

CSD-Core: Mercury [表示機能]

星野学（帝京大学）

hoshino.manabu.ly@teikyo-u.ac.jp

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



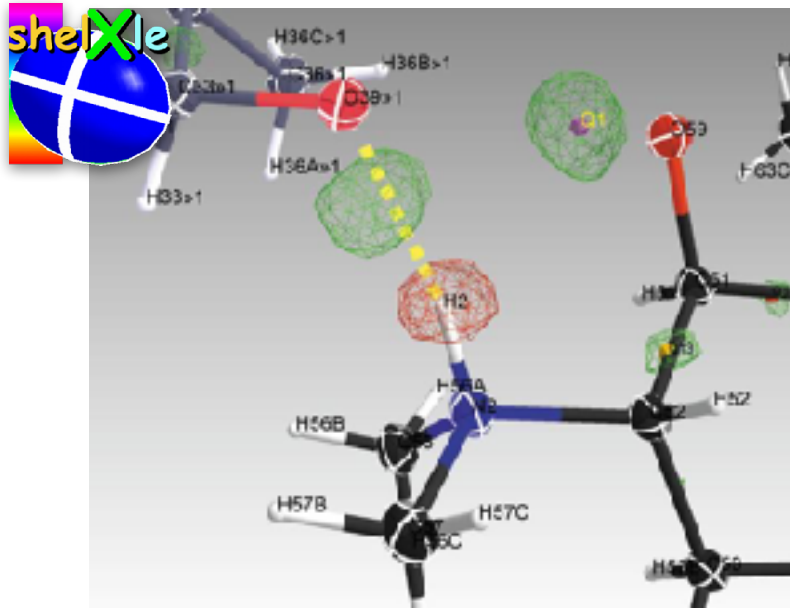
*SHELXL*のインターフェース

解析「**過程**」を見るのに役立つ

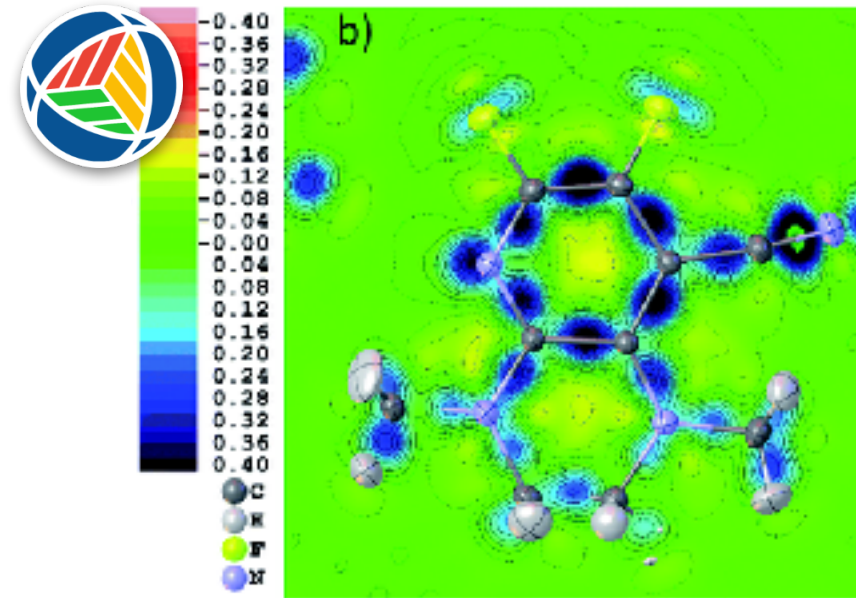
Olex2



電子密度分布の表示



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



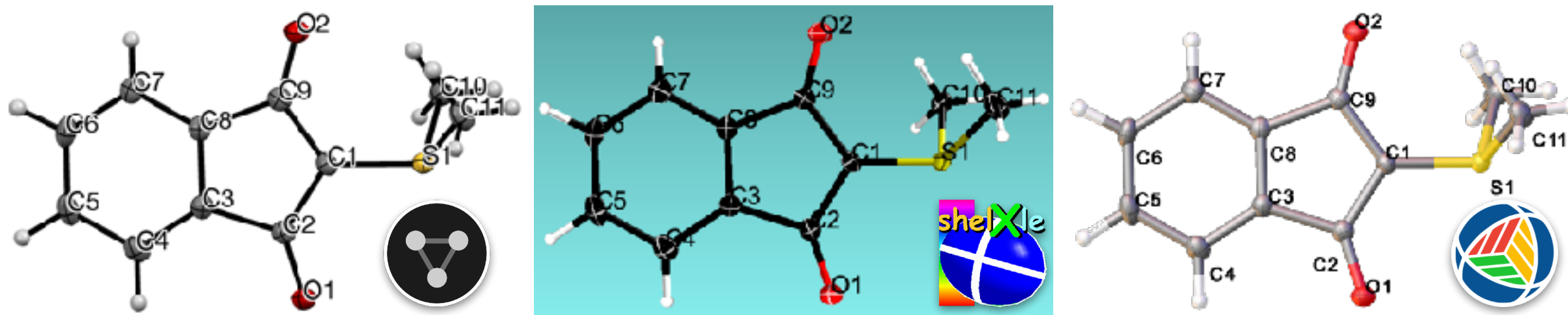
Kleemiss *et al.*, *Chem. Sci.*,
12, 1675-1692 (2021)

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

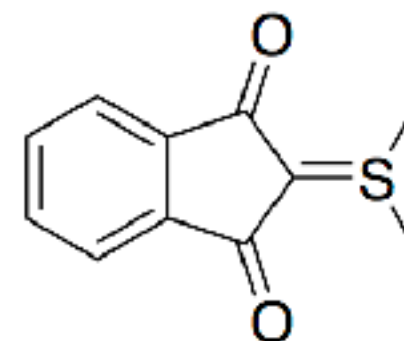
Mercuryでは表示することができません

ORTEP図の表示



同じデータで表示したYLID*のORTEP図

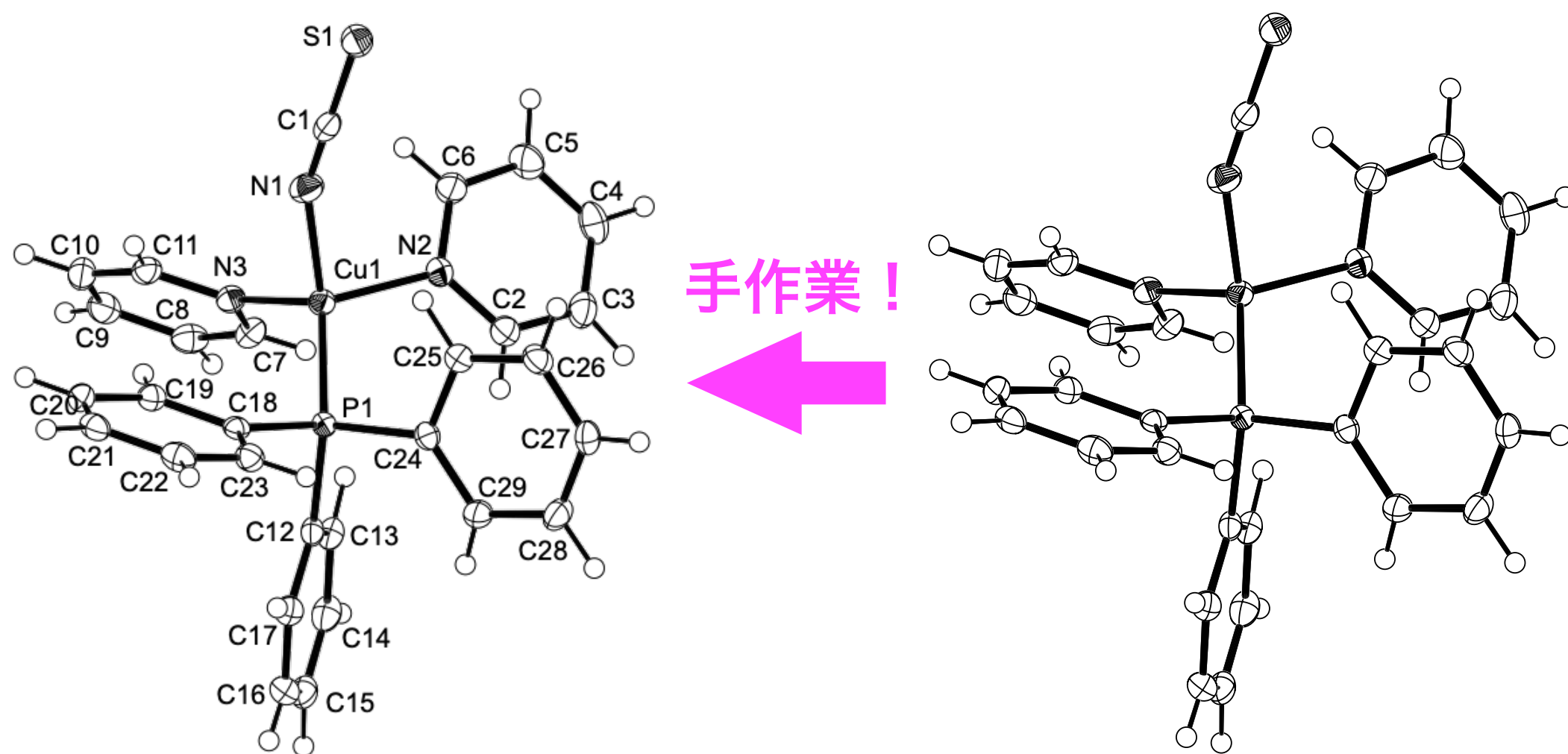
*2-dimethylsufuranylidene-1,3-indanedione



