

プログラム PFLS (試料 1) の実行例

Microsoft Windows XP [Version 5.1.2600]

(C) Copyright 1985-2001 Microsoft Corp.

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.

110506.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 = 5501

File name of profile intensity data: 110506.dat

TiO2

2theta-s	2theta-e	Step	Time	Nobs	Lambda1	Lambda2	I2/I1
----------	----------	------	------	------	---------	---------	-------

20.000 130.000 0.020 2.0 5501 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。

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

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

Df" : 0.189 0.047

Df"" : 1.807 0.032

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: 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: P42/mnm (No.136) 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	0.5000000	0.5000000	0.5000000
4	1	0	0	0	-1	0	0	0	-1	0.5000000	0.5000000	0.5000000
5	0	1	0	1	0	0	0	0	1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
6	0	1	0	1	0	0	0	0	-1	0.0000000	0.0000000	0.0000000
7	0	1	0	-1	0	0	0	0	1	0.5000000	0.5000000	0.5000000
8	0	1	0	-1	0	0	0	0	-1	0.5000000	0.5000000	0.5000000

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

Select a file name for profile parameters

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

- 0 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 を指定します。PFLS を実行する前に REFLEX で作成した reflexa.dat を reflexa.d に変更しておく必要があります。
- なお、reflexa.dat のファイル名を変更していない場合は、読み込むデータファイル名を指定する 3 を選択します。ご面倒ですが、3 を選択して、ファイル名 reflexa.dat を入力してください。

Profile parameters were read from a file: reflexa.d

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 = 20.000 to 130.000

The 2theta-range of reflection data = 10.000 to 120.000

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

20

120 解析 2 範囲を指定します。ここでは、例えば、2 = 20 ~ 120 ° と入力しています。

2theta-L	2theta-H	Nobs	Y(max) at 2theta	Y(min) at 2theta
20.000	120.000	5001	81654. 25.380	40. 87.940

----- 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
2.9	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

! 24 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					
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					
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

L.S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp"	Re	GOF
Before cyl	1	5001	3845	8	0.89561	3.22416	0.93007	0.04075	79.121

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	34	1.00000	0.55729	0.44271	0.47143	0.28417

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	34	1.00000	3.10462	-2.10462	2.23397	0.65410

Change of l.s. parameters in cycle 1

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.000000	0.114904	0.114904	0.027940 >5%
		b1	0.000000	-0.037665	-0.037665	0.110422 >5%
		b2	0.000000	-0.067330	-0.067330	0.186714 >5%
		b3	0.000000	-0.050620	-0.050620	0.462868 >5%
		b4	0.000000	0.214972	0.214972	0.222213 >5%
		b5	0.000000	0.076803	0.076803	0.428023 >5%
1	Scale	1.000000	0.114367	1.114367	0.074673 >5%	
2	Scale	1.000000	-0.984656	0.015344	0.014194 >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	9	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					
pp	11	11	12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	13	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	5001	3186	13	0.48455	0.55872	0.58809	0.04073	13.718

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	0.61684	0.38316	0.38340	0.20041

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	20	1.00000	0.65029	0.34971	0.44032	0.27127

Change of l.s. parameters in cycle 2

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.114904	-0.000970	0.113934	0.004844 >5%
		b1	-0.037665	-0.000752	-0.038417	0.019146
		b2	-0.067330	0.005630	-0.061700	0.032373 >5%
		b3	-0.050620	-0.002620	-0.053240	0.080251
		b4	0.214972	-0.009686	0.205286	0.038530 >5%
		b5	0.076803	0.000376	0.077179	0.074208
		t0	0.000000	0.028599	0.028599	0.001588 >5%
1		a	3.784000	0.000264	3.784264	0.000119 >5%
1		b	3.784000	0.000264	3.784264	0.000000
1		c	9.515000	0.000773	9.515773	0.000331 >5%
1		Scale	1.114367	0.125205	1.239571	0.013608 >5%
2		a	4.593000	-0.000203	4.592797	0.001704 >5%
2		b	4.593000	-0.000203	4.592797	0.000000
2		c	2.959000	-0.001106	2.957894	0.002015 >5%
2		Scale	0.015344	0.000574	0.015918	0.002491 >5%

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	9	0	0	0	10	11	12	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	13	0															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						
pp	14	14	15	0	0	0	16	17	18	0	0	0	0	0	0	0	0
tp	19	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	5001	3255	19	0.38451	0.45400	0.46607	0.04070	11.154

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	0.68490	0.31510	0.31538	0.15887

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	20	1.00000	0.72427	0.27573	0.36803	0.21811

Change of l.s. parameters in cycle 3

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.113934	-0.015347	0.098586	0.003952 >5%
		b1	-0.038417	0.013738	-0.024679	0.015578 >5%
		b2	-0.061700	0.032410	-0.029290	0.026333 >5%
		b3	-0.053240	-0.031627	-0.084867	0.065292 >5%
		b4	0.205286	-0.063314	0.141972	0.031362 >5%
		b5	0.077179	0.018698	0.095877	0.060373 >5%
		t0	0.028599	0.036256	0.064855	0.001307 >5%
1		a	3.784264	0.000628	3.784891	0.000093 >5%
1		b	3.784264	0.000628	3.784891	0.000000
1		c	9.515773	0.001614	9.517386	0.000259 >5%
1		U	0.010800	0.016515	0.027315	0.002463 >5%
1		V	-0.003700	-0.010734	-0.014434	0.003217 >5%
1		W	0.008000	0.011849	0.019849	0.000894 >5%
1		Scale	1.239571	0.441086	1.680657	0.013057 >5%
2		a	4.592797	0.000625	4.593422	0.001392 >5%
2		b	4.592797	0.000625	4.593422	0.000000

2	c	2.957894	0.000642	2.958536	0.001661	>5%
2	U	0.010800	-0.007224	0.003576	0.076832	>5%
2	V	-0.003700	0.005176	0.001476	0.081010	>5%
2	W	0.008000	0.010069	0.018069	0.018720	>5%
2	Scale	0.015918	0.005722	0.021639	0.002518	>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	9	0	0	0	10	11	12	0	0	0	0	0	0	0
tp	13	0														
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0					
pp	14	14	15	0	0	0	16	17	18	0	0	0	0	0	0	0
tp	19	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	5001	3818	19	0.16053	0.20990	0.19084	0.04070	5.157

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	0.91163	0.08837	0.08971	0.03655

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	25	1.00000	1.09490-0.09490	0.19823	0.15910	

