

(VESTA :Ver3.3.1、OS:Windows7、ブラウザ:Internet Explorer 11.0 の場合)

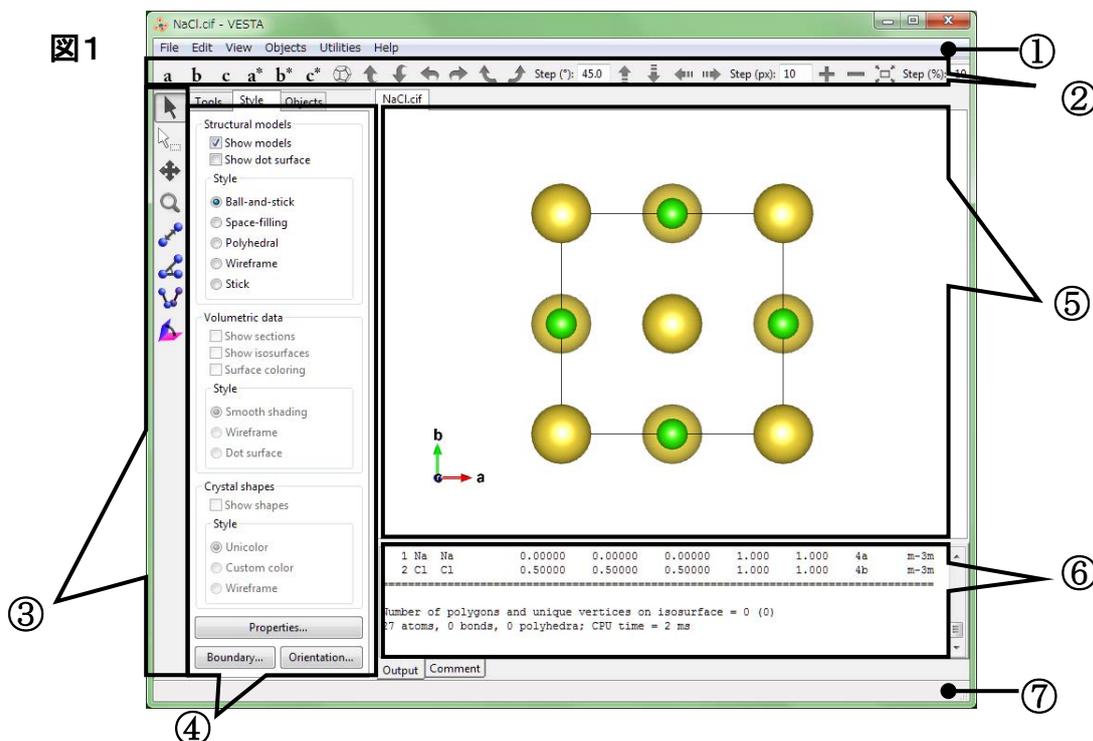
1) HP「中温域固体伝導体」中の「結晶構造ギャラリー」の 5. 元素・化合物・鉱物など 岩塩(塩化ナトリウム)の物質名(和名)にある **CIF** アイコンを右クリックし、[対象をファイルに保存]を選ぶと、[名前を付けて保存]ウィンドウが開く。[ファイル名]が NaCl.cif、[ファイルの種類]が CIF ファイル(*.cif)であることを確認し、[保存する場所](例えばデスクトップ)を選び、[保存]ボタンを押して、ダウンロード保存する。

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 NaCl.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)。

黄色の球:Na⁺イオン、緑色の球:Cl⁻イオン、実線:単位胞



- ① メニューバー File、Edit、View、Objects、Utilities、Help のメニューが並んでいる
- ② 水平ツールバー よく使われるツールが並んでいる
- ③ 垂直ツールバー よく使われるツールが並んでいる(水平ツールバー以外)
- 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
- ⑦ STATUS(状態)バー 1行の文字で情報が表示される

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、水平ツールバーの[C]ボタン(*c*軸方向から眺める)を押す、あるいはサイドパネルの[Orientation]ボタンを押し、開いた[Orientation]ウインドウの[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。

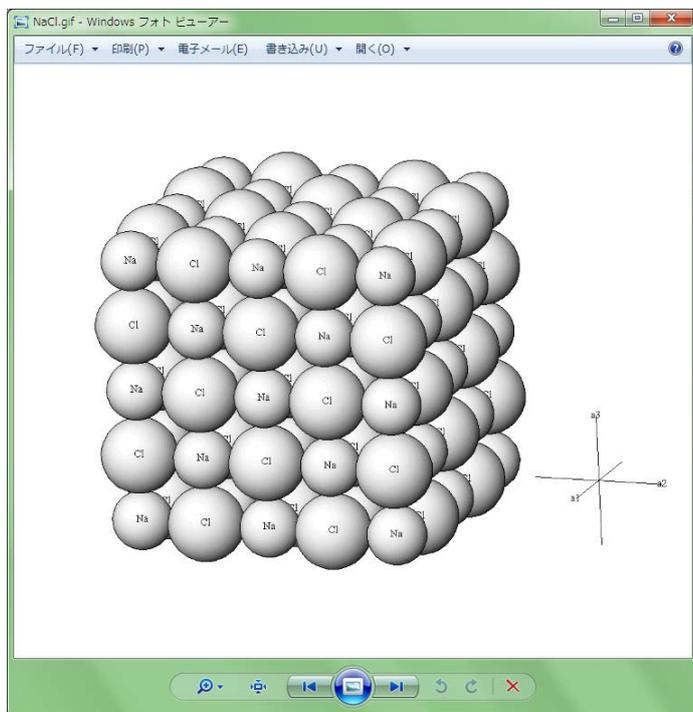


図2

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

・[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* 軸と *b* 軸の間方向($u:1, v:1, w:0$)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] $u:[0]$ 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。

