

# macOS 用 RIETAN-FP ・ VENUS システム のインストールと環境構築

泉 富士夫 \*

京都大学大学院 工学研究科 物質エネルギー化学専攻

2021 年 12 月 20 日

## 1 配付ファイル

### 1.1 配付ファイルの内容

macOS 用圧縮ディスクイメージ・ファイル macOS\_versions.dmg をホームフォルダー以下の階層（たとえば ~/Documents フォルダー）に置いてからダブルクリックすると、

- a) RIETAN\_VENUS フォルダー
- b) RIETAN\_VENUS\_examples フォルダー
- c) Install\_RIETAN\_VENUS
- d) Uninstall\_RIETAN\_VENUS
- e) File\_manipulation1.command
- f) File\_manipulation2.command
- g) bash\_profile
- h) bashrc
- i) JeditOmega\_Preferences.plist
- j) Dysnomia フォルダー
- k) Gnuplot
- l) PyAbstantia フォルダー
- m) CrysFML フォルダー
- n) reflection.ipf

を含む macOS\_versions というボリュームがマウントされる。c)~i) はインストール・アンインストール時にだけ使われるファイルであり、m) はグラフ作成プログラム Igor Pro<sup>1)</sup>用のマクロ reflection である（2.2.4 参照）。a), b), g)~k) を C ドライブ中の所定のフォルダーにコピーするインストールの手続きについては 2.2.1 で述べる。

---

\* E-mail: [fizumi3776@gmail.com](mailto:fizumi3776@gmail.com)

1) <http://www.wavemetrics.com/>

## 1.2 互換性

後述する RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境の基盤となっている Jedit Ω pro は macOS 10.12 Sierra 以降での使用を推奨している。macOS 10.10 Yosemite と 10.11 El Capitan では、分割ビュー、ツールバーなど一部の機能が動作しない。CPU・GPU コアやメモリーなどを内蔵したシステム・オン・チップ (SOC) M1 を搭載した Mac 上でも動くユニバーサル・バイナリーに対応している。

RIETAN-FP, VESTA, Dynomia などの 64 ビット・アプリケーションは Intel CPU 用にビルドしたが、M1 Mac 上でも Rosetta 2 を通じ正常に動作する。

## 1.3 フォルダーとファイルの名前に関する制約

macOS 用 RIETAN-FP・VENUS システムのインストールや実行に使うフォルダー（全階層）の名前は英数字、ハイフン‘-’、アンダースコア‘\_’だけからなっていなければならない。他の文字、たとえばスペースや小カッコ‘(’と‘)’が含まれている場合、正常な動作を保証しない。

macOS 用 RIETAN-FP・VENUS システムの実行に使うフォルダーとファイルの名前は英数字<sup>2)</sup>、ハイフン‘-’、アンダースコア‘\_’、ドット‘.’（拡張子用の一個に限る）だけからなっていなければならない。拡張子は英数字だけを含むべきである。

## 2 インストールとチェック

### 2.1 Jedit Ω

macOS 用 RIETAN-FP・VENUS システム用マクロは RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境をテキストエディター Jedit Ω pro に組み込むことを念頭に置いて開発した。Jedit Ω pro はアートマン式壺が 1,840 円で販売している macOS 用テキストエディターであり、ライセンスを購入しユーザー登録すると高度な機能を備えた pro 版にアップグレードされる<sup>3)</sup>。以後、Jedit Ω pro を Jedit Ω と略すことにする。

Jedit Ω には App Store 版と Web 版がある。「他のアプリとのアップデート操作の共通化/容易さで選ぶなら AppStore 版、AppleScript などのマクロの利用を中心にお考えのかたは Web 版をおすすめします」と明記されているので、**Web 版の方を購入すべきである**。サンドボックス環境の導入によりセキュリティを強化した App Store 版での動作は保証しない。

なお、Jedit Ω のマニュアルは「ヘルプ > Jedit Ω ヘルプ」を選べば読める。必要に応じて参照されたい。

ほとんどのマクロはアップルスクリプト \*.scpt と bash スクリプト \*.command の組み合わせからなっている。Jedit Ω (Jedit Ω.app) は RIETAN-FP・VENUS システムをインストールする前に /Applications フォルダーにインストールしておく必要がある。macOS 10.12 Sierra 以降が推奨されている。

RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境を利用すれば、Jedit Ω pro が装備している次の機能を享受できる：

2) 英語に加え日本語のフォルダー名も与えられている場合は日本語のフォルダー名も許される。

3) Jedit Ω でメニューを開くと、使えないメニュー項目は鍵マーク付きで表示される。

1. マルチファイル検索・置換
2. プレフィックス（たとえば注釈を表す‘#’）の付加・除去
3. 二つのファイルの比較<sup>4)</sup>
4. 構文カラーリング
5. カスタマイズ可能な階層構造のマクロメニュー
6. AppleScript によるマクロ作成
7. ショートカットとコンテキストメニューによるマクロ実行
8. スマートインデックス<sup>5)</sup>を通じたブックマークの利用

同統合支援環境を利用すれば、複数の入出力テキストファイルをタブ切り替えして編集・閲覧でき、ショートカットを押すことにより主要マクロを実行可能で、コンテキストメニューからマクロを選べ、スマートインデックス・メニューでファイル中のしおりにジャンプできるため、利便性が高く作業効率が非常に高まる。詳しくは Readme\_scpt.pdf を参照せよ。

