

可視化 GUI ソフトウェア TAPIOCA



プログラム説明書

2015 年 3 月 13 日

----- 目次 -----

電子状態計算プログラム xTAPP 支援ソフトウェア	1
ソフトウェアの概要	1
計算プログラムの設定ファイルの系の三次元グラフィックス&GUIによる調整	2
計算プログラムの設定ファイルの各種パラメタの GUI による調整	2
計算プログラムの設定ファイルの保存と計算の実行	3
計算プログラムの計算結果の三次元グラフィックスによる可視化	3
結晶データの作成方法	4
単位胞の基本形状の選択	4
原子の基本配置の選択	6
単位胞の空間群の選択	6
描画画面の操作	8
単位胞の原子座標の調整	9
結晶データの保存・再読み込み	12
ファイルの入出力の概要	13
ファイルの種類	13
分子構造データの読み込み	14
計算プログラムの計算設定データの読み込み/書き出し	14
三次元フィールドデータの読み込み/書き出し	15
バンドデータの読み込み/書き出し	15
計算プログラムの計算設定パラメタの調整	16
xTAPP の設定パラメタの調整	16
バンド図 K 点経路の調整	21
グラフィックスの調整方法	25
グラフィックス調整ウィンドウ	25
Lattice タブ 結晶の表示方法の調整	26
Field タブ 三次元フィールドデータの表示方法の調整	28
Periodicity タブ 周期的表示に関する調整	32
Miscellaneous タブ その他のグラフィックスの表示方法の調整	34
バンド図の表示方法の調整	35
状態密度図の表示方法の調整	36
ソースファイルの概要	37
コンパイル環境の準備	37
ソースファイル構成	38
計算プログラムの規定値の変更	40
グラフィックスの規定色の変更	41

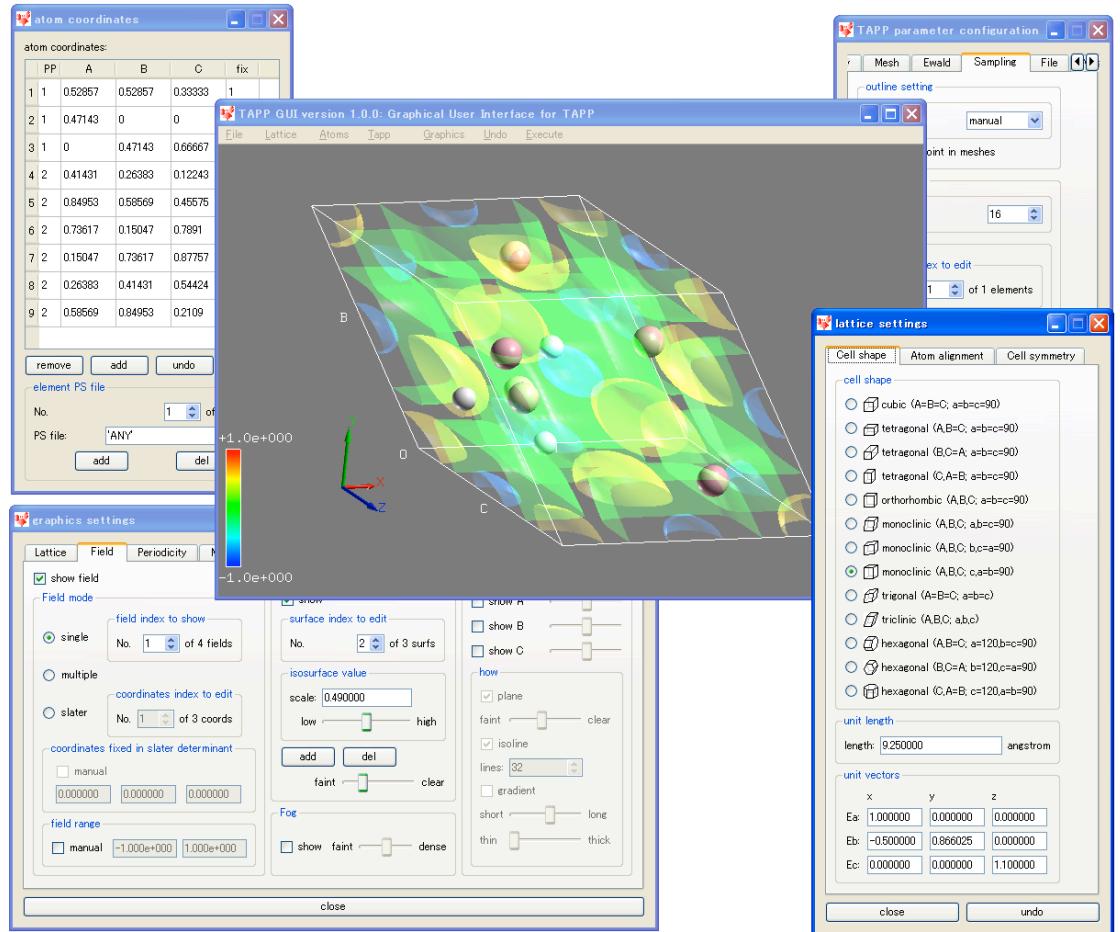
電子状態計算プログラム xTAPP 支援ソフトウェア

本ソフトウェア TAPIOCA はウルトラソフト擬ポテンシャル電子状態計算プログラム xTAPP による電子状態計算を視覚的容易に行えるようにするための支援ソフトウェアです。

本ソフトウェアの専用のグラフィカルユーザーインターフェース(GUI)と3次元コンピュータグラフィックス(3DCG)によって、これらの電子状態計算プログラムの計算内容の設定や計算結果の確認が簡単に行えます。

ソフトウェアの概要

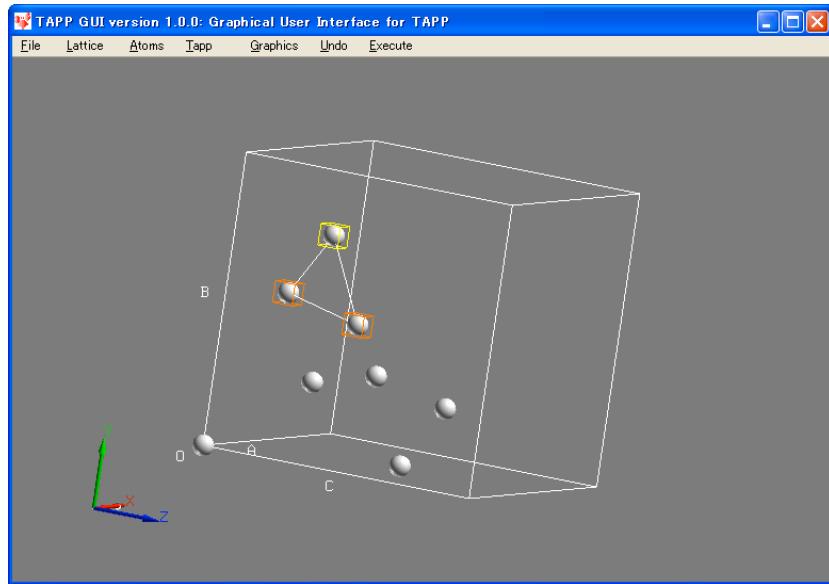
本ソフトウェアの概観は系の原子配置や電子状態を三次元グラフィックスで表示する描画画面と、さまざまな計算パラメタを調整する多数の設定ウィンドウから成ります。



本ソフトウェアを構成する各種ウィンドウの例

計算プログラムの設定ファイルの系の三次元グラフィックス&GUIによる調整

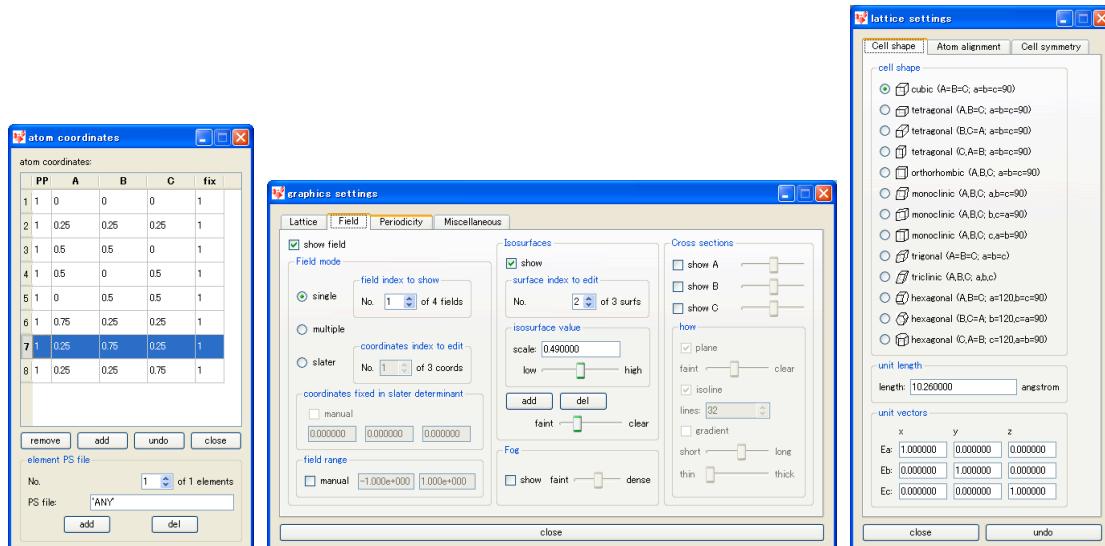
本ソフトウェアでは計算プログラムの設定ファイルに記されている系の原子配置を下図のように三次元グラフィックスで確認しながら GUI で調整することができます。



分子の空間配置の調整画面

計算プログラムの設定ファイルの各種パラメタの GUI による調整

本ソフトウェアでは計算プログラムの設定ファイルの各種パラメタを GUI で調整できます。パラメタは数値で直接指定することもできますが、スライダーによって大まかな強弱で指定することもできます。調整が必要なパラメタと通常は調整の必要の無いパラメタは別々に表示されるため、利用者は最小限の知識で計算プログラムの設定パラメタを調整することができます。



各種設定パラメタの調整画面

計算プログラムの設定ファイルの保存と計算の実行

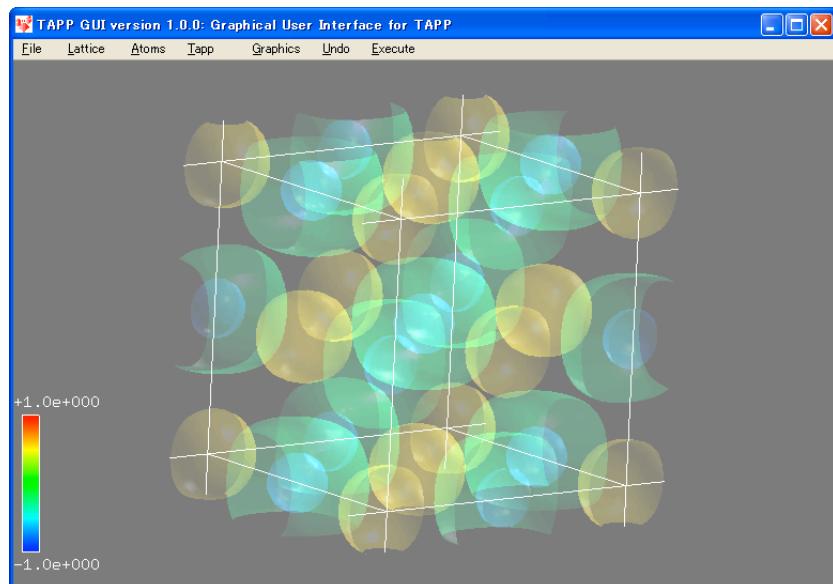
本ソフトウェアでは調整した分子の配置や各種設定パラメタを下図のような計算プログラムの設定ファイルに保存します。利用者はこの設定ファイルを計算プログラムに指定することで、設定した内容の計算を行えます。

```
#CGM-3.0
0 0 1 0 0 0 0
'LDAPZ81' 1 0 0 0
10.260
0.500 0.500 0.000
0.500 0.000 0.500
0.000 0.500 0.500
24 1 1 1
1 0 0 0 1 0 0 0 1
0 1 0 0 0 1 1 0 0
0 0 1 1 0 0 0 1 0
1 0 0 0 0 1 0 1 0
0 0 1 0 1 0 1 0 0
0 1 0 1 0 0 0 0 1
```

生成する計算プログラム用設定ファイルの例(抜粋)

計算プログラムの計算結果の三次元グラフィックスによる可視化

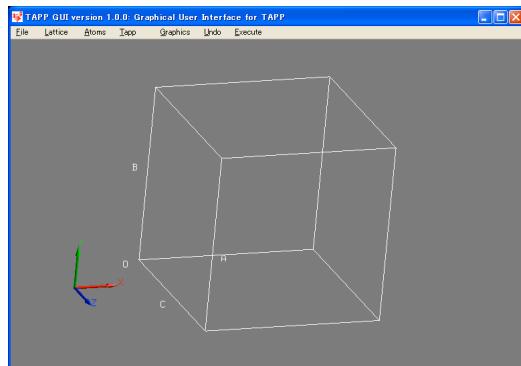
本ソフトウェアでは、計算結果の電子密度分布やポテンシャル分布、波動関数の分布などの三次元空間のフィールドを下図のように三次元グラフィックスで可視化できます。この可視化方法は GUI によって調整することができます。表示内容を BMP 形式の画像ファイルに保存することもできます。利用者は計算結果の定性的概要を視覚的に瞬時に把握することができます。



シミュレータの計算結果のポテンシャル分布の可視化画面

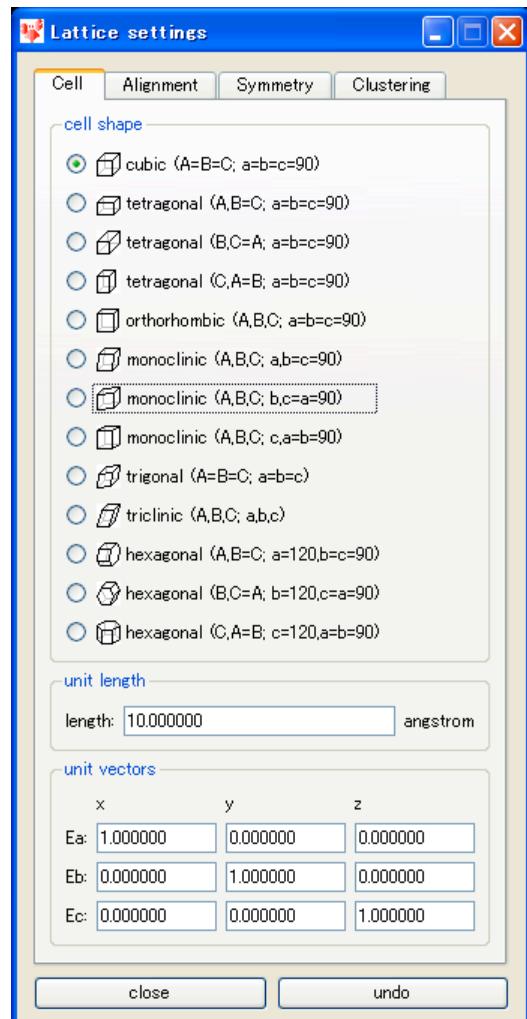
結晶データの作成方法

本ソフトウェアを用いて結晶データを作成する手順について紹介します。本ソフトウェアの起動時には描画画面には下図のように長さ 10Åの立方体の単位胞の枠のみが表示されています。



