

# Windows 用 RIETAN-FP ・ VENUS 統合支援環境の手引

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 16 日

## 1 はじめに

コマンドプロンプト窓におけるコマンド入力によるプログラムの実行は、グラフィカル・ユーザー・インターフェース (GUI) に慣れ親しんだユーザーが忌避する時代遅れの操作といって過言でない。旧態依然の操作を改善したいと願っていたとき知った L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 用入力支援環境「祝鳥」<sup>[1]</sup> に触発され、豊富な機能と高い安定性を兼ね備えたシェアウェアである秀丸エディタ<sup>1)</sup> 上で動く Microsoft Windows 用 RIETAN-FP ・ VENUS 統合支援環境を構築した。Microsoft Windows は以後、Windows と呼ぶ。同環境は RIETAN-FP、VENUS システム<sup>2)</sup> (Dysnomia, ALBA, VESTA, Alchemy)、付属プログラム、外部プログラムを起動し、それらが入出力するテキスト・ファイルをタブ切り替えて編集・閲覧し、ファイルを扱うためのソフトウェアの集合体である。エディターの全機能を秀丸エディタに任せているのは言うまでもない。省メモリと軽さが売り物の秀丸エディタは俊敏かつ安定に動作し、ファイルの入力、編集、閲覧、検索、マクロの実行、ファイル操作などを助けてくれる<sup>[2]</sup>。秀丸エディタは Windows 用に最適化されており、頻繁に更新され続けているところが好ましい。

同支援環境の実体は多数の秀丸マクロ \*.mac に他ならない。RIETAN-FP などの実行形式プログラム \*.exe を bash ウィンドウで実行するためのシェルスクリプト \*.command は \*.mac 中から起動される。Windows ・ macOS 用の \*.command は互いによく似ており、正規表現を駆使でき、コマンド同士をパイプでつなげられる grep, sed, awk, cat, head, tail などの UNIX コマンドがテキストファイルの処理で威力を発揮する。

秀丸エディタでは、ユーザーが作成した秀丸マクロをプルダウンメニュー、ツールバーとステータスバー上のボタン、ポップアップメニューに登録することにより機能を増強できる。その強力なカスタマイズ機能をフルに活用したのが本支援環境である。メニュー項目へのキーボード・ショートカットの割り当ても可能となっている。秀丸エディタの Graphical User Interface (GUI) を介して一連のデータ処理を行えるため、キーボードでコマンドを入力してプログラムを起動するより、はるかに親しみやすく効率的である。利用価値の高い秀丸マクロが多数公開されているのもありがたい。

---

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

1) <http://hide.maruo.co.jp/software/hidemaru.html>

2) <http://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html>

本文書には、本支援環境を使用する前に知っておくべき事柄が記されている。RIETAN-FP\_manual.pdf 中の「RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境」と「RIETAN-FP・VENUS システムと外部プログラムによる粉末構造解析」に関する解説 [3-5] を併読すると、本支援環境についての理解が一層深まるだろう。

ほとんどの RIETAN-FP の入出力ファイルは、その名前から絶対パスとピリオド+拡張子を除くと、同一の文字列（たとえば Fapatite フォルダの中でのファイルの場合、‘Fapatite’）となる。以後、慣例に従って、その文字列をメタ構文変数 (metasyntactic variable) ‘hoge’ で代表させることにする。また、**入力ファイル hoge.ins の雛形は、現配付ファイルに付属しているものを使う必要がある**（後方互換性がない）ことも指摘しておく。

本支援環境をご利用中に不具合、バグ、誤り（本文書）が見つかったら、お手数でも筆者に報告していただければ幸甚である。

## 2 事前の準備

### 2.1 もう一つの Readme

本支援環境を利用するには、まず配付ファイル Documents.zip を解凍して得られる Documents フォルダの中の手引き書 Readme\_Win.pdf に目を通し、Windows 用バージョンをインストールしておく必要がある。Readme\_Win.pdf をまだ読んでいないのだったら、本文書の前にそちらを熟読していただきたい。

### 2.2 秀丸エディタのインストール

本支援環境の基盤となっている秀丸エディタのインストールについては、Readme\_Win.pdf 中の「使用前の下準備」を参照せよ。今後、秀丸エディタを長く使用するのだったら、必ずライセンスを購入してほしい<sup>3)</sup>。

### 2.3 本支援環境から呼び出すプログラムのインストール

#### 2.3.1 RIETAN-FP・VENUS システム

Readme\_Win.pdf で述べた通りにインストールすれば、Windows\_versions フォルダに含まれている RIETAN\_VENUS フォルダは C:\Program Files フォルダの直下にコピーされる。すなわち、C:\Program Files\RIETAN\_VENUS が当該フォルダの絶対パスとなる。C:\Program Files フォルダ内に置かれるということは、とりもなおさずユーザーアカウント制御 (UAC) の下で保護・管理されることを意味する。同フォルダ内のファイル・フォルダ操作にあたっては、UAC ダイアログでの承認が必要となる。

#### 2.3.2 その他のプログラム

必要に応じ、外部アプリケーション（Web ページの URL は 4 節を参照のこと）も同様に C:\Program Files フォルダ内に置く：

---

3) フリーソフトウェアの作者には無料でライセンス登録できるという特典が与えられる。

- WinPLOTTR: C:\Program Files\winplotr\_package
- Fox: C:\Program Files\Fox
- EXPO2014: C:\Program Files\Expo2014
- Superflip: C:\Program Files\Superflip
- EDMA: C:\Program Files\EDMA
- CRYSCALC: C:\Program Files\cryscale
- VESTA: C:\Program Files\VESTA
- TeX Live: C:\texlive20XY\bin\win32

追加インストールの手続きについては、Readme\_Win.pdf 中の「5 追加インストールの手続き」に記した。TeX Live のインストール先で“XY”は年号の一部を表す。VESTA は厳密には三次元 (3D) 可視化システム VENUS<sup>4)</sup> のメンバーであるが、時々更新されることから VESTA フォルダは C:\Program Files\RIETAN\_VENUS フォルダでなく C:\Program Files フォルダの直下に置く。VESTA と EXPO2014 は 64 ビット版のインストールを推奨する。

## 2.4 Windows の設定

エクスプローラーでは (登録されている) ファイルの拡張子を表示しないのが Windows のデフォルト設定となっている。この設定は不便かつ非実用的なので、変更した方が良い。フォルダーオプションというコントロールパネルを開き、[登録されている拡張子は表示しない] のチェックを外すだけである。

秀丸マクロ (4 節) の内、特定の三つを使うためには、拡張子 pdf, itx, xlsx を次のように関連づけておく必要がある：

- (1) pdf → PDF ビューアー Sumatra PDF
- (2) itx → グラフ作成プログラム Igor Pro
- (3) xlsx → Microsoft Excel

それぞれの関連づけは

- gnuplot によるグラフ作成機能を使うか RIETAN-FP のマニュアルを参照する場合 (**Plot**, **MSCS**, **xdc**, **マニュアル**)、
- WaveMetrics 社の Igor Pro<sup>5)</sup> でリートベルト解析パターンと計算パターンをプロットする場合 (**Plot**)、
- 空間群のシンボルを収録した Excel ファイル Space\_groups.xlsx を閲覧する場合 (**空間群**)、

に必要となる。Readme\_Win.pdf にも記したように、PDF ビューアとしては本家の Adobe Acrobat Reader DC でなくフリーソフトウェアの Sumatra PDF<sup>6)</sup> を推奨する。

4) <http://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html>

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

6) <https://www.sumatrapdfreader.org/download-free-pdf-viewer.html>

## 3 秀丸エディタの設定

### 3.1 既存設定の保存

すでに秀丸エディタを使い込んでいて、諸設定が完了しており、それらの設定を保存しておきたい場合は、

その他 → 設定内容の保存/復元

で [設定情報をファイルに保存する] を選び、\*.hmereg というファイルに設定情報を出力しておくといよい。この設定ファイルさえあれば、

その他 → 設定内容の保存/復元

で [設定情報をファイルから復元する] と [現在の設定をリセットしてから復元] をチェックを選ぶことにより、いつでも \*.hmereg に保存した設定内容に復帰できる。RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境用の設定（キー割り当てを含む）は C:\Program Files\RIETAN\_VENUS\Macros\RIETAN\_VENUS.hmereg に保存する。

キー割り当ての一覧表は


その他 → キー割り当て → 一覧表作成  
で作成できる。

### 3.2 本支援環境用の設定

#### 3.2.1 設定ファイルの読み込み

マクロ登録内容以外の本支援環境に関する既成設定を復元するために、上述のように

その他 → 設定内容の保存/復元...

で [設定情報をファイルから復元する] と [現在の設定をリセットしてから復元] をチェックした後、前述の統合支援環境用設定ファイル C:\Program Files\RIETAN\_VENUS\Macros\RIETAN\_VENUS.hmereg を読み込む（ 1）。RIETAN\_VENUS.hmereg では

その他 → 動作環境 → 常駐機能

で「秀丸エディタの常駐」がチェックされている。そのため秀丸エディタへの切替が非常に速くなる。

ここで念のために

その他 → 動作環境 → 環境 → パス  
において、

- マクロファイル用フォルダー： C:\Program Files\RIETAN\_VENUS\Macros
- 設定ファイル用フォルダー： C:\Program Files\RIETAN\_VENUS\Macros

となっていることを確認する。以後、マクロメニューの下のマクロ登録を選んだとき、このフォルダーの絶対パスがダイアログボックスの下方に表示される。

最後に表示メニューにおいて、[ツールバー] と [ファンクションキー表示] がチェックされていることを確認する。64ビット版秀丸エディタを使っている場合は、さらに

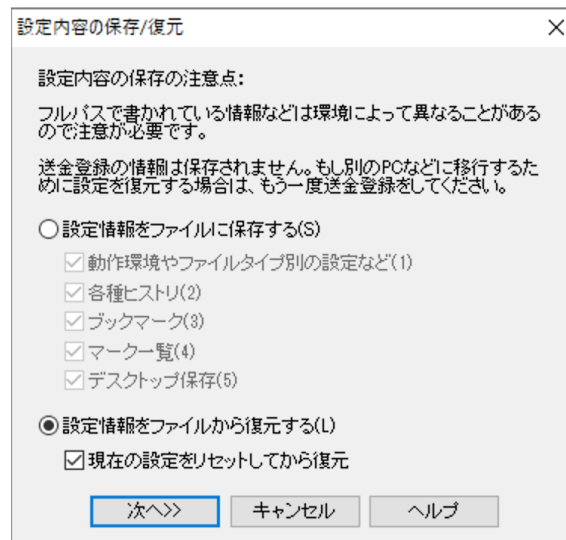


図 1 設定内容の保存/復元ダイアログ。

その他 → 動作環境 → 64bit 版

で [32bit DLL をマクロの loadlll で動作可能にする] がチェックされていることを確認する。

RIETAN\_VENUS.hmereg が改訂された場合、Install\_RIETAN\_VENUS.bat により RIETAN-FP・VENUS システムをインストールした後に同設定ファイルを読み直さないと、本支援環境が以前のままに留まってしまうということに注意してほしい。

### 3.2.2 PC に依存する変更

使用している PC の CPU やメモリー容量に応じて、

その他 → 動作環境 → 環境

で、[編集可能な最大行数] を変更し、さらに

その他 → 動作環境 → パフォーマンス

で、最大行数とパフォーマンスのレベルを変更するとよい。後者では、詳細設定も可能である。

最後に

その他 → 動作環境... → ウィンドウ → 配置

で [位置を指定する] と [サイズを指定する] をチェックした後、自分の PC のディスプレイに合わせて、ウィンドウの位置と大きさを適当な値に設定する。hoge.lst を表示するので、X 方向は少なくとも 100 文字以上にすることが望ましい。

