



DIAMOND

Crystal and Molecular Structure Visualization

クイックスタートガイド

概要

Diamond は、ドイツの Crystal Impact 社によって開発された結晶や分子構造を視覚化するためのソフトウェアです。プレゼンテーションや論文発表、書籍の出版だけでなく、研究や教育など、さまざまな結晶構造に関係する仕事に役立つ、多数の機能を統合した製品です。分子や結晶の美しい図を描けるだけではありません。構造パラメータ（格子、空間群、原子座標）の基本的な情報から、結晶構造のどんな任意の部分でも簡単にモデル化します。また、粉末パターンデータを計算で求めることもできます。本クイックスタートガイドの記述に従って、Diamond を操作すれば、一通りの操作方法をご理解いただけます。

(1) Diamond の基本操作	2
A. 結晶構造データのインポートと全自動描画	2
A. 結晶構造データのインポートと全自動描画	3
B. 結晶構造図と結晶構造データの表示	5
C. 結晶構造図の回転／視点変更	7
D. ビデオファイルの作成	8
(2) 結晶構造データの手動入力とウィザードによる作図	11
A. 原子の座標データを入力する	12
B. 構造図の表示方法を設定	16
(3) CIF ファイルのインポートと距離や角度の調べ方	19
A. CIF ファイルのインポート	20
B. 平面を作図する	23
(4) POV-Ray と連携させて高品質な画像を作成する	26
A. 結晶構造データを用意する	27
B. POV-Ray と連動させる設定	30
C. ここまでの設定を使って構造図を作図	33

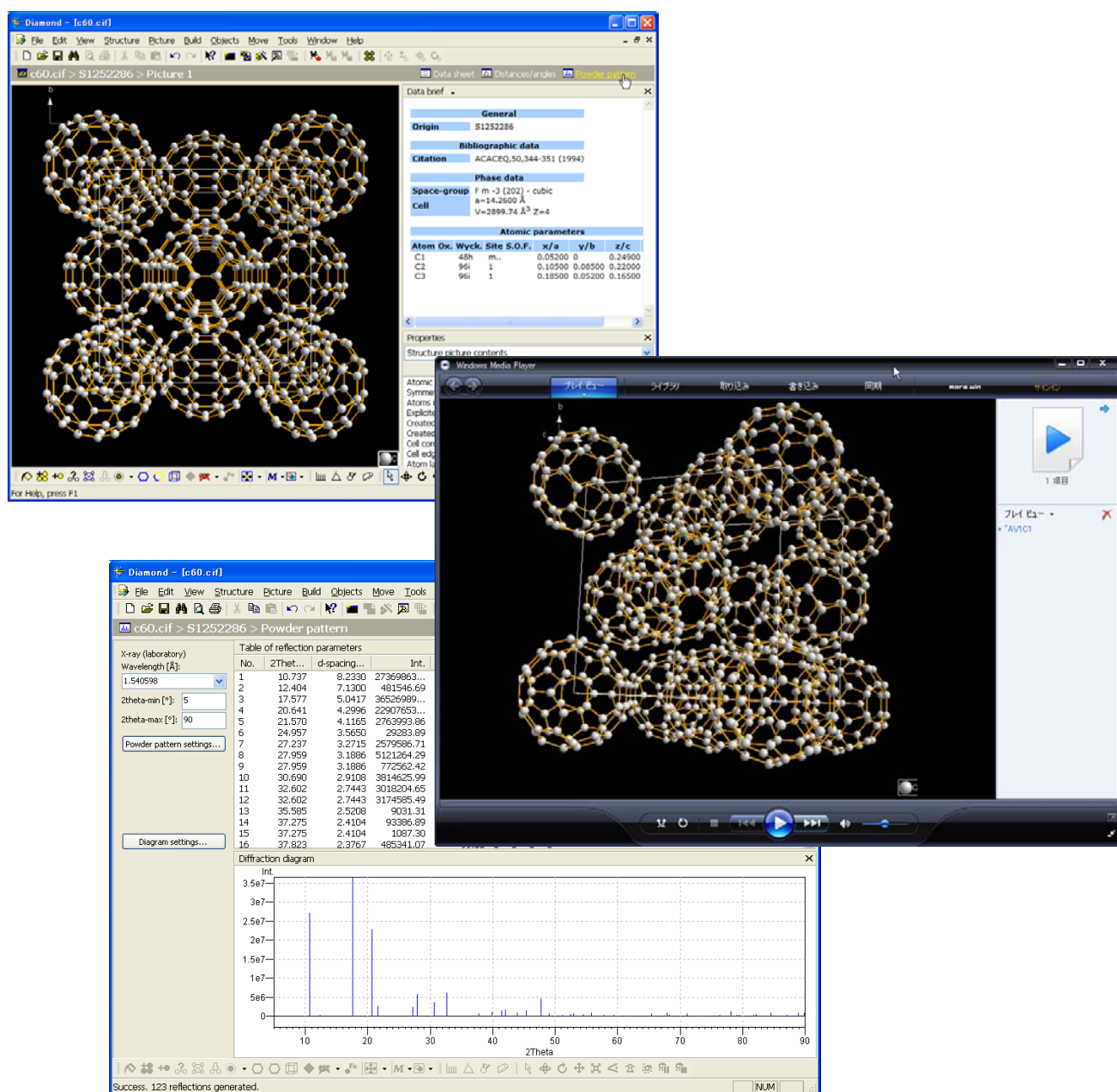
作成：株式会社ライストーン

20090324

(1) Diamond の基本操作

[ここで学ぶこと]

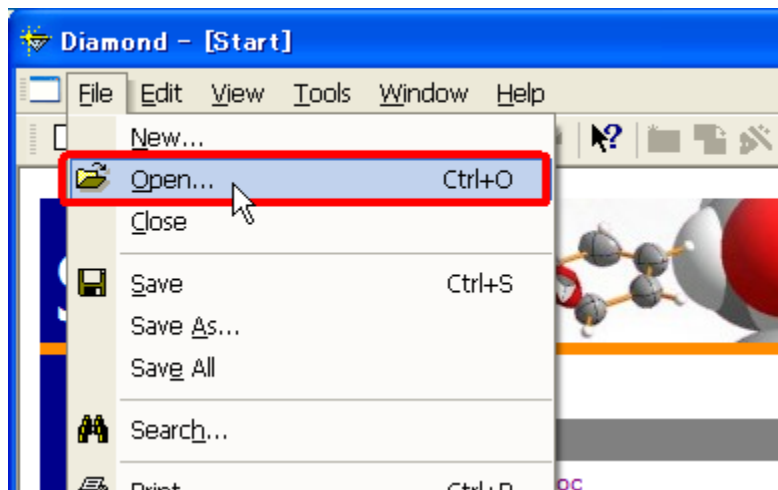
CIF 形式の結晶構造データを Diamond にインポートし、Diamond におまかせで結晶構造図を作成します。また、Diamond のウィンドウに表示される情報の見方を学び、作図した結晶構造データを詳しく見たり、図を表示させる視点を変更する操作も行います。最後に、表示させた結晶構造図を動かし、動画として保存します。



