

プログラム SPACEG (試料 1 の場合) の実行例

Microsoft Windows XP [Version 5.1.2600]

(C) Copyright 1985-2001 Microsoft Corp.

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.

4 第 1 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。

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

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 $I4_1/amd$ has a double setting.

Select:

0: origin at $-4m2$

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.

4 第4成分である Rutile 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.

136 次に Rutile の空間群である $P4_2/mnm$ の番号 136 を入力します。

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。

c: $\%xbin$ >