結晶構造作画プログラム ATOMS

無機材質研究所 泉 富士夫

Fujio IZUMI: ATOMS, a Program for Drawing Crystal Structures

- (1) 著作者: Dr. Eric Dowty, SHAPE SOFTWARE, 521 Hidden Valley Road, Kingsport, TN 37663, USA. 電話: 615-239-3258, ファックス: 615-239-3003.
- (2) 使用計算機: IBM PC/XT, AT, PS/2およびMacintosh. 以下の記述は, Macintosh用バージョン1.0を改良途上のテスト用暫定版を試用した経験に基づいていることをお断りしておく.
- (3) 入手方法: SHAPE SOFTWARE が395ドルの価格で販売している.
- (4) 概要

分子, 高分子, 結晶を含むあらゆるタイプの原子構造を描画・印刷するプログラムである. 1670万種類もの色を使いわけて画面表示する(24ビット・フルカラー・ビデオボード使用時)のはもとより, ドットプリンター, レーザープリンター, カラープリンターや多ペンのプロッターにも対応している.

結晶データや作図のために必要なパラメーターなどは, 階層構造をもつメニューからユーザーが項目を選択し, キーボードから入力する仕組みになっている. サイト名と原子座標については, 結晶解析のプログラムなどにより作成したファイルから, 指定したフォーマットで読み込むことも可能である. 230の空間群と32の点群の対称操作がデータベース化されているため, 番号あるいは記号を入力することにより簡単に呼び出せる.

構造を作図する範囲は, 五つの異なる方法から, いずれか一つを選んで指定する. 原子と結合はつぎの四通りのモード(およびこれらの組み合わせ)で, 無限遠点あるいは任意の位置に置いた視点からの投影図として表現する: ① 球状原子と結合(球棒模型, 第1図), ② 結合(線)だけ(骨格模型), ③ たがいに重なり合った球状原子(空間

第1図 サッカーボール状分子 C_{60} .

第2図 Tetranitratobis(triphenylphosphine oxide) - thorium(IV)¹⁾.

充填模型, 第2図), ④ 配位多面体(第3図).

ATOMSは一定の照射角で光を当て, 色彩あるいはドットパターン密度(白黒の場合)を連続的に変化させることにより, 原子, 結合および配位

第3図 $[\text{CuO}_6]$ と $[\text{TlO}_6]$ 配位多面体を含む超伝導酸化物 $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_6$ の理想化した結晶構造²⁾。

多面体に陰影をつける。奥へ向かうにつれて画像を暗くしたり、自動的にステレオ対を描くこともできる。Macintosh上での互換性の高いPICTフォーマット³⁾やEPSF⁴⁾の画像データ・ファイルを作成する機能も備えている。クリップボードに画像を一時的にPICTデータとして保管すれば、別のソフトウェアで編集中の文書や図の中に張り込める。

(5) 特長

ATOMSの最大の利点は、Post Scriptコードをプリンターおよびファイルへ出力できることだ。プリンターの分解能を指定すれば、その分解能を最大限に活かしたコードを作成してくれる。もちろん、この機能を享受するには、Post Scriptインタープリターを装備したレーザープリンターが必要となる。第1図から第3図は、ATOMSで作成したEPSFファイルをSPARCstation 2へ転送し、分解能400dpi(dots per inch)のSPARC-printerでプリントしたものである。画面上では非常に美しく立体的な結晶模型を表示するものの、プリンター出力を見るとがっかり——というプログラムが多い中で、胸を張って論文やOHPシート用に使える高品質の構造図が得られるようになったのは、この類の図を必要とする機会の多い

筆者にとって、願ってもないことだった。

直接プリンターへ出力せずに、PICT形式やEPSFのファイルを他のグラフィック・ソフトウェアで読み込んだ後に、文字や図形データを追加したり(第3図)、原子の模様を変えたりして、好みに応じて修飾・加工するのも自由自在である。残念ながら、ATOMSで作成したEPSFファイルの内容を表示かつ加工できるMacintoshのソフトウェアは、筆者の調べた範囲では見つからなかった。このため第3図中の文字や矢印は、SPARCstation 2のOpenWindows上で動くグラフィック・ソフトウェアIslandDrawにより追加せざるを得なかった。

画面を見ながら、描いた図形全体をa, b, c軸のまわりに指定した角度だけ回転したり、不要な原子を削除するように指示する機能もある。回転や削除を行なった結果はディスプレイ上でただちに確認できるので、適切な方向から見た、所望する範囲の構造を描くのに要する時間は、比較的短くてすむ。

残念なのは、Macintoshでは常識となっているグラフィカル・ユーザー・インターフェース(GUI)を採用していないことである。英字や番号をいちいち打ち込んでメニューを選択していくのは、キーボードから手を離すことを嫌うブラインド・タッチの実践者を除けば、あまり楽しい作業ではあるまい。マウス、プルダウン・メニュー⁵⁾、ダイアログ・ボックス⁶⁾などを駆使した、明快かつ親しみやすい操作を期待すると、まったく当てがはずれることになるだろう⁷⁾。

しかし、Post Scriptコード出力機能はこの欠点を補って余りあるほど魅力的であり、一度その強力なグラフィック能力の醍醐味を味わうと、他の結晶構造作図プログラムが色あせたものに見えてくるのも事実である。筆者がATOMSを使い始めたのは最近のことだが、これまで愛用してきたORTEP-IIは、原子や結合に陰影をつけられないので、異方性熱振動を表現したい場合を除けばほとんど見向きもしなくなり、もっぱらATOMSで構造図を作成するようになってしまった。

(6) ユーザーへの対応

Dowty氏は現在も精力的にATOMSの機能と使い勝手の向上に取り組んでいる。実際に使用してみて、バグや改善すべき点があったら、ただちに彼に知らせるとよい。ユーザーに対するサービ

スは非常に良心的で、バグはただちに修正してくれる。機能の追加についても、妥当かつ技術的に可能なものならば、将来のバージョンアップ時に実現してくれるだろう。

文献および注

- 1) K.M.A. Malik and J.W. Jeffery: Acta Crystallogr., Sect. B, **29**, 2687 (1973).
- 2) F. Izumi, J.D. Jorgensen, Y. Shimakawa, Y. Kubo, T. Manako, Shiyong Pei, T. Matsumoto, R.L. Hitterman and Y. Kanke: Physica C, in press.
- 3) Apple 社が公開している標準的な画像情報保存形式。ほとんどの Macintosh 用グラフィック・ソフトウェアは PICT ファイルを読み込むことができる。
- 4) Encapsulated PostScript Format の略。Adobe 社の開発したページ記述言語 Post Script のコードとビットマップ画像を一緒にしたもの。
- 5) 画面最上部のメニューバー上に並んだタイトルの一つをマウスで選択すると、垂れ幕がぶら下がるように表示されるメニュー。
- 6) ユーザーの入力や操作が必要になったとき表示される対話型入力用の窓。
- 7) Macintosh 的な GUI をもつソフトウェアを望む方には、Ball & Stick 3.0 (Cherwell Scientific Publishing) をお勧めする。ただし、主に分子の描画を目的としているため、配位多面体は描けない。このほか、アニメーションも楽しめる MolView (Jean-Michel CENSE) という素晴らしいプログラムがフランスで開発されつつある。