## 2.2 RIETAN-FP・VENUS システムのインストール

### 2.2.1 インストールの手続き

RIETAN-FP・VENUS システムなどは macOS\_versions ボリュームから以下の手続きによりインストールする。

1. 実行中のアプリケーションがあったら、終了しておく。
2. 必要なら、「環境設定 > セキュリティとプライバシー > 一般」でパスワードを入力してカギを解除し、“すべてのアプリケーションを許可”をチェックする。比較的新しい macOS の場合 “すべてのアプリケーションを許可” がなくなったため、“App Store と確認済みの開発元からのアプリケーションを許可”をチェックする。
3. 圧縮ディスクイメージ・ファイル macOS\_versions.dmg を ~/Documents フォルダにコピーする。ただし ‘~’ は自分のホームフォルダを表す。
4. macOS\_versions.dmg をダブルクリックして macOS\_versions ボリュームをマウントする。
5. 旧バージョンのプログラムをインストール済みの場合はアンインストールする。  
macOS\_versions フォルダ内の Uninstall\_RIETAN\_VENUS をダブルクリックすると、“Uninstall\_RIETAN\_VENUS” はインターネットからダウンロードされたアプリケーションです。開いてよろしいですか？”という警告ダイアログ (図 1) が現れる。“このディスクイメージ内のアプリケーションを開くときには警告しない”をチェックし、[開く] をクリックしてからパスワードを入力する。「RIETAN-FP・VENUS システムと外部プログラムによる粉末構造解析」講習会用コンテンツがインストールされている場合、RIETAN-FP・VENUS システムとは独立して使われる可能性があるサードパーティー製ソフトウェアも削除されない。
6. “The RIETAN-FP and VENUS systems have been successfully uninstalled.” というメッセージが現れたら、[OK] をクリックする。
7. macOS\_versions フォルダ内の Install\_RIETAN\_VENUS をダブルクリックし、アンインストールと同様の手続きにより RIETAN-FP・VENUS システムのインストールを開始する。し

---

4) Evernote の公開ノート「[書類の比較](#)」を参照せよ。

5) 正規表現（後方参照を含む）が使える点が秀逸。



図1 アンインストール・インストール時に現れる最初の警告ダイアログ。

しばらく待つと、全プログラムと実行例などのインストールが終わり、“The RIETAN-FP and VENUS systems have been successfully installed.” というメッセージが現れる。[OK] をクリックする。

8. Jedit  $\Omega$  を実行し、「環境設定 > 一般 > 詳細」で [すべての環境設定を取り込む] をクリックし、マウントした macOS\_versions ボリューム中の macOS\_versions/JeditOmega\_Preferences.plist を指定してから [読み込み] をクリックし、それに保存されている全設定を入力する。Jedit  $\Omega$  は自動的に終了する。
9. セキュリティーを元のレベルに戻したいなら、「環境設定 > セキュリティとプライバシー > 一般」でカギを解除し、“すべてのアプリケーションを許可” のチェックを外してから、施錠する。
10. 誤って macOS\_versions ボリューム中のファイルを処理するのを防ぐために、同ボリュームをアンマウントしておく。

CPU・GPU コアやメモリーなどを内蔵するシステム・オン・チップ (SoC) M1 を搭載する Mac や Monterey 以降の macOS をインストールした Mac でアンインストール (No. 5) を行おうとすると「管理者のユーザ名またはパスワードが正しくありません」というエラーメッセージ (図 2) が表示され、先に進めなくなる可能性がある。そこで macOS\_versions フォルダにシェルスクリプト mm.command を置き、上記の手続き No. 5~7 に相当する操作を mm.command とターミナルで行えるようにした。その手続きは次の通り。

5. マウントした macOS\_versions 内を Finder で表示する。
6. シェルスクリプト mm.command をダブルクリックし、ターミナルでパスワードを入力する。
7. アンインストールとインストールが終わった後、return キーを押してターミナルを閉じる。

本支援環境を使用しているうちに、自分の利用目的に合わせて環境設定を変更したくなるだろう。そうした時は、独自の環境設定ファイル \*.plist をたとえば

~/Library/Application Support/JeditOmega/JeditOmega\_Preferences.plist

に保存しておくことを推奨する。ショートカットキー、表示位置優先順位、コンテキストメニューにおける表示の有無 (Readme\_scpt.pdf 中の「マクロとショートカット」参照) 以外はすべて再現できる。

さらに Mojave 以降の macOS では、\*.scpt マクロ (アップルスクリプト) の実行には Jedit  $\Omega$  にターミナルの制御を許可することが必要になった。\*.scpt 中で 実行するシェルスクリプト \*.command はターミナル (Terminal.app) で開かれるためである。詳しくはブログエントリー