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？

ラベル付記によるあること

原子が多くなると、ラベルが混み合いがち



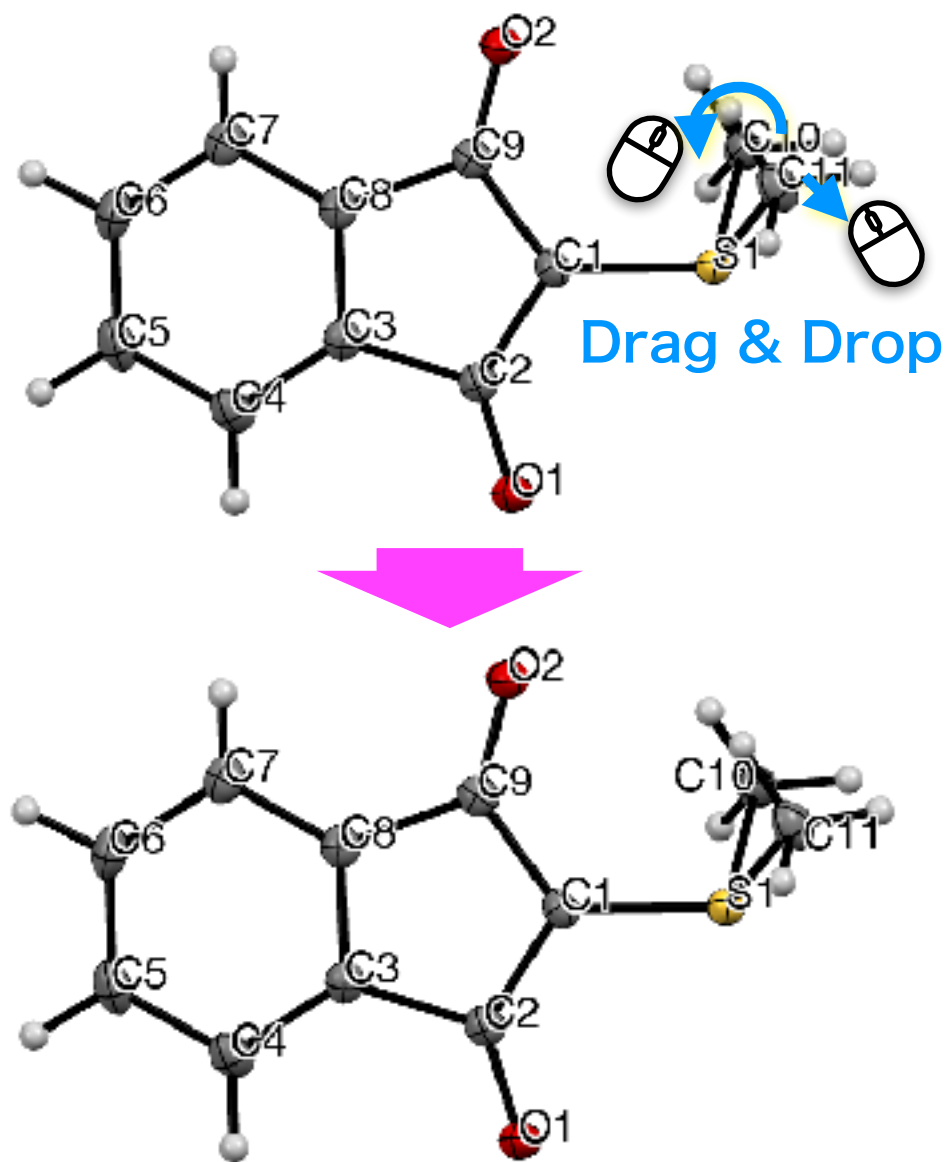
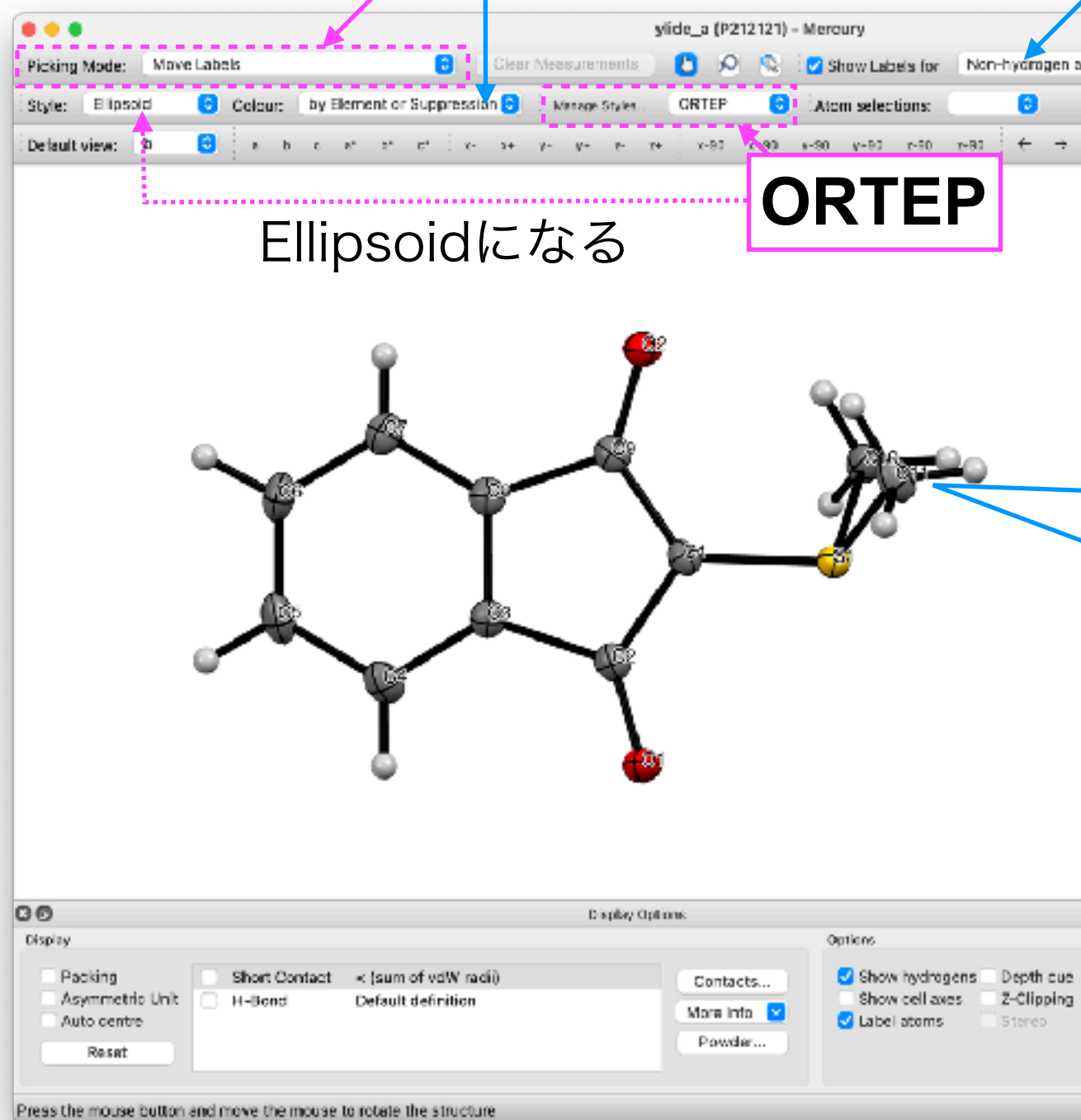
*Olex2でPostScript形式で出力

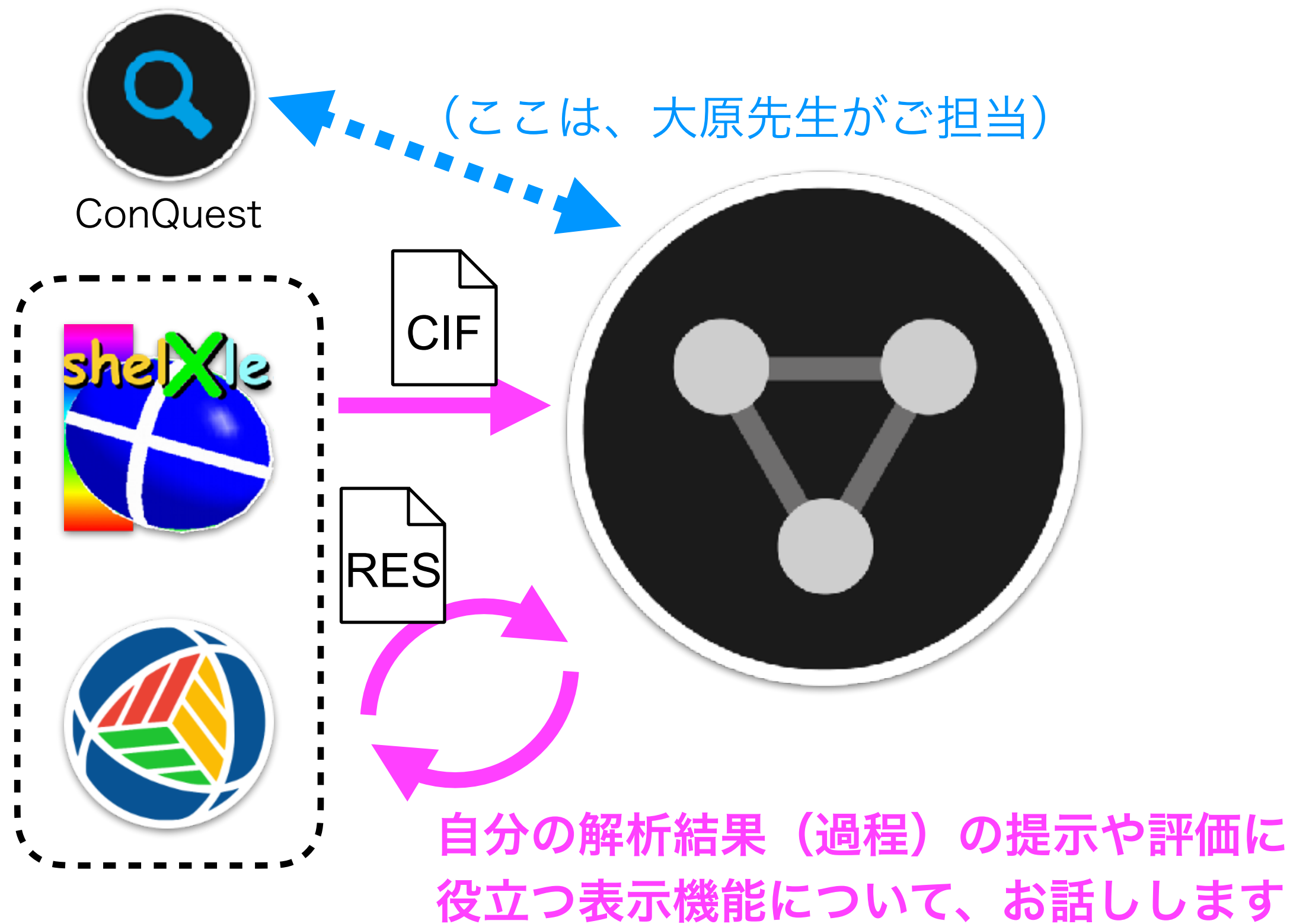
Hoshino & Ohgo, *Chem. Eur. J.*, **30**, e202401715 (2024)

原子ラベルの位置を動かす

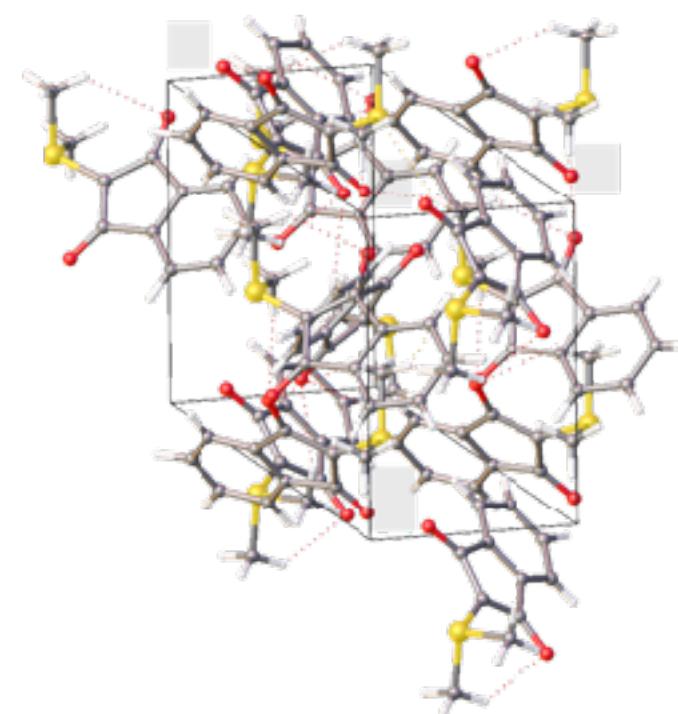
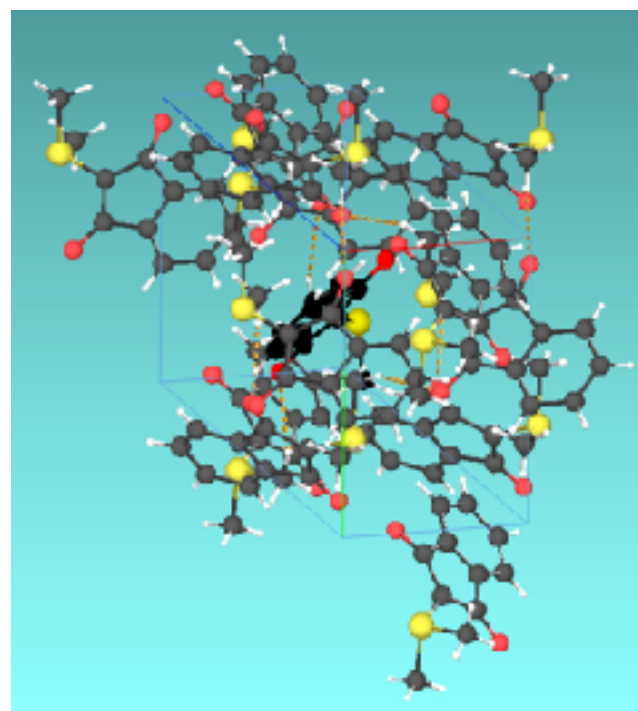
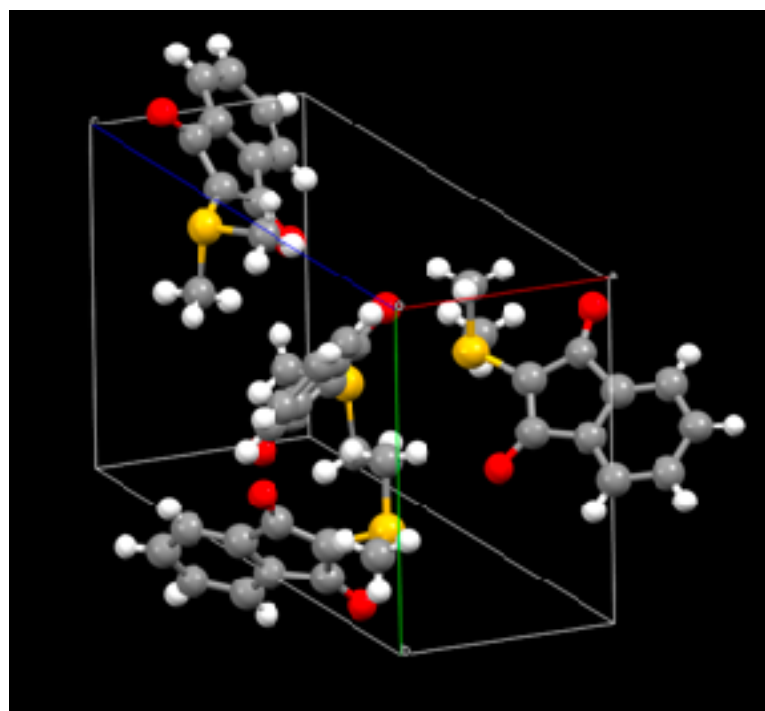
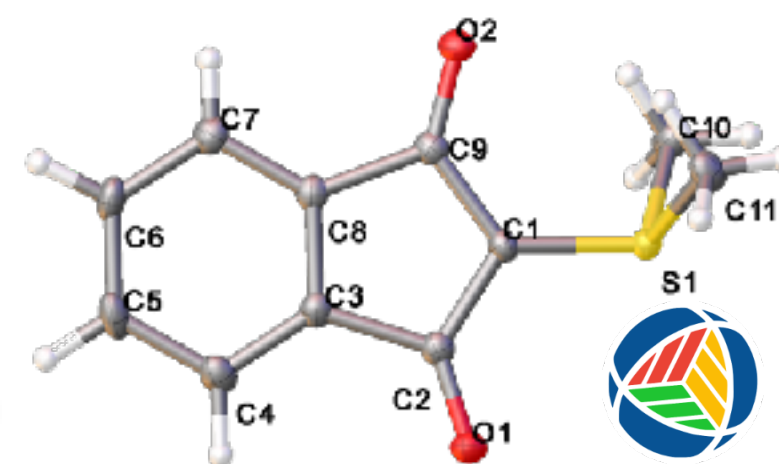
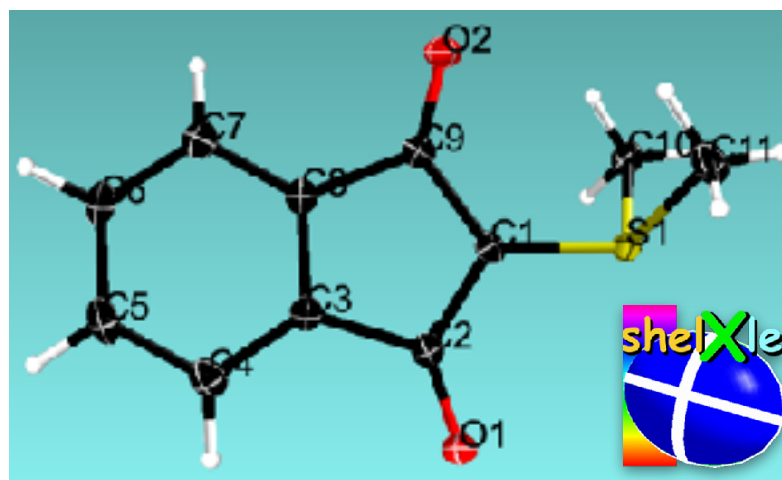
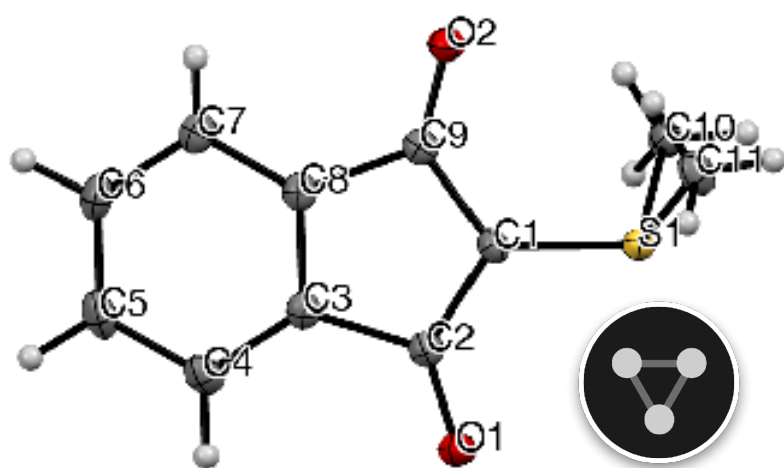
Move Labels

