

粉末指数付けソフトウェア Conograph マニュアル

平成 28 年 11 月

目次

1. 全体の構成	1-1
2. 新規プロジェクトの作成／既存プロジェクトを開く	2-1
2.1. 新規プロジェクトの作成	2-1
2.2. プロジェクトを開く	2-4
2.3. サンプルプロジェクトを開く	2-6
3. ピークサーチ	3-1
3.1. ピークサーチの実行	3-1
3.2. ピークサーチ結果のチェック	3-3
3.3. マニュアルによるピークの除去と追加	3-4
4. 指数付けに用いられるパラメータ	4-1
4.1. 探索パラメータと装置パラメータ	4-2
4.2. 指数付け詳細設定パラメータ	4-4
5. 指数付けを行う	5-1
5.1. 指数付けの実行	5-1
5.2. 指数付け終了時	5-2
5.3. 格子定数のソート・フィルタリング	5-3
5.4. 有力な格子定数を選び出す	5-6
5.5. 格子定数を決定する	5-10
6. 格子定数およびゼロ点シフトの精密化	6-1
6.1. 精密化の実行方法	6-1
6.1.1. リストから選択した格子定数の精密化	6-1
6.1.2. ユーザが入力した格子定数の精密化	6-3
6.2. 「元に戻す」ボタン	6-5
7. 結果の出力	7-1
7.1. *.index.xml	7-1
7.2. Igor テキストファイルおよび*.index2.xml ファイル	7-1
7.3. バックアップファイル	7-2
8. 空間群の候補の決定	8-3
9. その他の GUI 操作	9-1
9.1. 環境設定	9-1
9.2. Help メニュー	9-2
10. 結果を改善したいときに使用するパラメータ	10-1
10.1. ピークサーチ	10-1
10.2. 粉末指数付け	10-3

10.2.1.	より丁寧な探索を行う	10-3
10.2.2.	計算を速くする	10-3
10.2.3.	Figures of merit によるソート結果を改善する	10-4
11.	入出力テキストファイルのフォーマット	11-1
12.	最後に.....	12-1
12.1.	論文引用のお願い.....	12-1
12.2.	バグ報告について.....	12-1

謝辞

Conograph プロジェクトのために粉末回折データをご提供頂いた茨城大学, 東京工業大学, 高エネルギー加速器研究機構の先生方, GUI 開発にご協力を頂いた(株)ヴィジブルインフォメーションセンターの皆様にご感謝いたします。また本ソフトウェアは, 科学研究費補助金若手研究 (B) (No. 22740077) および茨城県(J-PARC-23D06)の助成を受けて開発されました。

1. 全体の構成

粉末指数付けソフトウェア Conograph は、高エネルギー加速器研究機構によって開発された CUI プログラム:粉末指数付けプログラム CUI 版 Conograph およびピークサーチプログラムを、GUI 操作により実行するためのソフトウェアである。

本ソフトウェアにはインストーラ (setup.exe) が用意されており、これにより必要なランタイムがインストールされる。

Conograph のスクリーンショットを下図 1-1に示す。

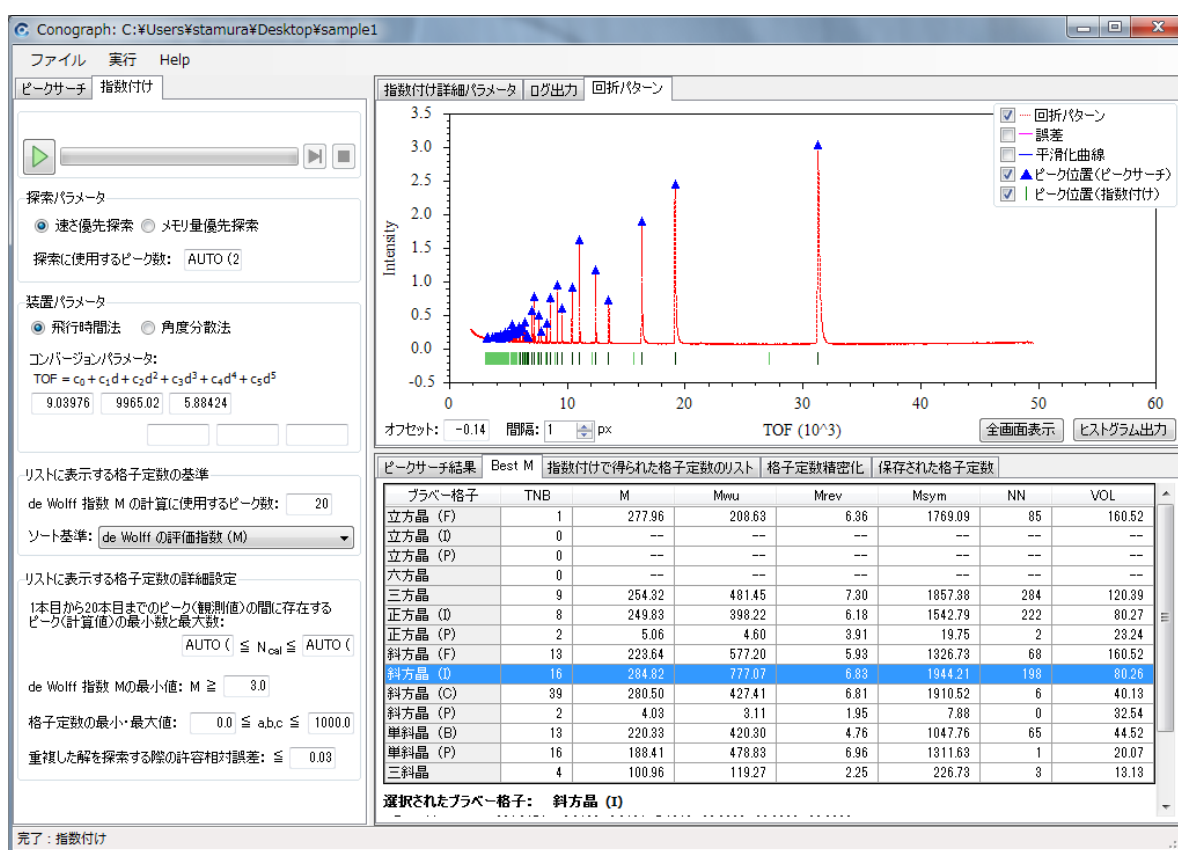


図 1-1 Conograph のユーザ・インターフェース

2. 新規プロジェクトの作成／既存プロジェクトを開く

Conograph の起動直後の様子を下図 2-1に示す。ピークサーチおよび指数付けを行うためには、新しいプロジェクトを作成するか、あるいは既存のプロジェクトを開く必要がある。本章ではその手順を説明する。

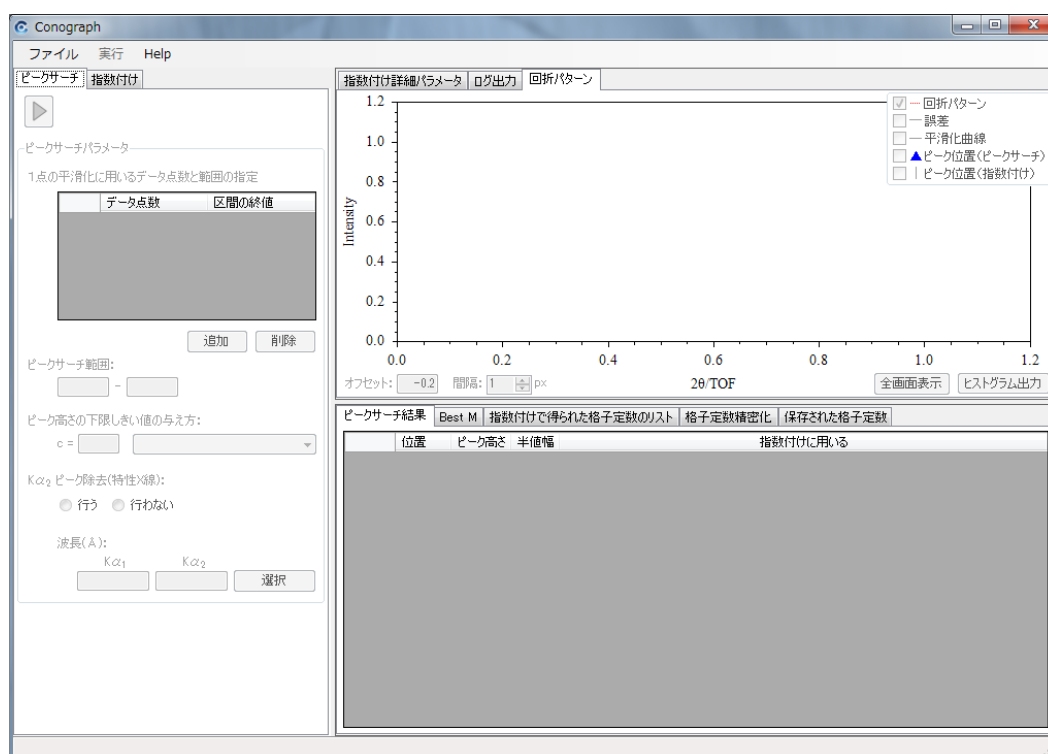
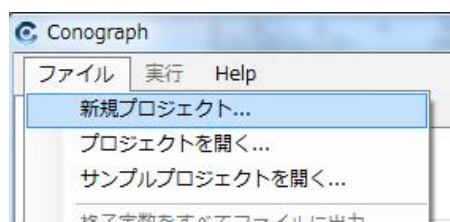


図 2-1 起動直後の様子

2.1. 新規プロジェクトの作成

新規にプロジェクトを作成するには、まず以下のように「ファイル>新規プロジェクト」を選択し：



その後表示されるプロジェクト作成用ダイアログ上で、図 2-2のように回折データファイルとプロジェクトフォルダを指定すればよい。

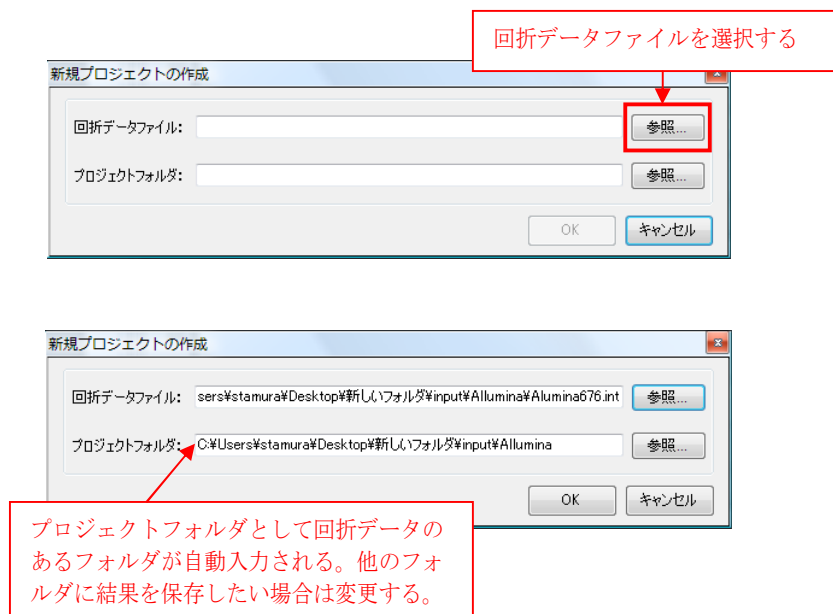
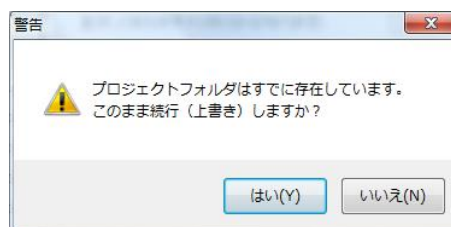


図 2-2 新規プロジェクト作成ダイアログ

回折データファイルのフォーマットとして XY (図 2-3)、IGOR (図 2-4)、Rietan (図 2-5) の 3 形式が使用できる。XY 形式と IGOR 形式では、データの 3 列目に Y 値 (2 列目) の観測誤差を入力することが出来る。3 列目に何も書いてなければ、Y 値のルートが観測誤差として使用される。なお、LF、CR+LF、CR は改行コードとして、空白、タブは分離記号として処理される。

プロジェクト情報を与えた後「OK」ボタンを押すとプロジェクトが作成される。プロジェクトフォルダには、自動出力されるファイル全てを格納するためのフォルダ **auto_generated_files** が生成される。プロジェクト作成直後、このフォルダには、含まれるのは、図 2-2 で指定された回折データファイルのコピーと、パラメータ設定ファイル (図 11-1、図 11-2, 4) である。

指定したプロジェクトフォルダが、既に存在し、**auto_generated_files** フォルダをサブフォルダとして含む場合、以下のようなダイアログが表示される：



「はい」を選択した場合、**auto_generated_files** フォルダ内にあった元のファイルはすべて削除される。

tof	yint	yerr
7. 00000	4942	70. 29935988
7. 01697	4956	70. 39886363
7. 03395	5084	71. 30217388
(中略)		
89. 66605	818	28. 60069929
89. 68303	818	28. 60069929
89. 70000	818	28. 60069929

図 2-3 XY 形式の書式例

IGOR		
WAVES/0 tof, yint, yerr		
BEGIN		
8792. 00000	0. 85962	0. 05899
8808. 00000	0. 79276	0. 05643
8824. 00000	0. 75064	0. 05470
(中略)		
199536. 00000	0. 40015	0. 01698
199664. 00000	0. 36920	0. 01634
199792. 00000	0. 39202	0. 01686
END		

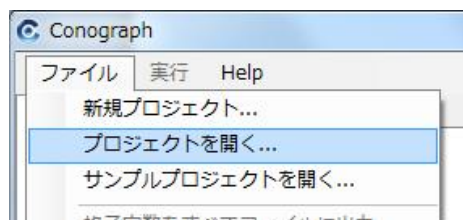
図 2-4 IGOR 形式の書式例

3500	10. 0000	0. 0200
15, 16, 26, 19		
30, 15, 23, 22		
26, 25, 20, 17		
(中略)		
8, 12, 4, 9		
13, 12, 8, 6		
7, 6, 11, 1		

図 2-5 Rietan 形式の書式例

2.2. プロジェクトを開く

既存のプロジェクトを開くには、以下のように「ファイル>プロジェクトを開く」を選択し：



その後表示されるフォルダ選択ダイアログからプロジェクトフォルダを指定すればよい。

すると図 2-6のように、回折パターンファイルとパラメータ設定ファイル (*.inp.xml) が読み込まれた状態になる。「回折パターン」タブ（図中**赤枠**）には、測定された回折パターン（...）とその誤差（—、回折パターンファイルに誤差が含まれている場合のみ）が表示される。

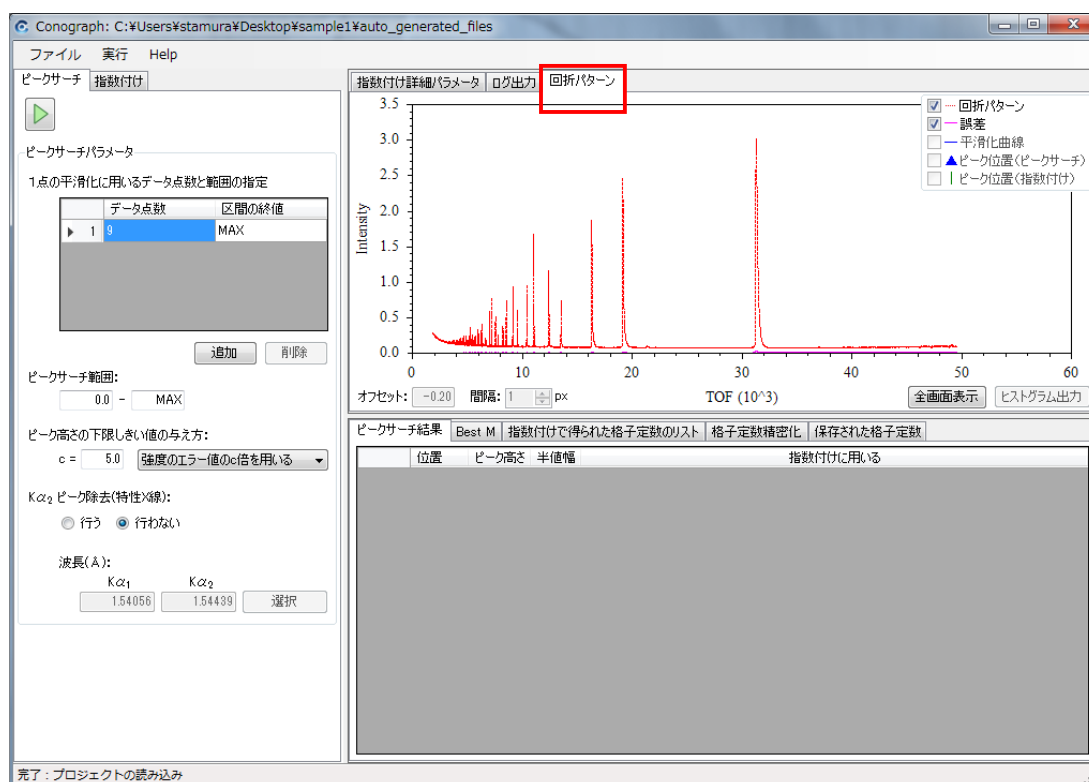


図 2-6 プロジェクトを開いた直後の様子（ピークサーチ前）

開いたプロジェクトにおいて、すでにピークサーチが行われており、*_pks.histogramIgorというファイルが存在する場合は、図 2-7のように指数付けタブが表示される。また、回折パターン（...）、ピーク位置（▲）および平滑化された回折パターン（—）が表示される。