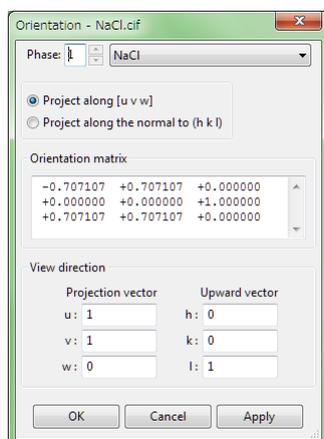


図3

・[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)。

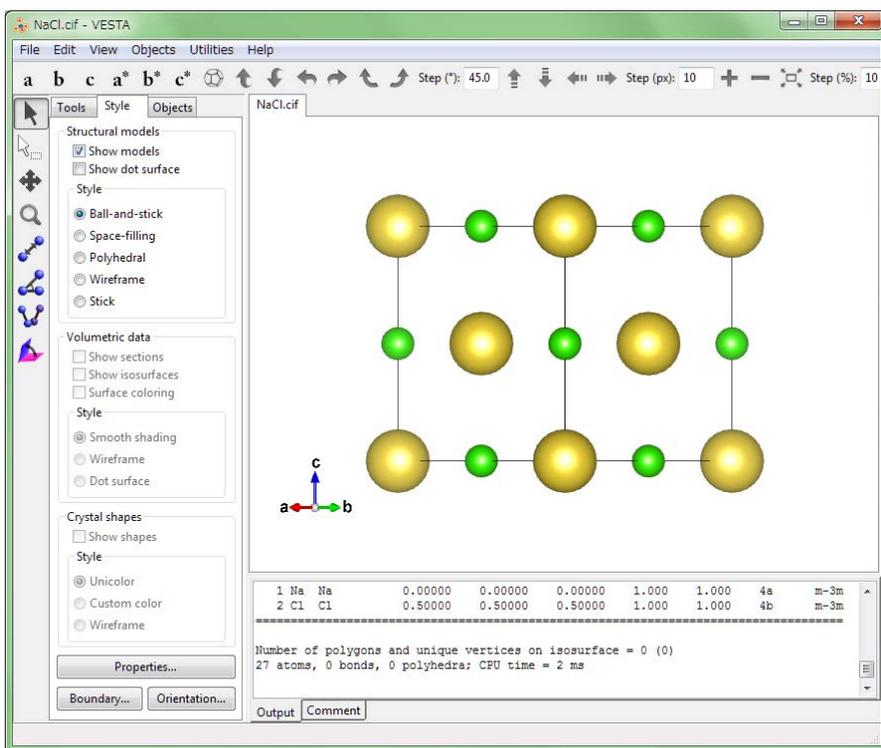


図4

・垂直ツールバーにある[↻] (回転) の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、下方向にドラッグし、c軸を画面の手前方向に傾ける(図5参照)。

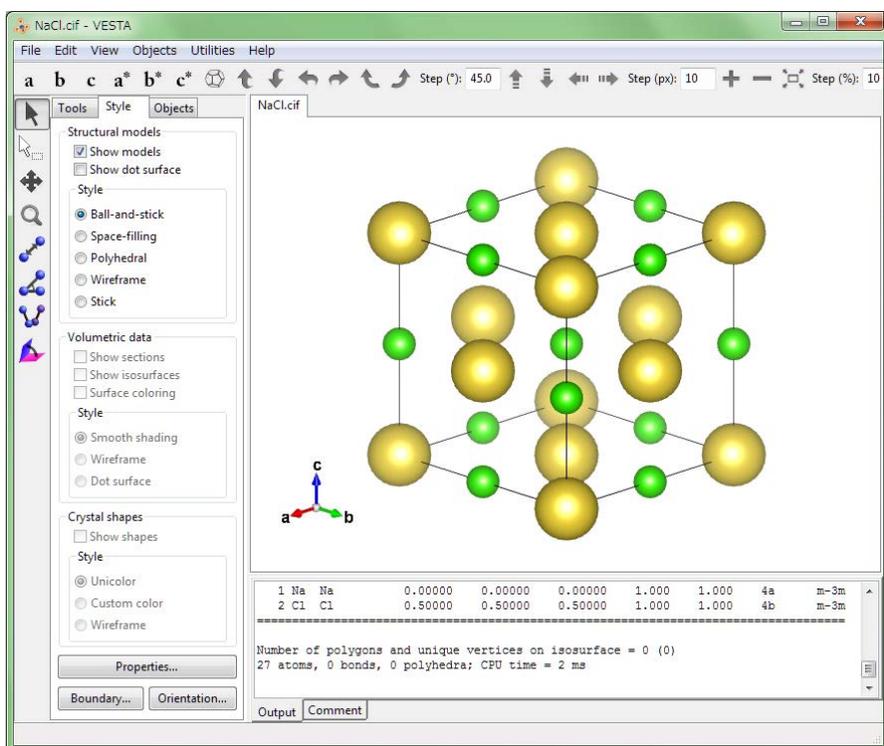


図5

岩塩(塩化ナトリウム)の場合、図2の結晶構造図には単位胞は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6参照)。

x (max) = 1 → 2

y (max) = 1 → 2

z (max) = 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 (max) = [1] 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。

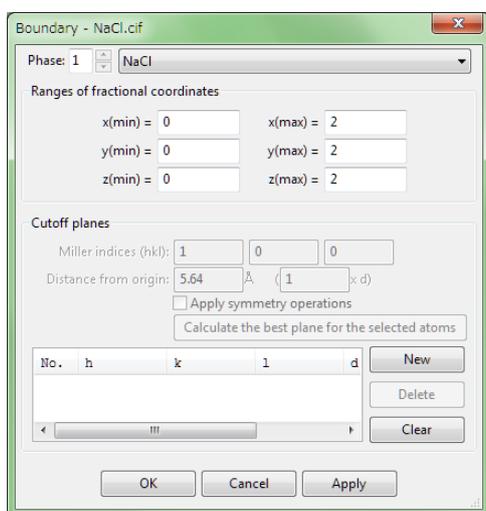


図6

・[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) に増える。[OK] ボタンを押すと [Boundary] ウィンドウが閉じる (図7参照)。

