

例 4) スピネル(尖晶石): $MgAl_2O_4$ (原点の変更 & 配位多面体を含む場合) 2010/08/14

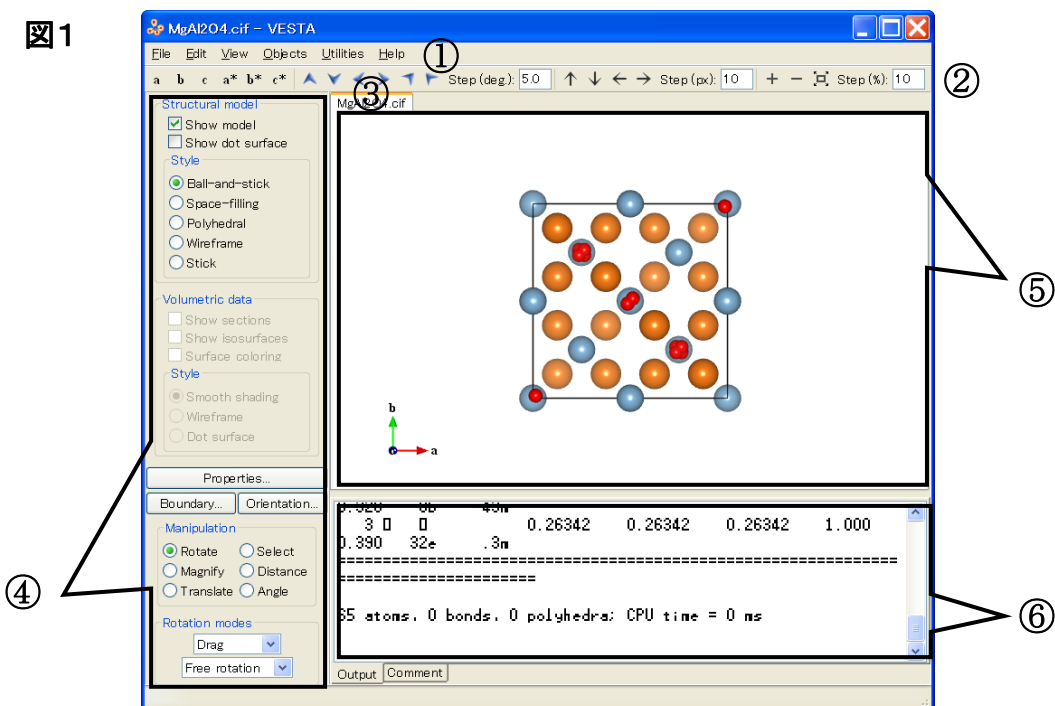
1) 5. 元素・化合物・鉱物など スピネル(尖晶石)の物質名(和名)にある **CIF** アイコンを右クリックし、[対象をファイルに保存]を選ぶと、[名前を付けて保存]ウィンドウが開く。[ファイル名]が $MgAl_2O_4$ 、[ファイルの種類]が .cifドキュメントであることを確認し、[保存する場所](例えばデスクトップ)を選び、[保存]ボタンを押して、ダウンロード保存する。(OS: Windows XP、ブラウザ: Internet Explorer 7.0, 8.0 の場合)

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 $MgAl_2O_4.cif$ 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)。

