

チュートリアル "FPMS プログラムの実例計算"

2019/10/04 13:30~17:30 @KEK つくばキャンパス

担当者：富山大学大学院理工学研究部（理学） 畑田 圭介

hatada@sci.u-toyama.ac.jp

[概要]

フルポテンシャル多重散乱理論（**Full-Potential Multiple Scattering theory : FPMS theory**）は、FEFFなどの多重乱計算プログラム内で用いられている”マフィンティン近似”を用いず、ポテンシャルを厳密に取り扱う理論です。ポテンシャルに対する近似が除かれるため、計算精度の向上が期待されます。

計算プログラム“FPMS”は、フルポテンシャル多重散乱理論によって X 線吸収スペクトル（XANES, XAFS）を計算するためのプログラムです。本チュートリアルでは、フルポテンシャル多重散乱理論を解説した後、“FPMS”の実例紹介と実習を行います。

[参加費]

無料

[推奨環境]

- ・参加される方は PC をご持参ください。
- ・推奨環境は、CPU: 64bit, OS: Linux, Mac OS ですが、Windows でも参加可能です。
- ・計算プログラムは、当日に指定したサイトからダウンロードしていただきますので、インターネット接続が必要です（会場には Wifi がございます）。
- ・計算結果のプロットを行いますので、プロットソフトをご用意ください。推奨ソフトは Gnuplot です。（使用方法については、当日にサポート可能です。）その他、Excel 等も可能です。
- ・並列計算の実習には、PGI コンパイラ（無償）(<https://www.pgroup.com/products/community.htm>)のインストールが必要です。事前にインストールされていますと、実習がスムーズに進みます。

[計画]

- ・本チュートリアルは、以下の計画に従って行います。
- ・実習の進行状況により、時間は前後する場合があります。

時刻	内容
13:30~14:20	「フルポテンシャル多重散乱理論と”FPMS”を用いた計算例（仮題）」 ・ EXAFS の原理とフルポテンシャル多重散乱理論、計算プログラム”FPMS”を用いた計算の実例と解析方法をご説明いたします。 ・ 質疑応答の時間を 5 分~10 分設ける予定です。

	講師：富山大学 畑田圭介
休憩 20 分	
14:40~16:00	<p>実習① “FPMS”のインストールとインプットファイルの作成</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ ご持参いただいた PC に”FPMS”プログラムのインストールを行います。 ・ 計算に必要なインプットファイルを作成しながら、各種パラメータの説明をいたします。 ・ 四塩化ゲルマニウムの Ge K-edge を例に、マフィンティン近似の場合とフルポテンシャル法の場合について、XANES 計算を行う予定です。 ・ 講師の他に、補助の者が数名巡回し、質問にお答えします。 <p>講師：富山大学 畑田圭介</p>
休憩 20 分	
16:20~17:30	<p>実習② X線吸収スペクトル計算とプロット作成</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 作成したインプットファイルを使い、計算を行います。 ・ 本チュートリアルでは、計算したデータをプロットし、X線吸収スペクトルを得るところまでを行う予定です。 ・ 講師の他に、補助の者が数名巡回し、質問にお答えします。 <p>講師：富山大学 畑田圭介</p>

[参考資料]

日本 XAFS 研究会編、「XAFS の基礎と応用」、講談社、2017 年。