Change of l.s. parameters in cycle 4

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.098586	-0.010303	0.088284	0.001840 >5%
		b1	-0.024679	0.009952	-0.014726	0.007216 >5%
		b2	-0.029290	0.021226	-0.008064	0.012188 >5%
		b3	-0.084867	-0.020695	-0.105562	0.030236 >5%
		b4	0.141972	-0.036503	0.105469	0.014522 >5%

	b5	0.095877	0.005736	0.101612	0.027956	>5%
	t0	0.064855	0.023584	0.088439	0.000708	>5%
1	a	3.784891	0.000406	3.785298	0.000054	>5%
1	b	3.784891	0.000406	3.785298	0.000000	
1	c	9.517386	0.000509	9.517895	0.000150	>5%
1	U	0.027315	0.013970	0.041285	0.002151	>5%
1	V	-0.014434	-0.012760	-0.027194	0.002833	>5%
1	W	0.019849	0.007276	0.027125	0.000763	>5%
1	Scale	1.680657	0.181649	1.862306	0.006396	>5%
2	a	4.593422	0.001715	4.595137	0.000757	>5%
2	b	4.593422	0.001715	4.595137	0.000000	
2	c	2.958536	0.001016	2.959552	0.000902	>5%
2	U	0.003576	0.016732	0.020308	0.044507	>5%
2	V	0.001476	-0.020783	-0.019307	0.057823	>5%
2	W	0.018069	0.004116	0.022185	0.014456	>5%
2	Scale	0.021639	-0.000978	0.020661	0.001315	>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	9	0	0	0	10	11	12	13	14	15	0	0	0	0
tp	16	0														
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0					
pp	17	17	18	0	0	0	19	20	21	13	14	15	0	0	0	0
tp	22	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	5	5001	3941	22	0.08074	0.12309	0.09470	0.04069	3.025

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	0.99667	0.00333	0.04319	0.02308

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.08239-0.08239	0.15361	0.12735	

Change of l.s. parameters in cycle 5

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.088284	-0.000687	0.087596	0.001083 >5%
		b1	-0.014726	-0.001867	-0.016594	0.004240 >5%
		b2	-0.008064	-0.003371	-0.011435	0.007157 >5%
		b3	-0.105562	0.013612	-0.091950	0.017763 >5%
		b4	0.105469	0.007590	0.113059	0.008533 >5%
		b5	0.101612	-0.022103	0.079509	0.016429 >5%
		t0	0.088439	-0.020059	0.068380	0.000825 >5%
1		a	3.785298	-0.000647	3.784651	0.000056 >5%
1		b	3.785298	-0.000647	3.784651	0.000000
1		c	9.517895	-0.001822	9.516072	0.000144 >5%
1		U	0.041285	0.004245	0.045530	0.001568 >5%
1		V	-0.027194	-0.004874	-0.032068	0.002021 >5%
1		W	0.027125	0.000846	0.027971	0.000533 >5%
1		a0	1.180000	0.005186	1.185186	0.019784 >5%
1		a1	-0.110000	0.417684	0.307684	0.044312 >5%
1		a2	-0.028000	-0.027530	-0.055530	0.006524 >5%
1		Scale	1.862306	0.012255	1.874561	0.003771 >5%
2		a	4.595137	-0.001252	4.593884	0.000460 >5%
2		b	4.595137	-0.001252	4.593884	0.000000
2		c	2.959552	-0.000540	2.959012	0.000548 >5%
2		U	0.020308	0.002157	0.022466	0.031909 >5%
2		V	-0.019307	-0.005034	-0.024341	0.037728 >5%
2		W	0.022185	-0.002059	0.020126	0.009261 >5%
2		a0	1.180000	0.005186	1.185186	0.000000
2		a1	-0.110000	0.417684	0.307684	0.000000
2		a2	-0.028000	-0.027530	-0.055530	0.000000
2		Scale	0.020661	-0.001369	0.019292	0.000771 >5%

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

Parameter selection in cycle 6: nr = 10

gp	1	2	3	4	5	6	7	0	0	0	0						
pp	8	8	9	0	0	0	10	11	12	13	14	15	16	0	17	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	13	14	15	16	0	17	0	0
tp	24	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	6	5001	3932	24	0.08155	0.11541	0.09559	0.04068	2.837

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00236	-0.00236	0.04269	0.02352

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.08151	-0.08151	0.11775	0.10175

Change of l.s. parameters in cycle 6

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.087596	-0.000829	0.086768	0.001028 >5%
		b1	-0.016594	0.001441	-0.015153	0.003987 >5%
		b2	-0.011435	0.002295	-0.009141	0.006724 >5%
		b3	-0.091950	-0.001850	-0.093801	0.016669 >5%
		b4	0.113059	-0.003413	0.109646	0.008026 >5%
		b5	0.079509	0.000539	0.080049	0.015412
		t0	0.068380	0.011212	0.079592	0.001009 >5%
1		a	3.784651	0.000143	3.784794	0.000052 >5%
1		b	3.784651	0.000143	3.784794	0.000000
1		c	9.516072	0.000322	9.516395	0.000131 >5%

1	U	0.045530	0.000353	0.045883	0.001499	>5%
1	V	-0.032068	0.000065	-0.032003	0.001898	
1	W	0.027971	-0.000750	0.027221	0.000530	>5%
1	a0	1.185186	0.193127	1.378313	0.023274	>5%
1	a1	0.307684	-0.160681	0.147003	0.038427	>5%
1	a2	-0.055530	0.010442	-0.045088	0.005499	>5%
1	e/mL0	0.550000	-0.088237	0.461763	0.008774	>5%
1	e/mH0	0.550000	0.146283	0.696283	0.010474	>5%
1	Scale	1.874561	0.003434	1.877994	0.003604	>5%
2	a	4.593884	0.000203	4.594087	0.000398	>5%
2	b	4.593884	0.000203	4.594087	0.000000	
2	c	2.959012	0.000066	2.959079	0.000473	>5%
2	U	0.022466	-0.012999	0.009466	0.024909	>5%
2	V	-0.024341	0.018362	-0.005979	0.029009	>5%
2	W	0.020126	-0.005840	0.014287	0.007372	>5%
2	a0	1.185186	0.193127	1.378313	0.000000	
2	a1	0.307684	-0.160681	0.147003	0.000000	
2	a2	-0.055530	0.010442	-0.045088	0.000000	
2	e/mL0	0.550000	-0.088237	0.461763	0.000000	
2	e/mH0	0.550000	0.146283	0.696283	0.000000	
2	Scale	0.019292	-0.000520	0.018773	0.000701	>5%

