

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

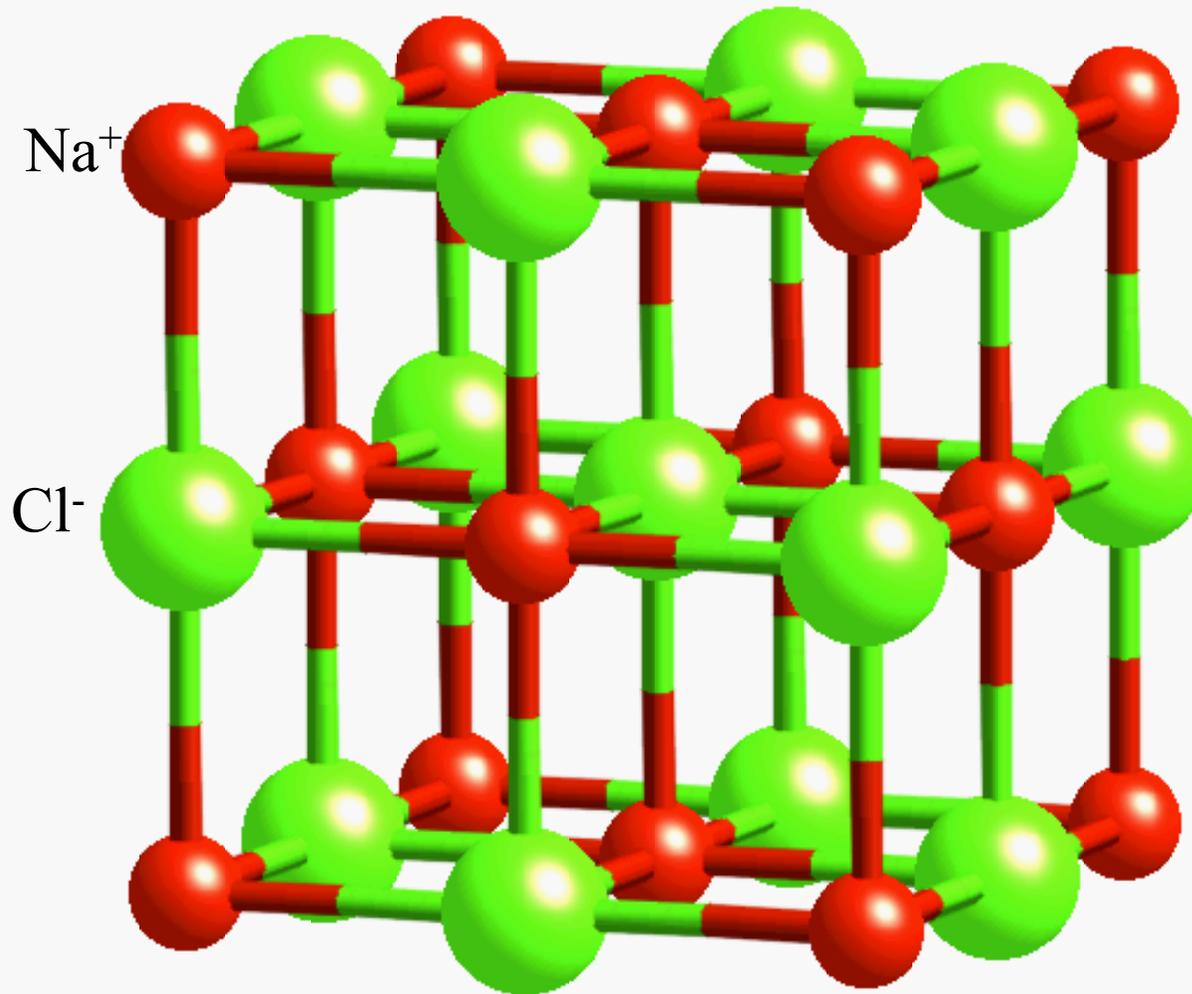
1

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？

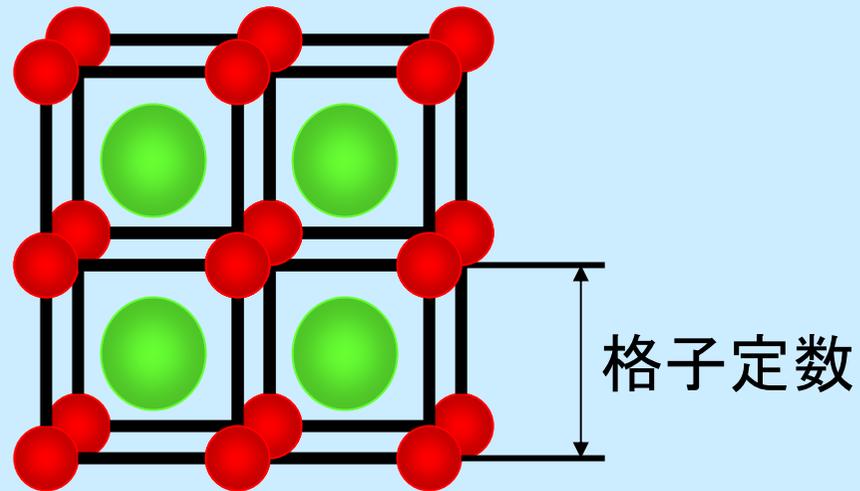
NaClの結晶構造



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

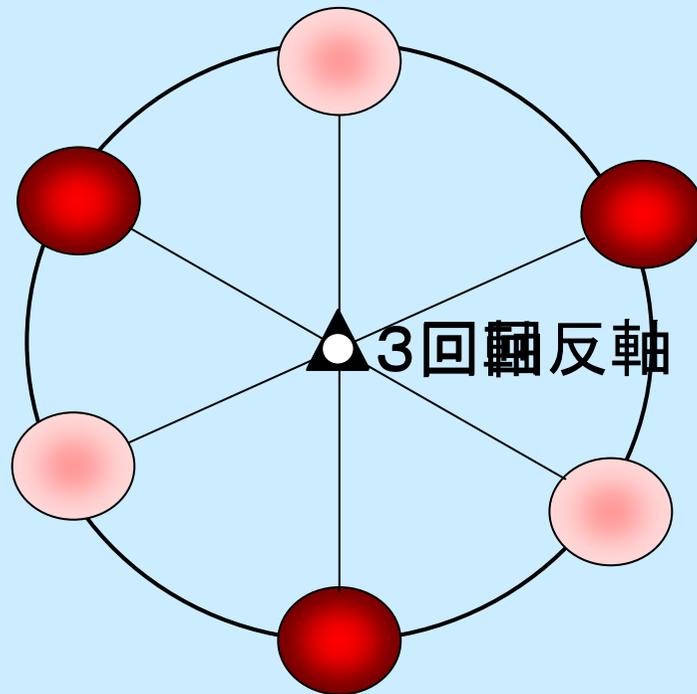


① 結晶構造とは？

結晶構造を描くために必要なパラメーター

1 格子定数

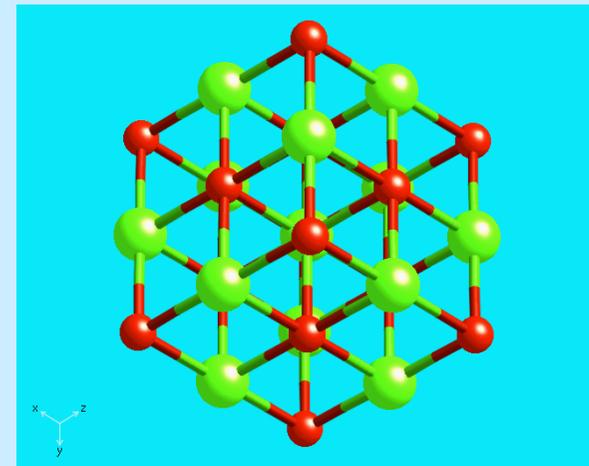
2 空間群



対称要素



230の空間群



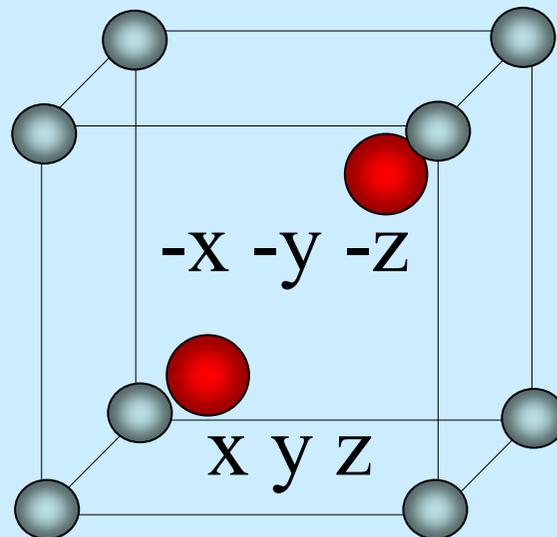
NaCl $Fm\bar{3}m$ (225)**5**

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

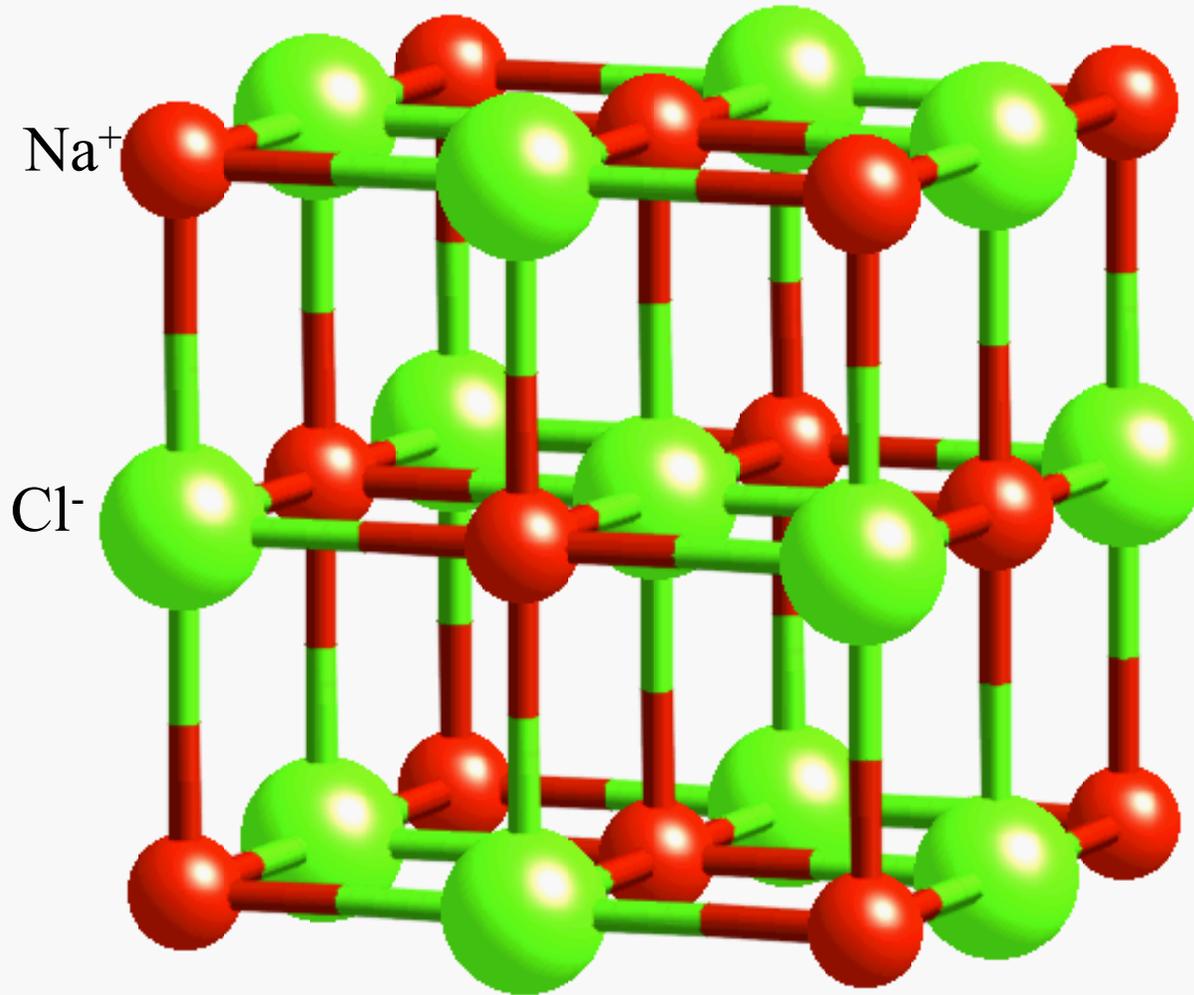
