



JASRI

実習(2)

FDMNESによる  
XANESシミュ  
レーション

2019版

(公益財団法人)  
高輝度光科学研究センター  
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

## 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**

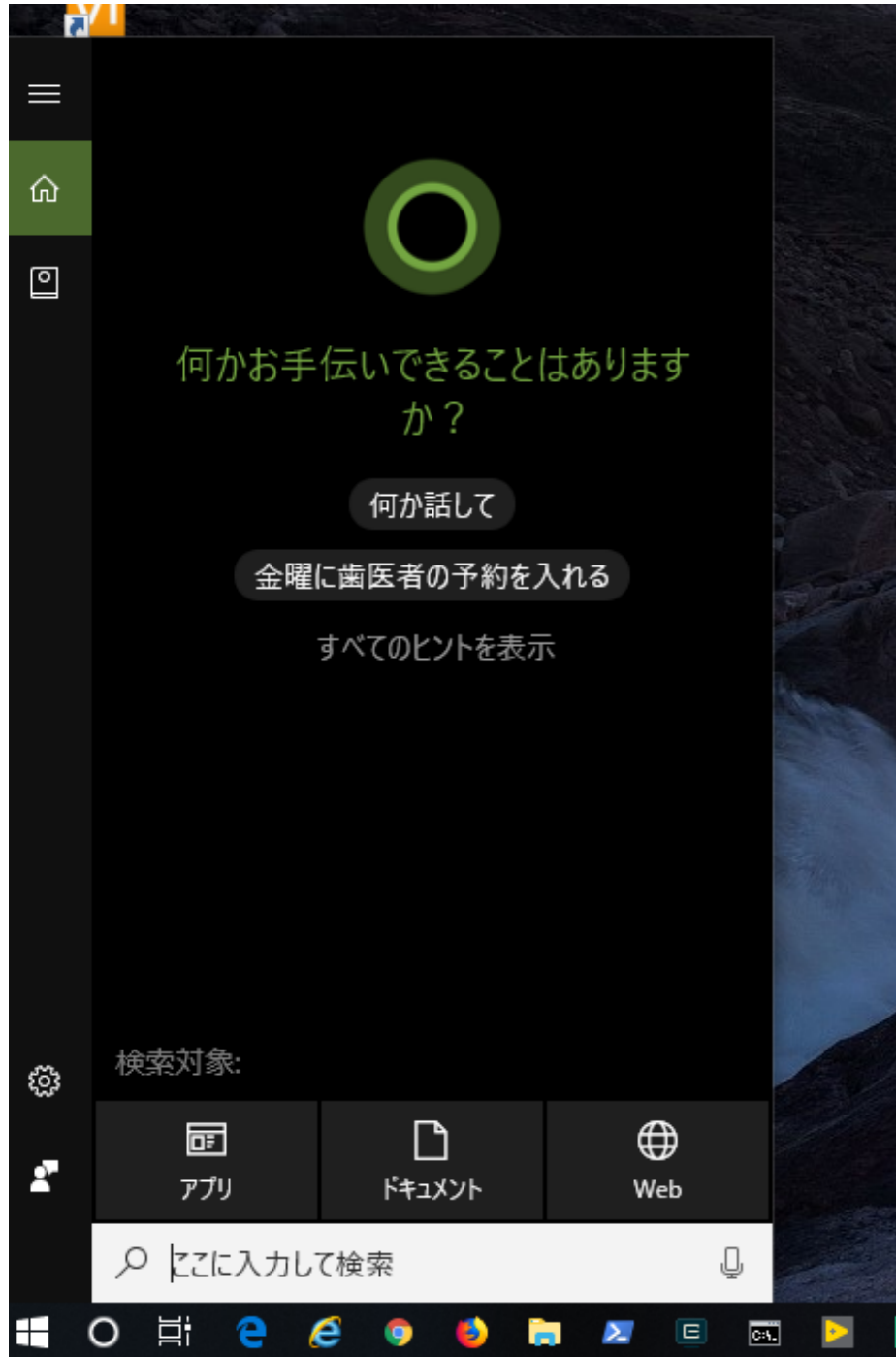
**とにかく動かしてみる**

# 0) PowerShell を開く

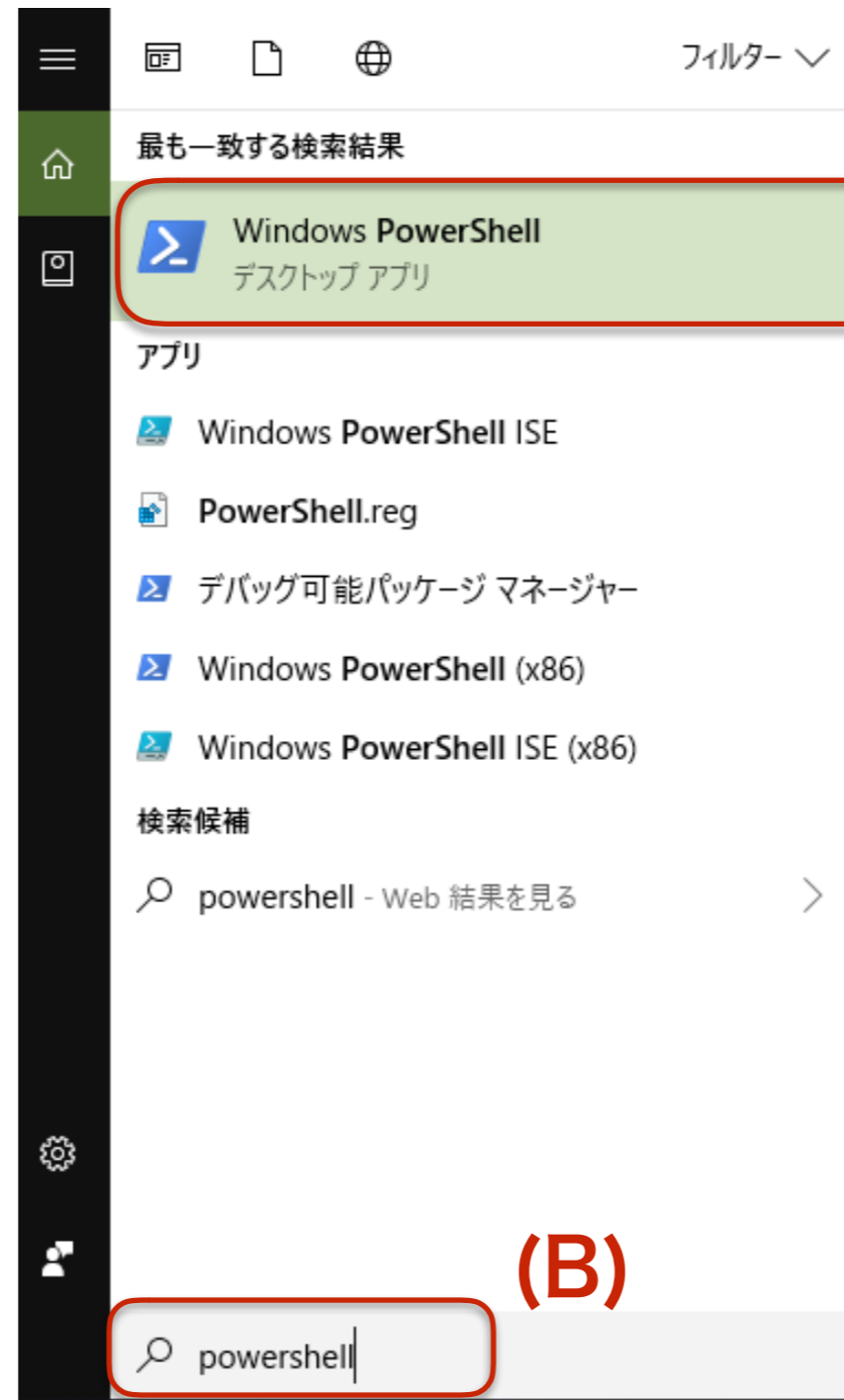
(A) 検索を開く  + S

(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  
スペース ↓ 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

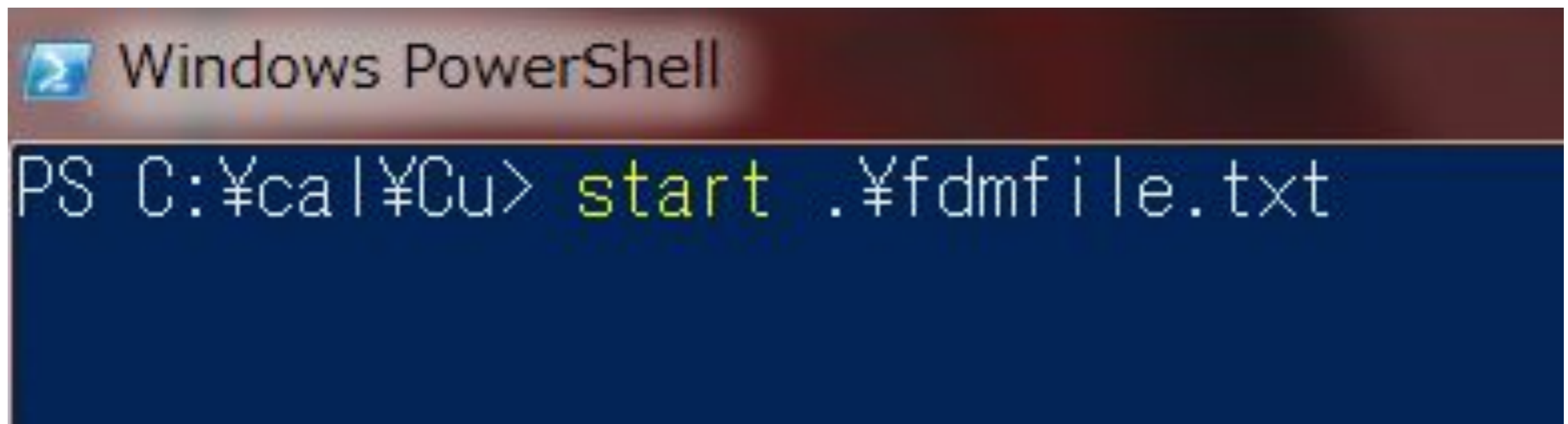
## 6) `fdmfile.txt` を編集する

`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)



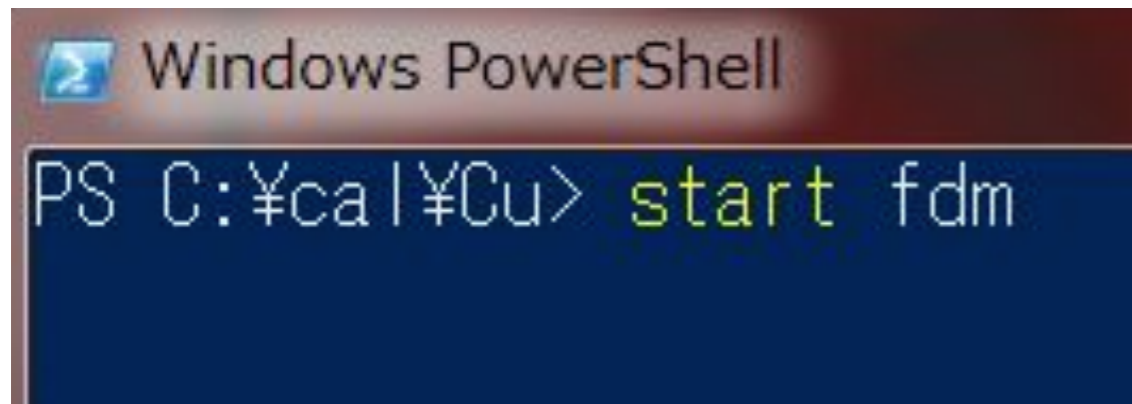
```
Windows PowerShell
PS C:¥ca|¥Cu> start .¥fdmfile.txt
```

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

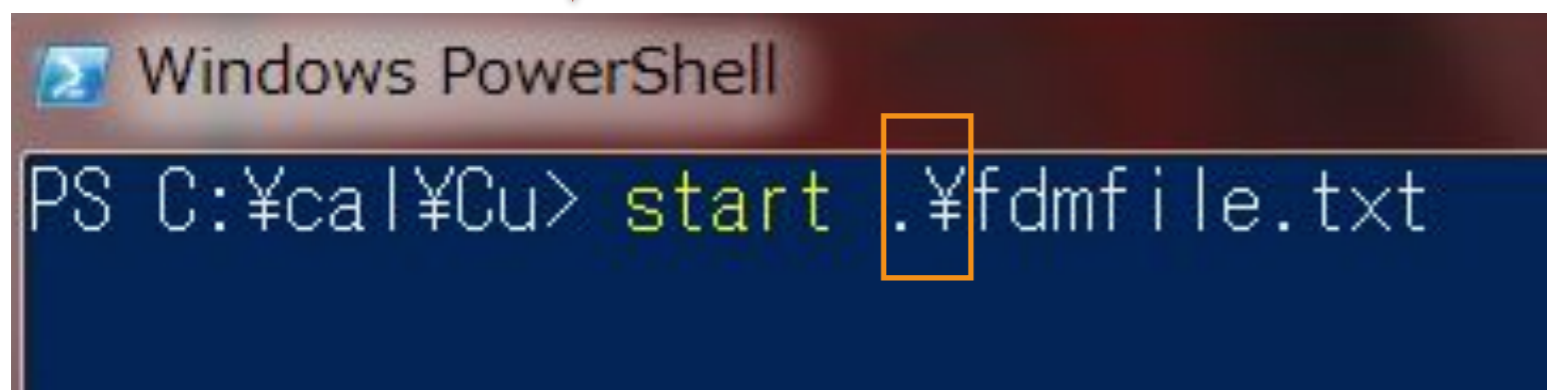
### TAB キーを活用する



```
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**

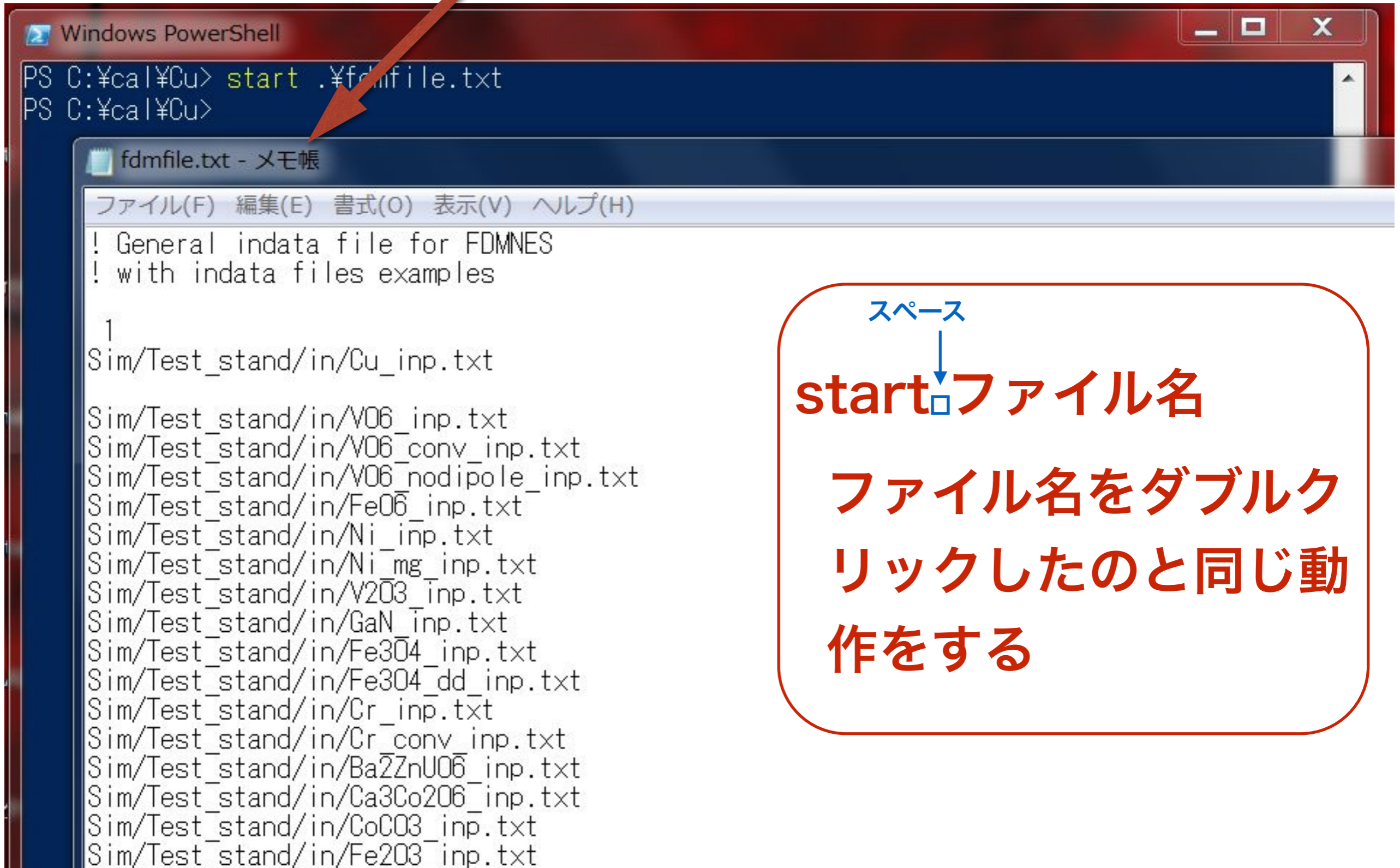


```
Windows PowerShell
PS C:\¥cal\¥Cu> start .¥fdmfile.txt
```

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 "Sim/Test\_stand/in/Cu\_inp.txt" and ending with "Sim/Test\_stand/in/Fe2O3\_inp.txt".

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

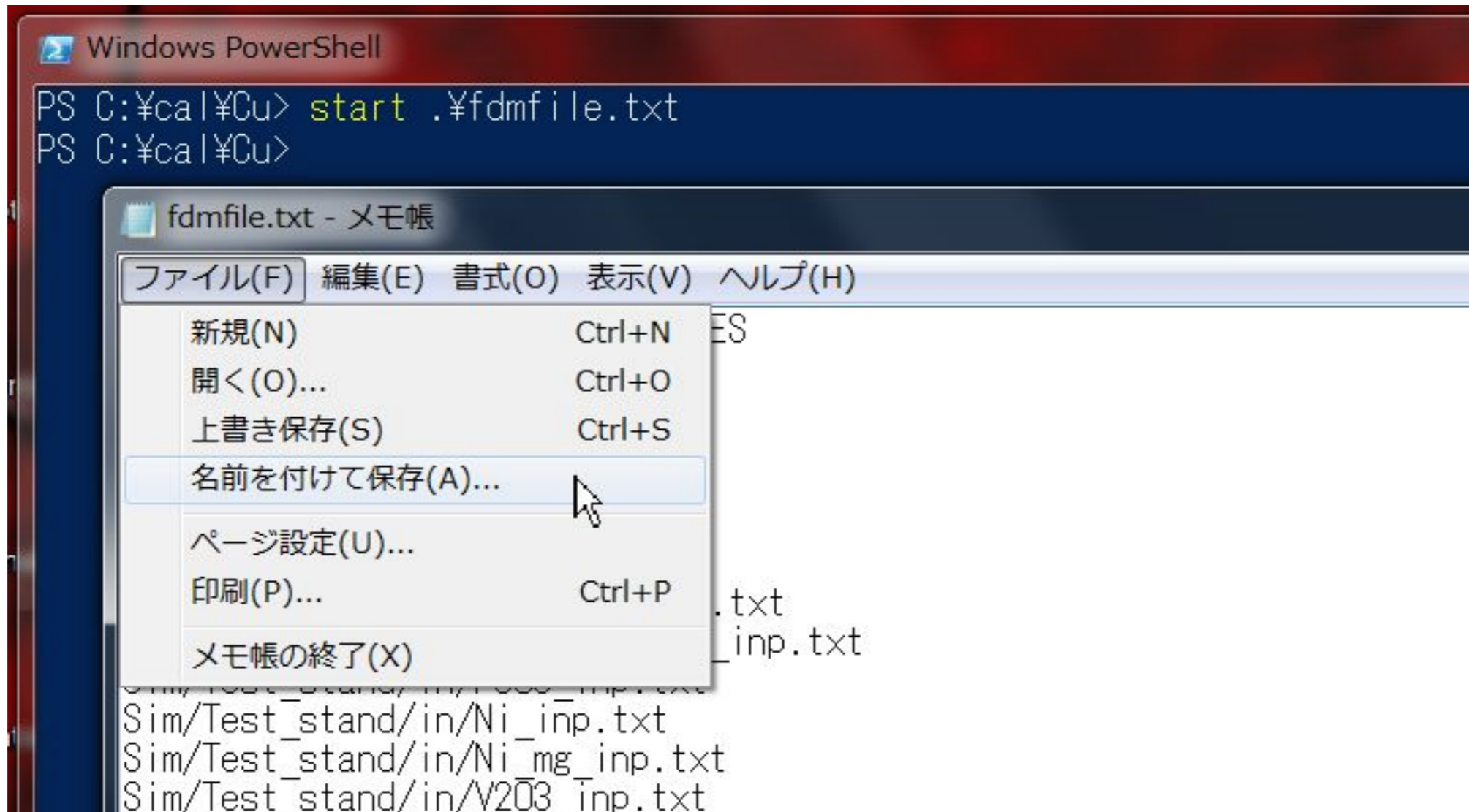
スペース  
↓  
**start**  **ファイル名**

**ファイル名をダブルクリックしたのと同じ動作をする**



## 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 `コンピューター > 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

fdmfile.txt - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

名前を付けて保存

コンピューター ▶ ローカル ディスク (C:) ▶ cal ▶ Cu

整理 ▶ 新しいフォルダー

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

名前を付けて保存の確認

fdmfile.txt は既に存在します。  
上書きしますか?

はい(Y) いいえ(N)

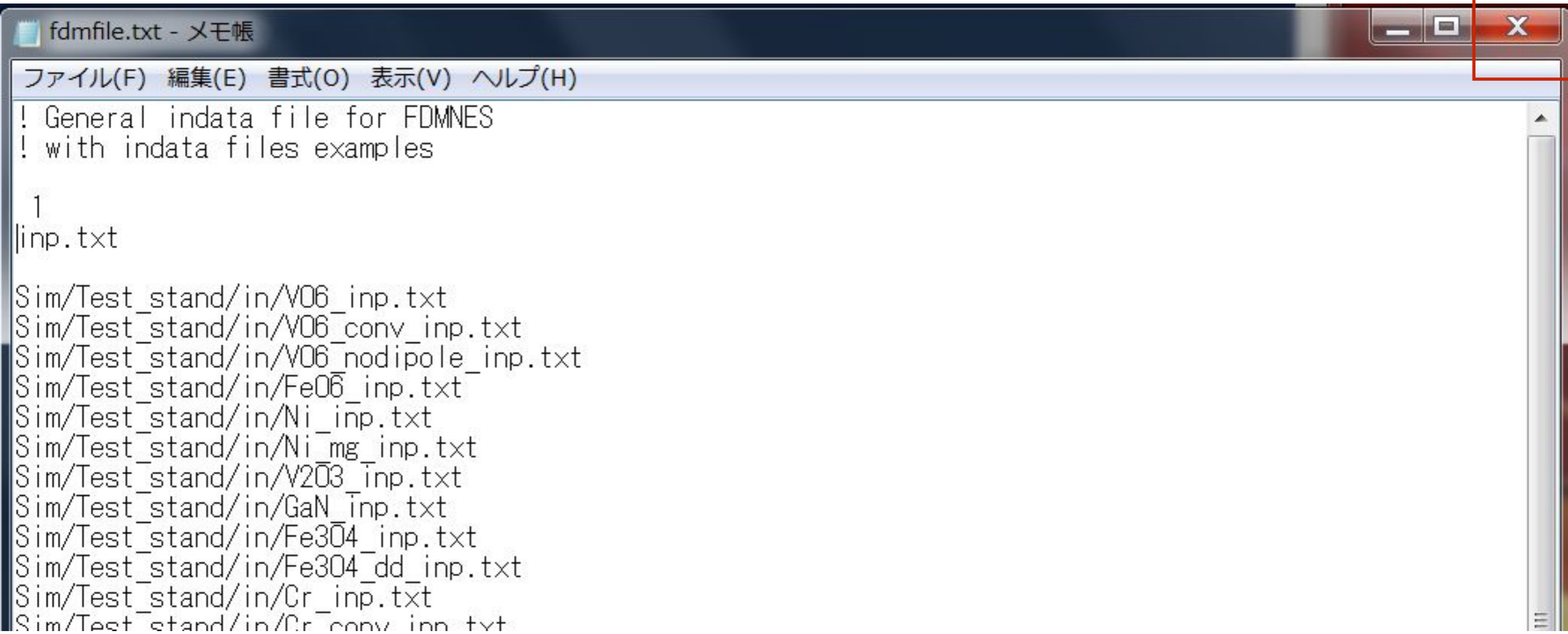
ファイル名(N): **fdmfile.txt**

ファイルの種類(T): テキスト文書 (\*.txt)

上書きします



## 8) 編集を終えた **fdmfile.txt** を閉じます

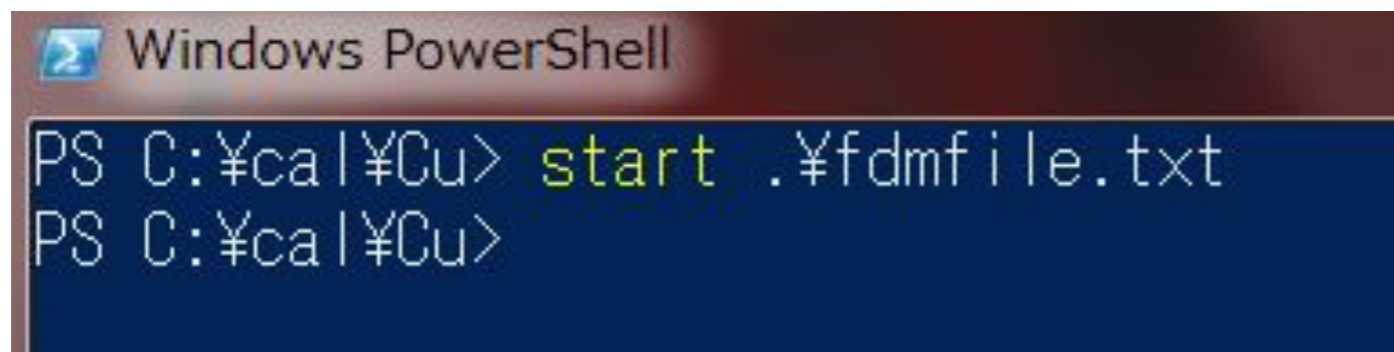


```
fdmfile.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
! General indata file for FDMNES
! with indata files examples

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/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
```

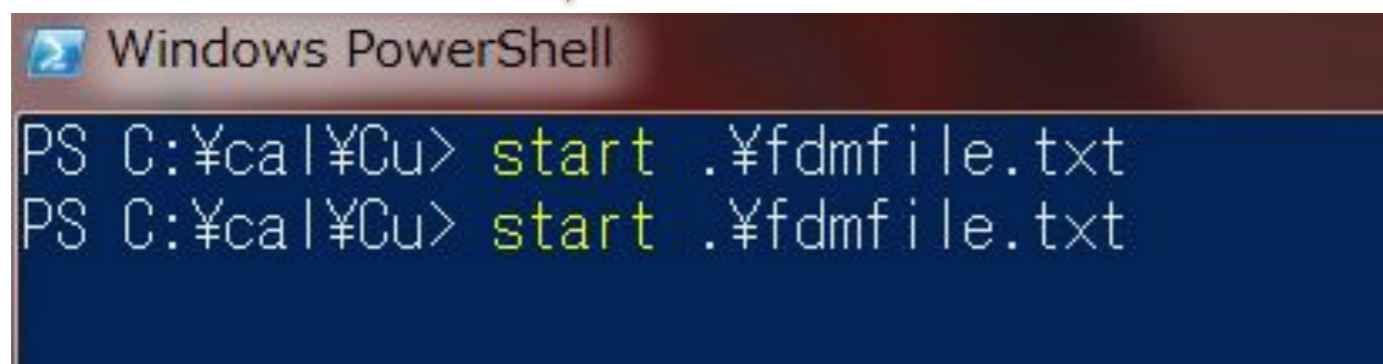
## 9) 念のため、編集したファイルをもう一度開いてみます



```
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

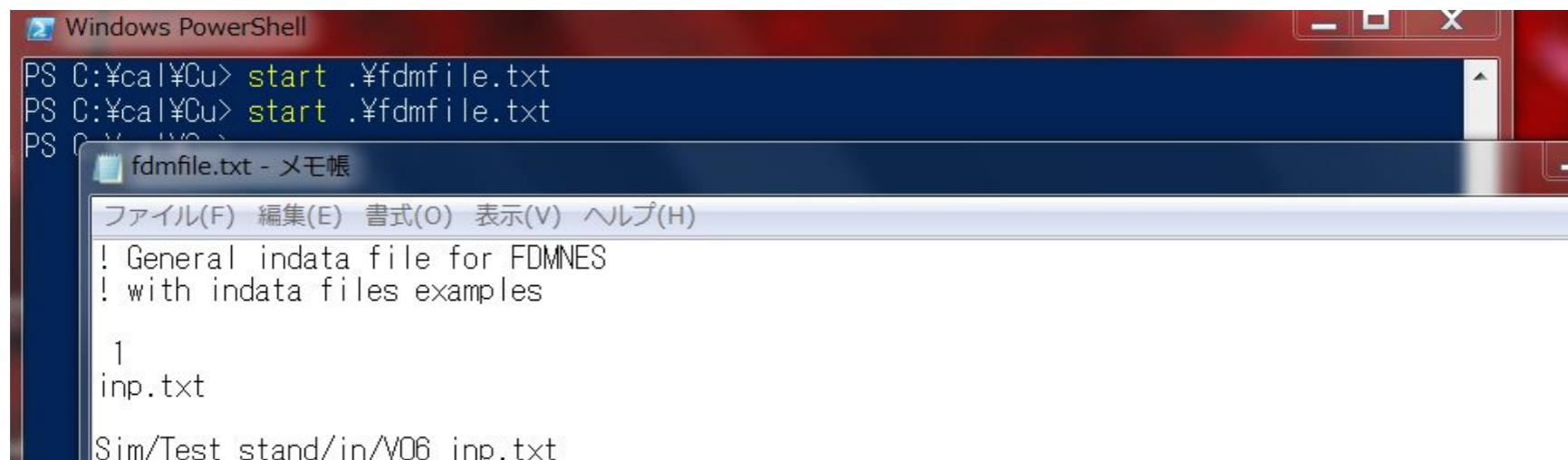


```
Windows PowerShell
PS C:¥ca|¥Cu> start .¥fdmfile.txt
PS C:¥ca|¥Cu> start .¥fdmfile.txt
```

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,
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



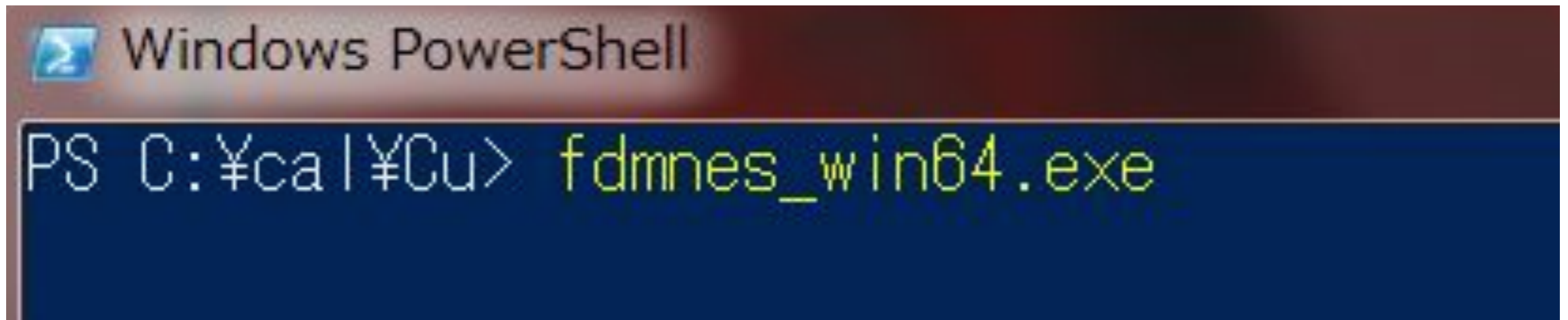
```
Fdmnes indata file
! Calculation for the copper K-edge in copper cfc
! Finite difference method calculation with convolution
Filout
Cu
Range          ! Energy range of calculation (eV)
-1. 0.2 5. 0.5 20. 1. 50. ! first energy, step, intermedia
Radius         ! Radius of the cluster where fina
3.0           ! 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
```

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

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**

計算結果(生)

**Cu\_bav.txt**

計算ログ

**Cu\_conv.txt**

計算結果

inp.txt

fdmfile.txt

# 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**

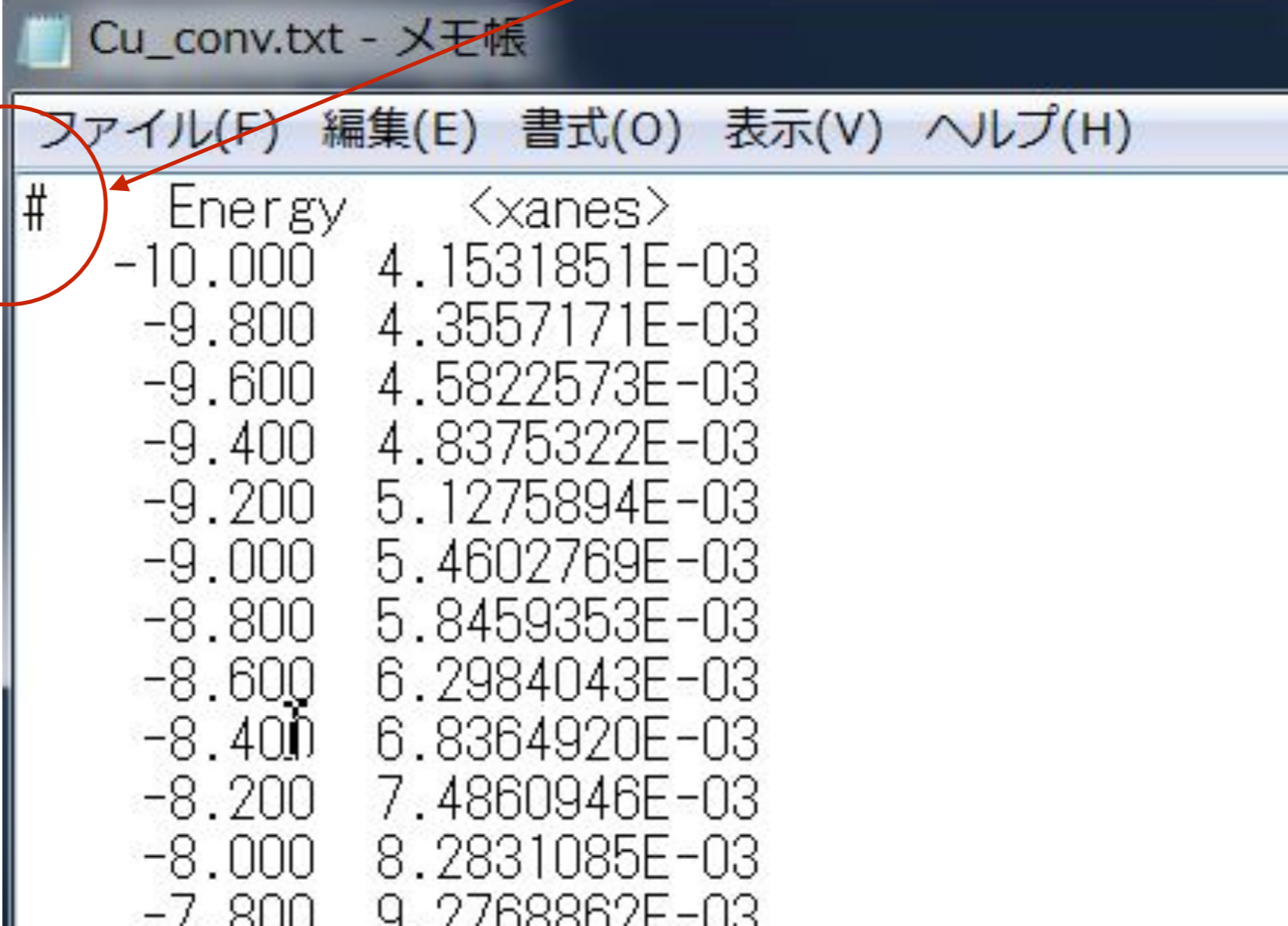


The screenshot shows a text editor window with the title 'Cu\_conv.txt - メモ帳'. The menu bar includes 'ファイル(F)', '編集(E)', '書式(O)', '表示(V)', and 'ヘルプ(H)'. The main content area displays a table with two columns: 'Energy' and '<xanes>'. The data points are as follows:

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 )

