

# CSD-Core: Mercury [表示機能]

星野学 (帝京大学)

[hoshino.manabu.ly@teikyo-u.ac.jp](mailto:hoshino.manabu.ly@teikyo-u.ac.jp)

蛋白研/JAICI合同 CSD利用セミナー2025 (2025/08/21)

# はじめに：有償／無償について

Mercury



無償版

非商用利用（アカデミック）のみ  
基本的な表示機能に限定

有償版 (CSD-core)

全機能が利用可能  
企業の方は有償版を利用

無償版で利用できない機能には  が表示されています

# 結晶構造を表示させるソフトウェア

\*もちろん、他にもたくさんあります

Mercury



結晶構造の表示  
と探索

解析「結果」の  
評価に役立つ

shelXle



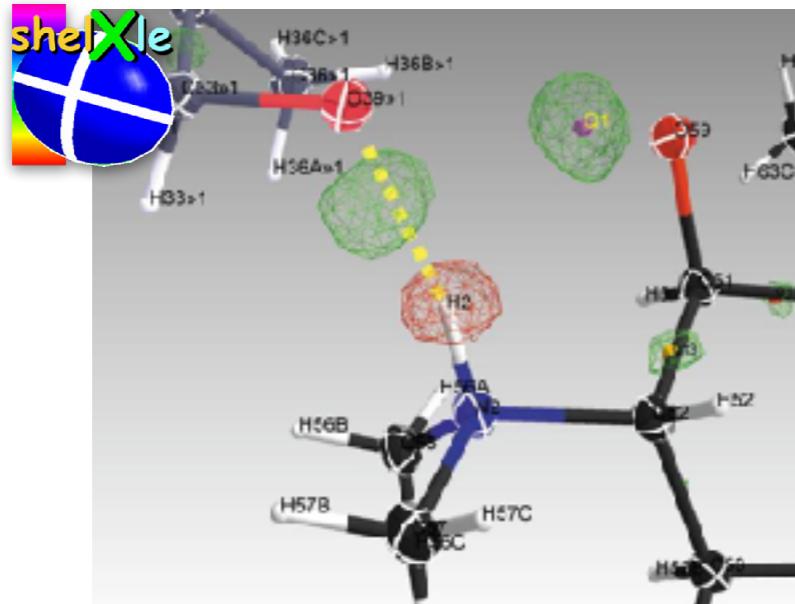
*SHELXL*のインターフェース

Olex2

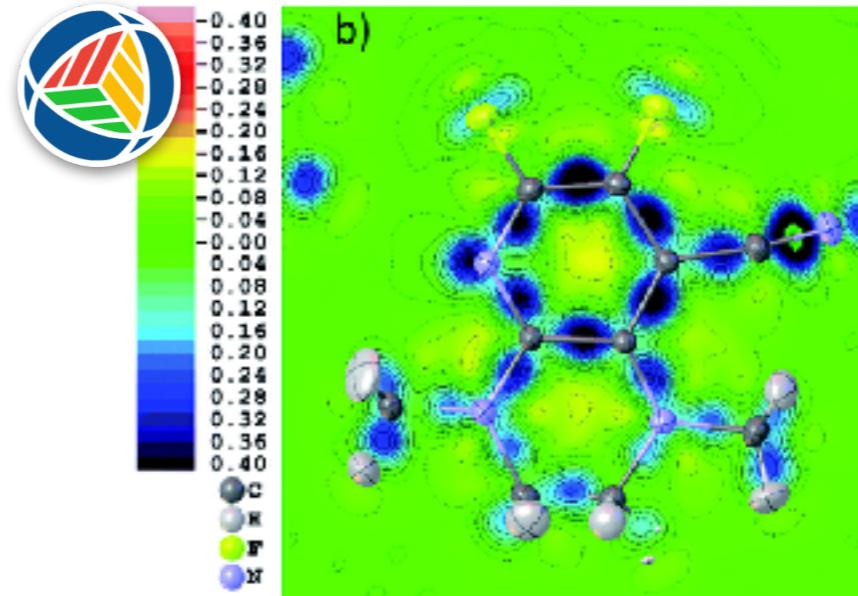


解析「過程」を見るのに役立つ

# 電子密度分布の表示



Hübschle *et al.*, *J. Appl. Cryst.*,  
44, 1281-1284 (2011)



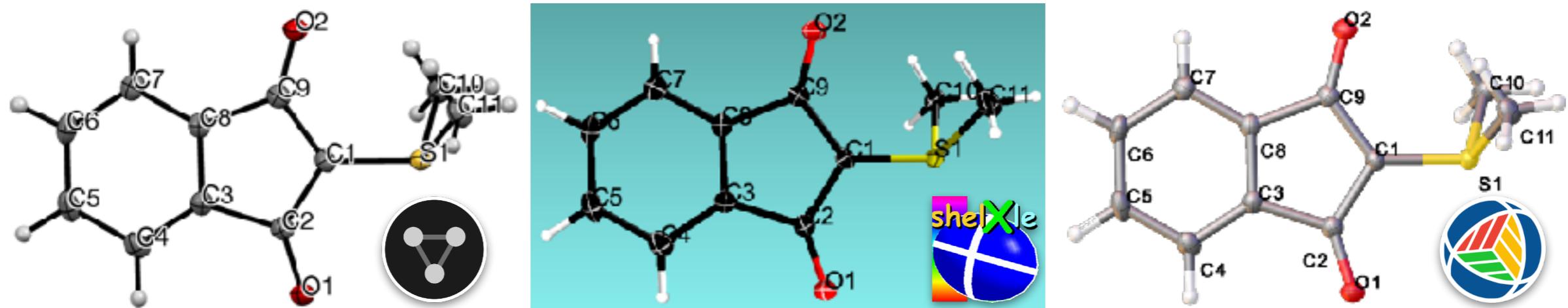
Kleemiss *et al.*, *Chem. Sci.*,  
12, 1675-1692 (2021)

3次元的な電子密度  
(差電子密度) 分布  
の表示

任意の平面における  
電子密度 (差電子密  
度) 分布の表示

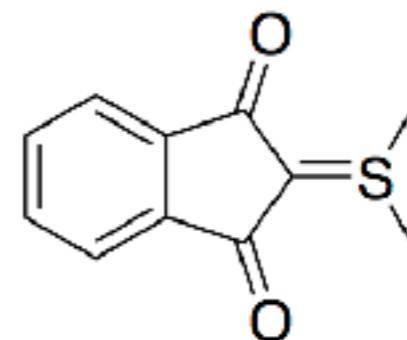
Mercuryでは表示することができません

# ORTEP図の表示



同じデータで表示したYLID\*のORTEP図

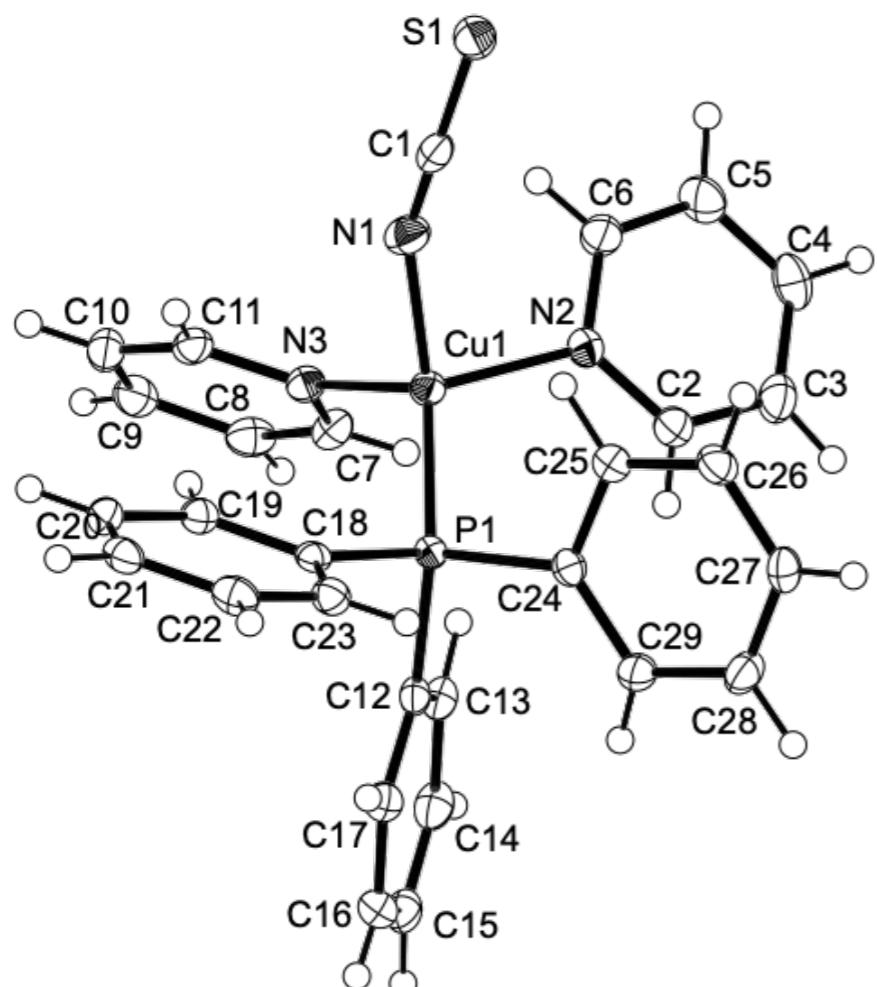
\*2-dimethylsulfuranylidene-1,3-indanedione



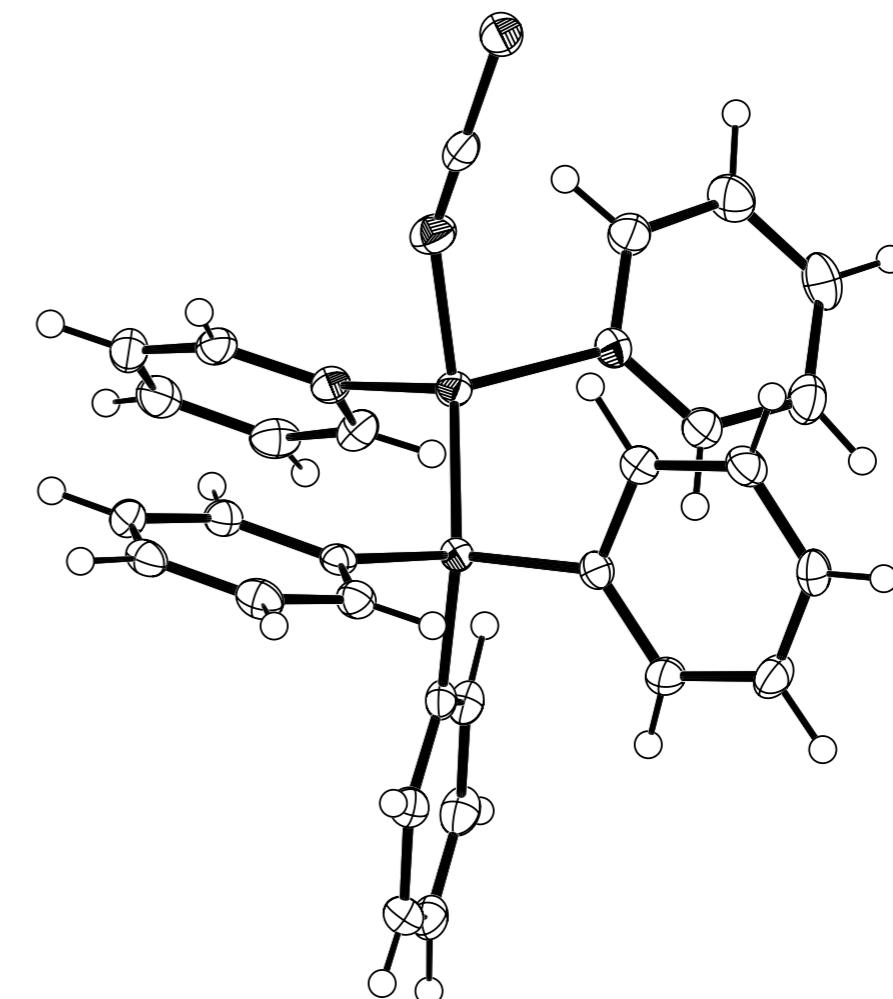
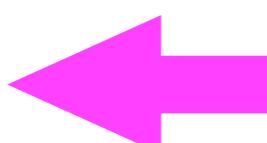
好みは人それぞれ、といった具合  
原子ラベルの位置、気になりませんか？

