

第17回高校課題研究フォーラム @東工大 平成22年8月24日

パソコンを使った結晶構造の描き方

(山梨大院・医工) 熊田伸弘

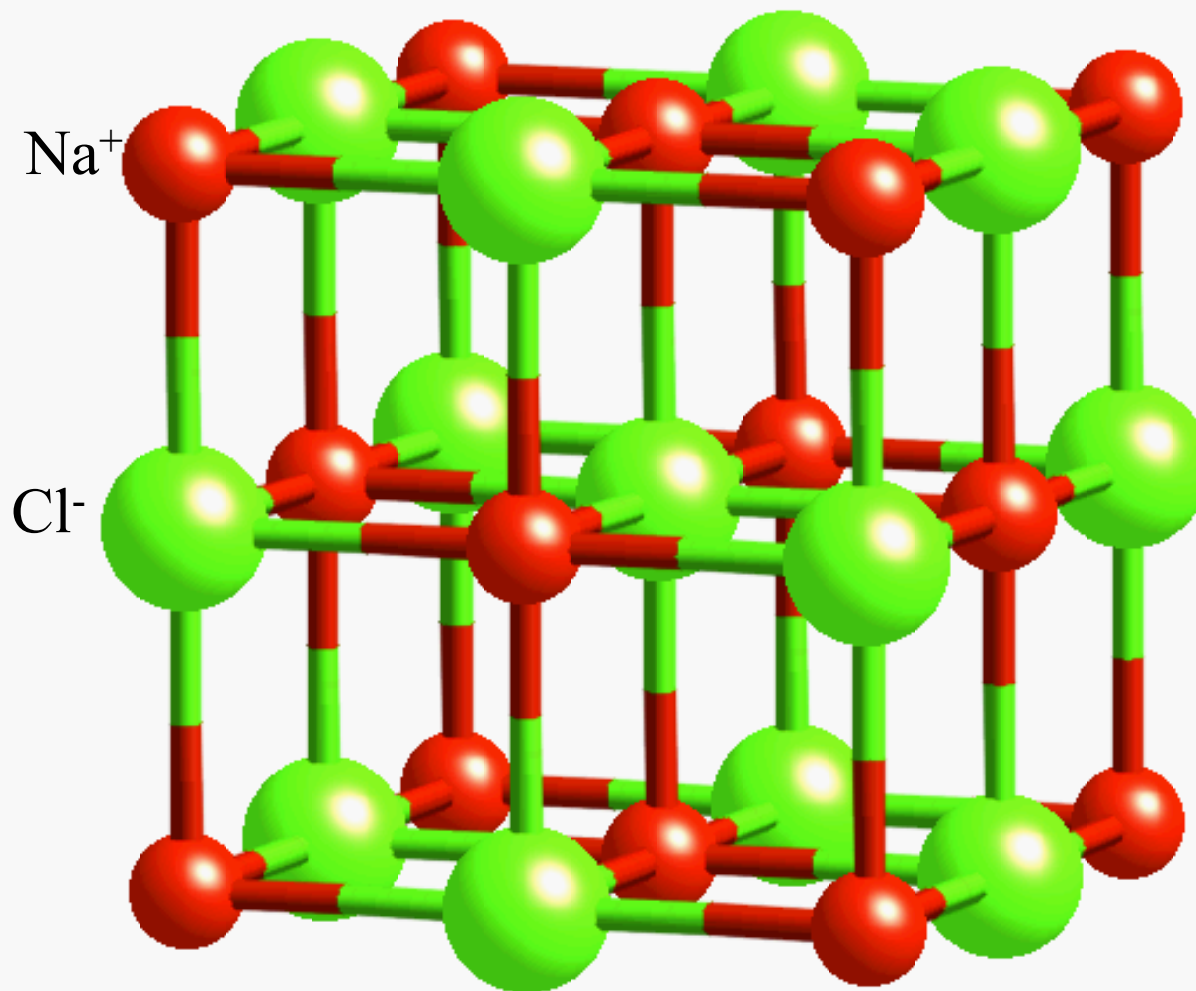
1

講演内容

- ① 結晶構造とは？
- ② 結晶構造描画ソフト(VESTA)の使い方
- ③ 無機結晶構造データベース(ICSD)の紹介
- ④ QUESKの使い方

① 結晶構造とは？

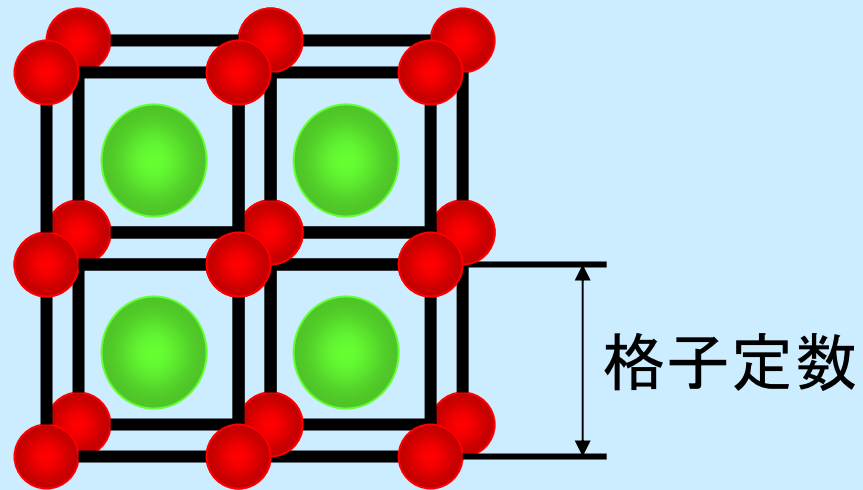
NaClの結晶構造



① 結晶構造とは？

結晶構造を描くために必要なパラメーター

1 格子定数

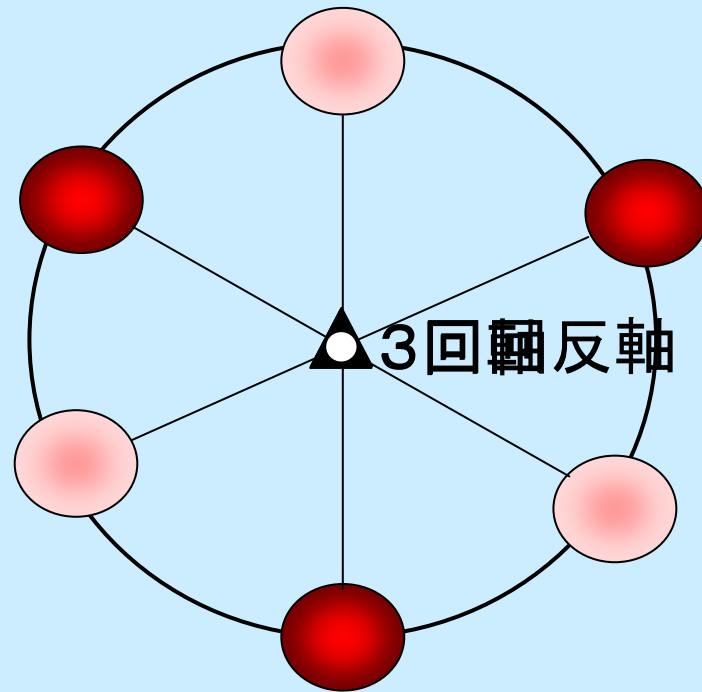


① 結晶構造とは？

結晶構造を描くために必要なパラメーター

1 格子定数

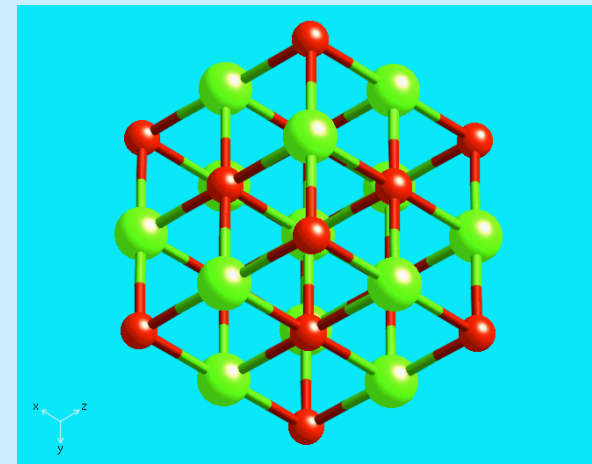
2 空間群



対称要素



230の空間群



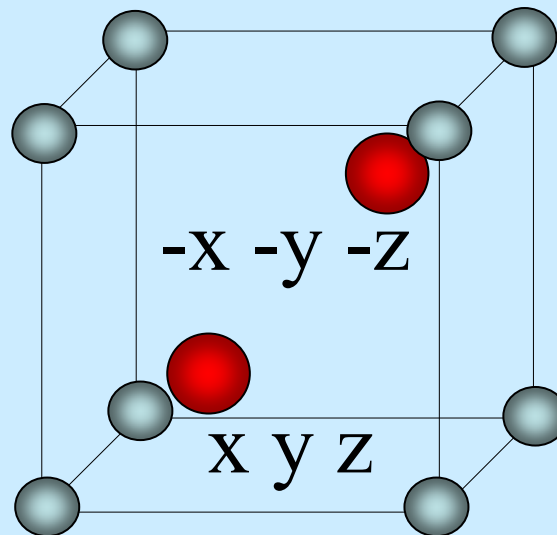
NaCl $Fm\bar{3}m$ (225)**5**

① 結晶構造とは？

結晶構造を描くために必要なパラメーター

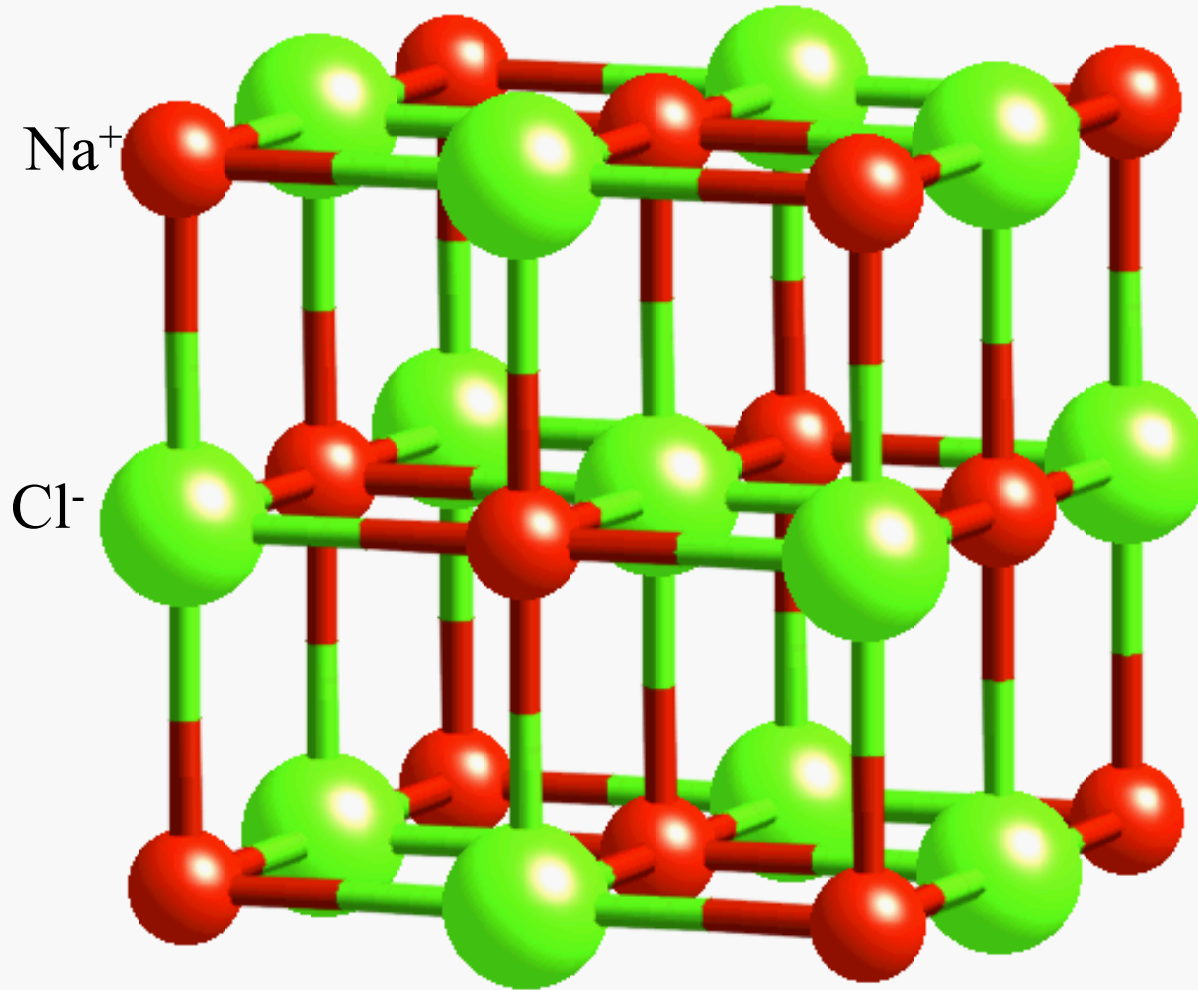
- 1 格子定数
- 2 空間群

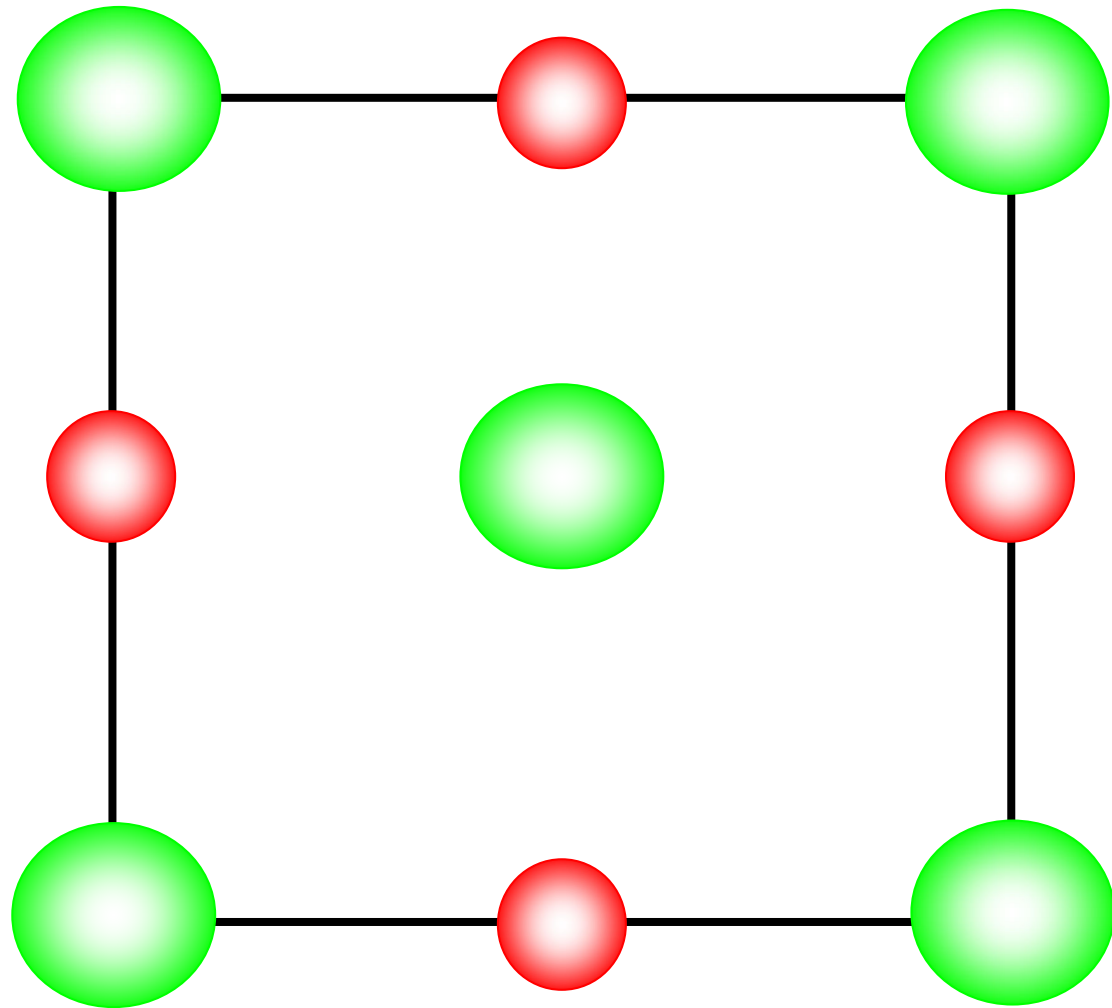
3 原子座標



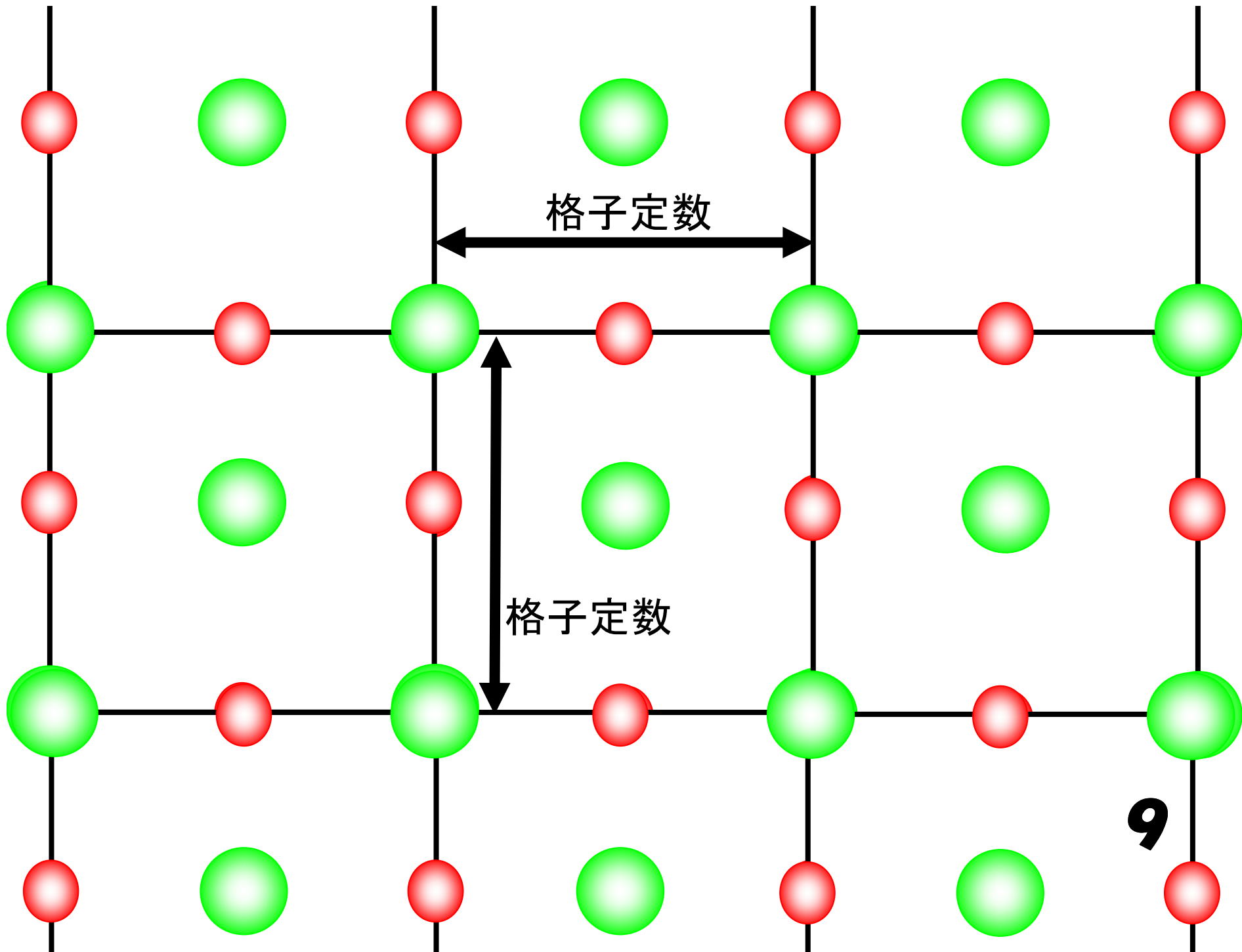
① 結晶構造とは？

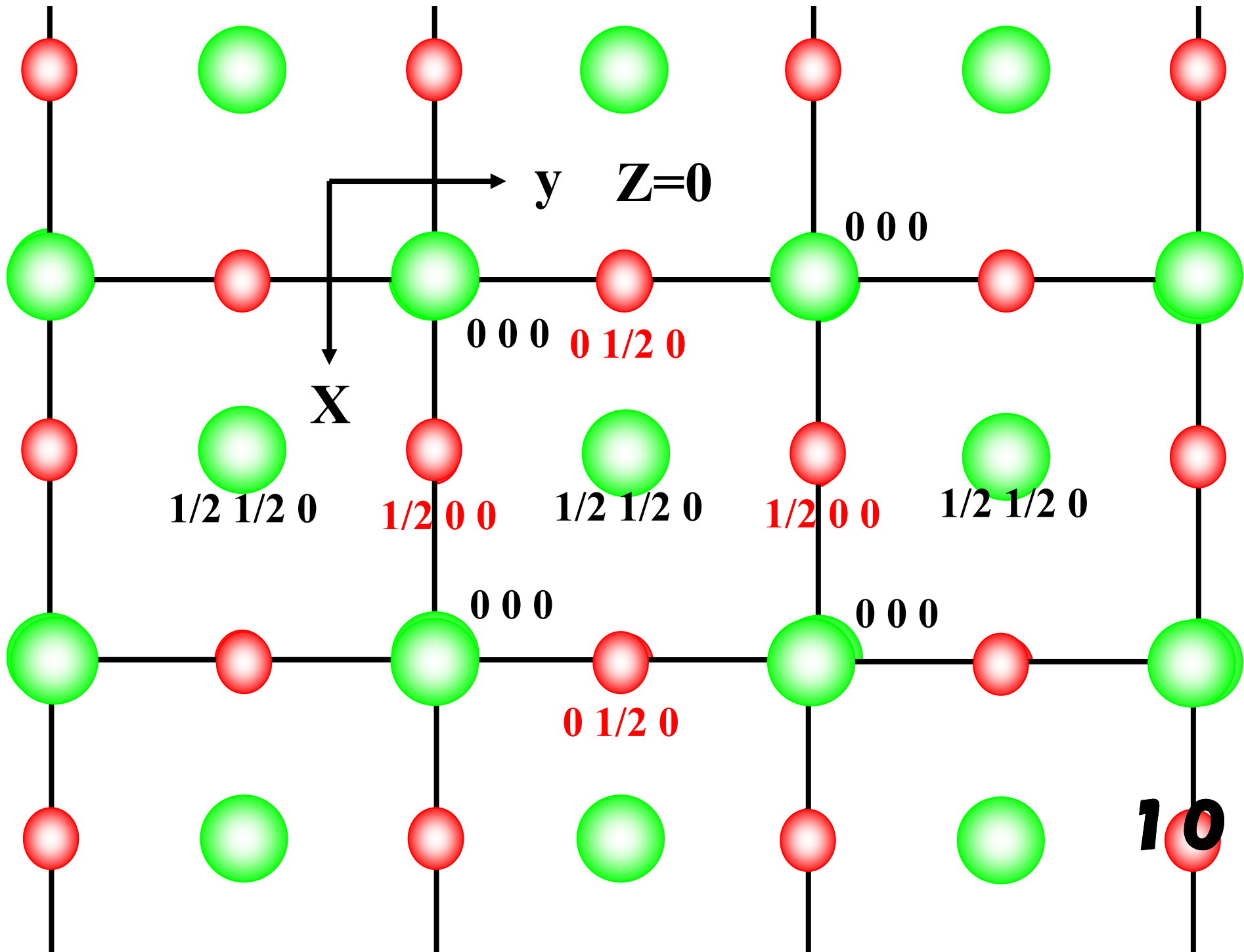
NaClの結晶構造





8

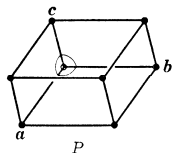




① 結晶構造とは？

1 繰り返しの単位 格子定数

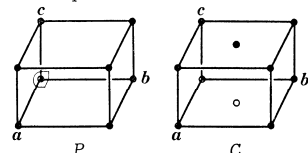
三斜晶系



底心格子(C)

