

# Windows 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 16 日

## 1 配布ファイル

### 1.1 配付ファイルの内容

Microsoft Windows（以後、Windows と呼ぶ）用配布アーカイブファイル Windows\_versions.zip を C ドライブ中のホームフォルダー、すなわち C:\Users\¥(ユーザー名) に置いてから解凍すると、Windows\_versions フォルダーに展開される。同フォルダーは外部アプリケーション・インストール用の Dysnomia, gnuplot, PyAbstantia, SumatraPDF フォルダー、WinPLOTR を追加インストールする場合に使うファイル二つを収めた components フォルダーに加え、

- a) RIETAN\_VENUS フォルダー
- b) RIETAN\_VENUS\_examples フォルダー
- c) DengakuDLL.dll
- d) DengakuDLL.txt
- e) DengakuDLL\_x64\_注意点.txt
- f) Install\_RIETAN\_VENUS.bat
- g) Uninstall\_RIETAN\_VENUS.bat
- h) Message1.vbs
- i) Message2.vbs
- j) reflection.ipf

を含む Windows\_versions フォルダーを含んでいる。d) は田楽 DLL（6 節参照）の説明書、f)～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、j) 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 参照）。

2.2 では、ファイル・フォルダー a)～c) と Dysnomia, gnuplot, PyAbstantia, SumatraPDF を C

---

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

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

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述べる。

## 1.2 互換性

本ソフトウェアは 64 ビット版 Windows にだけ対応している。Windows 7（サポート停止）以降の OS なら確実に動くはずである。

## 1.3 フォルダーとファイルの名前に関する制約

Windows 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<sup>2)</sup>、ハイフン‘-’、アンダースコア‘\_’、スペースだけからなっていなければならない。他の文字、たとえば小かっこ‘(’と‘)’が含まれている場合、正常な動作を保証しない。

Windows 用 RIETAN-FP・VENUS システムの実行に使うファイルの名前は英数字、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。フォルダー名と同様にスペースを入れてはならないことに注意せよ。拡張子は半角の英数字だけを含むべきである。

## 2 使用前の下準備

### 2.1 秀丸エディタ

秀丸エディタはサイトー企画の Web サイト<sup>3)</sup>で購入できる。消費税込みで 4,400 円だが、購入後のメジャーアップデートごとにアップグレード料金を請求するほどには利益を追求していない。秀丸エディタは機能制限なしに試用できる。試用期間を過ぎると送金を促すダイアログボックスが現れるようになるが、それを厭わなければ無期限で使える。ありがたいことに学校内に設置されている PC 上で学生が使う場合、生活に困窮している学生、フリーソフトウェアの作者には、フリー制度<sup>4)</sup>が提供されている。

同梱の RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境（詳細については Readme\_macros.pdf を参照のこと）を利用する場合は、64 ビット版 Windows 7/8/8.1/10 を使用し、64 ビット版秀丸エディタをインストールしなければならない。そういう制限を課しているのは、単に 32 ビットの Windows と秀丸エディタで動作チェックしていないためである。それに 64 ビット版 Windows では 32 ビット版秀丸エディタは通常 C:\Program Files\Hidemaru (x86) フォルダーにインストールされるため、後述の田楽 DLL がインストールされない他、原因不明のトラブルを引き起こす恐れがある。64 ビット版 Windows 上では 32 ビット・アプリケーションも正常に動くことを強調しておく。

秀丸エディタの最新版は C:\Program Files\Hidemaru フォルダーにインストールする必要がある。旧バージョンでは、一部の秀丸マクロが正常に動作しない可能性がある。小数点より後の数字が増えたバージョンアップは重ね書きで大丈夫である。

一部の自作秀丸マクロでは、杉浦方紀氏作の田楽 DLL<sup>5)</sup>中の関数を呼び出している。田楽 DLL はファイルとフォルダーの操作、ダイアログとポップアップメニューの表示、文字列操作などの機能を

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

4) <http://hide.maruo.co.jp/support/hidemarufree.html>

5) <http://www.ceres.dti.ne.jp/~sugiura/>

拡張し、秀丸エディタのマクロを補完するための秀逸な Windows DLL (Dynamic Link Library) である。ただし本支援環境では、64 ビット版 DengakuDLL.dll<sup>6)</sup> を使っている。Readme\_Win.pdf で述べたように、RIETAN・VENUS システムのインストール時に DengakuDLL.dll は C:\Program Files\Hidemaru フォルダ内にコピーされる。

