

Diamond クイックスタートガイド(2)

[ここで学ぶこと]

結晶構造データをファイルとして持っていない場合（文献などのデータしかない場合）に、手動で原子の分率座標などのデータを入力して、Diamond で結晶構造図を作図することができます。データの手動入力を実際に行う方法を説明します。

また、クイックスタートガイド(1)では、結晶構造図の可視化を Diamond におまかせで全自動に行いましたが、今回はウィザードを使って作図の設定を自分で指定します。ウィザードを使った半自動の作図も試してみましょう。

- A. 原子の座標データの入力 - 2 -
- B. 構造図の表示方法を設定 - 6 -

※ 今回入力する結晶データは下記の数値を利用します。

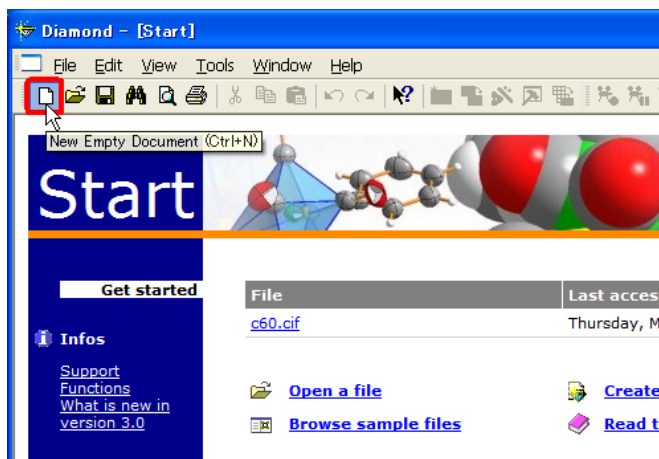
結晶 : SiO ₂
空間群 : P 3 1 2 1 (空間群番号 : 152)
単位格子の大きさ :
a = 4.535 Å
b = 4.535 Å
c = 5.17 Å
単位格子の 3 辺の角度
α = 90°
β = 90°
γ = 90°
各原子の分率座標 (1 つの非対称単位のみ)
Si (x/a, y/b, z/c) = (0.4487, 0, 0.3333)
O (x/a, y/b, z/c) = (0.367, 0.2962, 0.2427)

2008-10-14

A. 原子の座標データの入力

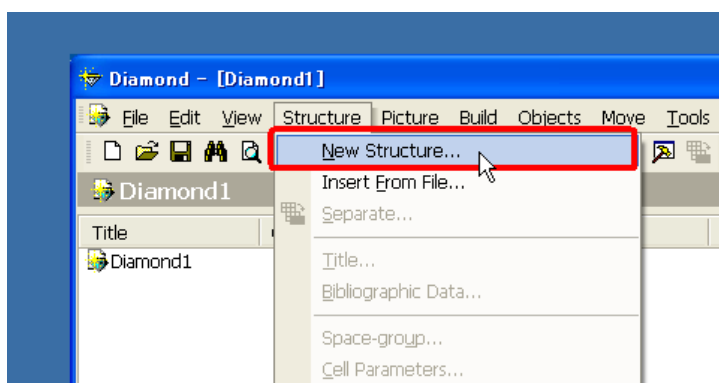
1. 新規のデータを作成する

Diamond の最初の画面で [New Empty Document] ボタン をクリックします。新規のデータファイルが作られます。



2. 結晶構造データを入力するウィザードを開く

[Structure] メニューから [New Structure] をクリックします。



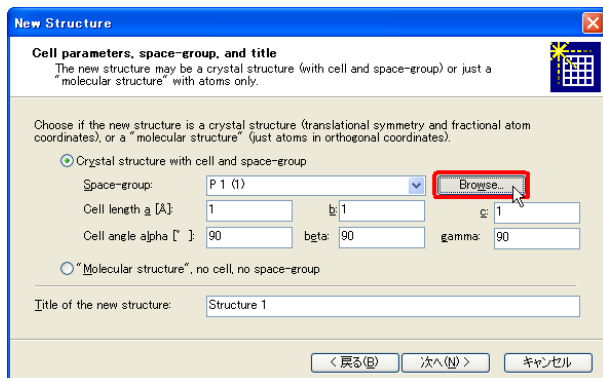
3. ウィザードを開始する

ただの表紙の画面なので、[次へ] ボタン を押して、次の画面へ進みます。



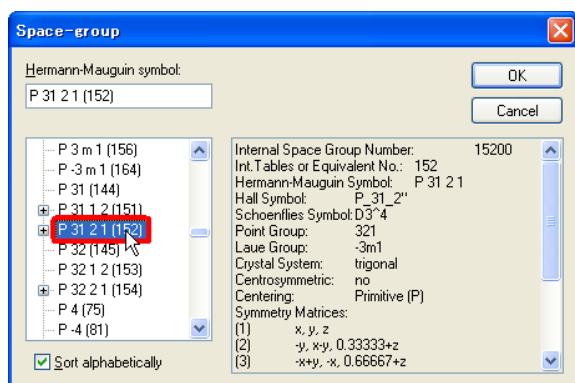
4. 格子定数を入力する

空間群、結晶の単位格子の3辺a, b, cの長さ、角度 α , β , γ をこの画面で入力していきます。まず、空間群を選択します。[Browse] ボタンを押してください。



