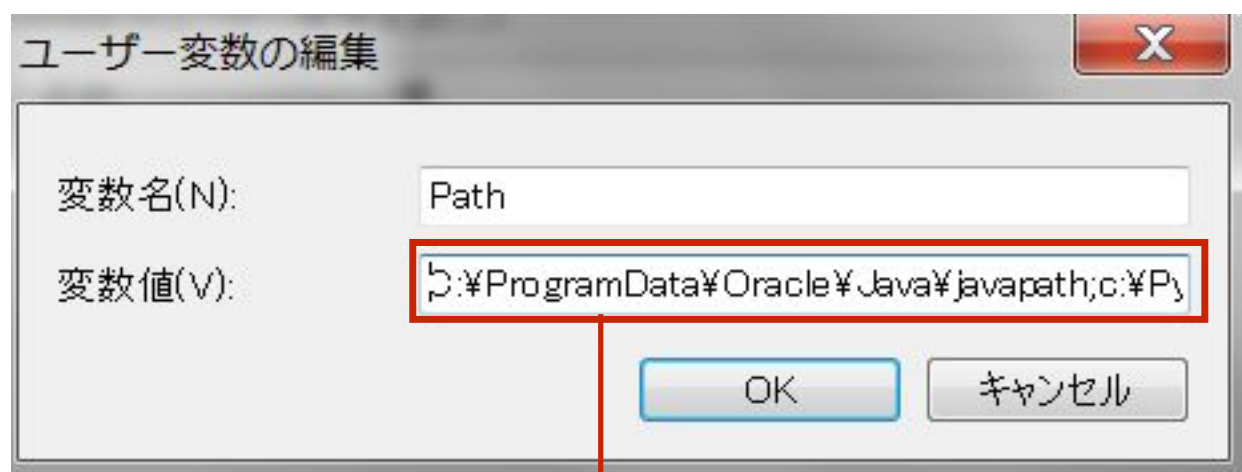


1) 変数Path
の行を選ぶ

2) 編集

細心の注意
が必要です

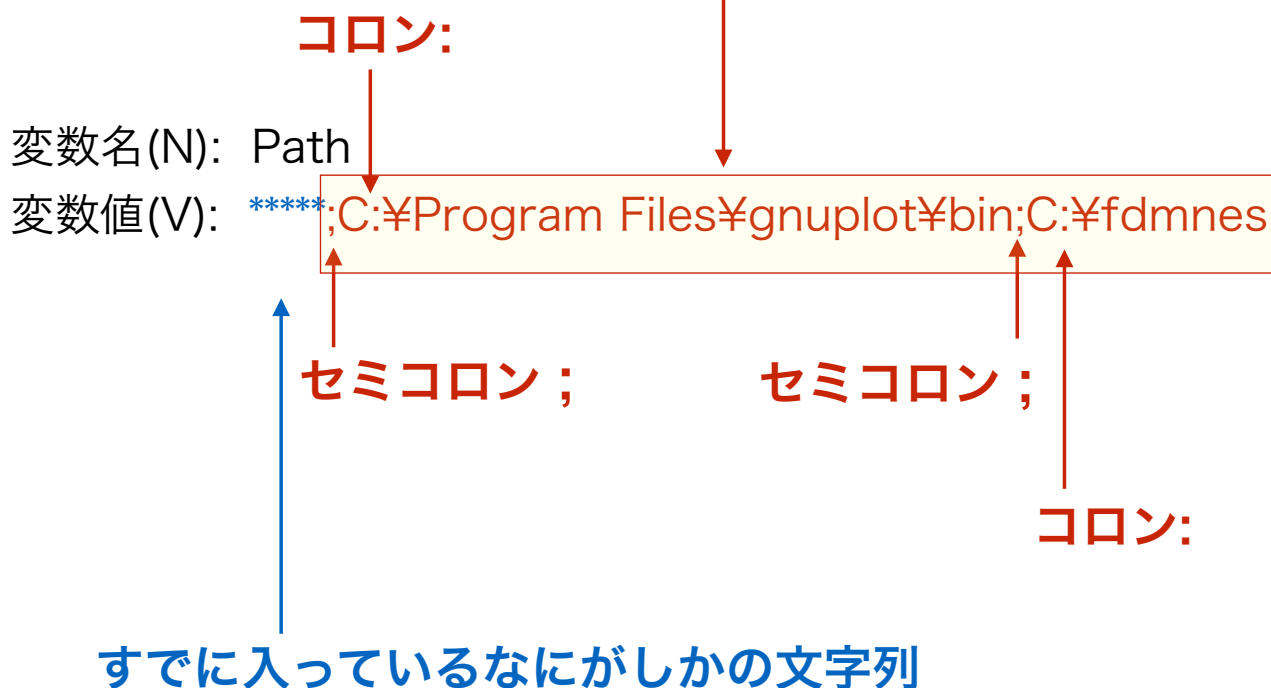
!!!!!! 注意 !!!!!!!



今ある、変数値は消さない

変数値にすでに文字が入っている場合は、文字の後ろに追加する

すでに入っている文字列の最後に追加する



入力が終わったらOKを押す

変数名(N): Path
変数値(V): C:¥Program Files¥gnuplot¥bin;C:¥fdmnes

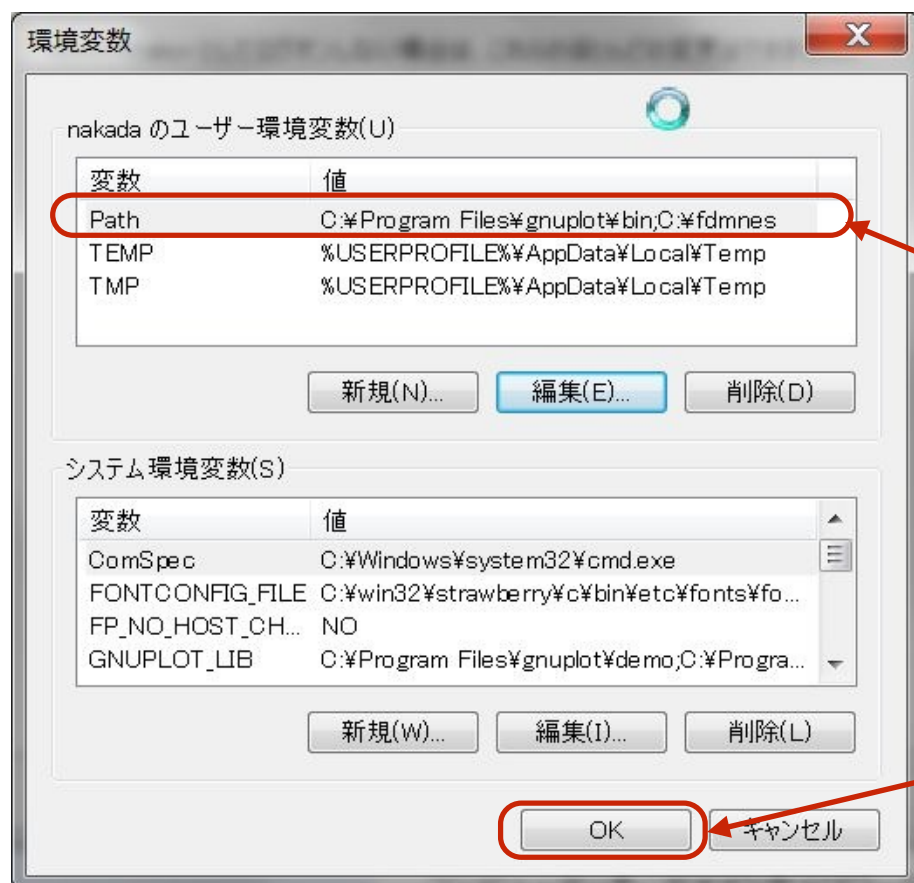
Mac 上で 英語キーボードを使っていて
VMWare Fusion 上の Windows 7のときは

パスがうまく通らないことがある

¥マークに見えても文字コードが実は¥でない事がある

「えん」と入力して漢字変換して[半角]で¥の文字を出すと
確実にパス区切りで使う 円記号になる

ユーザー環境変数がセットされる



1) 入力した文字を
(見える範囲で)確認

2) OKを押す

PowerShell の起動の方法

環境変数が正しくセットされているかの確認

shell からの gnuplot の起動

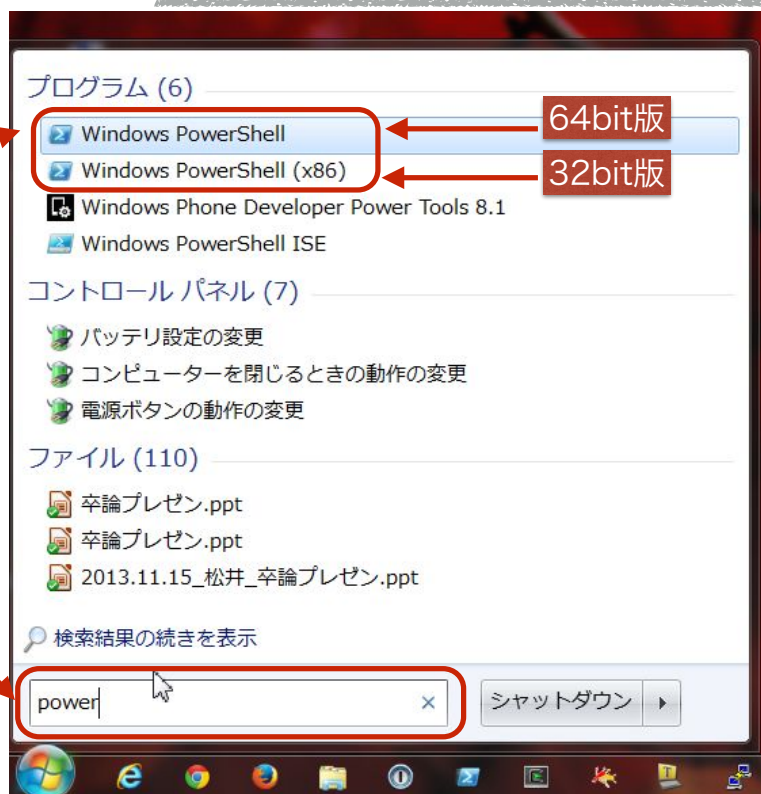
PowerShell の起動 Windows7

Windows PowerShell を起動

64bit windows では
32bit PowerShell と
64bit PowerShell の二つの選択肢

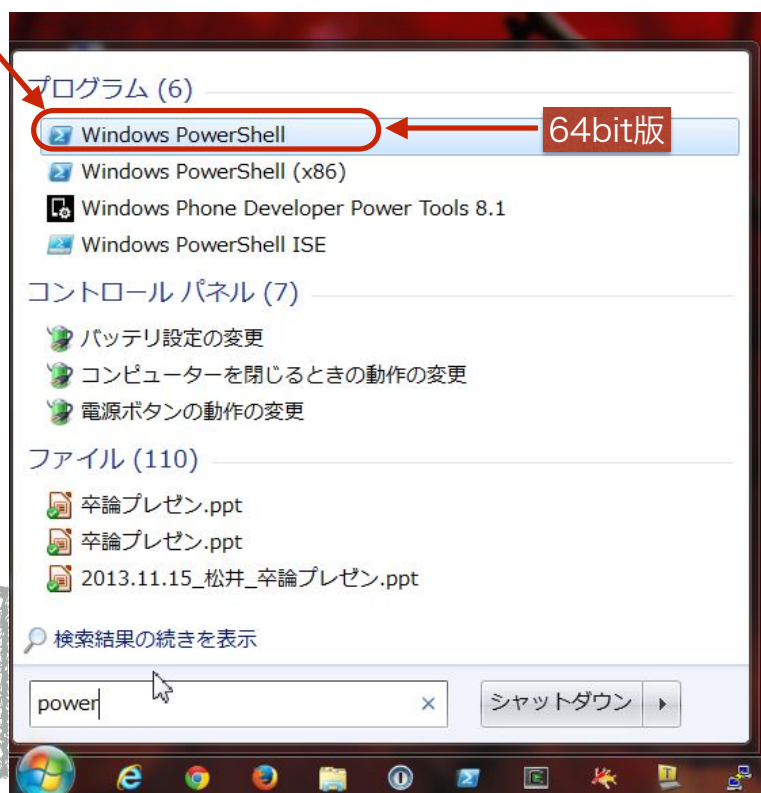
PowerShell と入力すると
プログラムの候補が出てくる

スタートメニューをクリック
(Windowsキーをクリック)