オレンジ色の球: Mg 原子、水色の球: Al 原子、赤色の球: O 原子、実線: 単位胞

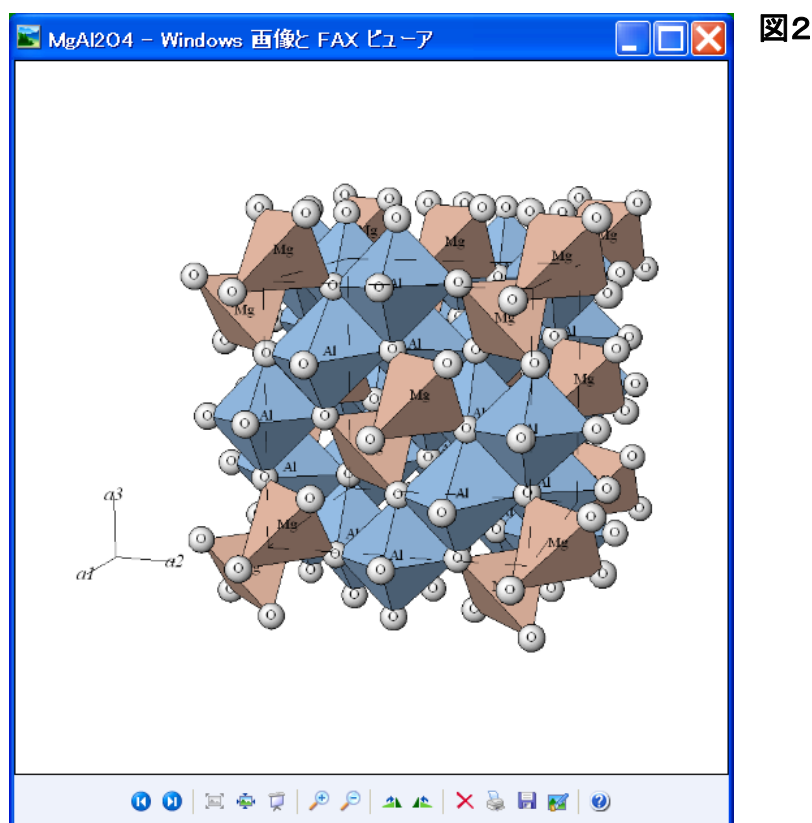


- ① メニューバー File、Edit 等のメニューが並んでいる
- ② ツールバー よく使われるツールが並んでいる
- ③ タブ ファイル名が表示され、複数のファイルを開けた際に切り替えられる
- ④ サイドパネル 操作に必要なツールボタンが並んでいる
- ⑤ グラフィックエリア 三次元結晶構造図と結晶軸コンパスが表示される
- ⑥ テキストエリア 行った操作で得られた情報がテキスト(文字、数字)で表示される

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]ボタンを押し。

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) 原点の変更

- ・メニューバーの[Edit]にある[Structure](構造)を選ぶと、[Structure]ウィンドウが開く(図3参照)。
- ・[Structure]ウィンドウの左上部分[Space-group symmetry](空間群対称性)にある[Update structure parameters](構造パラメータの更新)のチェック(✓)を外す。
- ・[Structure]ウィンドウの左上部分[Space-group symmetry]の上から4番目の設定[Setting]のプルダウンを[1 (Origin choice 1)]から[2 (Origin choice 2)]に変更する。
- ・[Structure]ウィンドウ最下部の[Apply]ボタンを押し、その後[OK]ボタンを押し。この操作により、[Structure]ウィンドウが閉じ、グラフィックウィンドウに表示される原子配列が図4の様に变化する。

