

鉱物の結晶解析計算システム (III)

金沢康夫* 月村勝宏* 堀内弘之**

KANAZAWA, Y., TSUKIMURA, K. and HORIUCHI, H. (1987) A crystallographic computation program system for minerals (III). *Bull. Geol. Surv. Japan*, vol. 38 (6), p. 331-347.

1. はじめに

これまでに、鉱物結晶を中心としてその構造解析の流れと各作業過程で使用する計算プログラムおよびその使用方法を紹介してきた。前回までに、(I) 観測データの収集と整理 (金沢・月村・堀内, 1981), (II) 結晶構造因子の位相角決定と構造の精密化 (金沢・月村・堀内, 1985) について述べた。今回は (III) 解析結果の整理, ということ世界的に広く使われている結晶構造図化のプログラム ORTEP (Oak Ridge Thermal-Ellipsoid Plot Program, JOHNSON, 1965) を紹介する。日本でもいくつかの大学で計算センターのライブラリーとして登録され、多くの利用に供されている。工業技術院内においても、すでに筑波研究センター・情報計算センター (RIPS) で使用可能となっており、地質調査所や化学技術研究所等で広く利用されている。

ORTEP は構造解析によって得られた各原子の座標と熱振動のようす、さらには化学結合の状態を投影法、透視法およびそのステレオ化の手法を用いて製図するための FORTRAN プログラムである。後に、ORTEP は隠れ線の消去が施され ORTEP II として改定された (JOHNSON, 1976)。現在、著者等が利用しているのがこの改訂版で、このプログラムの考え方とその使用方法について以下に概説する。なお、ORTEP についての簡単な解説としては飯高洋一ほか (1971 a, b), 金沢康夫 (1979) などがある。

2. 原子の熱振動を表現する確率楕円体

構造解析の結果には、単に構造の骨格を示す原子座標だけでなく、前回述べた温度因子という熱振動パラメータも含まれている。ORTEP はこれを熱振動確率楕円

体という形でみごとに図化している。この熱振動確率楕円体が 3 次元空間上においてどのような式で表わされるかを以下に述べる。

一般に、3 つの確率変数 X_1, X_2, X_3 とその空間内の一つの領域 S が与えられると、点 (X_1, X_2, X_3) が領域 S の中にあるという確率 $P(S)$ は

$$P(S) = \iiint_S \phi(X_1, X_2, X_3) dX_1 dX_2 dX_3 \quad (2.1)$$

と表わされる。ここで関数 $\phi(X_1, X_2, X_3)$ は X_1, X_2, X_3 の 3 次元分布に関する確率密度関数 (以下 pdf) である。確率の定義上、全空間の積分は 1 となる。

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} \phi(X_1, X_2, X_3) dX_1 dX_2 dX_3 = 1 \quad (2.2)$$

もし分布が正規 (ガウス) 分布であるなら pdf は

$$\phi(X) = \frac{[\det(M^{-1})]^{1/2}}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(X - \hat{X})^T M^{-1}(X - \hat{X})\right] \quad (2.3)$$

と表わせる。 \hat{X} は平均位置であり、 M は下に示すような対称分散 (分散-共分散) マトリックスである。

$$M = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_1 \sigma_2 \rho_{12} & \sigma_1 \sigma_3 \rho_{13} \\ \sigma_1 \sigma_2 \rho_{12} & \sigma_2^2 & \sigma_2 \sigma_3 \rho_{23} \\ \sigma_1 \sigma_3 \rho_{13} & \sigma_2 \sigma_3 \rho_{23} & \sigma_3^2 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

ここで σ_i^2 は \hat{X} のまわりの二次モーメントあるいは分散、 $\sigma_i \sigma_j \rho_{ij}$ は共分散、 ρ_{ij} は相関係数である。

(2.3) 式の中にある二次形式 $(X - \hat{X})^T M^{-1}(X - \hat{X})$ は正の有限値であり、これに主軸変換を行うと、相関係数が $\rho_{ij} = 0 (i \neq j)$ となり、(2.3) 式は簡単に

$$\phi(y_1, y_2, y_3) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \sigma_{y_1} \sigma_{y_2} \sigma_{y_3}} e^{-Q/2} \quad (2.5)$$

* 鉱床部 ** 東京大学理学部

$$Q = \frac{(y_1 - \hat{y}_1)^2}{\sigma_{y_1}^2} + \frac{(y_2 - \hat{y}_2)^2}{\sigma_{y_2}^2} + \frac{(y_3 - \hat{y}_3)^2}{\sigma_{y_3}^2} \quad (2.6)$$

となる。ここで y_i は直交主軸系に基づく座標、 $\sigma_{y_i}^2$ は主軸 $i=1, 2, 3$ に沿った分散である。正規確率密度関数は楕円体 $Q = C^2$ (C は定数) 上で一定値となり、点 (y_1, y_2, y_3) がこの楕円体内部に存在する確率 $P(C)$ は (2.1), (2.5), (2.6) 式を極座標に変換して

$$P(C) = (2/\pi)^{1/2} \int_0^C r^2 \exp(-r^2/2) dr \quad (2.7)$$

となる。確率 P に対する C の値は次のとおりである。

$$P=0.60 \quad 0.70 \quad 0.80 \quad 0.85 \quad 0.90 \quad 0.95$$

$$C=1.7164 \quad 1.9144 \quad 2.1544 \quad 2.3059 \quad 2.5003 \quad 2.7955$$

さて、確率密度関数 $\phi(X)$ の特性関数 $\Phi(T)$ は後述する結晶構造因子 $F(h)$ の指数部に相当することが知られている (例えば、JOHNSON and LEVY, 1974 を参照)。確率密度関数 $\phi(X)$ の特性関数 $\Phi(T)$ は $\exp(iT^T X)$ の期待値であるから、

$$\Phi(T) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(X) \exp(iT^T X) dX \quad (2.8)$$

と表わせる。もし、 $\phi(X)$ が (2.3) 式のような正規 pdf ならば、その特性関数は

$$\Phi(T) = \exp[iT^T \hat{X} - (1/2) T^T M T] \quad (2.9)$$

となる。

一方、結晶構造因子は

$$F(h) = \sum_n f_n(h) \exp(2\pi i h^T \hat{X}_n) \cdot \exp(-h^T B_n h) \quad (2.10)$$

と書ける。ここで h はミラー指数を表わすベクトル、 \hat{X}_n は n 番目原子の単位格子内座標 (分数型) を表わすベクトル、 B_n は n 番目原子の非等方性温度因子マトリックス、そして $f_n(h)$ は n 番目原子の原子散乱因子である。ここで $T = 2\pi h$ とおくと、上式は

$$F(T) = \sum_n f_n(T) \exp[iT^T \hat{X}_n - (1/2) T^T (B_n / 2\pi^2) T] \quad (2.11)$$

となるが、この式の指数部の項が (2.9) 式に相当する。そして、式中の $1/(2\pi^2)$ 倍された非等方性温度因子マトリックス $B/(2\pi^2)$ が (2.9) 式の分散マトリックス M に対応している。それぞれの原子の結晶空間3変量正規 pdf は

$$\phi(X) = \frac{[2\pi^2 \det(B^{-1})]^{1/2}}{(2\pi)^{3/2}} \cdot \exp\{-\pi^2 (X - \hat{X})^T B^{-1} (X - \hat{X})\} \quad (2.12)$$

となる。また、 $M^{-1} = 2\pi^2 B^{-1}$ とすれば (2.3) 式と全く同じになる。

すなわち、温度因子 B より分散マトリックス M を求め、二次形式 $Q = (X - \hat{X})^T M^{-1} (X - \hat{X})$ を作り、

これに任意の確率を与えて $Q = C^2$ とすれば、その等確率面で囲まれた熱振動楕円体ができあがる。

ここで、 M^{-1} の主軸変換の方法について述べる。今、 M^{-1} の主軸を y_1, y_2, y_3 とすると、

$$(y_i, M^{-1} y_i) = 1, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.13)$$

