

文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発
「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」

CISS フリーソフトウェア

ナノ・物質・材料・マルチスケール機能シミュレーション

PHASE-Viewer ver.3.2.0

ユーザマニュアル

本ソフトウェアは文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトによる成果物です。本ソフトウェアを無償でご使用になる場合「CISS フリーソフトウェア使用許諾条件」をご了承頂くことが前提となります。営利目的の場合には別途契約の締結が必要です。これらの契約で明示されていない事項に関して、或いは、これらの契約が存在しない状況においては、本ソフトウェアは著作権法など、関係法令により、保護されています。

お問い合わせ先

(公開/契約窓口)	(財) 生産技術研究奨励会 〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1
(ソフトウェア管理元)	東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター 〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1 FAX: 03-5452-6662 E-mail: software@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

CISS フリーソフトウェア使用許諾条件

東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター（以下 革新センター）は、次の条件や制限のもとで、革新センターで管理・公開するプロジェクト等による成果物の全てまたは一部を無償で使用することを許します。

1．CISS フリーソフトウェアの定義革新センター（CISS）で管理しているソースプログラム、オブジェクトプログラム、仕様書、設計書、データ、実行結果 および マニュアルなどの内、インターネット上に公開しているソフトウェアを CISS フリーソフトウェアと呼びます。

2．無償使用の範囲利用者が CISS フリーソフトウェアを無償で利用できる行為には、自己のために CISS フリーソフトウェアを任意のデータを用いて実行する行為、その結果を利用者の自己のために使用する行為、CISS フリーソフトウェアを複製し頒布する行為、および、CISS フリーソフトウェアを改変しそれを実行する行為等を含みます。

3．改変・頒布での遵守事項 CISS フリーソフトウェアを変更したり、他のソフトに組み込む等の行為により、改変した CISS フリーソフトウェアを複製・頒布する場合は、そのソフトウェア名には CISS フリーソフトウェアの名称を残し（例えば、CISS フリーソフトウェアの名称を ProteinDF とした場合、 / ProteinDF のようにネーミング）かつ、著作権表示を行うことを義務づけます。目的の如何を問わず、CISS フリーソフトウェア内部コードの『著作権表示』記載部分を修正する行為は、改変者氏名や改変日時などの改変記録を追加する場合を除き、禁止されています。

4．著作権の表示利用者は、各々の CISS フリーソフトウェアの複製物に、ソフトウェア名・バージョン・著作者氏名などの著作権表示を表示の先頭部等の箇所に適切かつ目立つように掲載するとともに、頒布する場合は、複製物に本許諾条件の全文をそのまま添付しなければなりません。

5．利用者義務 CISS フリーソフトウェアを利用した結果を公表する場合には、関連プロジェクト等の成果を利用した（例：『革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクトの成果を利用した』）旨を、使用した CISS ソフトウェアの名前、バージョン、著作者氏名などの記載とともに、明示して下さい。利用者が CISS ソフトウェアを改変し、その実行結果を公表する場合は、改変内容や改変履歴が特定できる説明を添付して公表しなければなりません。利用者が CISS ソフトウェアのバグや不具合を発見した場合、東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センターに報告して下さい。発見したバグや不具合を許可なく公表したり、第三者に知らせることを禁止します。

6．営利目的に使用する場合利用者は、CISS フリーソフトウェアを下記 (1)～(3) に例示するような営利目的に使用する場合には、事前に別途営利目的の場合における実施許諾契約を締結する必要があります。

(1) 利用者が CISS フリーソフトウェアを複製・頒布する場合、著作物としての対価のみならず、複製ないし頒布に必要な経費など経済的価値を、頒布を受ける者に対して提示ないし要求すること。(2) 法人を含み利用者は、自己の目的に限り CISS フリーソフトウェア実行が許諾されているものであり、有償無償を問わず第三者へのサービスのために CISS ソフトウェアを実行する行為をすること。(3) 利用者は、自己が改変した部分も含み、CISS フリーソフトウェアを質権や担保など、いかなる商取引の対象に加えること。

ただし、公的機関が当該ソフトウェアの普及促進を目的としてそれを利用したサービスを提供する場合は、そのサービスの有償無償を問わず、別途その内容に関して革新センターとの間で覚書等を交わすことをもって営利目的用実施許諾契約締結の代用とすることができるとします。利用者が本項に反する行為を行った場合には、各ソフトウェア等の著作権者によりその利用を差し止められることを利用者は予め了解します。かつ、利用者は、それにより得た利益相当額の賠償をもとめられることも予め了解します。

7．無保証 CISS フリーソフトウェアは、その品質や性能あるいは実行結果について、利用者に対してはいかなる保証もされていません。利用者は自己の責任において使用することに同意することとし、もし使用することにより損害が生じた場合には、第三者への損害や被害の修復も含み、その結果責任は全て利用者に帰することとします。

8．利用者が本使用許諾条件に違反した場合利用者が本使用許諾条件に違反した場合には、利用者は、東京大学生産技術研究所がその状態を是正するために必要と認めて行う措置に無条件に従うものとします。

- 以上 -

License to Use CISS Free Software for noncommercial purposes
Terms and Conditions of the CISS Free Software License

The Center for Research on Innovative Simulation Software (CISS) at the Institute of Industrial Science, the University of Tokyo gives explicit permission for anyone to use any or all of the free software that is maintained and made publicly available at the CISS site free of charge, subject to the terms and conditions detailed below.

1. Definition of CISS Free Software

CISS Free Software is any software explicitly marked “ CISS Free Software ” in CISS project source programs, object programs, specifications, design specifications, data, implementation results, and instruction manuals.

2. Extent of Free Use

Users may use CISS Free Software free of charge to run their own data, and use any results obtained for their own personal use. Users also have the rights to copy, to modify, and to redistribute the CISS Free Software.

3. Rules for Modification and Distribution

If the user creates a modified version of CISS Free Software by modifying the software itself, by incorporating it into other software, or any other means; then copies and/or distributes the software, the user must retain the words “ CISS free software ” in the name of the modified version (e.g., if the CISS free software is named Protein DF, the new software is named _____/Protein DF.) and also display a copyright notice in the modified version.

The “ copyright notice ” in the internal code of the CISS Free Software may not be altered for any reason, except to update or add to modification records such as altering the name of the modifier or the date of modification.

4. Copyright Notice

Users must prominently and conspicuously display the copyright notice in every CISS Free Software copy at or near the beginning of the credits along with the name of the software, the version, and the copyright holder. When distributing copies of CISS Free Software, the user must attach the full text of these Terms and Conditions without any changes.

5. User Obligations

To publicly acknowledge that results have been achieved using CISS Free Software, users are obligated to clearly display the name, version, and copyright holder, and acknowledge that “these results were achieved by using Innovative Simulation Software for an Industrial Science Project. ”

If the user modifies the CISS Software and acknowledges that results were achieved using the software, the user must attach an explanation detailing how the software was modified.

We request that users report any bugs or problems they discover in using the CISS Software to the Center for Research on Innovative Simulation Software at the Institute of Industrial Science, the University of Tokyo. Users may not publicly announce or disclose bugs or problems they discover in CISS software without permission.

6. Commercial Use

If a user intends to use CISS Free Software for a commercial purpose such as described in examples (1)-(3) below, the user must enter into a separate commercial license agreement before using the CISS software.

(1) A user copies and distributes CISS Free Software, then demands compensation from the recipient for the software itself as a copyrighted product or for copying and distributing the software.

(2) A user (corporate or individual) uses CISS Free Software not for personal use but to provide services to other parties, regardless of whether the services are offered gratis or for a fee.

(3) A user seeks to assume a right of pledge, a security interest, or some other form of commercial interest in CISS Free Software, including portions of the software that were modified by the user.

The user acknowledges in advance that if he or she violates any of the provisions of this agreement, the copyright holder of any software shall prohibit the user from using the software. The user also acknowledges in advance that the copyright holder is entitled to be compensated by an amount equivalent to any profit gained by the user through the violation of the terms of this agreement.

7. No Warranty

The Institute of Industrial Science (IIS), the University of Tokyo, the Foundation for the Promotion of Industrial Science, and other concerned parties disclaim all warranties with respect to the quality, the performance, or the results of CISS Free Software, either express or implied. The user assumes sole responsibility for the use of CISS software including any damages or losses arising out of the use of the CISS software.

8. Violations of Terms and Conditions

If a user is found to be in violation of these Terms and Conditions, he or she agrees to immediately pursue any and all steps required by the Institute of Industrial Science, the University of Tokyo to get back into compliance.

目 次

第 1 章	はじめに	9
1.1	初回起動前の処理	9
1.1.1	Ghostscript の入手	9
1.1.2	起動スクリプトの編集	9
1.1.3	計算用ファイルの入手とコピー	10
1.2	初回起動	11
第 2 章	メイン画面	13
2.1	概要	13
2.2	メニュー	13
2.2.1	“Project” メニュー	14
2.2.2	“Module” メニュー	14
2.2.3	“Process” メニュー	14
2.2.4	“Window” メニュー	14
2.2.5	“Preferences” メニュー	14
2.2.6	“Help” メニュー	15
2.3	グローバルホットキー	15
第 3 章	ディレクトリーブラウザー	17
3.1	概要	17
3.2	操作方法	18
3.2.1	サブプロジェクト制御用 GUI の起動	19
3.2.2	システムのファイル管理プログラムを起動する	19
3.2.3	システムのターミナルを起動する	19
3.2.4	プロジェクト/サブプロジェクト管理	19
第 4 章	ネットワーク機能	23
4.1	概要	23
4.2	設定	23
4.3	SSH ターミナル	24
4.4	SFTP クライアント	25
4.5	パッチファイル転送	27
第 5 章	サブプロジェクト制御用 GUI	29
5.1	PHASE 制御用 GUI	29
5.1.1	初期化用 GUI	29
5.1.2	PHASE 入力ファイル作成ウィザード	30
5.1.3	情報表示 GUI	31
5.1.4	入力ファイル編集	33
5.1.5	実効制御用 GUI	53
5.1.6	計算結果解析	54
5.2	ekcal 制御用 GUI	65
5.2.1	初期化用 GUI	65
5.2.2	情報表示 GUI	66
5.2.3	入力ファイル編集	67
5.2.4	実効制御用 GUI	69
5.2.5	結果解析	69
5.3	uvsor-epsilon 制御用 GUI	70
5.3.1	初期化用 GUI	70
5.3.2	情報表示 GUI	70
5.3.3	入力ファイル編集	71

5.3.4	実効制御用 GUI	72
5.3.5	結果解析	72
第 6 章	ジョブ制御	75
6.1	概要	75
6.2	ジョブ監視	75
6.3	スクリプトの利用	75
6.4	BeanShell スクリプトの利用方法	78
6.5	BeanShell スクリプトの例	79
6.5.1	PHASE→ekcal 計算を行うスクリプトのサンプル	80
6.5.2	セルを一様に拡大しながら SCF 計算を行うスクリプトのサンプル	82
6.6	同梱 BeanShell スクリプトの利用方法	84
6.6.1	scf-dos.bsh	84
6.6.2	scf-band.bsh	84
6.6.3	scf-epsilon.bsh	84
6.6.4	uniform_exp.bsh	84
6.6.5	phonon.bsh	85
6.6.6	cell_relax.bsh	85
6.7	BeanShell スクリプトより利用可能な関数	85
第 7 章	座標データのインポート/エクスポート	87
7.1	対応するファイル形式	87
7.2	基本的な操作方法	87
7.3	具体例	89
7.3.1	古典分子動力学シミュレーションとの連携	89
7.3.2	PHASE の計算結果からの入力	90
7.3.3	振動解析計算の結果の可視化	90
7.3.4	PHASE-Viewer 形式の書き出し, 読み込み	91
7.3.5	結晶構造データベースとの連携	93
第 8 章	原子配置ビューアー	95
8.1	概要	95
8.2	起動方法	96
8.3	アイコンとメニュー	96
8.4	座標のインポート・エクスポート	98
8.5	マウス操作	98
8.5.1	基本操作	98
8.5.2	原子の選択	98
8.6	キーボードによる操作	99
8.6.1	ホットキー一覧	99
8.6.2	ホットキー設定	99
8.7	表示	100
8.7.1	表示のカスタマイズ	100
8.7.2	元素情報	103
8.7.3	矢印	104
8.7.4	カラーバー	105
8.7.5	光源	105
8.7.6	水素結合	107
8.7.7	軸のカスタマイズ	108
8.7.8	その他	108
8.8	編集	109
8.8.1	原子の属性変更	109
8.8.2	複数の原子の編集	110
8.8.3	マウスによる座標の編集	111
8.8.4	原子配置表示テーブル	111
8.8.5	アンドゥ・リドゥ	113
8.9	測定	113
8.10	単位胞	114
8.10.1	基本格子とブラベー格子の相互変換	114

8.10.2	単位胞の表示方法の変更	116
8.11	動画	117
8.12	電荷密度の可視化	119
8.12.1	等値面の描画方法	119
8.12.2	等高線の描画方法	120
第 9 章	逆空間ビューアー	123
9.1	概要	123
9.2	起動方法	123
9.3	k 点エディター	124
9.3.1	対称点の作成	124
9.3.2	k 点メッシュの作成	125
9.4	フェルミ面	126
9.5	エネルギーの等高線	126
9.6	表示設定	126
9.6.1	全体的な表示の設定	127
9.6.2	対称点/対称線の表示の設定	128
9.7	ホットキー	128
第 10 章	グラフツール	129
10.1	概要	129
10.2	グラフの作成	129
10.2.1	“quick plot” ボタンによるグラフ作成	129
10.2.2	データセット制御モジュール	130
10.2.3	複数軸を持つグラフの作成	131
10.2.4	複数グラフを並べて描画	131
10.2.5	データセットのインポート/エクスポート	133
10.3	グラフ表示画面	134
10.3.1	画像ファイルエクスポート	135
10.3.2	マウスによる操作	135
10.3.3	表示のカスタマイズ	135
第 11 章	画像ビューアー	143
11.1	画像ファイル一覧	143
11.2	画像ファイル閲覧	144
付 録 A	共通の GUI および操作	147
A.1	選択ダイアログ	147
A.1.1	ファイル選択ダイアログ	147
A.1.2	フォント選択ダイアログ	147
A.1.3	カラー選択ダイアログ	147
A.2	テーブルの仕様	148
A.2.1	コピー・ペースト	148
A.2.2	テーブル上のデータの編集	148
A.2.3	グラフ機能付きテーブル	148
A.3	画像ファイルエクスポート	149
A.4	複数データの選択	150
付 録 B	コンパイル	151
B.1	準備	151
B.2	コンパイル	151
付 録 C	外部ライブラリー/ソフトウェアのライセンス	153
C.1	外部ライブラリー・ソフトウェア	153
C.2	使用ライブラリーのライセンス	154
C.2.1	Java Runtime Enviroment と Java3D のライセンス	154
C.2.2	GNU Lesser General Public ライセンス	156
C.2.3	JFontChooser のライセンス	158
C.2.4	SkinLF のライセンス	159
C.2.5	gnuplot のライセンス	159

C.2.6	Apache ライセンス	160
C.2.7	JSch のライセンス	162

第1章 はじめに

本マニュアルは、PHASE-Viewer バージョン 3.1(以下 PHASE-Viewer) のユーザーマニュアルです。PHASE-Viewer の全機能を詳細に説明します。

PHASE-Viewer は、第一原理擬ポテンシャル電子状態計算プログラムである PHASE をはじめとする、主に固体用のシミュレーションソフトウェアによる計算を簡便にすることを目的とした統合環境です。PHASE-Viewer をご利用いただくことにより、下記の操作を統一された Graphical User Interface(以下 GUI) 上で行うことが可能です。

- 計算のファイルやディレクトリーの管理 (第 3 章).
- 入力ファイルの作成, 編集 (第 5 章).
- 原子配置の可視化, 編集 (第 5 章, 第 8 章).
- 第一ブリュアンゾーンの可視化, マウスクリックによる対称 k 点ファイルの作成 (第 9 章).
- ローカルおよびリモートホストへのジョブ投入 (第 4 章, 第 5 章).
- BeanShell スクリプト¹による, 高度な計算の制御 (第 6 章).
- 計算結果の解析 (第 5 章).
- 原子配置取り込み (第 7 章).
- グラフ作成, 画像ファイル作成・閲覧 (第 10 章, 第 11 章).

本節の残りの部分では、PHASE-Viewer を使い始めるまでの手続きを説明します。以下の説明では、インストールディレクトリーを “INST_DIR” と表記します。

1.1 初回起動前の処理

ここでは、PHASE-Viewer を一番最初に起動する前に行っておくことをお勧めする処理を説明します。

1.1.1 Ghostscript の入手

PHASE-Viewer で PostScript(ps) 形式, Encapsulated PostScript(eps) 形式および Portable Document Format(pdf) 形式のファイルを表示するには、Ghostscript(<http://www.cs.wisc.edu/~ghost/>) というプログラムが必要です。お使いのコンピューターにインストールされていない場合、あらかじめ上記 URL からダウンロードしていただきインストールしておくことをお勧めします。

1.1.2 起動スクリプトの編集

インストーラーによって PHASE-Viewer の起動スクリプトが作成されますが、ご利用の環境に応じて若干の編集を施していただくとより一層便利にお使いいただけるようになります。起動スクリプトのパスは、INST_DIR/bin/phase-viewer_DIR ¥ bin ¥ phase-viewer.bat(Windows) です。起動スクリプトをエディターで開くと、下記のような行が見つかるはずです。²

```
INST_DIR/_jvm/bin/java -Djava.library.path=INST_DIR/lib -Dchase.home=INST_DIR
-Dfile.encoding=SHIFT_JIS -jar INST_DIR/bin/phase-viewer.jar
```

¹<http://www.beanshell.org/>, Java 仮想マシン上で動作するスクリプト環境

²OS によって若干の違いはあります。

このままでも PHASE-Viewer を起動することはできますが、「JVM が利用できるメモリの最大値」を変更しておくことをお勧めします。ただしこの値はインストール時に入力促されたはずであり、そこで設定した値で問題ないのならばここであらためて設定し直す必要はありません。