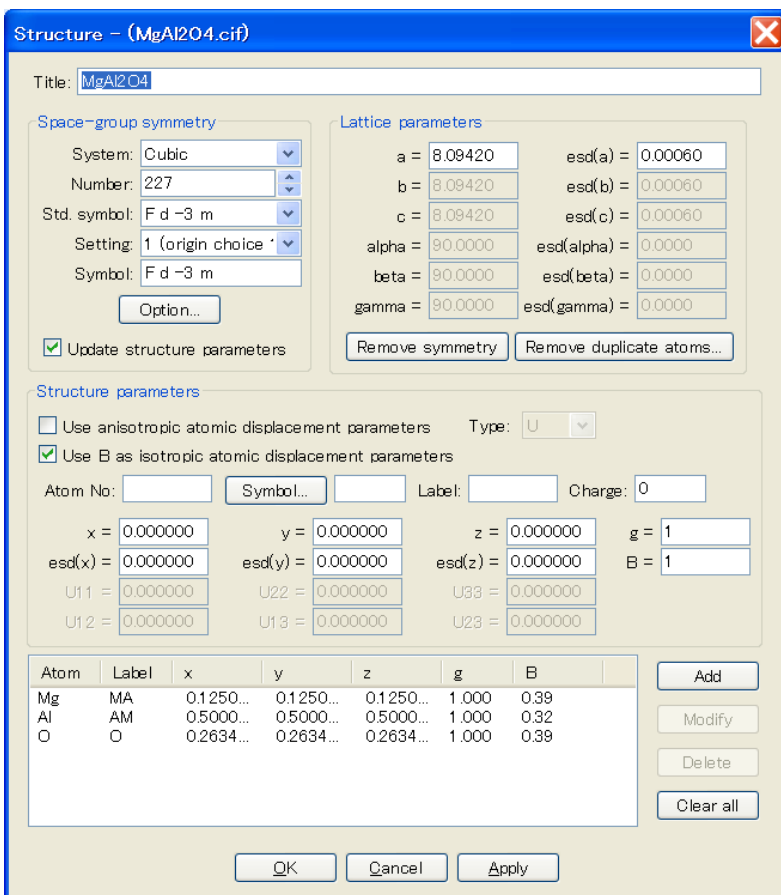


图3

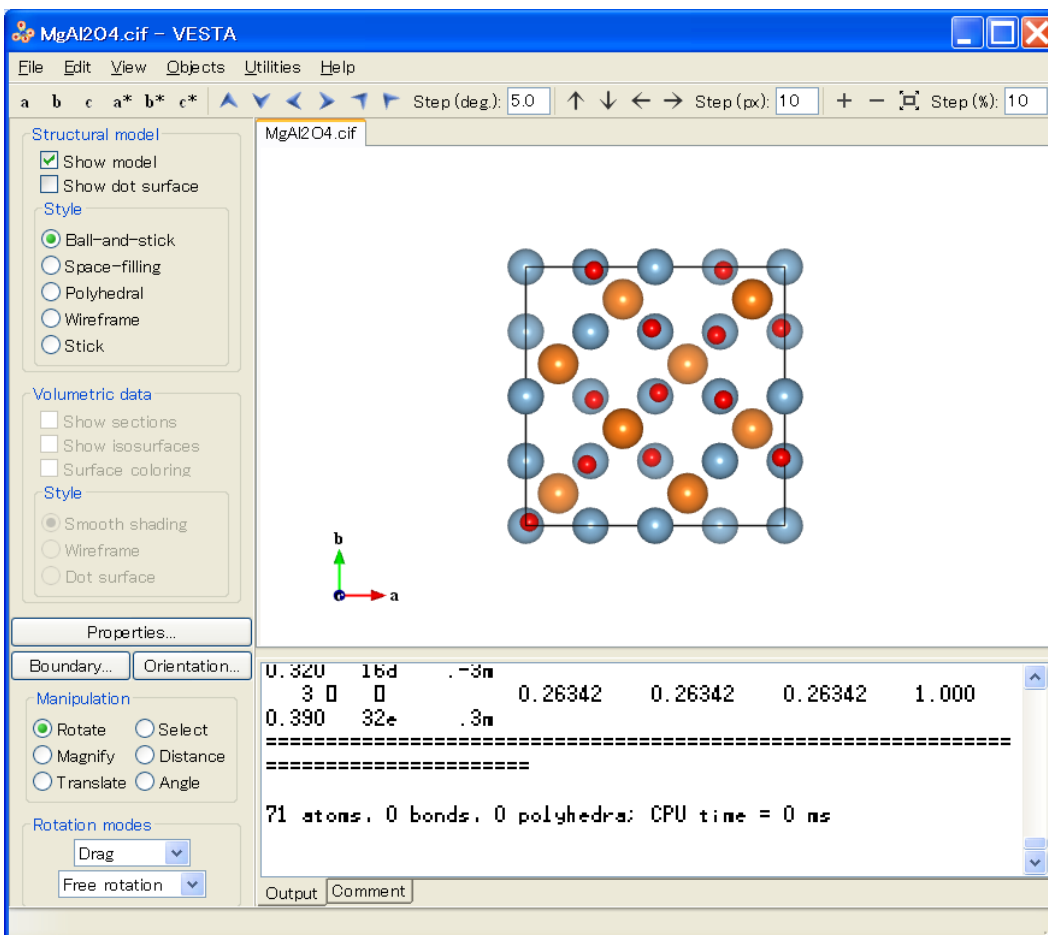


图4

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。

5-1) Mg と O の結合の表示

・結合を表示する2つの原子、Mg と O をプルダウンメニューにより A1:Mg、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:2.0 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、2.0) 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:Mg、Atom 2:O、Min. length:0.000、Max. length:2.000、Polyhedra:Yes、Boundary:Yes) の様に表示される (図5参照)。

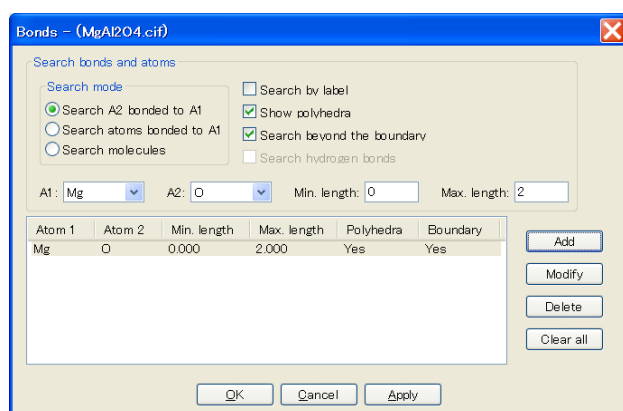


図5

・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 Mg-O の結合が灰色の棒で表示される。(図6参照)。