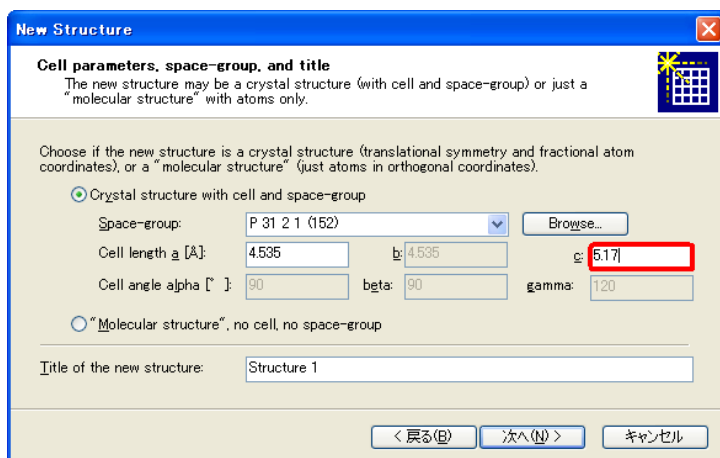
5. 空間群を選ぶ

今回は「P 31 2 1」（空間群番号：152）の結晶なので、[P 31 2 1 (152)] を選択して「OK」ボタンを押します。



6. 単位格子の3辺の長さ a,b,c と角度 α, β, γ を入力する

操作 5 で選んだ空間群によって、入力の不要な項目がグレイアウトします。操作今回選んだ空間群では、 $a=b$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ なので、aとcの値だけ決めれば、結晶格子の3辺の長さや角度が自動的に決まります。今回は「a」を「4.535」Å、「c」を「5.17」Åにします。



7. 名前を入力する

[Title of the new structure] には名前を入力します。あとで探すときにわかりやすいような名前を入力するといいでしょう。今回は「Quartz low」として、「次へ」ボタンを押します。

The screenshot shows the 'New Structure' dialog box with the 'Cell parameters, space-group, and title' tab selected. The 'Crystal structure with cell and space-group' radio button is chosen. The space-group is set to 'P 31 2 1 (152)'. Cell lengths are a: 4.535, b: 4.535, c: 5.17. Cell angles are alpha: 90, beta: 90, gamma: 120. The 'Title of the new structure' field contains 'Quartz low' and is highlighted with a red rectangle. Navigation buttons at the bottom are '< 戻る(B)', '次へ(N) >', and 'キャンセル'.

8. 単位格子中に含まれる原子の情報を入力

単位格子中に含まれる原子の種類と酸化数、それぞれの座標を入力します。

「Atom」欄は原子の種類と酸化数です。例えばケイ素を入力するときは「si+4」というようにスペースをあけずに入力します。座標については分率座標(x/a, y/b, z/c)で入力します。分率座標は 1 つの非対称単位内のサイトについてだけ入力します。対称性を定義してあるので、残りのサイトについては Diamond が自動的に計算、表示します。

今回はSiO₂のデータを入力して 3Dの構造図を作成します。まず、Siのデータを入力します。下記のデータがわかっているものとして、入力してください。

Atom : si+4
x/a : 0.4487
y/b : 0
z/c : 0.3333

すべての値を入力したら「Add」ボタンを押します。

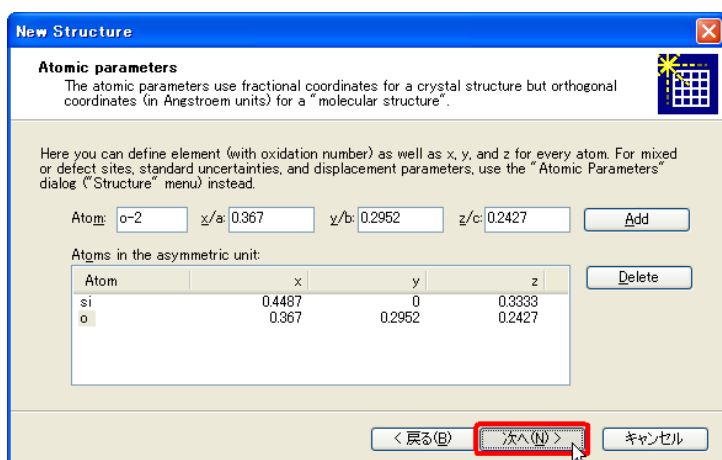
The screenshot shows the 'New Structure' dialog box with the 'Atomic parameters' tab selected. The 'Atom' field contains 'si+4', 'x/a' is '0.4487', 'y/b' is '0', and 'z/c' is '0.3333'. The 'Add' button is highlighted with a red rectangle. Below is a table for 'Atoms in the asymmetric unit' with columns for Atom, x, y, and z. A 'Delete' button is to the right of the table. Navigation buttons at the bottom are '< 戻る(B)', '次へ(N) >', and 'キャンセル'.