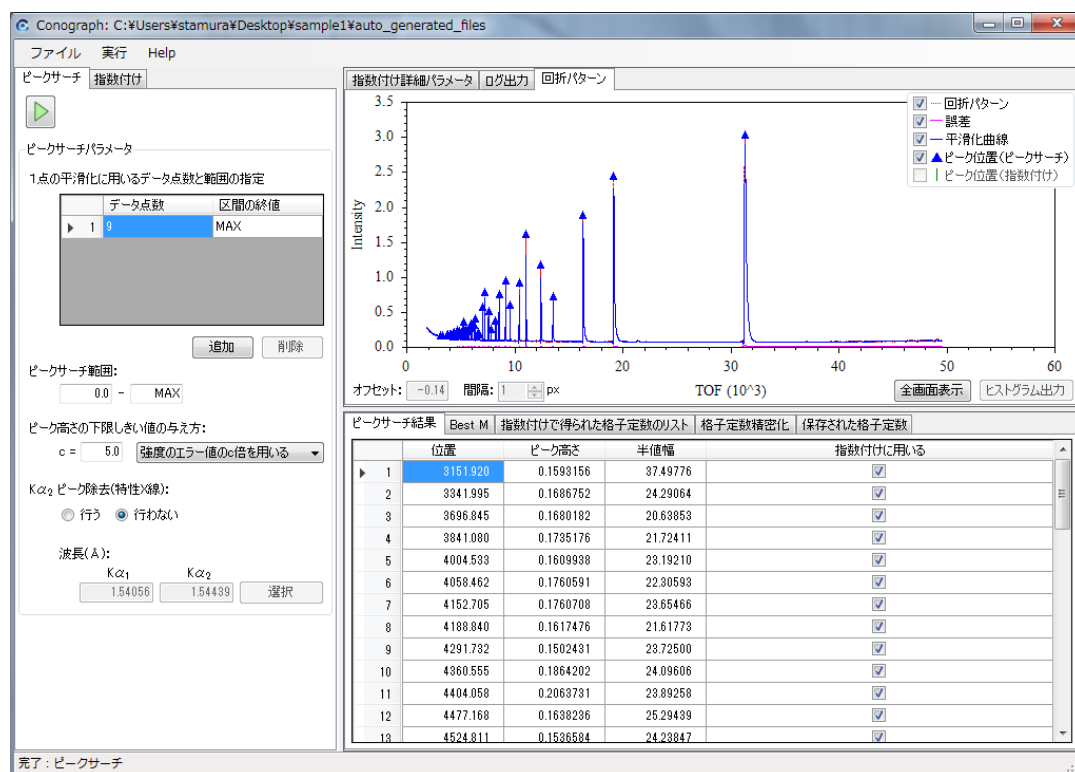
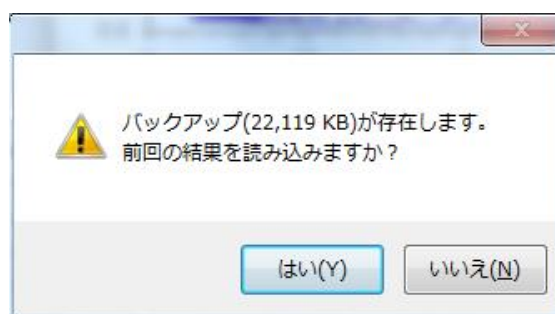


図 2-7 プロジェクトを開いた直後の様子（ピークサーチ後）

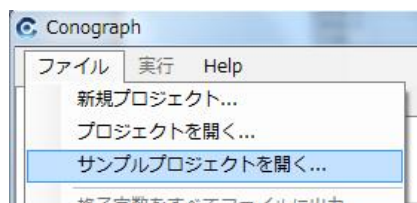
また、バックアップファイルが存在している場合には、以下のようなダイアログが表示される：



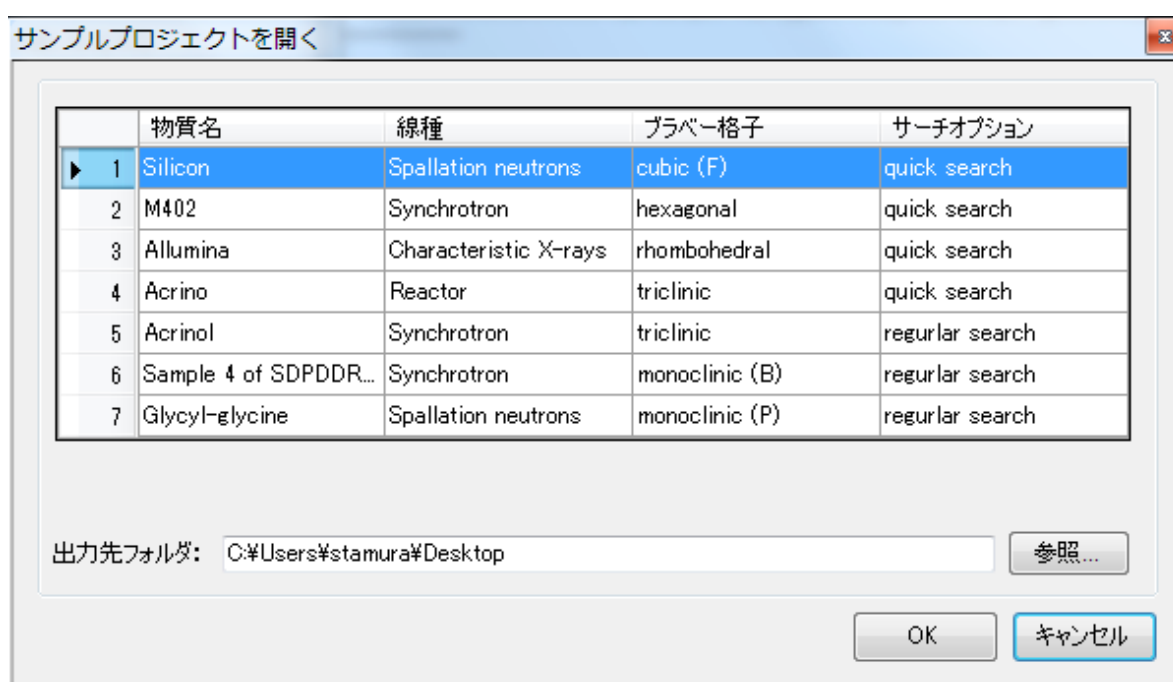
「はい」を選択すると、バックアップファイルを読み込み、前回保存した指数付け後の状態を復元する。「いいえ」を選択すると指数付け前の状態となる。

2.3. サンプルプロジェクトを開く

用意されているサンプルプロジェクトを開くには、「ファイル>サンプルプロジェクトを開く」:



を選択した時に現れる以下のダイアログ上で、開きたいサンプルと、出力先フォルダを指定すればよい:

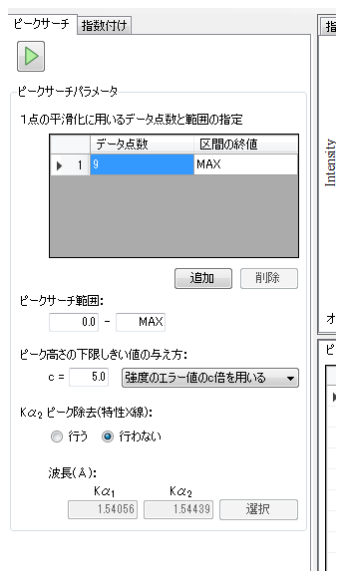


すると、「出力先フォルダ」内に選択したサンプルプロジェクトが生成され、そのプロジェクトが開かれる。

3. ピークサーチ

3.1. ピークサーチの実行

プロジェクトを開いた後は、指数付けに用いるピーク位置情報を得るため、まずピークサーチを行う必要がある。ピークサーチは「ピークサーチ」タブを用いて行う：



「ピークサーチ」タブの詳細を図 3-1に示す。

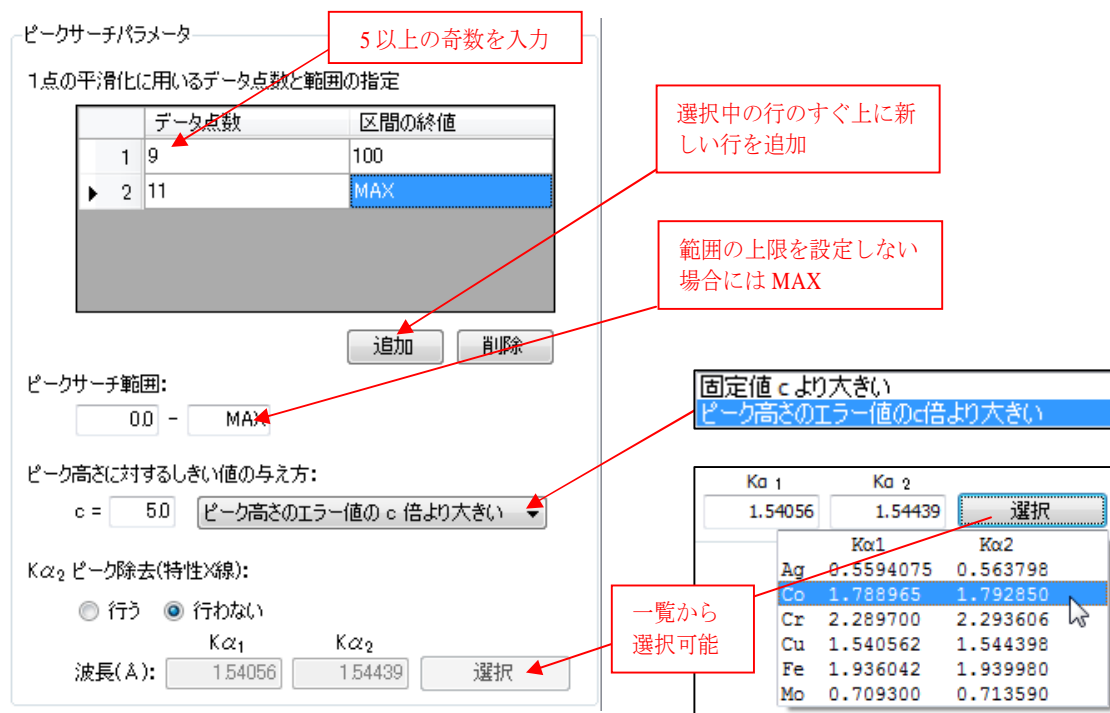

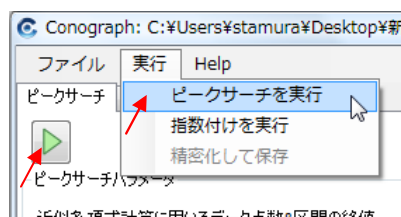
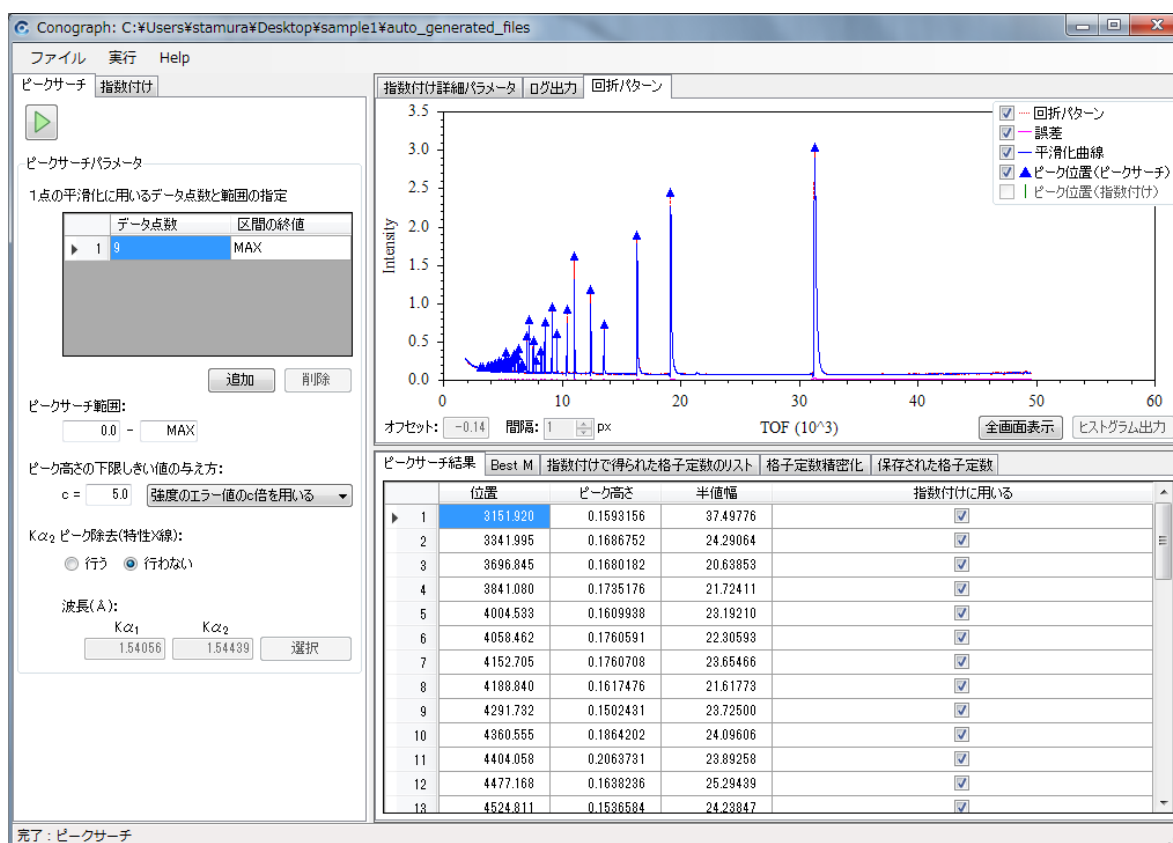


図 3-1 ピークサーチパラメータの設定

ピークサーチの実行は、実行ボタンを押すか「メニュー>実行>ピークサーチを実行」を選択する：



ピークサーチが終了すると以下のような画面になる：



「回折パターン」タブには、平滑化された回折パターン（—）およびピーク位置（▲）が新たに表示される。（同時に、平滑化された回折パターンおよびピーク位置の情報は **auto_generated_files/*_pks.histogramIgor** という名称のファイルに保存される¹⁾。）

¹⁾作成された*_pks.histogramIgor ファイル（図 11-4）の末尾にあるピークサーチ結果をテキストエディタで修正し、同じプロジェクトを再度読み込むことで、外部のソフトによるピークサーチ結果を使用することも可能。

3.2. ピークサーチ結果のチェック

指数付けのために適切なピークサーチ結果を得るには、回折パターンのグラフ表示を拡大し、特に底角のピークにおいて以下の問題が起きていないか、指数付けを始める前にチェックしておくといよい。

- ・ 多くの回折ピークが拾われていない状態になっていないか？
- ・ ノイズ（回折ピークかどうか不明確なぐらいの小さなピークを含む）がピークとして拾われていないか？

上記のようなピークサーチ結果に生じ得る問題は、一部のピークサーチパラメータを調整し、ピークサーチを再度実行することで解決できる（パラメータの調整方法は節10.1を参照）。

「回折パターン」タブにおけるグラフの倍率変更は「ホイール回転」あるいは「左ドラッグによるラバーバンド（＝長方形範囲）選択」により行うことができる。表示領域の平行移動は「Ctrl+左ドラッグ」あるいは「中ドラッグ」により行う。図 3-2及び表 3-1に、グラフ上を右クリックすることで現れるメニューを示す。

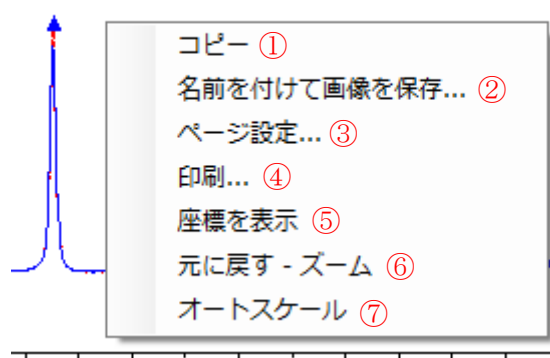


図 3-2 右クリックメニュー

表 3-1 右クリックメニュー

①	描画内容をクリップボードにコピーする
②	描画内容を画像ファイルに保存する
③	印刷時のページ設定を行う
④	描画内容の印刷を行う
⑤	グラフのプロット点の座標表示のオン/オフを切り替える
⑥	描画内容を一つ前の表示に戻す
⑦	描画全体を収めるようにスケールを調整する