### 3.2.3 秀丸エディタの自習

秀丸エディタの全般について学ぶには秀丸エディタヘルプと「執筆を効率化したい人のための秀丸エディタ実践入門」[2] が役立つ。秀丸エディタを使う際、非常に役立つツールバー、ファイルマネージャ枠 (6.8 参照) とアウトライン解析の枠 (6.9 参照) については、次のハンズオン手順を通じて学んでおくといよい。

1. RIETAN\_VENUS\_examples¥Fapatite¥Fapatite.ins を秀丸エディタで開く。
2. ツールバー上のボタン [行番号表示/非表示]、[アウトライン解析の枠]、[ファイルマネージャ枠] の上にカーソルを移動し、各ボタンの名称を表示してみる。いずれも表示・非表示がトグル

になっている。

3. アウトライン解析<sup>7)</sup>の枠を表示する。最初の文字が「!」であるしおりが行頭のスペース数 (0, 2, 4) に対応した形でツリー表示される。ツリーは折りたたむ。
4. どれか一つのしおりをクリックすると、当該しおりの行がテキストエリアの中心付近に茶色で表示される。アウトライン解析の枠を消す。
5. 行番号を表示し、消す。
6. ファイルマネージャ枠を表示し、同枠上部で特定のフォルダーを選択すると、そのフォルダー内のファイルすべてが下部に表示される。
7. テキストファイル、たとえば Fapatite.lst をダブルクリックすると、秀丸エディタでそれを開ける<sup>8)</sup>。秀丸エディタ以外のアプリケーション (たとえば VESTA) で開きたいときは、ファイルを右クリックして「プログラムから開く」を選び、プログラムを選択する。
8. ファイルマネージャ枠からシェルスクリプト \*.command を実行するには、ファイルを右クリックして「プログラムから開く」を選び、プログラムとして BusyBox multi-call binary (bash.exe) を選ぶ。
9. ファイルマネージャ枠で可能なファイル・フォルダー操作は次の通り。
  - ・ファイルを選択し **Ctrl**+**C**、**Ctrl**+**V** を押して同一フォルダーにコピーする。たとえば Fapatite.ins は Fapatite - のコピー.ins という名でコピーされる。
  - ・ファイルを選択し **Ctrl**+**C** を押した後、他のフォルダーを選択してから **Ctrl**+**V** を押してそのフォルダーにコピーできる。
  - ・ファイルを右クリックして削除する。
  - ・ファイルを右クリックして“切り取り”を選び、他のフォルダーを選択してから **Ctrl**+**V** を押してそのフォルダーに移動する。
  - ・フォルダーを右クリックし「開く」を選ぶと、そのフォルダーを表示したエクスプローラーのウィンドウが現れる。ファイルを改名する際に利用するとよい。ファイルマネージャ枠内でのファイル・フォルダー操作は以上の通りだが、6.8 で述べるようにエクスプローラーとの連携も可能となっている。
10. ファイルマネージャ枠を消す。

## 4 本支援環境に含まれる秀丸マクロ

秀丸マクロは文法的に C 言語と似ており、比較的プログラミングしやすい。Readme\_Win.pdf 中に記したように、田楽 DLL というダイナミックリンクライブラリーが提供する拡張機能も手軽に呼び出せる。マクロを削除し、新たなマクロを追加し、マクロ構造を再編成するのはごく簡単である。自分の環境や好みに合わせて各マクロを改変できるのは言うまでもない。

本支援環境を構成するすべてのマクロは

マクロ → マクロ登録

で登録した。本文書では、秀丸マクロのタイトルは **RIETAN** や **ORFFE** というようにボード書体で表すものと約束する。各マクロに関する詳細説明の部分では、**RIETAN** や **ORFFE** というよ

---

7) 特定の記号 (本支援環境の場合「!」) が行頭に存在しているならしおりと解釈する。

8) テキストファイルは秀丸エディタで開けるが、実行形式ファイルのダブルクリックでそれを実行できるわけではない。



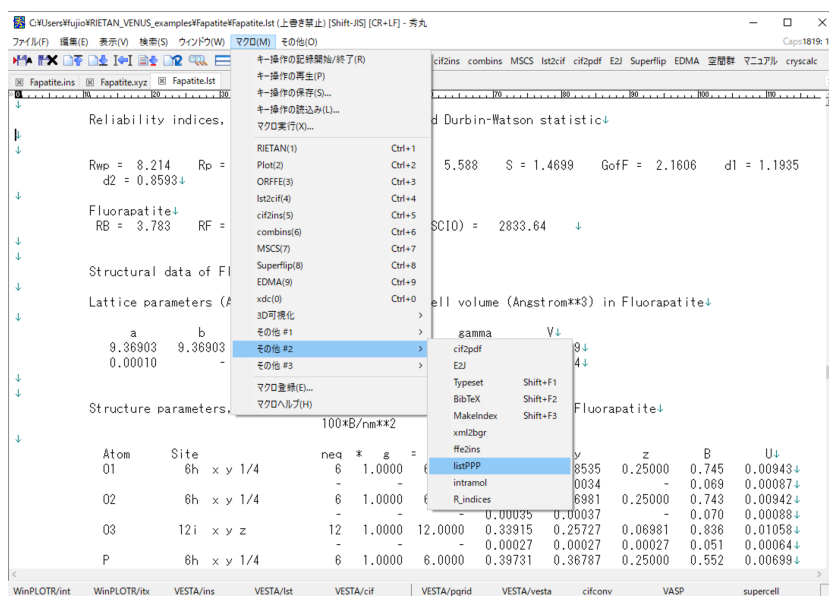


図2 マクロのプルダウンメニューで **listPPP**（その他 #2）を選択したところ。ツールバー上にボタン（**cif2ins** 以降が見えている）、ステータスバー上にファンクションキーが置かれている。

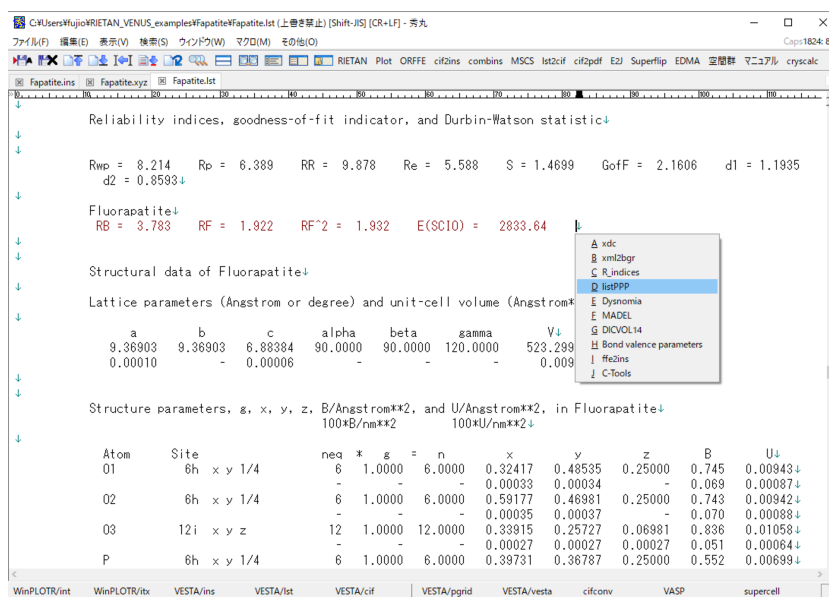


図3 **Ctrl+E**を押してポップアップメニューを開き、**listPPP**を選択したところ

うに赤いボールド書体で表す。

これらのマクロはマクロメニューやそのサブメニュー中の各項目（図2）、ツールバー上のボタン、ステータスバー上のボタン、ファンクションキー（ステータスバー上のボタンに対応）、ポップアップメニューを通じて起動する。マウスボタンのクリックだけで済むツールバーとステータスバー上のボタンは特に便利である。**Ctrl+E**を押せばポップアップメニューが現れ、表示されているマクロ2の内から一つの項目を選べる（図3）。

ポップアップメニューの左側に表示されているショートカットキーを押せば、マウスを使わずにブラインドタッチで項目を指定できる。ツールバーやステータスバーに登録されていないマクロを実行

するには、プルダウンメニューで階層構造を降りていくよりは、ポップアップメニューを利用する方が手っ取り早い。

各マクロのタイトルは

マクロ → マクロ登録

において、好きなように書き替えられる。ツールバー、ステータスバー（ファンクションキー）、ポップアップメニュー、キーボード・ショートカットも自由にカスタマイズできる。

RIETAN-FP の入力ファイルの名前が hoge.ins であるとしよう。xdc やマニュアルといった一部のマクロを除き、各マクロは hoge.\* あるいは hoge-\*. \* という名前のカレントファイルを秀丸エディタの前面で表示している状態で実行しなければならない。シェルスクリプトは絶対パス付きのカレントファイル名から文字列 hoge を取得する。

## 4.1 マクロ No. 1-10

マクロ No. 1-10 はマクロメニュー（ショートカットキーを表示）、ツールバー（RIETAN: ボタン 1, Plot: ボタン 2, ORFFE: ボタン 3, cif2ins: ボタン 4, combins: ボタン 5, MSCS: ボタン 6, lst2cif: ボタン 7, Superflip: ボタン 10, EDMA: ボタン 11）、ポップアップメニュー（xdc: A）から実行できる。

- 
1. **RIETAN**: RIETAN-FP による全回折パターンフィッティング（リートベルト解析、Le Bail 解析、ハイブリッド・パターン分解）あるいは粉末回折パターンのシミュレーション
  2. **Plot**: (a) Gnuplot<sup>9)</sup> により hoge.gpd と hoge.plt からリートベルト解析・シミュレーション結果を高げ.pdf に出力した後、Sumatra PDF で表示； (b) Igor Pro により hoge.itx を入力してグラフを表示
  3. **ORFFE**: ORFFE [6] による幾何学的パラメーター（原子間距離、結合角、二面角など）の計算
  4. **lst2cif**: RIETAN-FP の出力ファイル (hoge.lst) と ORFFE の出力ファイル (hoge.dst) を crystallographic Information file<sup>10)</sup> (CIF), hoge.cif に変換
  5. **cif2ins**: hoge.cif 中の結晶データ（空間群、格子定数、結晶構造パラメーターなど）を RIETAN-FP 用入力ファイルのひな形ファイル template.ins に導入し、RIETAN-FP の入力ファイル hoge.ins に変換する
  6. **combins**: 複数相の \*.ins から多相リートベルト解析に使う RIETAN-FP 用入力ファイル multi\_phase.ins を作成
  7. **MSCS**: RIETAN-FP が出力した gnuplot 用ファイル hoge.plt（後半の注釈部分）と hoge.gpd から Williamson-Hall あるいは Halder-Wagner プロットのグラフを高げ.pdf に出力し、ディスプレイに表示
  8. **Superflip**: RIETAN-FP が出力した hoge.inflip を入力ファイルとして双対空間法（チャージ・フリップング）プログラム Superflip [7] を実行
  9. **EDMA**: Superflip が出力した 3D 電子密度ファイル hoge.xplor を電子密度分布解析プログラム EDMA (Electron Density Map Analysis) [8] により hoge-EDMA.cif に変換した後、VESTA で結晶模型を表示

---

9) <http://gnuplot.sourceforge.net>

10) <http://www.iucr.org/resources/cif>



10. **xdc**: 特定元素の X 線分散補正項 (X-ray dispersion correction)  $f'$  と  $f''$ 、質量減衰係数 (mass attenuation coefficient)  $\mu_m$  の波長  $\lambda$  (フォトン・エネルギー  $E$ ) 依存性を gnuplot でグラフ化
- 

**RIETAN** (No. 1) の実行プログラム RIETAN-FP については RIETAN-FP\_manual.pdf に詳述されている。RIETAN-2000 を RIETAN-FP にアップグレードしてからの主な改訂内容については、その末尾に置かれた日本語文書「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」にまとめられている。

