

# 積層欠陥をもつ最密充てん構造の X 線回折強度 計算の電算機プログラム

高 橋 秀 夫

(1982年10月15日 受理)

## Electronic Computer's Program for Calculation of Diffracted Intensity by Close-packed Structures with Stacking Faults

Hidewo TAKAHASHI

### 1. 緒 言

我国における電算機の普及は目ざましく、電算機は我国の科学技術、産業等あらゆる分野での発展の跳躍台となっている。電算機の普及は同時に各種プログラムの開発につながり、我国には莫大なプログラムの蓄積がある筈である。それらのプログラムは部分的には各種ライブラリーとして編集されているが、国家的規模で編集されるべきであるとの提案は未だなされていないようである。X線回折データを編集した ASTM (American Society for Testing and Materials) カード一つ取り上げても、欧米人は事・物を標準化・規格化し万人に利用しやすい形に仕上げていく努力を積重ねていることがわかる。我国の科学技術における創造性の欠落が常に指摘され、学校教育においても、創造性の開発が常に叫ばれているが、筆者は欧米に見習うべきはむしろ事・物の標準化・規格化の方ではないかと考えている。電算機のプログラムについていえば、企業秘密に属しないものについては全て公表され、利用しやすい形に編集されてあることが望ましい。一方、プログラム作成者にとっては、プログラム公開はプログラムを所有することによる優位を失なうことになるとともに、プログラムには大かれ少かれ誤りがあることを思えば心が臆することである。筆者が所有する、他人に公開できる完成されたプログラムは数少ないのであるが、その一つをあえて公表して、このプログラムの編集化に向けての一石としたい。

本論文のプログラムは積層欠陥をもつ最密充てん構造の X 線回折強度を Allegra (1965) の式の Q 行列の固有値を求めて計算するもので、その理論および計算例は筆者 (1981) が既に記述したものである。Allegra (1965) の理論は柿木一小村 (1952, 1954) の式の簡約化という観点から構成されているため、難解で明確さを欠き、あまり注目されていない。筆者は Allegra の論文が公表された年、彼とは異なる観点から彼と同様な強度式を得て、論文にまとめ Acta Crystallographica に投稿したが、Allegra の論文が既に受理されている理由で却下された。筆者の方法は Allegra のそれとは全く異なるため、形式的には同形の諸行列の解釈が彼とは異なり、この差異が式の取扱いを

極めて簡単且つ容易にする。このことは Howard (1977) の extrinsic faults in face-centered cubic crystals を拡張した筆者の方法 (1978) と柿木—小村の方法による Howard and Kuwano (1979) の方法を比較すれば一目瞭然である。筆者の方法では、彼等の計算の5段階はあらゆる構造に対して予めプログラム化されている。筆者の方法ではPおよびQ行列を得る予備的段階のみが、唯一の作業であるが、これがまた柿木—小村の方法に比較すれば問題にならない程容易にできるように定式化されている。筆者の希望する所は本プログラムの多くの研究者が試され、積層欠陥をもつ多くの試料の解析に役立てて下さることである。

## 2. プログラムの説明

### Card no. 1-35

諸行列の次元は  $20 \times 20$  である。柿木—小村の式を用いた場合の  $60 \times 60$  に対応しているので、本プログラムは過去に考えられたあらゆる型の構造に対して適用可能であろう。入力はQの次元、逆格子点間の分割数および計算開始点である。この開始点は各ピークについてより詳しく計算するために設定されたが、本プログラムでは不必要である。入力される確率変数は  $\beta, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$  であり、 $\beta=1.0$  のとき、入力を停止する。計算例では  $\alpha_1$  のみが用いられている。

### Card no. 36-89

P行列が定義され、F行列が計算される。P行列は構造が異なればカードを入れ換えねばならない。変数  $\alpha_1$  を入力させる方がデータ・カードのタイピングが楽であると考えた。F行列の計算の際、FACOM 230-45S, SSL の GAUSED, GAUELD, SWEEP D を利用している。P行列は極めて特異な形をしているので、連立一次式の全ての解法を用いれば、どれか一つが解くであろうと考えた。

### Card no. 90-104

Q行列が計算される。本プログラムには Prasad & Lele (1971) の dHCP に対するQ行列が用いられている。筆者はQ行列も構造が異なればカードを入れ換えている。Q行列については入れ換えを行う必要は必ずしもなく、P行列の方を変えればよいのであるが、Q行列は構造が異なる毎に入れ換えた方が誤りを犯かす可能性が少ない。

### Card no. 105-186

Q行列の固有方程式の係数と  $B(m) = \text{Spur}(FQ^m)$  が計算される。Card no. 117-123, 148-155, 163-173 は  $B(m)$  についてのもので、これらを抜けば固有方程式の係数を求めるサブルーチンが得られる。

