

第一原理計算ソフト入力形式変換アプリ C-Tools

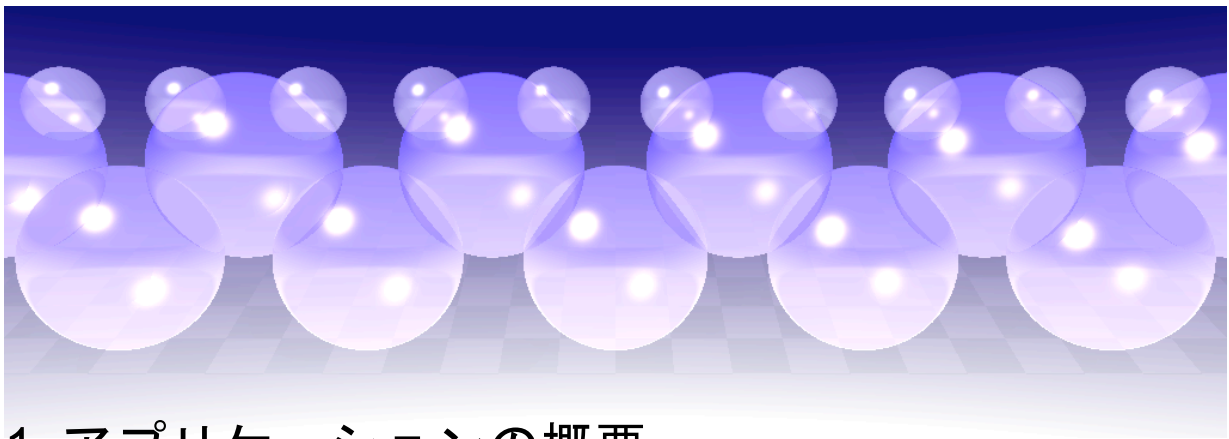
プログラム説明書

2015 年 2 月



---- 目次 ----

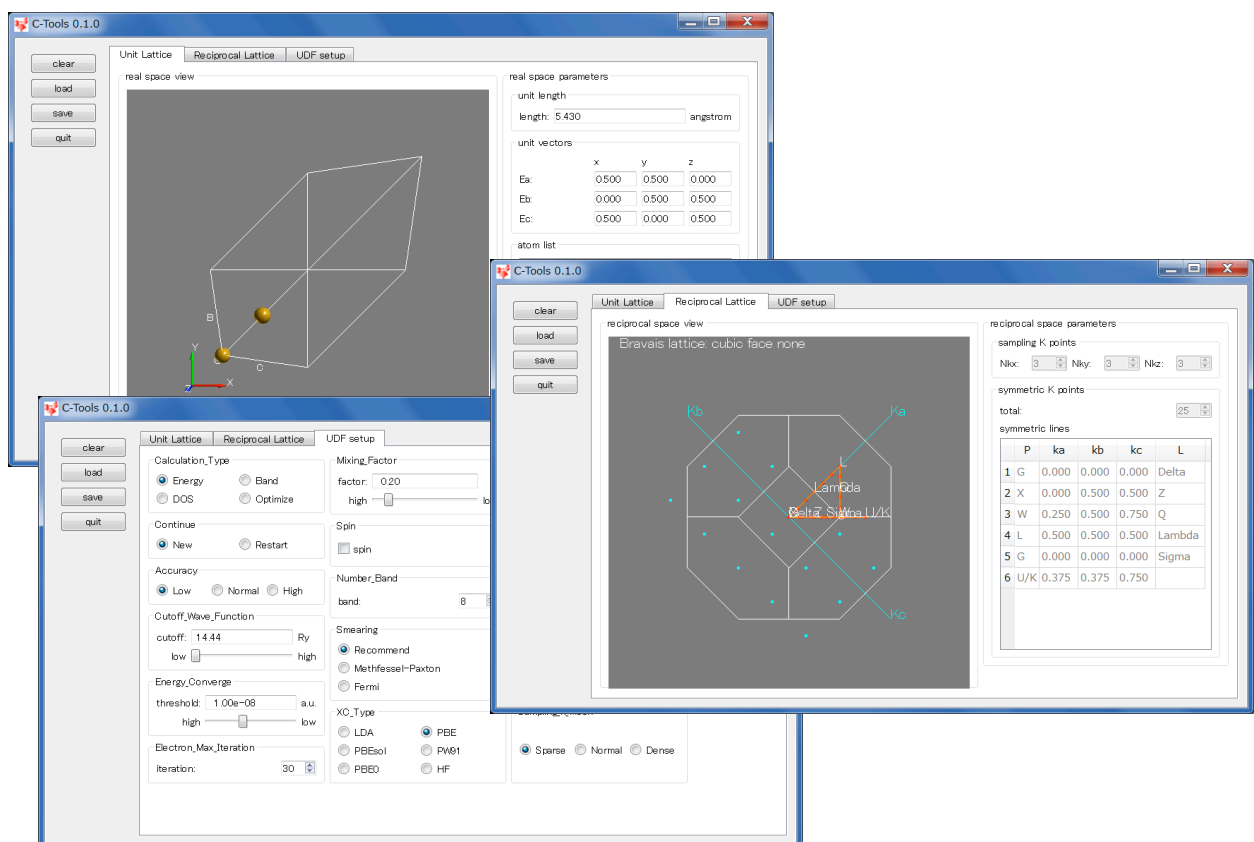
1. アプリケーションの概要.....	1
1.1. アプリケーションの目的.....	1
1.2. ウィンドウ画面構成.....	2
1.3. データ変換.....	3
1.4. 機能一覧.....	4
1.5. 実行環境.....	4
2. 電子状態計算の準備.....	5
2.1. アプリケーションの起動.....	5
2.2. ファイルの読み込み.....	7
2.3. 原子構造の確認.....	8
2.4. 原子構造の変更.....	9
2.5. 逆格子形状の確認.....	10
2.6. 計算パラメタの確認と調整.....	11
2.7. 設定ファイルの保存.....	11
3. データ形式.....	12
3.1. 統合密度汎関数理論形式.....	13
3.2. UDF 形式と xTAPP 形式の間でのデータ変換.....	21
3.3. UDF 形式と VASP 形式の間でのデータ変換.....	32
3.4. UDF 形式と OpenMX 形式の間でのデータ変換.....	45