9. 酸素 O の分率座標データも入力

操作 8 と同じ画面で、酸素 (O) のデータも入力します。下記の値がわかっているものとしてデータを入力し、「Add」ボタンを押します。入力欄に Si の数値が残っていても、そのまま無視して同じ欄に入力してください。

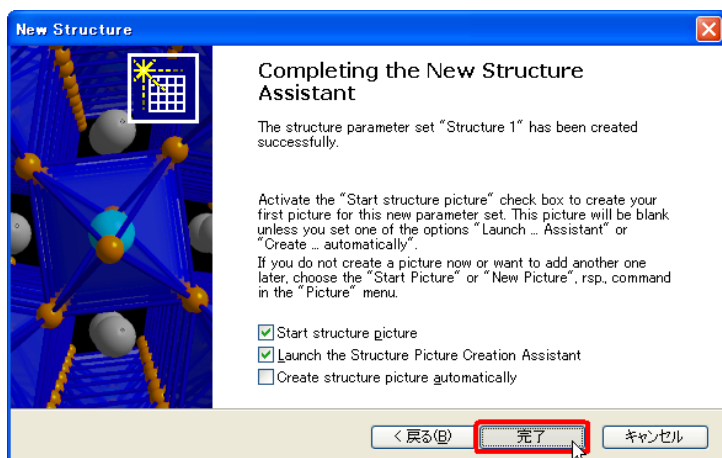
Atom : o-2
x/a : 0.367
y/b : 0.2962
z/c : 0.2427

「Atoms in the asymmetric unit」欄が下図のようになったら「次へ」ボタンを押します。



10. 立体構造図の作成方法を選ぶ

全自動で Diamond におまかせで図を作成するか、半自動で自分でウィザードを操作しながら図を作成するか選びます。今回は半自動で表示内容を指定しながら作図するので、「Start structure picture」と「Launch the Structure Picture」の2つにチェックをつけて「完了」ボタンを押します。作図を行う「Create Structure Picture」ウィザードが開きます。



B. 構造図の表示方法を設定

11. 既存の図を削除するか指示する

すでに画面上でほかの構造図を作図している場合、その図を消去してから新しい図を作るのか、そのまま残すのかを指定する画面です。今回は念のため削除することにししましょう。