64bit windows を使っている人は

PowerShell を選択する



32bit windows では
PowerShell しか選択出来ない
(名前は同じでも32bit版)

PowerShell の起動

Windows8

チャームを開く

windows キー



+ C

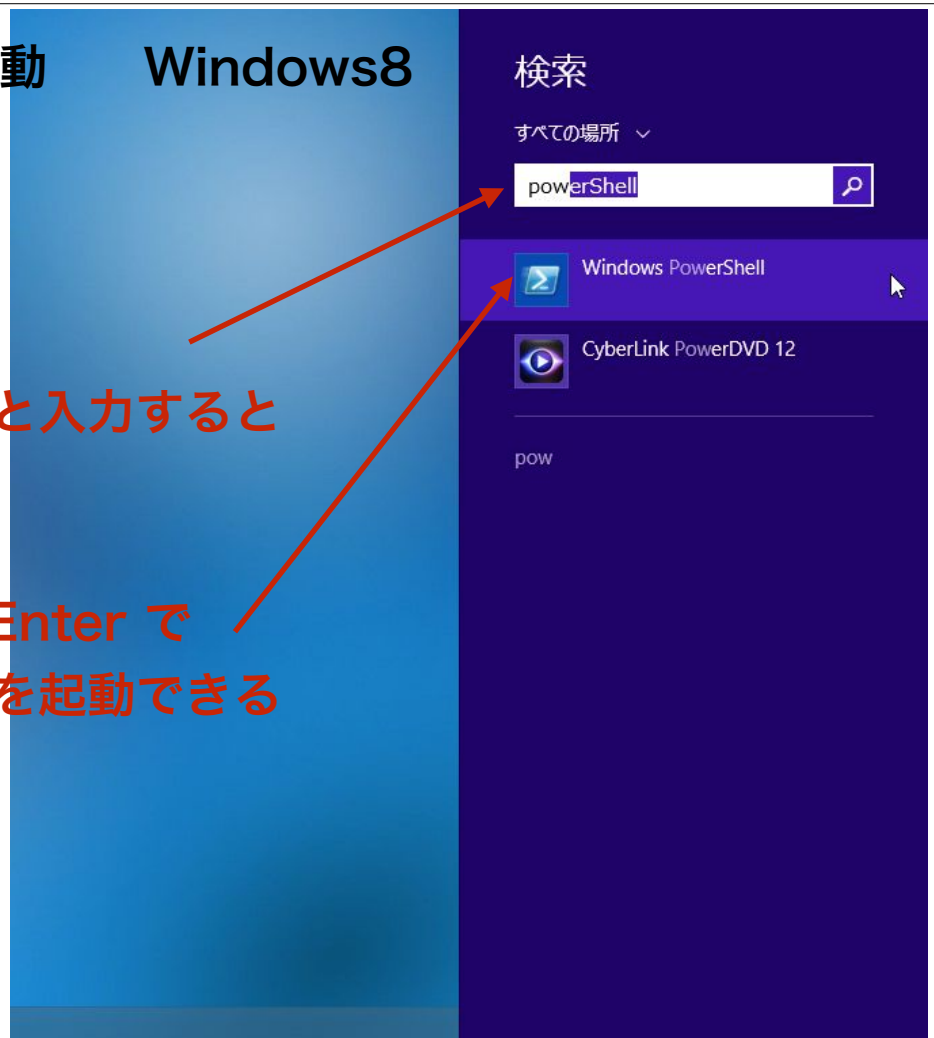


PowerShell の起動

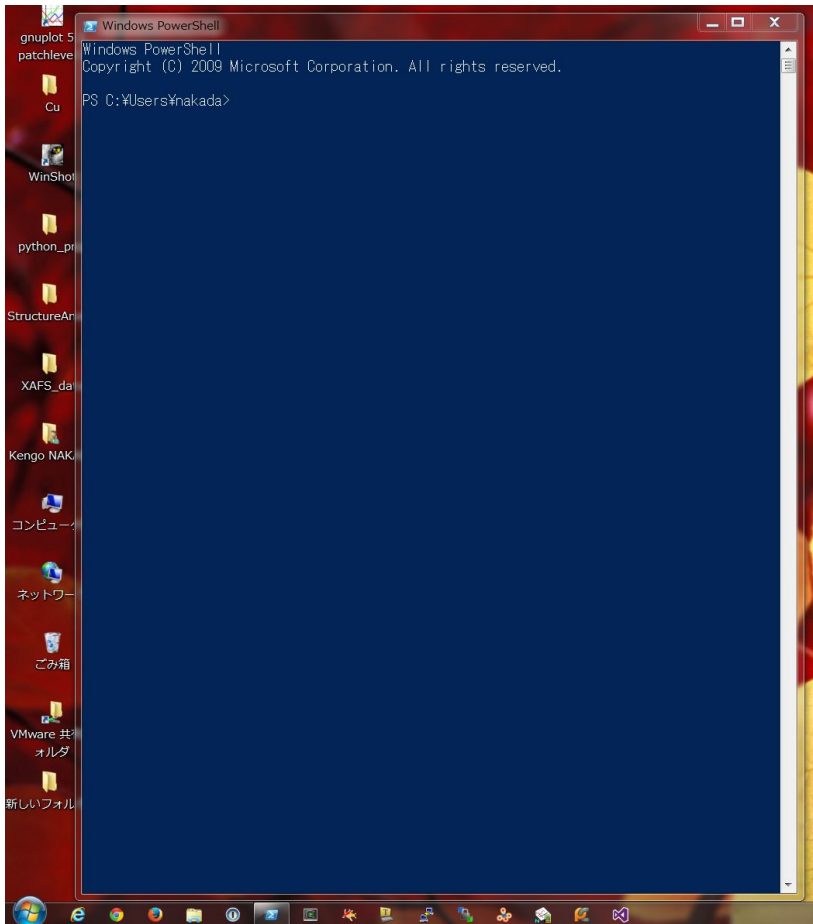
Windows8

PowerShell と入力すると

そのまま Enter で
PowerShell を起動できる



PowerShell の起動



コマンドプロンプト
(cmd.exe)

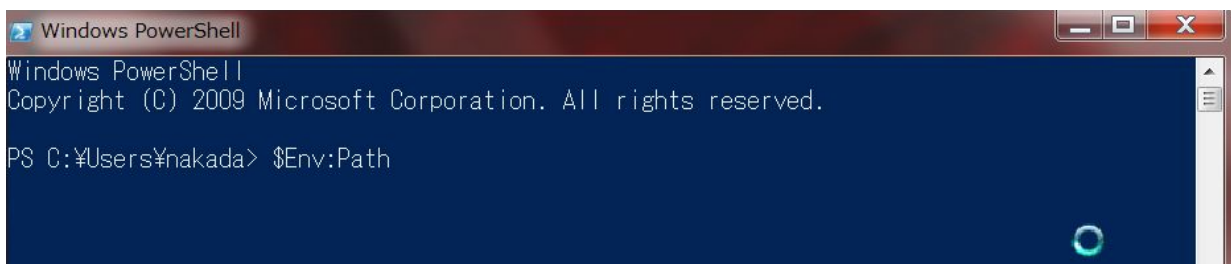
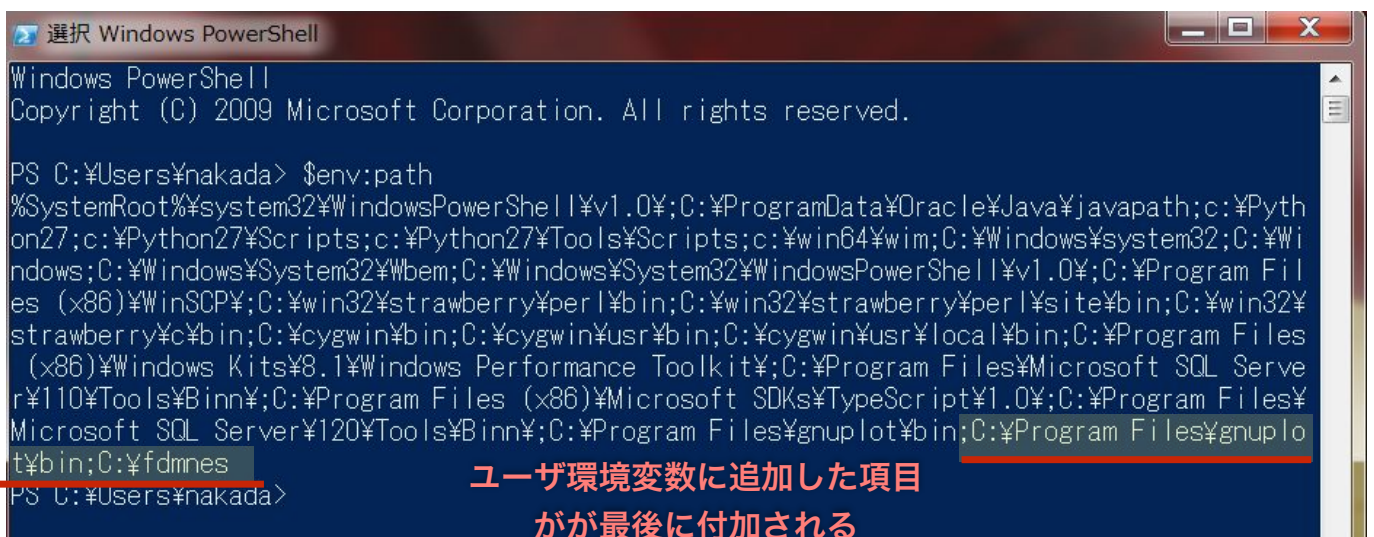
の拡張/高機能版

Linux と
ほぼ同じように使える

コロン:

環境変数Pathの確認(PowerShell)

\$Env:Path 入力して Enter (大文字小文字の区別なし)



コマンドが使えるかどうかのチェック

1) **gcm**^{スペース}**wgnuplot**

```
PS C:\Users\nakada> gcm wgnuplot

CommandType      Name
-----
Application      wgnuplot.exe
```

2) **gcm****fdmnes_win64**

```
PS C:\Users\nakada> gcm fdmnes_win64

CommandType      Name
-----
Application      fdmnes_win64.exe
```

