

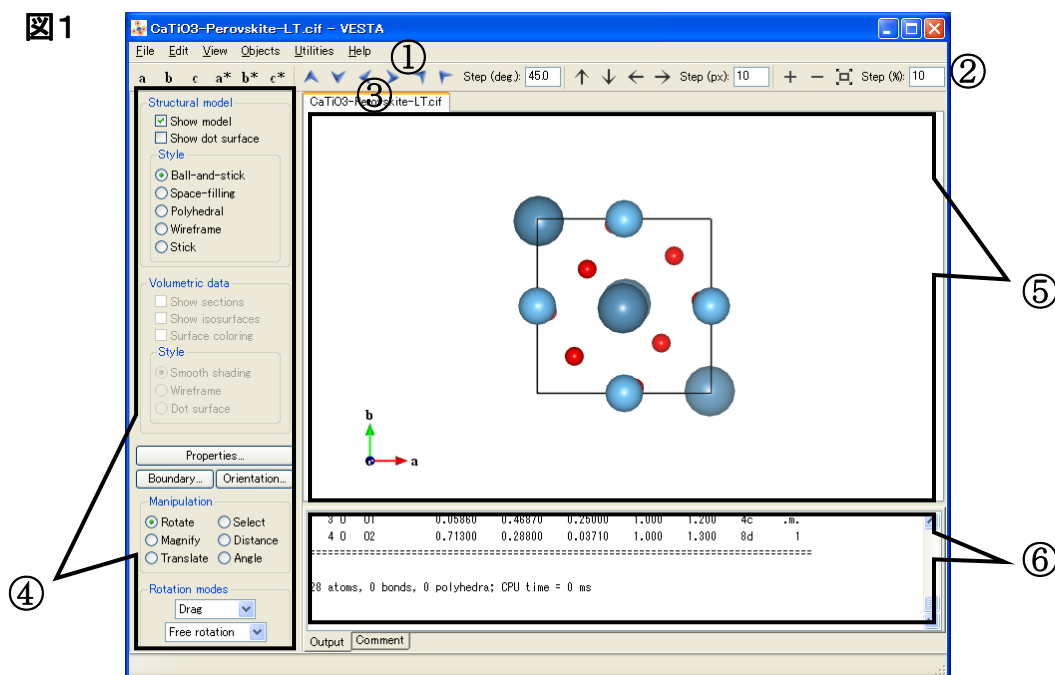
1) 5. 元素・化合物・鉱物など ペロブスカイト(ペロブスキー石)の物質名(和名)にある **CIF** アイコンを右クリックし、[対象をファイルに保存]を選ぶと、[名前を付けて保存]ウィンドウが開く。[ファイル名]が CaTiO_3 -Perovskite-LT、[ファイルの種類]が.cifドキュメントであることを確認し、[保存する場所](例えばデスクトップ)を選び、[保存]ボタンを押して、ダウンロード保存する。(OS:Windows XP、ブラウザ:Internet Explorer 7.0, 8.0 の場合)

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 CaTiO_3 -Perovskite-LT.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)。