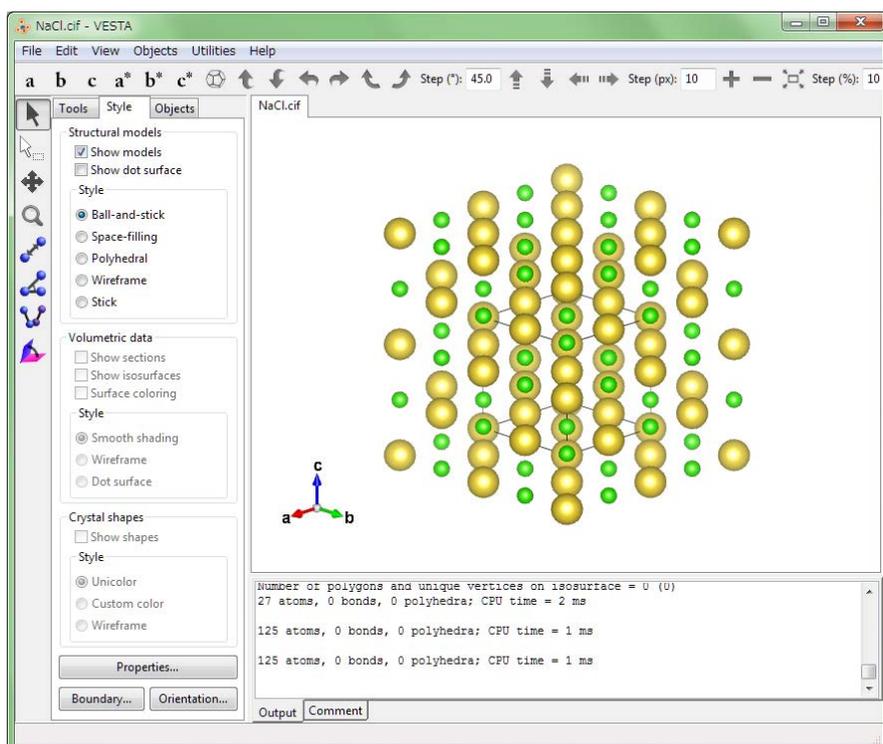


図7

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]-[Line]の[All unit cells] (全単位胞)のラジオボタンをクリックすると(図8参照)、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。

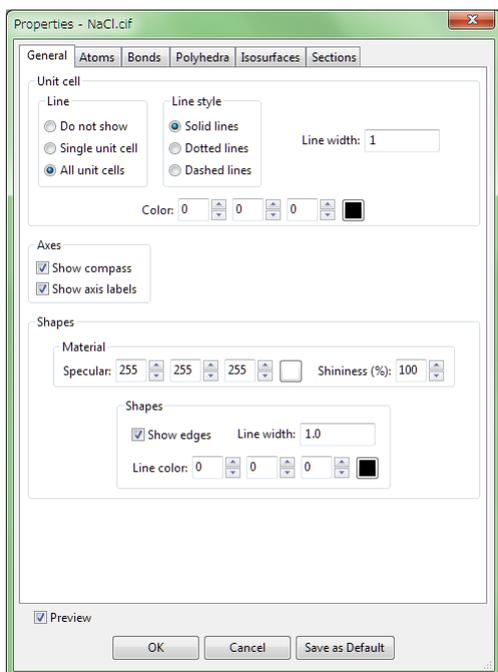


図8

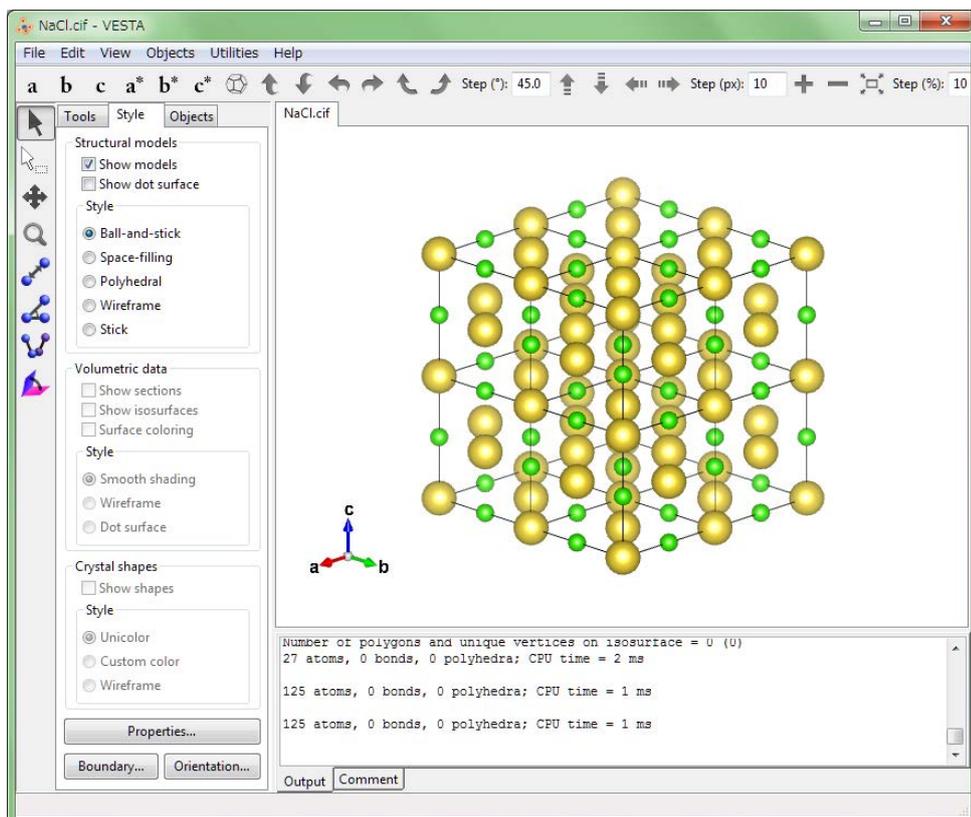


図9

7) 各原子の大きさ、及び各原子の色の変更

・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(Na 又は Cl)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 (例えば、Na: 3.2、Cl: 4)をキーボード入力すると、隣接するナトリウム(Na)原子と塩素(Cl)原子を接触した状態で表示することが出来る(図10、11参照)。
[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(Na、Cl: 白色)を選び(又は Color 255 255 255 と入力し)、[OK]ボタンを押すと、原子の色を変更することが出来る(図10~12参照)。