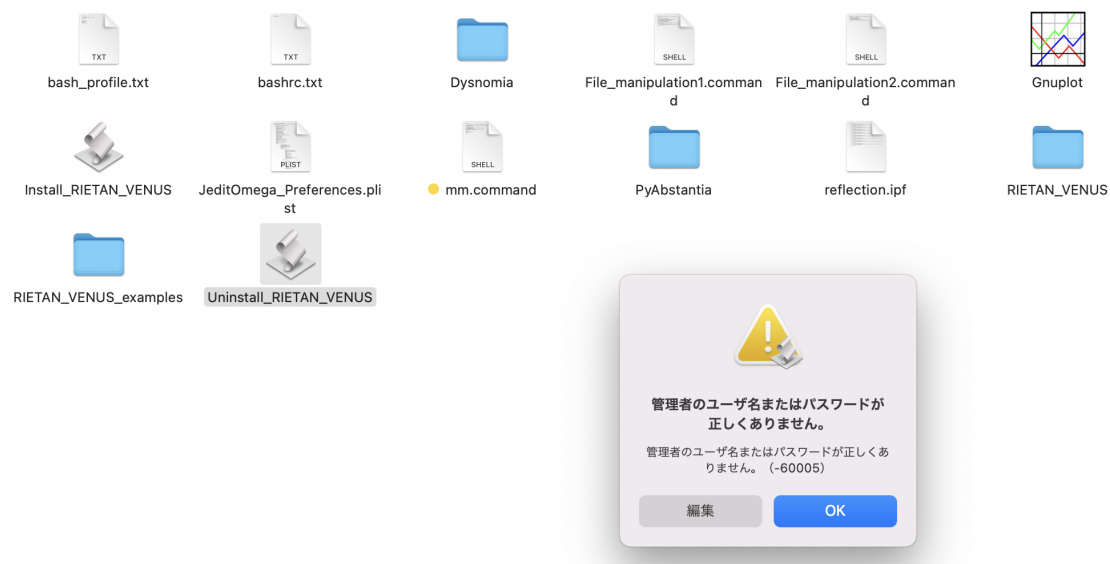


図2 アンインストール・インストール時に現れる二番目の警告ダイアログ。

「Jedit Ω 用マクロが実行できないときの対症療法」を参照せよ。

## 2.2.2 bash 用設定ファイルのひな形

ボリューム macOS\_versions の最上部に置かれた二つの bash 用設定ファイル `bash_profile.txt` と `bashrc.txt` はそれぞれホームフォルダー `/users/(ユーザー名)` に置くべき `.bash_profile` と `.bashrc` のひな形である。`.bash_profile` がログイン時に実行されるのに対し、`.bashrc` はシェル起動時に実行される。ファイル名の先頭にピリオドがあるので通常は不可視だが、Jedit Ω の「開く」ダイアログの左下で「隠しファイルもリストに表示」をチェックすれば、ファイル名が表示される。現在、自分が使っている `.bash_profile` と `.bashrc` を修正したいときは、`bash_profile` と `bashrc` を参考にするとよい。

## 2.2.3 ターミナルのセットアップ

シェルスクリプトや Fortran プログラムはターミナル上で実行される。必要に応じて `/Applications/Utilities` フォルダ中のターミナル (Terminal.app) を実行し、ターミナルメニューで「環境設定」を選んでから一般、プロファイル、ウインドウグループ、エンコーディングの各タブをクリックし、適切に設定するとよい。典型的な設定操作は次の通り。

1. [一般] ボタンをクリックする。
2. 「起動時に開く」で「次のプロファイルの新しいウインドウ」をチェックし、「Basic」を選ぶ。
3. macOS 用支援環境ではシェルとして bash を使う<sup>6)</sup>。そこで「開くシェル」で「コマンド (完全パス)」をチェックし、`/bin/bash` と入力する。
4. [プロファイル] ボタンをクリックする。
5. テキストタブをクリックし、「フォント」でフォント名とサイズをたとえば「Osaka 等幅 14pt.」のように指定し、「テキスト」で「テキストをアンチエイリアス処理」をチェックする。

6) ターミナルで使われるデフォルトのシェルは macOS 10.14 Mojave までは bash だったが、新規インストール時は zsh に変わった。macOS 用支援環境では、Windows 用 busybox64.exe との互換性を考慮して bash を使い続ける。

6. ウィンドウタブをクリックし、「ウィンドウサイズ」で列と行を指定する。スクロールバッファで「行数を制限」をチェックし、たとえば 10,000 と入力する。
7. シェルタブをクリックし、「コマンドを実行」をチェックしてから `/bin/bash` と入力し、「シェル内で実行」をチェックする。「シェルの終了時」は「ウィンドウを閉じる」に設定する。さらに「ウィンドウを閉じる前の確認」は「しない」を選ぶ。これらの設定により RIETAN\_VENUS/commonds\_common フォルダ中の bash スクリプト \*.command がターミナルのウィンドウ内で実行され、それらが終了した後は自動的にウィンドウが閉じるようになる。
8. 環境設定のダイアログボックスを閉じる。

### 2.2.4 Igor Pro 用マクロ reflection

/Applications フォルダに Igor Pro のフォルダが存在するときに限り、それが内包する Igor Procedures フォルダ中に reflection.ipf を手動でコピーする。