**RIETAN** 実行時には hoge.ins は自動的にカレントフォルダーの hoge.ins.bak に保存されるため、NUPDT = 1 と設定することにより精密化したパラメーターを更新したとしても、ただちに解析以前の内容に戻せる。

hoge.lst 中に 'MEP = 1' が含まれているならば、パターン分解 (Le Bail 解析またはハイブリッド・パターン分解) に引き続き ALBA [9] による最大エントロピー・パターン解析に移行し、重畳反射の積分強度を改善する。詳しくは ALBA\_manual.pdf を参照せよ。

hoge.lst 中に 'NMEM = 1' が含まれている場合は、MPF\_multi.command がカレントフォルダーに生成する (5.2 参照)。Finder 上で MPF\_multi.command をダブルクリックすれば、ただちに MPF 解析へと移行できる。

カレントフォルダーに VESTA 形式ファイル hoge.vesta が存在する場合、それに一定の書式で注釈を書き込むと、リートベルト解析過程で変化していく結晶構造を自動表示する機能を RIETAN-FP は備えている。詳しくは RIETAN\_VESTA\_cooperation.pdf 中の「実習: リートベルト解析途上の結晶データを含む VESTA 形式ファイルの逐次生成と結晶模型の自動表示」を参照せよ。

統合支援環境上で RIETAN-FP を実行した後は、Python スクリプト PyAbstantia を起動し、RIETAN-FP が出力した BVS.inp を入力して BVS の理想値との差  $|\Delta V|$  を記録したバイナリーファイル BVS.pgrid を出力できる。 $|\Delta V|$  はゼロに近いほど安定な位置と見なせる。引き続き、BVS.pgrid 中のボクセルデータを VESTA で表示する。BVS3D.inp を出力するには、hoge.ins 中で NMODE = 1 かつ NPYABST = 1 に設定し、可動イオンの原子価 (常に正の値)、反対電荷のイオンの元素名、経験的 BVS パラメーター  $R_0$  と  $b$  を入力すればよい。

一方、hoge.ins 中で NMODE = 1 かつ NPYABST = 2 に設定すれば、BVEL も同様に可視化できる。その場合、RIETAN-FP は BVEL.inp を、PyAbstantia は BVEL.pgrid を出力する。詳しくは Win\_Exercise.pdf 中の「可動化学種の空間分布計算法」を参照せよ。

なお、PyAbstantia を実行するには、Readme\_Win.pdf 中の「PyAbstantia」に記したように python 3.X とそれに対応した numpy をインストールした後、RIETAN.command 中の python の絶対パスを書き換える必要がある。

**Plot** (No. 2) はパターンフィッティングあるいは粉末回折パターンのシミュレーション結果をグラフ表示してくれる。hoge.ins 中で NPAT = 1 に設定したときは、カレントフォルダーに hoge.plt (gnuplot スクリプトファイル) と hoge.gpd (数値データファイル) のペアが生成し、NPAT = 2 と設定したときは hoge.itx (Igor テキストファイル) が生成する。Plot.command では、hoge.lst に NPAT = 1 と出力されている場合は gnuplot によるグラフ作成を優先し、NPAT = 2 と出力されている場合は Igor Pro で hoge.itx を開いてグラフをプロットするようにしている。Igor Pro でグラフを作成する際には、ファイルメニュー中の「情報を見る」において拡張子 itx を Igor Pro に関連づけて

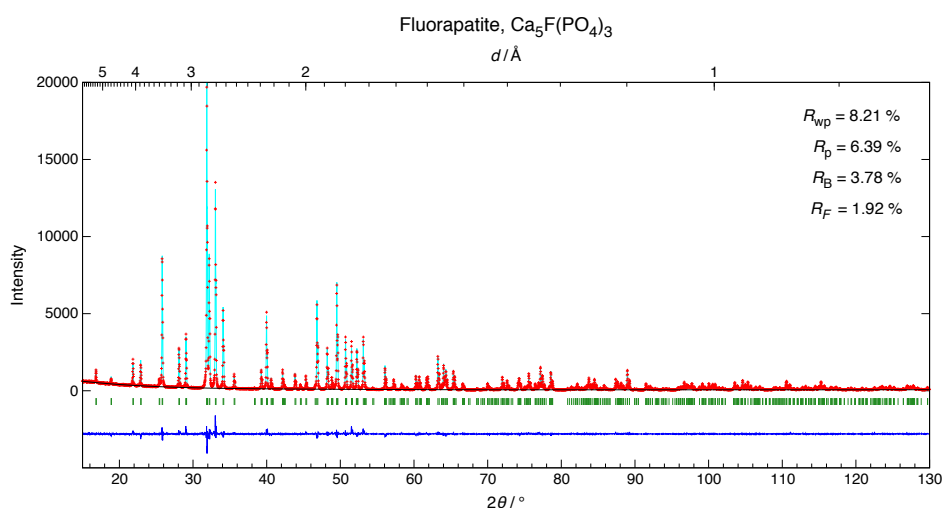


図4 Gnuplot で描いたフッ素アパタイトのX線リートベルト解析パターン

おく。

hoge.plt と hoge.gpd からグラフをプロットする場合、フォントの種類とサイズ、文字の位置などを変えたいときは、gnuplot のマニュアルを参照して hoge.plt を自分で書き直さなければならない。後述するマクロ MSCS と xdc でも同様である。

hoge.plt ではタイトルと信頼度の指標が注釈となっているが、行頭の '#' を削除するだけで出力できる (図 4)。この図では hoge.plt の 3 行目で LPS = 0 を LPS = 1 に変えて、上部の  $x_2$  軸に格子面間隔  $d$  の目盛りと値を追加した。

$x, y$  軸に平行なグリッド線をプロットするには、

```
set grid linewidth 2
```

という行を

```
set margins .....
```

の直後に挿入すればよい。

**ORFFE** (No. 3) により幾何学的パラメーターを計算するには、hoge.ins 中に 201 命令を書いて原子間距離を計算した後、結合角と二面角は自動的に計算させることを推奨する。詳細についてはブログエントリー「[ORFFE による結合角と二面角の計算](#)」を参照せよ。

**lst2cif** (No. 4) の利点は、hoge.lst に出力された粉末回折関連情報をできるだけ取り込んだ CIF を出力するところにある。hoge.ins 中で NPRINT > 1 に設定してリートベルト解析を実行すると、“Summary of possible reflections (based on the refined parameters)” というタイトルの反射リストが標準出力ファイル hoge.lst の末尾近くに出力される。**lst2cif** はこの反射リストからデータを抽出し、回折指数  $hkl$ 、回折角  $2\theta$ 、格子面間隔  $d$ 、観測積分強度  $I_o$ 、結晶構造因子  $|F|$ 、半値全幅  $H$  をスペース区切りで hoge.cif に追加する。`__rietan_i100_meas` は最強反射の観測積分強度を 100 としたときの相対強度の自家製定義である。本マクロを使う場合、仮想的化学種抜きでリートベルト解析を行う必要がある。さもないと、仮想的化学種が占めるサイトにおける各元素の占有率がわからなくなる。

**cif2ins** (No. 5) は同形の物質の CIF に記録されている結晶データを hoge.ins に導入し、必要に応じて構成成分、格子定数、構造パラメーターなどをエディターで変更 するという手続きの効率を向上させ、誤りを減らすのに役立つ。ただし **CIF の公式ルール** に則ったファイルを使用しないと、かえって手間がかかるかもしれない。サイト名 `_atom_site_label` が RIETAN-FP のルール (先頭の文字が大文字のアルファベットで 2 番目以降の文字が英数字) に従っており、なおかつ `_atom_site_type_symbol` が記録されていることをチェックする必要がある。サイト名は元素名 + 通し番号の形式が望ましい。また、空間群の Hermann–Mauguin 記号は RIETAN\_VENUS フォルダー中のファイル Spgr.daf に記載されている通り、スペース入りで記述する。**cif2ins** を実行する前に Win\_exercise.pdf 中の「CIF のチェック」を読めば、hoge.cif → hoge.ins 変換時のトラブルが避けられる。

二つの出発ファイル、すなわち適当なひな形ファイル template.ins (固定ファイル名) と hoge.cif を同一フォルダーに置き、秀丸エディタのカレントウィンドウに hoge.cif が表示されている状態で **cif2ins** を起動すると、hoge.cif が入力され、bash ウィンドウにデータ処理の進捗状況、エラーメッセージ、警告が表示される。順調にいけば、hoge.ins が同じフォルダーに生成した後、秀丸エディタでオープンされる。

hoge.cif 中のどこかに '#std' という行が含まれていると、結晶データを標準化するための hoge.ins が出力される。引き続き、この hoge.ins を対象としてシミュレーション・モード (NMODE = 1) で RIETAN-FP を実行すると、hoge.ins 中の結晶データが RIETAN-FP 内蔵の Structure Tidy で標準化される。

VESTA で CIF を入力し、「File > Export Data」を選び、File Type として “RIETAN (\*.ins)” を指定すれば **lst2cif** と同様のファイル処理を行える。

**combins** (No. 6) を使うにあたって必要な前処理など、具体的な手続きについては、Win\_exercise.pdf 中の「複数の入力ファイルの統合とリートベルト解析」(5 章) に詳述した。**cif2ins** によって複数の CIF を RIETAN-FP 用入力ファイル \*.ins に変換した後、**combins** によりそれらの相の混合物を対象とする多相リートベルト解析用入力ファイル multi\_phase.ins を作成する手続きを学べる。

**MSCS** (No. 7) というプログラム名は MicroStrain and Crystallite Size の略である。hoge.plt 中にコメントとして追加された Williamson–Hall (hoge.ins 中で MSCS = 1 と設定) あるいは Halder–Wagner (hoge.ins 中で MSCS = 2 と設定) プロット [10] の作画命令を抽出し、gnuplot でグラフの PDF ファイルを作成し、プレビューで表示するためのマクロである。PDF ファイルの名前は hoge-mscs.pdf である。グラフ表示を通じ視覚に強く訴える上、異方的なプロファイルの広がりも一目で認識できる。**MSCS** 用の設定を変更するには、hoge.plt の後半にコメント行として追加されている MSCS 用命令の部分を書き換える。

RIETAN-FP による Williamson–Hall 法や Halder–Wagner 法による格子ひずみと結晶子サイズの計算結果は hoge.lst に出力され、本マクロは単にグラフをプロットするのに使う。また十分結晶性の高い試料の強度データと解析結果も必要なことを忘れてはならない [10]。

**Superflip** (No. 8) の入力ファイルの拡張子は inflip に固定されている。現在表示中のファイルと拡張子抜きファイル名 (hoge) が同じで、なおかつそのファイルと同一のフォルダーを共有する hoge.inflip が処理の対象となる。電子密度の 3D ピクセルデータは必ず hoge.xplor に出力すること。

RIETAN-FP が出力する hoge.inflp は hoge.xplor を出力する命令と **EDMA** 用の命令を含んでいる。**Superflip** による結晶構造モデル構築については、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)」を参照せよ。

**EDMA** (No. 9) は **Superflip** が出力した電子密度データファイル hoge.xplor を CIF (hoge-EDMA.cif) に変換した後、VESTA でそれを入力して結晶模型を表示する。

**xdc** (No. 10) は放射光だけでなく特性 X 線にも適用でき、吸収端の位置を知り、その近傍における  $f'$ ,  $f''$ ,  $\mu_m$  の急激な変化を理解するのに有効である。**xdc** を使う前には、あらかじめ hoge.ins 中で NBEAM = 1 or 2, NPRINT = 2 に設定してから RIETAN-FP を実行しておかねばならない。その際、hoge.ins 中に無関係な元素名をダミーとして追加すると、その元素の  $f'$ ,  $f''$ ,  $\mu_m$  の  $\lambda$  (E) 依存性もプロットできる。たとえば配付ファイルに含まれる BaSO4.ins 中で

```
'Ba2+' 'S' 'O-' 'Ni'/'
```

