

演 題	Java 3D による結晶点群の可視化プログラムの作成	
発 表 者 (所 属)	○Nor Azillah Fatimah、藤井秀彦、野口文雄、小林秀彦(埼玉大工)	
連 絡 先	〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255 埼玉大学工学部応用化学科 Tel/FAX 048-858-3536, e-mail: noguchi@apc.saitama-u.ac.jp	
キーワード		
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 等	汎用の結晶儀ソフトウェア開発の基礎コードとして、ユーザー入力の恒等元の座標から、3 2 点群の一般同価点の極点座標を生成し、ステレオ投影法の参照球上に極点を3次元表示するとともにステレオ投影図も出力する。	
環 境	適 応 機 種 名	Java Virtual Machine(JVM)が作動する機種
	O S 名	Windows, Linux, MacOS など JVM が装備された OS
	ソ ー ス 言 語	Java
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い)	・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ○未定	具 体 的 方 法

1 はじめに

結晶には並進対称（繰り返しの対称）があるため、結晶の回転軸の種類は1, 2, 3, 4, 6回軸に限定され、これに対称心、鏡映面および4回反軸が加わったものが結晶の基本対称要素である。この基本対称要素の組み合わせは3 2種類の結晶点群（晶族）として知られている。結晶の対称操作を理解するには、点群のステレオ投影図を利用することが有力な手段となる。しかし、2次元のステレオ投影図から3次元の同価点配置を連想するには熟練を要する。そこで、ユーザー入力の恒等元の座標にもとづいて同価点座標を自動生成し、ステレオ投影法の参照球の表面に一般同価点の極点を表示した3次元画像およびそれに対応するステレオ投影図も出力できるソフトウェアを開発した。また、当研究室で開発した結晶構造可視化ソフトウェアから出力される結晶多面体の座標データを読みとり、任意の結晶面を指定して作成される各種の結晶多面体を参照球とともに3次元表示する結晶儀の機能も付与した。

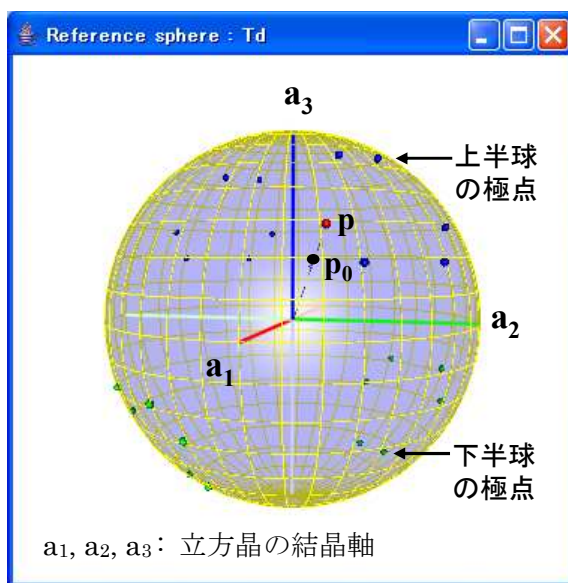
2 プログラミングの方法

プログラミングでは、Java 1.4.2 および Java3D を組み込んだ Eclipse を統合開発環境とした。参照球および結晶多面体の描画には Java3D を利用することで、半透明色の利用、環境光設定等による高画

質な出力およびマウスの操作性（回転・遠近ズーム）に優れたソフトウェアとした。ステレオ投影図の出力では、本来が2次元の図であるためJava2Dを利用し多彩な2次元描画機能により、同価点および対称要素の符号を描画した。

3 出力例

恒等元の座標を $P_0(0.5, 0.3, 0.2)$ とした点群 T_d の参照球上での一般同価点の極を表示した3次元画像（図1）には、この点の座標が一般同価点の座標であることから、点群 T_d の位数24と同数の極点が描画された。この場合のステレオ投影図（図2）には6個の極点の集合が参照球の上半球の点として、第1、3象限に描画され、第2、4象限には下半球の点として同様な極点の集合が描画されており、各6個の極点の集合は、中央の4回反対称軸による対称操作を満たしていることが容易に読みとれる。正四面体の対称性は点群 T_d に所属するが、このことは参照球内に正四面体を配置した結晶儀画像（図3）の(111)面の極の配置から6個の極点が一箇の極点に重なり4個にまで減少することから分かる。



p_0 : ユーザー入力座標の点, p : 恒等元の極

図1 点群 T_d の参照球上の極点配置

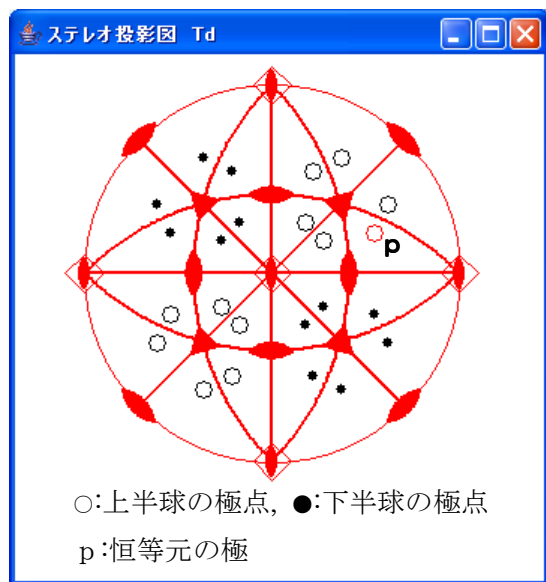


図2 点群 T_d のステレオ投影図

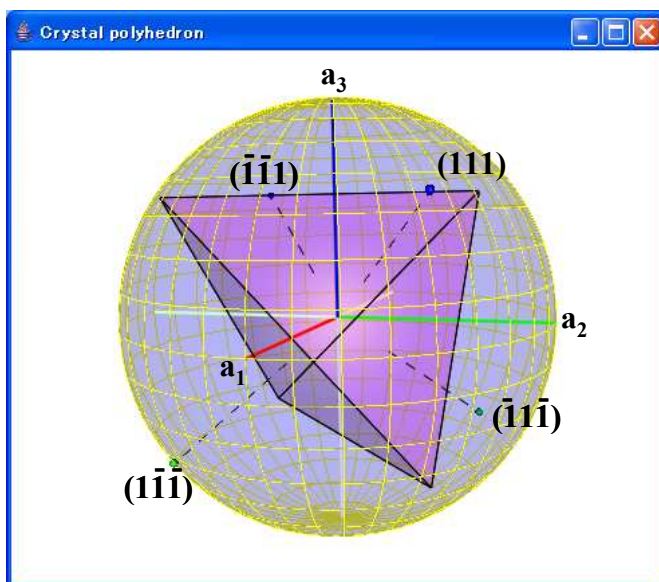


図3 正四面体の結晶儀画像

4 今後の課題と展望

多面体データファイルに依存せず、結晶面のユーザー指定により多様な多面体データを自動生成する機能を持たせることが望まれる。また、対称操作の積演算の結果を3次元画像上でモニター・認識できる機能を搭載させ、群論の入門者が、対称操作を視覚的に理解できる学習用ソフトウェアに仕上げたい。