

---

# プログラム **sim-trhepd-rheed** の使い方 マニュアル

東北大学 金属材料研究所 花田 貴

2021 年 02 月 08 日



# Contents:

第 1 章	概要	1
第 2 章	使い方	3
2.1	作業ディレクトリの作成	3
2.2	計算実行ファイルの作成	3
2.3	BULK.EXE の入力データのフォーマット	4
2.4	SURF.EXE の入力データのフォーマット	8
2.5	原子構造表示ソフト用の.xyz ファイル作成	12
2.6	反射強度計算の実行	12
2.7	SURF.EXE の出力データ 'xxxx.s' のフォーマット	13
2.8	複数ドメインの加算強度計算	14
2.9	ドメインが複数時 (NDOM > 1) の出力データ 'xxxx.md' のフォーマット	14



# 第 1 章

## 概要

プログラム `sim-trhepd-rheed` は一宮彪彦先生の論文の方法で反射高速 (陽) 電子回折 (RHEED, TRHEPD) の強度計算を実行する. A. Ichimiya, Jpn. J. Appl. Phys. 22, 176 (1983); 24, 1365 (1985).

標準的な Linux 環境で, `gfortran` を用いてビルドすることを想定する.



## 第 2 章

# 使い方

### 2.1 作業ディレクトリの作成

適当な作業ディレクトリを作成し，git コマンドでソースコードをダウンロードする．

```
$ git clone https://github.com/sim-trhepd-rheed/sim-trhepd-rheed/
```

下のディレクトリが出来る．

sim-trhepd-rheed

### 2.2 計算実行ファイルの作成

sim-trhepd-rheed ディレクトリにおいて，以下を順次実行する

```
$ cd src/  
$ make  
gfortran -O3 -o bulk.exe bulkm.f90 bulkio.f90 bulk.f90 bulksb.f90 asf.f90 strfac.  
↪f90 scpot.f90 trmatg.f90 gcmi.f90 zgeev.f zgeevb.f  
gfortran -O3 -o surf.exe surfm.f90 surf.f90 surfio.f90 surfsub.f90 domainsum.f90 asf.  
↪f90 strfac.f90 scpot.f90 trmatg.f90 gcmi.f90 zgeev.f zgeevb.f
```

以下の実行ファイルが生成される

bulk.exe

surf.exe

オプションとして，さらに原子座標可視化用ツールをビルドする場合は，以下を実行する．

```
$ make xyz
gfortran -o xyz.exe xyz.f90 strfac.f90 asf.f90
```

以下のファイルが実行ファイルが生成される

xyzb.exe

注：上記ビルドでは、数値計算ライブラリ LAPACK の一部ソースコード (zggev.f, zggevb.f) もコンパイルされている。LAPACK がプレインストールされている計算機の場合、プレインストールされた LAPACK を用いることもできる。

## 2.3 BULK.EXE の入力データのフォーマット

計算実行に必要な、表面構造のバルク部分のパラメータを指定する入力ファイルの説明です。例えば、sample フォルダ内の Si111b.txt ファイルを参照すると、以下のように Si(111) 面のバルク構造パラメータが記載されています。

### Si111b.txt

```
3,3,1      ,NH,NK,NDOM,  ----- Si(111) bulk
13         ,NB
0          ,RDOM
-6,-6,-5,-5,-4,-4,-3,-3,-2,-2,-1,-1,0,0,1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6  , (IH(I),IK(I))
15,-30,-30,0,0.5,7,0.1  ,BE,AZI,AZF,DAZ,GI,GF,DG
0.1,100    ,DZ,ML
1          ,NELM
14,1.0, 0.1      ,Si Z,dal,sap
0.4,0.4,0.4      ,BH(I),BK(I),BZ(I)
14,3.83966,3.83966,120,3.13507,-0.333333,0.333333  ,NSG,AA,BB,GAM,CC,DX,DY
2          ,NATM
1,1,0,0,1.17565    ,IELM(I),ocr(I),X(I),Y(I),Z(I)
1,1,-0.333333,0.333333,1.95942  ,IELM(I),ocr(I),X(I),Y(I),Z(I)
```

以下説明。

### NH, NK, NDOM

- NH, NK

計算に取り入れる反射ビーム指数を決める値。後で入力する IH, IK を使って、バルク  $1 \times 1$  の逆格子を単位として IH/NH, IK/NK と表される指数のビームを計算する（例えば  $7 \times 7$  表面であっても、整数次の反射