- 1 格子定数
- 2 空間群

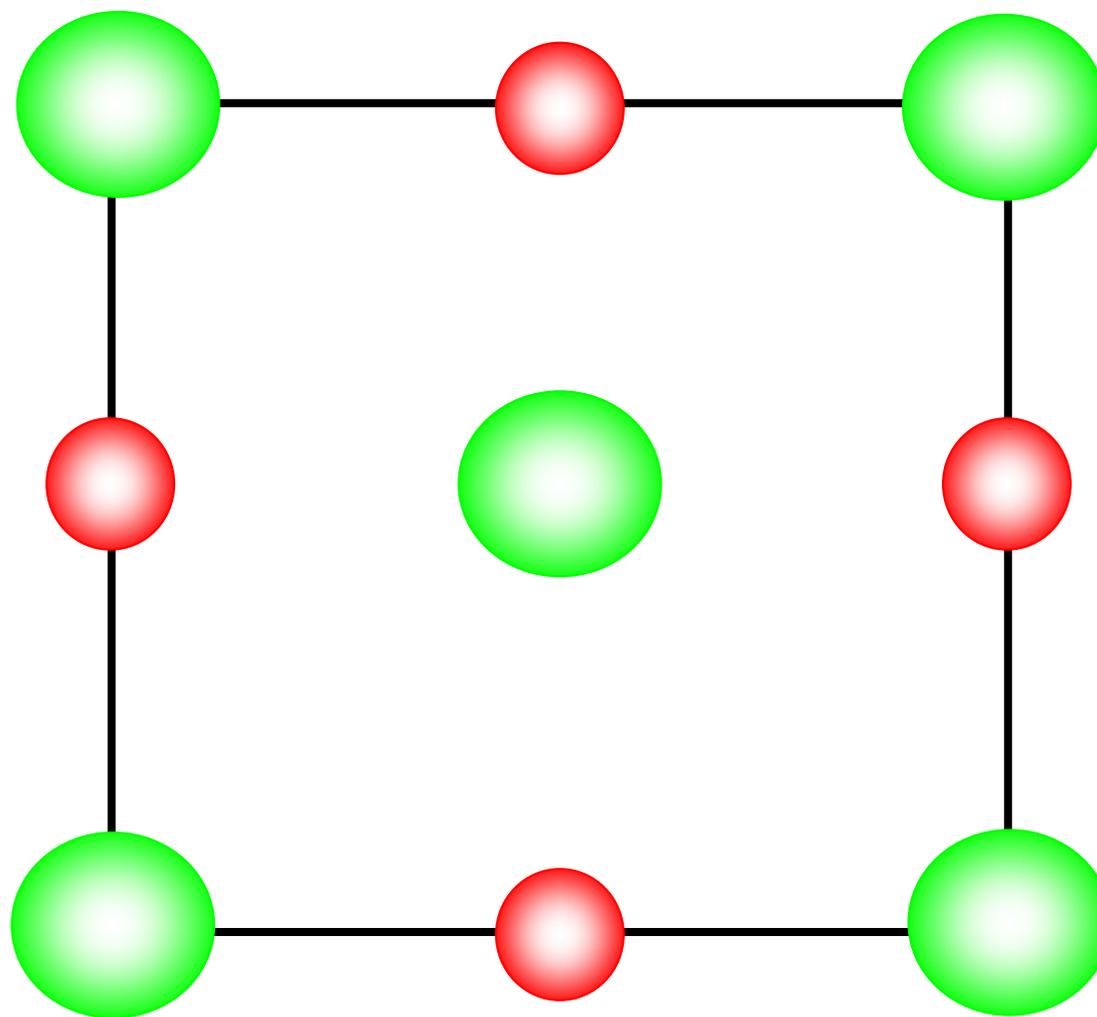
3 原子座標



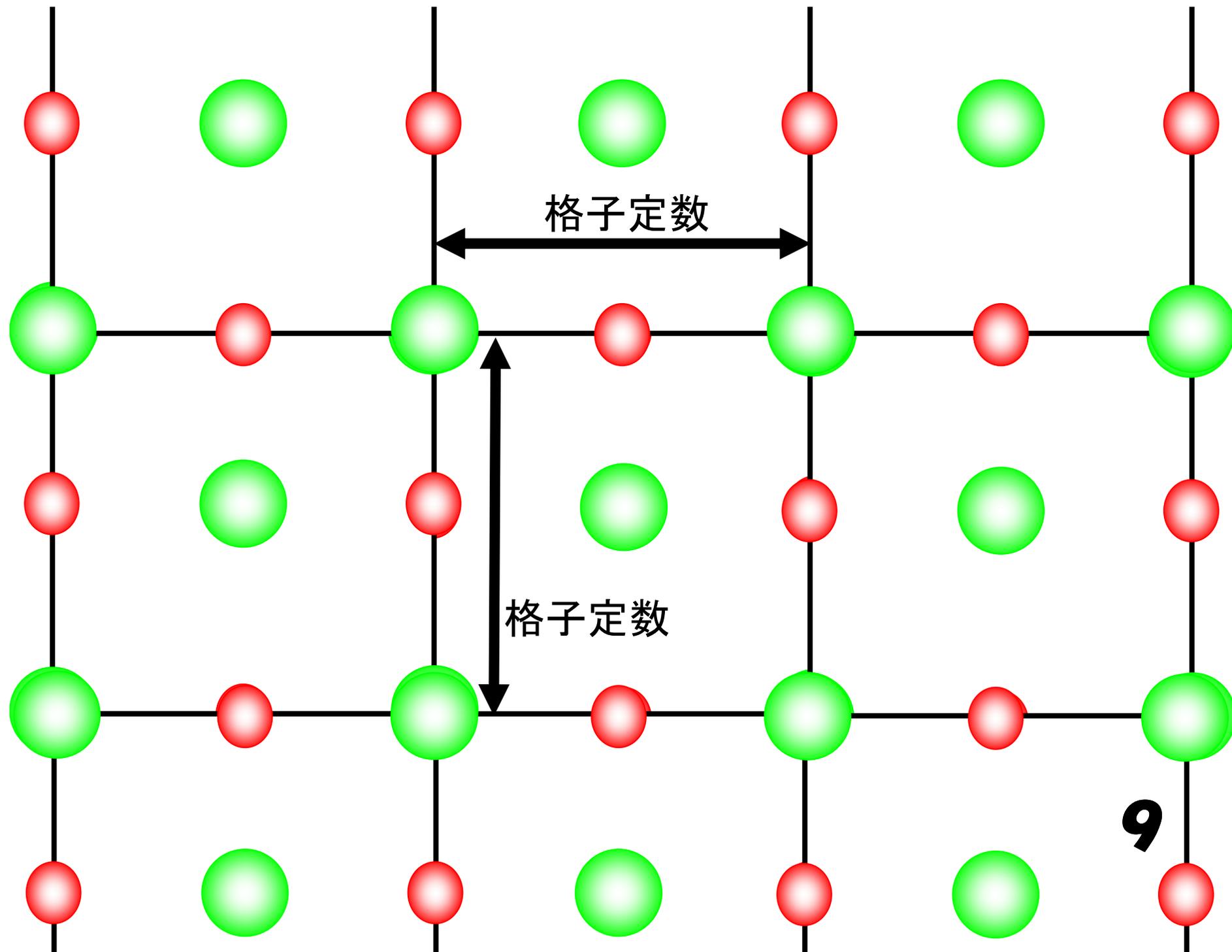
① 結晶構造とは？

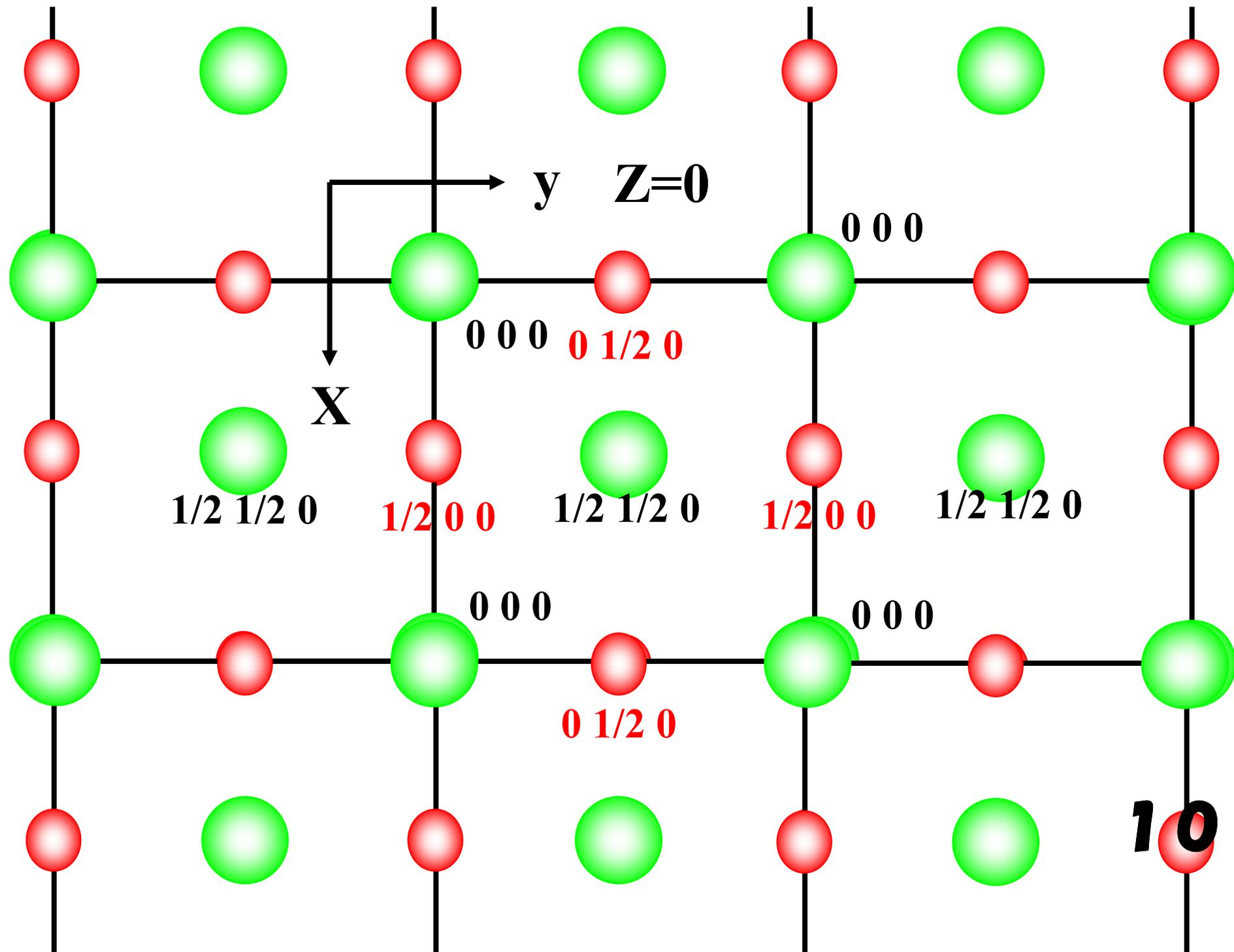
NaClの結晶構造





8

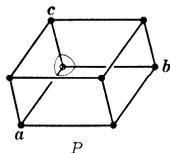




① 結晶構造とは？

1 繰り返しの単位 格子定数

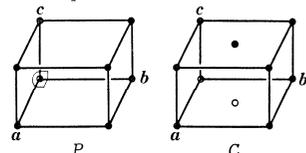
三斜晶系



底心格子(C)

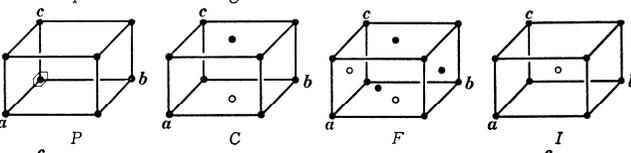
$$a \neq b \neq c \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

単斜晶系



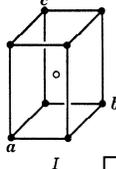
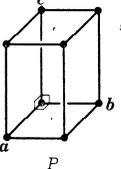
$$a \neq b \neq c \quad \alpha = \gamma = 90^\circ \quad \beta \neq 90^\circ$$

斜方晶系



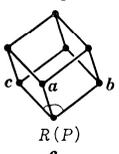
$$a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

正方晶系



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

三方晶系

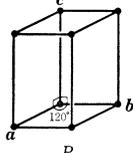


ブラベ格子

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

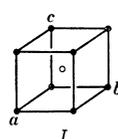
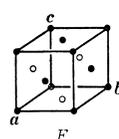
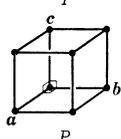
$$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ \quad (R)$$

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)

