

EXAFS 測定サンプル調整用プログラム： EXSAMP 1 の開発

佐藤 光史

国立科学博物館理工学研究部

Development of a Program for Sample Preparation in EXAFS Measurements

by

Mitsunobu SATO

Department of Science and Engineering, National Science Museum, Tokyo

Abstract

A program titled "EXSAMPI" was developed in order to estimate the appropriate values for the both weights of sample and binder in EXAFS measurements. These values presented by this program are useful to prepare sample pellets, whose diameters are 1.3 cm, and can be obtained by giving only the molecular formula for sample and binder. Two data files, which are accessibly recorded on a floppy disk, of an index of atomic symbols and basic data of elements, are essential to execute the program. A set of the basic data of an element consists of the atomic symbol, atomic weight, absorption edge energies, and coefficients of Victoreen's equation of the element. By the calculation with automatic citation of these data, the maximal values, below 4 and 2 respectively, of the X-ray absorption and the jump accompanied with the absorption, agree with the requirements from both theoretical and empirical considerations.

1. 開発の目的と背景

EXAFS (広域 X 線吸収微細構造) 解析法は、従来の単結晶を用いる X 線結晶構造解析法では適用の不可能であった非晶質物質まで含めた各種物質の構造を知る上で重要な情報を提供し得るものである。特に金属錯体やクラスター化合物について、中心金属まわりの配位原子数や結合距離など、その構造の本質的な知見を与えることからきわめて重要な分析手法のひとつである。また、溶液についても適用できることや短時間で測定できるなど、従来の構造解析法と比較して相補的で優れた面をいくつか有している。一方、強力な X 線源や精密な大型測定器を必要とすることなどの制約もあり、国内では文部省高エネルギー物理学研究所 (KEK) のフォトンファクトリー (PF) などの設備を用いた共同利用の研究例が多く、¹⁾ 測定までに行うべき試料調整などの事前の準備が不可欠である。本プログラムの開発に当たっても、KEK の PF 内 BL10B および BL7C, 6B の利用を念頭においている。

このような EXAFS を測定するに当たっては、測定試料の量、あるいはその厚さを予め予測し試料を調整することが必要である。なぜならば、測定の際に、増幅器等に適当な信号強度を得たり測定したスペクトルの質を良好に保つために、X 線の吸収強度にいくつかの制約が存在するからである。このために、理論的な研究も行われているが、²⁾ 銅の K α 線吸収端付近では、吸収の最大値が 4 を越えず、吸収の立ち上がり幅が 2~1 となる試料が一般に推奨されている。³⁾ さらに計算方法として Victoreen 式で求めた試料による X 線の吸収やその立ち上がり幅の計算結果は、一般に実測値と良い一致が得られることから、これらを測定前に求めておくことは十分な価値を有している。なお、サンプルの必要量を見積ることは、測定準備のひとつとして重要であるばかりでなく、希釈剤を用いる場合には、作成した錠剤試料からサンプルのみを分離・回収することの一般的な困難を考慮すると、貴重なサンプルを節約する上でも重要なことがわかる。そこで従来、必要な係数や定数などを計算の度に参照しながら、比較的複雑な計算が行われていた。これらをより簡便に実行し、かつ各種係数や定数を自動的に参照しながら計算するプログラムは、準備の負担を大きく軽減するものである。

ここで開発したプログラムは、金属錯体などの固体サンプルをポリエチレンや窒化ホウ素などの希釈剤と混合した錠剤試料を成型するために必要となるサンプルおよび希釈剤の量を、それらの化学式を入力するだけで上述の制約を考慮しながら容易に求めることができる。計算に用いる X 線の吸収端エネルギーや各種係数は原子番号 83 のビスマスまでプログラムに付属するデータファイルに標準的に用意されている。ただし、希ガスと、安定同位体がなく特定の天然同位体組成を示さない元素については除外している。したがって、本プログラムを使用することによって、通常元素については外部からの一切のデータを参照することなく EXAFS 測定のための予備計算を迅速かつ正確に行え、さらに計算結果がプリンタに出力されるのでその保存性を高めることができる。なお本プログラムでは、作成する錠剤の直径は 1.3 cm としている。また本稿で測定試料または錠剤試料と表す場合には、実際に測定可能に成型した錠剤を示し、希釈剤を混合し成型する以前の化合物はサンプルと呼んで区別する。

2. 理論と計算方法

EXAFS 測定に伴う X 線吸収の理論については、文献⁸⁾にもまとめられているが、ここでは特に密度が未知のことが多い錠剤試料について計算を行うために、その計算方法と合わせて以下に述べる。この方法によって、密度は未知のままサンプルと希釈剤の最適な重量が各々得られる。

物質による X 線の吸収はその強度について次式が成り立つ。

$$I/I_0 = \exp(-\mu \cdot \rho \cdot X) = \exp(-M) \quad (1)$$

ここで、 I_0 は入射 X 線強度、 I は透過 X 線強度、 μ は質量吸収係数 [$\text{cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}$]、 ρ は試料の密度 [$\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$]、また X は試料の厚さ [cm] である。

作成する錠剤試料の直径を D [cm]、また重さを W [g] とすると、密度は次式で表される。

$$\rho = W / \{X \cdot \pi \cdot (D/2)^2\} \quad (2)$$

(1) および (2) 式から (3) 式が得られる。ここで $V = 4/(\pi \cdot D^2)$ であり、錠剤の直径で決まる定数項 [cm^{-2}] である。

$$\mu \cdot \rho \cdot X = M = V \cdot \mu \cdot W \quad (3)$$

したがって (3) 式より X 線の吸収について、試料錠剤の密度を測定することなく、特定の波長における試料の質量吸収係数と重さから予測値を求めることができる。

一方、混合物、化合物の場合には質量吸収係数について (4) 式が成り立つ。

$$\mu = \sum (\mu_i \cdot W_i) \quad (4)$$

ここで μ_i と W_i は、各成分の質量吸収係数と重量百分率である。したがって、吸収端直前のサンプルの質量吸収係数を μ_L 、直後について μ_H 、さらに希釈剤について μ_B とすると (3) 式より (5) および (6) 式が成り立つ。ここで M_L 、 M_H は吸収端前後での M 値を示し、 W の添字は各々サンプル (S) と希釈剤 (B) を表す。

$$M_H = V \cdot \mu_H \cdot W_S + V \cdot \mu_B \cdot W_B \quad (5)$$

$$M_L = V \cdot \mu_L \cdot W_S + V \cdot \mu_B \cdot W_B \quad (6)$$

(5) 式より (7) 式が得られる。

$$V \cdot \mu_B \cdot W_B = M_H - V \cdot \mu_H \cdot W_S \quad (7)$$

(7) 式において、 $V > 0$ 、 $\mu_B > 0$ であり、希釈剤量 $W_B > 0$ の条件から (8) 式が求まる。

$$W_S < M_H / V \cdot \mu_H \quad (8)$$

したがって、この式の右辺に測定条件として M_H を代入すると、対象化合物におけるサンプル使用量の上限值 S_{\max} が求まる。一方、(5) 式と (6) 式から、(9) 式が得られる。ここで、左辺は吸収の立ち上がり幅である。