・[OK]ボタンを押すと[Properties]ウィンドウが閉じる。

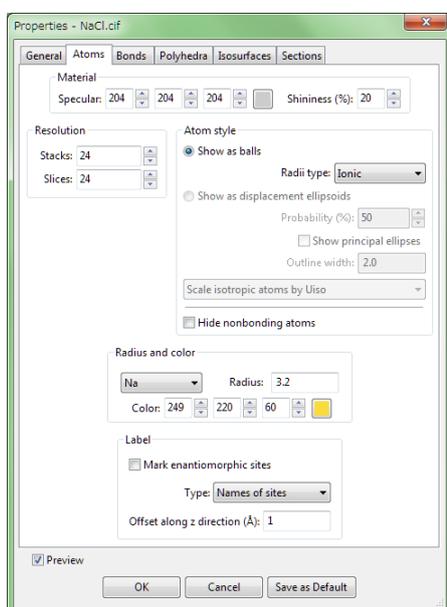


図10

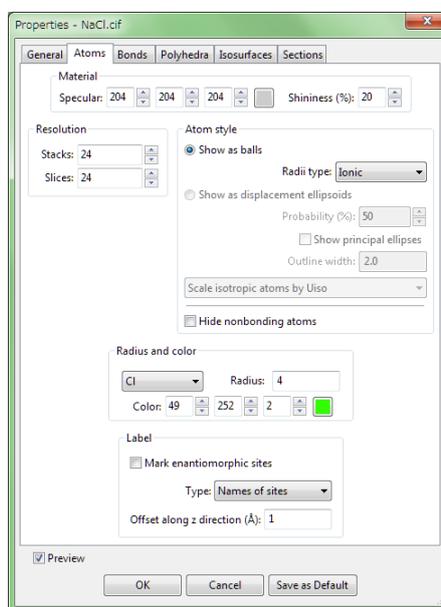


図11

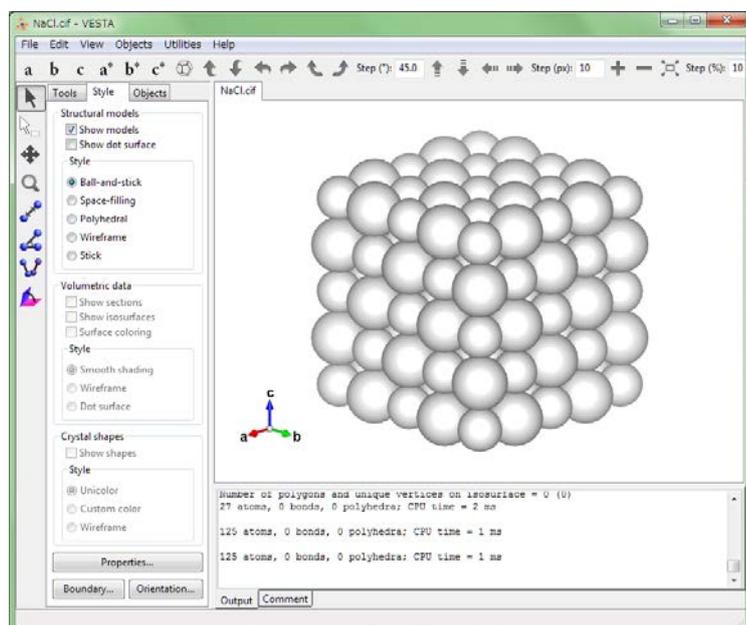


図12

以下の 8)~13) に、VESTA の他の操作方法の例を示す。

8) 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13参照)。

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。

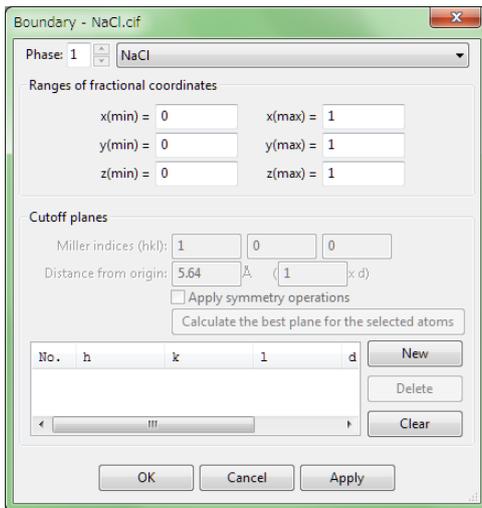


図13

・[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14参照)。

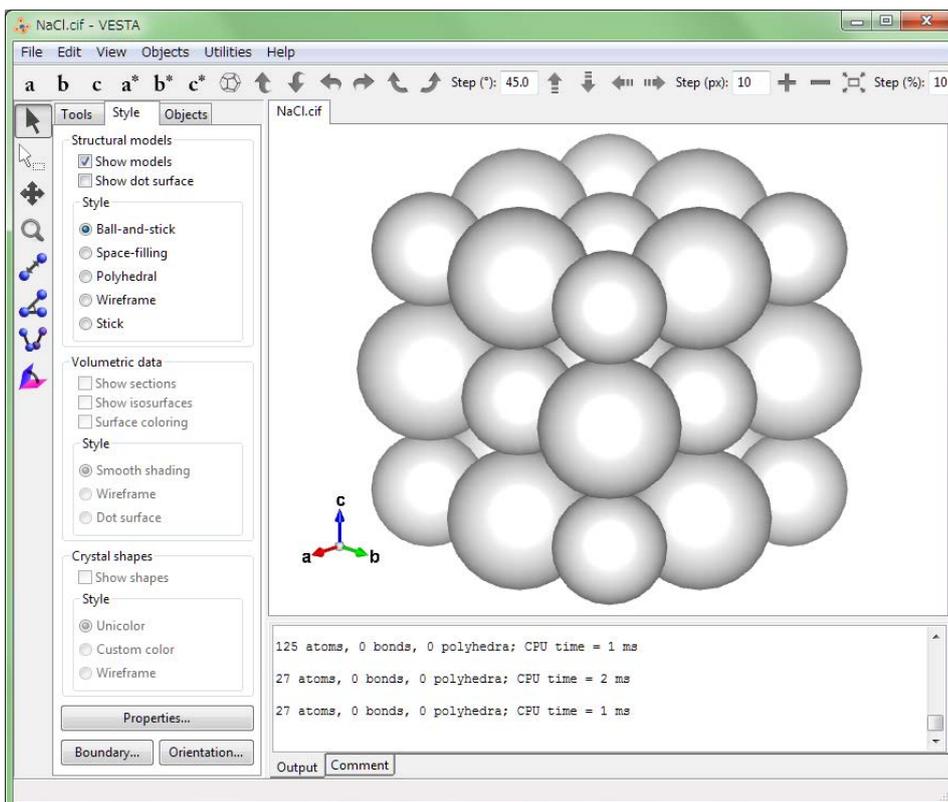


図14

・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]のプルダウンメニューにより原子(Na又はCl)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 (例えば、Na: 1.6、Cl: 2)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15、16参照)。[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(例えば、Na: 黄(Color: 249, 220, 60)、Cl: 緑(Color: 49, 252, 2))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15~17参照)。