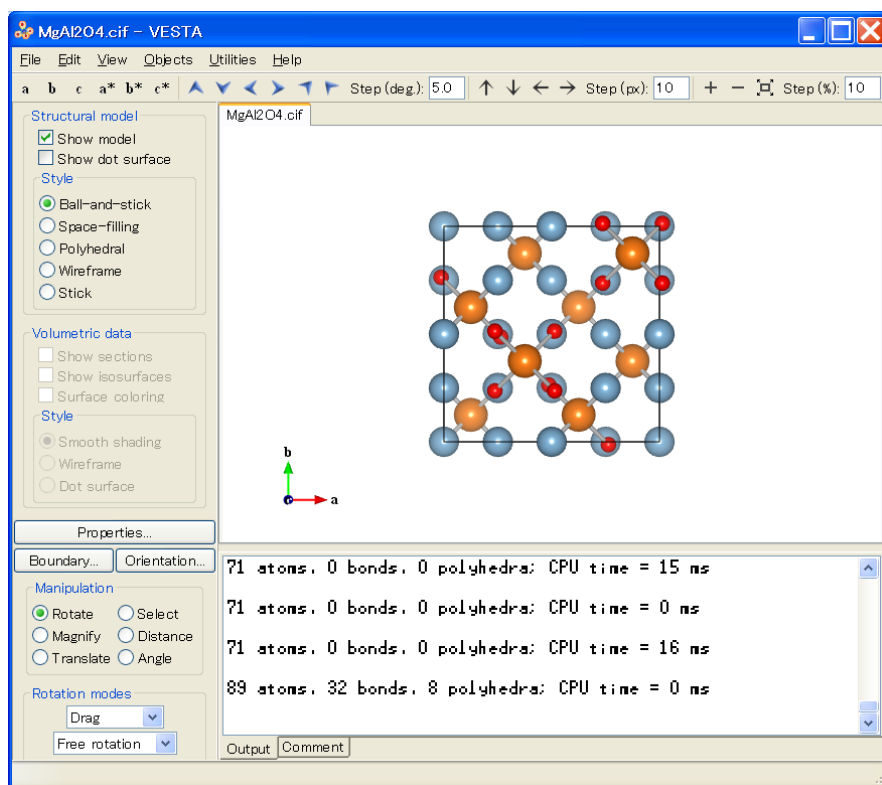


図6

5-2) Al と O の結合の表示

- ・結合を表示する2つの原子、AlとOをプルダウンメニューによりA1:Al、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:2.0 の様に、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:Al、Atom 2:O、Min. length:0.000、Max. length:2.000、Polyhedra:Yes、Boundary:Yes) の様に表示される (図7参照)。

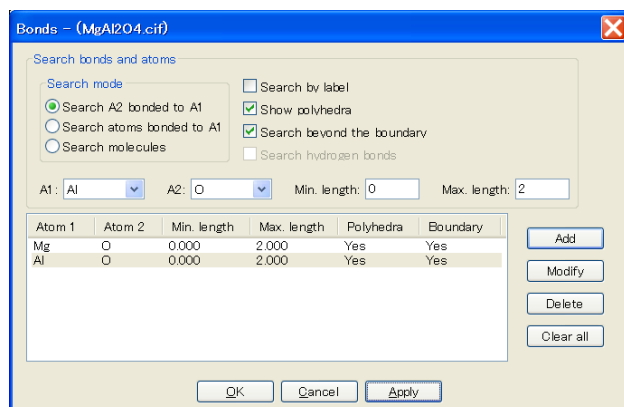


図7

・[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Al-Oの結合が灰色の棒で追加表示される。(図8参照)。
 ・[OK]ボタンを押すと[Bonds]ウィンドウが閉じる。

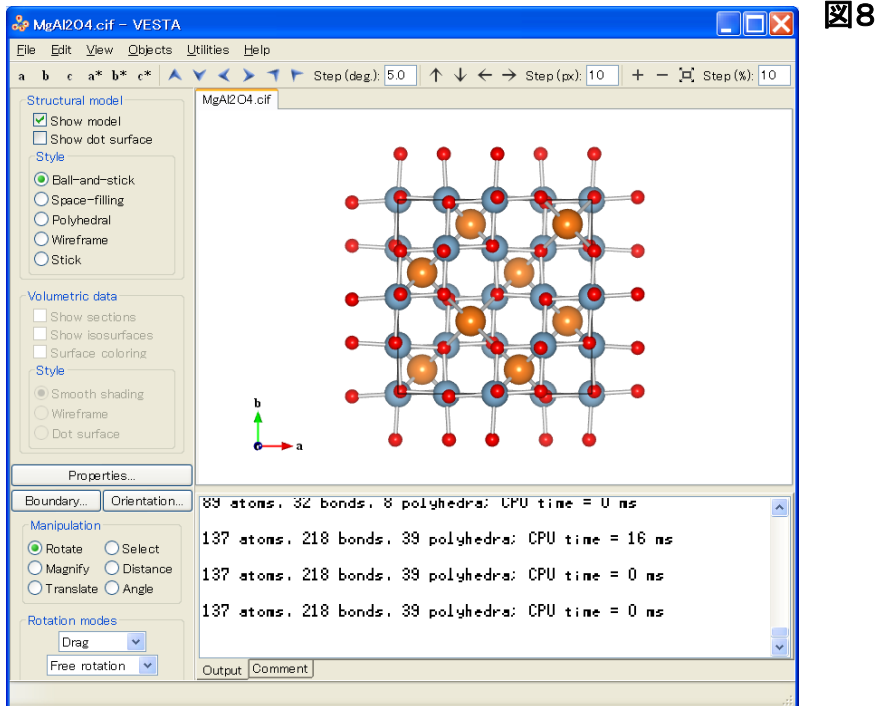


図8

5-3) 配位多面体の表示

・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、MgO₄の配位四面体がオレンジ色で、AlO₆の配位八面体が水色で表示される(図9参照)。