プログラム起動時の状態

単位胞の基本形状の選択



画面上部の Lattice メニューをクリックすると以下の Cell shape タブが開きます。

単位胞の形状を cell shape の中の 13 種類の基本形状から選択してください。選択すると描画画面の単位胞の枠が変化しますので形状を確認できます。

それぞれの基本形状について次頁に図示します。

次に unit length の欄に単位胞の基本単位長さをÅ 単位で指定してください。

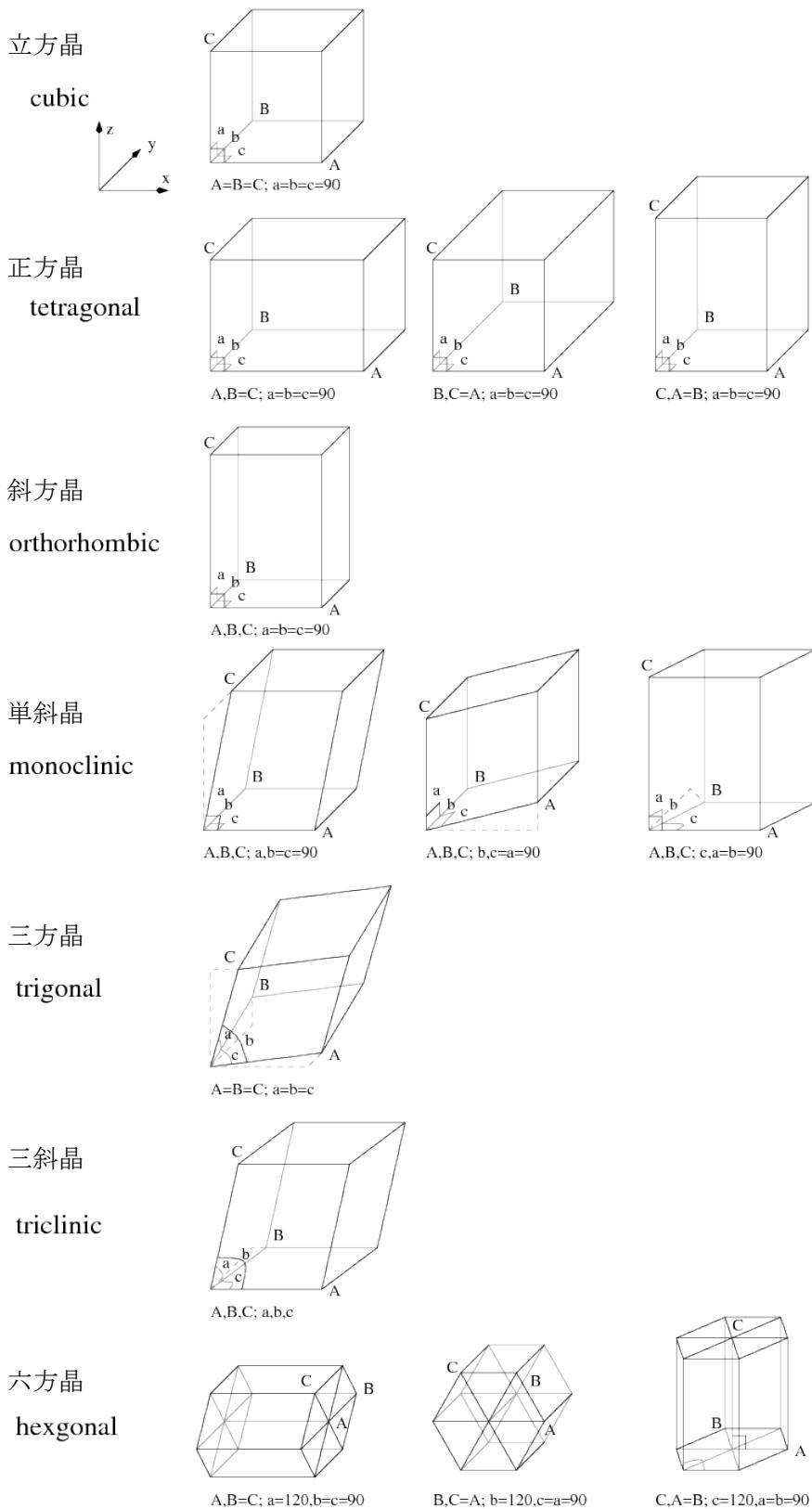
この unit length の長さを単位として 3 つの基本格子ベクトルの直交座標での成分(x,y,z 値)を unit vectors の欄にそれぞれ指定してください。

このタブで編集している単位胞の形状は随時画面に表示されます。元に戻したい場合はタブの下の undo ボタンで最初まで戻ることができます。

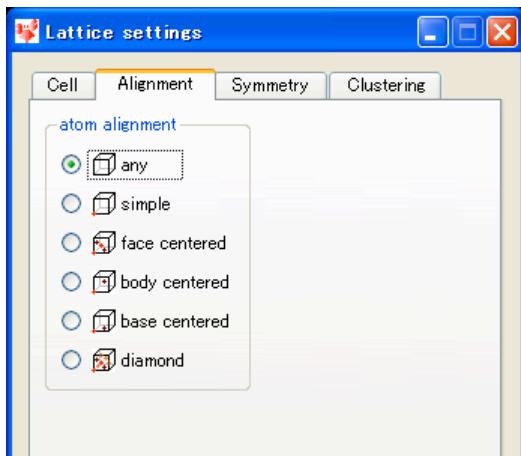
Unit vectors の値を編集すると、cell shape の選択が自動的に適切なものに更新されます。

Cell shape の選択を変更すると、unit vectors の値は初期値の既定値に戻ります。

7種類(軸の向きを含めて13種類)の単位胞の基本形状



原子の基本配置の選択

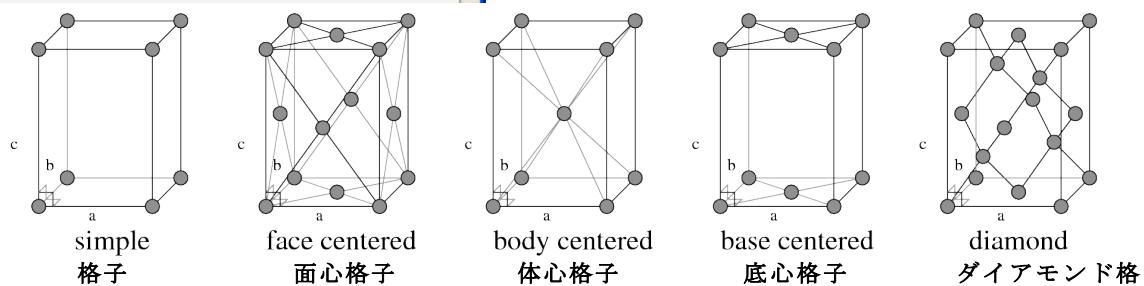


Cell shape タブの隣に Atom alignment タブがあります。クリックでタブを切り替えます。

単位胞内の原子の配置についてこの atom alignment の中から選択してください。

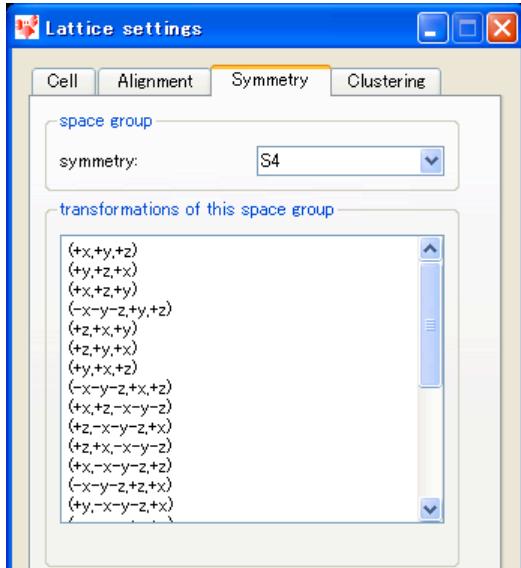
Any 以外の項目を選択すると、それぞれの配置での原子が表示されます。

基本配置とは異なる特殊な配置にする場合は Any を選択しておいて次に進んでください。



子

単位胞の空間群の選択



Atom alignment タブの隣に Cell symmetry タブがあります。クリックでタブを切り替えます。

Space group でこの単位胞の空間群を選択します。それぞれの空間群の変換操作が下側にリストされます。

空間群はデータベースファイル spacegroup.db に記載されたものから選択できます。このデータベースは現状では不足のため、次ページの手順でユーザーによるデータの追加が必要です。

以上で基本的な結晶構造が作成されました。続いて、より複雑な結晶構造を作るための操作について紹介します。

空間群データベースと変換操作の扱い

データベースファイル spacegroup.db には以下の形式で各空間群の変換操作の一覧が記載されています。この形式で空間群を追加することができます。

```
spacegroup_name: P1
spacegroup_number: 1
has_inversion: 0
number_operations: 1
each_operation:
  1 (+x, +y, +z)

spacegroup_name: Cmca
spacegroup_number: 64
has_inversion: 1
number_operations: 8
each_operation:
  1 (+x, +y, +z)
  2 (-x, -y, -z)
  3 (-x+1/2, -y+1/2, +z+1/2)
  4 (+x+1/2, +y+1/2, -z+1/2)
  5 (+y+1/2, +x+1/2, -z+1/2)
  6 (-y+1/2, -x+1/2, +z+1/2)
  7 (-y, -x, -z)
  8 (+y, +x, +z)

...
```

本ソフトウェアでは計算プログラムの設定データファイルを読み込む際に、データの空間群の変換操作に完全に一致する空間群をこのデータベースから検索します。

完全に一致する空間群がない場合はその旨が表示された後、Lattice/Cell Symmetry タブのリストに追加表示されます。ユーザーがテキストエディッタでこの空間群をこのデータベースファイルに追加することもできます。

対称操作による不動点(特殊点)の扱い

本ソフトウェアでは系の各原子は系の空間群の各対称操作でその座標が変換コピーされます。この際に変換後の座標が変換前と一致する原子には不動点(特殊点)であることとその変換操作が記録されます。特殊点の原子の座標を変更する場合は、その変換操作で座標が不变のままである方向にしか座標は変更できなくなります。つまり系の対称性が壊れない条件でしか原子の座標は変更できません。

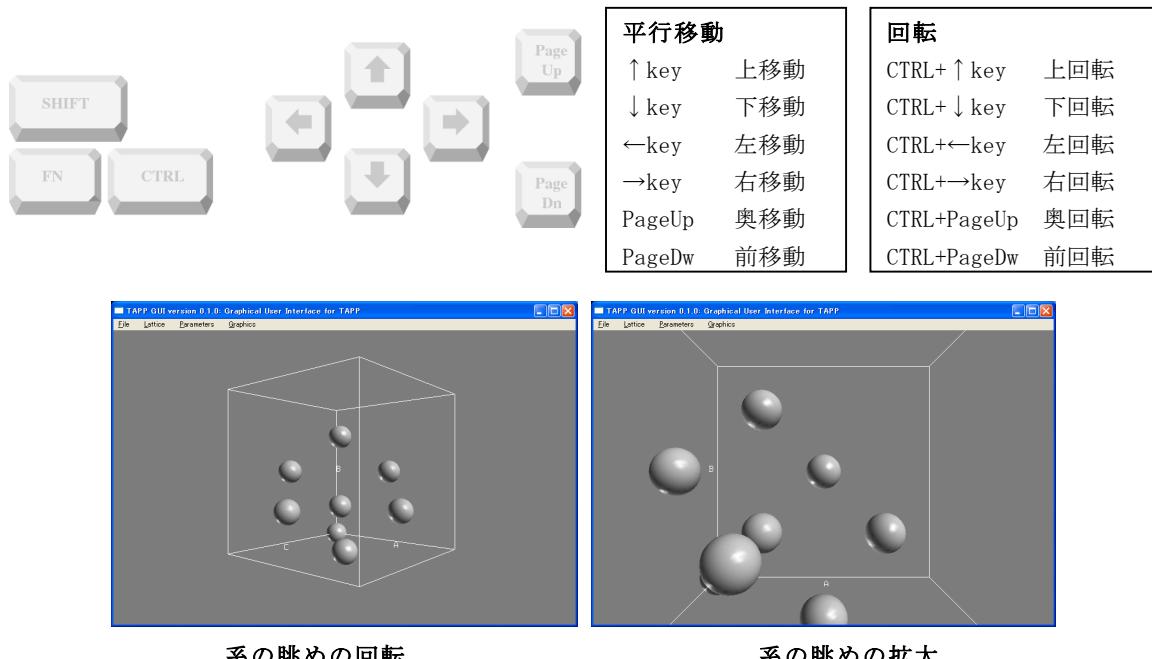
描画画面の操作

マウスとキーでの系の眺めの回転・拡大の操作

描画画面でマウスの左ボタンでドラッグすると、系の眺めを回転させることができます。

また、下図のようにキーボード操作でも系の眺めを回転させることができます。

さらに、眺めの拡大・縮小、上下左右の平行移動もできます。



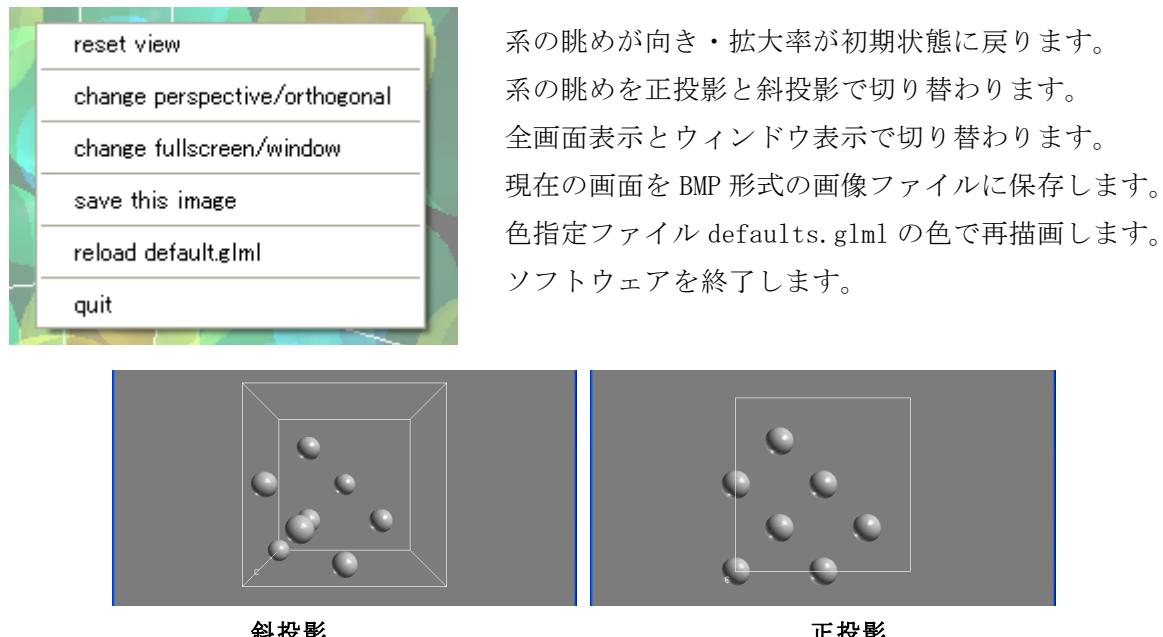
系の眺めの回転

系の眺めの拡大

原子が選択された状態でも、キーボードで回転・拡大の操作を行えます。

右クリックメニューでの操作

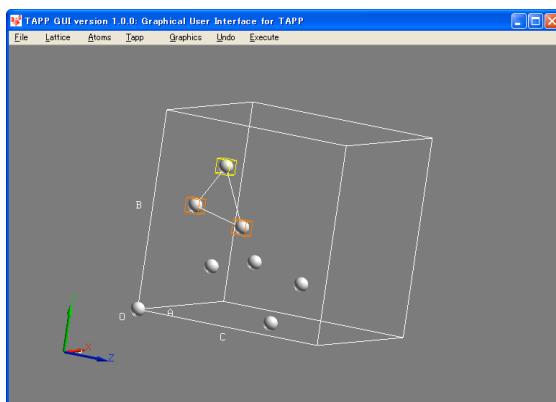
描画画面で右クリックすると下図の小さなメニューウィンドウが現れます。



単位胞の原子座標の調整

原子の選択

描画画面に表示されている原子の球をマウスの左ボタンでダブルクリックすると、その原子の周りに枠が現れ、この原子が選択された状態になります。同時に Atom settings ウィンドウが表示され、この画面に原子の座標などのリストが表示されます。



原子が選択された状態

atom coordinates:					
PP	A	B	C	mkd	
1 1	0.46463	8.15436e-18	0.666667	1	
2 1	0	0.46463	0.333333	1	
3 1	0.53537	0.53537	0	1	
4 2	0.409363	0.277515	0.776196	1	
5 2	0.722485	0.131848	0.442862	1	
6 2	0.868152	0.590637	0.109529	1	

原子のセル座標のリスト

選択原子の座標の操作

原子が選択された状態の描画画面でマウスの左ボタンでドラッグすると、選択された原子が移動し、同時に座標値も変更されます。

ただし、この系の変換操作のひとつがこの原子の位置を変えない場合は、その原子を移動しようとしてもその変換操作で位置が不变になる方向にしか移動できません。変換操作によっては全く移動できない場合もあり、その旨が表示されます。その条件を廃して移動する場合は Lattice/Cell Symmetry タブで系の空間群を変更してから、移動操作してください。



変換操作の不变条件のために移動できない表示

原子の移動はマウスの動きに連動して3つの格子ベクトルのいずれかの方向に移動されます。奥行き方向に移動する場合は系の眺めを変えてから移動してください。

選択を解除するにはその原子の上で再度ダブルクリックするか、原子のないところでダブルクリックしてください。

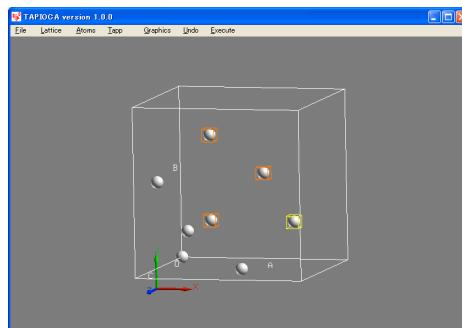
Atom settings ウィンドウのテーブルのセルからもセル座標値(A, B, C)を直接指定することができます。ただし変換操作で座標が不变な原子はその不变条件による制限があります。この他、各原子の擬ポテンシャル番号(PP)、(mkd)にて不動(0)・可動(1)の種別を指定できます。

複数原子の選択

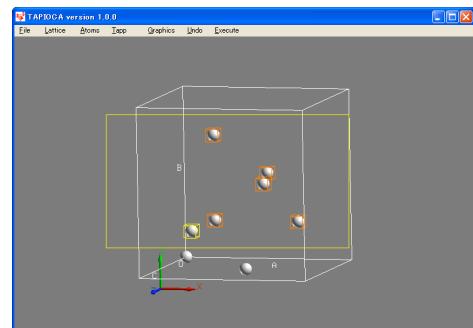
描画画面で Ctrl キーを押しながらマウスの左ボタンでダブルクリックすると、複数の原子を同時に選択することができます。また Shift キーを押しながらマウスの左ボタンでドラッグすると画面上のドラッグした長方形範囲内にある原子がすべて選択されます。選択されている原子を再度選択すると選択が解除されます。