「JVM が利用できるメモリの最大値」を指定するには、JVM に `-Xmx???m` というオプションを渡します。ここで `???` は任意の整数であり、JVM が動的に確保するメモリの最大値をメガバイト単位で指定します。たとえば JVM が最大 1GB のメモリを利用することを許可する場合、上記のコマンドを次のように書き換えてください。

```
INST_DIR/_jvm/bin/java -Djava.library.path=INST_DIR/lib -Dchase.home=INST_DIR
-Dfile.encoding=SHIFT_JIS -Xmx1000m -jar INST_DIR/bin/phase-viewer.jar
~~~~~
```

あくまで確保し得る最大のメモリであり、いきなりここで指定した値を JVM が確保するわけではありません。従ってある程度大きな値を指定しても通常問題はありますが、実装メモリを超える値は指定しないようご注意ください。³

1.1.3 計算用ファイルの入手とコピー

PHASE-Viewer を利用して計算を行う場合、CISS フリーソフトウェアである PHASE, ekcal, uvsor-epsilon や擬ポテンシャルファイルが必要になります。⁴ <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/> からダウンロードし、コンパイルしておくことをお勧めします。その後できればコマンドライン上で正しく動作することをご確認ください。

PHASE-Viewer を介して計算を行うには、計算用のバイナリーなどを所定のパスにコピーしていただく必要があります。この処理は、計算用のプログラムをローカルホストに置くのかリモートホストに置くのかで異なります。

計算用プログラムをリモートホストに配備する場合 この場合は、リモートホストに PHASE-Viewer が参照するディレクトリーを作成する必要があります。目的のホストの任意の場所にディレクトリーを作成し (以後 `REMOTE_INST_DIR` と表記)、その下に “bin” という名前のディレクトリーを作成してください。 `REMOTE_INST_DIR/bin` 以下に `phase`, `ekcal`, `epsmain` などのバイナリーファイルをコピーしてください。他方 PHASE TOOLS で提供されている各種 Perl スクリプトは、ローカルホストの `INST_DIR/bin` 以下にコピーしてください。 `BioStationViewer` をお持ちの場合、 `BioStationViewer.jar` というファイルをやはりローカルホストの `INST_DIR/bin` の下に置いてください。また、擬ポテンシャルファイルはローカルホストの `INST_DIR/pp` 以下にコピーしてください。その後、第 4.2 節にて説明している設定を目的のホストについて行ってください。

計算用プログラムをローカルホストに配備する場合 この場合は、ローカルホストに直接ファイルを置きます。 `phase`, `ekcal`, `epsmain` などのバイナリーファイルを、 `INST_DIR/bin` 以下にコピーしてください。 `BioStationViewer` をお持ちの場合、 `BioStationViewer.jar` というファイルをやはり `INST_DIR/bin` の下に置いてください。また、PHASE TOOLS で提供される各種 Perl スクリプトも `INST_DIR/bin` 以下に置いてください。最後に、擬ポテンシャルファイルを `INST_DIR/pp` 以下にコピーしてください。

計算用のホストは複数あっても構いません。また、ローカルホストとリモートホストが混在していても問題ありません。

³大きな値を指定すると、第 8 章にて説明するビューアーの動作が不安定になる場合があります。この場合、より小さな値を指定するようにしてください。

⁴PHASE-Viewer 同梱のサンプルで利用する擬ポテンシャルはインストーラーによってインストールされます。

1.2 初回起動

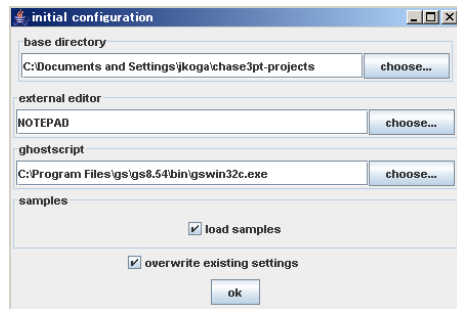


図 1.1: 初回起動時に現れる, 初期設定を行う画面.

レクトリーを指定します。既存のディレクトリーでも問題なく動作するはずですが、新規ディレクトリーを指定しておいた方が後々分かりやすいと思います。既定の値は、Linux の場合 `$HOME/chase3pt-projects`、Windows の場合 `%userprofile%\chase3pt-projects` です。

起動は、起動スクリプトを実行するのみです。起動スクリプトは下記のパスにあるはずですが (Windows の場合は、スタートメニューからすべてのプログラム → CISS → PHASE-Viewer → PHASE-Viewer とお選びいただくことによって起動することもできます)。

Windows : `INST_DIR\bin\phase-viewer.bat`

Linux : `INST_DIR/bin/phase-viewer`

初回起動時には、ユーザーごとの初期設定を行う画面、図 1.1 が現れるはずですが、各設定項目を説明します。

base directory 計算用のディレクトリーや擬ポテンシャルファイルなどを格納する、一番上位のディ

external editor 外部エディターを指定します。既定の値は、Windows の場合 NOTEPAD、Linux の場合 emacs です。

ghostscript ghostscript へのパスを指定します。⁵ 既定の値は、Linux の場合 `/usr/bin/gs`、Windows の場合はまずシステムを簡単に検索し、見つけれればその実行パス、見つからない場合は空白です。

samples サンプルデータをロードするかどうかを選べます。有効にしておいていただくことをお勧めします。

overwrite existing settings 前バージョンをすでにお使いの場合、前バージョンの設定ファイルを上書きしてよい場合有効にしておきます。上書きしても前バージョンは問題なく動作いたしますので、上書きすることをお勧めします。

設定が終わったら “ok” ボタンをクリックしてください。設定ファイルのコピーなどが行われた後、本体が起動します。なお、PHASE-Viewer が利用する設定ファイルやスクリプトテンプレートなどは `$HOME/.chase` (Linux) ないし `%userprofile%\chase` (Windows) ディレクトリー以下に保存されます。

⁵Windows の場合、“gswin32c.exe” という実行ファイルを指定してください

第2章 メイン画面

2.1 概要

起動後, 図 2.1 のような画面が得られます. この画面について説明します.

まず, 左端に見える GUI は「ディレクトリーブラウザー」(第3章)です. これまで行った計算用の (あるいはこれから行う計算用の) ディレクトリーなどをツリー表示します. この GUI によって, 計算の管理を分かりやすく行うことが可能です.

下の画面はログを閲覧するためのものです. 右のほうにある, “save log” ボタンをクリックすれば外部ファイルにログをエクスポートすることも可能です. また, 画面上方にはメニューが表示されています. 図 2.1 から以上を除いた部分 (以降「デスクトップ」と表記します) を利用して各種制御用 GUI を表示します.

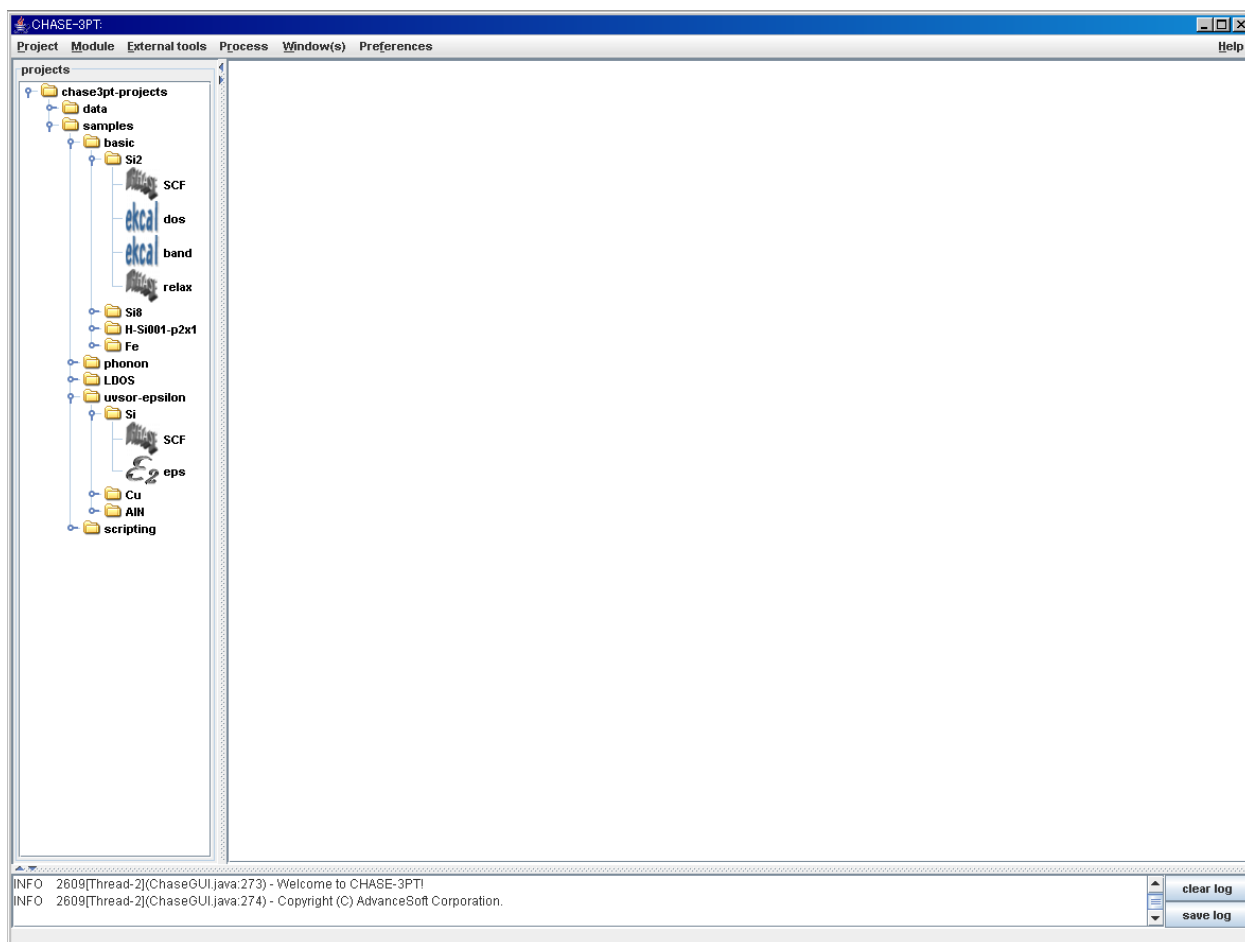


図 2.1: PHASE-Viewer 起動時に得られる主画面.

2.2 メニュー

ここでは, 図 2.1 に見えるメニューの説明をします. 尚, 図 2.1 上に表示されているメニューは, デスクトップ上の何も無いところで右クリックすることによっても得ることが可能です.

2.2.1 “Project” メニュー

第3章で説明する、「ディレクトリーブラウザー」の操作を行うためのメニューです。詳細は第3章にて解説します。

2.2.2 “Module” メニュー

このメニューから、PHASE-Viewer で利用できる便利なモジュールなどを呼び出すことができます。以下の項目があります。

ssh terminal 第4.3節で説明する、SSH ターミナルを起動します。

sftp client 第4.4節で説明する、SFTP クライアントを起動します。

configure host info 第4.2節で説明する、ホスト情報設定用 GUI を起動します。

atomic configuration viewer 第8章にて説明する、内蔵の原子配置ビューアーを起動します。

graph tool 第10章にて説明する、内蔵のグラフツールを起動します。

image viewer 第11章にて説明する、内蔵の画像ファイルビューアーを起動します。

BioStationViewer CISS フリーソフトウェアの一つである、BioStationViewer を起動します。BioStationViewer の詳細については BioStationViewer のユーザーマニュアルをご覧ください。

2.2.3 “Process” メニュー

ユーザーのプロセスを監視することができます。¹ ローカルホストのプロセスだけでなく、第4章の設定を行うことによりリモートホストのプロセスも見ることができます（メニューの項目に、設定したホスト情報が表示されます）。

図 2.2 にプロセスを表示している例を図示します。図 2.2 で表示されているボタンは、各々次の機能が割り当てられています。

reload ボタン デフォルトでは5秒に一回プロセス情報が更新されますが、このボタンをクリックするとただちにプロセス情報が更新されます。

close ボタン プロセスビューアーを閉じます。

kill -TERM ボタン 選択中のプロセスに、TERM シグナルを送ります。ほとんどのプロセスをこの操作で停止することができます。

kill -KILL ボタン 選択中のプロセスに、KILL シグナルを送ります。“kill -TERM” で停止できなかったプロセスでもこのボタンによって停止することができます。

2.2.4 “Window” メニュー

まず、最上位に “select from projects” という項目があります。これを選択すると現在アクティブなウィンドウに対応するノードをディレクトリーブラウザーにて選択状態にします。また、現在デスクトップ上にあるウィンドウの一覧を動的に作成し、表示します。現れたリストから項目を選択すると、対応するウィンドウがアクティブになります。

2.2.5 “Preferences” メニュー

PHASE-Viewer の設定を行うことができます。現在設定項目には下記があります。

program paths 外部プログラムのパスを指定します。² 指定する必要がある外部プログラムは外部エディターと ghostscript です。図 2.3 に設定用 GUI を図示します。“external editor” に外部エディターへのパスを、“ghostscript” に ghostscript へのパスを指定してください。Windows の場合、指定すべき ghostscript の実行ファイルは “gswin32c.exe” というファイルであることにご注意ください。

¹ ローカルホストが対象で、Windows の場合はタスクマネージャーが起動します。

² 初回起動時に正しくパスを指定した場合この設定は不要です。

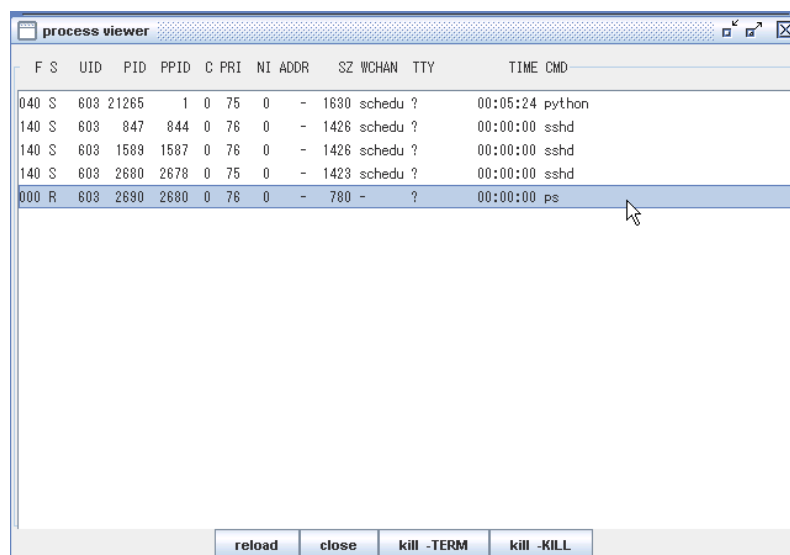


図 2.2: プロセスビューアーのスクリーンショット.

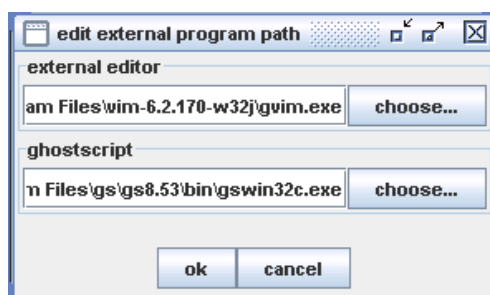


図 2.3: 外部プログラム設定用 GUI.

Look & Feel この項目より, “ルックアンドフィール (プログラム全体の見栄え)” を変更することができます. “Look & Feel” メニューに用意されている選択肢を色々選んでみてください. 全体の見栄えが変更されるはずですが. ルックアンドフィールは, <http://www.javootoo.com/> というウェブサイトから取得することができます. このサイトの “Skin Look And Feel” というページへ行きファイルをダウンロードして, INST_DIR/lib/skinlf というディレクトリーにそのファイルを置けば新しいルックアンドフィールを使用することができます.

restore default settings .chase 以下の設定ファイルをデフォルトのものに戻す場合, このメニューを選択してください.

2.2.6 “Help” メニュー

このドキュメントを表示します. また, バージョン情報を閲覧することもできます.

2.3 グローバルホットキー

PHASE-Viewer には, いくつかグローバルなホットキーが割り当てられています. ここで, その一覧を紹介します. これらのホットキーは, PHASE-Viewer を利用している間はいつでも有効です.

CTRL+W 現在アクティブなフレームを閉じます.

CTRL+Q プログラムを終了します.

CTRL+SHIFT+T ディレクトリーブラウザーへフォーカスを移します.

CTRL+TAB 起動中のフレームをトグルします.

CTRL+SHIFT+TAB CTRL+TAB の場合とは逆の方向で起動中のフレームをトグルします.

CTRL+SHIFT+1 現在アクティブなフレームに対応するノードをディレクトリーブラウザーから選択します.

F1 この文章を呼び出します.

第3章 ディレクトリーブラウザー

本章では, PHASE-Viewer のファイル管理を担う「ディレクトリーブラウザー」の機能を説明します. この機能によってこれまで行ってきた計算の管理が容易になり, また参照しやすくなるものと期待されます.

3.1 概要

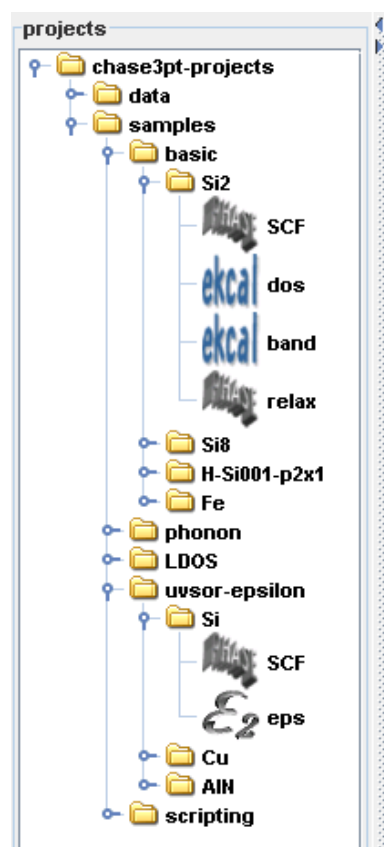


図 3.1: ディレクトリーブラウザーのスクリーンショット.

数多くの計算を行っていると, 入力ファイルや出力ファイルなどの管理がだんだん難しくなってきます. ここで説明する「ディレクトリーブラウザー」を利用することによって, これまで行ってきた計算の管理や参照がしやすくなります.

ディレクトリーブラウザーのスクリーンショットを図 3.1 に図示します. ディレクトリーブラウザーは図 2.1 に示すようにメイン画面には常に存在しますが, さらにファイル選択ダイアログなど様々なところで利用されており (付録 A.1.1 節参照), 計算ディレクトリーの参照が容易となるよう配慮されています.

PHASE-Viewer は, 計算用のディレクトリーを便宜上下記のように分類しています.

プロジェクト いくつかの計算を一まとめで管理するための単位; このディレクトリーの下に直接計算用のファイルが置かれることはない.

サブプロジェクト 実際の計算用ファイルが置かれたり, あるいは実際に計算が実行されるディレクトリー.

「プロジェクト」は, 図 3.2(a) で示すアイコンによって表示されます. プロジェクトの下にはプロジェクトもサブプロジェクトも作成することが可能ですが, 「ルートプロジェクト」の下にはプロジェクトのみ作成可能です. サブプロジェクトの下にはサブプロジェクトを作成することはできますが, プロジェクトを作成することはできません. ただし, 「data」プロジェクト, 「擬ポテンシャルサブプロジェクト」の下には何も作成することができません.



図 3.2: ディレクトリーブラウザーで利用されるアイコン

「サブプロジェクト」を表すノードのアイコンは, そのサブプロジェクトが対象としている計算の種類によって変わります. サブプロジェクトを表すアイコンは, 現在のところ下記の通りです.

擬ポテンシャル, 図 3.2(b) 擬ポテンシャルディレクトリーが格納されているディレクトリーの内容を閲覧することができます. “data” プロジェクトの下にある “pseudopotential” サブプロジェクトのノードをダブルク

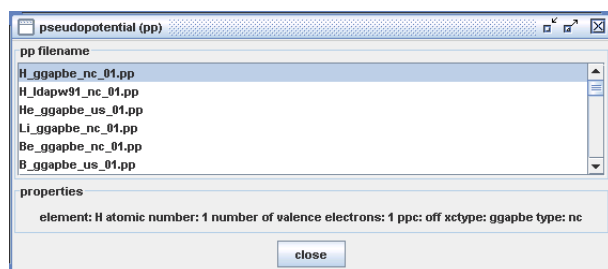


図 3.3: 登録されている擬ポテンシャルの性質を閲覧する画面。

リックすると図 3.3 を得ます。この画面は、まず “pp filename” 領域に登録されている擬ポテンシャルのリストが表示されます。また、このリストから任意の擬ポテンシャルを選択すると下記の情報が “properties” 領域に表示されます。

element 元素名を表示します。

atomic number 原子数を表示します。

number of valence electrons 価電子数を表示します。価電子数は、元素によっては通常内殻電子とみなされる電子が含まれる場合があるのでご注意ください。

ppc コア補正が入っているか否かを “on” か “off” で表示します。

xctype 交換相関エネルギーの計算方法が表示されます。GGA の場合は ggapbe, LDA の場合は ldapw91 と表示されます。

type ノルム保存型の擬ポテンシャルかウルトラソフト型の擬ポテンシャルかが表示されます。“nc” の場合ノルム保存型、“us” の場合ウルトラソフト型になります。

擬ポテンシャルファイルは、ユーザーごとに個別に管理されます。新たに登録するには、第 1.2 節で設定した “base directory” にある data ディレクトリーの下の pseudopotential ディレクトリーにコピーしてください。

PHASE, 図 3.2(c) PHASE による計算を制御するサブプロジェクトを表します。

ekcal, 図 3.2(d) ekcal による計算を制御するサブプロジェクトを表します。

uvsor-epsilon, 図 3.2(e) uvsor-epsilon による計算を制御するサブプロジェクトを表します。

3.2 操作方法

ディレクトリーブラウザーのメニューは、メイン画面の “Project” メニュー (第 2.2 節) をクリックするか、プロジェクト/サブプロジェクトを表すノードを右クリックすると現れます。図 3.4 にプロジェクトを表すノードを右クリックした際に得られるメニューを、図 3.5 にサブプロジェクトを表すノードを右クリックした際に得られるメニューを図示します。同様のメニューは、“Project” メニューを選択した場合でも得られます。この場合は、ディレクトリーブラウザーが選択中のノードによって得られるメニューが変わります。

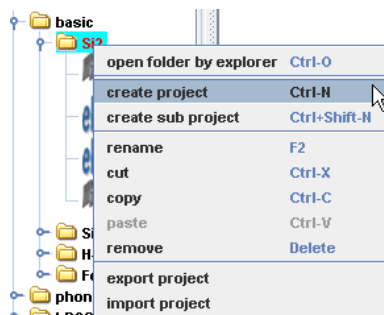


図 3.4: プロジェクトノードを右クリックした様子。

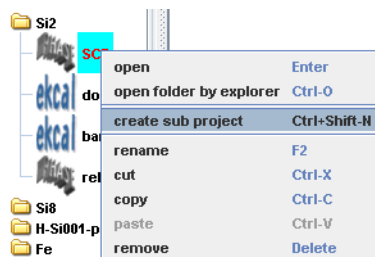


図 3.5: サブプロジェクトノードを右クリックした様子。

3.2.1 サブプロジェクト制御用 GUI の起動

サブプロジェクト制御用 GUI(第 5 章) は, 下記の操作によって起動することができます.

- サブプロジェクト用メニューから, “open” を選択する.
- 対応するノードをダブルクリックする.
- 対応するノードを選択状態にし, Enter キーを押下する.

3.2.2 システムのファイル管理プログラムを起動する

プロジェクト/サブプロジェクトの, 対応するディレクトリーをシステムのファイル管理プログラムで起動することができます.

Windows メニューから, “open folder by explorer” を選択します (あるいは Ctrl+O と押下します). 対応するフォルダーをエクスプローラーで開きます.

Linux メニューから, “open directory by konquerer” を選択します (あるいは Ctrl+O と押下します). Konquerer プログラムがインストールされているなら Konquerer によって対応するディレクトリーを開きます.

3.2.3 システムのターミナルを起動する

プロジェクト/サブプロジェクトの, 対応するディレクトリーをシステムのターミナルを引数に起動することができます. メニューから “open terminal” を選択する (あるいは Ctrl+T と押下する) と, Windows の場合 CMD.exe, Linux の場合 xterm を, 対応するディレクトリーを初期ディレクトリーとして起動します.

3.2.4 プロジェクト/サブプロジェクト管理

プロジェクト/サブプロジェクトの作成方法などについて説明します.

3.2.4.1 新規作成

プロジェクトの新規作成を行うには, そのプロジェクトの親プロジェクトを選択状態にし, メニューから “create project” と選択 (あるいは Ctrl+N 押下) してください. また, サブプロジェクトの新規作成を行うには, 親プロジェクト/親サブプロジェクトを選択状態にし, “create sub project” と選択 (あるいは Ctrl+Shift+N 押下) してください. それぞれ対応する GUI が起動します.

プロジェクトを新規作成する場合, 図 3.6 に図示している, 「新規プロジェクト作成用 GUI」が起動します. この GUI では下記の設定を行い, 新規プロジェクトの初期設定を行ってください.

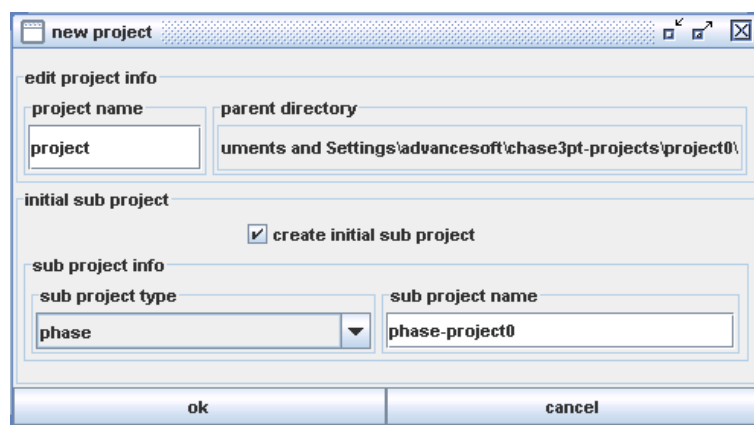


図 3.6: 新規プロジェクト作成用 GUI.

プロジェクト名を入力する “edit project info” 領域の “project name” というテキストフィールドにプロジェクトの名前を入力してください. プロジェクトの名前は, そのまま対応するディレクトリーの名前となります.

新規サブプロジェクトも同時に作成するか否か選択 現在作成しようとしているプロジェクトの下に新規サブプロジェクトも作成したい場合、“initial sub project”領域の“create initial sub project”とあるチェックボックスを有効にしてください。

新規サブプロジェクトの初期設定 新規サブプロジェクトを作成する設定にしている場合、さらにその新規サブプロジェクトについても設定を行う必要があります。“sub project info”領域の“sub project type”リストからサブプロジェクトの種類を(現在, PHASE, ekcal, uvsor-epsilon のいずれかを選択できます)、“sub project name”テキストフィールドにサブプロジェクトの名前を入力してください。

以上の操作の後、“ok” ボタンをクリックするとプロジェクトが作成されます。さらに初期サブプロジェクトも作成する、とした場合サブプロジェクトの種類に応じた初期化用 GUI が起動します。各サブプロジェクト制御用 GUI が提供する初期化用 GUI については、第5章をご覧ください。

サブプロジェクトを新規作成する場合は、図3.7に示す「新規サブプロジェクト作成用 GUI」が起動します。こ

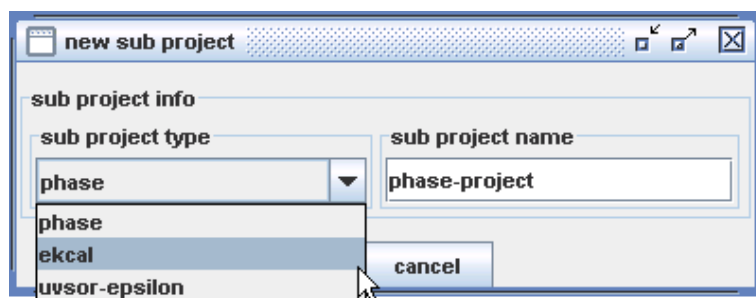


図 3.7: 新規サブプロジェクト作成用 GUI.

の GUI では、下記の設定を行ってください。

サブプロジェクトの種類を選択 “sub project type” リストよりサブプロジェクトの種類を選択してください。前述したように、新規作成可能なサブプロジェクトの種類としては現在 PHASE, ekcal, uvsor-epsilon の三種類を用意しています。

サブプロジェクトの名前を入力 “sub project name” テキストフィールドに、新たに作成したいサブプロジェクトの名前を入力してください。ここで指定した名前が、対応するディレクトリーの名前にもなります。

上記の設定を行ったら “ok” ボタンをクリックしてください。第5章にて詳しく説明する、サブプロジェクト初期化用 GUI がサブプロジェクトの種類に応じて起動します。

3.2.4.2 リネーム

プロジェクト/サブプロジェクトをリネームするには、メニューから “rename” を選んでください(あるいは F2 キーを押下してください)。図3.8に図示している、リネーム用 GUI が起動します。図3.8の “input new name” というテキストフィールドに新しい名前を入力し、“OK” をクリックしてください。対応するプロジェクト/サブプロジェクト(対応するディレクトリーも含め) がリネームされます。

3.2.4.3 削除

プロジェクト/サブプロジェクトを削除する場合は、メニューから “remove” を選んでください(あるいは delete キーを押下してください)。図3.9が得られます。ここで、対応するディスク上のファイルやディレクトリーまで削除したい場合は “remove files and directories too” というチェックボックスを有効にして¹、本当に削除してよいなら “OK” をクリックしてください。なお、この操作を経ずに対応するディレクトリーを直接削除しても特に問題は生じません。

3.2.4.4 カット/コピーアンドペースト

プロジェクト/サブプロジェクトを別のノードの下に移動したりコピーしたりすることができます。これは、下記の操作によって実現できます。

¹有効にしない場合は、PHASE-Viewer の登録から外れるのみです

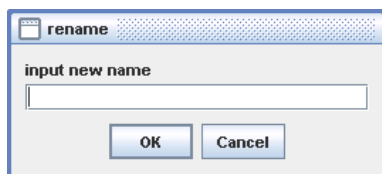


図 3.8: プロジェクト/サブプロジェクトをリネームする際に得られる画面。

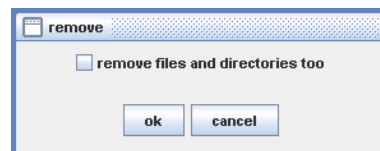


図 3.9: プロジェクト/サブプロジェクトを削除する際に得られる画面。

移動する場合 移動元のプロジェクト/サブプロジェクトを選択し、メニューから“cut”を選択します（あるいは Ctrl+X と押下します）。その後、目的のノードを選択し、メニューから“paste”を選択します（あるいは Ctrl+V と押下します）。

コピーする場合 コピー元のプロジェクト/サブプロジェクトを選択し、メニューから“copy”を選択します（あるいは Ctrl+C と押下します）。その後、目的のノードを選択し、メニューから“paste”を選択します（あるいは Ctrl+V と押下します）。

ここでいくつか注意点を挙げます。

- ekcal や uvsor-epsilon は PHASE のディレクトリーを参照します。この参照は更新されないで、ekcal や uvsor-epsilon サブプロジェクトに対して上記の操作を行う場合は参照する PHASE サブプロジェクトを指定し直して下さい。²
- “cut” 操作と前述の “remove” 操作は似ているように見えますが、内部的な振る舞いは全く異なります。“remove” の場合は操作を行ったその場で削除が行われ、新しいノードの下に足すこともできません。他方 “cut” の場合は操作を行った直後は元のプロジェクト/サブプロジェクトは不変です。“paste” が成功した場合に限り元のプロジェクト/サブプロジェクトが削除されます。

3.2.4.5 エクスポート/インポート

プロジェクトをエクスポートしたりインポートしたりすることができます（サブプロジェクトに対してはできません）。下記の操作を行ってください。

エクスポート エクスポートしたいプロジェクトを選択した状態でメニューから“export”を選択します。するとファイル選択ダイアログが現れるのでエクスポート先の ディレクトリー を選択し、“OK” ボタンをクリックしてください。エクスポート作業が行われます。

インポート インポート先のプロジェクトを選択した状態でメニューから“import”を選択します。するとファイル選択ダイアログが現れるので、上の操作でエクスポートしたディレクトリーの下にある“spec.xml”というファイルを選択してください。インポート作業が始まり、選択中のプロジェクトの下にそのプロジェクトが作成されます。また、エクスポート操作を経ないプロジェクトをインポートすることも可能です。

3.2.4.6 サブプロジェクト管理に関する一般的な注意

ここで、サブプロジェクトの管理について一般的な注意を述べます。

サブプロジェクトの名前 プロジェクト/サブプロジェクトの名前は、お使いの OS が許すならばどのような文字列でも利用することができます。しかし、できるだけ英数字のみをお使いいただくことをお勧めします。また、空白文字も避けることをお勧めします。

サブプロジェクトのリネームやペーストについて サブプロジェクトをリネームする、あるいはコピー/カットアンドペーストを行う場合、元のディレクトリー構成も変更されます。ジョブをリモートホストで行っている場合、リモートホストの対応するディレクトリー構成を変更することはいたしませんので注意が必要です。

²ただし参照は相対パスで行われるので、参照する PHASE サブプロジェクトも同時に移動/コピーする場合は問題ありません

第4章 ネットワーク機能

PHASE-Viewer には、ネットワークを介してリモートホストにファイルを転送したり計算を投入することを支援する機能があります。ここでは、この機能について説明します。

4.1 概要

シミュレーションの行い方は様々ですが、通常ユーザーが直接操作することができる計算機の計算パワーは大きくないと考えられます。そこで、多くの場合ローカルホストで入力ファイルの準備などを行い、計算サーバーに計算を投入し、結果をローカルホストに転送し解析する、という作業を行うことになります。PHASE-Viewer はこの一連の操作を支援する機能を有しています。

通信の手段として、SSH プロトコルのバージョン 2 を利用します。¹ SSH 通信モジュールは PHASE-Viewer に組み込まれているので特別なソフトウェアをインストールしていただく必要はありませんが、いくつか設定を行っていただく必要はあります (第 4.2 節参照)。

4.2 設定

本節では、ネットワーク機能をご利用いただくために必要な設定を説明します。なお、すでに PHASE-Viewer バージョン 2 をお使いで、この設定を行っている場合でもあらためて設定し直す必要がある点はご了承ください。

まず、“Module” メニューから “configure host info” を選択してください (図 4.1)。図 4.2 が得られるはずです。この画面は、以下の領域に分かれています。

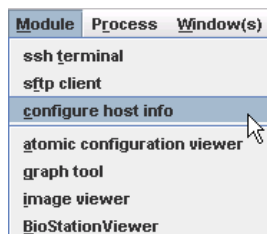


図 4.1: Module → configure host info メニュー。

ホスト表示 左上のリストに、登録されているホストの一覧が現れます。²

“create connection to host” リストで選択されているホストに、SSH ターミナルないし SFTP を介して接続します。“ssh terminal” ボタンをクリックすれば第 4.3 節で説明する SSH ターミナルが、“sftp client” をクリックすれば第 4.4 節で説明する SFTP クライアントが起動します。

設定編集 画面下部にある、タブで区切られた領域で上記リストで選択しているホストの設定を行います。

制御したいリモートホストの設定を行うには、下記

の操作を行ってください。

1. “add new host” ボタンをクリックし、現れるダイアログにホストを識別する文字列を入力する。³
2. “address” 領域にホストのアドレスを入力する。
3. “user name” にユーザー名を入力する。
4. パスワードなしで制御したい場合、“password” 領域のチェックボックスを有効にし、パスワードを入力する (暗号化を施してディスクに保存します)。
5. ここで登録したホストをデフォルトホストとする場合、ホスト表示リストの対応する default チェックボックスを有効にする。

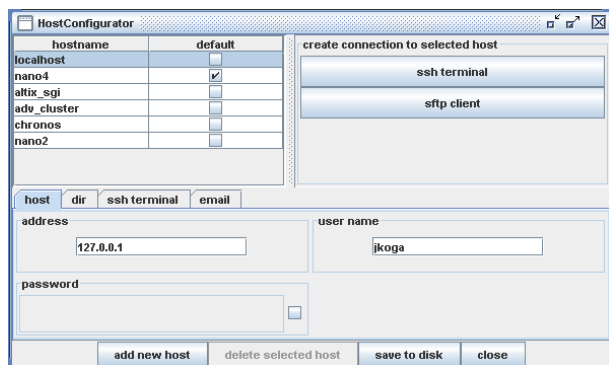


図 4.2: ホスト情報設定画面 1.

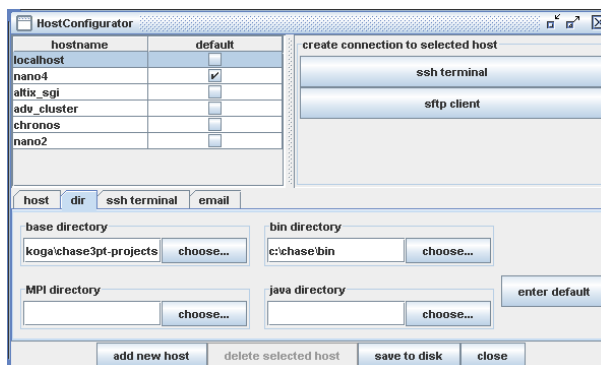


図 4.3: ホスト情報設定画面 2.

さらに、“dir” タブを選択してください。図 4.3 が得られます。ここでは下記の設定が必要となります。

1. “base directory” 領域で、このホストのベースとなるディレクトリーを入力する。このディレクトリーの下に計算で利用するファイルなどが転送され、また実際の計算の実行が行われます。この指定は必須です。
2. “bin directory” に PHASE などの実行ファイルのあるディレクトリーを入力します。この指定は必須です。
3. “MPI directory” に MPI のディレクトリーを入力します。指定は、たとえば /foo/bar/bin/mpirun 等となっている場合、/foo/bar としてください。
4. “java directory” にホストの Java Virtual Machine のインストールパスを入力します。第 6 章にて説明する、BeanShell スクリプトによるジョブ制御を行い、かつ java にパスが通っていない場合指定する必要があります。

4.3 SSH ターミナル

PHASE-Viewer には、簡易 SSH ターミナルが内蔵されています。本節ではその利用方法を簡単に説明します。

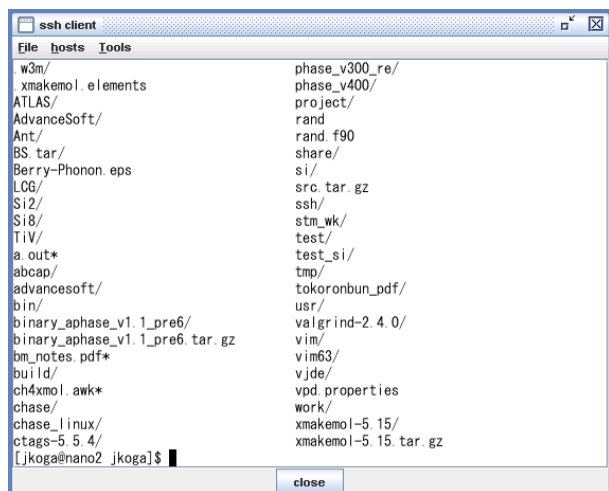


図 4.4: SSH ターミナルでリモートホストに接続している様子。

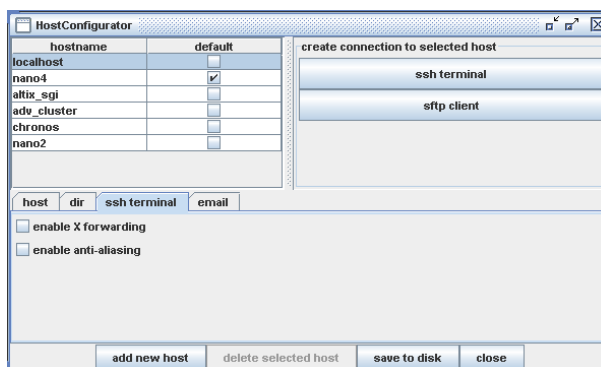


図 4.5: SSH ターミナル設定画面。

SSH ターミナルは、いくつかの方法で起動することができます。

1. メニューの、“Module” → “ssh terminal” を選択する。
2. 第 4.2 節で説明した、ホスト設定画面で “ssh terminal” ボタンをクリックする。
3. 第 4.5 節で説明する、バッチファイル転送画面の “ssh” ボタンをクリックする。

¹ 従って、本機能を利用する場合リモートホストで SSH2 のデーモンが起動している必要があります。

² “localhost” は常に存在します

³ この文字列には、空白文字は入らないようにしてください。

こうして起動した SSH ターミナルのスクリーンショットを、図 4.4 に図示します。

SSH ターミナルは、起動の方法によって若干初期の状態が変わります。メニューから選択した場合どこにも接続されていない状態で起動します。図 4.4 にある “hosts” メニューを選択すると第 4.2 節の手続きで登録したホストの一覧が現れるので、目的のホストを選択してください。設定が正しければ、そのホストに SSH 接続することができるはずです。ホスト設定画面より起動した場合は、その画面で選択中だったホストに接続された状態で起動します。さらにパッチファイル転送画面から起動する場合 (第 4.5 節)、可能ならば目的のディレクトリーへ移動した状態で起動します。

SSH ターミナルの設定は、登録されている各ホストについてホスト設定画面で行います。ホスト設定画面の、“ssh terminal” タブをクリックすると図 4.5 の SSH ターミナル設定画面が現れます。ここでは、以下の設定を行うことができます。

X フォワーディング X フォワーディングを有効にしたい場合、“enable X forwarding” チェックボックスを有効にします。デフォルトは無効です。

アンチエイリアス 画面で利用される文字列にアンチエイリアスをかけたい場合、“enable anti-aliasing” チェックボックスを有効にします。デフォルトは無効です。

この設定も、ご希望の設定値を入力したら “save to disk” ボタンをクリックしてディスクに設定を保存してください。

また、SSH クライアントに配備してある、“Tools” メニューからは、第 4.2 節で説明しているホスト設定画面と、第 4.4 節で説明している SFTP クライアントを起動するための選択肢があります。

4.4 SFTP クライアント

PHASE-Viewer には、ファイル転送を行うための簡易 SFTP クライアントが内蔵されています。そのスクリーンショットを図 4.6 に図示します。

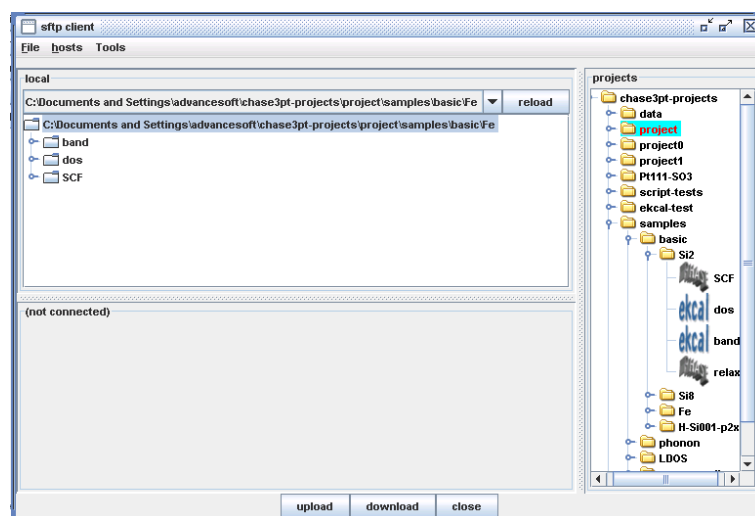


図 4.6: SFTP クライアントプログラムのスクリーンショット。

SFTP クライアントの起動方法も、SSH ターミナル同様複数あり、起動方法により初期の状態が若干異なります。

1. メニューの、“Module” → “sftp client” を選択する。
2. 第 4.2 節で説明した、ホスト設定画面で “sftp client” ボタンをクリックする。
3. 第 4.5 節で説明する、パッチファイル転送画面の “sftp” ボタンをクリックする。

また、第 5.1.6.2 節などで説明する画面にも似た仕組みの GUI が配備されています。

図 4.6 の説明をします。SFTP クライアントは、大きく分けて三つの部品から成ります。

“local” パネル 画面左上に、ローカルホストのファイルを見る画面があります。ローカルディレクトリーの下にあるファイルがツリービューで表示されています。その上にあるリストからより上位のディレクトリーを選択することもできます。

“remote” パネル 画面左下に、接続中のリモートホストのファイルを見る画面があります (接続していない場合にも表示されません)。画面自体はローカルホストのそれと変わりません。

ディレクトリーブラウザービュー 画面の右側は、「ディレクトリーブラウザー」(第 3 章) が表示されています。ディレクトリーブラウザーのノードをダブルクリックすると (あるいは Enter キーを押下すると) 対応するディレクトリーにローカル (可能な場合はリモートも) のディレクトリーが変わります。

SFTP クライアントからファイル操作を行う場合、まず対象とするファイルないしディレクトリーを選択状態にし、右クリックします (あるいは、メニューから File→local ないし remote と選択します)。次の操作が行えるメニューが現れます (図 4.7)。

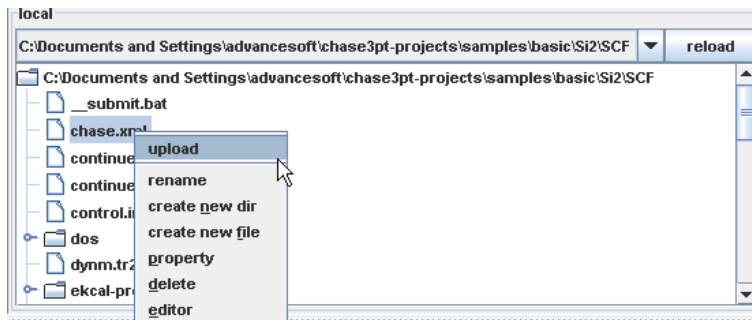


図 4.7: ファイルを選択状態として右クリックした際に得られるメニュー。

upload(download) 当該ファイルをアップロード (ダウンロード) します。

rename 当該ファイルをリネームします。

create new dir 新規ディレクトリーを作成します。

create new file 新規ファイルを作成します。

property 当該ファイルのプロパティーを見るための画面, 図 4.8 を起動します。

delete 当該ファイルを削除します。

editor 当該ファイルをエディターで開きます。この操作は Enter キーを押下 (ないしダブルクリック) することによっても実現できます。ただし、Enter キー押下 (ないしダブルクリック) の場合一部のファイルはエディターではなくより相応しいプログラムで起動します。たとえば画像ファイルの場合、第 11 章で説明する画像ファイルビューアーを利用して開きます。

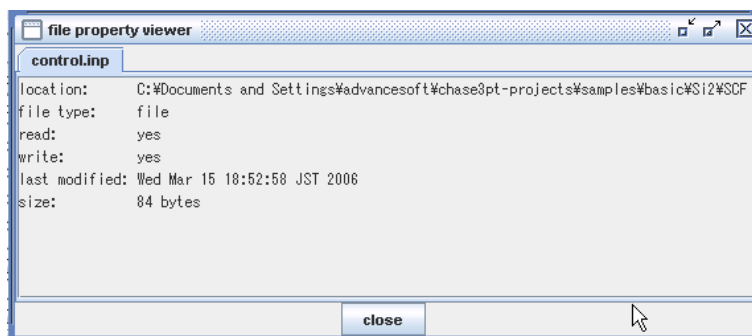


図 4.8: ファイルプロパティービューアー。

SFTP クライアントに配備されている、“hosts” メニューと “Tools” メニューは、SSH クライアント (第 4.3 節) と同様です。

4.5 バッチファイル転送

計算で利用する入出力ファイルは多岐に渡るので、その一つ一つを第 4.4 節で説明した SFTP クライアントを利用してアップロード/ダウンロードするのは煩雑な作業となります。この作業を簡便なものとするため、PHASE-Viewer は複数のファイルを設定に応じて一回の操作でアップロード/ダウンロードする仕組み (以下「バッチファイル転送」) を備えています。本節では、このバッチファイル転送機能について説明します。

バッチファイル転送を行うための画面を、図 4.9 に図示します。この画面は、たとえば第 5.1.5 節や第 5.1.6.1 節などで説明する画面上に配備されています。

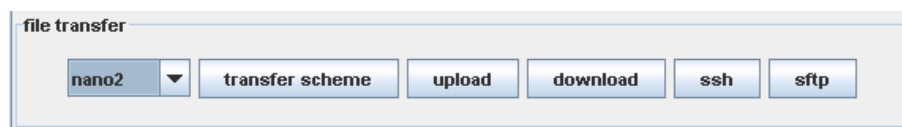


図 4.9: バッチファイル転送制御画面。

バッチファイル転送制御画面、図 4.9 の説明をします。

ホスト名リスト 一番左に配備されているリストから登録されているホストを選択できます。バッチファイル転送のターゲットホストを選択してください。

“transferscheme” ボタン このボタンをクリックすると、バッチファイル転送の設定を行う画面、図 4.10 が現れますので、この画面からバッチファイル転送の設定を行ってください。ただし、通常の計算を行う限りにおいては初期設定で問題ないよう作成されています。

“upload” ボタン 設定に従い、ホスト名リストにて選択したホストへファイルを一括でアップロードします。ただし、第 5.1.5 節などで説明するように、計算を実行する、という操作を行えば自動的に設定に基づくファイル転送は行われるので、必ずしもこのボタンを利用してファイル転送を行う必要はありません。

“download” ボタン 設定に従い、ホスト名リストにて選択したホストからファイルを一括でダウンロードします。

“ssh” ボタン 第 4.3 節で説明した SSH ターミナルを起動します。この際、リモートホストは上記のホストリストで指定したホスト、初期ディレクトリーは (存在する場合は) 対応するサブプロジェクトに関連付けられたディレクトリーとなります。

“sftp” ボタン 第 4.4 節で説明した SFTP クライアントを起動します。この際、リモートホスト、初期ディレクトリーは ssh の場合と同様です。

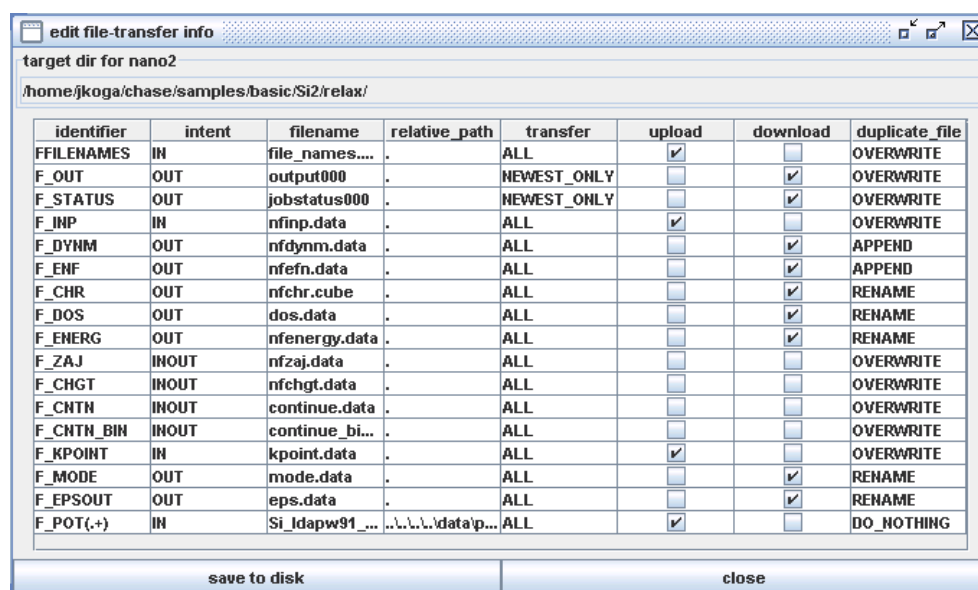


図 4.10: バッチファイル転送設定画面。

バッチファイル転送は、通常の計算を行う限りにおいては設定は不要であるように作成されていますが、細かい転送の設定を行うことも可能です。その設定は、図 4.10 の「ファイル転送設定画面」より行います。この画面は、まず画面上部に “target dir for ホスト名” という領域に、転送先のベースとなるディレクトリーが表示されています。すべてのファイル転送は、このディレクトリーから相対パスで指定されます。次に、転送の対象となるファイルのテーブルが表示されています。このテーブルの各行が転送対象となるファイル、各列が対象となるファイルの属性を表します。各列のカラム名とそれが意味するところを下記します。

identifier ファイルの識別子です。正規表現が使われている場合もあります。

intent 入力ファイル (IN)、出力ファイル (OUT)、入出力ファイル (INOUT) のいずれかを表します。

filename 実際のファイル名です。正規表現が使われている場合もあります。

exists ローカルディスク上に、これらのファイルが存在するか否かを表します。

localdir ローカルホストでのファイルの存在すべきディレクトリーを表します。

transfer 転送する場合、どのように転送するかを選択できます。

ALL 条件に合致する全てのファイルが転送対象となります。

NEWEST_ONLY 条件に合致するファイルの中で最も新しいものが転送対象となります。

upload このファイルをアップロード対象にする場合は有効にします。

download このファイルをダウンロード対象にする場合は有効にします。

overwrite 同名ファイルがある場合の処理を選択できます。

OVERWRITE 同名ファイルがある場合上書きします。

DO_NOTHING 同名ファイルがある場合転送を行いません。

APPEND 同名ファイルがある場合、もとのファイルの最後尾に内容を付け足します。

RENAME 同名ファイルがある場合、リネームして転送を行います。

RENAME_LOCAL 同名ファイルがある場合、ローカルのファイルをリネームして転送を行います。

以上の設定を行ったら、“save to disk” ボタンをクリックしてディスクに設定を保存してください。⁴

⁴対応するディレクトリーの下にある、“chase.xml” というファイルに保存されます。

第5章 サブプロジェクト制御用 GUI

PHASE-Viewer にて、実際の計算の準備、実行、結果の解析などを担うのは第 3 章でも言及している、「サブプロジェクト制御用 GUI」です。この GUI は、利用するプログラムに応じて変わります。現在、PHASE, ekcal, uvsor-epsilon の三種類のプログラムに対応する制御用 GUI を用意しています。本章では、各々の利用方法を詳しく説明します。

5.1 PHASE 制御用 GUI

まずは、第一原理擬ポテンシャル電子状態計算プログラムである、PHASE 制御用 GUI の説明をします。

5.1.1 初期化用 GUI

「PHASE サブプロジェクト」を作成するには、第 3.2.4.1 節にて説明した手続きを踏んでください。図 5.1 の、「PHASE 初期化用 GUI」が得られます。

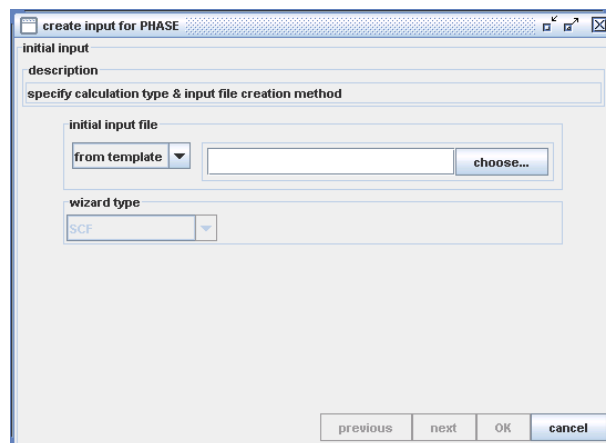


図 5.1: PHASE 初期化用 GUI

PHASE の初期化は、以下の方法で行うことが可能です。

テンプレートファイルから 既存の入力ファイルをコピーし、計算が実行できる状態にします。これは、次の操作によって実現できます。

- “initial input file” リストから、“from template” を選択する (既定値)。
- その隣にあるテキストフィールドに利用したいテンプレートファイルへのパスを入力する。この際、“choose” ボタンをクリックすることによって第 A.1.1 節のファイル選択ダイアログを起動することもできます。
- 画面下部の、“OK” ボタンをクリックする。

入力ファイル作成ウィザードを利用する 「入力ファイル作成ウィザード」を利用して初期の入力ファイルを作成します。この機能については、第 5.1.2 節を参照してください。

空の入力ファイルで初期化する 空の入力ファイルを利用して初期化を行うことも可能です。“initial input file” リストから “scratch” を選択し、画面下部にある “OK” ボタンをクリックしてください。

いずれの場合も、“cancel” ボタンをクリックすれば途中でキャンセルすることが可能です。

5.1.2 PHASE 入力ファイル作成ウィザード

PHASE-Viewer には、入力ファイル作成を支援するウィザード機能が備わっています。この機能を利用するには、まず、図 5.1 の “initial input file” リストから “wizard” を選択します。“wizard” によって作成できる入力は、本バージョンでは通常の SCF の入力です。

5.1.2.1 座標の指定

まずはじめに得られるのが、座標を指定する画面です。図 5.1 の “initial input file” リストから “wizard” を、“wizard type” リストから “SCF” を選択し “next” ボタンをクリックすると図 5.2 (a) に表示している、座標指定用 GUI が起動します。座標を自動的に作成することはできないので、必ず指定していただく必要があります。

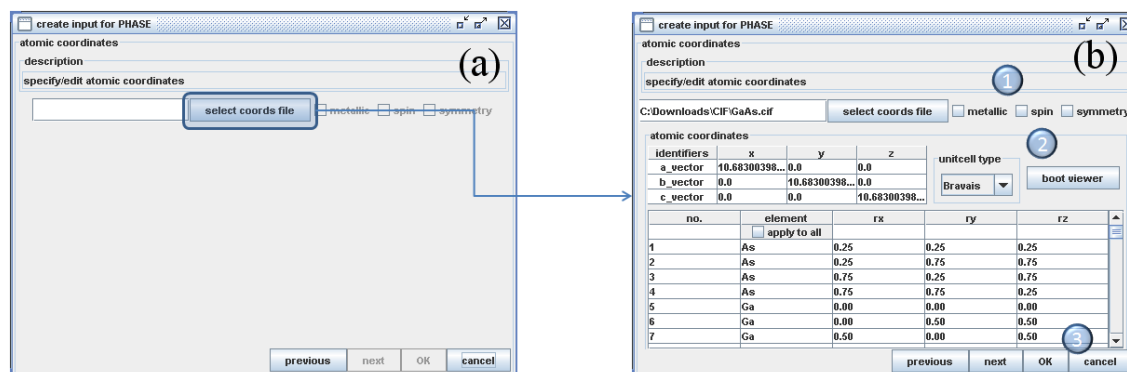


図 5.2: 座標指定用 GUI.

この画面の “select coords file” ボタンをクリックすると、第 7 章において解説している、座標インポート画面が得られます。ここから目的のファイルを選択し、座標を取り込んでください。図 5.2 (b) に図示しているように座標が取り込まれた状態となります。

さらにいくつかの設定を行うことが可能です。以下、図 5.2 (b) の数字に合わせて説明します。

1. “metallic”, “spin”, “symmetry” チェックボックス: それぞれ有効にすると、金属系に適した設定、スピンを考慮した計算に適した設定、対称性を考慮する計算に適した設定を施した入力を作成します。
2. 座標表示域: ここでは座標を表示しています。“boot viewer” ボタンから第 8 章にて説明する原子配置ビューアーを起動することができるので、ビューアーを介して座標を編集することなどの操作を行うこともできます。特に CIF から座標を取り込む場合、副格子の原子を取り除く、あるいは基本格子に変換する、という操作が必要となる場合があります。この点については、詳しくは第 8.10 節をご参照ください。
3. ボタン域: ここでこの後の操作を指定します。座標のみを指定しあとはデフォルトでよいのならば “OK”, さらに詳細な設定を行うのならば “next” をクリックします。

5.1.2.2 計算精度の指定

図 5.2 (b) で “next” をクリックすると、計算精度を設定するための画面、図 5.3 が得られます。この画面上で設定できる項目を、画面上の数字に合わせて説明します。なお、第 5.1.2.1 節において指定した座標に応じたデフォルト値があらかじめ入力されています。

1. バンド数と k 点サンプリング: バンド数と k 点サンプリングの方法やメッシュの細かさを指定します。
2. カットオフと収束条件の設定: カットオフエネルギーと収束条件を設定します。波動関数のカットオフエネルギーは、擬ポテンシャルファイルに記載があればその値、ない場合は 10 hartree という値がデフォルトです。電荷のカットオフエネルギーは、ノルム保存型の擬ポテンシャルの場合は波動関数のカットオフエネルギーの 4 倍、ない場合は 9 倍という値がデフォルトです。
3. 構造緩和の設定: 構造緩和を行う場合、“optimize structure” チェックボックスを有効にしてください。また、力の収束判定も入力してください (デフォルト値: 5×10^{-4} hartree/bohr)。さらに、ストレステンソルを計算したい場合 “calculate stress tensor” チェックボックスを有効にしてください。

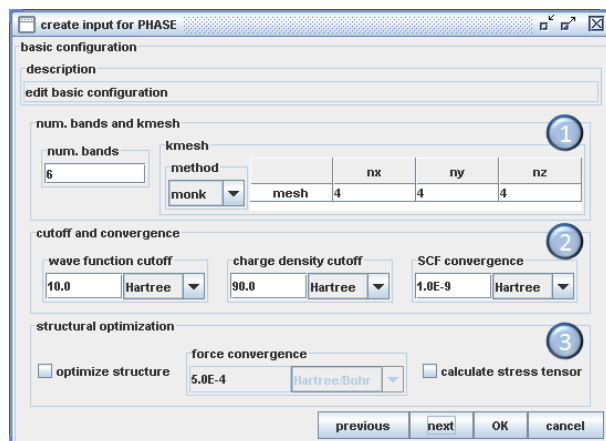


図 5.3: 計算精度設定用 GUI.

座標の指定の場合と同様、ここでの設定でよいのならば“OK”を、さらに詳細に設定するのならば“next”をクリックしてください。

5.1.2.3 ソルバーや電荷密度の混合法の指定、後処理の指定

計算精度設定用 GUI で“next”をクリックすると次に得られるのはソルバー/電荷密度混合法の設定画面です。ここでソルバーと電荷密度混合法をお選びいただけます。

ソルバーと電荷密度混合法の組み合わせは、現在以下の三種類が組み込まれています。

slow 計算時間はかかりますが、計算は高い確率で収束します。はじめから最後まで Davidson 法を利用します。

moderate 計算時間は slow より多くの場合はやいですが、収束性は若干劣ります。ただし多くの場合問題なく収束することは確認しています。はじめから最後まで lm+MSD 法を利用します。

fast うまくいく場合ははやく収束しますが、不安定な場合も多い組み合わせです。はじめ 5 回は lm+MSD 法を採用し、edelta_change_to_rmm パラメータの閾値より収束がよくなった場合に RMM2P 法に切り替わります。

通常、“moderate”が推奨されます。金属表面や界面のように収束しづらい系は slow を、単純な化合物半導体のように収束しやすい系は fast をご利用いただいた方がよいかもしれません。

さらに、これらの詳細を変更することも可能です。このような設定は、“configure”ボタンをクリックした結果得られる画面から行ってください。特に電荷密度の混合法は収束性に大きな影響を与えますので、特に収束しづらそうな系は詳細設定を行うことをお勧めします。

図 5.4 から“next”をクリックすると、後処理の指定を行うための画面、図 5.5 を得ます。ここで行うことのできる設定を、図 5.5 の数字に合わせて説明します。

1. DOS: 状態密度の設定を行います。全状態密度だけでなく、原子分割局所状態密度 (aldos)、層分割局所状態密度 (layerdos) の指定を行うことも可能です。
2. charge: 電荷密度を出力するかどうかの設定を行います。全価電子の出力だけでなく、部分電荷密度の出力の設定を行うことも可能です。
3. work function: 仕事関数解析に必要なファイルの書き出しを行うか否かを設定します。仕事関数解析に必要なファイルを書き出す場合、“generate output for work function analysis”チェックボックスを有効にします。

これらの設定を行ったあと、“OK”ボタンをクリックしてください。ここまで行った指定に応じた入力ファイルが作成され、第 5.1.3 節以降で説明する PHASE 制御用 GUI を起動することができます。

5.1.3 情報表示 GUI

PHASE 初期化用 GUI から“OK”をクリックした後、またはディレクトリーブラウザーの PHASE サブプロジェクトノードから PHASE 制御用 GUI を起動すると、まず図 5.6 が得られます。この GUI では、現在の PHASE サブプロジェクトに関わるいくつかの情報が表示されます。この画面で表示される情報について説明します。

“date of creation” サブプロジェクトの作成日時が表示されます。

“project name” 現在扱っているサブプロジェクトの名前が表示されます。この名前は、対応するディレクトリーの名前にもなっています。

“base directory” 現在扱っているサブプロジェクトのディレクトリーがフルパスで表示されます。

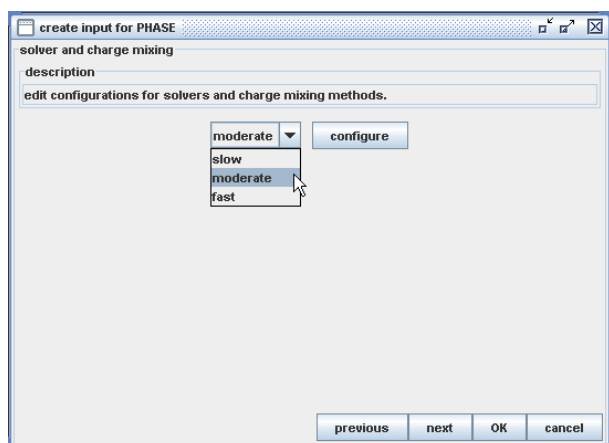


図 5.4: ソルバー/電荷密度混合法設定用 GUI.

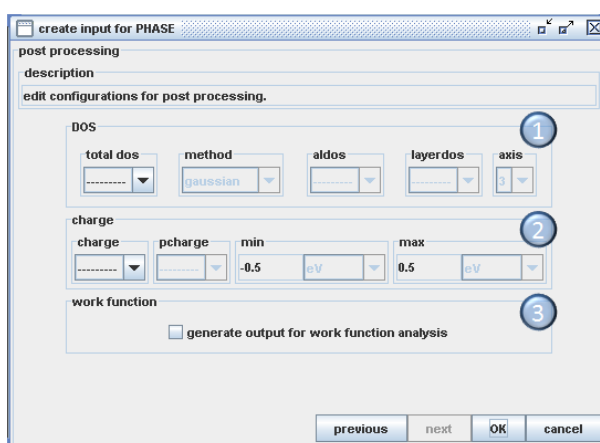


図 5.5: 後処理設定用 GUI.



図 5.6: PHASE 情報表示用 GUI

“comments” ユーザーが任意に入力したコメントが表示されます (このコメントは、ディレクトリーブラウザーのノード上に表示されるツールチップにも利用されます)。

“description” この GUI の利用方法などが記述されています。

さらに、図 5.6 の左側にはボタンが並んでいるのが分かります。PHASE による計算の各フェーズにおいて必要な機能を一まとめにした GUI を、このボタンから呼び出すことができます。各ボタンから呼び出せる GUI は下記の通りです。

info 図 5.6 の、情報表示用 GUI を呼び出します。

input 第 5.1.4 節で説明する、入力ファイル編集用 GUI を呼び出します。

exe 第 5.1.5 節で説明する、PHASE 実効制御用 GUI を呼び出します。

results 第 5.1.6 節で説明する, PHASE 計算結果解析用 GUI を呼び出します.

close このボタンは GUI を呼び出すボタンではなく, 画面を閉じるためのボタンです.

5.1.4 入力ファイル編集

図 5.6 の “input” ボタンをクリックすると, 図 5.7 で示す, 「PHASE 入力ファイル編集用 GUI」が得られます. 本節ではこの GUI について説明します. なお, PHASE 入力ファイルの各項目については, PHASE ユーザーマニュアルも併せてご覧ください.

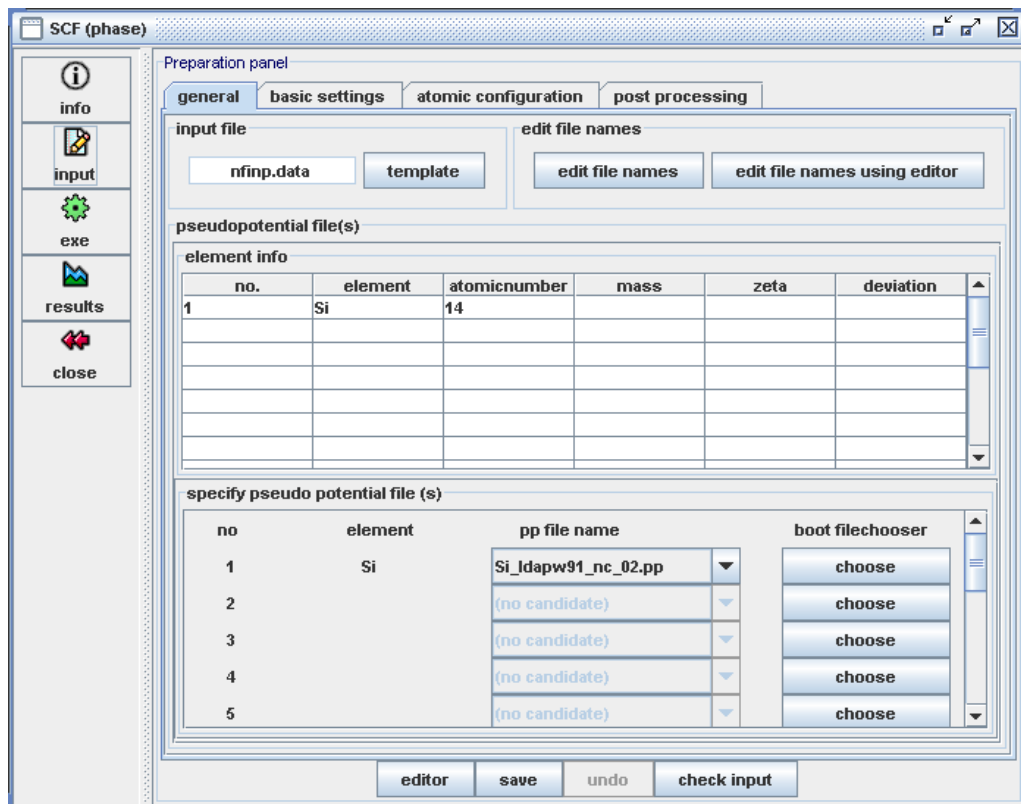


図 5.7: “input” ボタンをクリックするとまず得られる GUI.

この画面は, 入力ファイルの項目ごとにタブで区切られています. また, 項目によってはさらに細かくタブで区切られている場合もあります.