このメッセージならばOK

このメッセージならばOK

コマンドが使えるかどうかのチェック

もし、32bit windows の場合は・・・

3) **gcm****fdmnes_win32**

```
PS C:\Users\nakada> gcm fdmnes_win32.exe

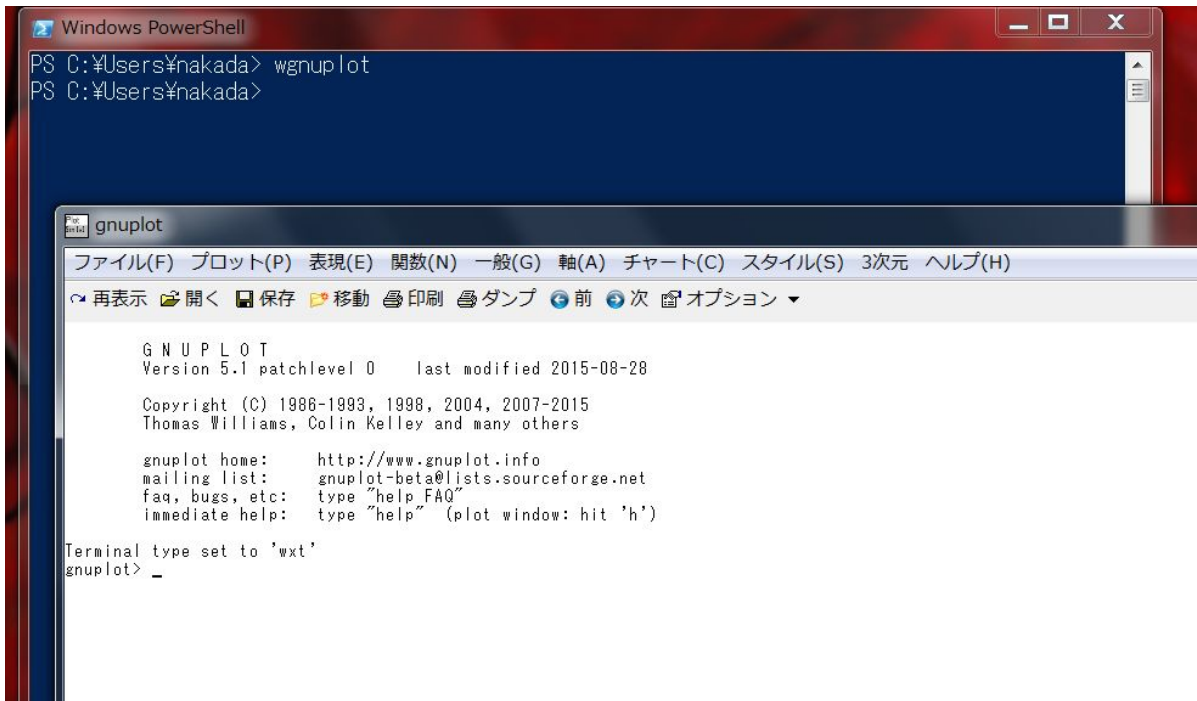
CommandType      Name
-----
Application      fdmnes_win32.exe
```

このメッセージならばOK

C:\Program Files\gnuplot\bin が Path に追加されている
のならば、どこでも **gnuplot** が起動できる

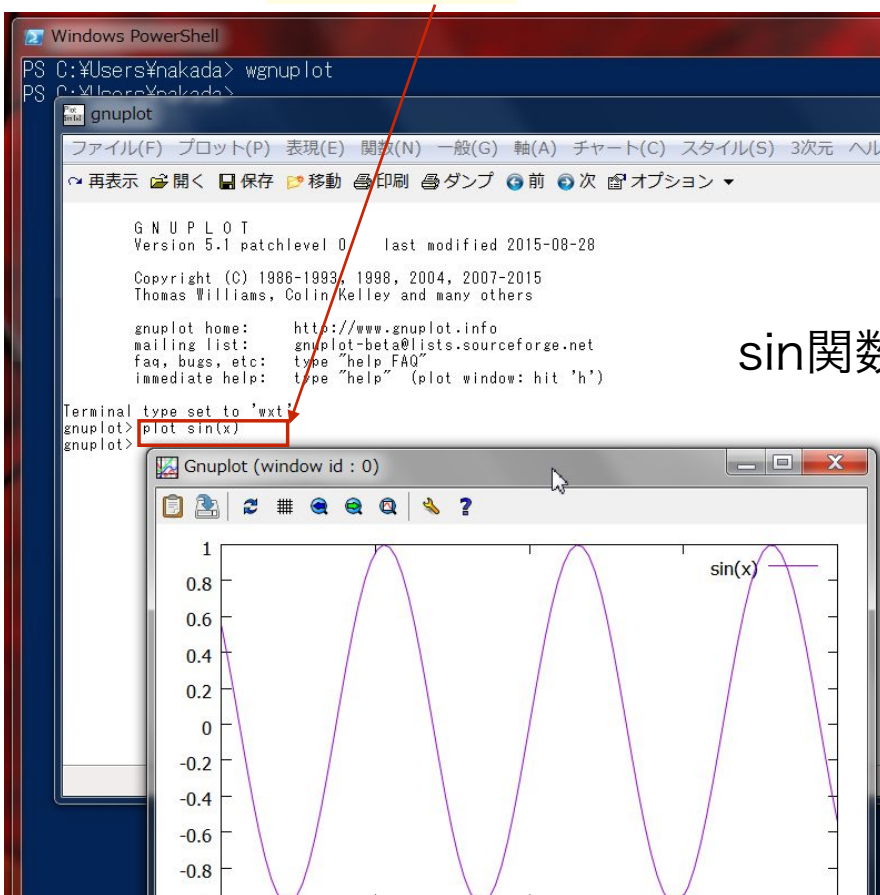
PowerShell 上で

wgnuplot 入力して Enter (window をもった gnuplot を起動)



動作確認(例)

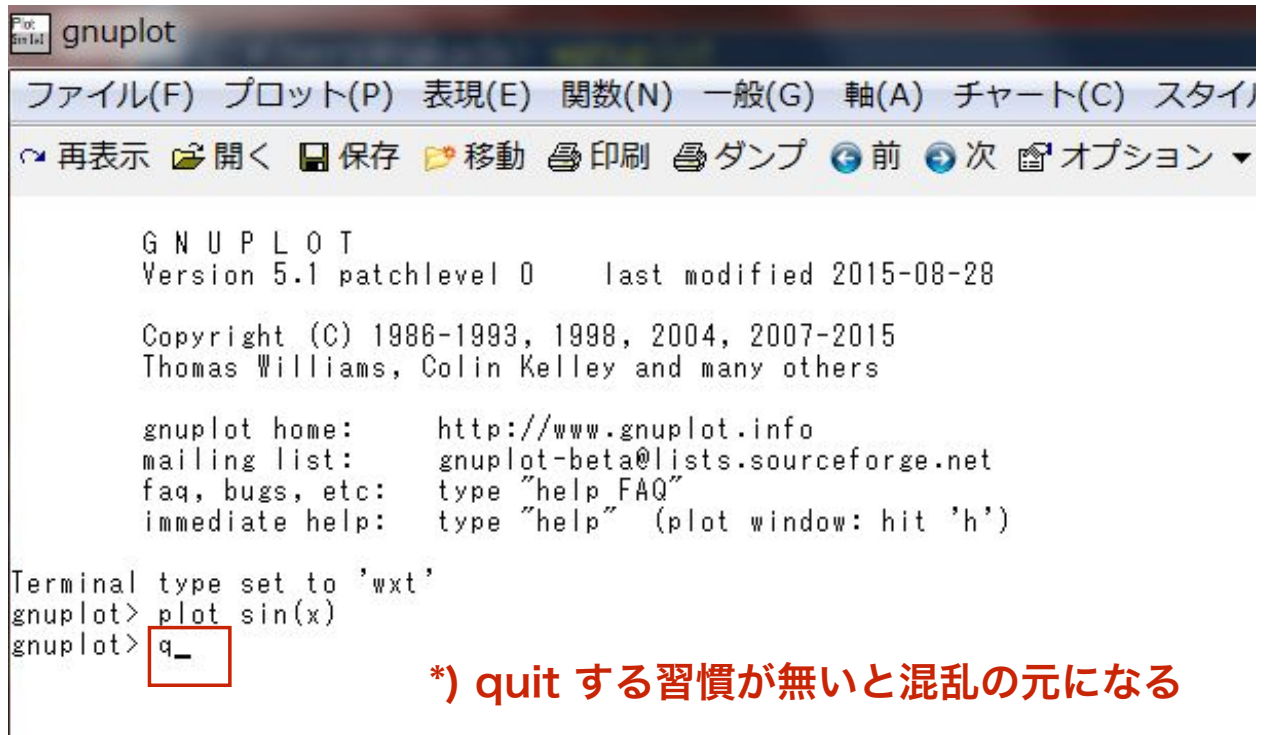
gnuplot 上で **plot sin(x)** 入力して Enter



sin関数がプロットされる

gnuplot はプロットが終わったらquit しておく

q を入力して Enter

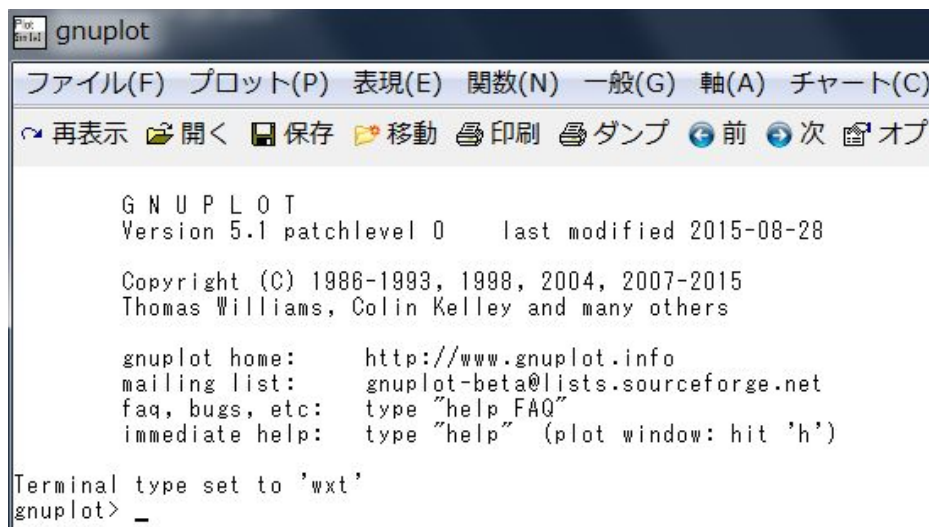


wgnuplot の履歴機能について

先ほど閉じた wgnuplot をもう一度開く

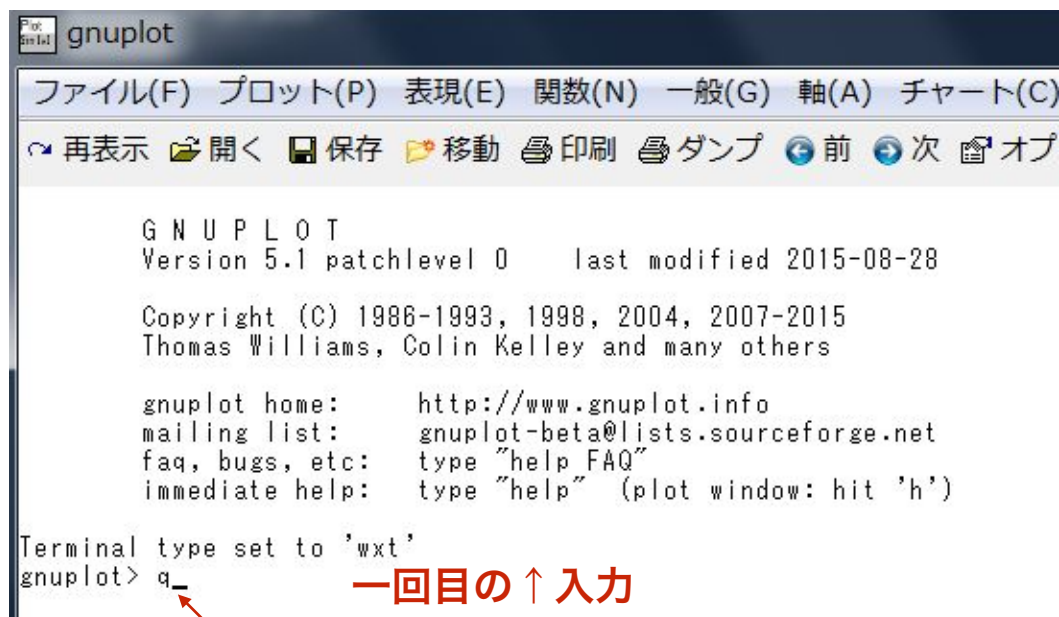
PowerShell 上で

wgnuplot を入力して Enter (GNUPLLOT を立ち上げる)



