

# SeqRunPro ユーザーズマニュアル

第 3 版

2015 年 8 月 5 日

本マニュアルの記載内容は情報使用の目的で提供されます。記載内容は予告なく変更することがあり、その内容については株式会社フィゾニット (以下、フィゾニット) の責任とはみなされません。本マニュアルに記載されている情報の正確性および信頼性には万全を期しておりますが、本マニュアルにおける誤りや不正確な情報により生じる損害に関して、また SeqRunPro を利用して得られた解析結果への責任に関して、フィゾニットは一切の責任を持ちません。

本マニュアルの内容は、‘**RIETAN-FP v2.63**’ で動作確認をしています。

本文中のシステム・製品名は、一般に各社の登録または商標です。

本マニュアルでは、TM, ®マークなどは明記していません。

本マニュアルの内容は、著作権法上の保護を受けています。当社の文書による許諾を得ずに、本マニュアルの内容の一部、あるいは全部を無断で複写 (コピー)・複製・転載することは、禁じられております。

©2014–2015, Physonit Inc. All Rights Reserved.

# 目次

第 1 章	はじめに	1
1.1	SeqRunPro	1
1.2	RIETAN-FP	2
1.3	リートベルト解析	2
1.3.1	リートベルト解析の原理	2
1.3.2	リートベルト解析で得られる物理量	3
1.3.3	リートベルト解析の特徴	4
第 2 章	SeqRunPro の使い方	5
2.1	インストール	5
2.2	画面説明	6
2.3	ファイル指定	7
2.3.1	Bat ファイル作成	8
2.3.2	テンプレートシーケンスワークシート作成	9
2.4	シーケンスワークシート指定	12
2.4.1	(1) ラベル	12
2.4.2	(2) ID	12
2.4.3	(3) 制約条件	12
2.4.4	(4) 出力フラグ	13
2.4.5	(5) コメント	13
2.5	実行	14
2.6	プリファレンス	15
2.6.1	ライセンス認証関連	15
2.6.2	結果出力関連	15
2.6.3	バッチファイル関連	17
2.7	ライセンス認証	18
2.7.1	個別キー生成	18
2.7.2	アクティベート	19
付録 A	RIETAN-FP のダウンロードとインストール	21
A.1	ダウンロード	21
A.2	インストール	21

---

A.3	動作確認 . . . . .	21
付録 B	hoge.bat	23
付録 C	使用許諾契約書	25
参考文献		29
索引		33

# 第 1 章

## はじめに

このたびは「SeqRunPro.xlsm (以下, SeqRunPro)」をダウンロード頂きまして, 誠にありがとうございます。インストール前に, このマニュアルをご一読下さい。お読みになった後は, いつでも見られるように大切にお手元に保管下さい。SeqRunPro により皆様の研究開発活動がさらに充実したものになりますことを, 心よりお祈り申し上げます。

### 1.1 SeqRunPro

SeqRunPro は, RIETAN-FP (1.2 節参照) を用いたリートベルト解析 (1.3 節参照) のための計算効率化マクロです。動作には, RIETAN-FP と Microsoft 社 Excel が必要です。Excel 上のワークシート操作により, 複数回数のリートベルト解析実行をサポートします。

1 回のリートベルト解析計算を“シーケンス”と呼ぶことにします。SeqRun(Pro) の名称は, Sequence Run (シーケンスを走らせる) に由来します。シーケンスランまたはセックランと呼んで下さい。

SeqRunPro により, 一連のリートベルト解析の所要時間が 10 分の 1 から 100 分の 1 程度に短縮可能です。解析計算中は別の作業に当たることができ, 人的リソースの有効活用に繋がります。さらに, 温度変化や組成変化等の一連のデータに対して同一のシーケンス群を適用できるため, これらのデータの解析結果を比較する際, 信頼性が向上します。またこれは, 部署や研究室内でシーケンスを組む人が 1 人いれば, 部署内の全員が同質の解析を容易に実施できることを意味します。

SeqRunPro では, 計算中に DOS プロンプトを表示させないモードや, 解析結果の変遷をファイルやワークシートに出力したり, Excel のグラフで図示する機能を備えています。表示/非表示, 出力/非出力は任意で変更可能です。

SeqRunPro の使用できる環境は以下のとおりです。なお, SeqRunPro が使用する外部プログラム (RIETAN-FP, Excel) は, 別途ご用意いただき, インストールする必要があります。RIETAN-FP のダウンロードとインストールについては, 付録 A をご覧下さい。

#### 動作環境

OS: Windows 8.1/8/7/Vista (32 ビット及び 64 ビット)

Excel: 2013/2010/2007 (32 ビット及び 64 ビット)

RIETAN-FP: v2.63 (適切な bat ファイルを用意すれば, 以前の RIETAN-FP でも動作します。)

## 1.2 RIETAN-FP

RIETAN-FP [1–3] は、独立行政法人物質・材料研究機構 (NIMS) の客員研究員・泉富士夫博士 (現名古屋工業大学客員教授) が長年にわたって開発・運営しているリートベルト解析プログラムです。日本で最も普及しているリートベルト解析プログラム、また、世界の三大リートベルト解析プログラムの一角です。プログラム名は RIETveld ANalysis の略称で、リータンと読みます。

また、日本語の情報が 1 番充実している、他のリートベルト解析プログラムと比べてフィッティング結果がよい、MEM/リートベルト解析 [4, 5] や MPF 法 [6–12] が使える、VESTA3 [13, 14] との連携に優れている等、他にも多くの特徴があります。詳細は RIETAN-FP マニュアル [15] や関連書籍 [16] をご覧ください。

## 1.3 リートベルト解析

リートベルト解析は、粉末材料の X 線・中性子回折データを使って、材料の結晶構造パラメータを精密化する解析手法です。オランダ人結晶学者ヒューゴ・リートベルト (H.M. Rietveld) 博士による開発です [17, 18]。1969 年に出版されたフルペーパー [18] がインターネット上で無償で公開されています [19]。ぜひアクセスして、ご一読下さい。

### 1.3.1 リートベルト解析の原理

リートベルト解析では、図 1.1 に示すように、(i) 実測の粉末回折パターンと (ii) 結晶構造モデルを用意します。結晶構造モデルから理論回折パターンを計算できるので、構造モデル中の各種パラメータを変えながら実測回折パターンに 1 番よく合う理論回折パターンを探します。こうして、各種パラメータを精密化します。

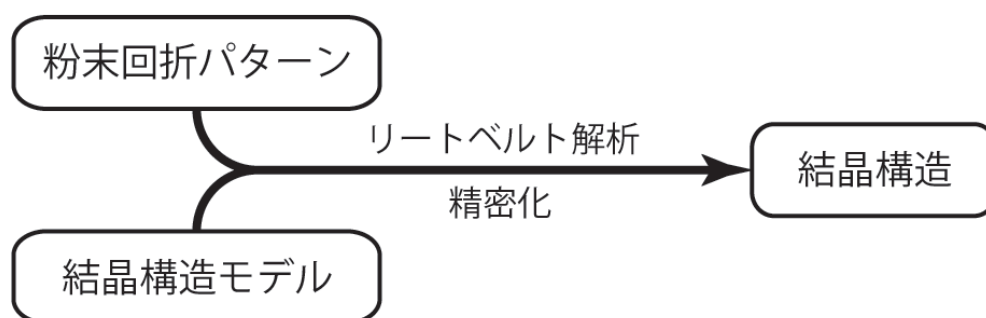


図 1.1 リートベルト解析のイメージ図

式で表すと以下になります。

$$S(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^N w_i [y_i - f_i(\boldsymbol{x})]^2 \quad (1.1)$$

ここで、 $S(\boldsymbol{x})$  は残差二乗和、観測点  $i$  における実測回折強度  $y_i$ 、理論回折強度  $f_i(\boldsymbol{x})$ 、重み  $w_i$ 、 $N$  は観測点数、 $\boldsymbol{x}$  はパラメータ群です。重みは一般的には、 $w_i = 1/y_i$  で定義します。また、 $\boldsymbol{x}$  は、 $\boldsymbol{x} = \{x_1, x_2, x_3, \dots, x_n\}$  のように複数のパラメータが含まれます。パラメータ数  $n$  は実験条件、測定試

料，解析条件によって変わります。これらのパラメータは，結晶構造パラメータとプロファイル・パラメータに分類することができます。前者は文字通り結晶構造を表現するパラメータ，後者は回折反射の形状（幅や広がり具合）を表現するパラメータです。

実際の計算では，まずユーザーが与えた  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  を使って最初の  $S(x)$  を算出し， $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  を少し変えてもう 1 度  $S(x)$  を算出し，また少し変えてさらに算出し... この反復を  $S(x)$  がこれ以上小さくなくなるまで続けます。以上が式 (1.1) の意味です。

また，式 (1.1) 中の  $f_i(x)$  は以下の式で表されます。

$$f_i(x) = S_R(\theta_i)A(\theta_i)D(\theta_i)s \sum_K m_K |F(\mathbf{h}_K)|^2 P_K L(\theta_K) G(\Delta 2\theta_{iK}) + y_b(2\theta_i) \quad (1.2)$$

ここで， $S_R(\theta_i)$  は表面粗さ補正因子， $A(\theta_i)$ : 吸収因子， $D(\theta_i)$ : 一定照射幅補正因子， $s$ : 尺度因子， $K$ : 反射番号， $m_K$ : 多重度， $F(\mathbf{h}_K)$ : 結晶構造因子， $\mathbf{h}_K$ : 反射指数  $hkl$ ， $P_K$ : 選択配向因子， $L(\theta_K)$ : ローレンツ・偏光因子， $\theta_K$ : ブラッグ角， $G(\Delta 2\theta_{iK}) \equiv G(2\theta_i - 2\theta_K)$ : プロファイル関数です。 $i$  番目の観測点に寄与する反射について総和を取ります。

ずいぶん複雑な式ですが，計算は非線形最小二乗法にもとづいて，コンピュータプログラム (RIETAN-FP) が行います。計算 1 回当りの所要時間は，最新のコンピュータなら速ければ数秒，遅くとも分単位です。ただし，“解析”を終えるには“一連の計算”(=数十回ないし数百回の計算)を必要とすることが大半です。SeqRunPro を使えば，“一連の計算”を（ユーザーによる事前設定にもとづいて）自動で完了させることが可能です。