$$M_H - M_L = V \cdot (\mu_H - \mu_L) \cdot W_S \quad (9)$$

(9) 式の右辺に錠剤の大きさによって決まる定数項 V と、 W_S に S_{\max} を代入することによって、このサンプルを用いる際の最大立ち上がり幅 $JUMP_{\max}$ が求まる。なお、(8) 式、(9) 式の μ_L 、 μ_H は、(10) 式の Victoreen 式と (4) 式を用いて理論的に求めることができる。ここで C 、 D は文献⁴⁾より引

$$\mu = C\lambda^3 - D\lambda^4 \quad (10)$$

用される定数で、 λ は吸収端波長⁴⁾である。

本プログラムでは、(8) 式における吸収の最大値 M_H を銅の吸収端付近に要請される上限値として 4 に設定して S_{\max} および $JUMP_{\max}$ をまず求め、サンプル量と立ち上がり幅の初期値としている。最適サンプル量算出には、この S_{\max} に後述の減少係数を乗じて繰り返し計算を実行し、一定の条件を満たす W_S と W_B 値を探索する手法を用いた。すなわち、(5) 式と (9) 式の右辺に S_{\max} に減少係数を乗じて導いた W_S と、後述のように決めた W_B の初期値に同様な減少係数を乗じた値を逐次代入し、各式から吸収の最大値と立ち上がり幅を求め、吸収の最大値が 4 未満でかつ立ち上がり幅が 2 未満の時に 1 セットの計算を終え、5 セット求めるまで計算を続行する。実際の計算では、(9) 式の立ち上がり幅が 2 以下の条件が先に求められるので、一旦この条件が満たされると吸収の最大値が 4 未満となる W_B が、サンプルの逐次減量に適用される以下の方法と同様に計算される。

各計算回について、サンプルおよび希釈剤を適宜減少させるために減少係数として $(1-1/N)$ を用いた。ここで、サンプル量については N は 12 から 2 までの整数値である。すなわち S_{\max} の 92% から計算し始め 50% までについて 1 回目の計算を実行し、この計算回で条件が満たされないときは 50% の値を初期値として次の計算回に入る。これによって、最大立ち上がり幅が大きいサンプルについても容易に 2 付近で条件を満たすサンプル量が求められ、また一旦 2 近傍に条件を満たすサンプル量が見つかり、5 サイクルの継続計算で立ち上がり幅が 1 付近まで順次測定に適した値が計算される。

希釈剤の量についても、同じ形式の減少法を用いたが、 N については 100 から 2 までの整数値とした。これは、各サンプル量を用いた際の吸収の上限値 4 にできるだけ近い値を得るために採用した。また各繰り返し計算の初回に希釈剤の初期値を新たに設定し直し、希釈剤量がサンプルよりも一般に多量に用いることを想定して、 W_S に 10^4 を乗じている。この乗数は、いくつかの化合物について変

化させて検討し、その計算結果が乗数に依存しなくなる十分に大きな値として決定した。

なお、本プログラムにおいて使用する錠剤の大きさで決まる定数項 V は、通常の赤外線吸収スペクトル測定に用いられる錠剤成型器のセルの直径 1.3 cm を用いて求める。また全ての実数計算は単精度実数型で実行する。

表 1 計算結果出力例.

***** K[Co(dhpta)] *****

Edge Energy of Atom No.1 (K Edge = 7709.0 eV)

No.	ATOM	AN	WEIGHT (%)
1 :	Co	1	14.16
2 :	K	1	9.39
3 :	O	9	34.59
4 :	N	2	6.73
5 :	C	11	31.74
6 :	H	14	3.39
FORMULAR WEIGHT =			416.27
7 :	C	1	85.63
8 :	H	2	14.37
FORMULAR WEIGHT =			14.03

MU HIGH (Co)	364.45
MU LOW (Co)	44.68
MU (K)	15.01
MU (O)	4.43
MU (N)	0.56
MU (C)	1.58
MU (H)	0.00
TOTAL MU HIGH =	73.17
TOTAL MU LOW =	27.90
MU (C : BINDER)	4.26
MU (H : BINDER)	0.01
MU (BINDER) =	4.27

Sample [mg]	Binder [mg]	TOP	JUMP
73	0	4.00	2.47
54	60	3.19	1.86
45	450	3.95	1.55
38	560	3.89	1.29
31	690	3.96	1.07
26	780	3.96	0.90
50	50	2.92	1.71
40	40	2.33	1.36
30	40	1.78	1.02

3. プログラムの構成と使用法

a) システムの構成

システムは、N₈₈-BASIC (86) システムの DISK BASIC モードで動作する。システムを立ち上げたディスクドライブには、元素名の索引データファイル (INDEX. DAT) および計算に使用する基本データのファイル (SEXAMP. DAT) を登載したフロッピーディスクがアクセス可能状態でなければならない。

プログラムは、サンプルおよび希釈剤量の最適値を求める計算モードと、この計算に必要な元素名索引や基本データのファイル入出力を管理するためのフロッピーディスクデータコントロールモード、およびこれらモードを選択するジョブコントロールから構成されている。プログラムリストを付録として記載した。ジョブコントロールは、行番号 1000 番台で実行されるが、いずれのモードも完全な対話形式で操作可能で、プリンタと連動して動作する。

b) 計算モード

計算モード (行番号 2000 番台から) においては要求にしたがって、サンプルおよび希釈剤の化学式 (各構成元素記号と数) のみを入力する。この際、ターゲット原子を最初に入力することが要求され、またこの原子についてはどの X 線吸収端で計算するかを指定する。希釈剤についての入力が終了すると、フロッピーディスク上の索引ファイルを参照した後、対応する元素の基本データをファイルから読み込む。なお現プログラムでは、サンプルおよび希釈剤における元素の種類は合わせて 12 に制限されており、同一元素でも両者に含まれている元素は別個に扱われる。

引き続き、基本計算ルーチン (行番号 3000 番台) でサンプルと希釈剤について重量分率や測定波長における質量吸収係数を求めて出力する。各元素の質量吸収係数を計算するに当たっては、測定する

表 2 INDEX. DAT ファイルに標準登載されている元素名索引データファイルリスト。

ATOMIC No. AND ATOMIC SYMBOL INDEX

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 : Rn	87 : Fr	88 : Ra
89 : Ac	90 : Th	91 : Pa	92 : U

表 3 EXSAMP. DAT ファイルに標準登録されている基本データファイルリスト,
I. K~M 吸収端エネルギー値, II. Victoreen 式の係数.

