

平成20年6月12日

## 粉末パターンフィッティング法の解析プログラムのインストールと実行について

### はじめに

ここで紹介する全粉末パターンフィッティング法の解析プログラムは、元名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センターの虎谷秀穂教授（現在は理学電機株式会社X線研究所長）によって開発されました。開発されたプログラムは、（１）結晶構造モデルを用いることなしに、重なった回折線を個々のブラック反射に分解するパターン分解法であるプロファイルフィッティング法（プログラム名：PRO-FIT）と Pawley 法（あるいは Whole-Powder-Pattern decomposition 法）（プログラム名：WPPF）、及び（２）回折パターン全体のデータを用いて構造パラメータを精密化する Rietveld 法（プログラム名：PFLS）です。ここで、パターン分解法のプロファイルフィッティング法は、回折図形の一部に適用され、Pawley 法はパターン全体に対して用いられるものです。

これらのソフトウェアは、名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センターのホームページにて公開（<http://www.crl.nitech.ac.jp/~toraya/index-j.html>）されておりますので、どなたでも利用が可能となっています。

なお、これらの解析ソフトウェアは、マイクロソフト社の Windows 上で動作します。プログラム操作上の利便性から、WindowsNT/XP/Vista 系での利用を強くおすすめします。

### 1. 解析ソフトウェアのインストール方法

#### （１）ソフトウェアのダウンロード

①インターネットに接続できるコンピュータにて、インターネットブラウザ「Internet Explorer」等で、次のアドレスにアクセスしてください。

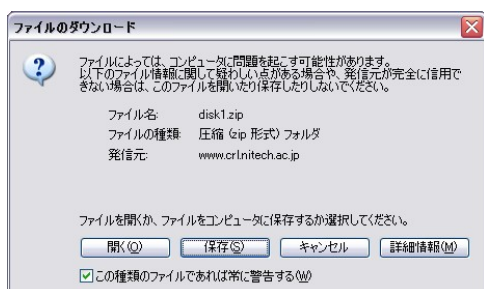
<http://www.crl.nitech.ac.jp/~toraya/software/index-j.html>



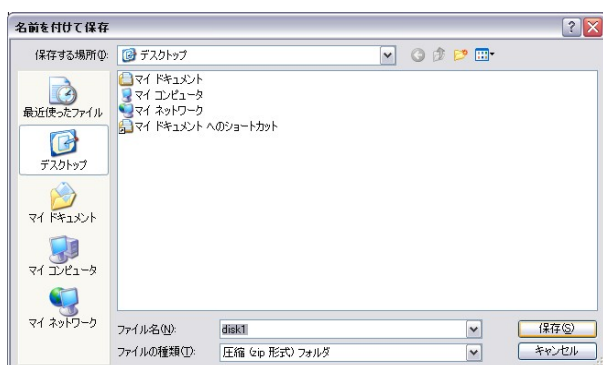
【画面1】ソフトウェアが公開されているホームページの画面

② 次に、「画面 1」にある 1. PRO-FIT, WPPF および関連プログラム (DISP, PROFILE, REFLEX, UNITCELL) の中の 1-1 disk1 (ZIPファイル)、1-2 disk2 (ZIPファイル)、1-3 readme (TXTファイル)、及び 1-4 マニュアル (PDFファイル) をダウンロードします。続いて、2. PFLS および関連プログラムの中の 2-1 ATOMS, PFLSX, SENTE (ZIPファイル) をダウンロードします。

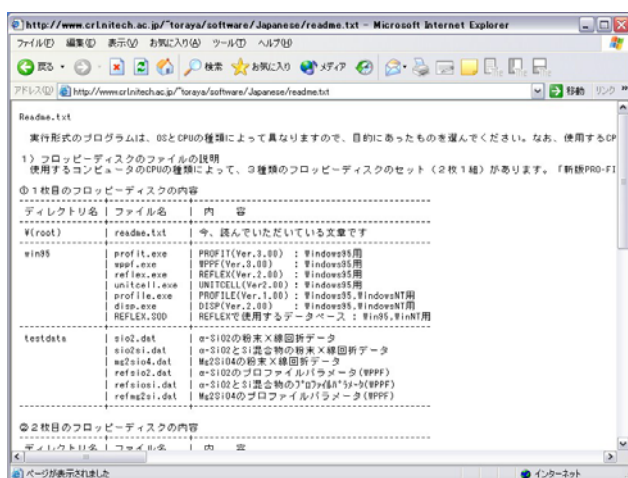
ここで、1-1 disk1 (ZIPファイル)、1-2 disk2 (ZIPファイル) と 2-1 ATOMS, PFLSX, SENTE (ZIPファイル) は、左クリックして適当な場所 (例えば、デスクトップ) へ保存してください。