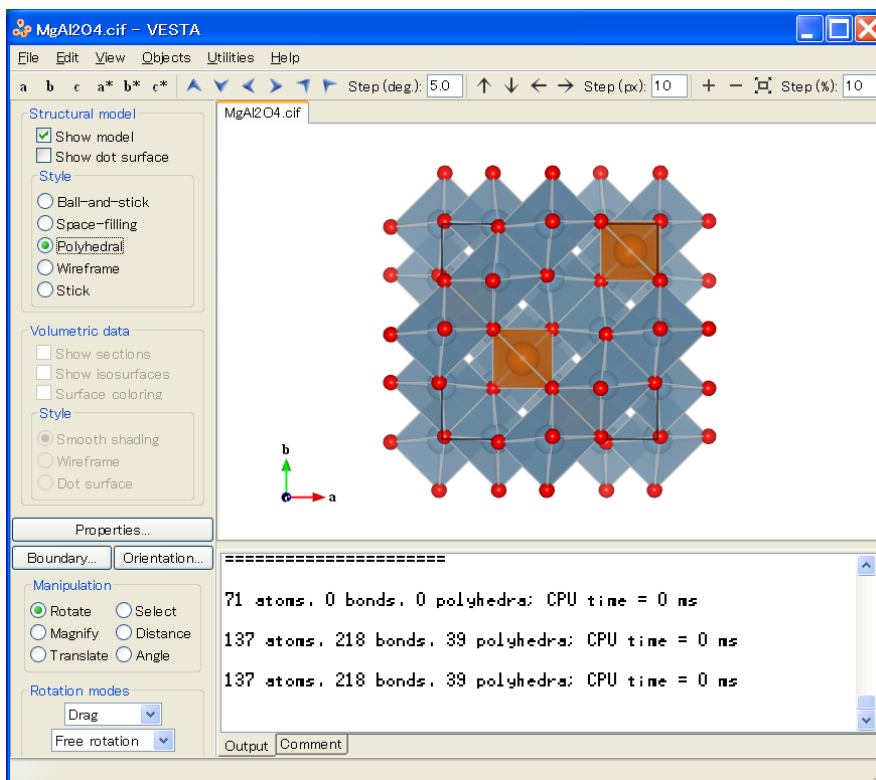


図9

スピネル(尖晶石)の場合、**図2**の結晶構造図には MgO_4 四面体(オレンジ色)は15個(**図2**の結晶構造図の向きからは見えない範囲に13個あるので、全部で28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 MgO_4 四面体(オレンジ色)が8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10**参照)。

$x(\min) = 0 \rightarrow -0.2$ 、 $x(\max) = 1 \rightarrow 1.2$

$y(\min) = 0 \rightarrow -0.2$ 、 $y(\max) = 1 \rightarrow 1.2$

$z(\min) = 0 \rightarrow -0.2$ 、 $z(\max) = 1 \rightarrow 1.2$

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、-0.2)をキーボード入力すれば良い。

・[Apply]ボタンを押すと、表示される MgO_4 四面体(オレンジ色)の数が8個から28個(現在の画面表示で見える範囲では14個)に増える。[OK]ボタンを押すと[Boundary]ウィンドウが閉じる(**図11**参照)。

