

実習 FDMNESによるXANESシミュレーション

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

FDMNES

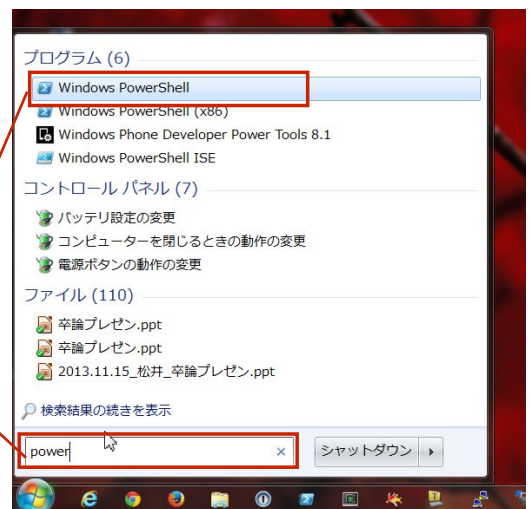
Cu-foil のお試し計算

とにかく動かしてみる

0) PowerShell を開く

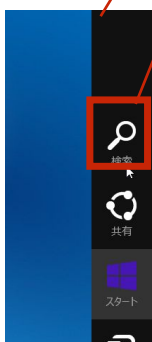
- A) スタートメニューから検索
- B) PowerShell と入力
- C) PowerShell を選択して起動

Windows 7 (64bit)

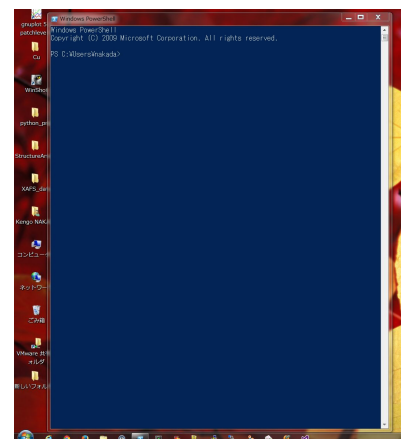


- A) チャームを開く  + C
- B) 検索をクリック
- C) PowerShell と入力
- D) PowerShell を選択して起動

Windows 8 (64bit)



PowerShell が立ち上がる



1) 計算用ディレクトリに移動する

スペース
↓

cd ¥cal

*) 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

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

カレントディレクトリが C:¥cal に移動したのが確認できる

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

1) Cu-foil の計算用ディレクトリを作成する

スペース
↓

mkdir ¥Cu

```
Windows PowerShell
PS C:¥cal> mkdir Cu

ディレクトリ: C:¥cal

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
d-----         2016/01/01          9:13         Cu

PS C:¥cal>
```

2) Cu-foil の計算用ディレクトリに移動する

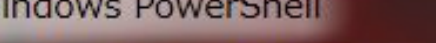
スペース
↓

cd ¥Cu

```
Windows PowerShell
PS C:¥cal> cd Cu
PS C:¥cal¥Cu>
```

3) 計算用に必要な基本データベースをコピーする

スペース ¥fdmnes ¥spacegroup.txt . ドット
cp ¥fdmnes ¥xsect.dat .
スペース



A screenshot of a Windows PowerShell terminal window. The title bar at the top says "Windows PowerShell". The terminal shows three lines of commands and their prompts:

```
PS C:\ca\Cu> cp C:\fdmnes\spacegroup.txt .
PS C:\ca\Cu> cp C:\fdmnes\xsect.dat .
PS C:\ca\Cu>
```

An orange arrow points upwards from the bottom line of the terminal towards the second command.

PowerShell の場合は Linux のシェルなどと異なり
コピー先がカレントの場合の . (ドット) は省略できる
(ただし、変な癖を付けない用に . (ドット) は付ける習慣にする)

4) Cu の計算用入力ファイルをコピーする

スペース

```
cp ¥fdmnes ¥Sim ¥Test_stand ¥in ¥Cu_inp.txt ¥inp.txt
```

スペース

```
cp ¥fdmnes ¥fdmfile.txt ¥.
```

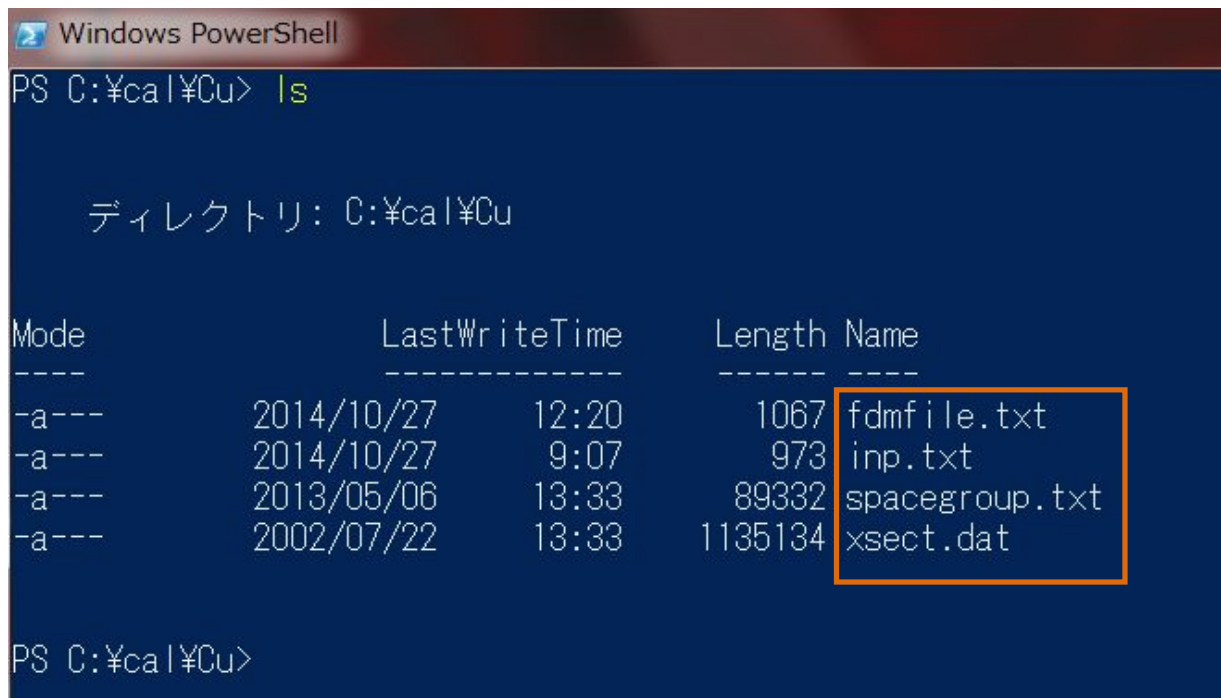
スペース

ドット

```
Windows PowerShell
PS C:\cal\Cu> cp C:\fdmnes\Sim\Test_stand\in\Cu_inp.txt inp.txt
PS C:\cal\Cu> cp C:\fdmnes\fdmfile.txt .
PS C:\cal\Cu>
```


5) コピーされたファイルを確認する

ls



```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> ls

ディレクトリ: C:\¥cal¥Cu

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---         2014/10/27   12:20           1067 fdmfile.txt
-a---         2014/10/27    9:07            973 inp.txt
-a---         2013/05/06   13:33         89332 spacegroup.txt
-a---         2002/07/22   13:33        1135134 xsect.dat

PS C:\¥cal¥Cu>
```

4つファイルがコピーされているのを確認する

合計4つのファイル(そのうち二つを編集する)

inp.txt

fdmfile.txt

spacegroup.txt

xsect.dat

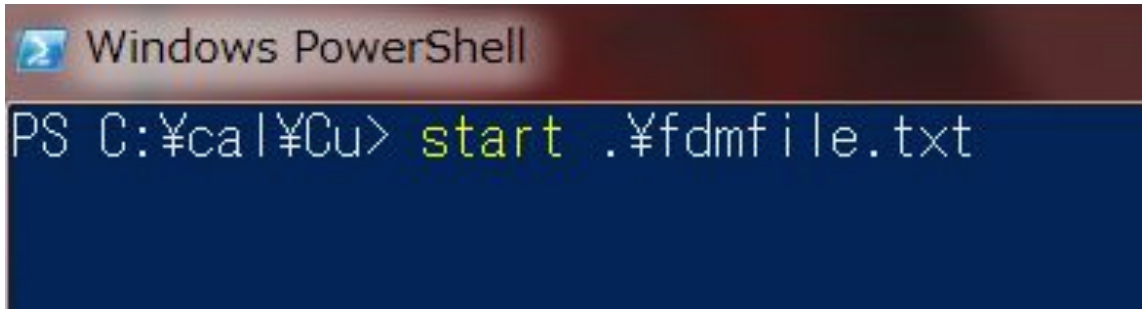
6) **fdmfile.txt** を編集する

start .¥fdmfile.txt

↑
スペース

↑
ドット

編集するファイルパスを誤解なく記述するためにファイル名の先頭に .¥ を付ける (これを付けないとパスの通ったところにある fdmfile.txt が選択される環境によってはある)



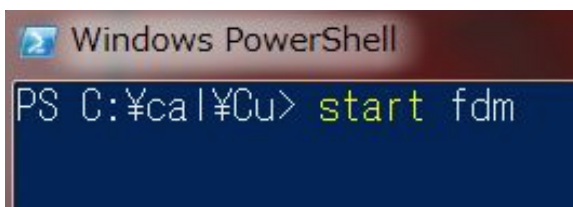
```
Windows PowerShell
PS C:¥cal¥Cu> start .¥fdmfile.txt
```

windows 上で .txt に登録してあるエディターが立ち上がる
(何も登録してなければ、デフォルトでは「メモ帳」が立ち上がる)

6) **fdmfile.txt** を編集する

- ・ファイル名が長くてめんどくさいとき
- ・誤解なく確実に目的のファイルを選択したいとき

TAB キーを活用する

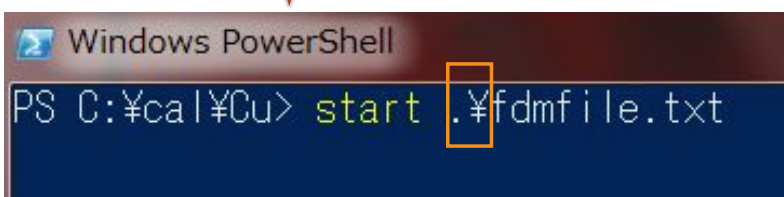


```
Windows PowerShell
PS C:¥cal¥Cu> start fdm
```

↑
スペース
start fdm

と入力後 **TAB キー**を押す

↓ **TAB キー**

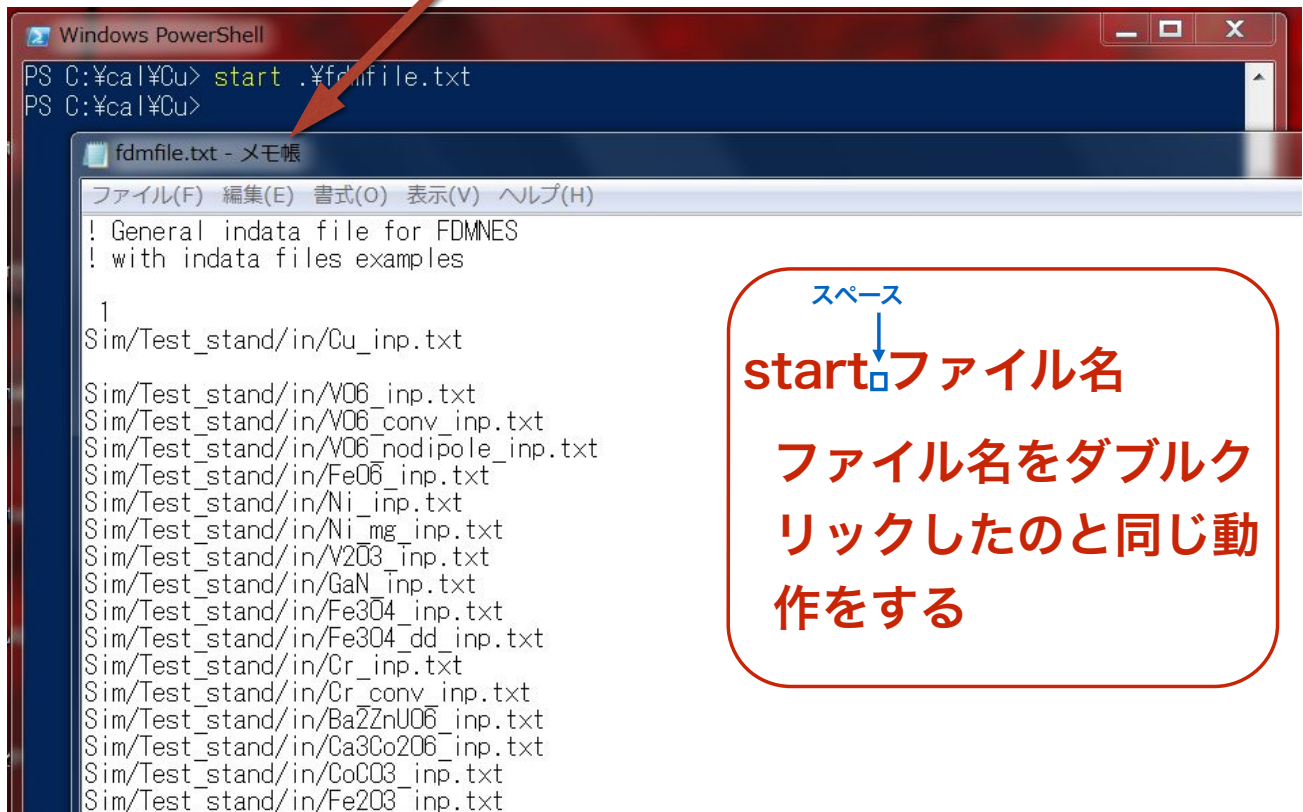


```
Windows PowerShell
PS C:¥cal¥Cu> start .¥fdmfile.txt
```

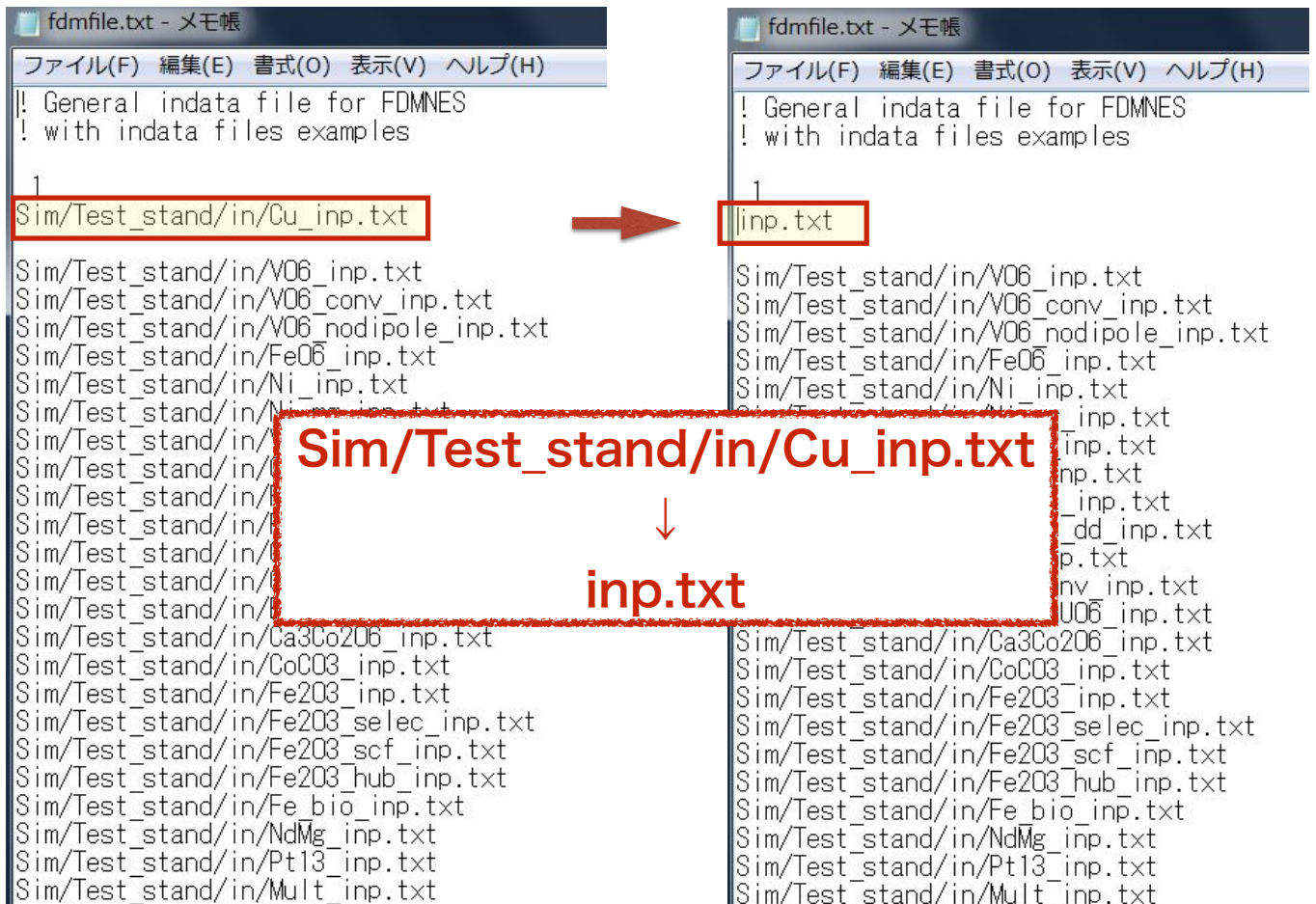
カレントディレクトリに fdm から始まるファイルが複数存在しないときは、全自動で .¥ を含めたファイル名が補完される

6) **fdmfile.txt** を編集する

.txt にメモ帳が割り当てられているときは
メモ帳が立ち上がる

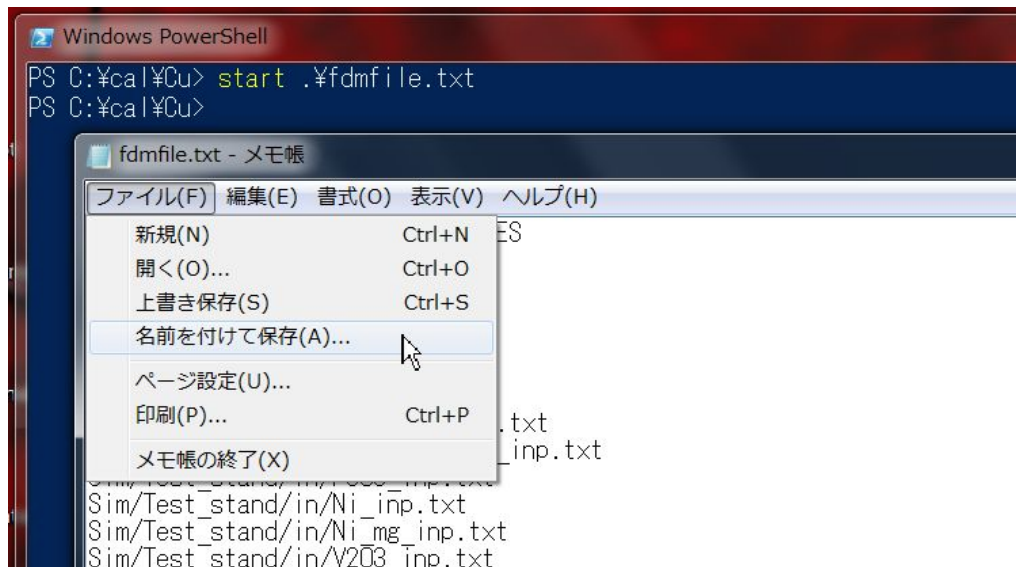


6) **fdmfile.txt** を編集する



7) 編集した **fdmfile.txt** を名前を付けた保存する

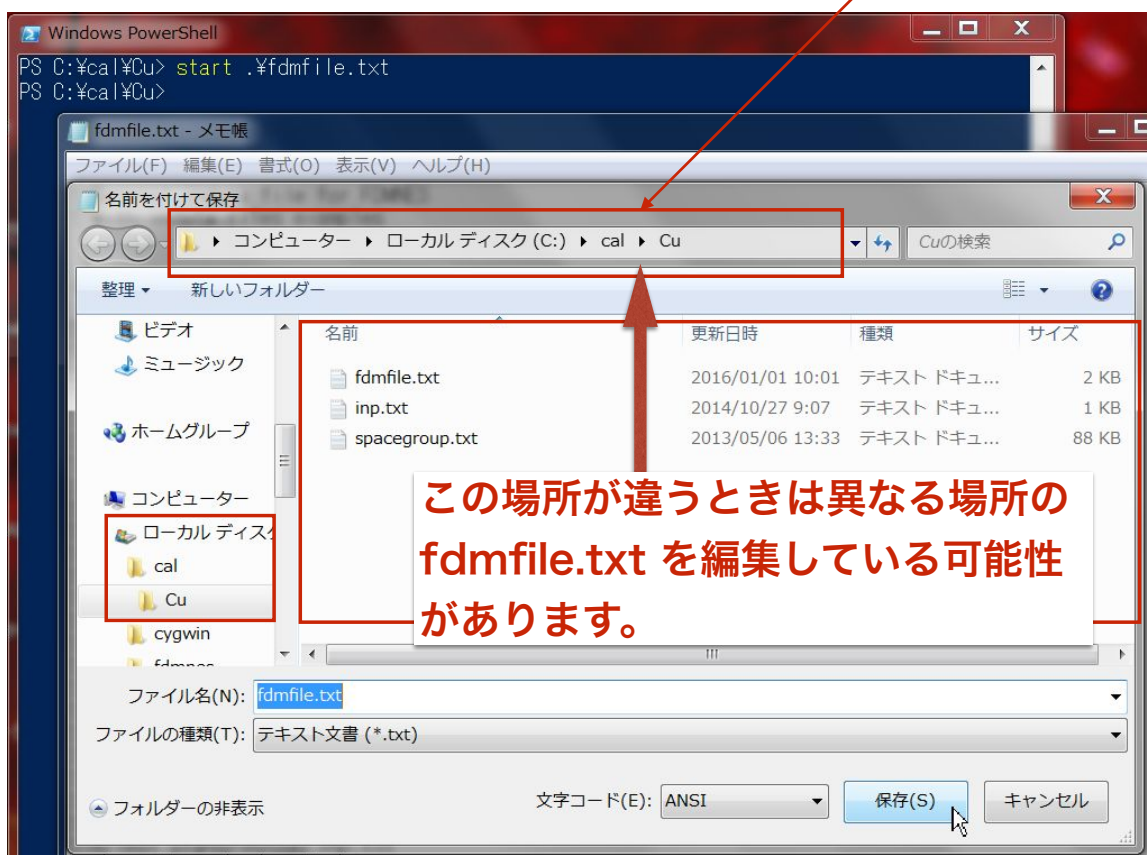
保存する場所を明確にするために
「名前を付けて保存」で保存する



7) 編集した **fdmfile.txt** を名前を付けた保存する

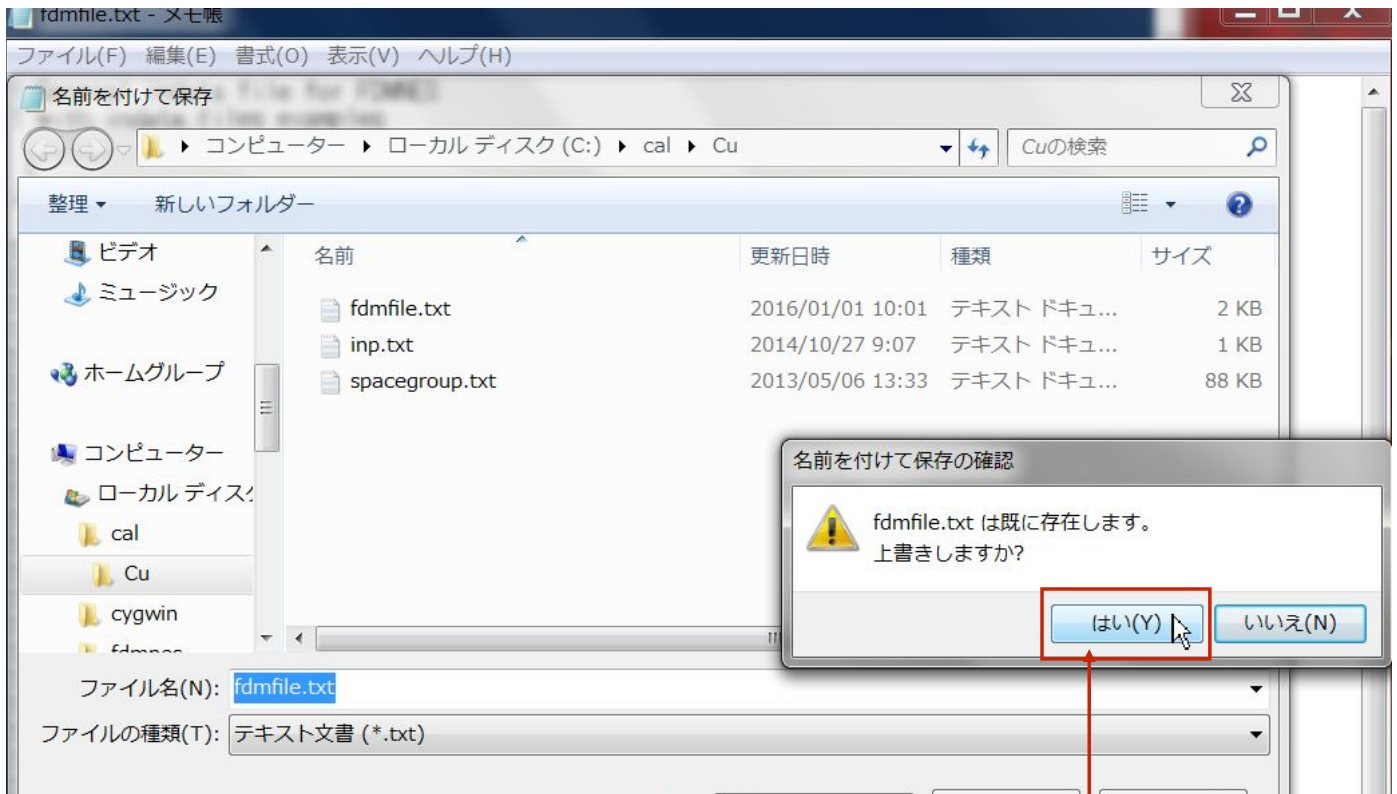
fdmfile.txt の名前のままで保存する

保存場所を確認する



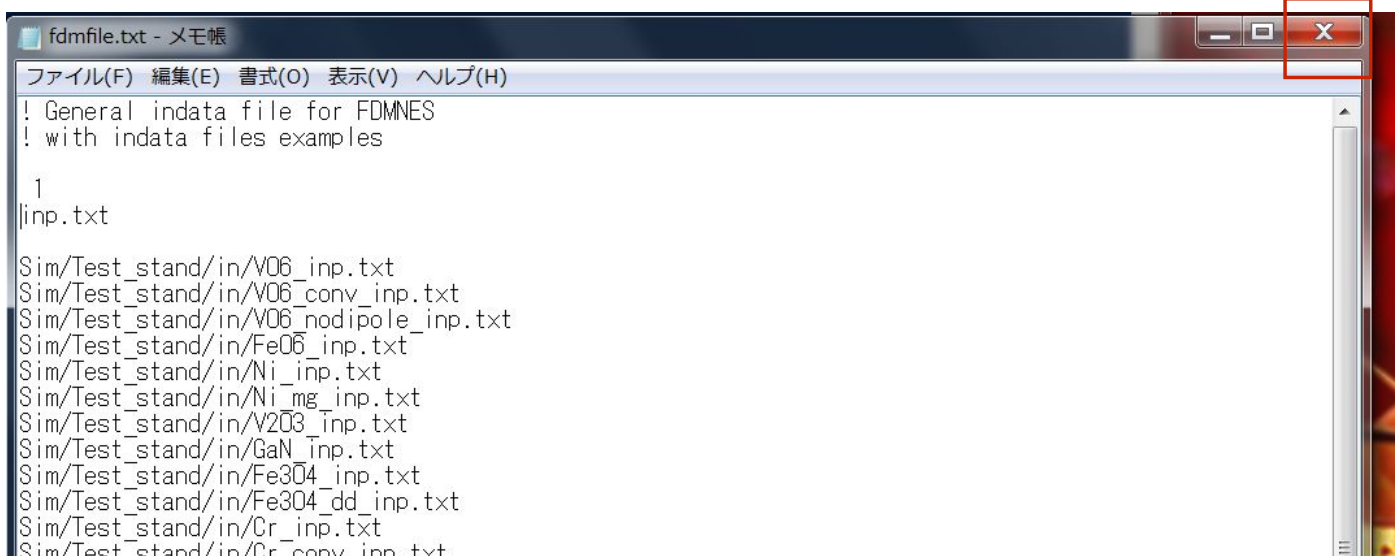
7) 編集した **fdmfile.txt** を名前を付けた保存する

保存場所を確認する



上書きします

8) 編集を終えた **fdmfile.txt** を閉じます



9) 念のため、編集したファイルをもう一度開いてみます

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> start .¥fdmfile.txt
PS C:\¥cal¥Cu>
```

fdmfile.txt を編集後、
ファイルを閉じた状態

↓ ↑ キーを押す

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> start .¥fdmfile.txt
PS C:\¥cal¥Cu> start .¥fdmfile.txt
```

直前に入力したコマンド
が画面に出てくる

↑ キーで履歴をたどれる

↓ リターンキー(Enterキー) を押す

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> start .¥fdmfile.txt
PS C:\¥cal¥Cu> start .¥fdmfile.txt
PS C:\¥cal¥Cu> start .¥fdmfile.txt

fdmfile.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
! General indata file for FDMNES
! with indata files examples

1
inp.txt

Sim/Test_stand/in/V06 inp.txt
```

もう一度開く
(内容確認)

10) inp.txt ファイルを編集する

start .¥inp.txt

```
! Fdmnes indata file
! Calculation for the copper K-edge
! Finite difference method calculation

Filout
Sim/Test_stand/Cu

Range
-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.