・[OK]ボタンを押すと[Properties]ウィンドウが閉じる。

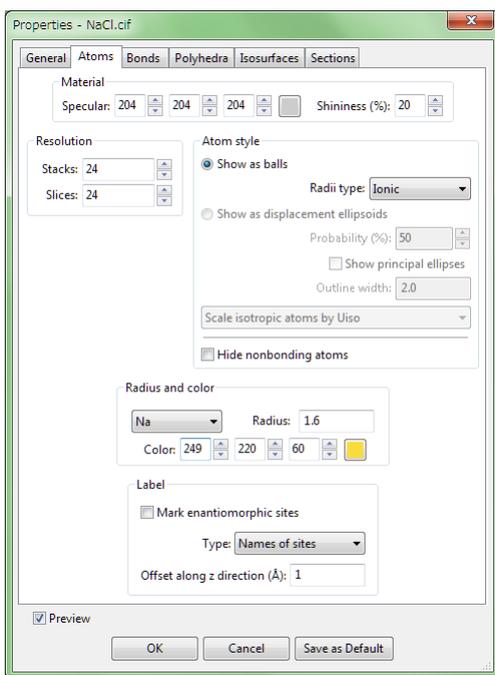


図15

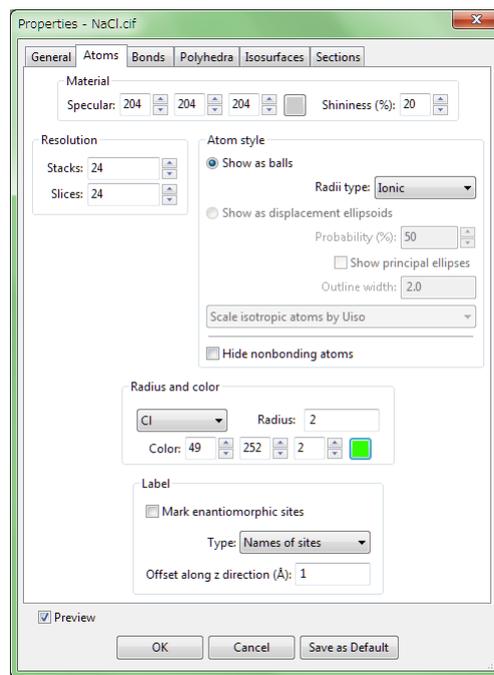


図16

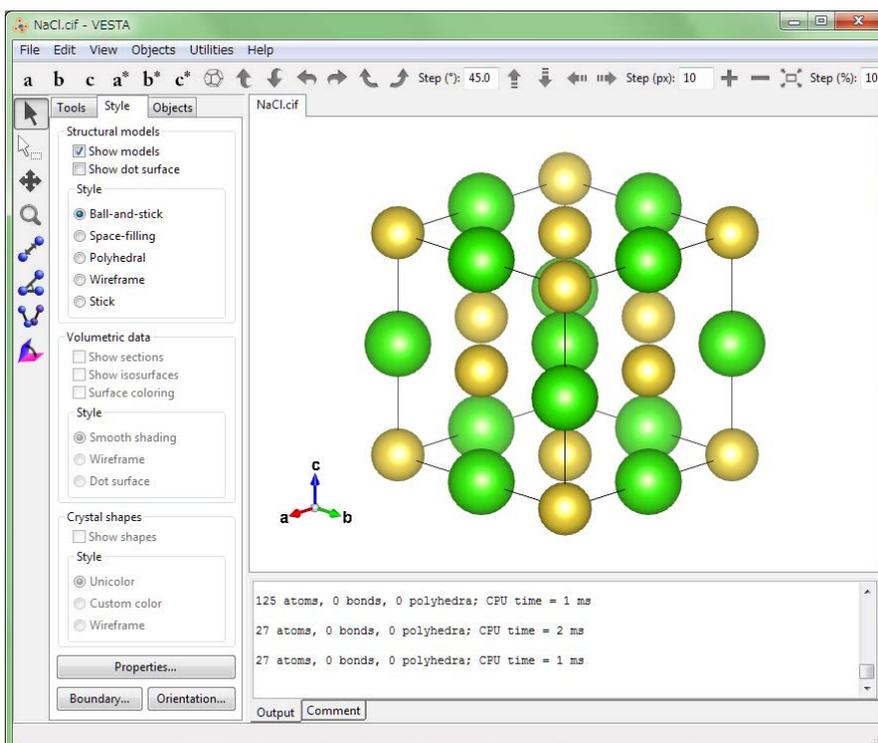


図17

9) 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。
- ・[Bonds]ウィンドウ右下の[New]ボタンを押す。
- ・[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。
- ・[Boundary mode]の[Do not search atoms beyond the boundary] (境界を越えて原子を探さない) のラジオボタンが押されていることを確認する。
- ・[Show polyhedra] (多面体を表示する) のチェックボックスの[√]を外す。
- ・結合を表示する 2 つの原子、Na と Cl をプルダウンメニューにより A1 : Na、A2 : Cl 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 : 3 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、3) を Å (オングストローム) 単位でキーボード入力する。