というように試料に含まれていない元素 Ni を書き加えておけば、Ni のグラフを描ける (図 5)。**xdc** を起動し、ターミナルで元素記号を入力すると、当該元素の吸収端に関する Web ページ<sup>11)</sup> が開かれ、 $\lambda$  と  $E$  の数値データが標準のブラウザで表示された後、gnuplot 用のスクリプト・ファイル xdc.plt とデータファイル xdc.gpd がカレント・フォルダーに出力される。次に、ストリームエディター sed と gnuplot の連係プレーにより xdc.plt と xdc.gpd がグラフの PDF ファイル xdc-\*.pdf (\* は元素記号) に変換される。こうして得られた xdc-\*.pdf が Sumatra PDF などの PDF 閲覧ソフトで表示される。異常分散の補正項は左側の  $y$  軸、 $\mu_m$  は右側の  $y_2$  軸に対してプロットされる。必要に応じて xdc.plt 中の諸設定を変更し、再度 **xdc** を実行できるのは言うまでもない。

**xdc** 実行の具体的な手続きについては、Win\_exercise.pdf 中の「Ni の X 線分散補正項と質量減衰係数のグラフ化」を参照されたい。

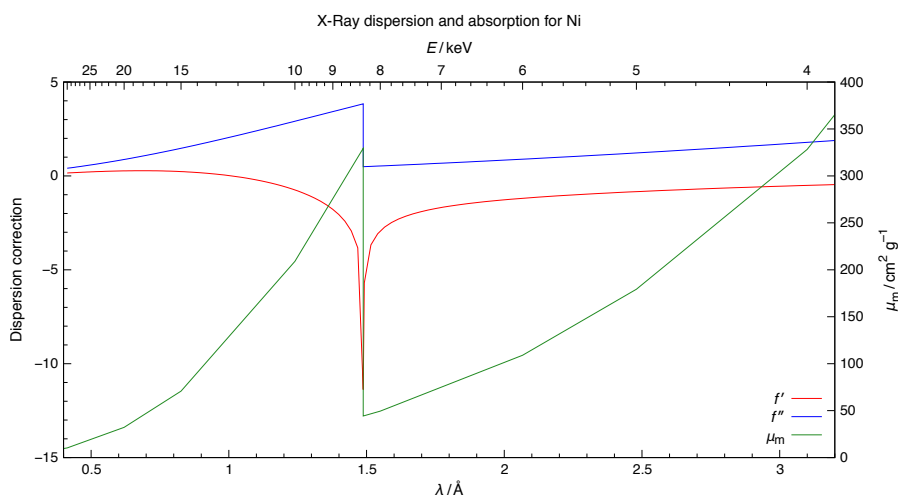


図 5 Ni における  $f'$ ,  $f''$ ,  $\mu_m$  と波長 (エネルギー) との関係

11) [http://skuld.bmsc.washington.edu/scatter/AS\\_periodic.html](http://skuld.bmsc.washington.edu/scatter/AS_periodic.html)

## 4.2 マクロ No. 11–17

三次元可視化プログラム VESTA<sup>12)</sup> 関係の秀丸マクロはマクロメニュー中の [3D 可視化] で選べる。ステータスバーにボタン表示されるファンクションキーに次のようにマクロが割り当てられる： VESTA/ins: [F3]、VESTA/lst: [F4]、VESTA/cif: [F5]、VESTA/pgrid: [F6]、VESTA/vesta: [F7]。ステータスバー上の対応するボタンをクリックするのもよい。

---

11. **VESTA**: VESTA によるカレントファイルの 3D 可視化。**VESTA** (No. 11) を実行すると、まず VESTA が立ち上がる。そして、カレントファイルが hoge.ins, hoge.lst, hoge.cif, hoge.den, hoge.vesta ならば、それぞれのファイルを入力する。それら以外がカレントファイルだったら、何も読み込まない。
  12. **VESTA/ins**: VESTA による hoge.ins 中の結晶データの 3D 可視化（結晶構造モデルの表示）
  13. **VESTA/lst**: VESTA による hoge.lst 中の結晶データの 3D 可視化（結晶構造モデルの表示）
  14. **VESTA/cif**: VESTA による hoge.cif 中の結晶データの 3D 可視化（結晶構造モデルの表示）
  15. **VESTA/den**: VESTA による hoge.den 中の電子・原子核密度データの 3D 可視化（等値曲面の表示）
  16. **VESTA/pgrid**: VESTA による hoge.pgrid 中の電子・原子核密度データの 3D 可視化（等値曲面の表示）
  17. **VESTA/vesta**: VESTA による hoge.vesta 中のデータの 3D 可視化
- 

**VESTA** (No. 11)、**VESTA/ins** (No. 12)、**VESTA/lst** (No. 13) で hoge.lst を読み込んだ場合、Manipulation を Select モードに設定して原子をクリックすると、ウィンドウの左下にサイト名、(化学種)、分率座標、占有率、多重度 + Wyckoff 文字、サイトの対称性が表示される。**VESTA/cif** (No. 14) は結晶構造データを標準フォーマットに従って記録したテキストファイル CIF の 3D 可視化に役立つ。**VESTA/den** (No. 15) で入力される hoge.den と **VESTA/vesta** (No. 17) で入力される hoge.vesta がテキストファイルであるのに対し、**VESTA/pgrid** (No. 16) で入力される hoge.pgrid は Dysnomia が出力するバイナリーファイルである。

## 4.3 マクロ No. 21–30

これらの秀丸マクロはマクロメニュー中の [その他 #1] から選べる。ツールバー（空間群: ボタン 12, マニュアル: ボタン 13）、ファンクションキー（WinPLOTR/int: [F1]、WinPLOTR/itx: [F2]、B2beta: [Ctrl]+[F1]）、ポップアップメニュー（MADEL: F, DICVOL14: G, Bond valence parameters: H）からも実行できる。[F1] と [F2] はステータスバー上の対応するボタンをクリックするのもよい。

---

21. **WinPLOTR/int**: 強度データファイル hoge.int の WinPLOTR による入力と表示
  22. **WinPLOTR/itx**: パターンフィッティング結果を保存したファイル hoge.itx の WinPLOTR による入力と表示
- 

12) <http://jp-minerals.org/vesta/jp/>



23. **DICVOL14**: 指数づけプログラム DICVOL14<sup>13)</sup> [13] の実行
24. **XY → RIETAN**: 現在編集中の General 形式および Igor テキスト形式の強度データファイル (等間隔の  $2\theta$  ステップ) を RIETAN 形式のファイル hoge.int (hoge は変換元ファイルの拡張子抜きファイル名) に変換
25. **RIETAN → General**: 現在編集中の RIETAN 形式の強度データファイルを一般 (General) 形式のファイル hoge.int (hoge は変換元ファイルの拡張子抜きファイル名) に変換
26. **B2beta**: 異方性原子変位パラメーター  $\beta_{ij}$  に対する精密化の指標 ID(I) と線形制約条件をユーザー入力ファイル hoge.ins に書き込むためのユーティリティー B2beta を実行
27. **MADEL**: フーリエ法 [11, 12] によりサイト・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 を実行
28. **Bond valence parameters**: Bond valence parameter を記録した CIF 形式ファイル<sup>14)</sup> (bvparm2020.cif) を表示
29. **空間群**: 空間群の Hermann–Mauguin 記号を記録した Open XM 形式のファイル Space\_groups.xlsx を表計算ソフトでオープン
30. **マニュアル**: RIETAN-FP のマニュアル RIETAN-FP\_manual.pdf の閲覧

---

**WinPLOTR/int** (No. 21) と **WinPLOTR/itx** (No. 22) は粉末回折用グラフィックツール WinPLOTR<sup>15)</sup> を利用するのに用いる。RIETAN-FP の出力する hoge.itx をグラフ表示できるなど RIETAN-FP との親和性が高いだけでなく、ピークサーチ、バックグラウンド強度の見積もり、指数づけなどの RIETAN-FP が提供していない機能を有することから、RIETAN-FP を補完する役割を果たせる。

**WinPLOTR/int** の使用にあたっては、WinPLOTR\_int.mac 中の

```
#NINT = 1; // 必要に応じて右辺の整数を書き換える。
```

という行に記載されている強度データファイル hoge.int の書式番号 #NINT の値を必要に応じて書き換えなければならない。秀丸マクロでは変数名の先頭の '#' は数値変数を表す。#NINT は hoge.ins 中の NINT に相当する。

WinPLOTR については、Evernote の公開ノート「RIETAN-FP と WinPLOTR との連携」<sup>16)</sup> に詳述した。**WinPLOTR/int** と **WinPLOTR/itx** を使う前に、これを通読することが望ましい。また、WinPLOTR と RIETAN-FP との連携を通じたバックグラウンド・ファイル hoge.bgr と hoge.bkg の作成、ひいてはパターン分解における hoge.bkg の活用については、RIETAN-FP\_manual.pdf 中の「バックグラウンド・ファイル hoge.bkg の作成」と Win\_exercise.pdf 中の「hoge.bgr の hoge.bkg への変換」を参照するとよい。

**DICVOL14** (No. 23) はデフォルトではインストールされない。WinPLOTR のパッケージは DICVOL の旧バージョンである DICVOL06 のみ包含している。しかし、Windows 用の最新版 DICVOL14 をその論文 [13] 中のリンクをクリックして入手し、C:\Program Files\winplotr\_package フォルダに DICVOL14.exe を置けば、WinPLOTR の作成した

---

13) <http://dx.doi.org/10.1017/S0885715614000906>

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

15) <http://www.cdifx.univ-rennes1.fr/winplotr/winplotr.htm>

16) <https://bit.ly/3jEcUBu>



DICVOL06 用入力ファイル hoge.dic (DICVOL06 と互換性がある)を読み込んで実行するのに DICVOL14 を使えるようになる。

**XY → RIETAN** (No. 24) は一つで二つの異なる変換を行うことに注意してほしい。いずれの変換でも、編集時のファイルが hoge.int だったら、それを hoge.int.BAK というバックアップファイルに保存する。**XY → RIETAN** で作成した hoge.int は EXPO で読み込める。強度データファイルのフォーマットについては、RIETAN-FP\_manual.pdf 中の “Intensity Data File” を参照せよ。

**RIETAN → General** (No. 25) の出力ファイル (General 形式) については、RIETAN-FP\_manual.pdf 中の “General format” を参照せよ。

**B2beta** (No. 26) は RIETAN-FP の入力ファイル hoge.ins 中の等方性原子変位パラメーター  $B$  の直前にダミーの ‘+’ を付けて 6 つの  $\beta_{ij}$  を発生させる前に実行する。ただし、**B2beta** で処理する相の結晶構造はあらかじめ VESTA あるいは RIETAN-FP に内蔵された Structure Tidy で標準化しておき、なおかつ RIETAN-FP の最新版でリートベルト解析を行って hoge.lst を生成しておかねばならない。**B2beta** は hoge.lst から制約条件の番号 NCON を読み込む。

さらに **B2beta** は配付ひな形ファイル hoge.ins 中の

```
# W. J. A. M. Peterson and J. H. Palm, Acta Crystallogr. 20 (1966) 147.
```

という行の後ろに  $\beta_{ij}$  に対する線形制約条件を挿入する。たとえば、配付ファイルに含まれている Fapatite.ins 中の Ca1 サイト (4f) と F サイト (4f) に異方性熱振動モデルを導入するとしよう。空間群  $P6_3/m$  における 4f サイトの  $\beta_{ij}$  に対する制約条件は  $\beta_{22} = \beta_{11}$ ,  $\beta_{12} = \beta_{11}/2$ ,  $\beta_{13} = \beta_{23} = 0$  である。したがって、両サイトの  $B$  の前に ‘+’ を付加し、

```
Ca1/Ca2+ 1.0 0.333333 0.666667 1.33243E-3 +0.648404 00011
Ca2/Ca2+ 1.0 0.241797 -7.95224E-3 0.25 0.531459 01101
F/F- 1.0 0.0 0.0 0.25 +1.42612 00001
```

```
.....
```

```
# W. J. A. M. Peterson and J. H. Palm, Acta Crystallogr. 20 (1966) 147.
```

```
# Place '}' + comment after the input of all the linear constraints.
# When no constraints are given, comment out them, including '}'.'
#} End of linear constraints.
```

