

第一原理計算ソフト入力形式変換アプリ C-Tools

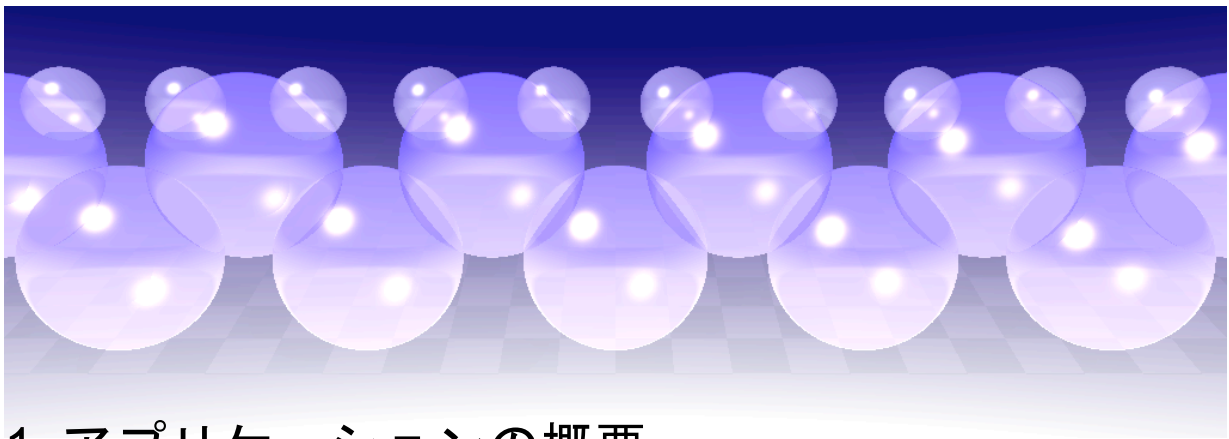
プログラム説明書

2015 年 6 月



---- 目次 ----

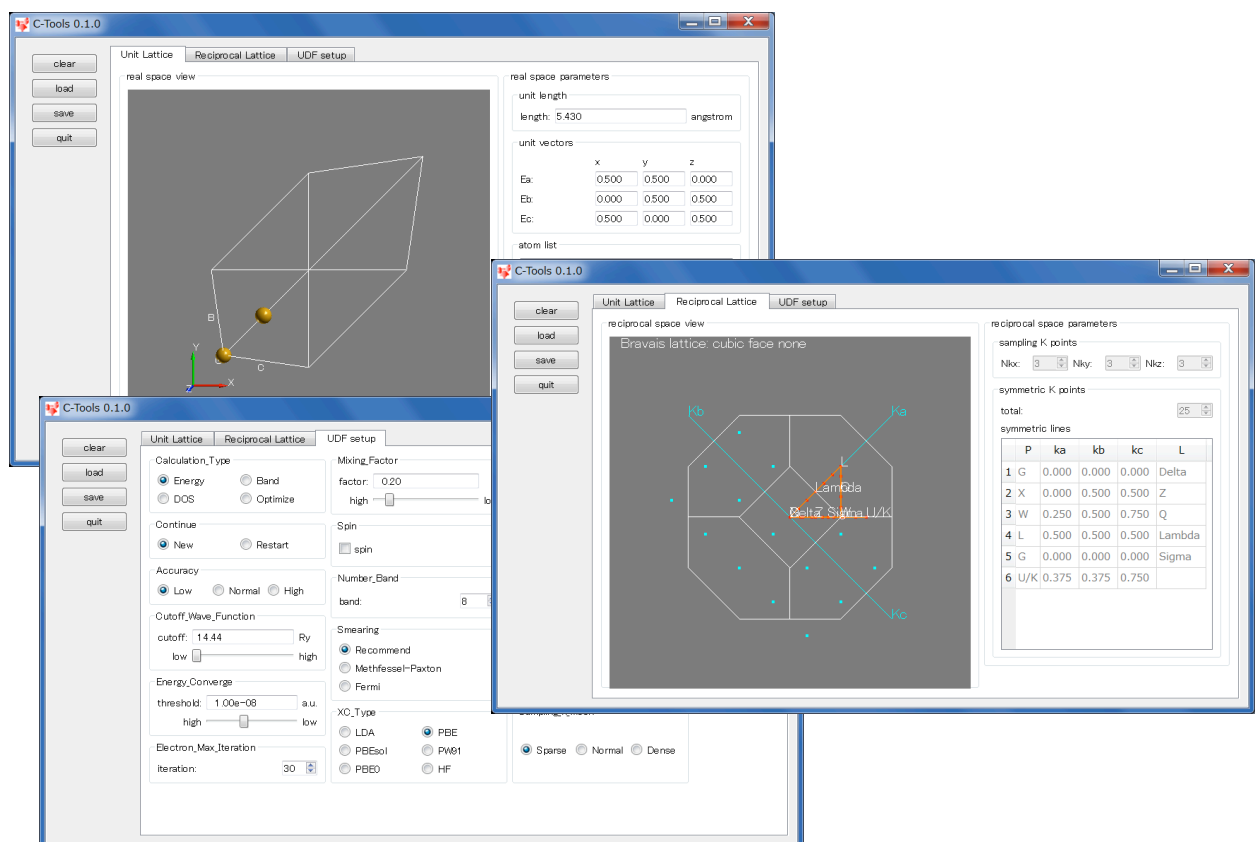
1. アプリケーションの概要.....	1
1.1. アプリケーションの目的.....	1
1.2. ウィンドウ画面構成.....	2
1.3. データ変換.....	3
1.4. 機能一覧.....	4
1.5. 実行環境.....	4
2. ファイル変換の実行.....	5
2.1. コマンドラインからのファイル変換.....	5
2.2. GUI アプリケーションの起動.....	6
2.3. ファイルの読み込み.....	8
2.4. 原子構造の確認.....	9
2.5. 原子構造の変更.....	10
2.6. 逆格子形状の確認.....	11
2.7. 計算パラメタの確認と調整.....	12
2.8. 設定ファイルの保存.....	12
3. データ形式.....	13
3.1. 統合密度汎関数理論形式.....	14
3.2. UDF 形式と xTAPP 形式の間でのデータ変換.....	23
3.3. UDF 形式と VASP 形式の間でのデータ変換.....	37
3.4. UDF 形式と OpenMX 形式の間でのデータ変換.....	53
3.5. UDF 形式と RSDFT 形式の間でのデータ変換.....	67



1. アプリケーションの概要

1.1. アプリケーションの目的

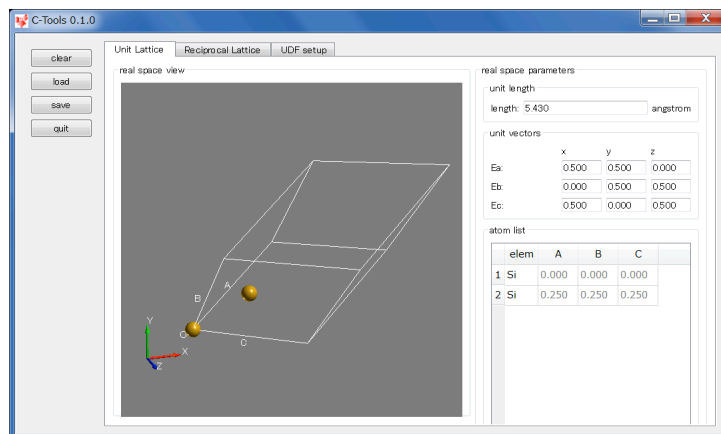
本アプリケーションは電子状態計算の初学者が第一原理電子状態計算プログラムのxTAPP、VASP、OpenMX、RSDFT、QMASを用いた計算を容易に始められるようにすることを目的に、それぞれの計算プログラムの設定ファイルをほぼ自動的に生成するものです。利用者は計算する系の原子構造を3次元コンピュータグラフィックス(3DCG)によって視覚的に確認しながら、電子状態計算の基本的な計算パラメータをグラフィカルユーザーインターフェース(GUI)で調整し、各計算プログラム用の設定ファイルとして保存できます。また、各計算プログラムの設定ファイルを他の計算プログラムの設定ファイルに変換することもでき、複数の計算プログラムのそれぞれの特徴を活かした計算比較を容易にします。



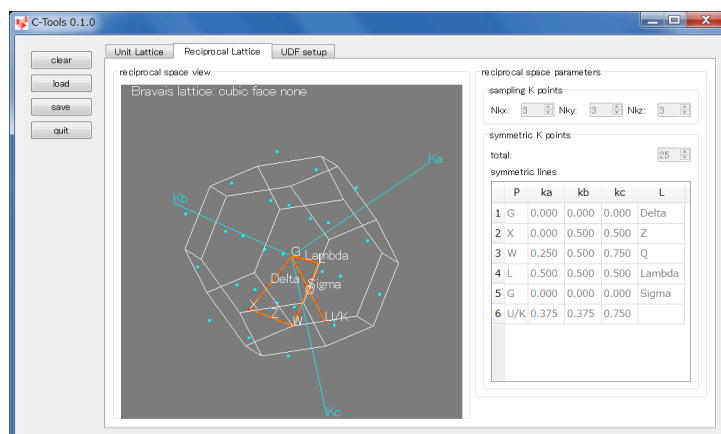
図：本アプリケーションによる GUI と 3DCG による電子状態計算の設定・確認の様子

1.2. ウィンドウ画面構成

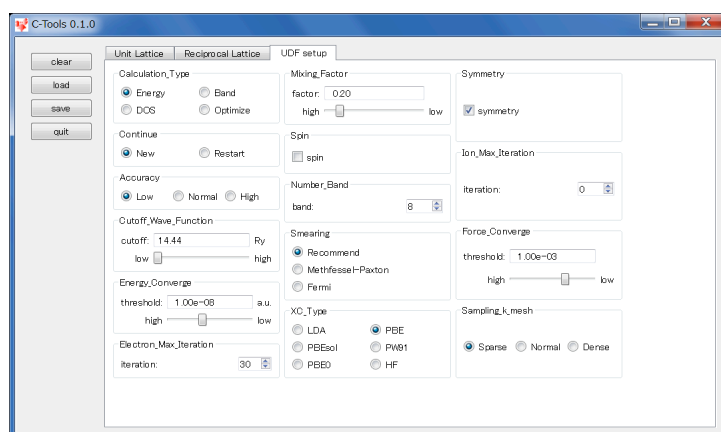
本アプリケーションの画面はタブにより多重化され、それぞれのタブ画面には下図のとおり計算対象の系の原子の配置、逆格子の形状、電子状態計算パラメタの一覧が表示されます。



実格子タブに表示される原子の配置



逆格子タブに表示される逆格子の形状

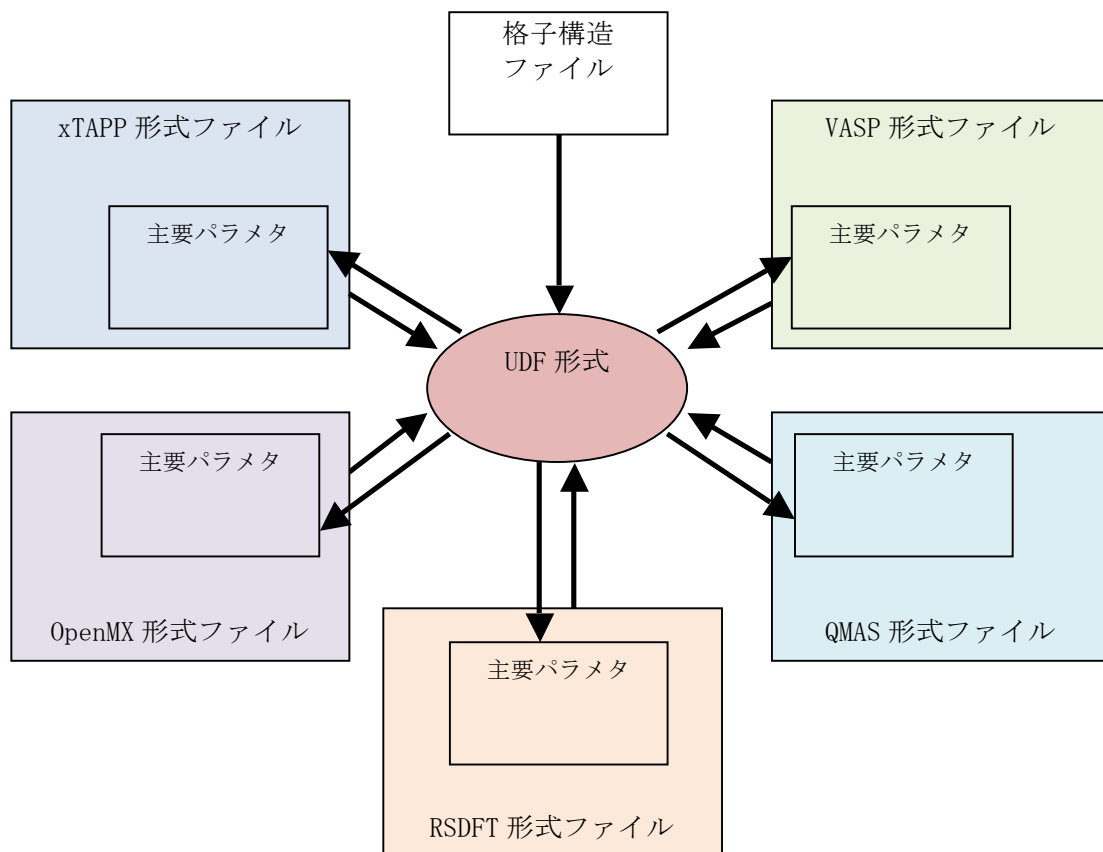


電子状態計算パラメタ設定タブに表示される計算パラメタ一覧

1.3. データ変換

本アプリケーションは原子構造を CIF 形式もしくは XYZ 形式から読み込みます。そして、電子状態計算のパラメタを本アプリケーションが定める統合密度汎関数理論形式 (UDF 形式) の設定ファイルから読み込みます。UDF 形式は各種の電子状態計算プログラムで共通となる普遍的で基本的な最小限のパラメタで構成されるものです。

本アプリケーションでは UDF 形式の基本的なパラメタが表す電子状態計算の概要が各電子状態計算プログラムで計算されるように各プログラムの形式で設定ファイルに保存されます。また、この逆に各電子状態計算プログラムの設定ファイルが読み込まれ、UDF 形式に変換されたうえで、他の形式に変換されてその設定ファイルに保存されます。



図：本アプリでのデータ変換の概念図

1.4. 機能一覧

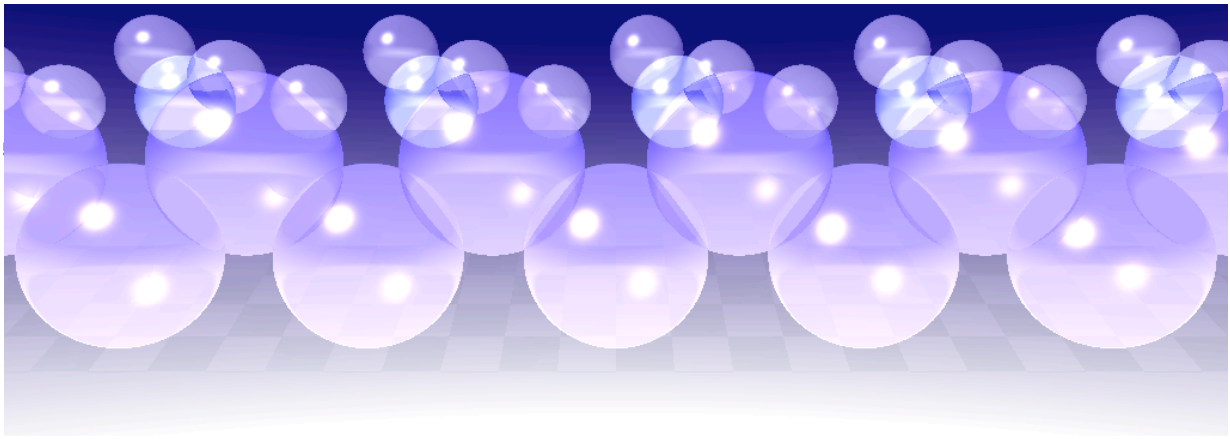
本アプリケーションの可視化・調整の主な機能は以下の通りです。

- 結晶構造データ形式(CIF 形式)ファイルから単位胞の原子配置の三次元可視化
- 分子構造データ形式(XYZ 形式)ファイルから分子の原子配置の三次元可視化
- 結晶格子ベクトルの変更
- 原子の元素名と内部座標の変更
- 可視化画像の BMP 形式画像ファイルへの保存
- 結晶格子のブラベ格子判定と推奨バンド図経路の自動設定
- 結晶格子と原子座標から対称操作を自動設定
- xTAPP 形式の設定ファイルの読み込み、UDF 形式への変換、推奨値の自動設定
- VASP 形式の設定ファイルの読み込み、UDF 形式への変換、推奨値の自動設定
- OpenMX 形式の設定ファイルの読み込み、UDF 形式への変換、推奨値の自動設定
- RSDFTX 形式の設定ファイルの読み込み、UDF 形式への変換、推奨値の自動設定
- UDF 形式のパラメタの確認・変更
- xTAPP 形式の設定ファイルの書き出し、UDF 形式からの変換
- VASP 形式の設定ファイルの書き出し、UDF 形式からの変換
- OpenMX 形式の設定ファイルの書き出し、UDF 形式からの変換
- RSDFT 形式の設定ファイルの書き出し、UDF 形式からの変換

1.5. 実行環境

本アプリケーションは以下の OS 環境のパソコン・ワークステーション機器で実行できます。

- Linux OpenSUSE
- MicroSoft Windows7
- MacOS X



2. ファイル変換の実行

2.1. コマンドラインからのファイル変換

Linuxなどのコマンドライン環境では本アプリケーションのプログラム名に変換での変換元ファイルと変換先ファイルを指定して実行することでGUI画面を開くことなく変換が実行されます。

```
$ c-tools -tapp Si.cg -openmx Si.dat
```

ここで与える各引数は以下の通りです。

第1引数：変換元ファイルの形式名

第2引数：変換元ファイルのファイル名

第3引数：変換先ファイルの形式名

第4引数：変換先ファイルのファイル名

ここで指定できる形式名は以下の通りです。

形式名	形式
-udf	統合設定ファイル形式
-tapp	xTAPP 設定ファイル形式
-vasp	VASP 設定ファイル形式
-openmx	OpenMX 設定ファイル形式
-rsdft	RSDFT 設定ファイル形式

VASP, RSDFT では設定ファイルのファイル名が固定されていますので、変換先として指定のファイルのディレクトリに固定のファイル名で出力されます。

2.2. GUI アプリケーションの起動

2.2.1. コマンドラインからの起動

Linuxなどのコマンドライン環境では本アプリケーションのプログラム名を実行することで本アプリケーションが起動されます。WindowsやMacOS Xでのプロンプト画面でも同様に起動されます。

```
$ c-tools
```