Ctrl キーを押しながらマウスでドラッグすると、選択されている複数の原子が集団で平行移動します。

Ctrl キーを離してマウスでドラッグすると最後に選択された黄色い枠の原子のみが移動します。ただし、2 原子が選択されている場合、移動はその 2 原子の結合軸方向のみに制限され、3 原子が選択されている場合、移動はその 3 原子が成す平面内のみに制限されます。併せて移動中の原子間距離が画面に表示されます。4 原子以上が選択されている場合、自由に移動できます。ただし、どの移動でも対称操作で不变である条件がある場合は移動が制限されます。



Ctrl キーで複数の原子を選択



Shift キーで範囲内の複数の原子を選択

複数原子の座標の変更

Atom settings ウィンドウのテーブルでも Ctrl キーを押しながらセルを選択すると複数の原子を同時に選択できます。

また、Shift キーを押しながらセルを選択すると範囲内のすべての原子が同時に選択できます。

原子の削除・追加

Atom settings ウィンドウの remove ボタンをクリックすると、選択されている原子が削除されます。

また、add ボタンをクリックすると、選択されている原子と同じ原子が追加されます。追加原子は元の原子と同じ座標にあるので座標を変更してください。

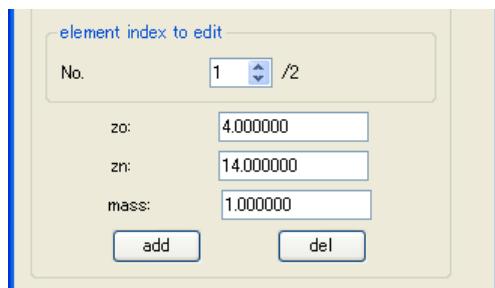
原子の操作は undo ボタンで最初の状態にまで戻せます。

atom coordinates:					
PP	A	B	C	fix	
1 1	0	0	0	1	
2 1	0.25	0.25	0.25	1	
3 1	0.5	0.5	0	1	
4 1	0.5	0	0.5	1	
5 1	0.616643	0.5	0.5	1	
6 1	0.75	0.25	0.25	1	
7 1	0.25	0.75	0.25	1	
8 1	0.25	0.25	0.75	1	

テーブルでの複数原子選択

元素の擬ポテンシャルの指定

Atom settings ウィンドウの PP 欄には擬ポテンシャル番号のみが表示されています。この擬ポテンシャル番号に対応する元素の価電子数・核電荷・質量はウィンドウの下側の操作パネルで指定します。原子の元素を変更して元素の種類を追加した際にはこの擬ポテンシャルも追加してください。



原子の擬ポテンシャル名の指定

基本セルから拡張セルの作成

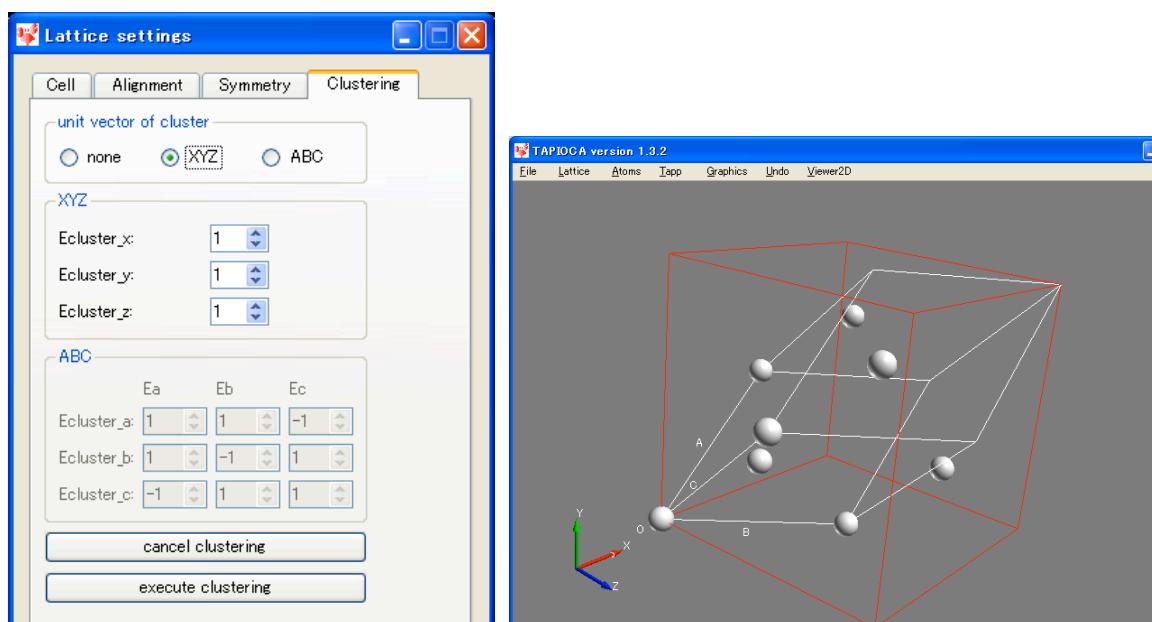
単位胞を周期的にならべて大きなクラスタを生成します。クラスタもまた大きな周期的な単位胞とします。そのためクラスタの単位ベクトルは次式のとおり単位胞の単位ベクトル ABC による格子点上になければなりません。ABC ベクトルに対する係数を GUI で指定します。

$$E_a^{\text{cluster}} = n_{aa} E_a^{\text{cell}} + n_{ab} E_b^{\text{cell}} + n_{ac} E_c^{\text{cell}}$$

$$E_b^{\text{cluster}} = n_{ba} E_a^{\text{cell}} + n_{bb} E_b^{\text{cell}} + n_{bc} E_c^{\text{cell}}$$

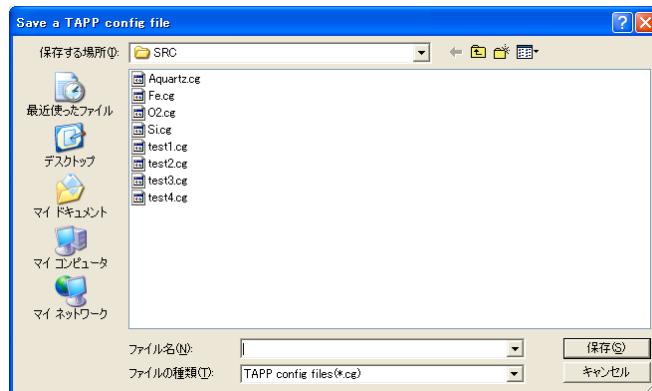
$$E_c^{\text{cluster}} = n_{ca} E_a^{\text{cell}} + n_{cb} E_b^{\text{cell}} + n_{cc} E_c^{\text{cell}}$$

この指定方法では単純な直方体のクラスタの生成が容易ではないので、lattice_factor(Å)を長さの単位としてクラスタの XYZ の各辺のサイズも指定できます。指定の長さに最も近い単位胞の単位ベクトルの格子点にクラスタの単位胞ベクトルが自動的に設定されます。



結晶データの保存・再読み込み

File メニューの save xTAPP input file で、作成した結晶データを TAPP 形式でファイルに保存できます。また、File メニューの load xTAPP input file でそのファイルを読み込んで再編集することができます。

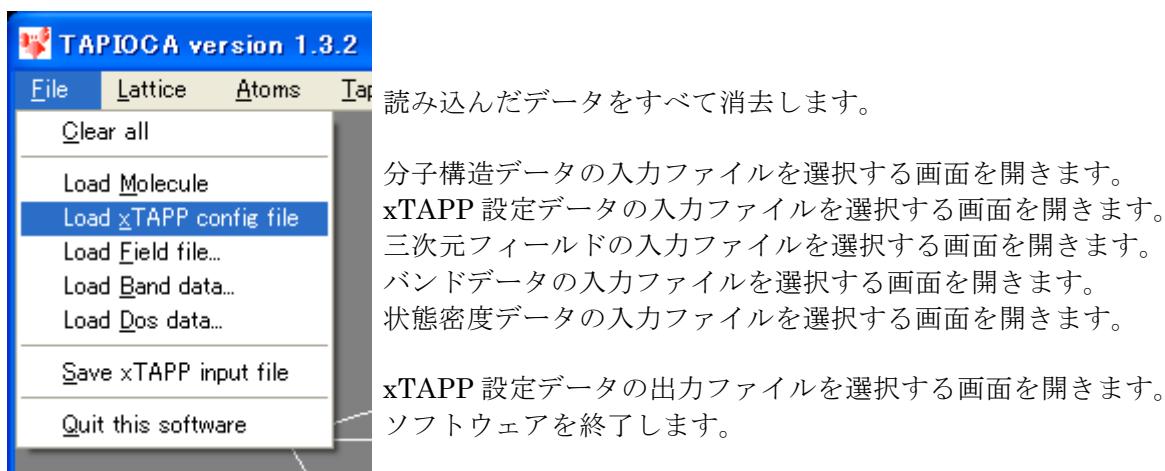


設定内容のファイルへの保存

ファイルの入出力の概要

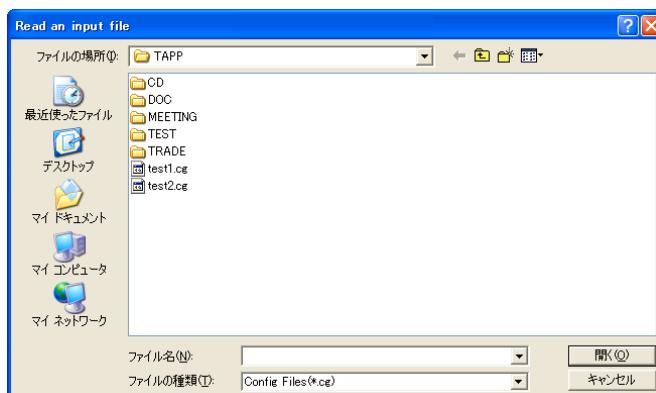
ファイルの種類

メニューバーの File をクリックすると下図のようなメニューが開きます。



ファイルの load メニューを選ぶと以下のようなファイル選択画面が開きます。

ファイルを選択すると、データが画面に表示されます。



読み込む入力ファイルを選択する画面

本ソフトウェアで入力できるファイルの種類は以下のとおりです。

分子構造データ	*.xyz (XYZ 形式) *.pdb (PDB 形式)
計算設定データ	*.cg (xTAPP 入力形式)
三次元フィールド	*.dx (OpenDX 形式) *.cube (Gaussian 形式) *.56 (TAPP3 出力形式)
バンドデータ	*.band (TAPP3 出力形式, xTAPP 出力形式)
状態密度データ	*.pdos (xTAPP 出力形式)

本ソフトウェアで出力できるファイルの種類は以下のとおりです。

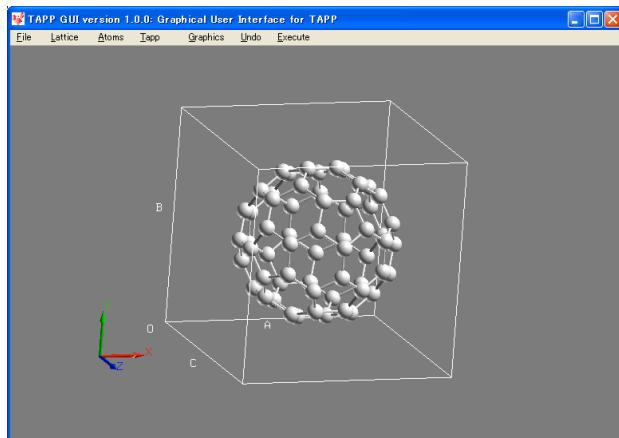
計算設定データ	*.cg (xTAPP 入力形式)
三次元描画画面	image???.bmp (Windows Bitmap 形式) (連番)
バンド図	*.bmp (Windows Bitmap 形式) *.eps (Encapsulated PostScript 形式)

分子構造データの読み込み

本ソフトウェアでは XYZ 形式と PDB 形式の一般的な分子構造ファイルを読み込んで編集できます。原子を個別に編集せずにまとまった原子団を一度に単位胞内に設置することができます。

読み込んだ原子の座標は系の基本格子ベクトルにもとづいてセル座標に変換されます。

単位胞が分子を含むのに十分な広さがないと原子の座標は周期的に折り返されたものとなりますので、分子ファイルを読み込む前に単位胞のサイズを適切に設定してください。



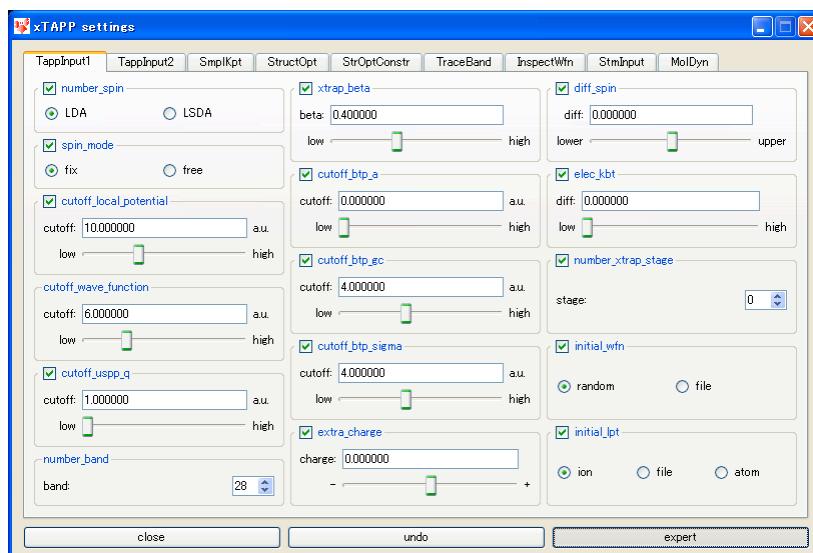
C60 分子の XYZ ファイルを読み込んだ様子

計算プログラムの計算設定データの読み込み/書き出し

本ソフトウェアでは xTAPP の設定データを読み込んで調整・可視化できます。

計算設定データに含まれる単位胞の形状、原子の配置、対称性も読み込まれ、その単位胞の様子が描画画面に表示されます。その他の計算条件のパラメタもすべて GUI で調整できます。パラメタの調整法については後述します。

調整した計算設定データは TAPP の設定データの形式でファイルに保存できます。

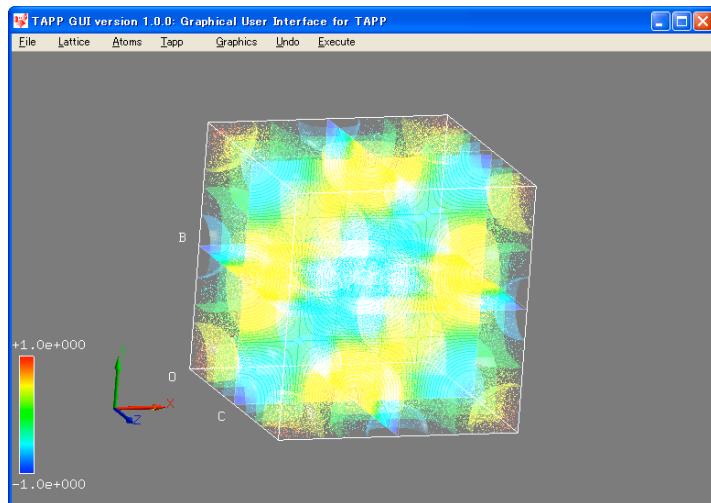


xTAPP 設定パラメタ用のさまざまな GUI タブ

三次元フィールドデータの読み込み/書き出し

本ソフトウェアでは xTAPP の出力形式の OpenDX 形式、Gaussian の Cube 形式、そして TAPP3 の出力形式の三次元スカラーフィールドデータを読み込んで可視化できます。

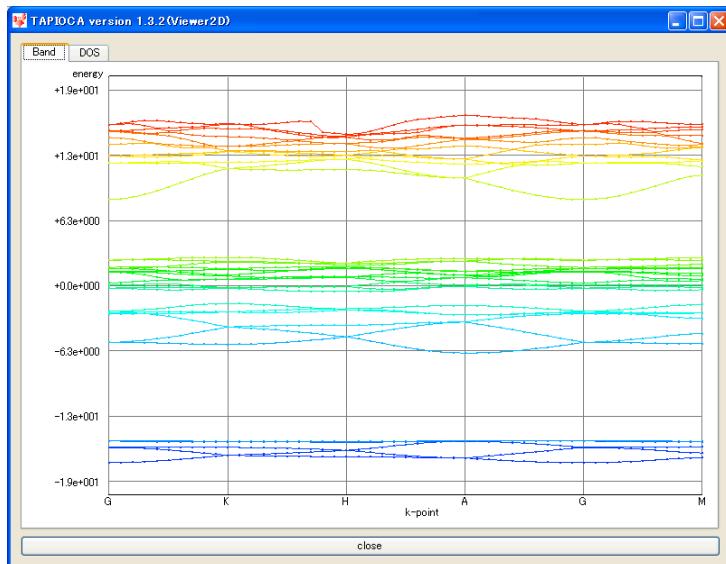
フィールドの値の三次元分布の様子は複数の描画手法で描画画面に表示されます。可視化の調整法については後述します。描画画面に表示されたグラフィックスはマウス右クリックメニューから BMP 形式でファイルに保存することができます。



