

## Diamond クイックスタートガイド(4)

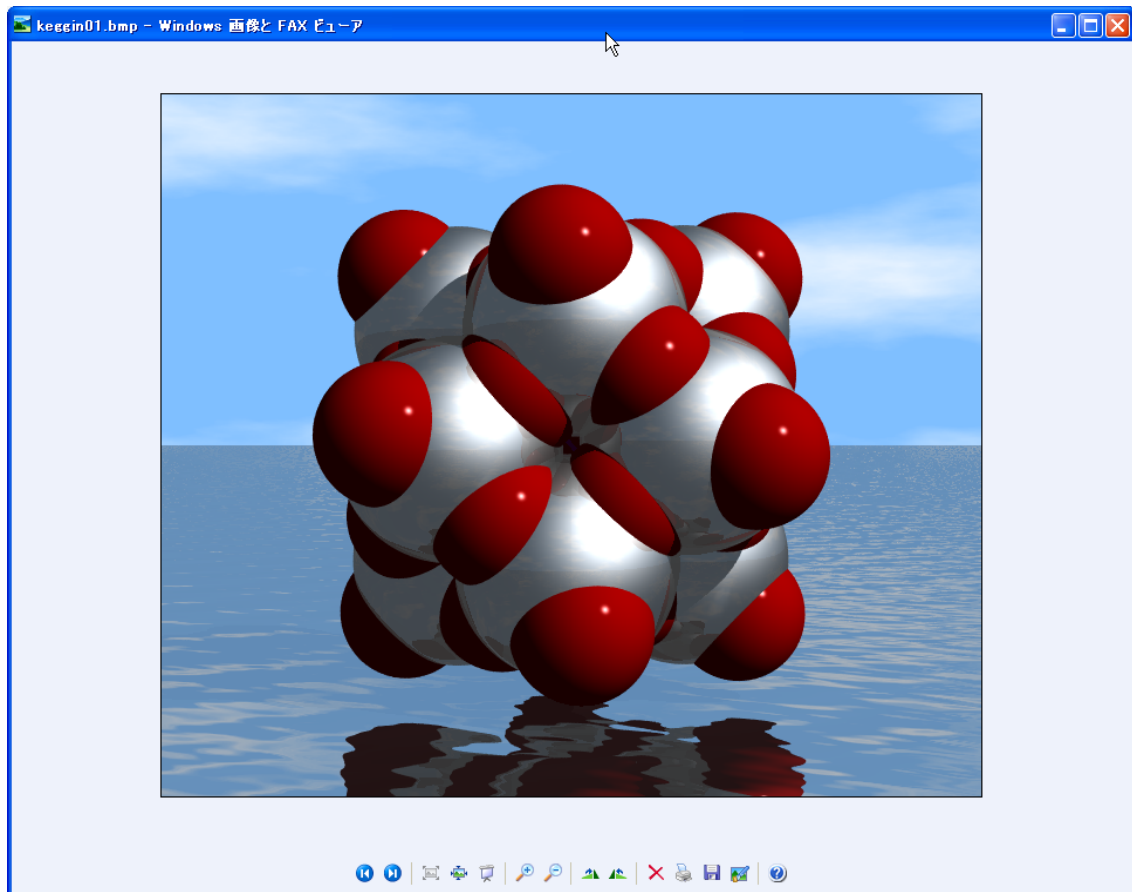


～ POV-Ray と連携させて高品質な画像を作成する

[ここで学ぶこと]

- ・ 結晶構造図を複製する方法
- ・ Diamond に付属するレタリングソフト「POV-Ray」と連動させて高画質の構造図を作成する方法

POV-Ray と連動させると、下の図のように原子に金属のような質感を持たせたり、背景画像と結晶構造図を合成することができます。実際にこのような図を作成してみましょう。