の関係がある。これは一般の三斜の結晶系でいうと、二次形式 $y^T G^{-1} y$ が次式の縛りを受けた一定値を持つことを意味する。

$$(y^T G^{-1} M^{-1} y) = 1 \quad (2.14)$$

ここで G^{-1} は格子の基本テンソルで成分 $a_i \cdot a_j$ をもつ (a_i は格子ベクトル)。具体的に書けば

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} a \cdot a & a \cdot b & a \cdot c \\ b \cdot a & b \cdot b & b \cdot c \\ c \cdot a & c \cdot b & c \cdot c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & acc \cos \beta \\ ba \cos \gamma & b^2 & bcc \cos \alpha \\ cac \cos \beta & abc \cos \alpha & c^2 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

となる。(2.13) 式にラグランジュの係数 $1/\lambda$ を導入すれば、

$$[G^{-1} - M^{-1}/\lambda_i] y_i = 0 \quad (i=1, 2, 3) \quad (2.16)$$

この式に M をかけて、

$$[MG^{-1} - I/\lambda_i] y_i = 0 \quad (i=1, 2, 3) \quad (2.17)$$

これを、変形して

$$[GM^{-1} - \lambda_i I] y_i = 0 \quad (i=1, 2, 3) \quad (2.18)$$

となる。ORTEP では実際には (2.17) 式のマトリックス MG^{-1} の固有値と固有ベクトルを計算する。

3. 作図の方法

3.1 熱振動楕円体の作図法

楕円体の作図を第1図を使って説明する。今、楕円体を $X^T A X = d$ (d は定数) で定義し、3つの主軸を $V1, V2, V3$ 、楕円体の中心から視点までのベクトル (観測ベクトル) を $V4$ とすると、極面 (視点から見た時、輪郭を作っている面) に垂直なベクトル $V5$ は

$$V5 = AV4 \quad (3.1)$$

で与えられる。輪郭楕円は2つの共役なベクトルを用いて合成することができる。1つは $V5$ に垂直な任意のベクトル $V6$ で、もう1つは

$$V7 = V5 \times AV6 \quad (3.2)$$

で定義されるベクトル $V7$ である。通常、観測ベクトル $V4$ の長さは楕円体の大きさに比べて十分に長いので、輪郭楕円は直径極面 (視点を無限遠点においた時できる輪郭をつくる面) 上にあるとしてさしつかえない。したがって、輪郭楕円を合成する2つの共役なベクトル $V6$ と $V7$ は楕円体の中心から楕円体面上へ向うベクトルが選べる。次に主楕円 (3つの主軸のうち2つを含

楕円) について、それを合成する共役な2つのベクトルを求める。V1とV2を含む主楕円は主軸V3に垂直であるが、その主楕円と輪郭楕円の交点ベクトルV8は

$$V8 = V5 \times V3 \quad (3.3)$$

で与えられる。V8が意味するところは、これが主楕円の見える側と隠れる側を境するということである。これを主楕円を合成する共役ベクトルの1つに選ばば、もう1つのベクトルV9は(3.2)と同様に

$$V9 = V3 \times AV8 \quad (3.4)$$

により求まる。

さて、共役ベクトルが得られたならば、その長さは楕円体 $X^TAX = d$ に $X = sI$ (I は共役ベクトルの方向をもつ単位ベクトル) を代入すれば、

$$s = [d/(I^T) \quad (3.5)$$

により決まる。2つの共役ベクトルはその反対方向も含めれば4個(90°間隔)にできる。隣接する単位ベクトルの中間にさらにベクトルを設定すると(隣接ベクトルを加える)、全部で8個(45°間隔)できる。ただし新たにできたベクトルは、単位ベクトルにするために長さを $\sqrt{2}$ で割算しておく必要がある。そして、隣接ベクトルを加算するというサイクルを繰り返せば、放射状に広がるたくさんのベクトルを合成することができる。それぞれのサイクルで合成されるベクトルに対しては長さを1にするために、

$$\begin{aligned} \text{CONT}(i) &= \{2[1 + \cos(\pi/2)^i]\}^{i/2} \\ &= 2 \cos(\pi/2^{i+1}) \end{aligned} \quad (i \text{ はサイクル数}) \quad (3.6)$$

の係数を掛けておけばよい。このように平面に放射状の等間隔で並んだベクトル集合ができたなら、楕円までの長さは(3.5)により求めればよい。

3.2 結合線(ボンド)の作図法

ボンドを描く場合の重要な問題は、ボンドと楕円体、接楕円柱、接楕円錐の交線を求めるところにある。今、楕円体を前述のように次式で表わす。

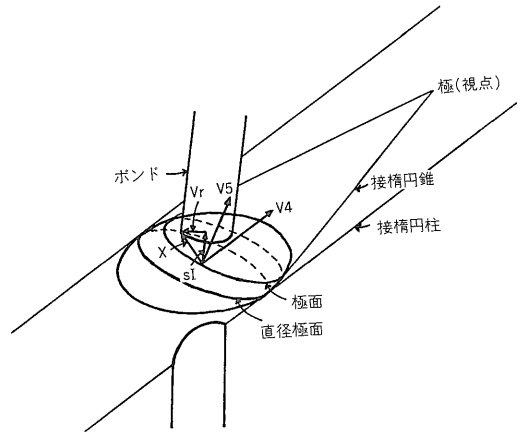
$$X^TAX = d \quad (3.7)$$

ここで d は定数、 X は楕円体の中心から表面までの任意ベクトル、 A は 3×3 の対称マトリックスでその要素を a_{ij} ($i, j=1, 2, 3$) とする。 z 方向の接楕円柱は

$$X^TBX = d \quad (3.8)$$

$$B = \begin{pmatrix} a_{11} - a_{13}a_{31}/a_{33} & a_{12} - a_{23}a_{31}/a_{33} & 0 \\ a_{12} - a_{13}a_{32}/a_{33} & a_{22} - a_{23}a_{32}/a_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

と書ける。この接楕円柱は、平行投影でボンドが輪郭楕円体で終わっている時に使用する。



第1図 熱振動楕円体、ボンドおよび極(視点)との位置関係

半径 r で Vb 方向の円柱ボンドが楕円体または接楕円柱と交わる線を見つけるには次のようにすればよい。

1. Vb に垂直でながさ r の放射状に並んだベクトル集合 Vr_j を用意する。
2. Vb に平行な単位ベクトルを I とし、交線上のベクトル X_j を次式で表わす(第1図)。

$$X_j = Vr_j + sI \quad (3.10)$$

この式を(3.8)に代入すると

$$s^2 I^T A I + 2s Vr^T A I + Vr^T A V r - d = 0 \quad (3.11)$$

これを解くと

$$s = \frac{-Vr^T A I + \sqrt{(Vr^T A I)^2 - (I^T A D)(Vr^T A V r - d)}}{I^T A I} \quad (3.12)$$

が求まる。

今度はボンドと接楕円錐の交線を求める。

1. z 軸が観測ベクトル Vu の方向を向くように回転し、新しい基準直交系にする。
2. 接楕円錐は

$$Y^T C Y = 0 \quad (3.13)$$

と表わせる。ここで Y は円錐の頂点(視点)から発するベクトル、 C は

$$C = \begin{pmatrix} a_{11} + a_{13}a_{31}/L & a_{12} + a_{13}a_{32}/L & K a_{13}/L \\ a_{12} + a_{23}a_{31}/L & a_{22} + a_{23}a_{32}/L & K a_{23}/L \\ K a_{31}/L & K a_{32}/L & K a_{33}/L \end{pmatrix}, \quad L = K - a_{33}, \quad K = d/(Vu^T Vu) \quad (3.14)$$

