

超大規模電子構造計算プログラムパッケージ

ELSESES

クイックスタートガイド

2017 年 3 月 6 日

ELSESES version 0.07.00dev

Copyright (C) ELSESES. 2007-2017 all rights reserved

目 次

1	ELSESES のインストール	2
2	ELSESES の実行	3
2.1	入力ファイル	3
2.2	ELSESES の実行	3
2.3	計算結果の出力	3
2.4	計算時間の出力	5
2.5	sample test tool の実行	6
2.6	計算途中での終了	7
3	ELSESES の入力ファイル	8
3.1	設定 XML ファイル	8
3.1.1	計算する原子構造の指定	9
3.1.2	エレメントファイルの指定	9
3.1.3	温度と熱浴質量の設定	9
3.1.4	ハミルトニアン相互作用半径の設定	10
3.1.5	計算モードの選択	10
3.1.6	optimization mode の設定	10
3.1.7	dynamics mode の設定	10
3.1.8	計算ソルバーの選択	11
3.1.9	Charge Self-Consistent 計算の設定	11
3.1.10	Wolfsberg-Helmholz 定数 K の設定	12
3.1.11	出力ファイルの設定	12
3.1.12	計算時間制限の設定 (オプション)	13
3.2	原子パラメータの設定 (GENO 型ハミルトニアン)	14
3.2.1	原子軌道の種類	14
3.2.2	Slater 軌道に関するパラメータの設定	15
3.2.3	Repulsive part の設定	15
3.2.4	Chemical hardness の設定	15
3.3	原子パラメータの設定 (NRL 型ハミルトニアン)	15
3.4	構造ファイルの書式	15
3.4.1	unit cell の設定	16
3.4.2	特定原子の座標を固定する場合	16
3.4.3	原子の初期座標の設定	16
3.4.4	原子の初期速度の設定	17
3.5	構造ファイルの作成方法	17

3.5.1	XYZ 形式の分子座標データファイルの用意	17
3.5.2	構造データ生成指定ファイルの用意	17
3.5.3	構造データ生成ユーティリティの実行	18
3.6	様々な計算モード	18
3.6.1	File conversion モード	18
3.6.2	Cell change only モード	18
4	出力ファイル -オプション-	20
4.1	DOS・固有エネルギーの出力	20
4.2	波動関数可視化用の中間ファイル出力	20
4.3	電子数の出力	21
5	各種可視化ソフトへの対応	22
5.1	rasmol によるバッチ処理	22
5.1.1	シミュレーション実行前の設定	22
5.1.2	バッチ処理に必要なファイル	22
5.1.3	rasmol の起動	22
5.1.4	rasmol でのバッチ処理	23
5.1.5	バッチファイルの中身について	23
6	ユーティリティツール	24
6.1	スーパーセル作成ユーティリティ: mkSupercell.pl	24
6.2	バンド計算ユーティリティ: band	25
6.3	Gaussian Cube ファイル作成ユーティリティ: elses-generate-cubefile	26
6.4	DOS 計算ユーティリティ: elses-dos	26
6.5	平均二乗変位計算ツール: msd	27
6.6	原子座標抽出ツール: xyz2xml.pl	27
6.7	原子座標変換ツール: xyz2xyz.pl	27
6.8	XML チェックツール:xml-check	27
7	重要な更新	29
7.1	v0.03.10	29
7.2	v0.03.12	29
7.3	v0.03.13	29
7.4	v0.03.15	29
7.5	v0.03.16	30
7.6	v0.07.00	30
8	トラブルシューティング	31
8.1	コンパイルがうまくいかない場合	31
8.2	実行時エラー:「XML parsing Error」	31
8.3	実行時エラー:「alloc. error」	31
8.4	Intel fortran compiler 11 のバグについて	31
8.5	Double- ζ パラメータの設定エラー	32

1 ELSEES のインストール

パッケージに含まれる README ファイル

README.md

を参照。

注：本 QuickStart では、最低限の構成 (MPI を使わない、optional な外部ライブラリを使わない) での利用法のみを、説明する。

2 ELSES の実行

ここでは汎用型モデルである、GENO システム (GENO 型 Hamiltonian) を利用する使い方を説明する。

2.1 入力ファイル

ELSES の基本的な入力ファイルは、以下の 3 種類がある；

- 設定 XML ファイル (ファイル名の例：config.xml) … 計算条件を記述する。
- 構造 XML ファイル (ファイル名の例：C6H6.xml) … 原子構造を記述する。
- 元素 XML ファイル (ファイル名の例：C.xml) … 元素ごとの (TB モデルに含まれる) パラメーターを記述する。

元素 XML ファイルは option で、明示的にファイルがない場合は、プログラム内の default 値が用いられる。

sample ディレクトリに、動作確認用として、

- sample/sample_gen0/C6H6_opt/ ベンゼンの構造最適化計算
- sample/sample_gen0/C6H6_dyn/ ベンゼンの有限温度ダイナミクス計算

がある。それぞれのディレクトリ下には、結果ファイルを格納したディレクトリ (result) がある。

2.2 ELSES の実行

以下は、ベンゼンの構造最適化計算 (sample/sample_gen0/C6H6_opt/) をとりあげる。次のように elses を実行することで行える。

```
prompt> cd sample/sample_gen0/C6H6_opt/  
prompt> ../../../../bin/elses config.xml > log.txt
```

標準出力ファイル (上記例での log.txt) の他に、主なログファイルとしては、

```
log-node00000.txt
```

というファイル (ファイル名は固定) が出力される。以後これを「ノードログ」と呼ぶ。

また実行の際に verbose mode を指定することにより、より詳細な計算データを標準出力させることが可能である。verbose mode を使用する場合には、

```
prompt> ../../../../bin/elses -verbose config.xml > log.txt
```

のようになること。¹

2.3 計算結果の出力

ELSES による計算結果は、

- Output.txt 各 MD ステップにおけるいくつかのエネルギーと力。
- position.*** 原子座標等の時系列データ (構造可視化用)。拡張子は出力形式指定により変化。

に出力される。Output.txt に出力される主な情報は、

¹ 「-verbose=10」などすることで、verbose level を指定することも可能である。Default 値は 1 となっている。

- EBD : 電子構造エネルギー ($EBD = 2\text{Tr}[\rho H_0^{TB}]$)
- ECSC: Charge Self-Consistent(CSC) エネルギー (CSC 計算以外ではゼロ)
- ECC : 「Rest part」(repulsive) エネルギー (主に、イオン間反発)
- EKE : イオン系の運動エネルギー (有限温度計算以外ではゼロ)
- ETOT=EBD + ECSC + ECC : 全エネルギー
- Force Amp. Average : 各原子に働く力の平均値
- Force Amp. Max : 原子に働く力の最大値
- The atom that gives the max. force amp. : 力の最大値を与える原子のインデックス

となっている。

MD ステップは step_count と表示され、初期構造が step_count=0 に相当する。構造可視化については、§3.1.11 および§5 を参照。Output.txt の例は、以下である (紙面幅の都合で、いくつかの行は右側が欠けている);

```

@@ Main output : ELSES version 0.03.15
INFO: config_name = C6H6_geno_opt_20121218
INFO-MPI-OMP: P_MPI, P_OMP=          1          12
Date: 2012 12 18; Time: 19 52 46
-----
Output; step_count=          0
Output energy
Band      Energy : EBD  [au]:          -21.074627243244468
ECSC      Energy : ECSC [au]:           0.000000000000000
Core-core Energy : ECC  [au]:           0.647213749370900
Kinetic   Energy : EKE  [au]:           0.000000000000000
EBD+ECSC+ECC Energy : ETOT [au]:        -20.427413493873569
Energy summary (explan.): step_count    EBD+ECSC+ECC    EBD+ECSC+ECC+EKE    EBD
Energy summary (au      ):              0    -20.42741349    -20.42741349    -21.07462724
Energy summary (eV/atom):              0    -46.32188375    -46.32188375    -47.78952722
SD energy difference per atom [eV]=      0          0.00019272172572821044
Output Force Amplitude
Force Amp. Average [au] [eV/A]=          0.000035411685775          0.001820957125198
Force Amp. Max      [au] [eV/A]=          0.000061352314869          0.003154888914855
The atom that gives the max. force amp. =          6
Force_summary(ave[eV/A],max[eV/A],atom for max)=          0          0.00182095712519828338
-----
Output; step_count=          1
Output energy
Band      Energy : EBD  [au]:          -21.074258569701925
ECSC      Energy : ECSC [au]:           0.000000000000000
Core-core Energy : ECC  [au]:           0.646764619148410
Kinetic   Energy : EKE  [au]:           0.000000000000000
EBD+ECSC+ECC Energy : ETOT [au]:        -20.427493950553515
Energy summary (explan.): step_count    EBD+ECSC+ECC    EBD+ECSC+ECC+EKE    EBD
Energy summary (au      ):              1    -20.42749395    -20.42749395    -21.07425857
Energy summary (eV/atom):              1    -46.32206620    -46.32206620    -47.78869121