- ・[Apply] 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 : Na、Atom 2 : Cl、Min. (Å) : 0、Max. (Å) : 3、Bound. : 1) の様に表示される (図 18 参照)。

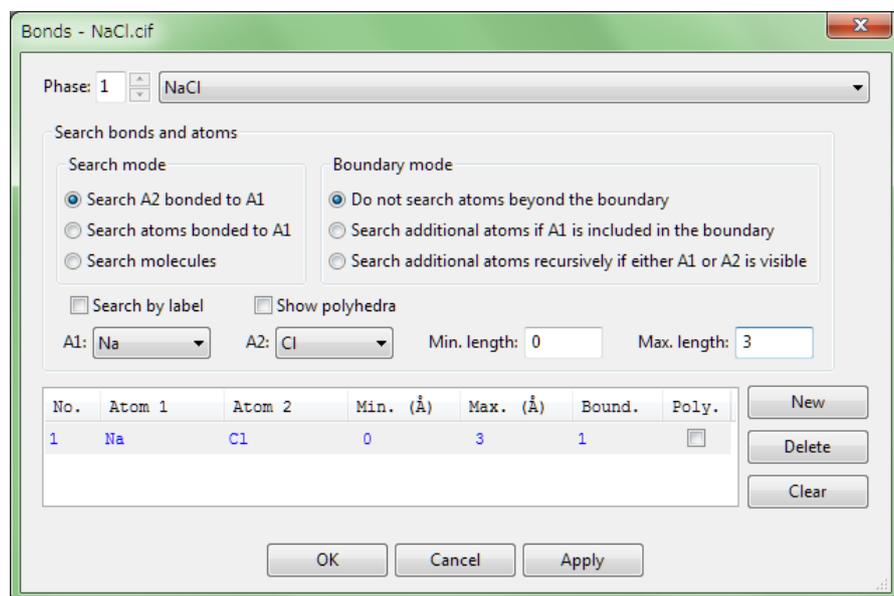


図 18

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[Apply]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 Na-Cl の結合が黄色と緑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 19 参照)。

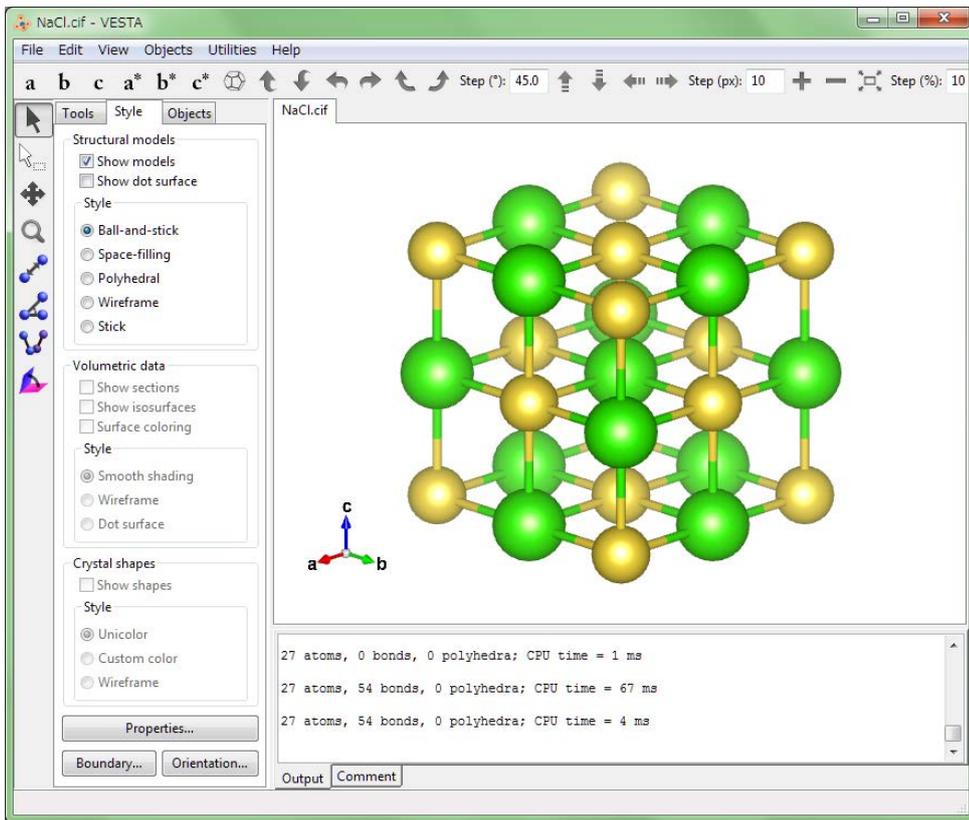


図19

10) 原子(イオン)のラベルの表示

・サイドパネルの[Objects]タブをクリックする。

・[Site]の[L](ラベル)のところのチェックボックスをマウスでクリックし、[✓]を入れると、結晶構造図中に原子(あるいはイオン)のラベルが表示される(図20参照)。