A. 結晶構造データのインポートと全自動描画

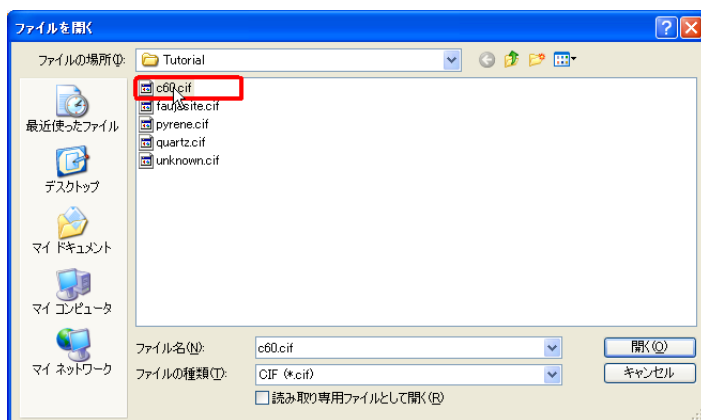
1. データファイルを開く

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。



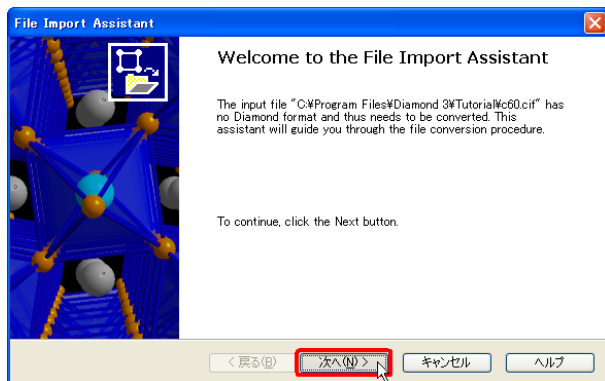
2. データを選択する

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。



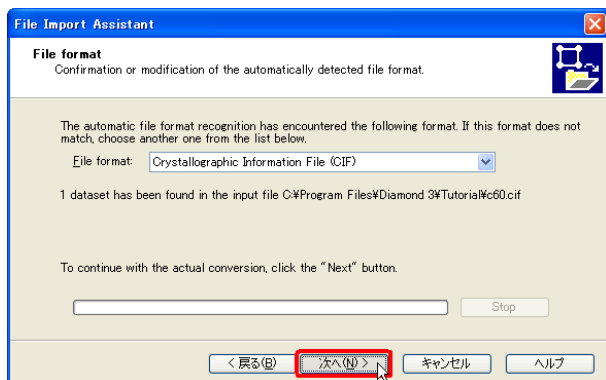
3. 「次へ」を押す

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。



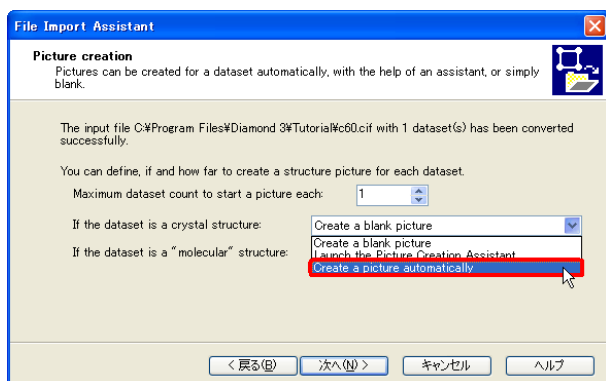
4. データ形式を選択する

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。



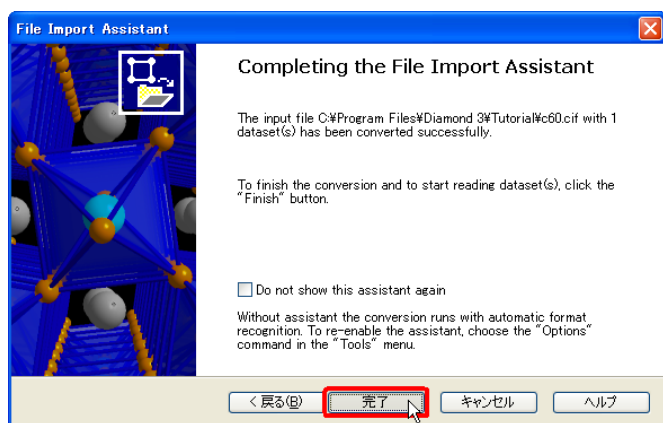
5. 全自動か半自動か選択する

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

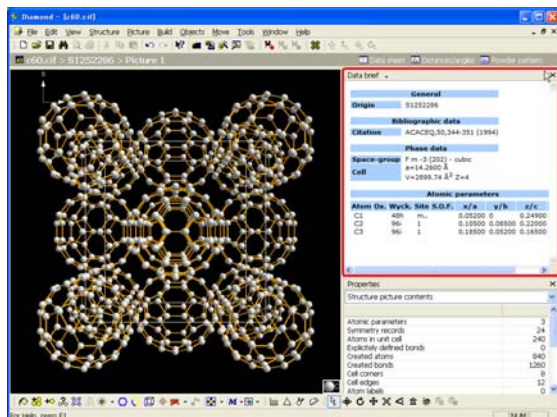
[完了] ボタン をクリックして結晶構造図を作成します。



B. 結晶構造図と結晶構造データの表示

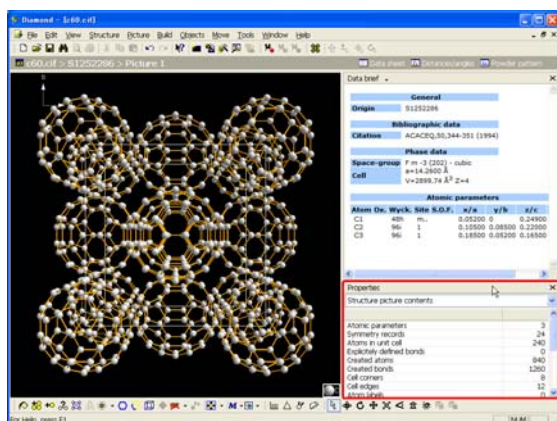
7. 結晶構造データを見る

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。



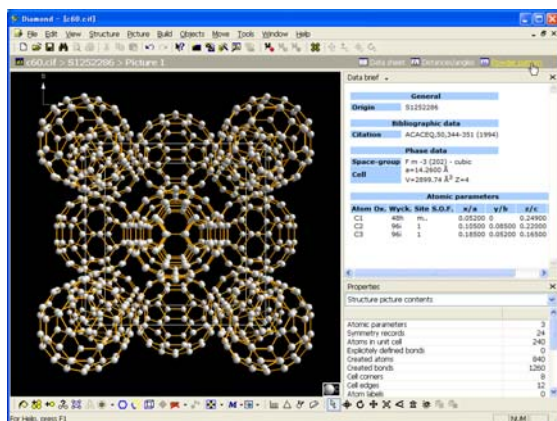
8. 構造図の内容を見る

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えられます。



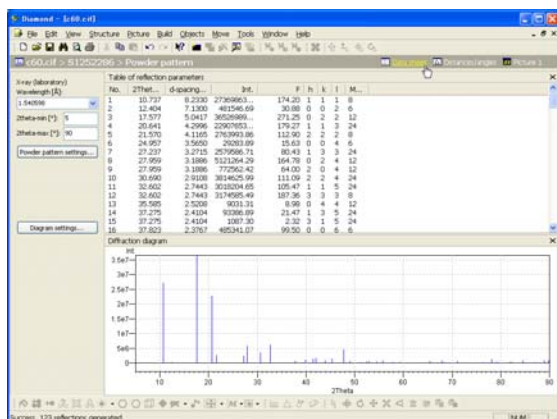
9. 結晶の粉末回折データを見る

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。



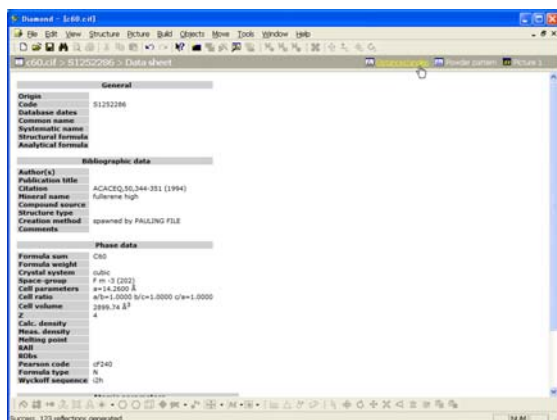
10. 粉末回折パターンをシミュレーション

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。



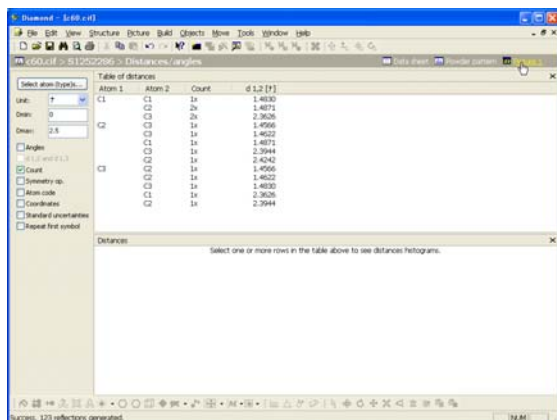
11. 結晶の詳細データを表示

「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。



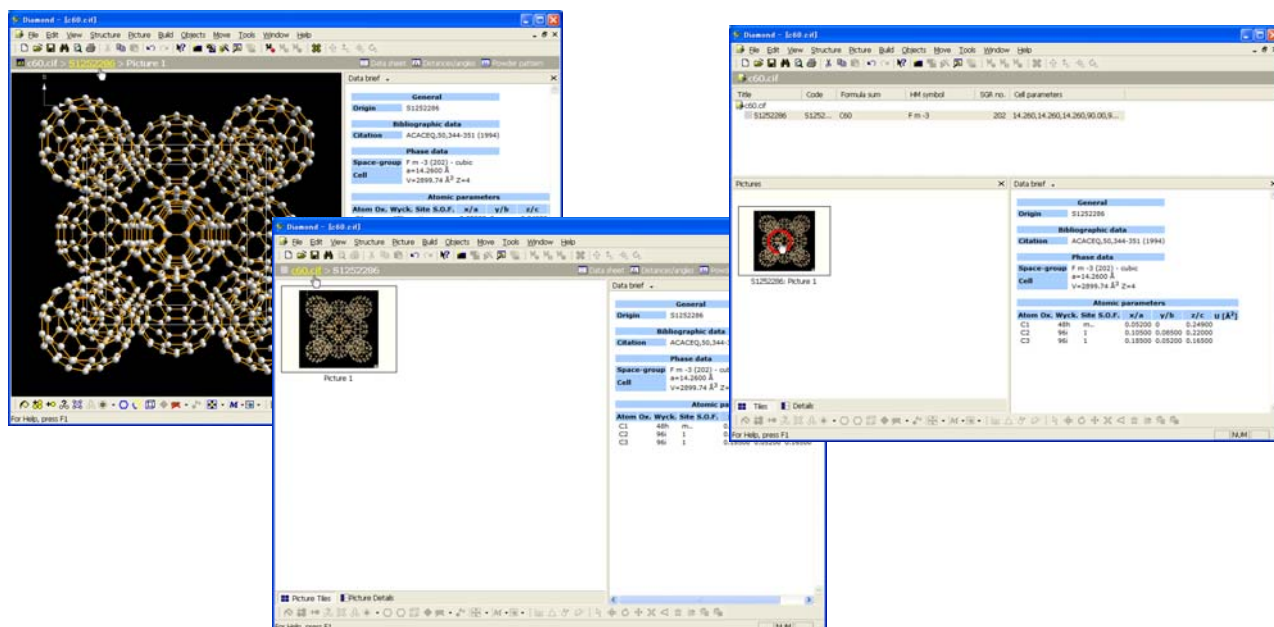
12. 原子間距離や角度を表示

「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

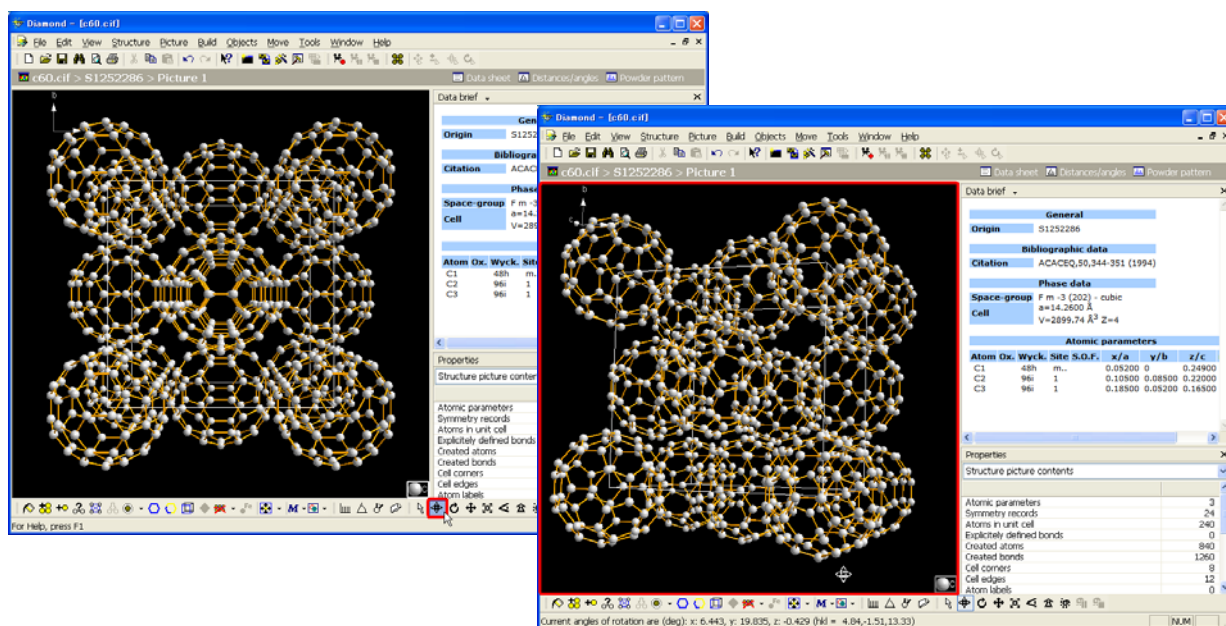
Diamond 形式のデータファイルは、複数の結晶構造データを含むことができ、階層管理も可能です。画面左上に表示される階層名をクリックすると、その階層に含まれているデータをすべて表示できます。