```

```

SD energy difference per atom [eV]=          1          0.00015499142578130867
Output Force Amplitude
Force Amp. Average [au] [eV/A]=              0.000028478925492          0.001464457315618
Force Amp. Max      [au] [eV/A]=              0.000045665333030          0.002348225218168
The atom that gives the max. force amp. =          3
Force_summary(ave[eV/A],max[eV/A],atom for max)=          1          0.00146445731561754074
-----

```

2.4 計算時間の出力

MD における全体の経過時間は、ノードログ (log-node00000.txt) の末尾付近に下記のように表示される；

```

.....Total Simulation time (sec )      =          0.05100
.....Total Simulation time (hour)      =          0.00001
.....Total Simulation time (day )      =          0.00000

```

この例では全体の経過時間が約 0.05 秒かかっている。

ノードログ (log-node00000.txt) の最終行が

```

..... ELSES ended successfully (without MPI)

```

であれば、計算が正常に終了したことを意味する。

各 MD ステップでの経過時間は、ノードログ (log-node00000.txt) に対して文字列「MDloop」を検索すると、以下のように表示される。

```

prompt> grep MDloop log-node000000.txt
elaps-time(befor MDloop)=          0          0.006400          0.000000          0.000000
elaps-time(lap MDloop)=          1          0.003500          0.000000          0.000000
elaps-time(lap MDloop)=          2          0.001400          0.000000          0.000000
elaps-time(lap MDloop)=          3          0.001300          0.000000          0.000000

```

この例では初期処理 (MD ステップに入る前の処理) に約 0.0064 秒かかり、最初の MD ステップが約 0.0035 秒かかっている。

なお、各ルーチンでの経過時間は、以下のように grep コマンドを用いることによってある程度知ることができる。

```

prompt> grep -i time log-node000000.txt

```

対角化ソルバーを選んだ場合には

```

TIME for LAPACK (DSYGV) =          0.0017000000

```

というようなメッセージが現れ、これは LAPACK の対角化ルーチン (DSYGV) に約 0.0017 秒が費やされたことを意味している。

2.5 sample test tool の実行

sample 検証ツール (shell script)

```
sample/shell_scripts/elses_sample_test.sh
```

を実行する事で、いくつかのサンプルデータの自動実行と結果検証ができる。ELSES を make した後、チェックとして行うことを想定している。下記のように実行される。

```
$ cd sample
$ ./shell_scripts/elses_sample_test.sh
```

問題がなければ、下記のように出力される。

```
-----
ELSES sample test
-----
TEST for C6H6_opt (GENO)
2013/08/09 PM 06:56:12
.....Total Simulation time (sec )      =                0.10900
-----
TEST for C6H6_dyn (GENO)
2013/08/09 PM 06:56:12
.....Total Simulation time (sec )      =                0.19280
-----
TEST for VCNT_100atom (non-geno)
      (with generation of initial XML file and final eigen values)
2013/08/09 PM 06:56:13
.....Total Simulation time (sec )      =                3.92220
.....Checking the resultant eigen levels
-----
TEST for Au_NW_0143atom (non-geno;NRL)
      (with generation of the element file)
2013/08/09 PM 06:56:17
.....Total Simulation time (sec )      =                7.52500
ELSES sample test .... ended successfully, if no numerical data appears above
-----
ELSES band calculation test : carbon diamond with Cerda spd orbitals
test> ../../../../bin/elses -band -verbose ./config.xml > logfile.txt
test> ../../../../bin/band > log-band.txt
test> diff EigenEnergy.txt result/EigenEnergy.txt
---> Test ended successfully, if no numerical data appears above
```

なんらかの数値データが出た場合は、問題があることになる。上記は 1 例であり、検証ツールは随時アップロードされることがある。最新版による出力結果（ログファイル）が、

```
sample/shell_scripts/result/result_elses_sample_test.txt
```

にある。

2.6 計算途中での終了

MD(繰り返し) 計算途中で stop signal を送ることで、プログラムを止めることができる。計算が完了した MDstep までの結果は保存しておきたい、ときに使う。

ファイルを用意することで stop signal を送る。具体的には、実行ディレクトリに、

`00_stop_signal.txt`

というファイルを用意して、1 行目に 0 以外の整数を書き込む (2 行目以降は不要)。毎 MDstep ごとに上記ファイルを探している。stop signal が検出されしだい、file への save などを行って計算を終了する。注：上記ファイルが存在しなかったり、1 行目に 0 が書いてあれば、発動しない。

3 ELSESES の入力ファイル

3.1 設定 XML ファイル

設定 XML ファイル (典型名: config.xml) を編集することにより ELSESES での計算条件を変更することができる。なお、設定ファイルは XML の文法に従って記述すること。

主な計算モードは、構造最適化と有限温度ダイナミクスである。前者での設定ファイルの例は

```
sample/sample_gen0/C6H6_opt/config.xml
```

であり、後者の例は

```
sample/sample_gen0/C6H6_dyn/config.xml
```

である。sample/sample_gen0/C6H6_opt/config.xml は、以下のようになっている。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<config name="C6H6_gen0_opt_20121218">

<system>
  <cluster structure="C6H6.xml" />
  <boundary x="nonperiodic" y="nonperiodic" z="nonperiodic" />
  <element name="C" model="geno" filename="C.xml"> </element>
  <element name="H" model="geno" filename="H.xml"> </element>
</system>

<calc mode="optimization">
  <solver scheme="eigen"> </solver>
  <genoOption>
    <CSC_method> ELSTNER </CSC_method>
    <CSC_max_loop_count> 0 </CSC_max_loop_count>
    <CSC_charge_convergence> 1d-5 </CSC_charge_convergence>
    <CSC_charge_mixing_ratio> 0.1 </CSC_charge_mixing_ratio>
  </genoOption>
  <optimization>
    <sd_ratio> 0.2 </sd_ratio>
    <max_num_iter> 2000 </max_num_iter>
    <convergence_criteria mode="energy_per_atom" unit="eV"> 1.0d-5 </convergence_criteria>
  </optimization>
</calc>

<output>
  <restart filename="restart.xml" interval="1" />
  <position filename="position.xyz" interval="1" />
  <wavefunction filename="output_wavefunction.txt" />
</output>

</config>
```

上記のうち、

```
<config name="C6H6_geno_opt_20121218">
```

で指定される config 名は計算結果には無関係で、任意である。

3.1.1 計算する原子構造の指定

system タグの中の cluster タグで系の原子構造データを設定できる。タグの structure 属性で原子構造データのファイル名を指定する。

```
<cluster structure="C6H6.xml" />
<boundary x="nonperiodic" y="nonperiodic" z="nonperiodic" />
```

boundary タグでは、 x, y, z 方向について、周期・非周期の境界条件を設定する。上記は非周期の例である。周期系の場合は「nonperiodic」のところを、「periodic」に変更する。boundary タグを省略した場合は、周期系と仮定される。

原子構造ファイルの詳細は、後で説明する。

3.1.2 エlementファイルの指定

計算に用いるパラメータを記述したElementファイルを、system タグの中の element タグで指定する。ファイル名の記述は必須である。なお、指定したElementファイルが存在しない場合には、ELSES にデフォルトで設定されているパラメータの値を用いて計算を行う。

```
<element name="C" model="geno" filename="C.xml"> </element>
```

3.1.3 温度と熱浴質量の設定

有限温度ダイナミクスは熱浴法²で実現され、温度と熱浴質量の設定が必要である。具体例は、ファイル sample/C6H6_dyn/config. を参照。

温度設定は、system タグ内の temperature タグ内で指定する。単位は 'kelvin' または 'a.u.' (default) が指定できる。

```
<temperature unit="kelvin"> 500 </temperature>
```

熱浴質量は、原子あたりの熱浴質量 (heat bath mass per atom) で、設定する。

```
<heatbath_mass mode="on">
  <mass_per_atom unit="a.u."> 25.0d0 </mass_per_atom>
</heatbath_mass>
```

もし「mode="off"」とすると、タグが無視される。

注：熱浴質量が多重定義されている場合の優先処理 … 熱浴質量は設定 XML ファイルのみならず構造 XML ファイルにも含まれる（例えば継続シミュレーションの場合）。多重定義されている場合の優先的処理は、下記のように定められている。（場合 I）設定 XML ファイルに値がある場合は、その値が採用される。構造 XML ファイルの値は、たとえあっても、無視される。（場合 II）設定 XML ファイルに値がなく構造 XML ファイルにある場合は、構造 XML ファイルの値が設定される。（場合 III）2 つの XML ファイルのどちらにも値がない場合は、default 値 ((heatbath per atom)=25 au) が設定される³。

² S. Nosé, Mol. Phys. **52**, 255 (1984); J. Chem. Phys. **81**, 511 (1984).

³ この default 値は推奨値ではない。熱浴質量は、適切な値を定める必要がある。古典（または量子）分子動力学のテキストなどを参照。

3.1.4 ハミルトニアン相互作用半径の設定

ハミルトニアン行列の相互作用半径は、system タグ中の cluster タグで指定できる。