しか計算しないときは  $NH=1, NK=1$ 。分数次も全て計算したい場合は  $NH=7, NK=7$ 。 $4 \times 2$  表面であっても、 $2 \times 1$  の反射しか計算しないときは  $NH=2, NK=1$  とすれば良い。表面再配列構造の単位格子の大きさは **surf.exe** の入力データに記述する。

- **NDOM**

ドメイン数、通常は 1。表面に方位が互いに回転した複数種ドメインがあり、**NDOM** 種のドメインからの反射点が重なり、それら強度を合計しなければならないとき  $NDOM > 1$ 。後で指定するバルク  $1 \times 1$  単位格子 **a, b** の大きさ  $AA = BB$  かつ、なす角  $GAM = 90^\circ$  または  $120^\circ$  のときのみ  $NDOM > 1$  が許される。そうでないときバルク計算は行われないので注意。例えば **Si(001)** $2 \times 1$  の計算は  $NDOM=2$  かつ  $GAM = 90^\circ$  なので、2 ドメイン (**XYZ** 座標を入力するドメインと、それを  $90^\circ$  回転したドメイン) からの整数次反射強度を計算して、あとで合計する。

### **NB(I)**

ドメイン (**I**) のビーム数 **NB(I)**。**NB(I)** を  $I=1$  から **NDOM** まで並べる。

### **RDOM(I)**

ドメイン (**I**) のアジマス角のシフト角 **RDOM(I)** (アジマス角にこの **RDOM(I)** を加える、deg 入力)。**RDOM(I)** を  $I=1$  から **NDOM** まで並べる。後に入力する **GAM**(単位格子 **a, b** のなす角) $= 90$  のとき、**RDOM(I)** は 90 の整数倍のみ許される。**GAM** $= 120$  のとき、**RDOM(I)** は 60 の整数倍のみ許される。そうでないときバルク計算は行われない。

### **IH(J, I), IK(J, I)**

—以下の { から } までを  $I=1$  から **NDOM** のドメイン数だけ繰り返す—

```
{
ドメイン (I) の反射ビームの指数 IH(J, I), IK(J, I) (RDOM(I) + アジマス角で観測される反射ビーム) を  $J=1$  から NB(I) まで並べる。
}
```

### **BE, AZI, AZF, DAZ, GI, GF, DG**

- ビームエネルギー **BE**(KeV)
- アジマス角初期値 **AZI**(deg)
- アジマス角最終値 **AZF**(deg)
- アジマス角ステップ **DAZ**(deg)

アジマス角はバルクの **a** 軸に沿って入射するとき 0 とし、**b** 軸方向に向かって回転するとき正にとる (表面を真空側からみて反時計まわり)。

- 視射角初期値 GI(deg)
- 視射角最終値 GF(deg)
- 視射角ステップ DG(deg)

## **DZ, ML**

1 スライスの厚さ DZ(Å), 0.01~0.1 程度

バルクからの反射が収束しないとき、表面垂直単位周期層（厚さ CC）の ML 倍の層数で打ち切, ~100

## **NELM**

バルクにある元素数。化学的に同一元素でも、振動変位など以下の { から } までの値を1つでも変えたものは別の元素として数え、以下の { から } までの値を別に記述する。

—以下の { から } までを I=1 から NELM の元素数だけ繰り返す—

{

**iz, da1, sap**

- iz

原子番号

- da1

~1.0, 原子散乱因子の実部の調整パラメータ, a(1) (b(1) が最も大きくなるように並べる) を a(1)-da1 に調整する: この値の理解には、P. A. Doyle and P. S. Turner: Acta Cryst. A24 (1968) 390, L. -M. Peng, Micron 30 (1999) 625 などを参照のこと。

- sap

10 keV: ~0.15, 15keV: ~0.10, 原子散乱因子の虚部 (吸収) のスケール調整、実部の sap 倍にされる (energy による補正はしないので、低 energy ほど多少 sap を大きめにするほうがいい)。

## **BH(I), BK(I), BZ(I)**

$B = 8 \pi \langle u^2 \rangle$  ( $\langle u^2 \rangle$  は自乗平均振動変位) (Å<sup>2</sup>) の成分を与える。