# ラベル付記でよるあるあること

原子が多くなると、ラベルが混み合いがち



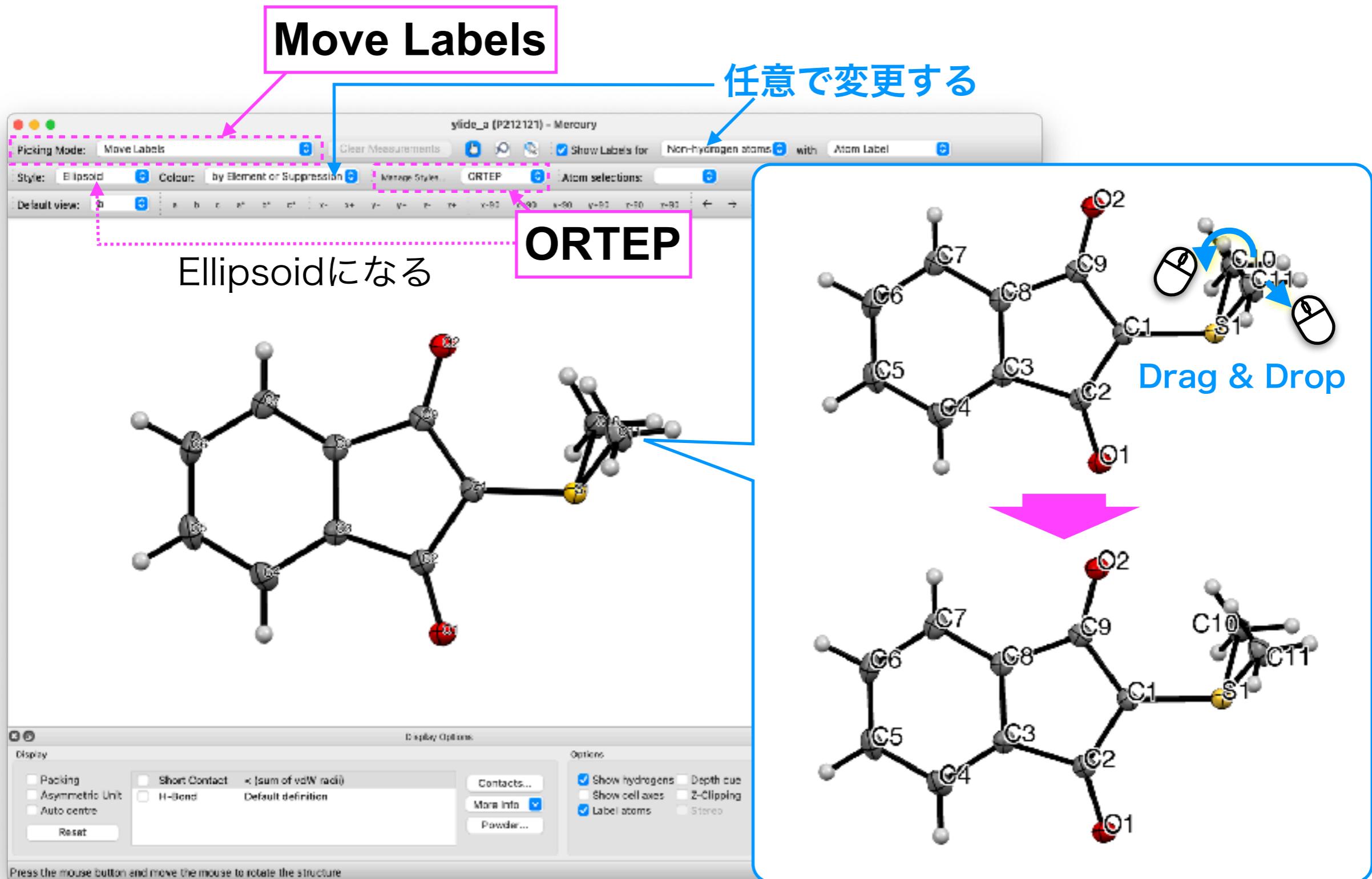
手作業！

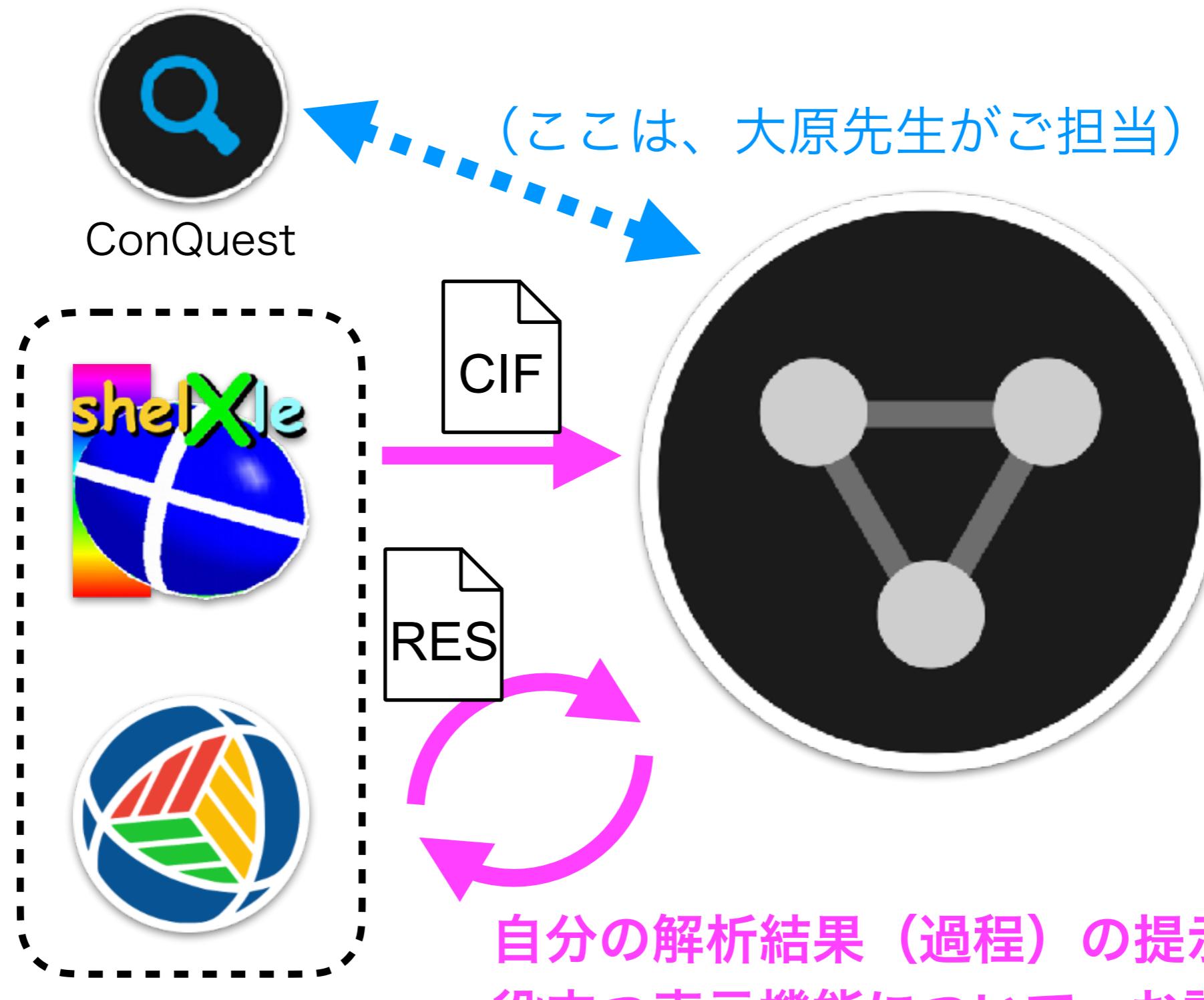


\*Olex2でPostScript形式で出力

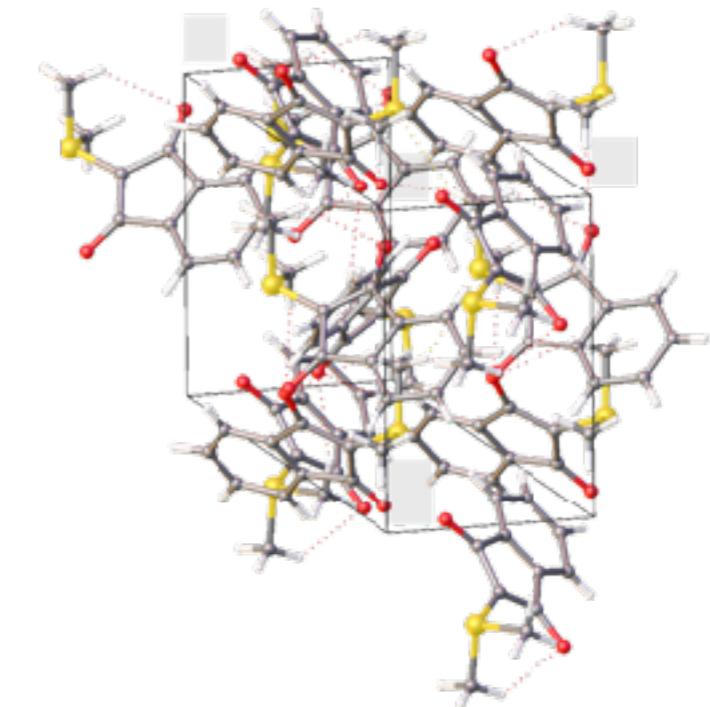
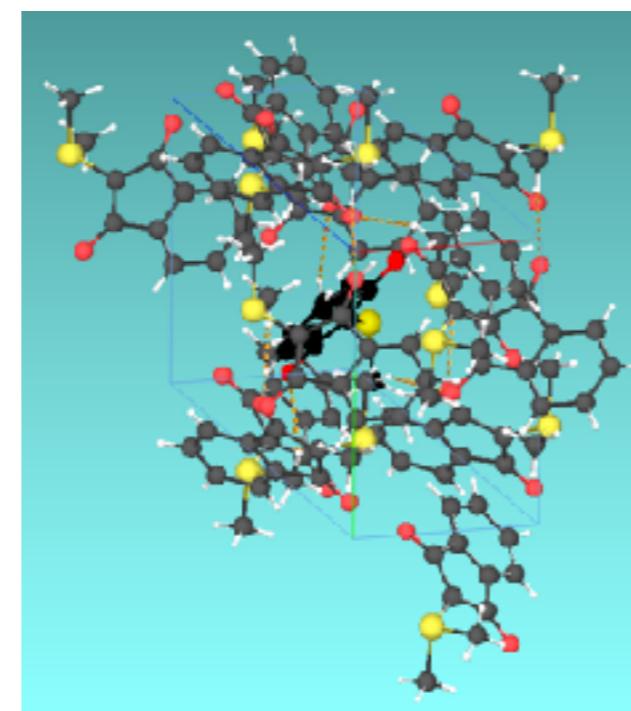
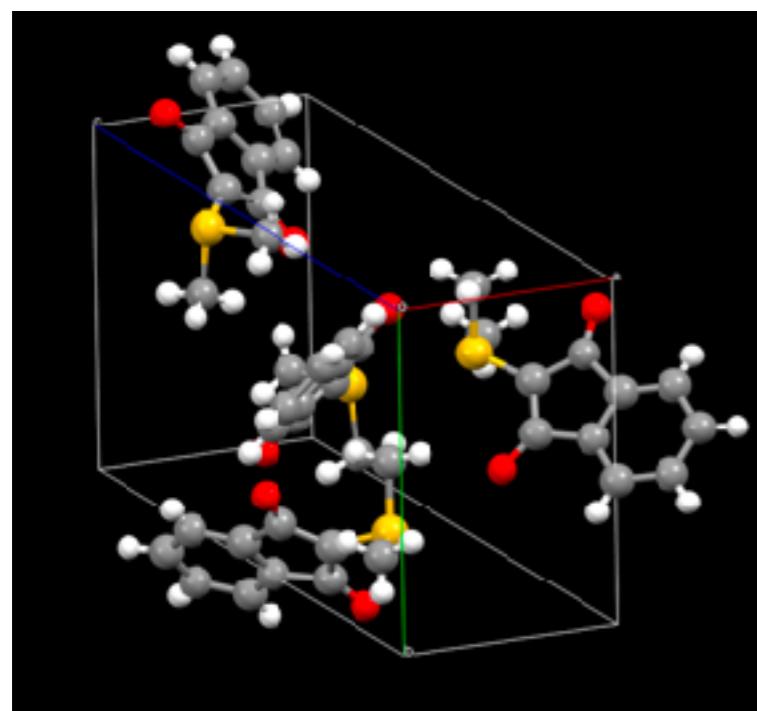
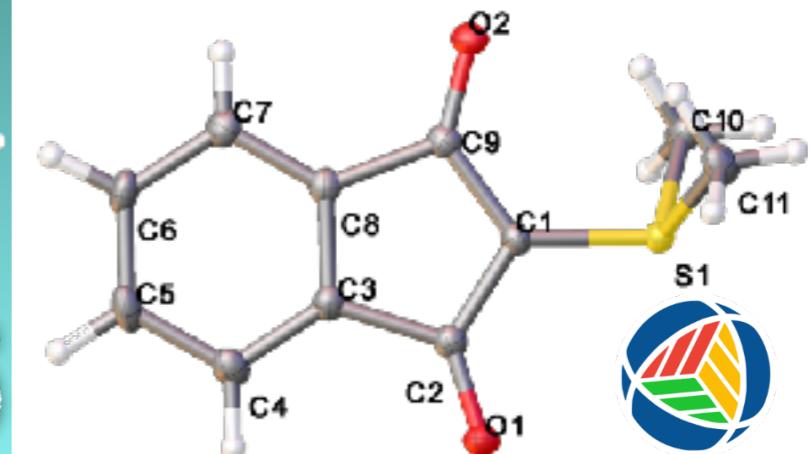
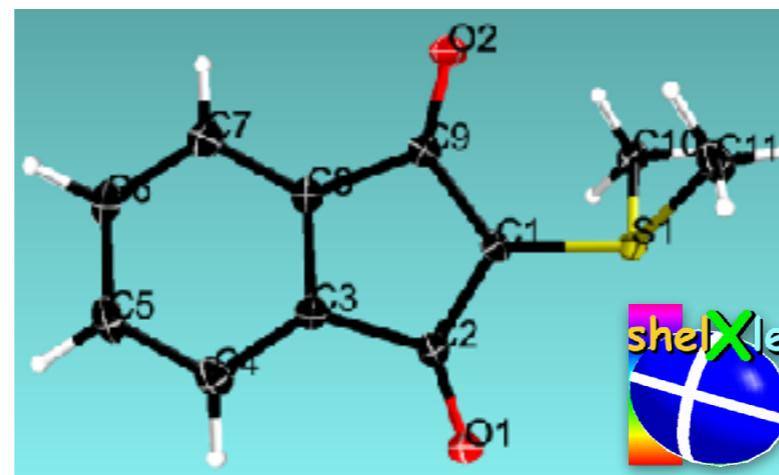
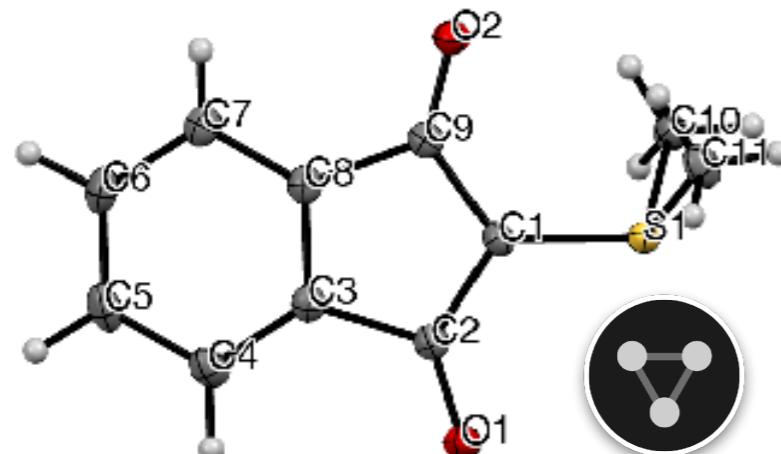
Hoshino & Ohgo, *Chem. Eur. J.*, **30**, e202401715 (2024)

