

六面体メッシュ法による計算化学のための曲面可視化

○吉永崇、野口文雄、小林秀彦

埼玉大学工学部応用化学科(〒338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255)

【緒言】原子軌道やフェルミ面などは、式をただでその形状を捉えることは困難であるため、その形状をコンピュータ上で可視化することは有用である。そこで本研究では六面体メッシュ法を用いた曲面の可視化プログラムをC#を用いて作成し、VRMLで可視化を行った。

【方法】曲面の表現はその面上にある点の空間座標を複数求め、これらの点を頂点とする三角形を割り当てることで可能である。しかし、算出された数万個の点をもとに適切な三角形のパッチを割り当てることは容易ではない。そこで、図1に示すように空間を微小六面体に切り分け、各六面体の辺と曲面との交点を算出する。そして、この算出された数個の点をもとに六面体の内部で三角パッチを作成し、曲面を作成した。

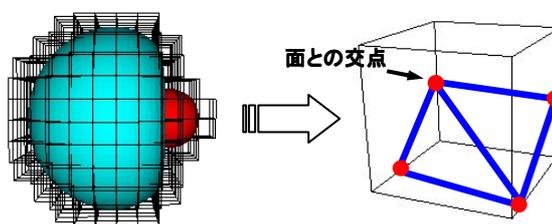


図1. 空間の切り分けと三角形の割り当て

この手法では、空間を切り分ける六面体を小さくすればより滑らかに曲面を表現することが可能である。しかし、始めから細かいメッシュを作成すると計算の無駄が多くなり、三角形のデータの作成に多くの時間を要する。そこで、最初はある程度大きな六面体メッシュを作成し、その内部に曲面を含むメッシュだけをさらに細かなメッシュに分割していく方法を考案・実装した(図2)。

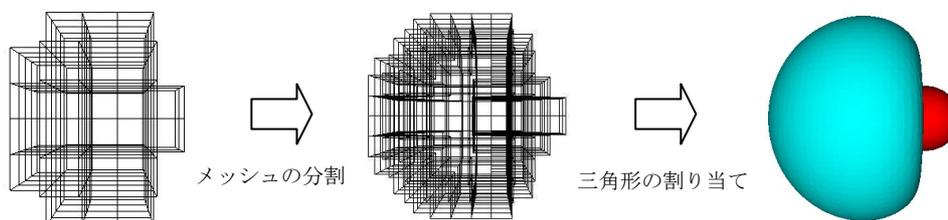


図2. 可視化の過程

【結果】出力例として面心立方格子(fcc)、単純立方格子(sc)のフェルミ面と水素原子の $5g_{35z^4-30z^2r^2+3r^4}$ 軌道の可視化結果を図3~5にそれぞれ示す。このアルゴリズムでは、無数の点の集合からの曲面生成を六面体内の少数の点から三角形を生成する問題に置き換えているため、容易に未知の形状の曲面を可視化できる汎用性をもつ。そのため、本プログラムはさまざまな化学計算の結果の可視化に応用できると考えられる。

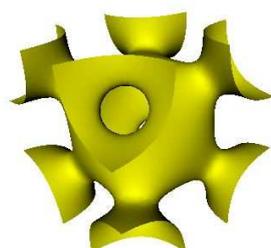


図3. fcc のフェルミ面

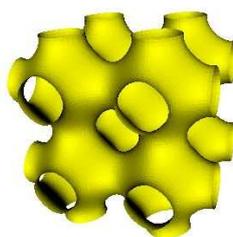


図4. sc のフェルミ面

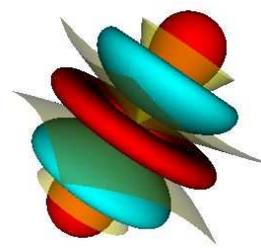


図5. $5g_{35z^4-30z^2r^2+3r^4}$ 軌道と節面