

ICDD PDF-4+ 2011 の結晶構造データを VESTA で描画する方法

名古屋工業大学 先進セラミックス研究センター

[井田 隆](#)

(ICDD Regional Co-chair of Eastern Pacific Rim)

[ICDD PDF-4+](#) (International Centre for Diffraction Data, Powder Diffraction File) には原子座標が記載されたデータがかなり多く含まれています (PDF-2 には原子座標が収録されていません)。このデータを [VESTA](#) で読み込み表示する方法についてのメモを公開します。

ICDD PDF-4+ 2011 (2011年度版) と VESTA ver. 3.0.7 で確認した方法であり、新しい版では操作のしかたが変わるかもしれないことには注意してください。

1. PDF-4+ から目的の PDF カードのウィンドウを表示する。
2. PDF カードウィンドウの Tools メニューから Simulated Profile を選択する。
3. Simulated Profile ウィンドウの File メニューから Save ... を選択する。
4. Save ダイアログ上の file type ポップアップメニューから CIF を選択し、適当なファイル名 (デフォルトで可) をつけて保存する。
5. VESTA の File メニューから Open ... を選択し、保存された CIF ファイルを開く。

ICDD PDF-4+ 2011 では、PDF カードウィンドウの File メニューから CIF ファイルを保存できるオプションが提供されていないので、わかりにくいと思います。また、以上の操作で原子座標のデータ自体は VESTA で読み込むことができますが、単位胞の軸や原点位置のとりかたが整合していない場合があります。そのために以下の操作が必要です。

6. PDF-4+ の PDF カードウィンドウの Tools メニューから 3D structure を選択する。この操作で描画される投影図には正しい構造が表示されているはずです。
7. VESTA で描画される投影図が一致していない場合、VESTA の Edit ► Edit Data ► Unit Cell ... を選択し、Setting: の下のポップアップメニューを [Update structure parameters to keep 3D geometry] から [Keep structure parameters unchanged] に変更し、PDF-4+ に記載された空間群番号を指定、セッティング Setting の選択項目を変更して [Apply] ボタンをクリック、VESTA で描画される投影図と PDF-4+ 3D structure の投影図を比較する。投影された構造が一致するセッティングが見つかるまでこの操作を繰り返す。