C. 結晶構造図の回転／視点変更

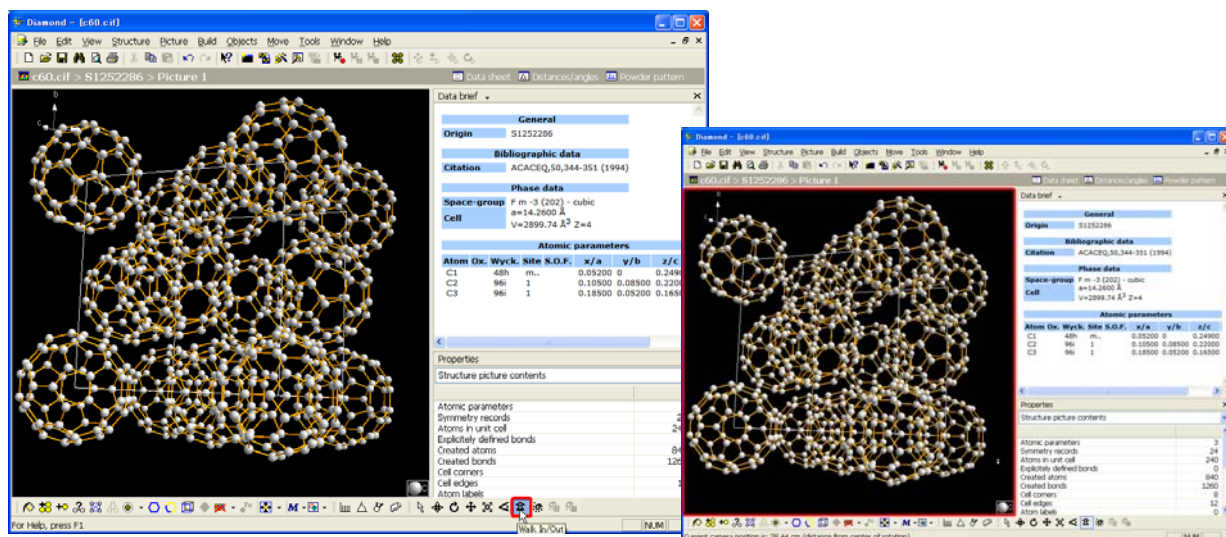
14. 構造図を回転させる

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

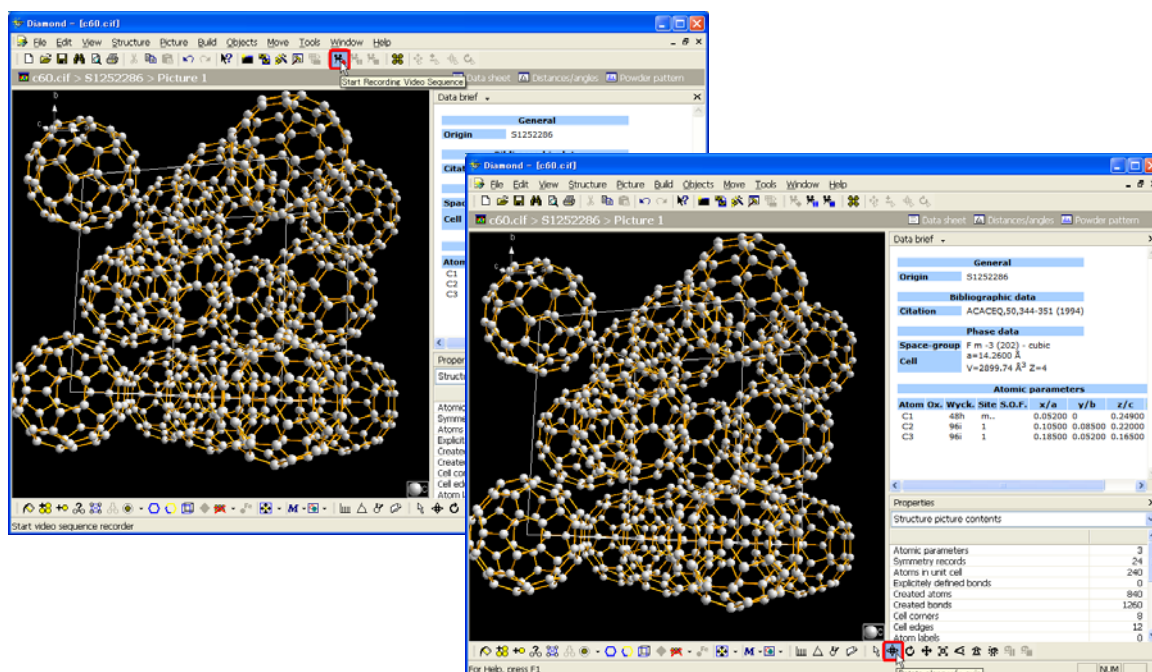
[Walk In/Out] チェック ボックス をオンにし、画面左の図が表示されている部分でマウスをドラッグします。マウスを上に向かって動かすと結晶が近づいてきます。逆に、マウスを下方向に動かすと、結晶構造図が遠くに離れていきます。



D. ビデオファイルの作成

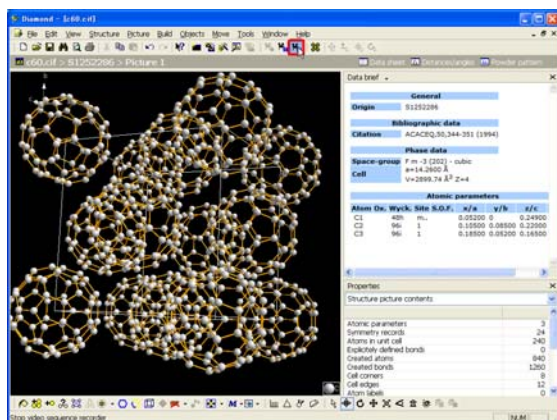
16. 図を動かしたようすをビデオファイルにする

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。



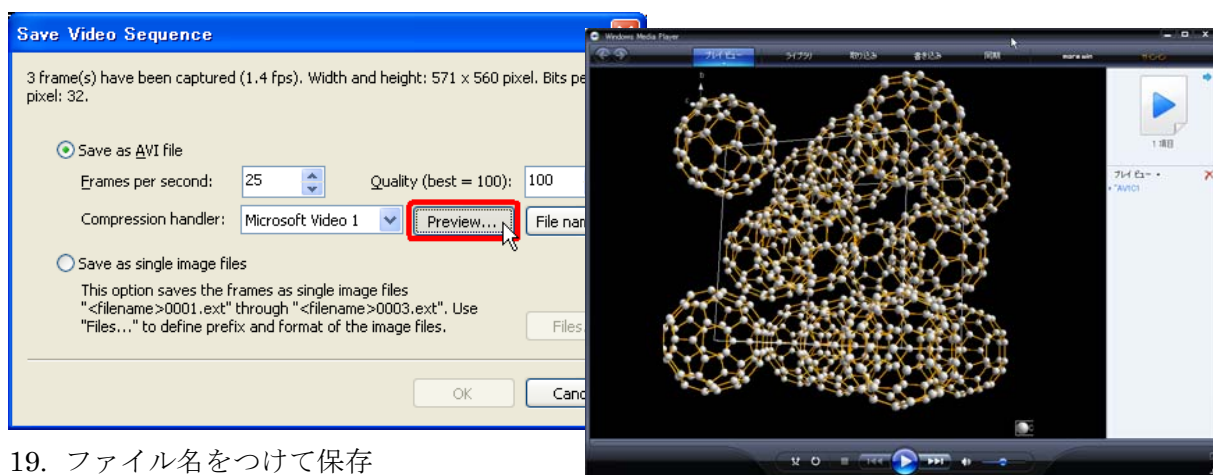
17. ビデオの録画を停止する

[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。



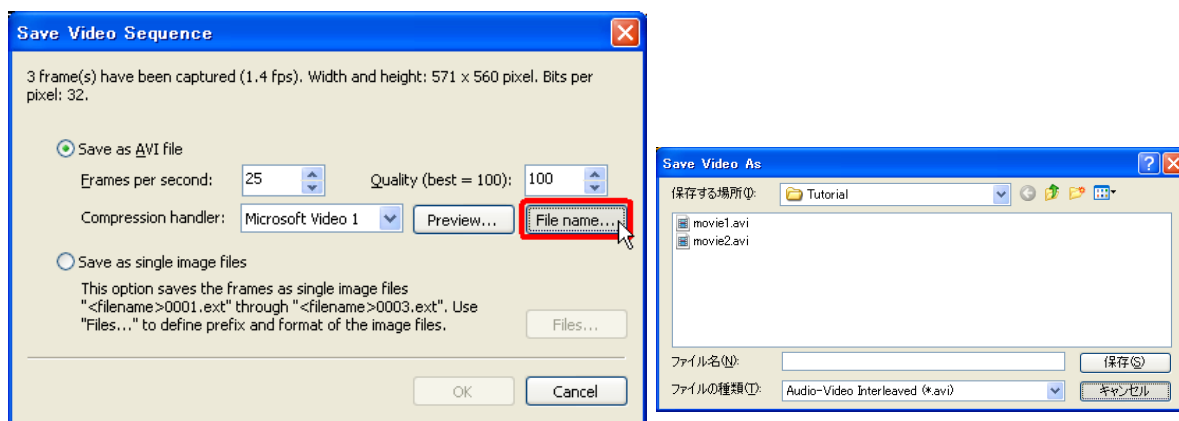
18. 動画ファイルとして保存する

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。



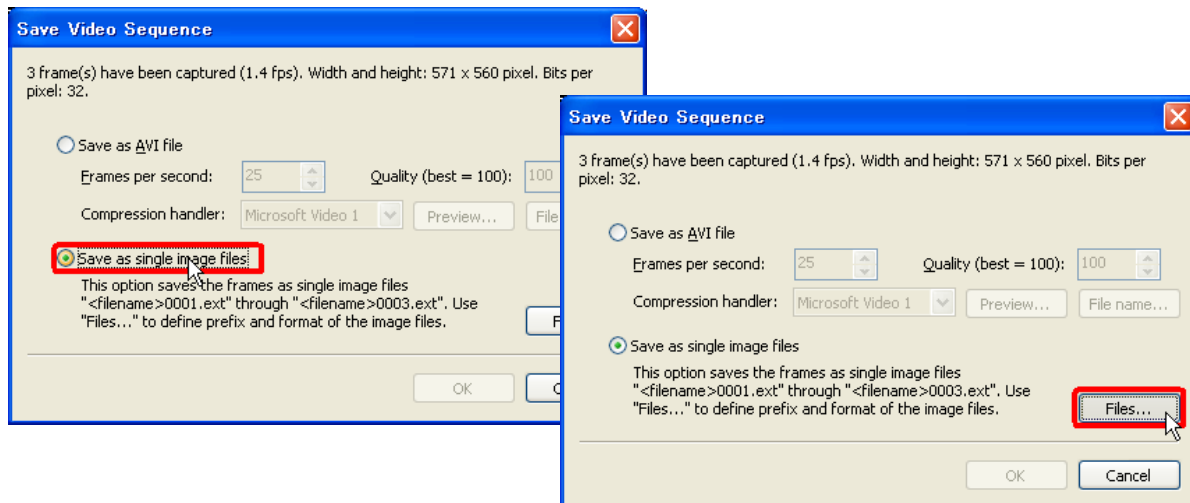
19. ファイル名をつけて保存

[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。



(2) 結晶構造データの手動入力とウィザードによる作図

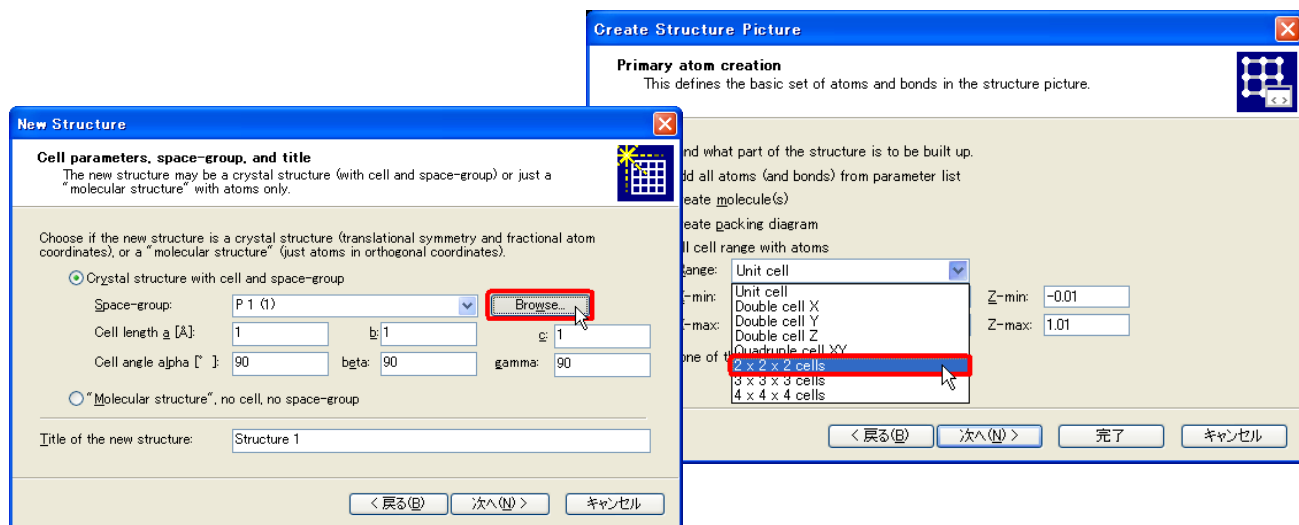
[ここで学ぶこと]

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。

※ 今回入力する結晶データは下記の数値を利用します。

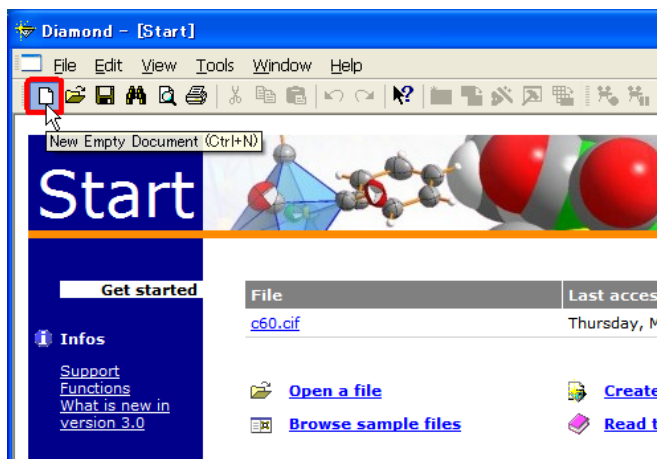
結晶 : SiO₂
空間群 : P 31 2 1 (空間群番号 : 152)
単位格子の大きさ :
a = 4.535 Å
b = 4.535 Å
c = 5.17 Å
単位格子の 3 辺の角度
α = 90°
β = 90°
γ = 90°
各原子の分率座標 (1 つの非対称単位のみ)
Si (x/a, y/b, z/c) = (0.4487, 0, 0.3333)
O (x/a, y/b, z/c) = (0.367, 0.2962, 0.2427)



