

◎プログラム ASFT の実行例

Microsoft Windows [Version 6.0.6000]

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

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

```
*****
*
*                                     *
*          Computer Program ASFT (ver. 1.02)          *
*                  for Generating                      *
*          Atomic Scattering Factor Tables            *
*
*                                     *
*                  By H. Toraya                        *
*
*                                     *
*****
```

Input atomic number and valence state (Input 0, 0 to finish).

Atomic number:

1. H	2. He	3. Li	4. Be	5. B	6. C	7. N	8. O	9. F	10. Ne
11. Na	12. Mg	13. Al	14. Si	15. P	16. S	17. Cl	18. Ar	19. K	20. Ca
21. Sc	22. Ti	23. V	24. Cr	25. Mn	26. Fe	27. Co	28. Ni	29. Cu	30. Zn
31. Ga	32. Ge	33. As	34. Se	35. Br	36. Kr	37. Rb	38. Sr	39. Y	40. Zr
41. Nb	42. Mo	43. Tc	44. Ru	45. Rh	46. Pd	47. Ag	48. Cd	49. In	50. Sn
51. Sb	52. Te	53. I	54. Xe	55. Cs	56. Ba	57. La	58. Ce	59. Pr	60. Nd
61. Pm	62. Sm	63. Eu	64. Gd	65. Tb	66. Dy	67. Ho	68. Er	69. Tm	70. Yb
71. Lu	72. Hf	73. Ta	74. W	75. Re	76. Os	77. Ir	78. Pt	79. Au	80. Hg
81. Tl	82. Pb	83. Bi	84. Po	85. At	86. Tn	87. Fr	88. Ra	89. Ac	90. Th
91. Pa	92. U	93. Np	94. Pu	95. Am	96. Cm	97. Bk	98. Cf		

Valence state:

-2:-2e -1:-e 0:0 1:+e 2:+2e 3:+3e 4:+4e 5:+5e 6:+6e

39 3 ←第1成分であるYttriaを構成する化学種を入力します。原子と電荷を指定します。

ここでは、化学種 Y^{3+} を入力するので、39.Y と 3:+3e を“39 3”と指定します。

Input atomic number and valence state (Input 0, 0 to finish).

Atomic number:

1. H	2. He	3. Li	4. Be	5. B	6. C	7. N	8. O	9. F	10. Ne
11. Na	12. Mg	13. Al	14. Si	15. P	16. S	17. Cl	18. Ar	19. K	20. Ca
21. Sc	22. Ti	23. V	24. Cr	25. Mn	26. Fe	27. Co	28. Ni	29. Cu	30. Zn
31. Ga	32. Ge	33. As	34. Se	35. Br	36. Kr	37. Rb	38. Sr	39. Y	40. Zr
41. Nb	42. Mo	43. Tc	44. Ru	45. Rh	46. Pd	47. Ag	48. Cd	49. In	50. Sn
51. Sb	52. Te	53. I	54. Xe	55. Cs	56. Ba	57. La	58. Ce	59. Pr	60. Nd
61. Pm	62. Sm	63. Eu	64. Gd	65. Tb	66. Dy	67. Ho	68. Er	69. Tm	70. Yb
71. Lu	72. Hf	73. Ta	74. W	75. Re	76. Os	77. Ir	78. Pt	79. Au	80. Hg
81. Tl	82. Pb	83. Bi	84. Po	85. At	86. Tn	87. Fr	88. Ra	89. Ac	90. Th
91. Pa	92. U	93. Np	94. Pu	95. Am	96. Cm	97. Bk	98. Cf		

Valence state:

-2:-2e -1:-e 0:0 1:+e 2:+2e 3:+3e 4:+4e 5:+5e 6:+6e

8 -2 ←引き続き、第1成分であるYttriaを構成する化学種を入力します。

ここでは、化学種 O^{2-} を入力するので、8.0 と -2:-2e を“8 -2”と指定します。

Input atomic number and valence state (Input 0, 0 to finish).