このタブは, 編集可能な項目全てを表しているわけではありません. タブ上で右クリックすると, さらに編集可能な項目の候補が現れます. この候補の中から編集したい項目を選択すれば, その項目に対応する GUI を表示するためのタブが現れます (図 5.8).

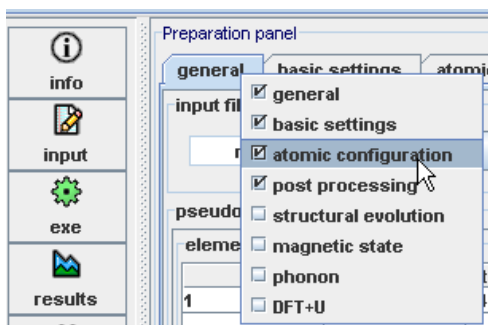


図 5.8: 入力ファイル編集用 GUI のタブ上で右クリックした際に得られるメニュー.

入力ファイル編集用 GUI は編集項目によって外観は変わりますが、共通しているのは下部にある三つのボタンです。各々次の機能が割り当てられています。

editor ボタン 現在編集中的の入力ファイルを、登録されているテキストエディターで開きます。

save ボタン 編集している入力ファイルをディスクに保存します。この操作を行わないと実際の計算で利用する入力ファイルに変更が反映されないのご注意ください。

undo ボタン 一つ前の操作を取り消します。

以後、各タブをクリックした際に得られる編集用画面とその説明を行います。

5.1.4.1 “general” ビュー

この画面は、“input” ボタンをクリックするとまず得られる画面、図 5.7 です。また、他の編集を行っている際には“general” タブをクリックすることによって表示することができます。この画面上からは次の操作を行うことができます。

- 入力ファイルテンプレートのコピー
- file_names.data ファイル (PHASE の入出力ファイルを指定するファイル) の編集
- 使用する元素情報の編集
- 擬ポテンシャルの指定

上記の操作の詳細を説明します。

入力ファイルテンプレートをコピーするためには、“input file” 領域にある“template” ボタンをクリックしてください。するとファイル選択ダイアログが起動しますので、望みの入力ファイルを指定すれば現在のサブプロジェクトにある入力ファイルに上書きされます。入力ファイルのファイル名の編集は、この領域のテキストフィールドではなく、次に説明する“file_names.data” ファイルの編集操作で行ってください。

file_names.data ファイルは PHASE が入出力ファイルを指定するためのファイルです。このファイルを GUI 上から編集したい場合、“edit file names” 領域にある、“edit file names” ボタンをクリックしてください。図 5.9 の、“file_names.data 編集用 GUI” が起動します。この GUI に示されている識別子の下のテキストフィールドに対応するファイル名を入力してください。ただし、通常デフォルトのファイル名で特に問題は生じません。また、エディターを利用して直接編集する場合は“edit file names using editor” ボタンをクリックすれば file_names.data ファイルを引数に登録されているテキストエディターが起動します。



図 5.9: file_names.data ファイルを編集するための GUI.

擬ポテンシャルファイルは、PHASE の仕様では `file_names.data` に指定するようになっていますが、PHASE-Viewer は独立に設定するようにしています。擬ポテンシャル関連の操作は、図 5.7 の “pseudopotential file(s)” 領域で行います。ここでは、元素情報の設定も行うことができるようになっています。まずは、入力ファイルの記述に従い元素の情報が “element info” テーブルに表示されます。このテーブルの各カラムは次のような意味を持っています。

no. 識別用の番号を表示します。

element 元素名を表示します。変更すると、“atomic number” と “mass” にも反映されます。

atomic number 原子番号を表示します。変更すると、“element” と “mass” にも反映されます。

mass 元素の質量を表示します。

zeta スピン分極の初期値を入力します。スピン分極を考慮する計算を行う場合指定する必要があります。

deviation 初期電荷をガウス関数の和で与えるときの、各ガウス関数の偏差を指定します。通常は指定する必要はないでしょう。

さらにこの元素情報を元に、擬ポテンシャルの候補を “specify pseudo potential file(s)” 領域に表示します。基本的には、「GGA の擬ポテンシャルの内最も最近作成したもの」を優先して表示するようにしています。¹ 異なる擬ポテンシャルを指定したい場合はリストから候補を選んでください。リストに現れる候補では不十分な場合、“choose” ボタンをクリックするとファイル選択ダイアログを起動することができるので、そこから適切な擬ポテンシャルファイルを選択してください。

5.1.4.2 “basic settings” ビュー

この画面上からは、PHASE 入力ファイルの基本的な項目を編集することができます。“basic settings” タブをクリックしていただくと、さらに細かくタブで編集項目が区切られています。各編集項目を説明します。

control 計算の制御を指定することができます。図 5.10 に “control” タブをクリックした際に得られる画面を示します。この図の各項目は、次のような設定に相当します。

- “Max CPU time” テキストフィールド: 計算時間の最大値を入力します。数字を入力し、隣のリストから “sec”, “hour”, “day”, のいずれかを選択してください。
- “Condition” リスト: 無指定, “preparation”, “automatic”, “Initial”, “Continuation”, “Fixed_charge”, “Fixed_charge_continuation” の項目が選択可能です。無指定の場合, “automatic” が採用されます。各選択肢は、各々次のような意味を持っています。

preparation: k 点の作成までを行った後計算を停止します。対称性指定のチェックの際などに利用します。

automatic: 継続計算が可能でない場合は初めから計算、可能な場合は継続計算を行います。

Initial: 計算を、初めから行います。

Continuation: 所定の手続きで停止した計算を、継続して行います。

Fixed_charge: 電荷密度を固定して計算を行います。ekcal および uvsor-epsilon 用の選択肢です。

Fixed_charge_continuation: Fixed_charge の場合の継続計算用選択肢です。

- “Max iteration” テキストフィールド: 繰り返し計算回数の上限です。デフォルトは 10000 です。
- “cachesize” テキストフィールド: 現行の PHASE はスカラマシン向けのキャッシュチューニングが施されていますが、想定するキャッシュサイズを指定することができます。最適なキャッシュサイズを指定することによって高速に計算を実施することが可能です。
- “driver” リスト: 拘束条件を課したダイナミクスを追跡したい場合に, “constraints” を選択します。

accuracy 計算の、精度に関わる設定を行うことができます。この画面上で編集可能な項目は下記の通りです。

1. “Cut-off” 領域: ここでカットオフエネルギーの設定を行います。

- “Wave function” テキストフィールド: 波動関数のカットオフを指定します。単位は、隣のリストから選択できます。

¹入力ファイルの “xctype” の指定が LDA の場合は LDA の内最も最近作成されたものが表示されます

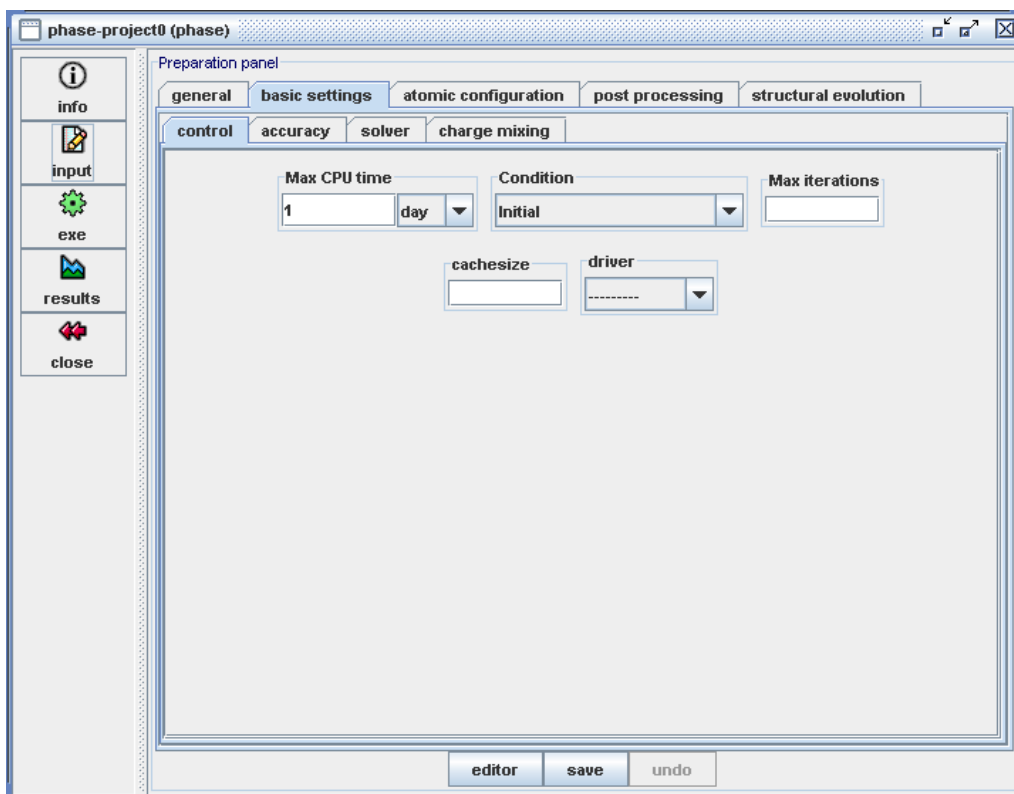


図 5.10: PHASE 入力ファイルの, “control” ブロック編集画面.

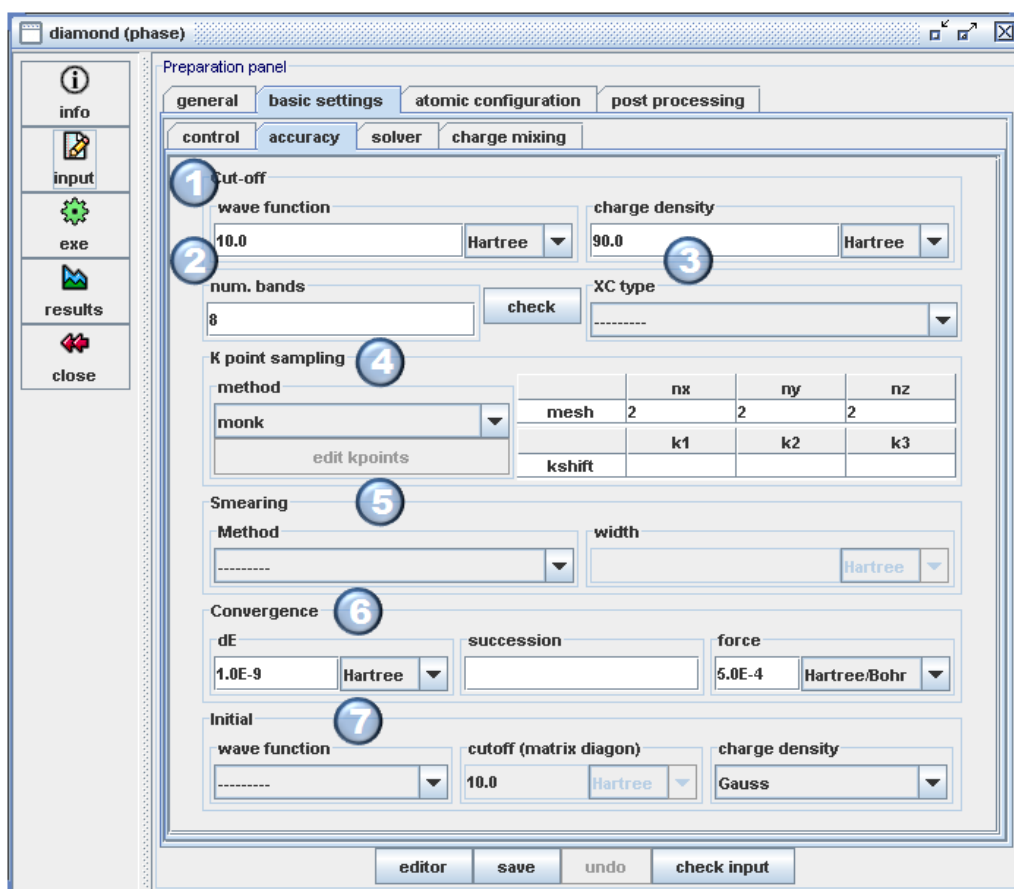


図 5.11: PHASE 入力ファイルの, “accuracy” ブロック編集画面.

- “Charge density” テキストフィールド: 電荷密度のカットオフを指定します。単位は、隣のリストから選択できます。電荷密度のカットオフは、ノルム保存型の擬ポテンシャルを使う場合は波動関数のカットオフの 4 倍、ウルトラソフト型の擬ポテンシャルを使う場合はさらに大きな値を採用する必要があります。たとえば PHASE の Fe のサンプルでは、波動関数のカットオフは 25 (Rydberg) であるのに対し、電荷密度のカットオフは 225 (Rydberg) となっています。
2. “Num. bands” テキストフィールド: バンドの数を指定します。バンド数は、系の全価電子数を 2 で割った値の 1.2 倍程度以上が目安となります。またこのテキストフィールドの横にある “check” ボタンをクリックすると、現在のバンド数が充分であるか否かを判定します。充分な場合図 5.12 が、不十分な場合図 5.13 が得られます。不十分な場合、 “OK” ボタンをクリックすれば推奨値を入力することができます。

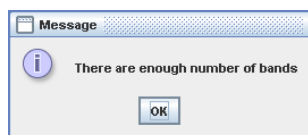


図 5.12: バンド数が十分な場合得られるメッセージ。

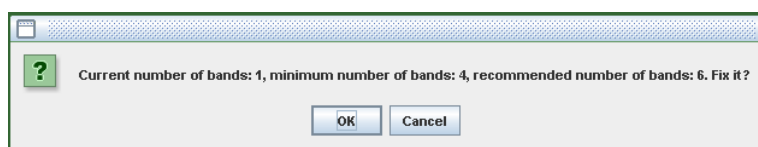
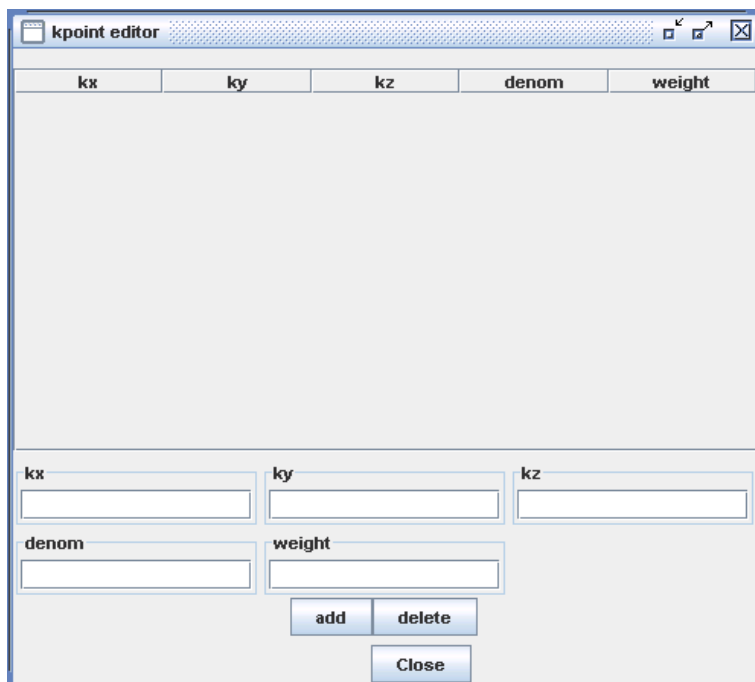


図 5.13: バンド数が不十分な場合得られるメッセージ

3. “XC type”: 交換相関エネルギーとポテンシャルの計算方法を選択します。“LDAPW91” と “GGAPBE” という選択肢を用意しています。指定がない場合、擬ポテンシャルファイルに書かれている情報が採用されますので、通常明示的に指定する必要はありません。
4. “K point sampling” 領域: k 点サンプリングの詳細を指定します。以下の項目を設定することが可能です。
 - “Method” リスト: k 点サンプリングの方法を指定します。以下の方法が選べます (無指定の場合、“Monk” が採用されます)。
 - Monk: Monkhorst-Pack 法により k 点を生成します。SCF 計算の場合、基本的にはこの方法をお選びください。
 - mesh: メッシュを生成します。後述の smearing にて tetrahedral を指定する場合こちらをお選びください。
 - file: ファイルから読み込みます。ekcal によるバンド計算の時にこのオプションを選んでください。ただし第 5.2.1 節で説明する手続きを経て ekcal サブプロジェクトを準備した場合あらかじめ設定された状態になるので明示的に指定する必要はありません。
 - directin: 自動生成はせず、直接入力ファイルに計算する k 点を記述します。
 - gamma: Γ 点のみ使って計算を行います。大きな非晶質系の計算などで使用すると良いでしょう。
 - “edit kpoint” ボタン: “Method” が “directin” の時に、 k 点を直接記述する際にこのボタンをクリックすると図 5.14 の k 点編集パネルが起動します。図 5.14 の各項目について説明します。“kx”, “ky”, “kz”, “denom” テキストフィールドの入力値をそれぞれ k_x , k_y , k_z , d とすると、 k 点は $(k_x/d, k_y/d, k_z/d)$ と指定されます。また、“weight” テキストフィールドに指定した値によってその k 点の重み付けを指定できます。このようにして k 点を指定したら、“add kpoint” ボタンで k 点を登録してください。登録済みの k 点を登録削除する場合は、“delete” ボタンをクリックしてください。
 - “mesh” テーブル: x, y, z 方向への分割数を指定します。デフォルトは (1,1,1), 上限値は (20,20,20) となっています。
 - “kshift” テーブル: “Method” が “Monk” の時有効なオプションです。メッシュのずれを指定します。k1, k2, k3 それぞれ [0.0,0.5] の範囲で入力してください。デフォルト値は、hexagonal の場合は k1=k2=0, k3=0.5, それ以外の場合は k1=k2=k3=0.5 となっています。
5. “Smearing” 領域: k 点サンプリングの smearing を指定します。以下の入力項目があります。
 - “method” リスト: Parabolic(デフォルト) と Tetrahedral の選択が可能です。
 - “width” テキストフィールド: “method” が Parabolic の時有効なオプションであり、デフォルト値は 0.001 (Hartree) となっています。
6. “Convergence” 領域: 収束判定に関わる設定を指定します。以下の設定を行うことが可能です。
 - “dE” テキストフィールド: 全エネルギーの計算誤差の上限 ΔE を指定します。デフォルト値は 10^{-10} (Hartree) です。

図 5.14: k 点編集パネル.

- “Succession” テキストフィールド: 収束判定に関わる回数を指定します. 誤差が, ここで指定した回数だけ ΔE 以下に連続して収まった時に収束したと判定します. デフォルト値は 3 です.
 - “Force” テキストフィールド: 構造緩和を計算する際に, 全原子に働く力の収束判定値を入力します. デフォルト値は 0.001 (Hartree/Bohr) です.
7. “Initial” 領域: 初期波動関数の計算方法に関わる設定を行います. 以下の項目を指定することが可能です.
- “Wave function” リスト: “Matrix diagon” と “Random_numbers” が選択可能です. 前者は波動関数の初期値を行列対角化によって与え, 後者は乱数によって与えます.
 - “cutoff (Matrix_diagon)” テキストフィールド: “Wave function” として “Matrix diagon” を選んだ際の波動関数のカットオフエネルギーを指定します. デフォルト値は, “cutoff_wf” と同じ値です.
 - “Charge density” リスト: 電荷密度の初期値を与えます. 選択肢として, “Gauss”, “atomic_charge_density”, “file” があります. “Gauss” はガウス分布関数の重ね合わせ, atomic_charge_density は原子の電子密度の重ね合わせ, “file” は既存の計算結果から読み込むオプションです. “file” を利用する場合, 計算を実行するディレクトリーに電荷密度ファイルが存在することをご確認ください.

solver 波動関数ソルバーの詳細設定を行うことができます. 図 5.15 に “solver” タブをクリックした際に得られる画面を図示します. PHASE には多くの波動関数ソルバーや電荷混合の方法が用意されており, 計算する系に応じてこれらを適切に組み合わせることによって, 安定で高速な計算を行うことが可能となります. 下記の設定が可能です.

1. 登録済みソルバー表示領域: ここに, 登録済みのソルバーを表示します. 既存の入力ファイルから読み込む場合, この領域にその入力ファイルに書いてあったソルバーが順に表示されます.
2. 新規ソルバー設定領域: ここで, 新たに登録したいソルバーを設定することができます. 各ボタンやテキストフィールドはそれぞれ PHASE のソルバー指定の仕様に従って用意されています.
 - “sol”: ソルバーの種類を指定します. matrixdiagon, msd, lm+msd, rmm2, rmm2p, rmm3, そして davidson 法が用意されています.
 - “till_n”: “sol” で指定された方法を適用する回数を指定します. 負の値を指定すると, SCF 計算が収束するまでそのソルバーが採用されます.
 - “dts”: 計算開始時の時間刻み幅を指定します.
 - “dte”: 次の, “itr” で指定された更新の回数での時間刻み幅を指定します. 指定がない場合, dts と同じ値が採用されます.

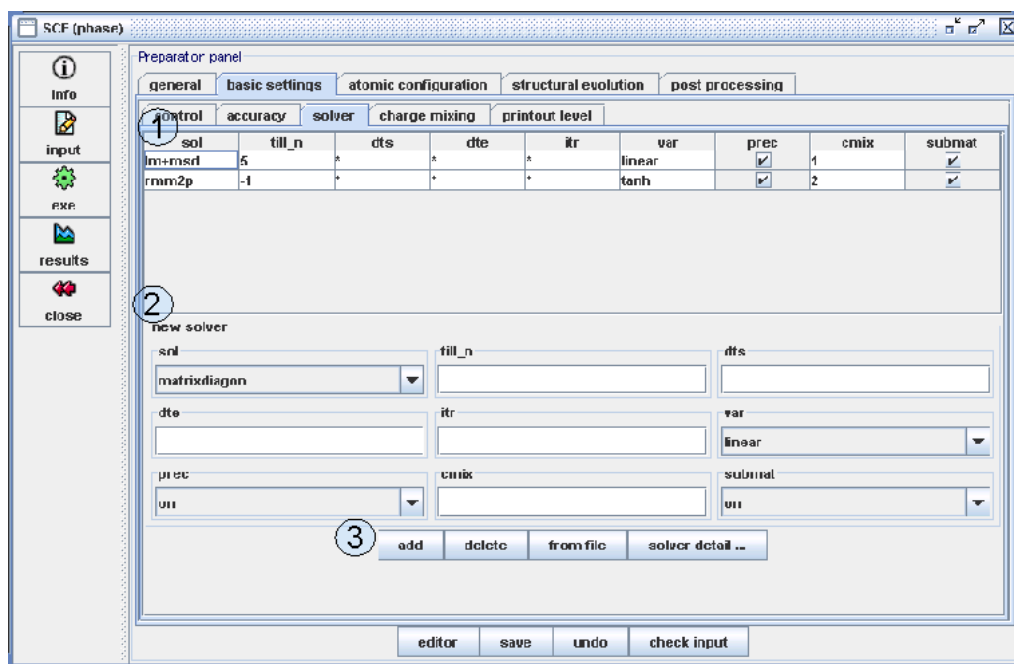


図 5.15: PHASE 入力ファイルの, “wavefunction_solver” ブロック編集画面.

- “itr”: 時間刻み幅を変化させる回数を指定します.
 - “var”: 時間刻み幅を変化させる際の補完の形式を選択できます. “linear” か “tanh” のいずれかを選ぶことができます.
 - “prec”: 前処理を行うか否かを選択できます. “on” なら前処理を行い, “off” なら前処理を行いません. 基本的には “on” が推奨されますが, Davidson ソルバーをご利用いただく場合は必ず “off” にしてください.
 - “cmix”: このソルバーが使用する電荷混合法を指定します. 電荷混合方法には後述のようにそれぞれ固有の番号を割り振る必要がありますが, その番号を使って指定します.
 - “submat”: “subspace rotation”(部分空間対角化)を行うか否かを指定します. 部分空間対角化を行うと一回の SCF 計算の計算時間は若干増えますが, 収束が加速されます. “on” と “off” の選択肢がありますが, “on” の時は後述の “subspace_rotation” タグに記された方法に従い “subspace_rotation” を行います.
3. ボタン領域: ここで, 設定したソルバーを登録ないし登録削除したり, ソルバーのより詳細な設定, 電荷混合方法の指定などを行うことができます.
- “add” ボタン: このボタンをクリックすると, 設定したソルバーを 1. の表に登録することができます.
 - “delete” ボタン: このボタンをクリックすると, 1. の表で選択しているソルバーの登録を削除することができます.
 - “solver detail” ボタン: ここをクリックすると, 図 5.16 の, 「ソルバー詳細設定パネル」を起動することができます. 以下, 図 5.16 の説明を行います.
 - “line minimization” 領域: ここで, “line minimization” ソルバーに関わる詳細設定を指定することができます.
 - ◇ dt_lower_critical: 次元探索を行う際の時間刻み幅の下限を指定します (デフォルト値: 0.005).
 - ◇ dt_upper_critical: 次元探索を行う際の時間刻み幅の上限を指定します (デフォルト値: 2.0).
 - “rmm” 領域: ここで, RMM ソルバーに関わる詳細設定を指定することができます.
 - ◇ imGSrmm: RMM 法で更新した波動関数を直交化する頻度を指定します (デフォルト値は, 毎回実行の 1).
 - ◇ rr_Critical_Value: バンド毎の収束判定条件を指定します.

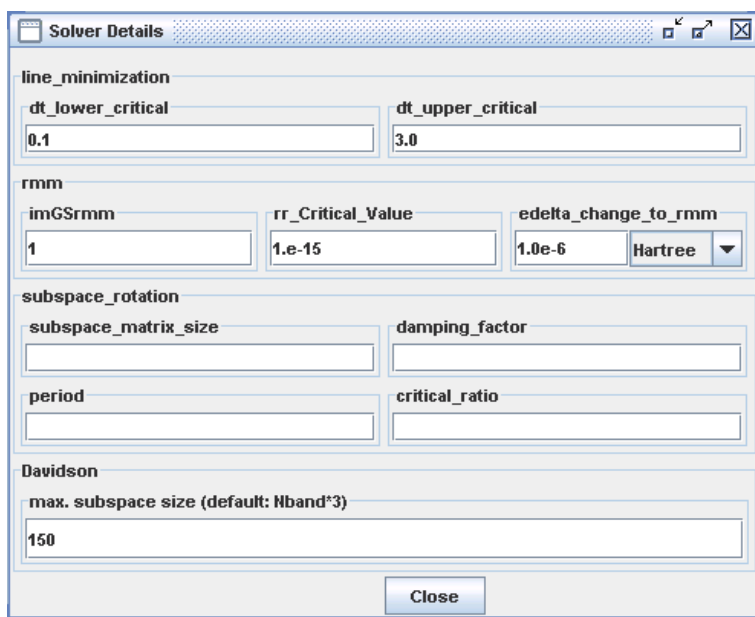


図 5.16: “Solver Details” パネル.

- ◇ edelta_change_to_rmm: ソルバーを RMM 法へ切り替える際の判定条件を指定します。ここで指定する値より全エネルギーの収束が悪い場合、その前のソルバーが採用されることになります。
- “subspace.rotation” 領域: ここで、“subspace rotation” に関わる詳細設定を指定することができます。
 - ◇ “subspace_matrix_size”: subspace の大きさを指定します。デフォルト値はバンド数であり、バンド数よりも大きな値を指定してもバンド数に書き換えられます。
 - ◇ “damping_factor”: 非対角要素のダンピング係数を指定します。[0.0,1.0] の値が有効な値です。
 - ◇ “period”: “subspace rotation” を行う頻度を指定します。デフォルト値は毎回実行の 1 です。
 - ◇ “critical_ratio”: “subspace rotation” を停止するための条件を指定します。非対角項の値と対角項の値の比が、ここで指定した値よりも小さくなった場合 subspace.rotation を行いません。デフォルト値は 10^{-15} です。
- “Davidson” 領域: ここで、Davidson ソルバーを利用する場合の調節パラメーター、“max_subspace_size”を入力します。規定値はバンド数の 3 倍です。
- “from file” ボタン: このボタンによって、既存の PHASE 入力ファイルからソルバー部分を抜き出し、編集中の入力ファイルに反映させることができます。ボタンクリックによって現れるファイル選択ダイアログから目的の入力ファイルを選択してください。

charge mixing 電荷密度の混合方法の詳細設定を行うことができます。図 5.17 に “charge mixing” タブをクリックした際に得られる画面を図示します。

この画面では、次の設定を行うことができます。

1. 電荷混合方法表示領域: ここのテーブルに、登録済みの電荷混合方法を表示します。
2. “add new cmix method” 領域: ここで、新規の電荷混合方法を設定します。以下の項目があります。
 - “no.”: この電荷混合方法を識別するための数字を指定します。ここで指定した数字を、ソルバー領域で使用します。
 - “method”: 電荷混合の方法を指定します。“simple” と “broyden2” のいずれかから選択できます。通常は “broyden2” が推奨されますが、ソルバーが RMM 法の場合 “simple” をお選びください。
 - “rmxs”: 計算開始時の電荷を混合する割合を指定します。デフォルトは 0.5 です。
 - “rmxe”: “itr” で指定した回数の後の電荷を混合する割合を指定します。指定がない場合、rmxs と同じ値が採用されます。
 - “itr”: 電荷混合の割合を変化させる回数を指定します。

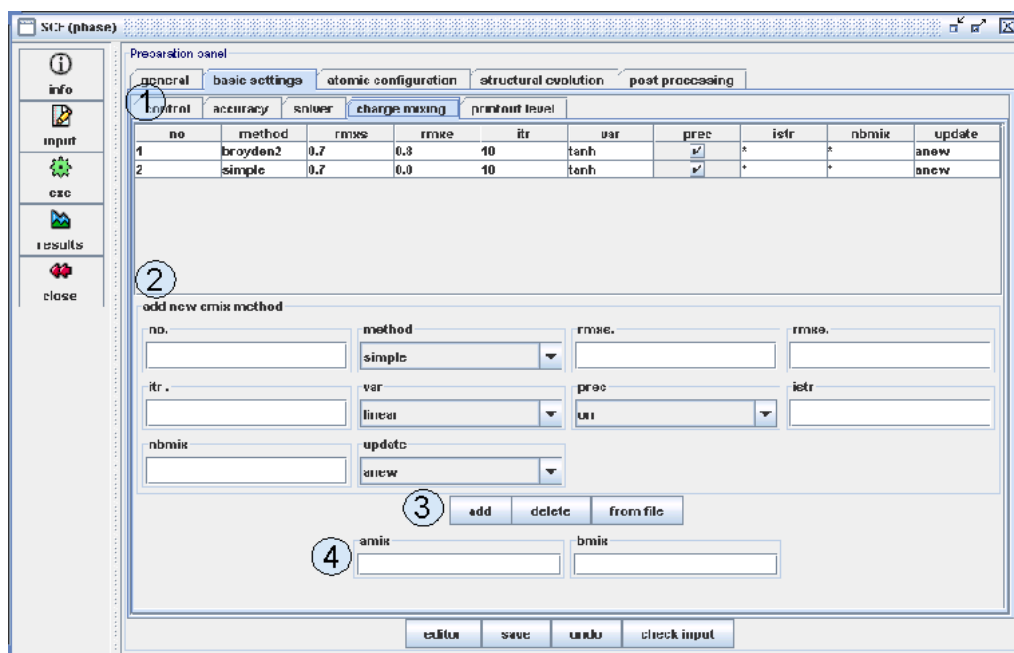


図 5.17: PHASE 入力ファイルの, “charge_mixing” ブロック編集画面.

- “var”: 電荷混合の割合を変化させる際の補間の形式を選択します. “linear” と “tanh” のいずれかが選択可能です.
 - “prec”: 前処理の有無を指定します. “on” と “off” の選択肢があり, “on” の場合前処理を行います.
 - “istr”: “method” が “simple” でない場合, その方法に切り替える回数を指定します.
 - “nbmix”: 蓄えておく電荷密度の回数を指定します (“method” が “simple” でない時に有効な項目です).
 - “update”: “nbmix” で指定されている回数の電荷密度を使い切った際の処理を選択します. “anew” と “renew” という選択肢があります. “anew” を指定するとそれまでのデータを全て破棄し, “renew” を指定すると最も古いデータを最新のデータと差し替えます (“method” が “simple” でない時に有効な項目です).
3. ボタン領域: ここのボタンで設定した電荷密度混合法を登録したり登録削除したり, ファイルから読み込むことができます.
- “add” ボタン: “add new cmix method” で設定した電荷密度混合法を登録します.
 - “delete” ボタン: 選択中の電荷密度混合法を削除します.
 - “from file” ボタン: このボタンによって, 既存の PHASE 入力ファイルから電荷密度混合法の部分を抜き出し, 編集中的入力ファイルに反映させることができます. ボタンクリックによって現れるファイル選択ダイアログから目的の入力ファイルを選択してください.
4. “charge preconditioning” 領域: 前処理の詳細設定を行うことが可能です. 前処理については, PHASE ユーザーマニュアルをご覧ください.
- amix: 前処理変数 a を指定します.
 - bmix: 前処理変数 b を指定します.

printoutlevel PHASE の標準出力ファイルの出力レベルを編集することができます. タブをクリックした際に得られる画面を, 図 5.18 に図示します.

出力レベルは, 項目に応じて 0,1,2 の三種類の値を選択することができるようになっています. 特に指定を行わない場合は “base” の値が採用されます. ここでは色々な設定を行うことが可能にはなっていますが, 推奨は “base” を 1 とすることです. 特に “base” を 2 に設定すると, 必要以上に大きなログファイルが得られてしまうので, 2 は避けることをお勧めします.

5.1.4.3 “atomic configuration” ビュー

図 5.7 の “atomic configuration” タブをクリックすると, 原子配置などの編集を行う画面, 図 5.19 が得られます. この画面の詳細を説明します.

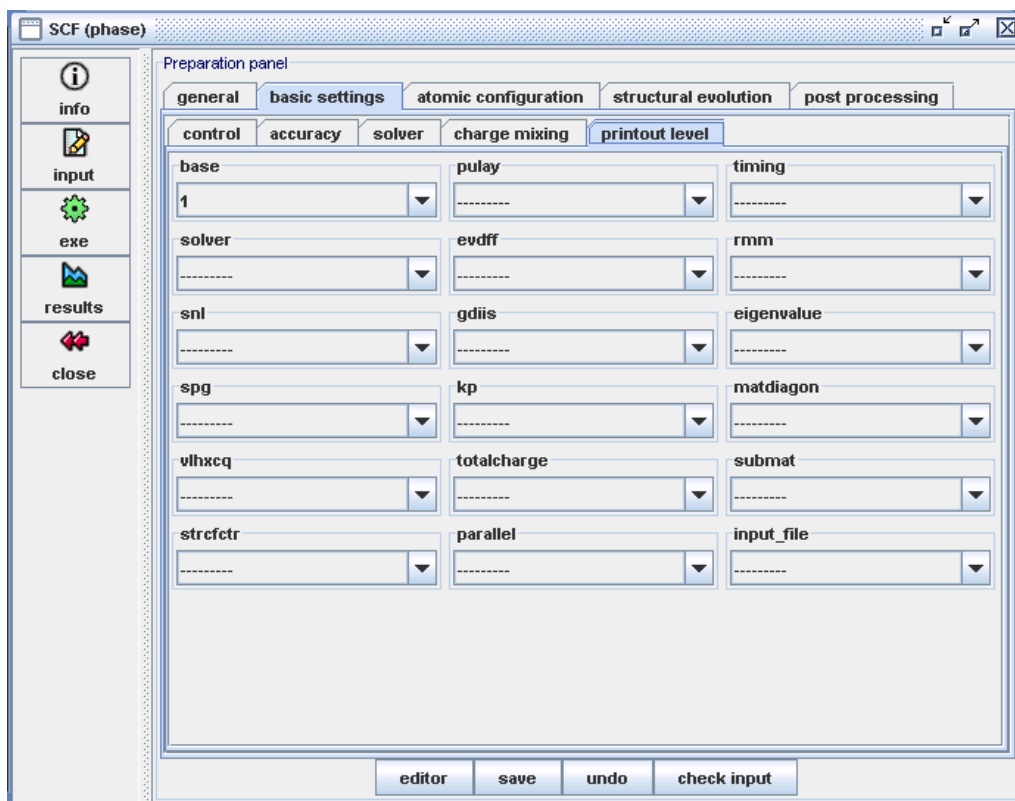


図 5.18: 標準出力ファイル出力レベル設定画面.

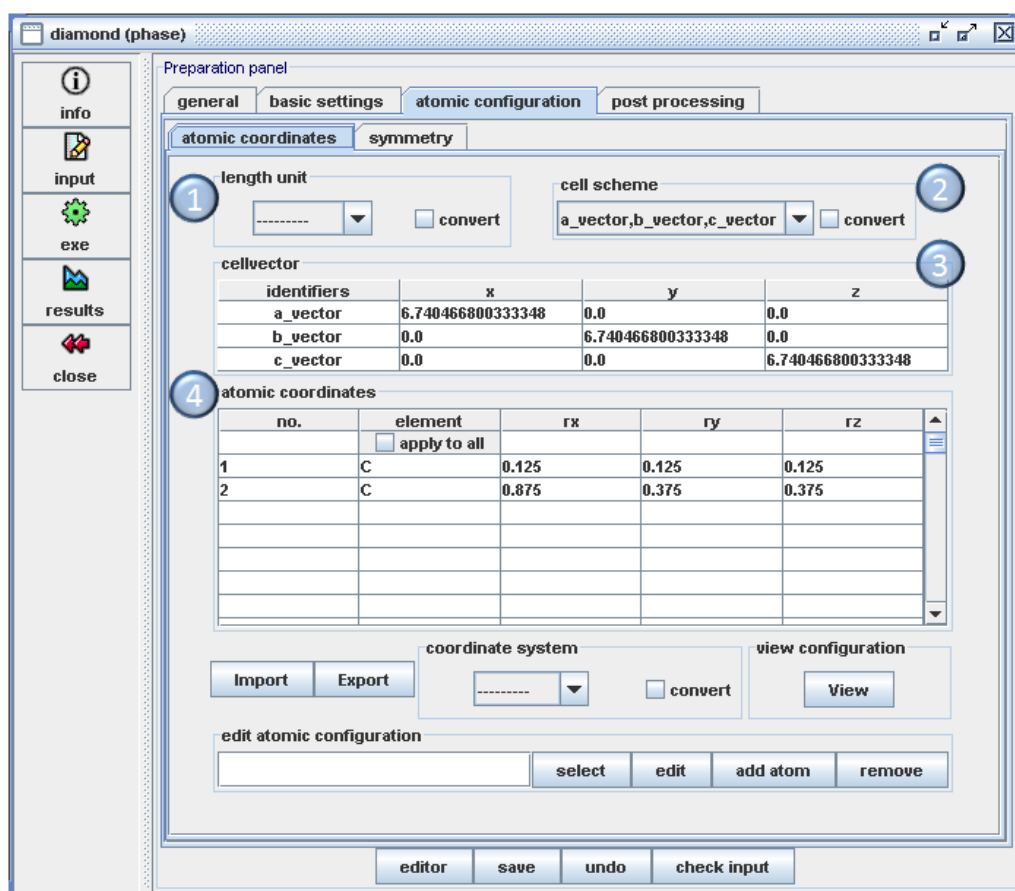


図 5.19: PHASE 入力ファイルの, “structure” ブロック編集画面 1.

1. “length units” リスト: 長さの単位を指定します。選択肢は、無指定, Bohr, Angstrom, nm となっています。無指定の場合, Bohr 単位が採用されます。
2. “cell scheme” リスト: a, b, c という表記と, $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ という表記を切り替えます。後者の選択肢は, unit_cell_type が Bravais の場合のみご利用いただけます。切り替えの際, となりの “automatic conversion” チェックボックスが選択されていればこの二つの表記の間の変換を自動的に行います。
3. “cellvector” 領域: ここでセルの情報を入力することが可能です。テーブルの表示方法は “cell scheme” での選択に依存します。単位は, 長さは “length unit” リストで指定したもの, 角度は度 (°) です。
4. 原子配置指定領域: この領域で, 原子配置を指定します。各項目について詳解します。

- 原子配置表示テーブル: ここに, 実際の原子配置を表示します。テーブル上の情報を直接編集することも可能ですし, 後述の “Import” ボタンから既存の原子配置データを取り込むことも可能です。このテーブルの各列には, 次のような情報が表示されています。

第一列 No.: 原子のラベルです。識別のためだけにある列で, 入力ファイルに反映されることはありません。

第二列 element: その原子の元素名を表示します。この列の一番上の行にある, “apply to all” チェックボックスをオンにしておくと, 元素名の変更は, 全原子に対し一斉に行われるようになります。

第三, 四, 五列 rx, ry, rz: 原子の, x 座標, y 座標, z 座標を指定します。単位は, “Length unit” で指定したものです。

また, このテーブル上で BackSpace ないし Delete キーを押下すると, 選択中の情報を削除することができます。

- テーブルの下領域: ここに配備されているボタンなどを使って, 原子配置をインポート・エクスポートしたり, 原子配置ビューアーで可視化したりすることが可能です。具体的には, 以下の操作が可能です。
 - “Import” ボタン: 原子配置をインポートすることが可能です。詳しくは第 7 章をご覧ください。
 - “Export” ボタン: 原子配置をエクスポートすることが可能です。詳しくは第 7 章をご覧ください。
 - “coordinate system”: 座標を, 普通のデカルト座標で表すのかセルベクトルを基準に -1 から 1 の値で表すのかを選べます。前者の場合は “Cartesian”, 後者の場合は “Internal” を選びます。無指定の場合 “Internal” が採用されます。
 - “view atomic configuration” 領域: ここにある “view” ボタンをクリックするとその右隣にあるリストに合わせ内蔵の原子配置ビューアーか BioStationViewer によって原子配置を三次元表示することが可能です。内蔵の原子配置ビューアーを使う場合は “use Internal Viewer” を選択した状態, BioStationViewer を使う場合は “use BioStationViewer” を選択した状態で “view” ボタンをクリックしてください。内蔵の原子配置ビューアーについては, 第 8 章をご覧ください。

なお, このテーブルには原子の属性の全てを表示しているわけではありません。テーブルカラム上で右クリックをすると, 図 5.20 のようなメニューが現れます。表示したい原子の属性を選択するとその属性を編集することができるようになります。

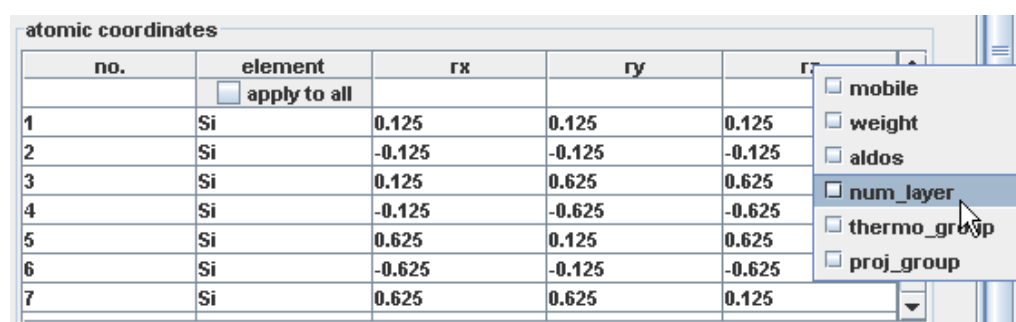


図 5.20: 原子の座標を表示する表のテーブルヘッダーを右クリックをした様子。

5. “edit atomic configuration” 領域: ここで原子配置の編集を行うことができます。各 GUI の説明は下記の通りです。
 - “select” ボタン: となりのテキストフィールドに入力された数字に対応する原子をテーブル上で選択します。

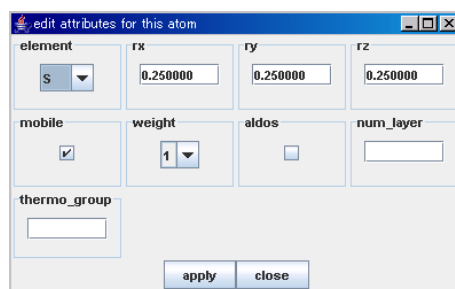


図 5.21: 原子の属性を編集する画面.

- “edit selected atom” ボタン: テーブル上で選択中の原子を編集する画面, 図 5.21 を起動します.
- “add new atom” ボタン: やはり図 5.21 を起動しますが, この場合そこで規定した原子が新たに足されます.
- “remove selected atom” ボタン: テーブル上で選択中の原子を削除します.

これら編集作業は, テーブル上の値に直接施していただいても当然問題ありません.

“atomic configuration” の “symmetry” タブをクリックすることによって結晶の対称性を指定する画面, 図 5.22 を表示することができます.

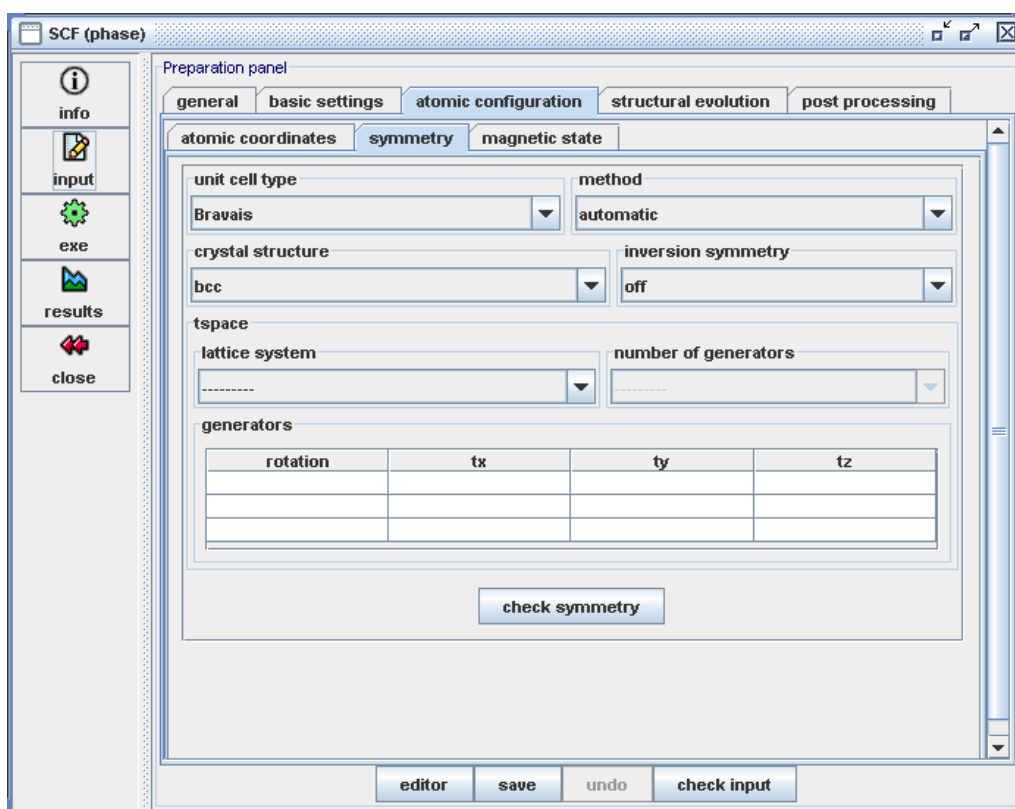


図 5.22: 結晶の対称性を指定する画面.

この画面では次の設定を行うことができます.

unit cell type 結晶の指定の仕方を選択します. “Primitive” で基本格子を, “Bravais” でブラベー格子によって結晶を指定します.

method PHASE の, 結晶性自動認識機能を利用する場合このリストから “automatic” を選択します. この場合, 格子の型が primitive 以外の場合, tspace の lattice_system 変数で格子の型の指定も行う必要があります.

crystal structure 結晶構造の型を入力します。 “diamond”, “hexagonal”, “fcc”, “bcc”, “hcp”, “simple_cubic” のいずれかを選択できます。

inversion symmetry 反転対称性の有無を指定します。 選択肢は “on” か “off” です。 系に反転対称性がある場合, “on” を指定すると計算コストを減らすことができます。 この場合, 反転操作の対象となる原子の “weight” 属性を “2” とする必要があります。

tspace 対称性を明示的に指定します。 明示的な対称性の指定に関しては, PHASE ユーザーマニュアルをご参照ください。

“**lattice system**” リスト: 結晶構造を指定します。 “trigonal”, “hexagonal”, “primitive”, “facecentered”, “bodycentered”, “basecentered” のいずれかを選択できます。

“**number of generators**” リスト: 生成元の数指定します。 1~3 の整数値です。

“**generators**” テーブル: 生成元を指定します。 PHASE ユーザーマニュアルをご参照ください。

check symmetry このボタンをクリックすると, 現在の入力の対称性や生成されると予想される k 点の数などが表示されます。 このボタンをクリックした後に得られる画面を図 5.23 に示します。

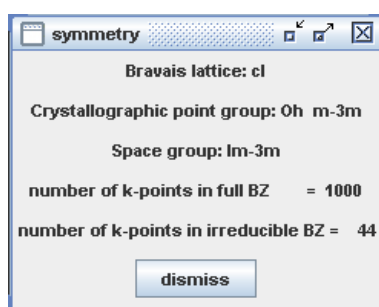


図 5.23: “check symmetry” ボタンをクリックすると得られる画面。

“atomic configuration” の “constraints” タブをクリックすることによって, 拘束条件を指定する画面, 図 5.24 を表示することができます。 拘束条件を指定するには, まず画面下部のリストから拘束条件の “種類” を指定し, “add constraints” ボタンをクリックします。 拘束条件は, 相容れるならばいくつでも定義することが可能です。 その後, 必要に応じて “atomxx (xx は整数)” に関連する原子の番号を入力します。 指定はするものの実際には拘束しない場合は “mobile” を “on” とし, また拘束条件の “値” をログファイルに出力したい場合は “monitor” を “on” とします。 さらに, 拘束条件を逐次変化させ, 化学反応を強制的に引き起こすには “reaction coordinate” を “on” とし, さらに “initial value”, “final value”, “increment” にそれぞれ反応座標の初期値, 終了値, 刻み幅を入力します。 この機能に関しては, PHASE のユーザーマニュアルも併せてご覧ください。 指定した拘束条件を削除する場合, “remove selected constraints” ボタンをクリックしてください。

5.1.4.4 “post processing” ビュー

図 5.7 の “post processing” タブをクリックすると, SCF 計算が終了した後のポスト処理を指定する画面, 図 5.25 が得られます。 この画面の詳細を説明します。

図 5.25 は, 状態密度の計算に関わる設定です。 PHASE は, 全状態密度のほか, 原子ごとの局所状態密度, 層ごとの局所状態密度の計算などを行うことが可能です。 状態密度計算について設定可能な項目を下記します。

total DOS 全状態密度に関わる設定を行います。 ここでの設定は, 局所状態密度の計算にも有効です。 下記の設定項目があります。

- “DOS output”: 状態密度を計算するか否かを指定します。 “on” と “off” の選択肢があり, “on” の場合状態密度を計算します。
- “Method”: 状態密度の計算方法を指定できます。 “Gaussian” と “Tetrahedral” が選択可能です。 “Tetrahedral” の場合, 次の条件が満たされていないと正しい計算が行われません。
 - k 点サンプリング法が “mesh” である
 - smearing 法が “tetrahedron” である。
- “dE”: 出力のエネルギー精度を指定できます。

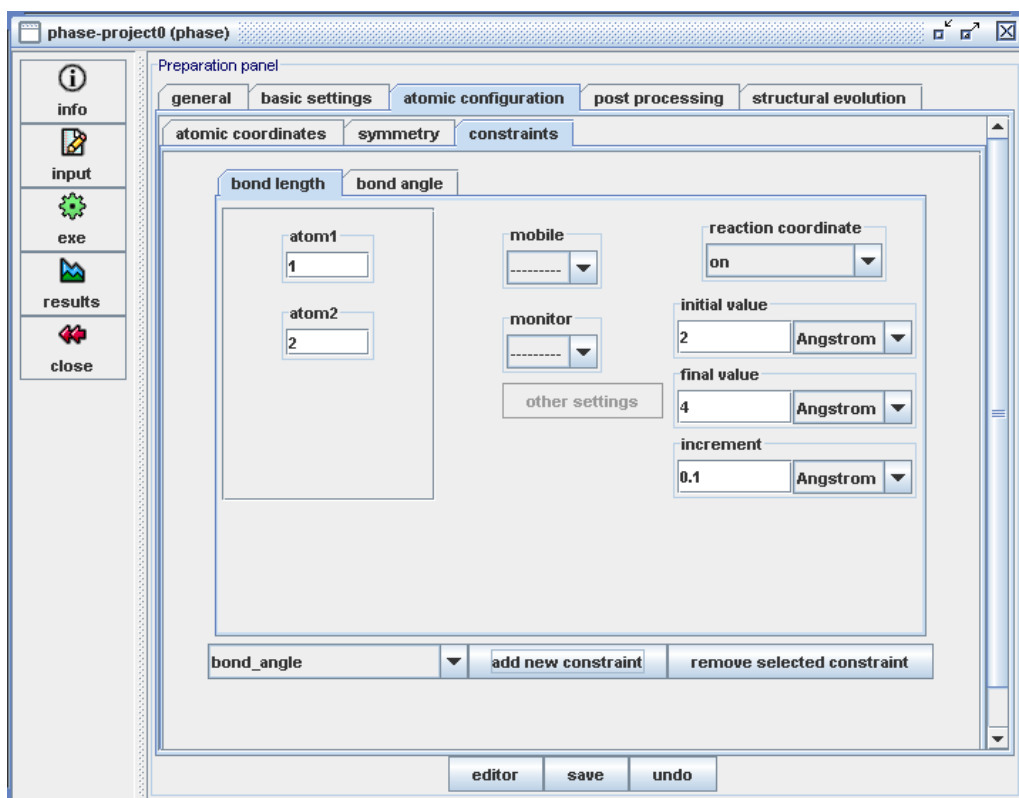


図 5.24: 拘束条件を指定する画面.

- “Window width”: 出力時のエネルギー幅に関わる値を指定します. ここで指定した値を W , “dE” で指定した値を dE とすると, エネルギー幅 ΔE は, $\Delta E = W \times dE$ で与えられます.

atomic local DOS 原子ごとの局所状態密度の計算の詳細を設定します. 下記の設定項目があります.

- “ALDOS output”: 原子ごとの局所状態密度を計算するか否かを指定します. “on” と “off” の選択肢があり, “on” の場合原子ごとの局所状態密度を計算します.
- “critical distance”: 単位格子を原子ごとにボロノイ多面体分割するときの臨界距離です. どの原子からもこの臨界距離以上離れている領域は真空領域とみなされます.
- “from atom” と “to atom”: 原子ごとの局所状態密度を計算する最初の原子と最後の原子を指定します.
- 状態密度の計算方法の詳細は, 全状態密度のそれが採用されます.

layer DOS 層分割局所状態密度の計算の詳細を設定します. 下記の設定項目があります.

- “LAYERDOS output”: 層分割局所状態密度を計算するか否かを指定します. “on” と “off” の選択肢があり, “on” の場合層分割局所状態密度を計算します.
- “slicing_way”: “regular_intervals” と “by_atomic_positions” という選択肢があります. “by_atomic_positions” の場合原子位置によって局所状態密度を計算する層を決めることができます. “regular_intervals” の場合ある領域を等間隔に分割して作成した各層について局所状態密度を計算します.
- “deltaz”: “regular_intervals” の場合の間隔の値を入力します.
- “critical distance”: 層を作成する領域を決める臨界距離です. 端の原子からこの距離まで層を作成します.
- “normal axis”: 層分割する際の層の法線方向を指定します. 1 が a 軸, 2 が b 軸, 3 が c 軸に対応します.
- 状態密度の計算方法の詳細は, 全状態密度のそれが採用されます.

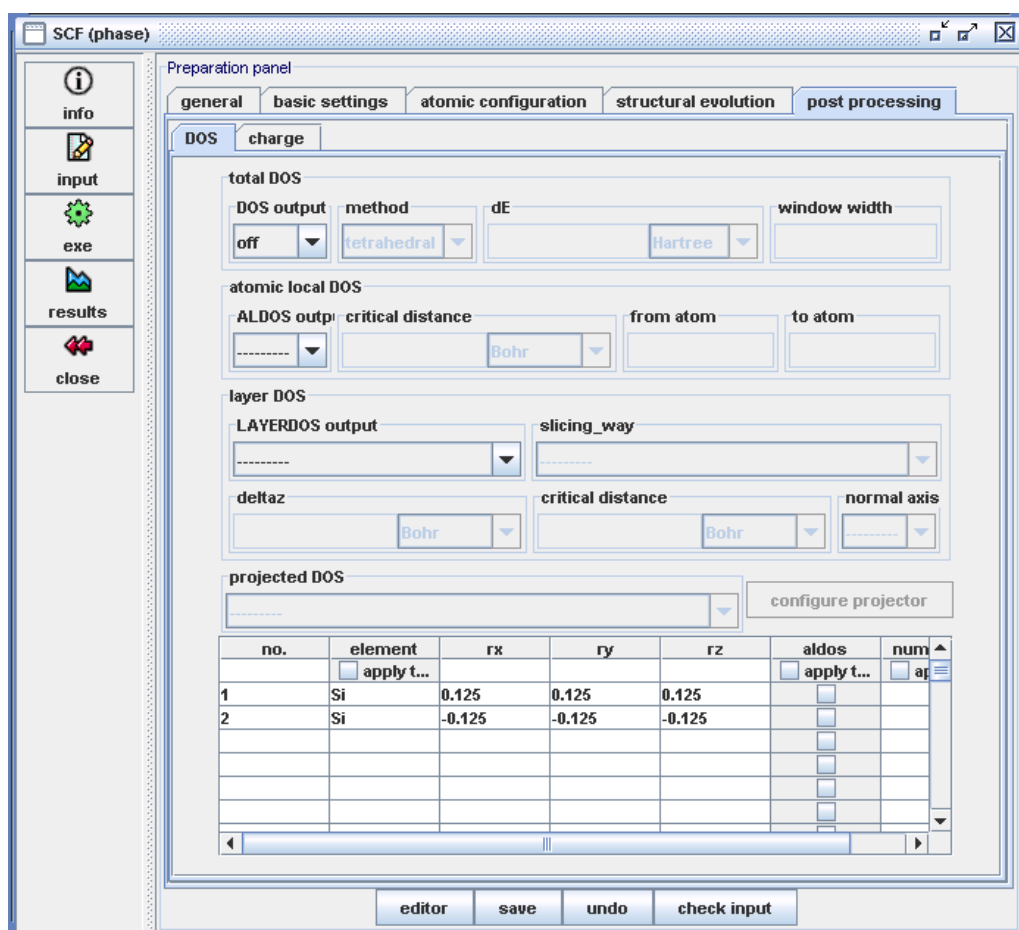


図 5.25: 状態密度計算の設定を行う画面.

原子配置テーブル 構造緩和の設定と同様、ここでも原子配置表示テーブルが配備されています。ここでは、原子ごとに局所状態密度を計算すべきか否かを表す属性 (“aldos”²) と、層分割局所状態密度計算において対応する原子がどの層に属するかを指定するための属性 (“num_layer”) が編集できるカラムが追加されています。

さらに、図 5.25 で “charge” タブをクリックすると電荷密度の書き出し方法に関わる設定を行うための画面、図 5.26 が得られます。電荷密度は、電荷密度のほか、任意のエネルギー範囲内の部分電荷密度の出力を行うことも可能です。

図 5.26 で設定可能な項目は下記の通りです。

valence charge 全電荷密度書き出しに関わる設定を行います。下記の設定項目があります。

- “Charge output”: 電荷密度出力の有無を指定できます。“on” と “off” のいずれかを選択できます。“on” の場合、電荷密度の出力を行います。
- “File type”: 電荷密度出力のファイル形式を選択できます。“cube” と “density_only” の選択肢があります。“cube” を選択すると Gaussian cube 形式の出力を、“density_only” を選択すると電荷密度のみの出力を行います。可視化に対応している形式は “cube” のみですので、“cube” を推奨いたします。
- “Title”: ファイル形式が “cube” の際、Gaussian cube ファイル中の見出しを設定できます。

partial charge 部分電荷密度書き出しに関わる設定を行います。下記の設定項目があります。

- “partial charge”: 部分電荷密度出力の有無を指定できます。“on” と “off” のいずれかを選択できます。“on” の場合、部分電荷密度の出力を行います。
- “file type”: “individual” と “integrated” という選択肢があります。“individual” の場合は設定した分だけ出力される部分電荷密度を一つのファイルに書き出します。“integrated” の場合、一つ一つの電荷密度が異なるファイルに書き出されます。“integrated” 形式を取り扱う方法をご用意しておりませんので、“individual” をお勧めいたします。

² “aldos” より “to” と “from” の方が優先されます

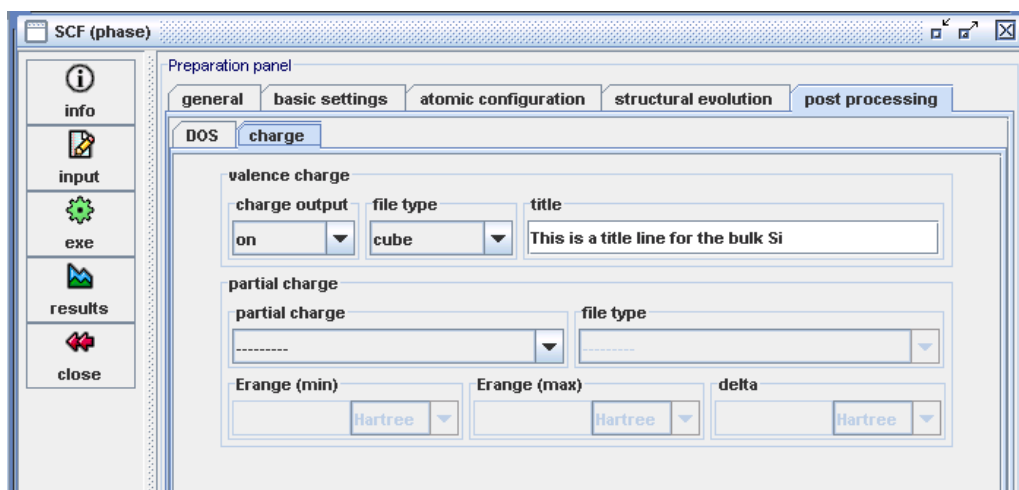


図 5.26: 電荷密度書き出しに関わる設定を行う画面.

- “Erange(min)” : 部分電荷密度を計算するエネルギー領域の最小値を入力します.
- “Erange(max)” : 部分電荷密度を計算するエネルギー領域の最大値を入力します.
- “delta” : 部分電荷密度を出力する間隔を入力します.

5.1.4.5 “magnetic state” ビュー

入力ファイル編集用画面の任意のタブ上で「右クリック」を行い、結果現れるメニュー (図 5.8) から “magnetic state” をクリックすると、磁性に関わる設定を行う画面、図 5.27 が表れます。この画面からは、次の指定を行うことができます。

magnetic state 磁性について指定できます。“para”(常磁性)、“ferro”(強磁性)、“antiferro”(反強磁性)のいずれかを選ぶことができます。“antiferro”を選択した場合、その下に配備されているテーブルからスピン反転を伴う生成元を下のテーブルで指定します。“ferro”が“antiferro”をご利用いただく場合、図 5.7 から元素ごとの zeta の値を設定する必要があります。

tspace 反強磁性を選択した場合、ここでスピン反転を伴う生成元を指定します。指定の方法は、図 5.22 で説明した tspace の指定の方法と同様です。

スピン分極を一定値に固定した計算を実行することも可能です。このような計算を実行するには、“fix total spin”を“on”とし、さらに“total spin”にスピン分極の値を入力してください。

5.1.4.6 “structural evolution” ビュー

入力ファイル編集用画面の任意のタブ上で「右クリック」を行い、結果現れるメニュー (図 5.8) から “structural evolution” をクリックすると、原子の構造緩和などに関わる設定を行う画面、図 5.28 が得られます。この画面の詳細を説明します。

- “method” リスト: 構造緩和の方法を選択します。“quench”、“gdiis”、“cg”、“velocity_verlet”、“temperature contro”のいずれかの方法を選択できます。デフォルトは“quench”です。なお、“quench”、“gdiis”、“cg”は構造緩和、“velocity verlet”は小正準集合の分子動力学シミュレーション、“temperature control”は正準集合の分子動力学シミュレーションを行います。
- “dt” テキストフィールド: 時間の刻み幅を入力します。単位は原子単位系です。デフォルト値は 100 です。
- “gdiis” 領域: “method” リストで “gdiis” を選択した際に、いくつかのオプションを設定できます。
 - gdiis_box_size: イオン座標を記憶しておく更新回数を指定します。
 - gdiis_hownew: 上で指定した回数分を使いきった際の処理法の選択をします。“anew”と“renew”が選択可能です。“anew”を指定するとそれまでのデータを全て破棄し、“renew”を指定すると最も古いデータを最新のデータと差し替えます。

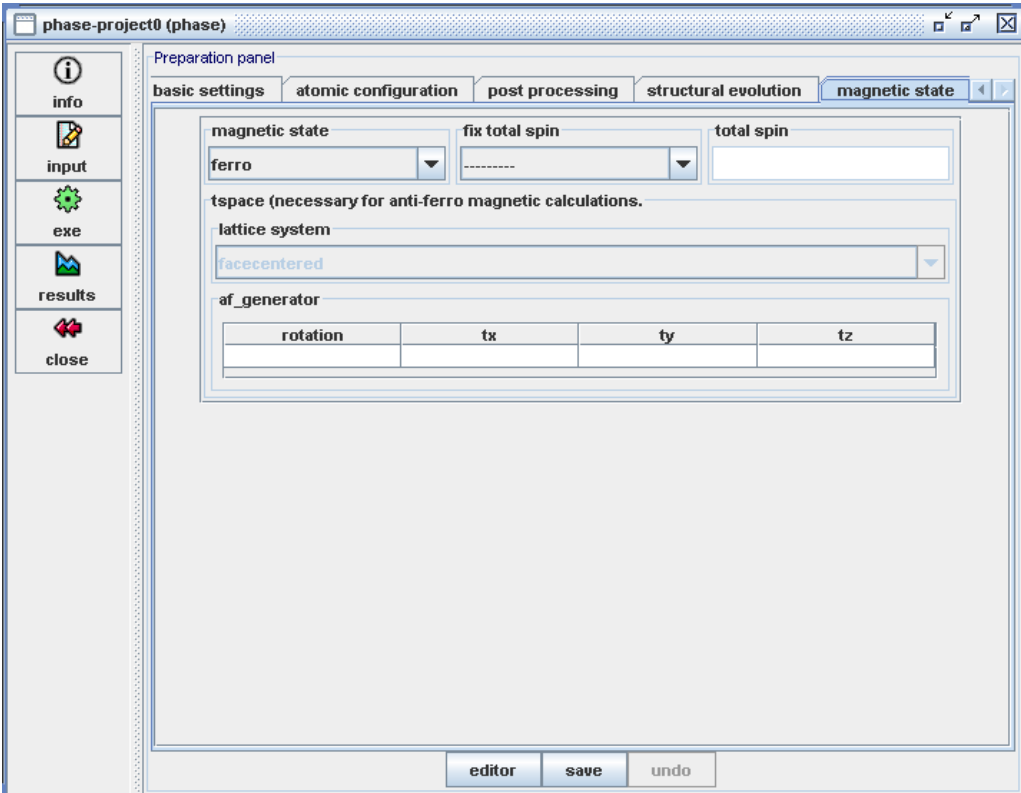


図 5.27: 磁性の設定を行う画面.

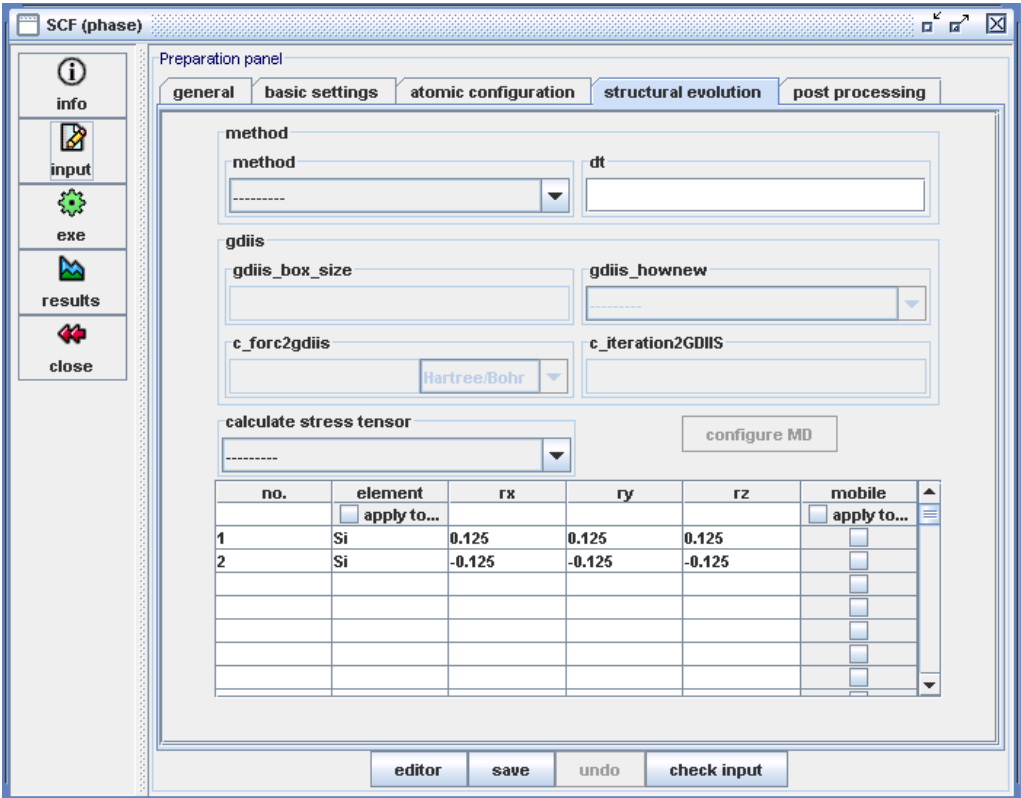


図 5.28: PHASE 入力ファイルの, “structure_evolution” ブロック編集画面.

- `c_forc2gdiis`: `gdiis` 法へ切り替える判定条件です。PHASE のデフォルト値は 0.0025 (Hartree/Bohr) です。
- “calculate stress tensor”: ストレステンソルを計算する場合, “on” としてください。
- “configure MD”: このボタンをクリックすると, 分子動力学計算設定用の GUI, 図 5.29 が現れます。図 5.29

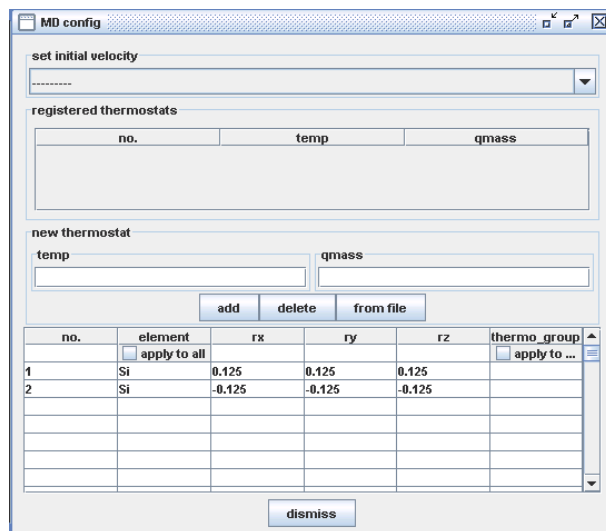


図 5.29: 分子動力学計算設定用画面。

の画面から, 次のような編集を行うことが可能です。

初期速度 原子の初期速度を設定するか否かを, “set initial velocity” というリストから選択することができます。

熱浴の設定 熱浴の設定を行うことができます。まず, “new thermostat” の “temp” というテキストフィールドに目的の温度をケルビン単位で, “qmass” というテキストフィールドに熱浴の質量を原子単位で入力します。その状態で “add” ボタンをクリックすると, “registered thermostats” テーブルに登録されます。また, “registered thermostats” テーブルにて登録されている熱浴を選択し “delete” ボタンをクリックすると登録解除することができます。

各原子の, 熱浴の割り当て 各原子にそれぞれ熱浴を関連付けることができます。この操作は, 画面下部の原子配置表示フィールドの thermo_group 列に対応する熱浴の ID を入力することによって行ってください。

さらに, 図 5.19 で表示されている原子配置表示テーブルと同等なテーブルが表示されています。唯一の違いは, 表示された時点で各原子の “mobile” 属性を編集することができる点です。“mobile” を有効にすると, 対応する原子は構造緩和や分子動力学シミュレーションの間その原子に働く力に応じて動きます。無効にしていると, 対応する原子はそれに働く力が何であれ動くことはありません。

5.1.4.7 “phonon” ビュー

振動解析を行うために必要な設定を行う画面を表示するには, まず入力ファイル編集用画面の任意のタブ上で「右クリック」を行い, 結果現れるメニュー (図 5.8) から “phonon” を選択してください。すると “phonon” タブが表示されるので, それを選択してください。図 5.30 が表示されます。

振動解析に関わる設定項目について説明します。

“phonon” “on” か “off” の選択肢があります。“on” の場合振動解析が行われます。

“point group” シェーンフリース記号で点群の名称を選択します。ただし, 対称性自動認識機能をご利用いただく場合指定は不要です。

“calculate force” 振動解析のための力計算を行うかを選択します。“on” の場合力計算が行われます。

“displacement” 原子変位のパラメータです。

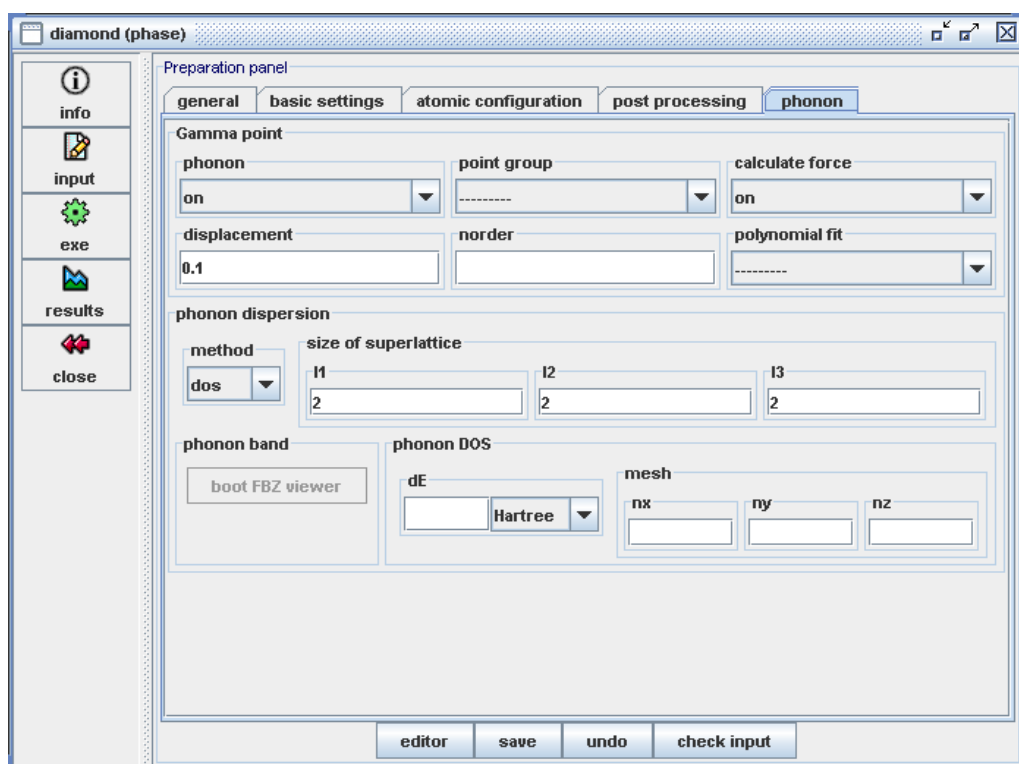


図 5.30: 振動解析の設定を行う画面.

“norder” 差分次数を変更するパラメータです.

“polynomial fit” 差分ではなく、多項式フィットで力の微分を求める時に “on” とします.

5.1.4.8 “DFT+U” ビュー

DFT+U 法による計算を設定するには、振動解析と同様まず入力ファイル編集用画面の任意のタブ上で「右クリック」を行い、結果現れるメニュー (図 5.8) から “DFT+U” を選択してください. 図 5.31 が得られます. この画面について説明します.

include Hubbard correction ハバード補正を行う場合、このリストから “on” を選択します.

“Hubbard” 領域 ここで、プロジェクターに対して有効クーロン相互作用の値を指定します. プロジェクターの設定そのものは、“projector_list” タブをクリックすると得られる図 5.32 から行います.

energy unit リスト エネルギーの単位を指定します.

ハバード補正表示テーブル プロジェクターの番号と、そのプロジェクターの有効クーロン相互作用の値が記述されたテーブルです.

new hubbard correction 領域 新たにプロジェクターに対して有効クーロン相互作用を指定する場合、ここで設定を行います. 次の操作を行うことができます.

- “no.” とあるテキストフィールドにプロジェクターの番号を入力し、“ueff” とあるテキストフィールドに有効クーロン相互作用の値を入力します.
- テーブルに登録する場合、“add” ボタンをクリックします.
- テーブルで選択中のデータを削除する場合 “delete” ボタンをクリックします.
- 既存の PHASE 入力から入力する場合 “from file” をクリックし、結果表れるファイル選択ダイアログより目的の PHASE 入力ファイルを選択します.

図 5.31 の “projector list” タブをクリックするとプロジェクターの設定を行う画面、図 5.32 が得られます. この画面の説明を行います.

“projector list” テーブル 登録されているプロジェクターの一覧が表示されます.

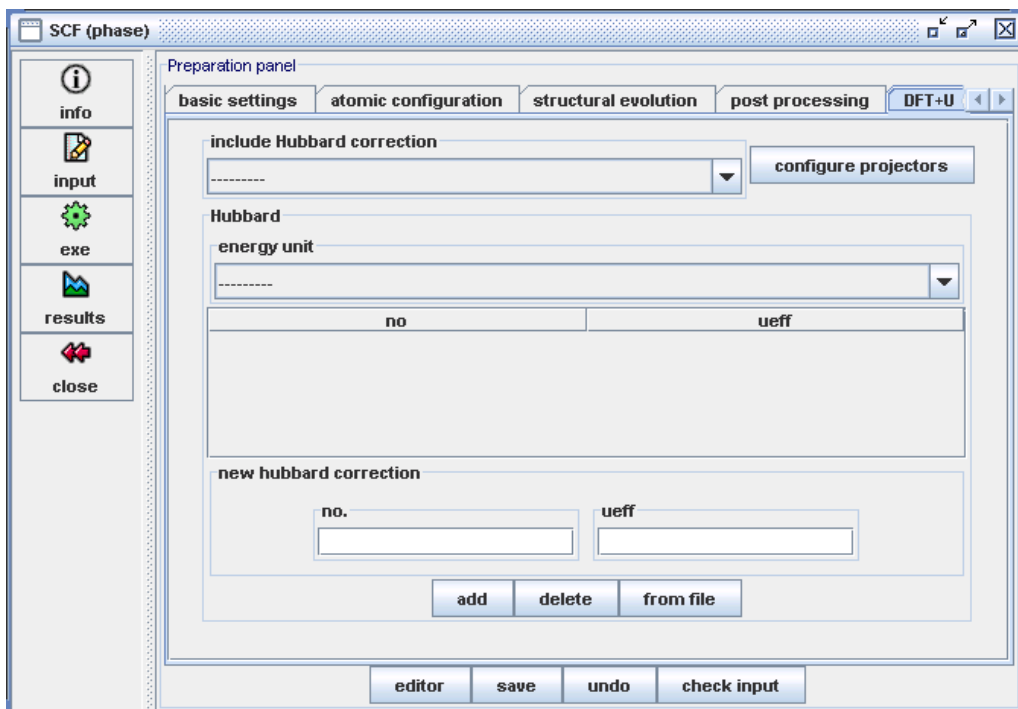


図 5.31: DFT+U の設定を行う画面.

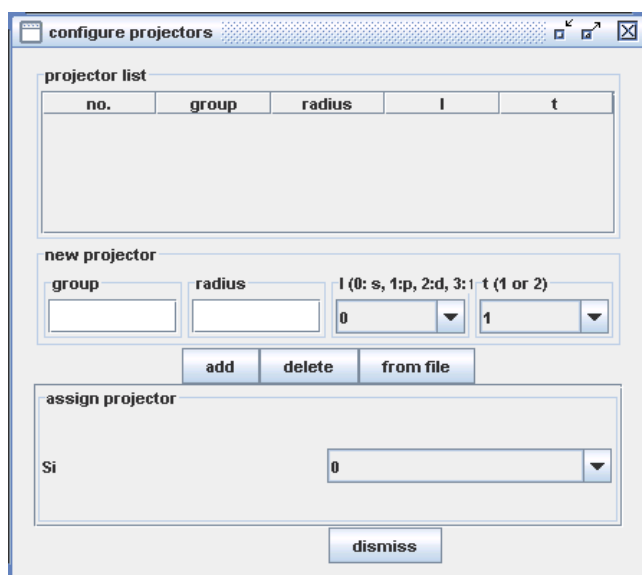


図 5.32: プロジェクターの設定を行う画面.

“new projector” 領域 この操作で新たにプロジェクターを登録します。次の操作を行ってください。

- まず、次の操作で新しいプロジェクターを設定します。
 - “group” テキストフィールドでプロジェクターのグループ番号を入力します。
 - “radius” テキストフィールドで有効原子半径を指定します。
 - “l” リストから方位量子数を指定します。
- テーブルに登録する場合、“add” ボタンをクリックします。
- テーブルで選択中のデータを削除する場合 “delete” ボタンをクリックします。
- 既存の PHASE 入力から入力する場合 “from file” をクリックし、結果表れるファイル選択ダイアログより目的の PHASE 入力ファイルを選択します。

“assign projector” 領域 PHASE の現実装では、射影演算子は元素ごとに割り振る仕組みになっています。この領域で、利用している元素の隣のリストから利用したいプロジェクターの group の値を選択します。0 は無指定に対応します。

5.1.5 実効制御用 GUI

図 5.6 の “exe” ボタンをクリックすると、図 5.33 で示す、「実効制御用 GUI」が得られます。この画面から計算の実行を制御します。本節ではこの GUI について説明します。

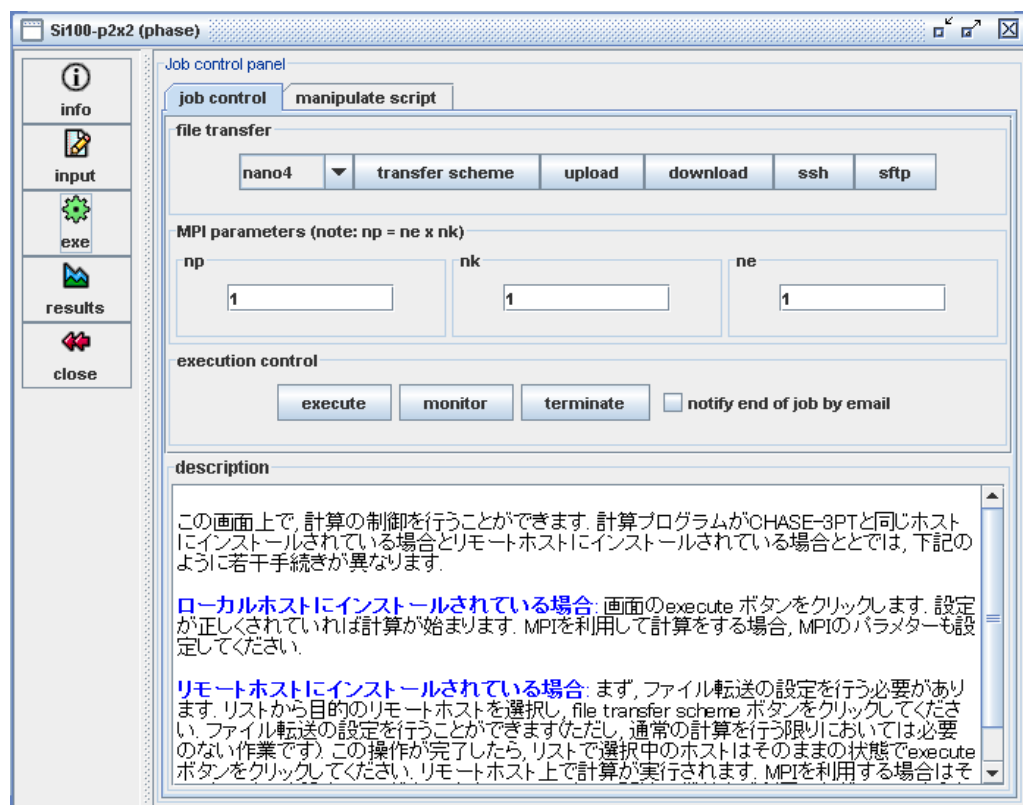


図 5.33: 実行制御用画面.

この画面では、次の操作を行うことができます。

5.1.5.1 ファイル転送の設定

実行を行う前にバッチファイル転送の設定を行うことができます。その方法は、第 4.5 節にて説明されている通りです。

5.1.5.2 MPI の設定

MPI 関連の設定を、“MPI parameters” 領域で行います。³ “np” に使用するプロセッサの数を入力します。また “nk” には k 点分割の数を、“ne” にはバンドの分割数を入力します。np, nk, ne の間には、 $np=nk \times ne$ という関係が成立している必要があります。並列の効率は、通常 k 点の方がよいです。そこで、あらかじめ利用する k 点の数を図 5.22 の “check symmetry” ボタンからチェックしておき、最適なプロセッサの割り振り方を決定することをお勧めします。たとえば 16 プロセッサがあり計算対象の k 点数が 8 なら、 $nk=8$, $ne=2$ という設定が理想的です。このように理想的な状況ばかりとは限りませんが、このような状況になるべく近づくような設定を施すことによって最適な並列化効率を得ることができます。

³後述の ekcal や uvsor-epsilon の計算の場合不要です。

5.1.5.3 スクリプトの設定

通常の計算を行う限りにおいては必要のない操作ですが、計算を実行するためのスクリプトを編集することもできます。“manipulate script” タブをクリックするとスクリプト制御画面が現れ、利用するスクリプトを設定したり、スクリプトそのものを編集することが可能となります。詳しくは第 6 章を参照してください。

5.1.5.4 計算の実行および実行停止

まず、「バッチファイル転送設定画面」より計算を投入するホストを選択しておいてください。

その後、“execute” ボタンをクリックするとローカルホストの場合はただちにジョブが投入され、またリモートホストの場合は必要なファイルのアップロードが行われた後ジョブが投入されます。また、“terminate” ボタンをクリックすることによって継続計算可能な状態で計算が停止されます。計算は終了してはいないけれど設定を変更して再計算を行いたい、などの場合にお使いください。さらに、“monitor” ボタンをクリックすると、実行中の計算をモニターすることができます。この機能については第 6.2 節をごらんください。

5.1.6 計算結果解析

図 5.6 の “results” ボタンをクリックすると、図 5.34 で示す、「結果解析用 GUI」が得られます。この画面から計算結果の解析などを行うことができます。本節ではこの GUI について説明します。

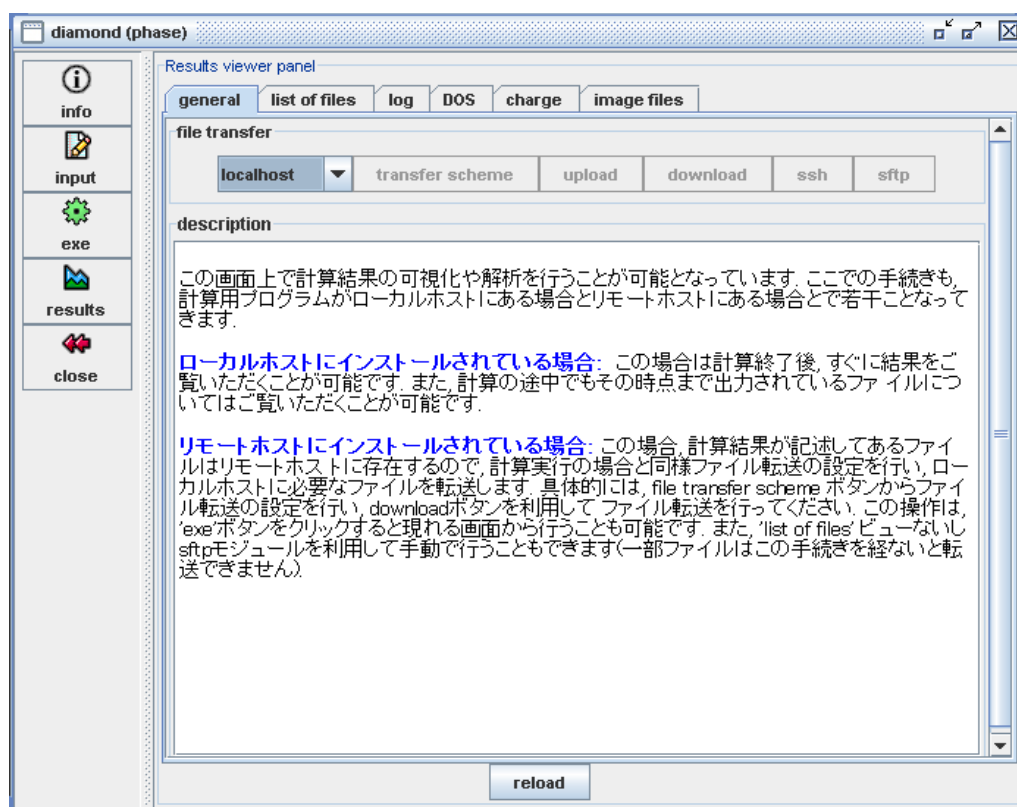


図 5.34: “results” ボタンをクリックするとまず得られる画面。

5.1.6.1 “general” ビュー

“results” ボタンをクリックするとまず得られるのが “general” ビューです。ここではバッチファイル転送画面 (図 4.9) を利用してファイル転送を行うことができます。その方法については第 4.5 節を参照してください。この画面は、“general” タブをクリックすることによって表示させることができます。

画面の下に配備されている、“reload” ボタンは結果ファイルの再度読み込みを行う場合利用します。タブをクリックすると対応するファイルが読み込まれますが、その情報に変化が生じた場合にご利用ください。

5.1.6.2 “list of files” ビュー

図 5.34 の, “list of files” タブをクリックすると, 図 5.35 の「ファイルリスト画面」が得られます。

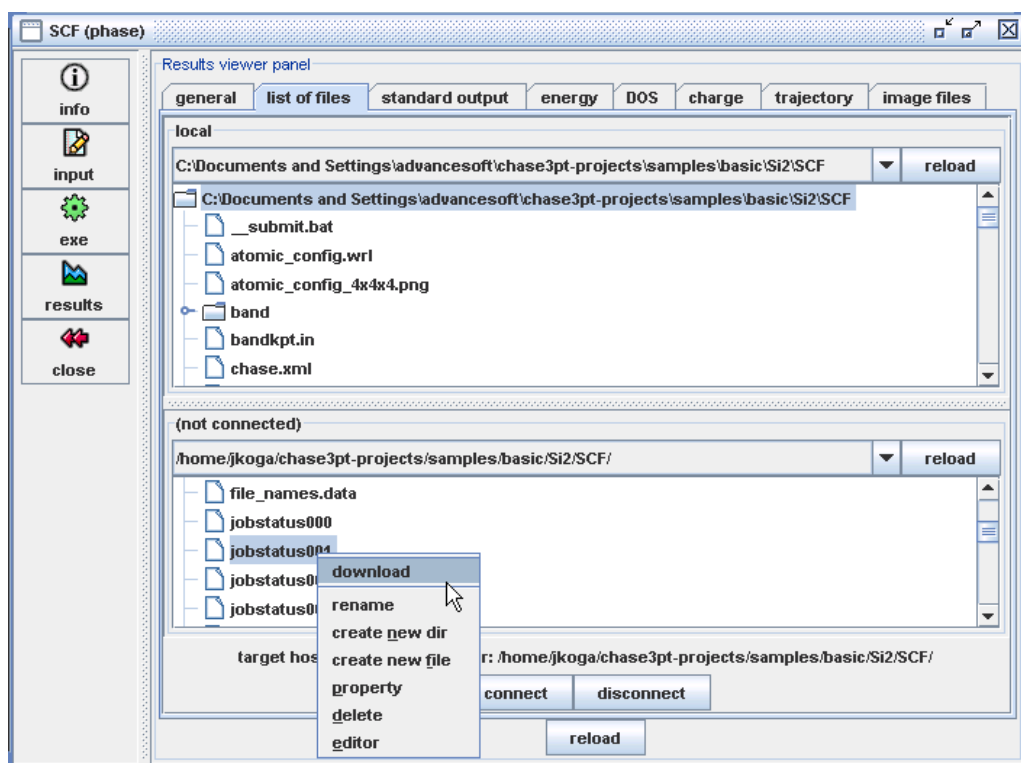


図 5.35: “list of files” タブをクリックすると得られる画面。

この画面上では, 対応するサブプロジェクトにある全てのファイルのリストが表示されます。また, 計算をリモートホストで行った場合リモートホストの対応するディレクトリーを表示し, ファイル転送などを行うことも可能です。この操作は, “connect” ボタンをクリックすることによって行うことができます。基本的な操作方法は, 第 4.4 節で説明した SFTP クライアントプログラムとほぼ同様です。