この小さな Igor Pro 用マクロは選択した反射の指数  $hkl$ 、格子面間隔  $d$ 、 $2\theta$  を表示するのに使う。リートベルト解析パターンまたはシミュレーション・パターンを Igor Pro でプロットした後、Graph メニューで “Show Info” を選ぶか、 $\mathbb{H}I$  を押す。次に観測/計算パターンと差パターンとの間に位置する反射の縦棒上にカーソル A（カーソル B でないことに注意）をドラッグ&ドロップし、Macro メニューから Reflection を選ぶと、ヒストリー領域に当該反射に関する情報が次のように現れる：

```
hkl = 1 1 1, d = 3.8728 angstroms, 2-theta = 22.893 degrees
```

## 2.3 RIETAN\_VENUS と RIETAN\_VENUS\_examples フォルダの点検

1. /Applications/RIETAN\_VENUS フォルダの中身を眺めて、どんなファイルやフォルダが入っているかを調べる。RIETAN\_VENUS/documents フォルダの中にはソフトウェアのマニュアルなどが置かれている（6 節参照）。
2. 同フォルダ内の任意の PDF ファイルを選択してから「ファイル > 情報を見る」を選んだとき、「このアプリケーションで開く」がプレビューになっていない場合は、プレビューに指定し直す。こうしておけば、hoge.plot と hoge.gpd から gnuplot が作成した PDF ファイルが自動的にプレビューで開かれる。プレビューには同名のファイルがすでに開かれていてもロックされないという利点がある。
3. 「ファイル > ウィンドウを閉じる」を選んで RIETAN-FP\_manual.pdf を閉じる。
4. 実行例を収めたフォルダ RIETAN\_VENUS\_examples が ~/Documents にコピーされたことを確認する。RIETAN\_VENUS\_examples フォルダをサイドバーの「よく使う項目」にドラッグし登録しておく、以後の実習に都合が良い。

## 2.4 同梱アプリケーション

### 2.4.1 Dysnomia

最大エントロピー法プログラム [Dysnomia](#) 1.0 [1] は [VENUS システム](#) のメンバーであり、L-BFGS アルゴリズムにより MEM の厳密解を求めることができる。(1) RIETAN-FP および関連プログラム



と (2) VENUS システムは互いに密接に連携して動くよう設計されているため、実行形式プログラム Dysnomia と三つのテキストファイルは RIETAN\_VENUS フォルダに収納される。

## 2.4.2 Gnuplot

macOS\_versions.dmg にはパッケージ化されたグラフ化ユーティリティー gnuplot<sup>7)</sup> 5.2.3 が同梱されており、/Applications フォルダにインストールされる。一方、Evernote の公開ノート「gnuplot の最新版を Homebrew でインストール」に詳述した手続きに従って gnuplot の最新版 5.4.X をインストールし、/usr/local/bin フォルダに gnuplot のエイリアスを置けば、自動的に最新版の方が実行される。RIETN-FP・VENUS システムがグラフを出力する pdfcairo ターミナルはいずれの gnuplot でも使える。

(a) 粉末回折パターンの当てはめとシミュレーション、(b) Williamson–Hall 法と Halder–Wagner 法による結晶子サイズとマイクロ歪みの決定、(c) X線分散の補正項  $f'$  と  $f''$  と質量減衰係数  $\mu_m$  の計算、(d)  $R_{wp}$  vs. サイクル数のプロットで得た結果をグラフ化し、PDF ファイルとして出力するのに使う。もちろん他の用途にも利用可能だが、gnuplot 5.2.3 で対数座標を使うとトラブルが発生することに注意せよ<sup>8)</sup>。

Gnuplot スクリプト・ファイル hoge.plt の一部を修正すれば、gnuplot が出力する PDF ファイルに直接反映される。グラフの種類や好みに応じて、フォント、線やシンボルの色と線幅、数値、キャプション、タイトルの大きさと位置などを変えることを推奨する。Gnuplot 5 全般について学ぶには文献 [2] を読むとよい。

hoge.plt を出力するために RIETAN-FP の入力ファイル hoge.ins 中で NPAT = 1 と指定すると、RIETAN-FP は ‘terminal pdfcairo .....’ というコマンドを hoge.plt 中に出力する。pdfcairo ターミナルに関する詳細はブログエントリー「Gnuplot で pdfcairo ターミナルを使うための手続き」に詳述した。pdfcairo ターミナルへの出力で生成した PDF ファイルでは、グラフの余白が自動的に切り取られる。これは LaTeX, Microsoft Office, Adobe Illustrator などに PDF ファイルを export するとき重宝する機能だが、完璧からは程遠く、グラフ中のラベルとタイトルが一部欠落するというトラブルに見舞われることがある。そのような場合は hoge.plt 中の

```
set margins -1, -1, -1, -1 # <left>, <right>, <bottom>, <top>
```

における数値を文字単位で変更すればよい。ただし負の値は（ここでは -1）は gnuplot が自動的に計算した値を表す。

## 2.4.3 PyAbstantia

西村真一氏（東京大学）が開発した BVS・BVCL 法用 python スクリプト PyAbstantia 0.7c<sup>9)</sup> は /Applications/PyAbstantia フォルダにインストールされる。PyAbstantia によりイオン伝導体における可動化学種の拡散経路を三次元可視化する際には、Python に加え数値計算用モジュール numpy が必要になる。

PyAbstantia と VESTA の組み合わせにより可動イオンの不規則分布を可視化する手続きについては、RIETAN\_VENUS/documents/Mac\_exercise.pdf 中の「可動イオンの拡散経路の可視化」を

