

Diamond クイックスタートガイド(1)

[ここで学ぶこと]

CIF 形式の結晶構造データを Diamond にインポートし、Diamond におまかせで結晶構造図を作成します。また、Diamond のウィンドウに表示される情報の見方を学び、作図した結晶構造データを詳しく見たり、図を表示させる視点を変更する操作も行います。最後に、表示させた結晶構造図を動かして、動画として保存します。

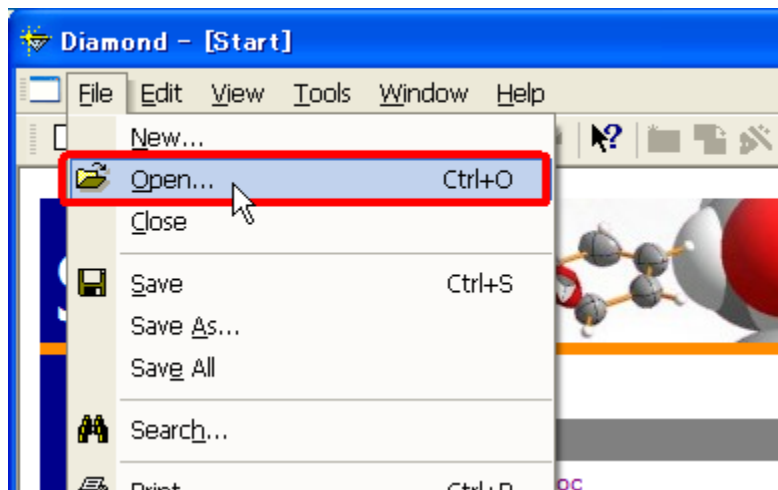
A. 結晶構造図の読み込み.....	- 2 -
B. 結晶構造図と結晶構造データの表示	- 4 -
C. 結晶構造図の回転／視点変更.....	- 6 -
D. ビデオファイルの作成	- 7 -