- BH(I)/a\* (a の逆格子) 方向の表面平行方向成分

- BK(I)/b\* (b の逆格子) 方向の表面平行方向成分
- BZ(I) 表面垂直方向成分

}

## **NSG, AA, BB, GAM, CC, DX, DY**

- NSG

バルク  $1 \times 1$  格子の 2 次元空間群の番号 (1~17), (2 次元空間群.doc 参照)。NSG=1 として  $1 \times 1$  単位胞のすべての原子の座標を入力すれば、空間群を考えなくても入力できる。

- AA

表面に平行なバルク単位格子 a の長さ (Å)

- BB

もう一つの表面に平行なバルク単位格子 b の長さ (Å)

- GAM

上の二つのなす角度 (deg)

- CC

表面に垂直な単位層の厚さ (Å)

- DX, DY

CC だけ上の層に行ったとき単位格子 a の方向に DX(単位長さ AA), b の方向に DY(単位長さ BB) だけ平行移動する。例えば zinc-blende(111) 面のとき ABC の 3 層分の原子座標を与えるのではなく、1 層分 (単位厚さ CC) の原子座標を与え、DX, DY で 1/3 ずつずらすという入力ができる。

## **NATM**

$1 \times 1$  単位胞内の独立な原子数。NSG に応じた対称性に従い単位胞内に展開される。

— 以下の { から } まで I=1 から NATM の原子数だけ繰り返す —

{

## **IELM(I), ocr(I), X(I), Y(I), Z(I)**

- IELM(I)

上で記述した 1 から NELM(=バルクにある元素数) 中の何番目の元素かを指定する番号、原子番号ではない。

- ocr(I)

原子の存在率 (0-1), 普通は 1, 50% の存在率のときは 0.5、混晶などで同じ X, Y, Z 位置に異なる元素や空孔が混在するとき使う。

- X(I)

原子の a 方向の座標 (単位 AA)

- Y(I)

原子の b 方向の座標 (単位 BB)

2 次元面内の対称操作を正しく行うために、表面垂直な回転対称軸上、または表面垂直な鏡映面上にある原子の X, Y は、小数点以下 4 桁以上の精度 (誤差 0.0001 以下) で与えること。それ以上ずれると対称性が低い位置と判定され、面内の対称位置への展開数が過剰になる。また鏡映面上にある原子の X, Y は独立に動けないので位置の最適化時に注意が必要。

- Z(I)

原子の c 方向の座標 (単位 Å)

$0 \leq z(i) < CC$  で入力。  $0 \leq z < CC$  の散乱ポテンシャルを計算するとき、CC の周期性と DX, DY に従って  $-CC \leq z < 0$  と  $CC \leq z < 2*CC$  にある原子からの寄与 (上下の単位層の原子からのポテンシャルのしみ出し) が加算されます。

}

## 2.4 SURF.EXE の入力データのフォーマット

続いて、計算実行に必要な、表面構造の表面部分のパラメータを指定する入力ファイルの説明です。例えば、sample フォルダ内の Alt4.txt ファイルを参照すると、以下のように Si(111) 面における  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$  -Al 表面 (T4 サイト吸着) の表面構造パラメータが記載されています。

### Alt4.txt

```
3      ,NELMS,  ----- Si(111)-root3 x root3-R30-Al T4
13,1.0,0.1    , Al Z,dal,sap
0.6,0.6,0.6   ,BH(I),BK(I),BZ(I)
14,1.0,0.1    , Si Z,dal,sap
0.6,0.6,0.6   ,BH(I),BK(I),BZ(I)
14,1.0,0.1    , Si Z,dal,sap
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
0.4,0.4,0.4      ,BH(I),BK(I),BZ(I)
15,2,1,-1,1, 1.7, 0.33333,-0.33333 ,NSGS,msa,msb,nsa,nsb,dthick,DXS,DYS
7      ,NATM
1,1  0.00000  0.00000  6.55449
2,1  0.63960  0.31980  5.13449
3,1  0.00000  0.00000  4.08072
3,1  1.00000  1.00000  4.51072
3,1  0.00000  0.00000  1.77942
3,1  1.00000  1.00000  2.08942
3,1  0.33333  0.66667  1.17565
1      ,WDOM
```

以下説明。

## NELMS

表面にある元素数。化学的に同一元素でも、振動変位など以下の { から } までの値を1つでも変えたものは別の元素として数え、以下の { から } までの値を別に記述する。