### 1.3.2 リートベルト解析で得られる物理量

リートベルト解析で得られる物理量を図 1.2 にまとめます。

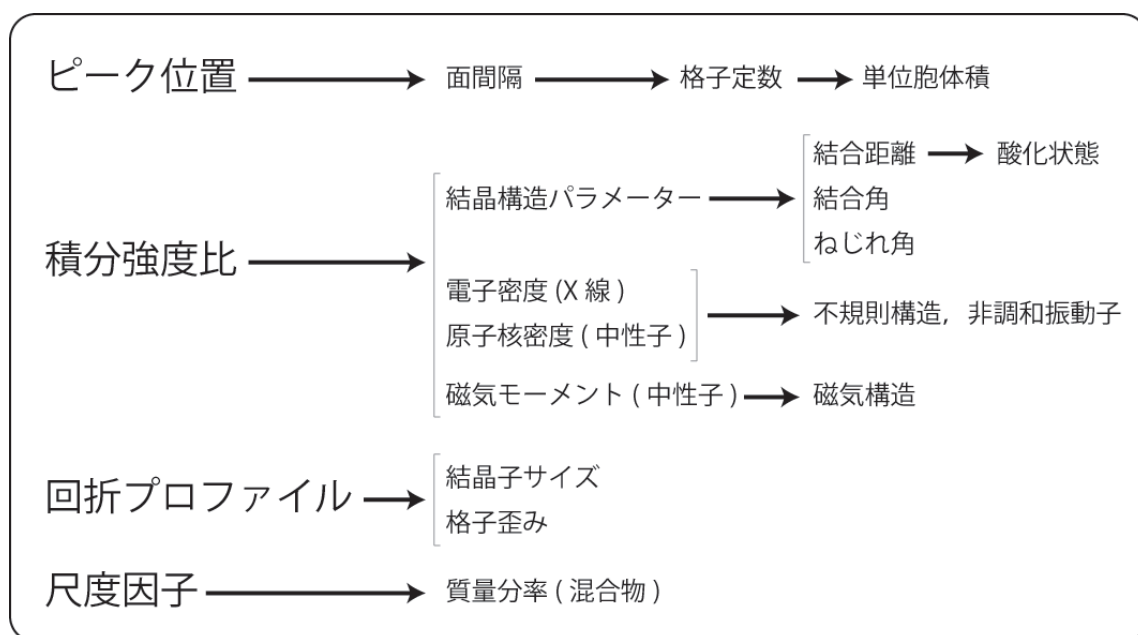


図 1.2 リートベルト解析で得られる物理量

### 1.3.3 リートベルト解析の特徴

リートベルト解析の特徴をまとめます。

- (1) リートベルト解析は、全パターン（全ての測定データ）をそのまま使うカーブフィッティング
- (2) フィッティングに非線形最小二乗法を用いる
- (3) 結晶構造モデルをユーザーが与える
- (4) 結晶構造モデル次第で得られる結果（結晶構造パラメータ）は変わる
- (5) 結晶構造パラメータの初期値が必要
- (6) 結晶構造パラメータの初期値が真値に近くないと、ローカル・ミニマムに陥るか発散する



## 第2章

# SeqRunPro の使い方

### 2.1 インストール

SeqRunPro は Excel ブック (コード) 形式のファイルです。ファイル内部にコードが記述されており、Windows のレジストリは一切変更しませんので、SeqRunPro 自身に関しては特にインストールの必要はありません。

SeqRunPro が使用する外部プログラム (RIETAN-FP, Excel) は別途インストールする必要があります。RIETAN-FP のダウンロードとインストールについては、付録 A をご覧ください。

配布用の ZIP アーカイブファイルを解凍してできる SeqRunPro という名前のフォルダ内の SeqRunPro.xlsm を適当な場所に置き、ダブルクリックすると Excel によって SeqRunPro.xlsm が起動されます。試用版では SeqRunPro の一部機能を利用することができ、起動時に図 2.1 のダイアログが現れます。ライセンスご購入およびアクティベート (2.7 節をご覧ください) して頂くことで、全ての機能をご利用頂けます。

また、Excel のデフォルトでは、マクロの設定は「警告を表示してすべてのマクロを無効にする (D)」となっています。この場合、図 2.2 の赤枠で示したような、セキュリティの警告バーが表示されます。SeqRunPro を動作させるには、「コンテンツの有効化」ボタンを押して下さい。

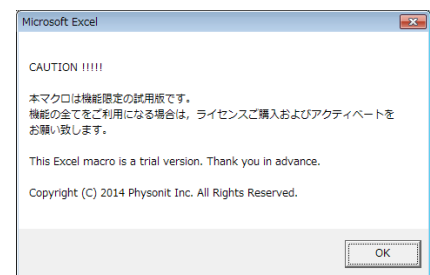


図 2.1 起動時ダイアログ (試用版のみ)

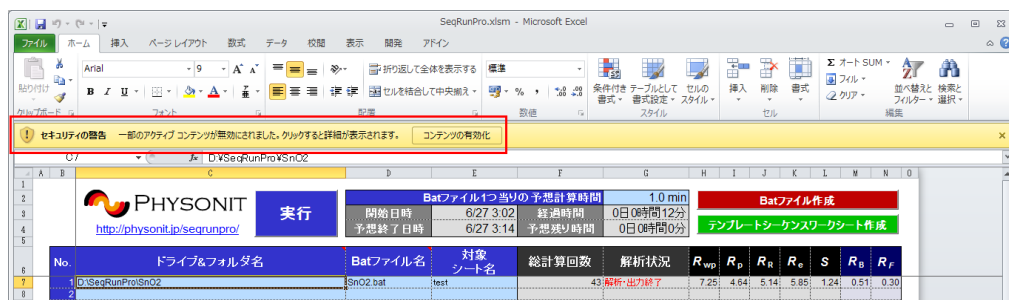


図 2.2 セキュリティの警告バー

## 2.2 画面説明

SeqRunPro は、4 種類のワークシートから構成されます (図 2.3)。(1) Pref ワークシート、(2) EXE ワークシート、(3) シーケンスワークシート、(4) 出力ワークシートです。

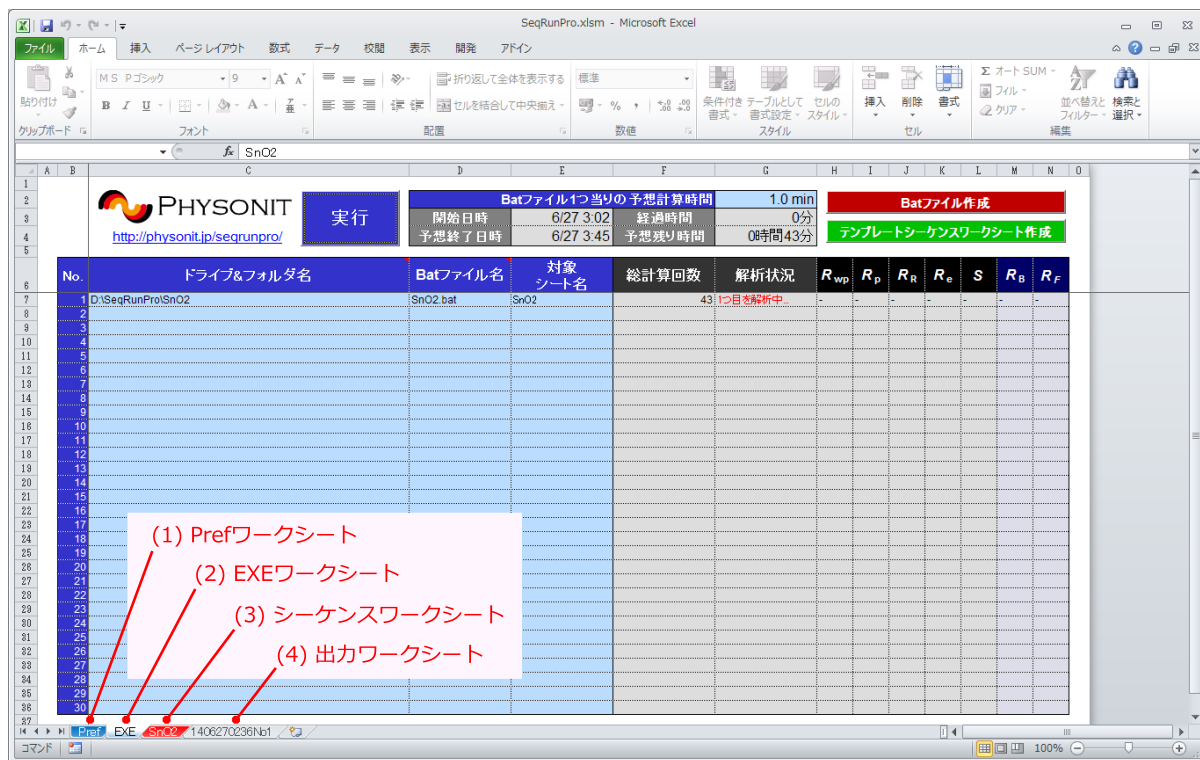


図 2.3 SeqRunPro 画面

各ワークシートの役割を以下にまとめます。

- (1) Pref ワークシート: 各種設定用ワークシート。計算結果をファイルやワークシートへ出力する/しない等の設定が可能です。必須であり、名前を変更することはできません。
- (2) EXE ワークシート: ファイル指定用ワークシート。計算対象のファイル情報 (ドライブおよびファイル名) を指定します。必須であり、名前を変更することはできません。
- (3) シーケンスワークシート: シーケンス指定用ワークシート。\*.ins ファイル中の ID を指定します。アクティベート後は、EXE ワークシートのテンプレートシーケンスワークシート作成ボタン (図 2.4 中 (6)) でテンプレートシーケンスワークシートを\*.ins ファイルから自動作成することができます。手動で作成しても構いません。計算実行時は必須であり、名前は任意です。
- (4) 出力ワークシート: 出力用ワークシート。Pref ワークシートの設定に応じて、計算後に SeqRunPro によって生成されます。名前は自動で付けられます (計算開始時の年月日時分および計算番号から成る YYMMDDhhmmNo\*)。計算結果の変遷をグラフ表示 (図 2.13) することもできます。

## 2.3 ファイル指定

EXE ワークシートでファイル指定を行います。図 2.4 の (1), (2), (3) にそれぞれドライブ&フォルダ名, Bat ファイル名, 対象シート名を入力します。ドライブ&フォルダ名の末尾は, ¥マークを含める/含めないのいずれでも構いません。Bat ファイル名は, 拡張子 (.bat) を付ける/付けないのいずれでも構いません。

尚, \*.bat, \*.ins, \*.int の 3 つのファイルが 1 つのフォルダに含まれていることが前提となります。

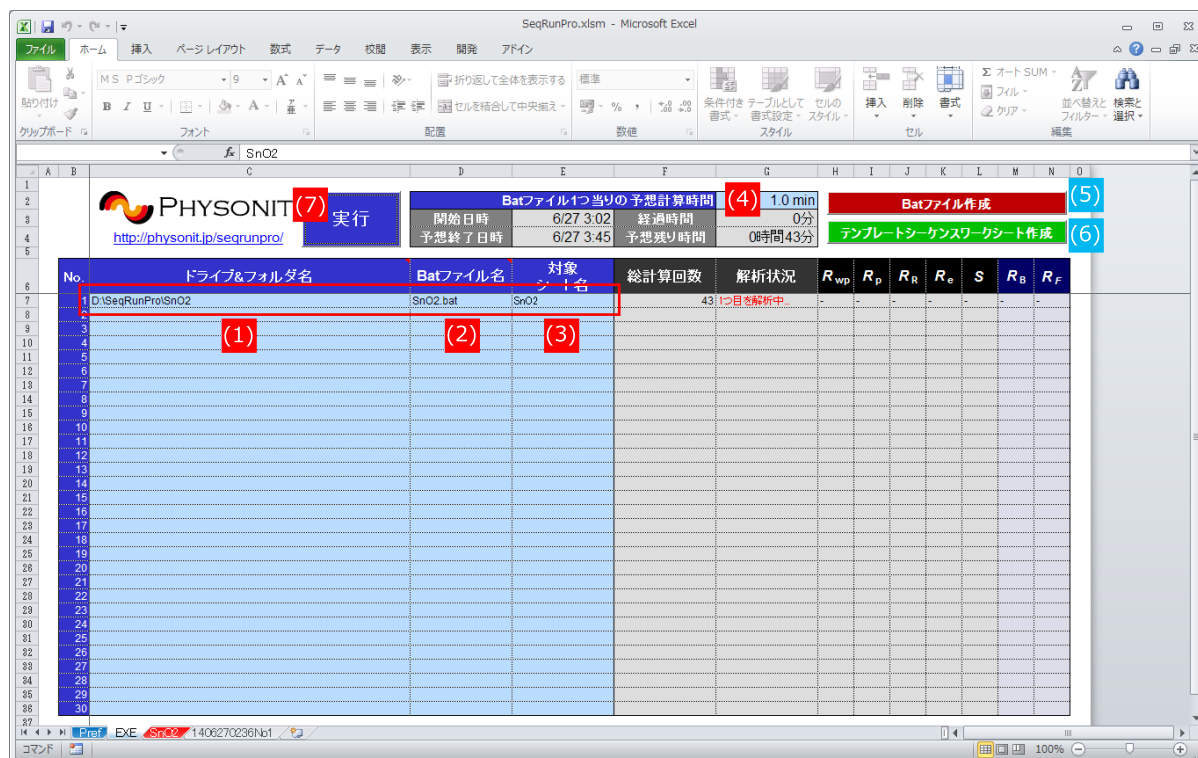


図 2.4 EXE ワークシート画面

試用版では, 計算実行されるファイルの数は 1 つのみです。2 つ以上指定しても, 計算されるのは 1 つとなります。

アクティベート後は, 最大 30 個のファイル指定が可能です。また, 図 2.5 のように空白セルを追加すると, 空白セルの前までが計算対象となります。この例では, SnO2 および TiO2 は計算されますが, ceria は計算されません。