GNU PLOT でプロットするために**1行目をコメントアウト**する

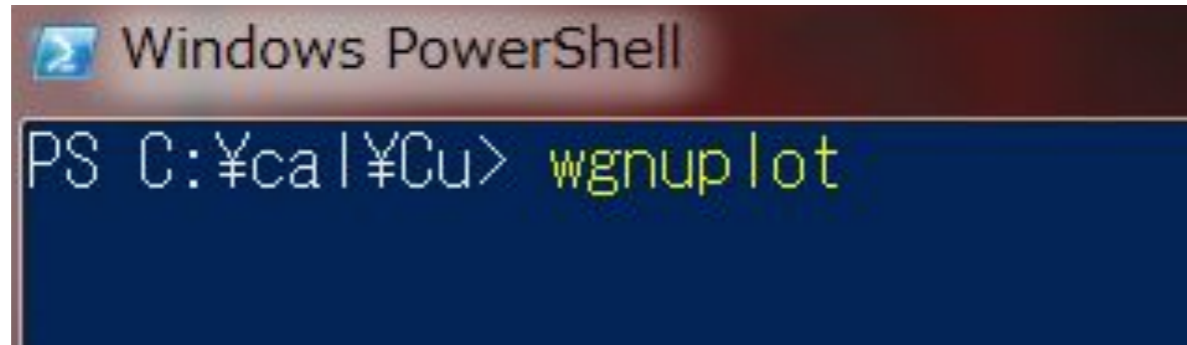


```
Cu_conv.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
# Energy <xanes>
-10.000 4.1531851E-03
-9.800 4.3557171E-03
-9.600 4.5822573E-03
-9.400 4.8375322E-03
-9.200 5.1275894E-03
-9.000 5.4602769E-03
-8.800 5.8459353E-03
-8.600 6.2984043E-03
-8.400 6.8364920E-03
-8.200 7.4860946E-03
-8.000 8.2831085E-03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

## wgnuplot

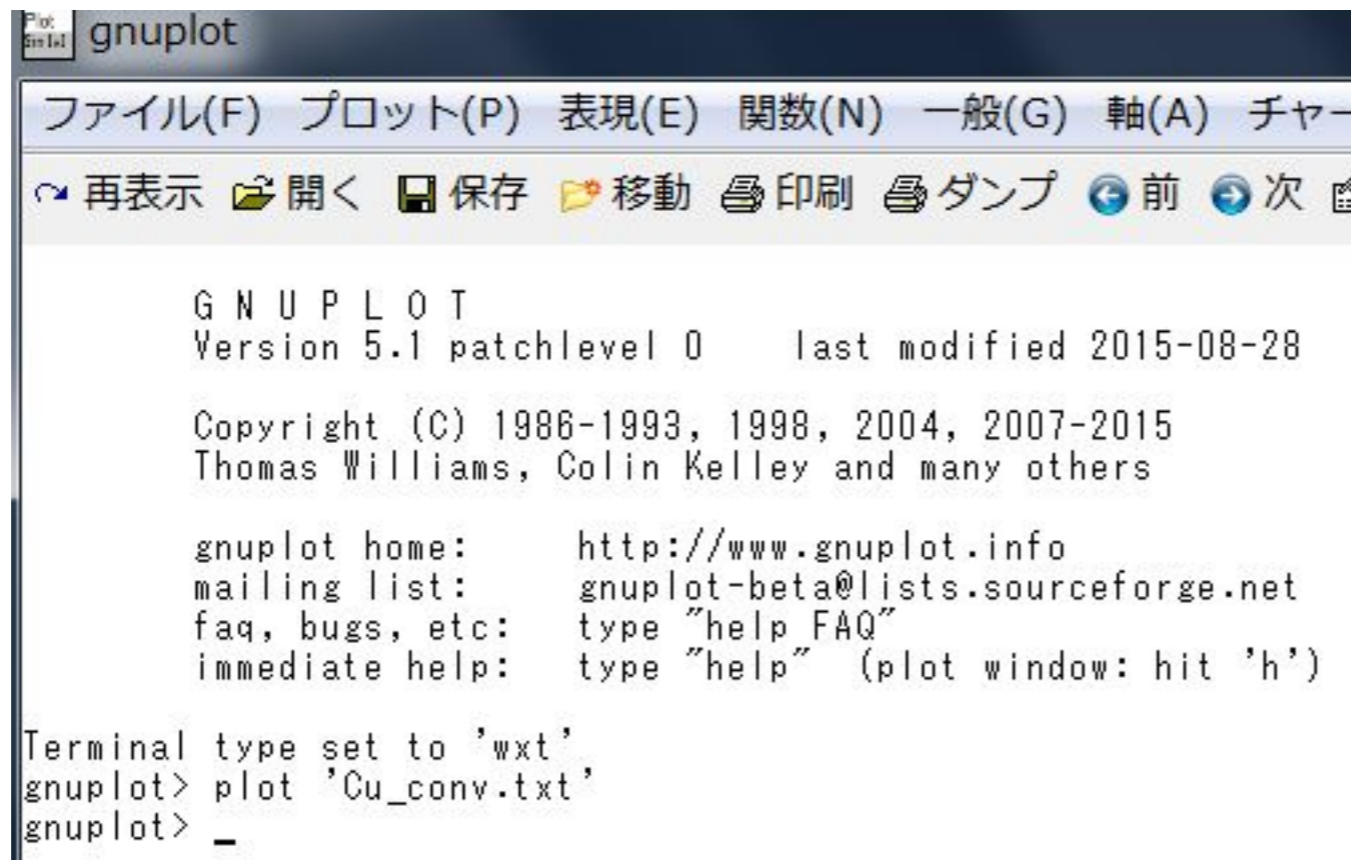


```
Windows PowerShell
PS C:\¥ca\¥Cu> wgnuplot
```

# 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

```
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)

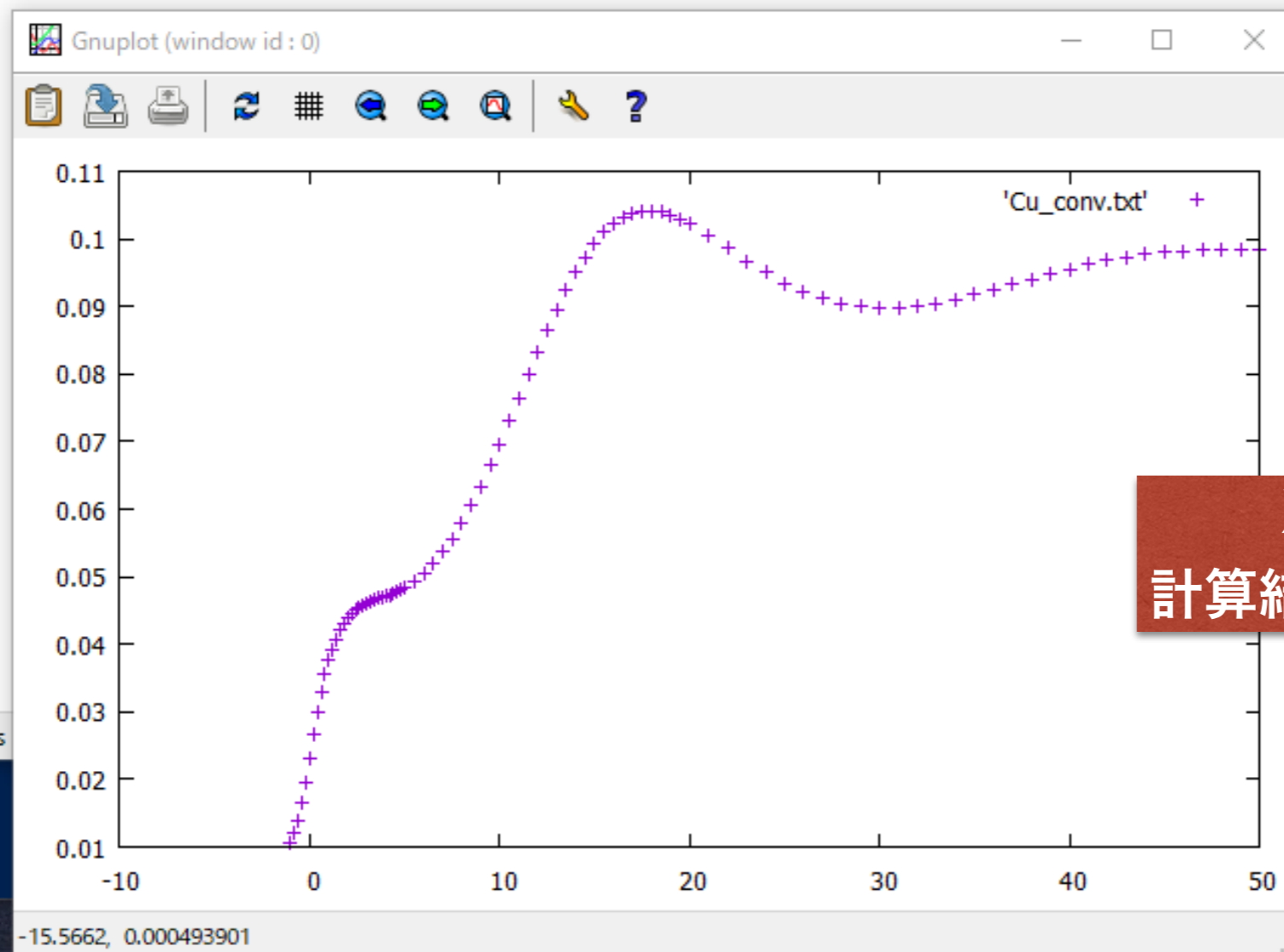
GNU PLOT
Version 5.2 patchlevel 6 last modified 2019-01-01

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>
```

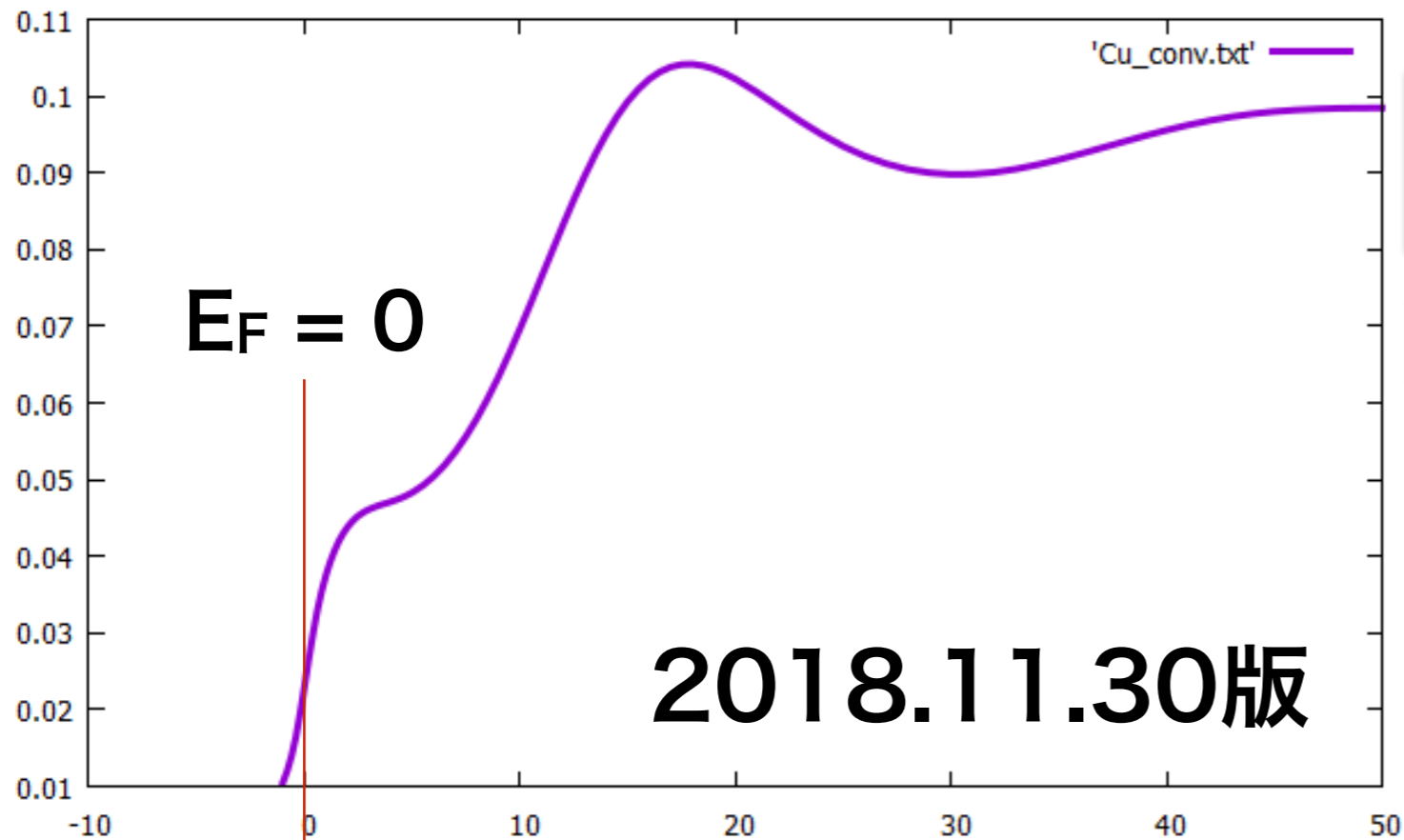
**plot 'Cu\_conv.txt'**



**XANES の  
計算結果が表示される**

encoding: sjis

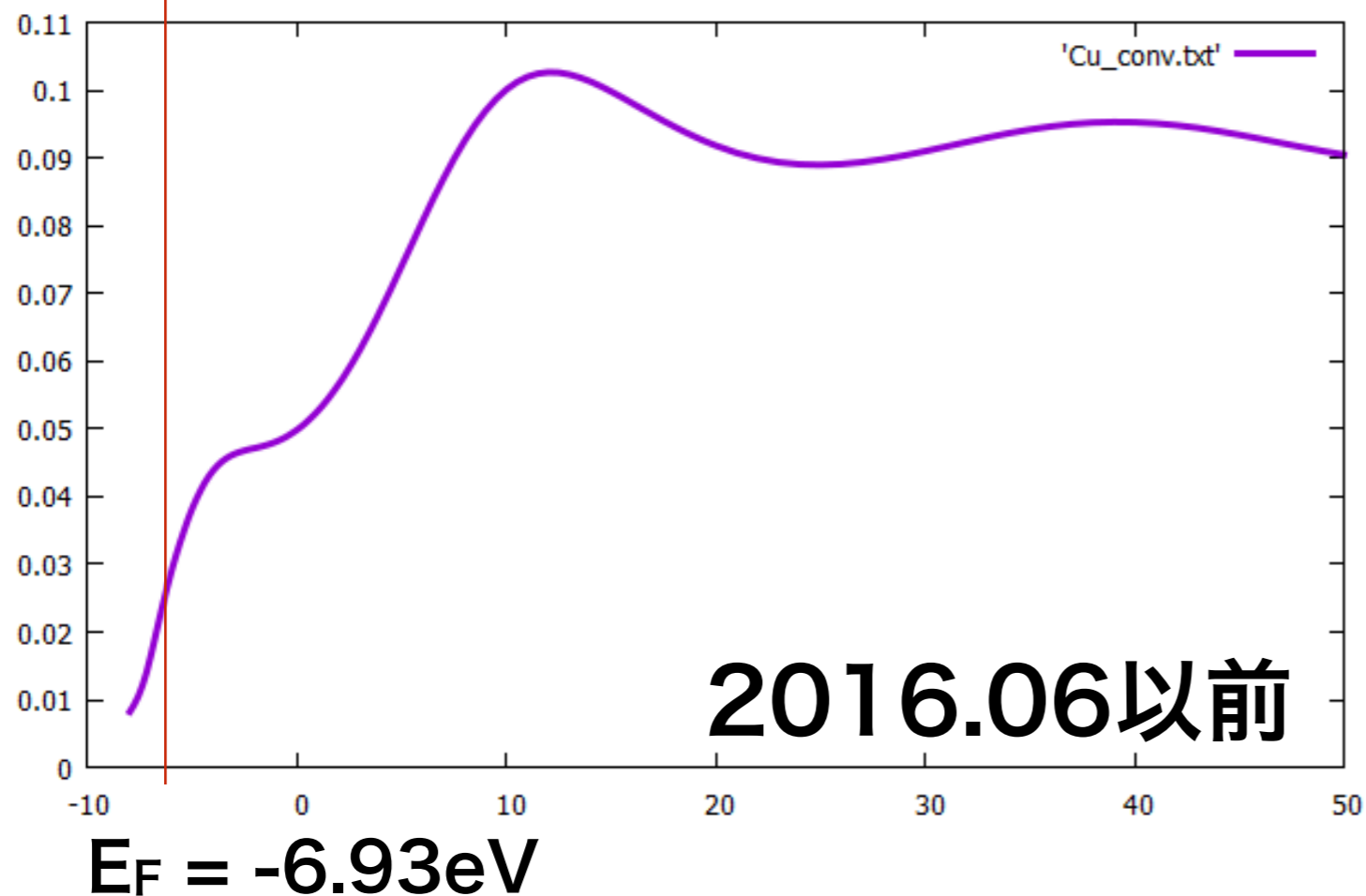
# XANESスペクトルの結果が以前バージョンと比べるとシフト



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  $E = E - E_F$



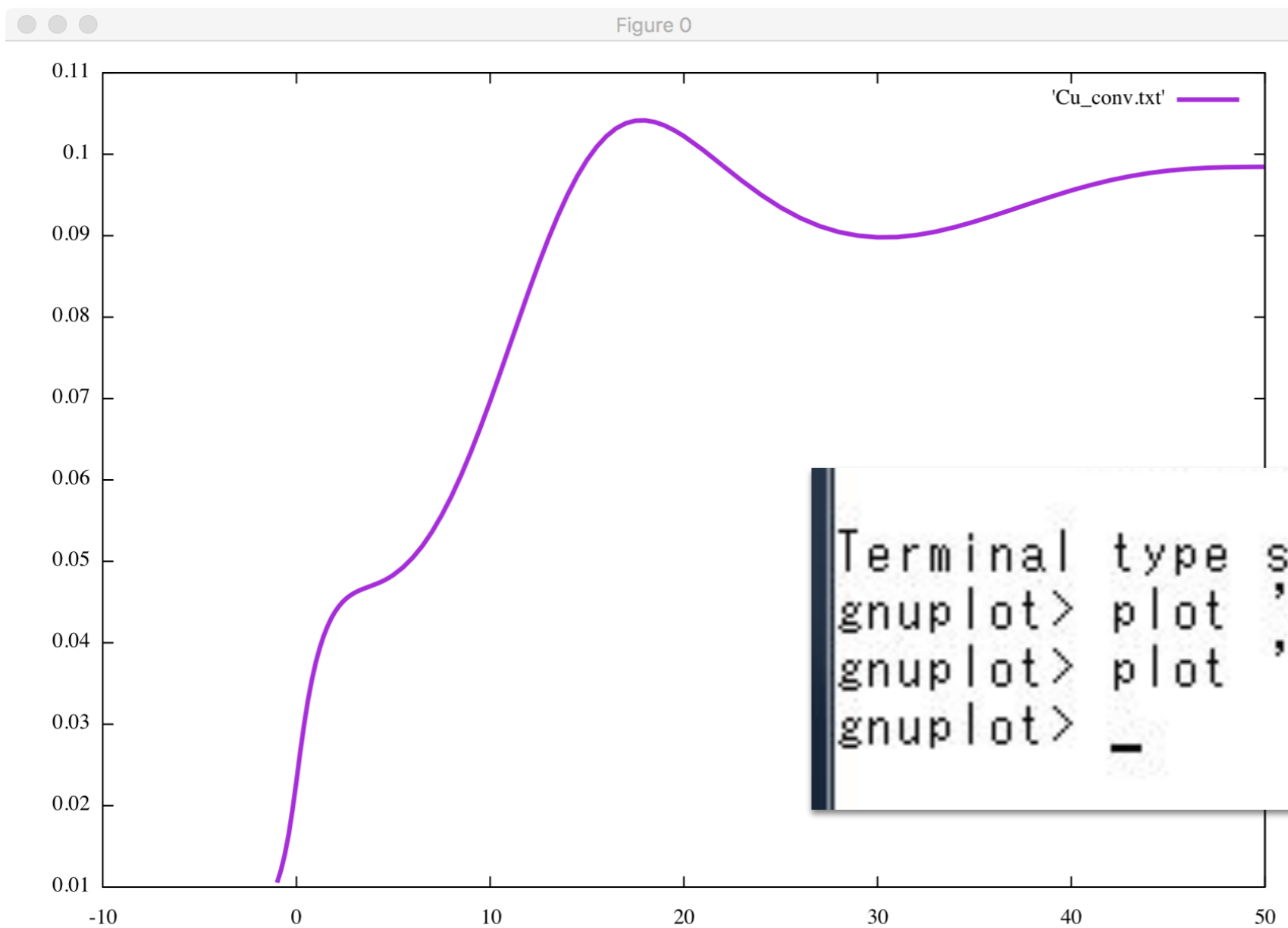
横軸  $E$

# 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 l

with line の略



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



# 17) GNUPLOT の結果を画像ファイルとして保存

gnuplot 上で

スペース

`set terminal png`

出力形式を png にする

`set output 'Cu.png'`

出力ファイル名を Cu.png にする

`plot 'Cu_conv.txt' w l  
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:\¥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 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 window displays the directory listing for 'C:\cal\Cu' and the command 'start Cu.png' which results in an error message: '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'.

	LastWriteTime	Length	Name
---	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

The gnuplot window shows the command 'plot 'Cu\_conv.txt' w l' and 'set terminal png'. The resulting plot is displayed in a window titled 'フォト - Cu.png'. The plot shows a curve with a peak around x=18 and a dip around x=30.

x	y
0	0.01
5	0.045
10	0.07
15	0.10
18	0.105
20	0.10
25	0.09
30	0.09
35	0.095
40	0.095
45	0.095
50	0.095

# 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

2

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

Sim/Test\_stand/in/V06\_inp.txt

注意) あまりこの機能は使わない方が健全

(複数のファイルを別のディレクトリで出力するのオススメしない)

入力と出力は同じディレクトリ内で完結するべき(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

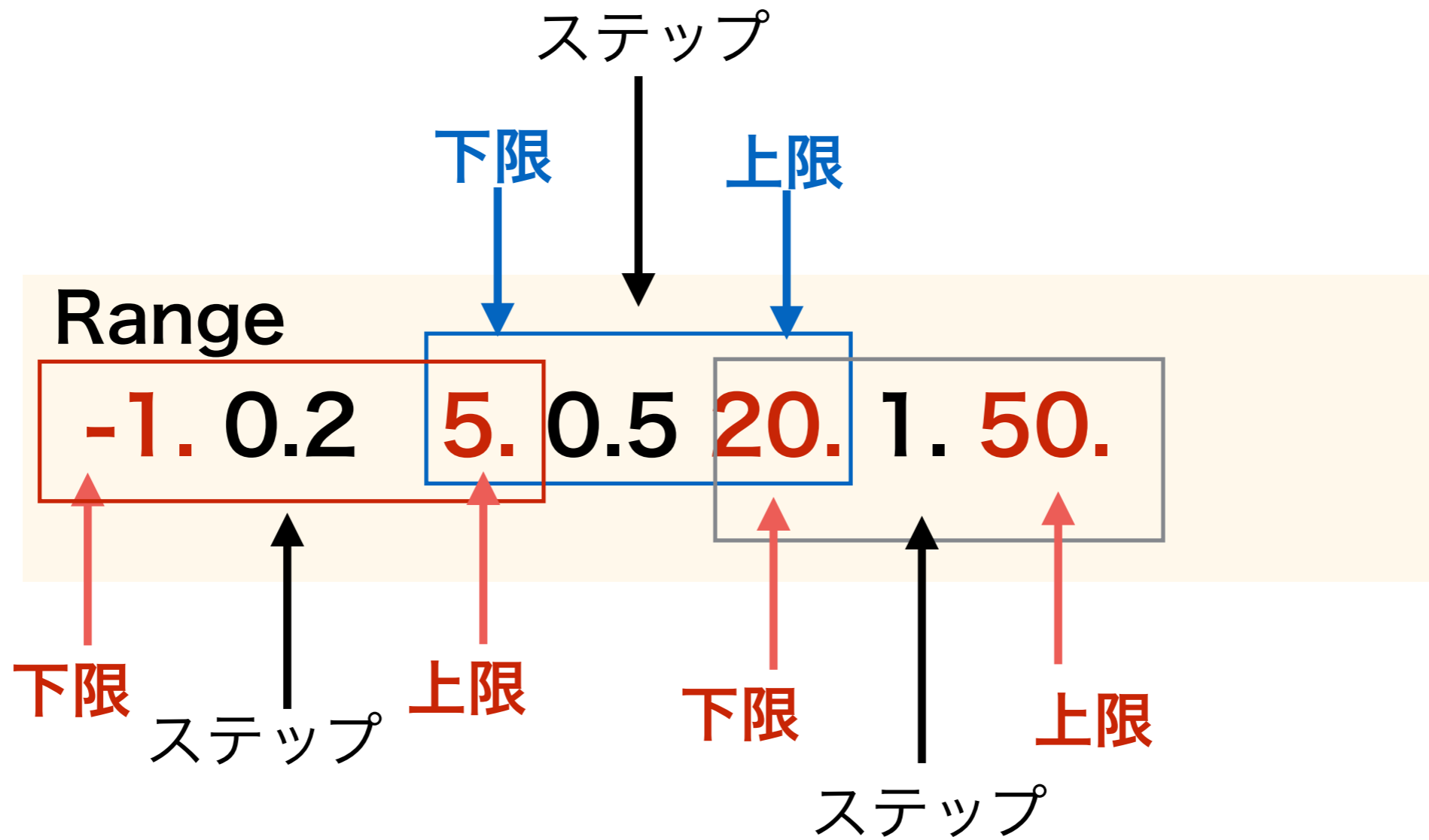
Mode	LastWriteTime	Length	Name
-a---	2016/01/01 14:39	4334	Cu.png
-a---	2016/01/02 9:07	2981	Cu.txt
-a---	2016/01/01 10:46	2201965	Cu_bav.txt
-a---	2016/01/01 14:12	2756	Cu_conv.txt
-a---	2016/01/01 10:20	1046	fdmfile.txt
-a---	2016/01/01 10:46	958	inp.txt