A. 原子の座標データを入力する

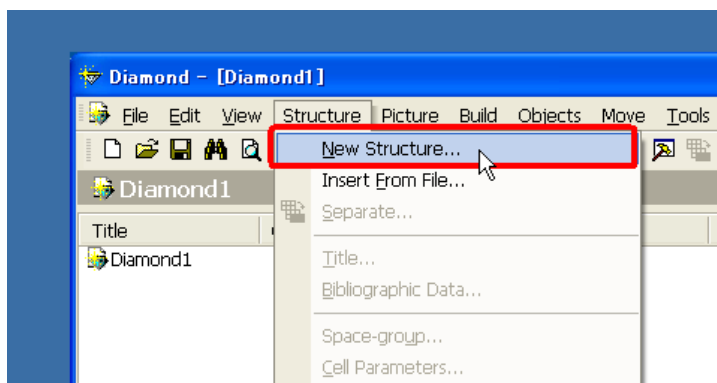
1. 新規のデータを作成する

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。



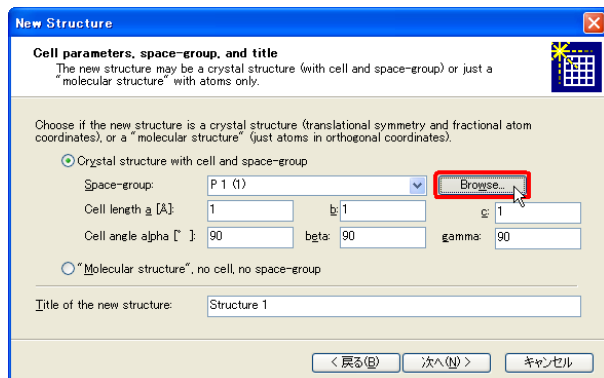
3. ウィザードを開始する

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。



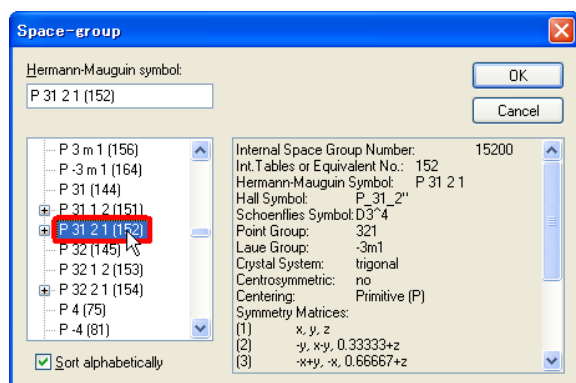
4. 格子定数を入力する

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。



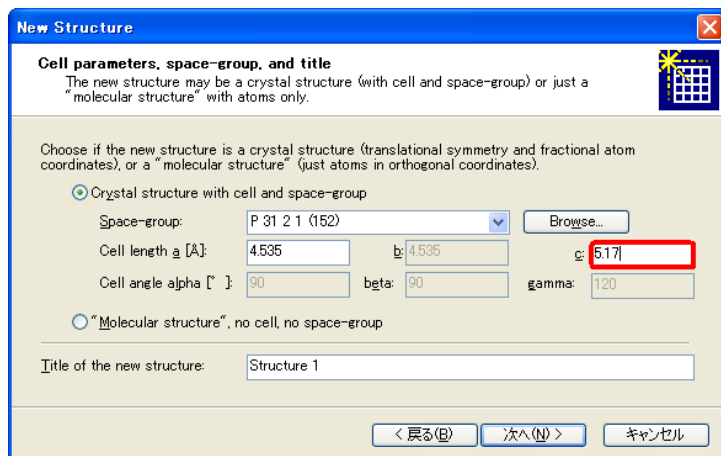
5. 空間群を選ぶ

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辺の長さと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いでしょう。今回は「Quartz low」として、「次へ」ボタンを押します。

New Structure

Cell parameters, space-group, and title
The new structure may be a crystal structure (with cell and space-group) or just a "molecular structure" with atoms only.

Choose if the new structure is a crystal structure (translational symmetry and fractional atom coordinates), or a "molecular structure" (just atoms in orthogonal coordinates).

☒ Crystal structure with cell and space-group

Space-group: P 31 2 1 (152) [Browse...]

Cell length a [Å]: 4.535 b: 4.535 c: 5.17

Cell angle alpha [°]: 90 beta: 90 gamma: 120

☐ "Molecular structure", no cell, no space-group

Title of the new structure: Quartz low

< 戻る(B) 次へ(N) > 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。

New Structure

Atomic parameters
The atomic parameters use fractional coordinates for a crystal structure but orthogonal coordinates (in Angstrom units) for a "molecular structure".

Here you can define element (with oxidation number) as well as x, y, and z for every atom. For mixed or defect sites, standard uncertainties, and displacement parameters, use the "Atomic Parameters" dialog ("Structure" menu) instead.

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

Atoms in the asymmetric unit:

Atom	x	y	z
------	---	---	---

Delete

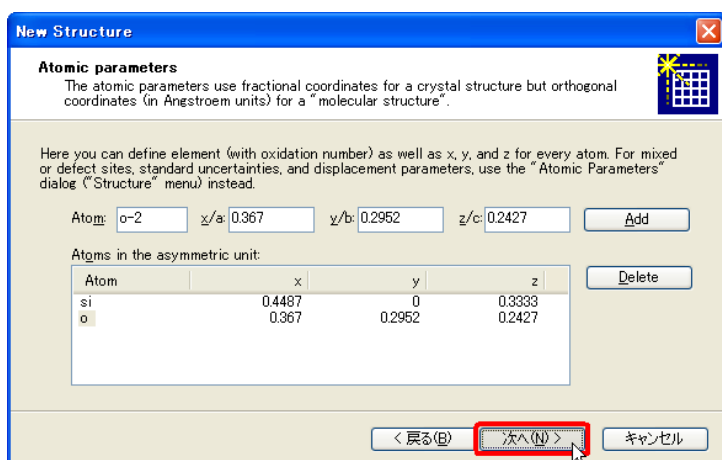
< 戻る(B) 次へ(N) > キャンセル

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。

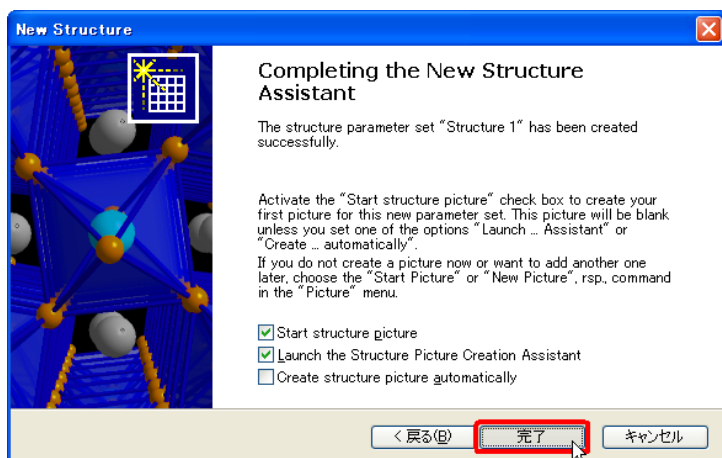
Atom : o-2
x/a : 0.367
y/b : 0.2962
z/c : 0.2427

「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。

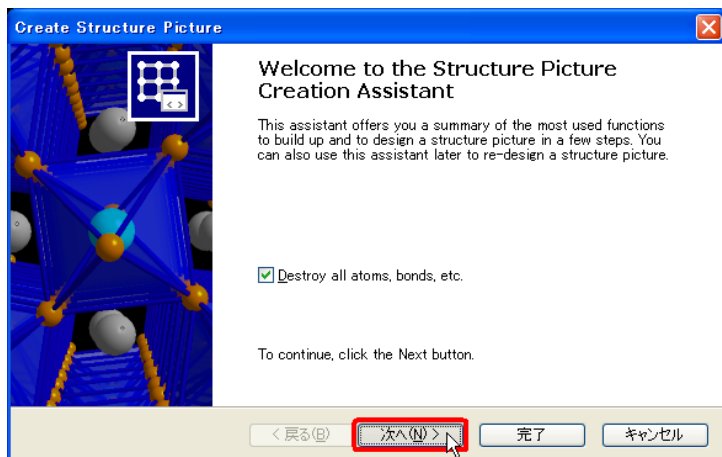


B. 構造図の表示方法を設定

11. 既存の図を削除するか指示する

すでに画面上では他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。

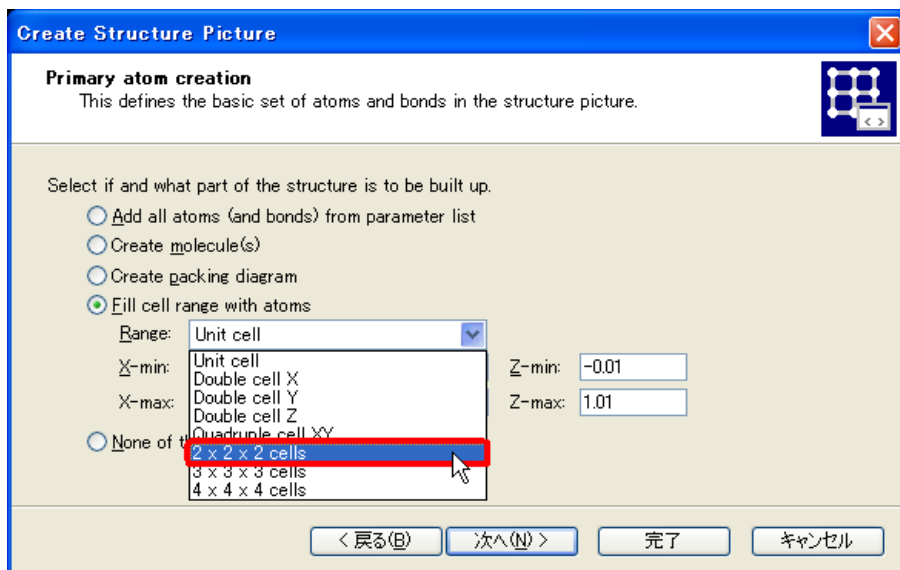


12. 結晶構造の表示範囲を指定する

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よう。

[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。



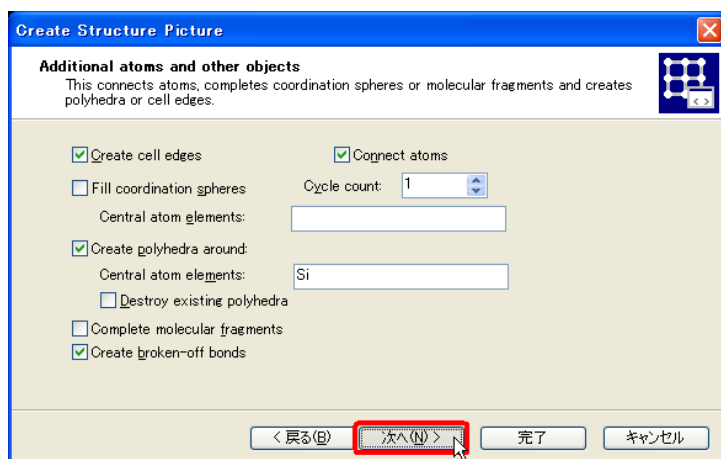
13. 結晶構造図の作図内容について設定します

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

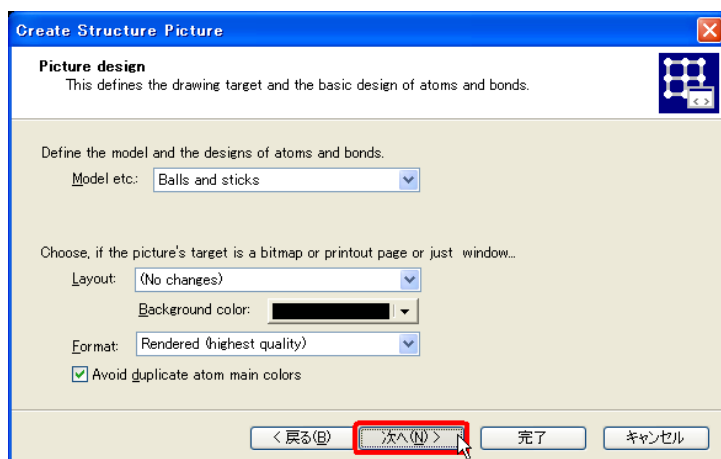
「Connect atoms」… 結合を表示します。各原子間の結合の有無は現在の「Connectivity settings」の設定にしたがいます

