

光電子強度分布計算ソフト SPADExp

5. GUI_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 `GUI_tools` ディレクトリに含まれるツールを説明する。これらは実際の光電子強度計算には使われないが、データを可視化する際に有用である。

目次

1	概要	1
2	<code>OpenMX_viewer</code>	1
3	<code>OpenMX_orbitals</code>	2

1 概要

以下で述べるツールは Python 3.7 で作成しており、表 1 に挙げたライブラリを使用している。

表 1 使用する Python ライブラリ。バージョンは動作確認を行った開発環境のものである。

ライブラリ名	バージョン
PyQt5	5.15.2
pyqtgraph	0.12.3
h5py	3.2.0
numpy	1.20.1

各ディレクトリには設定のテンプレートファイル `Config_example.py` がある。これを `Config.py` にコピーすることで、プログラムを正常に起動できる。`Config.py` は Git の管理外であり、環境に合わせて適切に編集できる。

2 `OpenMX_viewer`

`OpenMX` で使われるデータファイルには、`<keyword` で始まり `keyword>` で終わるデータブロック形式がよく用いられている。これを読み取り、グラフ表示することができる。

図 1 は `C6.0.pao` に含まれる擬原子軌道のグラフである。擬原子軌道のような距離 r の関数の場合、1 列目は $x = \log(r)$ 、2 列目は r 、3 列目以降が関数の値となっている [3]。

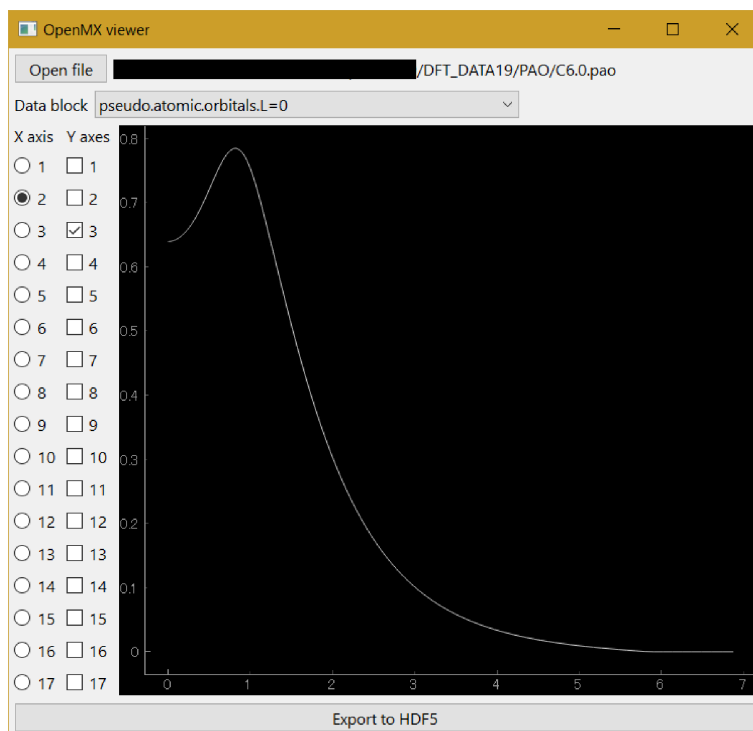


図 1 OpenMX_viewer.py の実行例。

3 OpenMX_orbitals

4. OpenMX/ADPACK における原子軌道・擬原子軌道で説明した流れに沿って、最適化された擬原子軌道に対応する原子軌道を求めるプログラムである。OpenMX で配布されている擬ポテンシャル・擬原子軌道ファイルにはそれぞれ ADPACK 用の入力パラメータも含まれているため、その部分を利用して以下 3 種類の計算を行う。

1. 擬ポテンシャルファイルの入力を用いた擬原子軌道計算
2. 擬ポテンシャルファイルの入力を用いた原子軌道計算
3. 擬原子軌道ファイルの入力を用いた擬原子軌道（最適化前）計算

実行前に、Config.py において workingDirectory（OpenMX の擬ポテンシャル・擬原子軌道が入っているディレクトリ）、adpack（改変版 ADPACK へのパス）を正しく設定する必要がある。ADPACK での計算には C コンパイラが必要であるため、OpenMX_orbitals.py も同じ環境で実行する必要がある。ただし、ADPACK での計算を一度行くとその後の計算は Python 内で行うため、データを引き継げば他の環境で作業を続けることもできる。

