

# macOS 用 RIETAN-FP ・ VENUS システム 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

Terminal 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だといって過言でない。そこで、豊富な機能と高い安定性を誇るシェアウェアであるテキストエディター Jedit  $\Omega$ <sup>1)</sup> 上で動く macOS 用 RIETAN-FP ・ VENUS 統合支援環境を構築した。Jedit  $\Omega$  の前身である Jedit X 用の支援環境を更新したに過ぎないが、セキュリティを重視する設計への対応にかなり手間取った。Jedit  $\Omega$  は macOS 10.12 Sierra 以降を主要ターゲットとする比較的新しいエディターなので、今後十分長くメンテナンスされ続けるだろう。事実、M1 を搭載した Mac 上でネイティブに動くユニバーサル・バイナリーにいち早く対応している。

同環境は Jedit  $\Omega$  の GUI を通じて RIETAN-FP、VENUS<sup>2)</sup> (Dysnomia, ALBA, VESTA, Alchemy)、関連プログラム、外部プログラムを起動し、それらの入出力ファイルをタブ切り替えで編集・閲覧するための計算機環境である。Jedit  $\Omega$  では、ユーザーが作成したアップルスクリプト \*.scpt をマクロ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。\*.scpt は bash で書かれたシェルスクリプト \*.command を起動するだけの、ごく短い AppleScript に過ぎない。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。ショートカット、プルダウンメニュー、スマートインデックスメニュー、コンテキストメニュー、タブ付きウィンドウなどの GUI を通じて一連の操作を実行できるため、ターミナル・ウィンドウでコマンドを入力してシェルスクリプトを起動するより、はるかにユーザーフレンドリーかつ効率的である。エディターの全機能を Jedit  $\Omega$  に任せているのは言うまでもない。

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項が記されている。RIETAN-FP\_manual.pdf 中の「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」に含まれている「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 [1-3] を併読すると、本支援環境についての理解が

---

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

1) <http://www.artman21.com/jp/jeditOmega/>

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

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 フォルダ中のファイルの場合、‘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 フォルダ中の手引き書 Readme\_Mac.pdf に目を通し、macOS 用バージョンをインストールしなければならない。Readme\_Mac.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おく。

### 2.2 Jedit Ω のインストール

Readme\_Mac.pdf でも述べたように、本支援環境を使うにはパッケージ化された Web 版 Jedit Ω (Jedit Ω.app) を /Applications フォルダに置くとともに、JeditOmega\_Preferences.plist に記録された環境設定を取り込む必要がある。

### 2.3 macOS 用 RIETAN-FP ・ VENUS システムのインストール

本支援環境を利用する前に、documents.zip を解凍して得られる documents フォルダ中の手引き書 Readme\_Mac.pdf を通読し、macOS 用 RIETAN-FP ・ VENUS システムをインストールしておく。Readme\_Mac.pdf をまだ読んでいないのだったら、まずそちらを熟読していただきたい。

RIETAN-FP ・ VENUS 統合支援環境は

- ~/Library/Application Support/JeditOmega/scripts

より下の階層に置かれたアップルスクリプト \*.scpt とそれらの中で実行される bash スクリプト

- /Applications/RIETAN\_VENUS/commands\_common/\*.command

からなっている。commands\_common フォルダにはストリームエディター sed<sup>3)</sup> とファイルフォーマットの変換コマンド nkf<sup>4)</sup> も入っている。インストール後に commands\_common フォルダを別な場所に移動してはならない。

---

3) E2J マクロ中で英語を日本語に連続置換していることを考慮し、macOS 標準のコマンドでなく GNU sed を使用。

4) nkf は cifconv.command [4] 中で使われる。

## 2.4 RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境

### 2.4.1 セキュリティー強化への対策

macOS 10.14 Mojave のリリース以降、Jedit Ω 用マクロが正常に動作しないという障害が急増した。Mojave 以降の macOS 上で本支援環境を使う場合は、ブログエントリー「[Jedit Ω 用マクロが実行できないときの対症療法](#)」に記したセキュリティー対策をとらねばならない。

### 2.4.2 Jedit Ωを基盤とする解析環境の構築

macOS 用 RIETAN-FP・VENUS システム用マクロ<sup>5)</sup>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 Jedit X の後継であり、

1. マルチファイル検索・置換
2. プリフィックスの付加・除去
3. 二つのファイルの比較<sup>6)</sup>
4. 編集ウィンドウを上下または左右の2つのビューに分割
5. 構文カラーリング
6. カスタマイズ可能な階層構造のマクロメニュー
7. コンテキストメニューからのマクロ実行
8. メニュー項目（マクロ）へのショートカットの割り当て
9. スマートインデックス<sup>7)</sup>を通じたブックマークの利用

などの強力な機能を備えたテキストエディターである。

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、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。RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境については、RIETAN\_VENUS/documents/Readme\_scpt.pdf を参照されたい。

統合支援環境用マクロ (AppleScript)\*.scpt は scripts フォルダとそのサブフォルダ ContextMenu, Information, LaTeX, Others に置かれている。‘.scpt’を除くマクロ名をフォルダごとに以下に列挙する。ボールド書体のマクロはデフォルトでコンテキストメニューに表示される。‘.’の後ろは既定のショートカットキー、‘^’は control、‘⌘’は command を示す。

• ~/Library/Application Support/JeditOmega/scripts フォルダ

1. **RIETAN**: ^R
2. **Plot**: ^P
3. **ORFFE**: ^O
4. **cif2ins**: ^C
5. **combins**: ^I (Ins)
6. **MSCS**: ^M