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

Parameter selection in cycle 7: nr = 9

gp	1	2	3	4	5	6	7	0	0	0	0						
pp	8	8	9	0	0	0	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	0
tp	20	0															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						
pp	21	21	22	0	0	0	23	24	25	13	14	15	16	17	18	19	0
tp	26	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 7 5001 3939 26 0.07422 0.10789 0.08692 0.04068 2.652

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00307	-0.00307	0.04248	0.02325

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.06162	-0.06162	0.12452	0.10835

Change of l.s. parameters in cycle 7

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.086768	-0.002056	0.084712	0.000971 >5%
		b1	-0.015153	0.001382	-0.013770	0.003734 >5%
		b2	-0.009141	0.006839	-0.002301	0.006312 >5%
		b3	-0.093801	-0.006633	-0.100433	0.015611 >5%
		b4	0.109646	-0.005035	0.104611	0.007537 >5%
		b5	0.080049	-0.007616	0.072433	0.014441 >5%
		t0	0.079592	0.010027	0.089619	0.001280 >5%
1		a	3.784794	0.000605	3.785398	0.000078 >5%
1		b	3.784794	0.000605	3.785398	0.000000
1		c	9.516395	0.001392	9.517787	0.000187 >5%
1		U	0.045883	-0.000369	0.045514	0.001397 >5%
1		V	-0.032003	-0.009139	-0.041142	0.001793 >5%
1		W	0.027221	0.004461	0.031682	0.000546 >5%
1		a0	1.378313	-0.230034	1.148279	0.040345 >5%
1		a1	0.147003	-0.586334	-0.439331	0.071739 >5%
1		a2	-0.045088	0.061151	0.016063	0.008927 >5%
1		e/mL0	0.461763	-0.268413	0.193350	0.013614 >5%
1		e/mL1	0.000000	0.005591	0.005591	0.000275 >5%
1		e/mH0	0.696283	0.071908	0.768191	0.029588 >5%
1		e/mH1	0.000000	-0.000547	-0.000547	0.000508 >5%
1		Scale	1.877994	0.009082	1.887077	0.003410 >5%
2		a	4.594087	0.000807	4.594894	0.000381 >5%
2		b	4.594087	0.000807	4.594894	0.000000
2		c	2.959079	0.000430	2.959509	0.000446 >5%

2	U	0.009466	0.006042	0.015509	0.020674	>5%
2	V	-0.005979	-0.012786	-0.018765	0.024875	>5%
2	W	0.014287	0.003567	0.017853	0.006228	>5%
2	a0	1.378313	-0.230034	1.148279	0.000000	
2	a1	0.147003	-0.586334	-0.439331	0.000000	
2	a2	-0.045088	0.061151	0.016063	0.000000	
2	e/mL0	0.461763	-0.268413	0.193350	0.000000	
2	e/mL1	0.000000	0.005591	0.005591	0.000000	
2	e/mH0	0.696283	0.071908	0.768191	0.000000	
2	e/mH1	0.000000	-0.000547	-0.000547	0.000000	
2	Scale	0.018773	-0.000589	0.018184	0.000652	>5%

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

Parameter selection in cycle 8: nr = 8

gp	1	2	3	4	5	6	7	0	0	0	0						
pp	8	8	9	0	0	0	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	0
tp	20	0															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						
pp	21	21	22	0	0	0	23	24	25	13	14	15	16	17	18	19	0
tp	26	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	8	5001	3988	26	0.06478	0.09624	0.07573	0.04068	2.366

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00577	-0.00577	0.04027	0.02288

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.06365	-0.06365	0.12179	0.09427

Change of l.s. parameters in cycle 8

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
------	-------	------	-----	--------	-----	--------

	b0	0.084712	-0.000541	0.084171	0.000867 >5%
	b1	-0.013770	0.002201	-0.011570	0.003339 >5%
	b2	-0.002301	-0.000993	-0.003294	0.005631 >5%
	b3	-0.100433	-0.007804	-0.108238	0.013945 >5%
	b4	0.104611	0.005237	0.109847	0.006736 >5%
	b5	0.072433	0.002016	0.074449	0.012900 >5%
	t0	0.089619	0.009732	0.099351	0.001186 >5%
1	a	3.785398	0.000544	3.785942	0.000074 >5%
1	b	3.785398	0.000544	3.785942	0.000000
1	c	9.517787	0.001308	9.519094	0.000183 >5%
1	U	0.045514	0.001815	0.047329	0.001280 >5%
1	V	-0.041142	-0.004538	-0.045680	0.001586 >5%
1	W	0.031682	0.001763	0.033445	0.000486 >5%
1	a0	1.148279	-0.166558	0.981721	0.034275 >5%
1	a1	-0.439331	-0.382084	-0.821415	0.058219 >5%
1	a2	0.016063	0.029378	0.045440	0.006684 >5%
1	e/mL0	0.193350	-0.096698	0.096652	0.011153 >5%
1	e/mL1	0.005591	0.001837	0.007428	0.000271 >5%
1	e/mH0	0.768191	0.169950	0.938141	0.030932 >5%
1	e/mH1	-0.000547	-0.002636	-0.003183	0.000500 >5%
1	Scale	1.887077	-0.001199	1.885877	0.003037 >5%
2	a	4.594894	0.000738	4.595633	0.000339 >5%
2	b	4.594894	0.000738	4.595633	0.000000
2	c	2.959509	0.000380	2.959889	0.000392 >5%
2	U	0.015509	0.003726	0.019235	0.018262 >5%
2	V	-0.018765	-0.005803	-0.024568	0.021724 >5%
2	W	0.017853	0.001928	0.019782	0.005508 >5%
2	a0	1.148279	-0.166558	0.981721	0.000000
2	a1	-0.439331	-0.382084	-0.821415	0.000000
2	a2	0.016063	0.029378	0.045440	0.000000
2	e/mL0	0.193350	-0.096698	0.096652	0.000000
2	e/mL1	0.005591	0.001837	0.007428	0.000000
2	e/mH0	0.768191	0.169950	0.938141	0.000000
2	e/mH1	-0.000547	-0.002636	-0.003183	0.000000

2 Scale 0.018184 0.000013 0.018197 0.000574

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

Parameter selection in cycle 9: nr = 7

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

L.S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp"	Re	GOF
Before cyl	9	5001	3988	27	0.06466	0.09380	0.07560	0.04067	2.306

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00506	-0.00506	0.03928	0.02236

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.06025	-0.06025	0.12251	0.09414

