

1) 4. 誕生石 4月 ダイヤモンドの鉱物名(和名)にある **CIF** アイコンを右クリックし、[対象をファイルに保存]を選ぶと、[名前を付けて保存]ウィンドウが開く。[ファイル名]が 4-Diamond、[ファイルの種類]が.cif ドキュメントであることを確認し、[保存する場所](例えばデスクトップ)を選び、[保存]ボタンを押して、ダウンロード保存する。

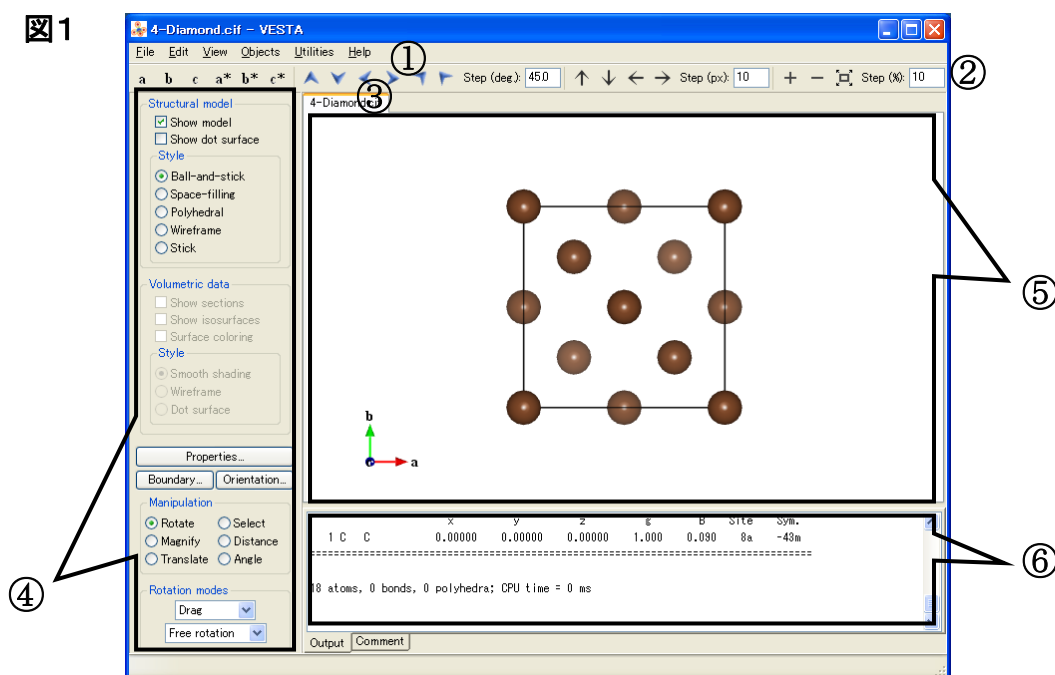
(OS:Windows XP、ブラウザ:Internet Explorer 7.0, 8.0 の場合)

2) VESTA を起動する。

3) メニューバーの[File]にある[Open]を選ぶと、[Open]ウィンドウが開く。ファイルの場所(例えばデスクトップ)を選び、上で保存した 4-Diamond.cif ファイルを開く。

グラフィックエリアに三次元結晶構造図が表示され、図の左下に(*a* 軸、*b* 軸、*c* 軸の向きを示す)結晶軸コンパスが現れる(図1参照)。

茶色の球:C 原子、実線:単位胞

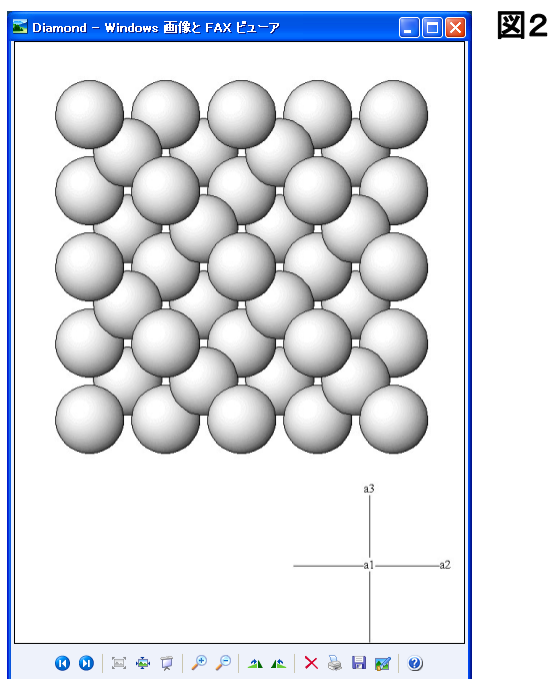


- ① メニューバー File、Edit 等のメニューが並んでいる
- ② ツールバー よく使われるツールが並んでいる
- ③ タブ ファイル名が表示され、複数のファイルを開けた際に切り替えられる
- ④ サイドパネル 操作に必要なツールボタンが並んでいる
- ⑤ グラフィックエリア 三次元結晶構造図と結晶軸コンパスが表示される
- ⑥ テキストエリア 行った操作で得られた情報がテキスト(文字、数字)で表示される

この状態で、グラフィックエリアにマウスポインタを置き、ドラッグすると、マウスの動きに合わせて三次元結晶構造図が回転する。

三次元結晶構造図を元(=初期)の向きに戻すには、サイドパネルの[Orientation]ボタンを押し、開いた[Orientation]ウィンドウの[OK]ボタンを押す。

