

■

■

第一原理自動計算プログラム
Template Oriented Atomic Simulation Toolkit (TOAST)
ユーザーマニュアル

目次

1. プログラムの概要	3
2. プログラムのインストール、環境設定	4
2.1 動作環境 / 環境設定	4
2.1.1 Python のインストール	4
2.1.2 第一原理計算プログラム	4
2.1.3 計算結果の可視化	4
2.2 インストール方法	5
2.3 環境設定	5
2.3.1 計算シナリオ設定ファイルの編集	5
2.3.2 ジョブ実行設定ファイルの編集	6
3. プログラムの使用方法	7
3.1 概要	7
3.2 計算パラメーター	8
3.3 設定ファイル	13
3.3.1 共通設定ファイル (toast.cfg)	13
3.3.2 計算シナリオ設定ファイル	14
3.3.3 擬ポテンシャル設定ファイル	15
3.3.4 設定ファイル例	16
3.3.4.1 共通設定ファイル例 (toast.cfg)	16
3.3.4.2 設定ファイル例 (VASP)	17
3.3.4.1 設定ファイル例 (Quantum ESPRESSO)	21
3.3.4.1 設定ファイル例 (ABINIT)	27
3.3.5 ジョブ実行設定ファイル	31
3.3.6 ジョブ実行設定ファイル例	32
3.3.6.1 設定ファイル例 (PBS)	32
3.4 プログラムの実行	33
3.4.1 複数の物質の自動計算	33
3.4.2 複数の物質の自動計算 (ジョブ状況更新/追加投入)	33
3.4.3 1つの結晶構造の第一原理自動計算	33
3.4.4 計算データリスト	35
3.4.5 計算状況	36
3.4.6 可視化データ	37
3.4.1 計算メタデータ	39
3.5 計算データ	40
3.5.1 計算データの概要	40
3.5.2 第一原理自動計算データファイル calculations.xml	41
4. プログラムの詳細	46
4.1 プログラム構造	46
4.2 主要クラス、関数	47
4.2.1 calculation./autocalc.py	47
4.2.2 calculation./calc.py	47
4.2.3 calculation./calculator.py	47
4.2.4 calculation./vasp.py	48
4.2.5 calculation./espresso.py	48
4.2.6 calculation./abinit.py	48
4.2.7 structure/crystal.py	49

4.2.8 jobmanage/job.py	49
4.2.9 calculation/calprop.py.....	49
4.2.10 calculation/calvis.py	49
4.2.11 calculation/metadata.py.....	49

1. プログラムの概要

第一原理自動計算プログラムは、ユーザーが用意した結晶構造（CIF ファイル） に対し、第一原理計算を実行するプログラムである。第一原理計算プログラムは、ユーザーが利用可能なプログラムを利用することを想定している。第一原理自動計算プログラムの概要を図 1.1 に示す。

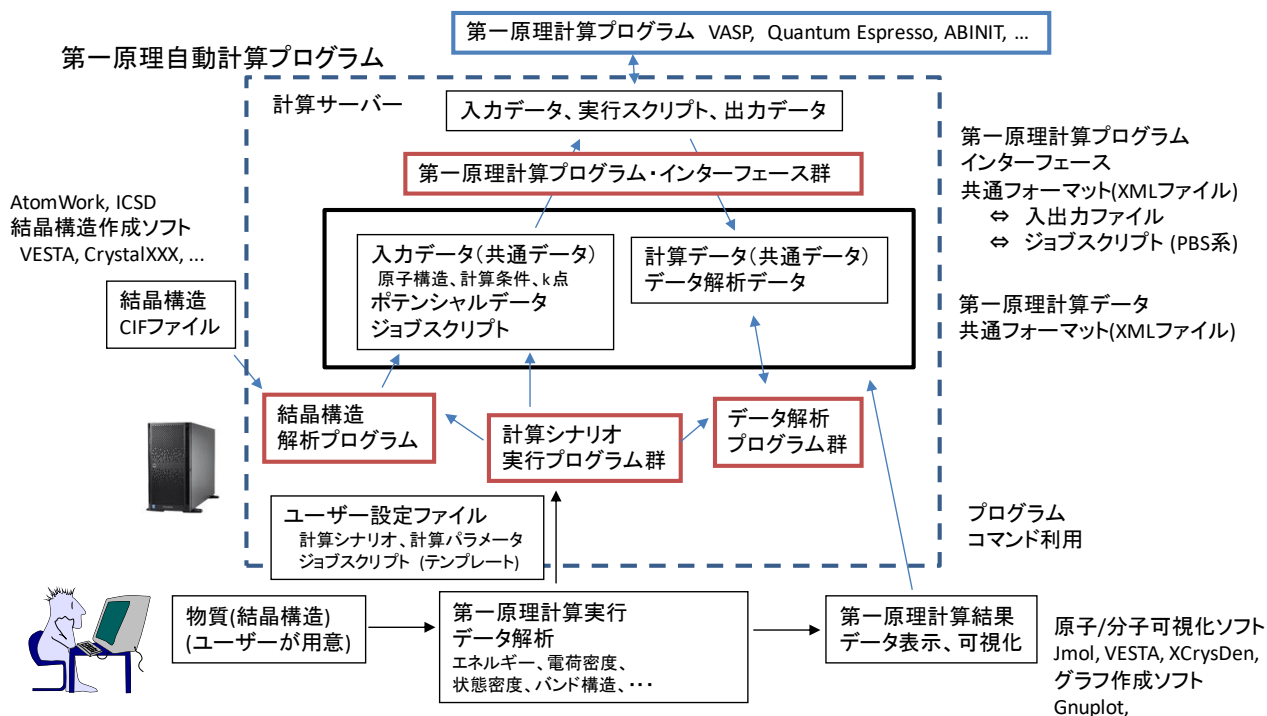


図 1.1 第一原理自動計算プログラムの概要

第一原理計算プログラムの主な特徴を以下に示す。

- Python プログラム群で構成されおり、Linux 環境において、コマンドベースで実行する。
- 第一原理自動計算プログラムのインターフェースは、以下の第一原理計算プログラムに対応している。
 - ・ The Vienna Abinitio Simulation Package (VASP) (<http://www.vasp.at/>)
 - ・ Quantum ESPRESSO (<http://www.quantum-espresso.org/>)
 - ・ ABINIT (<http://www.abinit.org/>)
- システムまたはユーザーが用意した計算シナリオに基づいて、第一原理計算を順次計算を実行する。
- 設定ファイルを編集することで、ユーザー環境に合わせて利用可能である。

2. プログラムのインストール、環境設定

2.1 動作環境 / 環境設定

第一原理自動計算プログラムは、Linux 環境の計算機で利用することを想定している。
必要なアプリケーションを以下に示す。

項目	アプリケーション	備考
Python 実行環境	Python 3.X	標準パッケージ numpy が必要
第一原理計算プログラム実行環境	第一原理計算プログラム	VASP, Quantum Espresso, ABINIT
計算結果可視化環境	Gnuplot 結晶構造可視化アプリケーション	

2.1.1 Python のインストール

Python パッケージは、多くの Linux ディストリビューションの提供パッケージとしてインストールが可能である。Python パッケージの標準パッケージの他に、Python パッケージ numpy のインストールが必要である。
または、Python パッケージをダウンロードし、ビルドを行う。(https://www.python.org)

2.1.2 第一原理計算プログラム

第一原理計算プログラムは、ユーザーが利用可能なプログラムを利用することを想定している。
第一原理計算プログラムのインターフェースは、以下の第一原理計算プログラムに対応している。

第一原理計算プログラム

第一原理計算プログラム	動作確認バージョン	Web サイト
The Vienna Abinitio Simulation Package (VASP)	VASP 5.4.4	http://www.vasp.at/
Quantum ESPRESSO	QE 6.4.1	http://www.quantum-espresso.org/
ABINIT	ABINIT 8.10.3	http://www.abinit.org/

第一原理計算プログラムのコンパイル、使用方法については、各プログラムのマニュアル、Web サイトを参照されたい。

2.1.3 計算結果の可視化

第一原理計算プログラムの計算結果の可視化は、市販/公開されているアプリケーションを利用する。

項目	データフォーマット	アプリケーション例
Crystal Structure	CIF ファイル 第一原理計算プログラムの入出力データ	VESTA, Jmol, XCrysDen 他
Brillouin Zone	Gnuplot スクリプト Jmol スクリプト	Gnuplot Jmol
Charge Density	Gaussian Cube	VESTA, Jmol, Xcrysden, 他
Density of State		Gnuplot 他
Band Structure		Gnuplot 他

2.2 インストール方法

第一原理自動計算プログラムのアーカイブ toast-X.X.X.tar.gz を、インストールするディレクトリで展開する。

第一原理自動計算プログラムの構成

インストールディレクトリ	サブディレクトリ	内容
toast-X.X.X	config	設定ファイル
	calc	Python プログラム群
	test	テスト用サンプルデータ

2.3 環境設定

第一原理自動計算プログラムは、toast/config にある設定ファイルを、ユーザーの計算環境に合わせて編集を行う。設定ファイルは、Config File 形式(RFC822 形式)となっており、ヘッダー[section]でセクションに分割され、各セクション内でパラメーターと値を name = value の形式で記述する。

* 設定ファイルの詳細については、3 章に記述している。

設定ファイル一覧

項目	ファイル	内容
共通設定ファイル	toast.cfg	共通設定ファイル ジョブ管理、計算シナリオ
計算シナリオ設定ファイル	vasp.para.cfg espresso.para.cfg abinit.para.cfg	VASP 用設定ファイル Quantum ESPRESSO 用設定ファイル ABINIT 用設定ファイル
擬ポテンシャル設定ファイル	vasp.pp.XXX.txt espresso.pp.XXX.txt abinit.pp.XXX.txt	VASP 用ポテンシャルリスト QE 用ポテンシャルリスト ABINIT 用ポテンシャルリスト
ジョブ実行設定ファイル	jobmanage.cfg jobtemplate/XXX.tmpl	ジョブ管理システム設定

2.3.1 計算シナリオ設定ファイルの編集

各計算プログラムの計算シナリオ設定ファイルの以下の項目をユーザーの第一原理計算プログラムの実行環境に合わせて記述する。

共通設定ファイル、計算シナリオ設定ファイル [general]セクション

項目	内容	記述例
ppdir	擬ポテンシャルファイルのディレクトリ	ppdir = /opt/app/vasp/potpaw_PBE ppdir = /opt/app/espresso/SSSP_eff_PBE ppdir = /opt/app/abinit/JTH-PBE-atomicdata-1.0
cmd	計算プログラムの実行コマンド	cmd = /opt/app/vasp/vasp.5.3.5/vasp cmd = /opt/app/espresso/espresso-5.4.0/bin/pw.x cmd = /opt/app/abinit/abinit-8.0.8/bin/abinit

2.3.2 ジョブ実行設定ファイルの編集

ジョブ管理システムを使用する場合は、ジョブ実行設定ファイルの編集、およびジョブ実行スクリプトのテンプレートの作成を行う。第一原理自動計算プログラムでは、PBS 系のジョブ管理システムのテンプレートを用意している。

ジョブ実行設定ファイル [general]セクション

項目	内容	記述例
jobmanage_type	ジョブ実行の Type を指定 interactive interactive 実行 section-name ジョブ管理システムを利用	jobmanage_type = interactive jobmanage_type = pbs
[section-name]	ジョブ実行スクリプトテンプレートの指定 テンプレート内の変数の設定 ジョブ投入コマンドの設定 ジョブ情報コマンドの設定	[pbs] template = job_template/pbs.tmpl core = 8 np = 8 queue = L ncpus = 1 nodes = 1 ppn = 8 walltime = 24:00:00 job_name = submit = qsub stat = qstat

