



JASRI

実習(2)

FDMNESによる
XANESシミュレ
ーション

2023版

株式会社ダイセル

(公益財団法人)

高輝度光科学研究センター

小出明広

中田謙吾



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
- ▶ **Cu-foil の試し計算**

インストールと操作

- ▶ 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)**
- ▶ **FeO₆の計算 (パラメータフィット)**

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

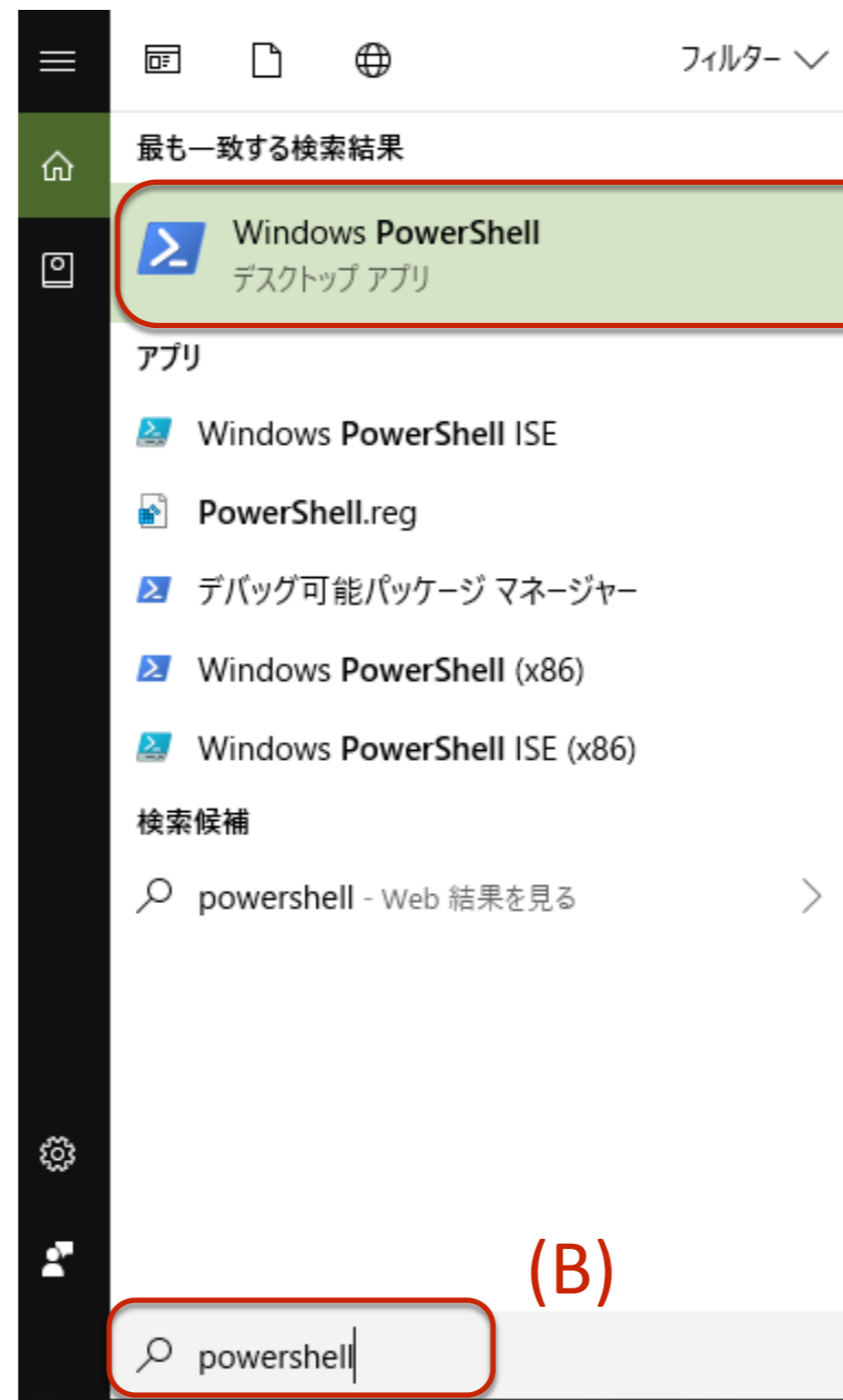
とにかく動かしてみる

0) PowerShell を開く

(A) 検索を開く  + S

(B) PowerShell と入力

(C) PowerShell を選択して起動



(A)

(B)

(C)

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>
```

4) Cu の計算用入力ファイルをコピーする

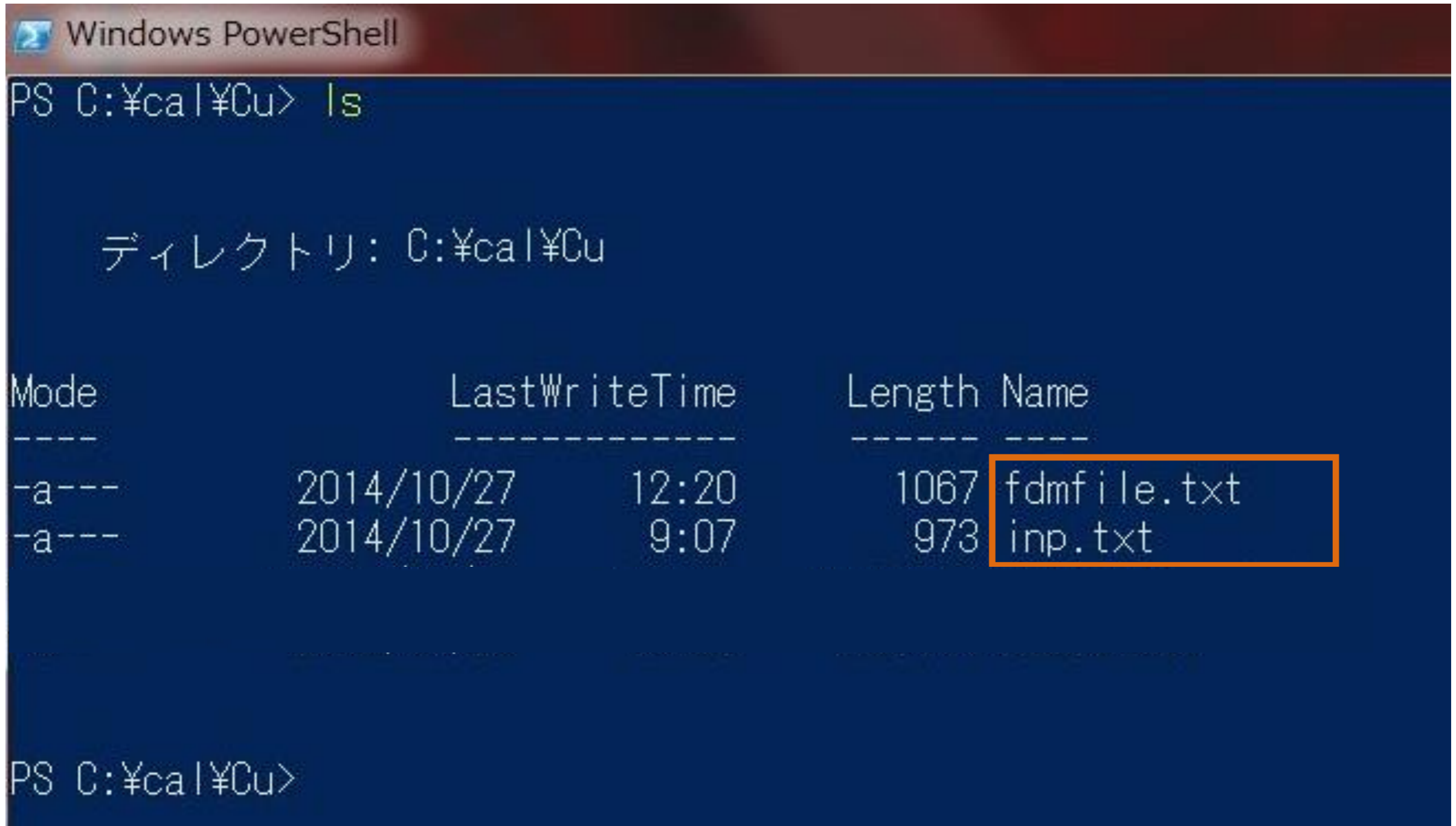
スペース ↓
cp ¥fdmnes¥Sim¥Test_stand¥in¥Cu_inp.txt inp.txt
cp ¥fdmnes¥fdmfile.txt .
スペース ↑ ドット

```
Windows PowerShell
PS C:¥ca | ¥Cu> cp C:¥fdmnes¥Sim¥Test_stand¥in¥Cu_inp.txt inp.txt
PS C:¥ca | ¥Cu> cp C:¥fdmnes¥fdmfile.txt .
PS C:¥ca | ¥Cu>
```

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)

5) コピーされたファイルを確認する

ls



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

ディレクトリ: C:\¥ca\¥Cu

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---              2014/10/27 12:20       1067 fdmfile.txt
-a---              2014/10/27  9:07         973 inp.txt

PS C:\¥ca\¥Cu>
```

2つファイルがコピーされているのを確認する

合計2つのファイルを編集する

inp.txt
fdmfile.txt

旧版ではさらに

- spacegroup.txt
- xsect.dat

が必要だが 2017.10.17 版以降なくてもOK

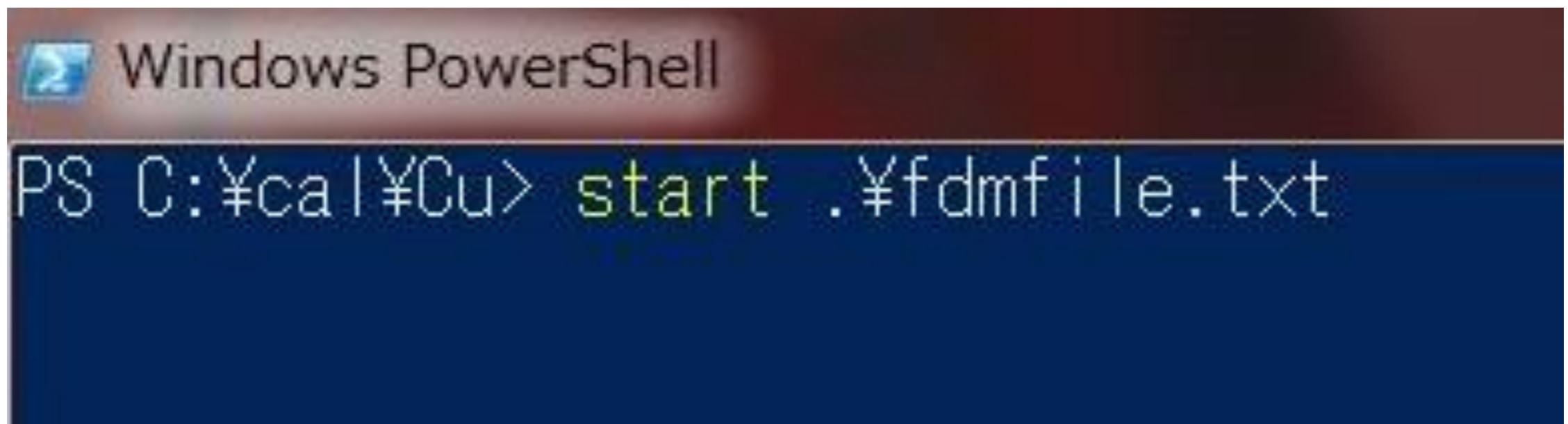
6) `fdmfile.txt` を編集する

`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` が選択される環境が場合によってはある)



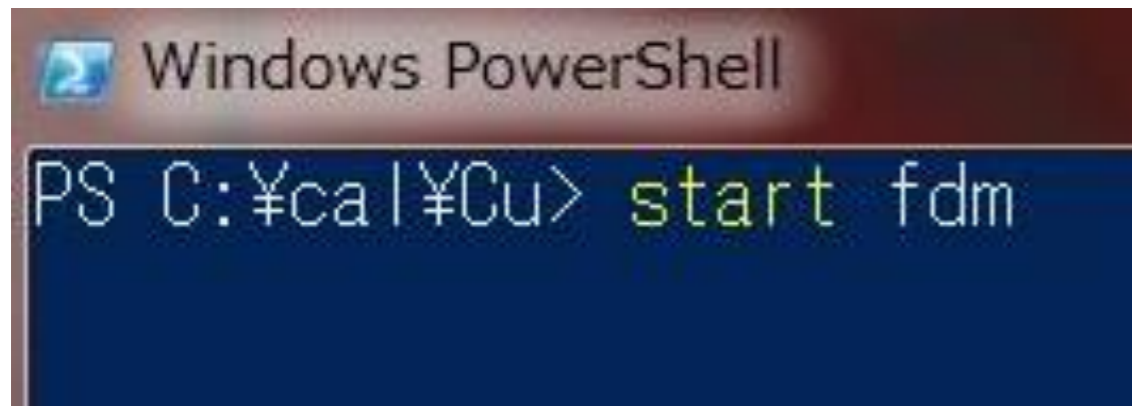
```
Windows PowerShell
PS C:¥ca|¥Cu> start .¥fdmfile.txt
```

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入力がめんどくさいとき
- ・ 誤解なく確実に目的のファイルを選択したいとき

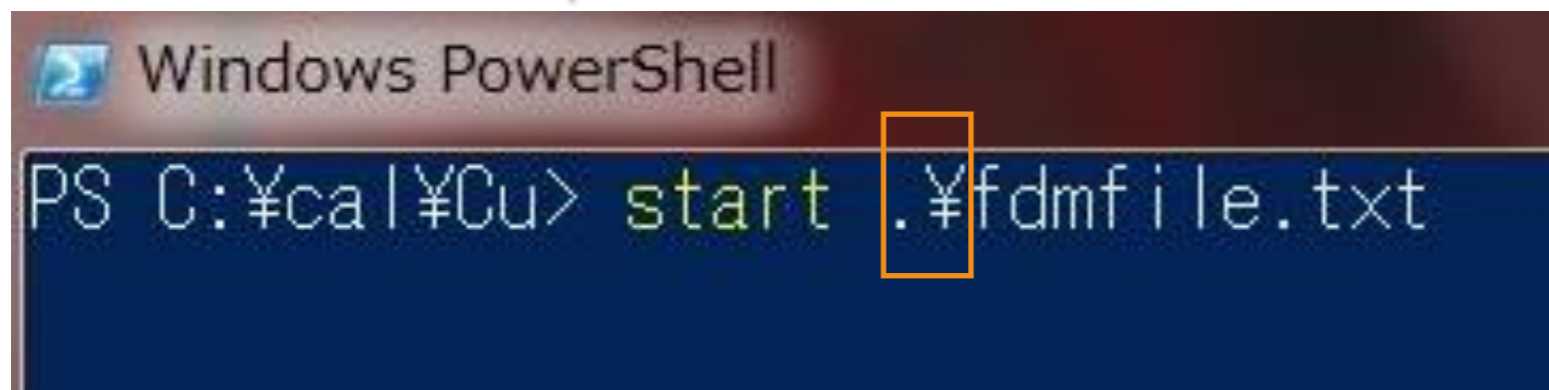
TAB キーを活用する



```
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**

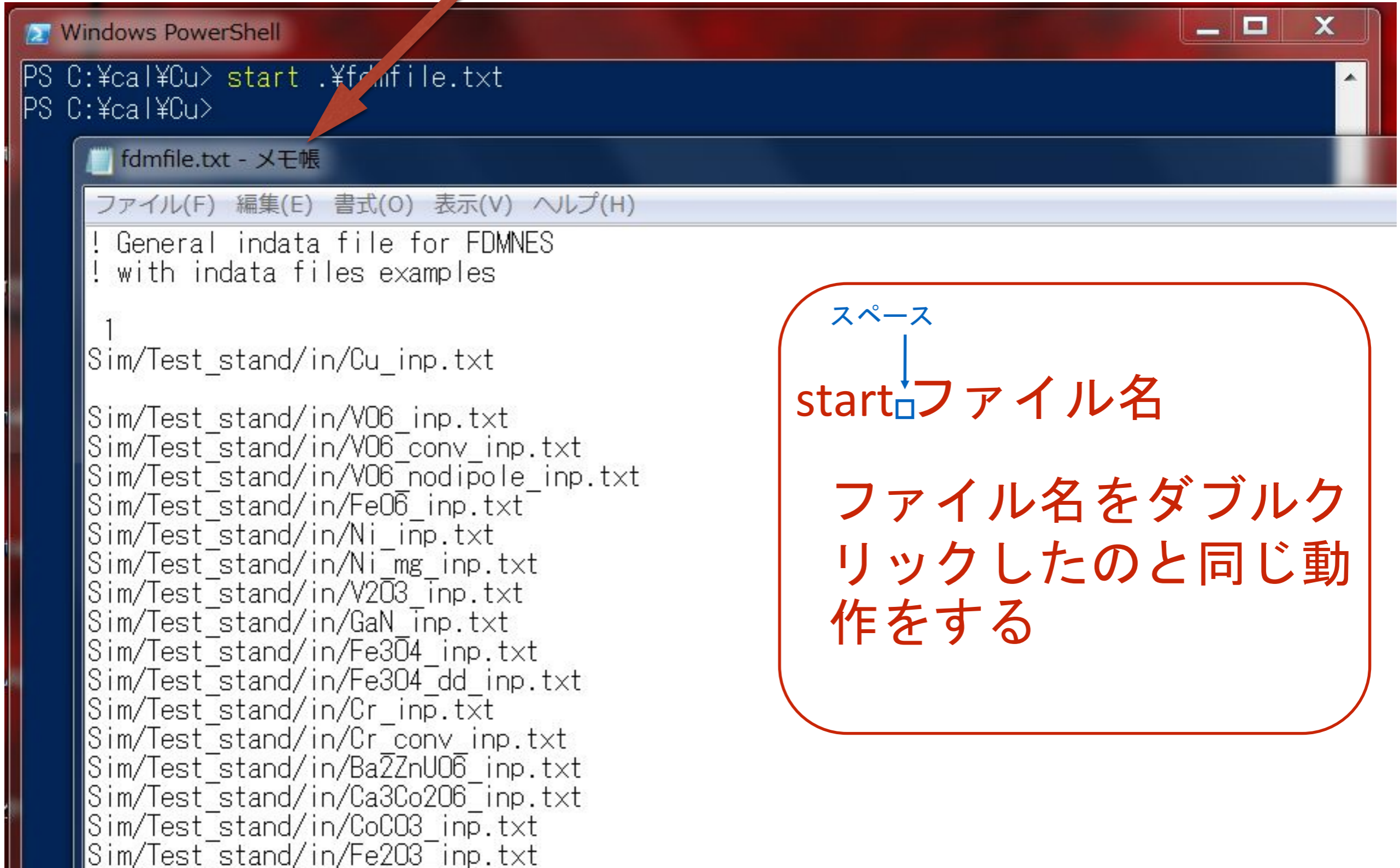


```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal\¥Cu> start .¥fdmfile.txt
```

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



The screenshot shows a Windows PowerShell window with the command `start .\fdmfile.txt` entered. Below it, a Notepad window titled "fdmfile.txt - メモ帳" is open, displaying the contents of the file. The file contains a list of input files for FDMNES, starting with "1 Sim/Test_stand/in/Cu_inp.txt" and followed by various other material-specific input files.

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

```
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
Sim/Test_stand/in/Cu_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/V2O3_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/Ba2ZnUO6_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Ca3Co2O6_inp.txt
Sim/Test_stand/in/CoCO3_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe2O3_inp.txt
```

スペース
↓
start □ ファイル名

ファイル名をダブルク
リックしたのと同じ動
作をする

6) `fdmfile.txt` を編集する

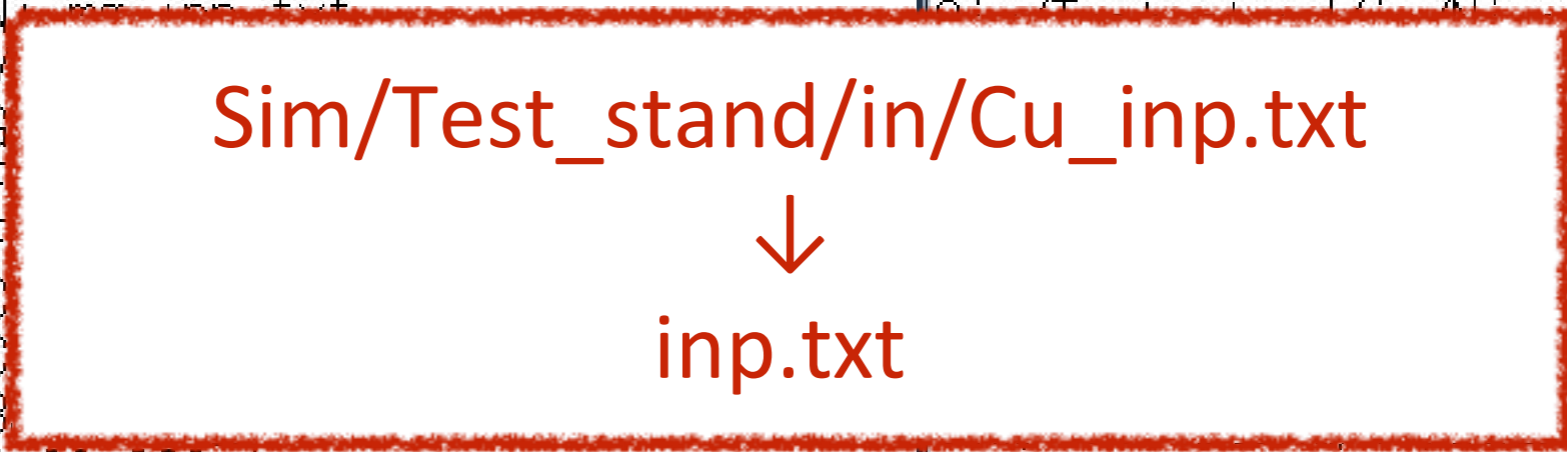
```
fdmfile.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
! General indata file for FDMNES
! with indata files examples

1
Sim/Test_stand/in/Cu_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_inp.txt
Sim/Test_stand/in/V06_inp.txt
Sim/Test_stand/in/G_inp.txt
Sim/Test_stand/in/F_inp.txt
Sim/Test_stand/in/F_inp.txt
Sim/Test_stand/in/C_inp.txt
Sim/Test_stand/in/C_inp.txt
Sim/Test_stand/in/B_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
Sim/Test_stand/in/Mult_inp.txt
```



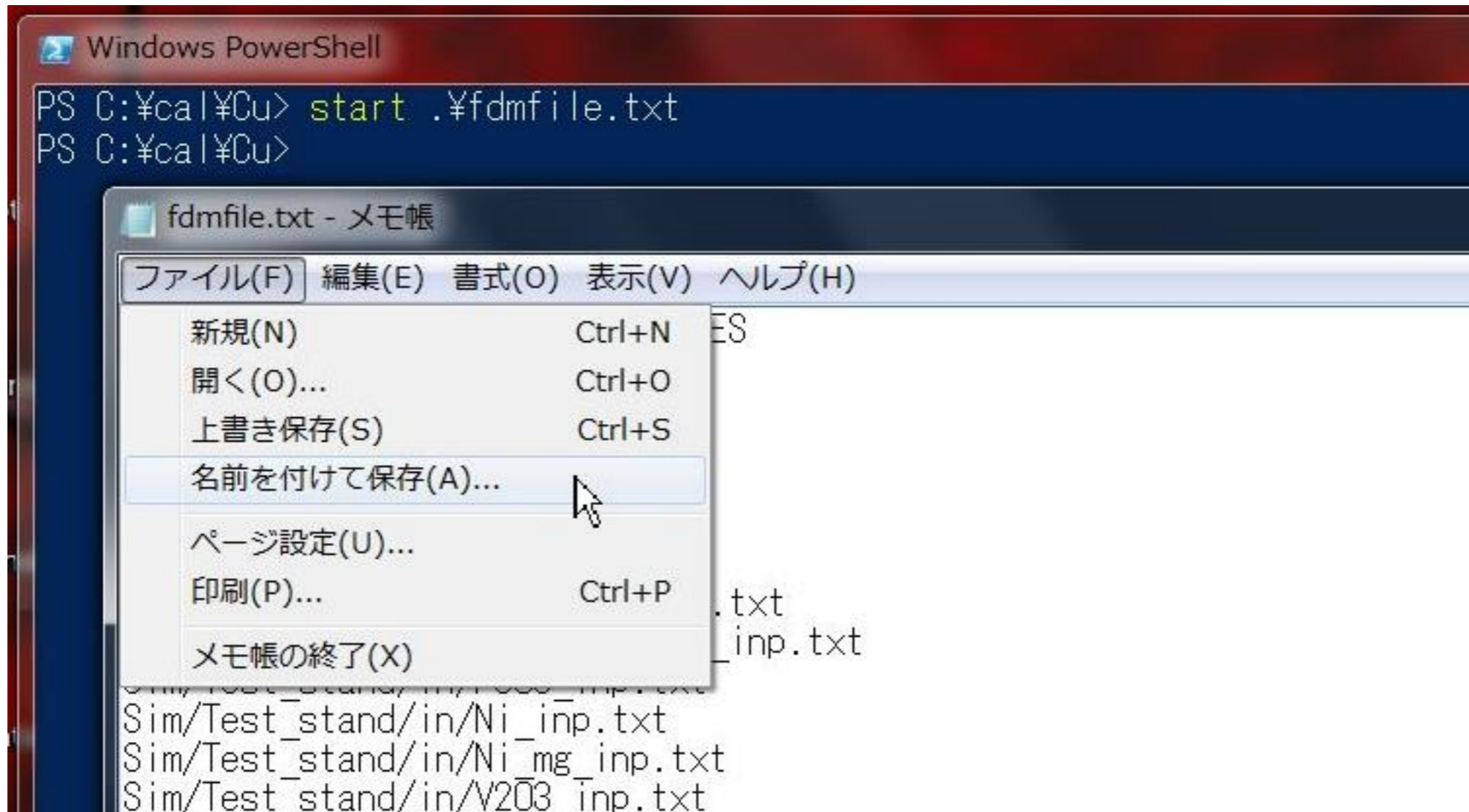
```
fdmfile.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
! General indata file for FDMNES
! with indata files examples

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_inp.txt
Sim/Test_stand/in/V06_inp.txt
Sim/Test_stand/in/G_inp.txt
Sim/Test_stand/in/F_inp.txt
Sim/Test_stand/in/F_inp.txt
Sim/Test_stand/in/C_inp.txt
Sim/Test_stand/in/C_inp.txt
Sim/Test_stand/in/B_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
Sim/Test_stand/in/Mult_inp.txt
```



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

The screenshot shows a Windows PowerShell window with the command `start .\fdmfile.txt` and a File Explorer window titled "名前を付けて保存" (Save As). The File Explorer window displays the path `コンピュータ > ローカルディスク (C:) > cal > Cu`. A table of files is shown in the main pane:

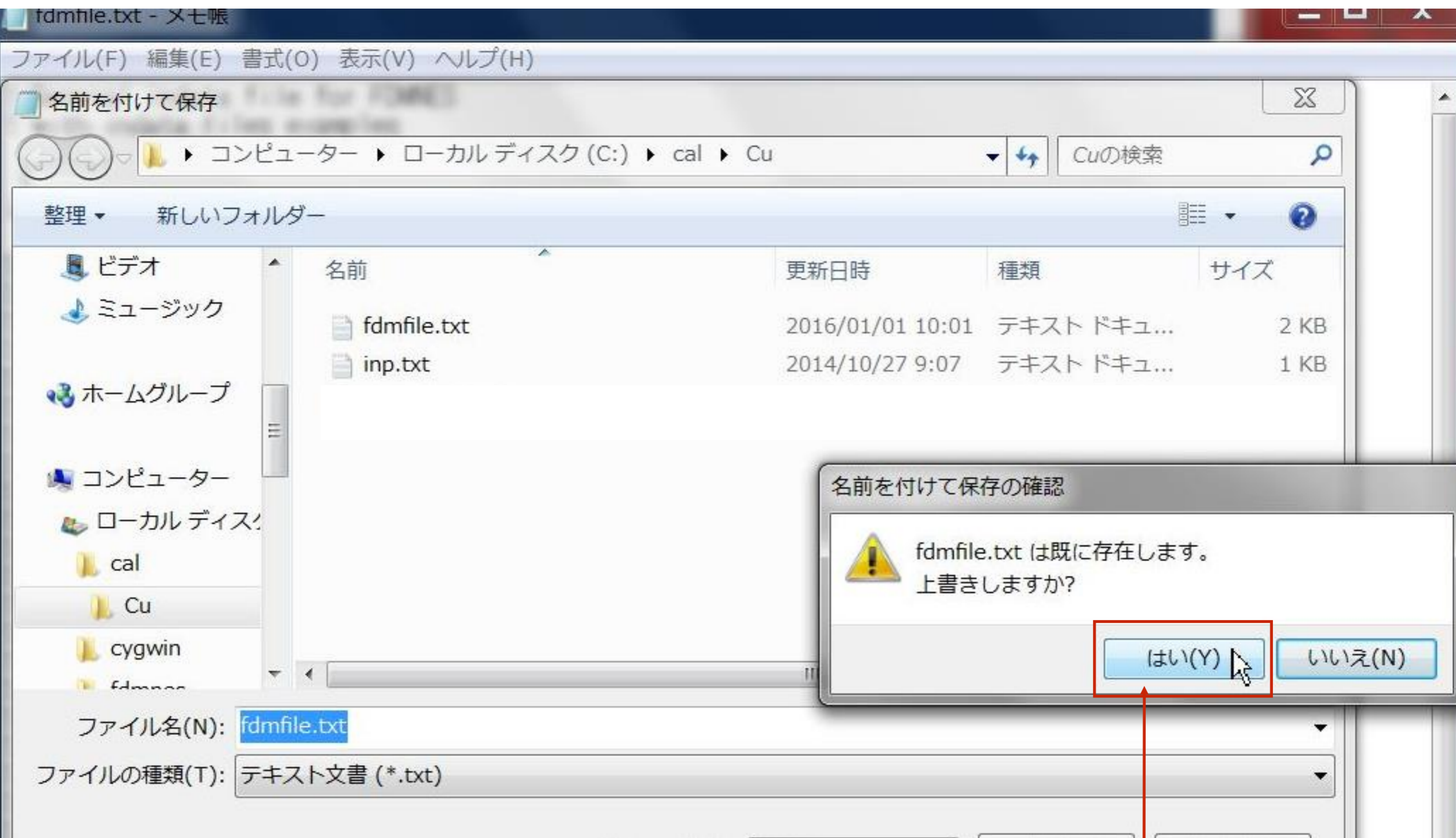
| 名前 | 更新日時 | 種類 | サイズ |
|----------------|------------------|-------------|-------|
| fdmfile.txt | 2016/01/01 10:01 | テキスト ドキュ... | 2 KB |
| inp.txt | 2014/10/27 9:07 | テキスト ドキュ... | 1 KB |
| spacegroup.txt | 2013/05/06 13:33 | テキスト ドキュ... | 88 KB |

The File Explorer window also shows the file name `fdmfile.txt` and the file type `テキスト文書 (*.txt)`. The "保存(S)" (Save) button is highlighted.

この場所が違うときは異なる場所の **fdmfile.txt** を編集している可能性があります。

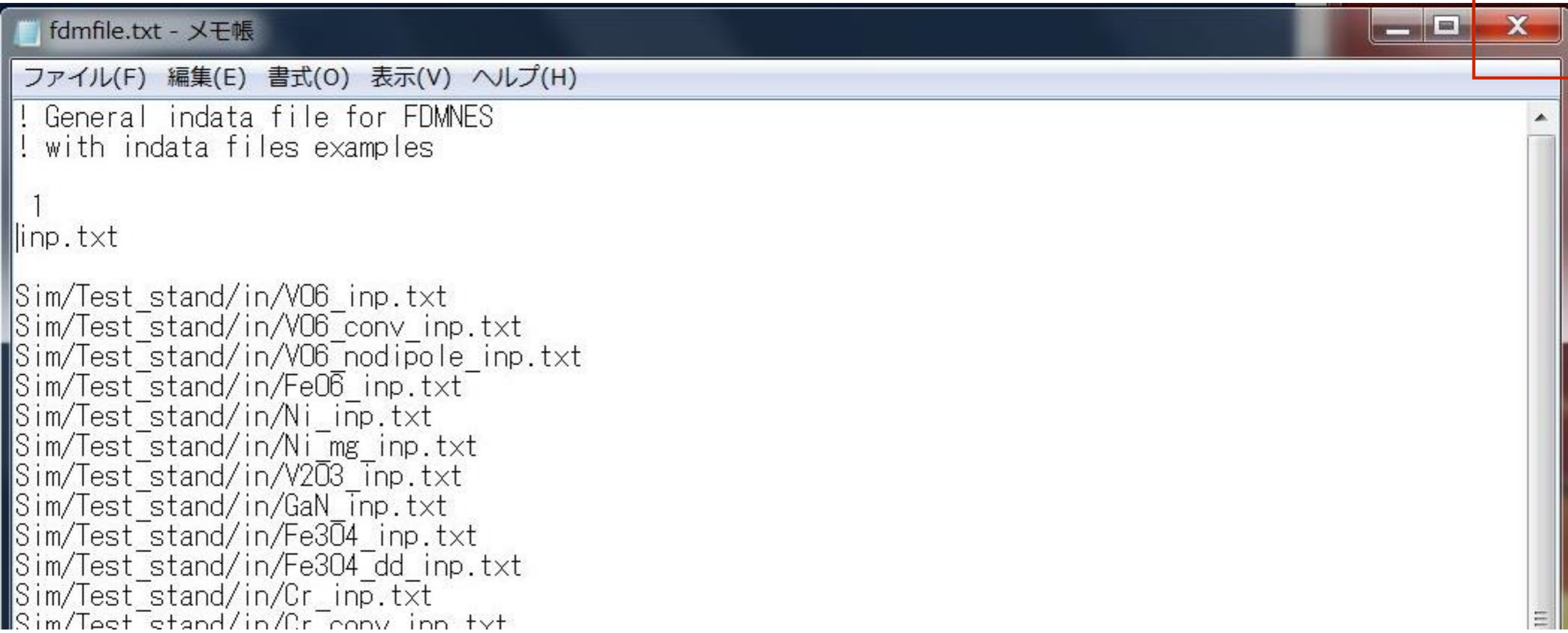
7) 編集した **fdmfile.txt** を名前を付けた保存する

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

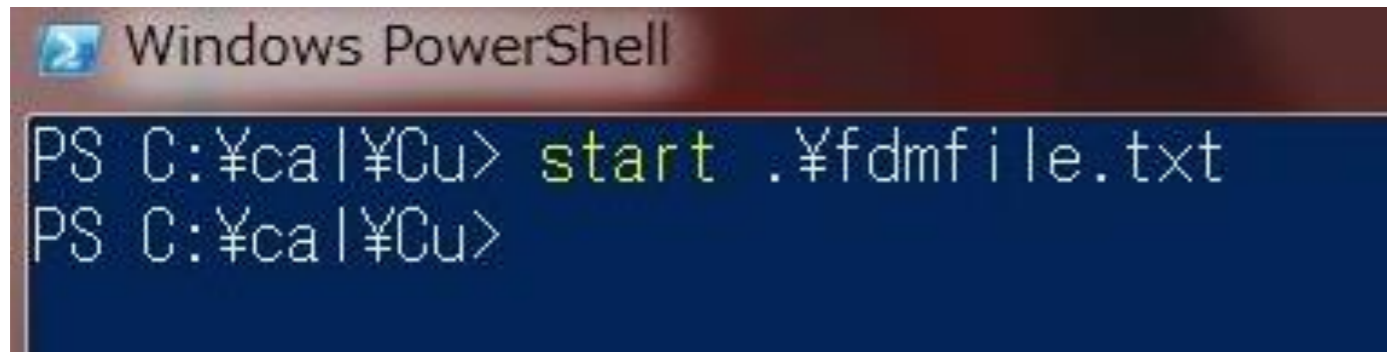


```
fdmfile.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
! General indata file for FDMNES
! with indata files examples

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/FeO6_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Ni_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Ni_mg_inp.txt
Sim/Test_stand/in/V2O3_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
```

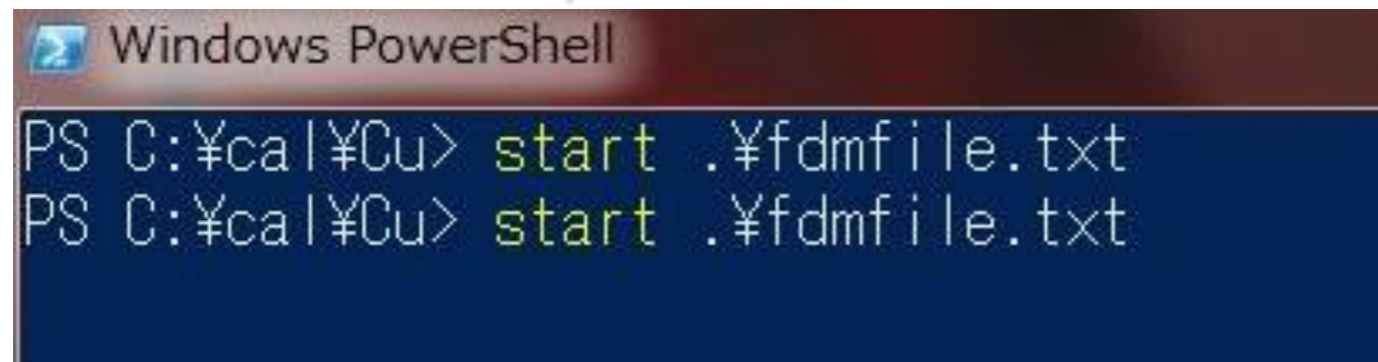
9) 念のため、編集したファイルをもう一度開いてみます



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

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 in copper cfc
! Finite difference method calculation with convolution
Filout
Sim/Test_stand/Cu
Range          ! Energy range of calculation (eV)
-1. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50. ! first energy, step, intermediary e
Radius         ! Radius of the cluster where final st
3.0            ! For a good calculation, this radius m
Angstroems
Crystal        ! Periodic materia
3.61 3.61 3.61 90. 90. 90. ! a, b, c
29 0.0 0.0 0.0          ! Z, x, y, z (
29 0.5 0.5 0.0
29 0.5 0.0 0.5
29 0.0 0.5 0.5
! Convolution keyword : broadening with a width increasing
Convolution
End
```

修正前



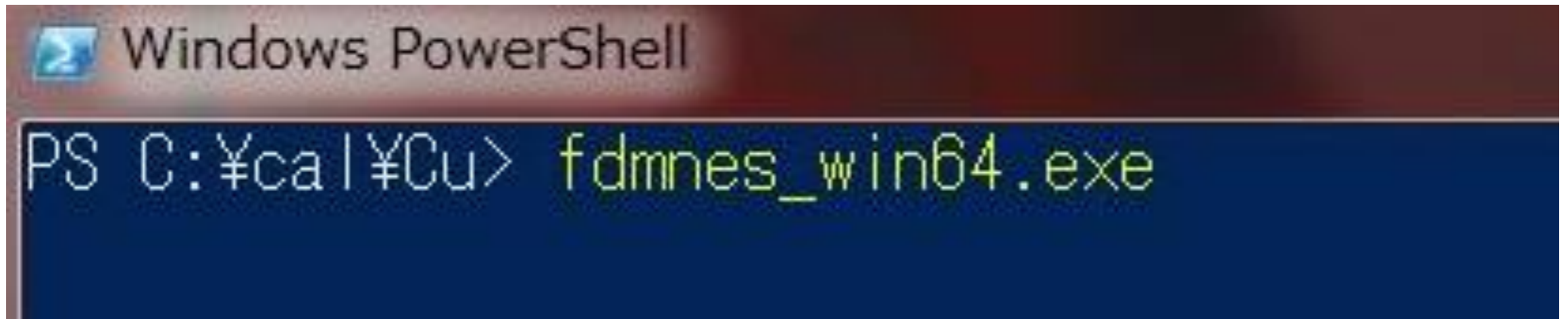
```
Fdmnes indata file
! Calculation for the copper K-edge in copper cfc
! Finite difference method calculation with convolution
Filout
Cu
Range          ! Energy range of calculation (eV)
-1. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50. ! first energy, step, intermedia
Radius         ! Radius of the cluster where fina
3.0            ! For a good calculation, this radius
! Periodic material description (un
90. 90. ! a, b, c, (Angstroem) a
! Z, x, y, z (unit cell unit)
29 0.5 0.0 0.5
29 0.0 0.5 0.5
! Convolution keyword : broadening with a width increa
Convolution
End
```

編集後は上書き保存

Sim/Test_stand/Cu
↓
Cu

修正後

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

Mac の人は `fdmnes_mac` を実行

Linux の人は `fdmnes_linux64` を実行

```
34.0000 9.0743602E-02
35.0000 9.2524000E-02
36.0000 9.4517031E-02
37.0000 9.6607556E-02
38.0000 9.8725689E-02
39.0000 1.0079507E-01
40.0000 1.0269886E-01
41.0000 1.0436507E-01
42.0000 1.0572142E-01
43.0000 1.0670829E-01
44.0000 1.0729099E-01
45.0000 1.0749008E-01
46.0000 1.0730480E-01
47.0000 1.0676325E-01
48.0000 1.0587236E-01
49.0000 1.0459175E-01
50.0000 1.0297074E-01
```

Arctangent model

Gamma_max = 15.00, Ecent = 30.00, Elarg = 30.00

Gamma_hole = 1.55, E_cut = 0.000, Shift = 0.000 eV

| E (eV) | Width (eV) | lambda (Å) |
|--------|------------|------------|
|--------|------------|------------|

| | | |
|--------|-------|-------|
| -1.000 | 1.550 | 0.000 |
|--------|-------|-------|

| | | |
|-------|-------|---------|
| 2.400 | 1.608 | 199.585 |
|-------|-------|---------|

| | | |
|-------|-------|--------|
| 6.000 | 1.917 | 37.631 |
|-------|-------|--------|

| | | |
|-------|-------|--------|
| 9.500 | 2.482 | 16.761 |
|-------|-------|--------|

| | | |
|--------|-------|-------|
| 13.000 | 3.327 | 9.713 |
|--------|-------|-------|

| | | |
|--------|-------|-------|
| 16.000 | 4.270 | 6.823 |
|--------|-------|-------|

| | | |
|--------|-------|-------|
| 19.500 | 5.554 | 4.987 |
|--------|-------|-------|

| | | |
|--------|-------|-------|
| 23.000 | 6.877 | 3.997 |
|--------|-------|-------|

| | | |
|--------|-------|-------|
| 27.000 | 8.222 | 3.404 |
|--------|-------|-------|

| | | |
|--------|-------|-------|
| 30.000 | 9.050 | 3.162 |
|--------|-------|-------|

| | | |
|--------|-------|-------|
| 33.000 | 9.729 | 3.016 |
|--------|-------|-------|

| | | |
|--------|--------|-------|
| 37.000 | 10.448 | 2.909 |
|--------|--------|-------|

| | | |
|--------|--------|-------|
| 40.000 | 10.882 | 2.867 |
|--------|--------|-------|

| | | |
|--------|--------|-------|
| 44.000 | 11.357 | 2.842 |
|--------|--------|-------|

| | | |
|--------|--------|-------|
| 47.000 | 11.655 | 2.839 |
|--------|--------|-------|

| | | |
|--------|--------|-------|
| 50.000 | 11.915 | 2.843 |
|--------|--------|-------|

最後にこの画面が出てくる

計算終了

PS C:\%cal%\Cu>

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:\¥ca\¥Cu> ls

ディレクトリ: C:\¥ca\¥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

PS C:\¥ca\¥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 クラスタ一半径 $R=3.0$ (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に計算したら 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

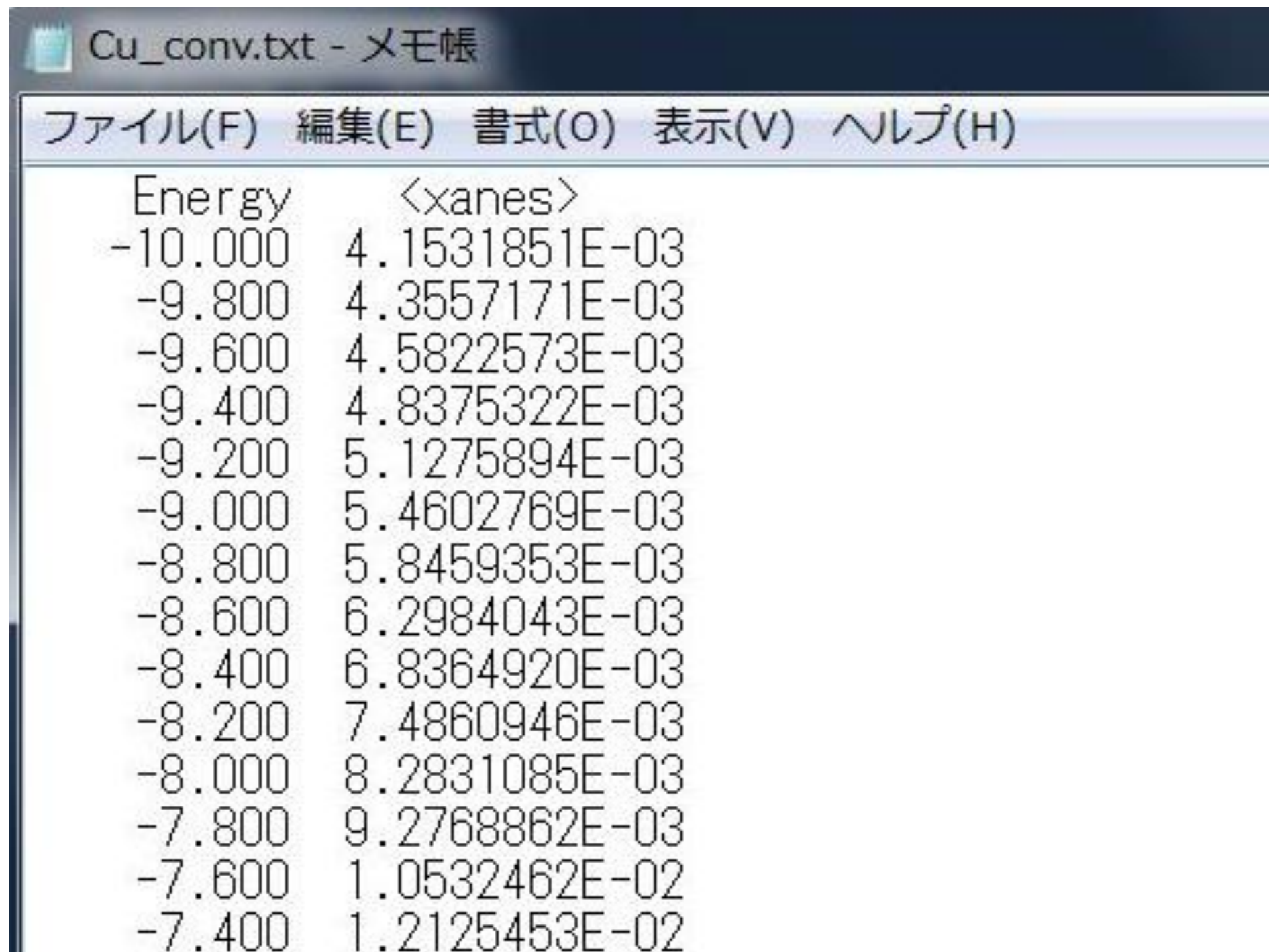
計算結果(生)