以下の4)~8)に、結晶構造ギャラリーの鉱物名(和名)をクリックすると表示される以下の結晶構造図(図2)を描くためのVESTAの操作方法を示す。



4) 三次元結晶構造図の向きの変更

・サイドパネルの[Orientation]ボタンを押すと、[Orientation]ウィンドウが開く。

・[View direction]にある[Projection vector](投影ベクトル)を初期値の c 軸方向($u:0, v:0, w:1$)から a 軸方向($u:1, v:0, w:0$)に、[Upward vector](上向きベクトル)を初期値の b 軸方向($h:0, k:1, l:0$)から c 軸方向($h:0, k:0, l:1$)に変更する(図3参照)。

数字を変更するには、変更したい数字の箇所(例えば、[Projection vector](投影ベクトル) $u:$ [0]のテキストボックス)をマウスで左クリックし、数字(例えば、0)を削除した後、新しい数字(例えば、1)をキーボード入力すれば良い。

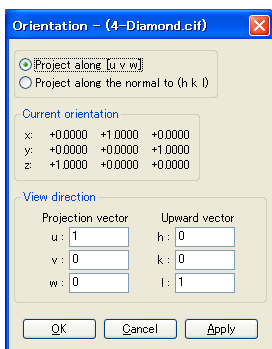


図3

・[Apply]ボタンを押すと三次元結晶構造図の向きが変化する。[OK]ボタンを押すと[Orientation]ウィンドウが閉じる(図4参照)。

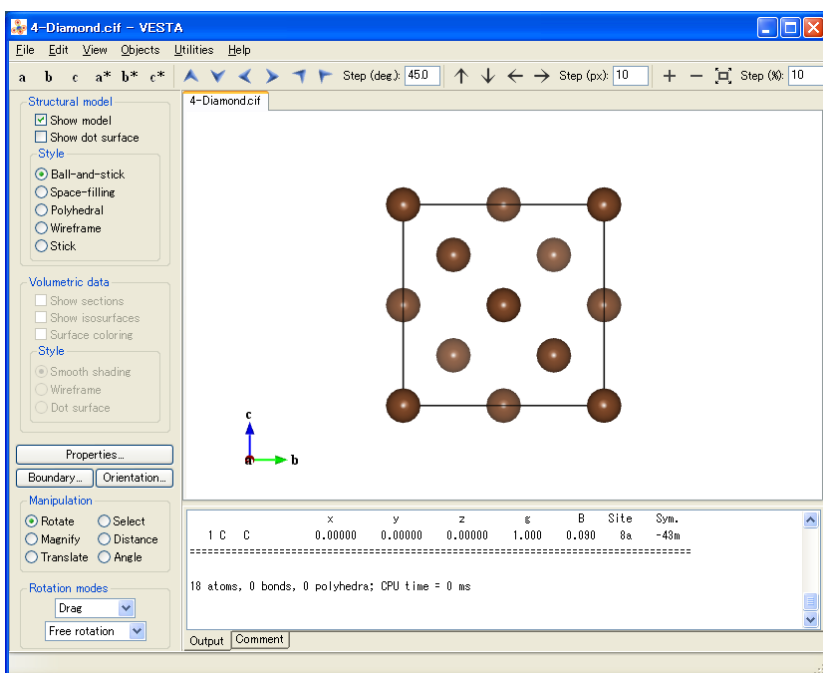


図4

ダイヤモンドの場合、図2の結晶構造図には単位胞が8個表示されているが、VESTAの初期設定では三次元結晶構造図の単位胞が1個しか表示されないため、次の5)で三次元結晶構造図の表示範囲を変更する。

5) 三次元結晶構造図の表示範囲の変更

VESTAの三次元結晶構造図の表示範囲(a 軸、 b 軸、 c 軸方向の表示範囲)は、初期設定では $0 \leq x \leq 1$ 、 $0 \leq y \leq 1$ 、 $0 \leq z \leq 1$ (分率座標表示)となっている。

・サイドパネルの[Boundary]ボタンを押すと、[Boundary]ウィンドウが開く。[Ranges of fractional coordinates](分率座標の範囲)を以下の様に変更する(図5参照)。

$$x(\text{max}) = 1 \rightarrow 2$$

$$y(\text{max}) = 1 \rightarrow 2$$

$$z(\text{max}) = 1 \rightarrow 2$$

数字を変更するには、変更したい数字の箇所(例えば、 $x(\max) = [1 \quad]$ のテキストボックス)をマウスで左クリックし、数字(例えば、1)を削除した後、新しい数字(例えば、2)をキーボード入力すれば良い。

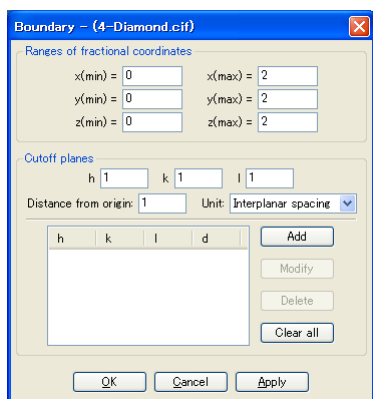


図5

・[Apply]ボタンを押すと表示される単位胞の数が1個から8個(a 軸、 b 軸、 c 軸方向にそれぞれ2個ずつ表示。現在の画面表示で見える範囲では4個)に増える。[OK]ボタンを押すと[Boundary]ウィンドウが閉じる(図6参照)。