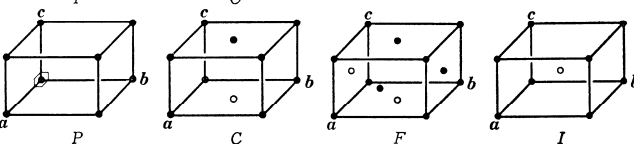
$$a \neq b \neq c \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

単斜晶系



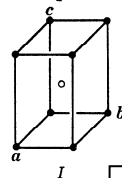
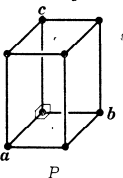
$$a \neq b \neq c \quad \alpha = \gamma = 90^\circ \quad \beta \neq 90^\circ$$

斜方晶系



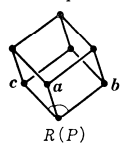
$$a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

正方晶系



$$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

三方晶系

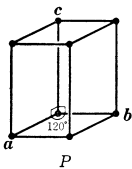


ブラベ格子

$$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$$

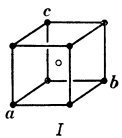
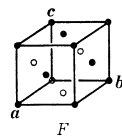
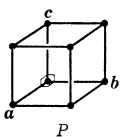
$$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ \quad (R)$$

六方晶系



$$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$$

立方晶系



$$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

単純格子(P)

面心格子(F)

体心格子(I)