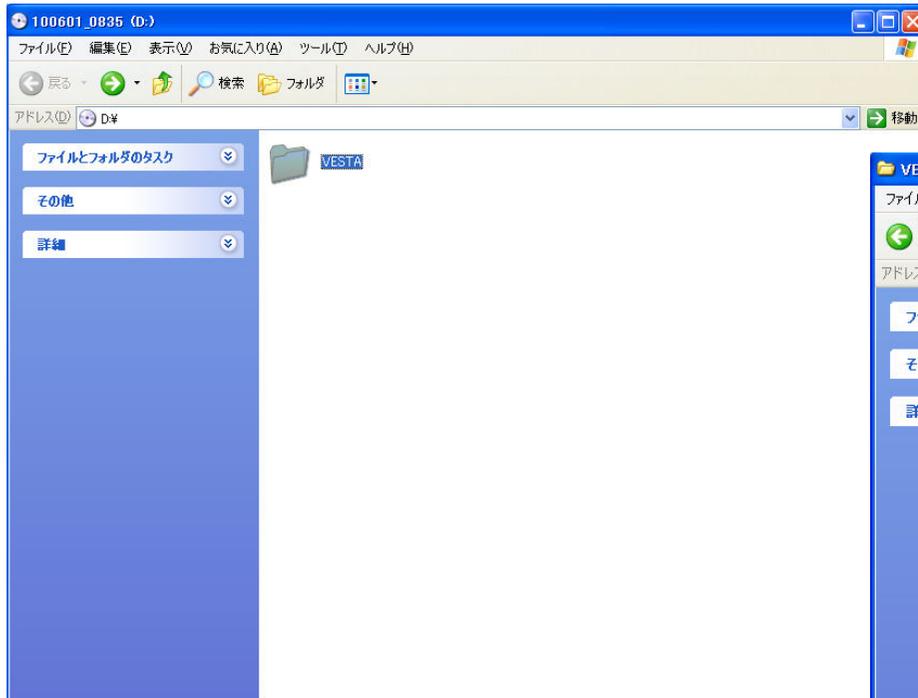
① 結晶構造とは？

結晶構造を描くために必要なパラメーター

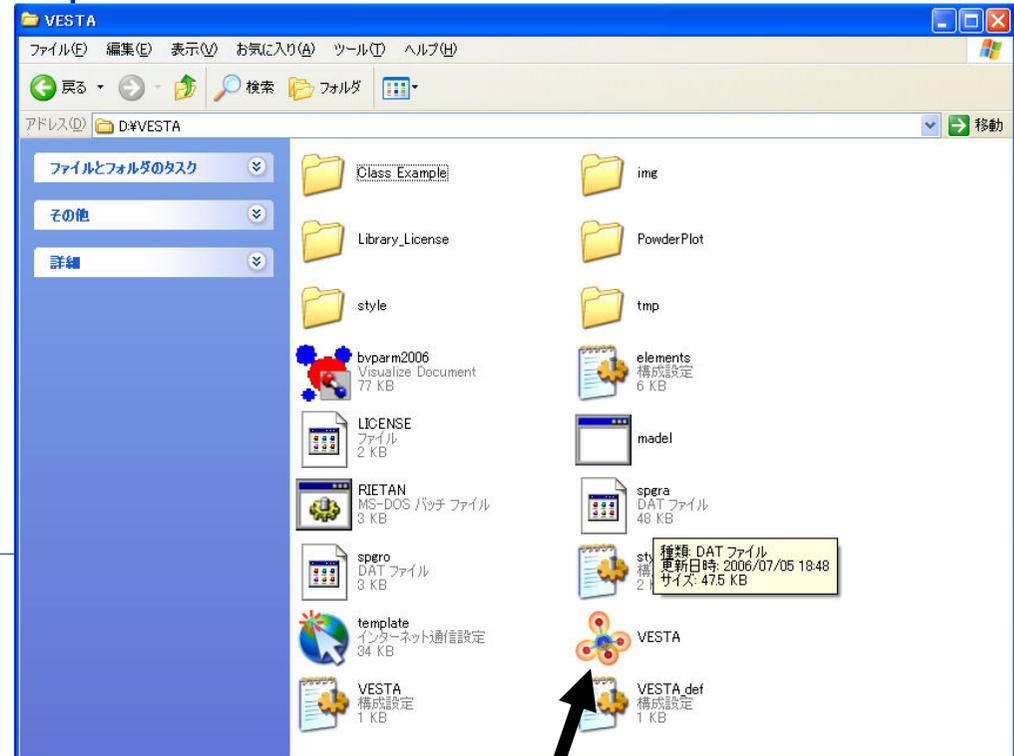
- 1 格子定数
- 2 空間群
- 3 原子座標

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

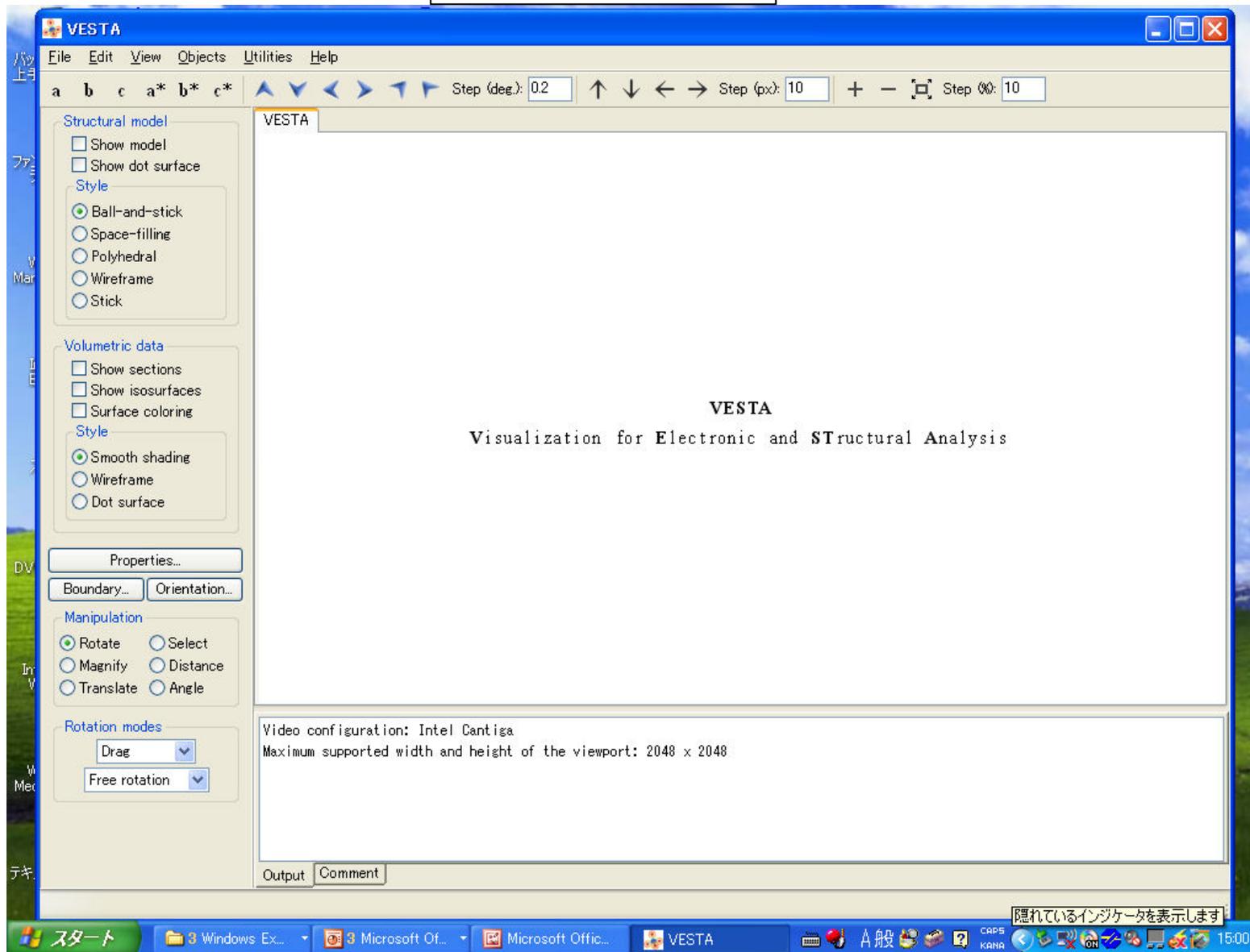


「VESTA」フォルダーをデスクトップにフォルダごとコピーする

「VESTA」をダブルクリックして起動

② VESTAを使ってみる

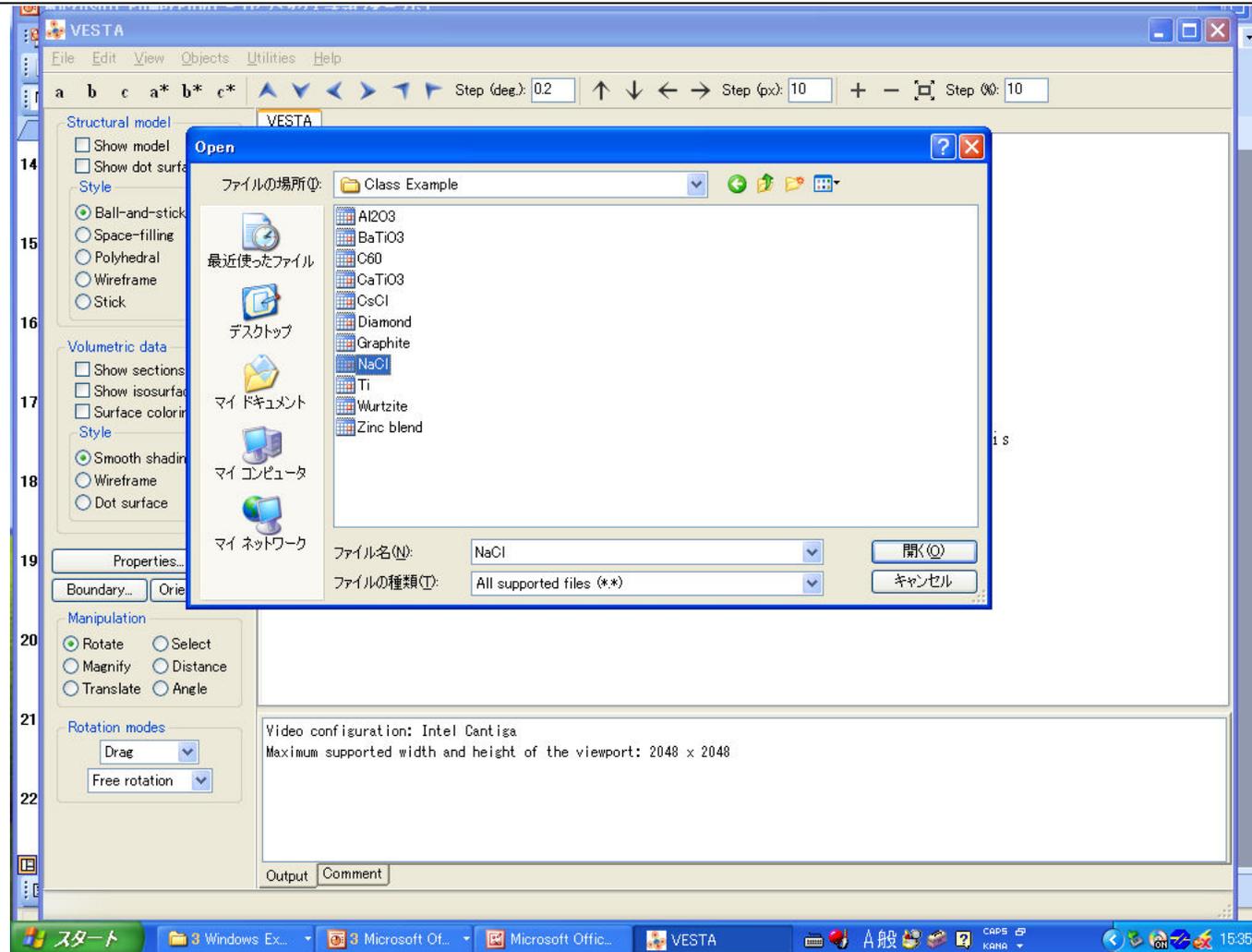
「VESTA」の起動



14

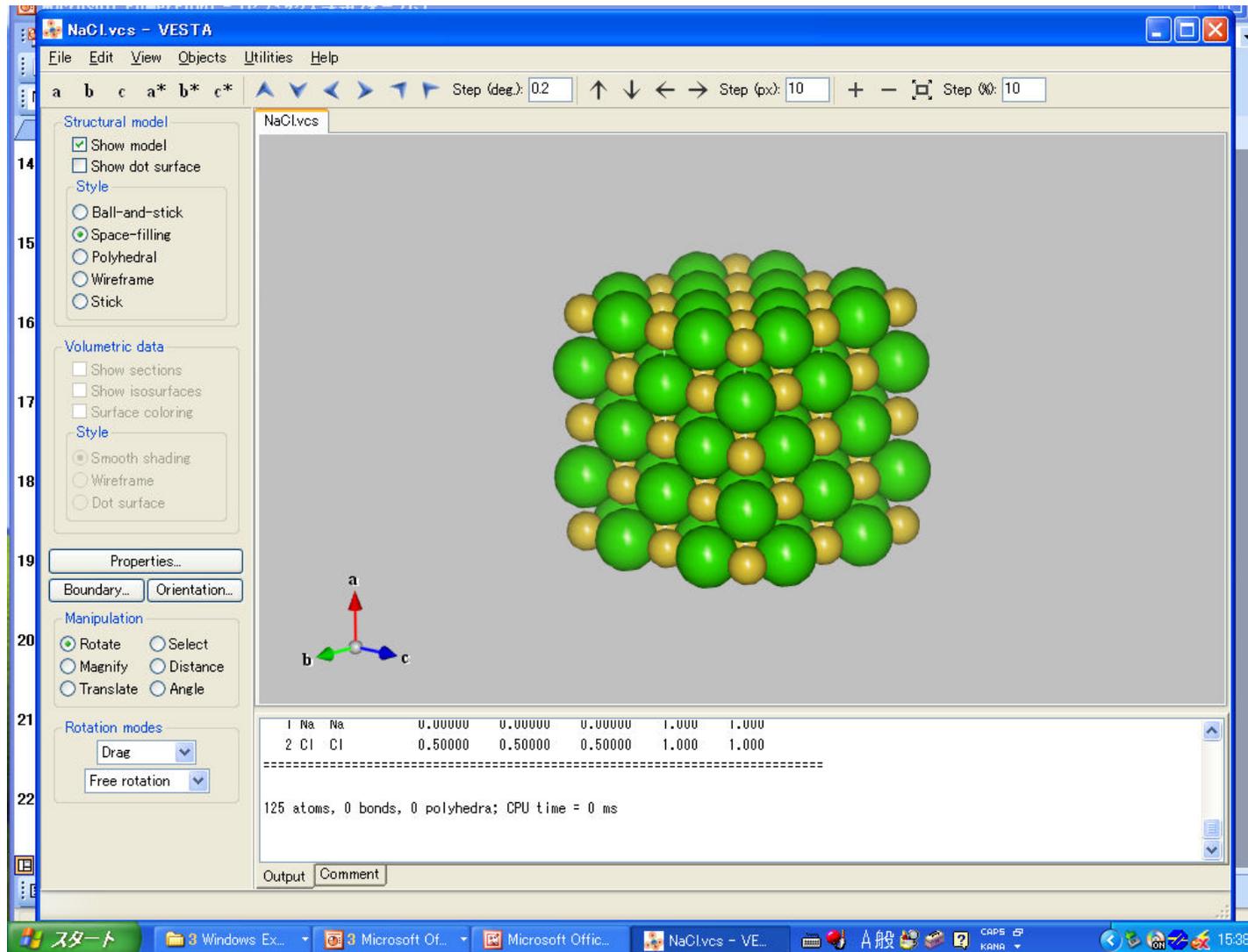
② VESTAを使ってみる

「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 at

Output Comment

スタート Windows Ex... Microsoft Of... Microsoft Offic... NaCl.vcs - VE... A般 CAPS KANA 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

The screenshot shows the VESTA interface with the 'Structure - (NaCl.vcs)' dialog box open. The dialog is divided into several sections:

- Space-group symmetry:** System: Cubic, Number: 225, Std. symbol: F m -3 m, Setting: 1, Symbol: F m -3 m.
- Lattice parameters:** a = 5.60000, b = 5.60000, c = 5.60000, alpha = 90.0000, beta = 90.0000, gamma = 90.0000. esd(a) = 0.00000, esd(beta) = 0.00000, esd(gamma) = 0.00000.
- Structure parameters:** Use B as isotropic atomic displacement parameters. Atom No., Symbol, Label, Charge, x, y, z, g, B.

Three callout boxes highlight specific parts of the dialog:

- 空間群 (Space group):** Points to the 'Space-group symmetry' section.
- 格子定数 (Lattice constants):** Points to the 'Lattice parameters' section.
- 原子座標 (Atomic coordinates):** Points to the 'Structure parameters' table.

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

Bonds - (NaCl.vcs)