また、以下のように起動直後に読み込まれるファイルを指定できます。

```
$ c-tools Si.cif
```

起動直後に読み込まれたファイルの内容が表示されます。

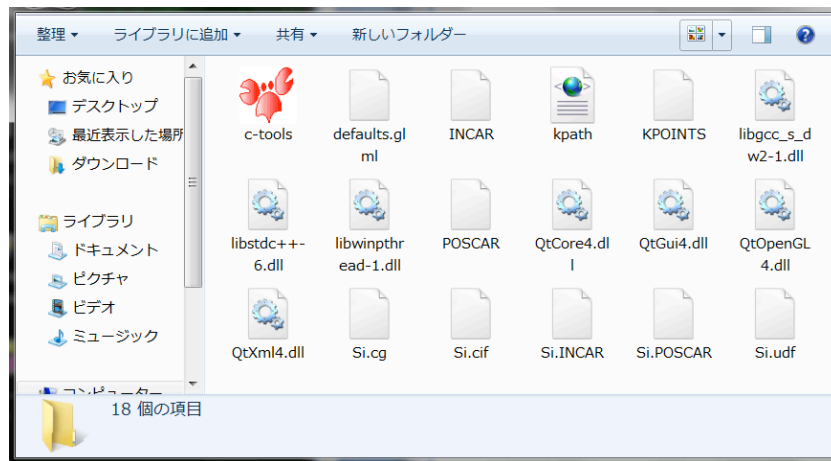
読み込めるファイルの形式は以下の通りです。

形式はファイルの拡張子とファイルの冒頭の記述内容から自動的に判定されます。

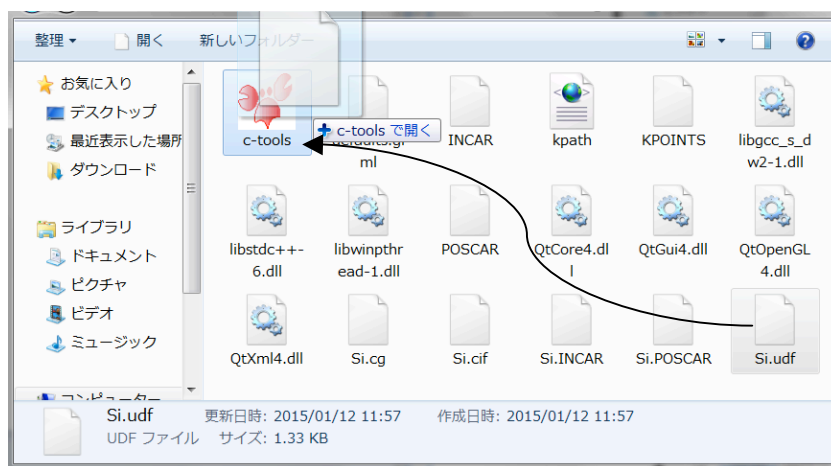
拡張子	形式	内容
.cif	CIF 形式	結晶の格子ベクトル、原子の内部座標、対称操作
.xyz	XYZ 形式。	分子の原子の座標、格子ベクトルも補足可能
.udf	統合設定ファイル形式	基本的な電子状態計算の計算パラメタ
.cg	xTAPP 設定ファイル形式	xTAPP の計算パラメタ
INCAR	VASP 設定ファイル形式	VASP の計算パラメタ
.dat	OpenMX 設定ファイル形式	OpenMX の計算パラメタ
fort.1	RSDFT 設定ファイル形式	RSDFT の設定ファイル形式

2.2.2. エクスプローラからの起動

Windows や Mac OS X などのファイル表示画面では下図のように本アプリケーションの実行ファイルのアイコンをクリックすることで本アプリケーションが起動されます。

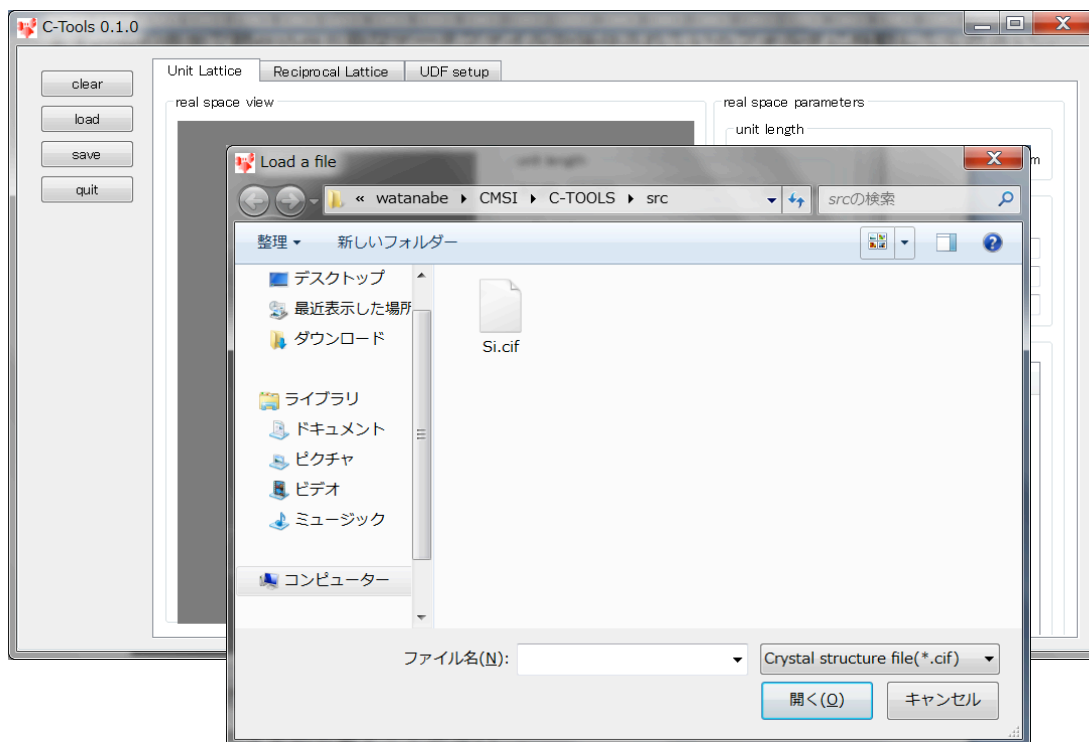


また、読み込みたいファイルのアイコンをドラッグして本アプリケーションの実行ファイルのアイコンに重ねると、起動直後にそのファイルが読み込まれ内容が表示されます。

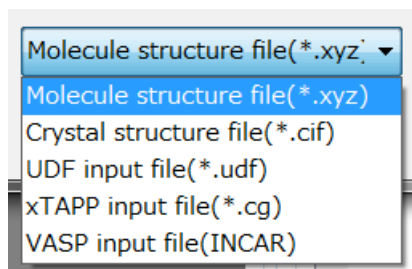


2.3. ファイルの読み込み

本アプリケーション起動時に読み込みファイルを指定しなかった場合は、画面左上方にある[load]ボタンを押して表示される下図の読み込みファイル選択画面から読み込みファイルを選択します。この画面で読み込み可能なデータファイルが保存されているフォルダに移動してください。



画面右下の[Molecular structure file(*.xyz)]と表示されているプルダウンリストをクリックすると下図のようにファイル選択画面に表示させる形式のリストが表示されます。XYZ ファイル以外を読み込む場合はここから読み込むファイルの形式を切り替えてください。

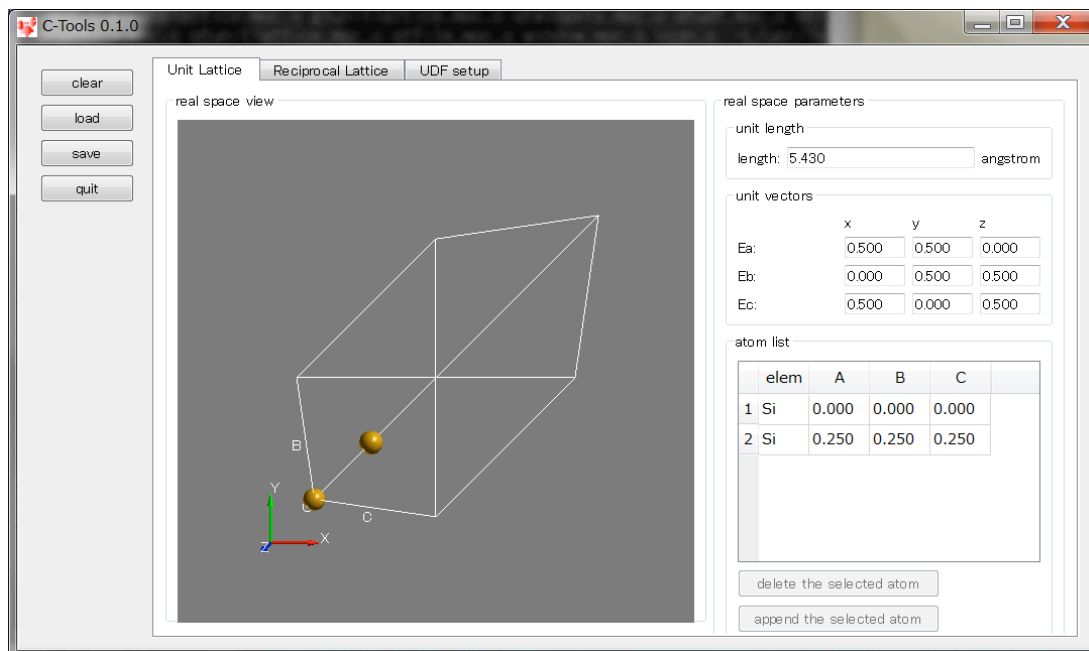


拡張子	形式	内容
.xyz	XYZ 形式。	原子構造
.cif	CIF 形式	原子構造
.udf	UDF 形式	電子状態計算パラメタ
.cg	xTAPP 形式	電子状態計算パラメタ
incar	VASP 形式	電子状態計算パラメタ
*.dat	OpenMX 形式	電子状態計算パラメタ
fort.1	RSDFT 形式	電子状態計算パラメタ

表示されたファイルのアイコンをダブルクリックするか画面右下の[開く]ボタンでファイルが読み込まれます。

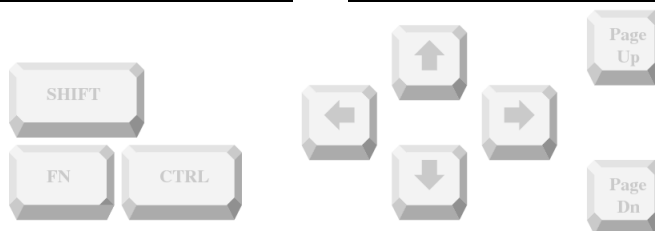
2.4. 原子構造の確認

原子構造が記録された XYZ 形式あるいは CIF 形式のファイルが読み込まれると、下図のように実格子タブ画面に系の格子形状と原子構造が表示されます。



可視化画面ではマウスとキーによる以下の操作で系の眺めを回転・拡大できます。

操作	内容	操作	内容
マウス左ドラッグ	回転		
マウスホイール	前後移動		
上矢印キー	上移動	CTRL+上矢印キー	上向 15 度回転
下矢印キー	下移動	CTRL+下矢印キー	下向 15 度回転
左矢印キー	左移動	CTRL+左矢印キー	左向 15 度回転
右矢印キー	右移動	CTRL+右矢印キー	右向 15 度回転
PgUp キー	後移動	CTRL+PgUp キー	左回 15 度回転
PgDn キー	前移動	CTRL+PgDn キー	右回 15 度回転



これとは別にマウス右クリックで可視化画面を BMP 画像に保存できます。

2.5. 原子構造の変更

実格子タブの右側では実格子の形状ならびに表から選択した原子の元素種と内部座標を変更できます。可視化画面での原子の球をダブルクリックすることでも原子を選択できます。また、選択した原子の削除ならびに同種の原子の追加もできます。

The screenshot shows the 'real space parameters' section with the following fields:

- unit length:** A text box containing '5.430' and a label 'angstrom'.
- unit vectors:** A table with columns 'x', 'y', and 'z' for vectors 'Ea', 'Eb', and 'Ec'.

The 'atom list' section contains a table with columns 'elem', 'A', 'B', and 'C'. The first two rows are highlighted in blue:

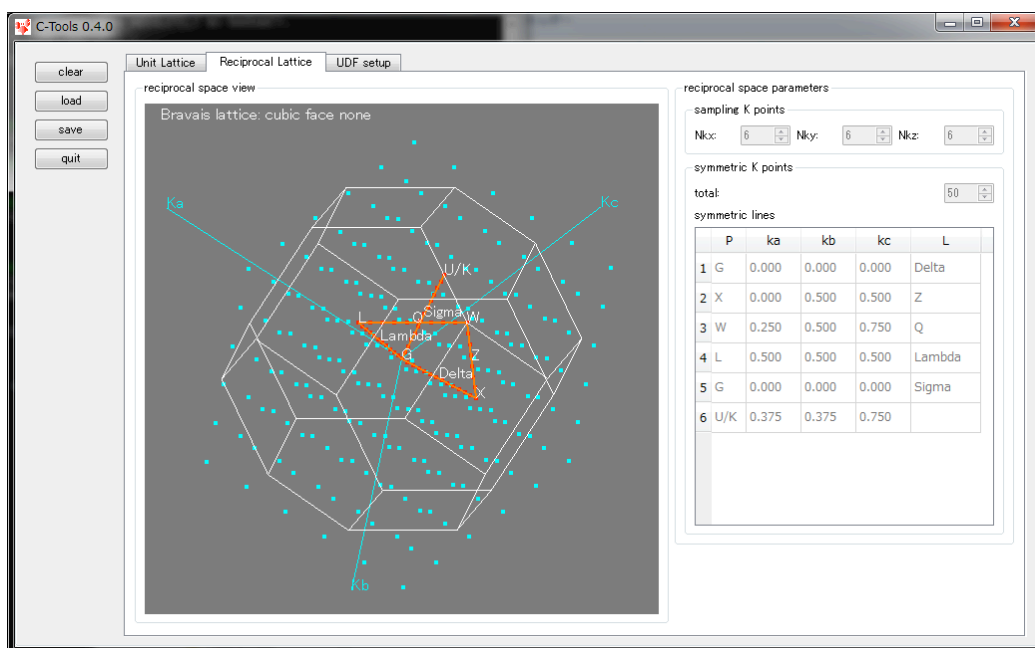
	elem	A	B	C
1	Si	0.000	0.000	0.000
2	Si	0.250	0.250	0.250

Annotations and their corresponding functions:

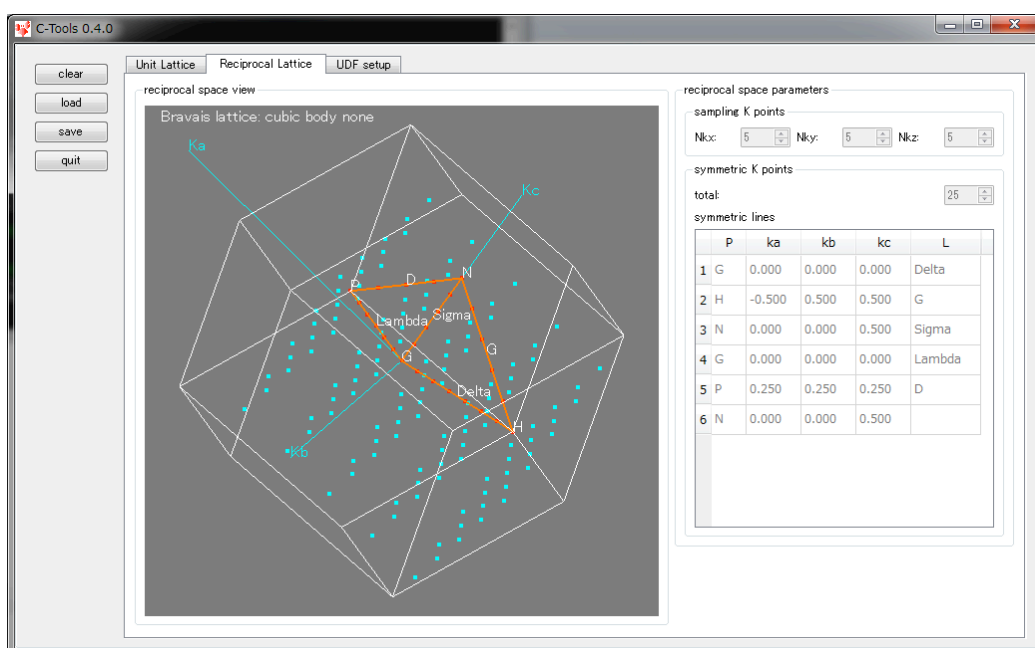
- 格子定数Åの調整** (Adjust lattice constant Å): Points to the 'unit length' field.
- 格子ベクトルの調整** (Adjust lattice vectors): Points to the 'unit vectors' table.
- 表の行番号を選択し、選択原子の元素名の変更** (Select row number and change element name of selected atom): Points to the 'elem' column header.
- 選択原子の内部座標の変更** (Change internal coordinates of selected atom): Points to the 'A', 'B', and 'C' columns.
- 可視化画面の原子をダブルクリックで選択し、選択原子の元素名の調整** (Select atom in visualization screen by double-clicking and adjust element name of selected atom): Points to the atom list table.
- 選択原子を削除** (Delete selected atom): Points to the 'delete the selected atom' button.
- 選択原子と同種原子を追加** (Add same type of atom as selected atom): Points to the 'append the selected atom' button.