— 以下の { から } まで I=1 から NELMS の元素数だけ繰り返す—

{

## iz, da1, sap

- iz

原子番号

- da1

~1.0

- sap

10 keV: ~0.15, 15keV: ~0.10

## BH(I), BK(I), BZ(I)

- $B = 8 \pi \langle u^2 \rangle (\text{\AA}^2)$  の成分を与える。 $\langle u^2 \rangle$  は自乗平均振動変位
- $BH(I)/a^*$  (a の逆格子) 方向の表面平行方向成分
- $BK(I)/b^*$  (b の逆格子) 方向の表面平行方向成分
- $BZ(I)$  表面垂直方向成分

}

**NSGS, msa, msb, nsa, nsb, dthick, DXS, DYS**

- NSGS

表面再配列構造の対称性の番号 (1~17)、(2 次元空間群.doc 参照)。表面再配列構造の単位格子ベクトル **as**, **bs** に関するもので、一般に **bulk** の **NSG** と異なる。**NSG=1** として表面の単位胞内のすべての原子の座標を記述すれば考えなくても良いが、表面原子を変位させて最適化したいときは、対称性を考えたほうが動かすパラメータ数が少なくなり容易。

- msa, msb, nsa, nsb

表面再配列構造の基本格子ベクトル **as**, **bs** を、バルク  $1 \times 1$  の基本格子ベクトル **a**, **b** によって以下のように決める。

$$\mathbf{as} = \mathbf{msa} \cdot \mathbf{a} + \mathbf{msb} \cdot \mathbf{b}$$

$$\mathbf{bs} = \mathbf{nsa} \cdot \mathbf{a} + \mathbf{nsb} \cdot \mathbf{b}$$

---

例

Si(111)  $7 \times 7$  のとき  $\mathbf{msa} = \mathbf{nsb} = 7$ ,  $\mathbf{msb} = \mathbf{nsa} = 0$ , **NSGS**=14

Si(111)  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  のとき  $\mathbf{msa} = 2$ ,  $\mathbf{msb} = 1$ ,  $\mathbf{nsa} = -1$ ,  $\mathbf{nsb} = 1$ , **NSGS**=15 (即ち  $1 \times 1$  から  $30^\circ$  回転)

Si(001)c( $4 \times 2$ ) のとき  $\mathbf{msa} = 4$ ,  $\mathbf{nsb} = 2$ ,  $\mathbf{msb} = \mathbf{nsa} = 0$ , **NSGS**=9

Si(001)p( $2 \times 2$ ) のとき  $\mathbf{msa} = 2$ ,  $\mathbf{nsb} = 2$ ,  $\mathbf{msb} = \mathbf{nsa} = 0$ , **NSGS**=7

Si(001)( $2 \times 1$ ) のとき  $\mathbf{msa} = 2$ ,  $\mathbf{nsb} = 1$ ,  $\mathbf{msb} = \mathbf{nsa} = 0$ , **NSGS**=6

※  $1 \times 1$  の面積を単位として、 $|\mathbf{msa} \cdot \mathbf{nsb} - \mathbf{msb} \cdot \mathbf{nsa}|$  は表面単位メッシュの面積になる。例えば Si(111)  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  構造なら 3。

---

- dthick

最も真空側に出ている原子からさらに真空側に **dthick**(Å) の厚さまで、表面層として計算に取り入れる、~2.0。

- DXS, DYS

バルクの最上層 (BULK.EXE の入力データに記述されている座標) に整合して表面層を重ねるため、表面層の全原子を単位格子 **a** の方向に **DXS**(単位はバルク AA), **b** の方向に **DYS**(単位はバルク BB) だけ平行移動する。

## NATMS

NSGS に応じた表面の単位胞内の独立な原子数。NSGS に応じた対称性に基づいて単位胞内に展開される。

— 以下の { から } まで I=1 から NATMS の原子数だけ繰り返す —

{

### IELM(I), ocr(I), X(I), Y(I), Z(I)

- IELM(I)

表面の入力ファイルの上のほうで記述した 1 から NELMS までの元素リスト中の何番目の元素かを指定する番号（原子番号ではない）。

- ocr(I)

原子の存在率 (0-1), 普通は 1, 50% の存在率のときは 0.5、混晶などで同じ X,Y,Z 位置に異なる元素や空孔が混在するとき使う。

- X(I)

原子の a 方向の座標 (単位バルク AA 格子定数)

- Y(I)

原子の b 方向の座標 (単位バルク BB 格子定数)

