

◎プログラム PFLS の実行例

Microsoft Windows [Version 6.0.6000]

Copyright (c) 2006 Microsoft Corporation. All rights reserved.

c:\¥xbin>pflsxe ←コマンドプロンプト画面にてpflsxと入力して、プログラムpflsx.exe
を実行します。

```
*****
*
*                               *
*          Computer Program PFLS (ver. 5.00)          *
*
*                               *
*          for Rietveld Refinement                    *
*
*                               *
*          By H. Toraya                                *
*
*                               *
*****
```

Input job title (memorandum) in 70 characters.

←ジョブタイトルを入力します (省略可)。

Input the filename of the intensity data.

h20.dat ←解析するX線回折データのファイル名を入力します。

Intensity data were read. N = 6251

File name of profile intensity data: h20.dat

4comp(Yt Zi An nonQz)80%+internal standard(Cor)20% RINT2500 40KV300mA

2theta-s	2theta-e	Step	Time	Nobs	Lambda1	Lambda2	I2/I1
10.000	135.000	0.020	2.0	6251	1.540562	1.544390	0.497

※以下、自動的にデータファイル ftable.d が読み込まれます。

Y (+3e)

36.000	35.588	34.425	32.705	30.675	28.567	26.548	24.712
23.086	21.654	20.382	19.231	18.166	17.163	16.208	15.292
14.415	13.578	12.784	12.038	11.340	10.694	10.100	9.559
9.067	8.624	8.225	7.868	7.548	7.263	7.008	6.780

O (-2e)

10.000	9.633	8.671	7.423	6.174	5.081	4.192	3.498
2.968	2.569	2.274	2.053	1.891	1.768	1.676	1.603
1.543	1.492	1.447	1.406	1.367	1.329	1.291	1.253
1.216	1.179	1.142	1.105	1.068	1.031	0.995	0.959

Zn (+2e)

28.000	27.732	26.958	25.766	24.275	22.606	20.869	19.149
17.504	15.974	14.580	13.331	12.227	11.263	10.429	9.711
9.097	8.573	8.126	7.743	7.414	7.128	6.879	6.656
6.455	6.269	6.096	5.932	5.775	5.622	5.472	5.324

Ti (+4e)

18.000	17.808	17.255	16.403	15.342	14.170	12.979	11.844
10.815	9.917	9.158	8.529	8.012	7.588	7.234	6.930
6.664	6.419	6.189	5.965	5.745	5.525	5.306	5.087
4.870	4.655	4.443	4.236	4.035	3.841	3.655	3.478

Al (+3e)

10.000	9.933	9.738	9.424	9.011	8.520	7.975	7.399
6.813	6.237	5.683	5.162	4.681	4.243	3.851	3.503
3.195	2.926	2.693	2.492	2.319	2.169	2.041	1.931
1.837	1.755	1.685	1.624	1.570	1.522	1.479	1.438

Df'' : -0.386 0.047 -1.612 0.189 0.204

Df''' : 2.025 0.032 0.678 1.807 0.246

※以下、自動的にデータファイル symope.d が読み込まれます。

Space group: Ia3 (No.206) Centro symmetric

Symmetry Operations:

No.	R11	R12	R13	R21	R22	R23	R31	R32	R33	T1	T2	T3
1	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
2	1	0	0	0	-1	0	0	0	-1	0.0000000	0.0000000	0.5000000
3	0	0	1	1	0	0	0	1	0	0.0000000	0.0000000	0.0000000
4	0	0	1	-1	0	0	0	-1	0	0.0000000	0.0000000	0.5000000
5	0	1	0	0	0	1	1	0	0	0.0000000	0.0000000	0.0000000
6	0	1	0	0	0	-1	-1	0	0	0.0000000	0.0000000	0.5000000
7	-1	0	0	0	1	0	0	0	-1	0.5000000	0.0000000	0.0000000
8	-1	0	0	0	-1	0	0	0	1	0.0000000	0.5000000	0.0000000
9	0	0	-1	1	0	0	0	-1	0	0.5000000	0.0000000	0.0000000
10	0	0	-1	-1	0	0	0	1	0	0.0000000	0.5000000	0.0000000
11	0	-1	0	0	0	1	-1	0	0	0.5000000	0.0000000	0.0000000
12	0	-1	0	0	0	-1	1	0	0	0.0000000	0.5000000	0.0000000
13	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0.5000000	0.5000000	0.5000000
14	1	0	0	0	-1	0	0	0	-1	0.5000000	0.5000000	0.0000000
15	0	0	1	1	0	0	0	1	0	0.5000000	0.5000000	0.5000000
16	0	0	1	-1	0	0	0	-1	0	0.5000000	0.5000000	0.0000000
17	0	1	0	0	0	1	1	0	0	0.5000000	0.5000000	0.5000000
18	0	1	0	0	0	-1	-1	0	0	0.5000000	0.5000000	0.0000000
19	-1	0	0	0	1	0	0	0	-1	0.0000000	0.5000000	0.5000000
20	-1	0	0	0	-1	0	0	0	1	0.5000000	0.0000000	0.5000000
21	0	0	-1	1	0	0	0	-1	0	0.0000000	0.5000000	0.5000000
22	0	0	-1	-1	0	0	0	1	0	0.5000000	0.0000000	0.5000000
23	0	-1	0	0	0	1	-1	0	0	0.0000000	0.5000000	0.5000000
24	0	-1	0	0	0	-1	1	0	0	0.5000000	0.0000000	0.5000000

Space group: P63mc (No.186) Noncentro symmetric

Symmetry Operations:

No.	R11	R12	R13	R21	R22	R23	R31	R32	R33	T1	T2	T3
1	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
2	-1	0	0	0	-1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.5000000
3	0	-1	0	-1	0	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
4	0	1	0	1	0	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.5000000
5	0	-1	0	1	-1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
6	0	1	0	-1	1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.5000000
7	1	0	0	1	-1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
8	-1	0	0	-1	1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.5000000
9	-1	1	0	-1	0	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
10	1	-1	0	1	0	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.5000000
11	-1	1	0	0	1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
12	1	-1	0	0	-1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.5000000

Space group: I41/amd (No. 141) Centro symmetric

Symmetry Operations:

No.	R11	R12	R13	R21	R22	R23	R31	R32	R33	T1	T2	T3
1	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
2	-1	0	0	0	-1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
3	1	0	0	0	1	0	0	0	-1	0.0000000	0.5000000	0.2500000
4	-1	0	0	0	-1	0	0	0	-1	0.0000000	0.5000000	0.2500000
5	-1	0	0	0	1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
6	1	0	0	0	-1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
7	-1	0	0	0	1	0	0	0	-1	0.0000000	0.5000000	0.2500000
8	1	0	0	0	-1	0	0	0	-1	0.0000000	0.5000000	0.2500000
9	0	1	0	1	0	0	0	0	-1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
10	0	-1	0	-1	0	0	0	0	-1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
11	0	1	0	1	0	0	0	0	1	0.0000000	0.5000000	0.2500000
12	0	-1	0	-1	0	0	0	0	1	0.0000000	0.5000000	0.2500000
13	0	-1	0	1	0	0	0	0	-1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
14	0	1	0	-1	0	0	0	0	-1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
15	0	-1	0	1	0	0	0	0	1	0.0000000	0.5000000	0.2500000
16	0	1	0	-1	0	0	0	0	1	0.0000000	0.5000000	0.2500000