```
PS C:\¥ca\¥Cu>
```

# inp.txt

計算するエネルギー範囲

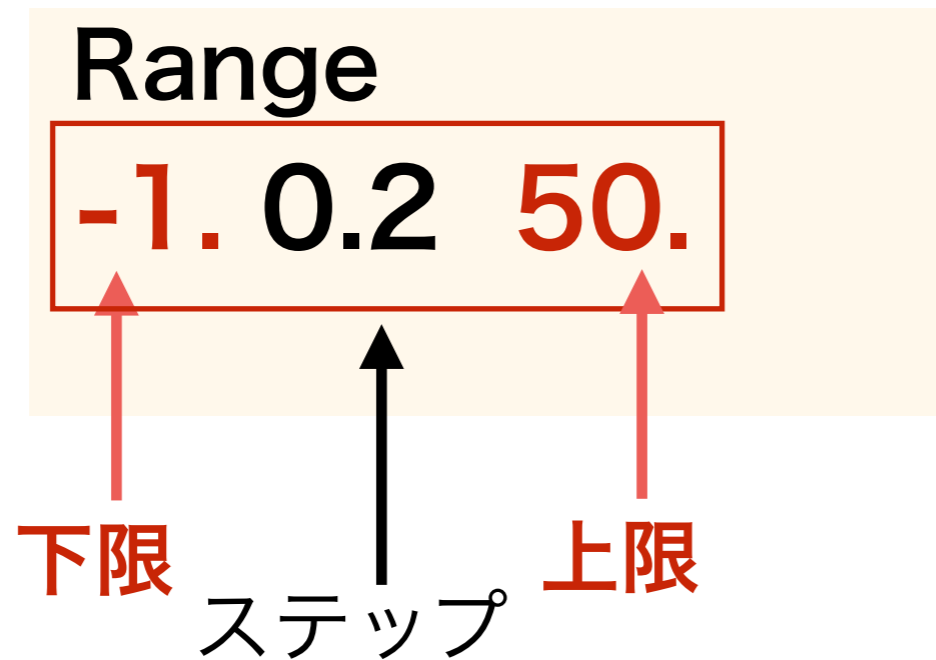
スペースで区切る



# 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)

**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-**

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

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

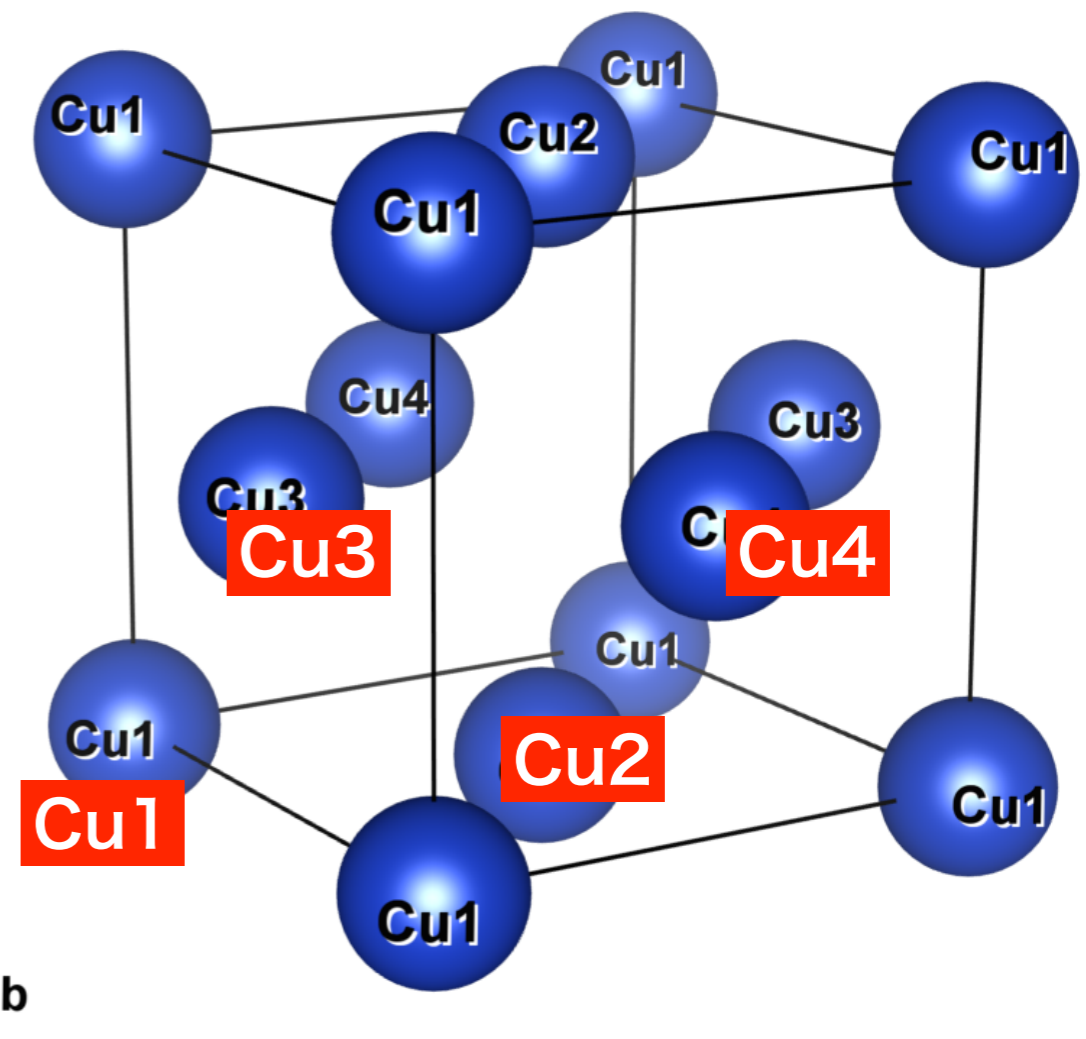
内部座標

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			

構造情報

Convolution

End

FDMNES ではクラスター計算が行われている

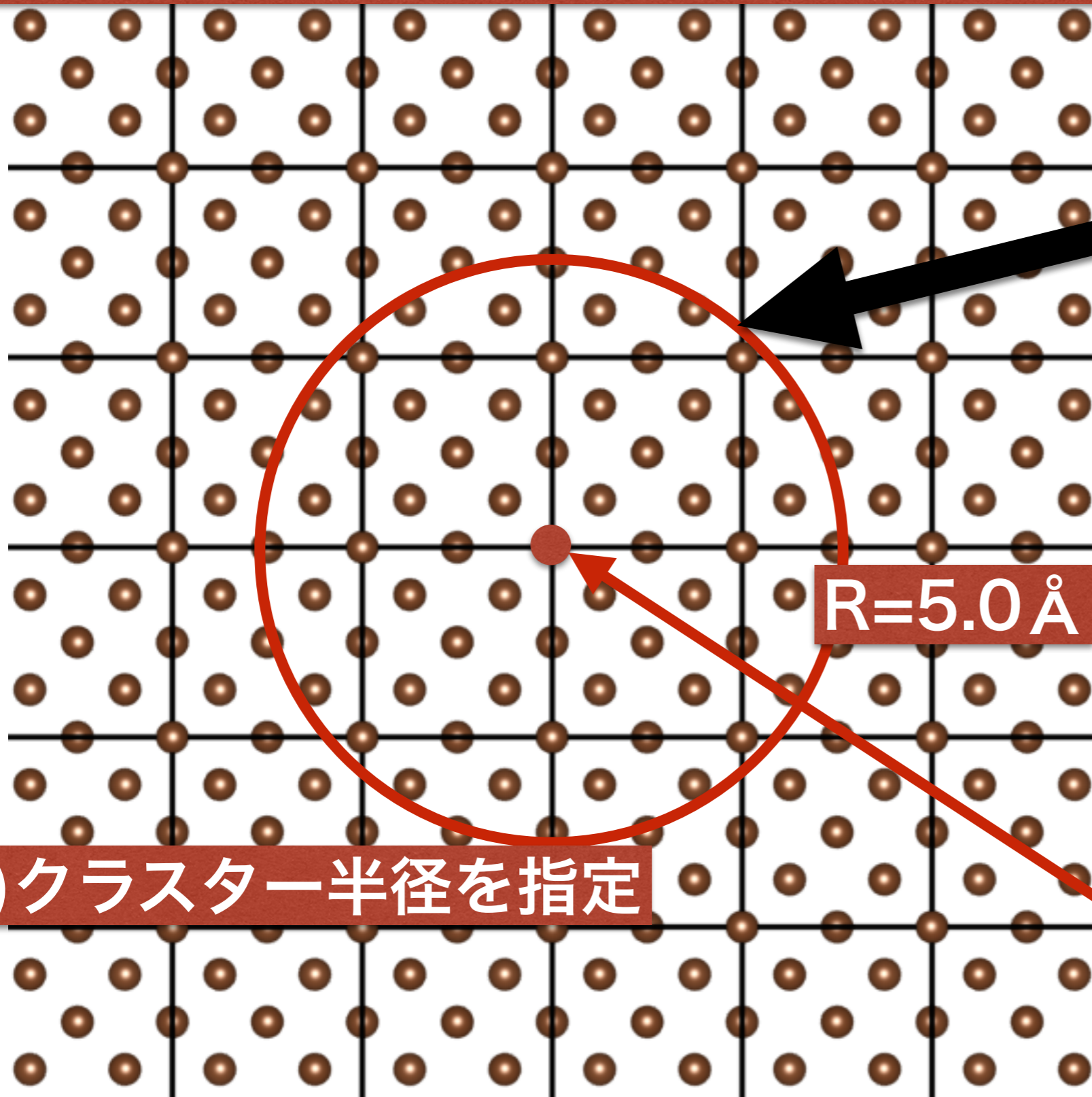
構造情報 (Crystal, Molecule)



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

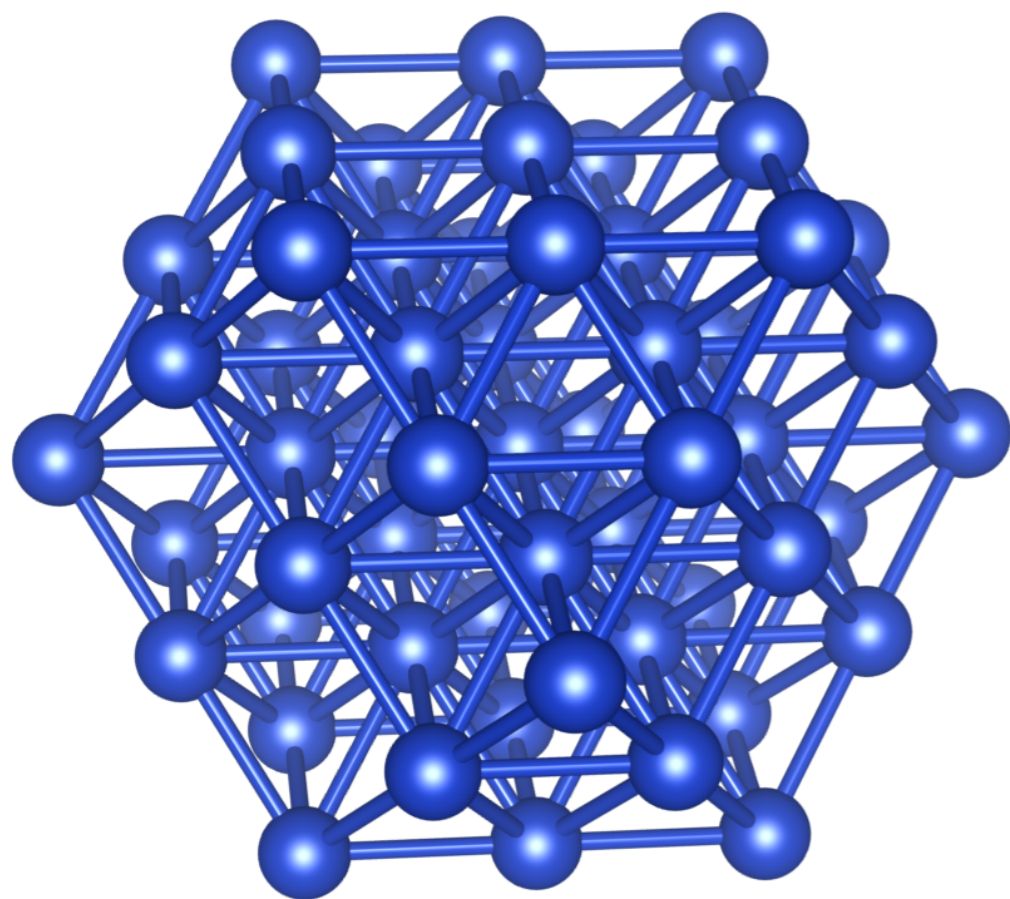
# 2) クラスタ一半径を指定

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)

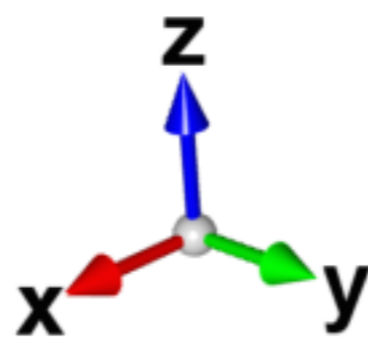
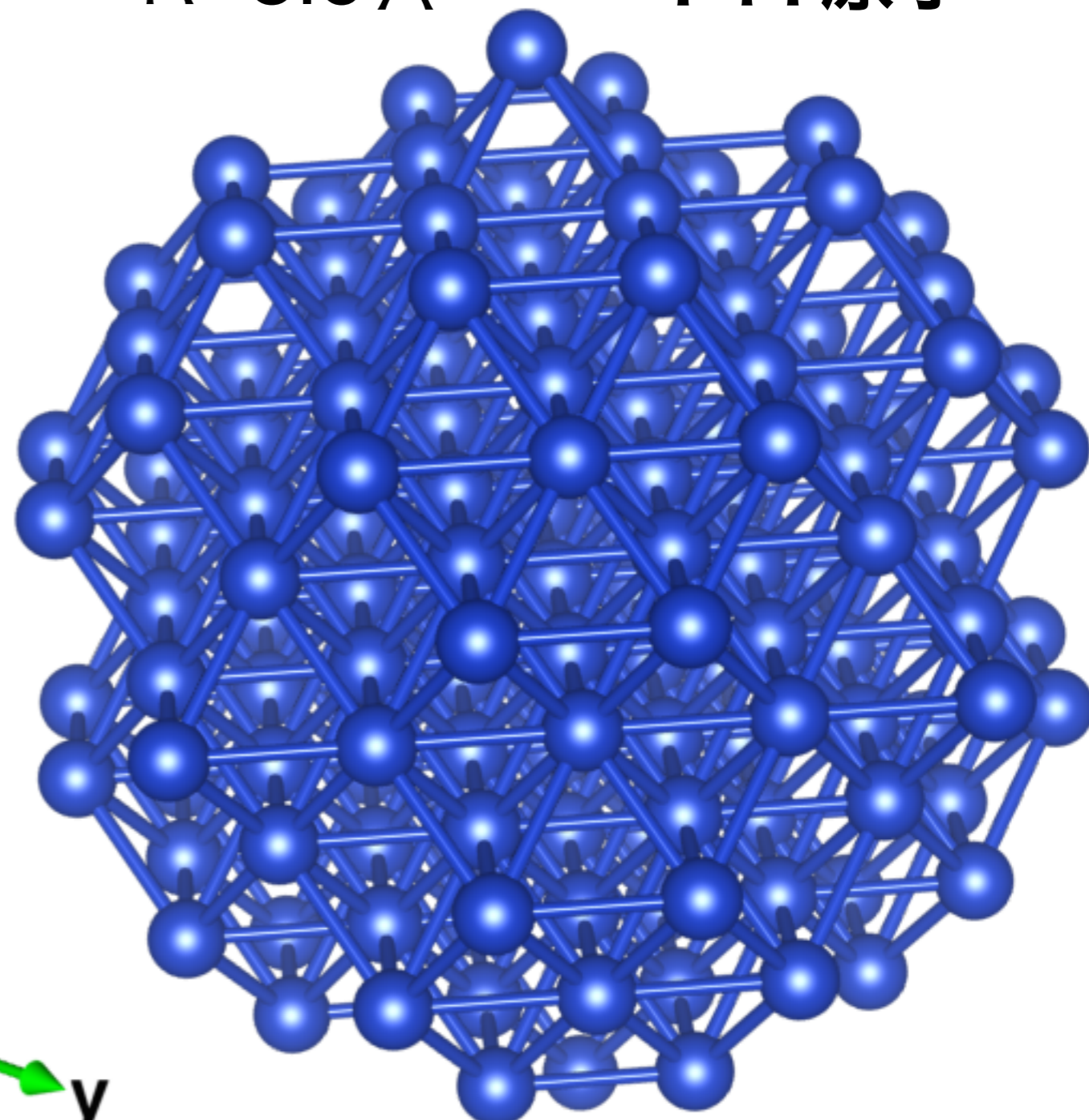
$R=3.0 \text{ \AA}$

55原子



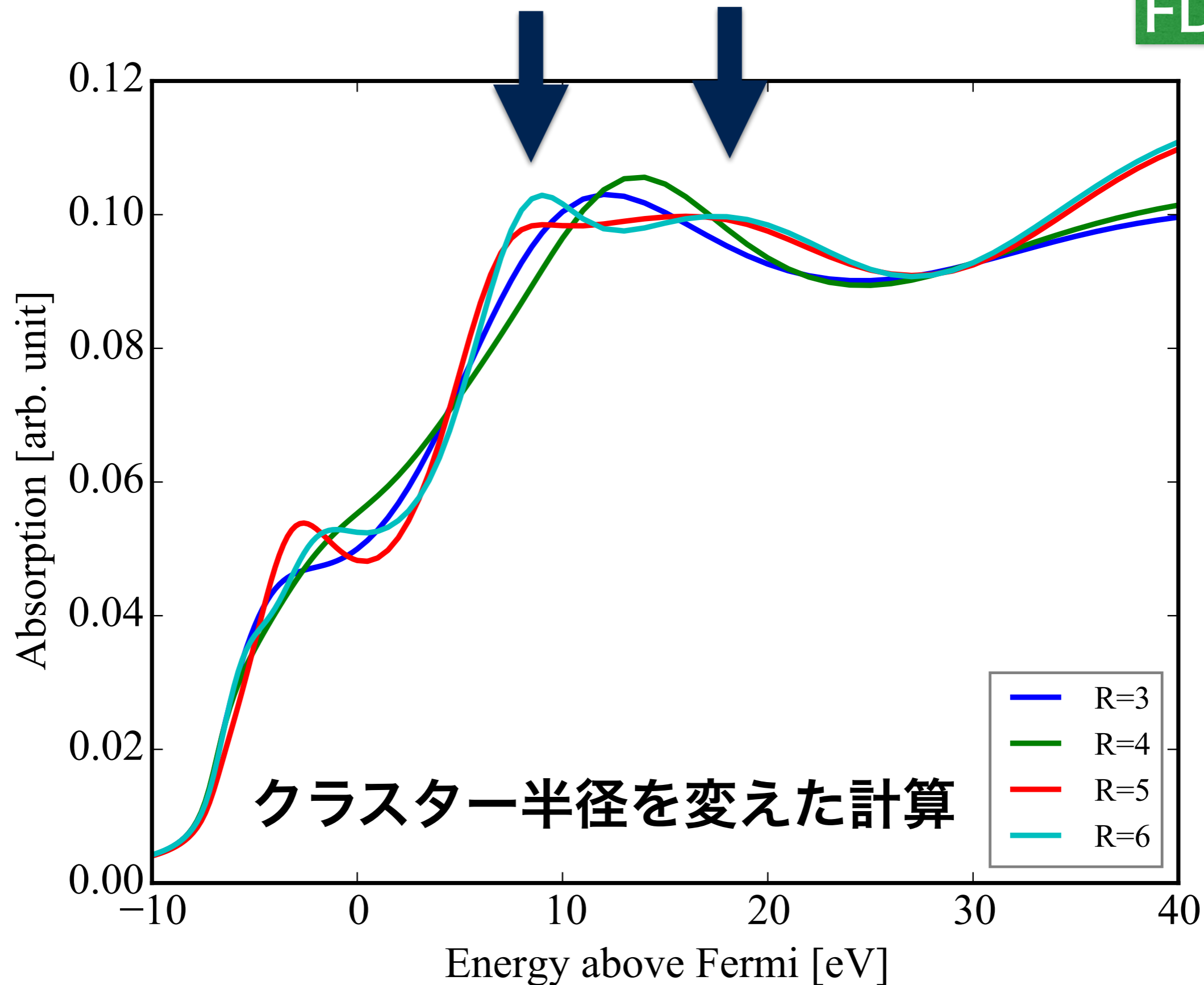
$R=5.0 \text{ \AA}$

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？**

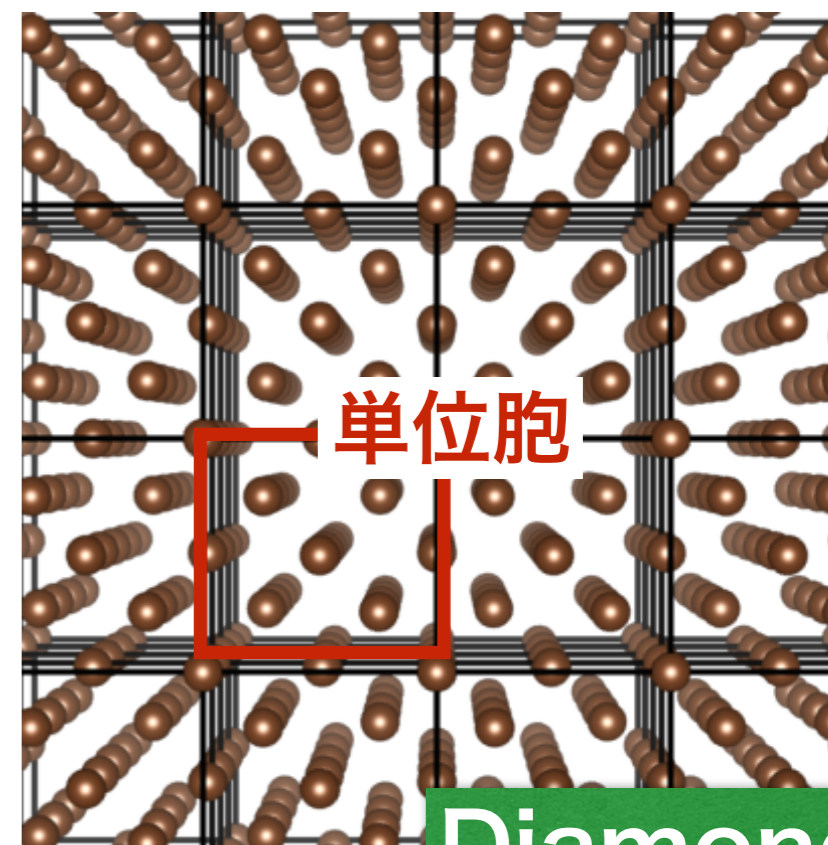
## Crystal のとき

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

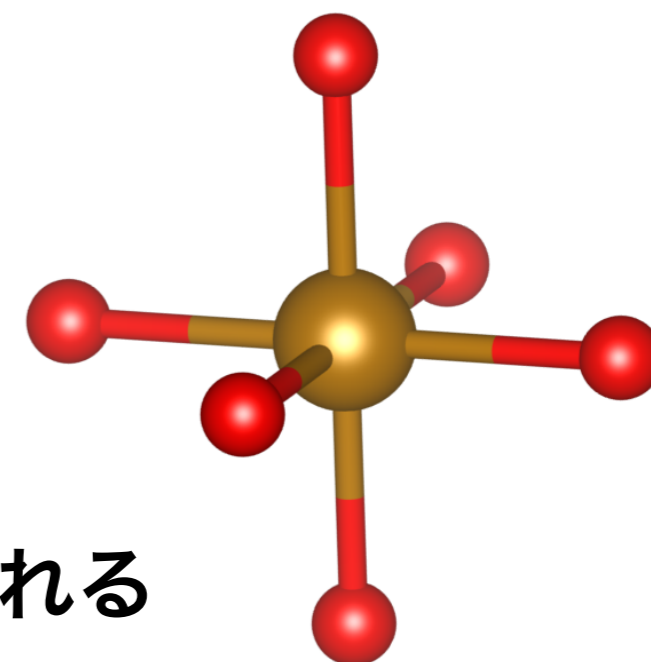
## Molecule のとき

### 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



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

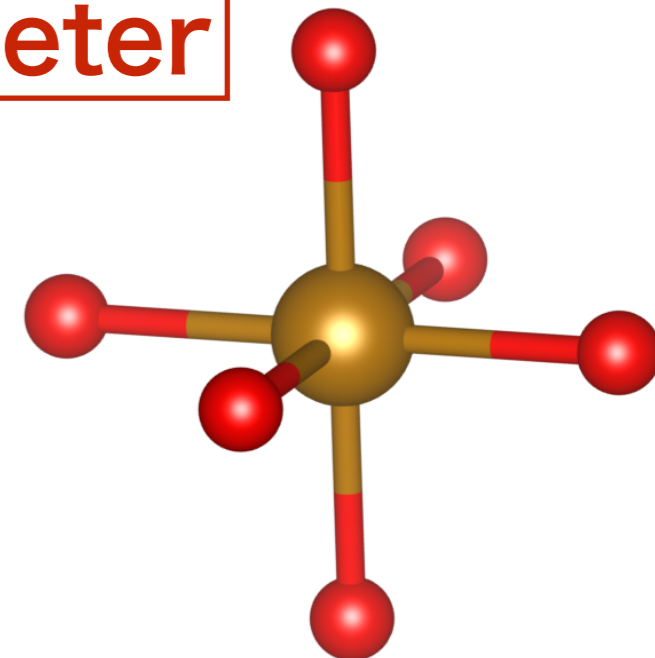
8 0.0 0.0 -1.0

mesh parameter

unit-cell

箱を作る必要

unit-cell を単位とした  
内部座標



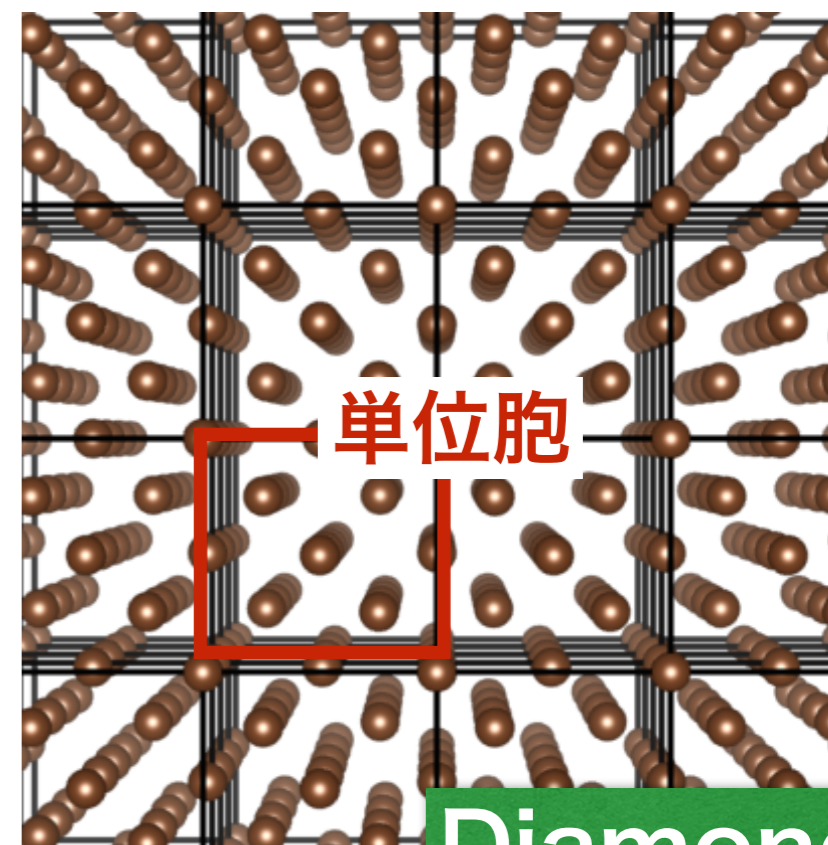
## Crystal のとき

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

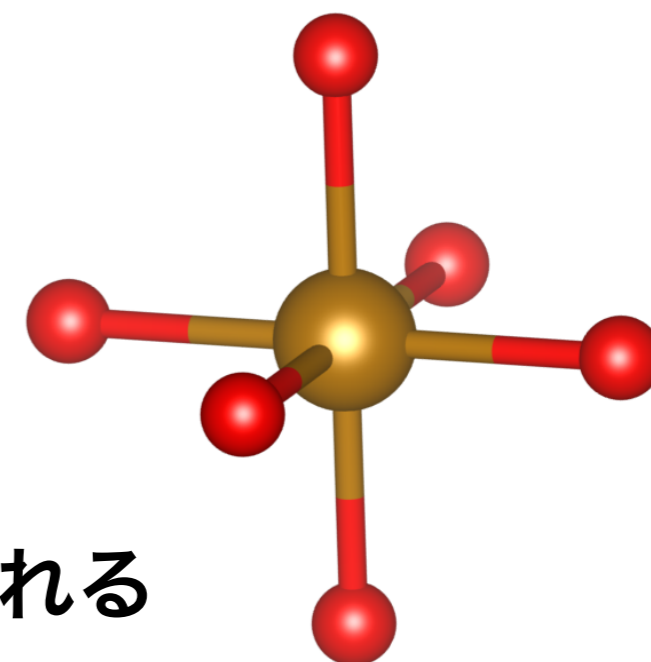
## Molecule のとき

### 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



FeO<sub>6</sub>

FDMNES での**分子の構造作成**は

実質的には**分子を含んだ単位胞の作成**となる

(ただし、非周期)

(注意)

通常**の分子系の構造情報はcartesian** で書かれている

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

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



# VESTA での分子系の記述

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 manipulation tools, 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'.

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 on a Mac. The 'Transform' menu is open, and the option 'Molecule to Crystal...' is highlighted in blue. The menu items are as follows:

- Set View Direction... ⌘D
- View Along Selection ⇧⌘D
- Rotate ▶
- Auto Rotate... ^⌘Y
- Set Scale... ⌘L
- Set Range... ⌘R
- Define Cluster... ⌘K
- 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...
- Molecule to Crystal...**
- Add Hydrogens
- Relax Molecule

The background shows the CrystalMaker window with a 3D ball-and-stick model of a molecule. The menu bar includes File, Edit, Selection, Model, Transform, Measure, Window, and Help. The title bar reads 'CrystalMaker'. The status bar at the bottom shows 'nakada@terbium:~/fdmr'.

# lattice parameter を設定

## Convert Molecule to Crystal

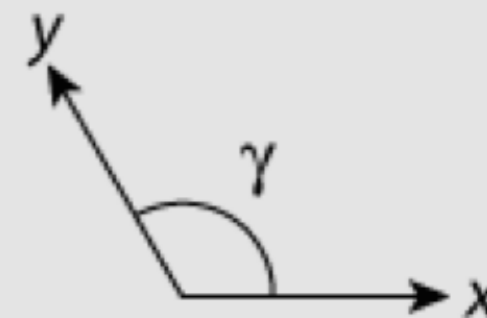
Molecular Dimensions:    Width ( $\Delta X$ )                      Height ( $\Delta Y$ )                      Depth ( $\Delta Z$ )  
                                  **8.117 Å**                      **7.805 Å**                      **6.599 Å**

Lattice Parameters:    a [Å]                      b [Å]                      c [Å]                       $\alpha$  [°]                       $\beta$  [°]                       $\gamma$  [°]  
                                  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!



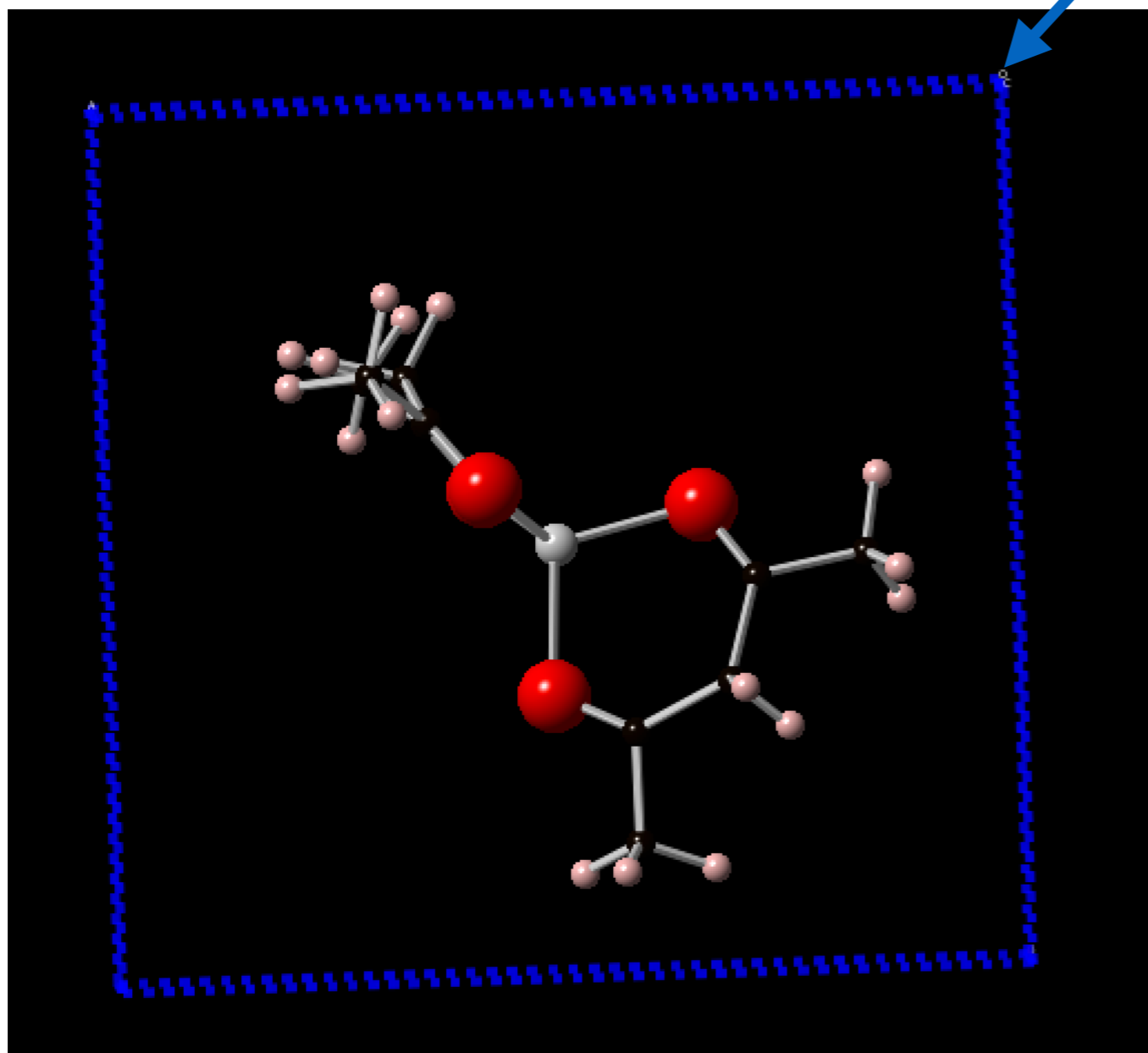
Position Molecule:     Centred inside the unit cell  
                                   Centred at the origin

?

Cancel

Convert

分子の情報に箱 (unit-cell) 加わる



lattice  $a$

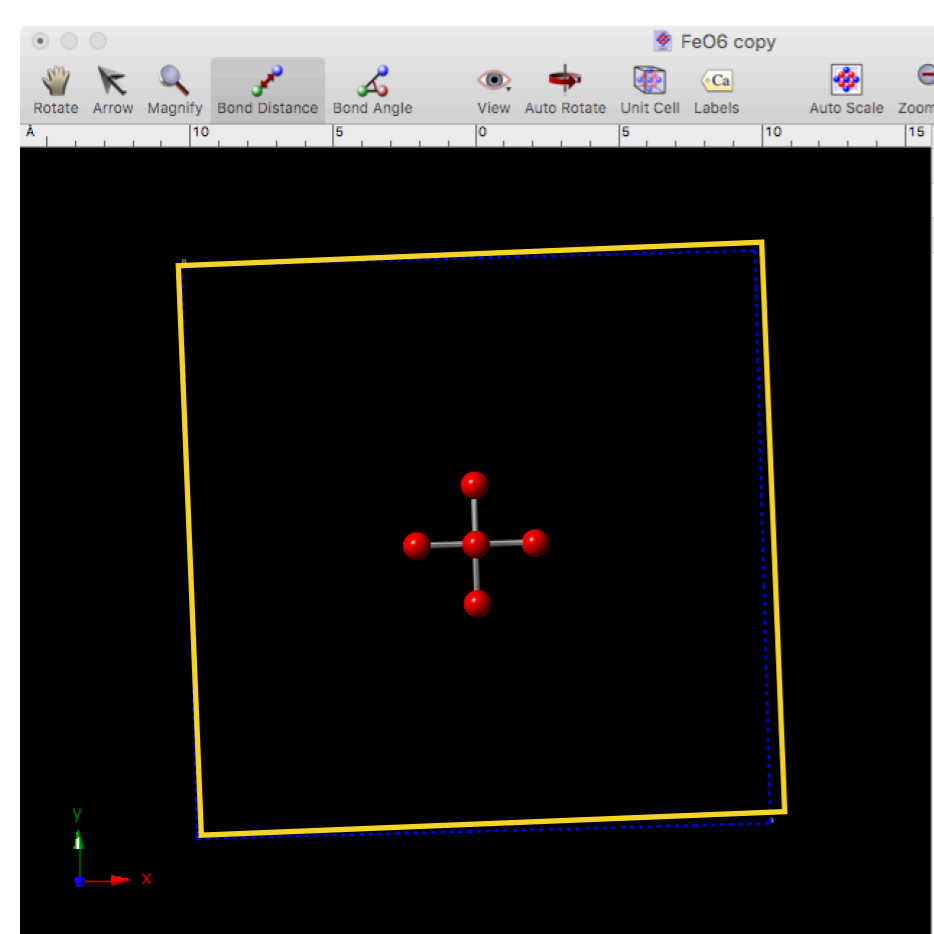
lattice  $b$

lattice  $c$

$\alpha$

$\beta$

$\gamma$



### data\_FeO6

\_audit\_creation\_method 'generated by CrystalMaker 9.2.9'

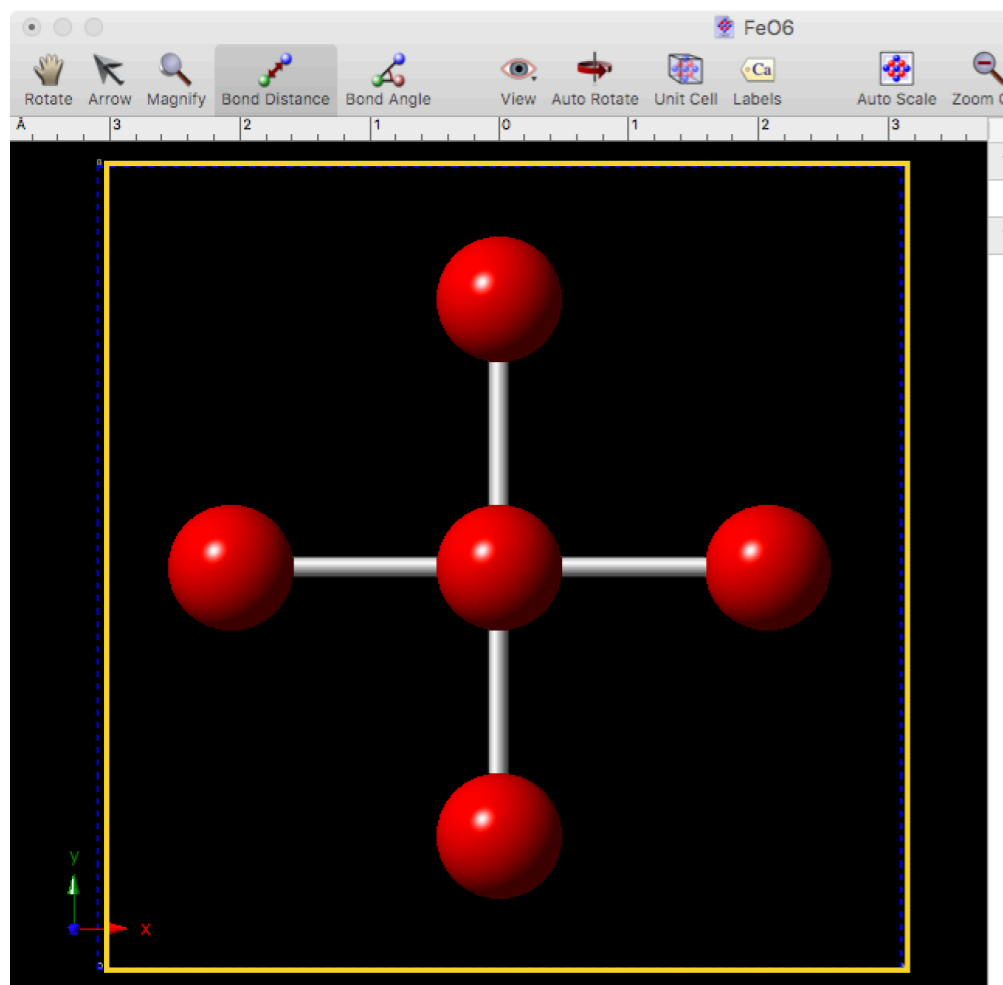
\_cell\_length\_a 20.0000(0)

\_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)

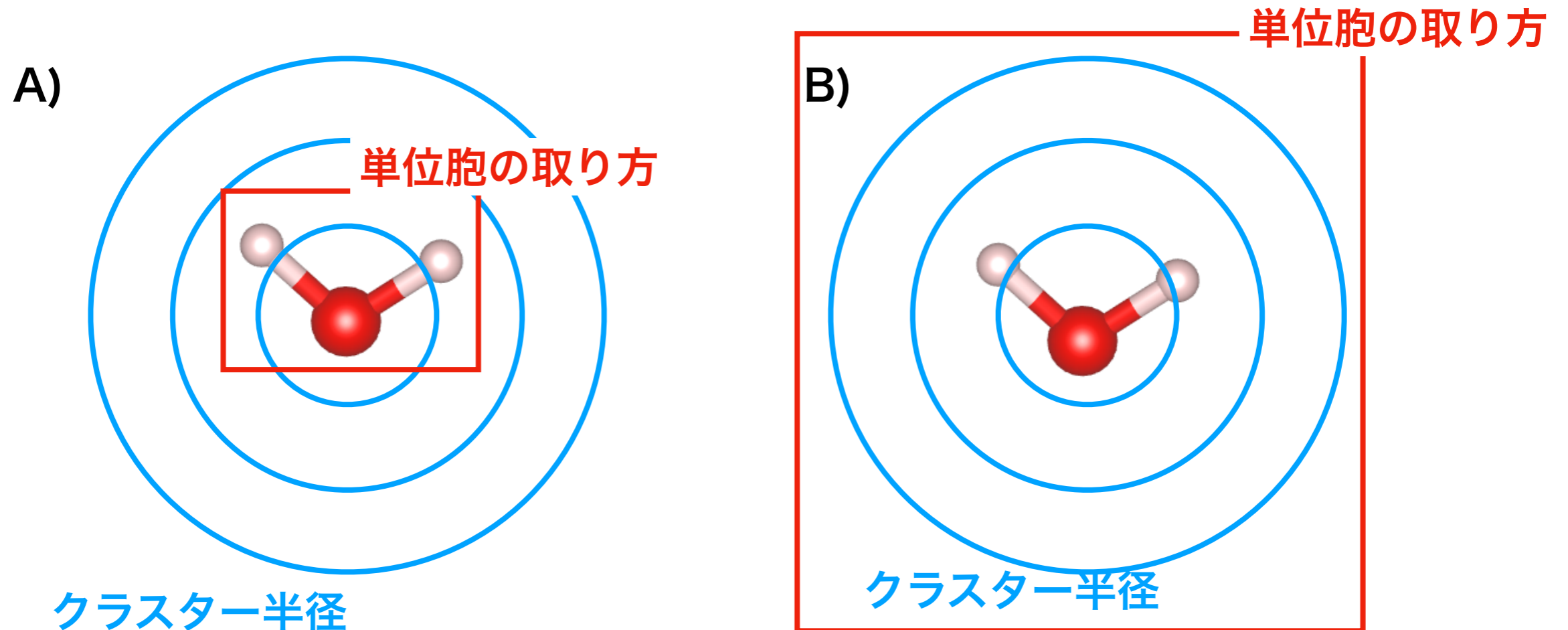
\_cell\_length\_b 6.1710(0)

\_cell\_length\_c 6.1710(0)

**6 Å の箱**

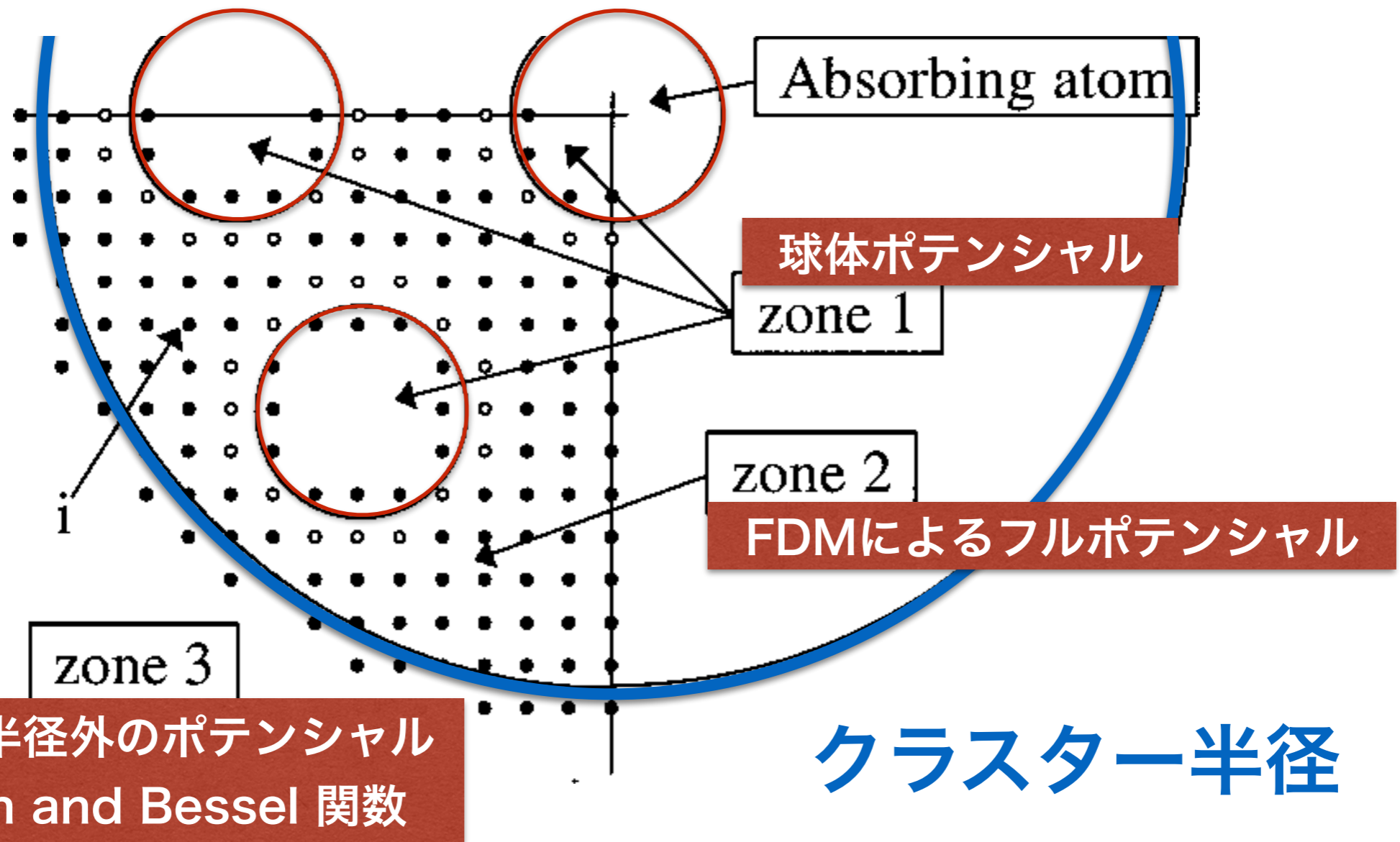
Fe1	Fe	1.0000	0.5000	0.5000	0.5000
O2	O	1.0000	0.8334	0.5000	0.5000
O3	O	1.0000	0.1666	0.5000	0.5000
O4	O	1.0000	0.5000	0.8334	0.5000
O5	O	1.0000	0.5000	0.1666	0.5000
O6	O	1.0000	0.5000	0.5000	0.8334
O7	O	1.0000	0.5000	0.5000	0.1666

# 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

# 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



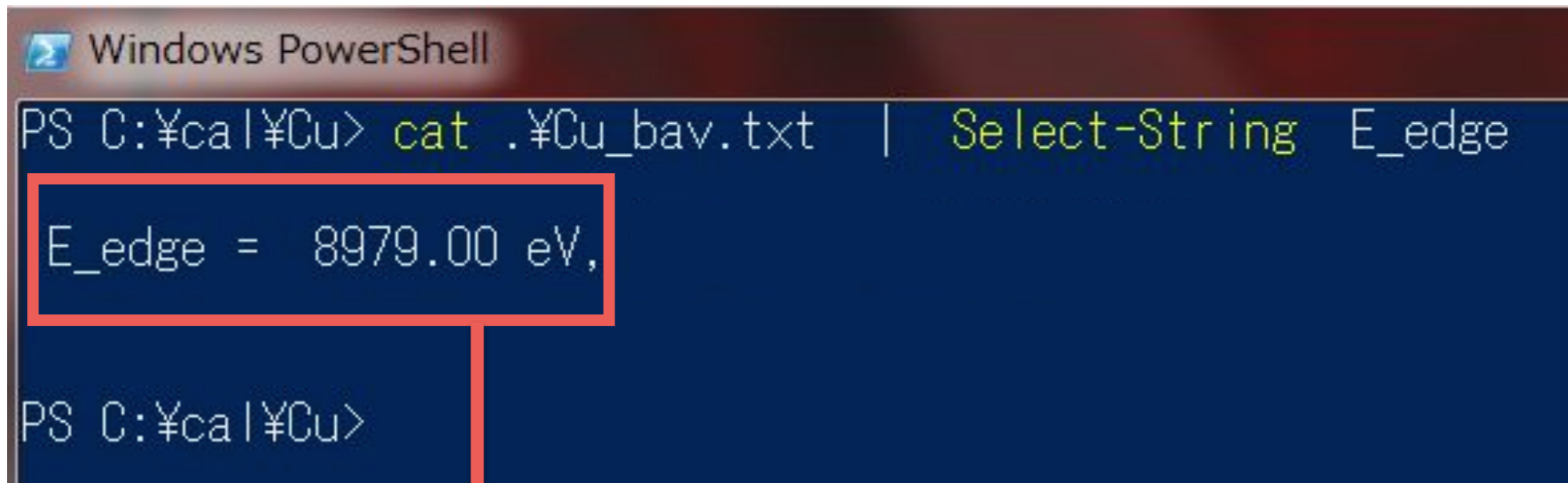
基本出力ファイルの解説

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

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

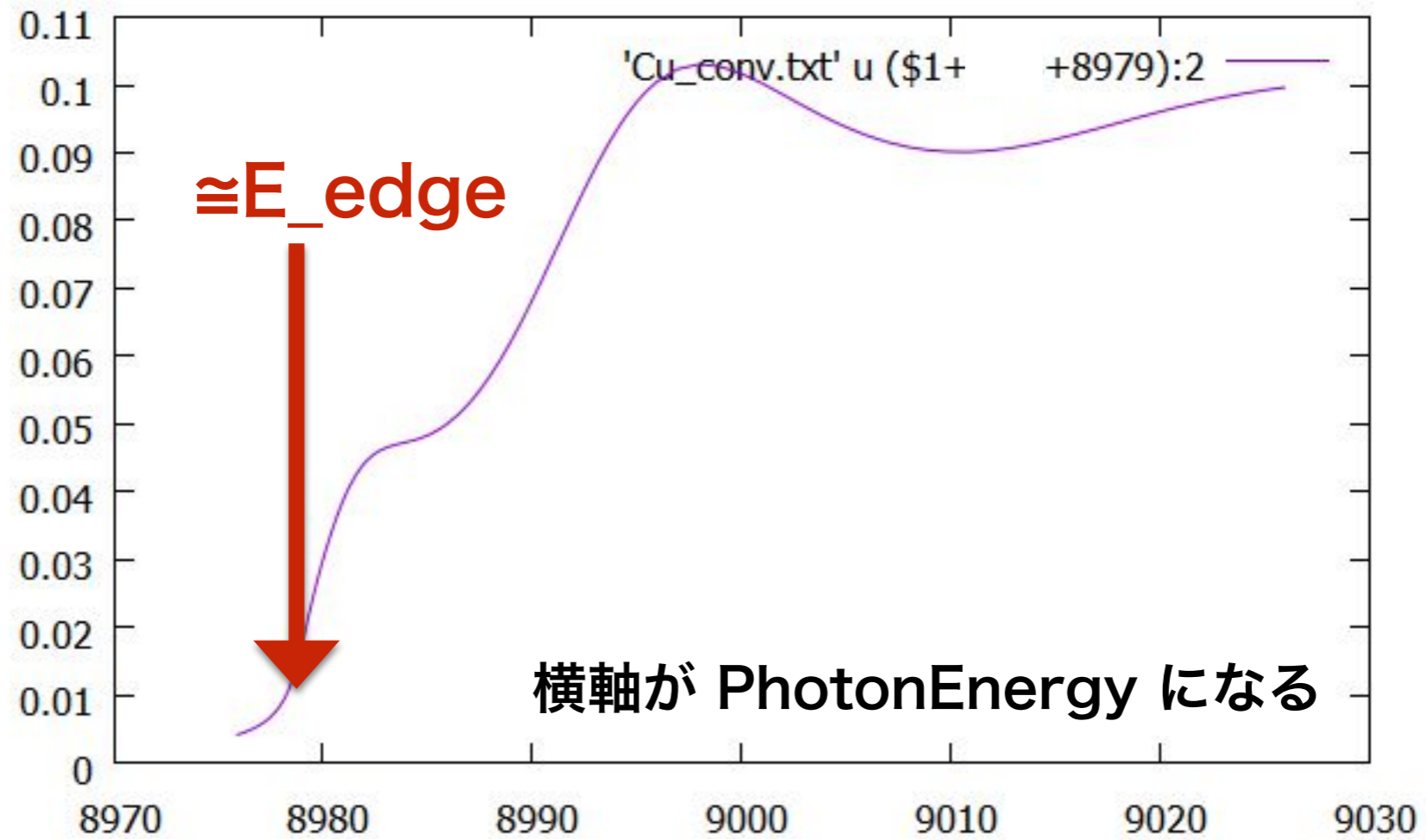
横軸を Photon Energy 表示する

一行目に 8979 を加える

1) wgnuplot

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

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



横軸が PhotonEnergy になる

3) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる

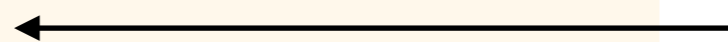
計算結果そのものを Photonenergy で書き出す

Filout  
Cu

Range

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

Energpho



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)

# Cu (Phthonenergy)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>
```