3. プログラムの使用方法

3.1 概要

第一原理自動計算プログラムは、ユーザーが用意した結晶構造（CIF ファイル） に対し、第一原理計算を実行するプログラムである。

- Python プログラム群で構成されており、Linux 環境において、コマンドベースで実行する。
- 第一原理自動計算プログラムのインターフェースは、以下の第一原理計算プログラムに対応している。
 - ・ The Vienna Abinitio Simulation Package (VASP) (<http://www.vasp.at/>)
 - ・ Quantum ESPRESSO (<http://www.quantum-espresso.org/>)
 - ・ ABINIT (<http://www.abinit.org/>)
- システムまたはユーザーが用意した計算シナリオに基づいて、第一原理計算を順次計算を実行する。
- 設定ファイルを編集することで、ユーザー環境に合わせて利用可能である。

第一原理自動計算プログラムの処理概要を以下に示す。

- ユーザーが容易した複数の結晶構造(CIF File)を読み込み
- 各結晶構造(Material ID)ごとに計算ディレクトリを作成
- 計算シナリオ(計算シナリオ設定ファイル)に基づいて、入力データの生成、ジョブ実行スクリプトを生成し、計算を実行する。
- 計算データは、自動計算データファイルに抽出・出力される。
- バンドギャップ等の計算結果解析を行う。
- 結晶構造、電荷密度、状態密度分布、バンド構造は、市販/公開されているアプリケーションで可視化可能なデータ形式で出力する。

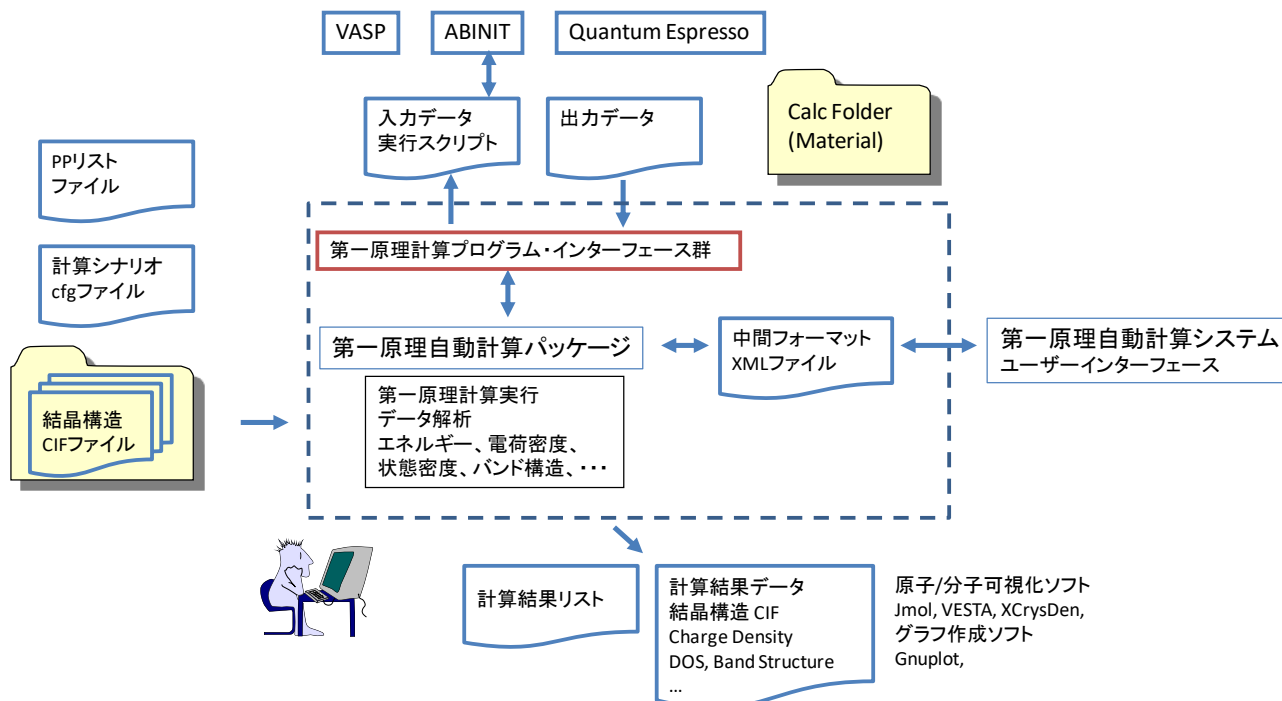


図 3.1 自動計算システムの処理概要

3.2 計算パラメーター

第一原理計算プログラムのエネルギーカットオフ、交換相関項、SCF 計算反復法、構造最適化手法、収束判定値等の計算パラメーターは、計算シナリオ設定ファイルに記述する。

結晶構造に依存する計算のユニットセル (Primitive Cell)、原子の相対座標、k 点メッシュ、バンド構造計算の k 点経路や、擬ポテンシャルに依存するバンド数等は、自動計算プログラム内で計算する。

項目	計算方法
結晶構造 原子リスト(原子座標)	CIF File の crystal_system, spacegroup, cell_length, cell_angle, symmetry, atom から、Conventional Cell, Primitive Cell, 原子リスト(原子座標)を計算
K 点メッシュ	計算シナリオ設定ファイルにおいて、_kpoints_length で length l を指定し計算。 bi は、Reciprocal Lattice Vector $N_{kx} = \max(4, l * b_1 + 0.5)$ $N_{ky} = \max(4, l * b_2 + 0.5)$ $N_{kz} = \max(4, l * b_3 + 0.5)$ 計算シナリオ設定ファイルにおいて、_kpoints_spacing で spacing s を指定し計算。 $N_{kx} = \max(4, b_1 / s + 0.5)$ $N_{ky} = \max(4, b_2 / s + 0.5)$ $N_{kz} = \max(4, b_3 / s + 0.5)$
バンド数	各元素の擬ポテンシャルの Z Valence の値を抽出。 $Z \text{ Valence} * \text{各元素の原子数から Electron 数 Nelect}$ を計算。 $N_{bands} = \text{int}(\text{Nelect} * 0.6 + 0.5) + \max(4, N_{atom} * 2)$
バンド計算用の k 点経路	CIF File の crystal_system, spacegroup, cell_length, cell_angle, symmetry から、Brillouin Zone を求め、k 点経路を計算。

バンド計算用の k 点経路

分類	System	Center	Type	Condition	K points Path, K Points		
単純立方格子	cubic	simple		$A=B=C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$	Delta	G(0.0 0.0 0.0)	X(0.5 0.0 0.0)
					Z	X(0.5 0.0 0.0)	M(0.5 0.5 0.0)
					Sigma	M(0.5 0.5 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	R(0.5 0.5 0.5)
					T	R(0.5 0.5 0.5)	M(0.5 0.5 0.0)
					S	X(0.5 0.0 0.0)	R(0.5 0.5 0.5)
面心立方格子	cubic	face		$A=B=C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$	Delta	G(0.0 0.0 0.0)	X(1.0 0.0 0.0)
					Z	X(1.0 0.0 0.0)	W(1.0 0.5 0.0)
					Q	W(1.0 0.5 0.0)	L(0.5 0.5 0.5)
					Lambda	L(0.5 0.5 0.5)	G(0.0 0.0 0.0)
					Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	K(0.75 0.75 0.0)
					S	U(1.0 0.5 0.5)	X(1.0 0.0 0.0)
体心立方格子	cubic	body		$A=B=C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$	Delta	G(0.0 0.0 0.0)	H(1.0 0.0 0.0)
					G	H(1.0 0.0 0.0)	N(0.5 0.5 0.0)
					Sigma	N(0.5 0.5 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	P(0.5 0.5 0.5)
					D	P(0.5 0.5 0.5)	N(0.5 0.5 0.0)
					F	H(1.0 0.0 0.0)	P(0.5 0.5 0.5)
六方格子	hexagonal	simple		$A=B \neq C$	Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	M(0.5 0.0 0.0)

				$\alpha = \beta = 90 \quad \gamma = 120$	T [*]	M(0.5 0.0 0.0)	K(1.0/3 1.0/3 0.0)
					T	K(1.0/3 1.0/3 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	A(0.0 0.0 0.5)
					R	A(0.0 0.0 0.5)	L(0.5 0.0 0.5)
					S'	L(0.5 0.0 0.5)	H(1.0/3 1.0/3 0.5)
					S	H(1.0/3 1.0/3 0.5)	A(0.0 0.0 0.5)
					U	L(0.5 0.0 0.5)	M(0.5 0.0 0.0)
					P	K(1.0/3 1.0/3 0.0)	H(1.0/3 1.0/3 0.5)
三方格子 1	trigonal	simple	type1	$A=B=C$ $\alpha = \beta = \gamma \quad \alpha < 90$	Q	F(0.0 0.5 1.0)	n1(2eta 0.5-eta 1.0)
					Sigma	n1(eta eta 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	Z(0.0 0.0 1.5)
					B	Z(0.0 0.0 1.5)	n2(-eta 2eta 1.5)
					Y	n2(0.5-eta 2eta 0.5)	L(0.5 0.0 0.5)
					ll	L(0.5 0.0 0.5)	G(0.0 0.0 0.0)
三方格子 2	trigonal	simple	type2	$A=B=C$ $\alpha = \beta = \gamma \quad \alpha \geq 90$	Sigma	F(0.5 0.5 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	n1(0.0 0.0 eta)
					P	n1(1.0 0.0 eta)	Z(1.0 0.0 -0.5)
					Y	Z(0.0 1.0 0.5)	L(0.5 0.0 0.5)
					ll	L(0.5 0.0 0.5)	G(0.0 0.0 0.0)
単純正方格子	tetragonal	simple		$A=B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$	Delta	G(0.0 0.0 0.0)	X(0.5 0.0 0.0)
					Y	X(0.5 0.0 0.0)	M(0.5 0.5 0.0)
					Sigma	M(0.5 0.5 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	Z(0.0 0.0 0.5)
					U	Z(0.0 0.0 0.5)	R(0.5 0.0 0.5)
					T	R(0.5 0.0 0.5)	A(0.5 0.5 0.5)
					S	A(0.5 0.5 0.5)	Z(0.0 0.0 0.5)
					W	R(0.5 0.0 0.5)	X(0.5 0.0 0.0)
					V	M(0.5 0.5 0.0)	A(0.5 0.5 0.5)
体心正方格子 1	tetragonal	body	type1	$A=B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$ $A=B < C$	Lambda	Z(0.0 0.0 1.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	n1(eta 0.0 0.0)
					F	n1(eta 0.0 1.0)	Z(0.0 0.0 1.0)
					U	Z(0.0 0.0 1.0)	n2(eta eta 1.0)
					Y	n2(eta 1.0-eta 0.0)	X(0.5 0.5 0.0)
					Delta	X(0.5 0.5 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					W	X(0.5 0.5 0.0)	P(0.5 0.5 0.5)
					Q	P(0.5 0.5 0.5)	N(0.5 0.0 0.5)
体心正方格子 2	tetragonal	body	type2	$A=B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$ $A=B > C$	V	Z(1.0 0.0 0.0)	n1(1.0 0.0 eta)
					Lambda	n1(0.0 0.0 eta)	G(0.0 0.0 0.0)
					Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	Z(1.0 0.0 0.0)
					Y	Z(1.0 0.0 0.0)	X(0.5 0.5 0.0)
					Delta	X(0.5 0.5 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					W	X(0.5 0.5 0.0)	P(0.5 0.5 0.5)
					Q	P(0.5 0.5 0.5)	N(0.5 0.0 0.5)