### Card no. 187-216

Q行列の固有値が SSL のヤラット・モデファイ法を用いて計算される。ヤラット・モデファイ法が電算機に格納されていない場合には、複素係数の高次多項式(多くの場合、実係数で充分のよ

うである)の他の解法のサブルーチンを利用すればよい。一般に高次多項式の全ての根が求められるわけではないが、サブルーチン HALSL では、一根でも正しい根が得られれば、組立互除法により方程式の次数を順次低下させて、最終的に全ての正しい根を得る仕組みになっている。また、その根が固有方程式を満たすか否か検算している。

Card no. 217-265, 314-322

C(i) が求められる。SSL の CSWEPD を利用している。Card no. 316-322 は C(i) の検算であるとともに固有値の検算でもある。

Card no. 266-313

ピークの位置 (P.P.), 最大強度, 積分強度幅, 強度分布の重心 (C.G.) と P.P. - C.G. の計算である。P.P. - C.G. が 0 であれば強度分布は P.P. について対称的になる。筆者の式, プログラムに誤りがあるとすれば, この個所であり, 読者は各自検討されたい。

Card no. 323-351

Q 行列の固有値を用いて強度計算を行う。柿木-小村の式 (プログラムは出力の後に付けてある) を用いた場合と一致する。

Card no. 352-440

各種サブルーチンである。HALSL 以外は極めて基礎的なものであるが, プログラム・ミスがある可能性もある。

#### 計 算 例

本例では入力カードは 3 枚で  $N=8$ ,  $N_1=100$ ,  $N_2=1$  が 1 枚に入っており,  $\beta=0.0$ ,  $\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=\alpha_4=0.1$  と  $\beta=1.0$  の 2 枚が確率変数として与えられている。 $\beta=1.0$  は読込み中止のためのものである。

#### 付 録

柿木-小村の式を用いた強度計算のプログラムである。先のプログラムの Card no. 161 の後に付けられればよいのであるが, そのとき dimension に注意する必要がある。又, 強度は F5 になっている。

#### 文 献

- Allegra, G. (1964). Acta Cryst. **17**, 579  
Howard, C. J. (1977). Acta Cryst. A **33**, 29  
Howard, C. J. & Kuwano, N. (1979). Acta Cryst. A **35**, 337  
Kakinoki, J. & Komura, Y. (1952). J. Phys. Soc. Japan **7**, 30  
Kakinoki, J. & Komura, Y. (1954). J. Phys. Soc. Japan **9**, 169  
Prasad, B. & Lele, S. (1971). Acta Cryst. A **27**, 54  
Takahashi, H. (1978). Acta Cryst. A **34**, 344  
Takahashi, H. (1981). Bull. Fac. Educ. Univ. Kagoshima (Nat. Sci.) **28**, 1

```

1:C   PROGRAM FOR CALCULATION OF DIFFRACTED INTENSITY BY CLOSE-
2:C   PACKED STRUCTURE WITH STACKING FAULTS
3:    COMPLEX EPS1, EPS2, EXP1, EXP2, S, FX, SB, EXPY
4:    COMPLEX Q, QQ, T, D, B, C, CRT, COAB, PCR, AQ
5:    DIMENSION P(20,20), A(20,20), Q(20,20), QQ(20,20), AB(40,25)
6:    DIMENSION AQ(20,20), SQ(25,25)
7:    DIMENSION F(20), T(25), D(25), B(25), CRT(20), COAB(25), X(20), C(25)
8:    DIMENSION PHAI(1000), FI(1000)
9:    PAI=3.141592653589793
10:   X1=-0.5
11:   Y1=0.86602540378
12:   EPS1=CMPLX(X1,Y1)
13:   EPS2=CMPLX(X1,-Y1)
14:   READ(5,501)N,N1,N2
15: 501 FORMAT(8I10)
16:C   N IS DIMENSION OF Q MATRIX
17:C   N1 IS NUMBER OF POINTS CALCULATED INTENSITY
18:C   N2 IS STARTING POINT OF CALCULATION
19:   N4=N1-N2+1
20:   N5=N-1
21:   N3=N1/2
22:   N6=N+1
23:   N9=N+2
24:   99 READ(5,510)BETA,ALP1,ALP2,ALP3,ALP4
25: 510 FORMAT(SF10.5)
26:   IF(BETA.EQ.1.0)STOP
27:   WRITE(6,650)
28: 650 FORMAT(1H1)
29:   WRITE(6,611)N
30: 611 FORMAT(10X,23HDIMENSION OF Q MATRIX =,15)
31:   WRITE(6,661)
32: 661 FORMAT(///,10X,25HPROBABILITIES OF P MATRIX)
33:   WRITE(6,600)BETA,ALP1,ALP2,ALP3,ALP4
34: 600 FORMAT(3F10.5)
35: 621 FORMAT(SF10.5)
36:   EXP2=(1.0-BETA)*EPS2+BETA*EPS1
37:   EXP1=BETA*EPS2+(1.0-BETA)*EPS1
38:   DO 10 I=1,N
39:   DO 10 J=1,N
40:   10 P(I,J)=0.0
41:C   P MATRIX IS GIVEN HERE.
42:C   DHCP OF LELE, ALP4C
43:   P(1,2)=P(3,4)=P(7,4)=P(8,2)=1.0-ALP1
44:   P(1,5)=P(3,6)=P(7,6)=P(8,5)=ALP1
45:   P(2,3)=P(4,1)=P(5,7)=P(6,8)=1.0
46:   22 CONTINUE
47:C   CALCULATION OF F MATRIX
48:   DO 11 I=1,N
49:   DO 11 J=1,N5
50:   A(J,I)=P(I,J)
51:   11 CONTINUE
52:   DO 12 I=1,N
53:   A(N,I)=1.0
54:   12 CONTINUE
55:   DO 13 I=1,N5
56:   A(I,N6)=0.0
57:   13 CONTINUE
58:   DO 16 I=1,N5
59:   A(I,I)=A(I,I)-1.0
60:   16 CONTINUE
61:   A(N,N6)=1.0
62:   IF(IND.EQ.2) GO TO 23
63:   CALL GAUSED(A,20,N6,1.0D-15,X,ILL)
64:   DO 21 I=1,N
65:   21 F(I)=X(I)