任意で変更する



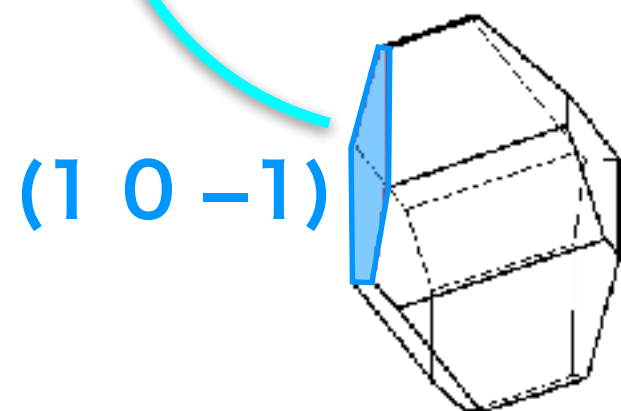
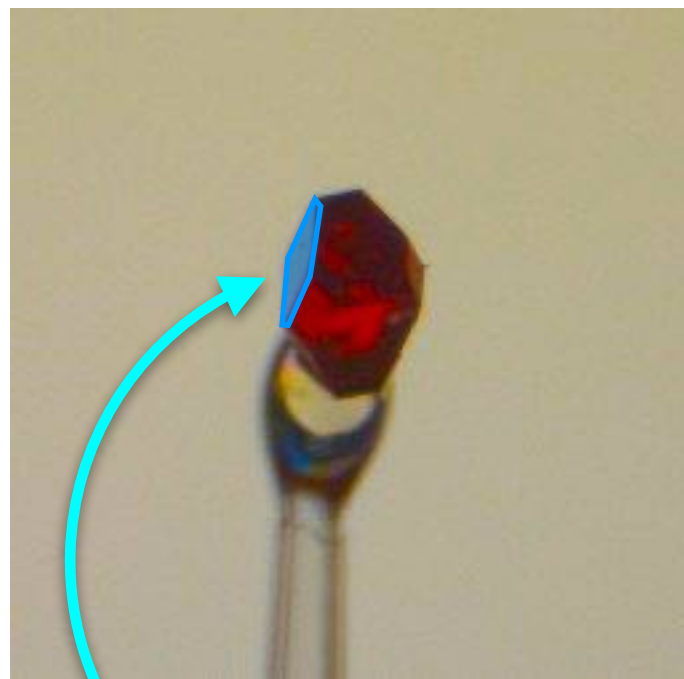