```
<cluster structure="structure.xml" cutoff_radius="10.0d0" />
```

単位は a.u. に固定されている。この値は、重なり行列の非ゼロ範囲の半径にもなっている。この指定は GENO 型ハミルトニアンと NRL 型ハミルトニアンで有効である。

3.1.5 計算モードの選択

ELSES では主に、構造最適化計算と定温ダイナミクス計算が実行可能である。実行する計算内容は calc タグの mode 属性で指定する。mode="optimization" で構造最適化、mode="dynamics" で定温ダイナミクス計算が実行される。

```
<calc mode="optimization">
</calc>
```

```
<calc mode="dynamics">
</calc>
```

その他の計算モードについては §3.6 で説明する。

3.1.6 optimization mode の設定

optimization mode で計算を行う場合には、optimization タグ内を下記の要領で指定する。

```
<optimization>
  <sd_ratio> 0.2 </sd_ratio>
  <max_num_iter> 200 </max_num_iter>
  <convergence_criteria mode="energy_per_atom" unit="eV"> 1.0d-5 </convergence_criteria>
</optimization>
```

sd_ratio タグは、steepest descent における更新比率を表す。max_num_iter タグは、構造最適化ステップの上限回数を表す。オプションとして、収束条件を convergence_criteria タグで与えることができる。具体的には、エネルギー変化量を全原子数で割った値 E (eV 単位) で指定する。収束条件を与えない場合、max_num_iter タグで指定した回数分だけ構造最適化ステップが進行する。

各構造最適化ステップでのエネルギー変化量 E は、出力ファイル (デフォルトでは Output.txt) に、以下の形式で出力される。

SD energy difference per atom [eV]=	0	0.00019272172572821233
-------------------------------------	---	------------------------

最初の整数値は step count (0 から始まる) をさす。

3.1.7 dynamics mode の設定

dynamics mode で計算を行う場合には、MD の経過時間を dynamics タグで設定する。dynamics タグの中の delta タグの数値で MD のひとつの時間ステップの時間刻み幅を設定できる。また、total タグの数値で MD でシミュレートする系の時間を設定できる。どちらも時間の単位は unit 属性で設定し、フェムト秒 (unit="fsec") と原子単位 (unit="a. u.") が指定できる。

```
<dynamics scheme="velocity verlet">
  <delta unit="fsec"> 1.00 </delta>
  <total unit="fsec"> 500.00 </total>
</dynamics>
```

3.1.8 計算ソルバーの選択

非直交基底系 (GENO 系列・NRL 系列) においては、対角化ソルバーおよび A 型クリロフ部分空間法ソルバー (generalized Krylov-subspace solver) が指定できる。デフォルトは対角化である。A 型クリロフ部分空間法ソルバーを指定する場合には、calc タグ中に以下のタグを書く。

```
<solver scheme="gKrylov_A">
</solver>
```

上記設定以外に、ハミルトニアン相互作用半径 (§3.1.4) も設定する必要がある。一方、明示的に対角化ソルバーを指定する場合には、calc タグ中に以下のタグを記述する。

```
<solver scheme="eigen">
</solver>
```

3.1.9 Charge Self-Consistent 計算の設定

ELSES では電荷自己無撞着 (CSC) 計算が可能である。CSC 計算では Hamiltonian が電荷分布に依存するため、各 MD ステップで、電荷分布が収束するまでのループ計算を行う。収束までのループ回数が大きいと、計算時間が長くなる。CSC 計算を行うには、genoOption タグ内の CSC_method タグで ELSTNER を指定する。

```
<genoOption>
  <CSC_method> ELSTNER </CSC_method>
  <CSC_max_loop_count> 1000 </CSC_max_loop_count>
  <CSC_charge_convergence> 1d-6 </CSC_charge_convergence>
  <CSC_charge_mixing_ratio> 0.6 </CSC_charge_mixing_ratio>
</genoOption>
```

CSC_charge_convergence タグは収束評価量に対する収束判定条件のしきい値である。この値が小さいほど、収束判定条件が厳しくなる。CSC_charge_mixing_ratio タグは、CSC ループ内における charge mixing ratio を決定する。この値によって、収束までの回数に変化することがある。この値は原理的に 0 より大きく 1 未満でなければならないが、典型的な値は 0.4 から 0.6 程度である。なお、このタグで設定される値は、charge mixing ratio の初期値である。計算途中の charge mixing ratio は、収束の振る舞いに基づき、自動的に調整される。

実際の計算で CSC ループが何回で収束しているのかは、

```
prompt> grep CSC (標準出力ファイル) | grep converge
```

とすると、以下の例のようにして確認することができる。

```
INFO:CSC loop is converged:loop num., dq=      9 0.898594E-06
INFO:CSC loop is converged:loop num., dq=      4 0.725716E-06
INFO:CSC loop is converged:loop num., dq=      4 0.247496E-06
INFO:CSC loop is converged:loop num., dq=      4 0.230907E-06
```

上記の例では最初の MD step では 9 回で収束し、次は 4 回で収束したことを意味する。あとに現れる数値 (1 行目の 0.898594E-06) は、最終的な収束評価量であり、CSC_charge_convergence タグで指定されたしきい値より小さくなっているはずである

また、CSC 計算を行わない場合には CSC_max_loop_count タグで 0 を指定すること。

```
<genoOption>
  <CSC_method> ELSTNER </CSC_method>
  <CSC_max_loop_count> 0 </CSC_max_loop_count>
  <CSC_charge_convergence> 1d-6 </CSC_charge_convergence>
  <CSC_charge_mixing_ratio> 0.6 </CSC_charge_mixing_ratio>
</genoOption>
```

3.1.10 Wolfsberg-Helmholz 定数 K の設定

Wolfsberg-Helmholz 定数 K を計算する際のパラメータである κ と δ を、genoOption タグ内の HML_kappa タグと HML_small_delta タグでそれぞれ指定すること。この時に、 δ の単位は \AA^{-1} で指定すること。

```
<genoOption>
  <HML_kappa> 1.00 </HML_kappa>
  <HML_small_delta> 0.35 </HML_small_delta>
</genoOption>
```

また、K を定数として計算したい場合には、

```
<genoOption>
  <HML_constant_K> T </HML_constant_K>
  <HML_K> 1.75d0 </HML_K>
</genoOption>
```

と指定することによって、原子間距離の依存性を考慮しない形の Wolfsberg-Helmholz 定数を用いた計算の実行が可能である。

3.1.11 出力ファイルの設定

output タグの中の position タグで各 MD ステップでの原子の座標を蓄積して保存するファイルを指定できる。ファイル名はタグの filename 属性で、間隔は interval 属性でそれぞれ設定できる。また、output タグの中の restart タグで原子の座標や速度などのデータを保存するファイルを指定できる。ファイル名はタグの filename 属性で、間隔は interval 属性でそれぞれ設定できる。このファイルは ELSESES でダイナミクス計算を再開するための再計算用データファイルとなる。

```
<output>
  <restart filename="restart.xml" interval="1" />
  <position filename="position.xyz" interval="1" />
</output>
```

また、ELSESES ではファイル名の拡張子を変更することによって、以下の 4 種類のファイル出力が可能である。

```
(1) xyz 形式
<position filename="position.xyz" interval="1" />
  出来るファイル : position.xyz
```

周期系非対応。力の表示なし。

対応ソフト：vmd, molden, vesta(*)

(2) axsf 形式 (animated xsf 形式)

<position filename="position.axsf" interval="1" />

出来るファイル：position.axsf

周期系対応。力の表示あり。

対応ソフト：xcrysden, vmd(***)

(3) xsf 形式

<position filename="position.xsf" interval="1" />

出来るファイル：連番ファイル (MDstep 番号が入っている)

(例: position0000000000.xsf, position0000000010.xsf, ...)

周期系対応。力の表示あり。

対応ソフト：xcrysden, vesta(**), vmd(***)

(4) pdb 形式

例： <position filename="position.pdb" interval="1" />

出来るファイル：連番ファイル (MDstep 番号が入っている)

(例: position0000000000.pdb, position0000000010.pdb, ...)

周期系非対応。力の表示なし。

対応ソフト：vmd, rasmol, molden, vesta

注：rasmol で連続読込・動画作成を実現する rasmol 専用スクリプトも出力される。

(ファイル名は、rasmol-batch.txt、rasmol-setting.txt)

(*) 最初の snapshot しか読み込まれない。

(**) 元素記号の部分を原子番号に置き換えないと正しく読み込まれない。

例：「H」 「1」

(***) 力の表示には非対応。

また、xyz 形式ファイルに unit cell 情報 (L_x , L_y , L_z) を追記することができる。この cell 情報付き xyz ファイルは ELSESES の独自拡張ファイルで、解析に有用な場合がある。本機能を使用するためには、タグ中に「cell_info="on"」を追加する。「off」にした場合には、本機能は発動しない。具体的には下記のように指定すること。