「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。



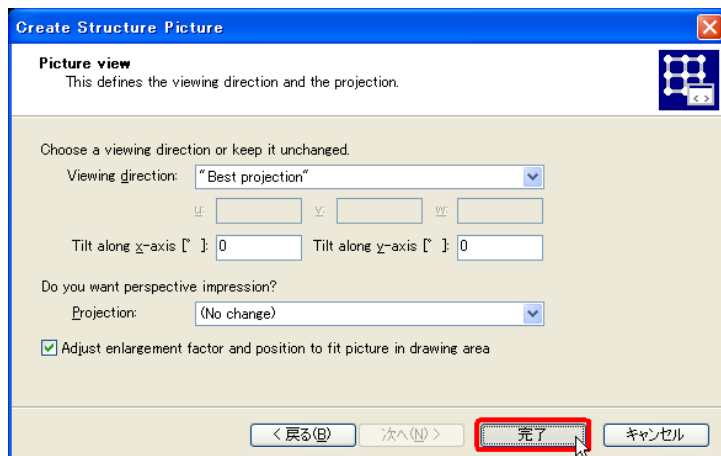
14. 構造図のデザインについての設定

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。



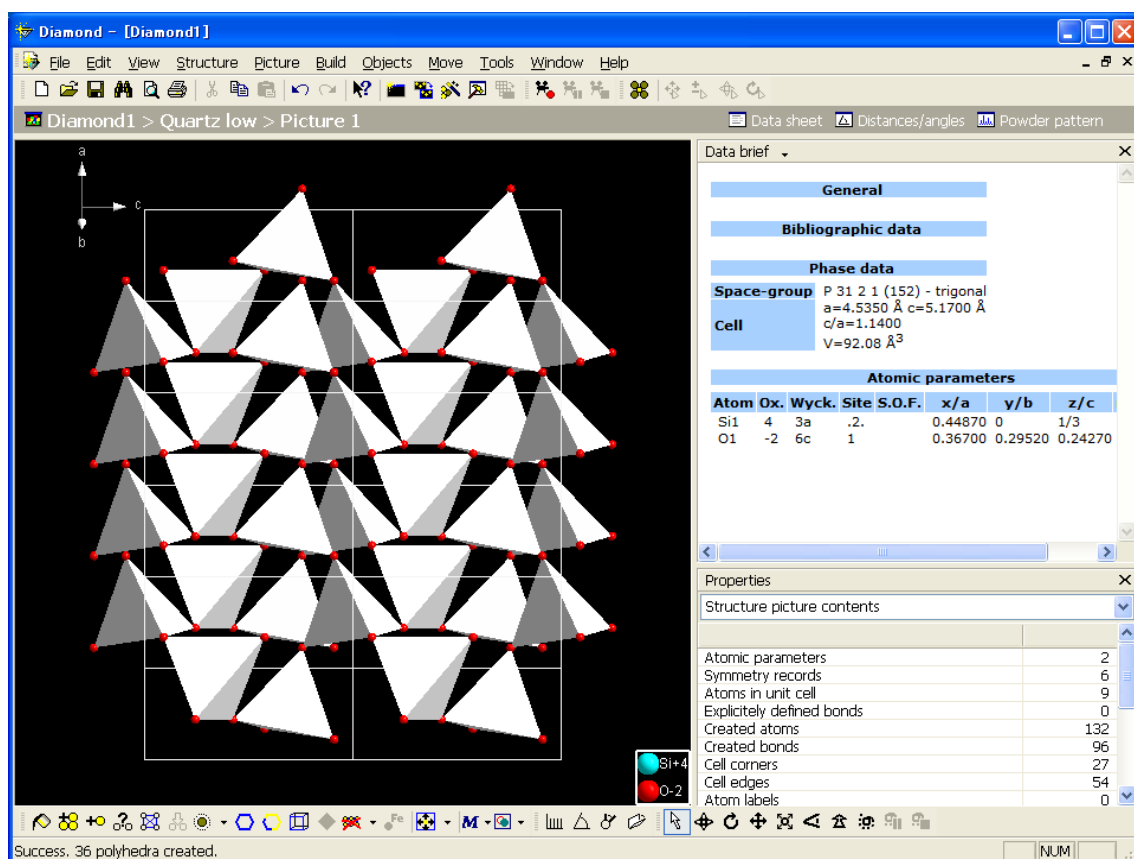
15. どの方向から見た構造図にするかなどの視点の設定

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えられるので、標準設定のままにします。「完了」ボタンを押すとい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 SiO_2 の結晶構造図が表示されます。

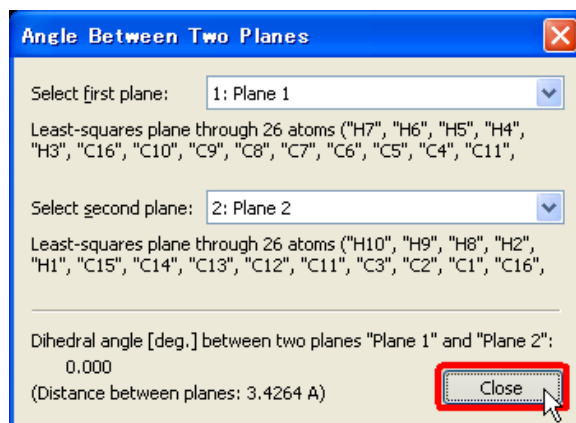
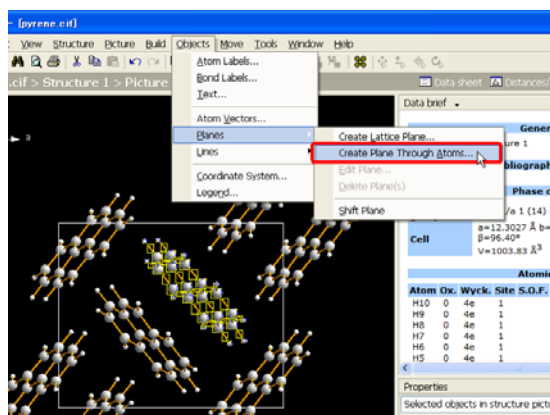
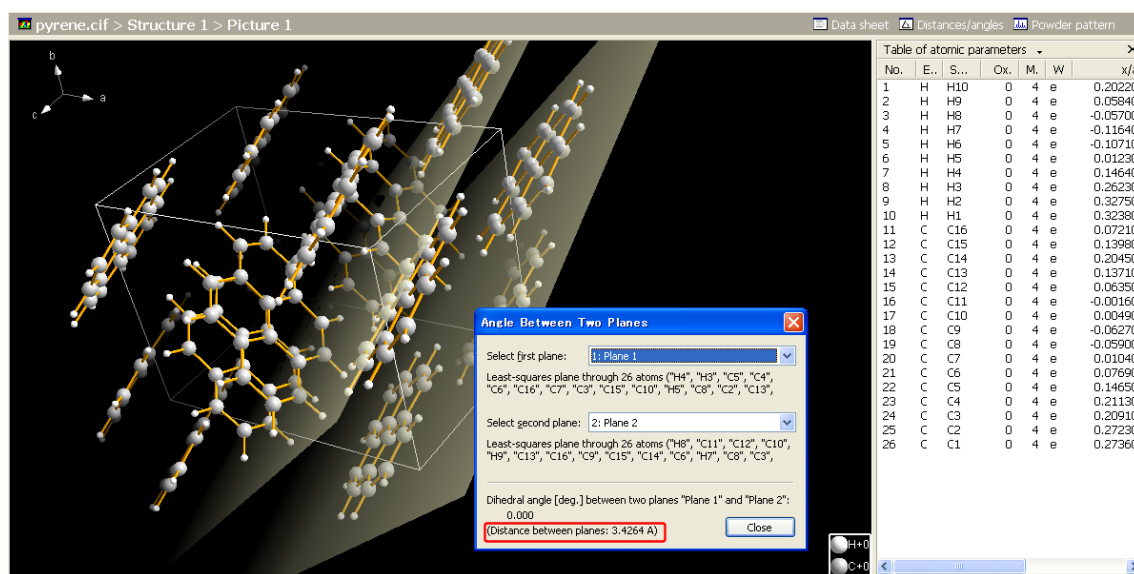


(3) CIF ファイルのインポートと距離や角度の調べ方

[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

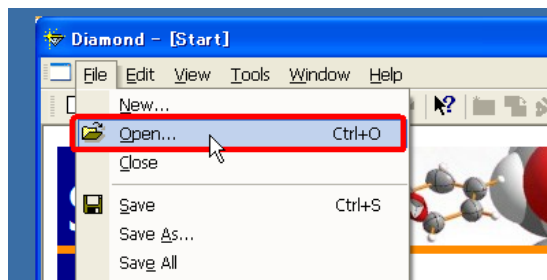
構造図に平面を作図する機能では、選択した複数の原子の最小二乗平面を描画できます。
この機能を利用して、隣り合っている 2 つのピレン分子の距離を調べてみましょう。



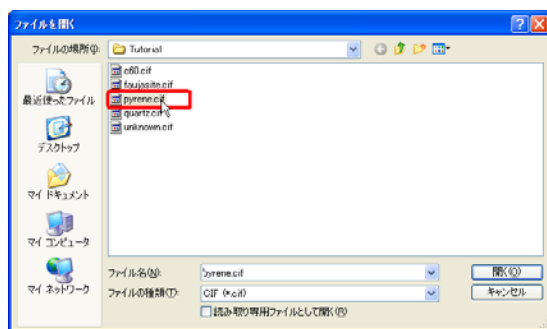
操作手順

A. CIF ファイルのインポート

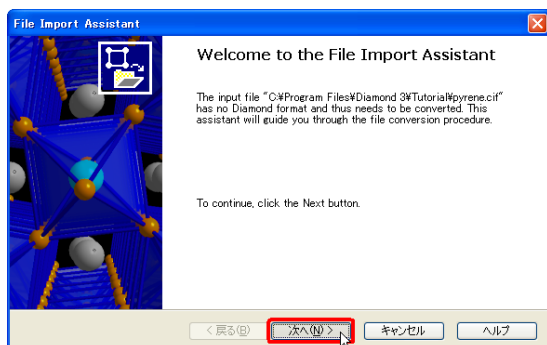
1. CIF ファイルをインポートする



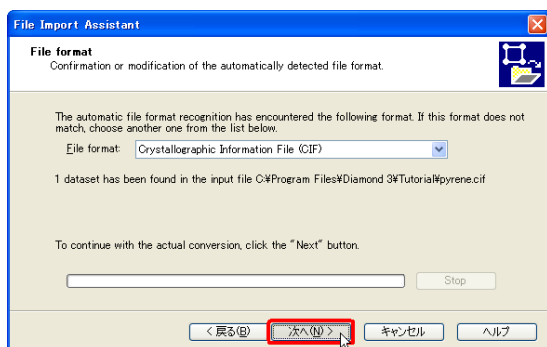
2. ピレンの CIF ファイルを選ぶ



3. 次へ進む



4. CIF 形式を選ぶ



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。

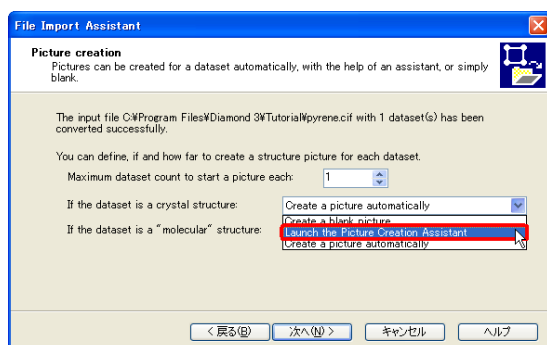
データファイルを選ぶ画面が表示されます。「ファイルの種類」を「CIF」にして、

「C:\Program Files\Diamond 3\Tutorial」フォルダにある「pyrene.cif」を選びます。

「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。

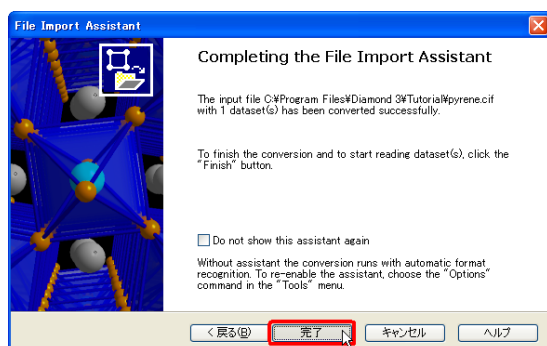
読み込むデータファイルのファイルタイプを指定します。通常は、データファイルの構造を読み取って、自動的に CIF 形式が選ばれているはずです。もし異なっている場合は、「CIF」を手動で選びます。「次へ」ボタンを押して次のページに進みます。