```

```
66:      IND=1
67:      IF(ILL.EQ.0) GO TO 14
68:      CALL GAUELD(A,20,N,N6,1.0D-15,ILL)
69:      IND=2
70:      IF(ILL.EQ.0) GO TO 14
71:      IF(ILL.NE.0) GO TO 22
72:      23 CONTINUE
73:      CALL SWEEP(A,20,N,N6,1.0D-15,ILL)
74:      IND=3
75:      IF(ILL.EQ.0) GO TO 14
76:      WRITE(6,606)ILL
77:      606 FORMAT(///,10X,5HILL =,I5)
78:      IF(ILL.NE.0) STOP
79:      14 DO 15 I=1,N
80:      F(I)=A(I,N6)
81:      15 CONTINUE
82:      WRITE(6,663)
83:      663 FORMAT(///,10X,25HPROBABILITIES OF F MATRIX)
84:      WRITE(6,610)IND
85:      610 FORMAT(8I10)
86:      WRITE(6,600)(F(I),I=1,N)
87:C     Q MATRIX IS GIVEN HERE.
88:      DO 20 I=1,N
89:C     Q MATRIX OF DHCP
90:      Q(I,1)=P(I,1)*EPS1
91:      Q(I,2)=P(I,2)*EPS2
92:      Q(I,3)=P(I,3)*EPS2
93:      Q(I,4)=P(I,4)*EPS1
94:      Q(I,5)=P(I,5)*EPS1
95:      Q(I,6)=P(I,6)*EPS2
96:      Q(I,7)=P(I,7)*EPS1
97:      Q(I,8)=P(I,8)*EPS2
98:      Q(I,9)=P(I,9)*EPS1
99:      Q(I,10)=P(I,10)*EPS2
100:     Q(I,11)=P(I,11)*EPS1
101:     Q(I,12)=P(I,12)*EPS2
102:     20 CONTINUE
103:C     CALCULATION OF CHARACTERISTIC VALUES OF Q MATRIX
104:C     CALCULATION OF B(M)=SPUR(F*Q**M)
105:     S=0.0
106:     DO 30 I=1,N
107:     S=S+Q(I,I)
108:     30 CONTINUE
109:     T(1)=S
110:     D(1)=1.0
111:     B(1)=1.0
112:     C(1)=1.0
113:     DO 31 I=1,N
114:     DO 31 J=1,N
115:     QQ(I,J)=Q(I,J)
116:     31 CONTINUE
117:     DO 32 I=1,N
118:     S=0.0
119:     DO 33 J=1,N
120:     S=S+Q(I,J)
121:     33 CONTINUE
122:     SQ(I,1)=S
123:     32 CONTINUE
124:     DO 40 M=2,N9
125:     DO 41 I=1,N
126:     DO 41 K=1,N
127:     S=0.0
128:     DO 42 J=1,N
129:     S=S+QQ(I,J)*Q(J,K)
130:     42 CONTINUE
```

```

131:      AQ(I,K)=S
132:      41 CONTINUE
133:      DO 61 I=1,N
134:      DO 61 J=1,N
135:      QQ(I,J)=AQ(I,J)
136:      61 CONTINUE
137:      S=0.0
138:      DO 43 I=1,N
139:      S=S+QQ(I,I)
140:      43 CONTINUE
141:      T(M)=S
142:      S=0.0
143:      MA=M-1
144:      DO 44 I=1,MA
145:      S=S+D(M-I)*T(I)*(-1)**(I+1)
146:      44 CONTINUE
147:      D(M)=S/MA
148:      DO 45 I=1,N
149:      S=0.0
150:      DO 46 J=1,N
151:      S=S+QQ(I,J)
152:      46 CONTINUE
153:      SQ(I,M)=S
154:      45 CONTINUE
155:      40 CONTINUE
156:      DO 50 I=1,N6
157:      C(I)=D(I)*(-1)**(I+1)
158:      50 CONTINUE
159:      WRITE(6,664)
160:      664 FORMAT(///,10X,39HCOEFFICIENTS OF CHARACTERISTIC EQUATION)
161:      WRITE(6,601)(C(J),J=1,N6)
162:      601 FORMAT(3(2F10.7,5X))
163:      DO 51 M=2,N9
164:      S=0.0
165:      DO 52 I=1,N
166:      S=S+F(I)*SQ(I,M-1)
167:      52 CONTINUE
168:      B(M)=S
169:      51 CONTINUE
170:      WRITE(6,665)
171:      665 FORMAT(///,10X,4HB(M))
172:      WRITE(6,605)(B(J),J=1,N9)
173:      605 FORMAT(2F15.7)
174:C      CALCULATION OF CHARACTERISTIC VALUES
175:C      CALCULATION OF AMPLITUDES AND ARGUMENTS OF CHARACTERISTIC VALUES
176:      NR=N6
177:      DO 100 I=1,N6
178:      J=N6+1-I
179:      CC=REAL(C(J))
180:      SC=AIMAC(C(J))
181:      SQC=CC**2+SC**2
182:      AMC=SQRT(SQC)
183:      IF(AMC.GT.0.1E-5) GO TO 101
184:      NR=NR-1
185:      100 CONTINUE
186:      101 CONTINUE
187:      NNR=NR-1
188:      EPS=0.1E-5
189:      WRITE(6,666)
190:      666 FORMAT(///,5X,65HCHARACTERISTIC VALUES      AMPLITUDES      ARGUMENTS
191:      1 ARGUMENTS/PAI )
192:      CALL HALSL(C,CRT,NR)
193:      DO 400 I=1,NNR
194:      ACR=REAL(CRT(I))
195:      400 CONTINUE