紺色の球:Ca 原子、水色の球:Ti 原子、赤色の球:O 原子、実線:単位胞

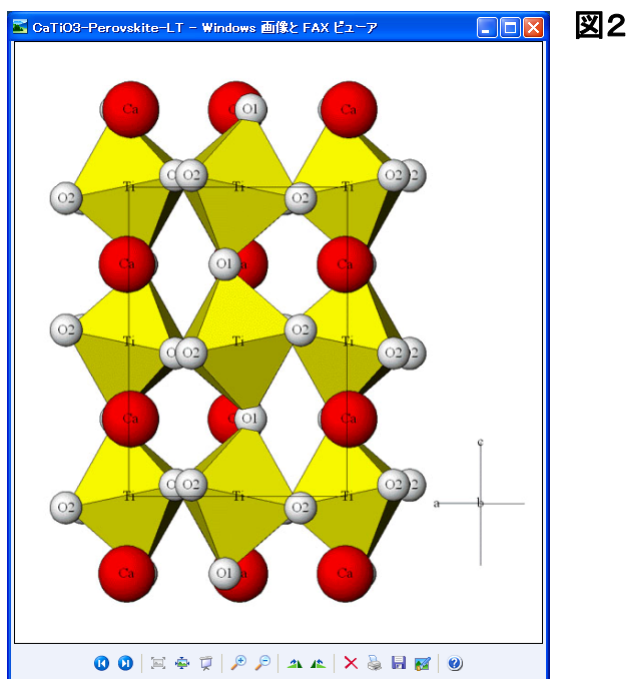


- ① メニューバー File、Edit 等のメニューが並んでいる
- ② ツールバー よく使われるツールが並んでいる
- ③ タブ ファイル名が表示され、複数のファイルを開けた際に切り替えられる
- ④ サイドパネル 操作に必要なツールボタンが並んでいる
- ⑤ グラフィックエリア 三次元結晶構造図と結晶軸コンパスが表示される
- ⑥ テキストエリア 行った操作で得られた情報がテキスト(文字、数字)で表示される

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)~7)に、結晶構造ギャラリーの物質名(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 b 軸方向 ($u:0, v:1, w:0$) 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) $v:$ [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。

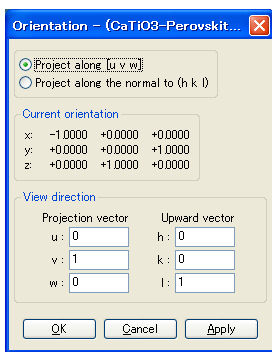


図3

- ・[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)。

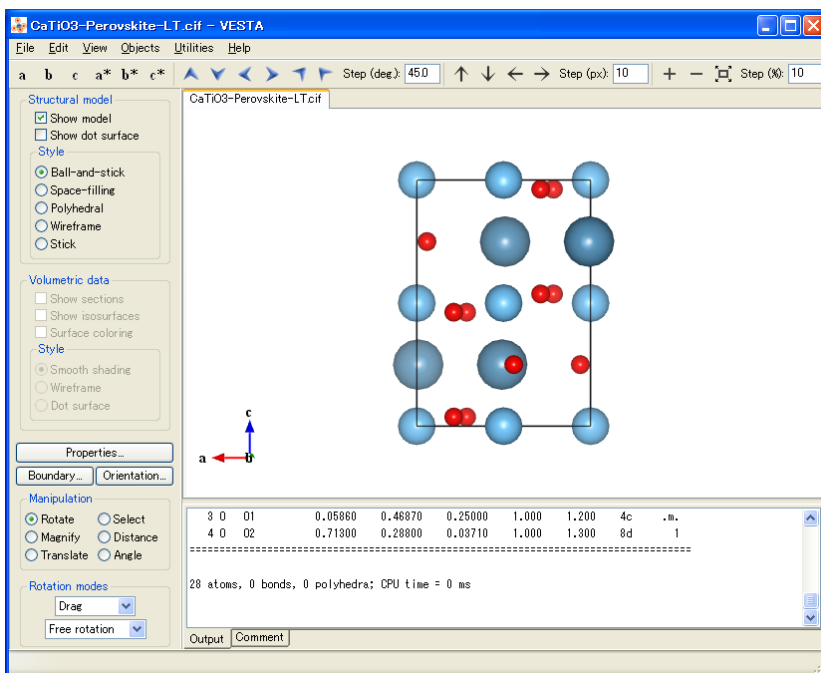


図4

5) 原子の結合、及び配位多面体の表示

- ・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、TiとOをプルダウンメニューによりA1:Ti、A2:Oと選択する。
- ・結合の最短距離(Min. length)及び最長距離(Max. length)をMin. length:0、Max. length:2.5の様に変更したい数字の箇所(例えば、Max. length:[1.6]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、1.6)を削除した後、新しい数字(例えば、2.5)をÅ(オングストローム)単位でキーボード入力する。
- ・[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がチェックされていることを確認する。

・[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:Ti、Atom 2:O、Min. length:0.000、Max. length:2.500、Polyhedra:Yes、Boundary:Yes)の様に表示される(図5参照)。