YLIDの結晶構造を表示

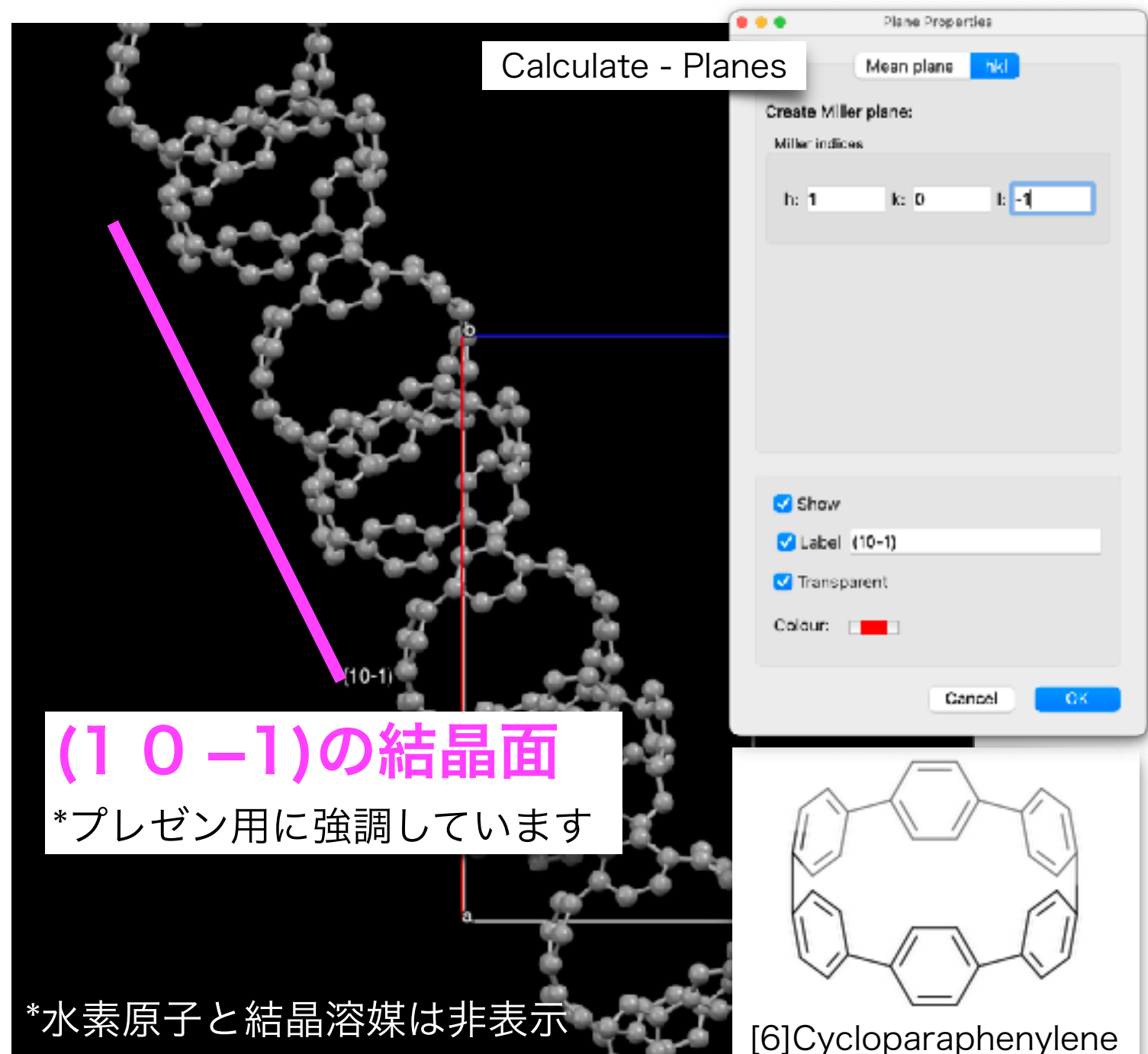


Mercuryでは繰り返し単位としての結晶構造が理解しやすい

結晶表面と結晶面を対応させる

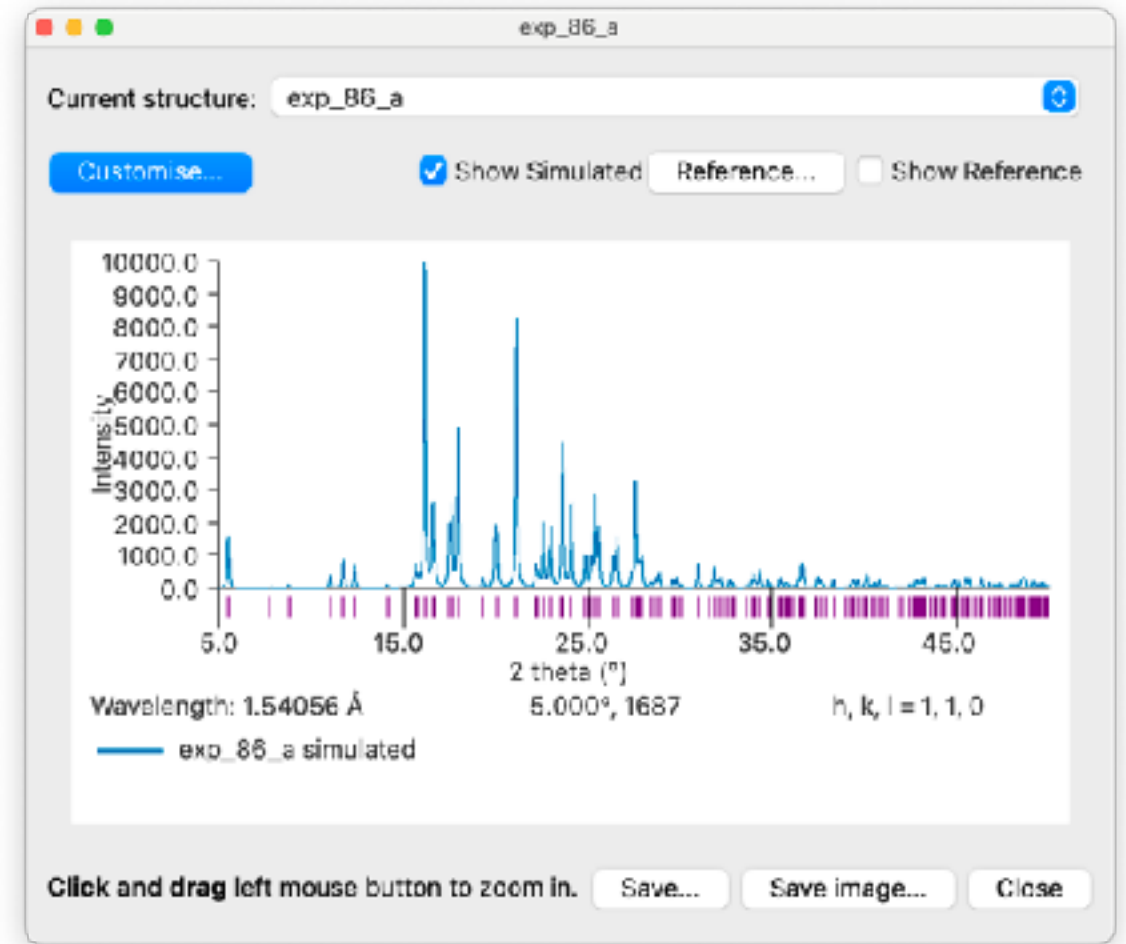
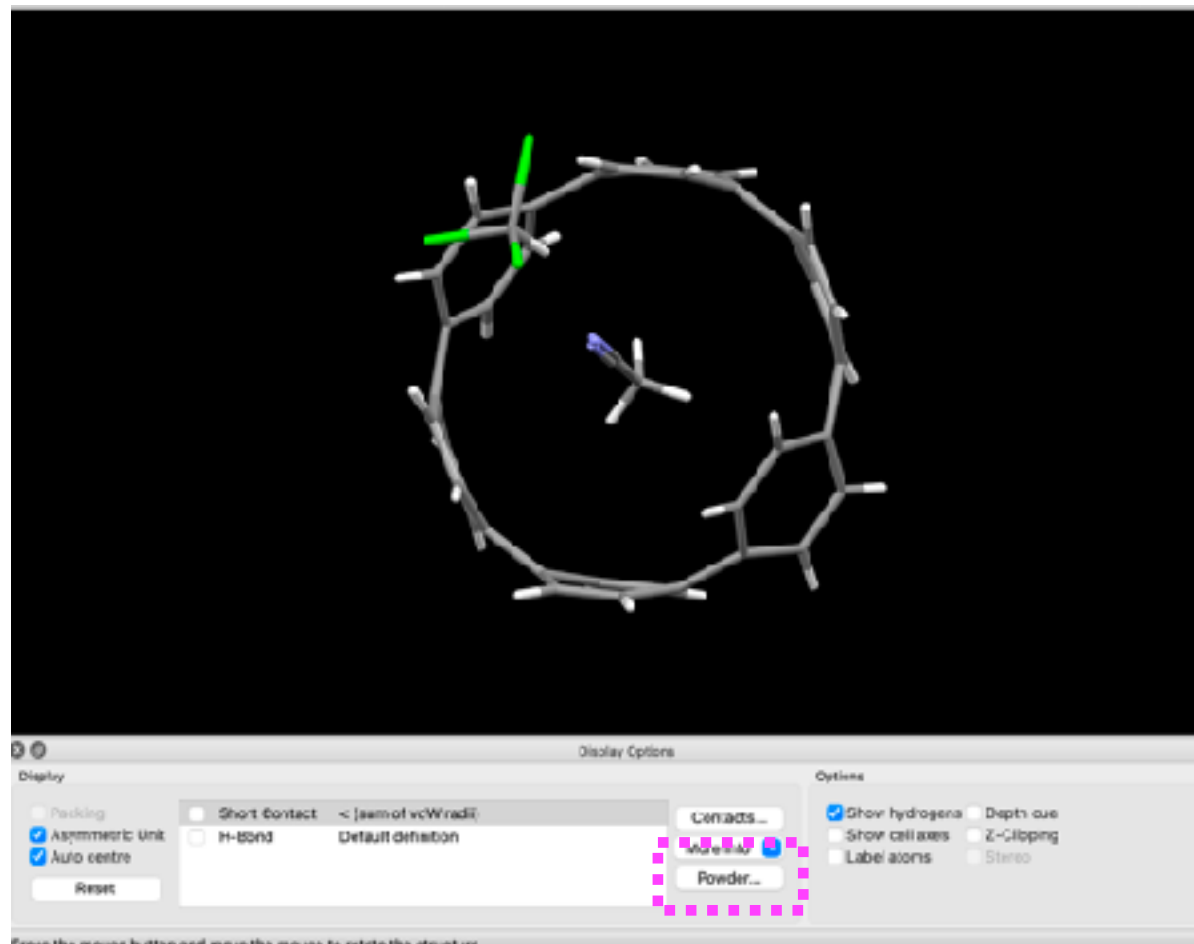


*CrysAlisPro (リガク)で
結晶表面の指数付け



[6]Cycloparaphenylene

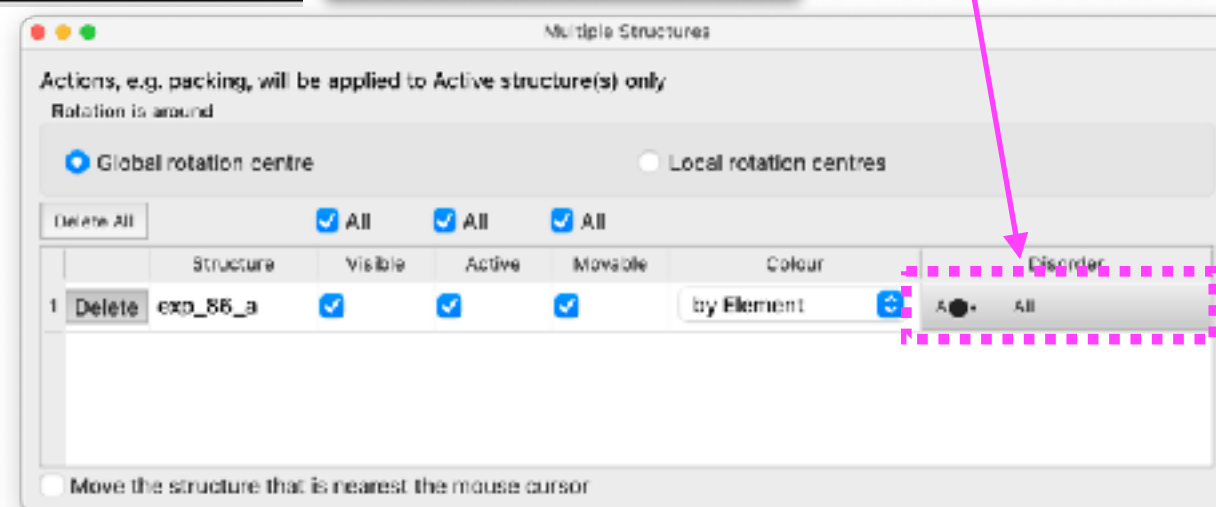
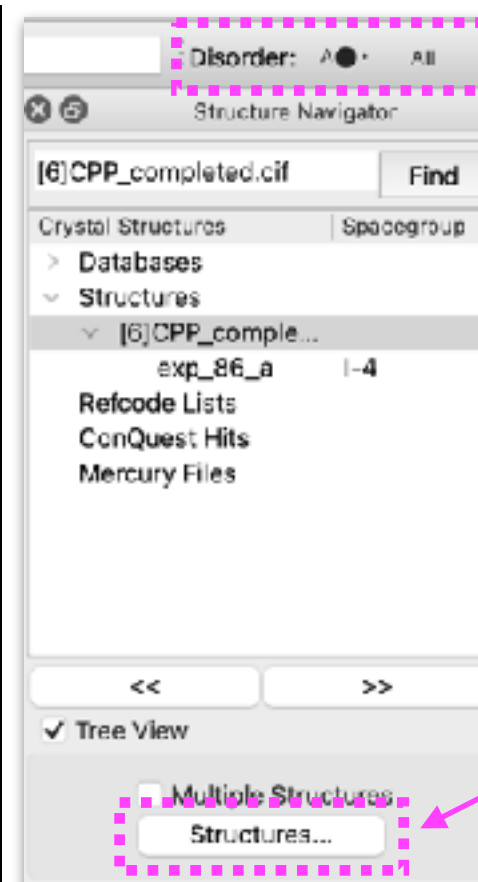
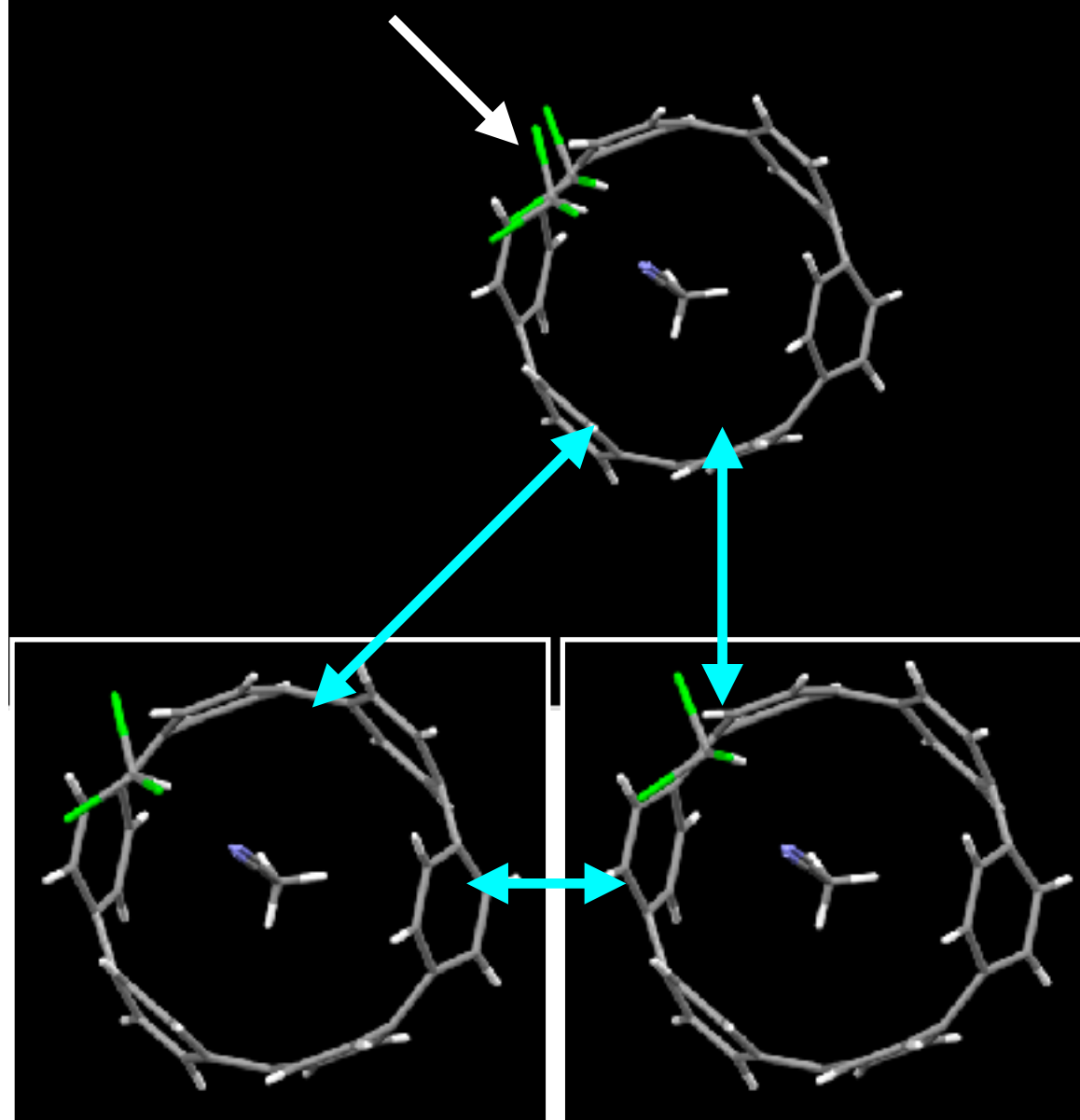
粉末回折パターンを計算する



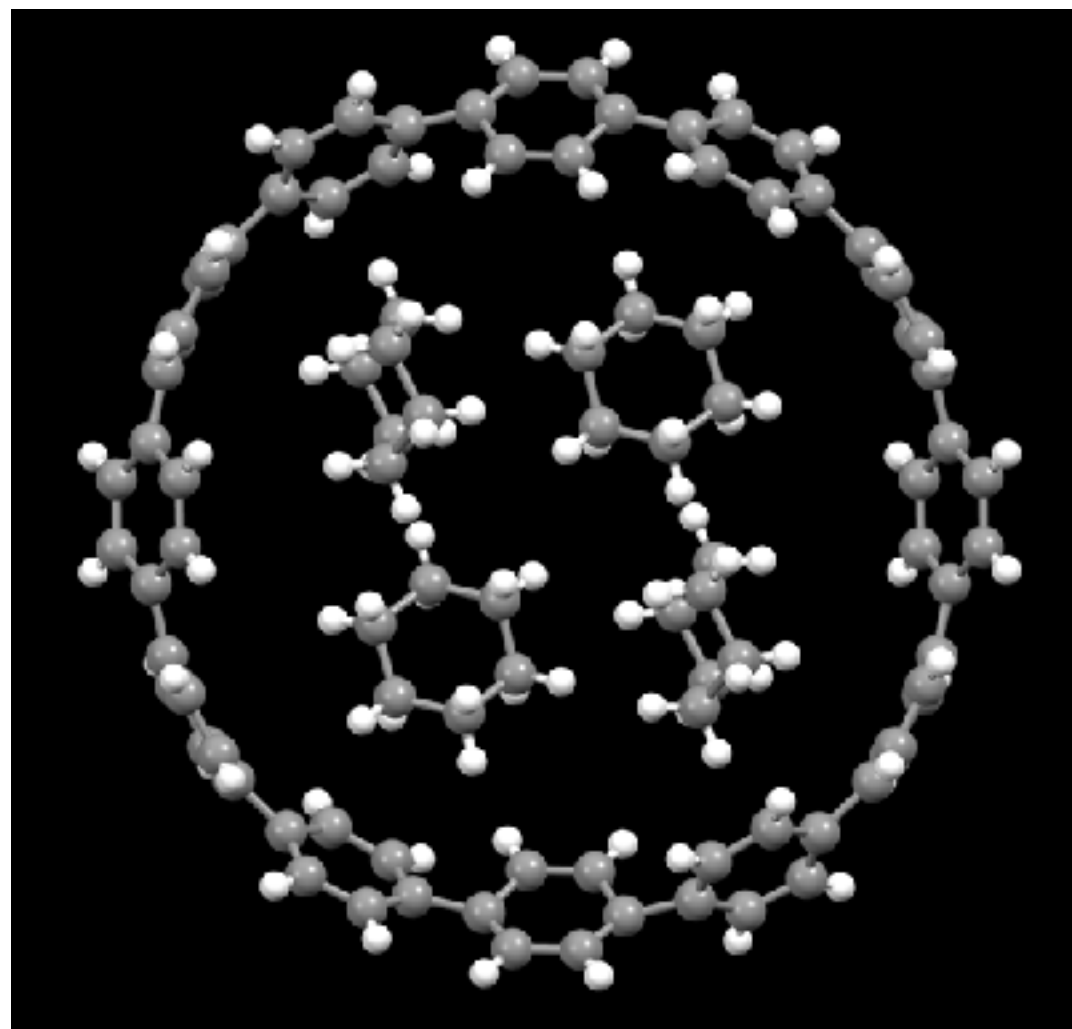
- Customiseで波長や 2θ の範囲などを変更可能
- 画像の保存、 2θ と強度のリストなどの出力も可能