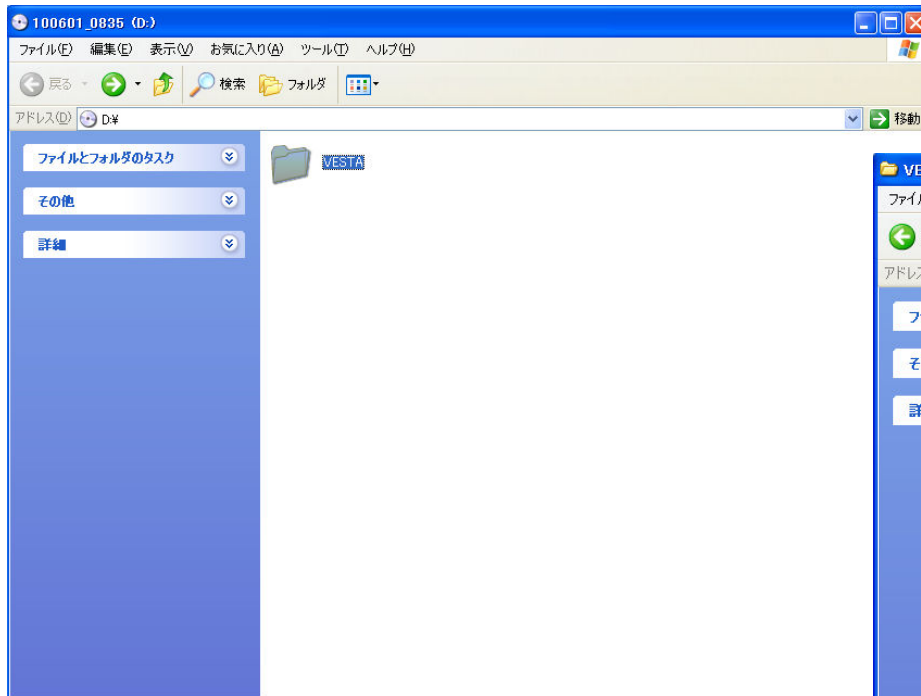
① 結晶構造とは？

結晶構造を描くために必要なパラメーター

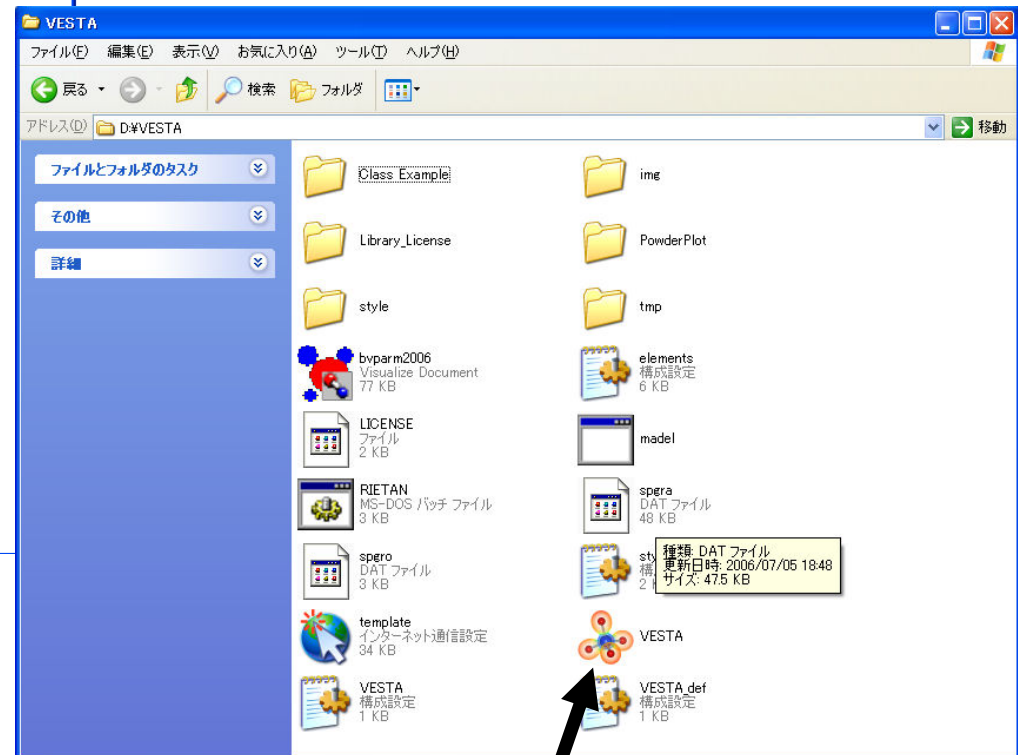
- 1 格子定数
- 2 空間群
- 3 原子座標

これらのパラメーターが分かれば結晶構造を描くことができる。

② VESTAを使ってみる



「VESTA」フォルダーの中身

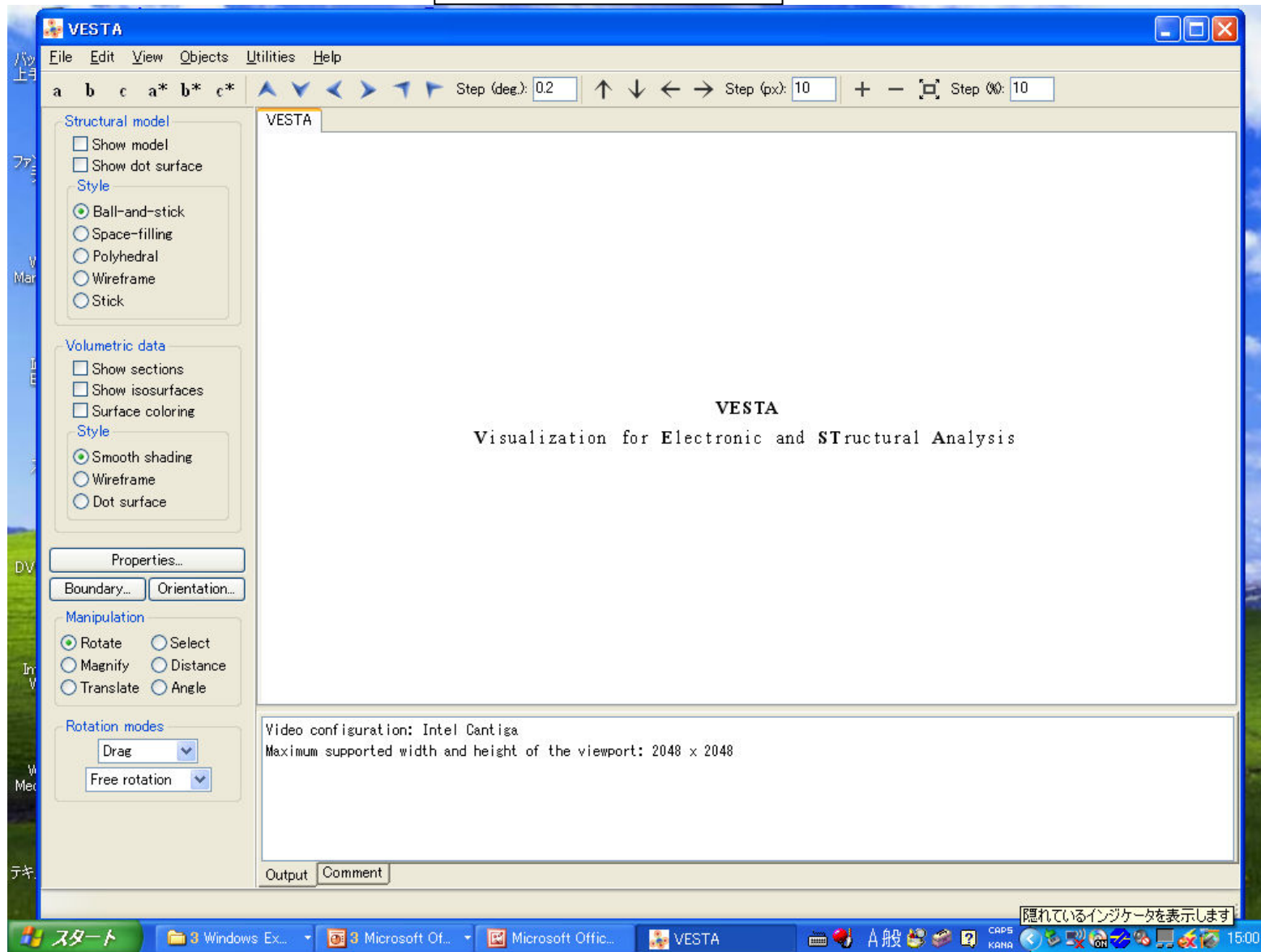


「VESTA」フォルダーをデスクトップにフォルダごとコピーする

「VESTA」をダブルクリックして起動

② VESTAを使ってみる

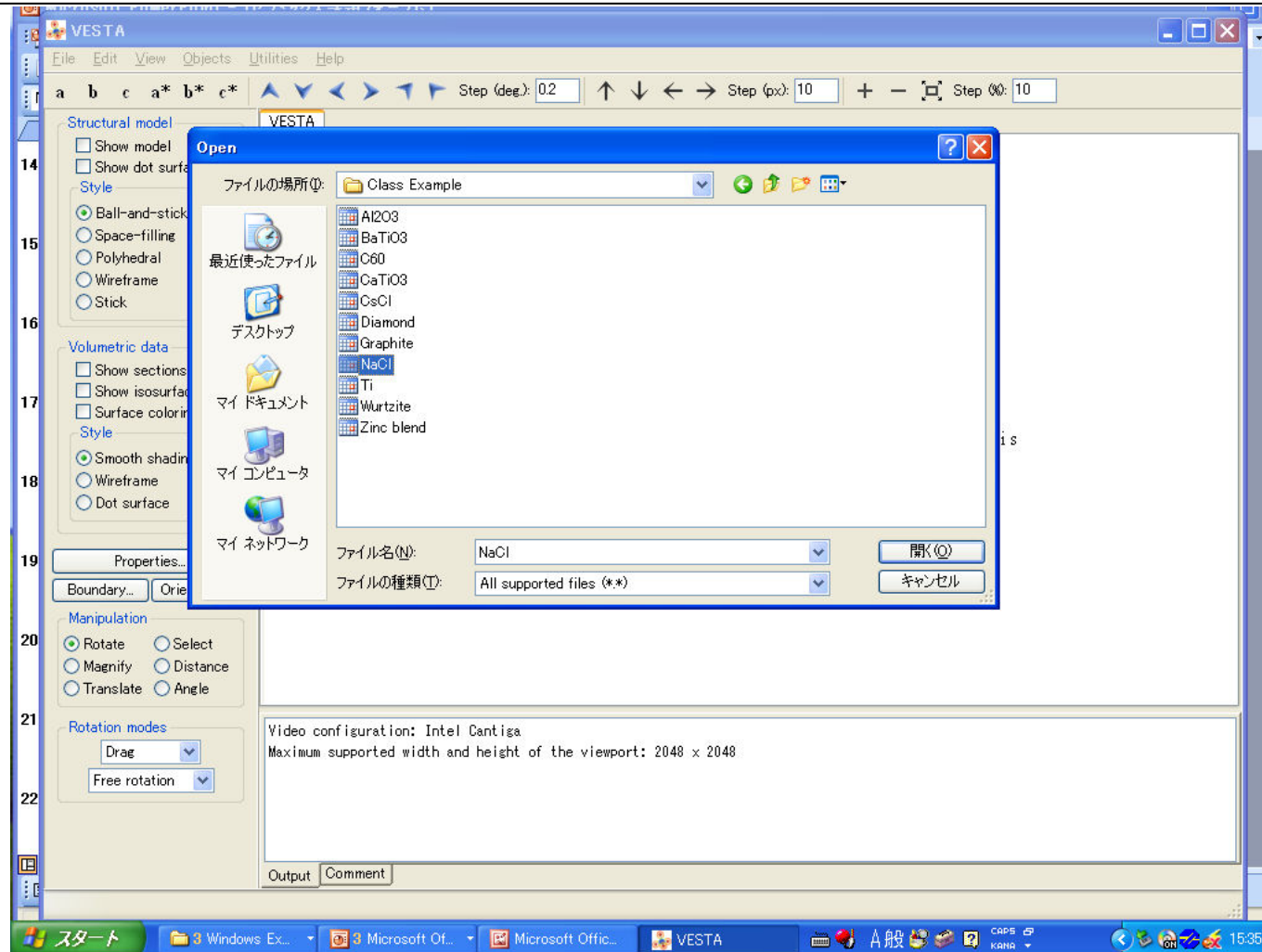
「VESTA」の起動



14

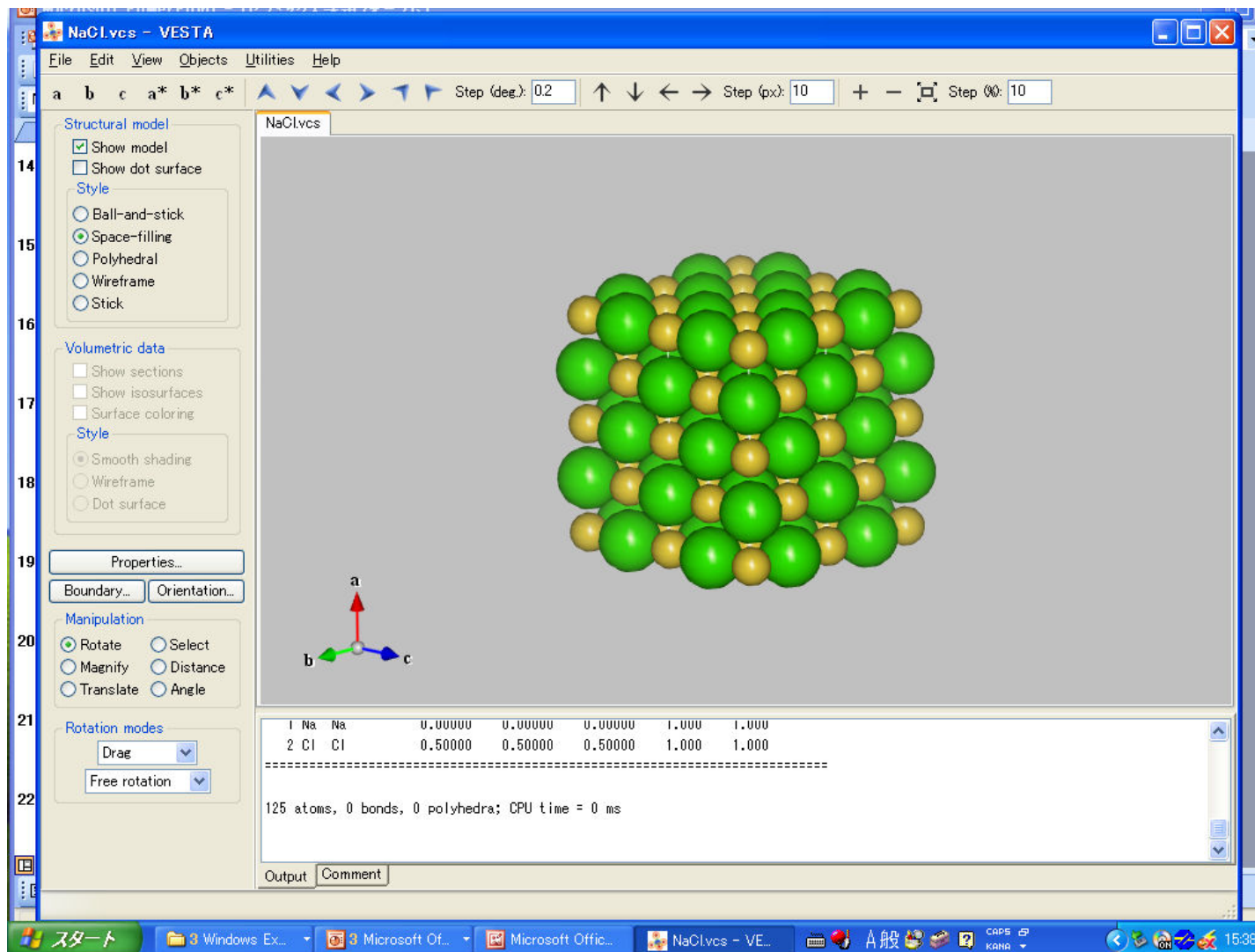
② VESTAを使ってみる

「File」の「Open」から「VESTA」フォルダの中の「Class Example」フォルダを開く
「NaCl」を選択して開く



② VESTAを使ってみる

「NaCl」の結晶構造が描かれる



16

② VESTAを使ってみる

「NaCl」の結晶構造が現れる

NaCl.vcs - VESTA

File Edit View Objects Utilities Help

a b c a* b* c* Step (deg.): 0.2 Step (px): 10 Step (%): 10

Structural model

- Show model
- Show dot surface

Style

- Ball-and-stick
- Space-filling
- Polyhedral
- Wireframe
- Stick

Volumetric data

- Show sections
- Show isosurfaces
- Surface coloring

Style

- Smooth shading
- Wireframe
- Dot surface

Properties...