17	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0.5000000	0.5000000	0.5000000
18	-1	0	0	0	-1	0	0	0	1	0.5000000	0.5000000	0.5000000
19	1	0	0	0	1	0	0	0	-1	0.5000000	0.0000000	0.7500000
20	-1	0	0	0	-1	0	0	0	-1	0.5000000	0.0000000	0.7500000
21	-1	0	0	0	1	0	0	0	1	0.5000000	0.5000000	0.5000000
22	1	0	0	0	-1	0	0	0	1	0.5000000	0.5000000	0.5000000
23	-1	0	0	0	1	0	0	0	-1	0.5000000	0.0000000	0.7500000
24	1	0	0	0	-1	0	0	0	-1	0.5000000	0.0000000	0.7500000
25	0	1	0	1	0	0	0	0	-1	0.5000000	0.5000000	0.5000000
26	0	-1	0	-1	0	0	0	0	-1	0.5000000	0.5000000	0.5000000
27	0	1	0	1	0	0	0	0	1	0.5000000	0.0000000	0.7500000
28	0	-1	0	-1	0	0	0	0	1	0.5000000	0.0000000	0.7500000
29	0	-1	0	1	0	0	0	0	-1	0.5000000	0.5000000	0.5000000
30	0	1	0	-1	0	0	0	0	-1	0.5000000	0.5000000	0.5000000
31	0	-1	0	1	0	0	0	0	1	0.5000000	0.0000000	0.7500000
32	0	1	0	-1	0	0	0	0	1	0.5000000	0.0000000	0.7500000

Space group: R-3c (No. 167) Centro symmetric

Symmetry Operations:

No.	R11	R12	R13	R21	R22	R23	R31	R32	R33	T1	T2	T3
1	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
2	0	-1	0	1	-1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
3	-1	1	0	-1	0	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
4	0	-1	0	-1	0	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.5000000
5	1	0	0	1	-1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.5000000
6	-1	1	0	0	1	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.5000000
7	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0.3333333	0.6666667	0.6666667
8	0	-1	0	1	-1	0	0	0	1	0.3333333	0.6666667	0.6666667
9	-1	1	0	-1	0	0	0	0	1	0.3333333	0.6666667	0.6666667
10	0	-1	0	-1	0	0	0	0	1	0.3333333	0.6666667	0.1666667
11	1	0	0	1	-1	0	0	0	1	0.3333333	0.6666667	0.1666667
12	-1	1	0	0	1	0	0	0	1	0.3333333	0.6666667	0.1666667
13	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0.6666667	0.3333333	0.3333333
14	0	-1	0	1	-1	0	0	0	1	0.6666667	0.3333333	0.3333333

15	-1	1	0	-1	0	0	0	0	1	0.6666667	0.3333333	0.3333333
16	0	-1	0	-1	0	0	0	0	1	0.6666667	0.3333333	0.8333334
17	1	0	0	1	-1	0	0	0	1	0.6666667	0.3333333	0.8333334
18	-1	1	0	0	1	0	0	0	1	0.6666667	0.3333333	0.8333334

----- Input profile and structural parameters -----

Select a file name for profile parameters

0:file A, 1:file B, 2:file C, 3:your option.

3 ←プロファイルパラメータと反射データを入力します。予めプログラムREFLEXで作成したデータファイルを指定します。この例では、データファイル名としてプログラムREFLEXで出力したfile Aであるreflexa.datを指定します。読み込むデータファイル名を指定する3を選択します。ここで、注意する点は、file A (0)を選択するとreflexa.dを指定することになるので、reflexa.datを読み込むことができません。ご面倒ですが、3を選択して、ファイル名と下記のように入力してください。

Input filename.

reflexa.dat ←ファイル名を入力します。ここでは、プログラムREFLEXで出力した0:file Aである「reflexa.dat」を指定しています。

Profile parameters were read from a file: reflexa.dat

Select a filename for structural parameters:

0:file A, 1:file B, 2:file C, 3:your option.

0 ←予めプログラムATOMSにて作成した結晶構造因子に関するデータのファイル名を入力します。この例では、プログラムATOMSで出力した0: file A である「atomsa.d」である0を選択します。

Atomic parameters were read from datafile: atomsa.d

----- Set 2-theta range for analysis -----

The 2theta-range of intensity data = 10.000 to 135.000

The 2theta-range of reflection data = 10.000 to 135.000

Input low- and high-angle limits of the 2theta range,
which is to be used for whole-powder-pattern fitting.

10

130 ←解析 2 θ 範囲を指定します。ここでは、例えば、 $2\theta = 10 \sim 130^\circ$ と入力しています。

2theta-L	2theta-H	Nobs	Y(max) at 2theta	Y(min) at 2theta
10.000	130.000	6001	61072. 36.340	202. 112.460

----- Correction of parameters before the l.s. -----

- 1: terminate job (results will be aborted)
- 0: no change
- 1: correct global and profile parameters
- 2: correct structural parameters
- 3: correct scale, OATM, or texture parameters
- 4: see the pattern before the l.s.
- 5: how to change parameter values ?

0 ←最小二乗(l.s.)サイクルを実行する前に、各種パラメータを訂正することができます。
訂正する必要がない場合は、0を入力します。

----- Set calculation conditions -----

Calculation of profile function is truncated
when profile intensity < Y(lim) (unit = counts).

Damping factors (DF) will be applied when parameters
oscillate or are apt to diverge during the least-squares.

Y(lim)	D.F.	bj	tj	I2I1	Cell	FWHM	Ae/m	axyzB	Scal	OATM	Xtex
2.2	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00

Enter number to change parameters:

0: no change, 1: Y(lim), 2: D.F.

0 ←プロファイル関数にてフィッティングする計算範囲の設定(Y(lim))とダンピングファクター(D.F. 最小二乗サイクルによるパラメータの精密化において発散する場合に1以下の数値を指定する)を指定することができます。この例では、いずれも指定しないので、0を入力します。

※解析を実行したときに精密化(最小二乗サイクル)の途中で、各種の初期パラメータが適切であるにもかかわらず、エラーや解の発散が起こる場合は、ダンピングファクターを設定することで、解析を続けることが可能になる場合が多いです。ダンピングファクターは、半値幅などのピーク形状を表すパラメータに設定することが有効です。最初は、0.5からはじめ、それでも発散する場合は、0.25→0.12→0.06などと1/2ごとに減少するのが一般的です。

----- Optimization was started -----

Select a mode of refinement:

-3: terminate/pause l.s. cycles

-2: full-manual (single-step)

-1: manual

0: automatic

0 ←最小二乗(精密化)サイクルにおいて、最適化するパラメータを自動か手動にて指定できます。ここでは、0を指定して自動(automatic)にて精密化を実行します。

Lp correction (normal): A part = 1.000 B part = 0.790

! 11 reflections were omitted because of $|F| = 0$.