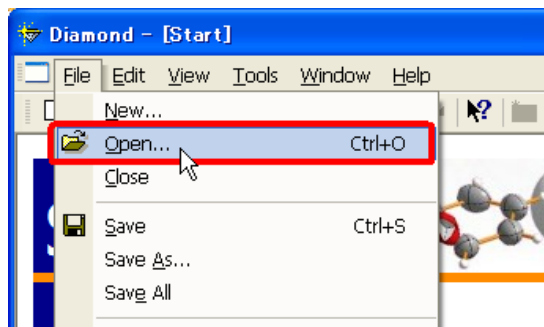
作成：株式会社ライトストーン

2009-03-18

## 操作手順

### A. 結晶構造データを用意する

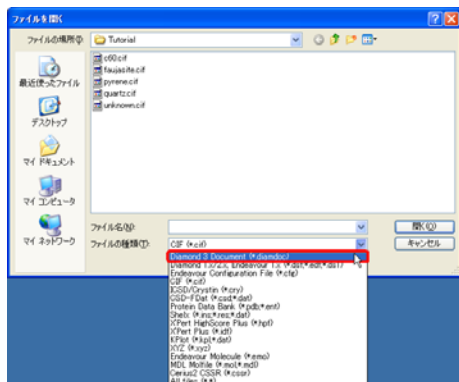
#### 1. 結晶構造データを開く



ここでは Diamond3 形式の結晶構造データを使って作図します。まず、データファイルを読み込みましょう。

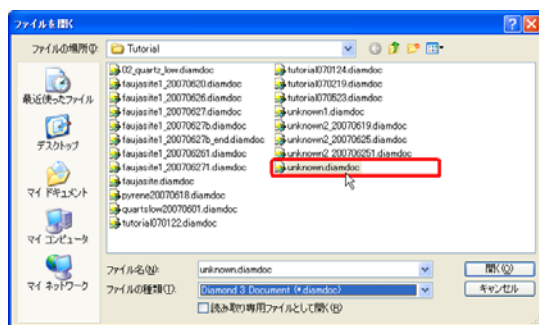
Diamond の「File」メニューから「Open」を選びます。

#### 2. Diamond3 形式を選ぶ



どの形式のファイルを読み込むか指定します。[ファイルの種類] リストで [Diamond 3 Document (\*.diamdoc)]を選びます。Diamond3 形式のファイルだけが表示されるようになります。

#### 3. 「unknown.diamdoc」を選ぶ

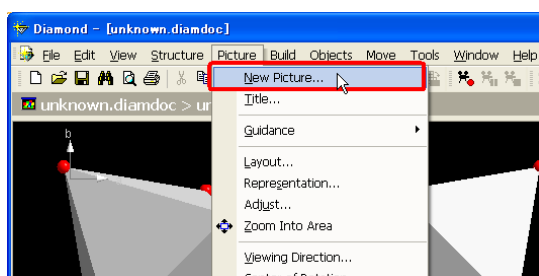


「unknown.diamdoc」というデータを使って図を作ります。Diamond をインストールしたフォルダにある「Tutorial」フォルダの中から「unknown.diamdoc」を選びます。