Change of l.s. parameters in cycle 9

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.084171	0.001174	0.085345	0.000854 >5%
		b1	-0.011570	0.003335	-0.008235	0.003271 >5%
		b2	-0.003294	-0.006334	-0.009629	0.005515 >5%
		b3	-0.108238	-0.008624	-0.116862	0.013629 >5%
		b4	0.109847	0.013846	0.123694	0.006651 >5%
		b5	0.074449	0.012934	0.087383	0.012650 >5%
		t0	0.099351	0.004099	0.103450	0.001063 >5%
1		a	3.785942	0.000270	3.786212	0.000065 >5%

1	b	3.785942	0.000270	3.786212	0.000000
1	c	9.519094	0.000684	9.519778	0.000168 >5%
1	U	0.047329	0.001049	0.048378	0.001235 >5%
1	V	-0.045680	-0.001999	-0.047679	0.001541 >5%
1	W	0.033445	0.000823	0.034269	0.000473 >5%
1	a0	0.981721	-0.088364	0.893357	0.026840 >5%
1	a1	-0.821415	-0.091835	-0.913251	0.044017 >5%
1	a2	0.045440	-0.004238	0.041202	0.004979 >5%
1	e/mL0	0.096652	-0.035477	0.061175	0.010294 >5%
1	e/mL1	0.007428	0.000710	0.008138	0.000270 >5%
1	e/mH0	0.938141	0.113564	1.051705	0.033323 >5%
1	e/mH1	-0.003183	-0.002188	-0.005371	0.000498 >5%
1	Scale	1.885877	0.035314	1.921191	0.004459 >5%
1	Temp	0.000000	0.116362	0.116362	0.010827 >5%
2	a	4.595633	0.000327	4.595960	0.000328 >5%
2	b	4.595633	0.000327	4.595960	0.000000
2	c	2.959889	0.000210	2.960099	0.000381 >5%
2	U	0.019235	0.003031	0.022266	0.018237 >5%
2	V	-0.024568	-0.005510	-0.030078	0.021580 >5%
2	W	0.019782	0.002014	0.021795	0.005461 >5%
2	a0	0.981721	-0.088364	0.893357	0.000000
2	a1	-0.821415	-0.091835	-0.913251	0.000000
2	a2	0.045440	-0.004238	0.041202	0.000000
2	e/mL0	0.096652	-0.035477	0.061175	0.000000
2	e/mL1	0.007428	0.000710	0.008138	0.000000
2	e/mH0	0.938141	0.113564	1.051705	0.000000
2	e/mH1	-0.003183	-0.002188	-0.005371	0.000000
2	Scale	0.018197	0.000368	0.018565	0.000559 >5%
2	Temp	0.000000	0.116362	0.116362	0.000000

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

Parameter selection in cycle 10: nr = 6

gp 1 2 3 4 5 6 7 0 0 0 0

pp	8	8	9	0	0	0	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	0
tp	20	21															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						
pp	22	22	23	0	0	0	24	25	26	13	14	15	16	17	18	19	0
tp	27	21															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						

L.S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp"	Re	GOF
Before cyl	10	5001	3961	27	0.06391	0.09187	0.07492	0.04067	2.259

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00447-0.00447	0.03262	0.01964	

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.06868-0.06868	0.12399	0.10043	

Change of l.s. parameters in cycle 10

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.085345	0.000159	0.085504	0.000836 >5%
		b1	-0.008235	0.000605	-0.007630	0.003208 >5%
		b2	-0.009629	-0.000956	-0.010585	0.005403 >5%
		b3	-0.116862	-0.000806	-0.117668	0.013360 >5%
		b4	0.123694	0.002237	0.125931	0.006516 >5%
		b5	0.087383	0.000150	0.087533	0.012394
		t0	0.103450	0.000848	0.104297	0.000958 >5%
1		a	3.786212	0.000061	3.786274	0.000060 >5%
1		b	3.786212	0.000061	3.786274	0.000000
1		c	9.519778	0.000174	9.519953	0.000154 >5%
1		U	0.048378	0.001055	0.049433	0.001208 >5%
1		V	-0.047679	-0.002272	-0.049951	0.001512 >5%
1		W	0.034269	0.000887	0.035155	0.000460 >5%
1		a0	0.893357	-0.020162	0.873195	0.022916 >5%
1		a1	-0.913251	-0.006281	-0.919532	0.036496 >5%
1		a2	0.041202	-0.002332	0.038870	0.004651 >5%

1	e/mL0	0.061175	-0.019288	0.041886	0.009769	>5%
1	e/mL1	0.008138	0.000432	0.008570	0.000268	>5%
1	e/mH0	1.051705	0.001225	1.052930	0.033295	
1	e/mH1	-0.005371	-0.000101	-0.005472	0.000484	>5%
1	Scale	1.921191	0.001552	1.922743	0.004441	>5%
1	Temp	0.116362	0.004985	0.121347	0.010904	>5%
2	a	4.595960	0.000063	4.596023	0.000320	>5%
2	b	4.595960	0.000063	4.596023	0.000000	
2	c	2.960099	0.000056	2.960155	0.000371	>5%
2	U	0.022266	0.001515	0.023781	0.018010	>5%
2	V	-0.030078	-0.002652	-0.032730	0.021344	>5%
2	W	0.021795	0.001008	0.022803	0.005431	>5%
2	a0	0.893357	-0.020162	0.873195	0.000000	
2	a1	-0.913251	-0.006281	-0.919532	0.000000	
2	a2	0.041202	-0.002332	0.038870	0.000000	
2	e/mL0	0.061175	-0.019288	0.041886	0.000000	
2	e/mL1	0.008138	0.000432	0.008570	0.000000	
2	e/mH0	1.051705	0.001225	1.052930	0.000000	
2	e/mH1	-0.005371	-0.000101	-0.005472	0.000000	
2	Scale	0.018565	0.000053	0.018618	0.000555	>5%
2	Temp	0.116362	0.004985	0.121347	0.000000	

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

Parameter selection in cycle 11: nr = 5

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

L.S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp"	Re	GOF
------	------	------	------	------	----	-----	-----	----	-----

Before cyl 11 5001 3961 27 0.06433 0.09173 0.07544 0.04067 2.255

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00470	-0.00470	0.03227	0.01960

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.07284	-0.07284	0.12499	0.10293