なお、田楽 DLL のマニュアル (\*.html) は C:\Program Files\RIETAN\_VENUS\Macros\DengakuDLL\_manual フォルダに収納されており、同フォルダ中の index.html をブラウザで開くことにより全関数の使用法を読める。必要に応じて参照せよ。

## 2.2 RIETAN-FP・VENUS システムのインストール

旧バージョンの RIETAN-FP・VENUS システムをインストール済みの場合、7 節に記載されている手続きに従ってアンインストールすることが望ましい。

### 2.2.1 インストール手順

まず管理者権限をもつユーザーとしてログインする。Microsoft アカウントでログインしてはならない。インストーラー Install\_RIETAN\_VENUS.bat を右クリックして「管理者として実行」を選び、ユーザーアカウント制御の下で全プログラムと実行例などを C ドライブにインストールする。“このアプリがデバイスに変更を加えることを許可しますか?” という問いには [はい] をクリックする。

PC の設定によっては、アンインストール・インストール時に「Windows によって PC が保護されました」という Windows Defender SmartScreen の警告ダイアログ (図 1) が現れる可能性がある。アプリケーションを実行しようとする、アプリケーションの安全性を確認して PC を保護する仕組みである。その際には図 1 中で赤枠で囲った「詳細情報」をクリックしてから、[実行] をクリックすればよい。

RIETAN\_VENUS\Commands フォルダ中の任意の \*.command を右クリックしてプロパティを選んだとき、「プログラム」が BusyBox multi-call binary (= bash.exe<sup>7)</sup>) になっていない場合は、[変更] をクリックしてから RIETAN\_VENUS\Commands\bash.exe に関連付けた後、[適用] をクリックする。秀丸マクロで生成した \*.command が BusyBox multi-call binary に関連付けられないこともまれにある。そのような場合も同じ措置をとる。

### 2.2.2 Igor Pro 用マクロ reflection

C:\Program Files フォルダ中に 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、そのショートカットを押す。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：

---

6) [http://htom.in.coocan.jp/macro/macro\\_dll.html](http://htom.in.coocan.jp/macro/macro_dll.html)

7) busybox64.exe を bash.exe に改名した。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。

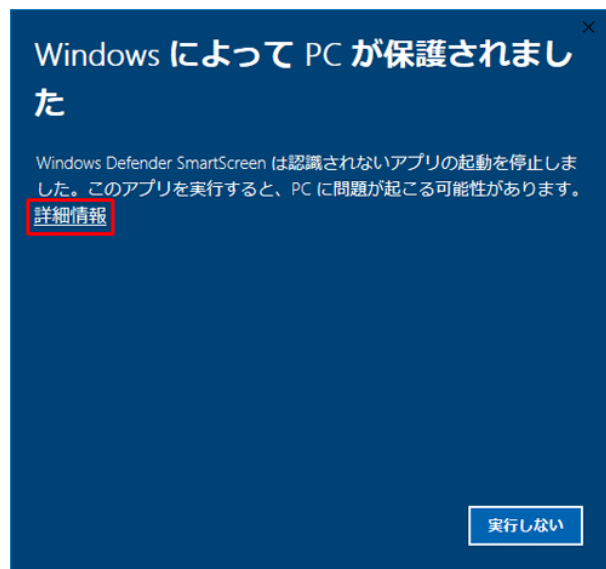


図1 ダウンロードしたファイルの実行時に表示されることがある SmartScreen の警告ダイアログ。

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

## 2.3 フォルダー・ファイルの行き先

Windows\_version フォルダーに含まれるフォルダーとファイルの行き先（フォルダー）を以下にまとめておく。

- RIETAN\_VENUS¥ → C:¥Program Files¥
- RIETAN\_VENUS\_examples¥ → C:¥Users¥(ユーザー名)¥
- DengakuDLL.dll → C:¥Program Files¥Hidemaru¥

同じファイルが存在する場合は、コピー元の日付がコピー先の日付より新しいファイルだけコピーする（/D /S /Q /K /Y オプション付きの XCOPY コマンドでコピー）。行き先のフォルダーには、ユーザーが追加したファイル・フォルダーはそのまま残る。それらのファイル・フォルダーが不要なら、インストール前にアンインストール（7 節参照）しておく。