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

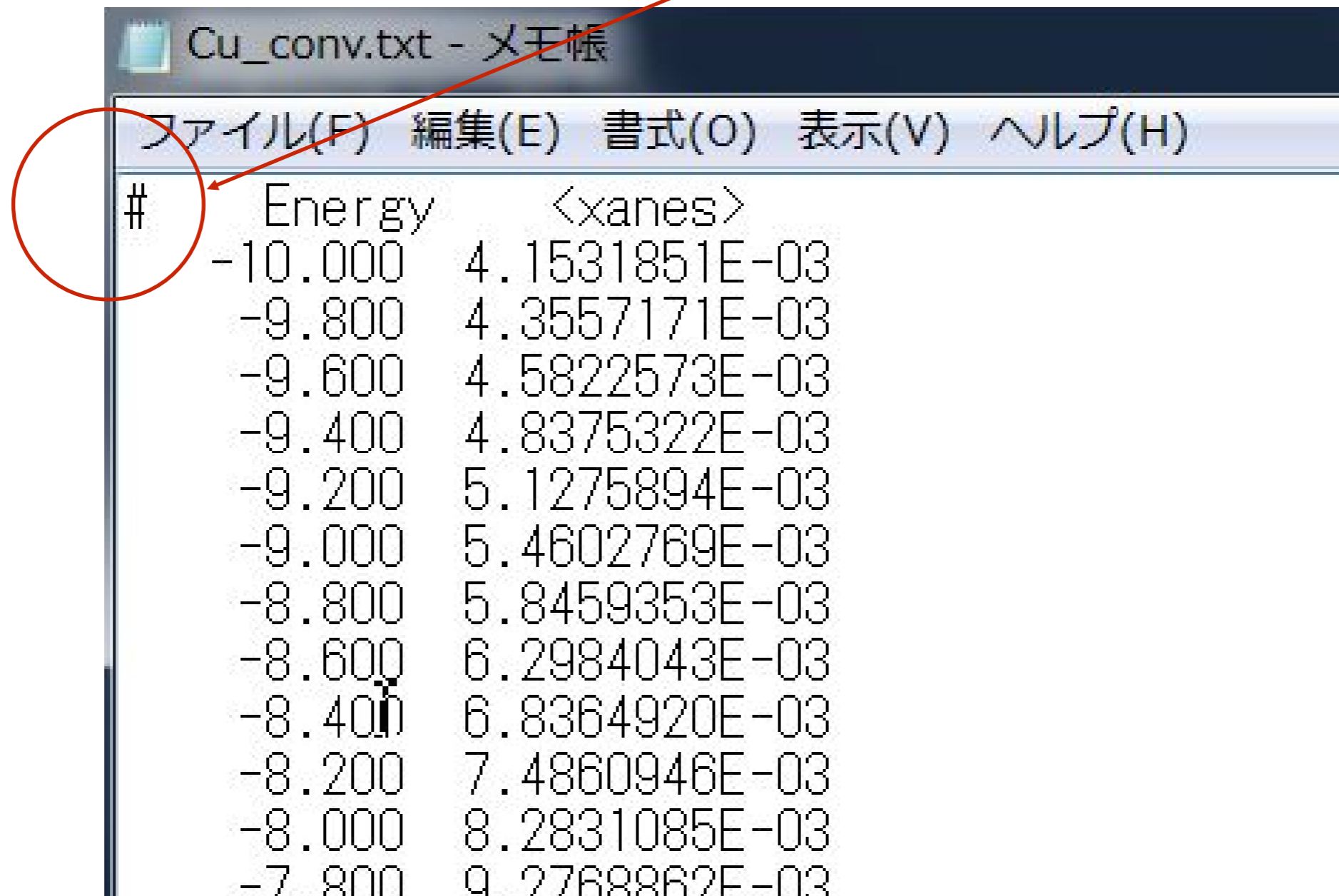


The screenshot shows a text editor window with the title 'Cu_conv.txt - メモ帳'. The menu bar includes 'ファイル(F)', '編集(E)', '書式(O)', '表示(V)', and 'ヘルプ(H)'. The main content area displays a table with two columns: 'Energy' and '<xanes>'. The data points are as follows:

| 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)

GNUPLOT でプロットするために1行目をコメントアウトする

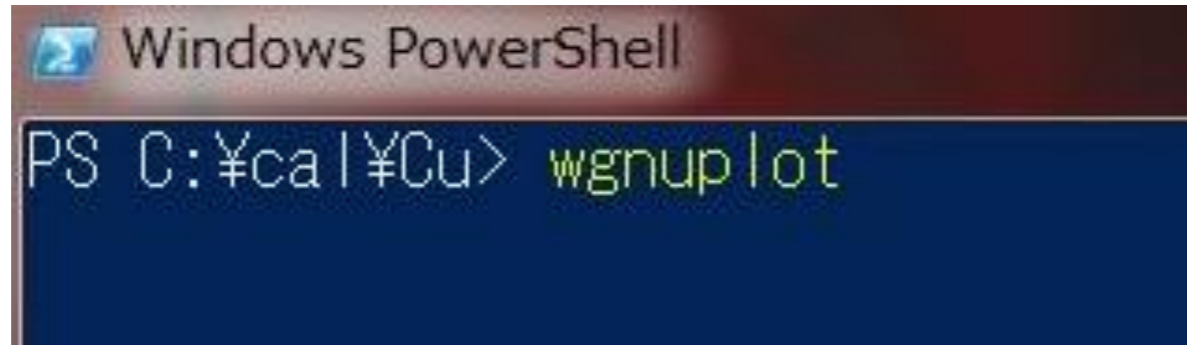


```
Cu_conv.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
# Energy <xanes>
-10.000 4.1531851E-03
-9.800 4.3557171E-03
-9.600 4.5822573E-03
-9.400 4.8375322E-03
-9.200 5.1275894E-03
-9.000 5.4602769E-03
-8.800 5.8459353E-03
-8.600 6.2984043E-03
-8.400 6.8364920E-03
-8.200 7.4860946E-03
-8.000 8.2831085E-03
-7.800 9.2768867E-03
```

名前を付けて上書き保存

15) 計算結果をプロットする(GNU PLOT の立ち上げ)

wgnuplot

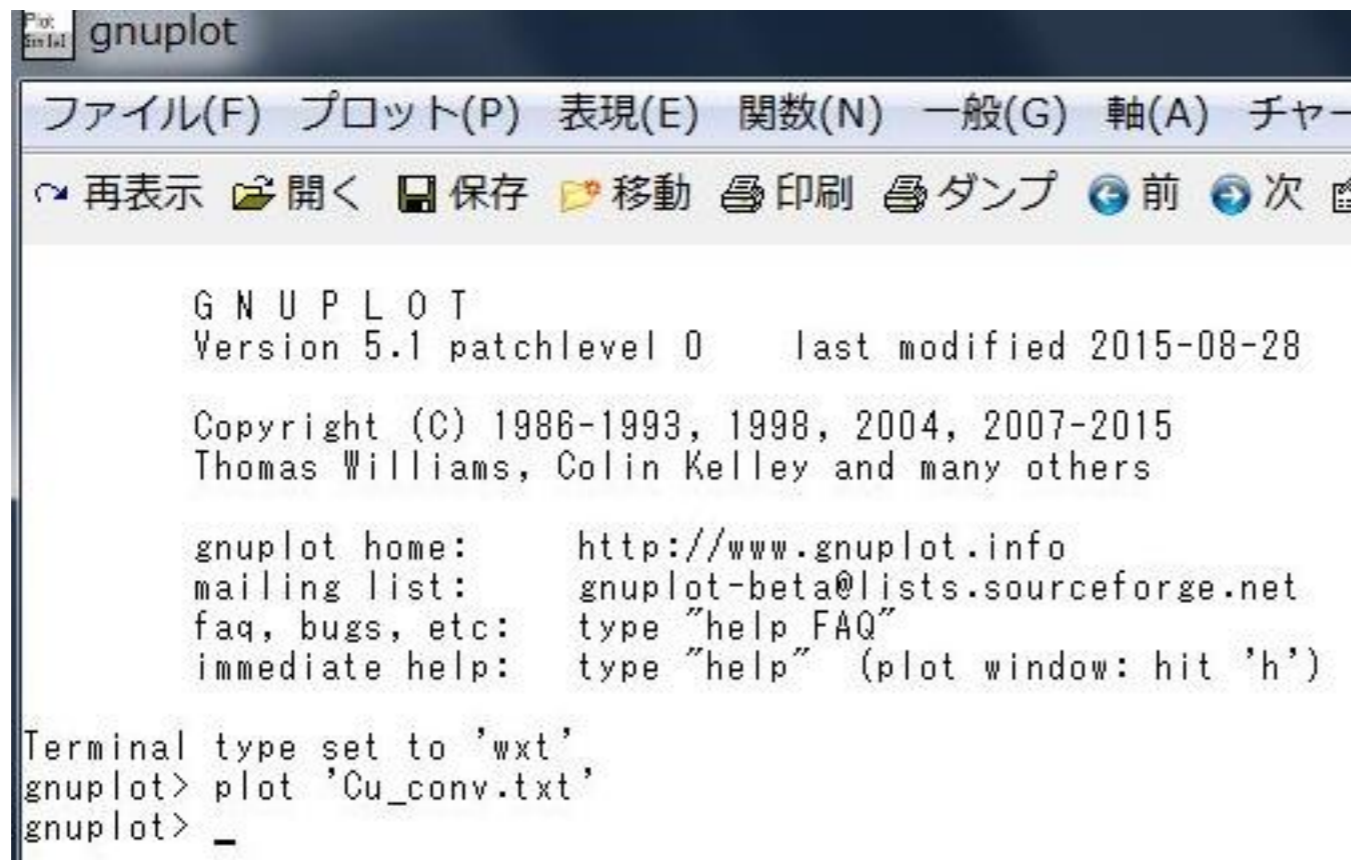


```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> wgnuplot
```

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
GNU PLOT
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

```
Windows PowerShell
PS C:\cal\Cu> wgnuplot
PS C:\cal\Cu> [main 11:16:07] update#setState checking for updates
[main 11:16:07] update#setState downloading
[main 11:16:14] update#setState downloaded
```

```
gnuplot
ファイル(F) プロット(P) 表現(E) 関数(N) 一般(G) 軸(A) チャート(C) スタイル(S) 3次元 ヘルプ(H)

GNU PLOT
Version 5.2 patchlevel 6 last modified 2019-01-01

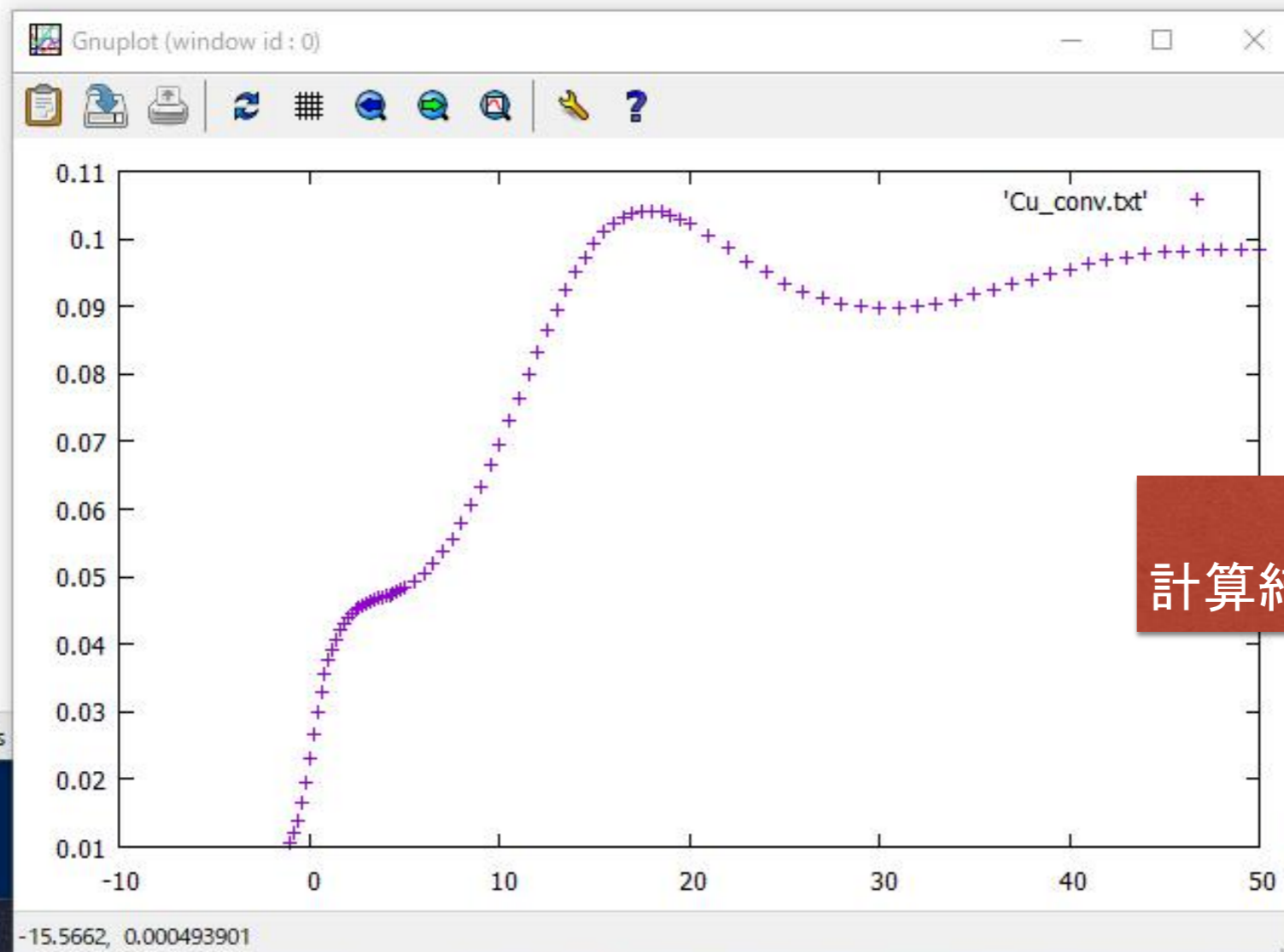
Copyright (C) 1986-1993, 1998, 2004, 2007-2018
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

gnuplot home: http://www.gnuplot.info
faq, bugs, etc: type "help FAQ"
immediate help: type "help" (plot window: hit 'h')
```

Terminal type is now 'wxt'

```
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt'
gnuplot>
```

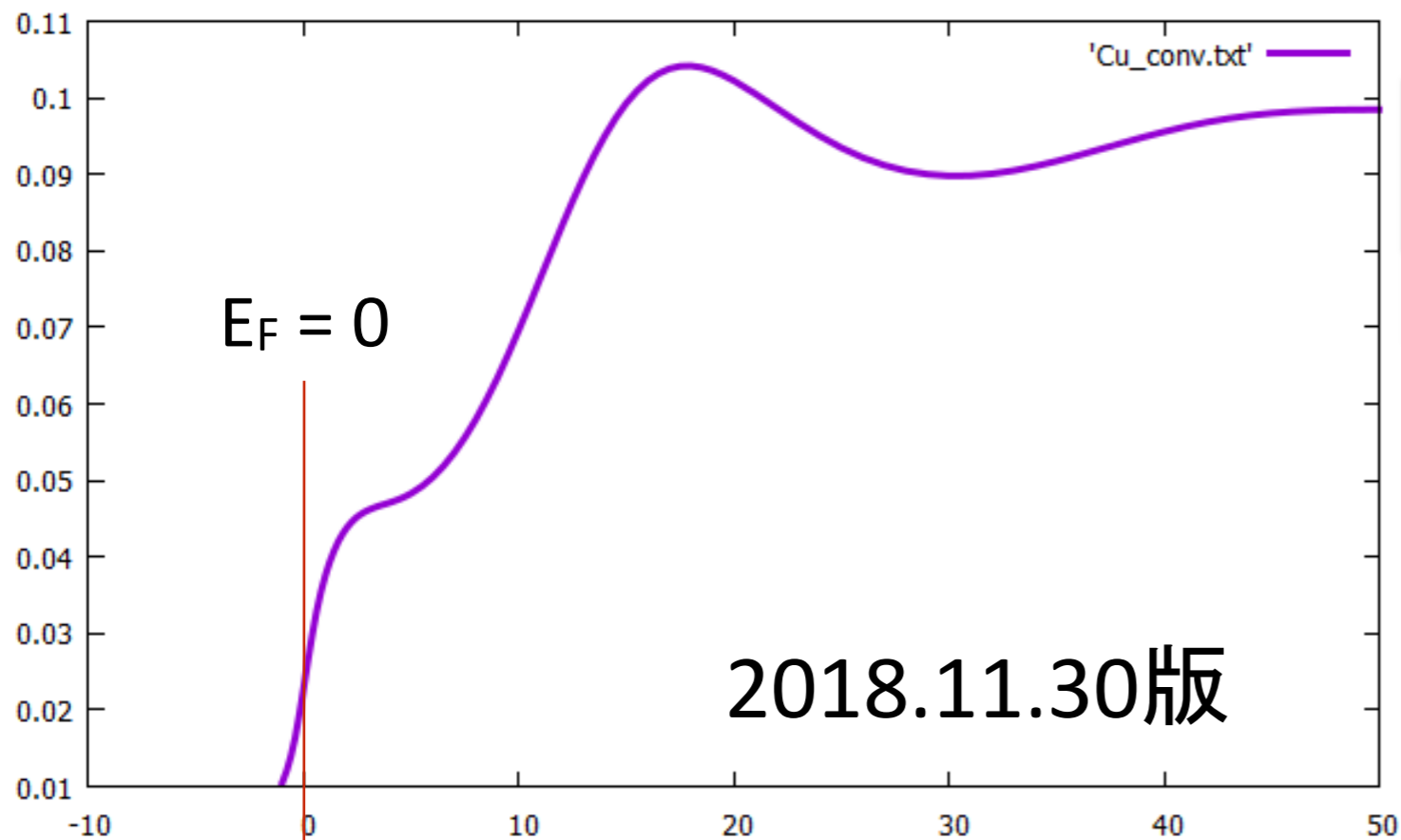
plot 'Cu_conv.txt'



XANES の
計算結果が表示される

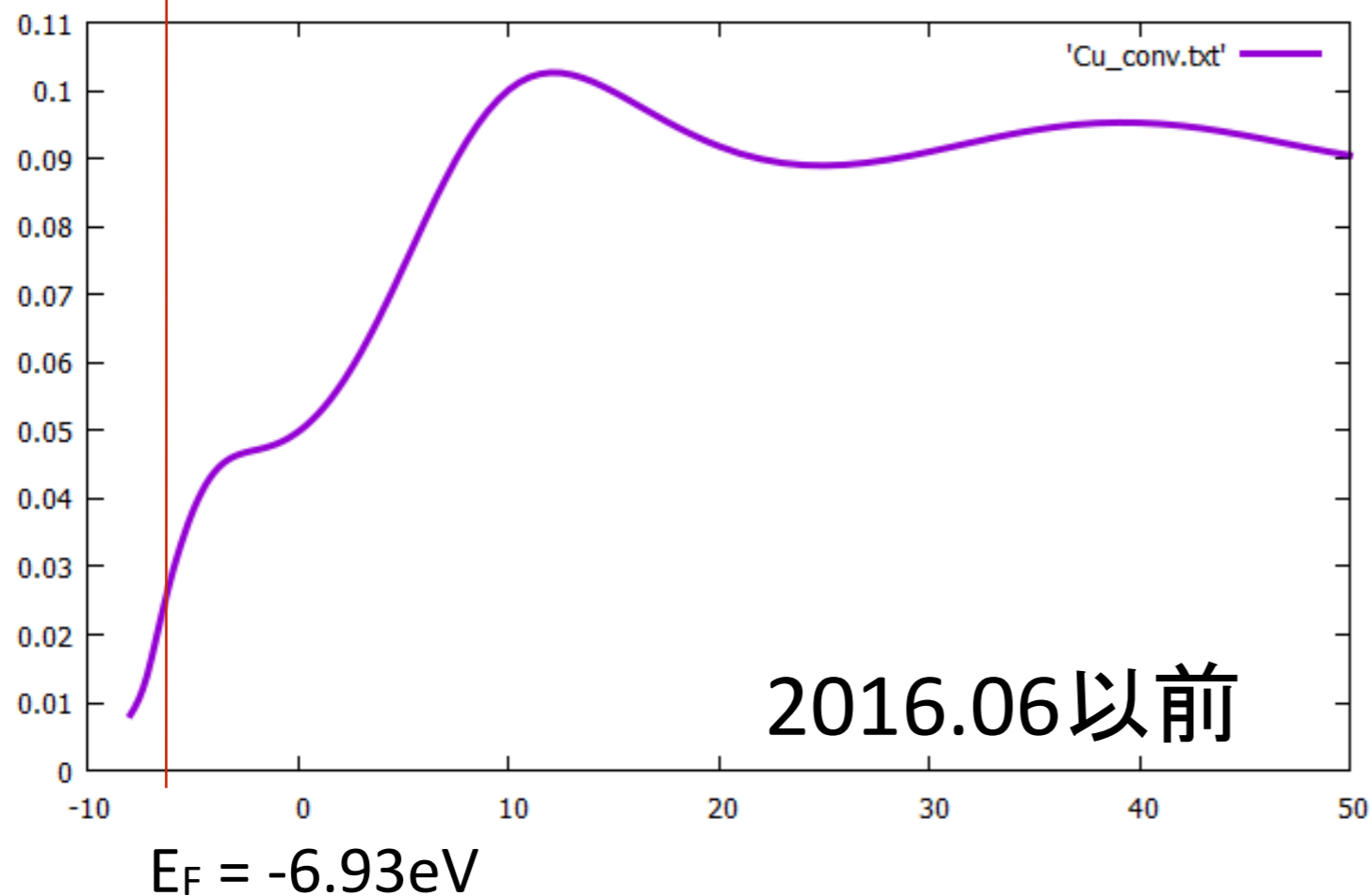
encoding: sjis

XANESスペクトルの結果が以前バージョンと比べるとシフト



2016.06.02 版からエネルギーの軸が $E - E_F$ として設定されている
ゼロエネルギー = フェルミエネルギー

横軸 $E = E - E_F$



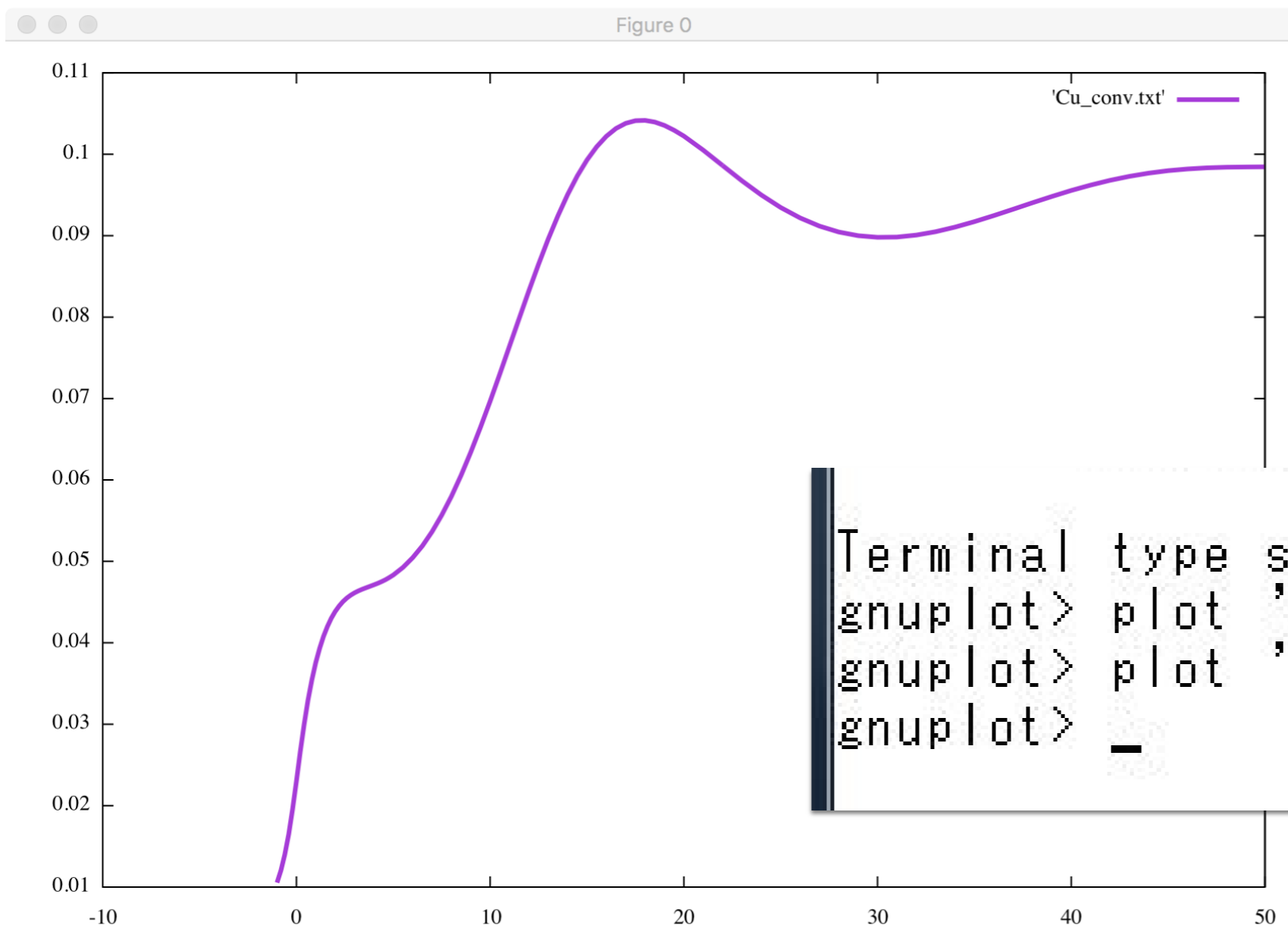
横軸 E

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 | □ □
```

with line の略



```
Terminal type set to 'wxt'  
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt'  
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt' w |  
gnuplot> _
```


17) GNUPLOT の結果を画像ファイルとして保存

gnulot 上で

スペース

```
set terminal png
```

```
set output 'Cu.png'
```

```
plot 'Cu_conv.txt' w l
```

```
q
```

出力形式を png にする

出力ファイル名を Cu.png にする

plot し直す (replot コマンドでもよい)

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:\¥ca\¥Cu> ls

ディレクトリ: C:\¥ca\¥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

PS C:\¥ca\¥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
(windows7/10/11 だとフォトビューアー)

The image shows a Windows PowerShell terminal window on the left and a gnuplot window on the right. The PowerShell terminal displays the following commands and output:

```
C:\Users\nakada> cd
C:\Users\nakada> cd C:\cal\Cu\
C:\cal\Cu> dir

ディレクトリ: C:\cal\Cu

   日付      時刻      長さ 名前
----
2019/02/18 11:26      0 Cu.png
2019/02/18 11:15     2803 Cu.txt
2019/02/18 11:15 2978714 Cu_bav.txt
2019/02/18 11:15     2484 Cu_conv.txt
2019/01/23 13:38     1174 fdmfile.txt
2019/01/23 13:39      957 inp.txt

C:\cal\Cu> start dir
エラー: このコマンドは、次のエラーのため実行できません: 指定されたファイルが見つかりません。
場所 行:1 文字:1
start_dir
+ CategoryInfo          : InvalidOperation: (:) [Start-Process], InvalidOperation
+ FullyQualifiedErrorId : InvalidOperationException,Microsoft.PowerShell.Commands

C:\cal\Cu> dir

ディレクトリ: C:\cal\Cu

   日付      時刻      長さ 名前
----
2019/02/18 11:26      0 Cu.png
2019/02/18 11:15     2803 Cu.txt
2019/02/18 11:15 2978714 Cu_bav.txt
2019/02/18 11:15     2484 Cu_conv.txt
2019/01/23 13:38     1174 fdmfile.txt
2019/01/23 13:39      957 inp.txt

C:\cal\Cu> start Cu.png
C:\cal\Cu>
```

The gnuplot window shows the following commands and output:

```
GNUPLOT
Version 5.2 patchlevel 6 last modified 2019-01-01

Copyright (C) 1986-1993, 1998, 2004, 2007-2018
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

gnuplot home: http://www.gnuplot.info
faq, bugs, etc: type "help FAQ"
immediate help: type "help" (plot window: hit 'h')

Terminal type is now 'wxt'
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt'
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt' w l
gnuplot> set terminal png

Terminal type is now 'png'
Options are 'nocrop enhanced size 640,480 font "arial,12.0" '
gnuplot> set output 'Cu.png'
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt' w l
gnuplot>
gnuplot>
```

The resulting plot is displayed in the 'フォト - Cu.png' window. The plot shows a curve with a peak around x=18 and a minimum around x=30. The y-axis ranges from 0.01 to 0.11, and the x-axis ranges from -10 to 50.

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)

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/V2O3_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/Ba2ZnUO6_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Ca3Co2O6_inp.txt
Sim/Test_stand/in/CoCO3_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe2O3_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe2O3_selec_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe2O3_scf_inp.txt
Sim/Test_stand/in/Fe2O3_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

!: コメントアウト (後述)
!が行頭にあると、その行は読まない

読み込む
入力ファイルの数

2

Sim/Test_stand/in/Cu_inp.txt

Sim/Test_stand/in/VO6_inp.txt

入力ファイルのパス

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
-1. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50.

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:\¥ca\¥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:\¥ca\¥Cu

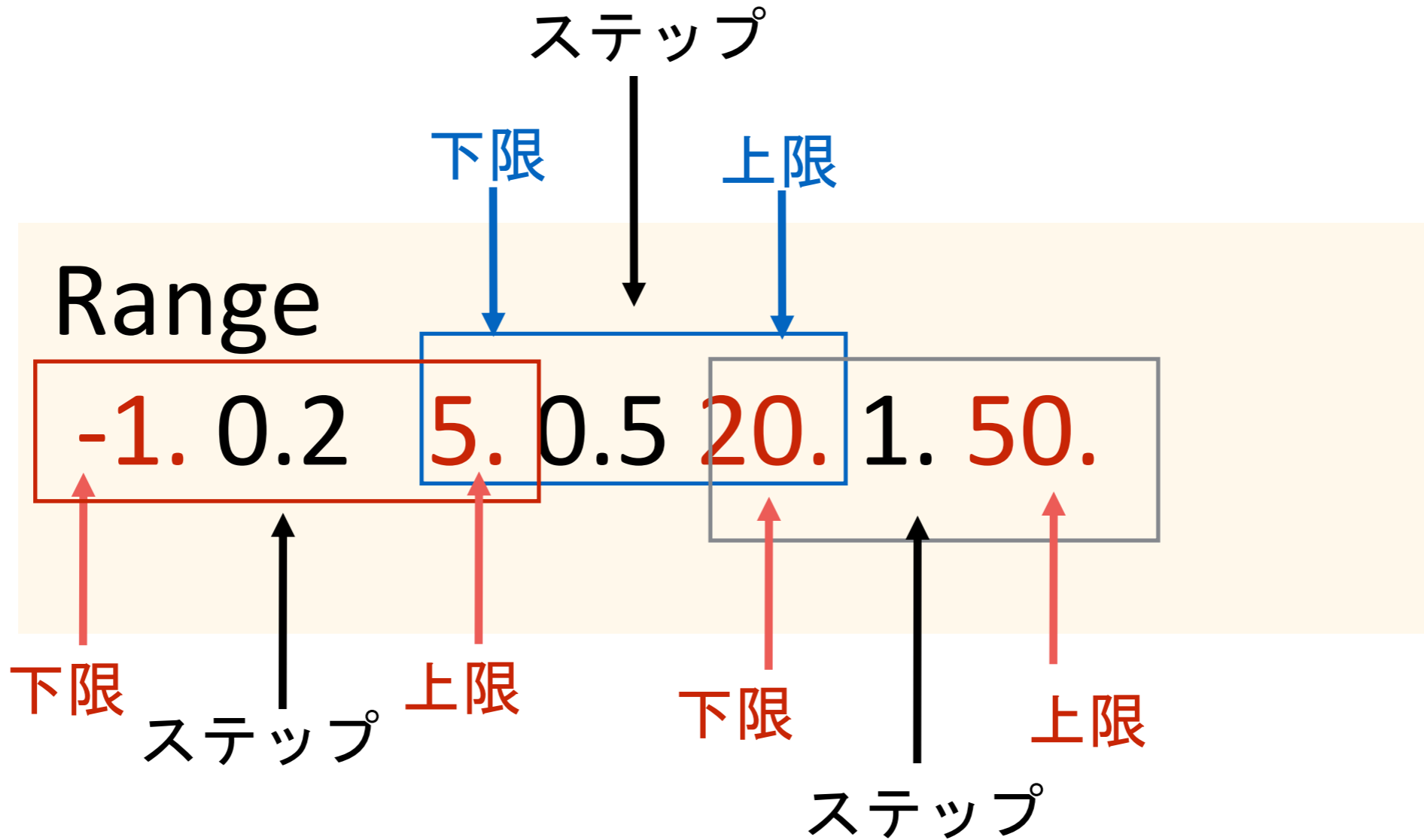
| Mode | LastWriteTime | Length | Name |
|-------|------------------|---------|-------------|
| -a--- | 2016/01/01 14:39 | 4334 | Cu.png |
| -a--- | 2016/01/02 9:07 | 2981 | Cu.txt |
| -a--- | 2016/01/01 10:46 | 2201965 | Cu_bav.txt |
| -a--- | 2016/01/01 14:12 | 2756 | Cu_conv.txt |
| -a--- | 2016/01/01 10:20 | 1046 | fdmfile.txt |
| -a--- | 2016/01/01 10:46 | 958 | inp.txt |

```
PS C:\¥ca\¥Cu>
```

inp.txt

計算するエネルギー範囲

スペースで区切る



いくらかでも追加できる。

-20. 2. -10. 1. -1. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50.

等もOK。

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ーで定義される

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ーの間には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)

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

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
```

FDMNES

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 | | | |

内部座標

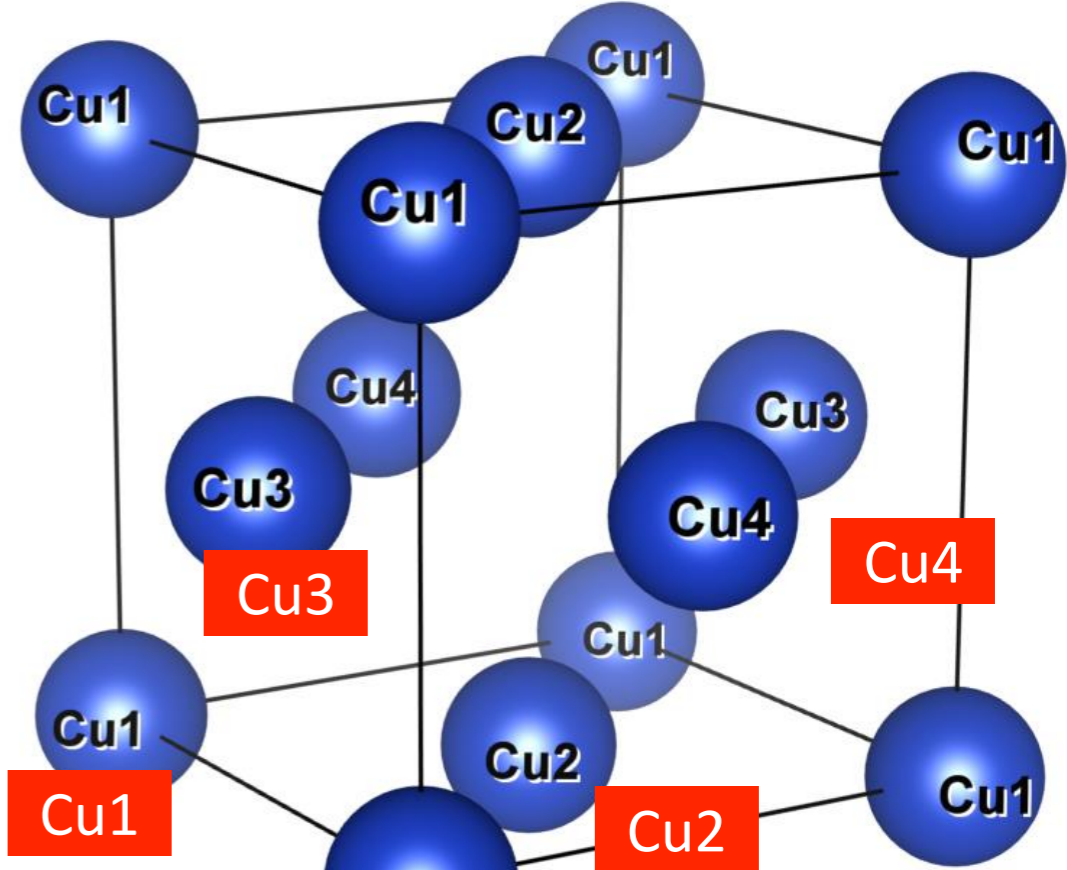
$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$

原子番号

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

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
```

Total time 10.8 s CPU

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
```

Total time 10.7 s CPU

計算するときには内部的に自動で対称性を探す

内部的に作られるクラスタ構造が同じ

基本入力ファイルの解説

-クラスター半径-

Filout

Cu

Range

-1. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50.

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

Convolution

構造情報

End

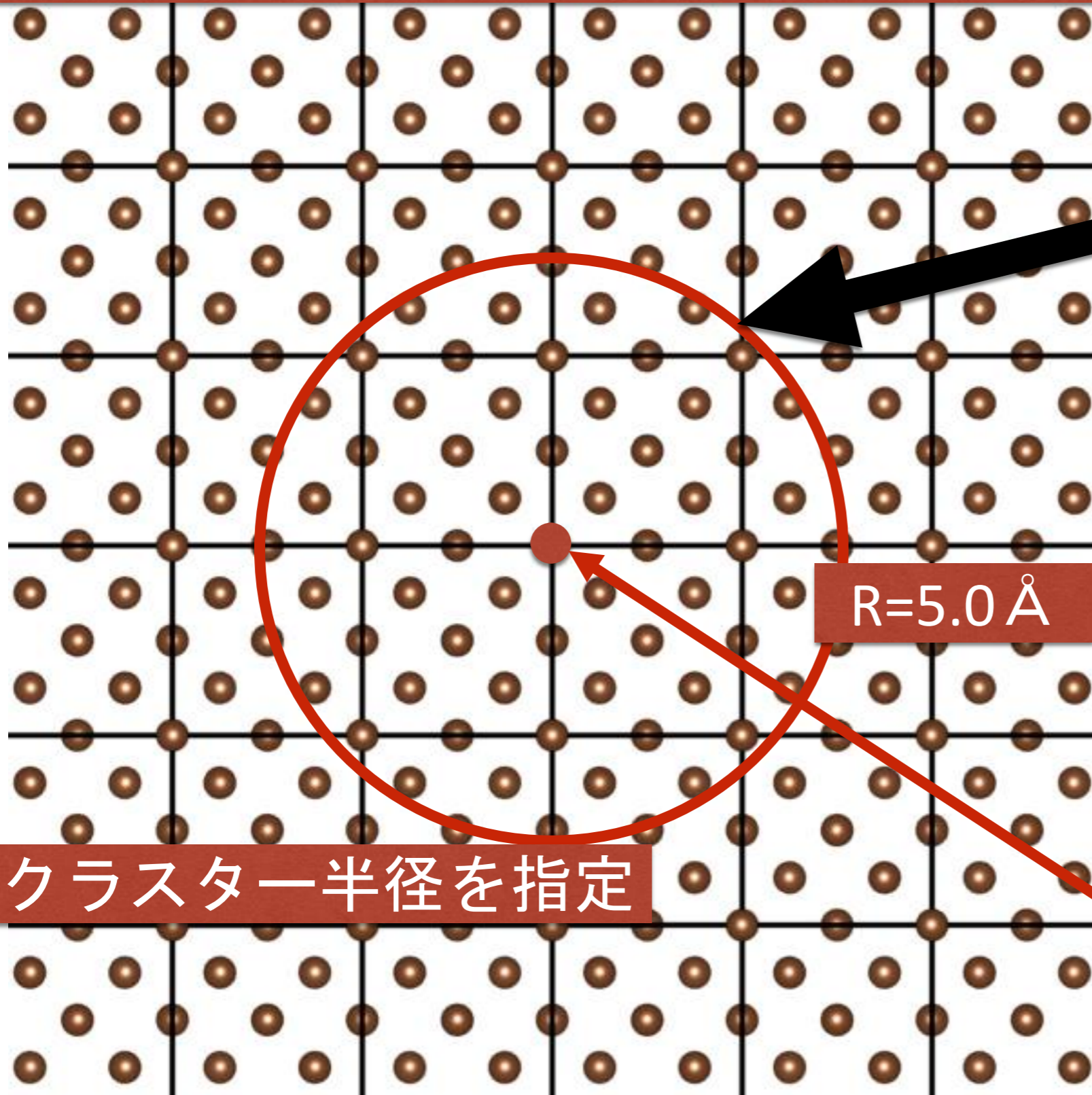
FDMNES ではクラスター計算が行われている

構造情報 (Crystal, Molecule)



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

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

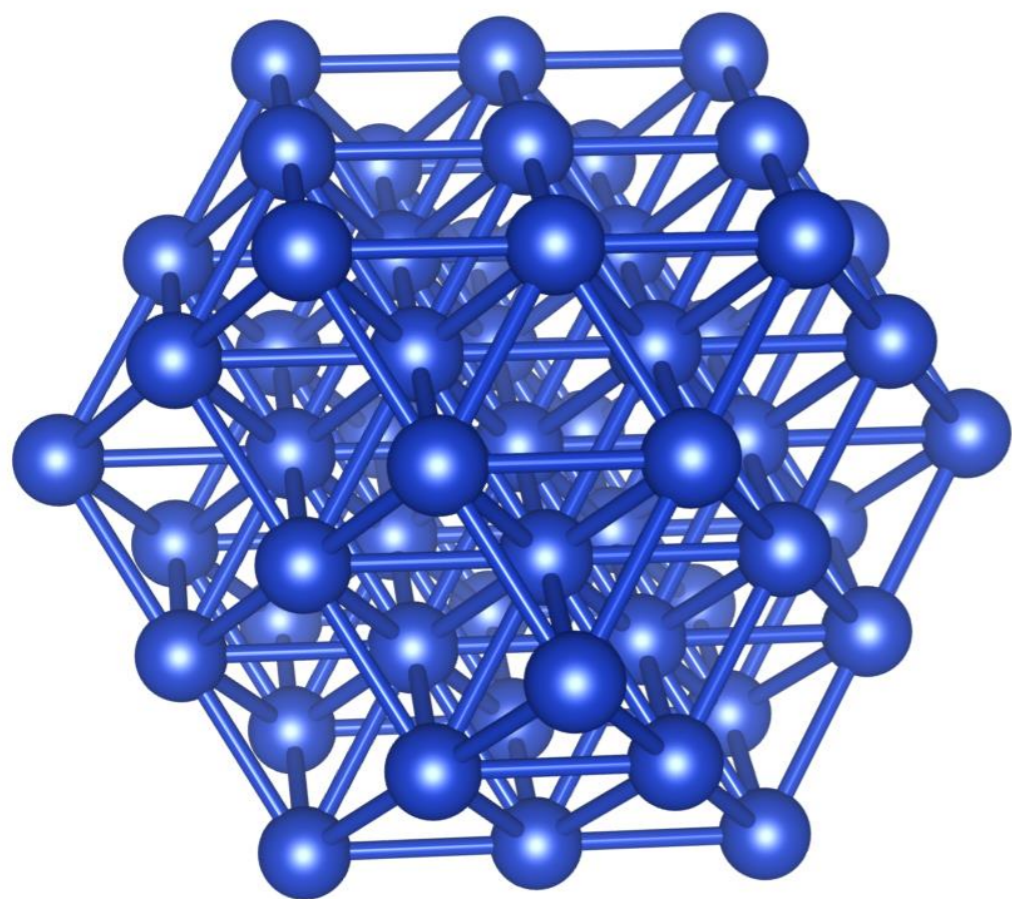
2) クラスタ一半径を指定

吸収原子
(ホールが空く)

吸収原子を中心とした半径
(クラスター半径のイメージ図)

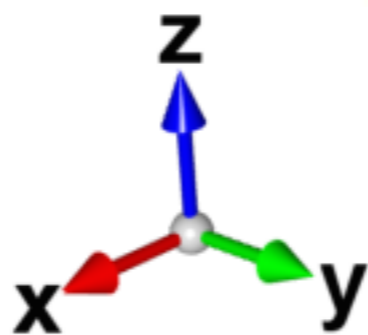
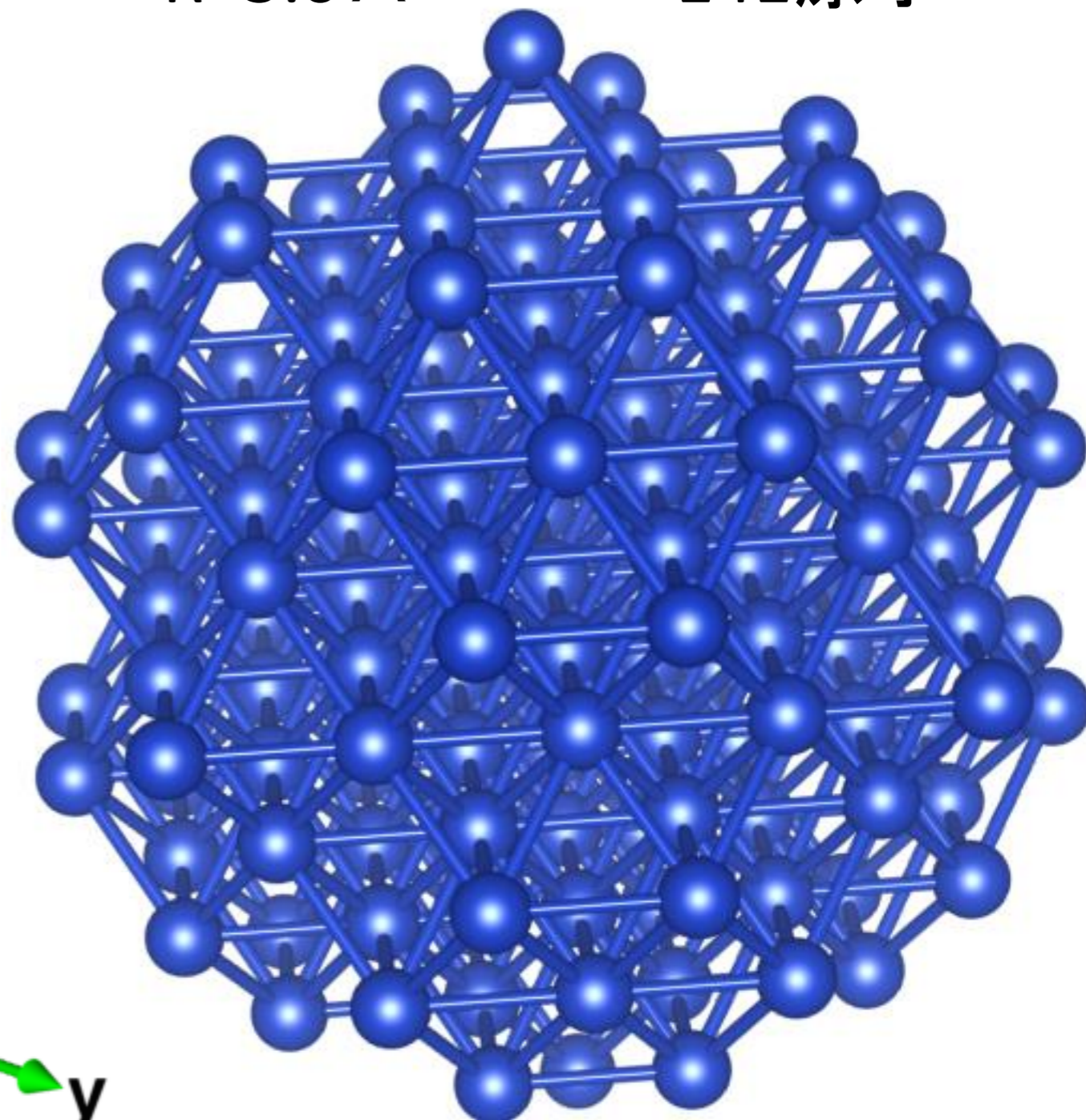
$R=3.0 \text{ \AA}$