2008-10-10

A. 結晶構造データのインポートと全自動描画

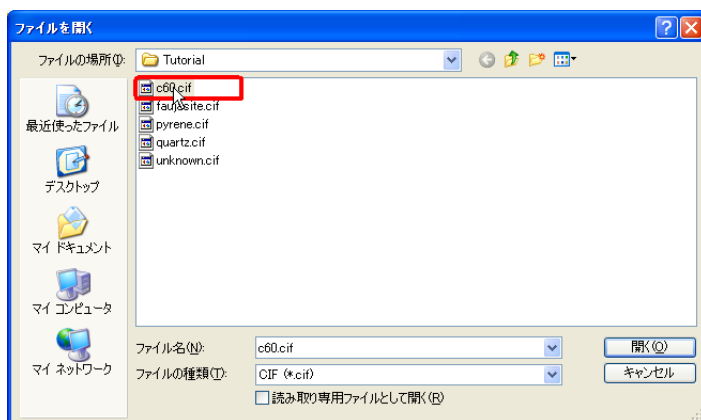
1. データファイルを開く

Diamond を起動し、[コンテキスト] メニューの [Open] をクリックします。



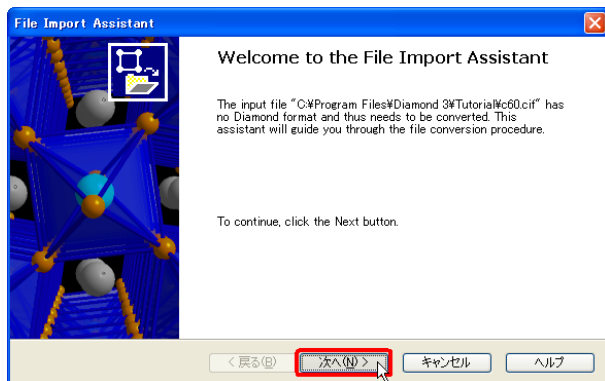
2. データを選択する

Diamond をインストールしたフォルダ内にある「Tutorial」フォルダにある「c60.cif」を選び、データを開きます。



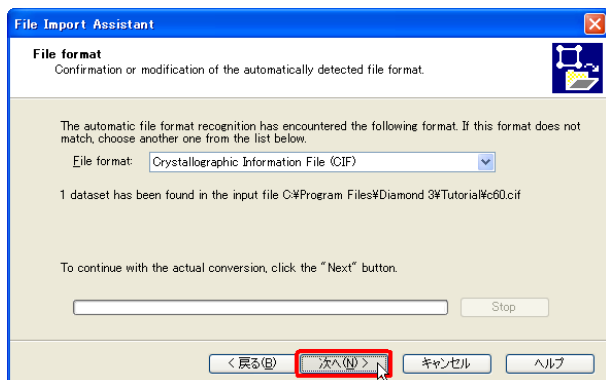
3. 「次へ」を押す

ただのタイトル画面なので、[次へ(N) >] ボタン をクリックして進みます。



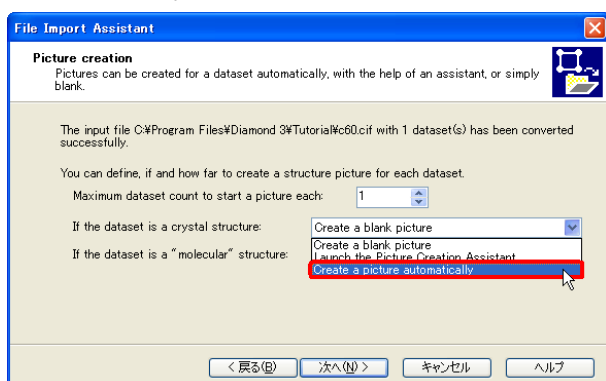
4. データ形式を選択する

Diamond は、選んだファイルのデータ形式を自動的に判断し「File format」欄に表示しますが、自動選択機能が間違って判断した場合には、ここでファイル形式を手動で変更してください。[次へ(N) >] ボタン を押すと次に進みます。



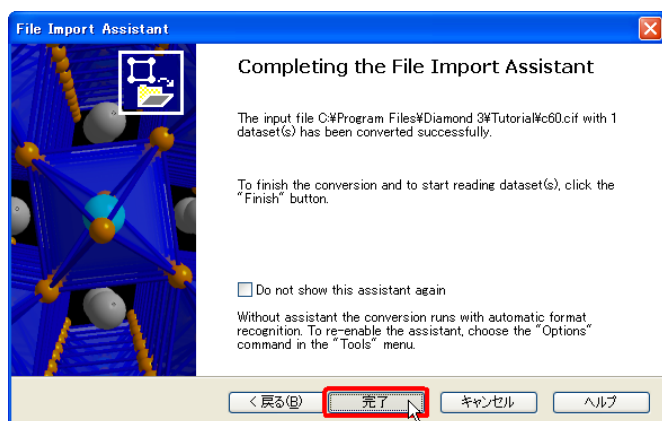
5. 全自動か半自動か選択する

結晶構造図を全自動で作成するか、設定を選びながら半自動で作成するかを選べます。今回は全自動で作図するので、[If the dataset is a "crystal" structure] のリストで [Create a picture automatically] を選び、[次へ] ボタンを押します。結晶構造データなので「molecule」ではなく「crystal」のほうの設定で指定します。



