

# Crystal Information Manual

## 目次

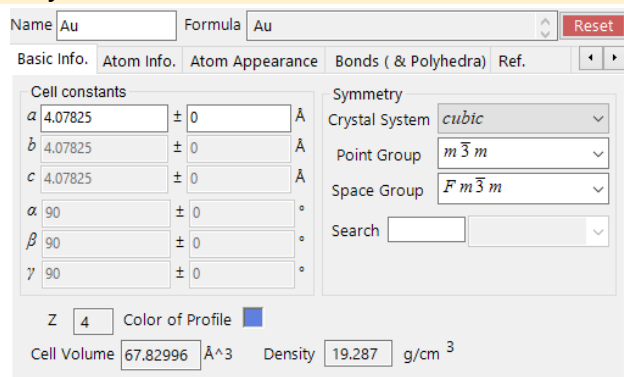
1. Overview.....	1
2. Crystal information .....	1
1.1. Basic info. ....	1
1.2. Atom info. ....	2
1.3. Atom appearance .....	2
1.4. Bonds (& polyhedra) .....	3
1.5. Ref.....	3
1.6. EOS.....	3
1.10. Context menu (right click menu) .....	4
3. Symmetry information.....	4
Group info .....	4
Conditions .....	4
Wyckoff positions.....	5
Geometrics calculation .....	5
4. Scattering factor.....	5

## 1. Overview

“Crystal Information” コントロールは、結晶に関する様々な情報を設定する機能を提供します。Crystal Information およびそれに付随する機能は、独立したアプリケーションではなく、ReciPro, PDIndexer, CSmanager などと利用されている共通のコントロールです。単体で動作するものではありませんのでご注意ください。

ReciPro、PDIndexer、CSmanager などのソフトウェアでは、複数の結晶をリスト化して使用します。新たに結晶を作成した場合や変更した場合は、各ソフトで **Add** ボタンあるいは **Replace** ボタンを押すまでは、結晶リストに反映されませんのでご注意ください。

## 2. Crystal information



“Crystal Information”は、結晶に関する様々な情報を設定する機能を提供するコントロールです。最上部に共通情報が表示され、下部には対称性、原子位置、文献などの情報を設定するタブが配置されています。

### Name

結晶の名前を表示/設定します。

### Formula

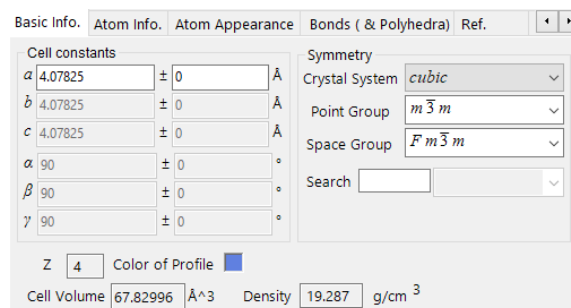
原子情報が入力されている場合に組成式が表示され

ます。

### Reset

結晶の全情報をリセットします。

## 1.1. Basic info.



このタブでは、結晶の格子定数/対称性/原子位置などを設定/表示します。

### Cell constants

格子定数を表示/設定します。単位は Å (10<sup>-10</sup> m)です。対称性を指定すると、制限(例えば)がある場合は自動的に再設定されます。

### Symmetry

対称性を階層ごとに表示/設定します。

### Crystal system

結晶系を表示/設定します。

### Point group

点群を表示/設定します。

### Space group

空間群を表示/設定します。軸のセッティングなどにご注意ください。

### Search

空間群の文字列を打ち込むと、その候補が右のリストに表示されます。大文字小文字が区別されます。

### Cell Volume

単位格子の体積が表示されます。

### Z

単位格子に含まれる組成式の数が表示されます。(原子情報が入力されている場合のみ)

### Density

密度が表示されます。(原子情報が入力されている場合のみ)