三次元フィールドのさまざまな可視化方法による表示の例

バンドデータの読み込み/書き出し

本ソフトウェアでは xTAPP が output するバンドデータや状態密度データを読み込んで可視化できます。可視化の調整法については後述します。描画されたバンド図はマウス右クリックメニューから BMP 形式と EPS 形式でファイルに保存することができます。



バンドデータの表示の例

計算プログラムの計算設定パラメタの調整

本ソフトウェアでは xTAPP プログラムの計算内容を設定する入力ファイルを読み込み、パラメタを GUI で調整することができます。

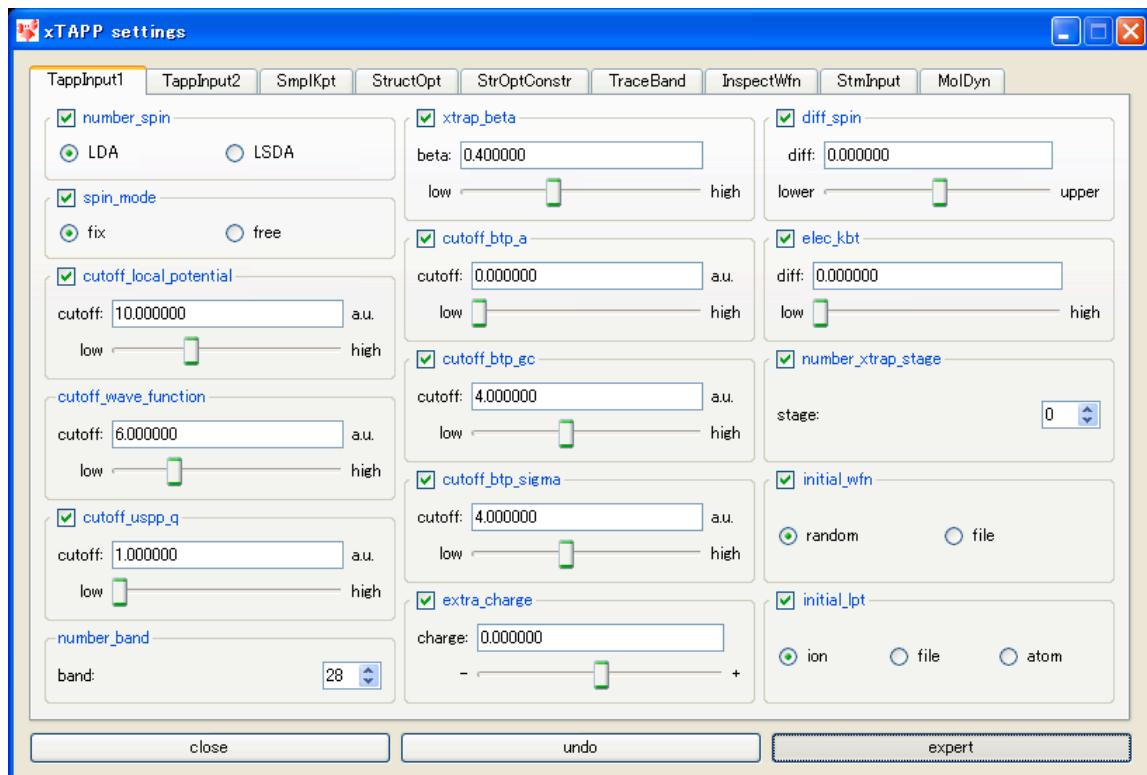
xTAPP の設定パラメタの調整

メニューバーの xTAPP をクリックすると xTAPP 設定画面が開きます。この画面には入力データの複数のグループのパラメタ用の設定タブが重なっていて、画面上部のタブをクリックすることでタブの内容が切り替え表示されます。

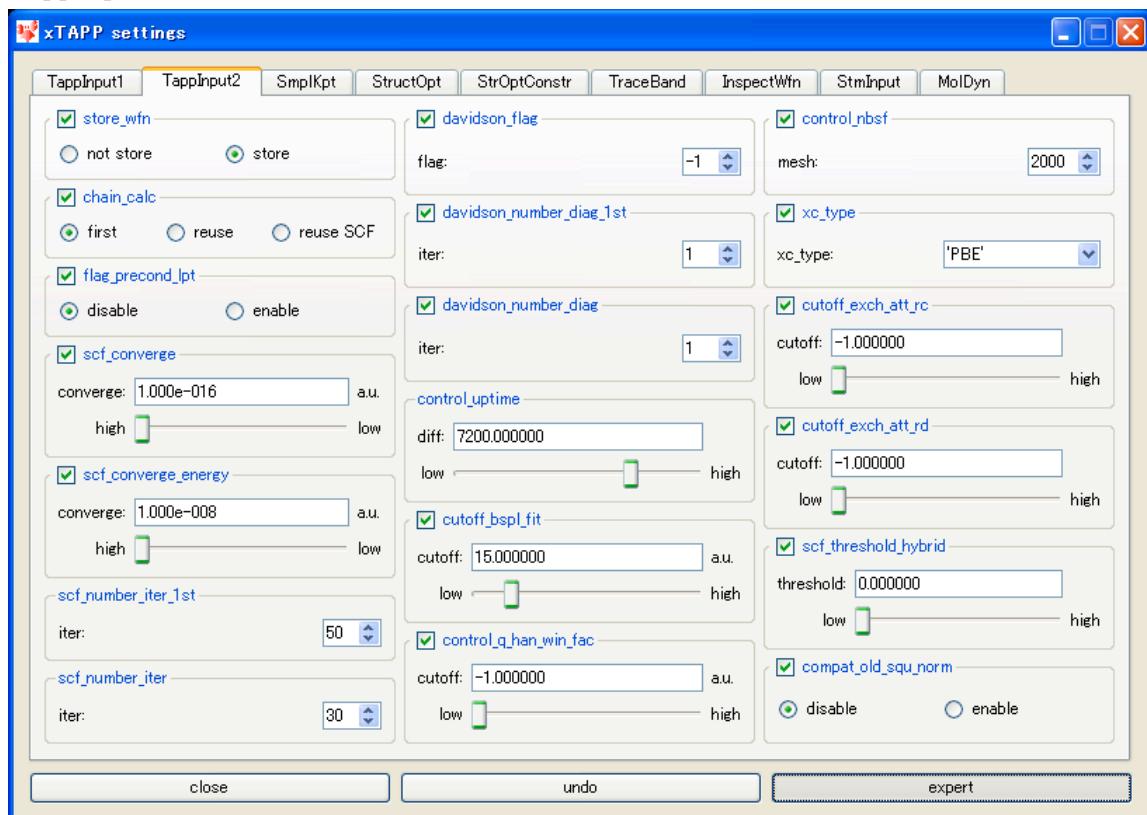
ウィンドウの下部にはこの画面を閉じる close ボタンと前回の操作を戻す undo ボタン、そしてエキスパート向け詳細パラメタも編集できるようになる expert トグルボタンがあります。

