

## ◎プログラム SPACEG の実行例

Microsoft Windows [Version 6.0.6000]

Copyright (c) 2006 Microsoft Corporation. All rights reserved.

c:\¥xbin>>spaceg ←コマンドプロンプト画面にて spaceg と入力して、プログラム spaceg.exe を実行します。

```
*****
*
*          Computer Program SPACEG (ver.1.02)
*
*          for Generating Symmetry Operations
*
*          By H.Toraya
*
*****
```

Crystal Systems:

1. Triclinic
2. Monoclinic
3. Orthorhombic
4. Tetragonal
5. Trigonal
6. Hexagonal
7. Cubic

Select a crystal system.

7 ←第1成分であるYttriaの結晶系(立方晶)を入力します。ここでは7を選択します。

なお、ここで入力する各成分の順序は、プログラム REFLEX で指定した順序と同一にする必要  
があります。

---

Space Group Symbols:

---

195: P23	204: Im3	213: P4132	222: Pn3n
196: F23	205: Pa3	214: I4132	223: Pm3n
197: I23	206: Ia3	215: P-43m	224: Pn3m
198: P213	207: P432	216: F-43m	225: Fm3m
199: I213	208: P4232	217: I-43m	226: Fm3c
200: Pm3	209: F432	218: P-43n	227: Fd3m
201: Pn3	210: F4132	219: F-43c	228: Fd3c
202: Fm3	211: I432	220: I-43d	229: Im3m
203: Fd3	212: P4332	221: Pm3m	230: Ia3d

---

Select a space group number.

206 ←次にYttriaの空間群である **Ia3** の番号 206 を入力します。

Select:

0: add one more component

1: terminate job

0 ←第2成分を入力するので、0を入力します。

Crystal Systems:

1. Triclinic
2. Monoclinic
3. Orthorhombic
4. Tetragonal
5. Trigonal
6. Hexagonal
7. Cubic

Select a crystal system.

6 ←第2成分であるZinciteの結晶系(六方晶)を指定します。ここでは6を選択します。

---

Space Group Symbols:

---

168: P6	175: P6/m	182: P6322	189: P-62m
169: P61	176: P63/m	183: P6mm	190: P-62c
170: P65	177: P622	184: P6cc	191: P6/mmm
171: P62	178: P6122	185: P63cm	192: P6/mcc
172: P64	179: P6522	186: P63mc	193: P63/mcm
173: P63	180: P6222	187: P-6m2	194: P63/mmc
174: P-6	181: P6422	188: P-6c2	

---

Select a space group number.

186 ←次にZinciteの空間群である  $P6_3mc$  の番号 186 を入力します。

Select:

- 0: add one more component
- 1: terminate job

0 ←第3成分を入力するので、0 を入力します。

Crystal Systems:

- 1. Triclinic
- 2. Monoclinic
- 3. Orthorhombic
- 4. Tetragonal
- 5. Trigonal
- 6. Hexagonal
- 7. Cubic

Select a crystal system.

4 ←第3成分であるAnataseの結晶系(正方晶)を指定します。ここでは4を選択します。

---

Space Group Symbols:

---

75: P4	92: P41212	109: I41md	126: P4/nnc
76: P41	93: P4222	110: I41cd	127: P4/mbm
77: P42	94: P42212	111: P-42m	128: P4/mnc
78: P43	95: P4322	112: P-42c	129: P4/nmm
79: I4	96: P43212	113: P-421m	130: P4/ncc
80: I41	97: I422	114: P-421c	131: P42/mmc
81: P-4	98: I4122	115: P-4m2	132: P42/mcm
82: I-4	99: P4mm	116: P-4c2	133: P42/nbc
83: P4/m	100: P4bm	117: P-4b2	134: P42/nnm
84: P42/m	101: P42cm	118: P-4n2	135: P42/mbc
85: P4/n	102: P42nm	119: I-4m2	136: P42/mnm
86: P42/n	103: P4cc	120: I-4c2	137: P42/nmc
87: I4/m	104: P4nc	121: I-42m	138: P42/ncm
88: I41/a	105: P42mc	122: I-42d	139: I4/mmm
89: P422	106: P42bc	123: P4/mmm	140: I4/mcm
90: P4212	107: I4mm	124: P4/mcc	141: I41/amd
91: P4122	108: I4cm	125: P4/nbm	142: I41/acd

---

Select a space group number.

141 ←次にAnataseの空間群である  $I4_1/amd$  の番号 141 を入力します。

Space group I41/amd has a double setting.

Select:

0: origin at  $\bar{4}m2$

1: origin at 2/m

0 ←  $I4_1/amd$  は上記の 2 種類の原点(origin)があります。Anataseの結晶構造パラメータの原点は  $\bar{4}m2$  であるので、0 を選択します。

Select:

0: add one more component

1: terminate job

0 ← 第4成分を入力するので、0を入力します。

Crystal Systems:

1. Triclinic
2. Monoclinic
3. Orthorhombic
4. Tetragonal
5. Trigonal
6. Hexagonal
7. Cubic

Select a crystal system.

5 ← 第4成分（内部標準物質）であるcorundumの結晶系（三方晶）を指定します。ここでは5を選択します。

---

Space Group Symbols:

---

143: P3	150: P321	157: P31m	164: P-3m1
144: P31	151: P3112	158: P3c1	165: P-3c1
145: P32	152: P3121	159: P31c	166: R-3m
146: R3	153: P3212	160: R3m	167: R-3c
147: P-3	154: P3221	161: R3c	
148: R-3	155: R32	162: P-31m	
149: P312	156: P3m1	163: P-31c	

---

Select a space group number.

167 ← 次にcorundumの空間群である  $R\bar{3}c$  の番号 167 を入力します。

Space group R-3c      has a double setting.

Select:

0: rhombohedral axis

1: hexagonal axis

1 ←Hexagonal AXISを選択します。

Select:

0: add one more component

1: terminate job

1 ←これ以上追加する成分がないので、1 を選びプログラムSPACEGを終了します。

Output filename for print out = /tmp/spaceg

Output filename for sym. ope. = /tmp/symope

↑

※プログラム SPACEG の操作記録が¥tmp¥spaceg (このファイルには拡張子はありません) にテキストファイルとして出力されます。(このファイルは特に必要ではありません。)

また、プログラム SPACEG の実行により対称操作のデータファイルが¥tmp¥symope (このファイルには拡張子はありません) にテキストファイルとして出力されます。このファイルはリートベルト解析に必要です。

Before starting computer program ATOMS or PFLS,

you need to change "/tmp/symope" to "symope.d".

Stop - Program terminated.

↑

※リートベルト解析を実行する(すなわちプログラム PFLS やプログラム ATOMS を実行する)ためには、¥tmp ディレクトリ (あるいは¥tmp フォルダとも呼ぶ) にある symope というテキストファイルの名前を symope.d へ変更します(拡張子はdat ではなく dとしてください)。  
そして、この symope.d ファイルを必ずプログラム PFLS や ATOMS を実行するディレクトリ (この例では、¥XBIN) へ移動 (あるいはコピー) してください