乱れ構造の表示／非表示

CHCl₃の乱れ構造 (Disorder)



環の中心や平均平面を計算する



[12]Cycloparaphenylene
+ Cyclohexane (4分子)

環の中心や平均平面を計算する

Plane Properties

Mean plane ☒ hkl

Select at least three atoms to calculate least squares plane:

Pick atom to select:

- ☐ Picked atom
- ☐ Picked molecule
- ☒ Ring

Or select:

☒ Show

☒ Label C5B C2B C3A C1 C2A C6B C5B

☒ Transparent

Colour:

Centroid: C3A C2B C1 C6A C5A C1

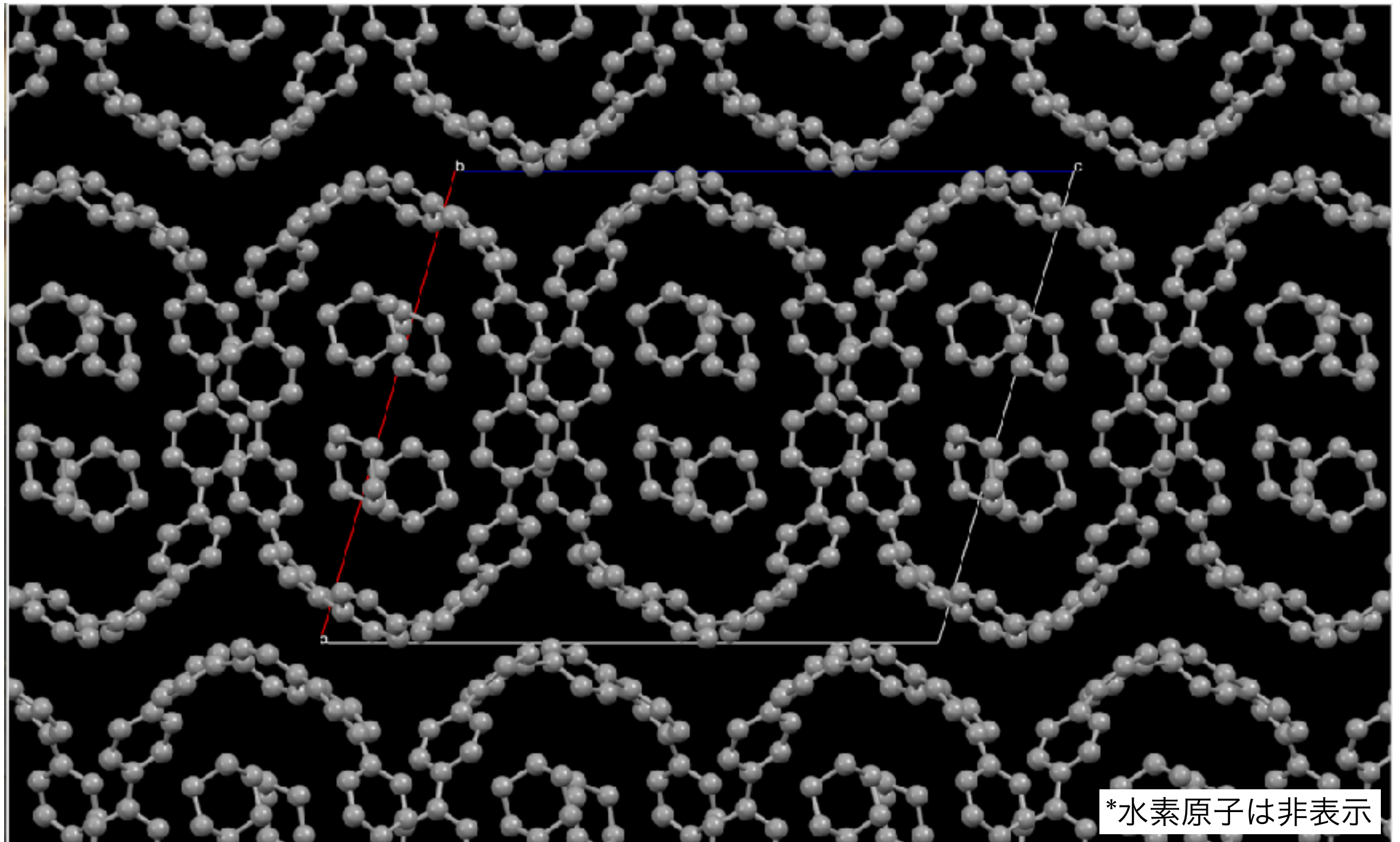
3.674
3.350

Structure Information

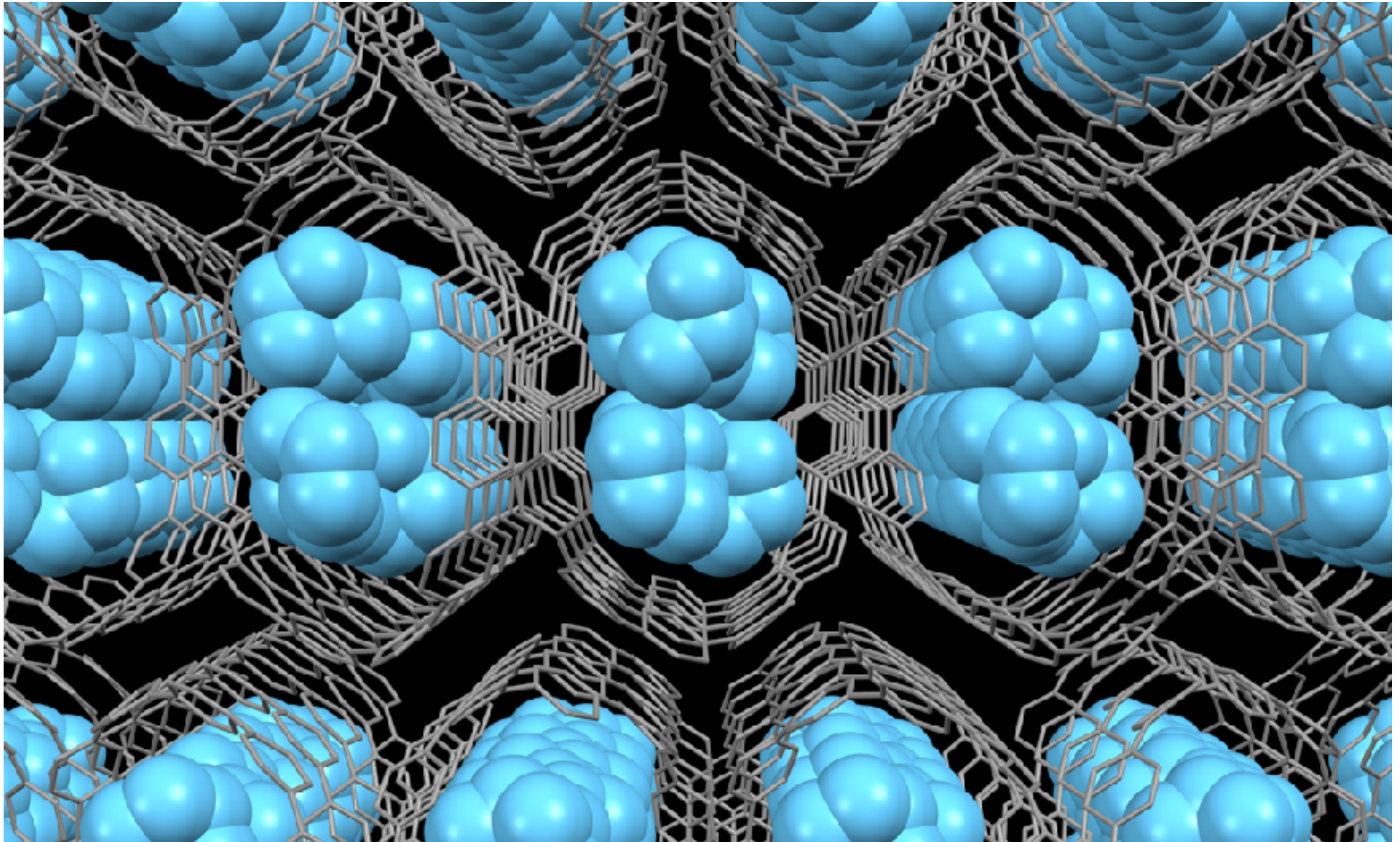
座標、法線ベクトル、面指数 etc.

Number	Label	Normal	Distance	Nearest Miller
1	mean: 24 atoms	-0.235 -0.632 0.739	4.27450	(-4 -5 17)