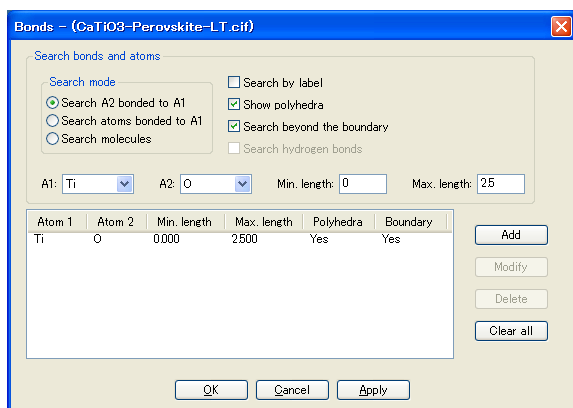


図5

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 Ti-O 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6参照)。

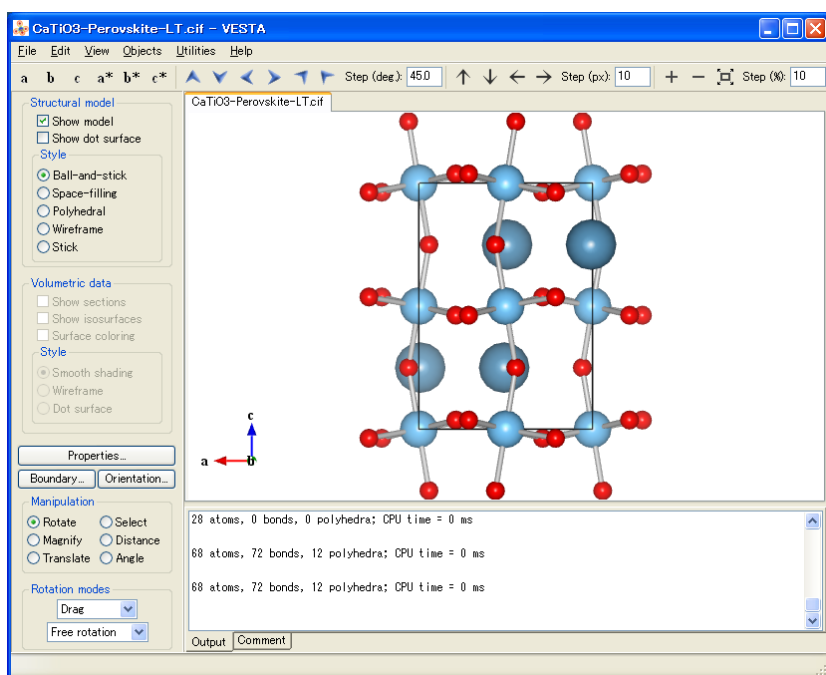


図6

・サイドパネルの[Structural model]の[Style]にある[Polyhedral](配位多面体モデル)のラジオボタンをクリックすると、TiO₆の配位多面体が水色で表示される(図7参照)。