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

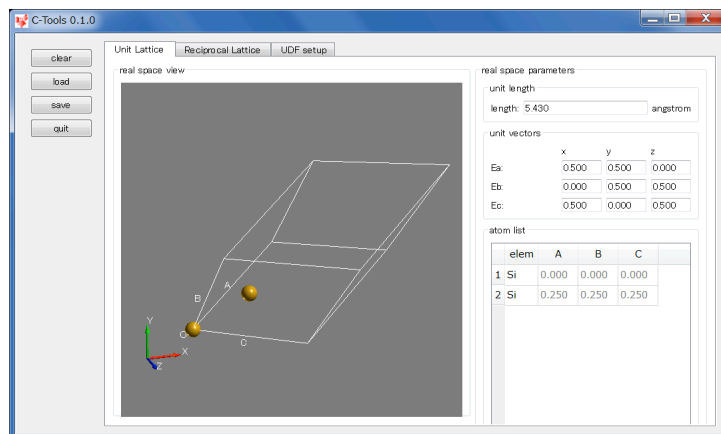
本アプリケーションは電子状態計算の初学者が第一原理電子状態計算プログラムのxTAPP、VASP、OpenMX、RSDFT、QMASを用いた計算を容易に始められるようにすることを目的に、それぞれの計算プログラムの設定ファイルをほぼ自動的に生成するものです。利用者は計算する系の原子構造を3次元コンピュータグラフィックス(3DCG)によって視覚的に確認しながら、電子状態計算の基本的な計算パラメータをグラフィカルユーザーインターフェース(GUI)で調整し、各計算プログラム用の設定ファイルとして保存できます。また、各計算プログラムの設定ファイルを他の計算プログラムの設定ファイルに変換することもでき、複数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



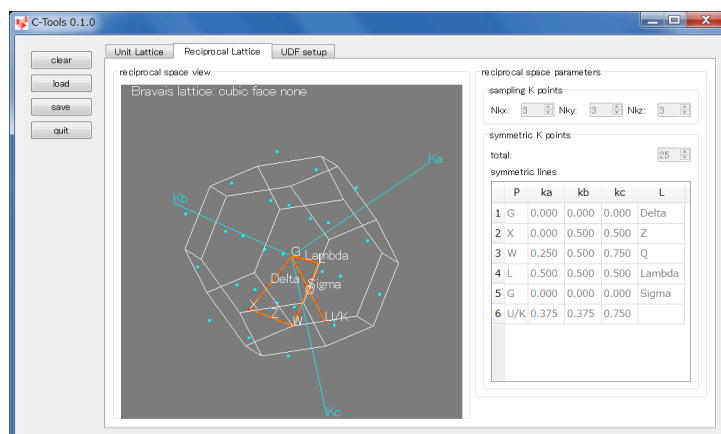
図：本アプリケーションによる GUI と 3DCG による電子状態計算の設定・確認の様子

1.2. ウィンドウ画面構成

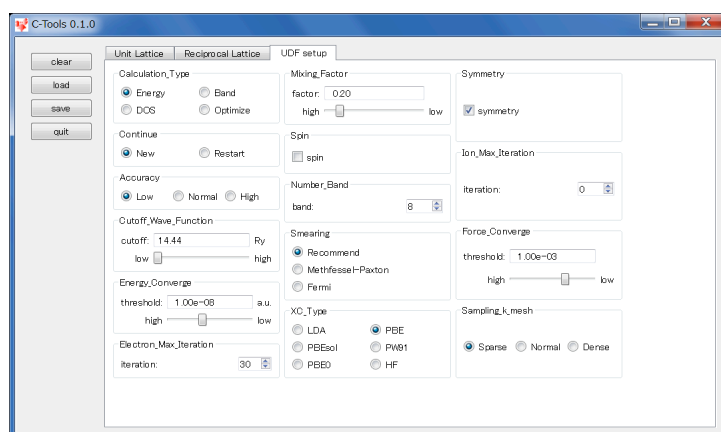
本アプリケーションの画面はタブにより多重化され、それぞれのタブ画面には下図のとおり計算対象の系の原子の配置、逆格子の形状、電子状態計算パラメタの一覧が表示されます。