```
<position filename="position.xyz" cell_info="on" interval="1" />
```

出力される XYZ ファイルには、各スナップショットごとの 1 行目に、下に示した形式で原子数、 L_x , L_y , L_z が並ぶ (長さは Angstrom 単位)。

12	10.00000000000000000000	10.00000000000000000000	10.00000000000000000000
----	-------------------------	-------------------------	-------------------------

3.1.12 計算時間制限の設定 (オプション)

計算時間制限を設定することができる。計算途中で (規定の MDstep 数に到達する前に) 終了させることができる。例えば、計算時間を 10 分に設定する場合、calc タグ内に

```
<limit>
  <time unit="min"> 10 </time>
</limit>
```

を追加する。unit には以下の表記が可能である。

```
「second」「seconds」「sec」「s」(秒)
「minute」「minutes」「min」「m」(分)
「hour」「hours」「h」(時間)
「day」「days」「d」(日)
```

本機能では、(経過時間) > (設定時間) になった場合には、ファイルへの保存等を行って計算を終了する。従って、全体の経過時間は上記設定時間を上回る。計算時間に hard limit がある場合は、hard limit より小さい値を設定する必要がある。

3.2 原子パラメータの設定 (GENO 型ハミルトニアン)

エレメントファイルを用意することにより、ELSES 内で使われる原子パラメータを設定することができる。エレメントファイルを用意しない場合は、プログラムに含まれるデフォルト値が設定される (デフォルト値の詳細は別紙のドキュメントを参照)。エレメントファイルを使用する場合には、計算に必要な全ての情報を入力する必要がある。サンプルデータとして用意されている水分子における酸素原子のエレメントファイル sample/H2O/O.xml は、以下のようになっている。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<element type="Huckel" name="O">
  <mass> 16.0d0 </mass>
  <initial_charge> 0 </initial_charge>
  <principal_quantum_number> 2 2 2 2 </principal_quantum_number>
  <initial_occupation> 2.d0 1.333d0 1.333d0 1.333d0 </initial_occupation>
  <initial_diagonal_elements> -28.20d0 -12.4d0 -12.4d0 -12.4d0 </initial_diagonal_elements>
  <zeta> 2.575d0 2.275d0 2.275d0 2.275d0 </zeta>
  <chemical_hardness> 12.4d0 </chemical_hardness>
  <repulsive_rescaling> 1.0 1.0 1.0 1.0 </repulsive_rescaling>
</element>
```

また、d 軌道を用いた計算を行う場合には、サンプルリストのパラメータ以外に、zeta2、c1、c2 といったパラメータの入力も必要になる。d 軌道に関する入力例は、/sample/FeO/Fe.xml を参照。尚、s、p 軌道はデフォルトでは single- ζ の計算になっているが、d 軌道を用いた計算をする場合と同様に zeta2、c1、c2 を指定することによって、double- ζ の計算を行うことが可能である。

3.2.1 原子軌道の種類

原子の質量は mass タグ内で指定し、原子の初期電荷は initial_charge タグで指定する。この時の電荷は中性原子からのズレで入力すること。どちらも原子単位系での入力になる。

```
<mass> 16.0d0 </mass>
<initial_charge> 0 </initial_charge>
```

計算に用いる原子軌道の種類は、principal_quantum_number タグで設定する。現在の ELSES では、s 軌道 1 個、p 軌道 3 個、d 軌道 5 個を用いた計算が可能である。各軌道の主量子数を、s、p、d 軌道の順番で指定する。また、初期の各軌道の電子占有数は initial_occupation タグで指定する。軌道の種類を指定する場合と同様に、s、p、d 軌道の順番で占有数を指定する。

```
<principal_quantum_number> 2 2 2 2 </principal_quantum_number>
<initial_occupation> 2.d0 1.333d0 1.333d0 1.333d0 </initial_occupation>
```

3.2.2 Slater 軌道に関するパラメータの設定

計算で用いる軌道エネルギーを `initial_diagonal_elements` タグで設定できる。軌道エネルギーを s、p、d 軌道の順番で eV 単位で指定すること。Slater 軌道の広がりを決める ζ は、`zeta` タグで設定する。原子単位系で s、p、d 軌道の順番で指定すること。

```
<initial_diagonal_elements> -28.20d0 -12.4d0 -12.4d0 -12.4d0 </initial_diagonal_elements>
<zeta> 2.575d0 2.275d0 2.275d0 2.275d0 </zeta>
```

3.2.3 Repulsive part の設定

Repulsive part 計算時の STO の ζ を $\zeta^{rep} = (\text{repulsive_rescaling}) * \zeta$ の形で設定できる。`repulsive_rescaling` タグ内で、s、p、d 軌道の順番で指定すること。この際に d 軌道に関しては、 ζ_2 に対してのみ反発項の調整が行われる。

```
<repulsive_rescaling> 1.0 1.0 1.0 1.0 </repulsive_rescaling>
```

3.2.4 Chemical hardness の設定

CSC 計算を行う際の chemical hardness の値を設定することができる。数値は eV 単位で指定すること。

```
<chemical_hardness> 12.4d0 </chemical_hardness>
```

3.3 原子パラメータの設定 (NRL 型ハミルトニアン)

Naval Research Laboratory (NRL) 型のハミルトニアンを用いるときは、NRL のサイト (<http://cst-www.nrl.navy.mil/bind>) からパラメータファイルをダウンロードし、XML 形式に変換する必要がある。なお、ELSES で NRL ハミルトニアンを用いる場合、現状では単体系のみに対応している。

以下では金を例とし、ダウンロードしたパラメータファイルを `au_par_99.txt` とする。変換は `bin/elses-xml-generate-nrl-param` を以下のように使う。

```
prompt> elses-xml-generate-nrl-param au_par_99.txt au_par_99.xml Au
```

コマンドの引数は順番に、ダウンロードしたパラメータファイル、生成される XML ファイル名、元素名、である。XML ファイル名は任意である。

出力された XML ファイル (例では `au_par_99.xml`) を実行ディレクトリにコピーし、configuration XML ファイルの `system` タグ下に以下のように記述する。

```
<element name="Au" model="NRL" filename="au_par_99.xml"> </element>
```

3.4 構造ファイルの書式

構造ファイルを編集することで各原子の初期座標や初期速度、座標を固定するかなどを変更できる。サンプルデータとして用意されている水分子の設定ファイル `sample/H2O/H2O.xml` は、次のようになっている。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<structure name="H2O" mdstep="0">

<unitcell>
```



```

<vector unit="angstrom"> 10.0 0.0 0.0 </vector>
<vector unit="angstrom"> 0.0 10.0 0.0 </vector>
<vector unit="angstrom"> 0.0 0.0 10.0 </vector>
</unitcell>

<heatbath>
<massperatom unit="a.u."> 0.2500000000000000E+02</massperatom>
<position unit="a.u."> 0.0000000000000000E+00 </position>
<velocity unit="a.u."> 0.0000000000000000E+00 </velocity>
</heatbath>

<atom element="O" class="" motion="free">
<position unit="angstrom"> 0.000000000 0.000000000 0.000000000 </position>
</atom>
<atom element="H" class="" motion="free">
<position unit="angstrom"> 0.584410971 0.761619206 0.000000000 </position>
</atom>
<atom element="H" class="" motion="free">
<position unit="angstrom"> 0.584410971 -0.761619206 0.000000000 </position>
</atom>

```

ただし、このファイルは次の章で説明する付属ユーティリティプログラムで自動生成される（3.5 節参照）ので、このファイルを手作業で編集する機会は少ない。いくつかの基本的な項目の変更方法を以下で説明する。

3.4.1 unit cell の設定

unit cell の大きさは unit cell タグで指定する。この時に mylength タグの設定を行っていると、vector タグのオプションで unit="myLength" を指定することによって mylength の設定値を長さの単位に変更することができる。mylength 指定時のオプションに使えるのは unit="a.u." と unit="angstrom" となっており、指定が無い場合には原子単位系 ("a.u.") と解釈される。

