mol2crystal.py 処理フローとサブルーチンの概要

# 概要

mol2crystal.py は、分子構造ファイル（precursor.mol）を入力として、空間群対称性を活用し、分子結晶構造の候補を自動生成・評価するPythonスクリプトです。初期構造生成、空間群の適用、原子間重なりの判定、構造の保存と密度評価までを一貫して自動化します。

# 処理フロー

1. 1. 分子構造の読み込みと中心化
2. 2. 点群解析（pymsym）による対称性の取得
3. 3. 空間群候補の抽出（群論的・物理的拡張）
4. 4. 分子の回転と単位胞の定義
5. 5. 空間群の適用による結晶構造生成
6. 6. 原子間重なりのチェック
7. 7. 原始単位胞への変換（spglib）
8. 8. 構造の保存（VASP形式）と密度評価
9. 9. 結果の記録（structure\_vs\_energy.txt）

# 主要サブルーチンの詳細解説

## rotate\_molecule(positions, theta, phi)

分子をZ軸とY軸で回転させ、構造の多様性を確保します。  
- theta：Z軸回転角（水平回転）  
- phi：Y軸回転角（垂直回転）  
回転行列を構築し、positions（原子座標）に適用します。

## has\_overlap\_neighborlist(atoms, covalent\_radii, scale)

NeighborListを用いて原子間の重なりを高速に判定します。  
- 原子間距離が scale × (r1 + r2) 以下なら重なりと判定。  
ASEのNeighborListを使用して効率的にチェックします。

## adjust\_cellpar\_by\_spacegroup(sg, cellpar)

空間群に応じて単位胞パラメータを調整し、対称性に適した格子を構築します。  
- 空間群 sg に対応する格子制約（直交性・角度・軸長比など）を適用。  
- cellpar（a, b, c, α, β, γ）を修正します。

## get\_primitive\_cell(atoms)

spglibを用いて原始単位胞に変換します。  
- 与えられた構造から原始単位胞を抽出。  
- 格子ベクトルと原子配置を再構成します。

## density\_calc(fname)

構造ファイルから質量と体積を計算し、密度を求めてログに記録します。  
- 原子質量の合計と単位胞体積から密度を算出。  
- 結果をログファイルに記録します。

## get\_all\_subgroups(group, relation\_dict)

指定した点群の厳密な下位群を再帰的に取得します。  
- 群論的関係辞書 relation\_dict を参照。  
- 再帰的に subgroup を探索します。

## expand\_physical\_supergroups(base\_dict, max\_depth)

物理的に近い上位点群を指定深さまで拡張し、空間群候補を広げます。  
- base\_dict に基づき、点群の近傍関係を拡張。  
- max\_depth により探索の深さを制限します。