Parameter selection in cycle 1: nr = 15

gp	1	2	3	4	5	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
----	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

pp	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
----	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

tp	7	0														
----	---	---	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0
----	---	---	---	---	---	--	---	---	---	---	---	--	---	---	---	---

pp	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
----	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

tp	8	0														
----	---	---	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

sp	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
pp	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	9	0														
sp	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
pp	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	10	0														
sp	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

L. S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp''	Re	GOF
Before cyl	1	6001	5666	10	0.27317	0.37419	0.38396	0.02822	13.260

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
1	169	1.00000	1.70010	-0.70010	0.72723	0.28664

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
2	23	1.00000	0.75796	0.24204	0.24690	0.11153

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
3	35	1.00000	0.94626	0.05374	0.12225	0.06542

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
4	47	1.00000	1.10306	-0.10306	0.18236	0.11411

Change of l.s. parameters in cycle 1

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e. s. d.
		b0	0.436241	-0.016432	0.419809	0.013471 >5%
		b1	0.155826	-0.082520	0.073306	0.049922 >5%
		b2	0.215677	0.210741	0.426418	0.083875 >5%
		b3	-1.835118	0.312472	-1.522646	0.204114 >5%
		b4	0.452528	-0.321766	0.130763	0.092769 >5%
		b5	1.352440	-0.367387	0.985053	0.181079 >5%
1		Scale	1.000000	-0.516627	0.483373	0.008044 >5%
2		Scale	1.000000	0.435548	1.435549	0.013629 >5%
3		Scale	1.000000	0.091274	1.091274	0.016759 >5%

4 Scale 1.000000 0.005796 1.005796 0.027600 >5%

Lp correction (normal): A part = 1.000 B part = 0.790

Parameter selection in cycle 2: nr = 14

gp	1	2	3	4	5	6	7	0	0	0	0					
pp	8	8	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	9	0														
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0
pp	10	10	11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	12	0														
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0					
pp	13	13	14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	15	0														
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0					
pp	16	16	17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	18	0														
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0					

L. S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp''	Re	GOF
Before cyl	2	6001	5619	18	0.06612	0.09343	0.09229	0.02820	3.313

Comp	Nref	SumIo	SumIc	SumdI	RBragg	RF
1	173	1.00000	0.99803	0.00197	0.09930	0.06101

Comp	Nref	SumIo	SumIc	SumdI	RBragg	RF
2	23	1.00000	1.00509-0.00509	0.04585	0.02510	

Comp	Nref	SumIo	SumIc	SumdI	RBragg	RF
3	35	1.00000	0.98120	0.01880	0.08120	0.03456

Comp	Nref	SumIo	SumIc	SumdI	RBragg	RF
4	50	1.00000	1.03796-0.03796	0.06759	0.06015	

Change of l. s. parameters in cycle 2

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e. s. d.
		b0	0.419809	0.002267	0.422076	0.003365 >5%
		b1	0.073306	0.001385	0.074690	0.012475 >5%
		b2	0.426418	-0.004784	0.421633	0.020963 >5%
		b3	-1.522646	-0.005428	-1.528074	0.051008 >5%
		b4	0.130763	0.002932	0.133695	0.023185 >5%
		b5	0.985053	0.004646	0.989699	0.045251 >5%
		t0	0.096351	0.000186	0.096537	0.000311 >5%
1		a	10.610764	0.000126	10.610889	0.000128 >5%
1		b	10.610764	0.000126	10.610889	0.000000
1		c	10.610764	0.000126	10.610889	0.000000
1		Scale	0.483373	-0.000378	0.482995	0.002013 >5%
2		a	3.250910	0.000009	3.250919	0.000019 >5%
2		b	3.250910	0.000009	3.250919	0.000000
2		c	5.208336	0.000009	5.208345	0.000042 >5%
2		Scale	1.435549	0.000110	1.435659	0.003407
3		a	3.786555	0.000047	3.786602	0.000041 >5%
3		b	3.786555	0.000047	3.786602	0.000000
3		c	9.515668	-0.000077	9.515591	0.000147 >5%
3		Scale	1.091274	0.000274	1.091548	0.004188 >5%
4		a	4.761104	0.000010	4.761115	0.000126 >5%
4		b	4.761104	0.000010	4.761115	0.000000
4		c	12.997920	0.000132	12.998053	0.000540 >5%
4		Scale	1.005796	-0.000089	1.005707	0.006933

Lp correction (normal): A part = 1.000 B part = 0.790

Parameter selection in cycle 3: nr = 13

gp	1	2	3	4	5	6	7	0	0	0	0						
pp	8	8	8	0	0	0	9	10	11	0	0	0	0	0	0	0	0

tp	12	0															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0
pp	13	13	14	0	0	0	15	16	17	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	18	0															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						
pp	19	19	20	0	0	0	21	22	23	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	24	0															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						
pp	25	25	26	0	0	0	27	28	29	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	30	0															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						

L. S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp''	Re	GOF	
Before	cyl	3	6001	5619	30	0.06605	0.09340	0.09226	0.02817	3.316

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
1	173	1.00000	0.99876	0.00124	0.09948	0.06156

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
2	23	1.00000	1.00557	-0.00557	0.04604	0.02528

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
3	35	1.00000	0.98215	0.01785	0.08160	0.03486

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
4	50	1.00000	1.03953	-0.03953	0.06814	0.06085

Change of l. s. parameters in cycle 3

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e. s. d.
	b0		0.422076	-0.001419	0.420657	0.003505 >5%
	b1		0.074690	0.001702	0.076393	0.012631 >5%
	b2		0.421633	-0.000287	0.421346	0.021370
	b3		-1.528074	-0.018069	-1.546143	0.051463 >5%
	b4		0.133695	0.001330	0.135025	0.023536 >5%

	b5	0.989699	0.017692	1.007391	0.045639 >5%
	t0	0.096537	0.000014	0.096551	0.000321
1	a	10.610889	0.000009	10.610899	0.000130 >5%
1	b	10.610889	0.000009	10.610899	0.000000
1	c	10.610889	0.000009	10.610899	0.000000
1	U	0.053921	-0.004112	0.049809	0.006295 >5%
1	V	-0.032377	0.008554	-0.023823	0.007993 >5%
1	W	0.040367	-0.002346	0.038021	0.001971 >5%
1	Scale	0.482995	0.000472	0.483468	0.002142 >5%
2	a	3.250919	0.000003	3.250922	0.000019 >5%
2	b	3.250919	0.000003	3.250922	0.000000
2	c	5.208345	0.000000	5.208345	0.000042
2	U	0.010939	0.000858	0.011797	0.000869 >5%
2	V	-0.012570	-0.000386	-0.012956	0.001378 >5%
2	W	0.016984	-0.000030	0.016954	0.000438 >5%
2	Scale	1.435659	0.001431	1.437090	0.003497 >5%
3	a	3.786602	0.000001	3.786603	0.000042
3	b	3.786602	0.000001	3.786603	0.000000
3	c	9.515591	0.000047	9.515638	0.000148 >5%
3	U	0.021497	0.005287	0.026784	0.001960 >5%
3	V	-0.020026	-0.004424	-0.024450	0.002722 >5%
3	W	0.022860	0.000742	0.023602	0.000754 >5%
3	Scale	1.091548	0.001911	1.093459	0.004370 >5%
4	a	4.761115	-0.000008	4.761107	0.000127 >5%
4	b	4.761115	-0.000008	4.761107	0.000000
4	c	12.998053	-0.000024	12.998029	0.000546
4	U	-0.005418	0.002873	-0.002545	0.003643 >5%
4	V	0.026028	0.000456	0.026484	0.007107 >5%
4	W	0.015716	-0.000633	0.015083	0.002308 >5%
4	Scale	1.005707	0.002190	1.007897	0.007635 >5%