※ X(I), Y(I) はバルク  $1 \times 1$  の単位格子を単位にしていることに注意（プログラム内で表面再配列構造の単位格子を単位とする座標に変換して対称操作している）。2 次元面内の対称操作を正しく行うため、表面垂直な回転対称軸上、または表面垂直な鏡映面上にある原子の X, Y は小数点以下 4 桁以上の精度（誤差 0.0001 以下）で与えること。

- Z(I) : 原子の c 方向の座標 (単位 Å)。バルクの単位層厚さの CC の高さのレベルを表面の座標 Z の原点 O にする。

※ 表面層の計算で、バルク構造 (から変位の無い下層の原子層) は入力する必要はありません。バルク計算と整合するように、表面層の下に、ある程度の厚さ (CC または dthick の小さい方と同程度) のバルク構造を DX, DY を考慮して自動的に挿入します。散乱ポテンシャルを計算する際には、もうひとつ下のバルク単位層の寄与 (しみ出し) も加算されます。

}

## WDOM(I)

ドメイン (I) の強度の重み WDOM(I)、I=1 から NDOM まで並べる（普通は全て「1」、ある方位のドメインを広げるような試料作製をしていたら「面積比」を入力する）。NDOM はバルクの入力で与えられている。NDOM の最大値は 6 なので、この行に 1, 1, 1, 1, 1, 1 と書いておけば必要な数の 1 が読み込まれる。NDOM = 1 のときは、入力値に関係なく WDOM(1) = 1 と読み込まれる。

## 2.5 原子構造表示ソフト用の.xyz ファイル作成

xyz.exe は bulk と surf の入力ファイルの原子座標の与え方が正しいかどうか確認するため、原子構造表示ソフト用の ‘~.xyz’ ファイルを作るものです。

面内に拡張する a, b 方向の周期数 m, n と、bulk の方向に拡張する単位層数 nbl を入力すると、surf の単位格子  $m \times n$  周期内の原子の下に bulk の  $m \times n$  格子を nbl 層（厚さ  $nbl \times CC$ ）分つなげた ‘~.xyz’ ファイル（text ファイル）ができます。ファイル名は surf.exe の出力と同じように自動的に決まります。ファイル内には、原子数、コメント、元素記号、x, y, z の直交座標（すべて Å 単位）が原子数行書かれます。各原子の占有率 ocr は反映されません。

上記の ‘~.xyz’ ファイルを可視化する原子構造表示ソフトとしては VESTA があります。VESTA は <http://jp-minerals.org/vesta/jp/download.html> からダウンロードできます。ネットで ‘VESTA’ を検索すると使い方を説明しているものが見つかります。例えば、Edit -> Bonds -> New で指定した距離以内の原子間のボンドを表示できます。

## 2.6 反射強度計算の実行

はじめに BULK.EXE を実行し、電子なら 0、陽電子なら 1 を入力。続いてバルク構造データファイル（例えば Si111b.txt, Ag111b.txt など）を指定する。ここではバルク構造、ビーム数、ビーム指数などのデータを読み込んで計算が行われ、出力ファイルに BULK 層からの反射データが書き出される。出力ファイル名は、入力ファイル名の最後に陽電子なら P、電子なら E の文字が追加され、拡張子が ‘.b’ になる。生成される出力ファイルはバイナリファイルで、メモ帳など text editor では読めない。

次に SURF.EXE を実行し、BULK.EXE で生成された出力ファイル (xxxxx.b, 例えば Si111bP.b, Ag111bP.b など) を指定する。続いて表面構造データファイル（例えば Al4.txt, Ag111s.txt, idealsurf.txt など）を指定し、反射強度を計算して出力ファイルに書き出す。出力ファイル名は上記 2 つのファイル名を ‘-’ でつなぎ、拡張子 ‘.s’ になる。出力ファイルは text 形式で第 1 列が角度、第 2 列以降が反射強度となる。詳しいフォーマットは「[SURF.EXE の出力データ ‘xxxx.s’ のフォーマット](#)」の項を見て下さい。また同時に、日付と時刻がファイル名になった、計算パラメータを書き出したファイルが生成されます。