スペース

start  `¥Cu_conv.txt`

コメントアウト  
(最初の1行)

## Cu\_conv.txt の編集

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

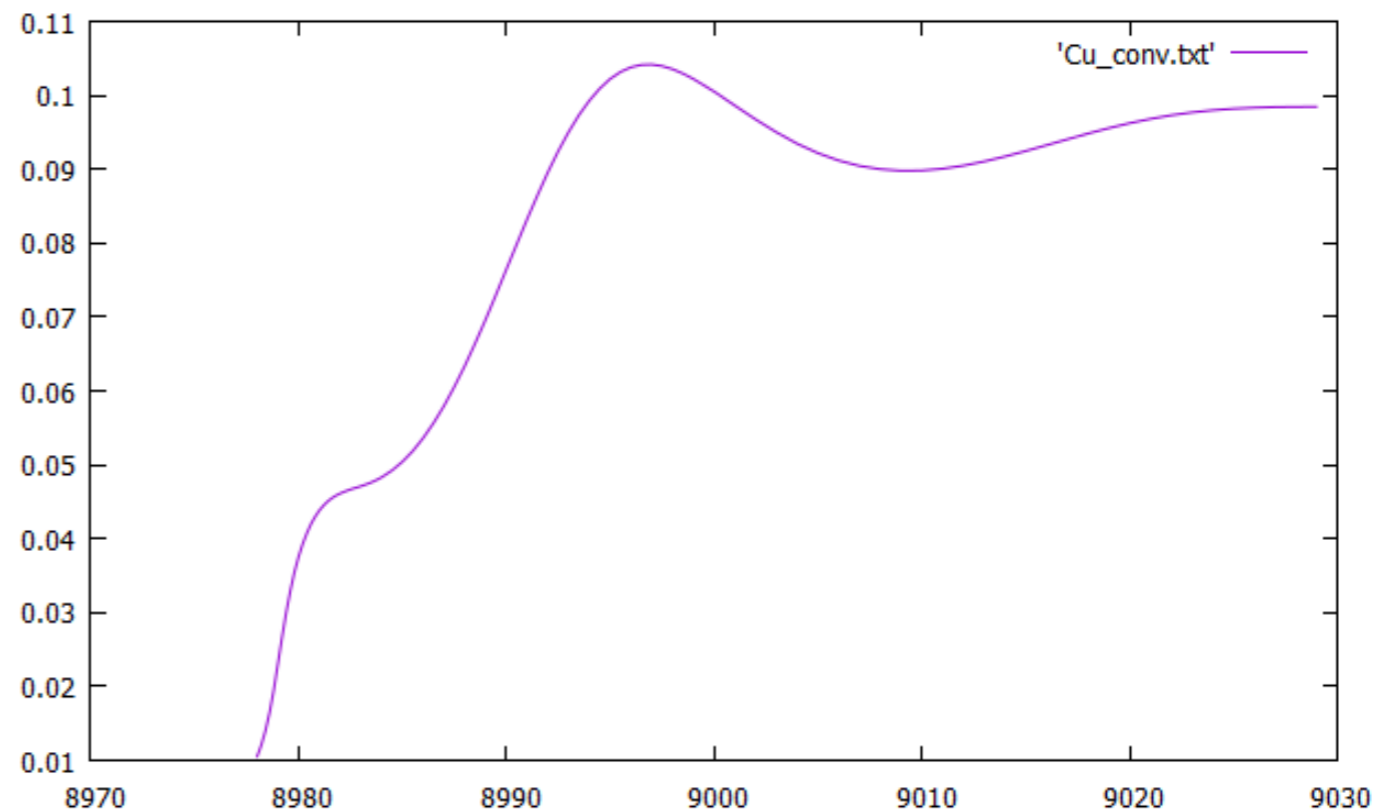
GNUPLOT  
Version 5.2 patchlevel 6  
Copyright (C) 1986-1993,  
Thomas Williams, Colin Ke

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)

Plotting 'Cu\_conv.txt' with lines



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

xt - 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
   0.1565197E+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



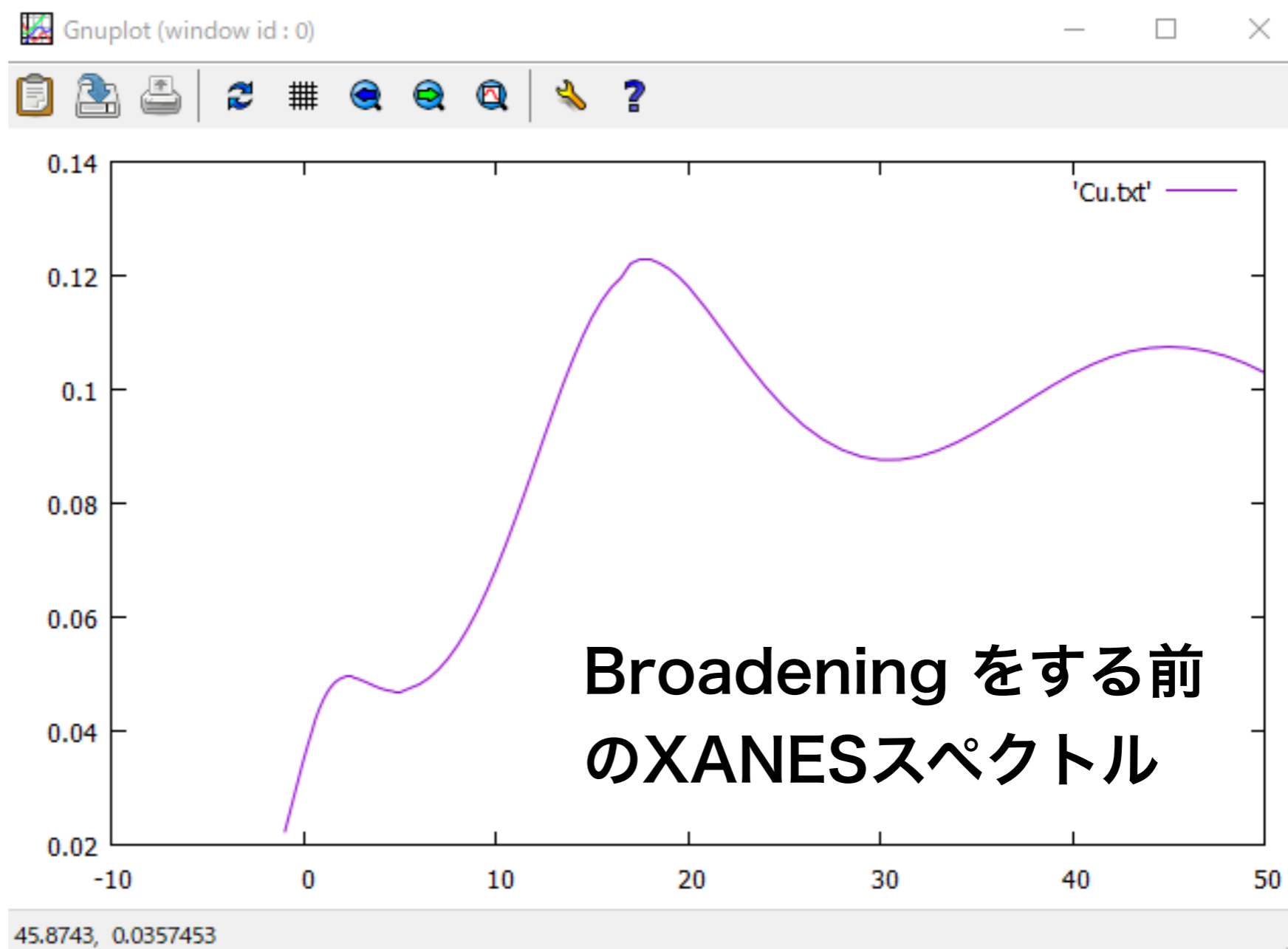
# Broadening をする前のスペクトルをプロットする

## 1) wgnuplot

スペース

2) `plot 'Cu.txt' w l`

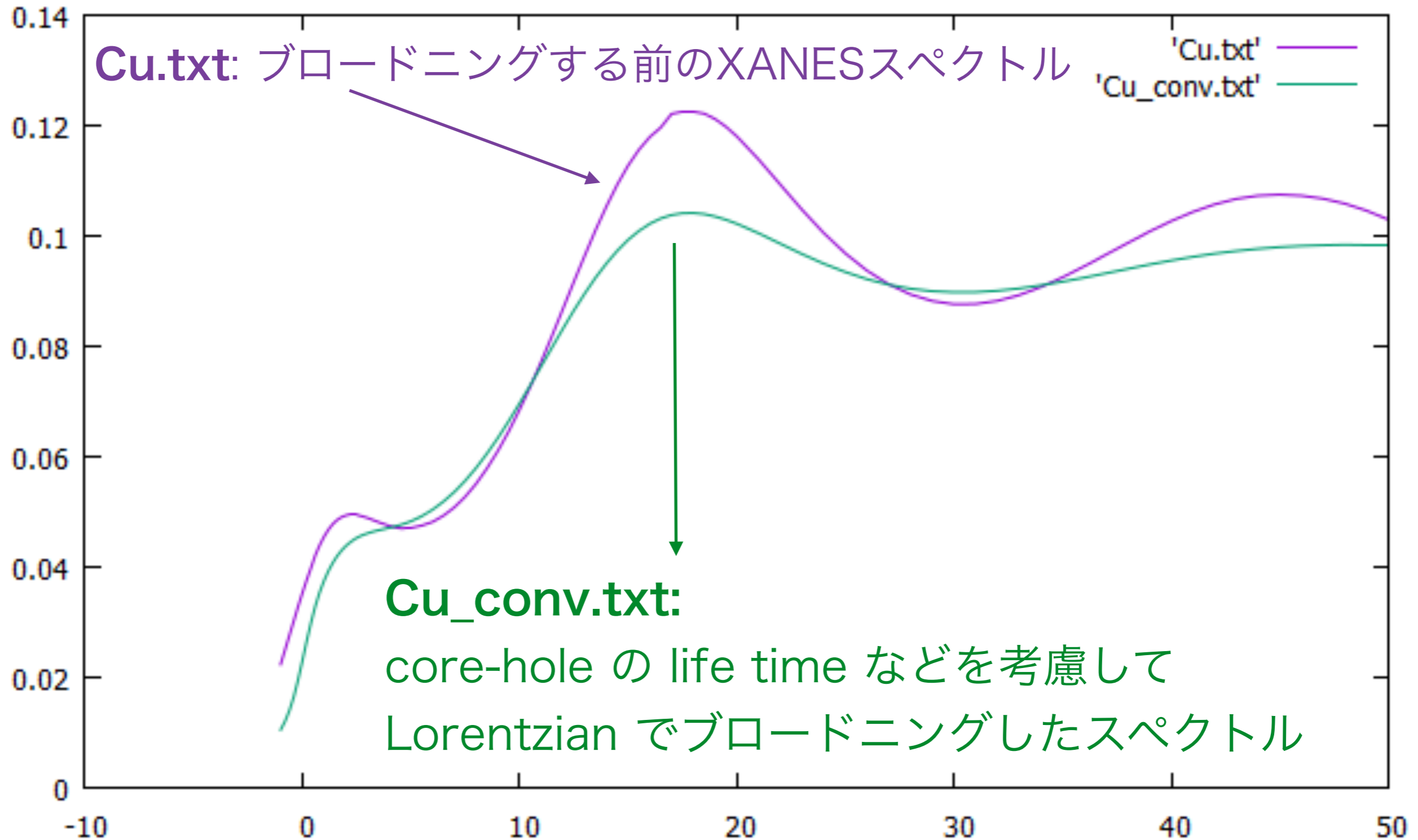
Cu.txt をプロットする



カンマ で区切ることにより複数のデータをプロット

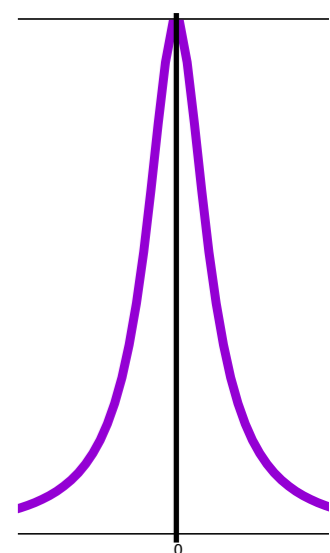
スペース

```
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

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

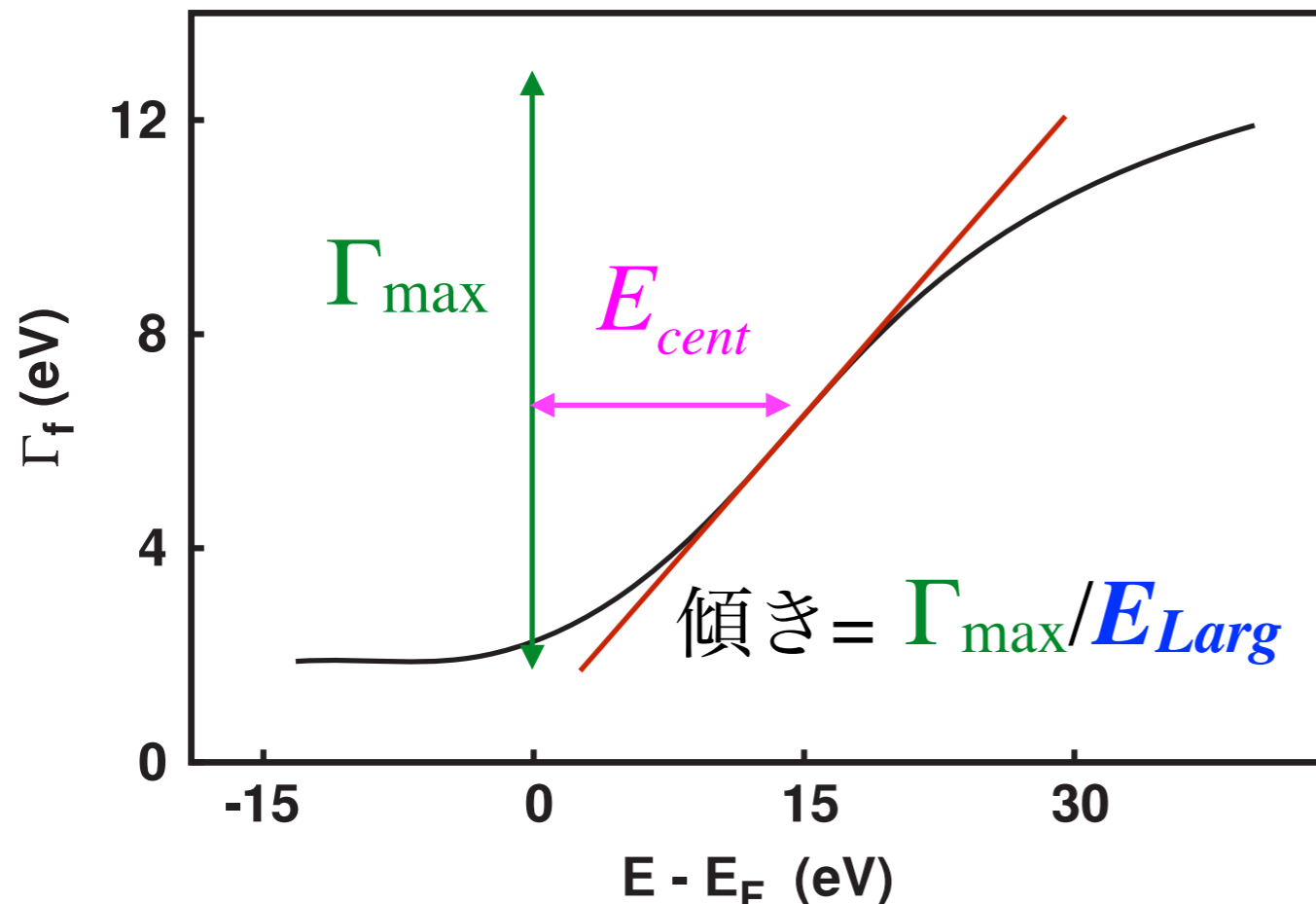
$$\Gamma_f(E - E_F) = \Gamma_{\text{Hole}} + \Gamma_{\text{max}} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left( \frac{\pi}{3} \frac{\Gamma_{\text{max}}}{E_{\text{Larg}}} \left( e - \frac{1}{e^2} \right) \right) \right)$$

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

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

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

arctangent 型



$\Gamma_{max}$  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

# 化合物の計算実習

## -Cu<sub>2</sub>O の計算例-

スペース



- (1) `cd □ ¥cal`
- (2) `mkdir □ Cu20`
- (3) `cd □ Cu20`
- (4) `cp □ ..¥Cu¥fdmfile.txt □.`
- (5) `cp □ ..¥Cu¥inp.txt □.`

## Cu<sub>2</sub>Oの計算準備

計算のホームへ移動

Cu<sub>2</sub>O 作業ディレクトリ作成

Cu<sub>2</sub>O 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:¥ca|¥Cu20> ls

ディレクトリ: C:¥ca|¥Cu20

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

PS C:¥ca|¥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
└── 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

fdmfile.txt

inp.txt

編集

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EF0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

クラスター半径5.0

Radius  
5.0

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

Green

Crystal

```
4.2676 4.2676 4.2676 90.0 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)

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

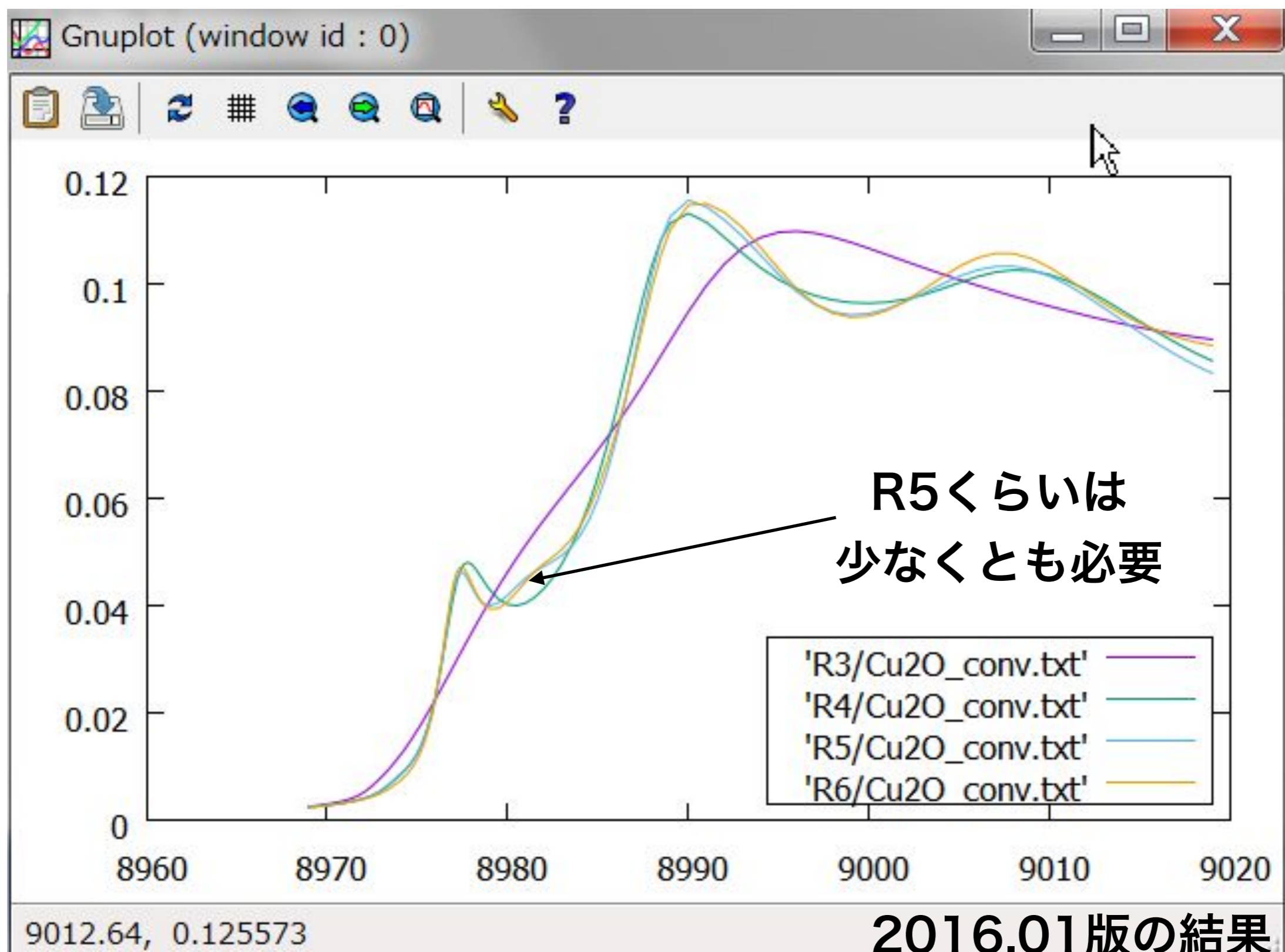
29 0.0000 0.5000 0.5000 ! Cu

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



2016.01版の結果

# Cu<sub>2</sub>O (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 0.0000000E+00 1.0289280E+03 7.7723280E+01 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
```

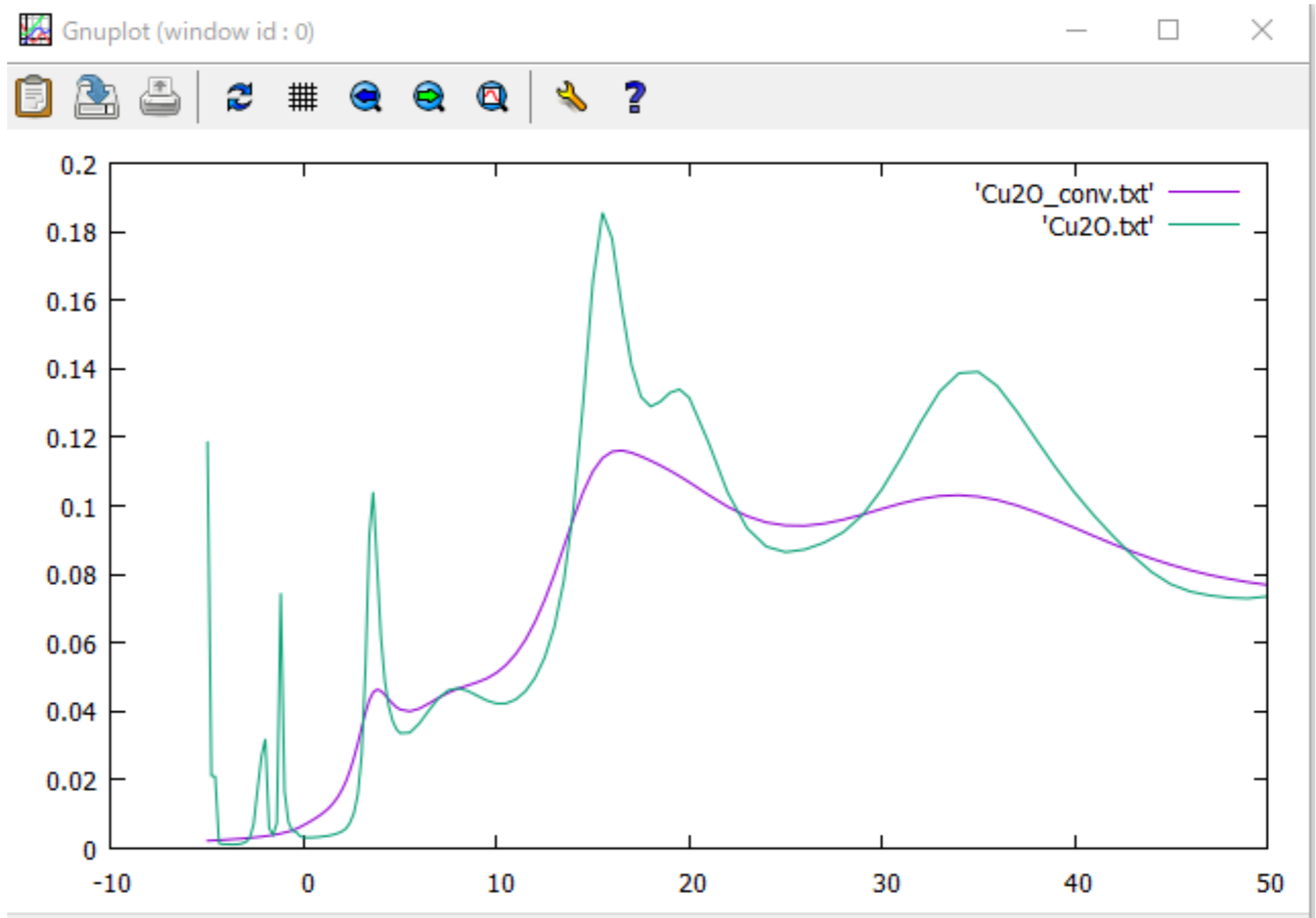
# Cu2O のXANESスペクトルのプロット

## 1) wgnuplot

スペース

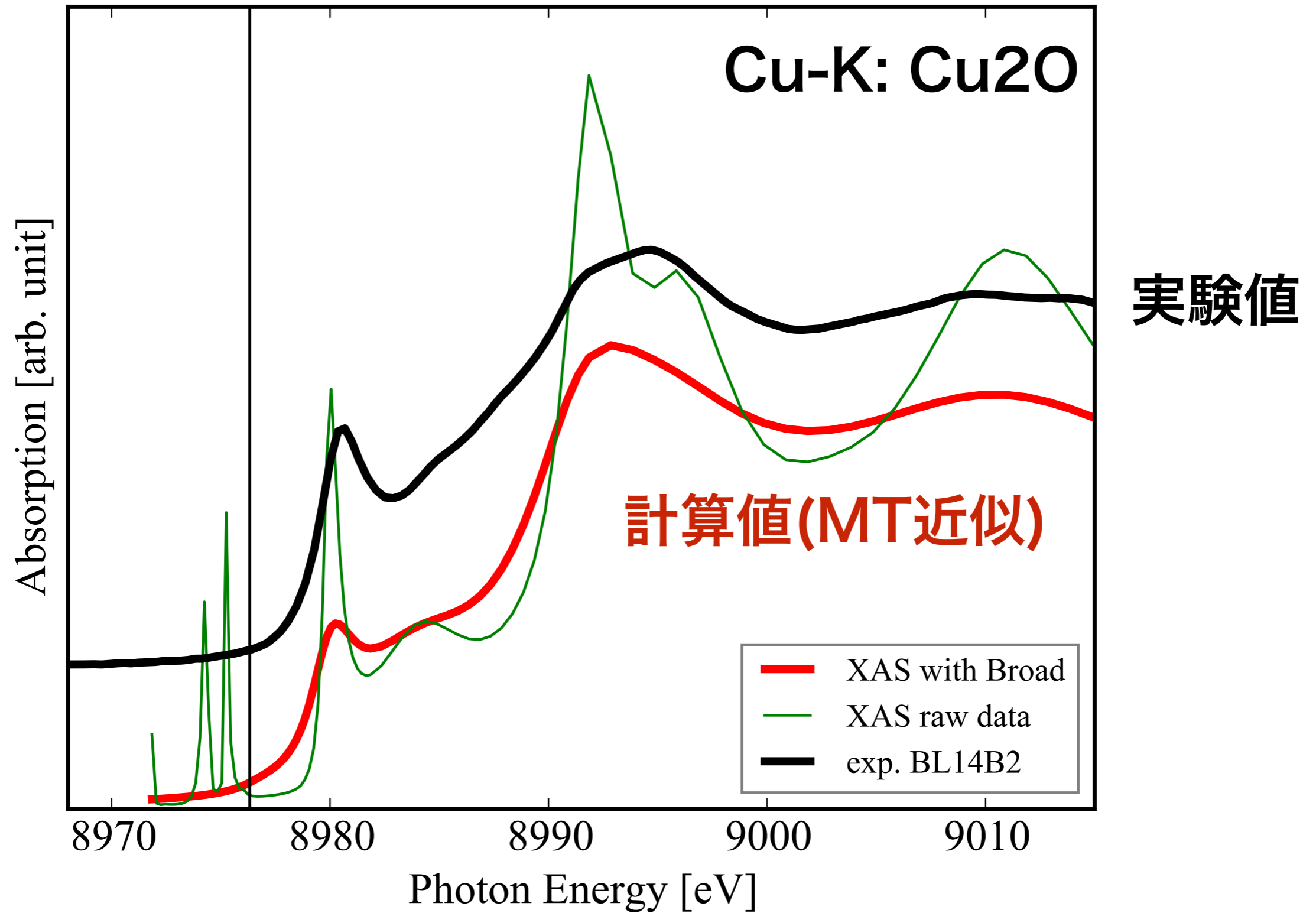
スペース カンマ

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-

-Cu<sub>2</sub>O 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

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

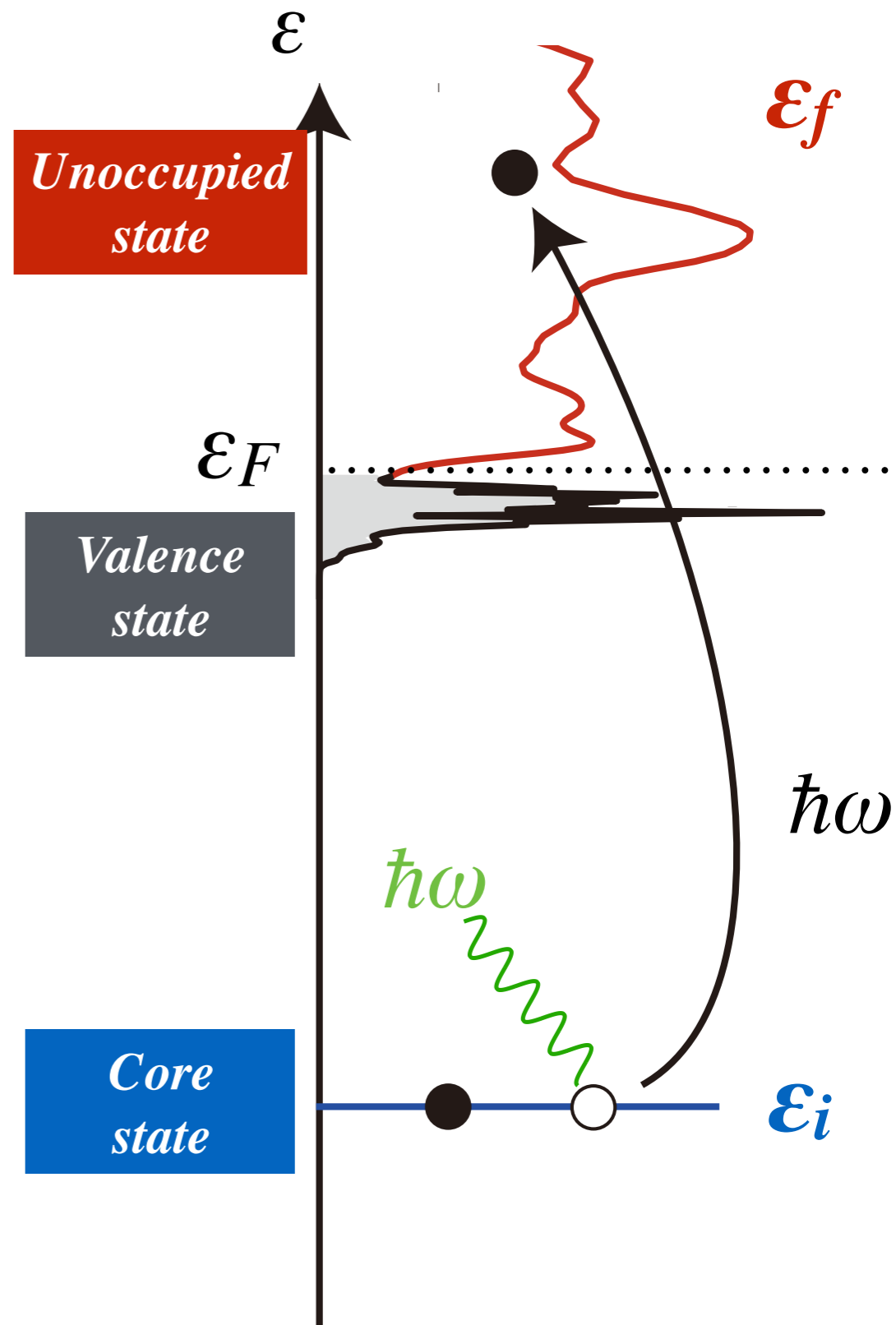


unoccupied state

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	$\hat{F} = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} = e(E_x x + E_y y + E_z z)$	

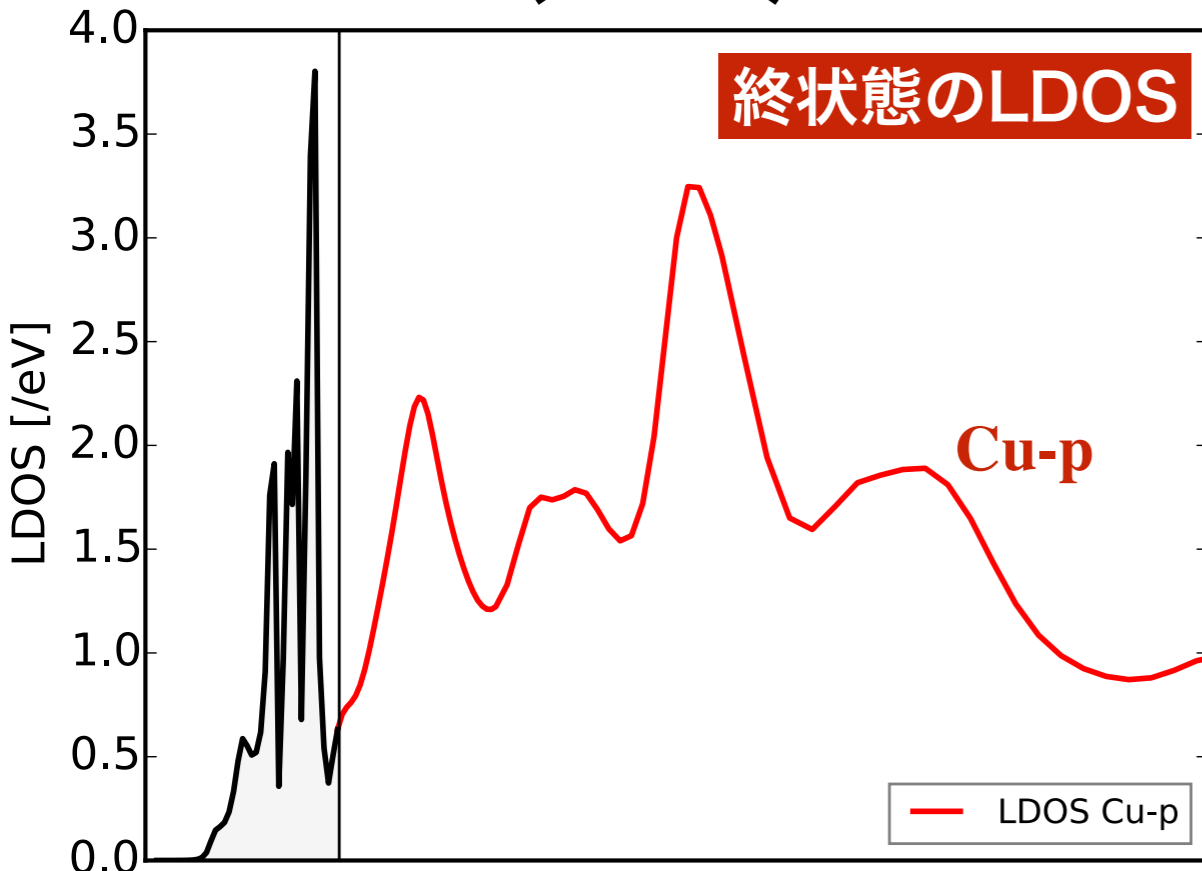
...

$$\propto |I_{Lnl}|^2 \sum_{m_s} w_{j\mu m_s} \boxed{D_{LMM_s}(\hbar\omega + \varepsilon_i)} \quad \text{終状態の部分状態密度}$$

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

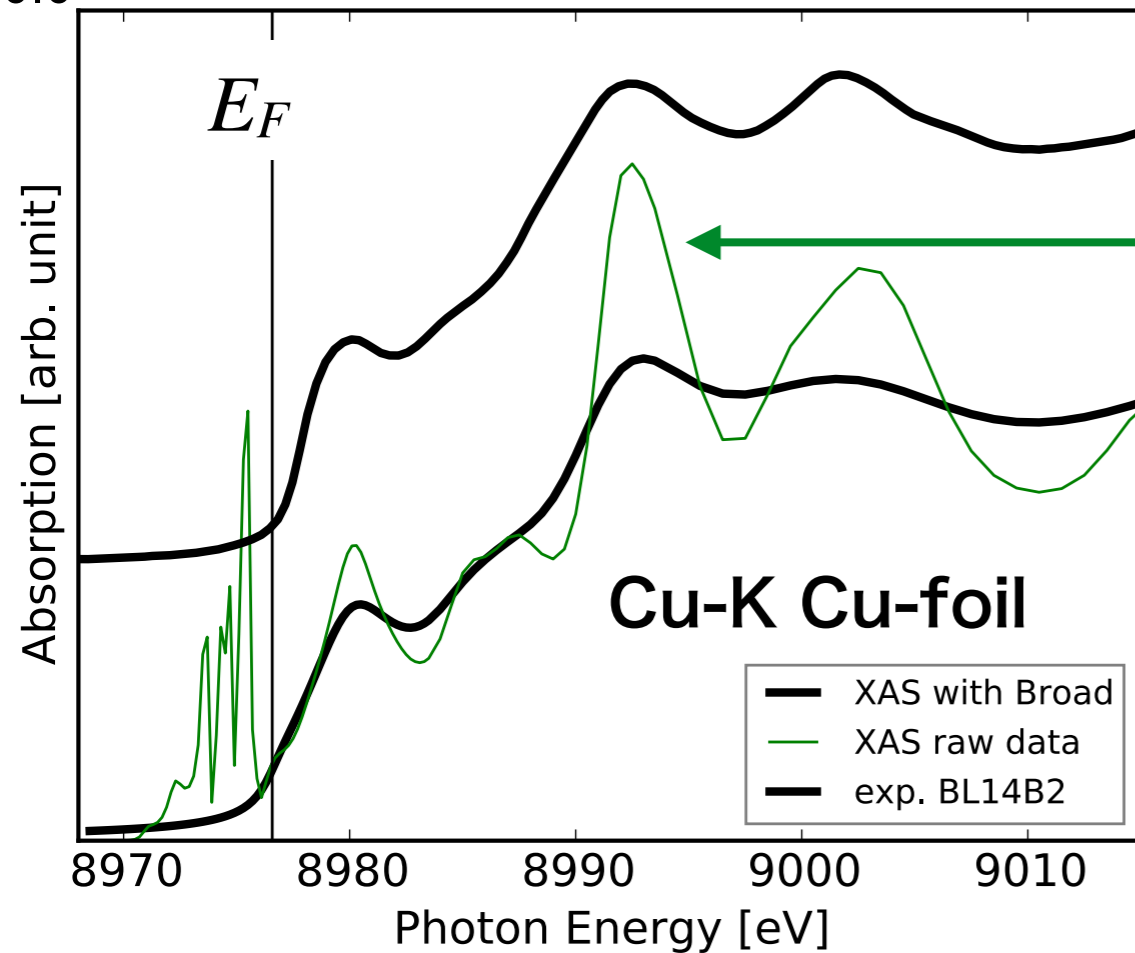
# FDMNES (R=7.0) FDM



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, Cu<sub>2</sub>O, 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

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

\* アスタ  
リスク

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         3843 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    19:38         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 ~

2018.11.30

