

Python を用いた波動関数可視化ツールの開発 Development of a python-based wavefunction visualization tool

山崎 溪太, 秋山 洋平, 星 健夫 K. Yamazaki, Y. Akiyama, T. Hoshi, 鳥取大学 Tottori Univ.

プログラミング言語 python をもちいて、汎用な波動関数可視化ツール「VisBAR_wave_batch」を開発した。概要と例を述べる。

波動関数可視化ツールは多数あるが、大規模数値計算と可視化のシームレスな一体処理を目的として開発している。将来的には、(1)独自開発している大規模（オーダー N ）電子状態計算コード ELSESES[1-4]との統合、(2)多数の電子状態計算コード(Gaussian や平面化基底コード)にも対応した汎用な可視化ツール、(3) 拡張性をもった(研究者がそれぞれの目的に応じて書き換え可能な)ツール、を目標としている。

上記目的の一環として、汎用なバッチツールを開発した。多数の波動関数データファイル(Gaussian cube 形式)を、順次可視化していく。補助ツールを併用することで、動画も作成できる。Gaussian や(Gaussian cube 形式に対応した)他電子状態計算コードで用いることができる。可視化モジュールとして Visualization Tool Kit (<http://www.vtk.org/>)を用いている。本ツールは、独自の原子構造可視化ツール VisBAR パッケージ[3] [5]の一部として開発されている。本ツールは、近日中に試験公開予定。

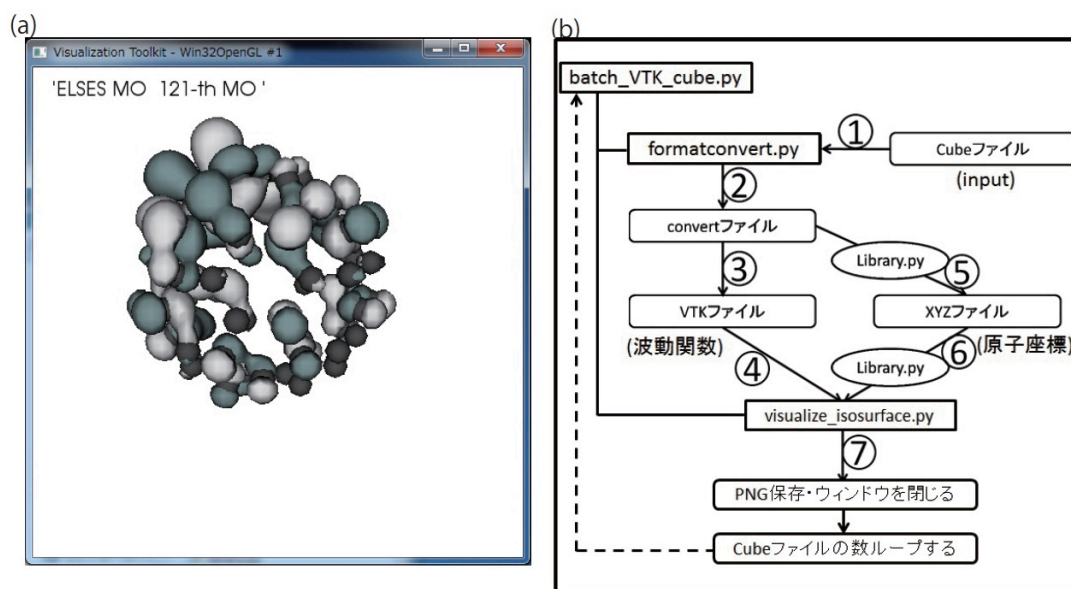


図 (a)波動関数の可視化例(*) : ELSESES[1-4]での水素吸着フラレン(C60H2)有限温度計算における、最高占有波動関数。(b) 可視化のワークフロー。

[1] <http://www.elses.jp/>; <http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/> [2] T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe, S.-L. Zhang, J. Phys.: Condens. Matter 24, 165502 (2012). [3] T. Hoshi, Y. Akiyama, T. Tanaka and T. Ohno, J. Phys. Soc. Jpn. 82, 023710 (2013). [4] 星・秋山, 本会. [5] VisBAR[3]の機能縮小版にあたる教育用ソフトは、下記で公開されている : VisBAR_edu http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/visbar_edu/ (*) 白黒印刷用に調整した図。