

## 実習 FDMNESによるXANESシミュレーション

中田謙吾  
JASRI/SPring-8



### 講習の流れ

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

インストールと操作

- ▶ **Cu-foil の試し計算**
- ▶ FDMNESの基本的な流れ
- ▶ 入力ファイルの解説 -基礎-
- ▶ 入力ファイルの解説 -構造情報の作成-
- ▶ 入力ファイルの解説 -クラスター半径-
- ▶ **出力ファイルの解説 -フェルミレベル-**
- ▶ 出力ファイルの解説 -Convolution-
- ▶ **Cu<sub>2</sub>Oの計算(クラスター半径の違い等)**
- ▶ **Cu<sub>2</sub>OのLDOS計算、出力ファイルの解説 -LDOS-**
- ▶ **BaTiO<sub>3</sub> の計算(Pm3-mとR3m)**

基本的な計算と解説

- ▶ 時間があれば Appendix の解説

# FDMNES

## Cu-foil のお試し計算

とにかく動かしてみる

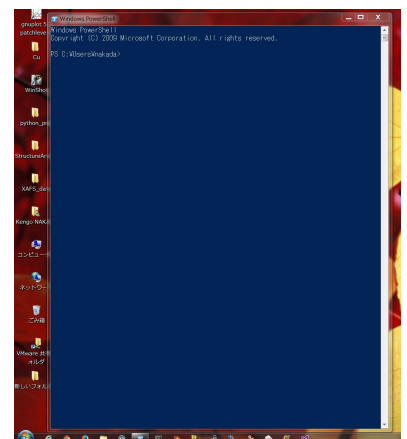
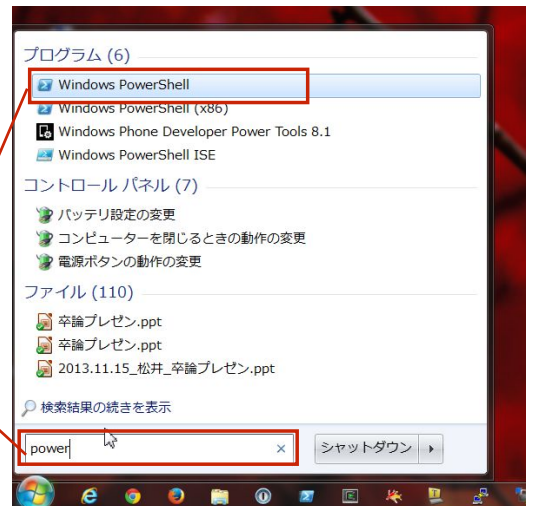
### 0) PowerShell を開く

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

Windows 7 (64bit)

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

Windows 8 (64bit)



PowerShell が立ち上がる

## 1) 計算用ディレクトリに移動する

スペース

cd ¥cal

\*) C: などのドライブ指定は同じドライブ内移動ならば省略できる

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

カレントディレクトリが C:¥cal に移動したのが確認できる

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

## 1) Cu-foil の計算用ディレクトリを作成する

スペース

mkdir ¥Cu

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

ディレクトリ: C:¥cal

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

PS C:¥cal>
```

## 2) Cu-foil の計算用ディレクトリに移動する

スペース

cd ¥Cu

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

### 3) 計算用に必要な基本データベースをコピーする

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

```
Windows PowerShell
PS C:\¥ca\¥Cu> cp C:\¥fdmnes¥spacegroup.txt .
PS C:\¥ca\¥Cu> cp C:\¥fdmnes¥xsect.dat .
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)

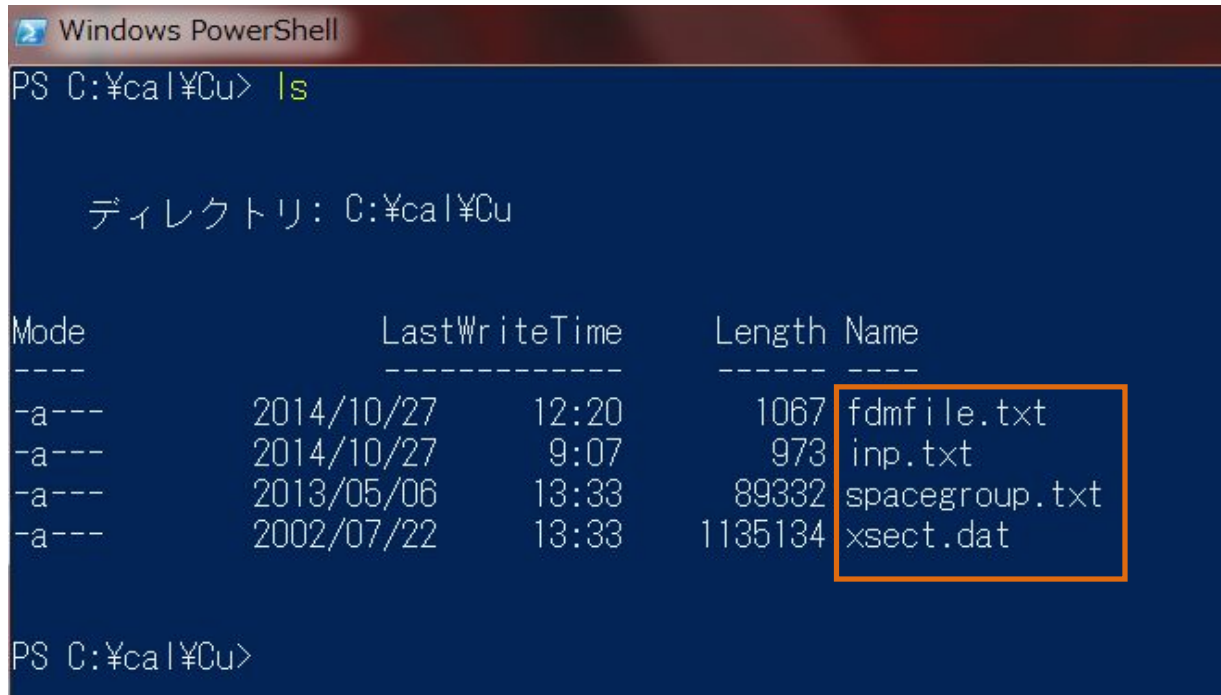
### 4) Cu の計算用入力ファイルをコピーする

スペース ↓ cp ¥fdmnes ¥Sim ¥Test\_stand ¥in ¥Cu\_inp.txt inp.txt  
cp ¥fdmnes ¥fdmfile.txt . ← ドット  
↑  
スペース

```
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>
```

## 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
-a---             2013/05/06 13:33        89332 spacegroup.txt
-a---             2002/07/22 13:33       1135134 xsect.dat

PS C:\¥ca\¥Cu>
```

4つファイルがコピーされているのを確認する

合計4つのファイル(そのうち二つを編集する)

**inp.txt**

**fdmfile.txt**

**spacegroup.txt**

**xsect.dat**

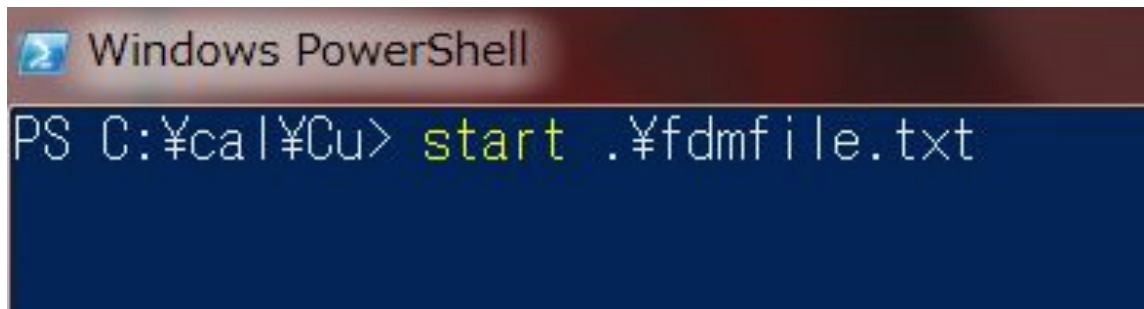
## 6) `fdmfile.txt` を編集する

`start .¥fdmfile.txt`

↑  
スペース

↑  
ドット

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



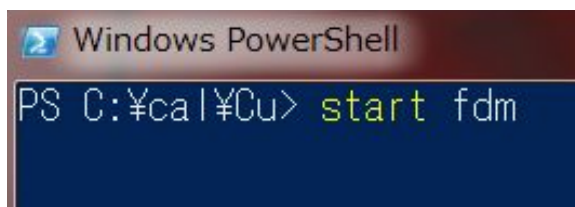
```
Windows PowerShell
PS C:¥ca|¥Cu> start .¥fdmfile.txt
```

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**

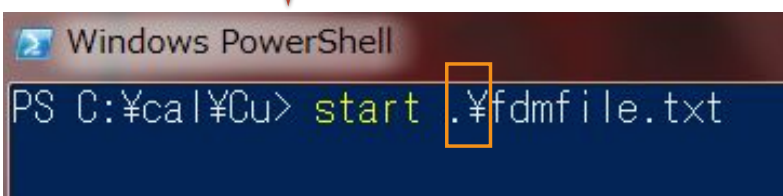


```
Windows PowerShell
PS C:¥ca|¥Cu> start fdm
```

↑  
スペース

`start`□`fdm`  
と入力後 **TAB キー**を押す

↓ **TAB キー**

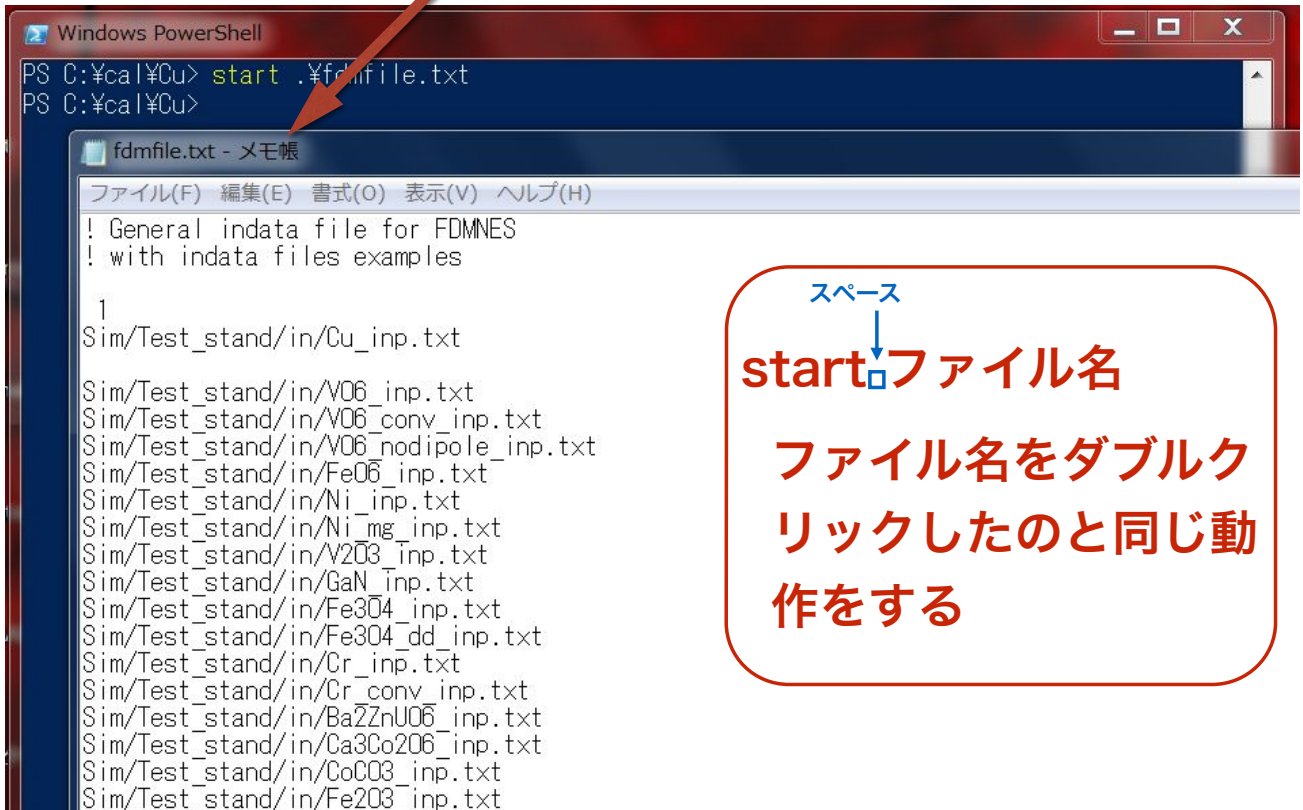


```
Windows PowerShell
PS C:¥ca|¥Cu> start .¥fdmfile.txt
```

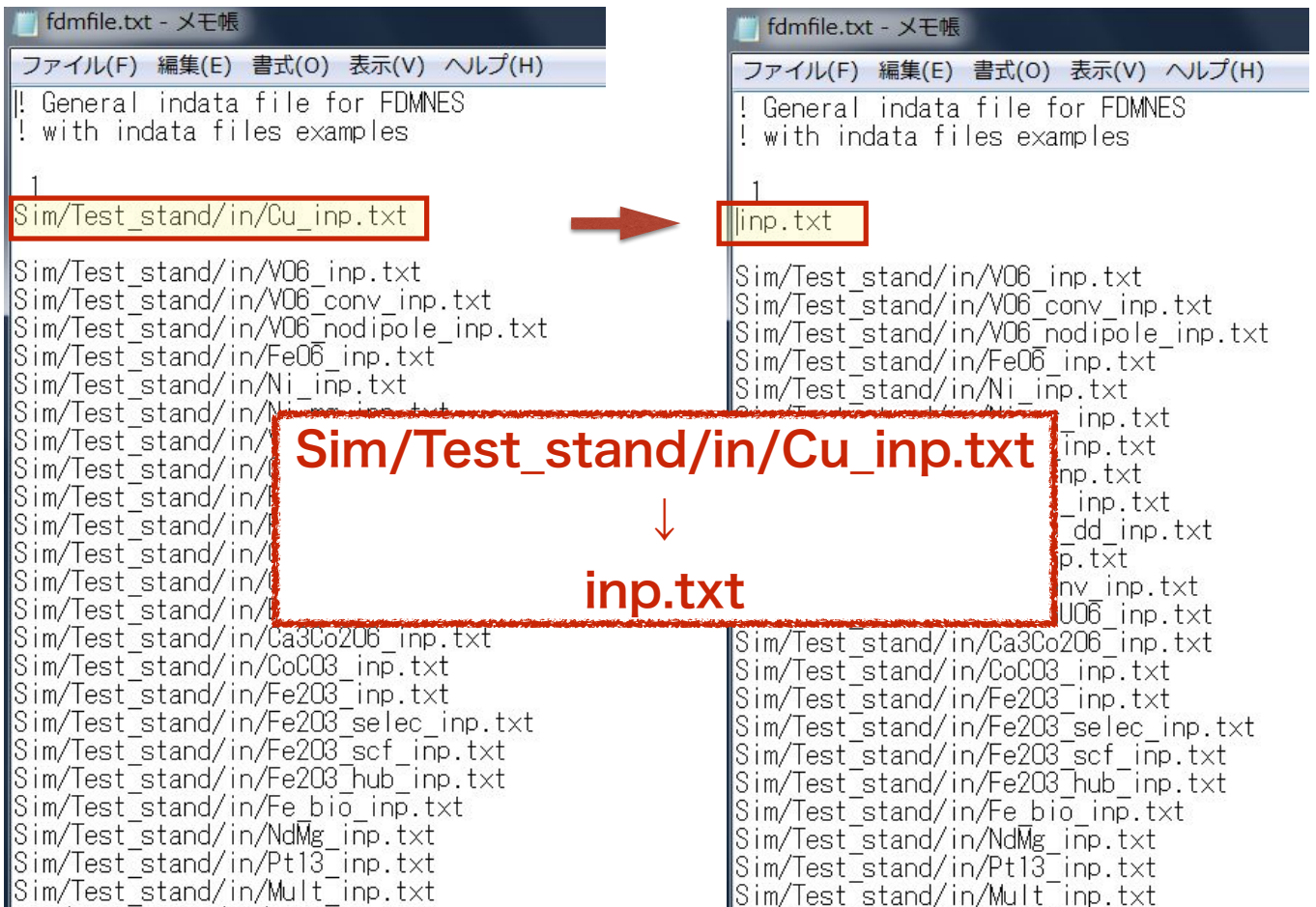
カレントディレクトリに `fdm` から始まるファイルが複数存在しないときは、全自動で `.¥` を含めたファイル名が補完される

## 6) **fdmfile.txt** を編集する

**.txt** にメモ帳が割り当てられているときは  
メモ帳が立ち上がる

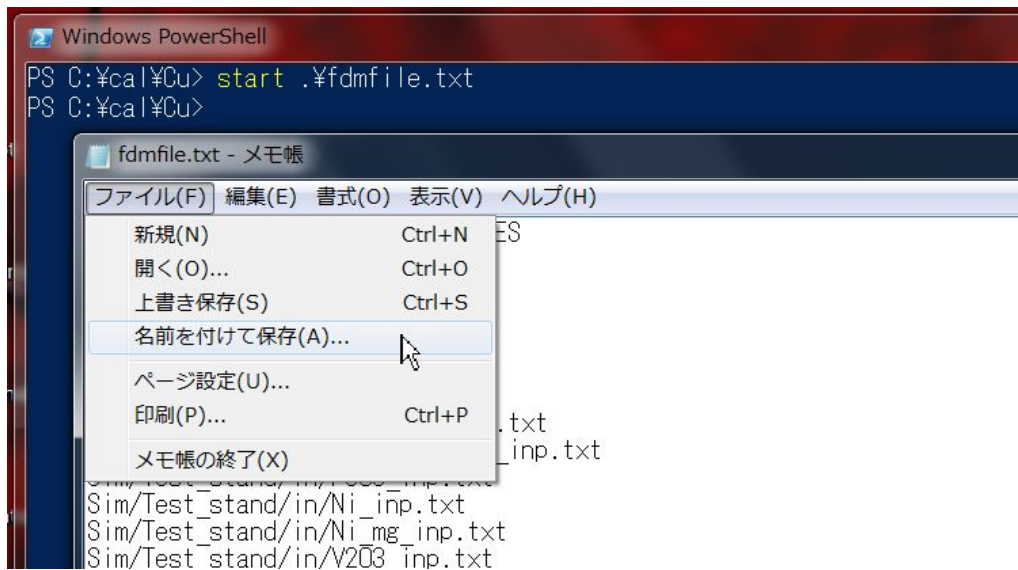


## 6) **fdmfile.txt** を編集する



## 7) 編集した **fdmfile.txt** を名前を付けた保存する

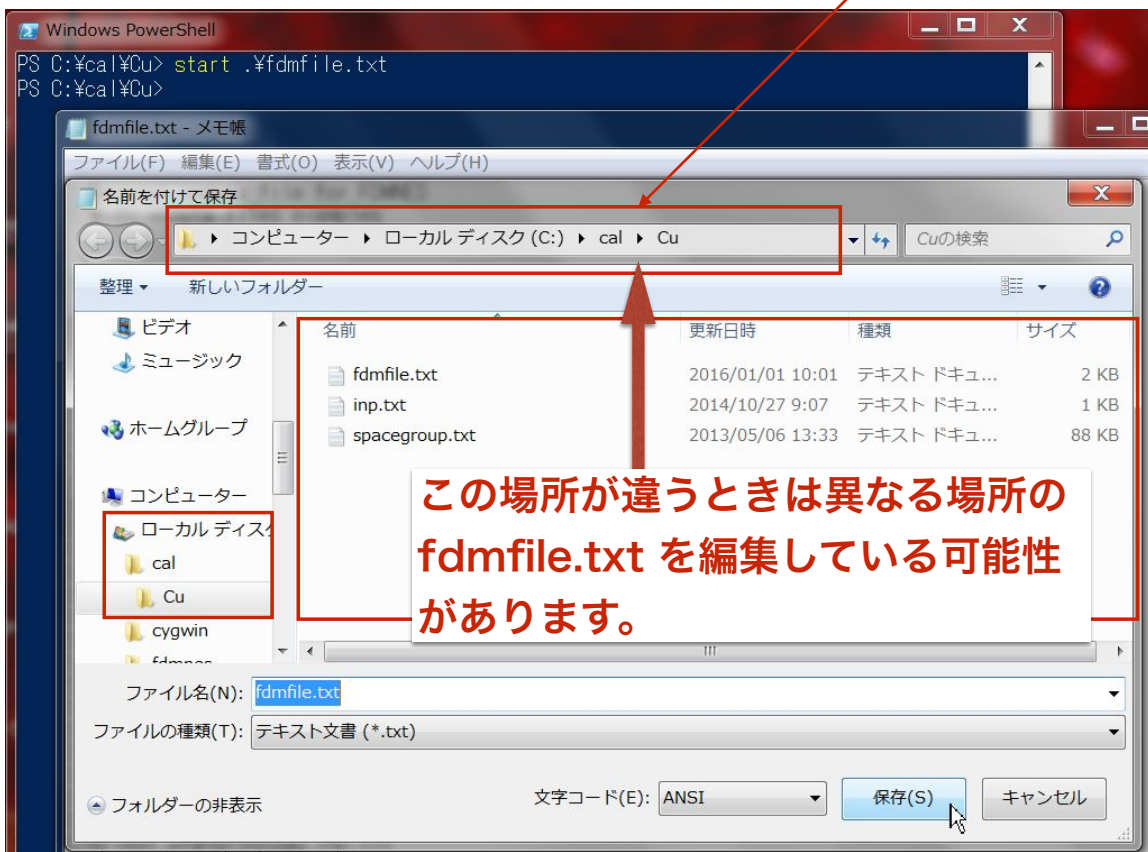
保存する場所を明確にするために  
「名前を付けて保存」で保存する



## 7) 編集した **fdmfile.txt** を名前を付けた保存する

fdmfile.txt の名前のままで保存する

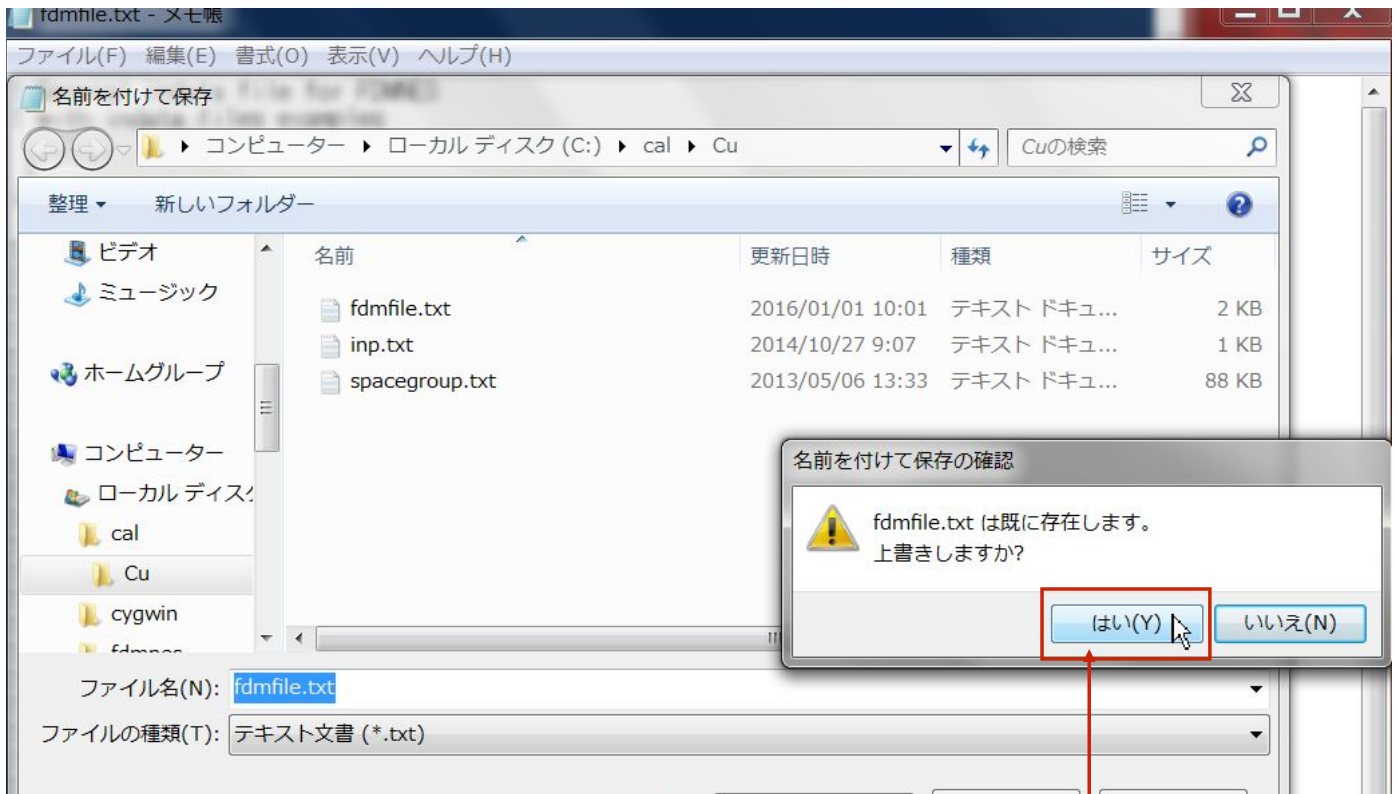
保存場所を確認する





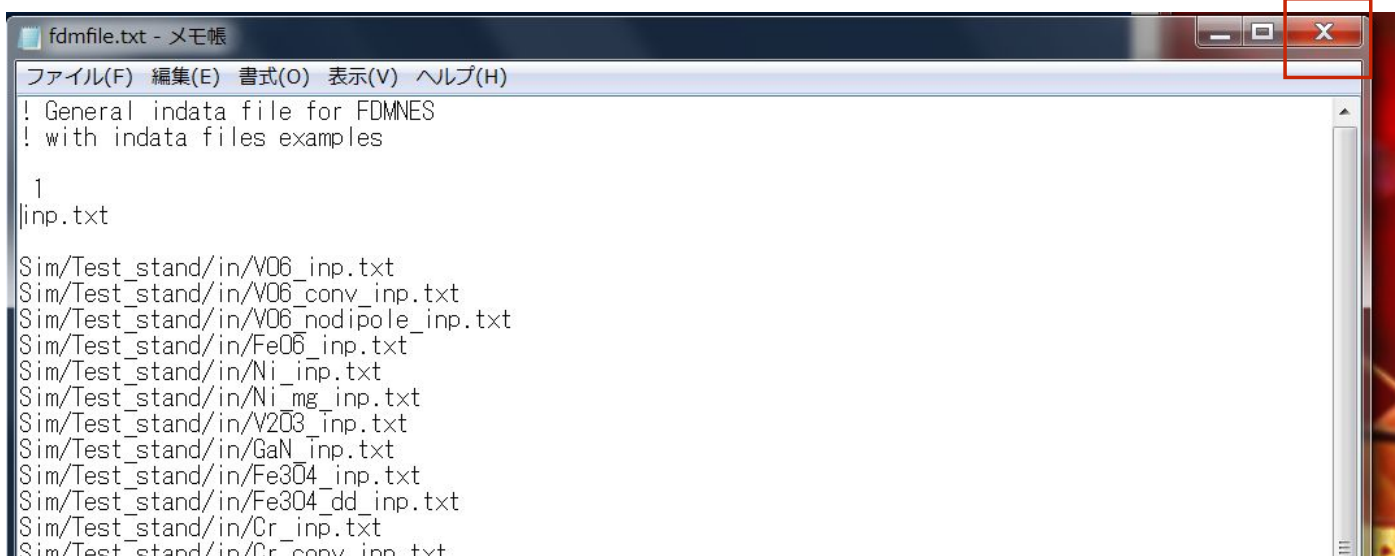
## 7) 編集した **fdmfile.txt** を名前を付けた保存する

保存場所を確認する



上書きします

## 8) 編集を終えた **fdmfile.txt** を閉じます



## 9) 念のため、編集したファイルをもう一度開いてみます

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

fdmfile.txt を編集後、  
ファイルを閉じた状態

↓ ↑ キーを押す

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

直前に入力したコマンド  
が画面に出てくる

↑ キーで履歴をたどれる

↓ リターンキー(Enterキー)を押す

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

fdmfile.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
! General indata file for FDMNES
! with indata files examples
1
inp.txt
Sim/Test_stand/in/V06 inp.txt
```