### Color of Profile

回折ピークを描く色を設定します。クリックすると色を設定するウィンドウが立ち上がります。

## 1.2. Atom info.

結晶に含まれる原子の情報を表示・設定します。上部リストには結晶に含まれる原子の一覧が表示され、各原子をクリックすると詳しい原子情報が画面下部に表示されます。

AddやReplaceボタンが押されないと原子情報がリストに保存されないのご注意ください。

### Add

設定した原子をリストに新規に追加します。

### Replace

設定した原子を現在選択されている原子と入れ替えます。

### Up/Down

選択した原子の順番を上/下に移動します。

### Delete

選択した原子をリストから削除します。

## Element & position

### Label

原子のラベルを入力します。

### Element

元素を表示/設定します。

### X, Y, Z

原子の分立座標を表示/設定します。0 から 1 までの実数を入力してください。1/2 や 2/3 のような分数も入力できます。

### Occ

原子の占有度を指定します。0 から 1 までの実数で指定してください。

## Debye Waller factor

### Isotropy Biso

等方的な温度散乱因子を用いて構造因子を計算します。U ではなくて B であることにご注意ください。良くわからなかったらとりあえず 0 でもかまいません。

### Anisotropy B<sub>##</sub>

非等方温度散乱因子を用います。U ではなくて B であることにご注意ください。

## Scattering factor

原子散乱因子を計算する際の価数や同位体組成の表示/

設定を行います。

## X-ray

X 線に対する弾性原子散乱因子の計算する際の原子価数を選択します。パラメータは International Tables for Crystallography volume C から引用しています。

## Electron

電子線に対する弾性原子散乱因子の計算する際の原子価数を選択します。パラメータは Peng (1998, Acta Cryst A54, 481-485) から引用しています。

## Neutron

中性子の弾性散乱長を計算する際の同位体組成を選択します。“Natural isotope abundance” か、“Custom isotope abundance” を選択することが出来ます。

後者を選択した場合は、右のようなウィンドウが立ち上がり、任意の同位体組成を設定することが出来ます。

## 1.3. Atom appearance

このタブでは結晶構造描画時の各原子の大きさや色などを競ってします。上の半分は Atom info. の説明と同じですので割愛します。

### Apply to same elements

設定した情報(イオン半径と描画色)を同元素種の原子すべてに適用します。

### Radius

原子半径を指定します。

### Atom color

原子の描画色を設定します。

### Material

描画時の原子の質感を設定します。(Ambient: 環境光の強さ; Emission: 放射光の強さ; Shininess: 反射光の強さ; Diffusion: 拡散光の強さ; Specular: 反射光の強さ; Alpha: 透明度)

## 1.4. Bonds (& polyhedra)

このタブでは結晶構造描画時に使われる結合ボンドとボンドで構成される多面体の情報を入力します。画面左にはボンド情報がリストされており、画面右には詳しい情報が表示されます。リストへの操作は Add, Replace, Delete することで行います。