Search bonds and atoms

Search mode

- Search A2 bonded to A1
- Search atoms bonded to A1
- Search molecules

Search by label

Show polyhedra

Search beyond the boundary

Search hydrogen bonds

A1: Na A2: Cl Min. length: 0 Max. length: 3.7

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

Add

Modify

OK Cancel Apply

12b atoms, 0 bonds, 0 polyhedra; CPU time = 0 ms

Atom: 2 Cl Cl 0.00000 1.00000 -0.50000 (-1, 0,-1)+ x+1/2, y+1/2, z

Atom: 2 Cl Cl -0.50000 1.00000 0.00000 (-1, 0,-1)+ x, y+1/2, z+1/2

Output Comment

A1をNa、A2をClとしてMax. Lengthに2.8を入力後、Add、OK

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

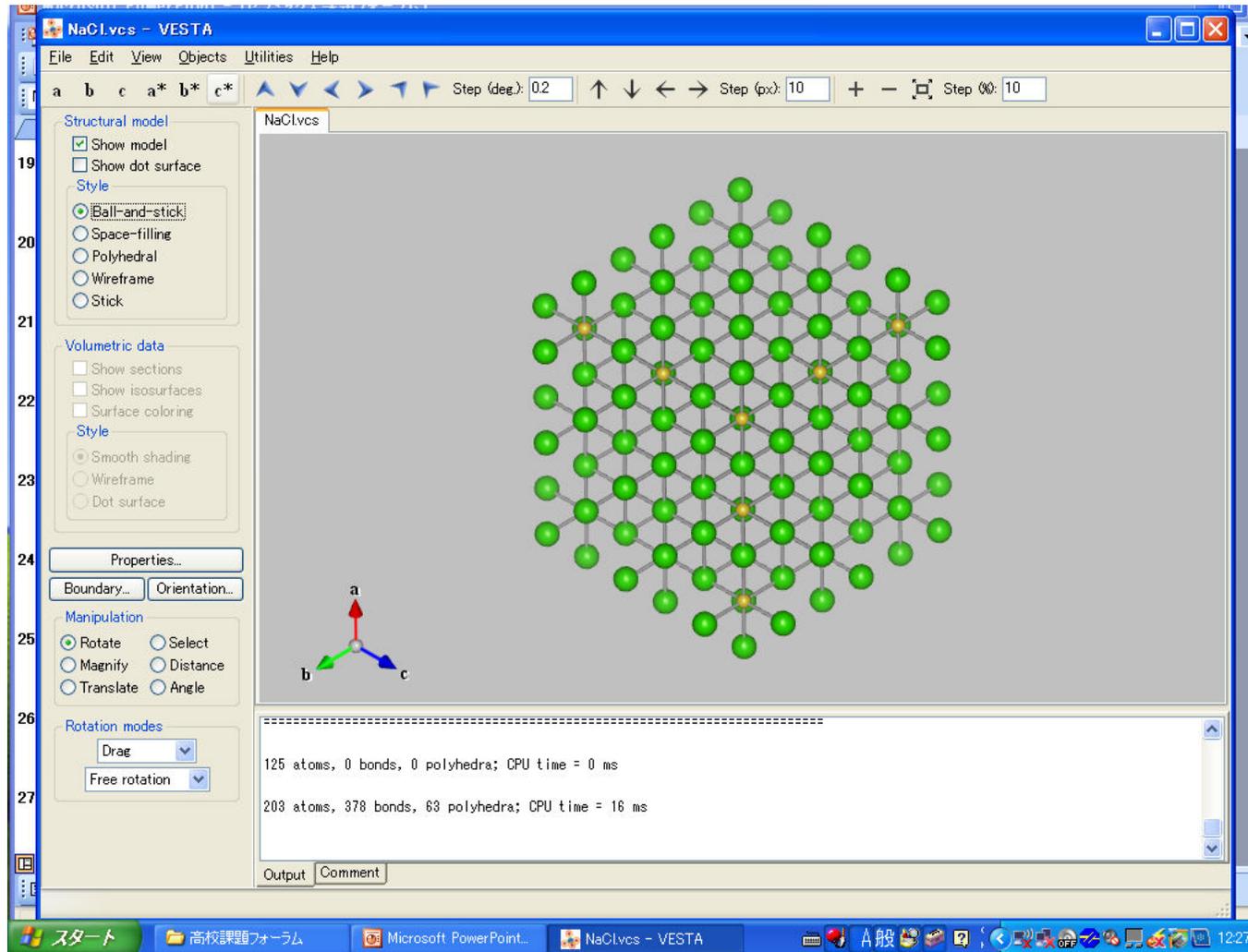
Output Comment

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

20

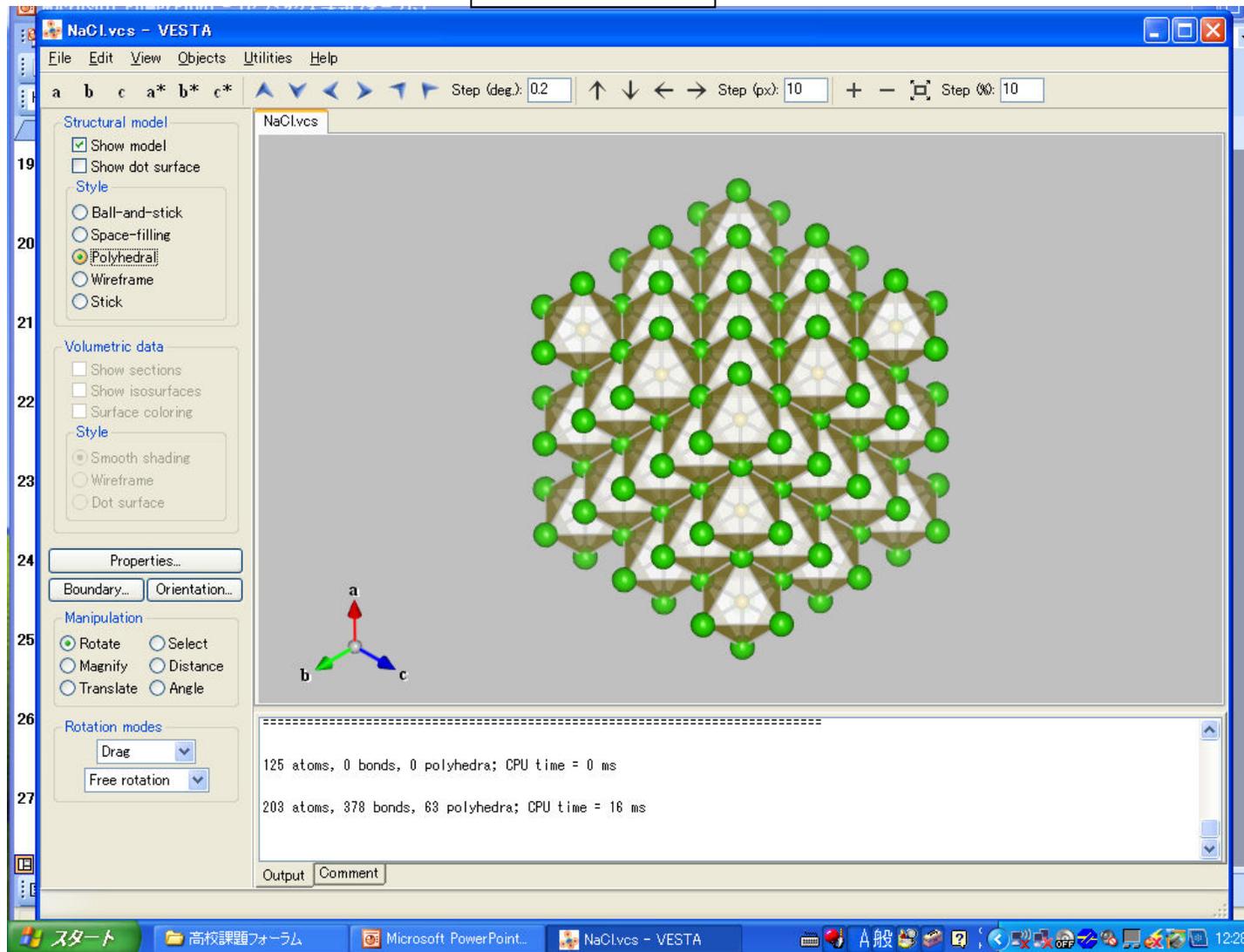
② VESTAを使ってみる

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:

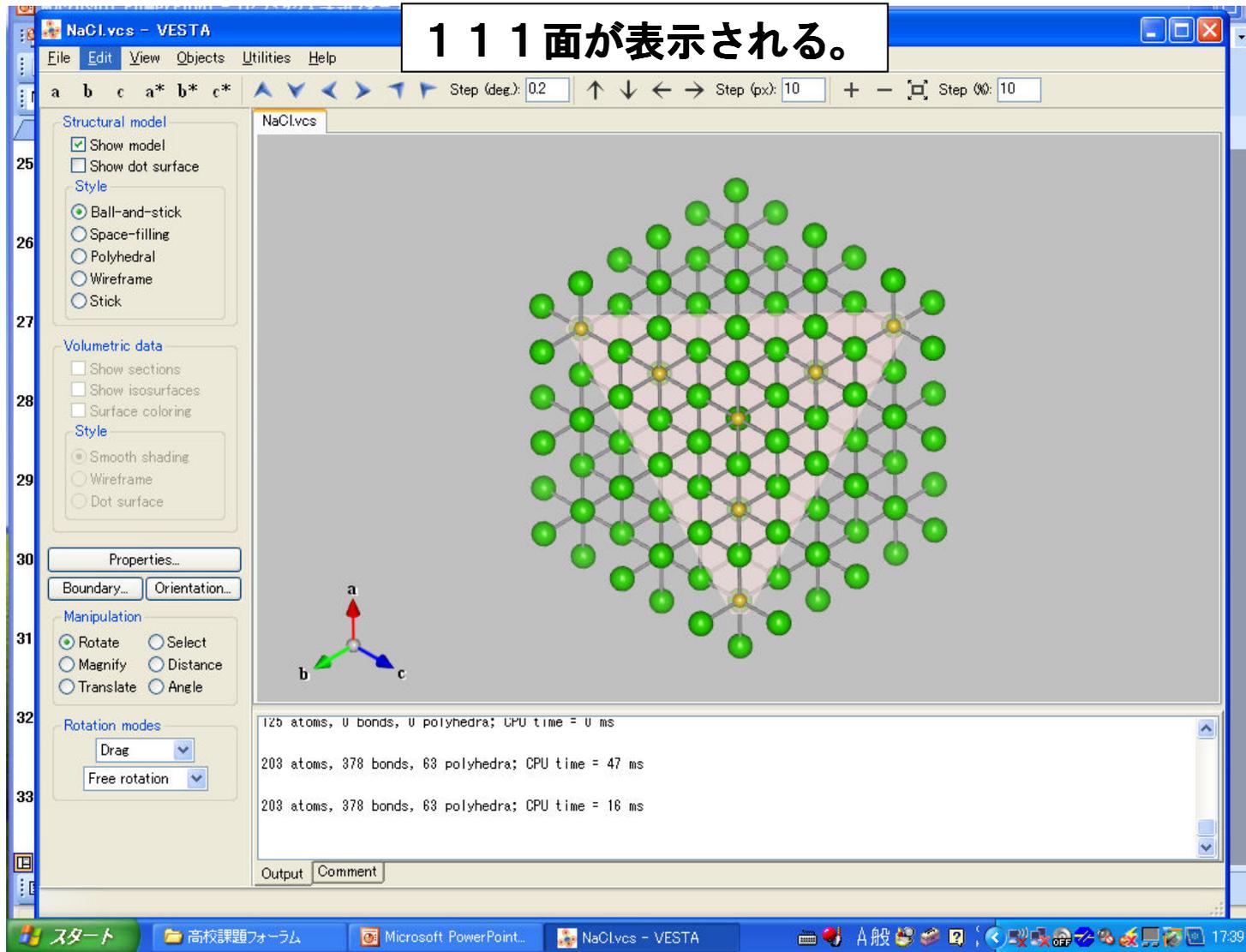
- Material: Specular (%): 100, Shininess (%): 100, Opacity (%): 60
- Edges: Show edges, Line width: 1.0
- Add lattice planes: Miller indices: h 1, k 1, l 1; Distance from origin: 1; Unit: Interplanar spacing; Color: 255, 0, 0
- Buttons: Add, Modify, Delete, Clear all, OK, Cancel
- Preview

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.