```
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

ia0 は Absorber なので sd0

sd2~sd7

(\*) \_bab.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)

```
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 x Cu2O_sd2.txt
1 # 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 -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
```

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)

```
_sd2.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 x
1 # 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)
2 -5.0000 2.36141E-01 3.50908E-02 5.15825E-04 7.01816E-02 1.03165E-03
3.15650E-01 4.63996E-03 7.36577E+00 1.08275E-01 3.15650E-01 4.63996E-03
1.59941E+01 2.35110E-01
```

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 x
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

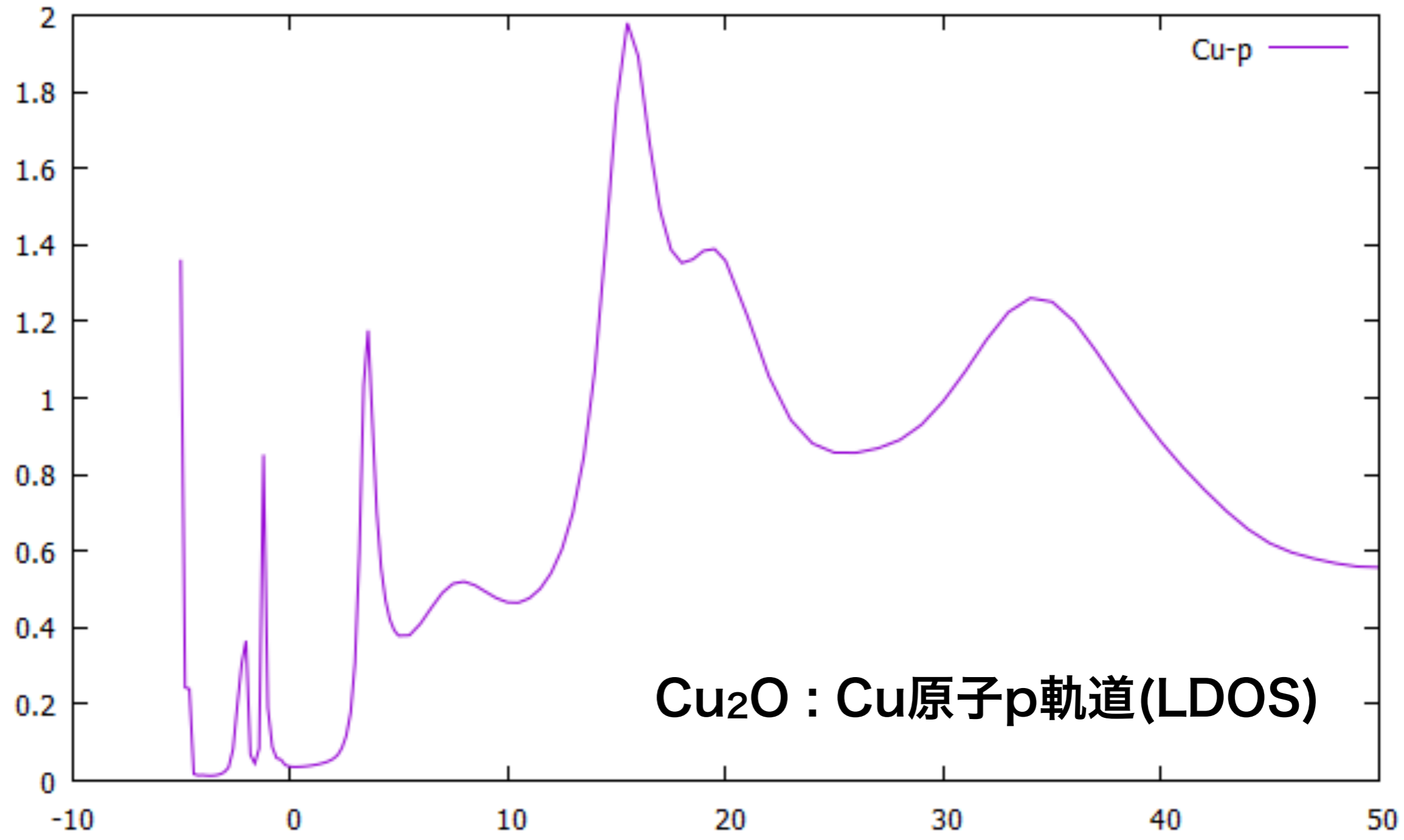
スペース

コロン

Cu-p軌道の指定

title を付ける

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



# 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 <sup>2</sup>	dxz	dx <sup>2</sup> -y <sup>2</sup>

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

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

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

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

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

$n(0,0)$

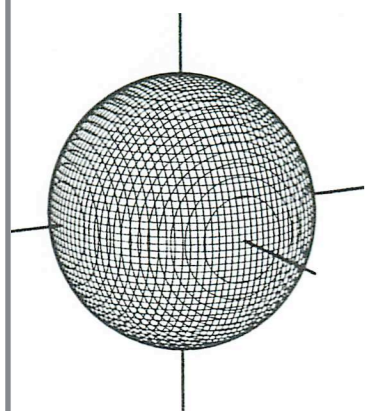
$n(2,0)$

$n(2,2)$

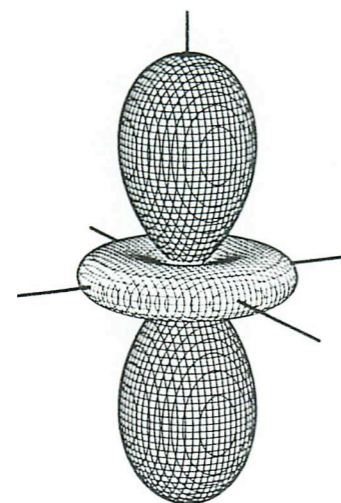
$n(2,-1)$

$n(2,1)$

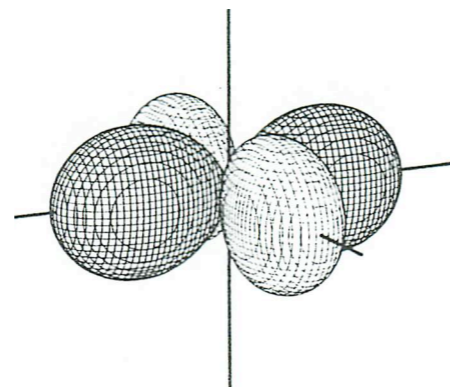
$n(2,-2)$



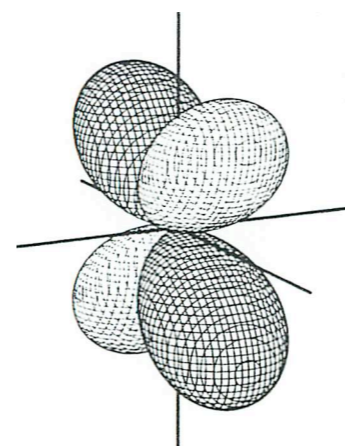
s



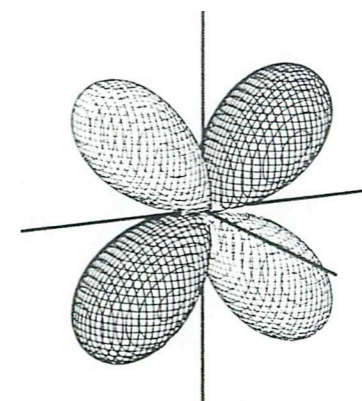
$d(3z^2-r^2)$



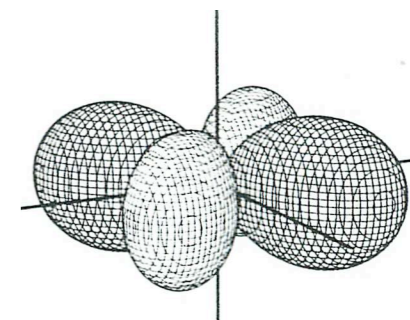
$d(x^2-y^2)$



$d(yz)$



$d(zx)$

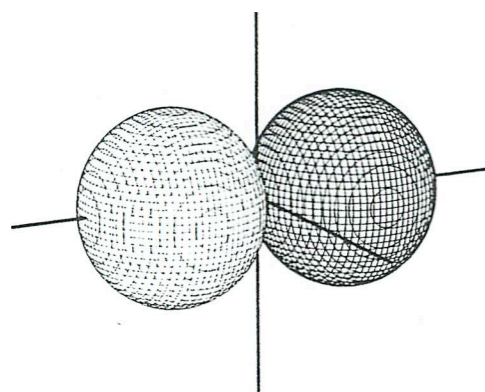


$d(xy)$

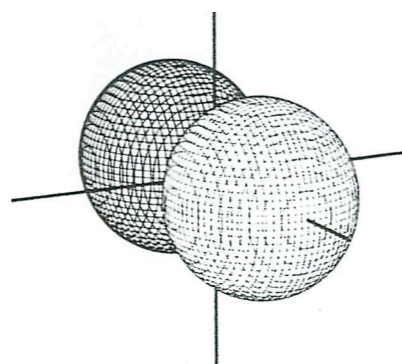
$n(1,1)$

$n(1,-1)$

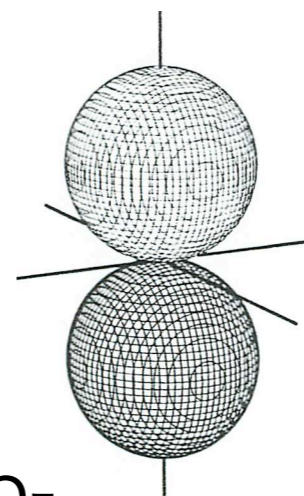
$n(1,0)$



$p_x$



$p_y$

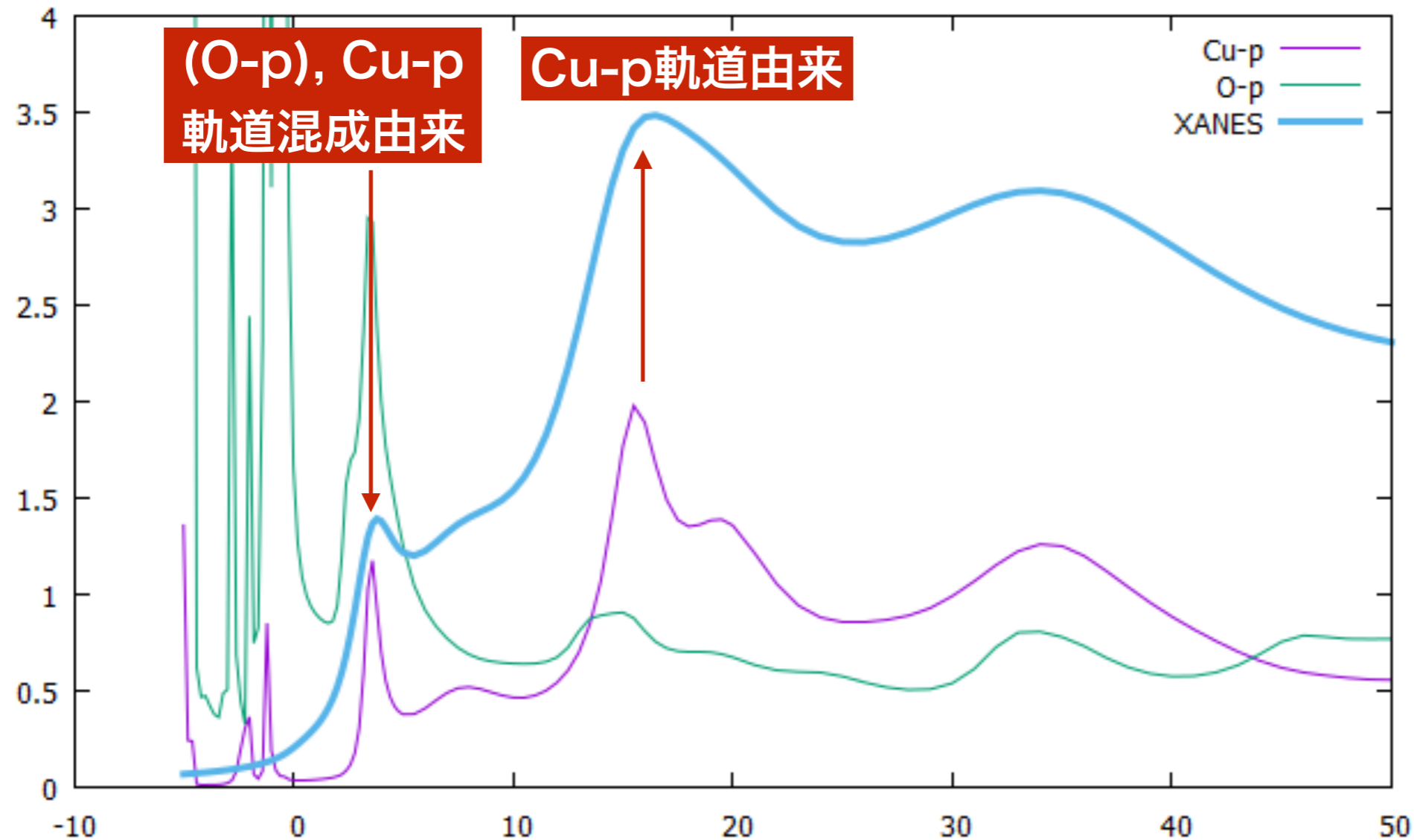


$p_z$



,(カンマ)後 改行せずにつなげる(1行で書く)

```
3) plot [ ] [0:4] 'Cu20_sd0.txt' u 1:13 w l t 'Cu-p',  
      'Cu20_sd2.txt' u 1:13 w l t 'O-p',  
      'Cu20_conv.txt' u 1:($2*30) w l lw 3 t 'XANES'
```



4) plot が終わったらGNUPLLOTを閉じる

**化合物の計算実習**  
**-BaTiO<sub>3</sub> の計算例-**

cubic, 221, Pm3-m

常誘電相 cif\_2100863

Absorber

1

Filout

BaTiO3

Range

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

Edge

K

Convolution

Green

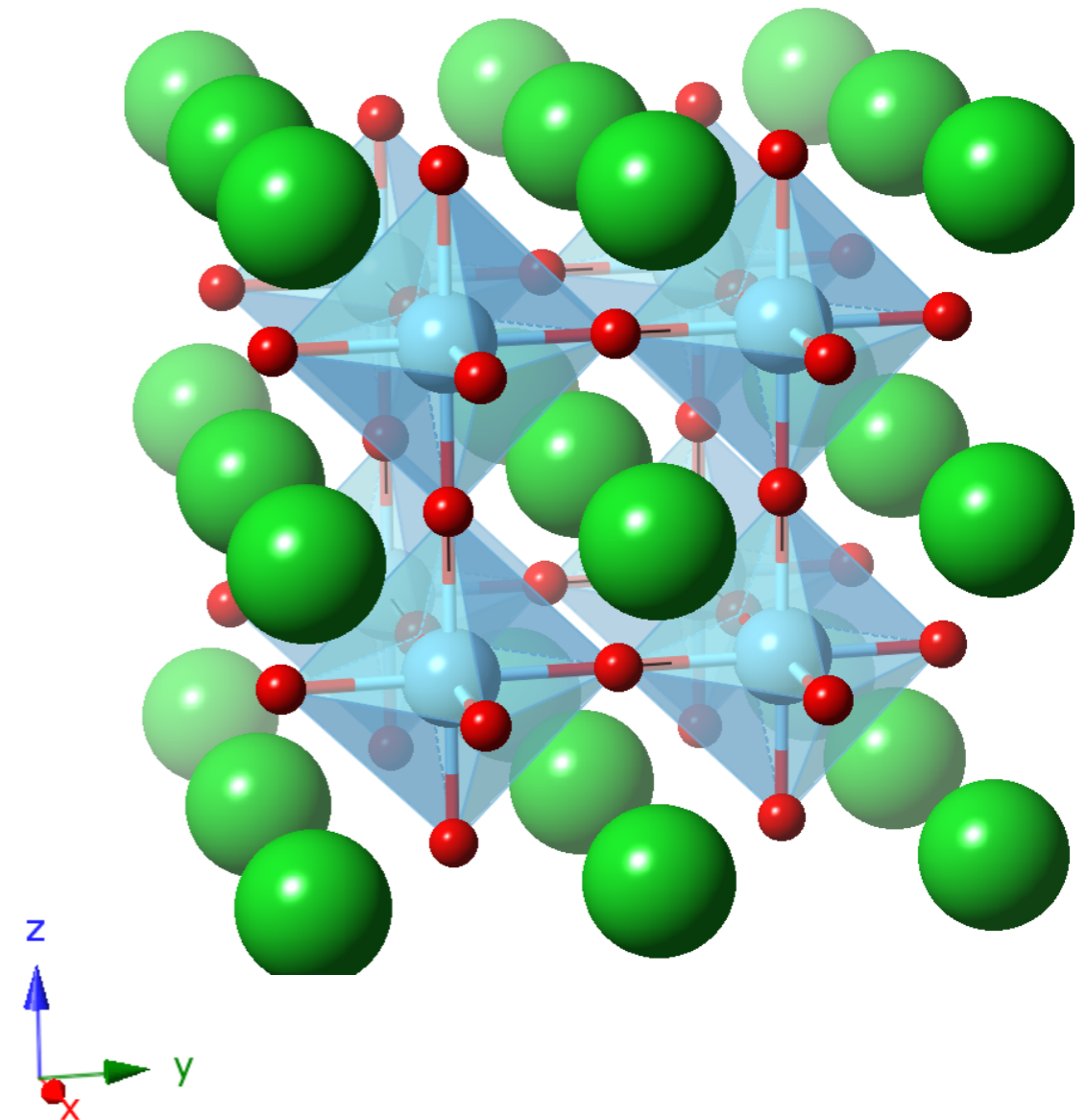
Radius

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



# 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

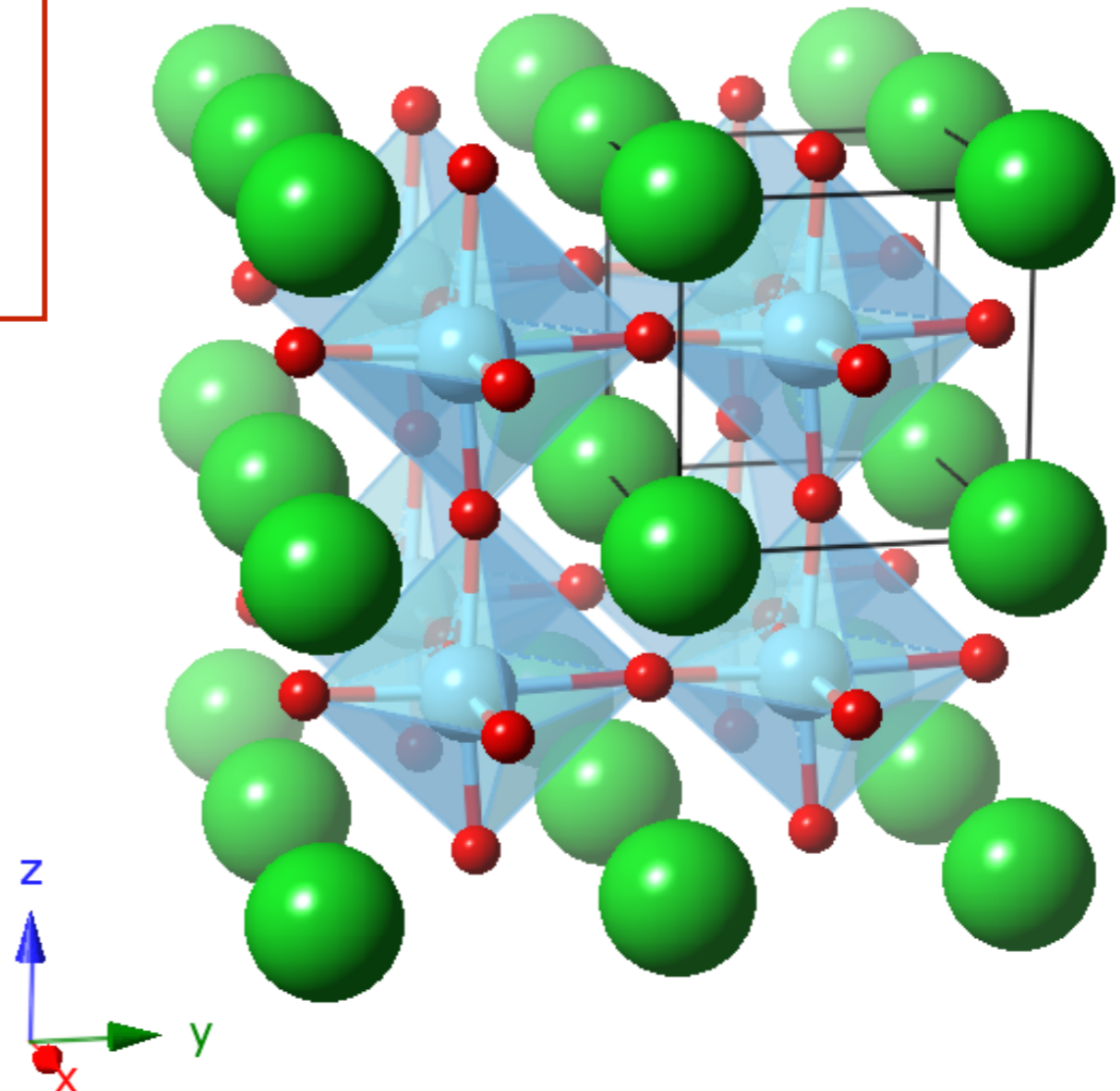
Crystal

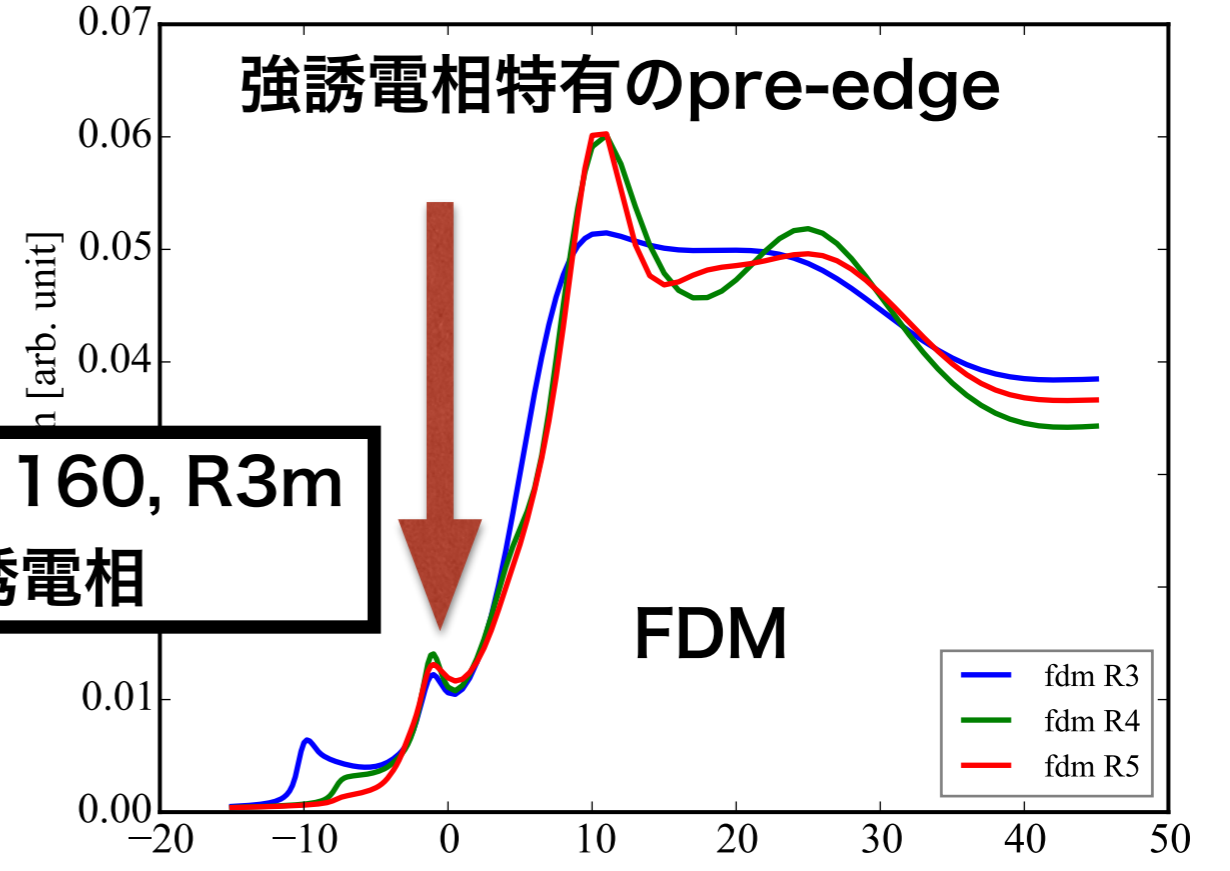
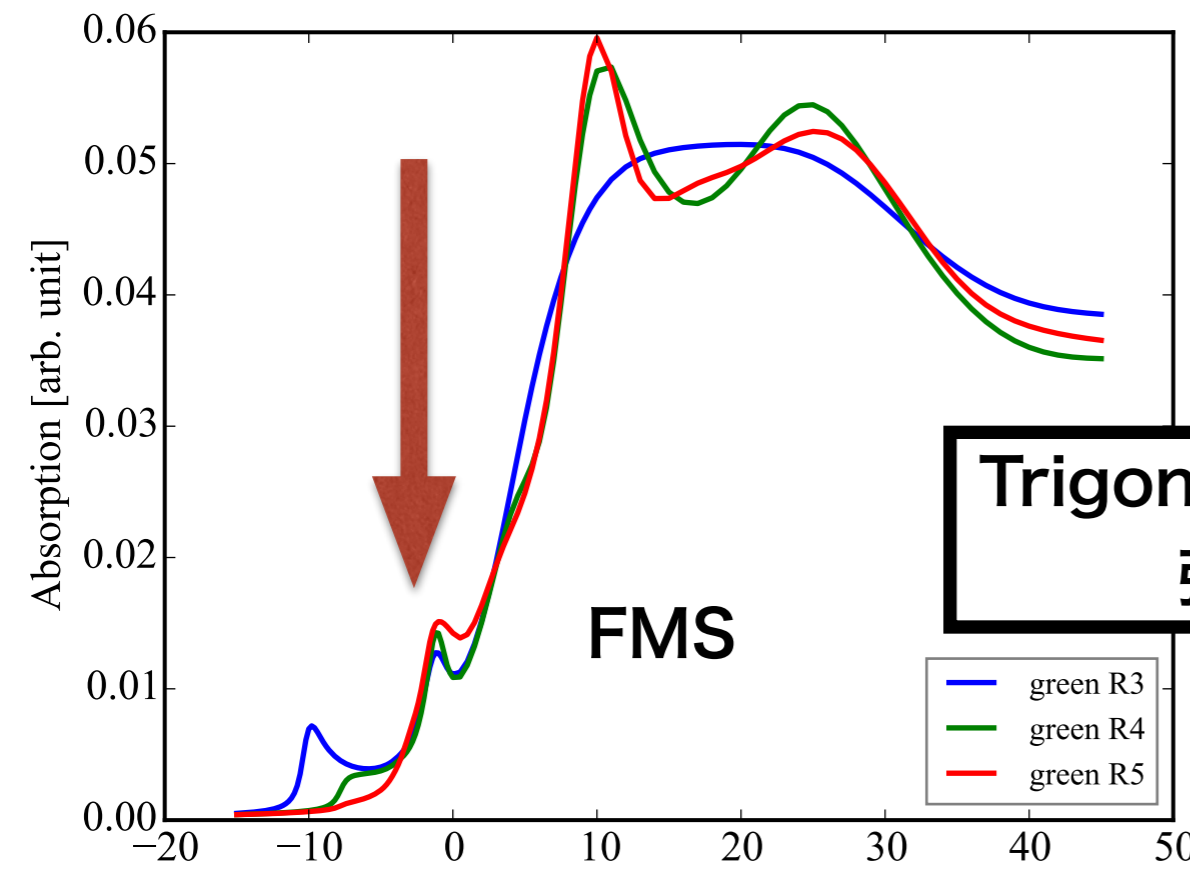
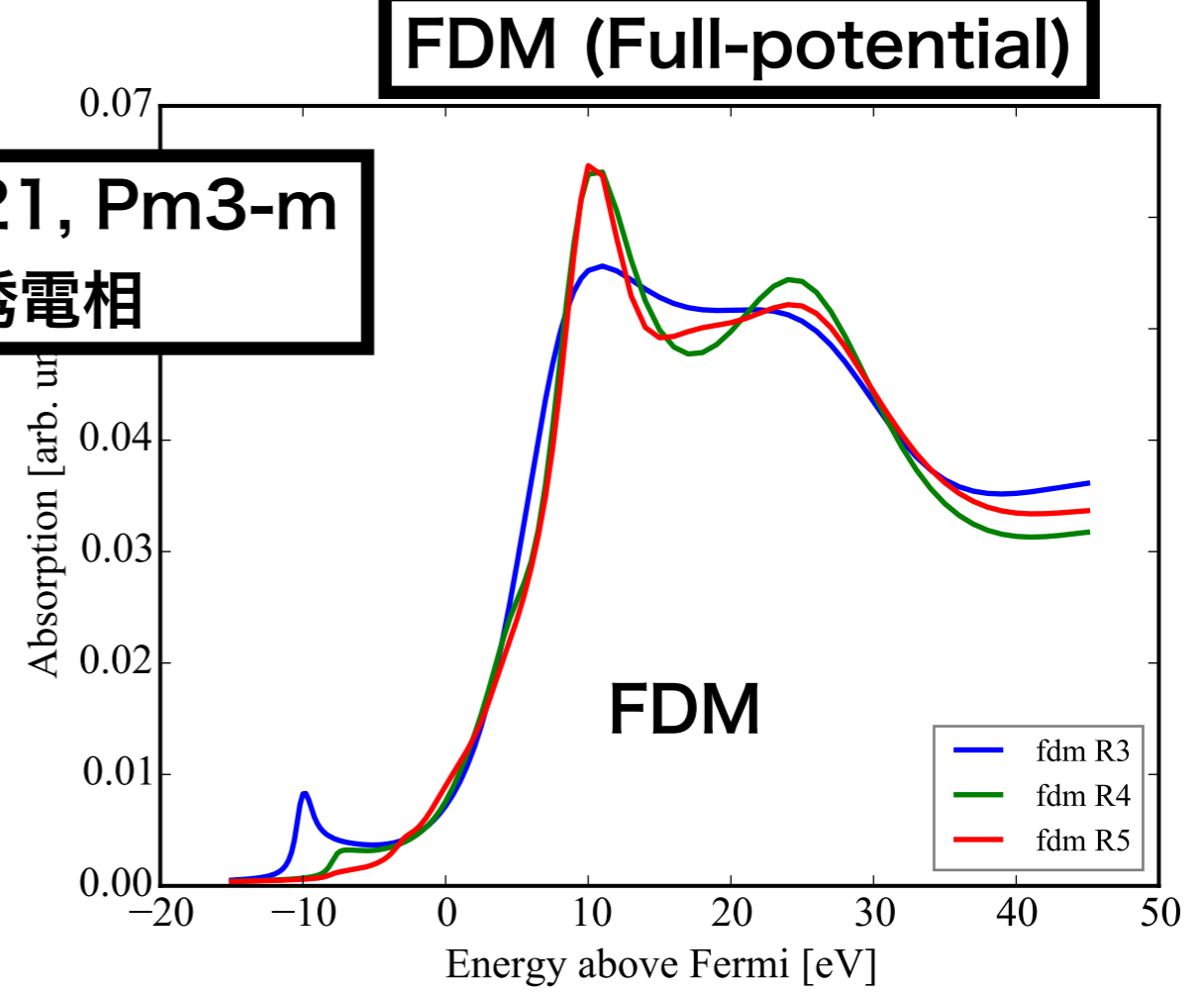
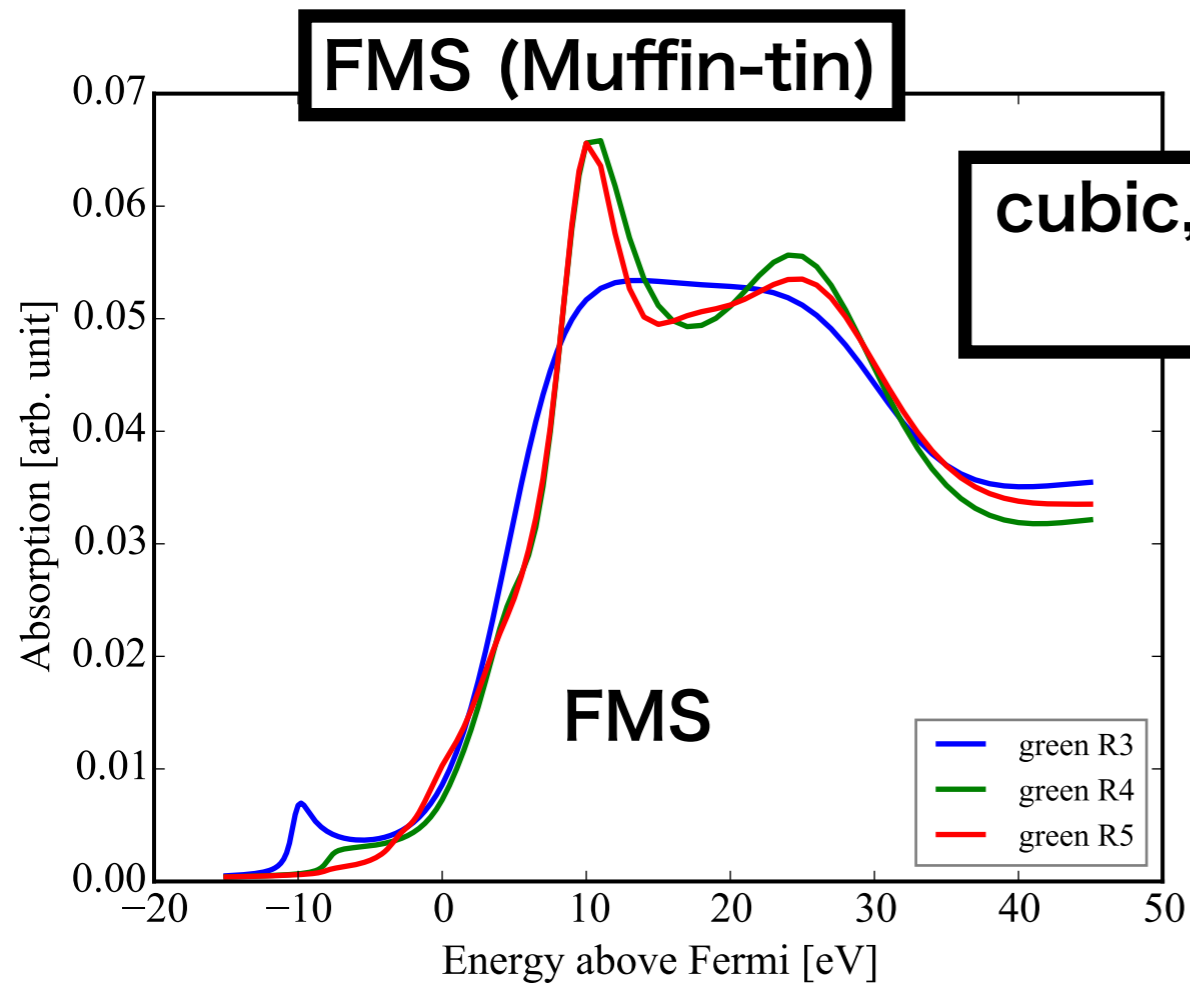
	4.0036	4.0036	4.0036	89.8404	89.8400	89.8396
22	0.4880	0.4880	0.4880	! Ti		
56	0.0000	0.0000	0.0000	! Ba		
8	0.5116	0.5116	0.0195	! O		
8	0.0195	0.5116	0.5116	! O		
8	0.5116	0.0195	0.5116	! O		

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)