55原子



$R=5.0 \text{ \AA}$

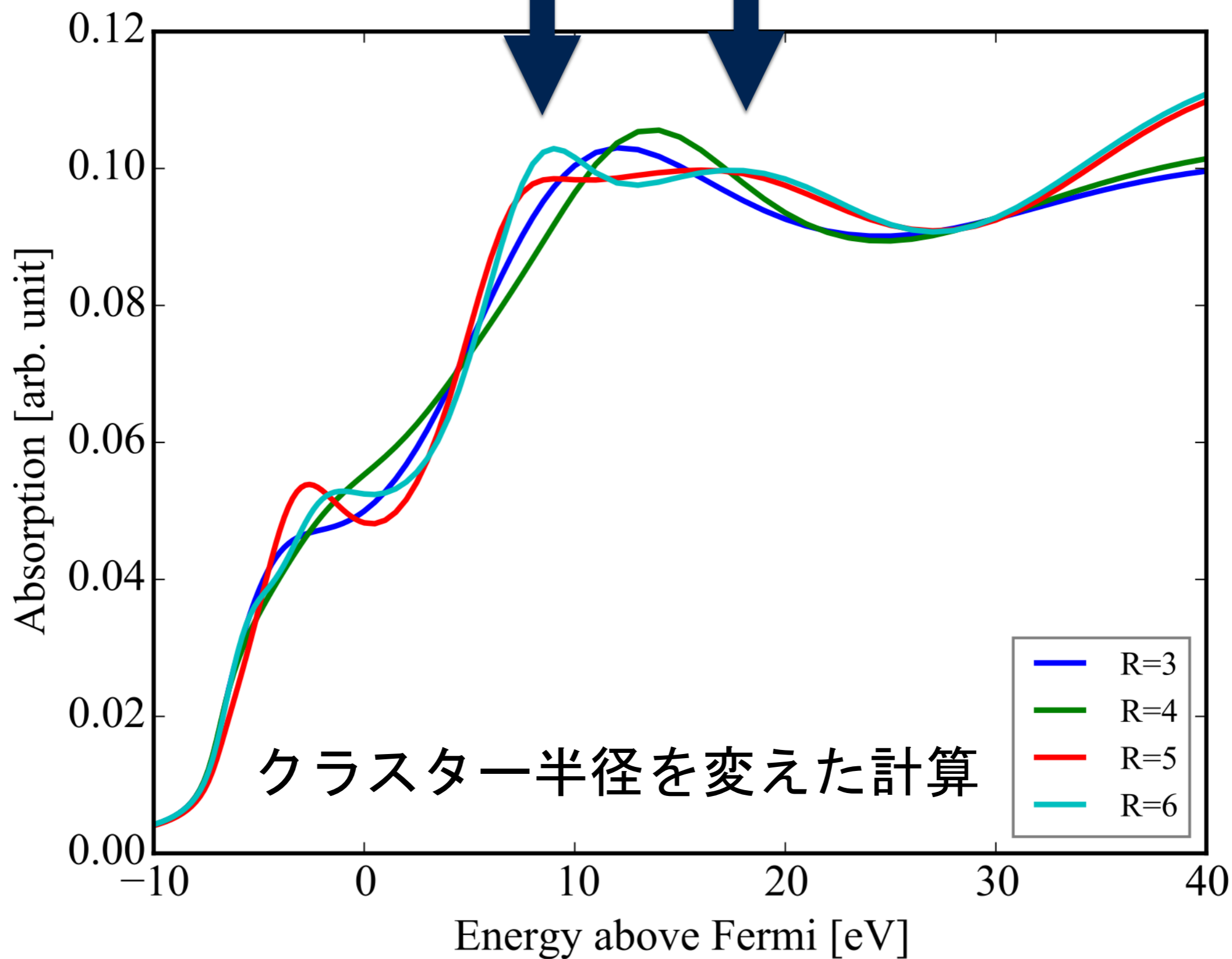
141原子



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



分子系の記述は？

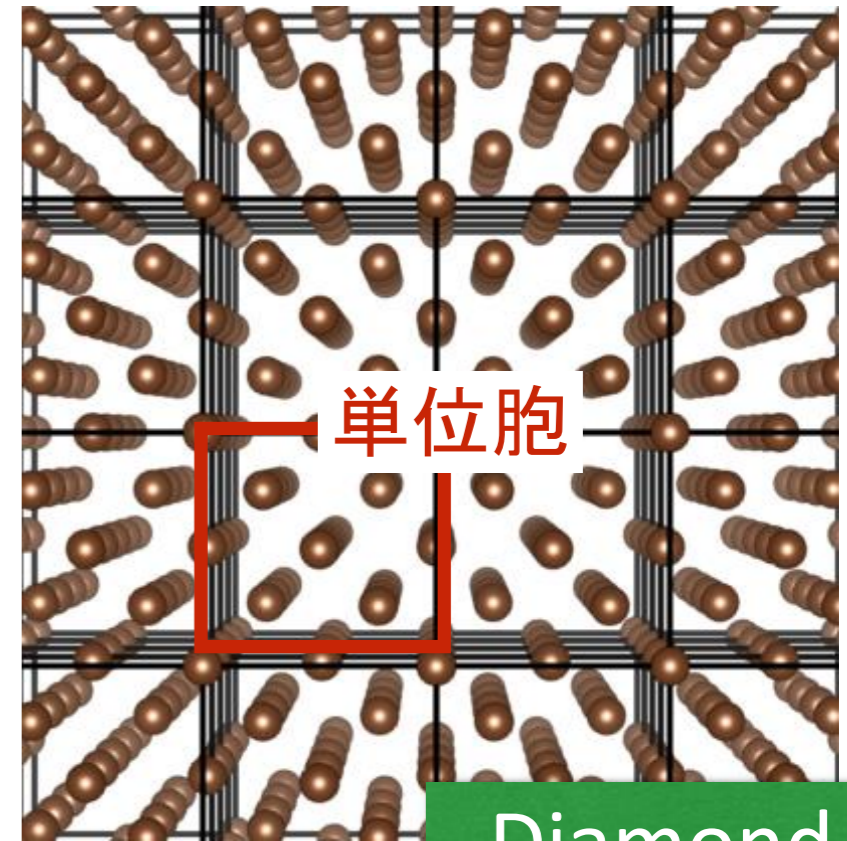
Crystal のとき

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



Diamond

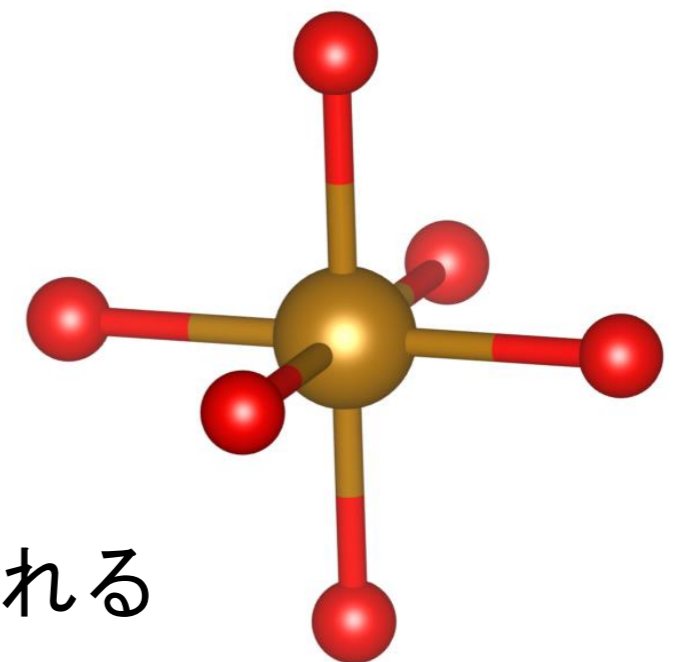
Molecule のとき

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



FeO⁶

for FDMNES

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 | | |

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

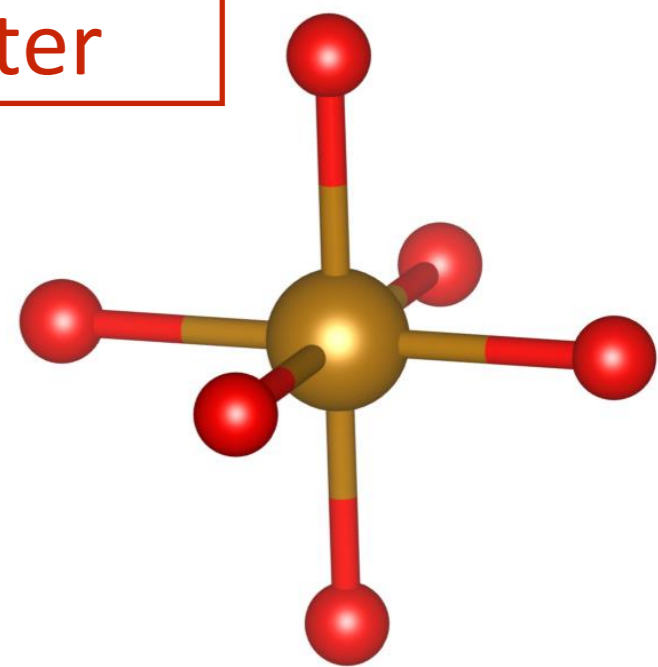
| | | | | | |
|------|------|------|------|-----|-----|
| 2.16 | 2.16 | 2.16 | 90. | 90. | 90. |
| 26 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | | |
| 8 | 1.0 | 0.0 | 0.0 | | |
| 8 | -1.0 | 0.0 | 0.0 | | |
| 8 | 0.0 | 1.0 | 0.0 | | |
| 8 | 0.0 | -1.0 | 0.0 | | |
| 8 | 0.0 | 0.0 | 1.0 | | |
| 8 | 0.0 | 0.0 | -1.0 | | |

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 での分子系の記述

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

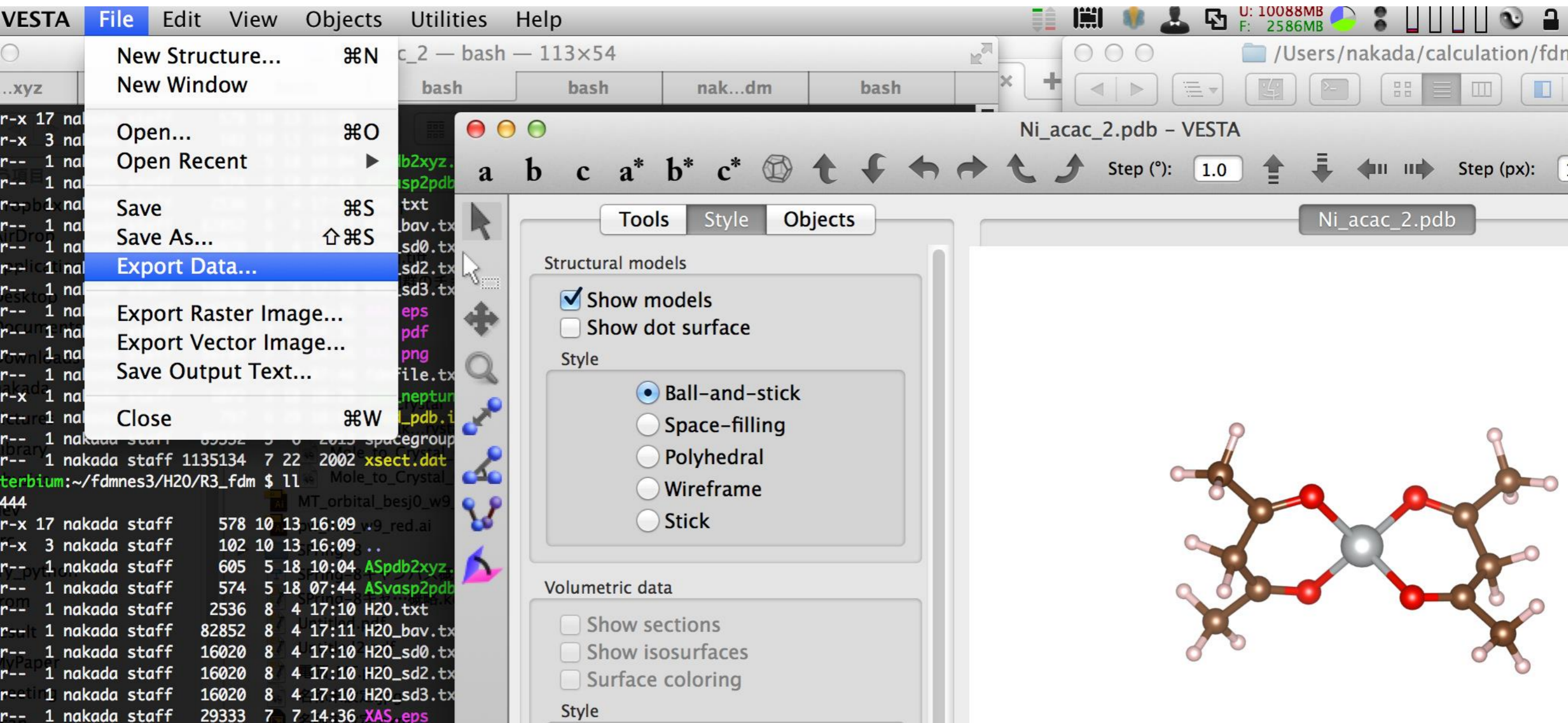
○) 一度 cif 形式に export する。

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



The screenshot shows the VESTA software interface. The 'File' menu is open, and 'Export Data...' is highlighted. The main window displays a ball-and-stick model of a crystal structure. The interface includes a menu bar (File, Edit, View, Objects, Utilities, Help), a toolbar with navigation and view controls, and a settings panel on the right with tabs for Tools, Style, and Objects. The 'Style' tab is active, showing options for 'Structural models' (Show models, Show dot surface) and 'Style' (Ball-and-stick, Space-filling, Polyhedral, Wireframe, Stick). The 'Volumetric data' section has options for Show sections, Show isosurfaces, and Surface coloring. The main window title is 'Ni_acac_2.pdb - VESTA' and the file name is 'Ni_acac_2.pdb'. The background shows a terminal window with a list of files and directories.

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

The image shows a screenshot of the CrystalMaker software interface. The menu bar at the top includes 'CrystalMaker', 'File', 'Edit', 'Selection', 'Model', 'Transform', 'Measure', 'Window', and 'Help'. The 'Transform' menu is open, displaying various options. The option 'Molecule to Crystal...' is highlighted in blue. Other visible options include 'Set View Direction...', 'View Along Selection', 'Rotate', 'Auto Rotate...', 'Set Scale...', 'Set Range...', 'Define Cluster...', 'Optimize Range', 'Show Lattice Plane', 'Set Plane Properties...', 'Slice With Lattice Plane...', 'Insert Space At Lattice Plane...', 'Generate Bonds Now...', 'Generate Bonds at File Import', 'Move Origin...', 'Transform Cell...', 'Discard Symmetry...', 'Add Hydrogens', and 'Relax Molecule'. The background shows a 3D ball-and-stick model of a molecule and a terminal window with a list of coordinates and file permissions.

lattice parameter を設定

Convert Molecule to Crystal

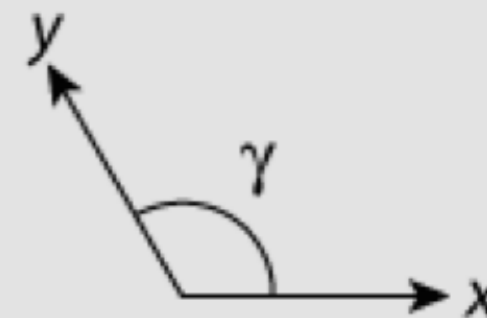
Molecular Dimensions: Width (ΔX) **8.117 Å** x Height (ΔY) **7.805 Å** x Depth (ΔZ) **6.599 Å**

Lattice Parameters: a [Å] b [Å] c [Å] α [°] β [°] γ [°]

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!



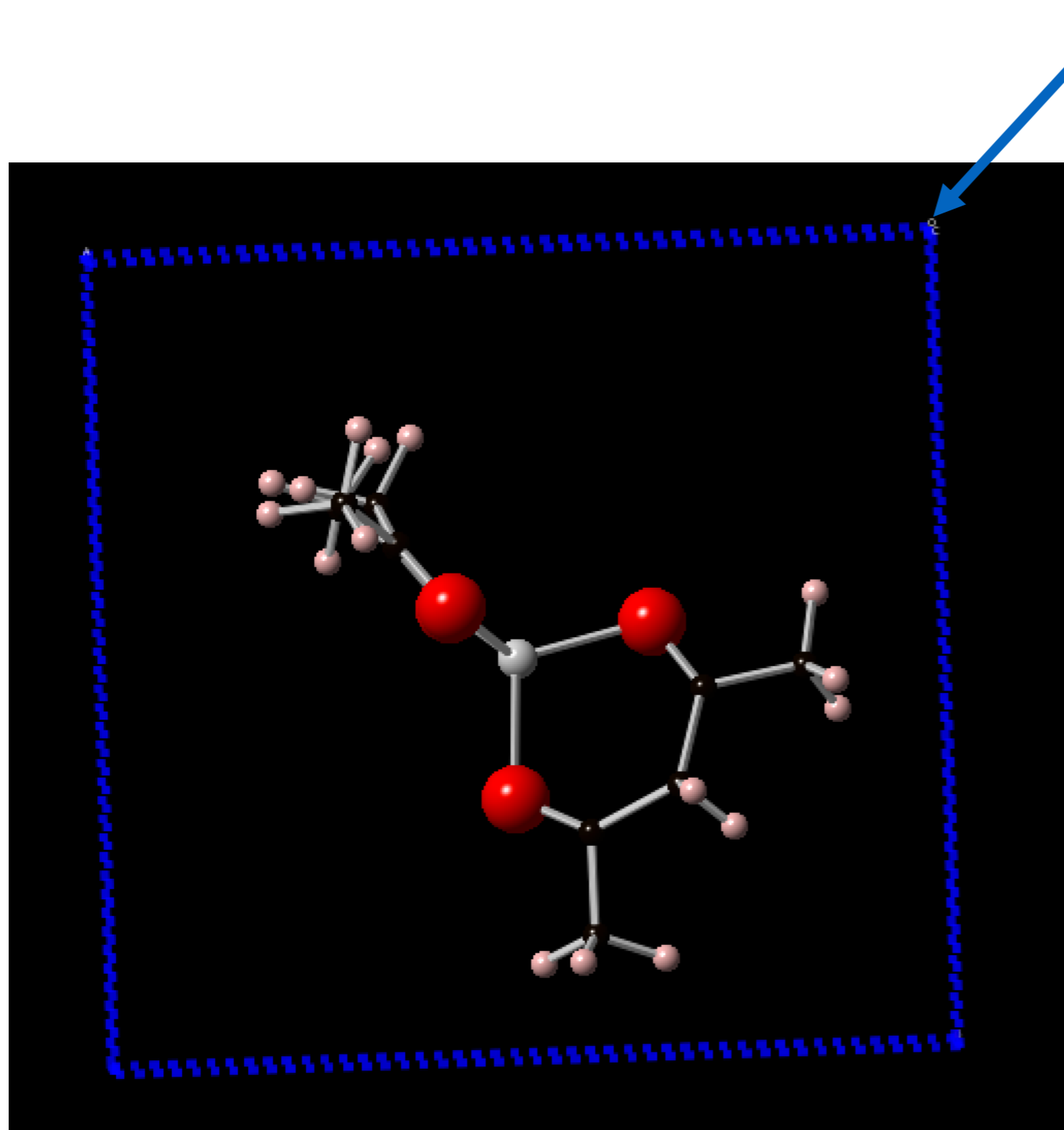
Position Molecule: Centred inside the unit cell
 Centred at the origin



Cancel

Convert

分子の情報に箱 (unit-cell) 加わる



lattice a

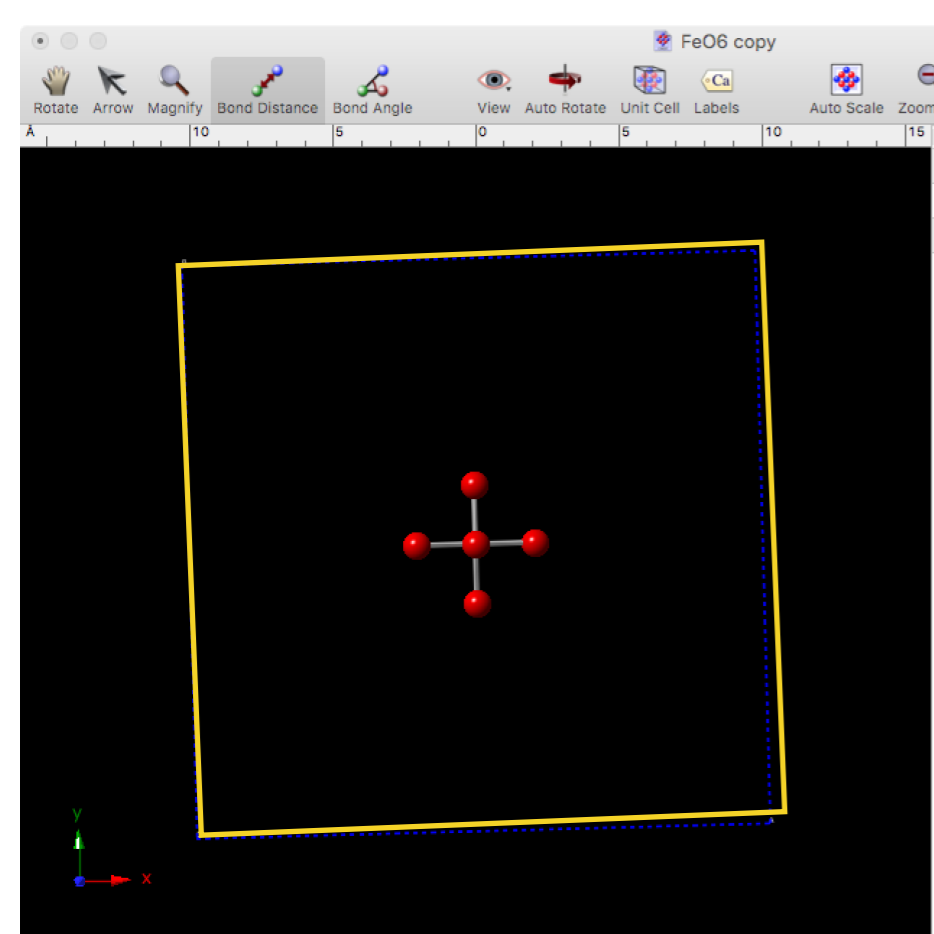
lattice b

lattice c

α

β

γ



data_FeO6

_audit_creation_method 'generated by CrystalMaker 9.2.9'

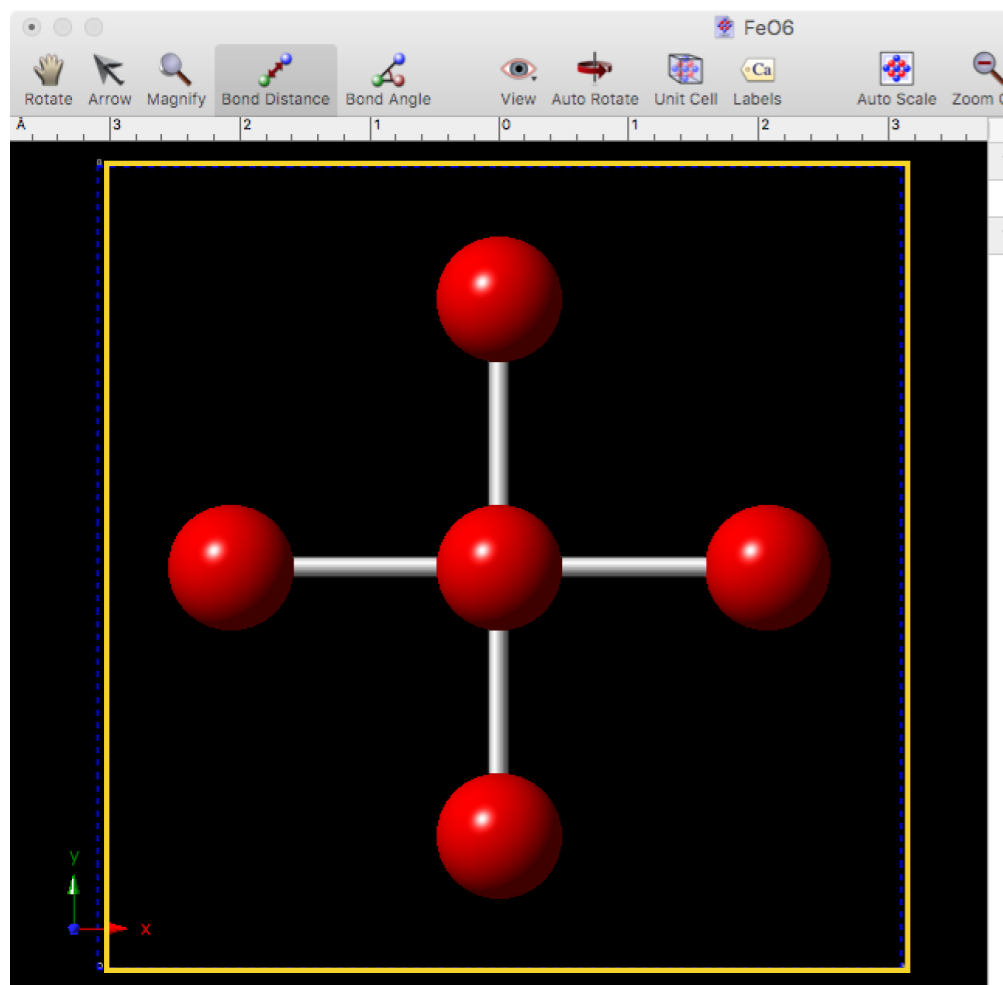
_cell_length_a 20.0000(0)

_cell_length_b 20.0000(0)

_cell_length_c 20.0000(0)

20 Å の箱

| | | | | | |
|-----|----|--------|--------|--------|--------|
| Fe1 | Fe | 1.0000 | 0.5000 | 0.5000 | 0.5000 |
| O2 | O | 1.0000 | 0.6029 | 0.5000 | 0.5000 |
| O3 | O | 1.0000 | 0.3971 | 0.5000 | 0.5000 |
| O4 | O | 1.0000 | 0.5000 | 0.6029 | 0.5000 |
| O5 | O | 1.0000 | 0.5000 | 0.3971 | 0.5000 |
| O6 | O | 1.0000 | 0.5000 | 0.5000 | 0.6029 |
| O7 | O | 1.0000 | 0.5000 | 0.5000 | 0.3971 |



data_FeO6

_audit_creation_method 'generated by CrystalMaker 9.2.9'

_cell_length_a 6.1710(0)

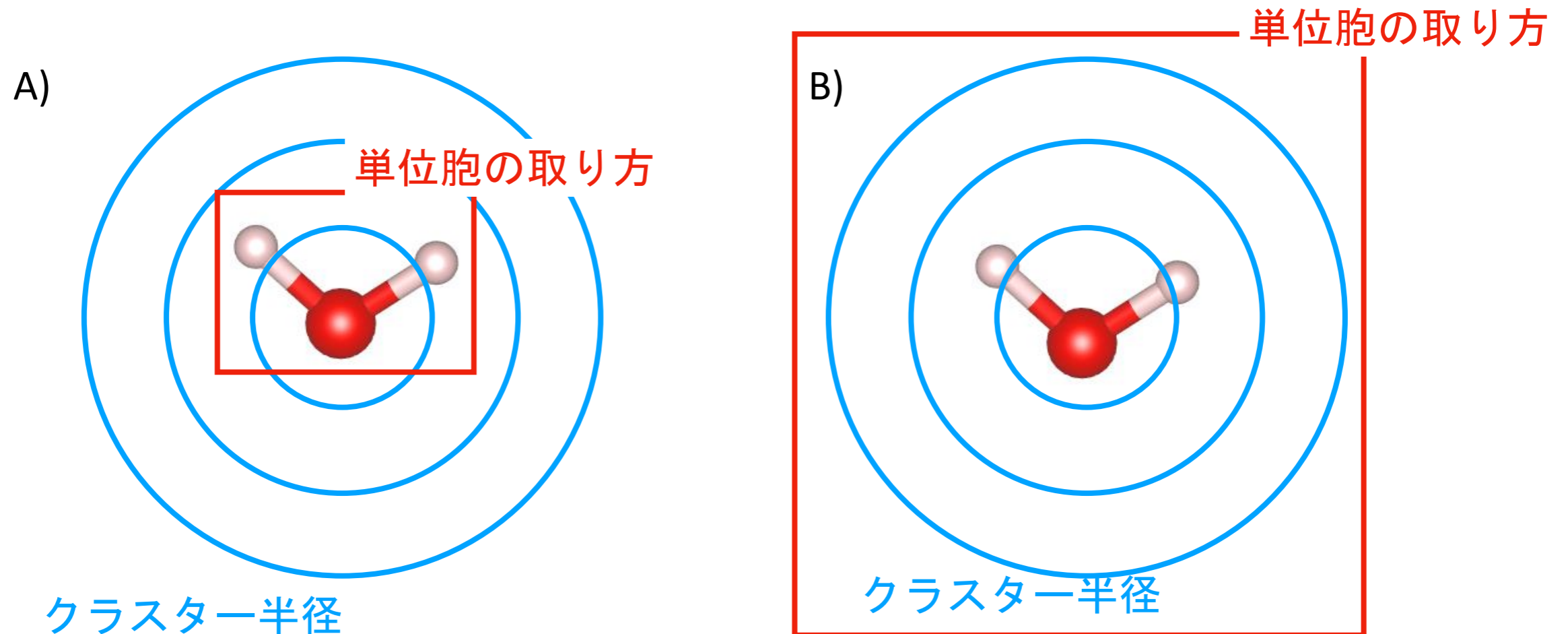
_cell_length_b 6.1710(0)

_cell_length_c 6.1710(0)

6 Å の箱

| | | | | | |
|-----|----|--------|--------|--------|--------|
| Fe1 | Fe | 1.0000 | 0.5000 | 0.5000 | 0.5000 |
| O2 | O | 1.0000 | 0.8334 | 0.5000 | 0.5000 |
| O3 | O | 1.0000 | 0.1666 | 0.5000 | 0.5000 |
| O4 | O | 1.0000 | 0.5000 | 0.8334 | 0.5000 |
| O5 | O | 1.0000 | 0.5000 | 0.1666 | 0.5000 |
| O6 | O | 1.0000 | 0.5000 | 0.5000 | 0.8334 |
| O7 | O | 1.0000 | 0.5000 | 0.5000 | 0.1666 |

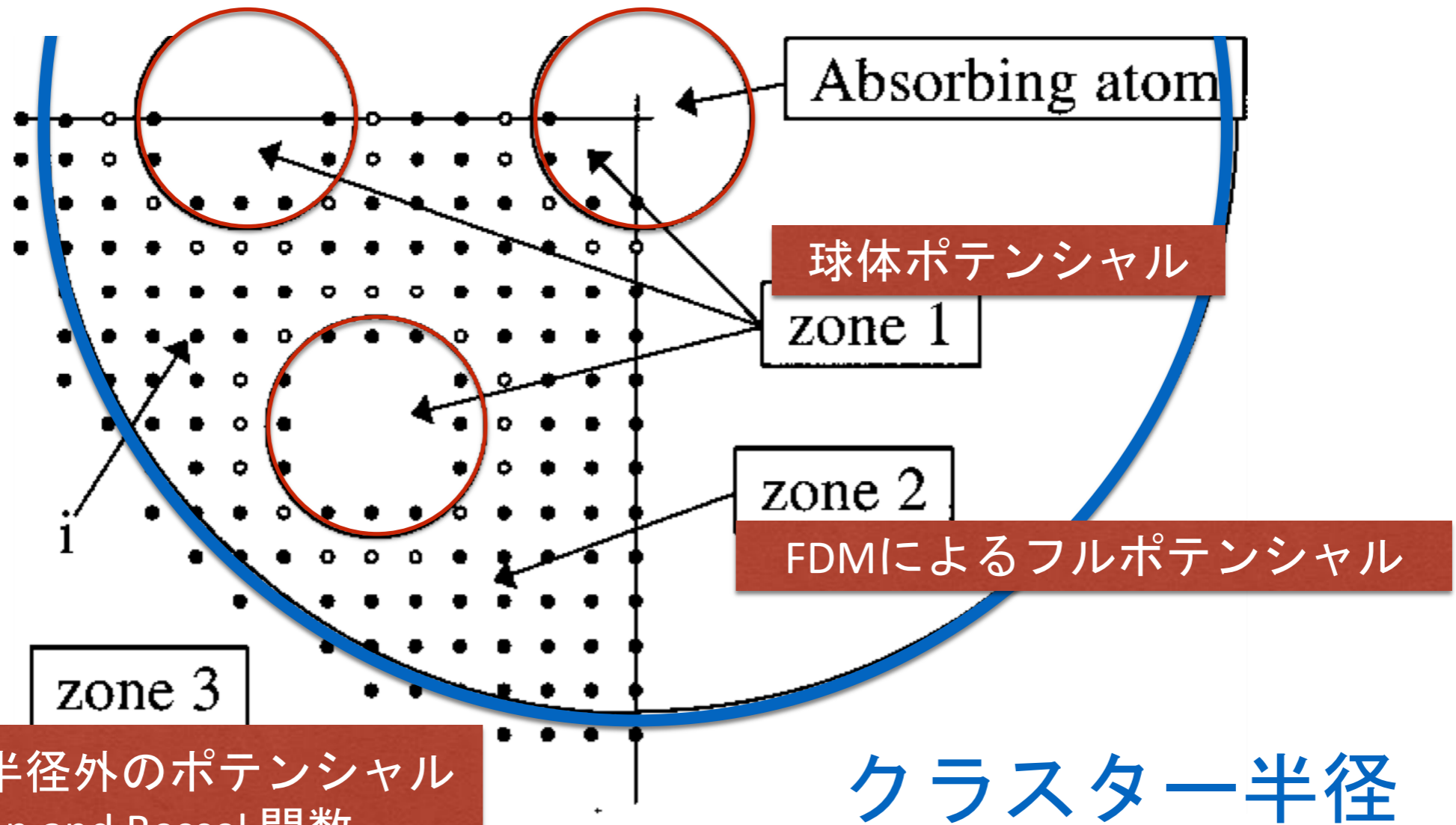
クラスター半径と単位胞の関係



- 1) それぞれの分子は、箱の中には収まっている
- 2) クラスター半径を
- 3) A と B の二つの構造の作り方でFDM計算の結果が異なる
- 4) A と B どちらの構造の取り方でも Green 関数計算だと結果は同じ

※クラスター半径は単位胞内に収まる必要はなく、半径が大きければ大きいほど精度は上がり、そして計算時間が掛かる。

計算領域によってポテンシャルの扱いが異なる



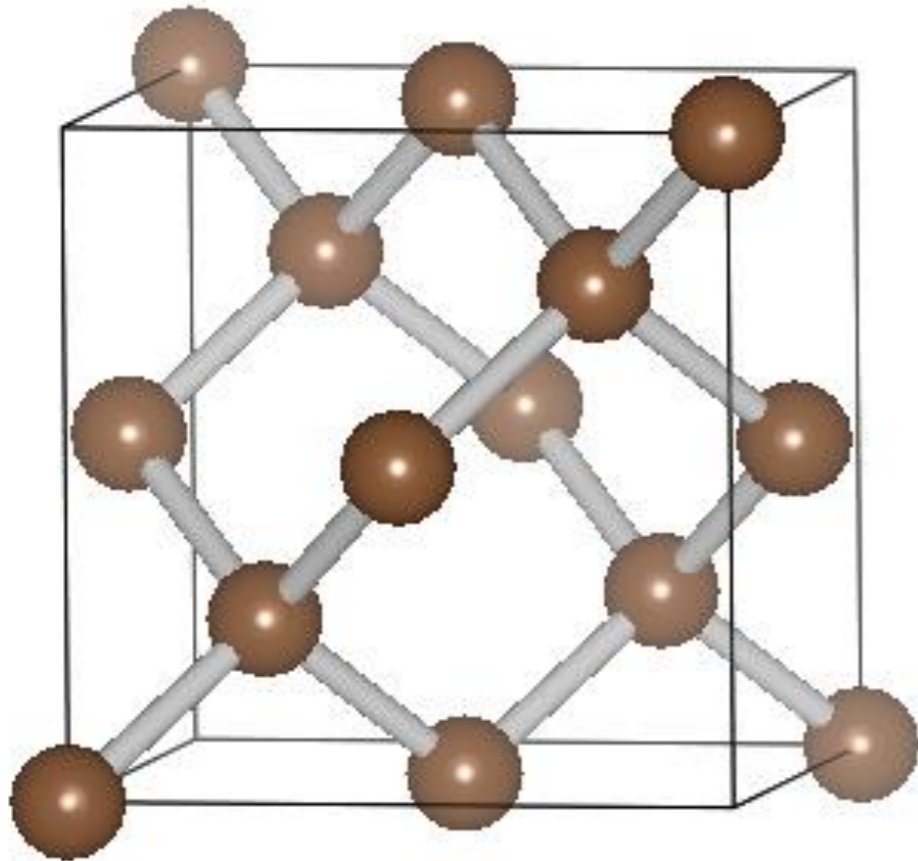
3つの領域

Appendix

空間群の入力の際の注意
および
cif での入力の話

空間群にチヨイスがある場合は注意

例) ダイヤモンド型構造



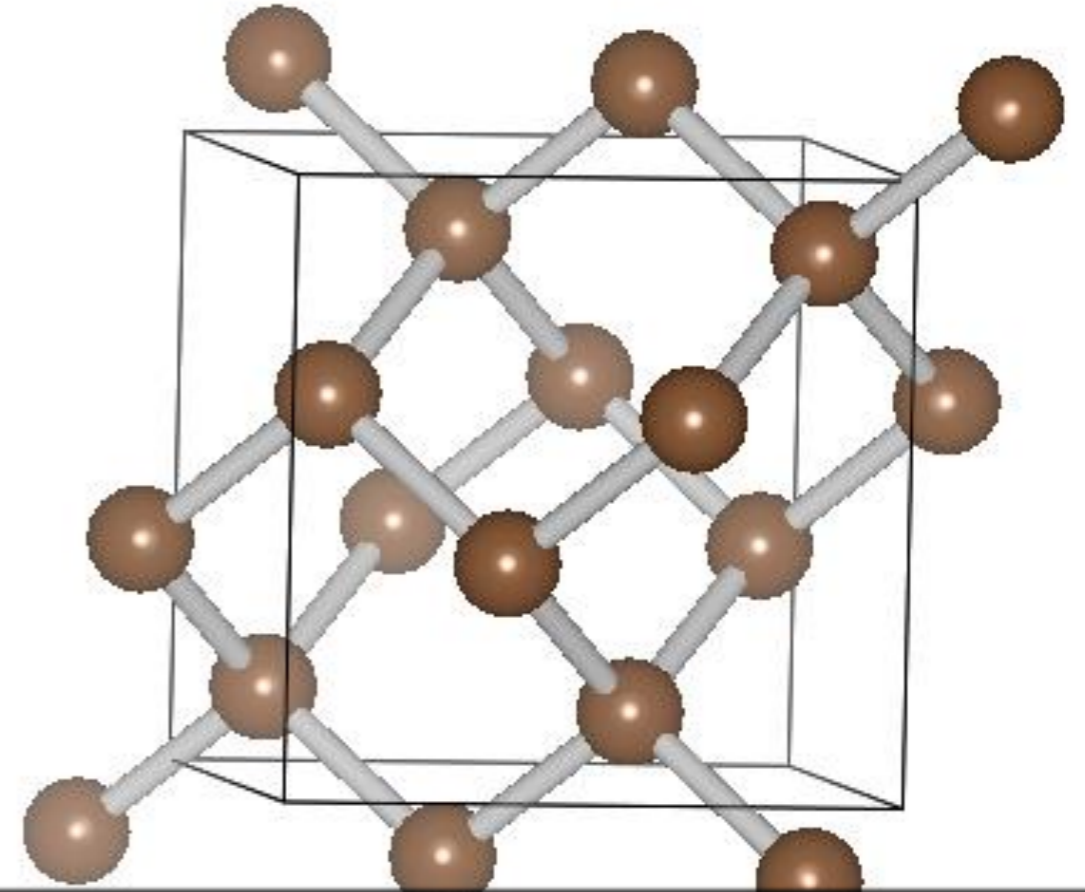
格子点を原子位置に一致

Non-Symmorphic Space Group

チヨイス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

チヨイス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 Oh⁷

Fd-3m:1

F 4d 2 3 -1d

x,y,z

-x+1/4,-y+1/4,-z+1/4

..

*227:2 Oh⁷

Fd-3m:2

-F 4vw 2vw 3

x,y,z

-y,x+1/4,z+1/4

..

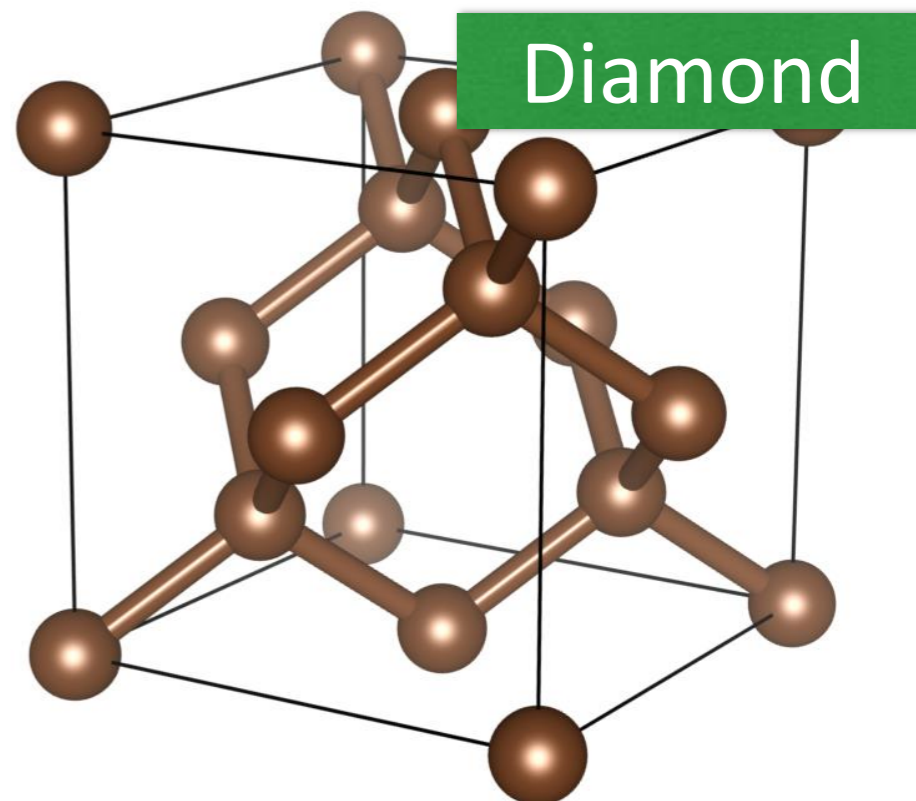
Spgroup

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

チョイス1



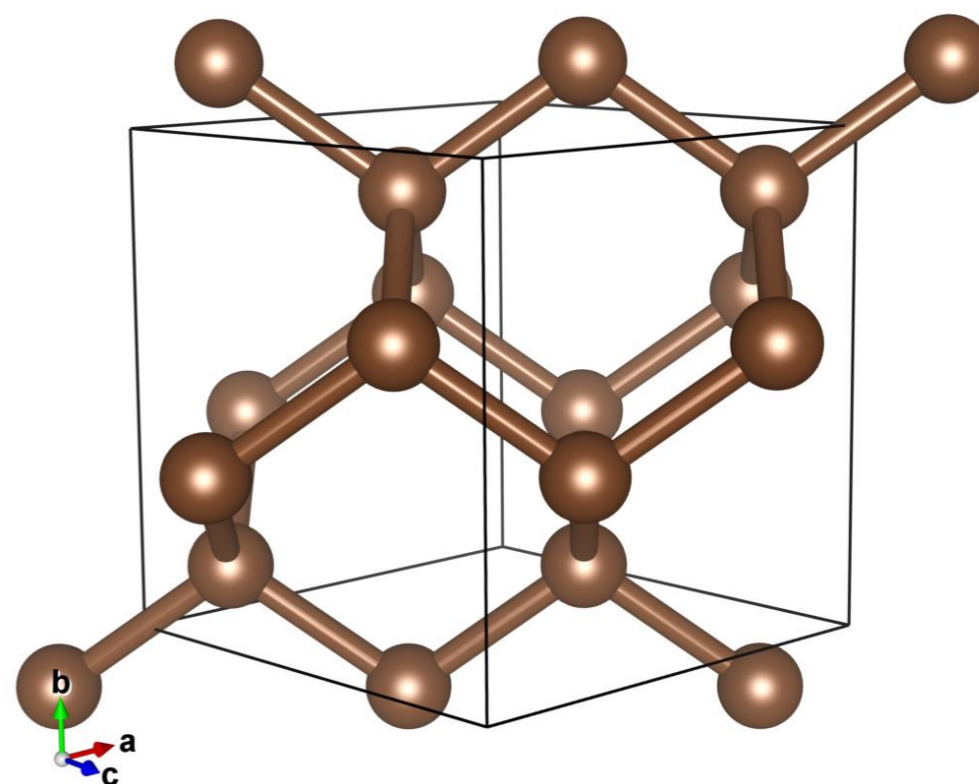
Spgroup

Fd-3m: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2



*) 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

Spgroup チョイス1,パターンA
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

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 チョイス1,パターンB
Fd-3m:1

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

チョイス1,パターンC

Spgroup
Fd-3m:1

Crystal

3.567 3.567 3.567 90. 90. 90.

| | | | |
|-----|------|------|------|
| 6.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 6.0 | 0.0 | 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出来ないの？

FDMNES には cif 入力の機能は実装されていますが、
使わない方が良いでしょう

意図していない構造で計算してしまう可能性があります

- 1) バグが多い (頻繁なアップデートで対処はしてくれています)
- 2) cif ファイルは様々なものがある
FDMNES が必要としている情報が書いてない cif もあります
- 3) occupation が 1.0 以外の場合はモデルの選択を自分で考えなくてはならない

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_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

cell parameter

_symmetry_space_group_name_H-M 'P 42/m n m'

_symmetry_Int_Tables_number 136

space group

_atom_site_type_symbol

Ti 1 0 0 0

Biso 0.42 Ti

O 1 0.3051(7) 0.3051(7) 0

Biso 0.60 O

元素名

x,y,z

占有率

!!! 簡単そうだ!!!

cif ファイル中でのチョイスの記述は？

Diamond

(Hall記号が併記していないcifがある)

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

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'

```

```

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'

```

+部分的並進操作

(Non-Symmorphic Space Group)

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

The screenshot shows the VESTA software interface. The 'Edit' menu is open, and the 'Unit Cell...' option is highlighted. The 'Structural models' panel is visible, showing 'Show models' checked and 'Ball-and-stick' selected as the style. The 'Volumetric data' panel is also visible, with 'Show sections', 'Show isosurfaces', and 'Surface coloring' unchecked, and 'Smooth shading' selected as the style. The main window displays a diamond crystal structure in a ball-and-stick representation within a unit cell.

Phase: 1

New structure

Diamond

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

Remove symmetry

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

対称性あり

Phase | Unit cell | Structure parameters | Volumetric data | Crystal shape

Diamond

Atomic displacement parameter Anisotropic: Isotropic:

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

x: y: z: Occ.:

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

U11: U22: U33:

U12: U13: U23:

| 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



Remove symmetry

対称性なし

| 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

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

U11: U22: U33: U12: U13: U23:

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

U11: 0.000000

U12: 0.000000

U12: 0.000000

U13: 0.000000

Fd-3m:1

Diamond

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

Remove symmetry

もし 8aサイトの代表選手以外も記述してしまったら

P1

| 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

重複してしまう
同じ座標を登録

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



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'

恒等操作のみ

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

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

空間群にチヨイスを含んだ 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

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



Python Framework

Atomic Simulation Environment

<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>

(FDMNES対応)

Python Framework+Tools

(構造以外にもFDMNESの各機能にもほぼ対応)

Structure Analysis Environment (仮)

(K.NAKADA/JASRI)

- 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

pyFDMNES

Python Framework

<http://www.desy.de/2011summerstudents/2013/reports/weigel.pdf.gz>

<https://github.com/tinaw/pyFDMNES>

Winmostar (商用)

<https://winmostar.com/jp/>

モデリングソフト

pyFDMNES の使用例

- 1) numpy, PyCifRW が必要
- 2) setup.cfg を編集(fdmnes_path)
- 3) python setup.py install