【画面 2】ダウンロード画面：「保存(S)」をクリックします。



【画面 3】ファイル保存画面：これは、デスクトップへ保存する場合の例です。



【画面 4】readme (TXTファイル) の表示

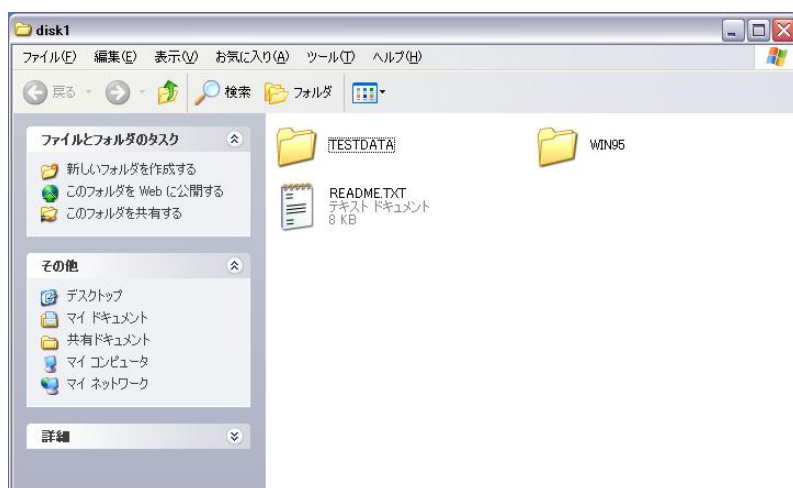
1-3 readme (TXTファイル) の場合は、「画面 4」のように内容が表示されます。印刷す

る場合は、一度テキストファイルを保存して、Word等でページ設定を行ってから印刷すると読みやすいです。なお、1-1 disk1 (ZIPファイル)を解凍すると同じ内容のものが readme.txtファイルとして得られます。1-4 マニュアル (PDFファイル)の場合、Adobe社の Acrobat Readerで印刷等が可能です。

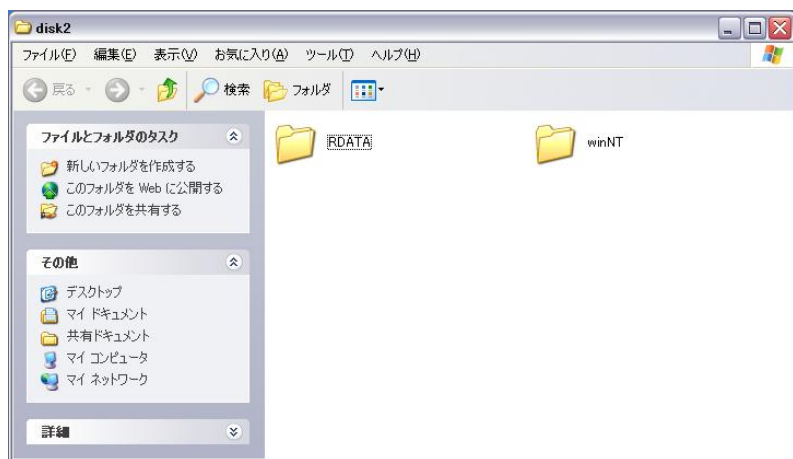
## (2) ソフトウェアのインストール

①ダウンロードした ZIP 形式で圧縮されているファイル disk1.zip、disk2.zip、及び PFLS.zip を ZIP 形式が解凍できるソフトで解凍してください。ここで、disk1.zip と disk2.zip は、disk1 (または disk2) に解凍されます(「画面 5」と「画面 6」参照)。PFLS.zip は PFLS に解凍されます(「画面 7」参照)。

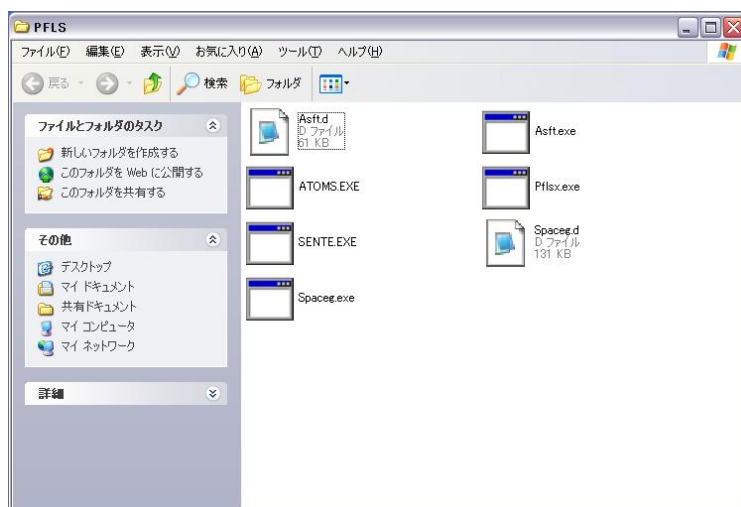
※注意：WindowsXP/Vista には標準で、ZIP ファイルを解凍する機能があります。