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

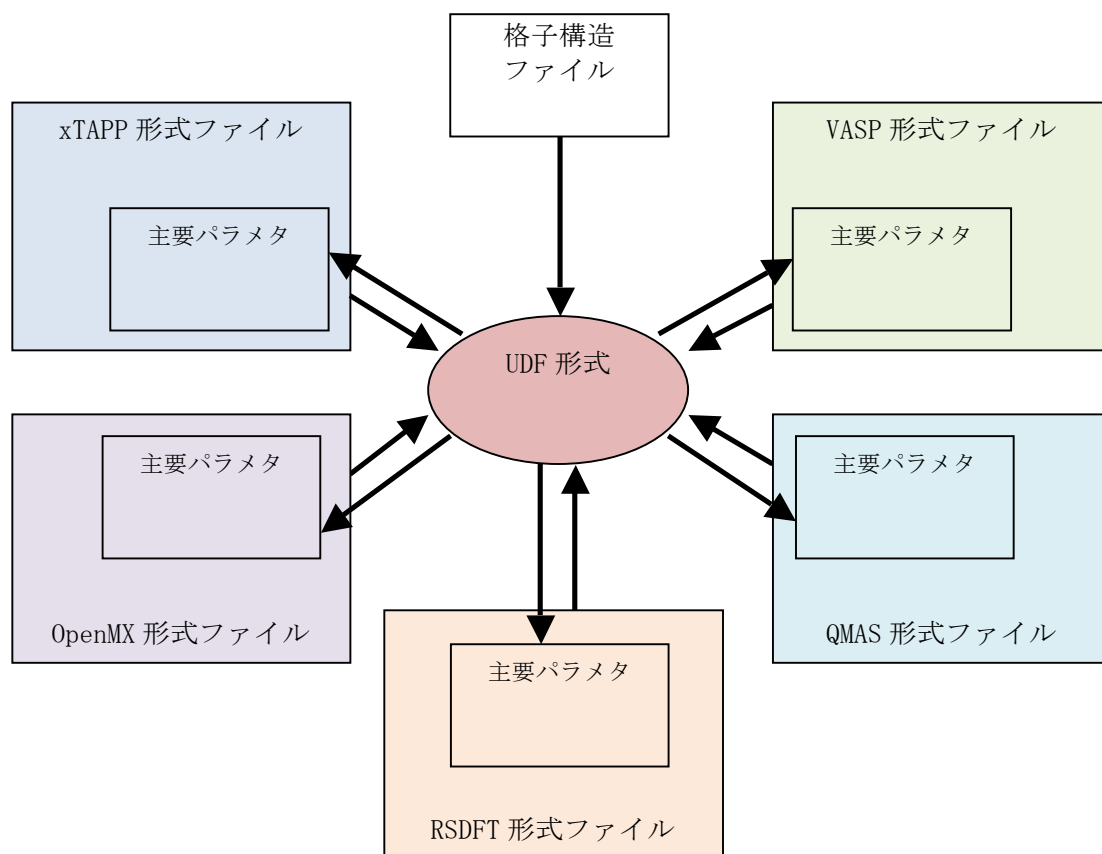


電子状態計算パラメタ設定タブに表示される計算パラメタ一覧

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

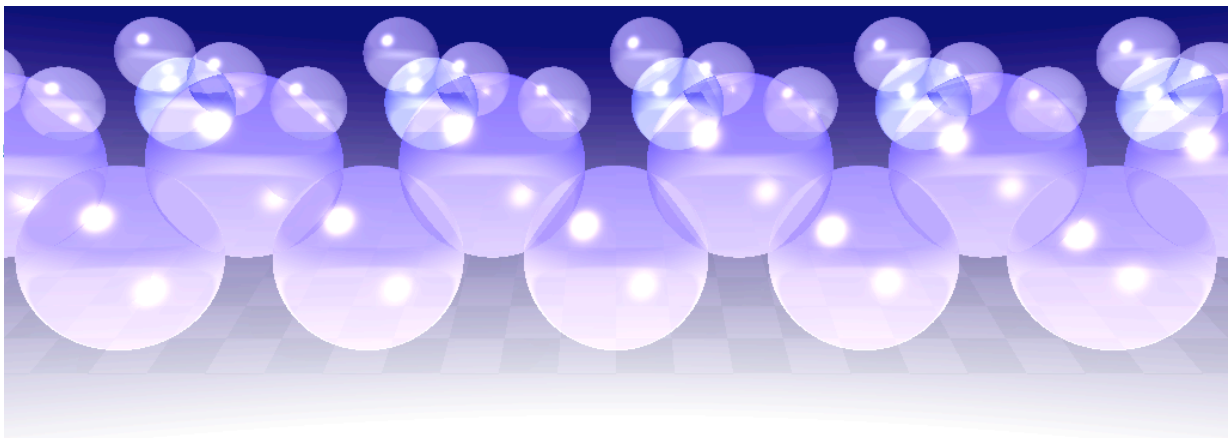
本アプリケーションの可視化・調整の主な機能は以下の通りです。

- 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
- 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
- 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

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. 電子状態計算の準備

2.1. アプリケーションの起動

2.1.1. 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。

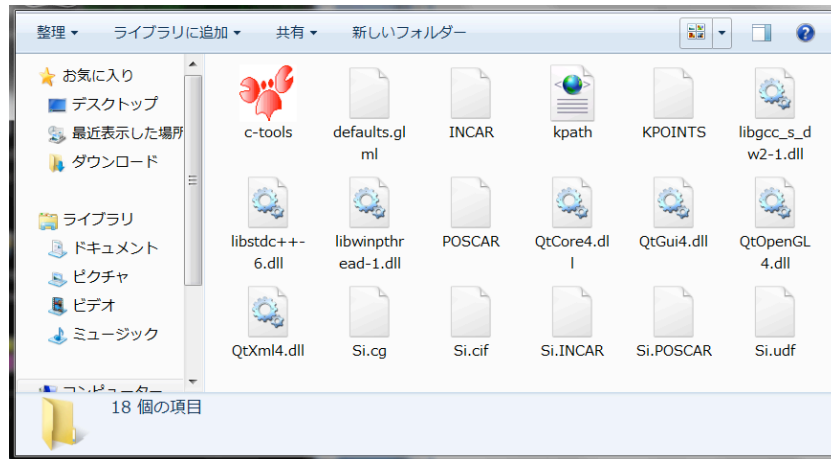
読み込めるファイルの形式は以下の通りです。

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。

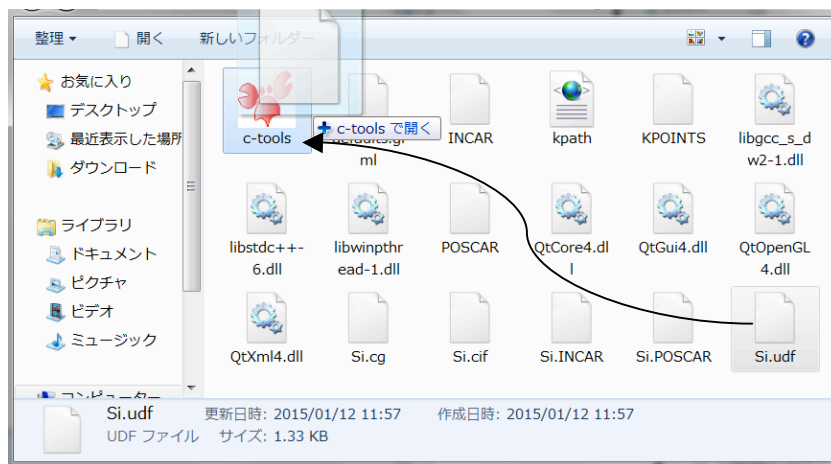
拡張子	形式	内容
.cif	CIF 形式	結晶の格子ベクトル、原子の内部座標、対称操作
.xyz	XYZ 形式。	分子の原子の座標、格子ベクトルも補足可能
.udf	統合設定ファイル形式	基本的な電子状態計算の計算パラメタ
.cg	xTAPP 設定ファイル形式	xTAPP の計算パラメタ
INCAR	VASP 設定ファイル形式	VASP の計算パラメタ
.dat	OpenMX 設定ファイル形式	OpenMX の計算パラメタ