```

<unitcell>
<mylength unit="a.u."> 0.410342853147435E+02 </mylength>
<vector unit="myLength"> 1.0d0 0.0000000000000000E+00 0.0000000000000000E+00 </vector>
<vector unit="myLength"> 0.0000000000000000E+00 1.0d0 0.0000000000000000E+00 </vector>
<vector unit="myLength"> 0.0000000000000000E+00 0.0000000000000000E+00 1.0d0 </vector>
</unitcell>

```

3.4.2 特定原子の座標を固定する場合

各 atom タグの motion 属性に fixed を指定するとその原子の MD 計算での運動を固定することができる。

```

<atom element="H" motion="fixed"> ... </atom>

```

3.4.3 原子の初期座標の設定

各 atom タグの中の position タグの数値でその原子の 3 次元座標を設定できる。座標の単位はタグの unit 属性に "angstrom" を指定すればオングストロームとなり、"a.u." を指定すれば原子単位系の長さとなり、また "internal" を指定すれば unitcell

で指定した基本格子ベクトルに対する内部座標となる。

3.4.4 原子の初期速度の設定

各 atom タグの中の velocity タグの数値でその原子の 3 次元速度を設定できる (オプション)。

3.5 構造ファイルの作成方法

XML 形式の構造データファイルは ELSESES 付属のユーティリティプログラム bin/elses-xml-generate を用いて簡単な XYZ 形式の原子座標データファイルから生成することができる。

3.5.1 XYZ 形式の分子座標データファイルの用意

ELSESES で計算する分子の XYZ 形式のデータファイルを用意してある前提で以下を進める。XYZ 形式とは分子の各原子の元素名と座標が以下のような簡単な形式で保存されたデータファイルである。このファイルでの座標の単位はオングストロームである。XYZ 形式ファイルの 2 行目はコメント行で何を書いても構いませんが、空行だとエラーになる場合がある。ファイル名は任意であるが、ここでは H2O.xyz としておく。

```
3
H2O
O  0.000000000  0.000000000  0.000000000
H  0.584410971  0.761619206  0.000000000
H  0.584410971 -0.761619206  0.000000000
```

3.5.2 構造データ生成指定ファイルの用意

この XYZ 形式のファイルから XML 形式の構造ファイルを生成するための以下のような別の XML 形式による生成設定ファイルを用意すること。ファイル名は任意であるが、ここでは generate.xml としておく。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<generate name="H2O">
  <unitcell>
    <vector unit="angstrom"> 10.0  0.0  0.0 </vector>
    <vector unit="angstrom"> 0.0  10.0  0.0 </vector>
    <vector unit="angstrom"> 0.0  0.0  10.0 </vector>
  </unitcell>

  <cluster structure="H2O.xyz">
  </cluster>
</generate>
```

このファイルの冒頭では、直方体形状の系の各辺の長さを unitcell タグで指定しておくこと。各辺のベクトルが直交座標となるように座標値を指定しておくこと。現在、平行六面体などの斜交座標での計算には対応していない。座標の単位は unit 属性で angstrom にすることもできる。

3.5.3 構造データ生成ユーティリティの実行

この構造データ生成設定ファイルに対してユーティリティープログラム `bin/elses-xml-generate` を次のように実行すると、構造データファイル `H2O.xml` が生成される。

```
prompt> elses-xml-generate generate.xml H2O.xml
```

ここでこのコマンドの第一引数が入力となる構造データ生成設定ファイルで、第二引数が出力となる XML 形式の構造データファイルである。

3.6 様々な計算モード

ELSES には §3.1.5 で説明した構造最適化モード・定温ダイナミクスモードの他にもいくつかの計算モードがあり、本節でこれについて説明する。

3.6.1 File conversion モード

構造ファイルの形式変換 (XML 形式 他形式) を行うだけの、計算モードである。入力ファイルを読み込んだのち、電子状態計算を一切行わずに、他形式構造ファイル (設定 XML ファイルの `position` タグで指定した形式) とリスタート用 XML ファイルを出力する。

設定 XML ファイルの `calc` タグの `mode` 属性を、下記のように「`file_conversion`」または「`conversion`」と指定すること。

```
<calc mode="file_conversion">
</calc>
```

このモードでは、入力ファイル読み込みルーチンを経由するため、入力ファイル (設定 XML ファイル・構造 XML ファイル) が正しく書かれているかどうかのチェックを行う際にも有効である。

3.6.2 Cell change only モード

Cell lengths (AX, AY, AZ) だけを変える計算モードで、理想的な volume expansion などに対応した計算ができる。このモードでは、構造 XML ファイルは `normalize` された座標として読み込まれ、cell lengths の絶対値は新たに定義される補助ファイルで与えられる。非周期系でも、長さのスケールを変えるという物理的意味を持っている。現段階では cell vectors が直交している場合だけに対応している。

Cell change only モードを使用する場合には、設定 XML ファイルで `calc` タグの `mode` 属性を、下記のように「`cell_change_only`」と指定すること。

```
<calc mode="cell_change_only">
</calc>
```

さらに、`calc` タグ内に、下記の要領で「`cell_change`」タグを追加すること。

```
<cell_change scheme="from_file" filename="input_cell_change.txt">
  <max_num_iter> 10 </max_num_iter>
</cell_change>
```

ここで `max_num_iter` は、cell lengths を変えていく際の iteration 数を表す。計算の際に必要な補助ファイル (上記例では `input_cell_change.txt`) は、下記のように記述すること。

```

51.136009312574d0  88.5526014925063d0  94.4863438887178d0
0   0.8   0.8   0.8
1   0.85  0.85  0.85
2   0.9   0.9   0.9
3   0.95  0.95  0.95
4   1.0   1.0   1.0
5   1.1   1.1   1.1
6   1.2   1.2   1.2
7   1.3   1.3   1.3
8   1.4   1.4   1.4
9   1.5   1.5   1.5
10  1.6   1.6   1.6

```

ここで、各行は以下を意味する。

1 行目： cell lengths の reference 値 (a.u. 単位のみ)。

2 行目以降の各行： step count, AX の scale 値, AY の scale 値, AZ の scale 値。

step count は、最初を step count=0 としたものであり、AX, AY, AZ の scale 値とは、1 行目の値で normalize した値をさす。たとえば、step count=0 での AX, AY, AZ の値は、reference 値の 0.8 倍 ($AX = 51.136009312574 \times 0.8$ a.u. など) になる。この時、input_cell_change.txt に記録がない step count のときは直前の記録の値が用いられる。また、max_num_iter タグ値以降の step count については、補助ファイルの記述は無視される。たとえば上記例では、(max_num_iter タグ値)=10 なので、補助ファイルで有効な記述は、step count=0, 1, 2, ..., 9 となり、step count=10 の記述は無視される。max_num_iter タグ値を大きくとる場合、例えば上記例で (max_num_iter タグ値)=100 と設定した場合には、step count=11 以降では step count=10 の時の cell lengths(上記補助ファイルの最終行の値) が設定され、全く同じ計算を繰り返すだけなので物理的な意味はない。

Cell change only モードを用いた結果は、例えば、以下のようにして見る事ができる：

```

> grep Energy Output.txt | grep summary | grep eV
Energy summary (eV/atom):      0      -66.97559540
Energy summary (eV/atom):      1      -70.63700976
Energy summary (eV/atom):      2      -72.74055923
Energy summary (eV/atom):      3      -73.80520398
Energy summary (eV/atom):      4      -74.19291064
Energy summary (eV/atom):      5      -73.74131018
Energy summary (eV/atom):      6      -72.47607900
Energy summary (eV/atom):      7      -70.96731433
Energy summary (eV/atom):      8      -69.56988810
Energy summary (eV/atom):      9      -68.50967860
(上記の各行は、行頭部分だけしか書かれていない)

```

上記の場合、step count=4、つまり AX, AY, AZ の scale 値が全て 1.0 のときが、エネルギー最小になっている。

4 出力ファイル -オプション-

ELSES ではオプション設定を行うことにより、下記の項目の出力を行うことができる。

4.1 DOS・固有エネルギーの出力

DOS の出力を行う場合には、計算を行うディレクトリに input_energy_mesh.txt という入力ファイルを用意する。このファイルには下に示すように DOS を計算する際のエネルギー範囲等を記述する。

```
input_energy_mesh.txt の例 ( #以降はコメント ):  
1          # Mode ( 0 for nothing, 1 for TDOS)  
6000       # Number of the energy mesh points  
-40        # Lowest energy mesh point in eV  
110        # Highest energy mesh point in eV  
0.1        # Level broadening parameters in eV
```

Mode=1 を指定し ELSES を実行すると、下記のファイルが出力される。

- output_dos.txt : total DOS
- output_eigen_levels.txt : 固有エネルギー

output_dos.txt には 1 行ごとに

tdos=	0	-50.0000000000	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
-------	---	----------------	--------------	--------------	--------------

という形式で出力される。各項目は、エネルギー点の通し番号、DOS(1/eV)、NOS、Energy NOS (eV) を表している。一方、output_eigen_levels.txt は 1 行ごとに、