カーソルキーの↑を押す

カーソルキーの↑を押すたびに入力したコマンドの履歴が表示される



The screenshot shows the gnuplot terminal window. The menu bar includes: ファイル(F) プロット(P) 表現(E) 関数(N) 一般(G) 軸(A) チャート(C). The toolbar includes: 再表示, 開く, 保存, 移動, 印刷, ダンプ, 前, 次, オブ. The terminal text is as follows:

```
GNUPLOT
Version 5.1 patchlevel 0    last modified 2015-08-28

Copyright (C) 1986-1993, 1998, 2004, 2007-2015
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

gnuplot home:      http://www.gnuplot.info
mailing list:      gnuplot-beta@lists.sourceforge.net
faq, bugs, etc:    type "help FAQ"
immediate help:    type "help" (plot window: hit 'h')
```

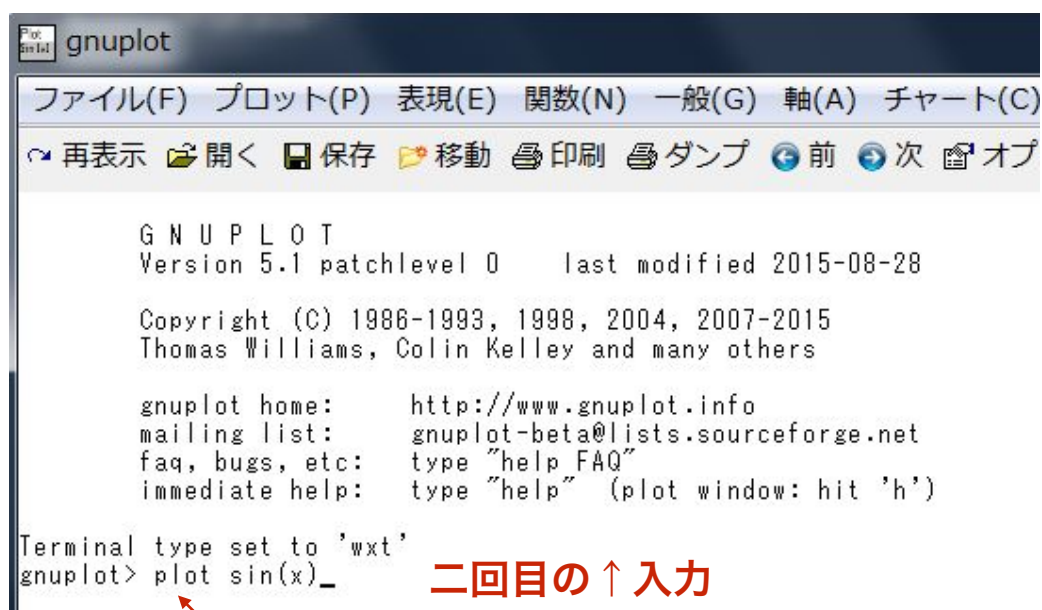
Terminal type set to 'wxt'

gnuplot> q_

一回目の↑入力

先ほど入力した q コマンドが履歴に出てくる

カーソルキーの↑を押すたびに入力したコマンドの履歴が表示される



The screenshot shows the gnuplot terminal window. The menu bar includes: ファイル(F) プロット(P) 表現(E) 関数(N) 一般(G) 軸(A) チャート(C). The toolbar includes: 再表示, 開く, 保存, 移動, 印刷, ダンプ, 前, 次, オブ. The terminal text is as follows:

```
GNUPLOT
Version 5.1 patchlevel 0    last modified 2015-08-28

Copyright (C) 1986-1993, 1998, 2004, 2007-2015
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

gnuplot home:      http://www.gnuplot.info
mailing list:      gnuplot-beta@lists.sourceforge.net
faq, bugs, etc:    type "help FAQ"
immediate help:    type "help" (plot window: hit 'h')
```

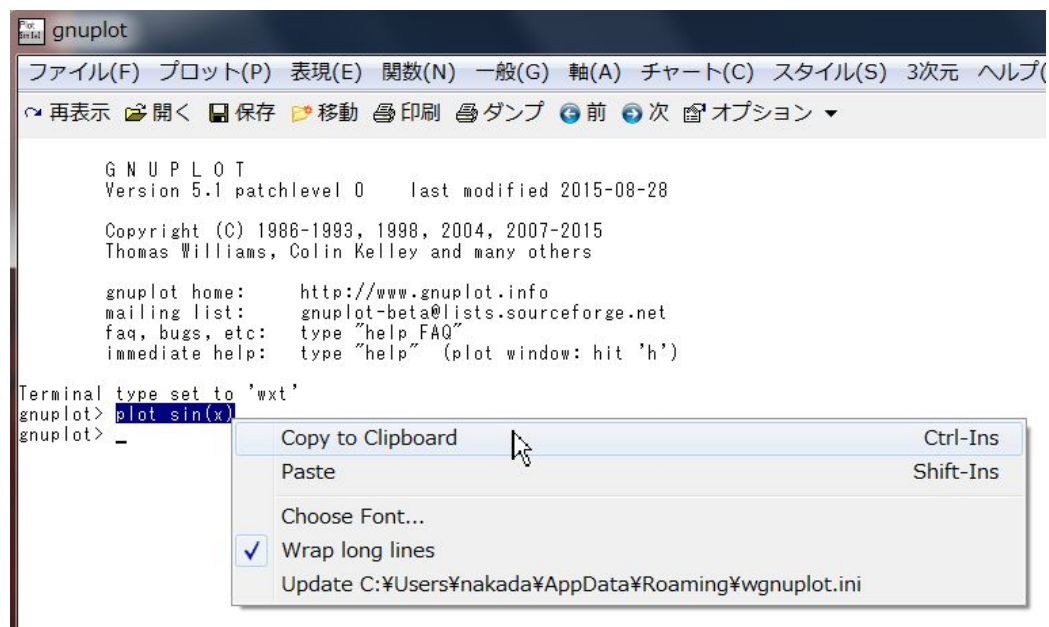
Terminal type set to 'wxt'

gnuplot> plot sin(x)_

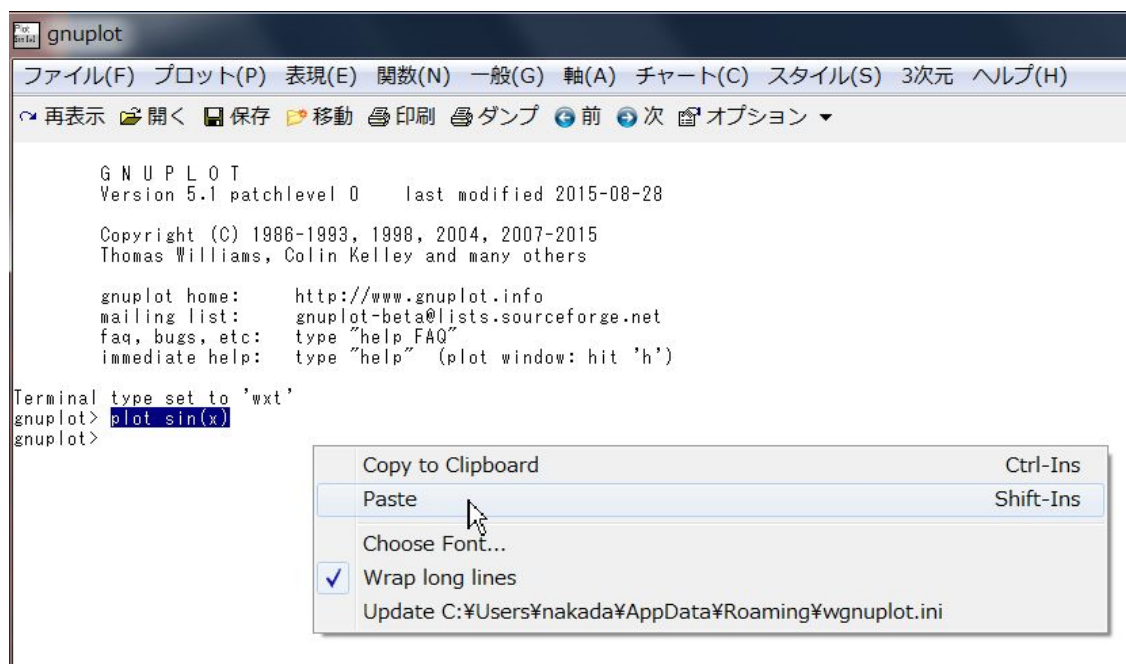
二回目の↑入力

先ほど入力した plot sin(x) コマンドが履歴に出てくる

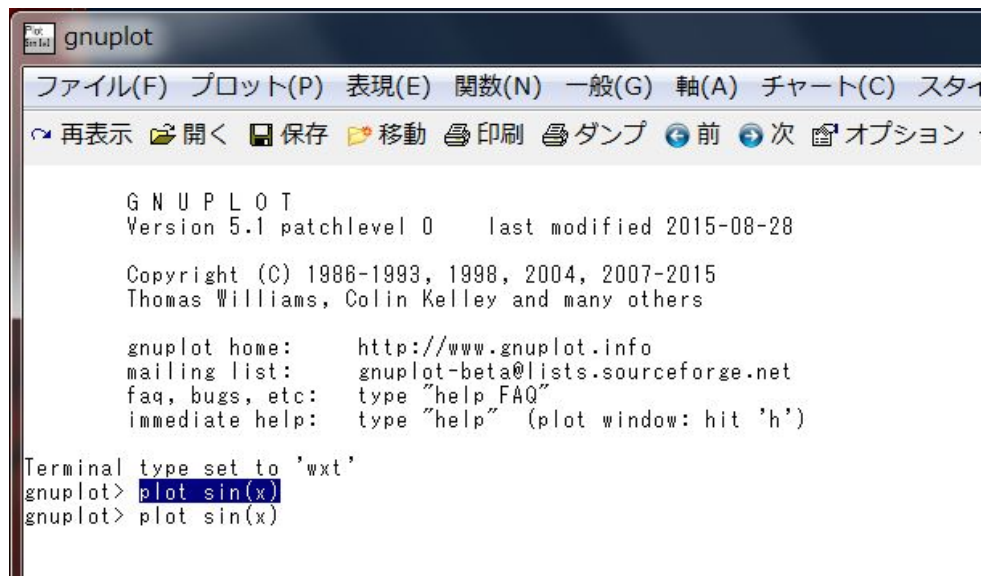
マウスで選択し、右クリックでメニューを出す Copy to Clipboard を選択