である。

3. 1. の回転の逆回転を行い、元の方向に座標系をもどす。原点は楕円体の中心ではなく、視点にあることに注意する。接楕円柱の時と同様に交線上のベクトル Y

をボンド方向のベクトル sI と円錐の内側の任意の点 Vp の和で表わすと,

$$Y = Vp + sI \quad (3.15)$$

これを (3.13) 式に入れて解くと,

$$s = \frac{-Vp^T CI + \sqrt{(Vp^T CI)^2 - (I^T CI)(Vp^T CVp)}}{I^T CI} \quad (3.16)$$

ベクトル Vp を楕円体中心からの放射状ベクトル集合 Vr を使って表わすと,

$$Vp = -Vu + Vr \quad (3.17)$$

となり, それぞれの Vr から (3.16) 式の s が求まり, 交線が描けることになる。

4. ORTEP の機能

ORTEP は非常に多くの機能を有したプログラムで, その使用法は極めて複雑であるといえる。このプログラムを使いこなすためには若干の ORTEP 用語について習熟しておく必要がある。最初にプログラムで用いる用語を定義し, 後半で入力データの構成と機能を述べる。

4.1 定義

1. 原子指定コード (ADC): 結晶内原子を指定するためのコードで, 次の5つの成分 AN, TA, TB, TC, SN より構成される。

$$ADC = AN * 10^5 + (TA + 5) * 10^4 + (TB + 5) * 10^3 + (TC + 5) * 10^2 + SN$$

AN = 原子の入力順番号,

TA, TB, TC = 格子軸 a, b, c に沿う格子並進数で, 1~9 の整数値をとる。'オリジン' 格子を並進数, 5, 5, 5 で表わすので, 各軸について ± 4 の格子並進が可能である。

SN = 対称操作入力順番号。SN = 1 には合同操作を入れる。

例: ADC = 347502 は, 3 番目の原子を, 2 番目の対称操作で動かし, a, b, c 軸に沿って, それぞれ 1, 2, 0 の格子並進した原子を表わす。

2. ベクトル指定コード (VDC): 2 つの ADC (上述) で決まるベクトルを表わす。ベクトルの向きは 1 番目から 2 番目の ADC へ向う。

3. 一連原子指定 (ADR): 2 つの ADC (上述) を用いて一連の原子を指定する。2 番目の ADC の前に (-) をつける。ADC 中の成分の動かし方は 1. AN, 2. SN, 3. TA, 4. TB, 5. TC の順である。

例: ADR(145502-245603) は 145502, 245502, 145503, 245503, 145602, 245602, 145603, 245603 の 8 つの原子を指定する。

4. 一連原子番号指定 (ANR): ADR (上述) の部分集合で一連の原子番号 AN だけを指定する。

例: (1 4) は 1, 2, 3, 4 番の原子を指定する。

5. ベクトルサーチコード (VSC): 2 つの ANR とある距離範囲で指定される。これは, 指定した ANR どの原子間距離を計算し, その中で指定した距離範囲にあるものを見つけるのに用いられる。

例: 金属原子 1, 2 と酸素原子 6-12 の間で距離が 1.9-2.4 Å の範囲にあるものを探す場合, (1 2) (6 12) (1.9 2.4) という形式で指定する。

6. 囲い球: 与えられた 'オリジン' 原子を中心にした半径 D の球をいう。これは球内に存在する原子を指定するのに用いられる。囲い球内の原子は VSC を使って任意の範囲に区切ることができる。

7. 囲い箱: ある座標値から軸にそって任意の大きさで囲った平行六面体をいう。

8. 基準, 作業, 標準直交座標系: ORTEP の多くの計算は a, b, c 軸 (三斜座標系) に基づく分数座標により行われるが, 場合によっては直交座標系を用いることも必要となる。そこで 2 つの直交座標系 (基準と作業) を使用する。基準系はプロットングを除くすべての操作に使用する。作業系は立体視の図で基準系の軸のまわりに回転して動かす時に使用する。ユーザーはこれらの座標系を 500 シリーズのインストラクション (後述) で定義することができる。500 シリーズが入力されるまでは以下の "標準直交座標系" が使われる。

$$\begin{aligned} x // a \\ y // (a \times b) \times a \\ z // (a \times b) = c^* \end{aligned}$$

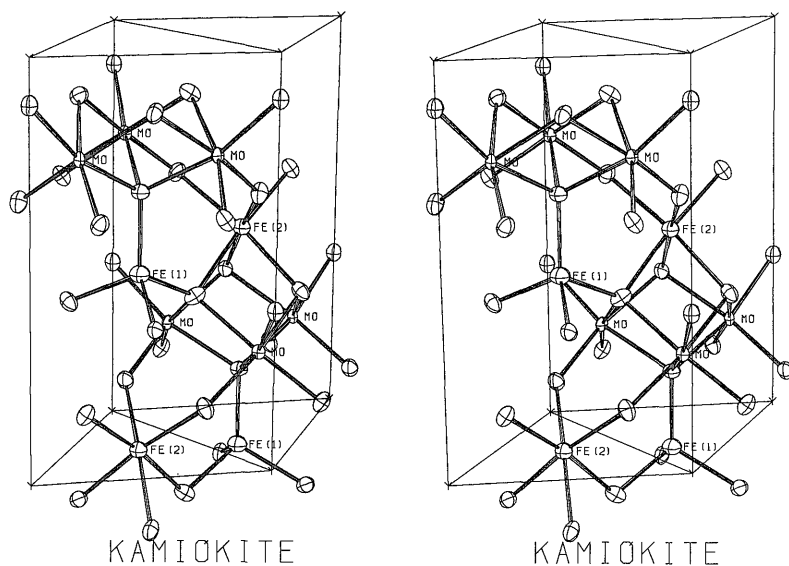
4.2 入力データの構成と機能

入力データは大きく分けて, 1. 結晶学データと 2. インストラクション (作図指令) データからなる。結晶学的データとしては格子定数, 対称操作, 原子パラメータ (座標値と温度因子) が含まれる。インストラクション・データは 100 番ごとのシリーズ番号が付けられ, 類似機能をもつインストラクションは同じシリーズ番号でまとめられている。シリーズ番号とその主な機能は以下のとおりであるが, より詳しいデータ入力マニュアルを付録 1 として載せてある。

100 シリーズ: 構造解析インストラクション。原子間距離・角度, 熱振動の主軸計算等を行う。作図とは直接関係しない。

200 シリーズ: プロッター制御インストラクション。

300 シリーズ: 作図領域インストラクション。図や枠の大きさなどを決める。



第2図 神岡鉍の結晶構造図

400 シリーズ:原子リスト・インストラクション。作図に含める原子を指定する。

500 シリーズ:軸方向決定インストラクション。基準直交座標系の定義, 作業系の回転などを行う。

600 シリーズ:中心原子の位置決めとスケールング・インストラクション。

700 シリーズ:原子プロット・インストラクション。

800 シリーズ:ボンド・プロット・インストラクション。

900 シリーズ:ラベル・プロット・インストラクション。

1100 シリーズ:データ保存インストラクション。同様の入力データを繰り返して使う時に使用する。

負数シリーズ:ジョブ終了インストラクション。

4.3 実例

最後に ORTEP II を使用した1つの典型的実例を第2図に示す。結晶構造は神岡鉍, $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ (KANAZAWA and SASAKI, 1986) で, 左目用と右目用の2つの図によるステレオ透視法を用いて表現してある。原子の形状は非等方性温度因子より計算し, 確率 95% 熱振動楕円体の輪郭楕円と主楕円で描いてある。原子間のボンドはスティック型で円柱のまわりに 45° 間隔で線引きしてある。また, 単位格子をラインボンドで示した。ラベルは, 原子名を Fe と Mo 原子についてのみ示し, タイトル名を構造の下に置いた。この実例では, まだ多くのインストラクションの一部しか使用していない。他のインス

トラクションを組合せればさらに細かい表現が可能となる。実例に用いた入力データを付録2に, RIPS で使用する時のコントロールカードの例を付録3として添付した。

文 献

- 飯高洋一・岡部健二 (1971 a) 結晶および分子構造を图示するプログラム ORTEP について. bit, vol. 3, p. 831-838.
- ・——— (1971 b) 結晶および分子構造を图示するプログラム ORTEP について. bit, vol. 3, p. 1016-1022.
- 金沢康夫 (1979) 鉍物結晶構造の作図. 地質ニュース, no. 294, p. 44-49.
- KANAZAWA, Y. and SASAKI, A. (1986) Structure of Kamiokite. *Acta Cryst.*, vol. C 42, p. 9-11.
- 金沢康夫・月村勝宏・堀内弘之 (1981) 鉍物の結晶解析計算システム (I). 地調月報, vol. 32, p. 551-561.
- ・———・——— (1985) 鉍物の結晶解析計算システム (II). 地調月報, vol. 36, p. 463-478.
- JOHNSON, C.K. (1965) ORTEP: A Fortran thermal-ellipsoid plot program for crystal structure illustrations. Report

ORNL-3794, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.

