

結晶/分子構造の視覚化ソフトウェア

Diamond クイックスタートガイド

20080312

目次

第1章 Diamondの概要とインストール方法	2
概要	2
インストールと起動	2
第2章データのインポートと画像の作成	4
File Import Assistant	4
構造図の作成	8
第3章 構造図のデザイン変更	13
構造図の編集	13
構造図編集ツール	14

Webでは「Diamond3活用講座」を公開中! http://www.lightstone.co.jp/crystal

(株)ライトストーンの Diamond の製品情報のホームページには、Diamond の使い 方を画面入りでわかりやすく紹介している「Diamond3 活用講座」もあります。 体験版をご利用の際には、このインストールガイドと合わせてご活用ください。



Diamond のホームページの 左のメニューから、 Diamond3 活用講座をクリック!

第1章 Diamondの概要とインストール方法 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 めのソフトフェアです。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、粉末回折パターン 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。体験版 CD には Diamond の姉妹製品である Endeavour と Match!の体験版 も同じ CD よりインストール可能ですが、本ガイドでは Diamond の操作方法に絞って、解説し ております。

なお、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その他のご質問: 営業部Tel:03-5600-7202Tel:Fax:03-5600-6671Fax:e-mail: tech@lightstone.co.jpe-mail: sales@lightstone.co.jp

インストールと起動

Diamond のインストール方法は以下の手順で行います。

- 1. Crystal Impact 社製品の体験版を PC の CD ドライブにセットします。
- 2. 自動的に以下の画面が表示されます。自動的に表示されない場合は、エクスプローラから CD-ROM ドライブをダブルクリックしてください。

🚮 インストールメニュー	
下のボタンをクリックして、Crystal Impact	製品をインストールしてください。
分子・結晶構造ビジュアライズソフト	「Diamond」のインストール
Diamondのレンダリング機能拡張ソフト	「POV-Ray」のインストール
POV-Raylま、Diamondをインストールし	た後にインストールしてください
	Diamondのチュートリアル マニュアルを表示(PDF)
粉末回折からの構造決定ソフト	粉末回折からの相同定解析ソフト
「Endeavour」のインストール	「Match!」のインストール
	5

- 3. "Diamond のインストール"を選択します。
- 4. 画面の指示に従って、インストールを完了します。

5. スタートメニュー: すべてのプログラム: Diamond 3: Diamond 3.1 を選択すると以下の画 面が表示されます。(デスクトップのショートカットアイコンをダブルクリックして起動す ることもできます)



第2章データのインポートと画像の作成

File Import Assistant

初期画面から、"Open a file"を選択すると「ファイルを開く」ダイアログが表示されます。



ここで、Diamond でそのまま開くことのできるファイル形式以外のファイルを選択すると、 "File Import Assistant"が表示されます。ここでは、チュートリアル用の C:¥Program Files¥Diamond 3¥Tutorial¥ c60.cif を指定します。以下"Data Import Assistant"について 説明します。なお、Diamond で直接開けるデータの場合はすぐに構造図が表示されます。

Step 1

下図のダイアログが表示されます。ファイルが保存されている場所を確認することができます。



Step 2

下図のようなダイアログが表示されます。自動的にインポートするファイル形式が設定されます。 もし、この設定に誤りがあれば、ドロップダウンリストから正しいファイル形式を選択します。 設定に誤りがなければ、「次へ」ボタンをクリックします。

File Import Assistant
File format Confirmation or modification of the automatically detected file format.
The automatic file format recognition has encountered the following format. If this format does not match, choose another one from the list below.
Eile format Crystallographic Information File (CIF)
1 dataset has been found in the input file C:¥Program Files¥Diamond 3¥Tutorial¥c60.cif
To continue with the actual conversion, click the "Next" button.
Stop
〈戻る個〉 次へ似 〉 キャンセル ヘルプ

Step 3

作成する画像に関する設定を行うダイアログが表示されます。インポートしたファイルからどの ように画像を作成するかを指定することができます。設定後、「次へ」ボタンをクリックします。

File Import Assistant	\mathbf{X}
Picture creation Pictures can be created for a dataset automatic blank.	ally, with the help of an assistant, or simply
The input file C:¥Program Files¥Diamond 3¥Tut successfully. You can define, if and how far to create a struc Maximum dataset count to start a picture ea	torial¥c60.cif with 1 dataset(s) has been converted sture picture for each dataset. ich:
If the dataset is a crystal structure: If the dataset is a "molecular" structure:	Launch the Picture Creation Assistant
(夏3(8))	次へ(11)> キャンセル ヘルプ

Step 4

最後の画面では、今後も"File Import Assistant"を表示させるかどうかを指定することができ ます。次回以降、表示させないようにするには、"Do not show this assistant again"チェック ボックスをチェックします。