2. 6. 逆格子形状の確認

逆格子タブには下図のように逆格子タブ画面に系の逆格子形状が表示されます。表示されるブラベ格子やバンド図経路は実格子の形状から自動的に判定・設定されたものです。下図は面心立方格子と体心立方格子のブリルアンゾーンでのバンド図経路がそれぞれ示された例です。



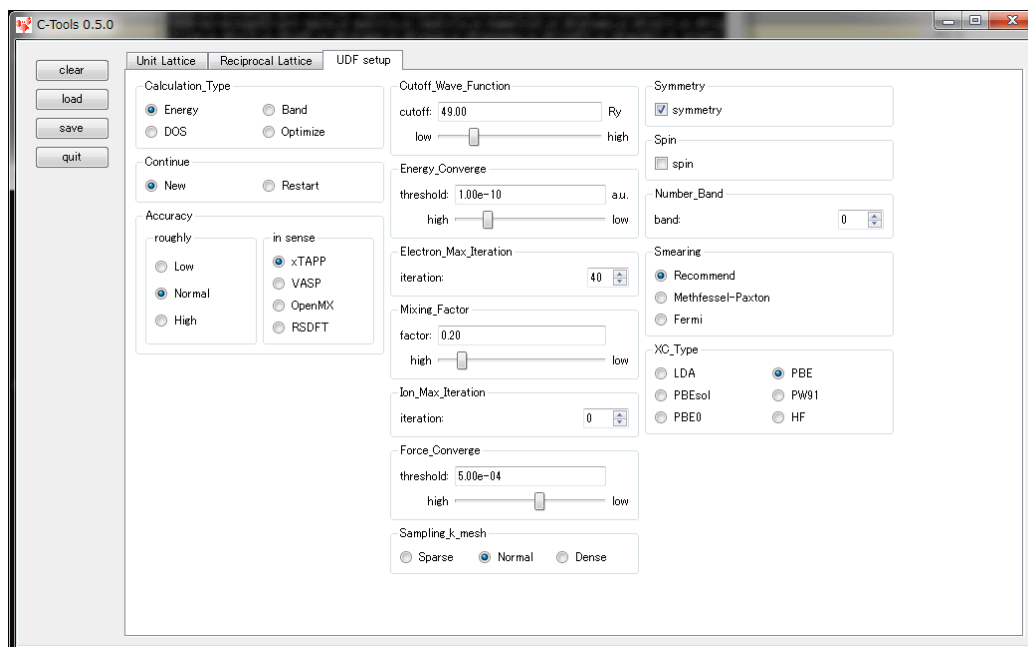
図：面心立方格子のブリルアンゾーンでのバンド図計算経路の表示例



図：体心立方格子のブリルアンゾーンでのバンド図計算経路の表示例

2.7. 計算パラメタの確認と調整

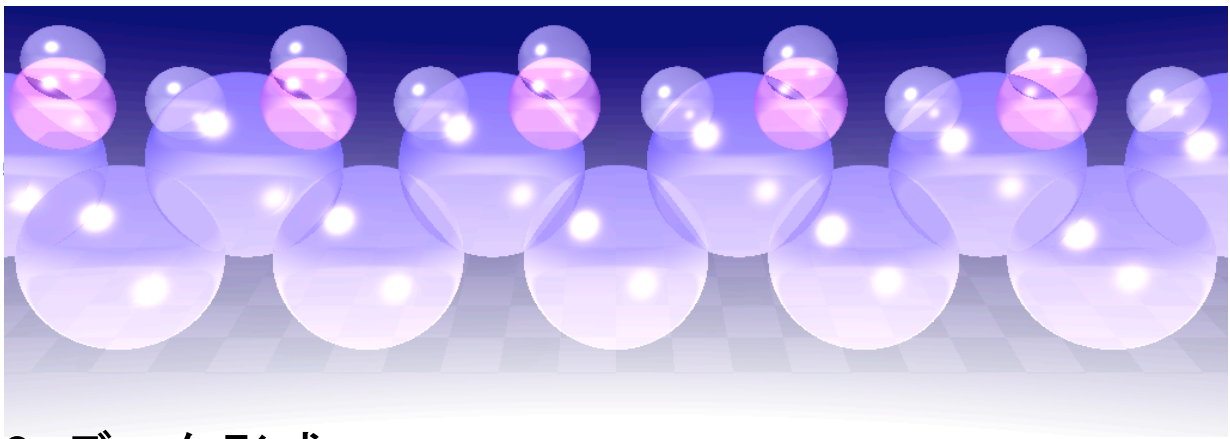
電子状態計算パラメタ設定タブには UDF 形式で定める電子状態計算の基本的な計算パラメタの値とその調整 GUI が表示されます。UDF 形式の各パラメタの詳細については次章に記載します。



2.8. 設定ファイルの保存

原子構造と計算パラメタの設定が完了したらその内容を目的の電子状態計算プログラムに合わせて設定ファイルを保存します。

本アプリケーションの画面左上方にある[save]ボタンを押すと書き出しファイル選択画面が表示されます。その画面の下部のプルダウンから電子状態計算プログラムの設定ファイルの形式を選択します。そして書き出すファイル名を記入あるいは選択すると、そのデータ形式で設定ファイルが生成されます。



3. データ形式

本アプリケーションで定める統合密度汎関数理論形式 (UDF 形式) のパラメタ、ならびにこの形式から変換、逆変換される各種電子状態計算プログラムの設定ファイルの形式の主要パラメタとそれら相互の変換仕様の詳細は本章で定めるとおりです。

本章でははじめに UDF 形式の各パラメタの内容について記載し、続いて各計算プログラムの入力パラメタからの UDF パラメタへの変換仕様、その逆の UDF パラメタからの各計算プログラムの入力パラメタへの変換仕様を記載します。

3.1. 統合密度汎関数理論形式

3.1.1. UDF 形式ファイルの概要

UDF 形式は以下の例のように XML 形式で計算の概要が記述されます。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<Unified_DFT_Format>
  <Common_Parameters>

    <Calculation_Settings>
      <Calculation_Type> Optimize </Calculation_Type>
      <Continue> New </Continue>
      <Accuracy> Low </Accuracy>
      <Energy_Converge> 1.000000e-008 </Energy_Converge>
      <Electron_Max_Iteration> 30 </Electron_Max_Iteration>
      <Cutoff_Wave_Function> 14.440000 </Cutoff_Wave_Function>
      <Mixing_Factor> 0.200000 </Mixing_Factor>
      <Number_Band> 8 </Number_Band>
      <Smearing> Recommend </Smearing>
      <Spin> off </Spin>
      <XC_Type> PBE </XC_Type>
      <Symmetry> on </Symmetry>
      <Ion_Max_Iteration> 30 </Ion_Max_Iteration>
      <Force_Converge> 1.000000e-003 </Force_Converge>
    </Calculation_Settings>

    <Structural_Parameters>
      <Lattice_Constant> 5.430000 </Lattice_Constant>
      <Lattice_Vector> +0.500000 +0.500000 +0.000000 </Lattice_Vector>
      <Lattice_Vector> +0.000000 +0.500000 +0.500000 </Lattice_Vector>
      <Lattice_Vector> +0.500000 +0.000000 +0.500000 </Lattice_Vector>
      <Atom> Si 0.000000 0.000000 0.000000 </Atom>
      <Atom> Si 0.250000 0.250000 0.250000 </Atom>
    </Structural_Parameters>

    <K_points>
      <Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh>
    </K_points>

  </Common_Parameters>
</Unified_DFT_Format>
```


3.1.2. UDF 形式の精度パラメタの既定値一覧

UDF 形式の精度パラメタの既定値を精度 Low/Normal/High の別に以下の通り定めます。

内容	パラメタ	Low	Normal	High
基底関数精度	Cutoff_Wave_Function	36.0	49.0	81.0
電子密度混合率	Mixing_Factor	0.3	0.2	0.1
SCF 反復回数	Electron_Max_Iteration	30	40	60
SCF 収束判定	Energy_Converge	1.0e-8	1.0e-10	1.0e-12
OPT 収束判定	Force_Converge	1.0e-2	1.0e-3	1.0e-4

これらの値は設定ファイル default.qml にて以下の XML 形式で指定されます。

```
<UDF>
  <Cutoff_Wave_Function value_low="36.0" value_normal="49.0" value_high="81.0" />
  <Mixing_Factor value_low="0.3" value_normal="0.2" value_high="0.1" />
  <Electron_Max_Iteration value_low="30" value_normal="40" value_high="60" />
  <Energy_Converge value_low="1.0e-8" value_normal="1.0e-10" value_high="1.0e-12" />
  <Force_Converge value_low="1.0e-2" value_normal="1.0e-3" value_high="1.0e-4" />
</UDF>
```

3.1.3. UDF 形式のパラメータ一覧

UDF 形式の全パラメータの仕様は以下の通りです。

パラメータ	<Calculation_Type>
内容	計算対象の物理データの種別
選択値	Energy : 固有エネルギー・全エネルギー Band : バンド図作図用の K 点経路上の固有エネルギー Dos : 状態密度分布図作図用の状態密度 Optimize : 原子の緩和構造
既定値	<Calculation_Type> Energy </Calculation_Type>
設定例	<Calculation_Type> Band </Calculation_Type>

パラメータ	<Continue>
内容	新規計算・継続計算
選択値	New : 新規計算 Restart : 前回計算結果の波動関数を用いた継続計算
既定値	<Continue> New </Continue>
設定例	<Continue> Restart </Continue>

パラメータ	<Accuracy>
内容	各種計算精度パラメータの計算精度の自動設定
選択値	Low : 各種計算精度パラメータを低精度に設定 Normal : 各種計算精度パラメータを中精度に設定 High : 各種計算精度パラメータを高精度に設定 次章に詳細を記述
既定値	<Accuracy> Normal </Accuracy>
設定例	<Accuracy> High </Accuracy>

パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>
内容	波動関数の表現基底の最大波数
指定値	単位：[Rydberg] 最小値：10.0 [Rydberg] 波動関数の表現が不足である可能性が高い 最大値：200.0 [Rydberg] 波動関数の表現が十分である可能性が高い
既定値	<Accuracy>の値により以下の異なる既定値となる <Accuracy> Low </Accuracy> の場合： <Cutoff_Wave_Function> 36.0 </Cutoff_Wave_Function> <Accuracy> Normal </Accuracy>の場合： <Cutoff_Wave_Function> 49.0 </Cutoff_Wave_Function> <Accuracy> High </Accuracy>の場合： <Cutoff_Wave_Function> 81.0 </Cutoff_Wave_Function>
設定例	<Cutoff_Wave_Function> 49.0 </Cutoff_Wave_Function>

パラメタ	<Mixing_Factor>
内容	固有エネルギー計算の電子密度更新での電子密度の混合割合
指定値	最大値：0.9 性急な混合により収束に至らない可能性が高い 最小値：0.1 慎重な混合により収束に至る可能性が高い
既定値	<Accuracy>の値により以下の異なる既定値となる <Accuracy> Low </Accuracy> の場合： <Mixing_Factor> 0.3 </Mixing_Factor> <Accuracy> Normal </Accuracy>の場合： <Mixing_Factor> 0.2 </Mixing_Factor> <Accuracy> High </Accuracy>の場合： <Mixing_Factor> 0.1 </Mixing_Factor>
設定例	<Mixing_Factor> 0.2 </Mixing_Factor>

パラメタ	<Electron_Max_Iteration>
内容	固有エネルギー計算の最大反復回数
指定値	最小値：10 収束判定値を満たさず反復を終了する可能性が高い 最大値：100 収束判定値を満たして反復を終了する可能性が高い
既定値	<Accuracy>の値により以下の異なる既定値となる <Accuracy> Low </Accuracy> の場合： <Electron_Max_Iteration> 30 </Electron_Max_Iteration> <Accuracy> Normal </Accuracy>の場合： <Electron_Max_Iteration> 40 </Electron_Max_Iteration>

	<Accuracy> High </Accuracy>の場合： <Electron_Max_Iteration> 60 </Electron_Max_Iteration>
--	--

パラメタ	<Energy_converge>
内容	固有エネルギーの反復計算の収束判定値
指定値	単位：[Hartree] 最大値：1.0e-6 [Hartree] 不完全な収束となる可能性が高い 最小値：1.0e-15 [Hartree] ほぼ完全な収束となる可能性が高い
既定値	<Accuracy>の値により以下の異なる既定値となる <Accuracy> Low </Accuracy> の場合： <Energy_converge> 1.0e-8 </Energy_converge> <Accuracy> Normal </Accuracy>の場合： <Energy_converge> 1.0e-10 </Energy_converge> <Accuracy> High </Accuracy>の場合： <Energy_converge> 1.0e-12 </Energy_converge>
設定例	<Energy_converge> 1.0e-10 </Energy_converge>

パラメタ	<Force_Converge>
内容	構造緩和の反復計算の収束判定値
指定値	単位：[Hartree/Bohr] 最小値：1.0e-1 [Hartree/Bohr] 構造緩和が不十分である可能性が高い 最大値：1.0e-5 [Hartree/Bohr] 構造緩和が十分である可能性が高い
既定値	<Accuracy>の値により以下の異なる既定値となる <Accuracy> Low </Accuracy> の場合： <Force_Converge> 1.0e-2 </Force_Converge> <Accuracy> Normal </Accuracy>の場合： <Force_Converge> 1.0e-3 </Force_Converge> <Accuracy> High </Accuracy>の場合： <Force_Converge> 1.0e-4 </Force_Converge>
設定例	<Force_Converge> 1.0e-3 </Force_Converge>

パラメタ	<Number_Bands>
内容	計算対象とするバンド数
指定値	価電子帯のバンド数を少なくとも指定 伝導帯のバンドも計算する場合はより大きな値を指定
既定値	<Spin>と<Atom>の構成により次式で値が自動計算 <Spin> Off </Spin>の場合 : 各原子の元素に規定の価電子数の総和/2 + 原子総数/2 の値 ※割算の端数は切り上げ <Spin> On </Spin>の場合 : 各原子の元素に規定の価電子数の総和 + 原子総数 の値
設定例	<Number_Bands> 18 </Number_Bands>

パラメタ	<Smearing>
内容	K 点サンプリングの手法
選択値	Recommend: 各種計算プログラムにてデフォルトとして用意されている値を設定 Methfessel-Paxton : Methfessel-Paxton first-order smearing (PRB 40, 3616 (1989)) Fermi : Fermi-Dirac 関数を用いた Smearing
既定値	<Smearing> Recommend </Smearing>
設定例	<Smearing> Methfessel-Paxton </Smearing>

パラメタ	<Spin>
内容	スピン自由度
選択値	Off : スピン自由度なし On : スピン自由度あり
既定値	<Spin> Off </Spin>
設定例	<Spin> On </Spin>

パラメタ	<XC_Type>
内容	交換相関汎関数
選択値	LDA, PBE, PBEsol, PW91, PBE0, HF
既定値	<XC_Type> PBE </XC_Type>
設定例	<XC_Type> LDA </XC_Type>

パラメタ	<Symmetry>
内容	対称性の使用
選択値	On:対称性を使用した計算 Off:対称性を使用しない計算
既定値	<Symmetry> On </Symmetry>
設定例	<Symmetry> Off </Symmetry>

パラメタ	<Ion_Max_Iteration>
内容	構造緩和の最大ステップ数
指定値	最小値： 0 構造緩和なし 最大値：100 十分に構造緩和する可能性が高い
既定値	<Calculatoin_Type>の値により以下の異なる既定値となる <Calculatoin_Type> Optimize </Calculatoin_Type>の場合 : <Ion_Max_ Iteration> 100 </Ion_Max_ Iteration> 上記以外の場合 : <Ion_Max_ Iteration> 0 </Ion_Max_ Iteration>
設定例	<Ion_Max_ Iteration> 100 </Ion_Max_ Iteration>

パラメタ	<Lattice_Constant>
内容	格子定数(格子ベクトルの単位長さ)
指定値	この値と Lattice_Vector に乗じたベクトルが格子ベクトル[Å]
既定値	10.0 [Å]
設定例	<Lattice_Constant> 5.430000 </Lattice_Constant>

パラメタ	<Lattice_Vector>
内容	各格子ベクトルのデカルト座標成分
指定値	この座標値と Lattice_Constant を乗じたベクトルが格子ベクトル[Å] A, B, C ベクトルの 3 つを連続してそれぞれ指定
既定値	<Lattice_Vector> 1.0, 0.0, 0.0 </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> 0.0, 1.0, 0.0 </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> 0.0, 0.0, 1.0 </Lattice_Vector>
設定例	<Lattice_Vector> 0.0, 0.5, 0.5 </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> 0.5, 0.0, 0.5 </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> 0.5, 0.5, 0.0 </Lattice_Vector>

パラメタ	<Atom>
内容	各原子の元素と位置
指定値	原子の元素名、位置の格子ベクトルに対する内部座標 系の各原子についてそれぞれ指定
既定値	系に原子は無いとして空を設定
設定例	<Atom> Si 0.000000 0.000000 0.000000 </Atom> <Atom> Si 0.250000 0.250000 0.250000 </Atom>

パラメタ	<Sample_k_point>
内容	逆格子内のサンプリング K 点の粒度 または、K 点経路上のサンプリング K 点の粒度
選択値	Sparse : 少ないサンプリング数で、結晶の表現がやや低精度となる Normal : 通常のサンプリング数で、結晶の表現がほぼ適切となる Dense : 多いサンプリング数で、結晶の表現がより高精度となる
既定値	<Accuracy>の値により以下の異なる既定値となる <Accuracy> Low </Accuracy> の場合 : <Sample_k_point> Sparse </Sample_k_point> <Accuracy> Normal </Accuracy>の場合 : <Sample_k_point> Normal </Sample_k_point> <Accuracy> High </Accuracy>の場合 : <Sample_k_point> Dense </Sample_k_point>
設定例	<Sample_k_point> Normal </Sample_k_point>

バンド経路の UDF 形式での扱い

本ツールではバンド経路は結晶のブラベ格子の種別から自動的に設定されます。
そのためバンド経路は UDF 形式のパラメタに含まれません。

対称性の UDF 形式での扱い

本ツールでは対称性は結晶の格子ベクトルと原子座標から自動的に検出されます。
そのため対称性は UDF 形式のパラメタに含まれません。

3.2. UDF 形式と xTAPP 形式の間でのデータ変換

3.2.1. xTAPP 形式ファイルの概要

xTAPP 形式は以下の例のように Fortran90 namelist 形式に独自データが追加された形式で計算内容が記述されます。

```
# main data
&tappinput
  lattice_factor = 10.261213
  lattice_list   = +0.50 +0.50 +0.00
                  +0.00 +0.50 +0.50
                  +0.50 +0.00 +0.50

  number_spin = 2
  cutoff_wave_function = 3.800000
  xtrap_beta = 0.200000
  number_element = 1
  number_atom = 2
  number_band = 8
  chain_calc = 0
  scf_converge = 1.000000e-008
  scf_number_iter = 30
  xc_type = 'PBE'
  control_uptime = 3600
  store_wfn = 1
/
# symmetry data
&symmetry
  symmetry_format = 'reciprocal'
  number_sym_op = 1
  has_inversion = 0
  denom_trans = 1
/
  1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0
# atom data
  4.00 14.00
1 0.000000 0.000000 0.000000 # atom Si
1 0.250000 0.250000 0.250000 # atom Si
```

(右枠へ続く)

(左枠から続き)

```
# k-points data
&smpl_kpt
  dos_mode = 'COS'
  dos_mesh = 0 0 0
  bz_mesh = 12
  bz_number_tile = 1
/
6 6 6 # mmm1
2 2 2 # mmm2
# struct_opt data
&struct_opt
  converge_force = 1.000000e-003
  number_cycle = 30
/
# str_opt_constr data
1 # only unit matrix
0 # no atoms fixed
# trace band data
&trace_band
  number_band_traced = 5
  number_trace_block = 4
/
'G'   'X'   'W'   'L'   'G'
0.000 0.000 0.250 0.500 0.000
0.000 0.500 0.500 0.500 0.000
0.000 0.500 0.750 0.500 0.000
      10    10    10    10    0
```

3.2.2. xTAPP 形式の主要パラメタとその既定値一覧

本アプリケーションは xTAPP の以下の主要パラメタを扱います。

ファイルにパラメタが記載されていない場合の既定値を以下の通り定めます。

パラメタ	内容	既定値
lattice_factor	格子定数[Bohr]	1.0
lattice_list[]	格子ベクトル	1.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 1.0
number_spin	スピン成分数	1
cutoff_wave_function	平面波の最大エネルギー [Rydberg]	7.0
xtrap_beta	電子密度の混合率	0.2
number_band	計算対象のバンド数	0
chain_calc	新規・継続計算	0
scf_converge	固有エネルギー計算の収束判定値	1.0e-10
scf_number_iter	固有エネルギー計算の最大反復回数	40
xc_type	交換相関汎関数	'PBE'
number_sym_op	対称操作の総数	1
atom[]_name	各原子の元素名	原子なし
atom[]_a	各原子の内部座標の A 軸成分	原子なし
atom[]_b	各原子の内部座標の B 軸成分	原子なし
atom[]_c	各原子の内部座標の C 軸成分	原子なし
dos_mode	サンプリング方法	'COS'
dos_mesh[]	状態密度計算用のサンプリング数	1 1 1
bz_mesh	固有エネルギー計算用のサンプリング数	2
mmm1	同上	2
mmm2	同上	2
converge_force	構造緩和計算の収束判定値	1.0e-3
number_cycle	構造緩和計算の最大反復回数	0
number_band_traced	バンド図計算の対称点の総数。 これに続いてバンド経路。	0 経路なし

3.2.3. xTAPP 形式の精度パラメタの既定値一覧

xTAPP の精度パラメタの既定値を精度 Low/Normal/High の別に以下の通り定めます。

内容	パラメタ	Low	Normal	High
基底関数精度	cutoff_wave_function	6.0	7.0	9.0
電子密度混合率	xtrap_beta	0.3	0.2	0.1
SCF 反復回数	scf_number_iter	30	40	60
SCF 収束判定	scf_converge	1.0e-8	1.0e-10	1.0e-12
OPT 収束判定	converge_force	1.0e-2	1.0e-3	1.0e-4

これらの値は設定ファイル default.qml にて以下の XML 形式で指定されます。