6. 結晶構造図を作図

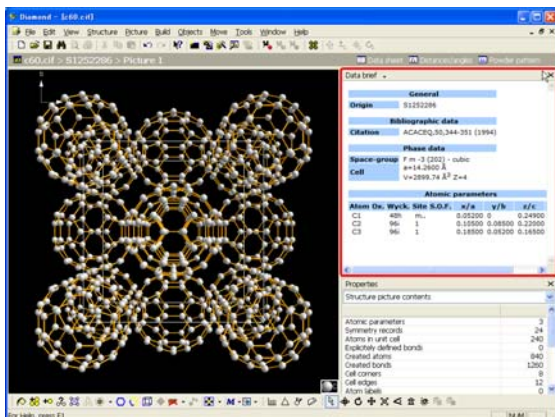
[完了] ボタン をクリックして結晶構造図を作成します。



B. 結晶構造図と結晶構造データの表示

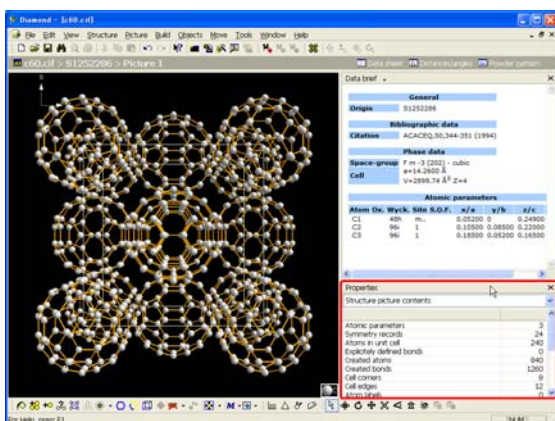
7. 結晶構造データを見る

画面右上の[Data brief]欄に、結晶構造データの重要な内容が表示されます。



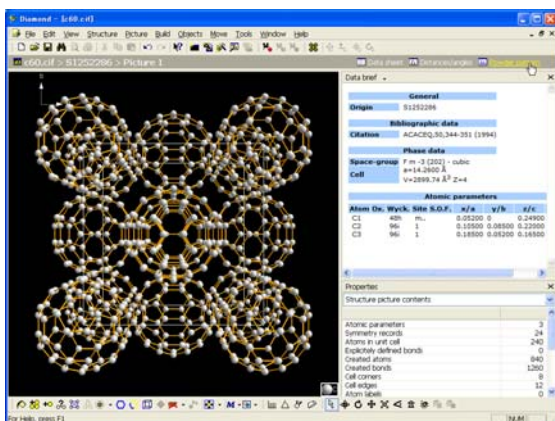
8. 構造図の内容を見る

画面右下の[Properties]欄に構造図に含まれる原子、選択したオブジェクト、選択した原子間の距離などが表示されます。表示内容はドロップダウンメニューで変更されます。



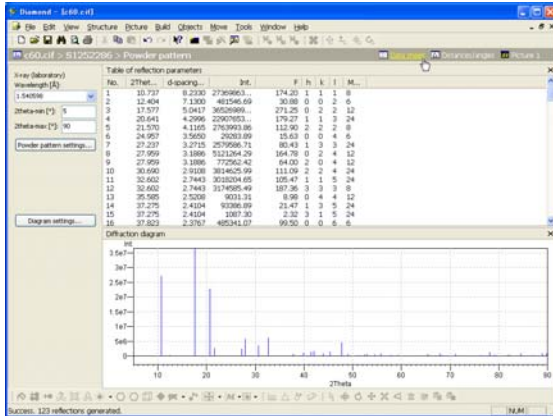
9. 結晶の粉末回折データを見る

画面右上の「Powder pattern」をクリックすると、表示させている結晶の構造データから粉末回折パターンを計算し、表示できます。



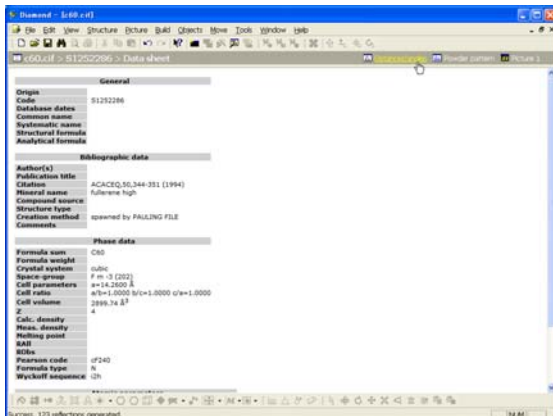
10. 粉末回折パターンをシミュレーション

シミュレーションの結果が、数値と図で表示されます。放射光のタイプを X 線（実験室、シンクロトロン）、中性子線、電子線から選んだり、波長を変えたりすることもできます。



