

目次

1. Overview.....	1
2. Crystal information	1
1.1. Basic info.	1
1.2. Atom info.	2
1.3. Ref.....	2
1.4. EOS.....	3
1.5. Context menu (right click menu).....	3
3. Symmetry information.....	5
4. Scattering factor.....	6

1. Overview

“Crystal Information” およびそれに付随するコントロールは、結晶に関する様々な情報を設定する機能を提供します。これらのコントロールは、ReciPro, PDIndexer, CSmanager などで利用されている共通のコントロールであり、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

The screenshot shows the 'Basic Info.' tab of the Crystal Information software. It contains input fields for cell constants (a, b, c) and angles (alpha, beta, gamma), as well as symmetry parameters (Crystal System, Point Group, Space Group). Below these, calculated values for Cell Volume, Cell Mass, Molar Volume, Molar Mass, and Density are displayed.

“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.

This is a detailed view of the 'Basic Info.' tab. It includes input fields for the six cell constants (a, b, c, alpha, beta, gamma) and three symmetry parameters (Crystal System, Point Group, Space Group). There are also search fields and a 'Show error' checkbox.

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^{-10} m)です。対称性を指定すると、格子定数に制限がある場合(例えば $a=b=c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ など)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。

Cell Mass

単位格子の重量が表示されます。

Molar Volume

1 モル当たりの体積が表示されます。(原子情報が入力されている場合のみ)

Molar Mass

1 モル当たりの重量が表示されます。(原子情報が入力されている場合のみ)

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をご注意ください。

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。

Origin shift

原子位置のシフトを行います。

Preset buttons

プリセットされた値で原点位置をシフトします。“+”あるいは“-”をチェックすることで符号を変えることができます。

Apply custom shift

Custom 値で原点位置をシフトします。

Debye Waller factor

Notation

U か B を選択してください。

Model

Isotropy か Anisotropy かを選択してください。

B## あるいは U##

温度因子を入力してください。

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. Ref.

結晶構造データの元となった引用文献の情報を表示/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。

1.4. 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 T_0 の時の単位格子体積を設定します。

Kt0

圧力が 0GPa, 温度が T_0 における体積弾性率を設定します。

K'T0

圧力が 0GPa, 温度が T_0 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¹で圧力を計算します。

Vinet

チェックすると Vinet 方程式²で圧力を計算します。

Theamal Pressure

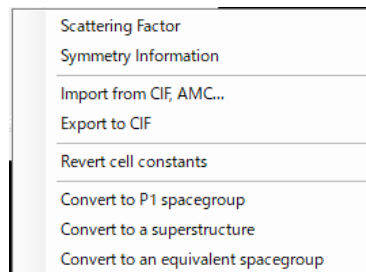
Mie-Gruneisen

チェックすると、Mie-Gruneisen 方程式³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。

1.5. 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 Factor](#) を参照してください。

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 [Symmetry information](#) を参照してください。

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

¹ Birch Murnaghan 方程式は以下の通りです。

$$P = \frac{3}{2} K_0 \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{7}{3}} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{5}{3}} \right] \left\{ 1 + \frac{3}{4} (K' - 4) \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right] \right\}$$

² Vinet 方程式による圧力の導出は、以下の通りです。

$$P = 3 K_0 \frac{(1-y)}{y^2} e^{\frac{3}{2}(K'-1)(1-y)} \quad \text{ただし、} \quad y = \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{1}{3}}$$

³ Mie-Grüneisen 方程式による thermal pressure ($\Delta P_{\text{thermal}}$)の導出は、以下の通りです。

$$\Delta P_{\text{thermal}} = (e - e_0) \Gamma / V$$

ただし、

$$e = 3 n k_B T \left(\frac{T}{\theta_0} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_0}{T}} \frac{z^3}{e^z} dz$$

$$V = \frac{v}{z} N_A \times 10^{-27}$$

$$e_0 = 3 n k_B T_0 \left(\frac{T_0}{\theta_0} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_0}{T_0}} \frac{z^3}{e^z} dz$$

$$V_0 = \frac{v_0}{z} N_A \times 10^{-27}$$

$$\theta = \theta_0 e^{\frac{\gamma_0 - \gamma}{q}}$$

$$\gamma = \gamma_0 \left(\frac{V}{V_0} \right)^q$$

z : Number of formula in unit cell

γ_0 : Grüneisen parameter at standard volume

t_0 : Standard temperature

v_0 : Standard volume (nm³)

n : Atoms per formula

q : Volume dependence of Grüneisen parameter

t_0 : Target temperature

v : Target volume (nm³)