JOHNSON, C.K. and LEVY, H.A. (1974) Thermal-motion analysis using Bragg diffraction data. *International Tables for X-ray Crystallography*, vol. 4 (Ed. IBERS, J.A. and HAMILTON, W.C.), p. 311-336.

JOHNSON, C.K. (1976) *ORTEP II*: A Fortran thermal-ellipsoid plot program for crystal structure illustrations. Report ORNL-5138, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.

(受付: 1986年11月17日; 受理: 1987年1月22日)

付録 1. ORTEP II データ入力マニュアル

1. 結晶構造データ入力

1.1 タイトルカード。- FORMAT(18A4)

```
|-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7-----|
| TITLE |
```

TITLE: 任意の英数字。メモに使用。

1.2 格子定数カード。- FORMAT(6F9.6)

```
|-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----|
| A | B | C | ALPHA | BETA | GAMMA |
```

格子定数を以下の4つの Type 1-4 から1つ選び、入力する。

| | A | B | C | ALPHA | BETA | GAMMA |
|---------|---------------|---------------|---------------|------------------|-----------------|------------------|
| Type 1: | a(A) | b(A) | c(A) | α (deg) | β (deg) | γ (deg) |
| Type 2: | a(A) | b(A) | c(A) | $\cos \alpha$ | $\cos \beta$ | $\cos \gamma$ |
| Type 3: | $a^*(A^{-1})$ | $b^*(A^{-1})$ | $c^*(A^{-1})$ | α^* (deg) | β^* (deg) | γ^* (deg) |
| Type 4: | $a^*(A^{-1})$ | $b^*(A^{-1})$ | $c^*(A^{-1})$ | $\cos \alpha^*$ | $\cos \beta^*$ | $\cos \gamma^*$ |

1.3 対称操作カード ($1 \leq \text{NSYM} \leq 48$)。- FORMAT(I1,F14.10,3F3.0,2(F15.10,3F3.0))

```
|-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7-----|
|L| T1 | S11|S12|S13| T2 | S21|S22|S23| T3 | S31|S32|S33|
```

L: 最後のカードだけ $\neq 0$

T1~T3: $T_1 \sim T_3$ 対称操作の並進部

S11~S33: $S_{11} \sim S_{33}$ 対称操作の回転部

1.4 原子パラメータカード ($1 \leq \text{NATOM} \leq 166$)。- 原子1個につき以下の座標値カードと温度因子カードの2枚が必要。

1.4.1 座標値カード。- FORMAT(A6,21X,3F9.6,F9.0)

```
|-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----|
| NAME | X | Y | Z | TYPE |
```

NAME: 原子名

座標値は以下の3つの Type 0-2 から1つ選び、入力する。

| | X | Y | Z | TYPE |
|---------|-------------|-------------|-------------|------|
| Type 0: | x(分数型, 結晶軸) | y(分数型, 結晶軸) | z(分数型, 結晶軸) | 0 |
| Type 1: | x(A, 結晶軸) | y(A, 結晶軸) | z(A, 結晶軸) | 1 |
| Type 2: | x(A, 直交軸) | y(A, 直交軸) | z(A, 直交軸) | 2 |

1.4.2 温度因子カード。- FORMAT(I1,F8.6,5F9.6,F9.0)

```
|-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----|
| B11 | B22 | B33 | B12 | B13 | B23 | TYPE |
```

温度因子は以下の Type 0-9 から1つ選んで入力する。

| | B11 | B22 | B33 | B12 | B13 | B23 | TYPE |
|---------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|---------|
| Type 0,1,2,3: | b_{11} | b_{22} | b_{33} | b_{12} | b_{13} | b_{23} | 0,1,2,3 |
| Type 4,5,8,9: | U_{11} | U_{22} | U_{33} | U_{12} | U_{13} | U_{33} | 4,5,8,9 |
| Type 6: | B | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 6 |
| Type 7: | R | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 7 |

Type 0,1,2,3 の時、次式の非等方性温度因子を用いる。

$$(Base)^{Temp}, \quad Temp = \{-D(b_{11}h^2 + b_{22}k^2 + b_{33}l^2 + Cb_{12}hk + Cb_{13} + Cb_{23}kl)\}$$

ただし、Type 0: Base=e, C=2, D=1 Type 1: Base=e, C=1, D=1

 Type 2: Base=2, C=2, D=1 Type 3: Base=2, C=1, D=1

Type 4,5,8,9 の時、次式の非等方性温度因子を用いる。

$$\exp \{-D(a_1^2 u_{11} h^2 + a_2^2 u_{22} k^2 + a_3^2 u_{33} l^2 + Ca_1^2 u_{12} hk + Ca_1^2 a_3^2 u_{13} hl + Ca_2^2 a_3^2 u_{23} kl)\}$$

ただし、Type 4: C=2, D=1/4 Type 5: C=1, D=1/4

 Type 8: C=2, D=2 π^2 Type 9: C=1, D=2 π^2

Type 6 の時、次式の等方性温度因子を用いる。

$$\exp(-B \sin^2 \theta / \lambda^2), \quad B=8\pi^2 \mu^2$$

Type 7 の時、任意の半径 R (=μ) を入力する。

2. インストラクションの入力

インストラクションというのは作図に用いる命令群のことである。各インストラクションは合理的な順序で独立して使用することができる。インストラクションのために以下の4つの FORMAT が用意されている。次のカードの FORMAT 指示は、現カードの 1-3 カラムにある変数 LA (Look ahead) で与えられる。

| LA: | 次のカード | プログラムの処理 |
|-----|-----------------------------------|--------------------------------|
| 0 | FORMAT No.0: 新しいインストラクションカード | 現在のインストラクションを実行し、次のカードを読む。 |
| 1 | FORMAT No.1: 現在のインストラクションが続く | 継続カードを読み、LA をチェック。 |
| 2 | FORMAT No.2: ベクトルサーチコード (VSC) カード | VSC カードを読み、LA をチェック。 |
| 3 | FORMAT No.3: ラベルカード | ラベルを読み、インストラクションを実行し、次のカードを読む。 |

2.1 インストラクション・カード。

2.1.1 FORMAT No.0 インストラクション・カード。 - FORMAT(13,16,7F9.0)

```

|---*---|1---*---|2---*---|3---*---|4---*---|5---*---|6---*---|7---*---|
| LA | INST | P(1) | P(2) | P(3) | P(4) | P(5) | P(6) | P(7) |

```

LA: "Look ahead" (=0,1,2,3)

INST: インストラクション・ナンバー P(i): i 番目のパラメーター

2.1.2 FORMAT No.1 インストラクション継続・カード。 - FORMAT(13,16,7F9.0)

```

|---*---|1---*---|2---*---|3---*---|4---*---|5---*---|6---*---|7---*---|
| LA | P(8) | P(9) | ..... |

```

LA: "Look ahead" (=0,1,2,3)