```
<xTAPP>
  <cutoff_wave_function value_low="6.0" value_normal="7.0" value_high="9.0" />
  <xtrap_beta value_low="0.3" value_normal="0.2" value_high="0.1" />
  <scf_number_iter value_low="30" value_normal="40" value_high="60" />
  <scf_converge value_low="1.0e-8" value_normal="1.0e-10" value_high="1.0e-12" />
  <converge_force value_low="1.0e-2" value_normal="1.0e-3" value_high="1.0e-4" />
</xTAPP>
```

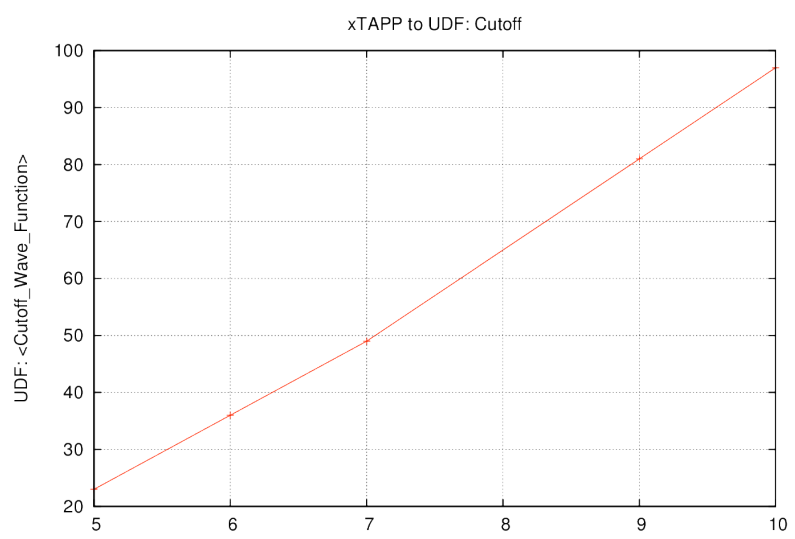
3.2.4. xTAPP 形式から UDF 形式へのパラメタへの変換

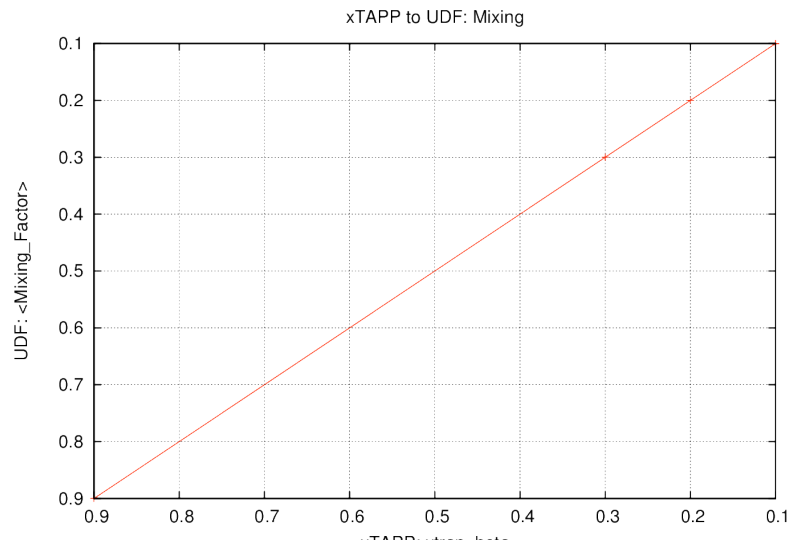
本アプリケーションは UDF パラメタを xTAPP の各パラメタから以下の仕様で変換設定します。

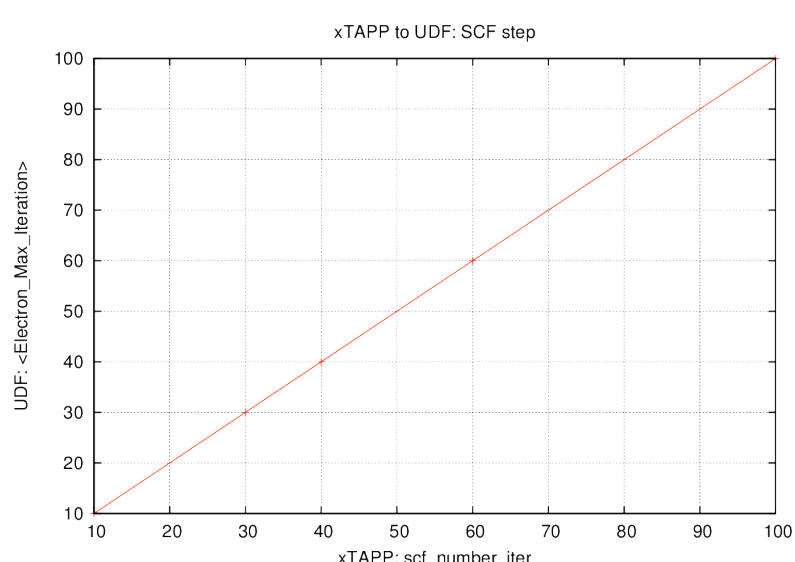
出力パラメタ	<Calculation_Type>
入力パラメタ	number_cycle, number_cycle, number_band_traced
変換処理	<pre> if(number_cycle != 0){ <Calculation_Type> Optimize </Calculation_Type> } else{ if(dos_mesh > 0){ <Calculation_Type> Dos </Calculation_Type> } else if(number_band_traced > 0){ <Calculation_Type> Band </Calculation_Type> } else{ <Calculation_Type> Energy </Calculation_Type> } } </pre>

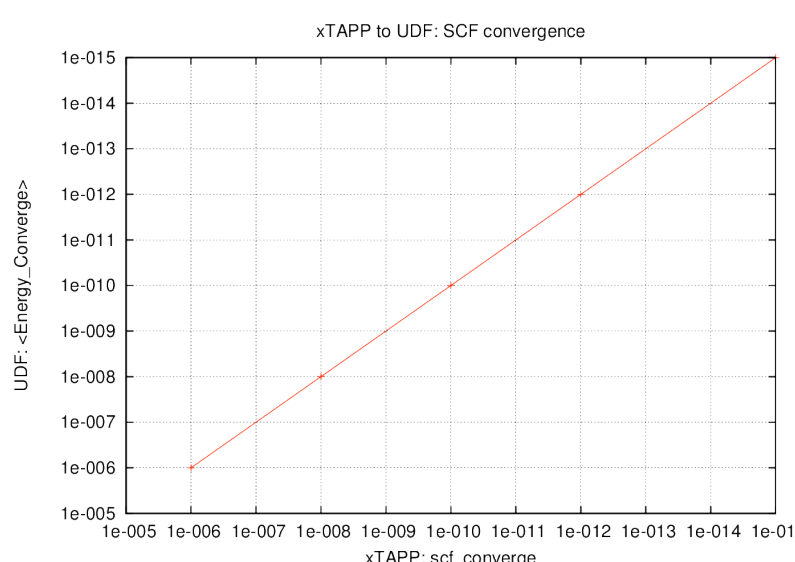
出力パラメタ	<Continue>
入力パラメタ	chain_calc
変換処理	<pre> if(chain_calc == 0){ <Continue> New </Continue> } else{ <Continue> Restart </Continue> } </pre>

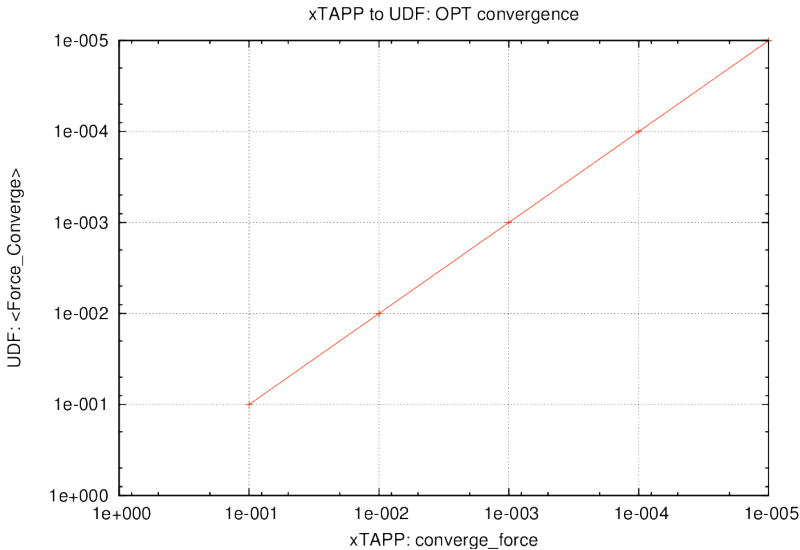
出力パラメタ	<Accuracy>
入力パラメタ	cutoff_wave_function
変換処理	<pre> if(cutoff_wave_function is around 6.0){ <Accuracy> Low </Accuracy> } else if(cutoff_wave_function is around 7.0){ <Accuracy> Normal </Accuracy> } else{ <Accuracy> High </Accuracy> } </pre>
備考	<Accuracy>で既定値が定義されるパラメタでは xTAPP の既定値もしくは指定値からの変換値を使用する。

出力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>														
入力パラメタ	cutoff_wave_function														
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <p>The graph shows a linear transformation from xTAPP values to UDF values for the Cutoff_Wave_Function. The x-axis is labeled 'xTAPP: cutoff_wave_function' and ranges from 5 to 10. The y-axis is labeled 'UDF: <Cutoff_Wave_Function>' and ranges from 20 to 100. A red line represents the transformation, starting at (5, 20) and ending at (10, 100).</p> <table border="1"> <caption>Data points for xTAPP to UDF: Cutoff</caption> <thead> <tr> <th>xTAPP: cutoff_wave_function</th> <th>UDF: <Cutoff_Wave_Function></th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>5</td><td>20</td></tr> <tr><td>6</td><td>35</td></tr> <tr><td>7</td><td>50</td></tr> <tr><td>8</td><td>65</td></tr> <tr><td>9</td><td>80</td></tr> <tr><td>10</td><td>100</td></tr> </tbody> </table>	xTAPP: cutoff_wave_function	UDF: <Cutoff_Wave_Function>	5	20	6	35	7	50	8	65	9	80	10	100
xTAPP: cutoff_wave_function	UDF: <Cutoff_Wave_Function>														
5	20														
6	35														
7	50														
8	65														
9	80														
10	100														

出力パラメタ	<Mixing_Factor>																				
入力パラメタ	xtrap_beta																				
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <p>The graph shows a linear transformation from xTAPP values to UDF values for the Mixing_Factor. The x-axis is labeled 'xTAPP: xtrap_beta' and ranges from 0.9 to 0.1. The y-axis is labeled 'UDF: <Mixing_Factor>' and ranges from 0.1 to 0.9. A red line represents the transformation, starting at (0.9, 0.9) and ending at (0.1, 0.1).</p> <table border="1"> <caption>Data points for xTAPP to UDF: Mixing</caption> <thead> <tr> <th>xTAPP: xtrap_beta</th> <th>UDF: <Mixing_Factor></th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0.9</td><td>0.9</td></tr> <tr><td>0.8</td><td>0.8</td></tr> <tr><td>0.7</td><td>0.7</td></tr> <tr><td>0.6</td><td>0.6</td></tr> <tr><td>0.5</td><td>0.5</td></tr> <tr><td>0.4</td><td>0.4</td></tr> <tr><td>0.3</td><td>0.3</td></tr> <tr><td>0.2</td><td>0.2</td></tr> <tr><td>0.1</td><td>0.1</td></tr> </tbody> </table>	xTAPP: xtrap_beta	UDF: <Mixing_Factor>	0.9	0.9	0.8	0.8	0.7	0.7	0.6	0.6	0.5	0.5	0.4	0.4	0.3	0.3	0.2	0.2	0.1	0.1
xTAPP: xtrap_beta	UDF: <Mixing_Factor>																				
0.9	0.9																				
0.8	0.8																				
0.7	0.7																				
0.6	0.6																				
0.5	0.5																				
0.4	0.4																				
0.3	0.3																				
0.2	0.2																				
0.1	0.1																				

出力パラメタ	<Electron_Max_Iteration>														
入力パラメタ	scf_number_iter														
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <p>The graph shows a linear relationship between the input parameter 'scf_number_iter' (xTAPP) and the output parameter '<Electron_Max_Iteration>' (UDF). The x-axis ranges from 10 to 100, and the y-axis ranges from 10 to 100. A red line represents the conversion, passing through the following data points:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>xTAPP: scf_number_iter</th> <th>UDF: <Electron_Max_Iteration></th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>10</td><td>10</td></tr> <tr><td>30</td><td>30</td></tr> <tr><td>40</td><td>40</td></tr> <tr><td>60</td><td>60</td></tr> <tr><td>80</td><td>80</td></tr> <tr><td>100</td><td>100</td></tr> </tbody> </table>	xTAPP: scf_number_iter	UDF: <Electron_Max_Iteration>	10	10	30	30	40	40	60	60	80	80	100	100
xTAPP: scf_number_iter	UDF: <Electron_Max_Iteration>														
10	10														
30	30														
40	40														
60	60														
80	80														
100	100														

出力パラメタ	<Energy_converge>												
入力パラメタ	scf_converge												
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <p>The graph shows a linear relationship between the input parameter 'scf_converge' (xTAPP) and the output parameter '<Energy_Converge>' (UDF) on a logarithmic scale. The x-axis ranges from 1e-005 to 1e-015, and the y-axis ranges from 1e-005 to 1e-015. A red line represents the conversion, passing through the following data points:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>xTAPP: scf_converge</th> <th>UDF: <Energy_Converge></th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1e-006</td><td>1e-006</td></tr> <tr><td>1e-008</td><td>1e-008</td></tr> <tr><td>1e-010</td><td>1e-010</td></tr> <tr><td>1e-012</td><td>1e-012</td></tr> <tr><td>1e-014</td><td>1e-014</td></tr> </tbody> </table>	xTAPP: scf_converge	UDF: <Energy_Converge>	1e-006	1e-006	1e-008	1e-008	1e-010	1e-010	1e-012	1e-012	1e-014	1e-014
xTAPP: scf_converge	UDF: <Energy_Converge>												
1e-006	1e-006												
1e-008	1e-008												
1e-010	1e-010												
1e-012	1e-012												
1e-014	1e-014												

出力パラメタ	<Force_Converge>
入力パラメタ	converge_force
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p> 

出力パラメタ	<Number_Bands>
入力パラメタ	元素名と原子数
変換処理	<p><Atom>から設定される既定値 number_band が設定される。</p> <p><Number_Bands> number_band </Number_Bands></p>

出力パラメタ	<Smearing>
入力パラメタ	dos_mode
変換処理	<pre> if(dos_mode == 'COS'){ <Smearing> Recommend </Smearing> } else if(dos_mode == 'METHEFESSEL_PAXTON'){ <Smearing> Methfessel-Paxton </Smearing> } else if(dos_mode == 'FERMI'){ <Smearing> Fermi </Smearing> } </pre>

出力パラメタ	<Spin>
入力パラメタ	number_spin
変換処理	<pre> if(number_spin == 2){ <Spin> On </Spin> } else{ <Spin> Off </Spin> } </pre>

出力パラメタ	<XC_Type>
入力パラメタ	xc_type
変換処理	<pre> if(xc_type == 'CAPZ'){ <XC_Type> LDA </XC_Type> } else if(xc_type == 'PBE'){ <XC_Type> PBE </XC_Type> } else if(xc_type == 'PBEsol'){ <XC_Type> PBEsol </XC_Type> } else if(xc_type == 'PW91'){ <XC_Type> PW91 </XC_Type> } else if(xc_type == 'PBE0'){ <XC_Type> PBE0 </XC_Type> } else if(xc_type == 'HF'){ <XC_Type> HF </XC_Type> } </pre>

出力パラメタ	<Symmetry>
入力パラメタ	number_sym_op
変換処理	<pre> if(number_sym_op > 1){ <Symmetry> On </Symmetry> } else{ <Symmetry> Off </Symmetry> } </pre>
備考	入力ファイルに記載の変換操作は考慮せず。

出力パラメタ	<Ion_Max_Iteration>
入力パラメタ	number_cycle
変換処理	<Ion_Max_Iteration> number_cycle </Ion_Max_Iteration>

出力パラメタ	<Lattice_Constant>
入力パラメタ	lattice_factor
変換処理	<Lattice_Constant> lattice_factor * 0.529177 </Lattice_Constant>
備考	単位を[Bohr]から[Å]に変換する。

出力パラメタ	<Lattice_Vector>
入力パラメタ	lattice_list
変換処理	<Lattice_Vector> lattice_list[0] </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> lattice_list[1] </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> lattice_list[2] </Lattice_Vector>

出力パラメタ	<Atom>
入力パラメタ	atom_name, atom_a, atom_b, atom_c
変換処理	<Atom> atom_name atom_a atom_b atom_c </Atom>

出力パラメタ	<Sampling_k_mesh>
入力パラメタ	lattice_factor, lattice_list
変換処理	A ベクトルの長さ[Å]を計算 Bz_mesh, mmm1, mmm2 から A 軸方向のサンプル K 点数 nkmesh[0]を計算する。 nkmesh[0]から以下手順で<Sampling_k_mesh>の値を設定する。 <pre> if(nkmesh[0] < int(15.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh> } else if(nkmesh[0] < int(25.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh> } else{ <Sampling_k_mesh> Dense </Sampling_k_mesh> } </pre>

バンド経路の xTAPP 形式からの入力

本ツールではバンド経路は結晶のブラベ格子の種別から自動的に設定されます。
 そのため xTAPP 形式で指定されたバンド経路は自動設定には反映されません。

対称性の xTAPP 形式からの入力

本ツールでは対称性は結晶の格子ベクトルと原子座標から自動的に検出されます。
 そのため xTAPP 形式で指定された対称性は自動検出には反映されません。

3.2.5. UDF 形式から xTAPP 形式へのパラメタへの変換

本アプリケーションは UDF パラメタから xTAPP の主要パラメタへ以下の仕様で変換設定します。

入力パラメタ	<Calculation_Type>
出力パラメタ	number_cycle, dos_mesh, number_band_traced
変換処理	<pre> if(<Calculation_Type> Energy </Calculation_Type>){ number_cycle = 0; dos_mesh = 0; number_band_traced = 0; } else if(<Calculation_Type> Band </Calculation_Type>){ number_cycle = 0; dos_mesh = 0; number_band_traced = K 点経路の対称点総数; } else if(<Calculation_Type> DOS </Calculation_Type>){ number_cycle = 0; dos_mesh = <Smampling_k_mesh>*2; number_band_traced = 0; } else if(<Calculation_Type> Optimize </Calculation_Type>){ number_cycle = <Ion_Max_Iteration>; dos_mesh = 0; number_band_traced = 0; } </pre>

入力パラメタ	<Continue>
出力パラメタ	chain_calc
変換処理	<pre> if(<Continue> New </Continue>){ chain_calc = 0; } else if(<Continue> Restart </Continue>){ chain_calc = 1; } </pre>

入力パラメタ	<Accuracy>
出力パラメタ	なし
変換処理	なし
備考	xTAPP に変換せず。

入力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>
出力パラメタ	cutoff_wave_function
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Mixing_Factor>
出力パラメタ	xtrap_beta
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Electron_Max_Iteration>
出力パラメタ	scf_number_iter
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Energy_converge>
出力パラメタ	scf_converge
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Force_Converge>
出力パラメタ	converge_force
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Number_Bands>
出力パラメタ	number_band
変換処理	number_band = <Number_Band>;

入力パラメタ	<Smearing>
出力パラメタ	dos_mode
変換処理	<pre> if(<Smearing> Recommend </Smearing>){ dos_mode = 'COS'; } else if(<Smearing> Methfessel-Paxton </Smearing>){ dos_mode = 'METHEFESSEL_PAXTON'; } else if(<Smearing> Fermi </Smearing>){ dos_mode = 'FERMI'; } </pre>

入力パラメタ	<Spin>
出力パラメタ	number_spin
変換処理	<pre> if(<Spin> On </Spin>){ number_spin = 2; } else if(<Spin> Off </Spin>){ number_spin = 1; } </pre>

入力パラメタ	<XC_Type>
出力パラメタ	xc_type
変換処理	<pre> if(<XC_Type> LDA </XC_Type>){ xc_type = 'CAPZ'; } else if(<XC_Type> PBE </XC_Type>){ xc_type = 'PBE'; } else if(<XC_Type> PBEsol </XC_Type>){ xc_type = 'PBEsol'; } else if(<XC_Type> PW91 </XC_Type>){ xc_type = 'PW91'; } else if(<XC_Type> PBE0 </XC_Type>){ xc_type = 'PBE0'; } else if(<XC_Type> HF </XC_Type>){ xc_type = 'HF'; } </pre>

入力パラメタ	<Symmetry>
出力パラメタ	number_sym_op、対象操作
変換処理	結晶単位胞と原子座標から対象操作の内容が記録される。

入力パラメタ	<Ion_Max_Iteration>
出力パラメタ	number_cycle
変換処理	<pre> if(<Calculation_Type> Optimize </ Calculation_Type >){ if(<Ion_Max_Iteration> == 0){ number_cycle = 3*<Atom>の総数; } else{ number_cycle = <Ion_Max_Iteration>; } } else{ number_cycle = 0; } </pre>

入力パラメタ	<Lattice_Constant>
出力パラメタ	lattice_factor
変換処理	<p>単位を[Å]から[Bohr]に変換する。</p> <pre> lattice_factor = <Lattice_Constant>/0.529177; </pre>

入力パラメタ	<Lattice_Vector>
出力パラメタ	lattice_list
変換処理	<pre> lattice_list[0] = <Lattice_Vector[0]>; lattice_list[1] = <Lattice_Vector[1]>; lattice_list[2] = <Lattice_Vector[2]>; </pre>

入力パラメタ	<Atom>
出力パラメタ	atom_name, atom_a, atom_b, atom_c
変換処理	<pre> atom_name = <Atom>_name; atom_a = <Atom>_a; atom_b = <Atom>_b; atom_c = <Atom>_c; </pre>

入力パラメタ	<Sampling_k_mesh>
出力パラメタ	bz_mesh, mmm1, mmm2, dos_mesh
変換処理	<p>A ベクトルの長さ[Å]を計算し、<Sampling_k_mesh>の値に応じて A 軸方向のサンプル K 点数 nkmesh[0]を以下手順で計算する。</p> <pre> if(<Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh>){ nkmesh[0] = int(ceil(10.0/A)); } else if(<Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh>){ nkmesh[0] = int(ceil(20.0/A)); } else if(<Sampling_k_mesh> Dense </Sampling_k_mesh>){ nkmesh[0] = int(ceil(30.0/A)); } </pre> <p>B, C 軸についても同様に nkmesh[1], nkmesh[2]を計算する。 これら nkmesh[]から bz_mesh, mmm1, mmm2 を計算する。</p> <p>さらに<Calculation_Type>の値に応じて dos_mesh を以下手順で計算する。</p> <pre> if(<Calculation_Type> DOS </Calculation_Type>){ dos_mesh[0] = nkmesh[0]*2; dos_mesh[1] = nkmesh[1]*2; dos_mesh[2] = nkmesh[2]*2; } else{ dos_mesh[0] = 0; dos_mesh[1] = 0; dos_mesh[2] = 0; } </pre>

バンド経路の xTAPP 形式へ出力

本ツールではバンド経路は結晶のブラベ格子の種別から自動的に設定されます。
自動設定されたバンド経路が xTAPP 形式として出力されます。

対称性の xTAPP 形式への出力

本ツールでは対称性は結晶の格子ベクトルと原子座標から自動的に検出されます。
自動検出された対称性が xTAPP 形式として出力されます。

3.3. UDF 形式と VASP 形式の間でのデータ変換

3.3.1. VASP 形式ファイルの概要

VASP 形式は以下の例のように 3 つのファイル INCAR, POSCAR, KPOINTS で計算内容が記述されます。

INCAR