右クリックで Paste を選択



ペースとされます

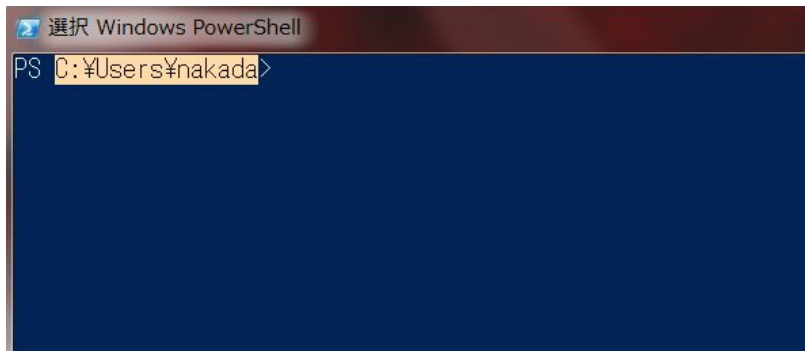


ここでのGNUPLLOTの操作は終わりなので q で
GNUPLLOT を閉じる

PowerShell の使い方

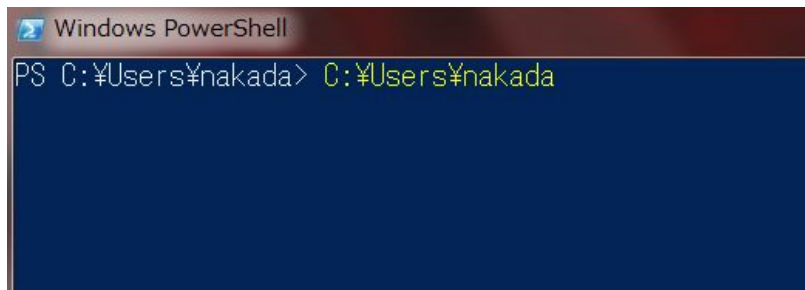
テキストのコピー

1) コピー：リージョン選択をして Enter でコピー



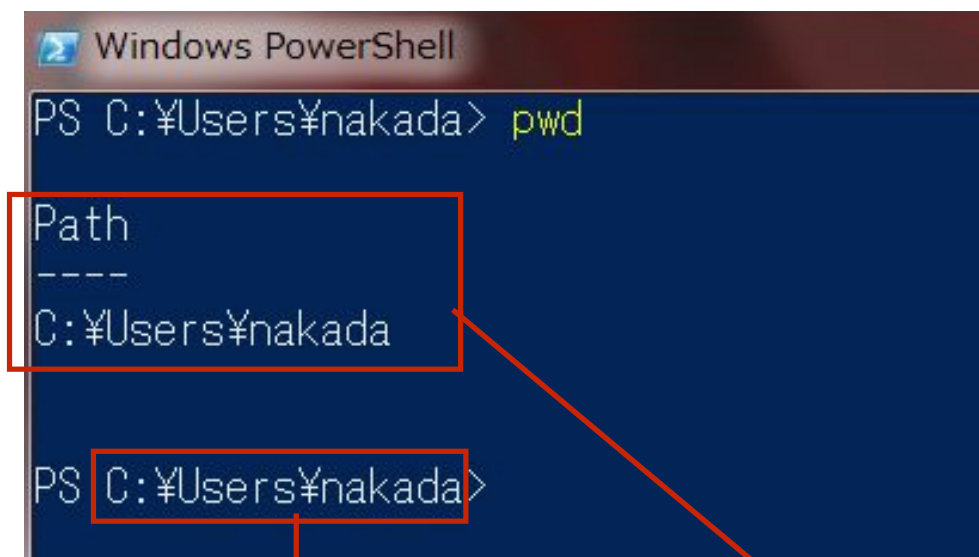
```
選択 Windows PowerShell
PS C:\Users¥nakada>
```

2) ペースト：右クリックで貼り付け



```
Windows PowerShell
PS C:\Users¥nakada> C:\Users¥nakada
```

pwd



```
Windows PowerShell
PS C:\Users¥nakada> pwd

Path
----
C:\Users¥nakada

PS C:\Users¥nakada>
```

現在自分がいる場所
(カレントディレクトリー)

pwd コマンドを入力しなくても
デフォルトでカレントディレクトリーが表示される

PowerShell の基本

ls

指定ディレクトリのファイル一覧表示

今いるディレクトリ
C:¥Users¥nakada

ファイル一覧

属性

d: ディレクトリ
a: アーカイブ(ファイル)
r: 読み取り専用
s: システム
h: 隠しファイル

```
Windows PowerShell
PS C:¥Users¥nakada> ls

ディレクトリ: C:¥Users¥nakada

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
d-----          2014/11/06      11:19         .idlerc
d-----          2015/08/11       6:57        .matplotlib
d-----          2015/11/05      17:22    .oracle_jre_usage
d-----          2014/12/18      19:09        .PyCharm40
d-r--          2015/10/14      12:42      Contacts
d-r--          2015/10/14      12:42      Desktop
d-r--          2015/10/14      12:42     Documents
d-r--          2015/11/06      14:37     Downloads
d-r--          2015/12/24       8:06      Dropbox
d-r--          2015/10/14      12:42     Favorites
d-----          2015/12/15      13:17         fdm
d-r--          2015/10/14      12:42       Links
d-r--          2015/10/14      12:42       Music
d-r--          2015/10/14      12:42     Pictures
d-----          2014/12/16      14:50   PycharmProjects
d-r--          2015/10/14      12:42   Saved Games
d-r--          2015/10/14      12:42     Searches
d-----          2015/10/06      13:58        test
d-r--          2015/10/14      12:42     Videos
-a-----          2015/10/08       9:49         15 .vimrc

PS C:¥Users¥nakada>
```

PowerShell の基本

(ドット二つ)

スペース
↓
cd ..

一つ上の階層のディレクトリに移動

一つ上の階層へ移動

```
PS C:¥Users¥nakada> cd ..
PS C:¥Users> pwd

Path
----
C:¥Users

PS C:¥Users>
```

自分の今いる場所の確認

C:¥Users¥nakada から C:¥Users へカレントディレクトリを移動した

PowerShell の基本

いつでもどこでもホームディレクトリに戻る

スペース
↓
cd □ ~

チルダ (による)

```
PS C:¥Users> cd ~
PS C:¥Users¥nakada>
```

ディレクトリの移動

PowerShell の基本

絶対パス指定でディレクトリを移動する

スペース
↓
cd □ ¥fdmnes

```
Windows PowerShell
PS C:¥Users¥nakada> cd ¥fdmnes
```



¥fdmnes ディレクトリに移動する

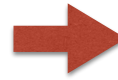
```
Windows PowerShell
PS C:¥fdmnes>
```

ディレクトリツリーの先頭から(ルートから)の絶対位置で移動先を指定する

ホームディレクトリに戻る

スペース
↓
cd □ **~**

```
Windows PowerShell
PS C:\¥fdmnes> cd ~
```



```
Windows PowerShell
PS C:\¥Users¥nakada>
```

ディレクトリの移動

相対パス指定でディレクトリを移動する

スペース
↓
cd □ **..¥..¥fdmnes**

ドット二つ は一つ上のディレクトリを示す

¥はディレクトリの区切り

```
Windows PowerShell
PS C:\¥Users¥nakada> cd ..¥..¥fdmnes
```



¥fdmnes ディレクトリに移動する

```
Windows PowerShell
PS C:\¥fdmnes>
```

カレントディレクトリ

スペース
↓
cd □ **.**

ドット一つはカレントディレクトリを示す
(今いるディレクトリ)

```
Windows PowerShell
PS C:\¥Users¥nakada> cd .
```

スペース
↓
cd □ **.¥Documents**

```
Windows PowerShell
PS C:\¥Users¥nakada> cd .¥Documents
```



今いるディレクトリを基準にして
相対的に位置を指定する

```
Windows PowerShell
PS C:\¥Users¥nakada¥Documents>
```

タブ補完 とディレクトリ移動

PowerShell の基本

スペース
↓
cd ¥fdm と入力する

*) C: などのドライブ指定は同じドライブ内移動ならば省略できる

```
PS C:¥Users¥nakada> cd ¥fdm
```

TAB キーを入力する

ディレクトリのお尻の¥記号: タブ補完で自動で付加されるが、なくても問題ない

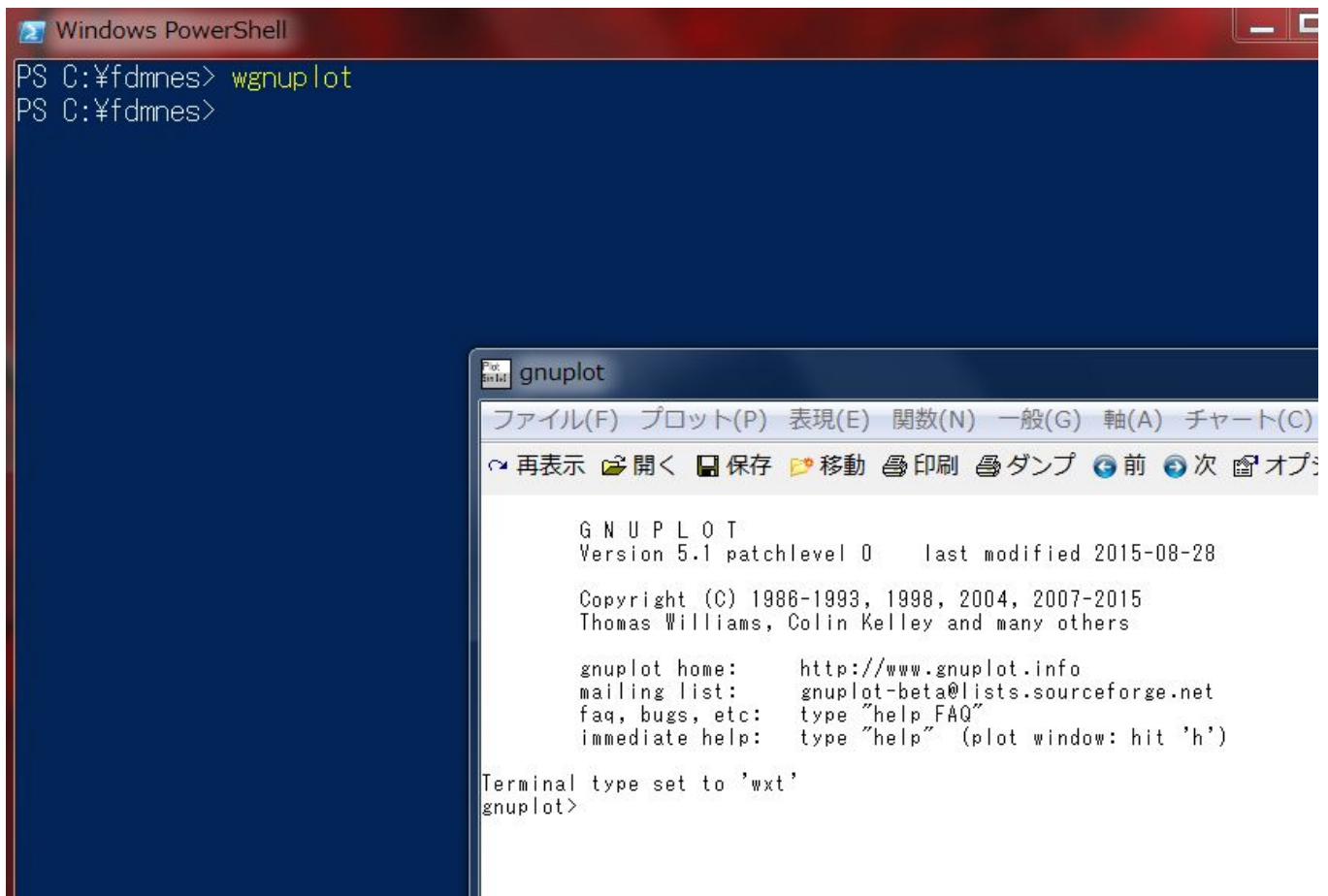
```
PS C:¥Users¥nakada> cd C:¥fdmnes¥
```