2.1.2. 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。

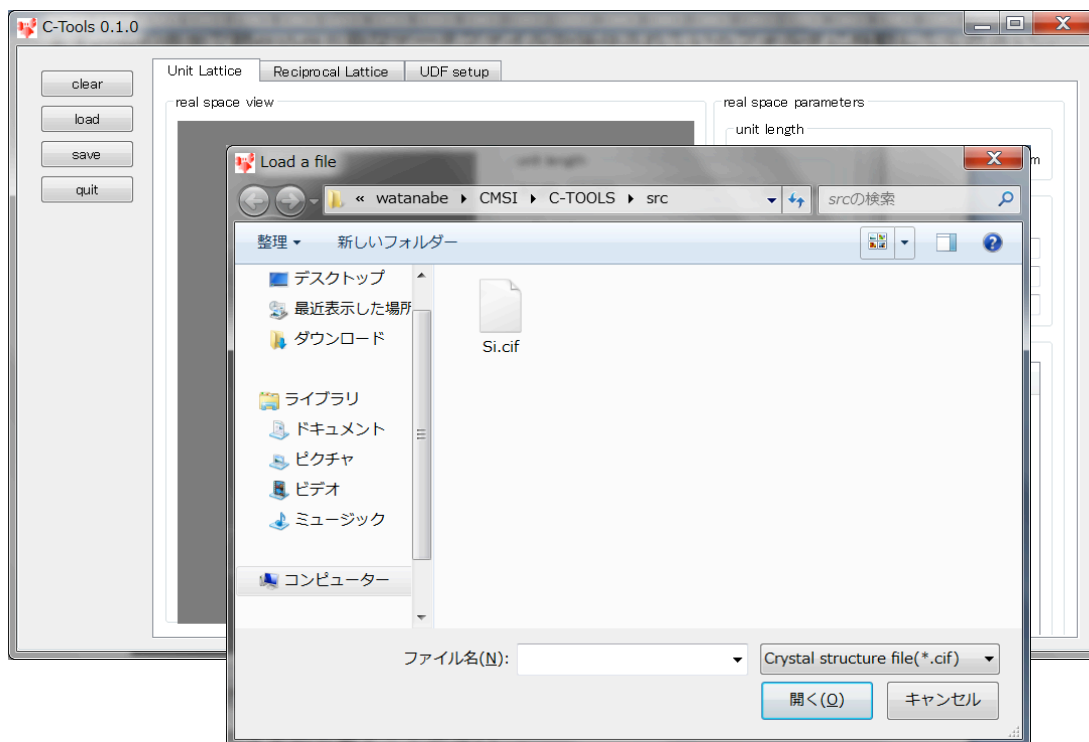


また、読み込みたいファイルのアイコンをドラッグして本アプリケーションの実行ファイルのアイコンに重ねると、起動直後にそのファイルが読み込まれ内容が表示されます。

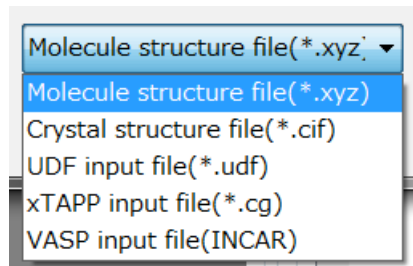


2.2. ファイルの読み込み

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。

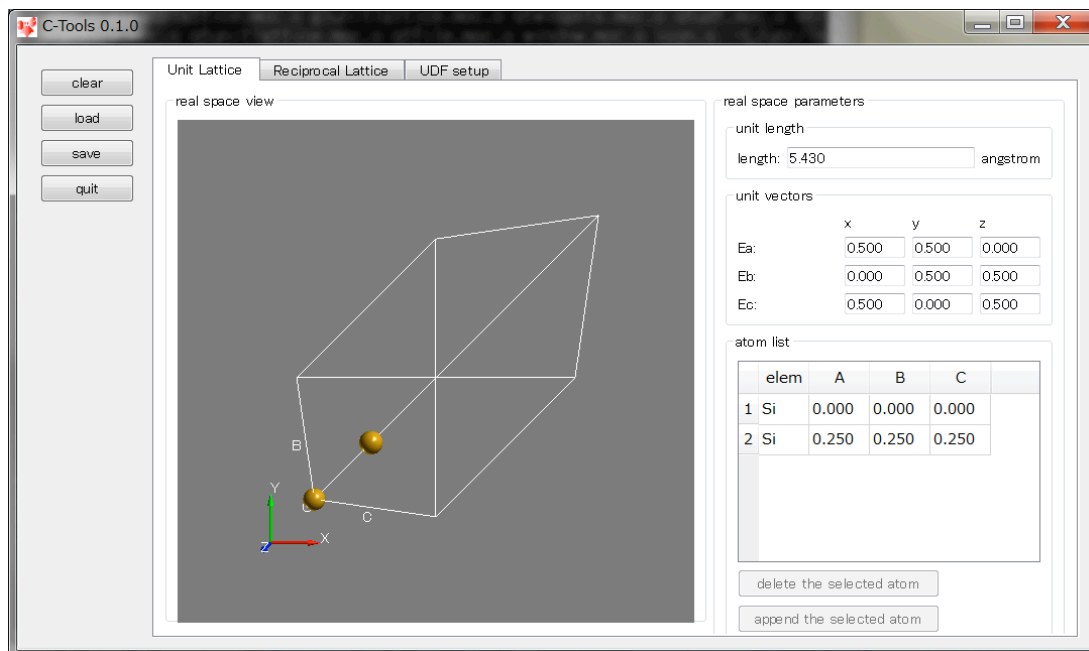


拡張子	形式	内容
.xyz	XYZ 形式。	原子構造
.cif	CIF 形式	原子構造
.udf	UDF 形式	電子状態計算パラメタ
.cg	xTAPP 形式	電子状態計算パラメタ
incar	VASP 形式	電子状態計算パラメタ
*.dat	OpenMX 形式	電子状態計算パラメタ

