

新構造精密化・三次元可視化システム RIETAN-FP・VESTA

泉 富士夫(物材機構)、門馬綱一(東北大)

この数年、われわれは多目的パターンフィッティング・システム RIETAN-2000 と三次元可視化システム VENUS の改訂に注力してきた¹⁾。RIETAN-2000 については、既存コードに新たなルーチンを継ぎ足すという現実路線を選び、RIETAN-FP²⁾ へとアップグレードした。3D 可視化プログラム VICS と VEND は C++ で書き直し、単一システム VESTA³⁾ (http://www.geocities.jp/kmo_mma/で公開)として統合した。

RIETAN-FP に追加した主な新機能は次の通りである:

- プリプロセッサ New Tink の拡張 (Select ブロック、If・Select ブロックの二重ネスト)。
- STRUCTURE TIDY⁴⁾ の標準軸設定に統一し、LAZY PULVERIX で回折指数 hkl と多重度 m を発生。
- 最大三つの選択配向ベクトルを扱える拡張 March-Dollase 選択配向関数。
- VESTA との連携による二面角に対する抑制条件の付加。
- メタデータを利用した原子間距離・結合角に対する抑制条件指定の省力化。
- Microabsorption と共存無定形物質を考慮した定量分析。
- 秀丸エディタのマクロ機能とタブモード付きウィンドウを徹底活用した RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境 (図 1)。

マクロメニュー、ツールバー	マクロ→3D可視化	マクロ→その他
RIETAN	VESTA	拡張子分岐
Plot	VESTA/ins	XY→RIETAN
ORFFE	VESTA/lst	RIETAN→General
PRIMA	VESTA/cif	PowderX...
ALBA	VESTA/den	Powder 4...
lst2cif	VESTA/pri	EDMA
res2ins...	VESTA/vesta	MADEL
Alchemy		マニュアル
EXPO...		Bond valence parameters
SUPERFLIP		Space groups

緑文字：ファンクションキー

図 1 RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境に含まれる自作マクロ

VESTA では、ツールキット wxWidgets を用いて GUI を構築するとともに、イメージの質、動作速度、スケーラビリティ、利便性、安定性を劇的に向上させた。VESTA は Windows、Mac OS X、Linux 上で動き、それぞれの OS に固有な外見をもつ。タブ付きマルチウィンドウ表示は操作性やリソースの節約などの点で優れている。原子や結合の探索アルゴリズム、等値曲面の形状計算アルゴリズム、OpenGL を駆使した 3D グラフィック・エンジンなど中核的ルーチンも一新し、俊敏な動作を実現した。

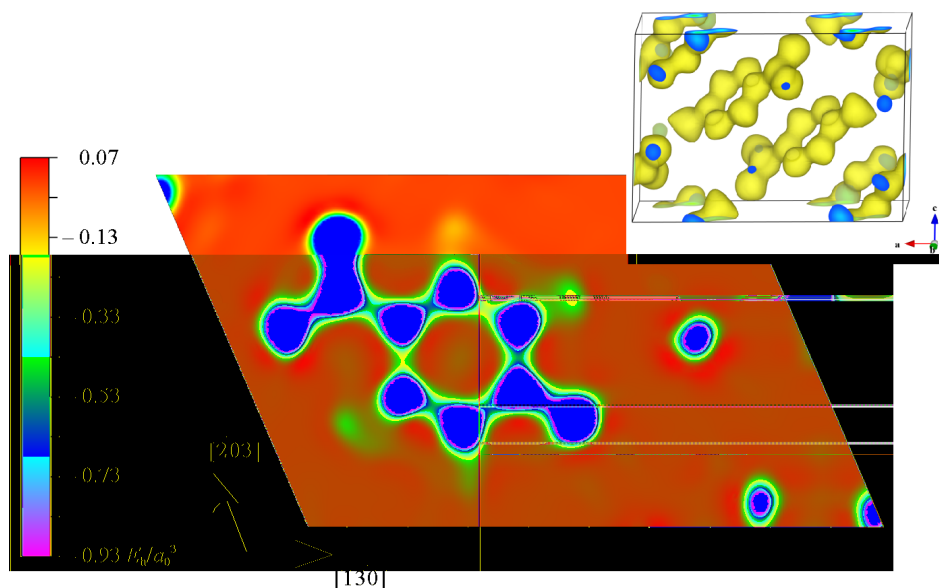


図2 粉末 X 線回折データの MPF 解析により求めた *p*-nitroaniline の電子密度分布 (等値レベル: 1 \AA^{-3}) と VESTA で計算した電子エネルギー密度 $h_e(\mathbf{r})$ の (312) 面上での分布

さらに、多重度 + Wyckoff 文字、サイト対称性、有効配位数、電荷分布^{5,6)}などの出力を増やすとともに、次の結晶学関連ユーティリティを利用できるようにした:

- a) STRUCTURE TIDY⁴⁾: 結晶データの標準化と Niggli-reduced cell の導出。
- b) RIETAN-FP: 粉末 X 線・中性子回折パターンのシミュレーション。
- c) MADEL: サイト・ポテンシャルとマーデルング・エネルギーの計算。
- d) ELEN: Tsirelson⁷⁾ の方法により電子密度をラプラシアンと 3 種類のエネルギー密度へ変換 (図 2)。

上記のアップグレードにより、VESTA は単なる 3D 可視化ソフトに留まることなく、結晶学の応用にも使える高度なツールへと脱皮した。今後もブラッシュアップと機能拡張を怠らず、構造解析と電子状態計算の架け橋として成熟させていく所存である。

文献

- 1) 泉 富士夫, 門馬綱一, セラミックス, **43**, 902 (2008).
- 2) F. Izumi and K. Momma, *Solid State Phenom.*, **130**, 15 (2007).
- 3) K. Momma and F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.*, **41**, 653 (2008).
- 4) L. M. Gelato and E. Parthé, *J. Appl. Crystallogr.*, **20**, 139 (1987).
- 5) R. Hoppe, S. Voigt, H. Glaum, J. Kissel, H. P. Müller, and K. Bernet, *J. Less-Common Met.*, **156**, 105 (1989).
- 6) M. Nespolo, G. Ferraris, and H. Ohashi, *Acta Crystallogr., Sect. B*, **55**, 902 (1999).
- 7) V. G. Tsirelson, *Acta Crystallogr., Sect. B*, **58**, 632 (2002).