### Bond list

現在設定されている Bond 情報が表示されます。

#### Add

右の詳細画面で設定したボンドをリスト最後尾に追加します。

#### Replace

リスト中の選択しているボンドと、設定したボンドを入れ替えます。

#### Delete

リスト中の選択しているボンドを削除します。

### Bond property

#### Bonding Atom (center)

ボンドを構成する一方の元素種を表示/設定します。多面体を描画するときには中心になります。

#### Bonding Atom (vertex)

ボンドを構成するもう一方の元素種を表示/設定します。多面体を描画するときには頂点になります。

#### Length between ...

ボンドの長さの下限、上限を表示/設定します。このしきい値を上回る/下回る場合は描画の対象になりません。

#### Bond Radius

描画するボンドの太さ(半径)を表示/設定します。

#### Alpha

描画するボンドの透明度を表示/設定します。

### Polyhedron property

#### Show Polyhedron

チェックするとコントロールがアクティブになり、ボンドによって構成される多面体を(多面体が成立すれば)表示します。

### Inner Bonds

チェックすると多面体の中にあるボンドを表示します。

### Center Atom

チェックすると多面体の中心原子を表示します。

### Inner Bonds

チェックすると多面体の頂点原子を表示します。

### Color

多面体の面の描画色を設定します。

### Alpha

多面体の面の透明度を設定します。

### Show Edge

チェックすると多面体の稜(頂点間を結ぶ線)を表示します。

### Color

稜線の色を設定します。

### Width

稜線の太さを設定します。

## 1.5. Ref.

結晶構造データの元となった引用情報を表示/設定します。

### Note

メモ、覚書を表示/設定します。

### Authors

引用論文の著者名を表示/設定します。

### Journal

引用論文の雑誌名を表示/設定します。

### Title

引用論文のタイトルを表示/設定します。

## 1.6. EOS

EOS (Equation Of States)から現在選択している結晶の圧力を計算します。

### Basic Info

#### Use EOS

チェックすると入力した状態方程式による圧力 P の計算を行います。

T0

状態方程式における基準温度を設定します。

T

結晶の体積測定時の温度を設定します。

P

設定したパラメータにしたがって圧力を計算し、GPa単位で表示します。

Note

文献情報。

## Isothermal Pressure

V0

圧力が 0GPa, 温度が T0 の時の体積を設定します。

Kt0

圧力が 0GPa, 温度が T0 における体積弾性率を設定します。

K'T0

圧力が 0GPa, 温度が T0 における体積弾性率の一次微分値を設定します。

Birch Murnaghan

チェックすると、Birch Murnaghan 方程式で圧力を計算します。

Vinet

チェックすると Vinet 方程式で圧力を計算します。

## Theamal Pressure

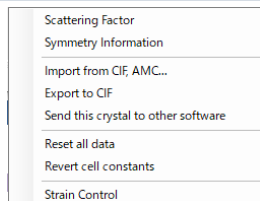
Mie-Gruneisen

チェックすると、Mie-Gruneisen 方程式で Thermal Pressure を計算します。

T-dependence K0&V0

チェックすると、温度依存を考慮した Birch Murnaghan 方程式で Thermal Pressure を計算します。

## 1.10. Context menu (right click menu)



コントロールのブランク部分を右クリックすると、上のようなメニューが現れます。

Scattering factor

結晶面のリストや構造因子を表示するウィンドウを開きます。詳しくは Scattering こちら。

Symmetry information

対象背に関する情報を表示するウィンドウを開きます。詳しくはこちら。

Import from CIF, AMC

結晶構造をインポートします。国際結晶学会の標準フォーマットである CIF 形式やアメリカ鉱物学会採用のフォーマットである AMC 形式に対応しています。

Export to CIF

現在の結晶を CIF 形式で書き出します。

Send this crystal to other software

「Crystal Information」を実装する他のソフトに結晶

の情報を送信します。たとえば ReciPro が 2 つ起動している場合でも相互に結晶の情報を送受信できます。

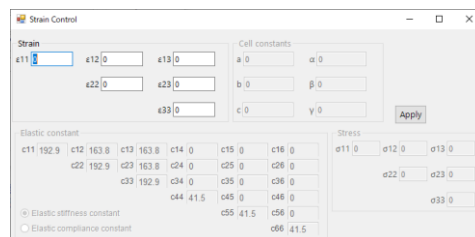
Reset all data

現在入力されている情報をすべて消去します。(使う機会はないかもしれませんが)

Revert cell constants

結晶の格子定数を、ソフトウェアが最初に読み込んだときの値に戻します。PDIndexerなどで意図せず格子定数を変更してしまったときなどに使用してください。

Strain control

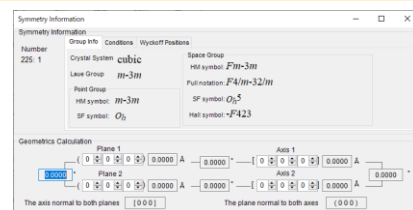


格子歪みテンソルを制御します。このコントロールが立ち上がると、元の結晶の対称性に関係なく空間群が P1 に設定されます。ε##に数値を入れると、単位格子の形状がテンソル演算され、格子定数(a, b, c, α, β, γ)が変更されます。このコントロールを終了すると、単位格子定数と空間群は元の状態に戻ります。