---

5) 一部のマクロを除き、AppleScript \*.scpt とシェルスクリプト \*.command の組み合わせからなる。

6) 「ヘルプ > Jedit Ω ヘルプ」を選び、「書類と比較」を参照せよ。

7) 正規表現（後方参照を含む）が使える点が秀逸。

7. **lst2cif**: ^L
  8. Superflip: ^S
  9. EDMA: ^E
  10. **VESTA**: ^V
- ~/Library/Application Support/JeditOmega/scripts/ContextMenu フォルダー
    1. **xdc**: ^X
    2. **xml2bgr**
    3. **B2beta**: ^B
    4. **ffe2ins**: ^F
    5. **R\_indices**
    6. **listPPP**
    7. **cifconv**: ^H (Henkan)
    8. **Rwp**
    9. **python**: option ⌘P
  - ~/Library/Application Support/JeditOmega/scripts/Information フォルダー
    1. Space groups
    2. Manual: ⌘M
    3. Bond valence parameters
    4. Effective ionic radii
    5. **cryscale**: ⌘@
  - ~/Library/Application Support/JeditOmega/scripts/LaTeX フォルダー
    1. cif2pdf: ⌘D (Documentation)
    2. E2J: ⌘J (Japanese)
    3. Typeset: ⌘T
    4. BibTeX: ⌘B
    5. MakeIndex
  - ~/Library/Application Support/JeditOmega/scripts/Others フォルダー
    1. Dynomia: ^D
    2. MADEL
    3. supercell: ^G (**G**enerate derivative structures)
    4. C-Tools: ^T (**T**ools)
    5. ファイル名を登録: ^@

CIF コンバーター cifconv、第一原理計算用マクロ supercell と C-Tools の詳細については、文献 [4,5] と cifconv\_man\_Mac.pdf を参照されたい。

「マクロ > スクリプトフォルダを表示」を選ぶと、scripts フォルダーが Finder に表示される。新しい\*.sctpt を上記のフォルダーに置けば、自作マクロを追加できる。マクロメニューやショートカットなどを変更したならば、「環境設定 > 一般 > 詳細」で [すべての環境設定を書き出す] をクリックし、Jedit Ω の全環境設定を

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

として保存すれば、再インストール時にバックアップが作成されるだけでなく、「マクロ > スクリプトフォルダを表示」の選択を通じて Finder に表示できる。もちろん別なフォルダーへの保存やファイル名の変更も許される。

上記の \*.scpt はいずれもごく短く、アプリケーションの実行、ファイル操作、テキストファイルの処理などを受け持つのは \*.scpt 中で実行されるシェルスクリプト /Applications/RIETAN\_VENUS/-commands\_common/\*.command である。筆者は元々 Mac の enthusiast であり、RIETAN-FP・VENUS システムは UNIX を基盤とする macOS 上で日々開発している。Jedit Ω 用マクロ \*.scpt から起動される \*.command では、UNIX 哲学のうち四つの指針

- 効率よりも移植しやすさを重視せよ。
- 単純なテキストファイルにデータを格納せよ。
- ソフトウェアの効率を自分の優位性として利用せよ。
- 効率と移植性を高めるためにシェルスクリプトを活用せよ。

に基づき、正規表現を駆使できる grep, sed, awk, cat, head, tail などの UNIX 系コマンド [6] によりテキスト（ファイル）を処理しているため、macOS (= UNIX + GUI) との親和性がすこぶる高い。UNIX のシェルやコマンドによりファイルを介して相互に連携しているプログラム群を Mac ユーザーに活用してもらえれば、これに優る喜びはない。

### 2.4.3 Jedit Ω の環境設定

Jedit Ω で入出力ファイルを閲覧・編集するには、「Jedit Ω > 環境設定 > 書類タイプ > フォントと表示色」で「基本」あるいは「プレーンテキスト」を対象としてベースフォントを“Osaka-レギュラー-等幅-14pt”に設定することを推奨する。既存ファイルのフォントがインスペクターバー上でそのように表示されないならば、“Osaka-レギュラー-等幅-14pt”に変更して保存するとよい。Osaka フォントは英数字と日本語のいずれも見やすく、入力用テキストファイルは文字幅が一定の方が閲覧・編集しやすい。理由は不明だが、14pt だとカーソル位置表示の小数点以下が“.00”となるだけでなく「ツール > 強制改行による桁揃え」が正常に動く。さらに表示倍率を 110%にすると目が疲れにくくなる（デフォルト設定）。なお倍率はメニューバーで「表示 > 表示倍率を上げる」か「表示 > 表示倍率を下げる」を選ぶことにより変えられる。ステータスバーでも変更できる。

不可視文字の表示については、「Jedit Ω > 書類タイプ > 表示 > 不可視文字の表示」で“基本”と“プレーンテキスト”に対して

- ☒ 全角スペース
- ☒ タブ
- ☒ パラグラフブレーク

としておくことが望ましい。とくに前二者は RIETAN-FP と周辺ソフトでは入力すべきでない文字であり、一目で識別できるようにしておく必要がある。

前述のように、日本語の RIETAN-FP の入力ファイル hoge.ins は EUC-JP エンコーディングで保存しなければならない。しかし「環境設定 > エンコーディング」中の“ファイルを開くとき”を「自動」にすると、自動エンコーディング判定が不完全なため EUC-JP と判定されないことがある。そういう場合は、「ファイル > 開く」を選び [オプション] をクリックしてから、“エンコーディング”

を「日本語 (EUC)」に指定して開けばよい。

その他の環境設定については、Evernote の公開ノート「[Jedit Ω：環境設定](#)」を参照せよ。

#### 2.4.4 マクロとショートカット

RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境用マクロはプルダウンメニュー「マクロ」(図 1) で選べる。「マクロ」(図 1 中の青色部分) はメニューバー上で「ヘルプ」の左側に位置している。ショートカットキーがマクロの右端に表示されている。マクロメニューは階層化しており、比較的使用頻度の低いマクロを収めたサブメニュー ContextMenu、Information、LaTeX、Others (2.4.2)、選択部分、AppleScript 用語説明を含んでいる。

「マクロ > 検疫解除」は支援環境とは無関係だが、テキストファイルを開こうとしたとき“開発元が未確認のため開けません”というアラート(図 2)が出る場合に、問題なく開けるようにしてくれるマクロだということを覚えておいてほしい。Finder 上で目的のファイルを選択した後、実行すれば当該ファイルが開けるようになる。この他、日付(元号)スタンプ、Shell コマンドを実行、数式を計算する、出現数をカウントといったマクロも選択できる。これらは [Jedit Ω 用ライブラリの Web ページ](#) で配付されている。