もう一度開く  
(内容確認)

## 10) inp.txt ファイルを編集する

start .¥inp.txt

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

Filout
Sim/Test_stand/Cu

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

Radius
3.0

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

! Convolution keyword : broadening
Convolution
End
```

修正前

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

Filout
Cu

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

Radius
3.0

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

! Convolution keyword : broadening
Convolution
End
```

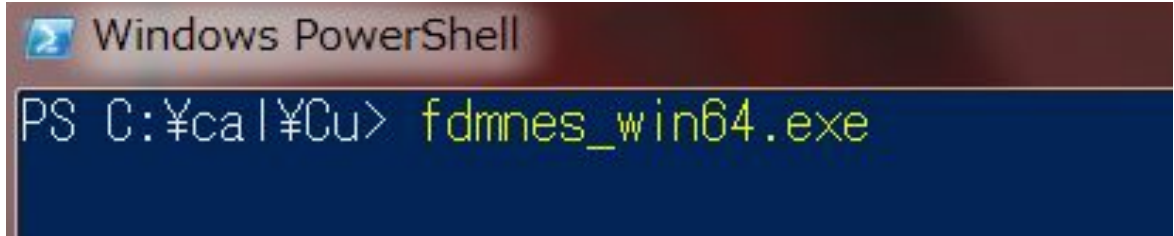
修正後

編集後は上書き保存

Sim/Test\_stand/Cu

Cu

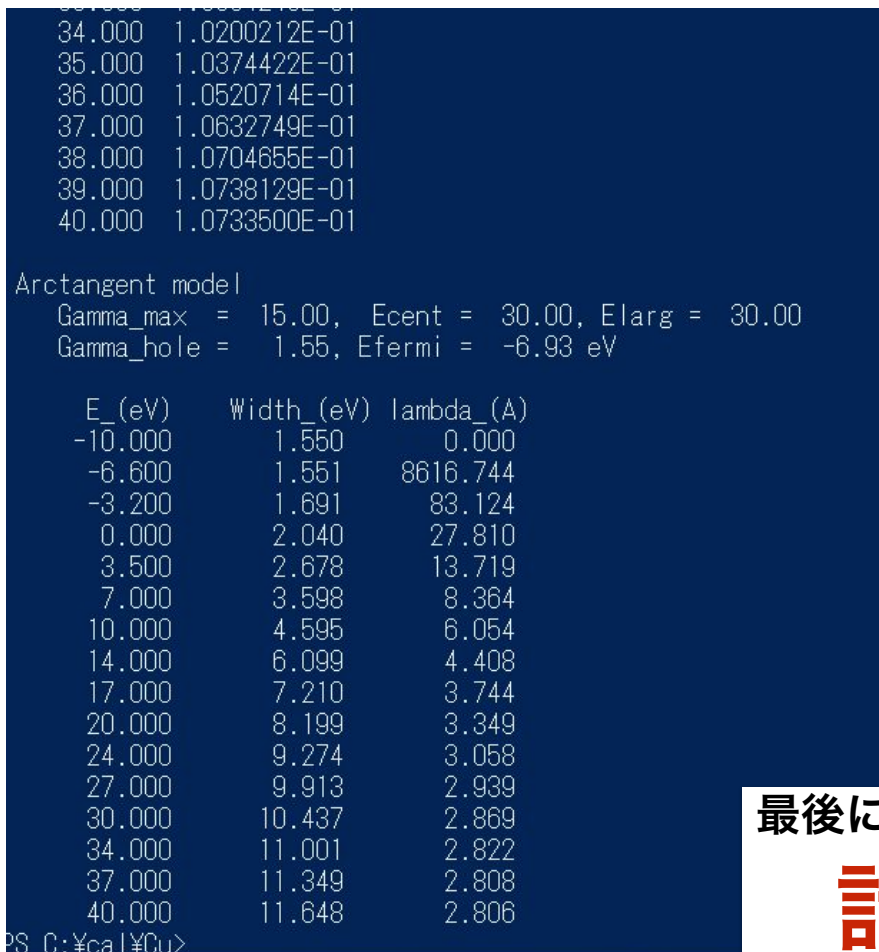
## 11) 計算を実行する `fdmnes_win64.exe`



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

# プログラムを実行する

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



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

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

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

PS C:\¥ca\¥Cu>
```

最後にこの画面が出てくる

# 計算終了

## 12) 計算後に出来たファイルを確認

計算の結果出来た3つのファイル (日付と時間確認)

→ 計算後に出来たものか?

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

ディレクトリ: C:\¥cal¥Cu

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

PS C:\¥cal¥Cu>
```

計算ログ

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

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

## 13) ログファイルの確認

スペース  
↓  
start .¥Cu\_bav.txt

Cu\_bav.txt ファイルの中身を見る

ファイルの一番最後を見る

計算時間

Have a beautiful day !

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

-----
Total time =      10.7 sCPU
Have a beautiful day !
```

FCC Cu クラスタ半径 $R=3.0$  (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

BaTiO<sub>3</sub> 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、

BaTiO<sub>3</sub> R3m (文字通りロンボのまま計算したら AMD だと 16分)

## 14) 計算結果をプロットする

**Cu.txt**

**Cu\_bav.txt**

**Cu\_conv.txt**

inp.txt

fdmfile.txt

spacegroup.txt

xsect.dat

計算結果(生)

計算ログ

計算結果

## 14) 計算結果をプロットする( **Cu\_conv.txt** の編集 )

スペース  
↓  
start  **Cu\_conv.txt**

```
Cu_conv.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
Energy <xanes>
-10.000 4.1531851E-03
-9.800 4.3557171E-03
-9.600 4.5822573E-03
-9.400 4.8375322E-03
-9.200 5.1275894E-03
-9.000 5.4602769E-03
-8.800 5.8459353E-03
-8.600 6.2984043E-03
-8.400 6.8364920E-03
-8.200 7.4860946E-03
-8.000 8.2831085E-03
-7.800 9.2768862E-03
-7.600 1.0532462E-02
-7.400 1.2125453E-02
```

## 14) 計算結果をプロットする( **Cu\_conv.txt** の編集 )

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 9.2768862E-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:\ca\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







## 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
```

出力形式を png にする

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

出力ファイル名を Cu.png にする

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

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:\¥cal\¥Cu> ls  
  
ディレクトリ: C:\¥cal\¥Cu  
  
Mode                LastWriteTime         Length Name  
----                -  
-a---              2016/01/01   14:39         4334 Cu.png  
-a---              2016/01/01   10:46         2979 Cu.txt  
-a---              2016/01/01   10:46    2201965 Cu_bav.txt  
-a---              2016/01/01   14:12         2756 Cu_conv.txt  
-a---              2016/01/01   10:20         1046 fdmfile.txt  
-a---              2016/01/01   10:46          958 inp.txt  
-a---              2013/05/06   13:33     89332 spacegroup.txt  
-a---              2002/07/22   13:33    1135134 xsect.dat  
  
PS C:\¥cal\¥Cu>
```

## 18) Cu.png ファイルの表示

スペース  
↓  
start Cu.png

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

The screenshot shows a Windows command prompt window with the following content:

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

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

Overlaid on the right is a window titled "Cu.png - Windows フォトビューア". It displays a line graph with the following data series:

x-axis	y-axis
-10	0.00
0	0.04
10	0.10
20	0.09
30	0.09
40	0.10

# FDMNES 計算の基本的な流れ

## 計算に必要なファイル (基本となる入力ファイル)

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

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

**inp.txt** 入力ファイル  
(構造、吸収端、クラスター半径、、、、)

## fdmfile.txt

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

1
inp.txt
Sim/Test_stand/in/V06_inp.txt
Sim/Test_stand/in/V06_conv_inp.txt
Sim/Test_stand/in/V06_nodipole_inp.txt
Sim/Test_stand/in/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
Sim/Test_stand/in/BaZnUO6_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

2

Sim/Test\_stand/in/Cu\_inp.txt

Sim/Test\_stand/in/VO6\_inp.txt

注意) あまりこの機能は使わない方が健全

(複数のファイルを別のディレクトリで出力するのがオススメしない)

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

# inp.txt

Filout

Cu

出力ファイルのベースとなる名前  
(パス込み)

Range

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

計算するエネルギー範囲

Radius

3.0

クラスター半径

Crystal

3.61 3.61 3.61 90. 90. 90.

29 0.0 0.0 0.0

29 0.5 0.5 0.0

29 0.5 0.0 0.5

29 0.0 0.5 0.5

計算する構造

Convolution

畳み込み(broadening)

End

# inp.txt

Filout  
Cu

Filout を Cu としたとき

```
Windows PowerShell
PS C:\¥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

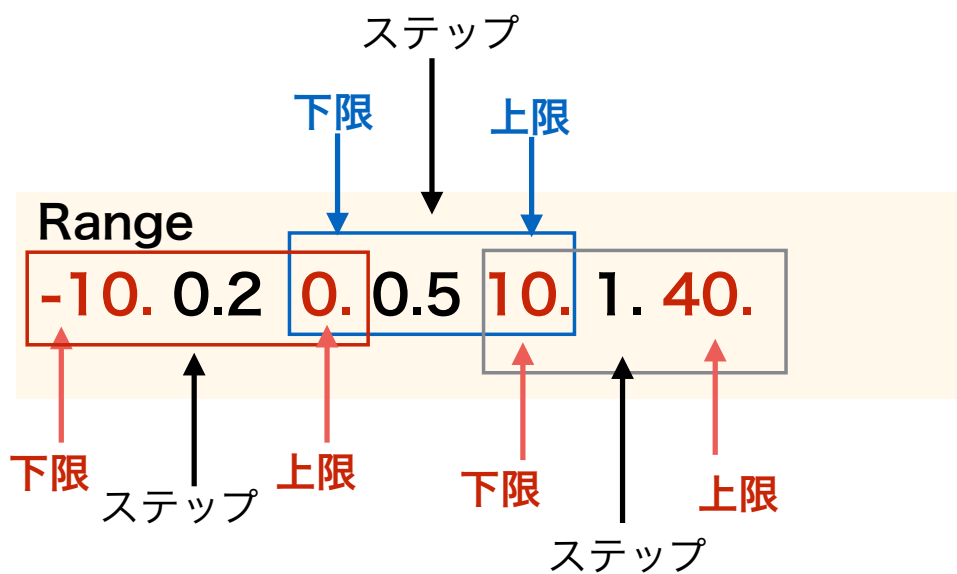
Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a---             2016/01/01  14:39         4334 Cu.png
-a---             2016/01/02   9:07         2981 Cu.txt
-a---             2016/01/01  10:46      2201965 Cu_bav.txt
-a---             2016/01/01  14:12         2756 Cu_conv.txt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

PS C:\¥ca\¥Cu>
```

# inp.txt

計算するエネルギー範囲

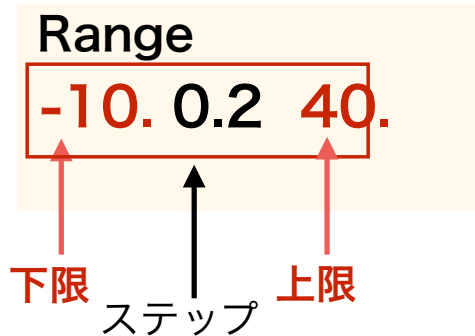
スペースで区切る



# inp.txt

計算するエネルギー範囲

スペースで区切る



入力パラメーターは複数のタグとそれに関連付けられたパラメータで定義される

Tag  
Parameter

## 基本ルール

- ◆コメントアウト記号は！ (半角)
- ◆タグと関連づけられたパラメータの間に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)

タグやパラメーターの間には空行を開けなくてもOK

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

スペースの入れ方は自由

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

コメント

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

**注意) (値が必須のタグの場合)**

**タグと値の間にはコメントは付けられない**