とすると、hoge.ins は次のように変換される。

```
Ca1/Ca2+ 1.0 0.333333 0.666667 1.33243E-3 +0.648404 0001121200
Ca2/Ca2+ 1.0 0.241797 -7.95224E-3 0.25 0.531459 01101
F/F- 1.0 0.0 0.0 0.25 +1.42612 0000121200
```

```
.....
```

```
# W. J. A. M. Peterson and J. H. Palm, Acta Crystallogr. 20 (1966) 147.
```

```
A(Ca1,B22)=A(Ca1,B11); A(Ca1,B12)=0.5*A(Ca1,B11)
A(F,B22)=A(F,B11); A(F,B12)=0.5*A(F,B11)
```

```
# Place '}' + comment after the input of all the linear constraints.
# When no constraints are given, comment out them, including '}'.'
} End of linear constraints.
```

したがって、‘# W. J. A. M. Peterson and .....’ という行を削除すると、**B2beta** は正常に動作しない。もちろん  $\beta_{ij}$  に対する線形制約条件がなければ、その行の後ろは不変である。線形制約条件の入力部分に ‘#J’ が存在する場合は、上に示したように、それを ‘J’ に変える。

上記のように更新した hoge.ins が正常に変換されたか否かは必ずチェックし、必要なら線形制約条件の左辺のパラメーターの順番となるよう適当な場所に移動する。hoge.ins のバックアップは hoge.bak に保存されるため、**B2beta** 実行前の状態に容易に戻せる。

hoge.ins 中で NUPDT = 1 として RIETAN-FP によるリートベルト解析を実行すると、それぞれの ‘+’ 付き  $B$  は 6 つの  $\beta_{ij}$  の精密化値に置き換えられる。すなわち、6 つの  $\beta_{ij}$  とそれらに対する ID(I) が対応した形に変わる。

**MADEL** (No. 27) の実行例が RIETAN\_VENUS\_examples¥YBa2Cu4O8 フォルダー内に置かれている。YBa2Cu4O8.pme が入力ファイル、YBa2Cu4O8.mad が出力ファイルである。入力ファイルの拡張子は任意だが、出力ファイルの拡張子は常に mad となる。なお VESTA には各サイトの酸化状態を入力すれば **MADEL** の入力ファイル hoge.pme を出力する便利な機能があるので、必要に応じてご利用いただきたい。

**Bond valence parameters** (No. 28)、**空間群** (No. 29)、**マニュアル** (No. 30) で読み込まれるファイルは RIETAN\_VENUS/documents フォルダーに置かれている。2.4 で述べたように、**空間群**マクロで空間群のシンボルを調べるには、あらかじめ C:¥Program Files¥RIETAN\_VENUS¥documents¥Space\_groups.xlsx を Microsoft Excel に関連づけておく必要がある。最後の空間群記号が “2” になっている空間群では、“International Tables for Crystallography,” Vol. A 中の第 2 設定（原点に対称心）が STRUCTURE TIDY の標準設定となる。

## 4.4 マクロ No. 31–40

No. 31, 37 は CIF → PDF 関係、No. 33–35 は L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 関係のマクロである。マクロ No. 31–35 は TeX Live をインストール済みでないと使えない。マクロメニュー中の「その他 #2」で利用できるほか、ツールバー (cif2pdf: ボタン 8, E2J: ボタン 9)、ファンクションキー (Typeset: [Shift]+[F1]、BibTeX: [Shift]+[F2]、MakeIndex: [Shift]+[F3])、ポップアップメニュー (xml2bgr: B, R\_indices: C, ffe2ins: I) でも起動できる。[F1]、[F2]、[F3] はステータスバー上の対応するボタンをクリックするのでもよい。

- 
31. **cif2pdf**: hoge.cif、結晶模型、Williamson–Hall・Halder–Wagner プロット、電子・散乱長密度分布イメージなどを L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X ファイル hoge-report.tex に変換し、それを pdflatex で組版して英文報告書 hoge-report.pdf を作成する [14]
  32. **E2J**: hoge-report.tex を日本語 L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X ファイル hoge-report-j.tex に「翻訳」し、それを platex と dvipdfmx により日本語報告書 hoge-report-j.pdf に組版する [14]
  33. **Typeset**: カレントファイルの拡張子部分を tex に置き換えた名前のファイル \*.tex を pdflatex, platex, uplatex, lua<sub>jit</sub>latex のどれかで組版し、PDF ファイルを作成する
  34. **BibTeX**: カレントファイルの拡張子部分を bib に置き換えた名前のファイルから参考文献リストファイル \*.bbl を出力する

35. **MakeIndex**: カレントファイルの拡張子部分を `tex` に置き換えた名前のファイルから索引作成用ファイル `*.ind` を作成する
36. **xml2bgr**: Fox [15] で作成した `hoge.xml` を XY 形式のバックグラウンド強度ファイル `hoge.bgr` に変換する
37. **ffe2ins**: `hoge.ffe` に記録されたすべての原子間距離と結合角に対し抑制条件を指定するための行を `hoge.ins` 中に自動挿入する
38. **listPPP**: 一次プロファイル・パラメーター (Primary Profile Parameter: PPP) の  $2\theta$  依存性を Igor Pro でグラフ化する
39. **intramol**: 分子内抑制条件だけを `hoge.ins` 中に残す (未公開機能)
40. **R\_indices**: `hoge.*` を表示している状態で本マクロを実行すると、`Log_folder` フォルダに含まれるすべての `ddHHMMss_hoge.lst` から信頼度指標の部分を抽出し、カレントフォルダの `hoge.rel` というファイルに時系列で出力し、秀丸エディタで表示する

---

**cif2pdf** (No. 31) は `pdflatex` により

1. `hoge-cif`: **lst2cif** で作成した結晶構造データ、幾何学的パラメーター、反射リストなどの CIF
2. `hoge.pdf`: RIETAN-FP によるリートベルト解析結果に基づいて Plot マクロでプロットした観測・計算・差パターン
3. `hoge-struct.pdf`: VESTA などで作画した結晶模型
4. `hoge-density.pdf`: VESTA で作画した電子・干渉性散乱長密度分布のイメージ
5. `hoge-mscs.pdf`: **MSCS** で作成した Williamson–Hall プロットあるいは Halder–Wagner プロットのグラフ
6. `append.pdf`: `hoge-report.pdf` の末尾に追加すべき PDF

を合体し、`hoge-report-j.pdf` (英語) を作成する。

シェルスクリプト `cif2ins.command` と `cif2pdf.command` を比べればわかるように、**cif2ins** と **cif2pdf** は同一のプログラム `cif2ins` を実行している。最初の引数が 1 (`cif2ins.command`) と 2 (`cif2pdf.command`) になっているところが異なっている。両者が共通に使うサブルーチンが多いため、ソースコードを維持管理しやすい仕様を選択した。

**E2J** (No. 32) を引き続き実行すると、`hoge-report.tex` を Shift\_JIS エンコーディングの日本語 L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X ファイル `hoge-report-j.tex` に「翻訳」し、それを `platex` と `dvipdfmx` により日本語報告書 `hoge-report-j.pdf` にタイプセットする。「翻訳」は単にストリームエディター `sed` により英文を和文に置換しているにすぎない。BusyBox が内蔵している `sed` は Shift\_JIS コードを処理できるが、2 バイト目が `0x5c` (`\`) となっている、いわゆる第 1 種ダメ文字が文字列置換時にトラブルを引き起こす。「ソ噂欺圭構蚕十申筆貼能表暴予禄免拿臂饅」などがそれに該当するが、「表」→「表 ㍻」というように“㍻”を後ろに付ければエスケープできる。組版エンジンには高速性を重視し `platex+dvipdfmx` を採用した。

`hoge-struct.pdf` と `hoge-density.pdf` としては、VESTA で出力したラスターイメージ・ファイル `*.png` の余白を画像処理ソフトウェアで切り取り、PDF 形式で保存したファイルを使うことを推奨する。`append.pdf` には、たとえば `xdc` の出力 `xdc-*.pdf` (\*: 元素記号) や “International Tables

for Crystallography,” Vol. A 中の特定空間群のページなどを保存する。

**Typeset** (No. 33) は \*.tex の組版, **BibTeX** (No. 34) は文献データベースファイル \*.bib のコンパイル, **MakeIndex** (No. 35) は索引ファイル \*.idx の作成に使う。**cif2pdf** と **E2J** がそれぞれ出力した hoge-report.tex と hoge-report-j.tex 中の一部を手直しするには、**TeXworks** や **TeXstudio** などの統合環境を利用するのが一般的には無難である。ただし hoge-report-j.tex に残された英語（例えば化合物名）を和訳し、図表のキャプションを書き直すといった、わずかな変更であれば、秀丸エディタ上で **Typeset**, **BibTeX**, **MakeIndex** を実行する方が効率的である。\*.tex と \*.pdf の相互参照機能を備えていない分だけ、組版が加速する。

**Typeset**, **BibTeX**, **MakeIndex** は一般の L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 文書もコンパイルできる。

また **Typeset** による組版では、

#### platex

クラス指定: \documentclass[.....]{j\*} (\*j: ‘jarticle’, ‘jsarticle’ などの ‘j’ から始まる文字列)

文字コード: Shift\_JIS

改行コード: CR+LF (Windows 形式)

#### uplatex

クラス指定: \documentclass[.....]{j\*} (\*j: ‘jarticle’, ‘jsarticle’ などの ‘j’ から始まる文字列)

文字コード: UTF-8

改行コード: CR+LF (Windows 形式)

#### lualatex

クラス指定: \documentclass[.....]{jlreq}

文字コード: UTF-8

改行コード: CR+LF (Windows 形式)

#### pdflatex

クラス指定: 上記二つ以外の documentclass (たとえば report)

文字コード: ASCII

改行コード: CR+LF (Windows 形式)

としなければならない。すなわち、日本語文書は platex, uplatex, lualatex でタイプセットするようになっている。uplatex を使えば、‘𐤀’ や ‘↑’ のような特殊記号や常用でない漢字の一部を \*.tex 中に入力できる。もちろん、必要に応じてクラス名あるいは組版用コマンドを書き換えてもよい。

CIF 関連マクロ (No. 31–35) の充実ぶりには目を瞠るものがある。CIF は単なるテキストファイルに過ぎず、互換性には優れているものの、結晶構に関する情報を過不足なく伝えるだけの表現力を持ち合わせていない。理工系文書に頻出するイタリック、ボールド、上付き、下付き、ギリシャ文字、特殊文字などの書体や複雑な数式については、完全にお手上げである。そこで CIF を RTF, PDF, HTML などのファイルに変換するためのコンバーターがいくつか出現した。publCIF がその代表例である。しかし自作ソフトで作画した種々のイメージやグラフを全自動で挿入するだけでなく、付録まで追加して L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 文書として組版するという究極進化形は、筆者の知る限り皆無である。pdflatex (英文) と platex (和文) による高速組版、図と付録がもたらす豊富な情報、L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 文書ならではの美しさには感嘆の声が上がるに違いない。cif2pdf と E2J は RIETAN・VENUS システム