5. 構造図の作図方法を選びます



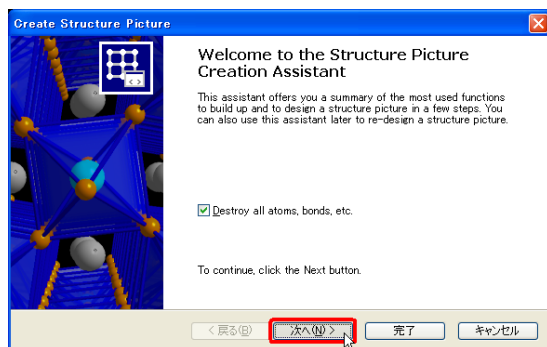
今回は作図を全自動で行わず、「Picture Creation アシスタント」を使います。「If the dataset is a "molecular" structure」の設定で「Launch the Picture Creation Assistant」を選び、「Next」ボタンを押してください。

6. 「完了」ボタンを押す



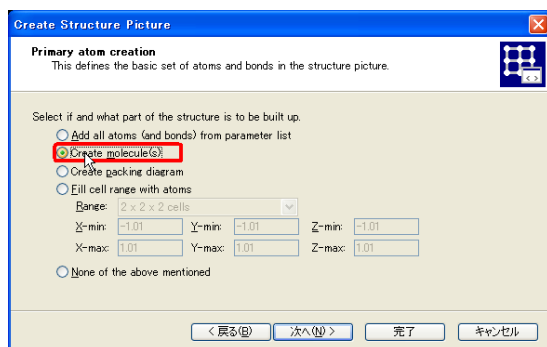
ファイルインポートについての設定はここまでで終わりなので、「完了」ボタンを押します。

7. 構造図の表示方法を指定します



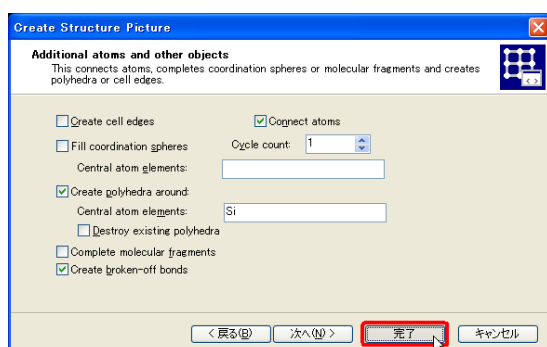
「Picture Creation アシスタント」の画面が開きます。このウィザードで、構造図の表示方法を具体的に設定します。ここではまったくの新規で図を作成したいので、「Destroy all atoms, bond, etc.」にチェックをつけて「次へ」を押します。以前の図の情報がすべて消去されて、新規に図を作成できます。

8. 分子構造を表示する



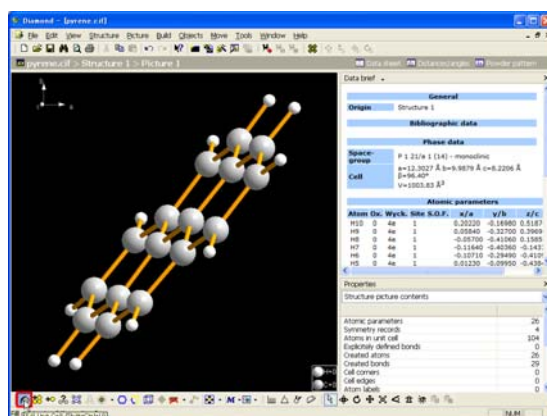
今回は、まず分子構造を表示したいので、「Createmolecule(s)」を選び、「次へ」ボタンを押します。

9. 結晶構造図の表示形式を指定



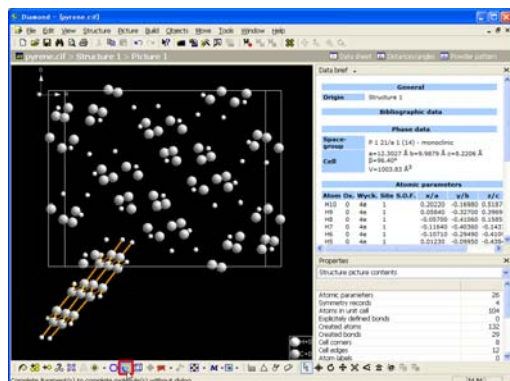
分子構造を表示したいだけなので単位格子を表示させないようにします。「Create cell edges」のチェックを外します。そのほかは左図のように初期設定のままにして「完了」ボタンを押します。

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。

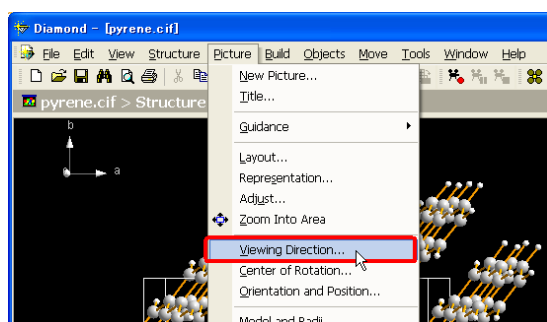
11. パッキング図を表示



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。

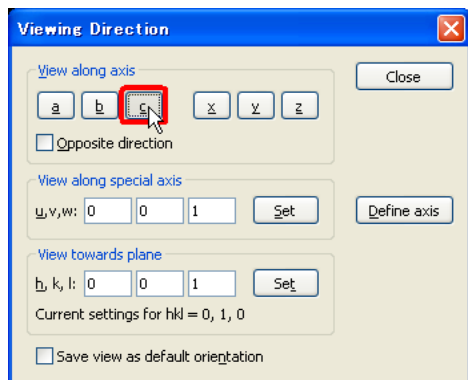
パッキング図を表示するにはまず「Fill Unit Cell」ボタンを押します。単位格子内に存在する原子が表示されますが、結合は表示されない状態です。ここで「Complete Fragments」ボタンを押すと、結合が描かれ、単位格子外に一部がはみ出ている分子についても分子全体を表示します。

12. いろいろな方向から見てみましょう



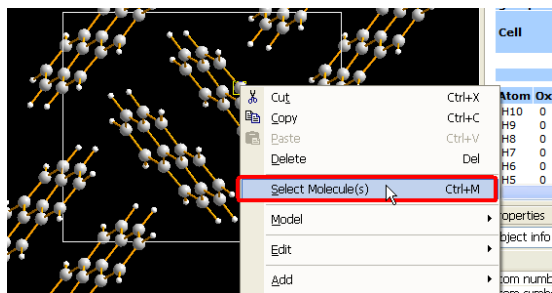
Diamond では、マウスのドラッグ操作で表示方向を変えることもできますが、単位格子の軸や平面を基準に結晶を回転させることもできます。今回はその方法で表示方向を変えてみましょう。メインメニューの「Picture」から「Viewing Direction」を選びます。

13. c 軸に沿って表示します

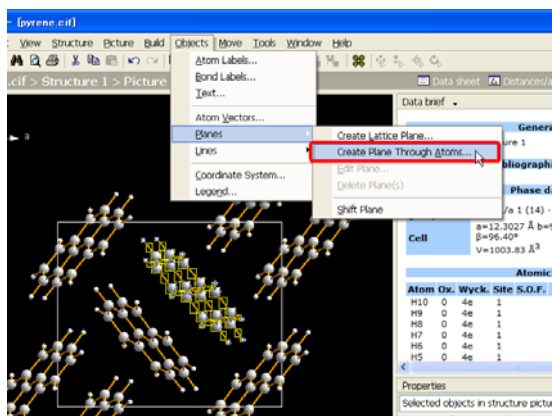


B. 平面を作図する

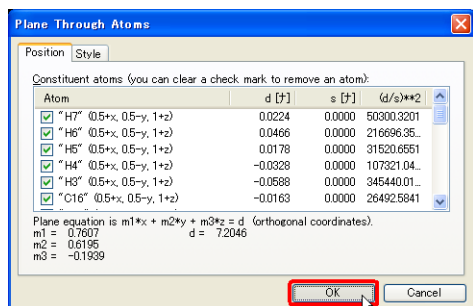
14. 分子 1 つを選択します



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。

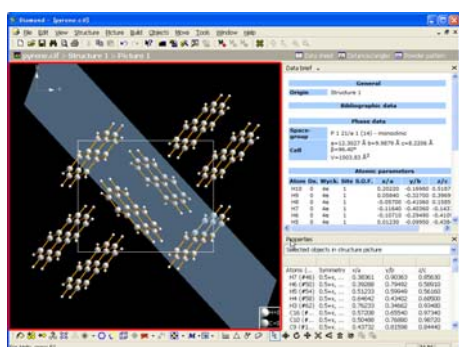
次に、平行に並んでいる 2 つのピレンが存在する平面間（最小二乗平面）の距離を調べてみましょう。まず、実際にそれぞれの平面を図として構造図に描き込みます。そして、平面間の距離を計算する機能を使って距離を求めます。

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。

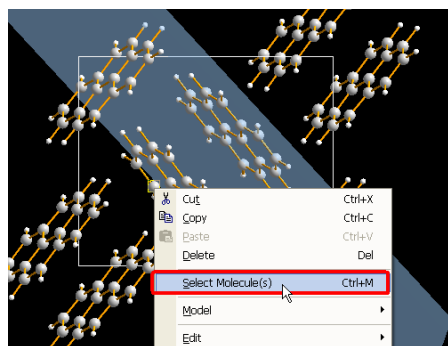
ピレン分子が選択されたままの状態、メインメニューから「Object」→「Planes/Create Plane Through Atoms」を選びます。

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。

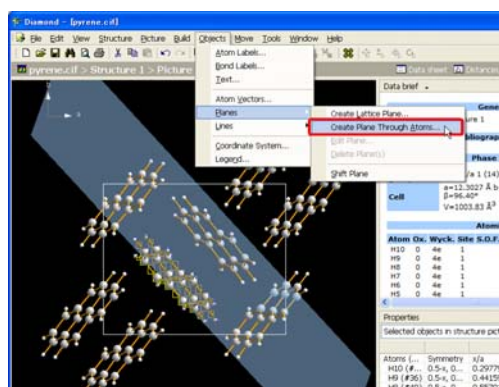
17. 1 つ目の平面が作図されます



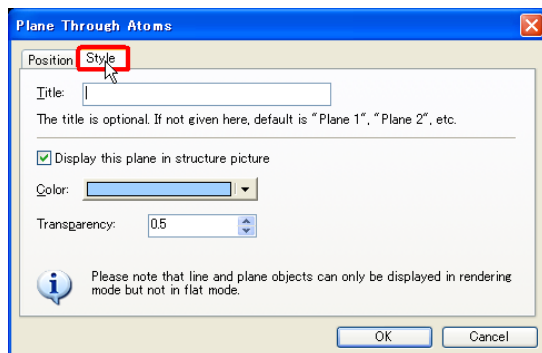
18. 隣のピレン分子を選択します



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。

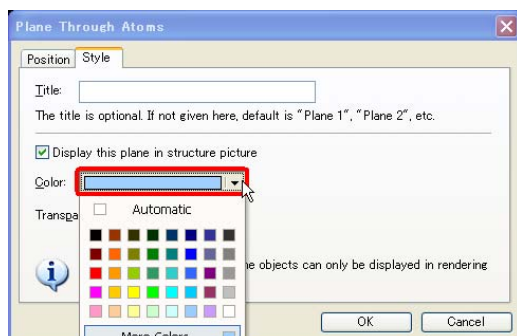
1 つめの平面を作図したのと同じ手順を、隣のピレン分子に対して行います。ピレン分子を構成する適当な原子をマウスで右クリックし、「Select Molecule(s)」を選びます。