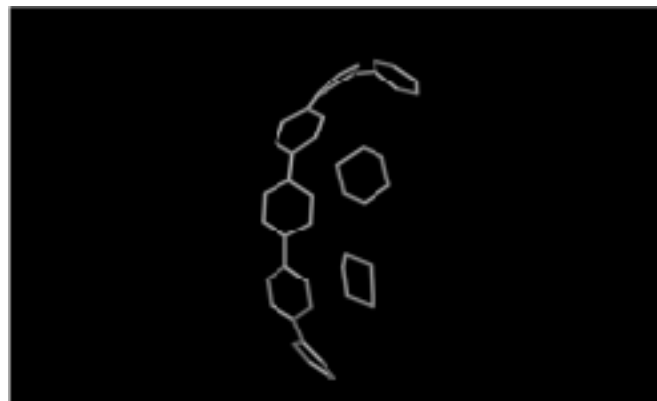
細孔性化合物結晶構造の表示例



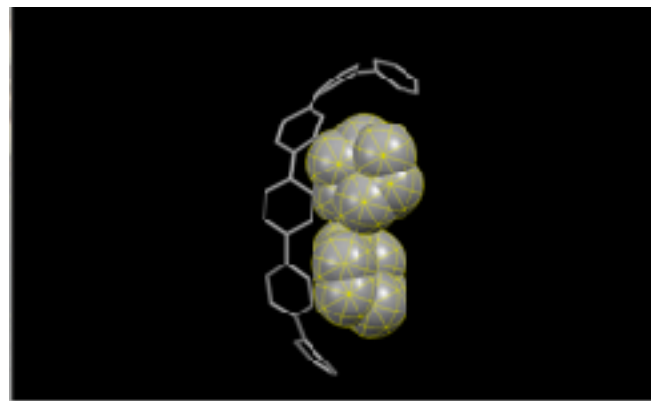
細孔性化合物結晶構造の表示例



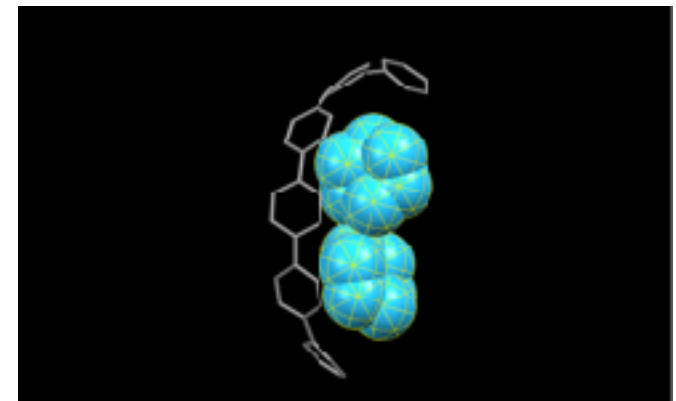
細孔性化合物結晶構造の表示例



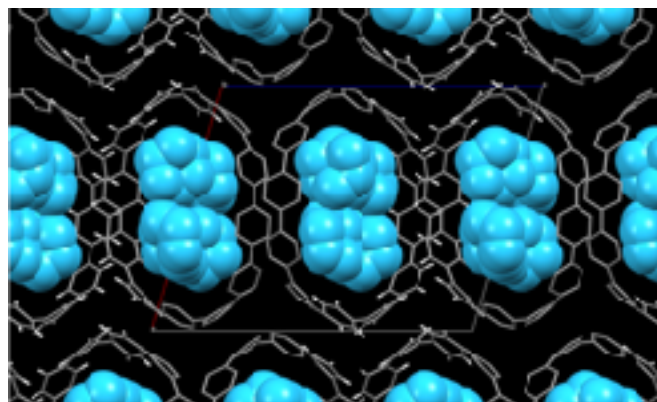
非対称単位をCapped Sticksで表示



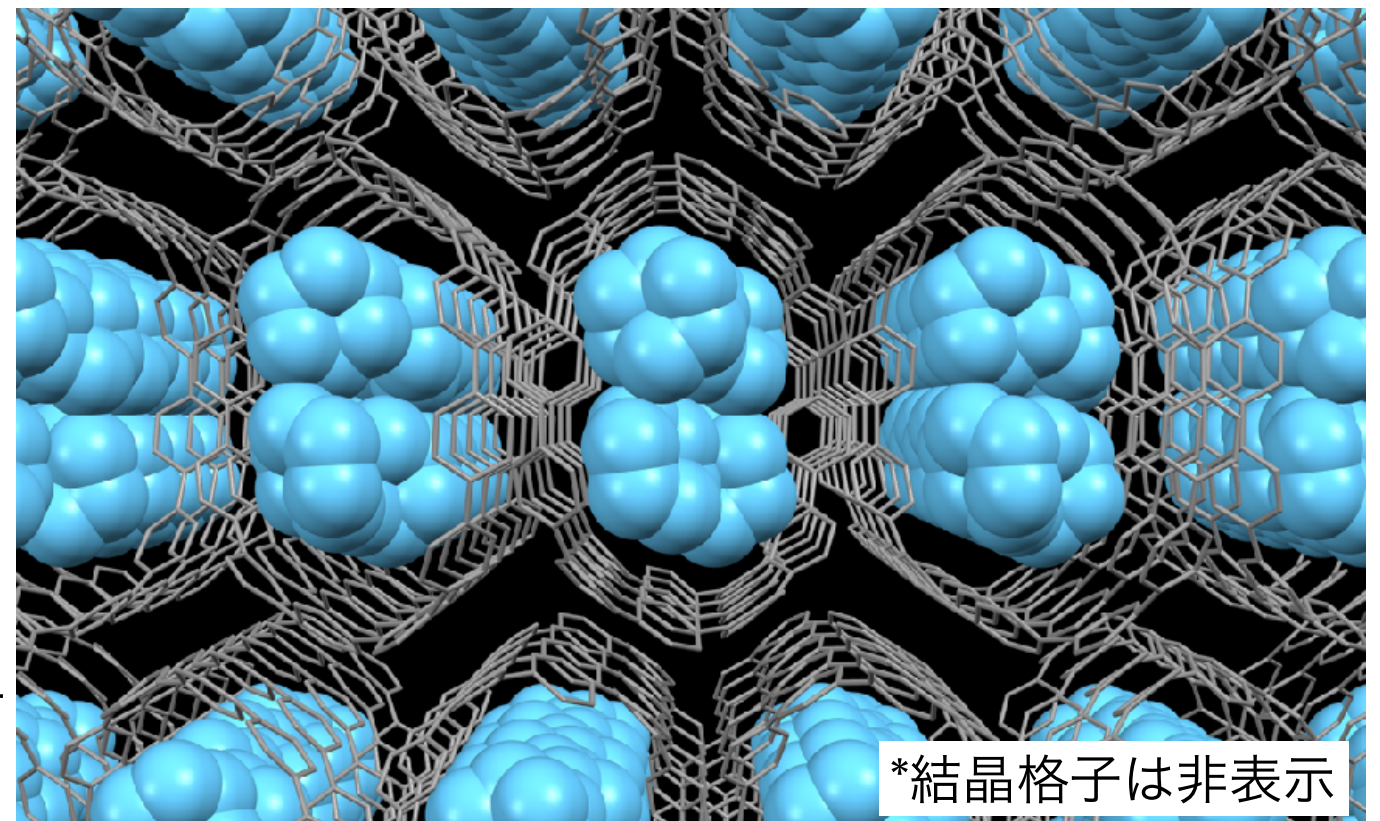
ゲスト分子を選択し Spacefillに変更



右クリック - Coloursで ゲスト分子の色を変更



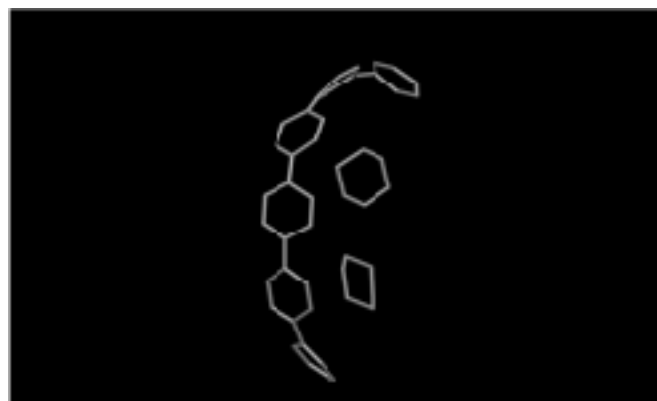
適当な範囲でPackingを表示



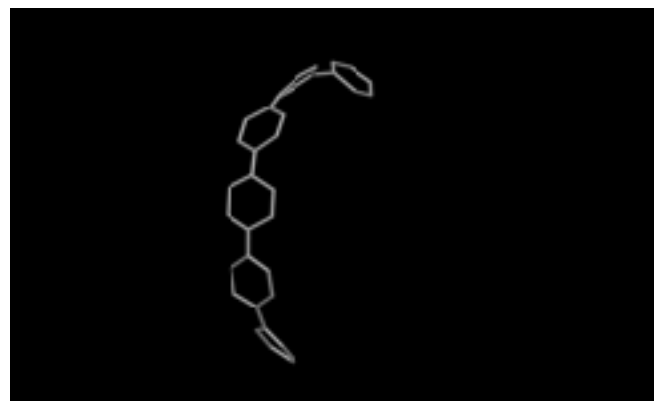
