

## プログラム ATOMS ( 試料 2 ) の実行例

Microsoft Windows XP [Version 5.1.2600]

(C) Copyright 1985-2001 Microsoft Corp.

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)

Brookite, Anatase, Corundum 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 = 3

プログラム SPACEG にて 3 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).

8 第 1 成分である Brookite の式数（化学単位）である Z=8 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 Brookite 単位胞中の独立原子の数を入力します。8c サイトに Ti1、8c サイトに O1 と  
8c サイトに O2 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 ?

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。

For 3th atom ?

O2 同様に第 3 原子を O2 と命名します。

TABLE 1. Atomic scattering factors (f-table)

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

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

For Ti1

- 1 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.1 の  $\text{Ti}^{4+}$  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  $\text{O}^{2-}$  を選択します。

For O2

- 2 原子 O2 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  $\text{O}^{2-}$  を選択します。

The number of general equivalent positions = 8

Input the number of special equivalent positions  
when the atom is on special positions.

Input 0 or 8  
when the atom is on general positions.

For Ti1

- 8 特殊同価位置の多重度を入力します。Ti1 は 8c サイトなので、8 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 8c サイトなので、8 を入力します。

For O2

- 8 特殊同価位置の多重度を入力します。O2 は 8c サイトなので、8 を入力します。

For 2th component:

Input the number of chemical formula units (Z).

- 4 第 2 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	Ti	4
2	O	-2
3	Al	3

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

For Ti1

- 1 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.1 の  $\text{Ti}^{4+}$  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  $\text{O}^{2-}$  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 3th component:

Input the number of chemical formula units (Z).

6 第3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 Al1 と 18e 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 ?

Al1 第1原子を Al1 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	Ti	4
2	O	-2
3	Al	3

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

For Al1

- 3 原子 Al1 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  $\text{Al}^{3+}$  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  $\text{O}^{2-}$  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 Al1

- 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 O1

- 18 特殊同価位置の多重度を入力します。O1 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	Ti1	22	4	1	8	0	0	0	0	0	0	47.90000	
2	O1	8	-2	2	8	0	0	0	0	0	0	15.99940	
3	O2	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	Ti1	22	4	1	4	0	0	0	0	0	0	47.90000	
2	O1	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	3	12	0	0	0	0	0	0	26.98150
2	O1	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 Ti1

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 01

0 0 0 0 0 0 以下、Ti1 と同じく全て 0 を指定します。

For 02

0 0 0 0 0 0

For 2th 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 3th 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 Ti1

- 1 第1成分である Brookite の Ti1 原子の席占有率を入力します。ここでは、Ti1 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 O1

1

For O2

1

For 2th component:

Input site occupancy in fraction for each atom.

For Ti1

1

For O1

1

For 3th component:

Input site occupancy in fraction for each atom.

For Al1

1

For O1

1

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

For Ti1

0.1289 0.0972 0.8628 0.373

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 01

0.0095 0.1491 0.1835 0.466

For 02

0.2314 0.1110 0.5366 0.537

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

For Ti1

0 0 0 0.396

For 01

0 0 0.2081 0.619

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

For Al1

0 0 0.35200 0.401

For 01

0.3064 0 0.25 0.512

----- 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

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

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

-----  
1) Title line

Brookite, Anatase, Corundum

-----

## 2) Data and Control Parameters

		Data Parameters				Control Parameters						
No.	Atom	an	vn	asf	ne	ia	ix	iy	iz	iB	nr	atom wt.
1	Ti1	22	4	1	8	0	0	0	0	0	0	47.90000
2	O1	8	-2	2	8	0	0	0	0	0	0	15.99940
3	O2	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	Ti1	22	4	1	4	0	0	0	0	0	0	47.90000
2	O1	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	3	12	0	0	0	0	0	0	26.98150
2	O1	8	-2	2	18	0	0	0	0	0	0	15.99940

-----

## 3) Atomic Parameters

No.	Atom	alpha	x	y	z	Biso
1	Ti1	1.00000	.128900	.097200	.862800	.3730
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000
2	O1	1.00000	.009500	.149100	.183500	.4660
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000
3	O2	1.00000	.231400	.111000	.536600	.5370
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000

No.	Atom	alpha	x	y	z	Biso
1	Ti1	1.00000	.000000	.000000	.000000	.3960
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000
2	O1	1.00000	.000000	.000000	.208100	.6190
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000

No.	Atom	alpha	x	y	z	Biso
1	Al1	1.00000	.000000	.000000	.352000	.4010
		.00000	.000000	.000000	.000000	.0000

2	01	1.00000	.306400	.000000	.250000	.5120
		.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

---

#### 5) Texture Parameters

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.

- 1    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1を指定したので、ファイル  
      名は atomsb.d 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:\fxbin>