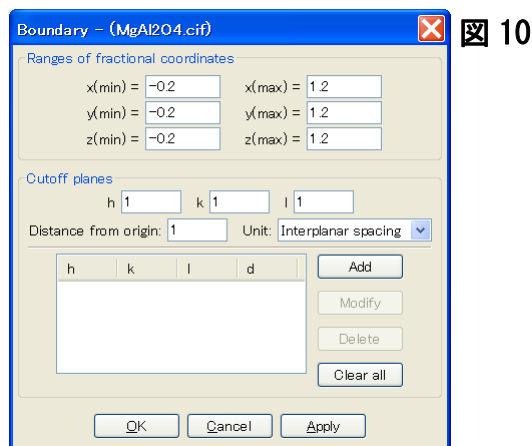


図10

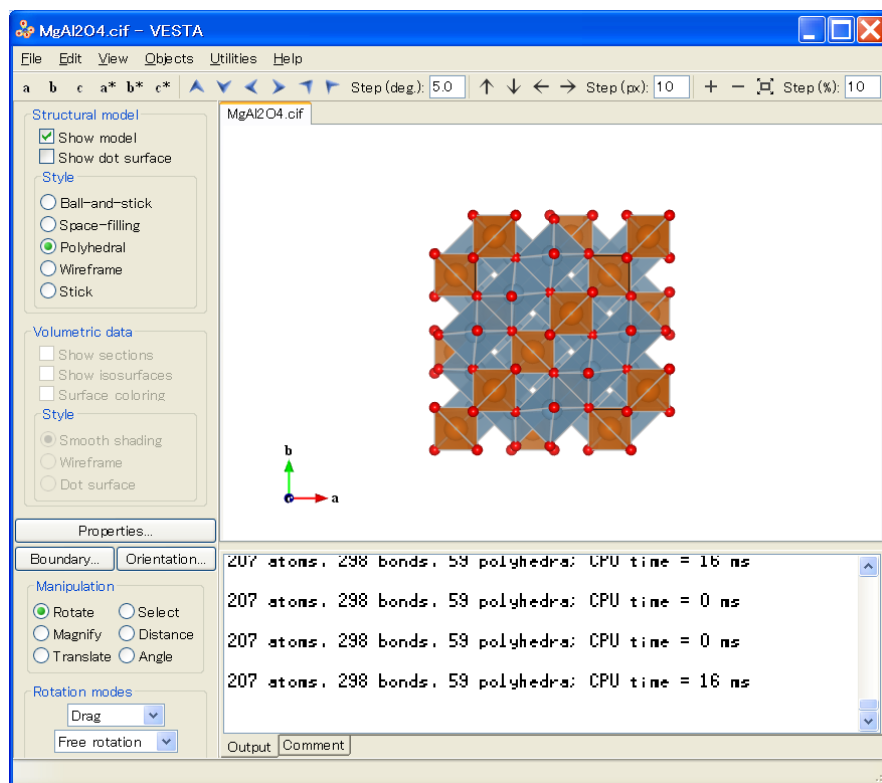


図11

7) 各原子の大きさ、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]のプルダウンメニューにより原子(Mg、Al 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、Mg:0.75、Al:0.45、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12~14参照)。[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(Mg: オレンジ、Al: 水色、O: 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12~15参照)。
- ・[OK]ボタンを押すと[Properties]ウィンドウが閉じる。