マクロメニューあるいはそのサブメニューにおけるマクロの順番は、マクロメニューあるいはそのサブメニューで各マクロを `control`+クリックすると現れるダイアログボックス(図 3)において“表示位置優先順位”で指定する。フォルダーごとに 1 から 25 までの数字を入力する。

同じダイアログで“ショートカットキー”を指定し“コンテキストメニューにも表示する”をチェックできる。デフォルトのコンテキストメニューでは、RIETAN、Plot、ORFFE、cif2ins、lst2cif、VESTA がサブフォルダー ContextMenu に置かれた 9 つのマクロ(2.4.2)の上に、crysalc が python の下に表示される。いずれも使用頻度が比較的高いマクロである。もちろん、既成の設定は好きなように変更して差し支えない。

時には、指定した覚えのないショートカットが表示されたり、ショートカットが消えたり、表示位置優先順位が変わったり、“コンテキストメニューにも表示する”のチェックが消える(付く)というトラブルが発生するかもしれない。こういう厄介な症状はマクロメニュー関係の設定が環境設定ファイル JeditOmeg\_Preferences.plist 中にすべて保存される訳ではないことに起因している。そういう不具合に直面したならば、上述の手続きに従い手動で再設定せざるを得ない。

コンテキストメニューは `control` を押しながらテキストエリア内の文字がない任意の場所<sup>8)</sup>をクリックすると、右下に現れる。2 ボタンマウスの場合は右クリックでも良い。コンテキストメニュー



図 1 マクロ・メニュー。Others 以上が統合支援環境用マクロ。

8) 余計なメニュー項目が表示されないよう白地の部分をクリックするのが望ましい。





図2 粉末構造解析講習会用チュートリアルを組版するためのファイル Mac\_exercise.tex をダブルクリックして開こうとした時に現れる警告。



図3 ORFFE マクロのショートカットキーと優先順位の指定。

はマウスをメニューバーまで移動せずに、その場でマクロを選べるという利点をもつ。

#### 2.4.5 Jedit Ω 用マクロが実行できないときの対症療法

macOS 10.14 Mojave がリリースされた後、RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境の基盤となっている Jedit Ω 用マクロ (AppleScript) が正常に動作しないという障害が急増した。セキュリティチェックが一段と厳しくなったのだろう。

macOS 10.15 Catalina ではさらにセキュリティ対策が強化されている。その結果、Jedit Ω から支援環境用マクロを実行しようとすると、ユーザー承認のポップアップ・ウィンドウがしばしば現れるようになった。そういう状況を把握するには、たとえば <https://bit.ly/2XSSRXM> やブログエントリー「[Jedit Ω 用マクロが実行できないときの対症療法](#)」を参照するとよい。Catalina 以降の macOS では 64 ビット・アプリケーションしか実行できないので、古い 32 ビット・アプリケーションを使い続けたい人は Mojave からのバージョンアップをあきらめるしかない。

マクロを実行できるようにするための対症療法について以下に述べる。Jedit Ω をインストールしたら、まずはテキストファイル（たとえば RIETAN-FP 用入力ファイル \*.ins）を一つ開いてみる。以後、「システム環境設定 > セキュリティとプライバシー > プライバシー > オートメーション」で、他のアプリケーションの制御を許可するアプリケーションのリストに Jedit Ω が現れる（図 4、

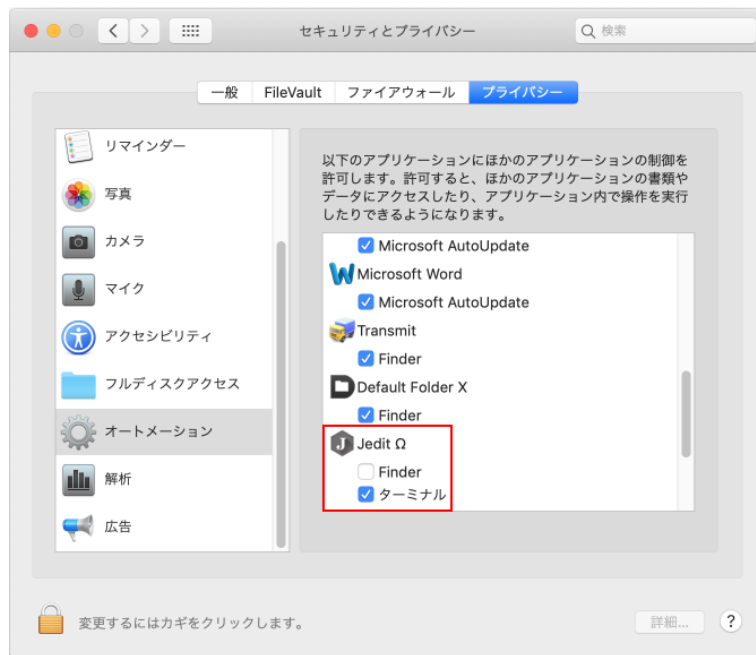


図4 「セキュリティとプライバシー」における Jedit Ω によるターミナルの制御の許可。

赤枠内)。Jedit Ω によるターミナル (Terminal.app) の制御を許可すれば、支援環境用マクロが実行可能になる。

それでもうまくいかないならば、ターミナルで

```
sudo spctl --master-disable
```

と入力してからパスワードを入力するとよい。

macOS におけるセキュリティ・チェックはバージョンアップのたびに厳しくなっている。今後、App Store 外からダウンロードしたアプリケーションの実行は拒絶される可能性が高くなっていくと予想される (<https://bit.ly/34WaV55> 参照)。

#### 2.4.6 マクロ実行前のファイルの保存

マクロ実行時に入力するファイルは事前に保存しておかなければならない。たとえば Jedit Ω で編集済みの \*.ins を保存せずに RIETAN を実行すると、



図5 AppleScript セキュリティエラーのメッセージ

というエラーメッセージが出る。RIETAN.scpt の冒頭部分

```
tell application "Jedit Ω"
```



```

tell front document
    -- Get (absolute path + filename) of the current file
    set FileName to path as text
    if modified then
        save
    end if
end tell