RIETAN\_VENUS フォルダーと DengakuDLL.dll は絶対に他の場所に移してはならないが、解析データを収納した RIETAN\_VENUS\_examples フォルダーはインストール終了後にホームフォルダー、すなわち C:¥Users¥(ユーザー名) より下の階層ならどこに移動しても構わない。ユーザー自身の解析用フォルダー（hoge.ins や hoge.int などを含むフォルダー）も同様である。

このようにして所定の場所にコピーされたファイル・フォルダーについては、4～6 節で順次説明していく。

## 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<sup>8)</sup> 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 フォルダに収納した。

### 2.4.2 Gnuplot

Windows\_versions.zip にはグラフ作成プログラム gnuplot 5.4.2<sup>9)</sup> が同梱されており、C:\Program Files\gnuplot フォルダにインストールされる。(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ミクロ歪みの決定、(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できる。

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・BVEL 法用スクリプト PyAbstantia 0.7c<sup>10)</sup> は C:\Program Files\PyAbstantia 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には、python に加え数値計算用モジュール numpy をインストールする必要がある。PyAbstantia は python 2.7 と 3.X の両方と互換性があるが、python 2 系統はもはや公式にサポートされていないので、python 3.X の方をインストールすることを推奨する。その手続きについては Evernote の公開ノート「[Windows 用の python と numpy のインストー](#)

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

9) <http://gnuplot.sourceforge.net> (GPL v2 に基づき無償配付されており、再配布可能)

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

ル」に詳述した。python 3.X の場合、X が異なるバージョンが広く使われている。自分がインストールした python.exe が置かれているフォルダーを調べ、Commands¥RIETAN.command 中の

```
~/AppData/Local/Programs/Python/Python39/python .....
```

という部分に書かれている python.exe の絶対パスを書き換える必要がある。‘~’ は自分のホームフォルダーを意味し、‘Python39’ は python 3.9 一式が入っているフォルダーの名前である。上述のように、BusyBox の bash スクリプトではフォルダー名の後ろに ‘¥’ でなく ‘/’ を置かねばならない。

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、Win\_exercise.pdf 中の「可動イオンの拡散経路の可視化」を参照せよ。

#### 2.4.4 Sumatra PDF

Windows 版 RIETAN-FP に追加した gnuplot によるグラフ作成機能を利用し、マニュアルを閲覧するには、PDF ファイルを表示するためのブラウザーが必要不可欠である。PDF の本家 Adobe 製のブラウザー Adobe Reader には使い勝手を悪化させる制限がある。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同名のファイルを表示してくれないのである。それでは面倒だし、やや重いのも気にかかる。Windows 用には軽快に動く無料ソフト Sumatra PDF<sup>11)</sup> を推奨する。コンテンツの編集こそできないものの、ブックマーク（しおり）は見られる。

64 ビット版 SumatraPDF 3.3.3（ポータブル・バージョン）は C:¥Program Files¥SumatraPDF フォルダーにインストールされる。Sumatra PDF で PDF ファイルを閲覧中に同名の PDF ファイルを開く場合、複数の Sumatra PDF が立ち上がるのではなく、単一の Sumatra PDF が表示を切り換えるよう設定する方がタブが増えずに済むと同時にメモリー効率も良くなる。そのためには、Sumatra PDF の設定メニューで [詳細設定] を選び、エディターで開かれた設定ファイル SumatraPDF-setting.txt 中の 5 行目が

```
ReuseInstance = false
```

となっていたら、

```
ReuseInstance = true
```

と書き換え、設定ファイルを保存すればよい。

さらに、拡張子 pdf をアプリケーション Sumatra PDF に関連付ける。任意の PDF ファイルをマウスで右クリックし、最下部の [プロパティ] を選ぶ。そして、プロパティ・ダイアログの [全般] で [変更] ボタンをクリックして、SumatraPDF.exe を指定する。これだけで、Sumatra PDF が PDF ファイルを閲覧するための標準アプリケーションに指定され、RIETAN-FP・VENUS 支援環境でパターンフィッティング・シミュレーション終了後に [Plot] ボタンをクリックすれば、Sumatra PDF がグラフを自動表示するようになる。以後、拡大・縮小と表示領域の移動は自由自在に行える。

