

Información técnica sobre xeoBabel

Nombre del programa

xeoBabel (version 1.0)

Autor

Daniel González Trabada: dgtrabada@yahoo.com

Breve descripción del programa

El programa xeoBabel es capaz de leer y escribir los archivos de entrada de diferentes programas de física-química cuántica. Así como, pasar de un formato a otro.

Actualmente con xeoBabel podemos leer y escribir completamente los formatos de bas, fireball, fireball_TG, xyz y xeo

En el caso de castep podemos leer y escribir las opciones en forma POSITIONS_ABS y los vectores de red como LATTICE_CART.

El caso de vasp y abinit están actualmente en desarrollo.

Las tres ventajas principales del programa son las siguientes:

1. **Es muy fácil incluir nuevos formatos**, simplemente tendremos que escribir en una clase los métodos read y write. El método read sería el encargado de leer los archivos en el formato que nosotros queramos y devuelve una cadena de caracteres con el formato xeo. Para escribir los archivos tendremos que hacer el método write, éste a partir del formato xeo escribe los archivos en el formato que nosotros preparemos. Una vez terminada esta clase tendremos que añadir un par de líneas como dejamos indicado en la ayuda y ya tendremos un nuevo formato añadido al proyecto, desde este momento podemos pasarlo a cualquiera de los formatos antes mencionados.

2. **Está escrito en java**, esto hace que no necesite ninguna instalación, que corra en cualquier sistema operativo que tenga la maquina virtual de java instalada y que pueda ser utilizado como librería en cualquier otro proyecto. Para esto último lo único que tenemos que hacer es añadir como librería xeoBabel.jar y utilizar los métodos read and write.
3. **Se distribuye bajo la licencia GPL "General Public License"**, lo que hace que sea un software libre y podamos copiarlo, cambiarlo y redistribuirlo bajo los términos de esta licencia.

Lenguaje de programación y dependencias

El programa está escrito en java, lenguaje interpretado y multiplataforma. El código java es compilado en bytecode de java, y compactado en un archivo jar que contiene todo el código del programa. El programa depende únicamente de las librerías estándar de java y utiliza características de la versión:

java versión "1.5.0_04"

Java(TM) 2 Runtime Environment, Standard Edition (build 1.5.0_04-b05)

Java HotSpot(TM) Client VM (build 1.5.0_04-b05, mixed mode, sharin

Entorno operativo

El programa puede ejecutarse en cualquier sistema que disponga de una máquina virtual de java completa. La lista de plataformas posibles incluye PC's compatibles con un sistema operativo POSIX basado en Linux, BSD, Solaris o Mac OS X, o de la familia Windows, pero también puede eventualmente incluir PDAs y dispositivos de otro tipo.

El programa se puede ejecutar escribiendo en línea de comandos

“java -jar xeoBabel.jar” de forma general. Para el caso de utilizar GNU-Linux podemos también ejecutar el script “./xeoBabel” y podemos introducir en el PATH de nuestro sistema, de tal forma que todos los usuarios tengan el programa instalado.