"完了"ボタンを押して、ダイアログを閉じると、作成された画像が表示されます。

Step 5

結晶構造を表す画像が表示されます。



これで、結晶構造データのインポートと構造図作成が同時に完了しました。Diamond のユーザ インターフェースを使って、データを探索することができるようになりました。

上図のように、画面の大部分は構造を表す画像になります。画像の右側に、2つの領域がありま す。デフォルトでは、上側の領域は"表"領域となり、結晶構造データの詳細が表示されます。 下側は"プロパティ"領域となり、以下のようなデータの属性情報を表示させることができます。

- 構造図の内容
- 構造図内に作成された原子
- 選択したオブジェクト
- 選択した原子間またはその周囲の距離
- 選択した原子の線条性または平面性 など

構造図及び"表"領域の上には、Navigation Bar があります。この Navigation Bar を利用する ことによって、データシート、距離や角度の分析、粉末回析図形、構造図などの表示を瞬時に切 り替えることができます。

なお、Diamond document file (*.diamdoc)には個々の結晶構造に対する複数の画像のみならず、 複数の結晶構造を含めることができます。

ナビゲーションバーの左側には、現在アクティブになっている画像の階層構造が表示されていま す。階層の区切り記号は > です。例えば、 c 60.cif > S1252286 > Picture1 と表示されている 場合は、Diamond ドキュメントファイル "c60.cif" 内に含まれる結晶構造名 "S1252286" の現在の画像 "Picture1"が表示されていることを意味します。

構造図に加えて、現在の構造に対する3つの異なる表示方法を利用可能にします。

Data Sheet : ここには、構造に関してその時点で知られている全ての情報が含まれています。 Distances and angles :ここには、表示されている構造内の様々な原子間の距離や角度を表す ヒストグラムや表が含まれています。

Powder pattern :粉末回折パターンは結晶構造データから算出されます。個々の反射の一覧や 回折ダイアグラムを表示させることができます。回折パターン算出のための様々なパラメータを 調節することも可能です。

ナビゲーションバーの各シンボルをクリックし、表示内容がどのように変化するか、お試しくだ さい。

構造図の作成(手動で結晶構造データを入力して構造図を作成する)

ここでは、必要な構造データが無い場合に手動で結晶構造データを入力する方法を学習します。 "File"メニューから "New"を選択します。表示されるダイアログはデフォルトのまま、"OK" ボタンを押します。

ここでは、石英(SiO2)のデータ(Pauling File Binaries Edition の S541934)を利用します。

"Structure" メニューから "New Structure..." を選択すると、"New Structure assistant" ウィザードが開きます。 "次へ" ボタンをクリックします。

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 coordinates), or a "molecular st	a crystal structur ructure″ (just ato ell and space-gro	e (transla ms in or oup	ational symm thogonal coo	etry an rdinate:	nd fraction s).	al atom	
Space-group:	P 1 (1)			~ (Bro <u>w</u> s	:e	
Cell length <u>a</u> [Å]:	1	Þ	1		<u>c</u> :	1	
Cell angle alpha [*]:	90	b <u>e</u> ta:	90		gamma:	90	
O [‴] Molecular structure [″] , r	o cell, no space-	group					
Title of the new structure:	Structure 1						
			戻る(B)	次^	<u>(N)</u> >	* †	<u>ว</u> ชม

"Crystal structure with cell and space group"が選択されていることを確認し、
"space group"入力欄の右上の"Browse"""
ボタンをクリックします。開いたダイアログ内で、"P3121(152)"を選択し、"OK"をクリックします。
"New Structure assistant page"
に変更が反映されます。

その後、単位格子パラメータを入力します。 a=4.535Å、c=5.17Åと入力します。

Space-group		
<u>H</u> ermann-Mauguin symbol: P 31 2 1 (152)		OK Cancel
P -31 m (162) P 3 2 1 (150) P 3 c 1 (158) P 3 a 1 (165) P 3 m 1 (156) P 3 1 2 (151) ● P 32 (145) ♥ Sort alphabetically	Internal Space Group Number: Int Tables or Equivalent No.: 152 Hermann-Mauguin Symbol: P 31 2 1 Hall Symbol: P 31 2 1 Laue Group: 321 Laue Group: -3m1 Centrosymmetric: no Centering: Primitive (P) Symmetry Matrices: (1) (2) -y, y, z (2) -w, y, -w, 0.33333+z (3) -w+y, -w, 0.66667+z	15200