### 3 追加インストールの手続き

Windows\_versions.zip を解凍してから 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 (WinPLOT, Fox, EXPO2014, Superflip, EDMA,

---

11) <https://www.sumatrapdfreader.org/download-free-pdf-viewer.html>（独自のライセンスに基づき無償配布されており、再配布が許されている）



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 WinPLOTTR

WinPLOTTR は粉末回折用グラフィック・ユーティリティである。winplotr\_package.zip と OpenMP 互換ダイナミックリンク・ライブラリー libiomp5md.dll を <https://cdifx.univ-rennes1.fr/winplotr/winplotr.htm> からダウンロードする。winplotr\_package.zip を解凍してから C:\Program Files\winplotr\_package フォルダとして保存する。さらに同フォルダ中の初期設定ファイル winplotr.set を RIETAN-FP や秀丸エディタなどの連携用に作成された Windows\_versions\components\winplotr.set と置き換え、libiomp5md.dll を C:\Program Files\winplotr\_package フォルダにコピーする。

RIETAN-FP・VENUS システム用インストーラー Install\_RIETAN\_VENUS.bat を実行すると、ユーザー環境変数 WINPLOTTR が自動的に C:\Program Files\winplotr\_package に設定される。

WinPLOTTR によるピークサーチ、指数付け、バックグラウンドの見積もりについては、Win\_exercise.pdf 中の「WinPLOTTR によるピークサーチと指数付け」と「WinPLOTTR によるバックグラウンドの見積もり」に詳述した。リートベルト解析や Le Bail 解析を順調に収束させるには格子定数の初期値が真値に近いことが望ましいが、WinPLOTTR によるピークサーチと指数づけにより得られる格子定数はその役目を十分果たしうる。

DICVOL14 [3] のアーカイブファイル<sup>12)</sup>をダウンロード・解凍し、得られた DICVOL14.exe を C:\Program Files\winplotr\_package フォルダ中に移せば、WinPLOTTR で DICVOL06 用入力ファイル hoge.dic を出力した後、RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境上で DICVOL14 マクロにより指数づけできるようになる。

### 3.2 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 Fox\*.zip をダウンロードしてから解凍し、得られた Fox-2017-06-28 フォルダを Fox に改名し、さらに同フォルダ中の実行プログラム Fox-2017-06-28.exe を Fox.exe と改名してから Fox フォルダを C:\Program Files フォルダ中に移す。

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、Win\_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

---

12) <https://bit.ly/2H3UD2a>

群の探査」に詳述した。

### 3.3 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、64 ビット Windows 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。EXPO2014 は C:\Program Files\Expo2014 フォルダーにインストールする。

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

### 3.4 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 (3.5 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。いずれも 32 ビット・アプリケーションだが、64 ビット Windows 上でも実行できる。実行プログラム superflip.exe を <http://superflip.fzu.cz> からダウンロードし、C:\Program Files\superflip フォルダー内に置く。

Superflip による未知構造解析については、Win\_exercise.pdf 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)」に詳述した。

### 3.5 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、得られた結晶データを CIF として出力するためのプログラムである。実行プログラム EDMA.exe を <http://superflip.fzu.cz> からダウンロードし、C:\Program Files\EDMA フォルダー内に置く。

### 3.6 CRYSCALC

CRYSCALC は CrysFML<sup>13)</sup> のソースコードの一部からビルドされた結晶学的計算コマンドである。CIF 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)、bond valence sum などが手軽に得られる。

<https://cdifx.univ-rennes1.fr/cryscalc> の最下部 CRYSCALC links で “Automatic install of CRYSCALC (for Windows)” をクリックしてインストーラー cryscalc\_setup.exe をダウンロードする。Windows 用 cryscalc の旧バージョンをインストール済みの場合は、コントロールパネル「プログラムと機能」によりアンインストールする。cryscalc\_setup.exe を管理者権限で実行し、C:\Program Files\cryscalc フォルダーにインストールする。なお、RIETAN-FP・VENUS システム用インストーラー Install\_RIETAN\_VENUS.bat を実行すると、ユーザー環境変数 CRYSCALC が自動的に C:\Program Files\cryscalc に設定される。