7) <http://gnuplot.sourceforge.net> (GPL v2 に基づき無償配付されており、再配布が許されている)

8) 対数スケールのグラフ限定で Windows 用の v5.2.8 を使うという手もある。

9) <https://shinichinishimura.github.io/pyabst/> (MIT ライセンスに基づき無償配付されており、再配布できる)

参照せよ。

### 3 追加インストールの手続き

macOS\_versions.dmg をマウントしてから RIETAN-FP・VENUS システムをインストールするだけでなく、必要に応じて他の外部プログラム (Fox, EXPO2014, Superflip, EDMA, cryscalc, VESTA, TeX Live) のアーカイブファイルを自分でダウンロードし、以下の手続きに従いインストールすれば、「RIETAN-FP・VENUS システムと外部プログラムによる粉末構造解析」講習会の実習用コンテンツに含まれるプログラムを使えるようになり、RIETAN-FP・VENUS システムをそれらのプログラムで補完しうる。もちろん自分が使うプログラムだけインストールすればよい。

継続して使用する場合は、各プログラムの配付 Web サイトで使用許諾条件を読み、遵守するようお願いする。

#### 3.1 Fox

Fox は直接空間法による未知構造解析用プログラムである。ピークサーチ、バックグラウンド強度の決定、指数付け、Le Bail 解析などの機能も備えている。GNU GPL に基づき無償配付されており、再配布が許されているが、RIETAN-FP・VENUS システムと名乗っている一般配布のファイルに含めるのは控えることにした。Le Bail 解析の機能も備えている。

Fox の [GitHub](#) からディスクイメージ・ファイル Fox\*.dmg をダウンロードしてからマウントし、/Applications/Fox フォルダに ChangeLog.txt, Fox, LICENSE.txt, README-Fox.txt, README.rst をコピーする。

FOX によるバックグラウンドの見積もり、ピークサーチ、指数付け、空間群の探査については、RIETAN\_VENUS/documents/Mac\_exercise.pdf 中の「FOX によるバックグラウンドの見積もり、ピークサーチ、指数付け、空間群の探査」に詳述した。

#### 3.2 EXPO2014

EXPO2014 は直接法（逆空間法）による未知構造解析用プログラムである。Le Bail・リートベルト解析の機能も備えている。[Bari 大学・結晶学研究所の Web サイト](#)でユーザー登録し、確認の電子メールを受けとれば、macOS 用のインストーラーをダウンロードできる。大学と非営利研究機関に所属する人は無償で使える。

ダウンロードしたディスクイメージファイルをダブルクリックしてマウントした後、パッケージ化アプリケーション Expo、すなわち Expo.app を/Applications フォルダにコピーする。

EXPO2014 による未知構造解析については、Mac\_exercise.pdf 中の「直接法による未知構造解析」に詳述した。

#### 3.3 Superflip

Superflip は双対空間法 (dual-space method. チャージ・フリッピングとも言う) により位相問題を解き単位胞内の電子密度を決定するプログラムである。RIETAN-FP は superflip と EDMA (3.4 参照) 用の入力ファイル hoge.inflip を作成する機能を有するので、未知構造解析に取り組む場合は、両プログラムのインストールを推奨する。

/Applications/superflip/フォルダを作成した後、アーカイブファイル superflip\_macos\_in-



tel.zip を <http://superflip.fzu.cz> からダウンロードし、解凍で得られた superflip を superflip フォルダーに移動する。ただし、32 ビット・アプリケーションなので macOS 10.15 Catalina 以降では実行できない。そういう場合は、Evernote の公開ノート「[macOS 用 superflip と EDMA のビルド](#)」の記述に従って、自分でビルドする必要がある。

Superflip と EDMA による双対空間法解析については、Mac\_exercise.pdf 中の「パターン分解と双対空間法 (硫酸バリウム)」と「パターン分解と双対空間法 (フッ素アパタイト)」で具体的な手続きを述べた。

### 3.4 EDMA

EDMA (Electron Density Map Analysis) は Superflip で得られた電子密度のピークに対し原子を割り付け、CIF を出力するためのプログラムである。

/Applications/EDMA フォルダーを作成してからアーカイブファイル EDMA\_macos\_intel.zip を <http://superflip.fzu.cz> からダウンロードし、解凍で得られた EDMA を EDMA フォルダーに移す。ただし、32 ビット・アプリケーションなので macOS 10.15 Catalina 以降では実行できない。そういう場合は、上述の「[macOS 用 superflip と EDMA のビルド](#)」を参照して自分でビルドする必要がある。

### 3.5 cryscal

cryscal は結晶学的計算コマンドの集合体である。これさえあれば、一般・特殊等価位置の座標、消滅則、異方性原子変位パラメーター間に課せられる制約条件、原子間距離、結合角、反射リスト ( $hkl$ ,  $m$ ,  $2\theta$ ,  $d$ ,  $|F|$ ,  $I/I_{\max}$  など)、全サイトの bond valence sum などが手軽に得られる。自分でビルドした cryscal には BEAM コマンドが正常に動作しないというバグが存在するため、[FullProf Suite](#) から下記の手続きにより cryscal を抽出するとよい。