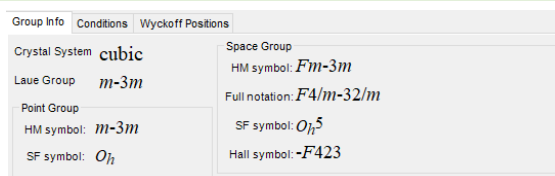
## 3. Symmetry information

このウィンドウは、現在選択している結晶の対称性に関する情報を表示し、さらに結晶面/品帯軸間の角度関係/周期長などを計算します。

左上の“Number”には、空間群の通し番号(ITA に準拠)と、その空間群に中心位置や軸交換に関するバリエーションがある場合は補助番号が表示されます。



## Group info



選択した結晶の空間群が属する結晶系、点群、ラウエ群を表示します。様々な形式の群表記を列挙します。

## Conditions



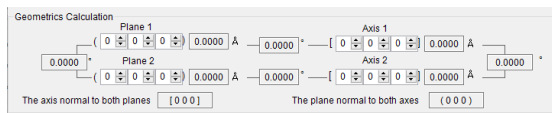
選択した結晶の空間群に関する結晶面の出現則を表示します。General conditions のみが表示されます。

## Wyckoff positions

Group info		Conditions	Wyckoff Positions			
Multiplicity	Wyck. Let.	Site Wyck. Let.	Coordinates			
-	-	-	(0,0,0)+			
24	d	1	x,y,z	-x+1/2,-y,z+1/2	-x,y+1/2,-z+1/2	x+1/2,-y+1/2,-z
			z,x,y	z+1/2,-x+1/2,-y	-z+1/2,-x,y+1/2	-z,x+1/2,-y+1/2
			y,z,x	-y,z+1/2,-x+1/2	y+1/2,-z+1/2,-x	-y+1/2,-z,x+1/2
			-x,-y,-z	x+1/2,y,-z+1/2	x,-y+1/2,z+1/2	-x+1/2,y+1/2,z

選択した結晶の空間群における Wyckoff positions が表示されます。

## Geometrics calculation



指定した結晶面あるいは晶帯軸の周期を計算します。あるいは二つの結晶面、二つの晶帯軸、結晶面と晶帯軸の間の角度を計算します

## 4. Scattering factor

Scattering Factor

X-ray

Electron

Neutron

Element

29: Cu

Ka

Value

このウィンドウは、現在選択している結晶の結晶面をリストアップし、様々な線源に対する構造散乱因子を計算します。画面の下部には各結晶面の index, multiplicity, q, 2θ, F (atomic scattering factor)などに関する情報が表示されます。

## Wave property

### X-ray

線源として X 線を指定します。特性 X 線を選択したい場合は、元素の種類および遷移条件(Siegbahn notation)を指定してください。放射光などによる X 線を選択したい場合は、Element を 0 番に指定し、エネルギーか波長を直接入力してください。

### Electron

エネルギーか波長を直接入力してください。

### Neutron

エネルギーか波長を直接入力してください。

## Powder diffraction intensities

Bragg-Brentano 光学系で多結晶体を測定したときの強度を表示します。

## Threshold of d-spacing

この面間隔以上の結晶面を計算対象にします。

## Hide equivalent planes

チェックすると結晶学的に結晶学的に等価な面の重複を排除して表示します。

## Copy to clipboard

このボタンをクリックすると、画面下部に表示されているリスト内の情報がクリップボードにコピーされます。データはタブ区切りになっており、エクセルに直接貼り付けることが出来ます。

## Hide equivalent planes

チェックすると消滅側に抵触する面を排除して表示します。