

# セラミストのためのパソコン講座ミニシンポジウム 「三次元可視化技術のインパクト」

3月24日(月) 9:00~12:00, L会場

1. 9:00~9:10 三重県科学技術振興センター 稲垣順一  
CD-ROM「セラミストのためのパソコン講座」について
2. 9:10~10:20 物質・材料研究機構 泉 富士夫  
結晶構造と電子・原子核密度の3D可視化システム VENUS
3. 10:20~10:50 東京工業大学 八島正知  
粉末X線・中性子回折による構造解析へのVENUSの応用
4. 11:00~11:30 産業技術総合研究所 池田卓史  
微細孔物質の構造解析における可視化テクノロジー
5. 11:30~12:00 産業技術総合研究所 高橋靖彦  
単結晶X線回折で求めた電子密度と電子状態計算結果の可視化

昨年12月に刊行されたCD-ROM「セラミストのためのパソコン講座」には、三次元(3D)可視化システムVENUSが多目的パターンフィッティング・システムRIETAN-2000とともに収録されており、当CD-ROM書籍の付加価値を高めています。

VENUSを使えば、

- (1) 結晶構造(配位多面体、棒・球棒・空間充填・針金模型、点表面、熱振動楕円体)、
- (2) 磁気構造(磁気モーメントを表示)、
- (3) 粉末X線・単結晶X線・中性子回折データから最大エントロピー法(MEM)やフーリエ合成により求めた電子(ラプラシアンも含む)・原子核密度分布、
- (4) WIEN2k(バンド構造計算)で計算した電子密度、SCAT(DV-X $\square$ 法)とGaussian 98(分子軌道法)で求めた電子密度、波動関数、静電ポテンシャル、

をWindows機上で手軽に3D視覚化できます。球棒・棒模型と等値面(isosurface)を重ね合わせて表示することも可能です。OpenGL対応のビデオカードを搭載したマシン上では、グラフィック・ワークステーション顔負けの高速3Dグラフィックを操れます。

VENUSは市販のソフトを凌駕する高い機能を誇っています。たとえばCIF、ICSD、PDBなど18種類もの結晶データファイルを読み込み、TIFF、EPS、JPEG 2000など9種類のグラフィックファイルを書き出せます。4つの回転モードと自動原子サーチ機能を備えており、水素結合、対称操作、原子間距離と結合角(esdつき)、2種の歪みパラメーター、bond valence sumなども表示できます。

さらに、超高速MEM解析プログラムPRIMAも最近、完成しました。PRIMAは従来のソフトMEEDに比べ桁上のスピードでMEM解析を実行できます(リートベルト解析より速い!)。PRIMAの出現により、高価なワークステーションや並列計算機など必要なくなりました。リートベルト解析終了後にPRIMAによるMEM解析、さらにはVENUSによる密度分布の可視化を励行し、構造モデルの妥当性をチェックすることが推奨されます。そのような一連の手続きによる解析例として、新超伝導層状化合物 $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ の構造解析にRIETAN-2000+PRIMA+VENUSの組み合わせを利用して得た成果(*Nature*, 3月6日号)を講演2で紹介します。

VENUSとPRIMAは無機材料の結晶構造および電子構造を3次元的に理解し、セラミストの創造性を拡大するための道具として数多くの研究に貢献すると確信しています。VENUSはフリーソフトウェアですから、物質構造に関する教育にも向いています。本ミニシンポジウムを通じて、3D可視化技術の存在意義と能力について理解を深めていただければ幸いです。