あらかじめ/Applications/FullProf\_Suite フォルダーを作成しておく。ディスクイメージ・ファイル FullProf4Mac\_v262.dmg を <https://www.ill.eu/sites/fullprof/php/downloads.html> からダウンロードしてからマウントし、パッケージ化アプリケーション FullProf4Mac、すなわち FullProf4Mac.app をホームフォルダー以下のフォルダー（たとえば Downloads）にコピーする。次に FullProf4Mac を **control** + クリックし、「パッケージの内容を表示」を選んで下層フォルダーにアクセスできるようにする。FullProf4Mac/Contents/Resources/FullProf\_Suite フォルダーから bond\_str と cryscal だけを/Applications/FullProf\_Suite フォルダーにコピーする。環境変数 cryscal は bash スクリプト cryscal.command 中で/Applications/FullProf\_Suite/に設定される。

cryscal マクロにより CIF から結晶学的情報を取得する手続きについては、Mac\_exercise.pdf 中の「CIF を出発点とする結晶学的情報の取得」に詳述した。

### 3.6 VESTA

VESTA [3] は結晶構造とボクセル・データの三次元可視化用 C++ プログラムである。VESTA がいかに広く普及しているかについては、ブログエントリー「[NIMS 発の論文で被引用数トップの地位を確立!](#)」をお読み頂きたい。[Dysnomia](#) とともに VENUS システムのメンバーである VESTA は厳密には外部プログラムと見なせないが、ユーザーからの要望や障害報告が多く更新頻度が比較的高いことから、macOS\_versions.dmg に同梱しないことにした。

<http://jp-minerals.org/vesta/jp/ownload.html> から VESTA.dmg をダウンロードしてからマウントし、VESTA フォルダを/Applications フォルダ中にコピーする。

RIETAN-FP と VESTA の連携による三次元可視化とファイル変換については RIETAN\_VESTA\_cooperation.pdf に詳述されている。Windows 用 RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境を対象としているが、macOS 版のユーザーでも役立つだろう。

### 3.7 TeX Live

TeX を活用するマクロ cif2pdf, E2J, Typeset, BibTeX, MakeIndex を使うには、あらかじめ TeX 関連ソフトウェアを集大成した TeX Live パッケージをインストールしておかねばならない。macOS 用 TeX Live は [MacTeX の Web ページ](#) から MacTeX.pkg をダウンロードし、それをダブルクリックしてインストールする。パッケージの更新法については「[Mac 用 TeX による組版](#)」を参照されたい。

cif2pdf と E2J によるリートベルト解析結果の文書化については Mac\_exercise.pdf 中の「リートベルト解析結果のドキュメンテーション」を参照せよ。

## 4 RIETAN\_VENUS フォルダ

/Applications/RIETAN\_VENUS フォルダには、

1. RIETAN-FP の実行形式ファイル： rietan
2. ORFFE の実行形式ファイル： orffe
3. lst2cif の実行形式ファイル： lst2cif
4. CIF → hoge.ins 変換と CIF → hoge-report.pdf 変換用のプログラム cif2ins の実行形式ファイル： cif2ins
5. MADEL の実行形式ファイル： madel
6. ALBA の実行形式ファイル： alba
7. Dysnomia の実行形式ファイル： Dysnomia
8. B2beta の実行形式ファイル： b2beta
9. 午前 0 時以降の経過時間（秒）を出力するコマンド: seconds
10. scripts\_JeditOmega フォルダ
11. scripts\_JeditOmega\_scpt フォルダ<sup>10)</sup>
12. set\_VESTA\_PREF フォルダ
13. commands\_common フォルダ
14. documents フォルダ

に加え、実行形式プログラムが使用するテキストファイル、任意の波長における X 線分散の補正項  $f'$  と  $f''$  を計算するためのデータを収めたバイナリーファイル xdc.bin が収納される。Fortran プログラム \*.exe は Intel Fortran Composer XE でコンパイルした。rietan、すなわち RIETAN-FP [4] が RIETAN-FP・VENUS システムの中核的存在であることは言うまでもない。seconds は自動 MPF 解析用 bash スクリプト MPF\_multi.command などの bash スクリプトで使われる自家製コマンドである。

---

10) 用アップルスクリプト \*.scpt が scripts\_JeditOmega\_scpt フォルダ以下の階層に置かれており、インストール時に全ファイル・フォルダが ~/Library/Application Support/JeditOmega/scripts フォルダにコピーされる。

サブフォルダー `commands_common` には AppleScript で書かれたマクロ `*.scpt` 内で実行するシェルスクリプト `*.command` が入っている。`*.command` はプリプロセッサ Tink の文法に従って記述されている RIETAN-FP 用入力ファイル `*.ins` の処理でとりわけ威力を発揮する。`*.ins` 中には変数名や If・Select ブロックが多数含まれているため、UNIX コマンドによる文字列の変換、検索、置換、抽出、結合、分割、比較などに適している。

`commands_common` と `documents` フォルダーは決して `RIETAN_VENUS` フォルダーから移動してはならない。さもないと、シェルスクリプト `commands_common/*.command`、ひいては `RIETAN-FP・VENUS` 統合支援環境が正常に動作しなくなる。