各タブでのパラメタについて紹介しますが、詳しくは xTAPP マニュアルを参照ください。

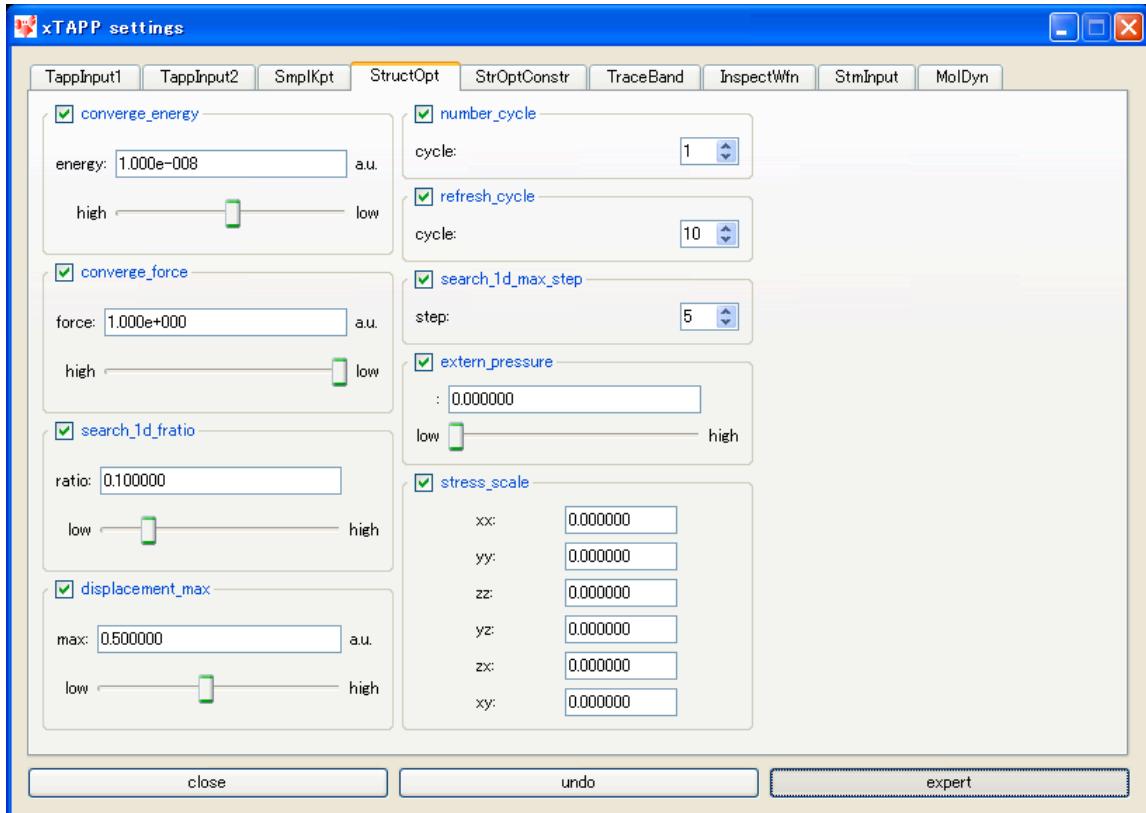
TappInput1 タブ : xTAPP の基本パラメタの調整画面その 1



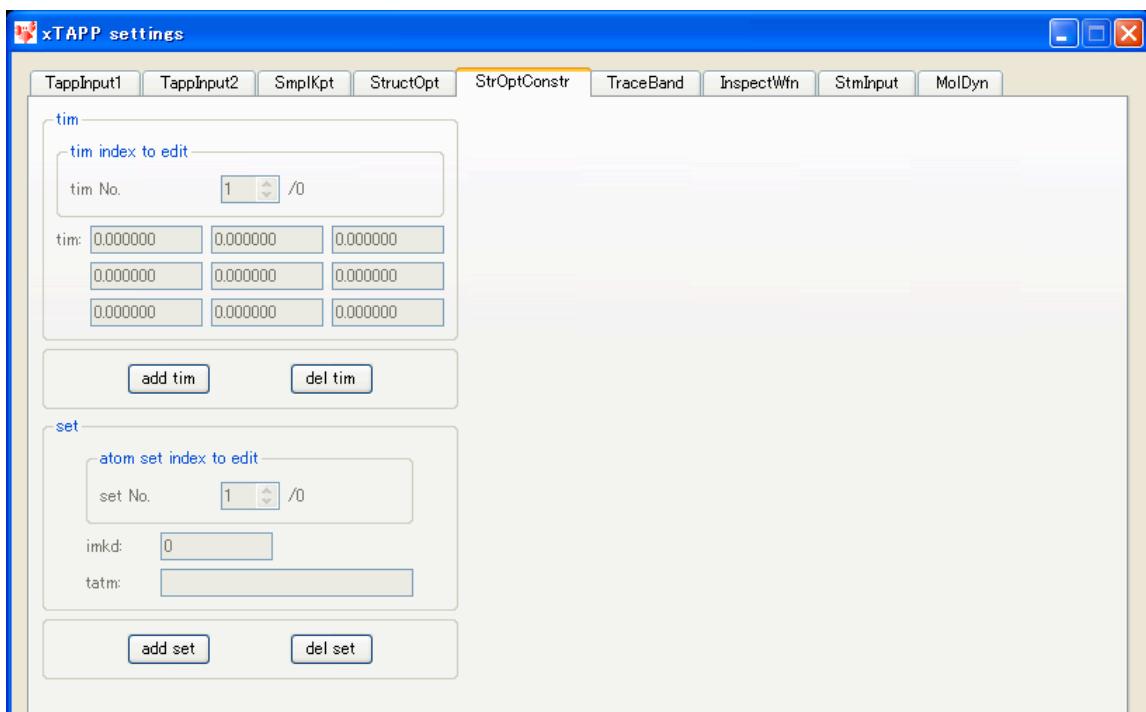
TappInput2 タブ : xTAPP の基本パラメタの調整画面その 2



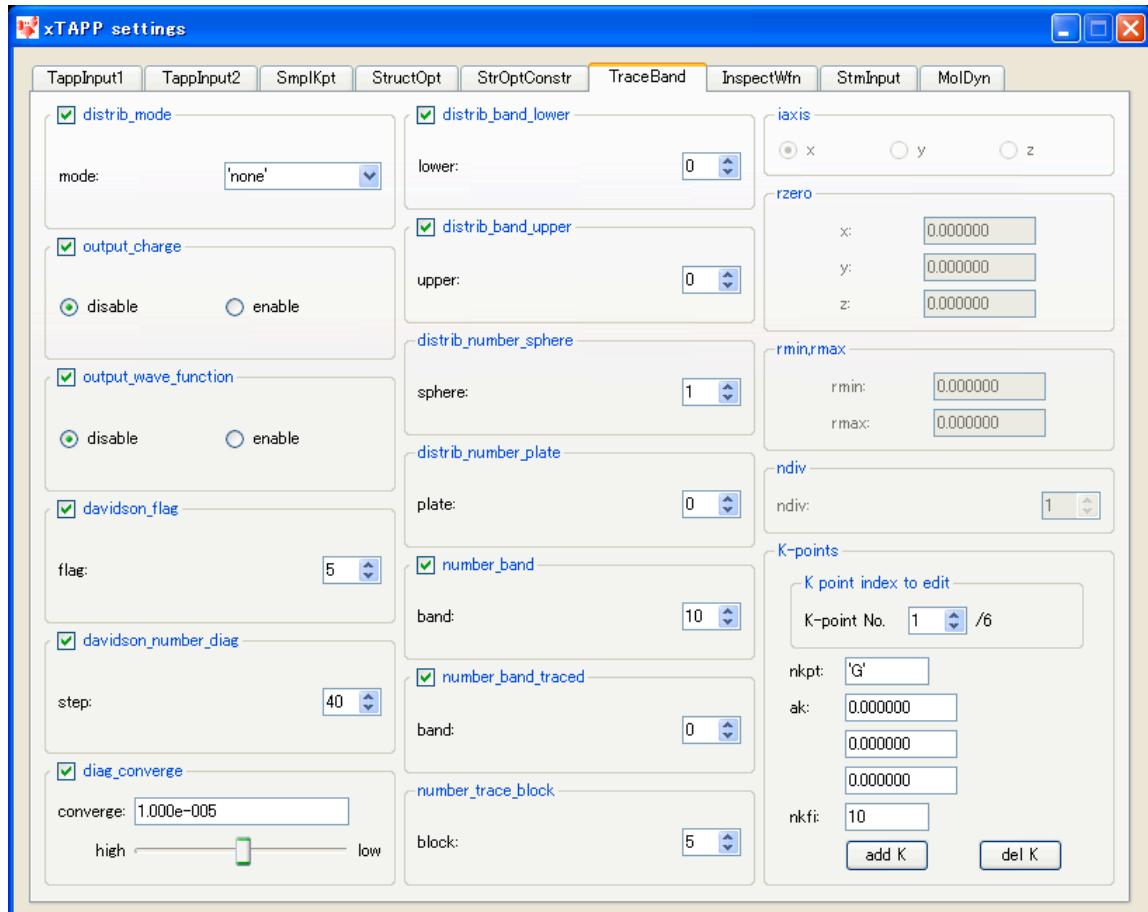
SmplKpt タブ : サンプリング K 点に関するパラメタの調整画面



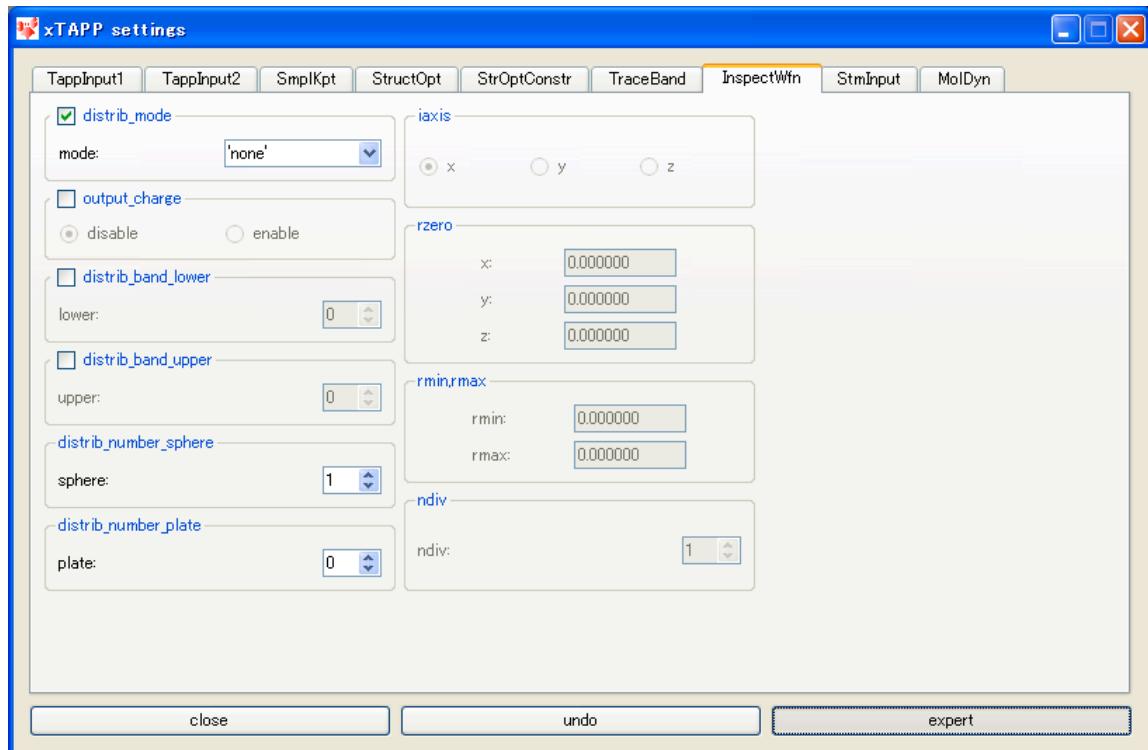
StrOptConstr タブ : 構造最適化に関するパラメタの調整画面



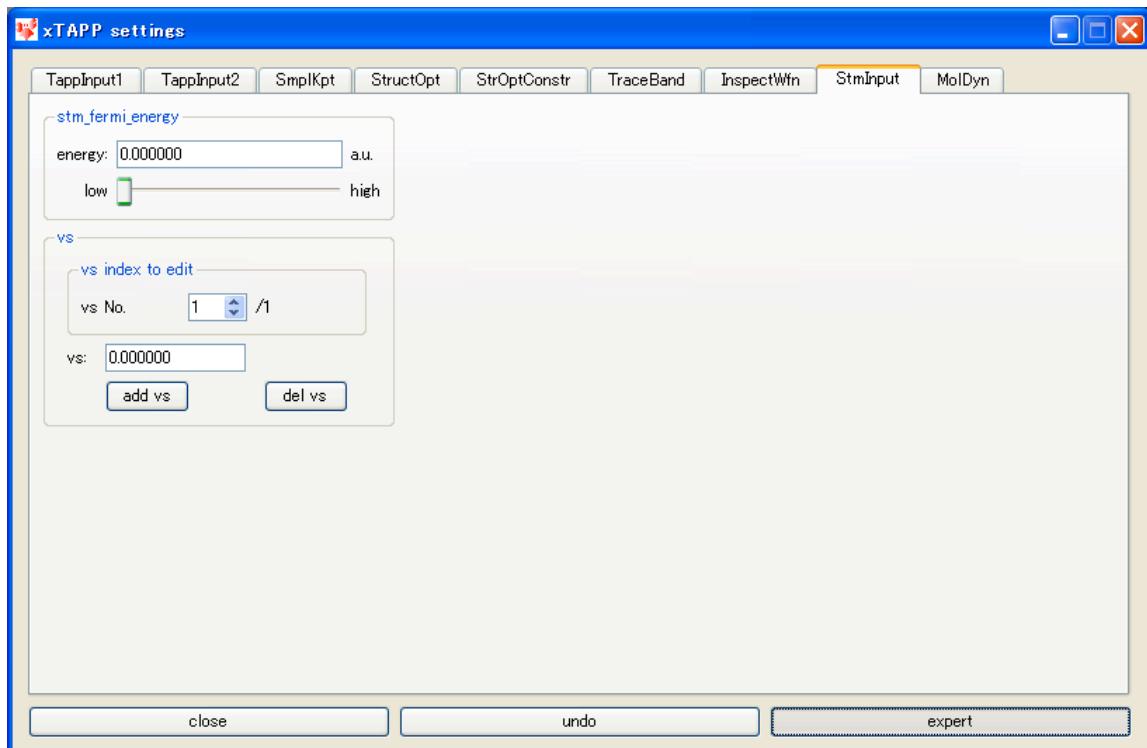
TraceBand タブ : バンド図作図に関するパラメタの調整画面



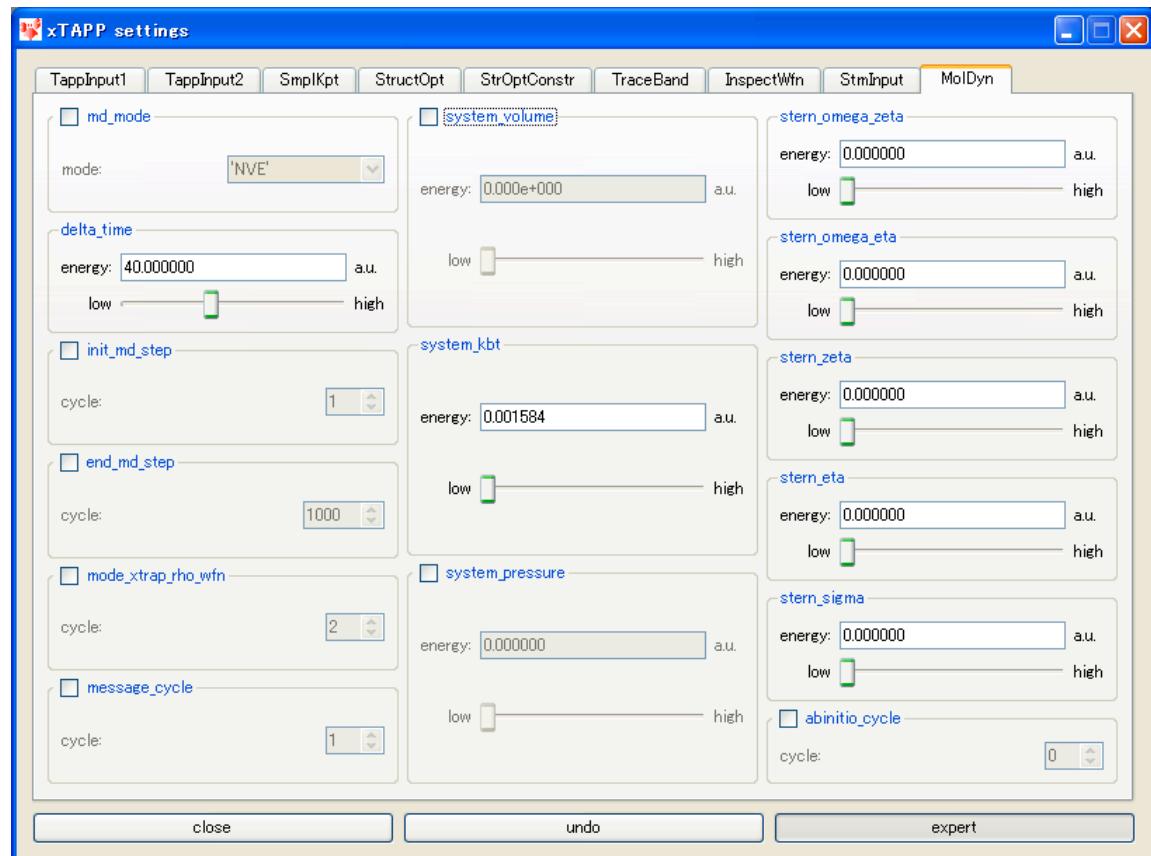
InspectWfn : 波動関数出力に関するパラメタの調整画面



StmInput : STM 像計算に関するパラメタの調整画面



MolDyn : 分子動力学計算に関するパラメタの調整画面



バンド図 K 点経路の調整

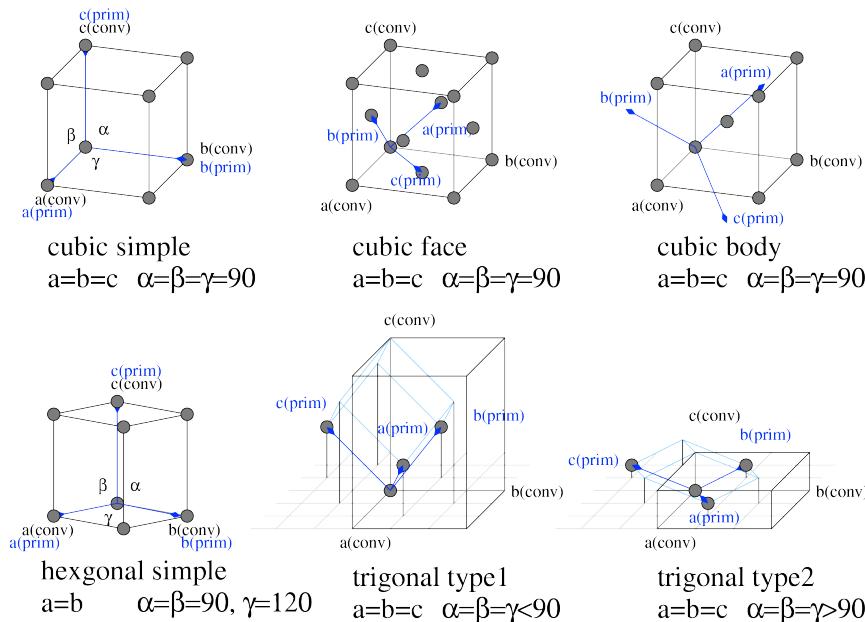
本ソフトウェアでは格子の形状からブラベ格子を判定し、ブラベ格子ごとに定義されたバンド図 K 点経路を第一ブリルアンゾーンと共に可視化し、この K 点経路を GUI で調整できます。さらに xTAPP の入力ファイルにその経路を出力できます。

コンベンショナルセルの自動判定

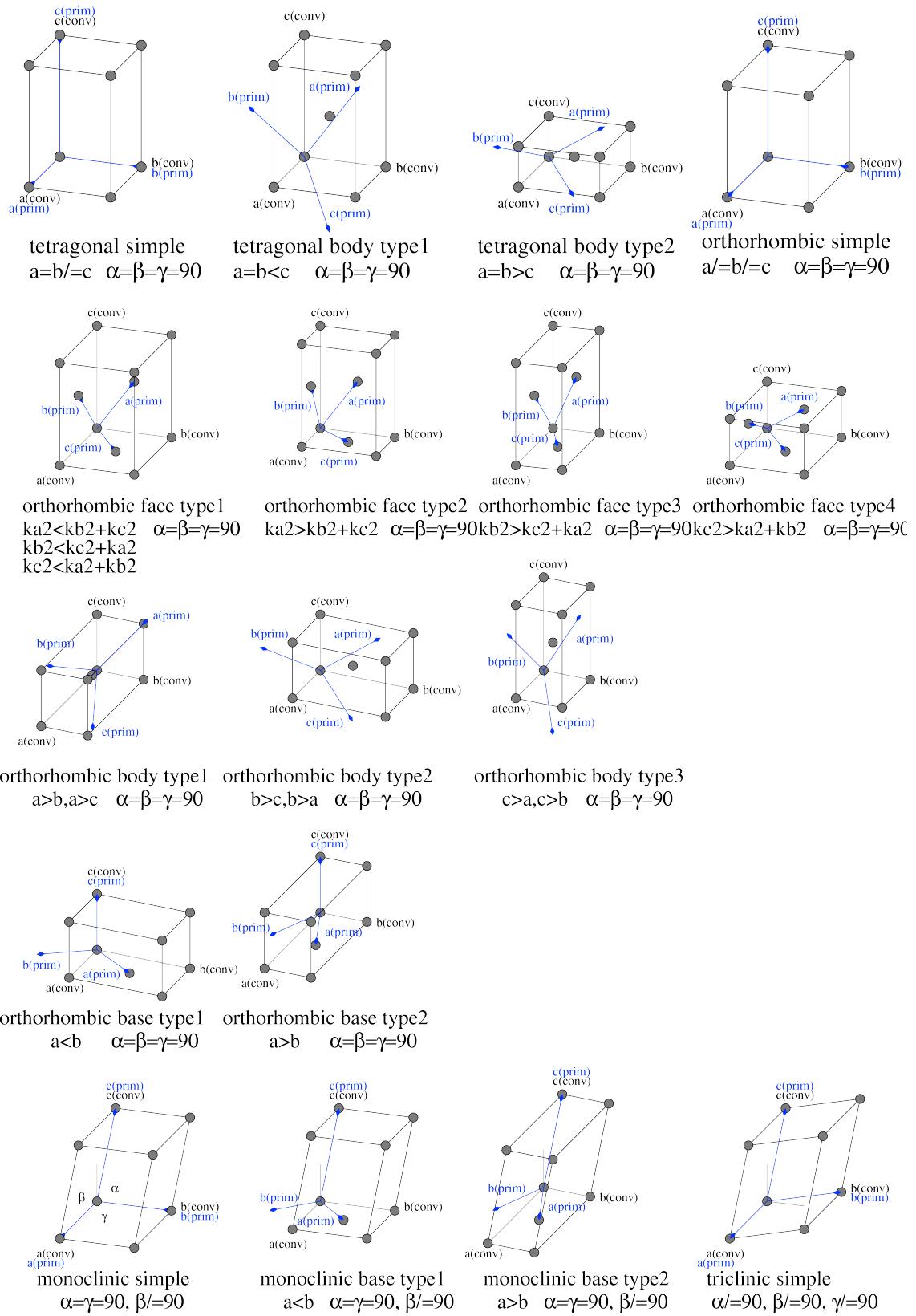
xTAPP で計算される単位胞は原子数最小のプリミティブセルです。しかし結晶学でのブラベ格子はコンベンショナルセルに対して定義されているため、プリミティブセルの基本ベクトルを展開して、プリミティブセルがコンベンショナルセルの一部であるかを自動的に判定します。

ブラベ格子の自動判定

ブラベ格子にはコンベンショナルセルの 3 辺の長さと角度と中心配置から 14 種類に分類されます。さらに同一のブラベ格子でも 3 辺の長さと角度の大小関係から第一ブリルアンゾーンの形状が変わるため対称点・対称線が変わります。そのため以下の 23 種類からコンベンショナルセルのブラベ格子を判定します。



図：ブリルアンゾーンの形が異なる 23 種類のブラベ格子(その 1)



図：ブリルアンゾーンの形が異なる 23 種類のブラベ格子(その 2)

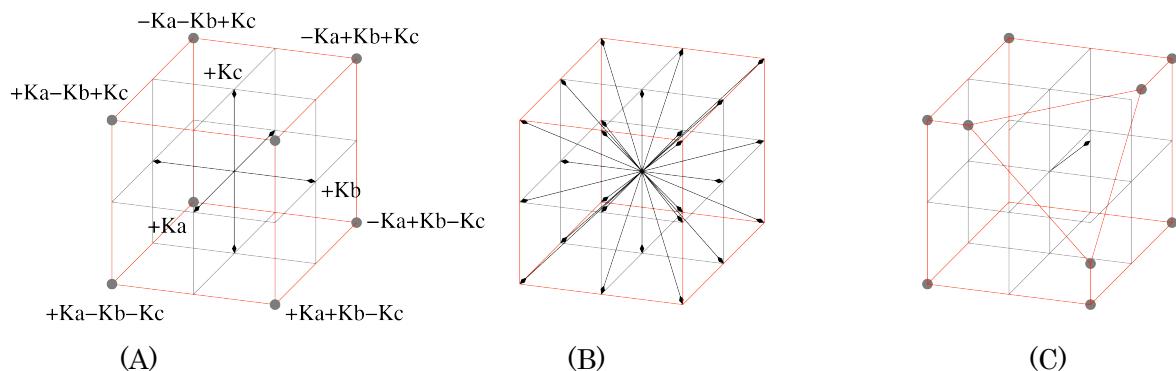
ブリルアンゾーンの形状計算

プリミティブセルの逆格子ベクトルの第一ブリルアンゾーンを以下の手順で計算します。

- プリミティブセルの逆格子ベクトル K_a, K_b, K_c を用いて下図の(A)のようにゾーンの初期値となる平行六面体の8つの頂点と6つの面と12本の辺を用意する。
- 下図の(B)のように原点から隣接の26点の逆格子点へのベクトルを設定する。
- 26本のベクトルのそれぞれについて垂直二等分面の方程式を設定する。

$$\frac{\vec{k}}{2} \cdot \vec{r} - \left| \frac{\vec{k}}{2} \right|^2 = 0$$

- 下図の(C)のように26枚の垂直二等分面の1枚ごとにゾーンの各面の各辺が交差するか方程式から計算する。辺が垂直二等分面を渡る場合はその交点で辺を切断して辺の始点と終点の座標を更新する。辺が垂直二等分面の外にでる場合は辺を消去する。面の各辺の交点が合計で2点あれば交点を結ぶ新たな辺を面に追加する。垂直二等分面と辺の交点の計算には数値誤差が伴うので交点の判定には注意を要する。



図：第一ブリルアンゾーンの形状の計算手順

プラベ格子の対称点・対称線の定義

柳瀬先生著「空間群のプログラム」の付録2.Aに記載された23種のブリルアンゾーンごとの対称点・対称線の定義をTAPIOCA内に実装し、判定されたプラベ格子ごとに対称点・対称線がブリルアンゾーン内に設定します。