# 原子ラベルの位置を動かす



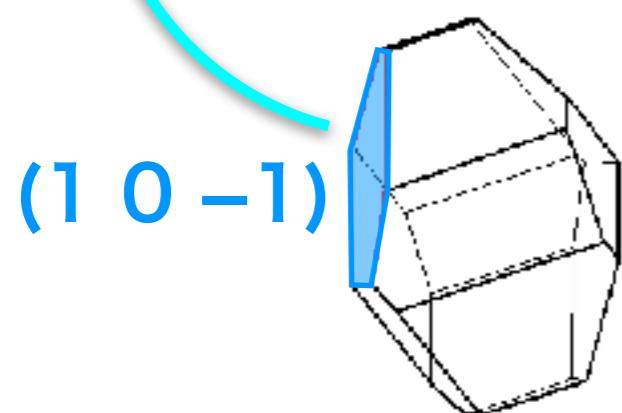
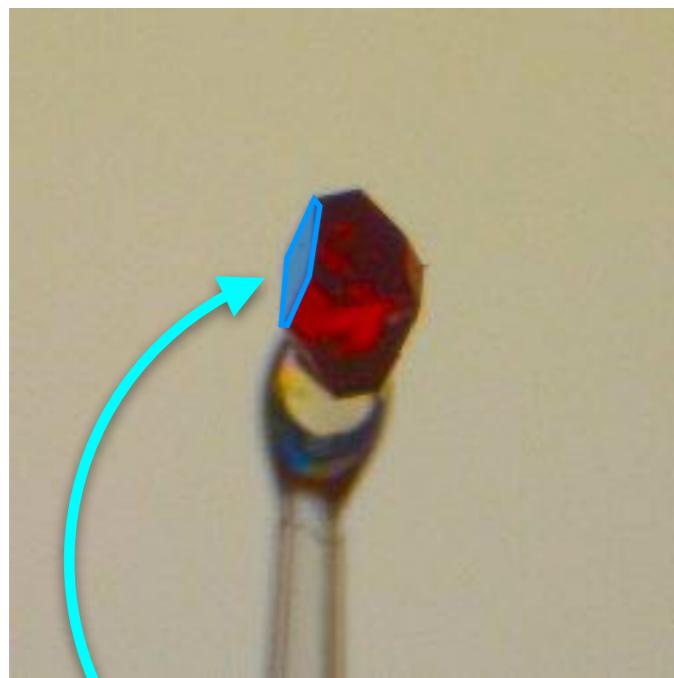