最後に、"Title of the new structure"に任意の名称、例えば "Quartz low"と入力します。 ダイアログは次図のようになります。

0-11		
The new structure may be	a crystal structure (with cell and space-group) or	justa
molecular structure with	stoms only.	
Choose if the new structure is coordinates), or a "molecular s	a crystal structure (translational symmetry and fra ructure" (just atoms in orthogonal coordinates).	actional atom
Orystal structure with	ell and space-group	
Space-group:	P 31 2 1 (152)	Bro <u>w</u> se
Cell length <u>a</u> [Å]:	4.535 <u>b</u> : 4.535	<u>c</u> : 5.17
Cell angle alpha [*]:	90 b <u>e</u> ta: 90 gam	ma: 120
O″ <u>M</u> olecular structure″,	io cell, no space-group	
Title of the new structure:	Quartz low	

"次へ"ボタンを押します。

原子パラメータを入力するためのダイアログが表示されます。"Atom"には si と入力した後、 この化合物の酸化状態である+4 を付加します。つまり、"Atom"フィールドには、"si+4"と入 力します。次に"x/a"には、0.4487と入力します。(フィールドの移動には TAB キーを利用す ると便利です) "y/b"には "0"と入力し、"z/c"には 0.3333 と入力します。"Add" ボタンを 押して、ダイアログ下部のテーブルにデータを追加します。(下図参照)

New Structur	e			X
Atomic para The atom coordinat	a meters iic parameters use fractional co es (in Angstroem units) for a ^r i	ordinates for a cryst. molecular structure".	al structure but orth	ogonal
Here you can or defect site dialog ("Struc Ato <u>m</u> : a Atoms in	define element (with oxidation s, standard uncertainties, and d sture [∞] menu) instead. si+4 ⊻/a: 0.4487	number) as well as > lisplacement paramet y/b:0	<, y, and z for every a ers, use the "Atomic z/c:0.3333	atom. For mixed Parameters ^{ee}
Atom	x	У	z	Delete
<u>(SI</u>)	0.4487	Ō	0.3333	
		(戻る(B)	> 次へ(№) >	キャンセル

同様に o-2 を左から(0.367, 0.2952, 0.2427)と入力します。(次ページの図 参照)

Atomic parameters The atomic parame coordinates (in Ang	ers use fractional coord stroem units) for a "mol	linates for a crystal ecular structure".	structure but orth	ogonal
Here you can define ele or defect sites, standar dialog ("Structure" mer Ato <u>m</u> : <mark>5=2</mark>	ment (with oxidation nu d uncertainties, and disp u) instead. ⊻/a:0.367 ⊻	mber) as well as x, lacement parameter /b: 0.2952 ;	y, and z for every s, use the "Atomi z/c: 0.2427	atom. For mixed c Parameters" <u>A</u> dd
Atoms in the asym	metric unit:			Delete
si o	0.4487 0.367	0 0.2952	0.3333 0.2427	
		< 定る(B))[](キャンカル

次へボタンを押した後、表示されるダイアログで"完了"ボタンを押します。

"New Structure Assistant"が閉じ、新しい(空白)の構造図が作成されます。同時に、"Structure Picture Creation Assistant" が起動します。最初のページには全てのオブジェクトを無効にするためのオプションが表示されます。ここでは、既に空の構造図のため、オプションはチェックせずにデフォルトの設定のままにしておきます。

Greate Structure Picture	
Primary atom creation This defines the basic set of atoms and bonds in the structure picture.	
Select if and what part of the structure is to be built up. Add all atoms (and bonds) from parameter list Oreate molecule(s) Oreate gacking diagram Ell cell range with atoms Range: Unit cell X-min: -001 Y-min: 1.01 Z-min: 1.01 X-max: 1.01 Mone of the above mentioned	
< 戻る(2) 次へ(1) > 完了 :	キャンセル

表示されるダイアログで"Fill cell range with atoms"チェックボックスをチェックした上で、 "Range"ドロップダウンリストから、"2x2x2 cells"を選択します。

Create Structur	e Picture					X
Primary atom o This defines	reation the basic set	of atoms a	and bonds in th	e structure	picture.	
Select if and wha	t part of the s	tructure is	s to be built up			
<u>○ A</u> dd all a	toms (and bon	ds) from p	oarameter list			
◯ Create <u>m</u>	olecule(s)					
🔘 Create <u>p</u> a	acking diagram	n i				
⊙ <u>F</u> ill cell r	ange with ator	ns				
<u>R</u> ange:	2 x 2 x 2 ce	ls	×			
<u>X</u> −min:	-1.01	Y-min:	-1.01	<u>Z</u> -min:	-1.01	
X-max:	1.01	Y-max:	1.01	Z-max:	1.01	
O None of t	he above men	tioned				
0						
						 a S haul
		く戻	<u>ର ଅ</u> ୍ଚମ	$((\underline{N}))$	一元了	ドヤンゼル