Radius
3.0

Crystal
3.61 3.61 3.61 90.
29 0.0 0.0 0.0
29 0.5 0.5 0.0
29 0.5 0.0 0.5
29 0.0 0.5 0.5

! Convolution keyword : broadening
Convolution
End
```

修正前

```
! Fdmnes indata file
! Calculation for the copper K-edge
! Finite difference method calculation

Filout
Cu

Range
-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.

Radius
3.0

Crystal
3.61 3.61 3.61 90.
29 0.0 0.0 0.0
29 0.5 0.5 0.0
29 0.5 0.0 0.5
29 0.0 0.5 0.5

! Convolution keyword : broadening
Convolution
End
```

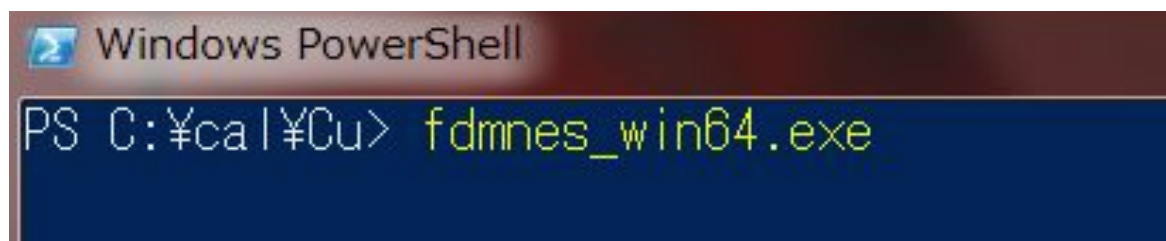
修正後

編集後は上書き保存

Sim/Test_stand/Cu

Cu

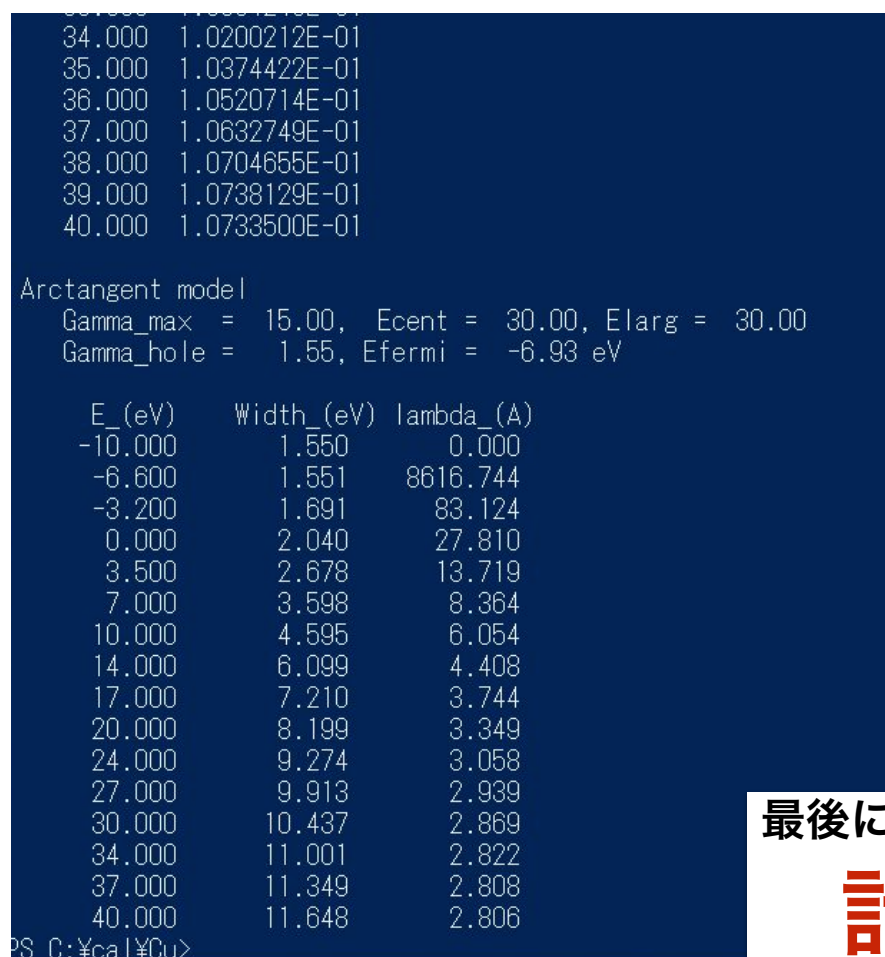
11) 計算を実行する **fdmnes_win64.exe**



```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> fdmnes_win64.exe
```

プログラムを実行する

32bit 版 windows の人は
fdmnes_win32.exe を実行してください



```
34.000 1.0200212E-01
35.000 1.0374422E-01
36.000 1.0520714E-01
37.000 1.0632749E-01
38.000 1.0704655E-01
39.000 1.0738129E-01
40.000 1.0733500E-01

Arctangent model
Gamma_max = 15.00, Ecent = 30.00, Elarg = 30.00
Gamma_hole = 1.55, Efermi = -6.93 eV

E_(eV)    Width_(eV)  lambda_(Å)
-10.000    1.550         0.000
-6.600     1.551        8616.744
-3.200     1.691        83.124
0.000      2.040        27.810
3.500      2.678        13.719
7.000      3.598         8.364
10.000     4.595         6.054
14.000     6.099         4.408
17.000     7.210         3.744
20.000     8.199         3.349
24.000     9.274         3.058
27.000     9.913         2.939
30.000    10.437         2.869
34.000    11.001         2.822
37.000    11.349         2.808
40.000    11.648         2.806

PS C:\¥cal¥Cu>
```

最後にこの画面が出てくる

計算終了

12) 計算後に出来たファイルを確認

計算の結果出来た3つのファイル (日付と時間確認)

→ 計算後に出来たものか？

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> ls

ディレクトリ: C:\¥cal¥Cu

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---         2016/01/01    10:46           2979 Cu.txt
-a---         2016/01/01    10:46        2201965 Cu_bav.txt
-a---         2016/01/01    10:46           2754 Cu_conv.txt
-a---         2016/01/01    10:20           1046 fdmfile.txt
-a---         2016/01/01    10:46            958 inp.txt
-a---         2013/05/06    13:33          89332 spacegroup.txt
-a---         2002/07/22    13:33        1135134 xsect.dat

PS C:\¥cal¥Cu>
```

計算ログ

ファイルサイズは
fdmnes のバー
ジョン(いつダウ
ンロードした
か?) によってに
よって異なります

スナップショットは FDMNES の 2015/12/16 バージョンの結果

13) ログファイルの確認

スペース
start □.¥Cu_bav.txt

Cu_bav.txt ファイル
の中身を見る

ファイルの一番最後を見る

計算時間

Have a beautiful day !

Cu_bav.txt - メモ帳			
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)			
13.000	5.716	4.719	
14.000	6.099	4.408	
15.000	6.478	4.148	
16.000	6.850	3.928	
17.000	7.210	3.744	
18.000	7.556	3.589	
19.000	7.886	3.458	
20.000	8.199	3.349	
21.000	8.494	3.256	
22.000	8.772	3.178	
23.000	9.031	3.113	
24.000	9.274	3.058	
25.000	9.502	3.011	
26.000	9.714	2.972	
27.000	9.913	2.939	
28.000	10.099	2.911	
29.000	10.273	2.888	
30.000	10.437	2.869	
31.000	10.590	2.853	
32.000	10.735	2.840	
33.000	10.872	2.830	
34.000	11.001	2.822	
35.000	11.123	2.816	
36.000	11.239	2.811	
37.000	11.349	2.808	
38.000	11.453	2.806	
39.000	11.553	2.806	
40.000	11.648	2.806	

Total time =		10.7 sCPU	
Have a beautiful day !			

FCC Cu クラスター半径 $R=3.0$ (FDM計算) conventional cell

2.6 GHz Intel Core i5(VMware on Mac)	約10秒
--	------

AMD E-450 1.65GHz	約50秒
-------------------	------

今回の実習で一回の計算で一番重い計算は

BaTiO₃ R3m (セルは cubic にする)

2.6 GHz Intel Core i5(VMware on Mac)	約16秒
--	------

AMD E-450 1.65GHz	約60秒
-------------------	------

もし、

BaTiO₃ R3m (文字通りロンボのままで計算したら AMD だと 16分)

14) 計算結果をプロットする

Cu.txt

Cu_bav.txt

Cu_conv.txt

inp.txt

fdmfile.txt

spacegroup.txt

xsect.dat

計算結果(生)

計算ログ

計算結果

14) 計算結果をプロットする(**Cu_conv.txt** の編集)

スペース
↓
start **¥Cu_conv.txt**

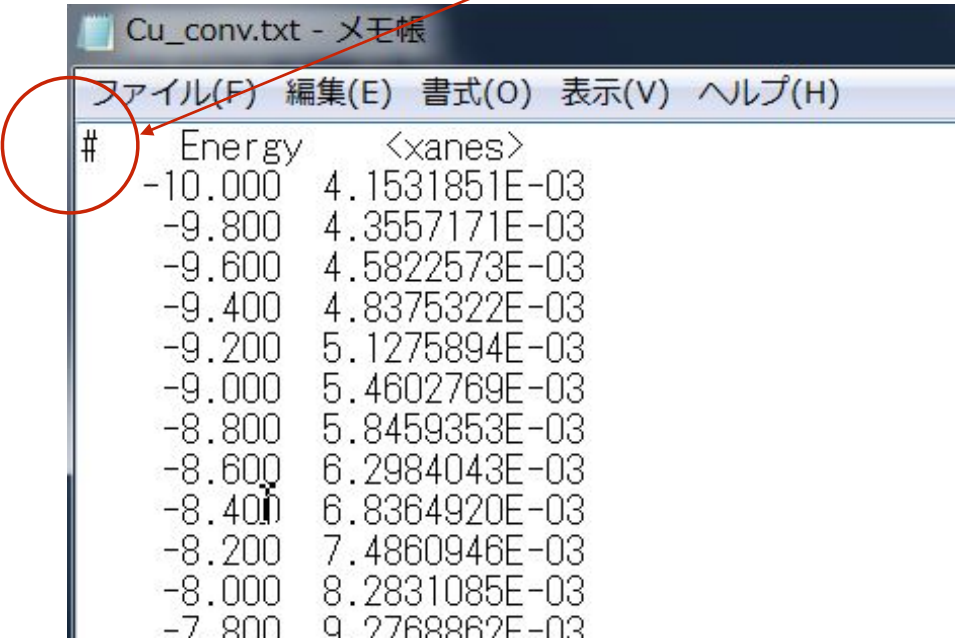


```
Cu_conv.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

Energy    <xanes>
-10.000    4.1531851E-03
-9.800     4.3557171E-03
-9.600     4.5822573E-03
-9.400     4.8375322E-03
-9.200     5.1275894E-03
-9.000     5.4602769E-03
-8.800     5.8459353E-03
-8.600     6.2984043E-03
-8.400     6.8364920E-03
-8.200     7.4860946E-03
-8.000     8.2831085E-03
-7.800     9.2768862E-03
-7.600     1.0532462E-02
-7.400     1.2125453E-02
```

14) 計算結果をプロットする(**Cu_conv.txt** の編集)

GNUPLLOT でプロットするために**1行目をコメントアウト**する



```
Cu_conv.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

# Energy    <xanes>
-10.000    4.1531851E-03
-9.800     4.3557171E-03
-9.600     4.5822573E-03
-9.400     4.8375322E-03
-9.200     5.1275894E-03
-9.000     5.4602769E-03
-8.800     5.8459353E-03
-8.600     6.2984043E-03
-8.400     6.8364920E-03
-8.200     7.4860946E-03
-8.000     8.2831085E-03
-7.800     9.2768862E-03
-7.600     1.0532462E-02
-7.400     1.2125453E-02
```

名前を付けて上書き保存

15) 計算結果をプロットする(GNUPLLOT の立ち上げ) wgnuplot

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> wgnuplot
```

16) wgnuplot 上でプロットコマンドの入力

スペース
↓
plot **'Cu_conv.txt'**

シングルクオート
(ダブルクオートでもよい)

```
gnuplot
ファイル(F) プロット(P) 表現(E) 関数(N) 一般(G) 軸(A) チャー
再表示 開く 保存 移動 印刷 ダンプ 前 次
GNUPLLOT
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 'Cu_conv.txt'
gnuplot> _
```

16) wgnuplot 上でプロットコマンドの入力

TAB 補完について

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot 'Cu_ **plot 'Cu** まで入力

↓ TABキーを押す(一回目)

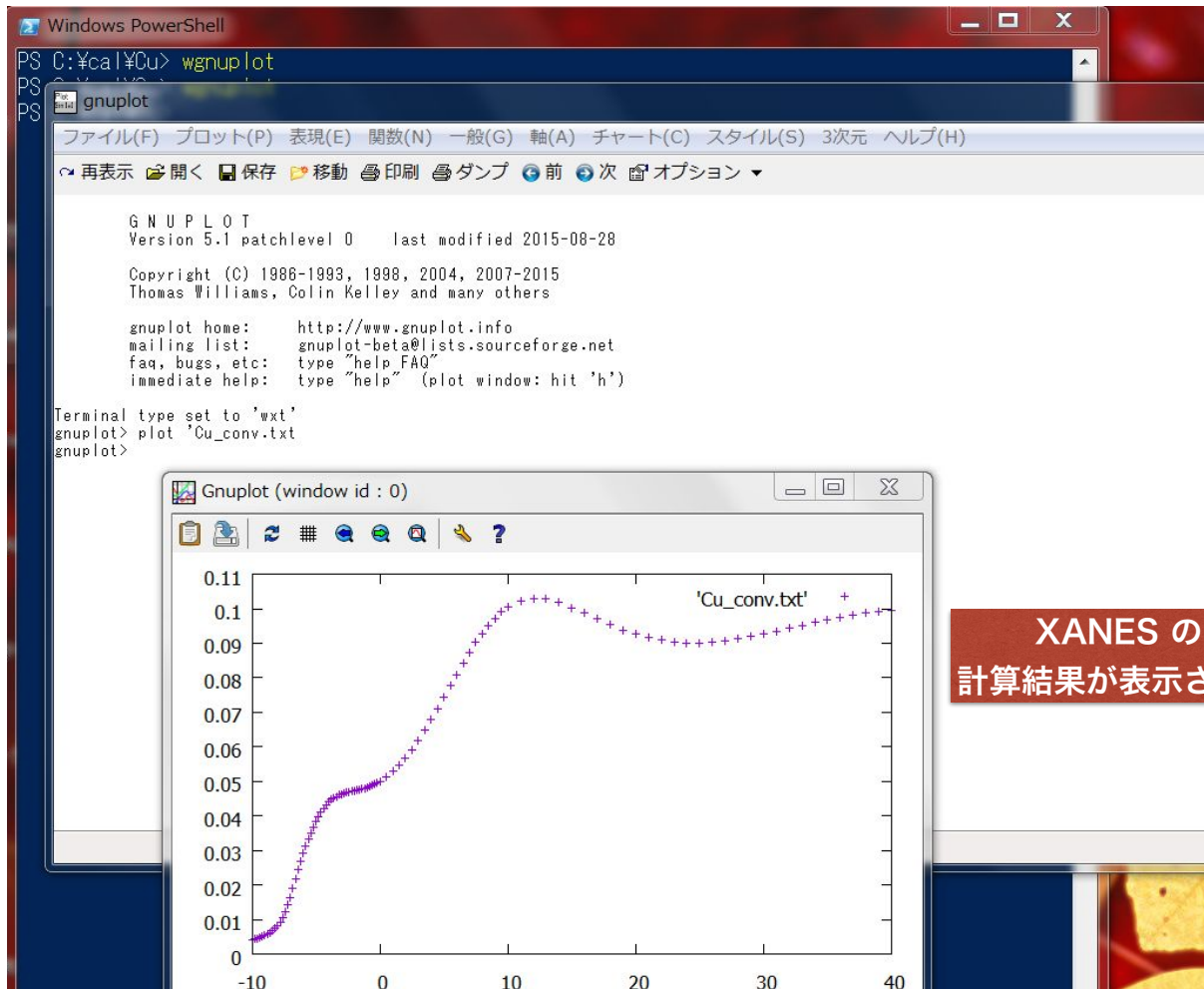
Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot 'Cu.txt_ Cu から始まるファイル名の候補1

↓ TABキーを押す(二回目)

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot 'Cu_bav.txt_ Cu から始まるファイル名の候補2

↓ TABキーを押す(三回目)

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt_ Cu から始まるファイル名の候補3

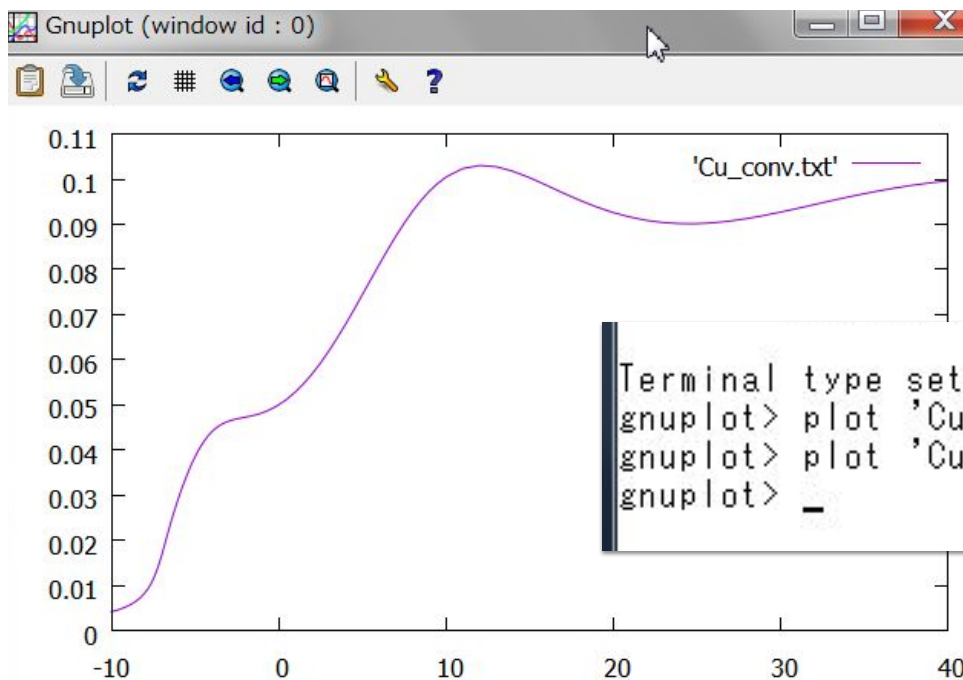


16) wgnuplot 上でプロットコマンドの入力

スペース スペース スペース

plot □ 'Cu_conv.txt' □ w □ l

with line の略



17) GNUPLOT の結果を画像ファイルとして保存

gnuplot 上で

スペース
↓

`set terminal png`

出力形式を png にする

`set output 'Cu.png'`

出力ファイル名を Cu.png にする

`plot 'Cu_conv.txt' w l`

plot し直す (replot コマンドでもよい)

`q`

gnuplot を閉じる

```
Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> set terminal png
Terminal type set to 'png'
Options are 'nocrop enhanced size 640,480 font "arial,12" '
gnuplot> set output 'Cu.png'
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt' w l
gnuplot> q_
```

注意) プロットは画面に表示されない

画面に表示される代わりにファイルに出力される

17) GNUPLOT の結果を画像ファイルとして保存

画面に表示される代わりに出力されたファイル

ls

```
PS C:\¥cal¥Cu> ls

ディレクトリ: C:\¥cal¥Cu

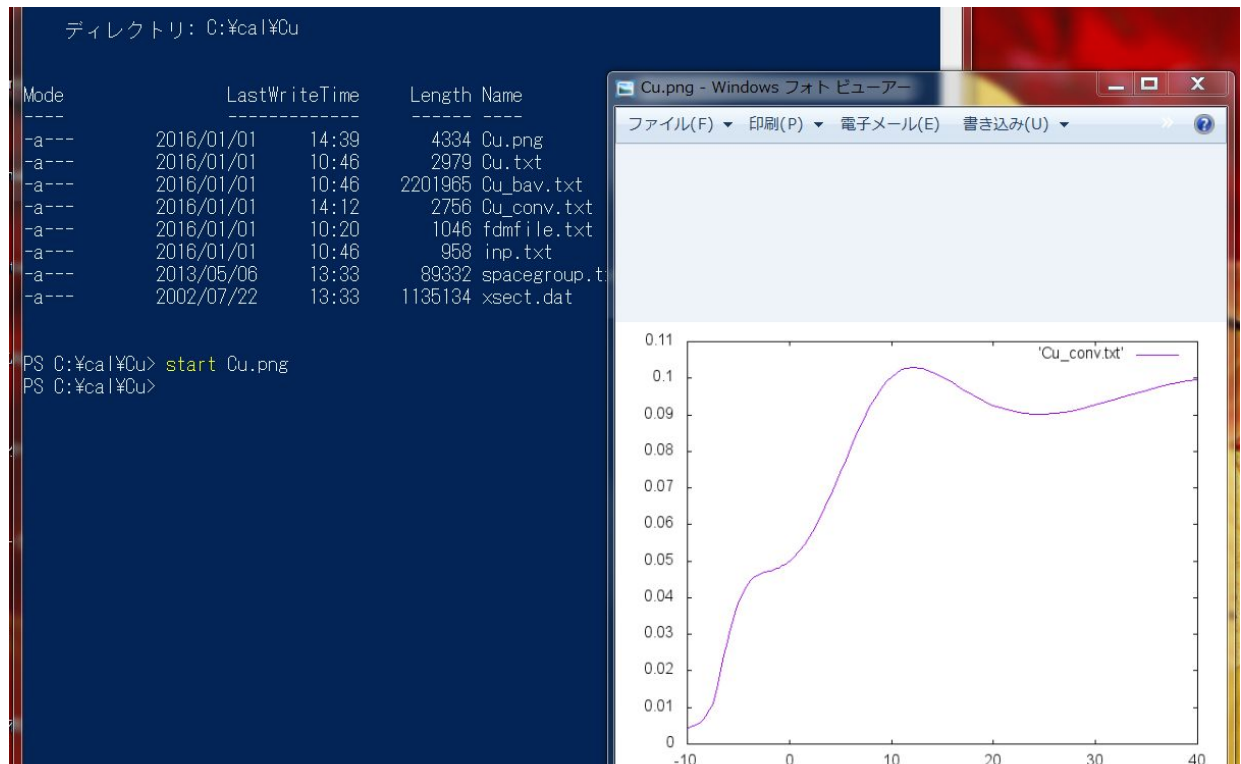
Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---             2016/01/01   14:39           4334 Cu.png
-a---             2016/01/01   10:46           2979 Cu.txt
-a---             2016/01/01   10:46      2201965 Cu_bav.txt
-a---             2016/01/01   14:12           2756 Cu_conv.txt
-a---             2016/01/01   10:20           1046 fdmfile.txt
-a---             2016/01/01   10:46            958 inp.txt
-a---             2013/05/06   13:33          89332 spacegroup.txt
-a---             2002/07/22   13:33       1135134 xsect.dat

PS C:\¥cal¥Cu>
```

18) Cu.png ファイルの表示

スペース
↓
start Cu.png

拡張子 *.png に割り当てられているビューアが起動
(windows7 だとフォトビューアー)



FDMNES 計算の基本的な流れ

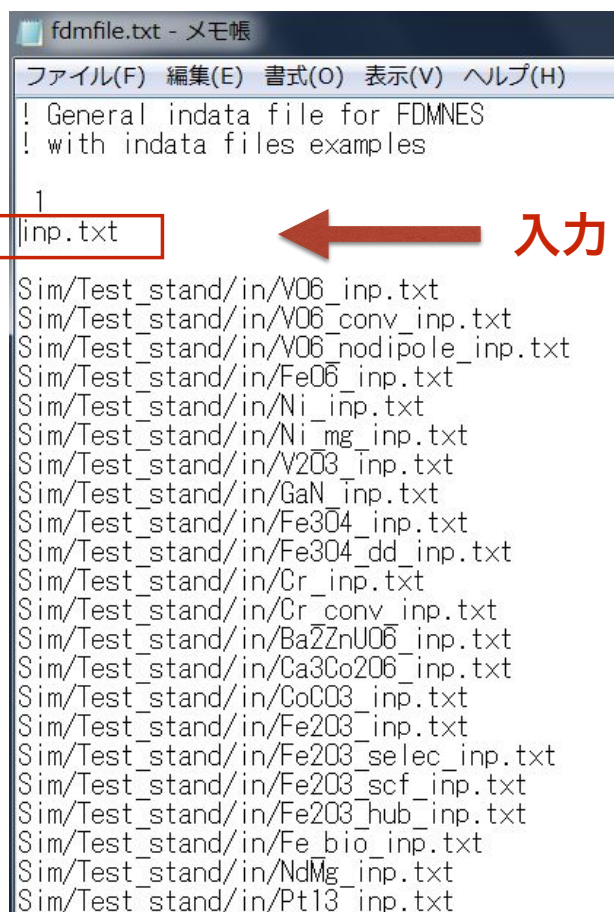
計算に必要なファイル (基本となる入力ファイル)

xsect.dat 原子のデータベース
spacegroup.txt 空間群のデータベース

fdmfile.txt 入力ファイルの名前を指定
(複数の入力ファイルの連続実行が可能)

inp.txt 入力ファイル
(構造、吸収端、クラスター半径、、、)

fdmfile.txt



```
fdmfile.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
! General indata file for FDMNES
! with indata files examples

1
inp.txt
Sim/Test_stand/in/V06_inp.txt
Sim/Test_stand/in/V06_conv_inp.txt
Sim/Test_stand/in/V06_nodipole_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe06_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Ni_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Ni_mg_inp.txt
Sim/Test_stand/in/V203_inp.txt
Sim/Test_stand/in/GaN_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe3O4_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe3O4_dd_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Cr_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Cr_conv_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Ba2ZnU06_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Ca3Co206_inp.txt
Sim/Test_stand/in/CoCO3_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe203_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe203_selec_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe203_scf_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe203_hub_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe bio_inp.txt
Sim/Test_stand/in/NdMg_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Pt13_inp.txt
```

入力ファイル名を inp.txt とする

今回の実習ではこのファイルはもう編集しません

第一原理計算(MD計算、構造緩和計算)の結果
CIF, PDB 構造情報
自分で作成したモデル構造

構造の情報

計算の詳細

inp.txt

電子状態計算 (FDM or 多重散乱理論)

XANESスペクトルの計算

Cu.txt

XANESスペクトルの畳み込み (broadening)

Cu_conv.txt

XANESスペクトル

基本入力ファイルの解説

-基本編-

fdmfile.txt

入力ファイルの指定

連続して複数の入力ファイルで計算を実行できる

例) ! General indata file for FDMNES
! with indata files examples

2

Sim/Test_stand/in/**Cu_inp.txt**

Sim/Test_stand/in/VO6_inp.txt

注意) あまりこの機能は使わない方が健全

(複数のファイルを別のディレクトリで出力するのオススメしない)

入力と出力は同じディレクトリ内で完結すべき(同じところに置くべき)
連続処理をさせたいときは、スクリプト(windowsならばバッチ)を書く

inp.txt

Filout

Cu

出力ファイルのベースとなる名前
(パス込み)

Range

-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.

計算するエネルギー範囲

Radius

3.0

クラスター半径

Crystal

3.61 3.61 3.61 90. 90. 90.

29 0.0 0.0 0.0

29 0.5 0.5 0.0

29 0.5 0.0 0.5

29 0.0 0.5 0.5

計算する構造

Convolution

畳み込み(broadening)

End

inp.txt

Filout
Cu

Filout を Cu としたとき

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> ls

出力ファイルのヘッダ部分が Cu になる

ディレクトリ: C:\¥cal¥Cu

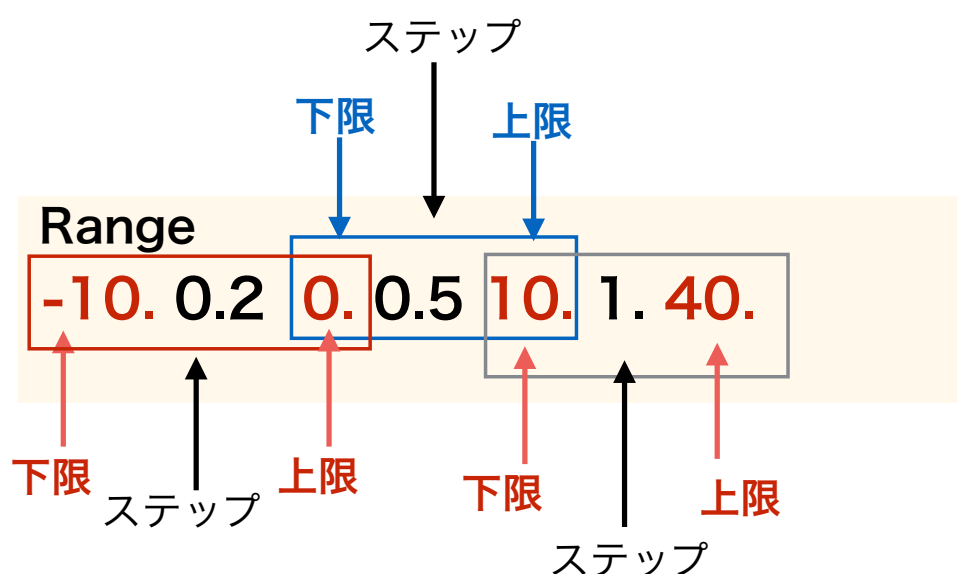
Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---            2016/01/01    14:39         4334 Cu.png
-a---            2016/01/02     9:07         2981 Cu.txt
-a---            2016/01/01    10:46    2201965 Cu_bav.txt
-a---            2016/01/01    14:12         2756 Cu_conv.txt
-a---            2016/01/01    10:20         1046 fdmfile.txt
-a---            2016/01/01    10:46          958 inp.txt
-a---            2013/05/06    13:33     89332 spacegroup.txt
-a---            2002/07/22    13:33    1135134 xsect.dat

PS C:\¥cal¥Cu>
```

inp.txt

計算するエネルギー範囲

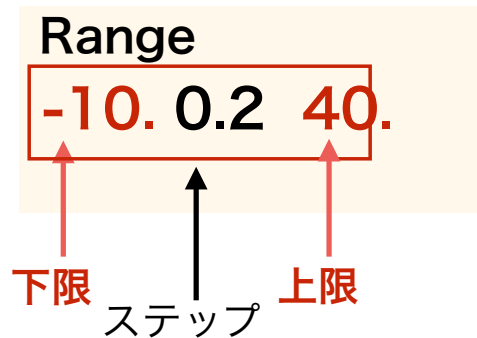
スペースで区切る



inp.txt

計算するエネルギー範囲

スペースで区切る



入力パラメーターは複数のタグとそれに関連付けられたパラメータで定義される

Tag
Parameter

基本ルール

- ◆コメントアウト記号は！ (半角)
- ◆タグと関連づけられたパラメータの間にコメントは付けられない
- ◆大文字と小文字は区別しない
- ◆タブは使えない
- ◆行頭のスペースは無視される
- ◆タグは全部の文字の入力が必要(省略不可)

タグやパラメーターの間には空行を開けなくてもOK

```
Filout
Cu
Range
-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.
Radius
3.0
```

スペースの入れ方は自由

```
Filout
Cu
Range
-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.
Radius
3.0
```

コメント

```
Filout ! comment
Cu
Range ! 日本語でもOK
-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.
Radius
3.0
```

注意) (値が必須のタグの場合)

タグと値の間にはコメントは付けられない

```
Fileout
! Fe2O3
Sim/Test_stand/Fe2O3
```

ダメな場合がある

```
Fileout
Sim/Test_stand/Fe2O3
! Fe2O3
```

問題なし

入力ファイルの改行コードは LF でも LF+CR でも OK
出力は windows のときはそれにあわせて LF+CR になる

基本入力ファイルの解説

-構造情報の作成-

Crystal						
	3.61	3.61	3.61	90.	90.	90.
29	0.0	0.0	0.0			
29	0.5	0.5	0.0			
29	0.5	0.0	0.5			
29	0.0	0.5	0.5			

原子番号

内部座標

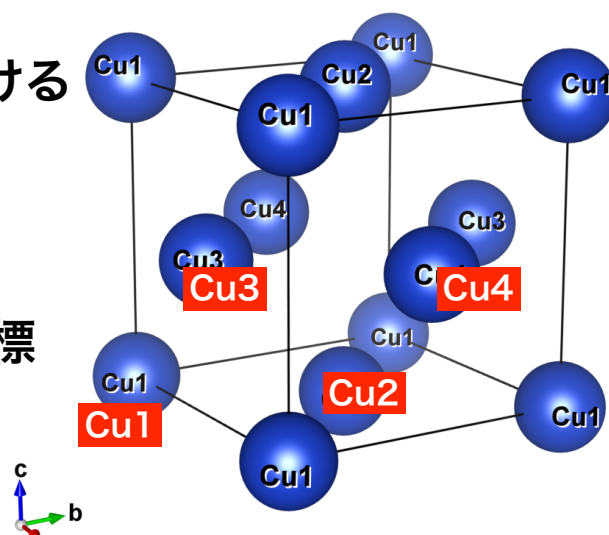
FCC Cu

$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$

1) コンベンショナルなセルで書ける

$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$

2) 内部座標はセル内での相対座標



空間群を使った記述も可能

空間群の指定

225, Fm-3m

Spgroup
Fm-3m

Crystal

3.61 3.61 3.61 90. 90. 90.