No.	ドライブ&フォルダ名	Batファイル名	対象シート名	総計算回数	解析状況	$R_{wp}$	$R_p$	$R_R$	$R_e$	S	$R_B$	$R_F$
1	D:\SeqRunPro\SnO2	SnO2.bat	test	43	解析・出力終了	7.25	4.64	5.14	5.85	1.24	0.51	0.30
2	D:\SeqRunPro\TiO2	TiO2.bat	TiO2									
3												
4	D:\SeqRunPro\ceria	ceria.bat	ceria									
5												
6												
7												
8												
9												
10												

図 2.5 EXE ワークシート画面 (アクティベート後)

### 2.3.1 Bat ファイル作成

図 2.4 中の (1), (2) を指定して, (5) の Bat ファイル作成ボタンを押します。図 2.4 中 (1) で指定したドライブ&フォルダに, RIETAN-FP 実行用のバッチファイルが作成されます (図 2.6(中))。ファイル名 (基本名) は, (2) で指定したものになります。また, 既にバッチファイルが存在する場合は, 既存ファイルは, 末尾に ‘.org’ が付加されたファイル名に変更されます (図 2.6(下))。

作成されるバッチファイルは, RIETAN-FP のテンプレートに含まれているものと完全に互換性があり, 日本語表示です。具体例が付録 B に示してあります。

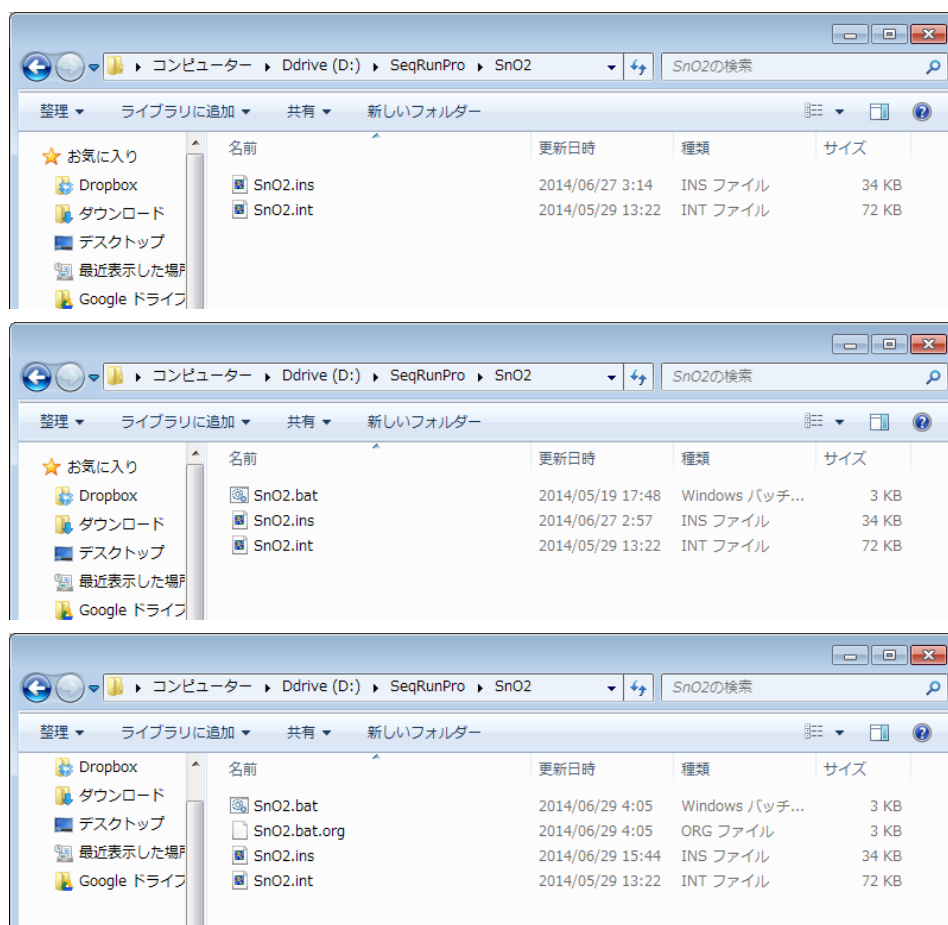


図 2.6 Bat ファイル作成ボタンを (上) 押す前, (中) 押した後, (下) 2 度以上押した後

## 2.3.2 テンプレートシーケンスワークシート作成

本機能により、\*.ins ファイルとシーケンスワークシート間のラベル名の不一致を避けられます。本機能は、アクティベート後にご利用頂けます。試用版ではデモ動作のみとなります。

図 2.4 中の (1), (2), (3) を指定して、(6) のテンプレートシーケンスワークシート作成ボタンを押します。(1) で指定したドライブ&フォルダ中の\*.ins ファイル ((2) で指定したファイル名と同一の基本名) を読み込み、(3) で指定した名前のシーケンスワークシートが作成されます (図 2.7(下), 図 2.8)。スケール因子の ID に 1, その他の ID に 0 が 1 行自動入力されます。これらは、テスト計算用に適しています。ID は、目的の計算に応じて自由に追加・変更して構いません。また、ID を入力するセルは条件付き書式となり、0, 1, 2 は自動でそれぞれ黒、赤、青に色づけされます。

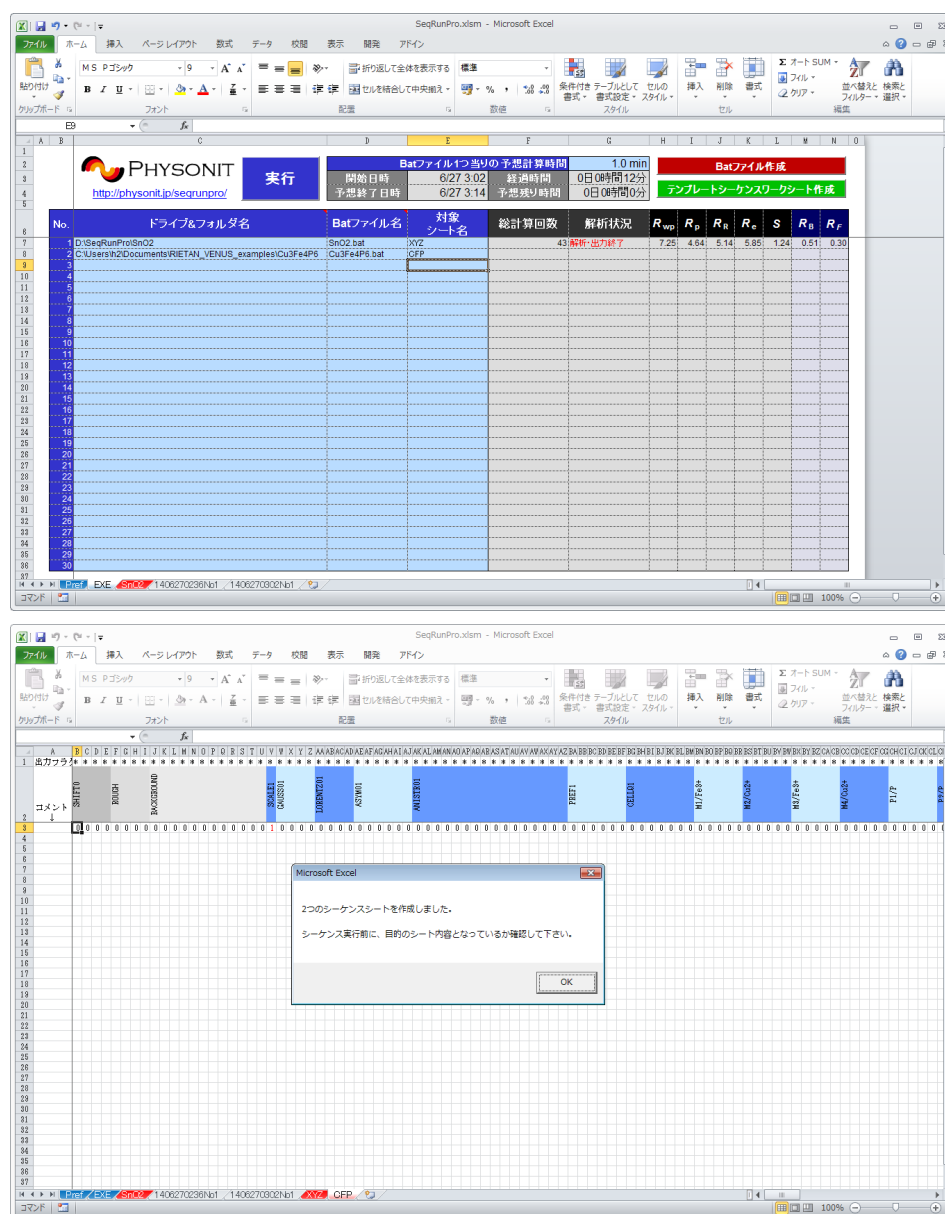


図 2.7 テンプレートシーケンスワークシート作成ボタンを (上) 押す前, (下) 押した後

また、ID = 2 の場合の計算にも対応しており、制約条件を記述する列が ID 末尾の空白列の後に用意されます (図 2.8(下))。ただし、ID = 2 を含む\*.ins ファイルを指定してテンプレートシーケンスワークシートを作成しても、制約条件記述セルは空白のままです。必要時は手動で記述して下さい。

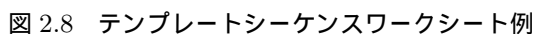


図 2.9 のように、対象シート名に既存のシーケンスワークシート名を指定している場合、ワークシートは作成されずに中断・終了します。この例では、1 つ目の test ワークシートが既存であるため、作成が中断されました。既存ワークシートの指定があるところで中断するため、2 つ目の TiO2 ワークシートも作成されません。本機能を用いてテンプレートシーケンスワークシートを作成する際は、指定の順序に注意して下さい。