に高付加価値を与える先進機能として珍重されよう。

**xml2bgr** (No. 36) の詳細については Win\_exercise.pdf 中の「バックグラウンド・ファイル hoge.bgr の作成」を参照せよ。「FOX による hoge.bgr の入力とグラフ化」も参考になろう。

**ffe2ins** (No. 37) の詳細については Win\_exercise.pdf 中の「FOX で得られた構造モデルに基づく構造精密化 — 抑制条件の付加」を参照せよ。

**listPPP** (No. 38) を実行すれば、精密化結果に基づく反射リストを含む hoge.lst から各反射の PPP を記録した Igor テキストファイル hoge\_PPP.itx を作成できる。一般に、プロファイル関数に含まれるプロファイル・パラメーターは

1. 非線形最小二乗法で直接精密化する二次プロファイル・パラメーター (Secondary Profile Parameter: SPP)、
2. 一次パラメーター<sup>17)</sup> (Primary Profile Parameter: PPP)

に分類できる。SPP は精密化パラメーターの表に、PPP は反射リストに出力される。RIETAN-FP が備えている部分プロファイル緩和の機能を使う際には、必要に応じて PPP の  $2\theta$  依存性をプロットし、PPP が物理的に意味のない解（たとえば非対称パラメーター  $A < 1$ ）に陥っていないことを確認するとよい。秀丸エディタで hoge.lst を表示している状態でコンテキストメニューを出した後、“listPPP” を選ぶ。多相試料では第一相の反射だけ、 $K\alpha$  特性 X 線で回折データを測定した場合は  $K\alpha_1$  反射だけが抽出される。次に Igor Pro で「データ > Load Waves > Load Igor Text...」を選んでから hoge\_PPP.itx を入力してグラフ化する。

**R\_indices** (No. 40) の実行例については Win\_exercise.pdf 中の「入出力ファイルの自動保存と信頼度指標の抽出・出力」を参照せよ。

## 4.5 マクロ No. 41–50

これらのマクロはマクロメニュー中の「その他 #3」から選べる。ツールバー (**crscal**: ボタン 14)、ファンクションキー (**Rwp**: **Ctrl**+**F9**)、**python**: **Ctrl**+**F10**、**Effective ionic radii**: **Ctrl**+**F2**、ショートカット (桁揃え: **Ctrl**+**Q**)、**拡張子分岐**: **Ctrl**+**T** を押して **ListReplace**: **Ctrl**+**@**) からも実行できる。**F2**、**F9**、**F10** はステータスバー上の対応するボタンをクリックするのでもよい。

- 
41. **Rwp**: RIETAN-FP でリートベルト・Le Bail 解析を実行した後、 $R_{wp}$  vs. サイクルのグラフを作成
  42. **python**: 秀丸エディタが表示している python スクリプトを実行
  43. **桁揃え**: 指定した桁数で各行に改行を入れ、強制的に行を折り返す<sup>18)</sup>
  44. **数値選択**: 数値上でマウスを左ダブルクリックして数値全体を選択<sup>19)</sup>

---

17) PPP の  $\theta$  依存性の式を使って個々の反射について SPP から計算する。

18) [https://hide.maruo.co.jp/lib/macro/enter\\_code.html](https://hide.maruo.co.jp/lib/macro/enter_code.html)

19) [http://hidemaruo.dip.jp:81/hidesoft/hidesoft\\_2/x33987.html](http://hidemaruo.dip.jp:81/hidesoft/hidesoft_2/x33987.html)

45. **注釈**: 選択した行を対象として注釈マークを挿入あるいは削除<sup>20)</sup>
46. **拡張子分岐**: 拡張子ごとのマクロ起動<sup>21)</sup> (6.4 参照)
47. **ListReplace**: 変換リストファイルを使う連続文字列置換
48. **Dysnomia**: Dysnomia<sup>22)</sup> による MEM 解析
49. **Effective ionic radii**: Shannon [16] の有効イオン半径が収録されているテキストファイル Effective\_ionic\_radii.txt を表示
50. **cryscalc**: hoge.cif という CIF を表示している状態で cryscalc<sup>23)</sup> を実行し、生成した hoge.cfl を編集してから再度実行し、得られた hoge.cco を表示

---

**Rwp** (No. 41) は RIETAN-FP がカレントフォルダーに出力したファイル Rwp.gpd から gnuplot によりグラフを作成する (図 6)。秀丸エディタが hoge.\* あるいは Rwp.gpd を表示している状態で実行する。

**python** (No. 42) は python スクリプト \*.py を作成しながらテストするのに役立つ。たとえば python 3.9.X をインストールした場合、\*.py の冒頭に

```
#! C:/Users/user_name/AppData/Local/Programs/Python/Python39/python
```

というようにシバンを置き、UTF-8 エンコーディングで保存することを推奨する。Matplotlib や gnuplot などでグラフをプロットするスクリプトを書き、その場で実行してグラフを眺めるのに便利である。VESTA で CIF を種々のフォーマットのファイルに自動変換する python スクリプトを書き、秀丸エディタから実行するのにも使える。

**桁揃え** (No. 43) はテキストファイルの体裁を整えたい時に役立つマクロである。詳細については RIETAN\_VENUS¥Macros¥enter\_code.txt を参照せよ。

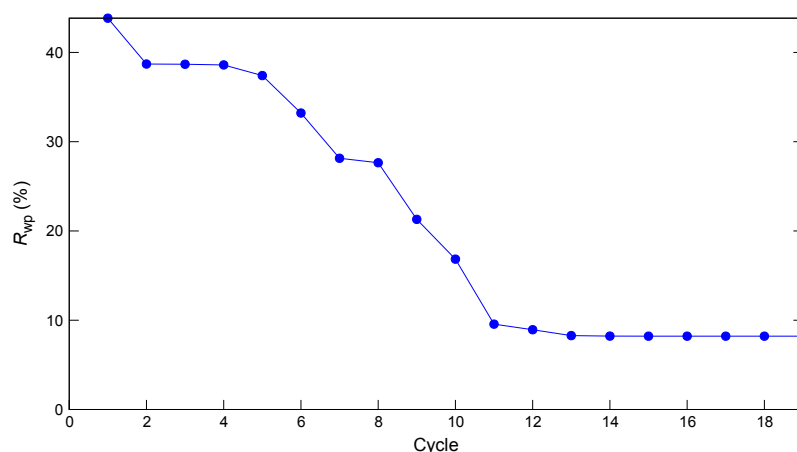


図 6 フッ素アパタイトのリートベルト解析における  $R_{wp}$  の変化。

---

20) [https://hide.maruo.co.jp/lib/macro/comment\\_out\\_v24.html](https://hide.maruo.co.jp/lib/macro/comment_out_v24.html)

21) <http://hide.maruo.co.jp/lib/macro/extdriver001.html>

22) <http://jp-minerals.org/dysnomia/jp/>

23) <https://cdifx.univ-rennes1.fr/cryscalc>



**注釈** (No. 45) はコメント化とコメント解除を統合したコメント反転マクロである。詳細については RIETAN\_VENUS¥Macros¥AltComment¥readme.html をブラウザで閲覧せよ。

**ListReplace** (No. 47) を使うための手続きについては、Win\_exercise.pdf 中の「ListReplace による CIF の変換」を参照せよ。廃止されたにもかかわらず惰性で使われ続けている CIF のデータ項目名 `_symmetry_.....` に関する文字列置換に使う。二つの変換リストファイル `cif_PDF-4+.txt` と `cif4MedeA.txt` がデフォルトで利用できる。

**Dysnomia** (No. 48) は RIETAN-FP が出力した `hoge.fos` と `hoge.prf` を対象として MEM 解析を行う (MEM/リートベルト解析)。MPF 解析に移行するときは、カレントフォルダーに生成したシェルスクリプト `MPF_multi.command` を使う。

**Effective ionic radii** (No. 49) では `h` 列に有効イオン半径が記録されている。

**cryscalc** (No. 50) を実行すれば、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 ( $hkl$ ,  $d$ ,  $2\theta$ ,  $|F|$ ,  $I/I_{\max}$  を含む)、全サイトの bond valence sum などが手軽に得られる。cryscalc で使えるキーワードと引数はその [Web ページ](#) に記されている。**cryscalc** を使うための手続きについては、Win\_exercise.pdf 中の「CIF を出発点とする結晶学的情報の取得」を参照せよ。

## 4.6 マクロ No. 51–54

**cifconv** (No. 51)、**VASP** (No. 52)、**supercell** (No. 53)、**C-Tools** (No. 54) にそれぞれ [F8](#)、[F9](#)、[F10](#)、[F11](#) が割り当てられているが、粉末構造解析とは無関係なので説明は省略する。No. 51–53 については「CIF を出発点とする第一原理計算支援用ユーティリティ」[\[17\]](#) と cifconv のマニュアル `cifconv_man_Win.pdf` をお読み頂きたい。**C-Tools** は DFT コードの入力ファイルを作成するための補助ツール C-Tools<sup>24)</sup> により VASP 用入力ファイル INCAR を開くのに使う。

## 5 繰り返し処理用シェルスクリプト

### 5.1 sda.command

`sda.command` (`sda: script-driven analyses`) は `hoge.ins` 中のデータを一部変更した一連のリートベルト解析を逐次実行し、得られた信頼度指標をログファイルに一括出力するためのシェルスクリプトである。言い換えれば、`sda.command` は RIETAN-FP を非線形最小二乗フィッティング (カーネル計算) のエンジンとする外回り計算を指示通りに行う。たとえば

1. 角度標準試料の粉末回折データを用いる放射光の波長の決定、
2. リートベルト解析における最終的な信頼度指標が精密化パラメーターの初期値に依存するか否かのチェック、
3. バックグラウンド強度を記録したファイル `hoge.bkg` を作成するためのパラメーター `NPICKUP`, `NREPEAT`, `CURVATURE` の最適化<sup>25)</sup>、

24) <https://sourceforge.net/projects/c-tools/>

25) `sda.command` 中で、各リートベルト解析が終わった後に `${hoge}.bkg` を削除しなければならない。

4. 精密化パラメーターの非線形性が強いと、真値からかけ離れた初期値を与えると発散するというトラブルの解決、
5. 互いに相関の強いパラメーターの交互精密化、
6. 各パラメーターを精密化するか固定するかを決めるための予備解析<sup>26)</sup>、
7. 選択配向ベクトルの決定、
8. 異方的プロファイル・ブロードニングの方向の決定、
9. 最適なプロファイル計算打ち切り範囲の決定、
10. 部分プロファイル緩和の有効性の検証、
11. 温度、圧力、化学組成を変化させて測定した一連の強度データの自動解析

などで絶大な威力を発揮する。sed, perl, ruby などによる文字列置換で使う正規表現に関する初歩知識さえ持ち合わせていれば、これまで試行錯誤のためリートベルト解析を繰り返すのに費やしていた時間と労力を大幅に節約できる。hoge.ins には変数名や注釈に加え回折強度を計算するためのパラメーターに対するラベルも含まれているため、正規表現を利用する置換に都合が良い。リートベルト解析だけでなく、Le Bail 解析における初期積分強度を変更するといった用途も考えられる。リートベルト解析前に一連の置換コマンドを通し番号+ ‘)’ の後ろに記述したテキストファイル hoge.sda を hoge.ins と同一フォルダーに作成しておけば、sda.command が自動的に生成する。

sda.command を実行するための手続きについては、Win\_exercise.pdf 中の「sda.command による逐次リートベルト解析」を参照せよ。

## 5.2 MPF\_multi.command

リートベルト解析やパターン分解のプログラムの開発は必ずしも難易度が高いとはいえず、有償・無償のプログラムが世界各国で盛んに作成され広く利用されている。しかし、厳密解を求めうる MEM 解析プログラムや結晶構造と 3D データの可視化プログラムまで無料で公開している例は RIETAN-FP・VENUS システムを除けば皆無である。これまでの経験から、古典的構造精密化法であるリートベルト解析止まりでは結晶構造モデルの修正、不規則な原子分布の把握、非調和熱振動の解析、化学結合の視覚化には不十分であることを痛感してきた。MEM に基づくパターンフィッティング (MEM-based Pattern Fitting: MPF) [18,19] を駆使すれば、RIETAN-FP, Dysnomia, VESTA の連携プレーを通じて別次元の解析能力を享受できる应该说でない。