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。

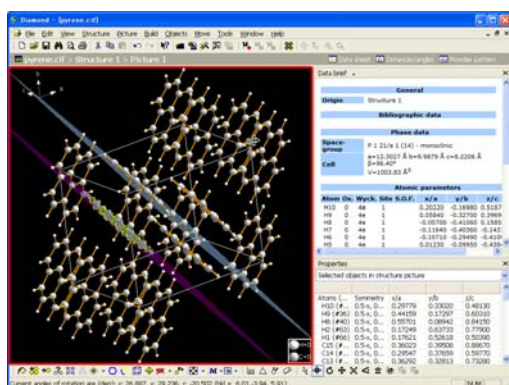
「Position」タブの設定は、1 つめの平面と同様、すべての原子が選択された状態のままにします。

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。

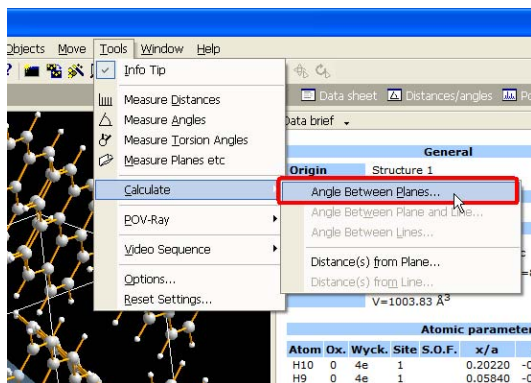
21. 色を選びます



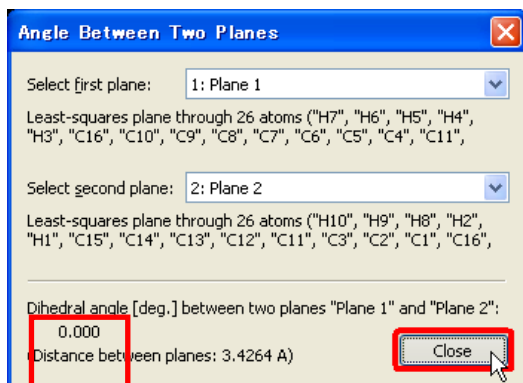
22. 2 つ目の平面が作図されます



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也表示されます。

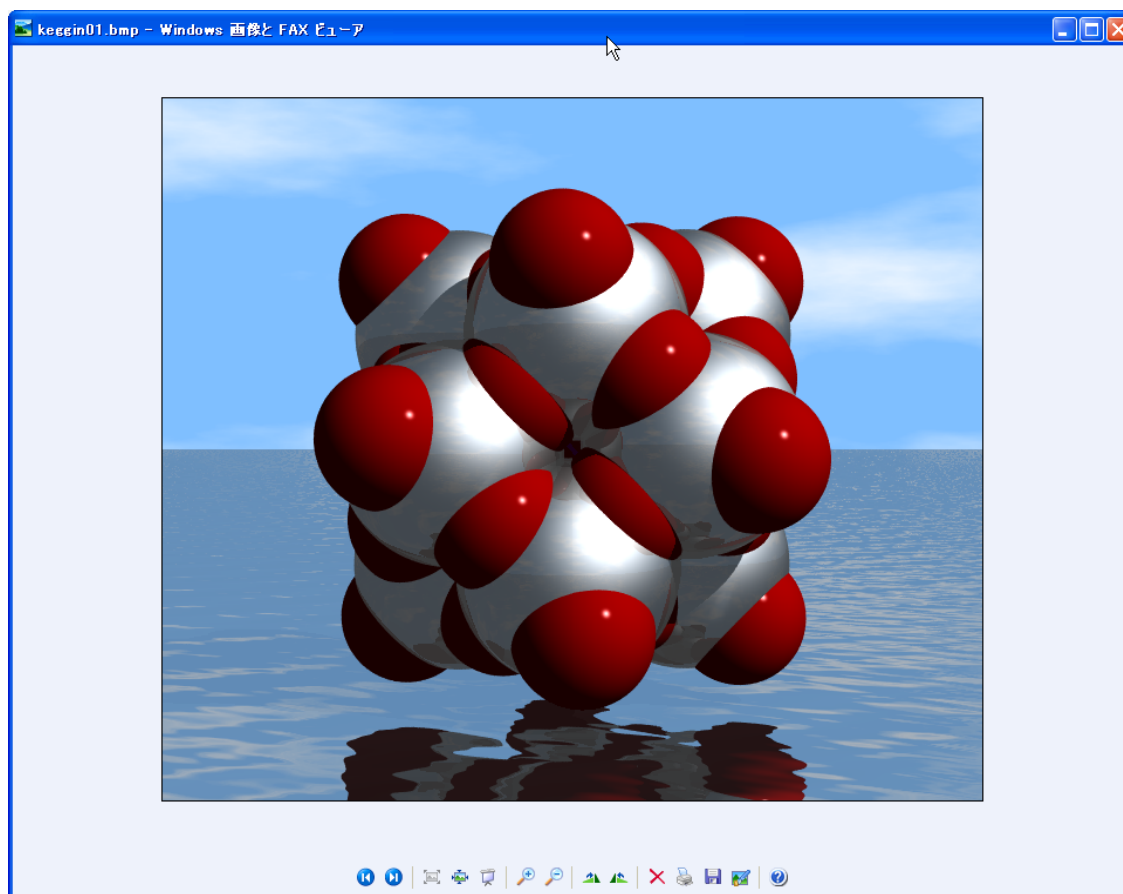
どの平面とどの平面の角度と距離を求めるのか設定できるので、「Select first plane」と「Select second plane」に、それぞれ「Plane1」と「Plane2」を選んでください。このダイアログの下部に 2 平面間の角度（単位は度）と距離（単位はÅ）が表示されます。このケースでは、「0.000」度と「3.4264」Åになっているはずです。確認したら「Close」ボタンで閉じます。

(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。

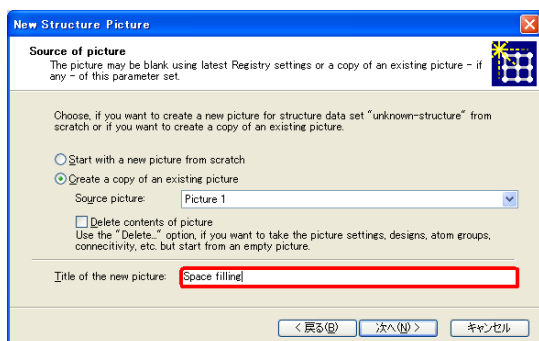


5. 次へ進む



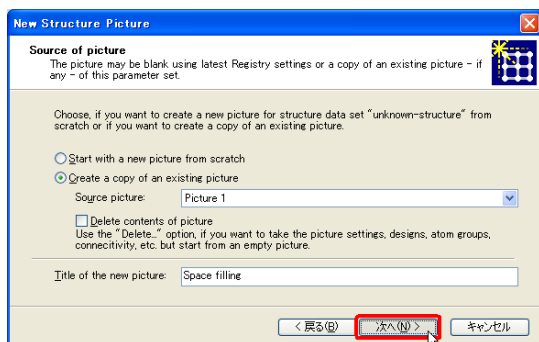
「New Structure Picture」ダイアログが開きます。最初の画面は表紙なので、「次へ」ボタンを押して次の画面に進みます。

6. 複製先画像に名前をつける



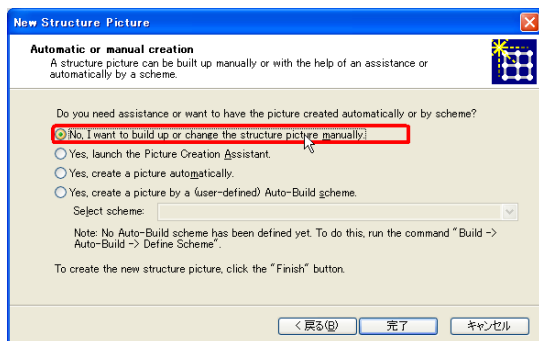
すでに存在する図を複製するので、[Create a copy of an existing picture] にチェックをつけます。[Source picture] には元画像の名前「Picture 1」を選びます。複製先のファイル名を [Title of the new picture] 欄に入力します。今回は「Space filling」という名前にしておきましょう。

7. 構造図の表示方法を指定します



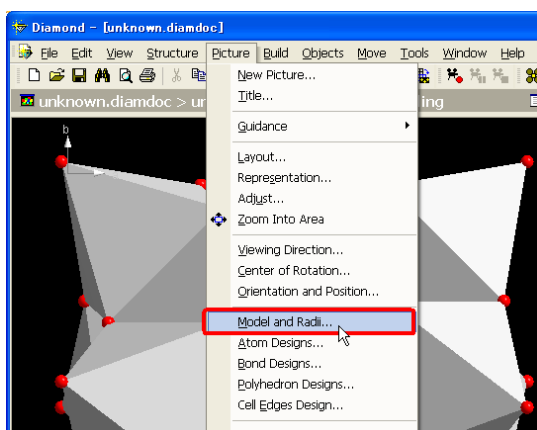
[次へ]ボタンを押して次の設定画面に進みます。

8. 作図方法を指定

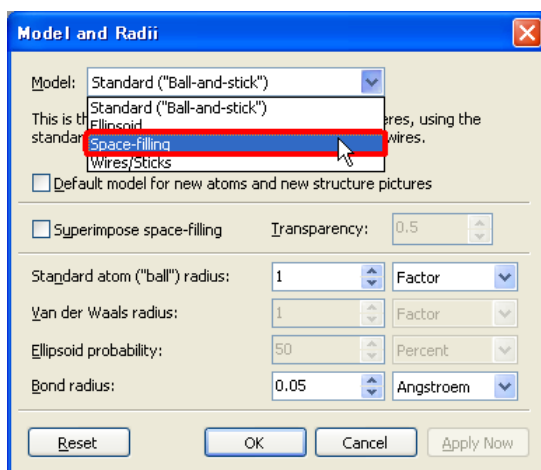


元の図を丸ごとコピーして表示モデルだけを変えます。新しい構造図がほしいので、[No, I want to build up or change the structure picture manually.] オプションをオンにして、[完了]ボタンを押します。「とりあえず丸ごとコピーだけ行って、変更はあとで手動で行う」というオプションです。

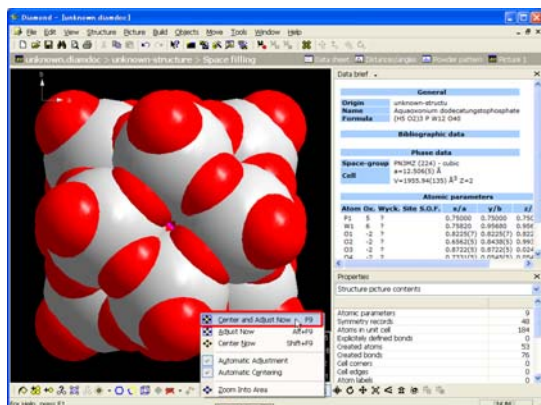
9. 表示モデルだけを変更する



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。

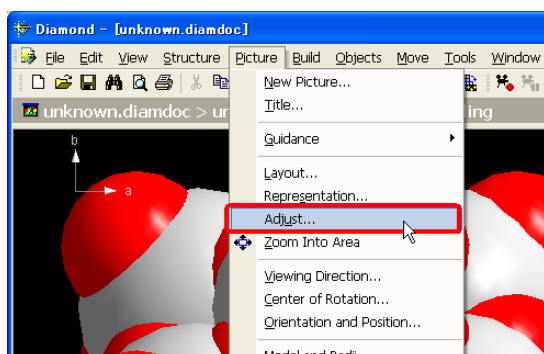
ここから表示モデルだけを変えてみましょう。表示モデルを変えるには、まず[Picture]メニューから[Model and Radii]を選びます。