※標準設定でインストールしてあれば、ファイルは以下の場所にあります。

C:\¥Diamond¥Samples¥Tutorial¥unknown.diamdoc

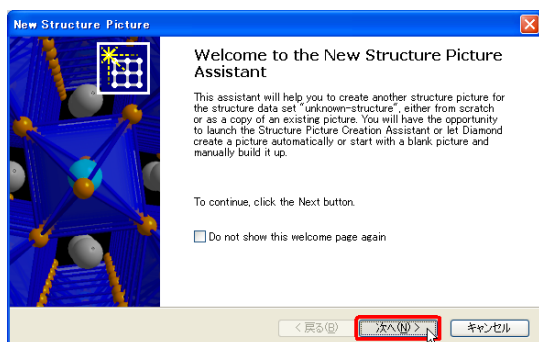
#### 4. 新しい構造図を作成する



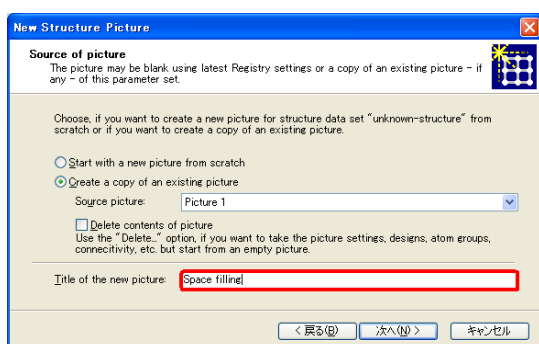
この図をそのまま使わずに「Space filling」モデルに変えます。この図にそのまま手を入れていくこともできますが、今回は図のコピーを編集していきましょう。図を複製するには、まず

「Picture」メニューから「New Picture」を選びます。

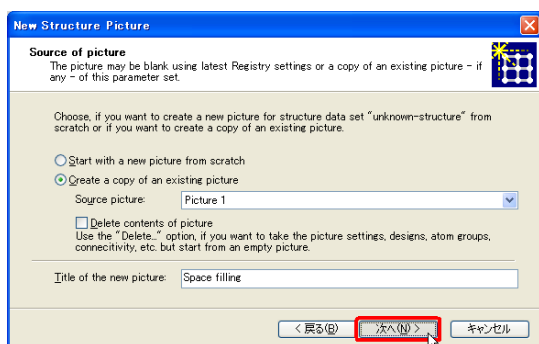
## 5. 次へ進む



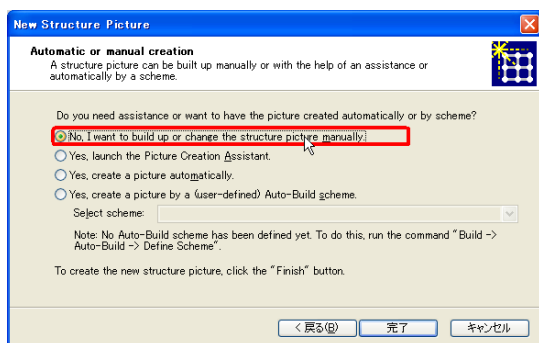
## 6. 複製先画像に名前をつける



## 7. 構造図の表示方法を指定します



## 8. 作図方法を指定



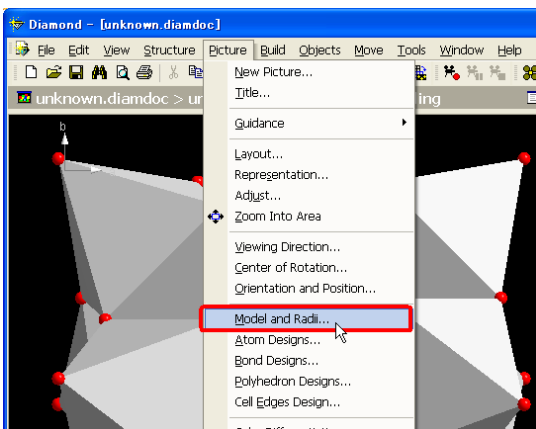
「New Structure Picture」ダイアログが開きます。最初の画面は表紙なので、「次へ」ボタンを押して次の画面に進みます。

すでに存在する図を複製するので、[Create a copy of an existing picture] にチェックをつけます。[Source picture] には元画像の名前「Picture 1」を選びます。複製先のファイル名を [Title of the new picture] 欄に入力します。今回は「Space filling」という名前にしておきましょう。

