

# Diamond クイックスタートガイド(3)



[ここで学ぶこと]

- ・ ピレンの CIF ファイルをインポートして分子 1 つだけの構造を表示する方法
- ・ パッキング図を表示する方法
- ・ 画面上に表示されている結晶構造の距離や角度を調べる幾何学計算の実行方法

構造図に平面を作図する機能では、選択した複数の原子の最小二乗平面を描画できます。この機能を利用して、隣り合っている 2 つのピレン分子の距離を調べてみましょう。

The screenshot shows the Crystal Impact software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a pyrene molecule within a unit cell. A dialog box titled "Angle Between Two Planes" is open, showing the selection of two planes and the resulting distance between them.

Table of atomic parameters:

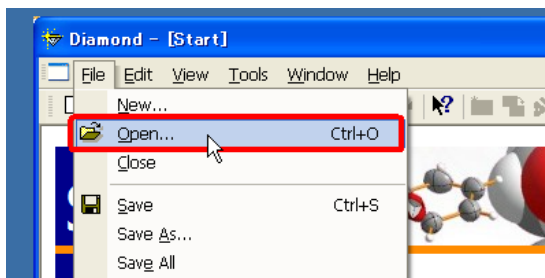
No.	E.	S...	Ox.	M.	W	x/a
1	H	H10	0	4	e	0.20220
2	H	H9	0	4	e	0.05840
3	H	H8	0	4	e	-0.05700
4	H	H7	0	4	e	-0.11540
5	H	H6	0	4	e	-0.10710
6	H	H5	0	4	e	0.01230
7	H	H4	0	4	e	0.14640
8	H	H3	0	4	e	0.26230
9	H	H2	0	4	e	0.32750
10	H	H1	0	4	e	0.32380
11	C	C16	0	4	e	0.07210
12	C	C15	0	4	e	0.13980
13	C	C14	0	4	e	0.20450
14	C	C13	0	4	e	0.13710
15	C	C12	0	4	e	0.06350
16	C	C11	0	4	e	-0.00160
17	C	C10	0	4	e	0.00490
18	C	C9	0	4	e	-0.06270
19	C	C8	0	4	e	-0.05900
20	C	C7	0	4	e	0.01040
21	C	C6	0	4	e	0.07690
22	C	C5	0	4	e	0.14650
23	C	C4	0	4	e	0.21130
24	C	C3	0	4	e	0.20910
25	C	C2	0	4	e	0.27230
26	C	C1	0	4	e	0.27360

Dialog box "Angle Between Two Planes" details:

- Select first plane: 1: Plane 1  
Least-squares plane through 26 atoms ("H4", "H3", "C5", "C4", "C6", "C16", "C7", "C3", "C15", "C10", "H5", "C8", "C2", "C13")
- Select second plane: 2: Plane 2  
Least-squares plane through 26 atoms ("H8", "C11", "C12", "C10", "H9", "C13", "C16", "C9", "C15", "C14", "C6", "H7", "C8", "C3")
- Dihedral angle [deg.] between two planes "Plane 1" and "Plane 2": 0.000
- (Distance between planes: 3.4264 Å)

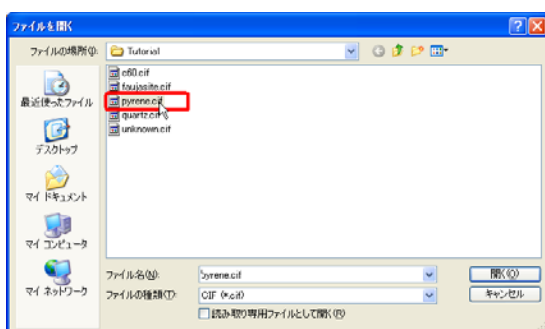
## 操作手順

### 1. CIF ファイルをインポートする



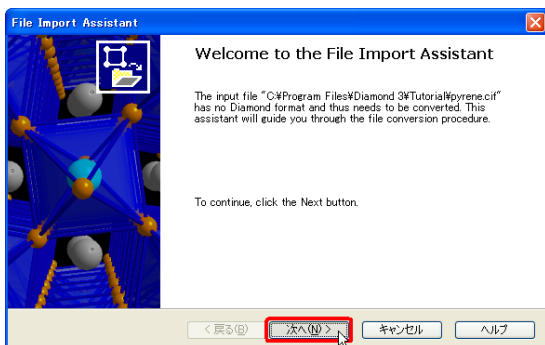
Diamond のインストールフォルダに、ピレン (Pyrene) の CIF ファイルがあるので、ここではそのデータを利用します。まず、Diamond を起動し、「File」メニューから「Open」を押します。