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）。

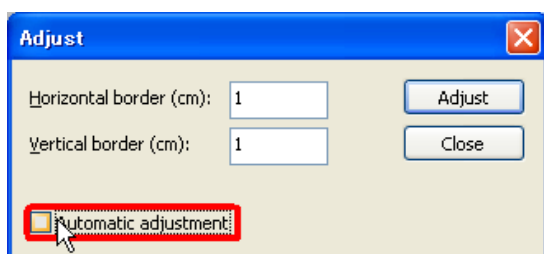
12. 自動調整機能をオフにする



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。

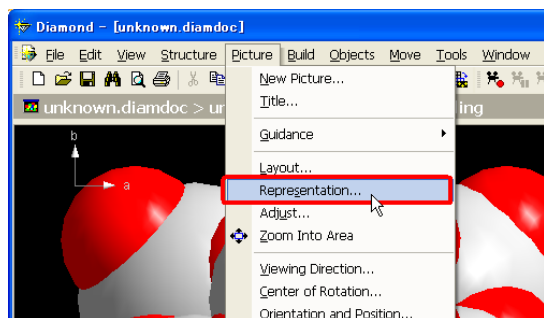
13. チェックを外す



「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

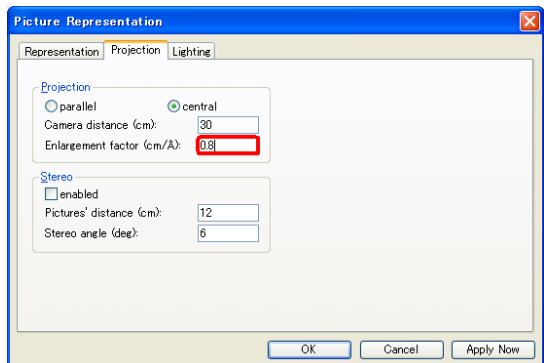
1. 遠近感が出やすいモードに変更



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。

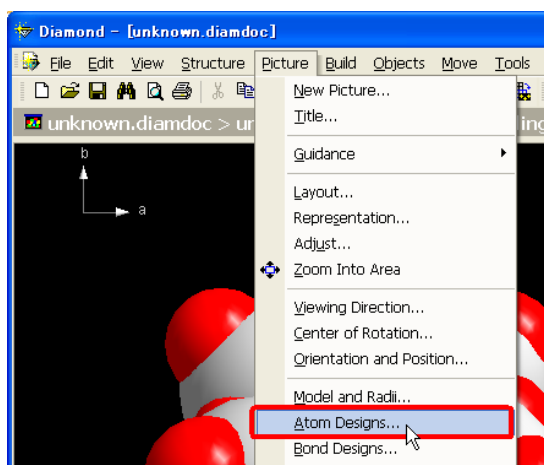
2. 結晶の表示サイズを調整



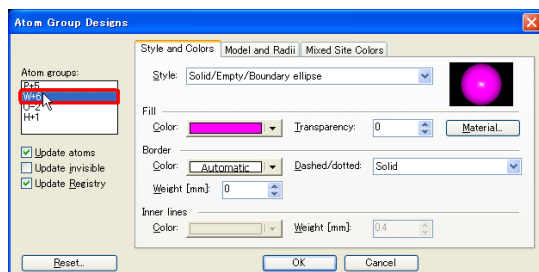
「Projection」タブの「Projection」の設定を「central」に変えます。また、結晶構造図の表示サイズを調整する「Enlargement factor」を今回は「0.8」にします。

※「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「画面上の 1cm が 1Åに相当する」という意味です。「0.5」とすれば画面上の 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。

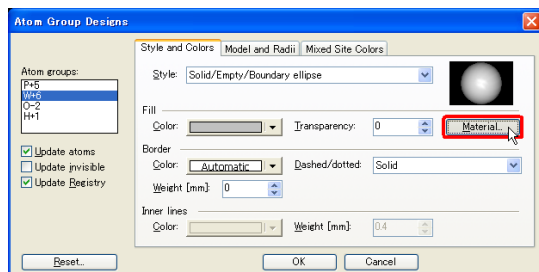
3. タングステン原子の質感を変更する



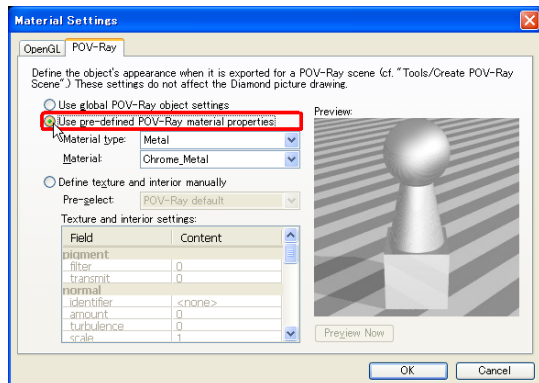
4. リストからタングステン(W)を選ぶ



5. 「Material」 ボタンを押す



6. 「Chrome_Metal」を選ぶ



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。

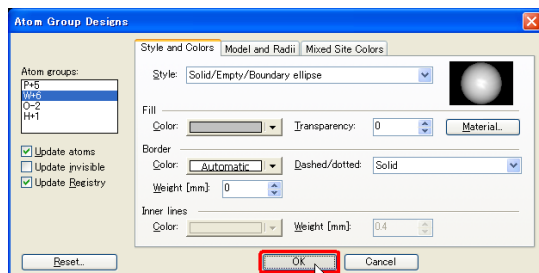
「Atom Group Design」タブが開きます。左にある「Atom Groups」の設定でタングステン「W+6」を選ぶと、タングステン原子の設定を変えられます。

「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。

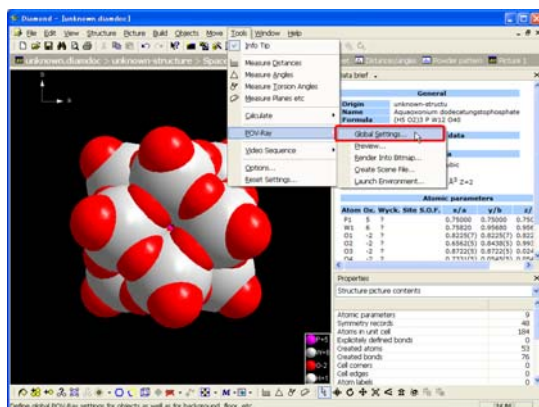
「Material Setting」ダイアログで「POV-Ray」タブを選びます。今回選んだタングステンの原子だけに、設定を適用したいので「Use pre-defined POV-Ray material properties」を選びます。

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

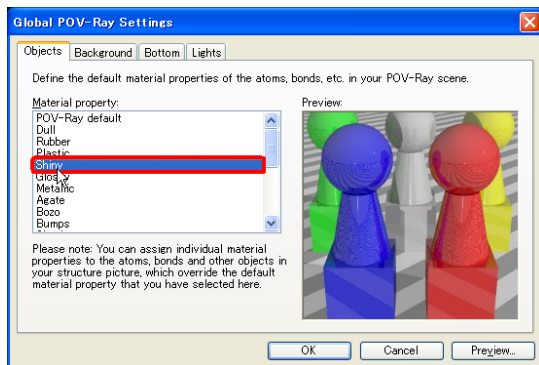
7. 設定を確定してダイアログを閉じる



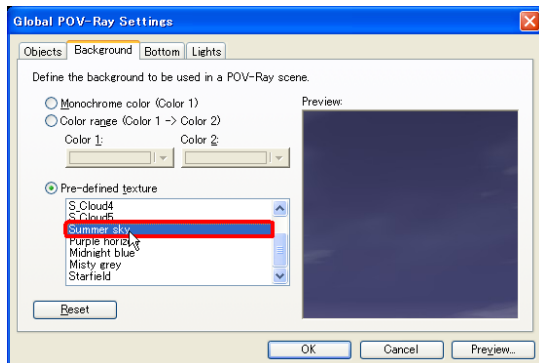
8. 背景やその他の原子の質感を設定



9. その他の原子を「Shiny」に設定



10. 背景を「Summer sky」に設定



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

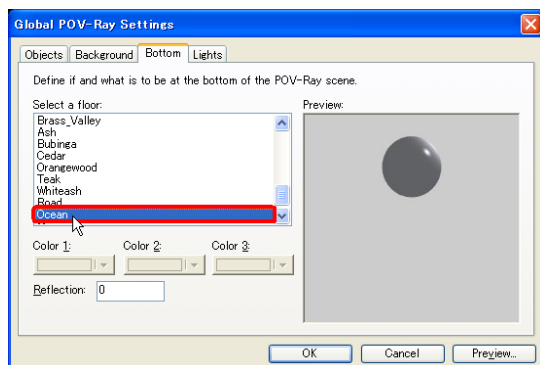
次にタングステン以外の原子の質感や背景を設定します。構造図の全体に対する設定は「グローバル設定」で指定します。「Tools」メニューから「POV-Ray」→「Global Setting」を選びます。

「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。

「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

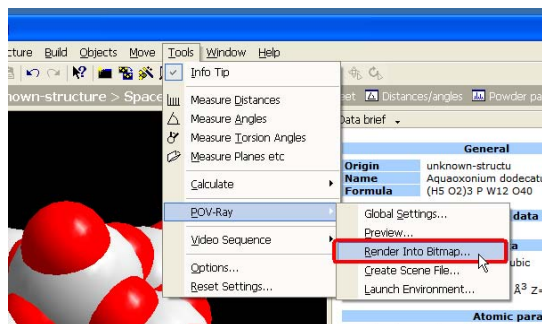


「Bottom」タブでは背景の底面を設定できます。ここでは試しに「Ocean」を選んでみましょう。底面が海のようになり、浮いている原子が底面にうつりこむようになります。

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。

C. ここまでの設定を使って構造図を作図

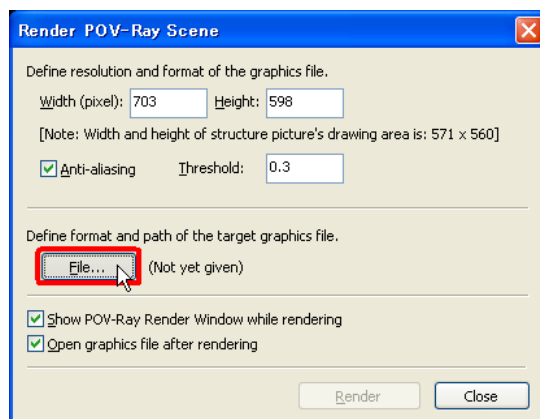
1. 「POV-Ray」メニューから作図する



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。

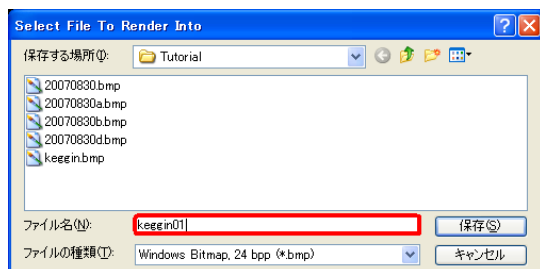
まず、Diamond の「Tools」メニューから「POV-Ray」→「Render Into Bitmap」を選びます。

2. 画像のサイズを決める



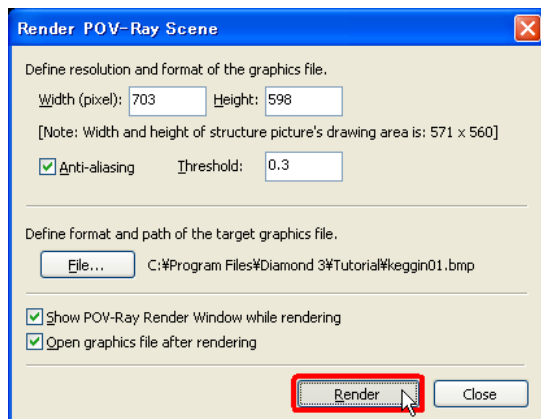
Width と Height に出力画像の幅と高さをピクセル数で指定します。そして、「File」ボタンを押すと、画像の出力先を決められます。

3. ファイル名を決める



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。

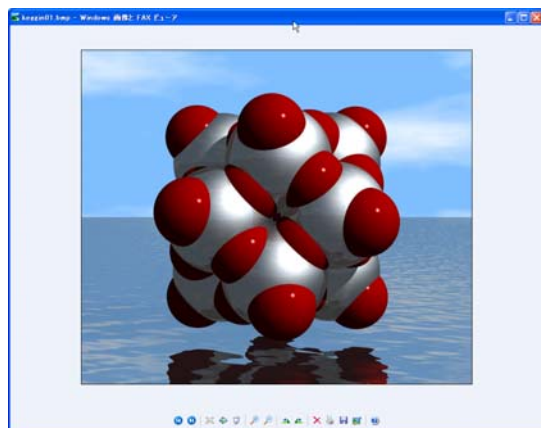
4. 画像サイズとファイル名を決める



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。

Diamond に関してご不明な点等ございましたら、下記までお問い合わせください。

株式会社ライトストーン

技術的なご質問： テクニカルサポート部

Tel： 03-3864-5212

Fax： 03-3865-0050

e-mail： tech@lightstone.co.jp

その他のご質問： 営業部

Tel： 03-3864-5211

Fax： 03-3865-0050

e-mail： sales@lightstone.co.jp