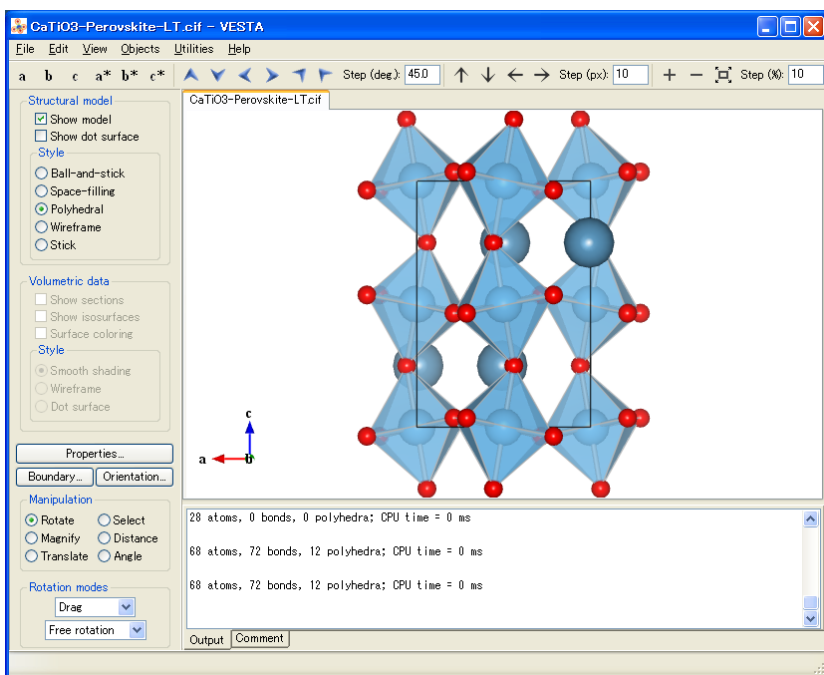


図7

ペロブスカイト(ペロブスキー石)の場合、図2の結晶構造図にはCa原子は12個(図2の結晶構造図の向きからは見えない範囲に8個あるので、全部で20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Ca原子(紺色の球)が4個しか表示されないため、次の6)で三次元結晶構造図の表示範囲を変更する。

6) 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8参照)。

$$\begin{aligned}
 x(\min) &= 0 \rightarrow -0.1, & x(\max) &= 1 \rightarrow 1.1 \\
 y(\min) &= 0 \rightarrow -0.1, & y(\max) &= 1 \rightarrow 1.1 \\
 z(\min) &= 0 \rightarrow -0.25, & z(\max) &= 1 \rightarrow 1.25
 \end{aligned}$$

数字を変更するには、変更したい数字の箇所(例えば、 $x(\min) = [0$]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、-0.1)をキーボード入力すれば良い。

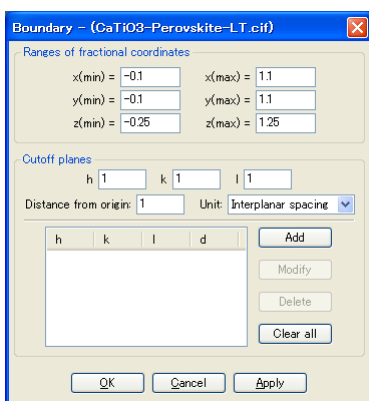


図8

・[Apply]ボタンを押すと表示される Ca 原子(紺色の球)の数が 4 個から 20 個(現在の画面表示で見える範囲では 12 個)に増える。[OK]ボタンを押すと[Boundary]ウィンドウが閉じる(図9 参照)。

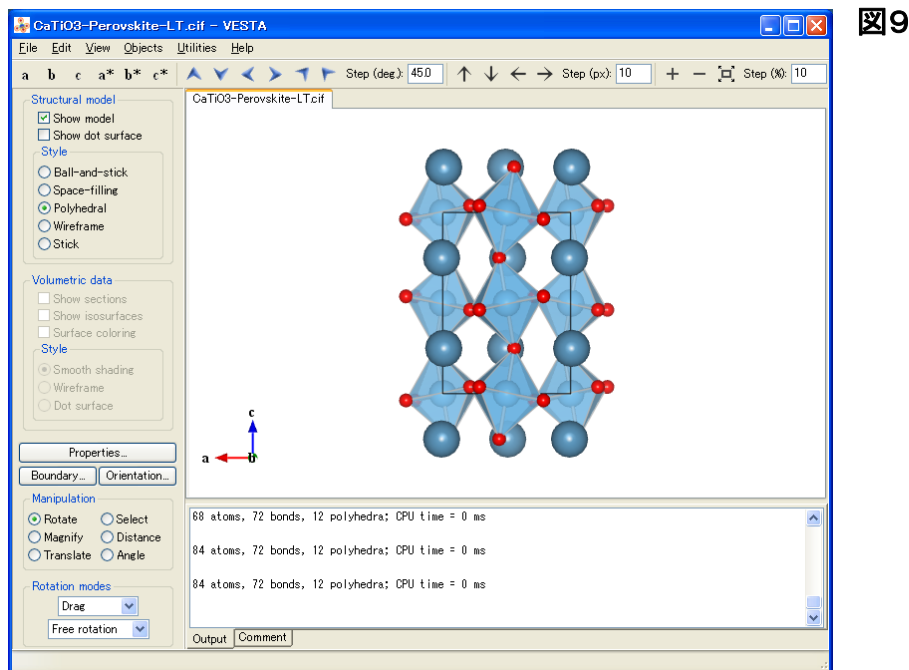


図9

7) 各原子の大きさ、及び各原子・配位多面体の色の変更

・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]のプルダウンメニューにより原子(Ca、Ti 又は O)を選び、[Radius](半径)に表示されている数字の箇所(テキストボックス)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、Ca: 1.3、Ti: 0.6、O: 1)をキーボード入力すると、原子の大きさを変更することが出来る(図10~12参照)。[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各原子の色(Ca: 赤、Ti: 黄、O: 白)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10~12、14参照)。