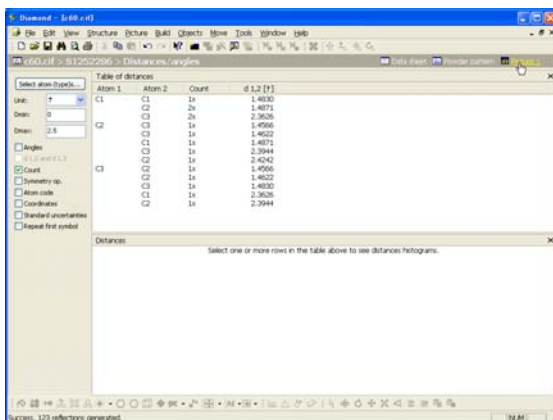
11. 結晶の詳細データを表示

「Data sheet」をクリックすると、結晶構造データの詳細データを表示できます。



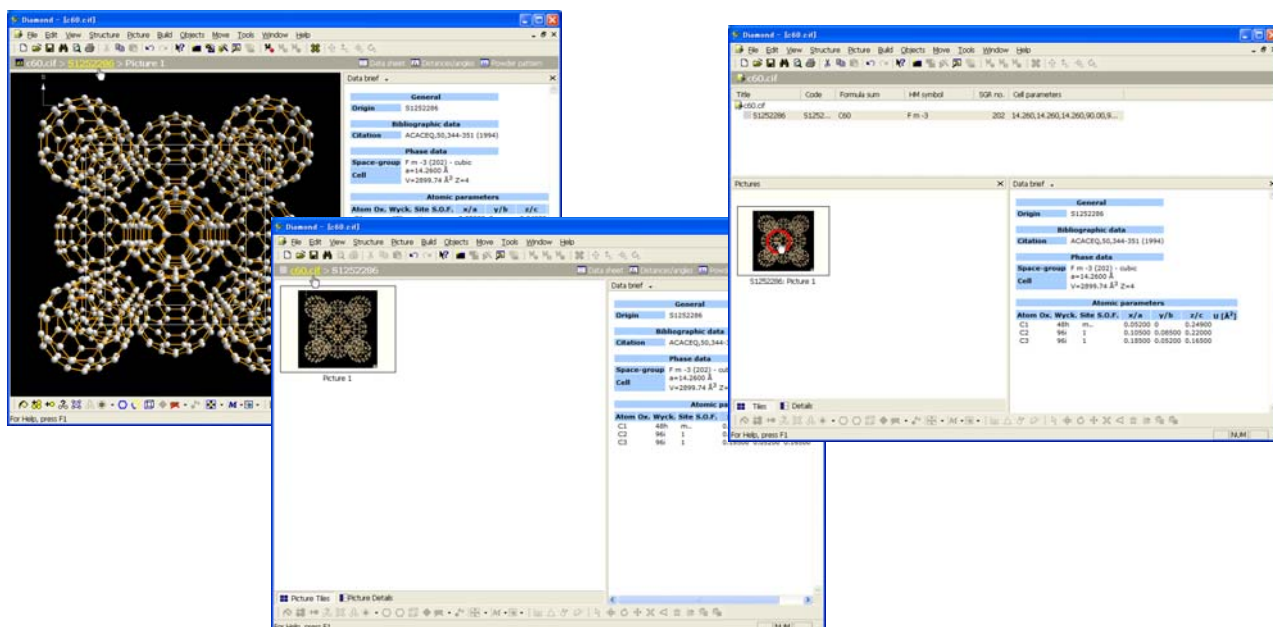
12. 原子間距離や角度を表示

「Distances/angles」をクリックすると、結晶中の原子間距離や角度が一覧表示されます。



13. ファイルのなかに含まれる全構造図を表示

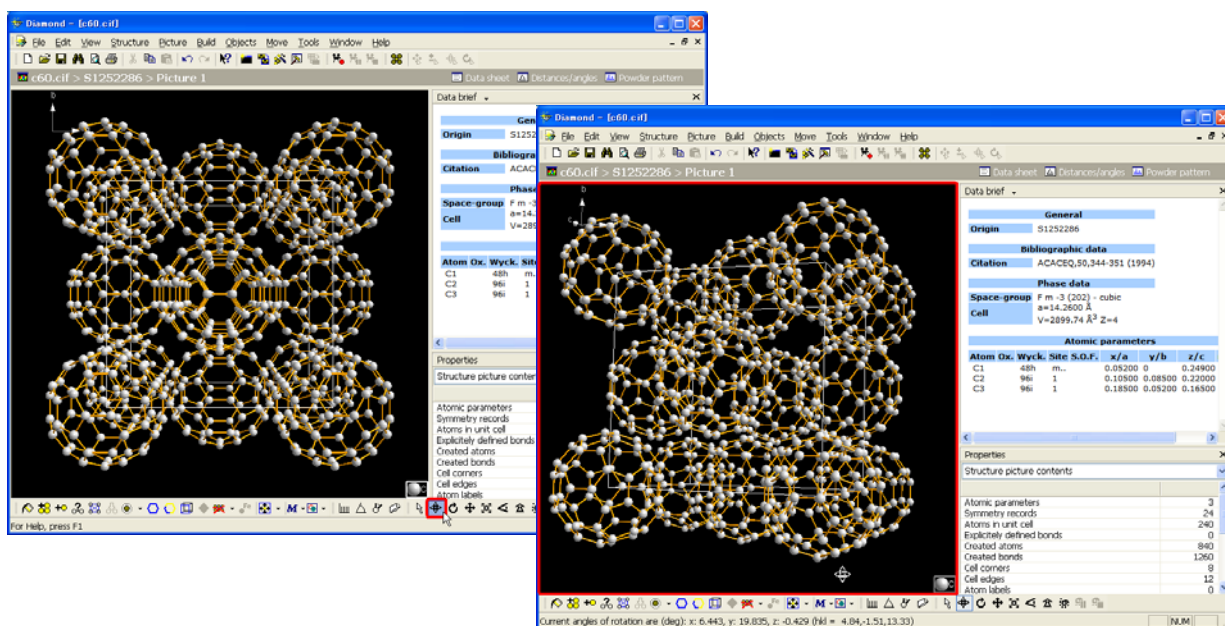