Lp correction (normal): A part = 1.000 B part = 0.790

Parameter selection in cycle 4: nr = 12

gp	1	2	3	4	5	6	7	0	0	0	0						
pp	8	8	8	0	0	0	9	10	11	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	12	0															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0
pp	13	13	14	0	0	0	15	16	17	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	18	0															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						
pp	19	19	20	0	0	0	21	22	23	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	24	0															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						
pp	25	25	26	0	0	0	27	28	29	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	30	0															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						

L. S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp''	Re	GOF	
Before	cyl	4	6001	5619	30	0.06568	0.09316	0.09167	0.02817	3.307

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
1	173	1.00000	0.99934	0.00066	0.09992	0.06183

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
2	23	1.00000	1.00581-0.00581	0.04582	0.02518	

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
3	35	1.00000	0.98263	0.01737	0.08211	0.03541

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
4	50	1.00000	1.04039-0.04039	0.06782	0.06057	

Change of l.s. parameters in cycle 4

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e. s. d.
		b0	0.420657	-0.000225	0.420433	0.003499 >5%
		b1	0.076393	-0.000589	0.075804	0.012603

	b2	0.421346	-0.000796	0.420551	0.021323
	b3	-1.546143	-0.000392	-1.546535	0.051343
	b4	0.135025	0.000709	0.135734	0.023481
	b5	1.007391	0.000734	1.008125	0.045529
	t0	0.096551	0.000034	0.096585	0.000325 >5%
1	a	10.610899	0.000005	10.610904	0.000131
1	b	10.610899	0.000005	10.610904	0.000000
1	c	10.610899	0.000005	10.610904	0.000000
1	U	0.049809	0.000428	0.050237	0.006324 >5%
1	V	-0.023823	-0.000513	-0.024336	0.008050 >5%
1	W	0.038021	0.000127	0.038148	0.001974 >5%
1	Scale	0.483468	0.000032	0.483499	0.002139
2	a	3.250922	0.000002	3.250924	0.000019 >5%
2	b	3.250922	0.000002	3.250924	0.000000
2	c	5.208345	0.000002	5.208347	0.000043
2	U	0.011797	0.000119	0.011915	0.000901 >5%
2	V	-0.012956	-0.000136	-0.013092	0.001406 >5%
2	W	0.016954	0.000031	0.016985	0.000443 >5%
2	Scale	1.437090	0.000084	1.437173	0.003489
3	a	3.786603	0.000003	3.786606	0.000043 >5%
3	b	3.786603	0.000003	3.786606	0.000000
3	c	9.515638	0.000018	9.515656	0.000153 >5%
3	U	0.026784	0.001115	0.027898	0.002167 >5%
3	V	-0.024450	-0.001077	-0.025526	0.002861 >5%
3	W	0.023602	0.000203	0.023804	0.000773 >5%
3	Scale	1.093459	0.000105	1.093565	0.004362
4	a	4.761107	0.000003	4.761110	0.000132
4	b	4.761107	0.000003	4.761110	0.000000
4	c	12.998029	0.000089	12.998117	0.000572 >5%
4	U	-0.002545	0.001906	-0.000639	0.004165 >5%
4	V	0.026484	-0.001673	0.024811	0.007512 >5%
4	W	0.015083	0.000353	0.015435	0.002374 >5%
4	Scale	1.007897	0.000438	1.008335	0.007639 >5%

Lp correction (normal): A part = 1.000 B part = 0.790

Parameter selection in cycle 5: nr = 11

```

gp  1  2  3  4  5  6  7  0  0  0  0
pp  8  8  8  0  0  0  9 10 11 12 13 14  0  0  0  0  0
tp 15  0
sp  0  0  0  0  0      0  0  0  0  0      0  0  0  0  0

pp 16 16 17  0  0  0 18 19 20 12 13 14  0  0  0  0  0
tp 21  0
sp  0  0  0  0  0      0  0  0  0  0

pp 22 22 23  0  0  0 24 25 26 12 13 14  0  0  0  0  0
tp 27  0
sp  0  0  0  0  0      0  0  0  0  0

pp 28 28 29  0  0  0 30 31 32 12 13 14  0  0  0  0  0
tp 33  0
sp  0  0  0  0  0      0  0  0  0  0

```

Rwp factor dose not change.

L. S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp''	Re	GOF
Rwp =const	5	6001	5619	33	0.06568	0.09315	0.09165	0.02816	3.307

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
1	173	1.00000	0.99917	0.00083	0.09985	0.06170

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
2	23	1.00000	1.00573	-0.00573	0.04579	0.02513

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
3	35	1.00000	0.98247	0.01753	0.08217	0.03547

Comp Nref	SumIo : SumIc	SumdI	RBragg	RF
4 50	1.00000 1.04021-0.04021	0.06763	0.06030	

You can see the pattern by entering "disp" in another window.

↑

※このメッセージが出たときは、別の「コマンドプロンプト」ウィンドウにてC:\FXBIN>dispと入力することで、プログラムDISPによる解析結果（フィッティングパターン図）を表示することが可能です。

※この段階で、パラメータの精密化を終了して、定量値を得ることも可能です。しかし、この段階ではピークの形状パラメータである非対称性(a0, a1, a2)、低角側および高角側 pseudo-Voigt 関数の η パラメータ (e/mL0, e/mL1 と e/mH0, e/mH1) に対して全成分間で拘束がかかった状態で精密化を行っています（正確には最小二乗法サイクルにおけるパラメータ変化量が同じになるような拘束がかかっている）。なお、この解析例では、事前にプログラム REFLEX にて各成分の半値幅(FWHM)は個々独立に精密化するという指定を行っている（半値幅の精密化の指定方法は、◎プログラム REFLEX の実行例をご参考にしてください。）ので各成分の半値幅(U, V, W)は拘束されていません。

そこで、よりよいフィッティング結果を得るために、これらの拘束条件のかかっているパラメータを全成分にて独立に精密化することを試みる必要があります。以下、精密化すべき全てのパラメータを独立に動かす場合について示します。

Enter option:

- 1: go back to upper menu
- 0: terminate l.s. cycles
- 1: continue l.s. cycles
- 2: display refined parameters & go back to this menu

1 ←最小二乗法のサイクルを終了せずに、継続するので1を選びます。

Select:

- 0: refine structural parameters from next cycles
- 1: no refinement of structural parameters

1 ←構造パラメータは初期値（文献値）で固定して、精密化は行わないので、1を選択します。

Select a mode of refinement:

-3: terminate/pause l.s. cycles

-2: full-manual (single-step)

-1: manual

0: automatic

n: repeat n times (n >= 1)

-2 ←最小二乗（精密化）サイクルにおいて、最適化するパラメータを自動か手動にて指定できます。ここでは、-2 を指定して完全手動（full-manual）にて精密化を実行します。