Shiftキー + 右クリック + マウス上下で遠近感が出る

*結晶格子は非表示

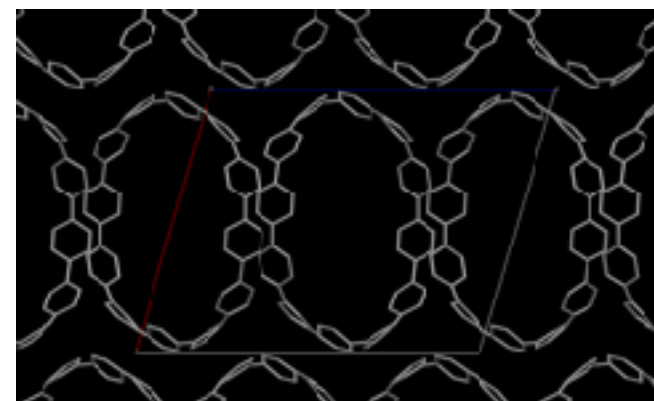
細孔性化合物結晶の“穴”を表示



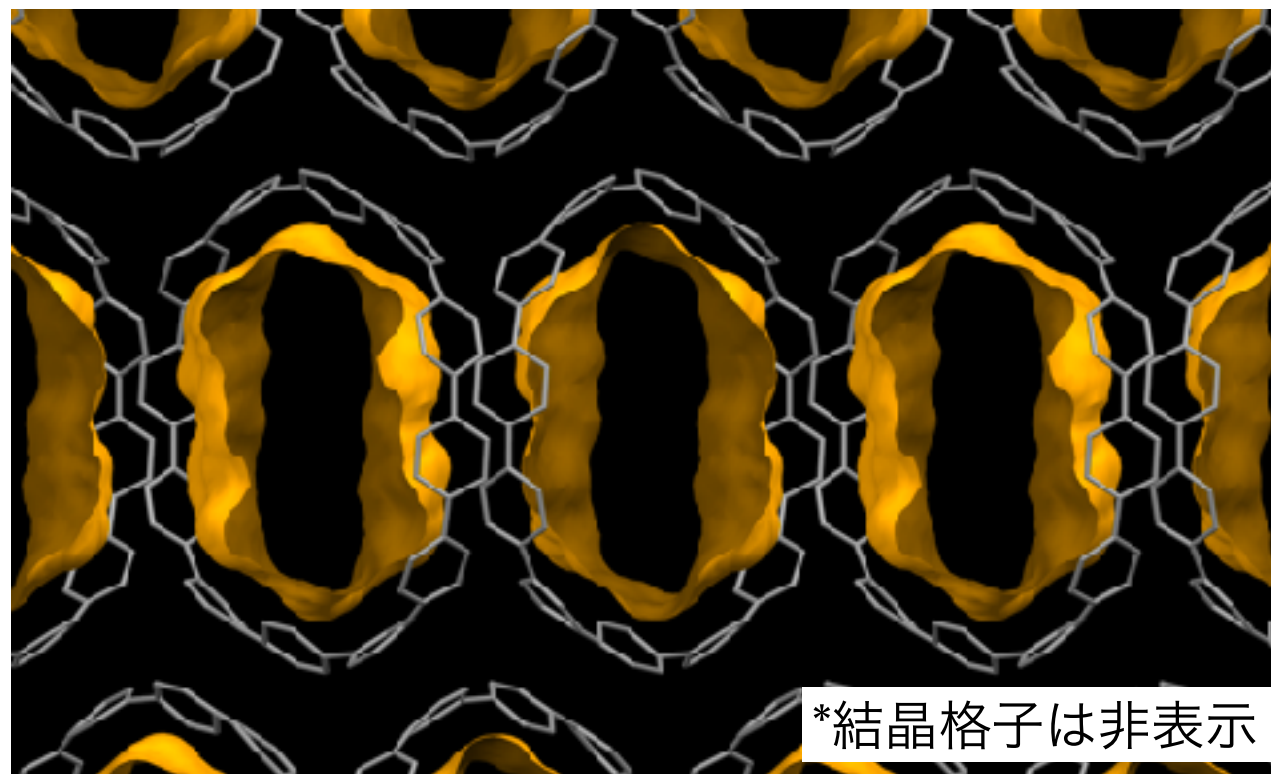
非対称単位でゲストを
右クリック → Delete



この状態でSave asで
CIF形式で保存



ゲストなしのCIFで適当
な範囲のPackingを表示

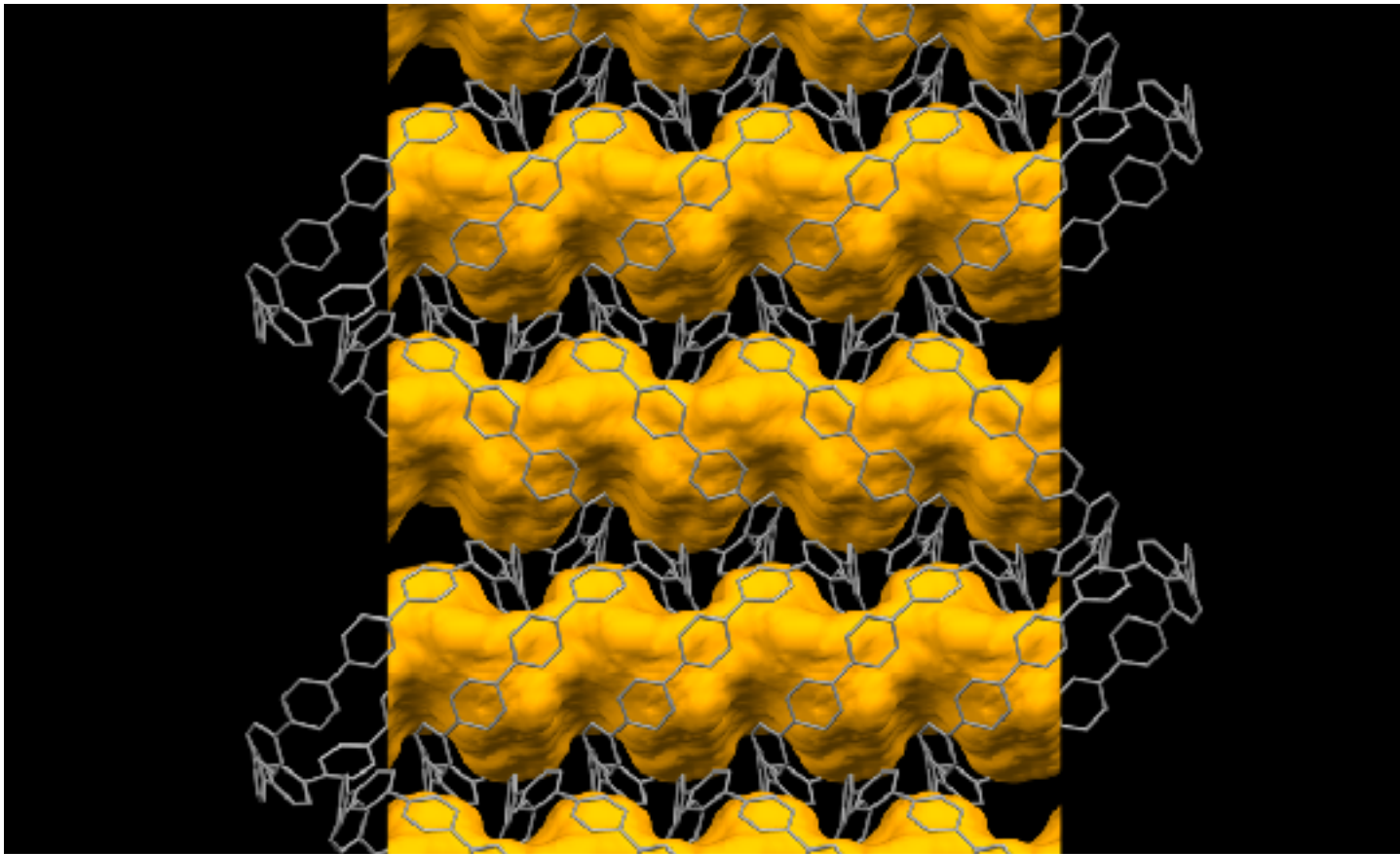


*結晶格子は非表示

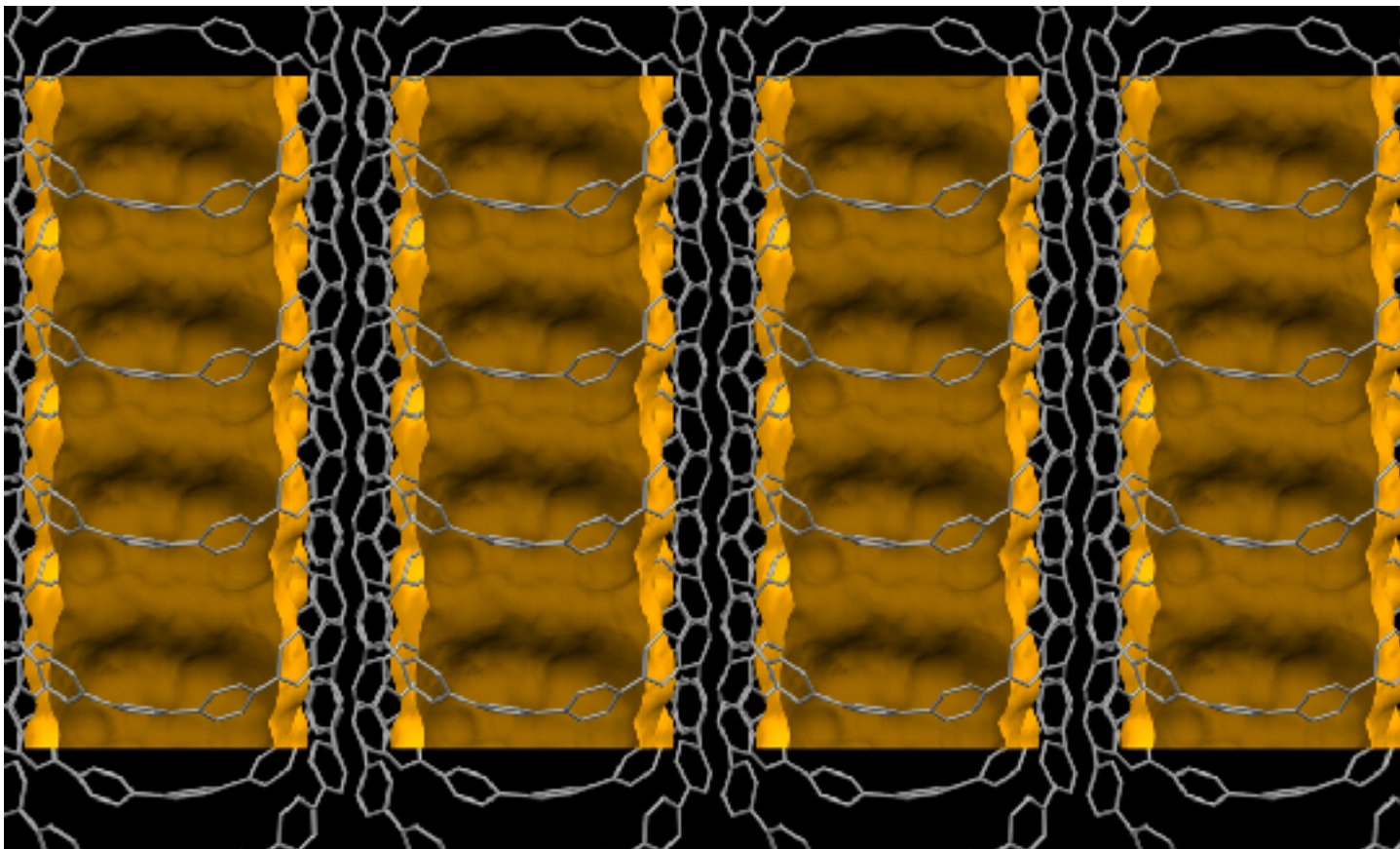
Display - Voidsで結晶構造中の空間
(=ゲスト分子がアクセス可能な領域)
を表示

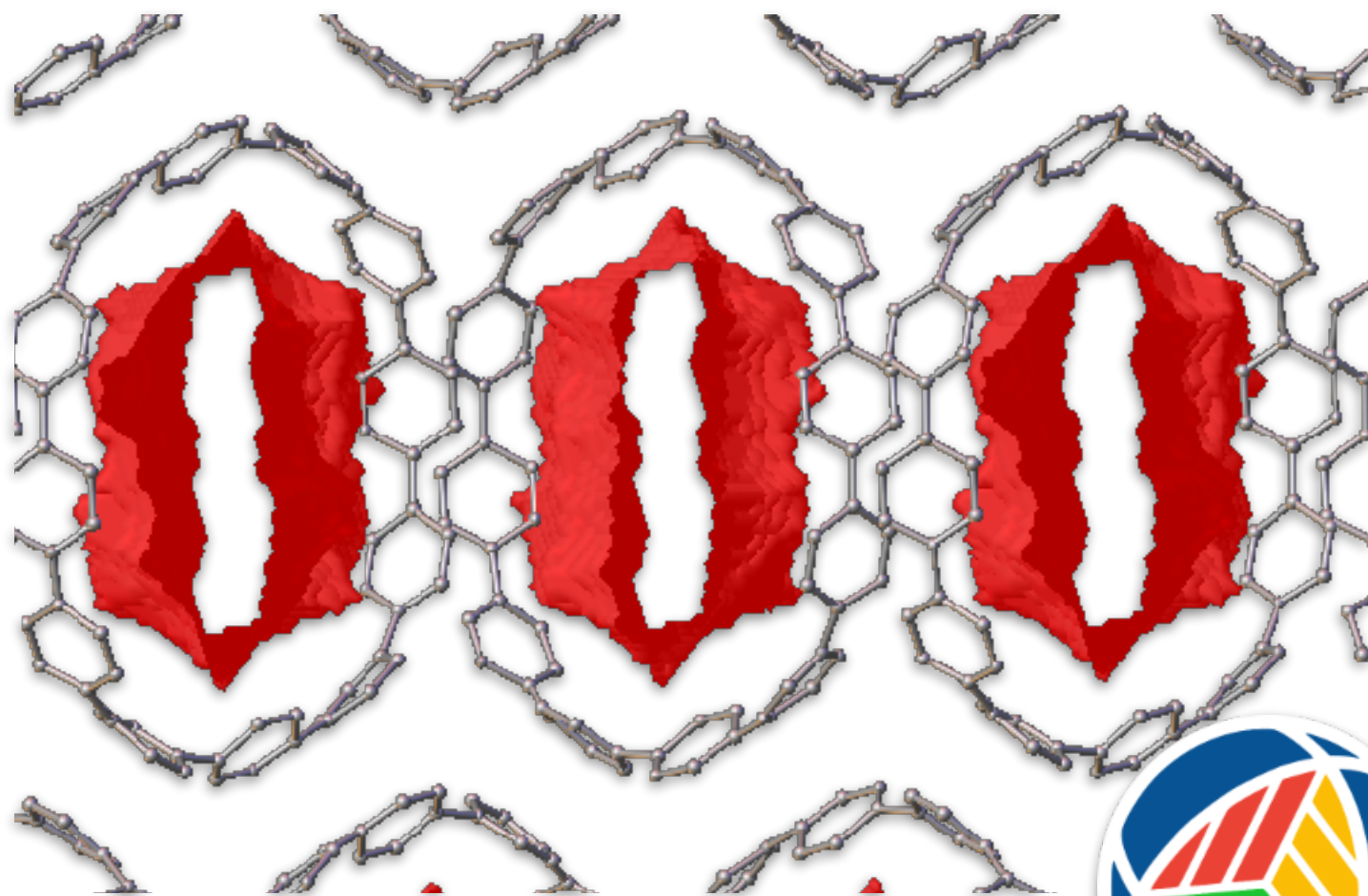
Results		
Volume	34.3	% of unit cell volume
	1174.53	Å ³