Diamond 形式のデータファイルは、複数の結晶構造データを含むことができ、階層管理も可能です。画面左上に表示される階層名をクリックすると、その階層に含まれているデータをすべて表示できます。



C. 結晶構造図の回転／視点変更

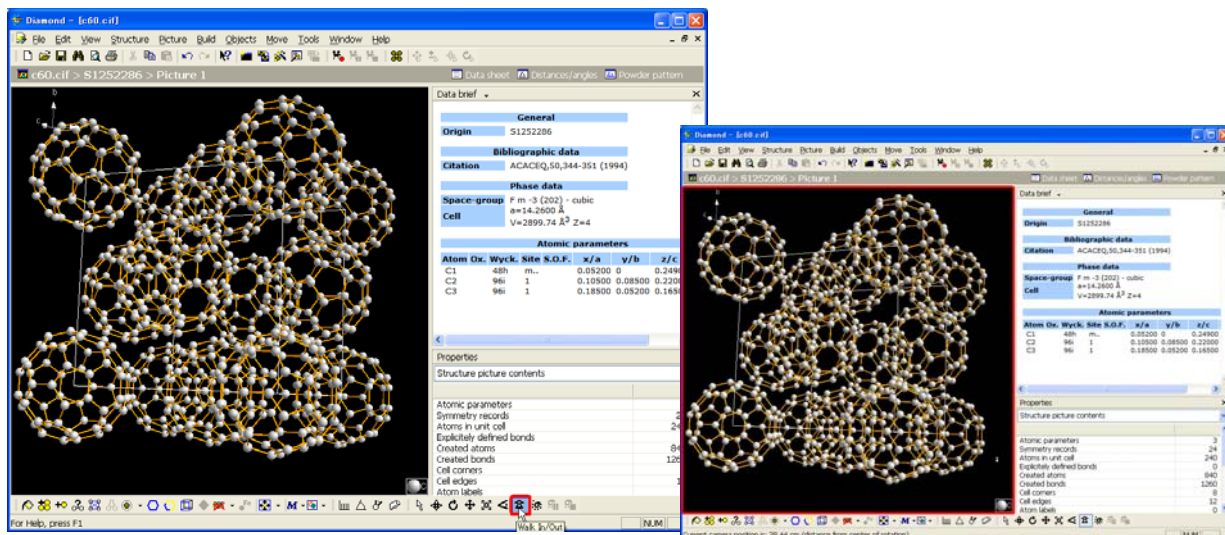
14. 構造図を回転させる

画面いちばん下にある [Rotate along x/y-axis] チェック ボックス をオンにし、画面左の図が表示されている部分でマウスをドラッグします。マウスを動かす方向にしたがって、結晶構造図が回転します。