5.1.6.3 “log” ビュー

図 5.34 の, “log” タブをクリックすると, 図 5.36 で図示している「PHASE 標準出力解析画面」が得られます。なお, PHASE の標準出力は outputxxx というファイルに書き込まれます。ここで xxx は三桁の数字で, 同じディレクトリー上で実行された回数に対応する数字です。基本的に数字が大きい方が (同一ディレクトリー上で) より最近行われた計算に対応します。

基本的な利用方法としては, 一番上の “select stdout file” リストから目的の標準出力ファイルを選択します。するとそれに応じて画面全体が再描画されます。最初にこの画面を表示した場合, 最も新しい標準出力ファイルが選択された状態になります。

“editor” ボタンをクリックすることによって標準出力ファイルをテキストエディターで開くことができます。さらに, 標準出力ファイルは色々な種類の情報が記述してあるので, キーワードでフィルターを掛けたテキストを参照できる仕組みを備えています。この操作を行うには, 次の手続きを踏む必要があります。

- “filter” テキストフィールドにフィルターを掛けたいテキストを入力する。
- 大文字, 小文字を区別しない場合 “ignore case” チェックボックスを有効にする。
- “editor” ボタンをクリックする。

例として, 標準出力ファイルから大文字で “TOTAL” という文字列の含まれる行 (全エネルギーの収束具合を確認することができます) をエディターで表示した様子を図 5.37 に図示します。

標準出力の中でも比較的重要と考えられる情報を残りの画面を利用して表示しています。この画面はタブで区切られており, “general” タブをクリックすると一般的な情報が, “SCF” タブをクリックすると SCF 計算の履歴が, “post” をクリックするとポスト処理部での情報がそれぞれ得られます。

まず, 図 5.36 で表示されている「一般的な情報」の説明をします。

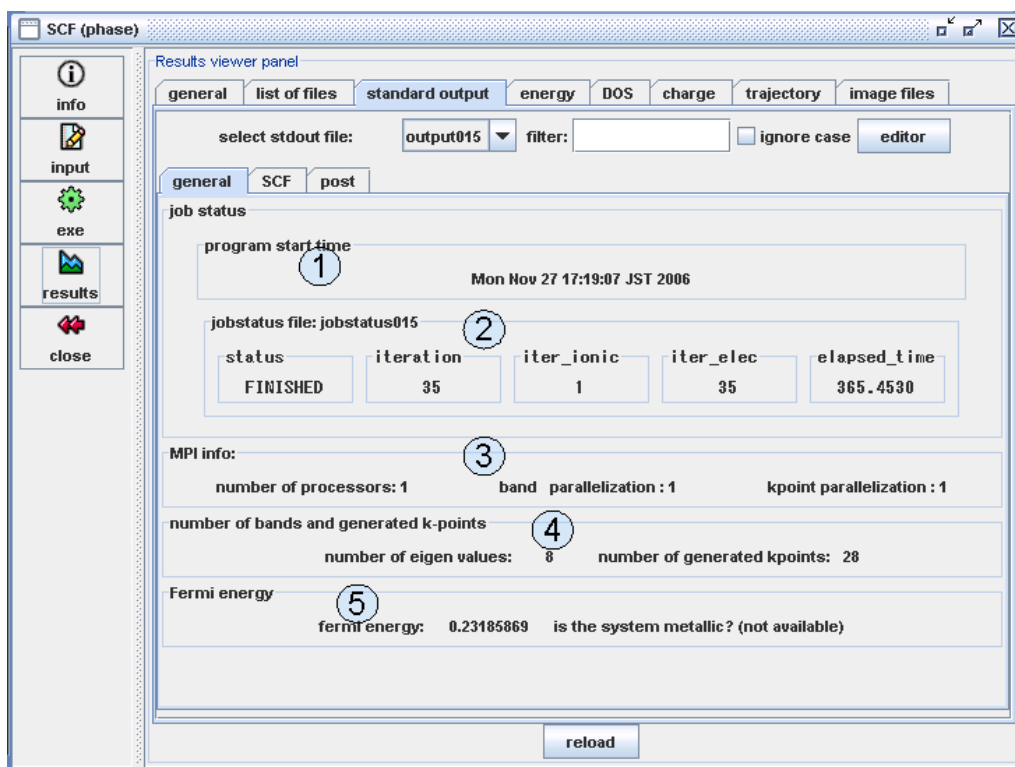


図 5.36: PHASE 標準出力解析画面 1.

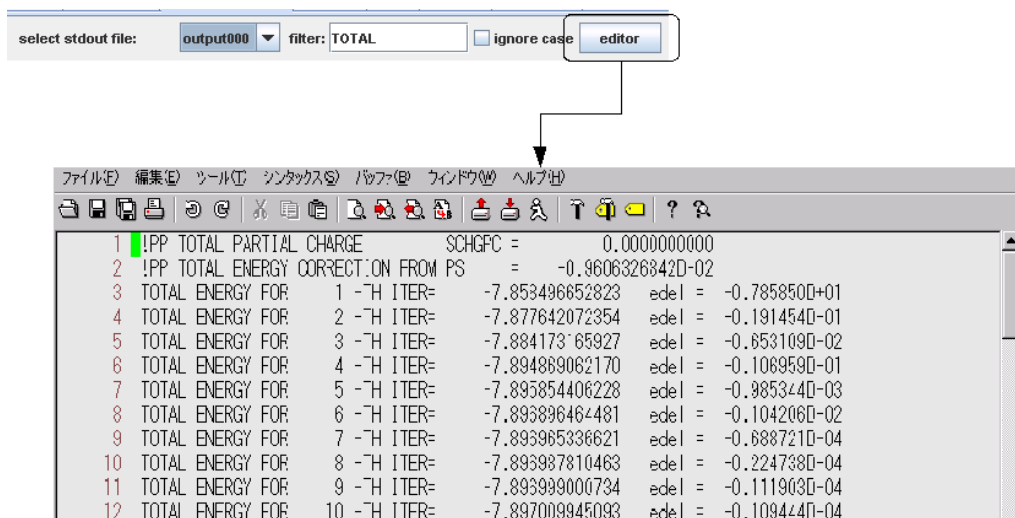


図 5.37: 標準出力ファイルより、“TOTAL” という文字列を含む行のみを抜き出してエディターで表示している例.

1. “program start time” 領域: 計算の開始時間が表示されています。
2. “jobstatus file”: “jobstatusxxxx” ファイルの内容が表示されます。このファイルは、PHASE 入力の printout-level ブロックで、base を 1 以上に設定した際に書き出されるファイルです。ここでは次の情報を知ることが可能です。

status “START”, “ITERATION”, “FINISHED” のいずれかの文字列が表示されます。それぞれ初期化・繰り返し計算・計算終了を表します。

iter_ionic: イオンの更新回数です。

iter_elec: 電子の更新回数です。

elapsed_time: 経過時間です。

3. “MPI info” 領域: MPI に関する情報が表示されています。利用したプロセッサ数, バンドの並列度, k 点の並列度が左から順に表示されています。
4. “number of bands and generated k-points” 領域: バンドの数とプログラムが作成した k 点の数を表示しています。
5. “Fermi energy” 領域: フェルミエネルギーと, 系が金属であったか非金属であったかの判定が出力されています。

図 5.36 の “SCF” タブをクリックすると, 図 5.38 が得られます。

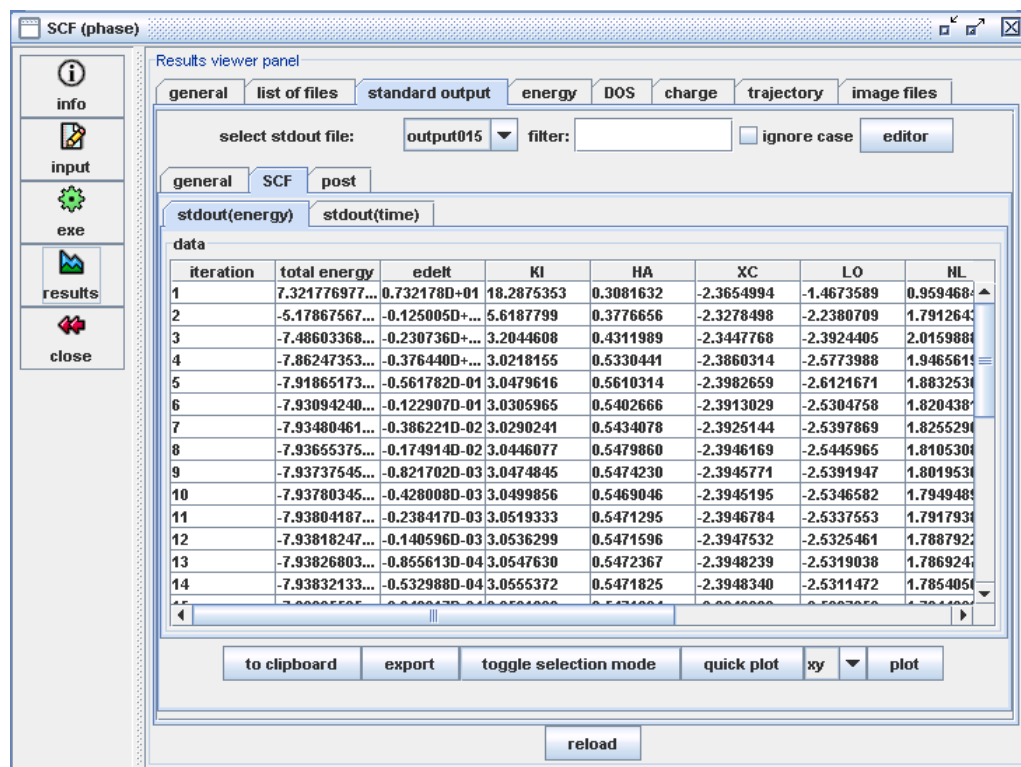


図 5.38: PHASE 標準出力解析画面 2.

この画面上では, SCF 計算の各ステップで得られたエネルギーの詳細がテーブルで表示されています。各カラムは, 次のような量に対応します。

iteration: SCF 計算の更新回数。

total energy: 全エネルギー。

edelt: 各イテレーションでの, 前のステップからの全エネルギーの変化分。

KI: 運動エネルギー。

HA: Hartree エネルギー。

XC: 交換相関エネルギー。

LO: 局所エネルギー。

NL: 非局所エネルギー。

EW: Ewald エネルギー。

PC: コア補正エネルギー。

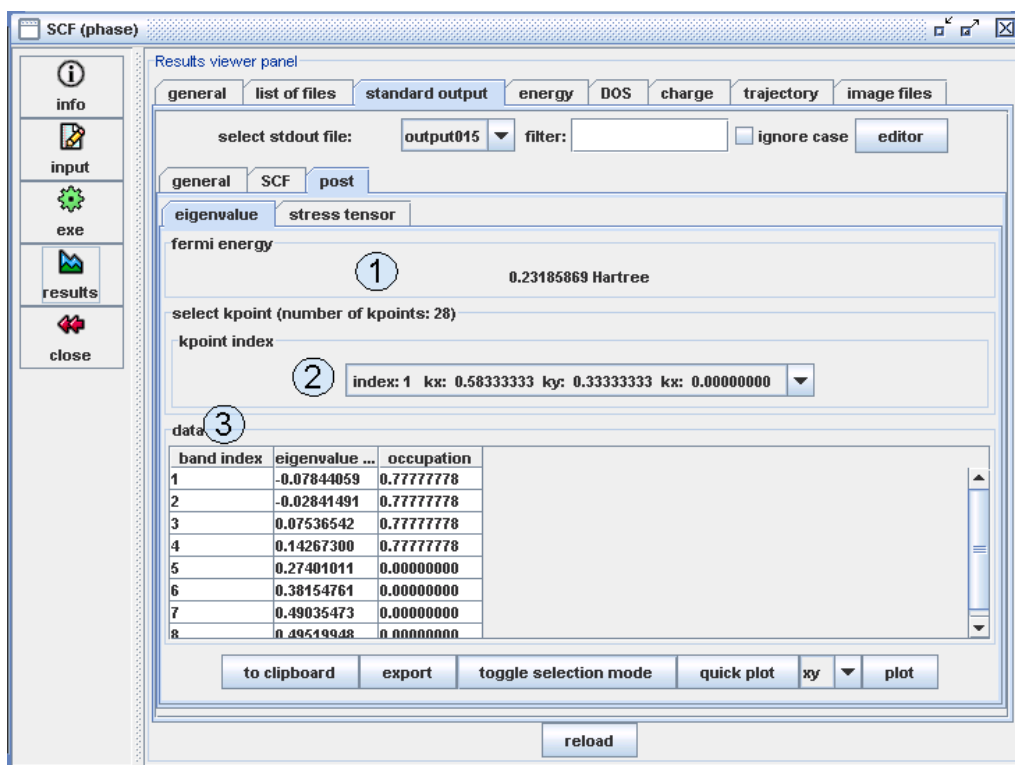


図 5.39: PHASE 標準出力解析画面 3.

表 5.1: ストレステンソルの表示形式.

σ_{xx}	σ_{yx}	σ_{zx}
σ_{xy}	σ_{yy}	σ_{zy}
σ_{xz}	σ_{yz}	σ_{zz}

これらのデータをグラフで表示することも可能です。その操作は、下部にあるボタン領域で行います。詳しい操作方法の説明は第 10 章で行います。

さらに、図 5.36 ないし図 5.38 の “post” タブをクリックすると図 5.39 が得られます。この画面はさらにタブで区切られており、“eigenvalue” と “stress tensor” を選択することができます。前者は最終的に得られた固有値の情報、後者は (計算する設定にしている場合は) 計算されたストレステンソルの情報を表示します。固有値表示画面では、まず図 5.39①にフェルミエネルギーの値が表示されています。ついで、どの k 点の固有値を表示させるかを選ぶためのリストがあります (図 5.39②)。ここから表示したい固有値に対応する k 点を選択してください。最後に、図 5.39③に固有値などの情報がテーブルに表示されます。このテーブルの各カラムは次のような量に対応します。

band index: バンド指標.

eigen value: 固有値.

occupation: 占有数.

SCF の場合と同様、グラフ表示などを行うことも可能です。この点は第 10 章にて解説します。

図 5.39 の “stress” をクリックすると、図 5.40 を得ます。この画面ではストレステンソルの値を参照することが可能です。表示されている 3×3 テーブルの値は、表 5.1 のようになっています。

5.1.6.4 “DOS” ビュー

図 5.34 の “DOS” タブをクリックすると、状態密度の結果を表示することができます。その際得られる画面を図 5.41 に図示します。

この画面は、大きく分けて二つに分かれています。

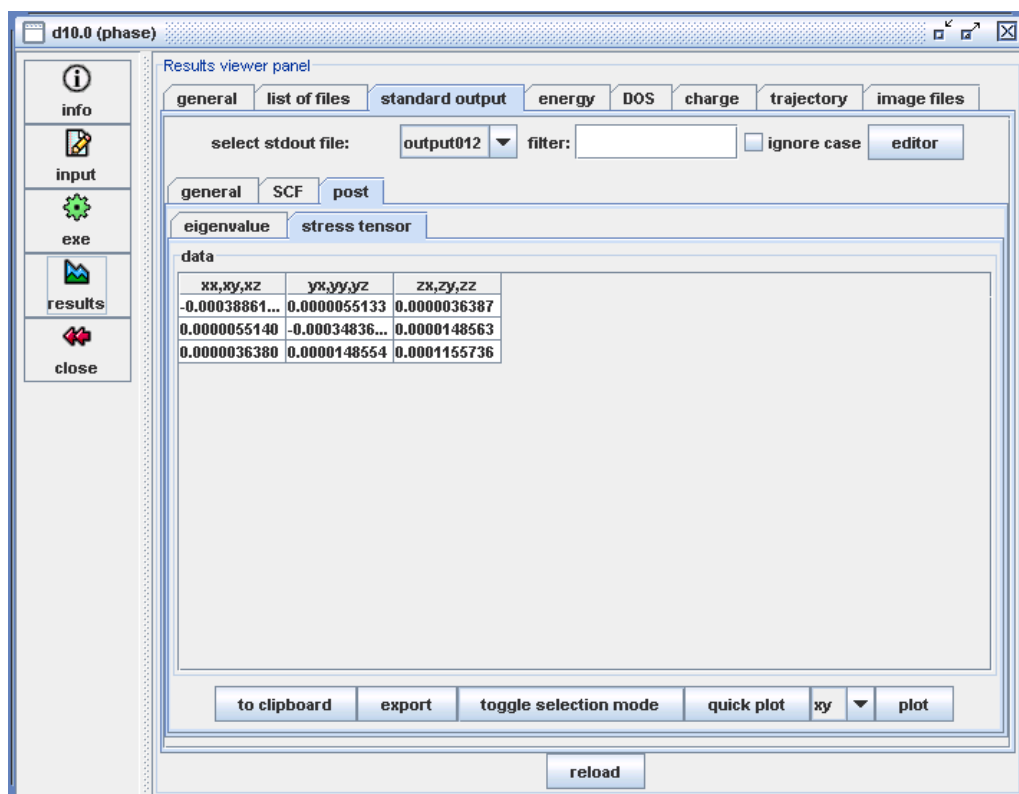


図 5.40: PHASE 標準出力解析画面 3.

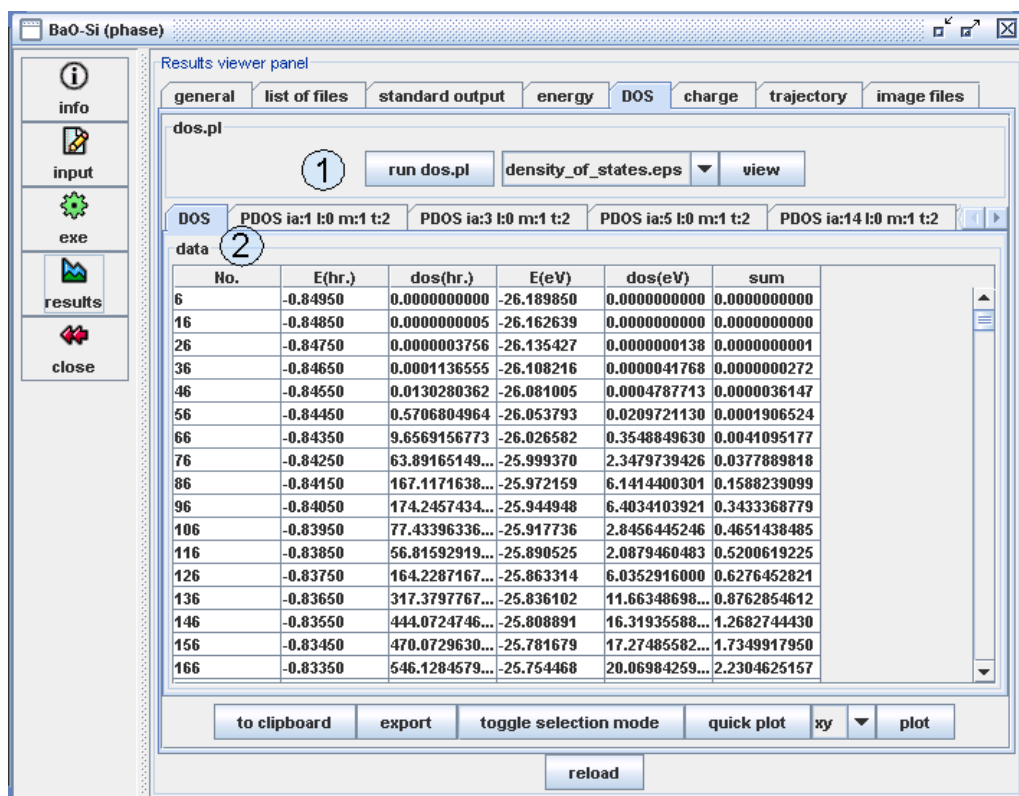


図 5.41: “DOS” タブをクリックすると得られる画面.

- ① **dos.pl 制御** 画面上方に, PHASE 付属の Perl スクリプト, “dos.pl” を制御するための画面が表示されます. “dos.pl” を利用すると, 少ない手続きで状態密度の encapsulated Post Script(eps) 図を得ることができます. dos.pl を利用するには, “run dos.pl” ボタンをクリックしてください. 図 5.42 が得られます. “dos.pl”

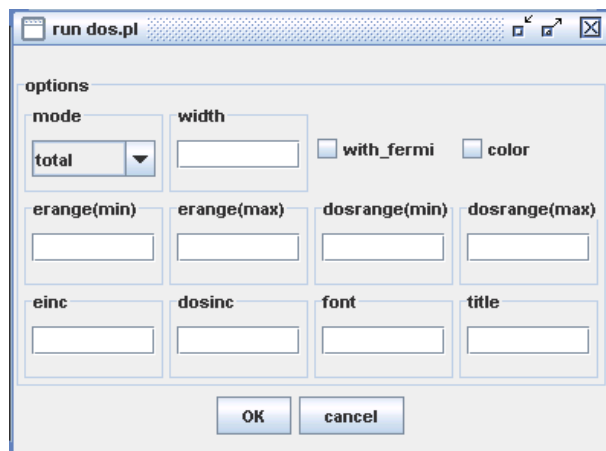


図 5.42: dos.pl 制御用画面.

のオプションを下記します.

mode “total”, “atom”, “layer”, “projected” のいずれかを選択できます. それぞれ, 全状態密度, 原子分割局所状態密度, 層分割局所状態密度, 射影状態密度の状態密度図を作成します.

width 図の幅を変更することができます. デフォルト値は 1 です.

with_fermi フェルミレベルないし価電子帯上端のエネルギーレベルを描画します.

color カラー表示します.

erange(min) エネルギーの最小値を入力します. 入力しない場合データの最小値が採用されます.

erange(max) エネルギーの最大値を入力します. 入力しない場合データの最大値が採用されます.

dosrange(min) 状態密度の最小値を入力します. 入力しない場合データの最小値が採用されます.

dosrange(max) 状態密度の最大値を入力します. 入力しない場合データの最大値が採用されます.

einc エネルギーの目盛りの間隔を指定できます.

dosinc 状態密度の目盛りの間隔を指定できます.

font 描画に使われる文字列のフォントの大きさを指定できます.

title 描かれるグラフにタイトルを付加することができます.

オプションを設定した後, “OK” をクリックすると dos.pl が実行され, 状態密度の eps 図が作成されます. この際, 全状態密度の場合は “density_of_states.eps” というファイルが作成されます. 例として, 図 5.43 に dos.pl によって作成されたシリコンの状態密度図を図示します. 原子分割状態密度の場合は dos_axxx.eps というファイルが, 層分割電子状態密度の場合は dos_lxxx.eps というファイルが作成されます. ここで “xxx” は対応する数字です. これらの eps ファイルを閲覧するには, リストから目的のファイルを選んで “view” ボタンをクリックしてください. 画像ファイルビューアー (第 11 章) が起動します.

- ② **状態密度データ表示** dos.pl 制御画面の下にあるテーブルに, 状態密度データが表示されます. その下に配備されているボタンを利用してグラフを作成することも可能です (詳しくは第 10 章). 局所状態密度を計算した場合複数の状態密度データが得られますが, この場合は一つのデータにつき一つのタブで表示されます. 目的の状態密度データに対応するタブを選択すればそのデータを表示したテーブルが現れます. テーブルの各カラムが表す量は, スピン分極を考慮していない計算と考慮している計算とで若干異なります.

スピン分極を考慮していない場合

No. データのインデックス.

E(hr.) ハートリー単位でのエネルギー

dos(hr.) ハートリー単位でエネルギーを表した場合の状態密度

E(eV.) 電子ボルト単位でのエネルギー

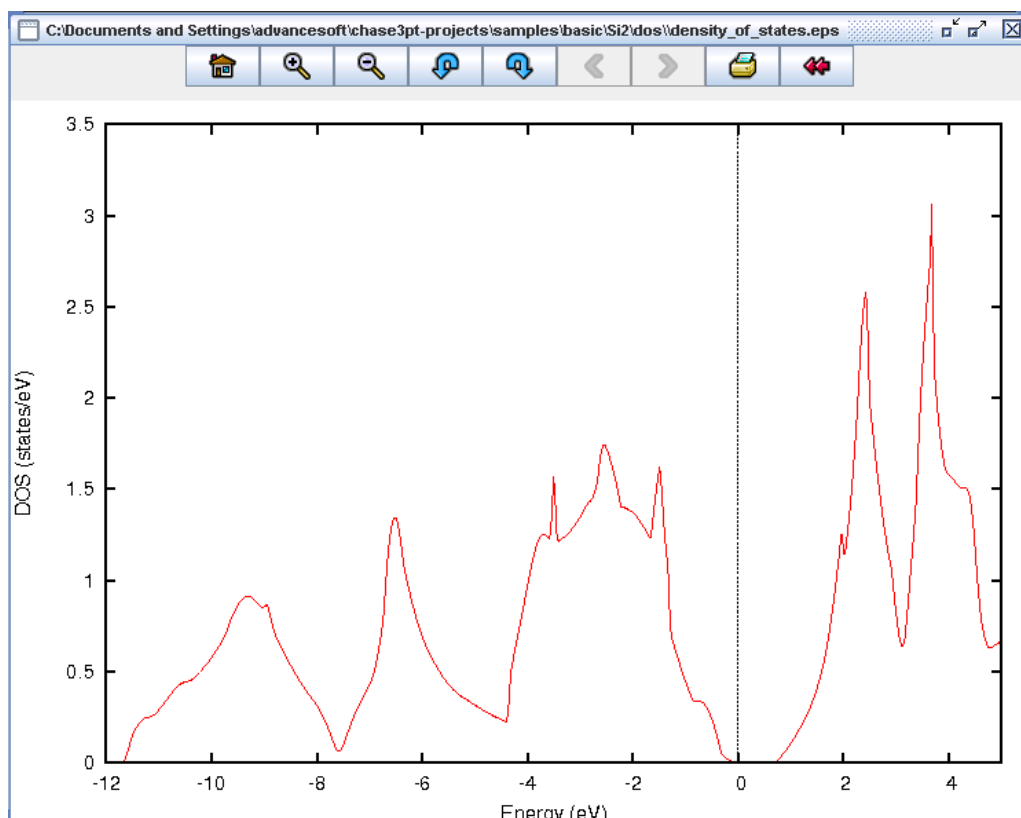


図 5.43: dos.pl によって作成された状態密度図を PHASE-Viewer 内蔵画像ビューアー (第 11 章) で見ている様子。

dos(eV.) 電子ボルト単位でエネルギーを表した場合の状態密度

sum 積算状態密度

スピン分極を考慮している場合

No. データのインデックス

E(hr.) ハートリー単位でのエネルギー

dos up(hartree) ハートリー単位でエネルギーを表した場合の多数派スピン状態の状態密度

dos down(hartree) ハートリー単位でエネルギーを表した場合の少数派スピン状態の状態密度

E(eV) 電子ボルト単位でのエネルギー

dos up(eV) 電子ボルト単位でエネルギーを表した場合の多数派スピン状態の状態密度

dos down(eV) 電子ボルト単位でエネルギーを表した場合の少数派スピン状態の状態密度

sum up 多数派スピン状態の積算状態密度

sum down 少数派スピン状態の積算状態密度

sum total 積算状態密度

5.1.6.5 “charge” ビュー

図 5.34 の “charge” タブをクリックすると、電荷密度の解析を行うことができます。図 5.44 にその画面のスクリーンショットを図示します。

電荷密度は、全価電子密度ファイルのほか、入力ファイルの設定によっては部分電荷密度も出力されます。目的の電荷密度ファイルを①の “select charge file” リストから選択してください。すると、②, “info” 領域の “title” と “comment” 部分にその電荷密度ファイルの情報が出力されます。また、①の “boot BioStationViewer” ボタンをクリックすると BioStationViewer によって、“boot internal viewer” をクリックすると第 8 章にて説明する原子配置ビューアーで当該ファイルを開くことが可能です。

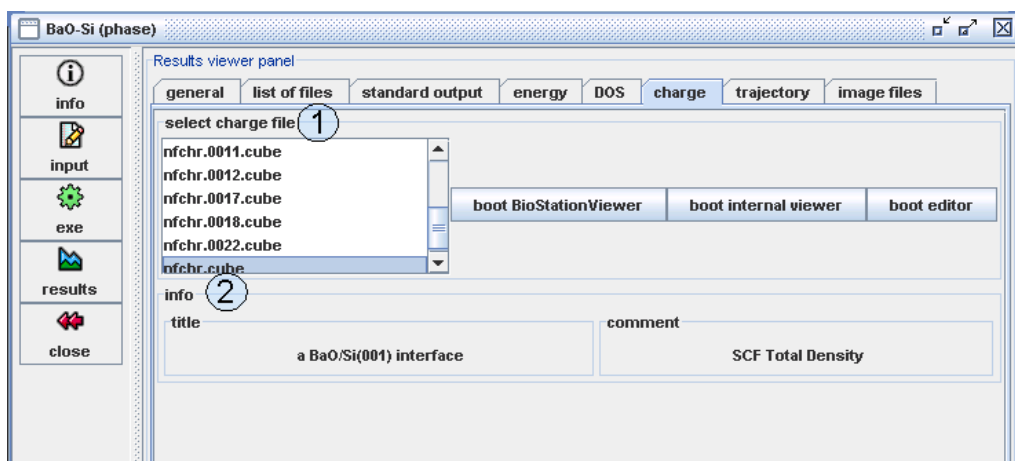


図 5.44: “charge” タブをクリックすると得られる画面.

5.1.6.6 “image files” ビュー

PHASE-Viewer の操作を通じて色々な画像ファイルを作成することが可能です. それら画像ファイルを閲覧する, 「画像ファイルビューアー」は図 5.34 の “image” タブをクリックすることによって表示することができます. 画像ファイルビューアーについては第 11 章にて詳解します.

5.1.6.7 “structural evolution” ビュー

図 5.8 で示しているように, タブを右クリックすることによって現れるメニューに表示される “structural evolution” を選択すると構造緩和/分子動力学シミュレーションの過程を解析する画面, 図 5.45 を得ることができます.

エネルギー 上記の操作によって得られる図 5.45 から全エネルギーや原子に働く力の最大値の変遷などを解析することができます. 図 5.34 の “energy” タブをクリックすると, PHASE によって計算された全エネルギーを表示する画面, 図 5.45 が得られます. 全エネルギーのデータは, file_names.data の中の F_ENF 識別子によって指定されるファイルに書き込まれます.

この画面上では, まず①に次の情報が表示されます.

file name F_ENF ファイルのファイル名.

num. steps イオンの更新回数

type 計算の種類; “static calculation”(イオンの更新なし), “geom. optimization”(構造緩和), “molecular dynamics”(分子動力学) のいずれかです.

また, エディターで表示するため, “editor” ボタンを配備しています.

次に, ②にエネルギーのデータがテーブルで表示されます. この表示は, “static calculation(一点計算)” ないし “geom. optimization(構造緩和)” の場合と “molecular dynamics(分子動力学)” の場合とで表示される情報が若干異なります. 以下, それぞれの場合について各カラムの表す量を説明します.

- “static calculation” ないし “geom. optimization” の場合:

iter_ion イオンの更新回数.

iter_total SCF の更新回数も含めた, 全更新回数.

etotal 全エネルギー.

forcmx 力の最大値.

- “molecular dynamics” の場合:

iter_ion イオンの更新回数.

iter_total SCF の更新回数も含めた, 全更新回数.

etotal 全エネルギー.

ekina イオンの運動エネルギー

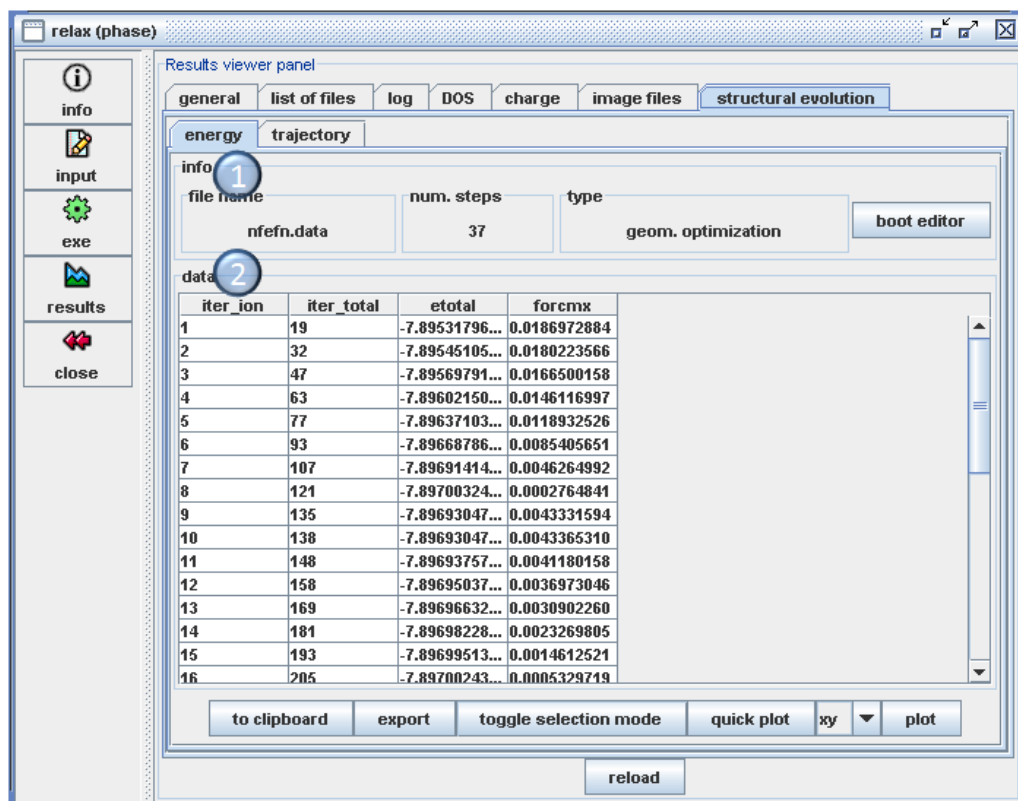


図 5.45: “energy” タブをクリックすると得られる画面。

econst 全エネルギー+イオンの全エネルギー; エネルギー一定の分子動力学の場合保存量.
 forcemx 力の最大値.

座標 図 5.45 の “trajectory” タブを選択すると、座標の変遷を解析するための画面、図 5.46 が得られます。

図 5.46 の各領域の説明をします。

1. ファイル名、フレーム数が表示されます (それぞれ “file name” と “num.frames” と表示されています)。また、“select frame” でビューアーで表示したいフレームを選択することができるようになっています。“all” を選択すれば全フレームを取り込んだ状態で、それ以外では対応するフレームの情報を取り込んだ状態で “viewer” ボタンをクリックするとビューアーを起動することができます。その後のビューアー操作の詳細は第 8 章を参照してください。さらに、“viewer” ボタンの隣にある “export” ボタンをクリックすると外部ファイルに現在の F_DYNN ファイルをエクスポートすることができます。エクスポートの詳細は、第 7 章を参照してください。“export” ボタンの隣にある “diff” ボタンをクリックすると、F_DYNN ファイルの「差分」を解析する画面、図 5.47 の左側の画面を得ます。ここで「比較元」のファイル名とフレーム数、「比較先」のファイル名とフレーム数を入力し、“ok” をクリックすると図 5.47 の右側の画面を得ます。フレームは、負の値を指定すると最後のフレームを指定することと同じ効果を持つようになります。起動時の状態では同じファイルの最初と最後のフレームを比較する状態になっていますが、任意のファイル間・フレーム間の差分を解析することが可能になっています。結果表示画面では各原子の x 座標、 y 座標、 z 座標の違いと動いた距離が Å 単位で表示されます。
2. セルベクトルの情報などが表示されます。
3. テーブルに、各ステップでの座標や働く力などが表示されます。

5.1.6.8 “phonon” ビュー

PHASE は振動解析を行うことができますが、図 5.8 で示しているように、タブを右クリックすることによって現れるメニューに表示される “phonon” を選択すると、図 5.48 の画面を得ることができます。

この画面からは、PHASE 付属の “freq.pl” と “animate.pl” という二種類の Perl スクリプトを操作することができます。“freq.pl” を利用すると振動数レベル図を作成することができます。また、“animate.pl” を利用すると基準振動の固有ベクトルを可視化することができます。詳しくは PHASE TOOLS マニュアルをご参照ください。

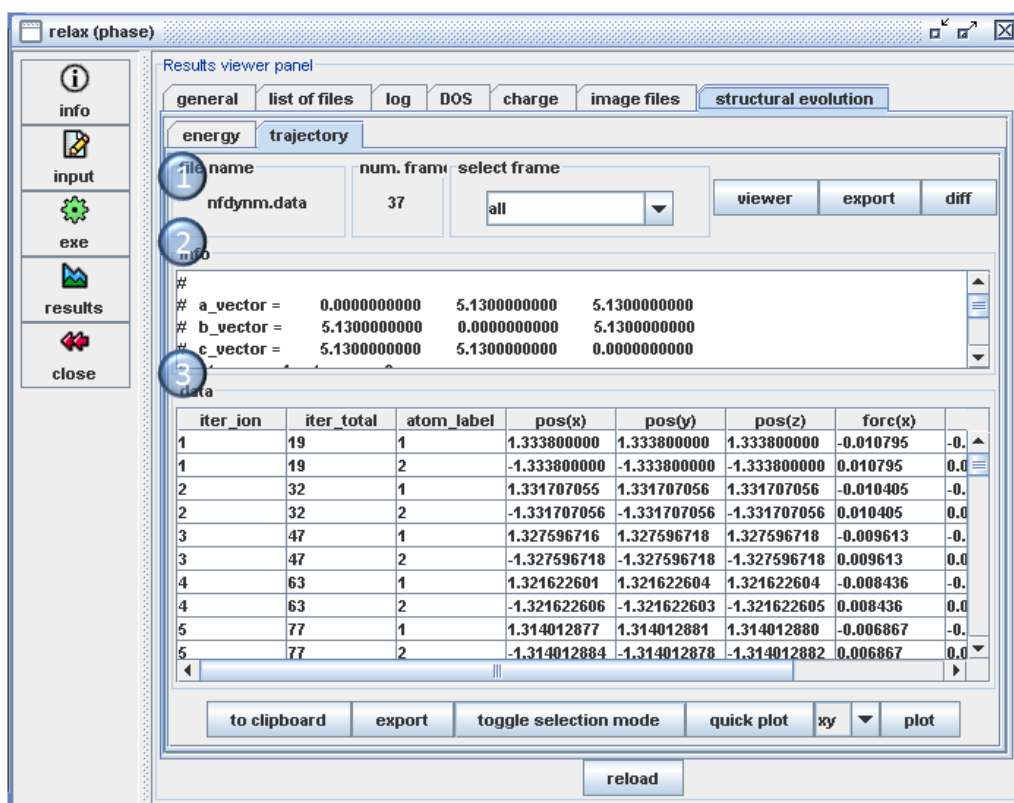


図 5.46: “trajectory” タブをクリックすると得られる画面.

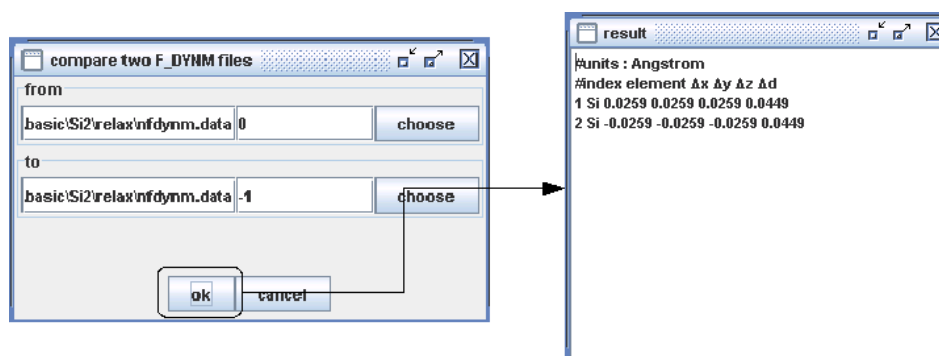


図 5.47: F_DYNAM ファイルの「差分」の解析.

図 5.48①にある, “run freq.pl” ボタンをクリックすると “freq.pl” を実行するための画面, 図 5.49 が得られます. ここで適切なオプションを設定し (オプションについては PHASE TOOLS マニュアルを参照), “ok” をクリックすれば振動数レベル図, “freq.eps” が得られます. “view” ボタンをクリックすれば作成した振動数レベル図を閲覧することもできます.

“animate.pl” の利用方法は, “dynm2tr2.pl” の利用方法とほぼ同様です. 図 5.48②の, “run animate.pl” ボタンをクリックしたら現れた画面上で必要に応じて “control.inp” ファイルを編集し, “ok” としてください. 基準振動の固有ベクトルの情報を含んだ拡張トラジェクトリー形式のファイルが基準振動の数だけ得られます. リストから目的のファイルを選択し “view” ボタンをクリックすればビューアで可視化することも可能です.

最後に, 図 5.48③には “mode.data” の内容が直接表示されます. このファイルの内容の詳細は PHASE ユーザーマニュアルをご覧ください.

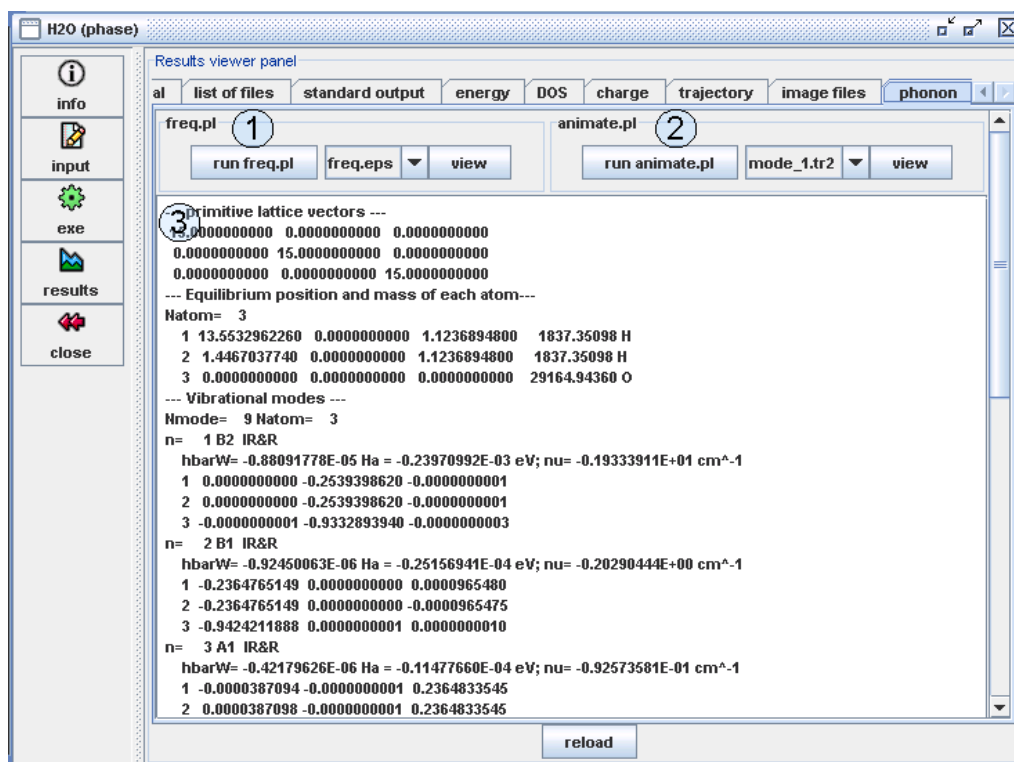


図 5.48: “phonon” タブをクリックすると得られる画面.

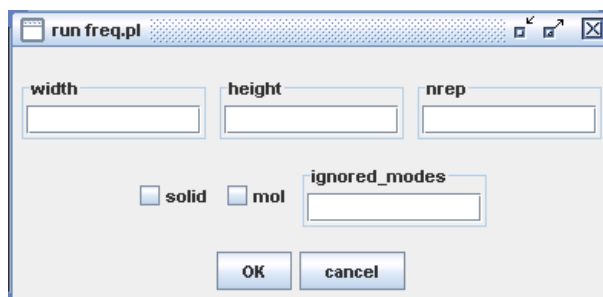


図 5.49: “freq.pl” を実行する画面.

5.2 ekcal 制御用 GUI

“ekcal” は, PHASE によって計算された self-consistent field(SCF) を利用して任意の k 点での固有値を計算するためのプログラムです. ekcal は, 入力ファイルの仕様などは PHASE と共通になっています. ekcal には, たとえば下記のような利用方法があります.

バンド計算 対称線上の k 点の情報を提供することにより, バンド構造の計算を行うことができます. 対称線上の k 点作成は, それを支援する Perl スクリプト (band_kpoint.pl) も付属しています. また, 第 9 章にて説明する逆空間ビューアーを利用してグラフィカルに作成することも可能です.

状態密度計算 一旦 PHASE の計算を Monkhorst-Pack 法による k 点サンプリングで行った後, 状態密度の計算は ekcal を利用して tetrahedron 法による k 点サンプリングで行うことができます.

5.2.1 初期化用 GUI

ekcal サブプロジェクトを作成するには, 第 3.2.4.1 節にて説明した手続きを踏んでください. 図 5.50 の, 「ekcal 初期化用 GUI」が得られます.

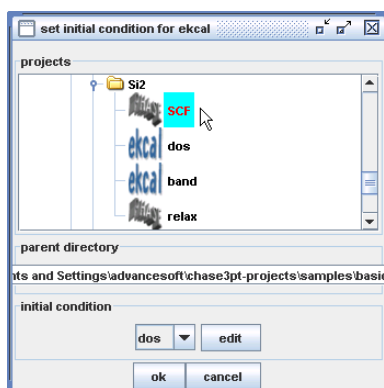


図 5.50: ekcal 初期化用画面.

この画面上では、次の操作を行うことができます。

参照する PHASE ディレクトリーの指定 上記したように、ekcal はすでに計算された PHASE の SCF を参照します。このファイル (F_CHGT ファイル) が存在する場所を指定します。指定は、図で表示されているディレクトリーブラウザー上の対応するノードをダブルクリックすることによって指定することができます。初期の指定は、選択中のノード (当該 ekcal サブプロジェクトの親ノード) になっています。

初期設定 ekcal 用の初期設定を指定することができます。まず、リストよりバンド計算用に初期化するのか (band) 状態密度計算用に初期化するのか (dos) を選択します。より詳細な初期設定が必要な場合は “edit” ボタンをクリックして後述の詳細設定画面を起動します。

5.2.1.1 初期条件の詳細設定

ekcal 計算用の初期設定を詳細に行うための手続きを説明します。この手続きは、バンド計算用に設定するのか状態密度計算用に設定するのかで異なってきます。なお、ここで説明する初期化の詳細設定は第 6 章で説明する BeanShell スクリプトを利用しています。そちらの方も併せてご覧ください。

バンド計算の場合 バンド計算用の詳細設定画面を、図 5.51 に図示します。ここで設定できる項目は、下記の通りです。

“band_kpoint.pl” による、対称 k 点の作成 バンド計算を行う対称 k 点のファイル作成を支援する Perl スクリプト、band_kpoint.pl の操作を行うことができます。“boot_kpoint_generator” ボタンをクリックすると band_kpoint.pl 制御用 GUI が起動します。band_kpoint.pl 制御用 GUI の詳細は第 5.2.3 節をご参照ください。

逆格子ビューアーによる、対称 k 点の作成 バンド計算を行う対称 k 点のファイル作成を、第 9 章にて説明する逆格子ビューアーを利用して行うことができます。

“accuracy” の設定 計算精度に関わる設定を行うことができます。具体的には、“ek_convergence” ブロックの内容を編集することができます。詳しくは PHASE ユーザーマニュアルおよび第 5.2.3 節をご覧ください。

状態密度の場合 状態密度計算用の詳細設定画面を、図 5.52 に図示します。ここで設定できる項目は、下記の通りです。

“accuracy” の設定 バンド計算の場合よりも、“accuracy” に関わる設定は多くできるようになっています。

“postprocessing” の設定 状態密度計算の詳細を設定することができます。

特に設定を行わない場合、次のような設定で初期化が行われます。

matrix_diagon のカットオフ: PHASE に準ずる

ksampling mesh 法, メッシュの細かさは PHASE に準ずる

smearing tetrahedron 法

状態密度計算方法 tetrahedron 法, $dE=1.0 \times 10^{-4}$ Hartree.

5.2.2 情報表示 GUI

PHASE の場合と同様、サブプロジェクト制御 GUI を起動するとまず得られるのは、図 5.53 で図示している “情報表示用 GUI” です。PHASE のそれとほぼ同様ですが、“参照するディレクトリー” を表示/変更する部分が存在する点がこととなります。“parent directory” とある領域に参照する PHASE のディレクトリーと、それを変更するためのボタンが配備されています。参照する PHASE ディレクトリーを変更するには、“select new parent” ボタンをクリックすると現れるファイル選択ダイアログから目的のディレクトリーを選択してください。

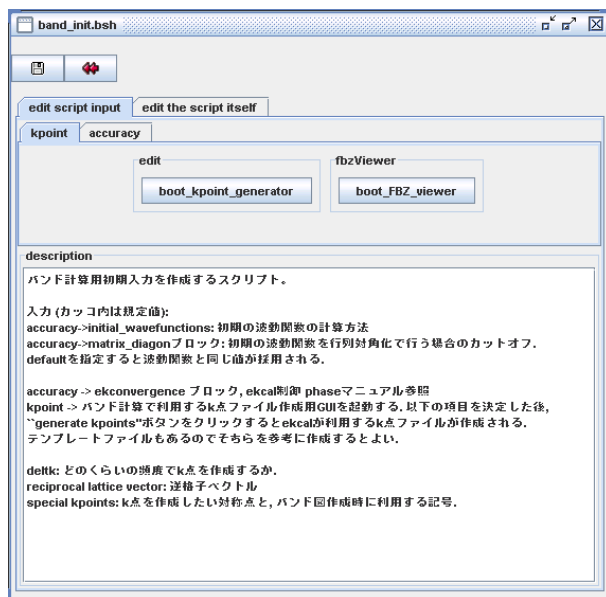


図 5.51: バンド計算用初期化詳細設定画面.

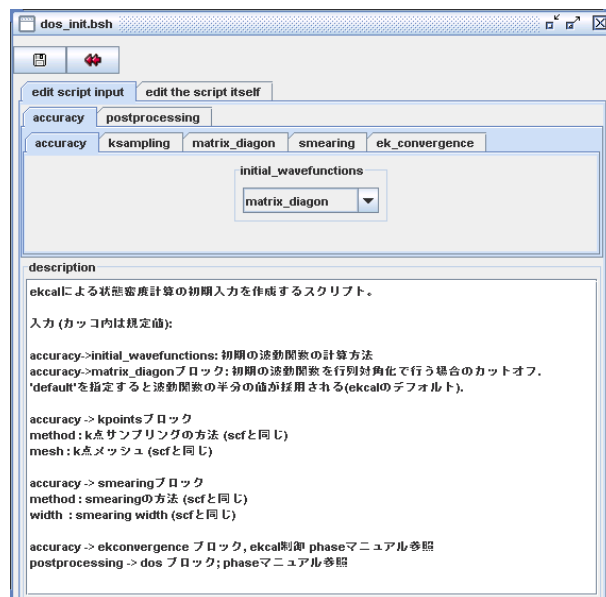


図 5.52: 状態密度計算用初期化詳細設定画面.

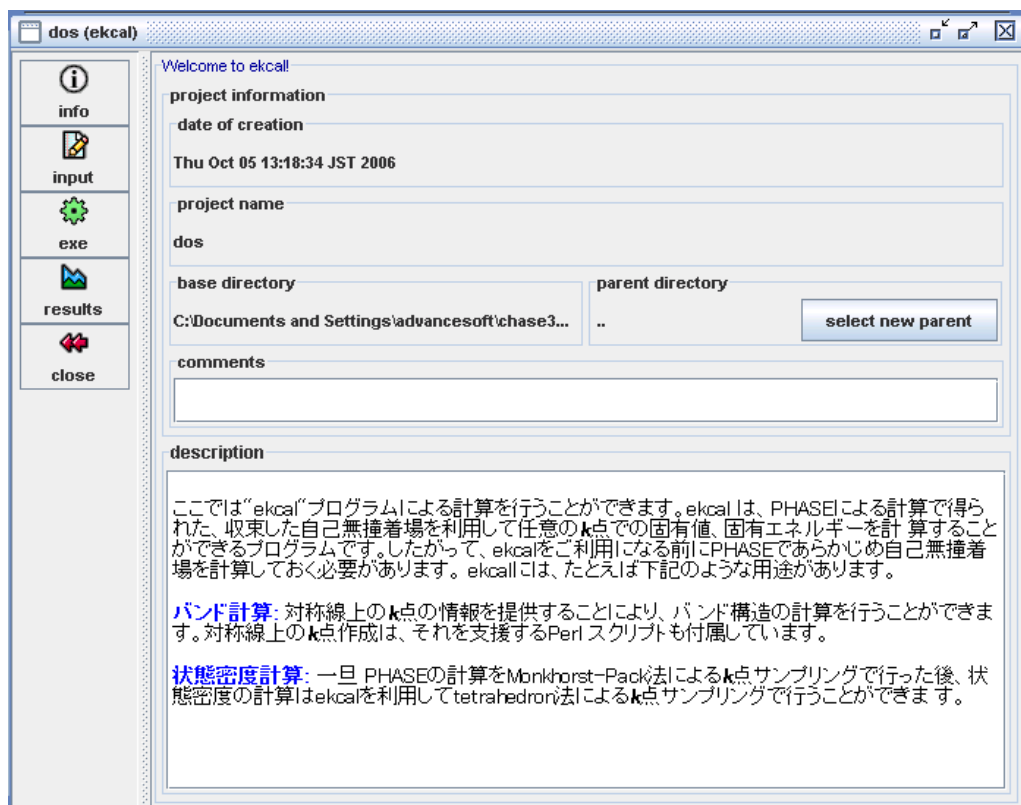


図 5.53: ekcal 情報表示画面.

5.2.3 入力ファイル編集

入力ファイル編集の基本は PHASE とほぼ同様ですが、設定できる項目は PHASE とくらべると少なくなっています。通常編集する必要があるのは、下記の通りです。

“ek convergence” ekcal の精度の設定です。図 5.54 に ek_convergence 設定用 GUI のスクリーンショットを示します。この画面を表示するには、“basic settings” タブをまずクリックし、ついで “ek_convergence” タブをクリックしてください。

ek_convergence には下記の設定項目があります。

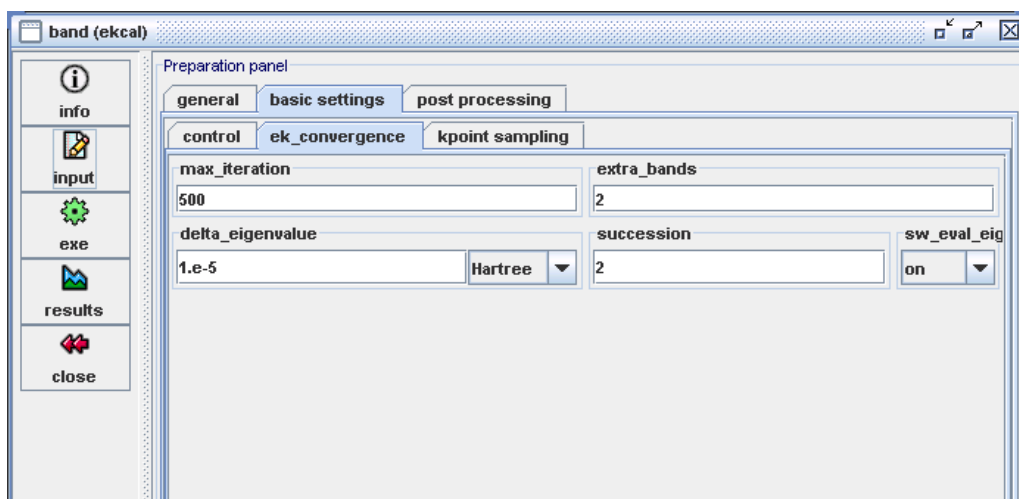


図 5.54: “ek_convergence” を設定するための画面.

max_iteration k 点一点あたりの最大の更新回数を指定します。デフォルト値は 300 です。

num_extra_bands 未収束でもかまわない追加バンドの数を指定します。デフォルト値は 2 です。

delta_eigenvalue 固有値の許容誤差を指定します。デフォルト値は 10^{-15} Hartree です。このデフォルト値は通常小さすぎるので、必ず変更してください。半導体の場合 10^{-4} rydberg 程度、金属の場合 10^{-6} rydberg 程度に設定するとよいでしょう。

succession 計算の繰り返し回数を指定します。デフォルト値は 3 です。

sw_eval_eig_diff 固有値評価用のスイッチです。“on”と“off”が選択可能です。

k 点サンプリング k 点のサンプリング法は計算の目的に応じて変更してください。たとえば、バンド計算を行う場合 k 点サンプリング法は“file”とする必要があります、また k 点ファイルを作成する必要があります (第 5.2.1 節の初期化で“band”とした場合自動的にそのようになっています)。また、バンド計算用の k 点ファイルを作成するための Perl スクリプト、“band_kpoint.pl”を実行することができます。band_kpoint.pl 実行制御用画面を図 5.55 に図示します。この画面上から band_kpoint.pl 用の入力ファイルを編集し、“generate kpoints”

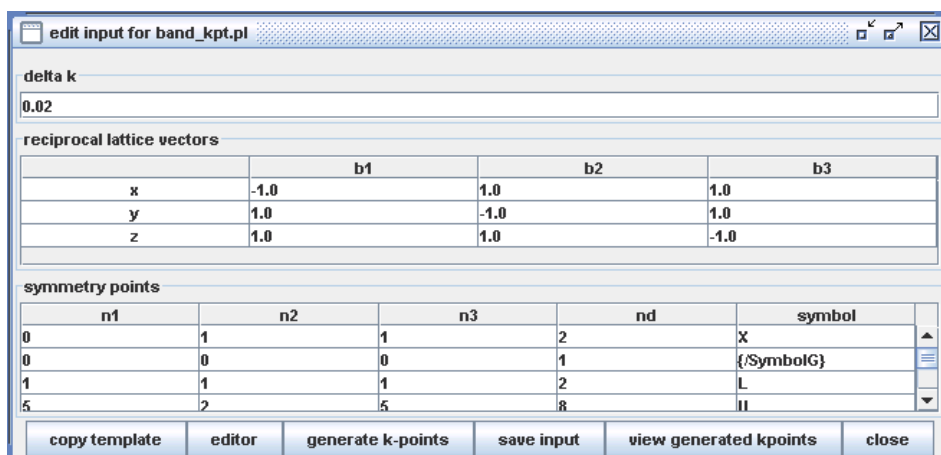


図 5.55: “band_kpoint.pl” 実行用 GUI.

ボタンをクリックすれば ekcal が読み込むことのできる k 点ファイルが作成されます。なお、band_kpoint.pl の詳細については PHASE TOOLS のユーザーマニュアルをご参照ください。

post processing たとえば状態密度計算の場合、状態密度の計算方法を詳細に設定する必要がある場合もあるかもしれません。そういった場合にご利用ください。

そのほか、ソルバーや電荷密度混合法設定用 GUI は“basic settings”のタブ上で右クリックすると現れるメニューから対応する項目を選択すれば編集可能となります。

5.2.4 実効制御用 GUI

ekcal 用の実行制御 GUI は, PHASE のそれと同様です. ただし MPI 関連の設定は意味を持ちません. 第 5.1.5 節を参照してください

5.2.5 結果解析

ekcal 結果解析用画面のほとんどは PHASE と共通です. 違いは, バンド計算の結果を解析する画面をデフォルトの状態で作成することができる点です. 結果解析画面の “band” タブを選択した際に得られる画面を図 5.56 に図示します.

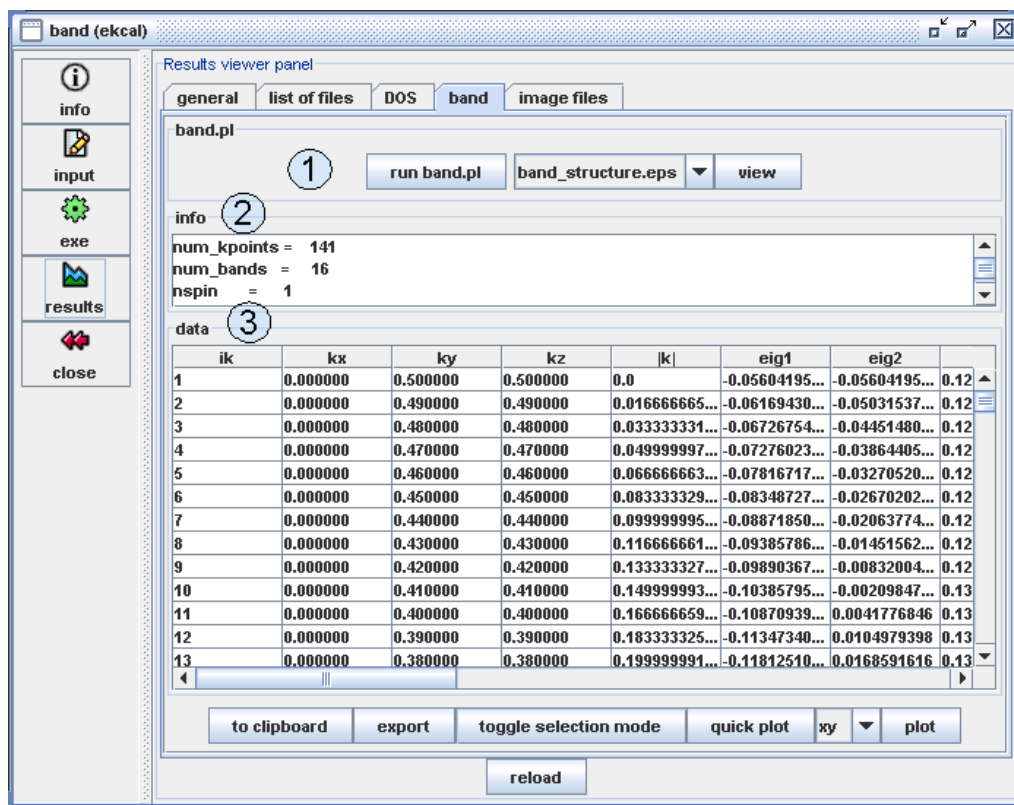


図 5.56: バンド計算の結果を解析するための画面.

この画面からは, 固有値データ (F_LENERG ファイル) からバンド図を作成するための Perl スクリプト, “band.pl” を起動することができます. 図 5.56①の “run band.pl” ボタンをクリックしてください. その結果現れる画面を図 5.57 に図示します.

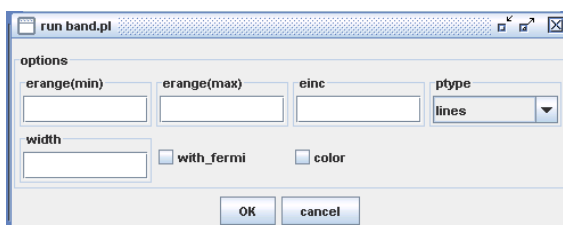


図 5.57: “band.pl” Perl スクリプトを起動する画面.

ここでオプションを適切に設定し, “ok” ボタンをクリックすればバンド構造の eps ファイル, “band_structure.eps” が作成されます. band.pl のオプションは下記の通りです.

erange(min) エネルギーの最小値を入力します. 入力しない場合データの最小値が採用されます.

erange(max) エネルギーの最大値を入力します. 入力しない場合データの最大値が採用されます.

einc エネルギーの目盛りの間隔を指定できます。

ptype “line”, “solid_circles” という選択肢があります。“line” を選ぶと直線で, “solid_circles” を選択すると塗りつぶされた黒丸でバンド図を作成します。

width 図の幅を変更することができます。デフォルト値は 1 です。

with_fermi フェルミレベルないし価電子帯上端のエネルギーレベルを描画します。

color カラー表示します。

作成された eps ファイルは, “view” ボタンをクリックして表示することも可能です。例として, シリコンのバンド構造を第 11 章で説明する画像ビューアーで表示している様子を図 5.58 に図示します。

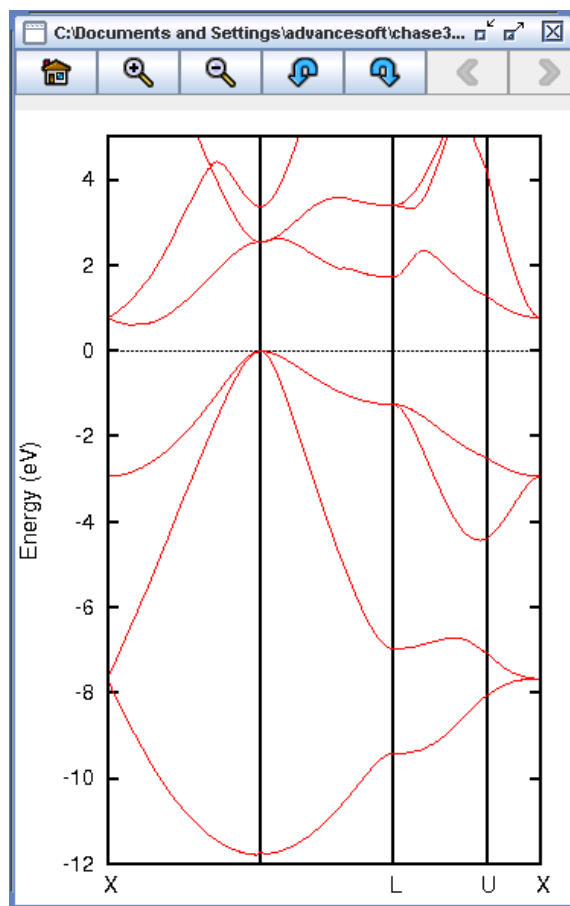


図 5.58: “band.pl” を利用して得られたバンド構造図を PHASE-Viewer の画像ビューアー (第 11 章) で表示させている様子。

5.3 uvsor-epsilon 制御用 GUI

uvsor-epsilon は, ekcal と同様 PHASE によって計算された SCF を利用するプログラムです。uvsor-epsilon は誘電関数の計算を行います。入力の仕様などは PHASE と共通です。

5.3.1 初期化用 GUI

初期化用の GUI は, ekcal の場合とほぼ同様です。ただし, 初期条件の詳細設定を行う画面が異なります。uvsor-epsilon の “epsilon” ブロックと “accuracy” ブロックの設定を行うことができます。

5.3.2 情報表示 GUI

情報表示 GUI は, ekcal と同様です。詳しくは第 5.2.2 節をご覧ください。

5.3.3 入力ファイル編集

入力ファイル編集も ekcal とほぼ同様です。違いは, uvsor-epsilon 専用のブロック, “epsilon” の設定ができる点です。 “epsilon” ブロック編集用 GUI を表示した際にはじめに得られる画面を図 5.59 に図示します。この画面

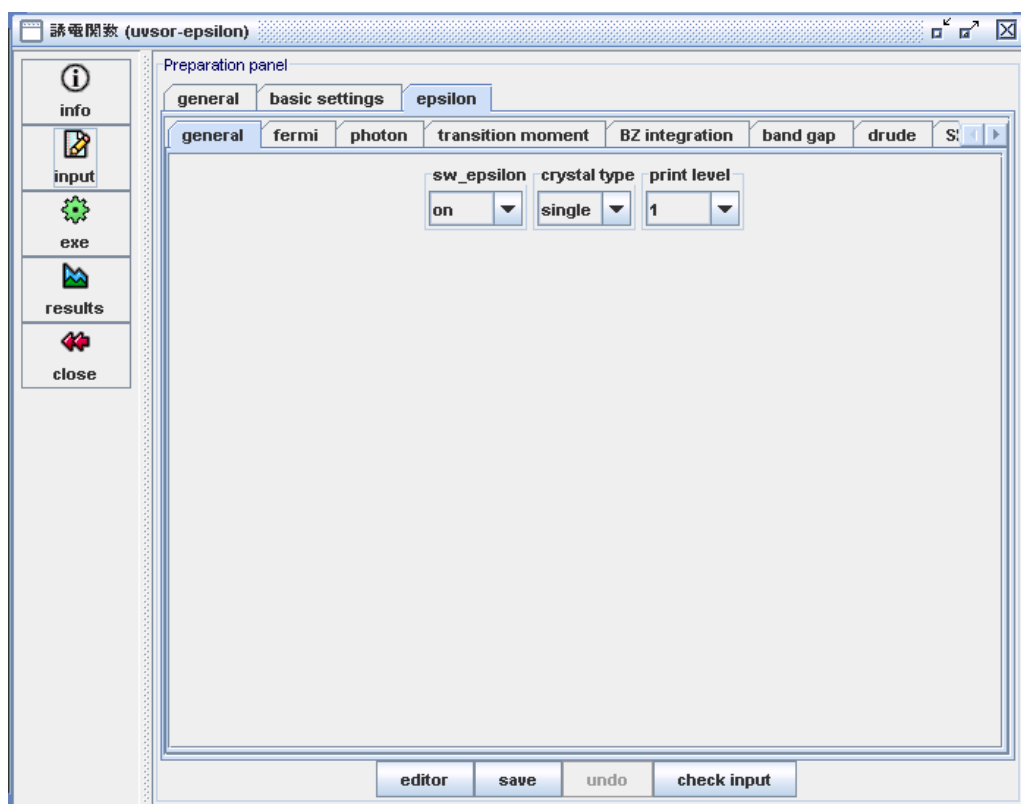


図 5.59: uvsor-epsilon の, “epsilon” ブロック編集用画面。

は “epsilon” ブロックの仕様に従いタブで分割されています。 “epsilon” から設定可能な項目を下記します。各項目の詳細については, UVSOR のユーザーマニュアルをご覧ください。

general ビュー 一般的な設定を行います。

sw_epsilon on の場合誘電関数の計算を行い, off の場合行いません。

crystal_type single と poly という選択肢があります。 poly を指定した場合誘電率の異方性は平均化されているとみなし, 単結晶の平均誘電率を計算します。

print level 出力レベルを指定できます。数字が大きいほど詳細な出力が得られます。

fermi ビュー フェルミエネルギーに関わる設定を行うことができます。

read Fermi energy on の場合, フェルミエネルギーを指定する必要があります。 off の場合はプログラムが計算します。

Fermi energy “read Fermi energy” が on の場合, ここでフェルミエネルギーの指定を行います。

photon 電磁波状態の指定を行います。

polar 直線偏光の分極ベクトルを指定します。 ux に偏光ベクトルの x 成分, uy に偏光成分の y 成分, uz に偏光成分の z 成分を入力します。単位は, 任意単位です。

pointing 非偏光のポインティングベクトルを指定します。 px にポインティングベクトルの x 成分, py にポインティングベクトルの y 成分, pz にポインティングベクトルの z 成分を入力します。単位は, 任意単位です。

energy 電磁波のエネルギーを指定します。 low にエネルギーの下限値, high にエネルギーの上限値, step にエネルギーの刻み幅を Hartree 単位で入力します。規定値はそれぞれ 0.0, 2.0, 0.002 です。

transition moment 遷移モーメントの計算オプションを指定できます。

type 遷移モーメントの補正方法を指定します。l で local 型遷移モーメント (デフォルト), rn で Read and Needs 型遷移モーメント補正, ks で Kageshima-Shiraishi 型遷移モーメント補正となります。

delq Reads and Needs 型遷移モーメント補正のパラメータを指定します。デフォルト値は 0.001 です。

symmetry 遷移モーメントの対称化オプションを指定します。対称化を行う場合 on を指定します。

band.i 価電子バンドの指定を行います。

band.f 伝導バンドの指定を行います。

BZ integration 遷移モーメント積をブリュアンゾーン内で積分する方法を指定します。

method 積分方法を指定します。tetrahedron の場合リニアテトラヘドロン法を, parabolic の場合 parabolic smearing 法を, gaussian の場合 gaussian smearing 法を用います。規定値は parabolic です。

width gaussian および parabolic の場合, smearing 幅を指定します。デフォルト値は 0.01837451 Hartree(0.5eV) です。この値は半導体や絶縁体では大きすぎるので, 変更することをお勧めします。

spin 電子スピンの指定を行います。both の場合 major および minor スピン状態の電子遷移について, major の場合 major スピン状態の電子遷移について, minor の場合 minor スピン状態の電子遷移について積分します。規定値は both です。

band gap バンドギャップの補正を行う場合, scissor operator とあるテキストフィールドに補正値を Hartree 単位で入力します。

drude ドルード項計算のパラメータを指定します。なお, damping_factor, conductivity, および plasma_frequency はいずれか一つを指定します。

drude on の場合ドルード項とバンド間遷移に起因する誘電関数を計算します。off の場合はバンド間遷移にのみ起因する誘電関数を計算します。規定値は off です。

effective.mass 有効質量を, 電子質量単位で入力します。

damping_factor ドルード damping factor を Hartree 単位で入力します。規定値は, 0.0036749 Hartree(0.1eV) です。

conductivity 電気伝導度の指定を, m/Ω 単位で入力します。

plasma.frequency プラズマ振動数を, Hartree 単位で指定します。

SHG 第 2 高調波発生 of 感受率計算の設定を行います。

process shg の場合計算を行い, off の場合計算を行いません。デフォルトは off です。

excitation 仮想励起プロセスの指定を行います。all の場合電子と正孔の励起プロセスを, electron の場合電子励起プロセスのみを, hole の場合正孔の励起プロセスのみを指定することに相当します。デフォルトは all です。

term 共鳴項の取扱を指定します。all の場合基本波および第 2 高調波の共鳴項を, omega の場合基本波の共鳴項のみを, omega2 の場合第 2 高調波の共鳴項のみを考慮することに相当します。デフォルトは all です。

dres.cut.off 2 重共鳴に対するカットオフの指定です。デフォルト値は 10^{-3} です。

5.3.4 実効制御用 GUI

uvsvor-epsilon 用の実行制御 GUI は, PHASE や ekcal のそれと同様です。5.1.5 を参照してください。

5.3.5 結果解析

uvsvor-epsilon によって得られた誘電関数の結果は, 結果解析画面の “epsout” を選択すると表示されます。図 5.60 にそのスクリーンショットを図示します

誘電関数が, テーブルで表示されています。このテーブルの各カラムの表す量を下記します。

energy (eV) 電磁波のエネルギー

real part 誘電関数の実部

imaginary part 誘電関数の虚部

The screenshot shows a window titled 'eps (uvsor-epsilon)' with a sidebar on the left containing icons for 'info', 'input', 'exe', 'results', and 'close'. The main area is the 'Results viewer panel' with tabs for 'general', 'list of files', 'log', 'epsout' (selected), 'SHG', and 'image files'. The 'epsout' tab displays a table of data with the following columns: energy (ev), real part, imaginary p..., n, k, abs, and R. The table contains 20 rows of data. Below the table are buttons for 'to clipboard', 'export', 'toggle selection mode', 'quick plot', a dropdown menu set to 'xy', and a 'plot' button. A 'reload' button is located at the bottom center of the panel.

energy (ev)	real part	imaginary p...	n	k	abs	R
0.00000	4.86787	0.00000	2.20632	0.00000	0.00000	0.14155
0.10885	4.87245	0.00000	2.20736	0.00000	0.00000	0.14170
0.21769	4.88630	0.00000	2.21050	0.00000	0.00000	0.14216
0.32654	4.90980	0.00000	2.21581	0.00000	0.00000	0.14294
0.43538	4.94359	0.00000	2.22342	0.00000	0.00000	0.14405
0.54423	4.98864	0.00000	2.23353	0.00000	0.00000	0.14553
0.65307	5.04638	0.00000	2.24641	0.00000	0.00000	0.14741
0.76192	5.11883	0.00000	2.26248	0.00000	0.00000	0.14975
0.87076	5.20892	0.00000	2.28231	0.00000	0.00000	0.15262
0.97961	5.32095	0.00000	2.30672	0.00000	0.00000	0.15616
1.08846	5.46154	0.00000	2.33699	0.00000	0.00000	0.16053
1.19730	5.64165	0.00000	2.37522	0.00000	0.00000	0.16601
1.30615	5.88142	0.00000	2.42516	0.00000	0.00000	0.17313
1.41499	6.22559	0.00000	2.49511	0.00000	0.00000	0.18299
1.52384	6.82403	0.00000	2.61228	0.00000	0.00000	0.19921
1.63268	7.30229	1.04699	2.70918	0.19323	0.00320	0.21447
1.74153	7.25161	2.10549	2.72054	0.38696	0.00683	0.22227
1.85037	6.92598	2.74536	2.68107	0.51199	0.00960	0.22358
1.95922	6.55994	3.15880	2.63066	0.60038	0.01192	0.22297
2.06807	6.21203	3.44665	2.58033	0.66787	0.01400	0.22190
2.17691	5.89685	3.66482	2.53375	0.72320	0.01596	0.22101
2.28576	5.60627	3.86437	2.49152	0.77550	0.01797	0.22092

図 5.60: 誘電関数計算結果表示画面.

n 屈折率の実部

k 屈折率の虚部

abs 吸収係数

R 反射スペクトル

分極ベクトルとポインティングベクトルの成分をすべて 0 にした場合, 誘電関数ではなく誘電テンソルが出力されます. その場合に得られる GUI が図 5.61 です. この場合, 図 5.61 から分かるように実部と虚部がタブで区切られて表示されます. テーブルの各カラムは誘電テンソルの各成分 (xx, xy, xz, \dots) に相当します.

さらに, 第 2 高調波感受率 (χ_2) の計算を行っている場合, “SHG” タブを選択することによってその結果を参照することができます. その場合に得られる GUI が図 5.62 です. この場合は, テンソルの各成分がタブで区切られています. 各タブ内のテーブルの各カラムは, 次の量に対応します.

Photon energy (eV) 入射光のエネルギーです.

real part χ_2 の実部です.

imaginary part χ_2 の虚部です.

abs χ_2 の絶対値です.

いずれの場合も, テーブルの下ボタン領域からデータをエクスポートしたりグラフ化したりすることができるのはこれまでと同様です.

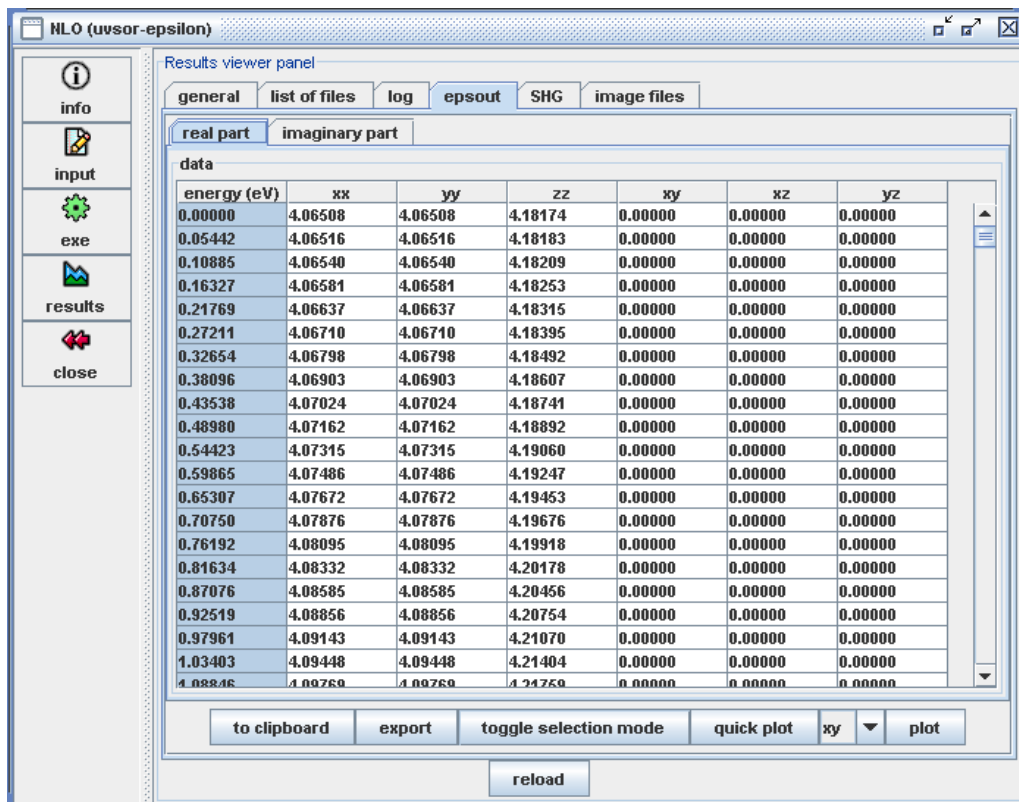


図 5.61: 誘電テンソル計算結果表示画面.

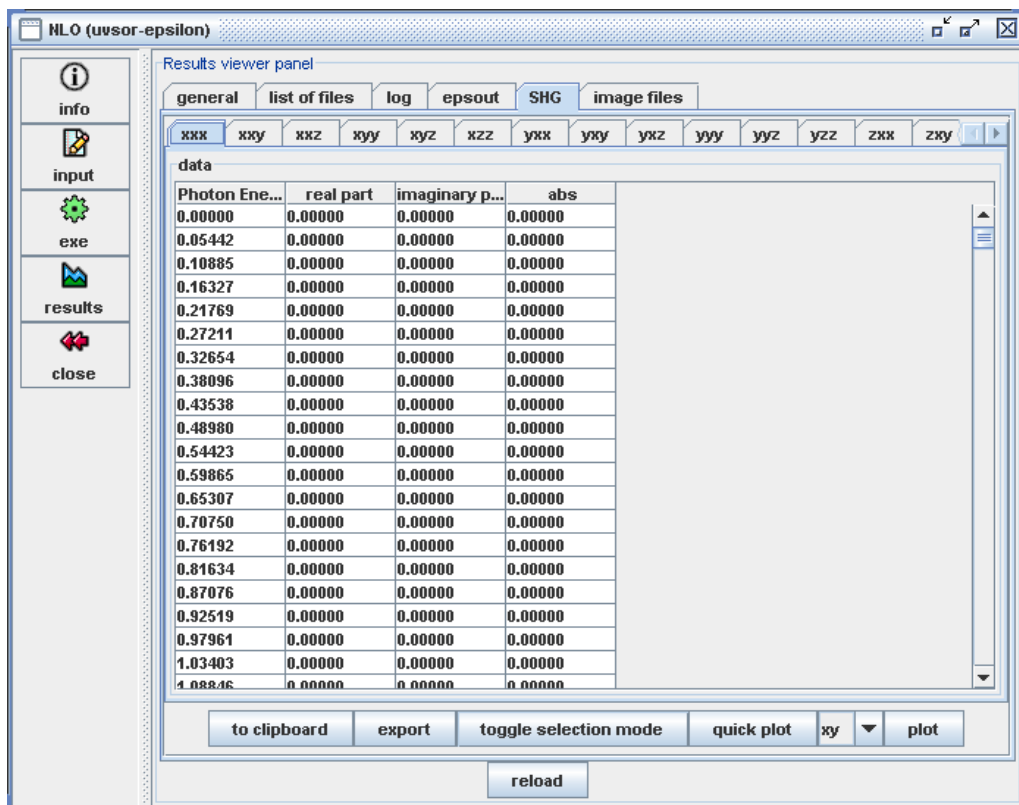


図 5.62: 第 2 高調波感受率計算結果表示画面.

第6章 ジョブ制御

PHASE-Viewer からジョブを実行する場合、ローカルホストで実行する場合でもリモートホストから実行する場合でもスクリプトを介して計算機に計算を投入します。本章はその振る舞いの詳細と細かい設定方法や、ジョブの経過状況を監視する方法などについて説明します。

6.1 概要

ジョブ制御に利用するスクリプトは、大きく分けて以下の二種類に分類できます。

システムのデフォルトスクリプト Unix ベースの OS の場合は sh スクリプトを、Windows の場合は BAT スクリプトを介してジョブを投入します。

BeanShell スクリプト BeanShell スクリプト¹によるジョブの制御を行います。

後者の場合、特にリモートホストへのジョブの投入の場合、そのリモートホストに JVM と PHASE-Viewer がインストールされている必要があります。詳細はインストールガイドをご覧ください。

スクリプトファイルは、.chase ディレクトリーの“scripts”ディレクトリー下に本体があります。図 5.33 の画面を表示すると対応するディレクトリーにコピーされます。さらに、実際の計算に利用されるスクリプトは、コピーされたスクリプトの中のいくつかのキーワードを置き換えたものとなります。そのファイル名は、もとのスクリプトファイル名の先頭に“_”を付加した文字列となります。

6.2 ジョブ監視

PHASE は収束計算を行いますので、終了時間が正確に予測できるわけではありません。いざ計算を実行してみると、計算を一旦終了し、設定を変更した方がよい、という状況も生じます。このような事情に対応するため、PHASE-Viewer には実行中のジョブを監視する機能が備わっています。本節ではこの機能の利用方法を説明します。

計算実行中に、図 5.33 の“monitor”ボタンをクリックしてください。図 6.1 に図示している、ジョブモニター画面が現れます。

この画面の各コントロールには次の機能が割り振られています。

1. “select file to monitor” リスト: モニターしたいファイルを選択します。たとえば PHASE の場合、F_OUT(標準出力ファイル)、F_STATUS(ジョブステータスファイル)、F_ENF(構造緩和/分子動力学シミュレーションの際のエネルギーや力の最大値の変化を記録したファイル)を選択することが可能です。
2. モニターボタン: このボタンを押しこんだ状態にすると、選択中のファイルの監視をはじめます。引っ込んだ状態にすれば終了します。
3. グラフ描画ボタン: 監視しているファイルによっては、途中経過を内蔵のグラフツール(第 10 節)を利用してグラフ化することも可能です。その場合にこのボタンを押しこんだ状態にしておくとグラフが描画されます。例として、図 6.2 に SCF 計算中に F_OUT ファイルを監視し、その途中経過をグラフ描画している様子を図示します。
4. 出力領域: ここに監視内容が記載されていきます。

6.3 スクリプトの利用

sh ないし BAT スクリプトの場合、特別な設定をすることなくご利用いただくことができます。準備されているデフォルトの振る舞いを変更したい場合、まず実行制御画面(図 5.33)の“manipulate script”タブをクリックしてください。図 6.3 が表示されます。

¹<http://www.beanshell.org>, JVM 上で動作するスクリプト環境

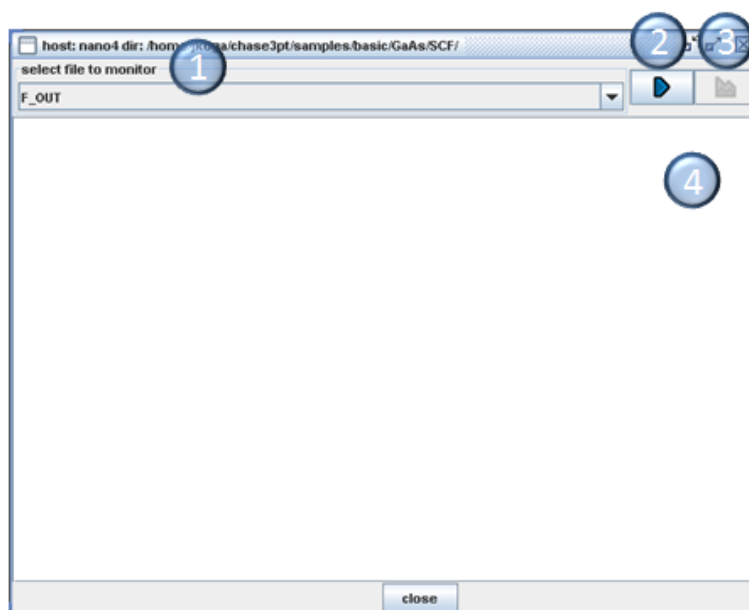


図 6.1: ジョブモニター画面.

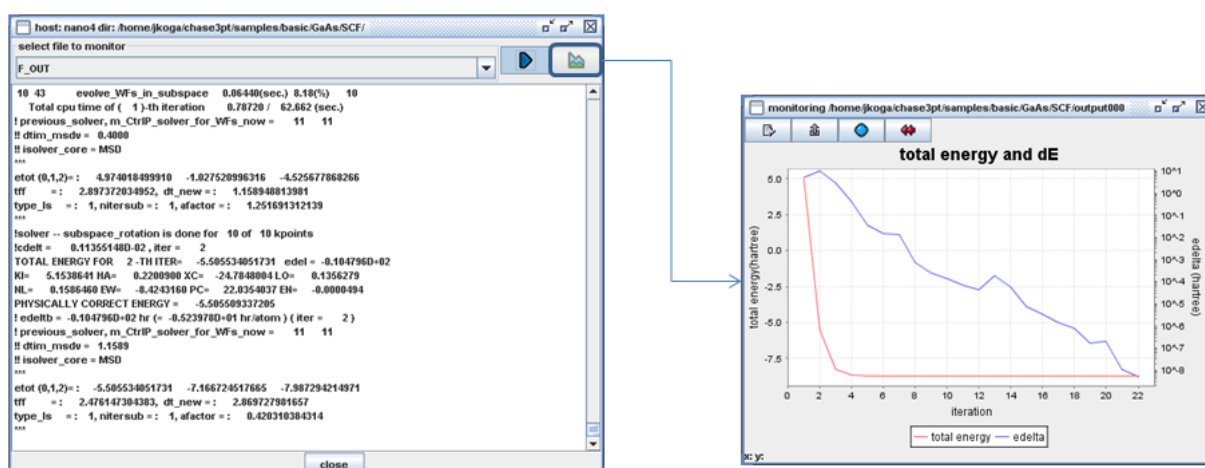


図 6.2: SCF 計算中に F_OUT ファイルを監視している例. グラフは、赤の実線が全エネルギーの経過、青の実線が前ステップとの全エネルギーの差の経過を表します.

この画面は上下に二分割されています. 上半分には、「このまま “execute” ボタンをクリックした際に利用されるスクリプト」の一覧が表示されます. スクリプトは、リストに表示された順序で実行されます. リストの下部にあるボタン、図 6.4 より次の操作を行うことができます.

1. 「スクリプト種」を選択します. “bat(Windows)” ないし “sh(Unix 系)” と “bsh(BeanShell)” のいずれかが選択可能です.
2. BeanShell スクリプトの場合、スクリプトの入力を編集するための GUI を起動します (第 6.4 節).
3. 選択中のスクリプトファイルをテキストエディターで開きます.
4. ファイル選択ダイアログを起動し、そこで選択されたスクリプトファイルを新たに登録します.
5. 選択中のファイルをリストから削除します.
6. 選択中のファイルの順序を一つ上げます.
7. 選択中のファイルの順序を一つ下げます.

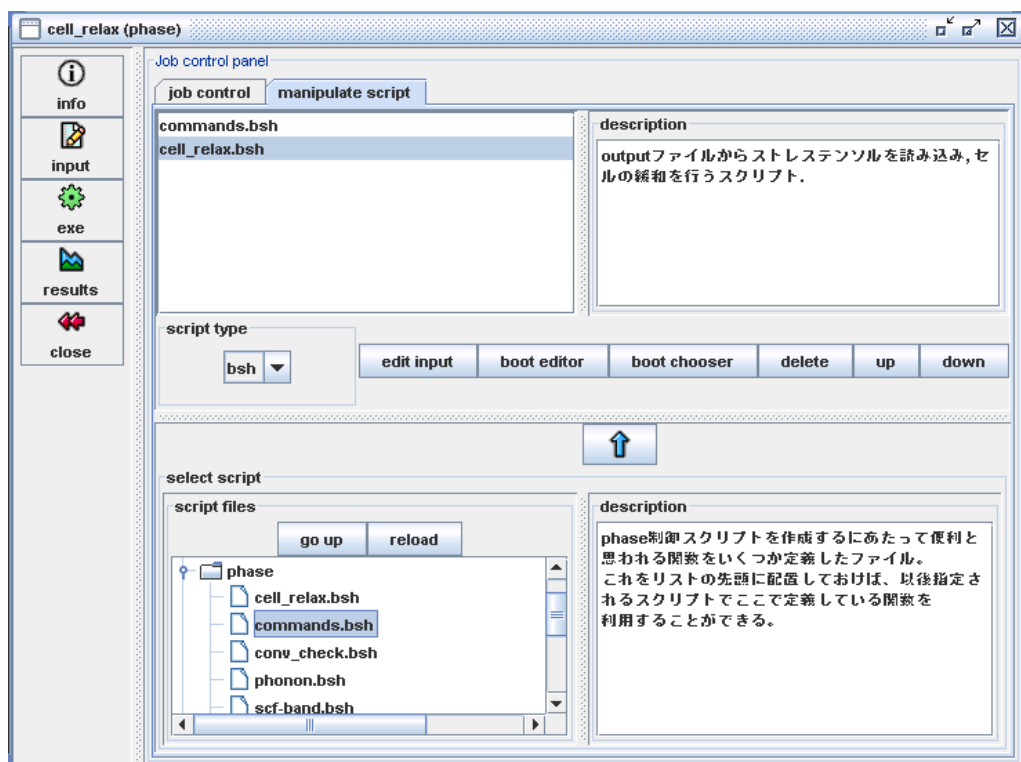


図 6.3: 利用スクリプト設定画面.



図 6.4: スクリプト設定画面のボタン.

これらの操作によってスクリプトの振る舞いを望みのものにしてください。

スクリプト中では、いくつか特殊なキーワードを利用することができます。これらのキーワードは、下記のように実行時に置き換えられます。スクリプトを直接編集する場合必要に応じてご利用ください。

__MPIRUN__ “mpirun” へのパス。

__MPIEXEC__ “mpiexec” へのパス。

__TARGETDIR__ ジョブが実行されるディレクトリー。

__CHASEDIR__ PHASE-Viewer のインストールディレクトリー。

__JAVA__ java へのパス。

__BINDIR__ 第 4.2 節で設定した “bin” ディレクトリー。

__FS__ ファイルセパレーター (Unix 系の場合 “/”, Windows の場合 “\”)。

__NP__ プロセス数。

__JAVADIR__ Java のインストールディレクトリー。

__PHASE__ PHASE の実行ファイルへのパス。

__NK__ PHASE 並列計算時の, k 点分割数。

__NE__ PHASE 並列計算時の、エネルギー分割数.

__EKCAL__ ekcal の実行ファイルへのパス.

__EPSILON__ uvSOR-epsilon の実行ファイルへのパス.

図 6.3 の下半分の画面からディスク上にあるスクリプトファイルを参照することができます. 起動時の状態では chase ディレクトリーの下に “scripts” 以下にあるファイルをツリー表示する仕組みになっています. ここから目的のスクリプトを選択し, 上矢印ボタンをクリックすると「利用スクリプトの一覧」に新たに登録することができます. また, 目的のスクリプトファイルを選択した状態でダブルクリックをするか Enter キーを押下するとエディターによってそのスクリプトを編集することもできます.

6.4 BeanShell スクリプトの利用方法

「BeanShell」は JVM 上で動作するスクリプティング環境です. 基本的には Java 言語と同等の文法ですが, クラスを定義することができない, ダイナミカルタイピング (変数を必ずしも宣言しなくてよい) に対応している, などの違いがあります. 文法の詳細などは BeanShell のホームページ, <http://www.beanshell.org/> を参照してください. BeanShell スクリプトを利用すると PHASE-Viewer のクラス, たとえば PHASE 入力ファイル进行操作するクラス, をご利用いただくことができる, などのメリットがあります.

PHASE-Viewer で実行する BeanShell スクリプトに, そのスクリプトの説明用の文字列やスクリプトの動作を規定する入力を埋め込むことができます. 埋め込まれた入力は, 図 6.4 の②, “edit input” ボタンをクリックすると起動できる “BeanShell スクリプト入力エディター”(図 6.5) から GUI を介して編集することができます.

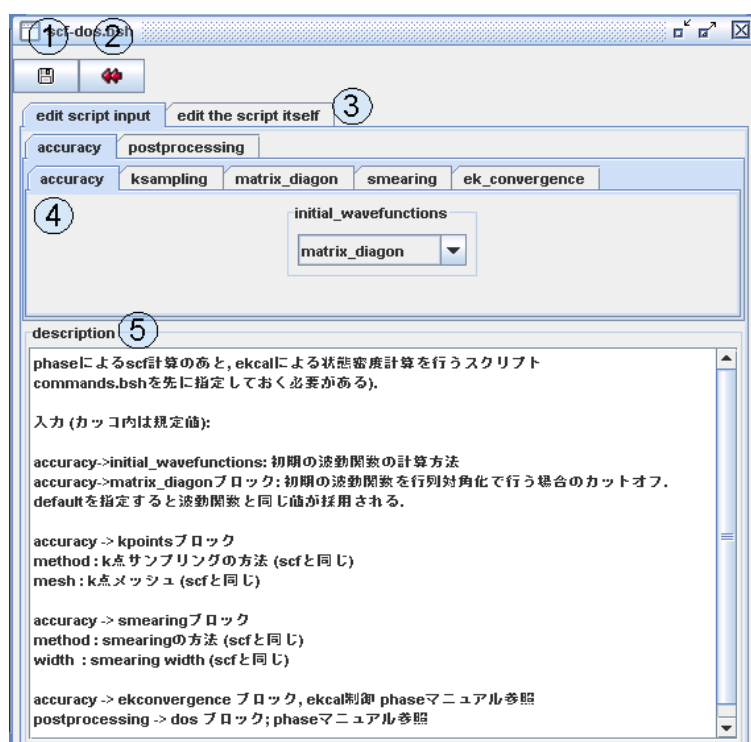


図 6.5: スクリプト編集画面.

この画面は, 下記の領域から成っています.

1. スクリプト入力の編集結果をディスクに保存するボタンです.
2. この画面を閉じるボタンです.
3. “edit script input” タブを選択するとスクリプト入力を編集するための GUI を表示します. “edit the script itself” を選択すると, スクリプトを直接編集することができます.
4. 「スクリプト入力編集用 GUI」(スクリプト入力の内容に併せて動的に作成されます).

5. 「埋め込まれた説明文表示領域」です.

図 6.5 のスクリプト編集画面が扱うことのできるファイルの書式を説明します. スクリプトの説明文とスクリプト入力は, ファイル先頭のブロックコメント内に記述します. スクリプト説明文は `BEGIN_DESCRIPTION` という文字列と `END_DESCRIPTION` という文字列の間に入力し, スクリプト入力は `BEGIN_INPUT` という文字列と `END_INPUT` という文字列の間に入力します. 入力は PHASE 入力ファイル仕様に準拠した形式で記述します. ただし, 現時点ではテーブル, 単位の入力には対応していません. この際, 下記のルールでスクリプト編集画面の GUI が動的に作成されます.

- { と } で囲まれたブロックは, 一つのタブ上で表示されます.
- 値のあとに, “:textfield” と記述するとテキストフィールドが作成されます (値の後に指定がない場合もテキストフィールドが作成されます).
- 値のあとに, “:combo:selection1_or_selection2_or_selection3” などと記述すると, selection1, selection2, selection3 という選択肢を持つリストが作成されます.
- 値のあとに, “:btn:gui/phase/bandkpt.bsh” などと記述すると, ボタンが配備されます.
この場合, 値には空白文字が入らないようにしてください. ここで配備されたボタンをクリックすると, .chase ディレクトリーの下の “scripts” ディレクトリーからみて “gui/phase/bandkpt.bsh” という BeanShell スクリプトが実行されます. また, 値がボタンの文字列に採用されます.

例として, バンド計算用の初期化を行うスクリプトのヘッダー部分を下記します. このスクリプトは, ekcal の初期化 (第 5.2.1 節) において状態密度計算の設定に利用されます. 詳細設定を行うと, このスクリプトを読み込んだ状態で図 6.5 が起動します.