--- Basic Data File I. Energy Values are presented in eV ---

No. :	ATOM	WEIGHT	K	L1	L2	L3	M
1 :	H	1.008	14	0	0	0	0
3 :	Li	9.012	55	0	0	0	0
4 :	Be	9.012	112	0	0	0	0
5 :	B	10.810	192	0	0	0	0
6 :	C	12.010	283	0	0	0	0
7 :	N	14.010	399	0	0	0	0
8 :	O	16.000	531	0	0	0	0
9 :	F	19.000	687	0	0	0	0
11 :	Na	22.990	1072	0	0	0	0
12 :	Mg	24.310	1305	0	0	0	0
13 :	Al	26.980	1559	0	0	0	0
14 :	Si	28.090	1838	0	0	0	0
15 :	P	30.970	2142	0	0	0	0
16 :	S	32.070	2472	0	0	0	0
17 :	Cl	35.450	2822	0	0	0	0
19 :	K	39.100	3607	0	0	0	0
20 :	Ca	40.080	4038	400	0	346	0
21 :	Sc	44.960	4496	463	0	403	0
22 :	Ti	47.880	4965	530	0	454	0
23 :	V	50.940	5465	604	0	513	0
24 :	Cr	52.000	5989	682	0	574	0
25 :	Mn	54.940	6540	754	0	641	0
26 :	Fe	55.850	7112	842	0	709	0
27 :	Co	58.930	7709	929	0	779	0
28 :	Ni	58.690	8333	1012	0	855	0
29 :	Cu	63.550	8979	1100	0	932	0
30 :	Zn	65.390	9659	1196	0	1021	0
31 :	Ga	69.720	10368	1300	0	1117	0
32 :	Ge	72.610	10368	1420	0	1218	0
33 :	As	74.920	11868	1530	0	1325	0
34 :	Se	78.960	12658	1653	0	1436	0
35 :	Br	79.900	13474	1794	1596	1550	0
37 :	Rb	85.470	15201	2067	1866	1806	0
38 :	Sr	87.620	16105	2216	2007	1940	0
39 :	Y	88.910	17037	2369	2145	2079	0
40 :	Zr	91.220	17998	2547	2307	2223	0
41 :	Nb	92.910	18986	2698	2465	2371	0
42 :	Mo	95.940	20002	2866	2625	2520	0
44 :	Ru	101.100	22118	3236	2966	2837	0
45 :	Rh	102.900	23224	3419	3146	3003	0
46 :	Pd	106.400	24350	3617	3330	3173	0
47 :	Ag	107.900	25514	3806	3524	3351	0
48 :	Cd	112.400	26711	4019	3727	3537	0
49 :	In	114.800	27940	4237	3938	3730	0
50 :	Sn	118.700	29200	4465	4156	3929	0
51 :	Sb	121.800	30491	4698	4381	4132	0
52 :	Te	127.600	31813	4939	4612	4341	0
53 :	I	126.900	33169	5188	4852	4557	0
55 :	Cs	132.900	35959	5720	5358	5011	0
56 :	Ba	137.300	37441	5995	5624	5247	0
57 :	La	138.900	38925	6267	5891	5483	851
58 :	Ce	140.100	40449	6549	6165	5724	902
59 :	Pr	140.900	41998	6846	6443	5968	0
60 :	Nd	144.200	43571	7126	6722	6208	1004
62 :	Sm	150.400	46835	7737	7312	6717	1108
63 :	Eu	152.000	48515	8069	7624	6983	0
64 :	Gd	157.300	50240	8376	7931	7243	1221
65 :	Tb	158.900	51996	8708	8252	7515	1280
66 :	Dy	162.500	53789	9083	8621	7850	0
67 :	Ho	164.900	55615	9395	8919	8071	1390
68 :	Er	167.300	57483	9776	9263	8364	0
69 :	Tm	168.900	59390	10116	9618	8648	1515

表 3 続き

--- Basic Data File I. Energy Values are presented in eV ---

No. :	ATOM	WEIGHT	K	L1	L2	L3	M
70 :	Yb	173.000	61332	10486	9978	8943	1578
71 :	Lu	175.000	63304	10867	10345	9241	0
72 :	Hf	178.500	65351	11264	10739	9561	1718
73 :	Ta	180.900	65351	11264	10739	9561	1718
74 :	W	183.900	69524	12098	11542	10204	1871
75 :	Re	186.200	71662	12522	11955	10531	0
76 :	Os	190.200	73860	12965	12383	10869	0
77 :	Ir	192.200	76112	13424	12824	11215	2116
78 :	Pt	195.100	78395	13892	13273	11564	2202
79 :	Au	197.000	80723	14353	13733	11918	2291
80 :	Hg	200.600	83103	14846	14209	12284	2385
81 :	Tl	204.400	85528	15344	14698	10992	2485
82 :	Pb	207.200	88006	15860	15198	13035	2586
83 :	Bi	209.000	90527	16385	15708	13418	2687

--- Basic Data File II. Victoreen's C & D ---

No. :	C1	D1	C2	D2	C3	D3	C4	D4	C5	D5
1 :	0.013	0.000	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
3 :	0.150	0.000	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
4 :	0.365	0.002	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
5 :	0.609	0.005	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
6 :	1.220	0.014	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
7 :	2.050	0.032	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
8 :	3.180	0.065	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
9 :	4.600	0.112	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
11 :	8.670	0.330	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
12 :	11.300	0.539	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
13 :	14.400	0.803	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
14 :	18.200	1.100	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
15 :	22.600	1.550	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
16 :	27.600	2.180	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
17 :	33.400	3.030	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
19 :	47.400	5.590	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
20 :	55.800	7.560	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
21 :	65.200	9.810	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
22 :	75.600	12.300	5.15	0.153	0	0	0	0.0	0.0	0.000
23 :	86.900	15.100	6.14	0.203	0	0	0	0.0	0.0	0.000
24 :	99.000	18.200	7.24	0.268	0	0	0	0.0	0.0	0.000
25 :	112.000	22.300	8.51	0.344	0	0	0	0.0	0.0	0.000
26 :	126.000	27.200	9.95	0.433	0	0	0	0.0	0.0	0.000
27 :	141.000	33.200	11.60	0.535	0	0	0	0.0	0.0	0.000
28 :	158.000	40.100	13.40	0.651	0	0	0	0.0	0.0	0.000
29 :	176.000	48.300	15.60	0.779	0	0	0	0.0	0.0	0.000
30 :	195.000	57.500	17.80	0.937	0	0	0	0.0	0.0	0.000
31 :	216.000	68.600	20.20	1.130	0	0	0	0.0	0.0	0.000
32 :	238.000	81.100	22.70	1.370	0	0	0	0.0	0.0	0.000
33 :	262.000	95.400	25.30	1.670	0	0	0	0.0	0.0	0.000
34 :	287.000	112.000	28.00	2.020	0	0	0	0.0	0.0	0.000
35 :	314.000	130.000	30.90	2.430	0	0	0	0.0	0.0	0.000
37 :	374.000	174.000	37.10	3.480	0	0	0	0.0	0.0	0.000
38 :	406.000	200.000	40.50	4.140	0	0	0	0.0	0.0	0.000
39 :	441.000	229.000	44.10	4.880	0	0	0	0.0	0.0	0.000
40 :	477.000	261.000	47.90	5.720	0	0	0	0.0	0.0	0.000
41 :	515.000	296.000	51.90	6.670	0	0	0	0.0	0.0	0.000
42 :	555.000	336.000	56.20	7.730	0	0	0	0.0	0.0	0.000
44 :	641.000	427.000	65.50	10.100	0	0	0	0.0	0.0	0.000
45 :	686.000	479.000	70.50	11.400	0	0	0	0.0	0.0	0.000
46 :	734.000	537.000	75.80	12.800	0	0	0	0.0	0.0	0.000
47 :	784.000	599.000	81.40	14.300	0	0	0	0.0	0.0	0.000
48 :	835.000	667.000	87.40	15.900	0	0	0	0.0	0.0	0.000

表 3 続き

--- Basic Data File 11. Victoreen's C & D ---

No. :	C1	D1	C2	D2	C3	D3	C4	D4	C5	D5
49 :	889.000	741.000	93.60	17.700	0	0	0	0.0	0.0	0.000
50 :	944.000	821.000	100.00	19.700	0	0	0	0.0	0.0	0.000
51 :	1000.000	908.000	107.00	21.800	0	0	0	0.0	0.0	0.000
52 :	1060.000	1000.000	114.00	24.300	0	0	0	0.0	0.0	0.000
53 :	1120.000	1100.000	122.00	27.100	0	0	0	0.0	12.4	0.761
54 :	0.000	0.000	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
55 :	1250.000	1330.000	139.00	33.600	0	0	0	0.0	17.0	1.380
56 :	1310.000	1460.000	147.00	37.300	0	0	0	0.0	19.2	1.720
57 :	1380.000	1590.000	157.00	41.300	0	0	0	0.0	21.5	2.070
58 :	1450.000	1740.000	166.00	45.600	0	0	0	0.0	23.8	2.440
59 :	1418.000	1831.000	176.00	50.200	0	0	0	0.0	26.1	2.830
60 :	1489.000	1993.000	187.00	55.100	0	0	0	0.0	28.4	3.240
61 :	0.000	0.000	0.00	0.000	0	0	0	0.0	0.0	0.000
62 :	1645.000	2362.000	210.00	65.800	0	0	0	0.0	33.1	4.120
63 :	2213.000	3881.000	290.00	105.000	0	0	0	0.0	35.4	4.610
64 :	1804.000	2773.000	234.00	77.700	0	0	0	0.0	37.8	5.110
65 :	1910.000	3035.000	247.00	84.100	0	0	0	0.0	40.3	5.640
66 :	1996.000	3278.000	261.00	90.800	0	0	0	0.0	42.8	6.200
67 :	2103.000	3572.000	275.00	98.000	0	0	0	0.0	45.4	6.790
68 :	2213.000	3881.000	290.00	105.000	0	0	0	0.0	48.0	7.410
69 :	2336.000	4229.000	305.00	113.000	0	0	0	0.0	50.7	8.060
70 :	2429.000	4538.000	321.00	121.000	0	0	0	0.0	53.4	8.750
71 :	2557.000	4928.000	337.00	130.000	0	0	0	0.0	56.2	9.470
72 :	2666.000	5299.000	354.00	140.000	0	0	0	0.0	59.2	10.200
73 :	2796.000	5727.000	372.00	150.000	325	128	188	56.6	62.2	11.000
74 :	2923.000	6170.000	390.00	161.000	342	138	199	62.0	65.3	11.900
75 :	3064.000	6662.000	409.00	173.000	360	150	211	68.0	68.4	12.700
76 :	3182.000	7126.000	429.00	187.000	375	161	222	73.9	71.8	13.600
77 :	3339.000	7697.000	449.00	202.000	395	175	235	81.0	75.2	14.600
78 :	3485.000	8925.000	492.00	240.000	413	188	248	88.2	78.7	15.600
79 :	3656.000	8925.000	492.00	240.000	413	188	248	88.2	78.7	15.600
80 :	3800.000	9542.000	514.00	265.000	453	219	275	104.0	86.1	17.700
81 :	3946.000	10189.000	540.00	295.000	471	234	288	113.0	90.0	18.900
82 :	4115.000	10925.000	570.00	333.000	493	251	303	123.0	94.1	20.000
83 :	4312.000	11766.000	605.00	382.000	517	271	320	134.0	98.3	21.300

元素の吸収エネルギー値によって他の元素に用いるべき Victoreen 式の定数を複数の中から選択する必要があるが、本プログラムでは自動的にエネルギー値を比較して決定する。ここで求めた結果を基に行番号 4000 番台で、吸収の最大値が 4 となるサンプル量 S_{max} と吸収の立ち上がり幅 $JUMP_{max}$ を計算し出力するルーチンが実行される。さらに行番号 5000 番台で、この初期値を用いて係数を自動的に変えながら繰り返し計算を行い、吸収の最大値が 4 を越えず、立ち上がり幅が 2 を越えない条件を満たすサンプルおよび希釈剤の量が 5 セット出力される。出力例を表 1 に示した。

この例でも明らかなように、最大立ち上がり幅が 2 以上のサンプルについては、ほぼ 2~1 付近に 5 セット出力される。また一般に、立ち上がり幅の最大値が小さくなるにつれて、出力される立ち上がり幅の差が小さくなり、測定に適した条件が得られるように計算される。なお吸収の最大値は、多くの場合に第 1 回目を除いていずれも 4 未満の近傍の値になるように希釈剤の量が計算されるので、各セットに示された希釈剤量は出力されたサンプル量に応じた最大値と考えて良い。

一方、現実的には用意できるサンプルの量が計算された適量よりも少なかったり、希釈剤量を減らした条件で、あるいは銅などに比べて吸収の最大値に制約の小さい原子について測定を行う場合も少なくない。そこで本プログラムでは、出力された吸収と立ち上がり幅を参考にしながらサンプル量と

希釈剤量を新たに入力して、独自に吸収と立ち上がり幅を計算するルーチンも用意している。表 1 で、5 セットの後ろに出力されている 3 セットは、このルーチンによって求めたものである。このルーチンもプログラムの入力要請に応ずるだけで実行可能である。

c) フロッピーディスクデータコントロールモード

上述のように、計算の実行には元素名の索引データファイル (INDEX. DAT) および基本データのファイル (EXSAMP. DAT) が必要である。行番号 6000 番台で、これらデータファイルの作成や訂正、および内容の参照を選択し、各ルーチンを実行する。いずれの実行においても、終了後プリンタに各データファイルの全内容が出力される。標準的に装備している各ファイルの出力を表 2 および 3 に示した。

元素名索引データファイル (INDEX. DAT) への入出力は、行番号 7000 番台で実行される。標準では、原子番号 1 の水素から順に 92 番のウランまで入力可能で、標準ファイルとして格納されている。この内、必要のない元素については、使用者が元素記号に対応する 2 文字以内の特定の記号を作成することによって別途利用することも可能である。基本データファイル中の元素名、番号とさえ対応していれば良い。

基本データファイル (EXSAMP. DAT) の作成、訂正、参照は、行番号 8000 番、9000 番台で行われる。このファイルには、希ガスとテクネチウム (原子番号 43) およびプロメチウム (同 61) を除くビスマス (同 83) までの各元素について原子量、X 線吸収端エネルギー、質量吸収係数を求めるための Victoreen 式の係数が格納されている。本ファイル中除外した元素名は、“@@” で入力されており、参照時読み飛ばすのでデータのリストには出力されない。

標準では、本モードを使用する必要はない。

4. お わ り に

ここで開発したプログラムと使用方法を以上に報告し、Victoreen 式の係数の選択等も含め、使用に当たっては一切の判断が自動的に行われることを示した。現時点では、溶液試料の濃度や厚さ、あるいは金属薄膜の厚さを鏡剤試料と同じように求め、出力する形式を持っていない。しかし、本プログラムで出力された結果を利用するといずれも容易に計算することができる。例えば、溶液の場合には、希釈剤として溶媒を、また単一の金属薄膜の時には希釈剤を入力しない計算を行い、それを元に各々適当な濃度や厚みを求めれば良い。

本プログラムを作成するに当り、貴重な助言と励ましを頂いた奈良女子大学理学部矢野重信教授と東京理科大学理学部山村剛士助教授、東邦大学理学部棚瀬知明博士、ならびに国立科学博物館理工学研究部の大迫正弘主任研究官に感謝する。

文 献

- 1) “Photon Factory Activity Report”, 1989, No. 7, 文部省高エネルギー物理学研究所, など.
- 2) P. A. LEE, P. H. CITRIN, P. EISENBERGER, and B. M. KINCAID, 1981, *Rev. Mod. Phys.*, **53**, p. 769.
- 3) a) 野村昌治, 「BL7C 利用の手引」, 1987 年, 高エネルギー物理学研究所放射光実験施設, p. 49. b) 「PF-EXAFS 実験の手引」, 1985 年高エネルギー加速器科学研究奨励会研修会, p. 59.
- 4) a) “International Tables for X-ray Crystallography,” Vol. III, 1974, p. 161, Kynoch Press. b) B. K. TEO, “EXAFS: Basic Principles and Data Analysis,” 1986, p. 288, Elsevier.

付録 プログラムリスト

```

1000 'file "EXSAMP1
1010 '                                     Programmed by Mitsunobu SATO ( NSM, AUG. 1990 )
1020 '
1030 '==== system set-up routine ====
1040 '
1050     SCREEN 3,0: WIDTH 80,25: CONSOLE 0,25,0,1
1060     DIM AT$(12),A(12),RW(12),MUP(12),MUS(12),MUT(12),MUF(12),MUI(12)
1070     DIM W(12),FK(12),FL1(12),FL2(12),FL3(12),FM(12)
1080     DIM C1(12),D1(12),C2(12),D2(12),C3(12),D3(12)
1090     DIM C4(12),D4(12),C5(12),D5(12)
1100     LOCATE 14,10: COLOR 5
1110     PRINT "***** WELCOME TO PROGRAM FOR EXAFS *****"
1120     LOCATE 15,15,0: COLOR 6: GOSUB *TIME
1130     INPUT "SET-UP YOUR PRINTER <<< ON LINE >>> and HIT RETURN ",J
1140 '
1150 '==== job selection menu ====
1160 '
1170 *JOBSEL
1180     PRINT CHR$(12)
1190     LOCATE 15, 6: PRINT "***** SELECT YOUR JOB *****"
1200     LOCATE 21,11: COLOR 5: PRINT "CALCULATION           : HIT RETURN"
1210     LOCATE 21,14:           PRINT "FDD I/O CONTROL       : 1"
1220     LOCATE 21,17:           PRINT "JOB END               : 2"
1230     LOCATE 21,20,1:       INPUT "SELECTION           : ",J
1240     IF J=0 THEN 1280
1250     IF J=1 THEN 1300
1260     IF J=2 THEN 1320
1270     GOTO 1180
1280     LOCATE 21,11: COLOR 6: PRINT "CALCULATION": GOSUB *TIME
1290     GOSUB *MOLFOR: GOSUB *TIME: GOTO 1180
1300     LOCATE 21,14: COLOR 6: PRINT "FDD I/O CONTROL": GOSUB *TIME
1310     GOSUB *FDDCON: GOSUB *TIME: GOTO 1180
1320     LOCATE 21,17: COLOR 2: PRINT "JOB END": LOCATE 0,24: COLOR 7: END
2000 '
2010 '==== molecular formula for sample ====
2020 '
2030 *MOLFOR
2040     AN=1
2050     ON HELP GOSUB *BINDER: HELP ON: PRINT CHR$(12): LOCATE 20,8: COLOR 5
2060     PRINT "***** COMMENTS ( < 40 Characters ) *****": COLOR 6
2070     LOCATE 20,14: PRINT "-----10-----20-----30-----40"
2080     LOCATE 19,11: COLOR 5: INPUT " ",CMT$: GOSUB *TIME: PRINT CHR$(12)
2090     LOCATE 20, 8: COLOR 2: PRINT "***** INPUT the TARGET ATOM *****"
2100     LOCATE 20,24: COLOR 6: PRINT "***** PUSH ' HELP KEY ' if END *****"
2110     LOCATE 20, 5: COLOR 5: PRINT "***** DATA INPUT *****"
2120     LOCATE 26,12: INPUT "ATOMIC SYMBOL = ",AT$(AN)
2130     LOCATE 26,15: INPUT "No. of the ATOM = ",A(AN)
2140     IF LEN(AT$(AN))=1 THEN AT$(AN)=AT$(AN)+SPACE$(1)
2150     IF AN=1 THEN 2160 ELSE 2170
2160     LOCATE 26,20: INPUT "Abs. Edge ( K, L1, L2, L3, M ) = ",AE$
2170     AN=AN+1: PRINT CHR$(12)
2180     GOTO 2100
2190 '
2200 '==== molecular formula for binder ====
2210 '
2220 *BINDER
2230     BAN=AN
2240     ON HELP GOSUB *INDEXR: HELP ON: PRINT CHR$(12)
2250     LOCATE 20,8: COLOR 2: PRINT "***** INPUT the BINDER Molecule *****"
2260     GOTO 2100
2270 '
2280 '==== index read ====
2290 '

```

付録 続き

```

2300 *INDEXR
2310 PRINT CHR$(12): LOCATE 15,10: COLOR 2
2320 PRINT "***** FDD ACCESS *****" WAIT !!! "
2330 OPEN "INDEX.DAT" AS 1
2340 FIELD 1, 2 AS AT$
2350 FOR Z=1 TO 92
2360 GET 1, Z
2370 FOR I=1 TO AN-1
2380 IF AT$=AT$(I) THEN Z(I)=Z
2390 NEXT
2400 NEXT
2410 CLOSE
2420 '
2430 '==== basic data read ====
2440 '
2450 OPEN "EXSAMP.DAT" AS 1
2460 FIELD 1, 2 AS AT$, 8 AS W$, 8 AS FK$
2470 FIELD 1, 18 AS DUMMY$, 8 AS FL1$, 8 AS FL2$, 8 AS FL3$, 8 AS FM$
2480 FIELD 1, 50 AS DUMMY$, 8 AS C1$, 8 AS D1$, 8 AS C2$, 8 AS D2$
2490 FIELD 1, 82 AS DUMMY$, 8 AS C3$, 8 AS D3$, 8 AS C4$, 8 AS D4$
2500 FIELD 1,122 AS DUMMY$, 8 AS C5$, 8 AS D5$
2510 FOR I=1 TO AN-1
2520 GET 1, Z(I)
2530 W(I)=CVS(W$): FK(I)=CVS(FK$): FL1(I)=CVS(FL1$)
2540 FL2(I)=CVS(FL2$): FL3(I)=CVS(FL3$): FM(I)=CVS(FM$)
2550 C1(I)=CVS(C1$): D1(I)=CVS(D1$)
2560 C2(I)=CVS(C2$): D2(I)=CVS(D2$)
2570 C3(I)=CVS(C3$): D3(I)=CVS(D3$)
2580 C4(I)=CVS(C4$): D4(I)=CVS(D4$)
2590 C5(I)=CVS(C5$): D5(I)=CVS(D5$)
2600 NEXT
2610 CLOSE
3000 '
3010 '==== basic calculation ====
3020 '
3030 FLAGP=0
3040 IF AE$="K" THEN F1=FK(1)
3050 IF AE$="L1" THEN F1=FL1(1)
3060 IF AE$="L2" THEN F1=FL2(1)
3070 IF AE$="L3" THEN F1=FL3(1)
3080 IF AE$="M" THEN F1=FM(1)
3090 F=12398.5/F1: R3=F^3: R4=F^4
3100 MUH=C1(1)*R3-D1(1)*R4: MUL=C2(1)*R3-D2(1)*R4
3110 K=1: L=BAN-1
3120 TW=0: TTM=0
3130 FOR J=K TO L: W(J)=W(J)*A(J): NEXT
3140 FOR J=K TO L: TW=TW+W(J): NEXT
3150 FOR J=K TO L: RW(J)=W(J)/TW: NEXT
3160 IF FLAGP=1 THEN 3180
3170 GOSUB *BDPROT: GOTO 3190
3180 K=BAN-1
3190 FOR J=K+1 TO L
3200 MUP(J)=C1(J)*R3-D1(J)*R4: MUP(J)=MUP(J)*RW(J)
3210 MUS(J)=C2(J)*R3-D2(J)*R4: MUS(J)=MUS(J)*RW(J)
3220 MUT(J)=C3(J)*R3-D3(J)*R4: MUT(J)=MUT(J)*RW(J)
3230 MUF(J)=C4(J)*R3-D4(J)*R4: MUF(J)=MUF(J)*RW(J)
3240 MUI(J)=C5(J)*R3-D5(J)*R4: MUI(J)=MUI(J)*RW(J)
3250 IF F1>FK(J) THEN MUP(J)=MUP(J)
3260 IF F1<FK(J) AND F1>FL1(J) THEN MUP(J)=MUS(J)
3270 IF F1<FL1(J) AND F1>FL2(J) THEN MUP(J)=MUT(J)
3280 IF F1<FL2(J) AND F1>FL3(J) THEN MUP(J)=MUF(J)
3290 IF F1<FL3(J) AND F1>FM(J) THEN MUP(J)=MUI(J)
3300 NEXT

```

付録 続き

```

3310     IF K=BAN-1 THEN GOSUB *TDPROT
3320     FOR J=K+1 TO L
3330         TTM=TTM+MUP(J)
3340     NEXT
3350         TMH=TTM+MUH*RW(1) : TML=TTM+MUL*RW(1)
3360     K=BAN: L=AN-1
3370     GOTO 3120
4000 '
4010 '==== basic data print out ====
4020 '
4030 *BDPROT
4040     FLAG=1
4050     PRINT CHR$(12): COLOR 5: PRINT CMT$: PRINT: GOSUB *TIME
4060     PRINT USING "Energy of Atom No.1 ( && Edge ";AES;
4070     PRINT USING "= #####.# eV )";F1: PRINT
4080     PRINT "      No.      ATOM      AN      WEIGHT(%): PRINT
4090     LPRINT CMT$: LPRINT: LPRINT
4100     LPRINT USING "Abs. Edge Energy of Atom No.1 ( && )";AES;
4110     LPRINT USING "      #####.# eV";F1: LPRINT
4120     LPRINT "      No.      ATOM      AN      WEIGHT(%): LPRINT
4130     FOR J=K TO L
4140         PRINT USING "      ## :      &&      ##";J,AT$(J),A(J) :
4150         PRINT USING "      ## :      &&      ##";RW(J)*100
4160         LPRINT USING "      ## :      &&      ##";J,AT$(J),A(J) :
4170         LPRINT USING "      ## :      &&      ##";RW(J)*100
4180     NEXT
4190     PRINT: LPRINT
4200     PRINT USING "      FORMULAR WEIGHT = #####.##";TW
4210     LPRINT USING "      FORMULAR WEIGHT = #####.##";TW
4220     PRINT: LPRINT
4230     RETURN
4240 '
4250 '==== data print out ( continued ) ====
4260 '
4270 *TDPROT
4280     K=BAN
4290     GOSUB 4130
4300     PRINT "-----"
4310     LPRINT "-----"
4320     PRINT: LPRINT: GOSUB *TIME
4330     PRINT USING "      MU HIGH ( && )      #####.##";AT$(1),MUH
4340     PRINT USING "      MU LOW ( && )      #####.##";AT$(1),MUL
4350     LPRINT USING "      MU HIGH ( && )      #####.##";AT$(1),MUH
4360     LPRINT USING "      MU LOW ( && )      #####.##";AT$(1),MUL
4370     PRINT: LPRINT
4380     FOR J=2 TO K-1
4390         PRINT USING "      MU      ( && )";AT$(J);
4400         PRINT USING "      #####.##";MUP(J)
4410         LPRINT USING "      MU      ( && )";AT$(J);
4420         LPRINT USING "      #####.##";MUP(J)
4430     NEXT
4440     PRINT: LPRINT
4450     PRINT USING "      TOTAL MU HIGH = ###.##";TMH
4460     PRINT USING "      TOTAL MU LOW = ###.##";TML
4470     LPRINT USING "      TOTAL MU HIGH = ###.##";TMH
4480     LPRINT USING "      TOTAL MU LOW = ###.##";TML
4490     PRINT: LPRINT: GOSUB *TIME
4500 '
4510 '==== binder data calculation ( continued ) and print out ====
4520 '
4530     BTM=0
4540     FOR J=K TO L
4550         BTM=BTM+MUP(J)

```

付録 続き

```

4560     PRINT USING "      MU      (  && : BINDER  )";AT$(J);
4570     PRINT USING "      #####.##";MUP(J)
4580     LPRINT USING "      MU      (  && : BINDER  )";AT$(J);
4590     LPRINT USING "      #####.##";MUP(J)
4600     NEXT
4610     PRINT: LPRINT
4620     PRINT USING "                MU ( BINDER )      =      #####.##";BTM: PRINT
4630     LPRINT USING "                MU ( BINDER )      =      #####.##";BTM: LPRINT
4640     PRINT "-----"
4650     LPRINT "-----": GOSUB *TIME
5000     '
5010     '==== prediction of mu and hight of jump ( maximum top & jump ) =====
5020     '
5030     PRINT CHR$(12): COLOR 5
5040     PI=3.14: C=13^2: V=C*PI: V=400/V: TOP=4!
5050     MAXS=TOP/(V*TMH)
5060     MAXJ=(TMH-TML)*V*MAXS
5070     MINB=(TOP/V-MAXS*TMH)/BTM
5080     S=MAXS*10^3: B=MINB*10^3
5090     PRINT: LPRINT
5100     PRINT "      Sample [mg]      Binder [mg]      TOP      JUMP": PRINT
5110     LPRINT "      Sample [mg]      Binder [mg]      TOP      JUMP": LPRINT
5120     PRINT USING "      #####      #####      4.00      ##.##";S,B,MAXJ
5130     LPRINT USING "      #####      #####      4.00      ##.##";S,B,MAXJ
5140     PRINT: LPRINT
5150     '
5160     '==== calculation for appropriate values =====
5170     '
5180     SB=0: PS=12
5190     B=S*10^4
5200     FOR K=12 TO 2 STEP -1
5210     S=(1-1/K)*S
5220     FOR L=100 TO 2 STEP -1
5230     B=(1-1/L)*B: B=10*INT(B/10)
5240     TOP=(B*BTM+S*TMH)*V/10^3
5250     JUMP=(TMH-TML)*V*S/10^3
5260     IF Q$="Y" OR Q$="y" THEN 5300
5270     IF TOP<4 AND JUMP<2 THEN 5300
5280     NEXT
5290     NEXT
5300     PRINT USING "      #####      #####";S,B;
5310     PRINT USING "      ##.##      ##.##";TOP,JUMP
5320     LPRINT USING "      #####      #####";S,B;
5330     LPRINT USING "      ##.##      ##.##";TOP,JUMP
5340     SB=SB+1
5350     IF SB>=5 THEN 5360 ELSE 5190
5360     LOCATE 1,20: PRINT SPC(79): LOCATE 1,20: COLOR 6
5370     INPUT "Do you try other set of WEIGHT ( y / n ) ";Q$
5380     IF Q$="Y" OR Q$="y" THEN 5410
5390     GOSUB *TIME
5400     GOSUB *JOBSEL
5410     LOCATE 1,20: PRINT SPC(79): LOCATE 1,20: COLOR 5
5420     INPUT "Weight of SAMPLE [mg] = ",S: LOCATE 35,20
5430     INPUT "Weight of BINDER [mg] = ",B
5440     LOCATE 0,PS: PS=PS+1
5450     IF PS=13 THEN LPRINT
5460     GOTO 5240
6000     '
6010     '==== fdd control mode =====
6020     '
6030     *FDDCON
6040     PRINT CHR$(12): COLOR 2
6050     LOCATE 15, 4: PRINT "***** FDD I/O CONTROL MODE *****"

```

付録 続き

```

6060          LOCATE 15, 6: PRINT "***** SELECT YOUR JOB *****"
6070          LOCATE 21,10: COLOR 5: PRINT "INDEX CHECK      : 1"
6080          LOCATE 21,12:          PRINT "INDEX WRITE      : 2"
6090          LOCATE 21,14:          PRINT "BASIC DATA CHECK : 3"
6100          LOCATE 21,16:          PRINT "BASIC DATA WRITE : 4"
6110          LOCATE 21,18:          PRINT "FDD MODE END     : 5"
6120          LOCATE 21,22:          INPUT "SELECTION ( 1-5 ) : ",J
6130          IF J=1 THEN 6190
6140          IF J=2 THEN 6210
6150          IF J=3 THEN 6230
6160          IF J=4 THEN 6250
6170          IF J=5 THEN 6270
6180          GOTO 6040
6190          LOCATE 21,10: COLOR 6: PRINT "INDEX CHECK": GOSUB *TIME
6200          GOSUB *INDEXC: GOSUB *TIME: GOTO 6040
6210          LOCATE 21,12: COLOR 6: PRINT "INDEX WRITE": GOSUB *TIME
6220          GOSUB *INDEXW: GOSUB *TIME: GOTO 6040
6230          LOCATE 21,14: COLOR 6: PRINT "BASIC DATA CHECK": GOSUB *TIME
6240          GOSUB *BDFDDC: GOSUB *TIME: GOTO 6040
6250          LOCATE 21,16:          PRINT "BASIC DATA WRITE": GOSUB *TIME
6260          GOSUB *BDFDDW: GOSUB *TIME: GOTO 6040
6270          LOCATE 21,18: COLOR 2: PRINT "FDD MODE END": GOSUB *TIME
6280          GOSUB *JOBSEL
7000          '
7010          '==== index data fdd write ====
7020          '
7030          *INDEXW
7040          OPEN "INDEX.DAT" AS 1
7050          FIELD 1,2 AS AT$
7060          PRINT CHR$(12)
7070          LOCATE 57, 1: COLOR 2: PRINT "=== FDD WRITE MODE ===": COLOR 6
7080          LOCATE 15, 3: PRINT "ATOMIC No. AND ATOMIC SYMBOL INDEX": COLOR 5
7090          LOCATE 25, 7: INPUT "ATOMIC NAME = ", KAT$
7100          LOCATE 25,10: INPUT "ATOMIC No. = ", Z: COLOR 6
7110          LOCATE 15,20: INPUT "NEXT PROCESS (C/B/E) ", CBE$
7120          IF CBE$="C" THEN GOSUB 7190: GOTO 7060
7130          IF CBE$="B" THEN 7090
7140          IF CBE$="E" THEN GOSUB 7190: CLOSE: GOSUB *TIME: GOSUB *INDEXC
7150          GOTO 7110
7160          '
7170          '==== fdd write ====
7180          '
7190          LSET AT$=KAT$
7200          PUT #1, Z
7210          RETURN
7220          '
7230          '==== index data fdd read ====
7240          '
7250          *INDEXC
7260          OPEN "INDEX.DAT" AS 1
7270          FIELD 1, 2 AS AT$
7280          PRINT CHR$(12)
7290          LOCATE 58, 0: COLOR 2: PRINT "=== FDD READ MODE ===": COLOR 6
7300          LOCATE 0, 0: PRINT "ATOMIC No. AND ATOMIC SYMBOL INDEX": COLOR 5
7310          LPRINT "ATOMIC No. AND ATOMIC SYMBOL INDEX": LPRINT
7320          LPRINT CHR$(27); "(";"001,016,032,048."
7330          K=1
7340          FOR FD=1 TO 23
7350          MULT=1: LPRINT CHR$(10)
7360          FOR Z=K TO K+3
7370          GET 1, Z
7380          CN=MULT*15-5
7390          LOCATE CN,FD: PRINT USING "## : &&"; Z,AT$

```

付録 続き

```

7400     GOSUB 7480
7410         LPRINT USING "## : &&"; Z,AT$;
7420         MULT=MULT+1
7430     NEXT
7440     K=K+4
7450     NEXT
7460     CLOSE: GOSUB *TIME: LPRINT: LPRINT CHR$(27);"2";
7470     GOSUB *FDDCON
7480     A=INP(&H42) AND 4: IF A<>4 THEN 7480
7490     OUT &H40,9: OUT &H46,14: OUT &H46,15: RETURN
8000 '
8010 '==== basic data fdd write ====
8020 '
8030 *BDFDDW
8040     OPEN "EXSAMP.DAT" AS 1
8050     FIELD 1,122 AS DUMMY$, 8 AS C5$, 8 AS D5$
8060     FIELD 1, 82 AS DUMMY$, 8 AS C3$, 8 AS D3$, 8 AS C4$, 8 AS D4$
8070     FIELD 1, 50 AS DUMMY$, 8 AS C1$, 8 AS D1$, 8 AS C2$, 8 AS D2$
8080     FIELD 1, 18 AS DUMMY$, 8 AS FL1$, 8 AS FL2$, 8 AS FL3$, 8 AS FM$
8090     FIELD 1, 2 AS AT$, 8 AS AW$, 8 AS FK$
8100     PRINT CHR$(12): COLOR 2
8110     LOCATE 57, 0: PRINT "==== FDD WRITE MODE ===": COLOR 6
8120     LOCATE 26, 1: PRINT "BASIC DATA INPUT": COLOR 5
8130     LOCATE 8, 3: INPUT "ATOMIC NAME = ",KAT$
8140     LOCATE 42, 3: INPUT "ATOMIC No. = ",Z
8150     LOCATE 8, 5: INPUT "ATOMIC WEIGHT = ",AW
8160     LOCATE 8, 7: INPUT "ENERGY ( K ) = ",FK
8170     LOCATE 8, 8: INPUT "ENERGY ( L1 ) = ",FL1
8180     LOCATE 8, 9: INPUT "ENERGY ( L2 ) = ",FL2
8190     LOCATE 8,10: INPUT "ENERGY ( L3 ) = ",FL3
8200     LOCATE 8,11: INPUT "ENERGY ( M ) = ",FM
8210     LOCATE 8,13: INPUT "COEFF ( C1 ) = ",C1
8220     LOCATE 8,14: INPUT "COEFF ( D1 ) = ",D1
8230     LOCATE 8,15: INPUT "COEFF ( C2 ) = ",C2
8240     LOCATE 8,16: INPUT "COEFF ( D2 ) = ",D2
8250     LOCATE 8,17: INPUT "COEFF ( C3 ) = ",C3
8260     LOCATE 8,18: INPUT "COEFF ( D3 ) = ",D3
8270     LOCATE 8,19: INPUT "COEFF ( C4 ) = ",C4
8280     LOCATE 8,20: INPUT "COEFF ( D4 ) = ",D4
8290     LOCATE 8,21: INPUT "COEFF ( C5 ) = ",C5
8300     LOCATE 8,22: INPUT "COEFF ( D5 ) = ",D5: COLOR 6
8310     LOCATE 8,24: INPUT "NEXT PROCESS (C/B/E) ",CBES$
8320     IF CBES="C" THEN GOSUB 8390: GOTO 8100
8330     IF CBES="B" THEN 8130
8340     IF CBES="E" THEN GOSUB 8390: CLOSE: GOSUB *TIME: GOSUB *BDFDDC
8350     GOTO 8290
8360 '
8370 '==== fdd write ====
8380 '
8390     LSET AT$=KAT$: LSET AW$=MK$$(AW): LSET FK$=MK$$(FK)
8400     LSET FL1$=MK$$(FL1): LSET FL2$=MK$$(FL2)
8410     LSET FL3$=MK$$(FL3): LSET FM$=MK$$(FM)
8420     LSET C1$=MK$$(C1): LSET D1$=MK$$(D1)
8430     LSET C2$=MK$$(C2): LSET D2$=MK$$(D2)
8440     LSET C3$=MK$$(C3): LSET D3$=MK$$(D3)
8450     LSET C4$=MK$$(C4): LSET D4$=MK$$(D4)
8460     LSET C5$=MK$$(C5): LSET D5$=MK$$(D5)
8470     PUT 1, Z
8480     RETURN
9000 '
9010 '==== basic data fdd read ====
9020 '
9030 *BDFDDC

```

付録 続き

```

9040 OPEN "EXSAMP.DAT" AS 1
9050 FIELD 1, 2 AS AT$, 8 AS AW$, 8 AS FK$
9060 FIELD 1, 18 AS DUMMY$, 8 AS FL1$, 8 AS FL2$, 8 AS FL3$, 8 AS FM$
9070 PRINT CHR$(12): LOCATE 58, 1: COLOR 2
9080 PRINT "=== FDD READ MODE ===": COLOR 6: PRINT
9090 PRINT "--- Basic Data File I. ";
9100 PRINT "Energy Values are presented in eV ---": COLOR 5: PRINT
9110 PRINT "No. : ATOM WEIGHT K ";
9120 PRINT "L1 L2 L3 M ";
9130 LPRINT "--- Basic Data File I. ";
9140 LPRINT "Energy Series are presented in eV ---": LPRINT
9150 LPRINT "No. : ATOM WEIGHT K ";
9160 LPRINT "L1 L2 L3 M ";
9170 PRINT: LPRINT
9180 FOR Z=1 TO 92
9190 GET 1, Z
9200 IF AT$="@" THEN 9290
9210 AW=CVS(AW$): FK=CVS(FK$)
9220 FL1=CVS(FL1$): FL2=CVS(FL2$): FL3=CVS(FL3$): FM=CVS(FM$)
9230 PRINT USING "## : && ###.### #### " ; Z, AT$, AW, FK;
9240 PRINT USING "#####" ; FL1, FL2, FL3;
9250 PRINT USING "#####"; FM
9260 LPRINT USING "## : && ###.### #### " ; Z, AT$, AW, FK;
9270 LPRINT USING "#####" ; FL1, FL2, FL3;
9280 LPRINT USING "#####"; FM
9290 NEXT
9300 FOR J=1 TO 3: PRINT: LPRINT: NEXT: GOSUB *TIME
9310 FIELD 1, 50 AS DUMMY$, 8 AS C1$, 8 AS D1$, 8 AS C2$, 8 AS D2$
9320 FIELD 1, 82 AS DUMMY$, 8 AS C3$, 8 AS D3$, 8 AS C4$, 8 AS D4$
9330 FIELD 1, 122 AS DUMMY$, 8 AS C5$, 8 AS D5$
9340 PRINT CHR$(12): LOCATE 58, 1: COLOR 2
9350 PRINT "=== FDD READ MODE ===": COLOR 6: PRINT
9360 PRINT "--- Basic Data File II. ";
9370 PRINT "Victoreen's C & D ---": COLOR 5: PRINT
9380 PRINT "No. : C1 D1 C2 D2 ";
9390 PRINT "C3 D3 C4 D4 C5 D5"
9400 LPRINT "--- Basic Data File II. ";
9410 LPRINT "Victoreen's C & D ---": LPRINT
9420 LPRINT "No. : C1 D1 C2 D2 ";
9430 LPRINT "C3 D3 C4 D4 C5 D5"
9440 PRINT: LPRINT
9450 FOR Z=1 TO 92
9460 GET 1, Z
9470 IF AT$="@" THEN 9570
9480 C1=CVS(C1$): D1=CVS(D1$): C2=CVS(C2$): D2=CVS(D2$)
9490 C3=CVS(C3$): D3=CVS(D3$): C4=CVS(C4$): D4=CVS(D4$)
9500 C5=CVS(C5$): D5=CVS(D5$)
9510 PRINT USING "## : ###.### ####.### ##.## " ; Z, C1, D1, C2;
9520 PRINT USING "###.### ## ## ## " ; D2, C3, D3, C4;
9530 PRINT USING "###.# ##.# ##.###" ; D4, C5, D5
9540 LPRINT USING "## : ###.### ####.### ##.## " ; Z, C1, D1, C2;
9550 LPRINT USING "###.### ## ## ## " ; D2, C3, D3, C4;
9560 LPRINT USING "###.# ##.# ##.###" ; D4, C5, D5
9570 NEXT
9580 CLOSE: GOSUB *TIME
9590 GOSUB *FDDCON
10000 '
10010 '==== time interval subroutine ====
10020 '
10030 *TIME: FOR TIME=1 TO 4000: NEXT: RETURN
10040 '
10050 '==== program end ====
10060 '

```