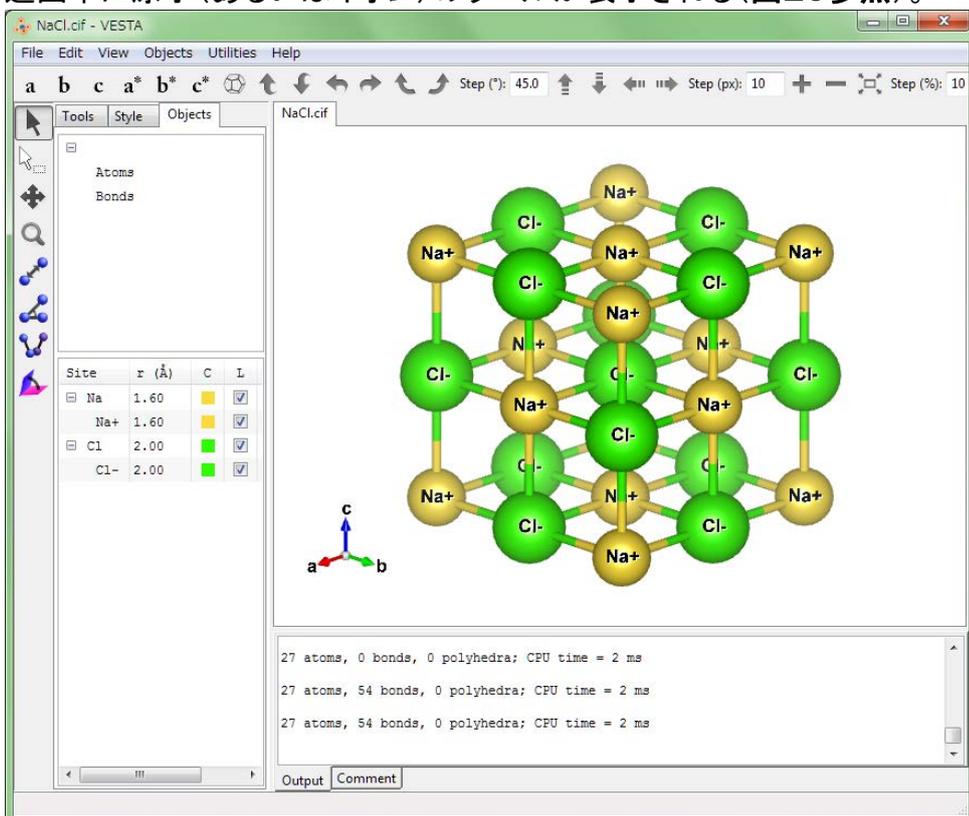


図20

11) 原子座標、結合距離、及び結合角の表示

・垂直ツールバーの上から2つ目の白抜矢印[] (選択) の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(イオン) (例えば、下図のNa⁺イオン1個) をクリックすると、原子(イオン)の色が変わり、テキストエリア、及びSTATUS(状態)バーに原子の分率座標(例:Na(0.00000, 1.00000, 0.00000))が表示される(図21参照)。

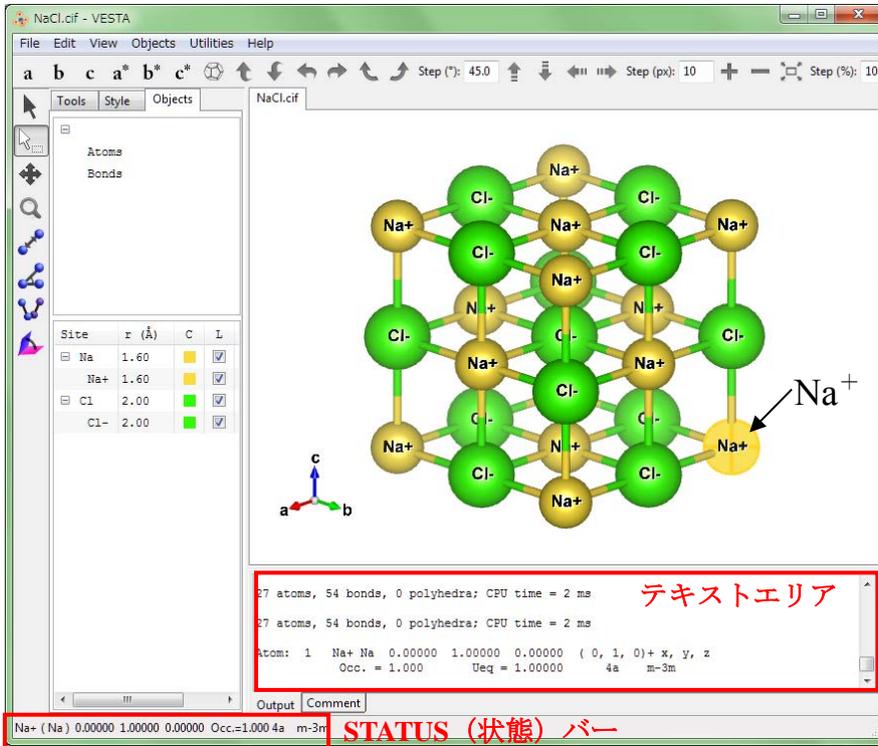


図21

・垂直ツールバーの上から5つ目の[距離]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(イオン) (例:下図のNa⁺, Cl⁻) をクリックすると、色が変わり、テキストエリアに2原子(イオン)間の結合距離(例:Na⁺-Cl⁻間=2.820(5) Å)及び2原子(イオン)の分率座標(例:Na⁺(0.50000, 0.50000, 1.00000)、Cl⁻(1.00000, 0.50000, 1.00000))が、STATUS(状態)バーに結合距離が表示される(図22参照)