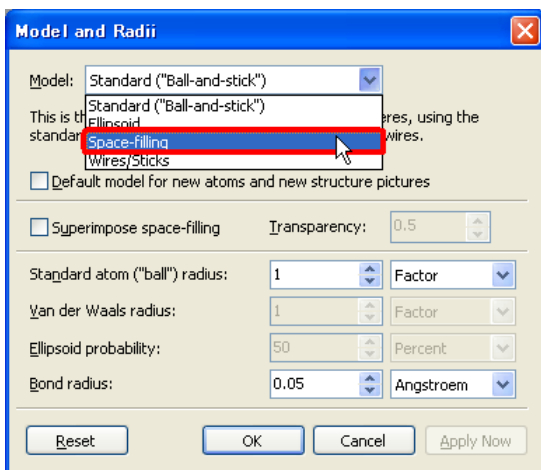
[次へ]ボタンを押して次の設定画面に進みます。

元の図を丸ごとコピーして表示モデルだけを変えます。新しい構造図がほしいので、[No, I want to build up or change the structure picture manually.] オプションをオンにして、[完了]ボタンを押します。「とりあえず丸ごとコピーだけ行って、変更はあとで手動で行う」というオプションです。

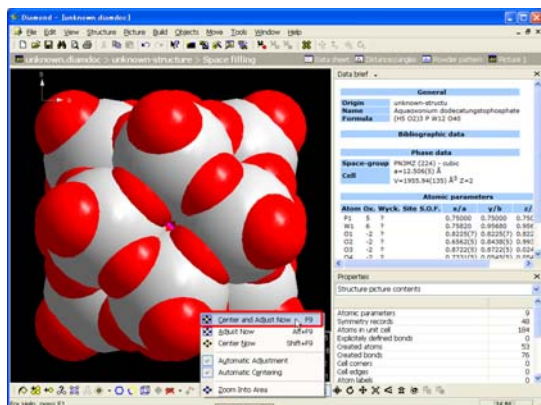
### 9. 表示モデルだけを変更する



### 10. Space-filling モデルに変更



### 11. 大きさと位置を自動調整



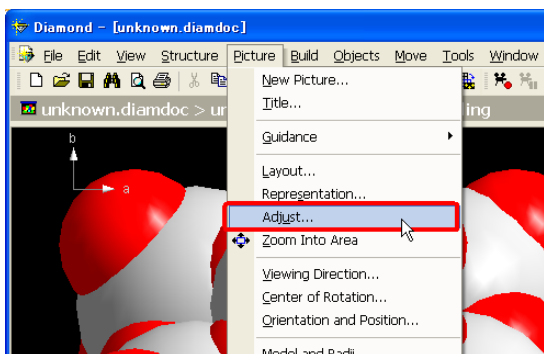
コピーした図が表示されます。元の図とまったく同じなのでわかりにくいですが、構造図の上方に表示されるナビゲーションバーの名前が「Space filling」に変わっています。今表示されている構造図は「Space filling」という名前の図であるという意味です。