・Polyhedra タブ-[Planes](面)の[Central atom]のプルダウンメニューによりTiが選択されていることを確認する。[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色(黄)を選び[OK]ボタンを押すと、配位多面体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。

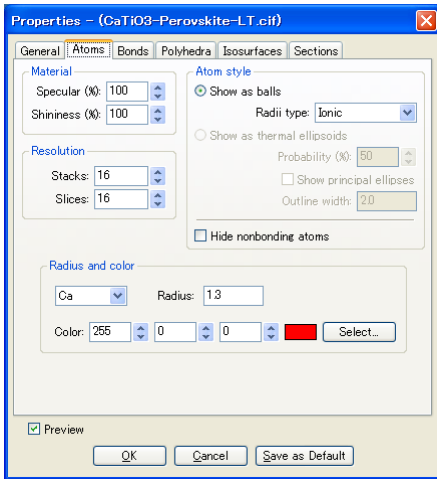


图 10

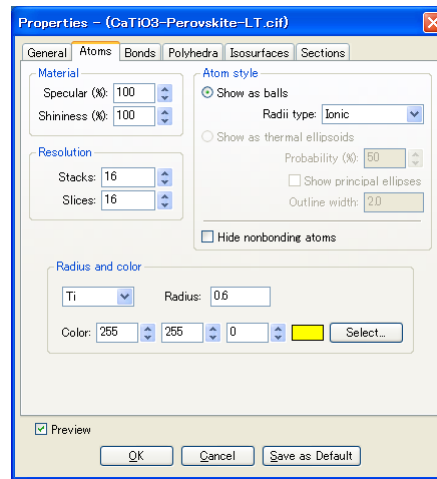


图 11

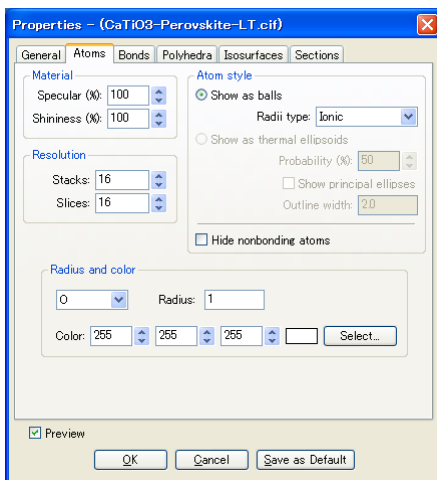


图 12

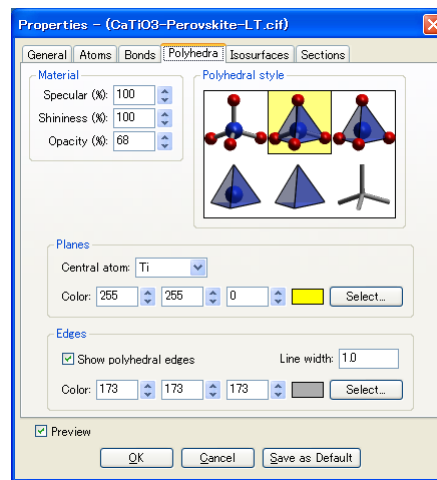


图 13

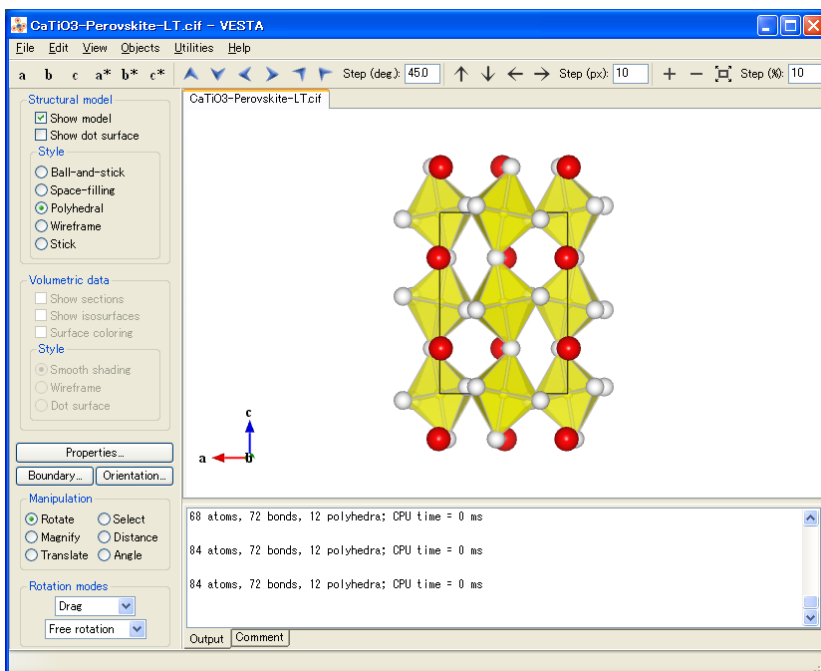


图 14

以下の 8)~11) に、VESTA の他の操作方法の例を示す。

8) 原子座標、結合距離、及び結合角の表示