単位格子中の空間の合計体積と
割合も表示



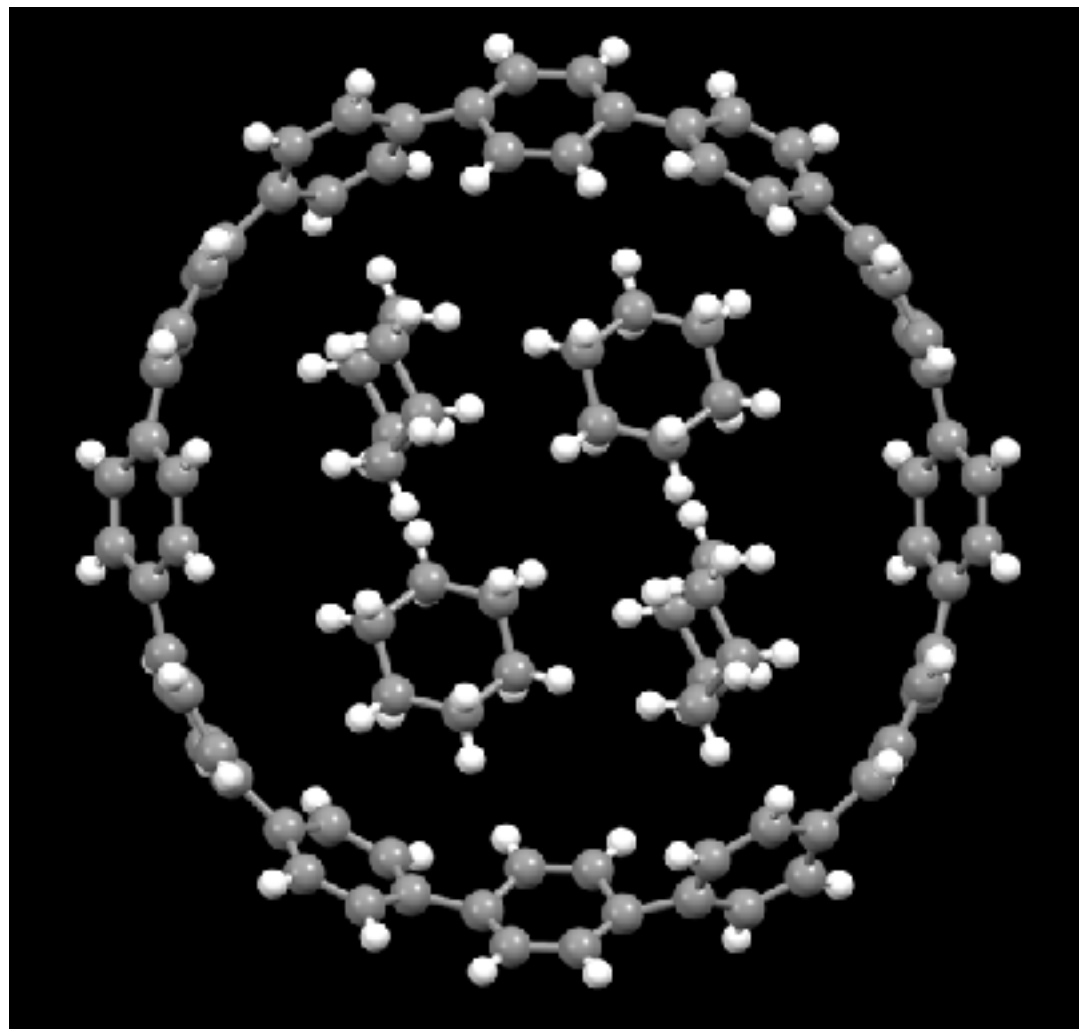
空間の形状や断面を見る
こともできる



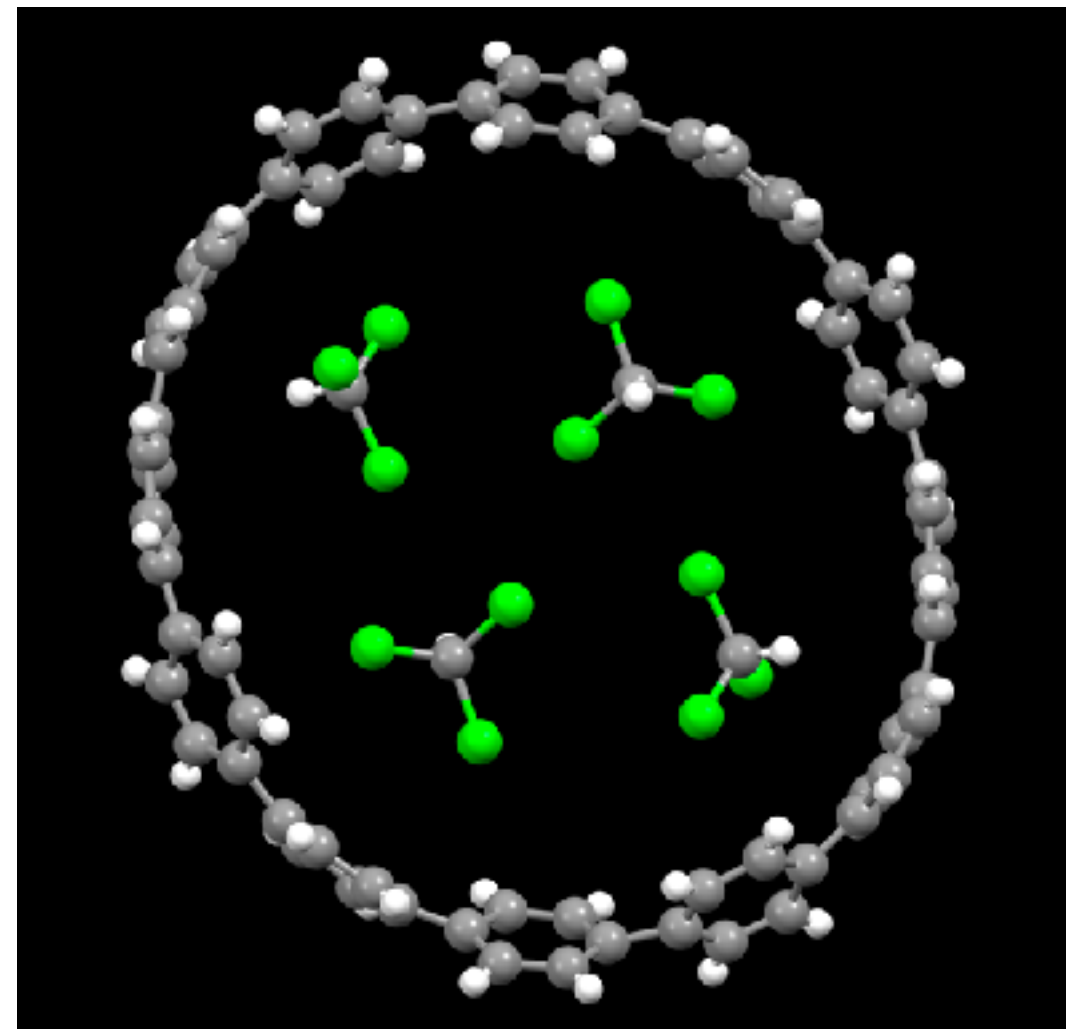


(参考)
Olex2でも表示できます

結晶構造・分子構造の比較

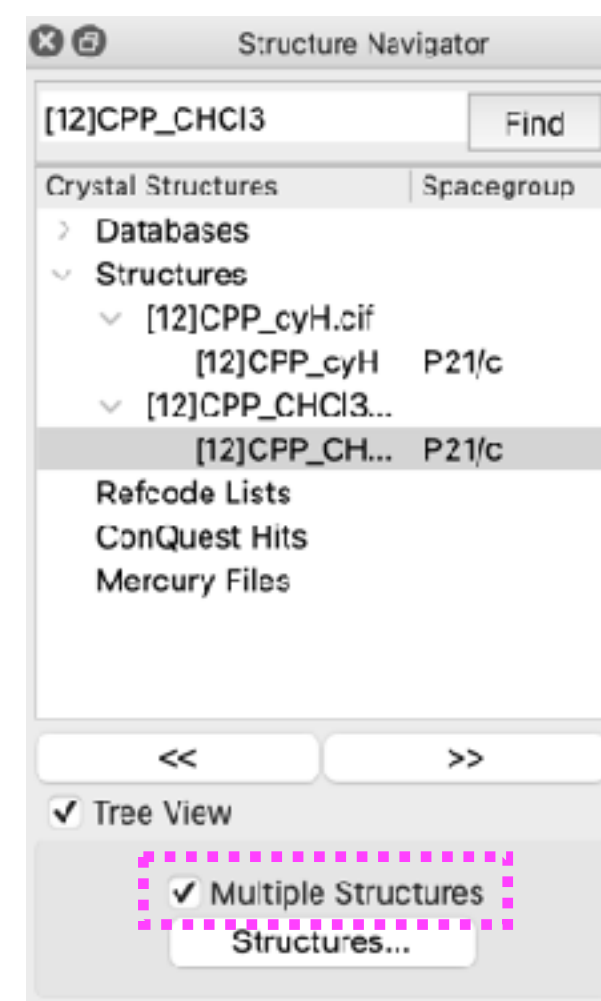
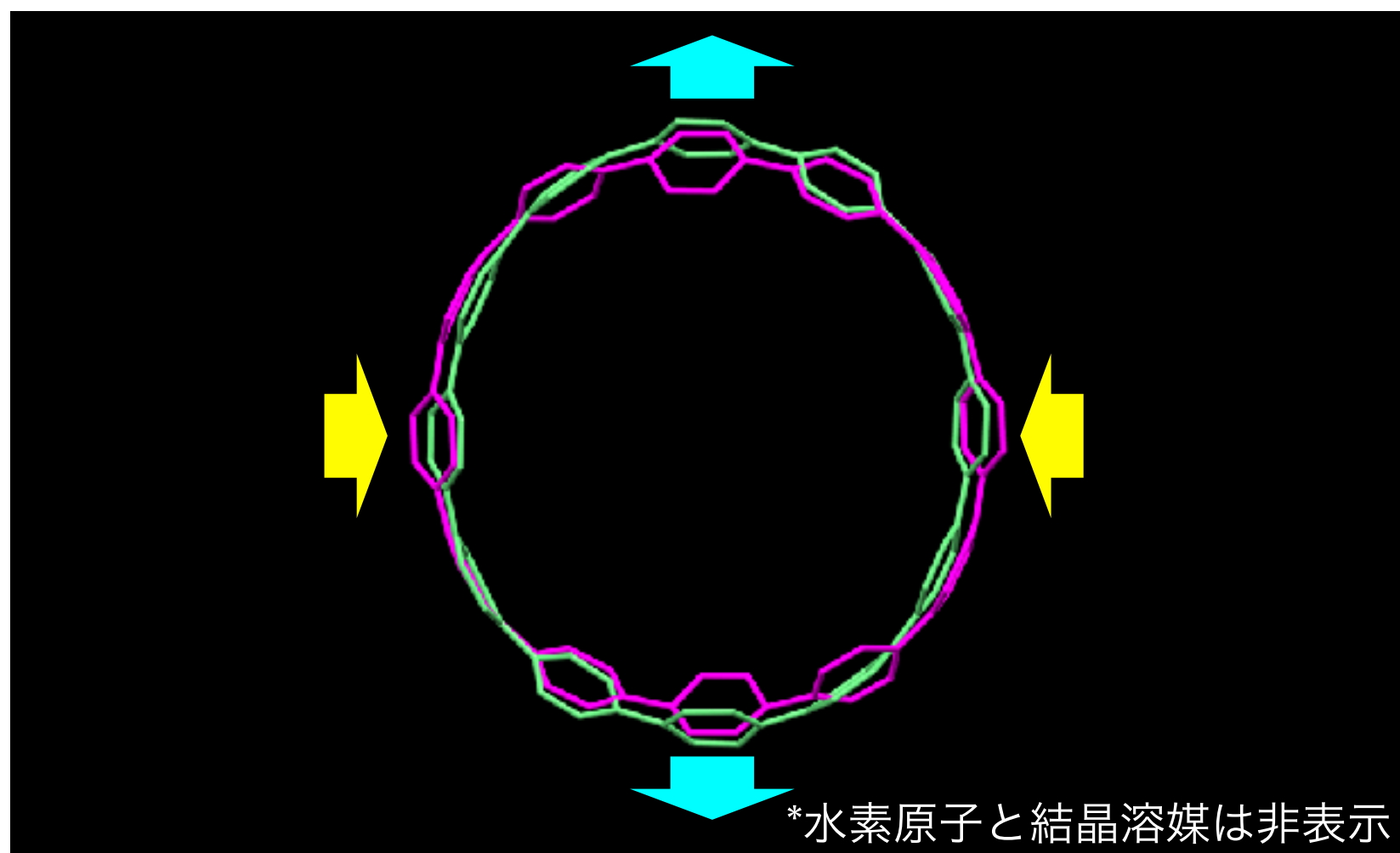


[1 2]Cycloparaphenylene
+ Cyclohexane (4分子)



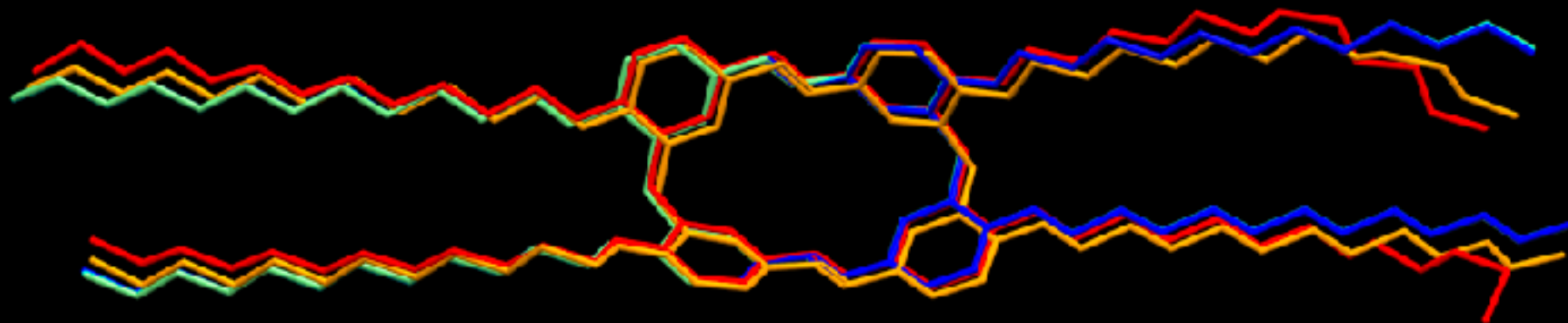
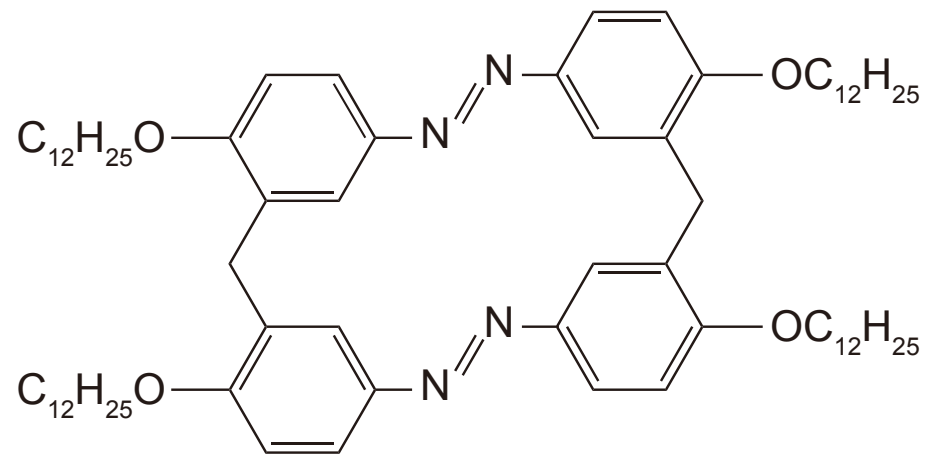
[1 2]Cycloparaphenylene
+ Chloroform (4分子)

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 <input type="button" value="v"/>
[12]CPP_CHCl3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	■ Light Green <input type="button" value="v"/>

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"/>	■ Blue <input type="text" value="⌵"/>
140K	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	■ Cyan <input type="text" value="⌵"/>
190K	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	■ Light Green <input type="text" value="⌵"/>
240K	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	■ Orange <input type="text" value="⌵"/>
293K	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	■ Red <input type="text" 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