ここから表示モデルだけを変えてみましょう。表示モデルを変えるには、まず[Picture]メニューから[Model and Radii]を選びます。

表示モデルを変更する画面が現れます。[Model]の設定を[Space-filling]に設定します。そのほかは変更せずに[OK]ボタンを押します。

多面体構造が Space-filling モデルに変わります。キーボードの[F9]キーを押します。表示のバランスを整えられます（大きさ、位置の自動調整機能）。

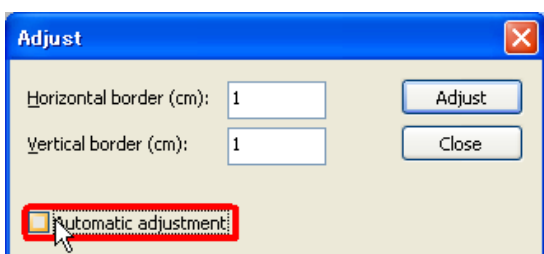
## 12. 自動調整機能をオフにする



表示のバランスを整えた状態で保っておきたいので、自動調整機能をオフにします。

まず「Picture」メニューから「Adjust」を選びます。

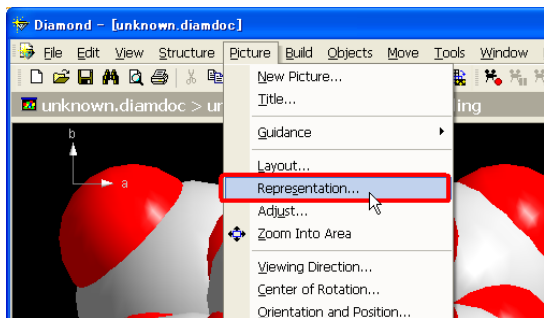
## 13. チェックを外す



「Auto adjustment」のチェックを外して、「Close」ボタンで閉じると、自動調整機能がオフになります。

## B. POV-Ray と連動させる設定

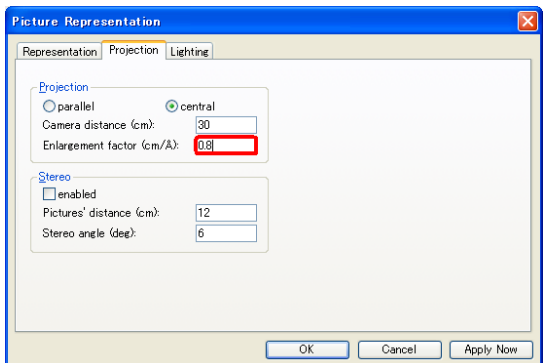
### 1. 遠近感が出やすいモードに変更



POV-Ray と連動させて図を作成する場合は、Diamond の設定で結晶構造図を「central projection」という遠近感が出やすいモードにしておく方が見栄えがよくなります。

その設定を行うために、まず「Picture」メニューから「Representation」を選びます。

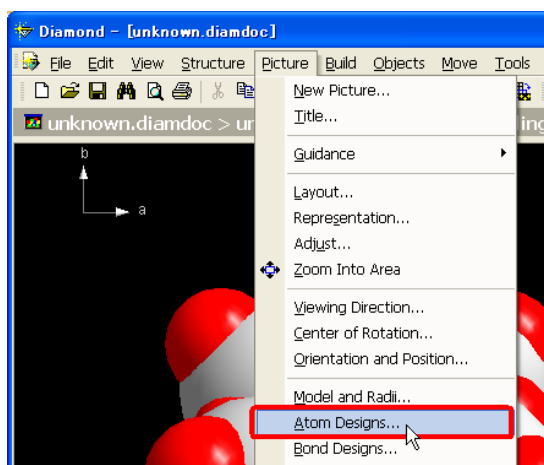
### 2. 結晶の表示サイズを調整



「Projection」タブの「Projection」の設定を「central」に変えます。また、結晶構造図の表示サイズを調整する「Enlargement factor」を今回は「0.8」にします。

※「Enlargement factor」の設定は「cm/Å」で入力します。例えば「1.0」と入力すれば「画面上的 1cm が 1Åに相当する」という意味です。「0.5」とすれば画面上的 2cm が 1Å（0.5cm が 1Å）になります。値を小さくするほど図が小さくなります。

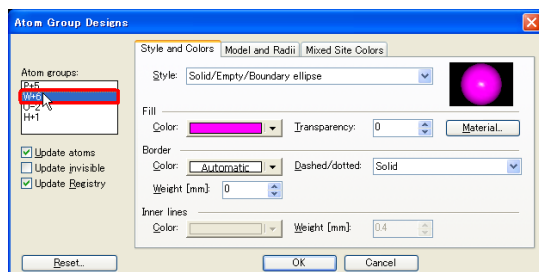
### 3. タングステン原子の質感を変更する



ここからは POV-Ray での作図についての設定を行います。POV-Ray は、物体の表面に反射する光を計算して作図します。その結果、物体に石、金属、ガラスなどの質感を与えることができます。今回はタングステン原子 (W) にソリッドクロムの質感をつけることにします。