P(i): i 番目のパラメーター。 8 ≤ i ≤ 140 で、このカードは 19 枚続けることができる。

2.1.3 FORMAT No.2 ベクトルサーチコード(VSC)・カード。 - FORMAT(I3,6X,5I3,8F6.0)
 VSC の変数の内容は以下のようにインストラクションごとに異なっている。詳細はそれぞれのインストラクションで説明する。

| LA | O1 | O2 | T1 | T2 | BT | DMIN | DMAX | BR | HGTPER | PEROFF | HGTPAR | PAROFF | DEC |
|--------------------|----------------------|---------------|------|----|---------------------------|---------|----------------------|---------------|--------|--------|------------------------|--------|------|
| Search instruction | | Inertial axes | | | Bond plotting instruction | | | (HGTPER<0の場合) | | | | | |
| 101 | 402 | | 505 | | | 801/811 | | 802/812 | 803 | | 802/812 | 803 | |
| 102 | 412 | | 506 | | | 821 | | 822 | 813 | | 822 | 813 | |
| 変数 | | | | | | | | | | | | | |
| LA: | "Look ahead" | | -->同 | | -->同 | | -->同 | | -->同 | | -->同 | | -->同 |
| O1-O2: | ORG.ANR | | ANR | | --- | | ANR(A) | | -->同 | | -->同 | | -->同 |
| T1-T2: | TAR.ANR | | --- | | --- | | ANR(B) | | -->同 | | -->同 | | -->同 |
| BT: | --- | | --- | | Bond タイプ | | -->同 | | --- | | -->同 | | --- |
| DMIN: | D _{min} (A) | | 重み | | --- | | D _{min} (A) | | -->同 | | -->同 | | -->同 |
| DMAX: | D _{max} (A) | | --- | | --- | | D _{max} (A) | | -->同 | | -->同 | | -->同 |
| BR: | --- | | --- | | Bond 半径 | | -->同 | | --- | | -->同 | | --- |
| HGTPER: | --- | | --- | | ラベル文字の高さ (透視法 イン) | | -->同 | | --- | | ANR(P) | | -->同 |
| PEROFF: | --- | | --- | | その垂直変位(インチ) | | -->同 | | --- | | " | | -->同 |
| HGTPAR: | --- | | --- | | ラベル文字の高さ (投影法 イン) | | -->同 | | --- | | D _{p min} (A) | | -->同 |
| PAROFF: | --- | | --- | | その垂直変位(インチ) | | -->同 | | --- | | D _{p max} (A) | | -->同 |
| DEC: | --- | | --- | | 小数点以下の桁数 | | -->同 | | --- | | --- | | --- |

2.1.4 FORMAT No.3 ラベルカード。 - FORMAT(18A4)

-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----
 LABEL

LABEL: 任意の英数字。36-37 カラムが中心になるように書く。このカードには"Look ahead" カラムがないので、次のカードは新しいインストラクション・カードがくる。インストラクション 902, 903, 913 では、このカードが必要であるが、他の場合コメントやメモに使用できる。

2.2 構造解析インストラクション (100 シリーズ)。- 作図とは直接関係しないが原子間距離・角度や熱振動の主軸などの計算を行ってくれるので、次に描く作図領域などの判断に使用できる。

2.2.1 インストラクション 101, 102。 - 'オリジン' 原子を中心に半径 D_{max} の囲い球内にあるすべての 'ターゲット' 原子を見つけ出す(subroutine SEARCH を使用)。101 は原子間距離のみ、102 はベクトル間の角度も計算し印刷する。

-----1-----2-----3-----4-----5-----
 LA| INST | ORG1 | ORG2 | TAR1 | TAR2 | DMAX |
 LA: 0 or 1 (look ahead) INST: 101 or 102
 ORG1 - ORG2: オリジン ADR TAR1 - TAR2: ターゲット ANR
 DMAX: D_{max}

例: -----1-----2-----3-----4-----5-----
 | 101 | 155501 | 2 | 1 | 4 | 3.61 |

対称操作 1 の原子 1,2 から半径 3.61A の球内にあるすべての原子 1-4 までの距離を計算し印刷する。FORMAT No.2 の VSC カードによる指定も可能である。

2.2.2 インストラクション 103. - 基準直交座標系に基づく熱振動の主軸方向と根2乗平均変位を計算する.

```

|----*----|
|   |   |
|----|   |
|   | 103|

```

2.2.3 インストラクション 105, 106. - このインストラクションは 401, 402, 403 または 404 のインストラクションで求めた ATOMS table (原子リスト) を利用する. ATOMS table の中から, ANR でオリジン原子番号を指定すると, そのまわりにある指定半径内のすべての隣接原子とその距離を見つかる. スクリーニング (殻内指定) が必要ならば VSC カードを使用できる. インストラクション 105 と 106 は似ているが, 106 では見つけられるオリジン ANR の原子がなくなるまで “たたきこみ” 処理を継続する.

```

|----*----|1----*----|2----*----|3----*----|4----*----|5----|
|LA|INST|ORG1|ORG2|TAR1|TAR2|DMAX|
|LA: 0 or 2 (look ahead)          INST: 105 or 106
|ORG1 - ORG2: オリジン ANR        TAR1 - TAR2: ターゲット ANR
|DMAX: Dmax

```

2.3 プロッター制御インストラクション (200 シリーズ). - プロッターを制御するためのインストラクション. subroutine F200 で実行される. インストラクションは Cal Comp 765, 835 に対して定義されている. 201 がプロッタの初期化, 202 が処理終了および紙送りである.

```

|----*----|1----*----|
|   |INST|X|INST: 201 or 202 X: 紙送りの長さ(インチ) (202 の時, 使用する)

```

2.4 作図領域インストラクション (300 シリーズ). - 図の大きさ, 視点, レタリングの方向, 線のリトレースのためのペン移動を指示する.

2.4.1 インストラクション 301. - 作図領域と透視図の視点までの距離を与える.

```

|----*----|1----*----|2----*----|3----*----|4----*----|
|   |301|X|Y|VIEW|BRDR|
|X: x 方向(横軸)の長さ(インチ). 初期値 17.
|Y: y 方向(縦軸)の長さ(インチ). 初期値 11.
|VIEW: 視点までの距離 (インチ). " 0. (平行投影)
|BRDR: へりの幅 (インチ). " 0.5

```

2.4.2 インストラクション 302. - タイトルや化学記号の回転を指示する. x 軸を基線として反時計まわりの角度を入力する.

```

|----*----|1----*----|
|   |302|THETA|THETA: 角度 (deg.) 初期値 0.

```

2.4.3 インストラクション 303. - 作図原子の輪郭などを太く描くためのリトレース命令.

```

|----*----|1----*----|
|   |303|X|X: リトレースのためのペン移動距離(インチ) 初期値 0.005

```

2.5 原子リスト・インストラクション (400 シリーズ). - 作図に含める原子を指定する. 選択された原子は ATOMS 配列に蓄えられる (500 個まで). 400 シリーズは ATOMS 配列への入力・追加命令, 410 シリーズは配列からの削除命令である.

2.5.1 インストラクション 401 (411). - ADC, ADR による原子指定(削除).

```

|---*---|1---*---|2---*---|3---*---|4---*---|5---*---|6---*---|7---*---|
| LA | INST | FROM(1) | TO(2) | FROM(2) | TO(2) | FROM(3) | TO(3) | FROM(4) |

```

LA: blank or 1 (look ahead) INST: 401 or 411

FROM(i) - TO(i): 以下の (a), (b), (c), (d) で指定する.

- (a) 原子指定コード (ADC)
- (b) 一連原子指定 (ADR)
- (c) ブランク
- (d) 上記 (a)(b)(c) の組合せ

FORMAT No.1 の継続カードは 19 枚, 一連指定は 70 個, 原子数は最初の 500 原子まで可能.

2.5.2 インストラクション 402 (412). - 囲い球による原子指定(削除). 指定方法はインストラクション 101, 102 と同じ. 囲い球の中心にあるオリジン原子も含めたいならばターゲット原子にもその原子を入れておかなければならない. 同様に, FORMAT No.2 のベクトル-サーチ-コード-カードを使用する時もオリジン原子のための 0 ベクトルを入れておかなければならない.