29 0.0 0.0 0.0

セルはコンベンショナルに記述

4a サイト 0,0,0

空間群を使って記述

Spgroup
Fm-3m

Crystal

3.61 3.61 3.61 90. 90. 90.

29 0.0 0.0 0.0

P1 で記述

Crystal

3.61 3.61 3.61 90. 90. 90.

29 0.0 0.0 0.0

29 0.5 0.5 0.0

29 0.5 0.0 0.5

29 0.0 0.5 0.5

同じ構造

FCC Cu

記述方法が異なるだけ

同じ構造なので同じXANESスペクトルが描ける

計算するときには内部的に自動で対称性を探す

基本入力ファイルの解説

-クラスター半径-

Filout

Cu

FDMNES ではクラスター計算が行われている

Range

-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.

Radius

3.0

クラスター半径

構造情報 (Crystal,Molecule)



Crystal

	3.61	3.61	3.61	90.	90.	90.
29	0.0	0.0	0.0			
29	0.5	0.5	0.0			
29	0.5	0.0	0.5			
29	0.0	0.5	0.5			

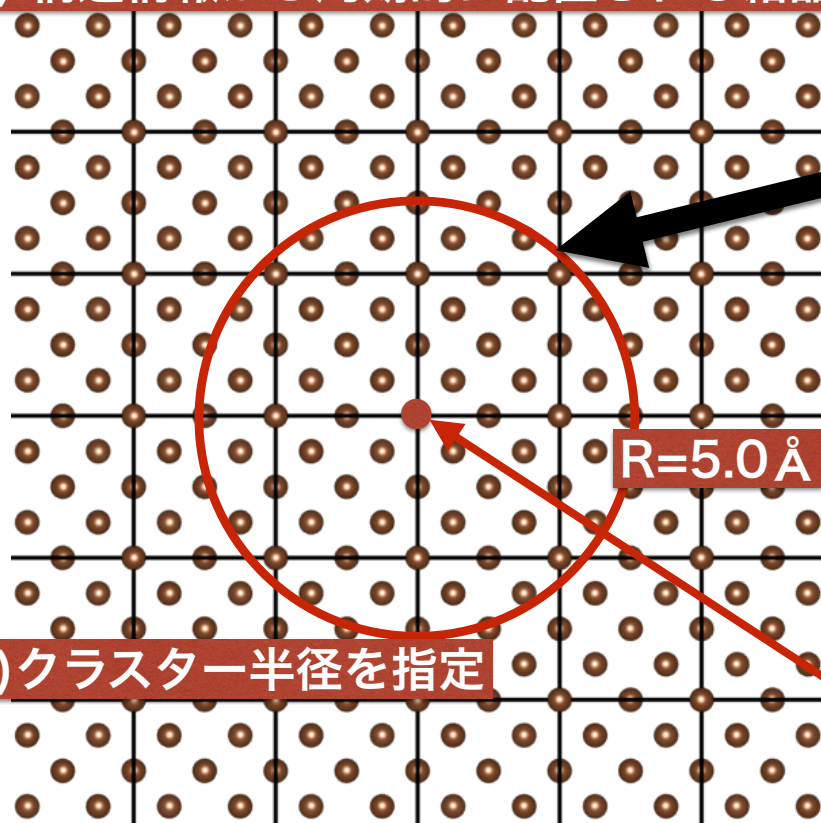
構造情報

吸収原子を中心にしてクラスター半径内の原子でクラスターを作る

Convolution

End

1) 構造情報から周期的に配置される結晶を作る



バルクの計算
では十分な大
きさのクラス
ターが必要

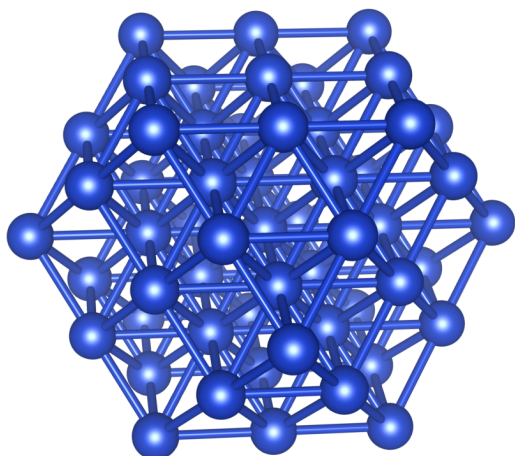
2) クラスター半径を指定

吸収原子
(ホールが空く)

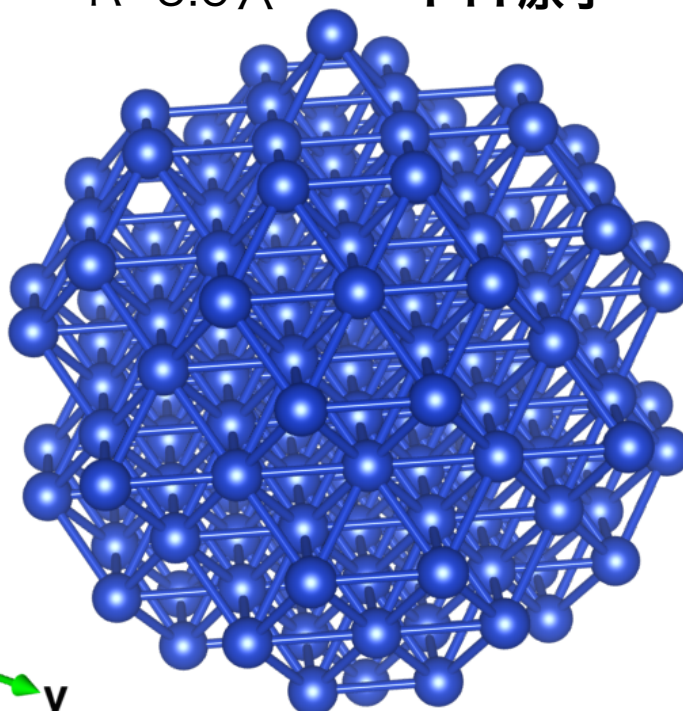
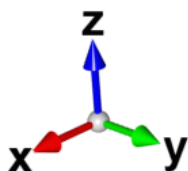
FCC Cu

吸収原子を中心とした半径

$R=3.0 \text{ \AA}$ 55原子

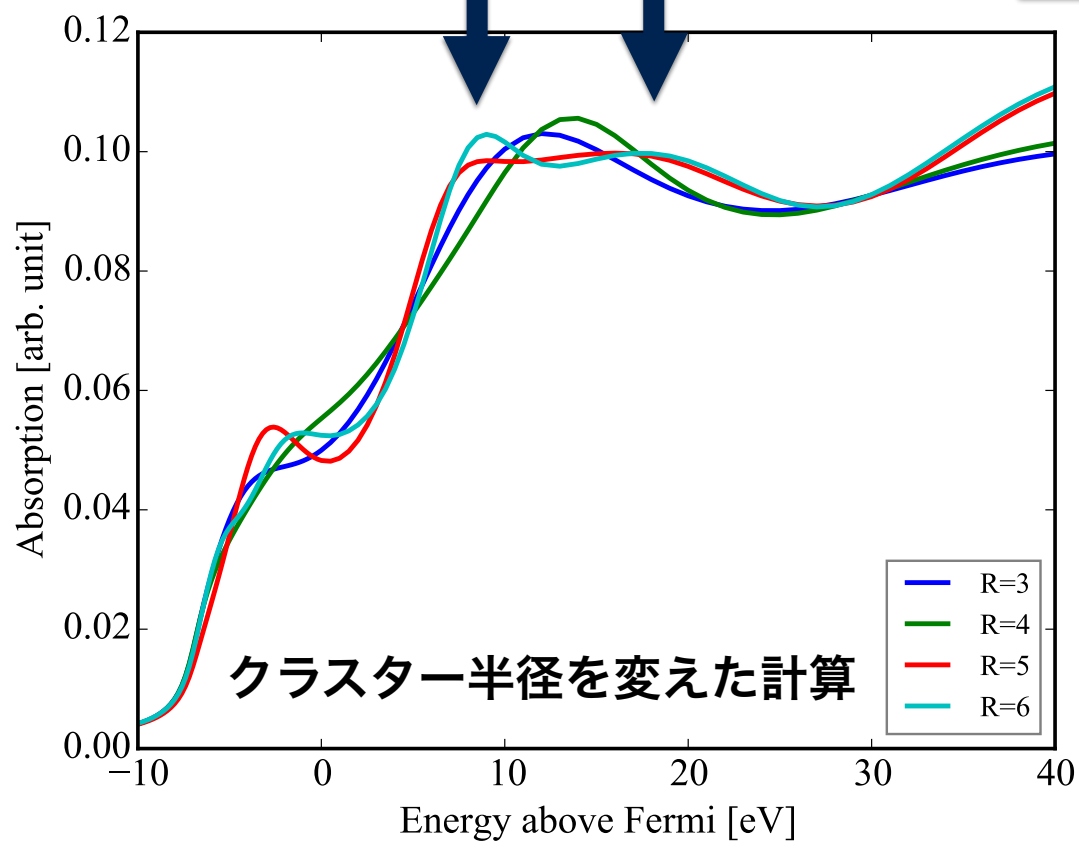


$R=5.0 \text{ \AA}$ 141原子

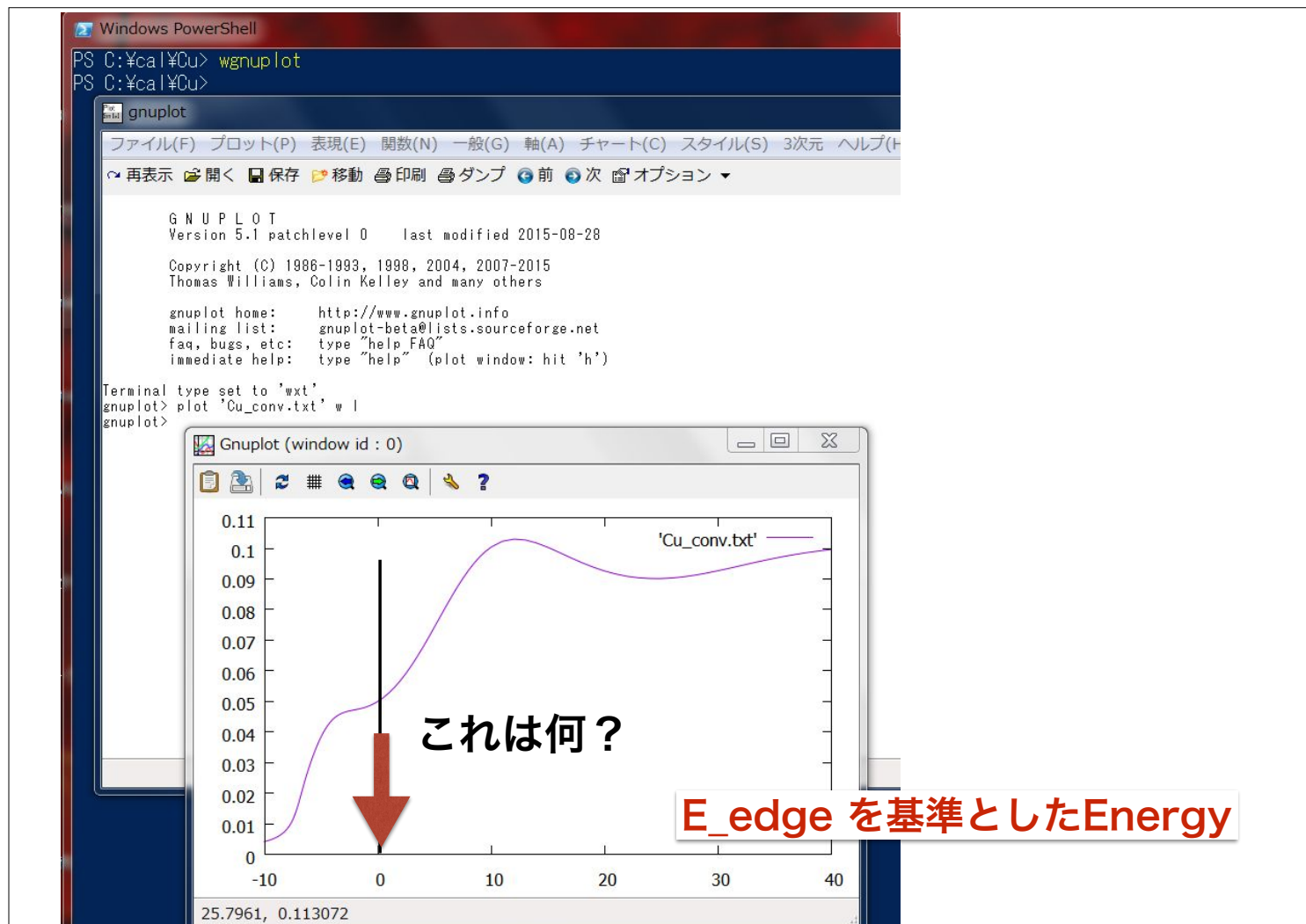


少なくとも $R=6\text{\AA}$ 以上で無いと
二つのピーク構造が出てこない

FCC Cu
FDM



基本出力ファイルの解説
-フェルミレベル-



計算ログ(Cu_bav.txt)の中からフェルミレベルを取り出す

スペース パイプ(縦棒) スペース

cat .¥Cu_bav.txt | Select-String Efermi

Cu_bav.txt ファイル中の Efermi という文字がある行を検索

Windows PowerShell

```
PS C:\¥cal¥Cu> cat .¥Cu_bav.txt | Select-String Efermi
```

Gamma_hole = 1.55, Efermi = -6.93 eV

PS C:\¥cal¥Cu>

Select-String
grep と同等のコマンド

エイリアスがオススメ
notepad \$profile
alias grep Select-String

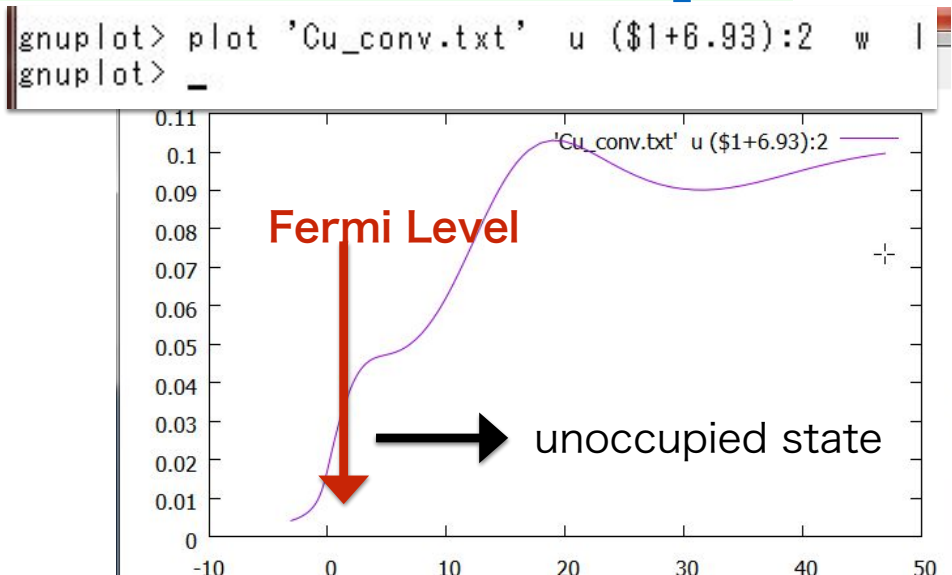


GNU PLOT で E_F をゼロとして表示し直す

1) wgnuplot

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal\¥Cu> wgnuplot
```

2) plot 'Cu_conv.txt' u (\$1+6.93):2 w l



3) plot が終わったらGNU PLOTを閉じる

計算ログ(Cu_bav.txt)の中から Edge Energy を取り出す

スペース スペース スペース

cat .¥Cu_bav.txt | Select-String E_edge

Cu_bav.txt ファイル中の E_{edge} という文字がある行を検索

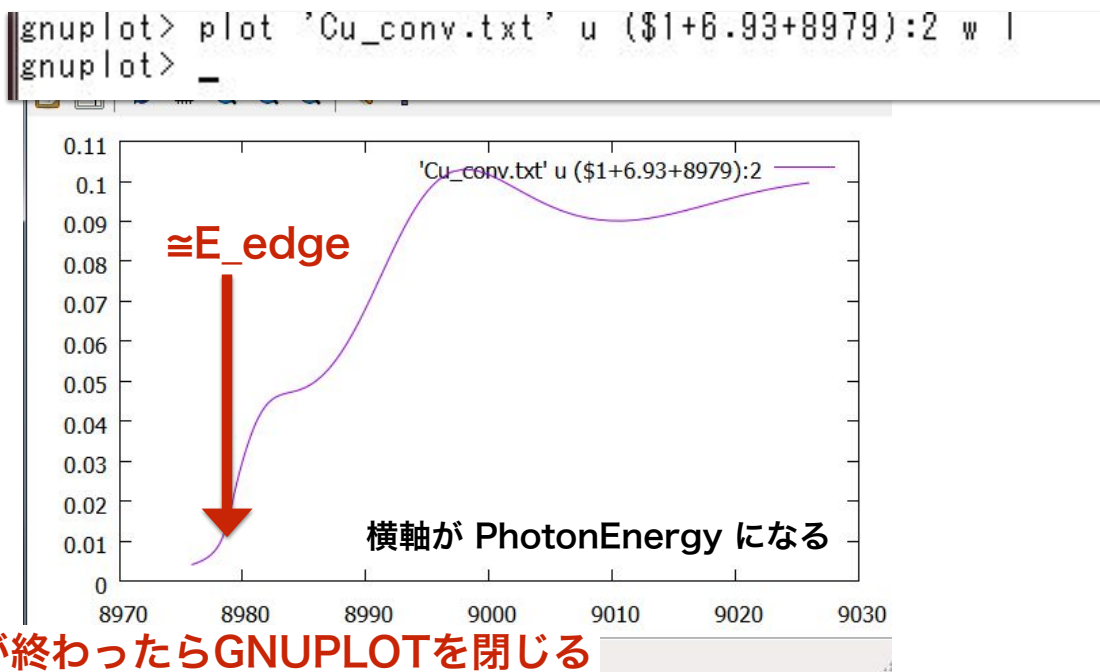
```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal\¥Cu> cat .¥Cu_bav.txt | Select-String E_edge
E_edge = 8979.00 eV, WorkF = 4.00 eV
PS C:\¥cal\¥Cu>
```

$\cong$ Fermi Level

横軸を Photon Energy 表示する

1) wgnuplot

2) plot 'Cu_conv.txt' u (\$1+6.93+8979):2 w l



3) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる

Filout
Cu

Range

-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.

Energpho

Radius

3.0

Crystal

3.61 3.61 3.61 90. 90. 90.

29 0.0 0.0 0.0

29 0.5 0.5 0.0

29 0.5 0.0 0.5

29 0.0 0.5 0.5

Convolution

End

計算結果そのものを Photonenergy で書き出す

Energpho タグを追加して
計算していると初めから Photonenergy で出力

(例)

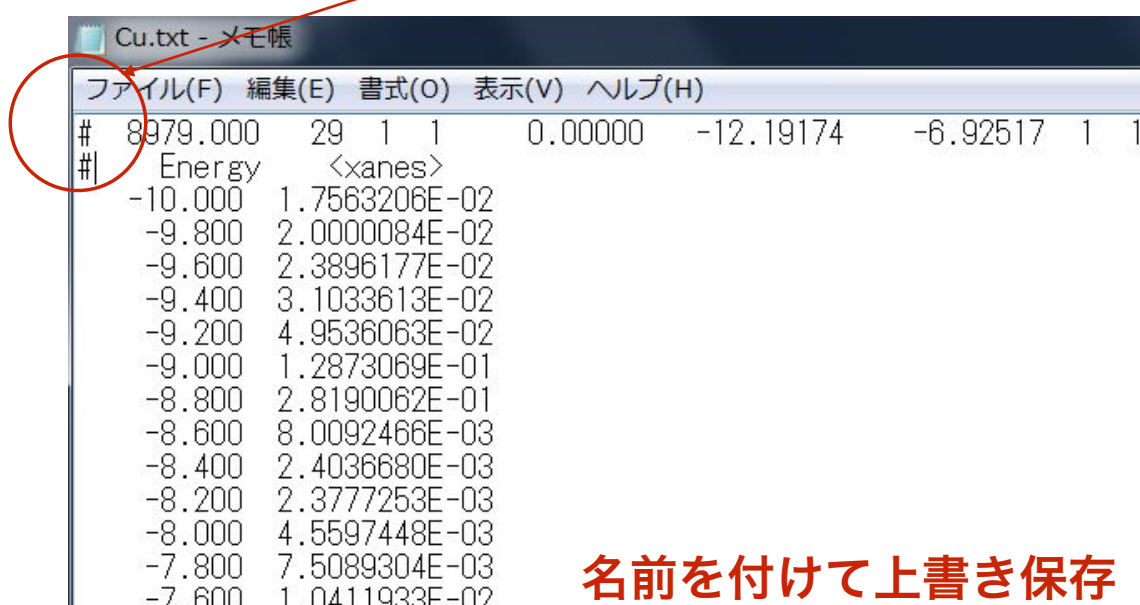
基本出力ファイルの解説 -Convolution-

Broadening をする前のスペクトルをプロットする

スペース
↓
start □.¥Cu.txt

Cu.txt を編集する

最初の2行をコメントアウトする



```
Cu.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
# 8979.000 29 1 1 0.00000 -12.19174 -6.92517 1 1
#| Energy <xanes>
-10.000 1.7563206E-02
-9.800 2.0000084E-02
-9.600 2.3896177E-02
-9.400 3.1033613E-02
-9.200 4.9536063E-02
-9.000 1.2873069E-01
-8.800 2.8190062E-01
-8.600 8.0092466E-03
-8.400 2.4036680E-03
-8.200 2.3777253E-03
-8.000 4.5597448E-03
-7.800 7.5089304E-03
-7.600 1.0411933E-02
```

名前を付けて上書き保存

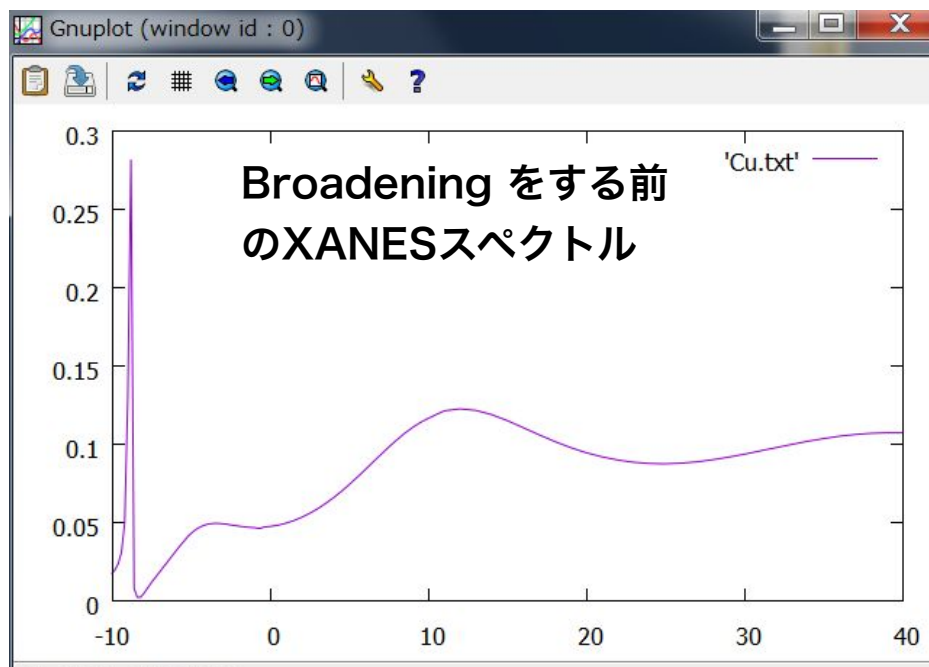
Broadening をする前のスペクトルをプロットする

1) wgnuplot

スペース

2) plot 'Cu.txt' w l

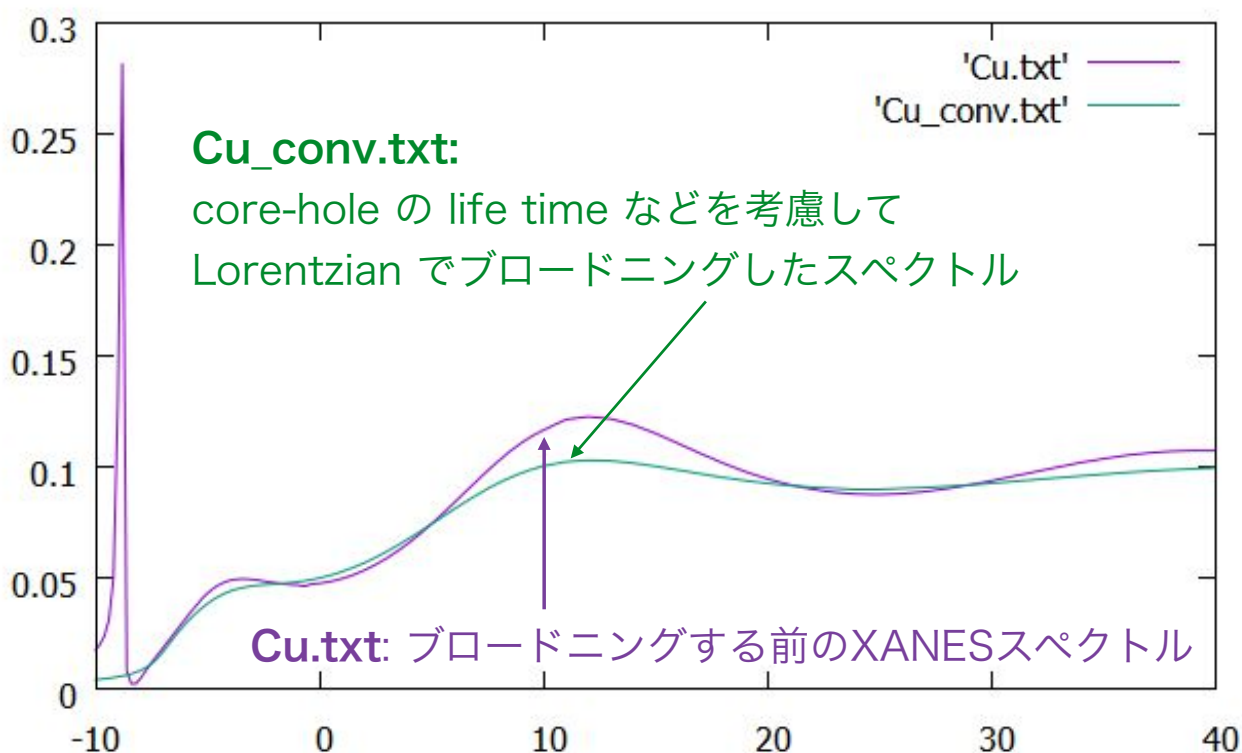
Cu.txt をプロットする



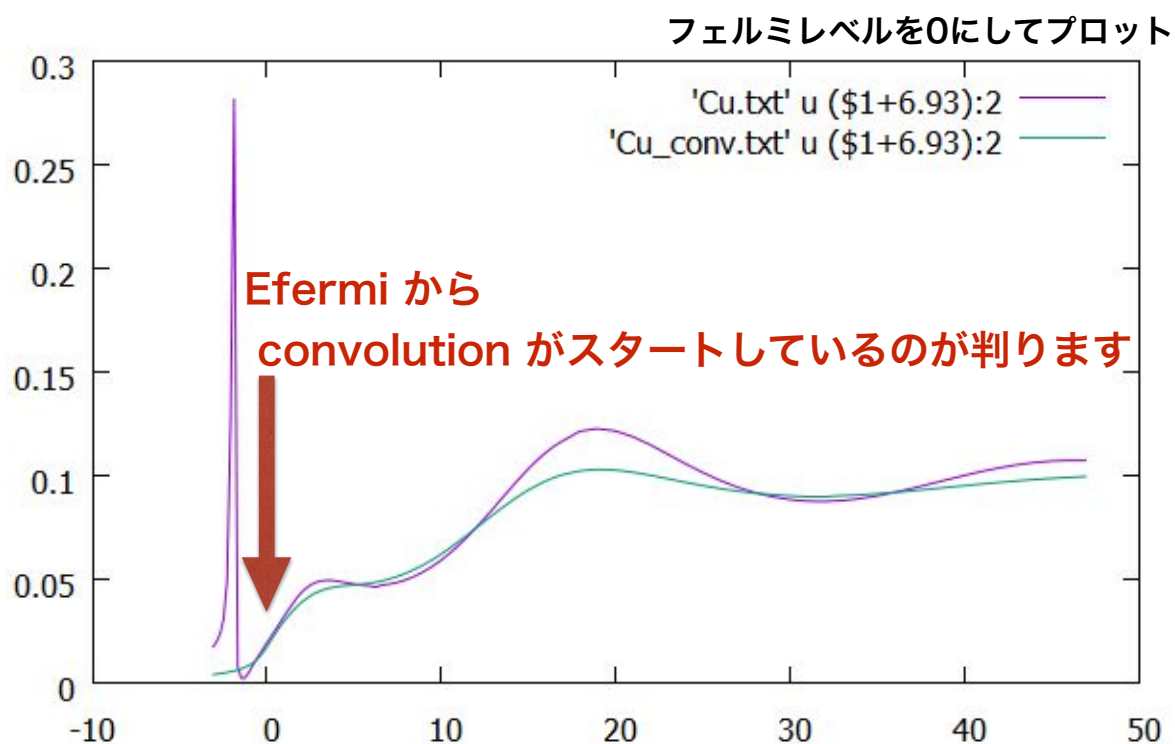
カンマ で区切ることでにより複数のデータをプロット

スペース

3) plot 'Cu.txt' w l, 'Cu_conv.txt' w l



4) plot 'Cu.txt' u (\$1+6.93):2 w l, 'Cu_conv.txt' u (\$1+6.93):2 w l



5) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる

化合物の計算実習 -Cu₂O の計算例-

スペース

- (1) `cd ¥cal`
- (2) `mkdir Cu20`
- (3) `cd Cu20`
- (4) `cp ../¥Cu¥spacegroup.txt .`
- (5) `cp ../¥Cu¥xsect.dat .`
- (6) `cp ../¥Cu¥fdmfile.txt .`
- (7) `cp ../¥Cu¥inp.txt .`

Cu2Oの計算準備

計算のホームへ移動

Cu2O 作業ディレクトリ作成

Cu2O 作業ディレクトリへ移動

計算に必要なファイルをコピー

準備したファイルを確認

ls