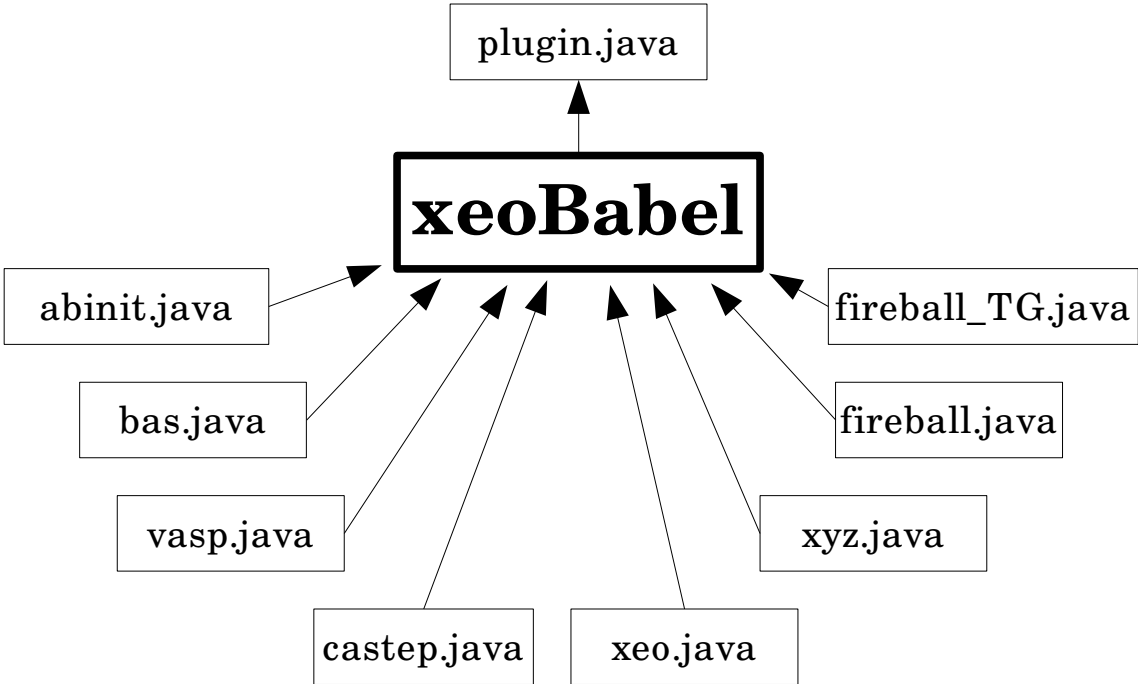
Listado de Ficheros

- **xeoBabel.java** : clase principal, gracias a ella podemos utilizar xeoBabel en línea de comandos.
- **plugin.java** : Esta clase es la responsable de la comunicación con xeo, o cualquier otro programa. Utiliza dos métodos read y write, read lee los diferentes formatos y devuelve los archivos leídos en un formato de “xeo”. El otro método importante es write, este método a partir del formato xeo escribirá los archivos en el formato que corresponda.
- **format.java** : en esta clase separamos los Strings por columnas, por líneas, por muchos tipos de variables primitivas, como por ejemplo (double, String, int). Emulamos la salida en formato de Fortran ...
- **periodicTable.java** : Tabla periódica de los elementos, aquí encontramos los valores para el radio covalente, el color, ..., hemos tomado los mismos valores de JMOL.

Las siguientes clases se utilizan para leer y escribir los archivos en diferentes formatos:

- **abinit.java** : [//http://www.abinit.org/](http://www.abinit.org/)
- **bas.java** : [//http://www.fireball-dft.org/web/fireballHome](http://www.fireball-dft.org/web/fireballHome); <http://www.efireball>.
- **castep.java** : [//http://en.wikipedia.org/wiki/CASTEP](http://en.wikipedia.org/wiki/CASTEP)
- **fireball.java** : [//http://www.fireball-dft.org/web/fireballHome](http://www.fireball-dft.org/web/fireballHome); <http://www.efireball.cz/>
- **fireball_TG.java** : [//http://www.fireball-dft.org/web/fireballHome](http://www.fireball-dft.org/web/fireballHome); <http://www.efireball.cz/>
- **vasp.java** [//http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp](http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp)
- **xeo.java** [//https://sourceforge.net/projects/xeo/](https://sourceforge.net/projects/xeo/)
- **xyz.java** : http://en.wikipedia.org/wiki/XYZ_file_format

Diagrama de flujo



Formato interno de xeoBabel:

10

```
Si    0.0000   -1.5419    7.9376    0 0 0
C     1.5733   -1.5706    6.8144    0 0 0
Si    1.5733    0.0038    5.6689    0 0 0
C     0.0000    0.0003    4.5251    0 0 0
Si    0.0000   -1.5730    3.3931    0 0 0
C     1.5733   -1.5732    2.2437    0 0 0
Si    1.5733    0.0000    1.1125    1 1 1
C     0.0000    0.0000    0.0000    1 1 1
H     0.0000   -0.8394   -0.6927    1 1 1
H     0.0000    0.8394   -0.6927    1 1 1
3.146  0.000    0.000
0.000  3.146    0.000
0.000  0.000   99.000
```



symbol of the elements