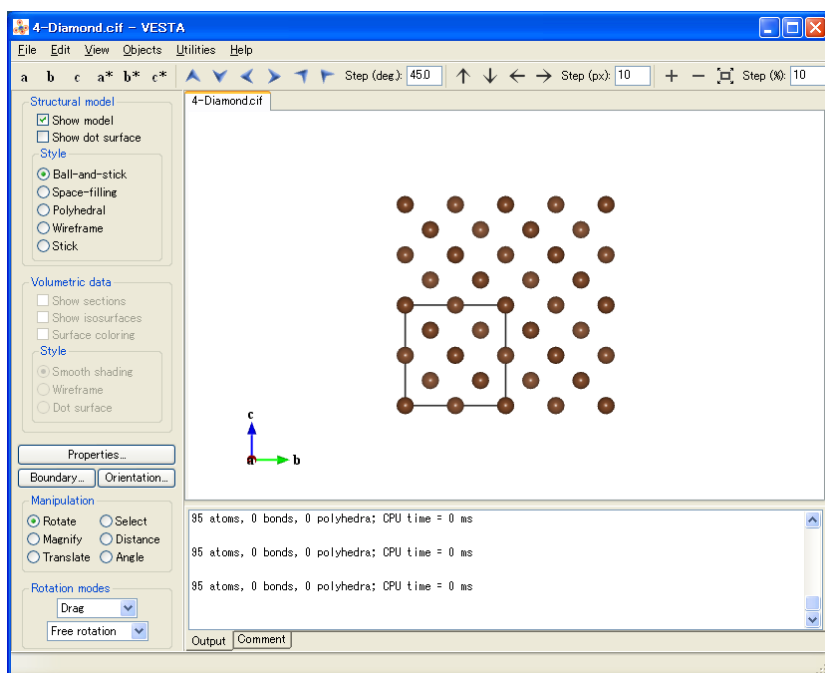


図6

6) 単位胞の表示の変更

- ・サイドパネルの[Properties]ボタンを押すと、[Properties]ウィンドウが開く。
- ・General タブ-[Unit cell]の[All unit cells](全単位胞)のラジオボタンをクリックすると、三次元結晶構造図の全ての単位胞(Unit cell)(8個)が実線で表示される(図7参照)。
- ・[OK]ボタンを押すと[Properties]ウィンドウが閉じる。

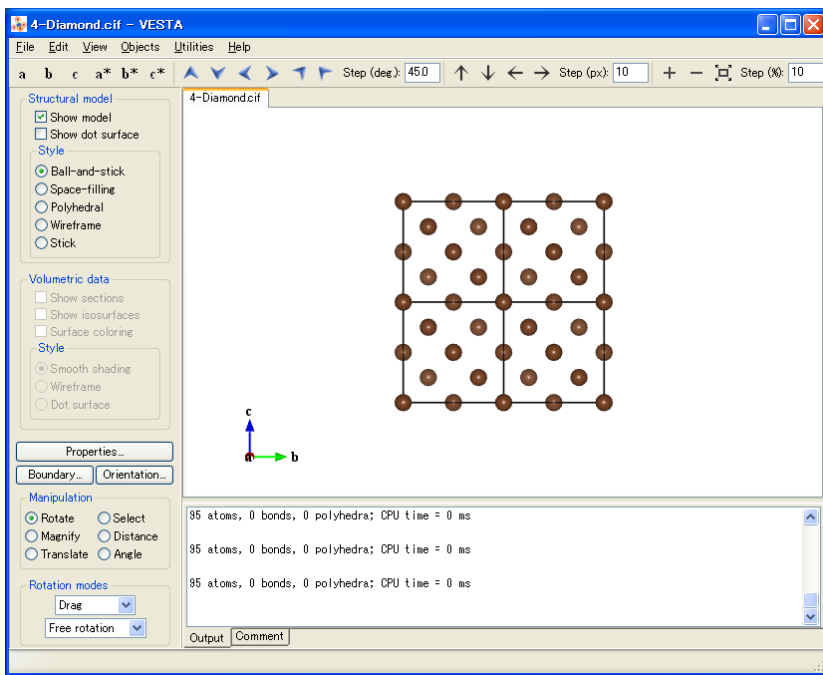


図7

7) 原子の大きさ、及び色の変更

- ・サイドパネルの[Properties]ボタンを押すと、[Properties]ウィンドウが開く。
- ・Atoms タブ-[Atom style]にある[Show as balls]の[Radii type]のプルダウンメニューにより、Ionic(イオン半径)を選ぶ。
- ・Atoms タブ-[Radius and color]の[Radius](半径)に表示されている数字の箇所をマウスで左クリックし、数字を削除した後、新しい数字(例えば、2)をキーボード入力すると、隣接する炭素(C)原子を接触した状態に表示することが出来る(図8参照)。
[Color]の[Select]ボタンを押すと、[色の設定]ウィンドウが開く。[基本色]のカラーパレットから原子の色(白色)を選び、[OK]ボタンを押すと、原子の色を変更することが出来る(図8、9参照)。
- ・[OK]ボタンを押すと[Properties]ウィンドウが閉じる。