```
import fdmnes
import os

# BaTiO3_Pm3-m
sim = fdmnes.fdmnes("2100863.cif")

Sim.P.Absorber = ('2')
sim.P.Range = (-15, 0.5, 50)
sim.P.radius = 4.0
sim.P.Rpotmax = 8.50
sim.P.Green = True
sim.P.cartesian = False

sim.WriteInputFile("inp.txt", overwrite=True)
```

cif には space group の情報が必要

```
sim.P = Paramters()
```

inp.txt 作成までの例

pyFDMNES の使用例

計算してプロット

```
import fdmnes
import matplotlib.pyplot as plt

sim = fdmnes.fdmnes("2100863.cif")

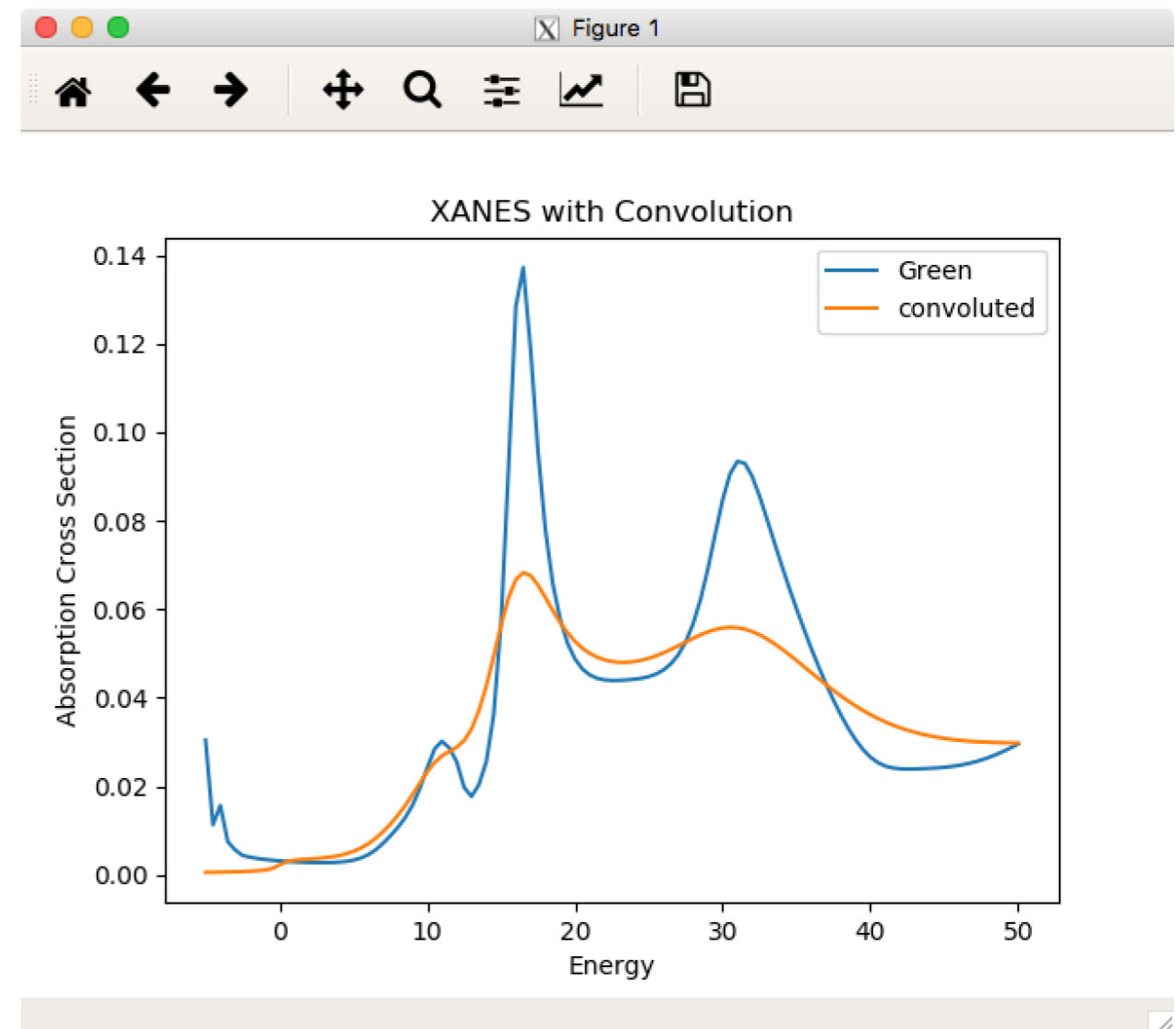
sim.P.Absorber = ('2')
sim.P.Range = (-5, 0.5, 50)
sim.P.radius = 4.0
sim.P.Green = True
sim.P.cartesian = False

sim.WriteInputFile("inp.txt", overwrite=True)

sim.Run(wait=True)
sim.Status()
data = sim.get_XANES()
plt.plot (data[:,0], data[:,1], label="Green")

sim.DoConvolution(overwrite=True)
sim.Status()
data_conv = sim.get_XANES(conv=True)
plt.plot (data_conv[:,0], data_conv[:,1], label="convoluted")

plt.title("XANES with Convolution")
plt.xlabel("Energy")
plt.ylabel("Absorption Cross Section")
plt.legend(loc = 1)
plt.show()
```



基本出力ファイルの解説
-Photonenergy を軸とする-

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:\ca\Cu> cat .\Cu_bav.txt | Select-String E_edge
E_edge = 8979.00 eV,
PS C:\ca\Cu>
```

2016.06.02 版から
エネルギーの軸が $E_{F0} = E - E_F$ として設定されている \cong Fermi Level

Photonenergy を軸とするには $E_{F0} + \text{Edge Energy}$
Edge エネルギーはFDMの計算ではない。内部テーブル。

横軸を Photon Energy 表示する

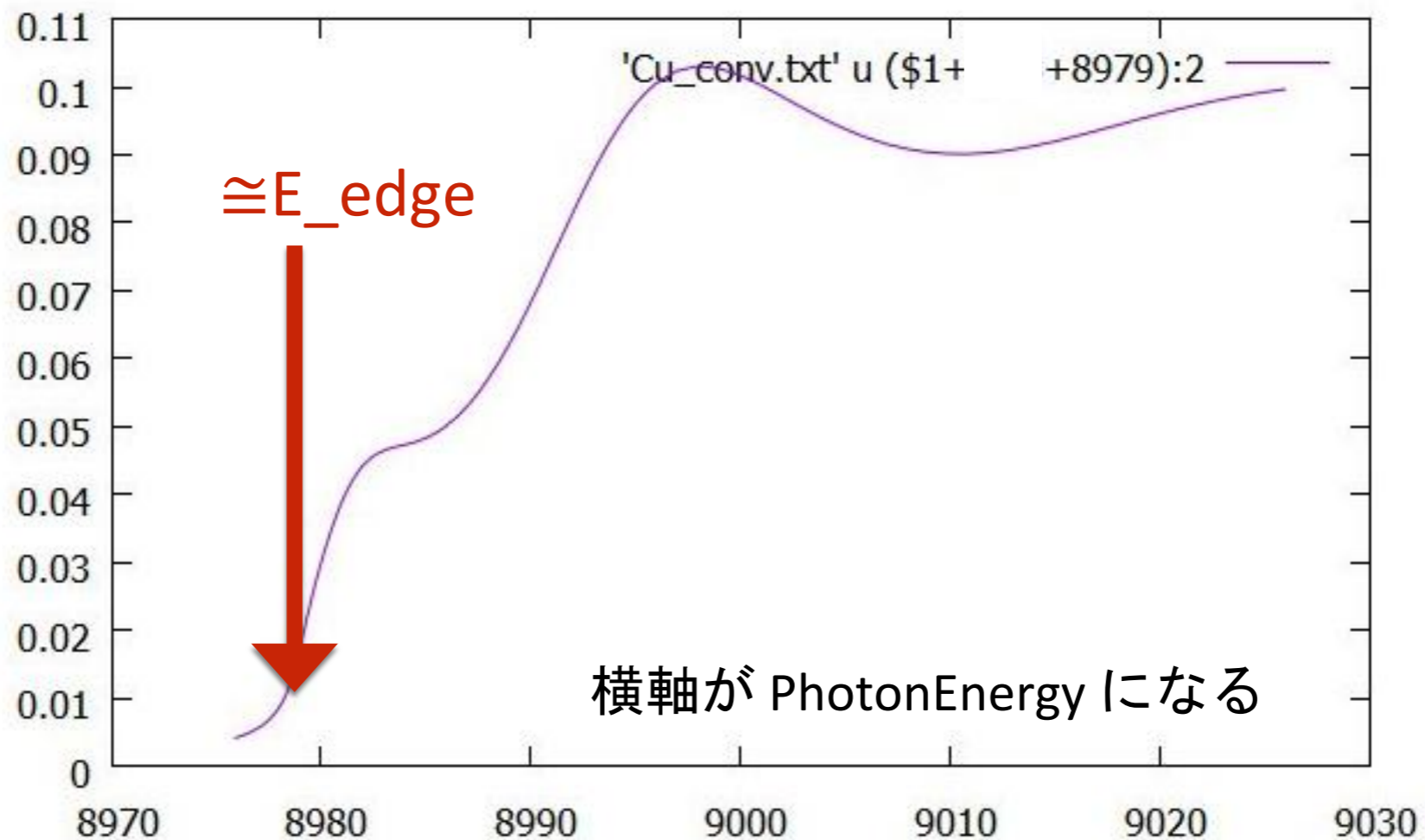
一行目に 8979 を加える

1) wgnuplot

コロン
スペース

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

```
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt' u ($1 +8979):2 w l
gnuplot> _
```



3) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる

計算結果そのものを Photonenergy で書き出す

Filout

Cu

Range

-1. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50.

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

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

Cu (Photonenergy)計算準備

スペース

- (1) `cd %cal`
- (2) `mkdir Cu_energpho`
- (3) `cd Cu_energpho`

(4) `cp ../%Cu%fdmfile.txt.`

(5) `cp ../%Cu%inp.txt.`

(6) `start inp.txt` (入力ファイル編集)

計算のホームへ移動

Cu_energpho 作業ディレクトリ作成

Cu_energpho 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%Cu_energpho> dir

ディレクトリ: C:%cal%Cu_energpho

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a----            2019/01/23   13:38           1174 fdmfile.txt
-a----            2019/02/18   16:20           262 inp.txt

PS C:%cal%Cu_energpho>
```

Cu_conv.txt の編集

スペース
↓
start □ ¥Cu_conv.txt

コメントアウト
(最初の1行)

Visual Studio Code

選択(S) 表示(V) 移動(G) デバッグ(D) ターミナル(T) ヘルプ(H)

```
av.txt  inp.txt  Cu_conv.txt C:\...\Cu_energpho x  Cu_conv.txt C:\...\2016_0
# Energy <xanes>
8978.00 1.0544122E-02
8978.20 1.2055813E-02
8978.40 1.3994943E-02
8978.60 1.6467896E-02
8978.80 1.9516534E-02
8979.00 2.3011998E-02
8979.20 2.6629381E-02
8979.40 3.0015086E-02
```

gnuplot

ファイル(F) プロット(P) 表現(E) 関



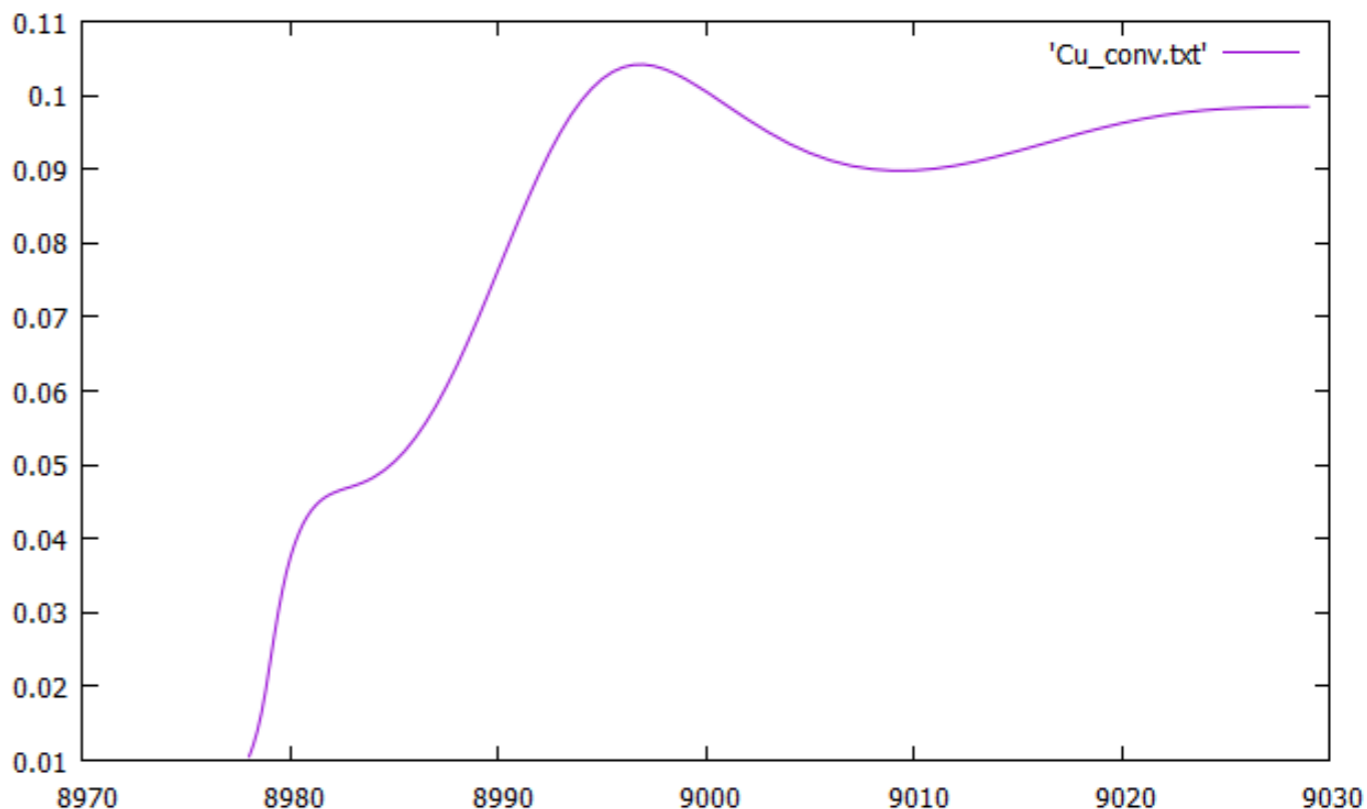
```
GNUPLOT
Version 5.2 patchlevel 6

Copyright (C) 1986-1993,
Thomas Williams, Colin Ke

gnuplot home: http://
faq, bugs, etc: type "h
immediate help: type "h
```

```
terminal type is now 'wxt'
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt' w l
gnuplot>
```

Gnuplot (window id : 0)



9027.46 0.0769741

スペクトルのプロット

1) wgnuplot

2) plot □ 'Cu_conv.txt' □ w □ l

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

ct - Visual Studio Code

編集(E) 選択(S) 表示(V) 移動(G) デバッグ(D) ターミナル(T) ヘルプ(H)

☰ Cu.txt ×

```
1 # 8979.000 29 1 1 1.5099232E-02 -6.5107875E+00 0.0000000E+00 1 1
  9.1565197E+03 4.7045881E+01 0.0000000E+00 9.0366095E-01 4.0000000E+00
  0.0000000E+00 = E_edge, Z, n_edge, j_edge, Abs_before_edge, VO_interstitial, E_c
  ninit1, ninit1, Epsii, UnitCell_Volume, Surface_ref, f0_forward, natomsym_f,
  abs_u_i
```

```
2 # Energy <xanes>
3 -1.00000 2.2389267E-02
4 -0.80000 2.4996353E-02
5 -0.60000 2.7615693E-02
6 -0.40000 3.0228930E-02
7 -0.20000 3.2806473E-02
```

名前を付けて上書き保存

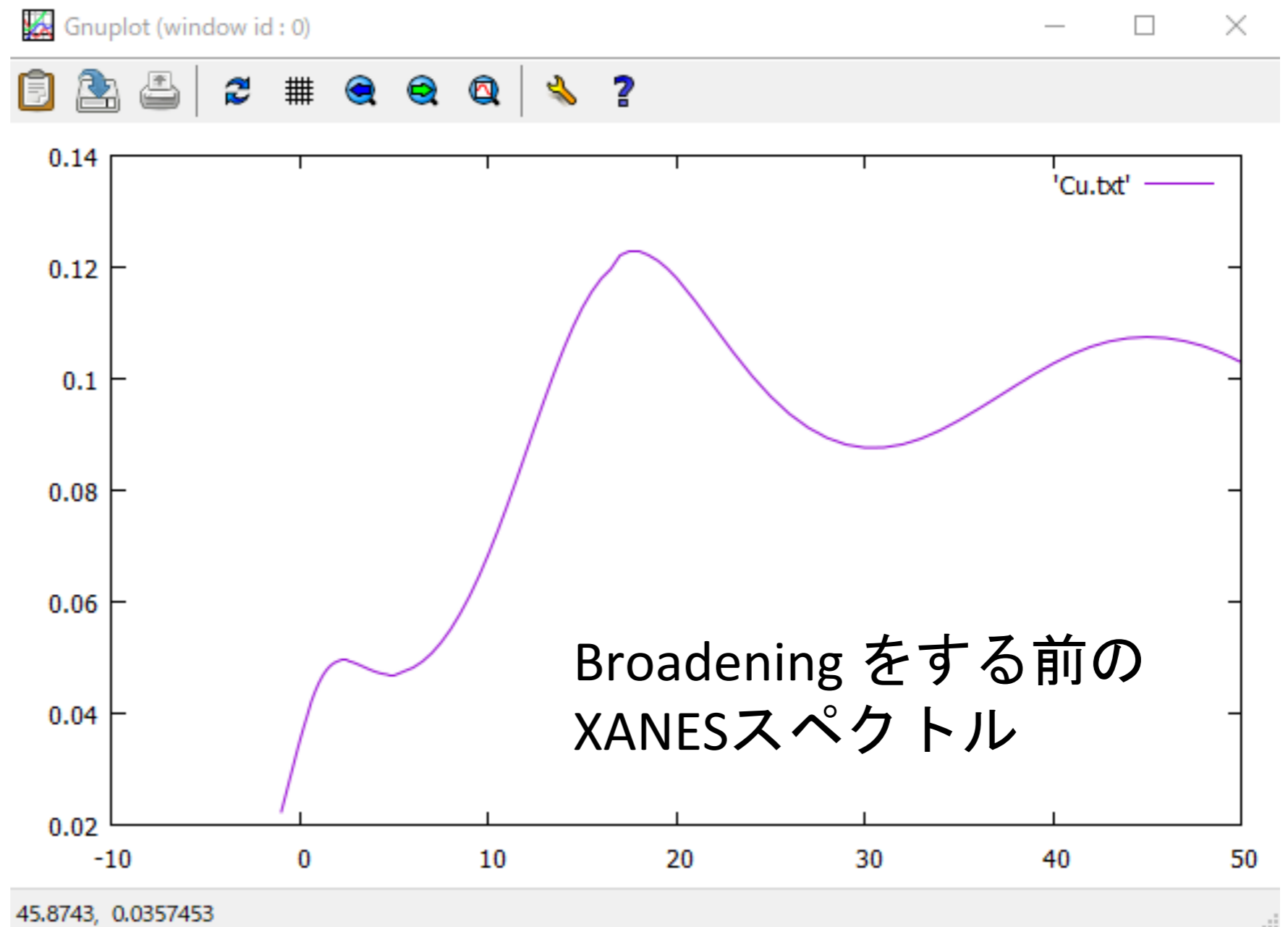
Broadening をする前のスペクトルをプロットする

1) wgnuplot

スペース

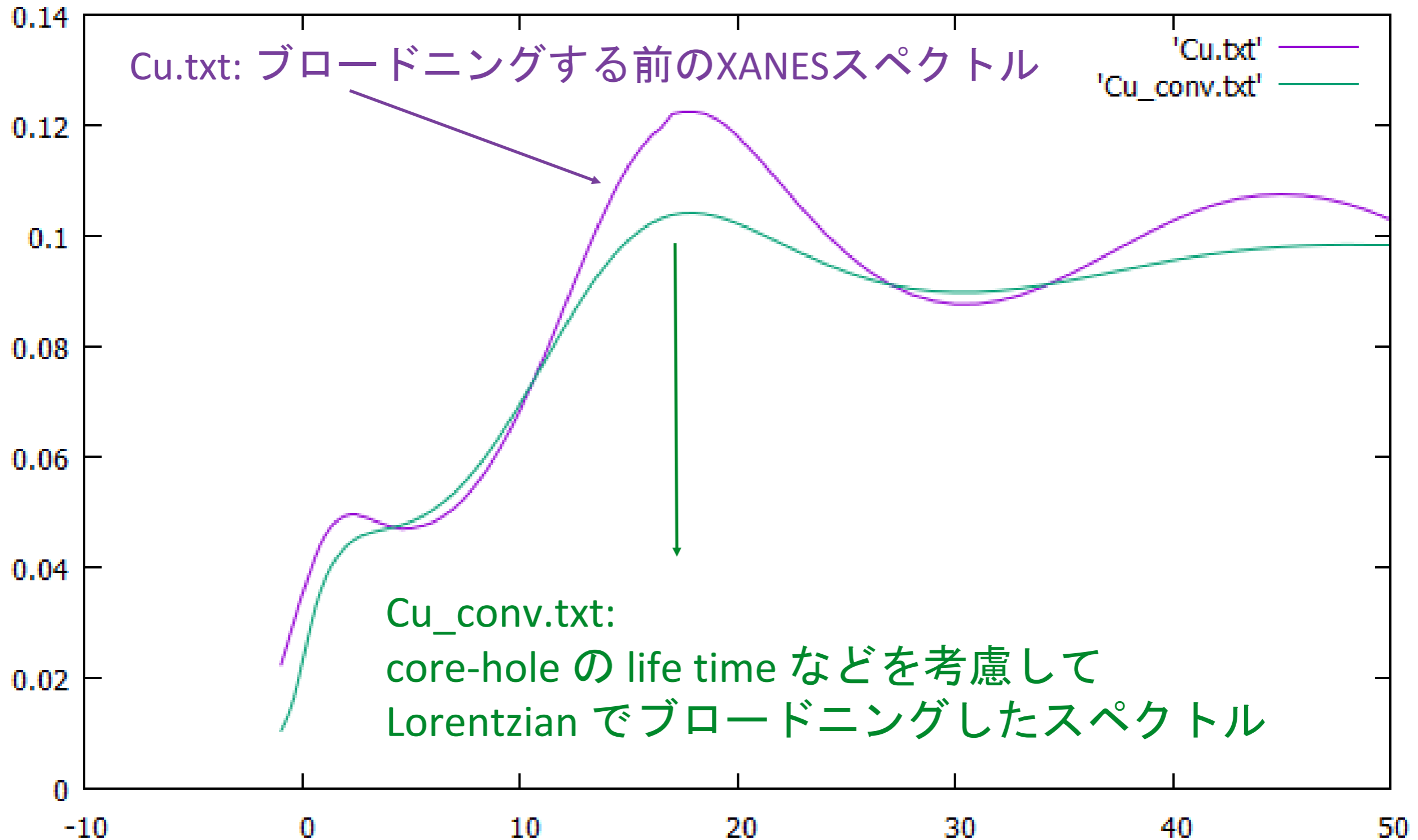
2) plot 'Cu.txt' w

Cu.txt をプロットする



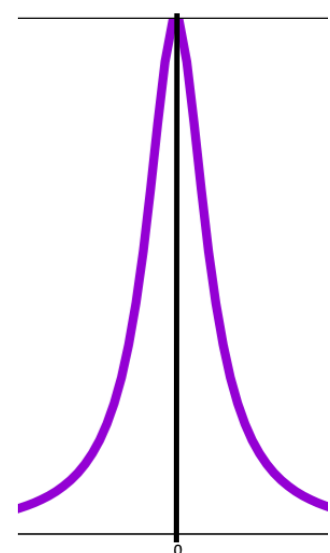
カンマで区切ることにより複数のデータをプロット

スペース
3) plot 'Cu.txt' w l , 'Cu_conv.txt' w l



4) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる

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

Lorentzian 型

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

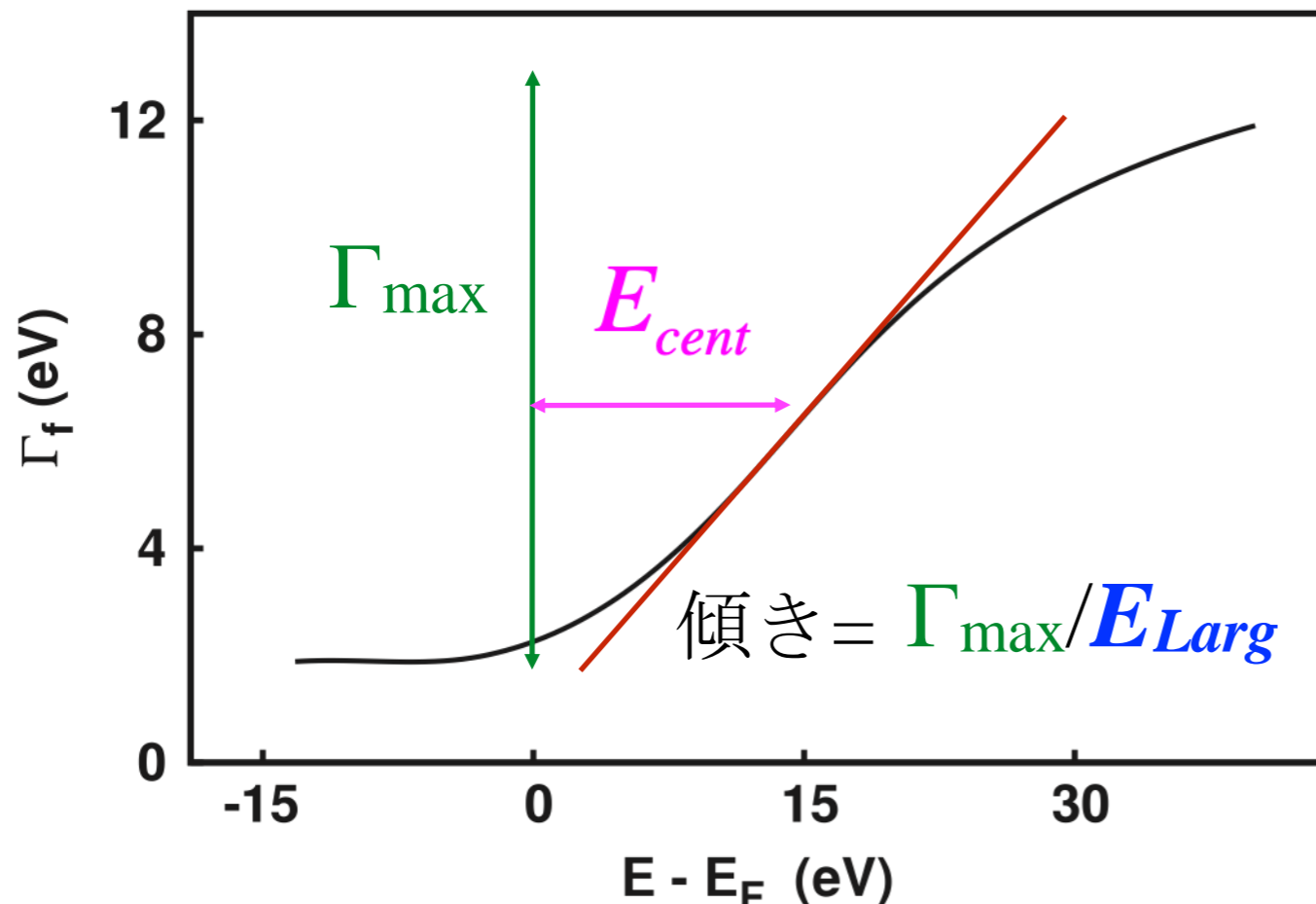
$$\Gamma_f(E - E_F) = \Gamma_{\text{Hole}} + \Gamma_{\text{max}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{\pi}{3} \frac{\Gamma_{\text{max}}}{E_{\text{Larg}}} \left(e - \frac{1}{e^2} \right) \right) \right)$$

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

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

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

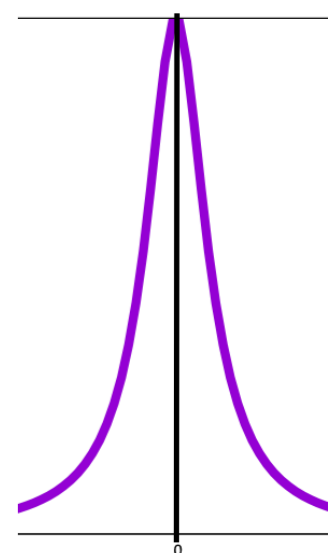
E_{cent} arctangent の中心

E_{fermi} Fermi Level

Appendix

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

Lorentzian 型

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

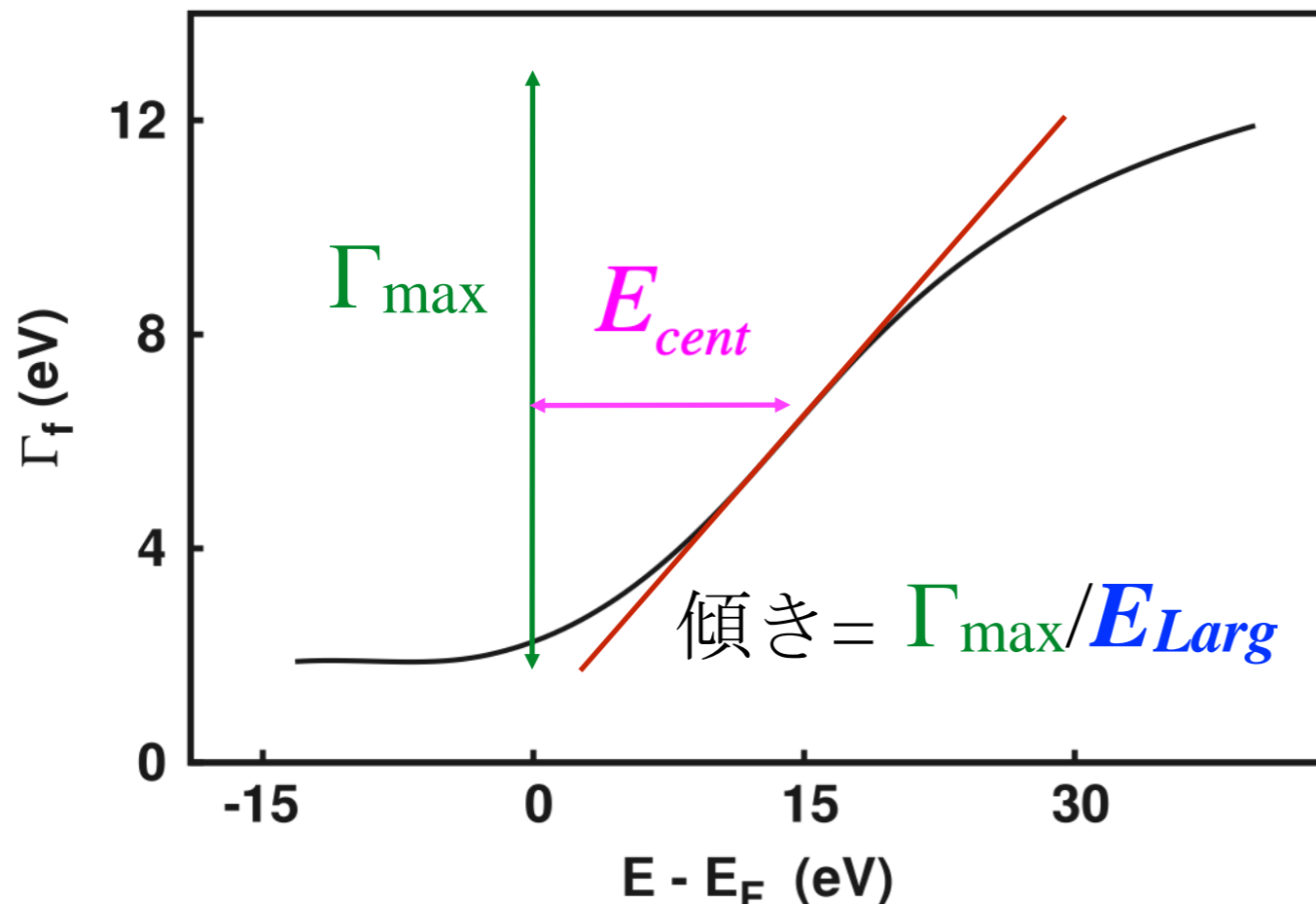
$$\Gamma_f(E - E_F) = \Gamma_{\text{Hole}} + \Gamma_{\text{max}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{\pi}{3} \frac{\Gamma_{\text{max}}}{E_{\text{Larg}}} \left(e - \frac{1}{e^2} \right) \right) \right)$$

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

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

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

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

End

convolution 畳み込みをする

出力

Cu.txt
Cu_bav.txt
Cu_conv.txt

inp.txt
fdmfile.txt
spacegroup.txt
xsect.dat

core-hole の life time などを考慮

アーケタンジェント型の 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 パラメータを確認

1) `Select-String Gamma_*.txt`

(Gamma 値を検索)

```
Windows PowerShell
PS C:\¥ca\¥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:\¥ca\¥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
↓ ↓
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

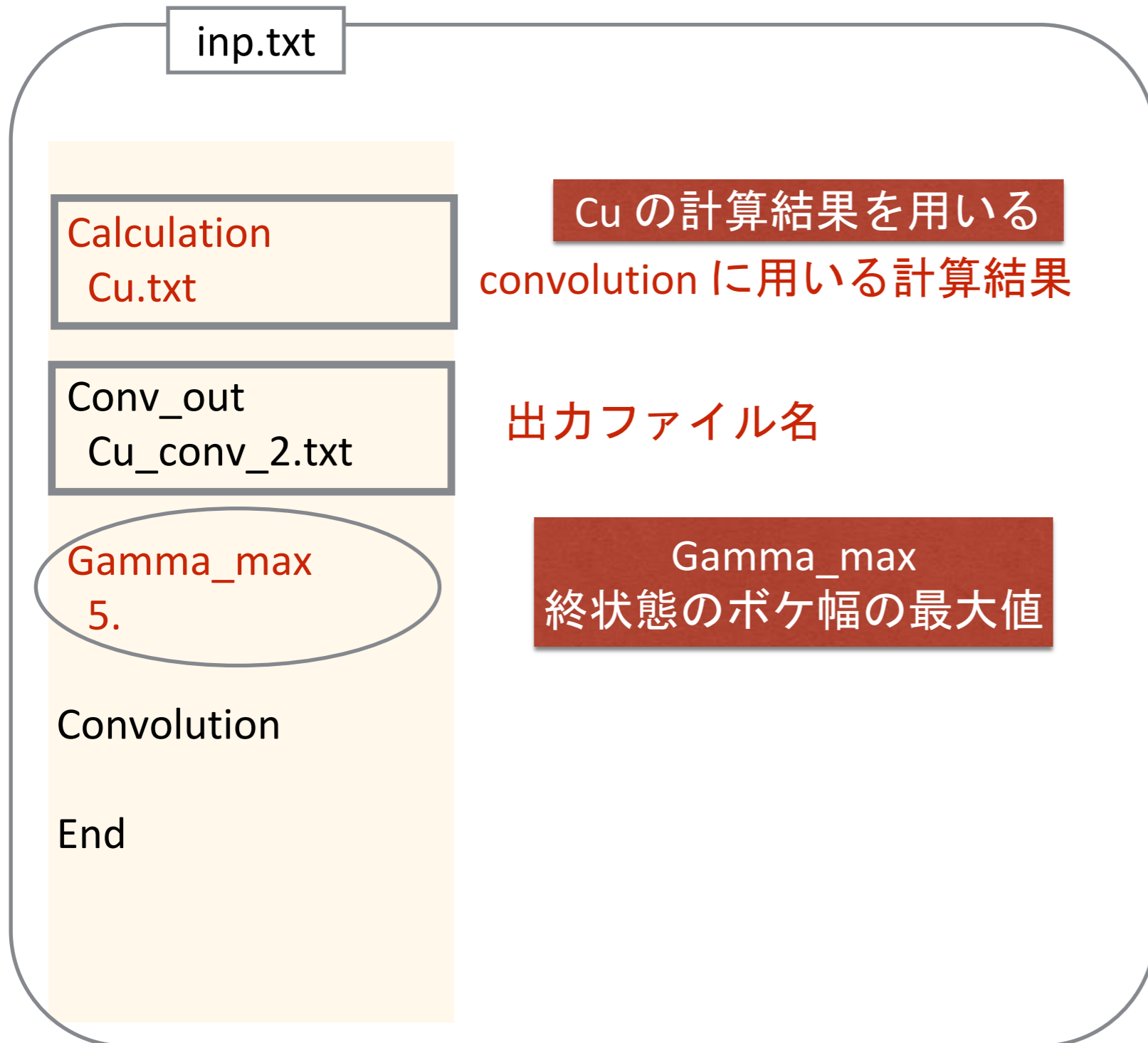
計算に必要な基本ファイルのコピー

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

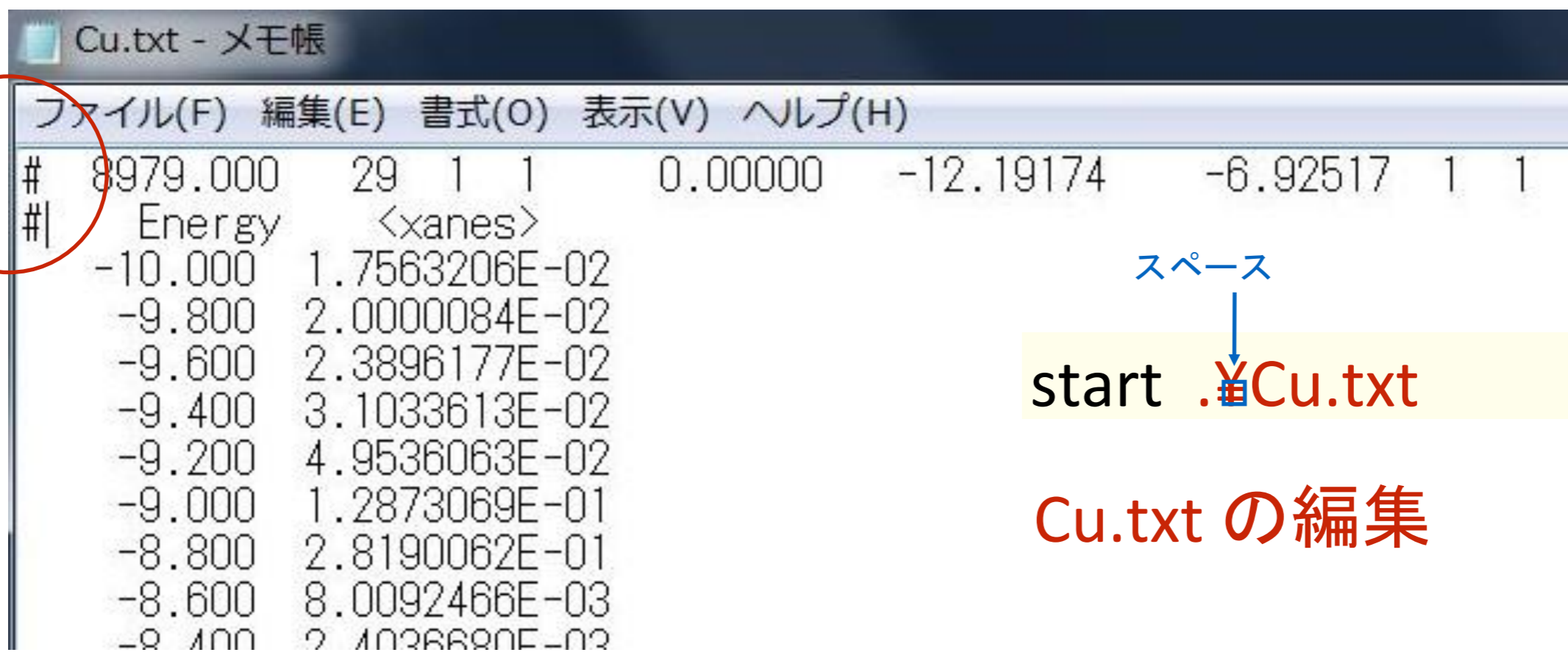
スペース
↓
start □.¥inp.txt

inp.txt の編集



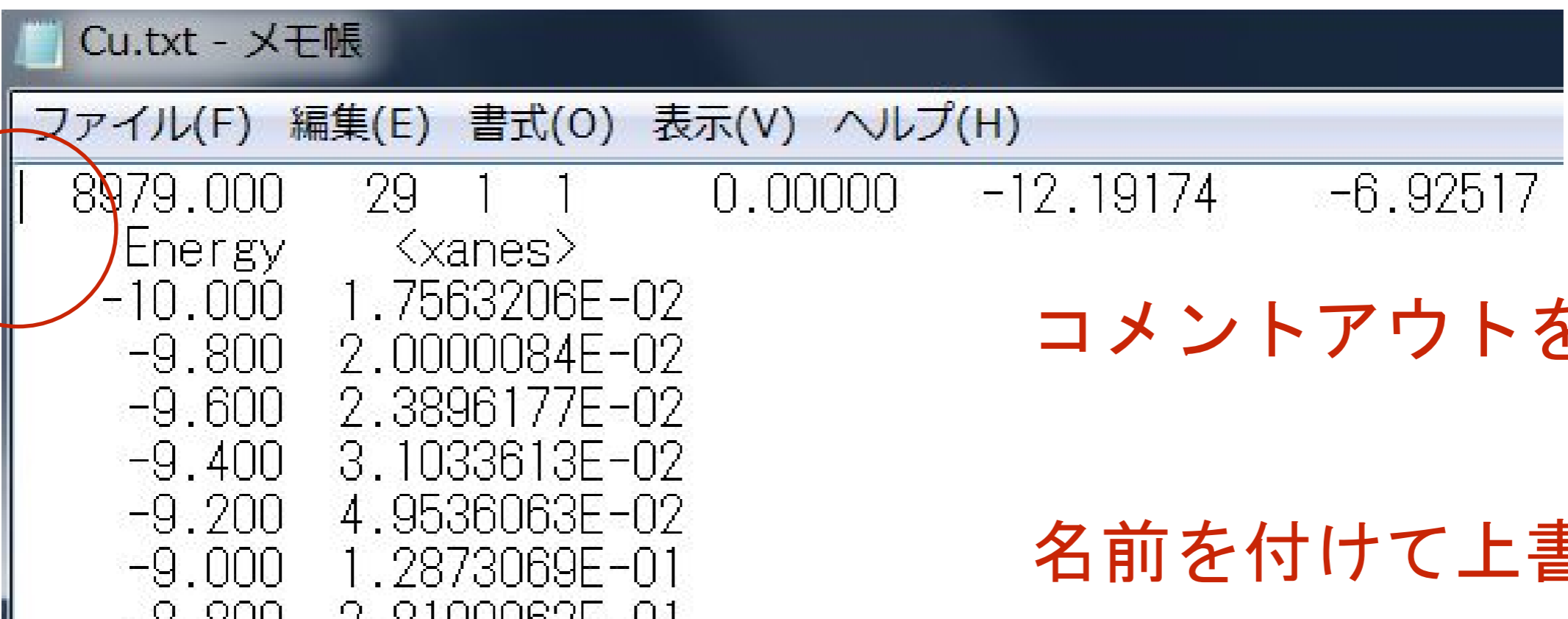
入力に必要な値はこれだけです
それ以外は消してください

GNUPLOT用にコメントアウトしていた Cu.txt を元に戻す



```
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 2.1026680E-02
```

スペース
↓
start . Cu.txt
Cu.txt の編集



```
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
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 2.1026680E-02
```

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:\¥ca\¥Cu¥ReConvolution> ls

ディレクトリ: C:\¥ca\¥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:\¥ca\¥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:\ca\Cu\ReConvolution> ls

ディレクトリ: C:\ca\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:\ca\Cu\ReConvolution>
```



Cu_conv_2.txt

'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)