MPF\_multi.command は MPF\_multi.command の誤差調節因子  $E$  を複数の指定値に変えて MPF を自動的に実行するためのシェルスクリプトである。hoge.ins 中で  $NMEM = 1$  (第 1 相の MEM 解析用ファイルを出力) に設定すれば、リートベルト解析終了後に MPF\_multi.command がカレントフォルダーに出力される。

MPF\_multi.command を実行するための手続きについては、MPF\_multi\_Win.command と Win\_exercise.pdf 中の「Cimetidine の MPF 解析」を参照せよ。また、VESTA 講習会のチュートリアル RIETAN\_VESTA\_cooperation.pdf で述べた拡張 MPF 解析の技法は REMEDY サイクル No. 2 以降の全回折パターンフィッティングにおける  $R_{wp}$  を減らすのに有効である。

---

26) たとえば精密化するバックグラウンド・パラメーターの最適数を決めるのに使う。

## 6 操作方法

### 6.1 キーワードのカラー表示

ひな形ファイル Fapatite.ins と Cu<sub>3</sub>Fe<sub>4</sub>P<sub>6</sub>.ins を見ればわかるように、If ブロックと Select ブロック中のキーワード (If, then, else, end if, Select case, case, end select, Go to など) は強調カラー表示される。

### 6.2 マクロ実行時のカレントファイル

マニュアル (No. 30) 以外の秀丸マクロは、hoge.ins と同一フォルダーに存在し、しかも拡張子抜きファイル名 (hoge) が処理対象のファイルと同一のファイルのウィンドウから起動しなければならない。たとえば、hoge.xyz から幾何学的パラメーターを求めたいときは、hoge.xyz (hoge.ins と同一のフォルダーに存在) のウィンドウで **ORFFE** (No. 3) を実行する。

**RIETAN** (No. 1) と **lst2cif** (No. 4) を実行する場合、カレントファイルに応じて、オープン中のファイルが次のように処理される：

1) hoge.ins のウィンドウから起動した場合

hoge.ins の一部を変更したにもかかわらず保存されていない場合、すなわち hoge.ins のタイトルバーに (更新) と表示されている場合、hoge.ins を保存した後に RIETAN-FP の実行を開始する。

2) hoge.ins 以外のウィンドウから起動した場合

一部変更されたファイルをすべて保存してから、RIETAN-FP の実行を開始する。

いずれの場合も、RIETAN-FP が hoge.ins を更新したならば、更新ファイルが自動的に表示される。

### 6.3 プログラム実行後の挙動

計算時間が比較的長い **RIETAN** (No. 1) や **Superflip** (No. 8) などでは bash ウィンドウに標準出力がリアルタイムで表示される。bash ウィンドウ中に参照すべき情報が出力されたり返答を求めたりする場合を除き、計算終了後に bash ウィンドウは消える。ユーザーが閲覧・編集すべき主要出力ファイルは秀丸エディタにより自動的に開かれる。更新される可能性のあるファイル (たとえば hoge.ins) も (再) オープンされる。こうして開かれたファイルにはそれぞれ個別のタブが割り当てられる。最前面のファイルはタブのクリックにより容易に切り換えられる。このため、スクリーンがウィンドウだらけにならずに済み、利便性と作業効率が大幅に向上する。タブをダブルクリックすれば、当該タブに割り当てられたファイルを別なウィンドウに表示できる。もちろん再結合も可能である。

### 6.4 拡張子に応じた動作

**拡張子分岐** (No. 46) には **Ctrl+T** というショートカットが割り付けられている。カレントファイルを対象に秀丸マクロ No. 1-8, 14, 15, 17, STRUCTURE\_TIDY.mac (C:\Program Files\RIETAN\_VENUS\Macros フォルダーに置いてあるが、マクロ登録はしていない) を実行する。

カレントファイルの拡張子が ffo と ffx (EXPO マクロ実行後に得られる観測積分強度を収めた

ファイル extra.hkl を改名) の場合、**拡張子分岐**は ext2ffi.mac を実行する。ext2ffi.mac はカレントファイルを別ファイル hoge.ffi に保存し、hoge.ffi を開くための秀丸マクロである。

カレントファイルが STRUCTURE TIDY の入力ファイル (拡張子: sti) である場合、**拡張子分岐**は未登録の秀丸マクロ STRUCTURE\_TIDY.mac を実行し、STRUCTURE TIDY の出力ファイル hoge.sto を開く。STRUCTURE TIDY は結晶データを標準化するプログラムである。詳しくは RIETAN-FP\_manual.pdf 中の 8.3.10 を読んでいただきたい。hoge.sti の入力データは下記の通りである:

- 1 行目: 空間群のシンボル<sup>27)</sup>
- 2 行目: 原点に反転中心がないとき 0、あるとき 1
- 3 行目: 格子定数  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  (書式なし)
- 4 行目以降、最後から 3 行目まで: 各サイトのラベルと分率座標 (書式なし)。
- 最後の 2 行: end

各サイトのラベルは化学種名 (2 文字以下のアルファベット文字) + 識別文字列からなっており、最大 6 文字である (たとえば O2, Fe3, H123a)。

STRUCTURE TIDY は複数のデータセットを扱えるが、通常は “end” を二行続けて入力し、単一結晶データだけを標準化する。RIETAN\_VENUS\_examples¥YBa2Cu4O8 フォルダに実行例 YBa2Cu4O8.sti と YBa2Cu4O8.sto が、RIETAN\_VENUS\_examples- ¥Zr2Fe12P7 フォルダに別な実行例 Zr2Fe12P7.sti と Zr2Fe12P7.sto が入っている。

## 6.5 ポップアップメニューからの起動

**[Ctrl]+[E]** を押すと、ツールバーとステータスバー (ファンクションキー) に割り当てられていない秀丸マクロがポップアップメニューに表示される (図 3)。目的の秀丸マクロを選択するか、左端にアンダーライン付きで表示されているショートカットキーを押せば、そのマクロが実行できる。

## 6.6 タブ操作

一つのファイルのタブをウィンドウ外部に向かってドラッグし、ウィンドウの外枠が見えてきたところでドロップすれば、そのファイルをオープンした状態のウィンドウが開く。タブ上での左ダブルクリックでもよい (動作環境 → ウィンドウ → タブモード → 詳細 → マウス操作 → 左ダブルクリックで「このタブを分離/移動」に設定した場合)。こうして開いたウィンドウから元のウィンドウに当該ファイルのタブをドラッグ&ドロップすれば、元に戻る。

## 6.7 行番号、アウトライン解析、ファイルマネージャ用のボタン

ツールバー上の三つのボタン [行番号表示/非表示]、[アウトライン解析の枠]、[ファイルマネージャ枠] (図 7) は支援環境を使う際に重宝する。それらの上にカーソルを移動すると、各ボタンの名称が表示される。いずれも表示・非表示がトグルになっている。

---

27) 入力可能なシンボルは空間群で参照できる。

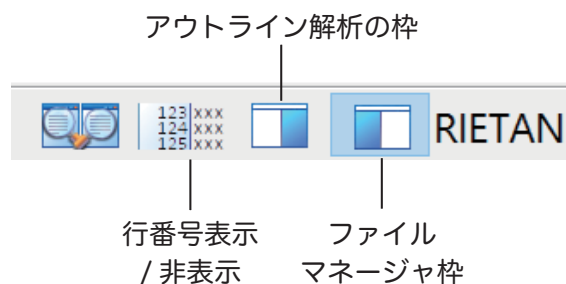


図7 ツールバーの中心付近に置かれている 5 つのボタン。ファイルマネージャ枠を表示しているときのスナップショット。

## 6.8 ファイルマネージャ枠

各タブの左側に位置する X を □ で囲った形のマークをクリックすると、そのファイルを閉じることができる。

複数のファイルを開いている場合、それぞれのファイルにタブが割り当てられる。特定のタブをマウスの左ボタンでダブルクリックすると、当該タブ以外のタブに相当するファイルが閉じられる。また、特定のタブを右クリックすると、当該タブより右側の全タブのファイルが閉じられる

秀丸エディタではツールバー上のボタン [ファイルマネージャ枠] をクリックすると、ウィンドウ内にフォルダー・ファイル一覧を表示し、その場でファイル进行操作できるファイルマネージャ枠を表示できる (図 8)。

ファイルマネージャ枠の右上の ▼ をクリックし、[フォルダー+ファイル一覧] という表示形式を選び、[サブフォルダも表示] をチェックすれば、フォルダーツリーとファイル一覧を上下に表示してくれる。後者においてテキストファイルの名前をダブルクリックすれば、当該ファイルが開かれる。やはり右上の ▼ をクリックし、[位置] で枠の位置を指定することもできる。ファイルマネージャ枠で可能なファイル・フォルダー操作については 3.2.3 を参照せよ。

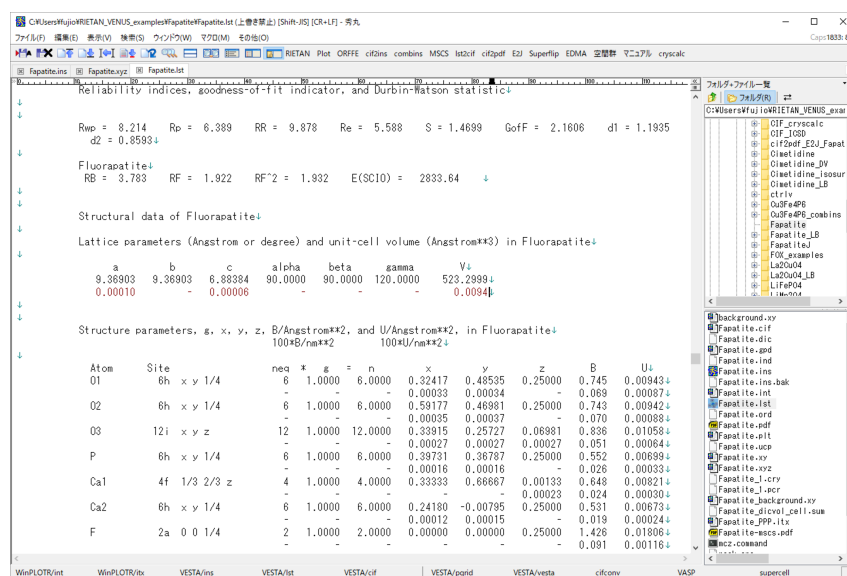


図8 Fapatite.lst を表示しているテキストウィンドウの右側にファイルマネージャ枠を引き出した秀丸エディタ。

ファイルマネージャ枠を開いた後、表示しているフォルダー内に変更があると、ファイルマネージャ枠同期マクロ v0.03, [filemng\\_sync.mac](#) によりファイル一覧が自動更新される。エクスプローラーと連携したファイル操作も可能となっている。ファイル一覧中のファイルを右クリックして「コピー」、「削除」、「切り取り」を選べ、**[Ctrl]+[V]**を押して削除するか切り取ったファイルを他のフォルダーにペーストできる。ただしファイルマネージャ枠とエクスプローラーを併用してファイル进行操作した後のファイルマネージャ枠では、秀丸エディタのカレントファイルを含むフォルダーが常に表示されることに注意せよ。

RIETAN-FP 実行後にカレントフォルダーに生成する MPF\_multi.command をファイルマネージャ枠内でダブルクリックしても、秀丸エディタでオープンされるだけで、シェルスクリプトとしては実行できないことに注意してほしい。MPF\_multi.command はエクスプローラー上でダブルクリックして実行する必要がある。