### 実行例



コマンドプロンプトを起動し、mingw を使えるようにしたら

```
cd sample
```

と type して sample フォルダに移動する。

```
..\bulk <p-bulk.txt
```

と type して RHEPD の bulk 計算を実行。

```
..\bulk <e-bulk.txt
```

と type して RHEED の bulk 計算を実行。

```
..\surf <surf.txt
```

と type して RHEPD と RHEED の surf 計算を実行。

計算結果は ‘.s’ の拡張子の text file です。

単に..bulk または..surf と type して起動し、そのつどファイル名などを入力しても良いが、p(e)-bulk(surf).txt のように bulk、surf に入力するファイル名を順に書いたファイルを作ったほうが、複数の計算をまとめてするときなどに便利。

- bulk の例は Si(111)

Si111b.txt (吸収原子散乱因子 (虚数) が原子散乱因子 (実) の 0.1 倍)

- surf の例は Si(111)  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Al の T4 model

AIT4.txt (吸収原子散乱因子 (虚数) が原子散乱因子 (実) の 0.1 倍)

- bulk だけの反射強度を確認したい場合は、source フォルダにある nosurf.txt を表面の入力ファイルとして使用してください。

## 2.7 SURF.EXE の出力データ ‘xxxx.s’ のフォーマット

グラフ作成や R 因子計算には ‘xxxx.s’ ファイルを使います。通常の rocking curve は、アジマス数 NAZ=1, ドメイン数 NDOM=1 です。

Format 説明。

```
#azimuths, g-angles, beams
```

```
アジマス数 naz, 視射角数 ng, 反射ビーム数 nb を出力
```

```
#ih, ik
```

```
反射ビーム指数 ih(j), ik(j) を j=1 から nb まで、1 行当たり 200 ビームずつ出力。この指数の順番によってどの回折強度列を実験値と比較するか判断して下さい。回折強度の順序は BULK 入力ファイルで IH, IK を指定した順です。
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

空行

アジマス数  $NAZ$ 、視射角数  $NG$  のうちステップ数の小さい方を外側のループとして

```
{
ステップ数の大きい方を内側のループとして、内側のループの角度、回折強度（j=1 から nb までビーム数だけ、1 行 200
ビームずつ出力）..... 内側のループの角度数の行数だけ出力
}
```

空行

を外側のループの角度数だけ繰り返す。

## 2.8 複数ドメインの加算強度計算

$NDOM > 1$  の場合、SURF.EXE の計算後、xxxx.md ファイルが生成されます。詳しいフォーマットは「**ドメインが複数時 ( $NDOM > 1$ ) の出力データ 'xxxx.md' のフォーマット**」の項を見て下さい。xxxx.md ファイルを用いて、重み  $WDOM(I)$  を変更した加算強度を求めたいときは DOMAIN.EXE を使います。surf の出力ファイル名 xxxx.md を入力し、各ドメインを加算するときの重みをドメイン数だけ入力すると、xxxx.s 形式のファイルが生成されます。

ドメインが複数ある計算の例は  $Si(001)2 \times 1$  で、sample フォルダの Si001b.txt がバルク、Si2x1.txt が表面の入力ファイルです。

## 2.9 ドメインが複数時 ( $NDOM > 1$ ) の出力データ 'xxxx.md' のフォーマット

ドメインごとの強度が出力された 'xxxx.md' ファイルから、回折パターン上で重複する反射の強度に重み  $WDOM(I)$  を掛けて加算した 'xxxx.s' ファイルが以下のように生成されます。

```
#azimuths, g-angles, domains, nh, nk, gam
```

アジマス数  $NAZ$ 、視射角数  $NG$ 、ドメイン数  $NDOM$ 、 $NH$ 、 $NK$ 、 $GAM$  を出力

```
#beams, domain angle, domain weight
```

反射ビーム数 ( $NB$ )、ドメイン回転角 ( $RDOM$ )、ドメイン重み ( $WDOM$ ) をドメイン数  $NDOM$  の行数だけ出力

```
#ih, ik
```

反射ビームの指数  $IH(J, I)$ 、 $IK(J, I)$  を  $J=1$  から  $NB(I)$  まで並べる。..... ドメイン数  $NDOM$  の行数だけ出力  
ドメイン 1 から  $NDOM$  まで

```
{
```

アジマス数  $NAZ$ 、視射角数  $NG$  のうちステップ数の小さい方を外側のループとし

```
{
ステップ数の大きい方を内側のループとして内側のループの角度、回折強度（今のドメインのビーム数だけ）..... 内側の
ループの角度数の行数だけ出力
}
```

```
}
```

空行

を外側のループの角度数だけ繰り返す。

```
}
```

をドメイン数だけ繰り返す。