```
Fileout
! Fe203
Sim/Test_stand/Fe203
```

**ダメな場合がある**

```
Fileout
Sim/Test_stand/Fe203
! Fe203
```

**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 のときはそれに合わせて LF+CR になる



# 基本入力ファイルの解説

## -構造情報の作成-

FCC Cu

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

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

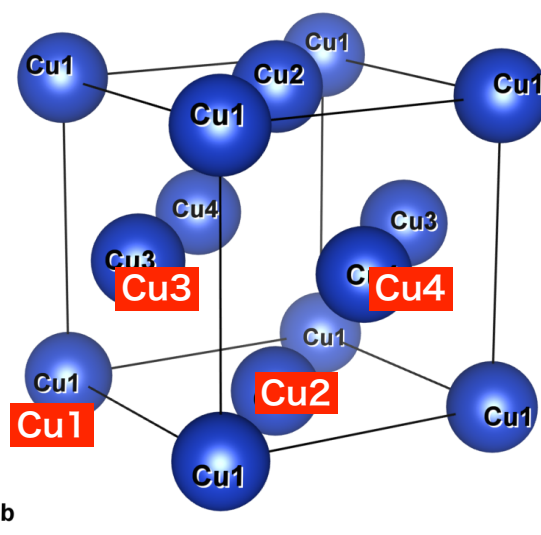
原子番号

内部座標

1) コンベンショナルなセルで書ける

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

2) 内部座標はセル内での相対座標



空間群を使った記述も可能

空間群の指定  
225, Fm-3m

Spgroup  
Fm-3m

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

セルはコンベンショナルに記述

4a サイト 0,0,0

空間群を使って記述

Spgroup  
Fm-3m

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

P1 で記述

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

同じ構造

FCC Cu

記述方法が異なるだけ

同じ構造なので同じXANESスペクトルが描ける

計算するときには内部的に自動で対称性を探す

# 基本入力ファイルの解説

## -クラスター半径-

Filout

Cu

FDMNES ではクラスター計算が行われている

Range

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

Radius

3.0

クラスター半径

構造情報 (Crystal, Molecule)



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

Crystal

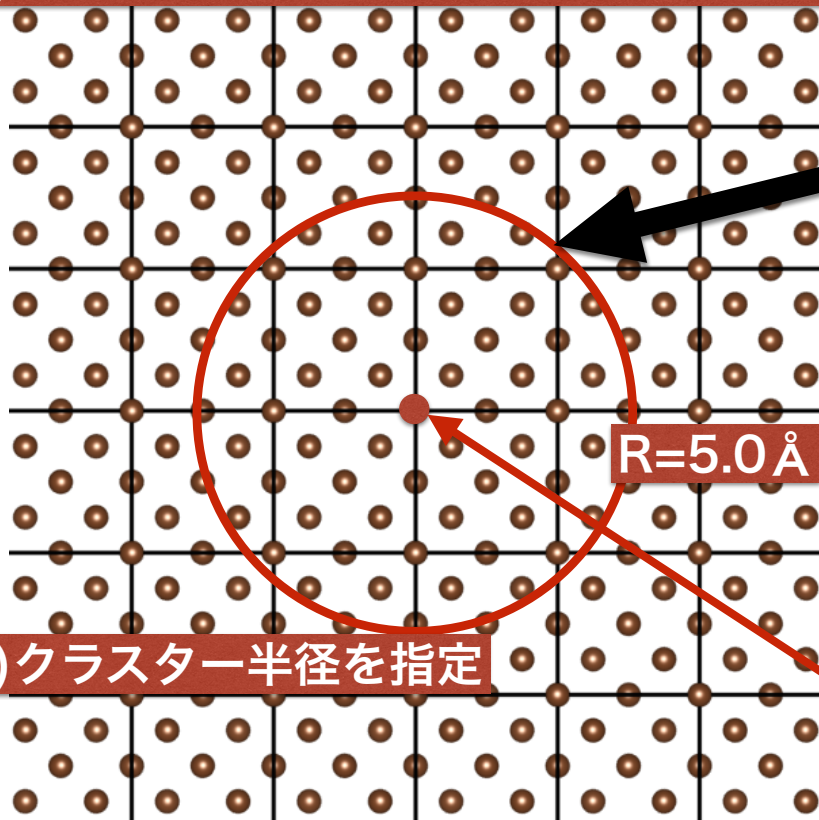
	3.61	3.61	3.61	90.	90.	90.
29	0.0	0.0	0.0			
29	0.5	0.5	0.0			
29	0.5	0.0	0.5			
29	0.0	0.5	0.5			

構造情報

Convolution

End

1) 構造情報から周期的に配置される結晶を作る



バルクの計算  
では十分な大  
きさのクラス  
ターが必要

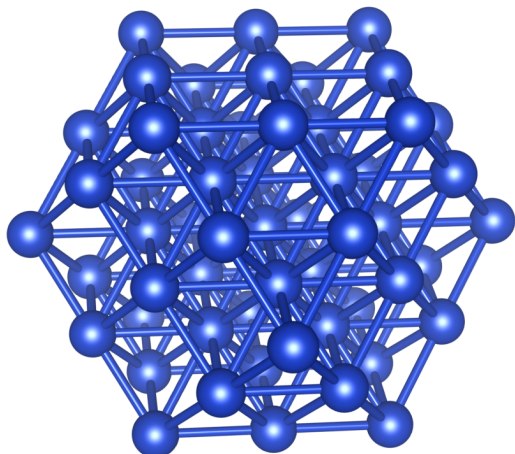
2) クラスタ半径を指定

吸収原子  
(ホールが空く)

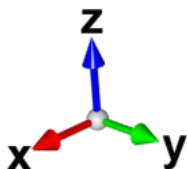
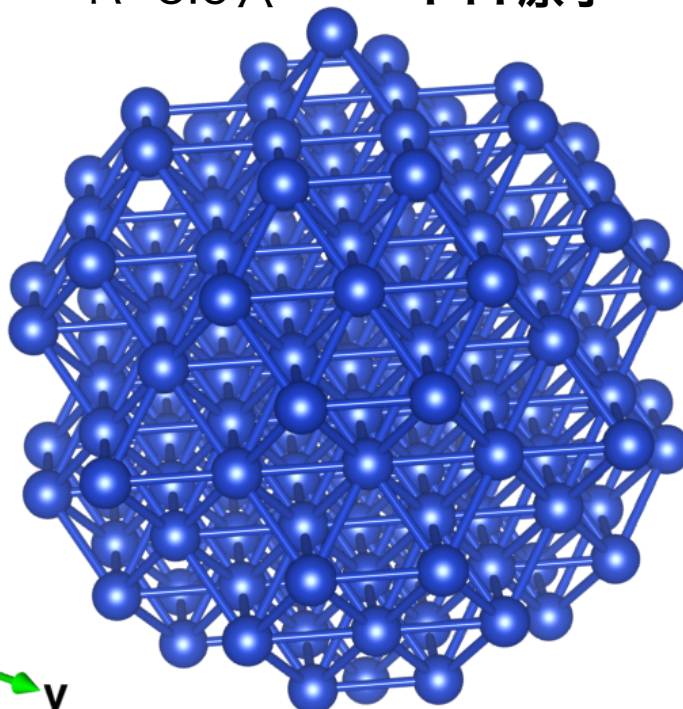
FCC Cu

吸収原子を中心とした半径

$R=3.0\text{Å}$  55原子

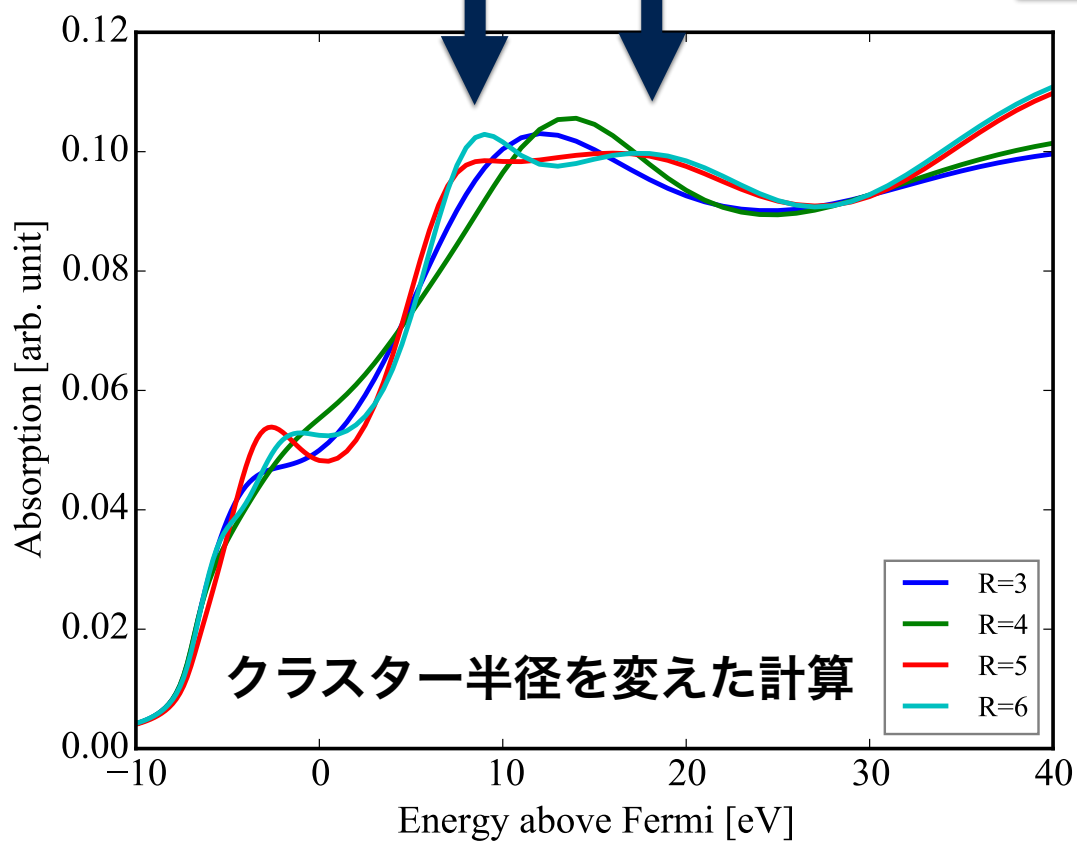


$R=5.0\text{Å}$  141原子



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

FCC Cu  
FDM



基本出力ファイルの解説  
-フェルミレベル-



# GNU PLOT で $E_F$ をゼロとして表示し直す

## 1) wgnuplot

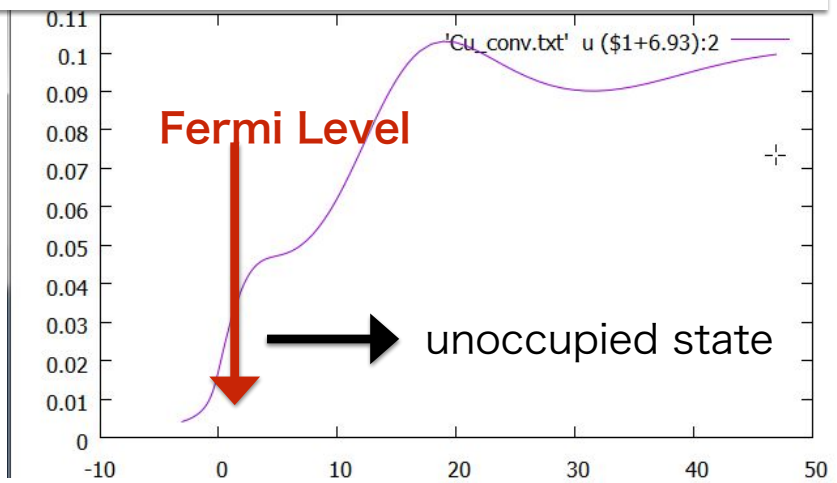
```
Windows PowerShell  
PS C:\¥cal\¥Cu> wgnuplot
```

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

一行目に 6.93  
を加える  
 $E_F = -6.93\text{eV}$

コロン  
スペース

```
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt' u ($1+6.93):2 w l  
gnuplot> _
```



## 3) plot が終わったらGNU PLOTを閉じる

# 計算ログ(Cu\_bav.txt)の中から Edge Energy を取り出す

```
cat .¥Cu_bav.txt | Select-String E_edge
```

Cu\_bav.txt ファイル中の  $E_{\text{edge}}$  という文字がある行を検索

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

$\cong$  Fermi Level

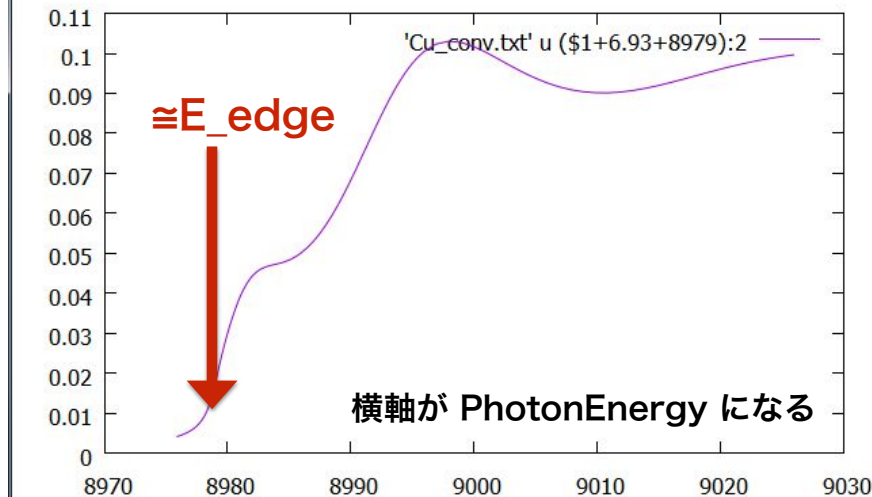
# 横軸を Photon Energy 表示する

1) wgnuplot

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

コロン  
スペース

```
gnuplot> plot 'Cu_conv.txt' u ($1+6.93+8979):2 w l  
gnuplot> _
```



3) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる

Filout  
Cu

計算結果そのものを Photonenergy で書き出す

Range

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

Energpho

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

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

(例)



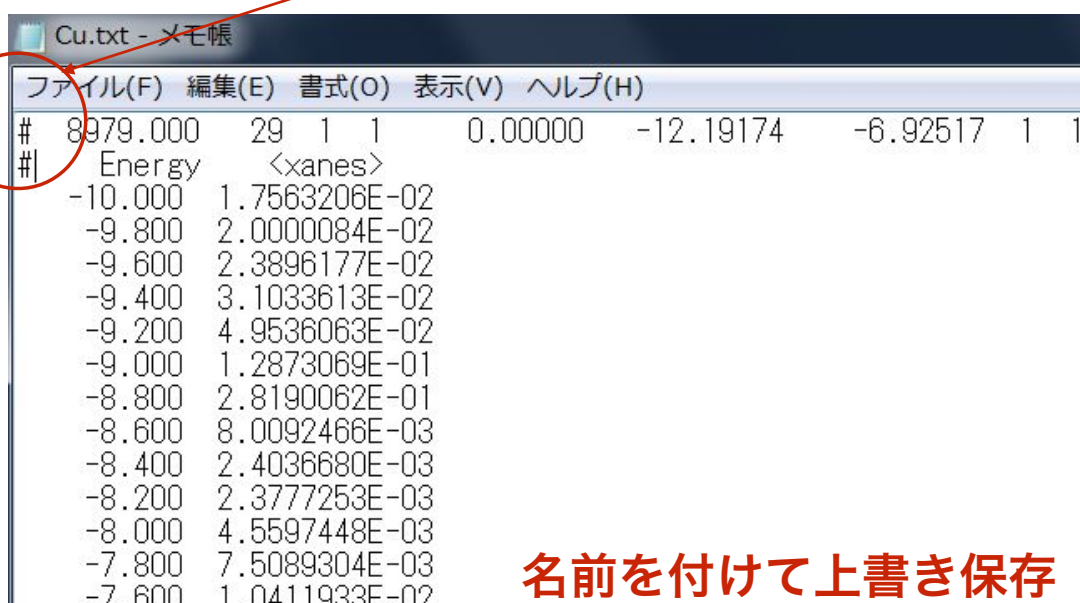
# 基本出力ファイルの解説 -Convolution-

Broadening をする前のスペクトルをプロットする

スペース  
↓  
start  ¥Cu.txt

Cu.txt を編集する

最初の2行をコメントアウトする



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

名前を付けて上書き保存

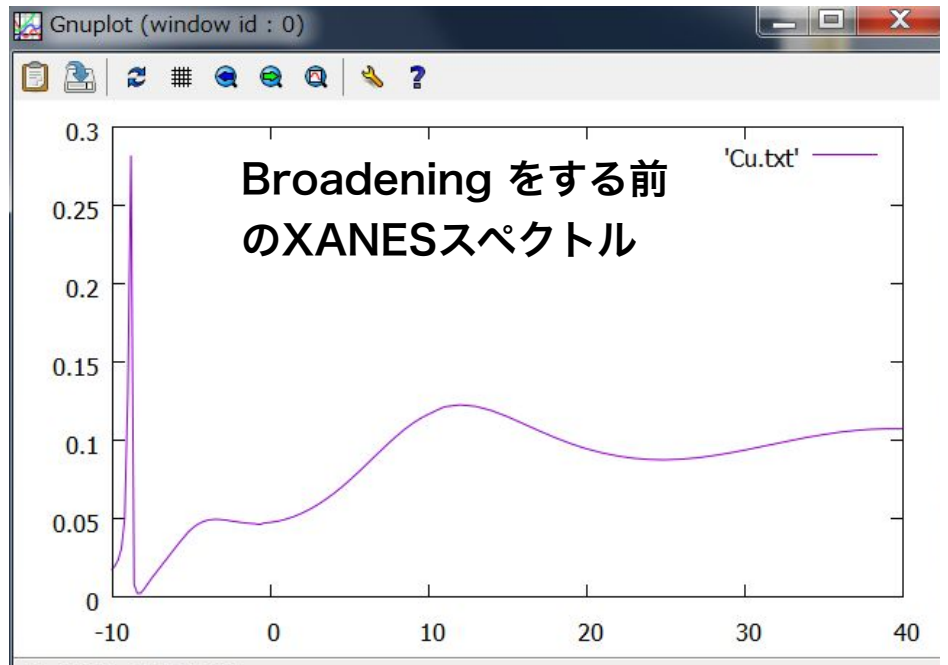
# Broadening をする前のスペクトルをプロットする

1) wgnuplot

スペース

2) plot 'Cu.txt' w l

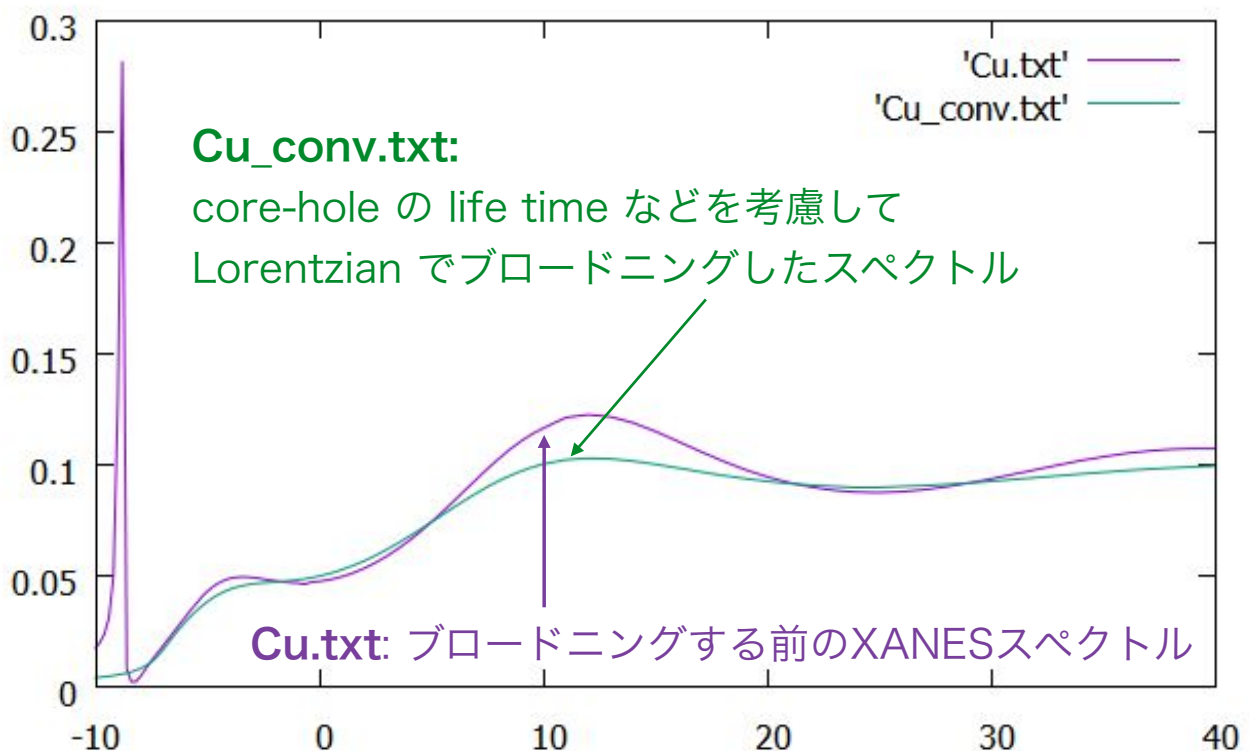
Cu.txt をプロットする



カンマ で区切る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





スペース

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

## Cu20の計算準備

計算のホームへ移動

Cu20 作業ディレクトリ作成

Cu20 作業ディレクトリへ移動

計算に必要なファイルをコピー

準備したファイルを確認

ls

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

ディレクトリ: C:¥cal¥Cu20

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

PS C:¥cal¥Cu20>
```

## 現在の状況

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

PS C:¥cal¥Cu>
```

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

Cu20 ディレクトリの下に

fdmfile.txt

inp.txt

編集

spacegroup.txt

xsect.dat

計算には4つのファイルが必要

Cu\_inp.txt をベースにして

inp.txt を編集

スペース  
start .¥inp.txt

```
Filout
Cu

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

Radius
3.0

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

Convolution

End
```

inp.txt

Absorber 1 吸収原子を1番目とする

Filout Cu20 出力する名前をCu20にする

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

Edge K クラスタ半径5.0

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

Green

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

Convolution

End
```

inp.txt

Absorber のデフォルトは一番  
(何も書かなければ1番を選択したことになる)

