

装置の条件なのでいじらない

```

02 Ti
#####
! 測定方法 4-420のマックサイエンスの装置に設定している
#####
# X線のデータ
NBEAM = 1
# 0:rietveld 1:simulation
NMODE = 0
# 出力の量
NPRINT = 1
# CuのK_alpha線
NTARG = 4
# (K_alpha2)/(K_alpha1)の強度比
R12 = 0.5
# 1.0:モノクロは使ってない
CTHM1 = 1.0
# 0:表面荒さの補正は行わない
NSURFR = 0
# 0: スリットは固定幅
NTRAN = 0
#####
! PHASE情報
#####
# 原子種のリスト (see RIETAN_VENUS/asfdc)
'0' 'Ti' /
PHASE{
PHNAME1 = '02 Ti'
VNS1 = 'A-136-1'
HKLM1 = 'P 42/m n m'

#####
! PHASEパラメータ
#####
# 原子間距離の制限は課さない
LPAIR1 = 0
# 原子置換パラメータは自動設定
INDIV1 = 1
IHA1 = 0
IKA1 = 0
ILA1 = 1
IHP1 = 1
IKP1 = 0
ILP1 = 0
IHP2 = 0
IKP2 = 0
ILP2 = 0
IHP3 = 0
IKP3 = 0
ILP3 = 0
}
# ピークの線形(2:Pseudo-Voigt関数)

```

本日は赤枠のパラメータを最適化する。

```

NPRFN = 2
# ピークのシフト補正(4:Legendre polynomials)
NSHIFT = 4

#####
# PHASE-A フィッティングパラメータの選択
#####
PHASE-A{
# 0のシフト                                4つのパラメータを0:精密化しない1:する
SHIFTN -5.31915E-2 -4.82041E-2 -9.27546E-3 -2.96782E-3 0000
# 表面荒さの補正
ROUGH 0.0 0.0 0.0 0.0 0000
# バックグラウンド

BKGD 150.257 -3.83554E1 31.1106 -8.38445 4.11766 5.80193
-6.22925
      9.5438 0.0 0.0 0.0 0.0 111111110000
# スケール因子
SCALE 4.92532E-4 1
# ピークの線幅 (U, V, W, dummy)
FWHM12 2.32538E-2 -2.47346E-2 2.06954E-2 0.0 0000
# ピークの非対称性因子 (a0, a1, a2, dummy)
ASYM12 0.673249 -8.5864E-1 3.63762E-2 0.0 0000
# ピークの減衰パラメータ (eta_L0, eta_L1, eta_H0, and eta_H1)
ETA12 0.455231 0.234877 1.34731 -6.4015E-1 0000
# ピークの非対称ブロードニングパラメータ, (Ue, Pe)
ANISOBR12 1.25664E-6 -6.39338E-7 00
# ダミー
DUMMY12 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0
      0.0 0.0 0.0 000000000000000000
# 配向性は考慮しない
PREF 1.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 000000
# 格子定数 a, b, c, alpha, beta, gamma, 全原子の温度因子
CELLQ 4.59682 4.59682 2.96071 90.0 90.0 90.0 0.0 1010000
# ラベル, 占有率, 分率座標, 温度因子
O1/O 1.0 0.3046 0.3046 0.0 0.335453 000000
Ti/Ti 1.0 0.0 0.0 0.0 0.748053 000000
}
# 最適化の制限                                4つのパラメータを0:精密化しない1:する2:制限付きでする
# {
# A(01,y)=A(01,x)
# }
「2:制限付きでする」の時に制限条件を指定する

#####
# 解析用のパラメータ
#####
NVOXA = 132
NVOXB = 132
NVOXC = 100
NCUT = 0

```

場合によってはフィッティングする範囲を調整する

```
#フィッティングする範囲を設定
# 0:全てのデータでfit 1:一部のデータでfit
NEXC = 0
If NEXC = 1 then
  # フィッティングしないθの範囲
  {
    0.0    14.99
    80.01  180.0
  }
end if
# 強度データのフォーマット
NINT = 1
NRANGE = 0

# フィッティング時のピークの裾の範囲 (+/-FWHM*PC)
PC = 40.00
```

```
#####
# 最適化法のパラメータ             ここから下は出力の条件なのでいじらない
#####
# Marquardt法
NLESQ = 0
# 標準偏差の評価法
NESU = 0
# 1つずつパラメータを最適化
NAUTO = 2
# 最適化サイクルの最大数
NCYCL = 100
# 収束チェックの閾値
CONV = 0.0001
# 収束チェックのサイクル数
NCONV = 6
# 0: パラメータの最適化に制限を課さない 1:課す
NC = 0
TK = 650.0
FINC = 2.0

*Update
# 1: insファイルをupdateする
NUPDT = 1
# 出力に関すること
*Graph
NPAT = 2
If NMODE <> 1 then
  IWIDTH = 800
  IHEIGHT = 400
  IYMIN = -2500
  IYMAX = 20000
  LBG = 0
  LDEL = 0
```

```
IOFFSETD = -1500
IPSIZE = 3
IFSIZE = 12
ILSIZE = 14
INDREF = 0
IOFFSET1 = -300
/
else
  IWIDTH = 800
  IHEIGHT = 400
  LBG = 0
  IPSIZE = 3
  IFSIZE = 12
  ILSIZE = 14
end if

# Charge flippingのファイルを出力しない
NCF = 0
# ORFFE解析用のファイルを出力しない
NDA = 0
# Fourier/D synthesis用のファイルを出力しない
NFR = 0
# MEM解析用のファイルを出力しない
NMEM = 0
*Quit
```