# YLIDの結晶構造を表示

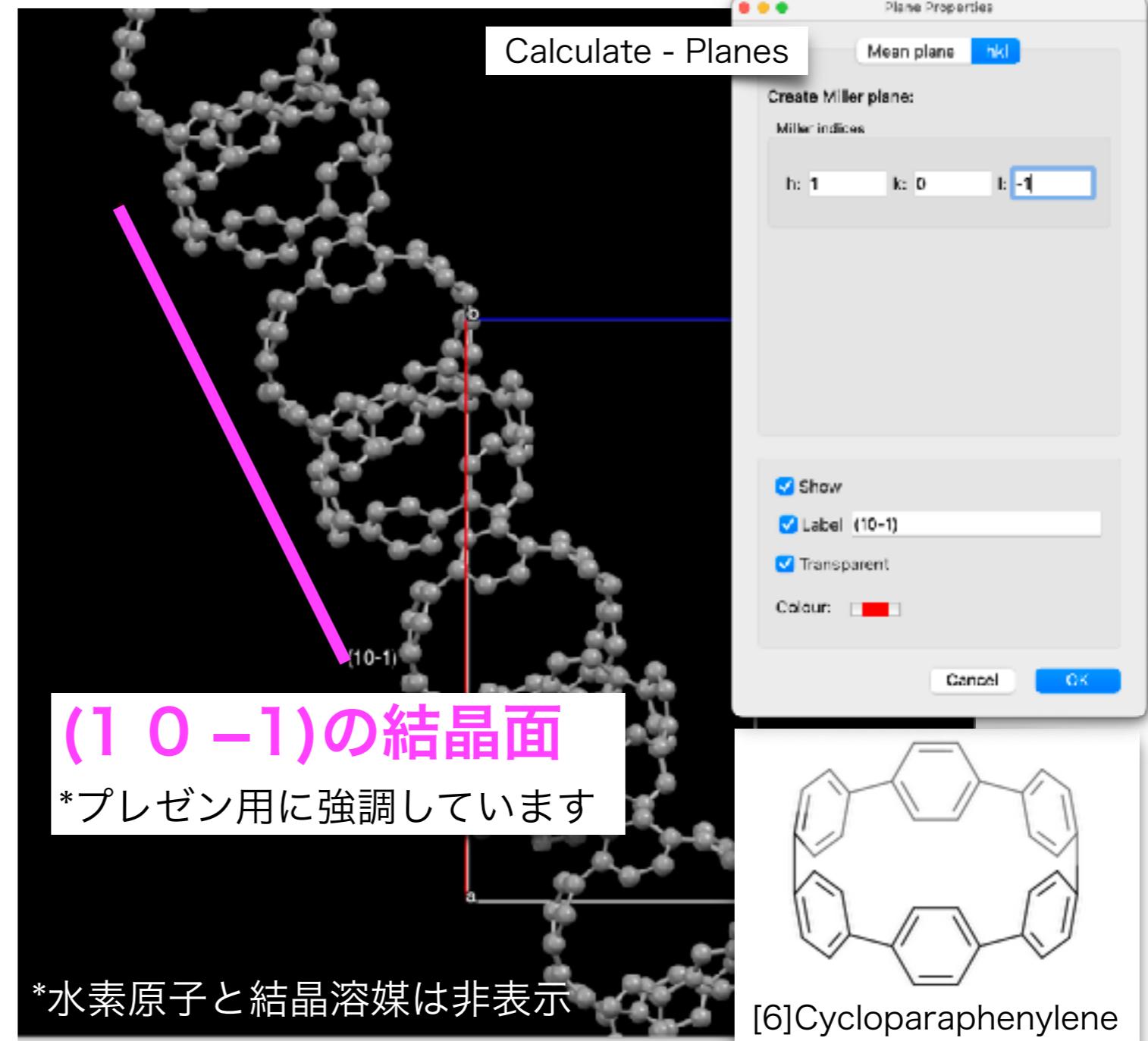


Mercuryでは繰り返し単位としての結晶構造が理解しやすい

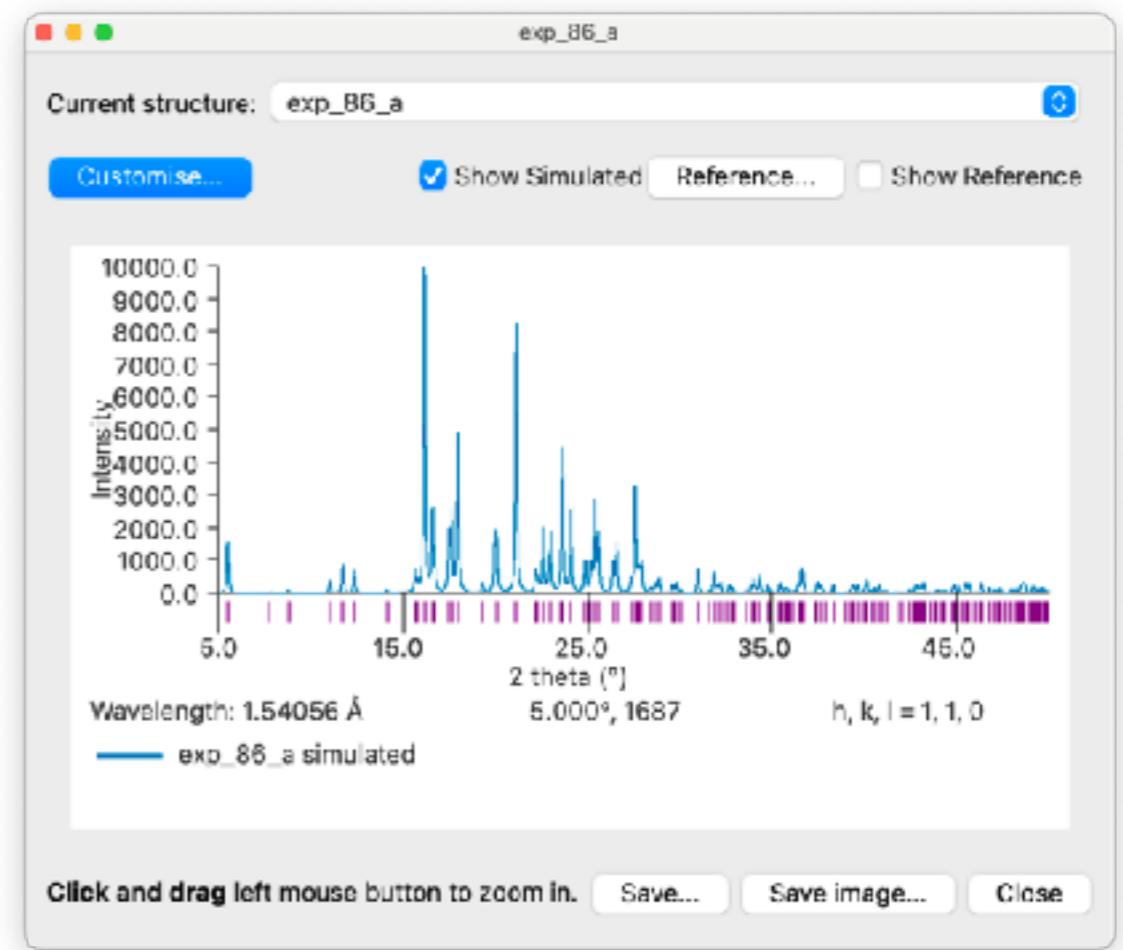
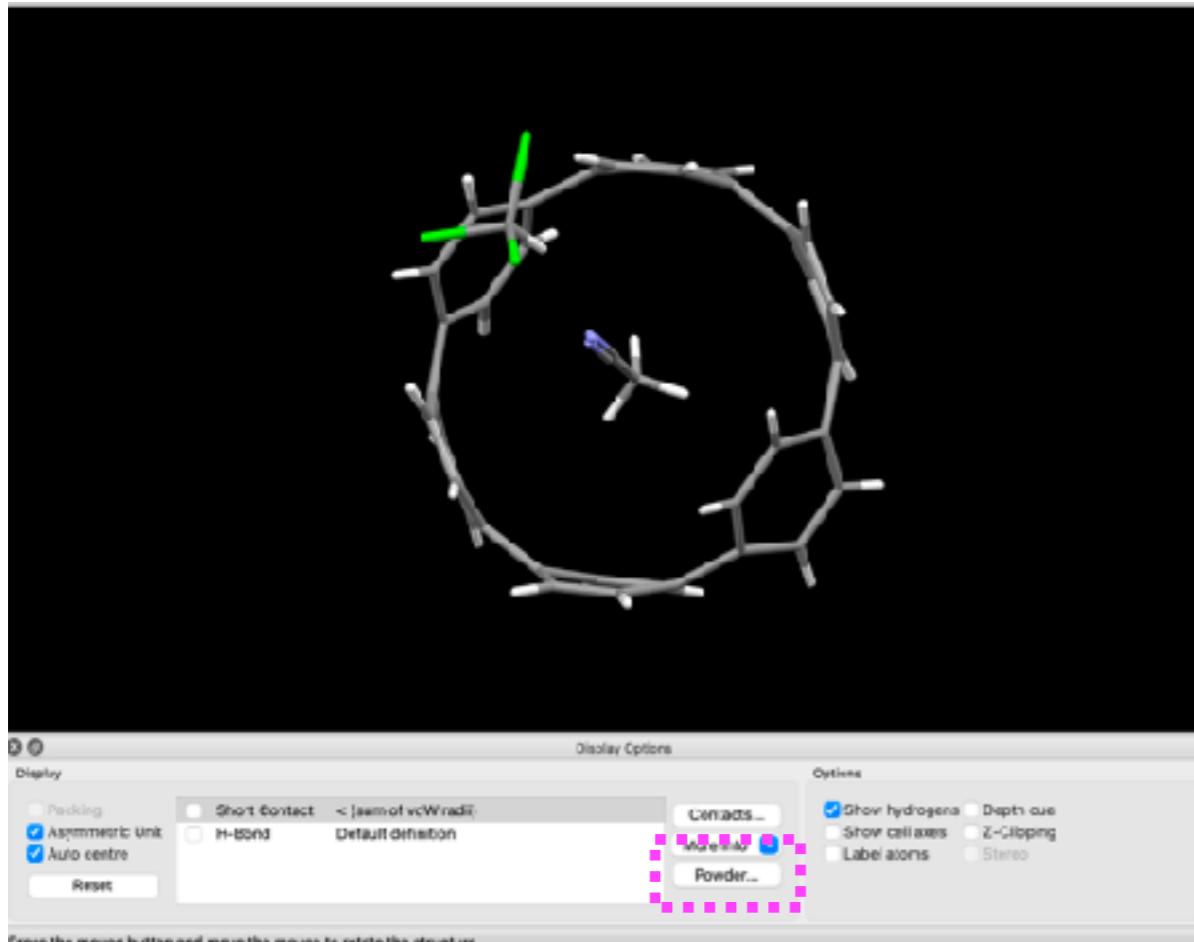
# 結晶表面と結晶面を対応させる