```
SYSTEM = Si
PREC = Single
GGA = None
AEXX = 0.000000
AGGAC = 0.000000
ALDAC = 0.000000
AMIX = 0.400000
EDIFF = 1.000000e-004
EDIFFG = -1.000000e-002
SIGMA = 0.100000
ICHARG = 0
ISMear = -5
ISPIN = 2
ISTART = 0
ISYM = 0
NELM = 50
NSW = 0
LHFCAL = .FALSE.
```

POSCAR

```
Si
5.43 ! lattice_constant
0.50 0.50 0.00 ! lattice_list[0]
0.00 0.50 0.50 ! lattice_list[1]
0.50 0.00 0.50 ! lattice_list[2]
Si
2
Direct
0.000000 0.000000 0.000000 ! Si
0.250000 0.250000 0.250000 ! Si
```

KPOINTS

```
band kpath
109 ! number_kpoints
reciprocal
+0.000000 +0.000000 +0.000000 1.0 ! Gamma
+0.041667 +0.000000 +0.000000 1.0
...
```

3.3.2. VASP 形式の主要パラメタとその既定値一覧

本アプリケーションは VASP の以下の主要パラメタを扱います。

ファイルにパラメタが記載されていない場合の既定値を以下の通り定めます。

パラメタ	内容	既定値
SYSTEM	系の名前	なし
PREC	各種計算精度パラメタの既定値の計算精度	Normal
GGA	一般勾配近似の使用	なし
AEXX	exact exchange の混合割合	0.0
ALDAC	LDA 相関エネルギーの混合割合	1.0
AGGAC	相関項への勾配補正の混合割合	1.0
AMIX	電子密度更新での電子密度の混合割合	0.4
EDIFF	固有エネルギーの反復計算の収束判定値	1.00E-04
EDIFFG	構造緩和の反復計算の収束判定値	1.00E-03
ISTART	新規・継続計算	0
ICHARG	初期電荷密度の作成方法	0
ISMEAR	K 点サンプリングの手法	1
SIGMA	Smearing に用いる電子温度[eV]	0.2
ISPIN	スピン自由度	1
ISYM	対称性使用の選択	1
NELM	固有エネルギー計算の最大反復回数	60
NSW	構造緩和の最大ステップ数	0
LHFCAL	HF 計算の実施	.FALSE.
(lattice_constant)	格子定数[Å]	1.0
(lattice_list)	格子ベクトル	1.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 1.0
(number_kpoints)	バンド図計算の対称線の総数。 これに続いてハンド経路。	0 経路なし

3.3.3. VASP 形式の精度パラメタの既定値一覧

VASP の精度パラメタの既定値を精度 Low/Normal/High の別に以下の通り定めます。

内容	パラメタ	Low	Normal	High
基底関数精度	PREC	Single	Normal	High
電子密度混合率	AMIX	0.4	0.3	0.2
SCF 反復回数	NELM	50	60	80
SCF 収束判定	EDIFF	1.0e-2	1.0e-4	1.0e-6
OPT 収束判定	EDIFFG (出力時は負値)	1.0e-1	1.0e-2	1.0e-3

これらの値は設定ファイル default.qtml にて以下の XML 形式で指定されます。