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。

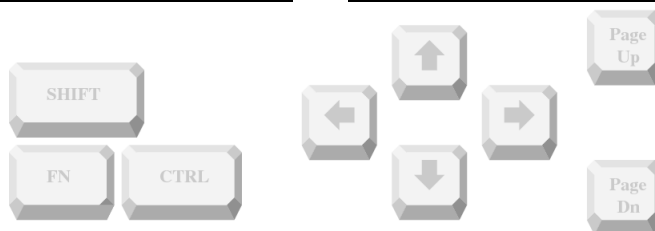
2.3. 原子構造の確認

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。

2.4. 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。

real space parameters

unit length
length: 5.430 angstrom

unit vectors

	x	y	z
Ea:	0.500	0.500	0.000
Eb:	0.000	0.500	0.500
Ec:	0.500	0.000	0.500

atom list

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

delete the selected atom

append the selected atom

格子定数Åの調整

格子ベクトルの調整

表の行番号を選択し、
選択原子の元素名の変更

選択原子の内部座標の変更

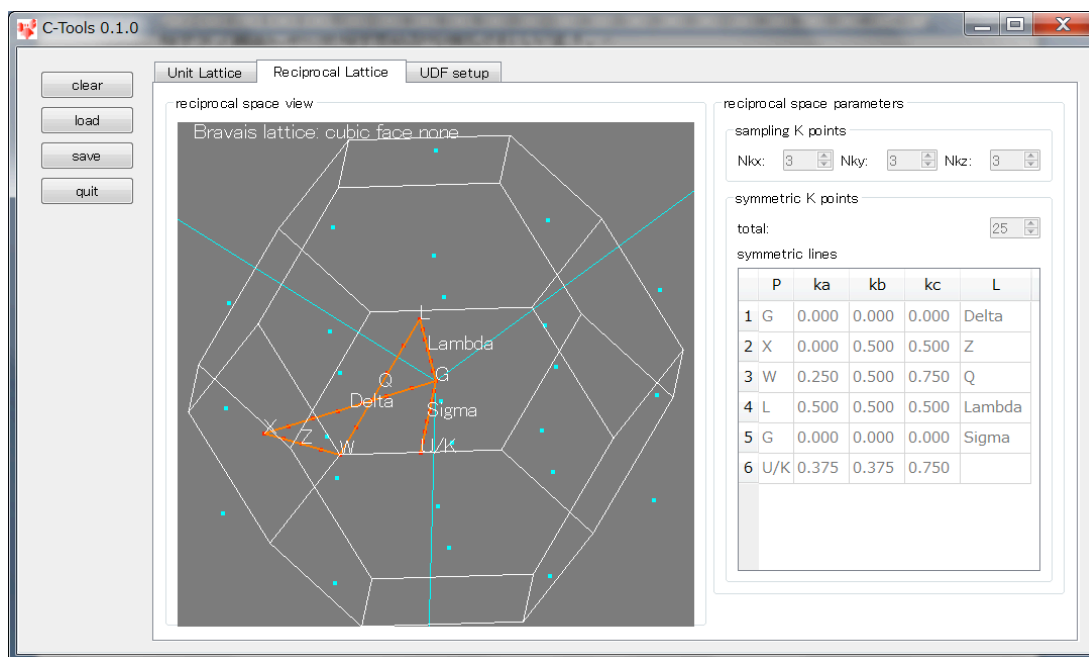
可視化画面の原子をダブルクリック
で選択し、選択原子の元素名の調整

選択原子を削除

選択原子と同種原子を追加

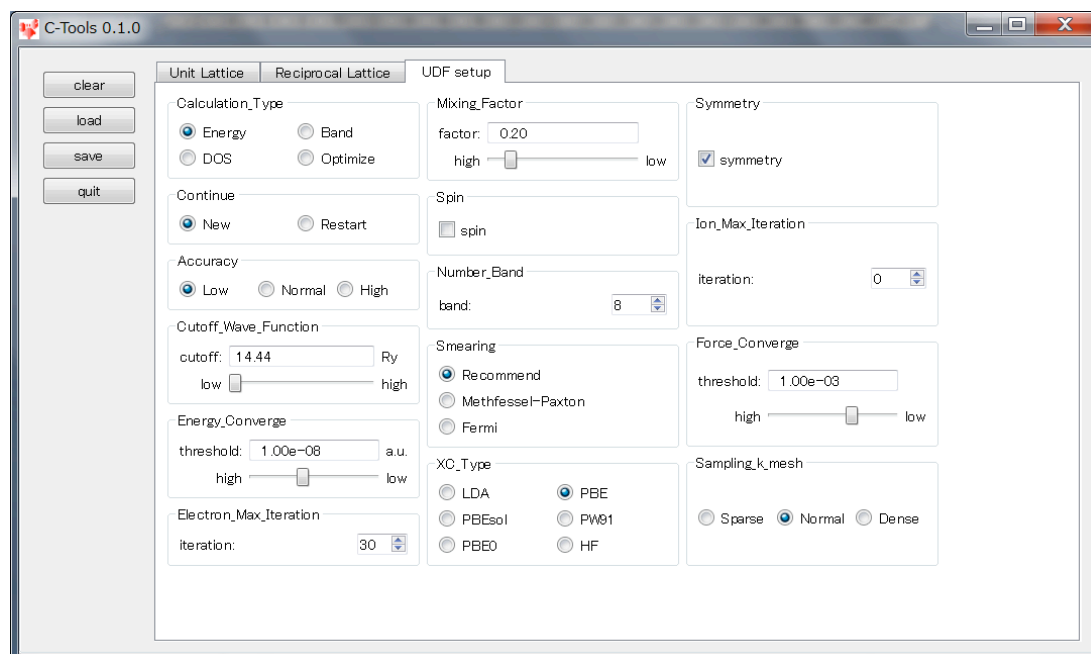
2.5. 逆格子形状の確認

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。



2.6. 計算パラメタの確認と調整

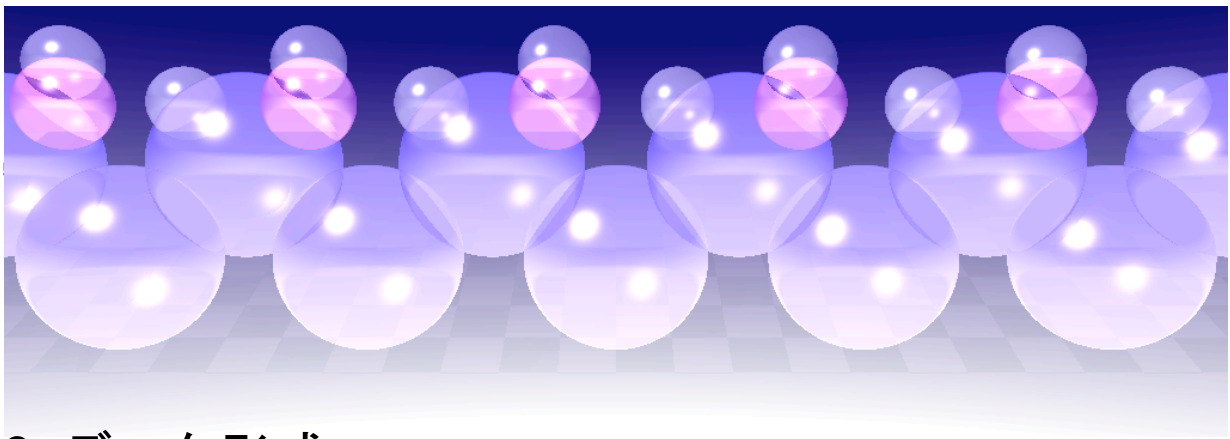
電子状態計算パラメタ設定タブにはUDF形式で定める電子状態計算の基本的な計算パラメタの値とその調整 GUI が表示されます。UDF形式の各パラメタの詳細については次章に記載します。



2.7. 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。

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 形式のパラメータ一覧

UDF 形式の全パラメタの仕様は以下の通りです。

パラメタ	<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>

パラメタ	<Accuracy>
内容	各種計算精度パラメタの既定値の計算精度
選択値	Low : 各種計算精度パラメタの既定値を低精度に設定 Normal : 各種計算精度パラメタの既定値を中精度に設定 High : 各種計算精度パラメタの既定値を高精度に設定
既定値	<Accuracy> Normal </Accuracy>
設定例	<Accuracy> High </Accuracy>

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-2 [Hartree] 不完全な収束となる可能性が高い 最小値：1.0e-12 [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	<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> 40 </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>
設定例	<Electron_Max_Iteration> 40 </Electron_Max_Iteration>

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 : 25.0 [Rydberg] 波動関数の表現が不足である可能性が高い 最大値 : 100.0 [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> 49.0 </Cutoff_Wave_Function> <Accuracy> Normal </Accuracy>の場合 : <Cutoff_Wave_Function> 64.0 </Cutoff_Wave_Function> <Accuracy> High </Accuracy>の場合 : <Cutoff_Wave_Function> 81.0 </Cutoff_Wave_Function>
設定例	<Cutoff_Wave_Function> 36.0 </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> 0.2 </Mixing_Factor> <Accuracy> Normal </Accuracy>の場合 : <Mixing_Factor> 0.1 </Mixing_Factor> <Accuracy> High </Accuracy>の場合 : <Mixing_Factor> 0.1 </Mixing_Factor>
設定例	<Mixing_Factor> 0.3 </Mixing_Factor>

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 <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_Step>
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_Step> 100 </Ion_Max_Step> 上記以外の場合 : <Ion_Max_Step> 0 </Ion_Max_Step>
設定例	<Ion_Max_Step> 100 </Ion_Max_Step>