内部座標のズレ

End





**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:\¥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

ls

```
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
```



---- 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 ~ 2018.11.30**

```
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
```

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)

#	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)

#	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)

#	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

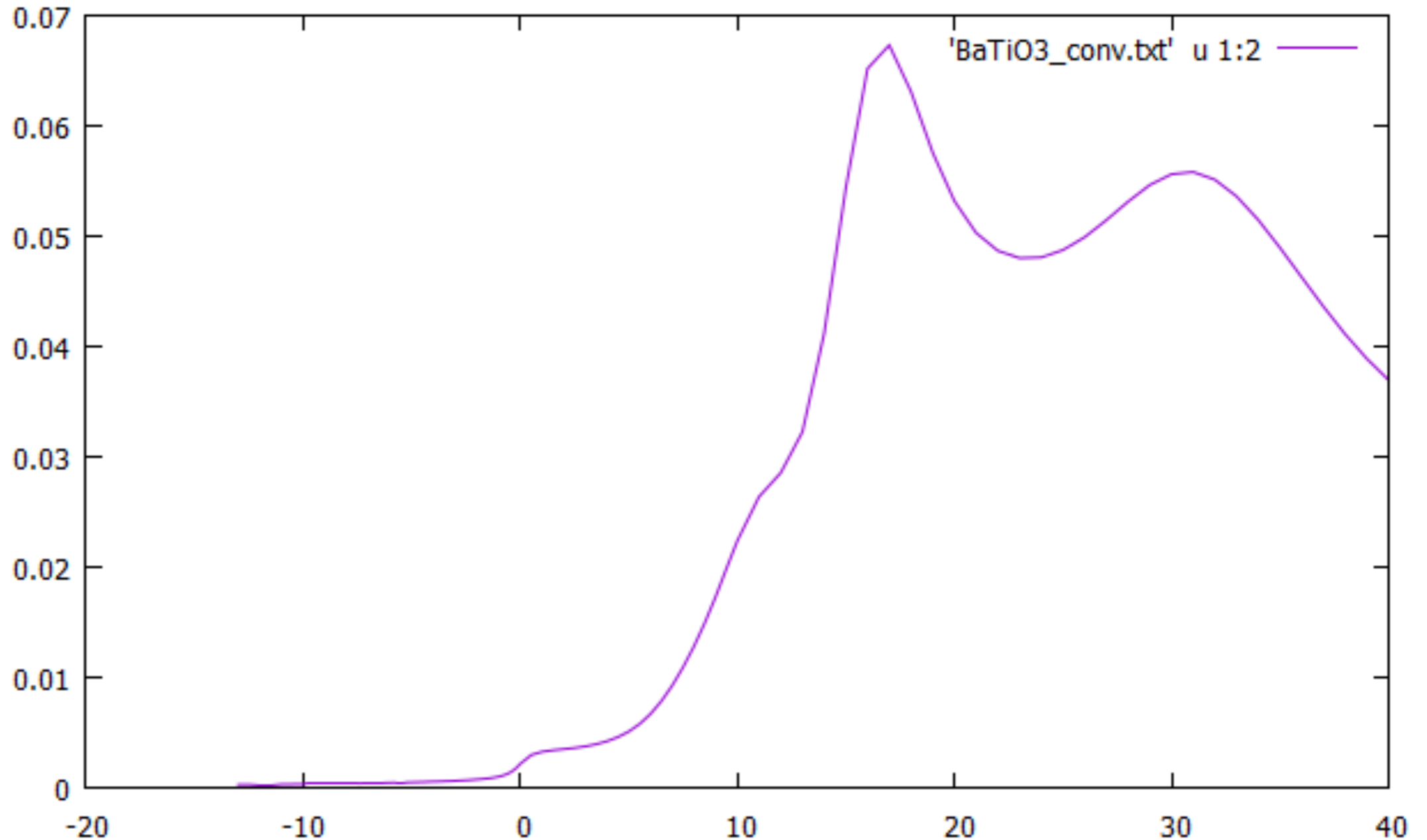
# 常誘電相

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

# 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

```
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
```

----- 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	1	Ti	T	T	F
2	8	3	3	3	2	0.00000	1.60864	-0.97383	1	O	T	F	F
3	8	3	4	3	7	1.43785	0.83014	1.33765	1	O	T	F	F
4	56	2	2	2	8	0.00000	0.00000	-3.38401	16	Ba	T	T	F
5	56	2	2	2	10	2.83097	1.63446	-1.07253	1	Ba	T	F	F
6	56	2	2	2	14	0.00000	3.26893	1.23895	1	Ba	T	F	F
7	56	2	2	2	15	0.00000	0.00000	3.55043	16	Ba	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)

#	Energy	<xanes>
1		
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)

#	Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_1(0)	Intn_1(0)
1						
-1)		Intn(1,-1)	n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)
		Intn_1(1)	n(2,-2)	Intn(2,-2)	n(2,-1)	Intn(2,-1)
		Intn(2,0)	n(2,1)	Intn(2,1)	n(2,2)	Intn(2,2)
(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)

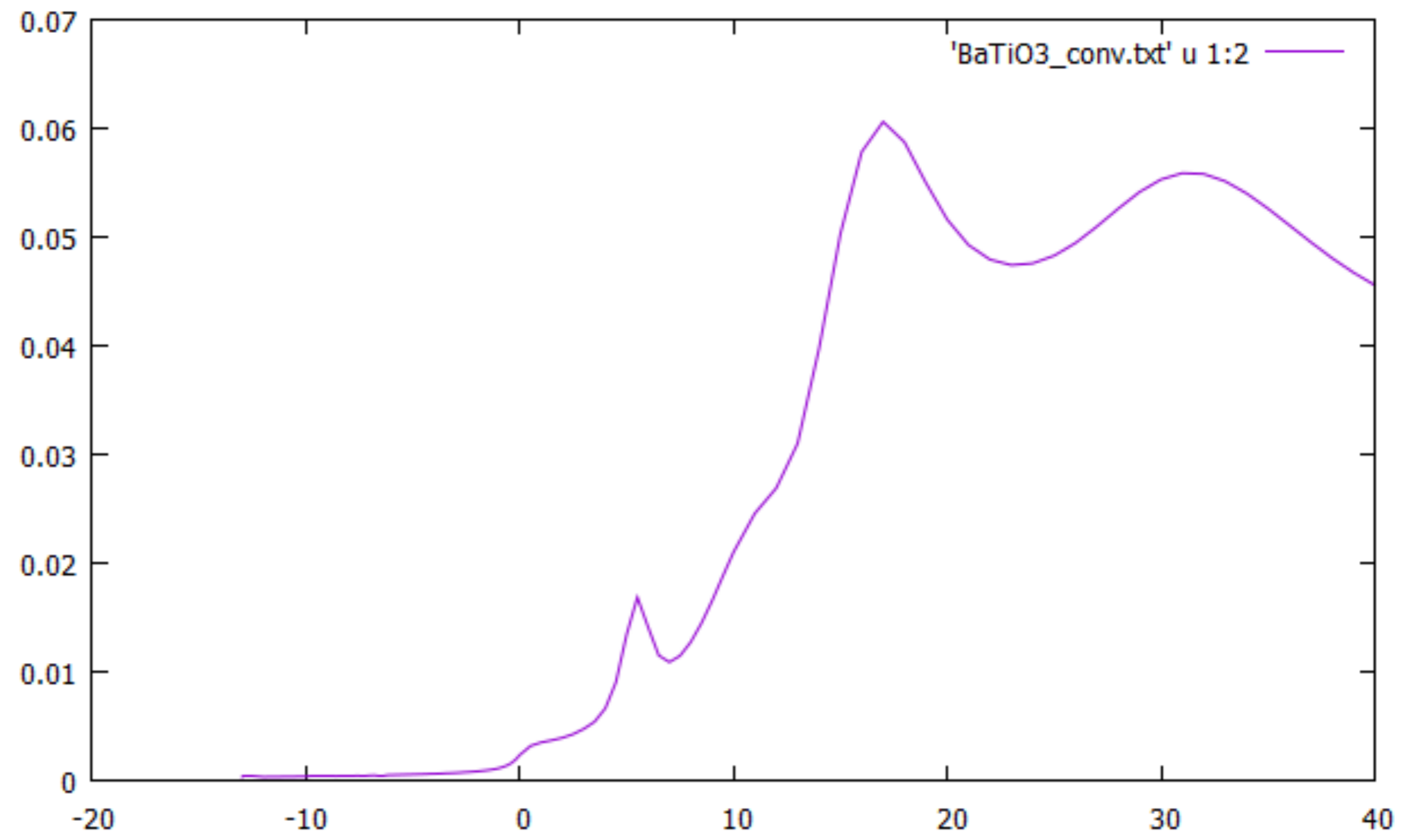
#	Energy	Int_t	n(0,0)	Intn(0,0)	n_1(0)	Intn_1(0)
1						
-1)		Intn(1,-1)	n(1,0)	Intn(1,0)	n(1,1)	Intn(1,1)
		Intn_1(1)				
2	-10.0000	2.81980E-04	8.21862E-04	1.20812E-05	1.64372E-03	2.41623E-05
		3.24073E-03	4.76379E-05	2.90845E-03	4.27534E-05	2.62030E-03
		1.75390E-02	2.57818E-04			3.85177E-05

# GNUPLOT でプロットする

強誘電相

1) wgnuplot

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



3) plot が終わったらGNUPLOTを閉じる



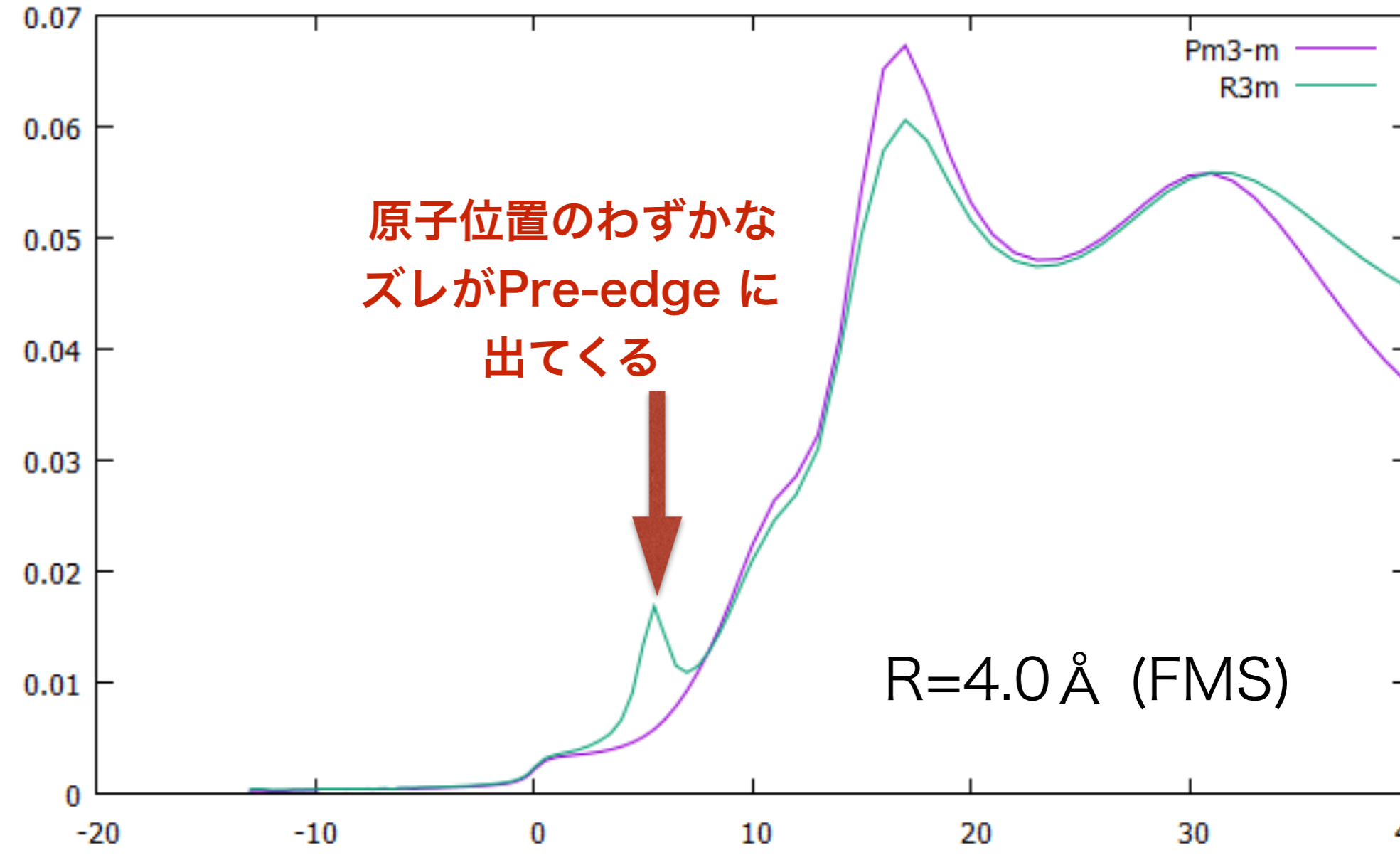
- 1) cd ¥cal
- 2) wgnuplot

,(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 1:2 w l t 'Pm3-m',  
      'BaTiO3_R3m¥BaTiO3_conv.txt' u 1:2 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  
  
—BaTiO3_R3m  
BaTiO3.txt  
BaTiO3_bav.txt  
BaTiO3_conv.txt  
BaTiO3_sd0.txt  
BaTiO3_sd2.txt  
BaTiO3_sd3.txt  
fdmfile.txt  
inp.txt
```



- 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

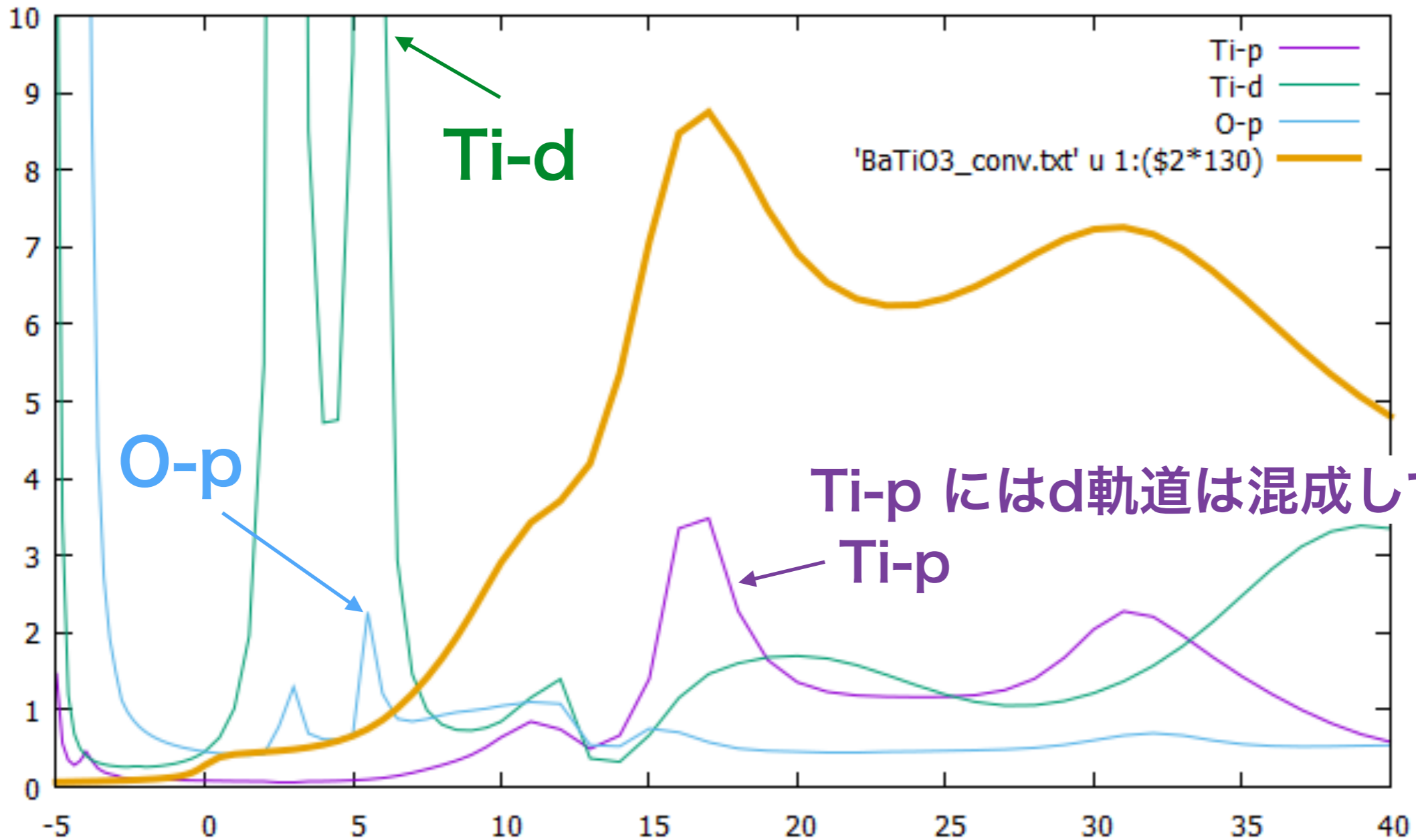
2) wgnuplot

```
3) plot [-5:40][:10] 'BaTiO3_sd0.txt' u 1:13 w l t 'Ti-p',  
      'BaTiO3_sd0.txt' u 1:25 w l t 'Ti-d',  
      'BaTiO3_sd3.txt' u 1:13 w l t 'O-p',  
      'BaTiO3_conv.txt' u 1:($2*130) w l lw 3 t '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



# 強誘電相(R3m)

1) cd ¥cal¥BaTiO3\_R3m

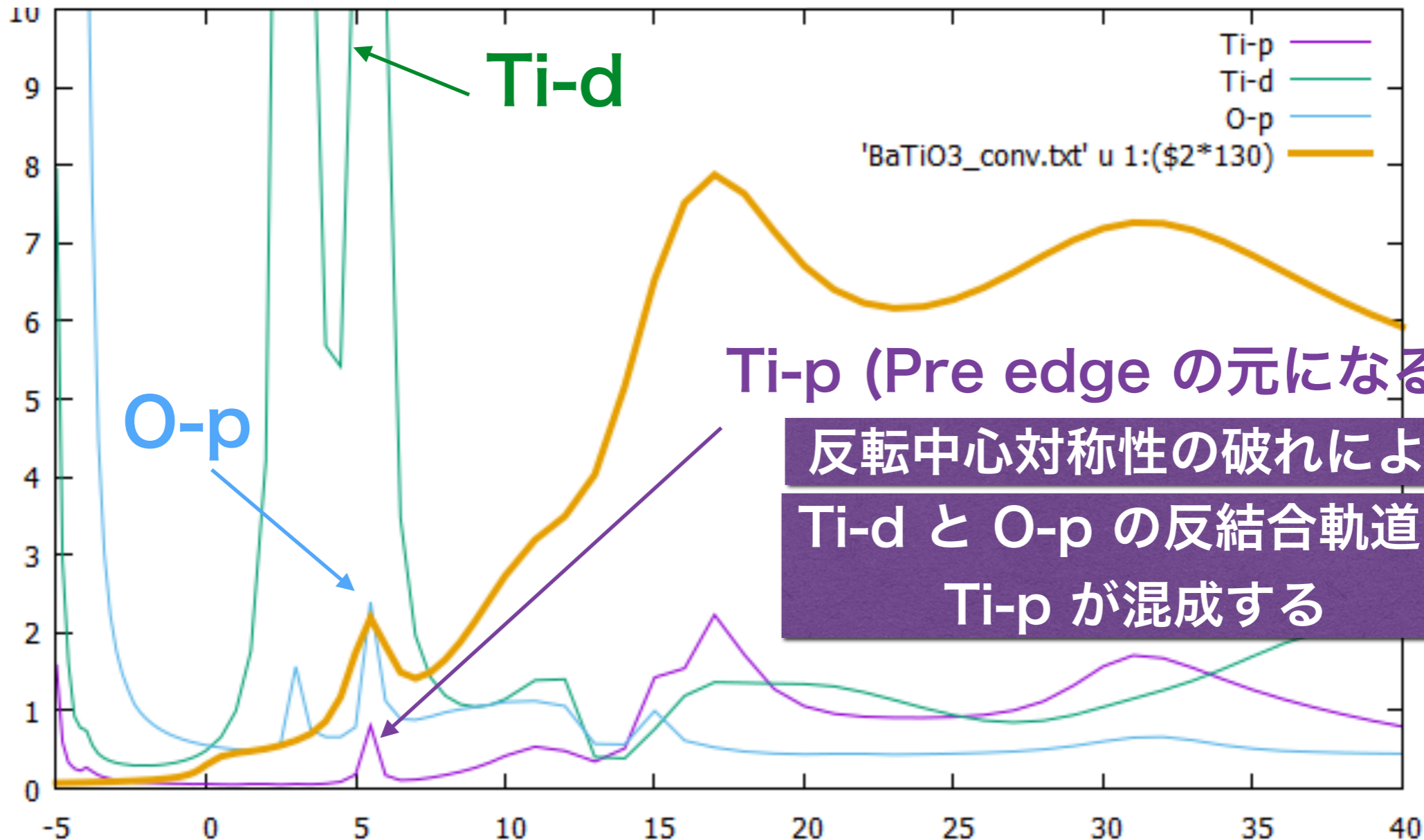
2) wgnuplot

```
3) plot [-5:45][:10] 'BaTiO3_sd0.txt' u 1:13 w l t 'Ti-p',  
    'BaTiO3_sd0.txt' u 1:25 w l t 'Ti-d',  
    'BaTiO3_sd3.txt' u 1:13 w l t 'O-p',  
    'BaTiO3_conv.txt' u 1:($2*130) w l lw 3 t '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

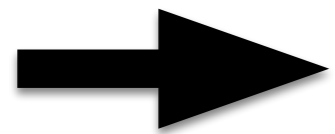


## 常誘電相(Pm3-m)

反転対称性がある場合

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

偶 偶 奇



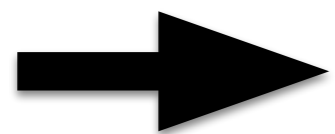
on-siteで Ti の p 軌道 と d 軌道は混成しない

## 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

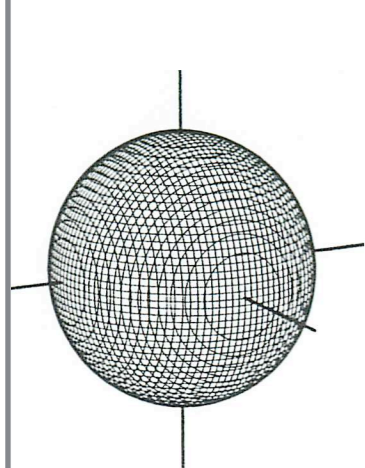


on-siteで Ti の p 軌道 と d 軌道は混成する

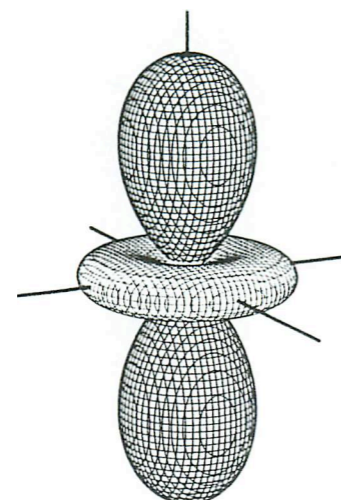
# 偶関数

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

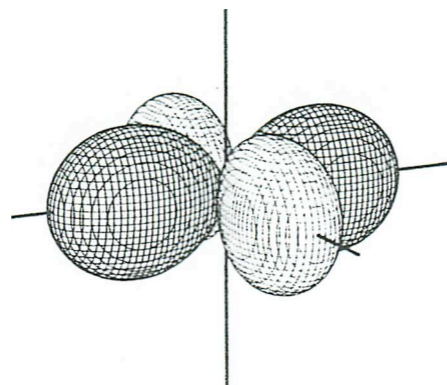
$$\int_{-a}^a f(x) \neq 0$$



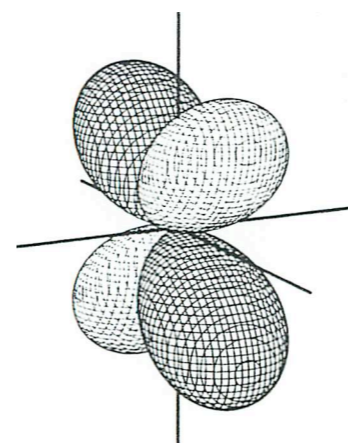
s



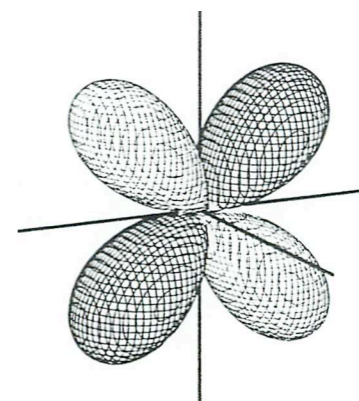
$d(3z^2-r^2)$



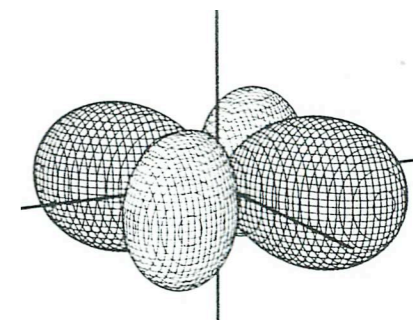
$d(x^2-y^2)$



$d(yz)$



$d(zx)$

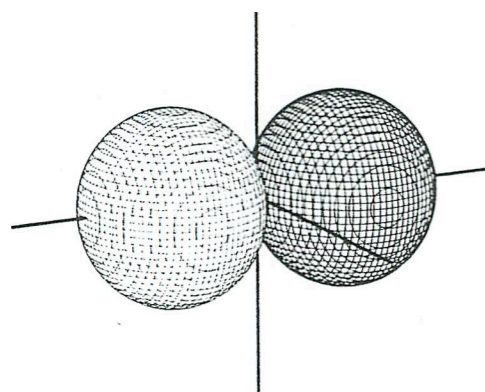


$d(xy)$

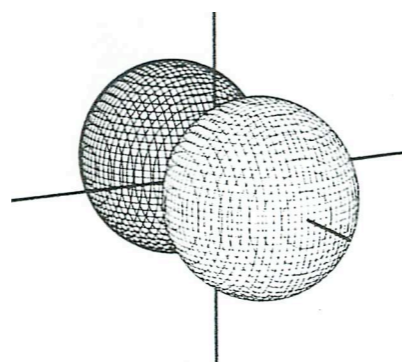
# 奇関数

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

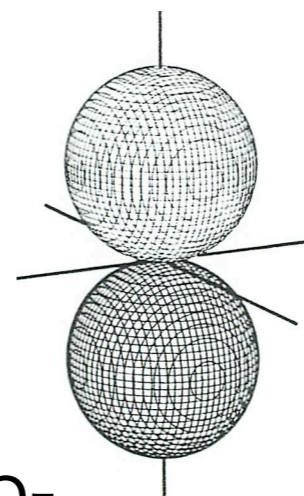
$$\int_{-a}^a f(x) = 0$$



$p_x$

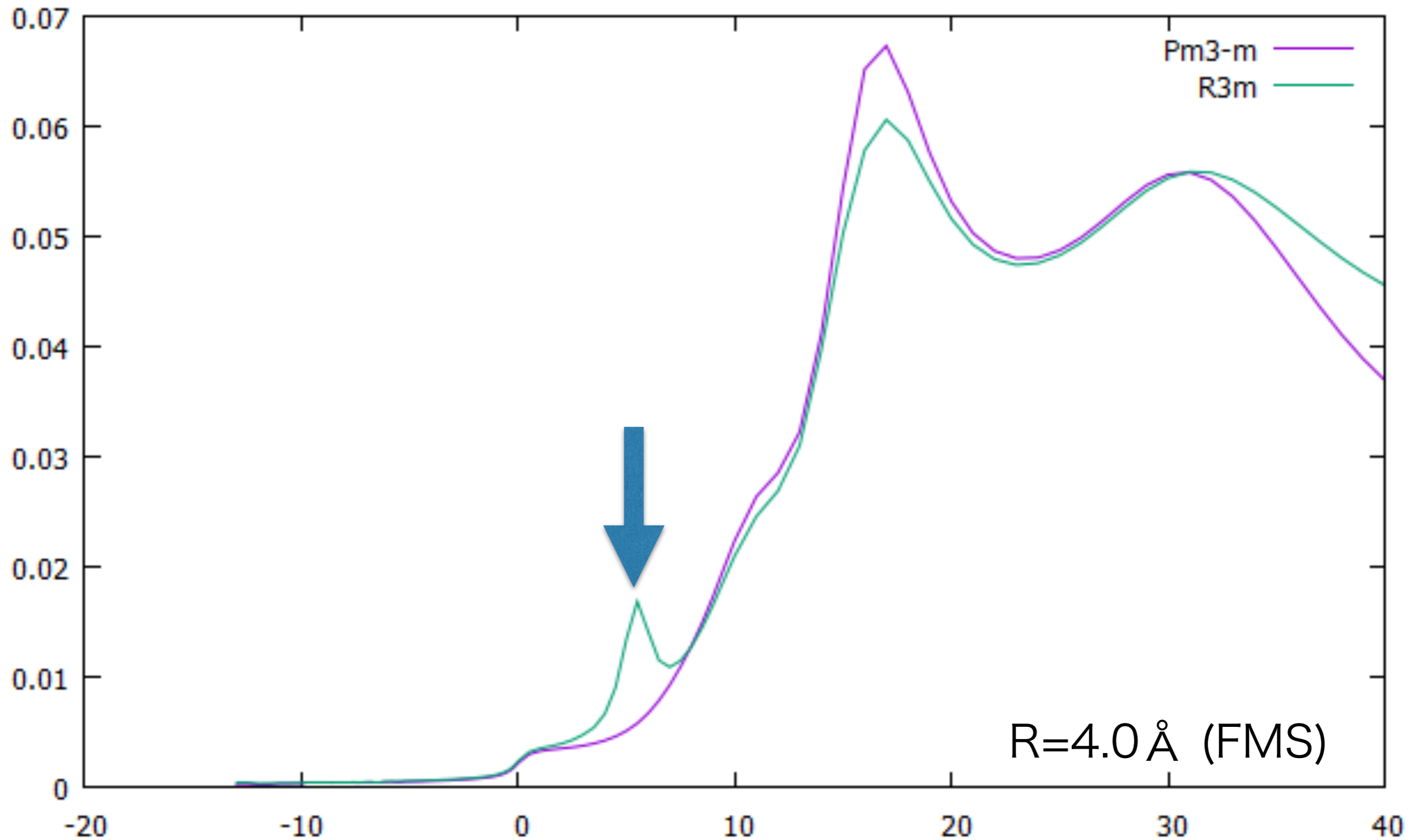


$p_y$



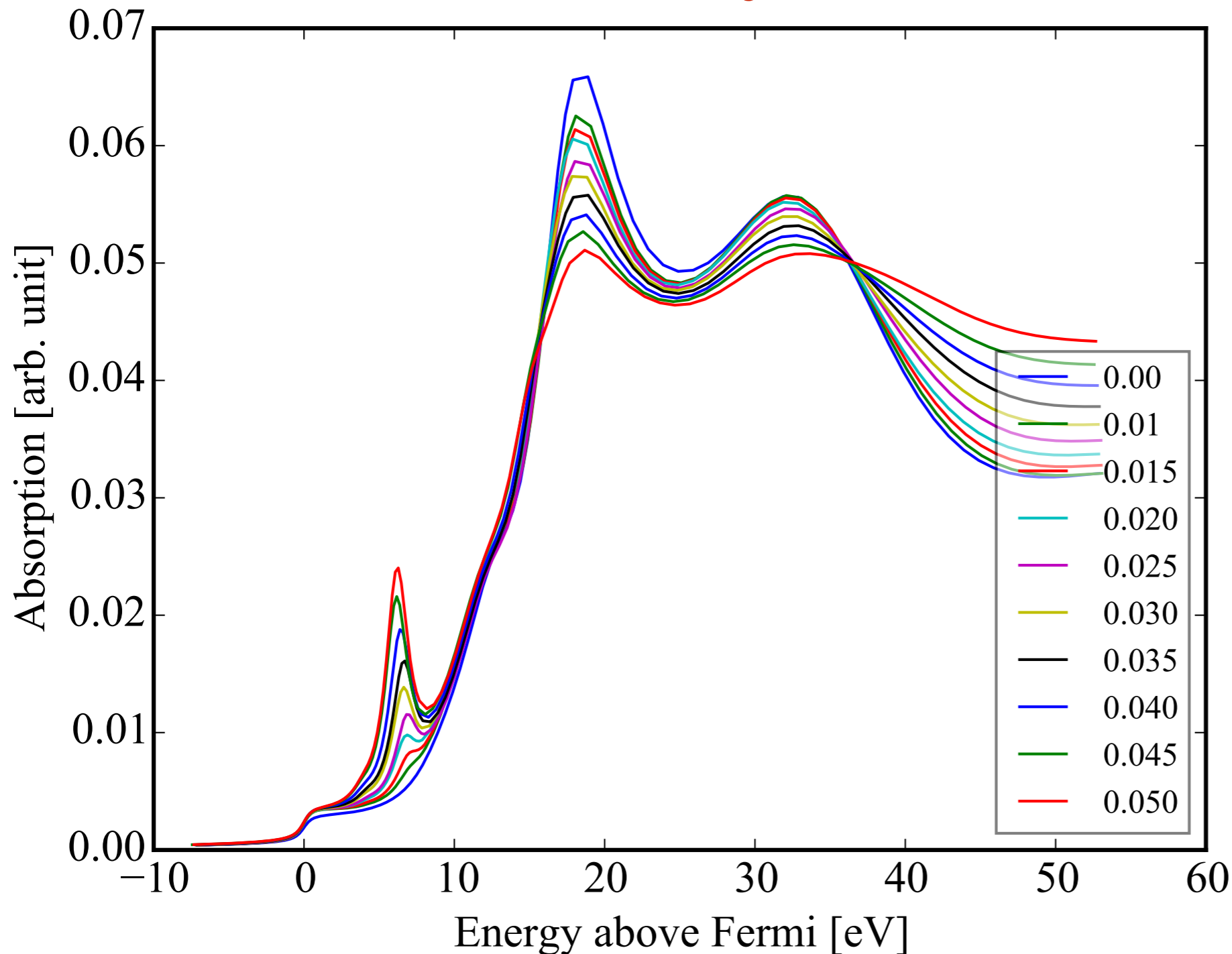
$p_z$

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



22	<b>0.5000</b>	<b>0.5000</b>	<b>0.5000</b>	! 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  $\Delta$  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

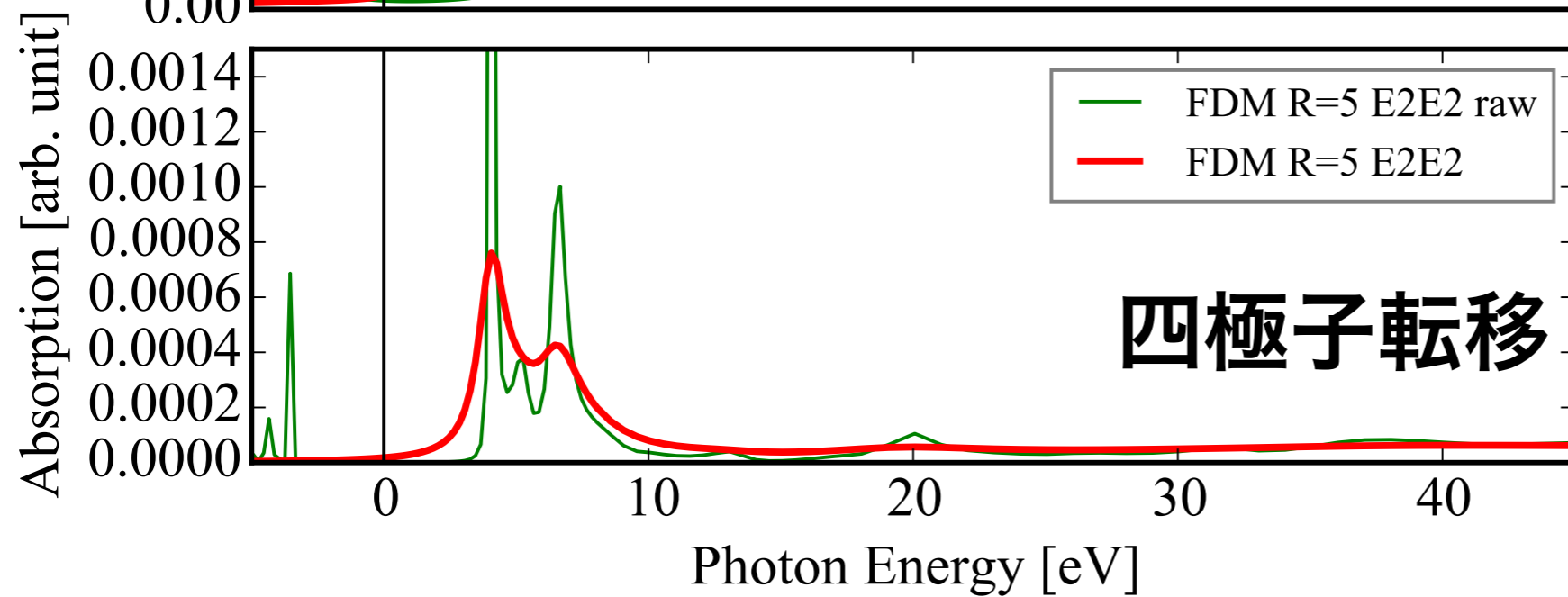
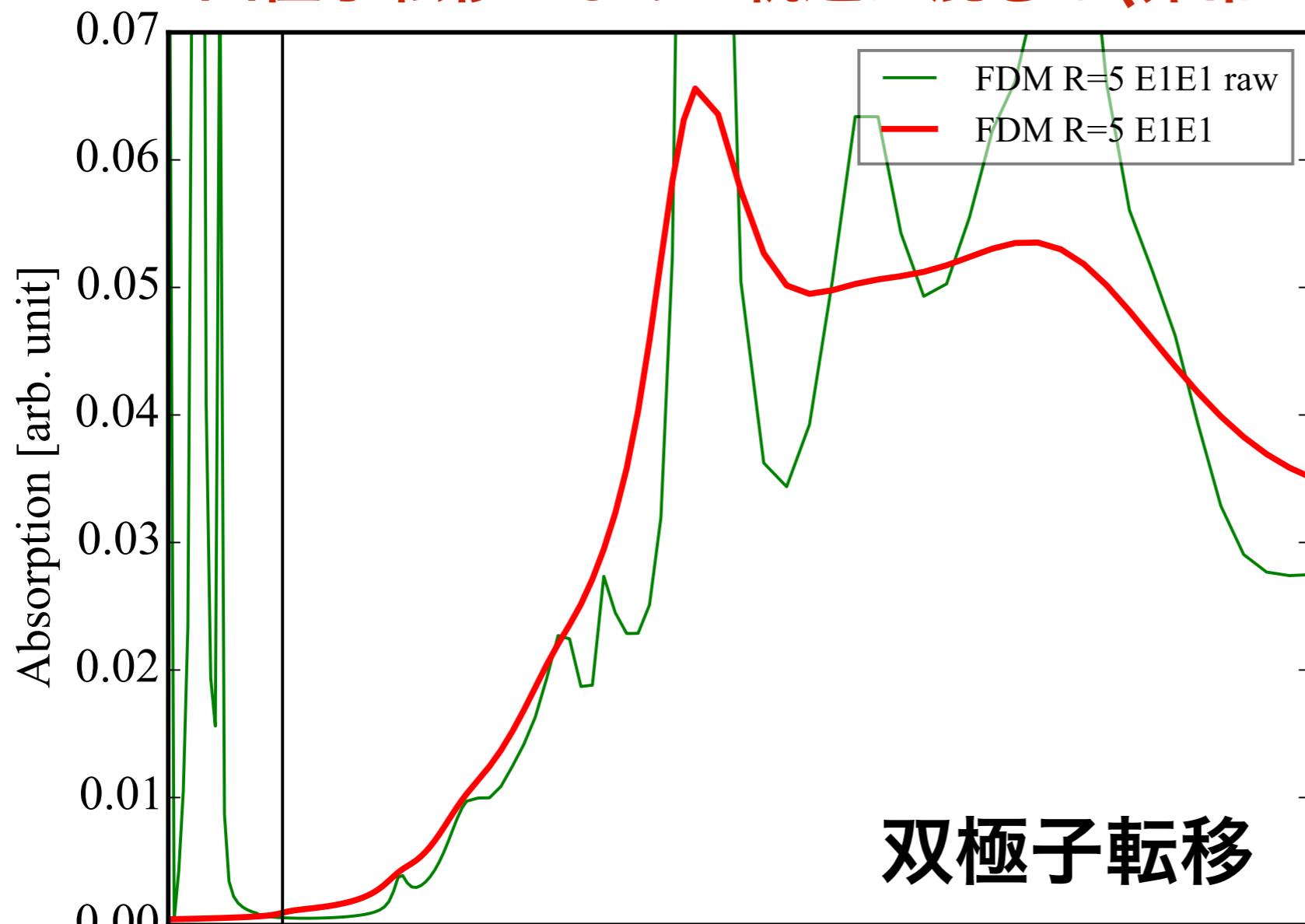
Crystal

	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		



# 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.

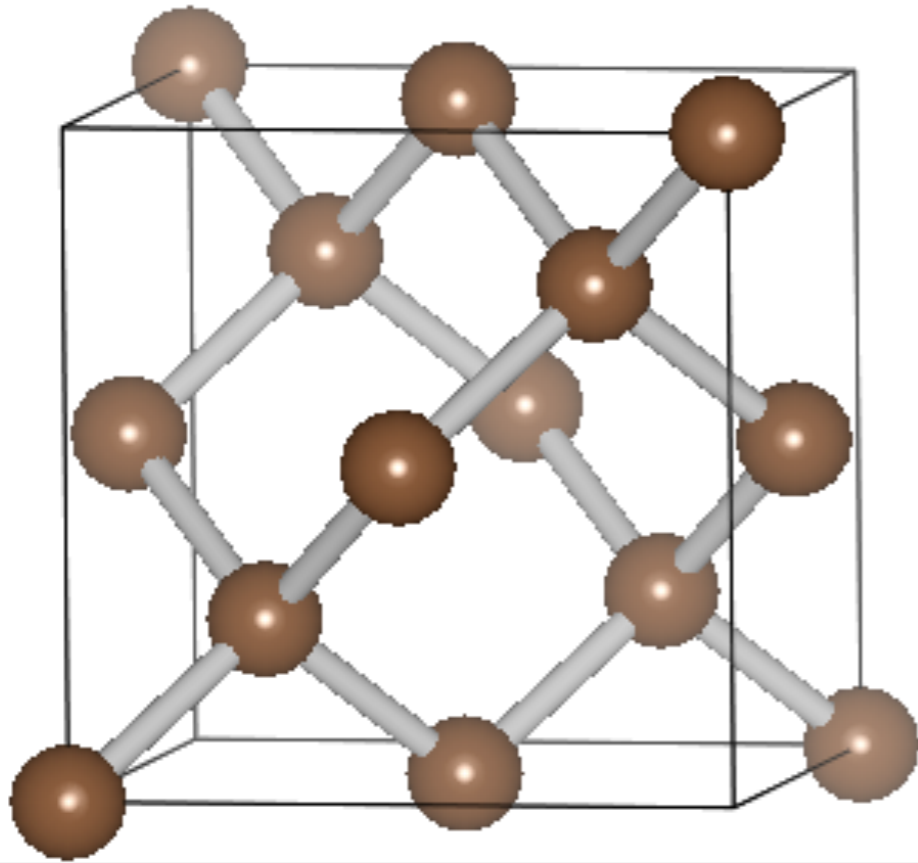
**Have a beautiful day !**

# Appendix

**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



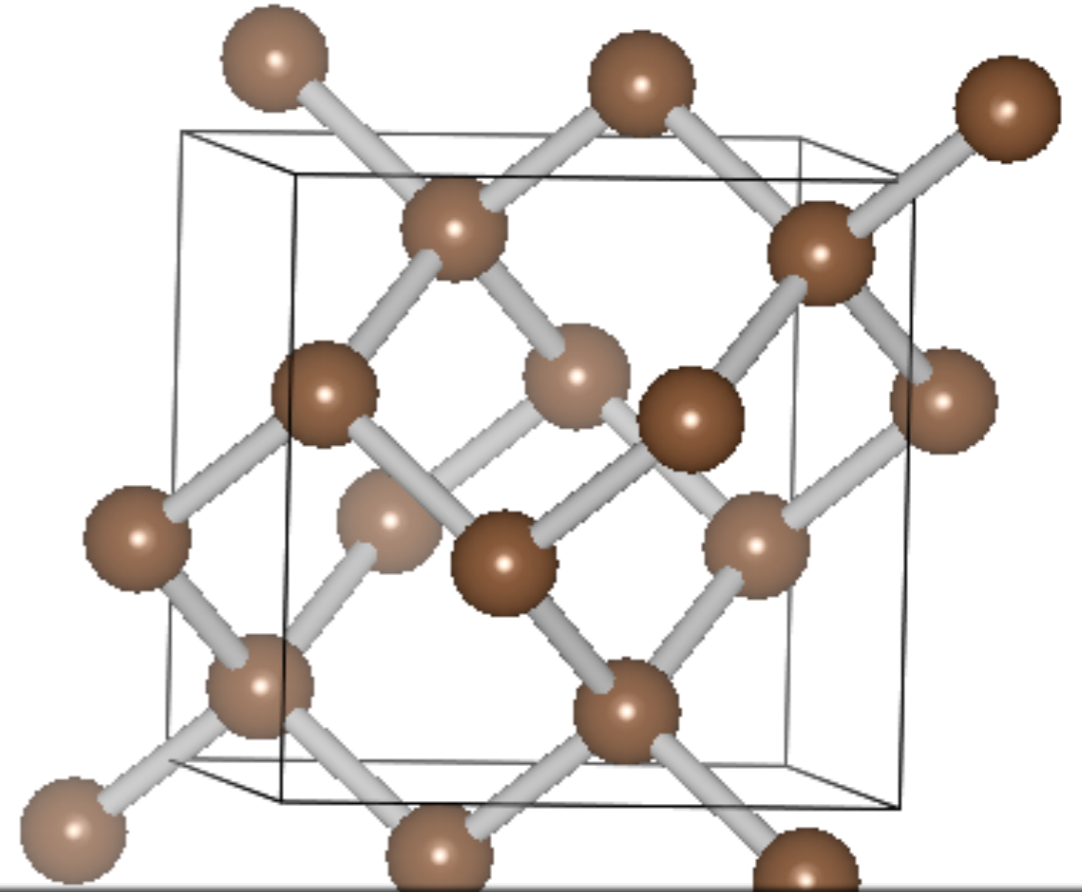
格子点を原子位置に一致

**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>

**Fd-3m:1**

F 4d 2 3 -1d

x,y,z

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

..

\*227:2

Oh<sup>7</sup>

**Fd-3m:2**

-F 4vw 2vw 3

x,y,z

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

..

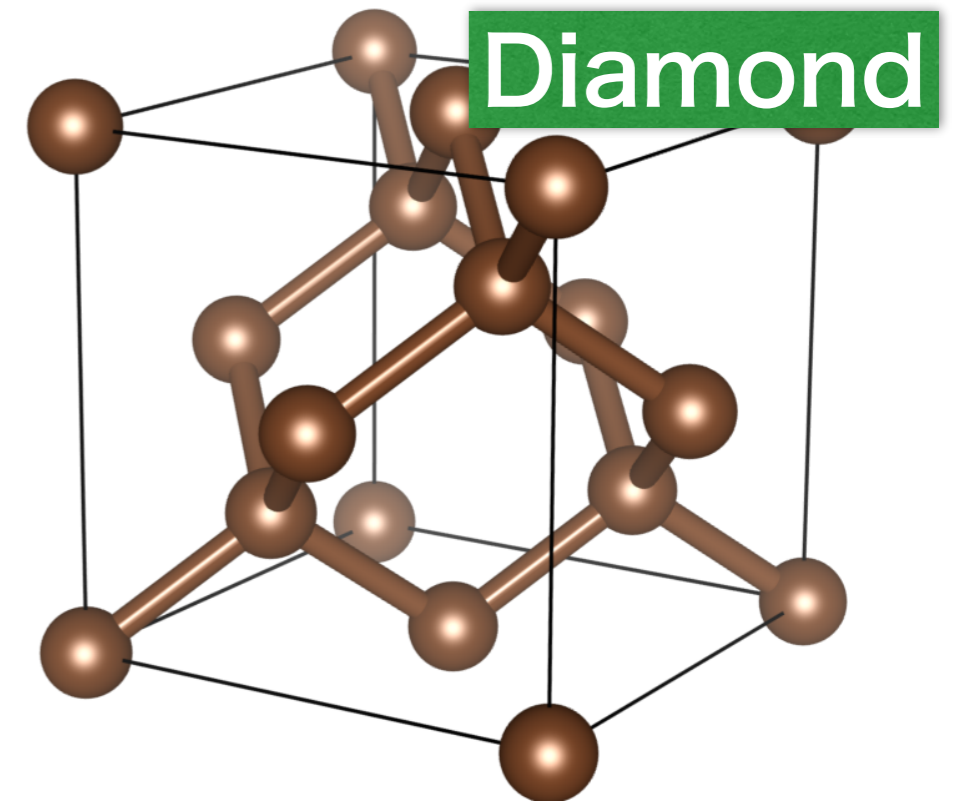
Spgroup

**Fd-3m:1**

チヨイス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



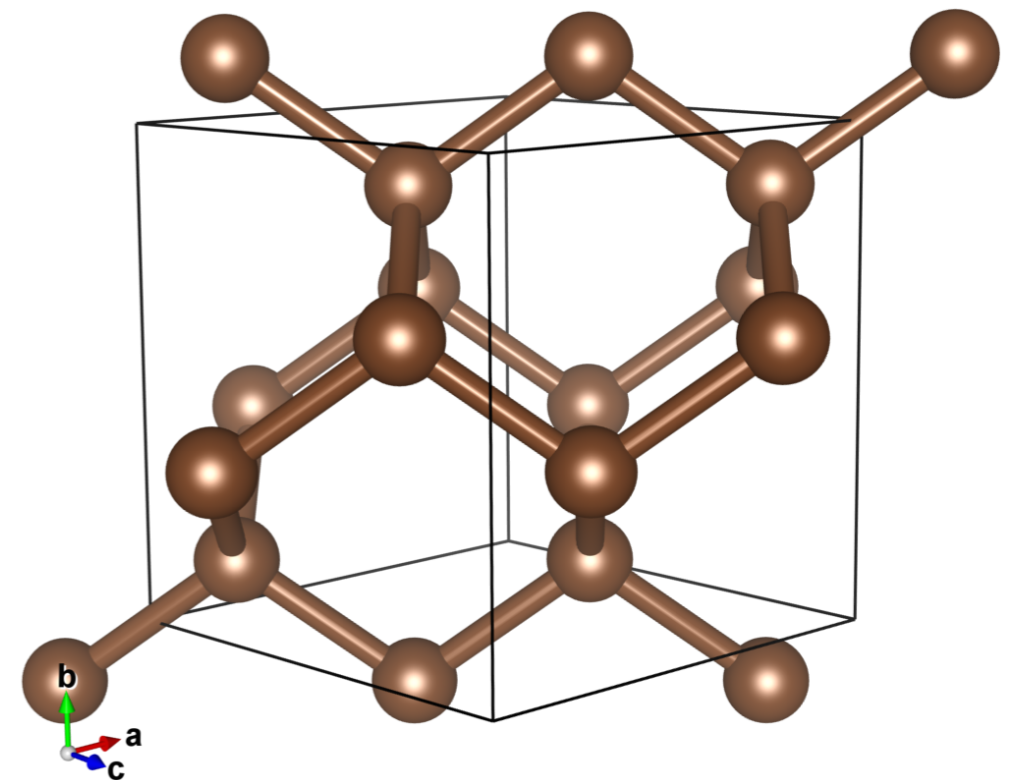
Spgroup

**Fd-3m:2**

チヨイス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



\*) チヨイスありの 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

TiO<sub>2</sub> 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 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？

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	
<b>_symmetry_space_group_name_H-M</b>		<b>'F d -3 m'</b>
_symmetry_Int_Tables_number	227	

実は 素のHermann-Mauguin記号なので**チョイスが判らん**

よく見ると

Diamond

対称操作が異なる

チョイス1

チョイス2

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