```
<VASP>
  <AMIX value_low="0.4" value_normal="0.3" value_high="0.2" />
  <NELM value_low="50" value_normal="60" value_high="80" />
  <EDIFF value_low="1.0e-2" value_normal="1.0e-4" value_high="1.0e-6" />
  <EDIFFG value_low="1.0e-1" value_normal="1.0e-2" value_high="1.0e-3" />
</VASP>
```

3.3.4. VASP 形式から UDF 形式へのパラメタへの変換

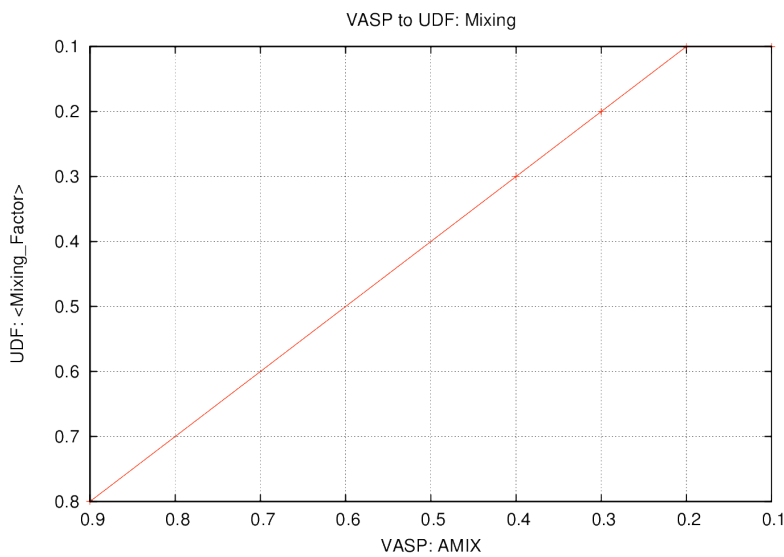
本アプリケーションは UDF パラメタを VASP の各パラメタから以下の仕様で変換設定します。

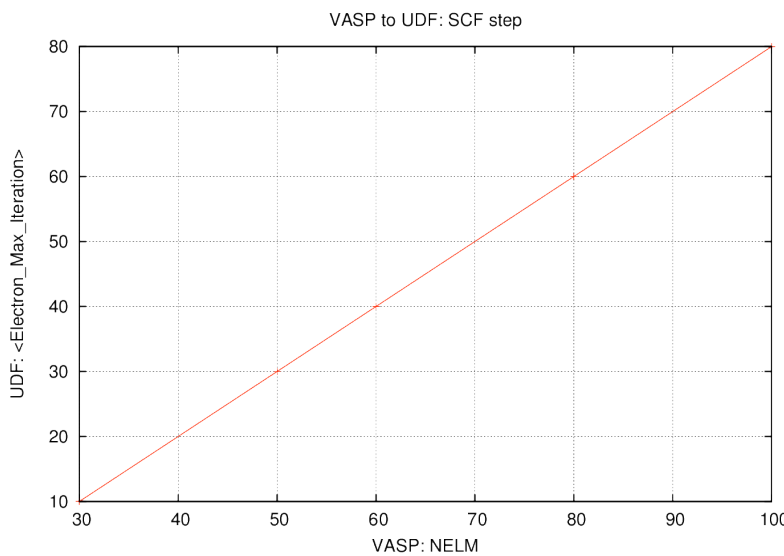
出力パラメタ	<Calculation_Type>
入力パラメタ	NSW, ICHARG, number_kpoints
変換処理	<pre> if(NSW != 0){ <Calculation_Type> Optimize </Calculation_Type> } else{ if(ICHARG < 10){ <Calculation_Type> Energy </Calculation_Type> } else{ if(number_kpoints != 0){ <Calculation_Type> Band </Calculation_Type> } else{ <Calculation_Type> DOS </Calculation_Type> } } } </pre>

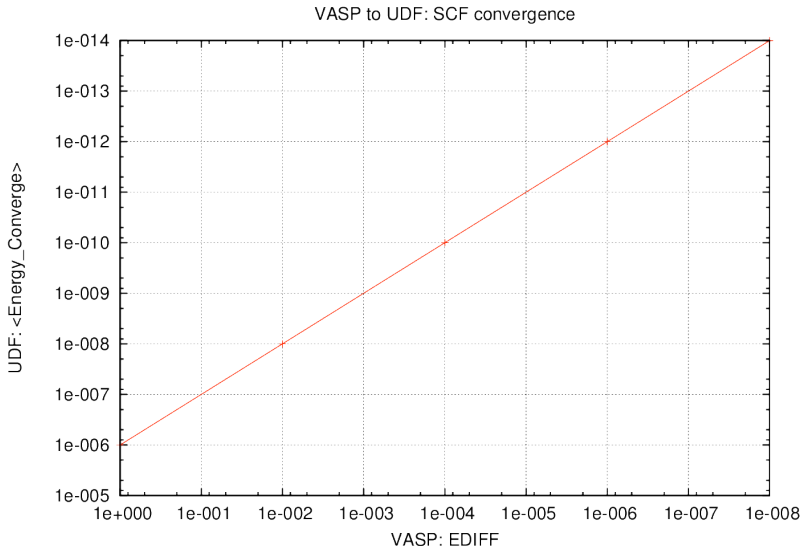
出力パラメタ	<Continue>
入力パラメタ	ISTART
変換処理	<pre> if(ISTART == 0){ <Continue> New </Continue> } else{ <Continue> Restart </Continue> } </pre>

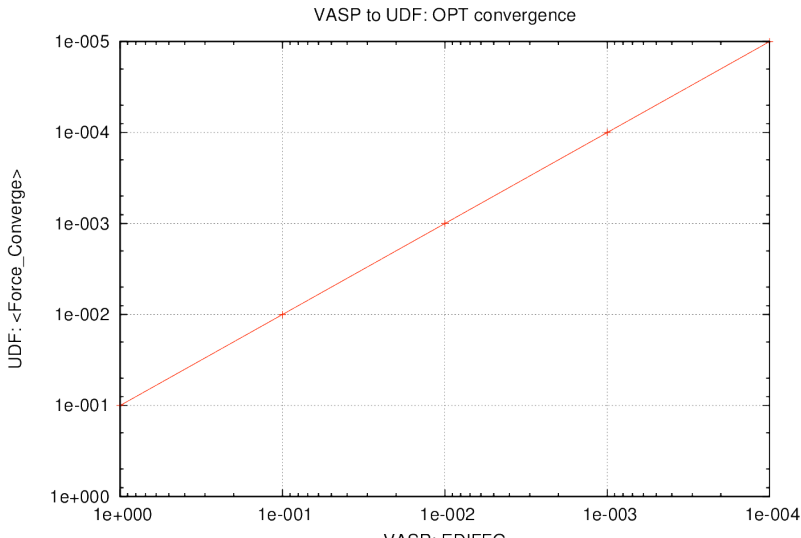
出力パラメタ	<Accuracy>
入力パラメタ	PREC
変換処理	<pre> if(PREC == Single){ <Accuracy> Low </Accuracy>; } else if(PREC == Normal){ <Accuracy> Normal </Accuracy>; } else if(PREC == High){ <Accuracy> High </Accuracy> } </pre>

出力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>
入力パラメタ	PREC
変換処理	PREC から定まる<Accuracy>から<Cutoff_Wave_Function>の既定値を設定

出力パラメタ	<Mixing_Factor>																		
入力パラメタ	AMIX																		
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <table border="1"> <caption>Data points for VASP to UDF: Mixing</caption> <thead> <tr> <th>VASP: AMIX</th> <th>UDF: <Mixing_Factor></th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0.9</td><td>0.8</td></tr> <tr><td>0.8</td><td>0.7</td></tr> <tr><td>0.7</td><td>0.6</td></tr> <tr><td>0.6</td><td>0.5</td></tr> <tr><td>0.5</td><td>0.4</td></tr> <tr><td>0.4</td><td>0.3</td></tr> <tr><td>0.3</td><td>0.2</td></tr> <tr><td>0.2</td><td>0.1</td></tr> </tbody> </table>	VASP: AMIX	UDF: <Mixing_Factor>	0.9	0.8	0.8	0.7	0.7	0.6	0.6	0.5	0.5	0.4	0.4	0.3	0.3	0.2	0.2	0.1
VASP: AMIX	UDF: <Mixing_Factor>																		
0.9	0.8																		
0.8	0.7																		
0.7	0.6																		
0.6	0.5																		
0.5	0.4																		
0.4	0.3																		
0.3	0.2																		
0.2	0.1																		

出力パラメタ	<Electron_Max_Iteration>																		
入力パラメタ	NELM																		
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <table border="1"> <caption>Data points for VASP to UDF: SCF step</caption> <thead> <tr> <th>VASP: NELM</th> <th>UDF: <Electron_Max_Iteration></th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>30</td><td>10</td></tr> <tr><td>40</td><td>20</td></tr> <tr><td>50</td><td>30</td></tr> <tr><td>60</td><td>40</td></tr> <tr><td>70</td><td>50</td></tr> <tr><td>80</td><td>60</td></tr> <tr><td>90</td><td>70</td></tr> <tr><td>100</td><td>80</td></tr> </tbody> </table>	VASP: NELM	UDF: <Electron_Max_Iteration>	30	10	40	20	50	30	60	40	70	50	80	60	90	70	100	80
VASP: NELM	UDF: <Electron_Max_Iteration>																		
30	10																		
40	20																		
50	30																		
60	40																		
70	50																		
80	60																		
90	70																		
100	80																		

出力パラメタ	<Energy_converge>
入力パラメタ	EDIFF
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p> 

出力パラメタ	<Force_Converge>
入力パラメタ	EDIFFG
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p> 

出力パラメタ	<Number_Bands>
入力パラメタ	元素名と原子数
変換処理	<p><Atom>から設定される既定値 number_band が設定される。</p> <p><Number_Bands> number_band </Number_Bands></p>

出力パラメタ	<Smearing>
入力パラメタ	ISMEAR
変換処理	<pre> if(ISMEAR == -5){ <Smearing> Recommend </Smearing> } else if(ISMEAR == 0){ <Smearing> Recommend </Smearing> } else if(ISMEAR == +1){ <Smearing> Methfessel-Paxton </Smearing> } else if(ISMEAR == -1){ <Smearing> Fermi </Smearing> } </pre>

出力パラメタ	<Spin>
入力パラメタ	ISPIN
変換処理	<pre> if(ISPIN == 2){ <Spin> On </Spin> } else{ <Spin> Off </Spin> } </pre>

出力パラメタ	<XC_Type>
入力パラメタ	GGA, LHFCAL
変換処理	<pre> if(GGA == None){ <XC_Type> LDA </XC_Type> } else if(GGA == PE && !LHFCAL){ <XC_Type> PBE </XC_Type> } else if(GGA == PS){ <XC_Type> PBEsol </XC_Type> } else if(GGA == 91){ <XC_Type> PW91 </XC_Type> } else if(GGA == PE && LHFCAL){ <XC_Type> PBE0 </XC_Type> } else if(GGA == None && LHFCAL){ <XC_Type> HF </XC_Type> } </pre>

出力パラメタ	<Symmetry>
入力パラメタ	ISYM
変換処理	<pre> if(ISYM == 2 ISYM == 1){ <Symmetry> On </Symmetry>; } else{ <Symmetry> Off </Symmetry> } </pre>

出力パラメタ	<Ion_Max_Iteration>
入力パラメタ	NSW
変換処理	<Ion_Max_Iteration> NSW </Ion_Max_Iteration>

出力パラメタ	<Sampling_k_mesh>
入力パラメタ	KPOINT.nkmesh
変換処理	<p>A ベクトルの長さ[Å]を計算 以下手順で<Sampling_k_mesh>の値を設定する。</p> <pre> if(<Calculation_type> Energy of Optimize </Calculation_type>){ if(KPOINT.nkmesh[0] < int(15.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh> } else if(KPOINT.nkmesh[0] < int(25.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh> } else{ <Sampling_k_mesh> Dense </Sampling_k_mesh> } } if(<Calculation_type> Dos </Calculation_type>){ if(KPOINT.nkmesh[0] < 2*int(15.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh> } else if(KPOINT.nkmesh[0] < 2*int(25.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh> } else{ <Sampling_k_mesh> Dense </Sampling_k_mesh> } } if(<Calculation_type> Band </Calculation_type>){ if(KPOINT. number_band_traced <= 25){ <Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh> } else if(KPOINT. number_band_traced <= 50){ <Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh> } else{ <Sampling_k_mesh> Dense </Sampling_k_mesh> } } </pre>

出力パラメタ	<Lattice_Constant>
入力パラメタ	lattice_factor
変換処理	<Lattice_Constant> lattice_factor </Lattice_Constant>

出力パラメタ	<Lattice_Vector>
入力パラメタ	lattice_list
変換処理	<Lattice_Vector> lattice_list[0] </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> lattice_list[1] </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> lattice_list[2] </Lattice_Vector>

出力パラメタ	<Atom>
入力パラメタ	atom_name, atom_a, atom_b, atom_c
変換処理	<Atom> atom_name atom_a atom_b atom_c </Atom>

バンド経路の VASP 形式からの入力

本ツールではバンド経路は結晶のブラベ格子の種別から自動的に設定されます。
そのため VASP 形式で指定されたバンド経路は自動設定には反映されません。

対称性の VASP 形式からの入力

本ツールでは対称性は結晶の格子ベクトルと原子座標から自動的に検出されます。
VASP 形式では対称性の指定はありません。

3.3.5. UDF 形式から VASP 形式へのパラメタへの変換

本アプリケーションは UDF パラメタから VASP の主要パラメタへ以下の仕様で変換設定します。

入力パラメタ	<Calculation_Type>
出力パラメタ	ICHARG, NSW, number_kpoints
変換処理	<pre> if(<Calculation_Type> Energy </Calculation_Type>){ ICHARG = 0; NSW = 0; number_kpoints = 0; } else if(<Calculation_Type> Band </Calculation_Type>){ ICHARG = 11; NSW = 0; number_kpoints = 1; } else if(<Calculation_Type> DOS </Calculation_Type>){ ICHARG = 11; NSW = 0; number_kpoints = 0; } else if(<Calculation_Type> Optimize </Calculation_Type>){ ICHARG = 0; NSW = <ION_Max_Iteration>; number_kpoints = 0; } </pre>

入力パラメタ	<Continue>
出力パラメタ	ISTART
変換処理	<pre> if(<Continue> New </Continue>){ ISTART = 0; } if(<Continue> Restart </Continue>){ ISTART = 1; } </pre>

入力パラメタ	<Accuracy>
出力パラメタ	PREC
変換処理	<pre> if(<Accuracy> Low </Accuracy>){ PREC = Single; } else if(<Accuracy> Normal </Accuracy>){ PREC = Normal; } else if(<Accuracy> High </Accuracy>){ PREC = High; } </pre>

入力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>
出力パラメタ	なし
変換処理	なし
備考	VASP は自動設定のため出力せず

入力パラメタ	<Mixing_Factor>
出力パラメタ	AMIX
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Electron_Max_Iteration>
出力パラメタ	NELM
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Energy_converge>
出力パラメタ	EDIFF
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Force_Converge>
出力パラメタ	EDIFFG
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Number_Bands>
出力パラメタ	なし
変換処理	なし
備考	VASP は自動設定のため出力せず

入力パラメタ	<Smearing>
出力パラメタ	ISMEAR
変換処理	<pre> if(<Smearing> Recommend </Smearing>){ if(<Calculation_Type> Energy </Calculation_Type> <Calculation_Type> DOS </Calculation_Type>){ ISMEAR = -5; } if(<Calculation_Type> Band </Calculation_Type> <Calculation_Type> Optimize </Calculation_Type>){ ISMEAR = 0; } SIGMA = 0.1; } else if(<Smearing> Methfessel-Paxton </Smearing>){ ISMEAR = +1; SIGMA = 0.1; } else if(<Smearing> Fermi </Smearing>){ ISMEAR = -1; SIGMA = 0.1; } </pre>

入力パラメタ	<Spin>
出力パラメタ	ISPIN
変換処理	<pre> if(<Spin> On </Spin>){ ISPIN = 2; } if(<Spin> Off </Spin>){ ISPIN = 1; } </pre>

入力パラメタ	<XC_Type>
出力パラメタ	GGA, LHFCAL, AEXX, AGGAC
変換処理	<pre> if(<XC_Type> LDA </XC_Type>){ GGA = None; LHFCAL = false; AEXX = 0.0; AGGAC = 1.0; } else if(<XC_Type> PBE </XC_Type>){ GGA = PE; LHFCAL = false; AEXX = 0.0; AGGAC = 1.0; } else if(<XC_Type> PBEsol </XC_Type>){ GGA = PS; LHFCAL = false; AEXX = 0.0; AGGAC = 1.0; } else if(<XC_Type> PW91 </XC_Type>){ GGA = 91; LHFCAL = false; AEXX = 0.0; AGGAC = 1.0; } else if(<XC_Type> PBE0 </XC_Type>){ GGA = PE; LHFCAL = true; AEXX = 0.25; AGGAC = 1.0; } else if(<XC_Type> HF </XC_Type>){ GGA = None; LHFCAL = true; AEXX = 1.0; AGGAC = 0.0; } </pre>

入力パラメタ	<Symmetry>
出力パラメタ	ISYM
変換処理	<pre> if(<Symmetry> On </Symmetry>){ ISYM = 1; } else{ ISYM = 0; } </pre>

入力パラメタ	<Ion_Max_Iteration>
出力パラメタ	NSW
変換処理	<pre> if(<Calculation_Type> Optimize </Calculation_Type>){ if(<Ion_Max_Iteration> == 0){ NSW = 100; } else{ NSW = <Ion_Max_Iteration>; } } else{ NSW =0; } </pre>

入力パラメタ	<Lattice_Constant>
出力パラメタ	lattice_factor
変換処理	lattice_factor = <Lattice_Constant>;

入力パラメタ	<Lattice_Vector>
出力パラメタ	lattice_list[]
変換処理	<pre> lattice_list[0] = <Lattice_Vector[0]>; lattice_list[1] = <Lattice_Vector[1]>; lattice_list[2] = <Lattice_Vector[2]>; </pre>

入力パラメタ	<Atom>
出力パラメタ	atom_name, atom_a, atom_b, atom_c
変換処理	<pre> atom_name = <Atom>_name; atom_a = <Atom>_a; atom_b = <Atom>_b; atom_c = <Atom>_c; </pre>

入力パラメタ	<Sampling_k_mesh>
出力パラメタ	KPOINT.nkmesh
変換処理	<p>A ベクトルの長さ[Å]を計算し、<Sampling_k_mesh>の値に応じて A 軸方向のサンプル K 点数 KPOINT.nkmesh [0]を以下手順で計算する。</p> <pre> if(<Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh>){ KPOINT.nkmesh [0] = int(ceil(10.0/A)); } else if(<Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh>){ KPOINT.nkmesh [0] = int(ceil(20.0/A)); } else if(<Sampling_k_mesh> Dense </Sampling_k_mesh>){ KPOINT.nkmesh [0] = int(ceil(30.0/A)); } </pre> <p>B, C 軸についても同様に KPOINT.nkmesh [1], KPOINT.nkmesh [2]を計算する。さらに<Calculation_Type>に応じて以下手順で変更する。</p> <pre> if(<Calculation_Type> DOS </Calculation_Type>){ KPOINT.nkmesh[0] = KPOINT.nkmesh[0]*2; KPOINT.nkmesh[1] = KPOINT.nkmesh[1]*2; KPOINT.nkmesh[2] = KPOINT.nkmesh[2]*2; } </pre>

バンド経路の VASP 形式へ出力

本ツールではバンド経路は結晶のブラベ格子の種別から自動的に設定されます。
自動設定されたバンド経路が VASP 形式として出力されます。

対称性の VASP 形式への出力

本ツールでは対称性は結晶の格子ベクトルと原子座標から自動的に検出されます。
VASP 形式では対称性の指定はありません。

3.4. UDF 形式と OpenMX 形式の間でのデータ変換

3.4.1. OpenMX 形式ファイルの概要

OpenMX 形式は以下の例のように計算内容が記述されます。

<pre> System.CurrentDirectory ./ System.Name Si Species.Number 1 <Definition.of.Atomic.Species Si Si7.0-slp1 Si_CA13 Definition.of.Atomic.Species> Atoms.Number 2 Atoms.SpeciesAndCoordinates.Unit Ang <Atoms.SpeciesAndCoordinates 1 Si 0.0000 0.0000 0.0000 2.00 2.00 2 Si 1.3575 1.3575 1.3575 2.00 2.00 Atoms.SpeciesAndCoordinates> Atoms.UnitVectors.Unit Ang <Atoms.UnitVectors 2.715000 2.715000 0.000000 0.000000 2.715000 2.715000 2.715000 0.000000 2.715000 Atoms.UnitVectors> scf.XcType GGA-PBE scf.SpinPolarization on scf.restart off scf.energycutoff 76.000000 scf.maxIter 90 scf.EigenvalueSolver band scf.Kgrid 3 3 3 scf.Mixing_Type Simple scf.Max_Mixing_Weight 0.400000 scf.criterion 1.000000e-004 (右枠へ続く) </pre>	<pre> (左枠から続き) MD.Type nomd MD.maxIter 0 MD.Opt_criterion 0.000100 Band.dispersion off Band.Nkpath 5 <Band.kpath 7 0.00 0.00 0.00 0.000 0.500 0.50 G X 4 0.00 0.50 0.50 0.250 0.500 0.75 X W 5 0.25 0.50 0.75 0.500 0.500 0.50 W L 6 0.50 0.50 0.50 0.000 0.000 0.00 L G 7 0.00 0.00 0.00 0.375 0.375 0.75 G U/K Band.kpath> Dos.fileout off Dos.Kgrid 0 0 0 </pre>
---	--

3.4.2. OpenMX 形式の主要パラメタとその既定値一覧

本アプリケーションは OpenMX の以下の主要パラメタを扱います。

ファイルにパラメタが記載されていない場合の既定値を以下の通り定めます。

パラメタ	内容	既定値
scf. XcType	交換相関汎関数	LDA
scf. SpinPolarization	スピン自由度	off
scf. restart	新規・継続計算	off
scf. energycutoff	波動関数の表現基底の最大エネルギー	150.0
scf. maxIter	固有エネルギー計算の最大反復回数	40
scf. Kgrid	固有エネルギー計算用のサンプリング数	4 4 4
scf. Mixing_Type	電子密度更新の方法	Simple
scf. Max_Mixing_Weight	電子密度更新での電子密度の混合割合	0.40
scf. criterion	固有エネルギーの反復計算の収束判定値	1.0E-06
MD. Type	構造緩和の有無	nomd
MD. maxIter	構造緩和の最大ステップ数	1
MD. Opt_criterion	構造緩和の反復計算の収束判定値	0.0003
Band. dispersion	バンド図計算の有無	off
Band. Nkpath	バンド図計算の対称線の総数	0
<Band. kpath>	バンド図の各線分の座標など	経路なし
Dos. fileout	状態密度計算の有無	off
Dos. Kgrid	状態密度計算用のサンプリング数	4 4 4
<Atoms. SpeciesAndCoordinates>	各原子の元素名、座標	
<Atoms. UnitVectors>	格子ベクトル[Å]	

3.4.3. OpenMX 形式の精度パラメタの既定値一覧

OpenMX の精度パラメタの既定値を精度 Low/Normal/High の別に以下の通り定めます。

内容	パラメタ	Low	Normal	High
基底関数精度	scf.energycutoff	120	150	180
電子密度混合率	scf.Max.Mixing.Weight	0.4	0.3	0.2
SCF 反復回数	scf.maxIter	30	40	60
SCF 収束判定	scf.criterion	1.0e-4	1.0e-6	1.0e-8
OPT 収束判定	Md.Opt.criterion	3.0e-3	3.0e-4	3.0e-5

これらの値は設定ファイル default.qtml にて以下の XML 形式で指定されます。