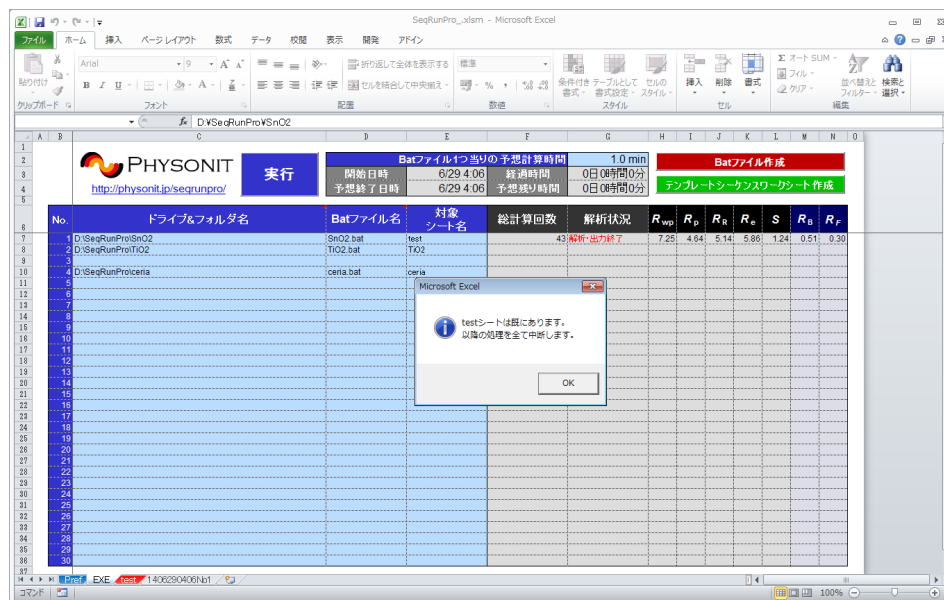


図 2.9 テンプレートシーケンスワークシート作成中断例

## 2.4 シーケンスワークシート指定

シーケンスワークシートは、(1) ラベル、(2) ID、(3) 制約条件、(4) 出力フラグ、(5) コメントから成ります (図 2.10)。3 行目以降の各行をシーケンスと呼びます。

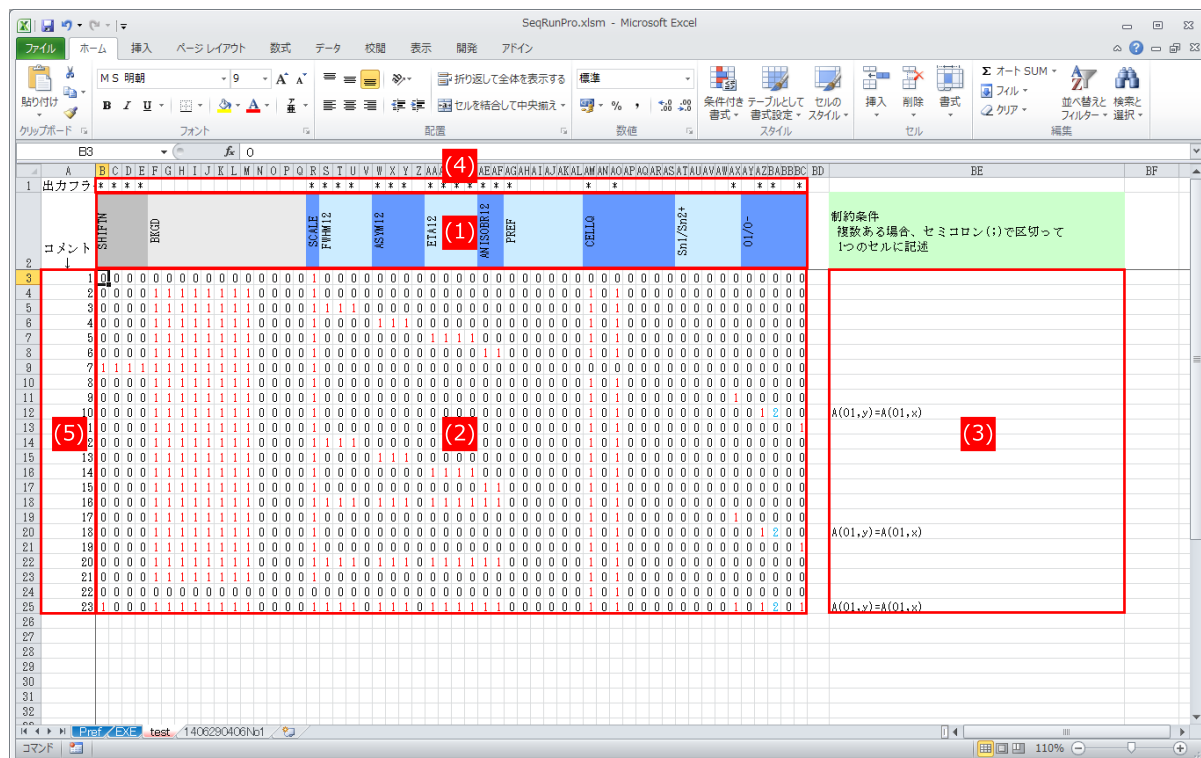


図 2.10 シーケンスワークシートの例

### 2.4.1 (1) ラベル

ラベル欄は、\*.ins ファイルで使われるラベルを指定します。各ラベル列の冒頭にラベル名を入力し、ラベル数の列を用意します。例えば、バックグラウンド・パラメータは 12 個あるため、BKGD の後に 11 個の空白列を用意します。

### 2.4.2 (2) ID

ID 欄は、0, 1, 2 を指定します。0 はパラメータ固定、1 はパラメータ精密化、2 は制約条件付きパラメータ精密化です。

試用版では、シーケンス 3 つまでの機能制限となっております。アクティベート後は、Excel の行数制限以内 (およそ 100 万行) の指定が可能です。

### 2.4.3 (3) 制約条件

ID = 2 を指定した場合、制約条件の指定も必須となります。制約条件が複数あるときは、セミコロンで区切って 1 つのセルに記述します。



#### 2.4.4 (4) 出力フラグ

各種パラメータ変遷をワークシート (2.6.2 小節参照) および CSV ファイル (2.6.2 小節参照) へ出力する際の出力指定をします。アスタリスク (\*) を記したパラメータが出力されます。

#### 2.4.5 (5) コメント

自由フォーマットでコメントを記述できます。空白でも構いません。図 2.10 では、シーケンスの通し番号を記しています。

## 2.5 実行

実行は EXE ワークシートより操作します。計算対象ファイル (図 2.4 中 (1), (2), (3)) および対応するシーケンスワークシート (図 2.10) を整えた後, 図 2.4 中 (7) の実行ボタンを押します。正しく設定されていれば, 計算が実行されます。

計算中は図 2.11 で示したように, 予想終了時間, 経過時間, 予想残り時間が逐次表示・更新されます。また, 解析状況, 1 つ前の計算結果 ( $R$  因子) も表示・更新されます。Bat ファイル 1 つ当りの予想計算時間 (図 2.4 中 (4)) は, 初回計算前のみ利用されます。

Pref ワークシートの設定で, 計算中の DOS プロンプトを表示/非表示や, 計算結果の変遷表示等を任意で決めることができます (2.6.2 小節参照)。

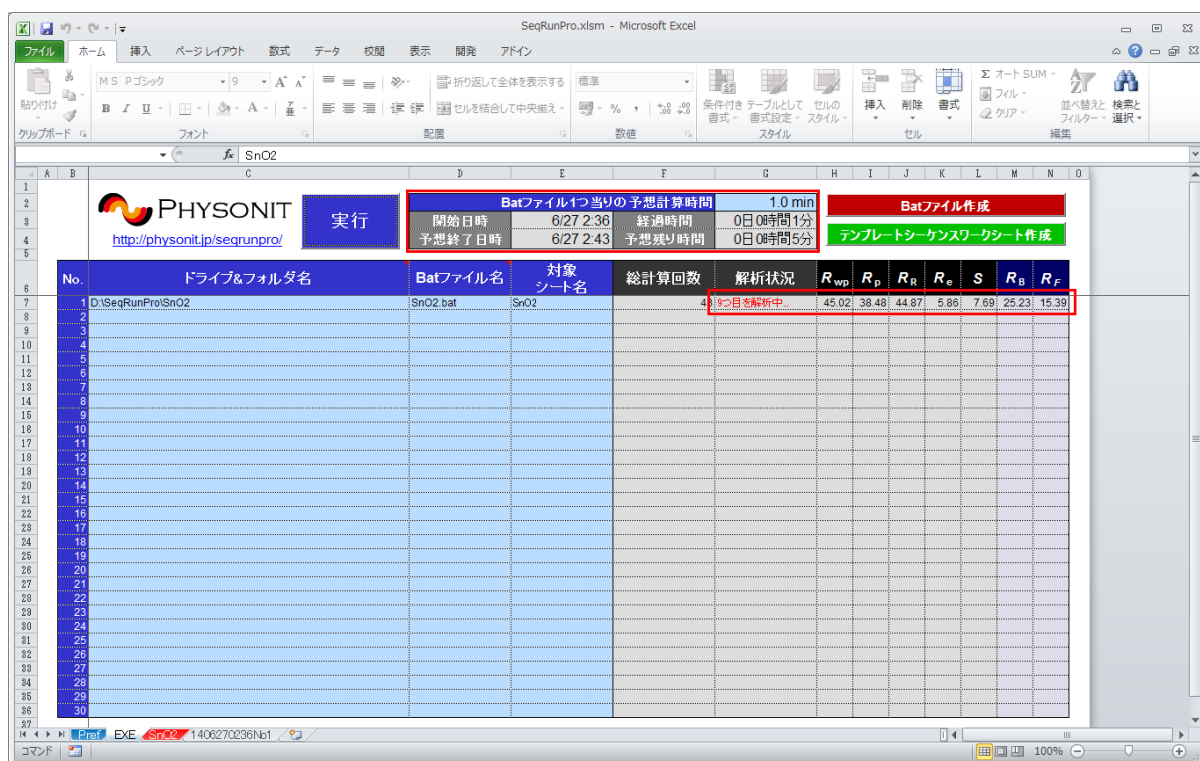


図 2.11 計算中画面例 (DOS プロンプト非表示)

## 2.6 プリファレンス

プリファレンス設定は Pref ワークシートで行います。黄色基調でライセンス認証関連，青色基調で結果出力関連，赤色基調でバッチファイル関連の設定を行います (図 2.12)。