単純直方格子	orthorhombic	simple		$A \neq B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$	Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	X(0.5 0.0 0.0)
					D	X(0.5 0.0 0.0)	S(0.5 0.5 0.0)
					C	S(0.5 0.5 0.0)	Y(0.0 0.5 0.0)
					Delta	Y(0.0 0.5 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	Z(0.0 0.0 0.5)
					A	Z(0.0 0.0 0.5)	U(0.5 0.0 0.5)
					P	U(0.5 0.0 0.5)	R(0.5 0.5 0.5)
					E	R(0.5 0.5 0.5)	T(0.0 0.5 0.5)
					B	T(0.0 0.5 0.5)	Z(0.0 0.0 0.5)
					G	U(0.5 0.0 0.5)	X(0.5 0.0 0.0)
面心直方格子 1	orthorhombic	face	type1	$A \neq B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$ $ka^2 < kb^2 + kc^2$ $kb^2 < kc^2 + ka^2$ $kc^2 < ka^2 + kb^2$	Lambda	Z(0.0 0.0 1.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	X(1.0 0.0 0.0)
					D	X(1.0 0.0 0.0)	n1(1.0 eta 0.0)
					B	n1(0.0 eta 1.0)	Z(0.0 0.0 1.0)
					A	Z(0.0 0.0 1.0)	n2(eta 0.0 1.0)
					C	n2(eta 1.0 0.0)	Y(0.0 1.0 0.0)
					Delta	Y(0.0 1.0 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					H	Y(0.0 1.0 0.0)	n3(0.0 1.0 eta)
					G	n3(1.0 0.0 eta)	X(1.0 0.0 0.0)
面心直方格子 2	orthorhombic	face	type2	$A \neq B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$ $ka^2 > kb^2 + kc^2$	Lambda	Z(0.0 0.0 1.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	n1(eta 0.0 0.0)
					U	n1(eta 1.0 1.0)	X(0.0 1.0 1.0)
					B	X(0.0 1.0 1.0)	Z(0.0 0.0 1.0)
					A	Z(0.0 0.0 1.0)	n2(eta 0.0 1.0)
					C	n2(eta 1.0 0.0)	Y(0.0 1.0 0.0)
					Delta	Y(0.0 1.0 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					H	Y(0.0 1.0 0.0)	X(0.0 1.0 1.0)
面心直方格子 3	orthorhombic	face	type3	$A \neq B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$ $kb^2 > kc^2 + ka^2$	Lambda	Z(0.0 0.0 1.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	X(1.0 0.0 0.0)
					D	X(1.0 0.0 0.0)	n2(1.0 eta 0.0)
					B	n2(0.0 eta 1.0)	Z(0.0 0.0 1.0)
					A	Z(0.0 0.0 1.0)	Y(1.0 0.0 1.0)
					R	Y(1.0 0.0 1.0)	n1(1.0 eta 1.0)
					Delta	n1(0.0 eta 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					G	Y(1.0 0.0 1.0)	X(1.0 0.0 0.0)
面心直方格子 4	orthorhombic	face	type4	$A \neq B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$ $kc^2 > ka^2 + kb^2$	Q	Z(1.0 1.0 0.0)	n1(1.0 1.0 eta)
					Lambda	n1(0.0 0.0 eta)	G(0.0 0.0 0.0)
					Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	X(1.0 0.0 0.0)
					D	X(1.0 0.0 0.0)	Z(1.0 1.0 0.0)
					C	Z(1.0 1.0 0.0)	Y(0.0 1.0 0.0)
					Delta	Y(0.0 1.0 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)

					H	Y(0.0 1.0 0.0)	n2(0.0 1.0 eta)
					G	n2(1.0 0.0 eta)	X(1.0 0.0 0.0)
体心直方格子 1	orthorhombic	body	type1	$A \neq B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$ $A > B \quad A > C$	Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	X(1.0 0.0 0.0)
					U	X(1.0 0.0 0.0)	n1(1.0 eta 0.0)
					Delta	n1(0.0 eta 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	n2(0.0 0.0 eta)
					G	n2(1.0 0.0 eta)	X(1.0 0.0 0.0)
					Q	R(0.5 0.0 0.5)	W(0.5 0.5 0.5)
					D	W(0.5 0.5 0.5)	S(0.0 0.5 0.5)
					P	T(0.5 0.5 0.0)	W(0.5 0.5 0.5)
体心直方格子 2	orthorhombic	body	type2	$A \neq B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$ $B > C \quad B > A$	Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	n2(eta 0.0 0.0)
					F	n2(eta 1.0 0.0)	X(0.0 1.0 0.0)
					Delta	X(0.0 1.0 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	n1(0.0 0.0 eta)
					G	n1(0.0 1.0 eta)	X(0.0 1.0 0.0)
					Q	R(0.5 0.0 0.5)	W(0.5 0.5 0.5)
					D	W(0.5 0.5 0.5)	S(0.0 0.5 0.5)
					P	T(0.5 0.5 0.0)	W(0.5 0.5 0.5)
体心直方格子 3	orthorhombic	body	type3	$A \neq B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$ $C > A \quad C > B$	Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	n1(eta 0.0 0.0)
					F	n1(eta 0.0 1.0)	X(0.0 0.0 1.0)
					U	X(0.0 0.0 1.0)	n2(0.0 eta 1.0)
					Delta	n2(0.0 eta 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	X(0.0 0.0 1.0)
					Q	R(0.5 0.0 0.5)	W(0.5 0.5 0.5)
					D	W(0.5 0.5 0.5)	S(0.0 0.5 0.5)
					P	T(0.5 0.5 0.0)	W(0.5 0.5 0.5)
底心直方格子 1	orthorhombic	base	type1	$A \neq B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$ $A < B$	Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	n1(eta 0.0 0.0)
					C	n1(eta 1.0 0.0)	Y(0.0 1.0 0.0)
					Delta	Y(0.0 1.0 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	Z(0.0 0.0 0.5)
					A	Z(0.0 0.0 0.5)	n2(eta 0.0 0.5)
					E	n2(eta 1.0 0.5)	T(0.0 1.0 0.5)
					B	T(0.0 0.0 0.5)	Z(0.0 1.0 0.5)
					H	Y(0.0 1.0 0.0)	T(0.0 1.0 0.5)
					D	S(0.5 0.5 0.0)	R(0.5 0.5 0.5)
底心直方格子 2	orthorhombic	base	type2	$A \neq B \neq C$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$ $A > B$	Sigma	G(0.0 0.0 0.0)	Y(1.0 0.0 0.0)
					F	Y(1.0 0.0 0.0)	n1(1.0 eta 0.0)
					Delta	n1(0.0 eta 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	Z(0.0 0.0 0.5)
					A	Z(0.0 0.0 0.5)	T(1.0 0.0 0.5)

					G	T(1.0 0.0 0.5)	n2(1.0 eta 0.5)
					B	n2(0.0 eta 0.5)	Z(0.0 0.0 0.5)
					H	Y(1.0 0.0 0.0)	T(1.0 0.0 0.5)
					D	S(0.5 0.5 0.0)	R(0.5 0.5 0.5)
單純單斜格子	monoclinic	simple		$A \neq B \neq C$ $\alpha = \gamma = 90$ $\beta > 90$	Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	Y(0.0 0.5 0.0)
					11	Y(0.0 0.5 0.0)	C(0.0 0.5 0.5)
					W	C(0.0 0.5 0.5)	Z(0.0 0.0 0.5)
					12	Z(0.0 0.0 0.5)	G(0.0 0.0 0.0)
					13	G(0.0 0.0 0.0)	X(0.5 0.0 0.0)
					V	X(0.5 0.0 0.0)	A(0.5 0.5 0.0)
					14	A(0.5 0.5 0.0)	Y(0.0 0.5 0.0)
					15	Y(0.0 0.5 0.0)	E(0.5 0.5 -0.5)
					U	E(0.5 0.5 -0.5)	D(0.5 0.0 -0.5)
					16	D(0.5 0.0 -0.5)	G(0.0 0.0 0.0)
底心單斜格子 1	monoclinic	base	type1	$A \neq B \neq C$ $\alpha = \gamma = 90$ $\beta > 90$ $A < B$	Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	Y(0.0 1.0 0.0)
					11	Y(0.0 1.0 0.0)	n1(eta 1.0 0.0)
					12	n1(eta 0.0 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					13	G(0.0 0.0 0.0)	Z(0.0 0.0 0.5)
					U	Z(0.0 0.0 0.5)	M(0.0 1.0 0.5)
					14	M(0.0 1.0 0.5)	Y(0.0 1.0 0.0)
底心單斜格子 2	monoclinic	base	type2	$A \neq B \neq C$ $\alpha = \gamma = 90$ $\beta > 90$ $A > B$	Lambda	G(0.0 0.0 0.0)	n1(0.0 eta 0.0)
					C	n1(1.0 eta 0.0)	Y(1.0 0.0 0.0)
					11	Y(1.0 0.0 0.0)	G(0.0 0.0 0.0)
					12	G(0.0 0.0 0.0)	Z(0.0 0.0 0.5)
					U	Z(0.0 0.0 0.5)	n2(0.0 eta 0.5)
					E	n2(1.0 eta -0.5)	M(1.0 0.0 -0.5)
					13	M(1.0 0.0 -0.5)	Y(1.0 0.0 0.0)

3.3 設定ファイル

3.3.1 共通設定ファイル (toast.cfg)

共通設定ファイル toast.cfg は、ジョブ管理、各プログラムに対する計算シナリオの共通設定を記述する。
共通設定ファイルの設定内容は、計算シナリオ設定ファイル、ジョブ管理設定ファイルより優先される。

Section	name	value	
[job]	jobmanage_type	interactive [section-name]	Interactive 実行 [section]で指定したテンプレート、変数を用いて ジョブスクリプトを生成
	mpi_cmd		MPI 実行コマンド
	nproc		プロセッサ数
[vasp]	program		プログラム
	version		バージョン
	ppdir		ポテンシャルファイルのディレクトリを指定
	pplist		元素のポテンシャルのリストファイルを指定
	cmd		計算プログラムの実行コマンドを指定
	scenario		計算シナリオファイル
[espresso]	program		プログラム
	version		バージョン
	ppdir		ポテンシャルファイルのディレクトリを指定
	pplist		元素のポテンシャルのリストファイルを指定
	cmd		計算プログラムの実行コマンドを指定
	scenario		計算シナリオファイル
[abinit]	program		プログラム
	version		バージョン
	ppdir		ポテンシャルファイルのディレクトリを指定
	pplist		元素のポテンシャルのリストファイルを指定
	cmd		計算プログラムの実行コマンドを指定
	scenario		計算シナリオファイル

3.3.2 計算シナリオ設定ファイル

第一原理自動計算プログラムは、toast/config にある設定ファイルを、ユーザーの計算環境に合わせて編集を行う。設定ファイルは、Config File 形式(RFC822 形式)となっており、ヘッダー[section]でセクションに分割され、各セクション内でパラメーターと値を name = value の形式で記述する。#で始まる行はコメント行である。