### 2. ピレンの CIF ファイルを選ぶ



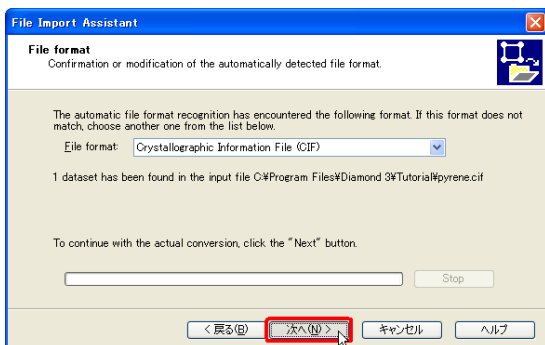
データファイルを選ぶ画面が表示されます。「ファイルの種類」を「CIF」にして、「C:\Program Files\Diamond 3\Tutorial」フォルダにある「pyrene.cif」を選びます。

### 3. 次へ進む



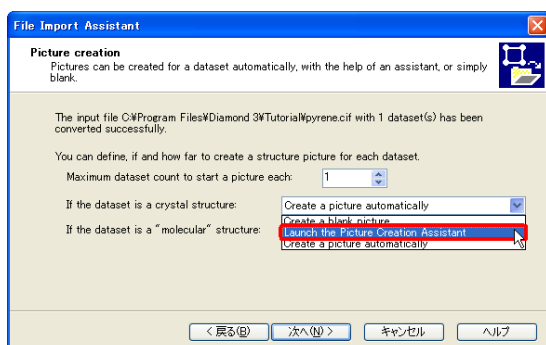
「インポートアシスタント」という、インポートの設定を簡単に行えるウィザードが表示されます。ウィザードの最初のページは表紙なので、そのまま「次へ」ボタンを押します。

### 4. CIF 形式を選ぶ



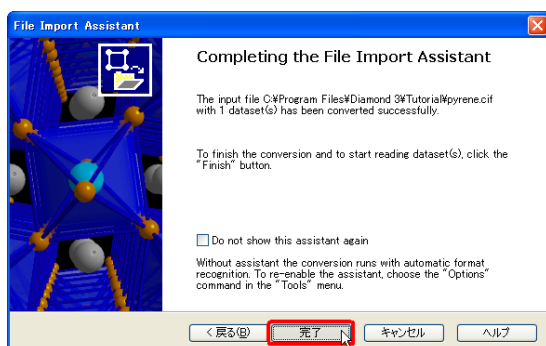
読み込むデータファイルのファイルタイプを指定します。通常は、データファイルの構造を読み取って、自動的に CIF 形式が選ばれているはずですが、もし異なっている場合は、「CIF」を手動で選びます。「次へ」ボタンを押して次のページに進みます。

## 5. 構造図の作図方法を選びます



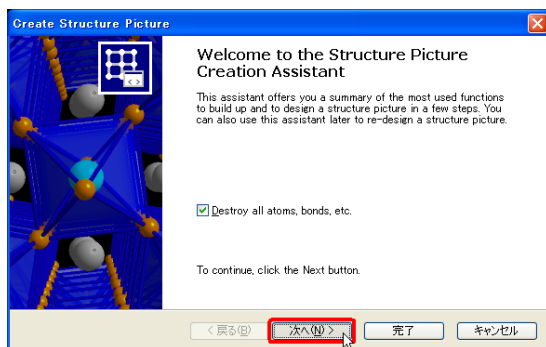
今回は作図を全自動で行わず、「Picture Creation アシスタント」を使います。「If the dataset is a "molecular" structure」の設定で「Launch the Picture Creation Assistant」を選び、「Next」ボタンを押してください。