```
Windows PowerShell
PS C:¥cal¥Cu20> ls

ディレクトリ: C:¥cal¥Cu20

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---         2016/01/01   10:20           1046 fdmfile.txt
-a---         2016/01/01   10:46            958 inp.txt
-a---         2013/05/06   13:33          89332 spacegroup.txt
-a---         2002/07/22   13:33       1135134 xsect.dat

PS C:¥cal¥Cu20>
```

現在の状況

```
Windows PowerShell
PS C:¥cal¥Cu> tree /F ¥cal
フォルダー パスの一覧
ボリューム シリアル番号は EC02-77DC です
C:¥CAL
├── Cu
│   ├── Cu.png
│   ├── Cu.txt
│   ├── Cu_bav.txt
│   ├── Cu_conv.txt
│   ├── fdmfile.txt
│   ├── inp.txt
│   ├── spacegroup.txt
│   └── xsect.dat
└── Cu20
    ├── Cu20.txt
    ├── Cu20_bav.txt
    ├── Cu20_conv.txt
    ├── fdmfile.txt
    ├── inp.txt
    ├── spacegroup.txt
    └── xsect.dat

PS C:¥cal¥Cu>
```

計算用ディレクトリ(¥cal)の下
Cu と同じ階層に Cu2O ディレクトリ

Cu2O ディレクトリの下に

fdmfile.txt

inp.txt

spacegroup.txt

xsect.dat

編集

計算には4つのファイルが必要

Cu_inp.txt をベースにして

inp.txt を編集

スペース

start .¥inp.txt

```
Filout
Cu

Range
-10.0.2 0.0.5 10.1.40.

Radius
3.0

Crystal
3.61 3.61 3.61 90.90.90.
29 0.0 0.0 0.0
29 0.5 0.5 0.0
29 0.5 0.0 0.5
29 0.0 0.5 0.5

Convolution

End
```

inp.txt

Absorber
1

吸収原子を1番目とする

Filout
Cu20

出力する名前をCu20にする

Range
-10.0.2 0.0.5 10.1.40.

K-edge

Edge
K

クラスター半径5.0

Radius
5.0

FMS(Full multiple scattering)
で計算 (Muffin-tin 近似)

Green

```
Crystal
4.2676 4.2676 4.2676 90.0000 90.0000 90.0000
29 0.0000 0.0000 0.0000 ! Cu
29 0.5000 0.5000 0.0000 ! Cu
29 0.5000 0.0000 0.5000 ! Cu
29 0.0000 0.5000 0.5000 ! Cu
8 0.2500 0.2500 0.2500 ! O
8 0.7500 0.7500 0.7500 ! O
```

Convolution

End

inp.txt

Absorber のデフォルトは一番

(何も書かなければ1番を選択したことになる)

Absorber
1

吸収原子を一番目の原子とする

Crystal

4.2676 4.2676 4.2676 90.0000 90.0000 90.0000

29 0.0000 0.0000 0.0000 ! Cu

29 0.5000 0.5000 0.0000 ! Cu

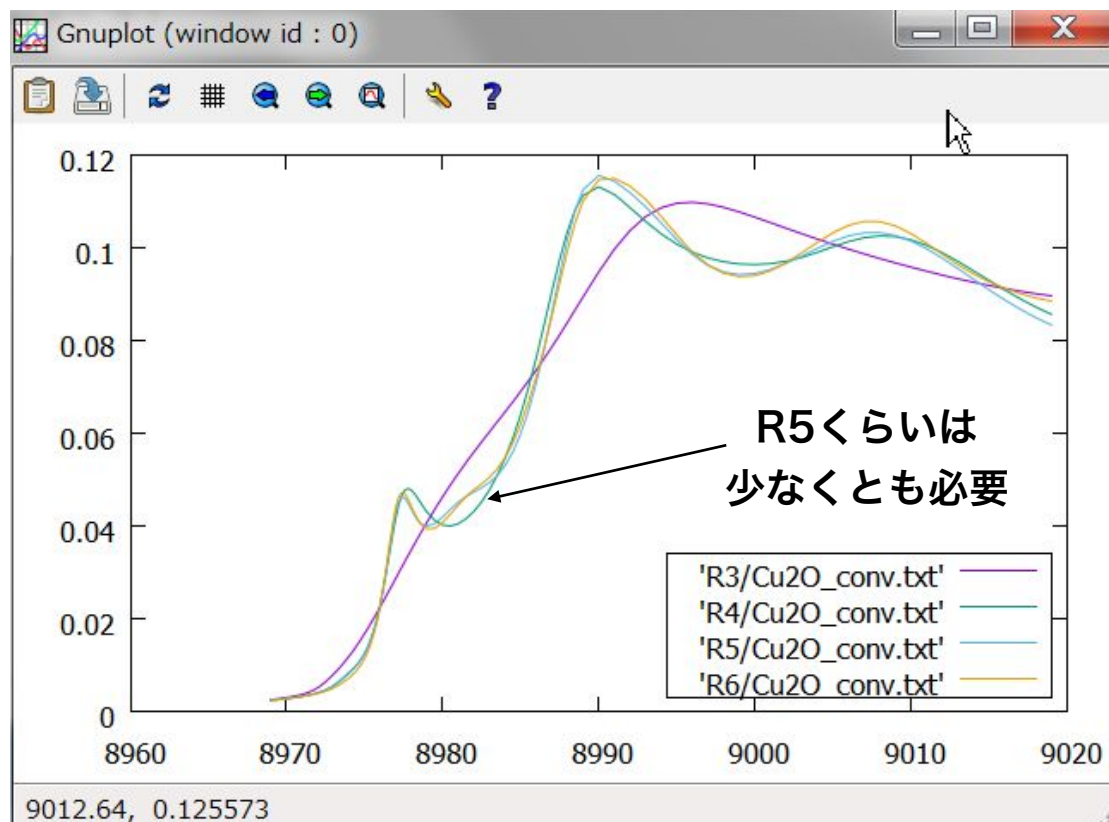
29 0.5000 0.0000 0.5000 ! Cu

29 0.0000 0.5000 0.5000 ! Cu

8 0.2500 0.2500 0.2500 ! O

8 0.7500 0.7500 0.7500 ! O

クラスター半径 実習では $R=5.0$ で計算してもらいます



Cu2O ($R=5.0$ FMS(Muffin-tin)) の計算

```
Windows PowerShell
PS C:\¥ca\¥Cu2O> fdmnes_win64.exe
```

fdmnes_win64.exe を実行します (64bit windows)

2.6 GHz Intel Core i5(VMware on Mac) 約15秒

計算終了後のディレクトリを見ると・・・

```
ls
Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---             2016/01/02         13:06         2979 Cu2O.txt
-a---             2016/01/02         13:06       1348662 Cu2O_bav.txt
-a---             2016/01/02         13:07         2755 Cu2O_conv.txt
-a---             2016/01/01         10:20         1046 fdmfile.txt
-a---             2016/01/02         13:06          495 inp.txt
-a---             2013/05/06         13:33        89332 spacegroup.txt
-a---             2002/07/22         13:33       1135134 xsect.dat

PS C:\¥ca\¥Cu2O>
```


スペース
↓
start .¥Cu2O_conv.txt Cu2O_conv.txt の編集

コメントアウト
(最初の1行)

```
Cu2O_conv.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
# Energy <xanes>
-10.000 2.4171599E-03
-9.800 2.4787703E-03
-9.600 2.5439347E-03
-9.400 2.6130043E-03
-9.200 2.6863814E-03
-9.000 2.7645312E-03
-8.800 2.8470010E-03
```

スペース
↓
start .¥Cu2O.txt Cu2O.txt の編集

コメントアウト
(最初の2行)

```
Cu2O.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
# 8979.000 29 1 1 0.00000 -10.01278
#| Energy <xanes>
-10.000 1.8561265E-02
-9.800 1.4536325E-03
-9.600 1.0685395E-03
-9.400 1.1892450E-03
-9.200 1.1354645E-03
-9.000 1.1225666E-03
-8.800 1.1999200E-03
-8.600 1.4171908E-03
```

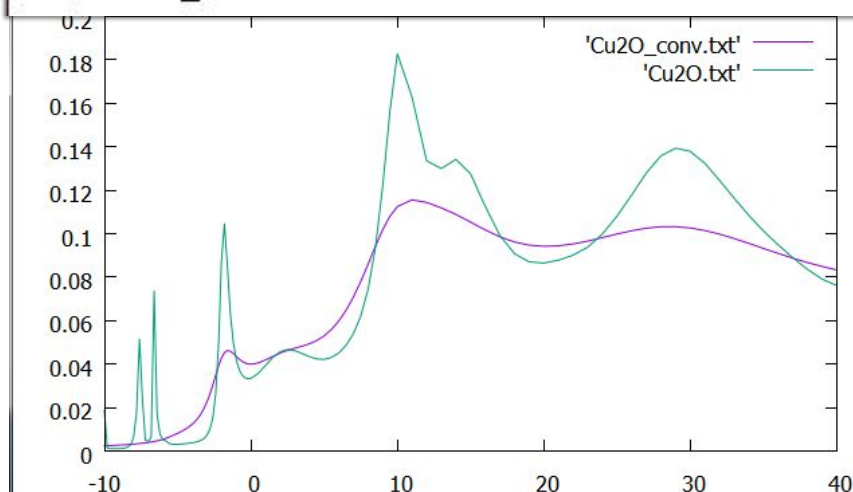
名前を付けて上書き保存

Cu2O のXANESスペクトルのプロット

1) wgnuplot

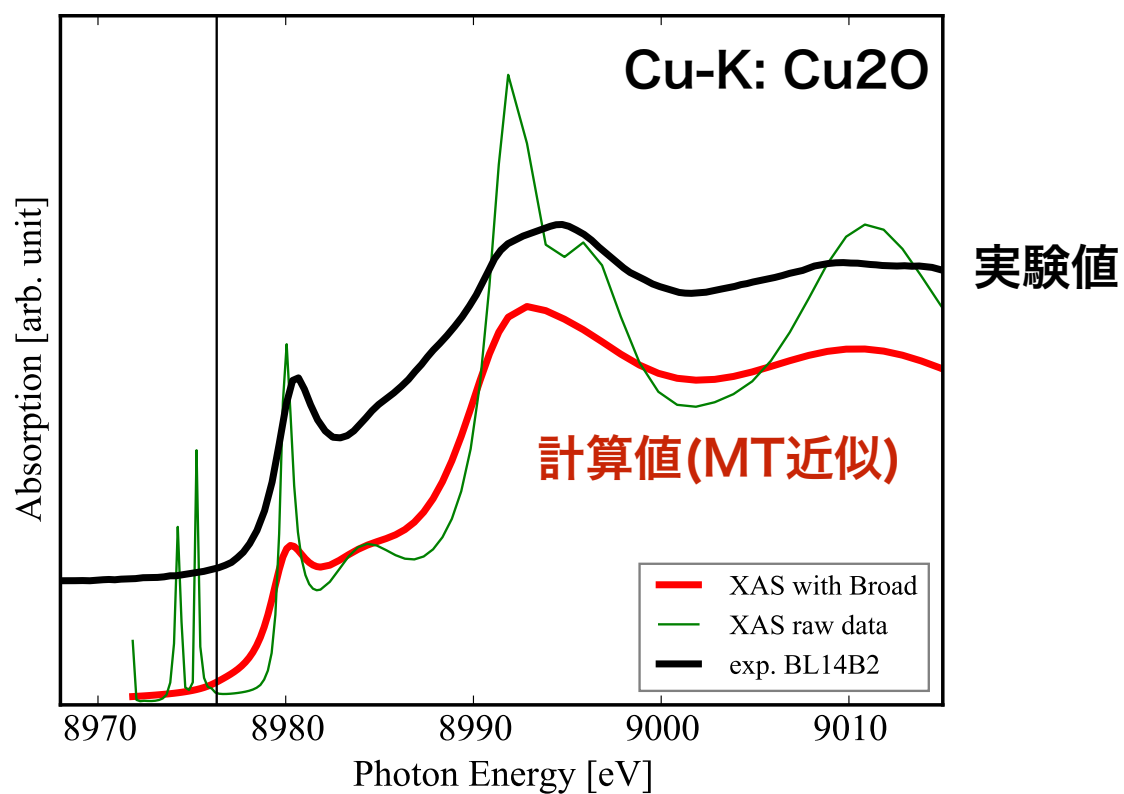
スペース
↓
2) plot 'Cu2O_conv.txt' w l, 'Cu2O.txt' w l

```
Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot 'Cu2O_conv.txt' w l, 'Cu2O.txt' w l
gnuplot> _
```



3) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる

FDMNES: FMS(Muffin-tin), R=5.0



基本出力ファイルの解説

-軌道成分の解析-

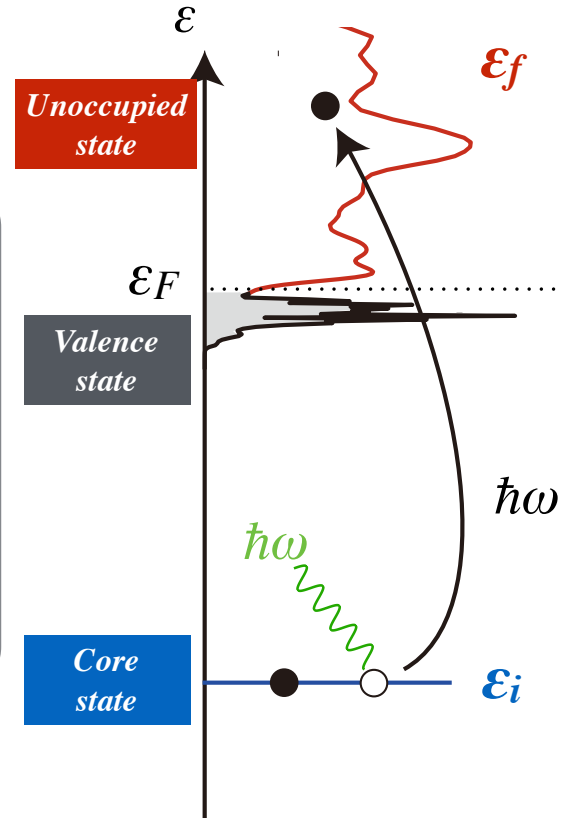
-Cu₂O の計算例-

XANES スペクトル

遷移確率 フェルミの黄金律

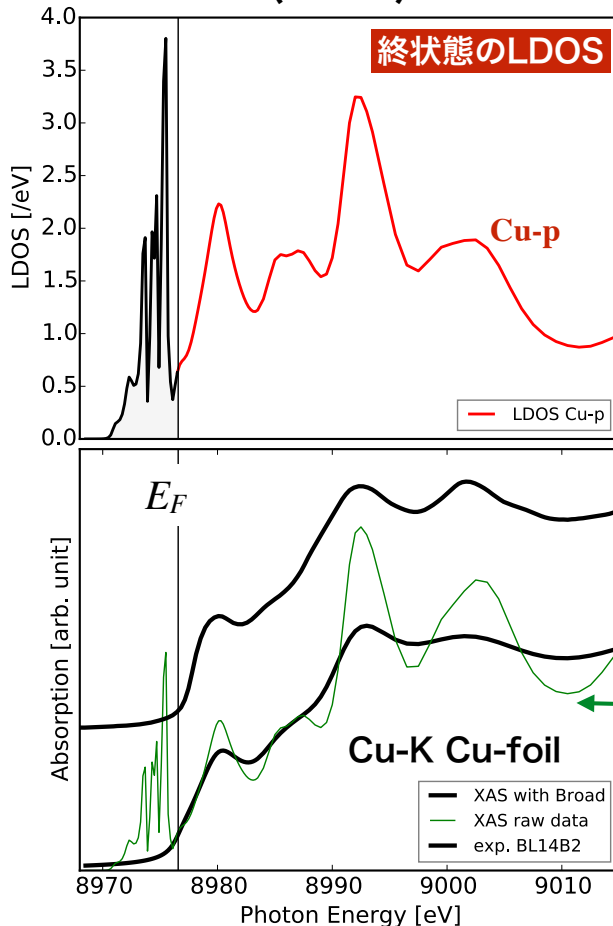
$$W(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |\langle f | \hat{F} | i \rangle|^2 \delta(\epsilon_i + \hbar\omega - \epsilon_f)$$

unoccupied state 終状態
core state 始状態



Cu-p (LDOS) with hole

FDMNES (R=7.0) FDM



遷移確率

動径積分・Gaunt係数

$$|\langle f | \hat{F} | i \rangle|^2 = \sum_{LMM_s, mm_s} a_{LMm_s, f}^* c_{mm_s, i}^{(nl)} F_{LMM_s, nlm m_s}$$

終状態の電子状態 内殻の電子状態

$$W(\omega) \propto |I_{Lnl}|^2 \sum_{m_s} w_{j\mu m_s} D_{LMm_s}(\hbar\omega + \epsilon_i)$$

終状態の状態密度

実験値

計算値 (Lorentzian Broadening)

計算値

XANES スペクトル ≒ 局所状態密度

Cu-K, Cu₂O, FMS

Absorber
1

Fileout
Cu2O

Range
-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.

Edge
K

Radius
5.0

Density
state_all

Green

Crystal

4.2676	4.2676	4.2676	90.0000	90.0000	90.0000
29	0.0000	0.0000	0.0000	! Cu	
29	0.5000	0.5000	0.0000	! Cu	
29	0.5000	0.0000	0.5000	! Cu	
29	0.0000	0.5000	0.5000	! Cu	
8	0.2500	0.2500	0.2500	! O	
8	0.7500	0.7500	0.7500	! O	

Convolution

End

inp.txt

名前を付けて上書き保存

- スペース
- (1) cd ¥cal
 - (2) mkdir Cu2O_dos
 - (3) cd Cu2O_dos
 - (4) cp ..¥Cu2O¥*.*
 - (5) rm Cu2O*.txt
 - (6) start inp.txt
- * アスタリスク
リスク
- inp.txt の編集

Density
state_all

追加

- (6) ls ファイルの確認

```
Length Name
-----
1046 fdmfile.txt
495 inp.txt
89332 spacegroup.txt
1135134 xsect.dat
```

Cu₂O のDOSの計算

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu2O_dos> fdmnes_win64.exe
```

fdmnes_wn64.exe を実行します (64bit windows)
2.6 GHz Intel Core i5(VMware on Mac) 約27秒

計算終了後

ls

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu2O_dos> ls

ディレクトリ: C:\¥cal¥Cu2O_dos

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---            2016/01/02    14:45           2979 Cu2O.txt
-a---            2016/01/02    14:45       1350527 Cu2O_bav.txt
-a---            2016/01/02    14:45           2754 Cu2O_conv.txt
-a---            2016/01/02    14:45          34374 Cu2O_sd0.txt
-a---            2016/01/02    14:45          34374 Cu2O_sd1.txt
-a---            2016/01/02    14:45          18462 Cu2O_sd2.txt
-a---            2016/01/01    10:20           1046 fdmfile.txt
-a---            2016/01/02    14:41            495 inp.txt
-a---            2013/05/06    13:33          89332 spacegroup.txt
-a---            2002/07/22    13:33       1135134 xsect.dat
```

出力ファイルが追加されている

Density タグで今回新たに作成されたファイル

Cu2O_sd0.txt

Cu2O_sd1.txt

Cu2O_sd2.txt

(吸収原子)

absorber の LDOS

1 番目の原子の LDOS (注意)

2 番目の原子の LDOS (注意)

sd0	Cu*
sd1	Cu
sd2	O

このナンバリングは物質(および対称性)によって変わってくる
詳しくはAppendix参照

!! 0番以外のナンバリングに注意 !!

スペース

start .¥Cu2O_sd0.txt

Cu2O_sd0.txt の編集

コメントアウト
(最初の1行)

Cu2O_sd0.txt - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

#	Energy	Int t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_l(0)
-10.0000	1.62013E-02	1.80092E-03	2.64731E-05	3.60185E-03	
-9.8000	2.10233E-02	1.72160E-03	5.17802E-05	3.44320E-03	
-9.6000	2.19306E-02	5.30934E-03	1.29826E-04	1.06187E-02	
-9.4000	2.47313E-02	1.02339E-02	2.80262E-04	2.04679E-02	

名前を付けて上書き保存

スペース

start .¥Cu2O_sd2.txt

Cu2O_sd0.txt の編集

コメントアウト
(最初の1行)

Cu2O_sd2.txt - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

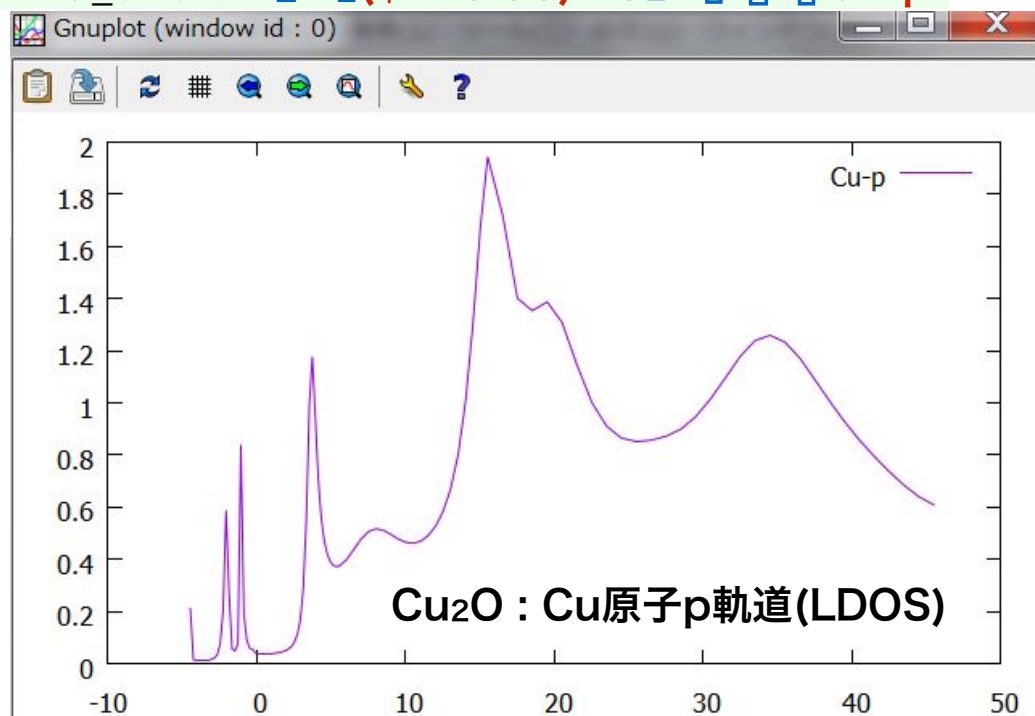
#	Energy	Int t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_l(0)
-10.0000	1.61888E-01	8.67137E-04	1.27467E-05	1.73427E-03	
-9.8000	1.70563E-01	6.85053E-04	2.28168E-05	1.37011E-03	
-9.6000	1.76458E-01	2.46539E-03	5.90574E-05	4.93078E-03	
-9.4000	1.82970E-01	3.63607E-03	1.12507E-04	7.27215E-03	

名前を付けて上書き保存

GNU PLOT でプロットする

1) wgnuplot

2) `plot 'Cu2O_sd0.txt' u ($1+5.53):13 w l t 'Cu-p'`



Cu₂O のフェルミレベルは？ `cat Cu2O_bat.txt | Select-String Efermi`

フェルミレベルを0にする

コロン

Cu-p軌道の指定

title を付ける

スペース

スペース

3) `plot [0:4] 'Cu2O_sd0.txt' u ($1+5.53):13 w l t 'Cu-p', 'Cu2O_sd2.txt' u ($1+5.53):13 w l t 'O-p'`

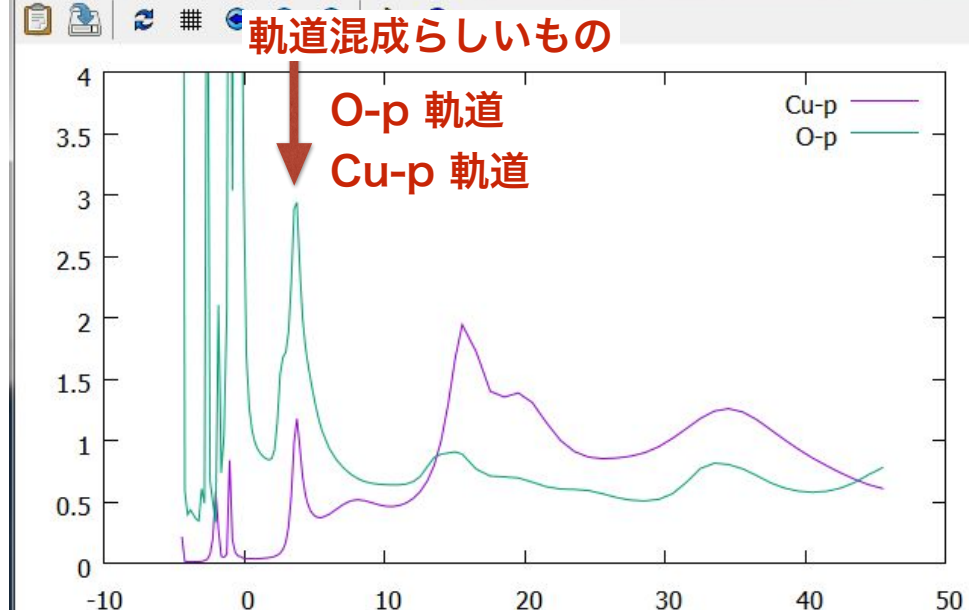
, (カンマ) 後 改行せずにつなげる (1行で書く)

スペース

スペース

コロン

スペース



4) plot が終わったらGNU PLOTを閉じる

化合物の計算実習

-BaTiO₃ の計算例-

Absorber
1

Filout
BaTiO3

Range
-15. 0.2 0. 0.5 10. 1. 45.

Edge
K

Convolution

Green

Radius
4.0

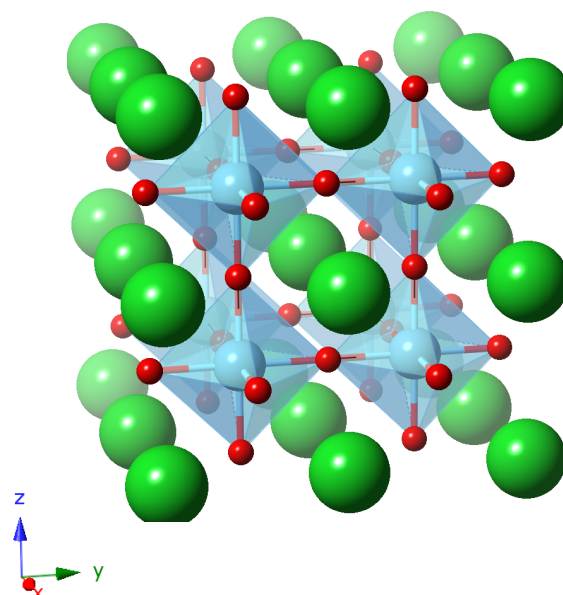
Crystal

	4.0060	4.0060	4.0060	90.0000	90.0000	90.0000
22	0.0000	0.0000	0.0000	! Ti		
56	0.5000	0.5000	0.5000	! Ba		
8	0.5000	0.0000	0.0000	! O		
8	0.0000	0.5000	0.0000	! O		
8	0.0000	0.0000	0.5000	! O		

End

cubic, 221, Pm3-m

常誘電相 cif_2100863



Trigonal, 160, R3m

強誘電相 cif_014230

Absorber

1

Filout

BaTiO3

Range

-15. 0.2 0. 0.5 10. 1. 45.

Edge

K

Convolution

Green

Radius

4.0

Crystal

4.0036 4.0036 4.0036 89.8404 89.8400 89.8396

22 0.4880 0.4880 0.4880 ! Ti

56 0.0000 0.0000 0.0000 ! Ba

8 0.5116 0.5116 0.0195 ! O

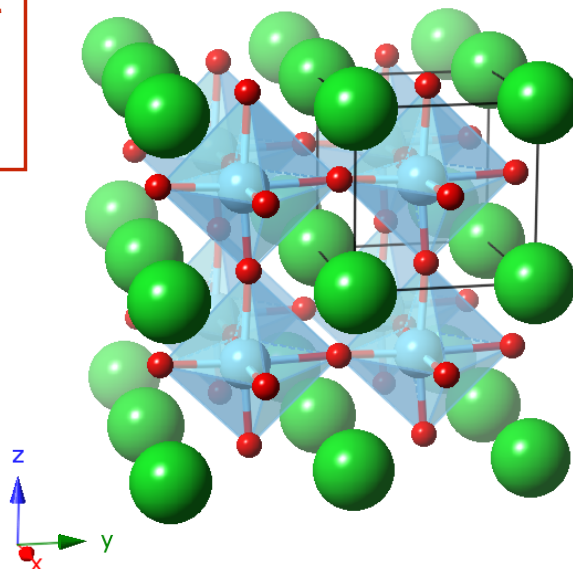
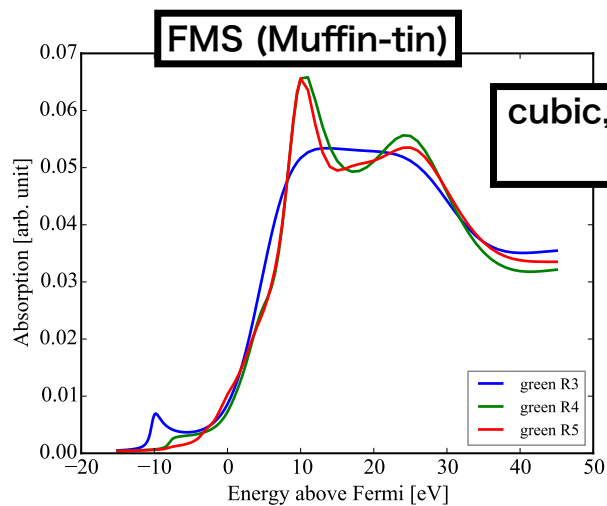
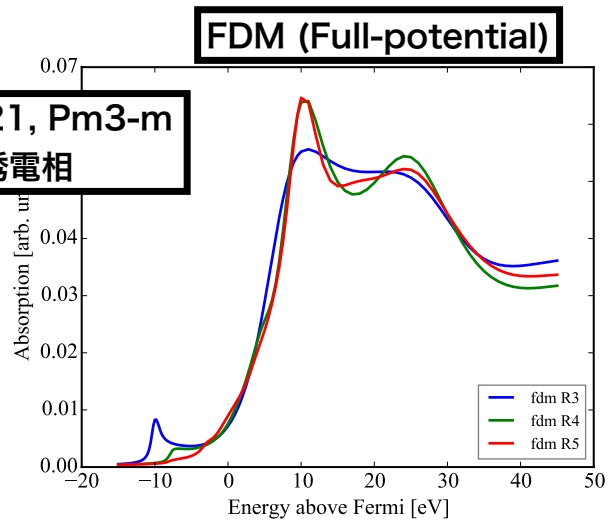
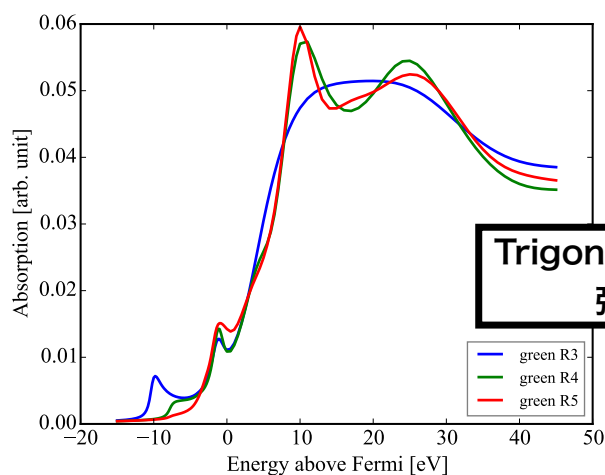
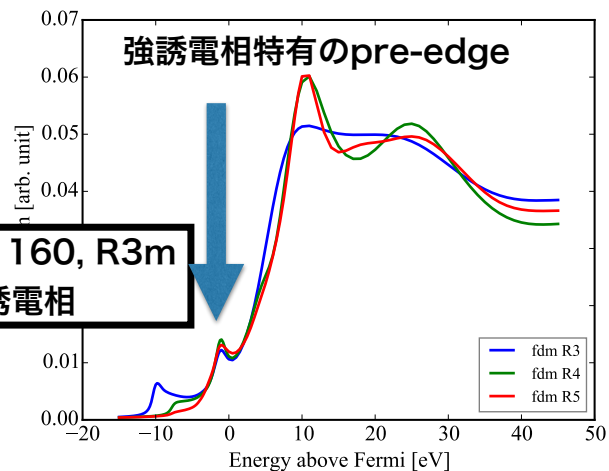
8 0.0195 0.5116 0.5116 ! O

8 0.5116 0.0195 0.5116 ! O

End

Rhombo の歪みが入っていると
計算時間が爆発的に増えるので
今回の実習では歪みは無くす
(あとで説明)

内部座標のズレ



計算時間 VMware on Mac

CPU: Intel Core i5-4258U 2.6G

single process (using MUMPS)

実習では

- 1) MT近似の FMS(green関数)を用いる
- 2) $R=4.0\text{\AA}$

BaTiO3_Pm3-m

fdm_R3 : 5.7s
fdm_R4 : 36.4s
fdm_R5 : 49.7s
green_R3 : 4.0s
green_R4 : 25.0s
green_R5 : 57.1s

BaTiO3_R3m

fdm_R3 : 253.3s
fdm_R4 : 2738.3s
fdm_R5 : 4403.4s (1h13min)
green_R3 : 6.7s
green_R4 : 42.4s
green_R5 : 271.4s

常誘電相の計算準備

スペース

- (1) `cd ¥cal`
- (2) `mkdir BaTiO3_Pm3-m`
- (3) `cd BaTiO3_Pm3-m`
- (4) `cp ¥Cu2O_dos¥*. *`
- (5) `rm Cu*.txt`
- (6) `start inp.txt`

* アスタ
リスク

常誘電相

Absorber

1

Filout

BaTiO3

Range

-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.

Estart

-18

Edge

K

Radius

4.0

Density

state_all

Green

Crystal

4.0036 4.0036 4.0036 90.0 90.0 90.0
22 0.5 0.5 0.5 ! Ti
56 0.0 0.0 0.0 ! Ba
8 0.5 0.5 0.0 ! O
8 0.0 0.5 0.5 ! O
8 0.5 0.0 0.5 ! O

Convolution

End

convolution 後の
Energy 領域をどこか
らスタートするか

議論しやすいように
強誘電相と同じセルの取り方をする
cell歪みなし
内部座標のズレなし

計算

(7) fdmnes_win64.exe

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥BaTiO3_Pm3-m> fdmnes_win64.exe
```