* Python ConfigParser モジュールを使用している。

- 用意した CIF ファイルに対して、ユーザーが指定したシナリオ(scenario)に従って複数のタスク(task)を順番に実行する。
- 設定ファイルはヘッダ [section-name] で各セクションに分割される。
- [general]セクション、[default]セクション以下のセクションは、順次実行するタスク(task)を設定する。
- 各タスクは、独自パラメーター (_name)と計算プログラムのパラメータ (name)から構成される。
- 計算プログラムのパラメータは、第一原理計算プログラムの入力データのキーワードそのものとする。
(第一原理計算プログラムの使用経験のあるユーザーを想定している。)

Section	name	value	
[general]	program	vasp espresso abinit	使用するプログラムを指定 VASP Quantum ESPRESSO ABINIT
	version		プログラムバージョン
	ppdir		ポテンシャルファイルのディレクトリを指定
	pplist		元素のポテンシャルのリストファイルを指定
	cmd		計算プログラムの実行コマンドを指定
[default]	_kpoints_length	30	K 点メッシュ生成における length を指定
	_kpoints_spacing	0.3	K 点メッシュ生成における spacing を指定
	_spin	nomag ferro	スピン計算の指定 スピンなし計算 スピン ferro 計算
	name	value	各[task]セクションで共通の計算プログラムのパラメーター 各[task]セクションで、_input=default が指定されている場合、これらの計算パラメータが追加される
[task]	_calc_dir		[task]を実行するサブディレクトリを指定
	_structure	cif task 名	CIF ファイルの結晶構造 [task]の計算結果の結晶構造
	_input	default	各[task]セクションで、[default]の計算パラメータが追加される
	_spin_criteion	0.1	スピン判定計算におけるスピン判定値 Task 名が[check_spin]の場合に有効
	_mkdir_X		生成するサブディレクトリを指定
	_copy_X	[src] [dist]	ファイルのコピー
	_name_list_X	control system electrons	入力データの namalist (QE 用)
	name	value	計算プログラムのパラメーター

3.3.3 擬ポテンシャル設定ファイル

第一原理計算プログラムの計算において、使用する各元素のポテンシャルを設定する。

第一原理自動計算プログラムは、各第一原理計算プログラム用に擬ポテンシャル設定ファイルを用意している。

プログラム	設定ファイル	擬ポテンシャル	備考
VASP	potpaw_PBE.rec.txt	Potpaw_PBE	VASP の推奨ポテンシャル
QE	espresso.pp.pbe.sssp.eff.txt	SSSP_eff_PBE	Standard Solid State Pseudopotentials (SSSP) http://materialscloud.org/sssp/
	espresso.pp.pbe.gbrv.txt	GBRV pbe_UPF	GBRV pseudopotential http://www.physics.rutgers.edu/gbrv/
ABINIT	abinit.pp.pbe.jth.txt	JTH PAW	JTH PAW atomic datasets http://www.abinit.org/

擬ポテンシャル設定ファイルの記述

原子番号	元素名	ポテンシャルファイル/ディレクトリ
...		

3.3.4 設定ファイル例

3.3.4.1 共通設定ファイル例 (toast.cfg)

共通設定ファイル例 (toast.cfg) を以下に示す。

```
[job]
#jobmanage_type = interactive
jobmanage_type = pbs
#mpi_cmd = mpijob -mpi
nproc = 4

[espresso]
program = espresso
version = 6.1
ppdir = /opt/app/qe/gbrv
pplist = espresso.pp.pbe.gbrv.txt
bindir = /opt/app/qe/6.1/bin
cmd = pw.x -nk ${nk:1}
nproc = 1
scenario = qe.para.noopt.checkspin.cfg

[vasp]
program = vasp
version = 5.3.5
ppdir = /opt/app/vasp/potpaw_PBE
pplist = vasp.pp.pbe.rec.txt
cmd = /opt/app/vasp/vasp.5.3.5/vasp
scenario = vasp.para.cfg

[abinit]
program = abinit
version = 8.4.2
ppdir = /opt/app/abinit/JTH-PBE-atomicdata-1.0
pplist = abinit.pp.pbe.jth.txt
#ppdir = /opt/app/abinit/gbrv
#pplist = abinit.pp.pbe.gbrv.txt
cmd = /opt/app/abinit/abinit-8.4.4/bin/abinit
#cmd = /opt/app/abinit/abinit-7.10.5/bin/abinit
scenario = abinit.para.cfg
```

3.3.4.2 設定ファイル例 (VASP)

VASP 用の設定ファイル例を以下に示す。

(1) 計算シナリオ設定ファイル

スピン判定計算、構造最適化計算、SCF 計算、DOS 計算、BAND 計算を順次計算するシナリオである。

```
[general]
program = vasp
version = 5.3.5
ppdir = /opt/app/vasp/potpaw_PBE
pplist = vasp.pp.pbe.rec.txt
cmd = /opt/app/vasp/vasp.5.3.5/vasp
#mpi_cmd = mpijob -mpi
nproc = 1

[default]
_kpoints_length = 30
#_kpoints_spacing = 0.03
#_spin = nonmag
#_spin = ferro
NPAR = 1
SYSTEM =
ISTART = 0
PREC = high
ENCUT = 550
ALGO = fast
#ALGO = normal
EDIFF = 1E-6
NELM = 100 # default 60
#NELMIN = 8
#NELMDL = -5
ISPIN =
NBANDS =
ISMEAR = 0 # default 1
SIGMA = 0.1 # default 0.2
ISYM =

[check_spin]
_calc_dir = spin
_structure = cif
_input = default
_spin_criterion = 0.1
ISPIN = 2
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.
IBRION = 2
ISIF = 3
```

```

NSW = 100
EDIFFG = 1e-5
POTIM = 0.05

[opt1]
_calc_dir = opt.1
_structure = cif
_input = default
NELMIN = 8
LWAVE =.FALSE.
LCHARG =.FALSE.
IBRION =2
ISIF = 3
NSW = 200
EDIFFG = 1e-5
POTIM = 0.05

[opt2]
_calc_dir = opt.2
_structure = opt1
_input = default
NELMIN = 8
LWAVE =.FALSE.
LCHARG =.FALSE.
IBRION =2
ISIF = 3
NSW = 200
EDIFFG = -0.01
POTIM = 0.05

[scf]
_calc_dir = scf
_structure = opt2
_input = default
NELMIN = 8
ISMEAR = -5
LAECHG = .TRUE.

[dos]
_calc_dir = dos
_structure = scf
_input = default
_copy_2 = ../scf/WAVECAR WAVECAR
_copy_3 = ../scf/CHGCAR CHGCAR
NELMIN = 8
ISMEAR = -5
ICHARG = 11
LORBIT = 11
_emin_ef = -20

```

```

_emax_ef = +20
EMIN = -20
EMAX = 30
NEDOS = 2501
LWAVE = .FALSE.

[band]
_calc_dir = band
_structure = scf
_input = default
_copy_2 = ../scf/WAVECAR WAVECAR
_copy_3 = ../scf/CHGCAR CHGCAR
ISMEAR =
SIGMA =
ICHARG = 11
LWAVE = .FALSE.

```

(2) 擬ポテンシャル設定ファイル

```

1 H H
2 He He
3 Li Li_sv
4 Be Be
5 B B
6 C C
7 N N
8 O O
9 F F
10 Ne Ne
11 Na Na_pv
12 Mg Mg
13 Al Al
14 Si Si
15 P P
16 S S
17 Cl Cl
18 Ar Ar
19 K K_sv
20 Ca Ca_sv
21 Sc Sc_sv
22 Ti Ti_sv
23 V V_sv
24 Cr Cr_sv_GW
25 Mn Mn_pv
26 Fe Fe
27 Co Co
28 Ni Ni
29 Cu Cu
30 Zn Zn

```

31	Ga	Ga_d
32	Ge	Ge_d
33	As	As
34	Se	Se
35	Br	Br
36	Kr	Kr
37	Rb	Rb_sv
38	Sr	Sr_sv
39	Y	Y_sv
40	Zr	Zr_sv
41	Nb	Nb_sv
42	Mo	Mo_sv
43	Tc	Tc_pv
44	Ru	Ru_sv_GW
45	Rh	Rh_sv_GW
46	Pd	Pd
47	Ag	Ag
48	Cd	Cd
49	In	In_d
50	Sn	Sn_d
51	Sb	Sb
52	Te	Te
53	I	I
54	Xe	Xe
55	Cs	Cs_sv
56	Ba	Ba_sv
57	La	La
58	Ce	Ce
59	Pr	Pr_3
60	Nd	Nd_3
61	Pm	Pm_3
62	Sm	Sm_3
63	Eu	Eu_2
64	Gd	Gd_3
65	Tb	Tb_3
66	Dy	Dy_3
67	Ho	Ho_3
68	Er	Er_3
69	Tm	Tm_3
70	Yb	Yb_2
71	Lu	Lu_3
72	Hf	Hf_pv
73	Ta	Ta_sv_GW
74	W	W_sv
75	Re	Re
76	Os	Os
77	Ir	Ir
78	Pt	Pt
79	Au	Au

```
80 Hg Hg
81 Tl Tl_d
82 Pb Pb_d
83 Bi Bi_d
84 Po Po_d
85 At At_d_GW
86 Rn Rn
87 Fr Fr_sv
88 Ra Ra_sv
89 Ac Ac
90 Th Th
91 Pa Pa
92 U U
93 Np Np
94 Pu Pu
95 Am Am
96 Cm Cm
```

3.3.4.1 設定ファイル例 (Quantum ESPRESSO)

Quantum ESPRESSO 用の設定ファイル例を以下に示す。

(1) 計算シナリオ設定ファイル

スピン判定計算、構造最適化計算、SCF 計算、DOS 計算、BAND 計算を順次計算するシナリオである。

```
[general]
program = espresso
version = 5.4.0
#ppdir = /opt/app/espresso/upf_files
ppdir = /opt/app/espresso/SSSP_eff_PBE
pplist = espresso.pp.pbe.sssp.eff.txt
#ppdir = /opt/app/espresso/gbrv
#pplist = espresso.pp.pbe.gbrv.txt
cmd = /opt/app/espresso/espresso-5.4.0/bin/pw.x
nproc = 1

[default]
_kpoints_length = 30
#_kpoints_spacing = 0.03
#_spin = nonmag
#_spin = ferro

_namelist_1 = control
calculation =
prefix =
tstress = .true.
tprnfor = .true.
pseudo_dir = '../'
```

```

outdir = './'
wfcdir =
etot_conv_thr = 1.0e-5
forc_conv_thr = 1.0e-4
disk_io = 'low'
wf_collect =

_namelist_2 = system
ibrav = 0
nat =
ntyp =
nbnd =
ecutwfc = 40.0
ecutrho = 200.0
occupations = 'smearing'
smearing = 'gaussian'
degauss = 0.1
nspin = 1

_namelist_3 = electrons
mixing_beta = 0.7
conv_thr = 1.0e-6

_namelist_4 = ions
_namelist_5 = cell

[check_spin]
_calc_dir = spin
_structure = cif
_input = default
calculation = 'vc-relax'
nspin = 2

[opt]
_calc_dir = opt
_structure = cif
_input = default
calculation = 'vc-relax'

[scf]
_calc_dir = scf
_structure = opt
_input = default
calculation = 'scf'
wfcdir = './'

[charge]
_calc_dir = scf
_cmd = /opt/app/espresso/espresso-5.4.0/bin/pp.x