## 6. 「完了」ボタンを押す



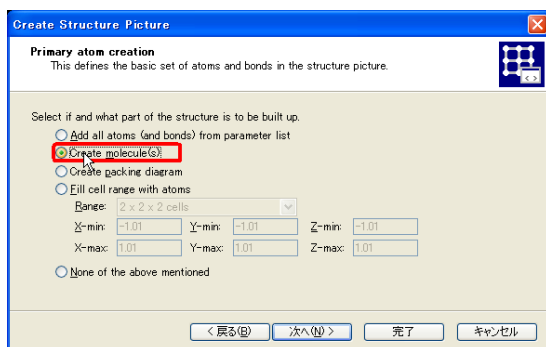
ファイルインポートについての設定はここまでで終わりなので、「完了」ボタンを押します。

## 7. 構造図の表示方法を指定します



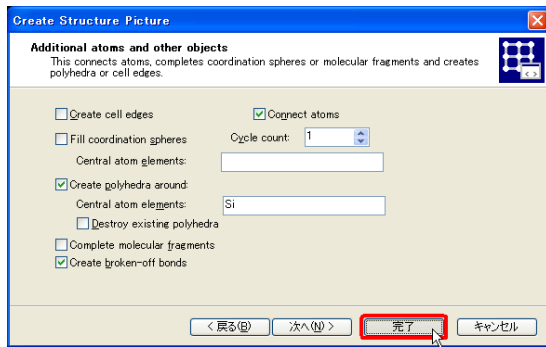
「Picture Creation アシスタント」の画面が開きます。このウィザードで、構造図の表示方法を具体的に設定します。ここではまったくの新規で図を作成したいので、「Destroy all atoms, bond, etc.」にチェックをつけて「次へ」を押します。以前の図の情報がすべて消去されて、新規に図を作成できます。

## 8. 分子構造を表示する



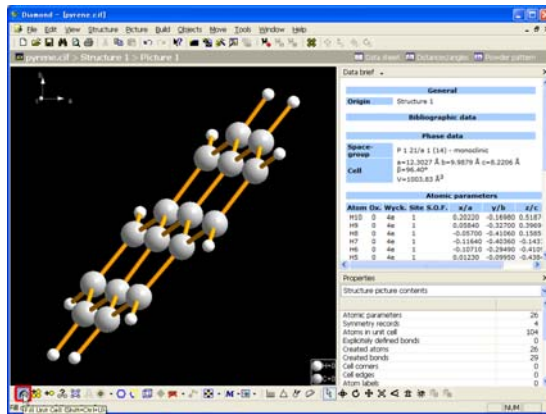
今回は、まず分子構造を表示したいので、「Createmolecule(s)」を選び、「次へ」ボタンを押します。

## 9. 結晶構造図の表示形式を指定



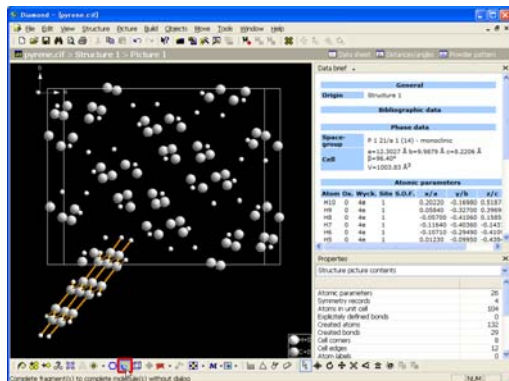
分子構造を表示したいだけなので単位格子を表示させないようにします。「Create cell edges」のチェックを外します。そのほかは左図のように初期設定のままにして「完了」ボタンを押します。