1	-30.3114648255	1.0000000000
---	----------------	--------------

という形式で出力される。各項目は固有エネルギー番号 k 、固有エネルギー ε_k (eV)、占有数 $f_k(0 \leq f_k \leq 1)$ を表す。なお、この機能は現段階では GENO 型ハミルトニアンにたいする対角化ソルバーの計算でのみ有効である。

4.2 波動関数可視化用の中間ファイル出力

設定ファイルの output タグに下のように wavefunction タグを追加することにより、Gaussian Cube ファイル作成ツール (§6.3 で説明) で使用する中間ファイルの出力を行える。

```
<output>  
  <wavefunction filename="output_wavefunction.txt" />  
</output>
```

データは最終 MD ステップのみに書き出される。ファイル名は自由に決めれるが、Gaussiann cube 作成ツールではファイル名が「output_wavefunction.txt」であることを仮定しているので注意すること。なお、この機能は現段階では GENO 型ハミルトニアンに対する対角化ソルバーの計算でのみ有効である。

4.3 電子数の出力

設定ファイルの output タグに下のように output_atom_charge タグを追加すると、指定した間隔 (interval) で、原子毎の電子数が指定したファイル (output_atom_charge.txt) に出力される。

```
<output>
<atom_charge filename="output_atom_charge.txt" interval="2" />
</output>
```

ファイル出力では、1 行目に原子数、2 行目に MD ステップ数が出力され、3 行目以降に各原子の電子数が出力される。系が s 軌道と p 軌道のみからなる場合には、原子インデックス、元素記号、初期電子数 (n_ini)、電子数の初期値からのずれ (n-n_ini)、s 軌道の電子数、p 軌道の電子数、各 p 軌道の電子数、ハミルトニアン相互作用半径内の原子数が以下のように出力される。系が s、p、d 軌道からなる場合には、これに加え d 軌道の電子数と各 d 軌道の電子数が、p 軌道の電子数と各 p 軌道の電子数のあとにそれぞれ出力される。

例：sample/C6H6 での結果

```

12
mdstep=          0
  1   C   4.00000  0.0146392611  1.16593  2.84871  0.92298  0.92573  1.00000      12
  2   C   4.00000  0.0146410769  1.16593  2.84871  0.92504  0.92367  1.00000      12
  3   C   4.00000  0.0146380523  1.16593  2.84871  0.92504  0.92367  1.00000      12
  4   C   4.00000  0.0146392611  1.16593  2.84871  0.92298  0.92573  1.00000      12
  5   C   4.00000  0.0146410769  1.16593  2.84871  0.92504  0.92367  1.00000      12
  6   C   4.00000  0.0146380523  1.16593  2.84871  0.92504  0.92367  1.00000      12
  7   H   1.00000 -0.0146392814  0.98536  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000      12
  8   H   1.00000 -0.0146408406  0.98536  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000      12
  9   H   1.00000 -0.0146382684  0.98536  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000      12
 10   H   1.00000 -0.0146392814  0.98536  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000      12
 11   H   1.00000 -0.0146408406  0.98536  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000      12
 12   H   1.00000 -0.0146382684  0.98536  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000      12
```

また、標準出力に、各 MDstep ごとに電子数の初期値からのずれの最大値と最小値が以下のように出る。

```
INFO:Max of elec_num ( n - n_ini )=          0          5  0.01464
INFO:Min of elec_num ( n - n_ini )=          0          8 -0.01464
```

数値は、mdstep 数、最大 (最小) 値を与える原子インデックス、最大 (最小) 値を表している。

5 各種可視化ソフトへの対応

ELSES では、以下の可視化ソフトに対応した出力が可能となっている。詳しい操作方法は、各ソフトのマニュアルを確認する。それぞれのソフトウェアで対応しているファイル形式が異なるので、§3.1.11 を参照し、適切なファイル形式で出力すること。この章では、rasmol によるバッチ処理について説明する。なお、Jmol でも同じスクリプト言語によるバッチ処理が可能である。

- rasmol (<http://openrasmol.org/>)
- Jmol (<http://jmol.sourceforge.net/>)
- molden (<http://www.cmbi.ru.nl/molden/molden.html>)
- xcrysden (<http://www.xcrysden.org/>)
- VMD (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>)
- VESTA (http://www.geocities.jp/kmo_mma/crystal/jp/vesta.html)

5.1 rasmol によるバッチ処理

rasmol はバッチファイルを使った連続処理が可能で、以下その例を説明する。内容的には、時系列的な構造データファイル (pdb 形式) を順次読み込み、可視化させていくと同時に画像ファイル (gif 形式) に変換していくというものである。

5.1.1 シミュレーション実行前の設定

シミュレーション実行前に、config.xml の中で、出力インターバルを設定する。また、§3.1.11 にある通り、出力ファイル形式を pdb に設定すること。

```
<position filename="H2O-position.pdb" interval="4" />
```

上記の例だと、4MD step ごとに出力される。(1, 5, 9, 13,..... iteration.....)

5.1.2 バッチ処理に必要なファイル

シミュレーション終了後、各 MD ステップごとのデータファイル (PDB 形式) が、多数出力される。ファイル名は例えば「snap0000000001.pdb」で、番号部分は MD ステップの数を表す。他に、以下の rasmol 用スクリプトファイルができる。

- rasmol-batch.txt
- rasmol-setting.txt

5.1.3 rasmol の起動

バッチファイルがあるディレクトリで、rasmol を起動する。可視化画面とコマンドラインが開くので、コマンドラインで

```
RasMol > set write on
```

を実行する (ファイルへの書き込みを許可する、という意味である)。

5.1.4 rasmol でのバッチ処理

rasmol コマンドライン上で、

```
RasMol > script rasmol-batch.txt
```

を実行する。すると、snapshot が順次読み込まれ、表示され、静止画像ファイルに変換される。

例 ; snap0000000001.pdb snap0000000001.gif

5.1.5 バッチファイルの中身について

rasmol-batch.txt はバッチファイルで、以下が 1snapshot ごとの動作を表す。

```
zap
set specular on
background white
load pdb snap0000000001.pdb
echo load snap0000000001.pdb
script rasmol-setting.txt
write gif snap0000000001.gif
```

最後の行の「gif」の部分を変えると、gif 以外の画像を生成できる。詳細は、rasmol の解説 WebPageなどを参照。

一方、rasmol-setting.txt は、描画の設定で、現在は、以下の中身になっている。

```
select all
color green
spacefill 150
wireframe 100
#pause
```

最終行の「#」はコメントアウトを意味し、最終行は無効になっている。「#」をはずすと、1 スナップショットごとに動作が一時停止し、リターンキーを押すと次のスナップショットに移る。詳細は、rasmol の解説 WebPageなどを参照。

6 ユーティリティーツール

ELSES にはいくつかのユーティリティーツールが実装されているので、各ツールに関する簡単な説明を以下に記述する。尚、下記ツールのうち、mkSupercell.pl には、perl および perl 用 libXML モジュールが必要である。これらのインストール方法については他文献を参照。

6.1 スーパーセル作成ユーティリティー: mkSupercell.pl

mkSupercell ユーティリティーは、ユニットセルの定義を記述した xml ファイル (ユニットセルファイル) とスーパーセルの並進ベクトルの定義を記述した xml ファイル (スーパーセルファイル) から、そのスーパーセルに対応する ELSES 用の入力ファイルを作成する。

ユニットセルファイル (unitcell.xml) の形式は以下のようになっており、unit cell タグ内でユニットセルのサイズ、含まれる原子種およびその座標を記述すること。

```
<unitcell>

<vector unit="angstrom"> 10.0 0.0 0.0 </vector>
<vector unit="angstrom"> 0.0 10.0 0.0 </vector>
<vector unit="angstrom"> 0.0 0.0 10.0 </vector>

<atom element="O" class="" motion="free">
<position unit="angstrom"> 0.000000000 0.000000000 0.00000000 </position>
</atom>

<atom element="H" class="" motion="free">
<position unit="angstrom"> 0.584410971 0.761619206 0.00000000 </position>
</atom>

<atom element="H" class="" motion="free">
<position unit="angstrom"> 0.584410971 -0.761619206 0.00000000 </position>
</atom>

</unitcell>
```

スーパーセルファイル (supercell.xml) の形式は以下のようになっており、structure タグ内で熱浴の情報と並進ベクトルの情報を記述する必要がある。

```
<structure>

<heatbath>
<massperatom unit="a.u."> 0.2500000000000000E+02</massperatom>
<position unit="a.u."> 0.0000000000000000E+00 </position>
<velocity unit="a.u."> 0.0000000000000000E+00 </velocity>
</heatbath>

<unitcell>
<vector unit="angstrom"> 50.0 0.0 0.0 </vector>
<vector unit="angstrom"> 0.0 50.0 0.0 </vector>
<vector unit="angstrom"> 0.0 0.0 50.0 </vector>
```

```
</unitcell>

</structure>
```