Change of l.s. parameters in cycle 11

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.085504	-0.000010	0.085495	0.000835
		b1	-0.007630	0.000218	-0.007411	0.003205 >5%
		b2	-0.010585	-0.000179	-0.010763	0.005396
		b3	-0.117668	-0.000679	-0.118347	0.013342 >5%
		b4	0.125931	0.000639	0.126570	0.006509 >5%
		b5	0.087533	0.000407	0.087939	0.012378
		t0	0.104297	0.000691	0.104989	0.000949 >5%
1		a	3.786274	0.000038	3.786312	0.000059 >5%
1		b	3.786274	0.000038	3.786312	0.000000
1		c	9.519953	0.000099	9.520052	0.000153 >5%
1		U	0.049433	0.000363	0.049796	0.001212 >5%
1		V	-0.049951	-0.000653	-0.050604	0.001514 >5%
1		W	0.035155	0.000221	0.035376	0.000461 >5%
1		a0	0.873195	-0.009992	0.863203	0.022277 >5%
1		a1	-0.919532	-0.017534	-0.937067	0.035263 >5%
1		a2	0.038870	0.000102	0.038972	0.004634
1		e/mL0	0.041886	-0.007766	0.034121	0.009701 >5%
1		e/mL1	0.008570	0.000157	0.008727	0.000269 >5%
1		e/mH0	1.052930	0.013397	1.066327	0.033159 >5%
1		e/mH1	-0.005472	-0.000204	-0.005676	0.000480 >5%
1		Scale	1.922743	0.000259	1.923002	0.004441 >5%
1		Temp	0.121347	0.001267	0.122613	0.010918 >5%
2		a	4.596023	0.000044	4.596066	0.000320 >5%
2		b	4.596023	0.000044	4.596066	0.000000

2	c	2.960155	0.000027	2.960181	0.000371 >5%
2	U	0.023781	0.000996	0.024778	0.018160 >5%
2	V	-0.032730	-0.001268	-0.033998	0.021540 >5%
2	W	0.022803	0.000399	0.023202	0.005499 >5%
2	a0	0.873195	-0.009992	0.863203	0.000000
2	a1	-0.919532	-0.017534	-0.937067	0.000000
2	a2	0.038870	0.000102	0.038972	0.000000
2	e/mL0	0.041886	-0.007766	0.034121	0.000000
2	e/mL1	0.008570	0.000157	0.008727	0.000000
2	e/mH0	1.052930	0.013397	1.066327	0.000000
2	e/mH1	-0.005472	-0.000204	-0.005676	0.000000
2	Scale	0.018618	0.000015	0.018634	0.000555
2	Temp	0.121347	0.001267	0.122613	0.000000

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

Parameter selection in cycle 12: nr = 4

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

L.S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp"	Re	GOF
Before cyl	12	5001	3961	27	0.06444	0.09172	0.07557	0.04067	2.255

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00466	-0.00466	0.03214	0.01954

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.07314	-0.07314	0.12554	0.10378

Change of l.s. parameters in cycle 12

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.085495	-0.000004	0.085490	0.000835
		b1	-0.007411	0.000072	-0.007340	0.003205
		b2	-0.010763	-0.000072	-0.010835	0.005395
		b3	-0.118347	-0.000159	-0.118506	0.013341
		b4	0.126570	0.000238	0.126808	0.006509
		b5	0.087939	0.000026	0.087966	0.012377
		t0	0.104989	0.000169	0.105157	0.000936 >5%
1		a	3.786312	0.000013	3.786325	0.000058 >5%
1		b	3.786312	0.000013	3.786325	0.000000
1		c	9.520052	0.000032	9.520084	0.000151 >5%
1		U	0.049796	0.000148	0.049944	0.001212 >5%
1		V	-0.050604	-0.000317	-0.050921	0.001513 >5%
1		W	0.035376	0.000127	0.035502	0.000461 >5%
1		a0	0.863203	-0.004525	0.858677	0.021886 >5%
1		a1	-0.937067	-0.004036	-0.941102	0.034666 >5%
1		a2	0.038972	0.000107	0.039079	0.004666
1		e/mL0	0.034121	-0.003206	0.030914	0.009657 >5%
1		e/mL1	0.008727	0.000073	0.008800	0.000270 >5%
1		e/mH0	1.066327	0.000537	1.066864	0.033274
1		e/mH1	-0.005676	-0.000025	-0.005702	0.000479 >5%
1		Scale	1.923002	-0.000018	1.922984	0.004442
1		Temp	0.122613	0.000035	0.122648	0.010929
2		a	4.596066	0.000012	4.596079	0.000321
2		b	4.596066	0.000012	4.596079	0.000000
2		c	2.960181	0.000013	2.960194	0.000373
2		U	0.024778	0.000687	0.025465	0.018408
2		V	-0.033998	-0.000873	-0.034871	0.021753
2		W	0.023202	0.000251	0.023453	0.005543
2		a0	0.863203	-0.004525	0.858677	0.000000
2		a1	-0.937067	-0.004036	-0.941102	0.000000
2		a2	0.038972	0.000107	0.039079	0.000000
2		e/mL0	0.034121	-0.003206	0.030914	0.000000

2	e/mL1	0.008727	0.000073	0.008800	0.000000
2	e/mH0	1.066327	0.000537	1.066864	0.000000
2	e/mH1	-0.005676	-0.000025	-0.005702	0.000000
2	Scale	0.018634	0.000003	0.018637	0.000555
2	Temp	0.122613	0.000035	0.122648	0.000000

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

Parameter selection in cycle 13: nr = 3

gp	1	2	3	4	5	6	7	0	0	0	0						
pp	8	8	9	0	0	0	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	0
tp	20	21															
sp	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0						
pp	22	22	23	0	0	0	24	25	26	13	14	15	16	17	18	19	0
tp	27	21															
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	13	5001	3961	27	0.06449	0.09171	0.07564	0.04067	2.255

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00466-0.00466	0.03211	0.01953	

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.07334-0.07334	0.12556	0.10389	

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:\¥XBIN>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 14 -----

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_1 と K_2 線の強度比である I_1 / I_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 1th 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 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 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

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。

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 Ti1

0 0 0 0 0 第1成分の「Anatase の(Ti1)」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 O1

0 0 0 0 0

For 2th component:

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

0 0 0 0 0

For 2th component:

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

0 0 0 0 0

How many cycles do you repeat this selection ?