## 10. 結晶構造が立体表示されます



ピレンの分子が1つ表示されます。これで、ピレンの分子構造の概略は理解できました。

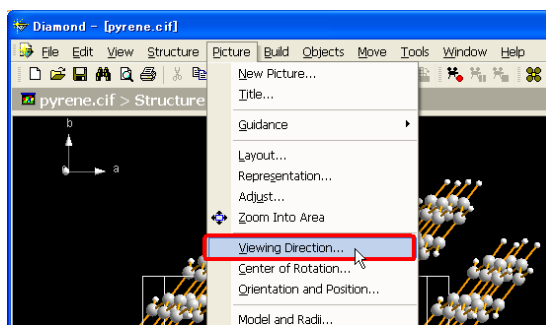
## 11. パッキング図を表示



結晶のなかでピレン分子の3次元配列がどうなっているか見てみましょう。パッキング図を表示させるとわかりやすいです。

パッキング図を表示するにはまず「Fill Unit Cell」ボタンを押します。単位格子内に存在する原子が表示されますが、結合は表示されない状態です。ここで「Complete Fragments」ボタンを押すと、結合が描かれ、単位格子外に一部がはみ出ている分子についても分子全体を表示します。

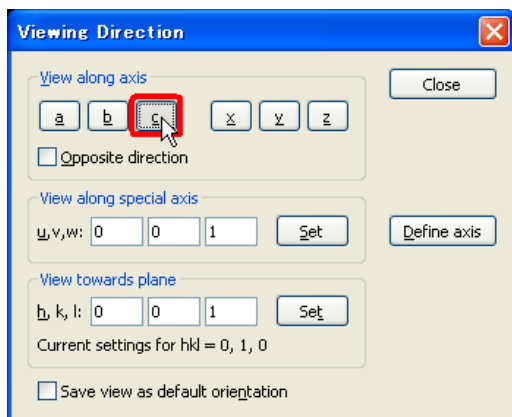
## 12. いろいろな方向から見てみましょう



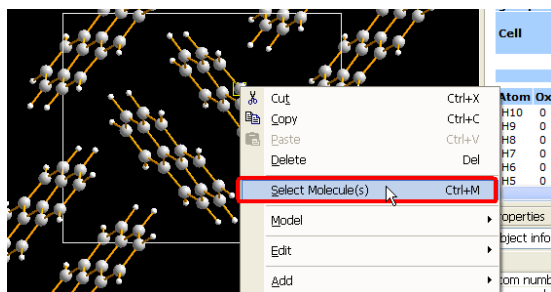
Diamond では、マウスのドラッグ操作で表示方向を変えることもできますが、単位格子の軸や平面を基準に結晶を回転させることもできます。今回はその方法で表示方向を変えてみましょう。

メインメニューの「Picture」から「Viewing Direction」を選びます。

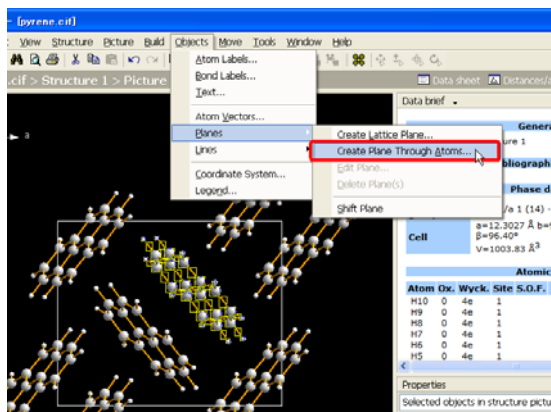
### 13. c 軸に沿って表示します



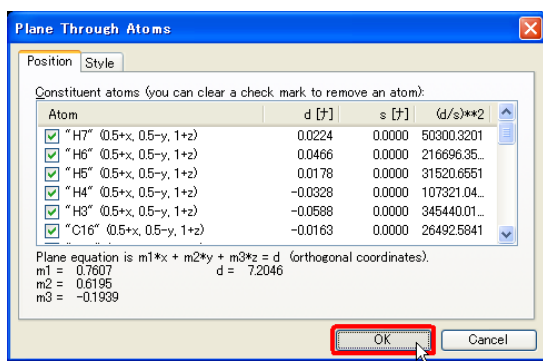
### 14. 分子 1 つを選択します



### 15. 最小二乗平面を作図します



### 16. 平面の作図に利用する原子を選びます



「View along axis」の設定で、「a」「b」「c」ボタンを順に押していきましょう。それぞれのボタンの軸が、PC の画面に直交する方向から見た図が表示されます。