2.5.3 インストラクション 403 (413). - 囲い箱による原子指定(削除). オリジン原子を中心にして, 三軸(基準直交座標系)にそう平行六面体内にあるターゲット原子を指定する. 囲い球と同様に中心原子は含まれないので, 同様の対処をすること. 軸の取り方を換えたいならば, 事前にインストラクション 501 や 502 を使用する.

```

|---*---|1---*---|2---*---|3---*---|4---*---|5---*---|6---*---|7---*---|
| INST | ORG1 | ORG2 | TAR1 | TAR2 | A/2 | B/2 | C/2 |

```

INST: 403 or 413

ORG1 - ORG2: オリジン ADR

TAR1 - TAR2: ターゲット ANR

A/2, B/2, C/2: x, y, z 軸方向の稜の長さの半分

2.5.4 インストラクション 404 (414). - 三斜軸の囲い箱による原子指定(削除). これはインストラクション 403 (413) と似ているが, 三斜軸の分数型座標系による平行六面体の箱を用いる. 単位格子中のすべての原子を指定するには稜の長さの半分以上 $A/2 = B/2 = C/2 = 0.5$ とおき, (0.5, 0.5, 0.5) の中心位置にオリジン原子をおく.

2.5.5 インストラクション 405 (415), 406 (416). - 囲い球のたたきこみによる原子指定(削除). 指定方法はインストラクション 105, 106 と同じ.

2.5.6 E-Map に関するオプション - (省略)

2.5.7 インストラクション 410. - ATOMS table を 0 にする. プログラムの最初で ATOMS table は自動的に 0 となる.

2.6 オリエーティング・インストラクション (500 シリーズ). - このシリーズは基準と作業直交座標系の取り方と方向を定義する. 基準系が 501 や 502 で定義あるいは回転されるごとに, 作業系も自動的に基準系に合わせられる. 503 基準系の軸を回転すると, 作業系は基準系から分離して回転する. 基準系は絶えず基準系の回転で作られ, 前の作業系の方向には依存しない.

2.6.1 インストラクション 501. - 基準直交座標系の定義. どの直交座標系も 3 つの直交基本ベクトルと 1 つの原点に基づいている. 原点(ORGN)は原子指定コードで指定される. 3 つの直交基本ベクトルは, 2 つの平行でないベクトル u, v を用いて次のように定義される.

| | Type A | Type B |
|----------------|-------------------------|-------------------------|
| 基本ベクトル 1 (x 軸) | u | u |
| 基本ベクトル 2 (y 軸) | $u \times v$ | $(u \times v) \times u$ |
| 基本ベクトル 3 (z 軸) | $u \times (u \times v)$ | $u \times v$ |

ここでいう x, y 軸はプロッターの x, y 軸である. また, ORGN はプロッター面上にある. 視点は

ORGN の真上, VIEW(イチ) 離れた所にあり, そこから z 軸方向を望む。

| | | | | | | |
|-----|------|-----|-----|-----|-----|------|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 501 | ORGN | V1A | V1B | V2A | V2B | TYPE |

ORGN: 原点(ADCで与える)(初期値 000000) TYPE: 0 = Type A, >0 = Type B (初期値 1)
 V1A-V1B: ベクトル u (初期値 155501-165501) V2A-V2B: ベクトル v (初期値 155501-156501)

2.6.2 インストラクション 502. - 基準直交系の回転. どんな回転も3軸のまわりの3回の回転組み合わせで得られるのであるが, プログラム上では便宜上回転の回数を制限していない. また, 基準直交系の対角方向のまわりの 120° ずつの回転も可能である.

| | | | | | | | | |
|----|-----|---------|--------|---------|--------|---------|--------|---------|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | | |
| LA | 502 | AXIS(1) | ROT(1) | AXIS(2) | ROT(2) | AXIS(3) | ROT(3) | AXIS(4) |

もし, 継続カードがあるなら, 次のカードが続く.

| | | | | | | |
|--------|-----|---|---|---|---|---|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| ROT(4) | ... | | | | | |

LA: 0 (or 1, 継続カードがある場合)

AXIS(i): 回転軸, 1=x, 2=y, 3=z, -1=対角方向120° の回転, -2=同, 240° の回転

ROT(i): AXIS(i)のまわりの回転角度. AXIS(i)= -1 or -2 の時はブランク. 回転角は右手系でとる. 正の値は, 指定軸が読者の方向へ向いている時, 反時計回りの回転となる.

2.6.3 インストラクション 503. - 作業直交系の回転(ステレオ図のための回転). 基準系と一致させないで作業系の回転を定義するために用いる. 対角方向の回転はできない.

| | |
|-----|--|
| 1 | 2 |
| 503 | AXIS(1) ROT(1) AXIS(1), ROT(1): 2.6.2 と同じ意味. |

2.6.4 立体図のための最適パラメータ. (省略)

完全なステレオ化は構造の回転ではなく, 原点の移動により得られるのであるが, 実際上は 2.6.3 の回転だけで充分にステレオ化の効果がある.

2.6.5 インストラクション 505. セントロイドの原点. (省略)

2.6.6 インストラクション 506. セントロイドの原点と慣性軸座標系.(省略)

2.6.7 インストラクション 511. 隠線消去 (2. 14 を見よ)

2.7 位置決めとスケーリング・インストラクション (600 シリーズ). - (501で指定した)ORGN を (301で決めた)作図領域のどこに置かかを指定する. また, (400 シリーズで選んだ)原子集合に対するスケールを指示する.

2.7.1 通常モード

| | | | | | |
|--------|------------------|----------------|----------------|-------|------|
| 1 | 2 | 3 | 4 | | |
| INST | X0 | Y0 | SCAL1 | SCAL2 | |
| INST: | 601 | 602 | 603 | 604 | 初期値 |
| X0: | ORGN 原子 | x ₀ | x ₀ | - | 8.5 |
| Y0: | の位置 | y ₀ | y ₀ | - | 5.5 |
| SCAL1: | (図の) | スケール | - | スケール | 1.0 |
| SCAL2: | 等確率楕円体の大きさを決める係数 | | | | 1.54 |

上述の(-)は省略されると初期値に設定されることを示す.

2.7.2 増分モード. - 上で与えた構造図を修正するために図をずらしたりスケール因子を変えたりするのに用いる.

| | | | | |
|------|-----|-----|----|-------|
| 1 | 2 | 3 | 4 | |
| INST | DX0 | DY0 | DK | SCAL2 |

INST: 611 612 613
DX0: X0に対する増分 Δx_0 Δx_0 -
DY0: Y0に対する増分 Δy_0 Δy_0 -
DK: SCAL1にかける倍率 ΔK - ΔK
SCAL2: SCAL2
 X0, Y0, SCAL1, SCAL2 及び - は 2.7.1 と同じ.

2.8 原子プロット・インストラクション (700 シリーズ).

2.8.1 原子プロット・インストラクション 701-704, 711-714. - 選択方式.

```

|---*---|1---*---|2---*---|3---*---|4---*---|5---*---|6---*---|7---*---|
| LA | INST | _____ | _____ | _____ | _____ | _____ | _____ |
    
```

このカードで LA=1 の時, 次のカードが継続する.

```

|---*---|1---*---|2---*---|3---*---|4---*---|
| _____ | _____ | _____ | _____ |
| AO | A1 | ANR1 | ANR2 |
    
```

LA: 0 or 1 (1 はバウンダリーをリトレスする時やプロット原子を選択する時で, 上の継続カードを伴う.)