```

では、Jedit Ω により編集・表示中のテキストファイルの名前を取得した後、それが変更済みならば保存しようとする。しかし Jedit Ω は AppleScript (\*.scpt) でなくアプリケーション (\*.app) によりコントロールするという仕様になっているため、セキュリティエラーが発生してしまうのである。とって、すべての \*.scpt をアプリケーション化すると、図 4 と同様の手続きにより \*.app によるターミナルの制御を一々許可せざるを得なくなるので、\*.scpt のままに留めている。

とにかく Jedit Ω で編集したファイルは ⌘S を押して保存した後にマクロを実行する習慣を身につけてほしい。

### 2.4.7 Jedit Ωの自習

秀丸エディタを使う際に役立つ諸機能については、「ヘルプ > Jedit Ω ヘルプ」を選ぶと表示されるマニュアルを読み、なおかつ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 Jedit Ω で開き、Tink の文法に則って記述されていることを説明する。
2. ツールバー上のスマートインデックスのアイコン<sup>9)</sup>をクリックすると、スペース以外の最初の文字が「!」であるしおりを行頭のスペース数 (0, 2, 4) に対応した形で段付け表示したプルダウンメニューが下りる (図 6)。ノート型 PC の使用時に、秀丸エディタのアウトライン解析枠のようにテキスト表示領域を狭めたりしないところがありがたい。前面のファイルがスマートインデックスの処理対象となっている場合は、スマートインデックスのアイコンがツールバー上にも現れる。
3. しおりを一つ選択すると、相当する行がテキストエリアの中心付近で選択表示される。
4. ウィンドウ左下の [V] (図 6 左下の赤枠で囲った部分) をクリックして“行番号”を選び、行番号を表示する。“番号表示しない”を選ぶと、逆に番号が消える<sup>10)</sup>。
5. 「表示 > ビューの分割 > 横に分割」を選ぶと、上下に分割される (境界線が横)。「表示 > ビューの分割 > 縦に分割」を選ぶと、左右に分割される (境界線が縦)。
6. 「マクロ > Information > Manual」を選ぶか、⌘M を押してプレビューで RIETAN-FP\_manual.pdf を開く<sup>11)</sup>。「表示 > 目次」を選び、目次を表示する。
7. いくつかの章にジャンプしてみる。末尾に RIETAN-FP に追加した新機能に関する日本語情報が付属していることを指摘する。
8. 表示範囲を素早く前後に移動し、表示を変更するキーバインドを教える。

9) El Capitan のようなツールバーが表示できない OS では、メニューバー上のアイコンでもよい。

10) ショートカット、すなわち ^N (行番号を表示する) と ^K (行番号を表示しない) も使える。

11) 万一、Preview.app がどこにあるかを質問されたら、/Applications/Preveiw.app (プレビュー) を指定する。

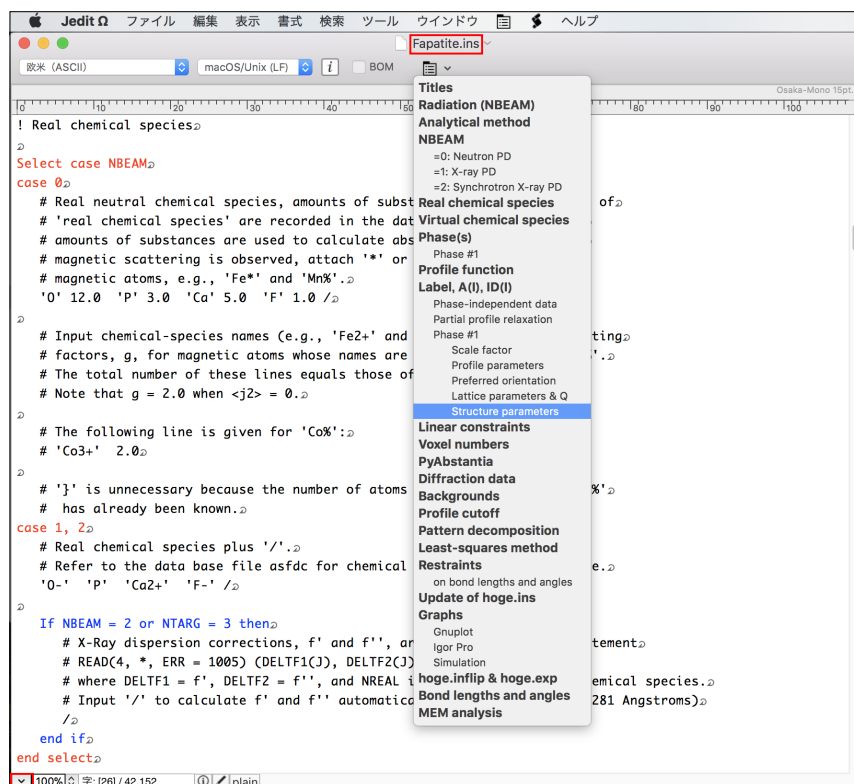


図6 スマートインデックスメニューで段付けされたブックマークを表示し、“Structure parameters”を選ぶ。hoge.insを対象とする構文カラーリング指定により Select・If ブロックの構文がそれぞれ赤と青の文字で表示されている。

- キャレットをファイルの先頭へ: ↑
- キャレットをファイルの最後へ: ↓
- キャレットを前のページへ: ↓
- キャレットを後ろのページへ: ↓
- インспекターバーの表示・非表示 (トグル): I
- 行番号の表示: ^N
- 行番号の非表示: ^K


9. を押すとファイルメニューに「すべてを閉じる」、「すべてを保存」、「別名で保存..」が現れることを教える。
10. を押しながら Fapatite.ins のウィンドウ最上部のタイトル (図 6 上部の赤枠で囲ったファイル名) をクリックすると編集ファイルを内包する階層をメニュー化したフォルダーメニューがポップアップする。フォルダーメニューからフォルダー名を選択すると、そのフォルダーが Finder で表示される。単にファイル名をクリックすれば、改名できる。ファイル名の左のプロキシアイコンを Finder 上にドラッグ&ドロップすれば、そのファイルを Finder にコピー (option を押す) あるいは移動できる。フォルダーメニューとプロキシアイコンは macOS 用アプリケーションに共通する便利なアプリケーション-Finder 間連携機能である。秀丸エディタのファイルマネージャ枠のようにテキスト表示領域を狭めたりしないところがありがたい。
11. を押して RIETAN-FP\_manual.pdf を閉じる。

hoge.ins, hoge.lst, hoge.cif, hoge.xplor などの VESTA が読み込めるフォーマットのファイルを Jedit Ω で表示している状態で支援環境から **VESTA** を実行すると、それらのテキストファイルが VESTA でオープンされ、結晶構造模型や電子密度が表示される。この開き方を覚えておくと、支援環境の利便性が一段と向上する。