Boundary... Orientation...

Manipulation

- Rotate
- Select
- Magnify
- Distance
- Translate
- Angle

Rotation modes

Drag

Free rotation

1 Na Na 0.00000 0.00000 0.00000 1.000 1.000
2 Cl Cl 0.50000 0.50000 0.50000 1.000 1.000

125 atd

Output Comment

スタート Windows Ex... Microsoft Of... Microsoft Offic... NaCl.vcs - VE... 15:38

カーソルを使って回転させることができる

17

② VESTAを使ってみる

「Edit」の「Structure」を開く
NaClのパラメーターを確認できる

空間群

格子定数

原子座標

Atom	Label	x	y	z	g	B
Na	Na	0.000000	0.000000	0.000000	1.00	1
Cl	Cl	0.500000	0.500000	0.500000	1.00	1

② VESTAを使ってみる

「Edit」の「Bonds」を開く
「NaCl」を選択して開く

The screenshot shows the VESTA interface with the 'Bonds - (NaCl.vcs)' dialog box open. The dialog box has the following settings:

- Search mode: Search A2 bonded to A1
- Search by label:
- Show polyhedra:
- Search atoms bonded to A1:
- Search beyond the boundary:
- Search molecules:
- Search hydrogen bonds:
- A1: Na
- A2: Cl
- Min. length: 0
- Max. length: 3.7

The table below shows the current bond data:

Atom 1	Atom 2	Min. length	Max. length	Polyhedra	Boundary
Na	Cl	0.000	1.600	Yes	Yes

A text box overlaid on the dialog box contains the instruction: **A1をNa、A2をClとしてMax. Lengthに2.8を入力後、Add、OK**

The dialog box also has 'Add' and 'Modify' buttons, and 'OK', 'Cancel', and 'Apply' buttons at the bottom.

② VESTAを使ってみる

このボタンで表示が変わる

結晶構造の図に大きな変化はない

NaCl.vcs - VESTA

File Edit View Objects

a b c a* b* c*

Step (deg): 0.2 Step (px): 10 Step (Å): 10

Structural model

- Show model
- Show dot surface

Style

- Ball-and-stick
- Space-filling
- Polyhedral
- Wireframe
- Stick

Volumetric data

- Show sections
- Show isosurfaces
- Surface coloring

Style

- Smooth shading
- Wireframe
- Dot surface

Properties...

Boundary... Orientation...

Manipulation

- Rotate Select
- Magnify Distance
- Translate Angle

Rotation modes

Drag

Free rotation

125 atoms, 0 bonds, 0 polyhedra; CPU time = 0 ms

203 atoms, 378 bonds, 63 polyhedra; CPU time = 16 ms

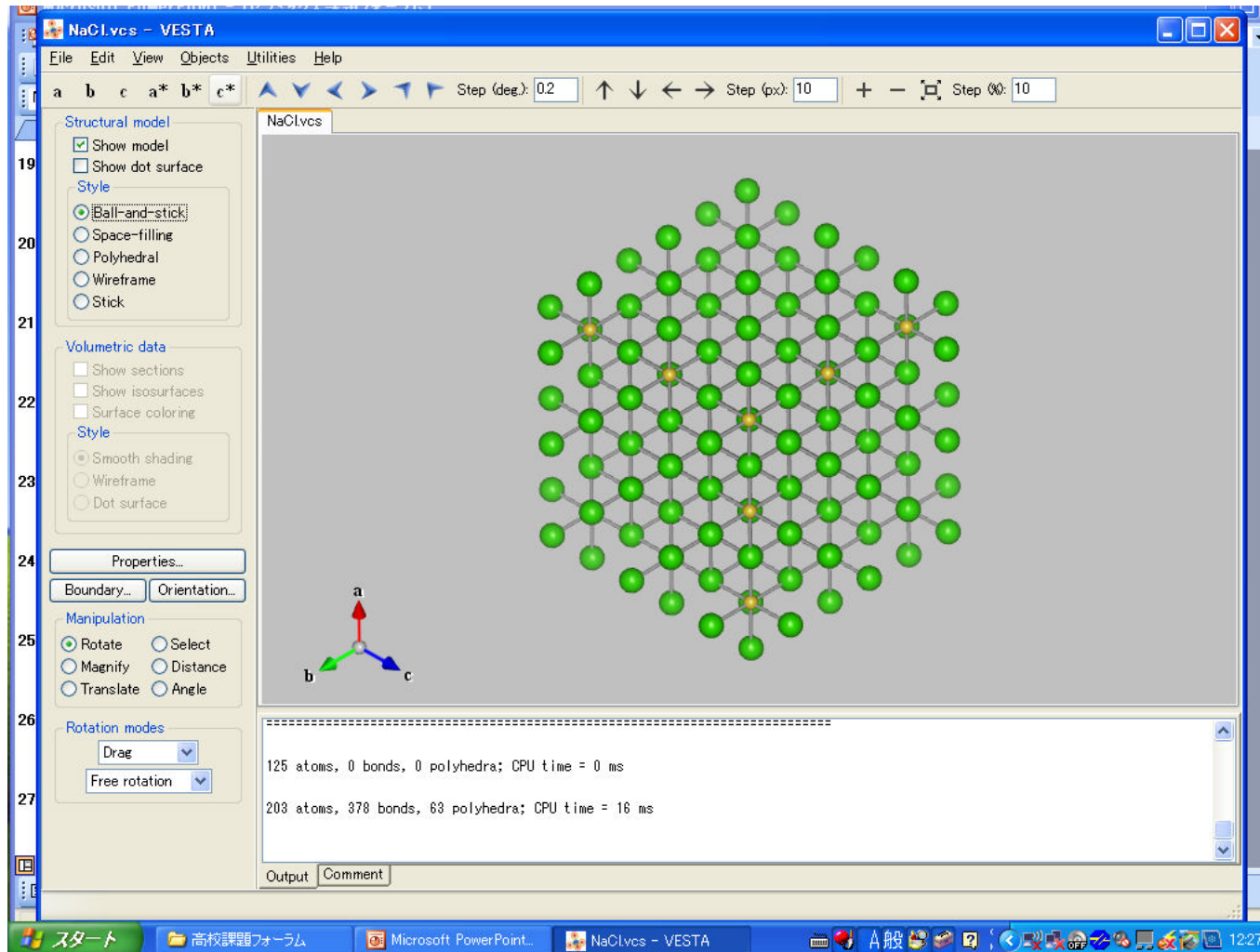
Output Comment

スタート 高校課題フォーラム Microsoft PowerPoint... NaCl.vcs - VESTA 12:23

20

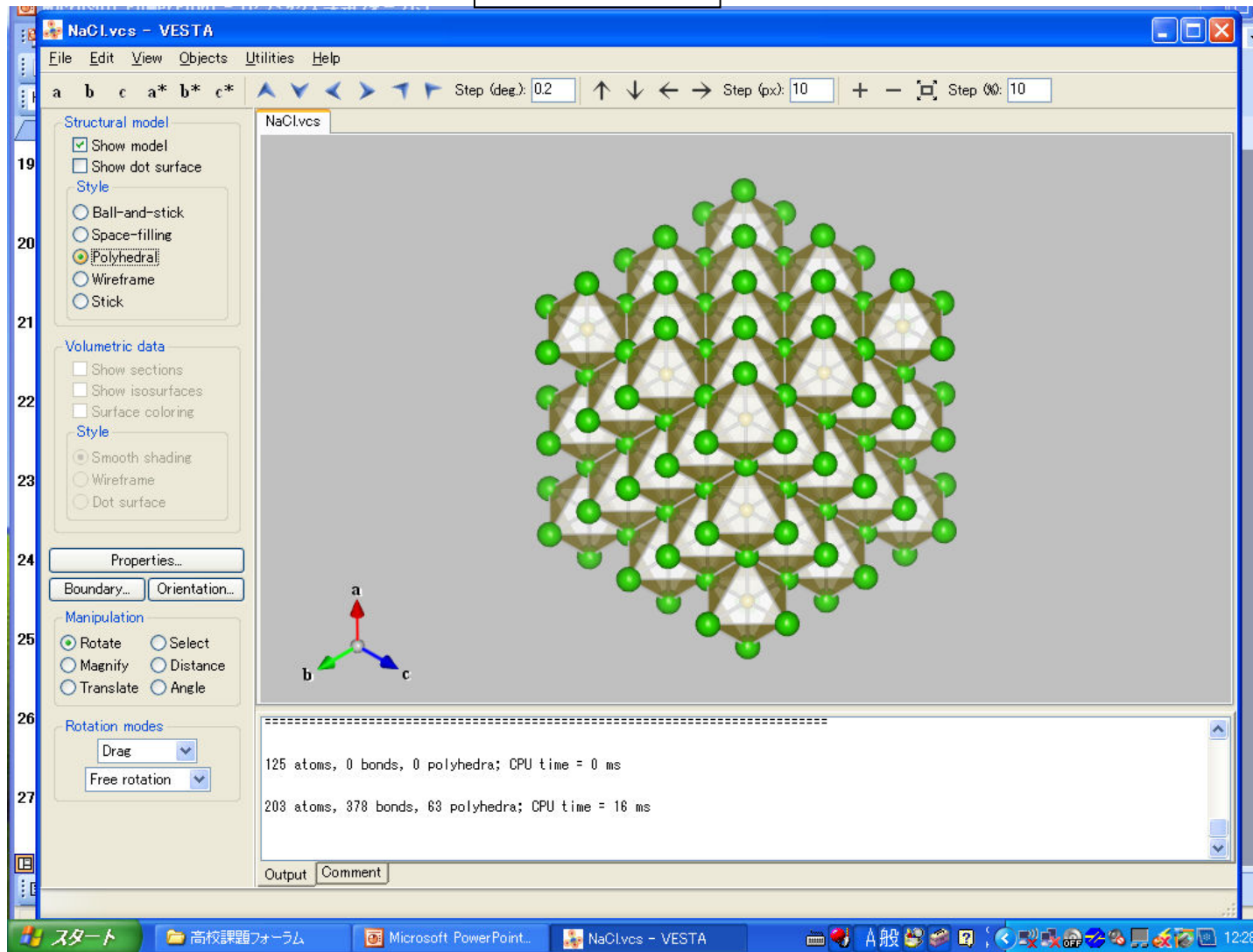
② VESTAを使ってみる

Ball and Stick 表示



② VESTAを使ってみる

多面体表示



22

② VESTAを使ってみる

Ball and stick表示に戻す。
「Edid」の「Lattice planes」を開く。
hklに111を入力して、Addを押してOK。

The screenshot shows the VESTA software interface with the 'Lattice Planes - (NaCl.vcs)' dialog box open. The dialog box has the following settings:

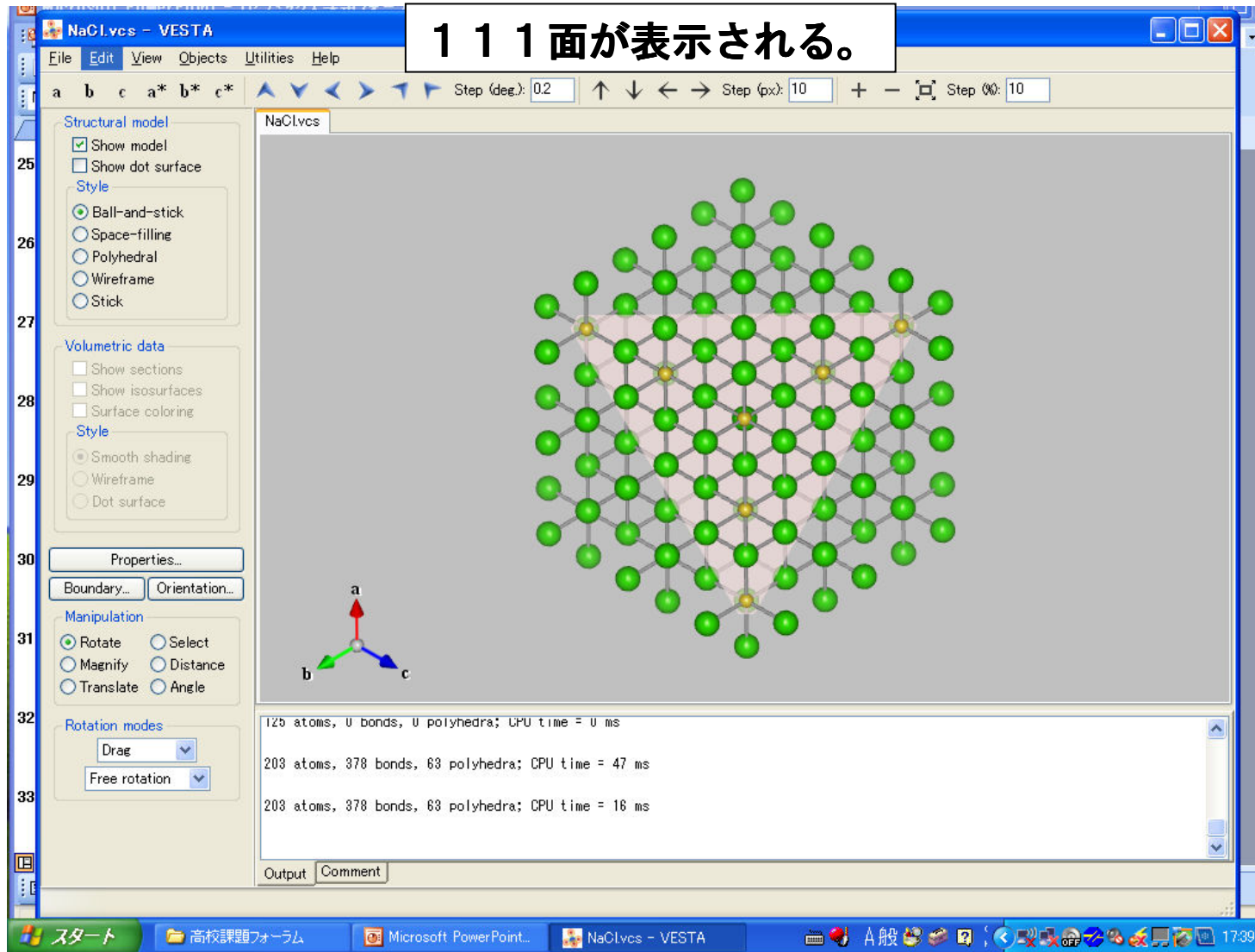
- Material: Specular (%): 100, Shininess (%): 100, Opacity (%): 60
- Edges: Show edges, Line width: 1.0
- Add lattice planes: Miller indices: h 1, k 1, l 1; Distance from origin: 1; Unit: Interplanar spacing
- Color: 255, 0, 0 (Red)
- Buttons: Add, Modify, Delete, Clear all, OK, Cancel
- Preview

The 3D model in the background shows a NaCl crystal structure with green spheres representing Cl atoms and orange spheres representing Na atoms. The 'Lattice Planes' dialog box is overlaid on the model.

At the bottom of the VESTA window, the output log shows:

```
126 atoms, 0 bonds, 0 polyhedra; CPU time = 0 ms
203 atoms, 378 bonds, 63 polyhedra; CPU time = 47 ms
203 atoms, 378 bonds, 63 polyhedra; CPU time = 16 ms
```

② VESTAを使ってみる



② VESTAを使ってみる

その他にも色々な機能がある。

- ・ 原子間距離を求める。
- ・ 他のファイルへのコピー。

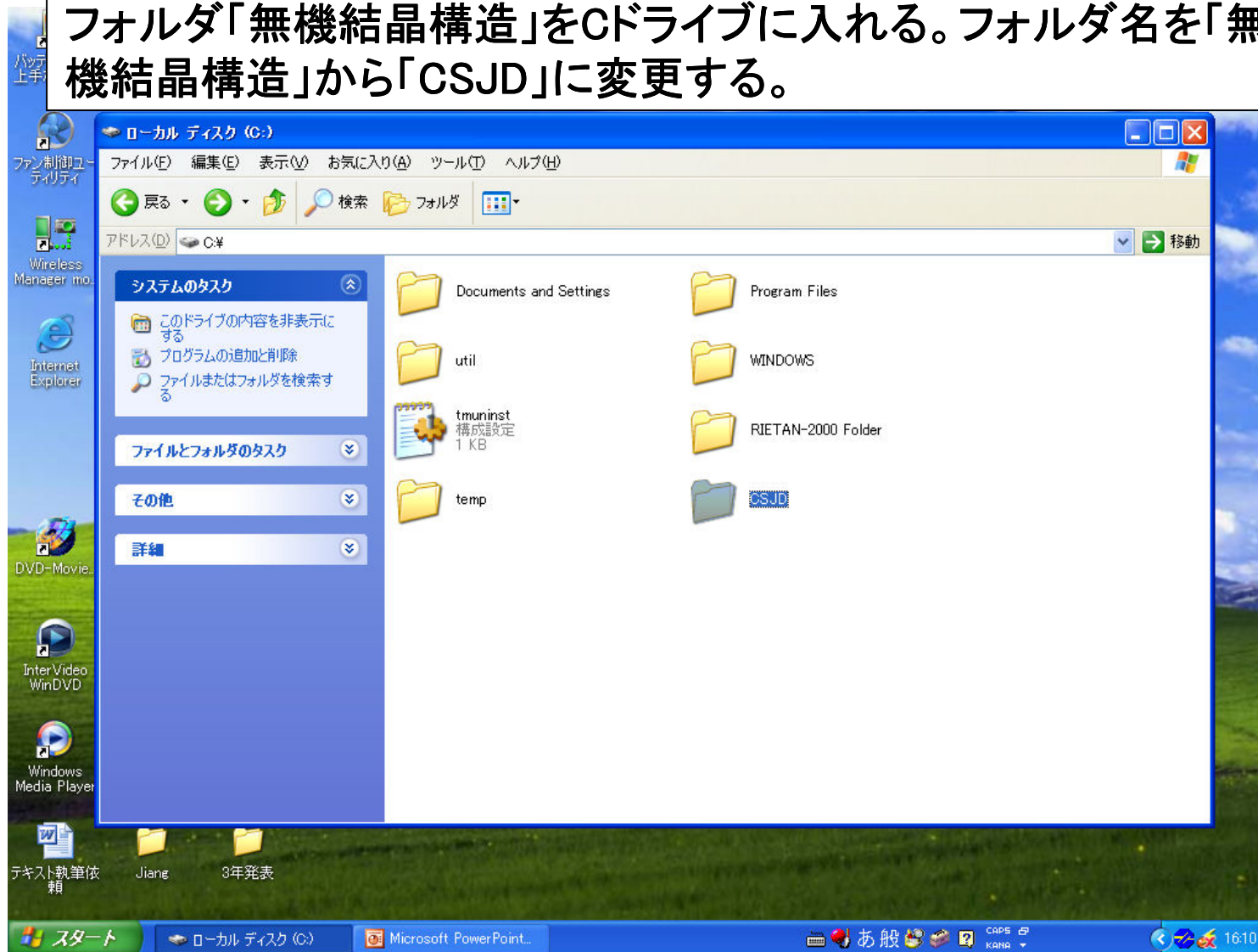
125 atoms, 0 bonds, 0 polyhedra; CPU time = 0 ms
203 atoms, 378 bonds, 63 polyhedra; CPU time = 47 ms
203 atoms, 378 bonds, 63 polyhedra; CPU time = 16 ms

③ ICSDの紹介

The screenshot displays the ICSD search interface within a Windows XP desktop environment. The desktop background is the classic Windows XP 'Bliss' wallpaper. The taskbar at the bottom shows the Start button, a Microsoft PowerPoint window, and the FindIt application window. The FindIt window is active and shows the ICSD search interface. A large white box with black text is overlaid on the top right of the FindIt window, containing the text '無機結晶構造データベース(ICSD)'. The ICSD search interface includes a menu bar with 'Chemistry', 'Crystal Data', 'Reduced Cell', 'Symmetry', and 'Reference'. Below the menu bar is a periodic table where several elements are highlighted in cyan: H, D, T, Li, Be, Na, Mg, K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, Cs, Ba, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn, Fr, Ra, Rf, Ha, La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, and Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr. To the right of the periodic table are search options, including radio buttons for 'And', 'And Not', 'Or', and 'Or Not', and input fields for 'Element Count', 'Element Subscript', and 'Oxidation State'. At the bottom of the search interface are buttons for 'Reset', 'Clear Page', and 'Search'. The status bar at the bottom of the FindIt window shows 'Search Screens', 'Visual', '2010/02/26', and '14:13'.