```
# 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

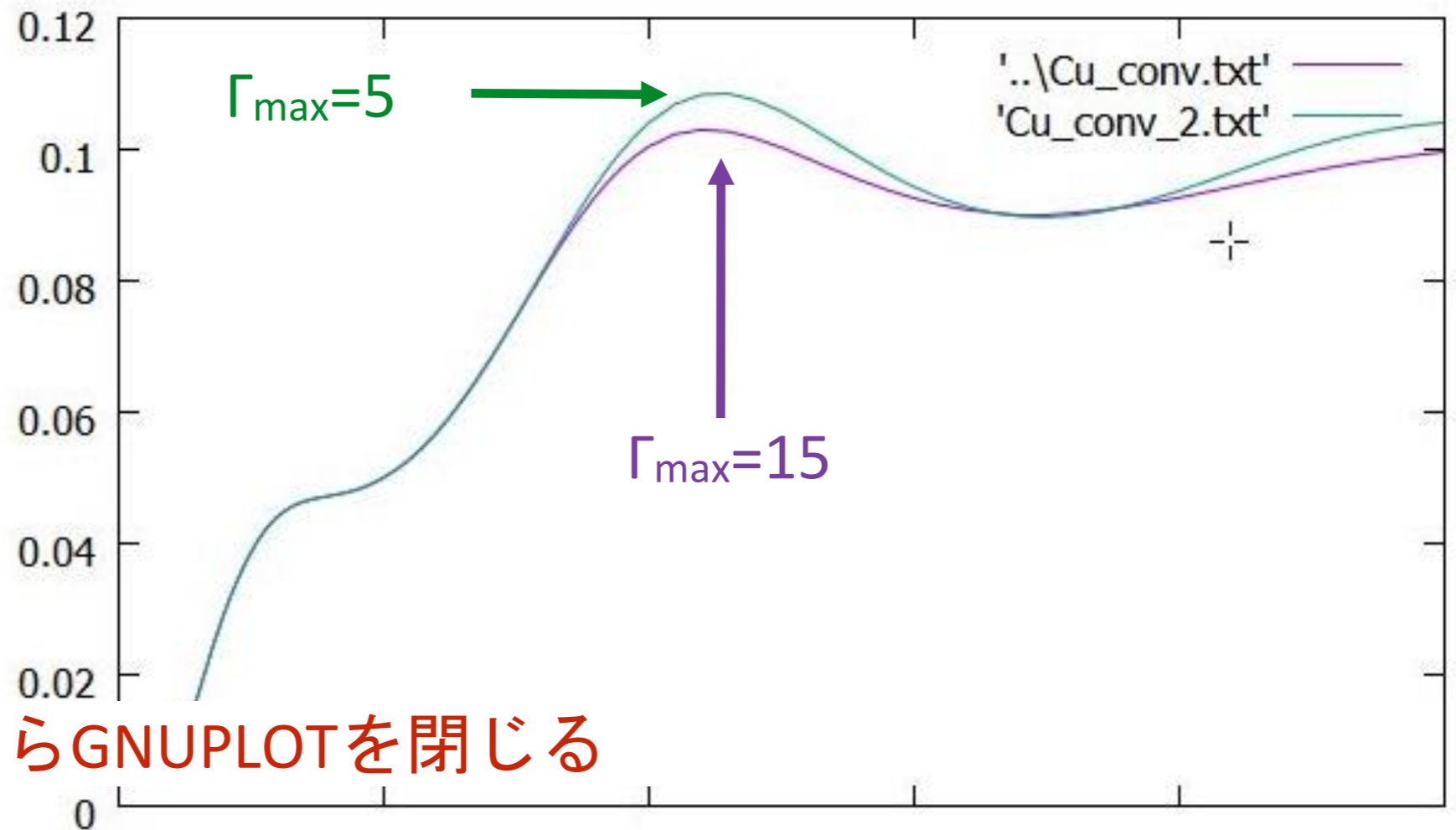
1) wgnuplot

2) `plot 'Cu_conv_2.txt' w l, '..\Cu_conv.txt' w l`

スペース 一つ上のディレクトリ
スペース カンマ

```
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

Γ_{\max} を変化

(Γ_{hole} は固定値)

後半部分のスペクトルの変化

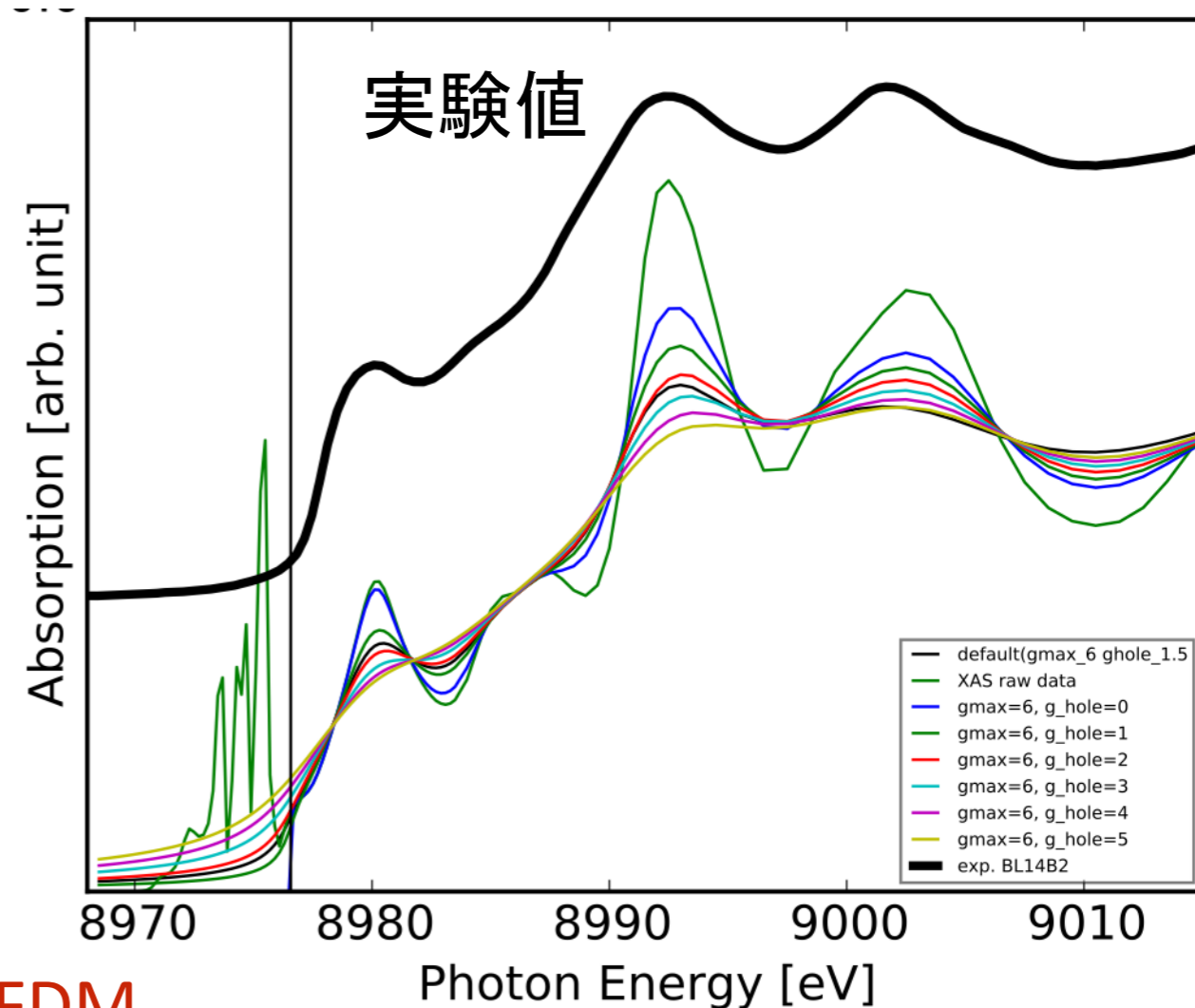
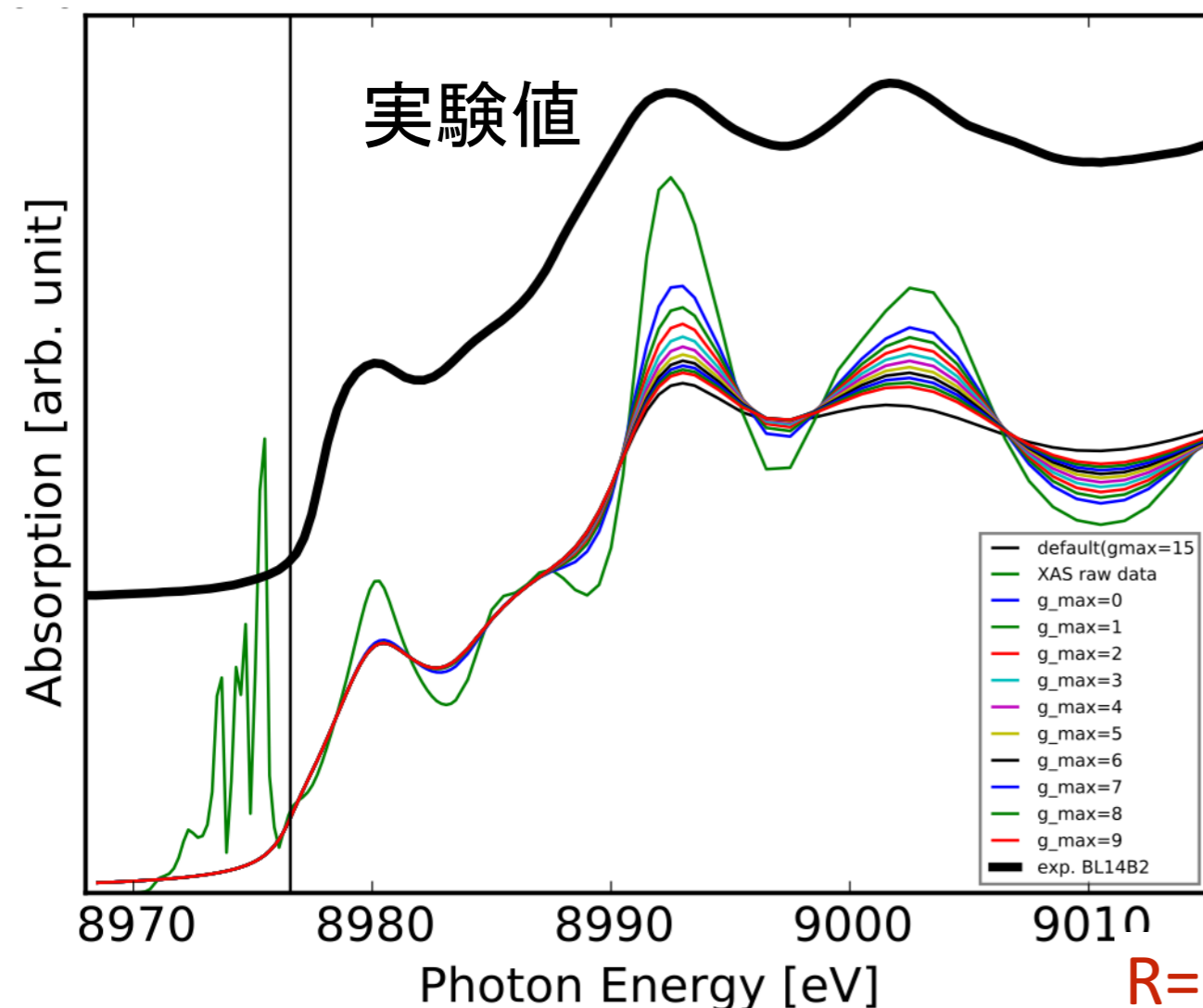
$\Gamma_{\max} = 15.0$ 固定

$\Gamma_{\text{hole}} = 1 \sim 5$ 変化

(Γ_{\max} は規定値のまま)

Γ_{hole} を変化

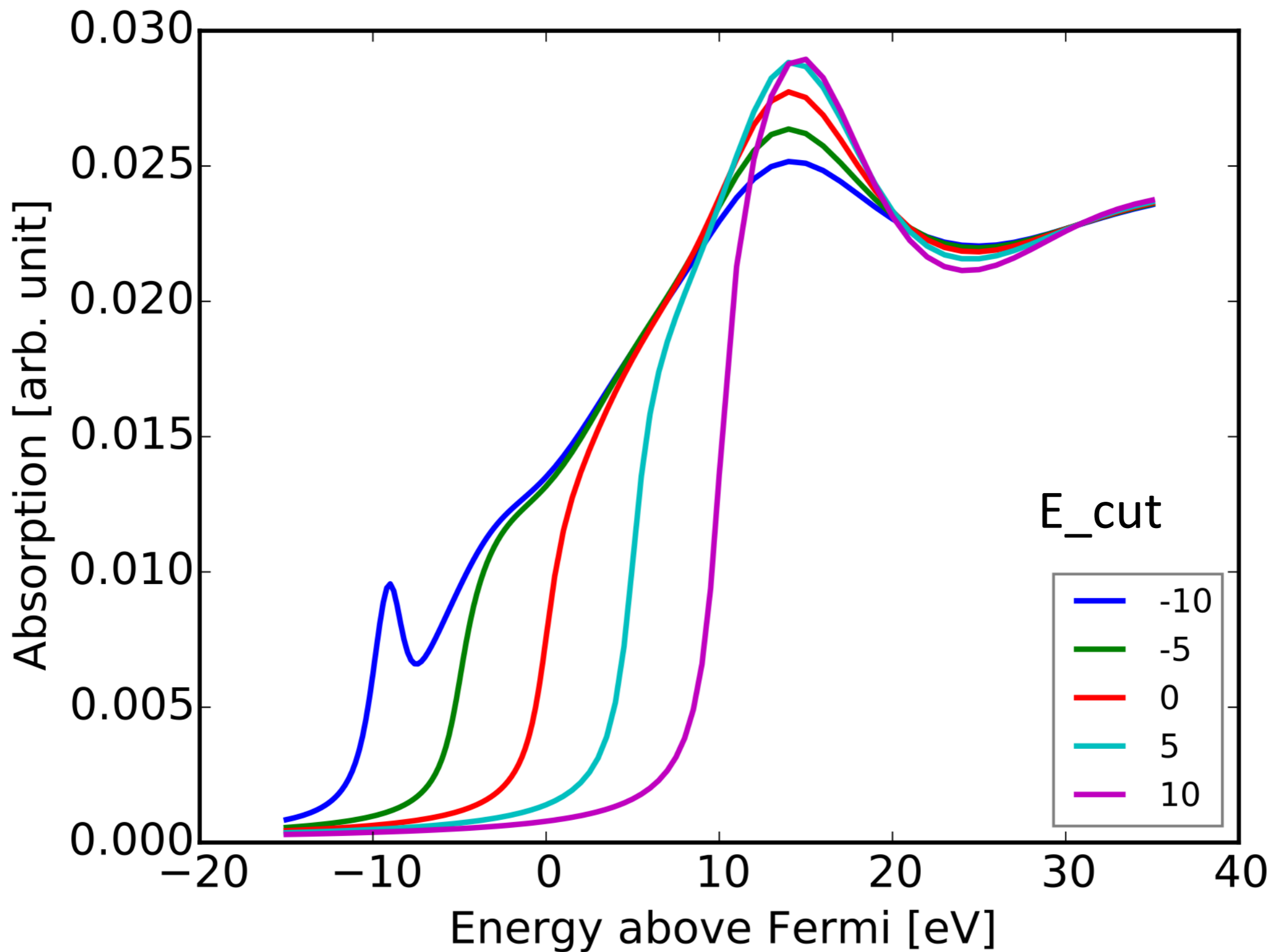
全体的なスペクトルのボカシ



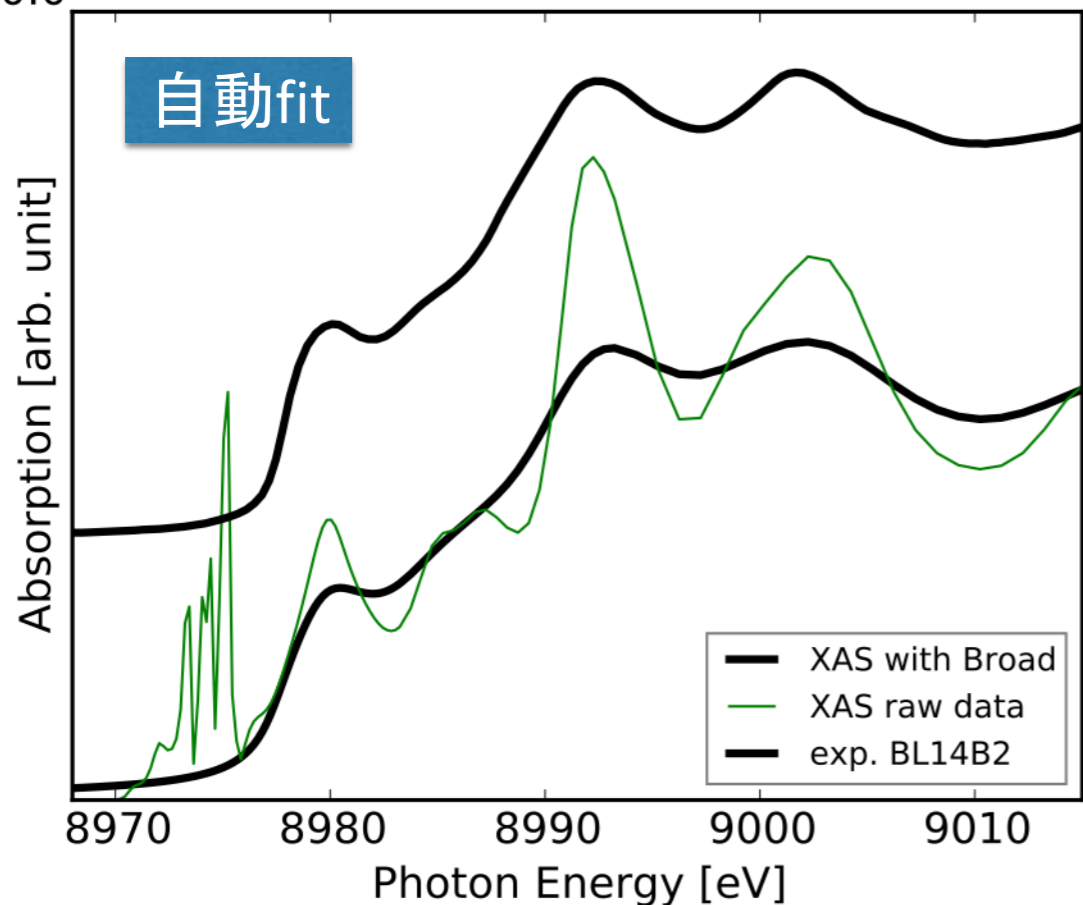
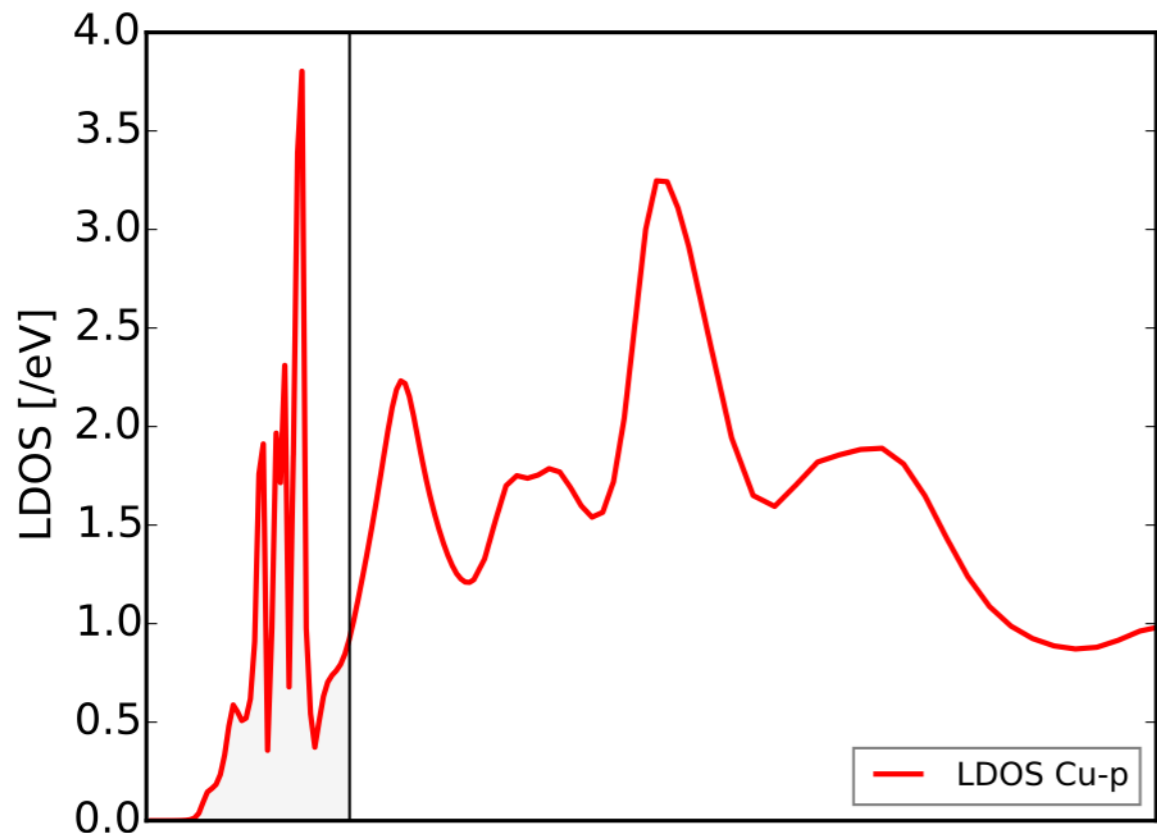
Convolution パラメーターの実験値へのフィット

FCC Cu
green R4

E_{cut} (旧 E_{fermi}) を変更すると
convolution 後の結果が変わる



convolution パラメータを
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}

化合物の計算実習

-Cu₂O の計算例-

スペース

- (1) `cd ¥cal`
- (2) `mkdir ¥Cu2O`
- (3) `cd ¥Cu2O`
- (4) `cp ¥..¥Cu¥fdmfile.txt ¥.`
- (5) `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¥Cu2O> ls

ディレクトリ: C:¥cal¥Cu2O

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---              2016/01/01   10:20     1046 fdmfile.txt
-a---              2016/01/01   10:46      958 inp.txt

PS C:¥cal¥Cu2O>
```

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
└── Cu20
    ├── Cu20.txt
    ├── Cu20_bav.txt
    ├── Cu20_conv.txt
    ├── fdmfile.txt
    └── inp.txt

PS C:\¥cal\¥Cu>
```

計算用ディレクトリ(¥cal)の下
Cu と同じ階層に Cu20 ディレクトリ

Cu20 ディレクトリの下に



計算には2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
-1. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50.

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

Energpho は消す(今後はEFOで)

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 -5. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50. → K-edge

Edge K → クラスタ半径5.0

Radius 5.0 → FMS(Full multiple scattering)で計算 (Muffin-tin 近似)

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

```
Crystal
 4.2676 4.2676 4.2676 90.0 90.0 90.0
29 0.00 0.00 0.00 !Cu
29 0.50 0.50 0.00 !Cu
29 0.50 0.00 0.50 !Cu
29 0.00 0.50 0.50 !Cu
 8 0.25 0.25 0.25 !O
 8 0.75 0.75 0.75 !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)

吸収原子を一番目の原子とする

Absorber
1

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

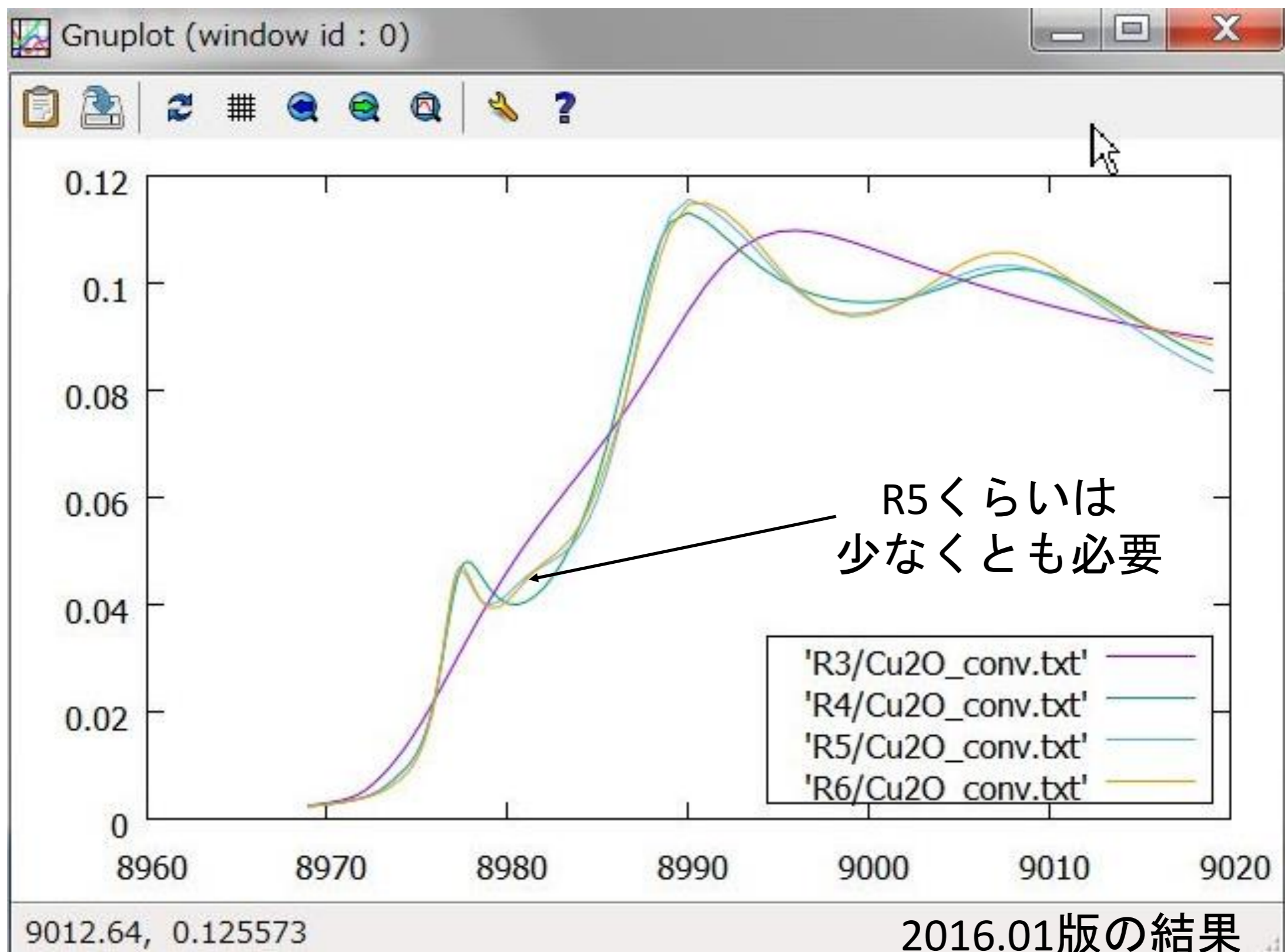
29 0.0000 0.5000 0.5000 ! Cu

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)) での計算

```
Windows PowerShell
PS C:\¥ca\¥Cu20> 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 Cu20.txt
-a---                2016/01/02          13:06       1348662 Cu20_bav.txt
-a---                2016/01/02          13:07         2755 Cu20_conv.txt
-a---                2016/01/01          10:20         1046 fdmfile.txt
-a---                2016/01/02          13:06          495 inp.txt
```

```
PS C:\¥ca\¥Cu20>
```

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)

_conv.txt - Visual Studio Code

編集(E) 選択(S) 表示(V) 移動(G) デバッグ(D) ターミナル(T) ヘルプ(H)

Cu2O.txt

Cu2O_conv.txt ✕

| 1 | # | Energy | <xanes> |
|---|---|----------|---------------|
| 2 | | -5.00000 | 2.2964607E-03 |
| 3 | | -4.80000 | 2.3518105E-03 |
| 4 | | -4.60000 | 2.4101182E-03 |
| 5 | | -4.40000 | 2.4716499E-03 |
| 6 | | -4.20000 | 2.5367073E-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)

txt - Visual Studio Code

編集(E) 選択(S) 表示(V) 移動(G) デバッグ(D) ターミナル(T) ヘルプ(H)

Cu2O.txt ✕

Cu2O_conv.txt

| | | | | | | | | |
|---|---|---------------|--|---------------|---------------|---------------|----------------|---|
| 1 | # | 8979.000 | 29 | 1 | 1 | 1.5499438E-02 | -4.6366957E+00 | (|
| | | 9.1562607E+03 | 7.7723280E+01 | 0.0000000E+00 | 1.0289280E+00 | | | |
| | | 0.0000000E+00 | = E_edge, Z, n_edge, j_edge, Abs_before, | | | | | |
| | | | ninit1, ninit1, Epsii, UnitCell_Volume, Surface_ref, | | | | | |
| | | | abs_u_i | | | | | |

| 2 | # | Energy | <xanes> |
|---|---|----------|---------------|
| 3 | | -5.00000 | 1.1853009E-01 |
| 4 | | -4.80000 | 2.1295281E-02 |
| 5 | | -4.60000 | 2.0980681E-02 |
| 6 | | -4.40000 | 1.5678094E-03 |
| 7 | | -4.20000 | 1.2846067E-03 |

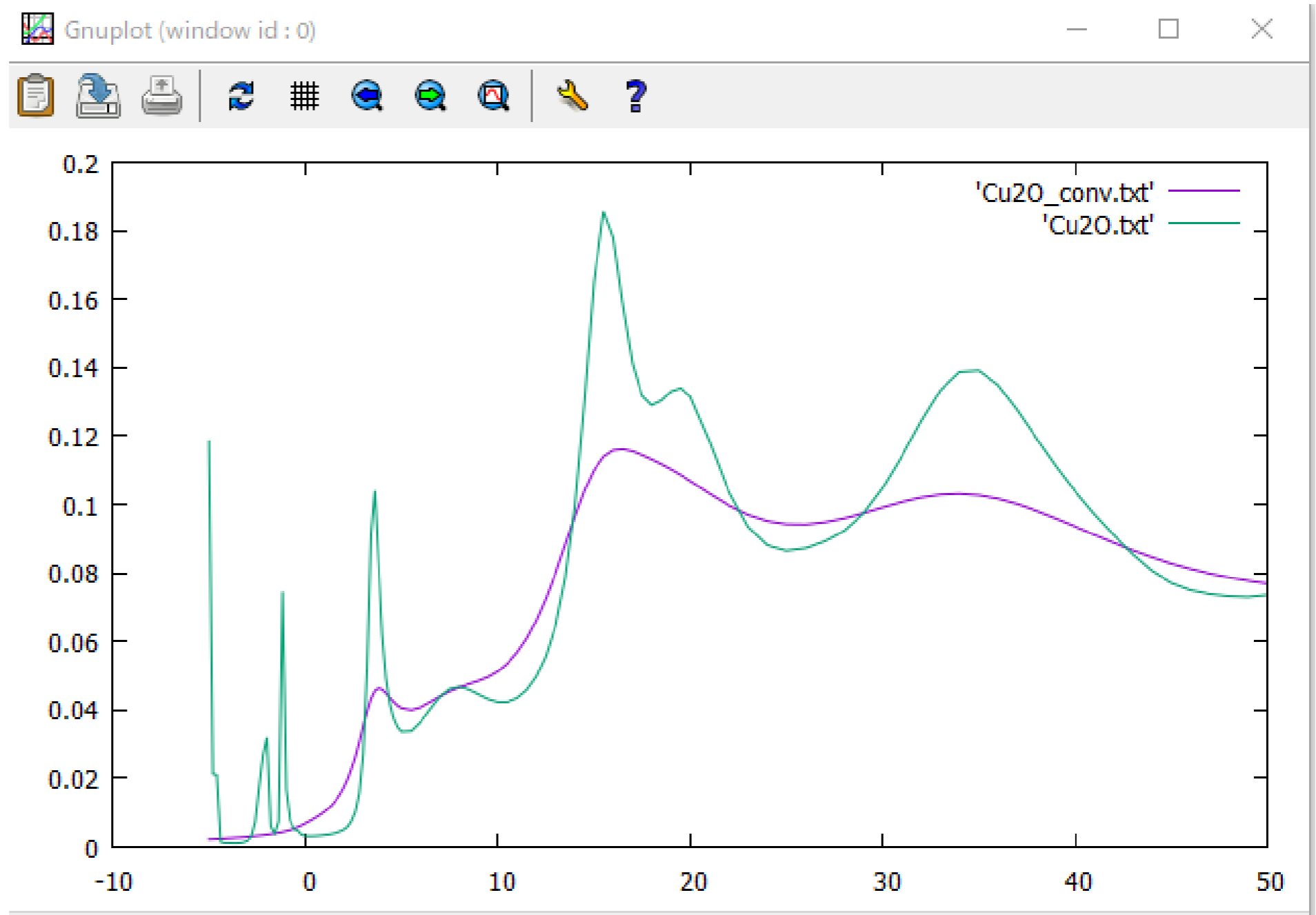
Cu2O のXANESスペクトルのプロット

1) wgnuplot

スペース

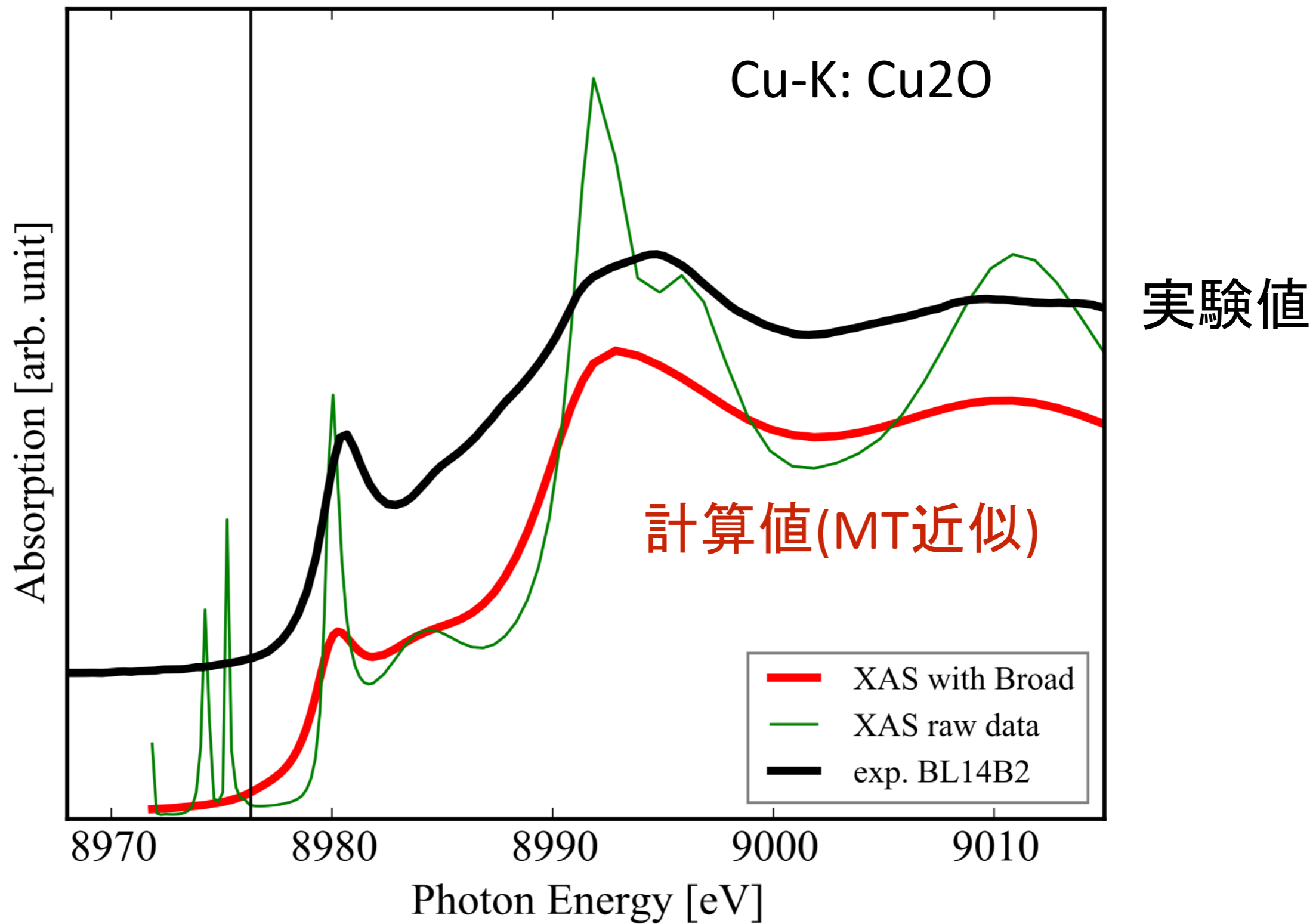
スペースカンマ

2) plot 'Cu2O_conv.txt' w l, 'Cu2O.txt' w l



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

-スペクトルの起源-

-Cu₂O の計算例-

XANES スペクトルの起源

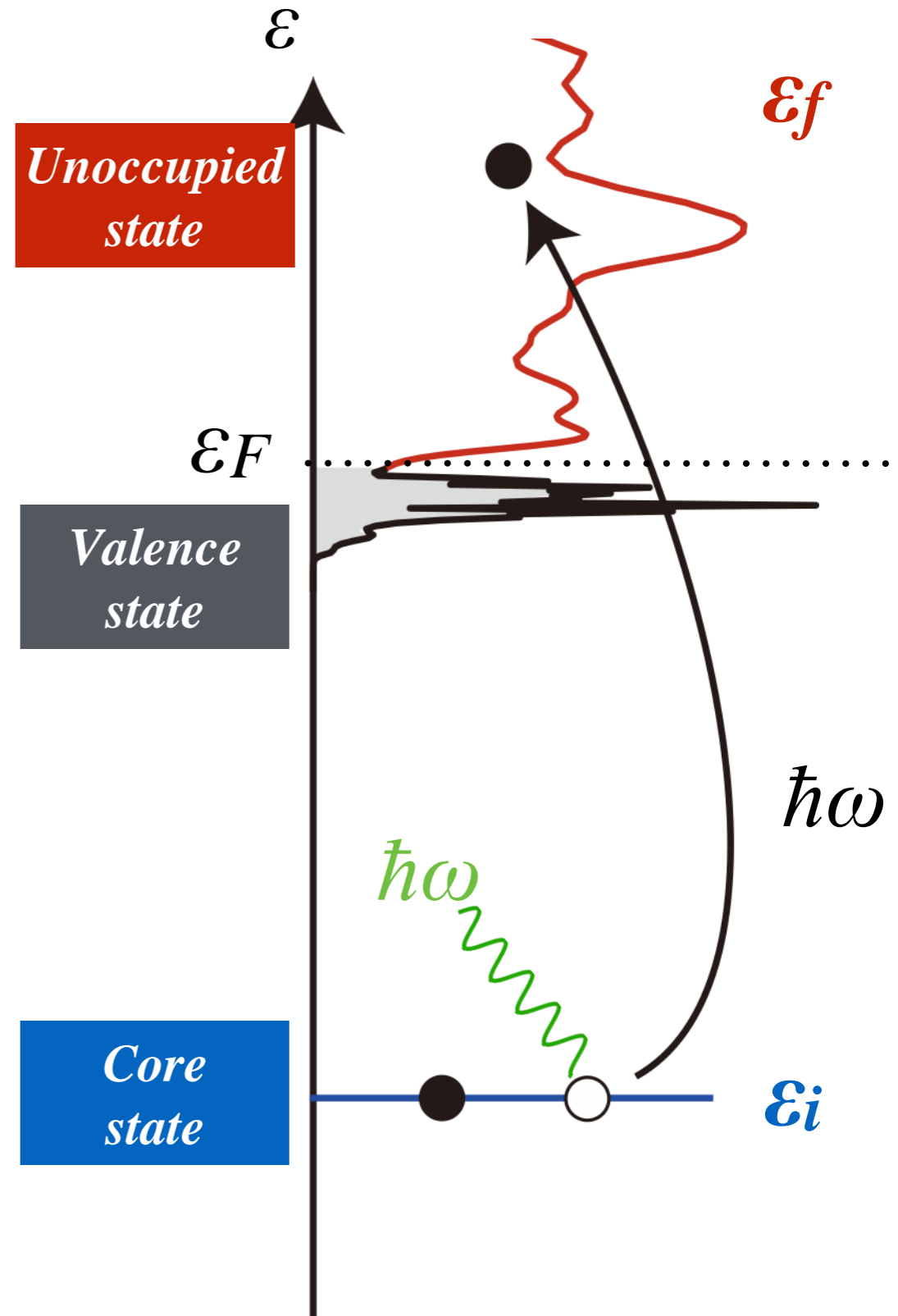
遷移確率

フェルミの黄金律

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

unoccupied state
終状態

core state
始状態



Cu-p (LDOS) with hole

遷移確率

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

| | | |
|-------|---|---|
| 始状態 | $ i\rangle = \sum_{mm_s} nlmm_s\rangle c_{mm_s,i}^{(nl)}$ | $\phi_{nlmm_s} = R_{nlm_s} Y_{lm} \sigma_{m_s}$ |
| 終状態 | $ f\rangle = \sum_{LMM_s} LMM_s\rangle a_{LMM_s,f}$ | $\phi_{LMM_s} = R_{LM_s} Y_{LM} \sigma_{M_s}$ |
| 電気双極子 | $\hat{F} = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} = e(E_x x + E_y y + E_z z)$ | |

...

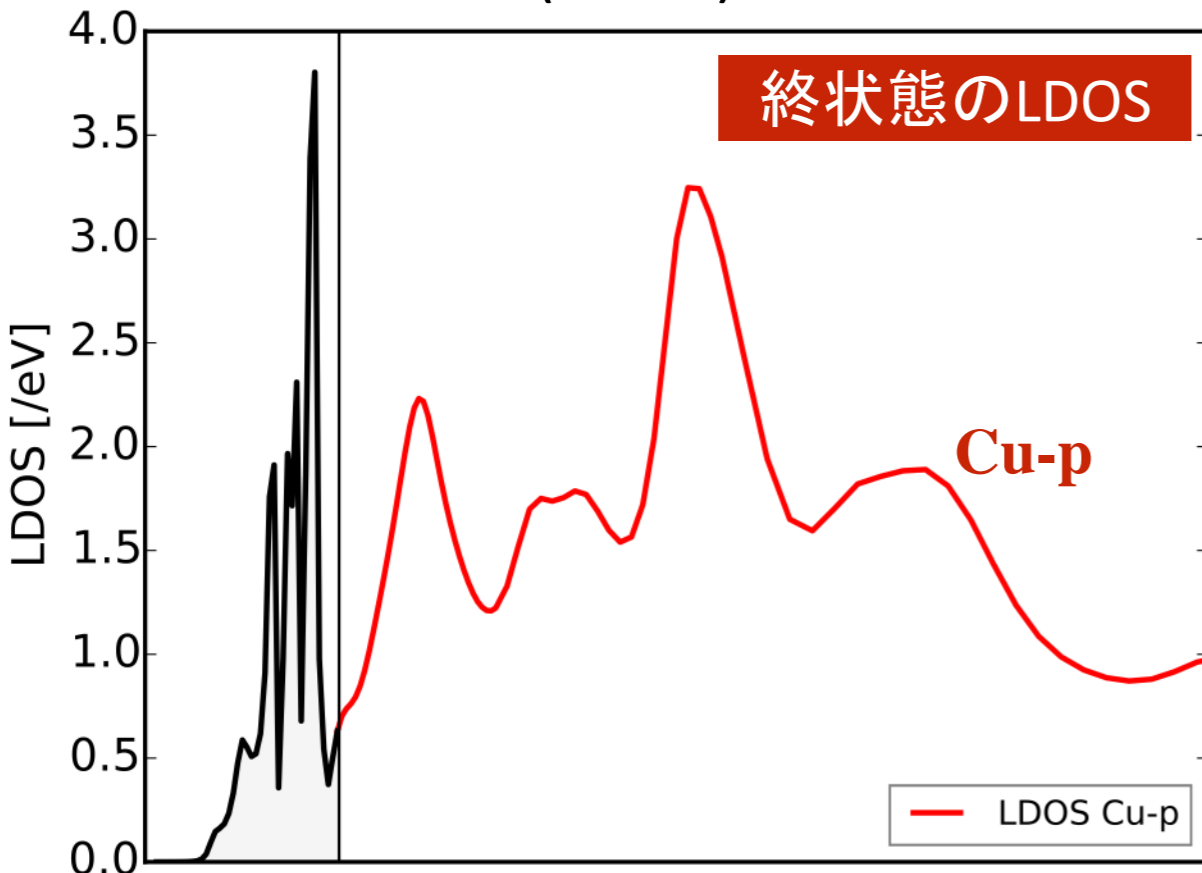
$$\propto |I_{Lnl}|^2 \sum_{m_s} w_{j\mu m_s} D_{LMM_s}(\hbar\omega + \varepsilon_i)$$

終状態の部分状態密度

部分状態密度 $D_{LMM_s}(\varepsilon) = \sum_f \left| a_{LMM_s,f} \right|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon)$

動径積分 $I_{LM_s, nlm_s}^{(k)}(\varepsilon_f) = \int_0^\infty R_{LM_s}(r; \varepsilon_f) r^k R_{nlm_s}(r) \cdot r^2 dr$

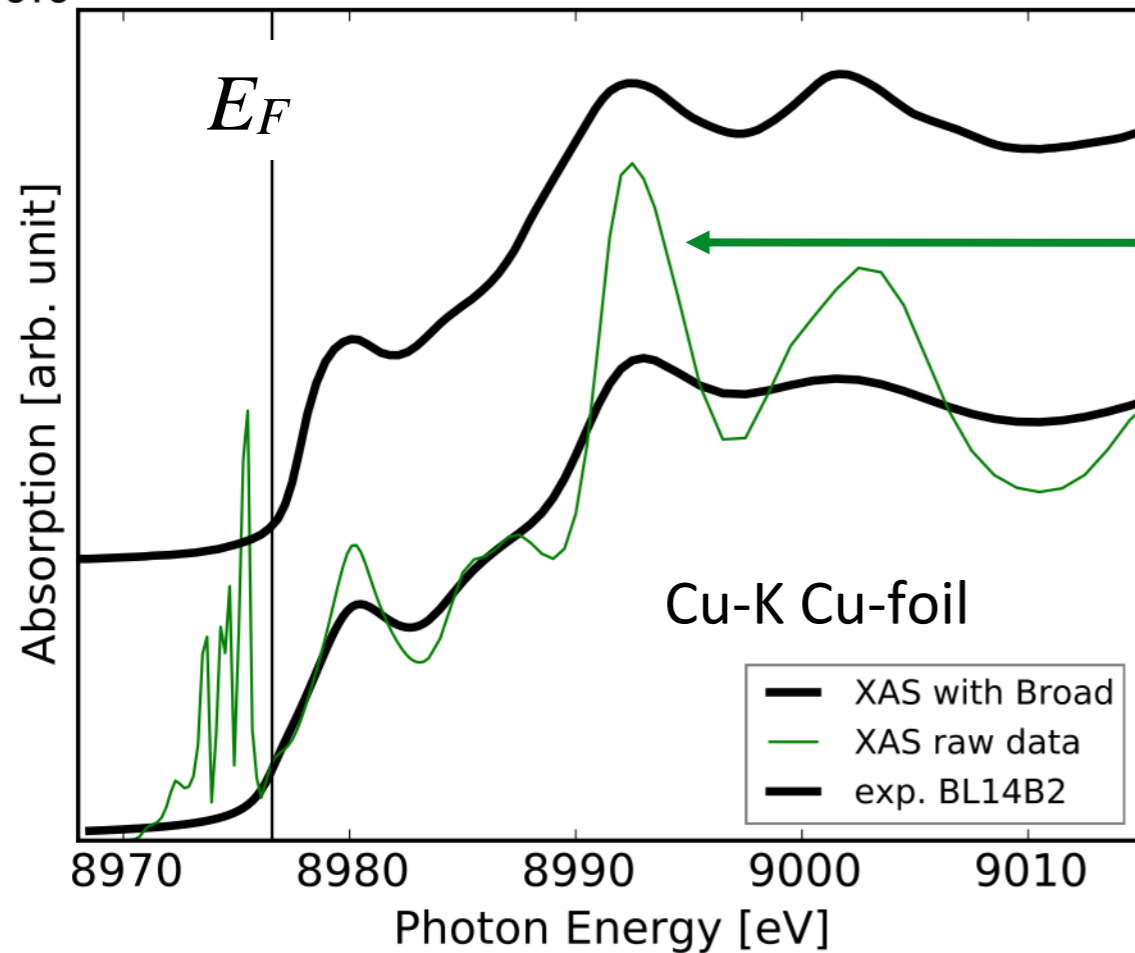
FDMNES (R=7.0) FDM



終状態のLDOS

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

$$\begin{cases} L = l \pm 1 \\ M = m + h \\ M_s = m_s \end{cases}$$



実験値

計算値(遷移確率)

計算値 (Lorentzian Broadening)

XANES スペクトル \propto 局所状態密度

Cu-K, Cu₂O, FMS

```
Absorber
1
Filout
Cu2O
Range
-5. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50.
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

Density
state_all

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

inp.txt の編集

Density
state_all

追加

(7) ls ファイルの確認

```
Length Name
-----
1046 fdmfile.txt
495 inp.txt
```

Cu20 のDOSの計算

```
Windows PowerShell
PS C:\%cal%\Cu20_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

```
50.000 11.915 2.796
PS C:\%cal%\Cu20_dos> dir

ディレクトリ: C:\%cal%\Cu20_dos

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
a----             2019/02/18 19:36           3343 Cu20.txt
a----             2019/02/18 19:36        2033683 Cu20_bav.txt
a----             2019/02/18 19:36           3024 Cu20_conv.txt
a----             2019/02/18 19:36           37744 Cu20_sd0.txt
a----             2019/02/18 19:36           20272 Cu20_sd2.txt
a----             2019/02/18 19:36           37744 Cu20_sd3.txt
a----             2019/02/18 19:36           37744 Cu20_sd4.txt
a----             2019/02/18 19:36           20272 Cu20_sd5.txt
a----             2019/02/18 19:36           37744 Cu20_sd6.txt
a----             2019/02/18 19:36           20272 Cu20_sd7.txt
a----             2019/01/23 18:38            1174 fdmfile.txt
a----             2019/02/18 19:35            488 inp.txt

PS C:\%cal%\Cu20_dos>
```

出力ファイルが追加されている

FDMNES のバージョンの違いによって挙動が違うので注意

前回2016の実習のVer

2016.01.08

```
4096 Jan 8 19:22 .
4096 Jan 8 17:30 ..
2876 Jan 8 17:32 Cu20.txt
1344709 Jan 8 17:32 Cu20_bav.txt
2652 Jan 8 17:32 Cu20_conv.txt
34272 Jan 8 17:32 Cu20_sd0.txt
34272 Jan 8 17:32 Cu20_sd1.txt
18360 Jan 8 17:32 Cu20_sd2.txt
15777 Jan 8 17:12 XAS.pdf
1174 Jan 7 11:28 fdmfile.txt
491 Jan 8 17:24 inp.txt
89332 May 6 2013 spacegroup.txt
1135134 Jul 22 2002 xsect.dat
```