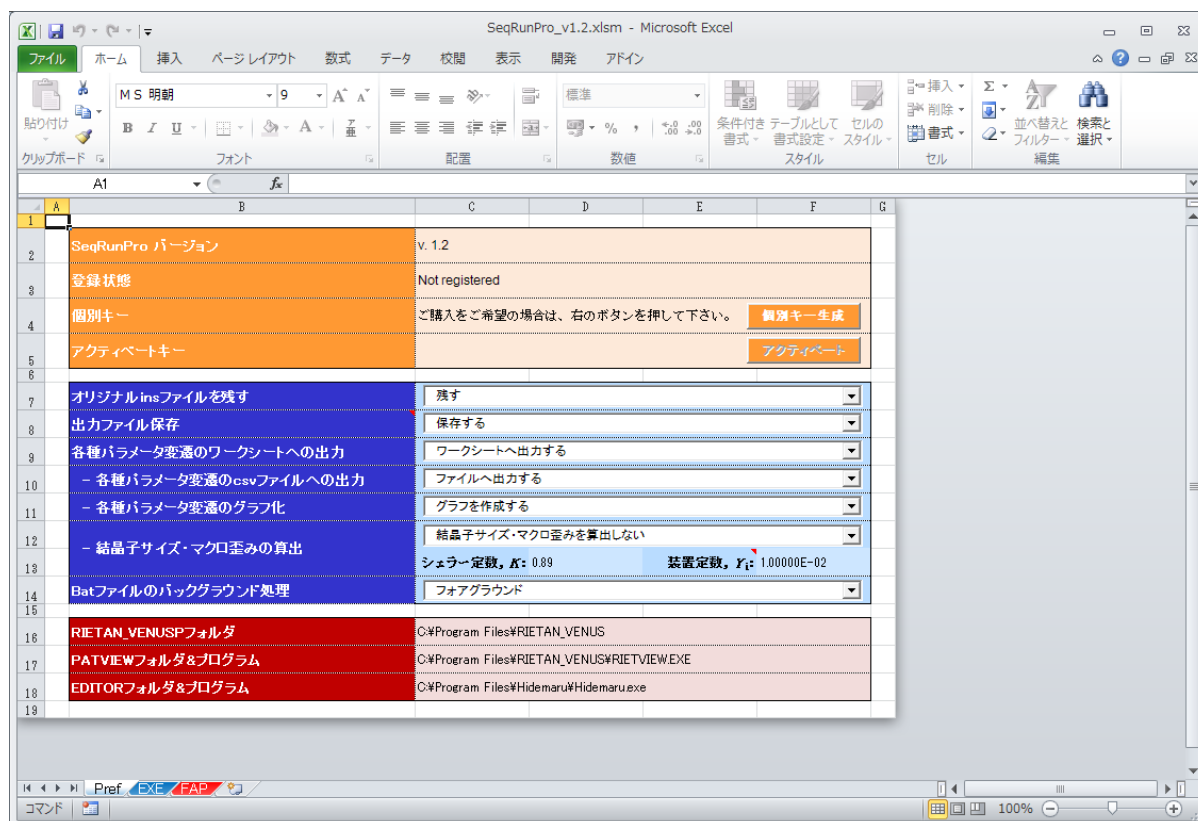


図 2.12 Pref ワークシート例 (試用版)

### 2.6.1 ライセンス認証関連

2.7 節をご覧ください。

### 2.6.2 結果出力関連

#### オリジナル ins ファイルを残す

残す/残さないの選択が可能です。残すを選択すると，実行ボタンを押したときの年月日時分 (YYMMDDhhmm) のフォルダが生成され，元のファイル名の\*.ins ファイルがコピーされます。

#### 出力ファイル保存

保存する/保存しないの選択が可能です。保存するを選択すると，各シーケンスごとにフォルダ (YYMMDDhhmm¥SeqXXXX (XXXX: シーケンス通し番号)) が生成され (図 2.14)，\*.ins, \*.lst, グラフ描画用ファイル (\*.itx または\*.gpd, \*.plt) がコピーされます。

### - 各種パラメータ変遷のワークシートへの出力

ワークシートへ出力する/出力しないの選択が可能です。出力するを選択すると、各ファイル指定番号ごとにワークシート (YYMMDDhhmmNo\* (\*: ファイル通し番号)) が生成され、 $R$  因子および出力フラグの付いたパラメータが出力されます。下記の csv ファイル、グラフのいずれかを出力する場合、ワークシートへの出力も必要となります。

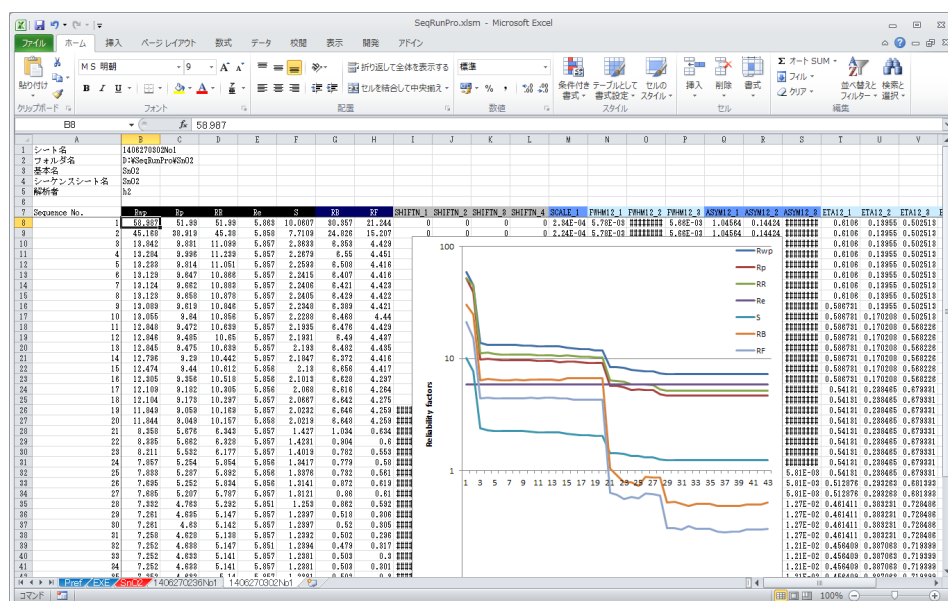


図 2.13 各種パラメータ変遷のワークシート出力例

### - 各種パラメータ変遷の csv ファイルへの出力

ファイルへ出力する/出力しないの選択が可能です。出力するを選択すると、各ファイル指定番号ごとに csv ファイルが生成され、 $R$  因子および出力フラグの付いたパラメータが出力されます。生成フォルダは YYMMDDhhmm, ファイル名は Sum\_基本名\_YYMMDDhhmm.csv となります (図 2.14)。



図 2.14 各種パラメータ変遷の csv ファイル出力例

### - 各種パラメータ変遷のグラフ化

グラフを作成する/作成しないの選択が可能です。図 2.13 は、グラフを作成した例です。

#### - 結晶子サイズ・マクロ歪みの算出

プロファイル関数に TCH の擬フォークト関数を選んでいる場合に、結晶子サイズ・マクロ歪みの算出が可能です。セル D13 にシェラー定数、セル F13 に装置定数を入力して下さい。装置定数とは、歪みのない試料について予め解析を行った際の  $Y$  の値です。ワークシート (YYMMDDhhmmNo\*) に出力されます。

#### Bat ファイルのバックグラウンド処理

バックグラウンド/フォアグラウンドの選択が可能です。フォアグラウンドの場合、RIETAN-FP 実行中に DOS プロンプトウィンドウが表示されます。バックグラウンドを選択すると、DOS プロンプトウィンドウは表示されません。

### 2.6.3 バッチファイル関連

Bat ファイル作成 (2.3.1 節) の際に参照されます。RIETAN\_VENUS フォルダ、PATVIEW フォルダ & プログラム、EDITOR フォルダ & プログラムを指定します。通常、デフォルトのままで構いません。

## 2.7 ライセンス認証

試用版では、SeqRunPro の一部機能をご利用になれます。全ての機能をご利用いただくためにはライセンス認証が必要となります。ライセンス認証は、個別キー生成 → ご連絡およびお支払、アクティベートキー取得 → アクティベートの手順となります。ライセンス認証をご検討の前に、付録 C の使用許諾契約書をご一読下さい。

### 2.7.1 個別キー生成

図 2.15(上) のように、Pref シートの個別キー生成ボタンを押して下さい。図 2.15(中) のダイアログが表示され、お使いの PC に固有の個別キーが生成されます(図 2.15(下))。また、個別キーボタンが無効の状態にロックされ、アクティベートボタンが有効になります。

個別キーを注文書 (SRP\_OrderForm.pdf) にお貼り付けの上、電子メール ([seqrunpro@physonit.jp](mailto:seqrunpro@physonit.jp)) にてお送り下さい。生成された個別キーはクリップボードにコピーされています。

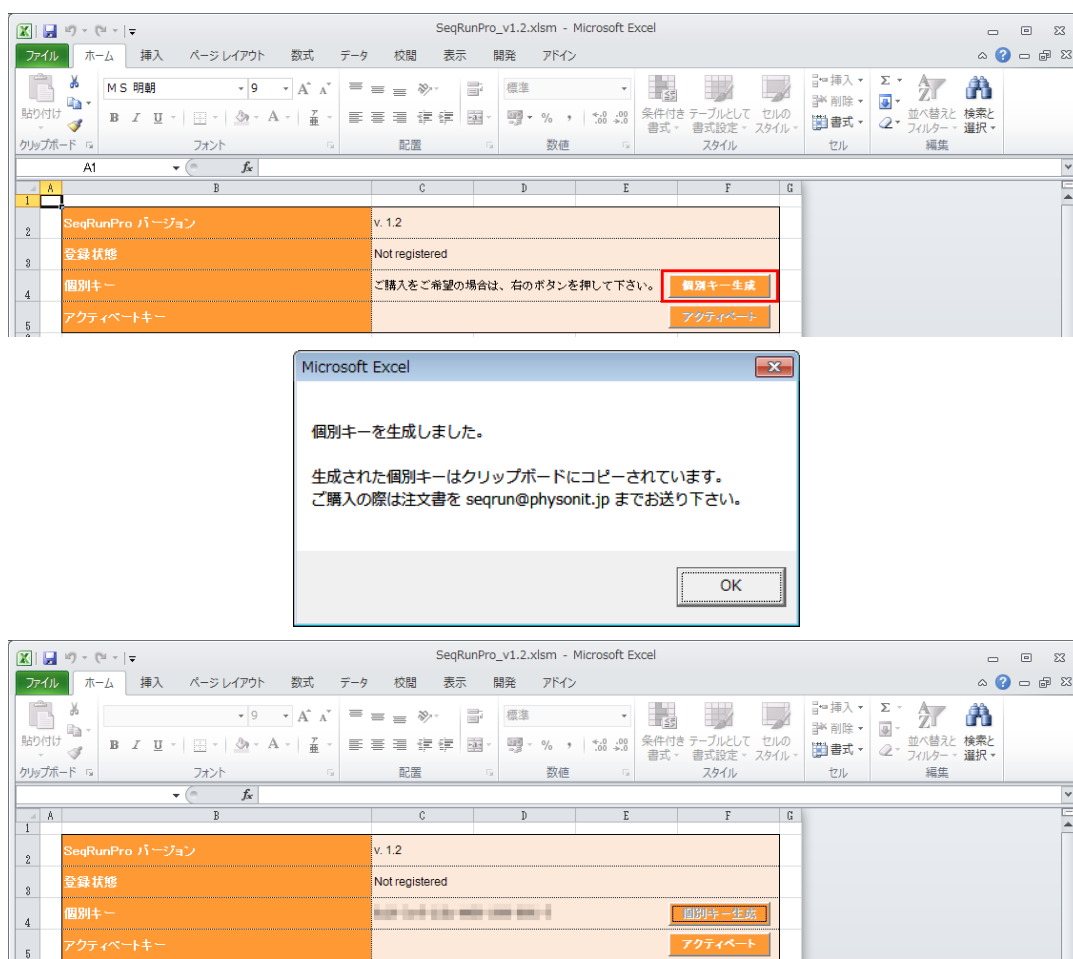


図 2.15 個別キー生成

おり返し、ご注文確認メールを当社よりお送り致します。内容をご確認の上、ライセンス年数に応じたライセンス費用をお支払下さい。お振込みを当社にて確認後、アクティベートキーを記したユーザー登録情報通知書をメールまたは郵送にてお送り致します。