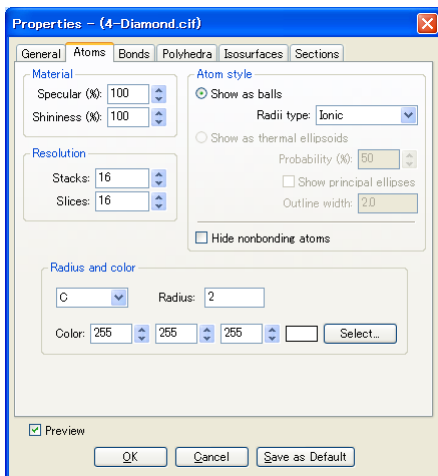


図8

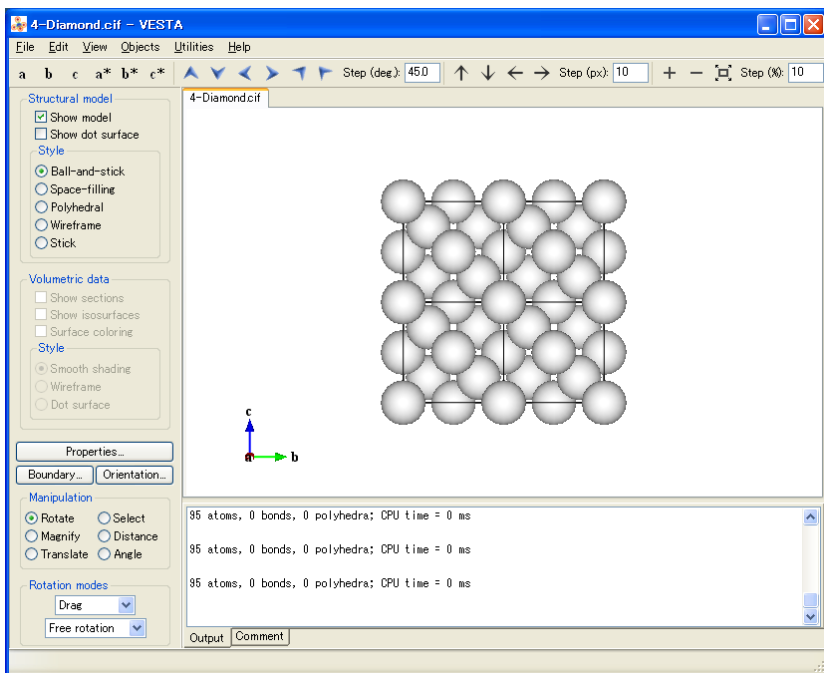


図9

8) 単位胞の表示の変更

- ・サイドパネルの[Properties]ボタンを押すと、[Properties]ウィンドウが開く。
- ・General タブ-[Unit cell]の[Do not show]のラジオボタンをクリックすると、三次元結晶構造図から単位胞(Unit cell)の実線表示が消える(図10参照)。
- ・[OK]ボタンを押すと[Properties]ウィンドウが閉じる。

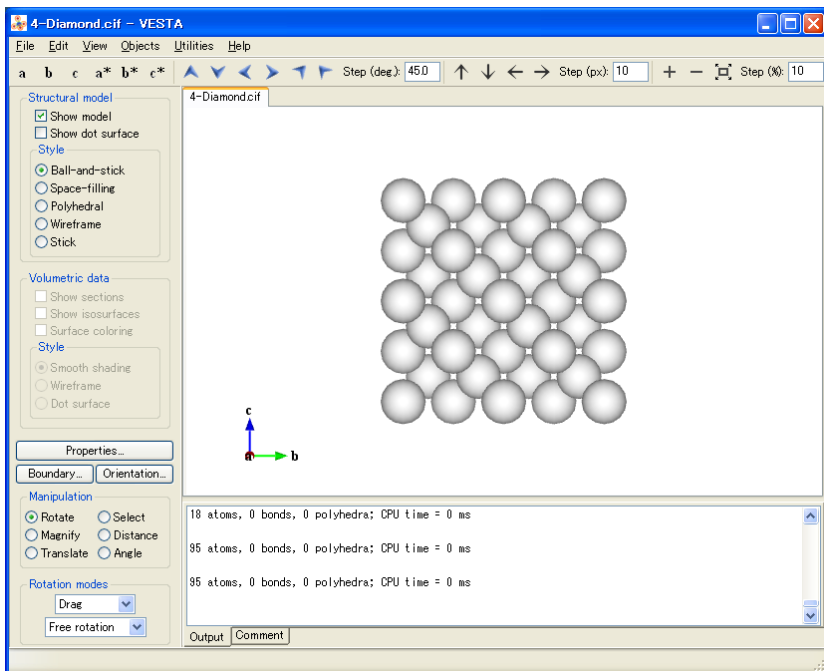


図10

以下の 9)~15) に、VESTA の他の操作方法の例を示す。

9) 三次元結晶構造図の表示範囲、並びに原子の大きさ・色の変更

・サイドパネルの[Boundary]ボタンを押すと、[Boundary]ウィンドウが開く。[Ranges of fractional coordinates] (分率座標の範囲)を以下の様に変更する(図11参照)。

x (max) = 2 → 1

y (max) = 2 → 1

z (max) = 2 → 1

数字を変更するには、変更したい数字の箇所(例えば、x (max) = [2]のテキストボックス)をマウスで左クリックし、数字(例えば、2)を削除した後、新しい数字(例えば、1)をキーボード入力すれば良い。

