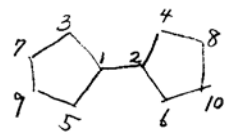


9 PLANE

TTF系の分子の長軸、短軸方向の平均ベクトルを計算し、
 2分子間の相対的な方位を計算するプログラム。
 次の計算を行う。

- ① 格子定数と原子座標パラメタから直交座標系での原子の座標を計算する。ただし変換は、結晶のa軸、ab面を直交座標のx軸、xy面に一致するように行う。
- ② 中心においた分子の長軸方向のベクトルを、 $r(2)-r(1), r(4)-r(3), \dots$ の平均として求める。これをベクトル l とする。
- ③ 中心においた分子の短軸方向のベクトルを $r(5)-r(3), r(6)-r(4), \dots$ の平均として求める。これをベクトル s とする。
- ④ ベクトル l と s は一般に直交しないので、分子平面に垂直な $v = l \times s$ を計算し、新たに $s' = v \times l$ を短軸方向のベクトルとする。
- ⑤ 分子の重心を原点とし、 l, s', v を X, Y, Z 軸とする座標系を考える。
- ⑥ 他分子の重心を X, Y, Z, $\varphi = \tan^{-1} Z/Y, L = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}$ で表わして出力する。



§1. 使用法

1. プランク		
2. NATM	(I4)	
3. CELLA, CELLB, CELLC, ALPHA, BETA, GAMM	(6F10.0)	
4. X, Y, Z	(5X, 3F10.0)	NATM 枚
5. NC	(I5)	
6. CK(1)~CK(9)	(12F6.0)	NC 枚
(4. にもどる)		

入力データ 1 ~ 4. は EXTDH または BANDH のデータを流用できる.

2. NATM (I4) 行 4 で読む、原子数 $4n+2$

3. CELLA, CELLB, CELLC, ALPHA, BETA, GAMMA (6F10.0)
格子定数 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$.

4. X, Y, Z (5X, 3F10.0) NATM 枚.

原子座標.
ただし原子を入れる順は左の図に従うこと.
原子の数は必ず " $4n+2$ " にする.

5. NC (I5)

計算する分子の数.
行 6 で読む 対称操作の数.

6. CK(1) ~ CK(9) (12F6.0) NC 枚

分子を作る対称操作カード UN: X 形式
ただし $CK(i) > 10$ とすれば、以降は最後の
カード 4. で読んだ原子座標を相手分子として
計算を行う.

$$\begin{pmatrix} CK(1), CK(2), CK(3) \\ CK(4), CK(5), CK(6) \\ CK(7), CK(8), CK(9) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} CK(10) \\ CK(11) \\ CK(12) \end{pmatrix}$$

6. に $CK(i) > 10$ の行があれば、NC 枚の 6. の後に
NATM 枚の新しいカード 4. が必要.