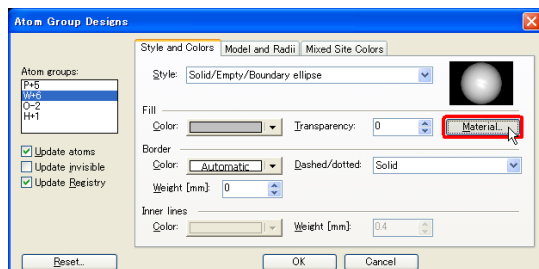
まず、構造図の背景をクリックしてどこも選択していない状態にしてから、「Picture」メニューから「Atom Design」を選びます。

### 4. リストからタングステン(W)を選ぶ



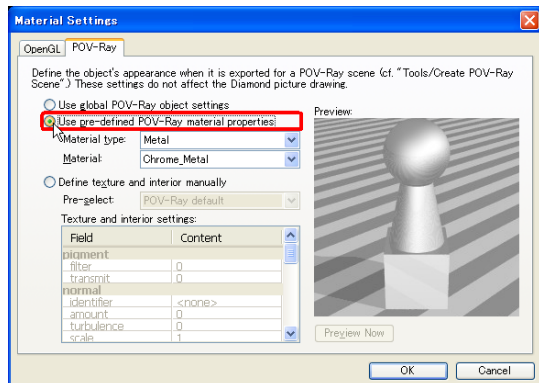
「Atom Group Design」タブが開きます。左にある「Atom Groups」の設定でタングステン「W+6」を選ぶと、タングステン原子の設定を変えられます。

### 5. 「Material」 ボタンを押す



「Material」ボタンを押します。POV-Ray の起動画面が表示されるのでその画面は適当に閉じてください。それとは別に Diamond の「Material Setting」という設定画面が開きます。その画面で設定を行います。

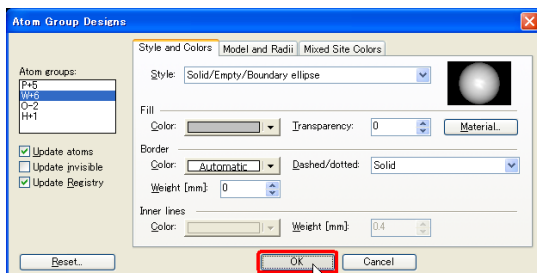
### 6. 「Chrome\_Metal」を選ぶ



「Material Setting」ダイアログで「POV-Ray」タブを選びます。今回選んだタングステンの原子だけに、設定を適用したいので「Use pre-defined POV-Ray material properties」を選びます。

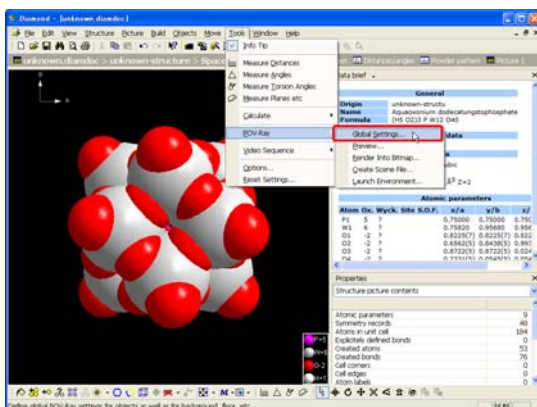
「Material type」を「Metal」に、「Material」を「Chrome\_Metal」を選び、「OK」ボタンを押します。