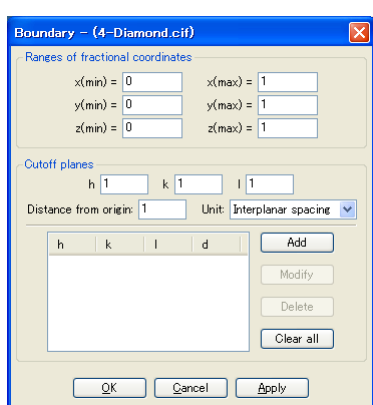


図11

・[Apply]ボタンを押すと表示される単位胞の数が 8 個から 1 個に減る。[OK]ボタンを押すと [Boundary]ウィンドウが閉じる(図12参照)。

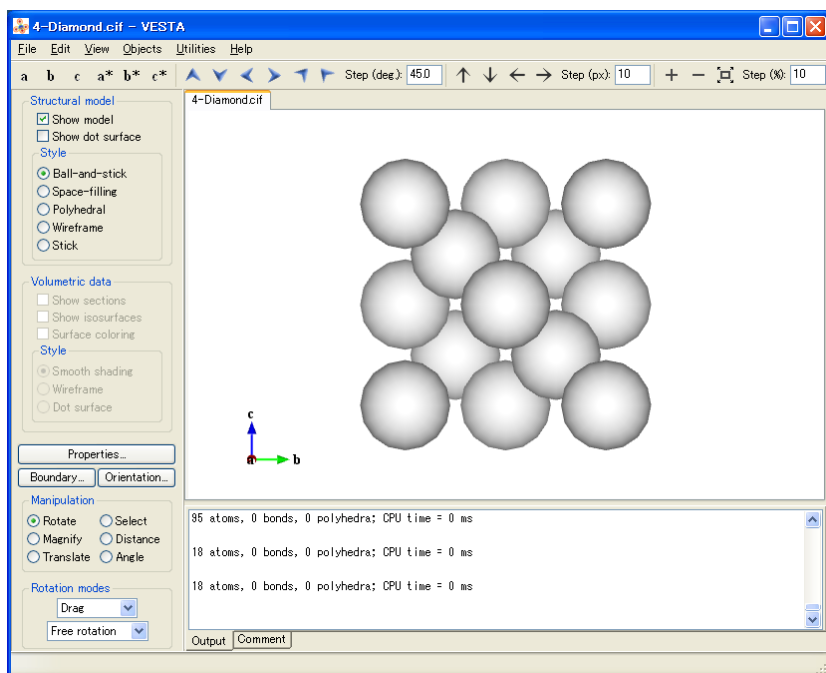
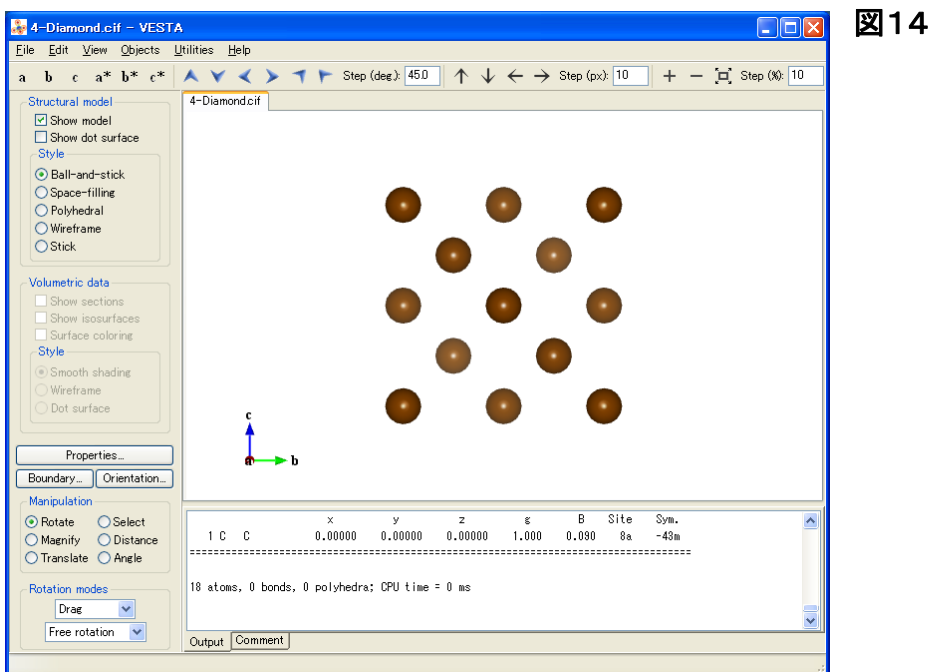
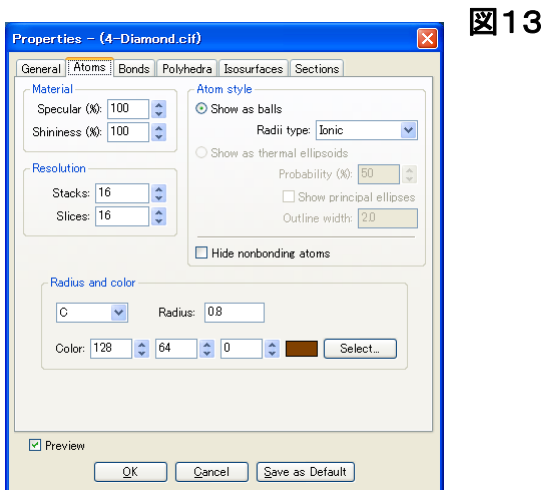


図12

・サイドパネルの[Properties]ボタンを押すと、[Properties]ウィンドウが開く。

・Atoms タブ-[Radius and color]の[Radius](半径)に表示されている数字の箇所をマウスで左クリックし、数字を削除した後、新しい数字(例えば、0.8)をキーボード入力すると、炭素(C)原子の大きさを変更することが出来る(図13参照)。
[Color]の[Select]ボタンを押すと、[色の設定]ウィンドウが開く。
[基本色]のカラーパレットから原子の色(例えば、茶色)を選び、[OK]ボタンを押すと、原子の色を変更することが出来る(図13、14参照)。

・[OK]ボタンを押すと[Properties]ウィンドウが閉じる。



10) 単位胞の表示の変更

・サイドパネルの[Properties]ボタンを押すと、[Properties]ウィンドウが開く。

・General タブ-[Unit cell]の[Single unit cell] (単位胞 1 個)のラジオボタンをクリックすると、三次元結晶構造図の単位胞 (Unit cell) 1 個が実線で表示される (図15参照)。