INST: 701 標準的楕円体; 輪郭楕円, 主楕円, 主軸, 1/8 分割球の陰付け
 702 輪郭楕円, 主楕円
 703 主楕円, 主軸
 704 輪郭楕円のみ

711-714 は 701-704 と同じであるが, モニター用の出力印字をしない

SYMHGT: プロット文字 (原子名) の高さ(インチ). 0 なら文字プロットなし

PAROFF: プロット文字の原子中心からの平行オフセット量(インチ)

PEROFF: プロット文字の原子中心からの垂直オフセット量(インチ)

AO, A1: A_0, A_1 (以下に記述) ANR1 - ANR2: 一連原子番号指定

輪郭楕円の線の太さを変えるのに A_0, A_1 パラメータを用いる. 線の太さは原子の紙面からの高さ z の関数で $\Delta R(z) = A_0 + A_1 z$ で指定する. 例えば, 紙面より下側5インチから上側5インチまでにある原子集合を想定して, 最も手前にある楕円体輪郭を最も遠くにあるものより5倍の太さで描きたいならば, $\Delta R(-5)=0, \Delta R(5)=0.008*(5-1)=0.032$ だから, $A_0=0.016$ (インチ), $A_1=0.0032$ (インチ) とすればよい.

2.8.2 原子プロット・インストラクション 705, 715. - 指定方式.

```

|---*---|1---*---|2---*---|3---*---|4---*---|5---*---|6---*---|7---*---|
| LA | INST | NPLANE | NDOT | NLINE | NDASH | SYMHGT | PAROFF | PEROFF |
    
```

LA: 0 or 1 1 なら 2.8.1 と同じ継続カードがくる.

NPLANE: =0, 楕円なし =1, 輪郭楕円のみ =3, 主楕円のみ =4, 輪郭+主楕円

NDOT: (主楕円の裏側について)

<0, 実線 =0, なし =3, 4トット =4, 8トット =5, 16トット =6, 32トット

NLINE: (前面の主軸と陰影について) =0, なし =1, 主軸のみ =N, 主軸+(N-1)個の陰影線

NDASH: (逆向き主軸について) =0, なし =N, N 個の点線

SYMHGT, PAROFF, PEROFF: 2.8.1 と同じ

2.9 ボンドプロット・インストラクション (800 シリーズ). - ボンドにはexplicit (VDC 使用) と implicit (400 シリーズで選んだ原子リストの中から VSC を使って与える) の2種類がある. また, 線の種類で分けるとスティックボンドとラインボンドがある. ラインボンドは原子中心に記号 (例えば, +, x, * など) を置いてその間を直線で結ぶ. スティックボンドは円錐棒状のボンドを使う. 円錐の透視法によるテーパは subroutine PRIME の TAPER で変えられる. また, 結合距離のラベルはスティックボンドにそって描くことができる. すべてのボンドパラメータは

Format No.2 カード (2.1.3 を参照) で与える。そのパラメータは以下のとおりである。

BT: スティックボンドの表現方指示 ($-5 \leq BT \leq 5$)。負の値は両端が楕円体と交わる。正の値は楕円体または接円錐と交わる。0 はボンドを描かない。絶対値はボンドの線を円錐の周囲に何度きざみに描くかを与える。|BT| = 1, 2, 3, 4, 5 に対して角度きざみはそれぞれ 180° (2本線), 90° , 45° , 22.5° , 11.25° となる。

BR: スティックボンドの平均半径(単位 A)。半径は 0.01-0.06A がよい。

HGTPER: 結合距離の透視法ラベル文字の高さ(インチ)。

PEROFF: その垂直オフセット量(インチ)。ボンドの中心からラベルの中心までの距離に関係。

HGTPAR: 結合距離の投影法ラベル文字の高さ(インチ)。

PAROFF: その垂直オフセット量(インチ)。

DEC: 距離の小数点以下の桁数。値が -1, 0, 1 はそれぞれ小数点が 1, 2, 3 桁を表わす。

2.9.1 インストラクション 801, 811. - explicit スティックボンド。2つの ADC でボンドを指定。Format No.1 カードを使い, Format No.2 カードを付けてもよい。2つの ADC は隣接したコラム・フィールドに書く。その間にブランク・フィールドを入れてもよい。

2.9.2 インストラクション 802, 812. - implicit スティックボンド。すべてのパラメータは Format No.2 カードで入力する。

2.9.3 インストラクション 803, 813. - implicit ラインボンド。Format No.2 カード使用。

2.9.4 インストラクション 821, 822. - 隠線処理(2.14 を見よ)。

811 - 813 は、モニター出力がないことを除けば、801 - 803 と同じ。802, 803 には配位多面体のボンドを描くための一連原子番号指定とその距離範囲を指定できる。

2.10 ラベルプロットング・インストラクション (900 シリーズ)。- 72 文字までのタイトル, 6 文字までの化学記号, 結合距離ラベル, プロッターで使用できる記号を描く。結合距離は小数点以下 1 桁, 2 桁, 3 桁のどれかで表わせる。インストラクションの 901 - 909 は通常のレタリング 913 - 916 は透視法によるレタリングを行う。レタリング面のために2つのベクトル, uprightベクトル(プロット面に平行)と基線ベクトル(透視用に3次元方向をもつ)を用いる。投影の場合基線ベクトルは一般ベクトルの投影された方向にそうか, 302 で回転したベクトル(θ 基線)方向にそうか, のどちらかである。 $\theta=0$ なら, θ 基線ベクトルはプロッタの +x 軸にそう。ラベルのセンタリングは次の順序で行なう。(1) A 原子の位置か, A と B の平均位置 P1 を見つける。(2) P1 を基線ベクトルにそって PAROFF(平行オフセット量)移動し, 次に uprightベクトルにそって PEROFF(垂直オフセット量)移動した点 P2 を見つける。(3) P2 をプロッタに投影した点 P3 を見つける。(4) XEDGE(X端のリセット値) >0 なら, x をその値にリセットする。XEDGE <0 なら, x の+側境界値から |XEDGE| を引いた所にリセットする。y についても同様である。

```

|---*---|1---*---|2---*---|3---*---|4---*---|5---*---|6---*---|7---
| LA | INST | ADC1 | ADC2 | XEDGE | YEDGE | SYMHGT | PAROFF | PEROFF |

```

LA=1 の時, 次のカードが継続する。

```

|---*---|1---*---|
|      | NSMBL |

```

LA: 0 or 3 (or 1 なら, 次に継続カード)

ADC1: A 原子の指定

XEDGE: x のリセット値

SYMHGT: プロット文字の高さ

PEROFF: 垂直オフセット量

INST: インストラクション・ナンバー

ADC2: B 原子の指定(または, ブランク)

YEDGE: y のリセット値

PAROFF: 平行オフセット量

NSMBL: CalComp の記号を与える番号(0-14)

2.10.1 インストラクション 901.- A 原子の化学記号を θ 基線にそって描く

2.10.2 インストラクション 902.- 次の Format No.3 カードのタイトルを θ 基線にそって描く

2.10.3 インストラクション 903, 913. - 原子 A から B へのベクトル傾きをもつタイトルを描く. 903 が投影で 913 が透視である. タイトル入力は 902 と同じ.

2.10.4 インストラクション 904, 905, 906, 914, 915, 916. - 一般方向をもつボンド距離ラベル. 904 - 906 が投影で, 数値の小数点以下の桁数が順に 1, 2, 3 になる. 914 - 916 が透視で, 小数点以下の桁数は同様.

2.10.5 インストラクション 908, 909. - プロッターのもつ記号プロット. 908 はペンアップ状態で記号位置までいく. 909 でペンダウン. 記号の番号は 0-14 で CalComp SYMBOL ルーチンにリストアップされている.