\*CrysAlisPro (リガク)で  
結晶表面の指数付け

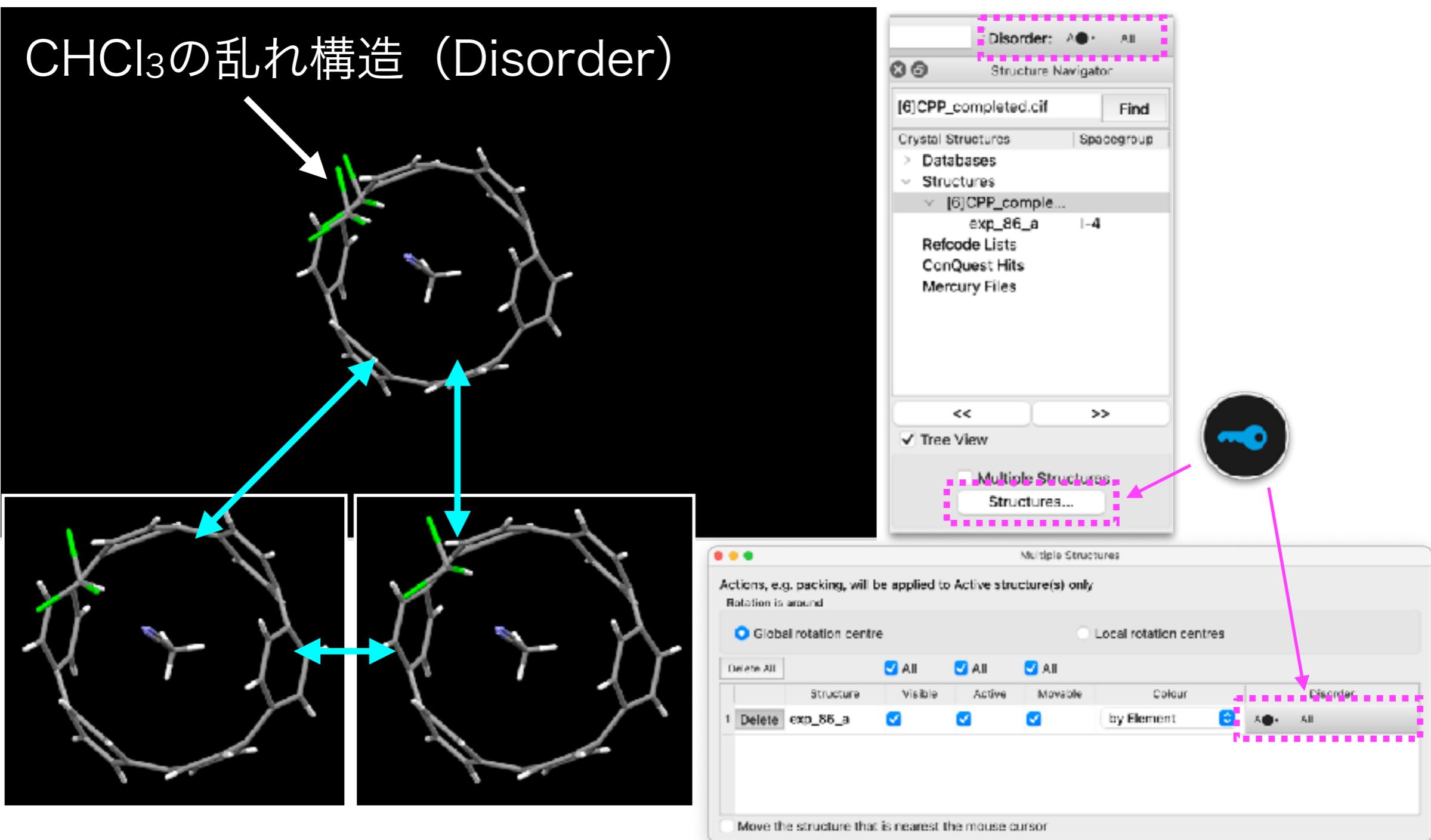


# 粉末回折パターンを計算する

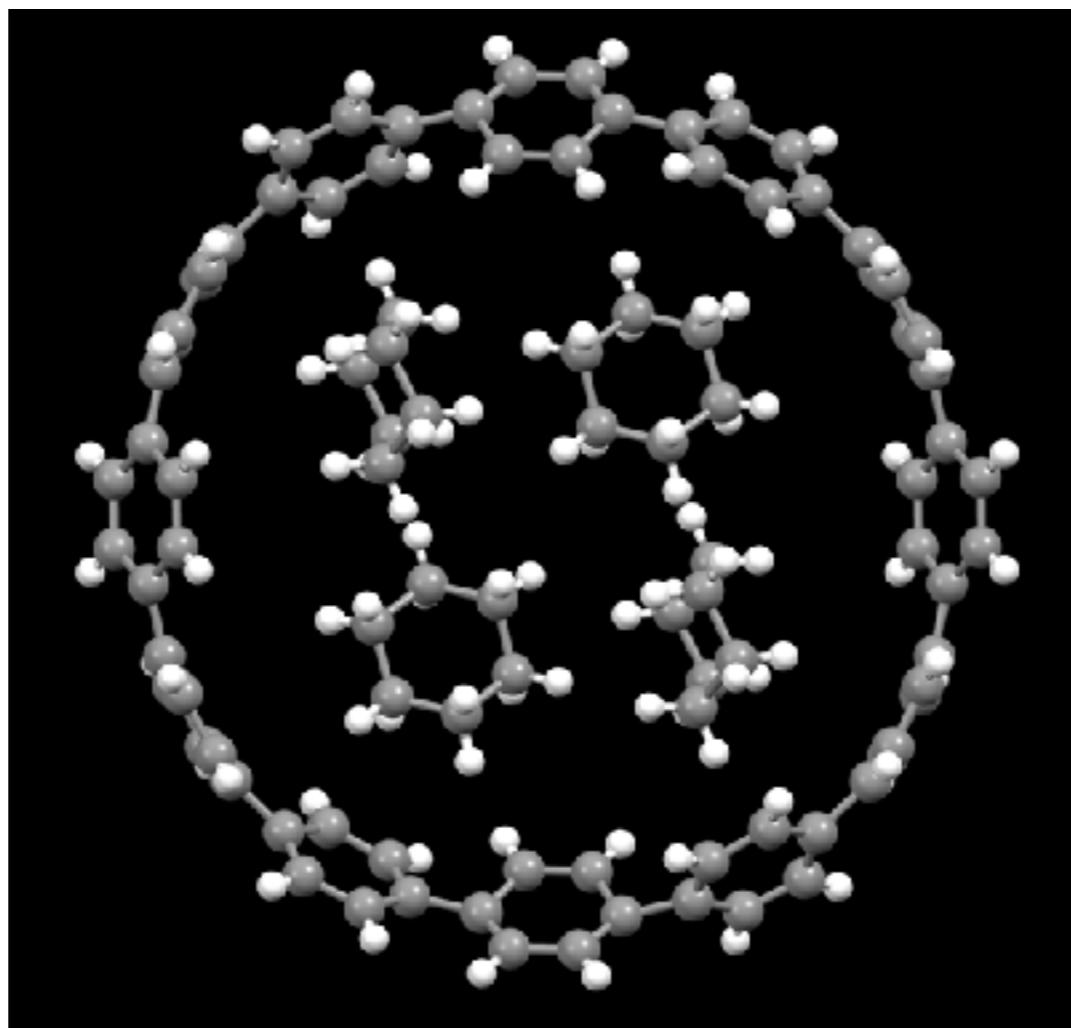


- Customiseで波長や $2\theta$ の範囲などを変更可能
- 画像の保存、 $2\theta$ と強度のリストなどの出力も可能

# 乱れ構造の表示／非表示

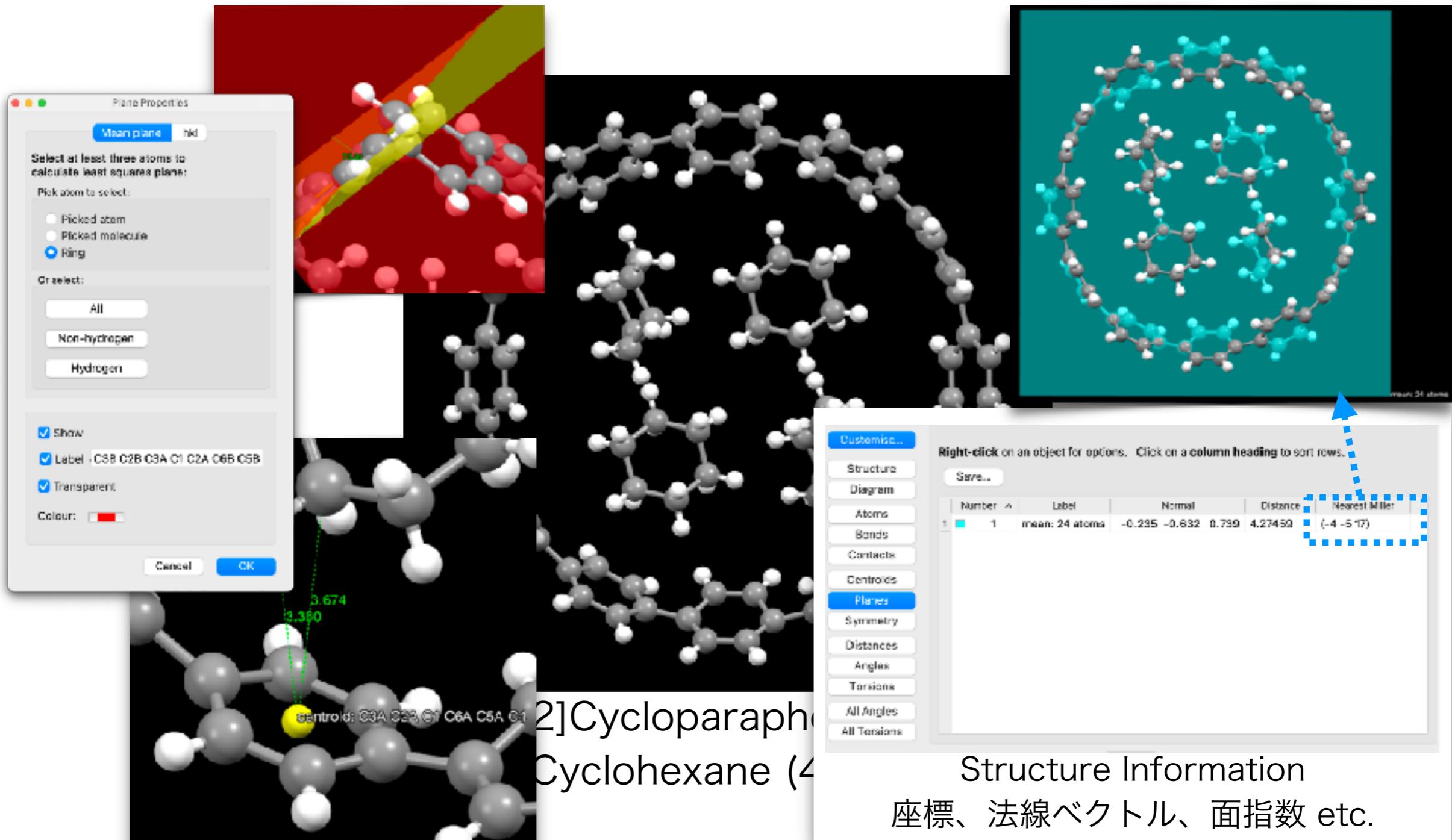


# 環の中心や平均平面を計算する

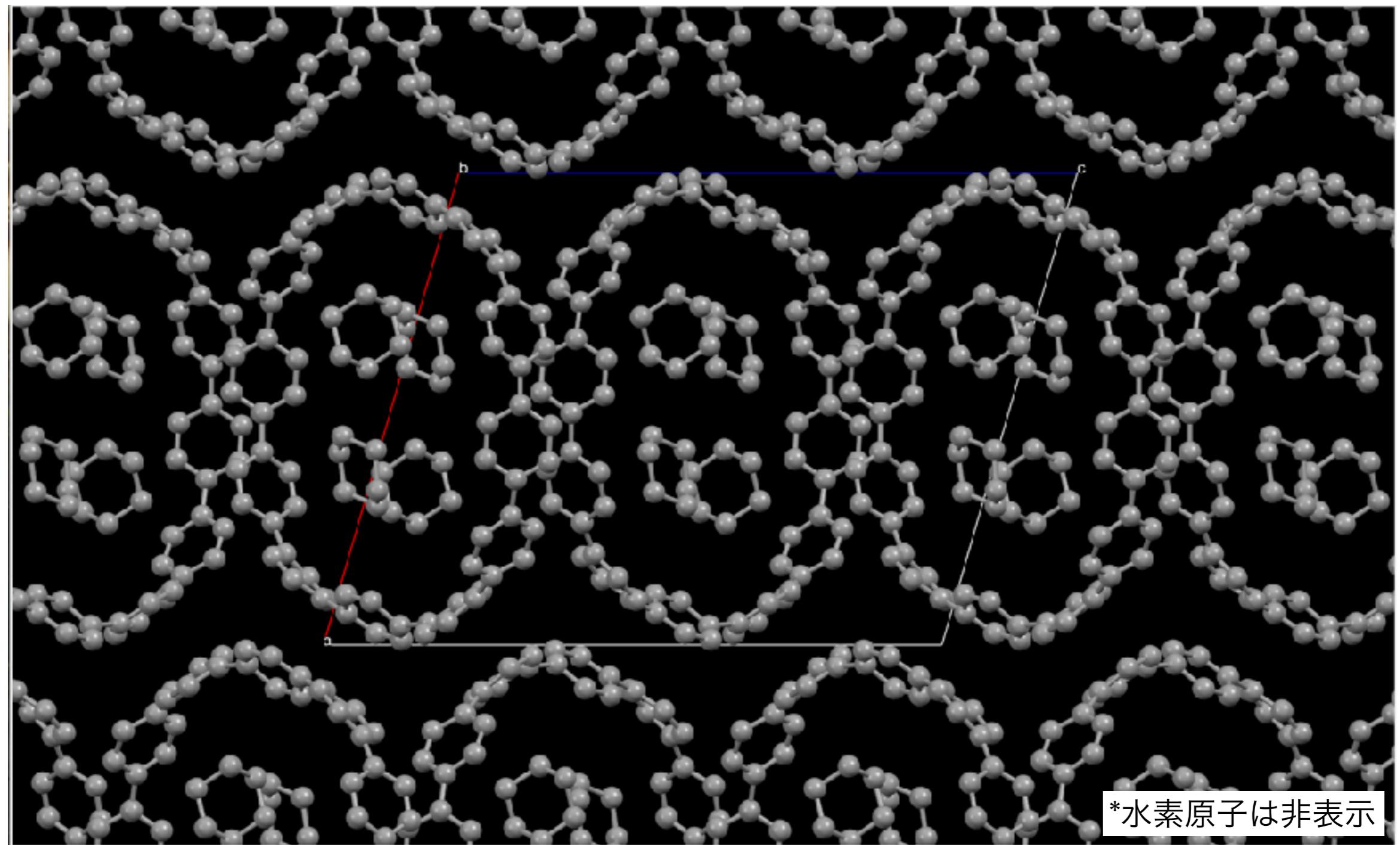


[12]Cycloparaphenylenecyclohexane  
+ Cyclohexane (4分子)

