

◎プログラム ATOMS の実行例

Microsoft Windows [Version 6.0.6000]

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

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

※プログラム ATOMS を実行するには、プログラム SPACEG を実行して作成したデータファイル「symope.d」がプログラム ATOMS (atoms.exe) と同一のフォルダ（あるいはディレクトリ）に存在する必要があります。（この例の場合、symope.d はフォルダ¥xbin に存在します。）さらに、プログラム ASFT を実行して作成したデータファイル「ftable.d」もプログラム ATOMS と同一のフォルダに存在する必要があります。

```
*****
*
*                                     *
*          Computer Program ATOMS (ver.1.02)          *
*          for preparing initial parameters            *
*          used in PFLS (ver. 6.00)                   *
*
*                                     *
*          By H.Toraya                                *
*
*                                     *
*****
```

Select:

0: generate a new dataset of l.s. parameters

1: change the l.s. parameters in old dataset

2: terminate job

0 ←新しい最小二乗パラメータ（結晶構造因子に関係する分）のデータセットを作成するので、0を選択します。

----- Enter title for your job -----

Enter job title (memorandum in max.70 characters)

←ジョブタイトルを入力します（入力しなくても可）。

----- Input the information on atoms -----

The number of components assumed = 4

↑

プログラム SPACEG にて 5 成分の結晶系を指定しているので、そのデータファイルである “symope.d” から自動的にその情報を読み取っています。

For 1th component:

Input the number of chemical formula units (Z).

16 ←第 1 成分である Yttria の式数 (化学単位) である Z=16 を入力します

How many crystallographically independent atoms in the unit cell ?

(When N kinds of atoms occupy the same crystallographic site,
they must be counted as N.)

3 ←Yttria 単位胞中の独立原子の数を入力します。8b サイトに Y1、24d サイトに Y2 および 48e サイトに O1 が存在するので、3 を入力します。

Give symbols for respective atoms (6 characters at maximum).

For 1th atom ?

Y1 ←個々の原子を区別するために半角 6 文字以下の記号を命名します。第 1 原子を Y1 と命名します。

For 2th atom ?

Y2 ←同様に第 2 原子を Y2 と命名します。

For 3th atom ?

O1 ←同様に第 3 原子を O1 と命名します。

TABLE 1. Atomic scattering factors (f-table)

No.	Atom	Valence
1	Y	3

2	O	-2
3	Zn	2
4	Ti	4
5	Al	3

Assign f-table number in TABLE 1 to each atom.

For Y1

- 1 ←原子Y1 の原子散乱因子を上記表から選択します。ここでは、No. 1 のY³⁺を選択します。

For Y2

- 1 ←同様に原子Y2 の原子散乱因子を上記表から選択します。ここでは、No. 1 のY³⁺を選択します。

For O1

- 2 ←原子O1 の原子散乱因子を上記表から選択します。ここでは、No. 2 のO²⁻を選択します。

The number of general equivalent positions = 48

Input the number of special equivalent positions

when the atom is on special positions.

Input 0 or 48

when the atom is on general positions.

For Y1

- 8 ←特殊同価位置(special equivalent position)の多重度(multiplicity)を入力します。
Y1 は 8b サイトなので、8 を入力します。

For Y2

- 24 ←同様にY2 について 24 を入力します。

For O1

- 48 ←O1 について一般位置(general position)なので、48 を入力します。

For 2th component:

Input the number of chemical formula units (Z).

- 2 ←第 2 成分であるZinciteの式数 (化学単位) であるZ=2 を入力します。

How many crystallographically independent atoms in the unit cell ?

(When N kinds of atoms occupy the same crystallographic site,
they must be counted as N.)

2 ←Zincite単位胞中の独立原子の数を入力します。2bサイトにZn1 と 2bサイトにO1 が存在するので、2を入力します。

Give symbols for respective atoms (6 characters at maximum).

For 1th atom ?

Zn1 ←第1原子をZn1 と命名します。

For 2th atom ?

O1 ←同様に第2原子をO1 と命名します。

TABLE 1. Atomic scattering factors (f-table)

No.	Atom	Valence
1	Y	3
2	O	-2
3	Zn	2
4	Ti	4
5	Al	3

Assign f-table number in TABLE 1 to each atom.

For Zn1

3 ←原子Zn1 の原子散乱因子を上記表から選択します。ここでは、No. 3 の Zn^{2+} を選択します。

For O1

2 ←原子O1 の原子散乱因子を上記表から選択します。ここでは、No. 2 の O^{2-} を選択します。

The number of general equivalent positions = 12

Input the number of special equivalent positions

when the atom is on special positions.