13) CrysFML は Lesser GNU Public Licence の下で配付されているため、CRYSCALC を外部プログラムまたは動的リンクライブラリー (DLL) として使用する限りは、自由に再配布できる。



CRYSCALC 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、Win\_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。

### 3.7 VESTA

VESTA [4] 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、Windows\_versions.zip に含めないことにした。<http://jp-minerals.org/vesta/jp/download.html> から 64 ビット Windows 用の VESTA-win64.zip をダウンロードし、それを解凍して得られたフォルダー VESTA-win64 を VESTA に改名してから C:\Program Files フォルダー中に移す。

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。

### 3.8 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。Windows 用 TeX Live は CTAN から install-tl-windows.exe をダウンロードし、右クリックしてから「管理者権限として実行」を選べば、perl.exe が裏で動いてインストールされる。TeX Live 20XY (“20XY” は “2021” のような年号を表す) の場合、システム変数 Path に C:\texlive\20XY\bin\win32 が追加される。TeX 関連実行形式プログラムはそのフォルダーに入っている。同フォルダー中の tlmgr-gui.exe をダブルクリックし、[導入済みのものをすべて更新] をクリックすればすべてのパッケージを更新できる。更新に失敗したならば、時間を置いて再度トライするとよい。

通常、TeX Live 20XY (20XY は西暦年号) は C:\texlive\20XY フォルダーにインストールされる。64 ビットのアプリケーションをインストールするとフォルダー名 ‘20XY’ が変わることに注意せよ。他のフォルダーにインストールされると、 $\LaTeX$  文書ファイル \*.tex が正常に組版できない恐れがある。C:\Program Files\RIETAN\_VENUS\Commands フォルダー中のシェルスクリプト cif2pdf.command, E2j.command, Typeset.command, BibTeX.command, MakeIndex.command では、“PATH=” の後ろにパス指定するフォルダーの絶対パスが列挙されている。その中に “C:\texlive\20XY\bin\win32” が複数含まれているが、インストール済みの TeX Live に応じ、必要なら ‘XY’ の部分を書き換えていただきたい。先頭のフォルダーから順に探索される。

マクロ 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、Win\_exercise.pdf 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 フォルダー

RIETAN\_VENUS フォルダーには、

1. RIETAN-FP の実行形式ファイル： RIETAN.exe
2. ALBA の実行形式ファイル： ALBA.exe

3. lst2cif の実行形式ファイル： lst2cif.exe
4. res2ins の実行形式ファイル： res2ins.exe
5. MADEL の実行形式ファイル： MADEL.exe
6. ORFFE の実行形式ファイル： ORFFE.exe
7. Dynomia の実行形式ファイル： Dynomia64.exe
8. STRUCTURE TIDY の実行形式ファイル： STRUCTURE\_TIDY.exe
9. B2beta の実行形式ファイル： b2beta.exe
10. 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.exe
11. リートベルト解析およびシミュレーションの結果をグラフ化するためソフト：  
RIETVIEW.EXE
12. 粉末回折強度データファイルのコンバータ: file\_conversion.exe
13. 午前 0 時以降の経過時間（秒）を出力するコマンド: seconds.exe
14. Macros フォルダ
15. Commands フォルダ
16. Batch\_files フォルダ
17. documents フォルダ

に加え、実行プログラム \*.exe 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。RIETAN.exe、すなわち RIETAN-FP [5] 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。Fortran プログラム \*.exe は Intel Visual Fortran Composer XE でコンパイルした。

なお、64 ビット版 Windows の環境下で C:\Program Files フォルダ内に 32 ビット・プログラムを含む RIETAN\_VENUS フォルダを置いても、とくに支障は来さない。

サブフォルダ Macros, Commands, Batch\_files は決して RIETAN\_VENUS フォルダから移動してはならない。さもないと、Commands 中のシェルスクリプト \*.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。

## 4.1 実行形式プログラム \*.exe

RIETAN\_VENUS フォルダ内の実行プログラム \*.exe は Intel Visual Fortran Composer XE でビルドした。ALBA.exe, Dynomia64.exe は VENUS システム<sup>14)</sup> のメンバーの実行プログラムである。(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、単一フォルダ RIETAN\_VENUS に収納した。

RIETVIEW.EXE は Software Laboratory<sup>15)</sup> から入手した。

seconds.exe は自動 MPF 解析用 bash スクリプト MPF\_multi.command (MPF\_multi\_Win.pdf 参照) などで使われる自家製コマンドである。