バンド図 K 点経路の既定値の設定

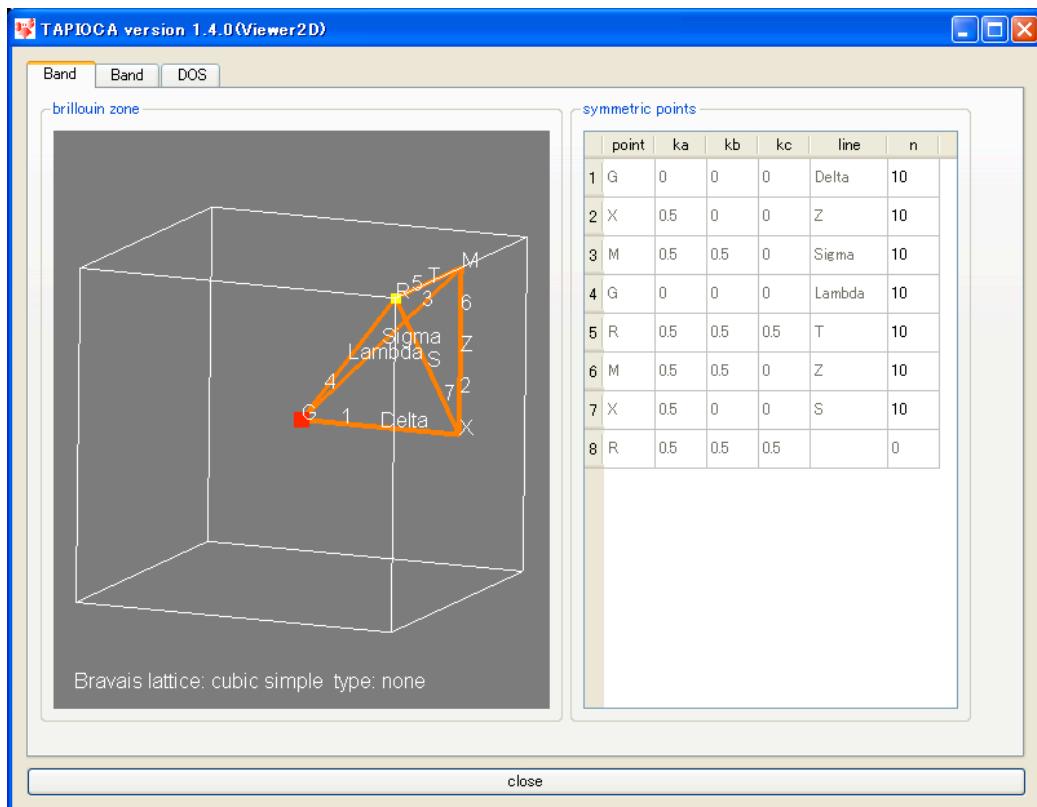
プラベ格子ごとに定義されている対称線を一筆書きで連続できるものを選び、これをバンド図用のK点経路の既定値とします。

K点経路の表示と調整

[Lattice]-[Brillouin]を選択すると格子のブリルアンゾーンと、ブラベ格子に定義されたK点経路が表示されます。

各画面の左側に白色線で表示される多面体が設定中の単位胞に対する第一ブリルアンゾーンです。黄色線で表示された線分がこの単位胞のブラベ格子に定義された対称線です。橙色線で表示された線分がバンド図用K点経路として選択されたものです。画面右側には選択されたK点経路の対称点の情報が表示されています。

この画面で選択中のK点経路の最初と最後の線分をマウスダブルクリックするとその線分の選択が解除されます。逆に選択中のK点経路の最初と最後の対称点に接続する未選択の線分をマウスダブルクリックするとその線分が選択されます。

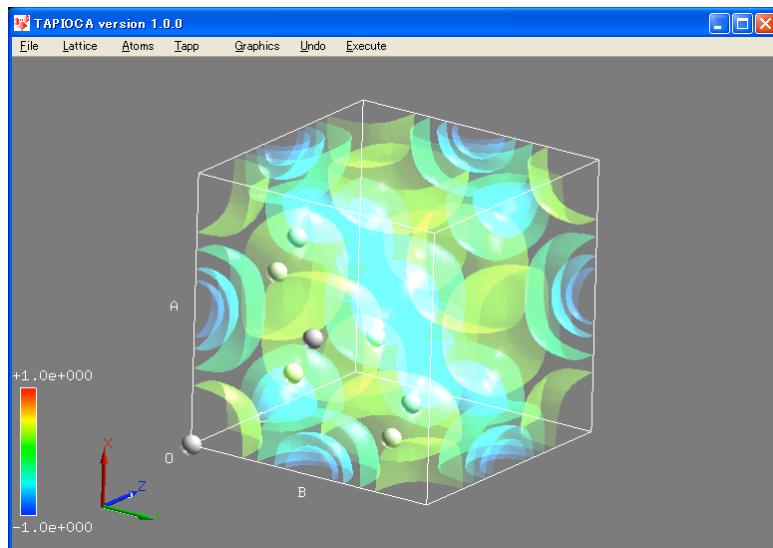


図：ブリルアンゾーンとバンド図K点経路の可視化・調整画面

グラフィックスの調整方法

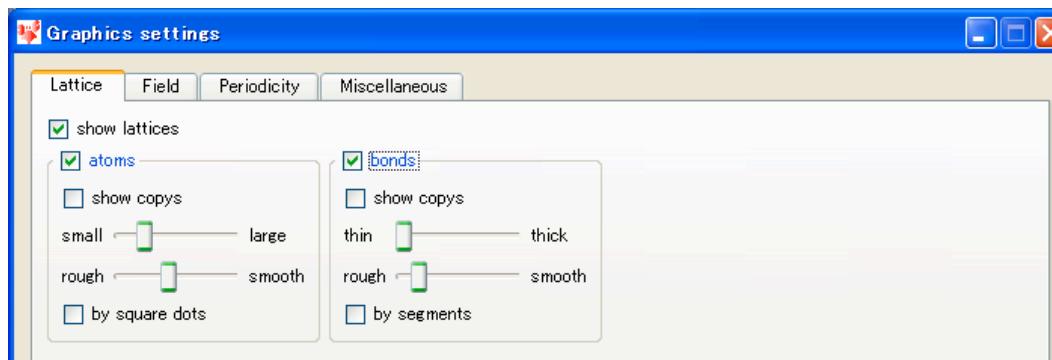
グラフィックス調整ウィンドウ

本ソフトウェアでは結晶の原子配置の他にも、電子密度分布などの三次元フィールドデータやバンド図を可視化できます。



フィールドデータを可視化した様子

メニューバーの Graphics をクリックすると下図のグラフィック設定画面が開きます。この画面には複数の設定タブが重なり、画面上部のタブをクリックすることでタブを切り替えできます。各タブでのグラフィック調整内容を後述します。



Lattice タブ

結晶原子、結晶単位胞枠の表示方法

Field タブ

三次元フィールドデータの表示方法

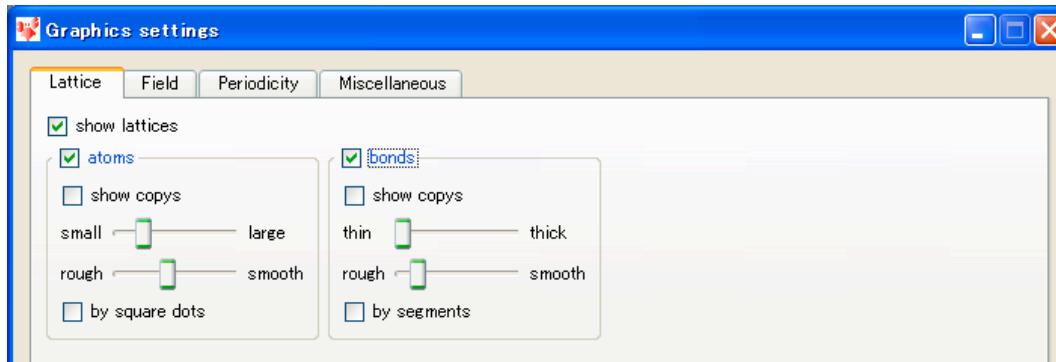
Periodicity タブ

周期性に関する表示方法

Miscellaneous タブ

その他のグラフィックの設定

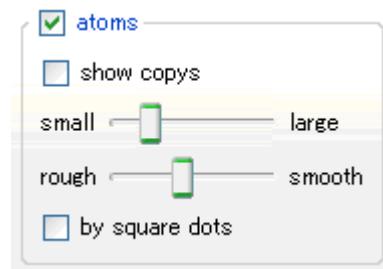
Lattice タブ 結晶の表示方法の調整



Show lattice

結晶の原子と単位胞枠を表示するかの一括指定。Off の場合は以下の項目は無効になります。

Atoms 原子の表示方法



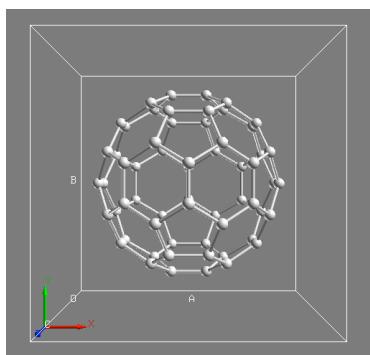
Atoms 原子を表示するかの指定。

show copy 変換操作のコピー原子も表示するかの指定。

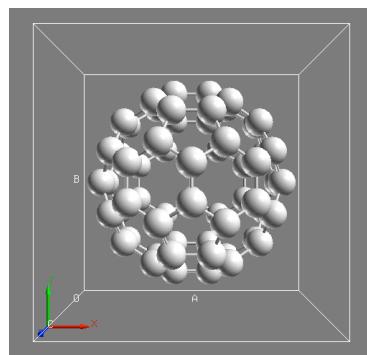
small/large 原子を表す球の大きさの調整。

rough/smooth ポリゴン精度の調整。

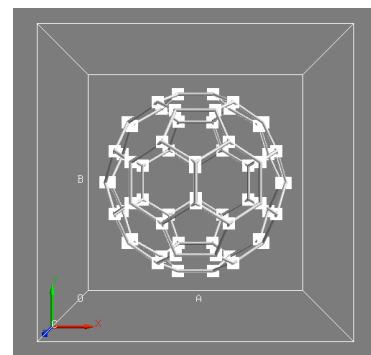
by square dots 原子を四角形で表示するかの指定。



原子の表示例： 小さい球

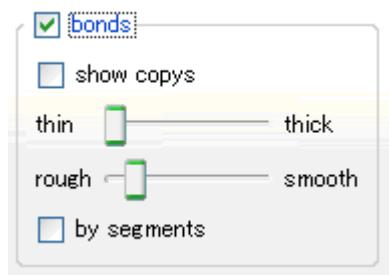


大きい球



四角形

Bonds 結合ボンドの表示方法



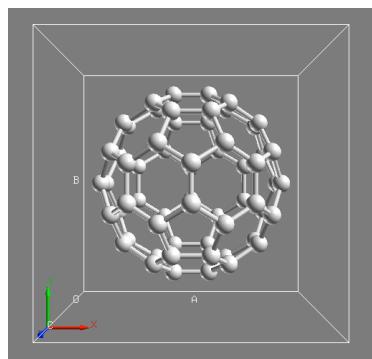
bonds 結合ボンドを表示するかの指定。

thin/thick 結合ボンドを表す円柱の太さの調整。

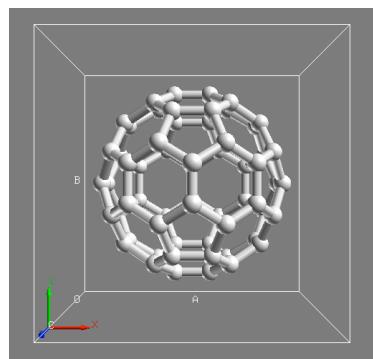
rough/smooth ポリゴン精度の調整。

by segments 結合ボンドを線分で表示するかの指定。

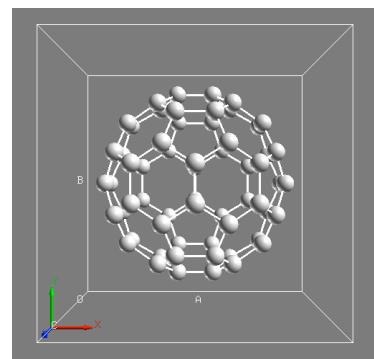
多原子系の高速描画用です。



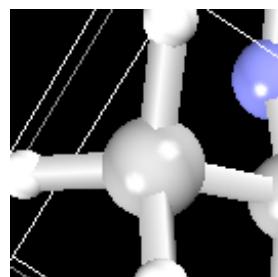
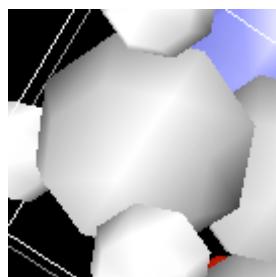
結合の表示例： 細い円柱



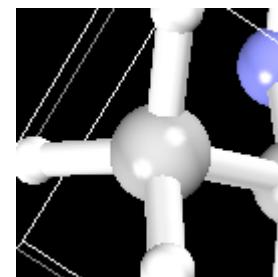
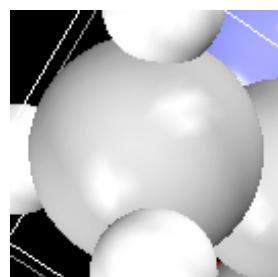
太い円柱



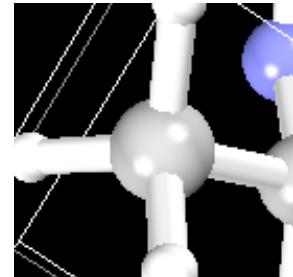
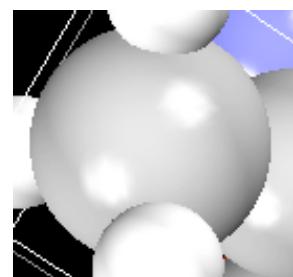
線分



ポリゴン精度の例：粗い

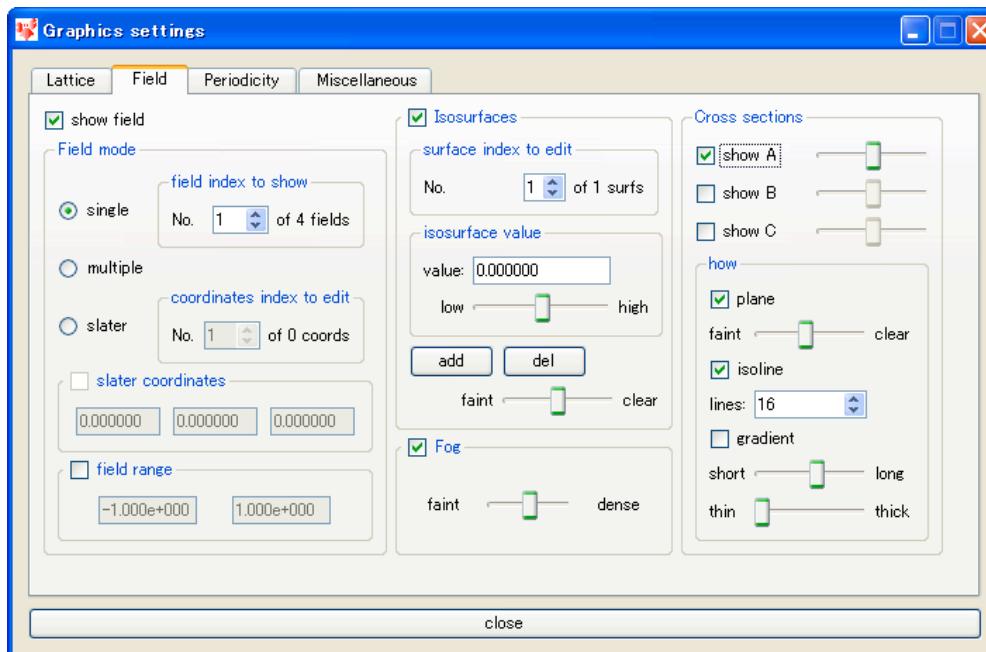


普通



細かい

Field タブ 三次元フィールドデータの表示方法の調整

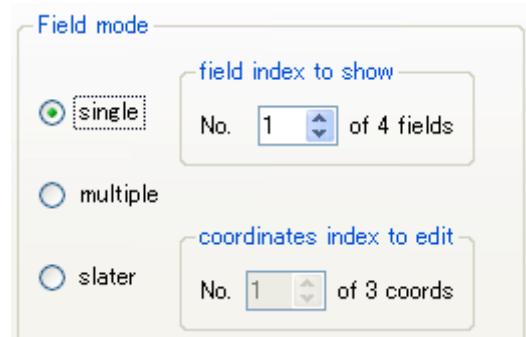


Show field

フィールドデータを表示するかの一括指定。Off の場合は以下の項目は操作できません。

Field mode

フィールドの表示方法を以下の3通りから選択できます。



Single 複数のフィールドのうち指定のひとつのみのフィールドが表示されます。表示するフィールドの番号を選択できます。

Multiple 複数のフィールドの各々を重ねて表示されます。

Slater 複数のフィールドの Slater 行列式のフィールドが表示されます。

field range



フィールドはその最小値・最大値が自動的に算出され、その範囲で色分けして表示されます。この色分けを固定するにはチェックして範囲の最大・最小値を指定ください。

Slater フィールドにはフィールドの数より 1 少ない数の固定座標を指定します。その座標は以下の候補から自動的に決定されます。

- 1. 選択されている原子の座標
- 2. 選択されていない原子の座標
- 3. ふたつの原子の中点の座標
- 4. 格子の原点(0, 0, 0)、(1/2, 1/2, 1/2)など