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-2 [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-3 </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	<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>

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、それぞれに既定値を設定します。

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	波動関数の表現基底の最大エネルギー [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	0

3.2.3. 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 <= 6.0){ <Accuracy> Low </Accuracy> } else if(cutoff_wave_function <= 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	<Energy_converge>
入力パラメタ	scf_converge
変換処理	<Energy_Converge> scf_converge </Energy_Converge>

出力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>
入力パラメタ	cutoff_wave_function
変換処理	<Cutoff_Wave_Function> cutoff_wave_function**2 </Cutoff_Wave_Function>

出力パラメタ	<Mixing_Factor>
入力パラメタ	xtrap_beta
変換処理	<Mixing_Factor> xtrap_beta </Mixing_Factor>

出力パラメタ	<Number_Bands>
入力パラメタ	number_band
変換処理	<Number_Bands> number_band </Number_Bands>

出力パラメタ	<Smearing>
入力パラメタ	dos_mode
変換処理	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> }

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

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	対称性考慮の有無のみを記録し、具体的な変換操作については記録しない。

出力パラメタ	<Ion_Max_Step>
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	<Force_Converge>
入力パラメタ	converge_force
変換処理	<Force_Converge> converge_force </Force_Converge>

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	<p>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。</p> <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>

3.2.4. 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	<Energy_converge>
出力パラメタ	scf_converge
変換処理	scf_converge = <Energy_Converge>;

入力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>
出力パラメタ	cutoff_wave_function
変換処理	<Cutoff_Wave_Function>の平方根を cutoff_wave_function とする。 cutoff_wave_function = sqrt(<Cutoff_Wave_Function>;

入力パラメタ	<Mixing_Factor>
出力パラメタ	xtrap_beta
変換処理	xtrap_beta = <Mixing_Factor>;

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	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'; }

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
変換処理	number_sym_op = 1;
備考	<p><Symmetry>の値によらず xTAPP では number_sym_op = 1 とする。</p> <p>※対称操作の自動判定機能を近日開発予定</p>

入力パラメタ	<Ion_Max_Step>
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	<Force_Converge>
出力パラメタ	converge_force
変換処理	converge_force = <Force_Converge>;

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> <p>lattice_factor = <Lattice_Constant>/0.529177;</p>

入力パラメタ	<Lattice_Vector>
出力パラメタ	lattice_list
変換処理	lattice_list = <Lattice_Vector>;