「Destroy all atoms, bonds, etc.」にチェックをつけて「次へ」ボタンを押します。

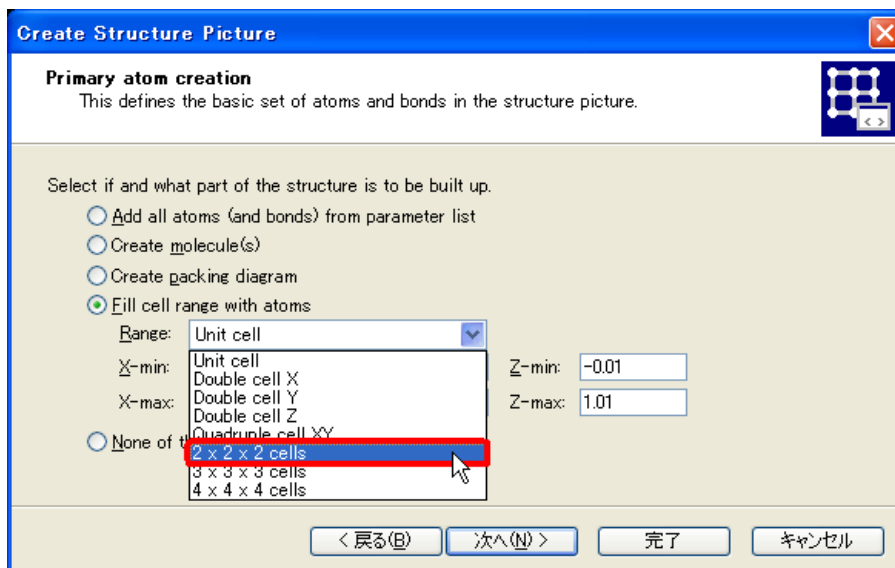


12. 結晶構造の表示範囲を指定する

この画面で結晶構造をどの範囲分だけ表示するか決めます。どの方向に単位格子何個分表示する、パッキング図として表示する、分子を表示するなどの選択肢から選べます。

今回は X,Y,Z 方向それぞれについて単位格子 2 個分の範囲（合計で単位格子 8 個分）の結晶構造を表示するようにしてみましょ。

[Range] の設定でリストから [2 x 2 x 2 cells] を選びます。「次へ」ボタンを押して次の設定画面に進みます。



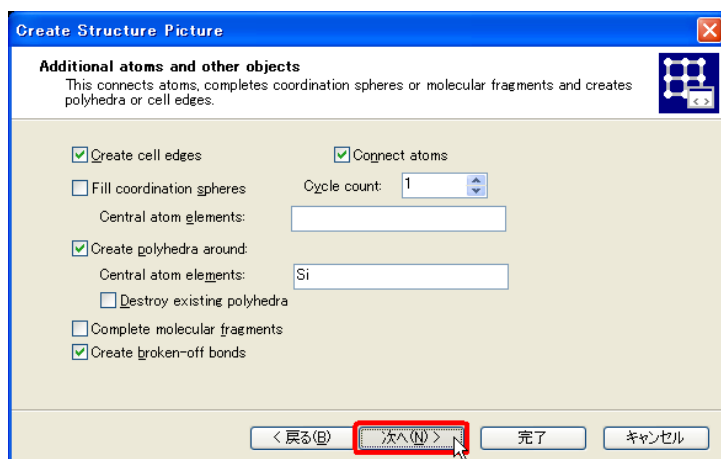
13. 結晶構造図の作図内容について設定します

チェックをつけることによって、各項目の表示を有効にします。今回は以下の項目にチェックをつけてみましょう。

「Create cell edges」… 単位格子の格子を線で表示します

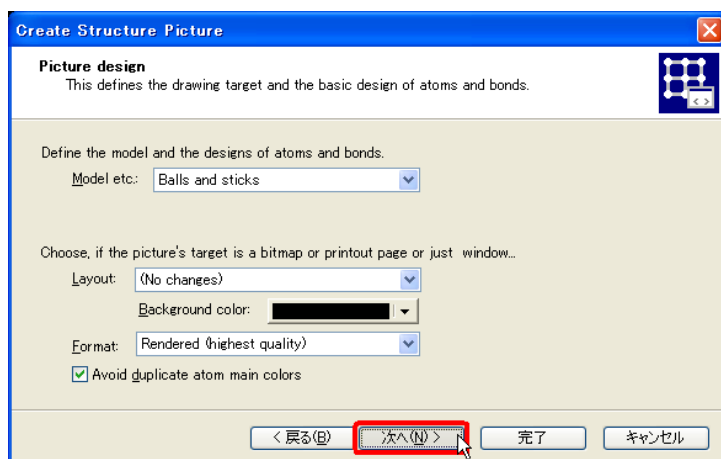
「Connect atoms」… 結合を表示します。各原子間の結合の有無は現在の「Connectivity settings」の設定にしたがいます

「Create polyhedra around」… 配位多面体を描写します。「Central atom elements」欄に入力した元素記号名の原子を中心とした配位多面体を作図します。



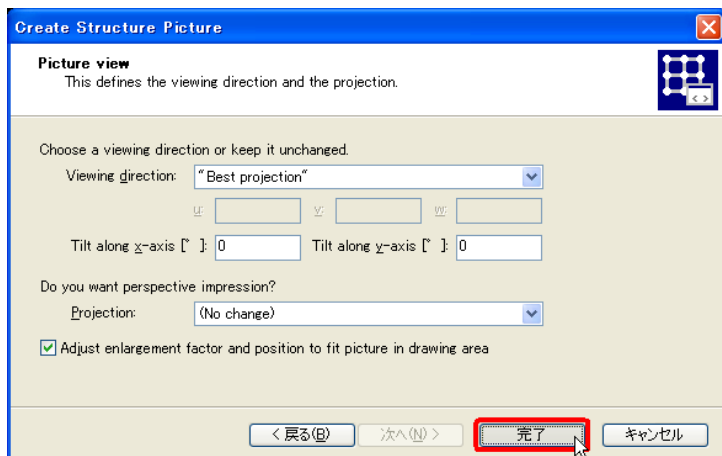
14. 構造図のデザインについての設定

原子の表示モデルや図のサイズ、色などを設定できます。あとで変えることもできるので、標準設定のまま「次へ」ボタンを押して、次の設定画面に進みます。



15. どの方向から見た構造図にするかなどの視点の設定

この設定も構造図を表示したあとでマウス操作や数値入力で自由に変更されるので、標準設定のままにします。「完了」ボタンを押すとよいよ結晶構造図が表示されます。



16. 結晶構造図が表示されます

このようなSiO₂の結晶構造図が表示されます。