【画面 5】disk1 を解凍した場合



【画面 6】disk2 を解凍した場合



## 【画面 7】PFLS を解凍した場合

### ②解凍した各ファイルの説明

実行形式のプログラムは、使用する OS の種類 (Windows95/98/Me 系と WindowsNT/XP/Vista 系) によって異なりますので、目的にあったものを選んでください。なお、OS による違いは、テキスト画面のスクロール機能がない Windows95/98/Me 系でプログラムを実行するときに、25 行以上のテキスト情報を表示する場合に問題が起こらないようにソースコードの一部を修正してあるかの違いだけです。プログラムの実行は Windows95/98/Me 系 (下記の表では Windows95 と表記) と WindowsNT/XP/Vista 系 (下記の表では WindowsNT と表記) のどちらの OS でも基本的に可能です。(ただし、PFLS 関連のソフトウェアは、Windows95/98/Me での使用を想定しておりませんので、テキスト表示に問題があります。)

### ◎disk1.zip の内容

ディレクトリ名	ファイル名	内 容
¥ (root)	readme.txt	
Win95	profit.exe	PROFIT (Ver. 3.00) : Windows95 用
	wppf.exe	WPPF (Ver. 3.00) : Windows95 用
	reflex.exe	REFLEX (Ver. 2.00) : Windows95 用
	unitcell.exe	UNITCELL (Ver2.00) : Windows95 用
	profile.exe	PROFILE (Ver. 1.00) : Windows95, WindowsNT 用
	disp.exe	DISP (Ver. 2.00) : Windows95, WindowsNT 用
	REFLEX.SOD	REFLEX で使用するデータベース : Win95, WinNT 用
testdata	sio2.dat	$\alpha$ -SiO <sub>2</sub> の X 線粉末回折データ
	sio2si.dat	$\alpha$ -SiO <sub>2</sub> と Si 混合物の X 線粉末回折データ
	mg2sio4.dat	Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub> の X 線粉末回折データ
	refsios.dat	$\alpha$ -SiO <sub>2</sub> のプロファイルパラメータ (WPPF 用)
	refmg2si.dat	Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub> のプロファイルパラメータ (WPPF 用)

◎disk2.zipの内容

ディレクトリ名	ファイル名	内 容
winNT	profit.exe wppf.exe reflex.exe unitcell.exe	PROFIT(Ver. 3.00) : WindowsNT 用 WPPF(Ver. 3.00) : WindowsNT 用 REFLEX(Ver. 2.00) : WindowsNT 用 UNITCELL(Ver2.00) : WindowsNT 用
rdata	prosiosi.txt wppsio2.txt wppsiosi.txt wppmg2si.txt rfnsio2.dat rfnsiosi.dat rfnmg2si.dat	$\alpha$ -SiO <sub>2</sub> の PROFIT による解析結果 $\alpha$ -SiO <sub>2</sub> の WPPF による解析結果 $\alpha$ -SiO <sub>2</sub> と Si 混合物の WPPF による解析結果 Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub> の WPPF による解析結果 $\alpha$ -SiO <sub>2</sub> の WPPF による解析結果(プロフィールパラメータ) $\alpha$ -SiO <sub>2</sub> と Si 混合物の WPPF による解析結果( " ) Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub> の WPPF による解析結果(プロフィールパラメータ)

◎pfls.zipの内容

ディレクトリ名	ファイル名	内 容
¥(root)	pflsx.exe atoms.exe sente.exe asft.exe spaceg.exe asft.d spaceg.d	PFLS(Ver. 5.00) : WindowsNT 用 ATOMS(Ver. 1.02) : WindowsNT 用 SENTE(Ver. 1.01) : WindowsNT 用 ASFT(Ver. 1.02) : WindowsNT 用 SPACEG(Ver. 1.02) : WindowsNT 用 プログラム ASFT 用のデータ プログラム SPACEG 用のデータ

※PFLS とその関連ソフトウェアは、WindowsNT/XP/Vista 系での動作が前提となります。

③プログラムを実行するカレントドライブに TMP ディレクトリを作成してください。各プログラムを実行した場合の結果は、この TMP ディレクトリに記録されます。(例えば、PROFIT を実行すると、解析の結果が¥TMP ディレクトリに profit.txt として作成されます。)