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>

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、それぞれに既定値を設定します。

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	0

3.3.3. 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	<Energy_converge>
入力パラメタ	EDIFF
変換処理	<Energy_Converge> EDIFF*1e-4 </Energy_Converge>

出力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>
入力パラメタ	なし
変換処理	<Accuracy>の値から自動設定

出力パラメタ	<Mixing_Factor>
入力パラメタ	AMIX
変換処理	<Mixing_Factor> AMIX*0.5 </Mixing_Factor>

出力パラメタ	<Number_Bands>
入力パラメタ	なし
変換処理	<p><Spin>と<Atom>の構成により次式で値が自動計算</p> <p><Spin> Off </Spin>の場合 :</p> <p>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</p> <p><Spin> On </Spin>の場合 :</p> <p>各原子の元素に規定の価電子数の総和 + 原子総数 の値</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 == 0){ <Symmetry> Off </Symmetry>; } else{ <Symmetry> On </Symmetry> } </pre>

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

出力パラメタ	<Force_Converge>
入力パラメタ	EDIFFG
変換処理	<pre> if(EDIFFG > 0.0){ <Force_Converge> 1.0e-2 </Force_Converge> } else{ <Force_Converge> EDIFFG*(-0.1) </Force_Converge> } </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	<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	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(10.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh> } else if(KPOINT.nkmesh[0] < int(20.0/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(10.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh> } else if(KPOINT.nkmesh[0] < 2*int(20.0/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>

3.3.4. 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_Step>; 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	<Energy_converge>
出力パラメタ	EDIFF
変換処理	EDIFF = <Energy_Converge>*1e+4;

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	AMIX = <Mixing_Factor>*2.0;

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_Step>
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	<Force_Converge>
出力パラメタ	EDIFFG
変換処理	EDIFFG = <Force_Converge>*(-10);

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>

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、それぞれに既定値を設定します。

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	0
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	
<Band.kpath>	バンド図の各線分の座標など	
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 <= 120.0){ <Accuracy> Low </Accuracy> } else if(scf.energycutoff <= 150.0){ <Accuracy> Normal </Accuracy> } else{ <Accuracy> High </Accuracy> } </pre>

出力パラメタ	<Energy_converge>
入力パラメタ	scf.criterion
変換処理	<Energy_Converge> scf.criterion*1e-4 </Energy_Converge>

出力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>
入力パラメタ	scf.energycutoff
変換処理	<Cutoff_Wave_Function> (openmx.scf.energycutoff/20.0)**2 </Cutoff_Wave_Function>

出力パラメタ	<Mixing_Factor>
入力パラメタ	scf.Max_Mixing_Weight
変換処理	<Mixing_Factor> scf.Max_Mixing_Weight*0.5 </Mixing_Factor>

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

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

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

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_Step>
入力パラメタ	MD.maxIter
変換処理	<Ion_Max_Iteration> MD.maxIter </Ion_Max_Iteration>

出力パラメタ	<Force_Converge>
入力パラメタ	MD.Opt_criterion
変換処理	<Force_Converge> MD.Opt_criterion*(10.0) </Force_Converge>

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(10.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Sparse </Sampling_k_mesh> } else if(scf.Kgrid[0] < int(20.0/A)){ <Sampling_k_mesh> Normal </Sampling_k_mesh> } else{ <Sampling_k_mesh> Dense </Sampling_k_mesh> } </pre>

3.4.4. 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	<Energy_converge>
出力パラメタ	scf.criterion
変換処理	scf.criterion = <Energy_Converge>*1e+4;

入力パラメタ	<Cutoff_Wave_Function>
出力パラメタ	scf.energycutoff
変換処理	scf.energycutoff = 20*sqrt(<Cutoff_Wave_Function>)

入力パラメタ	<Mixing_Factor>
出力パラメタ	scf.Max_Mixing_Weight
変換処理	scf.Max_Mixing_Weight = <Mixing_Factor>*2.0;

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
備考	OpenMX には当該機能なし

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

入力パラメタ	<Force_Converge>
出力パラメタ	MD.Opt_criterion
変換処理	MD.Opt_criterion = <Force_Converge>/10.0;

