

光電子強度分布計算ソフト SPADExp

6. OpenMX_tools ディレクトリ

田中 宏明 (東京大学 物性研究所/理学系研究科物理学専攻)

2022 年 8 月 4 日

概要

本パッケージの `OpenMX_tools` ディレクトリに含まれるツールを説明する。これらは、OpenMX の入出力に関わるプログラムである。

目次

1	コンパイル	1
2	<code>preproc.o</code>	1
3	<code>postproc.o</code>	2

1 コンパイル

プログラムは `make` コマンドを用いて C++ コンパイラでコンパイルされる。コンパイルの前に、HDF5[2] をインストールしておくことが必要である。HDF5 をインストールする際は、`configure` コマンドにおいて `--enable-cxx` オプションが必要である。

`Makefile.example` を参考に `Makefile` を作成し、HDF5 をインストールしたパスを記入することでコンパイルできるようになる。

2 `preproc.o`

`preproc.o` は、OpenMX で LCAO 係数を計算する入力ファイルを作成するためのプログラムである。

`>preproc.o (input file) (output file)`

のように、入力ファイル・出力ファイルのパスを引数にとる。

入力ファイルは、OpenMX の入力ファイルに加え、表 1 にあるキーワードについて値を設定したものである。キーワードは全て必須である。`minN`・`maxN` は `preproc.o` では読み取らないが `postproc.o` で必須となる。なお、`num.HOMOs` および `num.LUMOs` について値に 0 を設定しておく方がよい。波数空間の指定に用いられる数値 3 つは、逆格子ベクトルを基底にとった分率座標である。基底となる逆格子ベクトルは、`Band.KPath.UnitCell` または `Atom.UnitVectors` の逆格子である。両方が入力ファイルにある場合、バンド分散の指定と同様に前者が優先される。

出力ファイルは、入力ファイルのコピーに加え、`M0.fileout`・`M0.Nkpoint`・`M0.kpoint` のキーワードが表 1 の入力に合わせて設定されている。表 1 のキーワードも残っているが、OpenMX は不要なキーワードを読み飛ばすため実行に支障はない。

表 1 `preproc.o` で読み取られるキーワード。

キーワード	値	説明
SPADExp.dimension	数値 1 または 2	計算する波数空間の次元
SPADExp.curved	真偽値	計算する面（軸）が曲面（曲線）か平面（直線）か
SPADExp.origin	数値 3 つ	計算する波数空間の原点
SPADExp.range	数値 5 つ、整数 1 つ 次元と同じ行数だけ	波数空間領域の指定
		最初の数値 3 つはベクトル
		次の数値 2 つは範囲 最後の整数は分割数
SPADExp.minN	整数	バンド分散・LCAO を出力するバンドの最小インデックス
SPADExp.maxN	整数	バンド分散・LCAO を出力するバンドの最大インデックス

`origin` および `range` による波数空間の指定は次の手順で行われる。簡単のため `dimension` は 1 とし、逆格子ベクトルの基底を \mathbf{a}_i ($i = 1, 2, 3$) で表す。

1. `origin` の値 o_1, o_2, o_3 から、原点 $\mathbf{o} = \sum_i o_i \mathbf{a}_i$ を得る。
2. `range` の値（前半 3 つ） x_1, x_2, x_3 から、方向ベクトル $\mathbf{x} = \sum_i x_i \mathbf{a}_i$ を得る。
3. \mathbf{o} と \mathbf{x} が直交することを確認する。
4. `range` の値（後半 3 つ） p_1, p_2, n から、間隔 $d = (p_2 - p_1)/(n - 1)$ を得る。
5. i 番目の波数点は、`curved` が偽（平面/直線）の場合

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{o} + (p_1 + i \times d)\mathbf{x} \quad (1)$$

で、`curved` が真（曲面/曲線）の場合

$$\mathbf{v}_i = r \cdot \mathbf{o} + (p_1 + i \times d)\mathbf{x} \quad (2)$$

で得られる。係数 r は $|\mathbf{v}_i| = |\mathbf{o}|$ を満たすように定める。

3 postproc.o

`postproc.o` は、OpenMX の出力ファイルを読み込んで HDF5 ファイルに出力するプログラムである。

>postproc.o (input file)

のように、OpenMX の実行に用いた入力ファイル（`preproc.o` の出力ファイル）のパスを引数にとる。

入力ファイルや OpenMX の出力ファイル `System.Name.out` から、バンド分散、LCAO 係数、単位格子等を読み取る。LCAO 係数は文献 [3] のようなリスト形式であり、並び順を決めるループは外側から原子ラベル、方位量子数、主量子数、磁気量子数である。正確には、OpenMX で使われる基底は磁気量子数 m の固有状態ではなく、磁気量子数 $\pm m$ の固有状態を線形結合して実関数にしたものである。順序については OpenMX 内の `source/Band_DFT_M0.c` を参照。

参考文献

- [1] <http://www.openmx-square.org/>
- [2] <https://www.hdfgroup.org/downloads/hdf5/>
- [3] http://www.openmx-square.org/openmx_man3.8jp/node93.html