θ_0 : Debye temperature at standard volume

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。

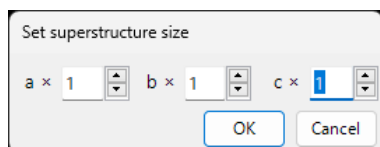
Revert cell constants

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。

Convert to P1 spacegroup

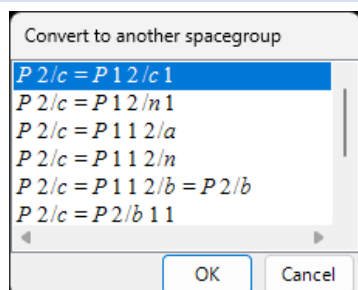
空間群を P1 に変換します。

Convert to a superstructure



空間群はそのまま、格子定数 a , b , c を整数倍した超格子に変換します。

Convert to an equivalent space group



可能な場合、軸セッティングを変更します。

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/晶帯軸間の角度関係/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。

Symmetry Information window showing group info, conditions, and Wyckoff positions. The Crystal System is cubic, Laue Group is $m\bar{3}m$, Point Group is $m\bar{3}m$, HM symbol is $m\bar{3}m$, SF symbol is O_h , Space Group is $Fm\bar{3}m$, HM symbol is $Fm\bar{3}m$, Full notation is $F4/m\bar{3}2/m$, SF symbol is O_h^5 , and Hall symbol is $-F423$. Geometric Calculation shows Plane 1 and Plane 2 with their respective axes and normals.

Group info

Group info window showing crystal system, laue group, point group, and space group. The Crystal System is cubic, Laue Group is $m\bar{3}m$, Point Group is $m\bar{3}m$, HM symbol is $m\bar{3}m$, SF symbol is O_h , Space Group is $Fm\bar{3}m$, HM symbol is $Fm\bar{3}m$, Full notation is $F4/m\bar{3}2/m$, SF symbol is O_h^5 , and Hall symbol is $-F423$.

選択した結晶の空間群が属する結晶系、ラウエ群、点群を表示します。様々な形式(Hermann–Mauguin notation, Schoenflies notation, Hall notation)の表現を列挙します。

Conditions

Conditions window showing limiting possible reflections. The conditions are: $h00: h=2n: 2_1/[100]$, $0k0: k=2n: 2_1/[010]$, $00l: l=2n: 2_1/[001]$, $h k 0: h=2n: a \perp [001]$, $0 k l: k=2n: b \perp [100]$, and $h k l: h=2n, k=2n, l=2n: c \perp [111]$.

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。

また、末尾にその出現則に関わる並進対象要素も表示されます。

Wyckoff positions

Multiplicity	Wyck. Let.	Site Wyck. Let.	Coordinates			
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

Geometrics Calculation window showing plane and axis calculations. It displays Plane 1 and Plane 2 with their respective axes and normals, and calculates the angle between them.

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

h	k	l	Multi.	d (Å)	q (2 π /d)	2 θ (°)	F _{real}	F _{inv}	F	F ²	Rel. Int. (%)
1	0	1	4	3.863587	1.626257	23.01998	5.053335	7.105427E-15	5.053335	25.5362	0.3562162
0	0	2	2	3.391	1.8529	26.28192	19.81339	1.065814E-14	19.81339	392.5706	5.476148
1	1	0	4	3.382277	1.857679	26.35092	-22.55304	-3.608225E-14	22.55304	508.6397	7.095249
1	1	1	8	3.026756	2.075881	29.51243	-11.64943	-1.509903E-14	11.64943	135.7093	1.893072
0	2	0	2	2.435	2.580364	36.91558	47.69075	-8.881784E-15	47.69075	2274.408	31.72676
1	1	2	8	2.394709	2.623778	37.55971	-48.66084	-1.199041E-14	48.66084	2367.878	33.03062
2	0	0	2	2.3505	2.673127	38.29339	43.17611	-1.021405E-14	43.17611	1864.177	26.00426
0	2	1	4	2.291762	2.741639	39.31468	-6.263229	-4.440892E-15	6.263229	39.22804	0.54721
1	2	0	4	2.162162	2.905973	41.77788	-14.42024	-3.108624E-14	14.42024	207.9432	2.900696
2	1	0	4	2.116838	2.968194	42.71574	-25.41981	-1.776357E-14	25.41981	646.1665	9.013675
1	2	1	8	2.060007	3.05008	43.95461	-17.5664	-7.993606E-15	17.5664	308.5785	4.304504

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, 2 θ , 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できます。

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。