Output window text:

```
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

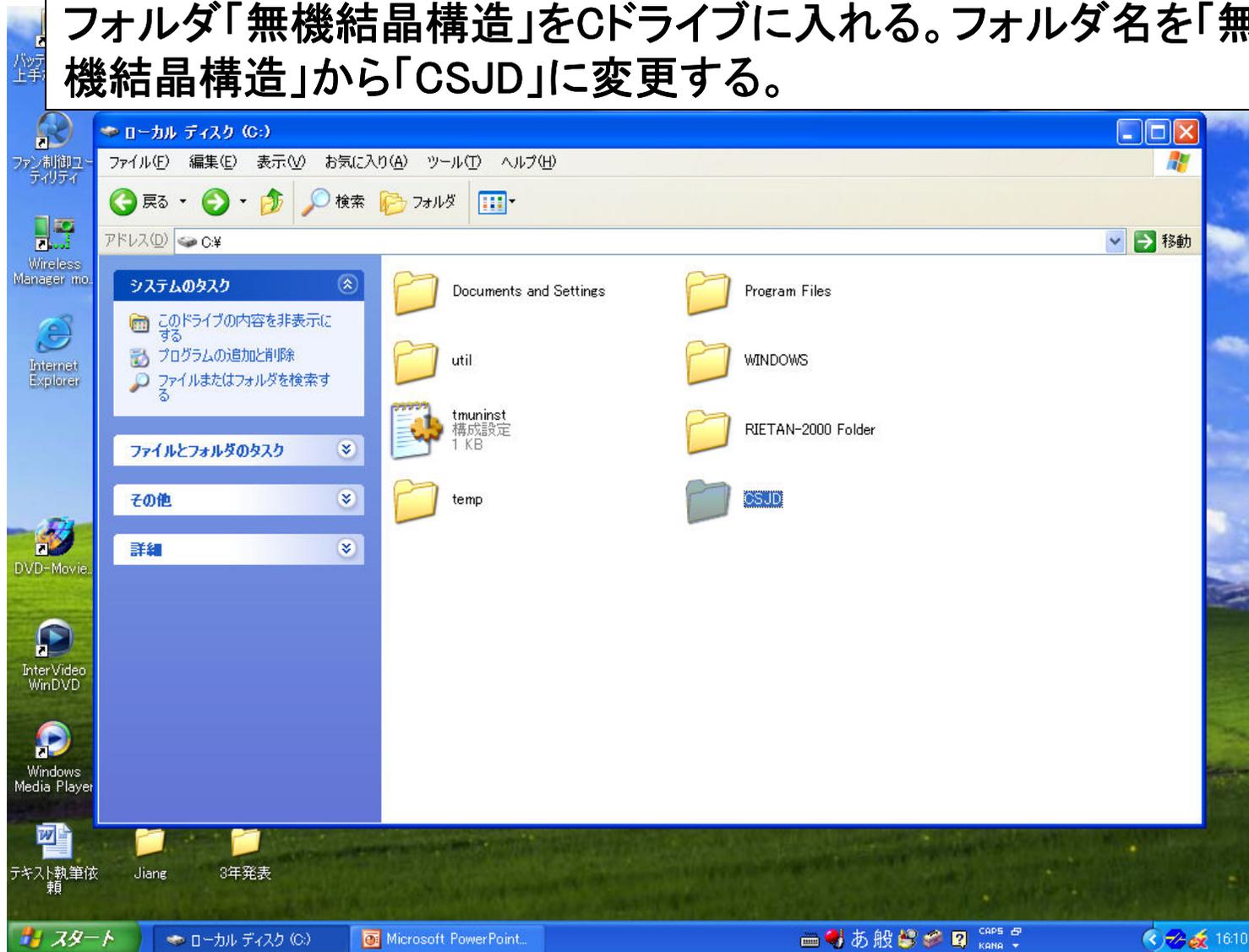
その他にも色々な機能がある。

- ・ 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

④ QUESKの使い方

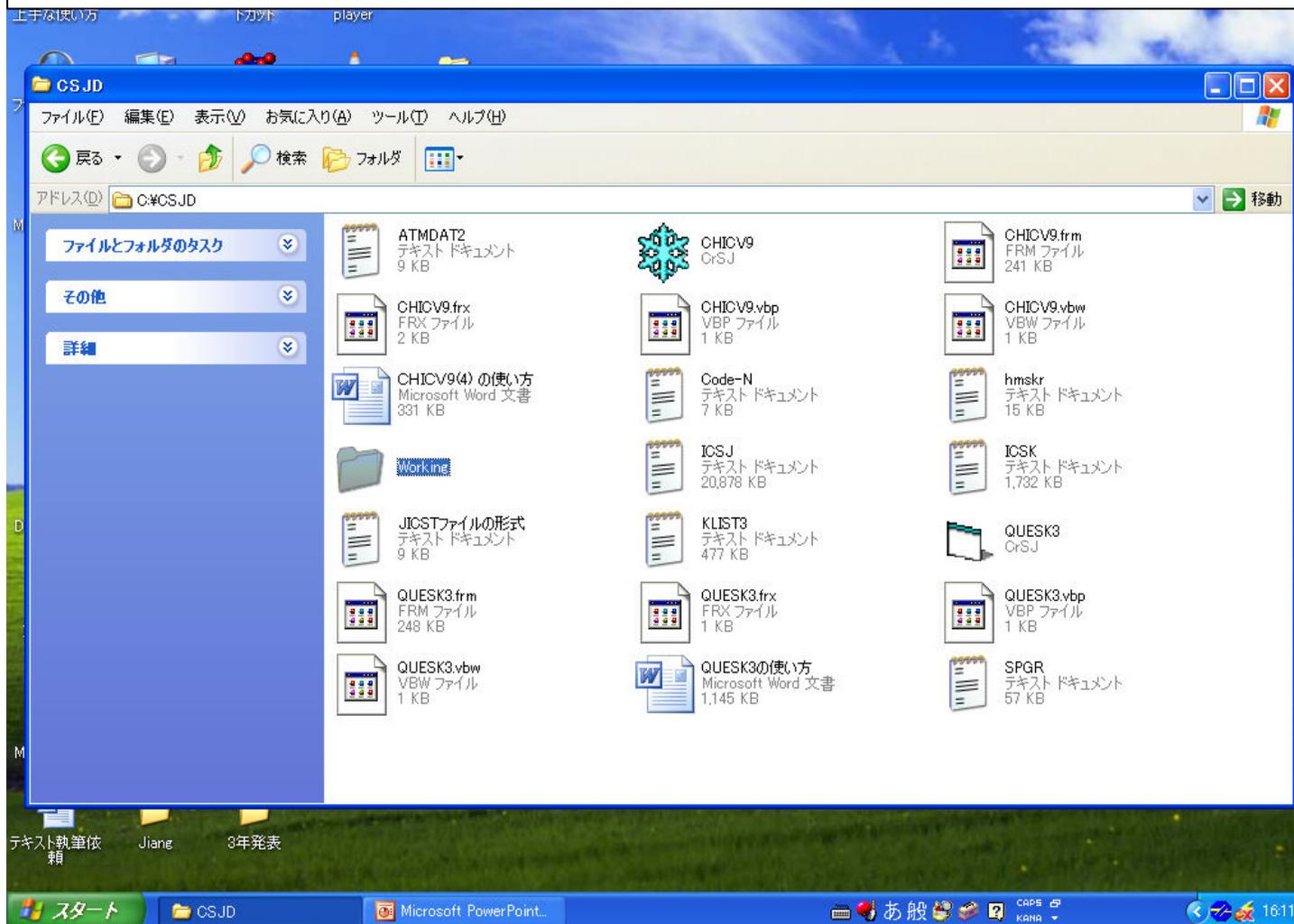
日本結晶学会のホームページからダウンロードして解凍したフォルダ「無機結晶構造」をCドライブに入れる。フォルダ名を「無機結晶構造」から「CSJD」に変更する。



27

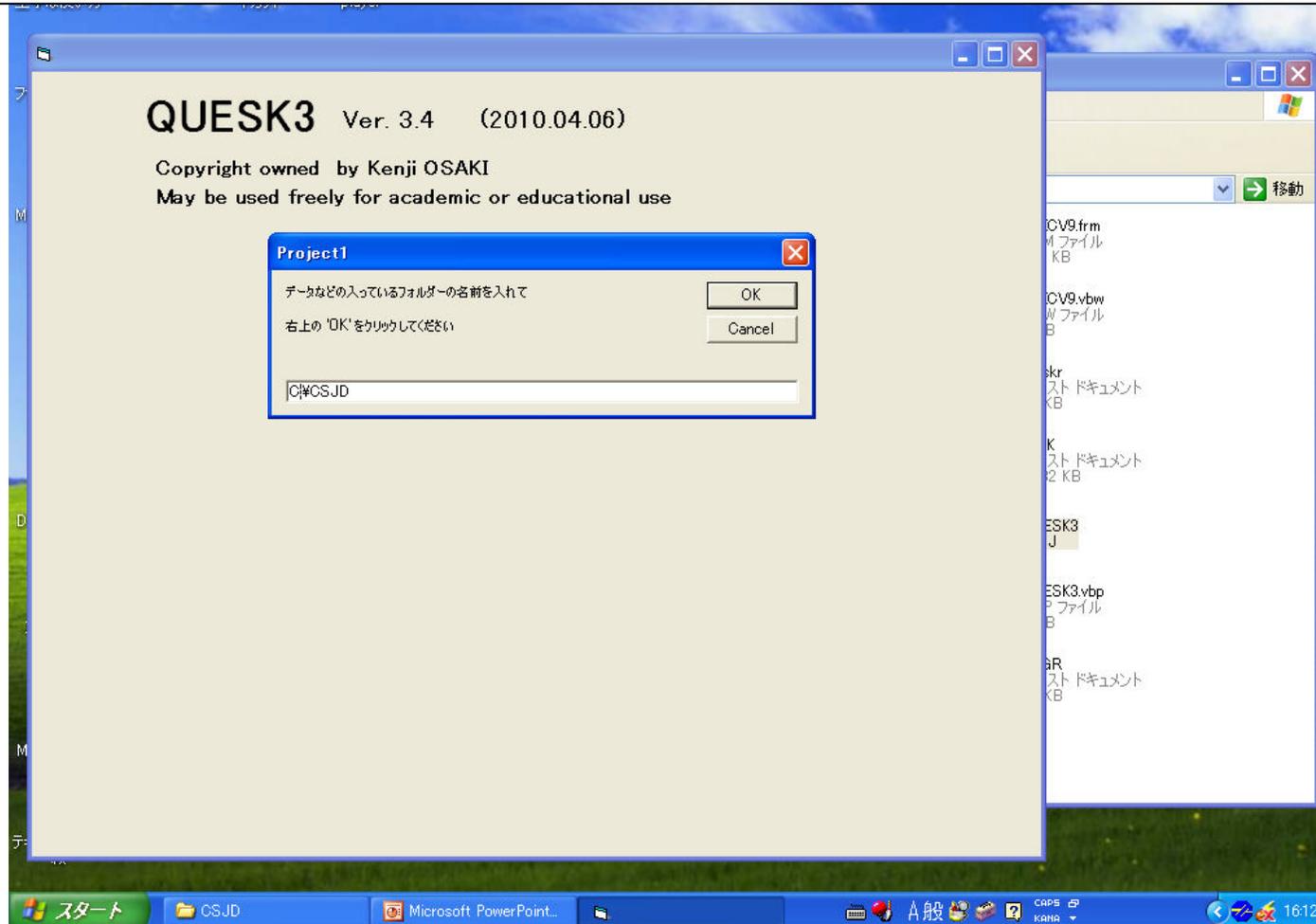
④ QUESKの使い方

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。

The screenshot shows the QUESK3 Ver. 3.4 (2010.04.06) interface. The main window displays the 'List2' window with the following content:

```
List2
ID1 = C:\無機結晶構造
ID2 = C:\無機結晶構造\Working
```

An 'Output Format' dialog box is open, asking for the output file format. The options are:

- 1なら 標準形式、2なら CIF形式、3なら JICST形式

The 'KLIST3 - メモ帳' window is also visible, showing a list of compounds and their properties:

ファイル(E)	編集(E)	書式(O)	表示(V)	ヘルプ(H)
C	1	Al2CdS4	I-4	CR912062 Z Krist 1990 190 103 OK
A	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 add
	1	203 Al2La	Fd-3m	KE070014 Inorg Chem 1991 30 4789 OK new
		Al2MgO4	Fd-3m N	CR862710 Kobutsu Zasshi 1983 26 77 OK new
	2	47 Al2O(GeO4)		
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	KE070169 Neu Jahrb Min 1990 217 OK new
	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 new
		Al2O3.Ca0.6	P63/mmc	CR861610 Neu Jahrb Min 1968 109 192 OK new
		Al2O3.Sr0.6	P63/mmc	CR890816 Acta Cryst B 1975 31 2940 OK new
A	1	198 Al2Pt	CaF2 Fm-3m	KE070015 J Less-Com Met 1982 87 305 OK new
A	1	152 Al2S3	P61	KE050494 Z Krist 1992 198 207 OK CM

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。

QUESK3 Ver. 3.4 (2010.04.06) [START] [EXIT]

List2

_journal_codon	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。

Output File Path: C:\...\Working\Output Data = C:\...\Working\ACS(requested) = CR912560 IOut, ACSQ = 1 CR912560 Input Data = C:\...\Working\ACS...

Output File Name: CHICV9 CIF

Output File Size: 1 KB

Output File Type: VBP ファイル

Output File Code: Code-N テキストドキュメント

Output File Size: 7 KB

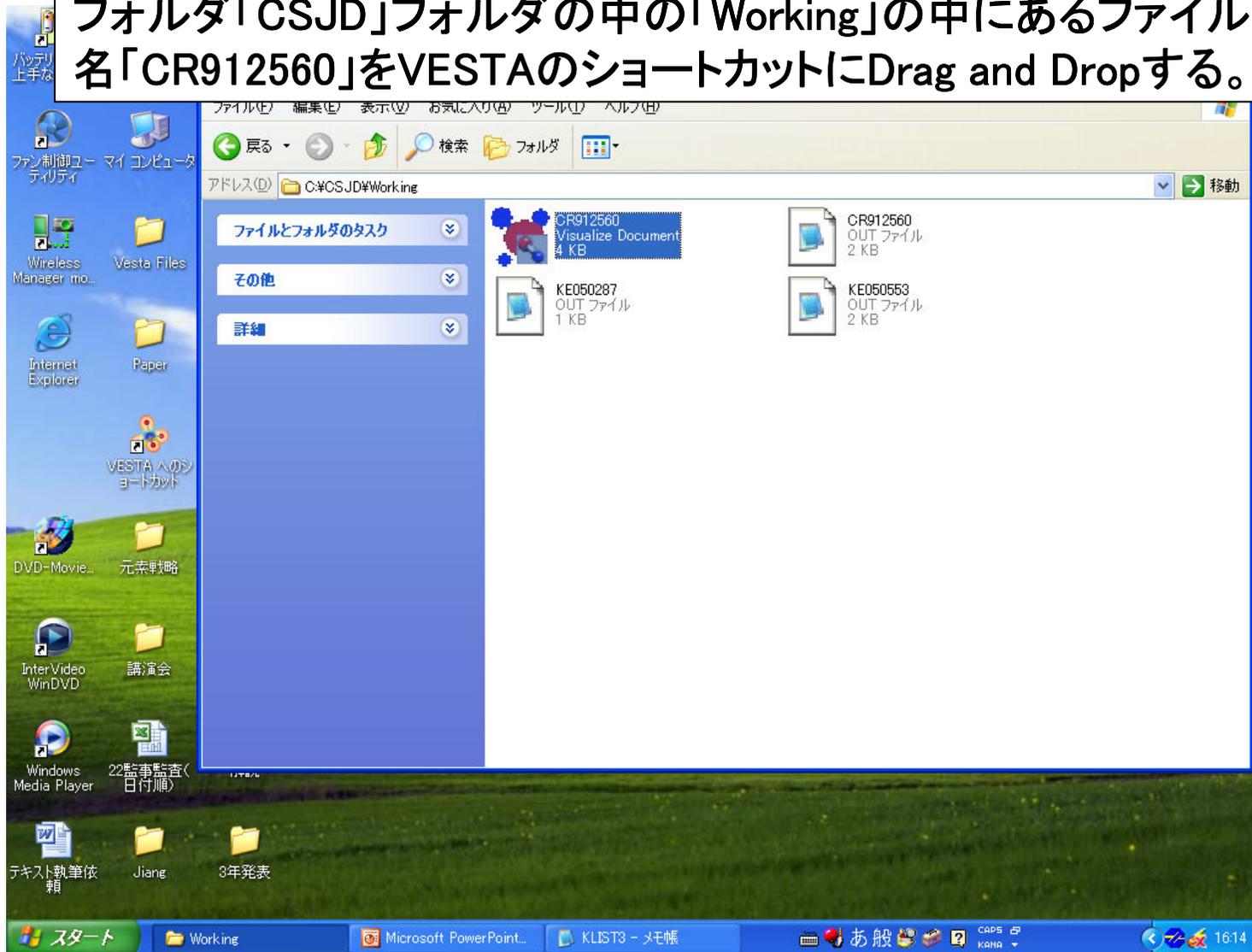
Output File Type: テキストドキュメント

Output File Size: 1,732 KB

Windows Taskbar: スタート | 無機結晶 | Microsoft ... | KLIST3 - ... | ドキュメント | ... | 16:01

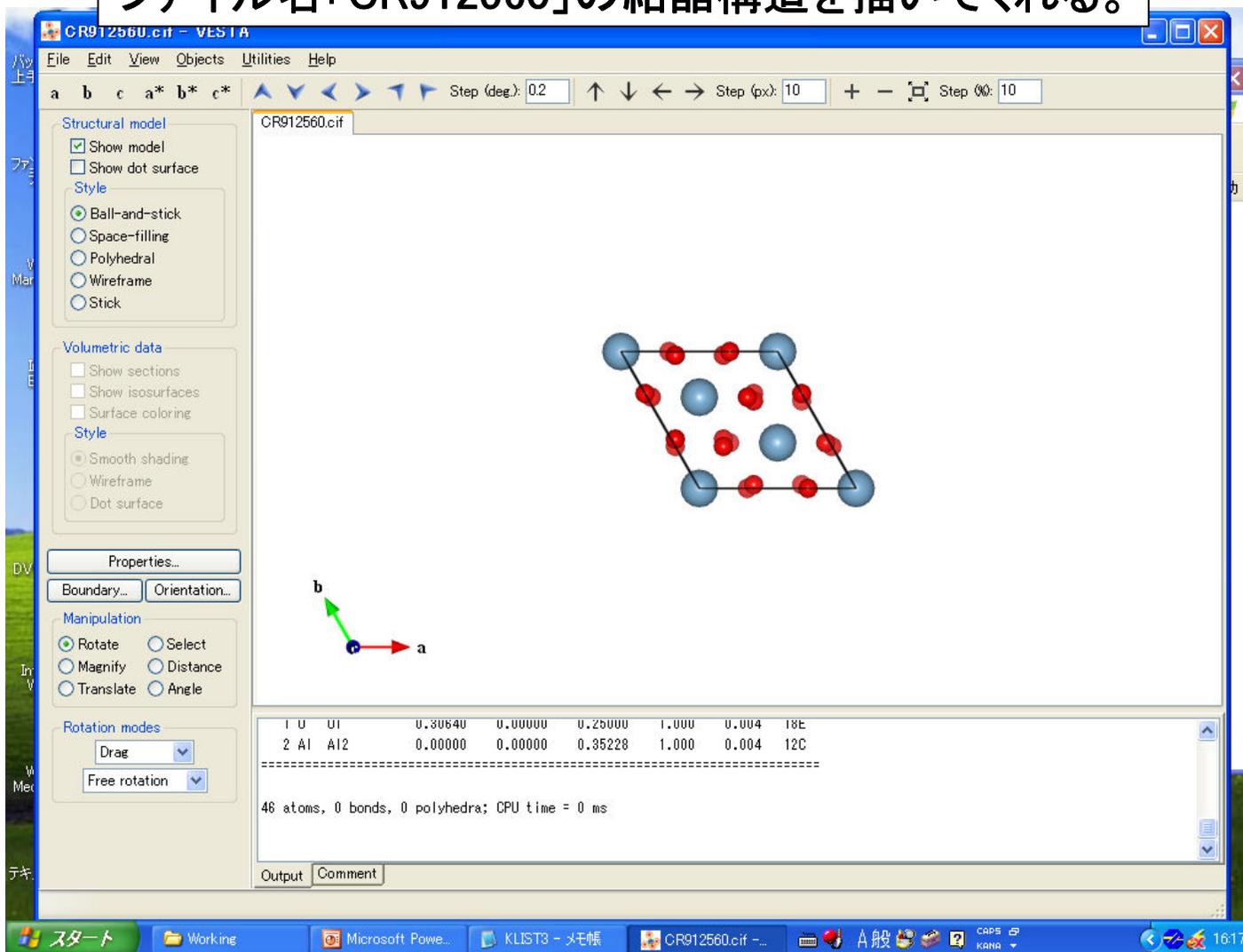
④ QUESKの使い方

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