Atomic number:

1. H	2. He	3. Li	4. Be	5. B	6. C	7. N	8. O	9. F	10. Ne
11. Na	12. Mg	13. Al	14. Si	15. P	16. S	17. Cl	18. Ar	19. K	20. Ca
21. Sc	22. Ti	23. V	24. Cr	25. Mn	26. Fe	27. Co	28. Ni	29. Cu	30. Zn
31. Ga	32. Ge	33. As	34. Se	35. Br	36. Kr	37. Rb	38. Sr	39. Y	40. Zr
41. Nb	42. Mo	43. Tc	44. Ru	45. Rh	46. Pd	47. Ag	48. Cd	49. In	50. Sn
51. Sb	52. Te	53. I	54. Xe	55. Cs	56. Ba	57. La	58. Ce	59. Pr	60. Nd
61. Pm	62. Sm	63. Eu	64. Gd	65. Tb	66. Dy	67. Ho	68. Er	69. Tm	70. Yb
71. Lu	72. Hf	73. Ta	74. W	75. Re	76. Os	77. Ir	78. Pt	79. Au	80. Hg
81. Tl	82. Pb	83. Bi	84. Po	85. At	86. Tn	87. Fr	88. Ra	89. Ac	90. Th
91. Pa	92. U	93. Np	94. Pu	95. Am	96. Cm	97. Bk	98. Cf		

Valence state:

-2:-2e -1:-e 0:0 1:+e 2:+2e 3:+3e 4:+4e 5:+5e 6:+6e

30 2 ←第2成分であるZinciteを構成する化学種を入力します。

ここでは、化学種 Zn^{2+} を入力するので、30. Zn と 2:+2e を “30 2” と指定します。なお、化学種 O^{2-} はすでに入力しているので、再度入力する必要はありません。

Input atomic number and valence state (Input 0, 0 to finish).

Atomic number:

1. H	2. He	3. Li	4. Be	5. B	6. C	7. N	8. O	9. F	10. Ne
11. Na	12. Mg	13. Al	14. Si	15. P	16. S	17. Cl	18. Ar	19. K	20. Ca
21. Sc	22. Ti	23. V	24. Cr	25. Mn	26. Fe	27. Co	28. Ni	29. Cu	30. Zn
31. Ga	32. Ge	33. As	34. Se	35. Br	36. Kr	37. Rb	38. Sr	39. Y	40. Zr
41. Nb	42. Mo	43. Tc	44. Ru	45. Rh	46. Pd	47. Ag	48. Cd	49. In	50. Sn
51. Sb	52. Te	53. I	54. Xe	55. Cs	56. Ba	57. La	58. Ce	59. Pr	60. Nd
61. Pm	62. Sm	63. Eu	64. Gd	65. Tb	66. Dy	67. Ho	68. Er	69. Tm	70. Yb
71. Lu	72. Hf	73. Ta	74. W	75. Re	76. Os	77. Ir	78. Pt	79. Au	80. Hg
81. Tl	82. Pb	83. Bi	84. Po	85. At	86. Tn	87. Fr	88. Ra	89. Ac	90. Th
91. Pa	92. U	93. Np	94. Pu	95. Am	96. Cm	97. Bk	98. Cf		

Valence state:

-2:-2e -1:-e 0:0 1:+e 2:+2e 3:+3e 4:+4e 5:+5e 6:+6e

22 4 ←第3成分であるAnataseを構成する化学種を入力します。

ここでは、化学種 Ti^{4+} を入力するので、22. Ti と 4:+4e を “22 4” と指定します。

Input atomic number and valence state (Input 0, 0 to finish).