2.6 GHz Intel Core i5 (VMware on Mac) 約86秒

計算結果作られるファイル

```
Is
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥BaTiO3_Pm3-m> ls

ディレクトリ: C:\¥cal¥BaTiO3_Pm3-m

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---             2016/01/02         16:07          2979 BaTiO3.txt
-a---             2016/01/02         16:07       1991403 BaTiO3_bav.txt
-a---             2016/01/02         16:07          2754 BaTiO3_conv.txt
-a---             2016/01/02         16:07        34374 BaTiO3_sd0.txt
-a---             2016/01/02         16:07        55590 BaTiO3_sd2.txt
-a---             2016/01/02         16:07        18462 BaTiO3_sd3.txt
-a---             2016/01/01          10:20         1046 fdmfile.txt
-a---             2016/01/02          16:05          470 inp.txt
-a---             2013/05/06          13:33       89332 spacegroup.txt
-a---             2002/07/22          13:33      1135134 xsect.dat
```

スペース
↓
start □.¥BaTiO3_conv.txt

BaTiO3_conv.txt の編集

コメントアウト
(最初の1行)

```
BaTiO3_conv.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
#| Energy <xanes>
-10.000 6.4984858E-04
-9.800 6.7606890E-04
-9.600 7.0658995E-04
```

名前を付けて
上書き保存

スペース
↓
start □.¥BaTiO3_sd0.txt

BaTiO3_sd0.txt の編集

コメントアウト
(最初の1行)

```
BaTiO3_sd0.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
#| Energy Int t n(0,0)
-10.0000 4.33972E-03 1.76803E-02
-9.8000 8.46465E-03 1.73432E-02
-9.6000 1.24593E-02 1.70115E-02
```

名前を付けて
上書き保存

スペース
↓
start □.¥BaTiO3_sd3.txt

BaTiO3_sd3.txt の編集

コメントアウト
(最初の1行)

```
BaTiO3_sd3.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
#| Energy Int t n(0,0)
-10.0000 2.51219E-02 3.55502E-03
-9.8000 4.37176E-02 3.95939E-03
-9.6000 5.86126E-02 4.43280E-03
```

名前を付けて
上書き保存

GNU PLOT でプロットする

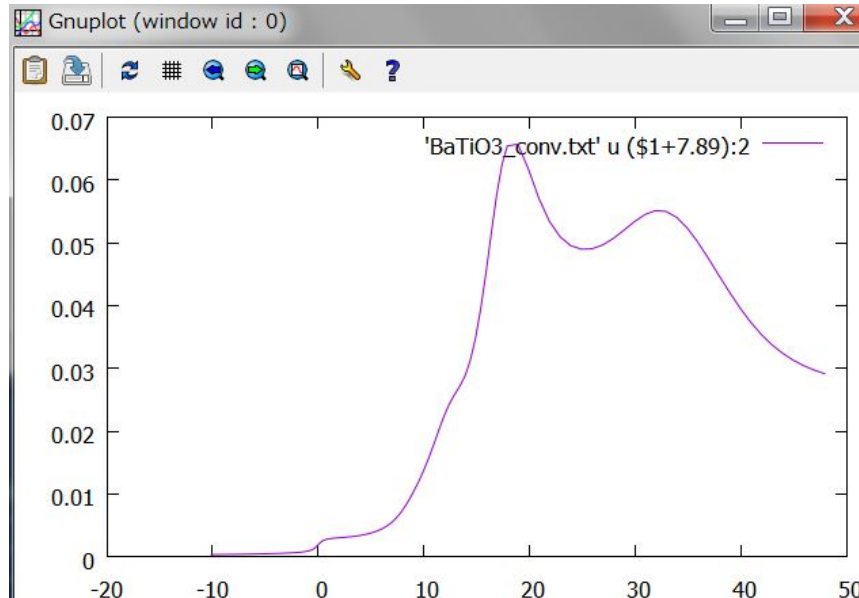
常誘電相

1) wgnuplot

2) plot 'BaTiO3_conv.txt' u (\$1+7.89):2 w l

スペース

コロン



3) plot が終わったらGNU PLOTを閉じる

強誘電相の計算準備

スペース

(1) cd %cal

(2) mkdir BaTiO3_R3m

(3) cd BaTiO3_R3m

(4) cp %BaTiO3_Pm3-m*.*

(5) rm BaTiO3*.txt

(6) start inp.txt

* アスタ
リスク

Absorber
1

Filout
BaTiO3

Range
-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.

Estart
-18

Edge
K

Radius
4.0

Density
state_all

Green

Crystal

4.0036 4.0036 4.0036 90.0 90.0 90.0
22 0.4880 0.4880 0.4880 ! Ti
56 0.0000 0.0000 0.0000 ! Ba
8 0.5116 0.5116 0.0195 ! O
8 0.0195 0.5116 0.5116 ! O
8 0.5116 0.0195 0.5116 ! O

Convolution

End

強誘電相

cell歪みをナシ(cubic にする)

内部座標の歪みを入れる

計算

(7) fdmnes_win64.exe

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥BaTiO3_R3m> fdmnes_win64.exe
```

2.6 GHz Intel Core i5 (VMware on Mac) 約15秒

計算結果作られるファイル

ls

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥BaTiO3_R3m> ls

ディレクトリ: C:\¥cal¥BaTiO3_R3m

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---         2016/01/02        18:26           2979 BaTiO3.txt
-a---         2016/01/02        18:26       2069300 BaTiO3_bav.txt
-a---         2016/01/02        18:26           3186 BaTiO3_conv.txt
-a---         2016/01/02        18:26       34374 BaTiO3_sd0.txt
-a---         2016/01/02        18:26       55590 BaTiO3_sd2.txt
-a---         2016/01/02        18:26       18462 BaTiO3_sd3.txt
-a---         2016/01/01        10:20          1046 fdmfile.txt
-a---         2016/01/02        18:25           463 inp.txt
-a---         2013/05/06        13:33       89332 spacegroup.txt
-a---         2002/07/22        13:33      1135134 xsect.dat
```

スペース
↓

start□.¥BaTiO3_conv.txt

BaTiO3_conv.txt の編集

コメントアウト
(最初の1行)

```
BaTiO3_conv.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
#| Energy    <xanes>
-18.000 3.3262042E-04
-17.500 3.4312995E-04
-17.000 3.5433204E-04
```

名前を付けて
上書き保存

スペース
↓

start□.¥BaTiO3_sd0.txt

BaTiO3_sd0.txt の編集

コメントアウト
(最初の1行)

```
BaTiO3_sd0.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
#| Energy    Int t      n(0,0)
-10.0000 7.53299E-03 2.71650E-02
-9.8000 1.44829E-02 2.53909E-02
-9.6000 2.10264E-02 2.39175E-02
```

名前を付けて
上書き保存

スペース
↓

start□.¥BaTiO3_sd3.txt

BaTiO3_sd3.txt の編集

コメントアウト
(最初の1行)

```
BaTiO3_sd3.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
#| Energy    Int t      n(0,0)
-10.0000 2.98071E-02 5.94081E-03
-9.8000 5.27789E-02 6.49756E-03
-9.6000 7.15962E-02 7.12472E-03
```

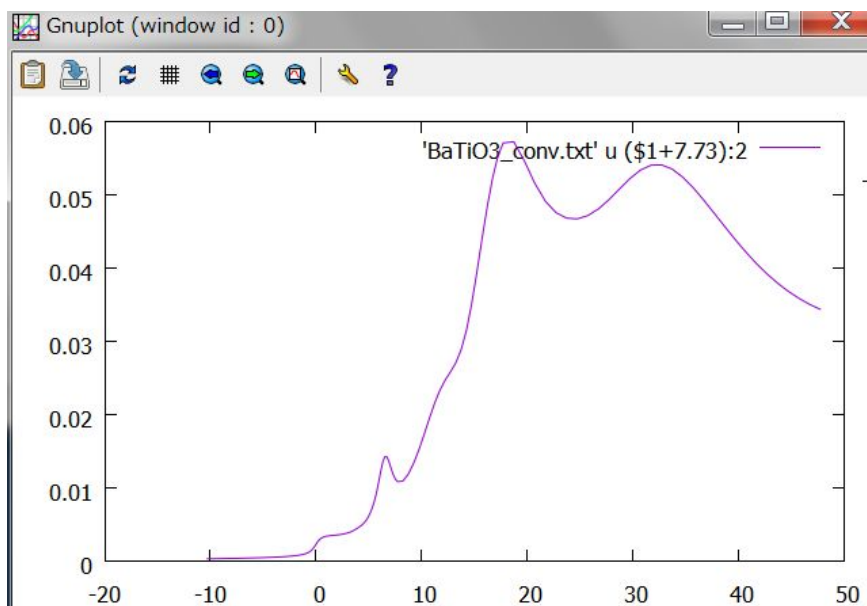
名前を付けて
上書き保存

GNU PLOT でプロットする

強誘電相

1) wgnuplot

2) plot 'BaTiO3_conv.txt' u (\$1+7.73):2 w l



3) plot が終わったらGNU PLOTを閉じる

1) cd %cal

2) wgnuplot

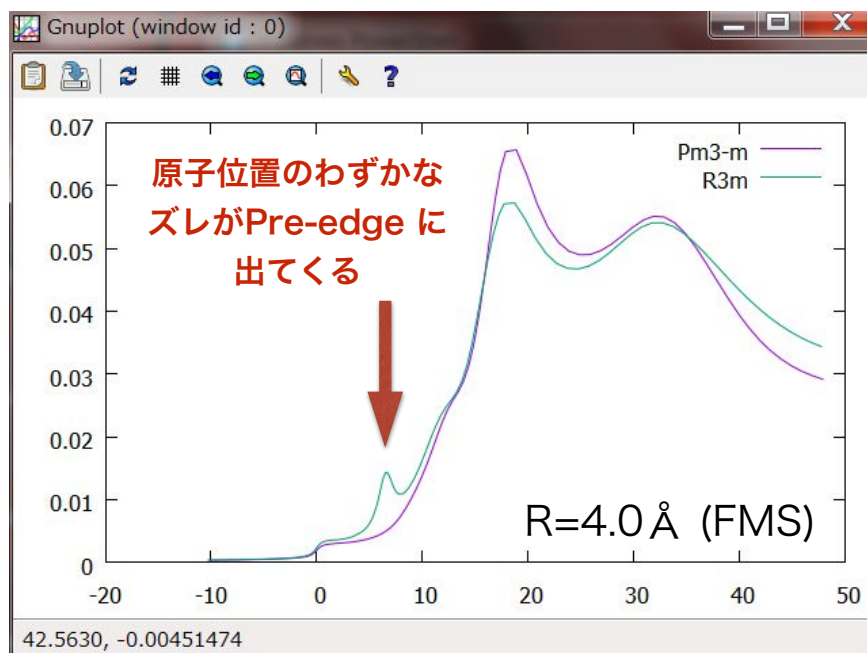
3) plot 'BaTiO3_Pm3-m%BaTiO3_conv.txt' u (\$1+7.89):2 w l, 'BaTiO3_R3m%BaTiO3_conv.txt' u (\$1+7.73):2 w l t 'Pm3-m', t 'R3m'

,(カンマ)後 改行せずにつなげる(1行で書く)

コロン スペース

```
BaTiO3_Pm3-m
BaTiO3.txt
BaTiO3_bav.txt
BaTiO3_conv.txt
BaTiO3_sd0.txt
BaTiO3_sd2.txt
BaTiO3_sd3.txt
fdmfile.txt
inp.txt
spacegroup.txt
xsect.dat

BaTiO3_R3m
BaTiO3.txt
BaTiO3_bav.txt
BaTiO3_conv.txt
BaTiO3_sd0.txt
BaTiO3_sd2.txt
BaTiO3_sd3.txt
fdmfile.txt
inp.txt
spacegroup.txt
xsect.dat
```



4) plot が終わったらGNU PLOTを閉じる

1) cd ¥cal¥BaTiO3_Pm3-m

2) wgnuplot

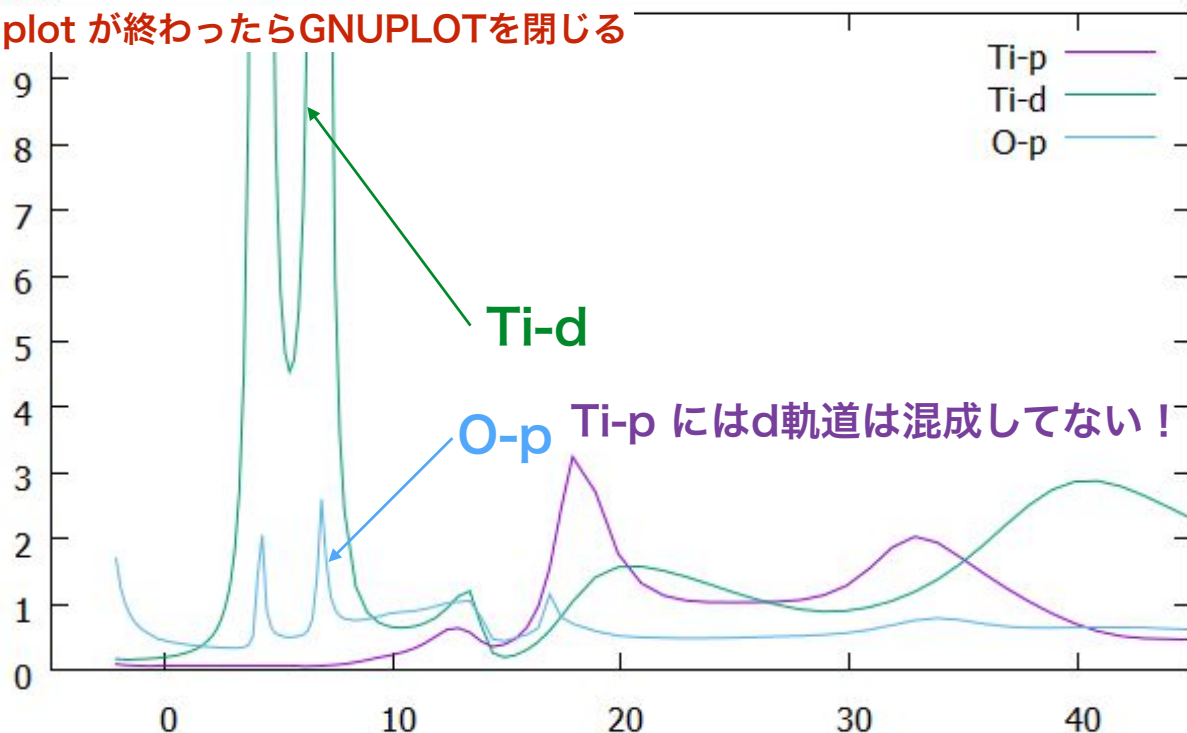
3) plot [-5:45][:10] 'BaTiO3_sd0.txt' u (\$1+7.89):13 w l t 'Ti-p',
'BaTiO3_sd0.txt' u (\$1+7.89):25 w l t 'Ti-d',
'BaTiO3_sd3.txt' u (\$1+7.89):13 w l t 'O-p'

常誘電相(Pm3-m)

スペース

, (カンマ)後 改行せずにつなげる(1行で書く)

4) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる



1) cd ¥cal¥BaTiO3_R3m

2) wgnuplot

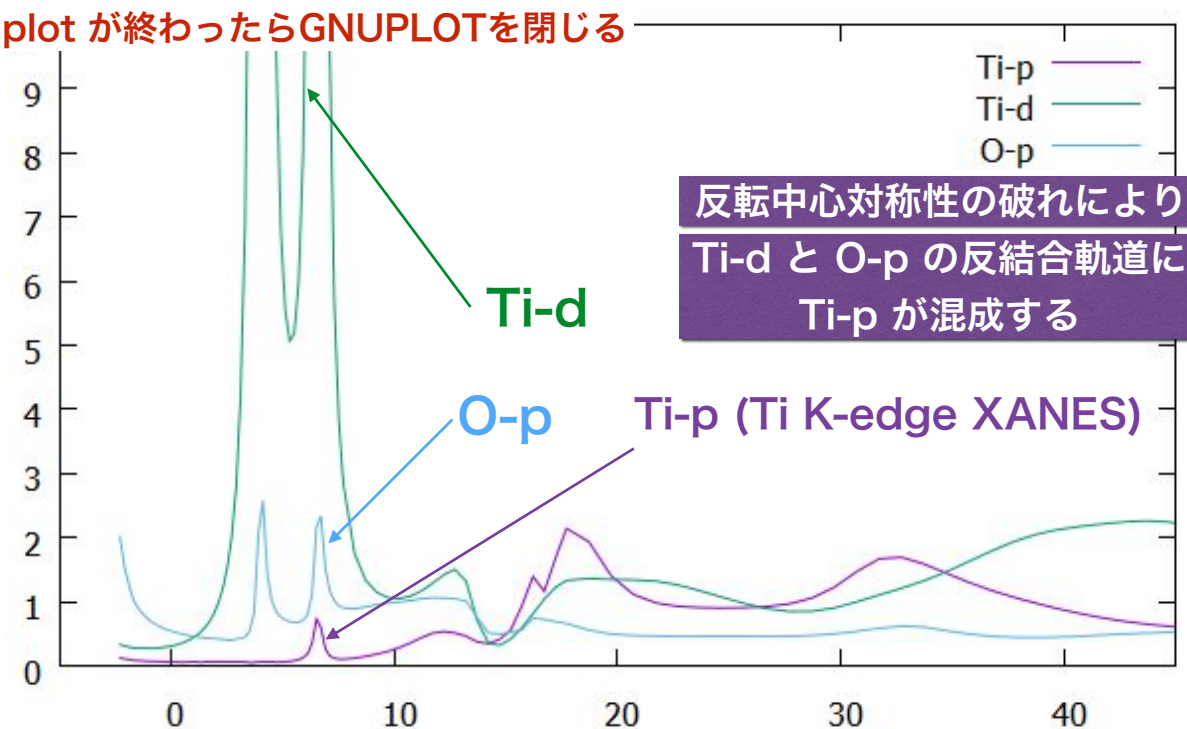
3) plot [-5:45][:10] 'BaTiO3_sd0.txt' u (\$1+7.73):13 w l t 'Ti-p',
'BaTiO3_sd0.txt' u (\$1+7.73):25 w l t 'Ti-d',
'BaTiO3_sd3.txt' u (\$1+7.73):13 w l t 'O-p'

強誘電相(R3m)

スペース

, (カンマ)後 改行せずにつなげる(1行で書く)

4) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる



常誘電相(Pm3-m)

反転対称性がある場合

$$\langle \text{Ti}-d | \mathbf{V} | \text{Ti}-p \rangle = 0$$

偶 偶 奇

➡ on-siteで Ti の p 軌道 と d 軌道は混成しない

強誘電相(R3m)

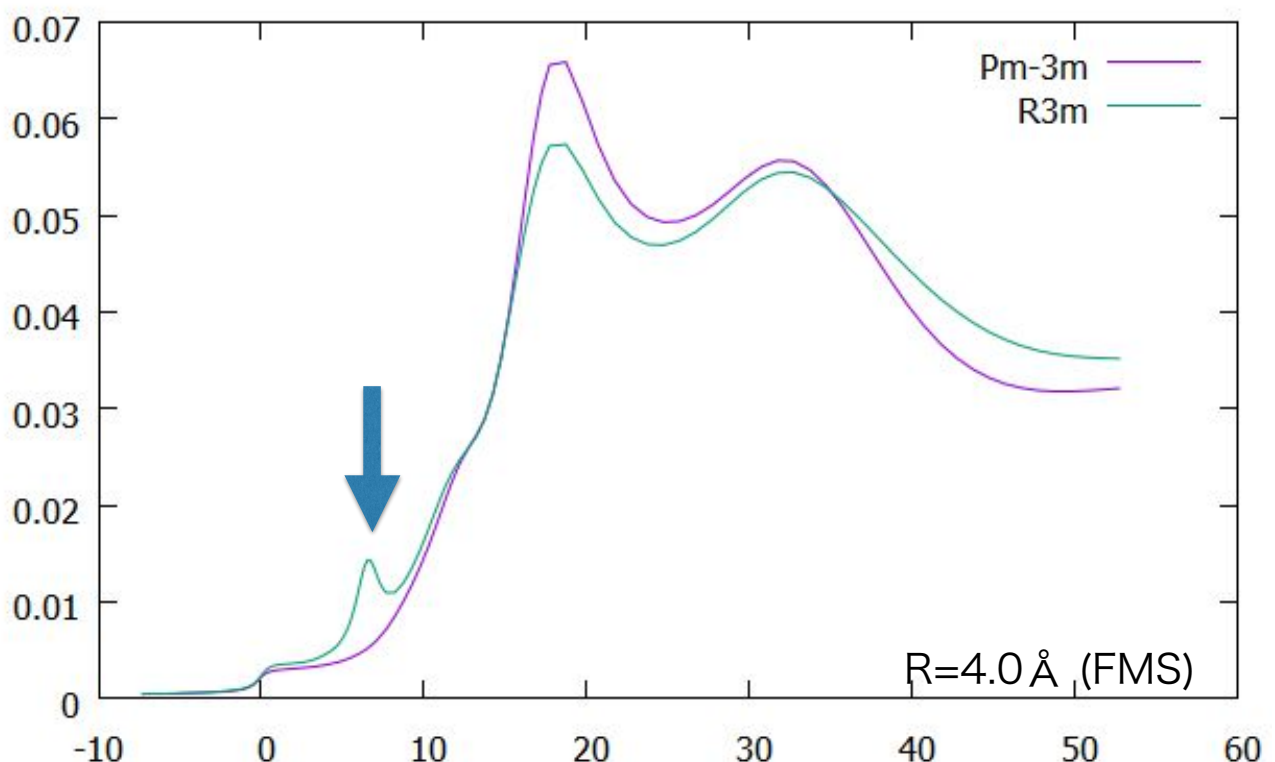
反転対称性がない場合

$$\langle \text{Ti}-d | \mathbf{V} | \text{Ti}-p \rangle \neq 0$$

偶 奇 奇

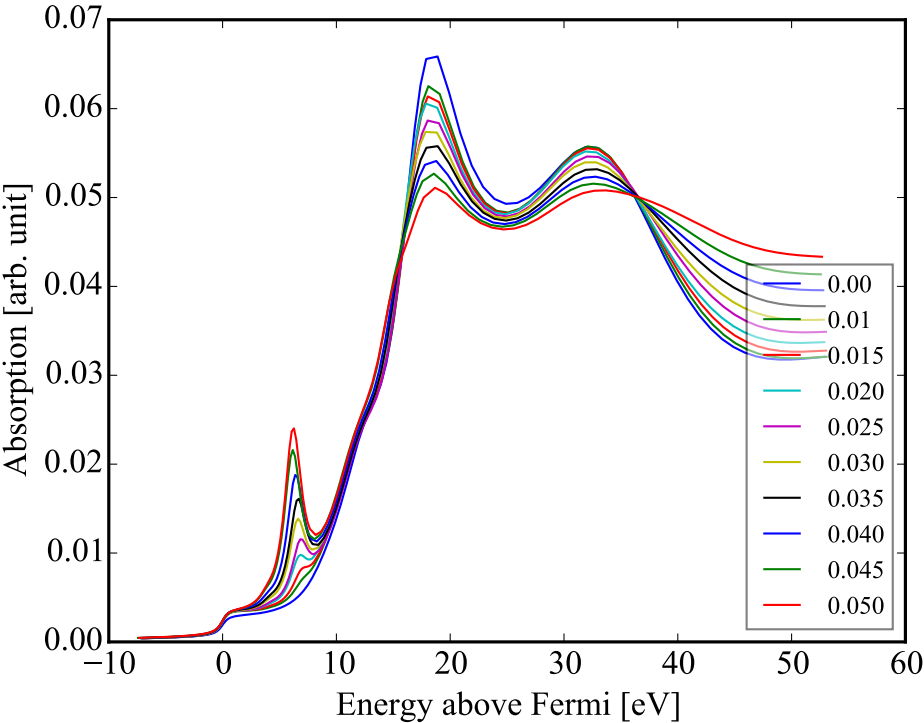
➡ on-siteで Ti の p 軌道 と d 軌道は混成する

E1E1 遷移(dipole-transition) でも対称性の破れにより
pre-edge が育つ



22	0.5000	0.5000	0.5000	! Ti
56	0.0000	0.0000	0.0000	! Ba
8	0.5000	0.5000	0.0000	! O
8	0.0000	0.5000	0.5000	! O
8	0.5000	0.0000	0.5000	! O

