



XCrySDen ユーザーマニュアル



目次

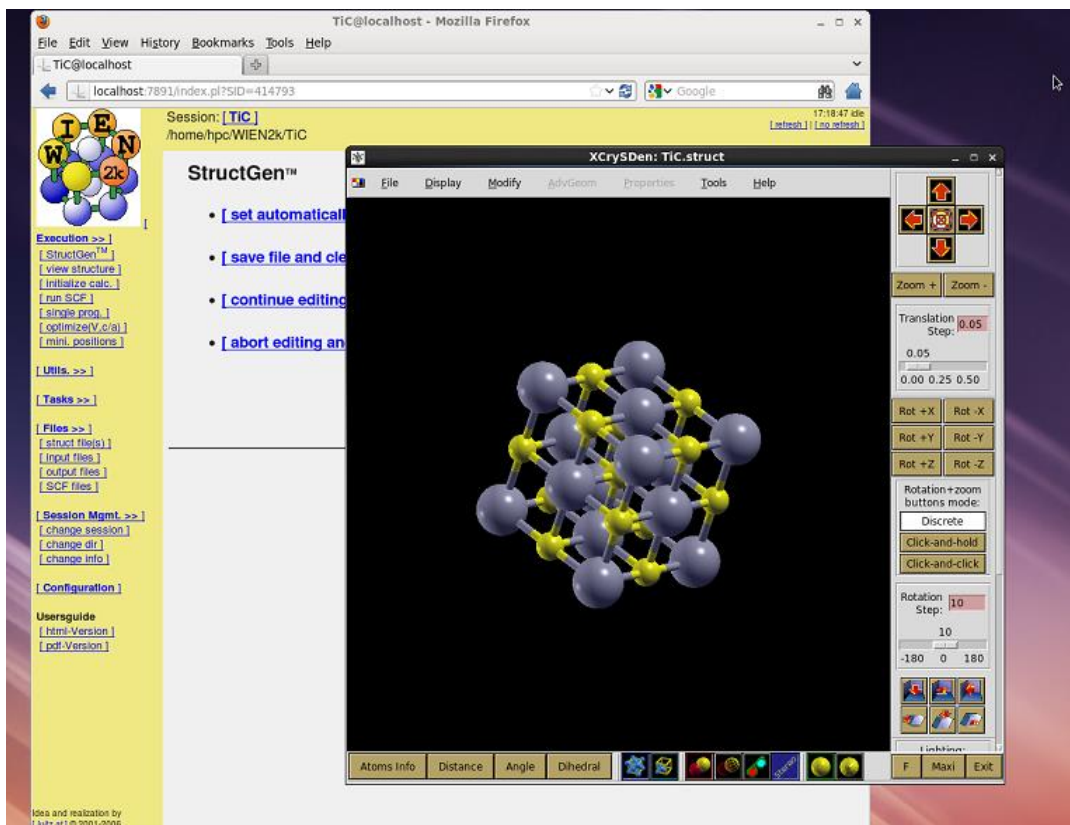
1	XCrySDen について	2
2	XCrySDen インストール概要	4
3	既知の問題点	5
	付録 A	6
	A.1 HPC システムズ お問い合わせ先	6