15. 結晶構造図に近づいたり離れたりする

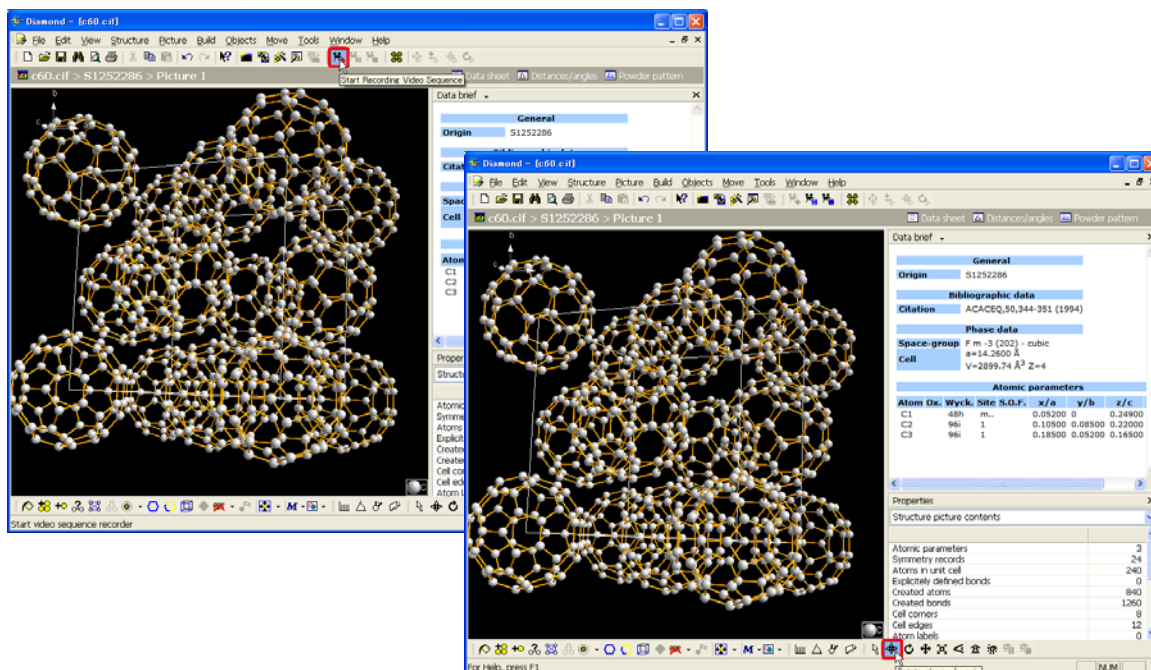
[Walk In/Out] チェック ボックス をオンにし、画面左の図が表示されている部分でマウスをドラッグします。マウスを上に向かすと結晶が近づいてきます。逆に、マウスを下方向に動かすと、結晶構造図が遠くに離れていきます。



D. ビデオファイルの作成

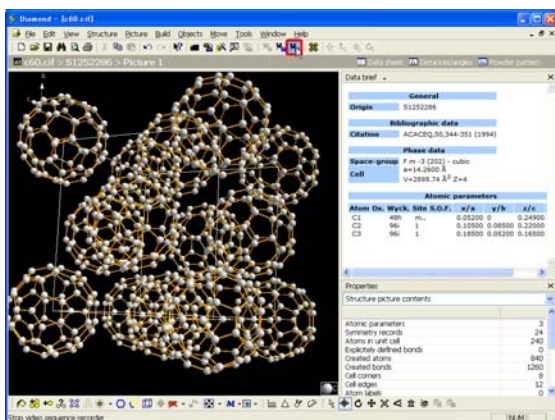
16. 図を動かしたようすをビデオファイルにする

画面上側のツールバーにある[Start Recording Video Sequence] ボタン をクリックします。録画モードになり、これ以後、例えば回転させるなど結晶構造図に変化を加えたようすが記録されます。