\*.command などのテキストファイルがインターネットからダウンロードされたスクリプトアプリケーションだと指摘される場合、Finder で選択した後、「マクロ > 検疫解除」を選んで一挙に検疫解除するとよい。

#### 2.4.8 コンテキストメニューの利用


マクロメニューやキーボードショートカットだけでなく、コンテキストメニューもプログラムの起動に使える。スクリプトウィンドウで [コンテキスト] タブを選べば、メニュー項目名の変更、他のメニュー項目の削除、スクリプトの並べ換え、区切り線の挿入も可能である。新たなマクロを登録するには、AppleScript (\*.scpt) を所望の位置にドラッグ・アンド・ドロップし、「コピーかエイリアスのどちらにしますか？」の問いに対し「エイリアス」をクリックする。

Jedit Ω のウィンドウ内で  を押しながらマウスをクリックすると、コンテキストメニューが現れる (図 7)。Windows 用 2 ボタンマウスの場合は右クリックだけで済む。トラックパッドを具備している MacBook Pro/Air の場合は、人差し指と中指でトラックパッドを同時にクリックすればよい。実行したいプログラムを選択してクリックすれば、プログラムが動き出す。

#### 2.4.9 タブ操作

二つ以上のファイルを開いている場合、それぞれのファイルに対応するタブをクリックすればカレントウィンドウを切り換えられる。タブをドラッグ&ドロップすると、それに対応するファイルが別ウィンドウに分離される。ウィンドウのプルダウンメニューで「すべてのウィンドウを結合」を選ぶと、全ウィンドウが合体する。合体後のタブ位置はどのウィンドウが選択されているかに依存する。

### 2.5 Space\_groups.xlsx の関連づけ

3 節で述べるメニュー項目 **Space groups** を有効にするには、RIETAN\_VENUS/documents/Space\_groups.xlsx を選択してから  I を押して、[このアプリケーションで開く:] で Microsoft Excel を指定し、関連づけておかねばならない。

## 3 本支援環境に含まれるマクロ

本支援環境の下では、マクロのプルダウンメニュー (図 1) から以下に列挙するアップルスクリプト (太字は項目名) を選択できる。ほとんどのマクロは /Applications/RIETAN\_VENUS/commands\_common フォルダ内のシェルスクリプト \*.command を内部で実行するようになっている。\*.command 実行中はターミナルのウィンドウが現れる。

本節では、マクロのタイトルは **RIETAN** や **ORFFE** というようにボール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** というように赤いボールド書体で表す。

RIETAN-FP の入力ファイルの名前が hoge.ins であるとしよう。xdc や **Manual** 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 Jedit Ω の前

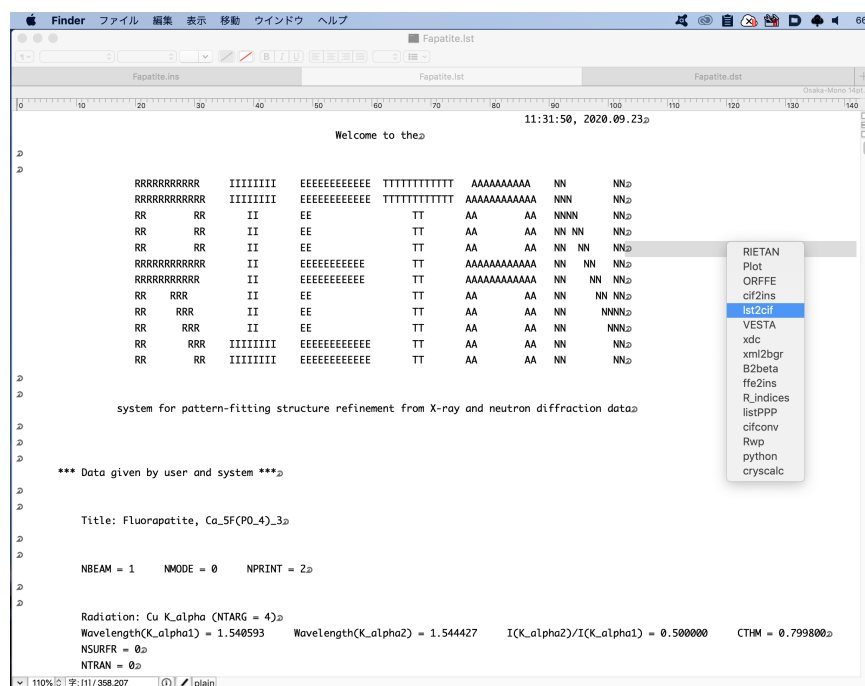


図7 フッ素アパタイトのリートベルト解析と幾何学的パラメーターの計算を終えた後、コンテキストメニューで **lst2cif** を実行しようとしているところ

面に表示している状態で実行しなければならない。各マクロはカレントファイル名から hoge という文字列を取得してシェルスクリプト \*.command に渡すためである。

### 3.1 Macro メニュー

2.4.2 において述べたように、**RIETAN** には ^R、**Plot** には ^P、**ORFFE** には ^O、**cif2ins** には ^C、**combins** には ^I、**MSCS** には ^M、**lst2cif** には ^L、**Superflip** には ^S、**EDMA** には ^E、**VESTA** には ^V が割り当てられている。比較的使用頻度の高い **RIETAN**、**Plot**、**ORFFE**、**cif2ins**、**lst2cif**、**VESTA** はコンテキストメニューにもデフォルト表示される。