----- Parameter selection for the L.S. of cycle 6 -----

Global parameters:

For parameters: b0, b1, b2, b3, b4, b5,

1 1 1 1 1 1 ←全体に関するパラメータであるバックグラウンド関数（5次の多項式）の各パラメータを精密化するので、b0 からb5 の6つのパラメータに対して1を指定します。

For parameters: t0, t1, t2, t3,

1 0 0 0 ←全体に関するパラメータであるピーク位置の補正関数のパラメータの内、零点補正の項目（t0）だけ精密化を行うので、1 0 0 0 と入力します。

For parameters: E,

0 ← $K\alpha_1$ と $K\alpha_2$ 線の強度比である $I\alpha_1 / I\alpha_2$ の値は精密化せずに固定するので、0を入力します。

Profile parameters:

For lth component:

For parameters: a, b, c, alpha, beta, gamma,

1 ←第1成分の格子定数パラメータを精密化するので、1を入力します。

For parameters: U, V, W,

1 1 1 ←第1成分の半値幅パラメータ（U,V&W）を精密化するので、1 1 1 と入力します。

For parameters: a0, a1, a2,

1 1 1 ←第1成分のプロファイルの非対称性パラメータ（a0, a1&a2）を精密化するので、1 1 1 と入力します。

For parameters: e/mL0, e/mL1,

1 1 ←第1成分の低角側pseudo-Voigt関数の η パラメータ(e/mL0, e/mL1)を精密化するので、1 1と入力します。

For parameters: e/mH0, e/mH1,

1 1 ←第1成分の高角側pseudo-Voigt関数の η パラメータ(e/mH0, e/mH1)を精密化するので、1 1と入力します。

For 2th component:

For parameters: a, b, c, alpha, beta, gamma,

1 ←以下、第2成分から第4成分まで、第1成分と同様に精密化するパラメータを指定します。

For parameters: U, V, W,

1 1 1

For parameters: a0, a1, a2,

1 1 1

For parameters: e/mL0, e/mL1,

1 1

For parameters: e/mH0, e/mH1,

1 1

For 3th component:

For parameters: a, b, c, alpha, beta, gamma,

1

For parameters: U, V, W,

1 1 1

For parameters: a0, a1, a2,

1 1 1

For parameters: e/mL0, e/mL1,

1 1

For parameters: e/mH0, e/mH1,

1 1

For 4th component:

For parameters: a, b, c, alpha, beta, gamma,

1

For parameters: U, V, W,

1 1 1

For parameters: a0, a1, a2,

1 1 1

For parameters: e/mL0, e/mL1,

1 1

For parameters: e/mH0, e/mH1,

1 1

Scale and OATM parameters:

↑

※次に、スケール因子と全体の温度因子の精密化について指定を行います。

For 1th component:

For parameters: Scale, Temp,

1 1 ←第1成分のスケール因子(Scale)と全体の温度因子(Temp)の精密化をするので 1 1 と入力します。

For 2th component:

For parameters: Scale, Temp,

1 2 ←第2成分のスケール因子を精密化し、全体の温度因子は第1成分と同じという拘束条件をつけるので 1 2 と入力します。なお、全体の温度因子も独立に精密化するとスケール因子との相関性が大きいことから正しい定量結果が得られないことがあります。

For 3th component:

For parameters: Scale, Temp,

1 2 ←以下、第3～4成分について、第2成分と同じ条件にて精密化を指定します。

For 4th component:

For parameters: Scale, Temp,

1 2

Texture parameters:

Structural paremeters:

↑

※次に、構造パラメータの精密化について指定を行います。これらは初期値（文献値）で

固定します。

For 1th component:

For parameters: alpha, x, y, z, Biso, of Y1

0 0 0 0 0 ←第1成分の「イットリウム1 (Y1)」に関する構造パラメータの精密化を指定します。ここでは、初期値で固定するので0 0 0 0 0と入力します。以下、全ての構造パラメータは固定します。

For 1th component:

For parameters: alpha, x, y, z, Biso, of Y2

0 0 0 0 0

For 1th component:

For parameters: alpha, x, y, z, Biso, of O1

0 0 0 0 0

For 2th component:

For parameters: alpha, x, y, z, Biso, of Zn1

0 0 0 0 0

For 2th component:

For parameters: alpha, x, y, z, Biso, of O1

0 0 0 0 0

For 3th component:

For parameters: alpha, x, y, z, Biso, of Ti1

0 0 0 0 0

For 3th component:

For parameters: alpha, x, y, z, Biso, of O1

0 0 0 0 0

For 4th component:

For parameters: alpha, x, y, z, Biso, of Al1

0 0 0 0 0

For 4th component:
 For parameters: alpha, x, y, z, Biso, of 01
0 0 0 0 0

How many cycles do you repeat this selectoin ?

-1: back to the beginning of selection

0: to parameter convergence

n: n cycles

0 ←最小二乗法による精密化サイクルの回数を指定します。ここでは、パラメータ値が収束するまで精密化を実行するの 0 を指定します。

Lp correction (normal): A part = 1.000 B part = 0.790

Parameter selection in cycle 6: nr = 0

gp	1	2	3	4	5	6	7	0	0	0	0						
pp	8	8	8	0	0	0	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	0
tp	19	20															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0
pp	21	21	22	0	0	0	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	0
tp	33	20															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						
pp	34	34	35	0	0	0	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	0
tp	46	20															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						
pp	47	47	48	0	0	0	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	0
tp	59	20															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						

L. S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp''	Re	GOF
Before cyl	6	6001	5619	59	0.06568	0.09315	0.09165	0.02810	3.315

Comp	Nref	SumIo	SumIc	SumdI	RBragg	RF
1	173	1.00000	0.99918	0.00082	0.09986	0.06171

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
2	23	1.00000	1.00574	-0.00574	0.04579	0.02513

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
3	35	1.00000	0.98248	0.01752	0.08218	0.03548

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
4	50	1.00000	1.04022	-0.04022	0.06763	0.06030

Change of l. s. parameters in cycle 6

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e. s. d.
		b0	0.420433	0.005259	0.425691	0.003790 >5%
		b1	0.075804	0.013717	0.089521	0.012938 >5%
		b2	0.420551	0.000560	0.421111	0.022147
		b3	-1.546535	0.034339	-1.512197	0.053249 >5%
		b4	0.135734	0.005879	0.141613	0.024355 >5%
		b5	1.008125	-0.043306	0.964819	0.047686 >5%
		t0	0.096585	-0.000077	0.096509	0.001024 >5%
1		a	10.610904	-0.000365	10.610538	0.000415 >5%
1		b	10.610904	-0.000365	10.610538	0.000000
1		c	10.610904	-0.000365	10.610538	0.000000
1		U	0.050237	-0.007459	0.042777	0.006496 >5%
1		V	-0.024336	-0.000856	-0.025193	0.008468 >5%
1		W	0.038148	0.001252	0.039401	0.002299 >5%
1		a0	0.762164	0.083487	0.845651	0.062072 >5%
1		a1	-0.686328	0.166654	-0.519674	0.072776 >5%
1		a2	0.049836	-0.026127	0.023709	0.012014 >5%
1		e/mL0	0.301296	-0.049498	0.251798	0.042651 >5%
1		e/mL1	0.004359	0.001450	0.005809	0.001229 >5%
1		e/mH0	1.021158	-0.021836	0.999322	0.061571 >5%
1		e/mH1	-0.005152	0.000762	-0.004390	0.001202 >5%
1		Scale	0.483499	0.007675	0.491174	0.002545 >5%
1		Temp	0.000000	0.106781	0.106781	0.014010 >5%
2		a	3.250924	-0.000008	3.250916	0.000054 >5%