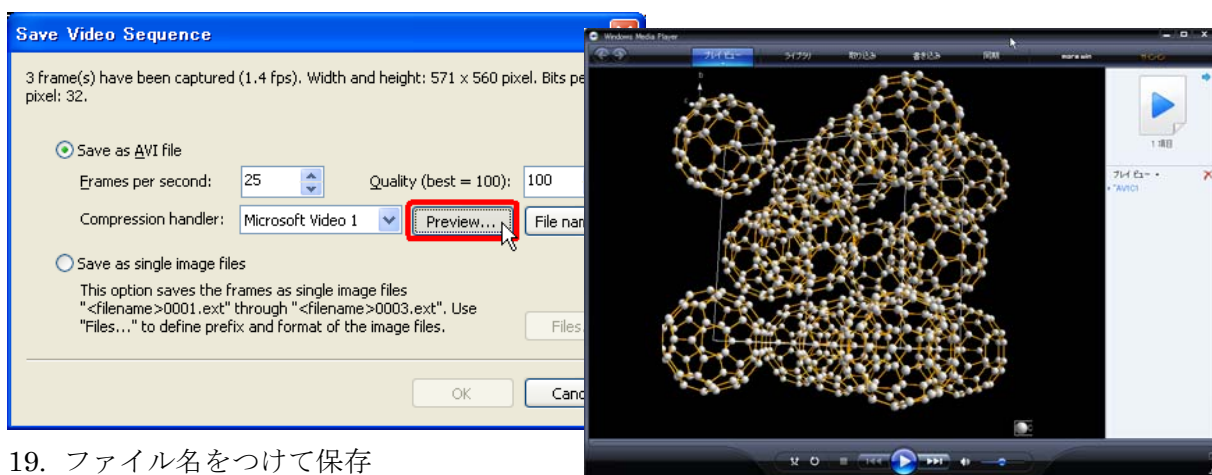
17. ビデオの録画を停止する

[Stop Recording Video Sequence] ボタン をクリックすると、ビデオモードが終了します。



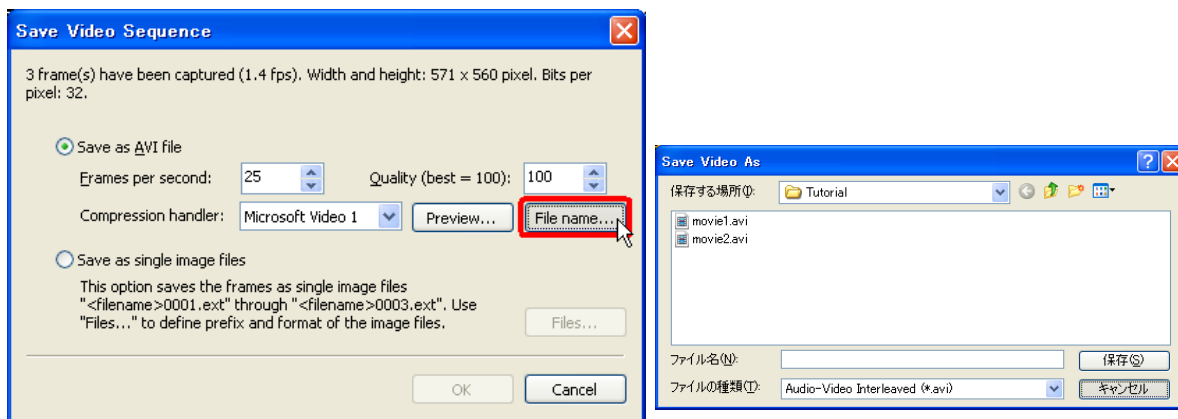
18. 動画ファイルとして保存する

動画ファイルとして保存するか、連続した複数枚の画像ファイルとして保存するかを選ぶ画面が表示されます。動画ファイルとして保存する場合は「Save as AVI file」を選択してください。[Preview] ボタン をクリックすると動画の再生ができます。



19. ファイル名をつけて保存

[File name] ボタン をクリックします。ファイル名を入力する画面が現れるので、名前をつけて保存します。



20. 連続した画像ファイルとして保存する

[Save as single image files] オプション ボタン をオンにして、「Files」ボタンを押すと、複数の画像ファイルとして保存できます（パラパラマンガや紙芝居のようなイメージです）。ファイル名は自動的に連番がふられます。アニメーション GIF の素材としても利用できます。