3.3. マニュアルによるピークの除去と追加

この節では、ピークサーチパラメータを調整する以外にマニュアルで行うことができる、ピークサーチ結果の修正方法を紹介する。

まず指数付けに用いるピークは「ピークサーチ結果」タブ（図 3-3）の「指数付けに用いる」カラムのチェックボックスより選択できる。

なお、ピークを選択操作は、「回折パターン」タブの表示と連動しており（図 3-4）、どのピークが指数付けに用いられるのか、グラフ上で視覚的に判断することができる。

ピークサーチ結果				
Best M				
指数付けで得られた格子定数のリスト				
格子定数精密化				
保存された格子定数				
	位置	ピーク高さ	半値幅	指数付けに用いる
1	3154.899	0.1589456	37.49776	<input checked="" type="checkbox"/>
2			24.29064	<input checked="" type="checkbox"/>
3	3696.845	0.1680182	20.63853	<input checked="" type="checkbox"/>
4	3841.080	0.1735176	21.72411	<input checked="" type="checkbox"/>
5	4004.533	0.1609938	23.19210	<input checked="" type="checkbox"/>
6	4058.462	0.1760591	22.30593	<input checked="" type="checkbox"/>
7	4152.705	0.1760708	22.65466	<input checked="" type="checkbox"/>
8	4188.840	0.1617476		<input checked="" type="checkbox"/>
9	4291.732	0.1502431	23.72500	<input checked="" type="checkbox"/>
10	4360.555	0.1864202	24.09606	<input checked="" type="checkbox"/>
11	4404.058	0.2063731	23.89258	<input checked="" type="checkbox"/>
12	4477.168	0.1638236	25.29439	<input checked="" type="checkbox"/>
13	4524.811	0.1536584	24.23847	<input checked="" type="checkbox"/>

図 3-3 入力ピーク位置

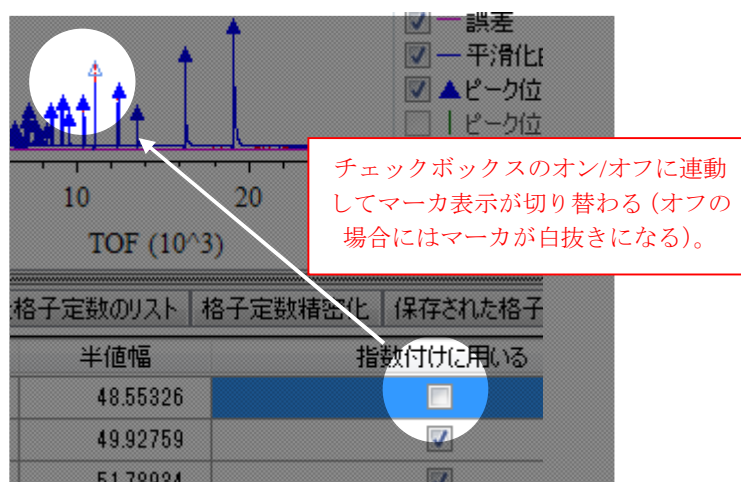


図 3-4 「回折パターン」タブとの連携

また、グラフ上でダブルクリックすることにより、マウスポインタの位置にピークを追加することができる（ただし y 座標の値は、回折パターンの補間により自動決定される）。ピーク位置や半値幅の具体的な値は「ピークサーチ結果」タブ内で編集できる（図 3-5）。

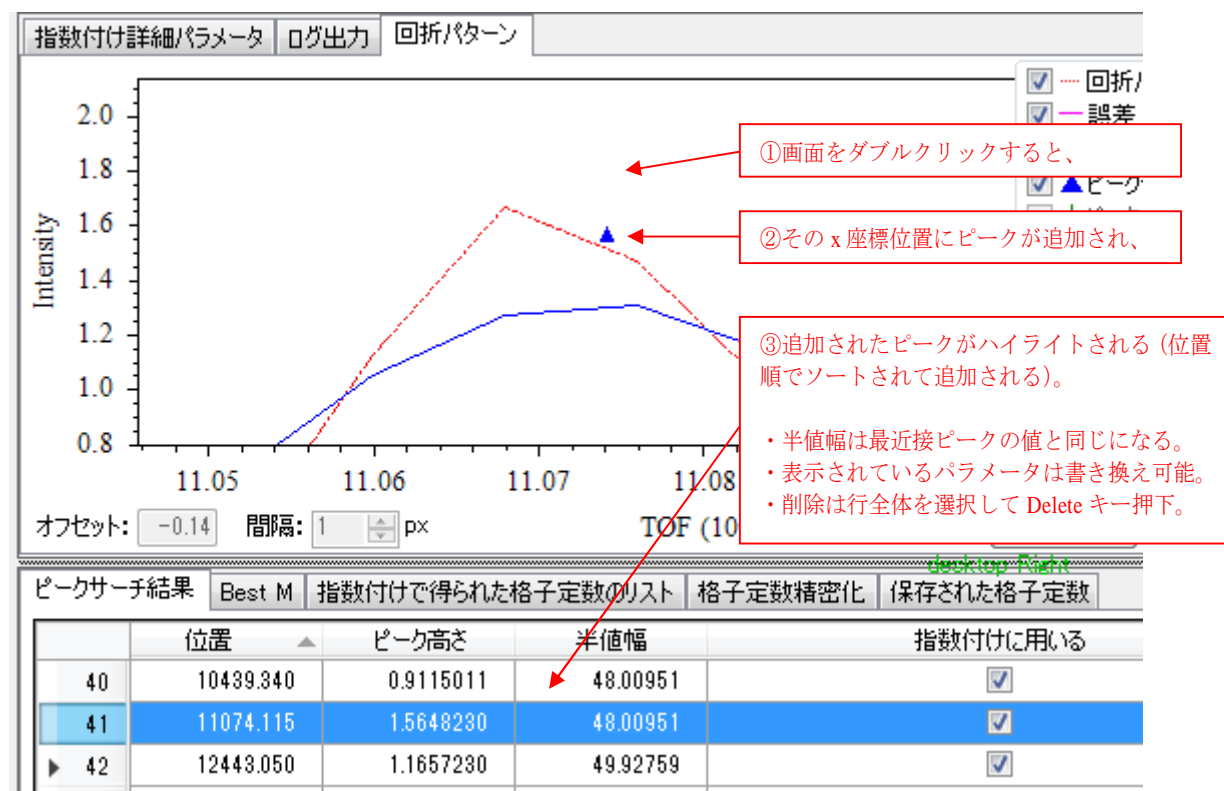


図 3-5 ピークの追加

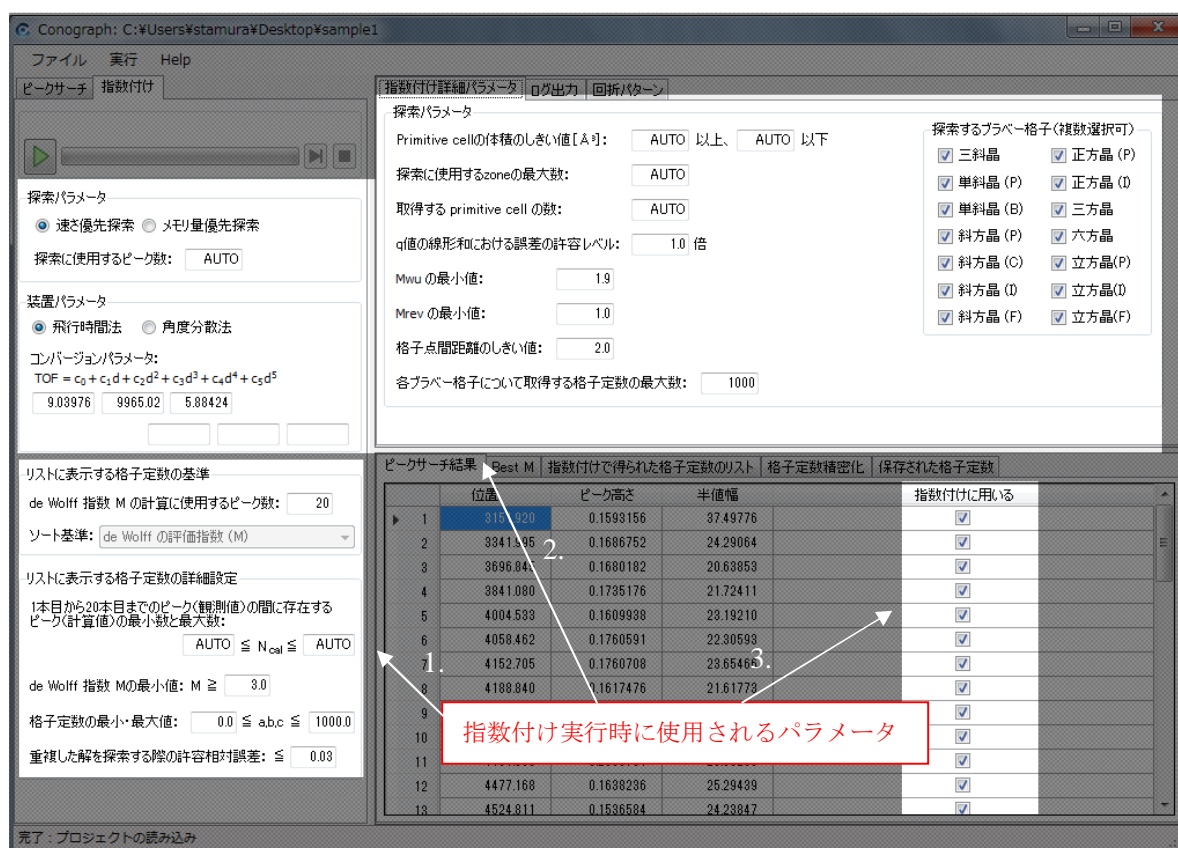
4. 指数付けに用いられるパラメータ

ピークサーチ後に指数付けを実行する際は、下図 4-1の3か所のパラメータが使用される。

1. 「指数付け」タブのパラメータ
 - a. 探索パラメータと装置パラメータ
 - b. リストに表示する格子定数のソート基準としきい値 (指数付けの後でも変更できる)
2. 「指数付け詳細パラメータ」タブ
3. 「ピークサーチ結果」タブ

新しいプロジェクトを作成した直後には、各パラメータの推奨値がセットされており、装置パラメータを除けば、推奨値は変えずに指数付けに進んでよい。特に、2.のパラメータの (ピークサーチの結果に問題がなければ3.も) 変更は必要ない。

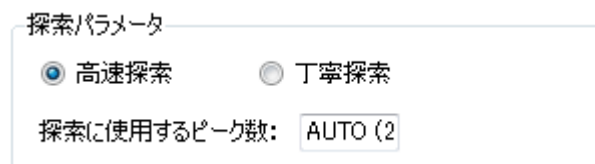
3. のパラメータについては節3.3で紹介した。1.b.のパラメータは、指数付けの後でも変更できるため、節5.3で紹介する。この章では、残る2種類のパラメータについて説明する。



4.1. 探索パラメータと装置パラメータ

探索パラメータ部では、以下の二つの探索の選択と指数付けに使用するピーク数が設定できる。

- ・ 高速探索 (単位胞のサイズが小さい、または、対称性の高いケース向き)
- ・ 丁寧探索 (全てのケースに対応)



探索パラメータ

☒ 高速探索 ☐ 丁寧探索

探索に使用するピーク数: AUTO (2)

図 4-2 探索パラメータ

二つの探索の基礎となるアルゴリズムは同一なので、「高速探索」で適当にパラメータを変更すれば、二つの探索は同じ結果を返すようになる。

「高速探索」でも指数付けはうまく行くケースが多いが、難しいケースでは「丁寧探索」が必要となることがある。「丁寧探索」では、計算に 10 分以上を要することがある。

装置パラメータ部では、飛行時間法・角度分散法を選択し、ゼロ点シフトを除いて、各回折装置に固有の値をそれぞれ入力する (図 4-3、図 4-4、表 4-1)。ゼロ点シフトは、通常 0 を入力し、指数付け後に精密化により値を求める。



装置パラメータ

① ☒ 飛行時間法 ☐ 角度分散法

コンバージョンパラメータ:

$TOF = c_0 + c_1 d + c_2 d^2 + c_3 d^3 + c_4 d^4 + c_5 d^5$

9.03976 9965.02 5.88424

②

装置パラメータ

① ☐ 飛行時間法 ☒ 角度分散法

波長: 1.54056 ③

ゼロ点シフト: $\Delta 2\theta =$ 0.0 deg. ④

⑤

ゼロ点シフトを推定

図 4-3 装置パラメータ (上: 飛行時間法、下: 角度分散法)

表 4-1 装置パラメータ

①	測定法を選択。「飛行時間法」または「角度分散法」。
②	コンバージョンパラメータ。左から多項式の 0 次～5 次の係数である。
③	波長[Å]。
④	ピークシフトパラメータ $\Delta 2\theta$ [度]。
⑤	ゼロ点シフトパラメータを Reflection pair 法により推定する。

ゼロ点シフトの値を、指数付け前に、reflection pair 法[1] により推定することも可能である。ピークシフトパラメータが 0.1 度を超えるような場合には、より正しい推定値を使用することで、指数付けの結果が改善されることはあり得る。

Reflection pair 法では、d 値の比がほぼ 2 倍に等しい二つのピーク位置を用いて、ゼロ点シフトを推定する。図 4-3 のように複数の候補が出力されるので、その中から推定値を選択する必要がある。

装置パラメータ

☐ 飛行時間法 ☒ 角度分散法

波長: 1.81958

ゼロ点シフト: $\Delta 2\theta =$ 0.0 deg.

ゼロ点シフトを推定

Reflection pair 法による推定

ピーク1	ピーク2	sin θ の比	ゼロ点シフト
1	2	2.0342	0.3432
3	11	1.9715	-0.7398
4	19	2.0037	0.1229
5	19	1.9593	-1.3801
5	20	2.0019	0.0646
6	21	2.0012	0.0423
7	22	1.9800	0.0000

OK キャンセル

装置パラメータ

☐ 飛行時間法 ☒ 角度分散法

波長: 1.81958

ゼロ点シフト: $\Delta 2\theta =$ 0.3432 deg.

ゼロ点シフトを推定

推定値を一つ選択すると、推定に使われたピークがハイライトされる

ボタンをクリックするとゼロ点シフト値の推定が行われ、その結果が一覧表示される

推定値を選択し OK ボタンを押すとその値が入力される

図 4-4 ゼロ点シフトパラメータの推定

4.2. 指数付け詳細設定パラメータ

「指数付け詳細パラメータ」タブのパラメータ推奨値は、プロジェクト作成時に自動でテキストボックス内にセットされており、特に変更は必要ない。ただし、推奨値は、難しいケースでもパラメータを変えて指数付けをやり直す必要がないように選択されたものなので、第9章で説明するカスタマイズによって、計算時間を速くする、などの改善が得られることはあり得る。

探索パラメータ

Primitive cellの体積のしきい値[A³]: ①

探索に使用するzoneの最大数: ②

取得する primitive cell の数: ③

q値の線形和における誤差の許容レベル: ④

Mwu の最小値: ⑤

Mrev の最小値: ⑥

格子点間距離のしきい値: ⑦

各ブラベー格子について取得する格子定数の最大数: ⑧

探索するブラベー格子(複数選択可)

☒ 三斜晶
☒ 正方晶(P)

☒ 単斜晶(P)
☒ 正方晶(I)

☒ 単斜晶(B)
☒ 三方晶

☒ 斜方晶(P)
☒ 六方晶

☒ 斜方晶(C)
☒ 立方晶(P)

☒ 斜方晶(I) ⑨
☒ 立方晶(I)

☒ 斜方晶(F)
☒ 立方晶(F)

図 4-5 指数付け詳細設定パラメータ

表 4.2 に各パラメータの説明と、その推奨値を記載する。


表 4-2 指数付け詳細設定パラメータ

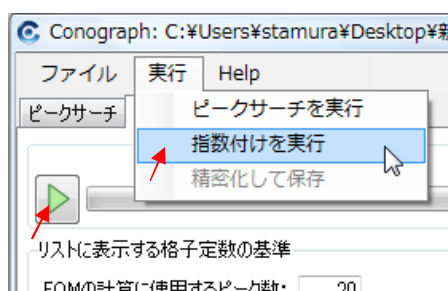
	内容	推奨値
①	Primitive cell の体積の下限と上限	AUTO
②	選別されたトポグラフから取得する伊藤の式を満たす 4 つの q 値 ($=1/d^2$) (q_1, q_2, q_3, q_4) の最大数。	AUTO
③	列挙する格子定数 (triclinic のみ) の最大数。	AUTO
④	伊藤の式を含む、q ($=1/d^2$) 値の線形和が 0 に等しいかどうかを判定するための基準値。	1.0
⑤	格子定数の Wu 指数(MWu)と Reversed FOM (MRev)の値と、最近接した二つの格子点間の距離についての下限しきい値。このしきい値を下回った格子定数は削除され、指数付け実行後に見ることはできない。	1.9
⑥		1.0
⑦		2.0
⑧	格子定数のうち同じ種類のブラベー格子を持つものと de Wolff 指数(M)でソートしたときの順位が、この数を下回る格子定数は削除され、指数付け実行後に見ることはできない。	1000
⑨	該当するブラベー格子の格子定数の出力が必要ないときは、チェックを外す。	<input checked="" type="checkbox"/> (Yes)

5. 指数付けを行う

ピークサーチ、装置パラメータを設定した後は、指数付けを実行する。

5.1. 指数付けの実行

指数付けを開始し、格子定数の候補のリストを取得するには、「指数付け実行」ボタンを押すか、「メニュー>実行>指数付けを実行」を選択すればよい（設定した入力パラメータの値は、**auto_generated_files** フォルダの中に、*_pks.histogramlgor ファイル、*.inp.xml ファイルとして自動保存される）：



指数付け実行中は、「ログ出力」タブに経過が出力される（下図 5-1）。解の探索を打ち切って後続処理へと移行するためのスキップボタンは解の探索中にのみ使用可能である。指数付け実行を中止するキャンセルボタンは、実行中は常に使用可能である。