```

```

_input_file = job2.in
_script_file = job2.sh
_log_file = log2
_namelist_1 = inputpp
prefix =
filplot = charge
plot_num = 0
spin_component = 0
#spin_component = 1 # spin up
#spin_component = 2 # spin down
_namelist_2 = plot
iflag = 3
output_format = 6
fileout = charge.cube

[nscf]
_calc_dir = dos
_structure = scf
_input = default
_mkdir = pwscf.save
_copy_1 = ../scf/pwscf.save/data-file.xml ../pwscf.save/data-file.xml
_copy_2 = ../scf/pwscf.save/charge-density.dat ../pwscf.save/charge-density.dat
_copy_3 = ../scf/pwscf.save/spin-polarization.dat ../pwscf.save/spin-polarization.dat
_copy_4 = ../scf/pwscf.paw ../pwscf.paw
calculation = 'nscf'
wf_collect = .true.
occupations = 'tetrahedra'
smearing =
degauss =

[tdos]
_calc_dir = dos
_cmd = /opt/app/espresso/espresso-5.4.0/bin/dos.x
_input_file = job2.in
_script_file = job2.sh
_log_file = log2
_namelist = dos
prefix =
fildos = dos
emin =
emax =

[pdos]
_calc_dir = dos
_cmd = /opt/app/espresso/espresso-5.4.0/bin/projwfc.x
_input_file = job3.in
_script_file = job3.sh
_log_file = log3
_namelist = projwfc

```



```

prefix =
filpdos = pdos
emin =
emax =

[dos_band]
_calc_dir = dos
_cmd = /opt/app/espresso/espresso-5.4.0/bin/bands.x
_input_file = job4.in
_script_file = job4.sh
_log_file = log4
_namelist = bands
prefix =
filband = band
#lsym = .true.

[dos_band2]
_calc_dir = dos
_cmd = /opt/app/espresso/espresso-5.4.0/bin/bands.x
_input_file = job5.in
_script_file = job5.sh
_log_file = log5
_namelist = bands
prefix =
filband = band2
#lsym = .true.
spin_component = 2

[band]
_calc_dir = band
_structure = scf
_input = default
_mkdir = pwscf.save
_copy_1 = ../scf/pwscf.save/data-file.xml ../pwscf.save/data-file.xml
_copy_2 = ../scf/pwscf.save/charge-density.dat ../pwscf.save/charge-density.dat
_copy_3 = ../scf/pwscf.save/spin-polarization.dat ../pwscf.save/spin-polarization.dat
_copy_4 = ../scf/pwscf.paw ../pwscf.paw
calculation = 'bands'
prefix =
occupations = 'smearing'
smearing = 'gaussian'
degauss = 0.01
#K_POINTS = {crystal_b}

[band_plot]
_calc_dir = band
_cmd = /opt/app/espresso/espresso-5.4.0/bin/bands.x
_input_file = job2.in
_script_file = job2.sh

```

```

_log_file = log2
_namelist = bands
prefix =
filband = band
#lsym = .true.

[band_plot2]
_calc_dir = band
_cmd = /opt/app/espresso/espresso-5.4.0/bin/bands.x
_input_file = job3.in
_script_file = job3.sh
_log_file = log3
_namelist = bands
prefix =
filband = band2
#lsym = .true.
spin_component = 2

```

(2) 擬ポテンシャル設定ファイル

```

1 H H.pbe-rrkjus_psl.0.1.UPF
2 He He_ONCV_PBE-1.0.upf
3 Li li_pbe_v1.4.uspp.F.UPF
4 Be Be_ONCV_PBE-1.0.upf
4 Be be_pbe_v1.4.uspp.F.UPF
5 B B.pbe-n-kjpaw_psl.0.1.UPF
6 C C_pbe_v1.2.uspp.F.UPF
7 N N.pbe.theos.UPF
8 O O_pbe_v1.2.uspp.F.UPF
9 F f_pbe_v1.4.uspp.F.UPF
10 Ne Ne.pbe-n-kjpaw_psl.1.0.0.UPF
11 Na Na_pbe_v1.uspp.F.UPF
12 Mg mg_pbe_v1.4.uspp.F.UPF
13 Al Al.pbe-n-kjpaw_psl.1.0.0.UPF
14 Si Si.pbe-n-rrkjus_psl.1.0.0.UPF
15 P P.pbe-n-rrkjus_psl.1.0.0.UPF
16 S S_pbe_v1.2.uspp.F.UPF
17 Cl cl_pbe_v1.4.uspp.F.UPF
18 Ar Ar.pbe-n-rrkjus_psl.1.0.0.UPF
19 K K.pbe-spn-rrkjus_psl.1.0.0.UPF
20 Ca Ca_pbe_v1.uspp.F.UPF
21 Sc Sc_pbe_v1.uspp.F.UPF
22 Ti ti_pbe_v1.4.uspp.F.UPF
23 V V_pbe_v1.uspp.F.UPF
24 Cr cr_pbe_v1.5.uspp.F.UPF
25 Mn Mn.pbe-spn-kjpaw_psl.0.3.1.UPF
26 Fe Fe.pbe-spn-kjpaw_psl.0.2.1.UPF
27 Co Co_pbe_v1.2.uspp.F.UPF
28 Ni ni_pbe_v1.4.uspp.F.UPF

```

29 Cu Cu_pbe_v1.2.uspp.F.UPF
 30 Zn Zn_pbe_v1.uspp.F.UPF
 31 Ga Ga.pbe-dn-rrkjus_psl.0.2.UPF
 32 Ge Ge.pbe-dn-kjpaw_psl.1.0.0.UPF
 33 As As.pbe-n-rrkjus_psl.0.2.UPF
 34 Se Se_pbe_v1.uspp.F.UPF
 35 Br br_pbe_v1.4.uspp.F.UPF
 36 Kr Kr.pbe-n-rrkjus_psl.0.2.3.UPF
 37 Rb Rb_ONCV_PBE-1.0.upf
 38 Sr Sr.pbe-spn-rrkjus_psl.1.0.0.UPF
 39 Y Y_pbe_v1.uspp.F.UPF
 40 Zr Zr_pbe_v1.uspp.F.UPF
 41 Nb Nb.pbe-spn-kjpaw_psl.0.3.0.UPF
 42 Mo Mo_ONCV_PBE-1.0.upf
 43 Tc Tc_ONCV_PBE-1.0.upf
 44 Ru Ru_ONCV_PBE-1.0.upf
 45 Rh Rh.pbe-spn-kjpaw_psl.1.0.0.UPF
 46 Pd Pd.pbe-spn-kjpaw_psl.1.0.0.UPF
 47 Ag ag_pbe_v1.4.uspp.F.UPF
 48 Cd Cd.pbe-dn-rrkjus_psl.0.3.1.UPF
 49 In In.pbe-dn-rrkjus_psl.0.2.2.UPF
 50 Sn Sn_pbe_v1.uspp.F.UPF
 51 Sb sb_pbe_v1.4.uspp.F.UPF
 52 Te Te_pbe_v1.uspp.F.UPF
 53 I I_pbe_v1.uspp.F.UPF
 54 Xe Xe.pbe-dn-rrkjus_psl.1.0.0.UPF
 55 Cs Cs_pbe_v1.uspp.F.UPF
 56 Ba Ba_ONCV_PBE-1.0.upf
 57 La La.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 58 Ce Ce.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 59 Pr Pr.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 60 Nd Nd.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 61 Pm Pm.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 62 Sm Sm.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 63 Eu Eu.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 64 Gd Gd.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 65 Tb Tb.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 66 Dy Dy.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 67 Ho Ho.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 68 Er Er.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 69 Tm Tm.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 70 Yb Yb.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 71 Lu Lu.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF
 72 Hf Hf.pbe-spn-rrkjus_psl.0.2.UPF
 73 Ta Ta_pbe_v1.uspp.F.UPF
 74 W W_pbe_v1.2.uspp.F.UPF
 75 Re Re_pbe_v1.2.uspp.F.UPF
 76 Os Os_pbe_v1.2.uspp.F.UPF
 77 Ir Ir_pbe_v1.2.uspp.F.UPF

```
78 Pt pt_pbe_v1.4.uspp.F.UPF
79 Au Au_ONCV_PBE-1.0.upf
80 Hg Hg_pbe_v1.uspp.F.UPF
81 Tl Tl.pbe-dn-rrkjus_psl.0.2.3.UPF
82 Pb Pb.pbe-dn-kjpaw_psl.0.2.2.UPF
83 Bi Bi.pbe-dn-kjpaw_psl.0.2.2.UPF
84 Po Po.pbe-dn-rrkjus_psl.1.0.0.UPF
86 Rn Rn.pbe-dn-rrkjus_psl.1.0.0.UPF
```

3.3.4.1 設定ファイル例 (ABINIT)

ABINIT 用の設定ファイル例を以下に示す。

(1) 計算シナリオ設定ファイル

スピン判定計算、構造最適化計算、SCF 計算、DOS 計算、BAND 計算を順次計算するシナリオである。

```
[general]
program = abinit
version = 8.0.7
ppdir = /opt/app/abinit/JTH-PBE-atomicdata-1.0
pplist = abinit.pp.pbe.jth.txt
#ppdir = /opt/app/abinit/gbrv
#pplist = abinit.pp.pbe.gbrv.txt
cmd = /opt/app/abinit/abinit-8.0.8/bin/abinit
#cmd = /opt/app/abinit/abinit-7.10.5/bin/abinit
nproc = 1

[default]
_kpoints_length = 30
#_kpoints_spacing = 0.03
#_spin = nonmag
#_spin = ferro
acell =
rprim =
ntypat = 0
znuc1 =
natom = 0
typat =
xred =
nband =
ecut = 30
pawecutdg = 40
iscf = 17
#ixc = 11
nstep = 100
occopt = 7
nsppol =
enunit = 1
```

```

prtxml = 1
kptopt = 1
ngkpt =
nshiftk =
shiftk =
prtcif = 1
autoparal = 1

[check_spin]
_calc_dir = spin
_structure = cif
_input = default
#_spin_criterion = 0.1
_spin_criterion = 0.0001
nsppol = 2
toldfe = 1.0e-6
#tolmxf = 0.5e-4
optcell = 1
ionmov = 2
dilatmx = 1.05
ecutsm = 0.5
ntime = 50

[opt1]
_calc_dir = opt.1
_structure = cif
_input = default
toldfe = 1.0e-6
#tolmxf = 1.0e-4
optcell = 1
ionmov = 2
dilatmx = 1.05
ecutsm = 0.5
ntime = 50

[opt2]
_calc_dir = opt.2
_structure = opt1
_input = default
toldfe = 1.0e-6
#toldff = 1.0e-4
#tolmxf = 1.0e-4
optcell = 1
ionmov = 2
#dilatmx = 1.05
dilatmx = 1.1
ecutsm = 0.5
ntime = 50

```

```

[scf]
_calc_dir = scf
_structure = opt2
_input = default
toldfe = 1.0e-6

[dos]
_calc_dir = dos
_structure = scf
_input = default
_copy = ../scf/jobxo_DEN jobxi_DEN
iscf = -2
tolwfr = 1.0e-10
prtdos = 2
#prtdos = 3

[pdos]
_calc_dir = pdos
_structure = scf
_input = default
_copy = ../scf/jobxo_DEN jobxi_DEN
iscf = -2
tolwfr = 1.0e-10
#prtdos = 2
prtdos = 3

[band]
_calc_dir = band
_structure = scf
_input = default
_copy = ../scf/jobxo_DEN jobxi_DEN
iscf = -2
tolwfr = 1.0e-10
kptopt = 0