この結晶の場合「c」ボタンを押した状態が、もっとも構造がわかりやすいでしょう。

次に、平行に並んでいる 2 つのピレンが存在する平面間（最小二乗平面）の距離を調べてみましょう。まず、実際にそれぞれの平面を図として構造図に描き込みます。そして、平面間の距離を計算する機能を使って距離を求めます。

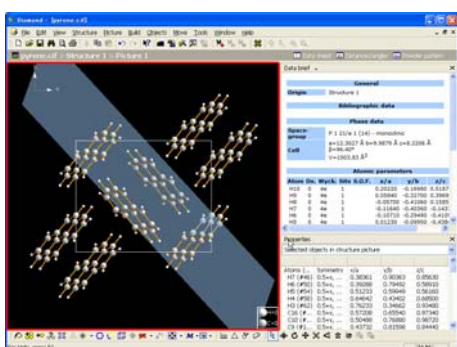
まず 1 つめの平面を作図します。距離を調べたい分子で、適当な原子を選んで右クリックし「Select Molecule(s)」を選びます。選んだピレンに含まれるすべての原子が選択された状態になります。

ピレン分子が選択されたままの状態、メインメニューから「Object」→「Planes/Create Plane Through Atoms」を選びます。

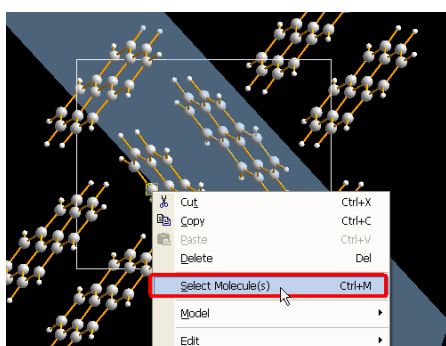
最小二乗平面を求めるときに利用する原子を選ぶ画面が表示されます。ここに表示されているピレン分子 1 つに含まれる原子すべてを利用するので、すべてにチェックをつけたまま「OK」ボタンを押します。

※ダイアログの下部に表示されているのが平面の式です。上のチェックボックスをオン/オフすると、平面の式に即座に反映します。

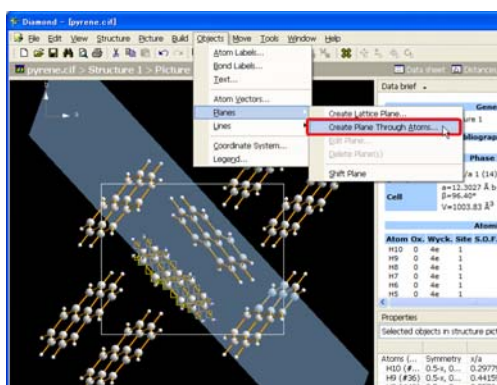
### 17. 1つ目の平面が作図されます



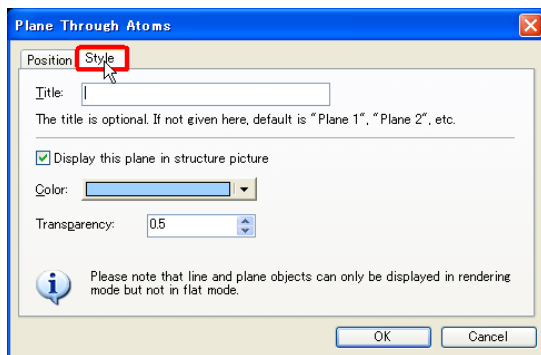
### 18. 隣のピレン分子を選択します



### 19. 平面を作図します



### 20. 2つ目の平面の色を変更します



このように平面が追加されます。

このピレン分子に隣り合うピレン分子を平面も求めます。先ほどのピレン分子が選択状態になっているのを解除します。図の何も無いところをマウスでクリックするか、キーボードの[Esc]キーを押してください。