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

15) <http://drhell.web.fc2.com/labo/index.html>

## 4.2 Batch\_files フォルダー

このフォルダーは start コマンドで (a) VESTA と (b) python を起動するためのバッチファイル (a) Start\_VESTA.bat と (b) Start\_python.bat を含んでいる。start は関連付けられたプログラムによりファイルを開く命令である。

## 4.3 Macros フォルダー

RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境で用いる秀丸マクロ \*.mac などを収納したフォルダー。秀丸マクロの使用法など、詳しくは Readme\_macros.pdf を参照せよ。

## 4.4 Commands フォルダー

サブフォルダー Commands には bash.exe、秀丸マクロ内で実行するシェルスクリプト \*.command、PDF ファイル編集用ユーティリティー一式を収めた qpdf フォルダーが入っている。\*.command では grep, sed, awk に代表される UNIX コマンドや正規表現を駆使しており、bash シェルによるテキスト処理のテクニックを学ぶのにも役立つ。\*.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。

秀丸マクロ \*.mac から起動される bash スクリプト \*.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、grep, sed, awk, cat などの UNIX 系コマンドによりテキスト（ファイル）を処理している。\*.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 の変換でとりわけ威力を発揮する。もともと UNIX を基盤とする macOS 用に作成した bash スクリプトだったが、BusyBox を活用した Windows への移植は比較的容易であった。丹精込めて育成してきた拙作シェルスクリプトを Windows ユーザーに日々活用してもらえれば、これに優る喜びはない。

シェルスクリプト実行の基盤として作動するのは組み込み UNIX プログラム BusyBox<sup>16)</sup> である。UNIX コマンドは bash.exe に内包されている。Windows 用 RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境では、bash.exe を bash スクリプトのバックエンドとして活用している。bash.exe は 64 ビット組み込み UNIX プログラム busybox64.exe を改名したものに他ならない。bash.exe (別名 BusyBox multi-call binary) に bash スクリプトを関連付けるだけで、[Windows 用 BusyBox の Web サイト](#)中の画面キャプチャーに表示されている全 UNIX アプレット（コマンド）を bash スクリプト中で使えるようになる。DLL は必要ない。busybox64.exe の詳細については、「[Windows 用 BusyBox について](#)」が参考になる。bash スクリプトで頻繁に使うストリームエディター sed で日本語を扱うため

---

16) <http://frippery.org/busybox/> (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)

のノウハウを会得し、E2J.command 中でフル活用できたのは大きな喜びだった。本統合支援環境のユーザーは BusyBox が極小サイズ、パワー、移植性、高度な安定性を兼ね備えた秀逸なユーティリティであることを実感するに違いない。

たとえば RIETAN-FP 実行用の秀丸マクロ RIETAN.mac では、

```
runsync2 "%C:%¥¥Program Files¥¥RIETAN_VENUS¥¥Commands¥¥bash¥"
"%C:%¥¥Program Files¥¥RIETAN_VENUS¥¥Commands¥¥RIETAN.command¥"
"% " + dllfuncstr("GSUB", filename2, "%¥", "/", -1) + "%";
```

というように bash スクリプト RIETAN.command を引数として bash.exe を実行する<sup>17)</sup>。RIETAN.command の引数は絶対パス付きのカレントファイル（秀丸エディタの前面で表示されているファイル）の名前である。すると bash ウィンドウが現れ、その中で RIETAN.command が動き出し、標準出力がウィンドウ内に表示される。bash ウィンドウのサイズ、位置、フォントサイズなどは bash.exe をダブルクリックして bash ウィンドウを開き、左上のアイコンをクリックして「プロパティ」を選んでから設定する。

qpdf<sup>18)</sup> はマクロ cif2pdf と E2J 中で PDF ファイルを合体するのに使う。

## 4.5 documents フォルダ

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

### 4.5.1 Readme\_win.pdf

Windows 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。

### 4.5.2 Readme\_macros.pdf

秀丸マクロ (\*.mac + \*.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「Windows 用 RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境の手引」。

### 4.5.3 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

---

17) メタ文字“¥”は“¥”でエスケープし、田楽 DLL の関数 `dllfuncstr(...)` では bash スクリプトに絶対パスを渡すために絶対パス中の“¥”を“/”で置換する。