## 7. 設定を確定してダイアログを閉じる



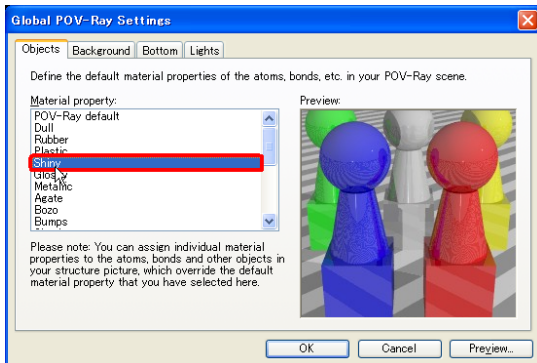
「Atom Groups Designs」ダイアログも「OK」ボタンで閉じます。

## 8. 背景やその他の原子の質感を設定



次にタングステン以外の原子の質感や背景を設定します。構造図の全体に対する設定は「グローバル設定」で指定します。「Tools」メニューから「POV-Ray」→「Global Setting」を選びます。

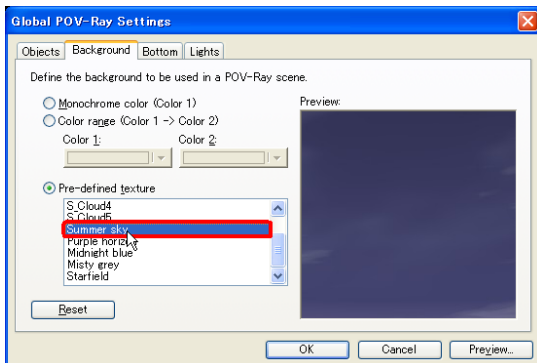
## 9. その他の原子を「Shiny」に設定



「Object」タブで「Material property」を「Shiny」にします。先ほど個別に設定したタングステン以外の原子と結合が、光をよく反射する「Shiny」という設定で表示されるようになります。

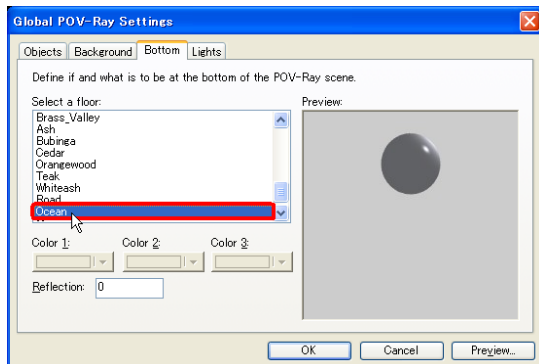
右側にプレビューが表示されるので、自分で設定を決める場合はプレビューを見ながら選ぶといいでしょう。

## 10. 背景を「Summer sky」に設定



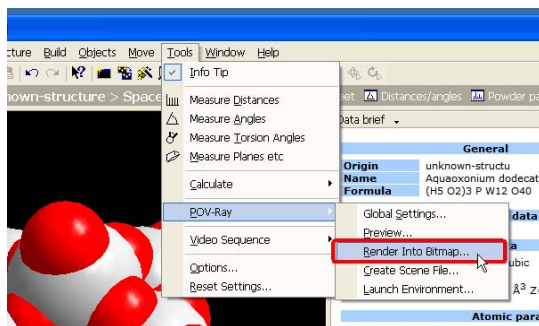
「Background」タブでは、構造図の背景を設定できます。「Pre-defined texture」にチェックをつけると、あらかじめ用意されている背景の中から選べます。ここでは青空の背景「Summer sky」を選んでみましょう。