・[OK]ボタンを押すと[Properties]ウィンドウが閉じる。

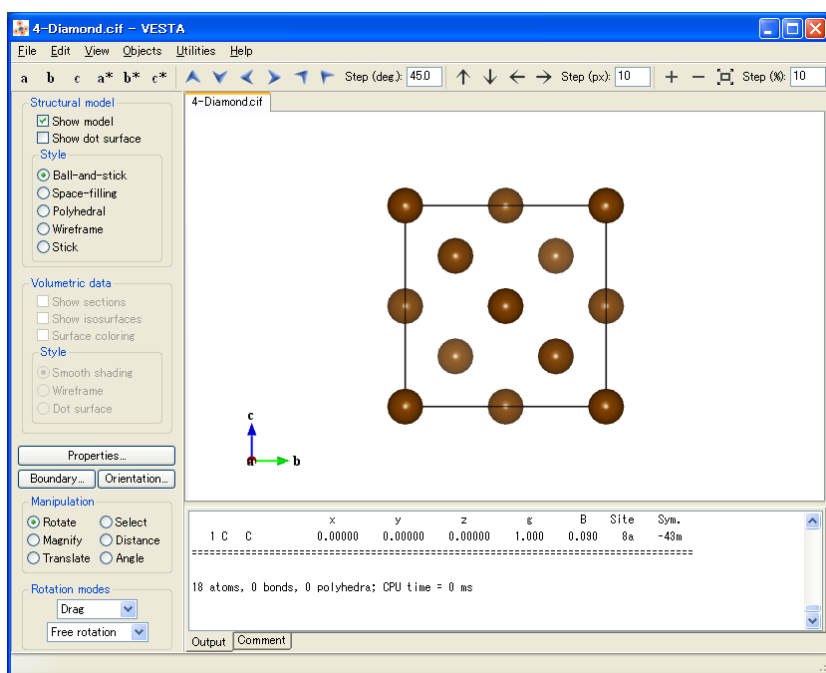


図15

11) 原子の結合の表示

・メニューバーの[Edit]にある[Bonds]を選ぶと、[Bonds]ウィンドウが開く。

・結合を表示する2つの原子、CとCがプルダウンメニューによりA1:C、A2:Cと選択されていることを確認する。

・結合の最短距離 (Min. length) 及び最長距離 (Max. length) が Min. length:0、Max. length:1.6 と入力されていることを確認する。

・[Search mode]の[Search A2 bonded to A1] (A1に結合しているA2を探す)のラジオボタンが押されていることを確認する。

・[Show polyhedra] (配位多面体を表示する) 及び [Search beyond the boundary] (単位胞の境界を越えて結合を探す)のチェックボックスをクリックし、チェックを外す。

・[Add]ボタンを押すと、ウィンドウ内の表に、上記設定が入力されたことが (Atom 1:C、Atom 2:C、Min. length:0.000、Max. length:1.600、Polyhedra:No、Boundary:No) の様に表示される (図16参照)。

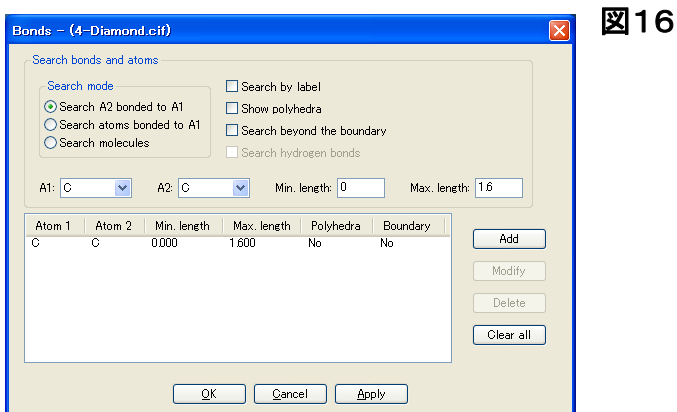


図16

設定を修正するには、表中の表示列をマウスでクリックし(表示列が青くなる)、必要な修正を行った上で[Modify]ボタンを押す。設定を削除するには、表中の表示列をマウスでクリックし(表示列が青くなる)、[Delete]ボタンを押す。

・[Apply]ボタンを押すと、グラフィックエリアの三次元結晶構造図に C-C の結合が灰色の棒で表示される。[OK]ボタンを押すと[Bonds]ウィンドウが閉じる(図17参照)。

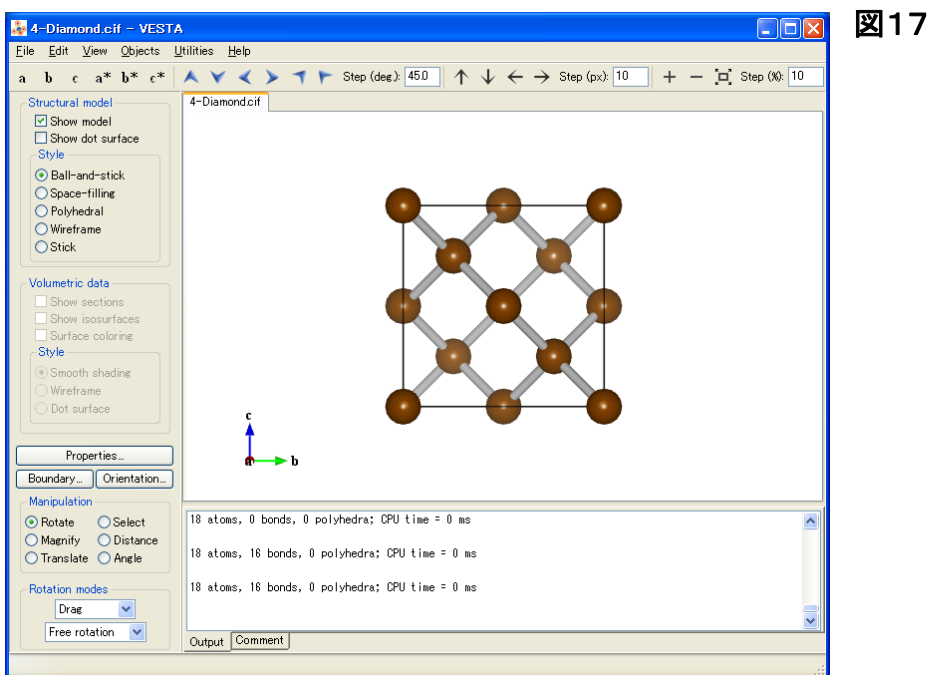


図17

12) 原子座標、結合距離、及び結合角の表示

・サイドパネルの[Manipulation](操作)にある[Select](選択)のラジオボタンをクリックし、グラフィックエリア内の任意の1原子(例えば、下図の1個)をクリックすると、原子の色が変わり、テキストエリアに原子の分率座標(例: C(1.00000, 0.50000, 0.50000))が表示される(図18参照)。