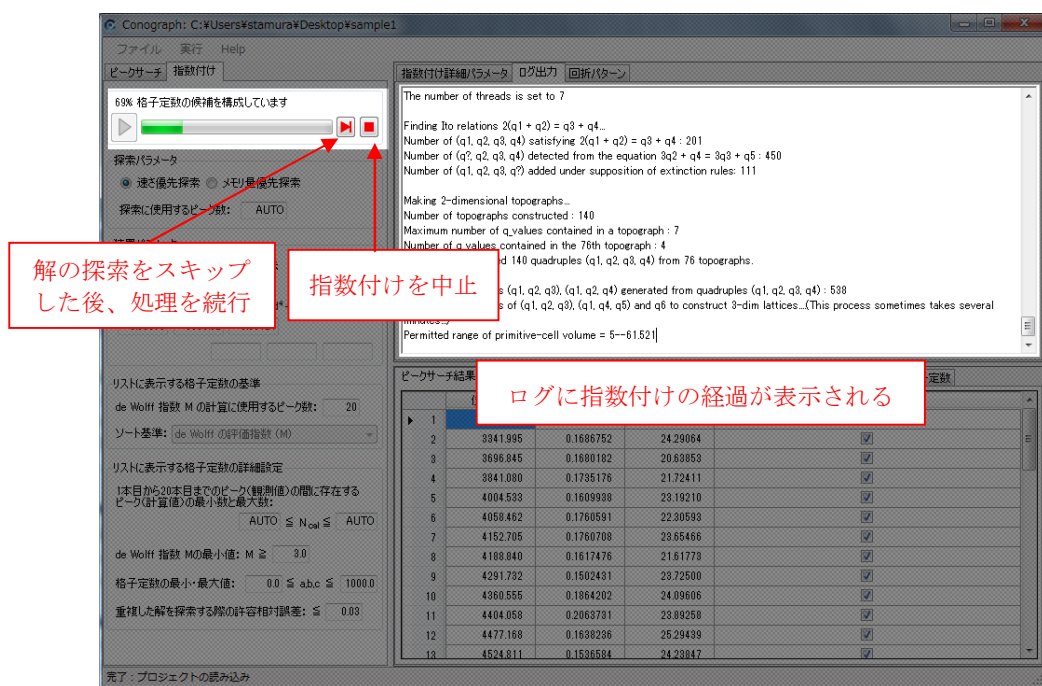


図 5-1 指数付け実行中の様子

5.2. 指数付け終了時

指数付けが終了すると、下図 5-2のような画面になる。

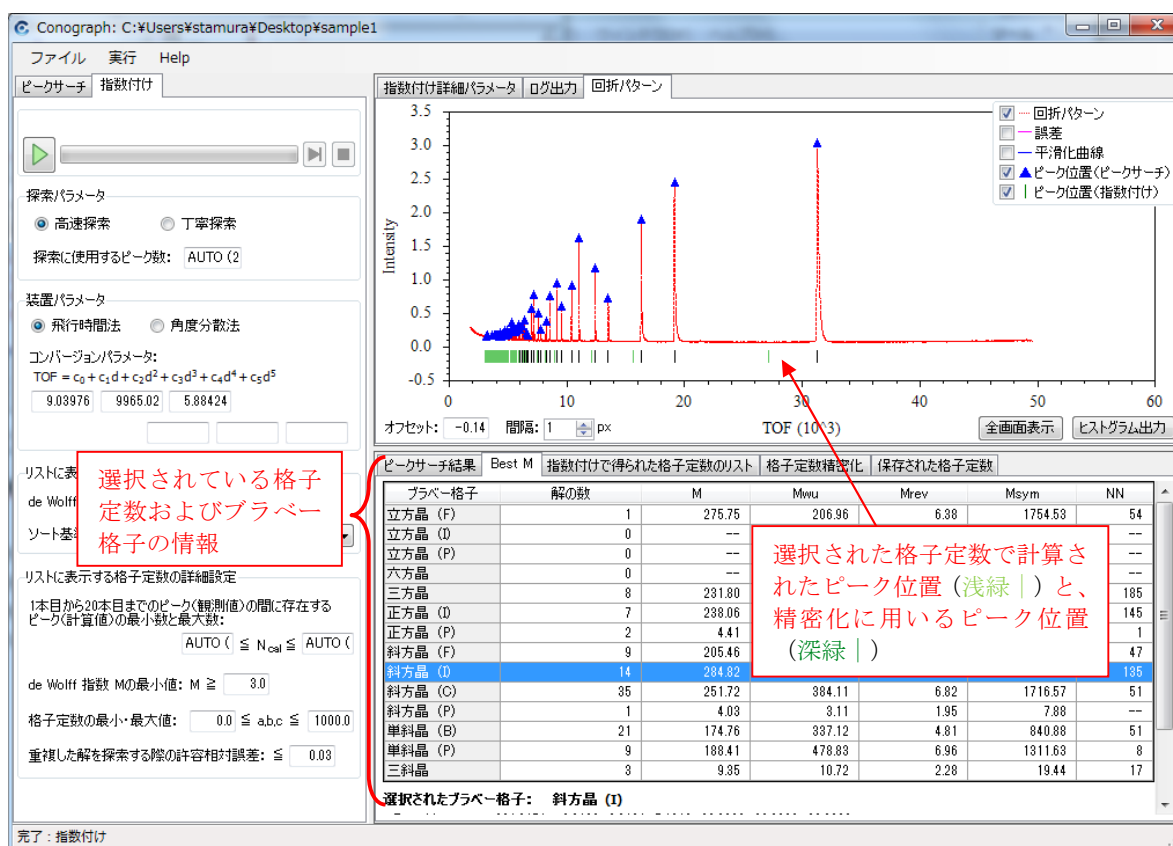


図 5-2 指数付け実行直後の様子

最大の de Wolff 指数[6]を持つ格子定数が自動的に選択され、その情報が「選択された格子定数」タブに表示される。またグラフ上に、選択された格子定数から計算されたピーク位置が浅緑色のティックマーク（|）で表示される。その中でも精密化（第6章）に用いるピーク位置については、深緑色のティックマーク（|）で表示される。

5.3. 格子定数のソート・フィルタリング

「リストに表示する格子定数の基準」「リストに表示する格子定数の詳細設定」パネルにあるパラメータを使用することで、指数付けによって得られた格子定数の候補をソート・フィルタリングすることができる。

指数付けの実行後、「指数付けによって得られた格子定数のリスト」タブのドロップダウンメニューにリストされる格子定数は、パネル内のパラメータを用いてソート・フィルタリングされている（図 5-3）。なお、指数付けの実行後のどの時点においても、このパネルにあるパラメータの値は、変更してソート・フィルタリングをやり直すことが可能である。

リストに表示する格子定数の基準

de Wolff 指数 M の計算に使用するピーク数: ①

ソート基準: de Wolff の評価指数 (M) ②

リストに表示する格子定数の詳細設定

1本目から20本目までのピーク(観測値)の間に存在するピーク(計算値)の最小数と最大数:

③ ≤ N_{cal} ≤ ④

de Wolff 指数 M の最小値: M ≥ ⑤

格子定数の最小・最大値: ≤ a,b,c ≤ ⑥

重複した解を探索する際の許容相対誤差: ≤ ⑦

ソート基準

格子定数のリストのソート基準(Figure of merit)。詳細は表 5-2及び表 5-2を参照。

リストに表示する格子定数のしきい値

表示される格子定数に関するしきい値を与えるパラメータ。パラメータの意味は及び表 5-1を参照。このテキストボックスの内容を変更した後、「Enter キーを押す」または「別のテキストボックス等に移動する」と、フィルタリングが再実行される。

ピークサーチ結果	指数付けで得られた格子定数のリスト	選択された格子定数	格子定数
ブラベー格子			M, Mwu, Mrev, Msym, NN; a, b, c,
立方晶 (F)	277.96, 208.63, 6.36, 1769.09, 85; 5.43, 5.43, 5.43, 90.0, 90.0, 90.0		
立方晶 (I)	--		
立方晶 (P)	--		
六方晶	--		
三方晶	254.32, 481.45, 7.30, 1857.38, 284; 3.84, 3.84, 9.41, 90.0, 90.0, 120.0		
正方晶 (I)	249.83, 398.22, 6.18, 1542.79, 222; 3.84, 3.84, 5.44, 90.0, 90.0, 90.0		
正方晶 (P)	5.06, 4.60, 3.91, 19.75, 2; 2.72, 2.72, 3.14, 90.0, 90.0, 90.0		
斜方晶 (F)	223.64, 577.20, 5.93, 1326.73, 68; 5.43, 5.43, 5.44, 90.0, 90.0, 90.0		
斜方晶 (I)	284.82, 777.07, 6.83, 1944.21, 198; 3.84, 3.84, 5.43, 90.0, 90.0, 90.0		
斜方晶 (C)	280.50, 427.41, 6.81, 1910.52, 6; 3.84, 5.43, 1.92, 90.0, 90.0, 90.0		
斜方晶 (P)	4.03, 3.11, 1.95, 7.88, 0; 2.70, 3.14, 3.84, 90.0, 90.0, 90.0		
単斜晶 (B)	220.33, 420.30, 4.76, 1047.76, 65; 3.99, 5.43, 2.13, 90.0, 105.5, 90.0		
単斜晶 (P)	188.41, 478.83, 6.96, 1311.63, 1; 3.33, 1.92, 3.33, 90.0, 109.5, 90.0		
三斜晶	100.96, 119.27, 2.25, 226.73, 3; 2.07, 2.10, 3.30, 106.8, 91.0, 105.8		

格子定数の候補のリスト

「リストに表示する格子定数のしきい値」の基準を満たした格子定数が、ブラベー格子別に、「ソート基準」でソートされて並んでいる。

図 5-3 リストに表示する格子定数のソート基準としきい値

表 4.3 に①--⑤の各パラメータの説明と、その推奨値を記載する。推奨値は、プロジェクト作成時に自動でテキストボックス内にセットされている。

表 5-1 リストに表示する格子定数に関するしきい値

	内容	推奨値
①	解の figure of merit (良度指数, FOM) の計算に使用するピークの数 n (q 値の小さい順に使用される。回折パターンに含まれるピーク数より大きな値も入力可。その場合、自動的に削減される)	20
②	1 本目から n 本目の観測ピークの範囲に存在する、ピーク数を、各々の格子定数を用いて計算出来る。そのピーク数の下限と上限のしきい値。	AUTO
③	ここで設定した値以上の de Wolff 指数 M_n を持つ格子候補のみが表示される。	3.
④	格子定数 a, b, c (Å) の下限と上限。(ここで設定した範囲の格子定数のみを表示する。)	
⑤	d^* ($= 1/d$) 値の相対的解像度。(二つの格子定数がほぼ同一のユニットセルを与えるかどうかを判定する際に使用する。)	0.03

指数付け終了時には、de Wolff 指数(M)によりリスト内の格子定数はソートされている。「ソート基準」(図 5-4) のドロップダウンメニューを用いて、リストされる格子定数のソート基準を変更することができる(表 5-2参照)。

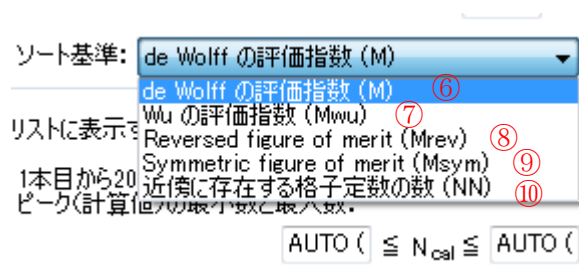


図 5-4 格子定数のソート基準

Conograph の 5 つのソート基準のうち、de Wolff 指数 M_n は対称性の高いブラベー格子に属する格子定数を特に優先する性質を持っており、また、正しい解を検出する能力が最も高い。ただし、不純物ピークがある場合この限りではない[5]。

表 5-2の⑥--⑨の4つのFOMは、観測ピーク位置と計算ピーク位置が相関を持たないとき、1に近い値を取るように定義されており、 $M_n > 10$, $M_n^{Wu} > 10$, $M_n^{Rev} > 3$ または $M_n^{Sym} > 30$ などを満たすような格子定数が見つければ、正しい解を与えている可能性が高い。とはいえ、複数の格子定数が同時に大きな値を取ることもあるので、節5.4、節5.5に述べる方法を参考に、格子定数の最終チェックを行うことをお勧めする。

表 5-2 リストに表示する格子定数のソート基準

⑥	<p>de Wolff 指数[6] (ただし、[5]に述べた方法で数値安定性を増している) による降順ソート。以下のような性質を持つ。</p> <p>a) 観測されていない計算ピーク位置 (消滅則など) の影響を受けにくい。</p> <p>b) 観測されたピークのうち指数がつかなかったもの (不純物ピークなどによる) の影響を受けやすい。</p> <p>c) ほぼ同一の格子が異なるブラベー格子に属しているとき、対称性の高いブラベー格子がより大きな値を得やすい。</p>
⑦	<p>Wu 指数[7]による降順ソート。性質は、a), b)については M と同様であるが、c) については逆に、対称性の低いブラベー格子の格子定数が大きな値を得やすい。</p>
⑧	<p>Reversed figure of merit (M^{Rev}) [5]による降順ソート。</p> <p>M^{Rev} は、de Wolff 指数における観測ピーク位置と計算ピーク位置 (qcal) の役割を逆転させた指数である。そのため、de Wolff 指数とは逆の、以下の性質を持つ。</p> <p>a) 観測されていない計算ピーク位置の影響を受けやすい。</p> <p>b) 観測されたピークのうち指数がつかなかったものの影響を受けにくい。</p> <p>c) ブラベー格子については、対称性の低い格子定数を選ぶ傾向が見られる。</p> <p>また、de Wolff 指数と同様、観測ピーク位置 (qobs) と計算ピーク位置 (qcal) に相関がなければ、1 に近い値となる。</p>
⑨	<p>Symmetric figure of merit ($M^{\text{Sym}} = M M^{\text{Rev}}$) [5]による降順ソート。定義より、⑥ M と⑧ M^{Rev} の中間の性質を持つ。カイ二乗値や R 因子などの多くの統計量と同様、観測ピーク位置と計算ピーク位置を交換しても値が変わらない。</p>
⑩	<p>⑤の相対的解像度を用いて、指数付けの解の中で、同一と判定された格子定数の数 (NN) による降順ソート。</p>

5.4. 有力な格子定数を選び出す

正解が指数付けで得られても、その格子定数がソートによって必ず最上位に選択されるとは限らない。不純物ピーク、消滅則などが原因となることもある。節5.3で紹介した FOM は、入力ピーク位置との整合性が高い少数の格子定数に候補を自動で絞ることができる。

しかし、二つの格子定数が異なるブラベー格子に属するとき、FOM による格子定数の比較はうまく行かないことがあり、FOM の値に加えて「対称性の高さ」も判断の基準となる。

「Best M」タブ（図 5-5）上では、各々のブラベー格子の中で得られた最良の FOM の値を比較することができる。ブラベー格子の名前を含む各行をクリックすると、そのブラベー格子の中でそれぞれ FOM が最大となる格子定数が下部のエリアに表示される。

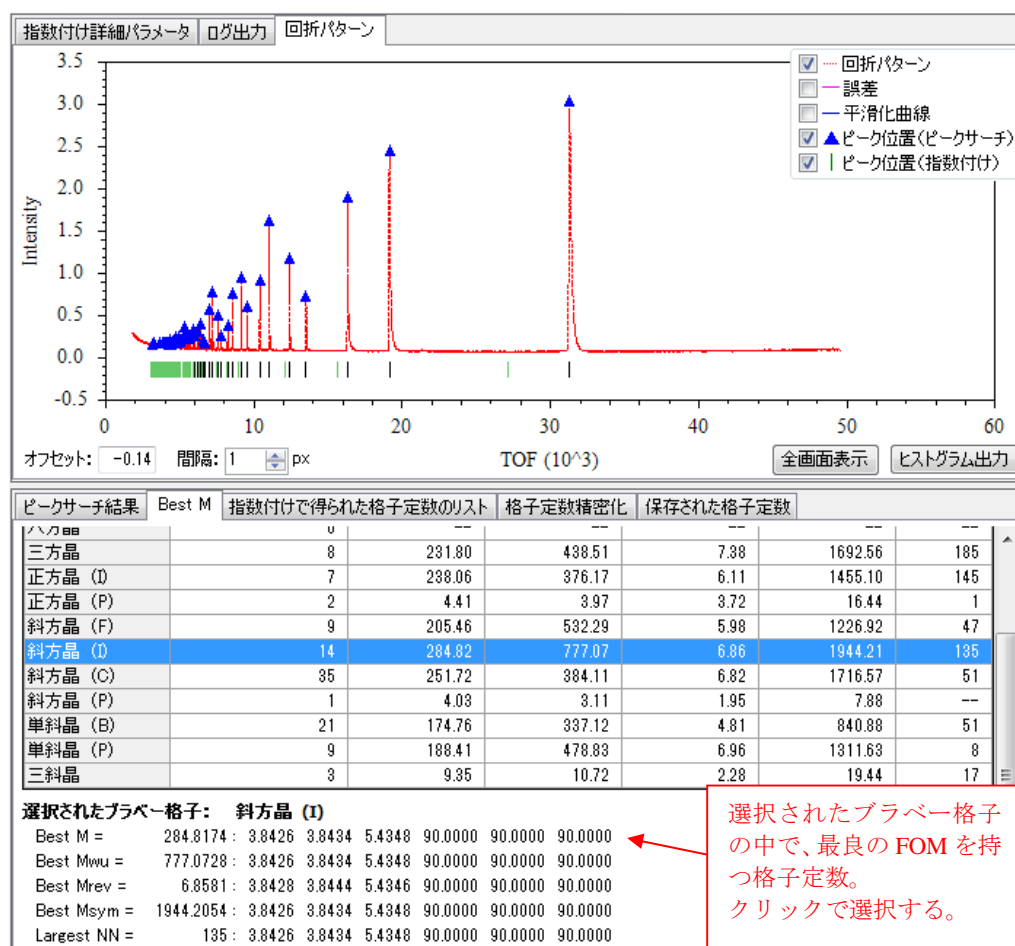


図 5-5 「Best M」タブ

「Best M」タブに表示されている情報に関して、以下の二点から結果のチェックを行うと、正解に早く辿りつくことができるだろう:

- (i) de Wolff 指数 M_n の最大値を比較したとき、大きな値（例えば、 $M_n > 10$ 程度）が得られているブラベー格子はどれか？
- (ii) そのブラベー格子では、同じ格子定数が、de Wolff 指数を含むほぼ全ての FOM で最大値を得ているか？（異なる FOM は、相補的な性質を持つ（表 5-2 を参照）ため、ある特定のブラベー格子の中で、 M_n , M_n^{Rev} , M_n^{Sym} が全て最大値を獲得している格子定数があれば、非常に有力な解の候補と考えられる。）

「Best M」タブ（図 5-5）の格子定数をクリックすると、「回折パターン」タブ内のチェックマークが自動的に更新され、「選択された格子定数」タブ（図 5-6、表 5-3）に、その格子定数の詳細情報が表示される。

	ピーク位置(入力値)	推定観測誤差	ピーク位置(計算値)	ミラー指数	精密化に用いる
1	31322.700	148.05590	31332.979	[1,0,-1]	<input checked="" type="checkbox"/>
2	19179.700			[0]	<input checked="" type="checkbox"/>
3	16352.790			[1]	<input checked="" type="checkbox"/>
4	13559.380	51.78934	13559.342	[0,0,4]	<input checked="" type="checkbox"/>
5	12443.050	49.92759	12443.274	[1,-2,-3]	<input checked="" type="checkbox"/>
6	11071.930	48.55326	11072.002	[1,-3,-2]	<input checked="" type="checkbox"/>

図 5-6 選択された格子定数の情報

表 5-3 選択された格子定数の情報

①	選択された格子定数の de Wolff 指数 M
②	選択された格子定数の Wu 指数 M^{Wu}
③	選択された格子定数の Reversed figure of merit M^{Rev}
④	選択された格子定数の Symmetric figure of merit M^{Sym}
⑤	選択された格子定数の NN、すなわち、指数付け実行中に見つかった格子定数の中で、選択された格子定数と同一と判定された格子定数の候補の数
⑥	格子体積 (\AA^3)

「Best M」タブ（図 5-5）に記載されていない格子定数は、「Lattice constant」タブ（図 5-7）で見ることができる。「Lattice constant」タブにある全ての格子定数を巡回して、そのピーク位置をチェックしたいときは、上下矢印キーを使用するとよい。格子定数の候補のリストのブラベー格子名をクリックすると、そのブラベー格子でのリスト最上位の格子候補が選択される。

ブラベー格子	M, Mwu
立方晶 (F)	--
立方晶 (I)	--
立方晶 (P)	--
六方晶	--
三方晶	10.88, 8.53, 1.98, 21.52, 6; 4.74, 4.74, 12.96, 90.0, 90...
正方晶 (I)	--
正方晶 (P)	--
斜方晶 (F)	3.29, 2.60, 1.49, 4.92, 1; 3.76, 9.25, 10.19, 90.0, 90.0, ...
斜方晶 (I)	4.06, 3.70, 1.45, 5.90, 2; 4.75, 6.11, 6.94, 90.0, 90.0, 9...
斜方晶 (C)	3.06, 3.10, 1.48, 4.52, 1; 4.91, 8.15, 6.45, 90.0, 90.0, 9...
斜方晶 (P)	3.47, 3.07, 1.45, 5.05, 0; 2.60, 4.01, 6.99, 90.0, 90.0, 9...
単斜晶 (B)	10.93, 11.46, 2.55, 27.83, 11; 6.99, 4.74, 2.56, 90.0, 9...
単斜晶 (P)	8.39, 7.82, 1.95, 16.38, 1; 4.10, 2.37, 4.52, 90.0, 107.3...
三斜晶	10.22, 16.46, 2.42, 24.69, 14; 2.55, 4.21, 4.23, 68.4, 8...

図 5-7 指数付けによって得られた格子定数の候補のリスト

良い解を選ぶ際は、選択した格子定数の精密化を行うことで、FOM の値が非常によくなる
ことがある (図 5-8参照)。そのため、解を選ぶ際は精密化の結果にも注意すべきであろう。
精密化の方法は節6.1.1で説明する。

指数付け詳細パラメータ	ログ出力	回折パターン
Wave-length: 1.54056		
Initial zero point shift: 0		
Reduced unit-cell parameters : 4.7521 4.7521 12.9704 90 90 120		格子定数の初期値
Optimizing lattice parameters by linear least squares...		
1) Initial M20 = 27.6254		初期の de Wolff 指数
M20 of optimized solution = 266.635		
2) Initial M20 = 266.635		de Wolff 指数が改善された。
M20 was not improved.		改善が見られなくなった時点で精密化をストップ
Optimized unit-cell parameters : 4.76098 4.76098 12.9954 90 90 120		精密化によって改善された
Optimized zero point shift : -0.147583		格子定数とゼロ点シフト
Reduced unit-cell parameters : 4.76098 4.76098 12.9954 90 90 120		格子定数を標準形 (Niglli 簡約) に変換

図 5-8 精密化実行時のログ出力例

また、格子定数の精密化を行った際、dominant zone に関する警告がログ出力されることが
ある (図 5-9参照)。この警告が出ている場合、FOM による解の判定はうまくいっていない

ので、「リストに表示する格子定数の基準」にある<de Wolff 指数 M の計算に使用するピーク数> (図 5-3) を警告メッセージに従って増やし、再度精密化を行っても警告が出ないことを確認すべきである。

指数付けパラメータ ログ出力 回折パターン

```
{13} The number of candidates for Cubic(I) : 0 -> 0
{14} The number of candidates for Cubic(F) : 0 -> 0

The Bravais lattice determination and refinement of unit-cell parameters finish in CPU time : 84 [sec]

-----
|
|----- 格子の候補を出力 -----
|[] 表示されている格子候補を出力しています:
|C:\Users\rtomi\Desktop\指数付テストデータ\sample4\auto_generated_files\sample4.index.xml
|-----

----- 最適化 -----
Initial unit-cell parameters : 38.7676 3.77813 30.024 90 117.028 90
Wave-length : 0.79776
Initial zero point shift : 0
Reduced unit-cell parameters : 38.7676 3.77813 30.024 90 117.028 90
Optimizing lattice parameters by linear least squares...

1) Initial M20 = 119.867
M20 was not improved.

Warning : A dominant zone exists. This is resolved by increasing the parameter <MaxNumberOfPeaksForFOM> to a number more than 23.
-----
```

<De Wolff 指数の計算に使用するピーク数>を 24 以上の値にするよう警告が出ている

図 5-9 Dominant zone が見つかったときのメッセージ

5.5. 格子定数を決定する

どの格子定数が正解かの最終判断には、実際にグラフを見て、計算ピーク位置（|）と観測ピーク位置（▲）の比較を行うとよい。また、図 5-10のように、完全に同じピーク位置を持つ格子定数が存在することが、低対称性の格子でも稀に（高対称性の格子の場合は常に）あり得る。この現象は、geometrical ambiguity として知られている[3]。そのため、Conograph の「一意性のチェック」ボタンを用いて、選択した格子定数とほぼ同一のピーク位置を持つ格子定数の有無のチェックを行う必要がある（図 5-12）。

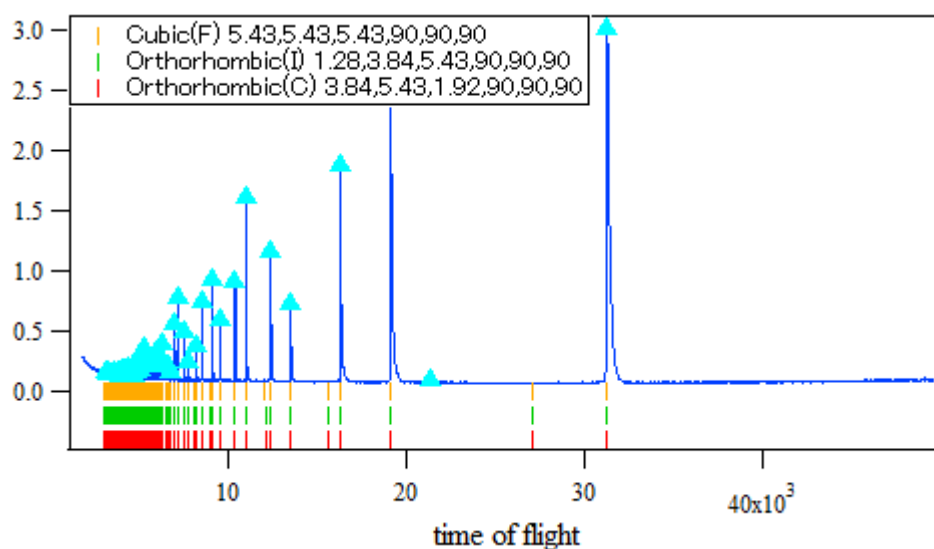


図 5-10 完全に一致するピーク位置を持つ異なる格子定数の例

精密化を行った全ての格子定数は、そのピーク位置を示すティックマークがグラフ上に表示された状態になる。これにより、複数の格子定数の計算ピーク位置（|）の比較を行うことができる。必要する必要がなくなった格子定数については、「保存された格子定数」タブより非表示を選択、または削除を行えば、表示されなくなる。

「回折パターン」タブにおけるティックマークの表示に関する操作方法を図 5-11、表 5-4 に示す。

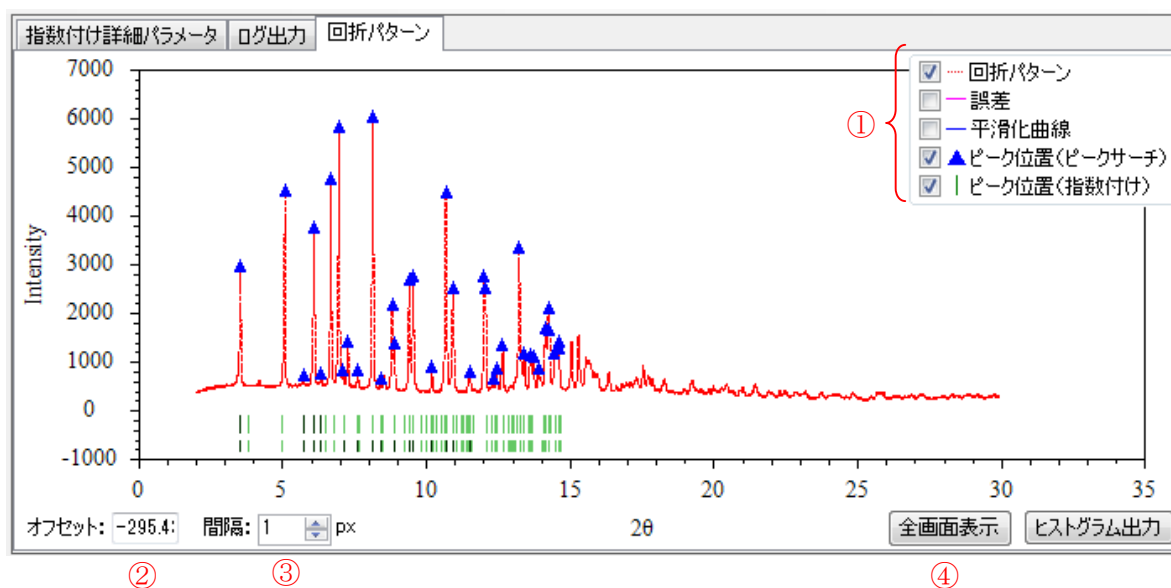


図 5-11 「回折パターン」 タブ

表 5-4 「回折パターン」 タブ

①	表示／非表示を切り替える
②	(一番上に表示されている) ティックマークの高さ (y 座標)。Enter キーを押すと、変更が反映される。また、このテキストボックス内でマウスホイールすることによっても高さを増減することができる。
③	上下のティックマーク間の間隔
④	回折パターンタブを全画面表示する。

回折パターンとピーク位置がよく一致する格子定数が見つかったとき、その格子定数を選択した状態で、「一意性のチェック」ボタンを押すことで、その格子定数とほぼ同一のピーク位置を持つ格子定数を全て生成させることができる[3]。

もし、ほぼ同一のピーク位置を持つ格子定数が存在すれば、図 5-12のようなウィンドウが現れ、「ログ出力」タブに具体的な格子定数が表示される。ウィンドウの操作方法是「回折パターン」タブと同じである。「ヒストグラム出力」ボタンを押すと、表示されているすべての格子定数に関するピーク位置情報を含むヒストグラムファイルが出力される。

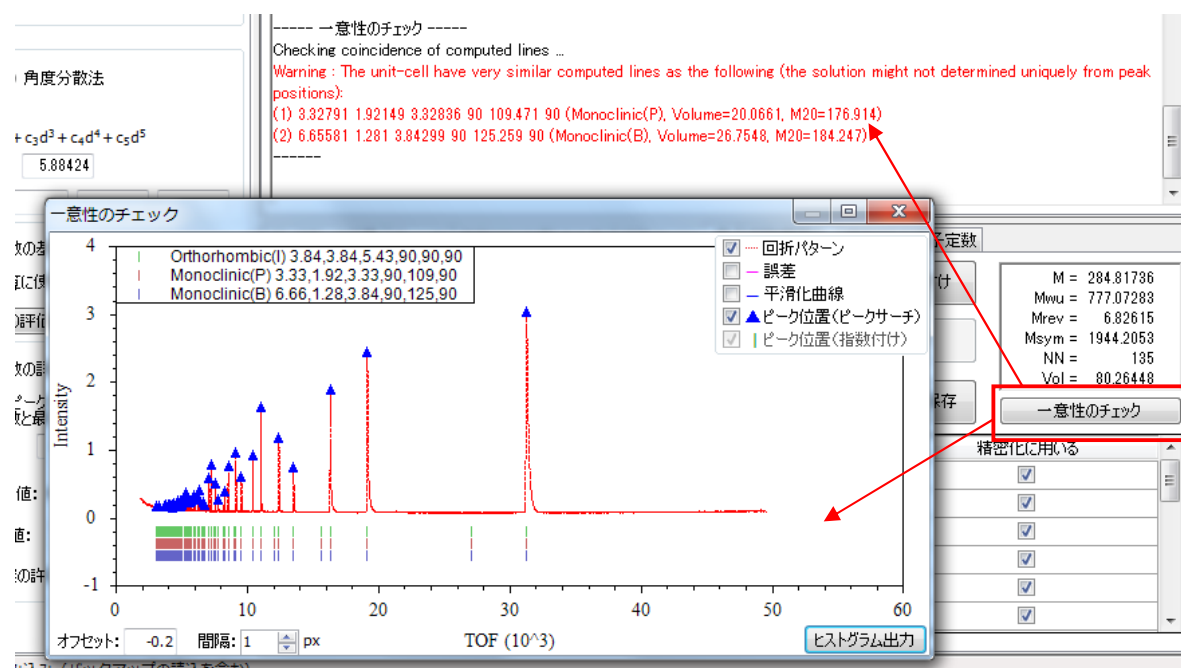


図 5-12 解の一意性のチェック

6. 格子定数およびゼロ点シフトの精密化

指数付けによって得られた格子定数（および角度分散ではゼロ点シフト）の精密化を行う方法を以下に説明する。精密化は、線形・非線形最小二乗法によって行われる。

6.1. 精密化の実行方法

6.1.1. リストから選択した格子定数の精密化

リストにある格子定数およびゼロ点シフトを精密化するには、該当の格子定数を選択した後に、「格子定数精密化」タブ中にある、「精密化して保存」ボタンをクリックすればよい（「メニュー>実行>精密化して保存」を選択しても同じ）：

ピークサーチ結果 Best M 指数付けで得られた格子定数のリスト 格子定数精密化 保存された格子定数

ブラベー格子: 斜方晶 (D) 空間群の決定

格子定数 a, b, c [Å], α , β , γ [deg]:
3.842608 3.843392 5.434786 90.0 90.0 90.0

ゼロ点シフト $\Delta 2\theta$ [deg]: 0.0

ミラー指数付け
元に戻す
精密化して保存
一意性のチェック

M = 284.81736
Mw = 777.07283
Mrev = 6.82615
Msym = 1944.2053
NN = 135
Vol = 80.26448

	ピーク位置(入力値)	推定観測誤差	ピーク位置(計算値)	ミラー指数	精密化に用いる
▶ 1	31322.700	148.05590	31332.979	[1,0,-1]	<input checked="" type="checkbox"/>
2	19179.700	80.59404	19180.509	[0,2,0]	<input checked="" type="checkbox"/>
3	16352.790	56.55483	16353.209	[2,1,1]	<input checked="" type="checkbox"/>
4	13559.380	51.78934	13559.342	[0,0,4]	<input checked="" type="checkbox"/>
5	12443.050	49.92759	12443.274	[1,-2,-3]	<input checked="" type="checkbox"/>
6	11071.930	48.55326	11072.002	[1,-3,-2]	<input checked="" type="checkbox"/>

精密化実行時の様子を図 6-1に示す。精密化された格子定数は「保存された格子定数」タブのリストに追加される。

指数付け詳細パラメータ ログ出力 回折パターン

<MaxPrimitiveUnitCellVolume> is set to 61.521.
 <MaxNumberOfMillerIndicesInRange> is set to 128.
 <MinNumberOfMillerIndicesInRange> is set to 12.