-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 14: nr = 0

gp 1 2 3 4 5 6 7 0 0 0 0

pp 8 8 9 0 0 0 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 0

tp 20 21

1	e/mH0	1.066864	0.003976	1.070840	0.033312	>5%
1	e/mH1	-0.005702	-0.000056	-0.005757	0.000479	>5%
1	Scale	1.922984	0.000005	1.922989	0.004447	
1	Temp	0.122648	0.000143	0.122792	0.010944	
2	a	4.596079	-0.000196	4.595883	0.000723	>5%
2	b	4.596079	-0.000196	4.595883	0.000000	
2	c	2.960194	0.000061	2.960256	0.000584	>5%
2	U	0.025465	-0.015520	0.009945	0.019647	>5%
2	V	-0.034871	0.008199	-0.026672	0.023776	>5%
2	W	0.023453	-0.002513	0.020940	0.006902	>5%
2	a0	0.858677	-0.335523	0.523154	0.596705	>5%
2	a1	-0.941102	-0.830933	-1.772035	1.025074	>5%
2	a2	0.039079	0.105506	0.144584	0.186061	>5%
2	e/mL0	0.030914	0.052074	0.082988	0.396086	>5%
2	e/mL1	0.008800	0.005885	0.014685	0.011028	>5%
2	e/mH0	1.066864	-0.738870	0.327994	0.573849	>5%
2	e/mH1	-0.005702	0.018877	0.013176	0.012524	>5%
2	Scale	0.018637	0.000641	0.019278	0.000817	>5%
2	Temp	0.122648	0.000143	0.122792	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	15	5001	3920	34	0.06448	0.09162	0.07562	0.04064	2.254

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00468	-0.00468	0.03208	0.01951

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.10738	-0.10738	0.13290	0.10902

Change of l.s. parameters in cycle 15

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.085544	0.000057	0.085602	0.000835 >5%

	b1	-0.007122	0.000399	-0.006724	0.003209 >5%
	b2	-0.011213	-0.000189	-0.011402	0.005405
	b3	-0.118996	-0.001099	-0.120094	0.013365 >5%
	b4	0.127344	0.000483	0.127828	0.006525 >5%
	b5	0.088433	0.001117	0.089549	0.012402 >5%
	t0	0.105345	-0.000001	0.105344	0.000929
1	a	3.786335	0.000000	3.786335	0.000058
1	b	3.786335	0.000000	3.786335	0.000000
1	c	9.520111	0.000001	9.520112	0.000150
1	U	0.050000	0.000031	0.050031	0.001211
1	V	-0.051046	-0.000063	-0.051109	0.001513
1	W	0.035537	0.000023	0.035559	0.000461
1	a0	0.856403	0.000124	0.856527	0.021641
1	a1	-0.944950	0.000674	-0.944277	0.034301
1	a2	0.039018	-0.000107	0.038910	0.004677
1	e/mL0	0.029415	-0.000476	0.028939	0.009640
1	e/mL1	0.008832	0.000012	0.008844	0.000270
1	e/mH0	1.070840	-0.000100	1.070740	0.033252
1	e/mH1	-0.005757	-0.000003	-0.005760	0.000478
1	Scale	1.922989	-0.000030	1.922959	0.004442
1	Temp	0.122792	0.000204	0.122996	0.010933
2	a	4.595883	0.000335	4.596219	0.000398 >5%
2	b	4.595883	0.000335	4.596219	0.000000
2	c	2.960256	0.000069	2.960325	0.000310 >5%
2	U	0.009945	0.004741	0.014685	0.007068 >5%
2	V	-0.026672	-0.003399	-0.030071	0.012652 >5%
2	W	0.020940	0.000628	0.021568	0.004509 >5%
2	a0	0.523154	-0.375902	0.147253	0.379618 >5%
2	a1	-1.772035	0.121239	-1.650796	0.834170 >5%
2	a2	0.144584	-0.038122	0.106462	0.156496 >5%
2	e/mL0	0.082988	-0.350363	-0.267374	0.335323 >5%
2	e/mL1	0.014685	0.009717	0.024402	0.009289 >5%
2	e/mH0	0.327994	0.218777	0.546771	0.477194 >5%
2	e/mH1	0.013176	-0.008762	0.004414	0.007799 >5%
2	Scale	0.019278	-0.000069	0.019209	0.000749 >5%

2	Temp	0.122792	0.000204	0.122996	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	16	5001	3923	34	0.06520	0.09393	0.07648	0.04064	2.311

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00511-0.00511	0.03166	0.01912	

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.05145-0.05145	0.15334	0.11852	

Change of l.s. parameters in cycle 16

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.085602	0.000447	0.086049	0.000860 >5%
		b1	-0.006724	0.002469	-0.004255	0.003311 >5%
		b2	-0.011402	-0.007042	-0.018444	0.005672 >5%
		b3	-0.120094	-0.016944	-0.137038	0.013961 >5%
		b4	0.127828	0.013139	0.140967	0.007057 >5%
		b5	0.089549	0.022317	0.111867	0.013229 >5%
		t0	0.105344	-0.000014	0.105330	0.000951
1	a	3.786335	-0.000010	3.786325	0.000059 >5%	
1	b	3.786335	-0.000010	3.786325	0.000000	
1	c	9.520112	-0.000008	9.520103	0.000154 >5%	
1	U	0.050031	-0.000009	0.050022	0.001241	
1	V	-0.051109	0.000117	-0.050992	0.001552 >5%	
1	W	0.035559	-0.000065	0.035494	0.000473 >5%	
1	a0	0.856527	0.006383	0.862910	0.022213 >5%	
1	a1	-0.944277	0.026422	-0.917855	0.035414 >5%	
1	a2	0.038910	-0.004909	0.034001	0.004857 >5%	
1	e/mL0	0.028939	-0.002185	0.026754	0.009873 >5%	
1	e/mL1	0.008844	0.000063	0.008907	0.000277 >5%	

1	e/mH0	1.070740	0.011916	1.082656	0.034114	>5%
1	e/mH1	-0.005760	-0.000240	-0.006000	0.000491	>5%
1	Scale	1.922959	0.001274	1.924232	0.004561	>5%
1	Temp	0.122996	0.005520	0.128516	0.011262	>5%
2	a	4.596219	0.000299	4.596518	0.000139	>5%
2	b	4.596219	0.000299	4.596518	0.000000	
2	c	2.960325	0.000531	2.960856	0.000286	>5%
2	U	0.014685	0.005397	0.020082	0.007056	>5%
2	V	-0.030071	-0.003160	-0.033231	0.011692	>5%
2	W	0.021568	0.000417	0.021985	0.004318	>5%
2	a0	0.147253	0.020647	0.167900	0.051387	>5%
2	a1	-1.650796	0.925875	-0.724921	0.620227	>5%
2	a2	0.106462	-0.154071	-0.047609	0.122208	>5%
2	e/mL0	-0.267374	-0.048299	-0.315674	0.207702	>5%
2	e/mL1	0.024402	0.000882	0.025284	0.001963	>5%
2	e/mH0	0.546771	0.107228	0.653999	0.416857	>5%
2	e/mH1	0.004414	-0.004753	-0.000339	0.005738	>5%
2	Scale	0.019209	-0.000295	0.018913	0.000766	>5%
2	Temp	0.122996	0.005520	0.128516	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	17	5001	3941	34	0.06453	0.09191	0.07578	0.04064	2.261