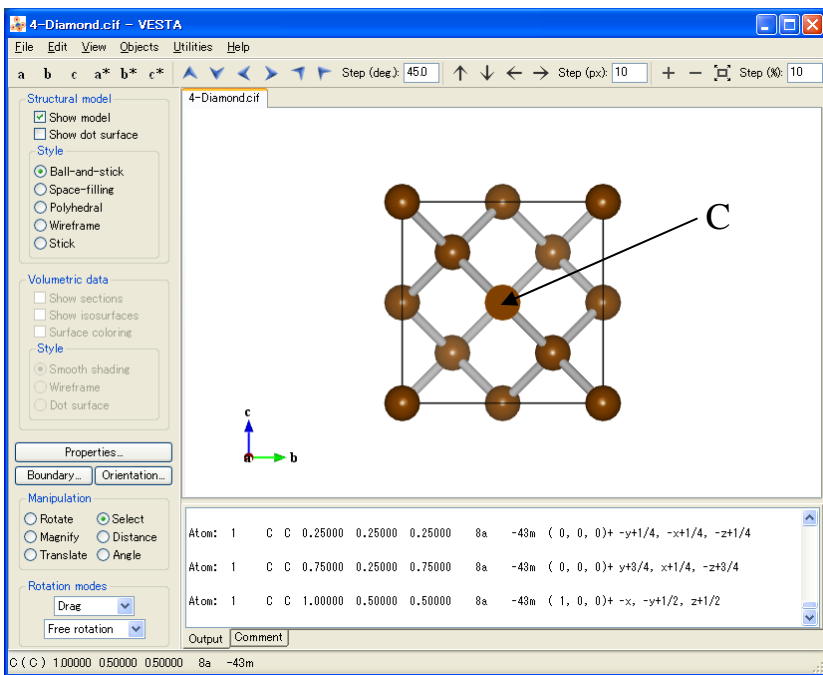


図18

・サイドパネルの[Manipulation] (操作)にある[Distance] (距離)のラジオボタンをクリックし、グラフィックエリア内の任意の2原子(例えば、下図の2個)をクリックすると、原子の色が変わり、原子間が点線でつながれ、テキストエリアに2原子間の結合距離(例: 2.52233(2) Å)及び2原子の分率座標(例: C(0.50000, 0.50000, 1.00000)、C(1.00000, 0.50000, 0.50000))が表示される(図19参照)。

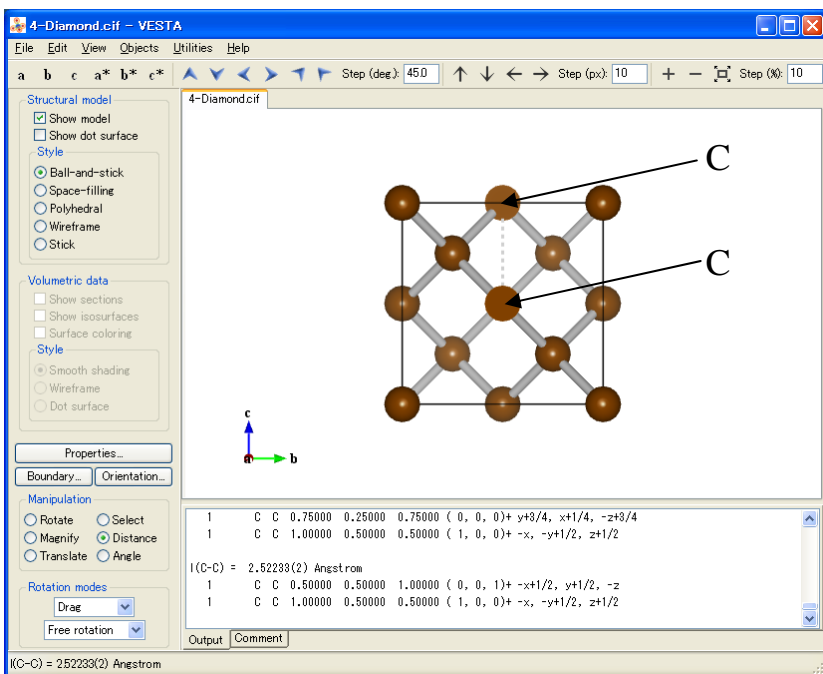


図19

・サイドパネルの[Manipulation] (操作)にある[Angle] (角度)のラジオボタンをクリックし、グラフィックエリア内の任意の3原子(例えば、下図の3個)を順番にクリックすると、原子の色が変わり、原子間が点線でつながれ、テキストエリアに3原子が構成する結合角(例: $\angle(\text{C}-\text{C}-\text{C}) = 50.4788(0)^\circ$)及び3原子の分率座標(例: C(0.25000, 0.25000, 0.25000)、C(1.00000, 0.50000, 0.50000)、C(0.25000, 0.75000, 0.75000))が表示される(図20参照)。