```

<OpenMX>
  <scf.energycutoff value_low="120.0" value_normal="150.0" value_high="180.0" />
  <scf.Max_Mixing_Weight value_low="0.4" value_normal="0.3" value_high="0.2" />
  <scf.maxIter value_low="30" value_normal="40" value_high="60" />
  <scf.criterion value_low="1.0e-4" value_normal="1.0e-6" value_high="1.0e-8" />
  <Md.Opt_criterion value_low="3.0e-3" value_normal="3.0e-4" value_high="3.0e-5" />
</OpenMX>

```

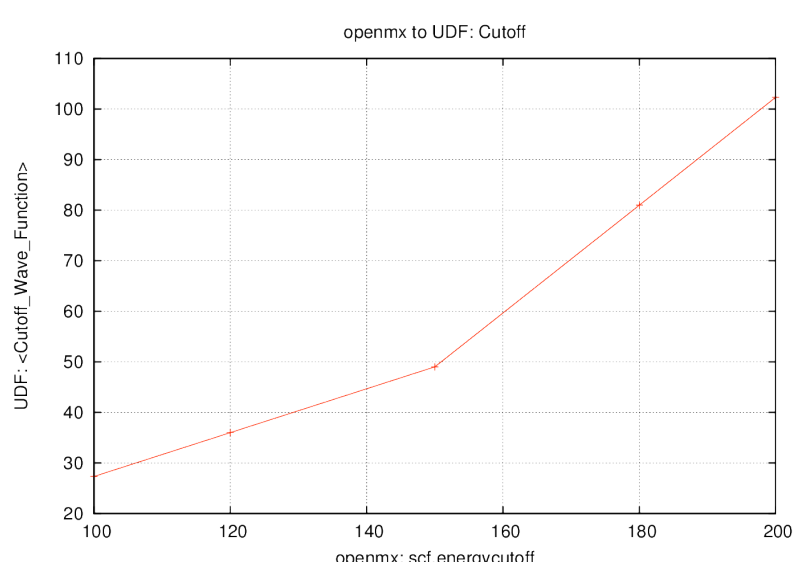
3.4.4. OpenMX 形式から UDF 形式へのパラメタへの変換

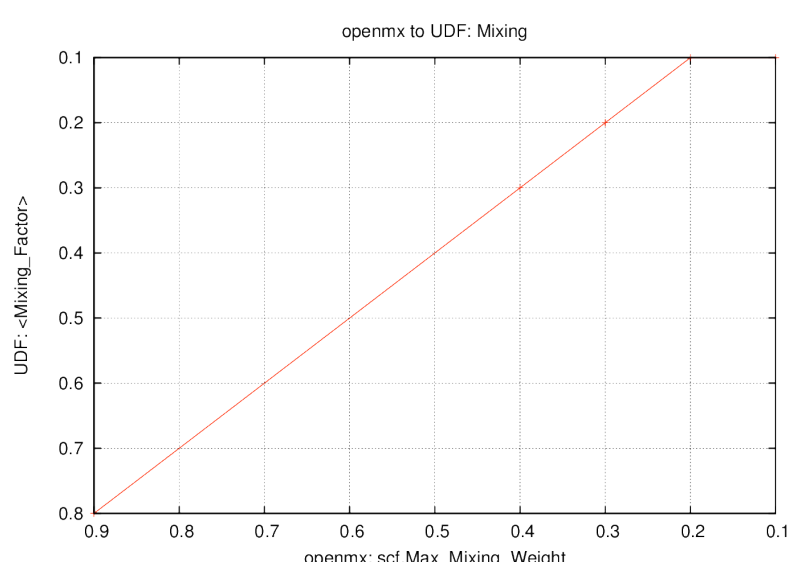
本アプリケーションは UDF パラメタを OpenMX の各パラメタから以下の仕様で変換設定します。

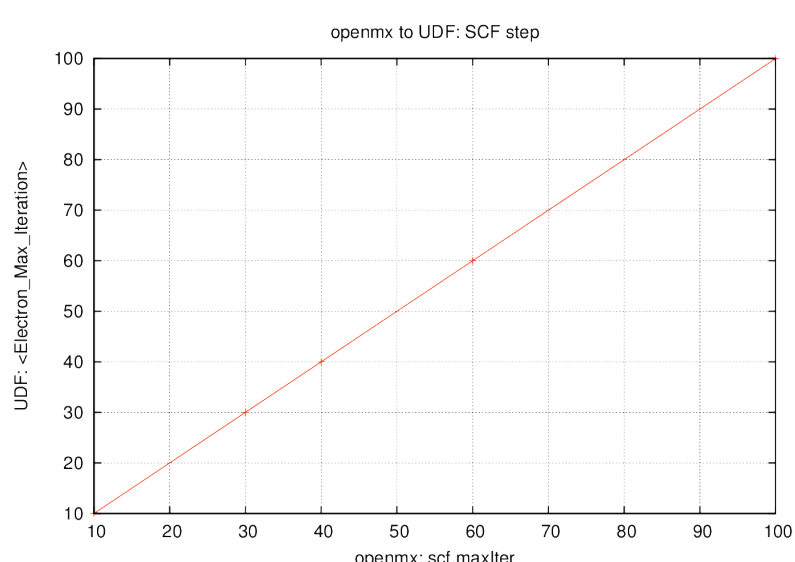
出力パラメタ	<Calculation_Type>
入力パラメタ	MD.Type, Band.dispersion, Dos.fileout
変換処理	<pre> if(MD.Type != "nomd"){ <Calculation_Type> Optimize </Calculation_Type> } else{ if(Band.dispersion){ <Calculation_Type> Band </Calculation_Type> } if(Dos.fileout){ <Calculation_Type> DOS </Calculation_Type> } else{ <Calculation_Type> Energy </Calculation_Type> } } </pre>

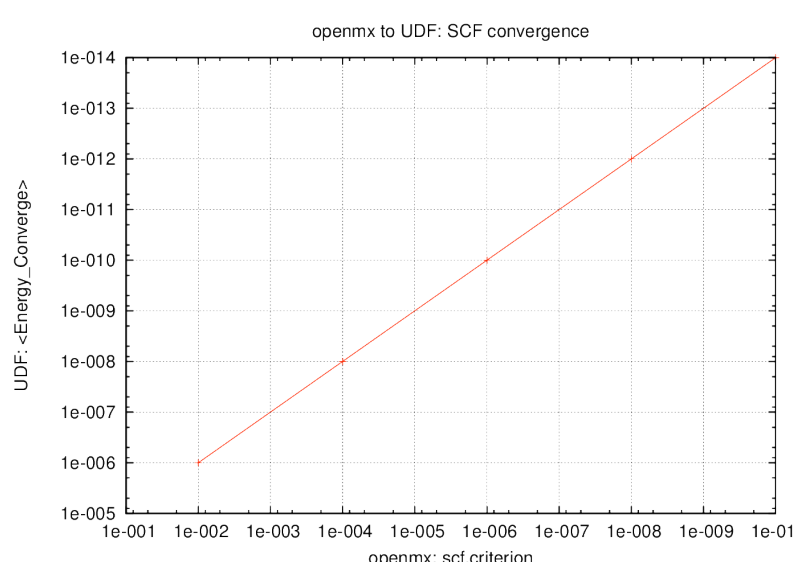
出力パラメタ	<Continue>
入力パラメタ	scf.restart
変換処理	<pre> if(scf.restart){ <Continue> Restart </Continue> } else{ <Continue> New </Continue> } </pre>

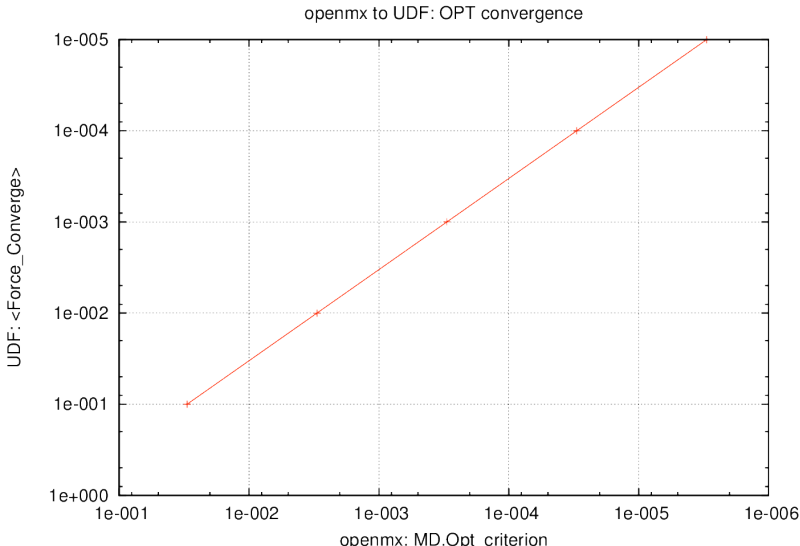
出力パラメタ	<Accuracy>
入力パラメタ	scf.energycutoff
変換処理	<pre> if(scf.energycutoff is around 120.0){ <Accuracy> Low </Accuracy> } else if(scf.energycutoff is around 150.0){ <Accuracy> Normal </Accuracy> } else{ <Accuracy> High </Accuracy> } </pre>

出力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>																
入力パラメタ	scf.energycutoff																
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <table border="1"> <caption>Data points for 'openmx to UDF: Cutoff' graph</caption> <thead> <tr> <th>openmx: scf.energycutoff</th> <th>UDF: <Cutoff_Wave_Function></th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>100</td><td>28</td></tr> <tr><td>120</td><td>38</td></tr> <tr><td>140</td><td>48</td></tr> <tr><td>150</td><td>50</td></tr> <tr><td>160</td><td>60</td></tr> <tr><td>180</td><td>82</td></tr> <tr><td>200</td><td>105</td></tr> </tbody> </table>	openmx: scf.energycutoff	UDF: <Cutoff_Wave_Function>	100	28	120	38	140	48	150	50	160	60	180	82	200	105
openmx: scf.energycutoff	UDF: <Cutoff_Wave_Function>																
100	28																
120	38																
140	48																
150	50																
160	60																
180	82																
200	105																

出力パラメタ	<Mixing_Factor>																		
入力パラメタ	scf.Max_Mixing_Weight																		
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <table border="1"> <caption>Data points for 'openmx to UDF: Mixing' graph</caption> <thead> <tr> <th>openmx: scf.Max_Mixing_Weight</th> <th>UDF: <Mixing_Factor></th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0.9</td><td>0.8</td></tr> <tr><td>0.8</td><td>0.7</td></tr> <tr><td>0.7</td><td>0.6</td></tr> <tr><td>0.6</td><td>0.5</td></tr> <tr><td>0.5</td><td>0.4</td></tr> <tr><td>0.4</td><td>0.3</td></tr> <tr><td>0.3</td><td>0.2</td></tr> <tr><td>0.2</td><td>0.1</td></tr> </tbody> </table>	openmx: scf.Max_Mixing_Weight	UDF: <Mixing_Factor>	0.9	0.8	0.8	0.7	0.7	0.6	0.6	0.5	0.5	0.4	0.4	0.3	0.3	0.2	0.2	0.1
openmx: scf.Max_Mixing_Weight	UDF: <Mixing_Factor>																		
0.9	0.8																		
0.8	0.7																		
0.7	0.6																		
0.6	0.5																		
0.5	0.4																		
0.4	0.3																		
0.3	0.2																		
0.2	0.1																		

出力パラメタ	<Electron_Max_Iteration>
入力パラメタ	scf.maxIter
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p> 

出力パラメタ	<Energy_converge>
入力パラメタ	scf.criterion
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p> 

出力パラメタ	<Force_Converge>
入力パラメタ	MD.Opt_criterion
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p> 

出力パラメタ	<Number_Bands>
入力パラメタ	元素名と原子数
変換処理	<p><Atom>から設定される既定値 number_band が設定される。</p> <p><Number_Bands> number_band </Number_Bands></p>

出力パラメタ	<Smearing>
入力パラメタ	なし
変換処理	<Smearing> Recommend </Smearing>

出力パラメタ	<Spin>
入力パラメタ	scf.SpinPolarization
変換処理	<pre> if(scf.SpinPolarization){ <Spin> On </Spin> } else{ <Spin> Off </Spin> } </pre>

出力パラメタ	<XC_Type>
入力パラメタ	scf.XcType
変換処理	<pre> if(scf.XcType == "LDA" scf.XcType == "LSDA-CA"){ <XC_Type> LDA </XC_Type> } else if(scf.XcType == "GGA-PBE"){ <XC_Type> PBE </XC_Type> } else if(scf.XcType == "LSDA-PW"){ <XC_Type> PW91 </XC_Type> } </pre>

出力パラメタ	<Symmetry>
入力パラメタ	なし
変換処理	<Symmetry> Off </Symmetry>

出力パラメタ	<Ion_Max_Iteration>
入力パラメタ	MD.maxIter
変換処理	<Ion_Max_Iteration> MD.maxIter-1 </Ion_Max_Iteration>

出力パラメタ	<Lattice_Constant>
入力パラメタ	なし
変換処理	<Lattice_Constant> 1.0 </Lattice_Constant>

出力パラメタ	<Lattice_Vector>
入力パラメタ	lattice_list
変換処理	<pre> <Lattice_Vector> lattice_list[0] </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> lattice_list[1] </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> lattice_list[2] </Lattice_Vector> </pre>

出力パラメタ	<Atom>
入力パラメタ	atom_name, atom_a, atom_b, atom_c
変換処理	<Atom> atom_name atom_a atom_b atom_c </Atom>

出力パラメタ	<Sampling_k_mesh>
入力パラメタ	scf.Kgrid
変換処理	<p>A ベクトルの長さ[Å]を計算 以下手順で<Sampling_k_mesh>の値を設定する。</p> <pre> if(scf.Kgrid[0] < int(15.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh> } else if(scf.Kgrid[0] < int(25.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh> } else{ <Sampling_k_mesh> Dense </Sampling_k_mesh> } </pre>

バンド経路の OpenMX 形式からの入力

本ツールではバンド経路は結晶のブラベ格子の種別から自動的に設定されます。
そのため OpenMX 形式で指定されたバンド経路は自動設定には反映されません。

対称性の OpenMX 形式からの入力

本ツールでは対称性は結晶の格子ベクトルと原子座標から自動的に検出されます。
OpenMX 形式では対称性の指定はありません。

3.4.5. UDF 形式から OpenMX 形式へのパラメタへの変換

本アプリケーションは UDF パラメタから OpenMX の主要パラメタへ以下の仕様で変換設定します。

入力パラメタ	<Calculation_Type>
出力パラメタ	Band.dispersion, Dos.fileout, MD.Type
変換処理	<pre> if(<Calculation_Type> Energy </Calculation_Type>){ Band.dispersion = off; Dos.fileout = off; MD.Type = "nomd"; } else if(<Calculation_Type> Band </Calculation_Type>){ Band.dispersion = on; Dos.fileout = off; MD.Type = "nomd"; } else if(<Calculation_Type> DOS </Calculation_Type>){ Band.dispersion = off; Dos.fileout = on; MD.Type = "nomd"; } else if(<Calculation_Type> Optimize </Calculation_Type>){ Band.dispersion = off; Dos.fileout = off; MD.Type = "Opt"; } </pre>

入力パラメタ	<Continue>
出力パラメタ	scf.restart
変換処理	<pre> if(<Continue> New </Continue>){ scf.restart = off; } if(<Continue> Restart </Continue>){ scf.restart = on; } </pre>

入力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>
出力パラメタ	scf.energycutoff
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Mixing_Factor>
出力パラメタ	scf.Max_Mixing_Weight
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Electron_Max_Iteration>
出力パラメタ	scf.maxIter
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Energy_converge>
出力パラメタ	scf.criterion
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Force_Converge>
出力パラメタ	MD.Opt_criterion
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Number_Bands>
出力パラメタ	なし
変換処理	なし
備考	OpenMX は自動設定のため出力せず

入力パラメタ	<Smearing>
出力パラメタ	なし
変換処理	なし
備考	OpenMX には当該機能なし

入力パラメタ	<Spin>
出力パラメタ	scf.SpinPolarization
変換処理	<pre> if(<Spin> On </Spin>){ scf.SpinPolarization = on; } if(<Spin> Off </Spin>){ scf.SpinPolarization = off; } </pre>

入力パラメタ	<XC_Type>
出力パラメタ	scf.XcType
変換処理	<pre> if(<XC_Type> LDA </XC_Type>){ scf.XcType = "LDA"; } else if(<XC_Type> PBE </XC_Type>){ scf.XcType = "GGA-PBE" } else if(<XC_Type> PBEsol </XC_Type>){ scf.XcType = "GGA-PBE"; } else if(<XC_Type> PW91 </XC_Type>){ scf.XcType = "LSDA-PW"; } else if(<XC_Type> PBE0 </XC_Type>){ scf.XcType = "GGA-PBE"; } else if(<XC_Type> HF </XC_Type>){ scf.XcType = "GGA-PBE"; } </pre>

入力パラメタ	<Symmetry>
出力パラメタ	なし
変換処理	なし

入力パラメタ	<Ion_Max_Iteration>
出力パラメタ	MD.maxIter
変換処理	MD.maxIter = <Ion_Max_Iteration> + 1;

入力パラメタ	<Lattice_Constant>
出力パラメタ	なし
変換処理	なし

入力パラメタ	<Lattice_Vector>
出力パラメタ	lattice_list[]
変換処理	lattice_list[0] = <Lattice_Vector[0]>; lattice_list[1] = <Lattice_Vector[1]>; lattice_list[2] = <Lattice_Vector[2]>;

入力パラメタ	<Atom>
出力パラメタ	atom_name, atom_a, atom_b, atom_c
変換処理	atom_name = <Atom>_name; atom_a = <Atom>_a; atom_b = <Atom>_b; atom_c = <Atom>_c;

入力パラメタ	<Sampling_k_mesh>
出力パラメタ	scf.Kgrid, Dos.Kgrid
変換処理	<p>A ベクトルの長さ[Å]を計算し、<Sampling_k_mesh>の値に応じて A 軸方向のサンプル K 点数 scf.Kgrid[0]を以下手順で計算する。</p> <pre> if(<Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh>){ scf.Kgrid [0] = int(ceil(10.0/A)); } else if(<Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh>){ scf.Kgrid [0] = int(ceil(20.0/A)); } else if(<Sampling_k_mesh> Dense </Sampling_k_mesh>){ scf.Kgrid [0] = int(ceil(30.0/A)); } </pre> <p>B, C 軸についても同様に scf.Kgrid[1], scf.Kgrid[2]を計算する。</p> <p>さらに<Calculation_Type>に応じて Dos.Kgrid を以下手順で計算する。</p> <pre> if(<Calculation_Type> DOS </Calculation_Type>){ Dos.Kgrid [0] = scf.Kgrid [0]*2; Dos.Kgrid [1] = scf.Kgrid [1]*2; Dos.Kgrid [2] = scf.Kgrid [2]*2; } else{ Dos.Kgrid [0] = 0; Dos.Kgrid [1] = 0; Dos.Kgrid [2] = 0; } </pre>

入力パラメタ	<Accuracy>		
出力パラメタ	<Definition. of. Atomic. Species>		
備考	精度に応じて各元素のPA0ファイルとVPSファイルを以下の通り設定します。		
変換処理			

バンド経路の OpenMX 形式へ出力

本ツールではバンド経路は結晶のブラベ格子の種別から自動的に設定されます。
自動設定されたバンド経路が OpenMX 形式として出力されます。

対称性の OpenMX 形式への出力

本ツールでは対称性は結晶の格子ベクトルと原子座標から自動的に検出されます。
OpenMX 形式では対称性の指定はありません。

# RSDFT	(左枠から続き)									
ISYM	1	'symdat'								
XCTYPE	'LDAPZ81'									
SYSTYPE	0									
AX	10.261									
A1	0.00	0.50	0.50							
A2	0.50	0.00	0.50							
A3	0.50	0.50	0.00							
NBAND	16									
NSPIN	1									
NDSPIN	0.0									
NFIXED	0									
NEXTE	0.d0									
NK	8									
MMM1	5	5	5							
MMM2	2	2	2							
NCG	2									
NGRID	12	12	12							
MD	6									
PSELECT	2									
PP	2	'Si_psv.dat'								
IMIX	10									
MMIX	4									
BETA	0.4									
SCFCONV	1.d-15									
PROCS	1	1	1	1	1	1				
(右枠へ続く)										
EKBT	1.d-5									
KINTEG	5									
DITER	100									
NSWEEP	5									
IC	0									
OC	3									
OC2	100									
IOCTRL	0									
SWSCF	1									
SWOPT	0									
SWBAND	1									
ETLIMIT	10000.d0									
ATOMOPT1	0	6	5							
ATOMOPT2	0.5d0	1.d-10	5.d-4	1.d-1						
ATOMOPT3	100									
HF	0.4	0	0	0						
BAND	7	24	20	1.d-7	100					
1.0	1.0	0.75	0.0	0.5	0.75	0.75	0.5			
0.0	0.5	0.375	0.0	0.5	0.375	0.25	0.0			
0.0	0.5	0.375	0.0	0.5	0.375	0.5	0.5			
30	5	10	10	10	5	5				

3.5.2. RSDFT 形式の主要パラメタとその既定値一覧

本アプリケーションは RSDFT の以下の主要パラメタを扱います。

ファイルにパラメタが記載されていない場合の既定値を以下の通り定めます。

パラメタ	内容	既定値
ISYM	対象操作の使用の有無	1
XCTYPE	交換関数関数	'LDAPZ81'
AX	格子定数[Bohr]	0.0
A1[]	格子ベクトル	0.0 0.0 0.0
A2[]	格子ベクトル	0.0 0.0 0.0
A3[]	格子ベクトル	0.0 0.0 0.0
NBAND	計算対象のバンド数	0
NSPIN	スピン成分数	1
NK	固有エネルギー計算用のサンプリング数	2
MMM1	同上	2 2 2
MMM2	同上	2 2 2
NGRID[]	格子点数	0 0 0
BETA	電子密度の混合率	0.3
SCFCONV	固有エネルギー計算の収束判定値	1.0e-15
DITER	SCF 計算の最大反復回数	120
SWSCF	SCF 計算の実行	1
SWOPT	構造最適化計算の実行	0
SWBAND	バンド計算の実行	0
ATOMOPT2	構造緩和計算の収束判定値	5.0e-4
ATOMOPT1	構造緩和計算の最大反復回数	100
number_sym_op	対称操作の総数	1
atom[]_name	各原子の元素名	原子なし
atom[]_a	各原子の内部座標の A 軸成分	原子なし
atom[]_b	各原子の内部座標の B 軸成分	原子なし
atom[]_c	各原子の内部座標の C 軸成分	原子なし
BAND	バンド図計算の対称点の総数。 これに続いてバンド経路。	0 経路なし

3.5.3. RSDFT 形式の精度パラメタの既定値一覧

RSDFT の精度パラメタの既定値を精度 Low/Normal/High の別に以下の通り定めます。

内容	パラメタ	Low	Normal	High
基底関数精度	DGRID (GUI 内部変数)	0.5	0.4	0.3
電子密度混合率	BETA	0.4	0.3	0.2
SCF 反復回数	DITER	80	120	200
SCF 収束判定	SCFCONV	1.0e-12	1.0e-15	1.0e-18
OPT 収束判定	ATOMOPT2	5.0e-3	5.0e-4	5.0e-5

これらの値は設定ファイル default.qml にて以下の XML 形式で指定されます。