Absorber  
1

吸収原子を一番目の原子とする

Crystal

4.2676 4.2676 4.2676 90.0000 90.0000 90.0000

29 0.0000 0.0000 0.0000 ! Cu

29 0.5000 0.5000 0.0000 ! Cu

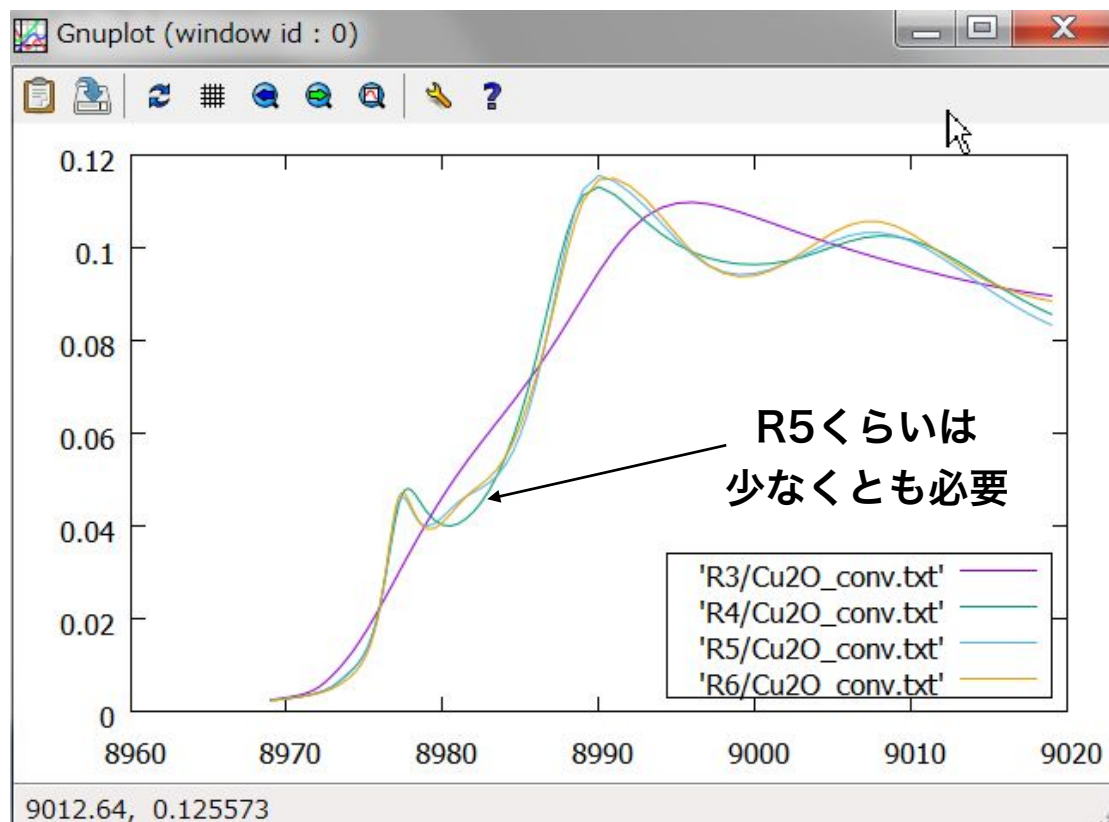
29 0.5000 0.0000 0.5000 ! Cu

29 0.0000 0.5000 0.5000 ! Cu

8 0.2500 0.2500 0.2500 ! O

8 0.7500 0.7500 0.7500 ! O

## クラスター半径 実習では $R=5.0$ で計算してもらいます



## Cu2O (R=5.0 FMS( Muffin-tin )) での計算

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

**fdmnes\_win64.exe** を実行します (64bit windows)

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

計算終了後のディレクトリを見ると・・・

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

スペース  
↓  
start .**¥Cu20\_conv.txt** Cu20\_conv.txt の編集

コメントアウト  
(最初の1行)

```
Cu20_conv.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
# Energy <xanes>
-10.000 2.4171599E-03
-9.800 2.4787703E-03
-9.600 2.5439347E-03
-9.400 2.6130043E-03
-9.200 2.6863814E-03
-9.000 2.7645312E-03
-8.800 2.8470010E-03
```

スペース  
↓  
start .**¥Cu20.txt** Cu20.txt の編集

コメントアウト  
(最初の2行)

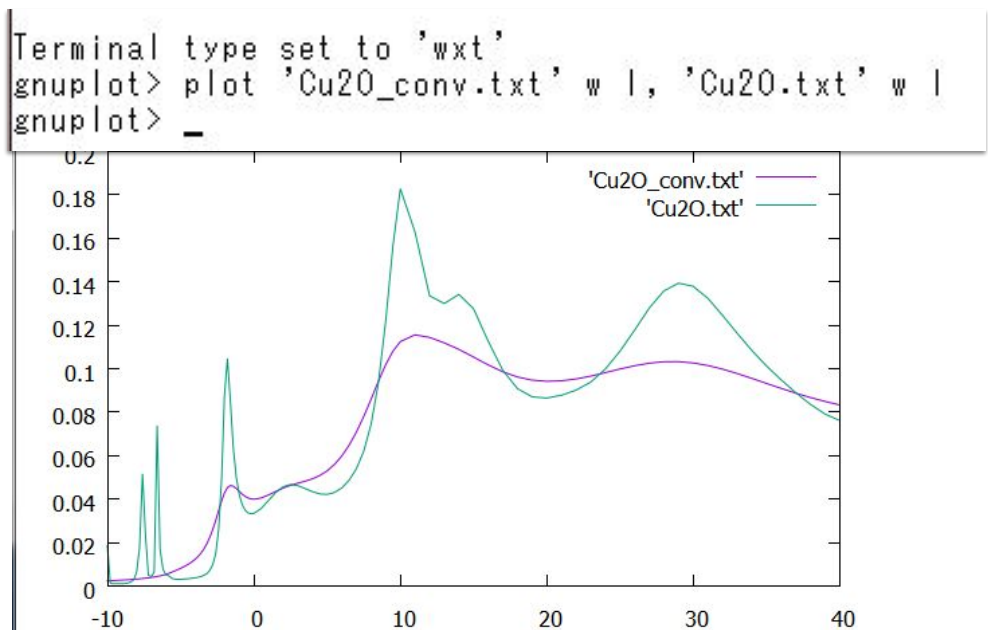
```
Cu20.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
# 8979.000 29 1 1 0.00000 -10.01278
#| Energy <xanes>
-10.000 1.8561265E-02
-9.800 1.4536325E-03
-9.600 1.0685395E-03
-9.400 1.1892450E-03
-9.200 1.1354645E-03
-9.000 1.1225666E-03
-8.800 1.1999200E-03
-8.600 1.4171908E-03
```

名前を付けて上書き保存

## Cu2O のXANESスペクトルのプロット

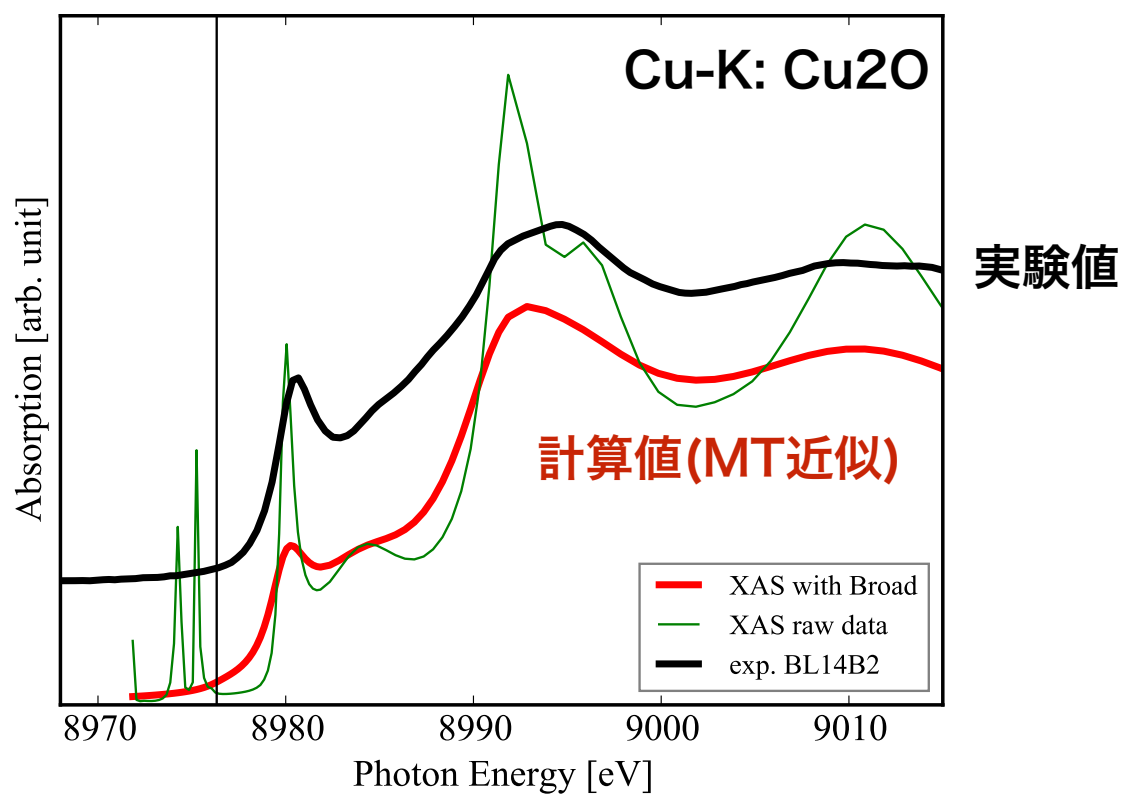
1) wgnuplot

スペース  
↓  
2) plot 'Cu20\_conv.txt' w l, 'Cu20.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

-軌道成分の解析-

-Cu<sub>2</sub>O の計算例-

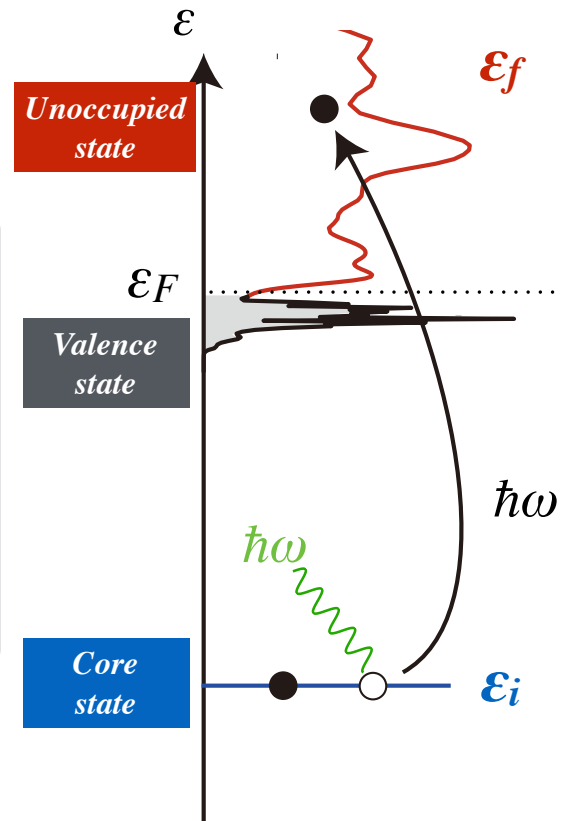


# XANES スペクトル

**遷移確率** フェルミの黄金律

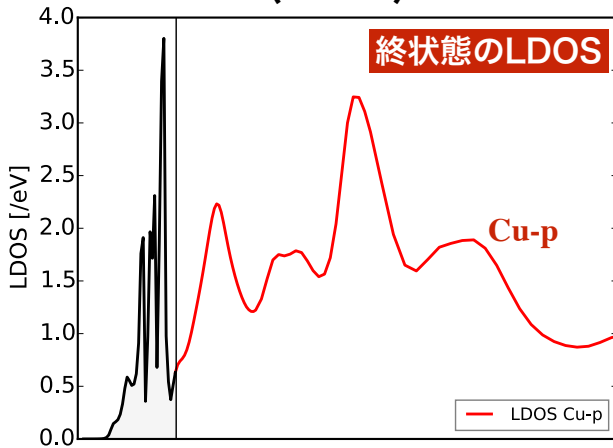
$$W(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |\langle f | \hat{F} | i \rangle|^2 \delta(\epsilon_i + \hbar\omega - \epsilon_f)$$

unoccupied state 終状態  
core state 始状態



Cu-p (LDOS) with hole

## FDMNES (R=7.0) FDM



終状態のLDOS

Cu-p

LDOS Cu-p

## 遷移確率

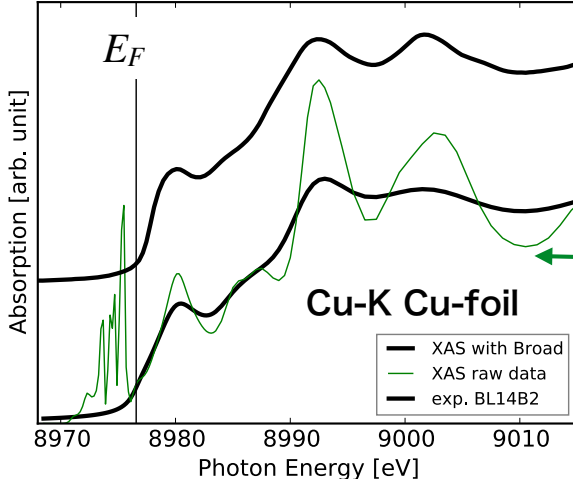
$$|\langle f | \hat{F} | i \rangle|^2 = \sum_{LMM_s, mm_s} a_{LMm_s, f}^* c_{mm_s, i}^{(nl)} F_{LMM_s, nlm m_s}$$

終状態の電子状態 内殻の電子状態

動径積分・Gaunt係数

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

終状態の状態密度



実験値

計算値 (Lorentzian Broadening)

計算値

Cu-K Cu-foil

XAS with Broad

XAS raw data

exp. BL14B2

XANES スペクトル  $\approx$  局所状態密度

# Cu-K, Cu<sub>2</sub>O, FMS

Absorber  
1 inp.txt

Filout  
Cu2O

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

Edge  
K

Radius  
5.0

**Density  
state\_all**

Green

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

Convolution

End

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 inp.txt の編集

**Density  
state\_all** 追加

- (6) ls ファイルの確認

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

## Cu<sub>2</sub>O のDOSの計算

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

**fdmnes\_wn64.exe を実行します (64bit windows)**  
2.6 GHz Intel Core i5( VMware on Mac ) 約27秒

計算終了後

ls

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

ディレクトリ: C:¥cal¥Cu2O_dos

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

出力ファイルが追加されている

# Density タグで今回新たに作成されたファイル

Cu2O\_sd0.txt  
 Cu2O\_sd1.txt  
 Cu2O\_sd2.txt

(吸収原子)

absorber の LDOS

1 番目の原子の LDOS (注意)  
 2 番目の原子の LDOS (注意)

sd0	Cu*
sd1	Cu
sd2	O

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

**!! 0番以外のナンバリングに注意 !!**

スペース ↓  
**start**  **¥Cu2O\_sd0.txt**      Cu2O\_sd0.txt の編集

コメントアウト  
 (最初の1行)

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

名前を付けて上書き保存

スペース ↓  
**start**  **¥Cu2O\_sd2.txt**      Cu2O\_sd0.txt の編集

コメントアウト  
 (最初の1行)

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

名前を付けて上書き保存

# GNU PLOT でプロットする

1) wgnuplot

スペース

スペース

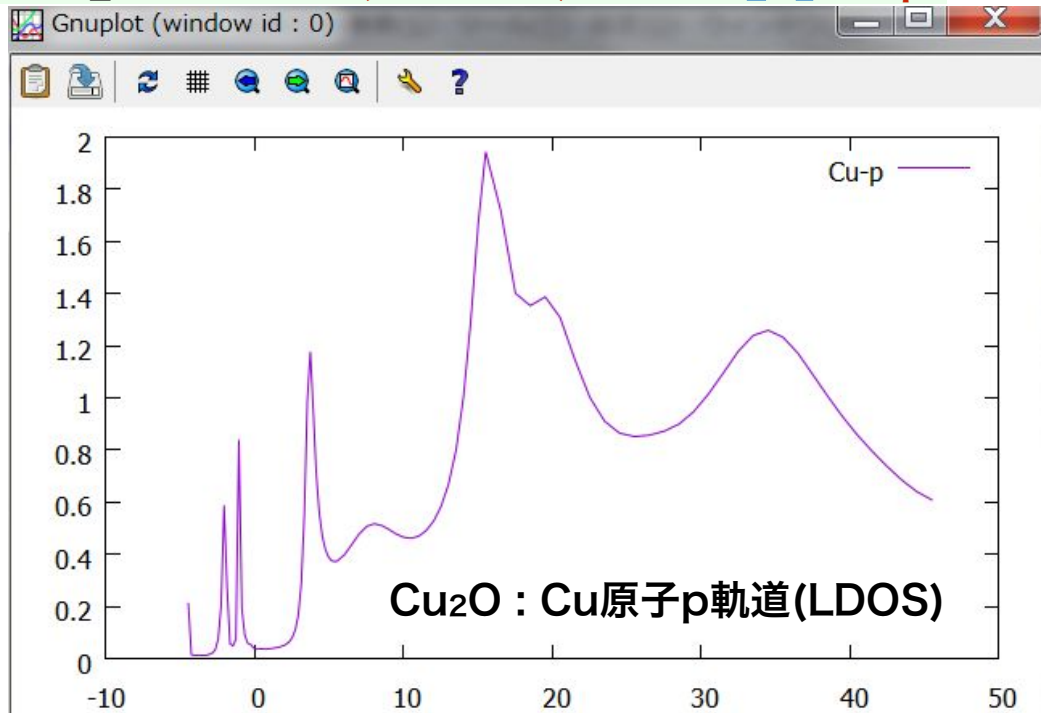
フェルミレベルを0にする

コロン

Cu-p軌道の指定

title を付ける

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



Cu<sub>2</sub>O のフェルミレベルは? `cat Cu2O_bat.txt | Select-String Efermi`

,(カンマ)後 改行せずにつなげる(1行で書く)