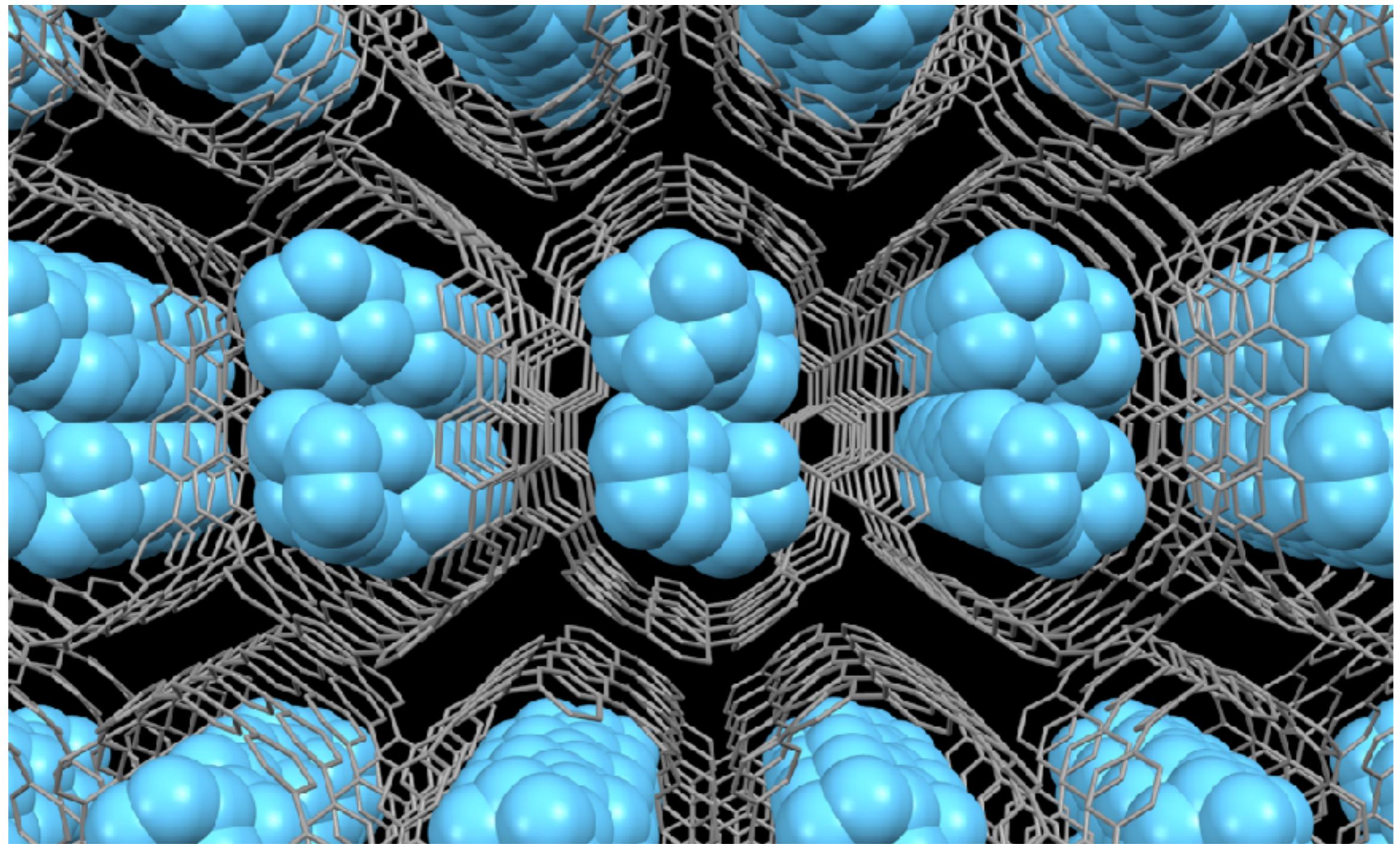
# 環の中心や平均平面を計算する



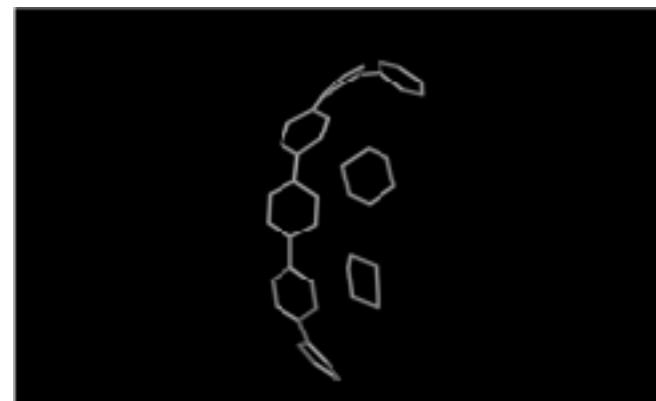
# 細孔性化合物結晶構造の表示例



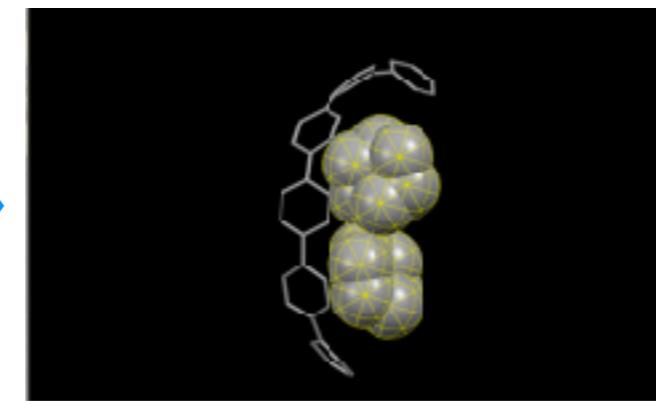
# 細孔性化合物結晶構造の表示例



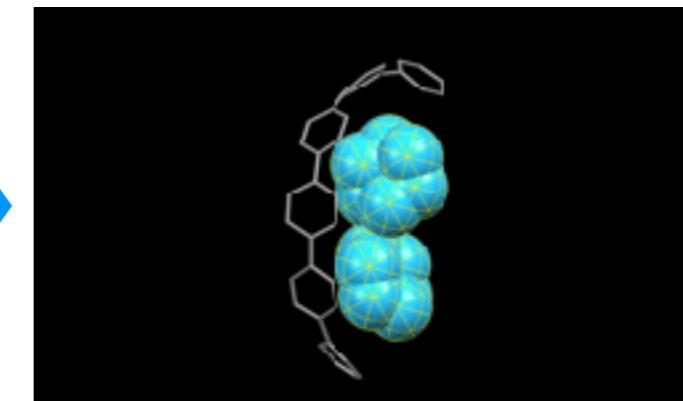
# 細孔性化合物結晶構造の表示例



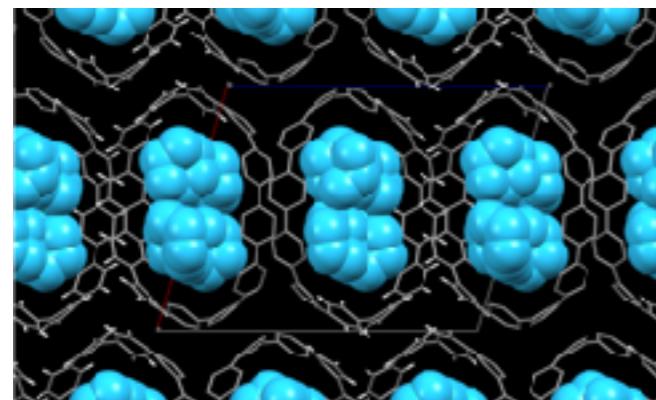
非対称単位をCapped Sticksで表示



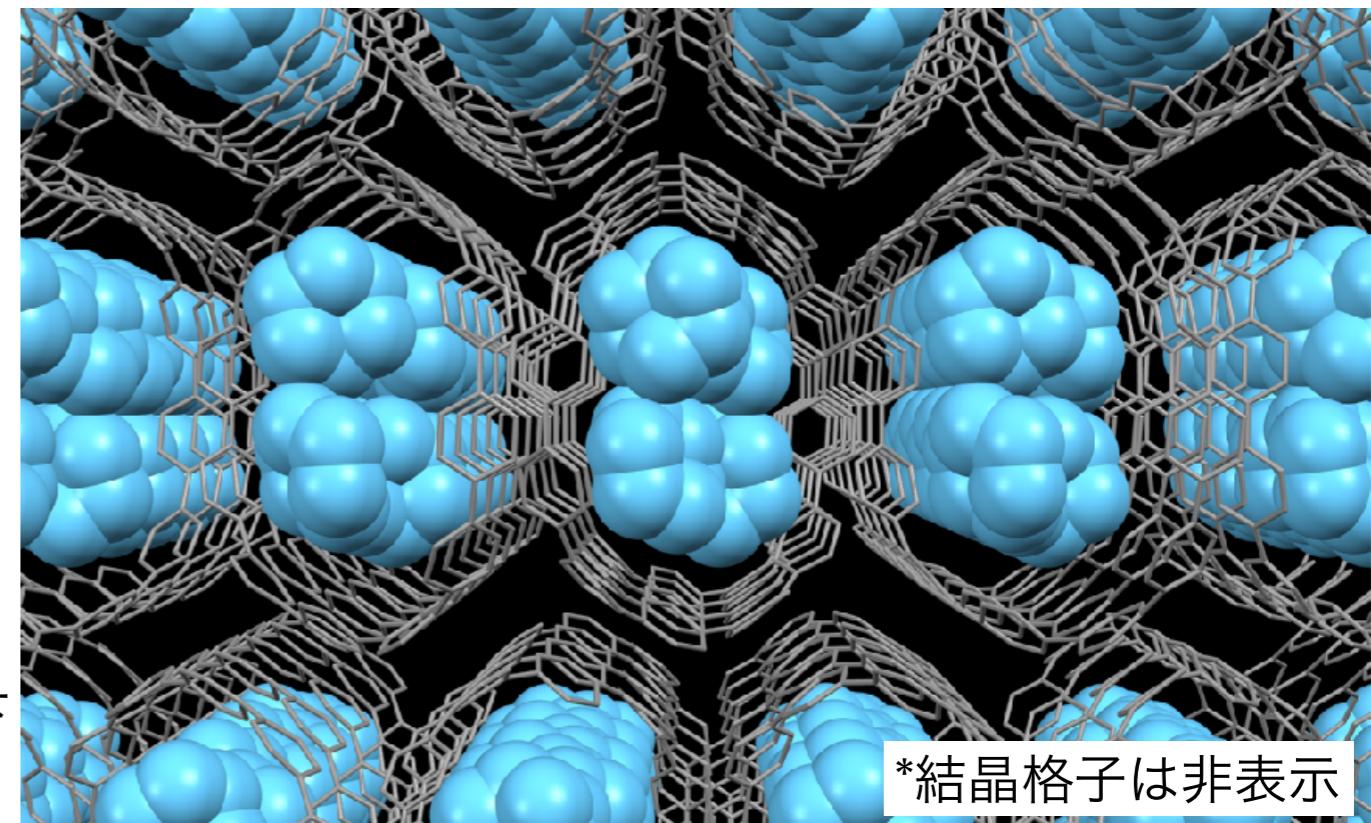
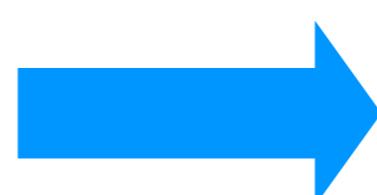
ゲスト分子を選択し Spacefillに変更