今は ¥fdm から始まるディレクトリは ¥fdmnes¥ しか存在しないので自動的に名前が補完される

スペース
↓
cd C:¥fdmnes¥ 指定したディレクトリに移動する

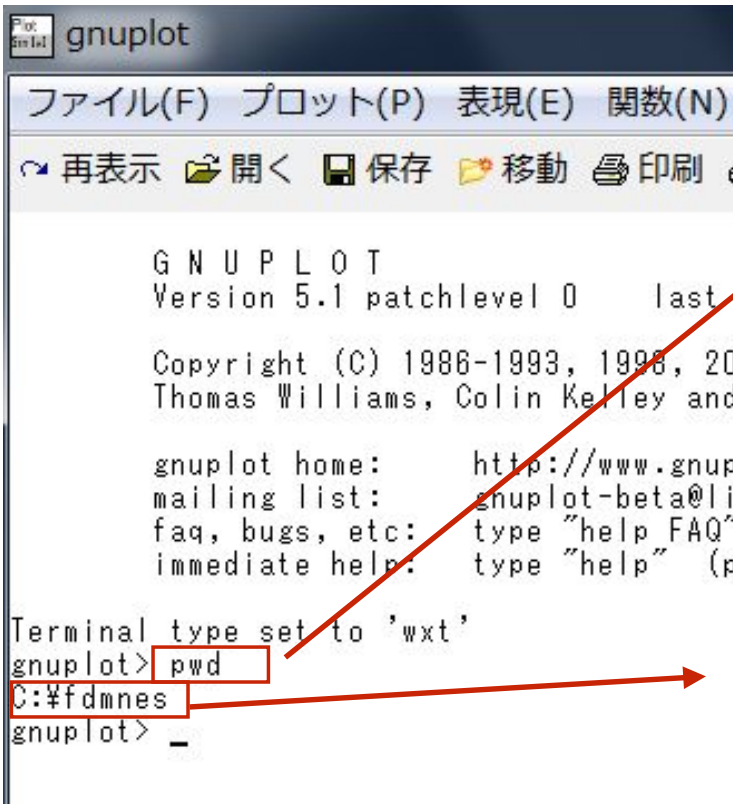
```
PS C:¥fdmnes>
```

c:¥fdmnes ディレクトリで GNUPLOT を起動



注意

GNUPLLOT を立ち上げた場所が、GNUPLLOT で作業しているカレントディレクトリになる
ファイルのセーブ場所やファイルの読み込み場所がこのディレクトリになる



```
gnuplot
ファイル(F) プロット(P) 表現(E) 関数(N)
再表示 開く 保存 移動 印刷

GNUPLLOT
Version 5.1 patchlevel 0 last

Copyright (C) 1986-1993, 1998, 20
Thomas Williams, Colin Kelley and

gnuplot home:      http://www.gnup
mailing list:      gnuplot-beta@li
faq, bugs, etc:    type "help FAQ"
immediate help:    type "help" (p

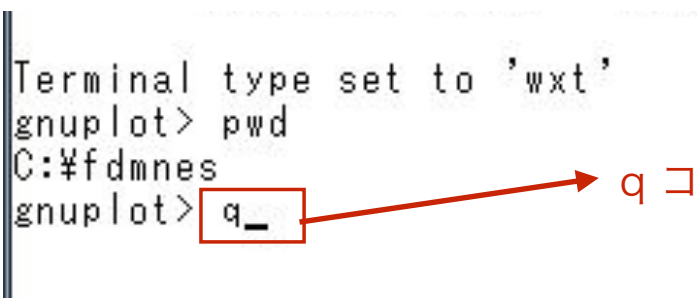
Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> pwd
C:\¥fdmnes
gnuplot> _
```

pwd コマンドで
現在位置の確認

GNUPLLOT 上でもpwd
などコマンドが使える

GNUPLLOT の作業ディレクトリが
C:\¥fdmnes であることが判る

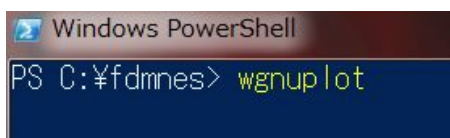
作業が終わったら、GNUPLLOT は必ず閉じる



```
Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> pwd
C:\¥fdmnes
gnuplot> q_
```

q コマンドで GNUPLLOT を閉じる

c:\¥fdmnes ディレクトリで GNUPLLOT を立ち上げるとき



```
Windows PowerShell
PS C:\¥fdmnes> wgnuplot
```

c:\¥Users¥nakada ディレクトリで GNUPLLOT を立ち上げるとき



```
Windows PowerShell
PS C:\¥Users¥nakada> wgnuplot
```

GNUPLLOT の立ち上げ場所によって、GNUPLLOT の作業場所が異なる
混乱しないように、作業を終えたら常に GUNUPLLOT は閉じる

コマンド履歴

PowerShell では過去に入力したコマンドを↑キーで呼び出せる

```
Windows PowerShell
PS C:\¥fdmnes>
```

```
Windows PowerShell
PS C:\¥fdmnes> wgnuplot
```

↑キーを押す

```
Windows PowerShell
PS C:\¥fdmnes> cd C:\¥fdmnes¥
```

↑キーを押す

過去に入力したコマンドが次々と表示される

history

過去に入力したコマンド履歴の一覧表示

```
Windows PowerShell
PS C:\¥fdmnes> history

Id CommandLine
--
1 pwd
2 ls
3 cd ..
4 pwd
5 cd ~
6 cd C:\¥fdmnes¥
7 wgnuplot

PS C:\¥fdmnes>
```

スペース

&(history -id 7)

7番目のヒストリを実行する

計算で使うディレクトリを作る

cd ¥

ルートディレクトリ(C:¥) に移動する

```
Windows PowerShell
PS C:¥fdmnes> cd ¥
```

```
Windows PowerShell
PS C:¥fdmnes> cd ¥
PS C:¥>
```

同一ドライブ(C:)ならばドライブ名(C:)は省略できる
cd C:¥ と入力するのと cd ¥ はこの場合同じになる

C:¥ 以下に

cal という名前のディレクトリを作る

スペース
mkdir cal

```
PS C:¥> mkdir cal

ディレクトリ: C:¥

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
d-----         2015/12/31      20:40             cal

PS C:¥>
```

もし mkdir コマンドが使えないとき

スペース スペース
ni cal -t od
 ↑
 スペース

ni → New-Item の略

ls

ファイル一覧を見る

cal という名前のディレクトリが出来ている

```
Windows PowerShell
PS C:¥> ls

ディレクトリ: C:¥

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
d-----         2015/12/31      20:40             cal
d-----         2014/10/15         7:15             cygwin
d-----         2015/11/06         14:38             fdmnes
d-----         2009/07/14         12:20             PerfLogs
d-r--         2015/12/25         14:46             Program Files
d-r--         2015/12/08         10:45             Program Files (x86)
d-----         2015/08/10          9:44             Python27
d-r--         2014/10/14         19:41             Users
d-----         2014/12/16         14:14             win32
d-----         2015/10/07         14:27             win64
d-----         2015/10/07         13:37             Windows
d-----         2014/12/18         17:16             work

PS C:¥>
```

PowerShell の基本

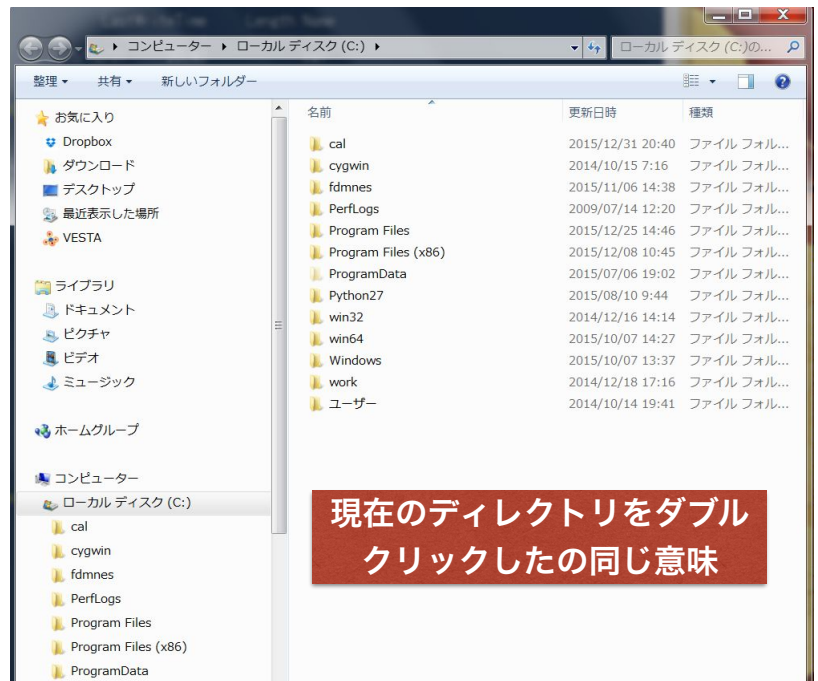
スペース
↓
start □ .
↑
ドット

```
PS C:¥> start .
```

ドットは現在のディレクトリの意味

現在のディレクトリで Explorer を開く

Explorer が立ち上がる

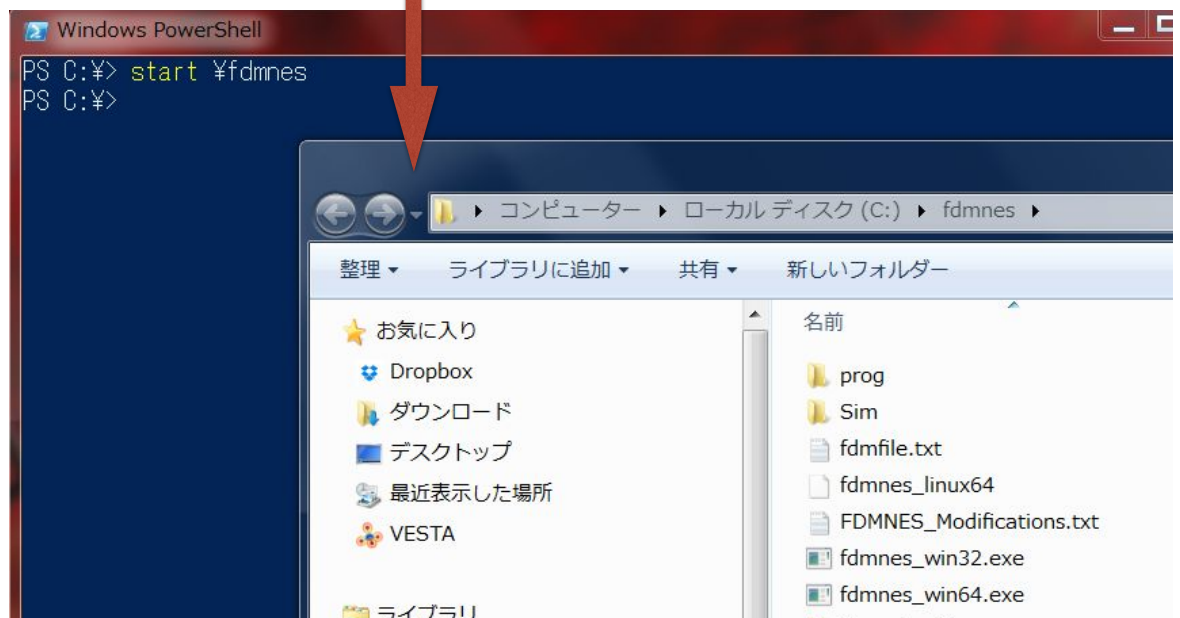


スペース
↓
start □ ¥fdmnes

¥fdmnes をダブルクリックしたのと同じ意味を持つ

```
Windows PowerShell  
PS C:¥> start ¥fdmnes
```

¥fdmnes ディレクトリが開かれる



スペース

start ¥fdmnes¥readme.txt

```
Windows PowerShell
PS C:¥> start ¥fdmnes¥readme.txt
```