Input 0 or 12

when the atom is on general positions.

For Zn1

2 ←特殊同価位置の多重度を入力します。Zn1 は 2b サイトなので、2 を入力します。

For O1

2 ←特殊同価位置の多重度を入力します。O1 は 2b サイトなので、2 を入力します。

For 3th component:

Input the number of chemical formula units (Z).

4 ←第3成分であるAnataseの式数（化学単位）であるZ=4を入力します。

How many crystallographically independent atoms in the unit cell ?

(When N kinds of atoms occupy the same crystallographic site,
they must be counted as N.)

2 ←Anatase単位胞中の独立原子の数を入力します。4aサイトにTi1 と 8eサイトにO1 が存在するので、2を入力します。

Give symbols for respective atoms (6 characters at maximum).

For 1th atom ?

Ti1 ←第1原子をTi1 と命名します。

For 2th atom ?

O1 ←同様に第2原子をO1 と命名します。

TABLE 1. Atomic scattering factors (f-table)

No.	Atom	Valence
-----	------	---------

1	Y	3
2	O	-2
3	Zn	2
4	Ti	4
5	Al	3

Assign f-table number in TABLE 1 to each atom.

For Ti1

4 ←原子Ti1の原子散乱因子を上記表から選択します。ここでは、No. 4の Ti^{4+} を選択します。

For O1

2 ←原子O1の原子散乱因子を上記表から選択します。ここでは、No. 2の O^{2-} を選択します。

The number of general equivalent positions = 32

Input the number of special equivalent positions

when the atom is on special positions.

Input 0 or 32

when the atom is on general positions.

For Ti1

4 ←特殊同価位置の多重度を入力します。Ti1は4aサイトなので、4を入力します。

For O1

8 ←特殊同価位置の多重度を入力します。O1は8eサイトなので、8を入力します。

For 4th component:

Input the number of chemical formula units (Z).

6 ←第4成分である内部標準物質のCorundumの式数(化学単位)である $Z=6$ を入力します。

How many crystallographically independent atoms in the unit cell ?

(When N kinds of atoms occupy the same crystallographic site,
they must be counted as N.)

2 ←Corundum単位胞中の独立原子の数を入力します。12cサイトにA11 と 18eサイトに01 が存在するので、2 を入力します。

Give symbols for respective atoms (6 characters at maximum).

For 1th atom ?

A11 ←第1原子をA11 と命名します。

For 2th atom ?

01 ←同様に第2原子を01 と命名します。

TABLE 1. Atomic scattering factors (f-table)

No.	Atom	Valence
1	Y	3
2	O	-2
3	Zn	2
4	Ti	4
5	Al	3

Assign f-table number in TABLE 1 to each atom.

For A11

5 ←原子A11 の原子散乱因子を上記表から選択します。ここでは、No. 5 のAl³⁺を選択します。

For 01

2 ←原子01 の原子散乱因子を上記表から選択します。ここでは、No. 2 のO²⁻を選択します。

The number of general equivalent positions = 36

Input the number of special equivalent positions

when the atom is on special positions.

Input 0 or 36

when the atom is on general positions.

For A11

12 ←特殊同価位置の多重度を入力します。Al1 は 12c サイトなので、12 を入力します。

For 01

18 ←特殊同価位置の多重度を入力します。01 は 18e サイトなので、18 を入力します

2) Data and Control Parameters

		Data Parameters				Control Parameters						
No.	Atom	an	vn	asf	ne	ia	ix	iy	iz	iB	nr	atom wt.
1	Y1	39	3	1	8	0	0	0	0	0	0	88.90500
2	Y2	39	3	1	24	0	0	0	0	0	0	88.90500
3	01	8	-2	2	48	0	0	0	0	0	0	15.99940

No.	Atom	an	vn	asf	ne	ia	ix	iy	iz	iB	nr	atom wt.
1	Zn1	30	2	3	2	0	0	0	0	0	0	65.37000
2	01	8	-2	2	2	0	0	0	0	0	0	15.99940

No.	Atom	an	vn	asf	ne	ia	ix	iy	iz	iB	nr	atom wt.
1	Ti1	22	4	4	4	0	0	0	0	0	0	47.90000
2	01	8	-2	2	8	0	0	0	0	0	0	15.99940

No.	Atom	an	vn	asf	ne	ia	ix	iy	iz	iB	nr	atom wt.
1	Al1	13	3	5	12	0	0	0	0	0	0	26.98150
2	01	8	-2	2	18	0	0	0	0	0	0	15.99940

Did you correctly input Data Parameters ?