```
/*
BEGIN_DESCRIPTION    <--スクリプト説明文の始まり
バンド計算用初期入力を作成するスクリプト。

入力（カッコ内は規定値）:
accuracy->initial_wavefunctions: 初期の波動関数の計算方法
accuracy->matrix_diagon ブロック: 初期の波動関数を行列対角化で行う場合のカットオフ.
default を指定すると波動関数と同じ値が採用される.

accuracy -> ekconvergence ブロック, ekcal 制御 phase マニュアル参照
kpoint -> バンド計算で利用する k 点ファイル作成用 GUI を起動する. 以下の項目を決定した後,
‘generate kpoints’ ボタンをクリックすると ekcal が利用する k 点ファイルが作成される.
テンプレートファイルもあるのでそちらを参考に作成するとよい.

deltk: どのくらいの頻度で k 点を作成するか.
reciprocal lattice vector: 逆格子ベクトル
special kpoints: k 点を作成したい対称点と, バンド図作成時に利用する記号.

END_DESCRIPTION      <--スクリプト説明文終了
BEGIN_INPUT          <--スクリプト入力始まり
kpoint{
    edit = boot_kpoint_generator:btn:gui/phase/bandkpt.bsh <--.chase/scripts/gui/phase/bandkpt.bsh スクリプトを実行するボタンが配備される
}
accuracy{
    initial_wavefunctions = matrix_diagon:combo:matrix_diagon_or_random_numbers <--matrix_diagon ないし random_numbers を選択肢とするリストが生成される
    matrix_diagon{
        cutoff_wf = default
    }
    ek_convergence{
        num_max_iteration = 500    <--‘500’ を初期テキストとするテキストフィールドが作成される
        sw_eval_eig_diff = on:combo:on_or_off
        delta_eigenvalue = 1.e-5
        succession = 2
        num_extra_bands = 2
    }
}
END_INPUT            <--スクリプト入力終了
*/
```

6.5 BeanShell スクリプトの例

ここでは, サンプルに用意したスクリプトの利用方法をいくつか紹介します.

6.5.1 PHASE→ekcal 計算を行うスクリプトのサンプル

PHASE による SCF 計算を行い、ついで ekcal による状態密度計算を行うスクリプトのサンプルが、PHASE-Viewer サンプルの “scripting” プロジェクトの下にある、“scf-dos” サブプロジェクトにあります。このサンプルについて詳解します。

図 6.3 の、「スクリプト設定画面」を表示させると、図 6.6 で示すように、“commands.bsh” というスクリプトと “scf-dos.bsh” という二つのスクリプトファイルが指定されているのが分かります。“commands.bsh” スクリプトは、共通の便利な関数をまとめて定義したファイルで、用意している多くのスクリプトファイルで参照します。

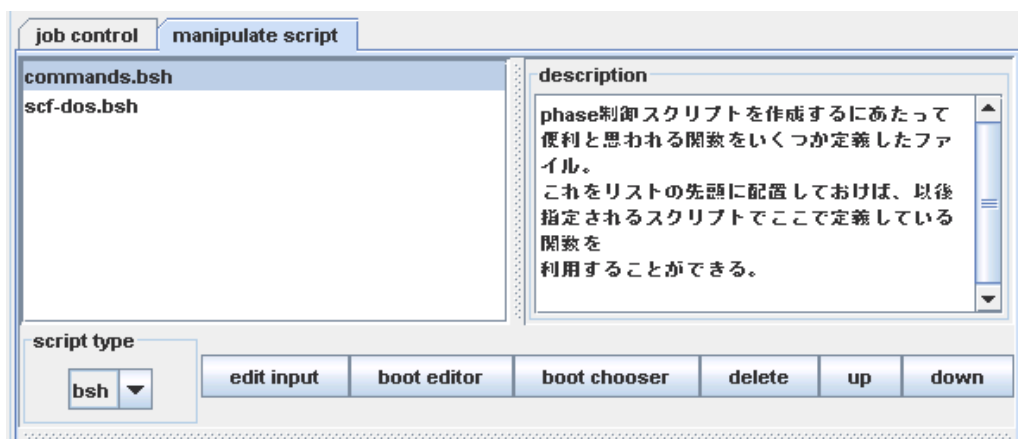


図 6.6: PHASE→ekcal 計算を行うためのスクリプト制御画面。

“scf-dos.bsh” スクリプトが、実際の計算を行うためのスクリプトです。このスクリプトのソースは、

.chase/scripts/jobcontrol/phase/scf-dos.bsh

です。

まず入力から説明します。入力部は、下記のようにになっています。

```
accuracy{
  initial_wavefunctions = matrix_diagon:combo:matrix_diagon_or_random_numbers
  ksampling{
    method = mesh:combo:scf_or_monk_or_mesh
    mesh{
      nx = scf
      ny = scf
      nz = scf
    }
  }
  matrix_diagon{
    cutoff_wf = default
  }
  smearing{
    method = tetrahedral:combo:scf_or_parabolic_or_tetrahedral
    width = scf
  }
  ek_convergence{
    num_max_iteration = 500
    sw_eval_eig_diff = on:combo:on_or_off
    delta_eigenvalue = 1.e-5
    succession = 2
  }
}
postprocessing{
  dos{
    sw_dos = on:combo:on_or_off
    method = tetrahedral:combo:gaussian_or_tetrahedral
    variance = 1.d-6
    nwd_dos_window_width = 10
    deltaE_dos = 1.d-4
  }
}
```

この入力、普通に設定した入力で PHASE 計算を行ったあと、ekcal 用の入力を作成するためのものです。“scf” とあるキーワードは、ekcal 実行時に「SCF 計算と同じ値を利用する」ことを意味します。

スクリプト実行部をみてみましょう。このスクリプトは、まず以下の関数が実行されます。


```

void execute() {
    logger.info("executing phase...");
    execute("__PHASE__");
    processInput();
    logger.info("executing ekcal...");
    execute("__EKCAL__");
    logger.info("done.");
}

```

“logger” 変数はログを取るためのオブジェクトです。execute("__PHASE__"); および execute("__EKCAL__"); という実行分でそれぞれ PHASE, ekcal を実行します。さらに, execute("__PHASE__"); のあとに呼んでいる processInput(); 関数によって PHASE 用入力ファイルを, スクリプトの入力に従って ekcal 用の入力に書き換えます。以下, processInput(); 関数を簡単に説明します。

processInput(); 関数は下記のようなものです。ここでは便宜上行頭に数字を振っていますが, 実際のスクリプトにはこの数字はありません。

```

1: InputInterface inputInterface = getInputInterface(nfinp);
2: InputInterface inputBSH = getInputInterfaceFromBSH("__TARGETDIR__"+"__FS__"+"__scf-dos.bsh");
3: void processInput() {
4:     inputInterface.selectAndCreateBlock("control");
5:     inputInterface.replaceEntry(new InputInterfacePrimitiveEntry("condition","fixed_charge",""));
6:     inputInterface.selectRoot();
7:
8:     inputBSH.selectBlock("accuracy.ksampling");
9:     method = inputBSH.getPrimitiveEntry("method");
10:    if ( method.getValueDelimitedBy().equals(scf) ) {
11:        inputBSH.removeEntry(method);
12:    }
13:    inputBSH.selectParentBlock();
14:
15:    inputBSH.selectBlock("accuracy.ksampling.mesh");
16:    nx = inputBSH.getPrimitiveEntry("nx");
17:    if ( nx.getValueDelimitedBy().equals(scf) ) {
18:        inputBSH.removeEntry(nx);
19:    }
20:    ny = inputBSH.getPrimitiveEntry("ny");
21:    if ( ny.getValueDelimitedBy().equals(scf) ) {
22:        inputBSH.removeEntry(ny);
23:    }
24:
25:    nz = inputBSH.getPrimitiveEntry("nz");
26:    if ( nz.getValueDelimitedBy().equals(scf) ) {
27:        inputBSH.removeEntry(nz);
28:    }
29:
30:    inputBSH.selectBlock("accuracy.smearing");
31:    smearing_method = inputBSH.getPrimitiveEntry("method");
32:    if ( smearing_method.getValueDelimitedBy().equals(scf) ) {
33:        inputBSH.removeEntry(smearing_method);
34:    }
35:    smearing_width = inputBSH.getPrimitiveEntry("width");
36:    if ( smearing_width.getValueDelimitedBy().equals(scf) ) {
37:        inputBSH.removeEntry(smearing_width);
38:    }
39:
40:    inputBSH.selectBlock("accuracy.matrix_diagon");
41:    cutoff_wf = inputBSH.getPrimitiveEntry("cutoff_wf");
42:    if ( cutoff_wf.getValueDelimitedBy().equals("default") ) {
43:        inputInterface.selectRoot();
44:        inputInterface.selectBlock("accuracy");
45:        inputBSH.replaceEntry(inputInterface.getPrimitiveEntry("cutoff_wf"));
46:    }
47:
48:    inputInterface.selectRoot();
49:    inputInterface.overWriteBlock(InputInterface.__ROOT__, "accuracy", inputBSH);
50:
51:    inputInterface.selectRoot();
52:    inputInterface.swapBlock("postprocessing", "dos", inputBSH);
53:
54:    inputInterface.save();
55: }

```

1 行目と 2 行目では, それぞれ PHASE(ekcal) で利用する入力ファイルとこのスクリプトの入力ファイル进行操作するクラス, InputInterface のオブジェクトをインスタンス化しています。3 行目からが processInput() 関数です。4 行目から 6 行目で “control” ブロックの “condition” を, ekcal 用に “fixed_charge” としています。

8 行目から 46 行目ではスクリプト入力の操作を行っています。一見複雑に見えるかもしれませんが, 行っていることは以下の二点のみです。

“scf” キーワードの処理 “scf” キーワードは PHASE の値をそのまま使う、ということに対応します。スクリプト用の InputInterface オブジェクトは後で実際の入力の InputInterface オブジェクトの該当部分に“上書き”するので、PHASE と同じ、ということはそのエントリーを削除すればよい、ということになります。実際に行っている操作もその通りになっています。

“default” キーワードの処理 初期波動関数を行列対角化で行う際のカットオフを、“default” の場合は波動関数のカットオフと同等になるような操作を行っています。

48 行目から 52 行目でスクリプトの入力から実際の入力を作成しています。49 行目では InputInterface の “overWriteBlock” メソッドによって “accuracy” ブロックを上書きし、さらに 52 行目では InputInterface の “swapBlock” メソッドによって postprocessing ブロックを差し替えています。

最後に、54 行目で実際に利用する入力をディスクに保存しています。

6.5.2 セルを一様に拡大しながら SCF 計算を行うスクリプトのサンプル

セルを一様に変化させながら SCF を計算するスクリプトのサンプルが、PHASE-Viewer サンプルの “scripting” プロジェクトの下にある “uniform-expansion” サブプロジェクトにあります。このサンプルについて詳解します。

第 6.5.1 節と同様スクリプト設定画面上では “commands.bsh” を利用する設定となっています。実際の計算を行うのは、“uniform_exp.bsh” です。このスクリプトのソースは、`.chase/scripts/jobcontrol/phase/uniform_exp.bsh` です。

まず入力から説明します。入力部は、下記のようになっています。

```
control{
  from    = 0.95
  to      = 1.05
  incre   = 0.01
}
```

“from” で最初の体積を、“to” で最後の体積を指定します。また、“incre” で体積をどれくらい増やすかを指定します。

スクリプトの残りの部分を見てみましょう。

```
1:  nfinp = getFileName("F_INP","__TARGETDIR____FS__");
2:  nfinpfp = "__TARGETDIR____FS__"+nfinp;
3:  nfinporg = "__TARGETDIR____FS__"+nfinp+"_orig";
4:  nfene = "__TARGETDIR____FS__"+getFileName("F_ENF","__TARGETDIR____FS__");
5:  to = 0.95;
6:  from = 1.05;
7:  incre = 0.01;
8:  logger = getLogger("uniform_exp");
9:  init() {
10:    cp(nfinpfp,nfinporg);
11:
12:    inputInterface = getInputInterfaceFromBSH("__TARGETDIR____FS____uniform_exp.bsh");
13:    inputInterface.selectBlock("control");
14:    nfinp = inputInterface.getPrimitiveEntry("inpfile").getValue();
15:    to = Double.parseDouble(inputInterface.getPrimitiveEntry("to").getValue());
16:    from = Double.parseDouble(inputInterface.getPrimitiveEntry("from").getValue());
17:    incre = Double.parseDouble(inputInterface.getPrimitiveEntry("incre").getValue());
18:
19:    /*
20:    'condition' must be 'initial'
21:    */
22:    input = getInputInterface(nfinporg);
23:    input.selectBlock("control");
24:    input.replaceEntry(new InputInterfacePrimitiveEntry("condition","initial",""));
25:    input.selectRoot();
26:    input.saveTo(new File(nfinporg));
27:  }
28:
29:  boolean boolvec = true;
30:  loop() {
31:    total = to - from;
32:    nsteps = (int) (total/incre);
33:    logger.info("nsteps: "+nsteps);
34:    if ( nsteps == 0 ) {
35:      return;
36:    }
37:
38:    try{
39:      PrintWriter writer = new PrintWriter(new BufferedWriter(new FileWriter(nfene+"_all")));
40:      writer.println("#V/V0 L/L0 energy");
```

```

41:         for ( int i=0 ; i<nsteps ; i++ ) {
42:             inputInterface = getInputInterface(nfinporg);
43:             cellvec = getCellVec(inputInterface);
44:             if ( cellvec == null ) {
45:                 logger.error("invalid cellvec!");
46:                 return;
47:             }
48:             boolvec = true;
49:             if ( cellvec.length == 2 ) {
50:                 boolvec = false;
51:             }
52:
53:             scale = Math.pow(from + i*incre,1.0/3.0);
54:             if ( boolvec ) {
55:                 for ( int i=0 ; i<3 ; i++ ) {
56:                     for ( int j=0 ; j<3 ; j++ ) {
57:                         cellvec[i][j] = scale * cellvec[i][j];
58:                     }
59:                     logger.info("cellvec: "+cellvec[i][0]+" "+cellvec[i][1]+" "+cellvec[i][2]);
60:                 }
61:             } else {
62:                 for ( int i=0 ; i<3 ; i++ ) {
63:                     cellvec[0][i] = cellvec[0][i] * scale;
64:                 }
65:                 logger.info("lattice const.: "+cellvec[0][i]+" "+cellvec[0][i]+" "+cellvec[0][i]);
66:             }
67:             setCellVec(cellvec,inputInterface);
68:             inputInterface.saveTo(new File(nfinpfp));
69:             execute("__PHASE__");
70:
71:             BufferedReader reader = new BufferedReader(new FileReader(nfene));
72:             String foo = "";
73:             String bar = "";
74:             while( (foo = reader.readLine()) != null ) {
75:                 bar = foo;
76:             }
77:             String [] line = bar.split("\s+");
78:             String energy = "";
79:             if ( line != null && line.length >= 4 ) {
80:                 energy = line[3];
81:             }
82:             reader.close();
83:             cp(nfene,nfene+"-"+String.valueOf(from+i*incre));
84:
85:             logger.info("energy for step "+i+": "+energy);
86:             logger.info(System.getProperty("line.separator"));
87:             writer.println(String.valueOf(from+i*incre)+" "
88:                             +String.valueOf(scale)+" "+energy);
89:         }
90:         writer.close();
91:     } catch(e){
92:         logger.error("error",e);
93:     }
94:     cp(nfinporg,nfinpfp);
95:     rm(nfinporg);
96:
97: }
98:
99: init();
100: loop();

```

少し長いスクリプトなので、ポイントのみ解説します。

99 行目, 100 行目 スクリプトが実行されると、まずこれらの行で呼んでいる “init()” メソッドと “loop()” メソッドが実行されます。

init() メソッド 初期化を行います。入力ファイル操作クラスの実インスタンス化やスクリプト入力の読み込みなどを行っています。

loop() メソッド 実際の計算を行うメソッドです。

38-39 行目: 各体積での計算のエネルギーを一つのファイルに書き込むため、PrintWriter クラスをインスタンス化しています。また、そのためループ全体を try ブロックに入れています。

43 行目: commands.bsh で定義されている、“getCellVec” メソッドによってセルベクトルを取得しています。

53-67 行目: セルをスケールしています。また、最後にやはり commands.bsh で定義されている “setCellVec” メソッドで新しいセルをセットしています。

68-69 行目: 計算で実際に利用する入力をディスクに保存し, PHASE を実行しています.

71-83 行目: 各体積で得られたエネルギーの値を, 別ファイルに書き込んでいます.

注意点として, ¥ の扱いがあります. 通常 Java では ¥ は特別な記号なので ¥ を記述する場合エスケープして ¥ と書く必要があります. ところが, PHASE-Viewer はスクリプトを投げる前に ¥ を ¥ ¥ で置き換えるのでこのような書き方ではなく, 単に ¥ としてください. たとえば, 77 行目でそのような書き方がされています.

6.6 同梱 BeanShell スクリプトの利用方法

PHASE-Viewer は, 第 6.5 節でご紹介したもののほか, すぐにお使いいただける BeanShell スクリプトをいくつか同梱しております. これらは, サンプルプロジェクトの下にある “scripting” プロジェクトからご利用いただくことができます. スクリプト本体は, .chase ディレクトリーの下の “scripts” ディレクトリーにあります. 以後, この同梱スクリプトの利用方法を説明します. 各スクリプトに共通する事柄を下記します.

- スクリプトのログは, “scriptlog” という名前のファイルに保存されます.
- ここで紹介するスクリプトは, 自分自身の前に “commands.bsh” を指定しないといずれも動作しません.

6.6.1 scf-dos.bsh

まず PHASE による SCF 計算を行ってから, ekcal による状態密度計算を行うスクリプトです. 通常通り SCF 計算用の入力ファイルをご用意いただき, さらにスクリプトの入力で ekcal 用の設定を行います. 規定の値としては, SCF 計算と同じ k 点分割数を利用し, tetrahedron 法による状態密度計算を行えるようにしています. 必要に応じて k 点分割数を増やすなどするとよいでしょう.

6.6.2 scf-band.bsh

まず PHASE による SCF 計算を行ってから, ekcal によるバンド計算を行うスクリプトです. 通常通り SCF 計算用の入力ファイルをご用意いただき, さらにスクリプトの入力で ekcal 用の設定を行います. 最低限, k 点ファイルの作成は行う必要があります. その他必要に応じて ek_convergence などを変更するとよいでしょう.

6.6.3 scf-epsilon.bsh

まず PHASE による SCF 計算を行ってから, uvsor-epsilon による誘電関数の計算を行うスクリプトです. 通常通り SCF 計算用の入力ファイルをご用意いただき, さらにスクリプトの入力で uvsor-epsilon 用の設定を行います. uvsor-epsilon の設定の規定値は, 基本的に uvsor-epsilon のそれに準じています. 必要に応じて変更してください.

6.6.4 uniform_exp.bsh

第 6.5 節でも言及した, セルの大きさを一様に変更しながら SCF 計算を行うスクリプトです. まず PHASE の入力を通常通り準備してください. スクリプトの入力としては, “from” と “to”, そして “incr” という項目があります. “from” には最初の体積を, 用意した入力の体積を 1 として入力してください. “to” には最後の体積をやはり用意した入力の体積を 1 として入力してください. “incr” には, “to” から “from” にいたるまでの刻み幅を入力してください. すべての計算が終了すると, 通常の PHASE による計算で出力されるファイルのほか, 下記のファイルが作成されているはずです.

- F_LEN_F ファイルのうしろに “_数字” という文字列の付加された名前のファイル. 各体積でのエネルギーのデータが書き込まれています.
- F_LEN_F ファイルのうしろに “_all” という文字列の付加された名前のファイル. 全体積のエネルギーのデータが書き込まれています. このデータは, 第 10 節で説明するグラフツールでインポート可能な形式となっています.

6.6.5 phonon.bsh

まず構造緩和の計算を行い、得られた安定構造を利用して振動解析を行うスクリプトです。PHASEの入力を通常通り用意し、さらにスクリプトの入力ではPHASEのPhononブロック相当の編集を行ってください。

6.6.6 cell_relax.bsh

PHASEによって計算されたストレステンソルを元のセルの緩和を行うスクリプトです。設定項目としては、時間刻み幅 dt 、収束条件 (ストレステンソルの上限値を指定します。単位は Hartree/Bohr³)、最大更新回数を指定します。次のような結果を得ます。

- F_ENF ファイルのうしろに “数字” という文字列の付加された名前のファイル。数字は、ステップ数に対応します。
- F_DYNM ファイルのうしろに “-数字” という文字列の付加された名前のファイル。数字は、ステップ数に対応します。
- F_DYNM ファイルそのものには、セル緩和の過程を記録してあり、第 8.11 節で説明する原子配置ビューアの動画表示機能で可視化することもできます。

また、scriptlog には各ステップでのストレステンソルの最大値なども書き込まれます。

6.7 BeanShell スクリプトより利用可能な関数

ここでは、PHASE-Viewer に埋め込まれている関数、または “commands.bsh” で定義されている関数とその利用方法を説明します。スクリプト作成の際参考にしてください。

- void appendToFile(String file1, String file2): file1 の内容を、file2 に付け足します。
- InputInterface getInputInterfaceFromBSH(String file): file で表される BeanShell スクリプトの入力部から InputInterface オブジェクトを作成します。
- Logger getLogger(String name): ログを取るためのクラスを作成します。“name” は事実上どのような文字列でも問題ありません。ログを取るクラスは、log4j(<http://logging.apache.org/log4j/docs/>) の Logger クラスです。詳しくはウェブサイトを参照してください。
- boolean isWindows(): 現ホストが Windows なら true, そうでないなら false を返します。
- void execute(String command): “command” を実行します。
- double[] [] getCellVec(InputInterface inputInterface): 指定の InputInterface オブジェクトからセルベクトルを抜き出して返します。
- double[] [] getGradientCell(double[] [] cell, double[] [] stress): 指定のセルベクトル、ストレステンソルから「セルの微分」を計算し返します。
- String getFileName(String ident, String dir): 識別子 ident のファイルのファイル名を、dir の下にある file_names.data から読み込んで返します。
- void setCellVec(double[] [] vec, InputInterface inputInterface): vec で指定されるセルベクトルを inputInterface に設定します。
- double[] [] getStressTensor(): 最も新しい PHASE 標準出力ファイルからストレステンソルを読み込み、返します。
- AtomCoords[] getAtomCoordsFromDynam(String fileName): PHASE の座標データ出力ファイルである、F_DYNM ファイルからデータを読み込み PHASE-Viewer の内部形式、AtomCoords クラスの配列に変換し返します。

第7章 座標データのインポート/エクスポート

計算で用いる結晶構造を用意するのは、通常手間の掛かる作業です。PHASE-Viewer には、様々なプログラム・データベースより取得した原子配置情報を取り込む、あるいは他のプログラムで利用できる形式に出力する機能を備えています。

7.1 対応するファイル形式

現在、下記のファイル形式に対応しています。

CIF 形式 結晶構造を指定するための、きわめて汎用的なファイル形式です (<http://www.iucr.org/iucr-top/cif/>)。考えられるすべての結晶構造を記述できる反面、利用するのは容易ではありません。PHASE-Viewer は、CIF パーサーである “ChasePmodel” プログラムを利用して CIF 形式で記述された結晶構造を取り込むことが可能です。“ChasePmodel” は PHASE-Viewer に組み込まれているので、ユーザーが明示的に意識していただく必要はありません。

XYZ 形式 元素名とデカルト座標によって記述された原子配置情報です。様々な「方言」がありますが、PHASE-Viewer では一般的な XYZ 形式ファイルの取り込み/書き出しのほか、BioStationViewer で扱える trj2 形式の取り込み、xmakemol (<http://www.nongnu.org/xmakemol/>) プログラムによって可視化可能な形式の XYZ ファイルの取り込み/書き出しが可能です。この操作は任意のフレーム、または全てのフレームに対して行うことができます。

XBS 形式 XBS プログラム (<http://www.ihp-ffo.de/~msm/>) によって可視化可能なファイルです。ナノシミュレーションシステムの一部である、FZMDDX コード (タイトバインディング MD および古典 MD 計算コード) の出力形式です。XBS 形式には通常シミュレーションセルの情報は書かれませんが、FZMDDX はダミーの原子とその間のボンドを定義することによってセルの描画を実現します。PHASE-Viewer は FZMDDX のこの性質を利用し、XBS ファイルより原子の元素名、座標だけでなくセルベクトルも取得することが可能です。この形式に対応しているので、FZMDDX による古典分子動力学計算より得られた原子配置を入力として第一原理計算を行う、といったことも容易に行うことが可能となります。この操作は任意のフレーム、または全てのフレームに対して行うことができます。

PHASE 形式 (入力) 汎用第一原理電子状態プログラムである PHASE の入力データから、原子配置の情報のみを抜き出して取り込むことができます。

PHASE 形式 (出力) 汎用第一原理電子状態プログラムである PHASE の出力データを取り込むことができます。

cube 形式 Gaussian Cube 形式を取り込むことができます。第 8 章にて説明する原子配置ビューアーから取り込んだ場合、電荷密度の可視化などを行うことも可能です。

PHASE-Viewer 形式 PHASE-Viewer 自体が独自の原子配置記述形式を備えており、当然 PHASE-Viewer によって書き出し、また読み込むことが可能です。XML (Extensible Markup Language, <http://www.w3.org/TR/2004/REC-xml-20040204/>) で記述されており、拡張性、汎用性に優れています。任意のフレーム、または全てのフレームの取り込み、書き出しが可能です。

7.2 基本的な操作方法

基本的な操作方法を説明します。

はじめに PHASE 入力ファイル編集画面から原子配置の取り込み/書き出しを行う方法を説明します。まず、“atomic configuration” タブを選択した状態にします。画面左下の方に “Import” と “Export” と書かれたボタンがあります (図 5.19)。原子配置を取り込む場合は “Import” ボタンを、書き出す場合は “Export” ボタンをクリックしてください。図 7.1 に図示しているファイル選択ダイアログが起動します。

取り込みも書き出しも、行う操作は同様です。

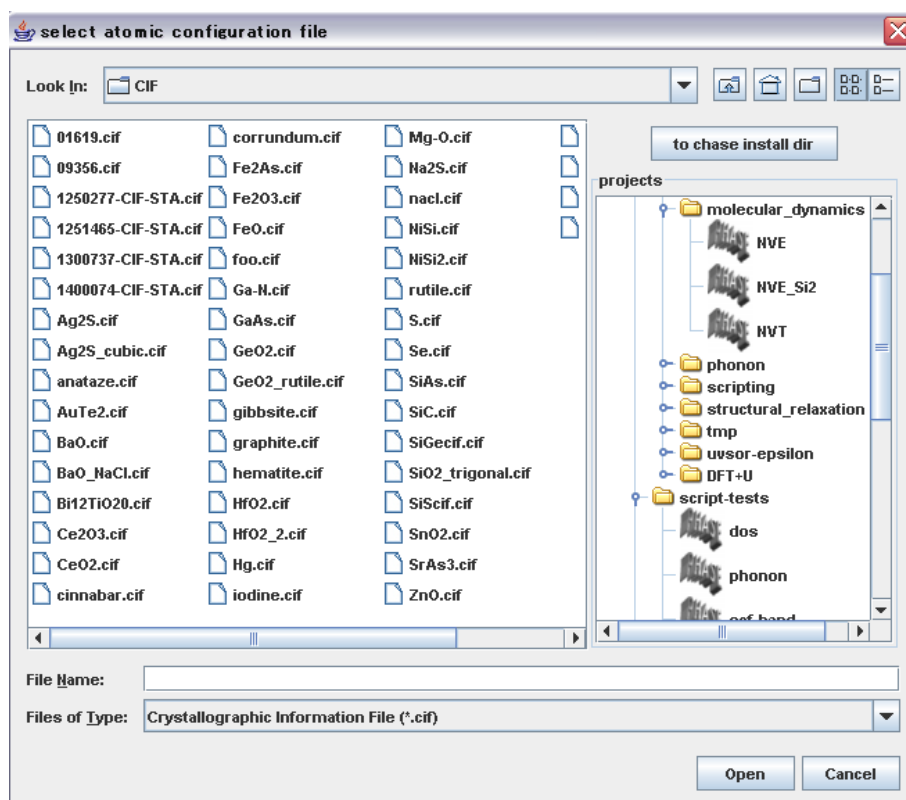


図 7.1: 座標インポート画面.

まず、“Files of type” から扱うファイルのファイル種を選択してください。ここでの選択によってファイルのパース方法が変わるので、必ず正しい形式を選択するようにしてください。ついで、ファイル選択ダイアログの標準的な操作から目的のファイルを選び、“Open” ボタンをクリックしてください。さらに、ファイル種によってはオプションを指定する必要があるものも存在します。このようなファイル種選択した場合、“Open” ボタンをクリックした後にオプション設定用の GUI が起動します。たとえば XYZ 形式や XBS 形式の場合、時系列にそって原子配置が記述されているのでどの時刻のそれを利用するか、という選択が可能となっています。XYZ 形式のファイルを取り込む場合のオプション設定画面を、図 7.2 に図示します。

選択として、“first frame”、“last frame”(すなわち一番最初の原子配置か一番最後の原子配置)のほか、“all” があります。“all” の場合全原子配置を取り込むことになりますが、ここでは一番最初のそれが利用されます(後でみるように、結晶構造ビューアーの場合は全原子配置が取り込まれ、動画表示などが可能となります)。いずれも当てはまらない場合、数字を直接入力することもできます。ここで不正な文字列(数字でない、ファイルに書き込まれている原子配置の数よりも大きい数、など)を入力した場合、自動的に一番最初の原子配置が使われます。

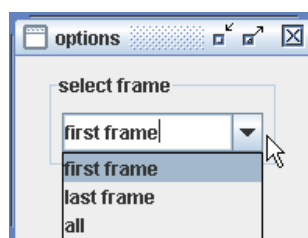


図 7.2: XYZ 形式ファイルのオプション設定画面.

原子配置の取り込み/書き出しは、結晶構造ビューアーから行うことも可能です。図 7.5 で示している“File”メニューから“import atomic coordinates from file”や“export atomic coordinates to file”を選択すると図 7.1 の画面が起動します。あとは先に説明したような手続きを踏むことによって、原子配置の取り込み/書き出しを行うことが可能です。PHASE 入力ファイル編集画面での作業との一番の違いは、「ファイルに記述された全原子配置を一度の操作で取り込むことができる」点です。たとえば、PHASE による振動解析の計算結果から「トラジェクトリ形式(拡張子 trj2 または tr2)」のファイルを作成することができますが、このファイルに記述されている全原子配置(と対応する振動モードの固有ベクトル)のデータを本プログラ

ムに取り込むことによって原子が振動する様子を可視化することが可能です。後ほど具体例を説明します。

7.3 具体例

原子配置の取り込み・書き出しは以上の操作で行うことができます。本節ではいくつか具体例を紹介します。

7.3.1 古典分子動力学シミュレーションとの連携

第一原理電子状態計算によって高精度に材料の物性を予測することが可能ですが、たとえばアモルファス構造を作成する、など負荷の高い計算は古典分子動力学シミュレーションで行い、その結果を第一原理電子状態計算の入力に利用できると便利です。

ここでは古典分子動力学プログラムである FZMDDX によって得られた出力座標から GUI にデータを取り込み、それを結晶構造ビューアーで表示したり、PHASE 用入力ファイルを作成する方法を詳しく説明します。使用するデータは、FZMDDX によって作成されたアモルファス HfO_2 のそれとします。

XBS ファイルのファイル形式を説明します。XBS 形式では、まず “.bs” 拡張子のファイルに初期構造の情報を書き込みます。具体例を下記します。

```
atom Hf      0.00000000    0.00000000    0.00000000
atom Hf      2.75000000    2.75000000    0.00000000
atom Hf      0.00000000    2.75000000    2.75000000
atom Hf      2.75000000    0.00000000    2.75000000
      ....
      ....
      ....

atom O       1.37500000    1.37500000    4.12500000
atom O       4.12500000    1.37500000    4.12500000
atom O       1.37500000    4.12500000    4.12500000
atom O       4.12500000    4.12500000    4.12500000
      ....
      ....
      ....

atom C01     0.00000000    0.00000000    0.00000000
atom C01     11.00000000    0.00000000    0.00000000
atom C02     0.00000000    0.00000000    0.00000000
atom C02     0.00000000    11.00000000    0.00000000
atom C03     0.00000000    0.00000000    0.00000000
atom C03     0.00000000    0.00000000    11.00000000
atom C12     11.00000000    0.00000000    0.00000000
atom C12     11.00000000    11.00000000    0.00000000
atom C21     0.00000000    11.00000000    0.00000000
atom C21     11.00000000    11.00000000    0.00000000
atom C13     11.00000000    0.00000000    0.00000000
atom C13     11.00000000    0.00000000    11.00000000
atom C31     0.00000000    0.00000000    11.00000000
atom C31     11.00000000    0.00000000    11.00000000
atom C23     0.00000000    11.00000000    0.00000000
atom C23     0.00000000    11.00000000    11.00000000
atom C32     0.00000000    0.00000000    11.00000000
atom C32     0.00000000    11.00000000    11.00000000
atom C123    11.00000000    11.00000000    0.00000000
atom C123    11.00000000    11.00000000    11.00000000
atom C213    11.00000000    0.00000000    11.00000000
atom C213    11.00000000    11.00000000    11.00000000
atom C321    11.00000000    11.00000000    11.00000000
atom C321    11.00000000    11.00000000    11.00000000
      ....
      ....
      ....
```

まず、Hf の座標が記述され、さらに O の座標が記述されています。さらに、”atom C01” 行から ”atom C321” 行まで、セル描画に使うダミー原子の情報が記述されています (これは FZMDDX 独自の拡張です)。この情報を利用して、原子の座標そのものだけでなく、セルベクトルも取得することができます。その後はボンド描画に関わる記述などがありますが、PHASE-Viewer では直接は使われません。XBS 形式ではこの入力を元に、さらに時系列にそった原子配置のデータを “.mv” 拡張子のファイルに書き込みます。そのファイルの例を下記します。

```
frame t=      20.000 [fs] T=   3000.250 [K] V=  1327.125 [A^3]
   0.018      10.902      10.954
   2.751       2.811       0.057
  10.980       2.723       2.801
   2.804       0.061       2.644
   0.039       0.014       5.476
   2.741       2.778       5.570
  10.897       2.790       8.315
```

```

2.673    0.161    8.232
10.981    5.418    10.885
2.801    8.061    10.873
.....
.....
.....
frame t=  40.000 [fs] T=  2995.622 [K] V=  1314.926 [A^3]
0.013    10.789    10.904
2.714    2.874    0.145
10.950    2.670    2.864
2.804    0.141    2.559
0.101    0.071    5.444
2.727    2.758    5.587
10.777    2.836    8.337
2.586    0.304    8.198
10.952    5.326    10.730
2.823    7.918    10.774
.....
.....
.....

```

“frame” から始まる行が、その時間ステップでの座標データの始まりを意味します。その後、“.bs” ファイルに書かれているのと同じ順序で原子座標の値が記述されています。各座標がどの原子に対応するかは “.bs” ファイルで指定したものと全く同様である必要があります (言い換えると粒子数が変化するようなデータを記述することはできません)。

上記 XBS 形式のデータを取り込むには、“.bs” ファイルの方を指定してください。そのさい、“.mv” ファイルは、存在するならば同じディレクトリーで、かつ拡張子以外は同一のファイル名である必要があります。“atomic configuration” タブから一番最初のフレームと一番最後のフレームを取り込み、結晶構造ビューアーで可視化した様子を図 7.3 と図 7.4 に図示します。当然のことながら、ここで取り込んだ座標を PHASE 入力ファイル形式で保存することは容易にできます (“save” ボタンをクリックするのみ)。

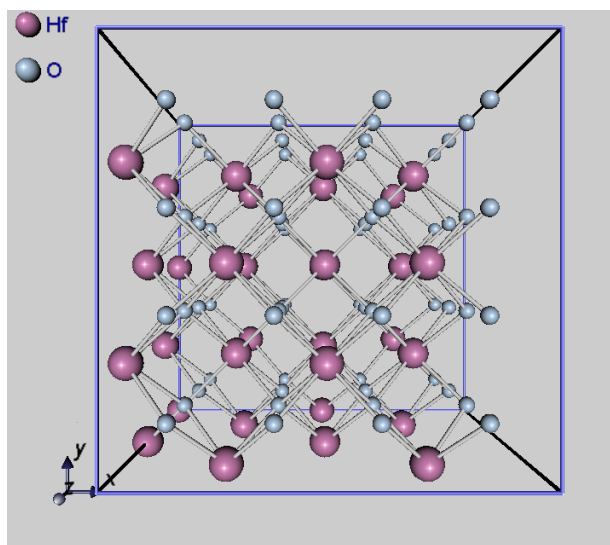


図 7.3: HfO₂ の古典 MD シミュレーションの初期構造。

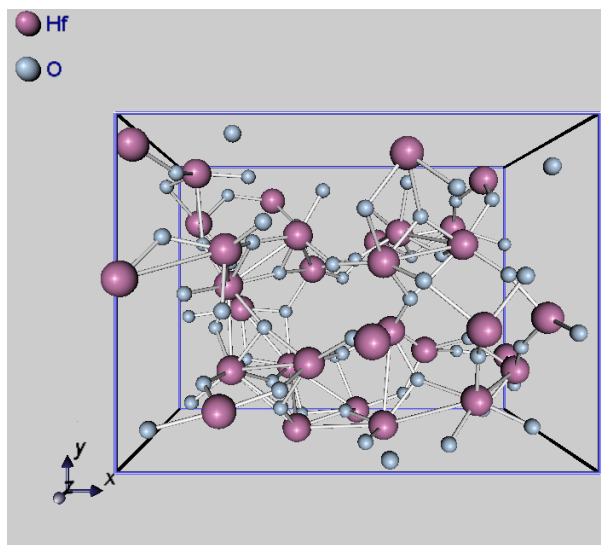


図 7.4: HfO₂ 古典 MD シミュレーションで得られた最終的な構造。

7.3.2 PHASE の計算結果からの入力

PHASE の計算を行うと、各原子の座標とそれに働く力が、file_names.data 中の F_DYNM 識別子によって指定されるファイルに書き込まれます。このファイルの中身をインポートし新たに PHASE で利用できる入力ファイルを作成することができます。

7.3.3 振動解析計算の結果の可視化

PHASE には振動解析を行い、その固有モードを可視化しやすいファイル形式で出力する機能があります。ここではそのファイルを利用して実際に振動解析の結果を可視化する手続きを説明します。具体的には、PHASE チュートリアルマニュアルにて紹介されている Si_2 の振動解析の例を利用します。

PHASE にて実行された振動解析は、BioStation-Viewer によって可視化することのできる「拡張トラジェクトリー形式」です。この形式は、基本的には XYZ 形式と同様です。PHASE チュートリアルに含まれている Si_2 の振動解析を行うことによって結果得られる tr2 ファイルを下記します。

まず、1 行目は対応するフレームの原子数です。ついで 2 行目はコメントですが、ここで記述されている形式でコメントを付加することにより BioStationViewer でラベルを付加したり、時系列にそった簡単な二次元グラフを作成することが可能です。三行目以降が各原子の情報です。1 列目が元素名、2, 3, 4 列目が座標、5, 6, 7 列目が振動モードの固有ベクトルに相当します。XYZ 形式は標準ではセルベクトルの情報は指定できません。trj2 形式ではファイル本体とは別に “grid.mol2” という名前のファイルを作成することによってセル情報を指定することができます。本プログラムはこの仕様を利用し、“grid.mol2” ファイルがトラジェクトリーファイルと同じディレクトリーに存在する場合はセルベクトルの取り込みも行います。くわしくは BioStationViewer のマニュアルをご覧ください。

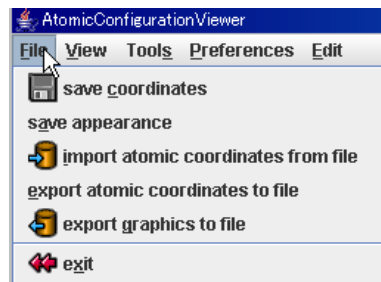


図 7.5: 結晶構造ビューアーの “File” メニュー

```
18
label = "step 1/ 20" omega(Ha)= 2.355e-03 omega(eV)= 6.409e-02 nu(cm-1)= 516.892
Si 5.38444199966976 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 2.69222099983488 2.69222099983488 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 5.38444199966976 5.38444199966976 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 2.69222099983488 0.00000000000000 2.69222099983488 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 5.38444199966976 2.69222099983488 5.38444199966976 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 2.69222099983488 2.69222099983488 2.69222099983488 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 2.69222099983488 2.69222099983488 5.38444199966976 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 5.38444199966976 5.38444199966976 5.38444199966976 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 0.00000000000000 5.38444199966976 5.38444199966976 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 4.03833149975232 1.34611049991744 1.34611049991744 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 1.34611049991744 4.03833149975232 1.34611049991744 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 1.34611049991744 1.34611049991744 4.03833149975232 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 4.03833149975232 4.03833149975232 4.03833149975232 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000

18
label = "step 2/ 20" omega(Ha)= 2.355e-03 omega(eV)= 6.409e-02 nu(cm-1)= 516.892
Si 5.38444199966976 0.00000000000000 -0.08176238133428 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.08176238133428 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 2.69222099983488 2.69222099983488 -0.08176238133428 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 5.38444199966976 5.38444199966976 -0.08176238133428 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 2.69222099983488 0.00000000000000 2.61045861850060 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 5.38444199966976 2.69222099983488 2.61045861850060 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 0.00000000000000 0.00000000000000 5.30267961833548 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 2.69222099983488 0.00000000000000 5.30267961833548 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 5.38444199966976 5.38444199966976 5.30267961833548 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 0.00000000000000 2.69222099983488 5.30267961833548 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 2.69222099983488 2.69222099983488 5.30267961833548 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 0.00000000000000 0.00000000000000 5.30267961833548 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 4.03833149975232 1.34611049991744 1.42787288125172 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 1.34611049991744 4.03833149975232 1.42787288125172 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 1.34611049991744 1.34611049991744 4.12009388108660 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
Si 4.03833149975232 4.03833149975232 4.12009388108660 0.00000000000000 0.00000000000000 -0.26458862400000
```

以上より、PHASE-Viewer を利用して trj2 ファイルを取り込み、原子配置および振動モードの固有ベクトルを可視化した様子を図 7.6 に図示します。

7.3.4 PHASE-Viewer 形式の書き出し、読み込み

PHASE-Viewer には、それ自体原子配置を記述するための独自のフォーマットを用意しています。XML で記述されており、汎用性、拡張性が高いと期待されます。具体的なファイルの中身は、たとえば下記ようになります。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<chase_atomic_coordinates creator="CHASE-3PT version 1.1.0" numframes="601">  <-- フレーム数など、全体の情報
  <frame framenum="0" iscart="true" lengthunit="angstrom">
    <atomlist numatoms="96">
      <atom>
        <element>Hf</element>
        <posx>0.00000000</posx>
        <posy>0.00000000</posy>
        <posz>0.00000000</posz>
      </atom>
      <atom>
        <element>Hf</element>
        <posx>2.75000000</posx>
```

<-- 「とあるフレーム」に対応するエレメント
 <-- 「原子」エレメントのはじまり
 <-- 個々の原子の属性を指定できるエレメント
 <-- 元素名、座標など；必要に応じて属性は任意

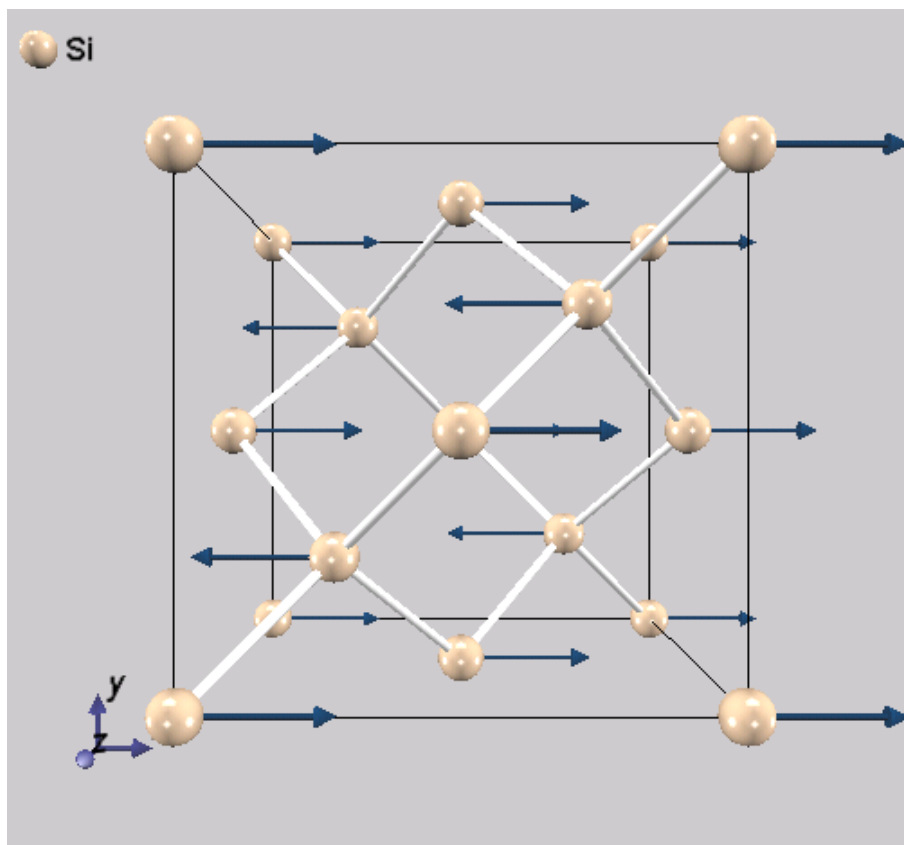


図 7.6: PHASE によって得られた Si_2 の振動解析結果を本プログラムに取り込み、振動モードを可視化した図.

```

    <posy>2.75000000</posy>
    <posz>0.00000000</posz>
  </atom>
  <atom>
    <element>Hf</element>
    <posx>0.00000000</posx>
    <posy>2.75000000</posy>
    <posz>2.75000000</posz>
  </atom>
  <atom>
    <element>Hf</element>
    <posx>2.75000000</posx>
    <posy>0.00000000</posy>
    <posz>2.75000000</posz>
  </atom>
  .....
  .....
  .....
  .....
</atomlist>
<cell>
  <a_vec>11.00000000 0.00000000 0.00000000</a_vec>
  <b_vec>0.00000000 11.00000000 0.00000000</b_vec>
  <c_vec>0.00000000 0.00000000 11.00000000</c_vec>
</cell>
</frame>
<frame framenum="1" iscart="true" lengthunit="angstrom">
  <atomlist numatoms="96">
    <atom>
      <element>Hf</element>
      <posx>0.018</posx>
      <posy>10.902</posy>
      <posz>10.954</posz>
    </atom>
    .....
    .....
    .....
  </atomlist>

```

<-- 「セルベクトル情報」を記述できるエレメン

```
.....
</chase_atomic_coordinates>
```

現在のところこの形式の原子配置を取り込む/書き出すことのできるプログラムは本プログラムのみですが、XML パーサーさえあればいかなるプログラムであっても PHASE-Viewer 形式の原子配置を簡単に再利用できるモジュールを作成することができます。

7.3.5 結晶構造データベースとの連携

ここでは、結晶構造データベースから取得できる結晶構造を読み込むライブラリー、“ChasePmodel”の利用方法を説明します。といってもこのライブラリーは統合環境に組み込まれているのでユーザーが意識する必要はありません。以下では結晶構造を取り込む手順を簡単に説明します。

7.3.5.1 結晶構造の入手

本プログラムが解釈することのできる結晶構造ファイルのファイル形式は、結晶構造データベースにおけるデファクトスタンダードである“Crystallographic Information File (CIF)”形式です。これらのファイルは有償・無償のデータベースから手に入れることが可能です。たとえば物質・材料研究機構のウェブサイトで公開されている“PaulingFile(<http://crystdb.nims.go.jp/>)”という結晶構造データベースから無償で CIF をダウンロードすることが可能です。典型的な CIF を下記します。このファイルは 4H 構造の SiC を記述したものです。

```
data_1251326
_chemical_formula_sum      'C50 Si50'
_symmetry_cell_setting     hexagonal
_symmetry_space_group_name_H-M 'P 63 m c'
_symmetry_Int_Tables_number 186
_cell_length_a             3.08
_cell_length_b             3.08
_cell_length_c             10.081
_cell_angle_alpha          90
_cell_angle_beta           90
_cell_angle_gamma          120
_cell_volume               82.82
_cell_formula_units_Z      4
loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_type_symbol
  _atom_site_occupancy
    Si      0.333333      0.666667      0.25      Si      0
    C      0.333333      0.666667      0.4375     C      0
    Si      0            0            0          Si      0
    C      0            0            0.1875     C      0
```

7.3.5.2 結晶構造取り込み

結晶構造を取り込むには、まず第 5.1.4 節で説明した、PHASE 入力ファイル編集パネルの“Structure”タブを選択した状態にするか、メニューから“Module”⇒“atomic configuration viewer”と選択してください。そこで得られた画面の下部にある“Import”ボタンをクリックするとファイル選択画面が現れるので、そこから CIF を選択してください。原子配置を表示するテーブルに原子の座標とセル情報が取り込まれるはずですが、そのまま“View”ボタンをクリックし得られた原子配置を可視化することも可能です。この一連の操作を、図 7.7 に図示します。

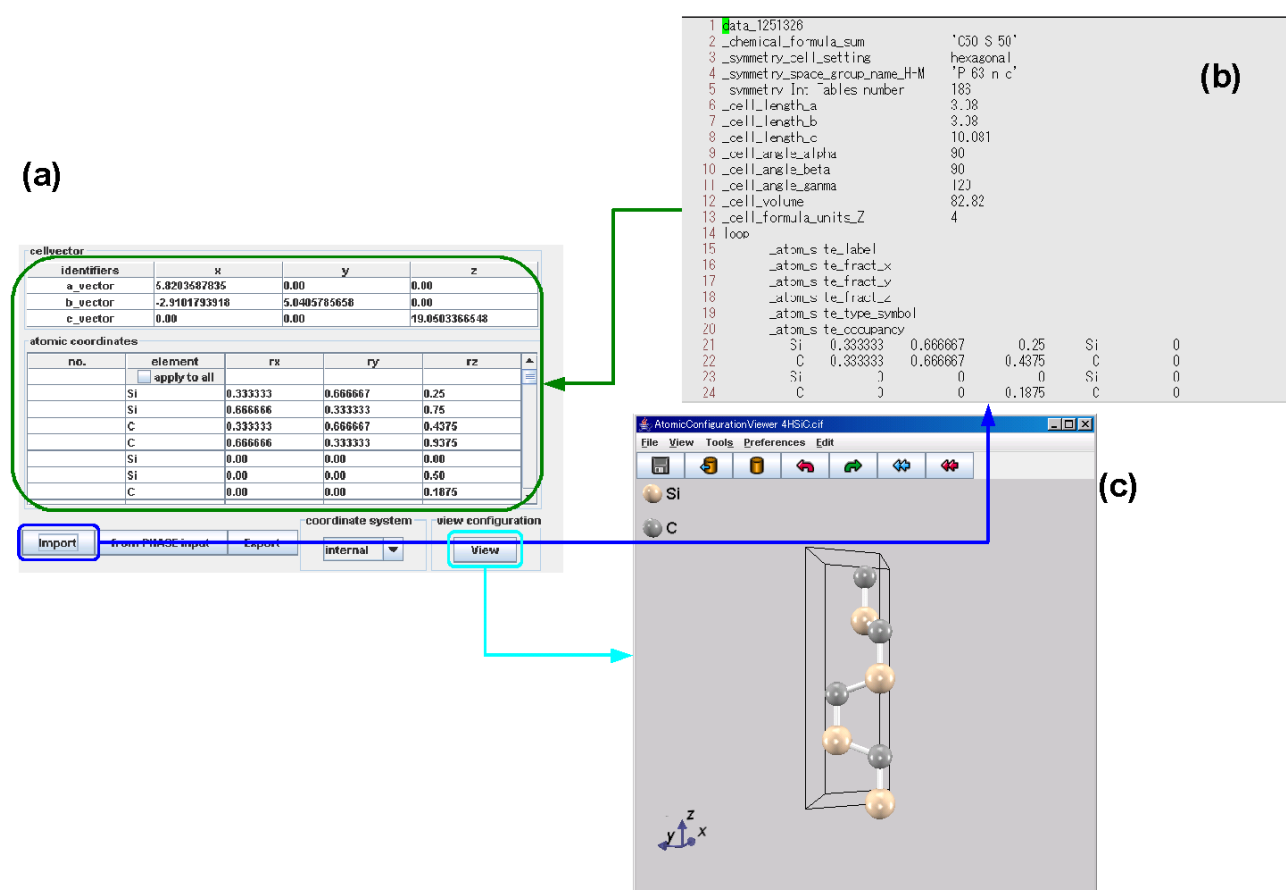


図 7.7: CIF を取り込み、さらにその情報を原子配置ビューアーで可視化している様子. まず (a) で取り込みたい CIF 形式のファイルを指定する. CIF 形式のファイルとは、たとえば (b) のようなものである (この例では 4H 構造の SiC を例としている). これを指定した後、“View” ボタンをクリックすると (c) のような原子配置の表示が得られる.

第8章 原子配置ビューアー

PHASE-Viewer は、結晶構造を可視化したり編集したりするための、“原子配置ビューアー”を備えています。本章ではこの機能について詳解します。

注: Linux 版は、デフォルトの状態ではビューアーを他の GUI などに重ねて描画することができない状態となっています。この設定を修正するには、以下の作業を行ってください。

1. GLX のバージョンを 1.3 以上にする (すでに 1.3 以上ならば何もする必要はありません)。GLX のバージョンアップについては、お使いのグラフィックボードのウェブサイトなどをご覧ください。
2. ビューアーの、“Preferences” メニューから “canvas” と選び、結果現れる画面の “use JCanvas3D” というチェックボックスを有効にし、“apply” とする。
3. PHASE-Viewer を再起動する。

8.1 概要

現バージョンの原子配置ビューアーには、下記のような機能があります。

原子配置の表示 原子配置を三次元表示することができます。ボンド描画、元素の色分け表示、原子に働く力の描画、電荷密度の可視化など、多くの描画方法が備わっています。図 8.1 に、PHASE サンプルにある水素終端された Si(100) 面の原子配置をビューアーで表示している様子を图示します。

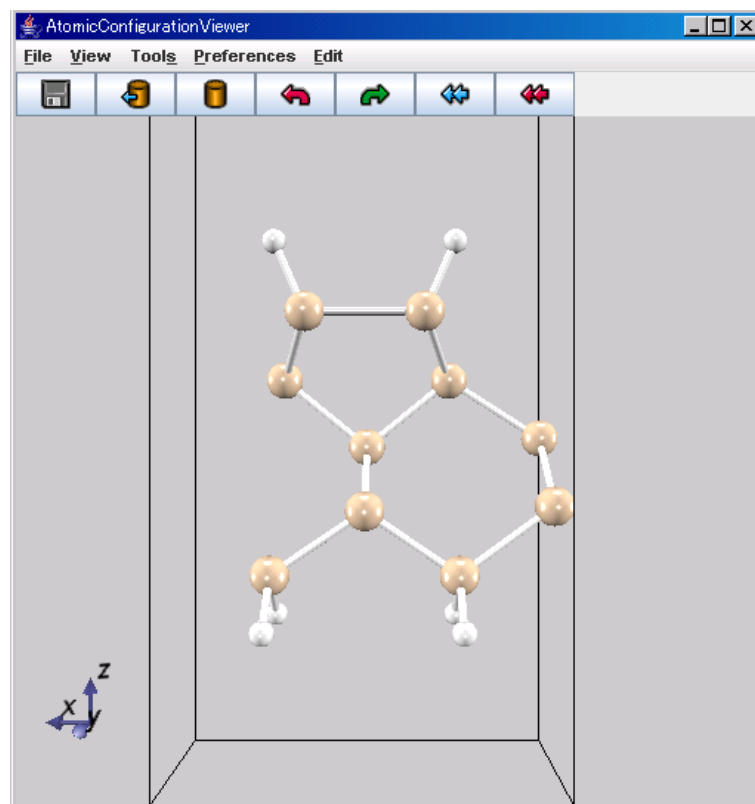


図 8.1: 原子配置ビューアーで Si-H 系を表示している例。

表示のカスタマイズ 原子, ボンドの描画色や大きさ, セルベクトルの描き方など, 表示に関わる様々な変更を施すことができます.

動画表示 連続するシミュレーションのデータを動画で表示することが可能です. 連番付きの画像ファイル出力にも対応しているので, 汎用性の高い動画ファイルを作成することも可能です.

電荷密度可視化 PHASE によって得られた電荷密度の等値面や, ある面に沿った等高線の描画を行うことが可能です.

測定機能 ボンド長, ボンド角, 二面角を測定することができます.

編集機能 計算の入力で利用できるよう, 原子配置に様々な変更を施すための機能が備わっています. 多段アンドゥ・リドゥ機能も備えています.

8.2 起動方法

原子配置ビューアーを起動する箇所は, PHASE-Viewer にいくつかあります. それらを列挙します.

- メニューから “Module” → “atomic configuration viewer” と選択する.
- 入力ファイル編集画面の “atomic configuration” ビュー (図 5.19) の “view” ボタンをクリックする.
- 結果解析画面の “trajectory” ビュー (図 5.46) から “viewer” ボタンをクリックする.
- 結果解析画面の “charge” ビュー (図 5.44) から, “internal viewer” ボタンをクリックする.

入力ファイル編集画面, 結果解析から起動する場合は, 表示したいデータを予め読み込んだ状態で起動します. 他方メニューから選択して起動する場合は, 起動後に原子配置のインポート (第 7 章) を行う必要があります.

8.3 アイコンとメニュー

原子配置ビューアーには, 各種機能をご利用いただくためのメニューやアイコンが配備されています. それらについて説明します.

メニューの構成は下記の通りとなっています.

File 原子配置を取り込んだり書き出したりする機能を呼び出します. 下記の選択肢があります.

- save coordinates** 入力ファイル編集画面から呼び出した場合, 施した座標の変更を呼び出し元に反映させます.
- save appearance** 施した見栄えに関わる変更をディスクに保存します.
- import atomic coordinates from file** 原子配置を外部ファイルからインポートします. 詳しくは第 7 章をご参照ください.
- export atomic coordinates to file** 原子配置を外部ファイルへエクスポートします. 詳しくは第 7 章をご参照ください.
- export graphics to file** 画像ファイルを作成します. 画像ファイルエクスポートについては, 付録 A.3 をご参照ください.
- exit** ビューアーを終了します.

View 表示方法の変更を施します.

- rotate** 回転操作はマウスで行うことも可能ですが, このメニューを選択すると数字で回転角を指定できます. 詳しくは第 8.5 節をご参照ください.
- Wigner-Seitz cell** セルのウィグナー・ザイツセルを描画します. 詳しくは第 8.7.8.2 節をご参照ください.
- toggle projection policy** 系の射影方法をトグルします. 詳しくは第 8.7.8.1 節をご参照ください.
- Front, Back, Left, Right, Top** 系を特定の方向に配置します. 詳しくは第 8.7.8.3 節をご参照ください.

Tools 便利なツールを提供します.

- charge density** 電荷密度描画に関わるツールを起動することができます.
- interpolationscheme** 電荷密度の描画の際に利用する補間の形式を選択します.

logarithmic データの間を対数で補間します。

linear データの間を線形に補間します。たとえばポテンシャルの描画などはこちらの方がよいでしょう。

isosurface 電荷密度の等値面を描画するツールを起動します。詳しくは第 8.12.1 節をご参照ください。

contour 電荷密度の、ある面に沿った等高線を描画するツールを起動します。詳しくは第 8.12.2 節をご参照ください。

measure ボンド長、ボンド角、二面角を測定します。詳しくは第 8.9 節をご参照ください。

frames 動画表示などを行います。詳しくは第 8.11 節をご参照ください。

unit cell 基本格子とブラベー格子を相互に切り替えたり、単位胞の表示方法を設定します。詳しくは第 8.10 節をご参照ください。

Preferences 様々な設定を行います。

appearance 見栄えに関わる設定を変更します。詳しくは第 8.7.1 節をご参照ください。

element 元素情報を変更します。詳しくは第 8.7.2 節をご参照ください。

arrow 原子に働く力などを矢印で表示する際の、矢印の描画方法の設定を行います。詳しくは第 8.7.3 節をご参照ください。

inversion symmetry PHASE の、“weight” 属性が 2 となっている原子については反転対称の位置に原子を描画するか否かをトグルします。

color bar カラーバーの描画方法を設定します。詳しくは第 8.7.4 節をご参照ください。

light 光源の設定を行います。詳しくは第 8.7.5 節をご参照ください。

hydrogen bonds 水素結合描画の設定を行います。詳しくは第 8.7.6 節をご参照ください。

key listener ホットキーの設定を行います。詳しくは第 8.6 節をご参照ください。

axis 軸の描画方法の設定を行います。詳しくは第 8.7.7 節をご参照ください。

Edit 原子配置を編集する機能を提供します。

undo アンドウ・リドゥ操作を行うことができます。詳しくは第 8.8.5 節をご参照ください。

edit atomic coordinates 原子配置編集用 GUI を起動します。詳しくは第 8.8 節をご参照ください。

上記のメニューから迎れる機能の内のいくつかは図 8.2 で図示した、画面上方に配備されているアイコンからご利用いただくこともできます。



図 8.2: 原子配置ビューアーに配置されているアイコン。

これらアイコンには、下記の機能が割り当てられています。

1. File→save coordinates と同様です。
2. File→export graphics to file と同様です。
3. Edit→edit atomic coordinates と同様です。
4. Edit→undo→undo と同様です。
5. Edit→undo→redo と同様です。
6. Edit→undo→restore initial configuration と同様です。
7. File→exit と同様です。

8.4 座標のインポート・エクスポート

ビューアーで表示したい座標のインポートを行うには、メニューから“File”→“import atomic coordinates from file”と選択してください。また、表示している座標をほかのプログラムで利用できるようにエクスポートを行うには、メニューから“File”→“export atomic coordinates to file”と選択してください。インポート/エクスポート機能の詳細は第 7 章を参照してください。

8.5 マウス操作

8.5.1 基本操作

原子配置ビューアー上でのマウス操作の説明をします。

系の回転、拡大・縮小、並進のマウスによる制御は、下記の操作によって実現できます。

系を回転する マウスの左ボタンを押した状態で適当に動かしてみてください。マウスの動きに応じて系が回転するはずです。

系を並進移動する マウスの右ボタンを押した状態でマウスを適当に動かしてみてください。マウスの動きに応じて系が並進移動するはずです。

系を拡大・縮小表示する マウスの真ん中ボタンを押すか、Alt キーとマウスの左ボタンを押した状態でマウスを上下に動かしてみてください。系は、マウスを上にした場合は拡大、下にした場合は縮小するはずです。¹

回転は回転角を明示的に指定して行うことも可能です。この操作を行うにはメニューから“view”→“rotate”と選択してください。図 8.3 が現れます。

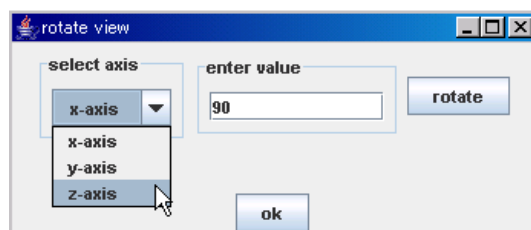


図 8.3: 回転角を明示的に指定する場合に利用する GUI.

この画面上で、まず“select axis”から回転軸を選択してください。ついで“enter value”に回転角を入力し(単位は度)、“rotate”ボタンをクリックします。すると系が指定の分だけ回転します。

8.5.2 原子の選択



図 8.4: 原子を“選択”している様子。

原子の情報を変更したりボンド長などを測定する際に、「原子の選択」を行う必要があります。この操作は、マウスポインターを目的の原子の位置へ移動し、真ん中ボタンをクリックするか Alt キーを押下しながら左クリックすることによって実現できます。

この操作を行うと目的の原子が図 8.4 で示すように黄色く縁取られ、“選択状態”であることが示されます。複数の原子を選択する場合はそのまま選択操作を行っ

てください。選択状態を解除するためには選択解除したい原子へマウスポインターを移動し、真ん中ボタンをクリックするか Alt キーを押下しながら左クリックしてください。選択中の全原子を選択解除したい場合、原子の描かれていない場所へマウスポインターを移動しやはり真ん中ボタンをクリックするか Alt キーを押下して左クリックしてください。

複数原子の選択は次のような操作でも行うことができます。

1. Control キーを押下しながら左マウスボタンを押下げ、マウスを移動する。

¹この機能は、後述の“遠近法を考慮せずに射影する”描画方法(第 8.7.8.1 節)を利用している場合機能しません。

2. 図 8.5 の左側に示すように矩形領域が作成できるので、選択したい原子がこの中に含まれるように矩形を作成する。
3. 左マウスボタンを離す。すると図 8.5 のように、矩形領域内の原子が選択状態となる。

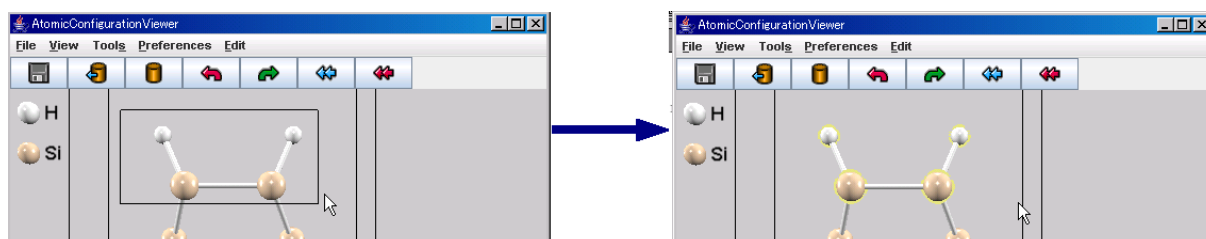


図 8.5: 複数の原子を一度に選択している様子。

8.6 キーボードによる操作

原子配置ビューアーには、キーボード操作によっても快適にご利用いただけるよういくつかのホットキーをご用意しています。本節ではビューアー上からご利用いただけるホットキーの説明を行います。

8.6.1 ホットキー一覧

矢印キーか hjkl 系を回転します。一度矢印キーを押すと何度回転するかはホットキー設定パネル (次節) より設定することができます。

CTRL+矢印キーか CTRL+hjkl 系を、90° 回転します。

SHIFT+矢印キーか SHIFT+hjkl 系を並進します。一度矢印キーを押すとどのくらい並進するかはホットキー設定パネル (次節) より設定することができます。

n か] フレームデータの場合、次のコマへ進みます。

p か [フレームデータの場合、前のコマへ戻ります。

PageDown か CTRL+F フレームデータの場合、ホットキー設定パネルで設定した分だけ飛ばしてコマを進めます。

PageUp か CTRL+B フレームデータの場合、ホットキー設定パネルで設定した分だけ飛ばしてコマを戻します。

Home か 0 フレームデータの場合、最初のコマへ戻ります。

End か SHIFT+4 フレームデータの場合、最後のコマへ進みます。

CTRL+Z アンドゥ操作を行います。

CTRL+Y リドゥ操作を行います。

ALT+矢印キーか ALT+hjkl 原子が選択状態にある場合、選択された原子のみを並進します。一度矢印キーを押すとどのくらい並進するかはホットキー設定パネル (次節) より設定することができます。

Enter 原子が選択状態にある場合、原子の属性エディター (第 8.8.1 節) を起動します。

Delete 選択中の原子がある場合、その原子を削除します。

8.6.2 ホットキー設定

ホットキーの振る舞いの詳細を変更するためには、ビューアーのメニューから “Preferences” → “key listener” と選択してください。図 8.6 の、ホットキー設定パネルを得ます。

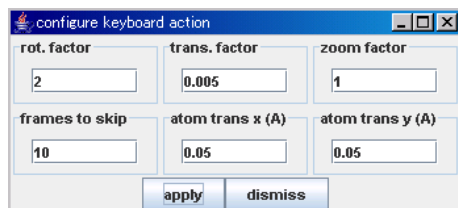


図 8.6: ホットキー設定を行う画面.

この画面上からは次の設定を行うことが可能です.

rot. factor 系をホットキーで回転させる時に、一回あたりどの程度回転するのかを指定します.

trans. factor 系をホットキーで並進させる時に、一回あたりどの程度並進するのかを指定します.

frames to skip フレームデータをホットキーで何コマか飛ばして表示する際に、何コマ飛ばすかを指定します.

atom trans x ホットキーから特定の原子を並進させる場合に、 x 方向にどの程度並進するかを指定します.

atom trans y ホットキーから特定の原子を並進させる場合に、 y 方向にどの程度並進するかを指定します.

8.7 表示

本節では、原子配置表示に関わる詳細を説明します.

8.7.1 表示のカスタマイズ

描画色などのカスタマイズの施し方を説明します. メニューから “Preferences” → “appearance” と選択してください. 図 8.7 の GUI が現れます.

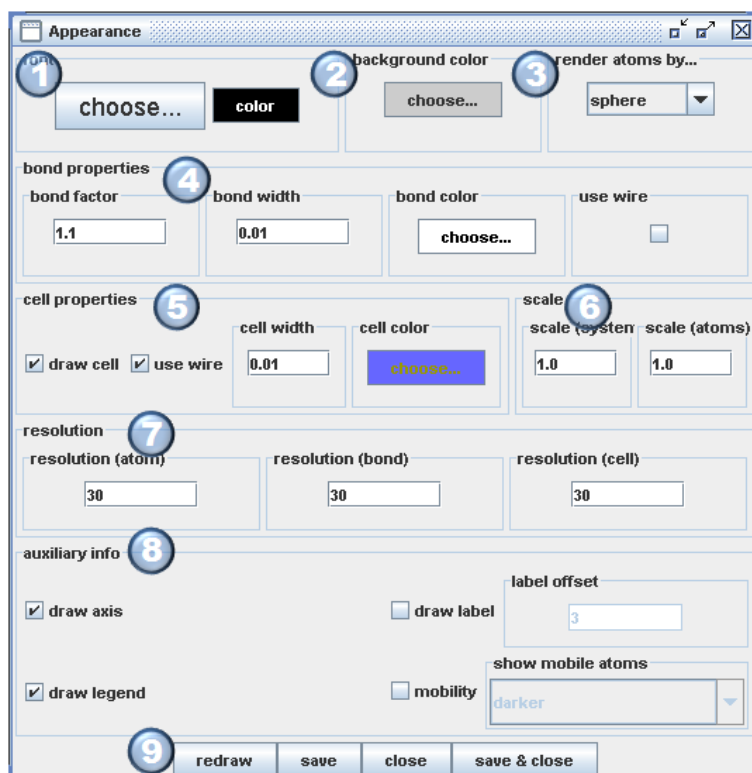


図 8.7: 表示の詳細設定を行う場合に利用する GUI.

この画面の利用法を下記します.

1. “font” 領域: ここでビューアー上で表示される文字列のフォントを選択することができます. “choose” ボタンをクリックすると付録 A.1.2 で説明しているフォント選択ダイアログが起動するので, お好みのフォントを設定してください.
2. “background color” 領域: 背景色を選択できます. “choose” ボタンをクリックすると付録 A.1.3 で説明しているカラー選択ダイアログが起動するので, お好きな背景色をお選びください.
3. “render atoms by”: 原子の描画方法を選択できます. “sphere”, “filled circle”, “null” という選択肢がありますが, それぞれ球, 塗りつぶした円, そして原子を描画しない, という選択に相当します. “sphere” よりも “filled circle” の方が, “filled circle” よりも “null” の方が描画に掛かる負荷は軽いので, 系の大きさやお使いのマシンの描画性能に併せてお選びください.
4. “bond properties” 領域: ここで, 結合の表示の仕方を変更することが可能です. 以下の項目を設定することができます.
 - “bond factor”: ボンドの描画判定に関わる値を指定できます. ボンドは, 二原子間の距離がその二原子に対応する “covalent radius” (第 8.7.2 節参照) の和に, ここで指定した値を掛けた値よりも短い場合に描画されます.
 - “bond width”: ボンド描画時の, ボンドの太さを指定できます.
 - “bond color”: ボンド描画時の, ボンドの色を指定できます.
 - “use wire”: 有効にすると, 円筒ではなく素朴な線でボンドを描画します. こちらの方が描画に掛かる負荷は軽いので, 状況に応じて有効にしてください. 特に第 8.11 節にて説明する動画表示のフレームレートにご満足いただけない場合有効にさせていただくことをお勧めします. 原子を “filled circle”, ボンドを wire とした例を図 8.8 に図示します.

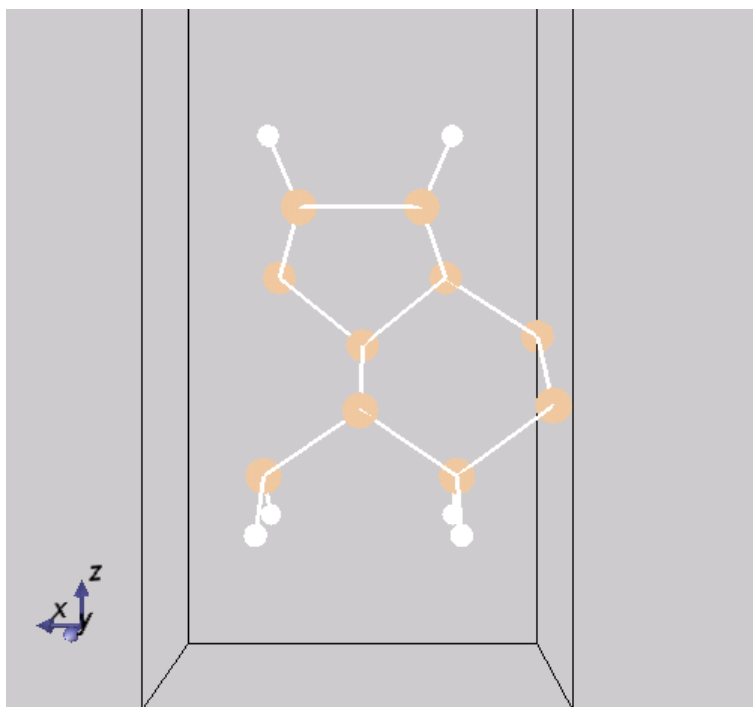


図 8.8: 原子の描画を “filled circle”, ボンドの描画を wire とした例.