インデックスを選択することで各固定座標の値を確認できます。

slater coordinates

0.000000	0.000000	0.000000
----------	----------	----------

チェックするとその座標値を編集できます。

複数のフィールドからひとつのスレーターフィールドを計算する計算式

多次元空間のスレーター行列式は次式で与えられるようにフィールドの数だけの空間座標をもつ多次元(3N 次元)フィールドなのでそのままでは可視化できません。

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}_1) & \varphi_1(\mathbf{r}_2) & \cdots & \varphi_1(\mathbf{r}_N) \\ \varphi_2(\mathbf{r}_1) & \varphi_2(\mathbf{r}_2) & & \varphi_2(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(\mathbf{r}_1) & \varphi_N(\mathbf{r}_2) & \cdots & \varphi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$$

そのため空間座標のひとつを自由座標として、他の N-1 個の空間座標を固定座標として通常の 3 次元のフィールドとして可視化することにします。本ソフトウェアでは N 番目の座標を自由座標として他を固定座標としています。スレーター行列式は列の入れ替えで符号しか変わらないためです。さらに、N-1 個の固定座標のスレーター行列式は N 個のスレーター行列式の値を事前に計算しておくことで、それらを係数とした各フィールドの線形結合で計算できます。

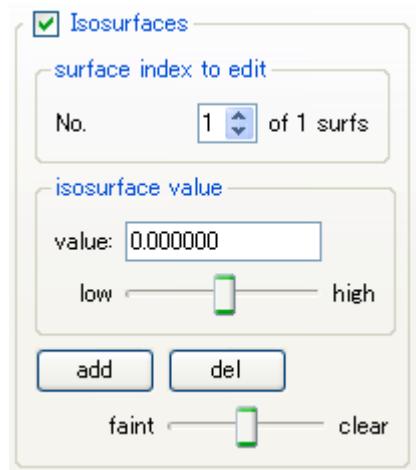
$$\psi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots; \mathbf{r}) = C_1 \varphi_1(\mathbf{r}) + \cdots + C_N \varphi_N(\mathbf{r})$$

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{R}_1) & \varphi_1(\mathbf{R}_2) & \cdots & 1 \\ \varphi_2(\mathbf{R}_1) & \varphi_2(\mathbf{R}_2) & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(\mathbf{R}_1) & \varphi_N(\mathbf{R}_2) & \cdots & 0 \end{vmatrix}, \dots, C_N = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{R}_1) & \varphi_1(\mathbf{R}_2) & \cdots & 0 \\ \varphi_2(\mathbf{R}_1) & \varphi_2(\mathbf{R}_2) & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(\mathbf{R}_1) & \varphi_N(\mathbf{R}_2) & \cdots & 1 \end{vmatrix}$$

これらの係数の行列式は Lapack 数値計算ライブラリの DGETRF 関数を用いて LU 展開したうえで、次式のようにその対角成分の積として計算します。

$$\begin{vmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 \\ L_{N1} & \cdots & 1 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} U_{11} & \cdots & U_{1N} \\ 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & U_{NN} \end{vmatrix} = \prod_{i=1}^N U_{ii}$$

Isosurf 等数値面による表示



Isosurfaces 等数値面を表示するかの指定。

等数値面は複数面を表示できます。

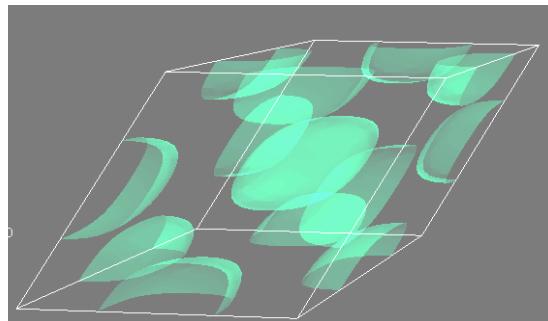
add ボタンと **del** ボタンで追加・削除できます。

index 等数値を調整する対象の面番号

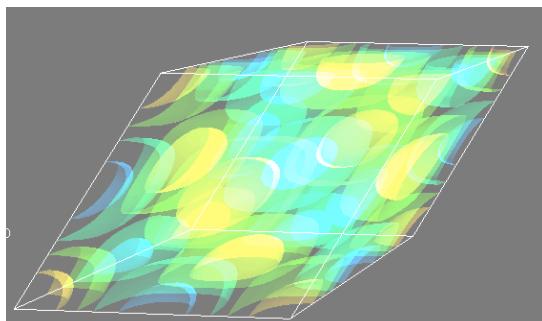
value 表示する等数値面の数値

low/high 等数値面の数値のスライダーによる調整。

faint/clear 面の透明度の調整。



一面での表示



三面での表示

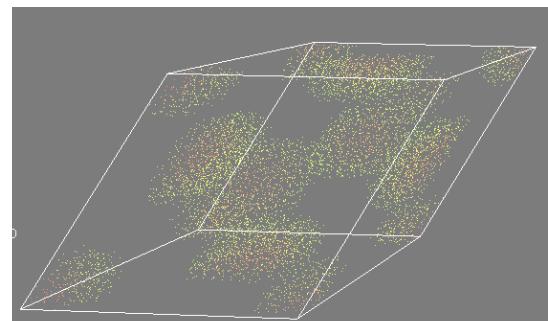
等数値面によるフィールドの表示例

Fog 多数の点群による表示

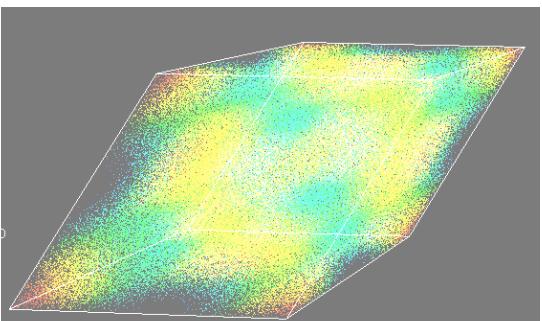


Fog 点群を表示するかの指定。

faint/dense 点の濃さの調整



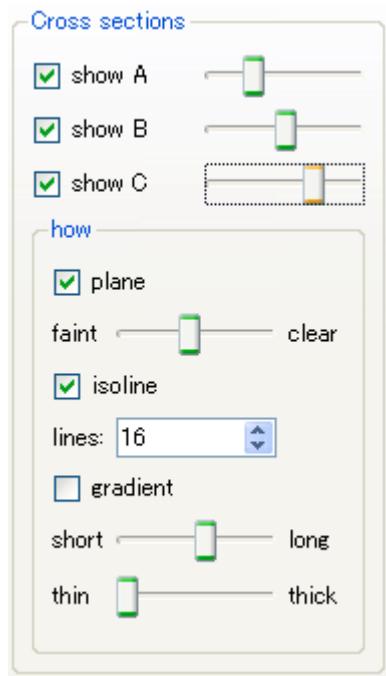
少数の点群



多数の点群

点群によるフィールドの表示例

Cross sections 断面での表示



show A BC 軸面に平行な断面を表示するかの指定

断面の A 座標はスライダーで調整できます。

show B CA 軸面に平行な断面を表示するかの指定

断面の B 座標はスライダーで調整できます。

show C AB 軸面に平行な断面を表示するかの指定

断面の C 座標はスライダーで調整できます。

How 断面の表示方法

by plane 断面での濃淡を表示するかの指定。

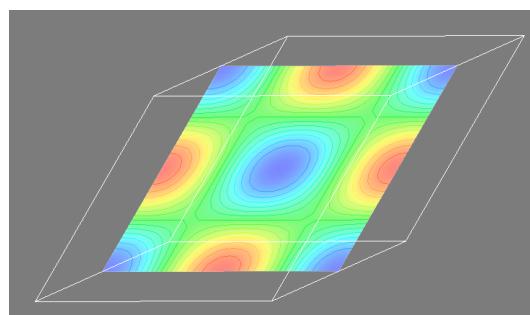
faint/clear 面の透明度の調整。

by isoline 断面での等高線を表示するかの指定。

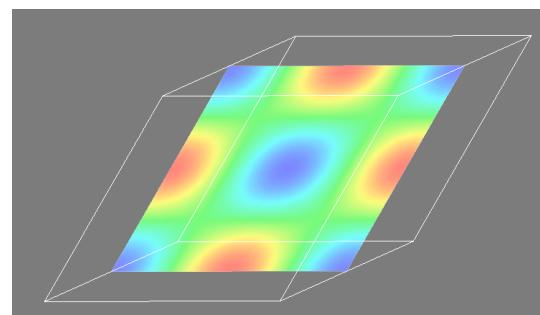
lines 等高線の数の調整。

by gradient 断面での勾配ベクトルを表示するかの指定。

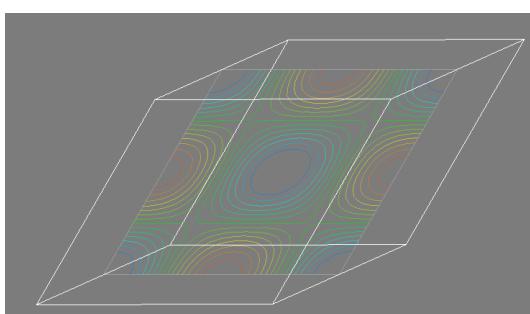
short/long ベクトルの大きさの調整。



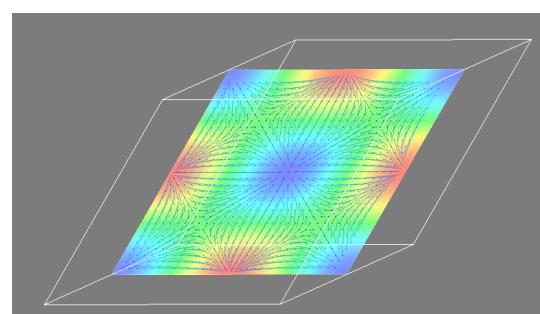
濃淡+等高線



濃淡のみ



等高線のみ

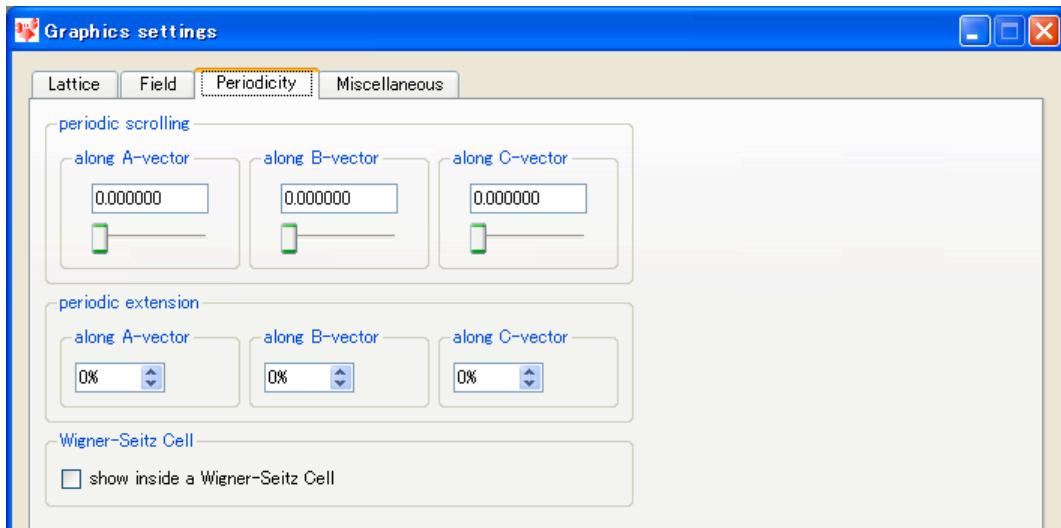


濃淡+勾配ベクトル

断面によるフィールドの表示例

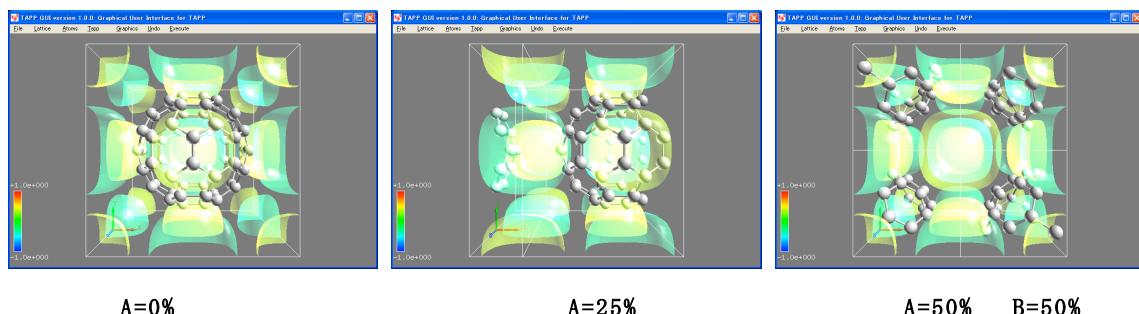
Periodicity タブ 周期的表示に関する調整

この画面では単位胞の表示位相を変更したり、周期的に拡張して表示したり、さらに現在の単位胞を周期的に並べた大きなクラスタを作成することができます。



Periodic scrolling

周期的な単位胞の表示開始位置をずらしてスクロールのように表示します。



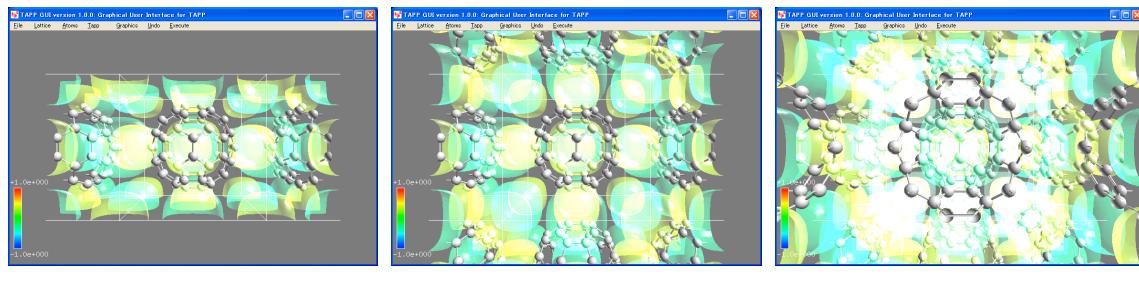
A=0%

A=25%

A=50% B=50%

Periodic extension

各軸方向に周期的に拡張して表示します。グラフィックカードによっては表示が乱れる場合があります。0%で中心単位胞のみ、100%で左右あわせて3つの単位胞が周期的に表示されます。

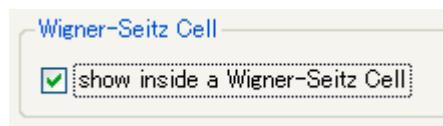


A=50%

A=50% B=50%

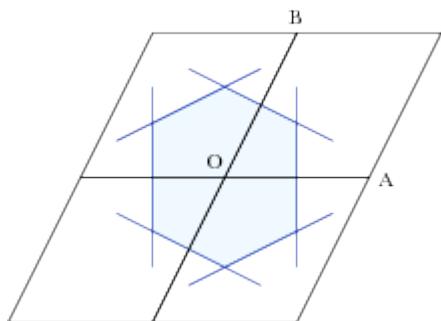
A=50% B=50% C=50%

Wigner-Seitz Cell

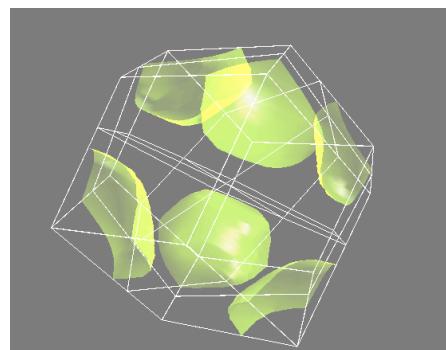


近隣単位胞を一部含んだWigner-Seitz Cellでフィールドを描画します。 グラフィックカードによっては表示が乱れる場合があります。

Wigner-Seitz Cell はすべての格子ベクトルについて、そのベクトルの中点を通るベクトルに垂直な面の内側で構成された胞です。



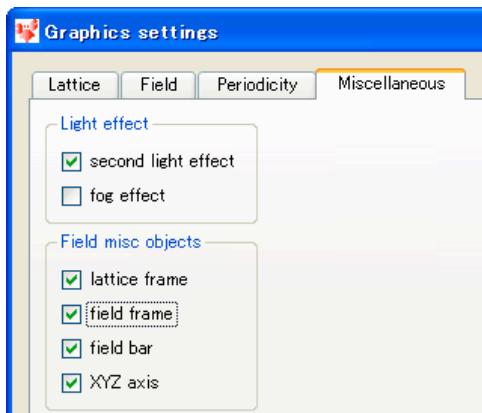
2次元結晶の Wigner-Seitz Cell の構成法



Wigner-Seitz Cell の表示例

Miscellaneous タブ その他のグラフィックスの表示方法の調整

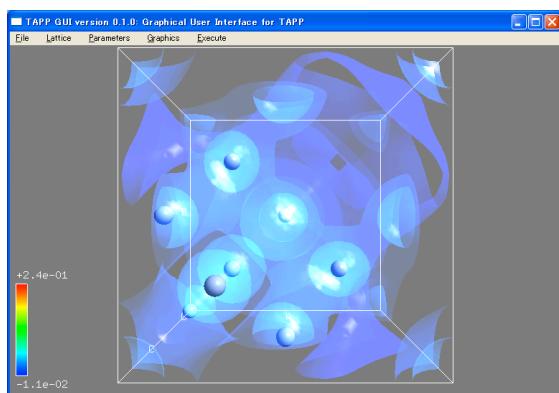
この画面では光学系の設定、奥行きを暗くする霧効果の設定、その他の描画オブジェクトの表示指定などを行います。