1 XCrySDen について

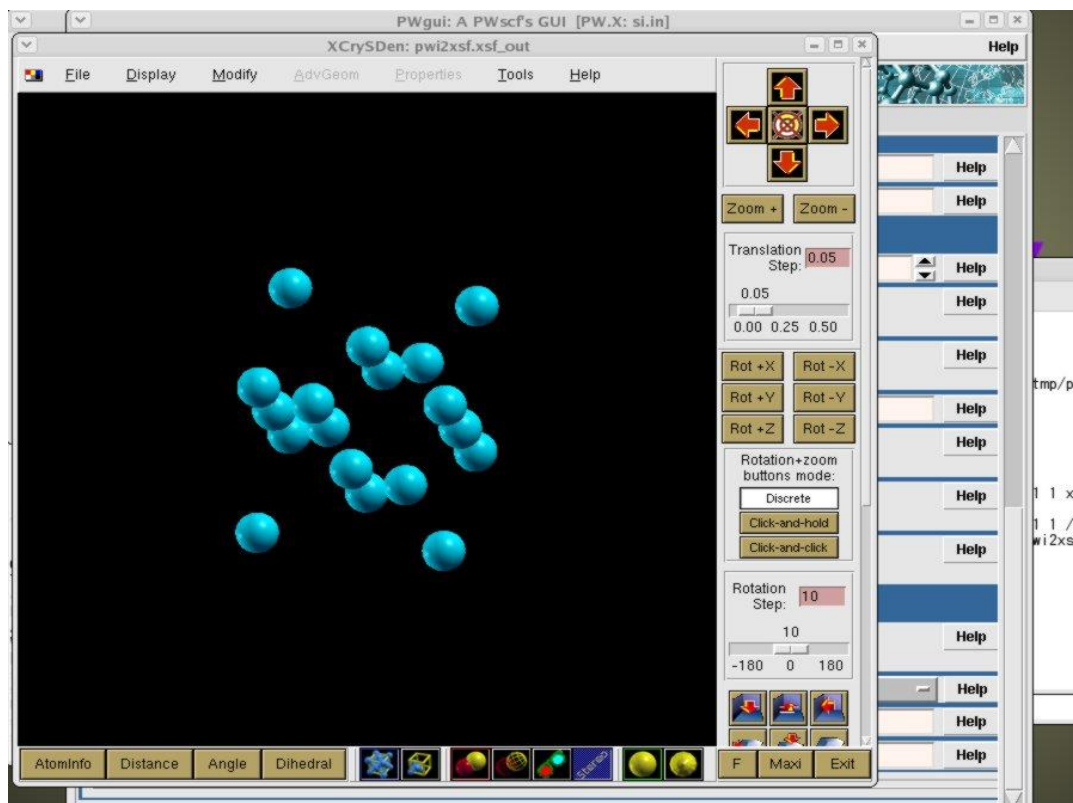
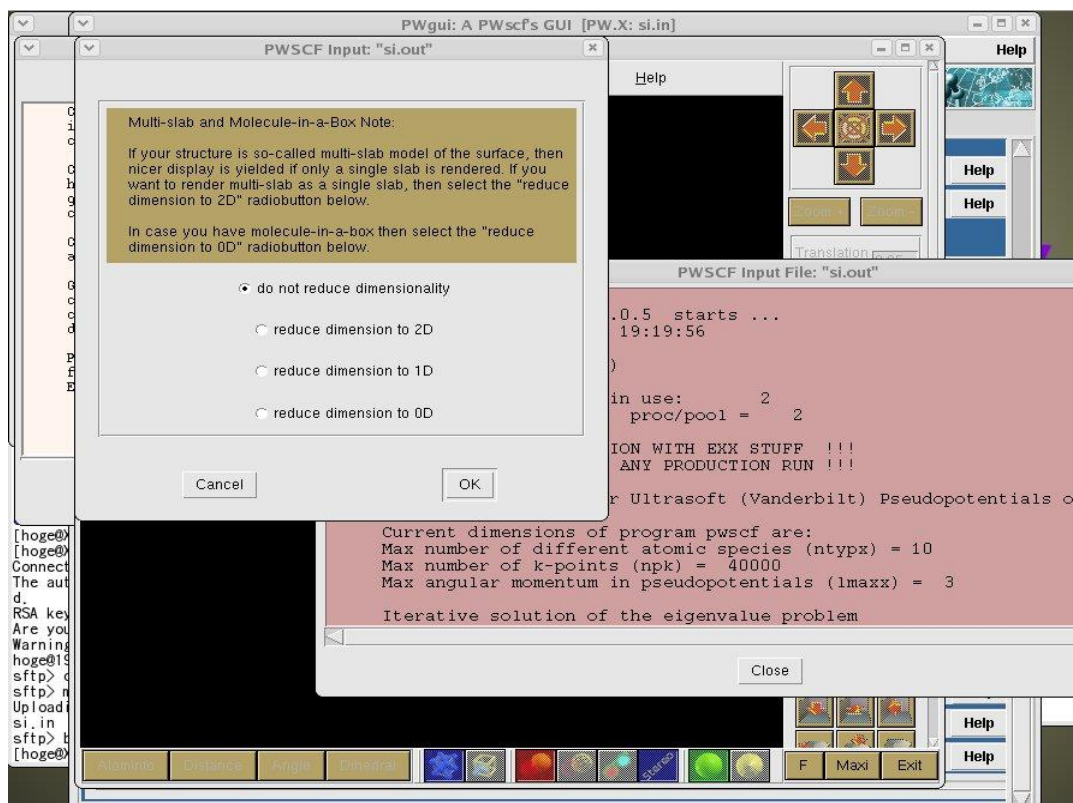
XCrySDen は結晶や分子構造を可視化するプログラムです。計算化学のソフトウェア PWscf, Crystal, Wien2k などの様々なソフトウェアに対応しています。

