

## プログラム ASFT ( 試料 2 の場合 ) の実行例

Microsoft Windows XP [Version 5.1.2600]

(C) Copyright 1985-2001 Microsoft Corp.

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

22,4 第1成分である Brookite (今回は第2成分である Anatase も同じ) 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” または “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

8,-2 引き続き、第1成分である Brookite (今回は第2成分である Anatase も同じ) 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.O と -2:-2e を “8,-2” または “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

13,3   第3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”または“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 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.

リートベルト解析を実行する(すなわちプログラム PFLS やプログラム ATOMS を実行する)ためには、¥tmp ディレクトリ (あるいは¥tmp フォルダとも呼ぶ) にある ftable というテキストファイルの名前を ftable.d へ変更します (拡張子は dat ではなく d としてください)。そして、この ftable.d ファイルを必ずプログラム PFLS や ATOMS を実行するディレクトリ (この例では、¥XBIN) へ移動 (あるいはコピー) してください。

c:¥xbin>