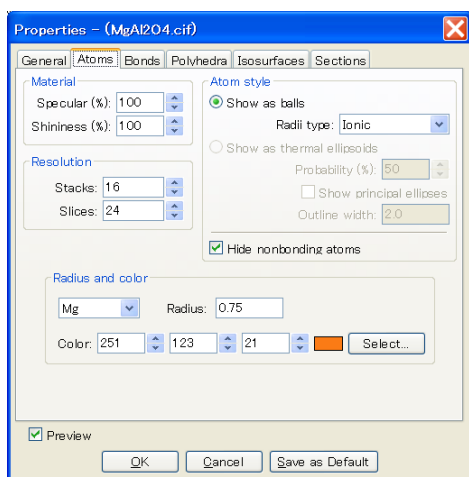


図12

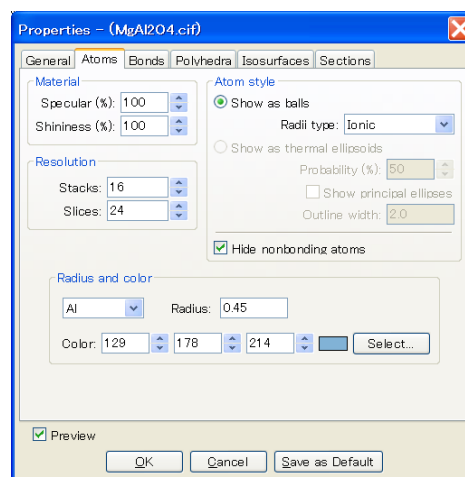


図13

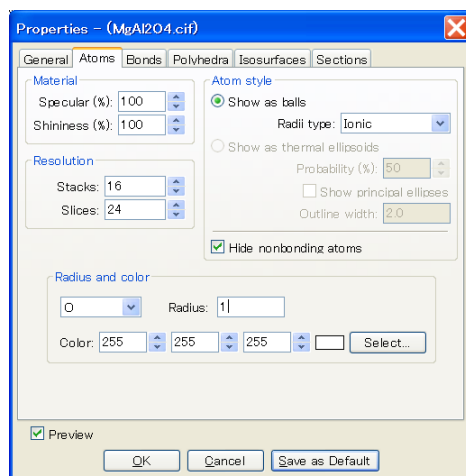


図14

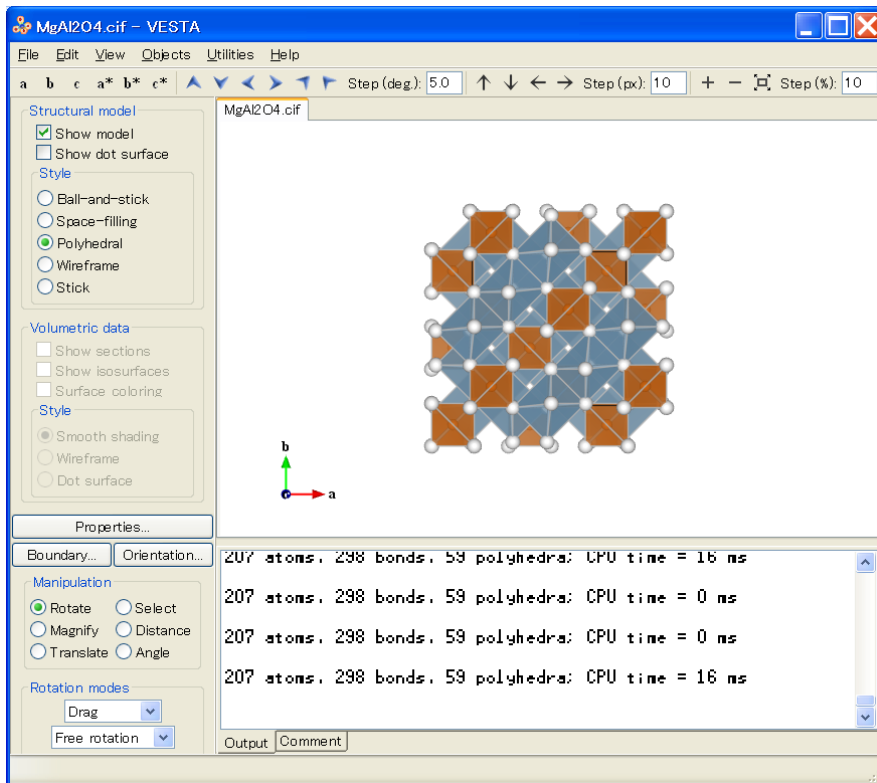


図15

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 Mg 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: Mg(0.87500, 0.87500, 0.87500))が表示される(図16参照)。