## 5 RIETAN\_VENUS\_examples フォルダー

~/Documents/RIETAN\_VENUS\_examples フォルダーには、計算例 (`*.ins`, `*.int`, `*.lst` など) を納めたサブフォルダーが含まれている。このフォルダーはデータファイルだけを含むため、/Applications フォルダー内に置くのを避けた。

原則としてテキストファイルのエンコーディングは欧米 (ASCII)、行末は LF とするが、日本語の注釈を含む `*.ins` はエンコーディングを EUC に設定して保存しなければならない。さもないと、Tink による `*.ins` の前処理の際、一部の文字が制御文字とみなされ、エラーが発生する可能性がある。

以下、`RIETAN_VENUS_examples` フォルダー中のリートベルト解析、パターン分解、MEM/MPF 解析に関するサブフォルダーについて、その内容を説明していく。講習会における実習のために追加したデータや `cifconv.command` [5] 関連データは省略する。前者については `Win_exercise.pdf`, `Mac_exercise.pdf`, `RIETAN_VESTA_cooperation.pdf` を参照されたい。

### 5.1 Fapatite フォルダー

フッ素アパタイト単相試料の粉末 X 線回折データ ( $\text{Cu } K\alpha$  特性 X 線) のリートベルト解析。`Fapatite.ins` を単相リートベルト解析用ユーザー入力ファイル `*.ins` のひな形に使っていただきたい。`Fapatite.ins` は `microabsorption` の補正に関する行を含んでいないため、多相解析のひな形として使うと、エラーが発生する。

### 5.2 FapatiteJ フォルダー

フッ素アパタイト単相試料の粉末 X 線回折データ ( $\text{Cu } K\alpha$  特性 X 線) のリートベルト解析。入力ファイル `FapatiteJ.ins` 中の注釈が日本語となっていることを除けば、5.1 と実質的に同じである。もちろん `FapatiteJ.ins` は EUC エンコーディングで保存されている。

### 5.3 Fapatite\_LB フォルダー

フッ素アパタイト単相試料の粉末 X 線回折データ ( $\text{Cu } K\alpha$  特性 X 線) の Le Bail 解析。`Fapatite.ins` を単相 Le Bail 解析用ユーザー入力ファイル `*.ins` のひな形に使っていただきたい。

### 5.4 Cu<sub>3</sub>Fe<sub>4</sub>P<sub>6</sub> フォルダー

3 相混合物試料の粉末 X 線回折データの解析。`Cu3Fe4P6.ins` を多相解析用ユーザー入力ファイル `*.ins` のひな形に使っていただきたい。`Cu3Fe4P6.ins` は `microabsorption` の補正に関する行を含ん

でいるため、単相解析のひな形として使うと、エラーが発生する。

## 5.5 Cimetidine フォルダー

Cimetidine の放射光粉末 X 線回折データのリートベルト解析。

## 5.6 MnO<sub>2</sub> フォルダー

$\alpha$ -MnO<sub>2</sub> 単相試料の粉末 X 線回折データ (Cu  $K\alpha$  特性 X 線) のリートベルト解析。

## 5.7 BaSO<sub>4</sub> フォルダー

BaSO<sub>4</sub> 単相試料の粉末 X 線回折データ (Cu  $K\alpha_1$  特性 X 線) のリートベルト解析。

## 5.8 BaSO<sub>4</sub>\_LB フォルダー

BaSO<sub>4</sub> 単相試料の粉末 X 線回折データ (Cu  $K\alpha_1$  特性 X 線) の Le Bail 解析。BaSO4.ins を Le Bail 解析用ユーザー入力ファイル \*.ins のひな形に使っていただきたい。

## 5.9 Tl<sub>2</sub>223 フォルダー

Tl<sub>2</sub>(Ba<sub>0.85</sub>Sr<sub>0.2</sub>)<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6</sub> という仕込み組成をもつ高温超伝導体の粉末中性子回折データのリートベルト解析。Tl2223.ins を中性子回折データのリートベルト解析用ユーザー入力ファイル \*.ins のひな形に使っていただきたい。

## 5.10 BiCoO<sub>3</sub> フォルダー

反強磁性酸化物 BiCoO<sub>3</sub> の粉末中性子回折データのリートベルト解析。BiCoO3.ins を反強磁性体の中性子回折データのリートベルト解析用ユーザー入力ファイル \*.ins のひな形に使っていただきたい。

## 5.11 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> フォルダー

ALBA による  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> の観測構造因子の最大エントロピー・パターンソン解析。

## 5.12 YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub> フォルダー

MADEL による高温超伝導体 YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub> のサイト・ポテンシャルとマーデルング・エネルギーの計算。入力ファイル：YBa2Cu4O8.pme、出力ファイル：YBa2Cu4O8.mad。