これら二つのファイルを用意しておき、スーパーセル作成ユーティリティを (/bin/mksupercell.pl) を実行する。使い方は以下の通りである。

```
prompt> mksuprecell.pl unitcell.xml supercell.xml
```

コマンドを実行すると、ユニットセルを展開した構造が supercell_new.xml に出力される。

この時に、“ForBandCalc.txt” というファイルも出力されるが、これは §6.2 で説明するバンド計算ユーティリティで使用する入力ファイルになる。

6.2 バンド計算ユーティリティ：band

バンド計算ユーティリティ band(/bin/band) は以下のファイルを入力としてバンドを作成するツールである。

- ForBandCalc.txt: 構造データファイル
- OverlapAndHamiltonian.txt: ハミルトニアンと重なり積分の情報が記述されているファイル
- SymLine.txt: 対称線の情報が記述されているファイル

これらの中で ForBandCalc.txt は、§6.1 で説明した mkSupercell.pl によって作成される。SymLine.txt には次のような形式で対称線の情報を記述すること。(#以下はコメントである)。

```
# number of symmetric lines
6
# number of points between b_start and b_end, b_start(x,y,z), b_end(x,y,z)
# all first and last points of symmetric lines should be given in a unit of 2*pi/aLat
# where aLat=|a1| (ai are the translation vectors of Bravais lattice (a.u.))
40  0.5  0.5  0.5  0.0  0.0  0.0      #L-G
40  0.0  0.0  0.0  0.0  1.0  0.0      #G-X
20  0.0  1.0  0.0  0.5  1.0  0.0      #X-W
30  0.5  1.0  0.0  0.5  0.5  0.5      #W-L
20  0.5  0.5  0.5  0.0  0.75  0.75    #L-K
40  0.0  0.75  0.75  0.0  0.0  0.0      #K-G
```

バンド計算の実行手順としては、まず mkSupercell.pl を用いて構造データファイルと ELSES から行列成分を抜き出すための ELSES 用入力ファイルを作成する (§6.1 を参照)。次に、ここで作成された supercell_new.xml を入力ファイルに指定した config ファイルを作成し、ELSES を実行する。ELSES を用いて行列成分の情報を抜き出す場合には、オプションとして -band をつけて実行を行う。

```
prompt> elses -band config.xml
```

このように実行すると OverlapAndHamiltonian.txt が出力される。

以上のようにして用意した入力ファイルをカレントディレクトリに置き、ユーティリティ band を実行することにより、バンド計算が行われる。

```
prompt> /bin/band
```

バンド計算の結果は“EigenEnergy.txt”に以下のように出力される。

```
# kx ky kz K E1 E2 E3 .....
```

横軸 K

縦軸 E1, E2, E3,... in eV-unit

サンプルとしてダイヤモンド構造に関する入力、出力ファイルが

```
/tool/band/sample/
```

に置いてある。

6.3 Gaussian Cube ファイル作成ユーティリティー: elses-generate-cubefile

elses-generate-cubefile(/bin/elses-generate-cubefile) は波動関数可視化用のデータを Gaussian Cube 形式で出力する。このユーティリティーは ELSESES で出力される可視化用中間ファイル (§4.2) を入力ファイルとして必要とする。

実行時に引数を与えて、出力する固有状態を指定できる。複数の固有状態を出力する場合は

```
prompt> elses-generate-cubefile N1 N2
```

とすることによって、N1 番目から N2 番目までの固有状態が出力される。出力されるファイル名には“eigen_state_000003.cube”といったように、固有状態の番号が付く。引数をひとつだけ与えた場合には、その番号の固有状態のみが出力される。

```
prompt> elses-generate-cubefile N1
```

また、引数を指定しなかった場合には全ての固有状態が出力される。

```
prompt> elses-generate-cubefile
```

また、入力ファイル“input_mesh_grid.txt”を用意しておくことにより、Gaussian Cube ファイルを作成する際のメッシュグリッドの設定が可能である。ファイルには x, y, z 方向のメッシュ数を以下のように 1 行に記述すること。

```
60 70 80 # Mesh points in the x,y,z directions
```

この入力ファイルがない場合には、メッシュ数は 3 方向とも 80 に設定される。

6.4 DOS 計算ユーティリティー: elses-dos

elses-dos (/bin/elses-dos) はファイルからエネルギー固有値を読み取り DOS を書くユーティリティーである。入力ファイルとしてエネルギー固有値が入っているファイル (levels.txt) と、DOS の計算条件を指定するファイル (input_energy_mesh.txt) が必要となる。DOS の計算条件を指定するファイルの形式は、ELSESES で DOS を計算する際に用意するものと同じある (§4.1 を参照)。実行の際には出力に含まれているレベルの数 N の入力を求められる。

```
prompt> elses-dos
Input # of levels
```

出力ファイルは output_tdos.txt となる。

現在、Gaussian の出力ファイルから固有値を読み取る事にのみに対応している。この際には出力ファイルから“Orbital energy”という文字列を探し、その次の行からレベルを読み込んでいるので、適宜ファイルを編集する必要がある。

6.5 平均二乗変位計算ツール: msd

平均二乗変位計算ツール (`/bin/msd`) は、原子座標ファイル (`position.xyz`) と MSD 計算条件ファイル (`input_msd.txt`) を入力ファイルとして、全原子に対する平均をとった平均二乗変位を計算し、ファイル (`output_msd.txt`) に出力する。コマンドの実行は両入力ファイルを用意して、

```
prompt> msd
```

とする。また、MSD 計算条件ファイルは以下のように記述する必要がある。

```
240      # natom: 全原子数
10000    # total_md_step: 全 MD ステップ数
500      # tmax: MSD の計算に使用する MD ステップ数
10       # it0: サンプリング間隔
500      # t0max: 保存する初期座標の数
10.0     # dt: MD ステップの時間間隔 [フェムト秒]
```

ここで、上記の数値は `position.xyz` ファイルに出力された情報に基づいて入力する必要がある。つまり、MD 計算を 1fs 刻みで 10000 ステップ行い、ファイル出力は 10fs 毎に 1000 回行った場合には、全 MD ステップ数部分は 1000、MD ステップの時間間隔部分は 10.0 として入力を行う。また、 $it0 \times t0max > tmax$ である必要がある。

6.6 原子座標抽出ツール: xyz2xml.pl

MD 計算等を行った際の原子座標出力ファイル `position.xyz` から、特定のスナップショットを抽出して構造ファイルを作成したい場合は、原子座標抽出ツール (`/bin/xyz2xml.pl`) を使用する。このツールを使用する際には `position.xyz` とリスタート用に出力されるファイル `restart.xml` を用意する。N 番目のスナップショットを取り出したい場合には、

```
prompt> xyz2xml.pl position.xyz restart.xml N
```

とコマンドを実行することにより、`restart_new.xml` に N 番目のスナップショットに対応する構造ファイルが出力される。尚、スナップショット番号の指定を省略した場合には最後のスナップショットが xml 形式に変換され出力される。

6.7 原子座標変換ツール: xyz2xyz.pl

MD 計算等を行った際の `position.xyz` ファイルには、周期境界条件下の計算であっても、単位胞内の座標に還元されずに原子位置が出力される。これを単位胞内の座標に還元する場合には原子座標変換ツール (`/bin/xyz2xyz.pl`) を使用する。`position.xyz` ファイルと計算に用いた構造ファイルを用意し、以下のコマンドを実行することにより、還元された座標が `position_new.xyz` に出力される。

```
prompt> xyz2xyz.pl 構造ファイル.xml position.xyz
```

6.8 XML チェックツール:xml-check

設定 XML ファイル (典型名 `config.xml`) や構造 XML ファイル (典型名 `structure.xml`) に含まれるタグ名のスペルが正しいかどうかをチェックするツール (`bin/xml-check`) である。シミュレーションを実行する前に、

```
prompt> xml-check (チェックしたい XML ファイル)
```

とすることで、ファイルのチェックができる。本ツールの実行結果例を下に示す。

- 実行結果の例 (sample/C6H6/config.xml の結果) :

```
XML tag checker
scanned file name=config.xml
-----Tag check starts-----
tag starts:config tag starts:system tag starts:cluster
( 中略 )
tag ends:position
tag ends:outputm
tag ends:config
-----Tag check ends-----
scanned file name=config.xml
RESULT: OK !
```

- 実行結果の例 (sample/C6H6/config.xml で、optimization タグを「optimisation」と spell miss したもの)

```
XML tag checker
scanned file name=config.xml
-----Tag check starts-----
tag starts:config tag starts:system tag starts:cluster
( 中略 )
unknown tag=optimisation
( 中略 )
tag ends:outputm
tag ends:config
-----Tag check ends-----
scanned file name=config.xml
RESULT:ERROR:unknown tag is found!
```