The range of d^* -value : $\sqrt{\text{the minimum of } q\text{-values}}$ -- $\sqrt{\text{the maximum of } q\text{-values}}$ = 0.318822--1.67623

----- 精密化 -----
 Initial unit-cell parameters : 3.84261 3.84339 5.43479 90 90 90
 Reduced unit-cell parameters : 3.84261 3.84339 5.43479 90 90 90
 Optimizing lattice parameters by linear least squares...

1) Initial M20 = 284.817
 M20 was not improved.

精密化結果に関するログ

ピークサーチ結果 Best M 指数付けで得られた格子定数のリスト 格子定数精密化 保存された格子定数

ブラベー格子: 斜方晶 (I) 空間群の決定

格子定数 a, b, c [Å], α , β , γ [deg]:
 3.842608 3.843392 5.434786 90.0 90.0 90.0

ゼロ点シフト $\Delta 2\theta$ [deg]: 0.0

ミラー指数付け 元に戻す(精密化) 精密化して保存 一意性のチェック

M = 284.81736
 Mwu = 777.07283
 Mrev = 6.82615
 Msym = 1944.2053
 NN = --
 Vol = 80.26448

	ピーク位置(入力値)	推定観測誤差	ピーク位置(計算値)	ミラー指数	精密化に用いる
1	31322.700	148.05590	31332.979	[1,0-1]	<input checked="" type="checkbox"/>
2	19179.700	80.59404	19180.509		
3	16352.790	56.55483	16353.209		
4	13559.380	51.78934	13559.342		
5	12443.050	49.92759	12443.274	[1,-2,3]	<input checked="" type="checkbox"/>
6	11071.930	48.55326	11072.002	[1,-3,2]	<input checked="" type="checkbox"/>

この情報は、ドラッグで範囲を指定した後 Ctrl+C でコピー可能

図 6-1 精密化実行時の様子

「格子定数精密化」タブで、使用するピーク位置をマニュアルで選択し直すこともできる精密化に用いるかどうかのフラグを変更すると、連動して、回折パターンの該当するピーク位置を示すティックマークが、**深緑色** (|) から **浅緑色** (|) に変化する。

ピークサーチ結果 Best M 指数付けで得られた格子定数のリスト 格子定数精密化 保存された格子定数

ブラベー格子: 斜方晶 (I) 空間群の決定

格子定数 a, b, c [Å], α , β , γ [deg]:
 3.842608 3.843392 5.434786 90.0 90.0 90.0

ゼロ点シフト $\Delta 2\theta$ [deg]: 0.0

ミラー指数付け 元に戻す(精密化) 精密化して保存 一意性のチェック

M = 284.81736
 Mwu = 777.07283
 Mrev = 6.82615
 Msym = 1944.2053
 NN = --
 Vol = 80.26448

	ピーク位置(入力値)	推定観測誤差	ピーク位置(計算値)	ミラー指数	精密化に用いる
1	31322.700	148.05590	31332.979	[1,0-1]	<input checked="" type="checkbox"/>
2	19179.700	80.59404	19180.509		<input checked="" type="checkbox"/>
3	16352.790	56.55483	16353.209	[2,1-1]	<input checked="" type="checkbox"/>
4	13559.380	51.78934	13559.342	[0,0,4]	<input checked="" type="checkbox"/>
5	12443.050	49.92759	12443.274	[1,-2,3]	<input checked="" type="checkbox"/>
6	11071.930	48.55326	11072.002	[1,-3,2]	<input checked="" type="checkbox"/>

精密化に使用するピークをチェック

6.1.2. ユーザが入力した格子定数の精密化

この節では、格子定数を手入力し、精密化を行う方法について述べる。この際、指数付けを実行する必要はないが、精密化に使用するピーク位置情報を取得するために、ピークサーチを実行する必要がある。

ピークサーチ実行後に、「指数付けパラメータ」タブより装置パラメータ「回折装置の波長」または「コンバージョンパラメータ」を入力する。角度分散を選択した場合には、以下のよう、「格子定数精密化」タブからゼロ点シフトが入力できるようになる：

ピークサーチ結果 Best M 指数付けで得られた格子定数のリスト 格子定数精密化 保存された格子定数

ブラベー格子: 斜方晶 (D) 空間群の決定

格子定数 a, b, c [Å], α , β , γ [deg]:
 3.842608 3.843392 5.434786 90.0 90.0 90.0

ゼロ点シフト $\Delta 2\theta$ [deg]: 0.0

ミラー指数付け
 元に戻す(精密化)
 精密化して保存

M = 284.81736
 Mwu = 777.07283
 Mrev = 6.82615
 Msym = 1944.2053
 NN = --
 Vol = 80.26448

一意性のチェック

	ピーク位置(入力値)	推定観測誤差	ピーク位置(計算値)	ミラー指数	精密化に用いる
1	31322.700	148.05590	31332.979	[1,0,-1]	<input checked="" type="checkbox"/>

ブラベー格子と格子定数を入力し（ゼロ点シフトは初期値の0のままでよい）、「ミラー指数付け」ボタンをクリックすると、各ピーク位置のミラー指数付けが行われ、各ピークに付けられたミラー指数が結果として表示される：

ピークサーチ結果 Best M 指数付けで得られた格子定数のリスト 格子定数精密化 保存された格子定数					
ブラベー格子: 斜方晶 (D)		空間群の決定		ミラー指数付け	
格子定数 a, b, c [Å], α , β , γ [deg]:		3.842608 3.843392 5.434786 90.0 90.0 90.0		元に戻す(精密化)	
ゼロ点シフト $\Delta 2\theta$ [deg]:		0.0		精密化して保存	
				一意性のチェック	
	ピーク位置(入力値)	推定観測誤差	ピーク位置(計算値)	ミラー指数	精密化に用いる
1	31322.700	148.05590	31332.979	[1,0,-1]	<input checked="" type="checkbox"/>
2	19179.700	80.59404	19180.509	[0,2,0]	<input checked="" type="checkbox"/>
3	16352.790	56.55493	16353.209	[2,1,-1]	<input checked="" type="checkbox"/>
4	13559.380	51.78934	13559.342	[0,0,4]	<input checked="" type="checkbox"/>
5	12443.050	49.92759	12443.274	[1,-2,3]	<input checked="" type="checkbox"/>
6	11071.930	48.55326	11072.002	[1,-3,2]	<input checked="" type="checkbox"/>

付けられたミラー指数を使用して、格子定数の精密化を行うことができる。各ピーク位置を格子定数の精密化に用いるかどうかを指定するフラグは、必要であればマニュアルでも設定可能である（その他の各カラムの意味については表 6-1を参照）。「精密化して保存」ボタンをクリックすれば、精密化された格子定数が、「保存された格子定数」タブに追加される。

表 6-1 「格子定数精密化」タブのピーク情報

カラム	内容
1	回折パターンのピーク位置
2	1 のピーク位置を格子定数の精密化に使用するとき、最小二乗法の重みとして使用される値。ピーク半値幅を用いて算出している。
3	選択された格子定数と 4 のミラー指数、装置パラメータから計算されたピーク位置
4	格子定数の精密化に使用するミラー指数
5	ピーク位置を格子定数の精密化に利用する場合、チェックする

6.2. 「元に戻す」ボタン

「元に戻す」ボタンを使用することによって、格子定数などのパラメータを手入力前の状態に戻す、あるいは精密化によって得られたパラメータを精密化前の状態に戻すことができる(図 6-2)。ただし元に戻せるのは1ステップのみで、2つ前の状態に戻すことはできない。

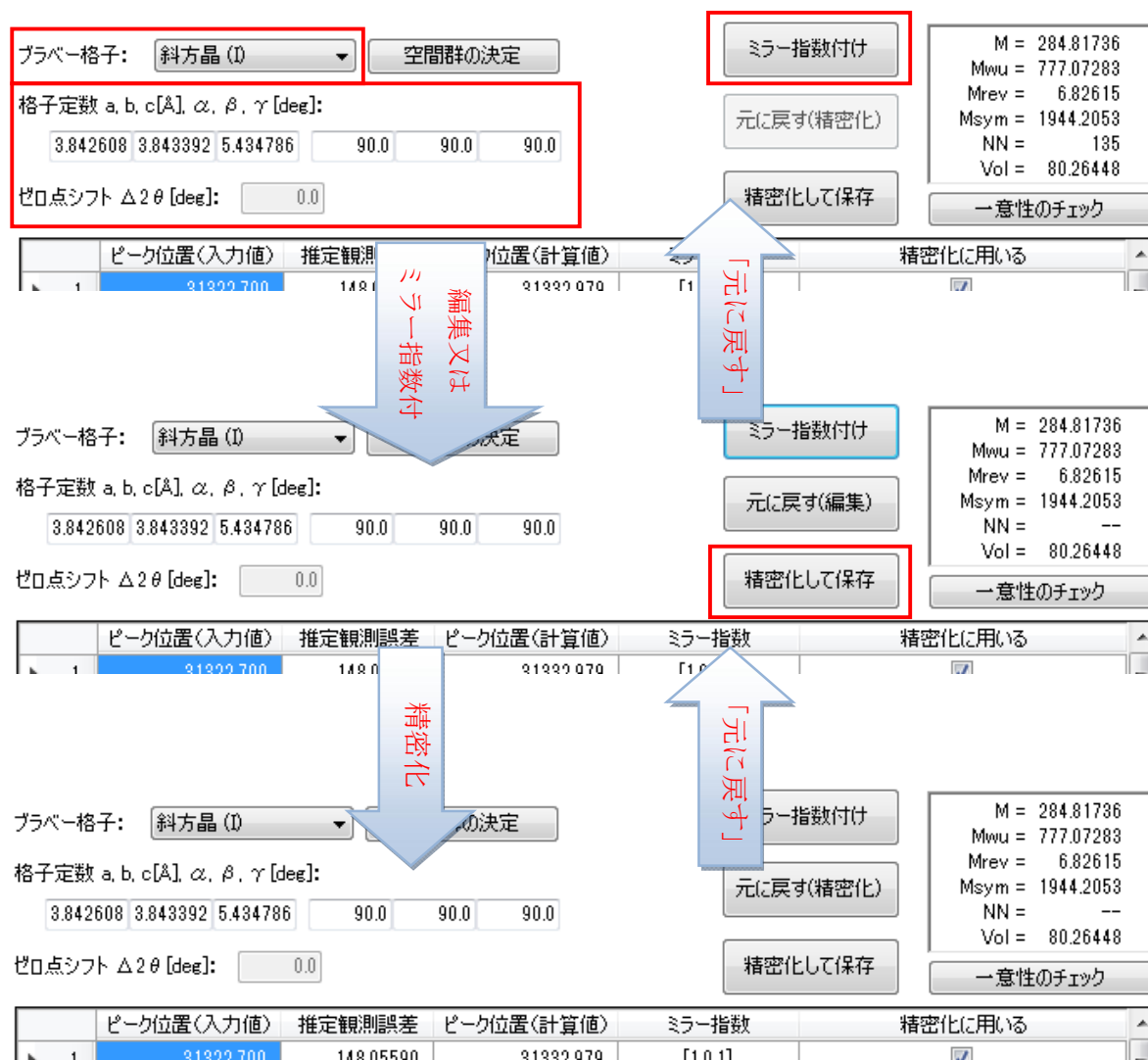


図 6-2 「元に戻す」ボタン

7. 結果の出力

出力ファイルの種類は3種類あり、***.index.xml** (***.index2.xml**)、***.histogramIgor** およびバックアップファイルである(バックアップファイル以外はテキストファイルである)。以下、各々のファイル出力について説明する。

7.1. *.index.xml

プロジェクトフォルダ (**auto_generated_files**) に***.index.xml** が出力されるのは、以下のいずれかが発生したときである：

- ・ 指数付けの実行終了時
- ・ アプリケーションを終了する、または別のプロジェクトを開いたとき
- ・ 「ファイル>格子定数を全てファイルに出力」(図 7-1) が選択されたとき

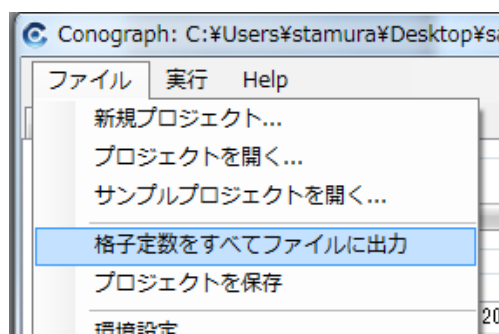
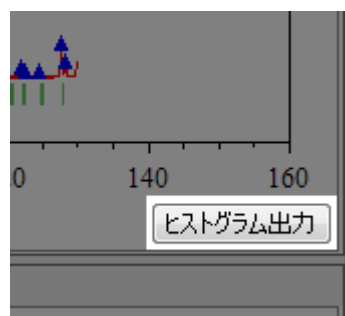


図 7-1 「格子定数を全てファイルに出力」

この***.index.xml** ファイルには、指数付けによって得られた格子定数の候補のうち、GUI 上に表示されている格子定数の情報が記載される(フォーマットは図 11-5, 7 を参照)。出力ファイル名は、回折データファイルの名前が、***.histogramIgor** であれば、***.index.xml** となり、上述のイベントに際して常に同じファイルが上書きされる。

7.2. Igor テキストファイルおよび*.index2.xml ファイル

「ヒストグラム出力」ボタン(図 7-2)を押すと、プロジェクトフォルダに***.histogramIgor** ファイルがプロジェクトフォルダに出力される。このファイルには、入力回折データファイルの内容に加えて、「回折パターン」タブ中にチェックマークが表示されている格子定数のミラー指数・ピーク位置が保存される。



ミラー指数と対応するピーク位置（ティックマーク）を含む*.histogramIgorファイルを出力する。

図 7-2 Igor ファイルの出力

同時に、*.histogramIgor ファイルに出力された格子定数に関する詳細情報が、*.index2.xml ファイルとして出力される。

7.3. バックアップファイル

「ファイル>プロジェクトを保存」（図 7-3）を選択すると、指数付けによって得られた全ての格子定数の候補、「保存された格子定数」タブに存在する全ての格子定数のなどを格納したバックアップファイルが、フォルダ **auto_generated_files** にファイル **backup.dat** として作成される。

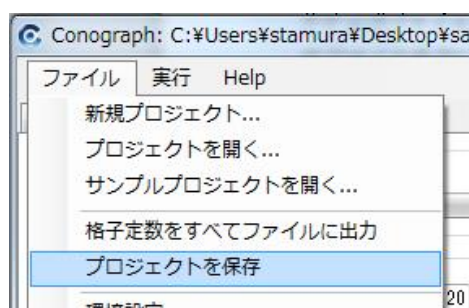


図 7-3 プロジェクトの保存

格子定数のデータが存在するプロジェクトが終了するとき（アプリケーションの終了時や別のプロジェクトを開くとき）にもこのファイルが出力される。

格子定数のデータが全く存在していない場合にはバックアップファイルは作成されない。

バックアップファイルを用いることで、Conograph の次回起動時、保存時の状態を再現することができる。次回プロジェクトを開いた際、プロジェクトフォルダ内にバックアップファイルが存在すれば、このファイルを開くかどうかを尋ねられる。バックアップファイルは、新しくバックアップファイルを保存する際に上書きされる。

8. 空間群の候補の決定

指数付けで得られた格子定数の figure of merit の値は、ブラベー格子によって決まる消滅側のみが考慮されている。空間群によっては追加の消滅則が生じる場合がある。「格子定数精密化」タブにある「空間群の決定」ボタンを押すと、タブ内で選択されたブラベー格子を持つ各空間群においてそれぞれ、消滅側を考慮したピーク位置を元に de Wolff figure of merit M の再計算が行われ、図 8-1 のような画面が表示される。画面上でよい M の値を持つ空間群をリストアップし、比較することができる。