```
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 'Unit Cell...' is selected. The interface displays a 3D model of a diamond crystal structure. The 'Structural models' panel is visible, showing options for 'Show models' (checked), 'Show dot surface' (unchecked), and 'Style' (Ball-and-stick selected). The 'Volumetric data' panel is also visible, showing options for 'Show sections' (unchecked), 'Show isosurfaces' (unchecked), 'Surface coloring' (unchecked), and 'Style' (Smooth shading selected).



## Symmetry

 Magnetic structure

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

Transform...

Customize...

Update structure parameters to keep 3D geometry

## Lattice parameters

	a (Å)	b (Å)	c (Å)	$\alpha$ (°)	$\beta$ (°)	$\gamma$ (°)
	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

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

New

Delete

Clear

# 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

Diamond

Fd-3m:1

Phase | Unit cell | Structure

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

P1

もし 8aサイトの代表選手以外も記述してしまったら

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

Remove symmetry

後に

Diamond



cif ファイルにエクスポートする

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

'P 1'

loop\_  
\_symmetry\_equiv\_pos\_as\_xyz  
'x, y, z'

恒等操作のみ

省略

P1での内部座標をゲット！

\_atom\_site\_type\_symbol

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

元素記号

x,y,z



FDMNESを

P1の内部座標で記述

空間群にチヨイスを含んだ 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 cif には space group の情報が必要

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

`sim.P = Parameters()`

```
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)
```

`inp.txt` 作成までの例

```

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")

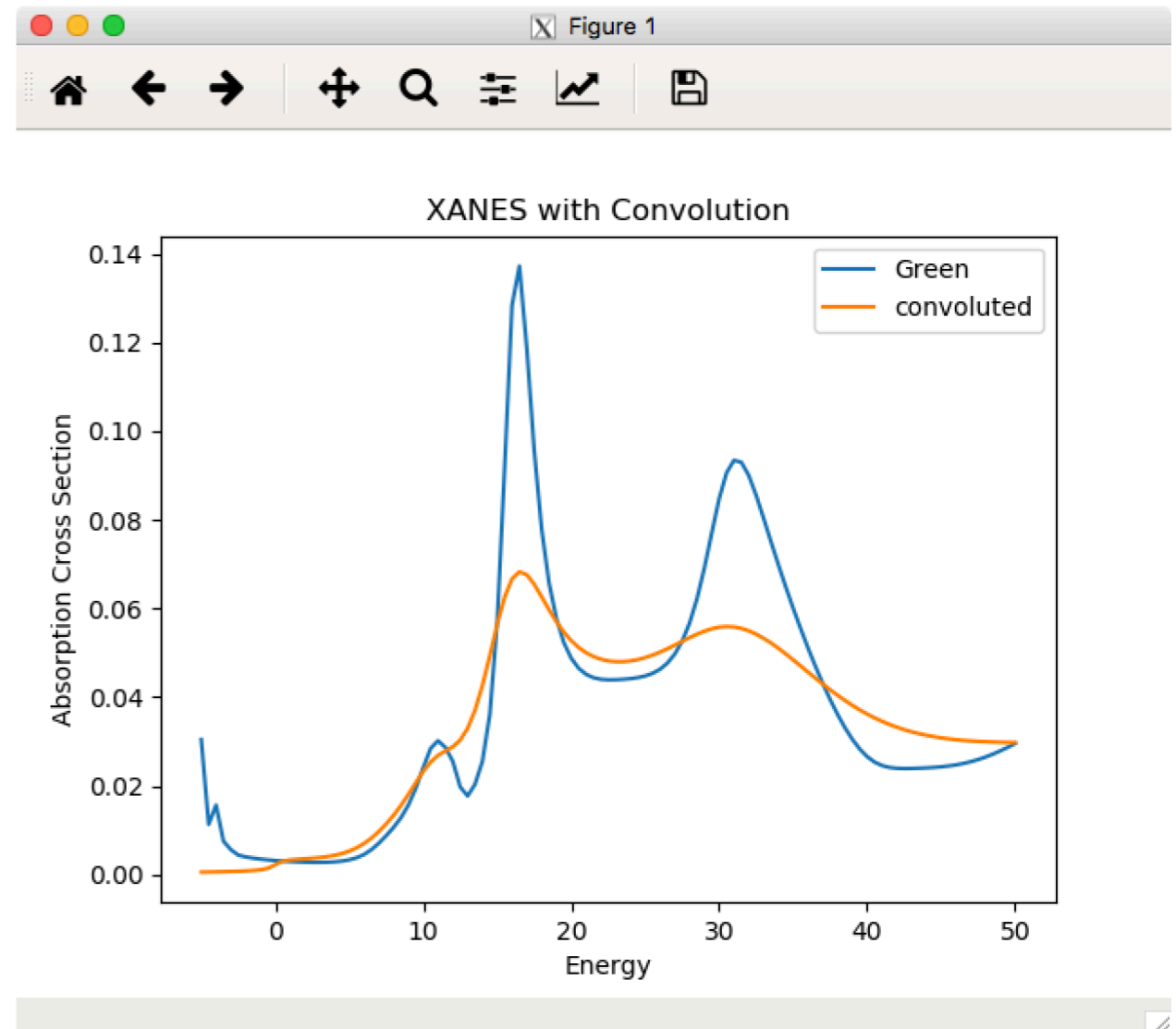
sim.DoConvolution(overwrite=True)
sim.Status()
data_conv = sim.get_XANES(conv=True)
plt.plot (data_conv[:,0], data_conv[:,1], label="convoluted")

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

```

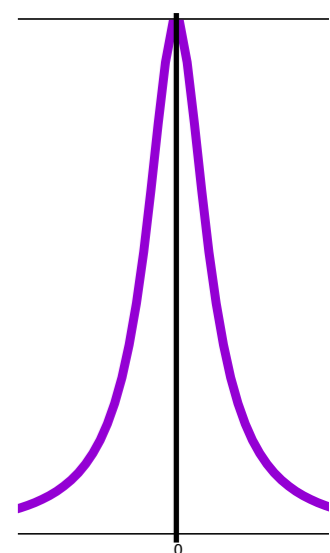
# pyFDMNES の使用例

## 計算してプロット



# 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

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

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

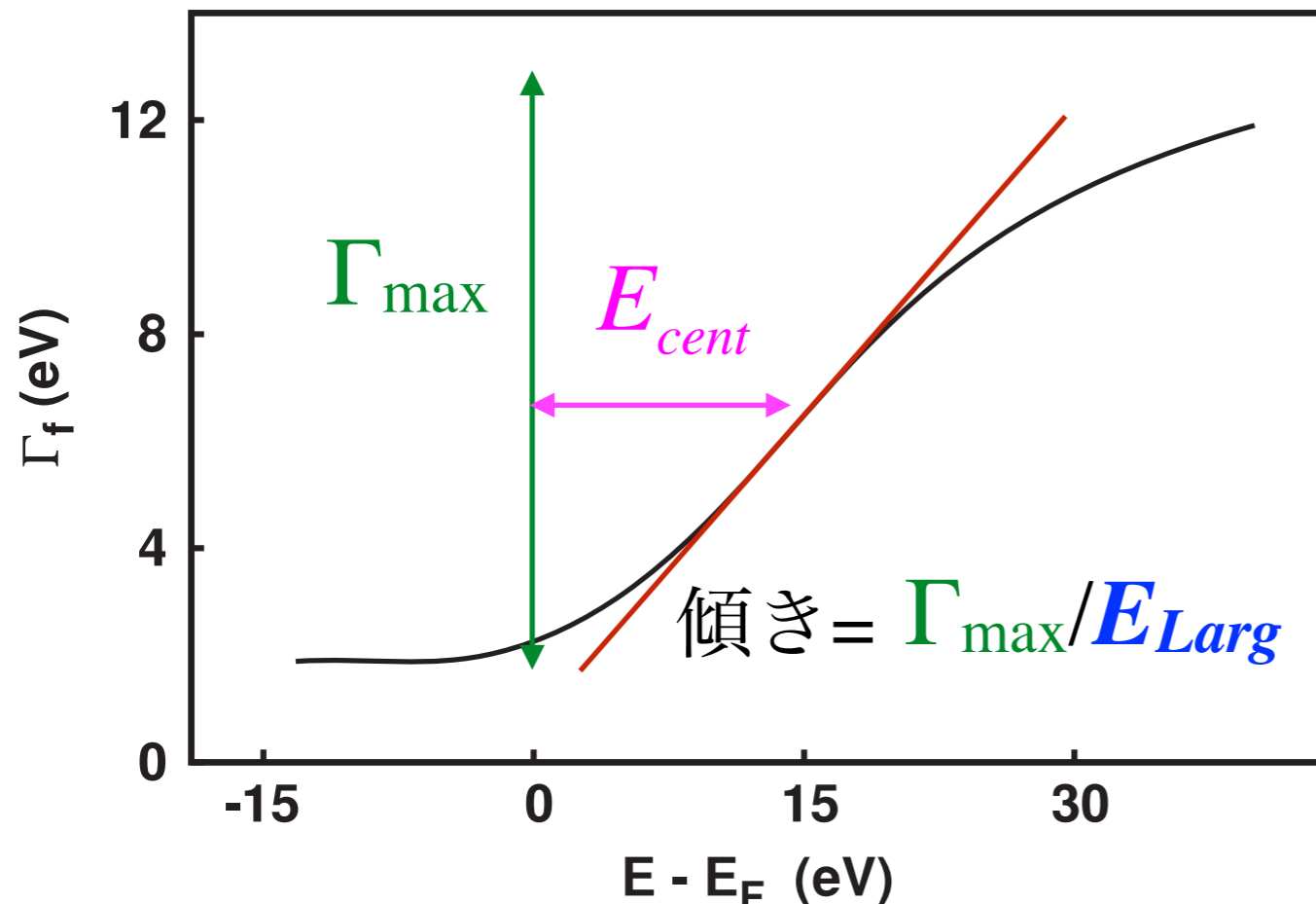
$$e = \frac{E - E_F}{E_{\text{cent}}} \quad \text{arctangent 型}$$



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

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

arctangent 型



$\Gamma_{max}$  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

# convolution (畳み込み)

Filout

Cu

Range

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

Radius

3.0

Crystal

3.61 3.61 3.61 90. 90. 90.

29 0.0 0.0 0.0

29 0.5 0.5 0.0

29 0.5 0.0 0.5

29 0.0 0.5 0.5

Convolution

convolution 畳み込みをする

End

Cu.txt

Cu\_bav.txt

Cu\_conv.txt

inp.txt

fdmfile.txt

spacegroup.txt

xsect.dat

出力

core-hole の life time などを考慮

アークタングェント型の 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:\¥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      スペース  
↓                    ↓  
**tree □ /F □ 指定ディレクトリ**

指定ディレクトリ以下をツリー表示 (/F を付けるとファイルも表示)

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

スペース

1) cd □ ¥cal¥Cu

2) mkdir □ ReConvolution

3) cd □ ReConvolution

4) cp □ ..¥Cu.txt □.

5) cp □ ..¥fdmfile.txt □.

6) cp □ ..¥spacegroup.txt □.

7) cp □ ..¥xsect.dat □.

8) cp □ ..¥inp.txt □.

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

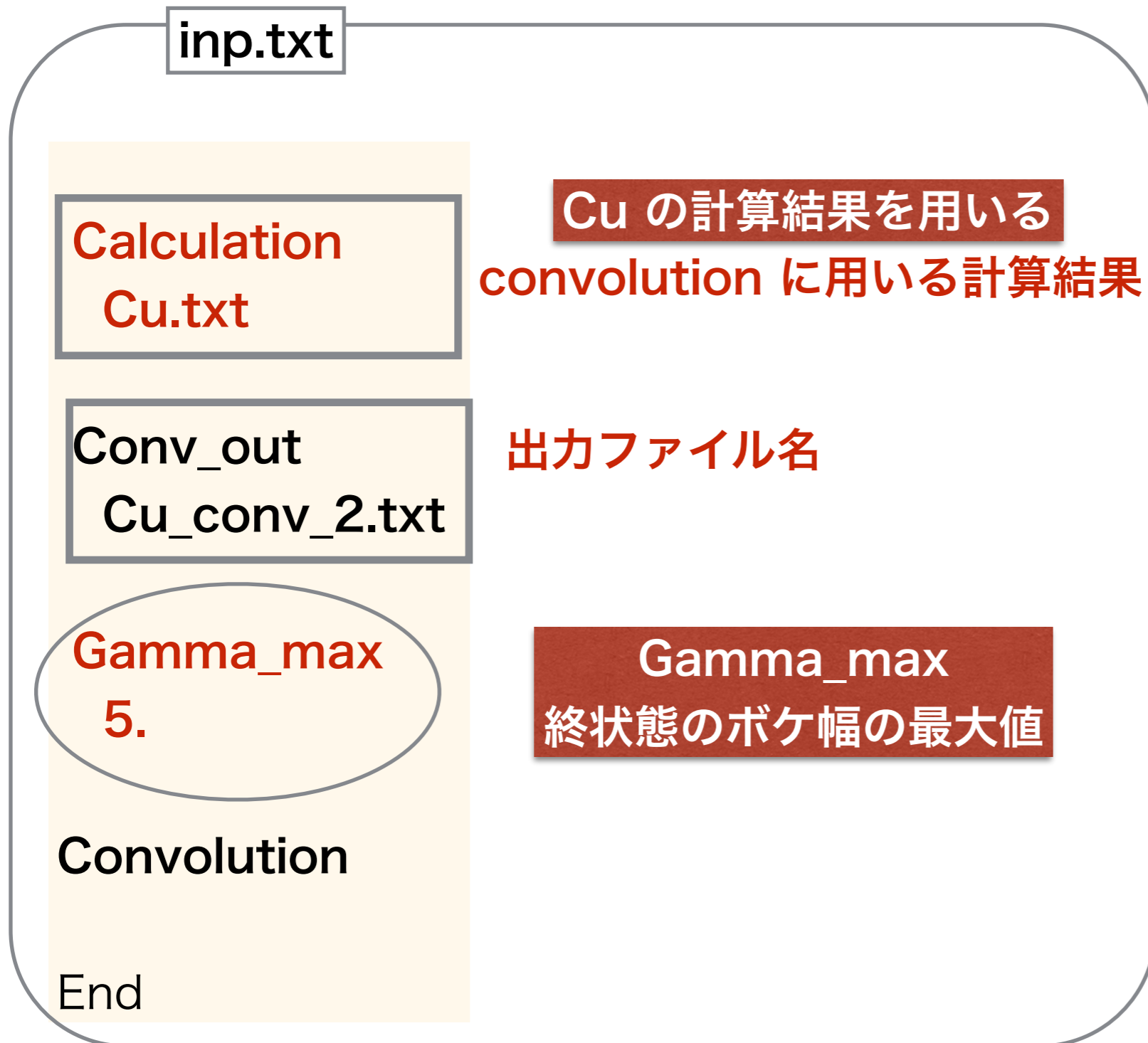
Cu の計算結果をコピーする

計算に必要な基本ファイルのコピー

入力ファイルのひな形をコピー

# Convolution 用の入力ファイルの編集と設定

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



入力に必要な値はこれだけです  
それ以外は消してください

# GNU PLOT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 2.00000084E-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 2.00000084E-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