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00549	-0.00549	0.03081	0.01868

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	30	1.00000	1.07355	-0.07355	0.10600	0.08114

Change of l.s. parameters in cycle 17

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.086049	-0.000290	0.085759	0.000839 >5%

	b1	-0.004255	-0.001627	-0.005881	0.003228 >5%
	b2	-0.018444	0.004436	-0.014008	0.005473 >5%
	b3	-0.137038	0.011354	-0.125684	0.013505 >5%
	b4	0.140967	-0.008711	0.132256	0.006677 >5%
	b5	0.111867	-0.015136	0.096730	0.012628 >5%
	t0	0.105330	-0.000104	0.105225	0.000930 >5%
1	a	3.786325	0.000003	3.786328	0.000058 >5%
1	b	3.786325	0.000003	3.786328	0.000000
1	c	9.520103	-0.000001	9.520103	0.000150
1	U	0.050022	0.000004	0.050026	0.001215
1	V	-0.050992	-0.000152	-0.051144	0.001517 >5%
1	W	0.035494	0.000098	0.035592	0.000462 >5%
1	a0	0.862910	-0.004508	0.858403	0.021918 >5%
1	a1	-0.917855	-0.016870	-0.934725	0.034450 >5%
1	a2	0.034001	0.003881	0.037882	0.004738 >5%
1	e/mL0	0.026754	0.002070	0.028823	0.009649 >5%
1	e/mL1	0.008907	-0.000055	0.008852	0.000271 >5%
1	e/mH0	1.082656	-0.014810	1.067845	0.033554 >5%
1	e/mH1	-0.006000	0.000257	-0.005743	0.000483 >5%
1	Scale	1.924232	-0.000941	1.923291	0.004461 >5%
1	Temp	0.128516	-0.004127	0.124389	0.010998 >5%
2	a	4.596518	-0.000237	4.596282	0.000347 >5%
2	b	4.596518	-0.000237	4.596282	0.000000
2	c	2.960856	-0.000578	2.960278	0.000284 >5%
2	U	0.020082	-0.023515	-0.003432	0.015057 >5%
2	V	-0.033231	0.026806	-0.006425	0.020193 >5%
2	W	0.021985	-0.006657	0.015328	0.005890 >5%
2	a0	0.167900	0.192119	0.360019	0.067334 >5%
2	a1	-0.724921	-0.435337	-1.160258	0.524632 >5%
2	a2	-0.047609	0.081052	0.033443	0.106995 >5%
2	e/mL0	-0.315674	0.528036	0.212363	0.283914 >5%
2	e/mL1	0.025284	-0.013524	0.011760	0.006223 >5%
2	e/mH0	0.653999	-0.263684	0.390315	0.512735 >5%
2	e/mH1	-0.000339	0.009493	0.009154	0.009124 >5%
2	Scale	0.018913	0.000499	0.019413	0.000764 >5%

2	Temp	0.128516	-0.004127	0.124389	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	18	5001	3927	34	0.06443	0.09154	0.07559	0.04064	2.252

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00486	-0.00486	0.03180	0.01935

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	27	1.00000	1.09618	-0.09618	0.11955	0.09464

Change of l.s. parameters in cycle 18

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.085759	-0.000108	0.085651	0.000834 >5%
		b1	-0.005881	-0.000644	-0.006525	0.003204 >5%
		b2	-0.014008	0.001318	-0.012691	0.005400 >5%
		b3	-0.125684	0.003712	-0.121973	0.013348 >5%
		b4	0.132256	-0.002094	0.130162	0.006509 >5%
		b5	0.096730	-0.004190	0.092540	0.012375 >5%
		t0	0.105225	0.000119	0.105344	0.000932 >5%
1	a	3.786328	0.000004	3.786333	0.000058 >5%	
1	b	3.786328	0.000004	3.786333	0.000000	
1	c	9.520103	0.000007	9.520109	0.000150	
1	U	0.050026	0.000005	0.050031	0.001211	
1	V	-0.051144	0.000061	-0.051083	0.001512	
1	W	0.035592	-0.000043	0.035548	0.000461 >5%	
1	a0	0.858403	-0.000455	0.857948	0.021715	
1	a1	-0.934725	-0.006411	-0.941136	0.034327 >5%	
1	a2	0.037882	0.000458	0.038340	0.004660 >5%	
1	e/mL0	0.028823	0.000282	0.029106	0.009635	
1	e/mL1	0.008852	-0.000015	0.008837	0.000270 >5%	

1	e/mH0	1.067845	0.004147	1.071992	0.033187	>5%
1	e/mH1	-0.005743	-0.000042	-0.005785	0.000478	>5%
1	Scale	1.923291	-0.000146	1.923145	0.004438	
1	Temp	0.124389	-0.000325	0.124064	0.010921	
2	a	4.596282	0.000021	4.596302	0.000521	
2	b	4.596282	0.000021	4.596302	0.000000	
2	c	2.960278	-0.000007	2.960272	0.000147	
2	U	-0.003432	0.002587	-0.000845	0.012116	>5%
2	V	-0.006425	-0.003268	-0.009693	0.020328	>5%
2	W	0.015328	0.000853	0.016181	0.005926	>5%
2	a0	0.360019	0.060397	0.420416	0.320006	>5%
2	a1	-1.160258	0.078265	-1.081993	0.750648	>5%
2	a2	0.033443	-0.009402	0.024041	0.143355	>5%
2	e/mL0	0.212363	-0.298676	-0.086313	0.392405	>5%
2	e/mL1	0.011760	0.009077	0.020837	0.011535	>5%
2	e/mH0	0.390315	0.050041	0.440356	0.500370	>5%
2	e/mH1	0.009154	-0.001569	0.007586	0.008906	>5%
2	Scale	0.019413	0.000013	0.019425	0.000750	
2	Temp	0.124389	-0.000325	0.124064	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	19	5001	3929	34	0.06438	0.09151	0.07553	0.04064	2.251

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00475	-0.00475	0.03195	0.01944

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	28	1.00000	1.09767	-0.09767	0.11845	0.09611