Ti の内部座標を x,y,z 方向 Δ だけシフトさせたときのXANES



R=4.0 Å (FMS)

仮想的な歪みの
XANESの計算

多極子展開

デフォルトは Dipole transition

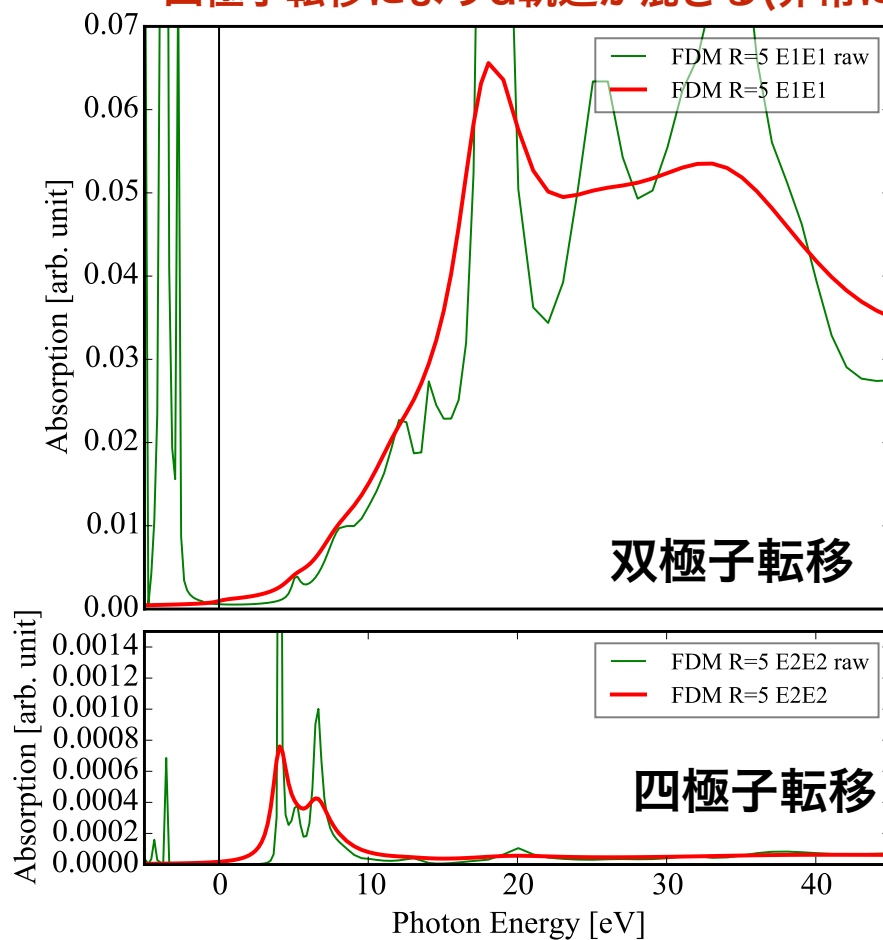
Quadrupole (E1E2 and E2E2)
Octupole (E1E3 and E3E3)
Dipmag (E1M1) and (M1M1)
 E1E2
 E1E3
 E2E2
 E3E3
 E1M1
 M1M1
 No_E1E1
 No_E2E2
 No_E1E2
 No_E1E3

Absorber	1
Filout	BaTiO3
Range	-15. 0.2 0. 0.5 10. 1. 45.
Quadrupole	
Edge	K
Convolution	
Green	
Radius	5.0
Crystal	4.0060 4.0060 4.0060 90.0000 90.0000 90.0000
22	0.0000 0.0000 0.0000 ! Ti
56	0.5000 0.5000 0.5000 ! Ba
8	0.5000 0.0000 0.0000 ! O
8	0.0000 0.5000 0.0000 ! O
8	0.0000 0.0000 0.5000 ! O

四極子展開を考慮した計算

BaTiO₃ 常誘電相(Pm3-m)

四極子転移によりd軌道が混ざる(非常に小さい)



デフォルトで E1E1 が
自動で入ってしまうので
E2E2 のみの計算をしたけ
れば 必ずNo_E1E1 をす
る必要がある

Filout

TiO2

E2E2のみ計算

Quadrupole

No_E1E1

No_E1E2

Range

-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.

Have a beautiful day !

Appendix

構造変換 or 構造作成

助けてくれるツールたち

(FDMNESには未対応)

わりと万能な構造変換機能があるツール



Atomic Simulation Environment

Python Framework

<https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>

cif2cell <http://sourceforge.net/projects/cif2cell/>

C-Tools <http://sourceforge.net/projects/c-tools/>

Xtaledit <http://pmt.sakura.ne.jp/wiki/index.php?title=XtalEdit>

Python Framework+Tools

★ (構造以外にもFDMNESの各機能にもほぼすべて対応)

Structure Analysis Environment (仮) (中田謙吾/JASRI, 公開準備中)

→ RMC_POT, FDMNES, 国産コードにも対応

→ 一部機能がしょぼいので ASEと組み合わせるのが吉

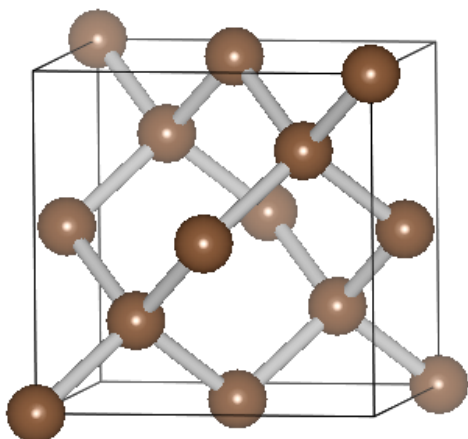
空間群の入力の際の注意

および

cif での入力の話

空間群にチョイスがある場合は注意

例) ダイヤモンド型構造



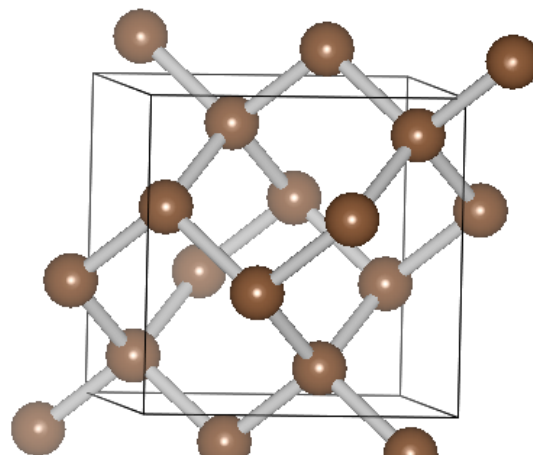
格子点を原子位置に一致

Non-Symmorphic Space Group

チョイス1

+部分的並進操作

**Fd-3m
(227)**



格子点を反転中心にとる

Symmorphic Space Group

チョイス2

International Tables for Crystallography (2006) から

227, Fd-3m **choice 1** Non-Symmorphic Space Group

8a サイト

0,0,0

3/4, 1/4, 3/4

227, Fd-3m **choice 2** Symmorphic Space Group

8a サイト

1/8, 1/8, 1/8

7/8, 3/8, 3/8

spacegroup.txt (FDMNES)

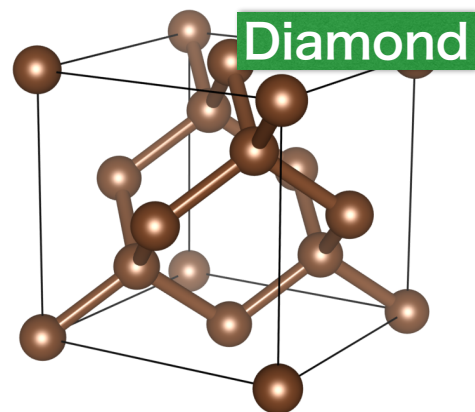
	Schoenflies	Hermann-Mauguin	Hall
*227:1	Oh ⁷	Fd-3m:1	F 4d 2 3 -1d
x,y,z			
-x+1/4,-y+1/4,-z+1/4			
..			
*227:2	Oh ⁷	Fd-3m:2	-F 4vw 2vw 3
x,y,z			
-y,x+1/4,z+1/4			
..			

Spgroup
Fd-3m:1

チョイス1

Crystal

3.567 3.567 3.567 90. 90. 90.
6.0 0.0 0.0 0.0
6.0 0.75 0.25 0.75

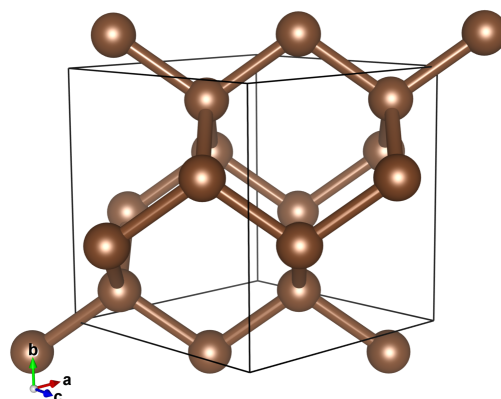


Spgroup
Fd-3m:2

チョイス2

Crystal

3.567 3.567 3.567 90. 90. 90.
6.0 0.125 0.125 0.125
6.0 0.875 0.375 0.375



*) チョイスありの H-M 記号で入力

サイトの記述についての注意

Diamond

Spgroup
Fd-3m:1

チョイス1,パターンA

Crystal

3.567 3.567 3.567 90. 90. 90.
6.0 0.0 0.0 0.0
6.0 0.75 0.25 0.75

サイトの

wycoff 位置 を全部書く

8a サイト 0,0,0
3/4, 1/4, 3/4

Spgroup
Fd-3m:1

チョイス1,パターンB

Crystal

3.567 3.567 3.567 90. 90. 90.
6.0 0.0 0.0 0.0

サイト内の代表選手のみ記述

8a サイト 0,0,0
3/4, 1/4, 3/4

空間群は指定しておく (しなくてもよい)

Diamond

Spgroup
Fd-3m:1

チョイス1,パターンC

Crystal

3.567 3.567 3.567 90. 90. 90.

6.0	0.0	0.0	0.0
6.0	0.0	0.5	0.5
6.0	0.5	0.5	0.0
6.0	0.5	0.0	0.5
6.0	0.75	0.25	0.75
6.0	0.25	0.25	0.25
6.0	0.25	0.75	0.75
6.0	0.75	0.75	0.25

8a サイト

サイト内の原子座標をP1で書く
(8aサイトなので8つある)

空間群を使っても使わなくても、
同じ構造を記述すれば良い

コードの内部ではその構造の元で、自動で空間群を探して
波動関数や電荷の対称化は行われる。

cif ファイルから直接入力は出来ないの？

FDMNES には cif 入力の機能はありません

*) PDBファイルの入力機能はありますが微妙に使えません

**FDMNESは
2016.01.08 の update で cif に対応しましたが・・・**

*) cifファイルの入力機能はありますが微妙に使えません

*) 対応している対称性が少ない(例:Rhombic はダメで Hexagonalに変換しなくてはならない)

*) 計算に必要な情報をすべて揃えているcifでないとダメ(例:チョイスなど)

*) P1 の cif はダメっぽい

対応していない cif が多すぎる

原則的には

1) cifファイルを読んで**構造を理解**すればよい

ただし、cif ファイルの中身は実はかなり**複雑**

2) cifが作られた論文を読めば構造情報がわかる

3) cifを **VESTA** や **CrystalMaker** で読み込ませる

自分が理解している出力形式へエクスポート

4) FDMNES に対応した構造ツールを使う

(1) 拙作 StructureAnalysisEnvironment (仮) 近日公開予定

(2) pyFDMNES (FDMNES専用の Python Framework)

cif ファイルの一番シンプルな内部構造

TiO₂ Rutile

_pd_phase_name		'TiO2 Rutile'				
cell parameter	_cell_length_a	4.593(2)				
	_cell_length_b	4.593(2)				
	_cell_length_c	2.959(2)				
	_cell_angle_alpha	90				
	_cell_angle_beta	90				
	_cell_angle_gamma	90				
_symmetry_space_group_name_H-M		'P 42/m n m'			space group	
_symmetry_Int_Tables_number		136				
_atom_site_type_symbol						
元素名 占有率	Ti	1	0	0	0	Biso 0.42 Ti
	O	1	0.3051(7)	0.3051(7)	0	Biso 0.60 O
x,y,z						

!!! 簡単そうだ!!!

cif ファイル中でのチョイスの記述は？ (Hall記号が併記してないcifがある)

Diamond

Diamond型 C (227,Fd-3m)

_cell_length_a	3.56700
_cell_length_b	3.56700
_cell_length_c	3.56700
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	90
_symmetry_space_group_name_H-M	'F d -3 m'
_symmetry_Int_Tables_number	227

実は 素のHermann-Mauguin記号なのでチョイスが判らん

よく見ると Diamond

対称操作が異なる

チョイス1

チョイス2

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
'-x, -y+1/2, z+1/2'
'-x+1/2, y+1/2, -z'
'x+1/2, -y, -z+1/2'
'z, x, y'
'z+1/2, -x, -y+1/2'
'-z, -x+1/2, y+1/2'
'-z+1/2, x+1/2, -y'
'y, z, x'
```

+部分的並進操作

(Non-Symmorphic Space Group)

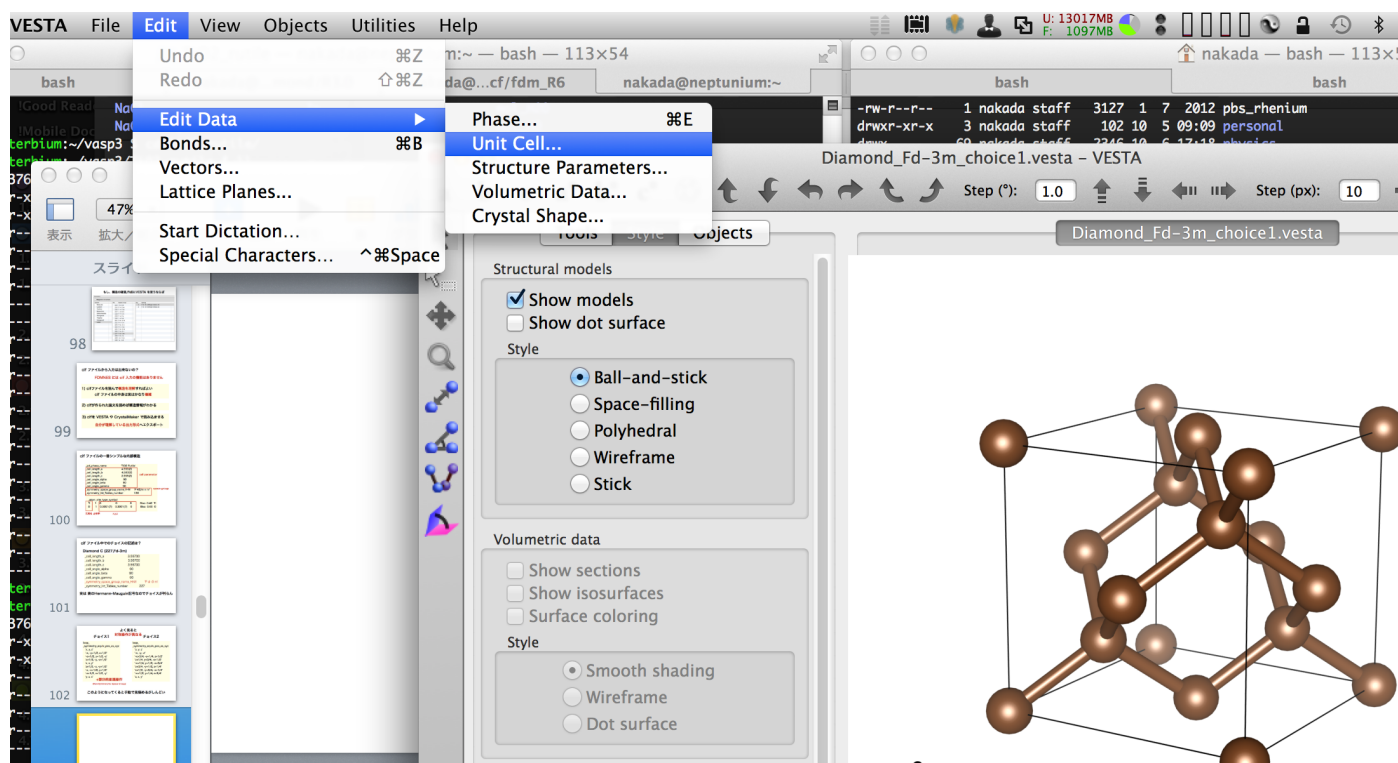
```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
'-x, -y, -z'
'-x+3/4, -y+1/4, z+1/2'
'x+1/4, y+3/4, -z+1/2'
'-x+1/4, y+1/2, -z+3/4'
'x+3/4, -y+1/2, z+1/4'
'x+1/2, -y+3/4, -z+1/4'
'-x+1/2, y+1/4, z+3/4'
'z, x, y'
```

原理的にはチョイスが見極められるのだが・・・
手動でチョイスを**並進操作**を見極めるのがしんどい

一番？簡単な方法としては

VESTA or CrystalMaker で**対称性を P1 に落とすこと**

Diamond



VESTA

Phase: 1 New structure

Phase Unit cell Structure parameters Volumetric data Crystal shape

Symmetry

☐ Magnetic structure

System	No.	Space Group	No.	Setting
Molecule	213	P 41 3 2	1	F d -3 m (Origin choice 1)
Custom	214	I 41 3 2	2	F d -3 m (Origin choice 2)
Triclinic	215	P -4 3 m		
Monoclinic	216	F -4 3 m		
Orthorhombic	217	I -4 3 m		
Tetragonal	218	P -4 3 n		
Trigonal	219	F -4 3 c		
Hexagonal	220	I -4 3 d		
Cubic	221	P m -3 m		
	222	P n -3 n		
	223	P m -3 n		
	224	P n -3 m		
	225	F m -3 m		
	226	F m -3 c		
	227	F d -3 m		
	228	F d -3 c		
	229	I m -3 m		
	230	I a -3 d		

Transform... Customize... Update structure parameters to keep 3D geometry

Lattice parameters

a (Å)	b (Å)	c (Å)	α (°)	β (°)	γ (°)
3.56700	3.56700	3.56700	90.0000	90.0000	90.0000
s.u.: 0.00000	0.00000	0.00000	0.0000	0.0000	0.0000

Remove symmetry

Diamond

Remove symmetry

VESTA

対称性あり

Diamond

Phase Unit cell Structure parameters Volumetric data Crystal shape

Atomic displacement parameter Anisotropic: None Isotropic: ☐

No.: Symbol... Label: Charge: 0

x: 0.000000 y: 0.000000 z: 0.000000 Occ.: 1

s.u.(x): 0.000000 s.u.(y): 0.000000 s.u.(z): 0.000000 B: 1

U11: 0.000000 U22: 0.000000 U33: 0.000000

U12: 0.000000 U13: 0.000000 U23: 0.000000

No.	Atom	Label	x	y	z	Occ.	B
1	C	C	0.000000	0.000000	0.000000	1	1

Fd-3m:1 の元での 8a サイト

New Delete Clear

対称性なし

Remove symmetry

No.	Atom	Label	x	y	z	Occ.	B
1	C	C	0.000000	0.000000	0.000000	1	1
2	C	C	0.000000	0.500000	0.500000	1	1
3	C	C	0.500000	0.500000	0.000000	1	1
4	C	C	0.500000	0.000000	0.500000	1	1
5	C	C	0.750000	0.250000	0.750000	1	1
6	C	C	0.250000	0.250000	0.250000	1	1
7	C	C	0.250000	0.750000	0.750000	1	1
8	C	C	0.750000	0.750000	0.250000	1	1

P1 にすると 8つのサイト

New Delete Clear

VESTA

注意) VESTA

Phase: 1 Fd-3m:1

Phase Unit cell Structure parameters Volumetric data Crystal shape

Atomic displacement parameter Anisotropic: None Isotropic: B

No.: 2/2 Symbol... C Label: C Charge: 0

x: 0.750000 y: 0.250000 z: 0.750000 Occ.: 1

s.u.(x): 0.000000 s.u.(y): 0.000000 s.u.(z): 0.000000 B: 1

Fd-3m:1 **8aサイト**

No.	Atom	Label	x	y	z	Occ.	B
1	C	C	0.000000	0.000000	0.000000	1	1
2	C	C	0.750000	0.250000	0.750000	1	1

New Delete Clear

VESTA はサイトの代表選手以外を書いても正しく描画する

Phase: 1 New structure

Phase Unit cell Structure

Atomic displacement parameter

No.: Symbol.

x: 0.000000 y: 0.000000 z: 0.000000

U11: 0.000000 U12: 0.000000 U13: 0.000000

Fd-3m:1 **Diamond**

Remove symmetry

P1

もし 8aサイトの代表選手以外も記述してしまったら

重複してしまう
同じ座標を登録

No.	Atom	Label	x	y	z	Occ.	B
1	C	C	0.000000	0.000000	0.000000	1	1
2	C	C	0.000000	0.500000	0.500000	1	1
3	C	C	0.500000	0.500000	0.000000	1	1
4	C	C	0.500000	0.000000	0.500000	1	1
5	C	C	0.750000	0.250000	0.750000	1	1
6	C	C	0.250000	0.250000	0.250000	1	1
7	C	C	0.250000	0.750000	0.750000	1	1
8	C	C	0.750000	0.750000	0.250000	1	1
9	C	C	0.750000	0.250000	0.750000	1	1
10	C	C	0.250000	0.250000	0.250000	1	1
11	C	C	0.750000	0.750000	0.250000	1	1
12	C	C	0.250000	0.750000	0.750000	1	1
13	C	C	0.000000	0.000000	0.000000	1	1
14	C	C	0.000000	0.500000	0.500000	1	1
15	C	C	0.500000	0.000000	0.500000	1	1
16	C	C	0.500000	0.500000	0.000000	1	1

New Delete Clear

VESTA

VESTA や CrystalMaker でサイトを記述するときは
基本、サイトの代表選手のみ記述した方がその後に誤解
が少ない

Remove symmetry 後に

Diamond



cif ファイルにエクスポートする

_cell_length_a	3.56700
_cell_length_b	3.56700
_cell_length_c	3.56700
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	90
_symmetry_space_group_name_H-M	
_symmetry_Int_Tables_number	1

'P 1'

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
```

恒等操作のみ

省略

P1での内部座標をゲット！

_atom_site_type_symbol

C	1.0	0.000000	0.000000	0.000000	Biso	1.000000	C
C	1.0	0.000000	0.500000	0.500000	Biso	1.000000	C
C	1.0	0.500000	0.500000	0.000000	Biso	1.000000	C
C	1.0	0.500000	0.000000	0.500000	Biso	1.000000	C
C	1.0	0.750000	0.250000	0.750000	Biso	1.000000	C
C	1.0	0.250000	0.250000	0.250000	Biso	1.000000	C
C	1.0	0.250000	0.750000	0.750000	Biso	1.000000	C
C	1.0	0.750000	0.750000	0.250000	Biso	1.000000	C

元素記号

x,y,z



FDMNESを

P1の内部座標で記述

空間群にチョイスを含んだ cif ファイルは
対称性を除いて P1 にして構造を作るのが間違いない
(オススメ)

Crystal

3.567 3.567 3.567 90. 90. 90.

```
6.0 0.0 0.0 0.0
6.0 0.0 0.5 0.5
6.0 0.5 0.5 0.0
6.0 0.5 0.0 0.5
6.0 0.75 0.25 0.75
6.0 0.25 0.25 0.25
6.0 0.25 0.75 0.75
6.0 0.75 0.75 0.25
```

計算したい
構造をうまく記述する

分子系の記述は？

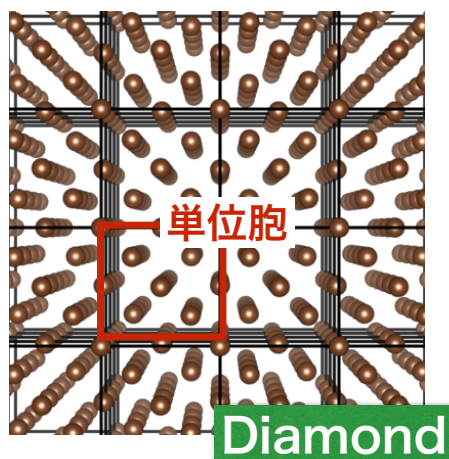
Crystal のとき

FDMNES は単位胞を周期的に配置する

Spgroup
Fd-3m:1

Crystal

3.567 3.567 3.567 90. 90. 90.
6.0 0.0 0.0 0.0



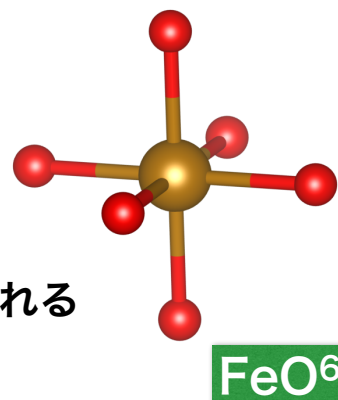
Molecule のとき

Molecule

2.16 2.16 2.16 90. 90. 90.
26 0.0 0.0 0.0
8 1.0 0.0 0.0
8 -1.0 0.0 0.0
8 0.0 1.0 0.0
8 0.0 -1.0 0.0
8 0.0 0.0 1.0
8 0.0 0.0 -1.0



孤立して配置される



Spgroup
Fd-3m:1

Crystal

3.567 3.567 3.567 90. 90. 90.
6.0 0.0 0.0 0.0
6.0 0.75 0.25 0.75

for FDMNES

mesh parameter
unit-cell

unit-cell を単位とした
内部座標

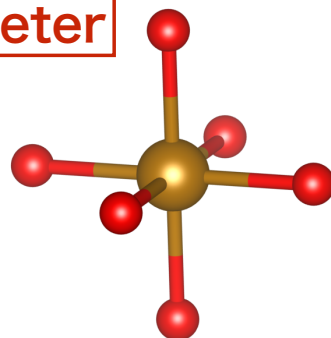
分子系の入力はxyz(Cartesian)ではなくDirectで行う

Molecule

2.16 2.16 2.16 90. 90. 90.
26 0.0 0.0 0.0
8 1.0 0.0 0.0
8 -1.0 0.0 0.0
8 0.0 1.0 0.0
8 0.0 -1.0 0.0
8 0.0 0.0 1.0
8 0.0 0.0 -1.0

mesh parameter
unit-cell
箱を作る必要

unit-cell を単位とした
内部座標



FDMNES での分子の構造作成は

実質的には分子を含んだ単位胞の作成となる
(ただし、非周期)

(注意)

