

等高線の作図

Program 名 cont3d.exe

2010-1-26 H.M.

MEM 解析の PRIMA を実行 → 3次元原子密度ファイル ○△□.pri
→ VESTA で3次元表示 → 等高線表示も出来る

しかしながら、原子密度の2次元あるいは1次元データを直接扱いたいこともある。その時は、VESTA のファイルメニューから Export Data → General volumetric data 3d → ○△□.3ed

↓

C:\Yusr\work\cont3d.exe

Cont3d, 2010, Jan. 25, csv-out

This program gives 2-dim. array of electron(nuclear) density data

** tentatively data size limit: 0-128

Input original density file *.3ed =DEMO0125.3ed

Read title=DEMO20100125 NaNO2 at 296K by FONDER Dec. 2007

Lattice constants= 3.57510 5.43260 5.58440 90.00000 90.00000 90.00000

pixel numbers= 21 31 33

Read density number= 21483

Now data is loading. Wait for a moment!

Output file is compatible to GraphR csv-format

If c-cut, then a-vertical, b-horizontal.

Select cut plane 3=c-cut, 2=b-cut, 1=a-cut ?=1

Output file name ?=Demo0125.csv

Cut plane=x, vertical=y, horizontal=z

input x, y & z range as 10,11,0,15,0,16 ?=10,10,0,30,0,32

どの軸に垂直な断面を見るかを1,2,3で指定する。指定値がこの範囲でないときは、元データのモニターが出来る。

切口(断面)をx, 下方をy, 水平をz軸とし、ピクセル位置で切り取る範囲を指定する。入力例では切口は10から10の1層。y方向には0から30の31行, z方向には0から32の33列。すなわち単位胞の $x=10/20=0.5$, $0 \leq y \leq 30/30=1$, $0 \leq z \leq 32/32=1$ の範囲を出力している。

上記の例で下線で示した部分が入力であり、出力ファイルをエクセルで処理すると、次のような等高線が描けるし、この2次元データを適当に切り取れば、1次元データとなる。

留意点: ○△□.3edには1PE15.6のFORMATで原子密度が書かれているが、これを四捨五入してF8.2のFORMATで書き出している。

MEMで20×30×32分割で計算した上例では、単位胞の原点を(0,0,0)、体対角線位置を(20,30,32)のpixelとしているので、データ総数(pixel numbers)は21×31×33となる。

