

## Python を用いた原子構造可視化ツール「VisBAR」

### A python-based atomic structure visualization tool “VisBAR”

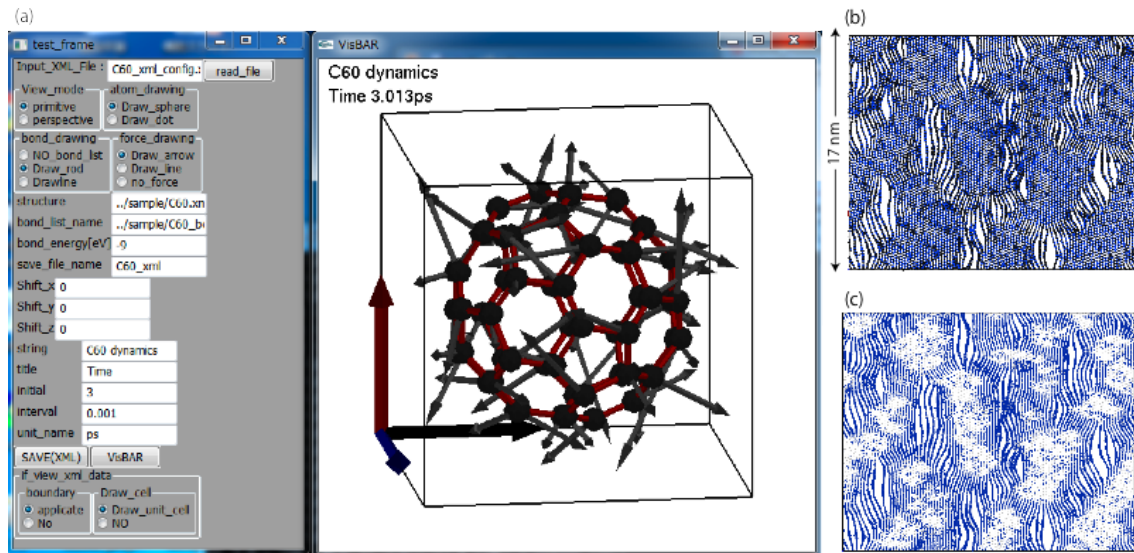
秋山洋平, 川居佳史, 星健夫; Y. Akiyama, Y. Kawai, T. Hoshi

鳥取大学 Tottori University

プログラミング言語 python (<http://python.org/>) をもちいて、電子状態計算むけ原子構造可視化ツール「VisBAR」(=Visualization tool with Ball, Arrow and Rod)の初期段階バージョンを開発した。概要と例(図)を述べる。原子座標・カベクトルなどを時系列的に可視化することができる。独自開発大規模電子状態計算コード ELSESES[1][2]との併用を主とし、下記2点を動機として開発している。

- (1) データ解析と可視化を一体処理し、独自に機能拡張できるコードが欲しい。大規模計算のデータ解析は、それ自体も大規模計算となる。現状での独自機能として、グリーン関数に基づく局所結合エネルギースペクトラム(COHP)理論[3][4]およびその拡張である $\pi$ COHP 理論[5]を用いて、結合描画ができる。
- (2) 様々な電子状態計算の結果を比較したい。現状では ELSESES[1]の他、Gaussian と VASP(OUTCAR 形式・vasprun.xml 形式)に対応している。汎用ファイルフォーマットである XYZ 形式(非周期系)・AXSF 形式(周期系)にも対応している。

内部的には、PyOpenGL (3D 可視化), mini DOM (XML 処理)、PIL(画像ファイル生成), wxPython (GUI)などのモジュールを用いている(GUI は必須ではない)。



図：(a) VisBAR の画面。結合描画には電子状態解析(COHP 理論)を用いている。(b)(c) 10 万原子系の例。ナノ多結晶ダイヤモンド研究[5][6]に現れる、 $sp^2$ - $sp^3$  ナノドメイン混合系。(b) COHP 理論による全結合領域の可視化、(c)  $\pi$ COHP 理論[5]による  $sp^2$ ( $\pi$ )結合領域のみの可視化。(b)で可視化され(c)で可視化されていない領域が、 $sp^3$  結合領域に相当する。

[1] <http://www.elses.jp> [2] 星, 当研究会発表. [3] Dronskowski and Bloechl, JPC 97, 8617 (1993) [4] Takayama, *et al.* JPSJ 73, 1519 (2004);PRB 73, 165108 (2006) [5] 星他, 日本物理学会 2012 年 3 月. [6] Hoshi *et al.*, JPCS 215, 012118 (2010).