通常の分子系の構造情報はcartesian で書かれている

PDB形式や xyz 形式などの cell の情報を持たない
ファイルフォーマットを元にするときには注意が必要

cell の情報を mesh parameter として用意する
FDM計算には mesh parameter が必要

VESTA では…

VESTA で PDB などの分子系の構造情報を読んだとき
output する方法

×) 直接 POSCAR などの周期系の形式で output する

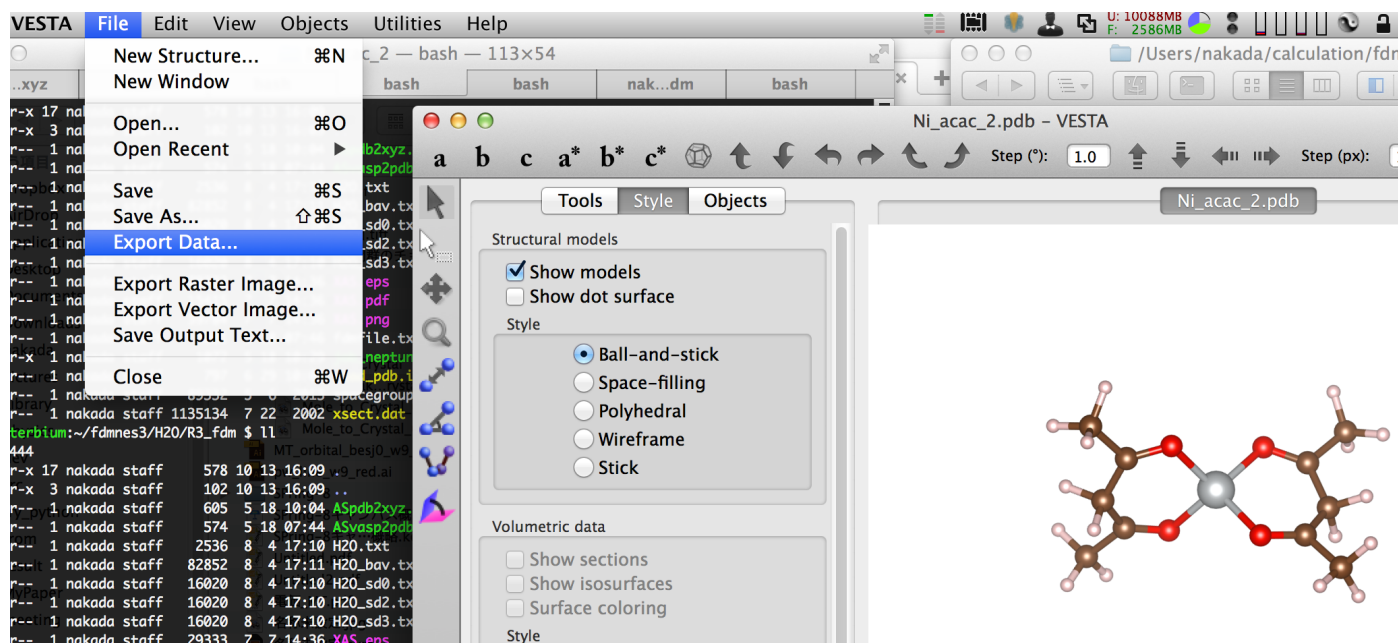
○) 一度 cif 形式に export する。

cif への output は分子の大きさが考慮されて
自動で分子を含む単位胞が作られる

単位胞情報を持った後ならば周期系の形式へ出
力が自由に出来る

VESTA では…

1) [File]-[Export Data…] で cif を選び保存する

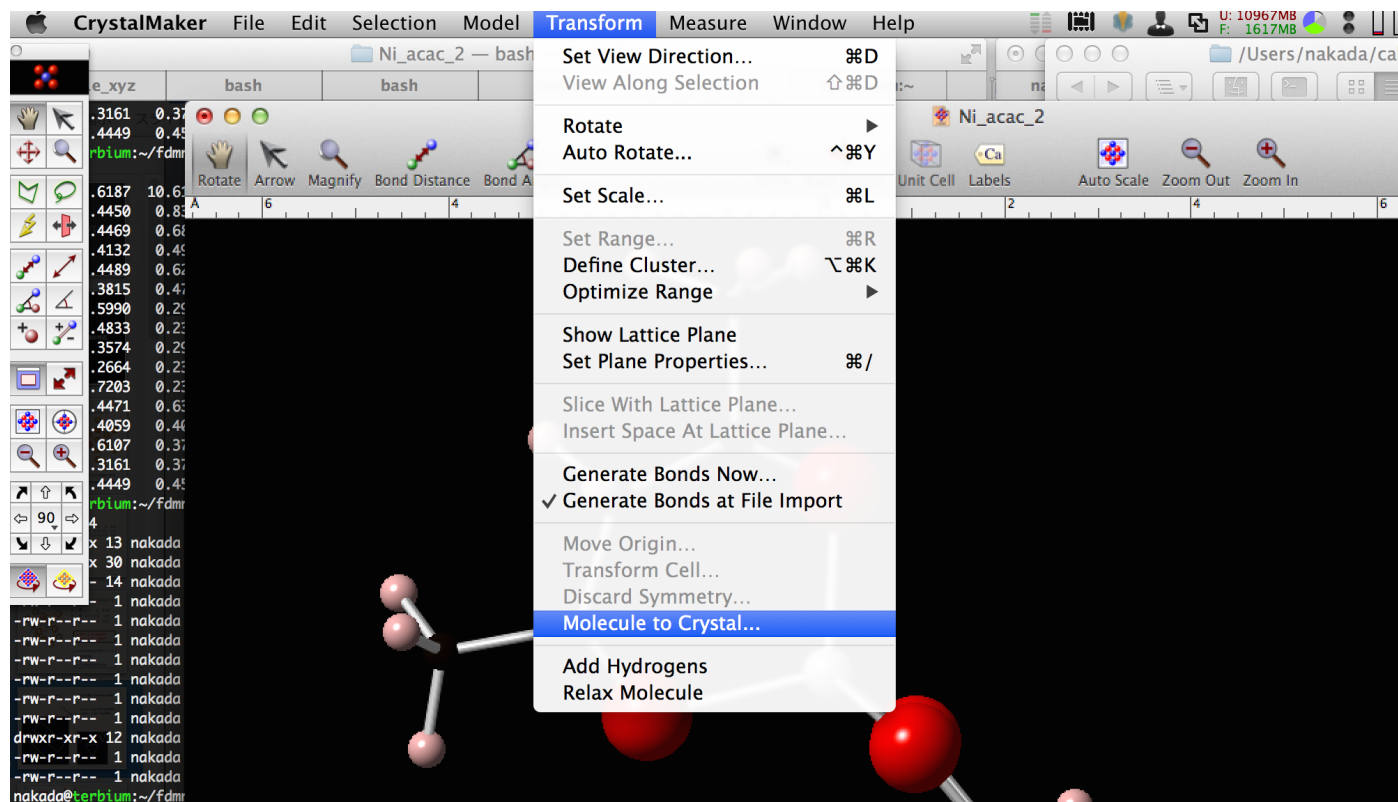


2) 保存した cif を開く

3) 再度 [File]-[Export Data…] で好きな形式に output する

Crystal Maker では

[Transform]-[Molecule to Crystal] を選択



lattice parameter を設定

Convert Molecule to Crystal

Molecular Dimensions: Width (ΔX) **8.117 Å** x Height (ΔY) **7.805 Å** x Depth (ΔZ) **6.599 Å**

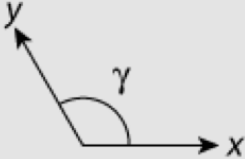
Lattice Parameters: a [Å] **12.176** b [Å] **11.708** c [Å] **9.899** α [°] **90.00** β [°] **90.00** γ [°] **90.00**

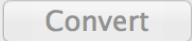
Orientation Relationship:

- x and y are parallel to the screen (as illustrated)
- z is directed out of the screen, towards you.

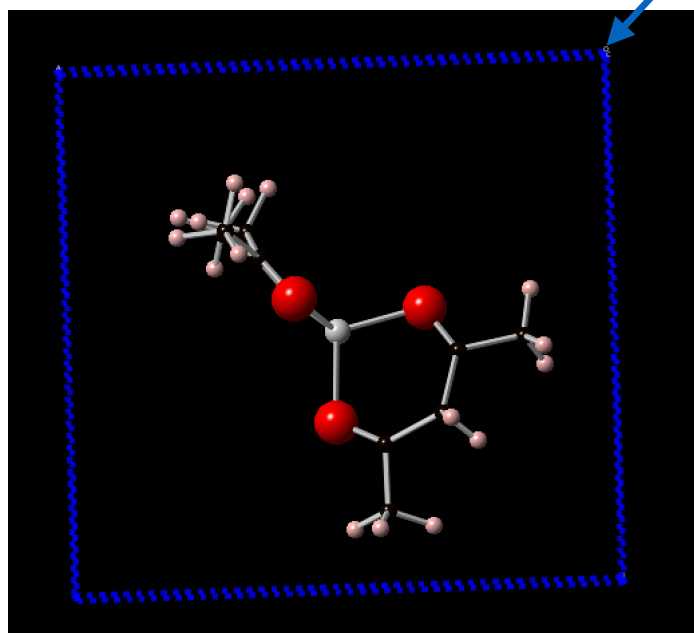
Please ensure that your molecule is in the correct orientation before proceeding!

Position Molecule: ☒ Centred inside the unit cell
☐ Centred at the origin



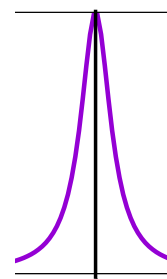
分子の情報に箱 (unit-cell) 加わる



lattice a
lattice b
lattice c
 α
 β
 γ

Convolution について

Lorentzian-convolution (畳み込み)



ブロードニングする前のスペクトル

ブロードニング後

$$\sigma^{\text{conv}}(\omega) = \int_{E_F}^{\infty} dE \sigma^{\text{nonconv}}(E) \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_f(\omega)}{\Gamma_f(\omega)^2 + (\hbar\omega - E)^2}$$

Lorentzian 型

$$\Gamma_f(E - E_F) = \Gamma_{\text{Hole}} + \Gamma_{\text{max}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{\pi}{3} \frac{\Gamma_{\text{max}}}{E_{\text{Larg}}} \left(e - \frac{1}{e^2} \right) \right) \right)$$

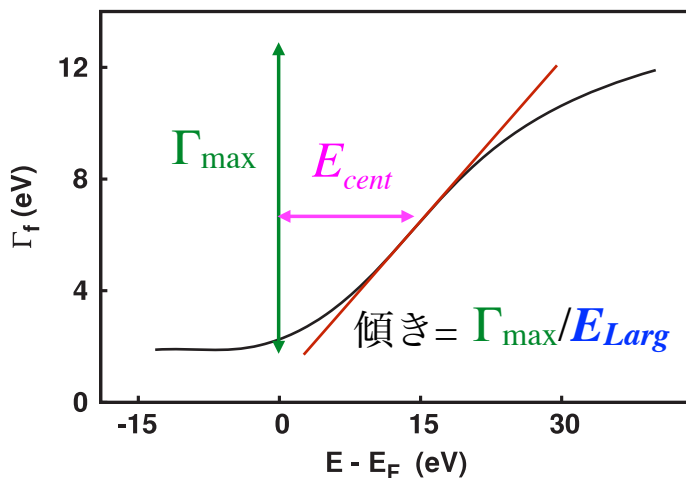
$$e = \frac{E - E_F}{E_{\text{cent}}}$$

arctangent 型

$$\Gamma_f(E - E_F) = \Gamma_{Hole} + \Gamma_{max} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{\pi}{3} \frac{\Gamma_{max}}{E_{Larg}} \left(e - \frac{1}{e^2} \right) \right) \right)$$

arctangent 型

$$e = \frac{E - E_F}{E_{cent}}$$



Γ_{max} 終状態の最大値

Γ_{hole} ホールの幅

E_{Larg} arctangent の幅

E_{cent} arctangent の中心

E_{fermi} Fermi Level

O. Bunau, Y. Joly, J. Phys.: Cond. Mat. 21, 345501 (2009)

convolution (畳み込み)

```
Filout
Cu

Range
-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.

Radius
3.0

Crystal
3.61 3.61 3.61 90. 90. 90.
29 0.0 0.0 0.0
29 0.5 0.5 0.0
29 0.5 0.0 0.5
29 0.0 0.5 0.5
```

Convolution

convolution 畳み込みをする

End

Cu.txt

Cu_bav.txt

Cu_conv.txt

inp.txt

fdmfile.txt

spacegroup.txt

xsect.dat

出力

core-hole の life time を考慮

アークタンジェント型の
Lorentzian でブロード
ニングしたスペクトルを
出力する

計算後に convolution パラメーターを変えて
再convolution する

現在の Convolution パラメーターを確認

1) **Select-String** ^{スペース} **Gamma_** ^{スペース} ***.txt** (Gamma 値を検索)

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> Select-String Gamma_ *.txt

Cu_bav.txt:6665:   Gamma_max = 15.00, Ecent = 30.00, Elarg = 30.00
Cu_bav.txt:6666:   Gamma_hole = 1.55, Efermi = -6.93 eV

PS C:\¥cal¥Cu>
```

Gamma_max = 15.00
Ecent = 30.00
Elarg = 30.00

Gamma_hole = 1.55
Efermi = -6.93 eV

デフォルトでは固定値

(元素毎に規定値が用いられている)
(計算値: convolution スタート)

Cu ディレクトリのしたに ReConvolution ディレクトリを作って convolutin 用の計算をする準備をする

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> tree /F ¥cal
フォルダー パスの一覧
ボリューム シリアル番号は EC02-77DC です
C:\¥CAL
├── Cu
│   ├── Cu.png
│   ├── Cu.txt
│   ├── Cu_bav.txt
│   ├── Cu_conv.txt
│   ├── fdmfile.txt
│   ├── inp.txt
│   ├── spacegroup.txt
│   └── xsect.dat
└── ReConvolution
    ├── Cu.txt
    ├── fdmfile.txt
    ├── inp.txt
    ├── spacegroup.txt
    └── xsect.dat

PS C:\¥cal¥Cu>
```

計算結果をコピー

スペース
↓
tree /F ¥cal

ディレクトリやファイルのツリー表示

スペース
↓
tree /F

カレントディレクトリ以下をツリー表示 (/F を付けるとファイルも表示)

スペース スペース
↓ ↓
tree /F 指定ディレクトリ

指定ディレクトリ以下をツリー表示 (/F を付けるとファイルも表示)

計算後に convolution パラメーターを変えて 再convolution する

- スペース
↓
- 1) cd ¥cal¥Cu
 - 2) mkdir ReConvolution
 - 3) cd ReConvolution
 - 4) cp ..¥Cu.txt .
 - 5) cp ..¥fdmfile.txt .
 - 6) cp ..¥spacegroup.txt .
 - 7) cp ..¥xsect.dat .
 - 8) cp ..¥inp.txt .

Cu の計算結果があるディレクトリへ
再convolution 用のディレクトリ作成

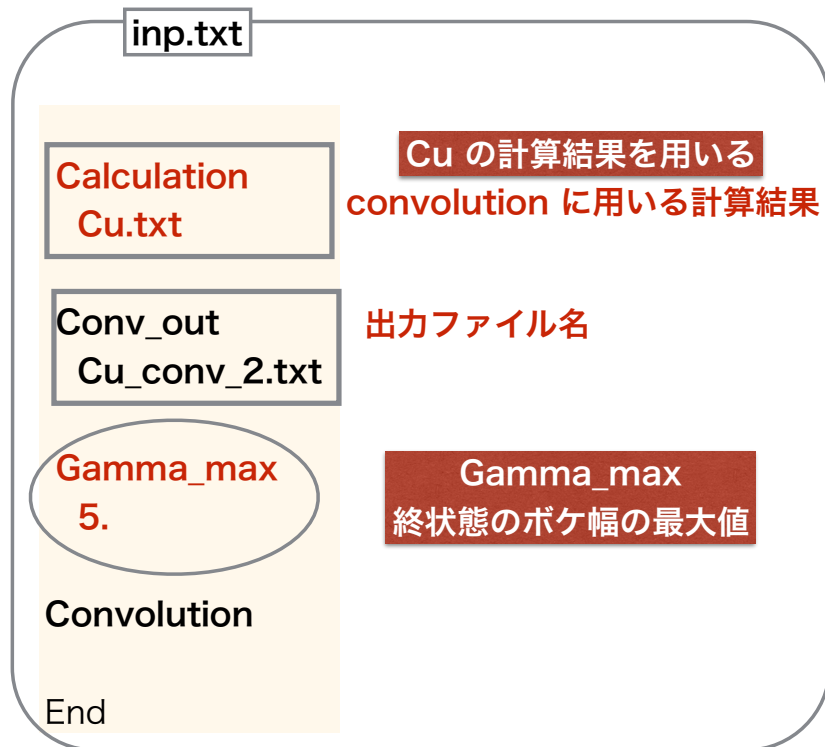
Cu の計算結果をコピーする

計算に必要な基本ファイルのコピー

入力ファイルのひな形をコピー

Convolution 用の入力ファイルの編集と設定

スペース
↓
start □.¥inp.txt inp.txt の編集



入力に必要な値はこれだけです
それ以外は消してください

GNUPLLOT用にコメントアウトしていた Cu.txt を元に戻す

A screenshot of a text editor window titled `Cu.txt - メモ帳`. The menu bar includes `ファイル(F)`, `編集(E)`, `書式(O)`, `表示(V)`, and `ヘルプ(H)`. The text content is as follows:

#	8979.000	29	1	1	0.00000	-12.19174	-6.92517	1	1
#	Energy	<xanes>							
	-10.000	1.7563206E-02							
	-9.800	2.0000084E-02							
	-9.600	2.3896177E-02							
	-9.400	3.1033613E-02							
	-9.200	4.9536063E-02							
	-9.000	1.2873069E-01							
	-8.800	2.8190062E-01							
	-8.600	8.0092466E-03							
	-8.400	2.4026680E-03							

Red circles highlight the first two lines. A red arrow points from the first line to the second screenshot.

スペース
↓
start □.¥Cu.txt
Cu.txt の編集

A second screenshot of the `Cu.txt` editor window. The first line is now `| 8979.000` instead of `# 8979.000`. The rest of the content is the same as the first screenshot.

コメントアウトを外す
名前を付けて上書き保存

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal\¥Cu> tree /F ¥cal
フォルダー パスの一覧
ボリューム シリアル番号は EC02-77DC です
C:\¥CAL
├── Cu
│   ├── Cu.png
│   ├── Cu.txt
│   ├── Cu_bav.txt
│   ├── Cu_conv.txt
│   ├── fdmfile.txt
│   ├── inp.txt
│   ├── spacegroup.txt
│   └── xsect.dat
└── ReConvolution
    ├── Cu.txt
    ├── fdmfile.txt
    ├── inp.txt
    ├── spacegroup.txt
    └── xsect.dat

PS C:\¥cal\¥Cu>
```

Cu 以下の ReConvolution ディレクトリで作業しています

自分が作業しているディレクトリ、編集しているファイルの確認
(編集しているファイル、場所は意図しているものものですか?)

ls

```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal\¥Cu¥ReConvolution> ls

ディレクトリ: C:\¥cal\¥Cu¥ReConvolution

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---             2016/01/02   9:52          2979 Cu.txt
-a---             2016/01/01  10:20          1046 fdmfile.txt
-a---             2016/01/02   9:52           236 inp.txt
-a---             2013/05/06  13:33        89332 spacegroup.txt
-a---             2002/07/22  13:33       1135134 xsect.dat

PS C:\¥cal\¥Cu¥ReConvolution>
```

再Convolution 計算します

Windows PowerShell

```
PS C:\¥cal¥Cu¥ReConvolution> fdmnes_win64.exe
```

fdmnes_wn64.exe を実行します (64bit windows)

一瞬で計算が終わります

計算後の画面

Windows PowerShell

```
PS C:\¥cal¥Cu¥ReConvolution> fdmnes_win64.exe
FDMNES II program, Revision 16 December 2015
Date = 02 01 2016
Time = 10 h 09 mn 13 s
```

Arctangent model

```
Gamma_max = 5.00, Ecent = 30.00, Elarg = 30.00
Gamma_hole = 1.55, Efermi = -6.93 eV
```

E_ (eV)	Width_ (eV)	lambda_ (Å)
-10.000	1.550	0.000
-6.600	1.551	8616.745
-3.200	1.691	83.317
0.000	2.027	28.573
3.500	2.545	15.542
7.000	3.047	11.430
10.000	3.377	10.073
14.000	3.680	9.389
17.000	3.836	9.233
20.000	3.955	9.218
24.000	4.075	9.307
27.000	4.147	9.417
30.000	4.208	9.545
34.000	4.278	9.730
37.000	4.324	9.873
40.000	4.367	10.016

```
PS C:\¥cal¥Cu¥ReConvolution>
```

再Convolution 後に出来るファイル

inp.txt 中の Conv_out タグで指定したファイル

ls

再Convolution 結果

Windows PowerShell

```
PS C:\¥cal¥Cu¥ReConvolution> ls
```

ディレクトリ: C:\¥cal¥Cu¥ReConvolution

Mode	LastWriteTime	Length	Name
-a---	2016/01/02 9:52	2979	Cu.txt
-a---	2016/01/02 10:11	2755	Cu_conv_2.txt
-a---	2016/01/01 10:20	1046	fdmfile.txt
-a---	2016/01/02 9:52	236	inp.txt
-a---	2013/05/06 13:33	89332	spacegroup.txt
-a---	2002/07/22 13:33	1135134	xsect.dat

```
PS C:\¥cal¥Cu¥ReConvolution>
```


‘Cu_conv_2.txt’ コメントアウト忘れずに

スペース
↓
start `¥Cu_conv_2.txt` Cu_conv_2.txt の編集

コメントアウト
(最初の1行)

```
Cu_conv_2.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
# Energy <xanes>
-10.000 4.1531851E-03
-9.800 4.3557171E-03
-9.600 4.5822573E-03
-9.400 4.8375322E-03
-9.200 5.1275894E-03
-9.000 5.4602769E-03
-8.800 5.8459353E-03
~ ~ ~ ~ ~
```

名前を付けて上書き保存

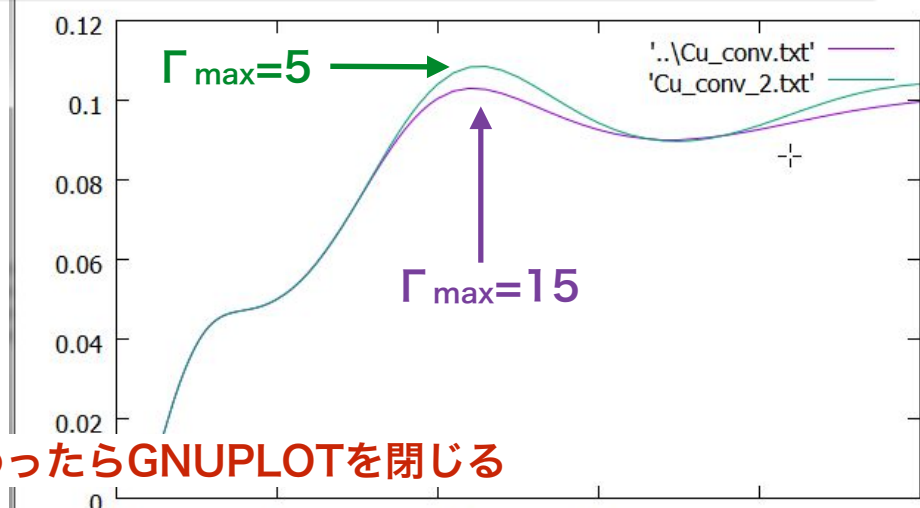
再Convolution の結果と、それ以前の結果を比較プロット

1) wgnuplot

スペース
↓
2) plot `¥Cu_conv_2.txt` `w l`, `..¥Cu_conv.txt` `w l`
カンマ
↑
一つ上のディレクトリ