## 6.9 アウトライン解析の枠

RIETAN-FP の機能増強とともに、hoge.ins の行数が増し、編集・閲覧したい箇所に到達するのに一苦労することが多くなってきた。目的行付近を素早く表示するには、なんといってもしおり（ブックマーク）が便利である。秀丸エディタは強力なアウトライン解析機能を備えており、正規表現による検索でヒットしたしおりをアウトライン解析の枠（フレーム）に表示できる。RIETAN-FP の入力ファイル hoge.ins や出力ファイル hoge.lst のような長いファイルでも、瞬時にして目的位置にジャンプしうる。

RIETAN-FP.reg では、ファイルタイプ \*.ins を対象に、その他 → ファイルタイプ別の設定 → アウトライン → 解析 → ツリー表示の定義で、検索文字列として「行頭の「!」」が指定されている。秀丸マクロは必要ない。その他の設定については、「RIETAN-FP、VESTA 関連メモ」の Web ページ<sup>28)</sup>を参照されたい。

hoge.ins がカレントウィンドウとなっており、しかも表示メニューで「アウトライン解析の枠」にチェックが入っていると、スペースを除く最初の文字が「!」である特別注釈行が「!」より前のスペースの数に対応してツリー構造で表示される。下層レベルのしおりは折りたためる。アウトライン解析枠の右上の ▼ をクリックすれば、ファイルマネージャ枠の場合と同様に [位置] で枠の位置を指定できる。

特定のしおりをクリックすると、hoge.ins 中の相当する位置にジャンプする（図 9）。特筆すべきなのは、hoge.ins においてしおりを追加、削除、変更するや否やブックマークリストに反映されるリアルタイム性である。

## 6.10 二つのファイルの相違点を比較

新旧ファイルの変更部分を知りたいときの操作は次の通り。

1. 二つのファイルを秀丸で開く。
2. 「ウィンドウ > 並べて表示」を選ぶ。
3. 左側の秀丸エディタで「ウィンドウ > 他の秀丸エディタと内容比較」を選ぶ。
4. “常にファイル先頭から比較”と“カラーマーカーで色付け”をチェックし、[指定] をクリックする。

---

28) <http://krdg.sitemix.jp/>（本支援環境にしおりの機能を追加する際、参考にさせて頂いた）



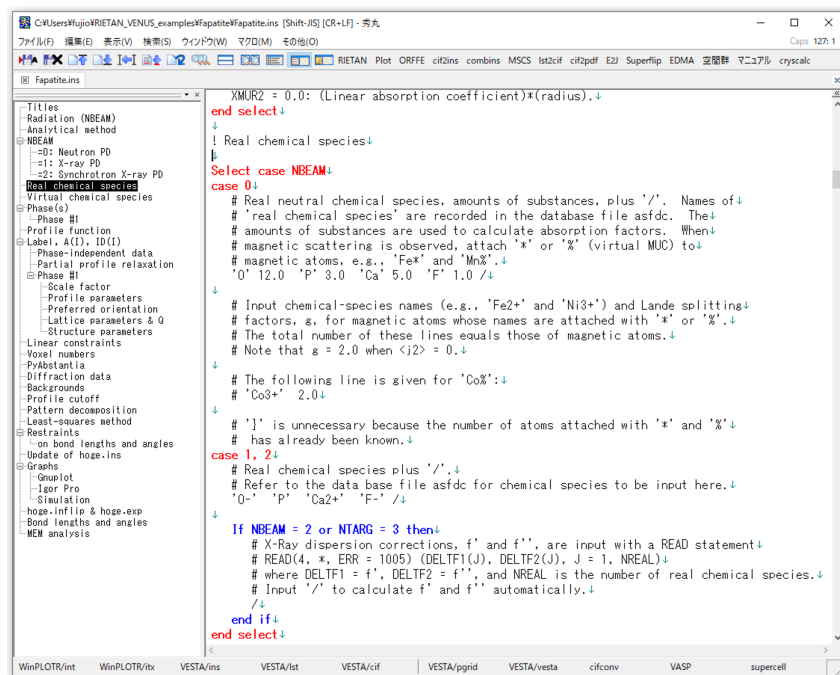


図9 テキストウィンドウの左側にアウトライン解析枠を表示した秀丸エディタで、‘! Real chemical species’ というしおりをクリックしたところ。Select ブロックと If ブロックの構文がそれぞれ赤と青で表示されるのは、強調表示を登録したためである。

5. 相違箇所が赤色表示される。
6. マウスで [次の結果] をクリックすると、次の相違箇所にジャンプする。右のウィンドウも対応箇所に自動的にスクロールする。
7. ファイルの比較が終わったら、[x 比較] の x をクリックして比較モードから抜ける。

## 7 使用にあたっての留意点

本支援環境を構成する秀丸マクロ \*.mac は必要に応じて変更して使うことを推奨する。秀丸マクロの詳細については、マクロメニューの一番下のマクロヘルプを参照されたい。

本支援環境では、

動作環境 → ファイル → 排他制御

において [ファイルを読み込みなおす] を選択している。他の設定を選ぶと、すでにオープンされているファイルを再びオープンしようとしたときの操作が煩雑になるので、注意すること。

秀丸エディタで編集したファイルのバックアップを保存しておきたい場合は、

その他 → 動作環境 → 保存

で、[所定のフォルダーにバックアップを作成する] をチェックし、適当なフォルダーを指定しておくとい。ただし、

その他 → ファイルタイプ別の設定 → その他 → 保存・読み込み

で、[バックアップファイルの作成] をチェックする必要がある。

## 8 付録：秀丸マクロ関係の操作

本支援環境の構築に利用している秀丸マクロに関する主な操作を以下に述べる。

### 8.1 ユーザーメニューへのマクロの登録

その他 → メニュー編集 → ユーザーメニュー → メニュー：メニュー  $n$  ( $n = 3-7$ )

でタイトルを設定。[追加] をクリックする。コマンド：メニュー/マクロとしてからマクロを指定し、キー (0-9, A-O) を入力する。この操作を繰り返して最大 25 個のマクロを登録する。必要に応じて [一つ上に移動] または [一つ下に移動] をクリックし、適当な位置に移動する。マクロ名をダブルクリックすれば、キーを変更できる。

キーを変更するときは、旧登録マクロを削除し、[追加] をクリックして再登録し、必要なら上下に移動する。これらのマクログループにはキーを割り当てられる。たとえば本支援環境では、ポップアップメニューに **[Ctrl]+[E]** を割り当てている。

### 8.2 マクログループとマクロへのキーの割り当て

その他 → キー割り当て → コマンド：メニュー/マクロ

で **[ctrl]** や **[Alt]** などをチェックして、それとともに押すキーを選ぶか、単独のファンクションキーを選び、コマンド：メニュー/マクロでメニュー  $n$  を選んでから、OK をクリックする。同様に、特定のマクロにキーを割り当てることもできる。

### 8.3 キー割り当ての解除

その他 → キー割り当て

でそのキー（たとえば **[Ctrl]+[E]**）を指定した後、[コマンド：] でファイル系+ (なし) を指定する。従来のキー割り当てを変更する際には、新しいキーを割り当てる前にキー割り当てを解除する必要がある。

### 8.4 ツールバーにおけるマクロのアイコンの表示

その他 → 動作環境 → ウィンドウ

で [ツールバー] をチェックしてから [詳細] をクリックする。右側の [コマンド] で [メニュー/マクロ系] を選び、追加するマクロを選択後、[追加] (中央部の一番上) をクリックする。その際、[削除] をクリックすれば、そのマクロが削除される。メニュー名  $Mn$  ( $n$ : 整数 1, 2, 3, ...) のアイコンがツールバーの右端に追加される。[詳細] の隣の [デザイン] をクリックし、[マクロ名を表示] をチェックする。

RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境では、デフォルトのアイコンから「新規作成」と「検索開始位置へ戻る」が削除され、「行番号表示/非表示」、「アウトライン解析の枠」、「ファイルマネージャ枠」が追加されている。ユーザーが好みに応じてカスタマイズするのは自由である。

### 8.5 プログラム実行系命令

プログラム実行命令 run, runsync, runsync2 の後ろには文字列が来る。文字列同士は“+”でつなぐ。文字列が空白を含む絶対パス+ファイル名の際には、二重のダブルクォーテーション記号ペアで

囲む。

runsync と runsync2 の引数（文字列）中では、標準入出力のリダイレクトやパイプは使えない。

一対のダブルクォーテーション記号の内側では、¥ マークは ¥¥、ダブルクォーテーション記号は ¥"と記述しなければならない。詳しくは、

マクロ → マクロヘルプ → 目次 → 式について → 文字列  
を参照のこと。

## 9 配付ソフトウェアの使用許諾条件

拙作プログラムを使って得た研究成果を論文や解説として発表する際には、

**RIETAN-FP**: F. Izumi and K. Momma, “Three-dimensional visualization in powder diffraction,” *Solid State Phenom.*, **130**, 15–20 (2007).

**VESTA**: K. Momma and F. Izumi, “VESTA: a three-dimensional visualization system for electronic and structural analysis,” *J. Appl. Crystallogr.*, **44**, 1272–1276 (2011).

**Dysnomia**: K. Momma, T. Ikeda, A. A. Belik, and F. Izumi, “Dysnomia, a computer program for maximum-entropy method (MEM) analysis and its performance in the MEM-based pattern fitting,” *Powder Diffr.*, **28**, 184–193 (2013).

**ALBA**: F. Izumi, “Spectroscopy and Diffraction III,” 5th Series of Experimental Chemistry, Vol. 11, ed. by Chem. Soc. Jpn., Maruzen, Tokyo (2006), pp. 220–223.

を必ず引用しなければならない。

## 参考文献

- [1] 阿部紀行, “一步踏み込む L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X の基本 — 入力支援環境「祝鳥」を用いた文書作成 —”, サイエンス社 (2006).
- [2] 吉良野すた, “執筆を効率化したい人のための秀丸エディタ実践入門”, Kindle (2019).
- [3] 泉 富士夫, まてりあ, **56**, 393 (2017).
- [4] 泉 富士夫, まてりあ, **56**, 453 (2017).
- [5] 泉 富士夫, まてりあ, **56**, 503 (2017).
- [6] W. R. Busing, K. O. Martin, and H. A. Levy, “A FORTRAN Crystallographic Function and Error Program”, Report ORNL-TM-306, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee (1964).
- [7] L. Palatinus and G. Chapuis *J. Appl. Crystallogr.*, **40**, 786 (2007).
- [8] L. Palatinus, S. J. Prathapa, and S. van Smaalen, *J. Appl. Crystallogr.*, **45**, 575 (2012).
- [9] 泉 富士夫, “実験化学講座 11 物質の構造 III 回折”, 第 5 版, 日本化学会編, 丸善 (2006), pp. 168–174.
- [10] F. Izumi and T. Ikeda, *Annu. Rep., Adv. Ceram. Res. Center, Nagoya Inst. Technol.*, **3**, 33 (2014).
- [11] E. F. Bertaut, *Phys. Rev.*, **91**, 415 (1953).
- [12] J. Kanamori, T. Moriya, K. Motizuki, and T. Nagamiya, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **10**, 93 (1955).
- [13] D. Louër and A. Boultif, *Powder Diff.*, **29**, S7 (2014).
- [14] 泉 富士夫, 先進セラミックス研究センター年報, **5**, 57 (2016).
- [15] V. Favre-Nicolin and R. Cerny, *J. Appl. Crystallogr.*, **35**, 734 (2002).
- [16] R. D. Shannon, *Acta Crystallogr., Sect. A*, **32**, 751 (1976).
- [17] 泉 富士夫, 宮崎晃平, セラミックス, **54**, 473 (2019).
- [18] F. Izumi and R. A. Dilanian, “Recent Research Developments in Physics,” Vol. 3, Part II, Transworld Research Network, Trivandrum (2002), pp. 699–726.
- [19] F. Izumi, *Solid State Ionics*, **172**, 1 (2004).