この xml-check ツールには本 quickstart に含まれるタグはすべて登録されているが、実験的機能のタグは登録されていないものがあり、「unknown tag」となる場合がある。入力ファイルのチェックとしては、本ツール利用の前に、構文チェックを行うことを推奨する。構文チェックの方法としては、

- (1) 一部のウェブブラウザ (Firefox など) にドラッグする、
- (2) xmllint (UNIX コマンド) を利用する (§8.2)、

といったものがある。

また、XML のエラーには種類があり、検出には限界がある。以下の (b) 以降は ELSESES 実行時にエラーにならない場合がほとんどなので、上記の事前チェックを推奨する。

- (a) XML 構文の間違い

正 : <calc></calc>

誤 : <calc></kalc> (タグの始まりと終わりが対応していない)

正 : <calc><solver></solver></calc>

誤 : <calc><solver></calc> (solver タグが終わっていない)

構文チェック (上記 (1), (2)) で検出可能。ELSESES 実行時にも、たいていエラーとなる。

- (b) タグ名のスペル間違い

正 : <calc></calc>

誤 : <kalc></kalc> (タグ名を calc kalc とスペルミスしている)

本ツール (xml-check) で検出可能。

(c) タグ階層性の間違い

正 : `<calc><solver></solver></calc>` (calc タグの内部に solver タグがある)
誤 : `<calc></calc><solver></solver>` (calc タグと solver タグが並立している)
一部のケースは、本ツール (xml-check) で検出可能。

(d) 属性 (attribute) の間違い

正 : ``
誤 : `` (属性名を unit vnit とスペルミスしている)
今のところ、検出不可能。

7 重要な更新

本章では、重要な更新、特に下位互換性をもたない仕様変更をまとめている。

7.1 v0.03.10

下記にあった実行ファイル (ツール類) を、bin 下に移動した。

```
tool/elses-xml-generatenrl-param  
tool/elses-xml-generate  
tool/Perl/mksupercell.pl  
tool/band/src/band  
tool/plot_eigenstates/src/elses-generate-cubefile  
tool/DOS/elses-dos  
tool/Perl/xyz2xml.pl  
tool/Perl/xyz2xyz.pl
```

7.2 v0.03.12

標準出力ファイル (「elses > log.txt」としたときの log.txt) に出されていた情報の多くを、ログファイル (log-node00000.txt) に出力するように変更した。現在のところファイル名は固定である。今後もこのような移動は特にアナウンスをせずに順次行っていく予定である。最終的には、標準出力ファイルは、エラーメッセージなど、特殊なものだけが出ることになる。

7.3 v0.03.13

非直交基底システム (GENO, NRL) と直交基底システム (上記以外) とで、従来は default solver が違っていたが、これを eigen に統一した (従来は非直交系では eigen、直交系では krylov)。

またこれに伴い、sample ファイルでの動作が従来と同じになるように、直交基底システムでは、config ファイルの calc タグ内に

```
<solver scheme="krylov"> </solver>
```

を追加した。

7.4 v0.03.15

サンプルデータ (/sample/) を再構成した。非 GENO システムのデータは、下位ディレクトリ (/sample/sample_non_gen/) に移動した。

7.5 v0.03.16

サンプルデータ (/sample/) を再構成し、以下のようにした。

```
/sample/sample_genom/  
/sample/sample_genom_mpi/  
/sample/sample_non_genom/  
/sample/shell_script/
```

それぞれ、GENO 系 sample、MPI 計算における GENO 系 sample、非 GENO 系 sample、関連するシェルスクリプト、を格納している。

7.6 v0.07.00

ビルド方法の若干のヘンソ校。詳細は、Sec.??を参照。

8 トラブルシューティング

8.1 コンパイルがうまくいかない場合

通常は §1 で説明した方法でコンパイルできるが、それがうまくいかない場合には、下記コマンドを逐次実行し、報告のこと。ただし、「make」の部分は必要に応じて「gmake」に置き換える。

```
prompt> make clean
prompt> make xml
prompt> make elses
prompt> make tool
prompt> make tool-LDOS
```

8.2 実行時エラー : 「XML parsing Error」

実行時エラーとなり標準出力に「XML parsing Error」と出る場合、入力用 XML ファイルが XML の文法を満たしていない (例えば、タグが閉じていない)。多くの場合、もう少し詳しいエラーメッセージがでていて、間違った箇所が分かる。XML 文法は、一般的な XML の解説文書を参考にする。また、汎用の XML 文法チェッカー (例えば xmllint) を使ってみると、間違いを発見しやすい場合がある。

xmllint チェッカーの使い方は、linux のコマンドラインならば、

```
prompt> xmllint -noout XML ファイル
```

で利用できる。

8.3 実行時エラー : 「alloc. error」

実行時エラーとなり標準出力に「alloc. error」と出る場合には、メモリ不足により配列の確保 (allocation) に失敗している。

8.4 Intel fortran compiler 11 のバグについて

Intel compiler version 11.0 以降、version 11.1.056 未満のものは、コンパイラの不具合のために ELSESES のコンパイルが途中で止まる。ユーザーから提供された、この問題に対するパッチをパッケージに同梱している。該当するバージョンをお使いの方は elses-ice-20090606.ReadMe を一読の上 elses-ice-20090606.patch を適用することを推奨している。

Intel compiler version 11.1.056 でも、以下のようなメッセージが出てコンパイルが途中でとまる場合がある。

```
elses-md-main.f90(26): internal error: Please visit
'http://www.intel.com/software/products/support' for assistance.
call get_elapse_wall_clock_time(elapse_time)
[ Aborting due to internal error. ]
```

これも、コンパイラの不具合であり、基本的にはコンパイラをバージョンアップする必要がある。しかし、そのまま (make clean などせず) 何度か make を繰り返すと make できる場合があるので、何度か試してみることをすすめる。

8.5 Double- ζ パラメータの設定エラー

Double- ζ 関数 (§3.2) を決定するパラメーターである、 ζ_1 , ζ_2 , c_1 , c_2 は独立ではなく、基底関数の規格化からくる条件がある。規格化条件を満たさないままの設定で実行した場合には、下記に示したような規格化条件を正すためのメッセージが表示され計算が終了する。

```
c1,c2= 7.23130306240707E-01 6.00000000000000E-01
z1,z2= 2.12500000000000E+00 2.50000000000000E+01
sqrt(z1.z2) = 9.60113094396169E-01
Suggested c1,c2 = 7.53172006986839E-01 6.24926379508812E-01
ERROR:Please correct the element XML file for the double-zeta parameters
renormalizeDoubleZeta in SetAtomParameters: erroneous normalization of double zeta
```

上記で提案された c_1 , c_2 は当初指定した c_1/c_2 を保ったまま規格化条件を満たすので、これを設定値とすると計算が実行できる。

また参考として、TB パラメーター設定を多数要素について与えている論文 (Cerdà and Soria, Physical Review B 61, 7965 (2000)) に記載されている TB パラメータの設定方法を以下で説明している。こちらの論文の中では非対角要素に関連したパラメーター K を一定にするモデルで (設定方法: §3.1.10)、s, p, d 基底に対して double- ζ 関数を用いている。Double- ζ 関数を決定するパラメーターである、 ζ_1 , ζ_2 , c_1 , c_2 が論文中の Table I にまとめてあるが、局在した成分を表す方の $\zeta(\zeta_2)$ の値が、一部記載されていません。論文には、 $\zeta_2 > 20$ の場合は (値によって本質的な影響はないので) 表に含めないとの記述があり、追試した範囲では、確かに結果にほとんど影響を与えない。しかしながら、実際に ELSESES で計算を行う際には規格化条件を満たすパラメーターを設定する必要がある。

以下、炭素の 2s 軌道を例に具体的なパラメーター設定の方法を説明する。論文の中では $\zeta_1=2.125$ au, $c_1=0.790$ の記述はあるが、 ζ_2 , c_2 の値は省略されている。これは先述した理由によるもので、 ζ_2 , c_2 がゼロという意味ではない。 $c_2=0$ ならば規格化条件から $c_1=1$ でなければならないが、文献の値からそのような設定ではないことがわかる。また、ELSESES では $c_2=0$ に設定した場合には $c_1=1$ の single- ζ 計算と解釈され、 ζ_2 の値は無視されるので注意すること。

このような場合には、以下のようにして適切にデータを補う必要がある。例えば試行値として、 $\zeta_2=25$ 、 $c_2=0.72$ としてみる。この c_2 はいい加減にいれたので規格化条件を満たさず、ELSESES を実行した際には、本項の最初にあげたメッセージがでて計算がとまる。なので、このエラーメッセージで出力された c_1 , c_2 を新たに設定することで、計算を実行することができる。