2	b	3.250924	-0.000008	3.250916	0.000000
2	c	5.208347	-0.000003	5.208344	0.000092
2	U	0.011915	-0.000938	0.010978	0.000971 >5%
2	V	-0.013092	0.000543	-0.012550	0.001467 >5%
2	W	0.016985	-0.000011	0.016973	0.000506
2	a0	1.037279	0.000179	1.037458	0.047675
2	a1	-0.902569	-0.024841	-0.927410	0.102761 >5%
2	a2	0.062708	0.004450	0.067158	0.017556 >5%
2	e/mL0	0.051772	-0.002249	0.049523	0.024564 >5%
2	e/mL1	0.009275	-0.000001	0.009274	0.000551
2	e/mH0	0.816344	-0.003813	0.812531	0.044703 >5%
2	e/mH1	0.000338	0.000100	0.000438	0.000703 >5%
2	Scale	1.437173	0.027875	1.465049	0.005187 >5%
2	Temp	0.000000	0.106781	0.106781	0.000000
3	a	3.786606	0.000007	3.786612	0.000104 >5%
3	b	3.786606	0.000007	3.786612	0.000000
3	c	9.515656	-0.000004	9.515652	0.000287
3	U	0.027898	-0.002365	0.025534	0.002382 >5%
3	V	-0.025526	0.000467	-0.025060	0.003065 >5%
3	W	0.023804	0.000221	0.024026	0.000989 >5%
3	a0	0.911376	-0.001324	0.910052	0.067535
3	a1	-0.706888	0.033257	-0.673631	0.085801 >5%
3	a2	0.037765	-0.004302	0.033463	0.013080 >5%
3	e/mL0	0.364450	-0.012396	0.352054	0.031377 >5%
3	e/mL1	0.005355	0.000512	0.005867	0.000864 >5%
3	e/mH0	0.914056	-0.024398	0.889658	0.065571 >5%
3	e/mH1	-0.002580	0.000456	-0.002124	0.001077 >5%
3	Scale	1.093565	0.017980	1.111545	0.005210 >5%
3	Temp	0.000000	0.106781	0.106781	0.000000
4	a	4.761110	0.000088	4.761198	0.000227 >5%
4	b	4.761110	0.000088	4.761198	0.000000
4	c	12.998117	0.000098	12.998216	0.000761 >5%
4	U	-0.000639	-0.000264	-0.000903	0.004853 >5%
4	V	0.024811	-0.003337	0.021474	0.008366 >5%
4	W	0.015435	0.001302	0.016737	0.002862 >5%
4	a0	0.913003	-0.034601	0.878402	0.111433 >5%

4	a1	-1.715820	0.068055	-1.647765	0.183216	>5%
4	a2	0.214418	-0.011758	0.202660	0.031765	>5%
4	e/mL0	-0.119788	0.000476	-0.119312	0.076170	
4	e/mL1	0.015495	0.000256	0.015751	0.001372	>5%
4	e/mH0	1.268095	-0.005340	1.262755	0.132253	
4	e/mH1	-0.002712	-0.000194	-0.002906	0.002142	>5%
4	Scale	1.008335	0.020856	1.029190	0.009089	>5%
4	Temp	0.000000	0.106781	0.106781	0.000000	

Lp correction (normal): A part = 1.000 B part = 0.790

L. S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp''	Re	GOF
Before cyl	7	6001	5621	59	0.06432	0.09234	0.09015	0.02810	3.286

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
1	173	1.00000	1.00017	-0.00017	0.10233	0.06268

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
2	23	1.00000	1.00566	-0.00566	0.04189	0.02356

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
3	35	1.00000	0.98168	0.01832	0.07848	0.03377

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
4	50	1.00000	1.04106	-0.04106	0.06778	0.06097

Change of l. s. parameters in cycle 7

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e. s. d.
		b0	0.425691	0.000485	0.426176	0.003751 >5%
		b1	0.089521	0.000929	0.090451	0.012822 >5%
		b2	0.421111	0.000101	0.421212	0.021960
		b3	-1.512197	-0.001525	-1.513722	0.052774
		b4	0.141613	-0.000046	0.141567	0.024155
		b5	0.964819	0.001252	0.966071	0.047262

	t0	0.096509	-0.000077	0.096431	0.001009 >5%
1	a	10.610538	0.000050	10.610588	0.000412 >5%
1	b	10.610538	0.000050	10.610588	0.000000
1	c	10.610538	0.000050	10.610588	0.000000
1	U	0.042777	-0.000105	0.042673	0.005957
1	V	-0.025193	0.000145	-0.025048	0.008010
1	W	0.039401	0.000185	0.039586	0.002227 >5%
1	a0	0.845651	-0.008124	0.837527	0.072726 >5%
1	a1	-0.519674	0.017368	-0.502306	0.081818 >5%
1	a2	0.023709	-0.002840	0.020869	0.013191 >5%
1	e/mL0	0.251798	-0.006243	0.245555	0.041354 >5%
1	e/mL1	0.005809	0.000188	0.005997	0.001193 >5%
1	e/mH0	0.999322	-0.012198	0.987124	0.061663 >5%
1	e/mH1	-0.004390	0.000034	-0.004356	0.001245
1	Scale	0.491174	0.000154	0.491328	0.002549 >5%
1	Temp	0.106781	0.003857	0.110638	0.014089 >5%
2	a	3.250916	-0.000003	3.250913	0.000054 >5%
2	b	3.250916	-0.000003	3.250913	0.000000
2	c	5.208344	-0.000004	5.208339	0.000091
2	U	0.010978	-0.000017	0.010960	0.000944
2	V	-0.012550	-0.000054	-0.012604	0.001444
2	W	0.016973	0.000045	0.017018	0.000499 >5%
2	a0	1.037458	0.001158	1.038617	0.048251
2	a1	-0.927410	0.010580	-0.916829	0.103602 >5%
2	a2	0.067158	-0.001718	0.065441	0.017667 >5%
2	e/mL0	0.049523	-0.001738	0.047785	0.024485 >5%
2	e/mL1	0.009274	0.000031	0.009306	0.000556 >5%
2	e/mH0	0.812531	-0.002439	0.810092	0.044395 >5%
2	e/mH1	0.000438	0.000022	0.000461	0.000707
2	Scale	1.465049	0.001159	1.466208	0.005218 >5%
2	Temp	0.106781	0.003857	0.110638	0.000000
3	a	3.786612	-0.000011	3.786602	0.000104 >5%
3	b	3.786612	-0.000011	3.786602	0.000000
3	c	9.515652	-0.000023	9.515629	0.000284 >5%
3	U	0.025534	-0.000084	0.025450	0.002296