### 2.7.2 アクティベート

Pref シートのアクティベートキーを入力し (図 2.16) , アクティベートボタンを押します。アクティベートに成功すると, 図 2.16(中) のダイアログウィンドウが現れます。また, 図 2.16(下) のように, アクティベートボタンが無効の状態にロックされます。アクティベートは, 必ず, 個別キーを生成したマシンで行って下さい。

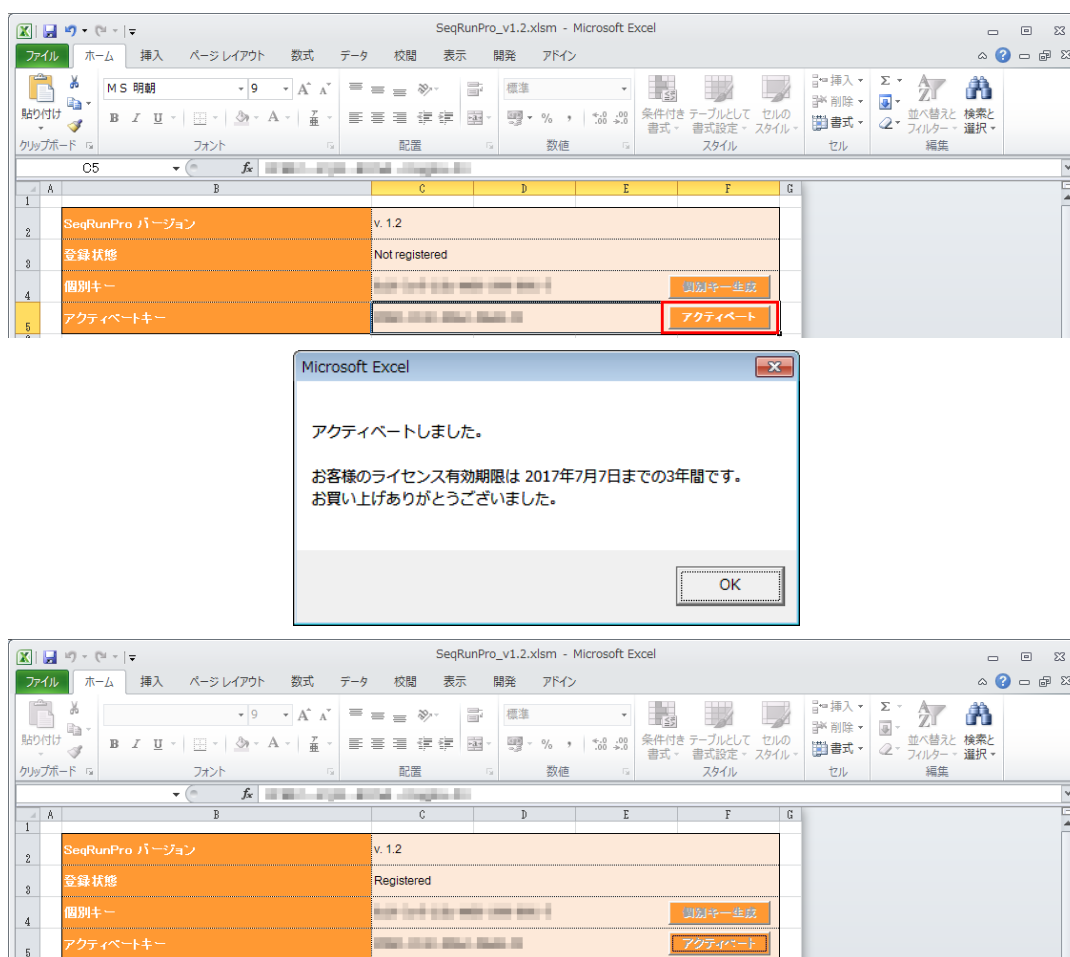


図 2.16 アクティベート

Pref シートへのアクティベートキー入力時, Ctrl+V ではうまくいかない可能性があります (図 2.17 上図参照)。回避方法は次頁をご覧ください。

Pref シートへのアクティベートキー入力用セルで (1) F2 キーを押した後、Ctrl+V で貼り付けます。または、(2) 数式バーをクリックした後、Ctrl+V で貼り付けます。図 2.17 下図を参照してください。

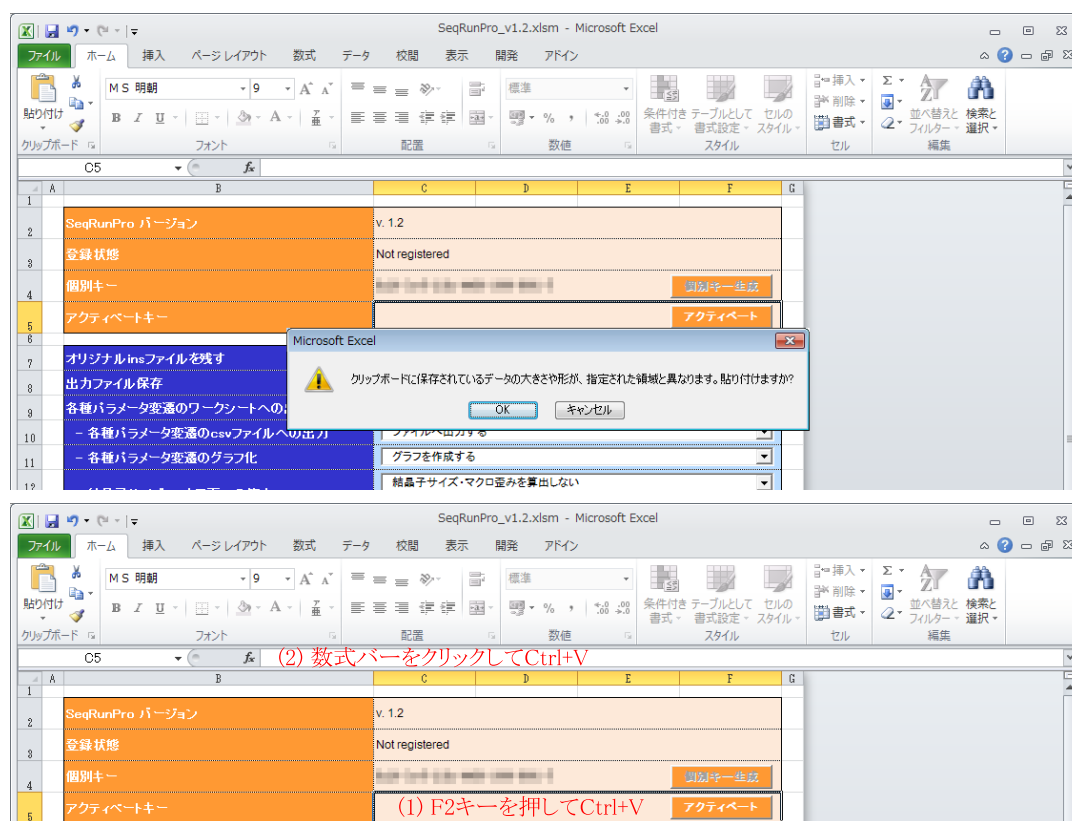


図 2.17 アクティベートキー貼り付け注意点

アクティベートによって制限解除される機能は以下の通りです。

- ファイル指定数 (EXE ワークシート中): 1 → 30
- シーケンス数 (シーケンスワークシート中): 3 → およそ 100 万
- テンプレートシーケンスワークシート作成: デモのみ → デモ解除

試用版では  $1 \times 3 = 3$  回の計算が、アクティベート後は  $30 \times 100 \text{ 万} = 3000 \text{ 万}$  回の計算が無人行えます。計算中は、他の作業はもとより、お出かけや睡眠など、貴重なお時間をご活用頂けます。化学組成や温度を変えた試料で、同一の解析を行うことが可能です。解析者や解析時期が異なっても、同様です。RIETAN-FP と SeqRunPro を利用して効果的にリートベルト解析を行うために、ライセンス認証されることをお勧めいたします。



## 付録 A

# RIETAN-FP のダウンロードとインストール

### A.1 ダウンロード

泉博士のウェブサイト (<http://fujioizumi.verse.jp/>) にアクセスして、Windows 用配付ファイル Windows\_versions.zip をダウンロードして下さい<sup>\*1</sup>。サイト中「日本語 (RIETAN-FP・VENUS システム配布ファイル)」をクリックすると配布ページにアクセスできます。

インストール方法の説明は、Windows\_versions.zip とは別に用意されています。ドキュメンテーションから documents.zip をダウンロードし、解凍して下さい。Readme\_win.pdf に詳細説明があります。

また、ドキュメンテーションに含まれる RIETAN-FP マニュアル (RIETAN-FP\_manual.pdf) は、印刷してお手元に置いておくことをお勧めいたします。

### A.2 インストール

ダウンロードした Windows\_versions.zip を解凍すると、フォルダ Windows\_versions の下に 2 つのフォルダと 8 つのファイルが作成されます。Install\_RIETAN\_VENUS.bat を管理者権限で実行すればインストールが完了します。

### A.3 動作確認

インストールに成功したかどうかを確認するには、ドキュメント-RIETAN\_VENUS\_examples-FapatiteJ-FapatiteJ.bat をダブルクリックします。FapatiteJ.lst 等いくつかのファイルが更新 (生成) されていれば、正しくインストールされています。