再Convolution 結果

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---            2016/01/02  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>
```

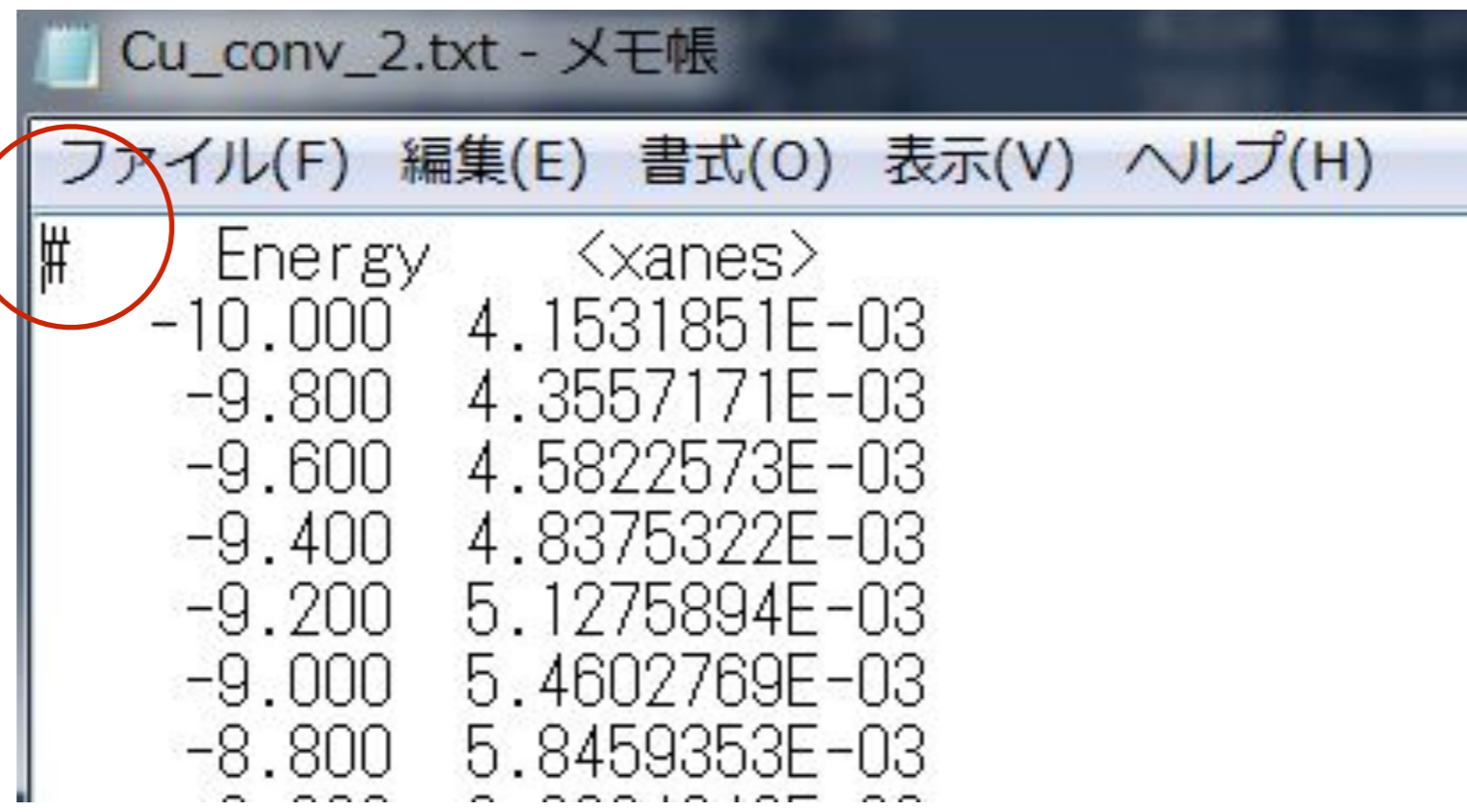
# 'Cu\_conv\_2.txt' コメントアウト忘れずに

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)



名前を付けて上書き保存



$\Gamma_{\max} = 1 \sim 9$  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

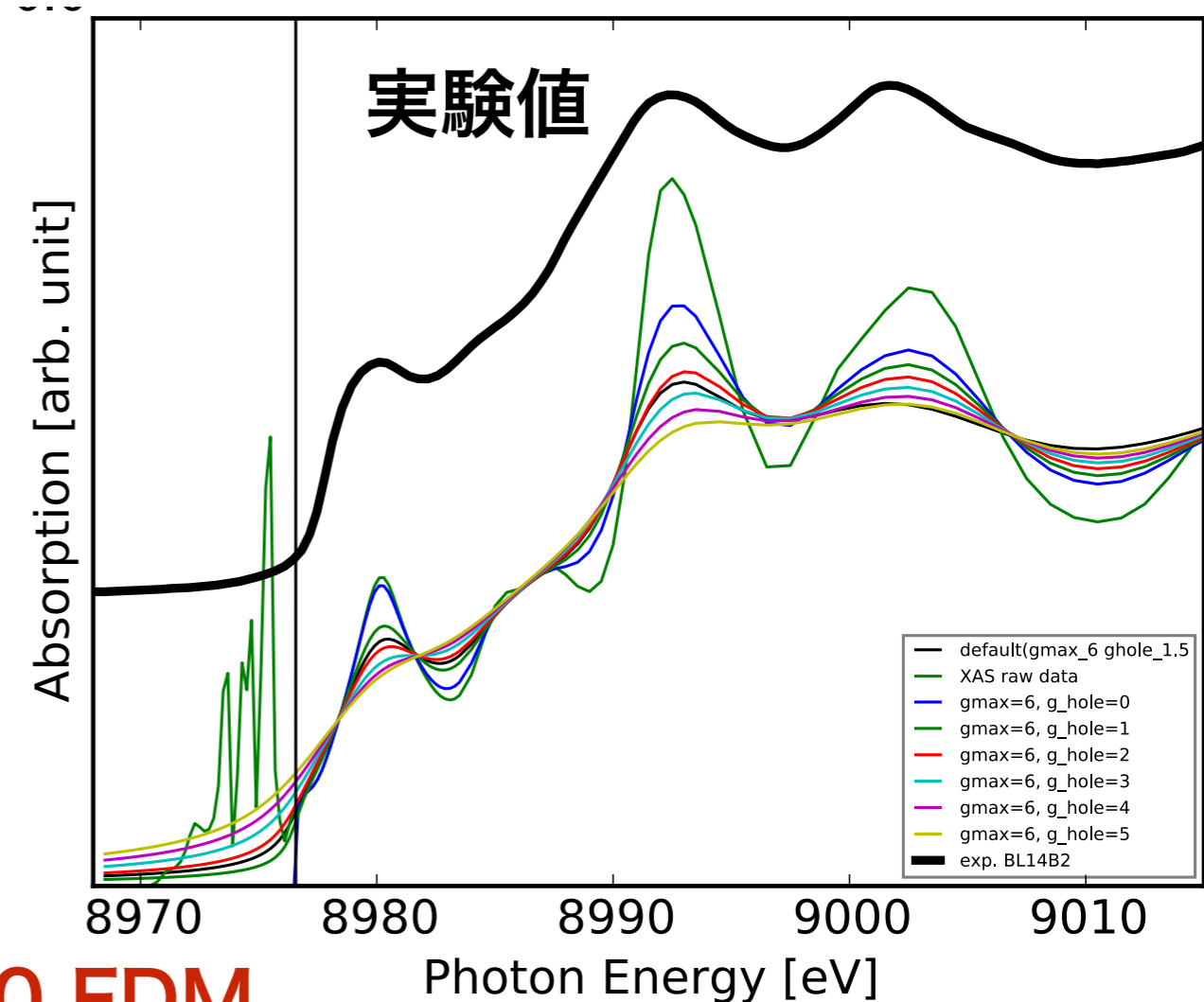
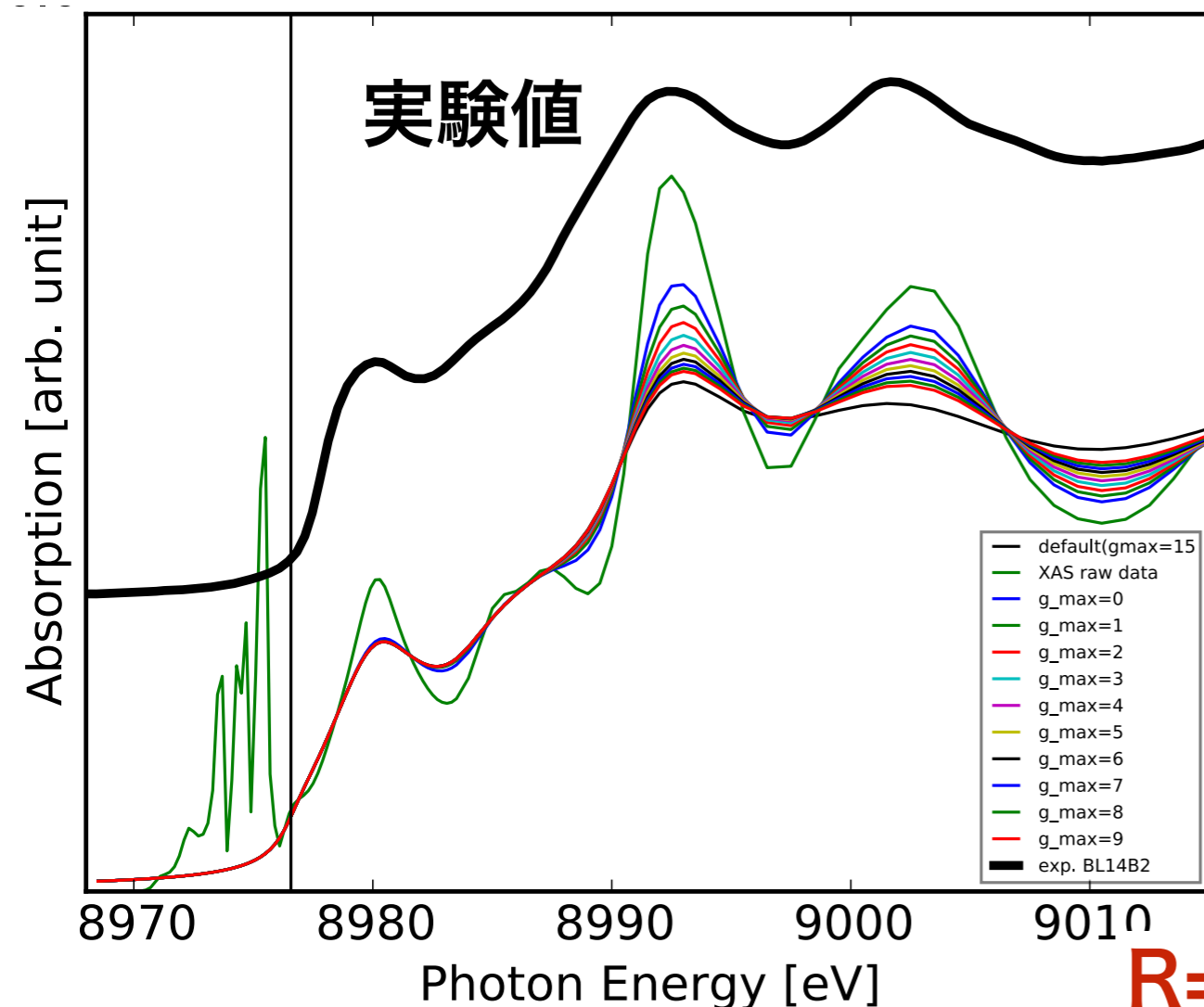
$\Gamma_{\max} = 15.0$  固定

$\Gamma_{\text{hole}} = 1 \sim 5$  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

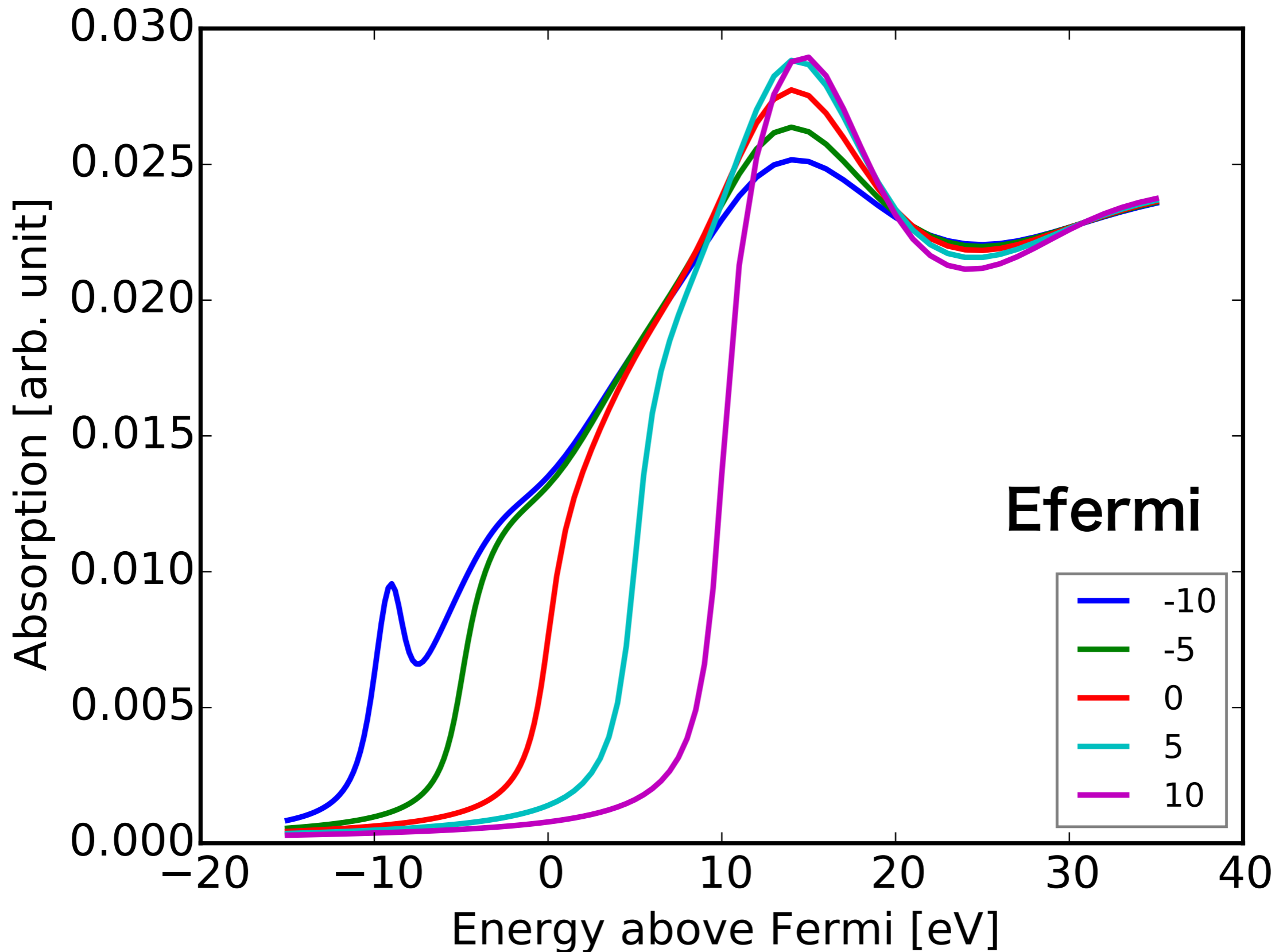


**Convolution パラメーターの実験値へのフィット**

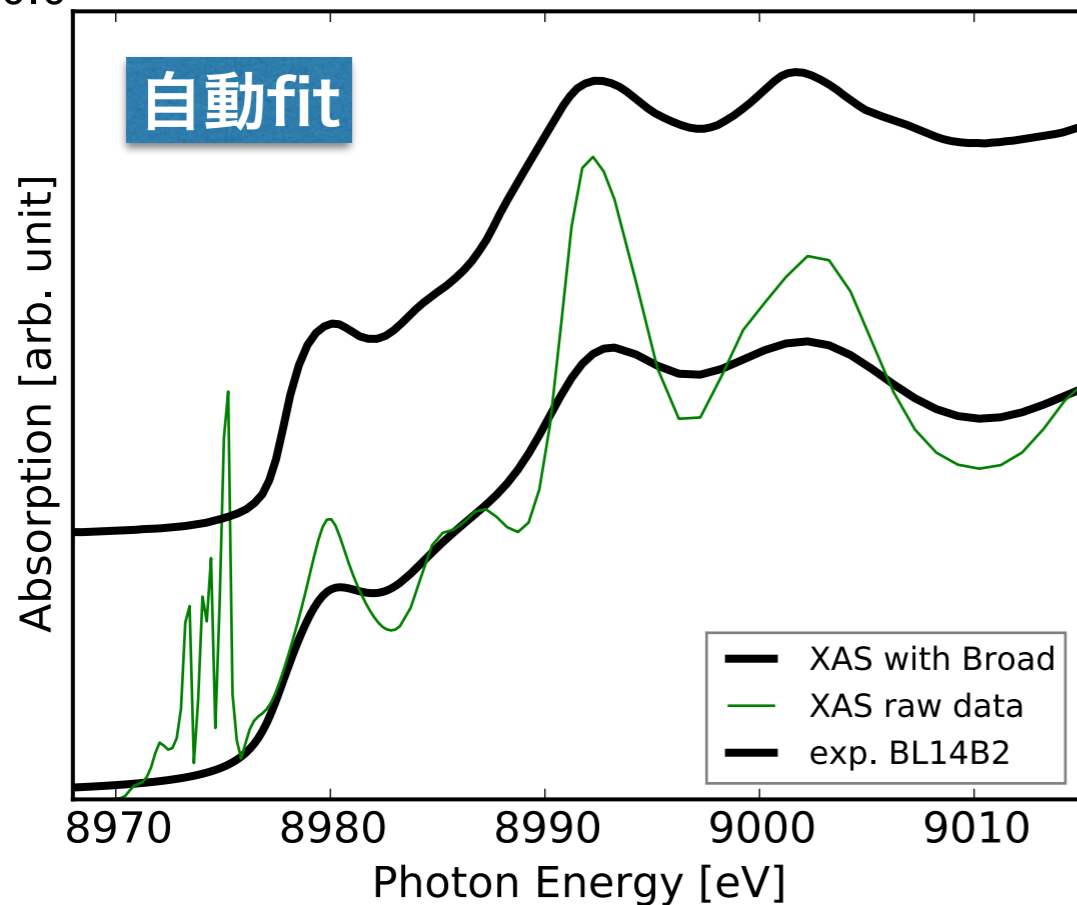
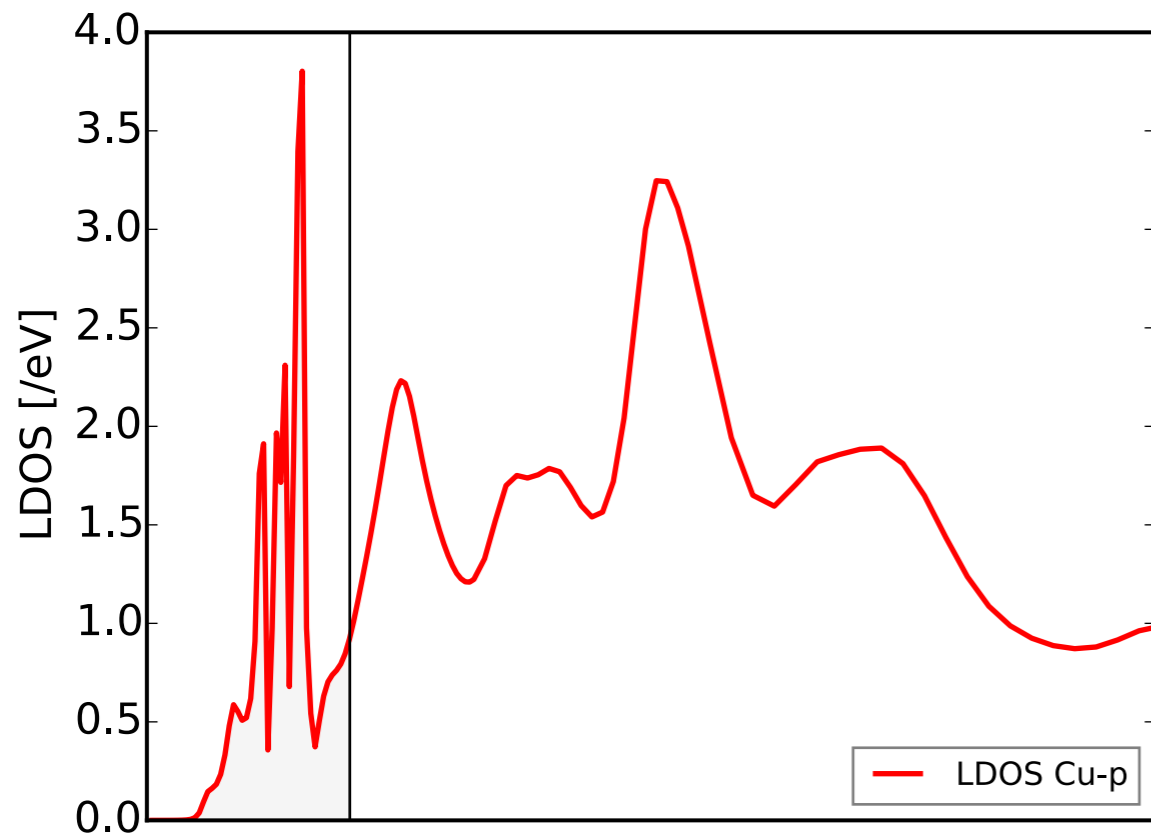


FCC Cu  
green R4

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

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

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

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

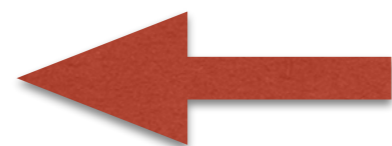
Par\_gamma\_max      **Maximum width for the final states**  
0. 20. 100.       **$\Gamma_{max}$**

**Cu2O の DOS(sd\*.txt) のナンバリングについて**

Cu20\_sd0.txt

Cu20\_sd1.txt

Cu20\_sd2.txt



どの原子のLDOSなのか？

計算ログ(Cu20\_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	0.000000000000	0.000000000000	0.000000000000
----	---	----------------	----------------	----------------

29	1	0.500000000000	0.500000000000	0.000000000000
----	---	----------------	----------------	----------------

29	1	0.500000000000	0.000000000000	0.500000000000
----	---	----------------	----------------	----------------

29	1	0.000000000000	0.500000000000	0.500000000000
----	---	----------------	----------------	----------------

8	2	0.250000000000	0.250000000000	0.250000000000
---	---	----------------	----------------	----------------

8	2	0.750000000000	0.750000000000	0.750000000000
---	---	----------------	----------------	----------------

2種類

6原子

# FDMES は入力結晶/分子構造からクラスターを自動作成

入力構造

入力構造



入力構造での対称性のファインダー



吸収原子を中心とした半径Rのクラスターの作成



クラスター内での対称性のファインダー

クラスター  
構造

# 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**

<b>igr</b>	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**

<b>igr</b>	posx	posy	posz	sym	code
5	0.25000	0.25000	0.25000	E	1
6	0.75000	0.75000	0.75000	C2_110	10

**ipr=2**

(等価な原子が2つ)

系の対称性から二種類のサイトが見つかる

# 作成したクラスター構造の確認

元になった結晶で対称性での分類番号 (ipr)

元になった結晶の通し番号 (igr)

クラスターの通し番号 (ia)

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

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

# OLD Version

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



# 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

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

ia0 は Absorber なので sd0

sd2~sd7

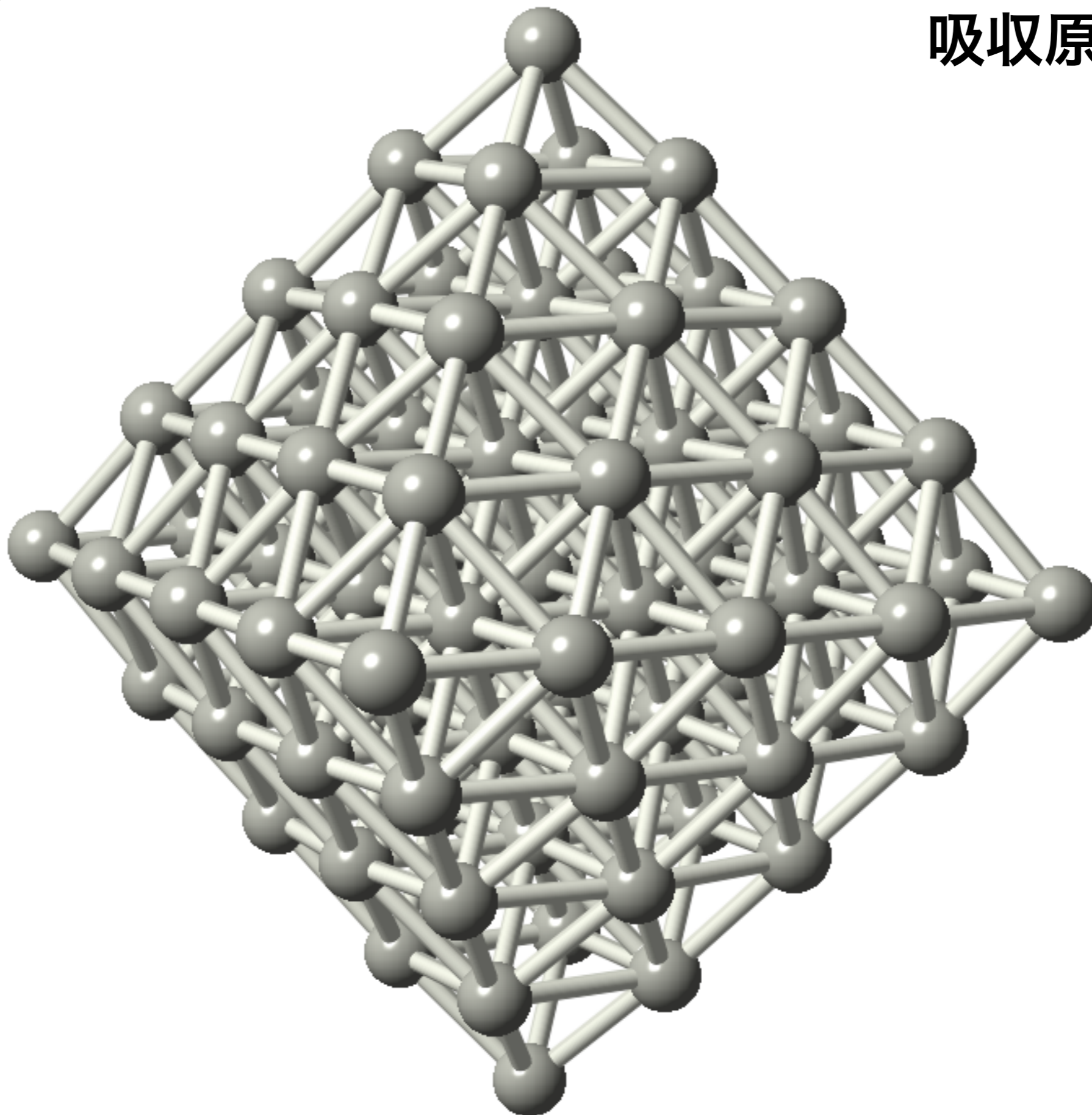
(\*) 情報はどこにも公開されていないので確定情報ではない

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

\*) メモリは今回の実習では1Gも使いません

参考) 産業利用に役立つ第一原理計算コードの選び方

[http://www.spring8.or.jp/ext/ja/iuss/html/text/15file/computational\\_science/1st/5.nakada.pdf](http://www.spring8.or.jp/ext/ja/iuss/html/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 <sub>3</sub> (k:444)	867.01	170.646		311.524		<b>58.881</b>	642.071	
Brookite (k:997)		478.646		1096.748	201.735	434.355		
C60 (k:111)	42590.01	74.388		19.267	<b>18.64</b>		20.367	
Graphene 1x1x1 (k:24241)	155.584	<b>6.148</b>		11.635	10.276	327.155	<b>8.319</b>	
H <sub>2</sub> O mol	64223.02	8.581		6.086				
Methane		5.651		5.295	<b>4.896</b>	56.252 (1core)		
Nitro Benzene		59.518		14.911	<b>7.585</b>			

**BaTiO<sub>3</sub> 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

元になった結晶の通し番号(igr)

Rsort = 3.467 A

nx = 19

natome = 5, igrpt = 8, Cluster\_comp = F, Cluster\_mag = F

No 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	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**



# 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)				

-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

-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

3行目

## (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

\*) 球面調和関数のRealPart の意味ではなく線形結合を定義し直しているYLM、以下の形になる

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

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



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

$p_y$

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

$p_z$

$Y_{10}$

$p_x$

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

$d_{xy}$

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

$d_{yz}$

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

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

$Y_{20}$

$d_{xz}$

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

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

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

局所状態密度

局所積分状態密度

s軌道

$n_l(0)$

$intn_l(0)$

p軌道

$n_l(1)$

$intn_l(1)$

d軌道

$n_l(2)$

$intn_l(2)$

## Cu20\_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)	<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)		

1行5列: n\_l(0) → s軌道

1行13列: n\_l(1) → p軌道

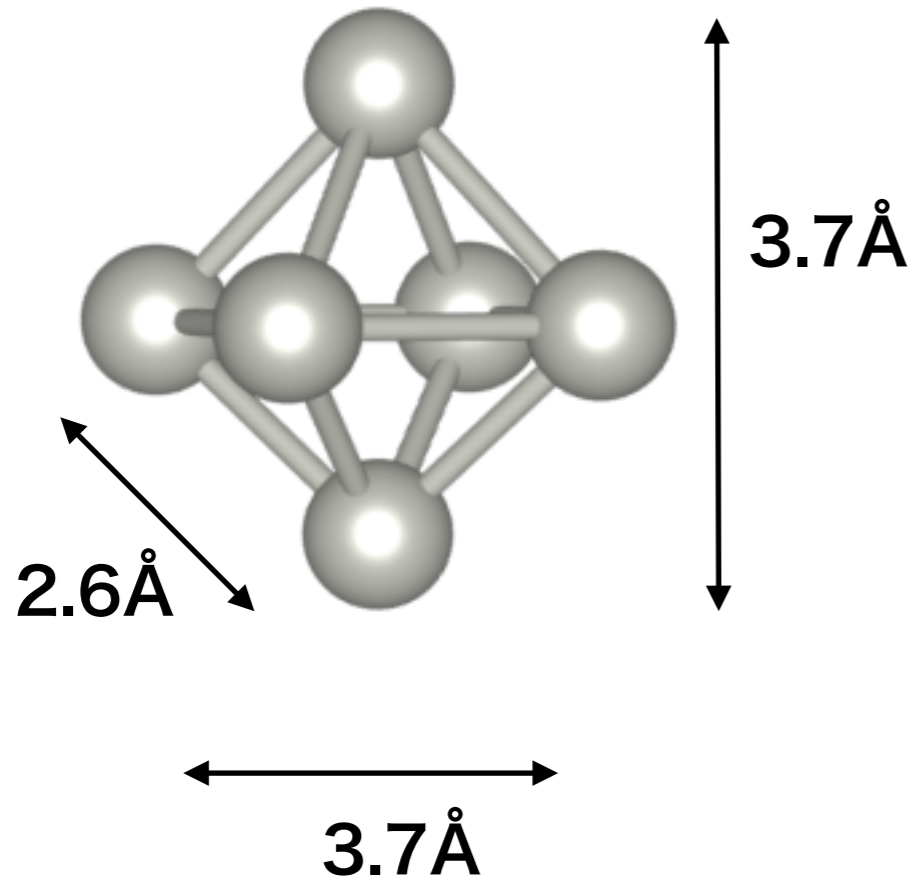
wgnuplot を開く

```
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
```

# 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 site 1 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

..

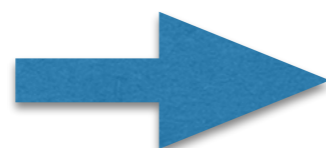
..

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

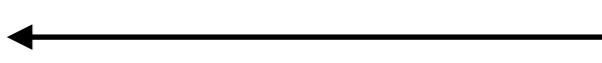
Pd6\_conv.txt



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

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

INP name = read\_pdb.inp  
TEXT name = Pd6\_1

**FDplot\_XAS.py -t Pd6\_2 -a 1 2 3 4 5**

```
--- 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
<b>Pd6_1.txt</b>	Pd6_3_sd0.txt	Pd6_5_sd4.txt	SAE_my	spacegroup.txt
<b>Pd6_1_conv.txt</b>	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**

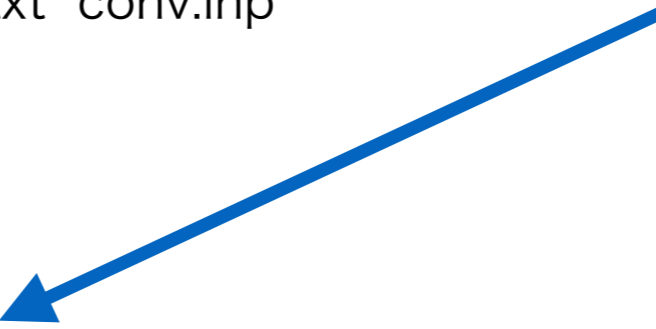


# allsite 時に \*.inp (fileout)にしたがってサイトごとプロット

```
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 fdLDC.inp
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.inp
POSCAR.fdmnes Pd6_3.txt Pd6_5_sd2.txt ReadFdmSd.py job_n.inp
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.inp
Pd6_1_conv.txt Pd6_3_sd2.txt Pd6_atom1_1.txt XAS.eps xsect.inp
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
```

**Pd6\_1.txt**  
**Pd6\_1\_conv.txt**

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

---- Symsite

---

```
igr = 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**

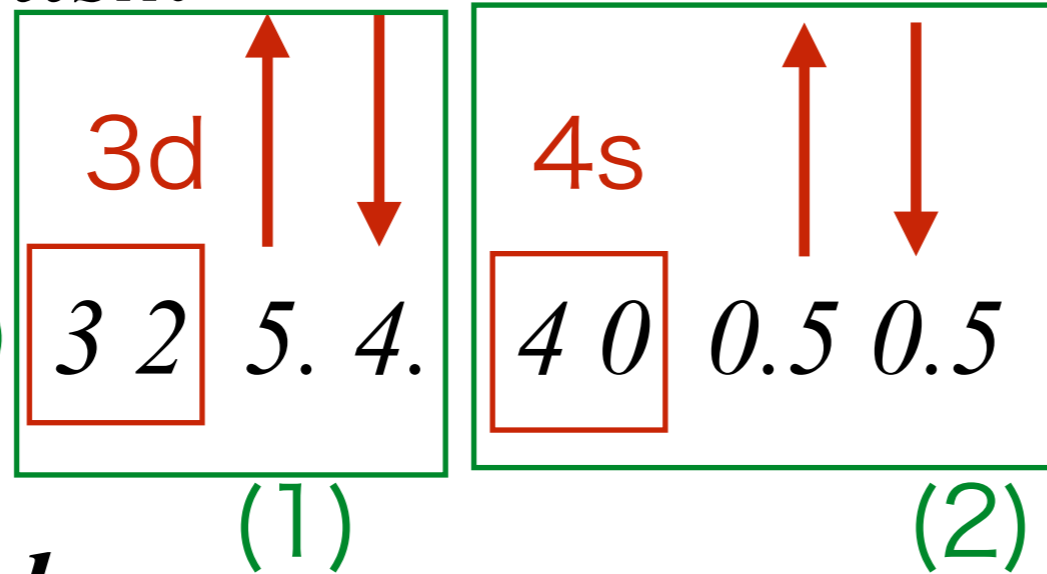
**スピン分極計算**  
**2015版ノート**

# 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

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

↑  
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 7<sup>th</sup> 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	<b>5.751</b>	0.029	0.224

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

Integrated Mulliken

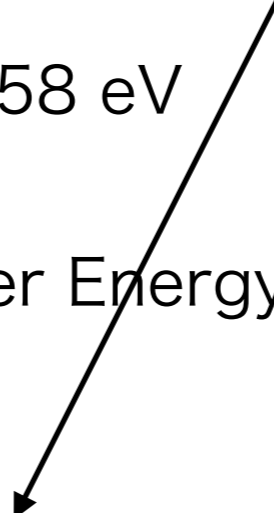
non excited atom = 5.751    6.000  
excited atom       = 6.784    7.000

---- Potcomp

VmoyF = -19.370 eV,    Vmoyc = -8.958 eV

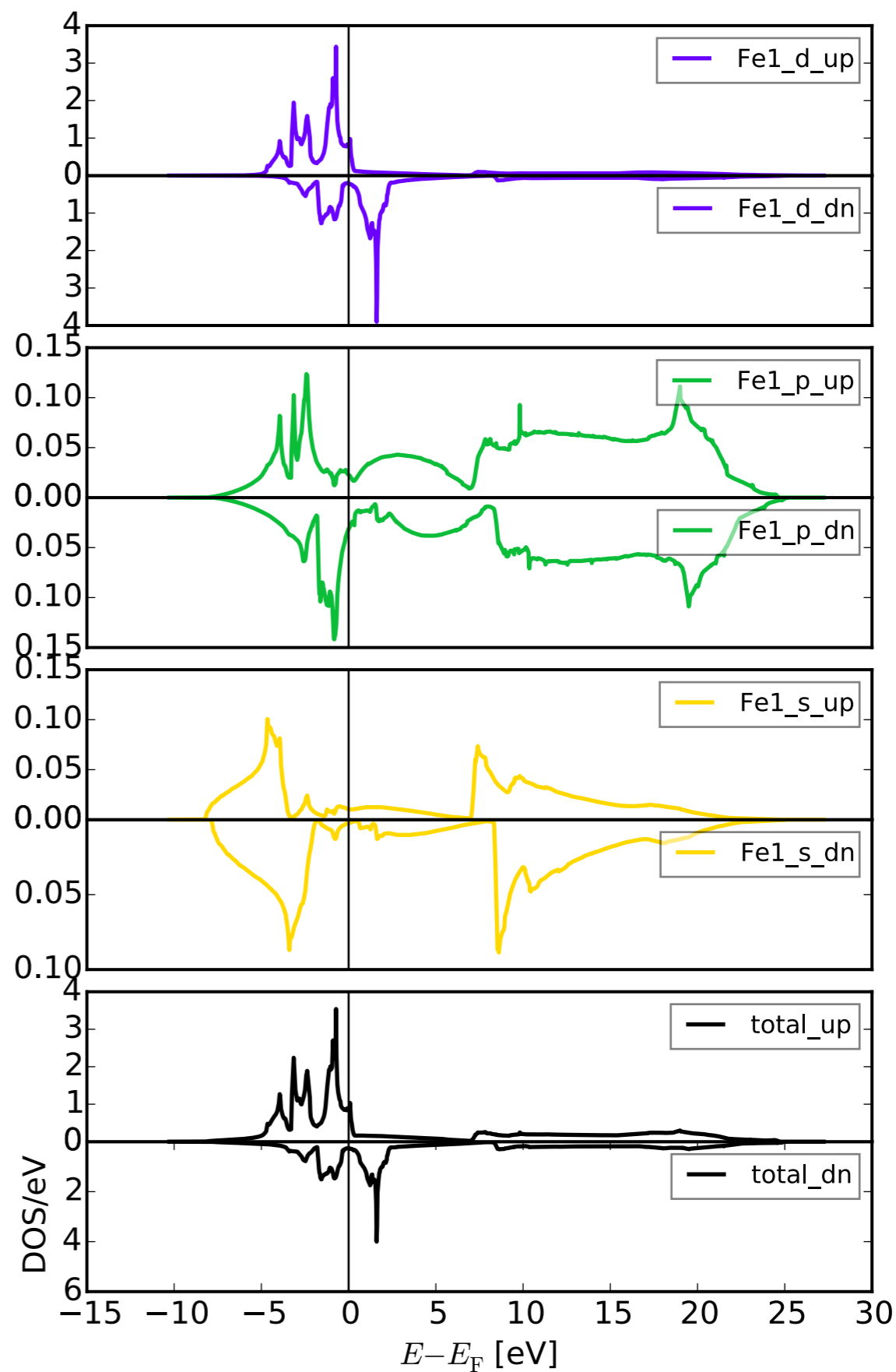
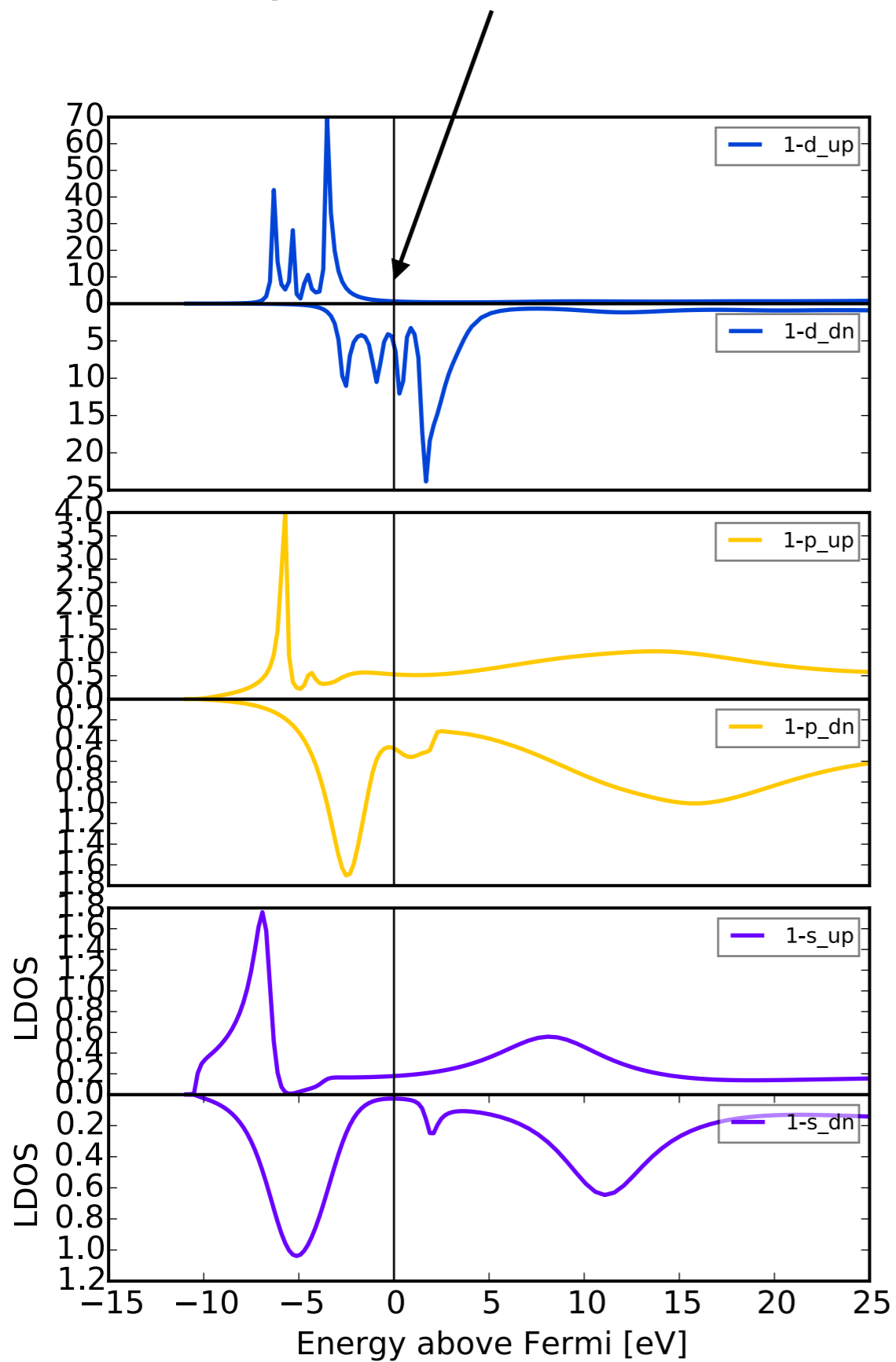
Cycle 1, Fermi Energy = -4.083 eV, Cluster Energy\_KS = -61.808 eV  
Level val absorb = -5.133 eV

妙に大きいスピンモーメントが出てくる



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

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

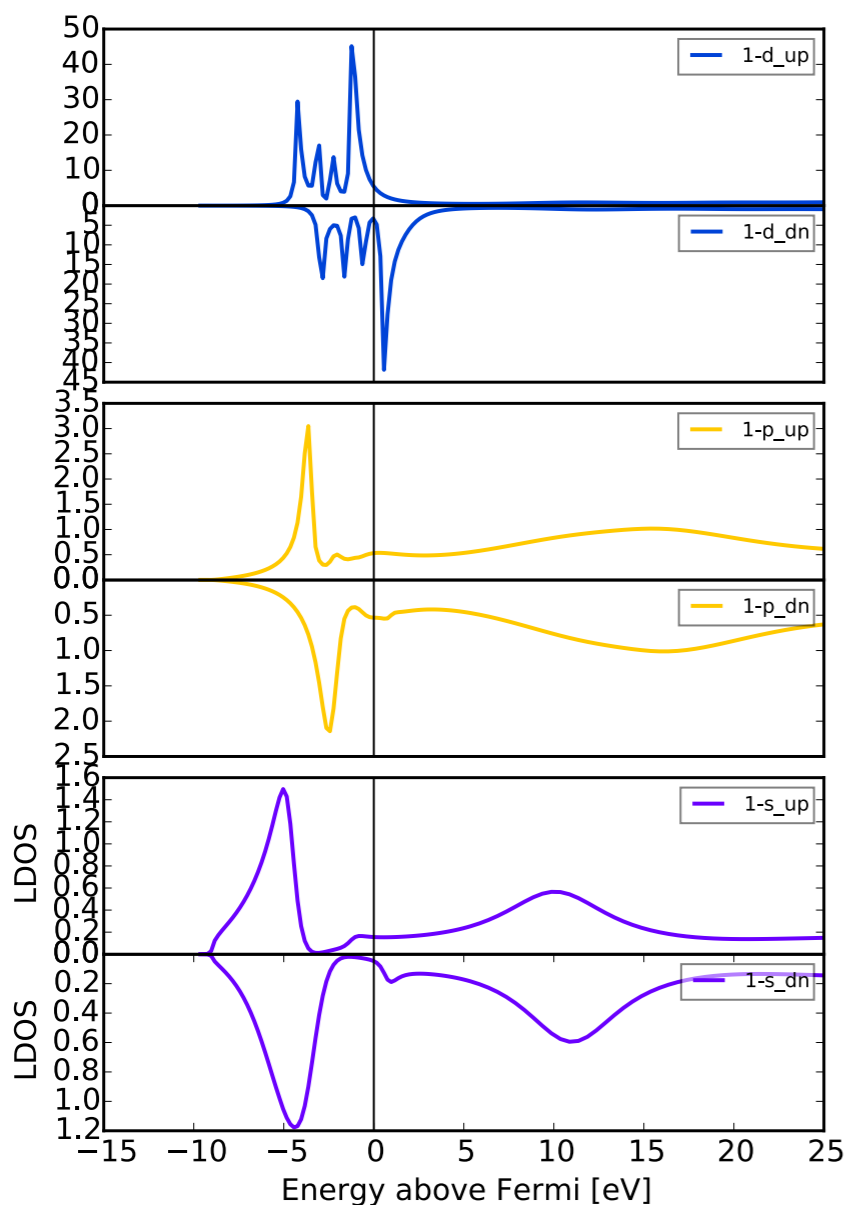
**Cycle 6**, Fermi Energy = -5.365 eV, Cluster Energy\_KS = -61.155 eV  
 Level val absorb = -5.955 eV

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

up-dn  
2.019

good!!

## 初期スピン配置



Atom									
26	2	3	2	4.0	2.0	4	0	1.0	1.0

Crystal									
1	-0.0000	0.0000	0.0000	2.4855	2.4855	2.4855	109.4712	109.4712	109.4712

**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,<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

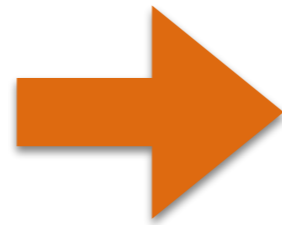
BLAS

BLACS

ScaLAPAC

**make**

**make z**



**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

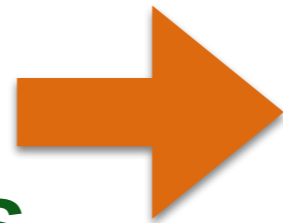
Makefile.inc

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

LDFLAGS = -lz -lm -pthread -lrt

追加

make  
make esmumps



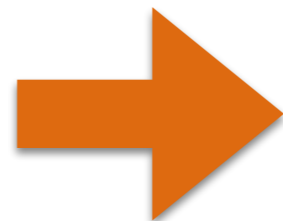
libscotch/libscotch.a  
libscotch/libscotcherr.a  
esmumps/libesmumps.a

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

.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) \$?

# FDMNES の Makefile

## Intel Compiler, MKL and OpenMPI

[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