XCrySDen は GPL に基づいてフリーで配布されています。当社が出荷する Linux マシンでは標準でインストールしております。

下例は Wien2k の struct ファイルの可視化をしています。w2web のブラウザ画面の「Execution」→「view structfile」をクリックすることで XCrySDen が自動で動作します。



以下は Quantum-Espresso (PWscf) の PWgui から呼び出して PWscf の可視化として使用している例です。

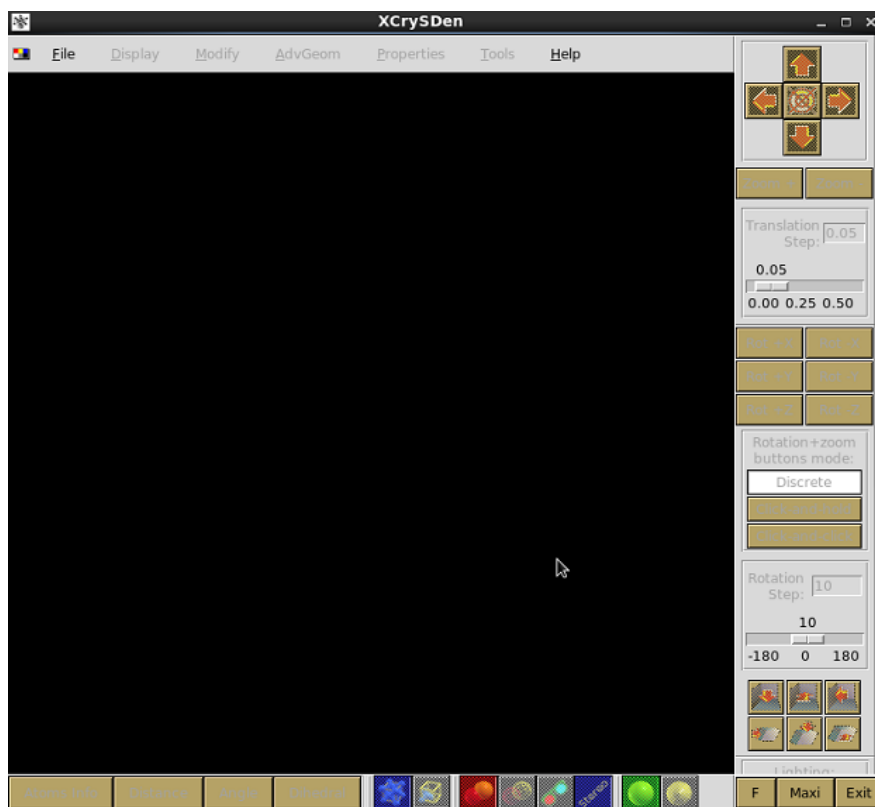


2 XCrySDen インストール概要

XCrySDen はソースコード版を `/usr/local` 以下に展開してセットアップしています。root 以外のユーザーで以下コマンドを実行すると XCrySDen が起動します。

```
$ xcrysdn
```

※ XCrySDen は X-Window が動作している端末でないと起動しないのでご注意ください。



使用方法の詳細は以下 URL の配布元のホームページをご覧ください。使用方法や各アプリケーション用のサンプル等が数多く掲載されています。

<http://www.xcrysdn.org/Documentation.html>

3 既知の問題点

2013年10月31日現在、XCrySDen 1.5.53 で明らかになっている問題点はありません。

付録A

A.1 HPC システムズ お問い合わせ先



弊社ホームページ http://www.hpc.co.jp/support_index.html

サポート案内やお問い合わせの多い内容など様々な情報を掲載しております。
是非ご活用ください。

HPC システムズ株式会社

〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階

HPC 事業部



【営業】 03-5446-5531 【サポート】 03-5446-5532

お電話によるサポート受付は祝日、弊社指定休日を除く月曜日から金曜日の 9:30～17:30
とさせていただきます。



【FAX】 03-5446-5550



【電子メール】 hpcs_support@hpc.co.jp