---

<sup>\*1</sup> 本マニュアルでは、OS X 版の説明は省略いたします。



## 付録 B

# hoge.bat

SeqRunPro によって生成されるバッチファイルの例を示します。赤文字，青文字部分が SeqRunPro 上の設定に応じて変わります。

```

1: REM RIETAN-FP v2.63 on Windows Vista/7/8 実行バッチファイル
2: REM Created by SeqRunPro on 2015/08/05
3: ECHO OFF
4: CLS
5:
6: REM SET で始まる行の環境変数 LOCINS, SAMPLE, RIETAN を指定して下さい。
7: REM フォルダ, ファイル, 基本名に空白文字が含まれていても, ダブルクォーテーションで囲む必要はありません。
8:
9: REM *.ins および*.int ファイルの絶対パス
10: SET LOCINS=D:¥Rietveld¥Ana¥Sn02
11:
12: REM 基本名。ファイル名 = (基本名).*. ここで, '*' は ins, int 等の拡張子を示す。
13: SET SAMPLE=Sn02
14:
15: REM RIETAN.exe, orffe.exe 等の絶対パス。
16: SET RIETAN=C:¥Program Files¥RIETAN.VENUS
17:
18: ECHO データファイル: '%LOCINS%'.
19: ECHO 基本名: '%SAMPLE%'.
20: REM カレントディレクトリ変更
21: IF "%OS%" == "Windows_NT" CHDIR /D "%LOCINS%"
22: IF NOT "%OS%" == "Windows_NT" "%RIETAN%¥pushd" "%LOCINS%"
23:
24: IF EXIST "%SAMPLE%.itx" RENAME "%SAMPLE%.itx" "%SAMPLE%.sav"
25: IF EXIST "%SAMPLE%.plt" DEL "%SAMPLE%.plt"
26:
27: FOR /F "USEBACKQ" %T IN ('"%RIETAN%¥seconds.exe"') DO SET BEFORE=%T
28: IF EXIST "%RIETAN%¥RIETAN64.exe" (
29:     "%RIETAN%¥RIETAN64.exe" "%SAMPLE%.ins" "%SAMPLE%.int" "%SAMPLE%.bkg" "%SAMPLE%.itx"
        "%SAMPLE%.hkl" "%SAMPLE%.xyz" "%SAMPLE%.fos" "%SAMPLE%.ffe" "%SAMPLE%.fba" "%SAMPLE%.ffi"
        "%SAMPLE%.ffo" "%SAMPLE%.vesta" "%SAMPLE%.plt" "%SAMPLE%.gpd" "%SAMPLE%.alb" "%SAMPLE%.prf"
        "%SAMPLE%.inflip" "%SAMPLE%.exp" | "%RIETAN%¥Commands¥tee.exe" "%SAMPLE%.lst"
30: ) ELSE (
31:     "%RIETAN%¥RIETAN.exe" "%SAMPLE%.ins" "%SAMPLE%.int" "%SAMPLE%.bkg" "%SAMPLE%.itx"
        "%SAMPLE%.hkl" "%SAMPLE%.xyz" "%SAMPLE%.fos" "%SAMPLE%.ffe" "%SAMPLE%.fba" "%SAMPLE%.ffi"
        "%SAMPLE%.ffo" "%SAMPLE%.vesta" "%SAMPLE%.plt" "%SAMPLE%.gpd" "%SAMPLE%.alb" "%SAMPLE%.prf"
        "%SAMPLE%.inflip" "%SAMPLE%.exp" | "%RIETAN%¥Commands¥tee.exe" "%SAMPLE%.lst"
32: )

```

```
33:  
34: IF EXIST "%SAMPLE%.sav" DEL "%SAMPLE%.sav"  
35:
```

## 付録 C

# 使用許諾契約書

**重要** - 以下の使用許諾契約書を注意してお読みください。本使用許諾契約書（以下、「本契約書」といいます。）は、フィゾニットソフトウェア製品（以下、「本ソフトウェア製品」といいます。）に関してお客様（個人または法人のいずれであるかを問いません。）と株式会社フィゾニットとの間で締結される法的な契約書です。お客様が本ソフトウェア製品のインストール、複製、または使用をした場合には、お客様は本契約書の条項に拘束されることに同意されたものとみなされます。本契約書の条項に同意されない場合、株式会社フィゾニットは、お客様に本ソフトウェア製品のインストール、複製または使用のいずれも許諾できません。そのような場合、速やかに株式会社フィゾニットにご連絡の上、本ソフトウェア製品を返却または廃棄してください。また、株式会社フィゾニットは、本ソフトウェア製品またはライセンスを不正コピーその他の不正な手段により取得した者または本契約書に違反する態様で取得した者に対して、いかなる場合においても本ソフトウェア製品のインストール、複製または使用のいずれも許諾しません。

### ソフトウェア製品ライセンス

本ソフトウェア製品は、著作権法および著作権に関する条約をはじめ、その他知的財産権に関する法律および条約によって保護されています。本ソフトウェア製品は使用許諾されるもので、販売されるものではありません。

#### 第 1 条（定義）

「本ソフトウェア製品」とは、本契約書とともに交付されるコンピュータソフトウェア並びにそれに関連した媒体、印刷物（マニュアルなどの文書）、および電子文書（電子的形態での提供コンテンツ）を含みます。また、お客様が最初に本ソフトウェア製品のライセンスを取得された後に、株式会社フィゾニットから入手した本ソフトウェア製品のアップデート、アドオン、コンポーネント、Web サービス、および追加機能、並びにお客様による本ソフトウェア製品のライセンス取得の前後にかかわらずお客様が株式会社フィゾニットから入手した本ソフトウェア製品に係る印刷物（マニュアルなどの文書）、電子文書（電子的形態での提供コンテンツ）、テンプレートデータおよびコンバートキットもこれに含まれます（これらについて別途、使用許諾契約書または使用条項が添付されている場合はその使用許諾契約書または使用条項が優先します。但し、コンバートキットについては本契約書が優先します。）。

「使用者」とは、株式会社フィゾニットより受けた許諾に基づき本契約書の条件条項に従って、本ソフトウェア製品を使用する者をいいます。

#### 第 2 条（使用許諾内容）

お客様が本契約書の定めに従われることを条件として、株式会社フィゾニットはお客様に対し、以下の内容で本ソフトウェア製品を使用することを許諾します。但し、ライセンス認証を行うまでの間は一部機能のみの使用を許諾し、ライセンス認証を行なった後は全機能の使用を許諾します。

- (1) お客様がご購入された本ソフトウェア製品ライセンス 1 単位につき、特定の 1 台のコンピュータ内の特定の 1 つのオペレーティングシステム（このように特定されたものを以下、「OS」といいます。）にインストールして使用することができます。なお、特定の 1 台のコンピュータ内の複数の OS それぞれに本ソフトウェア製品をインストールする場合には、OS の数に対応した数のライセンスが必要となります。
- (2) お客様は、以下に定める特別な場合にのみ、本ソフトウェア製品をインストールしライセンス認証したコンピュータの使用権を第三者へ譲渡、貸与（以下、「譲渡等」といいます。）することができますが、いかなる場合でも本ソフトウェア製品とそのライセンスのみを譲渡等することはできません。
  - (a) 法人版ライセンスを使用する教官または社員が異動する際、所属研究室内または所属部署内の後継者に引継ぐ場合。また、特別な場合の譲渡等においても、お客様は本ソフトウェア製品の全ての構成物（第 7 条に規定するバックアップ目的の複製も含みます。）を一体として当該第三者へ譲渡等しなければなりません。
- (3) お客様は、本ソフトウェア製品をリバースエンジニアリング、逆コンパイル、または逆アセンブルなどのソースコードの閲覧及び解析作業に供してはなりません。
- (4) お客様は本ソフトウェア製品をお客様の事業のためにのみ使用することができます。ただし、営利を目的とした有償の受託解析等に使用することはできません。
- (5) お客様は本ソフトウェア製品の使用者に対して、本条（1）ないし（4）に規定する内容を指導し、使用者に遵守させる義務を負います。

#### 第 3 条（使用者への通知）

お客様は本契約書の内容を本ソフトウェア製品の全ての使用者に対して通知し、遵守させなければなりません。

#### 第 4 条（ライセンス認証）

お客様がライセンス認証を行わない限り、本ソフトウェア製品の機能が一部制限されます。お客様は、本ソフトウェア製品の全機能を使用開始する際、使用する全てのライセンス数に応じた回数のライセンス認証が必要となります。お客様が本ソフトウェア製品を再インストールする際やコンピュータ、本ソフトウェア製品の設定を変更した場合、再度ライセンス認証が必要となることがあります。ライセンス認証の目的を達成するために株式会社フィゾニットが必要と認めた情報を取得することがありますが、株式会社フィゾニットが事前にお客様の承諾を得ることなくお客様を個別に特定する情報（コンピュータ名、OS の種類およびバージョン、データベースの種類およびバージョン並びにインターネット接続状態を除きます。）を収集することはありません。なお、ライセンス認証に際して、お客様負担の通信料金が発生する場合があります。

#### 第 5 条（情報の利用）

本契約書第 4 条に規定する情報のうち、インターネットまたは電話を通じて取得する情報は、各条に記載する目的または機能を達成するために株式会社フィゾニットが独自に収集するものです。株式会社フィゾニットは、取得した情報を事前にお客様の承諾を得ることなく当該目的以外の用途で使用することはありません。なお、お客様の個人情報に関する取扱い指針は、株式会社フィゾニットが別途定めるプライバシーポリシー

(<http://physonit.jp/privacy/>) によります。

#### 第 6 条（著作権）

本ソフトウェア製品、および本ソフトウェア製品の複製物についての権原および著作権その他の知的財産権は、株式会社フィゾニットが有するものまたは正当な権原を有する第三者から株式会社フィゾニットが許諾を受けたものです。

お客様は、本ソフトウェア製品に含まれる印刷物（マニュアルなどの文書）、および電子文書（電子的形態での提供コンテンツ）を複製および模倣した商品を製造し、譲渡し、貸し渡し、公衆送信し、譲渡もしくは貸し渡しのために展示し、輸出し、または輸入することはできません。お客様が本契約書に記載のない方法で、本ソフトウェア製品を使用、製造、公衆送信もしくは配布し、または株式会社フィゾニットの文書による許諾なく本ソフトウェア製品のモニタ画像の表示ないしプリンタへの出力物の複製物を利用して出版などを行うことはできません。

但し、本ソフトウェア製品のマニュアルが電子的形態によって本ソフトウェア製品に含まれている場合には、お客様は当該電子的形態によるマニュアルを、本ソフトウェア製品を自己使用する目的の範囲内に限り、お客様がご購入されたライセンス数を限度として印刷することができます。

#### 第 7 条（バックアップ目的の複製）

お客様は、本契約書に従って本ソフトウェア製品をインストールした後で、本ソフトウェア製品を、バックアップする目的でのみ、コピーを複製することができます。本契約書に特に規定されている場合を除き、お客様は本ソフトウェア製品または本ソフトウェア製品に含まれるマニュアルおよび電子文書（電子的形態での提供コンテンツ）などを複製または改変することはできません。お客様は、本ソフトウェア製品に付されている著作権表示およびその他の権利表示を除去することはできません。本条に基づき本ソフトウェア製品に含まれるコンピュータソフトウェアを複製する場合には、本ソフトウェア製品に付されている著作権表示およびその他の権利表示も同時に複製するものとします。

#### 第 8 条（保証）

本条は、お客様に適用される本ソフトウェア製品に関する唯一の明示の品質保証規定であり、本ソフトウェア製品に含まれるその他の文書またはパッケージに記載されるその他の明示の保証（該当する場合）に代替するものです。株式会社フィゾニットでは本ソフトウェア製品に関して、本品品質保証規定に規定されていないその他の保証（商品性、特定の目的に対する適合性、応答的確性、使用結果、および瑕疵の不存在についての黙示の保証、義務または条件を含むがこれらに限定されない）を明示、黙示、または法律上のものであることを問わず、一切いたしません。

