

Date: Fri, 25 Sep 2015 13:06:35 +0900
From: Tsukasa NAKANO
To: "TSUCHIYAMA, Akira", Kentaro Uesugi
Cc: MIYAKE, Aki Takigawa, Junya Matsuno,
中村隆大, Takashi Sakurama, Akihisa TAKEUCHI
Subject: RIDの計算プログラム

みなさま、

GSJ/AIST のなかのです。

(1)
密度と化学組成が既知の物質の 10 eV ~ 30 keV の範囲のエネルギーにおける RID (refractive index decrement; 1 から屈折率の実数部の値を差し引いた、いわゆる「 n' 」の値) の理論値を計算するプログラム `rid_cm` と `rid_dcc` などを書きました。

(2)
これらの使い方は以前に紹介した X 線 LAC (linear absorption coefficients) の理論値の計算プログラム `lac_cm` と `lac_dcc` の使い方とまったく同じです。それについては以下の文書の "lac" を "rid" に読み替えて下さい。

http://www-bl20.spring8.or.jp/~sp8ct/tmp/h_s.pdf#page=3

(3)
新しいプログラムのソースコードや 32 bit Windows 用実行ファイルなどを以下の書庫ファイルに入れておきましたので、どうぞ御利用下さい。

<http://www-bl20.spring8.or.jp/~sp8ct/tmp/henke.taz>
<http://www-bl20.spring8.or.jp/~sp8ct/tmp/henke.zip>

(4) これらの書庫ファイルの内容は以下の通りです。

henke/
index.txt
原子番号 1 ~ 92 の元素それぞれに対する以下の 4 個の値が各行にタブコード区切りで書き込まれているテキストファイル。
[1] 原子番号 (01 ~ 92)
[2] 原子番号 / 質量数
[3] 元素記号
[4] 元素の名前
なお、プログラム `lac_cm` や `lac_dcc` を作成した時もこれとまったく同じファイルを使用しました。

url.txt
参考文献および RID などの計算に用いた atomic scattering factors のデータファイルの URL が書き込まれているテキストファイル。

sf.pdf
RID などの計算式を記した PDF ファイル。

run.sf
LBL (Lawrence Berkeley National Laboratory) のサイトから atomic scattering factors のデータすべてをダウンロードし、それらから eV 単位のエネルギーごとの元素の MRID (mass RID) や MPAC (mass photo-absorption coefficients) を計算する C-shell script。

sf/*.nff と sf/read.me
LBL のサイトからダウンロードした書庫ファイルに入っていた atomic scattering factors のデータファイルとそれらの説明のファイル。

ev_mrid/*.txt と ev_mpac/*.txt
run.sf で得た 92 元素の MRID と MPAC のデータファイル。

run.lin_mrid と run.log_mpac
ev_mrid/*.txt や ev_mpac/*.txt のデータを C 言語コードに変換する C-shell scripts。
lin_mrid.h と log_mpac.h
run.lin_mrid や run.log_mpac が出力した長大な C 言語コード。

mrid.c、mrid.h、rid_cm.c と rid_dcc.c
rid_cm や rid_dcc の C 言語コード。コンパイル時にマクロ定数 LPAC を与えてやれば後述するプログラム lpac_cm や lpac_dcc を生成することもできる。

Makefile
"make" 入力で新しいプログラムすべてを gcc (GNU C++ compiler) でコンパイルする設定にしてある「Makefile」。

rid_cm.exe と rid_dcc.exe
rid_cm と rid_dcc の 32 bit Windows 用実行ファイル
lpac_cm.exe と lpac_dcc.exe
X 線 LPAC (linear photo-absorption coefficients) の理論値を計算するプログラムの 32 bit Windows 用実行ファイル。

log_rid.pdf と lin_rid.pdf
log_lpac.pdf と lin_lpac.pdf
rid_cm や lpac_cm を使って計算した 5 ~ 25 keV における 8 種類の物質それぞれの対数もしくはリニアスケールの RID や LPAC のプロファイルと並べた PDF ファイル。なお、LPAC のグラフには lac_cm で計算した通常の LAC のプロファイルもプロットしてある。

log_mrid.pdf と lin_mrid.pdf
log_mpac.pdf と lin_mpac.pdf
rid_cm や lpac_cm を使って計算した 5 ~ 25 keV における 8 元素の対数もしくはリニアスケールの MRID や MPAC のプロファイルと並べた PDF ファイル。なお、MPAC のグラフには lac_cm で計算した通常の atomic MAC のプロファイルもプロットしてある。

(5)
上にも書いたように、今回は元素ごとの atomic scattering factors の虚数部の値から算出できる、吸収の素因として光電効果だけを考慮した LPAC の理論値の計算プログラム lpac_cm と lpac_dcc も書きました。rid_cm や rid_dcc の場合と同様にこれらの使い方も lac_cm や lac_dcc のものとまったく同じです。なお、LPAC (および MPAC) と通常の LAC (および MAC) の違いについては以下の文書の「物質による X 線の吸収」の章を御覧下さい。

http://www-bl20.spring8.or.jp/~sp8ct/tmp/nakano_JGSJ.pdf#page=2
http://www-bl20.spring8.or.jp/~sp8ct/tmp/nakano_JGeolSocJpn.pdf#page=8

とりあえず以上です。