¥fdmnes¥readme.txt をダブルクリックしたのと同じ

```
Windows PowerShell
PS C:¥> start ¥fdmnes¥readme.txt
PS C:¥>
```

readme.txt - メモ帳

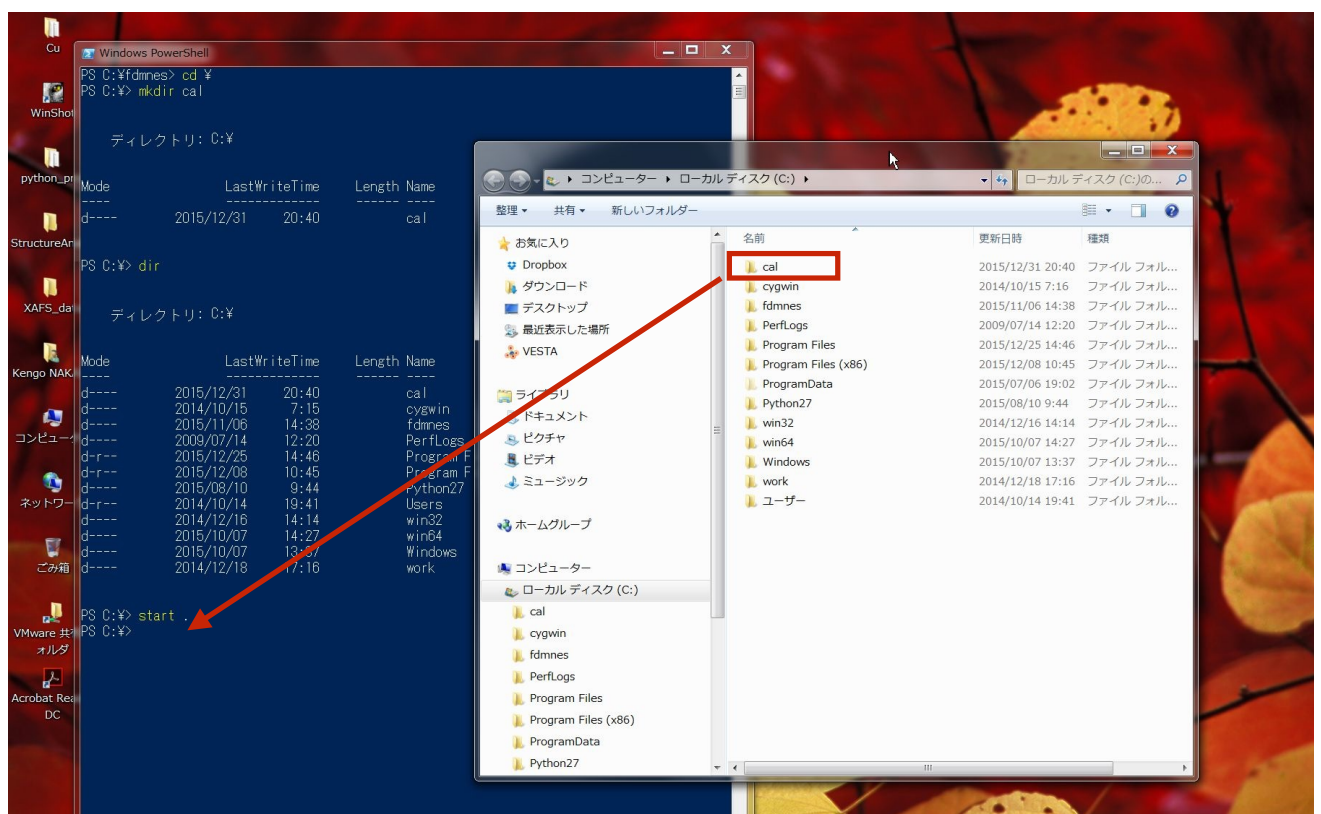
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

This package contains:

- "fdmnes_win64.exe" : executable of fdmnes for Windows 64 bits.
- "fdmnes_win32.exe" : executable of fdmnes for Windows 32 bits.
- "fdmnes_linux64" : executable of fdmnes for Linux 64 bits (Intel).
- "Sim/Test_stand/in" : directory containing a set of examples of indata
- "fdmfile.txt" : fdmnes indata file.
- "xsect.dat" : fdmnes data.
- "spacegroup.txt" : fdmnes data.
- "Manuel.pdf" : manual in French.
- "Manuel_Eng.pdf" : manual in English.
- "Manuel_cours.pdf" : course on the x-ray absorption spectroscopies in I