5. “cell properties” 領域: ここで, セルの表示の有無などを指定できます. 以下の設定項目を用意しています.
 - “draw cell”: セルを描画するか否かを指定できます (ただし有効なセルパラメーターを記述している必要があります). このチェックボックスをチェックした状態の時, セルが描画されます.
 - “use wire”: 有効にすると, ボンドの場合と同様円筒ではなく素朴な線でセルを描画します.
 - “cell width”: セル描画時の, セルの太さを指定できます.
 - “cell color”: セル描画時の, セルの色を指定できます.

6. “scale” 領域: ここでは, 系の表示上の大きさを設定することが可能です. 以下の設定項目があります.

- “scale(system)”: 画面に対し系全体の大きさを指定します (画面は, 差し渡し 2.0 です).
- “scale(atoms)”: 系に対し, 原子の大きさをどの程度にするかを指定できます.

7. “resolution” 領域: ここでは, 原子やボンド, セルを描画する際の解像度を指定することが可能です. 解像度を大きくすれば表示は美しくなりますが, マシンパワーもそれだけ必要になります. お使いの環境, 表示させたい系の大きさに応じて適宜変更してください. 以下の項目を編集できます.

- “resolution(atom)”: 原子の解像度を変更します.
- “resolution(bond)”: ボンドの解像度を変更します.
- “resolution(cell)”: セルの解像度を変更します.

8. “auxiliary info” 領域: ここで, 上記以外の補助的な設定を行います. 以下の設定項目を準備しています.

- “set axis”: x , y , z 方向を表す軸を描画するか否かを指定できます. このチェックボックスを有効にしている場合, 軸が描画されます.
- “set legend”: 凡例を描画するか否かを指定します. このチェックボックスを有効にしている場合, 凡例が描画されます. 例として, 図 8.9 に図 8.1 の Si-H 系を凡例込みで図示します.

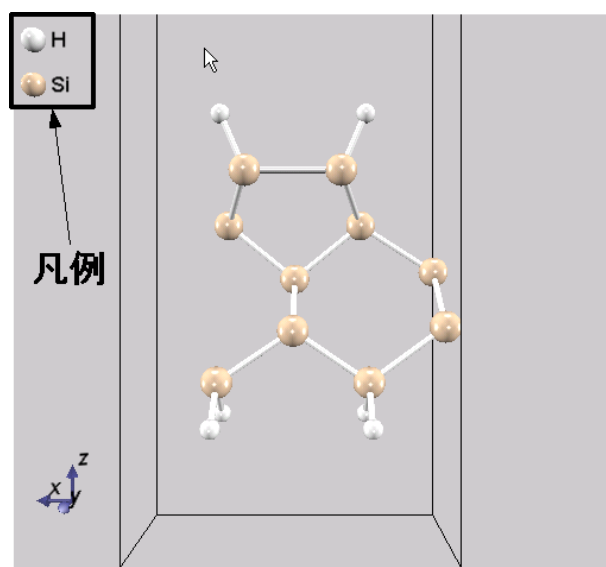


図 8.9: 凡例込みで Si-H 系を表示した例.

- “set label”: 各々の原子にラベルを割り付けて表示します. “set label” チェックボックスを有効にしている場合ラベルを表示します. また, その際 “label offset” テキストフィールドに指定した数字分だけ原子の中心から離れて描画します. 例として, 図 8.10 に図 8.1 の Si-H 系をラベル込みで図示します.
- “mobility”: PHASE 仕様にある, “mobility” 属性を “1” にした原子の表示方法を変更することが可能です. “mobility” チェックボックスを有効にすると “mobility” が “1” の原子は, となりの “show mobile atoms” リストに合わせて描画方法が変化します. なお, “show mobile atoms” を “darker” に指定していると暗く, “brighter” に指定していると明るく表示します. 例として, 図 8.11 に, 図 8.1 の Si-H 系のいくつかの原子の “mobility” を “1” にし, “mobility” をチェックし, “show mobile atoms” は “darker” とした状態で描画した図を表示します.

9. ボタン領域: ボタン領域: 変更を反映させる操作を行います.

- “redraw”: 設定した項目を反映し, 再描画を行います.²
- “save”: 設定項目をディスクに保存します
- “close”: Property Editor を, 変更部分を保存せずに閉じます.
- “save & close”: 図 8.7 を, 変更部分をディスクに保存してから閉じます.

² “redraw” では反映されない変更もあります. この場合, “save” とした後原子配置ビューアーを再起動すれば反映されます.

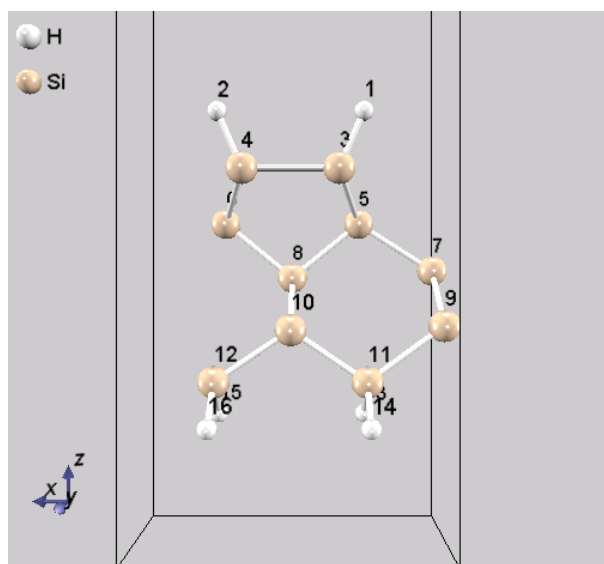


図 8.10: ラベル込みで Si-H 系を表示した例.

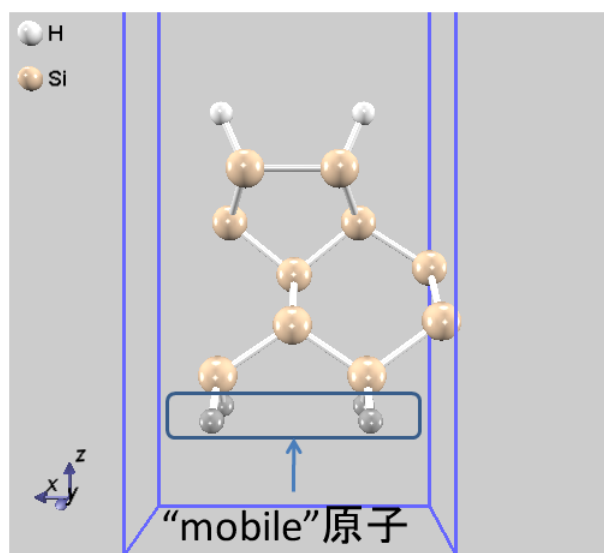


図 8.11: “mobile atoms” を “暗く” 表示した例.

8.7.2 元素情報

メニューから “Preferences” → “element” 選ぶと, 図 8.12 が起動します. このパネルでは, 元素ごとの性質を編集することが可能です.

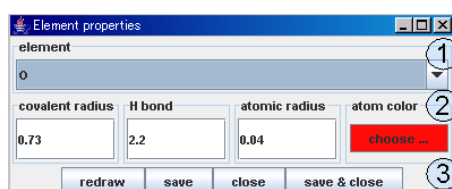


図 8.12: 元素情報を変更する際に利用する GUI.

以下 GUI の各部分を, 図 8.12 中に記された数字に則して説明します.

1. 元素選択域: カスタマイズしたい元素をリストから選ぶことができます.

2. 元素情報編集: “choose element” リストで選んだ元素の性質をこの領域で編集することができます。編集可能項目として以下を用意しています。

- “covalent radius”: “choose element” で選択した元素の covalent radius を指定できます。単位はÅ です。ここで指定した値と、“Preference” タブで指定した “bond factor” の値によってとある二原子間にボンドを描画するか否かを判定します。
- “H bond”: 水素結合描画 (第 8.7.6 節参照) 描画の際の臨界距離を入力します。設定した場合、水素原子の第二近接原子で、その原子間距離がここで指定した値よりも短い場合水素結合の対象と見做されます。
- “atomic radius”: “choose element” で選択した元素の半径を指定できます。描画時の原子の大きさに反映されます。
- “atom color”: “choose element” で選択した元素の色を指定できます。描画時に、ここで指定した色で表示されます。

3. ボタン領域: 変更を反映させる操作を行います。

- “redraw”: 設定した項目を反映し、再描画を行います。
- “save”: 設定項目を保存します。
- “close”: Property Editor を、変更部分を保存せずに閉じます。
- “save & close”: 図 8.12 を、変更部分をディスクに保存してから閉じます。

8.7.3 矢印

原子に働く力の大きさなどの量を矢印で表示することができます。この機能をご利用いただく場合、まずメニューから “Preferences” → “arrow” と選択してください。図 8.13 の、「矢印設定画面」が得られます。

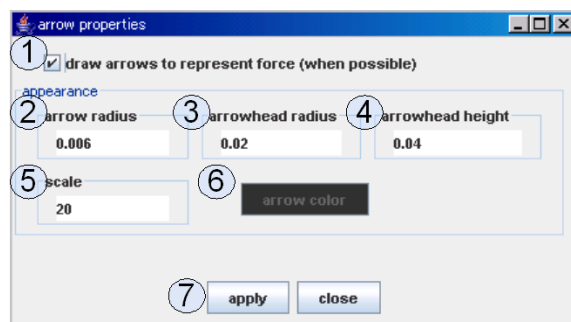


図 8.13: 矢印描画の設定を行う GUI。

この画面上から、次のような設定を行うことができます。

1. 矢印によって原子に働く力を表示する場合、このチェックボックスを有効にします。
2. “arrow radius”: 矢印の半径を設定します。
3. “arrow head radius”: 矢印の、矢頭の半径を設定します。
4. “arrow head height”: 矢印の、矢頭の長さを設定します。
5. “scale”: ある力の値につき、どの程度の大きさの矢印を描くかを設定します。
6. “arrow color”: 矢印の描画色を設定します。
7. “apply”: このボタンをクリックすれば設定がビューアーに反映されます。

矢印描画の例として、図 8.14 に Si-H 系の計算終了後得られた F_DYNM ファイルから原子に働く力を矢印で表示した様子を図示します。

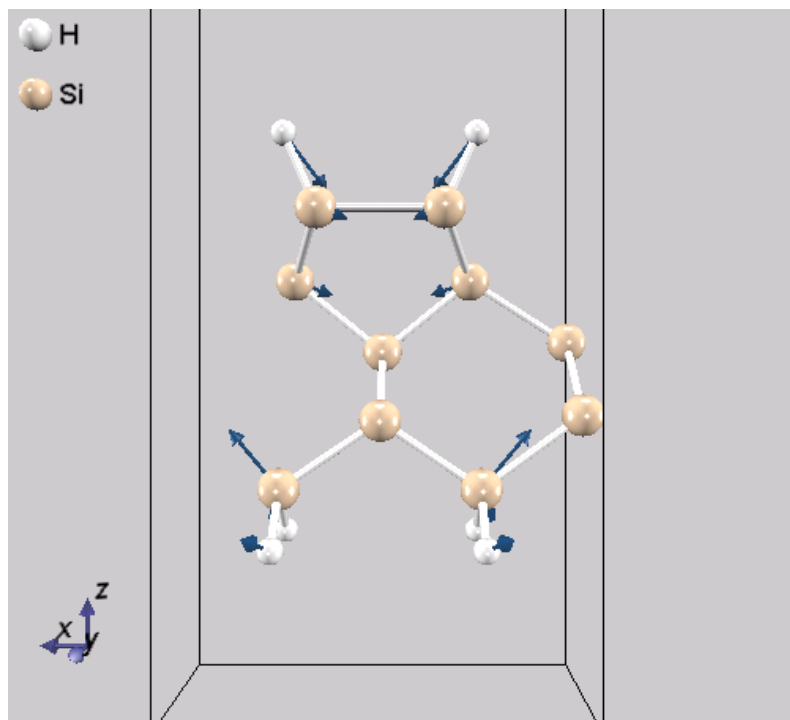


図 8.14: Si-H 系の計算終了後、原子に働く力の大きさを矢印で表示している様子。

8.7.4 カラーバー

第 8.12 節で説明する電荷密度の可視化を行う際などに、描画色と値の関係を表示するカラーバーを描画する機能が備わっています。カラーバーの外観は、たとえば図 8.15 のようになります。カラーバーを描画する方法そのものは第 8.12 節にて説明しますが、ここではカラーバーの見栄えをカスタマイズする方法を説明します。

メニューから “Preferences” → “colorbar” と選択するとカラーバーの描画方法を変更するための GUI、図 8.16 が現れます。この GUI を通じて、下記のような設定を行うことが可能です。

描画位置 カラーバーの描画位置を変更するには、“position” の下に配備されている、 x , y , z というテキストフィールドにそれぞれ x , y , z 座標を入力してください。

カラーバーの大きさ カラーバーの大きさを変更するには、“height” と “width” というテキストフィールドにそれぞれ高さと幅を入力してください。

カラーバーの文字 カラーバーで値を表示する文字の描画方法を変更するには、下記の操作を行ってください。

フォント “font size” にフォントの大きさ、“font color” からフォントの描画色を選択することができます。

分割数 最小値から最大値の分割数を、“division” テキストフィールドにて指定できます。

format “format” テキストフィールドで数字のフォーマットを指定できます。フォーマットについては Java の DecimalFormat クラスに準拠します。詳しくは DecimalFormat の API ドキュメントをご覧ください (たとえば <http://java.sun.com/j2se/1.3/ja/docs/ja/api/java/text/DecimalFormat.html>)

望みの変更を施した後に画面下部に配備されている “apply” ボタンをクリックすれば変更が反映されます。

8.7.5 光源

光源の設定を行うことによって、同じ系でも異なる見栄えを得ることが可能です。光源の設定を行うには、メニューから “Preferences” → “light” と選択してください。図 8.17 に図示している、光源設定用 GUI を起動することができます。

設定できる光源は、最大 5 つまでです。各光源に対し次の設定を行うことが可能です。

光源の種類 一番左のリストから、光源の種類を選択することができます。選択肢は、off, point, directional, ambient です。



図 8.15: カラーバーの例.

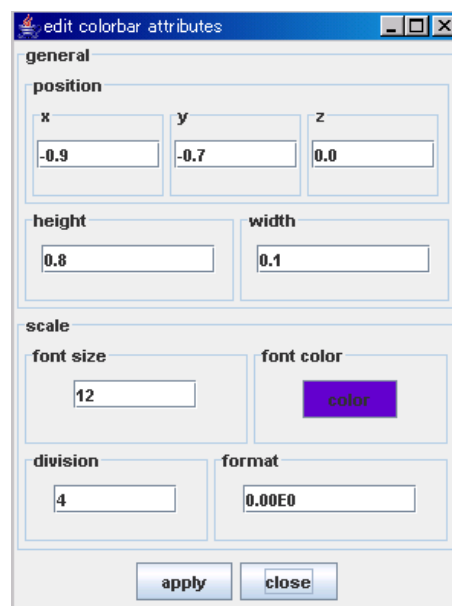


図 8.16: カラーバーの描画方法を編集する GUI.

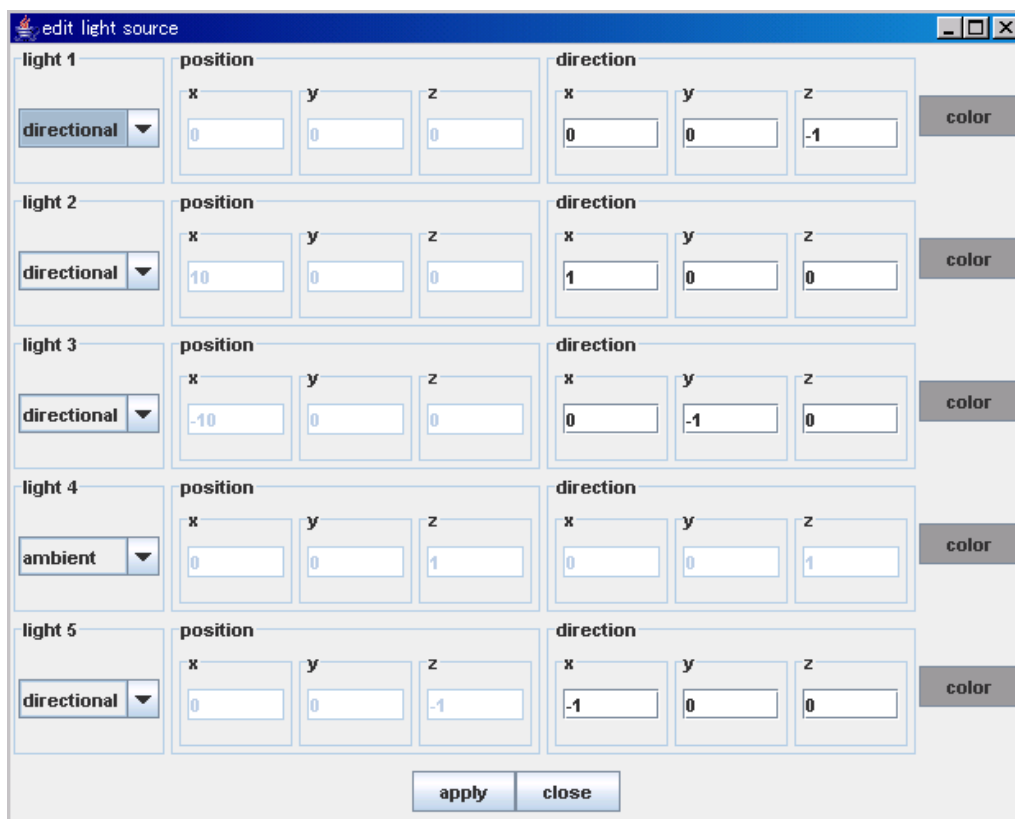


図 8.17: 光源の設定を行う GUI.

光源の位置 “position” とある領域のテキストボックスに光源の位置を入力することができます. “point” のみで意味のある設定です.

光源の方向 “direction” とある領域のテキストボックスに光源の方向を入力することができます. “directional” のみで意味のある設定です.

光源の色 “color” とあるボタンをクリックすると, 光源の色を選択するための色選択ダイアログを起動することができます.

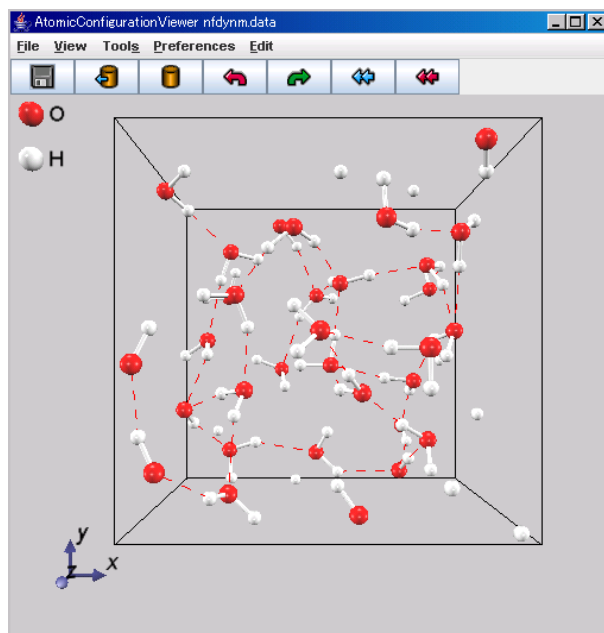


図 8.19: 水を、水素結合込みで描画している例.

望みの光源の設定を行った後画面下部に配備されている“apply” ボタンをクリックすると変更を画面に反映することができます。

8.7.6 水素結合

指定の元素と水素の間に水素結合を描画することもできます。この機能を利用するためにはメニューから“Tools”→“hydrogen bonds”と選択してください。図 8.18 で図示している、水素結合設定画面が現れます。この画面上からは、次の操作を行うことができます。

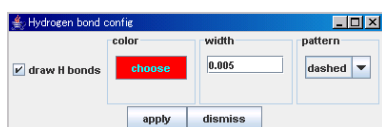


図 8.18: 水素結合設定画面.

水素結合描画 水素結合描画を行う場合、“draw H bonds” とあるチェックボックスを有効にしてください。

水素結合の描画色設定 水素結合の描画色を変更するには、“color” ボタンをクリックし、結果現れる色選択ダイアログから望みの色を選択してください。

水素結合の描画幅設定 水素結合の描画幅を変更するには、“width” テキストフィールドに線幅を入力してください。

水素結合の描画方法 水素結合の描画方法を変更するには、“pattern” リストから望みの種類を選択してください。現在、“solid”、“dashed”、“dotted”という選択肢があります。それぞれ実線、破線、点線に相当します。

図 8.18 での設定が完了したら“apply” ボタンをクリックしてください。変更が反映されます。参考のため、図 8.19 に水を水素結合込みで描画した例を図示します。

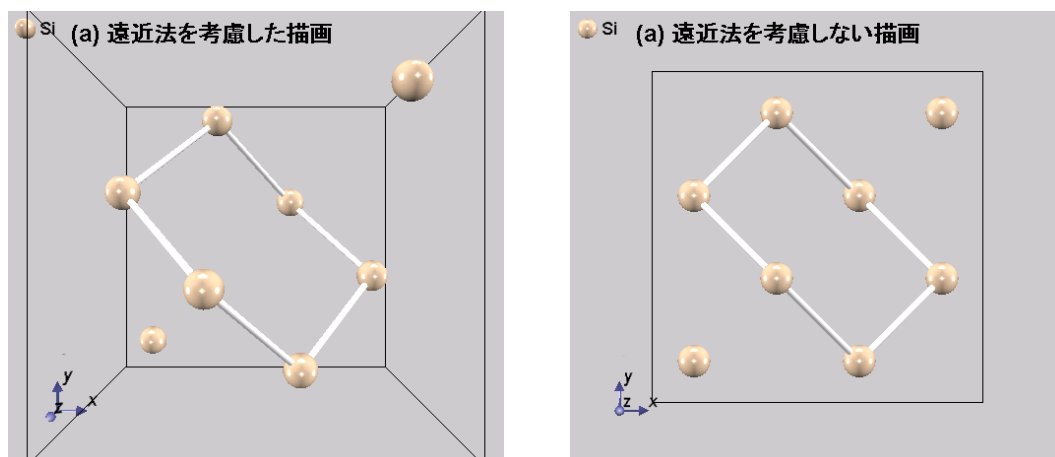


図 8.21: 遠近法を (a) 考慮する描画, (b) 考慮しない描画.

8.7.7 軸のカスタマイズ

x , y , z 方向を表す軸の見栄えを編集することができます. この操作を行うには, “Preferences” → “axis” と選択してください.

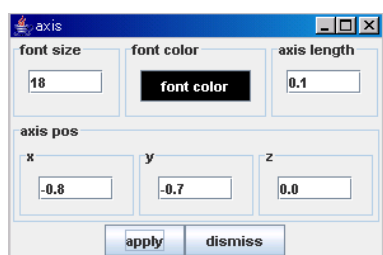


図 8.20: 軸の見栄えを編集する画面.

この画面からは次の設定を行うことができます.

フォントサイズ変更 “font size” に, x , y , z という文字列を描画するフォントのフォントサイズを入力してください.

フォントの描画色変更 “font color” ボタンをクリックすると現れる色選択ダイアログからフォントの描画色を選択してください.

軸の長さ “axis length” テキストフィールドに, 軸の長さを入力してください.

axis pos 軸を描画する場所を, x , y , z テキストフィールドに入力してください.

望みの編集を施したあとに “apply” ボタンをクリックしてください. 変更が反映されます.

8.7.8 その他

8.7.8.1 射影方法の変更

系の描画を行う際の射影方法には, 遠近法を考慮する射影方法と単純な射影方法の二種類を用意しています. 起動直後は遠近法を考慮する射影方法を採用しますが, “View” → “toggle projection policy” と選択していただくとこの二つの方法をトグルします. その違いを, 図 8.21 に図示します.

8.7.8.2 Wigner-Seitz セルを描画する

格子の形状から, Wigner-Seitz セルを描画することが可能です. この操作を行うには, “View” メニューから “Wigner-Seitz cell” と選択してください. 図 8.22 を得ます. この画面の下部に配備されている “apply” というボタンをクリックすると Wigner-Seitz セルが描画されます. なお, この画面の利用方法は後述の図 9.9 とほぼ同等なので, 利用方法についてはそちらをごらんください. Wigner-Seitz セル描画の例として, 面心立方格子の Wigner-Seitz セルを描画した例を図 8.23 に図示します.

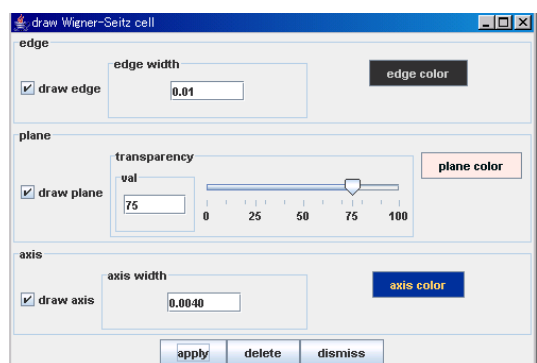


図 8.22: Wigner-Seitz セル設定用 GUI.

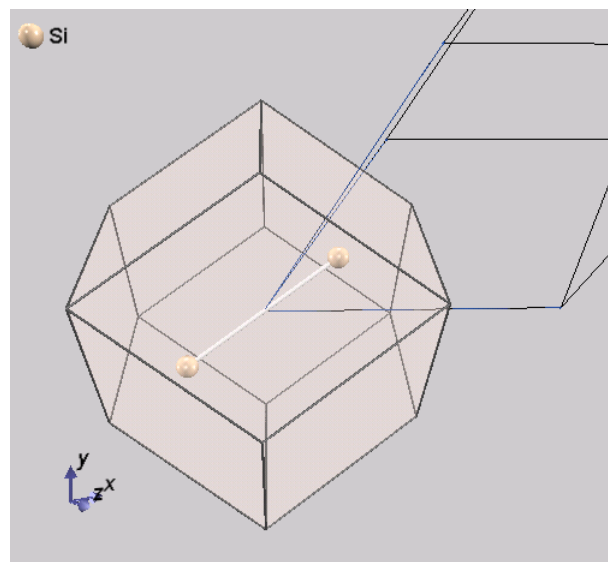


図 8.23: 面心立方格子の Wigner-Seitz セルを描画している様子.

8.7.8.3 系を特定の方向に配置する

“View” メニューから次の項目を選ぶことによって、系が現在どのような配置にあろうとも、特定の方向に配置させることができます。

Front z 軸が画面に垂直で、手前向きの配置です。起動時の配置です。

Back z 軸が画面に垂直で、奥向きの配置です。

Left z 軸が、向って右に向く方向です。

Right z 軸が、向って左に向く方向です。

Top z 軸が下に向く方向です。

Bottom z 軸が上に向く方向です。

8.8 編集

PHASE などの計算で利用する座標データを、原子配置ビューアーで編集することができます。本節ではこの機能の説明をします。

8.8.1 原子の属性変更

原子の座標や原子種、構造緩和の際に“可動か否か”といった編集は、図 8.24 に図示する、「原子属性エディター」上で行うことができます。この画面を起動するには、まず目的の原子を選択状態とし(第 8.5.2 節)、左クリックをしてください。

この画面上で編集できる項目を説明します。

element このリストから原子種を選択することができます。

rx x 座標を入力します。単位はÅ です。

ry y 座標を入力します。単位はÅ です。

rz z 座標を入力します。単位はÅ です。

mobile 構造緩和や分子動力学計算を行う際に、対応する原子を動かしたい場合有効にします。

weight 反転対称性のある系の場合、反転操作の対象となる原子は“2”，それ以外の場合は“1”とします。

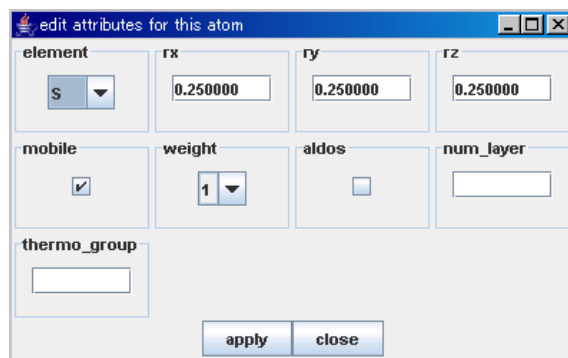


図 8.24: 原子属性エディター.

aldos 原子分割局所状態密度を計算する場合, 対応する原子の局所状態密度を計算する場合有効にします.

num_layer 層分割局所状態密度を計算する場合, 対応する原子が属する層の ID を入力します.

thermo_group 温度制御分子動力学シミュレーションを行う際, 対応する原子が属する熱浴の ID を入力します.

8.8.2 複数の原子の編集

原子一つではなく, 複数の原子を同時に編集することも可能です. この操作を行うには目的の (複数の) 原子を選択状態にし, 左クリックをします. 図 8.25 で図示する, 複数原子編集エディターが起動します.

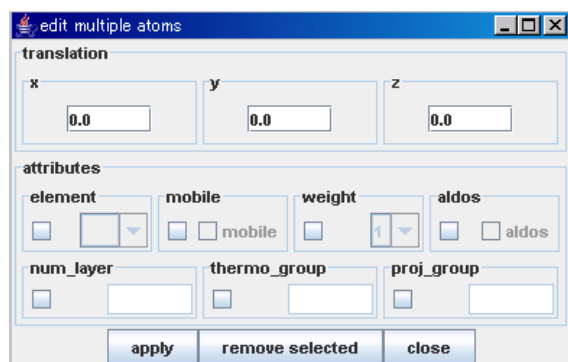


図 8.25: 複数の原子を編集する GUI.

この画面上では次の操作を行うことができます.

並進 選択中の原子に並進操作を施します. “x”, “y”, “z” とあるテキストフィールドに並進の x , y , z の値を入力し “apply” としてください. 単位はÅ です.

原子の属性 選択中の原子の属性を一括で変更します. この操作を行うには, まず “attributes” 領域の中で編集したい項目の左側にあるチェックボックスを有効にし, ついで右側のリスト/テキストフィールド/チェックボックスを利用して値を指定し, “apply” ボタンをクリックします. 選択中の全原子に対し属性の変更が施されます.

削除 選択中の原子を削除するには, “delete selected atoms” ボタンをクリックします.

ここで挙げた以外の属性を変更するには、カラム上で右クリックをして、結果現れるメニューから編集したい目的の項目を選択してください。図 8.24 と同等の編集項目をお選びいただくことができます。また、テーブルの下に位置するボタン列には次のような機能が割り当てられています。

select 左隣のテキストフィールドに入力された ID に従い、原子の行を選択します。

edit selected atom テーブル上で選択中の原子に対して図 8.24 を起動します。

add new atom やはり図 8.24 を起動しますが、この場合は新規原子が足されます。

remove selected atom テーブル上で選択中の原子を削除します。

図 8.27 の “unit cell” タブをクリックするとユニットセル編集用 GUI、図 8.28 を得ます。この GUI は下記の

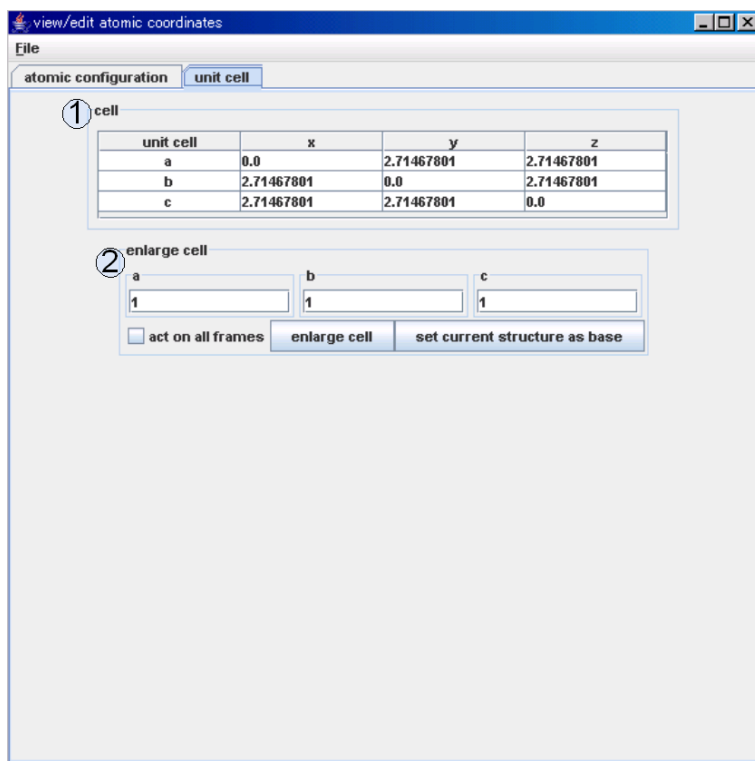


図 8.28: ユニットセル編集パネル。

ように利用します。

①cell テーブル このテーブル上にセルベクトルの値が表示されます。セルベクトルを変更する場合、この値を編集してください。

②enlarge cell 領域 ここで、“セル拡大表示”を行うことができます。結晶からスーパーセルを作成する場合などに利用します。次のような操作を行うと「セル拡大表示」を行うことができます。

- “a”, “b”, “c” とあるテキストフィールドにそれぞれ a 軸, b 軸, c 軸を何倍にしたいのかを入力する。
- “enlarge cell” ボタンをクリックする。
- 第 8.11 節で説明する、動画表示を行っていて全フレームで同様に拡大表示したい場合は “act on all frames” チェックボックスを有効にする。
- 拡大した結果を新たにベースとなる構造にする場合、“set current structure as base” ボタンをクリックする。

「拡大表示」の例として、図 8.29 に、図 8.1 の SiH 系の b 軸を 2 倍とした様子を図示します。

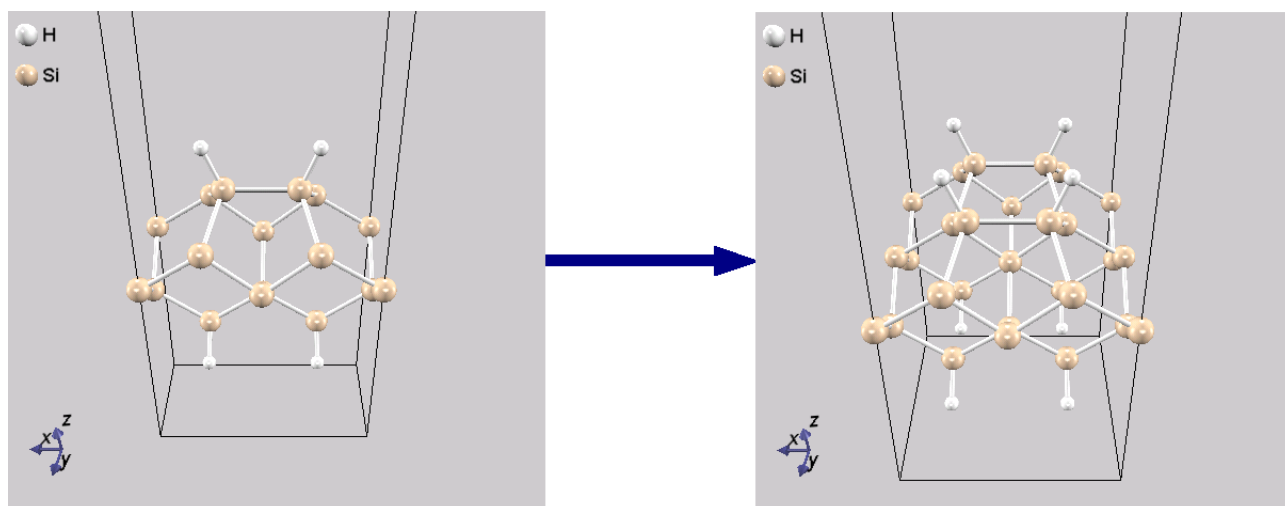


図 8.29: ユニットセル拡大表示の例.

8.8.5 アンドゥ・リドゥ

ここまで説明した操作で施した変更は、すべてアンドゥすることができます。また、アンドゥした操作を再び有効にする、リドゥ操作も行うことができます。この操作を行うには、下記のいずれかを実行してください。

アイコンの操作: 図 8.2 の④がアンドゥ、⑤がリドゥ、そして⑥が一番最初の原子配置を復旧する、という操作に対応します。

メニューから: メニューの、“Edit”→“undo” から、“undo” を選ぶとアンドゥ、“redo” を選ぶとリドゥ、“restore initial configuration” を選ぶと一番最初の原子配置を復旧する、という操作が行われます。

8.9 測定

ビューアーは、原子間の距離や結合角などを測定する機能を備えています。この機能をご利用いただくには、まずメニューから“Tools”→“measure”とお選びください。図 8.30 に図示している、測定用 GUI を得ます。

測定を行うには、この画面からまず“select measure”というリストから測定の種類を選択し、測定対象となる原子を必要な数だけ選択します。具体的には下記の操作になります。

原子間の距離の測定 “select measure” から distance を選び、その後測定したい原子を連続で二つ選択してください。

結合角の測定 “select measure” から bond angle を選び、その後測定したい原子を連続で三つ選択してください。

二面角の測定 “select measure” から dihedral angle を選び、その後測定したい原子を連続で四つ選択してください。

一時的に無効にする 測定機能は、図 8.30 が表示されている間有効ですが、一時的に無効にするには“select measure”から“—”を選択してください。

測定結果は以下のように表示されます。

- 測定用 GUI の結果表示部
- 画面上の対応する原子間
- ログ表示画面

結果を削除するには、測定用 GUI の結果表示部から削除したい測定結果を選択し、画面下部に配備されているボタンから“remove selected”を選択してください。すべての測定結果をクリアするには、“remove all” ボタンをクリックしてください。測定の例として、Si 表面のボンド長と結合角を測定した様子を図 8.31 に図示します。

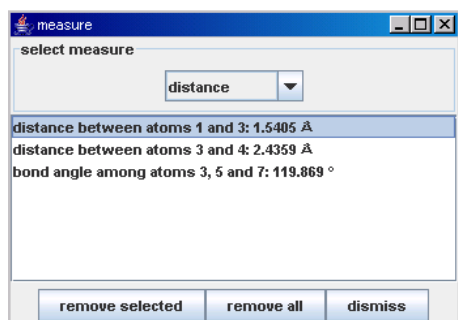


図 8.30: 測定用 GUI.

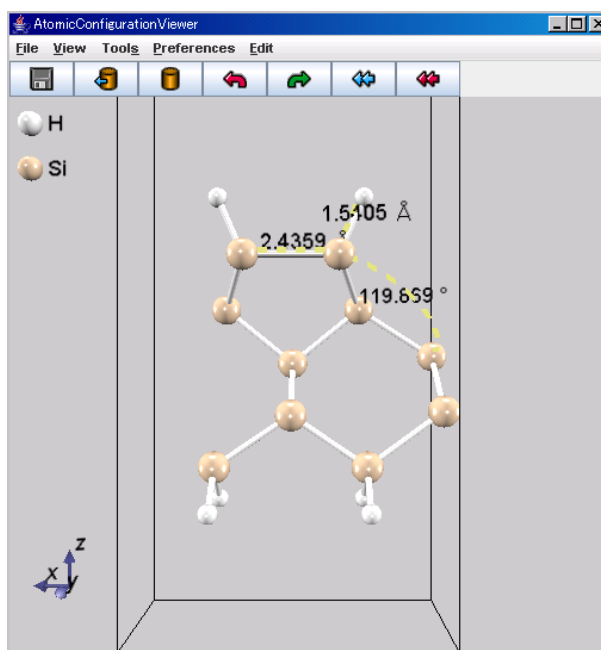


図 8.31: 結晶 Si のボンド長とボンド角を測定している様子.

8.10 単位胞

メニューから “Tools” → “unit cell” と選択すると現れる、図 8.32 や、その上部に配備されている “view” タブをクリックすると現れる図 8.33 の GUI を利用すると、単位胞に関わる様々な変換や設定を行うことができます。本節ではこの機能について説明します。

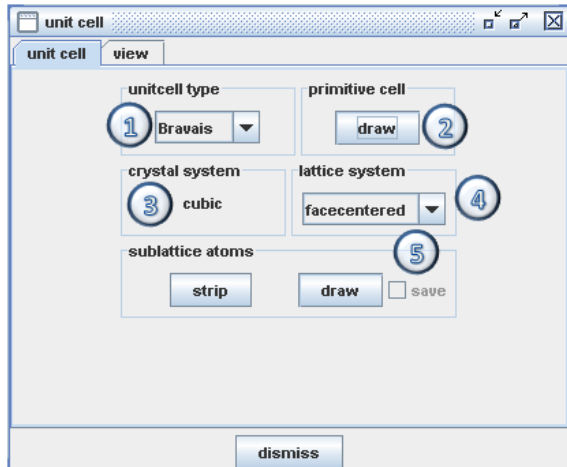


図 8.32: 基本格子とブラベー格子の相互変換を行う GUI.

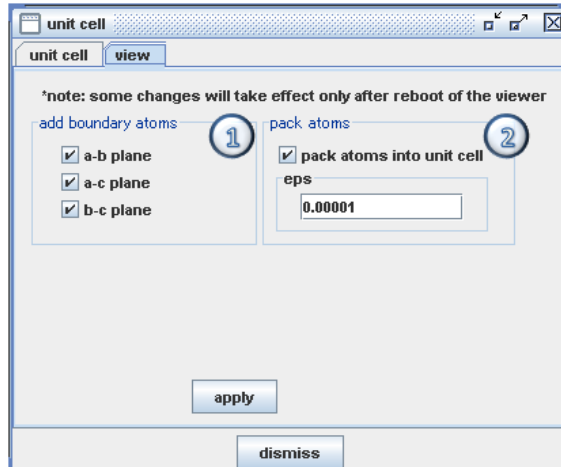


図 8.33: 単位胞の表示方法の設定を行う GUI.

8.10.1 基本格子とブラベー格子の相互変換

PHASE は単位胞を基本格子でもブラベー格子でも入力することが可能ですが、ブラベー格子の場合、センタリングに由来する副格子の原子は取り除いてある必要があります。他方、第 8.4 節で説明した CIF から原子配置を取り込む場合は副格子も含んだブラベー格子として取り込まれます。そこで、副格子点に位置する原子を削除する必要があります。また、たとえば PHASE が出力する電荷密度ファイルは入力をブラベー格子で入力していても基本格子を元に出力されますが、ブラベー格子で可視化した方が分かりやすい場合もあるでしょう。逆にあるブラベー格子を基本格子に変換した様子を見たい場合もあると思われます。このような状況に対応するため、原子配置ビューアーには基本格子とブラベー格子を相互変換する機能が備わっています。ここではこの機能の利用方法を説明します。

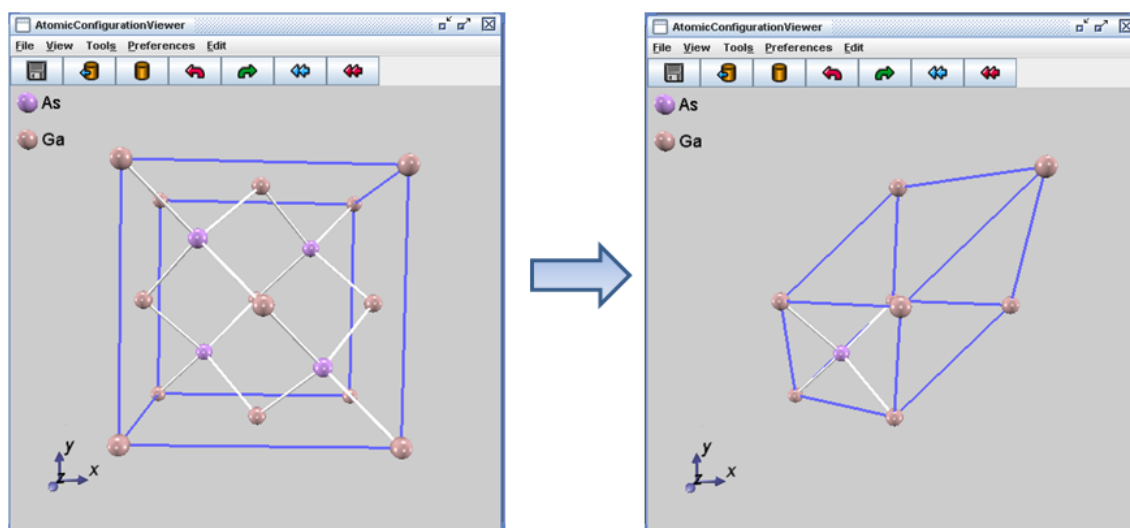


図 8.34: GaAs 結晶を, ブラベー格子から基本格子へ変換している様子.

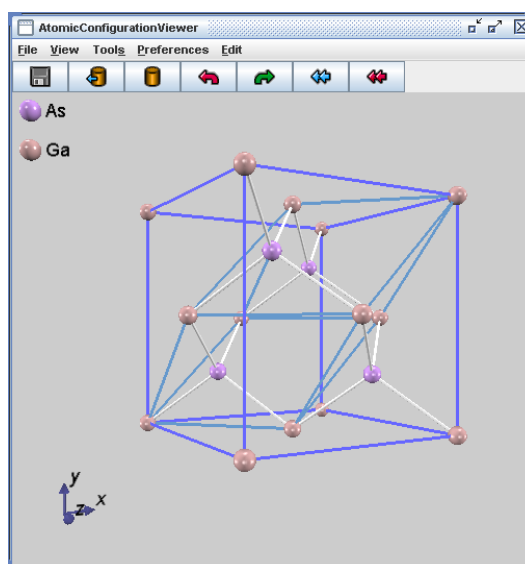


図 8.35: ブラベー格子に基本格子を描画している例.

基本格子とブラベー格子の相互変換を行うためには, まず図 8.32 を表示している状態にします. この GUI の各領域の利用方法は以下の通りです.

1. “unit cell type”: このリストから基本格子とブラベー格子を切り替えることができます. 図 8.34 に, 閃亜鉛型構造のガリウム砒素結晶を, ブラベー格子から基本格子に変換した例を図示します.
2. “primitive cell”: ブラベー表示の際, このボタンを押しこんだ状態にしておくと対応する基本格子を描画することができます. 図 8.34 左側ののブラベー格子表示の GaAs 結晶に基本格子も同時に描画した様子を図 8.35 に図示します.
3. “crystal system”: 系の結晶系を表示します.
4. “lattice system”: センタリングの方法を選択することができます. ただし起動時に自動的に判定されるので, 通常変更する必要はありません.
5. “sublattice atoms”: “strip” ボタンをクリックすると, 副格子点上に位置する原子を削除することができます. また, “draw” ボタンを押しこんだ状態にしておくと, 副格子点上の原子を描画します. ただしこの状態で呼び出し元に保存をしても副格子点上の原子は保存されません. あえて副格子点上の原子を保存する場合は, その隣の “save” というチェックボックスを有効にしておいてください. 例として, 図 8.36 に体心正

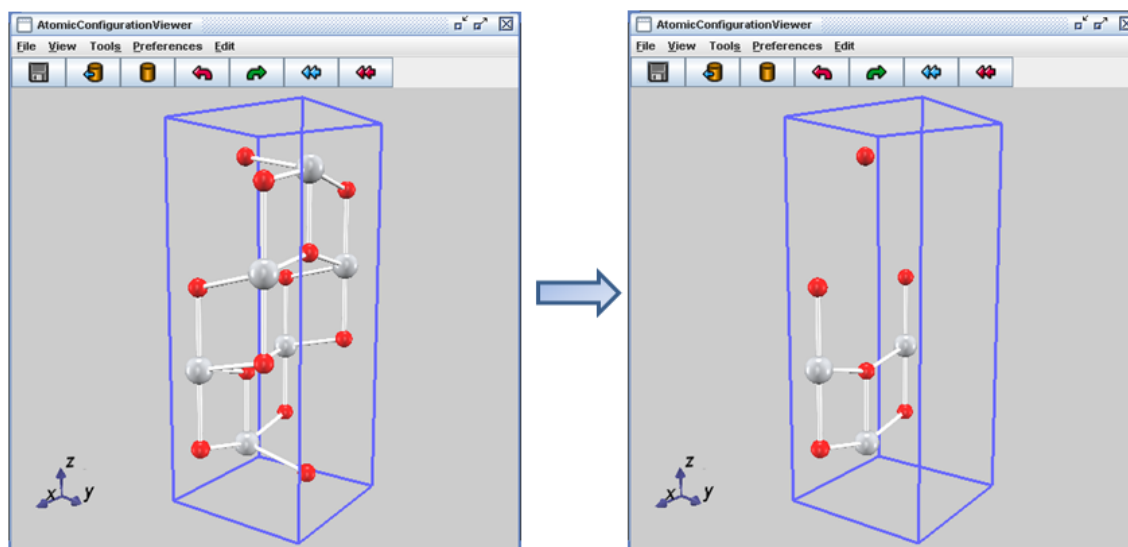


図 8.36: アナターゼ型の TiO_2 から体心原子を取り除いている様子.

方格子をとるアナターゼ型の TiO_2 のブラベー格子から、体心原子を strip ボタンで取り除いている例を図示します.

8.10.2 単位胞の表示方法の変更

図 8.33 の画面から単位胞の表示方法を変更することができます. ここでは、この GUI の利用方法を説明します.

1. “add boundary atoms” 領域: セルの境界に原子がある場合、反対側にも原子を描画するか否かを設定することができます. “a-b plane”, “a-c plane”, “b-c plane” とあるチェックボックスを有効にすると対応する面についてこの機能が有効になります. 図 8.37 に、PHASE サンプルに含まれる BaO-Si 界面の、境界上の原子を描画している様子を図示します.

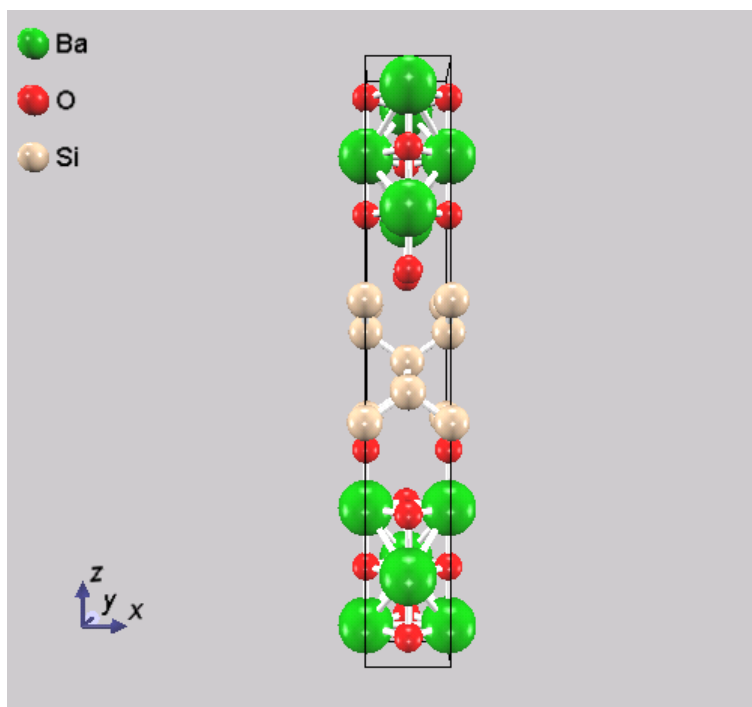


図 8.37: 「境界上の原子」を描画している様子.

2. “pack atoms into unit cell” 領域: セルから飛び出ている原子を周期境界条件に従ってセルの中に詰めなおすか否かを設定します. 図 8.38 に, サンプルにある Si8 の系でこの操作を行う場合と行わない場合の違いを図示します.

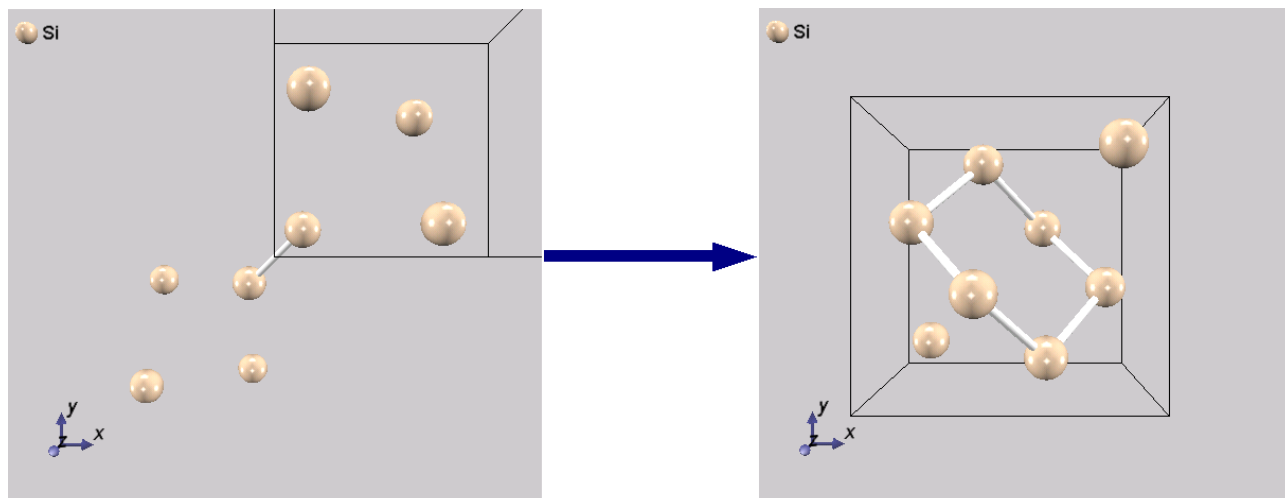


図 8.38: ユニットセルから飛び出ている原子をユニットセルの中に押し込めている様子.

8.11 動画

PHASE の F_DYNM ファイルなど, 原子配置が時間によって変化する情報を動画表示することができます. 本節ではこの機能の利用方法を説明します.

動画表示を行うには, まずメニューから “Tools” → “frames” と選択してください. 図 8.39 に示す, フレーム制御用 GUI を得ます. この画面を次のように利用して動画を表示します.

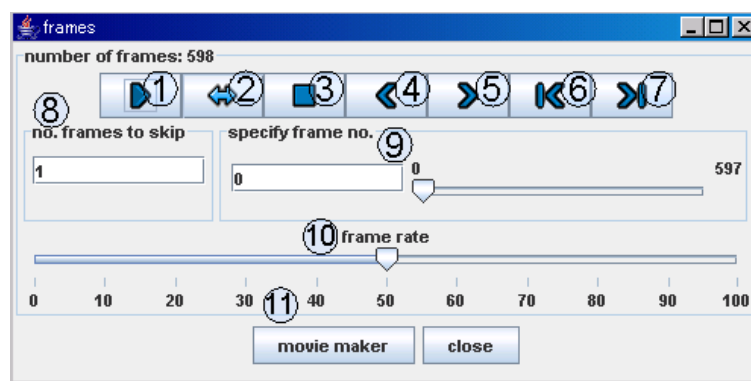


図 8.39: フレーム制御用 GUI.

1. 動画表示を始めます.
2. 「最後のフレームに到達したら逆回して動画を再生する」機能をトグルします.
3. 動画表示を止めます.
4. 次のフレームを表示します. 最後のフレームの場合, 最初のフレームを表示します.
5. 一つ前のフレームを表示します. 最初のフレームの場合, 最後のフレームを表示します.
6. 最初のフレームを表示します.
7. 最後のフレームを表示します.

8. 動画再生の間、一回の更新で何フレームスキップするかを入力します。
9. フレームの番号を入力します。隣のスライダーから選択することもできます。
10. フレームレートの設定を行います。
11. 後述する、動画ファイル作成用 GUI を起動します。

これらの操作は、一部キーボードから行うことも可能です。第 8.6.1 節をご参照ください。

動画の例として、Si 表面の構造緩和のサンプルを元に作成した動画のいくつかのフレームを図 8.40 に図示します。この図では、原子に働く力の矢印表示も行っています。

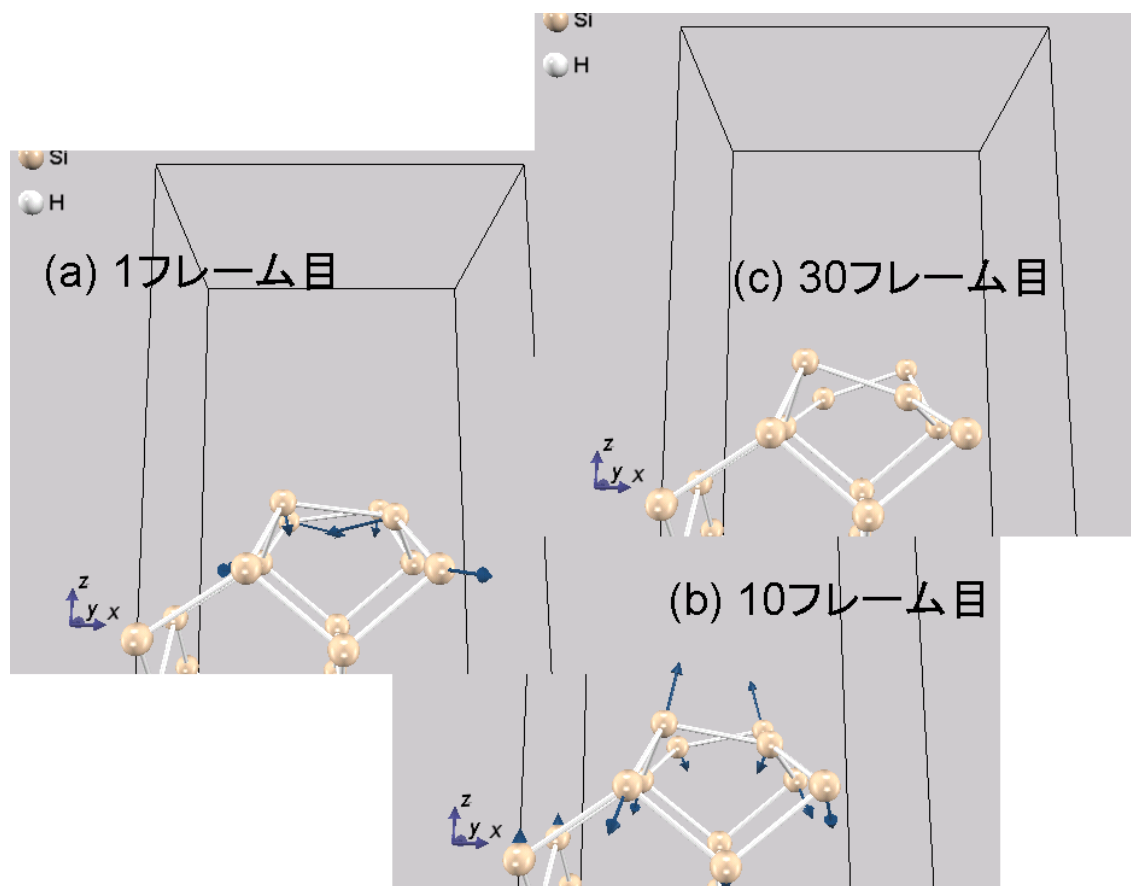


図 8.40: Si 表面の構造緩和の過程; (a)1 フレーム目, (b)10 フレーム目, (c)30 フレーム目。

PHASE-Viewer の中だけでなく、一般的な環境で観賞することのできる動画ファイルを作成することも可能です。この機能を利用するには、図 8.39④の “movie maker” ボタンをクリックし図 8.41 を起動する必要があります。この画面上から次の操作を行ってください。

1. “base directory” 領域: ベースとなるディレクトリーを入力してください。“choose” ボタンをクリックすれば付録 A.1.1 で説明するファイル選択ダイアログから選択することも可能です。
2. 連番付きの jpeg ファイルの接頭部を入力してください。連番付きの jpeg ファイルがあれば、AVIMaker(<http://yamatabi.que.ne.jp/>) などのソフトウェアをご利用いただくことによって動画ファイルを作成することができます。
3. “QuickTimeMovie” 領域: QuickTime 形式の動画ファイルの作成に関わる設定を行います。

create QuickTime Movie 連番付き jpeg ファイルから QuickTime 形式のムービーファイルを作成するか否かを設定します。

delete jpeg files QuickTime 形式のムービーファイルを作成する場合、操作が完了した後連番付き jpeg ファイルを削除するか否かを設定します。

frame rate フレームレートを入力します。

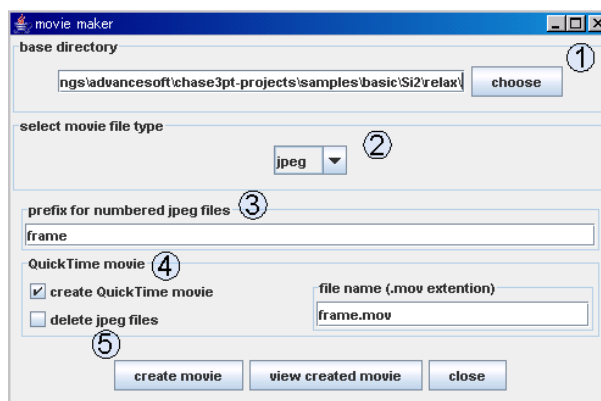


図 8.41: 動画ファイル作成用 GUI.

file name (.mov extension) QuickTime 形式のムービーファイルのファイル名を指定します。拡張子は, “.mov” としてください。

4. ボタン領域: 動画作成の制御を行います。

create movie 設定に従い, 動画ファイル (あるいは連番付き jpeg ファイル) を作成します。

view created movie QuickTime 形式の動画の場合, このボタンをクリックすると内蔵ビューアーで作成したムービーファイルを観覧することができます。

close この GUI を閉じます。

8.12 電荷密度の可視化

原子配置ビューアーには, 電荷密度を可視化する機能が備わっています。本節ではこの機能の利用方法を説明します。

電荷密度の可視化方法には, 以下の二通りがあります。

等値面の描画 電荷密度は空間上の各点で大きさを持っている量です。同じ大きさの空間の点を結べばその点の集合は面を成しますが, “等値面” とはこの面のことを指します。等値面描画方法は, 第 8.12.1 節にて説明します。

等高線の描画 空間上のある面に注目すると, その面上での電荷密度の等高線を描画することが可能です。等高線描画機能は, 第 8.12.2 節にて説明します。

8.12.1 等値面の描画方法

等値面を描画するには, “Tools” メニューから “charge density” を選び, そこからさらに “isosurface” という項目を選択します。この操作を行うと, 図 8.42 の, 等値面描画用 GUI を得ます。

この GUI の利用方法を, 画面に記された数字に則して説明します。

1. “select data”: 複数のデータを読み込んだ状態で起動した場合, このリストより処理の対象としたいデータを選択します。
2. “value”: ここで, 等値面を描きたい値を指定します。テキストフィールドにタイプしてもよいですし, スライダーから入力することも可能です。
3. “select isosurface”: 複数の等値面を描画している場合, ここから処理の対象にしたい等値面を選択します。
4. “transparency”: 等値面描画の際の透明度を入力します。0 から 100 の値を指定してください。
5. “normal generator”: シェーディングに利用する法線ベクトルの作成方法を指定します。
6. “coloring scheme”: 等値面の描画色の決め方を指定します。選択肢としては “by color” と “by value” があります。前者は直接描画色を指定する方法です。他方後者は等値面の値によって描画色を割り当てる方法です。

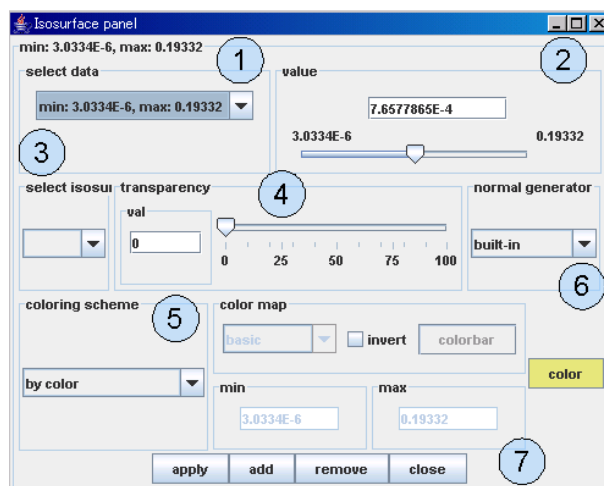


図 8.42: 等値面描画用 GUI.

7. “color map”: “coloring scheme” として “by value” を選択した場合のカラーマップの設定を行います。

カラーマップの選択 リストから、使用するカラーマップを選択できます。現在, “basic”, “gray scale”, “red to blue”, “red scale”, “green scale”, “blue scale” をご用意しています。

カラーマップの逆転 リストの隣のチェックボックスを有効にすると値と色の関係を逆転させることができます。

カラーバーの表示 “colorbar” ボタンをクリックすると、カラーバーを描画します。カラーバーを非表示にするにはもう一度クリックしてください。

最小値, 最大値の設定 “min” と “max” にそれぞれ値の最小値と最大値を指定することができます。

8. “color”: “coloring scheme” として “by color” を選択した場合の描画色を, “color” ボタンから起動できる色選択ダイアログからお選びいただけます。
9. ボタン領域: ここで表示されているボタンには、次のような機能が割り当てられています。

apply すでに存在する等値面に、変更を施した場合はその変更を施します。等値面が画面に一枚も描かれていない場合は等値面を付け足します。

add 等値面を追加します。

remove “select isosurface” リストで選択中の等値面を削除します。

close この GUI を閉じます。

シリコン結晶の電荷密度を描画した例を図 8.43 に、さらに値によって描画色を変更し、カラーバーも付加した例を図 8.44 に図示します。

8.12.2 等高線の描画方法

等高線を描画するには、まずメニューから “Tools” → “charge density” → “contour” と選択してください。図 8.45 を得ます。この画面の最上部に配備されている “data” 領域のリストからは、複数のデータを読み込んだ際には対象としたいデータを選択することができます。また, “plane” 領域のリストからはこれまで描画した等高線を選択することができます。等高線が描かれている場合、ここで選択された等高線が下記の操作の対象となります。

8.12.2.1 等高線を描く面の指定

どの面上にて等高線を描画するかという指定は、図 8.45 と、この画面の上部に配備されている “origin” というタブをクリックすると得られる画面、図 8.46, を利用して行います。

図 8.45 から面の向きを指定します。以下、この画面について説明します。

normal vector of plane 面の法線ベクトルを直接指定します。x, y, z それぞれのテキストフィールドに法線ベクトルの x, y, z 成分を入力してください。

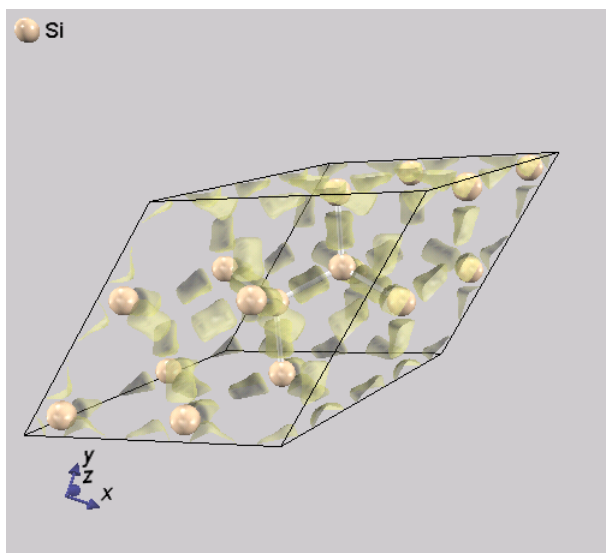


図 8.43: シリコン結晶で電荷密度の等値面を描画している例.

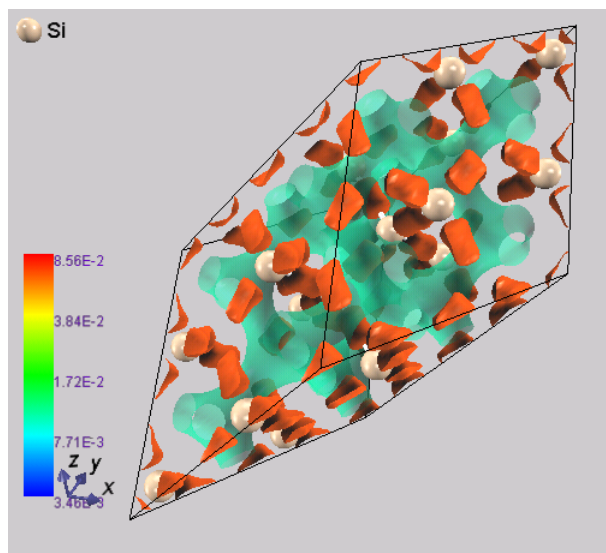


図 8.44: coloring scheme として, by value を採用した例.

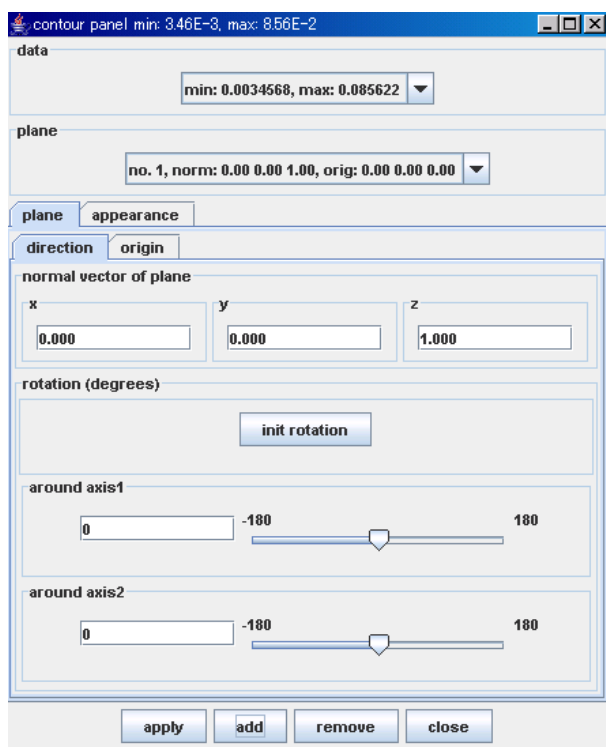


図 8.45: 面の向きを指定する画面.

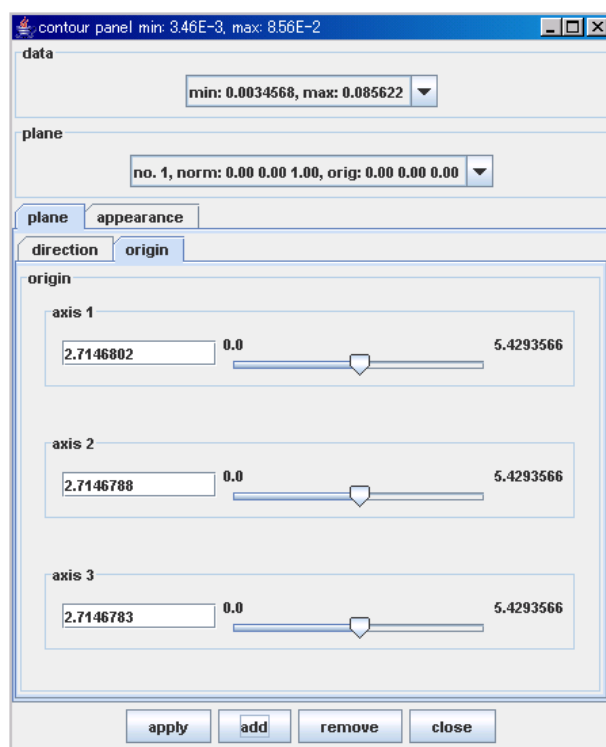


図 8.46: 面の原点を指定する画面.

rotation 回転によって面を指定します.

init rotation 回転を初期化します.

around axis 1 一つ目の軸の周りの回転を入力します. テキストフィールドに直接入力するか, その隣のスライダーで回転角を指定してください.

around axis 2 二つ目の軸の周りの回転を入力します. 一つ目の軸の場合と入力方法は同じです.