STARUCTION TIDY による結晶データの標準化。入力ファイル：YBa2Cu4O8.sti、出力ファイル：YBa2Cu4O8.sto。

## 5.13 Zr<sub>2</sub>Fe<sub>12</sub>P<sub>7</sub> フォルダー

STARUCTION TIDY による結晶データの標準化。入力ファイル：Zr2Fe12P7.sti、出力ファイル：Zr2Fe12P7.sto。

## 5.14 ZrPO4-pyr フォルダ

Superflip によるチャージフリップ解析。入力ファイル： ZrPO4-pyr.inflip、出力ファイル： ZrPO4-pyr.sflog。

EDMA による電子密度解析。入力ファイル： ZrPO4-pyr.edma、出力ファイル： ZrPO4-pyr.cif, ZrPO4-pyr.coo。

## 6 documents フォルダ

RIETAN\_VENUS/documents フォルダは以下に列挙するファイル (cifconv.command に関するファイルを除く) を収納している。

### 6.1 Readme\_Mac.pdf

macOS 用 RIETAN-FP・VENUS システムを利用する前に必ず読むべき PDF ファイル。本ファイルにほかならない。

### 6.2 Readme\_scpt.pdf

Jedit Ω 用マクロ (\*.scpt + \*.command) を徹底活用した RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境について詳述したマニュアル「macOS 用 RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境の手引き」。

### 6.3 RIETAN-FP\_manual.pdf

RIETAN-FP のユーザーマニュアル “Multi-Purpose Pattern Fitting System RIETAN-FP”。付録として、

- モデル関数に含まれるパラメーターの一覧： Parameters contained in the model function in RIETAN-FP
- RIETAN-FP に追加した新機能に関する日本語説明書「多目的パターンフィッティング・システム RIETAN-FP の新機能について」

を含む。RIETAN-2000 のユーザーだった方は後者を通読してから RIETAN-FP を使うことを推奨する。英文を敬遠する初心者には RIETAN-FP の使用を前提として編集された書籍 [6] が助けになる。

### 6.4 ALBA\_manual.pdf

最大エントロピー・パターンソン法プログラム ALBA のマニュアル “ALBA: a Fortran 90 Program to Determine 3D Patterson Functions from X-ray and Neutron Diffraction Data by the Maximum-Entropy Patterson Method”。

### 6.5 ALBA\_appendix.pdf

ALBA\_manual.pdf の付録。

## 6.6 MADEL.pdf

サイト・ポテンシャルとマーデルング・エネルギーを計算するプログラム MADEL v1.1 のマニュアル。VESTA のマニュアル VESTA\_manual.pdf にも含まれている。

## 6.7 MPF\_multi\_Mac.pdf

自動 MPF 解析用シェルスクリプト MPF\_multi.command のマニュアル「OS X 用自動 MPF 解析スクリプト MPF\_multi.command の使用法」。

## 6.8 Space\_groups.xls

空間群の Hermann-Mauguin 記号を記録した Excel ブック形式のファイル Space\_groups.xlsx。閲覧するには Microsoft Excel が必要となる。

## 6.9 bvparm2020.cif

Bond valence sum を計算するための bond valence parameter (Brown, 2020) を記録している CIF<sup>11)</sup>。

## 6.10 Effective\_ionic\_radii.txt

有効イオン半径を記録した Effective\_ionic\_radii.txt は D. Van Horn の Web ページ<sup>12)</sup> からダウンロードし、どんなタブ設定のエディターでも閲覧できるように変更した。

## 6.11 Mac\_exercise.pdf

「RIETAN-FP・VENUS システムと外部プログラムによる粉末構造解析」講習会のハンズオン (Mac を使用) で配付したチュートリアル。実習手順だけでなく RIETAN-FP・VENUS システムを使いこなすのに必要なノウハウとテクニックも記載されているため、初心者にとって貴重な情報源となる。Readme\_Mac.pdf (本文書) と Readme\_scpt.pdf に加え Mac\_exercise.pdf も必要に応じて参照することを推奨する。

### 6.11.1 RIETAN\_VESTA\_cooperation.pdf

「VESTA を利用した三次元可視化と粉末構造解析」講習会の実習用テキスト「RIETAN-FP と VESTA の連携による三次元可視化とファイル変換」。RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境と VESTA とを組み合わせることにより、どのようなことが実現できるのかを認識・理解するのに役立つ。実習には Windows PC を使用したが、Mac ユーザーにも大いに役立つ。

## 7 注意事項と要請

われわれは本ソフトウェア一式を使用した結果生じた障害と損失には一切責任を負わない。また不具合、バグ、誤り (マニュアル、文書、実行例) が見つかったら、ただちに報告していただければ幸甚である。

---

11) <http://www.iucr.org/resources/data/datasets/bond-valence-parameters>

12) <http://v.web.umkc.edu/vanhornj/shannonradii.htm>



RIETAN-FP, VESTA, Dynsomnia, ALBA を用いて得た解析結果を論文、解説、書籍などの形で発表する際には、Readme\_scpt.pdf の末尾に記載されている使用許諾条件（指定論文の引用）を遵守しなければならない。

## 参考文献

- [1] K. Momma, T. Ikeda, A. A. Belik, and F. Izumi, *Powder Diff.*, **28**, 184 (2013).
- [2] P. K. Janert, “Gnuplot in Action,” 2nd ed., Manning Publ., Shelter Island (2016).
- [3] K. Momma and F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.*, **44**, 1272 (2011).
- [4] F. Izumi and K. Momma, *Solid State Phenom.*, **130**, 15 (2007).
- [5] 泉 富士夫, 宮崎晃平, セラミックス, **54**, 473 (2019).
- [6] “粉末 X 線解析の実際”, 第 3 版, 中井 泉・泉 富士夫編著, 朝倉書店 (2021).