図 2 は C6.0.pao・C.PBE19.vps を使用した実行例である。計算内容は Analysis type で指定でき、今は最適化前後の擬原子軌道である。中央の表は、左下のグラフに表示する軌道を選択する。今は s_0 ($2s$ 軌道) が表示されている。右下の表は、軌道の線型結合係数やノルムを表示させることができる。今は s 軌道 ($l = 0$) における縮約係数を、C6.0.pao に含まれる Contraction.coefficients のデータブロックから求めたものと、最適化前後の軌道同士の内積から求めたものを上下に表示している。

OpenMX で配布されているデータを直接利用すると不具合の出る箇所がいくつかあり、それらについては表??にまとめている。

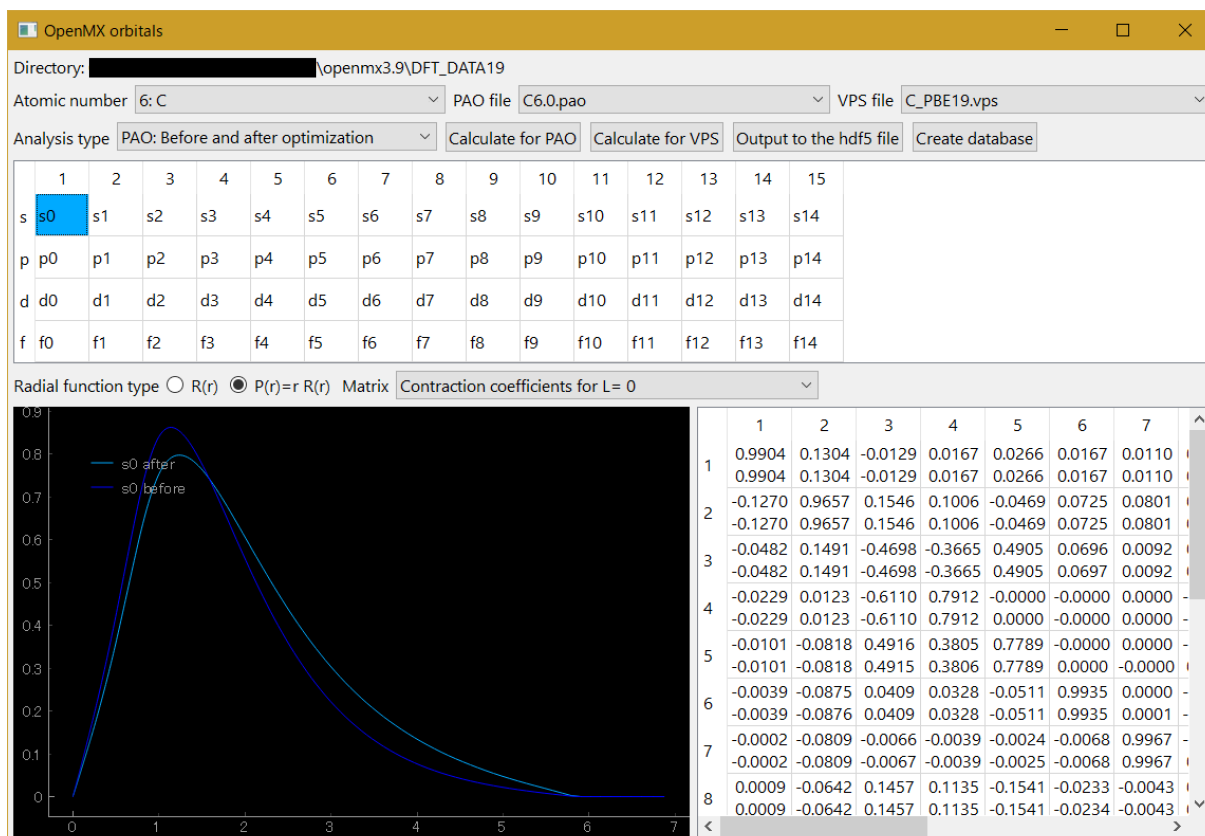


図 2 OpenMX_orbitals.py の実行例。炭素原子における最適化前後の擬原子軌道を表示している。

4 OpenMX_band

OpenMX から得られたバンド分散・LCAO 係数を表示することができる。Main.GUI/SPADExp_GUI.py を作成する過程で得られたプログラムであり、後者を使うべきである。

参考文献

- [1] <http://www.openmx-square.org/>
- [2] http://www.openmx-square.org/adpack_man2.2/
- [3] http://www.openmx-square.org/adpack_man2.2-jp/node22.html