1. **RIETAN**: IETAN-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>12)</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 hoge.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 [7] 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. **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
5. **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

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

6. **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 hoge.pdf に出力し、ディスプレイに表示
7. **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>13)</sup> (CIF), hoge.cif に変換
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・フリッピング) プログラム Superflip<sup>14)</sup> [8] 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<sup>15)</sup> (Electron Density Map Analysis) [9] により hoge-EDMA.cif に変換した後、VESTA で結晶模型を表示
10. **VESTA**: VESTA<sup>16)</sup> によるカレントファイル<sup>17)</sup> の内容の 3 次元可視化

---

**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 [10] 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 をカレントフォルダーに生成する (4.2 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 中のボックスデータを 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

---

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

14) <http://superflip.fzu.cz>

15) <http://superflip.fzu.cz>

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

17) Jedit  $\Omega$  で現在、選択・前面表示されているファイルをカレントファイルと呼ぶ。

る。その場合、RIETAN-FP は BVEL.inp を、PyAbstantia は BVEL.pgrid を出力する。詳しくは Mac\_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\_Mac.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 8)。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。

Gnuplot によるグラフ作成機能を利用するには、PDF ファイルを表示するためのブラウザが必要不可欠となる。PDF の本家である Adobe 製のブラウザ Adobe Acrobat Reader DC には使い勝

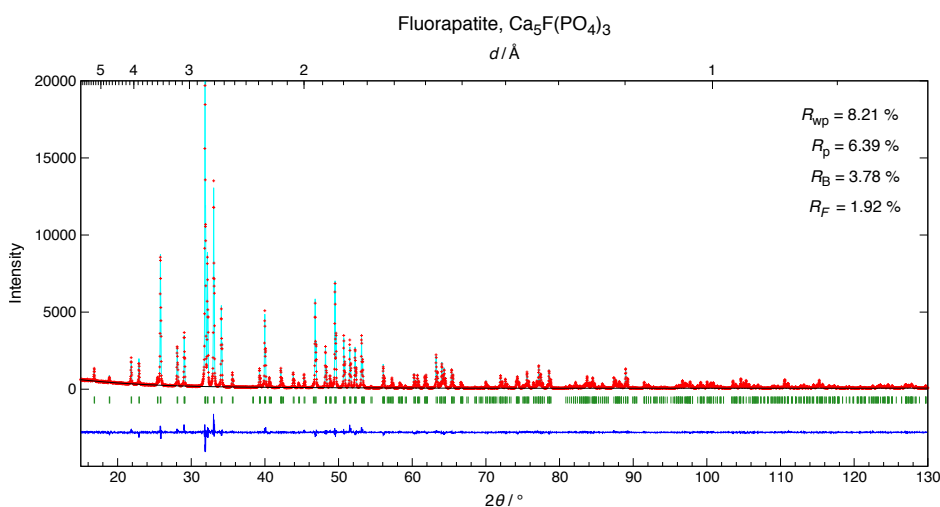


図 8 Gnuplot で描いたフッ素アパタイトの X 線リートベルト解析パターン



手を悪化する制限がある。PDF ファイルをロックするため、表示中のファイルを閉じないと新たなファイルを表示してくれないのである。これでは面倒だし、やや重いのも気にかかる。したがって、PDF ファイルをロックしない軽量アプリケーション Preview.app（プレビュー）で PDF ファイルを開くようにしている。Preview.app は macOS に標準で含まれている。

**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。

**cif2ins** (No. 4) 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<sup>18)</sup> 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 Mac\_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、Jedit  $\Omega$  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、ターミナルの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。順調にいけば、hoge.ins が同じフォルダーに生成した後、Jedit  $\Omega$  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. 5) 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、Mac\_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」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. 6) 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 [11] 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

---

18) <http://www.iucr.org/resources/cif/documentation/cifguide>

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 [11]。

**lst2cif** (No. 7) 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。

**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.inflip 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。

**VESTA** (No. 10) を起動した場合、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, hogevesta ならば、それぞれのファイルを入力・可視化する。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。

## 3.2 ContextMenu サブメニューのマクロ

次のマクロはすべてコンテキストメニューにデフォルトで表示される。2.4.2 で述べたように、**xdc** には  $\wedge X$ 、**B2beta** には  $\wedge B$ 、**ffe2ins** には  $\wedge F$ 、**cifconv** には  $\wedge H$  が割り当てられている。

- 
1. **xdc**: 特定元素の X 線分散補正項 (X-ray dispersion correction) の実部  $f'$  と虚部  $f''$ 、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
  2. **xml2bgr**: Fox [12] 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
  3. **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

4. **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
5. **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 フォルダーに含まれるすべての ddHHMMss\_hoge.lst から信頼度指標の部分抽出し、カレントフォルダーの hoge.rel というファイルに時系列で出力し、Jedit  $\Omega$  で表示する。
6. **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
7. **cifconv**: 現在表示している CIF を対象として cifconv.command [4] を実行
8. **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
9. **python**: Jedit  $\Omega$  が表示している python スクリプトを実行

**xdc** (No. 1) 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 中に任意の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 9)。

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

**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>19)</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 gsed と gnuplot の連携プレーにより 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 はプレビューで表示される。

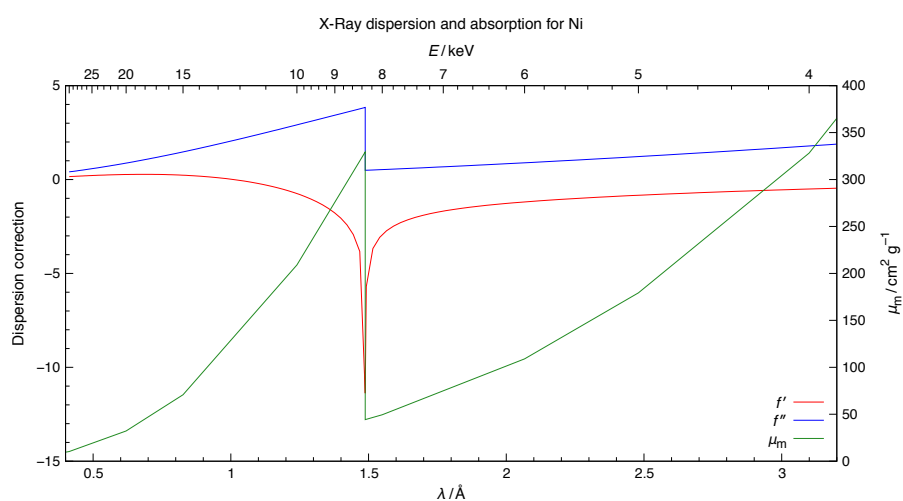


図 9 Ni における  $f'$ ,  $f''$ ,  $\mu_m$  と波長 (エネルギー) との関係

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

X 線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。

**xml2bgr** (No. 2) の詳細については Mac\_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。

**B2beta** (No. 3) 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 '#' が存在する場合は、上に示したように、それを '}' 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。前述のように、hoge.ins はバックアップファイル hoge.ins.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。