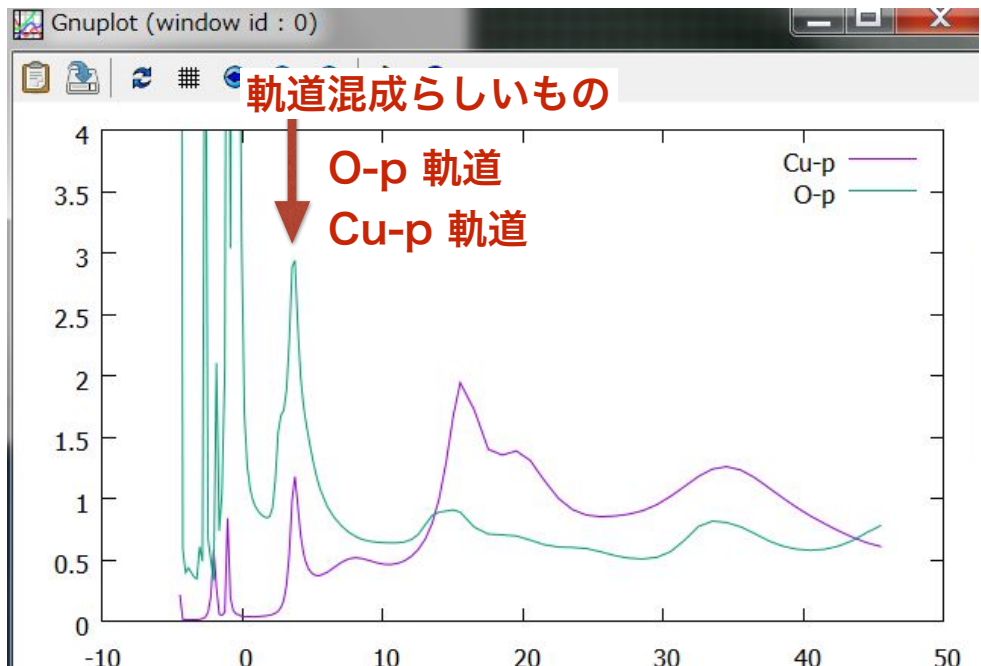
スペース

スペース

コロン

スペース

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



4) plot が終わったらGNU PLOTを閉じる

# 化合物の計算実習

## -BaTiO<sub>3</sub> の計算例-

```
Absorber
1

Filout
BaTiO3

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

Edge
K

Convolution

Green

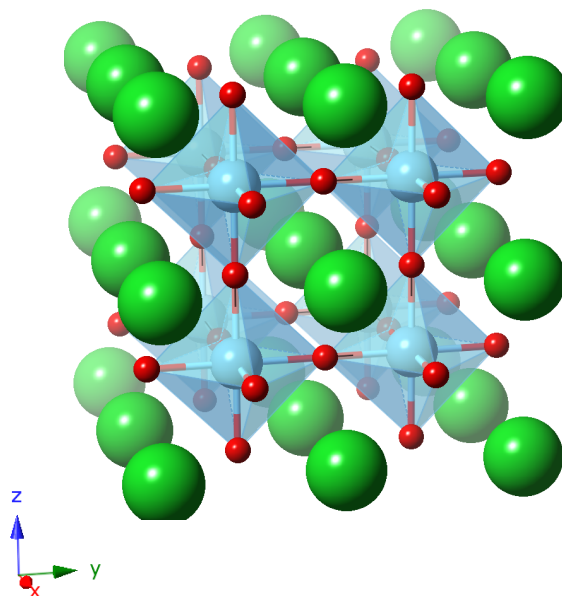
Radius
4.0

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

End
```

cubic, 221, Pm3-m

常誘電相 cif\_2100863



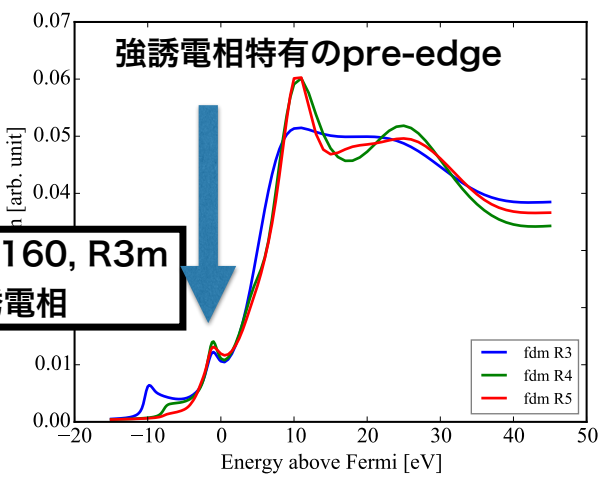
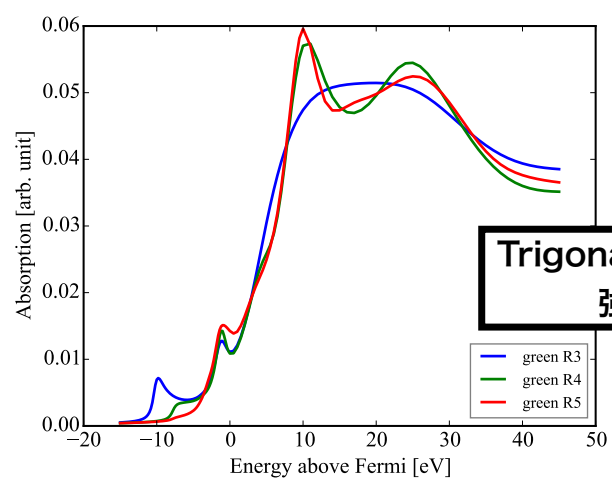
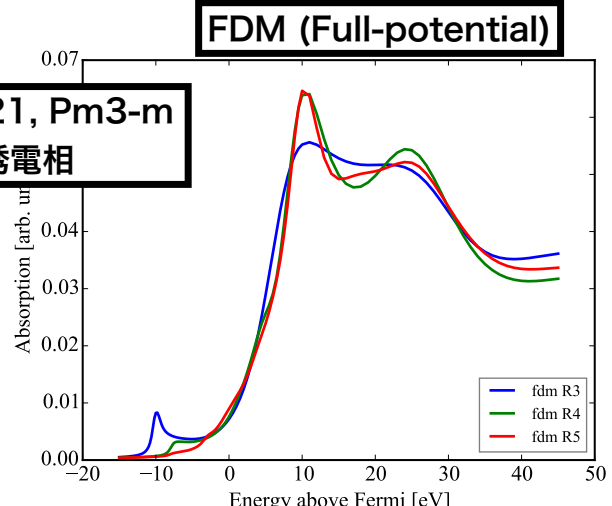
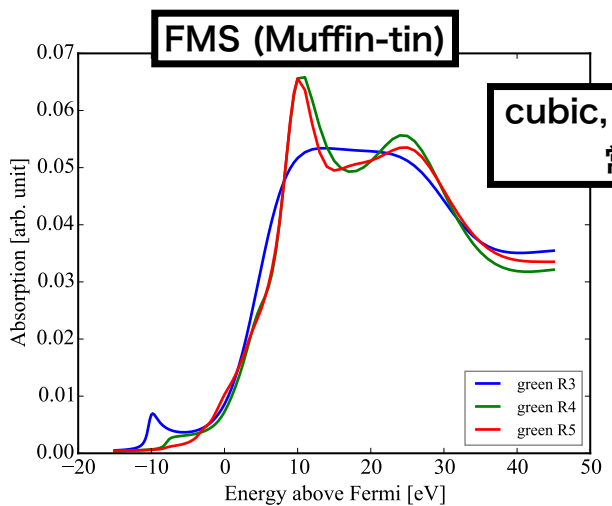
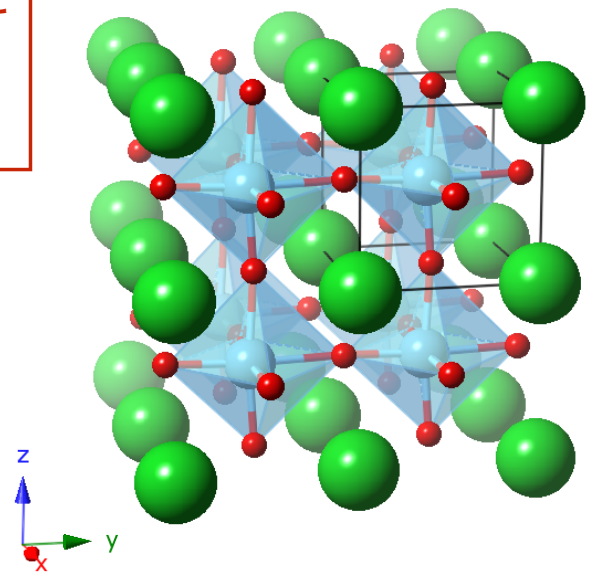
# Trigonal, 160, R3m 強誘電相 cif\_014230

Absorber  
1  
Filout  
BaTiO3  
Range  
-15. 0.2 0. 0.5 10. 1. 45.

Edge  
K  
Convolution  
Green  
Radius  
4.0  
Crystal  
4.0036 4.0036 4.0036 89.8404 89.8400 89.8396  
22 0.4880 0.4880 0.4880 ! Ti  
56 0.0000 0.0000 0.0000 ! Ba  
8 0.5116 0.5116 0.0195 ! O  
8 0.0195 0.5116 0.5116 ! O  
8 0.5116 0.0195 0.5116 ! O  
End

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

内部座標のズレ



# 計算時間 VMware on Mac

CPU: Intel Core i5-4258U 2.6G

single process (using MUMPS)

実習では

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

BaTiO3\_Pm3-m

-----  
fdm\_R3 : 5.7s  
fdm\_R4 : 36.4s  
fdm\_R5 : 49.7s  
green\_R3 : 4.0s  
**green\_R4 : 25.0s**  
green\_R5 : 57.1s

BaTiO3\_R3m

-----  
fdm\_R3 : 253.3s  
fdm\_R4 : 2738.3s  
fdm\_R5 : 4403.4s (1h13min)  
green\_R3 : 6.7s  
**green\_R4 : 42.4s**  
green\_R5 : 271.4s

## 常誘電相の計算準備

スペース

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

## 常誘電相

```
Absorber
1

Filout
BaTiO3

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

Estart
-18

Edge
K

Radius
4.0

Density
state_all

Green

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

Convolution

End
```

convolution 後の Energy 領域をどこからスタートするか

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

## 計算

### (7) fdmnes\_win64.exe

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

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

## 計算結果作られるファイル

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

ディレクトリ: C:\¥cal¥BaTiO3_Pm3-m

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

スペース  
start □.¥BaTiO3\_conv.txt

### BaTiO3\_conv.txt の編集

コメントアウト  
(最初の1行)

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

名前を付けて  
上書き保存

スペース  
start □.¥BaTiO3\_sd0.txt

### BaTiO3\_sd0.txt の編集

コメントアウト  
(最初の1行)

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

名前を付けて  
上書き保存

スペース  
start □.¥BaTiO3\_sd3.txt

### BaTiO3\_sd3.txt の編集

コメントアウト  
(最初の1行)

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

名前を付けて  
上書き保存



# GNU PLOT でプロットする

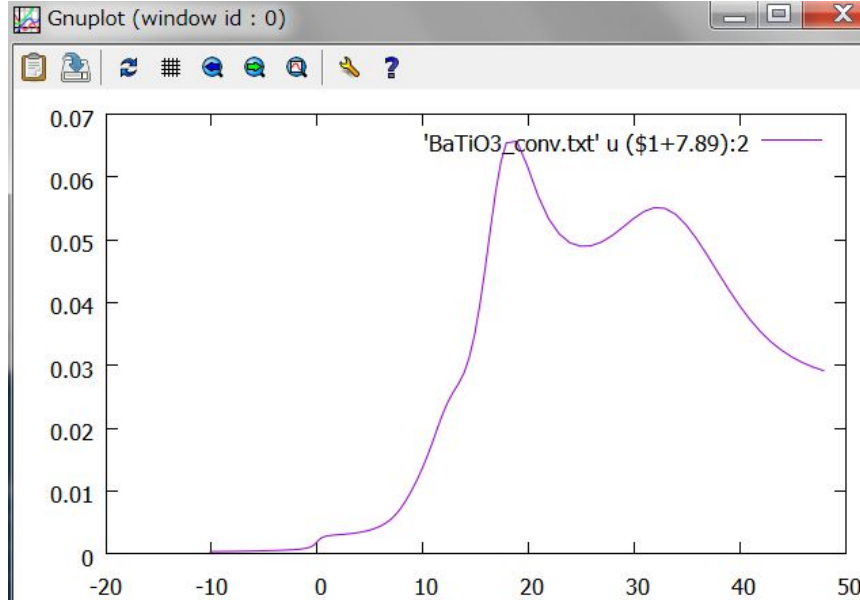
# 常誘電相

1) wgnuplot

スペース

コロン

2) plot 'BaTiO3\_conv.txt' u (\$1+7.89):2 w l



3) plot が終わったらGNU PLOTを閉じる

## 強誘電相の計算準備

スペース

- (1) cd ¥cal
- (2) mkdir BaTiO3\_R3m
- (3) cd BaTiO3\_R3m
- (4) cp ..¥BaTiO3\_Pm3-m¥\*. .
- (5) rm BaTiO3\*.txt
- (6) start inp.txt

\* アスタ  
リスク

Absorber 1	<b>強誘電相</b>
Filout BaTiO3	
Range -10. 0.2 0. 0.5 10. 1. 40.	
Estart -18	
Edge K	
Radius 4.0	
Density state_all	
Green	
Crystal	
4.0036 4.0036 4.0036 90.0 90.0 90.0	
22 0.4880 0.4880 0.4880 !Ti	
56 0.0000 0.0000 0.0000 !Ba	
8 0.5116 0.5116 0.0195 !O	
8 0.0195 0.5116 0.5116 !O	
8 0.5116 0.0195 0.5116 !O	
Convolution	
End	

cell歪みをナシ(cubic にする)

内部座標の歪みを入れる

## 計算

### (7) fdmnes\_win64.exe

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

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

## 計算結果作られるファイル

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

ディレクトリ: C:\¥cal¥BaTiO3_R3m

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

### start **¥BaTiO3\_conv.txt** BaTiO3\_conv.txt の編集

スペース  
↓

コメントアウト  
(最初の1行)

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

名前を付けて  
上書き保存

### start **¥BaTiO3\_sd0.txt** BaTiO3\_sd0.txt の編集

スペース  
↓

コメントアウト  
(最初の1行)

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

名前を付けて  
上書き保存

### start **¥BaTiO3\_sd3.txt** BaTiO3\_sd3.txt の編集

スペース  
↓

コメントアウト  
(最初の1行)

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

名前を付けて  
上書き保存

# GNU PLOT でプロットする

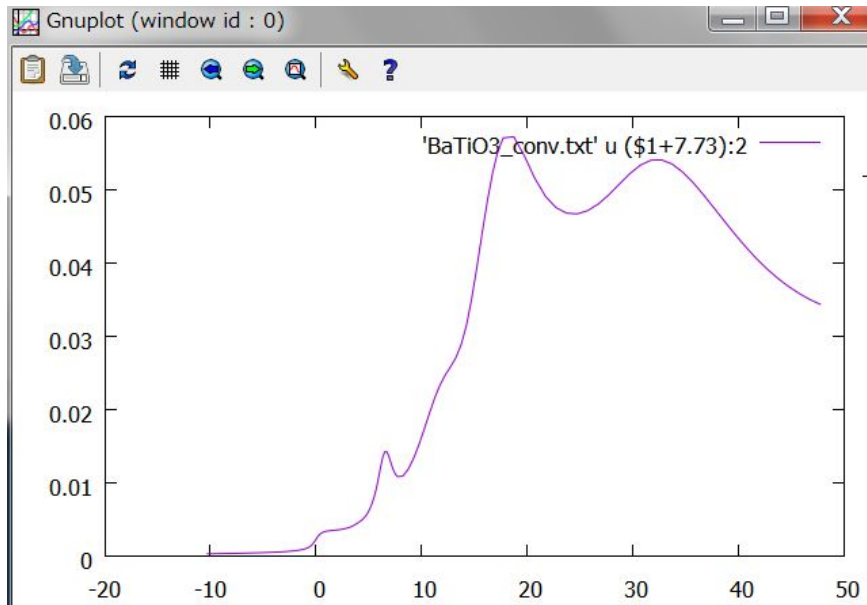
## 強誘電相

1) wgnuplot

スペース

コロン

2) plot 'BaTiO3\_conv.txt' u (\$1+7.73):2 w l



3) plot が終わったらGNU PLOTを閉じる

1) cd %cal

2) wgnuplot

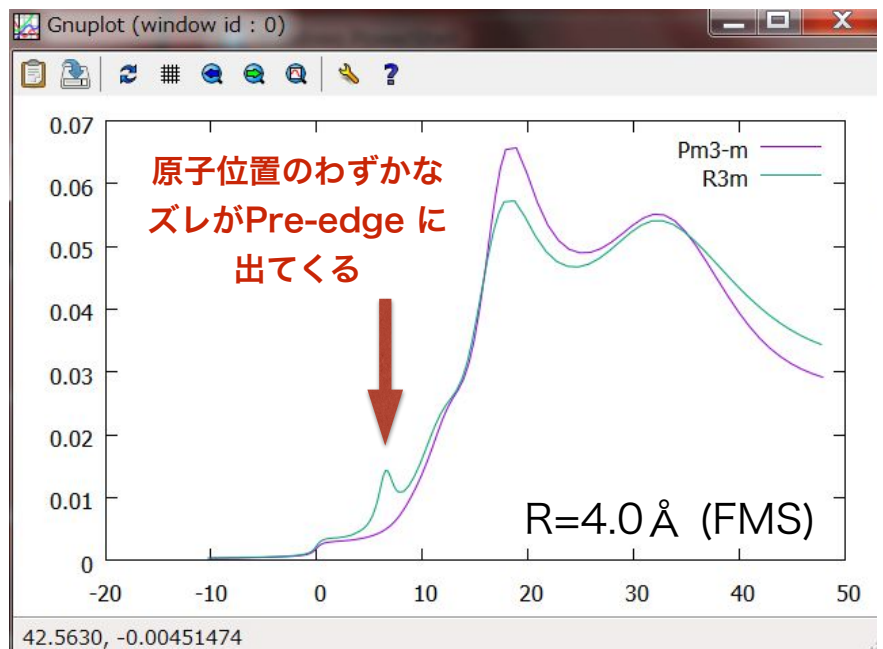
, (カンマ)後 改行せずにつなげる(1行で書く)

コロン スペース

3) plot 'BaTiO3\_Pm3-m%BaTiO3\_conv.txt' u (\$1+7.89):2 w l, t 'Pm3-m',  
'BaTiO3\_R3m%BaTiO3\_conv.txt' u (\$1+7.73):2 w l, t 'R3m'

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

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



4) plot が終わったらGNU PLOTを閉じる

## 常誘電相(Pm3-m)

1) cd ¥cal¥BaTiO3\_Pm3-m

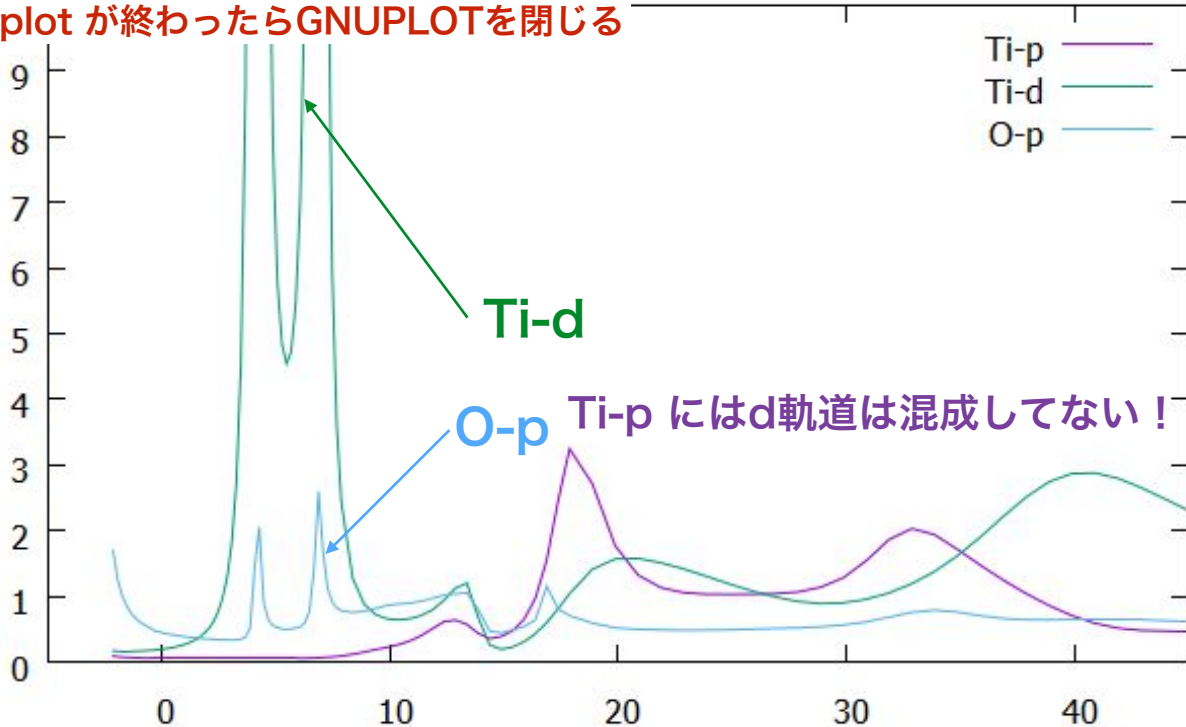
2) wgnuplot

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

スペース

, (カンマ)後 改行せずにつなげる(1行で書く)

4) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる



## 強誘電相(R3m)

1) cd ¥cal¥BaTiO3\_R3m

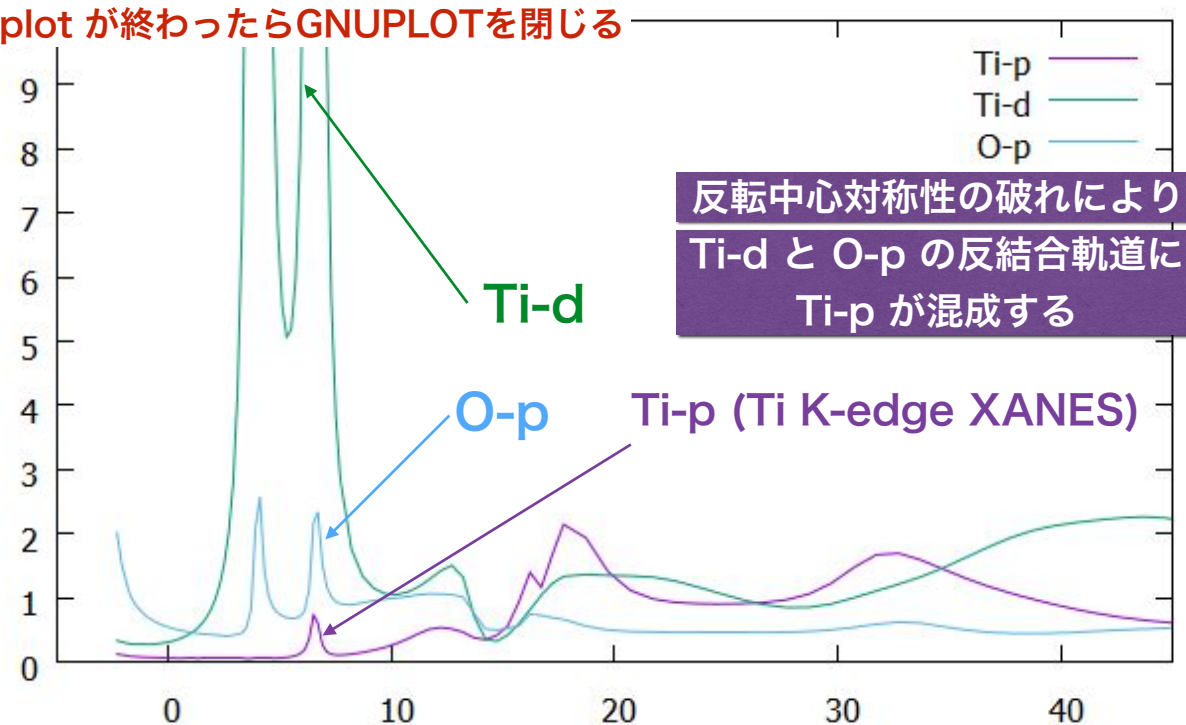
2) wgnuplot

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

スペース

, (カンマ)後 改行せずにつなげる(1行で書く)

4) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる



## 常誘電相(Pm3-m)

反転対称性がある場合

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

偶 偶 奇

➡ on-siteでTiのp軌道とd軌道は混成しない

## 強誘電相(R3m)

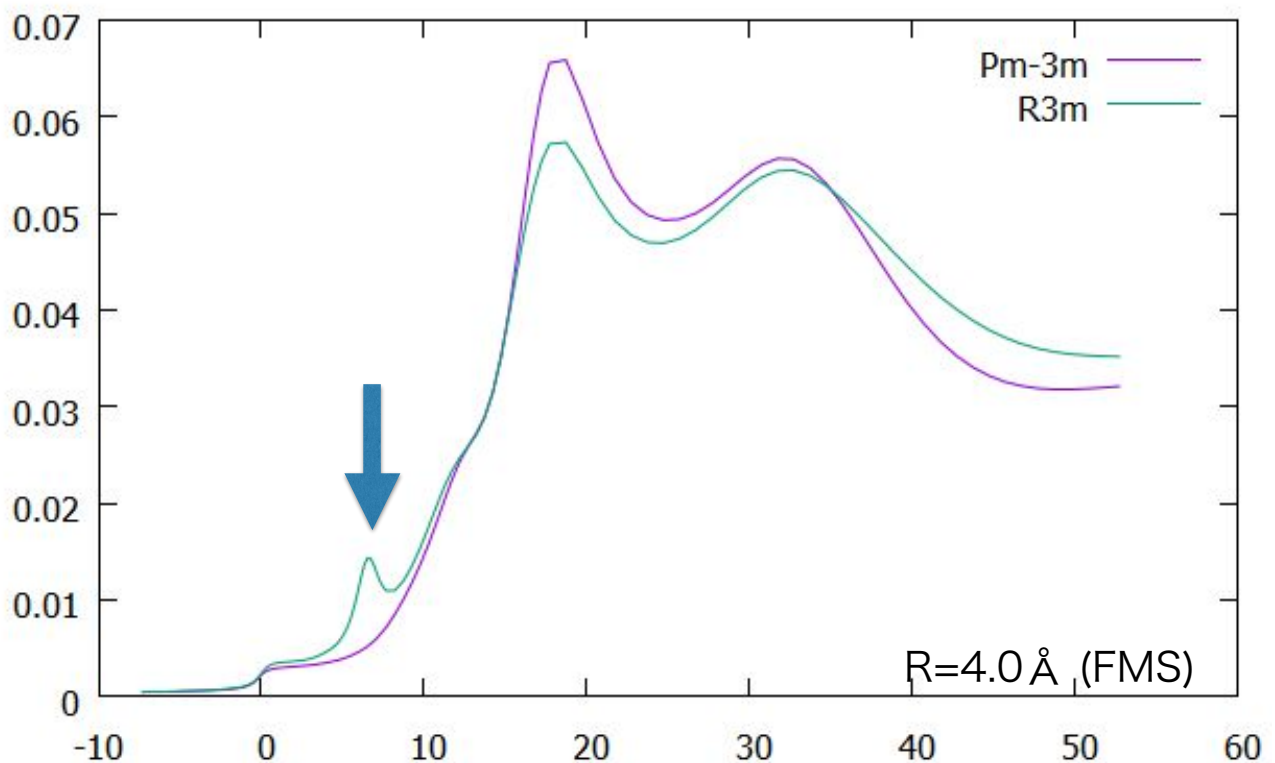
反転対称性がない場合

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

偶 奇 奇

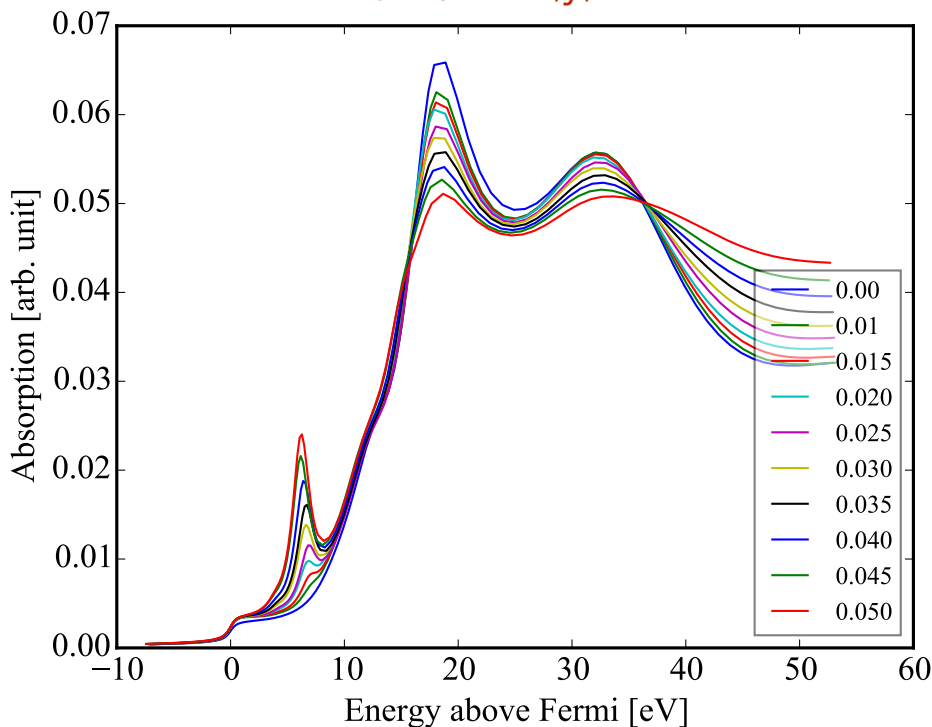
➡ on-siteでTiのp軌道とd軌道は混成する

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



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

Ti の内部座標を x,y,z 方向ΔだけシフトさせたときのXANES



R=4.0 Å (FMS)

仮想的な歪みの  
XANESの計算

### 多極子展開

デフォルトは Dipole transition

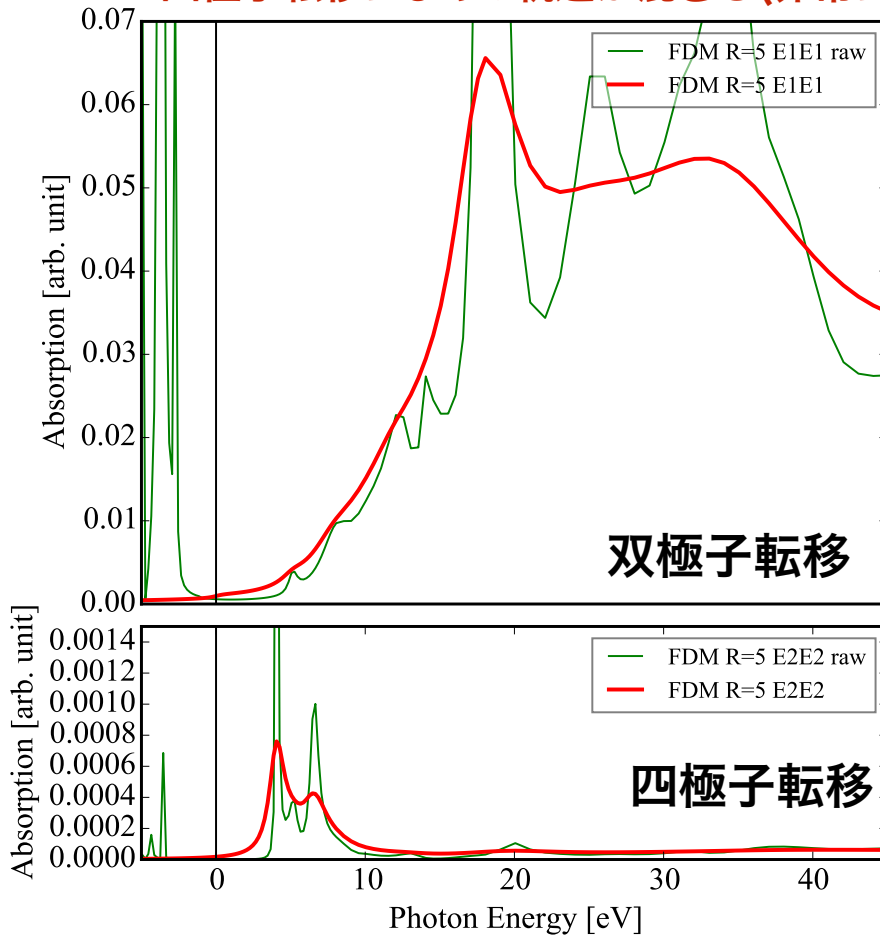
- Quadrupole (E1E2 and E2E2)
- Octupole (E1E3 and E3E3)
- Dipmag (E1M1) and (M1M1)
- E1E2
- E1E3
- E2E2
- E3E3
- E1M1
- M1M1
- No\_E1E1
- No\_E2E2
- No\_E1E2
- No\_E1E3

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

四極子展開を考慮した計算

# BaTiO3 常誘電相(Pm3-m)

四極子転移によりd軌道が混ざる(非常に小さい)



デフォルトで E1E1 が自動で入ってしまうので E2E2 のみの計算をしたければ必ず No\_E1E1 をする必要がある

```
Filout
TiO2
E2E2のみ計算
Quadrupole
No_E1E1
No_E1E2

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

Have a beautiful day !

## Appendix

構造変換 or 構造作成



## 助けてくれるツールたち

(FDMNESには未対応)

わりと万能な構造変換機能があるツール



**Atomic Simulation Environment**

**Python Framework**

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

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

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

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

**Python Framework+Tools**

★ (構造以外にもFDMNESの各機能にもほぼすべて対応)

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

→ RMC\_POT, FDMNES, 国産コードにも対応

→ 一部機能がしょぼいので ASEと組み合わせるのが吉

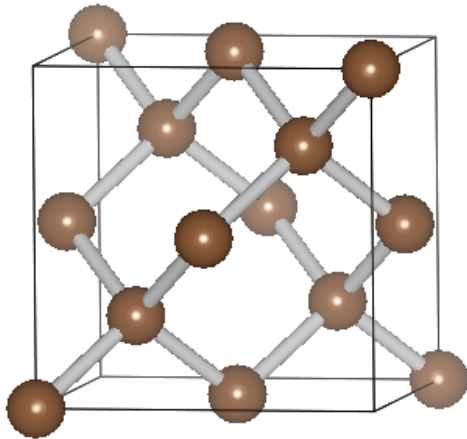
空間群の入力の際の注意

および

cif での入力の話

# 空間群にチョイスがある場合は注意

## 例) ダイヤモンド型構造



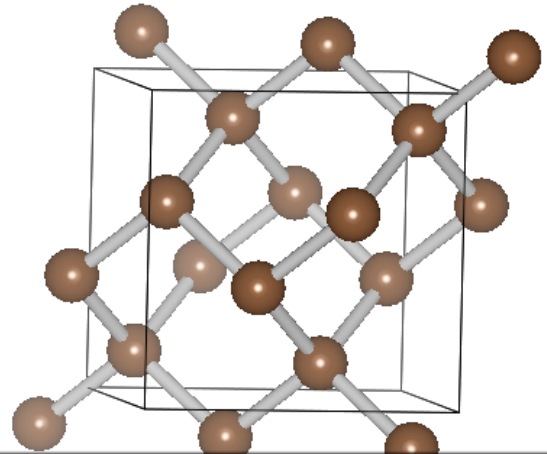
格子点を原子位置に一致

Non-Symmorphic Space Group

チョイス1

+部分的並進操作

Fd-3m  
(227)



格子点を反転中心にとる

Symmorphic Space Group

チョイス2

## International Tables for Crystallography (2006) から

227, Fd-3m **choice 1**

Non-Symmorphic Space Group

8a サイト

0,0,0

3/4, 1/4, 3/4

227, Fd-3m **choice 2**

Symmorphic Space Group

8a サイト

1/8, 1/8, 1/8

7/8, 3/8, 3/8

## spacegroup.txt (FDMNES)

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

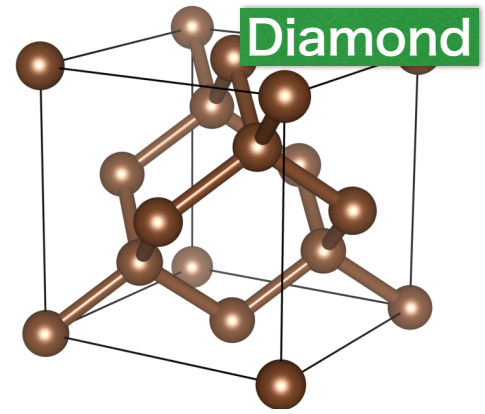
Spgroup

Fd-3m:1

チョイス1

Crystal

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



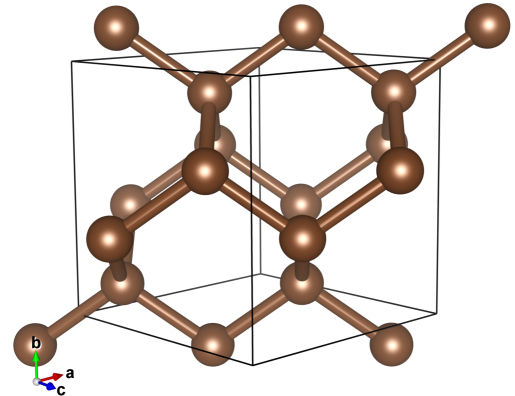
Spgroup

Fd-3m:2

チョイス2

Crystal

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



\*) チョイスありの H-M 記号で入力

### サイトの記述についての注意

Diamond

Spgroup

Fd-3m:1

チョイス1,パターンA

Crystal

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

サイトの

wycoff 位置 を全部書く

8a サイト 0,0,0  
3/4, 1/4, 3/4

Spgroup

Fd-3m:1

チョイス1,パターンB

Crystal

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

サイト内の代表選手のみ記述

8a サイト 0,0,0  
3/4, 1/4, 3/4

空間群は指定しておく (しなくてもよい)

Diamond

Spgroup  
Fd-3m:1

チョイス1,パターンC

Crystal

3.567 3.567 3.567 90. 90. 90.

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

8a サイト

サイト内の原子座標をP1で書く  
(8aサイトなので8つある)

空間群を使っても使わなくても、  
同じ構造を記述すれば良い

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

# cif ファイルから直接入力は出来ないの？

FDMNES には cif 入力の機能はありません

\*) PDBファイルの入力機能はありますが微妙に使えません

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

- \*) cifファイルの入力機能はありますが微妙に使えません
- \*) 対応している対称性が少ない(例:Rhombic はダメで Hexagonalに変換しなくてはならない)
- \*) 計算に必要な情報をすべて揃えているcifでないとダメ(例:チョイスなど)
- \*) P1 の cif はダメっぽい

対応していない cif が多すぎる

## 原則的には

- 1) cifファイルを読んで**構造を理解**すればよい  
ただし、cif ファイルの中身は実はかなり**複雑**
- 2) cifが作られた論文を読めば構造情報がわかる
- 3) cifを **VESTA** や **CrystalMaker** で読み込ませる  
自分が理解している出力形式へエクスポート
- 4) FDMNES に対応した構造ツールを使う
  - (1) 拙作 StructureAnalysisEnvironment (仮) 近日公開予定
  - (2) pyFDMNES (FDMNES専用の Python Framework)

# cif ファイルの一番シンプルな内部構造

TiO<sub>2</sub> Rutile

_pd_phase_name	'TiO2 Rutile'				
_cell_length_a	4.593(2)			cell parameter	
_cell_length_b	4.593(2)				
_cell_length_c	2.959(2)				
_cell_angle_alpha	90				
_cell_angle_beta	90				
_cell_angle_gamma	90				
_symmetry_space_group_name_H-M	'P 42/m n m'			space group	
_symmetry_Int_Tables_number	136				
_atom_site_type_symbol					
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 占有率                      x,y,z

!!! 簡単そうだ!!!

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

Diamond

## Diamond型 C (227,Fd-3m)

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

実は 素のHermann-Mauguin記号なのでチョイスが判らん

よく見ると  
対称操作が異なる

チョイス1

チョイス2

```

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

```

+部分的並進操作

(Non-Symmorphic Space Group)

```

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

```

原理的にはチョイスが見極められるのだが・・・

手動でチョイスを並進操作を見極めるのがしんどい

一番？簡単な方法としては

VESTA or CrystalMaker で対称性を P1 に落とすこと

The screenshot shows the VESTA software interface. The 'Edit' menu is open, and 'Unit Cell...' is selected. The interface displays structural models and volumetric data options. A 3D model of a diamond crystal structure is visible on the right side of the window.

VESTA

Phase: 1 New structure

Phase Unit cell Structure parameters Volumetric data Crystal shape

Diamond

Symmetry

Magnetic structure

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

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

Lattice parameters

a (Å)	b (Å)	c (Å)	$\alpha$ (°)	$\beta$ (°)	$\gamma$ (°)
3.56700	3.56700	3.56700	90.0000	90.0000	90.0000
s.u.:	0.00000	0.00000	0.0000	0.0000	0.0000

Remove symmetry

Remove symmetry

VESTA

対称性あり

Diamond

Atomic displacement parameter Anisotropic: None 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

New Delete Clear

VESTA



# 注意) VESTA

Phase: 1 Fd-3m:1

Phase Unit cell Structure parameters Volumetric data Crystal shape

Atomic displacement parameter Anisotropic: None Isotropic: B

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

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

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

**Fd-3m:1** **8aサイト**

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

New Delete Clear

VESTA はサイトの代表選手以外を書いても正しく描画する

Phase: 1 New structure

Phase Unit cell Structure

Atomic displacement parameter

No.: Symbol.

x: 0.000000 y: 0.000000 z: 0.000000

U11: 0.000000 U12: 0.000000 U13: 0.000000

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

**Fd-3m:1** **Diamond**

**Remove symmetry**

**P1**

もし 8aサイトの代表選手以外も記述してしまったら

重複してしまう  
同じ座標を登録

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

New Delete Clear

VESTA

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

**Remove symmetry** 後に

**Diamond**



cif ファイルにエクスポートする

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

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

恒等操作のみ

省略

P1での内部座標をゲット！

atom	site	type	symbol						
C	1.0	0.000000	0.000000	0.000000	Biso	1.000000	C		
C	1.0	0.000000	0.500000	0.500000	Biso	1.000000	C		
C	1.0	0.500000	0.500000	0.000000	Biso	1.000000	C		
C	1.0	0.500000	0.000000	0.500000	Biso	1.000000	C		
C	1.0	0.750000	0.250000	0.750000	Biso	1.000000	C		
C	1.0	0.250000	0.250000	0.250000	Biso	1.000000	C		
C	1.0	0.250000	0.750000	0.750000	Biso	1.000000	C		
C	1.0	0.750000	0.750000	0.250000	Biso	1.000000	C		

元素記号

x,y,z



FDMNESを

P1の内部座標で記述

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