(例) 一般的な DOS/V 仕様機の場合、ドライブ C のハードディスクがカレントドライブになりますので、C:¥TMP を作成してください。

・解凍したファイルから必要な実行プログラム等をハードディスクにコピーしてください。

(例) 一般的な DOS/V 仕様機の場合、ドライブ C のハードディスクがカレントドライブになりますので、例えば C:¥XBIN を作成した後、このディレクトリ (¥XBIN) に解凍したプログラムファイルをコピーしてください。そして、プログラムの実行は C:¥XBIN から行ってください。

例えば、Windows95/98/Me系でプログラムを実行する場合、コピーするファイルは、disk1 を解凍した時のディレクトリ ¥win95 の中の全てのファイルです。それらのファイルをハードディスクへコピー (例えば、ディレクトリ ¥XBIN へコピー) してください。また、

WindowsNT/XP/Vista系でプログラムを実行する場合、コピーするファイルは、disk1 を解凍した時のディレクトリ¥win95 中の「profile.exe」、「disp.exe」、「REFLEX.SOD」ファイルとdisk2 を解凍した時のディレクトリ¥winNT中の全てのファイルです。また、pfls.zipを解凍した時にできる7つのファイルもコピーしてください。

## 2. ソフトウェアの実行について

### ①Windows95/98/Me 系の場合の実行方法

画面左下のスタートボタンをクリックしプログラムを選びます。その中のMS-DOS プロンプトを実行し、MS-DOS プロンプトを起動します。このMS-DOS プロンプトから実行プログラムを起動します。当然ながら、OS がマルチタスク対応ですので、複数のMS-DOS プロンプトを起動できます。よって、例えばPROFITとDISPを同時に実行できます。

(例) 一般的なDOS/V仕様機の場合で、ドライブCのハードディスクにC:¥XBINを作成して添付のフロッピーディスクのプログラムファイルをコピーした場合について:MS-DOS プロンプトを起動した場合、C:¥WINDOWSがカレントディレクトリになりますので、ディレクトリをC:¥XBINに変更します。(cd ¥xbinで変更できます。)それから、各プログラムを実行してください。(例えば、C:¥XBIN>profit でPROFITが実行できます。)

なお、MS-DOS プロンプト状態でマウスが使用できなくなった場合は、Alt キー (NEC PC-9800の場合は、GRAPH キー) とスペースキーを同時に押して、MS-DOS プロンプトのプロパティの中のタブ:「その他」の中のマウスポインタを表示しないのチェックをはずしてください。(詳細は、Windows95のマニュアル等を参照してください。)

### ③Windows NT/XP/Vista 系の場合の実行方法

(イ) WindowsNTの場合、プログラムマネージャーからメインフォルダの中のコマンドプロンプトをクリックして、コマンドプロンプトを起動します。このコマンドプロンプトから実行プログラムを起動します。(ロ) WindowsXpの場合、画面左下のスタートボタンをクリックしプログラムを選びます。その中のアクセサリを選び、さらにその中のコマンドプロンプトを起動します。このコマンドプロンプトから実行プログラムを起動します。(ハ) WindowsVistaの場合、画面左下のスタートボタンをクリックしすべてのプログラムを選びます。その中のアクセサリを選び、さらにその中のコマンドプロンプトを起動します。このコマンドプロンプトから実行プログラムを起動します。

当然ながら、OS がマルチタスク対応ですので、複数のコマンドプロンプトを起動できます。よって、例えばPROFITとDISPを同時に実行できます。

また、25行以上のテキスト情報をスクロールバーを使って操作する場合は、(イ) WindowsNTの場合は、コマンドプロンプトのプロパティの中のタブ:「画面のサイズと位置」の中の「高さ」の項目を変更するか、プログラムマネージャーからメインフォルダの中のコントロールパネルをクリックして、その中のコンソールをクリックしてコンソールウィンドウのプロパティ設定で、同様の変更をあらかじめ行っておいてください。(ロ)

WindowsXp と (ハ) WindowsVista の場合は、画面左下のスタートボタンをクリックし (すべての) プログラムを選びます。その中のアクセサリを選び、さらにその中のコマンドプロンプトを右クリックして、プロパティを選択します。プロパティ画面の「レイアウト」タブを選択して、画面のバッファサイズの「高さ」の項目を変更してください。

### 3. プログラムの詳細について

1. (1) でダウンロードした1-4 マニュアル (PDFファイル) 「改定版PRO-FIT、WPPF および関連プログラムの使用法」にPFLS以外の各プログラムに関する解説が記載されていますので、参照してください。また、テストデータを用いて各プログラムのトレーニングを行ってください。

(三重県工業研究所窯業研究室 林 作成)