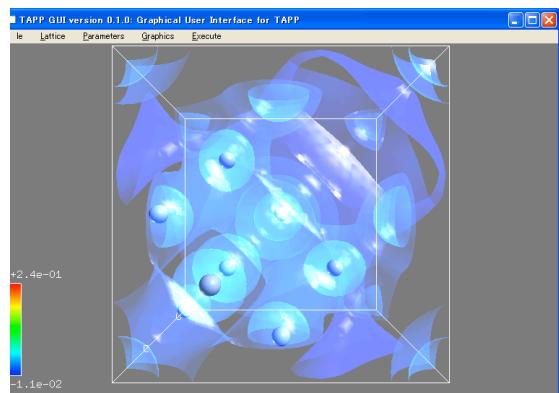
Light effect 照明効果の表示方法

second light effect 照明を二個用いるかの指定。物体の前側も奥側も明るくなります。

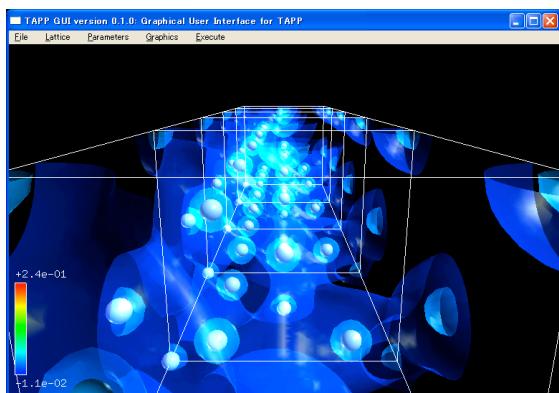
fog effect 霧（フォグ）の効果を用いるかの指定。遠方が薄暗くなります。



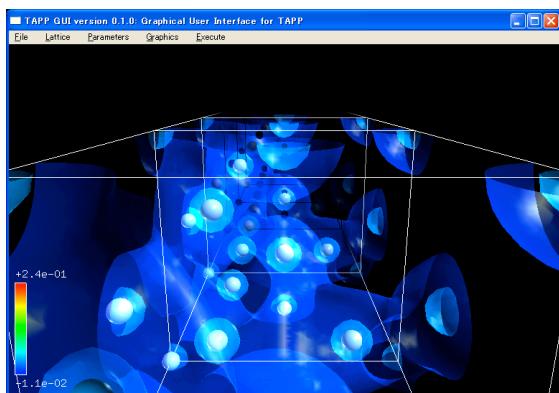
第二照明の不使用



第二照明の使用



フォグ効果なし

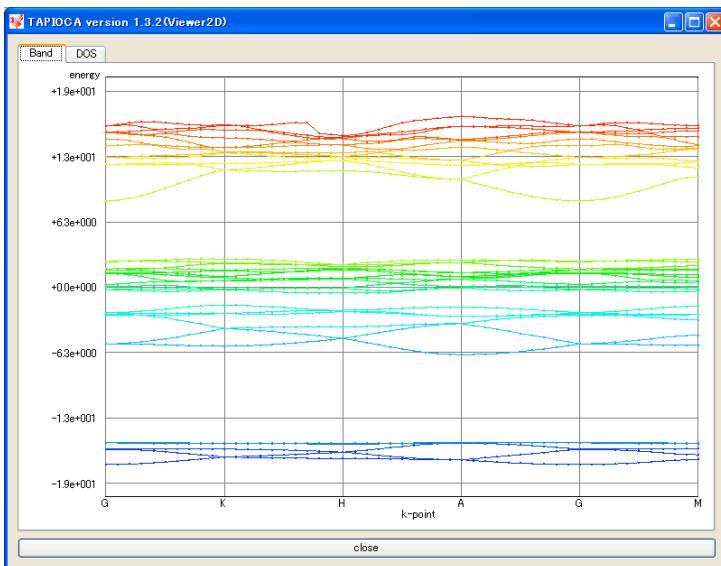


フォグ効果あり

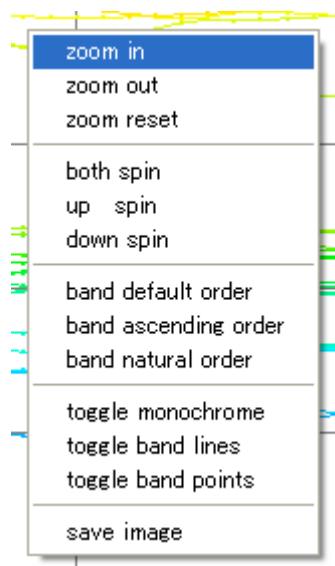
周期的表示の例

バンド図の表示方法の調整

本ソフトウェアでは xTAPP で計算された電子状態のバンド計算の結果を可視化できます。File メニューの load band でバンドのデータファイルを指定すると、バンド図が下図のような 2 次元グラフで表示されます。表示方法はマウス右クリックメニューで微調整できます。



バンド図の可視化の例



右クリックメニュー画面

Zoom in : カーソルの位置で図を拡大表示します。上下ドラッグでスクロールします。

Zoom out : カーソルの位置で図を縮小表示します。

Zoom reset : 拡大・縮小表示を元の全体表示に戻ります。

Both spin : 両 спинのデータを重ねてプロットします。

Up spin : 上スピニンのデータのみをプロットします。

Down spin : 下スピニンのデータのみをプロットします。

Band default order :

固有値の順序をそのまま、隣の k 点の同じ順序の点とで曲線を描きます。(規定値)

Band ascending order :

固有値をエネルギー順に並び替えて、隣の k 点の同じ順序の点とで曲線を描きます。

Band natural order :

固有値の順序をそのまま、隣の k 点のうち線分が滑らかになる点とで曲線を描きます。

Toggle monochrome : バンドの描画色をグラデーションで変化をつけて描くか単色で描くかを変更します。グラデーションと単色の色は外部設定ファイル default.gml で指定できます。

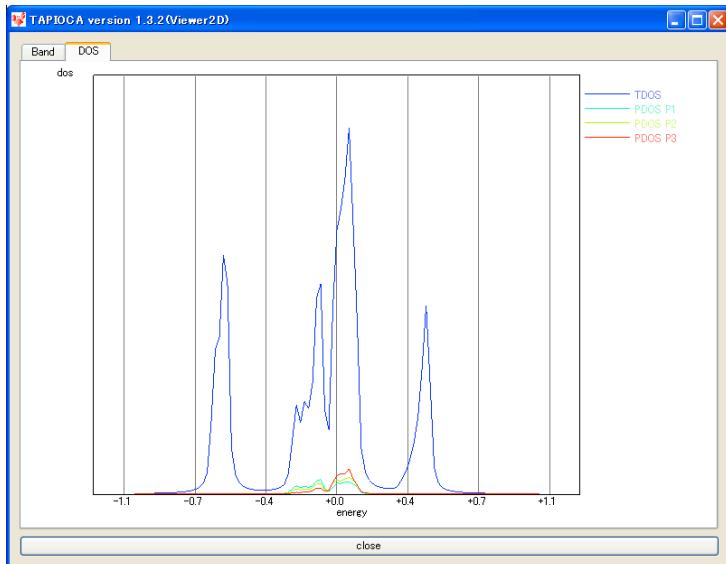
Toggle band lines : バンドの曲線を描くか描かないかを変更します。

Toggle band points : バンドの点を描くか描かないかをトグルで変更します。

Save image : このバンド図を BMP 形式と EPS 形式でファイルに保存します。

状態密度図の表示方法の調整

本ソフトウェアではxTAPPで計算された状態密度の結果を可視化できます。Fileメニューのload dosで状態密度のデータファイルを指定すると、状態密度が下図のような2次元グラフで表示されます。表示方法はマウス右クリックメニューで微調整できます。



バンド図の可視化の例



右クリックメニュー画面

Zoom in : カーソルの位置で図を拡大表示します。左右ドラッグでスクロールします。

Zoom out : カーソルの位置で図を縮小表示します。

Zoom reset : 拡大・縮小表示を元の全体表示に戻ります。

Save image :

このバンド図を BMP 形式と EPS 形式でファイルに保存します。

ソースファイルの概要

コンパイル環境の準備

本ソフトウェアはC++言語によりWindowsのCygwin上で開発されています。
本ソフトウェアをソースからコンパイルするには以下のソフトウェアが必要です。

Cygwin

入手先：<http://www.cygwin.com/>

セットアッププログラム setup.exe をダウンロードして実行してください。

セットアップ途中で以下のソフトウェアを選択してください。

- ❖ develop/ gcc-g++, gcc-mingw-g++, make, makedepend, mingw-runtime
- ❖ graphics/ opengl
- ❖ math/ lapack

Qt opensource mingw 版 version 4.8 以降

入手先：<ftp://ftp.qt-project.org/qt/source/>

自己解凍プログラム opensource-4.8.4-mingw.exe をダウンロードして実行してください。

セットアップ途中で求められる destination folder には以下を指定してください。

C:\cygwin\usr\local\qt4

セットアップ途中でMinGW を求められますが、不要ですのでスキップしてください。

本ソフトウェアのコンパイルはCygwin上で行います。Make コマンドでコンパイルが完了し、実行プログラムが生成されます。

この実行プログラムはCygwin上から実行できるだけでなく、Windowsのエクスプローラー上のアイコンからも実行できます。その場合は以下の DLL をプログラムと同じフォルダか Windows のシステムフォルダ C:\WINDOWS\system32\ にコピーをしてください。

```
/usr/local/qt4/bin/  
    QtCore4.dll      QtGui4.dll      QtOpenGL4.dll   QtXml4.dll  
/usr/bin/  
    mingwm10.dll
```

この実行プログラムは cygwin1.dll を必要としていません。これは Cygwin の GPL ライセンス条項を避けるためですが、本ソフトウェアは Qt のフリー版を利用しているため、Qt の GPL ライセンス条項に該当します。そのため本ソフトウェアを配布する際はソースファイルも含めて配布しなければなりません。

ソースファイル構成

本ソフトウェアは以下のような多数のソースファイルによって構成されています。

コンパイル制御ファイル	
Makefile	コンパイル方法を記述
Makefile.inc	コンパイルオプションを記述
メインファイル	
main.cc	メインプログラム
window.cc, h	メインウィンドウクラス
モデル管理ソースファイル	
dtmodel.cc, h	データの統合クラス
dtlattice.cc, h	格子データの統合クラス
dtcell.cc, h	格子の単位胞データのクラス
dtsymmetry.cc, h	格子の対称性データのクラス
dtatoms.cc, h	格子の原子配置データのクラス
dttapp.cc, h	TAPP 設定データのクラス
dtcpp.cc, h	TC++設定データのクラス（未実装）
dtfield.cc, h	三次元フィールドデータのクラス
dtband.cc, h	バンドデータのクラス
dthistory.h	履歴管理のクラス
ビューマネージメントソースファイル	
glview.cc, h	GL ビューアのクラス
gllattice.cc, h	格子の GL 表示の統合クラス
glatoms.cc, h	格子の原子の GL 表示のクラス
glbonds.cc, h	格子の結合の GL 表示のクラス
glcell.cc, h	格子の単位胞の GL 表示のクラス
glfield.cc, h	三次元フィールドの GL 表示の統合クラス
glisosurf.cc, h	三次元フィールドの等数値面の GL 表示のクラス
glcrosec.cc, h	三次元フィールドの断面図の GL 表示のクラス
glfog.cc, h	三次元フィールドのフォグの GL 表示のクラス
glframe.cc, h	三次元フィールドの領域枠の GL 表示のクラス
glspline.cc, h	データのスプライン補間クラス
glbase.cc, h	GL オブジェクトの描画基本クラス
glband.cc, h	バンドの GL 表示のクラス
gleps.cc, h	図形の EPS 形式でのファイル書き出しクラス
glmisc.cc, h	GL のその他の処理
gloption.cc, h	GL 表示の全ての表示指定

コントロール管理ソースファイル	
qtctrl.cc, h	QT コントローラの統合クラス
qlattice.cc, h	格子の GUI 表示の統合クラス
qtcell.cc, h	格子の単位胞の GUI 表示のクラス
qtalignment.cc, h	格子の原子配置の GUI 表示のクラス
qtsymmetry.cc, h	格子の対称性の GUI 表示のクラス
qtatoms.cc, h	格子の原子配置の GUI 表示のクラス
qttapp.cc, h	TAPP の設定の GUI 表示のクラス
qtcpp.cc, h	TC++の設定の GUI 表示のクラス（未実装）
qtgraphics.cc, h	GL 表示の GUI 表示の統合クラス
qtgllattice.cc, h	格子の GL 表示の GUI 表示の統合クラス
qtglfield.cc, h	フィールドの GL 表示の GUI 表示の統合クラス
qtglperiodic.cc, h	周期性の GL 表示の GUI 表示の統合クラス
qtglmisc.cc, h	その他の GL 表示の GUI 表示の統合クラス
qtwidgets.cc, h	付加機能 GUI 部品クラス
qtxception.cc, h	QT エラー対応クラス
qtxml.cc, h	XML データ読込クラス
qtxpm.h	XPM アイコンデータ
算術ソースファイル	
matrix.cc, h	3x3 実数行列クラス
position.h	3 次元座標クラス
imatrix.cc, h	3x3 整数行列+3 有理数ベクトルクラス
fraction.h	有理数クラス
vector2d.h	二次元フィールドクラス
vector3d.h	三次元フィールドクラス
symbol.h	元素記号クラス
その他のデータファイル	
icon.bmp, rc, ico	アイコン画像
defaults.qtml	GUI パラメタの規定値
defaults.glml	GL オプションの規定値
spacegroup.db	空間群データベース

計算プログラムの規定値の変更

xTAPP の設定パラメタを調整する QT の GUI の初期値や指定可能な最小・最大値は以下の XML ファイル defaults.qtml に指定されています。プログラム起動時にこの内容が反映されます。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<defaults name="tapioca">

<TAPP>
<LSDA>
  <xctype default="0" />
  <nspin default="1" />
  <spinmode default="0" />
  <ipmode default="0" />
  <nfixed min="0" max="10" default="1" />
</LSDA>

<Cutoff>
  <qf min="1.0" max="100.0" default="12.1" />
  <rf min="1.0" max="100.0" default="30.0" />
  <qm min="1.0" max="100.0" default=" 6.0" />
  <qc min="1.0" max="100.0" default="12.0" />
  <beta min="0.0" max="1.0" default="0.4" />
</Cutoff>

<Mesh>
  <nd min="1" max="16" default="8" />
  <nk min="1" max="16" default="8" />
  <nw min="1" max="16" default="8" />
  <nb min="1" max="16" default="2 8" />
  ...
</Mesh>

<Ewald>
  <qgb min="1.0" max="50.0" default="25.0" />
  <qr&b> min="1.0" max="300.0" default="150.0" />
  <g_min="0.1" max="10.0" default="0.68" />
</Ewald>

<Sampling>
  <nkrnew min="0" max="1" default="1" />
  <l1 min="0" max="1" default="0" />
</Sampling>

<Parameter>
  <eps min="1.0e-20" max="1.0e-12" default="1.0e-16" />
  <eepsa min="1.0e-14" max="1.0e-6" default="1.0e-10" />
  <feeps min="1.0e-4" max="1.0e-2" default="1.0e-3" />
  ...
</Parameter>
...
</TAPP>
</defaults>
```

グラフィックスの規定色の変更

グラフィックでの画面や物体の色、原子半径は以下の XML ファイル defaults.gml1 に指定されています。このファイルを編集することでグラフィックのこれらの値を変更することができます。また起動時にフルスクリーン表示や正投影表示するように変更することもできます。なお、原子の半径は原子間の結合ボンドが描かれる判定条件ともなっています。

色は色名もしくは RGB 輝度の 16 進数値または[0:1]の範囲の小数値で指定できます。

マウス右クリックメニューの reload default.gml1 でこの編集内容を即時反映できます。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<gldefaults name="tapioca">

<Window fullscreen="off" perspective="on">
  <background color="0.0 0.0 0.0" />
</Window>

<Lattice>
  <atom element="X" radius="1.00" color="0.00 0.00 0.00" />
  <atom element="H" radius="1.00" color="1.00 1.00 1.00" />
  <atom element="He" radius="1.60" color="1.00 0.75 0.80" />
  <atom element="Li" radius="1.60" color="0.70 0.13 0.13" />
  ...
  <bond color="1.00 1.00 1.00" />
  <box color="1.00 1.00 1.00" />
</Lattice>

<Field>
  <fog>
    <gradation color="0.00 0.00 1.00 0.50" />
    ...
    <gradation color="1.00 0.00 0.00 0.50" />
  </fog>
  <isosurface>
    <gradation color="0.00 0.00 1.00 0.50" />
    ...
    <gradation color="1.00 0.00 0.00 0.50" />
  </isosurface>
  <crossection>
    <gradation color="0.00 0.00 1.00 0.50" />
    ...
    <gradation color="1.00 0.00 0.00 0.50" />
  </crossection>
</Field>
<Band>
  <background color="white" />
  <foreground color="black" />
  <gradation color="0.00 0.00 1.00 0.50" />
  ...
  <gradation color="1.00 0.00 0.00 0.50" />
</Band>
</gldefaults>
```