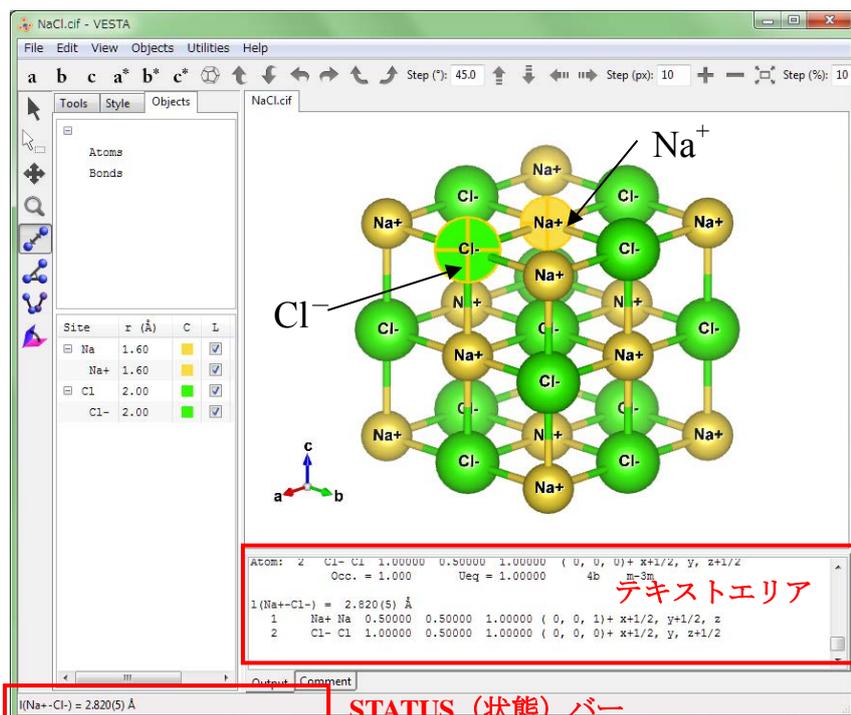


図22

・垂直ツールバーの上から6つ目の[角度]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(イオン)(例:下図の Na^+ , Cl^- , Na^+)を順番にクリックすると、原子の色が変わり、原子間が点線につながれ、テキストエリアに3原子が構成する結合角(例: $\angle(\text{Na}^+-\text{Cl}^--\text{Na}^+)=78.4630(0)^\circ$)及び3原子(イオン)の分率座標(例: $\text{Na}^+(1.00000, 0.00000, 1.00000)$ 、 $\text{Cl}^-(1.00000, 1.00000, 0.50000)$ 、 $\text{Na}^+(0.00000, 1.00000, 1.00000)$)が、STATUS(状態)バーに結合角が表示される(図23参照)。

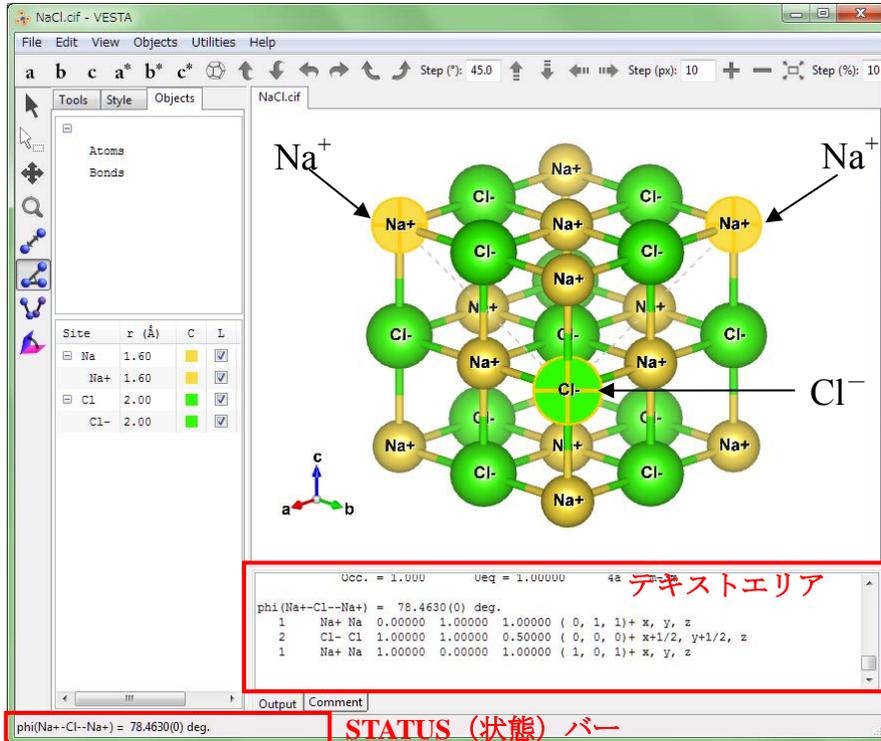


図23

12) 三次元結晶構造図の回転、拡大・縮小、及び並進

・垂直ツールバーの一番上の[Rotate]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。

・垂直ツールバーの上から4番目の[Magnify]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。

・垂直ツールバーの上から3番目の[Translate]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。

13) 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)の範囲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(Na 又は Cl)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。

14) 三次元結晶構造図の回転方法(詳細)

・サイドパネルの[Tools]タブをクリックする。[Rotation modes]の[Drag]のラジオボタンをクリックした後、[Orientation]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[Tools]タブをクリックする。[Rotation modes]の[Animation]のラジオボタンをクリックすると、[Click]のプルダウンメニューが現れ、三次元結晶構造図が連続回転を始める。[Orientation]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。

以上