右クリック - Coloursで  
ゲスト分子の色を変更



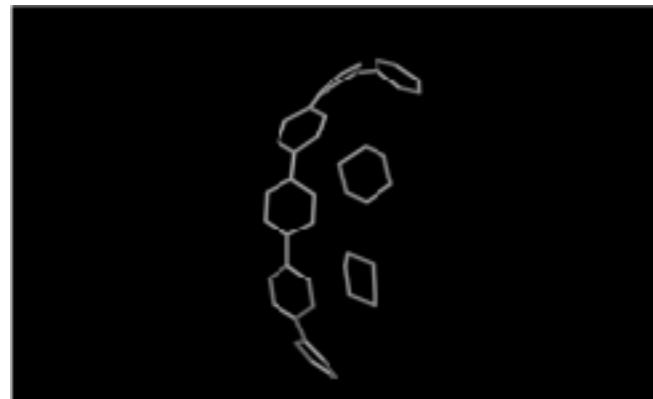
適当な範囲でPacking  
を表示



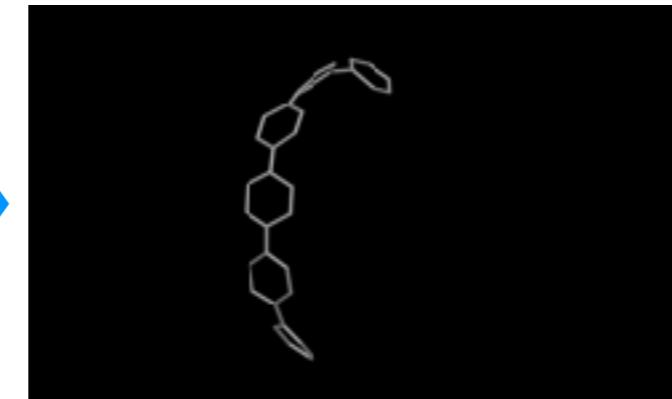
Shiftキー + 右クリック + マウス上下  
で遠近感が出る

\*結晶格子は非表示

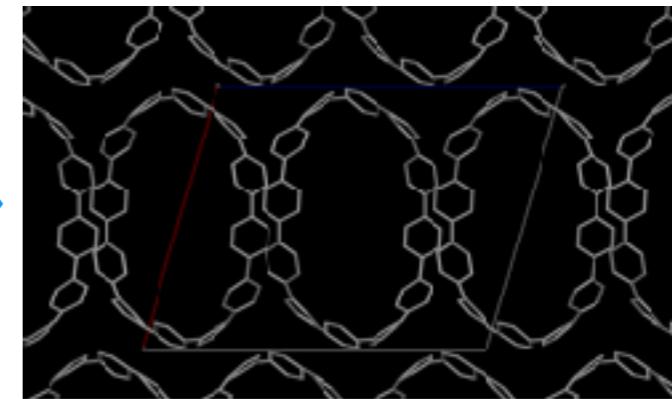
# 細孔性化合物結晶の“穴”を表示



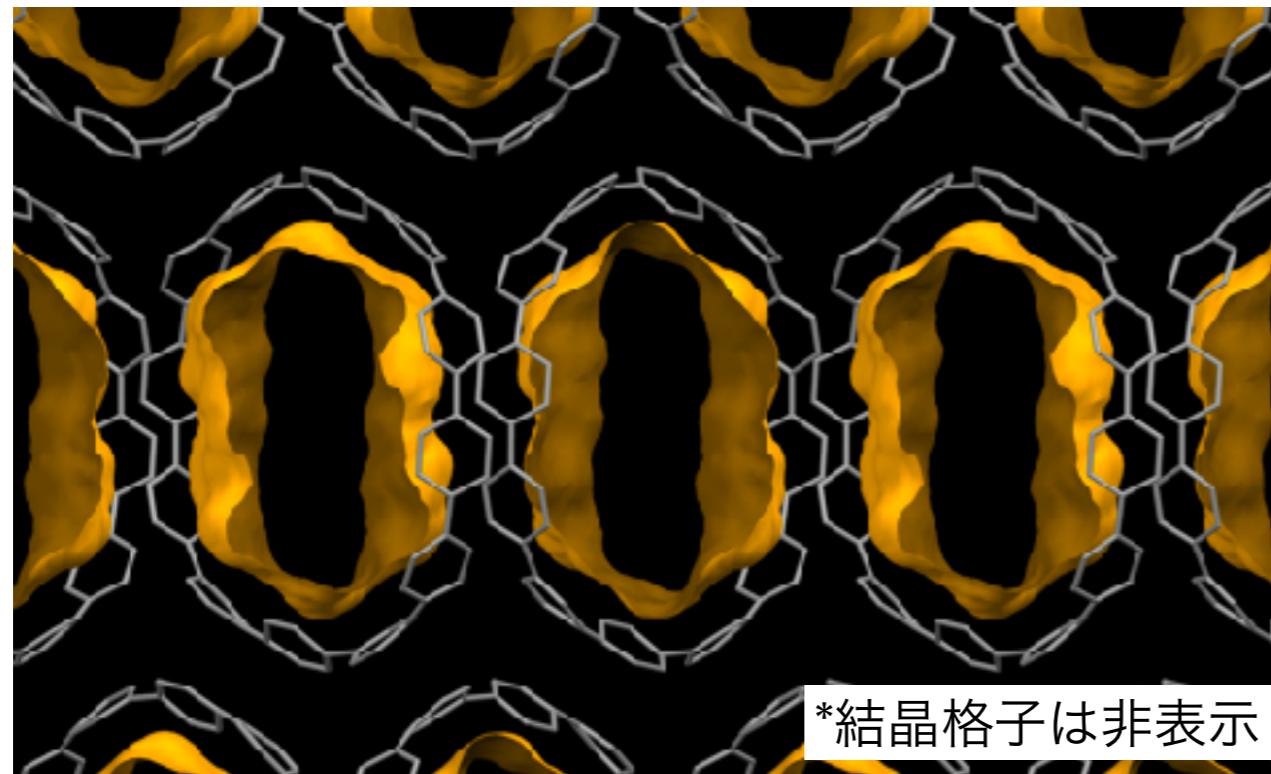
非対称単位でゲストを  
右クリック → Delete



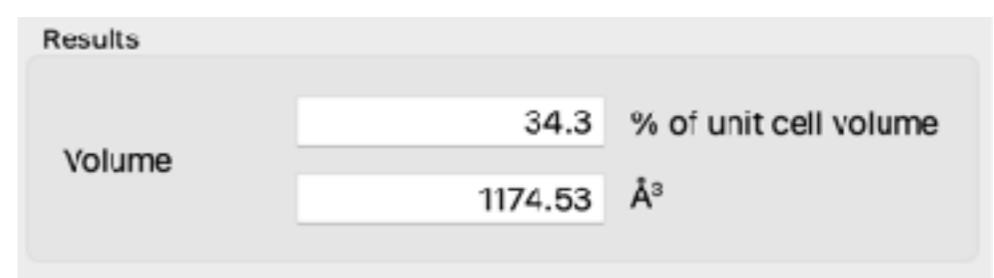
この状態でSave as  
CIF形式で保存



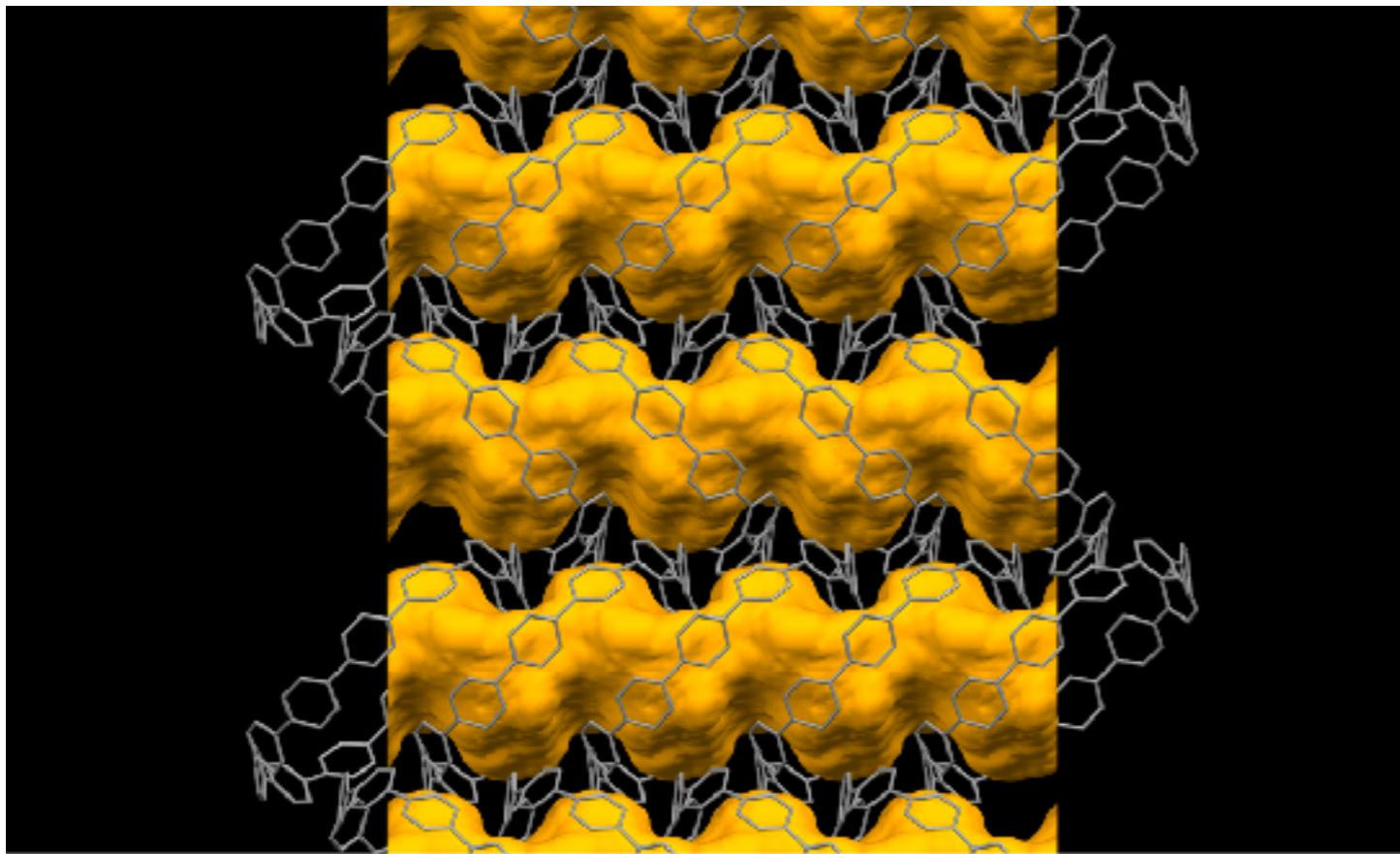
ゲストなしのCIFで適當  
な範囲のPackingを表示



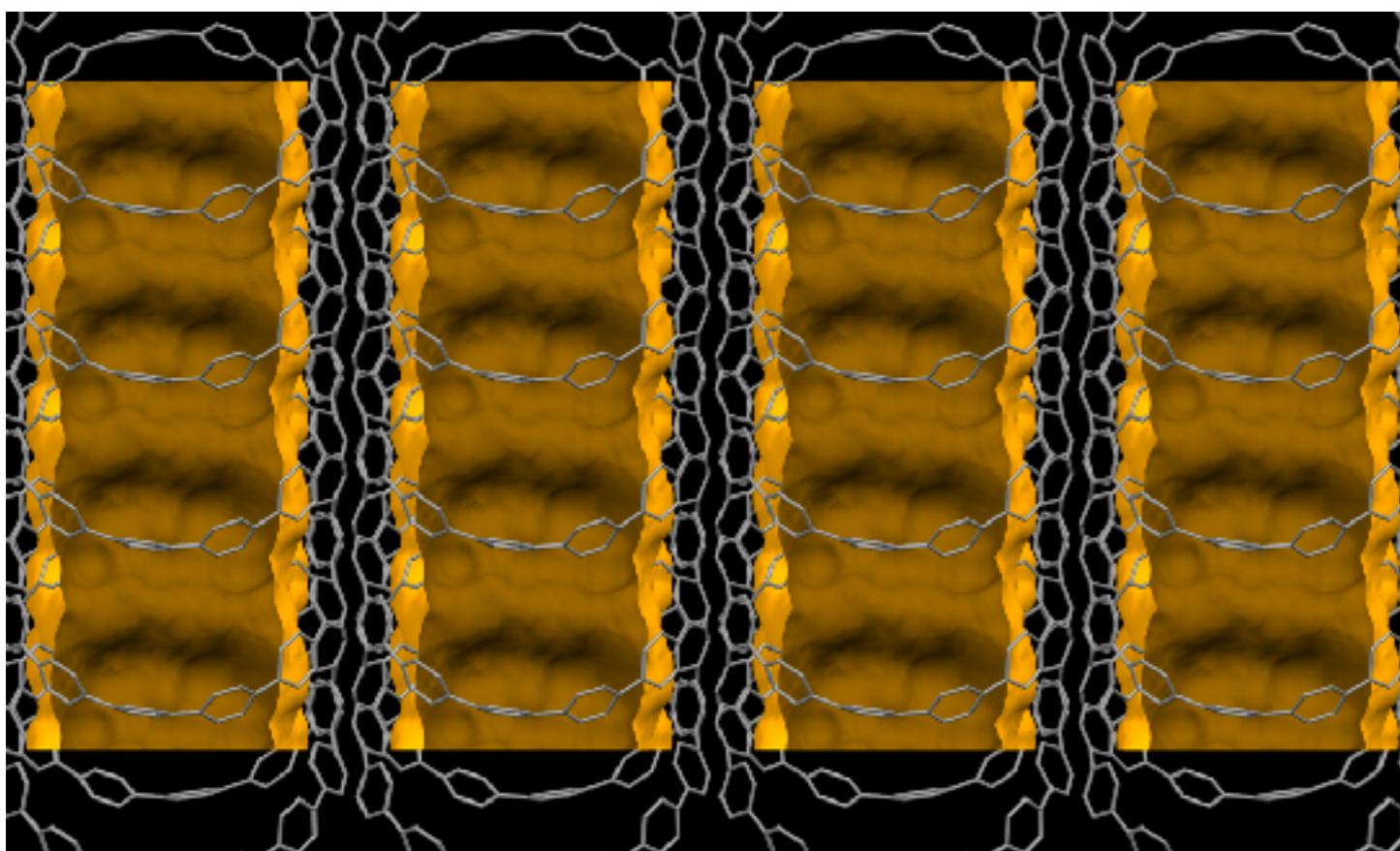
Display - Voidsで結晶構造中の空間  
(=ゲスト分子がアクセス可能な領域)  
を表示