Change of l.s. parameters in cycle 19

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.085651	-0.000006	0.085645	0.000834

	b1	-0.006525	0.000015	-0.006511	0.003203	
	b2	-0.012691	-0.000071	-0.012761	0.005398	
	b3	-0.121973	-0.000287	-0.122260	0.013340	
	b4	0.130162	0.000107	0.130269	0.006508	
	b5	0.092540	0.000275	0.092815	0.012368	
	t0	0.105344	-0.000010	0.105334	0.000929	
1	a	3.786333	0.000001	3.786334	0.000058	
1	b	3.786333	0.000001	3.786334	0.000000	
1	c	9.520109	0.000002	9.520111	0.000150	
1	U	0.050031	0.000031	0.050061	0.001210	
1	V	-0.051083	-0.000054	-0.051138	0.001511	
1	W	0.035548	0.000019	0.035568	0.000461	
1	a0	0.857948	-0.000873	0.857075	0.021667	
1	a1	-0.941136	0.000278	-0.940857	0.034293	
1	a2	0.038340	0.000035	0.038376	0.004673	
1	e/mL0	0.029106	-0.000336	0.028770	0.009623	
1	e/mL1	0.008837	0.000012	0.008849	0.000270	
1	e/mH0	1.071992	-0.000888	1.071104	0.033246	
1	e/mH1	-0.005785	0.000005	-0.005779	0.000478	
1	Scale	1.923145	-0.000028	1.923117	0.004436	
1	Temp	0.124064	0.000036	0.124099	0.010917	
2	a	4.596302	0.000140	4.596442	0.000519	>5%
2	b	4.596302	0.000140	4.596442	0.000000	
2	c	2.960272	-0.000049	2.960222	0.000235	>5%
2	U	-0.000845	0.005313	0.004468	0.011884	>5%
2	V	-0.009693	-0.007424	-0.017118	0.019296	>5%
2	W	0.016181	0.001875	0.018056	0.005655	>5%
2	a0	0.420416	-0.147040	0.273377	0.339749	>5%
2	a1	-1.081993	-0.205718	-1.287711	0.753074	>5%
2	a2	0.024041	0.031032	0.055073	0.141887	>5%
2	e/mL0	-0.086313	-0.087281	-0.173595	0.315299	>5%
2	e/mL1	0.020837	0.002252	0.023089	0.008042	>5%
2	e/mH0	0.440356	0.101471	0.541827	0.539540	>5%
2	e/mH1	0.007586	-0.002917	0.004669	0.010516	>5%
2	Scale	0.019425	-0.000069	0.019357	0.000748	>5%

2	Temp	0.124064	0.000036	0.124099	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	20	5001	3927	34	0.06450	0.09169	0.07566	0.04064	2.256

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
1	31	1.00000	1.00479	-0.00479	0.03183	0.01933

Comp	Nref	Sumlo	Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.10852	-0.10852	0.13178	0.11221

Change of l.s. parameters in cycle 20

Com.	Atoms	Para	old	change	new	e.s.d.
		b0	0.085645	-0.000030	0.085615	0.000836
		b1	-0.006511	0.000103	-0.006408	0.003212
		b2	-0.012761	0.000560	-0.012202	0.005414 >5%
		b3	-0.122260	-0.000081	-0.122340	0.013398
		b4	0.130269	-0.000854	0.129414	0.006548 >5%
		b5	0.092815	-0.000380	0.092435	0.012453
		t0	0.105334	0.000016	0.105350	0.000931
1	a	3.786334	0.000001	3.786335	0.000058	
1	b	3.786334	0.000001	3.786335	0.000000	
1	c	9.520111	0.000002	9.520113	0.000150	
1	U	0.050061	0.000069	0.050130	0.001213 >5%	
1	V	-0.051138	-0.000070	-0.051208	0.001515	
1	W	0.035568	0.000013	0.035581	0.000462	
1	a0	0.857075	0.000055	0.857130	0.021695	
1	a1	-0.940857	0.000079	-0.940778	0.034384	
1	a2	0.038376	-0.000070	0.038306	0.004688	
1	e/mL0	0.028770	-0.000271	0.028499	0.009643	
1	e/mL1	0.008849	0.000006	0.008856	0.000270	

1	e/mH0	1.071104	0.000012	1.071116	0.033280	
1	e/mH1	-0.005779	0.000009	-0.005770	0.000478	
1	Scale	1.923117	-0.000038	1.923079	0.004446	
1	Temp	0.124099	-0.000550	0.123549	0.010949	>5%
2	a	4.596442	-0.000075	4.596367	0.000329	>5%
2	b	4.596442	-0.000075	4.596367	0.000000	
2	c	2.960222	0.000080	2.960303	0.000179	>5%
2	U	0.004468	0.002499	0.006967	0.005240	>5%
2	V	-0.017118	-0.003414	-0.020532	0.010900	>5%
2	W	0.018056	0.000783	0.018838	0.004138	>5%
2	a0	0.273377	0.120478	0.393854	0.109528	>5%
2	a1	-1.287711	0.700441	-0.587270	0.617129	>5%
2	a2	0.055073	-0.123297	-0.068224	0.122411	>5%
2	e/mL0	-0.173595	0.040362	-0.133233	0.269303	>5%
2	e/mL1	0.023089	-0.001610	0.021479	0.005848	>5%
2	e/mH0	0.541827	-0.029048	0.512779	0.476740	>5%
2	e/mH1	0.004669	0.000240	0.004909	0.008302	
2	Scale	0.019357	-0.000188	0.019169	0.000744	>5%
2	Temp	0.124099	-0.000550	0.123549	0.000000	

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

Rwp factor dose not change.

Rwp 因子が変化しないので、プログラムが終了しました。

あるいは、All parameters converge [$d(x) < 5\%$ of $s(x)$]. というメッセージが出ると全ての精密化パラメータが収束したということになります。

L.S.	Ncyl	Nobs	Npar	Nvar	Rp	Rwp	Rp"	Re	GOF
Rwp =const	21	5001	3932	34	0.06449	0.09164	0.07566	0.04064	2.255

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
------	------	-------	---------	-------	--------	----

1 31 1.00000 1.00480-0.00480 0.03188 0.01939

Comp	Nref	Sumlo	: Sumlc	Sumdl	RBragg	RF
2	31	1.00000	1.10379-0.10379	0.13063	0.11062	

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:\¥XBIN>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 structural parameters -----

Select a file name for profile parameters

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

2 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）。

Profile parameters were written on a file: reflexc.d

Select a filename for structural parameters:

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

- 2 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)。

Atomic parameters were written on datafile: atomsc.d

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>