```

(2) 擬ポテンシャル設定ファイル

```

1 H H.GGA_PBE-JTH.xml
2 He He.GGA_PBE-JTH.xml
3 Li Li.GGA_PBE-JTH.xml
4 Be Be.GGA_PBE-JTH.xml
5 B B.GGA_PBE-JTH.xml
6 C C.GGA_PBE-JTH.xml
7 N N.GGA_PBE-JTH.xml
8 O O.GGA_PBE-JTH.xml
9 F F.GGA_PBE-JTH.xml
10 Ne Ne.GGA_PBE-JTH.xml
11 Na Na.GGA_PBE-JTH.xml
12 Mg Mg.GGA_PBE-JTH.xml

```

13 Al Al.GGA_PBE-JTH.xml
 14 Si Si.GGA_PBE-JTH.xml
 15 P P.GGA_PBE-JTH.xml
 16 S S.GGA_PBE-JTH.xml
 17 Cl Cl.GGA_PBE-JTH.xml
 18 Ar Ar.GGA_PBE-JTH.xml
 19 K K.GGA_PBE-JTH.xml
 20 Ca Ca.GGA_PBE-JTH.xml
 21 Sc Sc.GGA_PBE-JTH.xml
 22 Ti Ti.GGA_PBE-JTH.xml
 23 V V.GGA_PBE-JTH.xml
 24 Cr Cr.GGA_PBE-JTH.xml
 25 Mn Mn.GGA_PBE-JTH.xml
 26 Fe Fe.GGA_PBE-JTH.xml
 27 Co Co.GGA_PBE-JTH.xml
 28 Ni Ni.GGA_PBE-JTH.xml
 29 Cu Cu.GGA_PBE-JTH.xml
 30 Zn Zn.GGA_PBE-JTH.xml
 31 Ga Ga.GGA_PBE-JTH.xml
 32 Ge Ge.GGA_PBE-JTH.xml
 #33 As As.GGA_PBE-JTH_sp.xml
 33 As As.GGA_PBE-JTH.xml
 34 Se Se.GGA_PBE-JTH.xml
 35 Br Br.GGA_PBE-JTH.xml
 36 Kr Kr.GGA_PBE-JTH.xml
 37 Rb Rb.GGA_PBE-JTH.xml
 38 Sr Sr.GGA_PBE-JTH.xml
 39 Y Y.GGA_PBE-JTH.xml
 40 Zr Zr.GGA_PBE-JTH.xml
 41 Nb Nb.GGA_PBE-JTH.xml
 42 Mo Mo.GGA_PBE-JTH.xml
 43 Tc Tc.GGA_PBE-JTH.xml
 44 Ru Ru.GGA_PBE-JTH.xml
 45 Rh Rh.GGA_PBE-JTH.xml
 46 Pd Pd.GGA_PBE-JTH.xml
 47 Ag Ag.GGA_PBE-JTH.xml
 48 Cd Cd.GGA_PBE-JTH.xml
 #49 In In.GGA_PBE-JTH_sp.xml
 49 In In.GGA_PBE-JTH.xml
 #50 Sn Sn.GGA_PBE-JTH_sp.xml
 50 Sn Sn.GGA_PBE-JTH.xml
 #51 Sb Sb.GGA_PBE-JTH_sp.xml
 51 Sb Sb.GGA_PBE-JTH.xml
 52 Te Te.GGA_PBE-JTH.xml
 53 I I.GGA_PBE-JTH.xml
 54 Xe Xe.GGA_PBE-JTH.xml
 55 Cs Cs.GGA_PBE-JTH.xml
 56 Ba Ba.GGA_PBE-JTH.xml
 57 La La.GGA_PBE-JTH.xml

```

58 Ce Ce.GGA_PBE-JTH.xml
59 Pr Pr.GGA_PBE-JTH.xml
60 Nd Nd.GGA_PBE-JTH.xml
61 Pm Pm.GGA_PBE-JTH.xml
62 Sm Sm.GGA_PBE-JTH.xml
63 Eu Eu.GGA_PBE-JTH.xml
64 Gd Gd.GGA_PBE-JTH.xml
65 Tb Tb.GGA_PBE-JTH.xml
66 Dy Dy.GGA_PBE-JTH.xml
67 Ho Ho.GGA_PBE-JTH.xml
68 Er Er.GGA_PBE-JTH.xml
69 Tm Tm.GGA_PBE-JTH.xml
70 Yb Yb.GGA_PBE-JTH.xml
71 Lu Lu.GGA_PBE-JTH.xml
72 Hf Hf.GGA_PBE-JTH.xml
73 Ta Ta.GGA_PBE-JTH.xml
74 W W.GGA_PBE-JTH.xml
75 Re Re.GGA_PBE-JTH.xml
76 Os Os.GGA_PBE-JTH.xml
77 Ir Ir.GGA_PBE-JTH.xml
78 Pt Pt.GGA_PBE-JTH.xml
79 Au Au.GGA_PBE-JTH.xml
80 Hg Hg.GGA_PBE-JTH.xml
#81 Tl Tl.GGA_PBE-JTH_sp.xml
81 Tl Tl.GGA_PBE-JTH.xml
#82 Pb Pb.GGA_PBE-JTH_sp.xml
82 Pb Pb.GGA_PBE-JTH.xml
#83 Bi Bi.GGA_PBE-JTH_sp.xml
83 Bi Bi.GGA_PBE-JTH.xml
84 Po Po.GGA_PBE-JTH.xml
85 At At.GGA_PBE-JTH.xml
86 Rn Rn.GGA_PBE-JTH.xml

```

3.3.5 ジョブ実行設定ファイル

ジョブ実行設定ファイル `jobmanage.cfg` は、ユーザーのジョブ実行環境（ジョブ管理システム）に合わせて、ジョブ投入コマンド、ジョブスクリプトの形式を設定する。ジョブスクリプトの形式は、`config/job_template` ディレクトリにあるテンプレートを用いる。

Section	name	value	
[general]	jobmanage_type	interactive [section-name]	Interactive 実行 [section]で指定したテンプレート、変数を用いてジョブスクリプトを生成
[type]	template		ジョブスクリプトのテンプレートを指定
	np		MPI 実行のプロセス数
	name	value	ジョブスクリプトのテンプレート中の変数を指定

3.3.6 ジョブ実行設定ファイル例

3.3.6.1 設定ファイル例 (PBS)

PBS 系のジョブ管理システム Torque を用いた場合のジョブ実行設定ファイル例を以下に示す。

(1) ジョブ実行設定ファイル jobmanage.cfg

```
[general]
#jobmanage_type = interactive
jobmanage_type = pbs

[interactive]
submit = sh
stat = ps

[pbs]
template = job_template/pbs.tmpl
core = 8
np = 8
queue = L
ncpus = 1
nodes = 1
ppn = 8
walltime = 24:00:00
job_name =
submit = qsub
stat = qstat
```

(2) ジョブスクリプトのテンプレート pbs.tmpl

```
#!/bin/csh
#PBS -q $queue
#PBS -l ncpus=$ncpus
#PBS -l nodes=$nodes:ppn=$ppn
#PBS -l walltime=$walltime

#PBS -N $job_name
cd $$PBS_O_WORKDIR
```

3.4 プログラムの実行

3.4.1 複数の物質の自動計算

ユーザーが容易した複数の物質の結晶構造(CIF File)を読み込み、計算シナリオに基づいて、順次計算を実行する。

- 結晶構造ファイルは、ユーザーが 1 ディレクトリにまとめて用意する。
- 計算データは、指定したディレクトリに結晶構造ごとのサブディレクトリで計算を実行する。
- Material ID は、CIF ファイル名から設定する。(CIF File から拡張子.cif を除いたもの)

Python Script	Option		
calc/ac-setup.py	-m, --matdir	結晶構造(CIF File)のあるディレクトリ	
	-c, --caldir	計算を実行するディレクトリ	
	-p, --program	第一原理計算プログラムの指定	vasp (デフォルト) espresso abinit
	-s, --scenario	計算シナリオ設定ファイルの指定	Default システム提供 ユーザーシナリオ
	-n, --nproc	MPI 実行プロセス数	

実行例

%python [INSTALLDIR]/toast/calc/ac-setup.py -m matdir -c caldir -p vasp -s vasp.para.opt.checkspin.cfg -n 8

3.4.2 複数の物質の自動計算 (ジョブ状況更新/追加投入)

ユーザーが容易した複数の物質の結晶構造(CIF File)を読み込み、計算シナリオに基づいて、順次計算を実行する。

- ジョブ状況更新/追加投入
- 新規ジョブの投入

Python Script	Option		
calc/ac-update.py	joblist	joblist file	joblist.txt
	-c, --caldir	計算を実行するディレクトリ	
	-n, --dry-run	Status 更新のみ	新規 Job 投入なし
	-q, --qstat	ジョブ管理システムの status をチェックしてジョブ状況更新	
	-v, --verbose		

実行例

%python [INSTALLDIR]/toast/calc/ac-update.py -c caldir -v joblist.txt

3.4.3 1 つの結晶構造の第一原理自動計算

結晶構造(CIF File)があるディレクトリで、計算シナリオに基づいて、計算を実行する。

複数の結晶構造(CIF File)の第一原理計算を行う Python スクリプト ac-setup.py, ac-update.py から呼ばれる

Python スクリプトである。

Python Script	Option		
calc/ac-calc.py	-m, --mat	Material ID 結晶構造(CIF File)から拡張子.cif を除いたもの	AtomWork の CIF ファイルの場合、-1-2.cif を除いたもの
	-p, --program	第一原理計算プログラムの指定 vasp espresso abinit	デフォルト vasp
	-s, --scenario	計算シナリオ設定ファイルの指定	Default システム提供 ユーザーシナリオ
	-n, --nproc	MPI 実行プロセス数	

実行例

%python [INSTALLDIR]/toast/calc/ac-calc.py -m 4295272247 -p vasp -s vasp.param.opt.checkspin.cfg -n 8

3.4.4 計算データリスト

ユーザーが容易した複数の結晶構造(CIF File)に対して、第一原理自動計算の計算結果の一部をリスト形式のテキストファイルに出力する。

Python Script	Option		
calc/ac-summary.py	-c, --cal	計算を実行したディレクトリ	
	-o, --output	出力ファイル	caldata.txt

実行例

```
%python [INSTALLDIR]/toast/calc/ac-summary.py -c caldir
```

出力内容

項目	内容	備考
Material ID		CIF File の情報
Chemical Formula		CIF File の情報
Spacegroup		CIF File の情報
Spacegroup No		CIF File の情報
Lattice Parameter (original)	Cell Length a, b, c Cell Angle alpha, beta, gamma	CIF File の情報
Lattice Parameter (relaxed)	Cell Length a, b, c Cell Angle alpha, beta, gamma	
Total Energy (eV)		
Fermi Energy (eV)		
Bandgap Type	metal, direct, indirect	
Bandgap (eV)		

出力例

```
material chemical_formula spacegroup_name spacegroup_no lattice_parameter(original) lattice_parameter(relaxed)
total_energy(eV/atom) fermi_energy(eV) bandgap_type bandgap(eV)
4295272247 Si cubic Fd-3m 227 5.429 5.429 5.429 90.0 90.0 90.0 5.4688472 5.4688472 5.4688472 90.0 90.0 90.0 -5.42460796
5.65437076 indirect 0.618
4295278799 Fe cubic Im-3m 229 2.862 2.862 2.862 90.0 90.0 90.0 2.83553114 2.83553114 2.83553114 90.0 90.0 90.0
-8.23692267 5.75646479 metal -
4295349454 O Si cubic F-43m 216 5.45 5.45 5.45 90.0 90.0 90.0 4.87188342 4.87188342 4.87188342 90.0 90.0 90.0
-5.506395975 6.30502700 metal -
```