**ffe2ins** (No. 4) 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。

**R\_indices** (No. 5) の実行例については Mac\_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。

**listPPP** (No. 6) 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 (Primary Profile Parameter: PPP)

に分類できる。PPP はその  $\theta$  依存性の式により個々の反射について SPP から計算する。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。Jedit  $\Omega$  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。

**cifconv** (No. 7) は CIF を種々のフォーマットのファイルに変換するシェルスクリプトである。詳細については cifconv\_man\_Mac.pdf を参照せよ。

**Rwp** (No. 8) 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 10)。Jedit  $\Omega$  が hoge.\* あるいは Rwp.gpd を表示している状態で実行する。

**python** (No. 9) 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

```
#!/Library/Frameworks/Python.framework/Versions/3.9/bin/python3
```

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、Jedit  $\Omega$  から実行するのにも使える。



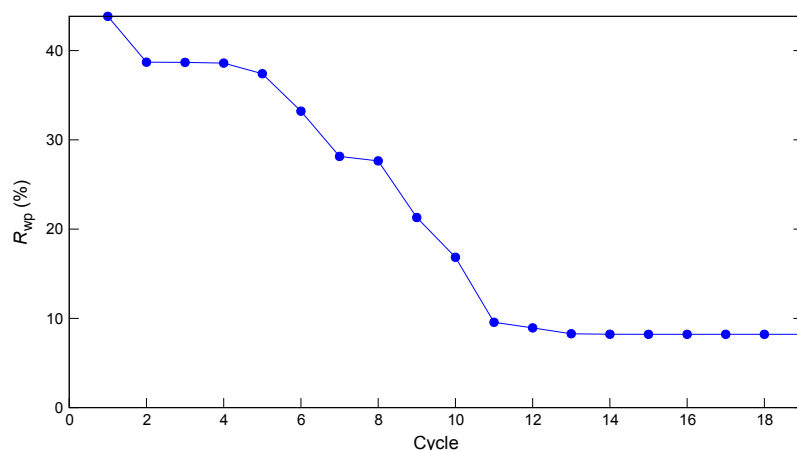


図 10 フッ素アパタイトのリートベルト解析における  $R_{wp}$  の変化。

### 3.3 Information サブメニューのマクロ

使用頻度が比較的高い **cryscalc** はコンテキストメニューにデフォルト表示される。[2.4.2](#) で述べたように、**Manual** には  $\mathbb{M}$ 、**cryscalc** には  $\mathbb{C}$  が割り当てられている。

1. **Space groups**: 空間群の Hermann–Mauguin 記号を記録した Open XML 形式のファイル Space\_groups.xlsx を Microsoft Excel でオープン
2. **Manual**: プレビューによる RIETAN-FP のマニュアル RIETAN-FP\_manual.pdf の閲覧
3. **Bond valence parameters**: Bond valence parameter を記録した CIF 形式ファイル<sup>20)</sup> (bvparm2020.cif) を表示
4. **Effective ionic radii**: Shannon [13] 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
5. **cryscalc**: hoge.cif という CIF を表示している状態で cryscalc<sup>21)</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

**Space groups** (No. 1), **Manual** (No. 2), **Bond valence parameters** (No. 3) で読み込まれるファイルは RIETAN\_VENUS/documents フォルダに置かれている。

**Effective ionic radii** (No. 4) では h 列に有効イオン半径が記録されている。

**cryscalc** (No. 5) 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)、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、Mac\_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。

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

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



### 3.4 LaTeX サブメニューのマクロ

**cif2pdf** には  $\text{\textcircled{D}}$ 、**E2J** には  $\text{\textcircled{J}}$ 、**Typeset** には  $\text{\textcircled{T}}$ 、**BibTeX** には  $\text{\textcircled{B}}$  が割り当てられている (2.4.2)。本サブメニューのマクロは TeX Live をインストール済みでないと使えない。

---

1. **cif2pdf**: **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 LaTeX 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]
  2. **E2J**: **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 LaTeX 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]
  3. **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, luajitlatex, platex のどれかで組版し、PDF ファイルを作成する。
  4. **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
  5. **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
- 

**cif2pdf** (No. 1) 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. 2) を引き続き実行すると、hoge-report.tex を日本語 LaTeX 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。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 の余白をプレビューで切り取り、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. 3) は \*.tex の組版, **BibTeX** (No. 4) は文献データベースファイル \*.bib のコンパイル, **MakeIndex** (No. 5) 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,<sup>22)</sup> TeXShop,<sup>23)</sup> TeXstudio<sup>24)</sup> 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、Jedit Ω 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。

T<sub>E</sub>X 文書専用の統合組版環境がいくつも公開されているにもかかわらず本支援環境に **Typeset**, **BibTeX**, **MakeIndex** を実装した理由については、ブログエントリー「Jedit Ω 用 L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 組版支援環境」<sup>25)</sup> をお読みいただきたい。

LaTeX サブメニュー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

22) <http://tug.org/pipermail/texworks/>

23) <http://pages.uoregon.edu/koch/texshop/>

24) <http://www.texstudio.org/>

25) <http://blog.fujioizumi.verse.jp/?eid=307>

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。

### 3.5 Others サブメニューのマクロ

2.4.2 で述べたように、Dysnomia には <sup>^</sup>D、supercell には <sup>^</sup>G、C-Tools には <sup>^</sup>T、**ファイル名を登録** には <sup>^</sup>@が割り当てられている。