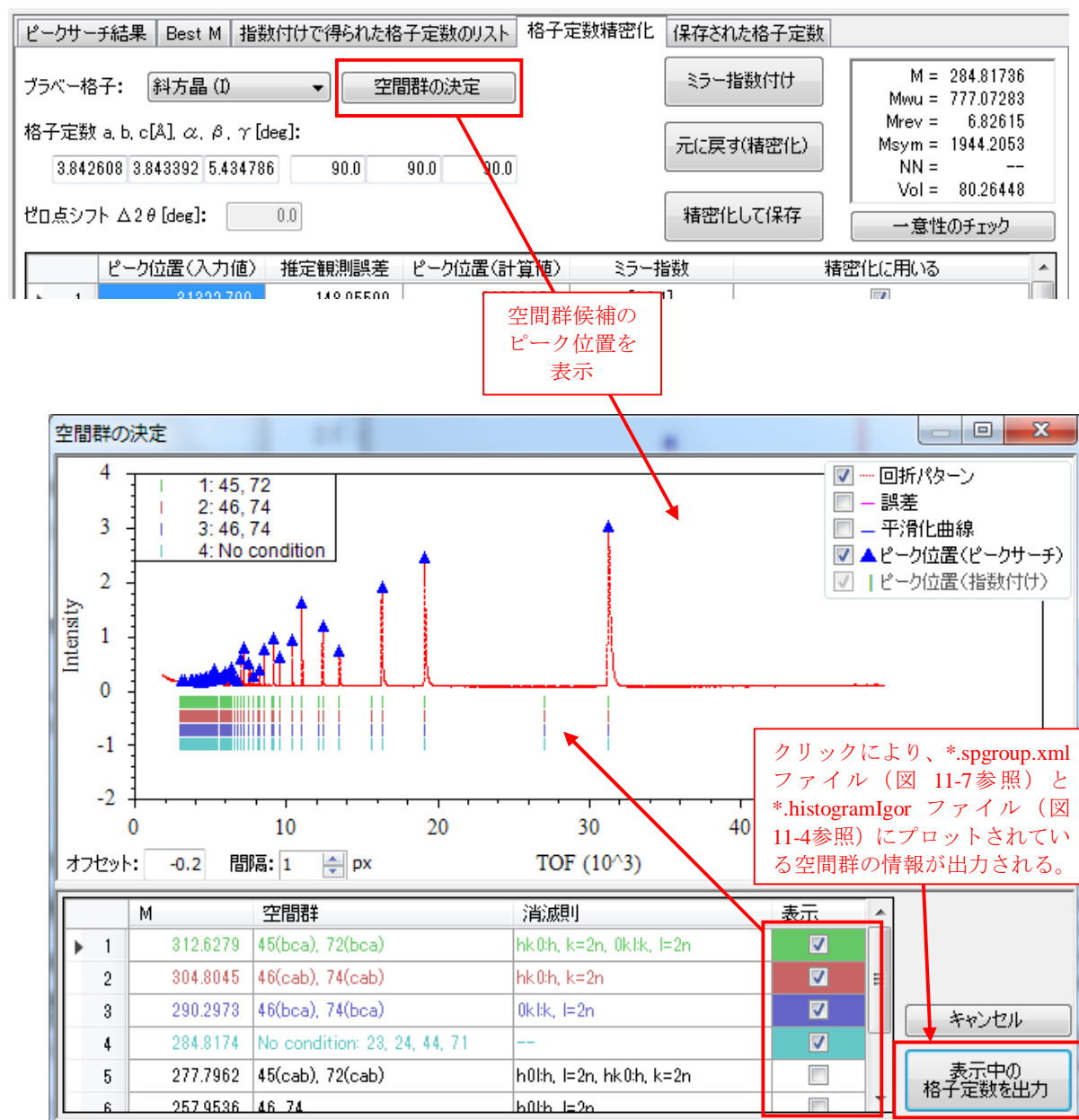
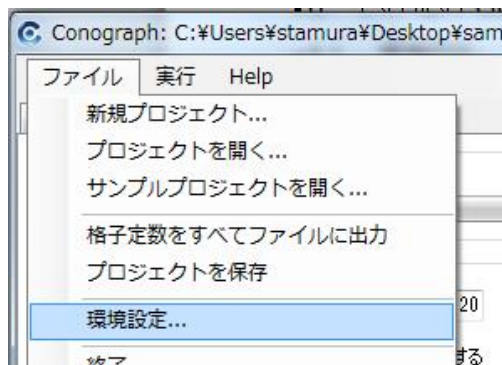


図 8-1 空間群の候補の決定

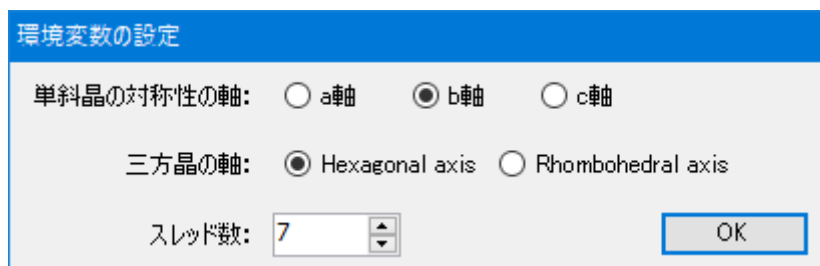
9. その他の GUI 操作

9.1. 環境設定

以下のように「メニュー>ファイル>環境設定」を選択する：



と、環境設定ダイアログが表示される：

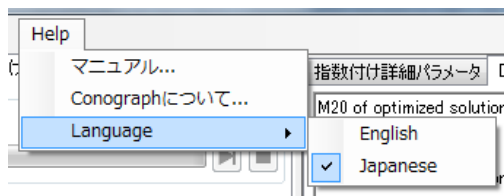


<スレッド数>は並列計算時に使用するスレッド数（つまり並列に実行する計算の数）である。取り得る値の範囲は計算機に依存する。初期値は（同時実行可能な最大スレッド数－1）である。値が大きくなるほど高速であるが負荷が大きくなる。計算中に別のアプリケーションを実行したい場合には小さい値に変更するとよい。

使用した環境設定パラメータは、**auto_generated_files/*.inp.xml** ファイルに保存される。また、アプリケーション終了時の環境設定パラメータの値は、ソフトウェアの設定ファイルに保存され、次回に起動したときに初期値として設定される。

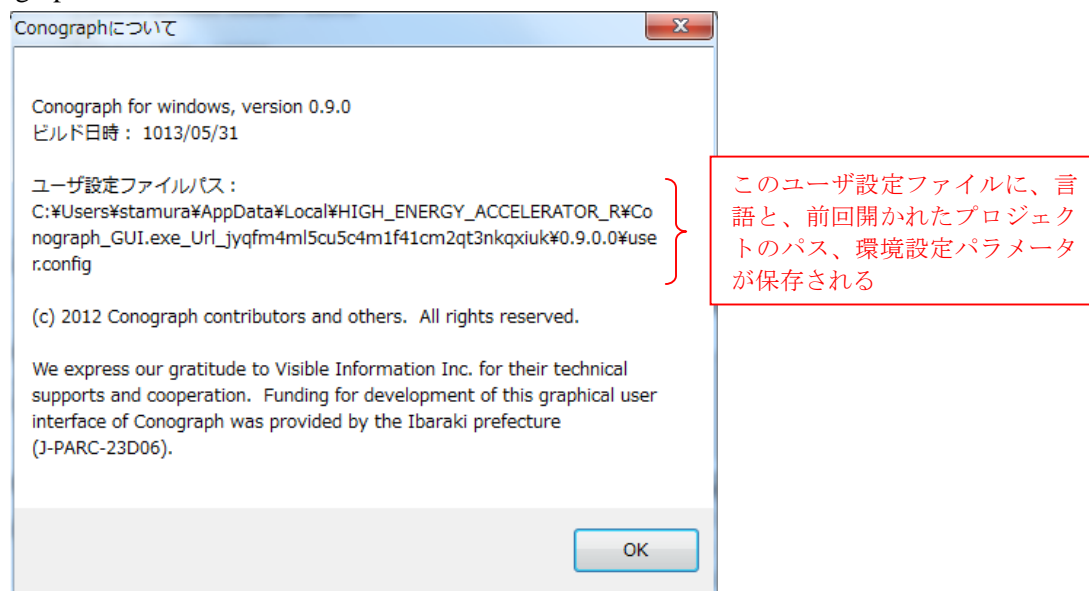
9.2. Help メニュー

Help メニューから「マニュアル」および「Conograph について」、「Language」の3項目が利用できる：



「マニュアル」を選択するとマニュアル（＝このファイル）が表示される。

「Conograph について」を選択すると以下のようなダイアログが表示される：



「Language」では、GUI に表示される言語を英語、日本語から選択できる。この設定の変更を有効にするには、アプリケーションの再起動が必要である。

10. 結果を改善したいときに使用するパラメータ

10.1. ピークサーチ

ピークサーチでは、ピーク高さを基準に回折ピークを出来るだけ一様に拾うようにした方がよい。特に、根拠のある事前情報がある場合を除けば、Conograph に入力するために、回折ピークの人為的な選別や重畳ピークの除去を行う意味はほとんどない。

そのようなピークサーチ結果が得るためには、ピークサーチの実行結果を見ながら、以下のパラメータを調整すればよい：

- (1) <ピーク高さに対するしきい値>
- (2) <1 点の平滑化に用いるデータ点数>

また、 $\alpha 2$ ピークを含む特性 X 線データに対して粉末指数づけを行う際は、前処理として $\alpha 2$ 除去を行う必要がある（設定方法は図 3-1を参照）。

上記の(1), (2)のパラメータの調整を行う際は、以下のポイントに注意する。

(1) <ピーク高さに対するしきい値>

強度の小さな回折ピークをどの程度検出するかを設定するパラメータである。初期設定の「強度のエラー値の c 倍を用いる」が使用されているならば、ピーク位置が x 、ピーク高さが h に等しいピークが検出される必要十分条件は、粉末回折パターンの x における Y 座標 y （強度）の推定観測誤差を $\text{Err}[y]$ としたとき、 $h > (\text{しきい値}) \times \text{Err}[y]$ の値となることである。ただし、ピーク高さとは、 y から推定バックグラウンド値を差し引いた値である。多くのケースで 3 --10 の範囲の数字が、このパラメータの最適値を与える。

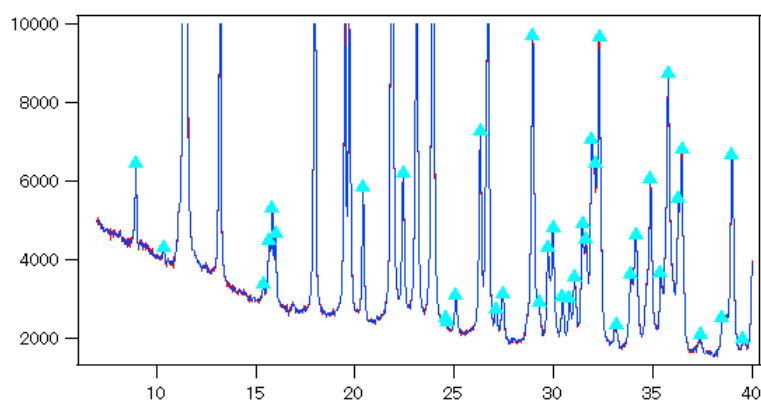


図 10-1 放射光データにおけるピークサーチ結果の例

(2) <1 点の平滑化に用いるデータ点数>

バックグラウンド等のノイズの検出を抑制するために使用する。この値が小さいと、より少ないデータ点数だけが平滑化に使用される結果、近似曲線（3次多項式）がバツ

クグラウンドノイズを正確に表現してしまうことがある。図 10-2に実例を与える。

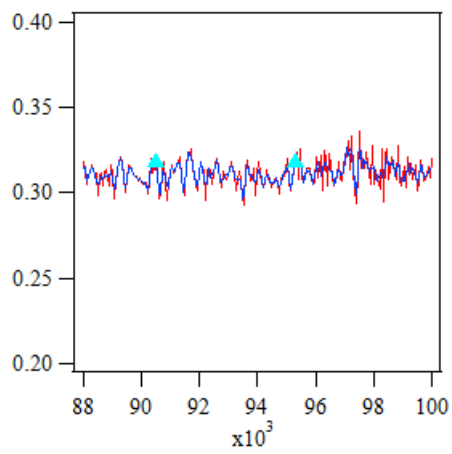


図 10-2 <データ点数>= 5

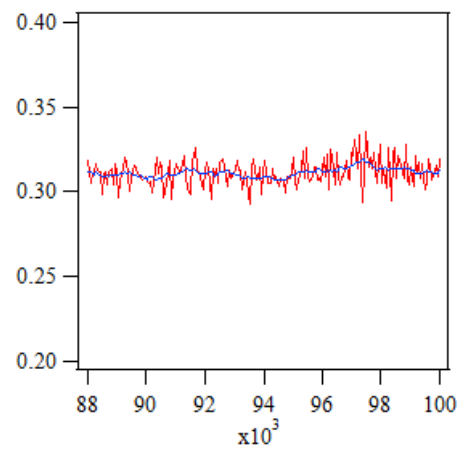


図 10-3 <データ点数>= 25

10.2. 粉末指数付け

特に省メモリ探索では、パラメータの推奨値を使用すれば、非常に幅広いケースで正しい解が得られることを確認している[4]。そのため、まずは推奨値で解析することをお勧めするが、それで良い結果が得られなかった場合、どのパラメータを変更すれば結果の改善が見込まれるか、3つの目的に分けて説明する。

10.2.1. より丁寧な探索を行う

(1) <探索方法>（「指数付けパラメータ」タブ）：高速探索 ⇒丁寧探索。

(2) <探索に使用するピーク数>（「指数付けパラメータ」タブ）：**AUTO** ⇒48 よりも大きな数

AUTO を指定した場合は、48 本のピークが使用される（回折パターンに含まれているピーク数が少ない場合を除く）。それでも足りないことは、**dominant zone** が存在すれば起こり得る。このとき、ピーク数を増やすことは有効である。

(3) <q 値の線形和の誤差の許容レベル>（「指数付けパラメータ」タブ）：1 ⇒1.5

特性 X 線または原子炉のデータにおいては、大きい値を用いることで結果がよくなることもある。

10.2.2. 計算を速くする

(1) <スレッド数>（「ファイル > 環境設定」）を増やす

単純だが、並列計算で使用するスレッドの数を増やす。

(2) <探索方法>（「指数付けパラメータ」タブ）：高速探索 ⇒丁寧探索。

(3) <ブラベー格子>（「指数付け詳細パラメータ」タブ）：チェックを外す

ブラベー格子についての事前情報がある場合、それを使用することで、ブラベー格子決定後のステージにかかる時間を減らすことができる。

(4) <Primitive cell の体積のしきい値>または<結晶格子の最近接格子点間距離>を変更する（「指数付け詳細パラメータ」タブ）

事前情報がある場合に、それを使用することで、格子定数の探索にかかる時間を減らすことができる。

10.2.3. Figures of merit によるソート結果を改善する

- (1) <ゼロ点シフト> (「指数付けパラメータ」タブ) : 0 ⇒ より正確な推定値

ゼロ点シフトが大きな回折データ ($\Delta 2\theta > 0.1^\circ$ 程度) では、FOM の値が小さくなることがある。ゼロ点シフトを推定し、粉末指数づけに用いることで、結果が改善されることがある。ゼロ点シフトの推定は以下のいずれかの方法で行うことができる (ただしいずれの方法も間違いが起り得るので、複数の候補値を検討する必要がある)。

- (a) Reflection pair 法 [1] を用いて推定する、
- (b) 一度、粉末指数づけを行った後、 M_n^{Rev} と M_n^{Sym} が比較的大きな格子定数 ($M_n^{\text{Rev}} > 3, M_n^{\text{Sym}} > 10$ 程度) を用いて、ゼロ点シフトの精密化を行い、その値を用いて、再度指数付けを実行する。

- (2) <de Wolff 指数の計算に使用するピーク数> (「指数付けパラメータ」タブ) : 20 ⇒ 20 よりも大きな数

求める格子定数に dominant zone と呼ばれる問題が生じていると、標準的に使用されている値 20 では不十分となることがある。格子定数とゼロ点シフトを精密化する際、Dominant zone が見つければ、「ログ出力」タブに、警告メッセージと最低限必要なピーク数が表示される (図 5-9) ので、それに従って、必要なピーク数を入力すればよい。

- (3) ピークサーチ結果を改善する (または<指数付けに用いる> (「ピークサーチ結果」タブ) のフラグを変更する)

不純物ピークは、格子定数のソート結果に大きく影響するため、パラメータ <de Wolff 指数の計算に使用するピーク数> が n のとき、1 本目から n 本目までのピークの範囲に存在する不純物ピークの数出来る限り抑えることが望ましい。

11. 入出力テキストファイルのフォーマット

ここでは、入出力ファイル：**cntl.inp.xml** および***.inp.xml**、***.histogramIgor**、***.index.xml** ファイルについて、そのフォーマットを示す。

```
<ZCodeParameters>
  <ConographInputFile>
    <!-- Control parameters for calculation. -->
    <ControlParamFile> HRP000675.BS.bin04f.inp.xml </ControlParamFile>
    <!-- Peak-position data. -->
    <PeakDataFile> HRP000675.BS.bin04f_pks.histogramIgor </PeakDataFile>
    <!-- Output file -->
    <OutputFile> hrp000675.bs.bin04f.index </OutputFile>
  </ConographInputFile>

  <PeakSearchInputFile>
    <ControlParamFile> HRP000675.BS.bin04f.inp.xml </ControlParamFile>
    <HistogramDataFile>
      <FileName> HRP000675.BS.bin04f.histogramIgor </FileName>
      <!-- "XY": general, "IGOR":IGOR; "Rietan":Rietan. -->
      <Format> IGOR </Format>
      <!-- When "IsErrorContained" equals 1, input errors in the 3rd column of the histogram. -->
      <IsErrorContained> 1 </IsErrorContained>
    </HistogramDataFile>
    <Outfile> HRP000675.BS.bin04f_pks.histogramIgor </Outfile>
  </PeakSearchInputFile>
</ZCodeParameters>
```