```

<RSDFT>
  <DGRID value_low="0.5" value_normal="0.4" value_high="0.3" />
  <BETA value_low="0.4" value_normal="0.3" value_high="0.2" />
  <DITER value_low="80" value_normal="120" value_high="200" />
  <SCFCONV value_low="1.0e-12" value_normal="1.0e-15" value_high="1.0e-18" />
  <ATOMOPT2 value_low="5.0e-3" value_normal="5.0e-4" value_high="5.0e-5" />
</RSDFT>

```

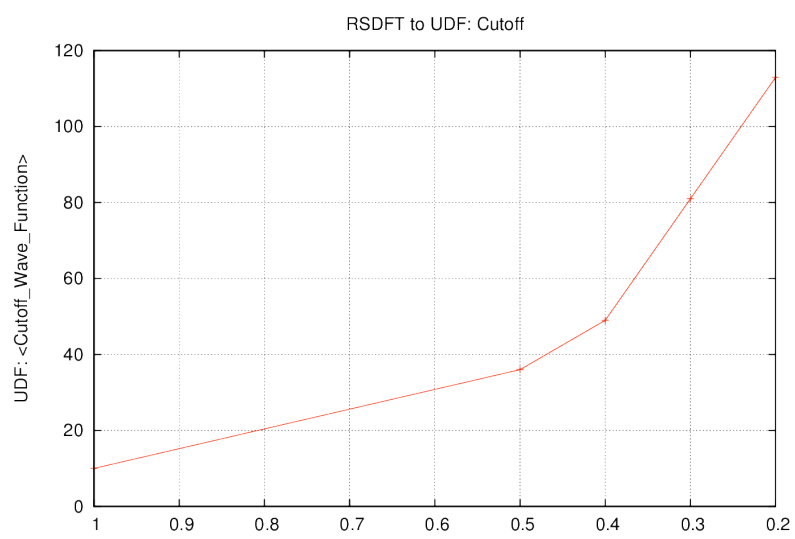
3.5.4. RSDFT 形式から UDF 形式へのパラメタへの変換

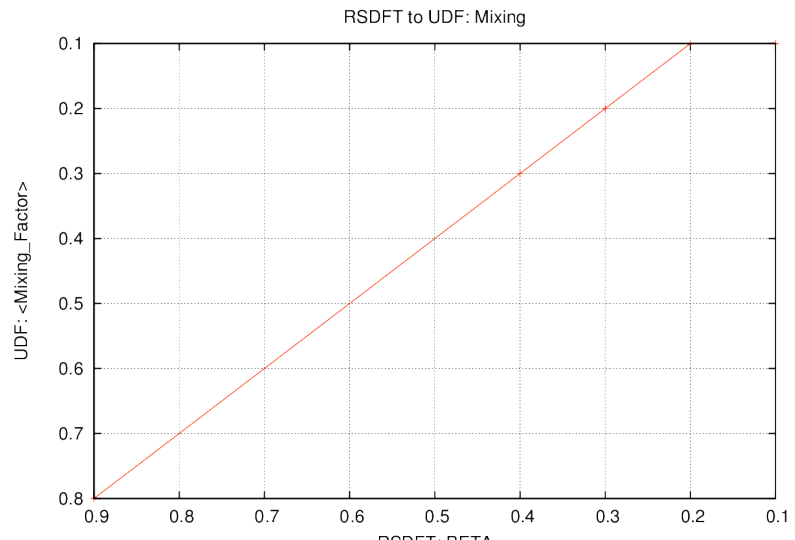
本アプリケーションは UDF パラメタを RSDFT の各パラメタから以下の仕様で変換設定します。

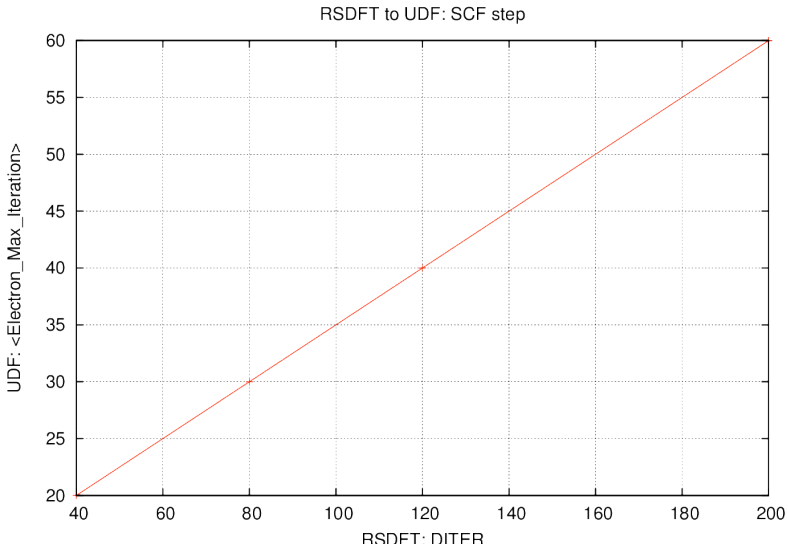
出力パラメタ	<Calculation_Type>
入力パラメタ	SWOPT, SWBAND, SWSCF
変換処理	<pre> if(SWOPT > 0){ <Calculation_Type> Optimize </Calculation_Type> } else if(SWBAND > 0){ <Calculation_Type> Band </Calculation_Type> } else{ <Calculation_Type> Energy </Calculation_Type> } </pre>

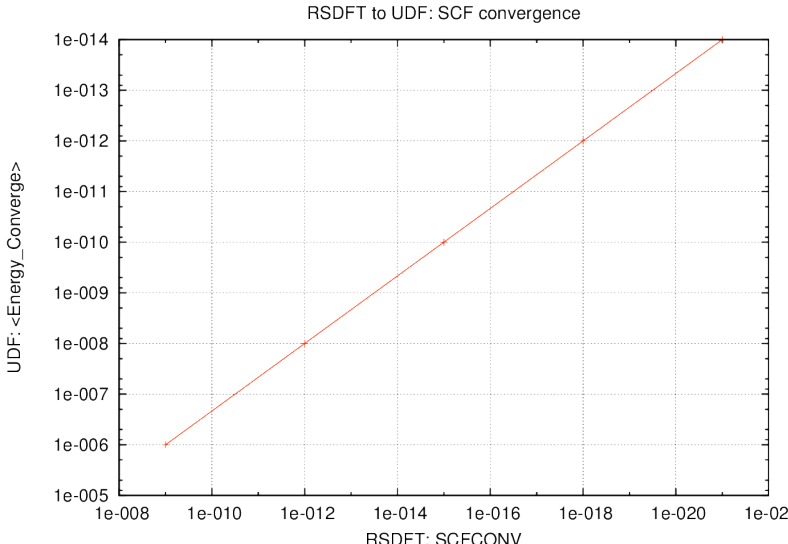
出力パラメタ	<Continue>
入力パラメタ	SWOPT
変換処理	<pre> if(SWOPT == 2){ <Continue> Restart </Continue> } else{ <Continue> New </Continue> } </pre>

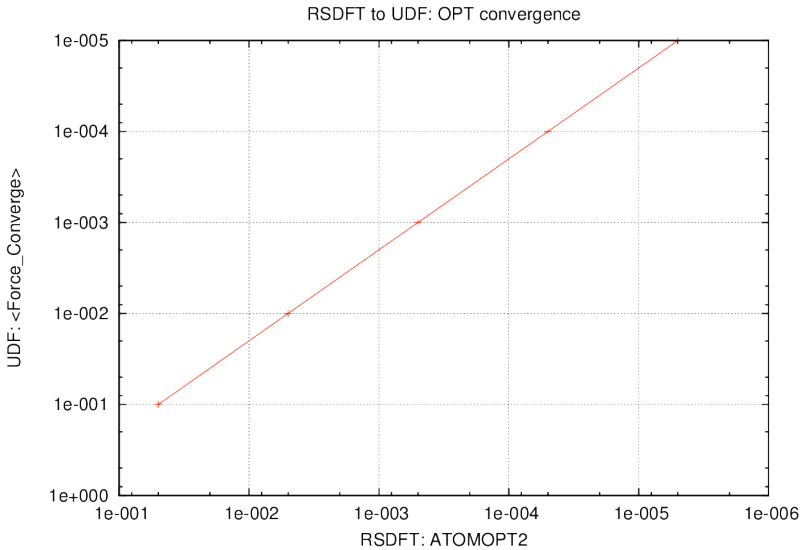
出力パラメタ	<Accuracy>
入力パラメタ	AX, A1, A2, A3, NGRID
変換処理	<p>格子ベクトル AX, A1, A2, A3 と格子点数 NGRID から定まる格子間隔の最小値 DGRID から以下手順で<Accuracy>の値を設定する。</p> <pre> if(DGRID is around 0.5){ <Accuracy> Low </Accuracy> } else if(DGRID is around 0.4){ <Accuracy> Normal </Accuracy> } else{ <Accuracy> High </Accuracy> } </pre>
備考	<Accuracy>で既定値が定義されるパラメタでは RSDFT の既定値もしくは指定値からの変換値を使用する。

出力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>																				
入力パラメタ	DGRID																				
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <table border="1"> <caption>Data points for RSDFT to UDF: Cutoff</caption> <thead> <tr> <th>RSDFT:DGRID</th> <th>UDF:Cutoff_Wave_Function</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1.0</td><td>10</td></tr> <tr><td>0.9</td><td>15</td></tr> <tr><td>0.8</td><td>20</td></tr> <tr><td>0.7</td><td>25</td></tr> <tr><td>0.6</td><td>30</td></tr> <tr><td>0.5</td><td>35</td></tr> <tr><td>0.4</td><td>50</td></tr> <tr><td>0.3</td><td>80</td></tr> <tr><td>0.2</td><td>115</td></tr> </tbody> </table>	RSDFT:DGRID	UDF:Cutoff_Wave_Function	1.0	10	0.9	15	0.8	20	0.7	25	0.6	30	0.5	35	0.4	50	0.3	80	0.2	115
RSDFT:DGRID	UDF:Cutoff_Wave_Function																				
1.0	10																				
0.9	15																				
0.8	20																				
0.7	25																				
0.6	30																				
0.5	35																				
0.4	50																				
0.3	80																				
0.2	115																				

出力パラメタ	<Mixing_Factor>																		
入力パラメタ	BETA																		
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <table border="1"> <caption>Data points for RSDFT to UDF: Mixing</caption> <thead> <tr> <th>RSDFT:BETA</th> <th>UDF:Mixing_Factor</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0.9</td><td>0.8</td></tr> <tr><td>0.8</td><td>0.7</td></tr> <tr><td>0.7</td><td>0.6</td></tr> <tr><td>0.6</td><td>0.5</td></tr> <tr><td>0.5</td><td>0.4</td></tr> <tr><td>0.4</td><td>0.3</td></tr> <tr><td>0.3</td><td>0.2</td></tr> <tr><td>0.2</td><td>0.1</td></tr> </tbody> </table>	RSDFT:BETA	UDF:Mixing_Factor	0.9	0.8	0.8	0.7	0.7	0.6	0.6	0.5	0.5	0.4	0.4	0.3	0.3	0.2	0.2	0.1
RSDFT:BETA	UDF:Mixing_Factor																		
0.9	0.8																		
0.8	0.7																		
0.7	0.6																		
0.6	0.5																		
0.5	0.4																		
0.4	0.3																		
0.3	0.2																		
0.2	0.1																		

出力パラメタ	<Electron_Max_Iteration>												
入力パラメタ	DITER												
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <p>Detailed description: A linear plot with 'RSDFT: DITER' on the x-axis ranging from 40 to 200 in increments of 20, and 'UDF: <Electron_Max_Iteration>' on the y-axis ranging from 20 to 60 in increments of 5. A red line represents the conversion, starting at (40, 20) and ending at (200, 60). Key points on the line are marked with small red dots.</p> <table border="1"> <caption>Data points for RSDFT to UDF: SCF step</caption> <thead> <tr> <th>RSDFT: DITER</th> <th>UDF: <Electron_Max_Iteration></th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>40</td><td>20</td></tr> <tr><td>80</td><td>30</td></tr> <tr><td>120</td><td>40</td></tr> <tr><td>160</td><td>50</td></tr> <tr><td>200</td><td>60</td></tr> </tbody> </table>	RSDFT: DITER	UDF: <Electron_Max_Iteration>	40	20	80	30	120	40	160	50	200	60
RSDFT: DITER	UDF: <Electron_Max_Iteration>												
40	20												
80	30												
120	40												
160	50												
200	60												

出力パラメタ	<Energy_converge>												
入力パラメタ	SCFCONV												
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p>  <p>Detailed description: A log-log plot with 'RSDFT: SCFCONV' on the x-axis ranging from 1e-008 to 1e-022 in increments of 4 orders of magnitude, and 'UDF: <Energy_Converge>' on the y-axis ranging from 1e-005 to 1e-014 in increments of 1 order of magnitude. A red line represents the conversion, showing a linear relationship on the log scale. Key points are marked with small red dots.</p> <table border="1"> <caption>Data points for RSDFT to UDF: SCF convergence</caption> <thead> <tr> <th>RSDFT: SCFCONV</th> <th>UDF: <Energy_Converge></th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1e-008</td><td>1e-006</td></tr> <tr><td>1e-012</td><td>1e-008</td></tr> <tr><td>1e-016</td><td>1e-010</td></tr> <tr><td>1e-020</td><td>1e-012</td></tr> <tr><td>1e-022</td><td>1e-014</td></tr> </tbody> </table>	RSDFT: SCFCONV	UDF: <Energy_Converge>	1e-008	1e-006	1e-012	1e-008	1e-016	1e-010	1e-020	1e-012	1e-022	1e-014
RSDFT: SCFCONV	UDF: <Energy_Converge>												
1e-008	1e-006												
1e-012	1e-008												
1e-016	1e-010												
1e-020	1e-012												
1e-022	1e-014												

出力パラメタ	<Force_Converge>
入力パラメタ	ATOMOPT2
変換処理	<p>下図で規定するグラフで XTAPP 値から UDF 値へ変換する。</p> 

出力パラメタ	<Number_Bands>
入力パラメタ	元素名と原子数
変換処理	<p><Atom>から設定される既定値 number_band が設定される。</p> <p><Number_Bands> number_band </Number_Bands></p>

出力パラメタ	<Smearing>
入力パラメタ	なし
変換処理	<Smearing> Methfessel-Paxton <Smearing>

出力パラメタ	<Spin>
入力パラメタ	NSPIN
変換処理	<pre> if(NSPIN == 2){ <Spin> On </Spin> } else{ <Spin> Off </Spin> } </pre>

出力パラメタ	<XC_Type>
入力パラメタ	XCTYPE
変換処理	<pre> if(XCTYPE == 'LDAPZ81'){ <XC_Type> LDA </XC_Type> } else if(XCTYPE == 'GGAPBE96'){ <XC_Type> PBE </XC_Type> } else if(XCTYPE == 'HSE'){ <XC_Type> HF </XC_Type> } </pre>

出力パラメタ	<Symmetry>
入力パラメタ	ISYM
変換処理	<pre> if(ISYM == 1){ <Symmetry> On </Symmetry> } else{ <Symmetry> Off </Symmetry> } </pre>
備考	対称性ファイルに記載の変換操作は考慮せず。

出力パラメタ	<Ion_Max_Iteration>
入力パラメタ	ATOMOPT1
変換処理	<Ion_Max_Iteration> ATOMOPT1 </Ion_Max_Iteration>

出力パラメタ	<Lattice_Constant>
入力パラメタ	AX
変換処理	<Lattice_Constant> AX * 0.529177 </Lattice_Constant>
備考	単位を[Bohr]から[Å]に変換する。

出力パラメタ	<Lattice_Vector>
入力パラメタ	A1, A2, A3
変換処理	<Lattice_Vector> A1 </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> A2 </Lattice_Vector> <Lattice_Vector> A3 </Lattice_Vector>

出力パラメタ	<Atom>
入力パラメタ	atom_name, atom_a, atom_b, atom_c
変換処理	<Atom> atom_name atom_a atom_b atom_c </Atom>

出力パラメタ	<Sampling_k_mesh>
入力パラメタ	lattice_factor, lattice_list
変換処理	A ベクトルの長さ[Å]を計算 NK, MMM1, MMM2 から A 軸方向のサンプル K 点数 nkmesh[0]を計算する。 nkmesh[0]から以下手順で<Sampling_k_mesh>の値を設定する。 <pre> if(nkmesh[0] < int(10.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh> } else if(nkmesh[0] < int(20.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh> } else{ <Sampling_k_mesh> Dense </Sampling_k_mesh> } </pre>

バンド経路の RSDFT 形式からの入力

本ツールではバンド経路は結晶のブラベ格子の種別から自動的に設定されます。
そのため RSDFT 形式で指定されたバンド経路は自動設定には反映されません。

対称性の RSDFT 形式からの入力

本ツールでは対称性は結晶の格子ベクトルと原子座標から自動的に検出されます。
そのため RSDFT 形式で指定された対称性は自動検出には反映されません。

3.5.5. UDF 形式から RSDFT 形式へのパラメタへの変換

本アプリケーションは UDF パラメタから RSDFT の主要パラメタへ以下の仕様で変換設定します。

入力パラメタ	<Calculation_Type>
出力パラメタ	SWSCF, SWBAND, SWOPT
変換処理	<pre> if(<Calculation_Type> Energy </Calculation_Type>){ SWSCF = 1; SWBAND = 0; SWOPT = 0; } else if(<Calculation_Type> Band </Calculation_Type>){ SWSCF = 1; SWBAND = 1; SWOPT = 0; } else if(<Calculation_Type> DOS </Calculation_Type>){ SWSCF = 1; SWBAND = 0; SWOPT = 0; } else if(<Calculation_Type> Optimize </Calculation_Type>){ SWSCF = 1; SWBAND = 0; SWOPT = 1; } </pre>

入力パラメタ	<Continue>
出力パラメタ	SWOPT
変換処理	<pre> if(<Continue> New </Continue>){ SWOPT = 2; } </pre>

入力パラメタ	<Accuracy>
出力パラメタ	なし
変換処理	なし
備考	RSDFT に変換せず。

入力パラメタ	<Lattice_Constant>, <Lattice_Vector>, <Cutoff_Wave_Function>
出力パラメタ	DGRID
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Mixing_Factor>
出力パラメタ	BETA
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Electron_Max_Iteration>
出力パラメタ	DITER
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Energy_converge>
出力パラメタ	SCFCONV
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Force_Converge>
出力パラメタ	ATOMOPT2
変換処理	先の正変換で規定したグラフで UDF 値から XTAPP 値へ逆変換する。

入力パラメタ	<Number_Bands>
出力パラメタ	NBAND
変換処理	NBAND = <Number_Band>;

入力パラメタ	<Smearing>
出力パラメタ	なし
備考	RSDFE は Methfessel-Paxton に限定

入力パラメタ	<Spin>
出力パラメタ	NSPIN
変換処理	<pre> if(<Spin> On </Spin>){ NSPIN = 2; } else if(<Spin> Off </Spin>){ NSPIN = 1; } </pre>

入力パラメタ	<XC_Type>
出力パラメタ	XCTYPE
変換処理	<pre> if(<XC_Type> LDA </XC_Type>){ XCTYPE = "'LDAPZ81' "; } else if(<XC_Type> PBE </XC_Type>){ XCTYPE = "'GGAPBE96' "; } else if(<XC_Type> PBEsol </XC_Type>){ XCTYPE = "'GGAPBE96' "; } else if(<XC_Type> PW91 </XC_Type>){ XCTYPE = "'LDAPZ81' "; } else if(<XC_Type> PBE0 </XC_Type>){ XCTYPE = "'HSE' "; } else if(<XC_Type> HF </XC_Type>){ XCTYPE = "'HSE' "; } </pre>

入力パラメタ	<Symmetry>
出力パラメタ	number_sym_op、対象操作
変換処理	単位胞と原子座標から対象操作の内容がファイル symdat に記録される。

入力パラメタ	<Ion_Max_Iteration>
出力パラメタ	ATOMOPT1
変換処理	<pre> if(<Calculation_Type> Optimize </ Calculation_Type >){ if(<Ion_Max_Iteration> == 0){ ATOMOPT1 = 3*<Atom>の総数; } else{ ATOMOPT1 = <Ion_Max_Iteration>; } } else{ ATOMOPT1 = 0; } </pre>

入力パラメタ	<Lattice_Constant>
出力パラメタ	AX
変換処理	<p>単位を[Å]から[Bohr]に変換する。</p> <p>AX = <Lattice_Constant>/0.529177;</p>

入力パラメタ	<Lattice_Vector>
出力パラメタ	A1, A2, A3
変換処理	<pre> A1 = <Lattice_Vector[0]>; A2 = <Lattice_Vector[1]>; A3 = <Lattice_Vector[2]>; </pre>

入力パラメタ	<Lattice_Constant>, <Lattice_Vector>, <Cutoff_Wave_Function>
出力パラメタ	NGRID
変換処理	格子ベクトルと格子間隔から格子点数を設定する。

入力パラメタ	<Atom>
出力パラメタ	atom_name, atom_a, atom_b, atom_c
変換処理	<pre> atom_name = <Atom>_name; atom_a = <Atom>_a; atom_b = <Atom>_b; atom_c = <Atom>_c; </pre>

入力パラメタ	<Sampling_k_mesh>
出力パラメタ	NK, MMM1, MMM2
変換処理	<p>A ベクトルの長さ[Å]を計算し、<Sampling_k_mesh>の値に応じて A 軸方向のサンプル K 点数 nkmesh[0]を以下手順で計算する。</p> <pre> if(<Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh>){ nkmesh[0] = int(ceil(10.0/A)); } else if(<Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh>){ nkmesh[0] = int(ceil(20.0/A)); } else if(<Sampling_k_mesh> Dense </Sampling_k_mesh>){ nkmesh[0] = int(ceil(30.0/A)); } </pre> <p>B, C 軸についても同様に nkmesh[1], nkmesh[2]を計算する。 これら nkmesh[]から NK, MMM1, MMM2 を計算する。</p>

バンド経路の RSDFT 形式へ出力

本ツールではバンド経路は結晶のブラベ格子の種別から自動的に設定されます。
 自動設定されたバンド経路が RSDFT 形式として出力されます。

対称性の RSDFT 形式への出力

本ツールでは対称性は結晶の格子ベクトルと原子座標から自動的に検出されます。
 自動検出された対称性が RSDFT 形式として出力されます。

以上