- (1) 株式会社フィゾニットは、お客様が本ソフトウェア製品のライセンスを正規に取得され、本契約書およびマニュアルその他の説明書に従って使用する場合、本ソフトウェア製品は実質的に作動することを保証します。
- (2) 本品品質保証規定は、法律上許容される限りにおいて、お客様が最初に本契約書の前文の記載に従い本契約書の条項に同意されたものとみなされる時点が帰属する日から 30 日間有効とします。この 30 日間の有効期間内にバージョンアップ版その他のソフトウェアを追加的に取得された場合、本ソフトウェア製品に関する本品品質保証規定の有効期間に変更はありません。追加的に取得されたソフトウェアに関する品質保証については、当該追加的に取得されたソフトウェアの品質保証規定に従います。
- (3) 本品品質保証規定に基づく品質が確保されていない場合、株式会社フィゾニットは、独自の判断により、① 無償で本ソフトウェア製品を修理または交換するか、② 本ソフトウェア製品の返品を受け付けるかのいずれかの方法をとるものとします。修理または交換を行った場合における修理交換後の本品品質保証規定の有効期間については、元の有効期間の満了日と修理交換後 30 日後のいずれか遅く到来する日までとします。また、返品を受け付ける際、お客様が既に代金を支払い済みである場合には、当該代金を返金いたします。但し、返金を行う場合には、領収書等の証明書類をもって、当該代金が実際に支払われたことが証明される必要があります。
- (4) お客様の作為、不作為もしくは第三者の作為、不作為その他の事項を原因とした問題については、株式会社フィゾニットは一切責任を負いません。また、本ソフトウェア製品のインストール、使用および本ソフトウェア製品から得られた結果についての責任についても、同様です。株式会社フィゾニットは、本ソフトウェア製品の選択によりお客様が意図された目的を達成することを一切保証しません。
- (5) 本品品質保証規定は、本ソフトウェア製品の完全性（誤りがないこと、中断その他の障害がないこと）またはお客様の要件を満たすことを保証するものではありません。
- (6) 株式会社フィゾニットは、本品品質保証規定の内容にかかわらず、独自判断により期間や対象を限定して保証範囲を拡大することがあります。
- (7) 本条 (3) に基づき本ソフトウェア製品を返品する場合、インストールされた本ソフトウェア製品をお客様がディアクティベート処理し、発行されたディアクティベートキーを株式会社フィゾニットが受け取り確認した後、返品に対応します。

#### 第 9 条（損害に関する免責）

法律上の請求の原因の種類を問わず、株式会社フィゾニットは、法律上許容される最大限において、本ソフトウェア製品の使用もしくは使用不能、サポートサービスの提供もしくは提供不能またはその他本契約書に関して生じる特別損害、付随的損害、間接的損害、派生的損害、その他の一切の損害（逸失利益、機密情報、機密情報もしくはその他の情報の喪失、事業の中断、人身傷害、プライバシーの喪失、またはその他の金銭的損失を含みますがこれらに限定されません。）に関しては、株式会社フィゾニットの債務不履行、不法行為、無過失責任、誠実義務または合理的な注意義務を含めた義務の不履行、契約違反または保証違反による場合であっても、一切の責任を負いません。たとえ、株式会社フィゾニットがこのような損害の可能性について知らされていた場合も同様です。いかなる場合においても、本契約書および本保証規定と関連する株式会社フィゾニットの責任は、お客様が本ソフトウェア製品について実際に支払った金額を上限とします。

#### 第 10 条（秘密保持）

お客様は、本ソフトウェア製品に関する情報および本契約書の内容のうち、公然と知られていないものについて秘密を保持するものとし、株式会社フィゾニットの事前の書面による承諾を得ることなく第三者に開示または漏洩しないものとします。

#### 第 11 条（バージョンアップ版、アップグレード版特約）

本ソフトウェア製品がバージョンアップ版もしくはアップグレード版（それぞれ有償無償を問いません。以下、「バージョンアップ版等」と総称します。）である場合、株式会社フィゾニットは、バージョンアップもしくはアップグレードの元となるソフトウェア製品（以下、「元となるソフトウェア製品」と総称します。）を正規に取得されたお客様に対してのみ本ソフトウェア製品の使用を許諾するものとします。バージョンアップ版等とその元となるソフトウェア製品との間で使用許諾契約の内容が異なる場合、バージョンアップ版等に関する使用許諾契約が優先されます。お客様が元となるソフトウェア製品を保持することなくバージョンアップ版等のみを何らかの方法で取得し、使用することはできません。

#### 第 12 条（ライセンス認証実施前における特約）

本ソフトウェア製品がライセンス認証実施前である場合、株式会社フィゾニットは、お客様が使用可能期間（株式会社フィゾニットが別途定めます。）中に試用していただくためにのみ本ソフトウェア製品の使用を許諾するものです。この場合、以下に指定する本契約書の条項の一部もしくはは全部を削除もしくは読み替えるものとします。

- (1) 第 2 条 (1) 中の「購入」を「入手」と読み替える
- (2) 第 2 条 (2) を削除
- (3) 第 2 条 (5) 中の「(1) ないし (4)」を「(1)、(3) および (4)」と読み替える
- (4) 第 4 条を削除
- (5) 第 7 条を削除
- (6) 第 8 条 (1)、(2)、(3) および (7) を削除

なお、上記条項を削除もしくは読み替えた場合であっても、他の条項における条項番号には影響を与えないものとします。

#### 第 13 条（使用許諾契約の有効期間）

- (1) 株式会社フィゾニットからお客様に対する本ソフトウェア製品の使用許諾は、本契約書の前文の記載に従い、お客様が本契約書の条項に同意されたものとみなされる時点から効力が生じます。
- (2) 株式会社フィゾニットからお客様に対する本ソフトウェア製品の使用許諾は、以下の事由が生じた場合には、お客様に対し何らの通知、催告なしに、直ちに将来に向かって効力を失います。なお、本条項に基づく使用許諾の終了にかかわらず、本契約書第 8 条 (4) および (5)、第 9 条、第 10 条、第 15 条、第 16 条並びに本契約書に基づくお客様の義務に関する条項は存続するものとします。
  - (a) 本ソフトウェア製品の使用可能期間が満了したとき。
  - (b) お客様または使用者が本契約書のいずれかの条項に違反したとき。
  - (c) 本ソフトウェア製品のアカデミック個人版ライセンスに限り、お客様が卒業や退学等により学籍を喪失したとき。

#### 第 14 条 (ライセンスの停止)

本ソフトウェア製品を購入したお客様が、支払期日までに本ソフトウェア製品の代金を全額支払われた場合、ライセンスを発行します。ライセンスの有効期限は、株式会社フィゾニットがライセンスを発行した日を起点とする。ライセンスの有効期間満了によってお客様または第三者に生じたいかなる損害についても、株式会社フィゾニットは責任を負わないものとします。

#### 第 15 条 (完全な合意)

本契約書 (本ソフトウェア製品に含まれる本契約書の追加および修正を含みます。) は、本ソフトウェア製品およびサポートサービス (該当する場合) に関してお客様と株式会社フィゾニットの間の完全な合意を構成し、本ソフトウェア製品のお客様に対する使用許諾に関する当事者間の全ての以前および同時の口頭または書面による意思表示、提案、および表明を無効にします。

#### 第 16 条 (その他)

- (1) 本契約書は、日本国法に準拠し、本契約書に関連または起因して生じる紛争については、広島地方裁判所を第一審の専属的合意管轄裁判所とするものとします。
- (2) 株式会社フィゾニットは、本ソフトウェア製品の日本国外における使用について何らの保証も行いません。お客様が本ソフトウェア製品を日本国外に持ち出して使用する場合には、すべてお客様の責任において行うものとします。なお、お客様が、本ソフトウェア製品を国外に持ち出して使用する場合には、日本国やその他の国における法律等による輸出管理規制が適用され、また、持ち出し先の国における法律等による規制が適用される可能性がありますので、これらの規制に違反されることのないよう十分ご注意ください。

以上





## 参考文献

- [1] F. Izumi and K. Momma, *Solid State Phenom.*, **130**, 15 (2007).
- [2] F. Izumi and K. Momma, *Bull. Ceram. Soc. Jpn.*, **43**, 902 (2008).
- [3] <http://fujioizumi.verse.jp/>.
- [4] M. Sakata and M. Sato, *Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Crystallogr.*, **46**, 263 (1990).
- [5] M. Sakata, R. Mori, S. Kumazawa, M. Takata, and H. Toraya, *J. Appl. Crystallogr.*, **23**, 526 (1990).
- [6] F. Izumi, S. Kumazawa, T. Ikeda, W.-Z. Hu, A. Yamamoto, and K. Oikawa, *Mater. Sci. Forum*, **378–381**, 59 (2001).
- [7] F. Izumi and T. Ikeda, *Commission on Powder Diffraction, IUCr Newsletter*, No. 26, 7 (2001).
- [8] F. Izumi and R. A. Dilanian, “Recent Research Developments in Physics,” Vol. 3, Part II, Transworld Research Network, Trivandrum (2002), pp. 699–726.
- [9] F. Izumi, *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **111**, 617 (2003).
- [10] F. Izumi, *Solid State Ionics*, **172**, 1 (2004).
- [11] F. Izumi, *RADIOISOTOPES*, **59**, 191 (2010).
- [12] F. Izumi and K. Momma, *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, **18**, 022001 (2011).
- [13] K. Momma and F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.*, **41**, 653 (2008).
- [14] K. Momma and F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.*, **44**, 1272 (2011).
- [15] <http://fujioizumi.verse.jp/download/documents.zip>.
- [16] 中井泉、泉富士夫, “粉末 X 線解析の実際・第 2 版,” 朝倉書店 (2009).
- [17] H. M. Rietveld, *Acta Crystallogr.*, **22**, 151 (1967).
- [18] H. M. Rietveld, *J. Appl. Crystallogr.*, **2**, 79 (1969).
- [19] <http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/hugorietveld/xtal/paper2/paper2.html>.



# 索引

## B

Bat ファイル ..... 8

## C

csv ファイル ..... 16

## D

DOS プロンプトウィンドウ ..... 17

## E

EXE ワークシート ..... 6, 7, 14, 19

## I

ID ..... 6, 9, 10, 12

## M

MEM/リートベルト解析 ..... 2

MPF 法 ..... 2

## P

Pref ワークシート ..... 6, 15

## R

RIETAN-FP ..... 2, 21

## V

VESTA3 ..... 2

## あ

アクティベート ..... 19

アクティベートキー ..... 19

## か

グラフ ..... 16

結晶構造モデル ..... 2, 4

個別キー ..... 18

コメント ..... 12

## さ

シーケンス ..... 1, 12, 19

シーケンスワークシート ..... 6, 12, 19

出力フラグ ..... 12, 16

出力ワークシート ..... 6

制約条件 ..... 12

## た

テンプレートシーケンスワークシート ..... 9, 10, 19

## は

バックグラウンド ..... 17

バッチファイル ..... 8

ヒューゴ・リートベルト ..... 2

ファイル指定 ..... 7, 19

フォアグラウンド ..... 17

プリファレンス ..... 15

粉末回折パターン ..... 2

## ら

ライセンス認証 ..... 18

ラベル ..... 12

リートベルト解析 ..... 2

## SeqRunPro ユーザーズマニュアル

2014 年 7 月 7 日 第 1 版発行

2015 年 8 月 5 日 第 3 版発行

©2014–2015 Physonit Inc. 無断での複写 (コピー)・転載・販売を禁じます。

---

お問い合わせ先 株式会社フィゾニット

電話 082-822-0710

受付時間 10:00 ~ 18:00 (土日・祝祭日を除く)

E-mail [seqrunkpro@physonit.jp](mailto:seqrunkpro@physonit.jp)

---

土曜、日曜、祝祭日はお休みをいただきます。

また、年末年始等、臨時にお休みをいただくことがあります。

基本的にサポートは、動作不良に関するお問い合わせのみ対応致します。Windows の操作方法、マシンの設定に関するお問い合わせには、お答えいたしかねますので、ご了承願います。

サポート情報等最新情報の提供をホームページで行っています。ぜひご覧下さい。<http://physonit.jp/seqrunkpro/>