・サイドパネルの[Structural model] (構造モデル) の[Style]にある[Ball-and-stick] (球棒モデル) のラジオボタンをクリックすると、三次元結晶構造図が球棒モデル(原子を球体で、原子間の結合を棒で表現するモデル)で表示される。

・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 Ti 原子 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: Ti(0.50000, 1.00000, 0.50000))が表示される(図15参照)。

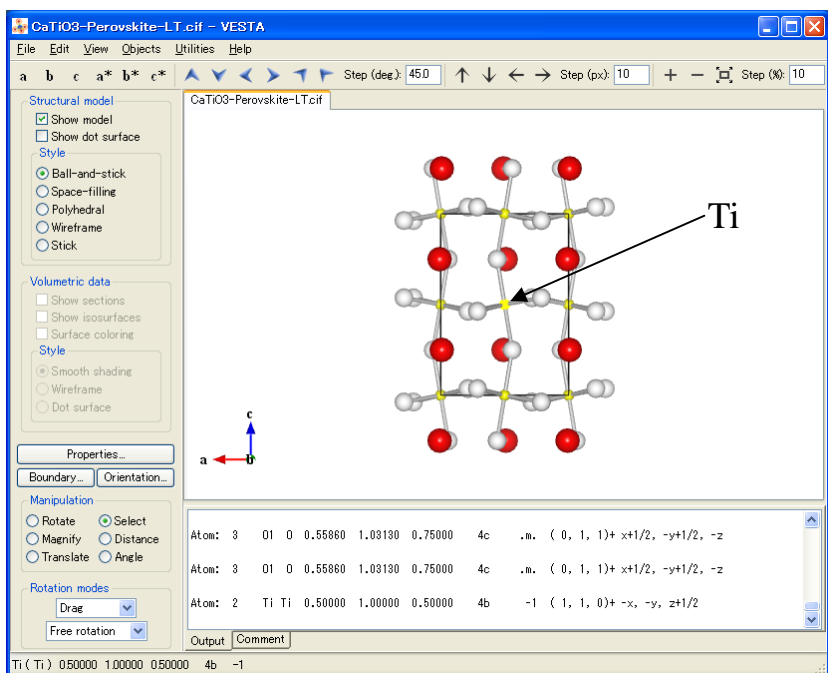


図15

・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 Ti, O)をクリックすると、原子の色が変わり、テキストエリアに 2 原子間の結合距離(例: Ti-O 間=1.961(5) Å)及び 2 原子の分率座標(例: Ti(0.50000, 1.00000, 0.50000)、O(0.71300, 1.28800, 0.46290))が表示される(図16参照)。

