

AtomEye (分子可視化プログラム) の使い方について

2005/12/01 文責

東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻 酒井・泉研究室 小林

1. CUI 操作(キーバインド)など (代表的なもの : 詳しくは上記ページの英語マニュアルを参照にしてください)

注) 全ての操作 (数字の入力は除く) は原子を描くウインドウにフォーカスしておこなってください。

全ての file format 共通操作

全ての key 操作時の変化量は gear box なるもので決められているので、数字[0-9]key を入力することで変化します。Default は 0 です。変化量が大きすぎる場合は 4 とか 5 を入力しましょう。

窓操作

- 終了 : q key
- 別 window で同一ファイルを起動 : F4 key
- load : F9 key → 別 window でファイル名を入力(例えば : 0000.cfg など)
- reload : F10 key
- window サイズ変更 : Ctrl + S → 別 window でサイズ入力(例えば : 512 512 など)

view 操作

- 回転 : $\leftarrow \rightarrow \uparrow \downarrow$ key あるいは mouse の左ドラッグ (操作の reset は u key → upright view へ)
- 拡大・縮小 : Shift + Home / End key あるいは mouse の右ドラッグ
- 回転・拡大・縮小中心(Anchor)の変更 : 右クリックで特定原子・特定ボンドを選択 (デフォルトへの復元は w key) 原子の番号が分かっている場合は f key → 別ターミナル (いろいろ数字が出ている方) で数字を入力
- super cell 全体を平行移動 : Ctrl + $\leftarrow \rightarrow \uparrow \downarrow$ key 又は Ctrl + mouse の左ドラッグ
- PBC 対応で super cell 内の原子を移動 : Shift + $\leftarrow \rightarrow \uparrow \downarrow$ key 又は Shift + mouse の左ドラッグ (操作の reset は z key)

描画操作

- bond の on/off : b key
(cut-off の変更 : r key → 数字 window でペアを入力 (例えば : Si C など) → 描画ウインドウで page up / page down key で変更 → r key ★注 同一原子間には変更できない)
- 原子の大きさの変更 : page up / page down key
- bond の半径の変更 : Home / End key
- super cell の wire frame の on/off : i key

- parallel/perspective view の変更 : tab key
- 特定原子・ボンドを隠す : Cap lock on の状態で右クリック (もとに戻す場合は'o' (オ) key)
- 特定色の原子を隠す : Ctrl + Shift + 右クリックで対応色の任意原子を選択 → 別 window で : -1 0 0 を入力
- 特定原子・ボンドの色を変更する : Cap lock on の状態で Ctrl + Shift + 右クリックで原子を選択 → 別 window で RGB を入力 (例えば : 1.0 1.0 0.5)

色付け操作

- 背景色の指定 : d key → 別 window で RGB の指定(例えば : 1.0 0.0 0.0 など)
- 配位数で着色 : k key
- central symmetry で着色 : Cap lock on の状態で h key
- 拡張 cfg で指定した物理量で着色 : Cap lock on の状態で [0-9,a-f] key -- 最大で 16 個の物理量が指定可能

ファイル保存

- jpeg で保存 : j key → 別 window でファイル名指定(例えば : test.jpg など)
- png で保存 : p key → 別 window でファイル名指定(例えば : test.png など)
- eps で保存 : e key → 別 window でファイル名指定(例えば : test.eps など)

注) 以下の操作では 0000.cfg, 0001.cfg, 00002.cfg...1000.cfg のように連番の時系列ファイルが用意されていることを前提とします。

時系列の表示

- 次の step : Shift + Delete
- 前の step : Shift + Insert
- 最後の step : Ctrl + Delete
- 最初の step : Ctrl + Insert
- step 間隔の調整 : Ctrl + F12 → 別 window で指定 (例えば : 2 など)
- 指定 step への移動

F9 key → 別 window でファイル名を入力(例えば : 0010.cfg など)

アニメーション作成 (AtomEye では Script 操作で jpg ファイルを吐き出すことができます。あとはそれを用いて mpeg や avi にエンコードします)

- ① 上記の方法で window size や view, coloring を指定する。
- ② y key で作成開始 (画質・形式を変更したい場合は script を別途用意する必要がある)
- ③ 吐き出された ./Jpg フォルダ中の /*.jpg ファイルを用いてエンコード

注) ③ 計算機の管理者にお願いして mplyer を入れてもらおうとおもうのでスクリプト処理がそのうちできるようになるはずです。