図 8.46 の画面からは面の原点を指定します. 三つのセルベクトルそれぞれに対しどの場所に原点を置くのかを指定できます.

8.12.2.2 等高線の描画方法

等高線を描画する際、描画する面の指定のほか、どの値をどのような色に割り振るのか、透明度を設定するのか、など、等高線の描画方法を設定する必要があります。このような設定を行うには、図 8.45, 8.46 の上部に配備されている“appearance”タブをクリックしていただくと現れる図 8.47 の画面を利用します。

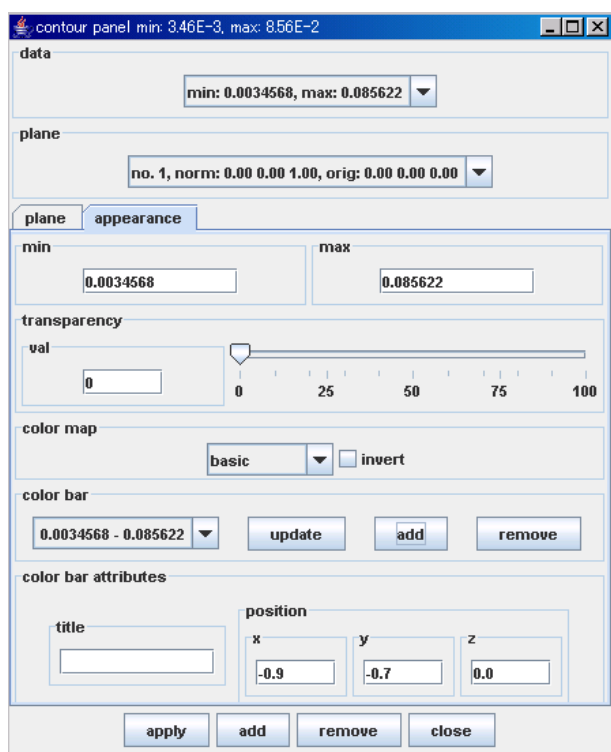


図 8.47: 等値面の描画方法をカスタマイズする画面。

この画面からは、次の操作を行うことが可能です。

最大値、最小値の設定 “min”, “max” テキストフィールドにそれぞれ最小値と最大値を入力します。デフォルト値はデータの最小値/最大値です。

透明度の設定 “transparency” で透明度の設定を行います。0 から 100 の間の数字を入力してください。

カラーマップの設定 “color map” リストから使用するカラーマップを選択します。ご利用いただけるカラーマップは、等値面の場合と同じです。

カラーバーの設定 “color bar” でカラーバーの設定を行うことができます。等値面の場合と違い、複数のカラーバーを配備することが可能です。

等高線の設定が終了したら、画面下部に配備されているボタンを利用して等高線を付け加えたり削除したりすることができます。

apply 既存の等高線に対し、変更を反映します。等高線が一つも描かれていない場合は新たに付け加えます。

add 画面の設定に併せた等高線を描画します。

remove 選択中の等高線を削除します。

close 画面を閉じます。

図 8.48 に、シリコン結晶のある面に沿った電荷密度の等高線を描画した例を図示します。

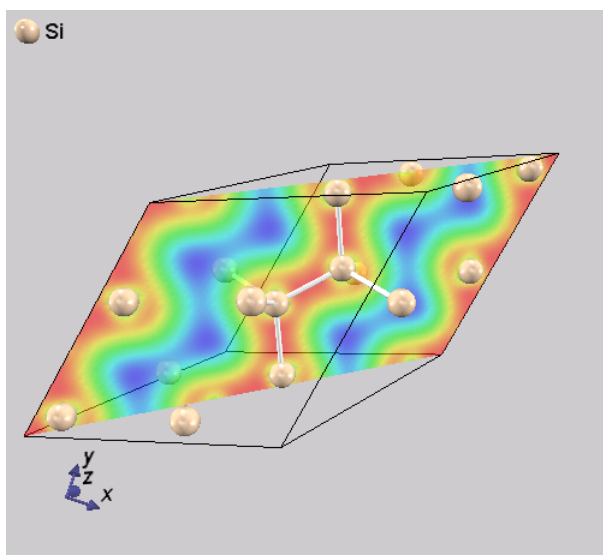


図 8.48: 結晶シリコンで電荷密度の等高線を描画している例。

第9章 逆空間ビューアー

PHASE-Viewer には、結晶のプリミティブセルの逆空間を可視化し、対称 k 点をマウスクリックで作成したり、フェルミ面を描画したり、逆空間におけるエネルギーの contour を描画する機能が備わっています。ここでは、この“逆空間ビューアー”について説明します。

注: Linux 版は、デフォルトの状態ではビューアーを他の GUI などと重ねて描画することができない状態となっています。この設定を修正するには、以下の作業を行ってください。

1. GLX のバージョンを 1.3 以上にする (すでに 1.3 以上ならば何もする必要はありません)。GLX のバージョンアップについては、お使いのグラフィックボードのウェブサイトなどをご覧ください。
2. ビューアーの、“Preferences” メニューから “canvas” と選び、結果現れる画面の “use JCanvas3D” というチェックボックスを有効にし、“apply” とする。
3. PHASE-Viewer を再起動する。

9.1 概要

逆空間ビューアーは、次のような機能を提供します。

第一ブリュアンゾーンの描画 結晶の第一ブリュアンゾーンを、結晶のユニットセルの情報から作成します。

対称 k 点ファイルの作成 バンド計算に必要な、対称線に沿った k 点ファイルを、ブリュアンゾーン上の対称点をクリックすることによって作成することができます。

フェルミ面の描画 フェルミ面の描画を行うことができます。また、フェルミ面計算のために必要な入力ファイル作成の支援も行います。

エネルギーの contour 描画 逆空間におけるエネルギーの等高線を、ある面上にて描画することができます。

画像ファイルエクスポート 画面はいつでも画像ファイルにエクスポートすることが可能です。

以下、上記の機能の利用方法を説明します。

9.2 起動方法

逆空間ビューアーは、PHASE-Viewer のいくつかのポイントにて起動することができます。以下に、その箇所を列挙します。

ekcal 入力編集画面 ekcal 入力制御画面 (第 5.2.3 節) の “kpoint sampling” ビューの “FBZ” ボタンをクリックするとやはり起動します。

バンド計算用初期詳細設定画面 図 5.51 の、バンド計算用初期化詳細設定画面の “boot_kpoint_generator” ボタンをクリックすると起動することができます。

なお、結晶構造をブラベー格子で入力している場合、lattice_system パラメーターの指定の応じて基本格子に変換し、描画します。

起動直後のスクリーンショットを、面心立方格子の場合について図 9.1 に図示します。

図 9.1 に表示されているメニューについて簡単に説明します。

File メニュー ファイル操作などを行います。

export graphics to file 画面を画像ファイルにエクスポートします。VRML 出力にも対応しています。

exit この画面を閉じます。

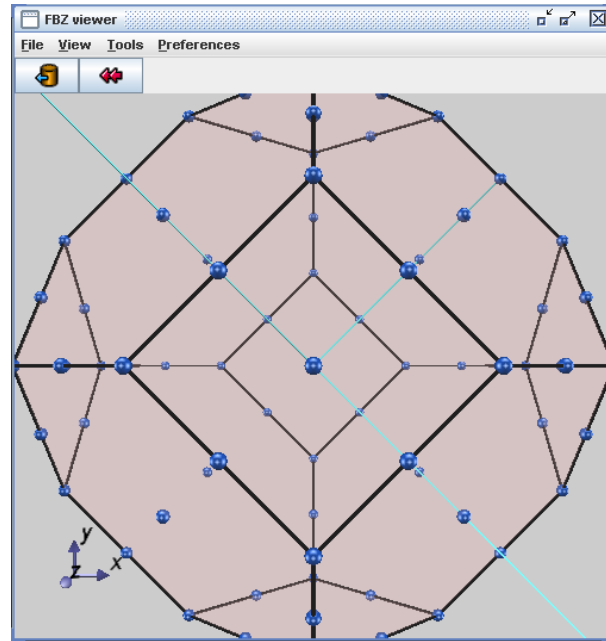


図 9.1: 面心立方格子の第一ブリュアンゾーンを表示している例.

View メニュー 表示方法の設定を行います. 原子配置ビューアーと同等なので, 詳しくは第 8 章をごらんください.

Tools メニュー 各種ツールを起動します.

Fermi surface フェルミ面描画用 GUI を起動します. 詳しくは第 9.4 節をごらんください.

energy contour 逆空間におけるエネルギーの contour を描画するための GUI を起動します. 詳しくは第 9.5 節をごらんください.

kpoint k 点を作成する GUI を起動します. 詳しくは第 9.3 節をごらんください.

Preferences 各種設定を行うことができます.

light 光源の設定を行います. 第 8.7.5 節にて説明した, 光源設定エディターを起動することができます.

appearance 表示の設定を行う GUI を起動します. 詳しくは第 9.6 節をごらんください.

9.3 k 点エディター

k 点作成機能には, バンド計算用の対称点の情報を編集する機能と, フェルミ面描画用の計算を行うための, 第一ブリュアンゾーン内で k 点のメッシュを作成する機能の二つがあります. それぞれについて以下で説明します.

9.3.1 対称点の作成

この機能を利用するには, まず第 9.6 節にて説明している表示設定画面の, “symm. point” ビューから対称点を表示する設定にしておいてください. この設定の場合は, 対称点が球で表示されます. 球で表された対称点をマウスで左クリックすると“選択状態”となります. さらに別の対称点を左クリックすると, その k 点を選択状態となり, さらに一つ前に選択状態であった k 点との間に線を結びます. この線が, “対称線”となります. 選択状態の k 点を再度左クリックすると選択解除, 何もないところで真ん中クリックを行うとすべての k を選択解除する, という操作になります. 図 9.2 に, 面心立方格子の第一ブリュアンゾーンにて対称 k 点を順次選択している様子を图示します.

望みの k 点を選択したのち, “Tools” メニューから “kpoint” を選択します. すると, 図 9.3 に图示している対称 k 点作成画面が得られます. この画面は, まず上部に “enter dk” とありますが, ここに k 点を作成する間隔を入力します. ついで, 選択した順に k 点の情報がテーブルに記載されています. さらに画面下部には k 点作成に利用するボタンが配備されています. ここに配備されているボタンには, 次のような機能があります.

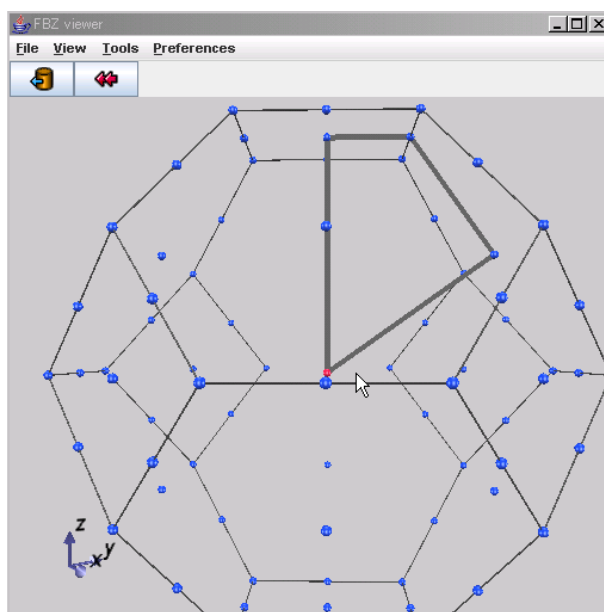


図 9.2: FCC 結晶の第一ブリュアンゾーンで対称点を順次選択している様子.

to file k 点の情報をファイルへ出力します. その形式は, PHASE Tools の band.kpoints.pl スクリプトの入力と同等です.

generate kpoints このボタンをクリックすると, PHASE が読み込める形式の k 点ファイルを作成します. また, ファイルへの保存も行われます.

clear このボタンをクリックすると, すべての情報がクリアされます.

dismiss この画面を閉じます.

k 点の作成は, “generate kpoints” ボタンをクリックするだけで行うことができます.

9.3.2 k 点メッシュの作成

フェルミ面を描画するには, 第一ブリュアンゾーン内の多くの点における固有値データが必要です. その計算を ekcal に行わせるためには, バンド計算と同様ファイルから k 点を作成する必要があります. この k 点ファイルを作成するには, 対称点の場合と同様に “Tools” メニューから “kpoint” を選択し, k 点編集画面を起動します. さらに, “mesh” とあるタブをクリックすると図 9.4 に表示されている, k 点メッシュ作成画面を起動します.

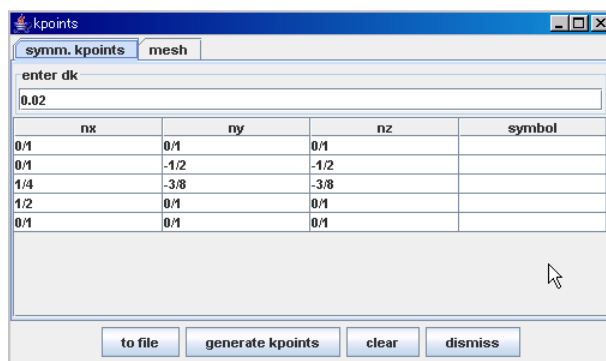
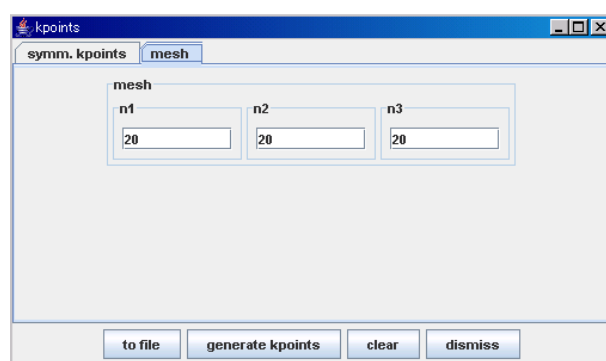


図 9.3: 対称点作成画面.

図 9.4: k 点メッシュ作成画面.

この画面に, “n1”, “n2”, “n3” とあるテキストフィールドがありますが, ここにそれぞれ b_1 , b_2 , b_3 軸の分割数を記述します. 望みの分割数を入力した後, “generate kpoint” ボタンをクリックすれば必要な k 点ファイルが作成されますので, ekcal の入力ファイルの k 点サンプルをファイルから読む設定にした後 ekcal を走らせれば必要な計算が行われます.

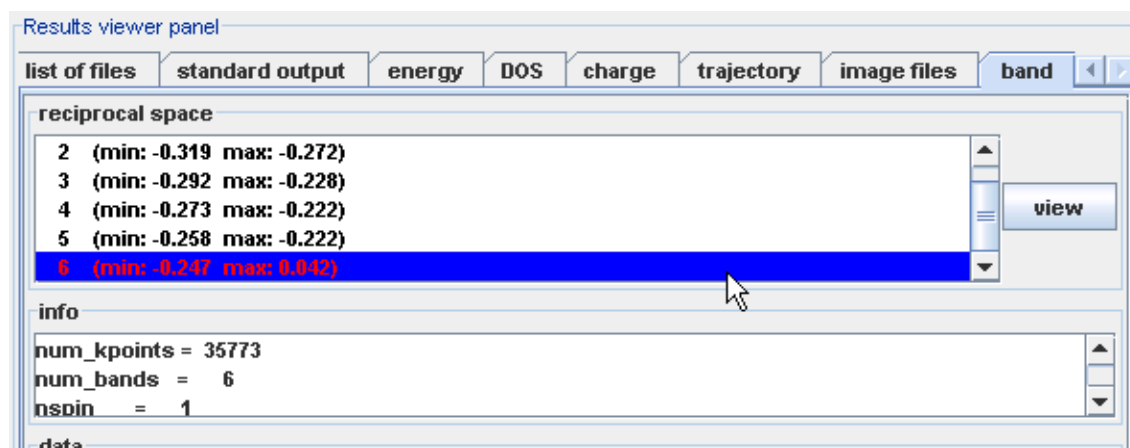


図 9.5: フェルミ面結果解析画面.

9.4 フェルミ面

フェルミ面を描画するためには、まず第 9.3 節にて説明されている手続きにしたがい計算を行う必要があります。計算が終了した後、ekcal の結果解析画面 (第 5.2.5 節) の、“band” ビューを表示します。今の場合、図 9.5 のような画面が得られます (スピンを考慮した計算の場合、さらに “up” と “down” タブで区切られた画面が得られます)。図 9.5 に表示されている、“reciprocal space” というリストには計算した各バンドのデータが表示されていますが、この内フェルミエネルギーを横切るバンドは赤く表示されていますので、このバンドの固有値データを利用してフェルミ面を描くことになります。¹ このデータを選択した状態で “ダブルクリック” を行うか、右隣の “view” ボタンをクリックしてください。図 9.1 のような画面が得られます。

ここで、メニューから “Tools” → “Fermi surface” と選択してください。第 8.12.1 節にて説明した、ボリウムデータの等値面を作成する GUI、図 8.42 が得られます。操作方法などは基本的に同じです。ただし既定の値がフェルミエネルギーになっていること、データの補間の方法が線形になっていること、などの違いがあります。

既定の値がフェルミエネルギーとなっているので、フェルミ面を描くのであればそのまま “apply” ないし “add” ボタンをクリックすればフェルミ面を描画することができます。図 9.6 に、銅のフェルミ面を描画した例を図示します。

さらに、複数のバンドがフェルミエネルギーを横切る場合は上記の “reciprocal space” リストには複数のバンドが赤く表示されますが、これらを全て選択し、“view” ボタンをクリックすれば選択したデータすべてを読み込んだ状態で逆空間ビューアーが起動します。その場合、第 8.12.1 節にて説明したように、“select data” というリストから望みのデータを選択すればそのデータに対する等エネルギー面を描画することが可能です。複数の等エネルギー面のプロパティを変更する場合は、電荷密度の場合と同様 “select isosurface” リストから変更したい等エネルギー面を選択した後に作業を行ってください。例として、マグネシウムのフェルミ面を描画した例を図 9.7 に図示します。

9.5 エネルギーの等高線

逆空間におけるエネルギーの等値面描画については第 9.4 節にて説明した通りですが、エネルギーの等高線を描画することもできます。この機能をご利用いただくには第 9.4 節と同様の計算データが必要になります。その準備ができ、同様の手続きでビューアーを起動してください。その後、“Tools” → “energy contour” と選択していただくと、第 8.12.2 節で説明した、等高線描画用の GUI が起動します。利用方法は電荷密度の場合と同じです。図 9.8 に、銅のエネルギーの等高線を図示します。

9.6 表示設定

表示の設定には、全体的な表示の設定と対称点/対称線に関わる設定の二種類があります。以下、各々について説明します。

¹ 実際はフェルミ面だけでなく、任意のエネルギーの、“逆空間における当エネルギー面” を描画することが可能です。

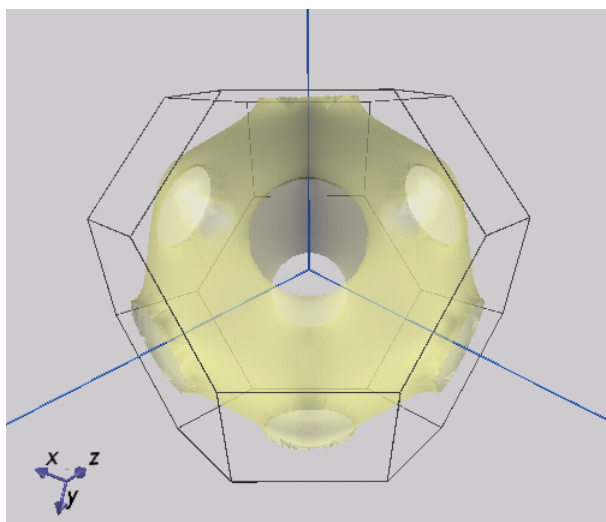


図 9.6: 銅のフェルミ面を描画した例.

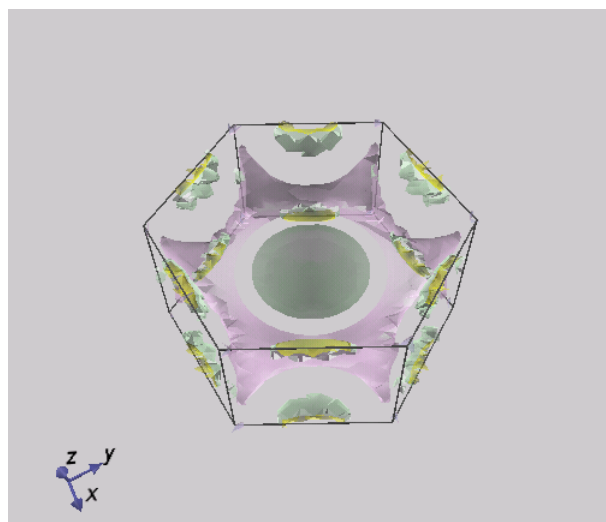


図 9.7: マグネシウムのフェルミ面を描画した例.

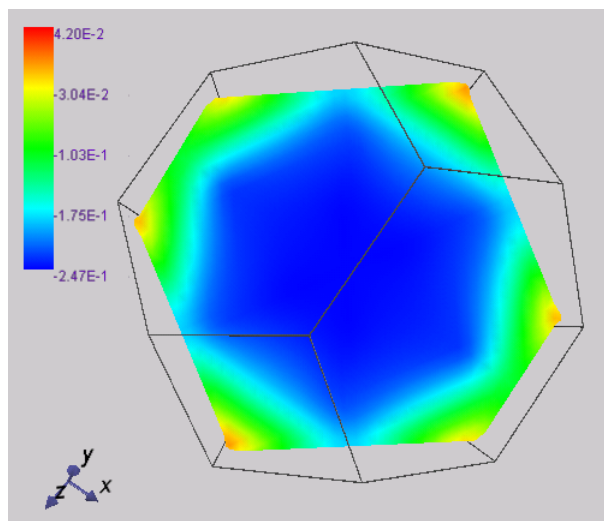


図 9.8: 銅の第一ブリュアンゾーンにおけるエネルギーの等高線.

9.6.1 全体的な表示の設定

全体的な表示の設定を行うには、まず図 9.1 のメニューから “Preferences” → “appearance” と選択してください。図 9.9 を得ます。各設定項目について説明します。

edge 第一ブリュアンゾーンの境界を示す辺の描画方法を指定できます。

draw edge 有効にした場合、辺が描画されます。

edge width 辺の描画幅を指定します。

edge color 辺の描画色を指定します。

plane 第一ブリュアンゾーンの境界を示す面の描画方法を指定できます。

draw plane 有効にした場合、面が描画されます。

transparency 面描画の際の、透明度を指定します。

plane color 面の描画色を指定します。

axis 逆格子ベクトルの描画方法を指定できます。

draw axis 有効にした場合、逆格子ベクトルが描画されます。

axis width 逆格子ベクトルの描画幅を指定します。

axis color 逆格子ベクトルの描画色を指定します。

望みの設定を行ったら, “apply” ボタンをクリックすることによって変更を反映することができます。

9.6.2 対称点/対称線の表示の設定

対称点や対称線の描画方法を設定するには, 図 9.9 の上部のタブから “symm. point” というタブを選んでください。図 9.10 が得られます。

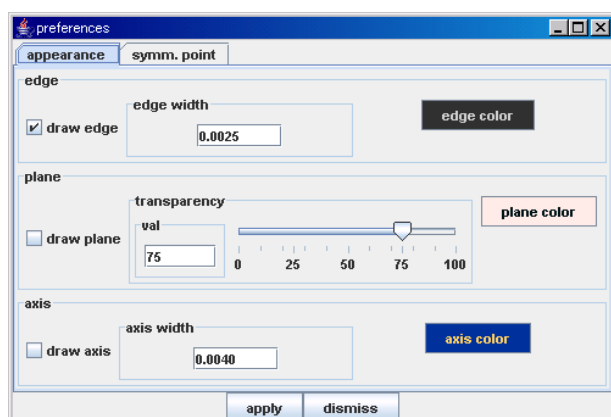


図 9.9: 全体の表示を設定する画面。

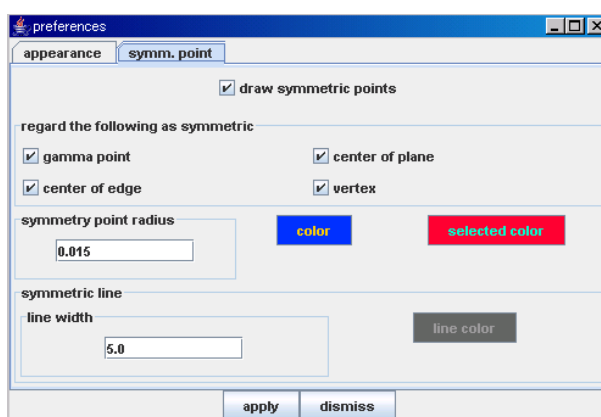


図 9.10: 対称点の表示を設定する画面。

以下に, 設定項目を記します。

draw symmetric points 有効にした場合, 対称点が描画されます。

regard the following as symmetryic “どの点を対称点と見做すか”を設定します。

gamma point 有効にすると, Γ 点を対称点と見做します。

center of plane 有効にすると, 面の中心を対称点と見做します。

center of edge 有効にすると, 辺の中心を対称点と見做します。

vertex 有効にすると, 辺の頂点を対称点と見做します。

symmetry point radius 対称点の描画半径を指定します。また, 右隣のボタンから対称点の描画色を, さらに もう一つ右隣のボタンから選択時の描画色を設定することができます。

symmetric line 対称線の描画幅を指定します。また, 右隣のボタンから対称線の描画色を指定することができます。

望みの設定を行ったら, “apply” ボタンをクリックすることによって変更を反映することができます。

9.7 ホットキー

逆空間ビューアーにも, 原子配置ビューアーと同様ホットキーが用意されています。それらは原子配置ビューアーのそれとほぼ同等なので, 詳細は第 8.6.1 節や第 8.6.2 節をごらんください。

第10章 グラフツール

PHASE-Viewer には、二次元データをグラフ描画することのできるグラフツールが備わっています。本節ではこのグラフツールの説明を行います。

10.1 概要

グラフツールを利用することによって、下記のようなグラフを作成することが可能です。グラフ作成については、第 10.2 節を参照してください。

単純なグラフ 通常の xy プロットを作成します。円グラフを作成することも可能です。

複数軸 スケールの異なるデータを同一グラフ上で表示するために、複数の軸を持ったグラフを作成することができます。第 10.2.3 節を参照してください。

複数グラフ 複数のグラフを、軸を共有させた状態で縦ないし横に並べて描画することができます。第 10.2.4 節を参照してください。

また、作成したグラフは、表示の変更を行うことも可能です。下記のような変更に対応しています。詳しくは第 10.3.3 節を参照してください。

タイトル グラフにタイトルをつけたりタイトルを変更したりすることができます。

軸の変更 x 軸、 y 軸とも次のような変更を施すことができます。

軸範囲 軸の範囲を変更できます。これは、マウスドラッグで行うことも可能です。

軸ラベル 軸ラベルの変更、あるいは非表示の設定などが行えます。

軸目盛り 軸目盛りの刻み幅などを設定することができます。

対数表示 軸を対数表示にすることができます。

背景色の変更 グラフの背景色などの変更を行うことができます。

線種・点種の変更 線種や点種、その色の変更をデータごとに行うことができます。

注釈 テキスト、矢印付き、画像などの注釈を埋め込むことができます。

以下、これらのグラフの作成方法を詳解します。

10.2 グラフの作成

グラフの作成方法は、主に二種類あります。

一つ目の方法は、たとえば PHASE 結果表示画面（たとえば第 5.1.6.4 節の“DOS”ビュー、図 5.41）などに配備されている“quick plot”ボタンを利用する方法です。この方法を利用すると最も少ない手続きでグラフを描くことができる反面、細かなカスタマイズを行うことはできません。もう一つの方法はメニューから“module”→“graph tool”と選択するか、やはり結果表示画面に表示されている“plot”ボタンをクリックすることによって得られる“データセット制御モジュール”（第 10.2.2 節参照）からグラフを作成する方法です。

10.2.1 “quick plot”ボタンによるグラフ作成

先の“DOS”ビューなど、“quick plot”ボタンが配備されている場合、

- 円グラフを描画したい場合リストから“xy”ではなく“pie”を選ぶ。

- とある列データを選んだ場合その列全体が選択される, という状態ではなく部分的に選択したい場合 “toggle selection mode” ボタンをクリックする.
- データ表示テーブルからデータを二列以上マウスで選ぶ.
- “quick plot” ボタンを押す

という操作を行うことによってグラフを描画することができます. この時, 選ばれた列の中で一番左にあるデータを独立変数としてグラフを描画します (三列以上選択している場合は, 一番左の列以外はすべて従属変数としてプロットします). xy プロットの例として図 10.1 にシリコンの状態密度のグラフを, 円グラフの例として PHASE のサブルーチンの CPU 使用時間のグラフを図 10.2 に図示します. グラフ表示画面の詳細は第 10.3 節を参照してください.

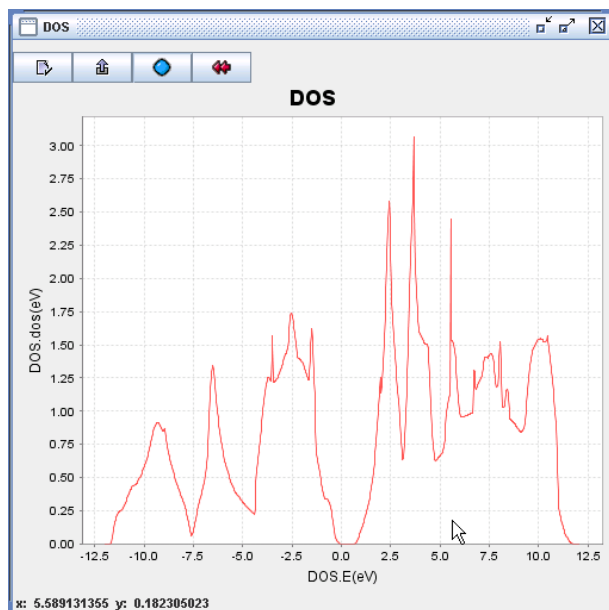


図 10.1: XY グラフを描画した例.

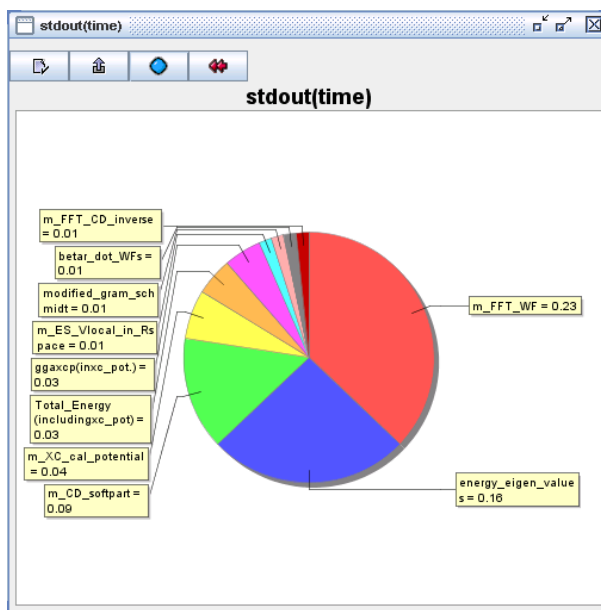


図 10.2: 円グラフを描画した例.

10.2.2 データセット制御モジュール

PHASE-Viewer グラフツールは, 一次元の列情報と対応する識別子などを一まとめにしたデータ構造を利用します (以下 “データセット” と称します). このデータセットを読み込んだり書き出したり, あるいはそれを元にグラフを作成したりするモジュールが “データセット制御モジュール” です.

メニューから “module” → “graph tool” と選択するか, 結果表示画面に表示される “plot” ボタンをクリックすると図 10.3 に示すデータセット制御モジュールを得ます. この場合, メニューから起動した場合はデータセットは取り込まれていない状態で, 結果表示画面から起動した場合は対応したデータを取り込んだ状態で起動します.

データセット制御モジュール, 図 10.3 の利用方法を説明します. 画面のデータセット制御域は左右に二分割されており, 左側がグラフの独立変数の, 右側が従属変数のデータセットの制御を行います. 利用方法自体はほぼ同じなので, 説明は左側についてのみ行います.

1. データセット表示域です. データセットの数だけツリー表示され, データセット内のデータそのものはその下に「リーフアイコン」とそのデータの識別子で表されます.
2. このボタンで, グラフに描画したいデータを登録/登録解除することができます. 左側の, 下向き矢印のアイコンで選択中のデータを登録, 右側のばつ印のアイコンで③の「登録されたデータの一覧」で選択中のデータを登録解除します.
3. ここで, グラフを描画する際に利用されるデータの一覧を表示します.
4. グラフ描画の際の軸操作を行います. “create” ボタンで新規軸を作成することができます. また, “remove” ボタンをクリックすると現在の軸が削除されます. とある軸に対応するデータを登録する, 確認する, などの作業を行う場合左のリストからその軸を選択します. 複数軸プロットについては第 10.2.3 節を参照してください.

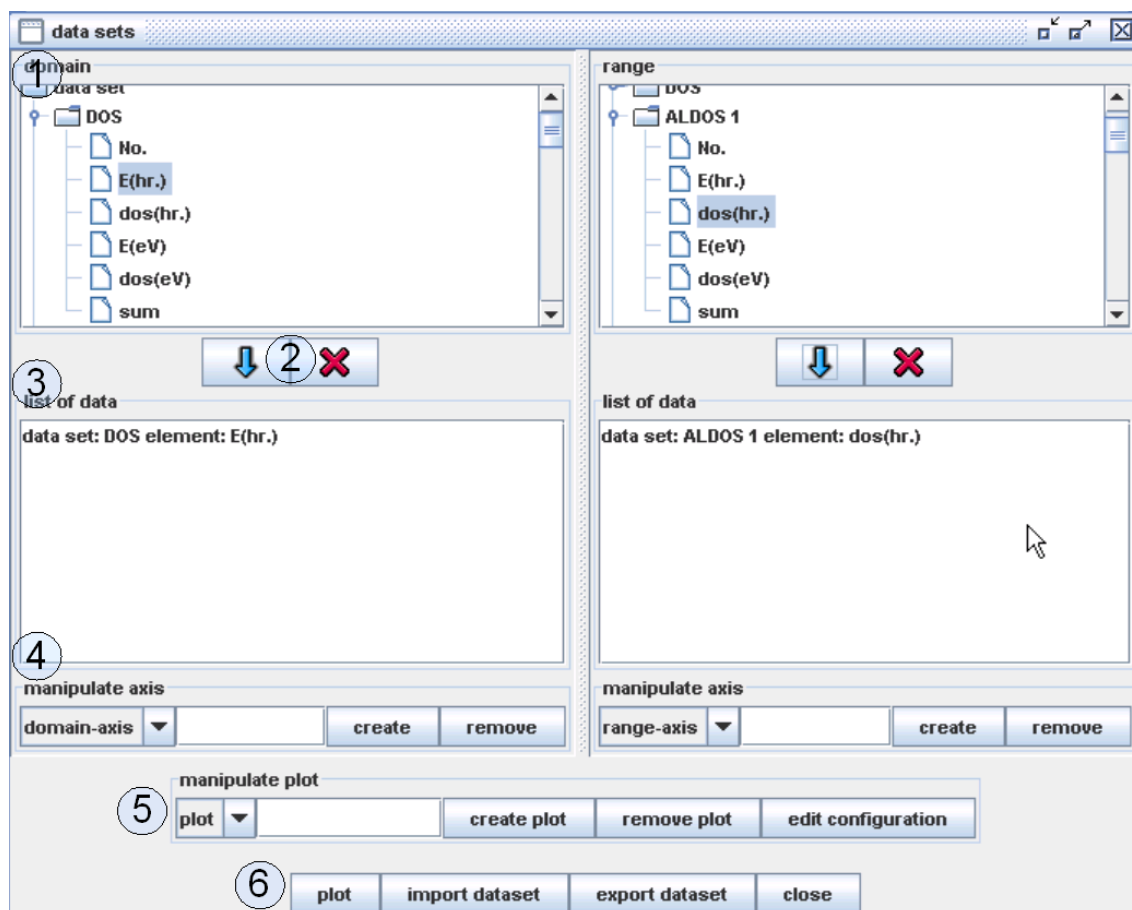


図 10.3: データセット制御モジュール.

- 複数のグラフを並べて描画する場合、この領域で操作を行います。“create plot” ボタンで新たにプロットを、“remove plot” で選択中のプロットを削除します。複数のプロットを持つグラフの作成については第 10.2.4 節を参照してください。
- グラフ作成、データセットのインポートやエクスポートを行います。“plot” ボタンでグラフ画面 (第 10.3 節) を、“import dataset” ボタンでデータセットのインポートを、“export dataset” ボタンでデータセットのエクスポートを行います。データセットのインポート/エクスポートの詳細は第 10.2.5 節を参照してください。また、“close” ボタンでこの画面を閉じます。

10.2.3 複数軸を持つグラフの作成

スケールの異なるデータを同一プロットで描画する場合、軸が複数あると見やすくなります。このようなグラフを作成する場合、次の手続きを踏んでください。

- 図 10.3 の④で、複数軸を作りたい方の“create” ボタンをクリックする。隣のテキストフィールドに名前を入力すれば識別用にその名前が利用されます。空白にした場合重ならない名前が自動的に付けられます。
- 図 10.3 の④のリストから新たに作成した軸を選択し、データを登録する。
- 図 10.3 の⑥の“plot” ボタンをクリックする。

例として、 y 軸を複数にしてエネルギーと原子に働く力の最大値を同時にプロットした様子を図 10.4 に図示します。この図は、サンプルの basic/Si2/relax の結果を利用して作成したものです。

10.2.4 複数グラフを並べて描画

軸を複数用意するのではなく、複数のプロットを一つの図に描画することも可能です。この操作は、図 10.3⑤の“manipulate plot” 領域を利用して行います。下記の操作を行ってください。

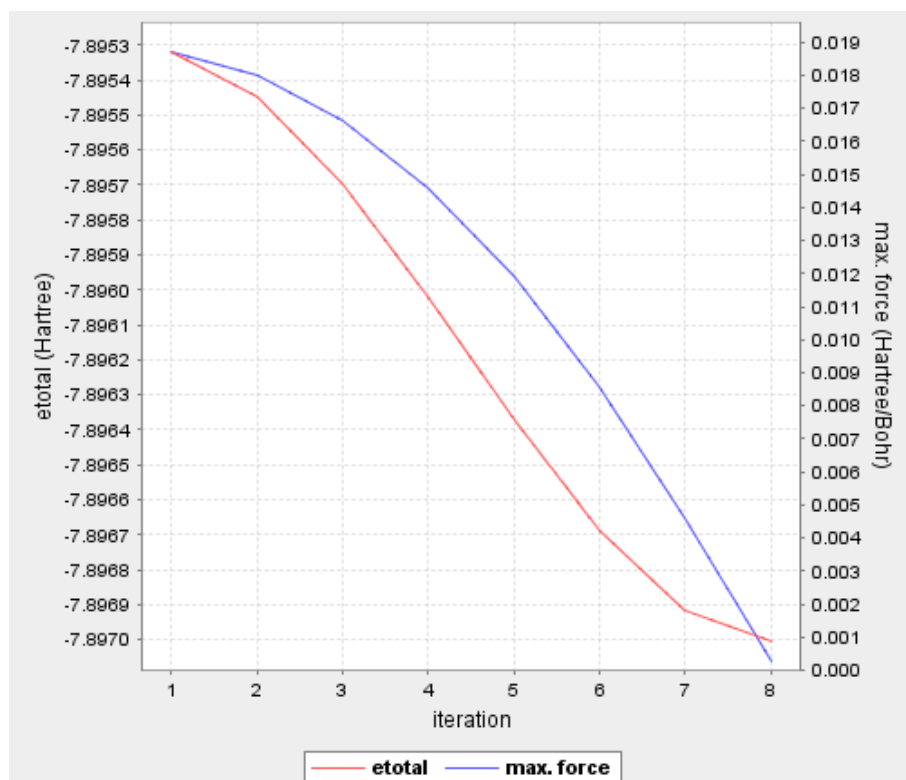


図 10.4: 複数軸プロットの例.

1. “create plot” ボタンをクリックする. 隣のテキストフィールドに名前を入力すれば識別用にその名前が利用されます. 空白にした場合重ならない名前が自動的に付けられます.
2. リストから新たに作成したプロットを選択し, データを登録する.
3. “edit configuration” をクリックして「複数プロットの設定」を行う. 設定用の画面を図 10.5 に図示します. この画面からは次のような設定を行うことができます.

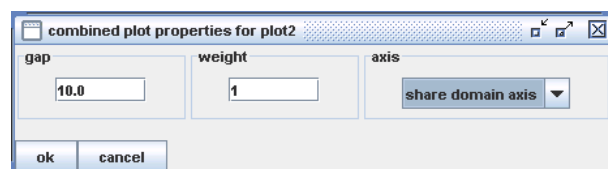


図 10.5: 複数プロット設定用画面.

gap プロット間の“距離”を指定します. デフォルト値は 10 です.

weight プロットの重みを指定します. この指定を大きくすればするほど対応するプロットは大きく, ほかのプロットは小さく描画されるようになります. 規定値は 1 です (全てのプロットを同じ大きさとする).

axis 共有する軸を指定します. “share domain axis” で x 軸を, “share range axis” で y 軸を共有することになります. 必然的に前者の場合縦に, 後者の場合横にプロットが並ぶことになります.

4. “plot” ボタンをクリックする.

例として, 図 10.6 に複数プロットの例を図示します. ここでは, 全状態密度と層分割状態密度を x 軸を共有して描いています. この図は, サンプルの LDOS/BaO-Si にある, BaO-Si 界面の局所状態密度を計算するサンプルから作成したものです.

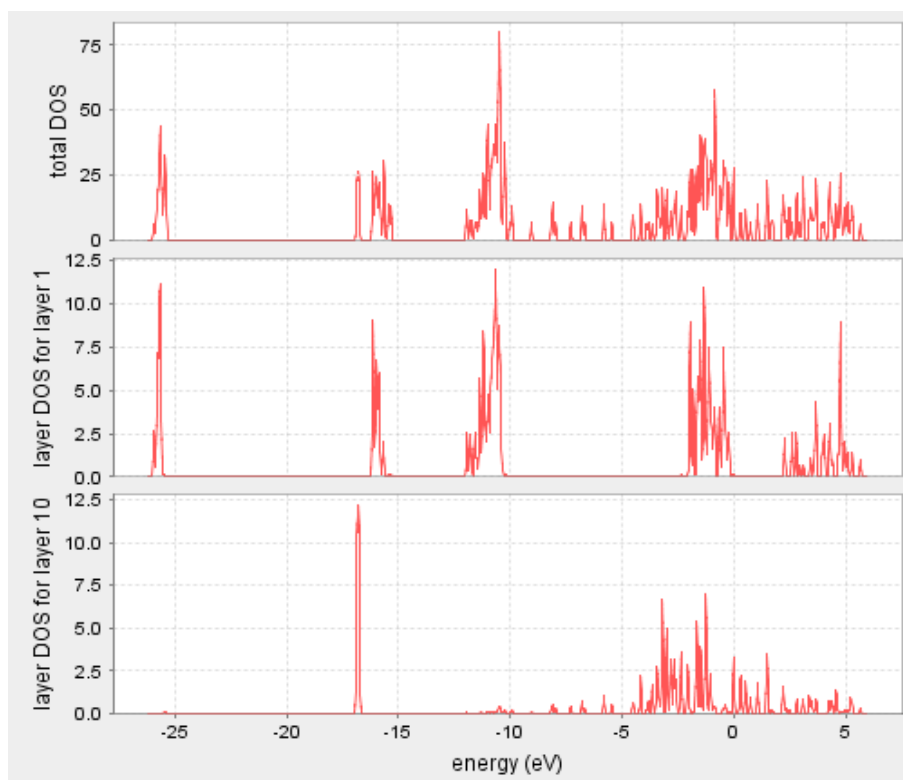


図 10.6: 複数プロットの例.

表 10.1: インポート可能なデータのファイル形式.

#	comment			
#!	identifier1	identifier2	identifier3	...
	value11	value12	value13	...
	value21	value22	value23	...
	value31	value32	value33	...

10.2.5 データセットのインポート/エクスポート

データセットを外部ファイルからインポートしたりエクスポートすることも可能です。この操作は、図 10.3⑥に配備されている “import dataset” と “export dataset” ボタンをクリックすることによって行うことができます。

“import dataset” をクリックするとファイル選択ダイアログが現れるので、インポートしたいファイルを選択します。インポート可能なファイルならば新しいデータセットが作成され、図 10.3①のデータセット表示域に表示されます。インポート可能なデータ形式を表 10.1 に図示します。

#から始まる文字列はコメントとみなされ、無視されます。#!からはじまる文字列で識別子を指定することができます。識別子を指定しない場合はデフォルト識別子が作成されます。その後はデータ域になります。各列が、データセットの一データとなります。データの数と識別子の数は整合性がないとうまく取り込めない場合がありますのでご注意ください。

現データセットを外部ファイルへエクスポートする際には、図 10.3⑥の “export dataset” ボタンをクリックします。図 10.7 で示している、「データセットエクスポート用 GUI」を得ます。

この GUI の利用方法を説明します。

1. データセットの名前を表示します。
2. エクスポート先のファイル名を表示します。“choose” をクリックすることによってファイル選択ダイアログから選択することも可能です。起動時に規定のファイル名が入力されています。必要に応じて変更してください。

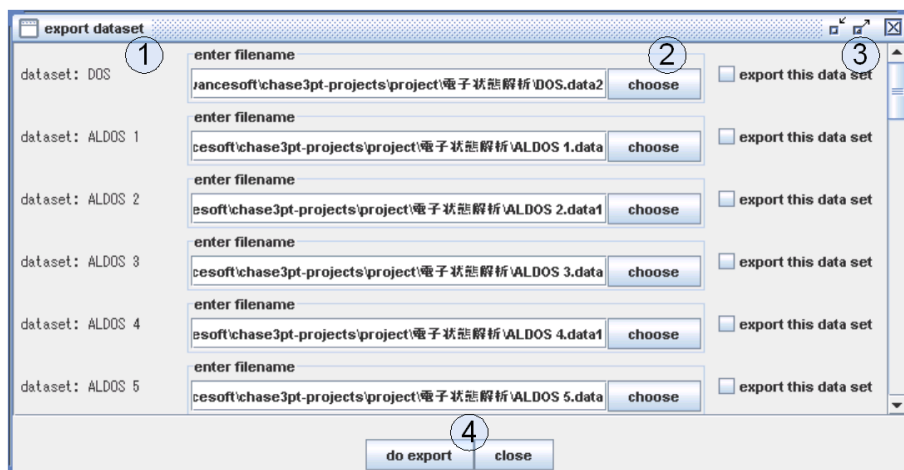


図 10.7: データセットエクスポート用 GUI.

3. このデータセットをエクスポートする場合はこのチェックボックスを有効にしてください.
4. “do export” ボタンをクリックするとエクスポートが行われます. データセット一つにつきファイルが一つ作成されます. エクスポートの形式は表 10.1 と同様です.

10.3 グラフ表示画面

グラフ描画の際に得られる画面の例を, 図 10.8 に示します.

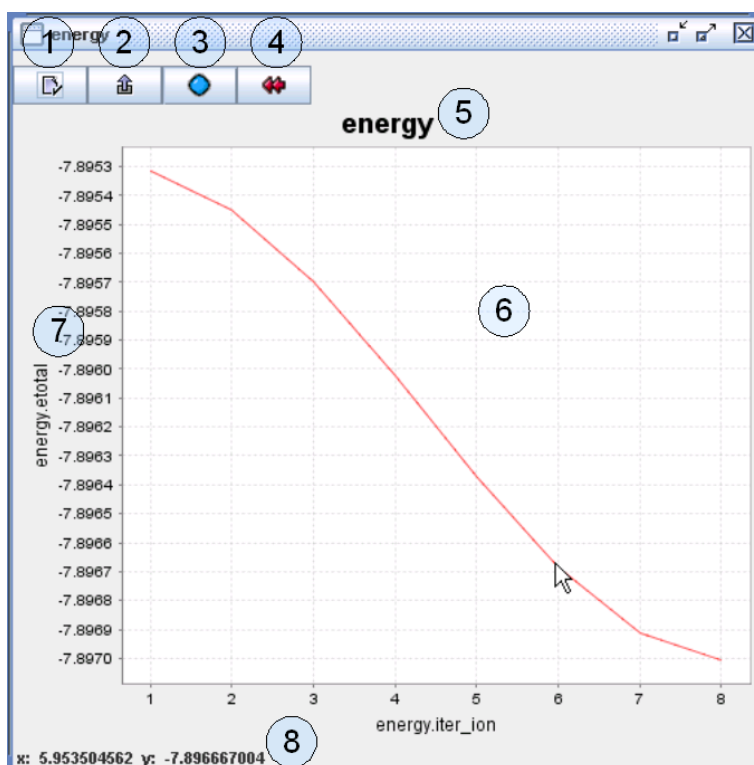


図 10.8: グラフ描画面.

グラフの各領域について説明します.

1. 表示カスタマイズ用の画面を起動します. 第 10.3.3 節をご参照ください.

2. 表示中のグラフを、画像ファイルにエクスポートします。画像ファイルエクスポートについては付録 A.3 をご参照ください。
3. マウスの振る舞いをトグルします。詳しくは第 10.3.2 節をご参照ください。
4. このグラフ描画画面を閉じます。
5. グラフのタイトルです。これを変更する/非表示にする手続きは第 10.3.3.1 節をご参照ください。
6. グラフ描画域です。
7. 軸領域です。軸の変更は、第 10.3.3.2 節をご参照ください。
8. 座標表示域です。現在のマウスの位置を、グラフ中の座標で表示します。¹

10.3.1 画像ファイルエクスポート

表示中のグラフを画像ファイルにエクスポートするには、図 10.8 の②のアイコンを押してください。付録 A.3 で説明する、画像ファイルエクスポート用 GUI を起動することができます。

10.3.2 マウスによる操作

図 10.8 はマウス操作によって状態を変更することができます。下記のような操作を行うことができます。

軸範囲の変更 1 マウスドラッグを行うと、それによって選択された範囲を拡大することができます。この際、ドラッグは右下に向かって行う必要があります。またこの操作によって変更した軸範囲は、左上にマウスドラッグすることによって元に戻すことができます。

軸範囲の変更 2 図 10.8③のアイコンをクリックします。この状態で左ドラッグをすると、左右方向で x 軸、上下方向で y 軸の軸範囲を変更することができるようになります。再度③のボタンをクリックすれば元の振る舞いに戻ります。

グラフの並進 上記と同様、図 10.8③のアイコンをクリックします。すると、右ドラッグによってグラフ全体を「並進」させることができます。再度③のボタンをクリックすれば元の振る舞いに戻ります。

マウスポインターの位置表示 図 10.8⑧には、「現在のマウスポインターの位置」をグラフ中のスケールで表示されます。

10.3.3 表示のカスタマイズ

図 10.8 の①というボタンを押すと表示設定エディター、図 10.9 を起動することができます。この GUI からグラフの見栄えを細かくカスタマイズし、望みのグラフを得ることが可能です。表示設定エディターは設定項目ごとに分類されており、それぞれの項目はタブをクリックすることによって行き来することが可能です。望みのカスタマイズを行い“update”ボタンをクリックすると変更を反映してグラフが再描画されます。以下、各タブを順に操作方法を説明していきます。

10.3.3.1 general タブ

表示設定エディターは、まずこのタブが選択された状態で起動します。スクリーンショットを図 10.9 に図示します。このタブでは、グラフ全体におよぶ設定項目を編集することができます。

以下、図 10.9 の利用方法を説明します。

1. タブ領域: ここで、編集可能な各項目を選択することができます。
2. “title” 領域: 図 10.8⑤の、タイトル領域を操作することができます。
 - “show title” チェックボックス: タイトルを表示するか否かを選択できます。このチェックボックスがオンの時タイトルは表示されます。
 - タイトル編集領域: チェックボックスの隣のテキストフィールドにタイトル用の文字列が表示されます。タイトルを変更する場合はこの文字列を編集してください。

¹複数軸プロットの場合、一つ目の軸を基準にした座標が表示されます。



図 10.9: “general” タブの外観.

- “select font” ボタン: タイトルに使用するフォントを選択できます。
3. “legend” 領域: 凡例表示に関わる設定を行うことができます。
 - “show legend” チェックボックス: 凡例を表示するか否かを選択できます。このチェックボックスがオンの時、凡例を表示します。
 - 凡例テキスト編集領域: “show legend” の隣の領域で凡例のテキスト編集などを行います。まず、左のリストから編集したいデータを選ぶことができます。また、真ん中のテキストフィールドで凡例のテキストを編集できます。最後に、右のリストから凡例の位置を選択できます。
 - “select font” ボタン: 凡例表示に採用するフォントを選択することができます。
 4. “anti-aliasing” チェックボックス: グラフに、アンチエイリアスを施すか否かを設定します。このチェックボックスがオンの時、アンチエイリアスを施します。
 5. ここから、複数グラフを描画している場合は編集対象のグラフを選択します。この操作は選択中のタブに関係なく行うことができます。
 6. ボタン領域: このパネル全体の操作を行うためのボタンが配備されています。この操作は選択中のタブに関係なく行うことができます。
 - “update”: このボタンをクリックすると、変更を反映し、グラフを再描画します。
 - “close”: このボタンをクリックすると、このパネルを閉じます。

10.3.3.2 axis タブ

“axis” タブをクリックすると、図 10.10 が現れます。このタブでは、軸表示に関わる設定を行うことが可能です。以下、図 10.10 に記された数字に則してこのタブの操作方法を説明します。

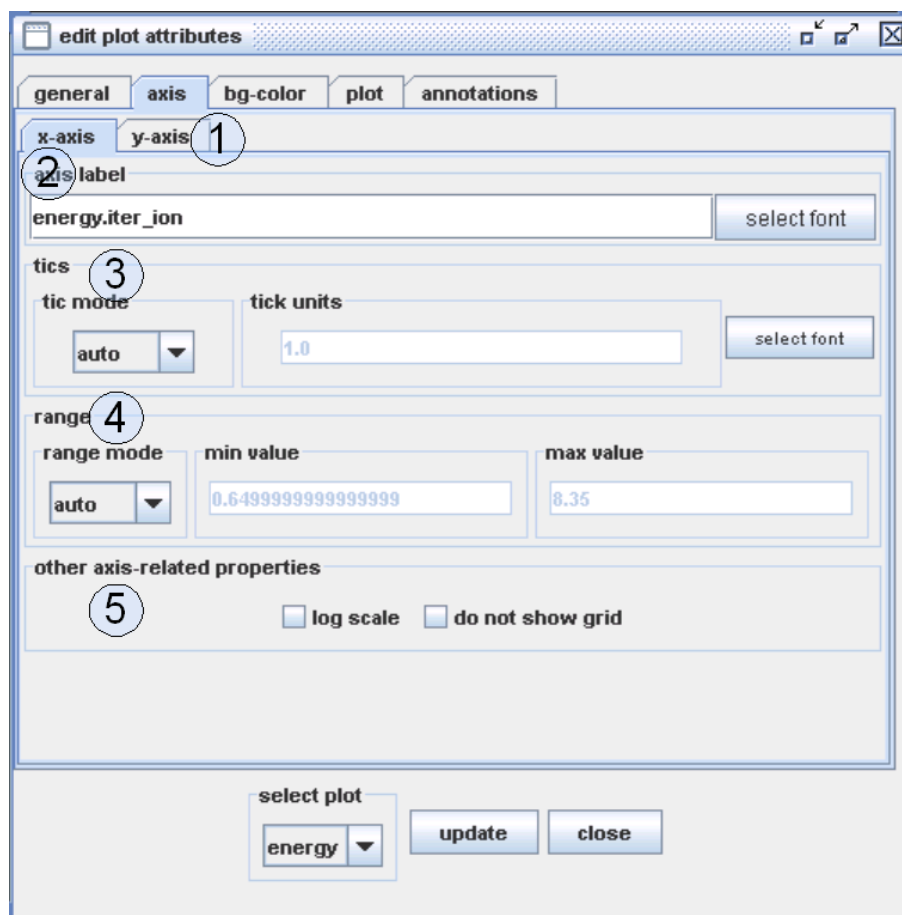


図 10.10: “axis” タブの外観.

1. 軸選択タブ: x 軸と y 軸のどちらの軸の表示を変更するかを選択できます. x 軸, y 軸ともに変更できる項目は同じです.
2. “axis label” 領域: 軸ラベルを変更することができます.
 - テキストエリア: 軸ラベルに用いられるテキストが表示されます. 軸ラベルを変更する際はここの文字列を変更してください.
 - “select font” ボタン: このボタンをクリックすると, 軸ラベル描画の際に使われるフォントを選択することができます.
3. “tics” 領域: ここでは, 軸目盛りに関わる設定を行うことが可能です.
 - “tic mode” リスト: ここで, 目盛りの振り方を選べます. “auto” は自動設定, “real” は実数による目盛り, “integer” は整数による目盛りにそれぞれ対応します.
 - “tick units”: このテキストフィールドに, 目盛りを入力します. たとえば “5” と入力すれば 5 の倍数で目盛りを振ることになります.
 - “select font”: 目盛り描画の際に使用されるフォントを選択することができます.
4. “range” 領域: ここでの操作を通じて, 軸範囲を設定することができます.
 - “range mode” リスト: “auto” と “manual” が選択可能です. “auto” を選ぶと自動的に軸範囲を設定します. “manual” の場合は隣の “min value” と “max value” テキストフィールドにそれぞれ最小値, 最大値を入力してください.
 - “min value”: 軸範囲の最小値を指定できます.
 - “max value”: 軸範囲の最大値を指定できます.
5. “other axis-related properties” 領域: ここで, その他軸に関わる設定を行います.

- “log scale” チェックボックス: このチェックボックスをオンにすると、軸を対数軸にします。この際、負の値に遭遇すると自動的にその絶対値で置換します。
- “do not show grid” チェックボックス: このチェックボックスをオンにすると、グリッド線を非表示にします。

10.3.3.3 bg タブ

“bg” タブをクリックすると、図 10.11 が現れます。このタブではグラフの背景色を変更することが可能です。

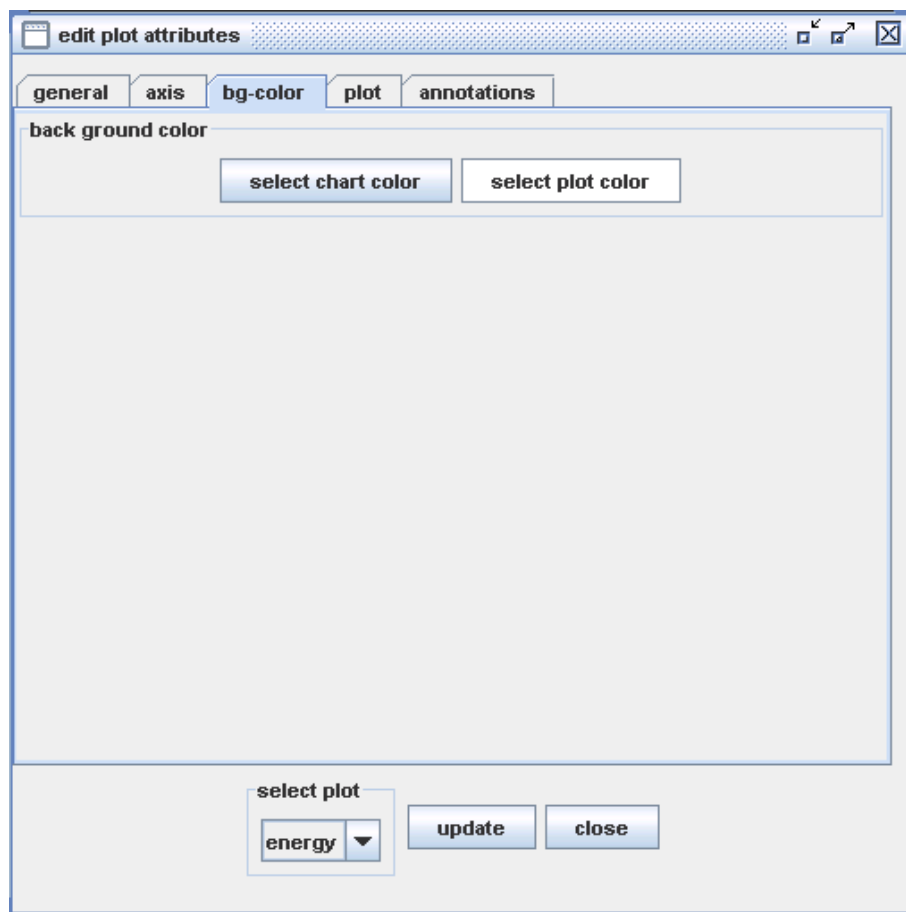


図 10.11: “bg” タブの外観。

- “select chart color” ボタン: パネル全体の背景色を選択することができます。「パネル全体」とは、タイトル領域や軸の外の領域を含みます。
- “select plot color” ボタン: プロットの背景色を選択することができます。「プロット」とは軸の内側の領域のことです。

10.3.3.4 plot タブ

“plot” タブをクリックすると、図 10.12 が現れます。このタブでは線種・点種のカスタマイズを行うことが可能です。

以下、図 10.12 に記された番号に則してこのタブの使用方法を説明します。

1. “series” 領域: 変更を施すデータを選択します。
 - データ表示領域: 有効なデータの一覧を表示します。ここで変更したいデータを選択し、線種・点種の変更を行います。なお、複数選択にも対応しています。



図 10.12: “plot” タブの外観.

- “apply changes to all series” ボタン: すべてのデータに同じ変更を施したい場合, このチェックボックスをオンにしてください (オンにした場合, データ表示領域での選択は無視されます).
- 2. プロット種選択領域: ここで, プロットの種類などの設定を行います. “plot type” リストには “lines”, “shapes”, “lines & shapes” の三つの選択肢があります. それぞれ, 線のための描画, 点のための描画, 線と点による描画に対応します.
- 3. プロット描画色選択: ここで, プロットの描画色を設定できます. “color” ボタンをクリックすると, 線や点の色を変更することができます.
- 4. “line properties” 領域: ここで線種に関わる設定を行うことが可能です.
 - “line type” リスト: 線種を選択することが可能です. 十種類の線種を用意しています.
 - “line width”: ここに, 線の太さを入力することができます.
- 5. “shape properties” 領域: ここで点種に関わる設定を行うことが可能です.
 - “shape type” リスト: 点種を選択することが可能です. 十種類の点種を用意しています.
 - “shape size”: ここに, 点の大きさを入力することができます.

例として, Fe のバンド構造を “up” 状態と “down” 状態を色分けして図 10.13 に図示します. この図は, Fe の F_ENERG ファイルに対します “up” の固有値を全て同時に選択し, いったん選択解除してから今度は “down” の固有値を全て同時に選択し “update graph panel” をクリックすれば得られます (軸範囲と軸ラベルも変更を施しています).

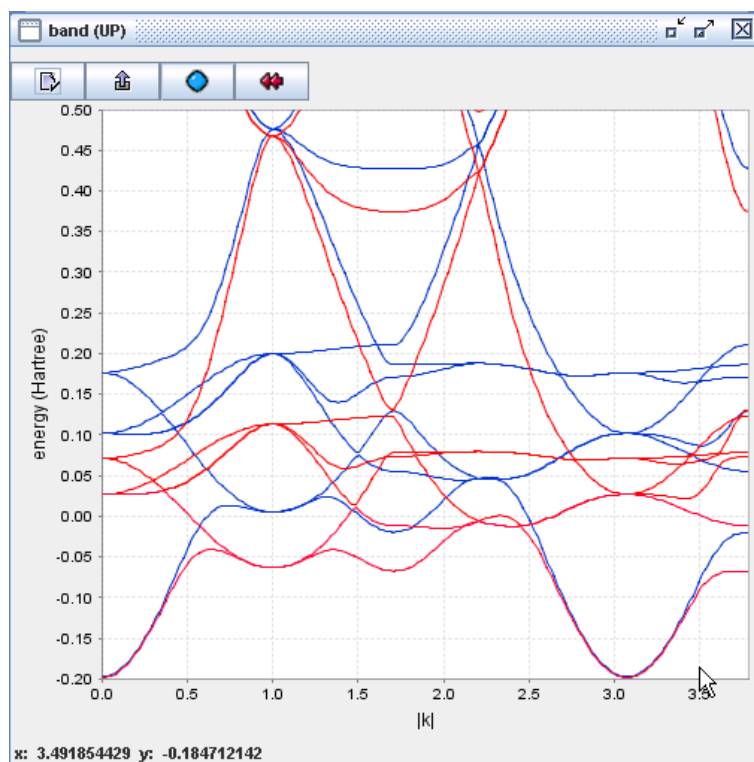


図 10.13: “plot” の色を編集した例.

10.3.3.5 annotations タブ

“annotations” タブをクリックすると図 10.14 を得ることができます. このタブでは, グラフ上に注釈を挿入する操作を行うことが可能です.

以下, 図 10.14 の使用方法を, 図に記された番号に則して説明します.

① “text annotation” 領域: 通常の, テキスト注釈を作成するための領域です.

- “mode” リスト: “new” と “add” の選択肢があります. “new” の場合は既存の注釈を破棄します. “add” の場合既存の注釈はそのまま, 指定した分だけ新たに加わることになります.
- “position(x)”: 注釈を表示する場所の x 座標を指定します.
- “position(y)”: 注釈を表示する場所の y 座標を指定します.
- “rot”: 注釈の回転を指定します. 0° は x 軸に平行であり, 正の回転角は時計回りに相当します.
- “annotation text”: 注釈のテキストを入力します.
- “select font” ボタン: 注釈のフォントを指定します.

② “image annotation” 領域: グラフ中に画像ファイルを挿入する操作を行う領域です.

- “choose image file” ボタン: このボタンを押して, グラフ中に挿入したい画像ファイルを選択してください.
- “scale”: 画像を縦横どのくらいスケールするかを入力します. 1.0 の場合, オリジナルのサイズが採用されます.
- “position(x)”: 画像を配置する場所の x 座標を入力します.
- “position(y)”: 画像を配置する場所の y 座標を入力します.

③ “arrow annotation” 領域: 矢印つき注釈を作成することができる領域です.

- “display” チェックボックス: 矢印つき注釈を表示するかどうかを選択できます. このチェックボックスがオンの時, 矢印つき注釈を描画します.
- “position(x)”: ここで矢印つき注釈を配置する場所の x 座標を指定します.

- “position(y)”：ここで矢印つき注釈を配置する場所の y 座標を指定します。
- “rotate(deg.)”：ここで矢印つき注釈の回転角を指定します。“text annotation” の場合と同様、 0° は x 軸に平行であり、正の回転角は時計回りに相当します。
- “base”：矢印つきテキストの、矢印の長さを指定します。
- “label text”：矢印つきテキストの、テキスト部分を指定します。
- “label font”：矢印つきテキストの、テキスト部分のフォントを選択します。
- “label offset”：矢印とテキストをどの程度離して描画するかを指定します。

例として、図 10.15 に三種類の注釈全てを挿入したグラフパネルを图示します。

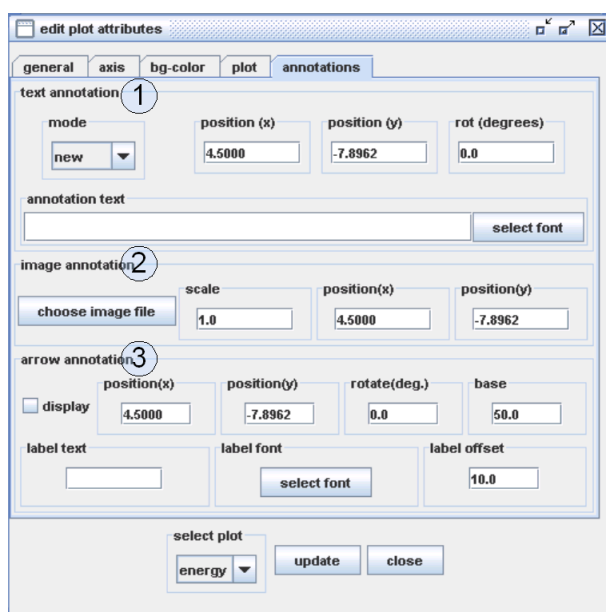


図 10.14: “annotations” タブの外観.

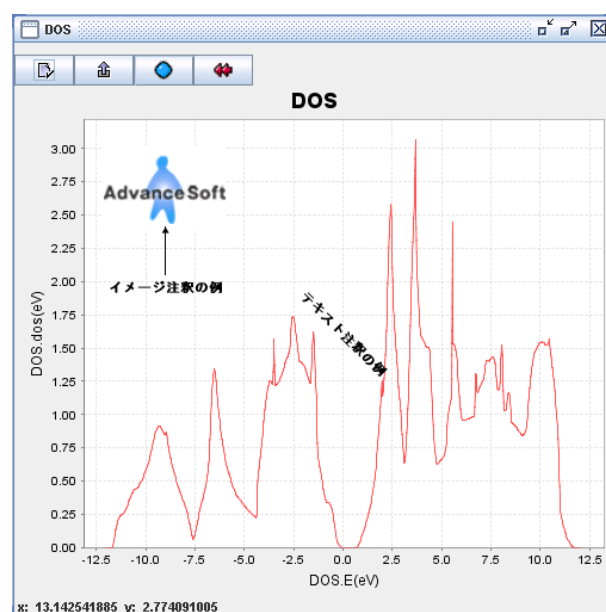


図 10.15: 注釈の例.