(input 0 for YES and 1 for NO.)

0 ←入力したパラメータ値に誤りがなければ、0 を入力します。

----- Input control parameters for the l.s. -----

Examples: (a: site occupancy, r: reset parameter)

For a x y z B r of the nth atom,

input 1 1 1 1 1 0 when vary a, x, y, z, & B


```

input  0  0  1  0  1  0  when vary  y & B
input  0  1  2  2  1  0  when vary  x & B (z = y = x)
input  0  1 -2  1  1  0  when vary  x (y = -x), z & B
input  0  1  0  3  1  0  when vary  x (z = x) & B

```

input 0 0 0 0 0 2 when the nth atom occupys the same site as that of the 2nd. In this case, x, y, z, & B of the nth atom are reset to those of the 2nd, and n must be > 2.

For 1th component

Input control parameters for a, x, y, z, B and r.

↑

※ a は席占有率、x, y, z は原子座標、B は等方性温度因子、および r は制約条件付加用のリセットパラメータです。ここでは、これらのパラメータを精密化するか否かの指定をします。1 を指定すると精密化して、0 を指定すると初期値のまま固定します。

For Y1

0 0 0 0 0 0 ←結晶構造パラメータは文献値（初期値）で固定するので、全て0を指定します。

For Y2

0 0 0 0 0 0 ←以下、Y1 と同じく全て0を指定します。

For O1

0 0 0 0 0 0

For 2th component

Input control parameters for a, x, y, z, B and r.

For Zn1

0 0 0 0 0 0

For 01
0 0 0 0 0 0

For 3th component

Input control parameters for a, x, y, z, B and r.

For Ti1
0 0 0 0 0 0

For 01
0 0 0 0 0 0

For 4th component

Input control parameters for a, x, y, z, B and r.

For Al1
0 0 0 0 0 0

For 01
0 0 0 0 0 0

----- Input atomic parameters -----

For 1th component:

Input site occupancy in fraction for each atom.

For Y1
1 ←第1成分であるYttriaのY1 原子の席占有率を入力します。ここでは、Y1 の席占有率は1 ですから 1 を入力します。以下、全ての成分における全ての原子も同様に 1 を入力し

ます。

For Y2

1

For O1

1

For 2th component:

Input site occupancy in fraction for each atom.

For Zn1

1

For O1

1

For 3th component:

Input site occupancy in fraction for each atom.

For Ti1

1

For O1

1

For 4th component:

Input site occupancy in fraction for each atom.

For Al1

1

For O1

1

Input x, y, z, & Biso for each atom.

For Y1

0.25 0.25 0.25 0.63 ←原子座標(x, y, z)と当方性温度因子(B_{iso})を入力します。今回は文献値をそのまま入力します。以下全ての原子について入力します。

For Y2

-0.0320 0.0 0.25 0.47

For O1

0.3911 0.1516 0.3827 0.41

Input x, y, z, & Biso for each atom.

For Zn1

0.333333 0.666667 0.0 0.31

For O1

0.333333 0.666667 0.3826 0.55

Input x, y, z, & Biso for each atom.

For Ti1

0.0 0.0 0.0 0.39

For O1

0.0 0.0 0.2081 0.61

Input x, y, z, & Biso for each atom.

For Al1

0.0 0.0 0.35200 0.40

For O1

0.3064 0.0 0.25 0.51

----- Select a function for preferred orientation correction -

Only one model can be selected for multi-component sample.

For 1th component:

- 0: no correction
- 1: Gaussian distribution (platy crystal)
- 2: Gaussian distribution (needle-like crystal)
- 3: plateau + Gaussian distribution (platy crystal)
- 4: plateau + Gaussian distribution (needle-like crystal)
- 5: March-Dollase function
- 6: symmetrized harmonics expansion

0 ←配向補正を行うか否か、および行う場合の補正関数を各成分で指定します。今回の例の場合では、配向補正を行わないので、全ての成分で0を指定します。

For 2th component:

- 0: no correction
- 1: Gaussian distribution (platy crystal)
- 2: Gaussian distribution (needle-like crystal)
- 3: plateau + Gaussian distribution (platy crystal)
- 4: plateau + Gaussian distribution (needle-like crystal)
- 5: March-Dollase function
- 6: symmetrized harmonics expansion

0

For 3th component:

- 0: no correction
- 1: Gaussian distribution (platy crystal)
- 2: Gaussian distribution (needle-like crystal)
- 3: plateau + Gaussian distribution (platy crystal)

- 4: plateau + Gaussian distribution (needle-like crystal)
- 5: March-Dollase function
- 6: symmetrized harmonics expansion

0

For 4th component:

- 0: no correction
- 1: Gaussian distribution (platy crystal)
- 2: Gaussian distribution (needle-like crystal)
- 3: plateau + Gaussian distribution (platy crystal)
- 4: plateau + Gaussian distribution (needle-like crystal)
- 5: March-Dollase function
- 6: symmetrized harmonics expansion

0

----- Write equations for site occupancy reset -----

I am sorry the function for site occupancy reset is not yet
available !

1) Title line

2) Data and Control Parameters

		Data Parameters				Control Parameters						
No.	Atom	an	vn	asf	ne	ia	ix	iy	iz	iB	nr	atom wt.
1	Y1	39	3	1	8	0	0	0	0	0	0	88.90500
2	Y2	39	3	1	24	0	0	0	0	0	0	88.90500
3	O1	8	-2	2	48	0	0	0	0	0	0	15.99940
No.	Atom	an	vn	asf	ne	ia	ix	iy	iz	iB	nr	atom wt.
1	Zn1	30	2	3	2	0	0	0	0	0	0	65.37000

2	01	8	-2	2	2	0	0	0	0	0	0	15.99940
---	----	---	----	---	---	---	---	---	---	---	---	----------

No.	Atom	an	vn	asf	ne	ia	ix	iy	iz	iB	nr	atom wt.
1	Ti1	22	4	4	4	0	0	0	0	0	0	47.90000
2	01	8	-2	2	8	0	0	0	0	0	0	15.99940

No.	Atom	an	vn	asf	ne	ia	ix	iy	iz	iB	nr	atom wt.
1	Al1	13	3	5	12	0	0	0	0	0	0	26.98150
2	01	8	-2	2	18	0	0	0	0	0	0	15.99940

3) Atomic Parameters

No.	Atom	alpha	x	y	z	Biso
1	Y1	1.00000	.250000	.250000	.250000	.6300
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000
2	Y2	1.00000	-.032000	.000000	.250000	.4700
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000
3	01	1.00000	.391100	.151600	.382700	.4100
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000

No.	Atom	alpha	x	y	z	Biso
1	Zn1	1.00000	.333333	.666667	.000000	.3100
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000
2	01	1.00000	.333333	.666667	.382600	.5500
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000

No.	Atom	alpha	x	y	z	Biso
1	Ti1	1.00000	.000000	.000000	.000000	.3900
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000
2	01	1.00000	.000000	.000000	.208100	.6100
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000

No.	Atom	alpha	x	y	z	Biso
1	Al1	1.00000	.000000	.000000	.352000	.4000
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000
2	01	1.00000	.306400	.000000	.250000	.5100

.00000 .000000 .000000 .000000 .0000

4) Scale and Overall Temperature Parameters

Scale	OA Temp
1.000000	.000000
.000000	.000000

Scale	OA Temp
1.000000	.000000
.000000	.000000

Scale	OA Temp
1.000000	.000000
.000000	.000000

Scale	OA Temp
1.000000	.000000
.000000	.000000

5) Texture Parameters

No correction

No correction

No correction

No correction

6) Reset Parameters

Sorry. This branch is closed.

1. Title line
2. Control parameters

3. Atomic Parameters
 4. Scale and Overall Temperature (OATM) Parameters
 5. Texture Parameters
 6. Equations for Site Occupancy Reset
-

If you like to change data before dumping on a file,
input number on the left shoulder for each item.

Input 0 (zero) when you do not need to change.

- 0 ←今まで入力したパラメータ値に誤りがある場合は、ここで、上記表の番号(1 から 5)を入力して訂正します。誤りがなければ0を入力します。

Select a filename for output l.s. parameters:

-1:no output, 0:file A, 1:file B, 2:file C, 3:your option.

- 0 ←入力したデータをデータファイルとして書き出す際のファイル名を指定します。
ファイル名を指定したい場合は、3を選びます。ここでは0を指定するので、ファイル名は atomsa.dat となります。

Select:

- 0: generate a new dataset of l.s. parameters
- 1: change the l.s. parameters in old dataset
- 2: terminate job

- 2 ←プログラムの終了を選択します。続けてデータセットを作成する(0 を選択)事もできます。

File name for printed output is /tmp/atoms.

Stop - Program terminated.

c:\¥xbin>