今回の実習のVer

2016.06.23 ~

```
2970 1 8 17:16 Cu20.txt
1313782 1 8 17:16 Cu20_bav.txt
2652 1 8 17:16 Cu20_conv.txt
34272 1 8 17:16 Cu20_sd0.txt
18360 1 8 17:16 Cu20_sd2.txt
34272 1 8 17:16 Cu20_sd3.txt
34272 1 8 17:16 Cu20_sd4.txt
18360 1 8 17:16 Cu20_sd5.txt
34272 1 8 17:16 Cu20_sd6.txt
18360 1 8 17:16 Cu20_sd7.txt
15777 1 8 17:12 XAS.pdf
1174 1 7 11:28 fdmfile.txt
491 1 8 17:15 inp.txt
```

この変更は とても大きいのに Change.log にも書いてない！

Cu2O_bav.txt

座標

----- Atom_selec -----

Rsort = 4.651 A

nx = 25

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

Full_atom mode

| ia | Z | it | igr | ipr | iap | posx | posy | posz | igrpt | PtGrName | Comp | Axe | Mag |
|----|----|----|-----|-----|-----|---------|---------|---------|-------|----------|------|-----|-----|
| 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 | 4 | 3.01765 | 0.00000 | 0.00000 | 1 | 1 | T | F | F |
| 4 | 29 | 1 | 4 | 1 | 14 | 1.50882 | 0.87112 | 2.46390 | 1 | 1 | T | F | F |
| 5 | 8 | 2 | 6 | 2 | 20 | 0.00000 | 3.48448 | 0.61598 | 1 | 1 | T | F | F |
| 6 | 29 | 1 | 1 | 1 | 25 | 0.00000 | 3.48448 | 2.46390 | 1 | 1 | T | F | F |
| 7 | 8 | 2 | 6 | 2 | 33 | 3.01765 | 1.74224 | 3.07988 | 1 | 1 | T | F | F |

中心原子から遠くなる

ia1 は Absorber なので sd0

sd2 ~ sd7

(*) _bav.txt の情報はどこにも公開されていないので確定情報ではない

元になった結晶の通し番号(igr)

| ia | Z | it | igr | ipr | iap | posx | posy | posz |
|----|----|----|-----|-----|-----|---------|---------|---------|
| 1 | 29 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 |
| 2 | 8 | 2 | 5 | 2 | 3 | 0.00000 | 0.00000 | 1.84793 |
| 3 | 29 | 1 | 2 | 1 | 4 | 3.01765 | 0.00000 | 0.00000 |
| 4 | 29 | 1 | 4 | 1 | 14 | 1.50882 | 0.87112 | 2.46390 |
| 5 | 8 | 2 | 6 | 2 | 20 | 0.00000 | 3.48448 | 0.61598 |
| 6 | 29 | 1 | 1 | 1 | 25 | 0.00000 | 3.48448 | 2.46390 |
| 7 | 8 | 2 | 6 | 2 | 33 | 3.01765 | 1.74224 | 3.07988 |

- sd0: Z=29 (Cu)
- sd2: Z=8 (O)
- sd3: Z=29 (Cu)
- sd4: Z=29 (Cu)
- sd5: Z=8 (O)
- sd6: Z=29 (Cu)
- sd7: Z=8 (O)

クラスター原点(吸収原子)からの距離別

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)

---- 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

sd2

sd1

Cu*

O

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

sd0: Z=29 (Cu)

sd2: Z=8 (O)

sd3: Z=29 (Cu)

sd4: Z=29 (Cu)

sd5: Z=8 (O)

sd6: Z=29 (Cu)

sd7: Z=8 (O)

sd0 (Cu) と sd2 (O) をプロットする

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 編集 表示
# Energy s Int(s) px py pz p Int(p)
dx2-y2 dz2 dyz dxz dxy d total total
Int(total)
-5.0000 1.03752E-02 1.52513E-04 1.09652E-03 1.09652E-03 3.83721E-02 4.05652E-02 5.96297E-04
3.18481E-02 1.28409E-01 6.04966E-02 6.04966E-02 3.18481E-02 3.13098E-01 4.60246E-03 3.64038E-01
5.35127E-03
```

名前を付けて上書き保存

スペース
↓
start □.¥Cu2O_sd2.txt

Cu2O_sd2.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 編集 表示
# Energy s Int(s) px py pz p Int(p)
total Int(total)
-5.0000 2.33021E-02 3.42535E-04 1.24578E-01 1.24578E-01 4.68588E-01 7.17744E-01 1.05506E-02
7.41046E-01 1.08932E-02
```

名前を付けて上書き保存

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)

onv.txt - Visual Studio Code

編集(E) 選択(S) 表示(V) 移動(G) デバッグ(D) ターミナル(T) ヘルプ(H)

inp.txt

Cu2O_sd0.txt

Cu2O_sd2.txt

Cu2O_conv.txt ✕

| | | | |
|----|---|----------|---------------|
| 1 | # | Energy | <xanes> |
| 2 | | -5.00000 | 2.2964607E-03 |
| 3 | | -4.80000 | 2.3518105E-03 |
| 4 | | -4.60000 | 2.4101182E-03 |
| 5 | | -4.40000 | 2.4716499E-03 |
| 6 | | -4.20000 | 2.5367073E-03 |
| 7 | | -4.00000 | 2.6056334E-03 |
| 8 | | -3.80000 | 2.6788206E-03 |
| 9 | | -3.60000 | 2.7567205E-03 |
| 10 | | -3.40000 | 2.8398559E-03 |
| 11 | | -3.20000 | 2.9288369E-03 |
| 12 | | -3.00000 | 3.0243807E-03 |
| 13 | | -2.80000 | 3.1273384E-03 |
| 14 | | -2.60000 | 3.2387296E-03 |
| 15 | | -2.40000 | 3.3597898E-03 |
| 16 | | -2.20000 | 3.4920349E-03 |
| 17 | | -2.00000 | 3.6377510E-03 |

名前を付けて上書き保存

GNUPLOT でプロットするフェルミレベルを0にする

1) wgnuplot

スペース

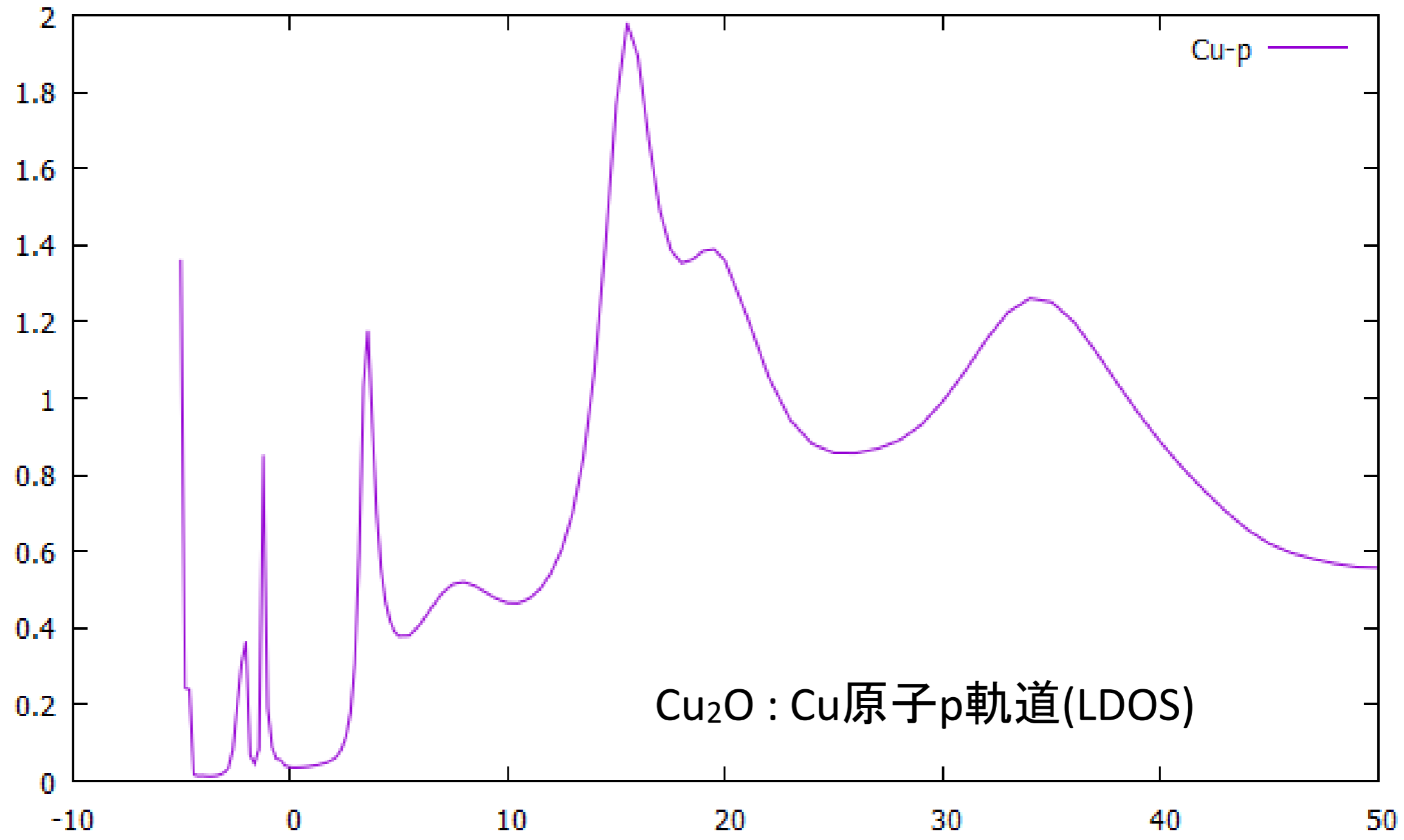
スペース

コロン

Cu-p軌道の指定

title を付ける

```
2) plot 'Cu2O_sd0.txt' u 1:7 w l t 'Cu-p'
```



※旧version(2018.11.30) 公式マニュアル p.38

Then one gets a new output file with the extension `_sd0.txt`. It contains, in column, **first the integral of the total atomic electron density**, then the density and its integral of each (l,m) followed by the sum over m, that is the density and its integral for each l. For magnetic calculation, the expansion is split between the “up” and “down” components. **By default, real harmonics** are used because they are directly the familiar px, py, pz, dxy, dxz... states. The correspondence is the following:

| | | | | | | | | |
|-------|--------|-------|-------|--------|--------|-----------------|-------|---------------------------------|
| (0,0) | (1,-1) | (1,0) | (1,1) | (2,-2) | (2,-1) | (2,-0) | (2,1) | (2,2) |
| s | py | pz | px | dxy | dyz | dz ² | dxz | dx ² -y ² |

sd0.txt - Visual Studio Code

編集(E) 選択(S) 表示(V) 移動(G) デバッグ(D) ターミナル(T) ヘルプ(H)

inp.txt

Cu2O_sd0.txt

Cu2O_sd2.txt

```

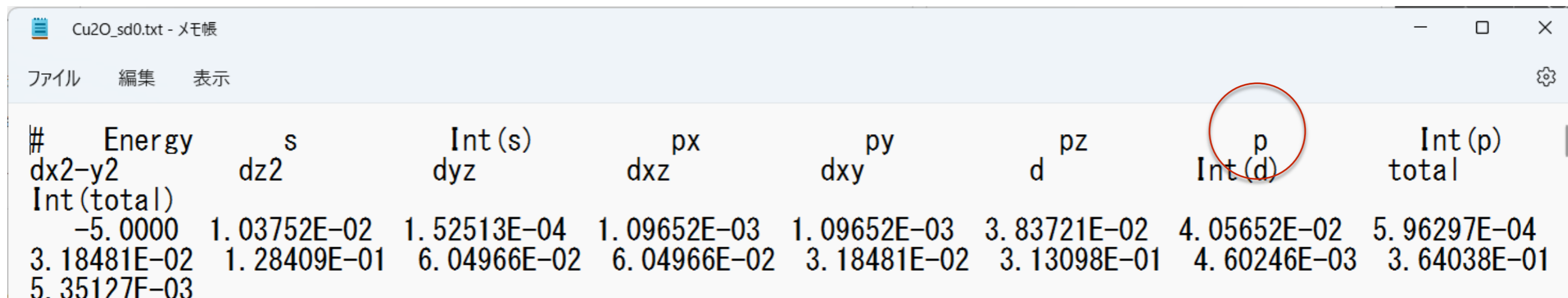
1  1 Energy      2 Int_t      3 n(0,0)      4 Intn(0,0)    5 n_l(0)      6 Intn_l(0)   7 n(1,
-1)  Intn(1,-1)  n(1,0)      Intn(1,0)   n(1,1)      Intn(1,1)   n_l(1) 13
  Intn_l(1)    n(2,-2)    Intn(2,-2)  n(2,-1)    Intn(2,-1)  n(2,0)
Intn(2,0)    n(2,1)    Intn(2,1)   n(2,2)    Intn(2,2)   n_l(2)     Intn_l
(2)
2  -5.0000  3.14353E-02  6.56653E-03  9.65262E-05  1.31331E-02  1.93052E-04
  5.19150E-03  7.63137E-05  6.68868E-01  9.83218E-03  5.19150E-03  7.63137E-05
  1.35850E+00  1.99696E-02  2.39657E-02  3.52289E-04  1.20489E-01  1.77116E-03
  9.45215E-02  1.38944E-03  1.20489E-01  1.77116E-03  2.39657E-02  3.52289E-04
  7.66862E-01  1.12727E-02

```

13 → p軌道

新version(2022.6.15) 公式マニュアル p.40 (Densityの項目)

Then one gets a new output file with the extension `_sd0.txt`. (if the absorbing atom is excited) or `_sd1.txt` in the other case. By default they are expressed using the cubic harmonics, that is: s, px, py, pz, dx2-y2, dz2... For magnetic calculation, the expansion is split between the “up” and “down” components.



| # | Energy | s | Int (s) | px | py | pz | p | Int (p) |
|---|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| | | dz2 | dyz | dxz | dxy | d | Int (d) | total |
| | Int (total) | | | | | | | |
| | -5.0000 | 1.03752E-02 | 1.52513E-04 | 1.09652E-03 | 1.09652E-03 | 3.83721E-02 | 4.05652E-02 | 5.96297E-04 |
| | 3.18481E-02 | 1.28409E-01 | 6.04966E-02 | 6.04966E-02 | 3.18481E-02 | 3.13098E-01 | 4.60246E-03 | 3.64038E-01 |
| | 5.35127E-03 | | | | | | | |

順番が変わっていることに注意！

旧ver.に近い表示（例えば、py,pz,px）にするには、
Harm_tess
を追加する。

7 → p軌道

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

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

FDMNES

orbital

real spherical
harmonics

complex spherical harmonics

$n(1,-1)$

P_y

Y_{1-1}

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

$n(1,0)$

P_z

Y_{10}

$n(1,1)$

P_x

Y_{11}

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1} - Y_1^1)$$

$n(2,-2)$

d_{xy}

Y_{2-2}

$$= \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_2^{-2} - Y_2^2)$$

$n(2,-1)$

d_{yz}

Y_{2-1}

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

$n(2,0)$

$d_{3z^2-r^2}$

Y_{20}

$n(2,1)$

d_{xz}

Y_{21}

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_2^{-1} - Y_2^1)$$

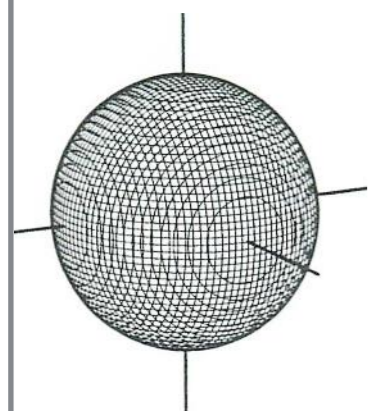
$n(2,2)$

$d_{x^2-y^2}$

Y_{22}

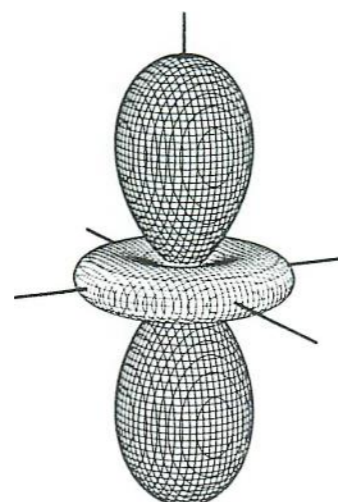
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_2^{-2} + Y_2^2)$$

$n(0,0)$



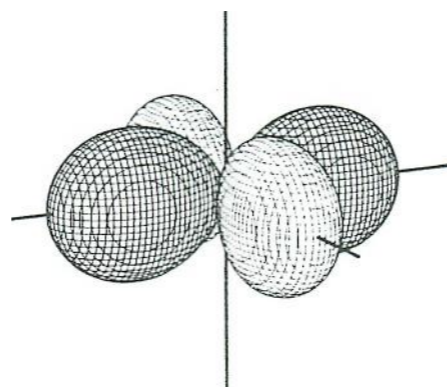
s

$n(2,0)$



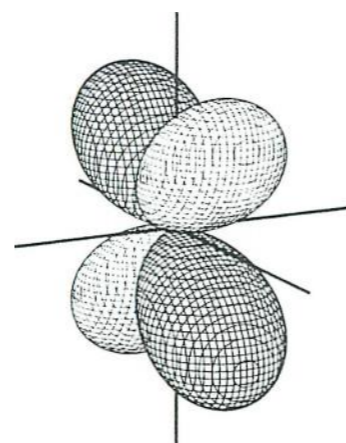
$d(3z^2-r^2)$

$n(2,2)$



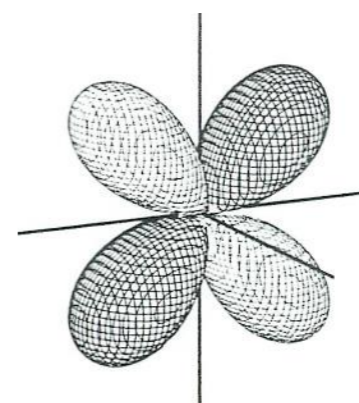
$d(x^2-y^2)$

$n(2,-1)$



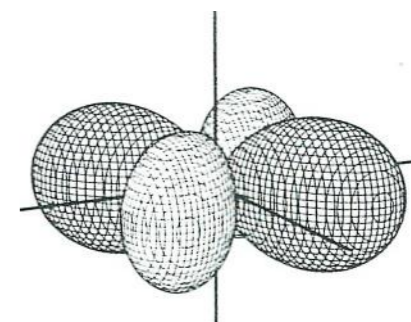
$d(yz)$

$n(2,1)$



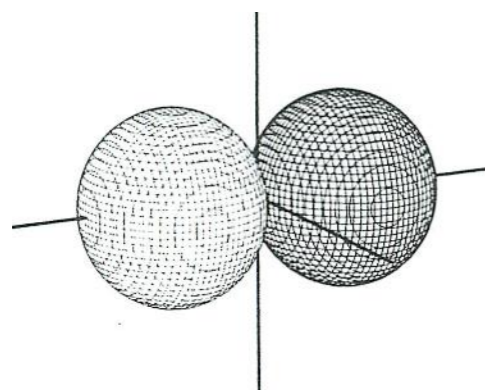
$d(zx)$

$n(2,-2)$



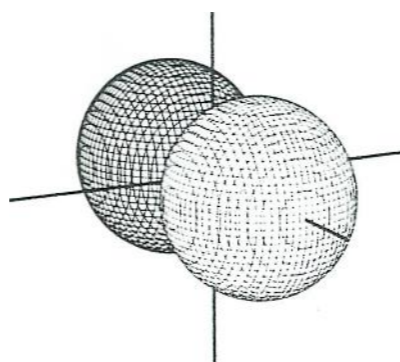
$d(xy)$

$n(1,1)$



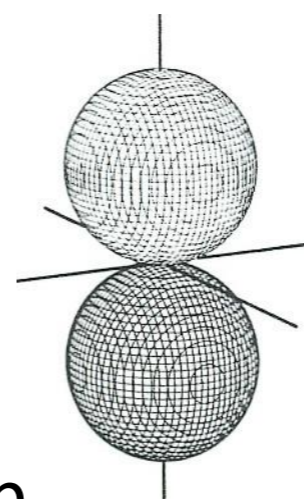
p_x

$n(1,-1)$



p_y

$n(1,0)$



p_z

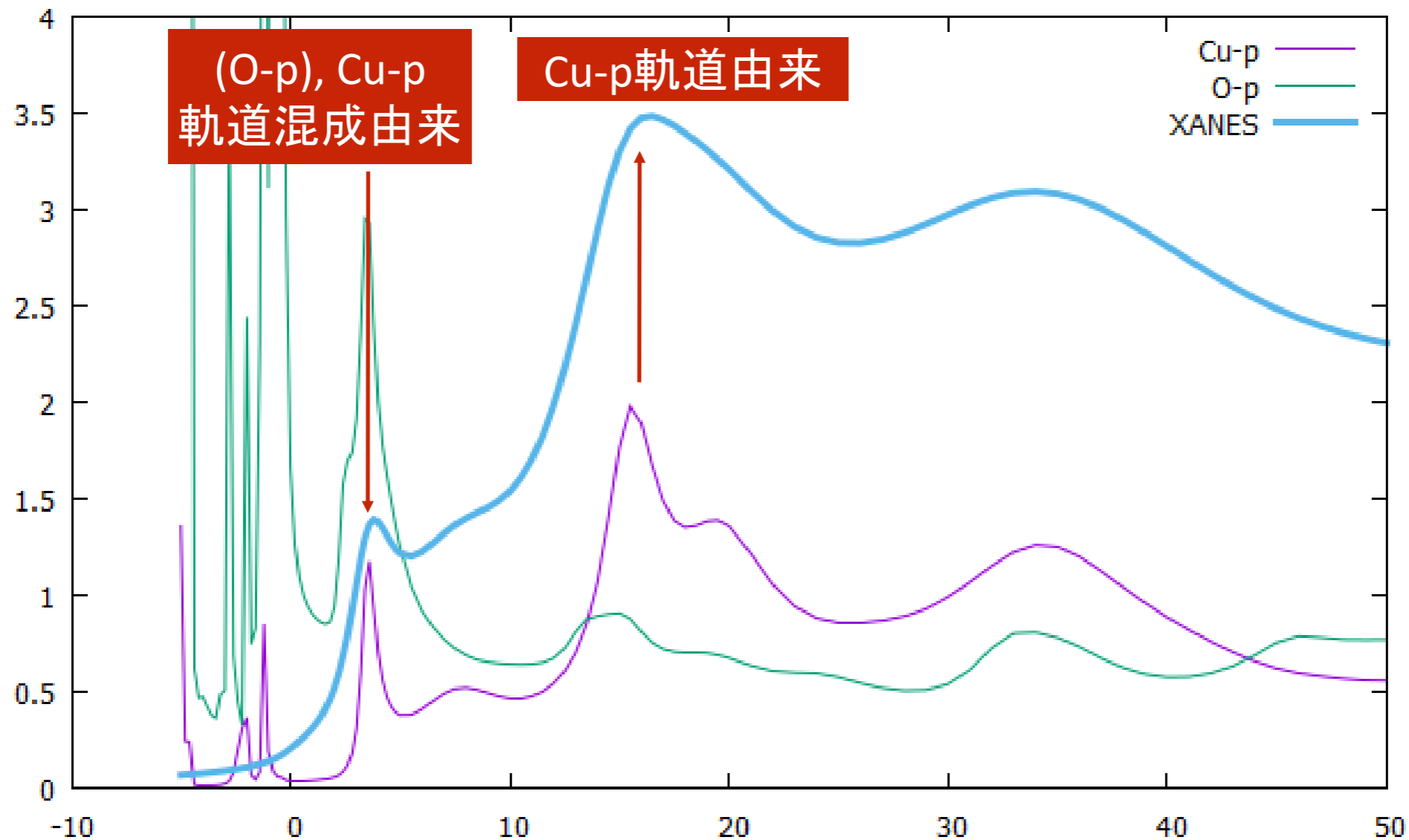
,(カンマ)後 改行せずにつなげる(1行で書く)

スペース

コロン

```
3) plot [ ] [0:4] 'Cu2O_sd0.txt' u 1:7 w l t 'Cu-p',  
      'Cu2O_sd2.txt' u 1:7 w l t 'O-p',  
      'Cu2O_conv.txt' u 1:($2*30) w l lw 3 t 'XANES'
```

\$2*30
2列目に30を掛けた値をプロット



4) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる

化合物の計算実習
-BaTiO₃ の計算例-

Absorber

1

Filout

BaTiO3

Range

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

Edge

K

Convolution

Green

Radius

4.0

Crystal

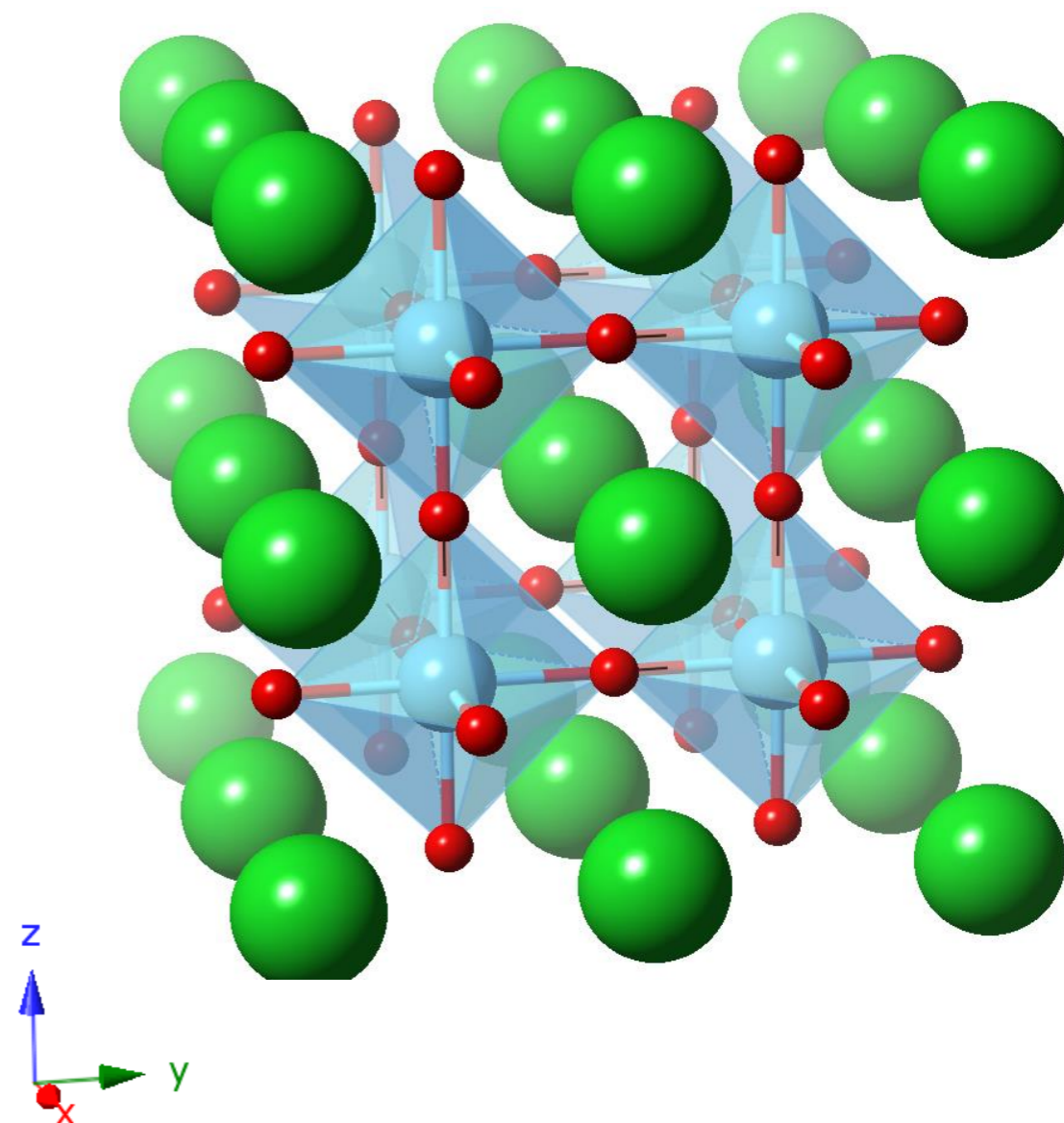
| | | | | | | |
|----|--------|--------|--------|---------|---------|---------|
| | 4.0060 | 4.0060 | 4.0060 | 90.0000 | 90.0000 | 90.0000 |
| 22 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | ! Ti | | |
| 56 | 0.5000 | 0.5000 | 0.5000 | ! Ba | | |
| 8 | 0.5000 | 0.0000 | 0.0000 | ! O | | |
| 8 | 0.0000 | 0.5000 | 0.0000 | ! 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
-10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 45.

Edge
K

Convolution

Green

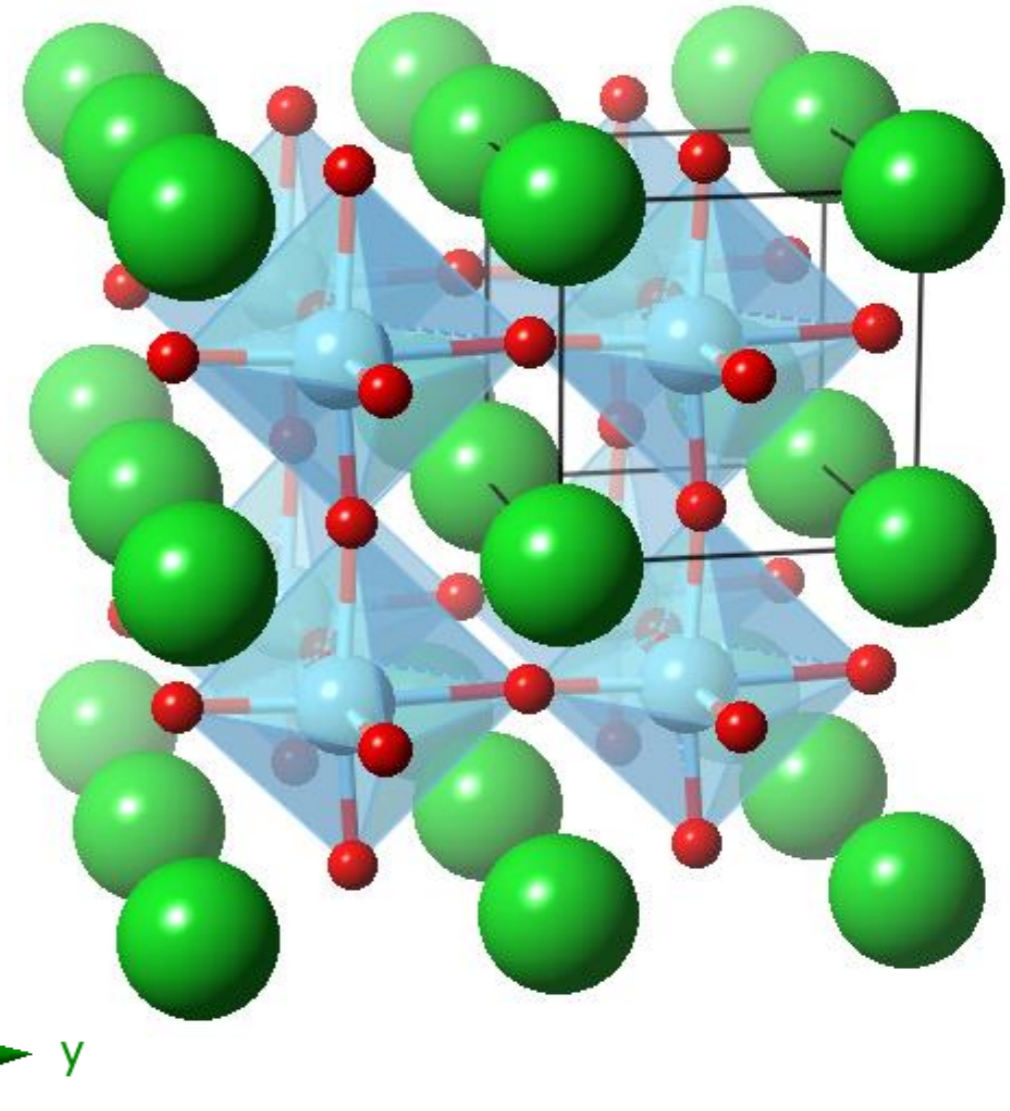
Radius
4.0

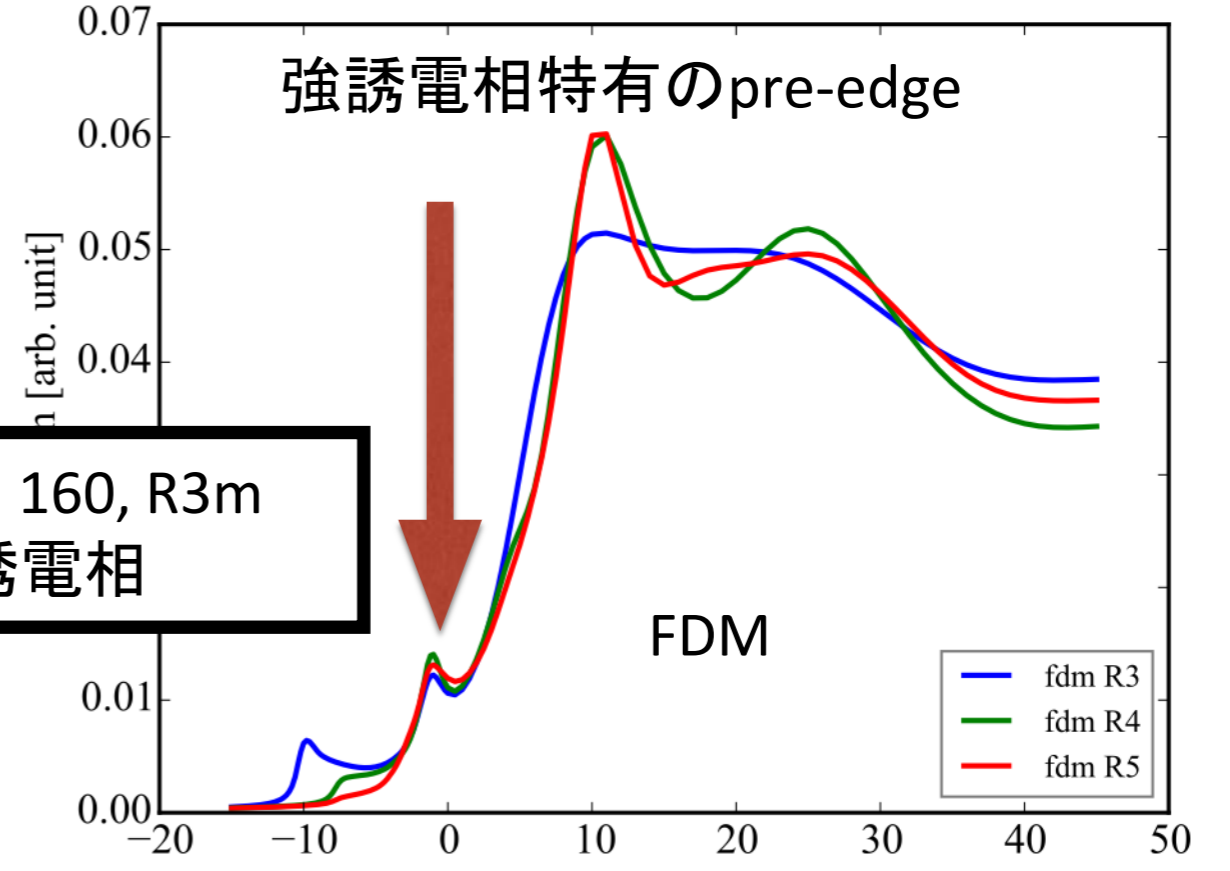
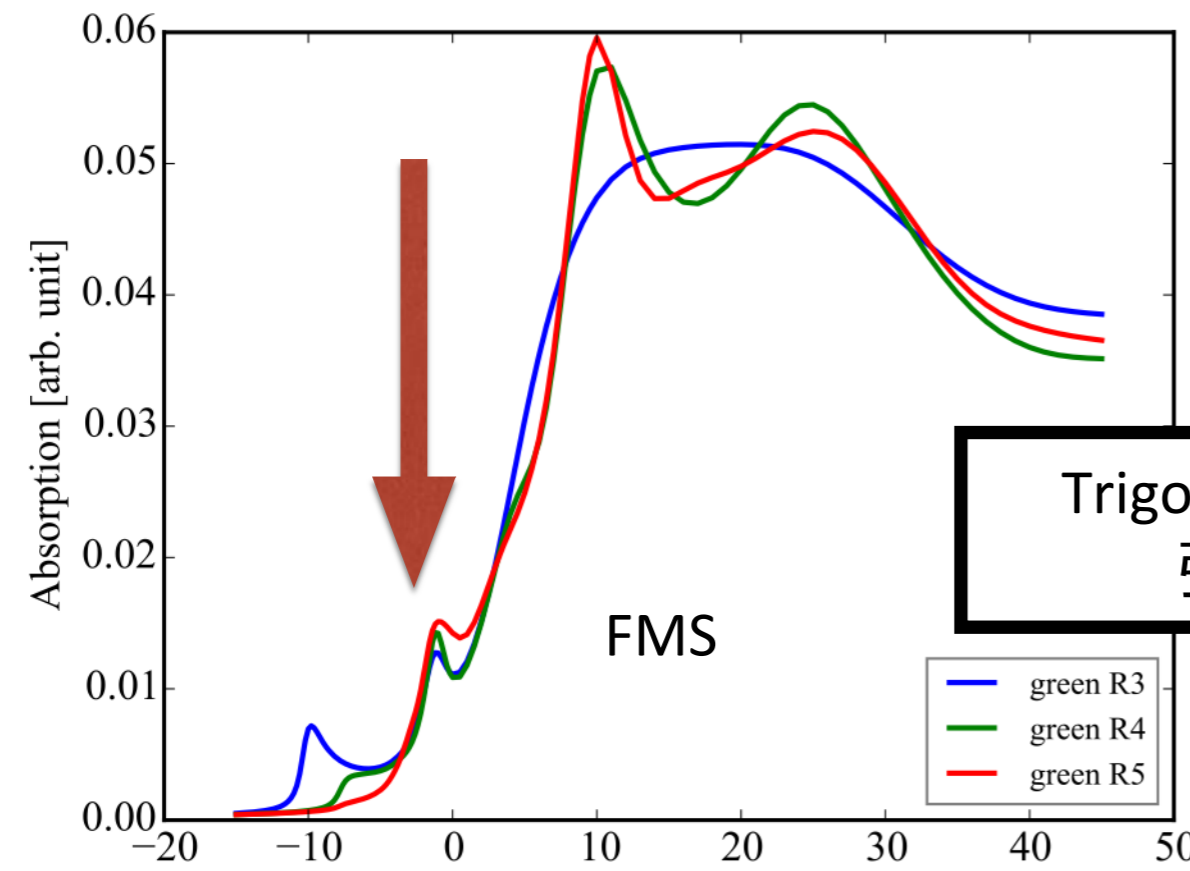
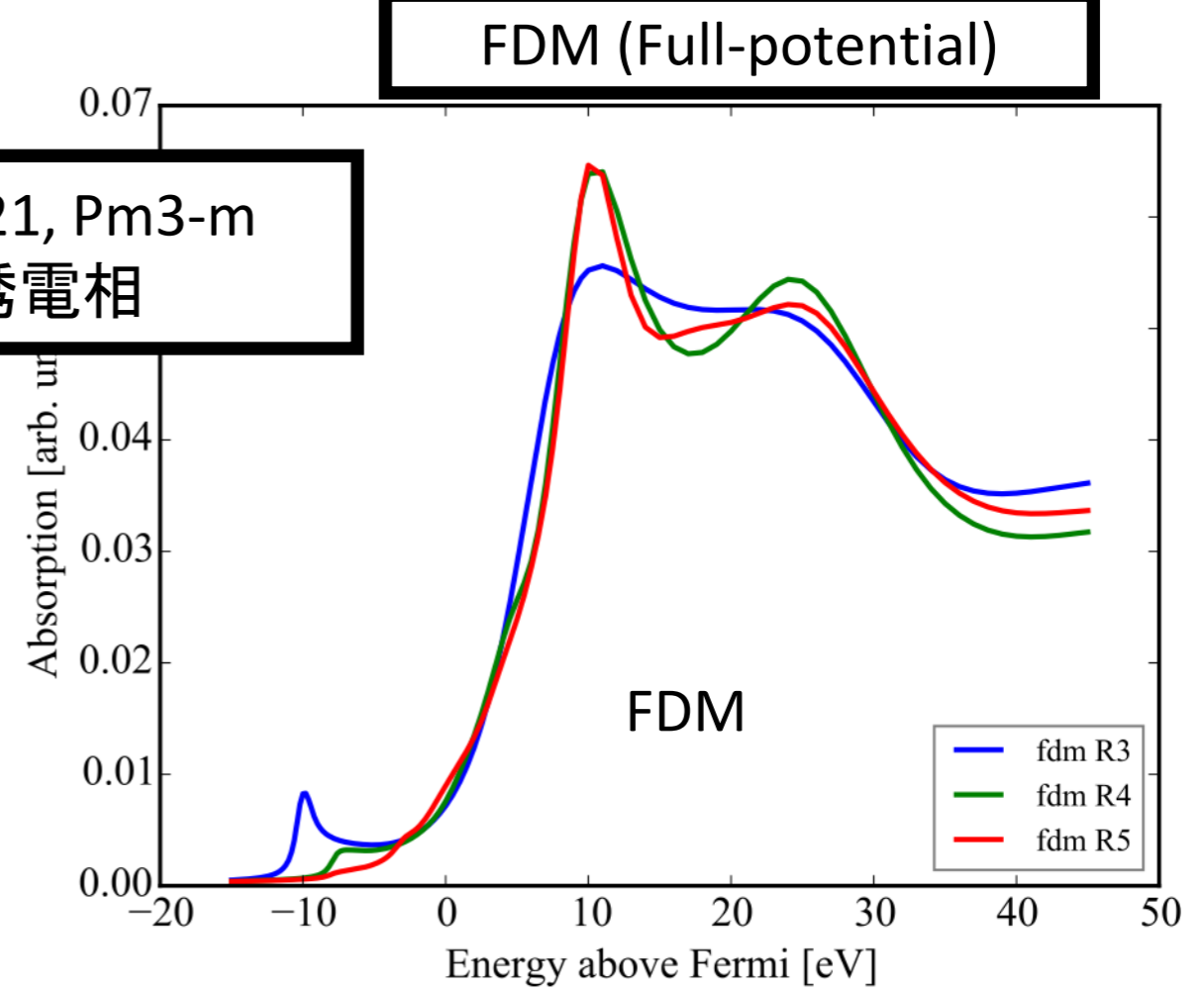
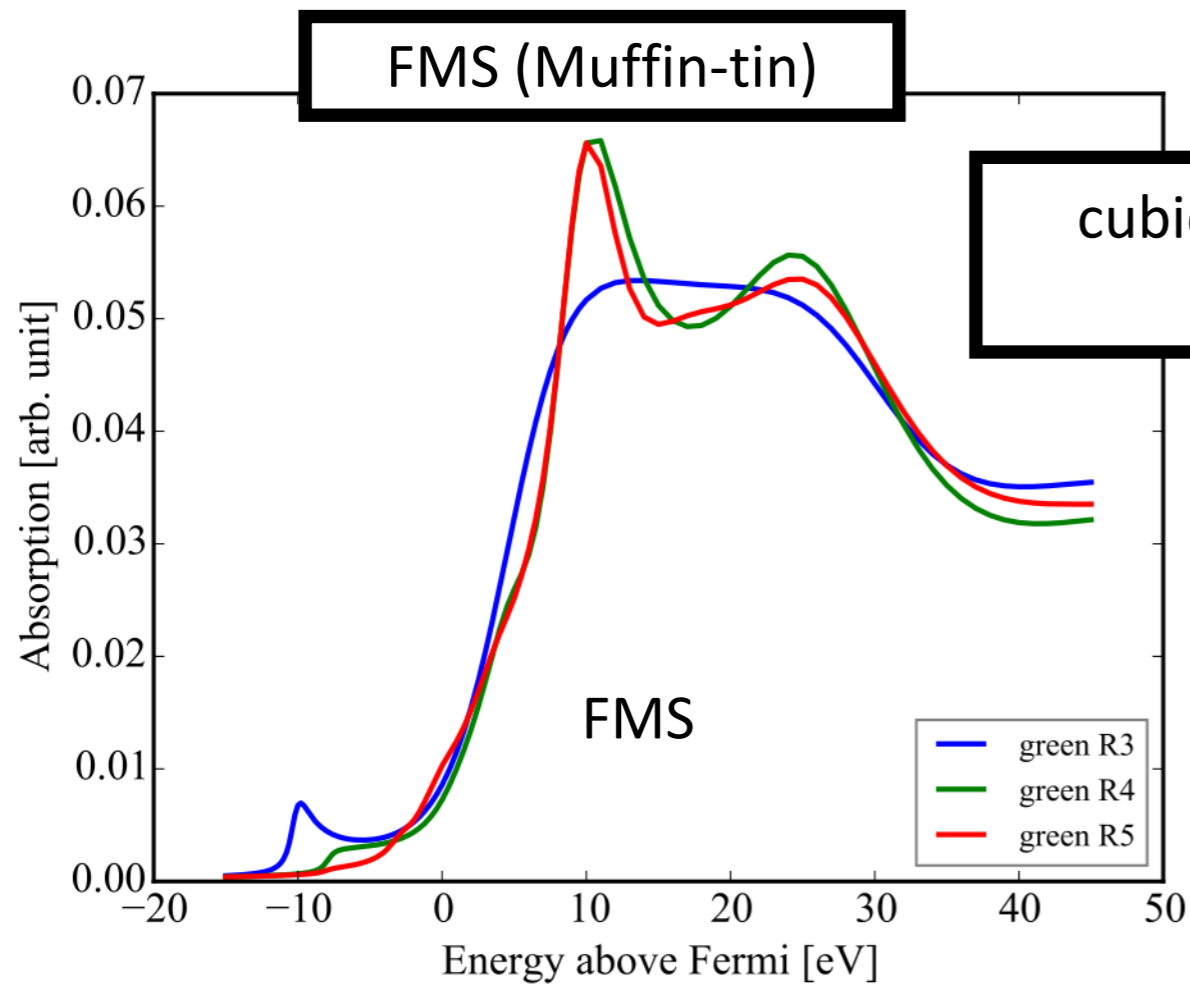
Crystal
4.0036 4.0036 4.0036 89.8404 89.8400 89.8396
22 0.4880 0.4880 0.4880 !Ti
56 0.0000 0.0000 0.0000 !Ba
8 0.5116 0.5116 0.0195 !O
8 0.0195 0.5116 0.5116 !O
8 0.5116 0.0195 0.5116 !O
```

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)

End

内部座標のズレ





FMS の範囲でもとりあえずは pre-edge が計算で出るので FMSで行う

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) $R=4.0 \text{ \AA}$

FDM だとR5だと 1h かかってしまう。

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

-13

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:\¥ca\¥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

ls

```
BaTiO3.txt  
BaTiO3_bav.txt  
BaTiO3_conv.txt  
BaTiO3_sd0.txt  
BaTiO3_sd2.txt  
BaTiO3_sd3.txt  
BaTiO3_sd4.txt  
BaTiO3_sd5.txt  
XAS.pdf  
fdmfile.txt  
inp.txt
```


----- Atom_selec -----

Rsort = 3.467 A

nx = 19

natome = 5, igrpt = 8, Cluster_comp = F, Cluster_mag = F

Full_atom mode

| 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 | Ti | 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 | O | 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 | Ba | 1 | F | F | F |

OLD

2016.01.08

```
2979 BaTiO3.txt
1991403 BaTiO3_bav.txt
2754 BaTiO3_conv.txt
34374 BaTiO3_sd0.txt
55590 BaTiO3_sd2.txt
18462 BaTiO3_sd3.txt
1046 fdmfile.txt
470 inp.txt
```

NEW

2016.06.23 ~