第11章 画像ビューアー

PHASE-Viewer の操作から画像ファイルを作成することができますが、PHASE-Viewer には作成された画像ファイルを開覧する機能もあります。本節では、この「画像ファイルビューアー」について説明します。

画像ファイルビューアーを利用して ps, eps, pdf 形式のファイルを表示することも可能です。この場合は ghostscript(<http://www.cs.wisc.edu/~ghost/>) を利用してラスター形式の画像ファイルに変換してから表示するので、お使いのマシンに ghostscript がインストールされている必要があります。また、第 1.2 節あるいは第 2.2.5 節で説明している設定を行う必要があります。

11.1 画像ファイル一覧

PHASE-Viewer は、とあるディレクトリー下にある (対応形式の) 画像ファイルの一覧表示をする GUI を備えています。この GUI は以下の二つの方法で表示させることができます。

結果解析画面から 第 5.1.6 節などで説明した計算結果解析画面より、“image” タブを選択します。

メニューから メニューから、“Module” → “image viewer” と選択します。

すると、図 11.1 が現れます。

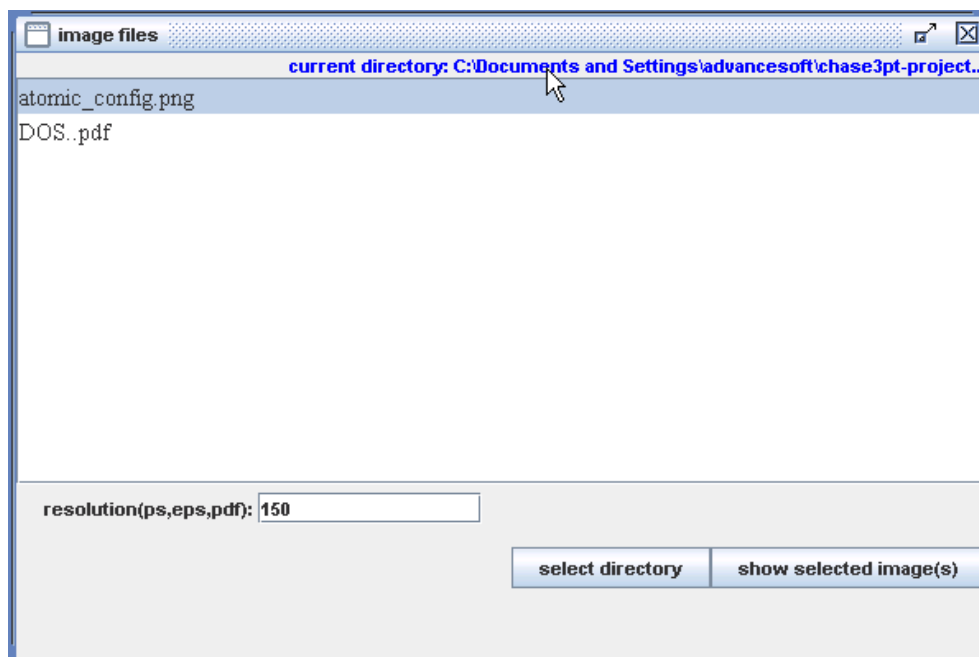


図 11.1: 画像ファイル選択画面。

図 11.1 ではディレクトリー単位で画像ファイル进行操作します。選択したディレクトリー以下で拡張子が jpg, gif, png, ps ないし eps, pdf のいずれかのファイルのリストを表示し、そのリストから表示したい画像ファイルを選んでボタンをクリックすると画像ファイルを表示します。以下この画面について説明します。

ディレクトリー表示領域: 選択されたディレクトリーのフルパスを表示します。

画像ファイルリスト表示領域: この領域に、選択されたディレクトリー以下でサポートしている拡張子を持つファイルのファイル名をリスト表示します。

“resolution” 領域: ps, eps, pdf ファイルを表示する際には, ghostscript によってラスター形式の画像に変換してから表示を行いますが, その変換の際の解像度を指定することができます. 画像ファイルが小さく表示されてしまった場合は, ここの入力を大きな値にして再表示してみてください.

ボタン領域: ここに, このパネルの操作を行うためのボタンを配備しています.

- “select directory”: 画像ファイルリストを表示するディレクトリーを選択します.
- “show selected image(s)”: 画像ファイルリストの内, 選択されたファイル (選択は複数のファイルについて行うことができます) を次節 (第 11.2 節参照) のビューアーパネルで表示します. リスト中の対応するファイルをダブルクリックすることによっても行うことができます.

11.2 画像ファイル閲覧

図 11.1 の “show selected image(s)” ボタンをクリックすることによって, 画像ビューアーパネルを起動することができます. 表示例を図 11.2 に示します. この例では, dos.pl によって生成された band_structure.eps という eps ファイルを表示しています.

* 注: ps, eps, pdf ファイルの表示には, gs の画像変換機能を利用して一度ラスター形式の画像に変換してから表示しています. その際, eps ファイルはクロップする (余白部分をなくす), というオプションをつけていますが, このオプションは gs のバージョンによってはうまくいかない場合があります.

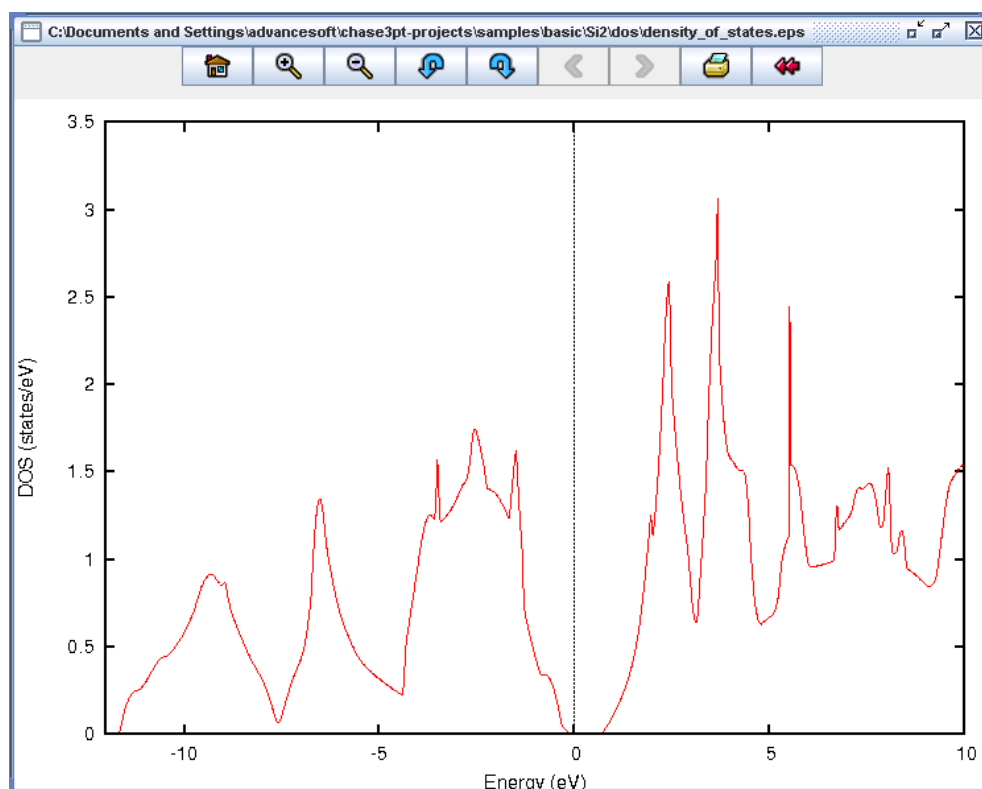


図 11.2: 画像ファイル閲覧.



図 11.3: 画像ファイル閲覧画面のアイコン.

この画面上で表示されているボタン, 図 11.3 を利用すれば, 下記のような操作を行うことができます.

1. 画像に施した変更を元に戻します.

2. 画像を少し拡大します.
3. 画像を少し縮小します.
4. 画像を反時計回りに回転します.
5. 画像を時計回りに回転します.
6. ps, eps, pdf ファイルの場合は複数ページのファイルも有り得ますが, その場合次のページを表示します.
7. ps, eps, pdf ファイルの場合は複数ページのファイルも有り得ますが, その場合前のページを表示します.
8. 表示中の画像ファイルを印刷します.
9. この画面を閉じます.

付 録 A 共通の GUI および操作

A.1 選択ダイアログ

本節では、各種“選択ダイアログ”について説明します。選択ダイアログとは、たとえばファイルを選択したり、フォントを選択したりといった作業を支援する GUI のことです。ここでは、“ファイル選択ダイアログ”、“カラー選択ダイアログ”、“フォント選択ダイアログ”の説明をします。

A.1.1 ファイル選択ダイアログ

PHASE-Viewer 標準のファイル選択ダイアログは、これまで行ってきた計算を参照しやすいよう「ディレクトリーブラウザー」を配備しています。図 A.1 にそのスクリーンショットを図示します。

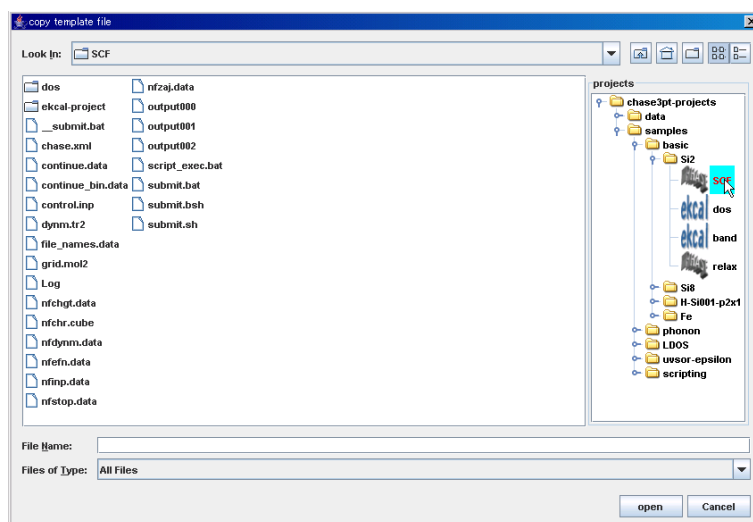


図 A.1: PHASE-Viewer ファイル選択ダイアログ。

通常のファイル選択ダイアログと同様の使用方法をしていただいてもよいですし、目的のディレクトリーがディレクトリーブラウザーのノードで表されているのならばそのノードをダブルクリックするか選択した状態で Enter キーを押下すればそのディレクトリーへ移ります。

A.1.2 フォント選択ダイアログ

画面上に文字列を表示する仕掛けの内、いくつかの部分でフォントの変更をサポートしています。フォント変更は、図 A.2 で行うことができます。“font name”領域でフォントの種類を、“Style”領域で書式（太字や斜体など）を、“size”領域で大きさを選ぶことが可能となっています。また、下の“Sample”領域にフォントイメージが表示されるので、それを参考にフォントを決定してください。“OK”ボタンをクリックすれば対応するフォントが採用されます。

A.1.3 カラー選択ダイアログ

原子配置表示やグラフ表示において、表示色の変更を行いたいことはよくあると思います。その際に、直接赤、青、緑の比を指定して悪いことはないですが、やはり GUI からイメージにあった色を選択の方が効率が良いでしょう。その目的のため、PHASE-Viewer は色の選択は図 A.3 のカラー選択ダイアログを使って行いただきます。この画面上で好きな色を選び、“OK”ボタンを選ぶだけで望みの色を選択することができます。色の選択

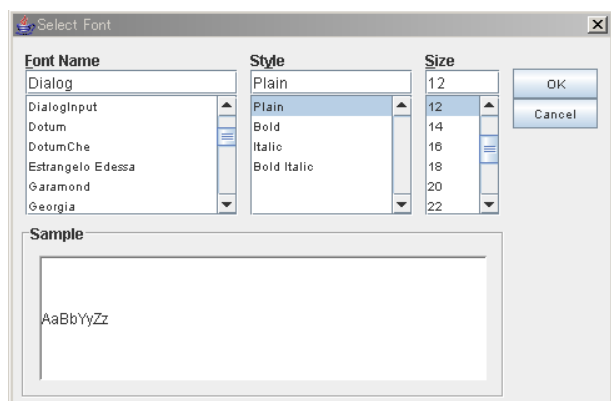


図 A.2: フォント選択ダイアログ.

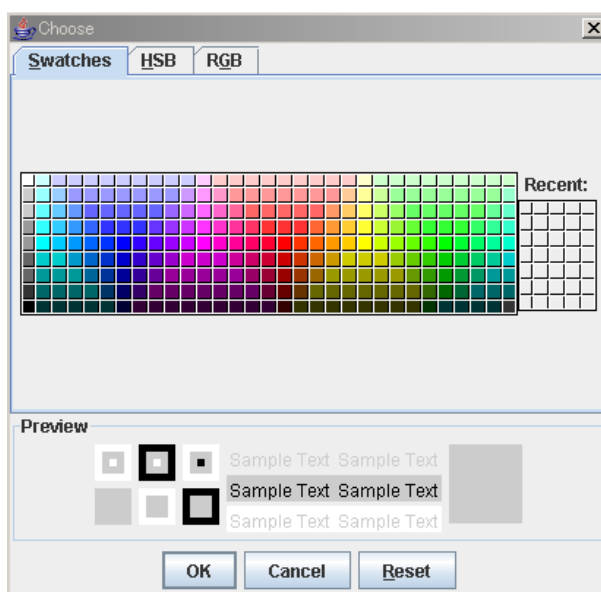


図 A.3: Java 標準のカラー選択ダイアログ.

は, “Swatches”, “HSB”, “RGB” のいずれかの「色指定方法」でもって行うことが可能となっています.

A.2 テーブルの仕様

本ソフトウェアは, データの表示を行うためにテーブルを多用しています. テーブルの仕様について共通する部分を本節で解説します.

A.2.1 コピー・ペースト

テーブル上のデータは, システムのクリップボードを介してコピー・ペーストすることが可能です. その方法とコピー・ペースト可能なデータ形式を説明します.

コピー: コピーしたいデータを選択し, Control+C とキーボードを押すと選択範囲内のデータがクリップボードに格納されます. この際, 格納されるテキストの行区切りは改行コード, 列区切りは「タブ」になります.

ペースト: ペーストしたいデータ列をクリップボードに格納しておいた状態にし, ペーストしたいテーブルの左上を選択状態にしておきます. この状態で Control+V とキーボードを押すとデータがペーストされます. クリップボード上のデータは, 行区切りは改行コード, 列区切りは“スペース”, “カンマ”, “タブ”のいずれかを仮定しています.

このコピー・ペーストのメカニズムは, MS Excel などのスプレッドシートとデータをやり取りすることを意識して作られています. MS Excel などと連携して本ソフトウェア用のデータを作成する, といったことも可能なので, ぜひお試しください.

A.2.2 テーブル上のデータの編集

テーブル上のデータの編集は, 直接キーボードから行う部分もありますが, 有限個の選択肢しかない場合はリストから選ぶようにしている箇所もあります. テーブル上では選択肢から選べるようになっていたとは分かりづらいのですが, 該当項目をクリックしてみると選択肢が現れ, 選択が可能になっていきます. 例として, 図 A.4 に原子配置表示テーブルで元素名を編集している様子を図示します.

A.2.3 グラフ機能付きテーブル

結果解析画面などで, 図 A.5 のように, 下部にボタンが配備されたテーブルが多く現れます. この GUI の利用方法を説明します.

これらのボタンには, それぞれ以下のような機能が割り振られています.

atomic configuration						
No.	element	rx	ry	rz	mobile	
	<input type="checkbox"/> apply to all				<input type="checkbox"/> apply to all	
1	H	0.2618	0.5000	0.6565	0	
2	H	0.7382	0.5000	0.6564	0	
3	Si	0.3414	0.5000	0.5697	0	
4	Si	0.6586	0.5000	0.5697	0	
5	Si	0.2623	0.0000	0.4939	0	
6	P	0.7376	0.0000	0.4938	0	
7	S	0.0000	0.0000	0.4150	0	
8		0.5000	0.0000	0.4030	0	
9	Cl	0.0000	0.5000	0.3277	0	
10	Ar	0.5000	0.5000	0.3215	0	
11	K	0.2500	0.5000	0.2417	0	
12	Ca	0.7500	0.5000	0.2417	0	
	Sc					

図 A.4: 原子配置表示テーブルで元素名を編集している例.

data					
No.	E(hr.)	dos(hr.)	E(eV)	dos(eV)	sum
6	-0.21700	0.0000000000	-12.190706	0.0000000000	0.0000000000
16	-0.21600	0.0000000000	-12.163495	0.0000000000	0.0000000000
26	-0.21500	0.0000000000	-12.136283	0.0000000000	0.0000000000
36	-0.21400	0.0000000000	-12.109072	0.0000000000	0.0000000000
46	-0.21300	0.0000000000	-12.081860	0.0000000000	0.0000000000
56	-0.21200	0.0000000000	-12.054649	0.0000000000	0.0000000000
66	-0.21100	0.0000000000	-12.027438	0.0000000000	0.0000000000
76	-0.21000	0.0000000000	-12.000226	0.0000000000	0.0000000000
86	-0.20900	0.0000891681	-11.973015	0.0000032769	0.0000000013
96	-0.20800	0.2140152966	-11.945803	0.0078649139	0.0000583542
106	-0.20700	1.2751677167	-11.918592	0.0468615304	0.0007328080
116	-0.20600	2.2962401654	-11.891381	0.0843852358	0.0025814852
126	-0.20500	2.5624931211	-11.864169	0.0941698475	0.0050628050
136	-0.20400	2.8240576232	-11.836958	0.1037821618	0.0077228039
146	-0.20300	3.3378532250	-11.809746	0.1226637943	0.0107954444
156	-0.20200	3.8818327859	-11.782535	0.1426546664	0.0144086272
166	-0.20100	4.2359196621	-11.755324	0.1556671139	0.0184925028
176	-0.20000	4.3310670427	-11.728112	0.1591637142	0.0227853347
486	0.40000	4.5223037705	44.700004	0.4665052607	0.0373026255

図 A.5: グラフ化機能つきテーブル

to clipboard システムのクリップボードにテーブルデータを送ります. このデータは, たとえば Microsoft Excel などのソフトウェアに貼り付けることができます.

export テーブルデータを, 以下の形式でテキストファイルにエクスポートします.

```
#col1 col2 col3
data11 data12 data13
data21 data22 data23
....
```

toggle selection mode テーブルのデータ上で左クリックすると, デフォルトの状態では列のすべてのデータを選択します. このボタンをクリックすると一つのセルづつ選択できるようになります.

quick plot このボタンをクリックすると, 第 10 章で説明した “quick plot” 機能を利用して簡易グラフを作成することができます. その際, グラフの形式は右隣のリストから選択します. xy プロットの場合, 選択中のデータで一番左にあるものが独立変数, 残りが従属変数として xy プロットが作成されます.

plot “quick plot” より細かくカスタマイズされたグラフを作成したい場合, このボタンをクリックして第 10 章で説明しているグラフツールを起動します.

A.3 画像ファイルエクスポート

本ソフトウェアには, グラフを描画したり, 原子配置を三次元表示する機能などが備わっています. これらを, 画面上に表示するだけでなく, 様々な形式の画像ファイルにエクスポートすることが可能です.

画像エクスポートは, “export” ボタンをクリックすると現れる図 A.6 に図示している画像エクスポートパネルを使用することによって行うことが可能です.

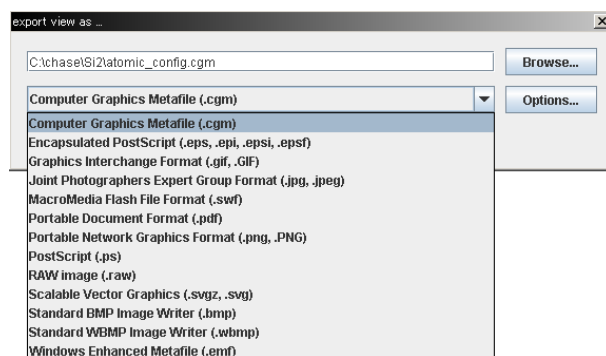


図 A.6: 画像ファイルエクスポートパネル。

図 A.6 は、エクスポート可能な画像ファイル形式を選択するリストを表示した状態になっています。ここからわかるように、様々な形式の画像ファイルを生成することが可能となっています。また、“Browse” ボタンを押すことによってエクスポート先を選んだり、“Options” ボタンを押すことによって各画像ファイル固有のオプションの設定などを行うことも可能となっています。

A.4 複数データの選択

本ソフトウェアの使用において、「何かを選択した後、選択されたものを対象に特定の操作を行う」という局面がよく訪れると思います。その際に、複数選択を許可している場合は以下のような方法で複数選択することが可能です。

連続データを選択する (選択解除する): Shift キーを押しながらマウスで選択する (選択解除する)。

飛び飛びのデータを選択する (選択解除する): Control キー (Mac OSX では Command キー) を押しながらマウスで選択する (選択解除する)。

このテクニックを使わないと実現できない選択パターンもあるので、ご注意ください。図 A.7 にその違いを図示します。左が Shift を押しながら選択をした例、右が Control を押しながら選択をした例です。

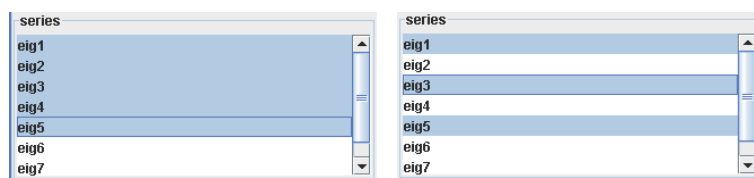


図 A.7: 「連続データの選択」と「飛び飛びのデータ」の選択の違い。

付 録 B コンパイル

ここでは、コンパイル方法を説明します。ただし、PHASE-Viewer は Java Archive 形式で配布されているので、コンパイルせずともご利用いただくことは可能です。

B.1 準備

PHASE-Viewer は、Ant というビルドツール (<http://ant.apache.org/>) を利用してコンパイルすることができます。上記ウェブサイトより Ant を入手し、インストールしてください。また、コンパイルには Java開発環境 が必要になります。お持ちでない場合、サン・マイクロシステムズ社より入手し (<http://java.sun.com/javase/downloads/index.html>), インストールしてください。

B.2 コンパイル

Java 開発環境と Ant をインストールし、適切な設定を行ったら、PHASE-Viewer のインストールディレクトリの下にある、“build” というディレクトリへ移動し、下記のコマンドをタイプしてください。

```
% ant phase-viewer
```

この一行のコマンドで必要なファイルのコピー、ソースファイルのコンパイルなどが行われ、さらに Java Archive 形式のファイル、phase-viewer.jar, が INSTALL_DIR/bin の下に作成されます。また、コンパイルを一からやり直したい場合は

```
% ant clean
```

というコマンドを発行してください。

付 録 C 外部ライブラリー/ソフトウェアのライセンス

C.1 外部ライブラリー・ソフトウェア

本ソフトウェアは多くのライブラリーやソフトウェアを同梱しています。具体的には以下を使用しています。

Java Runtime Enviroment: <http://java.sun.com/j2se/>, Sun Microsystems 社のライセンス

Java3D: <http://java.sun.com/products/java-media/3D/>, Sun Microsystems 社のライセンス

Java Media Framework: <http://java.sun.com/products/java-media/jmf/>, Sun Microsystems 社のライセンス。

JavaHelp <http://java.sun.com/products/javahelp/>, Sun Microsystems 社のライセンス。

JavaMail <http://java.sun.com/products/javamail/>, Sun Microsystems 社のライセンス

JDOM <http://www.jdom.org/>, Apache-style License.

Batik <http://xmlgraphics.apache.org/batik/>, Apache License.

BeanShell <http://www.beanshell.org/>, GNU Lesser Public License.

VectorGraphics: <http://java.freehep.org/vectorgraphics/index.html>, GNU Lesser General Public License.

JFreeChart: <http://www.jfree.org/jfreechart/>, GNU Lesser General Public License.

JCTerm: <http://www.jcraft.com/jcterm/index.html>, GNU Lesser Public License.

Apache perl(Windows 版のみ): <http://www.apache.org/>, Apache License.

Log4j: <http://logging.apache.org/log4j/docs/>, Apache License.

JAMA : <http://math.nist.gov/javanumerics/jama/>, public domain ソフトウェア.

JFontChooser: <http://jfontchooser.sourceforge.jp/cgi-bin/kaki.cgi>, 独自ライセンス.

SkinLF: <http://www.l2fprod.com/>, 独自ライセンス.

gnuplot(Windows 版のみ): <http://www.gnuplot.info/>, 独自ライセンス.

iText: <http://www.lowagie.com/iText/>, Mozilla Public License(<http://www.mozilla.org/MPL/> から取得可能).

JSch: <http://www.jcraft.com/>, BSD-style license.

これら素晴らしいライブラリー・ソフトウェアの作者の皆様に、この場を借りて謝辞を申し上げます。なお、GNU Lesser General Public License に従うソフトウェアにつきましては、ご利用の皆様のご希望があればそのソースコードをこちらの方から提供させていただく義務があります。同梱ソフトウェアの内、GNU Lesser Public License に従うプログラムのソースコードが必要な場合、ご連絡いただくか、上記 URL からダウンロードしてください。 This product includes software developed by L2FProd.com (<http://www.L2FProd.com/>).

C.2 使用ライブラリーのライセンス

C.2.1 Java Runtime Enviroment と Java3D のライセンス

C.2.1.1 Java Runtime Enviroment

Sun Microsystems, Inc. Binary Code License Agreement
for the JAVA 2 PLATFORM STANDARD EDITION RUNTIME ENVIRONMENT 5.0
SUN MICROSYSTEMS, INC. ("SUN") IS WILLING TO LICENSE THE SOFTWARE IDENTIFIED BELOW TO YOU ONLY UPON THE CONDITION THAT YOU ACCEPT ALL OF THE TERMS CONTAINED IN THIS BINARY CODE LICENSE AGREEMENT AND SUPPLEMENTAL LICENSE TERMS (COLLECTIVELY "AGREEMENT"). PLEASE READ THE AGREEMENT CAREFULLY. BY DOWNLOADING OR INSTALLING THIS SOFTWARE, YOU ACCEPT THE TERMS OF THE AGREEMENT. INDICATE ACCEPTANCE BY SELECTING THE "ACCEPT" BUTTON AT THE BOTTOM OF THE AGREEMENT. IF YOU ARE NOT WILLING TO BE BOUND BY ALL THE TERMS, SELECT THE "DECLINE" BUTTON AT THE BOTTOM OF THE AGREEMENT AND THE DOWNLOAD OR INSTALL PROCESS WILL NOT CONTINUE.

1. DEFINITIONS. "Software" means the identified above in binary form, any other machine readable materials (including, but not limited to, libraries, source files, header files, and data files), any updates or error corrections provided by Sun, and any user manuals, programming guides and other documentation provided to you by Sun under this Agreement. "Programs" mean Java applets and applications intended to run on the Java 2 Platform Standard Edition (J2SE platform) platform on Java-enabled general purpose desktop computers and servers.

2. LICENSE TO USE. Subject to the terms and conditions of this Agreement, including, but not limited to the Java Technology Restrictions of the Supplemental License Terms, Sun grants you a non-exclusive, non-transferable, limited license without license fees to reproduce and use internally Software complete and unmodified for the sole purpose of running Programs. Additional licenses for developers and/or publishers are granted in the Supplemental License Terms.

3. RESTRICTIONS. Software is confidential and copyrighted. Title to Software and all associated intellectual property rights is retained by Sun and/or its licensors. Unless enforcement is prohibited by applicable law, you may not modify, decompile, or reverse engineer Software. You acknowledge that Licensed Software is not designed or intended for use in the design, construction, operation or maintenance of any nuclear facility. Sun Microsystems, Inc. disclaims any express or implied warranty of fitness for such uses. No right, title or interest in or to any trademark, service mark, logo or trade name of Sun or its licensors is granted under this Agreement. Additional restrictions for developers and/or publishers licenses are set forth in the Supplemental License Terms.

4. LIMITED WARRANTY. Sun warrants to you that for a period of ninety (90) days from the date of purchase, as evidenced by a copy of the receipt, the media on which Software is furnished (if any) will be free of defects in materials and workmanship under normal use. Except for the foregoing, Software is provided "AS IS". Your exclusive remedy and Sun's entire liability under this limited warranty will be at Sun's option to replace Software media or refund the fee paid for Software. Any implied warranties on the Software are limited to 90 days. Some states do not allow limitations on duration of an implied warranty, so the above may not apply to you. This limited warranty gives you specific legal rights. You may have others, which vary from state to state.

5. DISCLAIMER OF WARRANTY. UNLESS SPECIFIED IN THIS AGREEMENT, ALL EXPRESS OR IMPLIED CONDITIONS, REPRESENTATIONS AND WARRANTIES, INCLUDING ANY IMPLIED WARRANTY OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE OR NON-INFRINGEMENT ARE DISCLAIMED, EXCEPT TO THE EXTENT THAT THESE DISCLAIMERS ARE HELD TO BE LEGALLY INVALID.

6. LIMITATION OF LIABILITY. TO THE EXTENT NOT PROHIBITED BY LAW, IN NO EVENT WILL SUN OR ITS LICENSORS BE LIABLE FOR ANY LOST REVENUE, PROFIT OR DATA, OR FOR SPECIAL, INDIRECT, CONSEQUENTIAL, INCIDENTAL OR PUNITIVE DAMAGES, HOWEVER CAUSED REGARDLESS OF THE THEORY OF LIABILITY, ARISING OUT OF OR RELATED TO THE USE OF OR INABILITY TO USE SOFTWARE, EVEN IF SUN HAS BEEN ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGES. In no event will Sun's liability to you, whether in contract, tort (including negligence), or otherwise, exceed the amount paid by you for Software under this Agreement. The foregoing limitations will apply even if the above stated warranty fails of its essential purpose. Some states do not allow the exclusion of incidental or consequential damages, so some of the terms above may not be applicable to you.

7. TERMINATION. This Agreement is effective until terminated. You may terminate this Agreement at any time by destroying all copies of Software. This Agreement will terminate immediately without notice from Sun if you fail to comply with any provision of this Agreement. Either party may terminate this Agreement immediately should any Software become, or in either party's opinion be likely to become, the subject of a claim of infringement of any intellectual property right. Upon Termination, you must destroy all copies of Software.

8. EXPORT REGULATIONS. All Software and technical data delivered under this Agreement are subject to US export control laws and may be subject to export or import regulations in other countries. You agree to comply strictly with all such laws and regulations and acknowledge that you have the responsibility to obtain such licenses to export, re-export, or import as may be required after delivery to you.

9. TRADEMARKS AND LOGOS. You acknowledge and agree as between you and Sun that Sun owns the SUN, SOLARIS, JAVA, JINI, FORTE, and iPLANET trademarks and all SUN, SOLARIS, JAVA, JINI, FORTE, and iPLANET-related trademarks, service marks, logos and other brand designations ("Sun Marks"), and you agree to comply with the Sun Trademark and Logo Usage Requirements currently located at <http://www.sun.com/policies/trademarks>. Any use you make of the Sun Marks inures to Sun's benefit.

10. U.S. GOVERNMENT RESTRICTED RIGHTS. If Software is being acquired by or on behalf of the U.S. Government or by a U.S. Government prime contractor or subcontractor (at any tier), then the Government's rights in Software and accompanying documentation will be only as set forth in this Agreement; this is in accordance with 48 CFR 227.7201 through 227.7202-4 (for Department of Defense (DOD) acquisitions) and with 48 CFR 2.101 and 12.212 (for non-DOD acquisitions).

11. GOVERNING LAW. Any action related to this Agreement will be governed by California law and controlling U.S. federal law. No choice of law rules of any jurisdiction will apply.

12. SEVERABILITY. If any provision of this Agreement is held to be unenforceable, this Agreement will remain in effect with the provision omitted, unless omission would frustrate the intent of the parties, in which case this Agreement will immediately terminate.

13. INTEGRATION. This Agreement is the entire agreement between you and Sun relating to its subject matter. It supersedes all prior or contemporaneous oral or written communications, proposals, representations and warranties and prevails over any conflicting or additional terms of any quote, order, acknowledgment, or other communication between the parties relating to its subject matter during the term of this Agreement. No modification of this Agreement will be binding, unless in writing and signed by an authorized representative of each party.

SUPPLEMENTAL LICENSE TERMS These Supplemental License Terms add to or modify the terms of the Binary Code License Agreement. Capitalized terms not defined in these Supplemental Terms shall have the same meanings ascribed to them in the Binary Code License Agreement. These Supplemental Terms shall supersede any inconsistent or conflicting terms in the Binary Code License Agreement, or in any license contained within the Software.

A. Software Internal Use and Development License Grant. Subject to the terms and conditions of this Agreement and restrictions and exceptions set forth in the Software "README" file, including, but not limited to the Java Technology Restrictions of these Supplemental Terms, Sun grants you a non-exclusive, non-transferable, limited license without fees to reproduce internally and use internally the Software complete and unmodified for the purpose of designing, developing, and testing your Programs.

C.2.1.2 Java3D

Sun Microsystems, Inc. Binary Code License Agreement JAVA 3D[™] API, VERSION 1.3.1, FCS RELEASE

READ THE TERMS OF THIS AGREEMENT AND ANY PROVIDED SUPPLEMENTAL LICENSE TERMS (COLLECTIVELY "AGREEMENT") CAREFULLY BEFORE OPENING THE SOFTWARE MEDIA PACKAGE. BY OPENING THE SOFTWARE MEDIA PACKAGE, YOU AGREE TO THE TERMS OF THIS AGREEMENT. IF YOU ARE ACCESSING THE SOFTWARE ELECTRONICALLY, INDICATE YOUR ACCEPTANCE OF THESE TERMS BY SELECTING THE "ACCEPT" BUTTON AT THE END OF THIS AGREEMENT. IF YOU DO NOT AGREE TO ALL THESE TERMS, PROMPTLY RETURN THE UNUSED SOFTWARE TO YOUR PLACE OF PURCHASE FOR A REFUND OR, IF THE SOFTWARE IS ACCESSED ELECTRONICALLY, SELECT THE "DECLINE" BUTTON AT THE END OF THIS AGREEMENT.

1. LICENSE TO USE. Sun Microsystems, Inc. ("Sun") grants you a non-exclusive and non-transferable license for the internal use only of the accompanying software and documentation and any error corrections provided by Sun (collectively "Software"), by the number of users and the class of computer hardware for which the corresponding fee has been paid.

2. RESTRICTIONS. Software is confidential and copyrighted. Title to Software and all associated intellectual property rights is retained by Sun and/or its licensors. Except as specifically authorized in any Supplemental License Terms, you may not make copies of Software, other than a single copy of Software for archival purposes. Unless enforcement is prohibited by applicable law, you may not modify, decompile, or reverse engineer Software. You acknowledge that Software is not designed, licensed or intended for use in the design, construction, operation or maintenance of any nuclear facility. Sun disclaims any express or implied warranty of fitness for such uses. No right, title or interest in or to any trademark, service mark, logo or trade name of Sun or its licensors is granted under this Agreement.

3. LIMITED WARRANTY. Sun warrants to you that for a period of ninety (90) days from the date of purchase, as evidenced by a copy of the receipt, the media on which Software is furnished (if any) will be free of defects in materials and workmanship under normal use. Except for the foregoing, Software is provided "AS IS". Your exclusive remedy and Sun's entire liability under this limited warranty will be at Sun's option to replace Software media or refund the fee paid for Software.

4. DISCLAIMER OF WARRANTY. UNLESS SPECIFIED IN THIS AGREEMENT, ALL EXPRESS OR IMPLIED CONDITIONS, REPRESENTATIONS AND WARRANTIES, INCLUDING ANY IMPLIED WARRANTY OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE OR NON-INFRINGEMENT ARE DISCLAIMED, EXCEPT TO THE EXTENT THAT THESE DISCLAIMERS ARE HELD TO BE LEGALLY INVALID.

5. LIMITATION OF LIABILITY. TO THE EXTENT NOT PROHIBITED BY LAW, IN NO EVENT WILL SUN OR ITS LICENSORS BE LIABLE FOR ANY LOST REVENUE, PROFIT OR DATA, OR FOR SPECIAL, INDIRECT, CONSEQUENTIAL, INCIDENTAL OR PUNITIVE DAMAGES, HOWEVER CAUSED REGARDLESS OF THE THEORY OF LIABILITY, ARISING OUT OF OR RELATED TO THE USE OF OR INABILITY TO USE SOFTWARE, EVEN IF SUN HAS BEEN ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGES. In no event will Sun's liability to you, whether in contract, tort (including negligence), or otherwise, exceed the amount paid by you for Software under this Agreement. The foregoing limitations will apply even if the above stated warranty fails of its essential purpose.

6. Termination. This Agreement is effective until terminated. You may terminate this Agreement at any time by destroying all copies of Software. This Agreement will terminate immediately without notice from Sun if you fail to comply with any provision of this Agreement. Upon Termination, you must destroy all copies of Software.

7. Export Regulations. All Software and technical data delivered under this Agreement are subject to US export control laws and may be subject to export or import regulations in other countries. You agree to comply strictly with all such laws and regulations and acknowledge that you have the responsibility to obtain such licenses to export, re-export, or import as may be required after delivery to you.

8. U.S. Government Restricted Rights. If Software is being acquired by or on behalf of the U.S. Government or by a U.S. Government prime contractor or subcontractor (at any tier), then the Government's rights in Software and accompanying documentation will be only as set forth in this Agreement; this is in accordance with 48 CFR 227.7201 through 227.7202-4 (for Department of Defense (DOD) acquisitions) and with 48 CFR 2.101 and 12.212 (for non-DOD acquisitions).

9. Governing Law. Any action related to this Agreement will be governed by California law and controlling U.S. federal law. No choice of law rules of any jurisdiction will apply.

10. Severability. If any provision of this Agreement is held to be unenforceable, this Agreement will remain in effect with the provision omitted, unless omission would frustrate the intent of the parties, in which case this Agreement will immediately terminate.

11. Integration. This Agreement is the entire agreement between you and Sun relating to its subject matter. It supersedes all prior or contemporaneous oral or written communications, proposals, representations and warranties and prevails over any conflicting or additional terms of any quote, order, acknowledgment, or other communication between the parties relating to its subject matter during the term of this Agreement. No modification of this Agreement will be binding, unless in writing and signed by an authorized representative of each party.

DEVELOPMENT TOOLS JAVA 3D[™] API, VERSION 1.3.1, FCS RELEASE SUPPLEMENTAL LICENSE TERMS

These supplemental license terms ("Supplemental Terms") add to or modify the terms of the Binary Code License Agreement (collectively, the "Agreement"). Capitalized terms not defined in these Supplemental Terms shall have the same meanings ascribed to them in the Agreement. These Supplemental Terms shall supersede any inconsistent or conflicting terms in the Agreement, or in any license contained within the Software.

1. Software Internal Use and Development License Grant. Subject to the terms and conditions of this Agreement, including, but not limited to Section 3 (Java[™]; Technology Restrictions) of these Supplemental Terms, Sun grants you a non-exclusive, non-transferable, limited license to reproduce internally and use internally the binary form of the Software complete and unmodified for the sole purpose of designing, developing and testing your Java applets and applications intended to run on the Java platform ("Programs").

2. License to Distribute Software. In addition to the license granted in Section 1 (Software Internal Use and Development License Grant) of these Supplemental Terms, subject to the terms and conditions of this Agreement, including but not limited to Section 3 (Java Technology Restrictions) of these Supplemental Terms, Sun grants you a non-exclusive, non-transferable, limited license to reproduce and distribute the Software in binary code form only, provided that you:

- (i) distribute the Software complete and unmodified and only bundled as part of your Programs,
- (ii) do not distribute additional software intended to replace any component(s) of the Software,
- (iii) do not remove or alter any proprietary legends or notices contained in the Software,
- (iv) only distribute the Software subject to a license agreement that protects Sun's interests consistent with the terms contained in this Agreement, and
- (v) agree to defend and indemnify Sun and its licensors from and against any damages, costs, liabilities, settlement amounts and/or expenses (including attorneys' fees) incurred in connection with any claim, lawsuit or action by any third party that arises or results from the use or distribution of any and all Programs and/or Software.

3. Java Technology Restrictions. You may not modify the Java Platform Interface ("JPI", identified as classes contained within the "java" package or any subpackages of the "java" package), by creating additional classes within the JPI or otherwise causing the addition to or modification of the classes in the JPI. In the event that you create an additional class and associated API(s) which

- (i) extends the functionality of the Java platform, and
- (ii) is exposed to third party software developers for the purpose of developing additional software which invokes such additional API, you must promptly publish broadly an accurate specification for such API for free use by all developers. You may not create, or authorize your licensees to create, additional classes, interfaces, or subpackages that are in any way identified as "java", "javax", "sun" or similar convention as specified by Sun in any naming convention designation.

4. Java Runtime Availability. Refer to the appropriate version of the Java Runtime Environment binary code license (currently located at <http://www.java.sun.com/jdk/index.html>) for the availability of runtime code which may be distributed with Java applets and applications.

5. Trademarks and Logos. You acknowledge and agree as between you and Sun that Sun owns the SUN, SOLARIS, JAVA, JAVA 3D, JINI, FORTE, STAROFFICE, STARPORTAL and iPLANET trademarks and all SUN, SOLARIS, JAVA, JAVA 3D, JINI, FORTE, STAROFFICE, STARPORTAL and iPLANET-related trademarks, service marks, logos and other brand designations ("Sun Marks"), and you agree to comply with the Sun Trademark and Logo Usage Requirements currently located at <http://www.sun.com/policies/trademarks>. Any use you make of the Sun Marks inures to Sun's benefit.

6. Source Code. Software may contain source code that is provided solely for reference purposes pursuant to the terms of this Agreement. Source code may not be redistributed unless expressly provided for in this Agreement.

7. Termination for Infringement. Either party may terminate this Agreement immediately should any Software become, or in either party's opinion be likely to become, the subject of a claim of infringement of any intellectual property right.

Note: Some portions of Software are provided with notices and/or licenses from other parties that govern the use of those portions, including the README file named README-LICENSE.

For inquiries please contact: Sun Microsystems, Inc. 4150 Network Circle, Santa Clara, California 95054. (Form ID#011801)

C.2.2 GNU Lesser General Public ライセンス

<http://www.gnu.org/copyleft/lesser.html>

GNU LESSER GENERAL PUBLIC LICENSE

Version 2.1, February 1999 Copyright (C) 1991, 1999 Free Software Foundation, Inc. 59 Temple Place, Suite 330, Boston, MA 02111-1307 USA Everyone is permitted to copy and distribute verbatim copies of this license document, but changing it is not allowed.

[This is the first released version of the Lesser GPL. It also counts as the successor of the GNU Library Public License, version 2, hence the version number 2.1.]

Preamble The licenses for most software are designed to take away your freedom to share and change it. By contrast, the GNU General Public Licenses are intended to guarantee your freedom to share and change free software—to make sure the software is free for all its users.

This license, the Lesser General Public License, applies to some specially designated software packages—typically libraries—of the Free Software Foundation and other authors who decide to use it. You can use it too, but we suggest you first think carefully about whether this license or the ordinary General Public License is the better strategy to use in any particular case, based on the explanations below.

When we speak of free software, we are referring to freedom of use, not price. Our General Public Licenses are designed to make sure that you have the freedom to distribute copies of free software (and charge for this service if you wish); that you receive source code or can get it if you want it; that you can change the software and use pieces of it in new free programs; and that you are informed that you can do these things.

To protect your rights, we need to make restrictions that forbid distributors to deny you these rights or to ask you to surrender these rights. These restrictions translate to certain responsibilities for you if you distribute copies of the library or if you modify it.

For example, if you distribute copies of the library, whether gratis or for a fee, you must give the recipients all the rights that we gave you. You must make sure that they, too, receive or can get the source code. If you link other code with the library, you must provide complete object files to the recipients, so that they can relink them with the library after making changes to the library and recompiling it. And you must show them these terms so they know their rights.

We protect your rights with a two-step method: (1) we copyright the library, and (2) we offer you this license, which gives you legal permission to copy, distribute and/or modify the library.

To protect each distributor, we want to make it very clear that there is no warranty for the free library. Also, if the library is modified by someone else and passed on, the recipients should know that what they have is not the original version, so that the original author's reputation will not be affected by problems that might be introduced by others.

Finally, software patents pose a constant threat to the existence of any free program. We wish to make sure that a company cannot effectively restrict the users of a free program by obtaining a restrictive license from a patent holder. Therefore, we insist that any patent license obtained for a version of the library must be consistent with the full freedom of use specified in this license.

Most GNU software, including some libraries, is covered by the ordinary GNU General Public License. This license, the GNU Lesser General Public License, applies to certain designated libraries, and is quite different from the ordinary General Public License. We use this license for certain libraries in order to permit linking those libraries into non-free programs.

When a program is linked with a library, whether statically or using a shared library, the combination of the two is legally speaking a combined work, a derivative of the original library. The ordinary General Public License therefore permits such linking only if the entire combination fits its criteria of freedom. The Lesser General Public License permits more lax criteria for linking other code with the library.

We call this license the "Lesser" General Public License because it does Less to protect the user's freedom than the ordinary General Public License. It also provides other free software developers Less of an advantage over competing non-free programs. These disadvantages are the reason we use the ordinary General Public License for many libraries. However, the Lesser license provides advantages in certain special circumstances.

For example, on rare occasions, there may be a special need to encourage the widest possible use of a certain library, so that it becomes a de-facto standard. To achieve this, non-free programs must be allowed to use the library. A more frequent case is that a free library does the same job as widely used non-free libraries. In this case, there is little to gain by limiting the free library to free software only, so we use the Lesser General Public License.

In other cases, permission to use a particular library in non-free programs enables a greater number of people to use a large body of free software. For example, permission to use the GNU C Library in non-free programs enables many more people to use the whole GNU operating system, as well as its variant, the GNU/Linux operating system.

Although the Lesser General Public License is Less protective of the users' freedom, it does ensure that the user of a program that is linked with the Library has the freedom and the wherewithal to run that program using a modified version of the Library.

The precise terms and conditions for copying, distribution and modification follow. Pay close attention to the difference between a "work based on the library" and a "work that uses the library". The former contains code derived from the library, whereas the latter must be combined with the library in order to run.

TERMS AND CONDITIONS FOR COPYING, DISTRIBUTION AND MODIFICATION 0. This License Agreement applies to any software library or other program which contains a notice placed by the copyright holder or other authorized party saying it may be distributed under the terms of this Lesser General Public License (also called "this License"). Each licensee is addressed as "you".

A "library" means a collection of software functions and/or data prepared so as to be conveniently linked with application programs (which use some of those functions and data) to form executables.

The "Library", below, refers to any such software library or work which has been distributed under these terms. A "work based on the Library" means either the Library or any derivative work under copyright law; that is to say, a work containing the Library or a portion of it, either verbatim or with modifications and/or translated straightforwardly into another language. (Hereinafter, translation is included without limitation in the term "modification".)

"Source code" for a work means the preferred form of the work for making modifications to it. For a library, complete source code means all the source code for all modules it contains, plus any associated interface definition files, plus the scripts used to control compilation and installation of the library.

Activities other than copying, distribution and modification are not covered by this License; they are outside its scope. The act of running a program using the Library is not restricted, and output from such a program is covered only if its contents constitute a work based on the Library (independent of the use of the Library in a tool for writing it). Whether that is true depends on what the Library does and what the program that uses the Library does.

1. You may copy and distribute verbatim copies of the Library's complete source code as you receive it, in any medium, provided that you conspicuously and appropriately publish on each copy an appropriate copyright notice and disclaimer of warranty; keep intact all the notices that refer to this License and to the absence of any warranty; and distribute a copy of this License along with the Library.

You may charge a fee for the physical act of transferring a copy, and you may at your option offer warranty protection in exchange for a fee.

2. You may modify your copy or copies of the Library or any portion of it, thus forming a work based on the Library, and copy and distribute such modifications or work under the terms of Section 1 above, provided that you also meet all of these conditions:

* a) The modified work must itself be a software library.

* b) You must cause the files modified to carry prominent notices stating that you changed the files and the date of any change.

* c) You must cause the whole of the work to be licensed at no charge to all third parties under the terms of this License.

* d) If a facility in the modified Library refers to a function or a table of data to be supplied by an application program that uses the facility, other than as an argument passed when the facility is invoked, then you must make a good faith effort to ensure that, in the event an application does not supply such function or table, the facility still operates, and performs whatever part of its purpose remains meaningful.

(For example, a function in a library to compute square roots has a purpose that is entirely well-defined independent of the application. Therefore, subsection 2d requires that any application-supplied function or table used by this function must be optional: if the application does not supply it, the square root function must still compute square roots.)

These requirements apply to the modified work as a whole. If identifiable sections of that work are not derived from the Library, and can be reasonably considered independent and separate works in themselves, then this License, and its terms, do not apply to those sections when you distribute them as separate works. But when you distribute the same sections as part of a whole which is a work based on the Library, the distribution of the whole must be on the terms of this License, whose permissions for other licensees extend to the entire whole, and thus to each and every part regardless of who wrote it.

Thus, it is not the intent of this section to claim rights or contest your rights to work written entirely by you; rather, the intent is to exercise the right to control the distribution of derivative or collective works based on the Library.

In addition, mere aggregation of another work not based on the Library with the Library (or with a work based on the Library) on a volume of a storage or distribution medium does not bring the other work under the scope of this License.

3. You may opt to apply the terms of the ordinary GNU General Public License instead of this License to a given copy of the Library. To do this, you must alter all the notices that refer to this License, so that they refer to the ordinary GNU General Public License, version 2, instead of to this License. (If a newer version than version 2 of the ordinary GNU General Public License has appeared, then you can specify that version instead if you wish.) Do not make any other change in these notices.

Once this change is made in a given copy, it is irreversible for that copy, so the ordinary GNU General Public License applies to all subsequent copies and derivative works made from that copy.

This option is useful when you wish to copy part of the code of the Library into a program that is not a library.

4. You may copy and distribute the Library (or a portion or derivative of it, under Section 2) in object code or executable form under the terms of Sections 1 and 2 above provided that you accompany it with the complete corresponding machine-readable source code, which must be distributed under the terms of Sections 1 and 2 above on a medium customarily used for software interchange.

If distribution of object code is made by offering access to copy from a designated place, then offering equivalent access to copy the source code from the same place satisfies the requirement to distribute the source code, even though third parties are not compelled to copy the source along with the object code.

5. A program that contains no derivative of any portion of the Library, but is designed to work with the Library by being compiled or linked with it, is called a "work that uses the Library". Such a work, in isolation, is not a derivative work of the Library, and therefore falls outside the scope of this License.

However, linking a "work that uses the Library" with the Library creates an executable that is a derivative of the Library (because it contains portions of the Library), rather than a "work that uses the library". The executable is therefore covered by this License. Section 6 states terms for distribution of such executables.

When a "work that uses the Library" uses material from a header file that is part of the Library, the object code for the work may be a derivative work of the Library even though the source code is not. Whether this is true is especially significant if the work can be linked without the Library, or if the work is itself a library. The threshold for this to be true is not precisely defined by law.

If such an object file uses only numerical parameters, data structure layouts and accessors, and small macros and small inline functions (ten lines or less in length), then the use of the object file is unrestricted, regardless of whether it is legally a derivative work. (Executables containing this object code plus portions of the Library will still fall under Section 6.)

Otherwise, if the work is a derivative of the Library, you may distribute the object code for the work under the terms of Section 6. Any executables containing that work also fall under Section 6, whether or not they are linked directly with the Library itself.

6. As an exception to the Sections above, you may also combine or link a "work that uses the Library" with the Library to produce a work containing portions of the Library, and distribute that work under terms of your choice, provided that the terms permit modification of the work for the customer's own use and reverse engineering for debugging such modifications.

You must give prominent notice with each copy of the work that the Library is used in it and that the Library and its use are covered by this License. You must supply a copy of this License. If the work during execution displays copyright notices, you must include the copyright notice for the Library among them, as well as a reference directing the user to the copy of this License. Also, you must do one of these things:

* a) Accompany the work with the complete corresponding machine-readable source code for the Library including whatever changes were used in the work (which must be distributed under Sections 1 and 2 above); and, if the work is an executable linked with the Library, with the complete machine-readable "work that uses the Library", as object code and/or source code, so that the user can modify the Library and then relink to produce a modified executable containing the modified Library. (It is understood that the user who changes the contents of definitions files in the Library will not necessarily be able to recompile the application to use the modified definitions.)

* b) Use a suitable shared library mechanism for linking with the Library. A suitable mechanism is one that (1) uses at run time a copy of the library already present on the user's computer system, rather than copying library functions into the executable, and (2) will operate properly with a modified version of the library, if the user installs one, as long as the modified version is interface-compatible with the version that the work was made with.

* c) Accompany the work with a written offer, valid for at least three years, to give the same user the materials specified in subsection 6a, above, for a charge no more than the cost of performing this distribution.

* d) If distribution of the work is made by offering access to copy from a designated place, offer equivalent access to copy the above specified materials from the same place.

* e) Verify that the user has already received a copy of these materials or that you have already sent this user a copy.

For an executable, the required form of the "work that uses the Library" must include any data and utility programs needed for reproducing the executable from it. However, as a special exception, the materials to be distributed need not include anything that is normally distributed (in either source or binary form) with the major components (compiler, kernel, and so on) of the operating system on which the executable runs, unless that component itself accompanies the executable.

It may happen that this requirement contradicts the license restrictions of other proprietary libraries that do not normally accompany the operating system. Such a contradiction means you cannot use both them and the Library together in an executable that you distribute.

7. You may place library facilities that are a work based on the Library side-by-side in a single library together with other library facilities not covered by this License, and distribute such a combined library, provided that the separate distribution of the work based on the Library and of the other library facilities is otherwise permitted, and provided that you do these two things:

* a) Accompany the combined library with a copy of the same work based on the Library, uncombined with any other library facilities. This must be distributed under the terms of the Sections above.

* b) Give prominent notice with the combined library of the fact that part of it is a work based on the Library, and explaining where to find the accompanying uncombined form of the same work.

8. You may not copy, modify, sublicense, link with, or distribute the Library except as expressly provided under this License. Any attempt otherwise to copy, modify, sublicense, link with, or distribute the Library is void, and will automatically terminate your rights under this License. However, parties who have received copies, or rights, from you under this License will not have their licenses terminated so long as such parties remain in full compliance.

9. You are not required to accept this License, since you have not signed it. However, nothing else grants you permission to modify or distribute the Library or its derivative works. These actions are prohibited by law if you do not accept this License. Therefore, by modifying or distributing the Library (or any work based on the Library), you indicate your acceptance of this License to do so, and all its terms and conditions for copying, distributing or modifying the Library or works based on it.

10. Each time you redistribute the Library (or any work based on the Library), the recipient automatically receives a license from the original licensor to copy, distribute, link with or modify the Library subject to these terms and conditions. You may not impose any further restrictions on the recipients' exercise of the rights granted herein. You are not responsible for enforcing compliance by third parties with this License.

11. If, as a consequence of a court judgment or allegation of patent infringement or for any other reason (not limited to patent issues), conditions are imposed on you (whether by court order, agreement or otherwise) that contradict the conditions of this License, they do not excuse you from the conditions of this License. If you cannot distribute so as to satisfy simultaneously your obligations under this License and any other pertinent obligations, then as a consequence you may not distribute the Library at all. For example, if a patent license would not permit royalty-free redistribution of the Library by all those who receive copies directly or indirectly through you, then the only way you could satisfy both it and this License would be to refrain entirely from distribution of the Library.

If any portion of this section is held invalid or unenforceable under any particular circumstance, the balance of the section is intended to apply, and the section as a whole is intended to apply in other circumstances.

It is not the purpose of this section to induce you to infringe any patents or other property right claims or to contest validity of any such claims; this section has the sole purpose of protecting the integrity of the free software distribution system which is implemented by public license practices. Many people have made generous contributions to the wide range of software distributed through that system in reliance on consistent application of that system; it is up to the author/donor to decide if he or she is willing to distribute software through any other system and a licensee cannot impose that choice.

This section is intended to make thoroughly clear what is believed to be a consequence of the rest of this License.

12. If the distribution and/or use of the Library is restricted in certain countries either by patents or by copyrighted interfaces, the original copyright holder who places the Library under this License may add an explicit geographical distribution limitation excluding those countries, so that distribution is permitted only in or among countries not thus excluded. In such case, this License incorporates the limitation as if written in the body of this License.

13. The Free Software Foundation may publish revised and/or new versions of the Lesser General Public License from time to time. Such new versions will be similar in spirit to the present version, but may differ in detail to address new problems or concerns.

Each version is given a distinguishing version number. If the Library specifies a version number of this License which applies to it and "any later version", you have the option of following the terms and conditions either of that version or of any later version published by the Free Software Foundation. If the Library does not specify a license version number, you may choose any version ever published by the Free Software Foundation.

14. If you wish to incorporate parts of the Library into other free programs whose distribution conditions are incompatible with these, write to the author to ask for permission. For software which is copyrighted by the Free Software Foundation, write to the Free Software Foundation; we sometimes make exceptions for this. Our decision will be guided by the two goals of preserving the free status of all derivatives of our free software and of promoting the sharing and reuse of software generally.

NO WARRANTY 15. BECAUSE THE LIBRARY IS LICENSED FREE OF CHARGE, THERE IS NO WARRANTY FOR THE LIBRARY, TO THE EXTENT PERMITTED BY APPLICABLE LAW. EXCEPT WHEN OTHERWISE STATED IN WRITING THE COPYRIGHT HOLDERS AND/OR OTHER PARTIES PROVIDE THE LIBRARY "AS IS" WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EITHER EXPRESSED OR IMPLIED, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. THE ENTIRE RISK AS TO THE QUALITY AND PERFORMANCE OF THE LIBRARY IS WITH YOU. SHOULD THE LIBRARY PROVE DEFECTIVE, YOU ASSUME THE COST OF ALL NECESSARY SERVICING, REPAIR OR CORRECTION.

16. IN NO EVENT UNLESS REQUIRED BY APPLICABLE LAW OR AGREED TO IN WRITING WILL ANY COPYRIGHT HOLDER, OR ANY OTHER PARTY WHO MAY MODIFY AND/OR REDISTRIBUTE THE LIBRARY AS PERMITTED ABOVE, BE LIABLE TO YOU FOR DAMAGES, INCLUDING ANY GENERAL, SPECIAL, INCIDENTAL OR CONSEQUENTIAL DAMAGES ARISING OUT OF THE USE OR INABILITY TO USE THE LIBRARY (INCLUDING BUT NOT LIMITED TO LOSS OF DATA OR DATA BEING RENDERED INACCURATE OR LOSSES SUSTAINED BY YOU OR THIRD PARTIES OR A FAILURE OF THE LIBRARY TO OPERATE WITH ANY OTHER SOFTWARE), EVEN IF SUCH HOLDER OR OTHER PARTY HAS BEEN ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGES.

END OF TERMS AND CONDITIONS

How to Apply These Terms to Your New Libraries If you develop a new library, and you want it to be of the greatest possible use to the public, we recommend making it free software that everyone can redistribute and change. You can do so by permitting redistribution under these terms (or, alternatively, under the terms of the ordinary General Public License).

To apply these terms, attach the following notices to the library. It is safest to attach them to the start of each source file to most effectively convey the exclusion of warranty; and each file should have at least the "copyright" line and a pointer to where the full notice is found.

< one line to give the library's name and a brief idea of what it does. > Copyright (C) < year > < name of author > This library is free software; you can redistribute it and/or modify it under the terms of the GNU Lesser General Public License as published by the Free Software Foundation; either version 2.1 of the License, or (at your option) any later version.

This library is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU Lesser General Public License for more details.

You should have received a copy of the GNU Lesser General Public License along with this library; if not, write to the Free Software Foundation, Inc., 59 Temple Place, Suite 330, Boston, MA 02111-1307 USA

Also add information on how to contact you by electronic and paper mail.

You should also get your employer (if you work as a programmer) or your school, if any, to sign a "copyright disclaimer" for the library, if necessary. Here is a sample; alter the names:

Yoyodyne, Inc., hereby disclaims all copyright interest in the library 'Frob' (a library for tweaking knobs) written by James Random Hacker.

< signature of Ty Coon >, 1 April 1990 Ty Coon, President of Vice
That's all there is to it!

C.2.3 JFontChooser のライセンス

Copyright 2003-2004 Masahiko SAWAI All Rights Reserved.

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the "Software"), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software. THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.

C.2.4 SkinLF のライセンス

```
/* =====
 *
 * Skin Look And Feel License.
 *
 * Copyright (c) 2000-2002 L2FProd.com. All rights reserved.
 *
 * Redistribution and use in source and binary forms, with or without
 * modification, are permitted provided that the following conditions
 * are met:
 *
 * 1. Redistributions of source code must retain the above copyright
 * notice, this list of conditions and the following disclaimer.
 *
 * 2. Redistributions in binary form must reproduce the above copyright
 * notice, this list of conditions and the following disclaimer in
 * the documentation and/or other materials provided with the
 * distribution.
 *
 * 3. The end-user documentation included with the redistribution, if
 * any, must include the following acknowledgement:
 * "This product includes software developed by L2FProd.com
 * (http://www.L2FProd.com/)."
 * Alternately, this acknowledgement may appear in the software itself,
 * if and wherever such third-party acknowledgements normally appear.
 *
 * 4. The names "Skin Look And Feel", "SkinLF" and "L2FProd.com" must not
 * be used to endorse or promote products derived from this software
 * without prior written permission. For written permission, please
 * contact information at L2FProd.com.
 *
 * 5. Products derived from this software may not be called "SkinLF"
 * nor may "SkinLF" appear in their names without prior written
 * permission of L2FProd.com.
 *
 * THIS SOFTWARE IS PROVIDED 'AS IS' AND ANY EXPRESSED OR IMPLIED
 * WARRANTIES, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES
 * OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE ARE
 * DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL L2FPROD.COM OR ITS CONTRIBUTORS BE
 * LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL, SPECIAL, EXEMPLARY, OR
 * CONSEQUENTIAL DAMAGES (INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF
 * SUBSTITUTE GOODS OR SERVICES; LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR
 * BUSINESS INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF LIABILITY,
 * WHETHER IN CONTRACT, STRICT LIABILITY, OR TORT (INCLUDING NEGLIGENCE
 * OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE USE OF THIS SOFTWARE,
 * EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGE.
 * =====
 */
```

C.2.5 gnuplot のライセンス

```
/*[
 * Copyright 1986 - 1993, 1998, 2004 Thomas Williams, Colin Kelley
 *
 * Permission to use, copy, and distribute this software and its
 * documentation for any purpose with or without fee is hereby granted,
 * provided that the above copyright notice appear in all copies and
 * that both that copyright notice and this permission notice appear
 * in supporting documentation.
 *
 * Permission to modify the software is granted, but not the right to
 * distribute the complete modified source code. Modifications are to
 * be distributed as patches to the released version. Permission to
 * distribute binaries produced by compiling modified sources is granted,
 * provided you
 *
 * 1. distribute the corresponding source modifications from the
 * released version in the form of a patch file along with the binaries,
 *
 * 2. add special version identification to distinguish your version
 * in addition to the base release version number,
 *
 * 3. provide your name and address as the primary contact for the
 * support of your modified version, and
 *
 * 4. retain our contact information in regard to use of the base
 * software.
```

```

* Permission to distribute the released version of the source code along
* with corresponding source modifications in the form of a patch file is
* granted with same provisions 2 through 4 for binary distributions.
*
* This software is provided "as is" without express or implied warranty
* to the extent permitted by applicable law.
]*/

```

C.2.6 Apache ライセンス

Apache License
Version 2.0, January 2004
<http://www.apache.org/licenses/>

TERMS AND CONDITIONS FOR USE, REPRODUCTION, AND DISTRIBUTION

1. Definitions.

"License" shall mean the terms and conditions for use, reproduction, and distribution as defined by Sections 1 through 9 of this document.

"Licensor" shall mean the copyright owner or entity authorized by the copyright owner that is granting the License.

"Legal Entity" shall mean the union of the acting entity and all other entities that control, are controlled by, or are under common control with that entity. For the purposes of this definition, "control" means (i) the power, direct or indirect, to cause the direction or management of such entity, whether by contract or otherwise, or (ii) ownership of fifty percent (50%) or more of the outstanding shares, or (iii) beneficial ownership of such entity.

"You" (or "Your") shall mean an individual or Legal Entity exercising permissions granted by this License.

"Source" form shall mean the preferred form for making modifications, including but not limited to software source code, documentation source, and configuration files.

"Object" form shall mean any form resulting from mechanical transformation or translation of a Source form, including but not limited to compiled object code, generated documentation, and conversions to other media types.

"Work" shall mean the work of authorship, whether in Source or Object form, made available under the License, as indicated by a copyright notice that is included in or attached to the work (an example is provided in the Appendix below).

"Derivative Works" shall mean any work, whether in Source or Object form, that is based on (or derived from) the Work and for which the editorial revisions, annotations, elaborations, or other modifications represent, as a whole, an original work of authorship. For the purposes of this License, Derivative Works shall not include works that remain separable from, or merely link (or bind by name) to the interfaces of, the Work and Derivative Works thereof.

"Contribution" shall mean any work of authorship, including the original version of the Work and any modifications or additions to that Work or Derivative Works thereof, that is intentionally submitted to Licensor for inclusion in the Work by the copyright owner or by an individual or Legal Entity authorized to submit on behalf of the copyright owner. For the purposes of this definition, "submitted" means any form of electronic, verbal, or written communication sent to the Licensor or its representatives, including but not limited to communication on electronic mailing lists, source code control systems, and issue tracking systems that are managed by, or on behalf of, the Licensor for the purpose of discussing and improving the Work, but excluding communication that is conspicuously marked or otherwise designated in writing by the copyright owner as "Not a Contribution."

"Contributor" shall mean Licensor and any individual or Legal Entity on behalf of whom a Contribution has been received by Licensor and subsequently incorporated within the Work.

2. Grant of Copyright License. Subject to the terms and conditions of this License, each Contributor hereby grants to You a perpetual, worldwide, non-exclusive, no-charge, royalty-free, irrevocable copyright license to reproduce, prepare Derivative Works of, publicly display, publicly perform, sublicense, and distribute the Work and such Derivative Works in Source or Object form.
3. Grant of Patent License. Subject to the terms and conditions of this License, each Contributor hereby grants to You a perpetual, worldwide, non-exclusive, no-charge, royalty-free, irrevocable (except as stated in this section) patent license to make, have made, use, offer to sell, sell, import, and otherwise transfer the Work, where such license applies only to those patent claims licensable by such Contributor that are necessarily infringed by their

Contribution(s) alone or by combination of their Contribution(s) with the Work to which such Contribution(s) was submitted. If You institute patent litigation against any entity (including a cross-claim or counterclaim in a lawsuit) alleging that the Work or a Contribution incorporated within the Work constitutes direct or contributory patent infringement, then any patent licenses granted to You under this License for that Work shall terminate as of the date such litigation is filed.

4. Redistribution. You may reproduce and distribute copies of the Work or Derivative Works thereof in any medium, with or without modifications, and in Source or Object form, provided that You meet the following conditions:
 - (a) You must give any other recipients of the Work or Derivative Works a copy of this License; and
 - (b) You must cause any modified files to carry prominent notices stating that You changed the files; and
 - (c) You must retain, in the Source form of any Derivative Works that You distribute, all copyright, patent, trademark, and attribution notices from the Source form of the Work, excluding those notices that do not pertain to any part of the Derivative Works; and
 - (d) If the Work includes a "NOTICE" text file as part of its distribution, then any Derivative Works that You distribute must include a readable copy of the attribution notices contained within such NOTICE file, excluding those notices that do not pertain to any part of the Derivative Works, in at least one of the following places: within a NOTICE text file distributed as part of the Derivative Works; within the Source form or documentation, if provided along with the Derivative Works; or, within a display generated by the Derivative Works, if and wherever such third-party notices normally appear. The contents of the NOTICE file are for informational purposes only and do not modify the License. You may add Your own attribution notices within Derivative Works that You distribute, alongside or as an addendum to the NOTICE text from the Work, provided that such additional attribution notices cannot be construed as modifying the License.

You may add Your own copyright statement to Your modifications and may provide additional or different license terms and conditions for use, reproduction, or distribution of Your modifications, or for any such Derivative Works as a whole, provided Your use, reproduction, and distribution of the Work otherwise complies with the conditions stated in this License.

5. Submission of Contributions. Unless You explicitly state otherwise, any Contribution intentionally submitted for inclusion in the Work by You to the Licensor shall be under the terms and conditions of this License, without any additional terms or conditions. Notwithstanding the above, nothing herein shall supersede or modify the terms of any separate license agreement you may have executed with Licensor regarding such Contributions.
6. Trademarks. This License does not grant permission to use the trade names, trademarks, service marks, or product names of the Licensor, except as required for reasonable and customary use in describing the origin of the Work and reproducing the content of the NOTICE file.
7. Disclaimer of Warranty. Unless required by applicable law or agreed to in writing, Licensor provides the Work (and each Contributor provides its Contributions) on an "AS IS" BASIS, WITHOUT WARRANTIES OR CONDITIONS OF ANY KIND, either express or implied, including, without limitation, any warranties or conditions of TITLE, NON-INFRINGEMENT, MERCHANTABILITY, or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. You are solely responsible for determining the appropriateness of using or redistributing the Work and assume any risks associated with Your exercise of permissions under this License.
8. Limitation of Liability. In no event and under no legal theory, whether in tort (including negligence), contract, or otherwise, unless required by applicable law (such as deliberate and grossly negligent acts) or agreed to in writing, shall any Contributor be liable to You for damages, including any direct, indirect, special, incidental, or consequential damages of any character arising as a result of this License or out of the use or inability to use the Work (including but not limited to damages for loss of goodwill, work stoppage, computer failure or malfunction, or any and all other commercial damages or losses), even if such Contributor has been advised of the possibility of such damages.
9. Accepting Warranty or Additional Liability. While redistributing the Work or Derivative Works thereof, You may choose to offer, and charge a fee for, acceptance of support, warranty, indemnity, or other liability obligations and/or rights consistent with this License. However, in accepting such obligations, You may act only on Your own behalf and on Your sole responsibility, not on behalf of any other Contributor, and only if You agree to indemnify,

defend, and hold each Contributor harmless for any liability incurred by, or claims asserted against, such Contributor by reason of your accepting any such warranty or additional liability.

END OF TERMS AND CONDITIONS

APPENDIX: How to apply the Apache License to your work.

To apply the Apache License to your work, attach the following boilerplate notice, with the fields enclosed by brackets "[]" replaced with your own identifying information. (Don't include the brackets!) The text should be enclosed in the appropriate comment syntax for the file format. We also recommend that a file or class name and description of purpose be included on the same "printed page" as the copyright notice for easier identification within third-party archives.

Copyright [yyyy] [name of copyright owner]

Licensed under the Apache License, Version 2.0 (the "License");
you may not use this file except in compliance with the License.
You may obtain a copy of the License at

<http://www.apache.org/licenses/LICENSE-2.0>

Unless required by applicable law or agreed to in writing, software distributed under the License is distributed on an "AS IS" BASIS, WITHOUT WARRANTIES OR CONDITIONS OF ANY KIND, either express or implied. See the License for the specific language governing permissions and limitations under the License.

C.2.7 JSch のライセンス

Copyright (c) 2002,2003,2004,2005,2006 Atsuhiko Yamanaka, JCraft, Inc.
All rights reserved.

Redistribution and use in source and binary forms, with or without modification, are permitted provided that the following conditions are met:

1. Redistributions of source code must retain the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer.
2. Redistributions in binary form must reproduce the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer in the documentation and/or other materials provided with the distribution.
3. The names of the authors may not be used to endorse or promote products derived from this software without specific prior written permission.

THIS SOFTWARE IS PROVIDED 'AS IS' AND ANY EXPRESSED OR IMPLIED WARRANTIES, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE ARE DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL JCRAFT, INC. OR ANY CONTRIBUTORS TO THIS SOFTWARE BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL, SPECIAL, EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL DAMAGES (INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR SERVICES; LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF LIABILITY, WHETHER IN CONTRACT, STRICT LIABILITY, OR TORT (INCLUDING NEGLIGENCE OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE USE OF THIS SOFTWARE, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGE.