

Make_materi_file_v2 説明書

1. はじめに

本ソフトは、X線・中性子反射率データの解析実習を行うために必要となる、マテリアルファイルの作成の便宜のために、Windows PC用に準備したものです。

2. インストール

¥make_materi_fileフォルダをWindows PCにコピーします。
その中のmake_materi_file_v2.exeをクリックし、実行します。
なお、¥Atom_Table, ¥Henke_Table, ¥Sasaki_Tableには
データファイルが入っています。

入力

Make Materi file 2017

Element	Z	A [g/mol]	f1 (Z-f')	f2 (f'')	bc [fm]	σ_{abs} [barn]	mass(g/cm ³)	mol ratio	δ []	β []	sld_re[A-2]	sld_im[A-2]
Si	14	28.0855	14.25584	0.32468	4.1491	0.171	2.33	1	7.575e-06	1.725e-07	2.073e-06	2.774e-11
O	8	15.9994	8.05229	0.03368	5.803	0.00019	1.43	2	4.610e-06	1.928e-08	3.123e-06	3.320e-14

☒ Henke
☐ Sasaki
 λ [Å]
 1.54
 Calc
 Change mass
 Save Materi
 All Clear
 Save CMateri

λ max
 1239.
 to
 λ min
 0.42

Compound	ave Z	A [g/mol]	f1 (Z-f')	f2 (f'')	bc [fm]	σ_{abs} [barn]	ave mass	δ []	β []	sld_re[A-2]	sld_im[A-2]
	10.00000	20.02810	10.12014	0.13068	5.25170	0.05713	1.73000	5.599e-06	7.230e-08	2.782e-06	9.648e-12

出力ファイル

10.0000 ; Z []
 20.0281 ; Aw[g]
 10.1201 ; xray f1 []
 0.1307 ; xray f2 []
 5.2517 ; neut coh scat length [fm]
 0.0571 ; neut abs cross section [barn]
 0.0000 ; net spin amplitude []
 1.7300 ; bulk density[g/cm³]
 1.5400 ; wave length(A)

密度の変更も可能

出力

ファイル名を入力すると
 拡張子'.mf' が付いた
 ファイルが作成される。

3. 使い方

- 「element」に元素名を入力する。
- 原子散乱因子テーブルとしてHenkeあるいはSasakiを選択(波長領域などが違う)
- 波長(λ)を指定
- 「calc」を押すと計算が行われ、マテリアルファイル作成に必要な値が表示される。

なお、 δ , β , sld(scattering length density: 散乱長密度)などはマテリアルファイルには含まれないが、参考のため表示している。

- 密度はデフォルト値が使われるが、マニュアルで入力し、「Change mass」を押すとその値で再計算される。

- 「save materi」を押すとテーブルの一番目の元素のマテリアルファイルが保存できる。

なお、作成したファイルにはバルク密度や波長も含まれるが、解析では利用されない。

- 化合物の場合は、構成しているelement名をすべて入力し、「mol ratio」にモル比を指定し「calc」を押すと下段のテーブルに計算値が出る。「save C_materi」を押すと化合物のマテリアルファイルが作成できる。図はSiO₂の計算を行った例。

- 元素はH(1)からU(92)まで指定可能である。

- 中性子用の同位体は指定できない。文献のテーブルなどからマテリアルファイルを作成するか、 $\%Atom_Table$ 内のデータに追加することも可能である。

- マテリアルファイルは解析する反射率データと同じフォルダに保存する。