```
Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot '..¥Cu_conv.txt' w l , 'Cu_conv_2.txt' w l
gnuplot> _
```

スペクトルの
ボケ具合を調
整することが
できる



3) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる

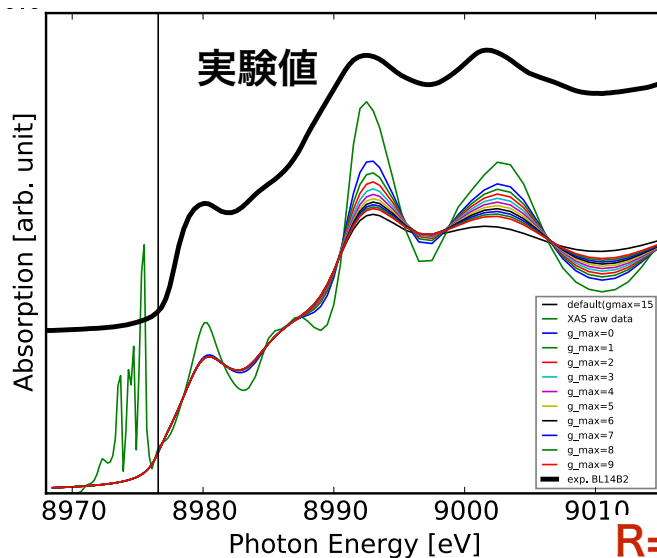
$\Gamma_{\max} = 1 \sim 9$ 変化

$\Gamma_{\text{hole}} = 1.55$ 固定

$\Gamma_{\max}$ を変化

(Γ_{hole} は固定値)

後半部分のスペクトルの変化



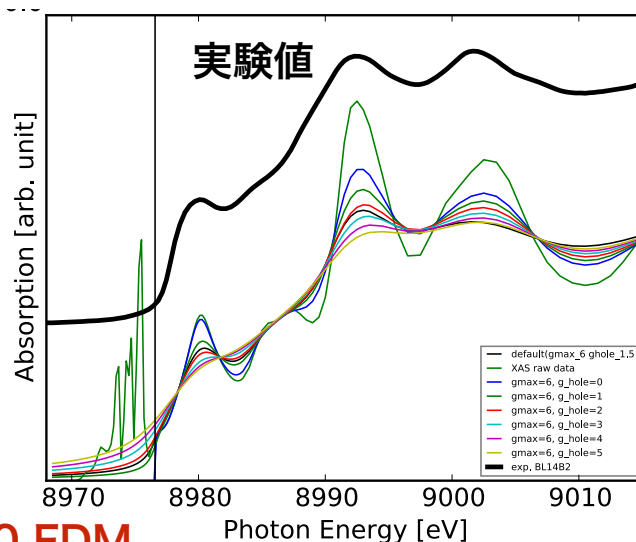
$\Gamma_{\max} = 15.0$ 固定

$\Gamma_{\text{hole}} = 1 \sim 5$ 変化

($\Gamma_{\max}$ は規定値のまま)

Γ_{hole} を変化

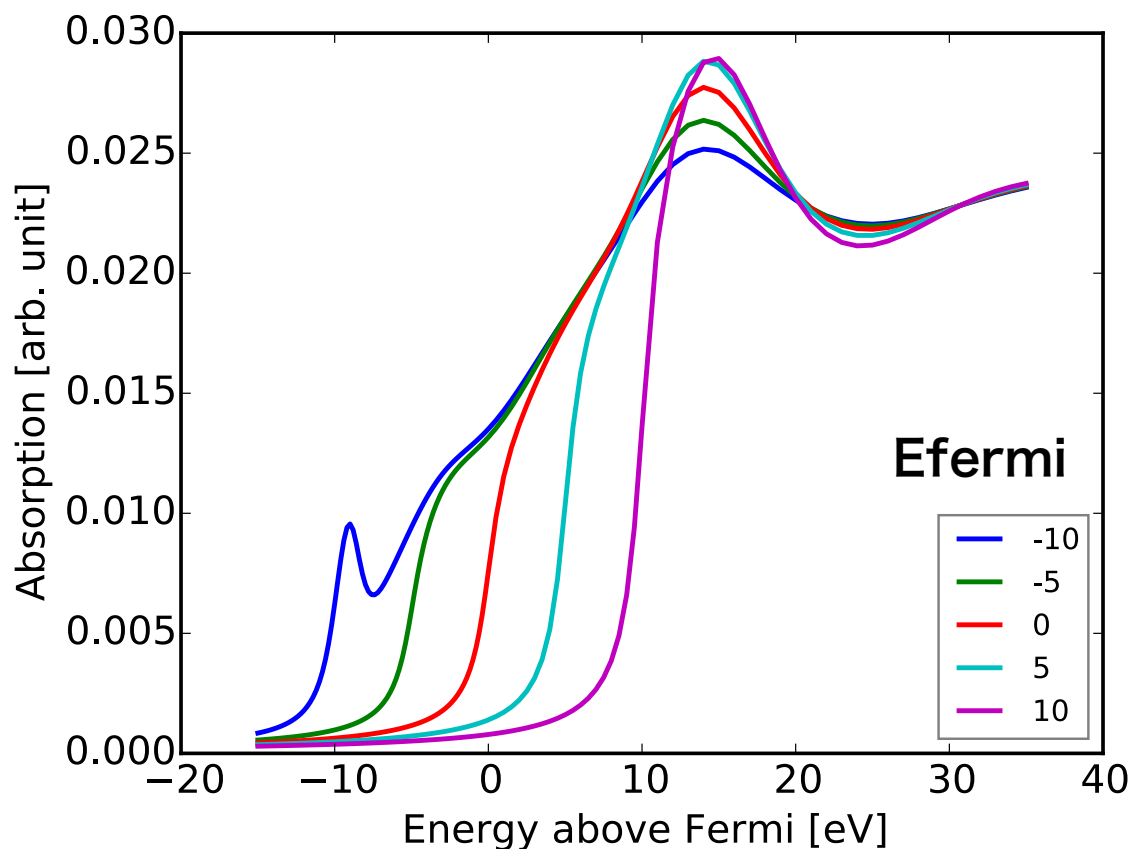
全体的なスペクトルのボカシ



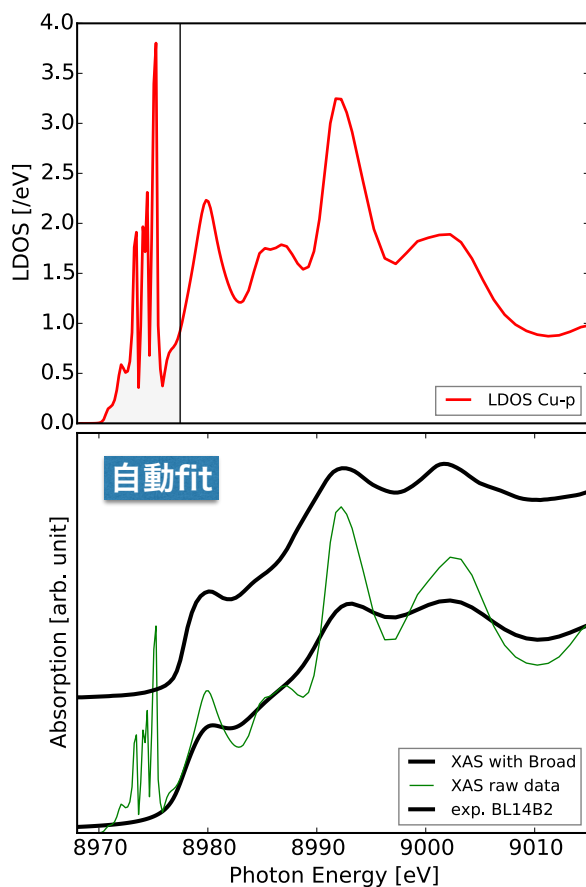
Convolution パラメーターの実験値へのフィット

FCC Cu green R4

Efermi を変更すると
convolution 後の結果が変わる



convolution パラメーターを
実験に合わせるよう fit する
(Rファクターでミニマム)



Metric_out
Cu_fit.log

Experiment
Cu_K_Cu_foil_Si311_50ms_140625.txt.nor

Gen_shift
-20. 20. 100

Parameter

Par_ecent
0. 50. 100.

Centra energy for the arctangents
Ecent

Par_elarg
0. 50. 100.

Energy width for the arctangents
Elarg

Par_efermi
-10. 10. 100.

Fermi energy
Efermi

Par_gamma_hole
0. 10. 100.

Hole width
 Γ_{hole}

Par_gamma_max
0. 20. 100.

Maximum width for the final states
 Γ_{max}

Cu2O の DOS(sd*.txt) のナンバリングについて

Cu2O_sd0.txt

Cu2O_sd1.txt

Cu2O_sd2.txt



どの原子のLDOSなのか？

計算ログ(Cu2O_bav.txt)の中を見る

Crystal

入力した構造情報の確認

ngroup = 6, ntype = 2

a, b, c = 4.2676000 4.2676000 4.2676000

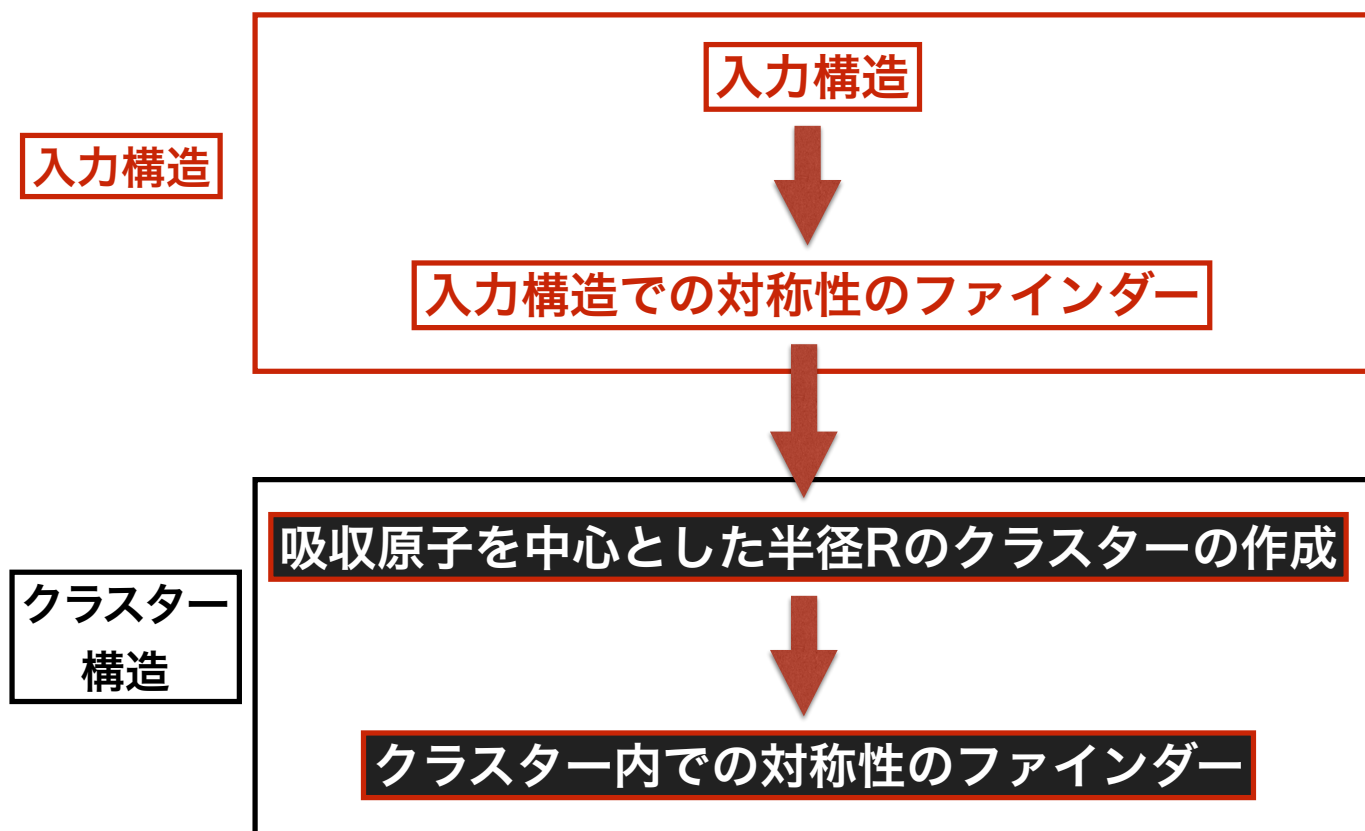
alfa, beta, gamma = 90.000 90.000 90.000

Z	Typ	posx	posy	posz
---	-----	------	------	------

29	1	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
29	1	0.5000000000	0.5000000000	0.0000000000
29	1	0.5000000000	0.0000000000	0.5000000000
29	1	0.0000000000	0.5000000000	0.5000000000
8	2	0.2500000000	0.2500000000	0.2500000000
8	2	0.7500000000	0.7500000000	0.7500000000

2種類
6原子

FDMES は入力の結晶/分子構造からクラスターを自動作成



入力した構造情報の対称性の確認

入力した結晶の通しの原子の番号

---- Symsite

ipr = 1, Z = 29, natomsym = 4

igr	posx	posy	posz	sym	code
1	0.00000	0.00000	0.00000	E	1
2	0.50000	0.50000	0.00000	C3_1-11	4
3	0.50000	0.00000	0.50000	C3_-111	6
4	0.00000	0.50000	0.50000	-C3_1-11	5

ipr=1

(等価な原子が4つ)

ipr = 2, Z = 8, natomsym = 2

igr	posx	posy	posz	sym	code
5	0.25000	0.25000	0.25000	E	1
6	0.75000	0.75000	0.75000	C2_110	10

ipr=2

(等価な原子が2つ)

系の対称性から二種類のサイトが見つかる

作成したクラスター構造の確認

元になった結晶で対称性での分類番号(ipr)

元になった結晶の通し番号(igr)

クラスターの通し番号(ia)

Cluster: atom positions in order, in the internal R2 bases

Z	posx	posy	posz	dista	ia	igr	ity	ipr	chargat
29	0.000000	0.000000	0.000000	!	0.000000	1	1	0	0.000000
8	0.000000	0.000000	-1.847925	!	1.847925	2	6	2	0.000000
8	0.000000	0.000000	1.847925	!	1.847925	3	5	2	0.000000
29	-3.017649	0.000000	0.000000	!	3.017649	4	2	1	0.000000
29	-1.508824	-2.613361	0.000000	!	3.017649	5	3	1	0.000000
29	1.508824	0.871120	-2.463900	!	3.017649	6	4	1	0.000000
29	3.017649	0.000000	0.000000	!	3.017649	7	2	1	0.000000

クラスターは absorber が原点に作られる

Atom_selec 項目のチェック

元になった結晶の通し番号(igr)

---- Atom_selec

Rsort = 4.651 A

nx = 25

natome = 7, igrpt = 17, Cluster_comp = T, Cluster_mag = F

No Full_atom mode

ia	Z	it	igr	ipr	iap	posx	posy	posz	igrpt	PtGrName	Comp
1	29	0	1	0	1	0.00000	0.00000	0.00000	17	-3	T T F
2	8	2	5	2	3	0.00000	0.00000	1.84793	16	3	T T F
3	29	1	2	1	7	3.01765	0.00000	0.00000	1	1	T F F
4	29	1	2	1	12	0.00000	1.74224	2.46390	1	1	T F F
5	8	2	6	2	21	3.01765	1.74224	0.61598	1	1	T F F
6	29	1	1	1	27	3.01765	1.74224	2.46390	1	1	T F F
7	8	2	6	2	31	0.00000	3.48448	3.07988	1	1	T F F

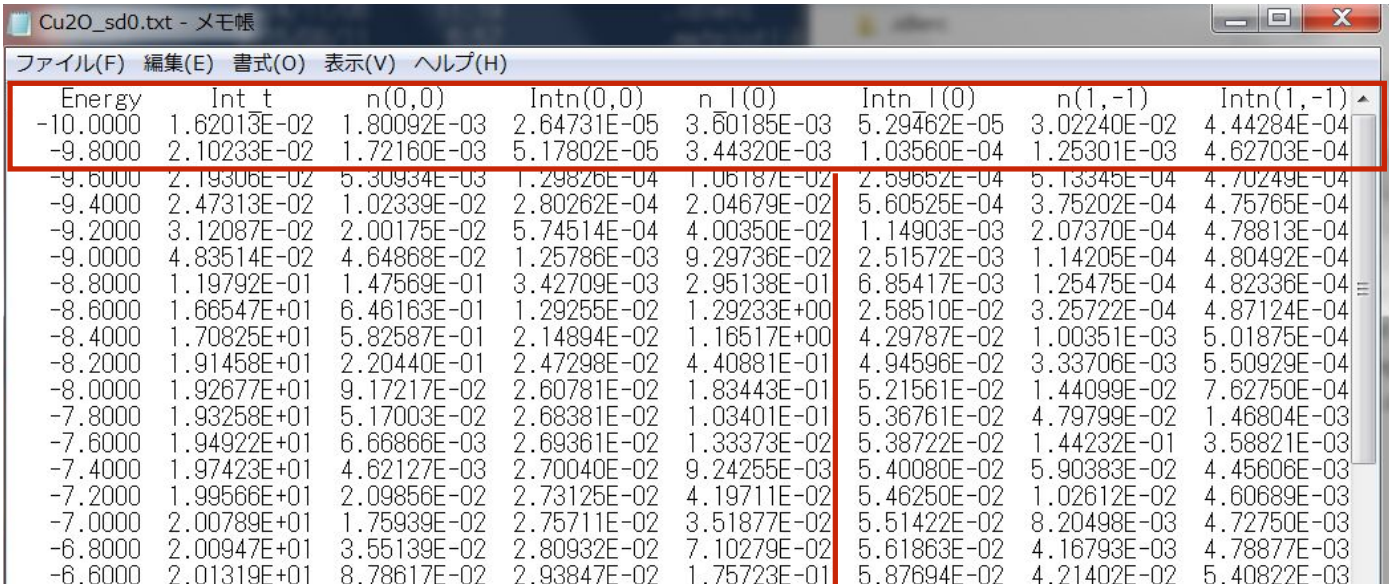
Absorber

sd0 Cu*
sd2 O
sd1 Cu

O原子のLDOSは **Cu2O_sd2.txt** ファイルに記述される
元構造では5番目の原子

Cu2O のDOS(sd*.txt) の中身について

Cu2O_sd0.txt ファイルの中身



Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_l(0)	Intn_l(0)	n(1,-1)	Intn(1,-1)
-10.0000	1.62013E-02	1.80092E-03	2.64731E-05	3.60185E-03	5.29462E-05	3.02240E-02	4.44284E-04
-9.8000	2.10233E-02	1.72160E-03	5.17802E-05	3.44320E-03	1.03560E-04	1.25301E-03	4.62703E-04
-9.6000	2.19306E-02	5.30934E-03	1.29826E-04	1.06187E-02	2.59662E-04	5.13345E-04	4.70249E-04
-9.4000	2.47313E-02	1.02339E-02	2.80262E-04	2.04679E-02	5.60525E-04	3.75202E-04	4.75765E-04
-9.2000	3.12087E-02	2.00175E-02	5.74514E-04	4.00350E-02	1.14903E-03	2.07370E-04	4.78813E-04
-9.0000	4.83514E-02	4.64868E-02	1.25786E-03	9.29736E-02	2.51572E-03	1.14205E-04	4.80492E-04
-8.8000	1.19792E-01	1.47569E-01	3.42709E-03	2.95138E-01	6.85417E-03	1.25475E-04	4.82336E-04
-8.6000	1.66547E+01	6.46163E-01	1.29255E-02	1.29233E+00	2.58510E-02	3.25722E-04	4.87124E-04
-8.4000	1.70825E+01	5.82587E-01	2.14894E-02	1.16517E+00	4.29787E-02	1.00351E-03	5.01875E-04
-8.2000	1.91458E+01	2.20440E-01	2.47298E-02	4.40881E-01	4.94596E-02	3.33706E-03	5.50929E-04
-8.0000	1.92677E+01	9.17217E-02	2.60781E-02	1.83443E-01	5.21561E-02	1.44099E-02	7.62750E-04
-7.8000	1.93258E+01	5.17003E-02	2.68381E-02	1.03401E-01	5.36761E-02	4.79799E-02	1.46804E-03
-7.6000	1.94922E+01	6.66866E-03	2.69361E-02	1.33373E-02	5.38722E-02	1.44232E-01	3.58821E-03
-7.4000	1.97423E+01	4.62127E-03	2.70040E-02	9.24255E-03	5.40080E-02	5.90383E-02	4.45606E-03
-7.2000	1.99566E+01	2.09856E-02	2.73125E-02	4.19711E-02	5.46250E-02	1.02612E-02	4.60689E-03
-7.0000	2.00789E+01	1.75939E-02	2.75711E-02	3.51877E-02	5.51422E-02	8.20498E-03	4.72750E-03
-6.8000	2.00947E+01	3.55139E-02	2.80932E-02	7.10279E-02	5.61863E-02	4.16793E-03	4.78877E-03
-6.6000	2.01319E+01	8.78617E-02	2.93847E-02	1.75723E-01	5.87694E-02	4.21402E-02	5.40822E-03

先頭の三行だけを詳しく見る

Cu2O_sd0.txt ヘッド情報を三行だけ抜き出す

1行目

Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_l(0)	Intn_l(0)
n(1,-1)	Intn(1,-1)	n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)
n_l(1)	Intn_l(1)	n(2,-2)	Intn(2,-2)	n(2,-1)	Intn(2,-1)
n(2,0)	Intn(2,0)	n(2,1)	Intn(2,1)	n(2,2)	Intn(2,2)
n_l(2)	Intn_l(2)				

2行目

-10.0000	1.62013E-02	1.80092E-03	2.64731E-05		
3.60185E-03	5.29462E-05	3.02240E-02	4.44284E-04		
4.51506E-02	6.63701E-04	3.02240E-02	4.44284E-04		
2.11197E-01	3.10454E-03	2.22016E-02	3.26358E-04		
1.91143E-01	2.80975E-03	1.69865E-02	2.49697E-04		
1.91143E-01	2.80975E-03	2.22016E-02	3.26358E-04		
8.87353E-01	1.30438E-02				

3行目

-9.8000	2.10233E-02	1.72160E-03	5.17802E-05		
3.44320E-03	1.03560E-04	1.25301E-03	4.62703E-04		
5.65732E-03	7.46862E-04	1.25301E-03	4.62703E-04		
1.63267E-02	3.34454E-03	2.87245E-02	7.48600E-04		
4.02563E-02	3.40151E-03	1.61685E-02	4.87370E-04		
4.02563E-02	3.40151E-03	2.87245E-02	7.48600E-04		
3.08260E-01	1.75752E-02				

int_t に対応しているのは 二列目

1行目

Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_l(0)	Intn_l(0)
n(1,-1)	Intn(1,-1)	n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)
n_l(1)	Intn_l(1)	n(2,-2)	Intn(2,-2)	n(2,-1)	Intn(2,-1)
n(2,0)	Intn(2,0)	n(2,1)	Intn(2,1)	n(2,2)	Intn(2,2)
n_l(2)	Intn_l(2)				

2行目

-10.0000	1.62013E-02	1.80092E-03	2.64731E-05		
3.60185E-03	5.29462E-05	3.02240E-02	4.44284E-04		
4.51506E-02	6.63701E-04	3.02240E-02	4.44284E-04		
2.11197E-01	3.10454E-03	2.22016E-02	3.26358E-04		
1.91143E-01	2.80975E-03	1.69865E-02	2.49697E-04		
1.91143E-01	2.80975E-03	2.22016E-02	3.26358E-04		
8.87353E-01	1.30438E-02				

3行目

-9.8000	2.10233E-02	1.72160E-03	5.17802E-05		
3.44320E-03	1.03560E-04	1.25301E-03	4.62703E-04		
5.65732E-03	7.46862E-04	1.25301E-03	4.62703E-04		
1.63267E-02	3.34454E-03	2.87245E-02	7.48600E-04		
4.02563E-02	3.40151E-03	1.61685E-02	4.87370E-04		
4.02563E-02	3.40151E-03	2.87245E-02	7.48600E-04		
3.08260E-01	1.75752E-02				

n(0,0) に対応しているのは 三列目

1行目

Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_l(0)	Intn_l(0)
n(1,-1)	Intn(1,-1)	n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)
n_l(1)	Intn_l(1)	n(2,-2)	Intn(2,-2)	n(2,-1)	Intn(2,-1)
n(2,0)	Intn(2,0)	n(2,1)	Intn(2,1)	n(2,2)	Intn(2,2)
n_l(2)	Intn_l(2)				

2行目

-10.0000	1.62013E-02	1.80092E-03	2.64731E-05		
3.60185E-03	5.29462E-05	3.02240E-02	4.44284E-04		
4.51506E-02	6.63701E-04	3.02240E-02	4.44284E-04		
2.11197E-01	3.10454E-03	2.22016E-02	3.26358E-04		
1.91143E-01	2.80975E-03	1.69865E-02	2.49697E-04		
1.91143E-01	2.80975E-03	2.22016E-02	3.26358E-04		
8.87353E-01	1.30438E-02				

3行目

-9.8000	2.10233E-02	1.72160E-03	5.17802E-05		
3.44320E-03	1.03560E-04	1.25301E-03	4.62703E-04		
5.65732E-03	7.46862E-04	1.25301E-03	4.62703E-04		
1.63267E-02	3.34454E-03	2.87245E-02	7.48600E-04		
4.02563E-02	3.40151E-03	1.61685E-02	4.87370E-04		
4.02563E-02	3.40151E-03	2.87245E-02	7.48600E-04		
3.08260E-01	1.75752E-02				

(注意)

計算した物質の原子種に応じて、このヘッダは毎回異なる
(l_{max} が異なるため)

Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_l(0)	Intn_l(0)
n(1,-1)	Intn(1,-1)	n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)
n_l(1)	Intn_l(1)	n(2,-2)	Intn(2,-2)	n(2,-1)	Intn(2,-1)
n(2,0)	Intn(2,0)	n(2,1)	Intn(2,1)	n(2,2)	Intn(2,2)
		n_l(2)	Intn_l(2)		

ここでのn(0,0) などの意味は

real spherical harmonics を意味している

real spherical harmonics

$l=1$	局所状態密度	積分局所状態密度
$m=-1$: p_y	$n(1,-1)$	$\text{intn}(1,-1)$
$m=0$: p_z	$n(1,0)$	$\text{intn}(1,0)$
$m=1$: p_x	$n(1,1)$	$\text{intn}(1,1)$

$l=2$	局所状態密度	積分局所状態密度
$m=-2$: d_{xy}	$n(2,-2)$	$\text{intn}(2,-2)$
$m=-1$: d_{yz}	$n(2,-1)$	$\text{intn}(2,-1)$
$m=0$: d_{z^2}	$n(2,0)$	$\text{intn}(2,0)$
$m=1$: d_{xz}	$n(2,1)$	$\text{intn}(2,1)$
$m=2$: $d_{x^2-y^2}$	$n(2,2)$	$\text{intn}(2,2)$

復習

complex spherical harmonics

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}$$

real spherical harmonics

$$Y_{lm} = \begin{cases} \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_l^m - (-1)^m Y_l^{-m}) & \text{if } m < 0 \\ Y_l^m & \text{if } m = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_l^{-m} + (-1)^m Y_l^m) & \text{if } m > 0 \end{cases}$$

orbital

real spherical harmonics

complex spherical harmonics

$$p_y \quad Y_{1-1} = \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1} + Y_1^1)$$

$$p_z \quad Y_{10}$$

$$p_x \quad Y_{11} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1} - Y_1^1)$$

$$d_{xy} \quad Y_{2-2} = \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_2^{-2} - Y_2^2)$$

$$d_{yz} \quad Y_{2-1} = \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_2^{-1} + Y_2^1)$$

$$d_{3z^2-r^2} \quad Y_{20}$$

$$d_{xz} \quad Y_{21} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_2^{-1} - Y_2^1)$$

$$d_{x^2-y^2} \quad Y_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_2^{-2} + Y_2^2)$$

局所状態密度

局所積分状態密度

s軌道

n_l(0)**intn_l(0)**

p軌道

n_l(1)**intn_l(1)**

d軌道

n_l(2)**intn_l(2)**

Cu2O_sd0.txt ヘッド情報を一行目

Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_l(0)	Intn_l(0)
n(1,-1)	Intn(1,-1)	n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)
n_l(1)	Intn_l(1)	n(2,-2)	Intn(2,-2)	n(2,-1)	Intn(2,-1)
n(2,0)	Intn(2,0)	n(2,1)	Intn(2,1)	n(2,2)	Intn(2,2)
		n_l(2)	Intn_l(2)		

1 行5列: **n_l(0)** → s軌道1 行13列: **n_l(1)** → p軌道1 行25列: **n_l(1)** → d軌道

Cu2O_sd0.txt の1行目をコメントアウト

```
Energy  Int_t    n(0,0)  Intn(0,0)  n_l(0)   Intn_l(0)  n(1,-1)  Intn(1,-1)
n(1,0)   Intn(1,0) n(1,1)  Intn(1,1)  n_l(1)   Intn_l(1)  n(2,-2)  Intn(2,-2)
n(2,-1)  Intn(2,-1)  n(2,0)  Intn(2,0)  n(2,1)   Intn(2,1)  n(2,2)   Intn(2,2)
          n_l(2)   Intn_l(2)
-10.0000 1.62013E-02 1.80092E-03 2.64731E-05 3.60185E-03 5.29462E-05
          3.02240E-02 4.44284E-04 4.51506E-02 6.63701E-04 3.02240E-02
```



```
# Energy  Int_t    n(0,0)  Intn(0,0)  n_l(0)   Intn_l(0)  n(1,-1)  Intn(1,-1)
n(1,0)   Intn(1,0) n(1,1)  Intn(1,1)  n_l(1)   Intn_l(1)  n(2,-2)  Intn(2,-2)
n(2,-1)  Intn(2,-1) n(2,0)  Intn(2,0)  n(2,1)   Intn(2,1)  n(2,2)   Intn(2,2)
          n_l(2)   Intn_l(2)
-10.0000 1.62013E-02 1.80092E-03 2.64731E-05 3.60185E-03 5.29462E-05
          3.02240E-02 4.44284E-04 4.51506E-02 6.63701E-04 3.02240E-02
          4.44284E-04 2.11197E-01 3.10454E-03 2.22016E-02 3.26358E-04
```

O原子のLDOSを確認する (Cu2O_sd2.txt)

```
Energy  Int_t    n(0,0)  Intn(0,0)  n_l(0)   Intn_l(0)
n(1,-1)  Intn(1,-1) n(1,0)  Intn(1,0)  n(1,1)   Intn(1,1)
          n_l(1)   Intn_l(1)
```

1 行5列: $n_l(0)$ → s軌道

1 行13列: $n_l(1)$ → p軌道

wgnuplot を開く

```
plot [] [0:4] 'Cu2O_sd0.txt' u ($1+5.52618):13 w l,
           'Cu2O_sd2.txt' u ($1+5.52618):5 w l,
           'Cu2O_sd2.txt' u ($1+5.52618):13 w l
```

BaTiO₃ のDOS(sd*.txt) の中身について

pre-edge の起源を探る 局所状態密度の解析

BaTiO₃_Pm3-m の BaTiO₃_bav.txt の確認

---- Atom_selec

Rsort = 3.467 A
nx = 19
natome = 5, igrpt = 8, Cluster_comp = F, Cluster_mag = F
No Full_atom mode

元になった結晶の通し番号(igr)

ia	Z	it	igr	ipr	iap	posx	posy	posz	igrpt	PtGrName	Comp	Axe	Mag
1	22	0	1	0	1	0.00000	0.00000	0.00000	8	mmm	F	T	F
2	8	3	3	3	5	0.00000	0.00000	2.00180	6	mm	F	T	F
3	8	3	5	3	6	0.00000	2.00180	0.00000	6	mm	F	F	F
4	8	3	4	3	7	2.00180	0.00000	0.00000	6	mm	F	F	F
5	56	2	2	2	15	2.00180	2.00180	2.00180	1	1	F	F	F

sd0 → Ti のLDOS

sd2 → Ba のLDOS

sd3 → O のLDOS

sd0 → Ti のLDOS

Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_l(0)	Intn_l(0)	n(1,-1)	Intn(1,-1)
n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)	n_l(1)	Intn_l(1)	n(2,-2)	Intn(2,-2)
n(2,-1)	Intn(2,-1)	n(2,0)	Intn(2,0)	n(2,1)	Intn(2,1)	n(2,2)	Intn(2,2)
			n_l(2)	Intn_l(2)			

sd2 → Ba のLDOS

Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_l(0)	Intn_l(0)	n(1,-1)	Intn(1,-1)
n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)	n_l(1)	Intn_l(1)	n(2,-2)	Intn(2,-2)
n(2,-1)	Intn(2,-1)	n(2,0)	Intn(2,0)	n(2,1)	Intn(2,1)	n(2,2)	Intn(2,2)
n_l(2)	Intn_l(2)	n(3,-3)	Intn(3,-3)	n(3,-2)	Intn(3,-2)	n(3,-1)	Intn(3,-1)
n(3,0)	Intn(3,0)	n(3,1)	Intn(3,1)	n(3,2)	Intn(3,2)	n(3,3)	Intn(3,3)
			n_l(3)	Intn_l(3)			

sd3 → O のLDOS

Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_l(0)	Intn_l(0)	n(1,-1)	Intn(1,-1)
	n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)	n_l(1)	Intn_l(1)	

Ti-p : sd0 13行目 Ti-d : sd0 25行目 O-p : sd3 13行目

FDMNES のLinux での**並列化版**のビルド
および**MUMPS**ライブラリでの高速化について

OpenMPI + Intel Compiler + MKL

Optimized Finite Difference Method for the Full-Potential XANES Simulations: Application to Molecular Adsorption Geometries in MOFs and Metal–Ligand Intersystem Crossing Transients

Sergey A. Guda,[†] Alexander A. Guda,^{*,‡} Mikhail A. Soldatov,[‡] Kirill A. Lomachenko,^{‡,§} Aram L. Bugaev,[‡] Carlo Lamberti,^{‡,§} Wojciech Gawelda,^{||} Christian Bressler,^{||,⊥} Grigory Smolentsev,^{‡,#} Alexander V. Soldatov,[‡] and Yves Joly^{▽,○}

DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00327

J. Chem. Theory Comput. 2015, 11, 4512–4521

MUMPS 等の疎行列ソルバーを使ったFDMNES の高速化について

2015.07.03以降のFDMNES には 彼らの仕事がマージされている
とてつもなく高速化される
ただし、ビルドがかなり煩雑になっているので注意が必要

2015.07.03以降のFDMNES には

3つの外部ライブラリが必要

+ さらに BLAS/BLACS/ScaLAPACK

MUMPS Library: a parallel sparse direct solver

<http://mumps.enseeiht.fr/>

ユーザー登録が必要

SCOTCH library

<https://www.labri.fr/perso/pelegrin/scotch/> 説明

<http://gforge.inria.fr/projects/scotch/> DL

METIS library

[http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/
download](http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/download)

MUMPS 5.0.1

Makefile.INTEL.PAR ベース

```
CC = mpicc  
FC = mpif90  
FL = mpif90
```

makefile.inc

必要ライブラリ

OpenMPI
BLAS
BLACS
ScaLAPAC

make
make z



4つのライブラリが作られる

lib/libdmumps.a
lib/libmumps_common.a
lib/libpord.a
lib/libzmumps.a

scotch 6.0.4

cd src

Makefile.inc

Make.inc/Makefile.inc.i686_pc_linus2 ベース

```
LDFLAGS = -lz -lm -pthread -lrt  
追加
```

make
make esmumps



libscotch/libscotch.a
libscotch/libscotcherr.a
esmumps/libesmumps.a

METIS library **CMake 2.8 以上が必要**

make config cc=icc prefix=~/.lib/metis
make
make install



~/.lib/metis/lib/libmetis.a

.SUFFIXES: .f90

FDMNES の Makefile

FC = mpif90

Intel Compiler, MKL and OpenMPI

EXEC = fdmnes

FFLAGS = -c -lincludemumps ← **MUMPS**

OBJ = main.o clemf0.o coabs.o convolution.o dirac.o fdm.o fprime.o general.o lecture.o mat.o metric.o \
minim.o optic.o potential.o selec.o scf.o spgroup.o sphere.o tab_data.o tddft.o tensor.o \
mat_solve_mumps.o

all: \$(EXEC)

\$(EXEC): \$(OBJ)

\$(FC) -o \$@ \$^ -Llibmumps -ldmumps -lmumps_common -lpord -lzmumps \ ← **MUMPS**
-Llibscotch -lscotch -lscotcherr \ ← **scotch**
-Llibesmumps -lesmumps \ ← **metis**
-L\$(HOME)/lib/metis/lib -lmetis \ ← **metis**
-mkl \ ← **BLAS, LAPACK**
-lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_openmpi_lp64 ← **BLACS, ScaLAPACK**
-lpthread

sphere.o: sphere.f90

\$(FC) -O1 -c \$.f90

%.o: %.f90

\$(FC) -O2 -o \$@ \$(FFLAGS) \$?

[今の場合の想定しているディレクトリ構成]

includemumps -> ../mumps/include

libesmumps -> ../scotch/src/esmumps

libmumps -> ../mumps/lib

libmumpsseq -> ../mumps/libseq

libscotch -> ../scotch/src/libscotch

libscotchmetis -> ../scotch/src/libscotchmetis

FCC Cu

FDM R=3.0

FDMNES 2015.01.05

34.8 sCPU

FDMNES 2015.10.06 (with MUMPS)

7.6 sCPU

4倍~5倍 速度向上

FDM R=4.0

FDMNES 2015.01.05

240.9 sCPU

FDMNES 2015.10.06 (with MUMPS)

18.8 sCPU

13倍 速度向上

ZrO₂ 表面構造

FDMNES 2015.01.05

33 h, 9 min, 56 sCPU

FDMNES 2015.10.06 (with MUMPS)

0 h, 10 min, 24 sCPU

190倍 速度向上