Atomic number:

1. H	2. He	3. Li	4. Be	5. B	6. C	7. N	8. O	9. F	10. Ne
11. Na	12. Mg	13. Al	14. Si	15. P	16. S	17. Cl	18. Ar	19. K	20. Ca
21. Sc	22. Ti	23. V	24. Cr	25. Mn	26. Fe	27. Co	28. Ni	29. Cu	30. Zn

31. Ga	32. Ge	33. As	34. Se	35. Br	36. Kr	37. Rb	38. Sr	39. Y	40. Zr
41. Nb	42. Mo	43. Tc	44. Ru	45. Rh	46. Pd	47. Ag	48. Cd	49. In	50. Sn
51. Sb	52. Te	53. I	54. Xe	55. Cs	56. Ba	57. La	58. Ce	59. Pr	60. Nd
61. Pm	62. Sm	63. Eu	64. Gd	65. Tb	66. Dy	67. Ho	68. Er	69. Tm	70. Yb
71. Lu	72. Hf	73. Ta	74. W	75. Re	76. Os	77. Ir	78. Pt	79. Au	80. Hg
81. Tl	82. Pb	83. Bi	84. Po	85. At	86. Tn	87. Fr	88. Ra	89. Ac	90. Th
91. Pa	92. U	93. Np	94. Pu	95. Am	96. Cm	97. Bk	98. Cf		

Valence state:

-2:-2e -1:-e 0:0 1:+e 2:+2e 3:+3e 4:+4e 5:+5e 6:+6e

13 3 ← 第4成分として内部標準物質のCorundumを構成する化学種を入力します。

ここでは、化学種 Al^{3+} を入力するので、13.Al と 3:+3e を “13 3” と指定します。

Input atomic number and valence state (Input 0, 0 to finish).

Atomic number:

1. H	2. He	3. Li	4. Be	5. B	6. C	7. N	8. O	9. F	10. Ne
11. Na	12. Mg	13. Al	14. Si	15. P	16. S	17. Cl	18. Ar	19. K	20. Ca
21. Sc	22. Ti	23. V	24. Cr	25. Mn	26. Fe	27. Co	28. Ni	29. Cu	30. Zn
31. Ga	32. Ge	33. As	34. Se	35. Br	36. Kr	37. Rb	38. Sr	39. Y	40. Zr
41. Nb	42. Mo	43. Tc	44. Ru	45. Rh	46. Pd	47. Ag	48. Cd	49. In	50. Sn
51. Sb	52. Te	53. I	54. Xe	55. Cs	56. Ba	57. La	58. Ce	59. Pr	60. Nd
61. Pm	62. Sm	63. Eu	64. Gd	65. Tb	66. Dy	67. Ho	68. Er	69. Tm	70. Yb
71. Lu	72. Hf	73. Ta	74. W	75. Re	76. Os	77. Ir	78. Pt	79. Au	80. Hg
81. Tl	82. Pb	83. Bi	84. Po	85. At	86. Tn	87. Fr	88. Ra	89. Ac	90. Th
91. Pa	92. U	93. Np	94. Pu	95. Am	96. Cm	97. Bk	98. Cf		

Valence state:

-2:-2e -1:-e 0:0 1:+e 2:+2e 3:+3e 4:+4e 5:+5e 6:+6e

0 0 ← 全ての化学種を入力したので、“0 0” と入力して化学種の入力を終了します。

For dispersion corrections, input number.

0: non appl., 1:Cu, 2:Cr, 3:Fe, 4:Mo, 5:Ag.

1 ←異常分散効果を考慮します。入射X線がCuK α なので、1を選択します。

Filename for print output = /tmp/asft

Filename for table output = /tmp/ftable

↑

※プログラム ASFT の操作記録が¥tmp¥asft (このファイルには拡張子はありません) にテキストファイルとして出力されます。(このファイルは特に必要ではありません。)

また、プログラム ASFT の実行により原子散乱因子のデータファイルが¥tmp¥ftable (このファイルには拡張子はありません) にテキストファイルとして出力されます。このファイルはリートベルト解析に必要です。

Before starting computer program ATOMS or PFLS,

you need to change "/tmp/ftable" to "ftable.d".

Stop - Program terminated.

c:¥xbin>