3	V	-0.025060	0.000051	-0.025008	0.002998	
3	W	0.024026	0.000032	0.024058	0.000977	
3	a0	0.910052	0.005605	0.915657	0.070051	>5%
3	a1	-0.673631	0.006419	-0.667211	0.087288	>5%
3	a2	0.033463	-0.000564	0.032899	0.013166	
3	e/mL0	0.352054	0.001064	0.353118	0.031370	
3	e/mL1	0.005867	-0.000056	0.005811	0.000879	>5%
3	e/mH0	0.889658	-0.005823	0.883835	0.064710	>5%
3	e/mH1	-0.002124	0.000076	-0.002047	0.001090	>5%
3	Scale	1.111545	0.000429	1.111973	0.005237	>5%
3	Temp	0.106781	0.003857	0.110638	0.000000	
4	a	4.761198	-0.000016	4.761182	0.000219	>5%
4	b	4.761198	-0.000016	4.761182	0.000000	
4	c	12.998216	-0.000010	12.998206	0.000735	
4	U	-0.000903	0.000068	-0.000835	0.004495	
4	V	0.021474	-0.001049	0.020425	0.008159	>5%
4	W	0.016737	0.000371	0.017108	0.002853	>5%
4	a0	0.878402	-0.000635	0.877767	0.105845	
4	a1	-1.647765	-0.021503	-1.669268	0.173747	>5%
4	a2	0.202660	0.004428	0.207088	0.030320	>5%
4	e/mL0	-0.119312	-0.010281	-0.129593	0.074969	>5%
4	e/mL1	0.015751	0.000188	0.015939	0.001346	>5%
4	e/mH0	1.262755	-0.018392	1.244363	0.130658	>5%
4	e/mH1	-0.002906	0.000383	-0.002523	0.002144	>5%
4	Scale	1.029190	-0.000051	1.029139	0.009159	
4	Temp	0.106781	0.003857	0.110638	0.000000	

Lp correction (normal): A part = 1.000 B part = 0.790

L.S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp''	Re	GOF
Before cyl	8	6001	5621	59	0.06432	0.09234	0.09018	0.02810	3.286
Comp Nref					SumIo : SumIc		SumdI	RBragg	RF
	1	173			1.00000	1.00029	-0.00029	0.10233	0.06279

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
2	23	1.00000	1.00575	-0.00575	0.04176	0.02355

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
3	35	1.00000	0.98162	0.01838	0.07851	0.03375

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
4	50	1.00000	1.04110	-0.04110	0.06796	0.06132

Change of l. s. parameters in cycle 8

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e. s. d.
		b0	0.426176	0.000044	0.426220	0.003751
		b1	0.090451	-0.000115	0.090336	0.012823
		b2	0.421212	0.000150	0.421362	0.021963
		b3	-1.513722	0.000363	-1.513358	0.052776
		b4	0.141567	-0.000219	0.141347	0.024158
		b5	0.966071	-0.000264	0.965807	0.047263
		t0	0.096431	-0.000012	0.096419	0.001009
1		a	10.610588	-0.000004	10.610584	0.000413
1		b	10.610588	-0.000004	10.610584	0.000000
1		c	10.610588	-0.000004	10.610584	0.000000
1		U	0.042673	-0.000005	0.042668	0.005998
1		V	-0.025048	-0.000040	-0.025088	0.008063
1		W	0.039586	0.000040	0.039626	0.002234
1		a0	0.837527	0.001630	0.839157	0.072261
1		a1	-0.502306	0.005290	-0.497016	0.081489 >5%
1		a2	0.020869	-0.000825	0.020044	0.013152 >5%
1		e/mL0	0.245555	0.000137	0.245692	0.041422
1		e/mL1	0.005997	-0.000011	0.005986	0.001197
1		e/mH0	0.987124	-0.001583	0.985541	0.061196
1		e/mH1	-0.004356	0.000018	-0.004338	0.001244
1		Scale	0.491328	-0.000026	0.491302	0.002551
1		Temp	0.110638	0.000205	0.110843	0.014094
2		a	3.250913	-0.000002	3.250911	0.000054

2	b	3.250913	-0.000002	3.250911	0.000000
2	c	5.208339	-0.000002	5.208337	0.000091
2	U	0.010960	-0.000004	0.010956	0.000943
2	V	-0.012604	-0.000004	-0.012608	0.001444
2	W	0.017018	0.000005	0.017023	0.000500
2	a0	1.038617	0.001528	1.040144	0.048368
2	a1	-0.916829	0.001743	-0.915087	0.103920
2	a2	0.065441	-0.000242	0.065199	0.017709
2	e/mL0	0.047785	0.000298	0.048083	0.024477
2	e/mL1	0.009306	-0.000012	0.009293	0.000556
2	e/mH0	0.810092	-0.000534	0.809558	0.044350
2	e/mH1	0.000461	0.000017	0.000477	0.000707
2	Scale	1.466208	0.000063	1.466271	0.005221
2	Temp	0.110638	0.000205	0.110843	0.000000
3	a	3.786602	-0.000002	3.786600	0.000104
3	b	3.786602	-0.000002	3.786600	0.000000
3	c	9.515629	-0.000005	9.515623	0.000285
3	U	0.025450	-0.000021	0.025429	0.002297
3	V	-0.025008	-0.000011	-0.025020	0.003001
3	W	0.024058	0.000012	0.024070	0.000977
3	a0	0.915657	0.001106	0.916763	0.070500
3	a1	-0.667211	0.001238	-0.665973	0.087811
3	a2	0.032899	-0.000112	0.032787	0.013221
3	e/mL0	0.353118	0.000123	0.353240	0.031332
3	e/mL1	0.005811	-0.000005	0.005806	0.000878
3	e/mH0	0.883835	-0.001957	0.881878	0.064625
3	e/mH1	-0.002047	0.000037	-0.002010	0.001092
3	Scale	1.111973	0.000036	1.112009	0.005240
3	Temp	0.110638	0.000205	0.110843	0.000000
4	a	4.761182	-0.000002	4.761180	0.000218
4	b	4.761182	-0.000002	4.761180	0.000000
4	c	12.998206	-0.000007	12.998199	0.000732
4	U	-0.000835	-0.000245	-0.001080	0.004465 >5%
4	V	0.020425	0.000147	0.020572	0.008119
4	W	0.017108	0.000007	0.017115	0.002850
4	a0	0.877767	-0.003178	0.874589	0.106209

4	a1	-1.669268	-0.007093	-1.676361	0.174004
4	a2	0.207088	0.001025	0.208113	0.030286
4	e/mL0	-0.129593	-0.005554	-0.135147	0.074543 >5%
4	e/mL1	0.015939	0.000099	0.016038	0.001333 >5%
4	e/mH0	1.244363	-0.000332	1.244031	0.130467
4	e/mH1	-0.002523	-0.000006	-0.002529	0.002147
4	Scale	1.029139	-0.000150	1.028989	0.009163
4	Temp	0.110638	0.000205	0.110843	0.000000

Lp correction (normal): A part = 1.000 B part = 0.790

L. S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp''	Re	GOF
Before cyl	9	6001	5621	59	0.06433	0.09234	0.09019	0.02810	3.286

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
1	173	1.00000	1.00027	-0.00027	0.10230	0.06276

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
2	23	1.00000	1.00576	-0.00576	0.04175	0.02355

