

プログラム SPACEG (試料 2 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.

3 第 1 成分である Brookite の結晶系(斜方晶)を指定します。ここでは 3 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:

No.	abc(std) (1)	cab (2)	bca (3)	a-cb (4)	ba-c (5)	-cba (6)

16	P222	P222	P222	P222	P222	P222
17	P2221	P2122	P2212	P2212	P2221	P2122
18	P21212	P22121	P21221	P21221	P21212	P22121
19	P212121	P212121	P212121	P212121	P212121	P212121
20	C2221	A2122	B2212	B2212	C2221	A2122
21	C222	A222	B222	B222	C222	A222
22	F222	F222	F222	F222	F222	F222
23	I222	I222	I222	I222	I222	I222
24	I212121	I212121	I212121	I212121	I212121	I212121
25	Pmm2	P2mm	Pm2m	Pm2m	Pmm2	P2mm
26	Pmc21	P21ma	Pb21m	Pm21b	Pcm21	P21am
27	Pcc2	P2aa	Pb2b	Pb2b	Pcc2	P2aa
28	Pma2	P2mb	Pc2m	Pm2a	Pbm2	P2cm
29	Pca21	P21ab	Pc21b	Pb21a	Pbc21	P21ca
30	Pnc2	P2na	Pb2n	Pn2b	Pcn2	P2an
31	Pmn21	P21mn	Pn21m	Pm21n	Pnm21	P21nm
32	Pba2	P2cb	Pc2a	Pc2a	Pba2	P2cb
33	Pna21	P21nb	Pc21n	Pn21a	Pbn21	P21cn
34	Pnn2	P2nn	Pn2n	Pn2n	Pnn2	P2nn
35	Cmm2	A2mm	Bm2m	Bm2m	Cmm2	A2mm
36	Cmc21	A21ma	Bb21m	Bm21b	Ccm21	A21am
37	Ccc2	A2aa	Bb2b	Bb2b	Ccc2	A2aa
38	Amm2	B2mm	Cm2m	Am2m	Bmm2	C2mm
39	Abm2	B2cm	Cm2a	Ac2m	Bma2	C2mb
40	Ama2	B2mb	Cc2m	Am2a	Bbm2	C2cm
41	Aba2	B2cb	Cc2a	Ac2a	Bba2	C2cb
42	Fmm2	F2mm	Fm2m	Fm2m	Fmm2	F2mm

43	Fdd2	F2dd	Fd2d	Fd2d	Fdd2	F2dd
44	Imm2	I2mm	Im2m	Im2m	Imm2	I2mm
45	Iba2	I2cb	Ic2a	Ic2a	Iba2	I2cb
46	Ima2	I2mb	Ic2m	Im2a	Ibm2	I2cm
47	Pmmm	Pmmm	Pmmm	Pmmm	Pmmm	Pmmm
48	Pnnn	Pnnn	Pnnn	Pnnn	Pnnn	Pnnn
49	Pccm	Pmaa	Pbmb	Pbmb	Pccm	Pmaa
50	Pban	Pncb	Pcna	Pcna	Pban	Pncb
51	Pmma	Pbmm	Pmcm	Pmam	Pmmb	Pcmm
52	Pnna	Pbnn	Pncn	Pnan	Pnnb	Pcnn
53	Pmna	Pbmn	Pncm	Pman	Pnmb	Pcnm
54	Pcca	Pbaa	Pbcb	Pbab	Pccb	Pcaa
55	Pbam	Pmcb	Pcma	Pcma	Pbam	Pmcb
56	Pccn	Pnaa	Pbnb	Pbnb	Pccn	Pnaa
57	Pbcm	Pmca	Pbma	Pcmb	Pcam	Pmab
58	Pnnm	Pmnn	Pnmn	Pnmn	Pnnm	Pmnn
59	Pmmn	Pnmm	Pnmn	Pnmn	Pmmn	Pnmm
60	Pbcn	Pnca	Pbna	Pcnb	Pcan	Pnab
61	Pbca	Pbca	Pbca	Pcab	Pcab	Pcab
62	Pnma	Pbnm	Pmcn	Pnam	Pmnb	Pcmn
63	Cmcm	Amma	Bbmm	Bmmb	Ccmm	Amam
64	Cmca	Abma	Bbcm	Bmab	Ccmb	Acam
65	Cmmm	Ammm	Bmmm	Bmmm	Cmmm	Ammm
66	Cccm	Amaa	Bbmb	Bbmb	Cccm	Amaa
67	Cmma	Abmm	Bmcm	Bmam	Cmmb	Acmm
68	Ccca	Abaa	Bbcb	Bbab	Cccb	Acaa
69	Fmmm	Fmmm	Fmmm	Fmmm	Fmmm	Fmmm
70	Fddd	Fddd	Fddd	Fddd	Fddd	Fddd
71	Immm	Immm	Immm	Immm	Immm	Immm
72	Ibam	Imcb	Icma	Icma	Ibam	Imcb
73	Ibca	Ibca	Ibca	Icab	Icab	Icab
74	Imma	Ibmm	Ibcm	Imam	Immb	Icmm

Select a space group number and a setting number (1 to 6).

61 1 次に Brookite の空間群である *Pbca* の番号 61 とセッティング 1 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.

4 第2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 3 成分 (内部標準物質) 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 3 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。

c:¥xbin>