```
BaTiO3.txt
BaTiO3_bav.txt
BaTiO3_conv.txt
BaTiO3_sd0.txt
BaTiO3_sd2.txt
BaTiO3_sd3.txt
BaTiO3_sd4.txt
BaTiO3_sd5.txt
XAS.pdf
fdmfile.txt
```

sd0 (Ti)

sd3 (O)

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

(Ti)

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

(O)

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

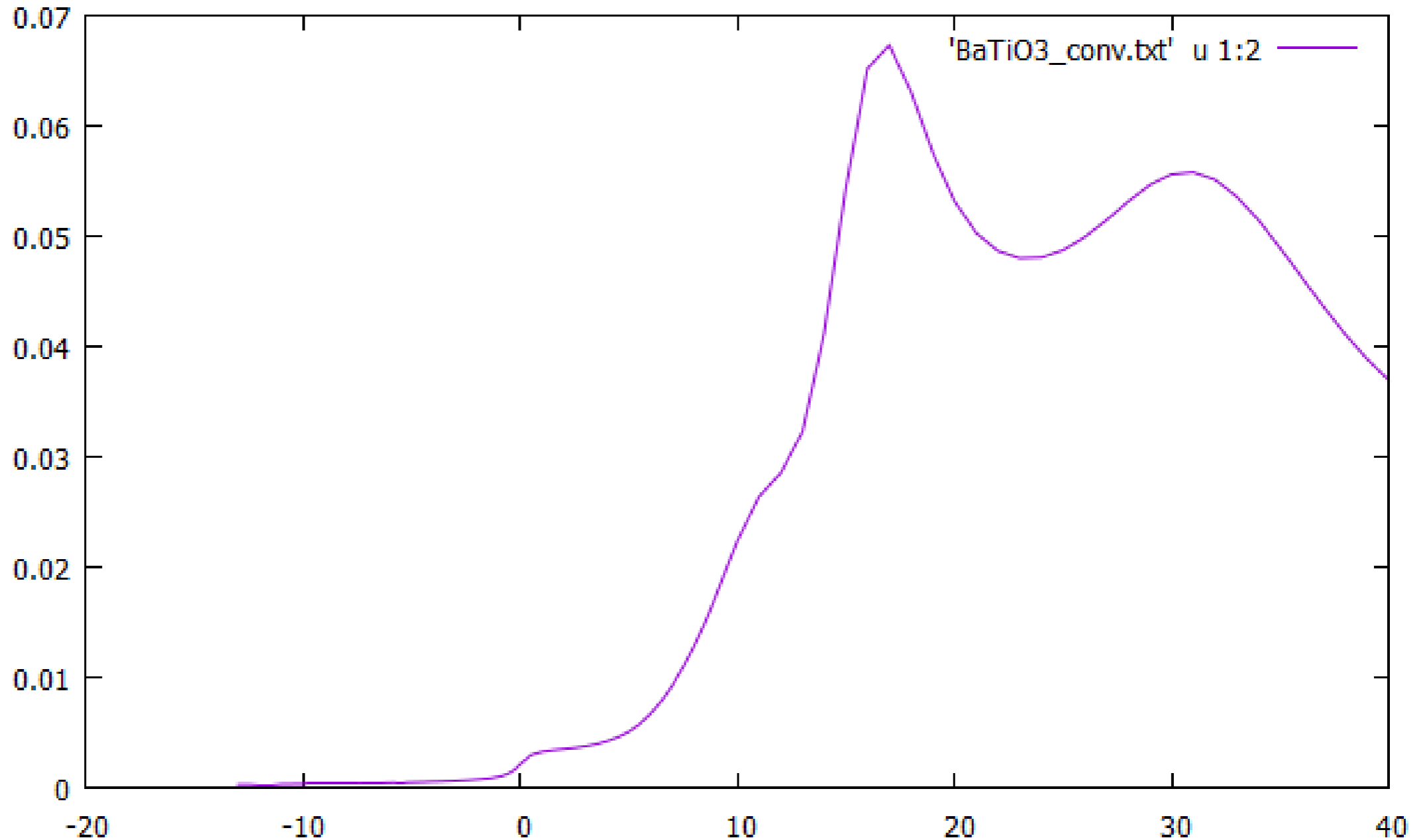
GNUPLOT でプロットする

1) wgnuplot

スペース

コロン

2) plot 'BaTiO3_conv.txt' u 1:2 w l



3) plot が終わったらGNUPLOT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

強誘電相

Absorber

1

Filout

BaTiO3

Range

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

Estart

-13

Edge

K

Radius

4.0

Density

state_all

Green

cell歪みをナシ(cubicにする)

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

内部座標の歪みを入れる

End

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`

```
BaTiO3.txt  
BaTiO3_bav.txt  
BaTiO3_conv.txt  
BaTiO3_sd0.txt  
BaTiO3_sd2.txt  
BaTiO3_sd3.txt  
BaTiO3_sd4.txt  
BaTiO3_sd5.txt  
BaTiO3_sd6.txt  
BaTiO3_sd7.txt  
XAS.pdf  
fdmfile.txt  
inp.txt
```

----- Atom_selec -----

Rsort = 3.550 A

nx = 20

natome = 7, igrpt = 16, Cluster_comp = T, Cluster_mag = F

Full_atom mode

| 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 | Ti | 3 | T | T | F |
| 2 | 8 | 3 | 3 | 3 | 2 | 0.00000 | 1.60864 | -0.97383 | O | 1 | T | F | F |
| 3 | 8 | 3 | 4 | 3 | 7 | 1.43785 | 0.83014 | 1.33765 | O | 1 | T | F | F |
| 4 | 56 | 2 | 2 | 2 | 8 | 0.00000 | 0.00000 | -3.38401 | Ba | 3 | T | T | F |
| 5 | 56 | 2 | 2 | 2 | 10 | 2.83097 | 1.63446 | -1.07253 | Ba | 1 | T | F | F |
| 6 | 56 | 2 | 2 | 2 | 14 | 0.00000 | 3.26893 | 1.23895 | Ba | 1 | T | F | F |
| 7 | 56 | 2 | 2 | 2 | 15 | 0.00000 | 0.00000 | 3.55043 | Ba | 1 | T | T | F |

- BaTiO3.txt
- BaTiO3_bav.txt
- BaTiO3_conv.txt
- BaTiO3_sd0.txt
- BaTiO3_sd2.txt
- BaTiO3_sd3.txt
- BaTiO3_sd4.txt
- BaTiO3_sd5.txt
- BaTiO3_sd6.txt
- BaTiO3_sd7.txt
- XAS.pdf
- fdmfile.txt
- inp.txt

sd0 (Ti)
sd3 (O)

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 * BaTiO3_sd0.txt BaTiO3_sd3.txt
1 # Energy <xanes>
2 -13.0000 3.2811484E-04
3 -12.5000 3.3694318E-04
4 -12.0000 3.4625391E-04
5 -11.5000 3.5609040E-04
6 -11.0000 3.6650186E-04
7 -10.5000 3.7754442E-04
8 -10.0000 3.8928255E-04
```

スペース
↓
start ¥BaTiO3_sd0.txt

BaTiO3_sd0.txt の編集

(Ti)

コメントアウト
(最初の1行)

```
BaTiO3_conv.txt BaTiO3_sd0.txt * BaTiO3_sd3.txt
1 # Energy Int_t n(0,0) Intn(0,0) n_l(0) Intn_l(0)
-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)
(2)
2 -10.0000 1.23902E-04 2.58302E-04 3.79697E-06 5.16604E-04 7.59394E-06
2.32842E-04 3.42271E-06 2.37887E-04 3.49687E-06 2.32842E-04 3.42271E-
```

スペース
↓
start ¥BaTiO3_sd3.txt

BaTiO3_sd3.txt の編集

(O)

コメントアウト
(最初の1行)

```
BaTiO3_conv.txt BaTiO3_sd0.txt BaTiO3_sd3.txt *
1 # Energy Int_t n(0,0) Intn(0,0) n_l(0) Intn_l(0)
-1) Intn(1,-1) n(1,0) Intn(1,0) n(1,1) Intn(1,1) n_l(1)
Intn_l(1)
2 -10.0000 2.81980E-04 8.21862E-04 1.20812E-05 1.64372E-03 2.41623E-05
3.24073E-03 4.76379E-05 2.90845E-03 4.27534E-05 2.62030E-03 3.85177E-05
1.75390E-02 2.57818E-04
```

GNUPLOT でプロットする

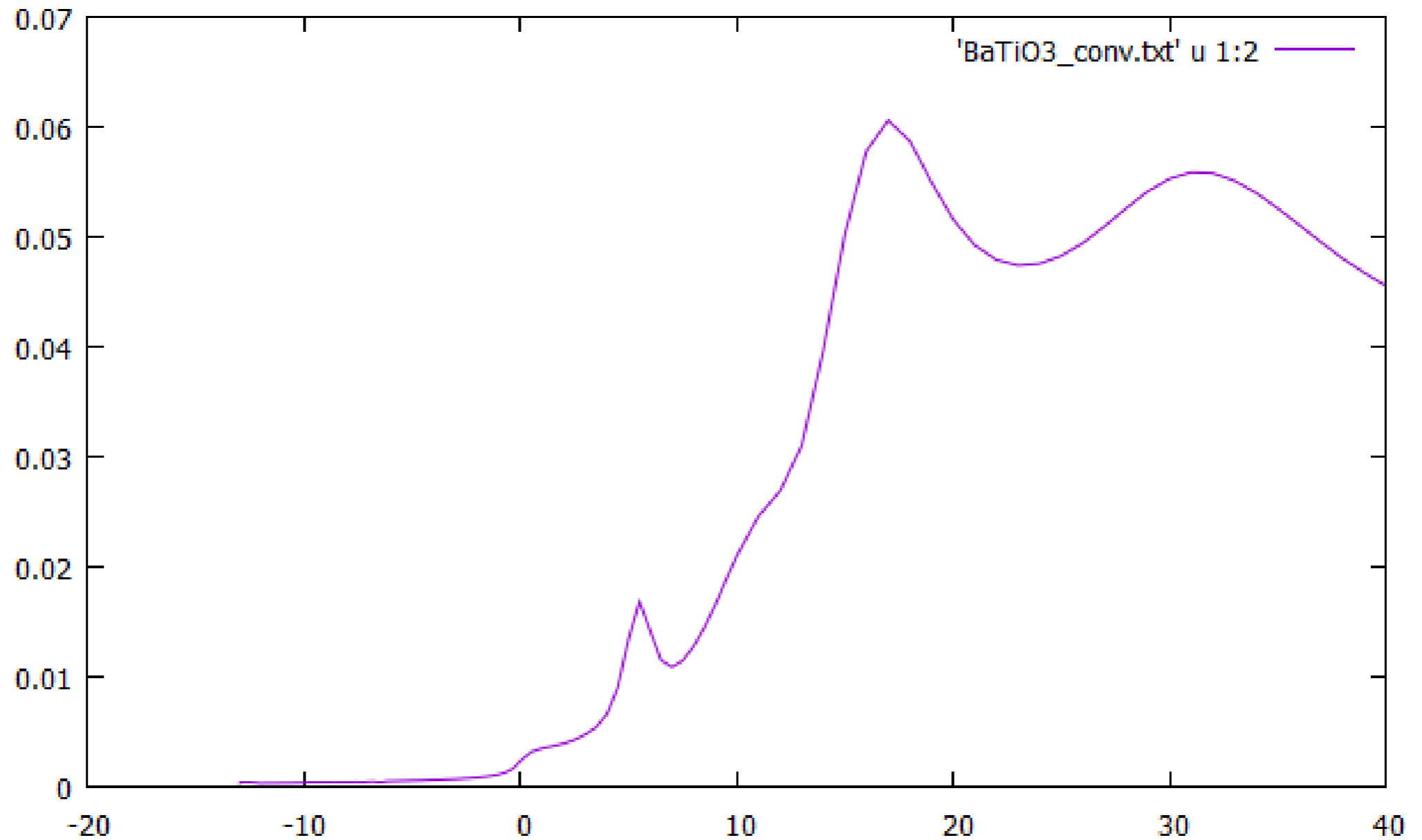
強誘電相

1) wgnuplot

スペース

コロン

2) plot 'BaTiO3_conv.txt' u 1:2 w l



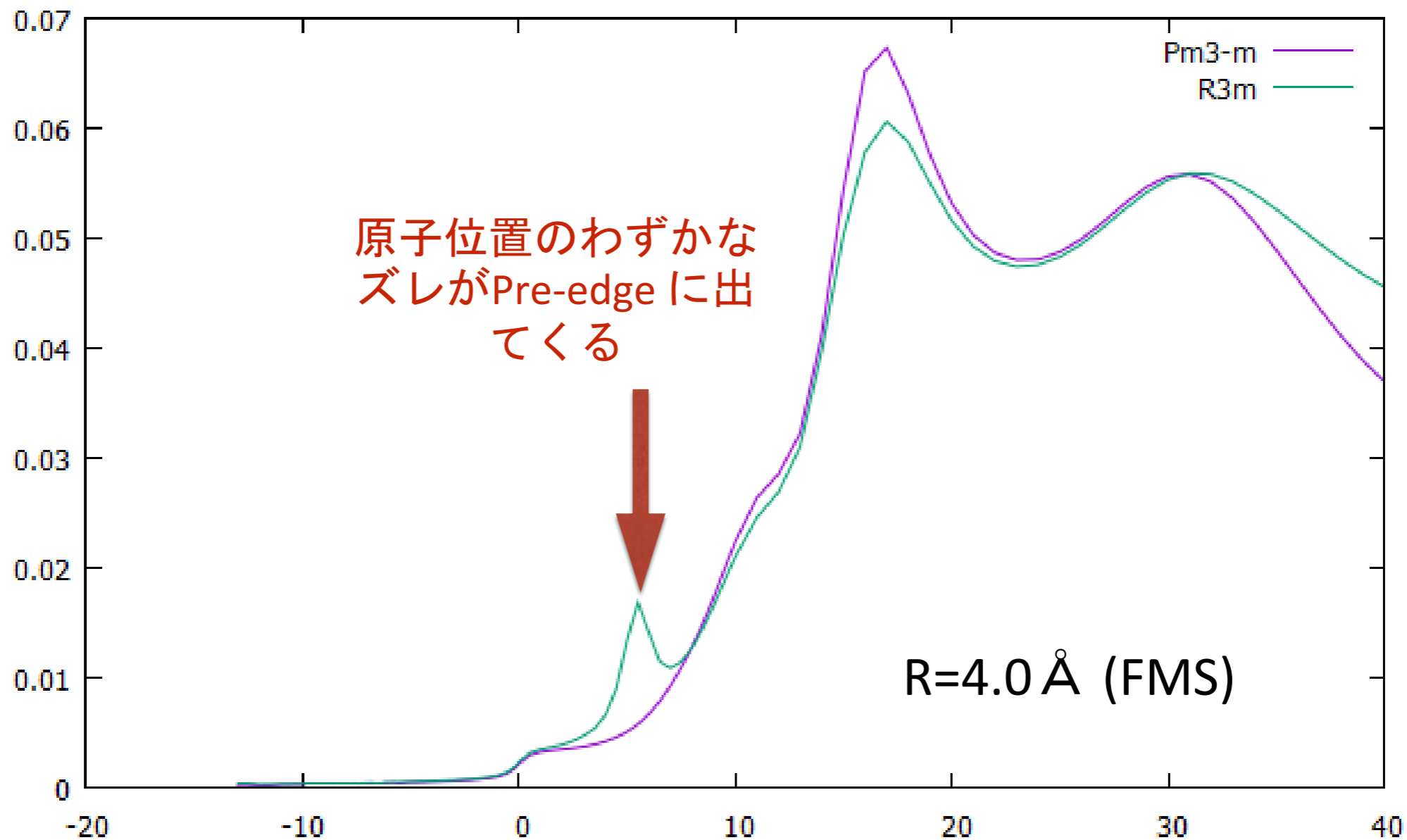
3) plot が終わったらGNUPLOTを閉じる

,(カンマ)後 改行せずにつなげる(1行で書く)

- 1) cd ¥cal
- 2) wgnuplot

コロン
↓
スペース
↓

- 3) plot 'BaTiO3_Pm3-m¥BaTiO3_conv.txt' u 1:2 w l to 'Pm3-m',
'BaTiO3_R3m¥BaTiO3_conv.txt' u 1:2 w l to 'R3m'



- 4) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる

常誘電相(Pm3-m)

1) cd ¥cal ¥BaTiO3_Pm3-m

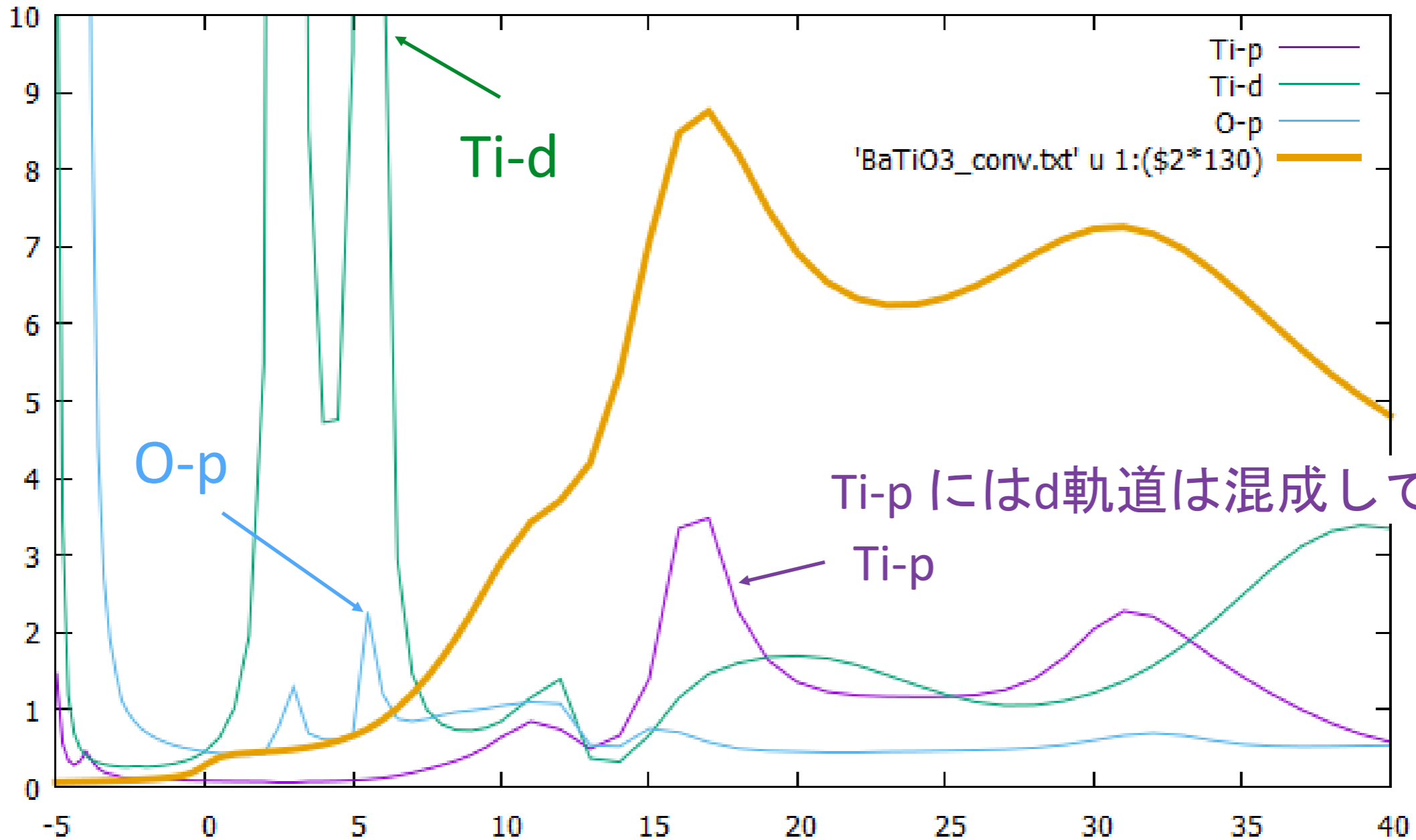
2) wgnuplot

```
3) plot [-5:40][:10] 'BaTiO3_sd0.txt' u 1:7 w l o Ti-p',  
      'BaTiO3_sd0.txt' u 1:14 w l o Ti-d',  
      'BaTiO3_sd3.txt' u 1:7 w l o O-p',  
      'BaTiO3_conv.txt' u 1:($2*130) w l w 3 XANES'
```

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GNU PLOTを閉じる



Ti-p にはd軌道は混成していない!

Ti-p

1) cd ¥cal¥BaTiO3_R3m

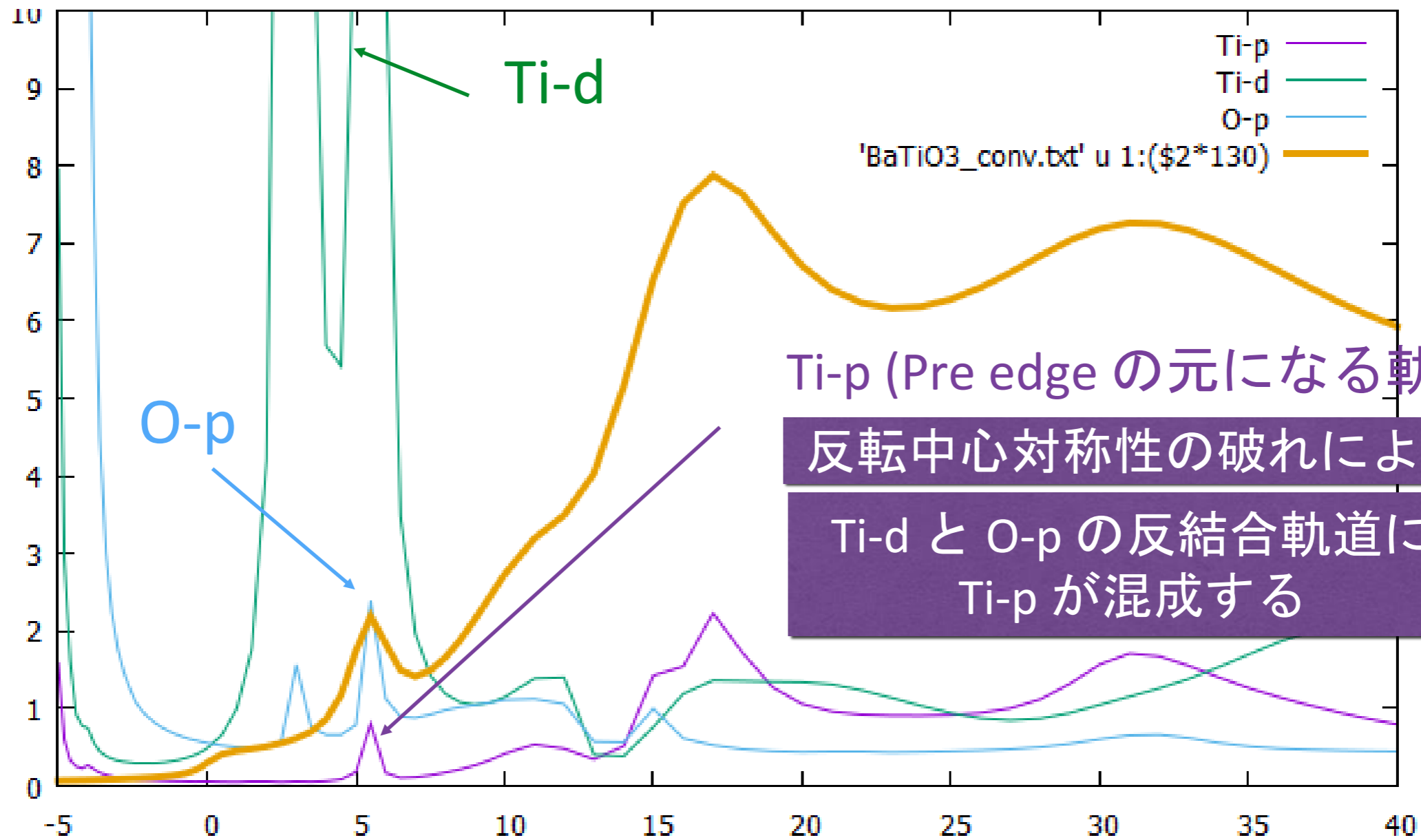
2) wgnuplot

```
3) plot [-5:45][:10] 'BaTiO3_sd0.txt' u 1:7 w l to 'Ti-p',  
      'BaTiO3_sd0.txt' u 1:14 w l to 'Ti-d',  
      'BaTiO3_sd3.txt' u 1:7 w l to 'O-p',  
      'BaTiO3_conv.txt' u 1:($2*130) w l w 3 to 'XANES'
```

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GNU PLOTを閉じる



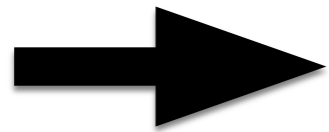
Ti-p (Pre edge の元になる軌道)
反転中心対称性の破れにより
Ti-d と O-p の反結合軌道に
Ti-p が混成する

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

$$H = H_d + H_p + V$$

$$\psi = c_d \psi_d + c_p \psi_p$$

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\begin{pmatrix} E_d & \langle \psi_d | V | \psi_p \rangle \\ \langle \psi_p | V | \psi_d \rangle & E_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_d \\ c_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_d \\ c_p \end{pmatrix}$$

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

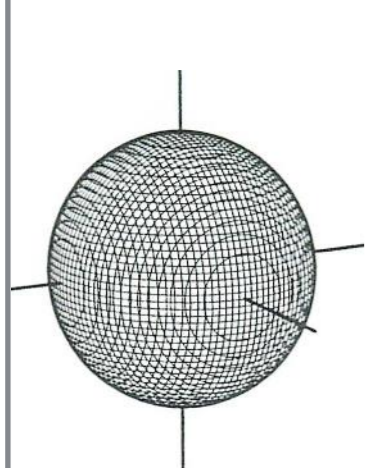


on-siteでTiのp軌道とd軌道は混成する

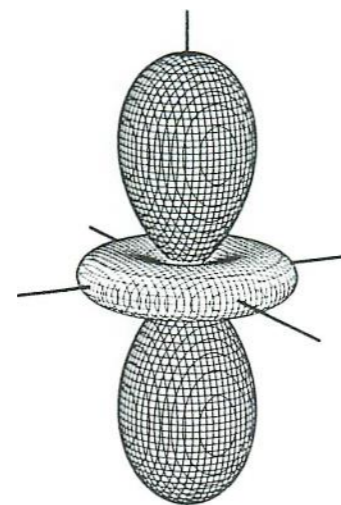
偶関数

$$f(-x) = f(x)$$

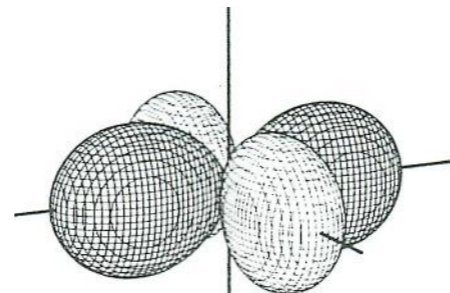
$$\int_{-a}^a f(x) \neq 0$$



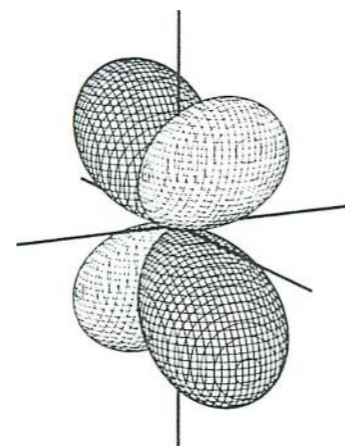
s



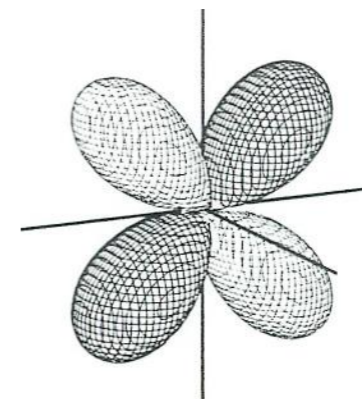
$d(3z^2 - r^2)$



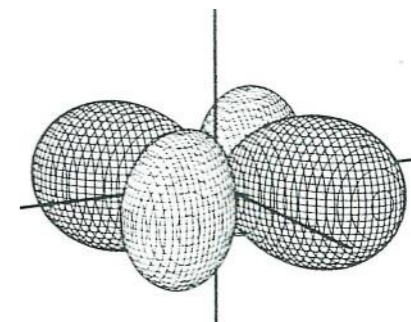
$d(x^2 - y^2)$



$d(yz)$



$d(zx)$

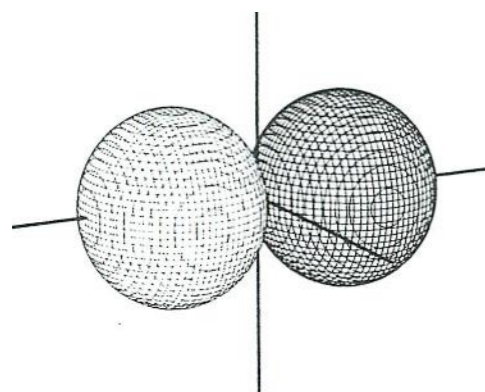


$d(xy)$

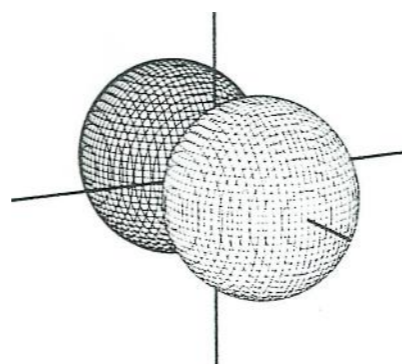
奇関数

$$f(-x) = -f(x)$$

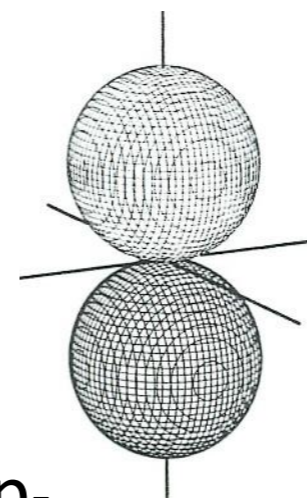
$$\int_{-a}^a f(x) = 0$$



p_x

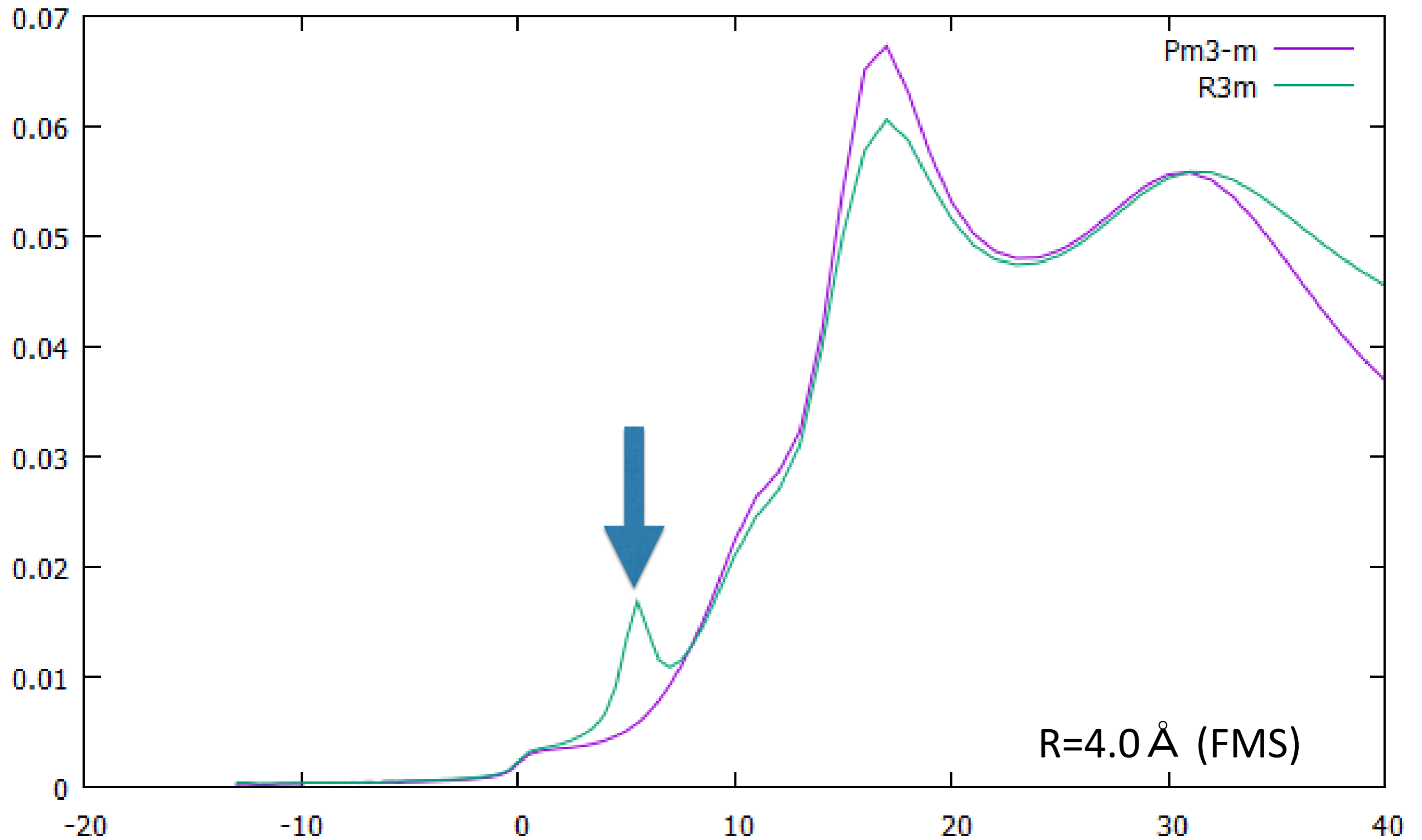


p_y



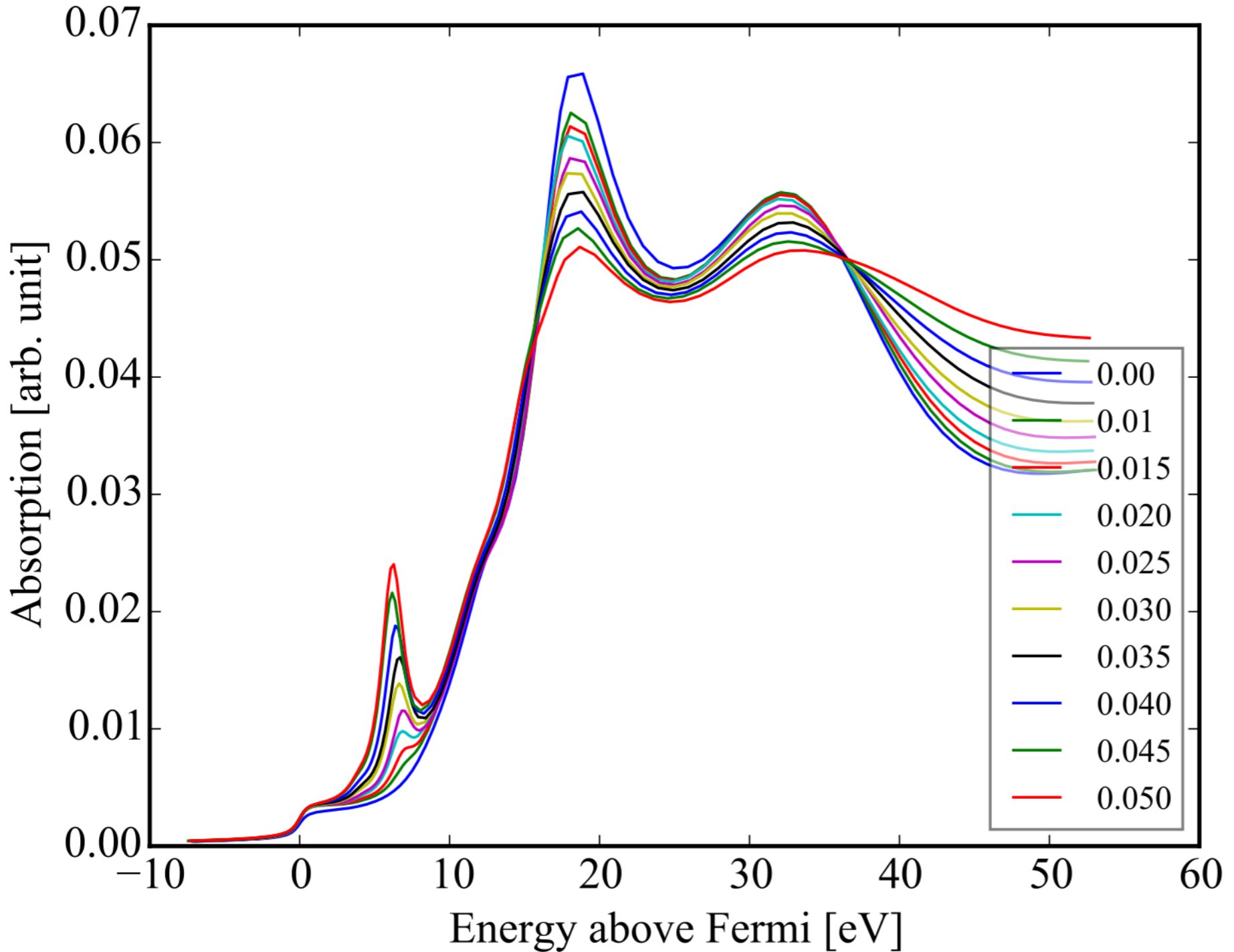
p_z

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

四極子展開を考慮した計算

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

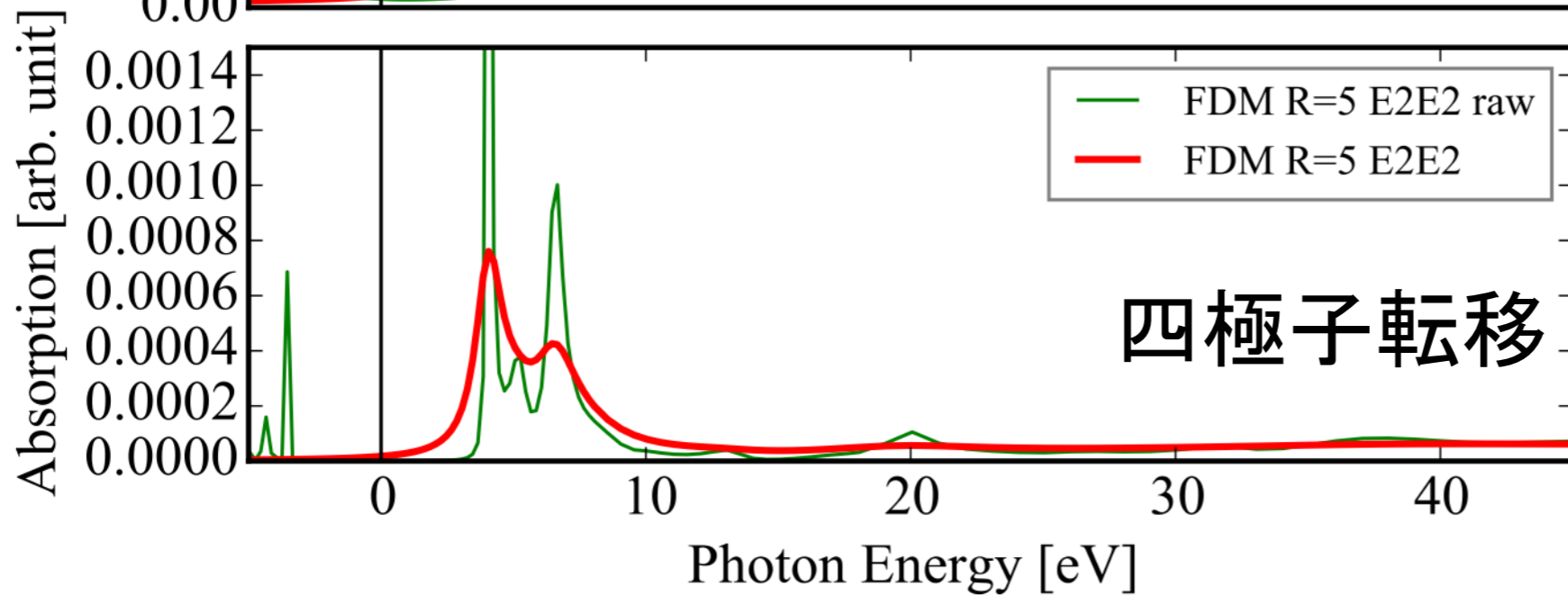
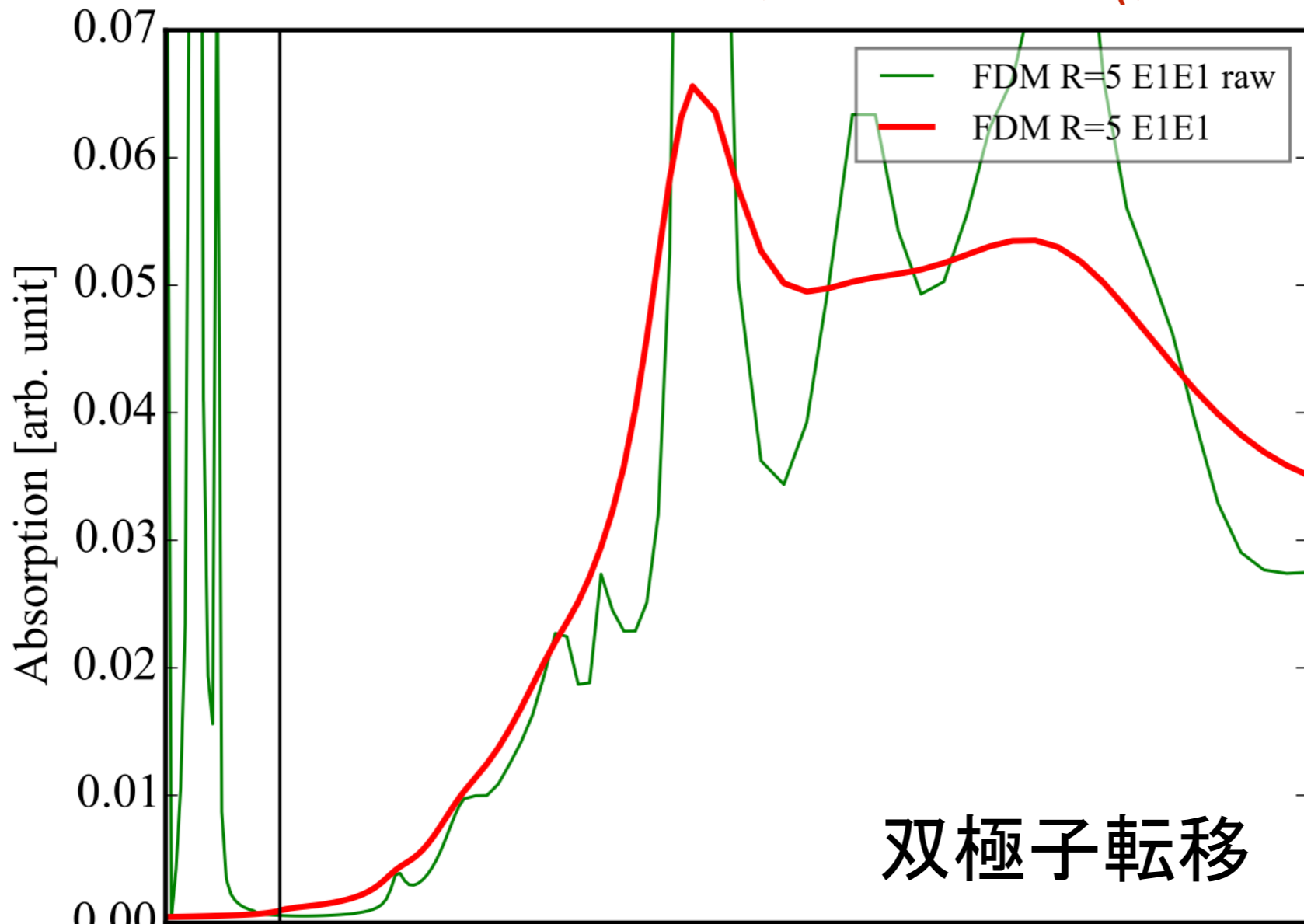
8 0.0000 0.5000 0.0000 !O

8 0.0000 0.0000 0.5000 !O

End

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.

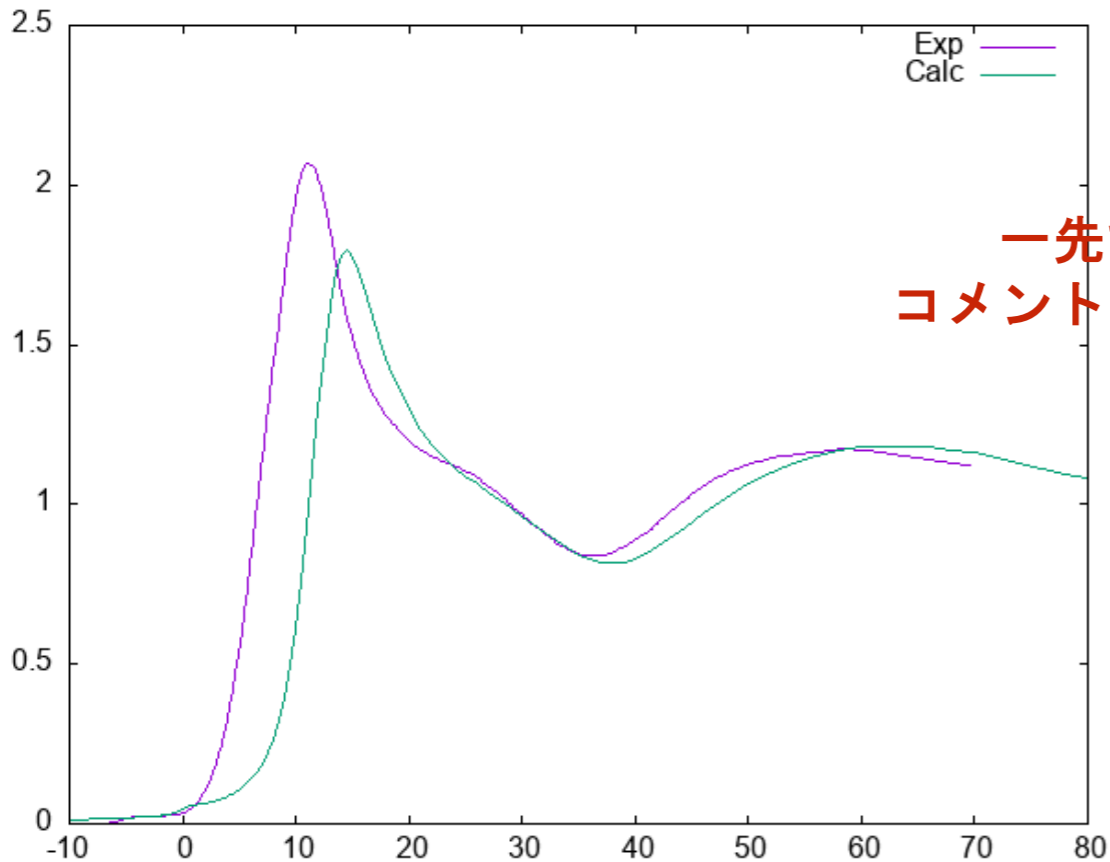
パラメーターの参照スペクトルへのフィット
～FeO6を例題として～

FeO6 (Fit無し:NoFit)

- (1) cd %cal
- (2) mkdir FeO6_NoFit
- (3) cd FeO6_NoFit
- (4) cp ../Cu%fdmfile.txt .
- (5) cp %fdmnes%Sim%Test_stand%in%FeO6* .
- (6) mv FeO6_inp.txt inp.txt
- (7) **start inp.txt**

- (8) fdmnes_win64.exe
- (9) (FeO6_NoFit_conv.txtの一行目に#)

- (10) wgnuplot
- (11) plot 'FeO6_NoFit_conv.txt' u 1:(\$2*35) w l
- (12) replot 'FeO6_exp.txt' u 1:2 w l



— 先ず
コメントアウト

Filout
FeO6_NoFit

Range
-2. 0.1 2. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50. 2. 80.