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
3	35	1.00000	0.98161	0.01839	0.07851	0.03375

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
4	50	1.00000	1.04105	-0.04105	0.06797	0.06133

Change of l. s. parameters in cycle 9

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e. s. d.
		b0	0.426220	0.000021	0.426241	0.003751
		b1	0.090336	-0.000022	0.090314	0.012823
		b2	0.421362	-0.000004	0.421358	0.021963
		b3	-1.513358	0.000061	-1.513297	0.052776
		b4	0.141347	0.000010	0.141358	0.024157
		b5	0.965807	-0.000006	0.965802	0.047263

	t0	0.096419	-0.000005	0.096414	0.001009
1	a	10.610584	0.000000	10.610584	0.000413
1	b	10.610584	0.000000	10.610584	0.000000
1	c	10.610584	0.000000	10.610584	0.000000
1	U	0.042668	-0.000047	0.042621	0.005997
1	V	-0.025088	0.000057	-0.025031	0.008064
1	W	0.039626	-0.000007	0.039619	0.002234
1	a0	0.839157	-0.000228	0.838928	0.072383
1	a1	-0.497016	0.000445	-0.496572	0.081658
1	a2	0.020044	-0.000068	0.019976	0.013176
1	e/mL0	0.245692	0.000049	0.245740	0.041411
1	e/mL1	0.005986	-0.000002	0.005984	0.001197
1	e/mH0	0.985541	-0.000250	0.985291	0.061164
1	e/mH1	-0.004338	-0.000002	-0.004340	0.001245
1	Scale	0.491302	-0.000003	0.491299	0.002551
1	Temp	0.110843	0.000109	0.110952	0.014091
2	a	3.250911	0.000000	3.250911	0.000054
2	b	3.250911	0.000000	3.250911	0.000000
2	c	5.208337	0.000000	5.208337	0.000091
2	U	0.010956	-0.000003	0.010954	0.000943
2	V	-0.012608	0.000002	-0.012606	0.001444
2	W	0.017023	0.000001	0.017024	0.000500
2	a0	1.040144	0.000339	1.040483	0.048458
2	a1	-0.915087	0.001000	-0.914086	0.104130
2	a2	0.065199	-0.000159	0.065040	0.017739
2	e/mL0	0.048083	0.000058	0.048142	0.024466
2	e/mL1	0.009293	-0.000002	0.009292	0.000555
2	e/mH0	0.809558	-0.000088	0.809471	0.044360
2	e/mH1	0.000477	0.000001	0.000479	0.000708
2	Scale	1.466271	0.000027	1.466298	0.005221
2	Temp	0.110843	0.000109	0.110952	0.000000
3	a	3.786600	0.000000	3.786600	0.000104
3	b	3.786600	0.000000	3.786600	0.000000
3	c	9.515623	0.000001	9.515624	0.000285
3	U	0.025429	-0.000006	0.025423	0.002297

3	V	-0.025020	0.000003	-0.025017	0.003001
3	W	0.024070	0.000001	0.024071	0.000978
3	a0	0.916763	-0.000023	0.916740	0.070628
3	a1	-0.665973	0.000705	-0.665268	0.087941
3	a2	0.032787	-0.000078	0.032709	0.013234
3	e/mL0	0.353240	0.000072	0.353312	0.031326
3	e/mL1	0.005806	0.000001	0.005807	0.000877
3	e/mH0	0.881878	-0.000577	0.881301	0.064597
3	e/mH1	-0.002010	0.000006	-0.002004	0.001092
3	Scale	1.112009	0.000021	1.112030	0.005240
3	Temp	0.110843	0.000109	0.110952	0.000000
4	a	4.761180	-0.000002	4.761178	0.000217
4	b	4.761180	-0.000002	4.761178	0.000000
4	c	12.998199	-0.000011	12.998187	0.000728
4	U	-0.001080	-0.000069	-0.001149	0.004430
4	V	0.020572	-0.000069	0.020503	0.008107
4	W	0.017115	0.000041	0.017156	0.002848
4	a0	0.874589	-0.001031	0.873558	0.105230
4	a1	-1.676361	-0.007938	-1.684300	0.173334
4	a2	0.208113	0.001275	0.209388	0.030205
4	e/mL0	-0.135147	-0.003164	-0.138311	0.074219
4	e/mL1	0.016038	0.000057	0.016095	0.001323
4	e/mH0	1.244031	-0.000432	1.243598	0.130286
4	e/mH1	-0.002529	0.000024	-0.002505	0.002143
4	Scale	1.028989	-0.000053	1.028936	0.009162
4	Temp	0.110843	0.000109	0.110952	0.000000

All parameters converge [d(x) < 5% of s(x)].

←全ての精密化パラメータが収束したというメッセージです。ここで、精密化終了です。

L.S. Ncyl Nobs Npar Nvar Rp Rwp Rp'' Re GOF

dx < 5%*sx 9 6001 5621 59 0.06433 0.09234 0.09019 0.02810 3.286

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
1	173	1.00000	1.00027	-0.00027	0.10230	0.06276

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
2	23	1.00000	1.00576	-0.00576	0.04175	0.02355

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
3	35	1.00000	0.98161	0.01839	0.07851	0.03375

Comp	Nref	SumIo	: SumIc	SumdI	RBragg	RF
4	50	1.00000	1.04105	-0.04105	0.06797	0.06133

You can see the pattern by entering "disp" in another window.

※ このメッセージが出たときは、別の「コマンドプロンプト」ウィンドウにて
C:\YXBIN>dispと入力することで、プログラムDISPによる解析結果（フィッティング
パターン図）を表示することが可能です。

Enter option:

-1: go back to upper menu

0: terminate l.s. cycles

1: continue l.s. cycles

2: display refined parameters & go back to this menu

0 ←最適化ができたので、解析の終了である0を入力します。

Select:

0: transfer overall temperature factor to individual ones

1: no transferring

1 ←全体の温度因子を個々の成分の温度因子へ反映させるかの選択です。ここでは、構造
パラメータを精密化するのが目的ではありませんので、1を選びます。(0を選んでも定量
結果などには影響はありません。)

----- Output profile and strutral parameters -----

Select a file name for profile parameters

-1:no output, 0:file A, 1:file B, 2:file C, 3:your option.

-1 ←最適化したプロファイルパラメータと反射データを記録する場合は、0～3 を選択します（プログラムREFLEXと同じ形式のデータを出力します）。ここでは、例としてデータファイルの出力を行わないために-1 を指定しています。

Select a filename for strutral parameters:

-1:no output, 0:file A, 1:file B, 2:file C, 3:your option.

-1 ←最適化した構造パラメータを記録する場合は、0～3 を選択します（プログラムAOMSと同じ形式のデータを出力します）。ここでは、例としてデータファイルの出力を行わないために-1 を指定しています。

Select:

0: continue refinement

1: change the 2theta-range to be analyzed

2: read new profile/structural parameters

3: read a new intensity data set

4: terminate job

4 ←プログラムPFLSを終了するので、4 の終了を選択します。

File name for printed output is /tmp/pfls.txt ←解析結果は¥tmp ディレクトリに
pfls.txt としてテキストファイル
形式にて自動的に出力されま
す。

c:¥xbin>