3.4.5 計算状況

ユーザーが用意した複数の結晶構造(CIF File)に対して、第一原理自動計算の計算状況をリスト形式のテキストファイルに出力する。

Python Script	Option		
calc/ac-stat.py	-c, --caldir	計算を実行したディレクトリ	
	-o, --output	出力ファイル	デフォルト calstat.txt

実行例

```
%python [INSTALLDIR]/toast/calc/ac-stat.py -c caldir
```

出力内容

項目	内容	備考
Material ID		CIF File の情報
Chemical Formula		CIF File の情報
Spacegroup		CIF File の情報
Spacegroup No		CIF File の情報
CIF File		CIF File の情報
Calculation Status	計算状況 o 計算終了 E 異常終了 / (計算中) - 未実行	計算シナリオの各 task の計算状況

計算状況の判定

計算状況	VASP	Quantum ESPRESSO	ABINIT
o 計算終了	vasprun.xml が正常出力 OUTCAR が計算終了まで出力	ログファイル(標準出力)に JOB DONE.が出力	job.out に Calculation Completed が出力
E 異常終了 / (計算中)	vasprun.xml が異常 OUTCAR が計算終了まで出力されていない	ログファイル(標準出力)に JOB DONE.が出力されていない	job.out に Calculation Completed が出力されていない
- 未実行	vasprun.xml, OUTCAR が存在しない	ログファイル(標準出力)が 存在しない	job.out が存在しない

出力例

```
material chemical_formula spacegroup_name spacegroup_no calculation_status
4295272247 Si cubic Fd-3m 227 4295272247-1-2.cif o o o o o
4295278799 Fe cubic Im-3m 229 4295278799-1-2.cif o o o o o
4295349454 O Si cubic F-43m 216 4295349454-1-2.cif o o o o o
```

3.4.6 可視化データ

第一原理自動計算の計算結果の可視化データをリスト形式、詳細表示の HTML ファイルに出力する。
結晶構造の可視化には、ブラウザの設定変更が必要である。

参考サイト http://wiki.jmol.org/index.php/Troubleshooting/Local_Files

Python Script	Option		
calc/ac-vis.py	-c, --caldir	計算を実行したディレクトリ	
	-o, --output	リスト表示ファイル	デフォルト caldata.html
	-j, --jsdir	Java Script ライブラリの Path	cdn / None (default) Local User define
	-a, --archive	可視化データ (zip ファイル)	

実行例

%python [INSTALLDIR]/toast/calc/ac-vis.py -c [caldir] -a caldata.zip
--

出力内容 (リスト表示)

項目	内容	備考
Material ID		CIF File の情報
Chemical Formula		CIF File の情報
Spacegroup		CIF File の情報
Spacegroup No		CIF File の情報
Lattice Parameter (original)	Cell Length a, b, c Cell Angle alpha, beta, gamma	CIF File の情報
Lattice Parameter (relaxed)	Cell Length a, b, c Cell Angle alpha, beta, gamma	
Total Energy (eV)		
Fermi Energy (eV)		
Bandgap Type	metal, direct, indirect	
Bandgap (eV)		

出力内容 (詳細表示)

項目	内容	備考
Material Information		
Crystal Structure	Crystal System Space Group Space Group Number Cell Parameter Atom Sites	
Structure	Conventional Cell (Initial) Primitive Cell (Initial) Primitive Cell (Relaxed) Brillouin Zone	
Energy	Total Energy Fermi Energy	
Band Structure		

Density of State		
Electronic Property	Band Gap Band Gap Type	

出力例 (リスト表示)

TOAST: Template Oriented Atomic Simulation Toolkit (TOAST)

Ab-initio Calculation

Calculation Result

Show 100 entries

Search:

#	Status	material	chemical_formula	crystal_system	spacegroup_name	spacegroup_no	lattice_parameter(original)	lattice_parameter(relaxed)	total_energy	
1	4295272247	O	4295272247	Si	cubic	Fd-3m	227	5.429 5.429 5.429 90.0 90.0 90.0	5.429 5.429 5.429 90.0 90.0 90.0	-5.42184594
2	4295277535	O	4295277535	As Ga	cubic	F-43m	216	5.654 5.654 5.654 90.0 90.0 90.0	5.654 5.654 5.654 90.0 90.0 90.0	-4.123915515
3	4295278799	O	4295278799	Fe	cubic	Im-3m	229	2.862 2.862 2.862 90.0 90.0 90.0	2.862 2.862 2.862 90.0 90.0 90.0	-8.23074879

Showing 1 to 3 of 3 entries

Previous1Next

出力例 (詳細表示)

TOAST: Template Oriented Atomic Simulation Toolkit (TOAST)

Material Information

Material ID: 4295272247

Chemical Formula: Si

CIF file: 4295272247-1-2.cif

Crystal Structure

Crystal System: cubic

Space Group: Fd-3m

Space Group Number: 227

Cell Parameter

a (Å)	b (Å)	c (Å)
5.429	5.429	5.429

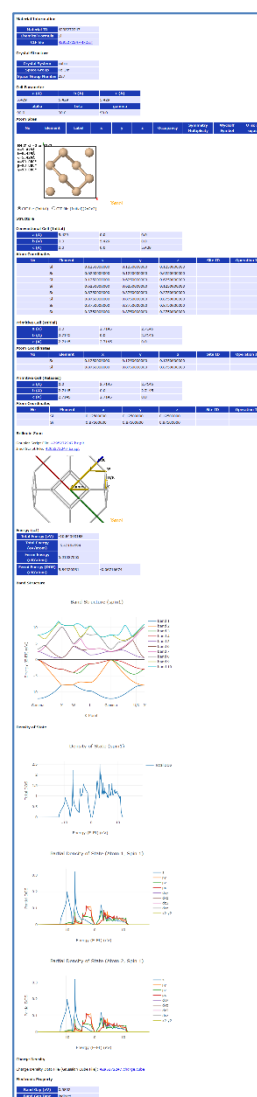
alpha: 90.0 beta: 90.0 gamma: 90.0

Atom Sites

No	Element	Label	x	y	z	Occupancy	Symmetry Multiplicity	Wyckoff Symbol	U iso or equiv
1	Si	1a	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000	24	4a	0.000000

Unit cell diagram showing the cubic structure of Silicon (Si) with lattice parameters a=b=c=5.429 Å and angles alpha=beta=gamma=90.000°.

Buttons: CIF file (Initial) CIF file (Initial)(2x2x2) XSmol



3.4.1 計算メタデータ

計算データから、計算メタデータ (materialRecord.xml)、データシートを生成する。

Python Script	Option		
calc/ac-data.py	-m, --mat	Material ID 結晶構造(CIF File)から拡張子.cif を除いたもの	AtomWork の CIF ファイルの場合、-1-2.cif を除いたもの
	-p, --program	第一原理計算プログラムの指定 vasp	Vasp のみに対応
	-s, --scenario	計算シナリオ設定ファイルの指定	Default システム提供 ユーザーシナリオ
	-o, --output	出力ファイル	設定なしの場合は [material id].xml
	--regid	registrationId	
	--reguid	registrationUserId	

実行例

python [INSTALLDIR]/toast/calc/ac-data.py -m [matid] -p vasp -s vasp.param.opt.checkspin.cfg
--

出力内容

項目	内容	備考
計算メタデータ	materialRecord.xml	
データシート	datasheet.xml	

3.5 計算データ

3.5.1 計算データの概要

結晶ごとの計算実行ディレクトリに、計算シナリオの各タスク(task)のサブディレクトリを作成し、第一原理計算を実行している。各タスク(task)の計算の入出力データは、そのサブディレクトリに保存されている。主要な計算データは、第一原理自動計算データファイル `calculations.xml` にまとめている。また、計算データの一部は、結晶構造可視化アプリケーションや `Gnuplot` で可視化可能なデータフォーマットで出力している。

項目	データファイル	内容	備考
結晶構造	<code>[maid].cif</code>	ユーザーが用意した CIF File	元の CIF File の格子定数を更新 P1 構造の CIF File
	<code>[maid].relaxed.cif</code>	構造最適化後の CIF File	
	<code>[maid].relaxed.p1cif</code>	構造最適化後の CIF File (P1)	
自動計算データ	<code>calculations.xml</code>	第一原理自動計算データファイル	
	<code>calculations.txt</code>	計算データの一部を出力	
Brillouin Zone		Brillouin Zone + k 点 Path	
	<code>[matid].bz.plt</code>	Gnuplot スクリプト	
	<code>[matid].bz.spt</code>	Jmol スクリプト	
Charge Density	<code>[matid].charge.cube</code>	Gaussian Cube Format	VESTA, Jmol, XCrysDen 等で可視化
DOS	<code>dos.plt</code>	Gnuplot スクリプト	チェック用の簡易表示
	<code>dos.dat</code>		
	<code>band.plt</code>	Gnuplot スクリプト	チェック用の簡易表示
	<code>band.dat</code>		

3.5.2 第一原理自動計算データファイル calculations.xml

主要な計算データは、第一原理自動計算データファイル **calculations.xml** にまとめている。
データファイル **calculations.xml** の構成(階層構造、タグ、属性)を以下に示す。

データファイル **calculations.xml** の構成

Tag 1	Tag 2	Tag 3	Tag 4	Tag 5	Tag 6	Tag 7	
calculations							
	materials	material_id chemical_formula crystal_system spacegroup spacegroup_no cif					
	structure [@name=initial]						初期構造
		lattice [@name=conventional]	a, b, c alpha,beta,gamma a1,a2,a3				Cell length Cell Angle Lat vector
		lattice [@name=primitive]	a, b, c alpha,beta,gamma a1,a2,a3				
		atom	i[@name=name]				coordinate
	structure [@name=relaxed]						構造最適化構造 (SCF 計算の構造)
	calculation [@name=task]						Task の計算データ
		inputs	i[@name=value]				
		kpoint[@type=kmesh]					nkx nky nkz
		kpoint[@type=kpath]	i[@name=KP]				kx ky kz
		property	i[@name=prop.@unit]				
			dos	spin	i		DOS ene dos
			pdos	atom	spin	i	PDOS ene pdos
			band	spin	kpoint	i	Band Struc ene occ

データファイル **calculations.xml** の出力例

```
<?xml version="1.0"?>
<calculations>
  <material>
    <material_id>4295272247</material_id>
    <chemical_formula>Si</chemical_formula>
    <crystal_system>cubic</crystal_system>
    <spacegroup>Fd-3m</spacegroup>
    <spacegroup_no>227</spacegroup_no>
    <cif>4295272247-1-2.cif</cif>
  </material>
  <structure name="original">
    <lattice type="conventional">
      <a>5.429</a>
```

```

    <b>5.429</b>
    <c>5.429</c>
    <alpha>90.0</alpha>
    <beta>90.0</beta>
    <gamma>90.0</gamma>
  </lattice>
  <lattice type="conventional">
    <a1>5.429 0.0 0.0</a1>
    <a2>0.0 5.429 0.0</a2>
    <a3>0.0 0.0 5.429</a3>
  </lattice>
  <lattice type="primitive">
    <a1>0.0 2.7145 2.7145</a1>
    <a2>2.7145 0.0 2.7145</a2>
    <a3>2.7145 2.7145 0.0</a3>
  </lattice>
</lattice>
<atom>
  <i name="Si"> 0.12500 0.12500 0.12500</i>
  <i name="Si"> 0.87500 0.87500 0.87500</i>
</atom>
</structure>
<structure name="relaxed">
  <lattice type="conventional">
    <a>5.4688472</a>
    <b>5.4688472</b>
    <c>5.4688472</c>
    <alpha>90.0</alpha>
    <beta>90.0</beta>
    <gamma>90.0</gamma>
  </lattice>
  <lattice type="conventional">
    <a1>5.4688472 0.0 0.0</a1>
    <a2>0.0 5.4688472 0.0</a2>
    <a3>0.0 0.0 5.4688472</a3>
  </lattice>
  <lattice type="primitive">
    <a1>0.0 2.7344236 2.7344236</a1>
    <a2>2.7344236 0.0 2.7344236</a2>
    <a3>2.7344236 2.7344236 0.0</a3>
  </lattice>
  <atom>
    <i name="Si">0.12500000 0.12500000 0.12500000</i>
    <i name="Si">0.87500000 0.87500000 0.87500000</i>
  </atom>
</structure>
<calculation name="check_spin">
...
<calculation name="opt1">