- 
1. **Dysnomia**: Dysnomia<sup>26)</sup> による最大エントロピー法 (MEM) 解析
  2. **MAD**EL: フーリエ法 [15, 16] 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 MAD<sub>EL</sub> を実行
  3. **supercell**: 冒頭に supercell のサイズが注釈として書き込まれた CIF を入力し、supercell<sup>27)</sup> により静電エネルギー的に安定な誘導構造の CIF を 20 個出力させる [4, 5]
  4. **C-Tools**: 密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションの入力ファイル作成用ユーティリティ **C-Tools** を活用するためのマクロ
  5. **ファイル名を登録**: 現在 Jedit Ω が表示しているファイル (カレントファイル) の絶対パス付きファイル名を ~/Library/Application Support/JeditOmega/filename.txt に出力する。
- 

**Dysnomia** (No. 1) 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。

**MAD**EL (No. 2) 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 **MAD**EL 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頂きたい。

**supercell** (No. 3) と **C-Tools** (No. 4) は RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境とは無関係なマクロである。詳しくは「CIF を出発点とする第一原理計算支援用ユーティリティ」 [4] と cifconv のマニュアル cifconv\_man\_Mac.pdf を参照されたい。

**ファイル名を登録** (No. 5) は Dock 上のシェルスクリプトのアイコン (RIETAN.command, Plot.command, ORFFE.command, cif2ins.command, MSCS.command, lst2cif.command) をク

---

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

27) <https://orex.github.io/supercell/>

リックして実行するためにカレントファイル名を filename.txt に記録するのに使う。それらのシェルスクリプトにアイコンを貼り付け、Dock に登録する手続きについては別途公表する。

## 4 繰り返し処理用シェルスクリプト

### 4.1 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>28)</sup>、
4. 精密化パラメーターの非線形性が強いため、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、
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、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、Mac\_exercise.pdf 中の「sda.command による逐次リートベルト解析」を参照せよ。

---

28) 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。

## 4.2 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十分と言えない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) [17, 18] 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という過言でない。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\_Mac.command と Mac\_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。

## 5 操作方法

### 5.1 キーワードのカラー表示

ひな形ファイル Fapatite.ins と Cu3Fe4P6.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 支援環境の操作

### 6.1 マクロの実行

マクロ (Jedit Ω 用アップルスクリプト \*.scpt) の処理対象となるファイル (たとえば hoge.ins や hoge.xyz) を Jedit Ω で変更したならば、当該ファイルを必ず保存しなければならない (2.4.6 参照)。次に [マクロ] のプルダウンメニューから実行すべきスクリプトを選ぶか、キーボードショートカットを押すか、コンテキストメニューからマクロを選ぶことにより、アップルスクリプトを実行する。RIETAN, Plot, ORFFE などの頻用マクロはキーボードショートカットで実行すれば、キーボードから手を離さずに済み能率的である。

Manual 以外のマクロは、hoge.ins と同一フォルダーに存在し、しかも hoge が処理対象のファイルと同一のファイルのカレントウィンドウ (現在、カレントファイルのウィンドウ) から起動しなければならない。各プログラムが処理するファイルの拡張子は固定されているので、カレントファイルの拡張子抜きファイル名さえ計算の対象となるファイルのそれと一致していればよい。たとえば

Fapatite.dst がカレントファイルとなっているとき **RIETAN** を実行すれば、RIETAN.scpt、さらには/Applications/RIETAN\_VENUS/rietan が起動され、Fapatite.ins と Fapatite.int が入力される。**Manual** 以外のマクロ実行時には、各アップルスクリプト中でカレントファイルの絶対パス+ファイル名が取得され、そこで呼び出される bash スクリプト \*.command 内で拡張子抜きファイル名ひいては処理の対象となるファイルの名前が決められた後、/Applications/RIETAN\_VENUS/フォルダー内の実行形式プログラムが実行される。

## 6.2 プログラム実行後の挙動

計算時間が比較的長い **RIETAN** や **Superflip** などではターミナル・ウィンドウに標準出力がリアルタイムで表示される。ターミナル・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るたりする場合を除き、計算終了後にターミナル・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 Jedit Ω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。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。

## 7 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] 泉 富士夫, まてりあ, **56**, 393 (2017).
- [2] 泉 富士夫, まてりあ, **56**, 453 (2017).
- [3] 泉 富士夫, まてりあ, **56**, 503 (2017).
- [4] 泉 富士夫, 宮崎晃平, セラミックス, **54**, 473 (2019).
- [5] K. Okhotnikov, T. Charpentier, and S. Cadars, *J. Cheminform.*, **8**, 17 (2016).
- [6] 西村めぐみ, 新居雅行, “macOS×コマンド入門”, 技術評論社 (2020).
- [7] 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).
- [8] L. Palatinus and G. Chapuis *J. Appl. Crystallogr.*, **40**, 786 (2007).
- [9] L. Palatinus, S. J. Prathapa, and S. van Smaalen, *J. Appl. Crystallogr.*, **45**, 575 (2012).
- [10] 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.
- [11] F. Izumi and T. Ikeda, *Annu. Rep., Adv. Ceram. Res. Center, Nagoya Inst. Technol.*, **3**, 33 (2014).
- [12] V. Favre-Nicolin and R. Cerny, *J. Appl. Crystallogr.*, **35**, 734 (2002).
- [13] R. D. Shannon, *Acta Crystallogr., Sect. A*, **32**, 751 (1976).
- [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] E. F. Bertaut, *Phys. Rev.*, **91**, 415 (1953).
- [16] J. Kanamori, T. Moriya, K. Motizuki, and T. Nagamiya, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **10**, 93 (1955).
- [17] F. Izumi and R. A. Dilanian, “Recent Research Developments in Physics,” Vol. 3, Part II, Transworld Research Network, Trivandrum (2002), pp. 699–726.
- [18] F. Izumi, *Solid State Ionics*, **172**, 1 (2004).