図 11-1 cntl.inp.xml の書式例

```

<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" ?>

<ZCodeParameters>
  <ConographParameters>
    <!-- Parameters for the hisitogram.-->
    <!-- 0:tof, 1:angle dispersion-->
    <IsAngleDispersion> 0 </IsAngleDispersion>

    <!-- Conversion parameters for tof : a polynomial of any degree -->
    <ConversionParameters> 0 1 0 </ConversionParameters>

    <!-- Peak shift parameters for angle dispersion : Z(deg.), Ds(deg.), Ts(deg.).
           2*d*sin(theta0) = Wlength, 2*theta = 2*theta0 + Z + Ds*cos(theta0) + Ts*sin(2*theta0). -->
    <PeakShiftParameters> 0 </PeakShiftParameters>

    <!-- Wave length(angstrom) for angle dispersion. -->
    <WaveLength> 1.54056 </WaveLength>

    <!-- Parameters for search.-->
    <SearchLevel>
      <!-- 0:quick search (suitable for lattices with higher symmetries.),
            1:regular search (suitable for lattices with lower symmetries.).-->
      0
    </SearchLevel>

    <!-- Number of reflections for calculation.-->
    <MaxNumberOfPeaks> AUTO </MaxNumberOfPeaks>

    <!-- The critical value c to judge if a linear sum of Q equals zero. ( abs(%sigma_i Q_i) <= c * Err(%sigma_i Q_i) ) -->
    <CriticalValueForLinearSum> 1 </CriticalValueForLinearSum>

    <!-- Minimum of the volume of primitive unit-cell (>=0) -->
    <MinPrimitiveUnitCellVolume> AUTO </MinPrimitiveUnitCellVolume>

    <!-- Maximum of the volume of primitive unit-cell (>0) -->
    <MaxPrimitiveUnitCellVolume> AUTO </MaxPrimitiveUnitCellVolume>

    <!-- Maximum number of quadruples (q1,q2,q3,q4) taken from selected topographs.-->
    <MaxNumberOfTwoDimTopographs> AUTO </MaxNumberOfTwoDimTopographs>

    <!-- Maximum number of seeds of 3-dimensional topographs -->
    <MaxNumberOfLatticeCandidates> AUTO </MaxNumberOfLatticeCandidates>

    <!--Output for each crystal system? (0:No, 1:Yes)-->
    <OutputTriclinic> 1 </OutputTriclinic>
    <OutputMonoclinicP> 1 </OutputMonoclinicP>
    <OutputMonoclinicB> 1 </OutputMonoclinicB>
    <OutputOrthorhombicP> 1 </OutputOrthorhombicP>
    <OutputOrthorhombicB> 1 </OutputOrthorhombicB>
    <OutputOrthorhombicI> 1 </OutputOrthorhombicI>
    <OutputOrthorhombicF> 1 </OutputOrthorhombicF>
    <OutputTetragonalP> 1 </OutputTetragonalP>
    <OutputTetragonalI> 1 </OutputTetragonalI>
    <OutputRhombohedral> 1 </OutputRhombohedral>
    <OutputHexagonal> 1 </OutputHexagonal>
    <OutputCubicP> 1 </OutputCubicP>
    <OutputCubicI> 1 </OutputCubicI>
    <OutputCubicF> 1 </OutputCubicF>

```

図 11-2 .inp.xml の書式例 (1/2)


```

<!-- Parameters for output.-->
<!-- Relative resolution to judge if two lattices are equivalent or not.
      If the relative difference of two lattice parameters are within this value,
      only the one with better figure of merit is output.-->
<Resolution> 0.05 </Resolution>

<!-- Maximum number of false (unindexed) peaks.-->
<MaxNumberOfUnindexedPeaks> 20 </MaxNumberOfUnindexedPeaks>

<!-- Number of reflections to calculate figure of Merit.
      Input a number >=20 even if reflections in a diffraction pattern is less than 20.-->
<MaxNumberOfPeaksForFOM> 20 </MaxNumberOfPeaksForFOM>

<!-- Output the candidates with better FOM than the following value.-->
<MinFOM> 3 </MinFOM>

<!-- Number of hkl among input reflections.-->
<MaxNumberOfMillerIndicesInRange> AUTO </MaxNumberOfMillerIndicesInRange>
<MinNumberOfMillerIndicesInRange> AUTO </MinNumberOfMillerIndicesInRange>
<!-- Minimum and maximum of the unit cell edges a, b, c (angstrom).-->
<MaxUnitCellEdgeABC> 1000 </MaxUnitCellEdgeABC>
<MinUnitCellEdgeABC> 0 </MinUnitCellEdgeABC>

</ConographParameters>

<PeakSearchPSPParameters>
  <ParametersForSmoothingDevison>
    <!--NumberOfPointsForSGMethod : odd number.-->
    <NumberOfPointsForSGMethod> 9 </NumberOfPointsForSGMethod>

    <EndOfRegion>
    <!-- The maximum point of smoothing range. -->
    MAX
    </EndOfRegion>
  </ParametersForSmoothingDevison>

  <PeakSearchRange>
    <Begin> 0.0 </Begin>
    <End> MAX </End>
  </PeakSearchRange>

  <!--0 : Use the threshold, 1 : Use a constant times the error of y-value as a threshold.-->
  <UseErrorData> 1 </UseErrorData>

  <!--When "UseErrorData" is 0, it is used as the threshold for peak-search.
        Otherwise, "Threshold" times the error of y-value as a threshold.-->
  <Threshold> 5.0 </Threshold>

  <!-- 0 : "Threshold" is applied to estimated y-values of peak-tops when the background of the histogram is removed,
        1 : "Threshold" is applied to actual y-values of peak-tops.-->
  <UseBGRemoved> 0 </UseBGRemoved>

  <!-- 0 : deconvolution is not applied.
        1 : deconvolution is applied.-->
  <Alpha2Correction> 0 </Alpha2Correction>
  <Waves>
    <Kalpha1WaveLength> 1.54056 </Kalpha1WaveLength>
    <Kalpha2WaveLength> 1.54439 </Kalpha2WaveLength>
  </Waves>
</PeakSearchPSPParameters>
</ZCodeParameters>

```

図 11-3 .inp.xml の書式例 (2/2)

```

IGOR
WAVES/0 tof, yint, yerr
BEGIN
  1850.00 2.871904E-001 3.359009E-003
  1854.00 2.834581E-001 3.337111E-003
  1858.00 2.848073E-001 3.351369E-003
  ~中略~
  49564.0 9.989611E-002 1.378697E-002
  49588.0 1.010892E-001 1.386346E-002
END
WAVES/0 peak, peakpos, height, FWHM, Flag
BEGIN
  1 3.148311E+003 1.535192E-001 3.749774E+001 1
  2 3.340909E+003 1.676432E-001 2.429063E+001 1
  3 3.697289E+003 1.661457E-001 2.063853E+001 1
  ~中略~
  49 3.133224E+004 2.968128E+000 1.480559E+002 1
  50 4.906641E+004 1.092195E-001 1.791403E+002 1
END
WAVES/0 dphase_1, xphase_1, yphase_1, h_1, k_1, l_1
BEGIN
  3.138130E+000 3.133851E+004 0.000000E+000 1 -1 1
  2.717700E+000 2.713443E+004 0.000000E+000 0 0 2
  1.921704E+000 1.918059E+004 0.000000E+000 0 2 -2
  ~中略~
  6.405680E-001 6.394727E+003 0.000000E+000 2 2 -8
  6.405680E-001 6.394727E+003 0.000000E+000 0 6 -6
END

X Display yint vs tof
X AppendToGraph yphase_1 vs xphase_1
X ModifyGraph mirror(left)=2
X ModifyGraph mirror(bottom)=2
X ModifyGraph rgb(yint)=(0, 65535, 65535)
X ModifyGraph
offset(yphase_1)={0, 0}, mode(yphase_1)=3, marker(yphase_1)=10, msiz(yphase_1)=3, mrkThick(yphase_1)=0.6, rgb(yphase_
1)=(3, 52428, 1)

```

}

出力時のみ

図 11-4 .histogramIgor の書式例

```

<ConographOutput>
<!--
    Thorough search has been executed in 12 sec. by combining vectors in 200 different two-dimensional topographs.
    Note that the initial candidates are selected from lattices of the volume more than 8.4131e+000(angstrom).
    If the volume seems to be large, input a smaller value for <Max Number of Seeds of 3-topographs>.
-->

<!-- Information on lattice candidates for each crystal system.
    number of Candidates, FOM de Wolff, number of lattices in the neighborhood, the primitive unit-cell volume of
the best candidate.
    Cubic (F) :      25    7.6120e+000  213    1.5861e+002
    Cubic (I) :      17    2.1801e+000  246    2.0063e+001
    Cubic (P) :       0
    Hexagonal :      4    2.1261e+000   43    1.3385e+001
    Rhombohedral :  20    4.6341e+000  149    1.0755e+002
    Tetragonal (I) : 14    3.3966e+000  633    8.0329e+001
    Tetragonal (P) :  0
    Orthorhombic (F) : 0
    Orthorhombic (I) : 0
    Orthorhombic (B) : 1    2.6029e+000   8    5.7058e+001
    Orthorhombic (P) : 0
    Monoclinic (B) :  0
    Monoclinic (P) :  0
    Triclinic :      0
-->

<!-- Information on the selected candidates.-->
<SelectedLatticeCandidate number="140153">
  <CrystalSystem>      Cubic (F) </CrystalSystem>

  <!-- a, b, c(angstrom), alpha, beta, gamma(deg.)-->
  <LatticeParameters>  5.4354e+000   5.4354e+000   5.4354e+000   9.0000e+001   9.0000e+001   9.0000e+001
</LatticeParameters>

  <!-- A*, B*, C*, D*, E*, F*(angstrom^(-2)).-->
  <ReciprocalLatticeParameters>  3.3848e-002   3.3848e-002   3.3848e-002   0.0000e+000   0.0000e+000
0.0000e+000 </ReciprocalLatticeParameters>
  <!-- A*, B*, C*, D*, E*, F*(angstrom^(-2)) first given by peak-positions.-->
  <InitialReciprocalLatticeParameters>  3.4129e-002   3.4129e-002   3.4129e-002   0.0000e+000   0.0000e+000
0.0000e+000 </InitialReciprocalLatticeParameters>
  <VolumeOfUnitCell>  1.5861e+002 </VolumeOfUnitCell>
  <FigureOfMeritWolff name="Fw20">  7.6120e+000 </FigureOfMeritWolff>
  <NumberOfLatticesInNeighborhood>  213 </NumberOfLatticesInNeighborhood>

  <!-- Number of pairs of hkl and -h-k-l upto the 20th reflection.-->
  <NumberOfMillerIndicesInRange>  2.7750e+001 </NumberOfMillerIndicesInRange>

  <EquivalentLatticeCandidates>
    <LatticeCandidate number="13034">
      <CrystalSystem>      Cubic (I) </CrystalSystem>
      <LatticeParameters>  4.1917e+000   4.1917e+000   4.1917e+000   9.0000e+001   9.0000e+001   9.0000e+001
</LatticeParameters>
      <ReciprocalLatticeParameters>  2.8457e-002   2.8457e-002   5.6913e-002   0.0000e+000   0.0000e+000
0.0000e+000 </ReciprocalLatticeParameters>
      <FigureOfMeritWolff name="Fw20">  1.3537e+000 </FigureOfMeritWolff>
      <NumberOfLatticesInNeighborhood>  213 </NumberOfLatticesInNeighborhood>
    </LatticeCandidate>
    ~中略~
  </EquivalentLatticeCandidates>

```

図 11-5 .index.xml の書式例 (1/2)

```

<IndexingResults>
  <!-- q_obs, q_cal, peak_pos, pos_cal, closest_hkl,
is_the_difference_between_q_obs_and_q_cal_small_compared_to_q_err?.-->
    4. 1501e-002 1. 0154e-001 4. 9066e+004 3. 1339e+004 [-1, 1, 1] 0
    1. 0159e-001 1. 0154e-001 3. 1332e+004 3. 1339e+004 [-1, -1, -1] 1
    2. 1784e-001 2. 7079e-001 2. 1387e+004 1. 9181e+004 [0, -2, -2] 0
  ~中略~
    2. 2680e+000 2. 2678e+000 6. 6286e+003 6. 6288e+003 [7, 3, -3] 1
    2. 4367e+000 2. 4371e+000 6. 3952e+003 6. 3947e+003 [-6, 6, 0] 1
</IndexingResults>

<FittingResults>
  <!-- q_obs, q_err, q_cal, peak_pos, peak_width, pos_cal, hkl, fix_or_fit.-->
    4. 1501e-002 1. 2834e-004 1. 0154e-001 4. 9066e+004 1. 7914e+002 3. 1339e+004 [-1, 1, 1] 0
    1. 0159e-001 4. 0706e-004 1. 0154e-001 3. 1332e+004 1. 4806e+002 3. 1339e+004 [-1, -1, -1] 1
    2. 1784e-001 8. 7727e-004 2. 7079e-001 2. 1387e+004 1. 0149e+002 1. 9181e+004 [0, -2, -2] 0
  ~中略~
    2. 2680e+000 7. 2533e-003 2. 2678e+000 6. 6286e+003 2. 4936e+001 6. 6288e+003 [7, 3, -3] 1
    2. 4367e+000 8. 1458e-003 2. 4371e+000 6. 3952e+003 2. 5146e+001 6. 3947e+003 [-6, 6, 0] 1
</FittingResults>

</SelectedLatticeCandidate>

<!-- Candidates for Cubic(F) -->
  ~中略~
</ConographOutput>

```

図 11-6 .index.xml の書式例 (2/2)

```

<ZCodeParameters>
  <ConographOutput>
    <TypeOfReflectionConditions>
      <Candidates>
        <SpaceGroups> 45 (bca), 72 (bca) </SpaceGroups>
        <ReflectionConditions> hk0:h, k=2n, 0kl:k, l=2n </ReflectionConditions>
        <FigureOfMeritWolff name="M20"> 3. 126279e+002 </FigureOfMeritWolff>
        <IndexingResults>
          <!-- q_obs, q_err, q_cal, peak_pos, peak_width, pos_cal, hkl, fix_or_fit.-->
            1. 016473e-001 9. 594352e-004 1. 015807e-001 3. 132270e+004 1. 480559e+002 3. 133298e+004 [1, 0, -1] 1
            2. 708116e-001 2. 274422e-003 2. 707887e-001 1. 917970e+004 8. 059404e+001 1. 918051e+004 [0, 2, 0] 1
            3. 724714e-001 2. 575261e-003 3. 724523e-001 1. 635279e+004 5. 655483e+001 1. 635321e+004 [2, 1, 1] 1
          ~中略 (ピークが並ぶ) ~
            2. 539049e+000 2. 019023e-002 2. 539077e+000 6. 265138e+003 2. 488311e+001 6. 265104e+003 [3, 4, -5] 1
            2. 707958e+000 2. 205347e-002 2. 707998e+000 6. 066813e+003 2. 467594e+001 6. 066769e+003 [2, 6, 0] 1
          </IndexingResults>
        </Candidates>
      ~中略 (<Candidates>タグが並ぶ) ~
    </TypeOfReflectionConditions>
  </ConographOutput>

```

図 11-7 .spgroup.xml ファイルの書式例

12. 最後に

12.1. 論文引用のお願い

Conograph を用いて得られた研究成果を発表される際は、以下を引用してください。

R. Oishi-Tomiyasu, *Robust powder auto-indexing using many peaks*, J. Appl. Cryst., 47 (2014), pp. 593–598.

Conograph の手法については、上記の他、以下の文献があります。

- R. Oishi-Tomiyasu, *A method to enumerate all geometrical ambiguities in powder indexing and its application*, submitted.
- R. Oishi-Tomiyasu, *Distribution rules of systematic absences on the Conway topograph and their application to powder auto-indexing*, Acta Cryst. A69 (2013), pp. 603–610.
- R. Oishi-Tomiyasu, *Reversed de Wolff figure of merit and its application to powder indexing solutions*, J. Appl. Cryst., 46 (2013), pp. 1277–1282.
- R. Oishi-Tomiyasu, *Rapid Bravais-lattice determination algorithm for lattice parameters containing large observation errors*, Acta Cryst. A68 (2012), pp. 525–535.
- R. Oishi, M. Yonemura, T. Ishigaki, A. Hoshikawa, K. Mori, T. Morishima, S. Torii, T. Kamiyama, *New approach to indexing method of powder diffraction patterns using topographs*, Zeitschrift für Kristallographie Supplements 30 (2009), pp. 15–20.

12.2. バグ報告について

アドレスconograph-bug@lists.osdn.meまで、下記の内容をご連絡下さい。全てのご意見は、Conograph のバージョンアップの際に考慮・反映させていただきます。

- (i) ご使用の OS (32bit, 64bit を含む)
- (ii) ご使用の Conograph のバージョン (GUI のヘルプメニューに記載されています)
- (iii) 不具合の内容
- (iv) 不具合が起きた時の詳細な状況
- (v) 再現可能か (常に起きるのか、時々なのか)
- (vi) お名前、ご所属、メールアドレス (こちらからご連絡差し上げることが可能なもの)

不具合の内容によっては、入出力ファイルなど、さらなる情報提供をお願いする場合もございますが、ご協力宜しくお願いいたします。

参考文献

- [1] C. Dong, F. Wu, H. Chen, *Correction of zero shift in powder diffraction patterns using the reflection-pair method*, J. Appl. Cryst., 32, pp. 850-853 (1999).
- [2] A. D. Mighell & A. Santoro, *Geometrical Ambiguities in the Indexing of Powder Patterns*, J. Appl. Cryst., 8, pp. 372-374 (1975).
- [3] R. Oishi-Tomiyasu, *A method to enumerate all geometrical ambiguities in powder indexing and its application*, submitted.
- [4] R. Oishi-Tomiyasu, *Robust powder auto-indexing using many peaks*, J. Appl. Cryst., 47 (2014), pp. 593-598.
- [5] R. Oishi-Tomiyasu, *Reversed de Wolff figure of merit and its application to powder indexing solutions*, J. Appl. Cryst., 46 (2013), pp. 1277-1282.
- [6] P. M. de Wolff, *A simplified criterion for the reliability of a powder pattern indexing*, J. Appl. Cryst., 1, pp. 108-113 (1968).
- [7] E. Wu, *A modification of the de Wolff figure of merit for reliability of powder pattern indexing*, J. Appl. Cryst., 21, pp. 530-535 (1988).