```
Crystal
3.567 3.567 3.567 90. 90. 90.
6.0 0.0 0.0 0.0
6.0 0.0 0.5 0.5
6.0 0.5 0.5 0.0
6.0 0.5 0.0 0.5
6.0 0.75 0.25 0.75
6.0 0.25 0.25 0.25
6.0 0.25 0.75 0.75
6.0 0.75 0.75 0.25
```

計算したい  
構造をうまく記述する

分子系の記述は？

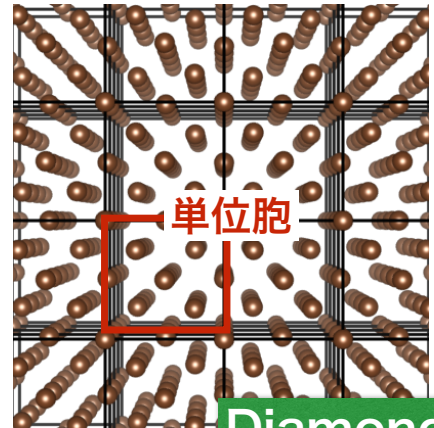
## Crystal のとき

FDMNES は単位胞を周期的に配置する

Spgroup  
Fd-3m:1

### Crystal

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



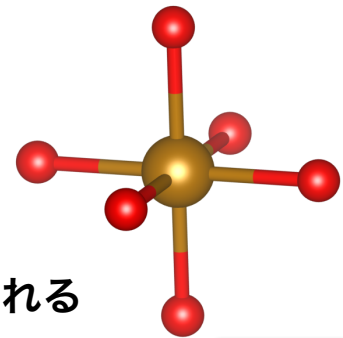
## Molecule のとき

### Molecule

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



孤立して配置される



FeO<sub>6</sub>

Spgroup  
Fd-3m:1

### Crystal

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

for FDMNES

mesh parameter  
unit-cell

unit-cell を単位とした  
内部座標

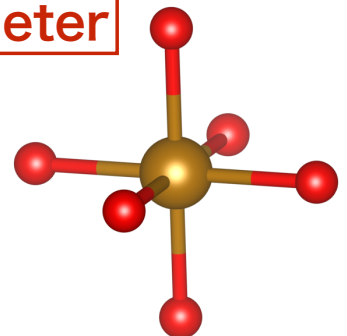
分子系の入力xyz(Cartesian)ではなくDirectで行う

### 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 では…

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

×) 直接 POSCAR などの**周期系の形式**で output する

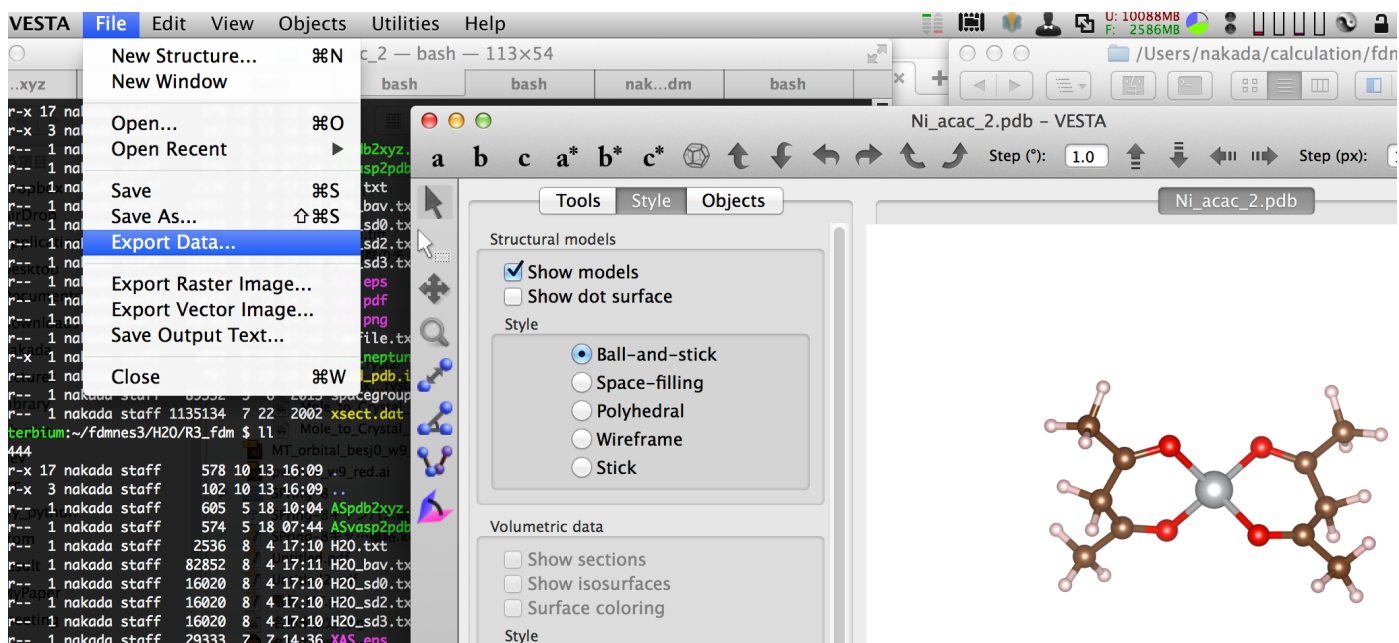
○) 一度 **cif 形式に export** する。

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

単位胞情報を持った後ならば周期系の形式へ出  
力が自由に出来る

## VESTA では…

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

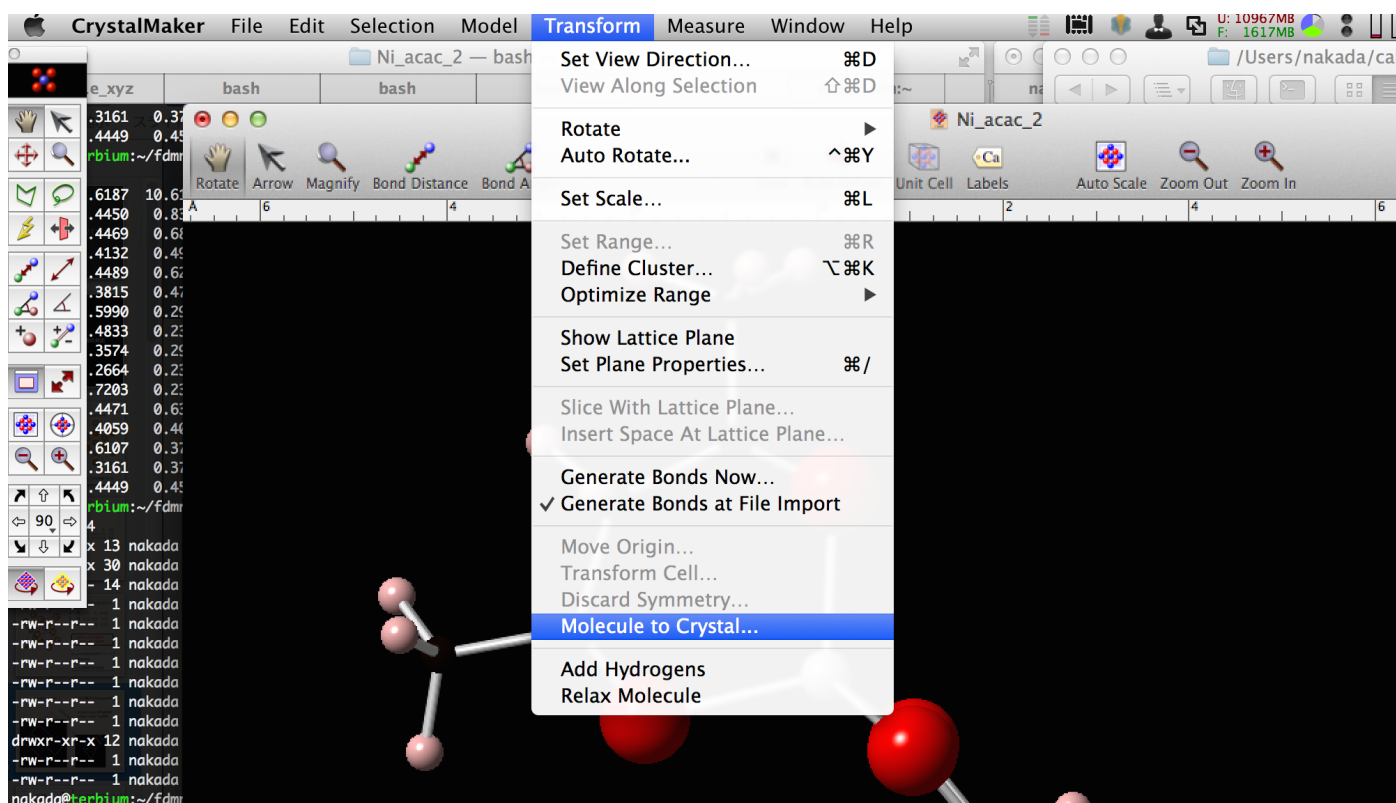


2) 保存した cif を開く

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

## Crystal Maker では

[Transform]-[Molecule to Crystal] を選択



# lattice parameter を設定

Convert Molecule to Crystal

	Width ( $\Delta X$ )		Height ( $\Delta Y$ )		Depth ( $\Delta Z$ )
Molecular Dimensions:	<b>8.117 Å</b>	x	<b>7.805 Å</b>	x	<b>6.599 Å</b>

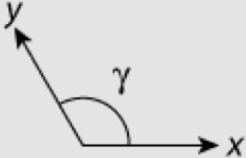
  

	a [Å]	b [Å]	c [Å]	$\alpha$ [°]	$\beta$ [°]	$\gamma$ [°]
Lattice Parameters:	12.176	11.708	9.899	90.00	90.00	90.00

Orientation Relationship:

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

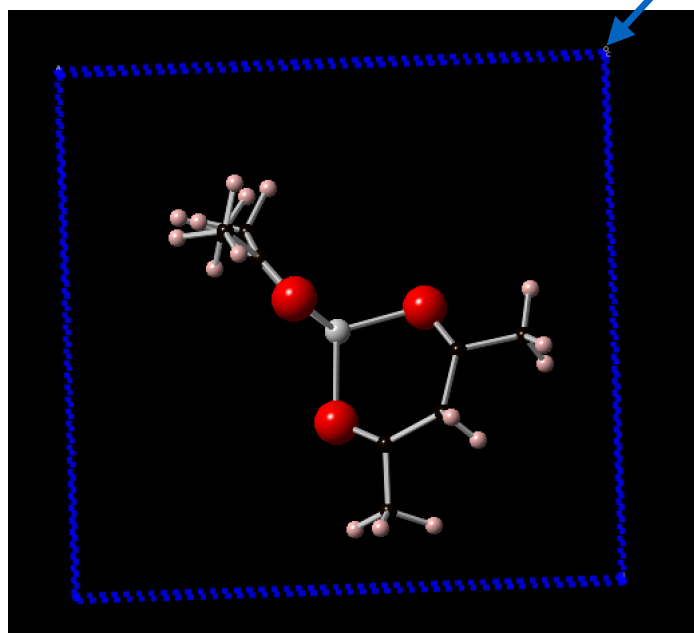
Please ensure that your molecule is in the correct orientation before proceeding!



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

? Cancel Convert

分子の情報に箱 (unit-cell) 加わる

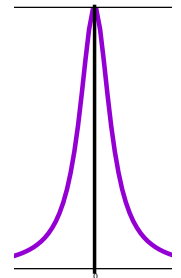


lattice *a*  
lattice *b*  
lattice *c*  
 $\alpha$   
 $\beta$   
 $\gamma$



# Convolution について

## Lorentzian-convolution (畳み込み)



ブロードニングする前のスペクトル

ブロードニング後

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

Lorentzian 型

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

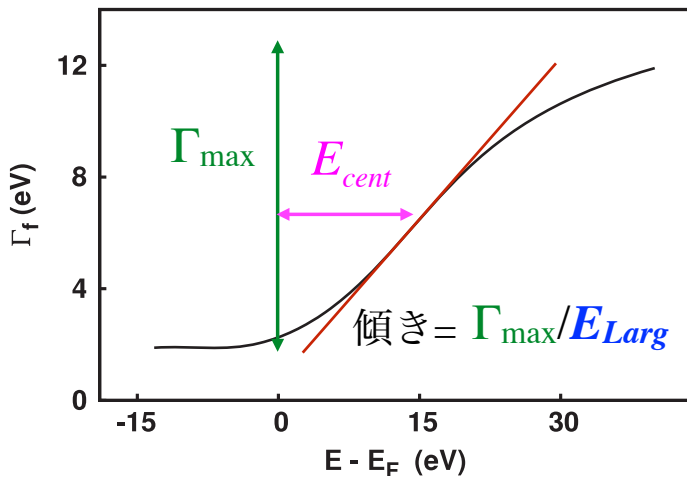
$$e = \frac{E - E_F}{E_{\text{cent}}}$$

arctangent 型

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

arctangent 型

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



- $\Gamma_{max}$  終状態の最大値
- $\Gamma_{hole}$  ホールの幅
- $E_{Larg}$  arctangent の幅
- $E_{cent}$  arctangent の中心
- $E_{fermi}$  Fermi Level

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

## convolution (畳み込み)

```
Filout
Cu

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

Radius
3.0

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

Convolution
convolution 畳み込みをする

End
```

出力

- Cu.txt
- Cu\_bav.txt
- Cu\_conv.txt
- inp.txt
- fdmfile.txt
- spacegroup.txt
- xsect.dat

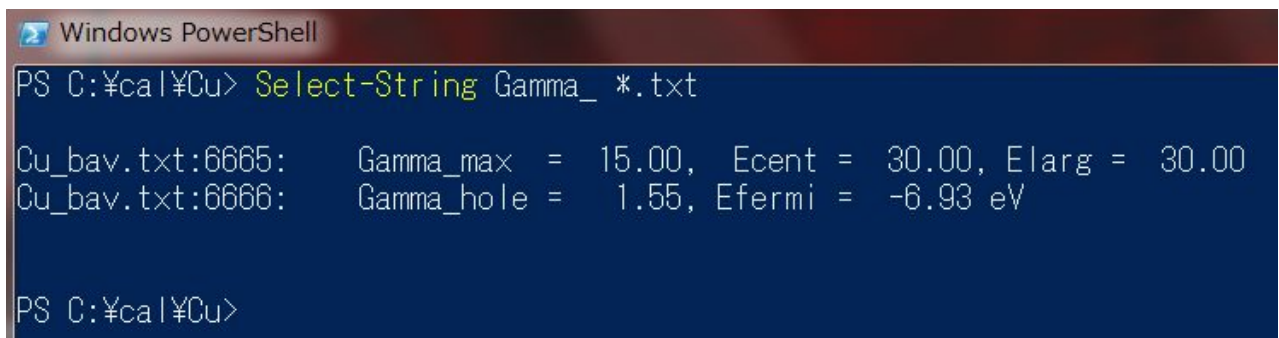
core-hole の life time などを考慮

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

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

### 現在の Convolution パラメーターを確認

1) `Select-String Gamma_*.txt` (Gamma 値を検索)



```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal¥Cu> Select-String Gamma_*.txt
Cu_bav.txt:6665: Gamma_max = 15.00, Ecent = 30.00, Elarg = 30.00
Cu_bav.txt:6666: Gamma_hole = 1.55, Efermi = -6.93 eV
PS C:\¥cal¥Cu>
```

**Gamma\_max = 15.00**  
**Ecent = 30.00**  
**Elarg = 30.00**

デフォルトでは固定値

**Gamma\_hole = 1.55**  
**Efermi = -6.93 eV**

(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 convolution 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>
```

スペース  
↓  
tree □ /F ¥cal

ディレクトリやファイルのツリー表示

スペース  
↓  
tree □ /F

カレントディレクトリ以下をツリー表示 (/F を付けるとファイルも表示)

スペース      スペース  
↓                    ↓  
tree □ /F □ 指定ディレクトリ

指定ディレクトリ以下をツリー表示 (/F を付けるとファイルも表示)

計算結果をコピー

## 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

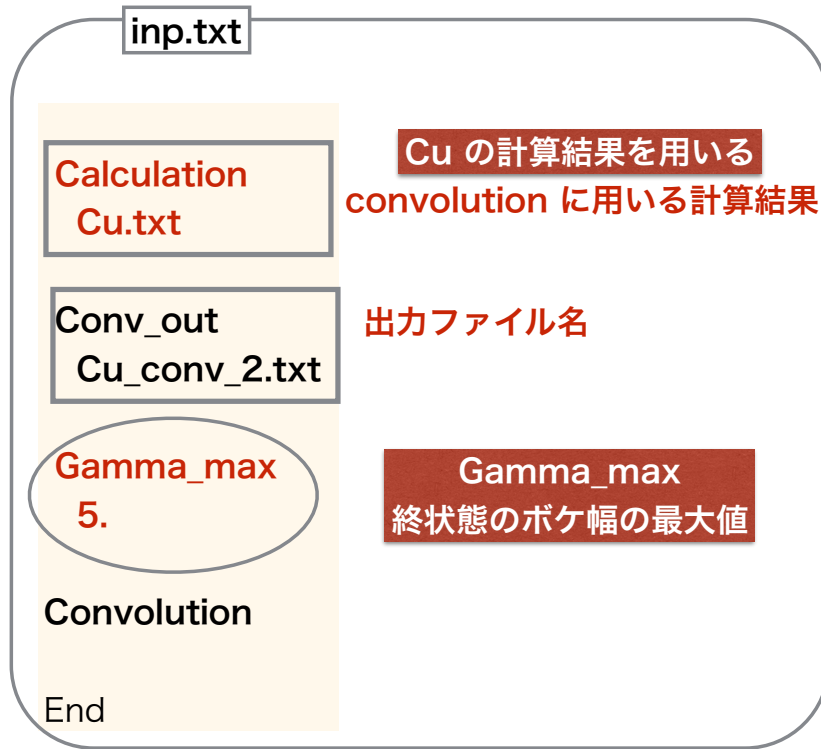
Cu の計算結果をコピーする

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

## GNU PLOT用にコメントアウトしていた Cu.txt を元に戻す

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

```
# 8979.000 29 1 1 0.00000 -12.19174 -6.92517 1 1  
#| Energy <xanes>  
-10.000 1.7563206E-02  
-9.800 2.0000084E-02  
-9.600 2.3896177E-02  
-9.400 3.1033613E-02  
-9.200 4.9536063E-02  
-9.000 1.2873069E-01  
-8.800 2.8190062E-01  
-8.600 8.0092466E-03  
-8.400 2.1026680E-02
```

A red circle highlights the first two lines, and a red arrow points from this circle to the second screenshot.

スペース  
↓  
start □. ¥Cu.txt  
Cu.txt の編集

A second screenshot of the same text editor window. The content is now:

```
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
```

A red circle highlights the first line, and a red arrow points from this circle to the text below.