"次へ"ボタンをクリックすると新たなダイアログが表示されます。

このダイアログでは、ケイ素原子の多面体を描画するように設定します。

"Fill coordination spheres"のチェックを外します。"Create polyhedra around"をチェック し、"Central atom elements"フィールドに"Si"と入力します。ダイアログ上部の"Create cell edges"と"Connect atoms"チェックボックスがチェックされていることを確認します。その 他のオプションは選択しません。(下図参照)

Create Structure Picture		
Additional atoms and other object This connects atoms, completes coc polyhedra or cell edges.	s ordination spheres or molecular fragments and creates	
Greate cell edges Fill coordination spheres Central atom glements: Create polyhedra around: Central atom elements: Destroy existing polyhedra Complete molecular fragments ✓ Create broken-off bonds	Connect atoms Cycle count 1	
	実る個) (次へ心) 完了 (キャ)	ンセル

ここまでの設定では、構造モデルを構築するための設定を行ってきました。 これ以降は構造図のデザイン上の設定を行うことになります。

Picture desi This defin	es the drawing target and the basic design of atoms and bonds.
Define the mo <u>M</u> odel etc	idel and the designs of atoms and bonds. C: Balls and sticks
Choose, if the	picture's target is a bitmap or printout page or just window
Choose, if the <u>L</u> ayout:	picture's target is a bitmap or printout page or just window (No changes)
Choose, if the <u>L</u> ayout:	picture's target is a bitmap or printout page or just window (No changes) Background color:
Choose, if the <u>L</u> ayout: <u>F</u> ormat:	picture's target is a bitmap or printout page or just window (No changes) Background color: Rendered (highest quality)
Choose, if the Layout: Format: V Avoid	picture's target is a bitmap or printout page or just window (No changes) Background color: Rendered (highest quality) guplicate atom main colors

モデルの形式はデフォルトの"Balls and Sticks"から"Wires"または"Space Filling"など に変更することができます。ここで重要なオプションは"Avoid duplicate atom main colors" です。このオプションは新たな構造図を作成する際は常にチェックされている必要があります。 このダイアログはデフォルトの設定のままで、"次へ"ボタンをクリックします。

新しいダイアログが表示されます。このダイアログでは構造図の視点などを設定します。 このダイアログで重要なオプションは "Adjust enlargement factor and position to fit picture in drawing area"です。このオプションがチェックされていると、構造モデルを完全に表示さ れるような大きさに自動的に画面を調整します。デフォルトのままで"完了"ボタンを押すと下

図のような構造図が作成されます。



第3章 構造図のデザイン変更

構造図の編集

作成した構造図を目的に応じて、編集することができます。本章では、作成した構造図を任意の デザインに変更する方法について説明します。先に作成した構造図を元に作業を行っていきます。 まず、前章で作成した構造図の一部のモデル形式を変更します。構造図の右下の原子を複数選択 します。原子を複数まとめて選択する際、マウスをドラッグして選択すると便利です。

選択後、画面下の"Picture"ツールバー からモデルボタン[▲] をクリックし、コンボボックス から、"Space-filling"を選択します。この編集によって、構造図は次のように変化します。



さらに、原子単位で色などを変更することも可能です。Diamondのメインメニュー"Picture" メニューから"Atom design"を選択します。次のダイアログが表示されますので、任意の編集 を行います。原子の色や境界の色などを編集することができます。



構造図編集ツール

Diamond には、構造図を編集したり、視点を変更したり、構造図上で距離や角度を計測するためのツールが用意されています。通常は画面下にドッキングされていますが、選択してドラッグすることによって切り離すことも可能です。

Picture ツールバー

構造図に色を追加したり、モデル形式を変更したりします。

Picture		X
∧ 🞖 ⊷ ぷ ೫ ೫ ◉	- 🔾 💭 🗐 🔶 🎮	• 📲 🙀 • M • 💽 •

Move ツールバー

構造図を回転させたり、拡大/縮小 表示させたりすることができます。

Move			×
₽ 4 6	$\oplus \boxtimes \lhd$	2 🤉 🤉	à s

Measure ツールバー

構造図内の距離や角度を計測することができます。

Measure × Ⅲ △ ♂ Ø

更に詳細な利用方法に関しては、Diamond のホームページの「Diamond3 活用講座」や、体験版 CD-ROM 内の"Diamond のチュートリアル"(英文)を参照してください。また、月に1回のペースで、(株)ライトストーン本社内のセミナールームにて、Diamond の基本的な使い方を学べる講習会も行っております。詳しくはホームページをご参照ください。

お問い合わせ先 株式会社ライトストーン Tel: 03·3864·5211 Fax: 03·3865·0050 e-mail: sales@lightstone.co.jp http://www.lightstone.co.jp/



詳しくはホームページで!