

## VESTA のインストール

<http://jp-minerals.org/vesta/jp/download.html> にアクセス

1. Latest versions > Windows 用 > VESTA.zip (32-bit 用、64-bit 用でも可) をダウンロードして解凍。
2. VESTA フォルダを適切な階層（例えば、C:\Program Files など）に移動。

## RIETAN のインストール

<http://fujioizumi.verse.jp/download/download.html> にアクセス

1. ドキュメンテーション > documents.zip をダウンロードして解凍。ここにマニュアルが入っている。
2. Windows 用配布ファイル > Windows\_versions\_#####.zip (#は数字)をダウンロードして解凍。展開されたファイルから Readme\_Win.pdf に記されている手続きに従いインストール。
3. C:\Program Files\RIETAN\_VENUS に documents フォルダをコピーする。

## VESTA と RIETAN の連携設定

1. C:\Users\ユーザー名\RIETAN\_VENUS\_examples (RIETAN インストール時に作成される) を開き、Fapatite フォルダの中にある Fapatite.ins をデスクトップにコピーする。
2. Fapatite.ins を template.ins に改名する。
3. template.ins をメモ帳で開き、Ctrl+F で検索窓を開いて DEG1 という文字列を検索。
4. 以下の様に変更する (2 $\theta$ の最大と最小値の変更)  
DEG1 = 10.0 -> DEG1 = 5.0  
DEG1 = 60.0 -> DEG1 = 160.0
5. VESTA フォルダを開く
6. template.ins を VESTA フォルダに上書きコピーする。
7. VESTA.exe を起動する
8. メニュー > Edit > Preferences を開いて以下の様に設定する。  
RIETAN: C:\Program Files\RIETAN\_VENUS\RIETAN.exe  
VIEWER: C:\Program Files\RIETAN\_VENUS\RIETVIEW.EXE  
template(\*ins): [VESTA フォルダのパス]\template.ins  
(注意) [VESTA フォルダのパス]には自分の環境でのパスを入れること。

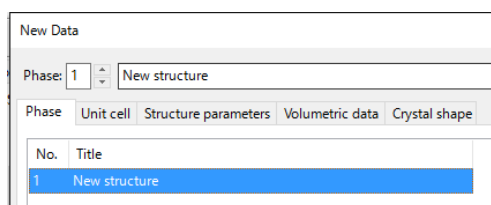
## 結晶構造の入力

1. 目的の化合物の結晶構造に関する以下のデータを入手しておく。

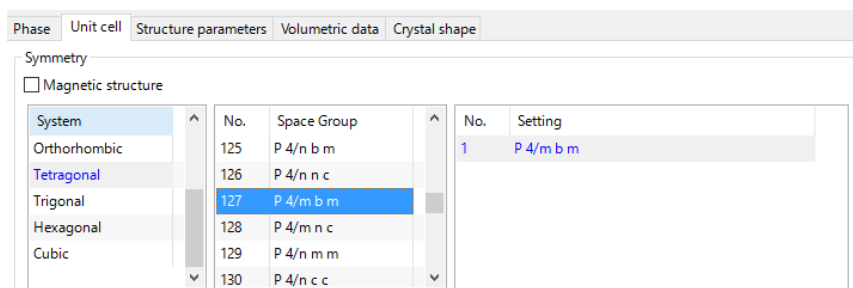
- ① 空間群ナンバー（もしくは P4/mbm 等の国際表記）
- ② 格子定数
- ③ 原子位置

2. メニュー > File > New Structure... を選択。

3. Phase タブの No. 1. の Title を選択し、入力する化合物の名前に変更する。



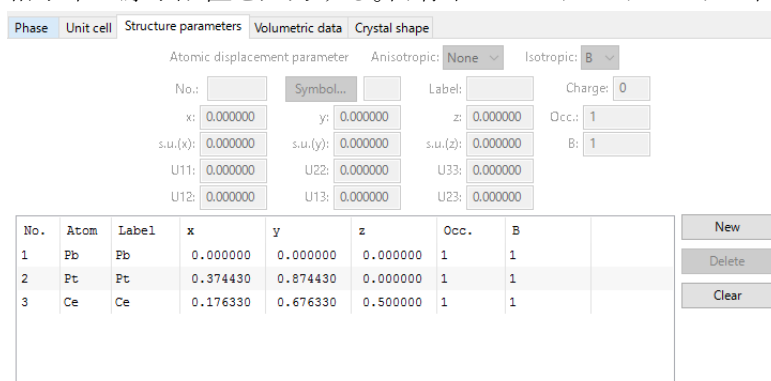
4. UnitCell タブを選択し、左から、適切な対称性、空間群（もしくは国際表記）、原点の選択（通常は No.1 でよい）を選択する



5. 同じく UnitCell タブで格子定数を入力する。

| Lattice parameters |         |         |              |             |              |
|--------------------|---------|---------|--------------|-------------|--------------|
| a (Å)              | b (Å)   | c (Å)   | $\alpha$ (°) | $\beta$ (°) | $\gamma$ (°) |
| 7.92984            | 7.92984 | 3.80153 | 90.0000      | 90.0000     | 90.0000      |
| s.u.:              | 0.00000 | 0.00000 | 0.0000       | 0.0000      | 0.0000       |

6. 格子中の原子配置を入力する。占有率 Occ とデバイワラー因子 B 値は通常 1 で良い。



7. OK を押す。

#### 粉末回折シミュレーションの実行

1. シミュレーションを実行したい構造を入力して保存する。ここでは保存ファイルを **CompName.vesta** とする。
2. メニュー > **Utilities > Powder Diffraction Pattern...** を選択。DOS 窓（黒い背景のウィンドウ）が開いて計算が実行された後、**RIETVIEW.exe** が実行されてシミュレーション結果が簡易表示される。
3. 計算結果は[VESTA フォルダのパス]¥tmp 以下に **CompName.itx** として保存される。
4. **CompName.itx** は IgorPro 用のファイル形式であるため、IgorPro に投げ込めば読み込むことができる。また、中身はテキスト形式のファイルなので適宜修正して他のソフトに読み込ませることも可能。