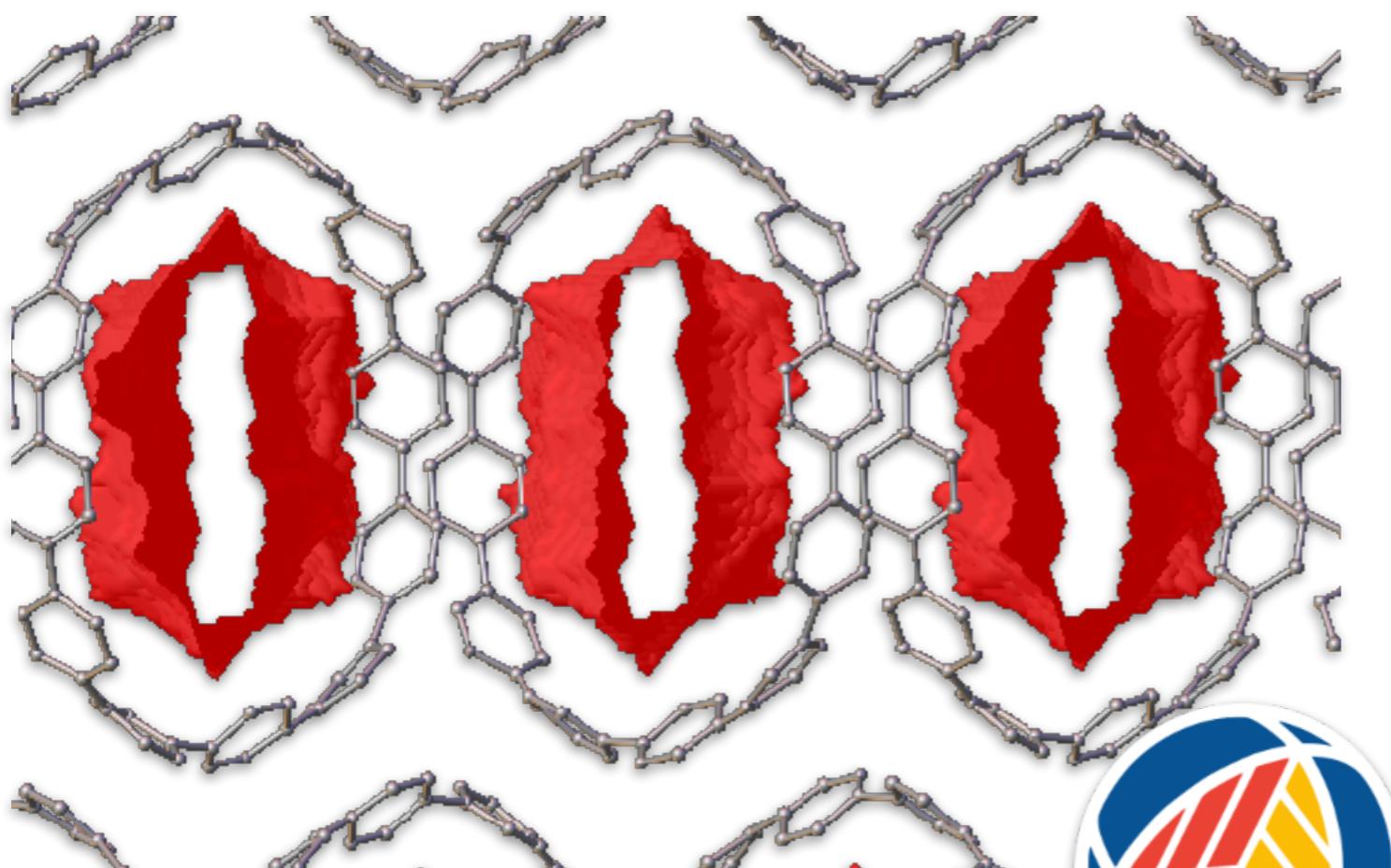


単位格子中の空間の合計体積と  
割合も表示



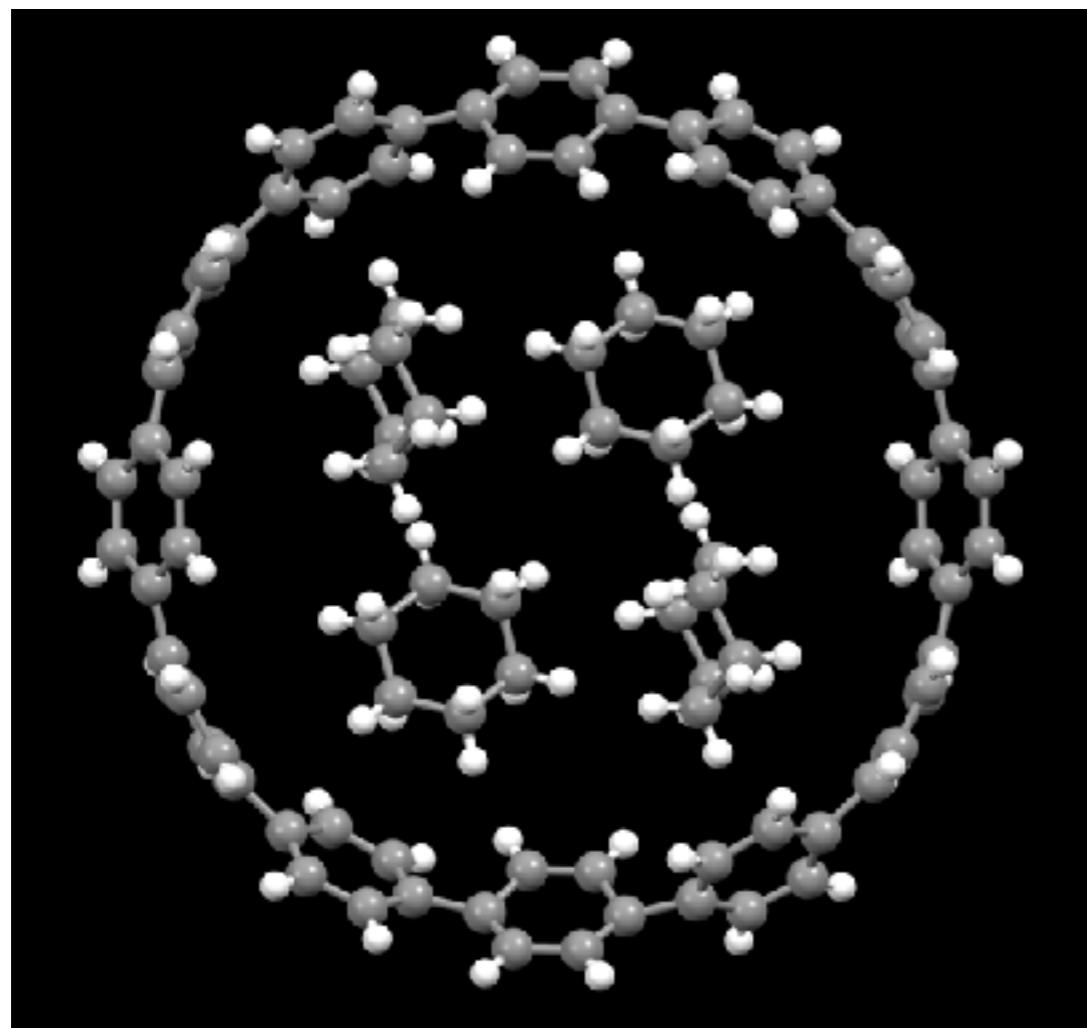
空間の形状や断面を見る  
こともできる



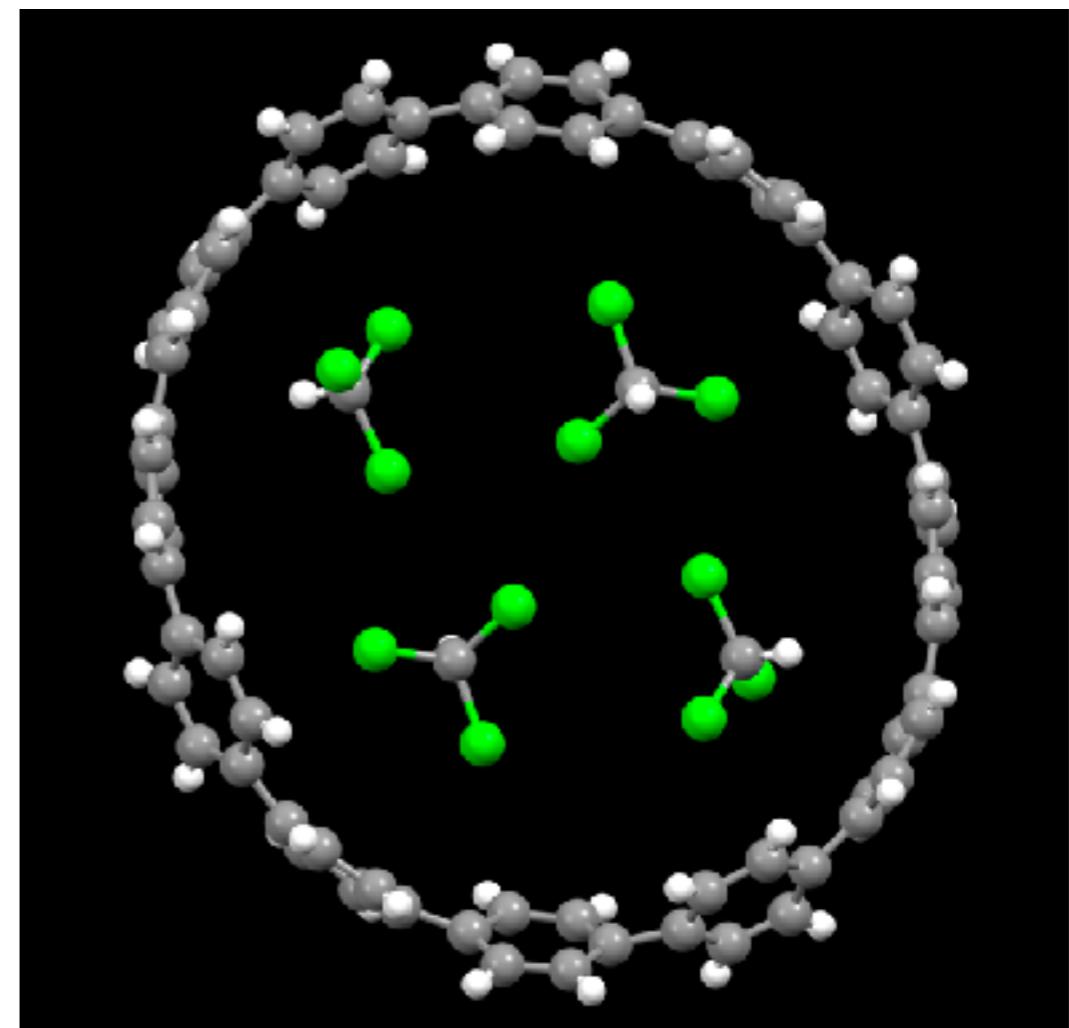


(参考)  
Olex2でも表示できます

# 結晶構造・分子構造の比較

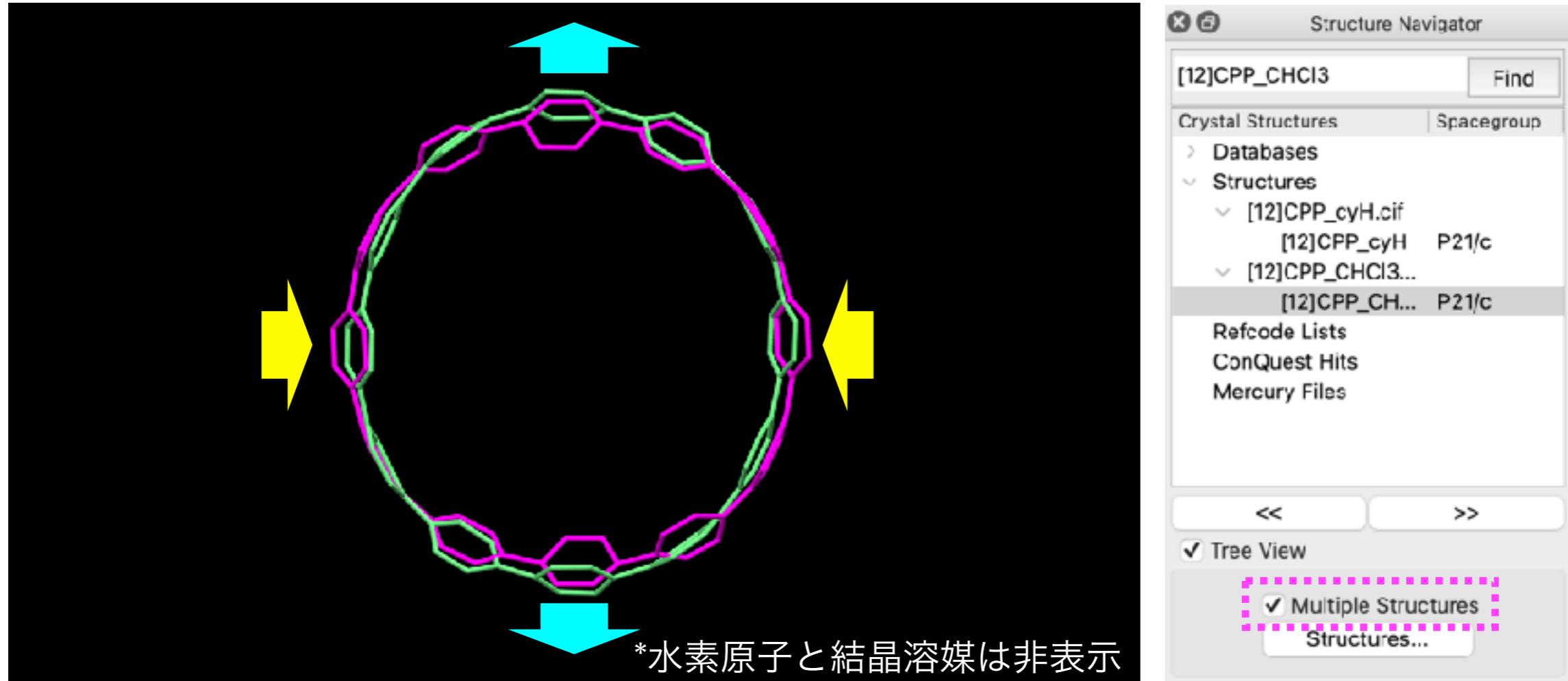


[12]Cycloparaphenylenecyclohexane  
+ Cyclohexane (4分子)



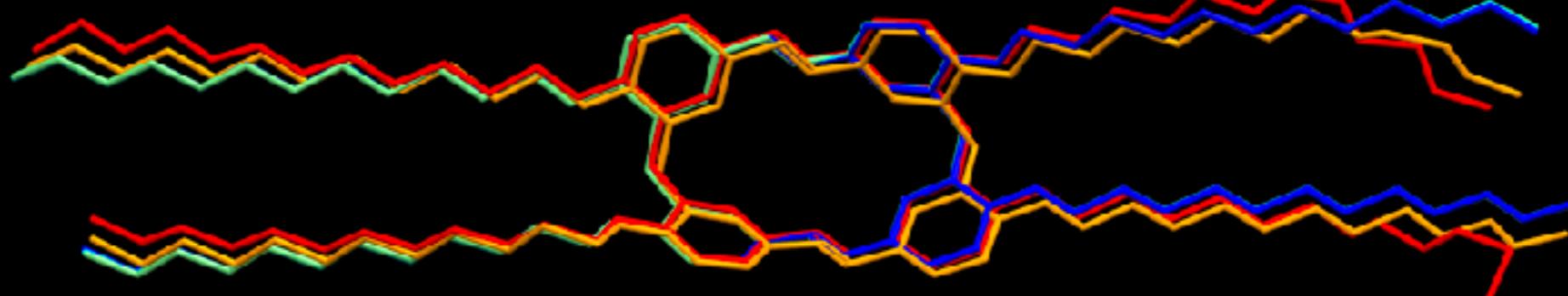
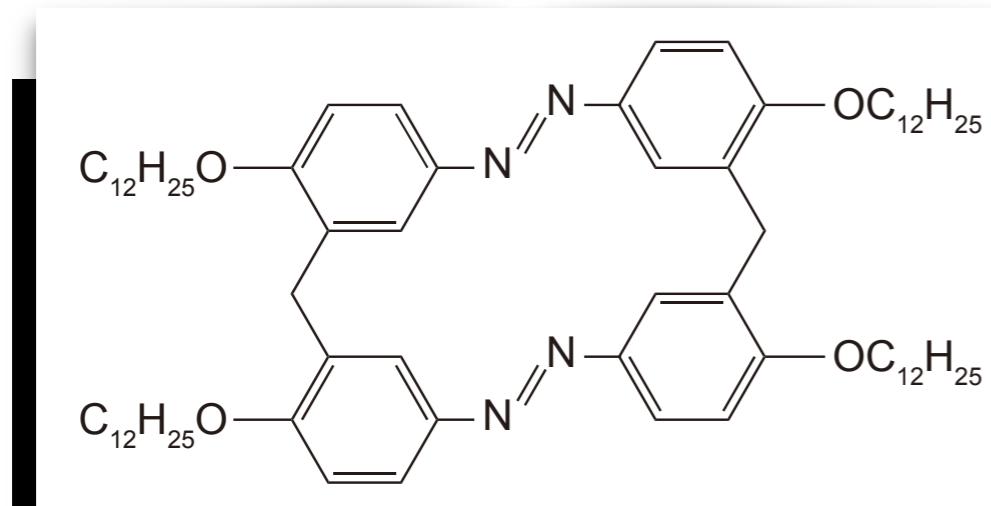
[12]Cycloparaphenylenecyclohexane  
+ Chloroform (4分子)

# 分子構造の重ね書き



Structure	Visible	Active	Movable	Colour
[12]CPP_cyH	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Magenta
[12]CPP_CHCl3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Light Green

# 分子の熱運動の解析結果を表現



Structure	Visible	Active	Movable	Colour
90K	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<span>Blue</span> <input type="button" value="▼"/>
140K	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<span>Cyan</span> <input type="button" value="▼"/>
190K	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<span>Light Green</span> <input type="button" value="▼"/>
240K	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<span>Orange</span> <input type="button" value="▼"/>
293K	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<span>Red</span> <input type="button" value="▼"/>

# おわりに

ご紹介した機能以外にも

- ✓ 他の表示・計算機能
- ✓ 他のCSD Softwareとの連携機能

など、多くの機能があります

解析結果の評価やプレゼンテーションに活用できると思っています