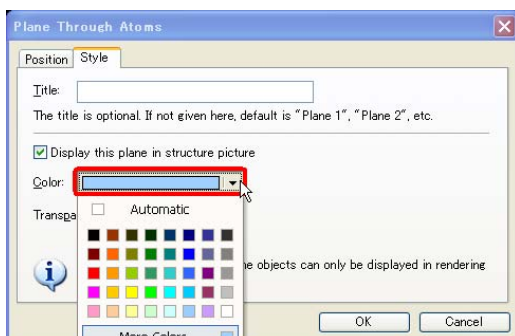
1つめの平面を作図したのと同じ手順を、隣のピレン分子に対して行います。ピレン分子を構成する適当な原子をマウスで右クリックし、「Select Molecule(s)」を選びます。

ピレン分子が選択されたままの状態、メインメニューから「Object」→「Planes/Create Plane Through Atoms」を選びます。

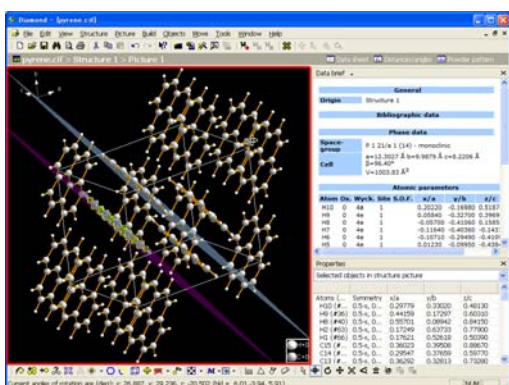
「Position」タブの設定は、1つめの平面と同様、すべての原子が選択された状態のままにします。

今回は、わかりやすいように平面の色を変更してみましょう。「Style」タブを開いてください。

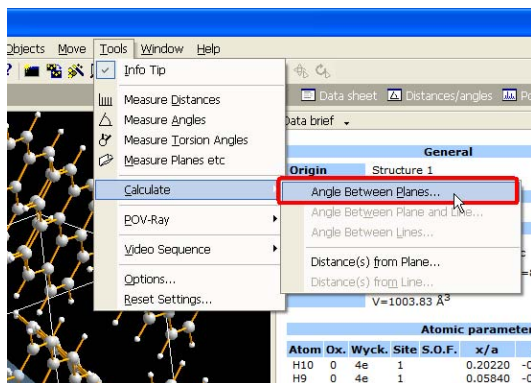
## 21. 色を選びます



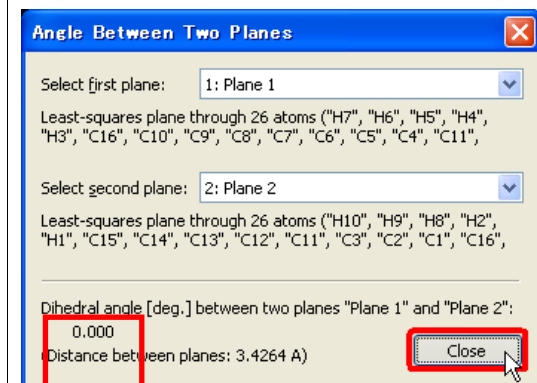
## 22. 2 つ目の平面が作図されます



## 23. 平面間の距離を計算します



## 24. 2 平面間の距離がわかります



「Color」の設定欄で「▼」ボタンを押すと、パレットが表示され、色を選べます。1 つめの平面とは異なる色を選び、「OK」ボタンを押します。

2 つの平行な平面が表示されました。この平面間の距離を計算することで、隣り合うピレン分子の距離を求めます。

メインメニューの「Tools」から「Calculate」→「Angle Between Planes」を選びます。

2 平面間の角度を求めるというコマンドを実行しましたが、角度だけでなく距離も表示されます。

どの平面とどの平面の角度と距離を求めるのか設定できるので、「Select first plane」と「Select second plane」に、それぞれ「Plane1」と「Plane2」を選んでください。このダイアログの下部に 2 平面間の角度（単位は度）と距離（単位はÅ）が表示されます。このケースでは、「0.000」度と「3.4264」Åになっているはずです。確認したら「Close」ボタンで閉じます。