2.11 データ保存インストラクション (1100 シリーズ). - 入力した一連のインストラクションを保存し, 繰り返して使用する. インストラクション 1100 は 保存開始, 1102 は 保存終了, 1103 は 保存した一連のインストラクションを実行する.

```

|---|*---|
|  |INST|   INST: 1101, 1102 or 1103

```

2.12 ジョブ終了インストラクション (負数シリーズ). - インストラクション (-1) はジョブを終了し, subroutine EXIT によりジョブから出る. (-2) はプログラムを初期化して, 別のジョブをスタートする (新たにタイトルカードから始める). ただし, インストラクション 201 は 1 回きりでよく, 繰り返す必要はない.

```

|---|*---|
|  |INST|   INST: -1 or -2

```

2.13 付録のインストラクション (1200 シリーズ). - (省略)

2.14 隠線消去インストラクション (511, 821, 822). - 511 インストラクションは ATOMS table 中のすべての原子の投影された輪郭楕円を保存する. 511 は通常 802 や 812 インストラクションで使用されたのと同じ FORMAT No.2 カードを伴う. また, 511 は投影されたボンドの外形をほぼ四角形で保存する. この場合も, FORMAT No.2 カードを付けるか, あるいは 822 インストラクション (これも, FORMAT No.2 カードを含む) を続けて, 801/811 で使用した同じパラメータを用いる. 投影された外形インストラクションはステレオペアのそれぞれに対して再計算される. したがって, 511 と 821 or 822 インストラクションは普通, 入力データ保存シーケンスの最初にある. 投影原子とボンドの最大値は 500 と 599 である. 700 シリーズで描かれた化学記号, 800 シリーズで描かれた結合距離ラベル, 900 シリーズで描かれたラベルや記号は処理されない.

2.14.1 インストラクション 511. - 投影物外形の保存. オーバーラップした時の隙間の幅を指定することもできる. デフォルト値は 0.025 インチ か (SCAL1)^{1/2} × 0.030 インチ のどちらか大きい方

```

|---|*---|1---*---|
| LA| 511| OVMRGN |

```

LA: 2 (ボンドも保存) or 0

OVMRGN: オーバーラップの隙間(インチ). 0<OVMRGN<1.0

blank or 0 ならデフォルト値使用, 1 (or -1) なら隙間は 0.0

2.14.2 インストラクション 821. - explicit ボンド外形の保存. 上述の説明のとおり.

2.14.3 インストラクション 822. - implicit ボンド外形の保存. //

付録 2. データ入力の場合

```

-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
KAMIOKITE    FE2 MO3 O8
  5.781      5.781      10.060      90.000      90.000      120.000
0      0.0      1. 0. 0.      0.0      0. 1. 0.      0.0      0. 0. 1.
0      0.0      0.-1. 0.      0.0      1.-1. 0.      0.0      0. 0. 1.
0      0.0      -1. 1. 0.      0.0      -1. 0. 0.      0.0      0. 0. 1.
0      0.0      0.-1. 0.      0.0      -1. 0. 0.      0.0      0. 0. 1.
0      0.0      1. 0. 0.      0.0      1.-1. 0.      0.0      0. 0. 1.
0      0.0      -1. 1. 0.      0.0      0. 1. 0.      0.0      0. 0. 1.
0      0.0      -1. 0. 0.      0.0      0.-1. 0.      0.5      0. 0. 1.
0      0.0      0. 1. 0.      0.0      -1. 1. 0.      0.5      0. 0. 1.
0      0.0      1.-1. *0.      0.0      1. 0. 0.      0.5      0. 0. 1.
0      0.0      0. 1. 0.      0.0      1. 0. 0.      0.5      0. 0. 1.
0      0.0      -1. 0. 0.      0.0      -1. 1. 0.      0.5      0. 0. 1.
1      0.0      1.-1. 0.      0.0      0.-1. 0.      0.5      0. 0. 1.
FE(1)
  0.006004 0.006004 0.001016 0.003002 0.0      0.0      0.
FE(2)
  0.004669 0.004669 0.000978 0.333333 0.666667 0.512022 0.
MO
  0.001886 0.001886 0.000822 0.146032 0.292065 0.250000 0.
O(1)
  0.003656 0.003656 0.001340 0.0      0.0      0.392335 0.
O(2)
  0.004922 0.004902 0.000810 0.666667 0.333333 0.648554 0.
O(3)
  0.005830 0.005830 0.001233 0.487240 0.974481 0.364517 0.
O(4)
  0.004521 0.004521 0.001515 0.004211-0.000722-0.000722 0.
  0.166504 0.333008 0.635222 0.002453 0.000768 0.000768 0.
ORGN
  0.0      0.0      0.0      0.5      0.5      0.45      7.
CORN
  10.01     0.0      0.0      0.0      0.0      0.0      7.
3 201
***** INITIALIZE X-Y PLOTTER *****
3 301 20. 20. 75. 1.5
***** 20X20 BOUNDARY, INSIDE 1.5 CM MARGIN, VIEW FROM 75 CM *****
3 303
***** ELIMINATE ALL RETRACING *****
3 401 955501 -966601
***** STORE UNIT CELL CORNERS FOR CELL OUTLINE *****
3 404 8 8 1 3 0.5 0.5 0.5
***** STORE METAL ATOMS IN ONE UNIT CELL *****
3 405 1 3 4 7 2.30
***** STORE OXYGEN ATOMS AROUND METALS OF "404" LESS THAN 2.30 A *****
3 501 855501 855501 856501 855501 855601 1
***** B AXIS HORIZONTAL, C* AXIS VERTICAL, VIEWED ALONG A* AXIS *****
3 502 2 10.0 1 15.0
***** ROTATE 10 DEGREES ABOUT Y, THEN 15 DEGREES ABOUT X *****
3 503 2 3.0
***** STEREO ROTATION OF 3.0 DEGREES ABOUT Y FOR LEFT EYE VIEW *****
3 604 0 0 0 2.80
** AUTO SCALE AND POSITION TO 9X9, 95 PERCENT PROBABILITY ELLIPSOIDS **
3 1101
***** START SAVE SEQUENCE *****
2 511 1

```



```

3      1 3 4 7 3 0.50 2.30 0.04
***** STORE PROJECTED ATOMS AND BONDS FOR OVERLAP, MARGIN SET BY 0 ****
1 712      .25      1.1      .00
0
1 712
3
3      4      7
***** DRAW ALL ATOMS ELLIPSOIDS + PRINCIPAL AXES *****
2 812
3      1 3 4 7 3 0.50 2.30 0.04
***** DRAW IMPLICIT STIC BONDS *****
2 813
2      9 9 9 9      5.77 5.79
3      9 9 9 9      10.05 10.07
***** DRAW IMPLICIT LINE BONDS FOR CELL OUTLINE *****
3 902 855501      0      0      0.8      .7      0      0
KAMIOKITE
3 1102
***** END OF SAVE SEQUENCE *****
3 202 14.
***** ADVANCE PLOTTER 12 CM ALONG X *****
3 503 2 -3.0
***** STEREO ROTATION OF -3.0 DEGREES ABOUT Y FOR RIGHT EYE VIEW *****
3 1103
***** EXECUTE SAVED SEQUENCE FOR RIGHT EYE DRAWING *****
3 202 5.
***** ADVANCE PLOTTER 5 CM *****
-1

```

付録 3. RIPS コントロールカードの例

```

//G**** JOB S
/*JOBPARM LINES=20
//PSPCLG EXEC FORTXCLG,PARM=NOPRINT,REGION=2000
//FORT.SYSIN DD DSN=G0364.MINCS.FORT(ORTEP),DISP=SHR
//LKED.SYSLIB DD DSN=SYS1.FORTLIB,DISP=SHR
// DD DSN=SYS1.PSPLIB,DISP=SHR
//GO.SYSIN DD DSN=G****.*****.DATA,DISP=SHR
/*
//GO.FT06F001 DD SYSOUT=A
//GO.FT16F001 DD DSN=&&PSPOUT,DISP=(NEW,PASS),UNIT=WORK,
//      SPACE=(CYL,(10,10))
//PSPCNV EXEC PGM=PSPCNV
//STEPLIB DD DSN=KING.GR.LOAD,DISP=SHR
//XYSYS DD DSN=&&PSPOUT,DISP=(OLD,DELETE)
//GDFILE DD SYSOUT=(A,KNGWTR)
//WORK DD UNIT=WORK,SPACE=(CYL,(10,10)),DISP=(NEW,DELETE)
//SYSPRINT DD SYSOUT=A
//SYSIN DD *
* XY POS=(2,2),M=10,L=12,D=L
* END
/*
//

```

下線部はユーザーデータファイル