入力パラメタ	<Lattice_Constant>
出力パラメタ	なし
変換処理	なし
備考	OpenMX は Lattice_Vector に含まれる

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	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	<table border="1"> <thead> <tr> <th rowspan="2">元素</th><th colspan="3"><Accuracy></th></tr> <tr> <th>Low</th><th>Normal</th><th>High</th></tr> </thead> <tbody> <tr><td>H</td><td>H5. 0-s2</td><td>H5. 0-s2p1</td><td>H6. 0-s2p2</td></tr> <tr><td>He</td><td>He8. 0-s2</td><td>He8. 0-s2p2</td><td>He8. 0-s2p2d1</td></tr> <tr><td>Li</td><td>Li8. 0-s2p1</td><td>Li8. 0-s2p2</td><td>Li8. 0-s3p2d1</td></tr> <tr><td>Be</td><td>Be7. 0-s2p1</td><td>Be8. 0-s2p2</td><td>Be8. 0-s3p2d1</td></tr> <tr><td>B</td><td>B7. 0-s2p1</td><td>B8. 0-s2p2d1</td><td>B8. 0-s3p2d2</td></tr> <tr><td>C</td><td>C5. 0-s2p1</td><td>C6. 0-s2p2d1</td><td>C6. 0-s3p2d2</td></tr> <tr><td>N</td><td>N5. 0-s2p1</td><td>N6. 0-s2p2d1</td><td>N6. 0-s3p2d2</td></tr> <tr><td>O</td><td>O5. 0-s2p1</td><td>O6. 0-s2p2d1</td><td>O6. 0-s3p3d1</td></tr> <tr><td>F</td><td>F5. 0-s2p1</td><td>F6. 0-s2p2d1</td><td>F6. 0-s3p3d1</td></tr> <tr><td>Ne</td><td>Ne9. 0-s2p1</td><td>Ne9. 0-s2p2d1</td><td>Ne9. 0-s3p3d1</td></tr> <tr><td>Na</td><td>Ne9. 0-s2p1</td><td>Ne9. 0-s2p2d1</td><td>Ne9. 0-s3p3d1</td></tr> <tr><td>Mg</td><td>Mg7. 0-s2p1</td><td>Mg9. 0-s2p2d1</td><td>Mg9. 0-s2p2d2f1</td></tr> <tr><td>Al</td><td>Al7. 0-s2p1</td><td>Al8. 0-s2p2d1</td><td>Al8. 0-s2p2d2f1</td></tr> <tr><td>Si</td><td>Si7. 0-s2p1</td><td>Si8. 0-s2p2d1</td><td>Si8. 0-s2p2d2f1</td></tr> <tr><td>P</td><td>P7. 0-s2p1</td><td>P8. 0-s2p2d1</td><td>P8. 0-s3p2d2</td></tr> <tr><td>S</td><td>S7. 0-s2p1</td><td>S8. 0-s2p2d1</td><td>S8. 0-s3p2d2</td></tr> <tr><td>Cl</td><td>Cl7. 0-s2p1</td><td>Cl8. 0-s2p2d1</td><td>Cl8. 0-s3p2d2</td></tr> <tr><td>Ar</td><td>Ar9. 0-s2p1</td><td>Ar9. 0-s2p2d1</td><td>Ar9. 0-s3p2d2</td></tr> <tr><td>K</td><td>K10. 0-s2p1</td><td>K12. 0-s2p2d1</td><td>K12. 0-s3p2d2</td></tr> <tr><td>Ca</td><td>Ca9. 0-s2p1</td><td>Ca11. 0-s2p2d1</td><td>Ca11. 0-s3p2d2</td></tr> <tr><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> </tbody> </table> <p>より重元素については検討中です。</p>			元素	<Accuracy>			Low	Normal	High	H	H5. 0-s2	H5. 0-s2p1	H6. 0-s2p2	He	He8. 0-s2	He8. 0-s2p2	He8. 0-s2p2d1	Li	Li8. 0-s2p1	Li8. 0-s2p2	Li8. 0-s3p2d1	Be	Be7. 0-s2p1	Be8. 0-s2p2	Be8. 0-s3p2d1	B	B7. 0-s2p1	B8. 0-s2p2d1	B8. 0-s3p2d2	C	C5. 0-s2p1	C6. 0-s2p2d1	C6. 0-s3p2d2	N	N5. 0-s2p1	N6. 0-s2p2d1	N6. 0-s3p2d2	O	O5. 0-s2p1	O6. 0-s2p2d1	O6. 0-s3p3d1	F	F5. 0-s2p1	F6. 0-s2p2d1	F6. 0-s3p3d1	Ne	Ne9. 0-s2p1	Ne9. 0-s2p2d1	Ne9. 0-s3p3d1	Na	Ne9. 0-s2p1	Ne9. 0-s2p2d1	Ne9. 0-s3p3d1	Mg	Mg7. 0-s2p1	Mg9. 0-s2p2d1	Mg9. 0-s2p2d2f1	Al	Al7. 0-s2p1	Al8. 0-s2p2d1	Al8. 0-s2p2d2f1	Si	Si7. 0-s2p1	Si8. 0-s2p2d1	Si8. 0-s2p2d2f1	P	P7. 0-s2p1	P8. 0-s2p2d1	P8. 0-s3p2d2	S	S7. 0-s2p1	S8. 0-s2p2d1	S8. 0-s3p2d2	Cl	Cl7. 0-s2p1	Cl8. 0-s2p2d1	Cl8. 0-s3p2d2	Ar	Ar9. 0-s2p1	Ar9. 0-s2p2d1	Ar9. 0-s3p2d2	K	K10. 0-s2p1	K12. 0-s2p2d1	K12. 0-s3p2d2	Ca	Ca9. 0-s2p1	Ca11. 0-s2p2d1	Ca11. 0-s3p2d2				
元素	<Accuracy>																																																																																													
	Low	Normal	High																																																																																											
H	H5. 0-s2	H5. 0-s2p1	H6. 0-s2p2																																																																																											
He	He8. 0-s2	He8. 0-s2p2	He8. 0-s2p2d1																																																																																											
Li	Li8. 0-s2p1	Li8. 0-s2p2	Li8. 0-s3p2d1																																																																																											
Be	Be7. 0-s2p1	Be8. 0-s2p2	Be8. 0-s3p2d1																																																																																											
B	B7. 0-s2p1	B8. 0-s2p2d1	B8. 0-s3p2d2																																																																																											
C	C5. 0-s2p1	C6. 0-s2p2d1	C6. 0-s3p2d2																																																																																											
N	N5. 0-s2p1	N6. 0-s2p2d1	N6. 0-s3p2d2																																																																																											
O	O5. 0-s2p1	O6. 0-s2p2d1	O6. 0-s3p3d1																																																																																											
F	F5. 0-s2p1	F6. 0-s2p2d1	F6. 0-s3p3d1																																																																																											
Ne	Ne9. 0-s2p1	Ne9. 0-s2p2d1	Ne9. 0-s3p3d1																																																																																											
Na	Ne9. 0-s2p1	Ne9. 0-s2p2d1	Ne9. 0-s3p3d1																																																																																											
Mg	Mg7. 0-s2p1	Mg9. 0-s2p2d1	Mg9. 0-s2p2d2f1																																																																																											
Al	Al7. 0-s2p1	Al8. 0-s2p2d1	Al8. 0-s2p2d2f1																																																																																											
Si	Si7. 0-s2p1	Si8. 0-s2p2d1	Si8. 0-s2p2d2f1																																																																																											
P	P7. 0-s2p1	P8. 0-s2p2d1	P8. 0-s3p2d2																																																																																											
S	S7. 0-s2p1	S8. 0-s2p2d1	S8. 0-s3p2d2																																																																																											
Cl	Cl7. 0-s2p1	Cl8. 0-s2p2d1	Cl8. 0-s3p2d2																																																																																											
Ar	Ar9. 0-s2p1	Ar9. 0-s2p2d1	Ar9. 0-s3p2d2																																																																																											
K	K10. 0-s2p1	K12. 0-s2p2d1	K12. 0-s3p2d2																																																																																											
Ca	Ca9. 0-s2p1	Ca11. 0-s2p2d1	Ca11. 0-s3p2d2																																																																																											