Radius
3.0

Green

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

Convolution

Estart
-10.

! Experiment
! FeO6_exp.txt

! Gen_Shift
! -6. -2. 21

! Parameter
! Par_abc
! -10. 0. 3.

! Parameter
! Par_Gamma_max
! 10. 15. 3

Minimum and maximum energy shift
between calculation and experiment and
number of value to test

General contraction or expansion in %

Minimum, Maximum, NumberOfValuesToTest

Maximum width for the final states

Minimum, Maximum, NumberOfValuesToTest

Γ_{max}

FeO6 (Fit有り:Fit)

- (1) cd %cal
- (2) mkdir FeO6_Fit
- (3) cd FeO6_Fit
- (4) cp ../Cu%fdmfile.txt .
- (5) cp %fdmnes%Sim%Test_stand%in%FeO6* .
- (6) mv FeO6_inp.txt inp.txt
- (7) start inp.txt

- (8) fdmnes_win64.exe

```
Windows PowerShell
Gamma_max = 16.20, Ecent = 30.00, Elarg = 30.00
Gamma_hole = 1.25, E_cut = 0.000, Shift = 0.000 eV
  E_(eV)      Width_(eV)  lambda_(A)
-10.000      1.250      0.000
  0.000      1.250      0.000
  2.000      1.291     210.127
  8.000      1.907     19.489
 14.000      3.338      7.668
 20.000      5.584      4.316
 26.000      8.024      3.112
 32.000      9.894      2.683
 38.000     11.148      2.536
 44.000     12.006      2.498
 50.000     12.630      2.506
 56.000     13.108      2.536
 62.000     13.490      2.578
 68.000     13.805      2.626
 74.000     14.071      2.677
 80.000     14.299      2.730

-----
Calculation with optimized parameters:
  gamma_max = 16.19814,
    abc = -4.53915,

D1 = 2.625983, general shift = -5.40 eV, ... up to now, best value !
Rx = 1.209814, general shift = -5.20 eV
PS C:\cal\FeO6_Fit>
```

Fileout

FeO6_Fit

Range

-2. 0.1 2. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50. 2. 80.

Radius

3.0

Green

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

Convolution

Estart

-10.

Experiment

FeO6_exp.txt

Gen_Shift

-6. -2. 21

Minimum and maximum energy shift
between calculation and experiment and
number of value to test

Parameter

Par_abc

-10. 0. 3.

General contraction or expansion in %

Minimum, Maximum, NumberOfValuesToTest

Parameter

Par_Gamma_max

10. 15. 3

Maximum width for the final states

Minimum, Maximum, NumberOfValuesToTest

Γ_{max}

フィッティングの結果はFeO6_Fit_fit.txtに出力されている。

実験スペクトルとの比較

- (1) (FeO6_Fit_conv.txtの一行目に#)
- (2) wgnuplot
- (3) plot 'FeO6_Fit_conv.txt' u (\$1-5.40):(\$2*35) w l t 'Fit'
- (4) replot '..¥FeO6_NoFit¥FeO6_NoFit_conv.txt' u (\$1-5.40):(\$2*35) w l 'NoFit'
- (5) replot 'FeO6_exp.txt' u 1:2 t 'Exp'

```

Calculation with optimized parameters:
  gamma_max = 16.19814,
  abc = -4.53915,

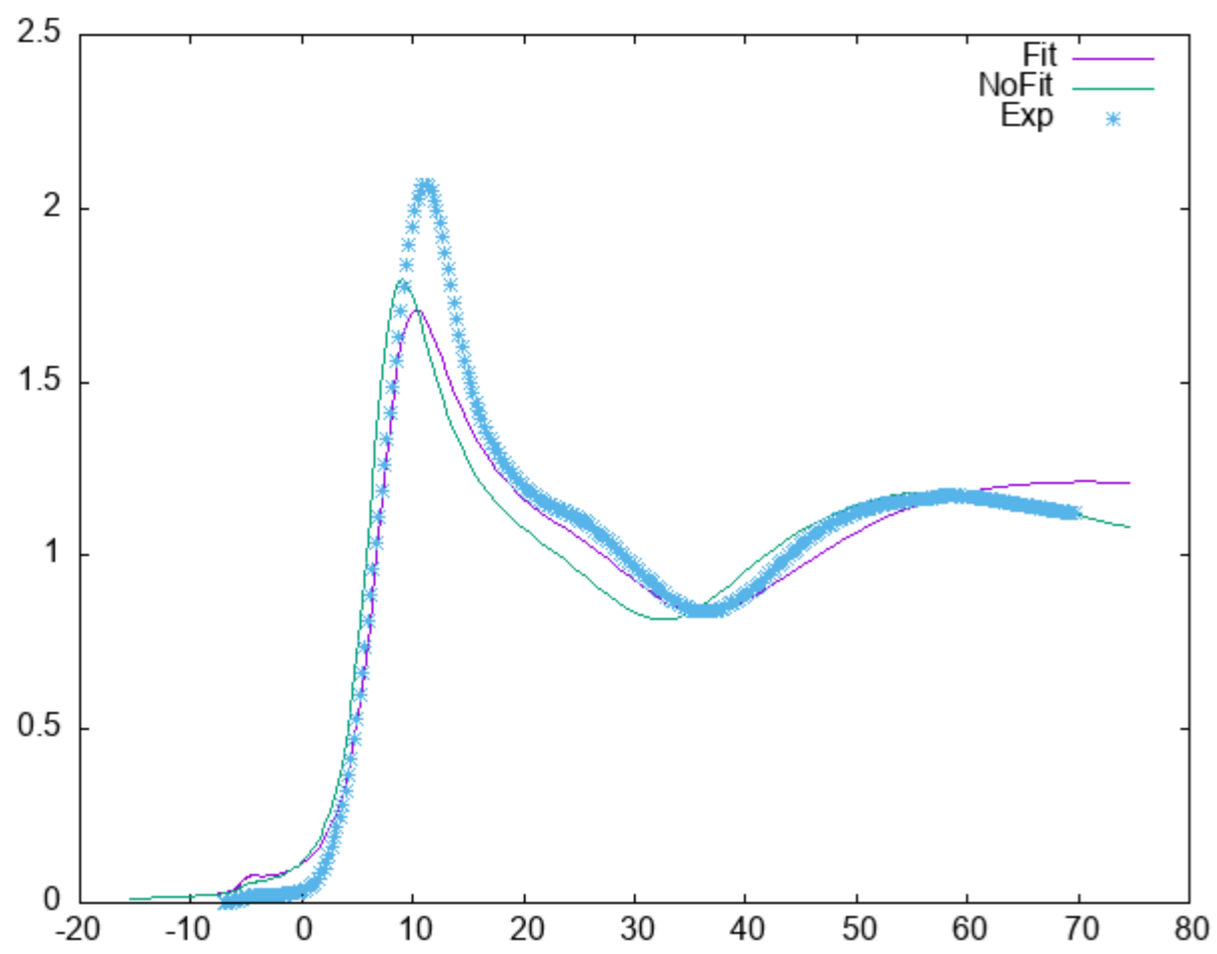
  D1 = 2.625983, general shift = -5.40 eV,
  Rx = 1.209814, general shift = -5.20 eV
    
```

$$abc = -4.53915\%$$



$$a, b, c = \frac{(100 - 4.53915)}{100} \times 2.061$$

$$= 2.061 \dots$$



```

FeO6_Fit_bav.txt - メモ帳
ファイル 編集 表示

Molecule. n_atom uc = 7
a. b. c = 2.0619545 2.0619545 2.0619545
alfa, beta, gamma = 90.000 90.000 90.000
  z      x      y      z      Typ
26 0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000 1
 8 1.0000000000 0.0000000000 0.0000000000 2
 8 -1.0000000000 0.0000000000 0.0000000000 2
 8 0.0000000000 1.0000000000 0.0000000000 2
 8 0.0000000000 -1.0000000000 0.0000000000 2
 8 0.0000000000 0.0000000000 1.0000000000 2
 8 0.0000000000 0.0000000000 -1.0000000000 2
    
```

計算スペクトルのファイルは、フィッティング後のパラメータが使用されている。

新version(2022.6.15) 公式マニュアル p.68

The parameters can be fitted are:

For the convolution:

| | |
|-----------------------|--|
| <i>Par_acent</i> | → Central energy for the arctangent |
| <i>Par_elarg</i> | → Energy width for the arctangent |
| <i>Par_efermi</i> | → Fermi (or cutting) energy |
| <i>Par_gamma_hole</i> | → Hole width |
| <i>Par_gamma_max</i> | → Maximum width for the final states |
| <i>Par_gauss</i> | → Gaussian width (or resolution) |
| <i>Par_shift</i> | → Energy shift |
| <i>Par_weight</i> | → weight |
| <i>Par_weight_co</i> | → weight for the average weight between 2 sets of calculated spectra |
| <i>Par_aseah</i> | → First parameter of the Seah-Dench formula |
| <i>Par_abs_u_iso</i> | → Mean square displacement of the absorbing atoms |

For the spectra calculation:

| | |
|----------------------|--|
| <i>Par_a</i> | → Contraction or expansion of the mesh parameter a in % |
| <i>Par_b</i> | → Contraction or expansion of the mesh parameter b in % |
| <i>Par_c</i> | → Contraction or expansion of the mesh parameter c in % |
| <i>Par_abc</i> | → General contraction or expansion in % |
| <i>Par_anga</i> | → Value of the unit mesh angle α |
| <i>Par_angb</i> | → Value of the unit mesh angle β |
| <i>Par_angc</i> | → Value of the unit mesh angle γ |
| <i>Par_poporb</i> | → Orbital occupancy |
| <i>Par_posx</i> | → Atom position along x |
| <i>Par_posy</i> | → Atom position along y |
| <i>Par_posz</i> | → Atom position along z |
| <i>Par_occup</i> | → occupancy of the atom |
| <i>Par_dposx</i> | → shift of the atom position along x from the original position |
| <i>Par_dposy</i> | → shift of the atom position along y from the original position |
| <i>Par_dposz</i> | → shift of the atom position along z from the original position |
| <i>Par_theta</i> | → position along θ for an atom in spherical coordinate |
| <i>Par_phi</i> | → position along ϕ for an atom in spherical or cylindrical coordinate |
| <i>Par_v_helm</i> | → Helmholtz potential |
| <i>Par_delta_hel</i> | → Distance of the Helmholtz layer from the topmost atom layer |
| <i>Par_width_hel</i> | → Width of the Helmholtz layer |

Under each parameter must be written the first and last values of the parameter followed by the number of values. For the parameters *Par_posx*, *Par_posy*, *Par_posz*, *Par_theta*, *Par_phi*, the number of the atom must also be specified in fourth position. Under the parameter

例えば、二つの原子のx座標をシフトしたいとき、

Parameter
Par_dposx
-10. 0. 3 1

3つ
1番の原子のx座標を-10, -5, 0 shiftさせて
パラメータフィッティングを行う

Parameter
Par_dposx
-10. 0. 3 2

3つ
2番の原子のx座標を-10, -5, 0 shiftさせて
パラメータフィッティングを行う

いちいち、ParameterおよびPar_dposxのタグを付ける必要がある。

※試行パラメータ数が増えると、その分だけスペクトル計算を内部で行うため、計算に時間が掛かることに注意。

Have a beautiful day !

Appendix

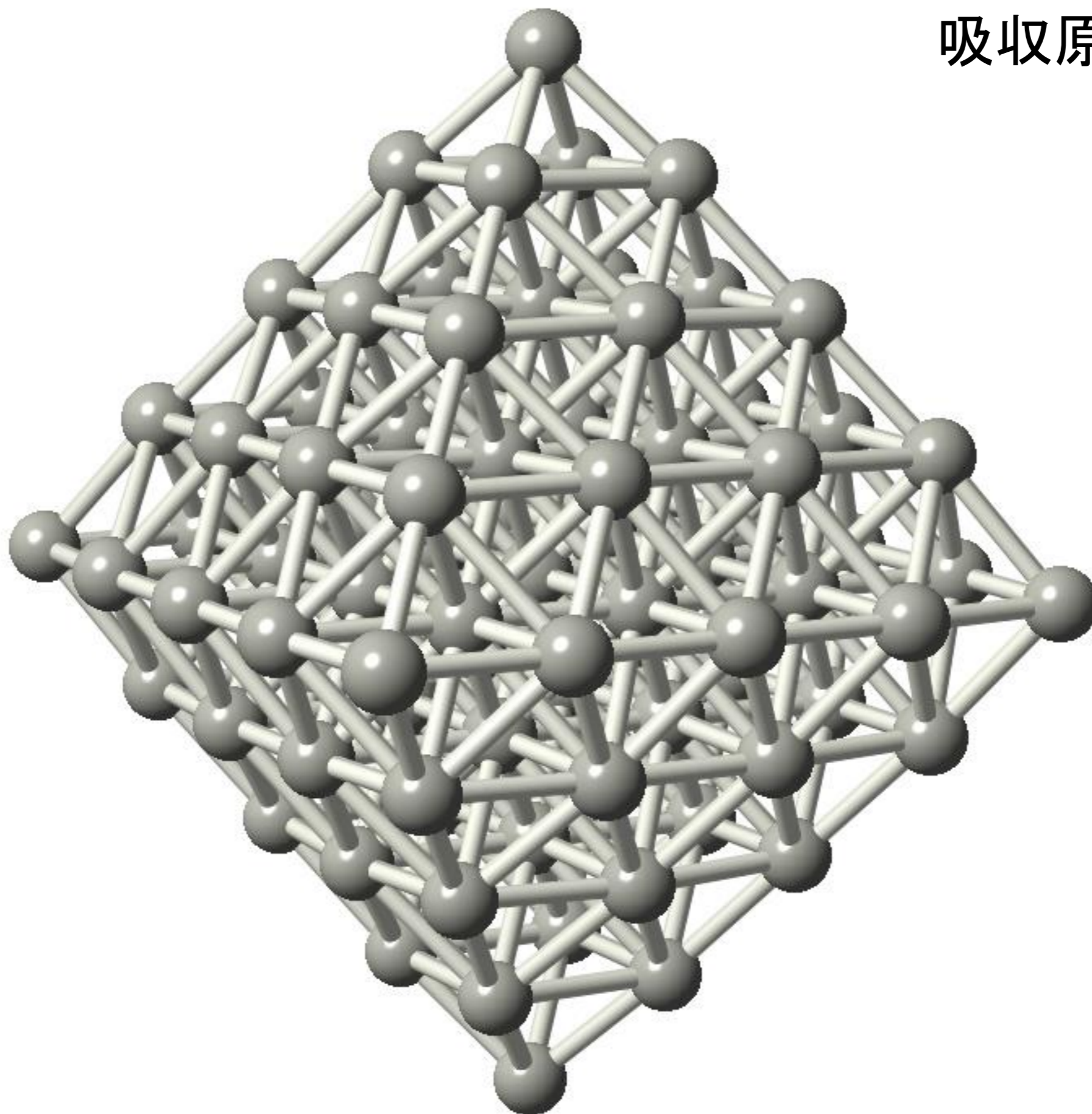
計算時間

Pd85

FDM

nonSCF R6: 2時間48分

吸収原子数: 7個



基底関数の大ざっぱな特徴

| | (FDM) | (LO basis) | (PW basis) |
|------------|-------|-------------|------------|
| | 有限差分 | 局在基底 | 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

1-node

Xeon E5-2667 v2 (3.3GHz)

DDR3-1866 16x16

node: 2ノード
CPU: 32core
メモリ: 512G



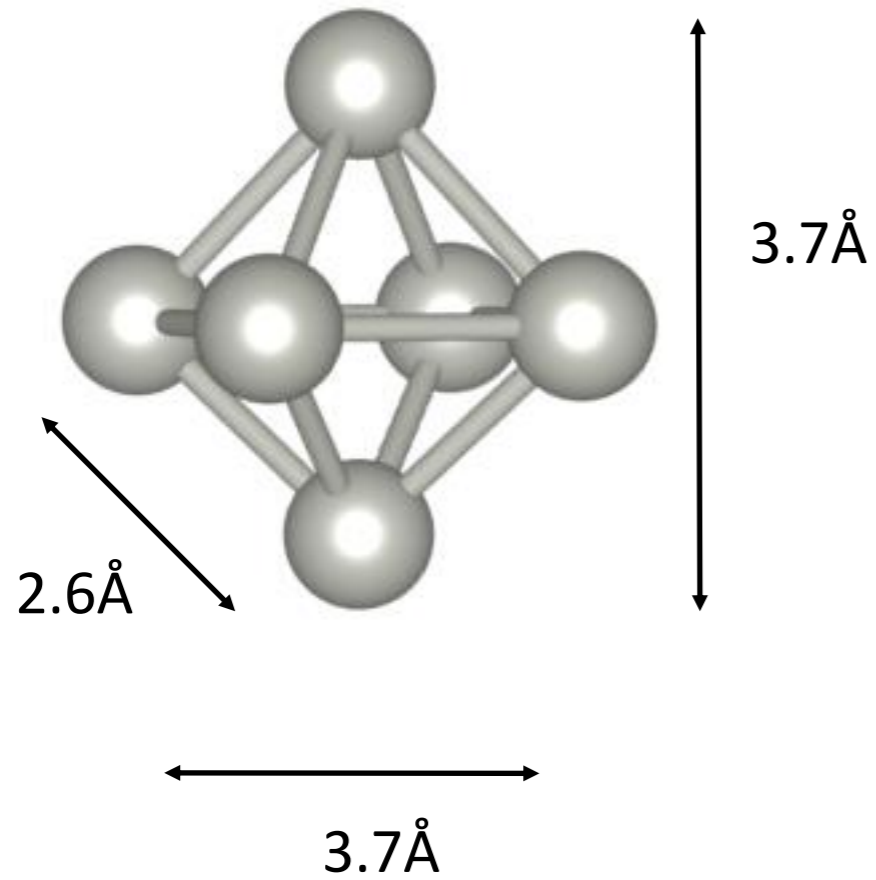
計算速度（だけ）比較、基本はほぼデフォルト値で
テスト(基底とかカットオフとかの比較を考えると**いい加減**)

| 16core | WIEN2k | VASP (high) | PWscf | OpenMX band | OpenMX cluster | GPAW PW | GPAW LCAO | CP2K |
|--------------------------------|----------|----------------|-------|----------------|-------------------|-------------------|--------------|------|
| YTiO ₃ (k:444) | 867.01 | 170.646 | | 311.524 | | 58.881 | 642.071 | |
| Brookite (k:997) | | 478.646 | | 1096.748 | 201.735 | 434.355 | | |
| C60 (k:111) | 42590.01 | 74.388 | | 19.267 | 18.64 | | 20.367 | |
| Graphene 1x1x1 (k:24241) | 155.584 | 6.148 | | 11.635 | 10.276 | 327.155 | 8.319 | |
| H ₂ O mol | 64223.02 | 8.581 | | 6.086 | | | | |
| Methane | | 5.651 | | 5.295 | 4.896 | 56.252 (1core) | | |
| Nitro Benzene | | 59.518 | | 14.911 | 7.585 | | | |

Allsite モード

内容は 2015.01.05 版で検証

Pd6



(構造緩和:VASP)

allsite のときは Absorber を外す

Absorber の代わりに
allsite で計算する

```
!Absorber
```

```
! 1
```

```
allsite
```


もし、

Absorber

1

allsite

site 1 で対称性でグルーピングされたサイトを
すべて計算する

対称性が低ければ、普通一つだけになるので
実質的には absorber 原子だけの計算になる
むしろ allsite のみで計算したほうがよい(時間はかかる)

同一サイト内の結びつけられた2つの原子
(中身は同じ結果になる)

Pd6_atom1_2.txt

Pd6_atom2_2.txt

全部で5つのサイト

Pd6_atom1_1.txt

Pd6_atom1_2.txt

Pd6_atom2_2.txt

Pd6_atom1_3.txt

Pd6_atom1_4.txt

Pd6_atom1_5.txt

```
ipr = 1, Z = 46, natomsym = 1
```

```
igr  posx  posy  posz      sym  code
1  0.50000 0.50000 0.50000      E   1
```

```
ipr = 2, Z = 46, natomsym = 2
```

```
igr  posx  posy  posz      sym  code
2  0.50100 0.49950 0.63220      E   1
3  0.50100 0.63220 0.49950    d_011  43
```

```
ipr = 3, Z = 46, natomsym = 1
```

```
igr  posx  posy  posz      sym  code
4  0.50200 0.63180 0.63180      E   1
```

```
ipr = 4, Z = 46, natomsym = 1
```

```
igr  posx  posy  posz      sym  code
5  0.59480 0.56520 0.56520      E   1
```

```
ipr = 5, Z = 46, natomsym = 1
```

```
igr  posx  posy  posz      sym  code
6  0.40740 0.56660 0.56660      E   1
```

*_bav.txt の最後

Convolution は site1 で行っている
(default absorber で convolution する)

---- Convolution -----

Arctangent model

Gamma_max = 15.00, Ecent = 30.00, Elarg = 30.00

Gamma_hole = 7.94, Efermi + Shift = -5.08, site 1

Pd6_1.txt
Pd6_1_sd0.txt
Pd6_1_sd2.txt
Pd6_1_sd3.txt
Pd6_1_sd4.txt

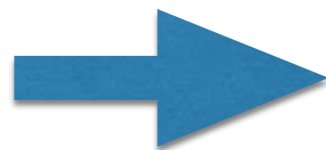
..
..

Pd6_5.txt
Pd6_5_sd0.txt
Pd6_5_sd2.txt
Pd6_5_sd3.txt
Pd6_5_sd4.txt

Pd6_atom1_1.txt
Pd6_atom1_2.txt
Pd6_atom1_3.txt
Pd6_atom1_4.txt
Pd6_atom1_5.txt
Pd6_atom2_2.txt

Pd6_bav.txt

Pd6_conv.txt



default absorber 以外では
convolution されてないので注意

全体のログ

default absorber での convolution



計算後に convolution する

Pd3_1.txt
Pd3_1_sd0.txt
Pd3_1_sd2.txt
Pd3_1_sd3.txt
conv.inp
fdmfile.txt (← conv.inp を読むように修正)
spacegroup.txt
xsect.dat



Pd3_1.txt
Pd3_1_conv.txt
Pd3_1_sd0.txt
Pd3_1_sd2.txt
Pd3_1_sd3.txt
conv.inp
fdmfile.txt
spacegroup.txt
xsect.dat

! Main indata file for fdmnes

Calculation
Pd3_1.txt

注意) 同一ディレクトリ内だと
Calculation名_conv.txt ではダメ

Conv_out ! To specify an output file name
Pd3_1_conv.txt

Convolution
End

allsite 時には

1) FDmakeConvAllsite.py を実行

conv*.inp

fdmfile.txt

作成

2) fdmnes 実行

fdmfile.txt にもとづき conv*.inp の数だけ

Convolution を行う

3) FDplot_xas.py -i conv.inp -a 1 2 3 4 5

-a オプションで引いた site の平均のXAS

をプロット&EPS化

さらに、*_0_conv.txt に平均のデータを出力

FDplot_XAS.py -t Pd6_1 -a 1 2 3 4 5

同じ動作

FDplot_XAS.py -t Pd6_2 -a 1 2 3 4 5

```
INP name      = read_pdb.inp
TEXT name     = Pd6_1
--- average mode
sum : Pd6_1_conv.txt
sum : Pd6_2_conv.txt
sum : Pd6_3_conv.txt
sum : Pd6_4_conv.txt
sum : Pd6_5_conv.txt
```

```
INP FILE      = read_pdb.inp (.inp)
DATA FILE (filout) = Pd6 (.txt)
BAV FILE (filout) = Pd6 (_bav.txt)
```

デフォルトで読み込む
read_pdb.inp
からの filout 情報のファイルが読めないと
プログラムが止まるので、
実際に読めるファイルの -t (生データ)
ファイルを与える

かつ 平均化モードならば
指定したファイルの連番ファイルが平均される

allsite 時にサイトごとのプロット

1) 2) fdmnes 実行までは同じ

3) FDplot_xas.py -a 1

or

3) FDplot_xas.py -i conv*.inp

convolution に用いた conv*.inp ファイルを読み込む
とその inp に対応した plot をする

allsite 時にサイトごとの直接プロット

```
1 Pd6_1_sd4.txt Pd6_4_conv.txt Pd6_atom1_5.txt conv_1.inp
CONTCAR_Pd6 Pd6_2.txt Pd6_4_sd0.txt Pd6_atom2_2.txt conv_2.inp
FDmakeCconvAllsite.py Pd6_2_conv.txt Pd6_4_sd2.txt Pd6_bav.txt conv_3.inp
FDplot_XAS.py Pd6_2_sd0.txt Pd6_4_sd3.txt Pd6_conv.txt conv_4.inp
FDplot_XASs.py Pd6_2_sd2.txt Pd6_4_sd4.txt ReadFdm.py conv_5.inp
MY_PYTHON Pd6_2_sd3.txt Pd6_5.txt ReadFdmBav.py fdLDOS0_specified.py
PBS_log Pd6_2_sd4.txt Pd6_5_conv.txt ReadFdmConv.py fdm.out
POSCAR Pd6_2_sd5.txt Pd6_5_sd0.txt ReadFdmInp.py fdmfile.txt
POSCAR.fdmnes Pd6_3.txt Pd6_5_sd2.txt ReadFdmSd.py job_neptunium_fdmnes.sh
Pd6_0_conv.txt Pd6_3_conv.txt Pd6_5_sd3.txt SAE read_pdb.inp
Pd6_1.txt Pd6_3_sd0.txt Pd6_5_sd4.txt SAE_my spacegroup.txt
Pd6_1_conv.txt Pd6_3_sd2.txt Pd6_atom1_1.txt XAS.eps xsect.dat
Pd6_1_sd0.txt Pd6_3_sd3.txt Pd6_atom1_2.txt XAS.pdf
Pd6_1_sd2.txt Pd6_3_sd4.txt Pd6_atom1_3.txt XAS.png
Pd6_1_sd3.txt Pd6_4.txt Pd6_atom1_4.txt conv.inp
```

元ファイル: Pd6_1.txt

Convolutionファイル: Pd6_1_conv.txt

FDplot_XAS.py -c Pd6_1 -t Pd6_1

allsite 時に *.inp (fileout)にしたがってサイトごとプロット

```
1 Pd6_1_sd4.txt Pd6_4_conv.txt Pd6_atom1_5.txt conv_1.inp
CONTCAR_Pd6 Pd6_2.txt Pd6_4_sd0.txt Pd6_atom2_2.txt conv_2.inp
FDmakeCconvAllsite.py Pd6_2_conv.txt Pd6_4_sd2.txt Pd6_bav.txt conv_3.inp
FDplot_XAS.py Pd6_2_sd0.txt Pd6_4_sd3.txt Pd6_conv.txt conv_4.inp
FDplot_XASs.py Pd6_2_sd2.txt Pd6_4_sd4.txt ReadFdm.py conv_5.inp
MY_PYTHON Pd6_2_sd3.txt Pd6_5.txt ReadFdmBav.py fdLDOS0_specified.py
PBS_log Pd6_2_sd4.txt Pd6_5_conv.txt ReadFdmConv.py fdm.out
POSCAR Pd6_2_sd5.txt Pd6_5_sd0.txt ReadFdmInp.py fdmfile.txt
POSCAR.fdmnes Pd6_3.txt Pd6_5_sd2.txt ReadFdmSd.py job_neptunium_fdmnes.s
Pd6_0_conv.txt Pd6_3_conv.txt Pd6_5_sd3.txt SAE read_pdb.inp
Pd6_1.txt Pd6_3_sd0.txt Pd6_5_sd4.txt SAE_my spacegroup.txt
Pd6_1_conv.txt Pd6_3_sd2.txt Pd6_atom1_1.txt XAS.eps xsect.dat
Pd6_1_sd0.txt Pd6_3_sd3.txt Pd6_atom1_2.txt XAS.pdf
Pd6_1_sd2.txt Pd6_3_sd4.txt Pd6_atom1_3.txt XAS.png
Pd6_1_sd3.txt Pd6_4.txt Pd6_atom1_4.txt conv.inp
```

```
Filout
Pd19

Calculation
Pd19_1.txt

Conv_out
Pd19_1_conv.txt

Convolution

END
```

conv_1.inp

FDplot_XAS.py -i conv_1.inp



Pd-dimer

---- Symbsite -----

ipr = 1, Z = 46, natomsym = 2

| igr | posx | posy | posz | sym | code |
|-----|---------|---------|---------|--------|------|
| 1 | 0.50000 | 0.50000 | 0.50000 | E | 1 |
| 2 | 0.50000 | 0.50000 | 0.66460 | C2_110 | 10 |

同一サイト内の結びつけられた2つの原子
(中身は同じ結果になる)

Pd2_atom1.txt

Pd2_atom2.txt

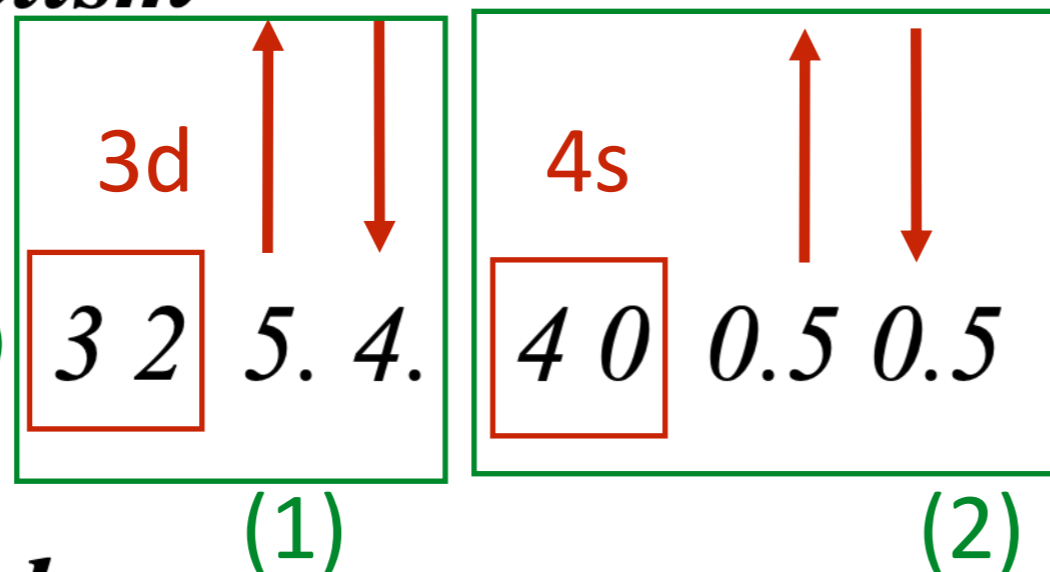
スピン分極計算
2015版ノート

Atom のセクションが必須となる

Magnetism

Atom

28 (2)



Crystal

3.52387 3.52387 3.52387 90. 90. 90.

1 0.0 0.0 0.0

1 0.5 0.5 0.0

1 0.5 0.0 0.5

1 0.0 0.5 0.5

Atom

23 3 3 2 2. 0. 4 0 1. 1. 4 1 0.5 0.5
8 2 2 0 1. 1. 2 1 2. 2.

Crystal

7.255 5.002 5.548 90.0 96.75 90.0 / a, b, c, alfa, beta, gamma

| | | | | |
|-----------|----------------|----------------|----------------|-----------|
| <i>1</i> | <i>0.34380</i> | <i>0.00080</i> | <i>0.29910</i> | <i>V8</i> |
| <i>1</i> | <i>0.65620</i> | <i>0.99920</i> | <i>0.70090</i> | <i>V6</i> |
| <i>1</i> | <i>0.84380</i> | <i>0.99920</i> | <i>0.29910</i> | <i>V3</i> |
| <i>1</i> | <i>0.15620</i> | <i>0.00080</i> | <i>0.70090</i> | <i>V7</i> |
| <i>-1</i> | <i>0.84380</i> | <i>0.50080</i> | <i>0.79910</i> | <i>V4</i> |
| <i>-1</i> | <i>0.15620</i> | <i>0.49920</i> | <i>0.20090</i> | <i>V5</i> |
| <i>-1</i> | <i>0.34380</i> | <i>0.49920</i> | <i>0.79910</i> | <i>V2</i> |
| <i>-1</i> | <i>0.65620</i> | <i>0.50080</i> | <i>0.20090</i> | <i>V1</i> |

↑
antiferro
↓

注意)デフォルトだと fix-spin

For a magnetic calculation, by default the spin polarization is kept fixed in amplitude. The total number of spin up and spin down electron is fixed along the self-consistent (for an antiferro, for the total on the atoms, the number of majoritary spin and minority spin electron are kept fixed). To have it free (equivalent to version before 7th of June 2012), use the keyword:

SCF_mag_free

SCF_mag_free だけだと no SCF 計算になる

| ia | Z | ch_val | ch_core | ch_total | ch_up-dn | ch_out | Charge |
|----|----|--------|---------|----------|----------|--------|--------|
| 1 | 26 | 7.813 | 17.962 | 25.776 | 5.751 | 0.029 | 0.224 |

Number of electron in the valence orbital of the absorbing atom:

Integrated Mulliken

non excited atom = 5.751 6.000

excited atom = 6.784 7.000

妙に大きいスピンモーメントが出てくる

---- Potcomp

VmoyF = -19.370 eV, Vmoyc = -8.958 eV

Cycle 1, Fermi Energy = -4.083 eV, Cluster Energy_KS = -61.808 eV

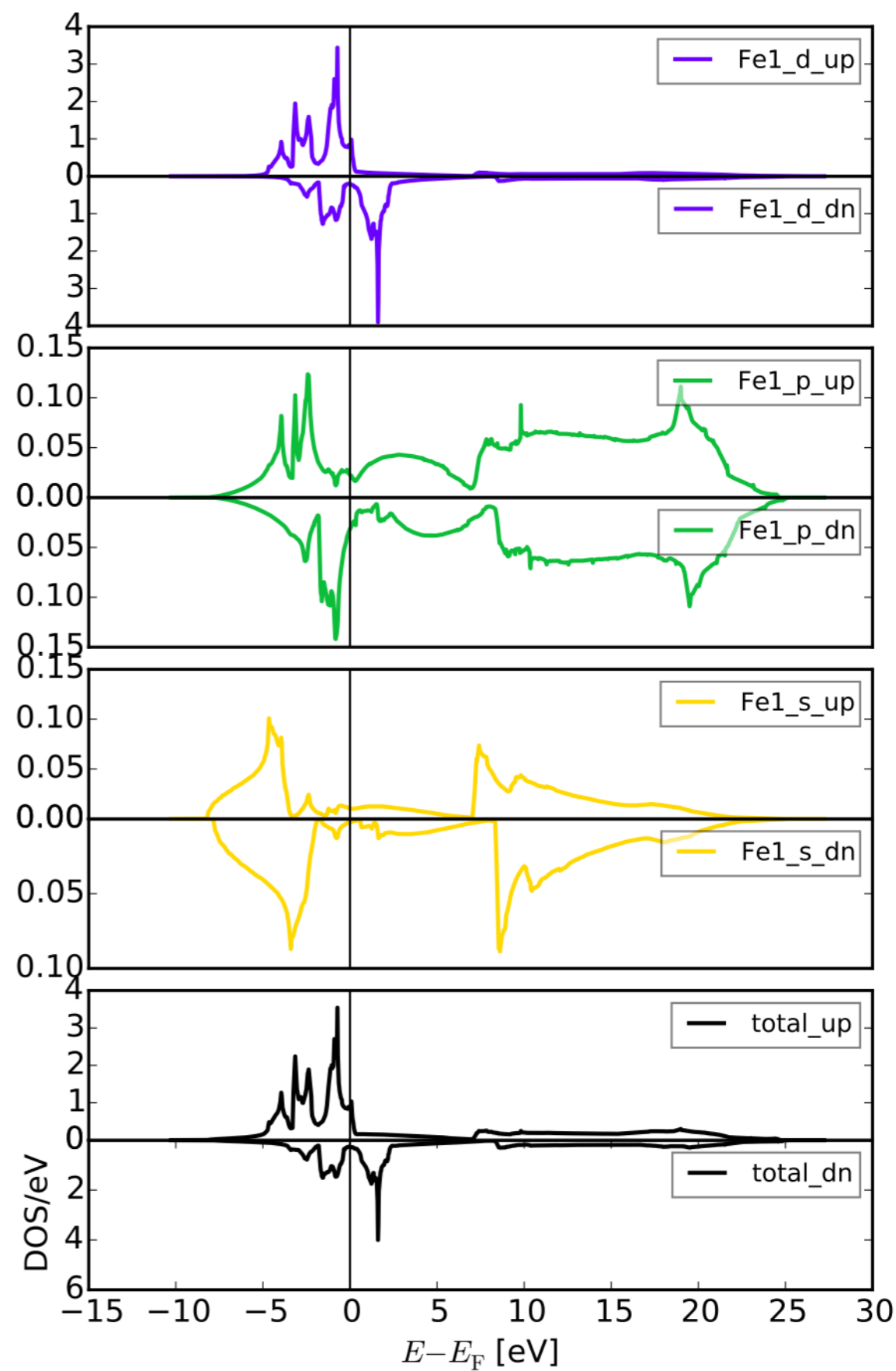
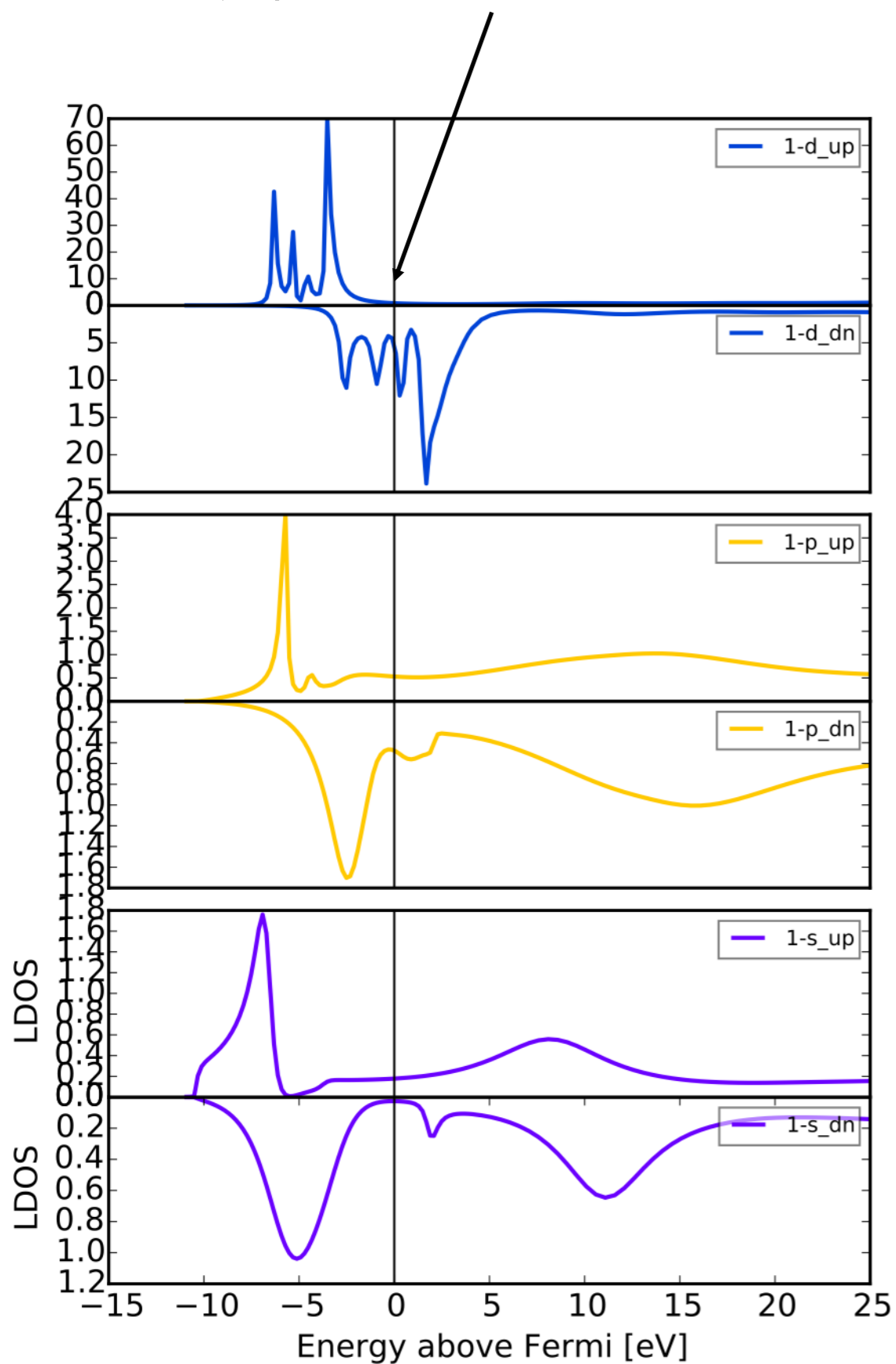
Level val absorb = -5.133 eV

| ia | Z | Energy_KS | Charge | up-dn | pop_orb_val(l) | l | Radius |
|----|----|-----------|--------|-------|----------------|---|---------|
| 1 | 26 | -61.808 | 0.224 | 3.111 | 6.358 | 2 | 1.36703 |

FDMNES without hole

VASP

スピンの分極がアホみたいに大きい



absorbeur
range
edge
green
radius
relativis
magnetism
scf
r_self
scf_mag_f
atom
crystal
density
state_all
nonexc

SCF_mag_free (スピンモーメントFree) SCF (SCF 計算)

スピン分極が大きい (Highspin の解?)

Cycle 1, Fermi Energy = -4.091 eV, Cluster Energy_KS = -61.844 eV
Level val absorb = -5.140 eV

| ia | Z | Energy_KS | Charge | up-dn | pop_orb_val(l) | l | Radius |
|----|----|-----------|--------|-------|----------------|---|---------|
| 1 | 26 | -61.844 | 0.224 | 3.119 | 6.359 | 2 | 1.36703 |

....

Cycle 5, Fermi Energy = -4.694 eV, Cluster Energy_KS = -63.285 eV
Level val absorb = -5.723 eV

| ia | Z | Energy_KS | Charge | up-dn | pop_orb_val(l) | l | Radius |
|----|----|-----------|--------|-------|----------------|---|---------|
| 1 | 26 | -63.285 | 0.224 | 2.964 | 6.413 | 2 | 1.36703 |

----- prep_next_iter -----

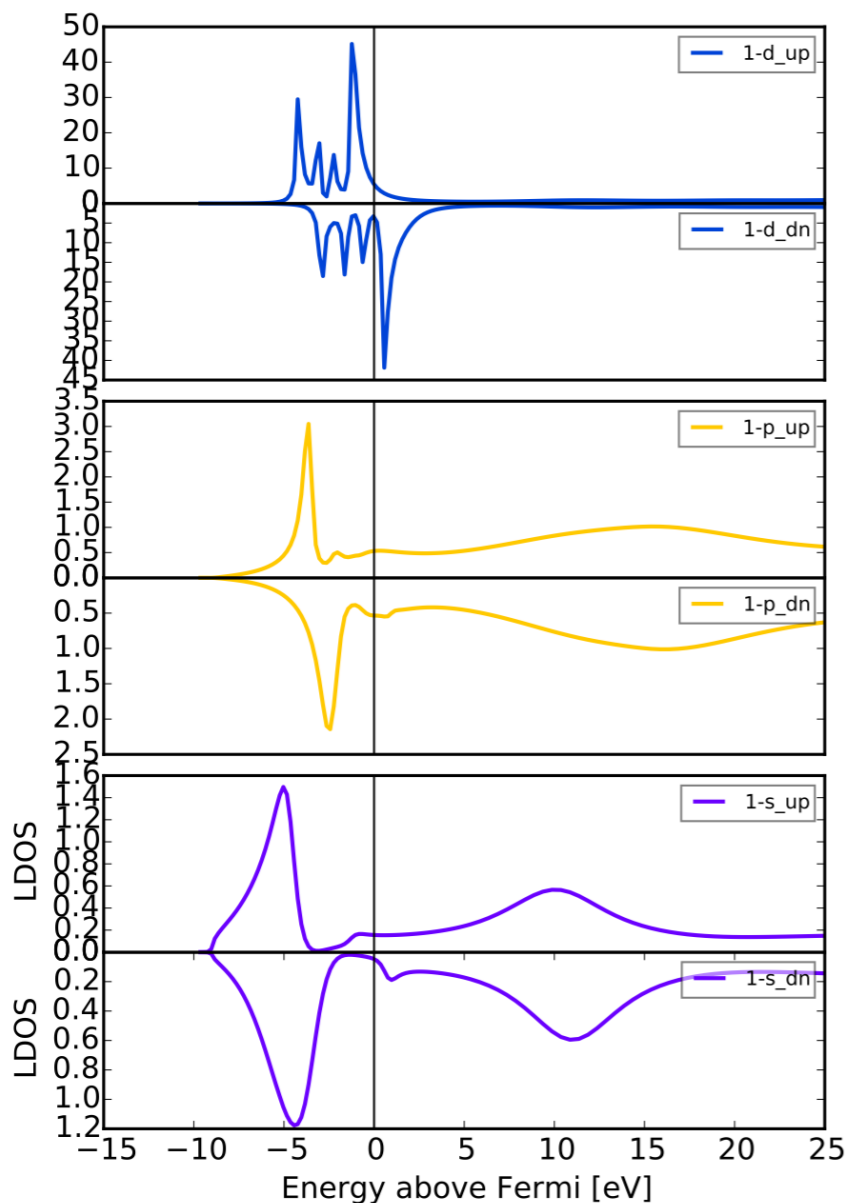
Delta_energ = 0.830 eV < Delta = 1.000 eV, Weight = 0.10000

d軌道
up(6), dn(0)

スピンの初期配置にかなり敏感

Cycle 6, Fermi Energy = -5.365 eV, Cluster Energy_KS = -61.155 eV
 Level val absorb = -5.955 eV

| ia | Z | Energy_KS | Charge | up-dn | pop_orb_val(l) | l | Radius |
|----|----|-----------|--------|-------|----------------|---|---------|
| 1 | 26 | -61.155 | 0.224 | 2.019 | 6.494 | 2 | 1.36703 |



good!!

初期スピン配置

| Atom | 26 | 2 | 3 | 2 | 4.0 | 2.0 | 4 | 0 | 1.0 | 1.0 |
|------|----|---|---|---|-----|-----|---|---|-----|-----|
| | | | | | | | | | | |

| Crystal | 2.4855 | 2.4855 | 2.4855 | 109.4712 | 109.4712 | 109.4712 |
|---------|---------|--------|--------|----------|----------|----------|
| 1 | -0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | !Fe | | |

FDMNES 2015.10.15版

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>

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

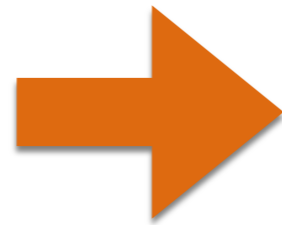
BLAS

BLACS

ScaLAPAC

make

make z



lib/libdmumps.a

lib/libmumps_common.a

lib/libpord.a

lib/libzmumps.a

4つのライブラリが作られる

scotch 6.0.4

cd src

Makefile.inc

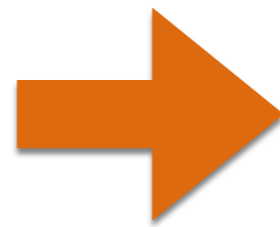
Make.inc/Makefile.inc.i686_pc_linus2 ベース

LDFLAGS = -lz -lm -pthread -lrt

追加

make

make esmumps



libscotch/libscotch.a

libscotch/libscotcherr.a

esmumps/libesmumps.a

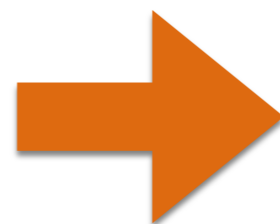
METIS library

CMake 2.8 以上が必要

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

make

make install



~/lib/metis/lib/libmetis.a

FDMNES の Makefile Intel Compiler, MKL and OpenMPI

.SUFFIXES: .f90

FC = mpif90

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 ¥

-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