事前に覚えておきたい PowerShell の使い方の基礎

ディレクトリ名を PowerShell にドラックできる

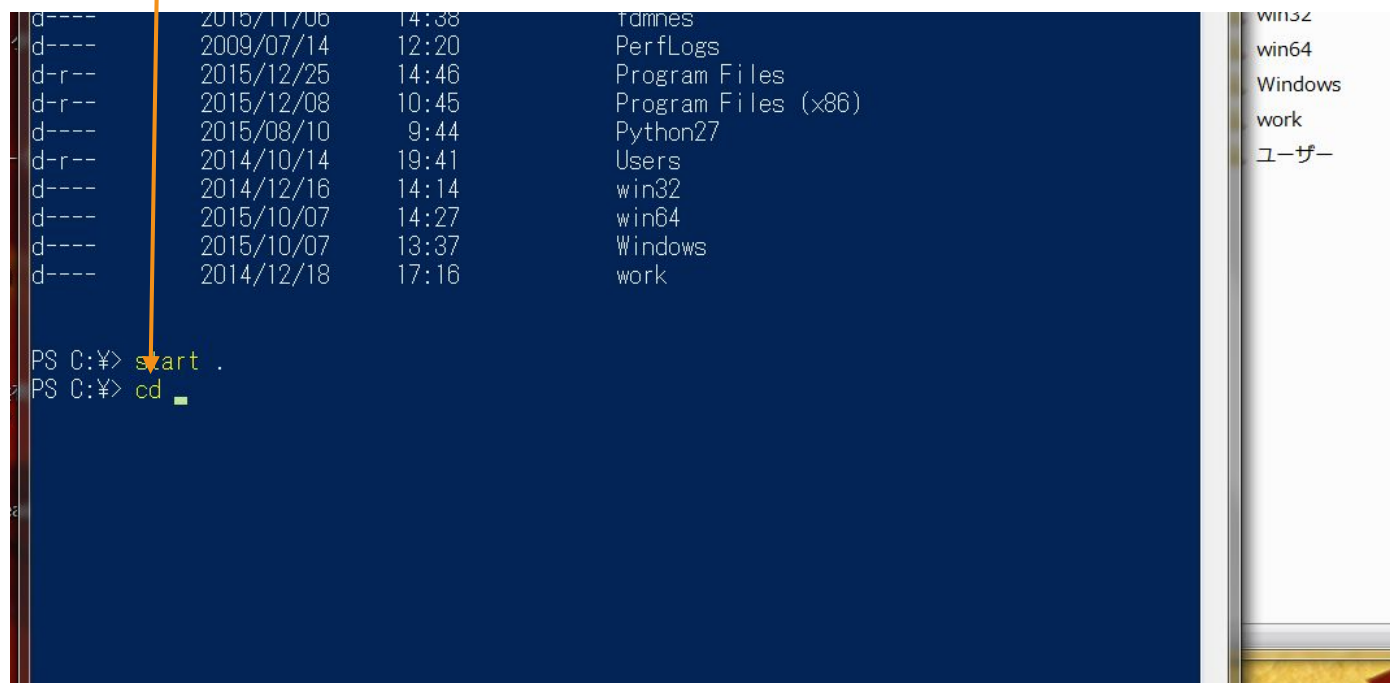


事前に覚えておきたい PowerShell の使い方の基礎

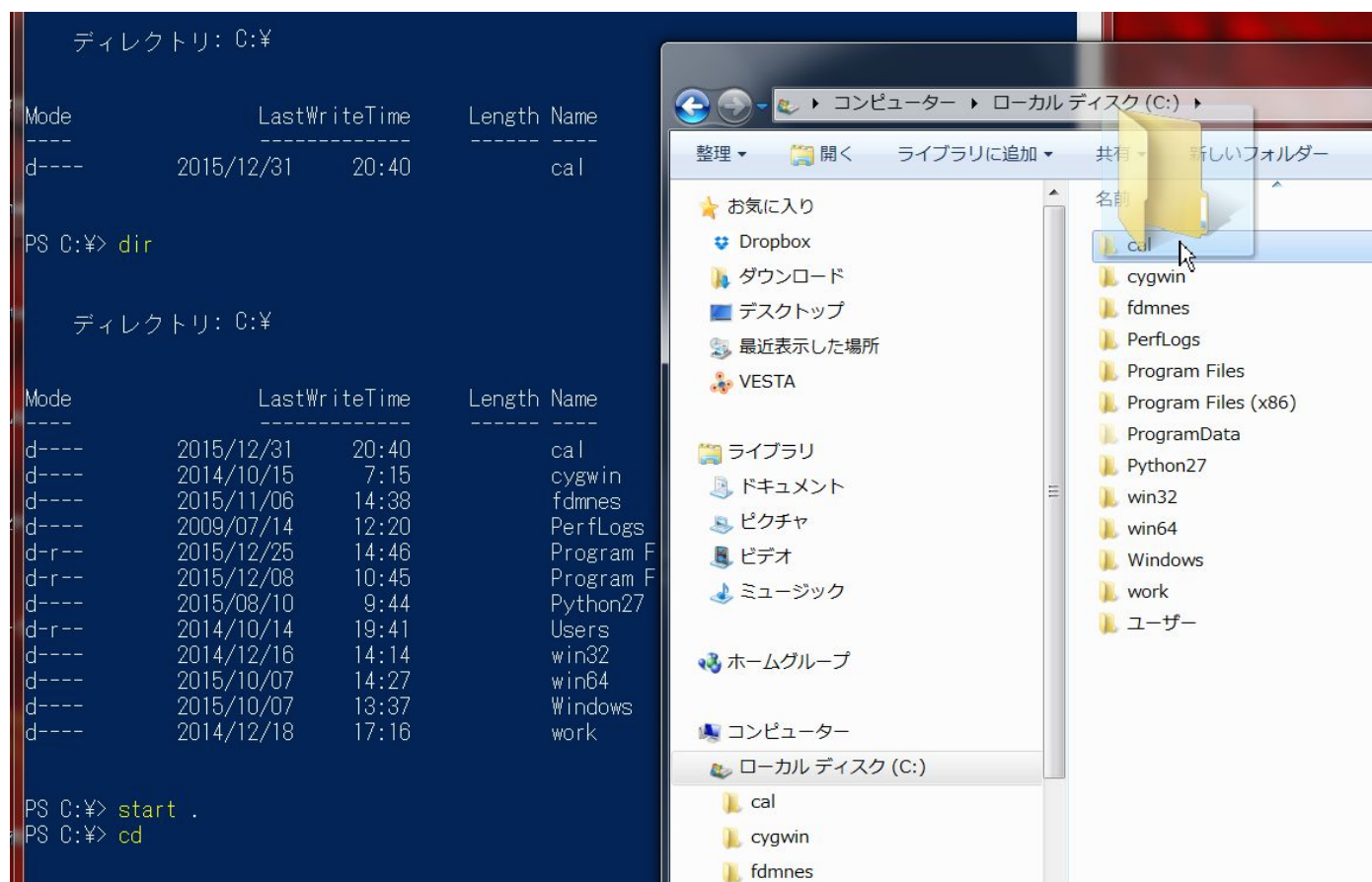
事前にコマンドを入れておく

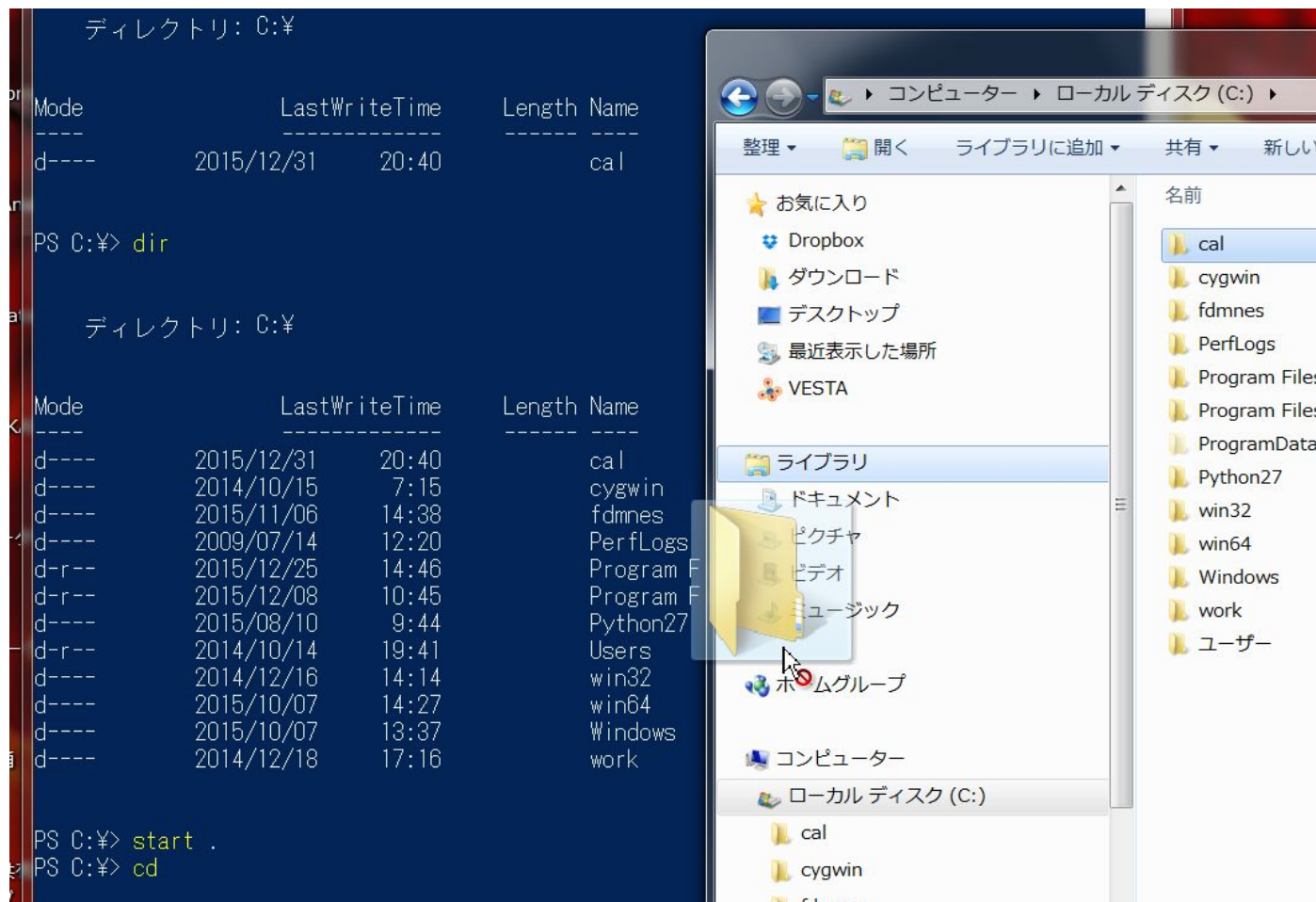
スペース

cd

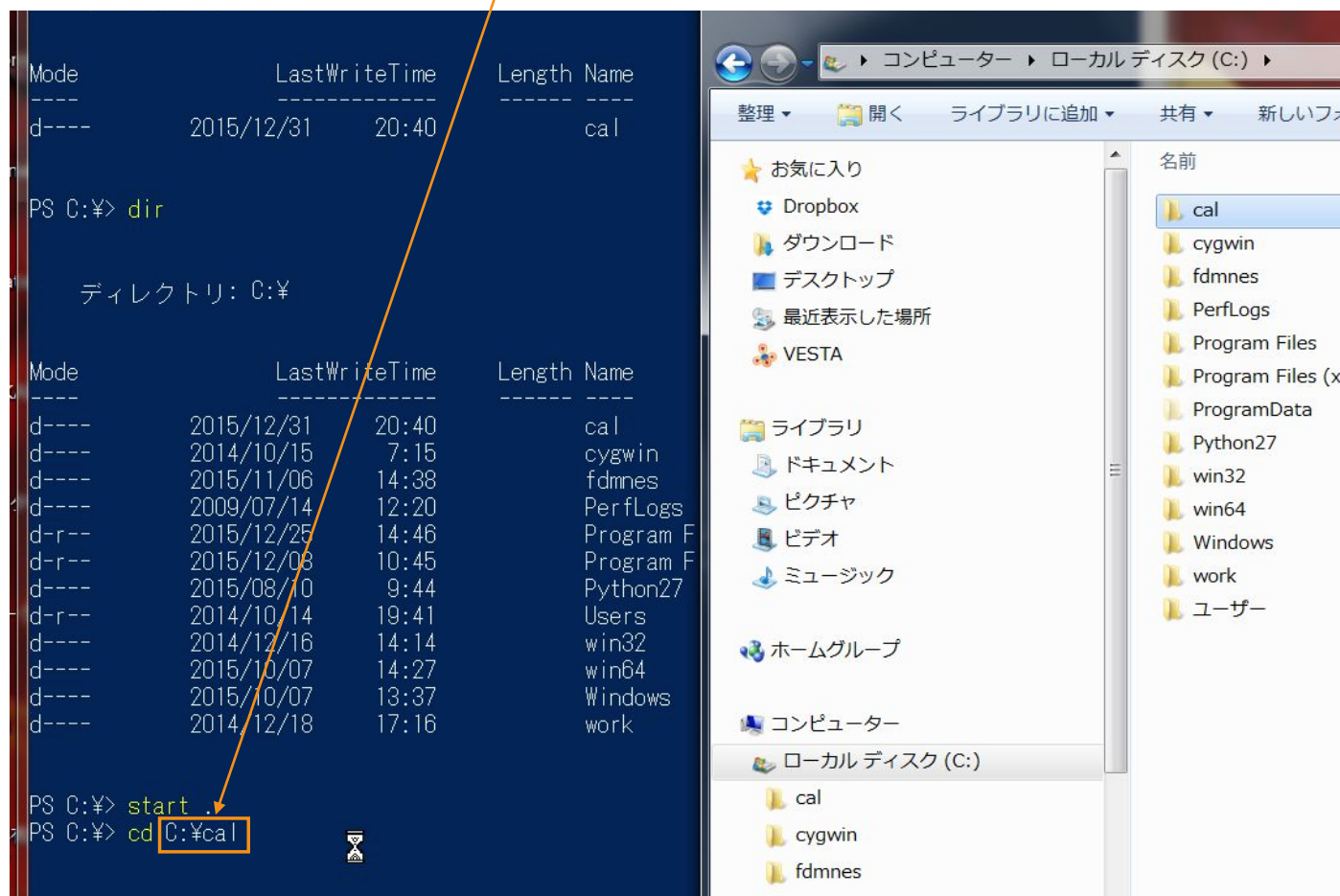


ドラッグする





ドラッグしたフォルダ名が入力される



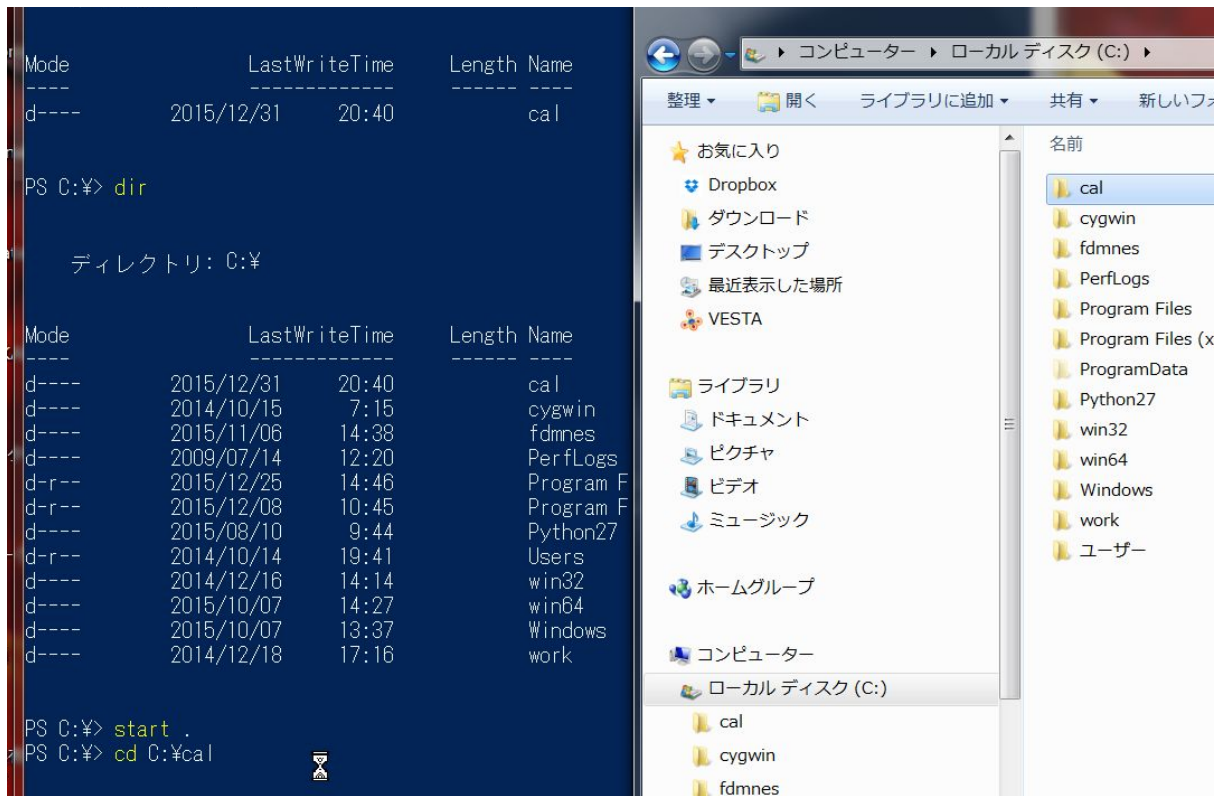
スペース

start .

フォルダのドラッグ

PowerShell → Explorer

Explorer → PowerShell



PowerShell 必須コマンド対応一覧

コマンド	エイリアス	for UNIX	for CMD
Get-ChildItem	gci, ls , dir	ls	dir
New-Item -type d	ni -type d	mkdir	md
Get-Content	gc, cat , type	cat	type
Move-Item	mi, mv , move	mv	move
Remove-Item	ri, rm , rmdir , del, erase, rd	rm	rd
Copy-Item	cpi, cp , copy	cp	copy
Get-Location	gl, pwd	pwd	cd (引数なし)
Get-Command	gcm, which	which	