④ QUESKの使い方

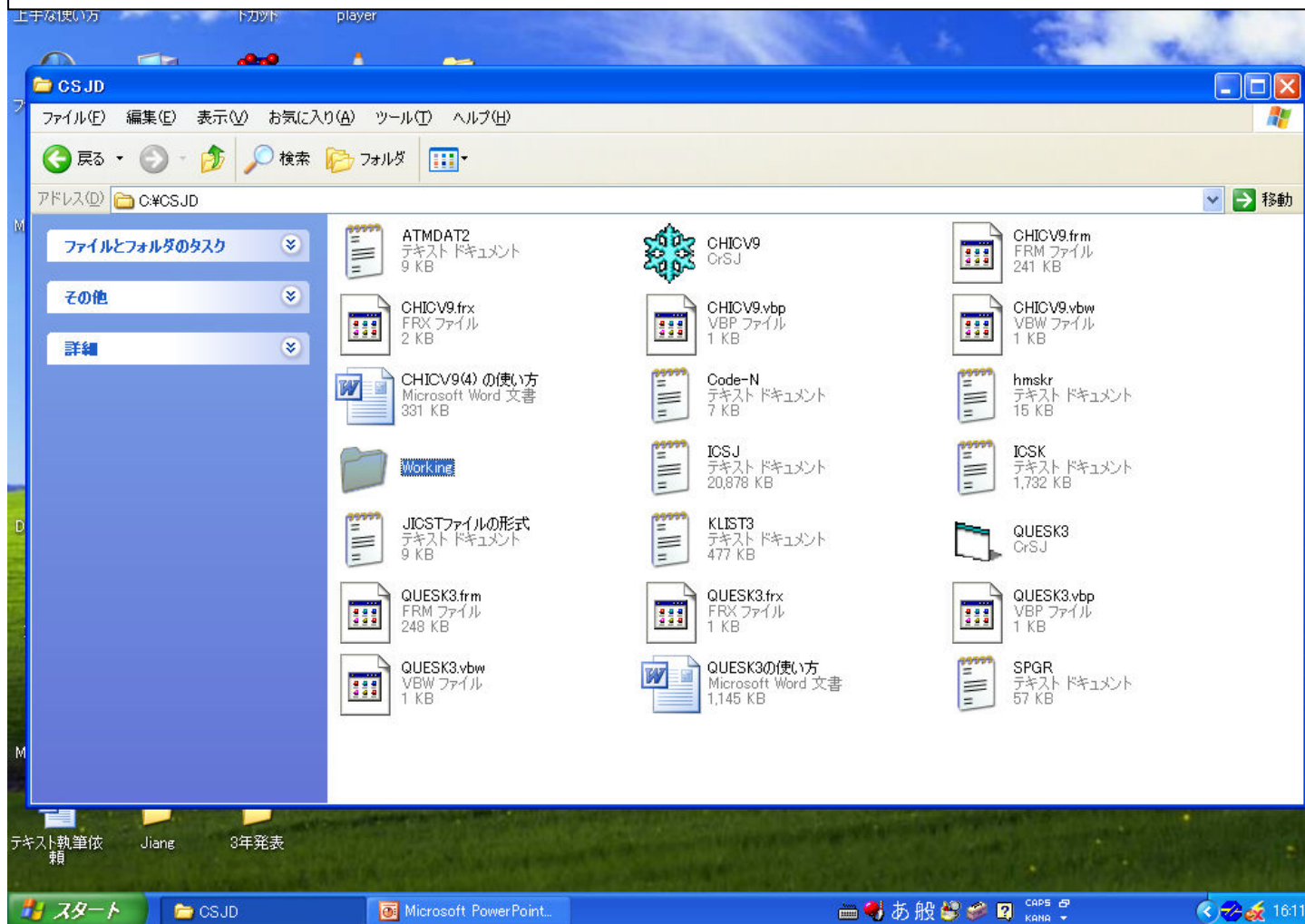
日本結晶学会のホームページからダウンロードして解凍したフォルダ「無機結晶構造」をCドライブに入れる。フォルダ名を「無機結晶構造」から「CSJD」に変更する。



27

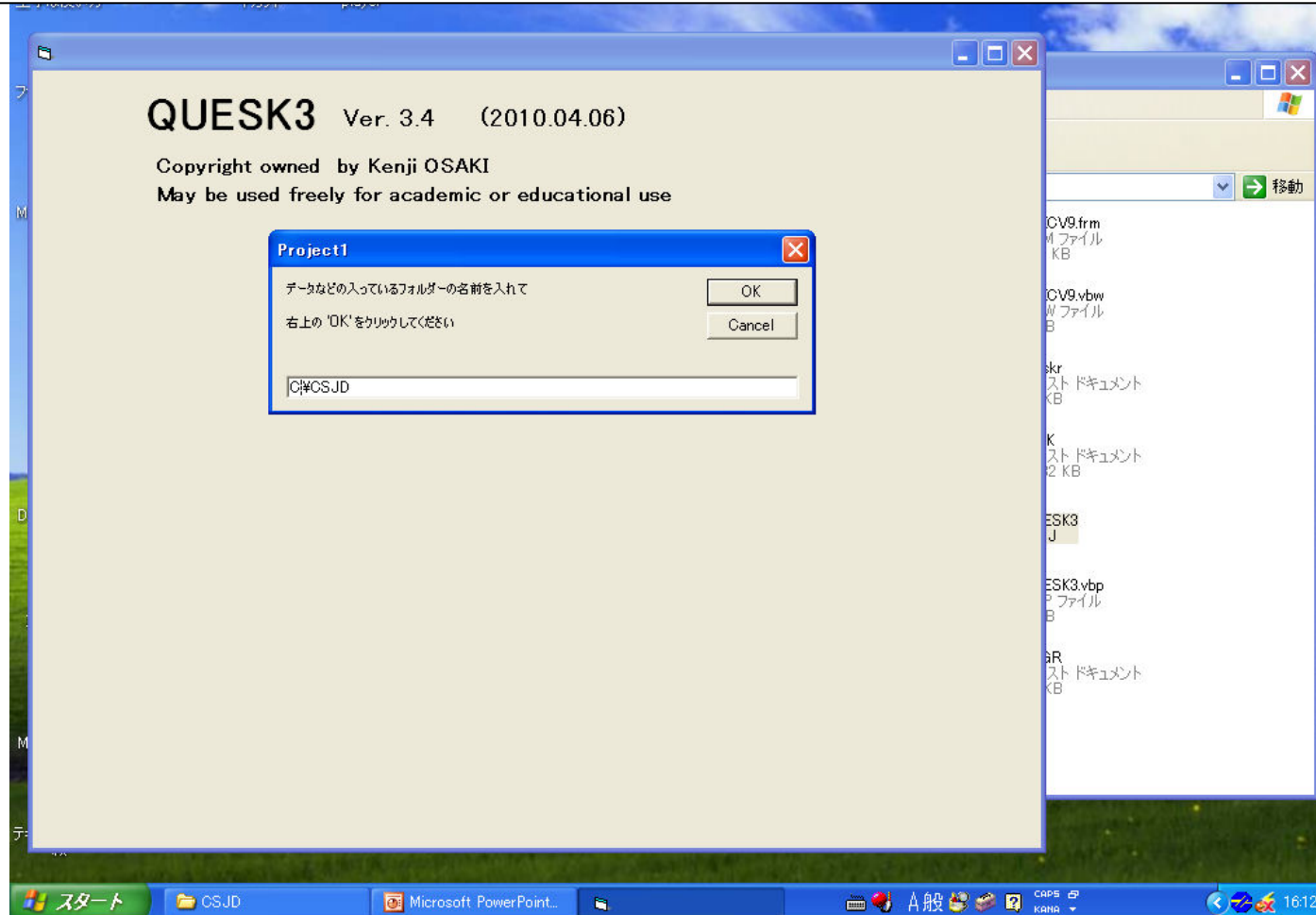
④ QUESKの使い方

フォルダ「CSJD」フォルダの中に新規フォルダ「Working」を作る。



④ QUESKの使い方

フォルダ「CSJD」フォルダの中のQUESK3をダブルクリックして起動する。
C:¥CSJDと入力してOKボタンを押す。



④ QUESKの使い方

フォルダ「CSJD」フォルダの中にKLIST3をダブルクリックして起動する。その中で化合物を探し、そのコードを選択してマウスの右クリックでコピーする。その後、QUESK3の入力画面で2を入力してOKボタンを押す。

Output Format dialog box options:

- 1なら 標準形式、2なら CIF形式、3なら JICST形式

KLIST3 - メモ帳 table:

ファイル(E)	編集(E)	書式(O)	表示(V)	ヘルプ(H)							
C	Al2CdS4	I-4	CR912062	Z Krist	1990	190	103	OK			
1	159	Al2CdSe4	I-4	Z anorg Chem	1955	279	241				
A	1	199	Al2Cu	I4/mcm	KE050698	J Solid St Ch	1989	83	370	OK	
			Al2HgS4	I-42m	CR912063	Z Krist	1990	190	103	OK	
1	203	Al2La	Fd-3m	KE070014	Inorg Chem	1991	30	4789	OK		
			Al2MgO4	Fd-3m N	CR862710	Kobutsu Zasshi	1983	26	77	OK	
2	47	Al2O(GeO4)								new	
C	1	111	Al2O3 alpha	R-3c	CR912560	Acta Cryst B	1980	36	228	OK	
			Al2O3 beta	P63/mmc	NY050048	Acta Cryst B	1977	33	1596	OK	
1	112	Al2O3 gamma	spinel	Fd-3m	KE070169	Neu Jahrb Min	1990		217	OK	
1	111	Al2O3 theta		C2/m		Acta Cryst B	1991	47	425		
			Al2O3(H2O)0.27	P63/mmc	CR861609	Acta Cryst B	1977	33	1596	OK	
			Al2O3.Ca0.6	P63/mmc	CR861610	Neu Jahrb Min	1968	109	192	OK	
			Al2O3.Sr0.6	P63/mmc	CR890816	Acta Cryst B	1975	31	2940	OK	
A	1	198	Al2Pt	CaF2	Fm-3m	KE070015	J Less-Com Met	1982	87	305	OK
A	1	152	Al2S2	P61	KE050494	Z Krist	1992	198	207	OK	