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:\%ca\%Cu> tree /F %ca\
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:\%ca\%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:\%ca\%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:\%ca\%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)	lambd (A)
-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:\%ca\%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>
```





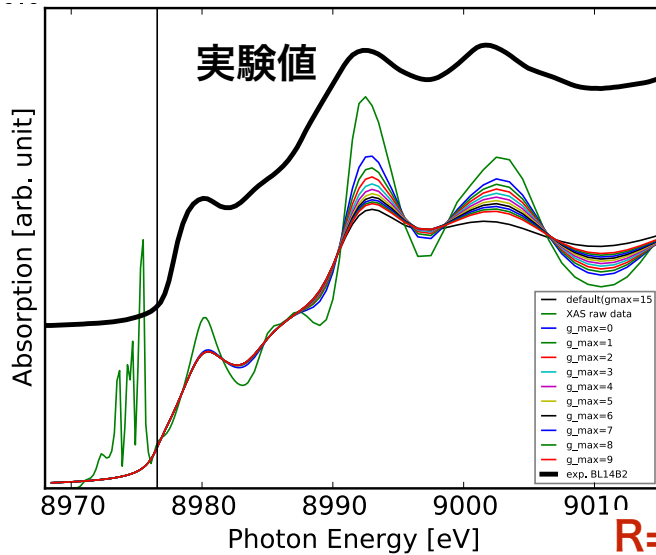
$\Gamma_{\max} = 1 \sim 9$  変化

$\Gamma_{\text{hole}} = 1.55$  固定

**$\Gamma_{\max}$  を変化**

**( $\Gamma_{\text{hole}}$  は固定値)**

**後半部分**のスペクトルの変化



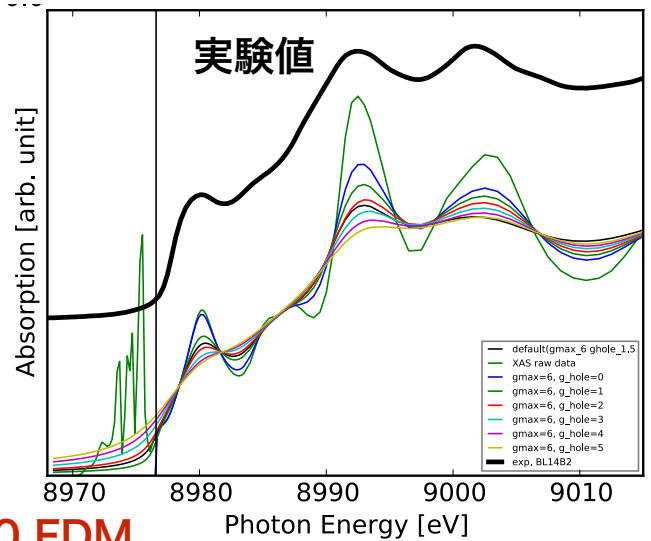
$\Gamma_{\max} = 15.0$  固定

$\Gamma_{\text{hole}} = 1 \sim 5$  変化

**( $\Gamma_{\max}$  は規定値のまま)**

**$\Gamma_{\text{hole}}$  を変化**

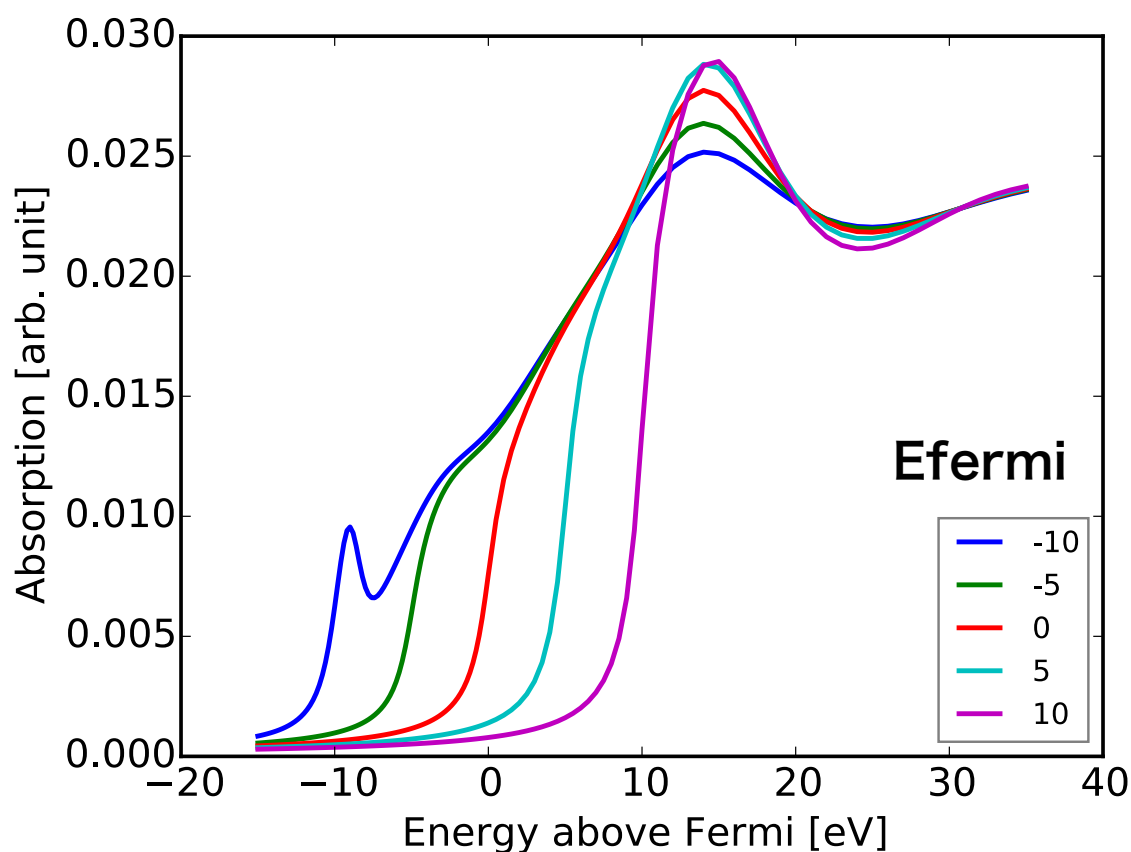
**全体的な**スペクトルのボカシ



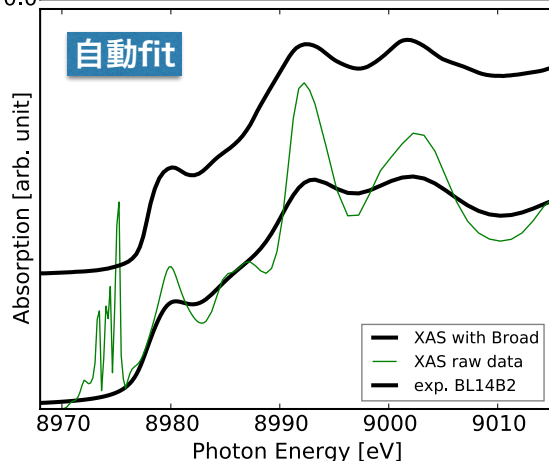
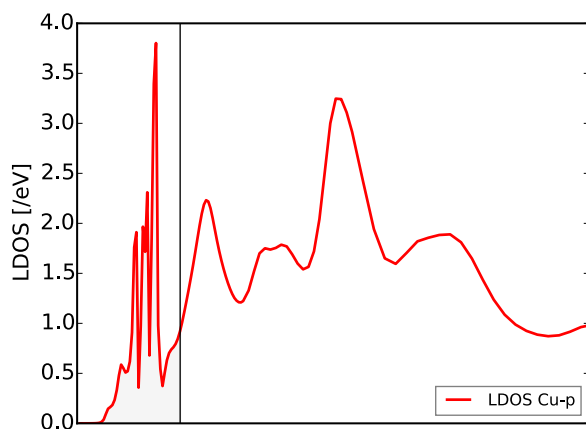
**Convolution パラメーターの実験値へのフィット**

FCC Cu  
green R4

Efermi を変更すると  
convolution 後の結果が変わる



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



Metric\_out  
Cu\_fit.log

Experiment  
Cu\_K\_Cu\_foil\_Si311\_50ms\_140625.txt.nor

Gen\_shift  
-20. 20. 100

Parameter

Par\_ecent      **Centra energy for the arctangents**  
0. 50. 100.      **Ecent**

Par\_elarg      **Energy width for the arctangents**  
0. 50. 100.      **Elarg**

Par\_efermi      **Fermi energy**      **Efermi**  
-10. 10. 100.

Par\_gamma\_hole      **Hole width**       **$\Gamma_{hole}$**   
0. 10. 100.

Par\_gamma\_max      **Maximum width for the final states**  
0. 20. 100.       **$\Gamma_{max}$**

## Cu2O の DOS(sd\*.txt) のナンバリングについて

Cu2O\_sd0.txt

Cu2O\_sd1.txt

Cu2O\_sd2.txt



どの原子のLDOSなのか？

計算ログ(Cu2O\_bav.txt)の中を見る

Crystal

入力した構造情報の確認

ngroup = 6, ntype = 2

a, b, c = 4.2676000 4.2676000 4.2676000

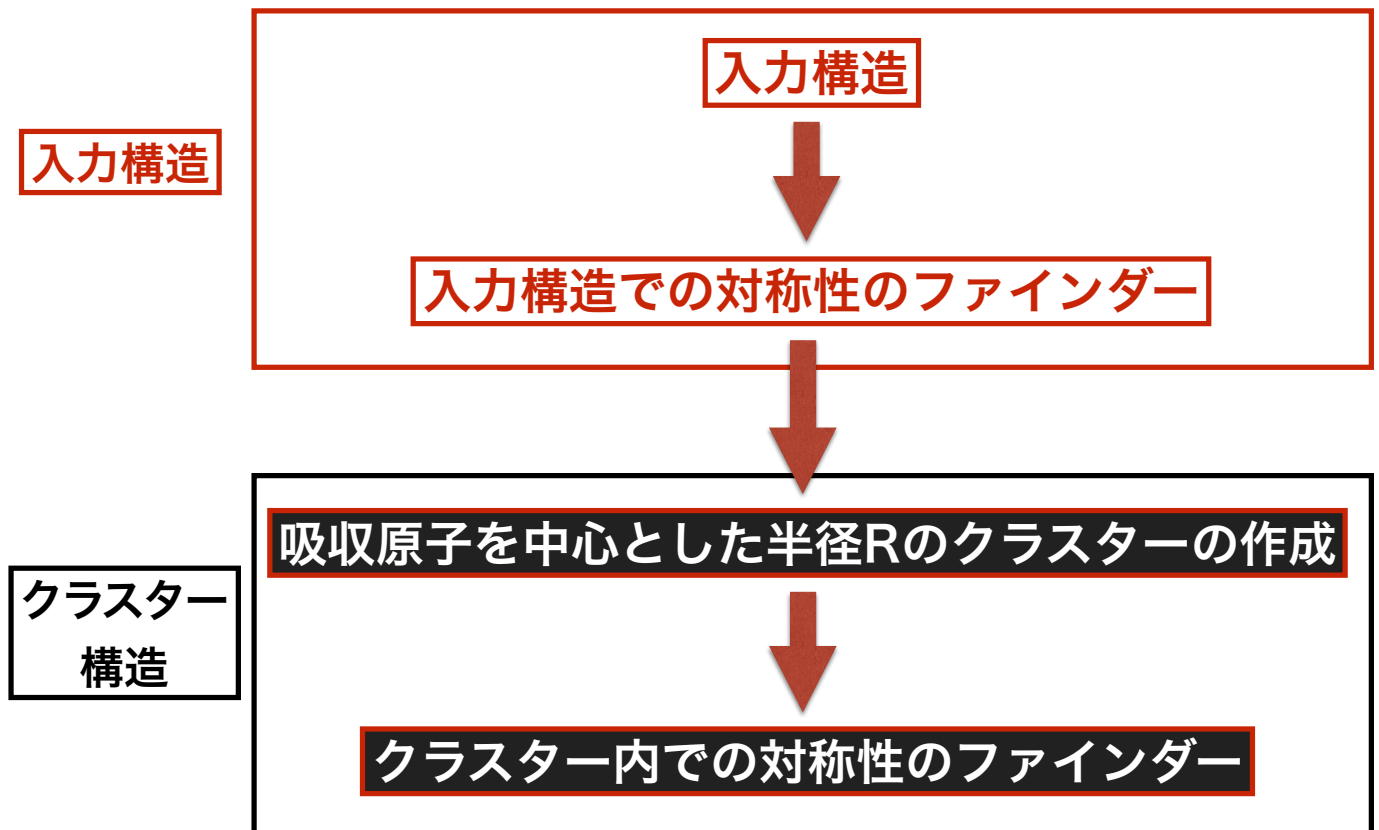
alfa, beta, gamma = 90.000 90.000 90.000

Z Typ posx posy posz

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

2種類  
6原子

# FDMES は入力の結晶/分子構造からクラスターを自動作成



## 入力した構造情報の対称性の確認

### 入力した結晶の通しの原子の番号

---- Symbsite

**ipr = 1, Z = 29, natomsym = 4**

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

**ipr=1**

(等価な原子が4つ)

**ipr = 2, Z = 8, natomsym = 2**

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

**ipr=2**

(等価な原子が2つ)

系の対称性から二種類のサイトが見つかる

## 作成したクラスター構造の確認

元になった結晶で対称性での分類番号(igr)

元になった結晶の通し番号(ia)

クラスターの通し番号(ia)

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

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

クラスターは absorber が原点に作られる

## Atom\_selec 項目のチェック

元になった結晶の通し番号(igr)

--- Atom\_selec

Rsort = 4.651 A

nx = 25

natome = 7, igrpt = 17, Cluster\_comp = T, Cluster\_mag = F

No Full\_atom mode

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

Absorber

sd0 Cu\*  
sd2 O  
sd1 Cu

O原子のLDOSは **Cu2O\_sd2.txt** ファイルに記述される  
元構造では5番目の原子

## Cu2O のDOS(sd\*.txt) の中身について

### Cu2O\_sd0.txt ファイルの中身

Energy	Int t	n(0,0)	Intn(0,0)	n l(0)	Intn l(0)	n(1,-1)	Intn(1,-1)
-10.0000	1.62013E-02	1.80092E-03	2.64731E-05	3.60185E-03	5.29462E-05	3.02240E-02	4.44284E-04
-9.8000	2.10233E-02	1.72160E-03	5.17802E-05	3.44320E-03	1.03560E-04	1.25301E-03	4.62703E-04
-9.6000	2.19306E-02	5.30934E-03	1.29826E-04	1.06187E-02	2.59652E-04	5.13345E-04	4.70249E-04
-9.4000	2.47313E-02	1.02339E-02	2.80262E-04	2.04679E-02	5.60525E-04	3.75202E-04	4.75765E-04
-9.2000	3.12087E-02	2.00175E-02	5.74514E-04	4.00350E-02	1.14903E-03	2.07370E-04	4.78813E-04
-9.0000	4.83514E-02	4.64868E-02	1.25786E-03	9.29736E-02	2.51572E-03	1.14205E-04	4.80492E-04
-8.8000	1.19792E-01	1.47569E-01	3.42709E-03	2.95138E-01	6.85417E-03	1.25475E-04	4.82336E-04
-8.6000	1.66547E+01	6.46163E-01	1.29255E-02	1.29233E+00	2.58510E-02	3.25722E-04	4.87124E-04
-8.4000	1.70825E+01	5.82587E-01	2.14894E-02	1.16517E+00	4.29787E-02	1.00351E-03	5.01875E-04
-8.2000	1.91458E+01	2.20440E-01	2.47298E-02	4.40881E-01	4.94596E-02	3.33706E-03	5.50929E-04
-8.0000	1.92677E+01	9.17217E-02	2.60781E-02	1.83443E-01	5.21561E-02	1.44099E-02	7.62750E-04
-7.8000	1.93258E+01	5.17003E-02	2.68381E-02	1.03401E-01	5.36761E-02	4.79799E-02	1.46804E-03
-7.6000	1.94922E+01	6.66866E-03	2.69361E-02	1.33373E-02	5.38722E-02	1.44232E-01	3.58821E-03
-7.4000	1.97423E+01	4.62127E-03	2.70040E-02	9.24255E-03	5.40080E-02	5.90383E-02	4.45606E-03
-7.2000	1.99566E+01	2.09856E-02	2.73125E-02	4.19711E-02	5.46250E-02	1.02612E-02	4.60689E-03
-7.0000	2.00789E+01	1.75939E-02	2.75711E-02	3.51877E-02	5.51422E-02	8.20498E-03	4.72750E-03
-6.8000	2.00947E+01	3.55139E-02	2.80932E-02	7.10279E-02	5.61863E-02	4.16793E-03	4.78877E-03
-6.6000	2.01319E+01	8.78617E-02	2.93847E-02	1.75723E-01	5.87694E-02	4.21402E-02	5.40822E-03

先頭の三行だけを詳しく見る

## Cu2O\_sd0.txt ヘッダ情報を三行だけ抜き出す

1行目

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

2行目

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

3行目

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

## int\_t に対応しているのは 二列目

1行目

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

2行目

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

3行目

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

## n(0,0) に対応しているのは 三列目

1行目

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

2行目

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

3行目

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

### (注意)

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

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

ここでのn(0,0) などの意味は

real spherical harmonics を意味している



## real spherical harmonics

$l=1$	局所状態密度	積分局所状態密度
$m=-1$ : p <sub>y</sub>	$n(1,-1)$	$\text{intn}(1,-1)$
$m=0$ : p <sub>z</sub>	$n(1,0)$	$\text{intn}(1,0)$
$m=1$ : p <sub>x</sub>	$n(1,1)$	$\text{intn}(1,1)$

$l=2$	局所状態密度	積分局所状態密度
$m=-2$ : d <sub>xy</sub>	$n(2,-2)$	$\text{intn}(2,-2)$
$m=-1$ : d <sub>yz</sub>	$n(2,-1)$	$\text{intn}(2,-1)$
$m=0$ : d <sub>z2</sub>	$n(2,0)$	$\text{intn}(2,0)$
$m=1$ : d <sub>xz</sub>	$n(2,1)$	$\text{intn}(2,1)$
$m=2$ : d <sub>x2-y2</sub>	$n(2,2)$	$\text{intn}(2,2)$

復習

## complex spherical harmonics

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

## real spherical harmonics

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

orbital    real spherical harmonics    complex spherical harmonics

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

$$p_z \quad Y_{10}$$

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

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

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

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

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

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

局所状態密度

局所積分状態密度

s軌道	$n_l(0)$	$\text{intn}_l(0)$
p軌道	$n_l(1)$	$\text{intn}_l(1)$
d軌道	$n_l(2)$	$\text{intn}_l(2)$

Cu2O\_sd0.txt ヘッダ情報を一行目

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

1行5列:  $n_l(0)$  → s軌道

1行13列:  $n_l(1)$  → p軌道

1行25列:  $n_l(1)$  → d軌道

## Cu2O\_sd0.txt の1行目をコメントアウト

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



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

## O原子のLDOSを確認する (Cu2O\_sd2.txt)

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

1行5列: n\_l(0) → s軌道

1行13列: n\_l(1) → p軌道

wgnuplot を開く

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

## BaTiO3 のDOS(sd\*.txt) の中身について

### pre-edge の起源を探る 局所状態密度の解析

#### BaTiO3\_Pm3-m の BaTiO3\_bav.txt の確認

---- Atom\_selec

Rsor = 3.467 A  
nx = 19  
natome = 5, igrpt = 8, Cluster\_comp = F, Cluster\_mag = F  
No Full\_atom mode

元になった結晶の通し番号(igr)

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

sd0 → Ti のLDOS

sd2 → Ba のLDOS

sd3 → O のLDOS

sd0 → Ti のLDOS

Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	<b>n_l(0)</b>	Intn_l(0)	n(1,-1)	Intn(1,-1)
n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)	<b>n_l(1)</b>	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)
			<b>n_l(2)</b>	Intn_l(2)			

sd2 → Ba のLDOS

Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	<b>n_l(0)</b>	Intn_l(0)	n(1,-1)	Intn(1,-1)
n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)	<b>n_l(1)</b>	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)
<b>n_l(2)</b>	Intn_l(2)	n(3,-3)	Intn(3,-3)	n(3,-2)	Intn(3,-2)	n(3,-1)	Intn(3,-1)
n(3,0)	Intn(3,0)	n(3,1)	Intn(3,1)	n(3,2)	Intn(3,2)	n(3,3)	Intn(3,3)
			<b>n_l(3)</b>	Intn_l(3)			

sd3 → O のLDOS

Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	<b>n_l(0)</b>	Intn_l(0)	n(1,-1)	Intn(1,-1)
	n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)	<b>n_l(1)</b>	Intn_l(1)	

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

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

**OpenMPI + Intel Compiler + MKL**

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

Sergey A. Guda,<sup>†</sup> Alexander A. Guda,<sup>\*,‡</sup> Mikhail A. Soldatov,<sup>‡</sup> Kirill A. Lomachenko,<sup>‡,§</sup> Aram L. Bugaev,<sup>‡</sup> Carlo Lamberti,<sup>‡,§</sup> Wojciech Gawelda,<sup>||</sup> Christian Bressler,<sup>||,⊥</sup> Grigory Smolentsev,<sup>‡,#</sup> Alexander V. Soldatov,<sup>‡</sup> and Yves Joly<sup>∇,○</sup>

DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00327

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

## MUMPS 等の疎行列ソルバーを使ったFDMNES の高速化について

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

## 2015.07.03以降のFDMNES には

3つの外部ライブラリが必要

+ さらに BLAS/BLACS/ScaLAPACK

**MUMPS Library:** a parallel sparse direct solver

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

ユーザー登録が必要

**SCOTCH library**

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

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

**METIS library**

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

## MUMPS 5.0.1

**Makefile.INTEL.PAR** ベース

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

[makefile.inc](#)

必要ライブラリ

```
OpenMPI  
BLAS  
BLACS  
ScaLAPAC
```

```
make  
make z
```

4つのライブラリが作られる



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

## scotch 6.0.4

```
cd src
```

[Makefile.inc](#)

**Make.inc/Makefile.inc.i686\_pc\_linus2** ベース

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

**追加**

```
make  
make esmumps
```



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

## METIS library **CMake 2.8 以上が必要**

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

```
make
```

```
make install
```



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

.SUFFIXES: .f90

## FDMNES の Makefile

FC = mpif90

## Intel Compiler, MKL and OpenMPI

EXEC = fdmnes

FFLAGS = -c -lincludemumps ← MUMPS

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

all: \$(EXEC)

\$(EXEC): \$(OBJ)

\$(FC) -o \$@ \$^ -Llibmumps -ldmumps -lmumps\_common -lpord -lzmumps \ ← MUMPS  
-Llibscotch -lscotch -lscotcherr \ ← scotch  
-Llibesmumps -lesmumps \ ← metis  
-L\$(HOME)/lib/metis/lib -lmetis \ ← metis  
-mkl \ ← BLAS, LAPACK  
-lmkl\_scalapack\_lp64 -lmkl\_blacs\_openmpi\_lp64 ← BLACS, ScaLAPACK  
-lpthread

sphere.o: sphere.f90

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

%.o: %.f90

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

[今の場合の想定しているディレクトリ構成]

includemumps -> ../mumps/include

libesmumps -> ../scotch/src/esmumps

libmumps -> ../mumps/lib

libmumpsseq -> ../mumps/libseq

libscotch -> ../scotch/src/libscotch

libscotchmetis -> ../scotch/src/libscotchmetis

## FCC Cu

FDM R=3.0

FDMNES 2015.01.05

34.8 sCPU

FDMNES 2015.10.06 (with MUMPS)

7.6 sCPU

4倍~5倍 速度向上

FDM R=4.0

FDMNES 2015.01.05

240.9 sCPU

FDMNES 2015.10.06 (with MUMPS)

18.8 sCPU

13倍 速度向上

## ZrO<sub>2</sub> 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