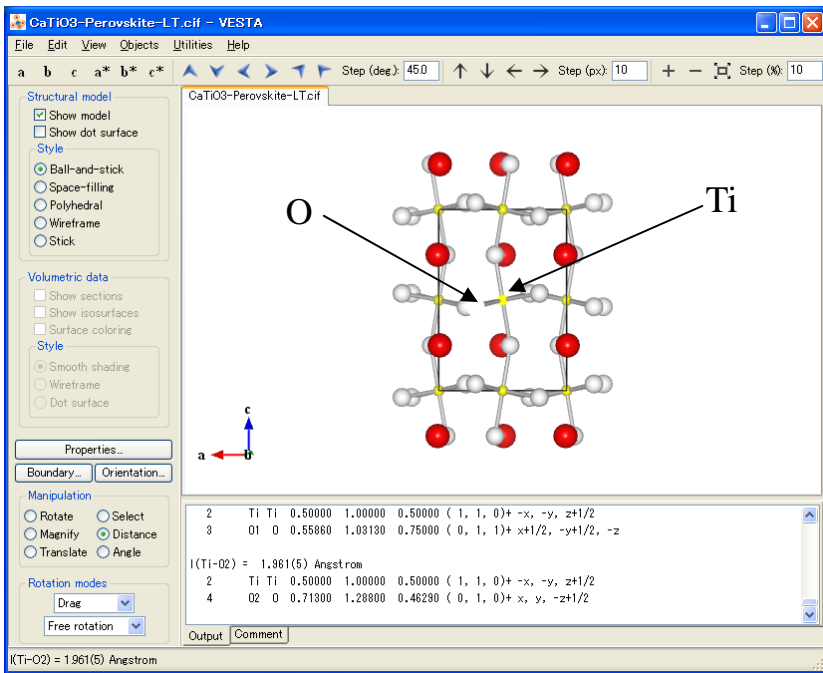


図16

・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 Ti, O, Ti)を順番にクリックすると、原子の色が変わり、テキストエリアに3原子が構成する結合角(例: $\angle(\text{Ti-O-Ti}) = 158.7(3)^\circ$)及び3原子の分率座標(例: Ti(0.50000, 1.00000, 1.00000)、O(0.55860, 1.03130, 0.75000)、Ti(0.50000, 1.00000, 0.50000))が表示される(図17参照)。

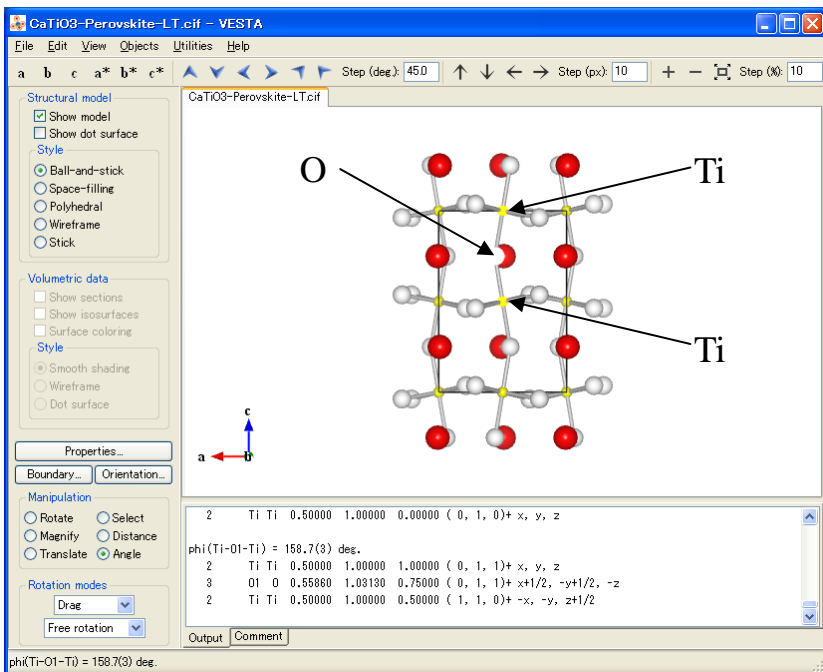


図17

9) 三次元結晶構造図の回転、拡大・縮小、及び並進移動

・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。

10) 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]のプルダウンメニューにより原子(Ca、Ti 又は O)を選び、[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つの数字は、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。

11) 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。