30

④ QUESKの使い方

KLIST3で選択した化合物の格子定数、空間群および原子座標がCIF(Crystal Information File)形式で表示される。

The screenshot displays the QUESK3 Ver. 3.4 (2010.04.06) application window. The main window is titled 'List2' and shows search results for a compound. The search criteria are: journal_coden: ACBCAR, and description: A structural investigation of alpha al2o3 at 2170k. The search results are displayed in a table format:

_journal_coden	ACBCAR
A structural investigation of alpha al2o3 at 2170k	
_chemical_name_common	ALUMINA,CORUNDUM-S,HEMATITE
_chemical_formula_moiety	'Al2 O3'
_cell_length_a	4.754(1)
_cell_length_b	4.754(1)
_cell_length_c	12.99(2)
_cell_angle_alpha	90.
_cell_angle_beta	90.
_cell_angle_gamma	120.
_cell_formula_units_Z	6
_symmetry_Int_Tables_number	167
_symmetry_space_group_name_H-M	R-3c
_symmetry_equiv_pos_as_xyz	x,y,z
_symmetry_equiv_pos_as_xyz	-y,x-y,z
_symmetry_equiv_pos_as_xyz	y-x,-x,z
_symmetry_equiv_pos_as_xyz	-x,-y,-z
_symmetry_equiv_pos_as_xyz	y,y-x,-z

検索は終わりました。出力件数: NFOut = 1

同じ方法で検索を再開するには、目的の化合物の登録番号を KLIST から選び、'START' ボタンを押してください。中止または検索方式の変更には 'EXIT' を押してください。

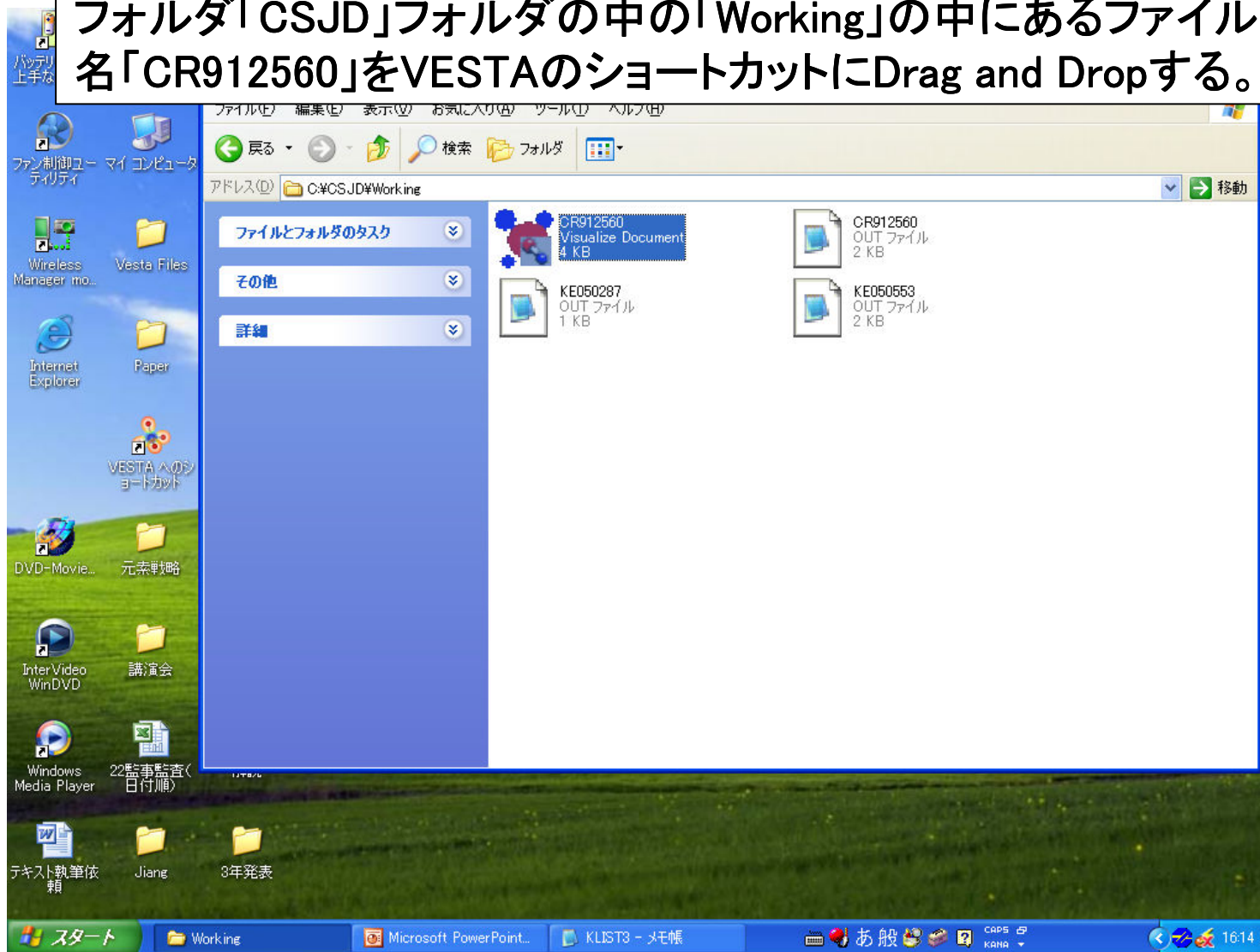
The right side of the window shows a file explorer window with the following files:

- CHICV9
- CRSJ
- CHICV9.vbp
- VBP ファイル
- 1 KB
- Code-N
- テキストドキュメント
- 7 KB
- IOSK
- テキストドキュメント
- 1,732 KB

The bottom of the window shows the Windows taskbar with the Start button and several open applications: 無機結晶, Microsoft..., KLIST3, ドキュメント, and CAPS KANA. The system clock shows 16:01.

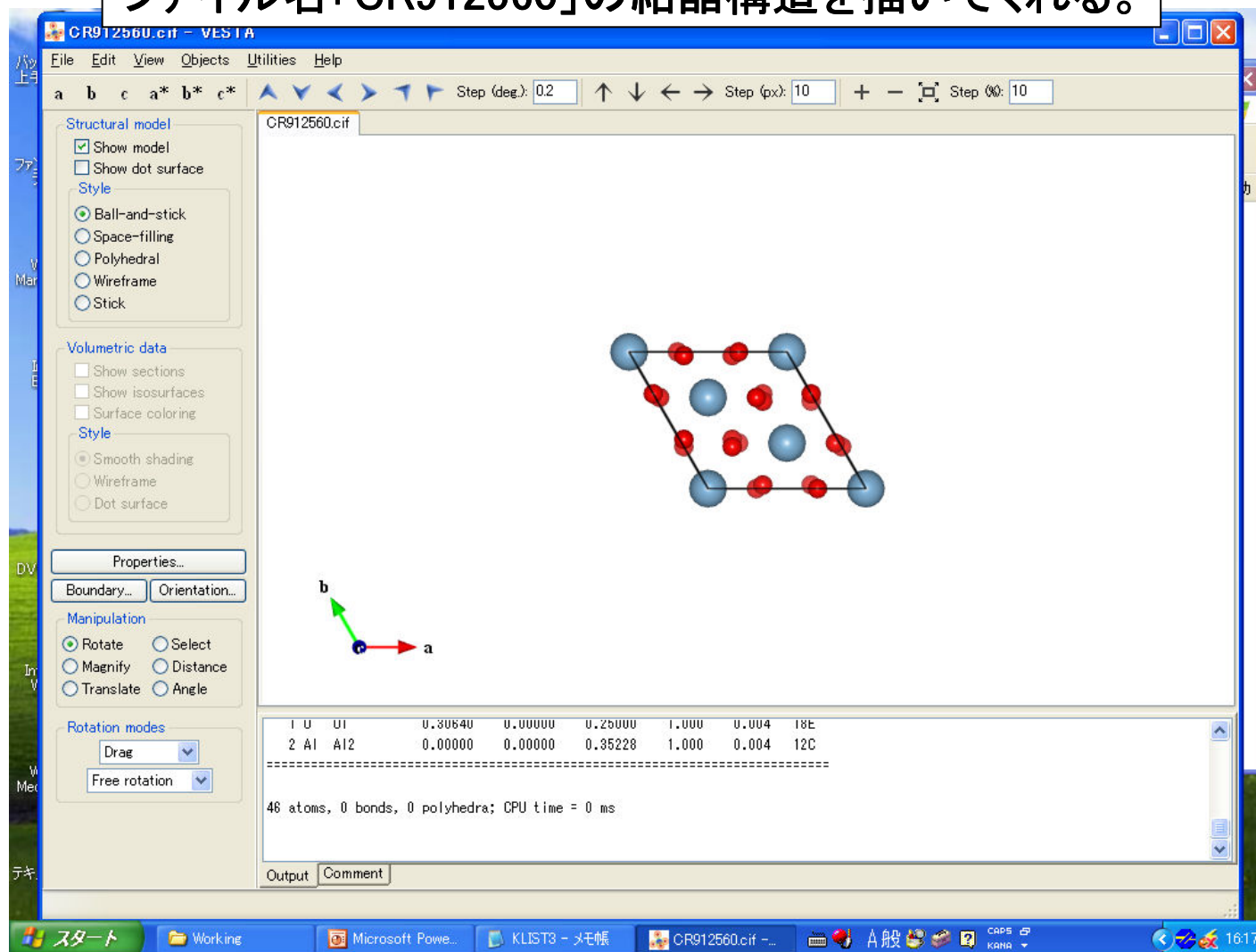
④ QUESKの使い方

フォルダ「CSJD」フォルダの中の「Working」の中にあるファイル名「CR912560」をVESTAのショートカットにDrag and Dropする。



④ QUESKの使い方

ファイル名「CR912560」の結晶構造を描いてくれる。



33