18) <http://qpdf.sourceforge.net/>（Apache License v 2.0 に基づいて配付されているフリーソフトウェアである）

ろう。

#### 4.5.4 ALBA\_manual.pdf

最大エントロピー・パターン法プログラム 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”。

#### 4.5.5 ALBA\_appendix.pdf

ALBA\_manual.pdf の付録。

#### 4.5.6 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。

#### 4.5.7 MPF\_multi\_Win.pdf

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

#### 4.5.8 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。

#### 4.5.9 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>19)</sup>。

#### 4.5.10 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>20)</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。

#### 4.5.11 Win\_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 (Windows 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\_Win.pdf (本文書) と Readme\_macros.pdf に加え Win\_exercise.pdf も必要に応じて参照することを推奨する。

---

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

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

#### 4.5.12 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」。Windows 用の 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。

## 5 RIETAN\_VENUS\_examples フォルダー

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が含まれている。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 CR+LF とするが、日本語の注釈を含む \*.ins はエンコードの種類を 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について、その内容を説明していく。無料講習会における実習のために追加したデータや cifconv.command [7] 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 (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 (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。

### 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 (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。Cu<sub>3</sub>Fe<sub>4</sub>P<sub>6</sub>.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。Cu<sub>3</sub>Fe<sub>4</sub>P<sub>6</sub>.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 MnO2 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 BaSO4 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 BaSO4\_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 Tl2223 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 BiCoO3 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 Al2O3 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 YBa2Cu4O8 フォルダー

MADOL 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。

STARUCTURE 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 Zr2Fe12P7 フォルダー

STARUCTURE 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 フォルダー

Superflip によるチャージフリッピング解析。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 DengakuDLL.dll

秀丸マクロの機能を拡張するための dynamic link library、64 ビット版の田楽 DLL v3.22<sup>21)</sup>。詳しくは Windows\_versions¥DengakuDLL.txt (1 節) を参照のこと。

## 7 アンインストール

まず管理者権限をもつユーザーとしてログインする。Uninstall\_RIETAN\_VENUS.bat を右クリックして「管理者として実行」を選び、ユーザーアカウント制御の下で全プログラムと実行例などを C ドライブからアンインストールする。「次のプログラムにこのコンピューターへの変更を許可しますか？」と操作の確認を求めるダイアログが表示される。そこで [はい] ボタンをクリックしてコンピューターへの変更を許可する。アンインストール中はコマンドプロンプトのウィンドウが開き、コマンドの実行結果が出力される。RIETAN\_VENUS\_examples フォルダーと C:¥Program Files¥RIETAN\_VENUS フォルダーの削除が終了すると、“The RIETAN-FP and VENUS systems have been successfully uninstalled.” というメッセージが現れる。[OK] ボタンを押せば、アンインストールが終わり、コマンドプロンプトのウィンドウが消える。

田楽 DLL はアンインストールの対象から外される。また RIETAN-FP・VENUS システムとは独立して使われる可能性がある「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、サードパーティー製ソフトウェアも削除されない。

## 8 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。

RIETAN-FP, VESTA, Dysnomia, ALBA を用いて得た解析結果を論文、解説、報告書などとして発表する際には、Readme\_macros.pdf の末尾に記載されている使用許諾条件を遵守しなければならない。

---

21) [http://htom.in.coocan.jp/macro/macro\\_dll.html](http://htom.in.coocan.jp/macro/macro_dll.html)

## 参考文献

- [1] K. Momma, T. Ikeda, A. A. Belik, and F. Izumi, *Powder Diffr.*, **28**, 184 (2013).
- [2] P. K. Janert, “Gnuplot in Action,” 2nd ed., Manning Publ., Shelter Island (2016).
- [3] D. Louër and A. Boultif, *Powder Diffr.*, **29**, S7 (2014).
- [4] K. Momma and F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.*, **44**, 1272 (2011).
- [5] F. Izumi and K. Momma, *Solid State Phenom.*, **130**, 15 (2007).
- [6] “粉末X線解析の実際”, 第3版, 中井 泉, 泉 富士夫編, 朝倉書店 (2021).
- [7] 泉 富士夫, 宮崎晃平, セラミックス, **54**, 473 (2019).