```

```

...
<calculation name="opt2">
...
<calculation name="scf">
  <inputs>
    <i name="_calc_dir">scf</i>
    <i name="_structure">opt2</i>
    <i name="_input">default</i>
    <i name="npar">1</i>
    <i name="system"/>
    <i name="istart">0</i>
    <i name="prec">high</i>
    <i name="encut">550</i>
    <i name="algo">fast</i>
    <i name="ediff">1E-6</i>
    <i name="nelm">100 # default 60</i>
    <i name="ispin"/>
    <i name="nbands"/>
    <i name="ismear">-5</i>
    <i name="sigma">0.1 # default 0.2</i>
    <i name="isym"/>
    <i name="nelmin">8</i>
    <i name="laechg">.TRUE.</i>
  </inputs>
  <structure name="initial">
    <lattice type="primitive">
      <a1>0.00000000 2.73442360 2.73442360</a1>
      <a2>2.73442360 0.00000000 2.73442360</a2>
      <a3>2.73442360 2.73442360 0.00000000</a3>
    </lattice>
    <atom>
      <i name="Si">0.12500000 0.12500000 0.12500000</i>
      <i name="Si">0.87500000 0.87500000 0.87500000</i>
    </atom>
  </structure>
  <structure name="final">
    <lattice type="primitive">
      <a1>0.00000000 2.73442360 2.73442360</a1>
      <a2>2.73442360 0.00000000 2.73442360</a2>
      <a3>2.73442360 2.73442360 0.00000000</a3>
    </lattice>
    <atom>
      <i name="Si">0.12500000 0.12500000 0.12500000</i>
      <i name="Si">0.87500000 0.87500000 0.87500000</i>
    </atom>
  </structure>
  <kpoints type="kmesh">10 10 10</kpoints>
  <parameters>
    <i name="ispin">1</i>

```

```

    <i name="nbands">10</i>
    <i name="nselect">8.00000000</i>
    <i name="nkpoints">47</i>
    <kpoints>
    </kpoints>
  </parameters>
  <properties>
    <i name="etotal" unit="eV">-10.84921592</i>
    <i name="etotal_per_atom" unit="eV/atom">-5.42460796</i>
    <i name="efermi" unit="eV">5.65437076</i>
  </properties>
</calculation>
<calculation name="dos">
  <inputs>
...
  <properties>
    <i name="etotal" unit="eV">-10.84994683</i>
    <i name="etotal_per_atom" unit="eV/atom">-5.424973415</i>
    <i name="efermi" unit="eV">5.62480381</i>
    <dos>
      <spin spin="1">
        <i>-14.0000 0.0000 0.0000</i>
        <i>-13.9844 0.0000 0.0000</i>
        <i>-13.9688 0.0000 0.0000</i>
        <i>-13.9532 0.0000 0.0000</i>
...
      <pdos>
        <i name="value">energy s py pz px dxy dyz dz2 dxz dx2</i>
        <atom atom="">
          <spin spin="1">
            <i> -14.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 </i>
            <i> -13.9844 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 </i>
            <i> -13.9688 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 </i>
            <i> -13.9532 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 </i>
            <i> -13.9376 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 </i>
...
          <i name="bandgap_type">indirect</i>
          <i name="bandgap" unit="eV">0.618</i>
        <band>
          <spin spin="1">
            <kpoint kpoint="1">
              <i>-6.1986 1.0000</i>
              <i>5.6156 1.0000</i>
              <i>5.6156 1.0000</i>
...
            </kpoint>
          </spin>
        </band>
      </pdos>
    </dos>
  </inputs>
</calculation name="band">
  <inputs>
...

```

```

<kpoints type="kpath">
  <i name="Gamma"> 0.00000 0.00000 0.00000</i>
  <i> 0.00000 0.02174 0.02174</i>
  <i> 0.00000 0.04348 0.04348</i>
  <i> 0.00000 0.06522 0.06522</i>
  <i> 0.00000 0.08696 0.08696</i>
...
<properties>
  <i name="etotal" unit="eV">-7.97993391</i>
  <i name="etotal_per_atom" unit="eV/atom">-3.989966955</i>
  <i name="efermi" unit="eV">5.74667513</i>
<band>
  <spin spin="1">
    <kpoint kpoint="1">
      <i>-6.1986 1.0000</i>
      <i>5.6156 0.9434</i>
      <i>5.6156 0.9433</i>
      <i>5.6156 0.9433</i>
      <i>8.1724 -0.0000</i>
      <i>8.1724 -0.0000</i>
      <i>8.1724 -0.0000</i>
      <i>8.7488 -0.0000</i>
      <i>13.3247 0.0000</i>
      <i>13.4902 0.0000</i>
...
    </kpoint>
  </spin>
</band>
</properties>
</calculation>
</calculations>

```

4. プログラムの詳細

4.1 プログラム構造

第一原理自動計算プログラムは、Python プログラム群で構成されている。第一原理自動計算プログラム構造の概要を以下に示す。

Install Directory	Subdirectory	Pythhon Program	
toast/calc		ac-setup.py	複数の結晶構造の第一原理自動計算
		ac-update.py	複数の結晶構造の第一原理自動計算 (ジョブ状況更新/追加投入)
		ac-calc.py	計算シナリオに基づく第一原理計算
		ac-summary.py	計算データリスト出力
		ac-stat.py	計算状況出力
	calculation	autocalc.py	複数の結晶構造の第一原理自動計算クラス
		calc.py	計算シナリオに基づく第一原理計算クラス
		calculator.py	第一原理計算プログラムの処理の Abstract クラス
		vasp.py	VASP 用処理クラス
		esprssso.py	QE 用処理クラス
		abinit.py	ABINIT 用処理クラス
	structure	crystal.py	結晶構造解析クラス
	jobmanage	job.py	ジョブ実行処理クラス
toast/config			設定ファイル
	job_template		ジョブスクリプト テンプレート

4.2 主要クラス、関数

4.2.1 calculation./autocalc.py

複数の結晶構造の第一原理自動計算クラス

Class	Function	
autocalc	calculate	複数の結晶構造の第一原理自動計算
	calc_prep	自動計算の前処理
	calc	自動計算の実行
	caldata	計算データリストの出力
	calstat	計算状況の出力

4.2.2 calculation./calc.py

計算シナリオに基づく第一原理計算クラス

Class	Function	
calc	calculate	計算シナリオに基づく第一原理計算
	read_config	計算シナリオ設定ファイルの読み込み
	structure	ユニットセルの生成
	calc_prep	前処理
	write_parameter	第一原理自動計算データファイル calculations.xml の生成
	calc_task	各タスクの実行
	calc_post	後処理、計算結果解析 自動計算データファイル calculations.xml の更新
	kpoints	K 点メッシュの計算
	ispin	スピン判定
	execute	第一原理計算プログラムの実行
	calstat	計算状況の出力

4.2.3 calculation./calculator.py

第一原理計算プログラムの処理の Abstract クラス

Class	Function	
calculator	calc	計算シナリオに基づく第一原理計算
	potentials	擬ポテンシャルファイルの生成、コピー
	inputs	入力データの生成
	nbands	バンド数の計算
	structure	CIF File または他の Task の計算結果から結晶構造、原子座標の生成
	mag	スピン判定のための magnetization の抽出
	efermi	DOS 計算の Emin, Emax のための Fermi Energy の抽出
	results	計算結果データの抽出 自動計算データファイル calculations.xml の更新
	calstat	計算状況の出力

4.2.4 calculation./vasp.py

VASP 用処理クラス

Class	Function	
calculator	calc	計算シナリオに基づく第一原理計算
	potentials	擬ポテンシャルファイルの生成、コピー
	inputs	入力データの生成
	nbands	バンド数の計算
	structure	CIF File または他の Task の計算結果から結晶構造、原子座標の生成
	mag	スピン判定のための magnetization の抽出
	efermi	DOS 計算の Emin,Emax のための Fermi Energy の抽出
	results	計算結果データの抽出 自動計算データファイル calculations.xml の更新
	calstat	計算状況の出力

4.2.5 calculation./espresso.py

Quantum ESPRESSO 用処理クラス

Class	Function	
calculator	calc	計算シナリオに基づく第一原理計算
	potentials	擬ポテンシャルファイルの生成、コピー
	inputs	入力データの生成
	nbands	バンド数の計算
	structure	CIF File または他の Task の計算結果から結晶構造、原子座標の生成
	mag	スピン判定のための magnetization の抽出
	efermi	DOS 計算の Emin,Emax のための Fermi Energy の抽出
	results	計算結果データの抽出 自動計算データファイル calculations.xml の更新
	calstat	計算状況の出力

4.2.6 calculation./abinit.py

ABINIT 用処理クラス

Class	Function	
calculator	calc	計算シナリオに基づく第一原理計算
	potentials	擬ポテンシャルファイルの生成、コピー
	inputs	入力データの生成
	nbands	バンド数の計算
	structure	CIF File または他の Task の計算結果から結晶構造、原子座標の生成
	mag	スピン判定のための magnetization の抽出
	efermi	DOS 計算の Emin,Emax のための Fermi Energy の抽出
	results	計算結果データの抽出 自動計算データファイル calculations.xml の更新
	calstat	計算状況の出力

4.2.7 structure/crystal.py

結晶構造解析クラス

Class	Function	
calculator	loadCIF	CIF File の読み込み
	checkCIF	CIF File のチェック
	convertCIF2VASP	セル (Conventional Cell, Primitive Cell) , 原子の相対座標の計算
	saveKPoints	バンド計算用の k 点経路の計算
	saveBrillouin	Brillouin Zone の可視化スクリプトの出力
	printLog	ログ出力

4.2.8 jobmanage/job.py

ジョブ実行処理クラス

Class	Function	
job	read_config	ジョブ実行設定ファイルの読み込み
	jobscript	ジョブ実行スクリプトの生成
	jobscript_interactive	Interactive 計算用の実行スクリプトの生成
	jobscript_template	ジョブ管理システムのジョブスクリプトのテンプレートをを用いたジョブスクリプトの生成

4.2.9 calculation/calprop.py

計算結果解析

Class	Function	
	cellparameter	Cell Parameter の計算
	bandgap	Bandgap の計算
	fermisurf	フェルミ面可視化データの生成
	dosplot	DOS プロットデータの生成
	pdosplot	PDOS プロットデータの生成
	bandplot	バンド構造プロットデータの生成
	caldat	計算データの出力

4.2.10 calculation/calvis.py

可視化データ

Class	Function	
	visdata	可視化データの生成

4.2.11 calculation/metadata.py

計算メタデータ

Class	Function	
	datasheet	データシートの生成
	materialrecord	計算メタデータの生成
	materialrecord_dataset	計算データセット (ZIP ファイル) の生成