## 11. 底面を「Ocean」に設定

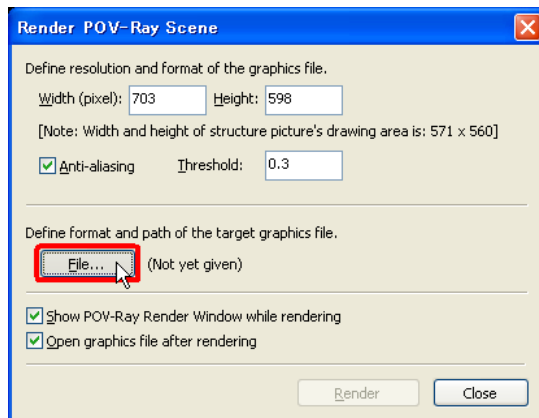


### ここまでの設定を使って構造図を作図

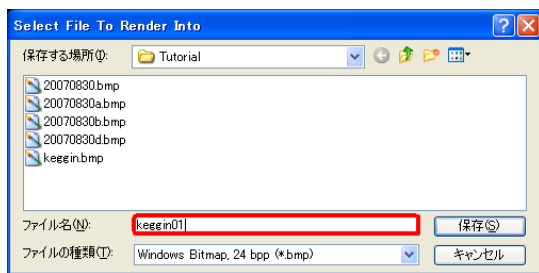
#### 1. 「POV-Ray」メニューから作図する



#### 2. 画像のサイズを決める



#### 3. ファイル名を決める



「Bottom」タブでは背景の底面を設定できます。ここでは試しに「Ocean」を選んでみましょう。底面が海ようになり、浮いている原子が底面にうつりこむようになります。

ここまでで POV-Ray と連動させた構造図を作成するための設定は終わりです。それでは、実際にこれまでの設定を使って作図してみましょう。

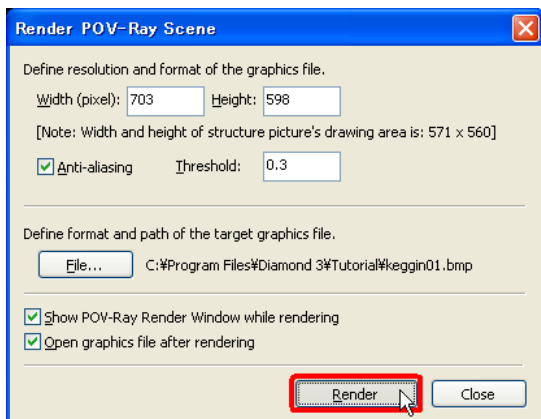
ここまでに設定した内容を反映させた結晶構造図を作図します。Diamond から POV-Ray にデータを渡し、画像ファイルとして出力される形になります。

まず、Diamond の「Tools」メニューから「POV-Ray」→「Render Into Bitmap」を選びます。

Width と Height に出力画像の幅と高さをピクセル数で指定します。そして、「File」ボタンを押すと、画像の出力先を決められます。

構造図を保存するフォルダを選び、ファイル名を指定してください。また「ファイルの種類」で保存するファイルの形式を指定できます。BMP ファイルと PNG ファイルのどちらかを選ぶことができます。

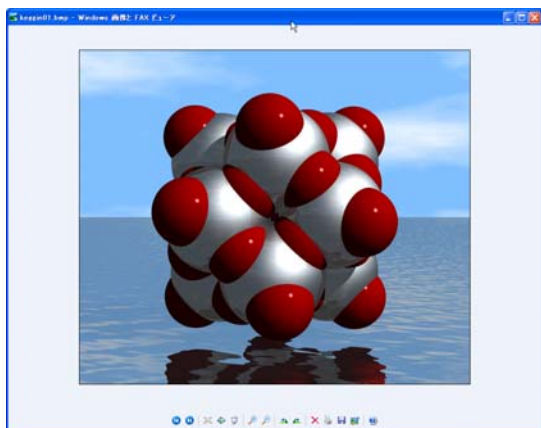
#### 4. 画像サイズとファイル名を決める



必要な設定をすべて行ったら「Render」ボタンを押すと、構造図が作図されます。

POV-Ray の起動画面が表示され、図が上から表示されていきます。すべて表示されるまで閉じたりせずにそのまま待ってください。

#### 5. 画像ソフトで構造図が開きます



作成した画像ファイルに関連づけられているソフトが開き、構造図が表示されます。座標軸や凡例などは表示されません。