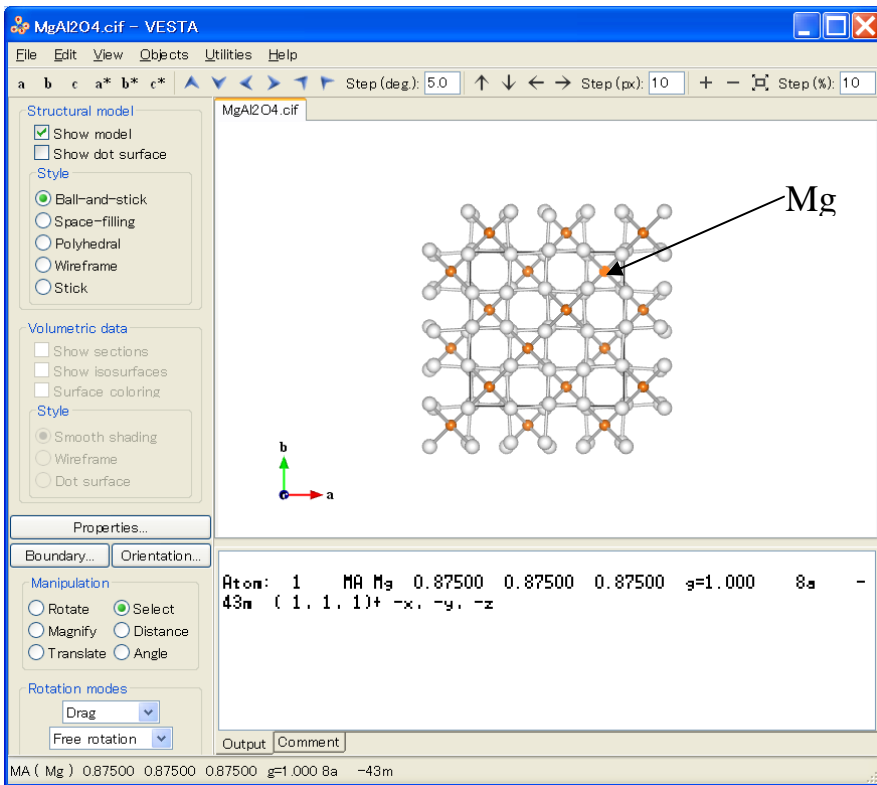
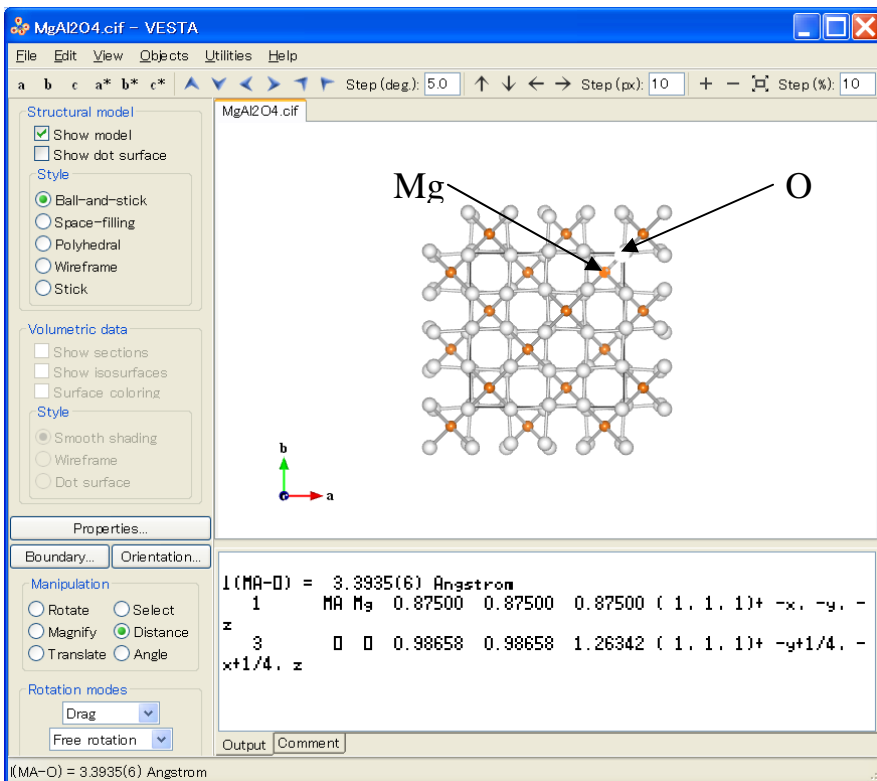
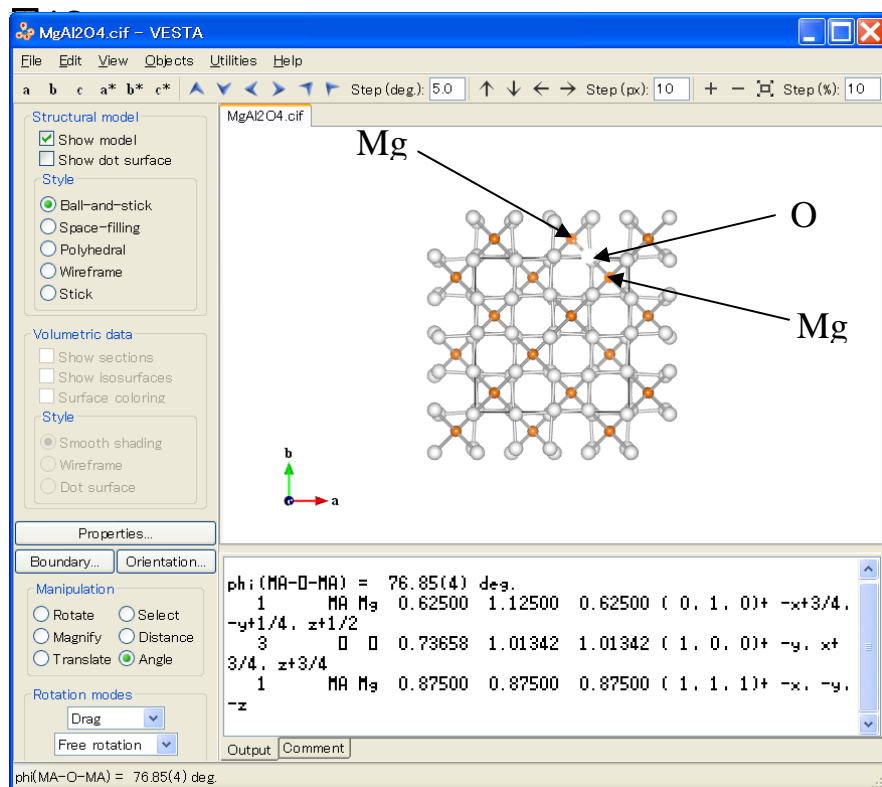


図16

・サイドパネルの[Manipulation] (操作)にある[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Mg, 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:Mg-O間=3.3935(6) Å)及び2原子の分率座標(例:Mg(0.87500, 0.87500, 0.87500)、O(0.98658, 0.98658, 1.26342))が表示される(図17参照)。



・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Mg, O, Mg)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: $\angle(\text{Mg}-\text{O}-\text{Mg})=158.7(3)^\circ$) 及び3原子の分率座標 (例: Mg(0.62500, 1.12500, 0.62500)、O(0.73658, 1.01342, 1.01342)、Mg(0.87500, 0.87500, 0.87500))が表示される(図18参照)。



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(Mg、Al 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できる。[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。