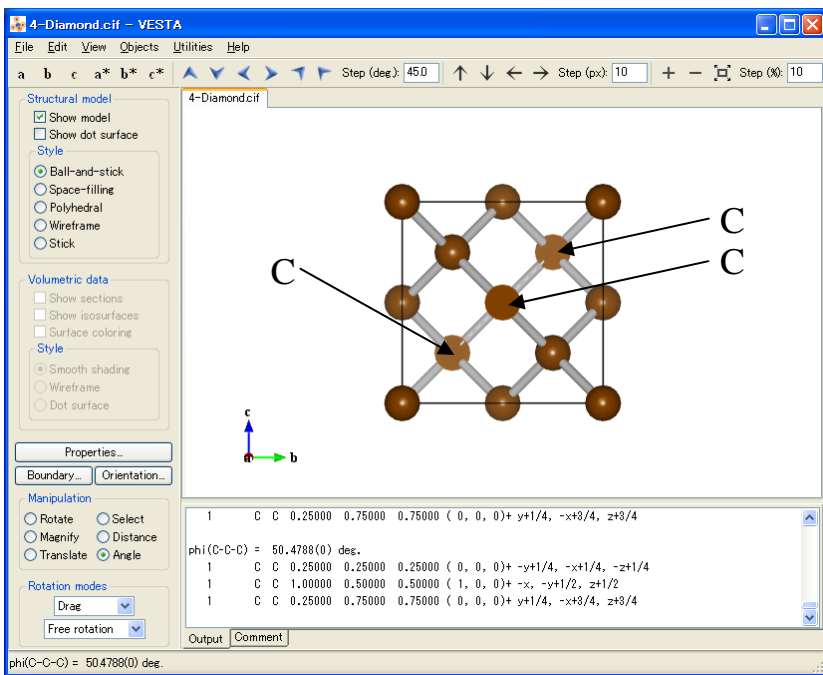


図20

13) 三次元結晶構造図の回転、拡大・縮小、及び並進

- ・サイドパネルの[Manipulation]にある[Rotate]のラジオボタンをクリックし、グラフィックエリアにマウスポインタを置き、ドラッグすると、マウスの動きに合わせて三次元結晶構造図が回転する。
- ・同[Manipulation]にある[Magnify]のラジオボタンをクリックし、グラフィックエリアにマウスポインタを置き、上下にドラッグすると、マウスの動きに合わせて三次元結晶構造図が拡大・縮小する。
- ・同[Manipulation]にある[Translate]のラジオボタンをクリックし、グラフィックエリアにマウスポインタを置き、ドラッグすると、マウスの動きに合わせて三次元結晶構造図が並進移動する。

14) 三次元結晶構造図詳細表示の変更方法

- ・サイドパネルの[Properties]ボタンを押すと、[Properties]ウィンドウが開く。
- ・General タブ-[Unit cell]の[Single unit cell]のラジオボタンをクリックすると、三次元結晶構造図に単位胞 (Unit cell) 1 個を表示することが出来る。
- ・General タブ-[Unit cell]にある[Line style]中のラジオボタンの 1 つをクリックすることにより、単位胞を実線 (Solid lines)、点線 (Dotted lines)、破線 (Dashed lines) のいずれかで表示することが出来る。線の太さは[Line width] (線幅) に数字 (例: 2.0) をキーボード入力することで指定出来る。

・Atoms タブ-[Atom style]にある[Show as balls]の[Radii type]のプルダウンメニューにより、原子の大きさを原子半径(Atomic)、イオン半径(Ionic)、ファンデルワールス半径(van der Waals)のいずれかで表示することが出来る。

・Atoms タブ-[Radius and color]の[Radius](半径)に表示されている数字の箇所をマウスで左クリックし、数字を削除した後、新しい数字をキーボード入力すると、原子の大きさを任意に変更することが出来る。また、[Color]に数字をキーボード入力する(3つの数値は、左から順に赤(R)、緑(G)、青(U)に対応し、0~255の整数を取る)、あるいは、[Color]の[Select]ボタンを押すと、[色の設定]ウィンドウが開く。[基本色]のカラーパレットから任意の色を選び、[OK]ボタンを押すと、原子の色を任意に変更することが出来る。

・各タブの下部にある[OK]ボタンを押すと[Properties]ウィンドウが閉じる。

・メニューバーの[View]にある[Overall Appearance]を選び、[Overall Appearance]ウィンドウを開く。[Projection]の[Perspective]のラジオボタンをクリックし、[Viewpoint]をスライドすると三次元結晶構造図を見る視点を近距離(Near)から遠距離(Far)まで移動することが出来る。

・同ウィンドウで[Depth-cueing]の[Enable depth-cueing]のチェックボックスをクリックすると、三次元結晶構造図の奥行き方向に画像表示をぼかすことが出来る。

・下部にある[OK]ボタンを押すと[Overall Appearance]ウィンドウが閉じる。

15) 三次元結晶構造図の回転方法(詳細)

・サイドパネルの[Manipulation]にある[Rotate]のラジオボタンをクリックする。同パネル[Rotation modes]の上部プルダウンメニューから[Drag]を選び、下部プルダウンメニューから[Free rotation]、[Around X axis]、[Around Y axis]、あるいは[Around Z axis]のいずれかを選ぶ。グラフィックエリア内にマウスポインタを置き、ドラッグすると、三次元結晶構造図を任意の方向、X軸の周り、Y軸の周り、あるいはZ軸の周り(*)に回転することが出来る。

・サイドパネルの[Manipulation]にある[Rotate]のラジオボタンをクリックし、同パネル[Rotation modes]の上部プルダウンメニューから[Animation]を選ぶと、三次元結晶構造図が連続回転を始める。[Rotation modes]の下部プルダウンメニューから、[Free rotation]、[Around X axis]、[Around Y axis]、あるいは[Around Z axis]のいずれかを選ぶと、任意の方向、X軸の周り、Y軸の周り、あるいはZ軸の周り(*)に連続回転をさせることが出来る。[Rotation modes]の中央部プルダウンメニューから[Push]を選ぶと、連続回転は止まる。

*)三次元結晶構造図の回転軸(X軸、Y軸、Z軸)の向きはグラフィックエリアの(左右、上下、画面に対して垂直)方向にそれぞれ対応し、結晶軸コンパス(a軸、b軸、c軸)の向きに対応しないことに注意。