```

```
196: NN=NNR
197: DO 58 I=1,NNR
198: CCR=REAL(CRT(I))
199: SCR=AIMAG(CRT(I))
200: SCRT=CCR**2+SCR**2
201: AMPL=SQRT(SCRT)
202: CALL COARG(CRT(I),ARG)
203: PARG=ARG/PAI
204: WRITE(6,604)CRT(I),AMPL,ARG,PARG
205: 604 FORMAT(5X,2F10.7,3(5X,F10.7))
206: 58 CONTINUE
207:C TEST OF CHARACTERISTIC VALUES
208: WRITE(6,667)
209: 667 FORMAT(///,10X,12HVALUES OF FX)
210: DO 210 I=1,NNR
211: FX=C(NR)
212: DO 211 J=1,NNR
213: FX=FX+C(J)*CRT(I)**(NR-J)
214: 211 CONTINUE
215: WRITE(6,600)FX
216: 210 CONTINUE
217:C CALCULATION OF COEFFICIENTS OF CHARACTERISTIC VALUES
218: NDW=NN*2
219: NN6=NN+1
220: DO 71 I=1,NDW
221: DO 71 J=1,NN6
222: AB(I,J)=0.0
223: 71 CONTINUE
224: NNN=NN+1
225: DO 53 I=1,NN
226: J=I+1
227: RBM=REAL(B(J))
228: AIBM=AIMAG(B(J))
229: N7=NN+I
230: AB(I,NN6)=RBM
231: AB(N7,NN6)=AIBM
232: 53 CONTINUE
233: DO 54 I=1,NN
234: DO 55 J=1,NN
235: PCR=CRT(J)**I
236: RPCR=REAL(PCR)
237: AIPCR=AIMAG(PCR)
238: N8=NN+I
239: AB(I,J)=RPCR
240: AB(N8,J)=AIPCR
241: 55 CONTINUE
242: 54 CONTINUE
243: 70 CONTINUE
244: WRITE(6,668)
245: 668 FORMAT(///,7X,66HCOEFFICIENTS C(I) AMPLITUDES ARGUMENTS
246: 1 ARGUMENTS/PAI)
247: CALL CSWEPD(AB,40,NN,1,0.1D-6,ILL)
248: IF(ILL.EQ.0) GO TO 57
249: WRITE(6,654)ILL
250: 654 FORMAT(///,10X,9HILL OF AB,I5)
251: IF(ILL.NE.0) STOP
252: 57 CONTINUE
253: DO 56 I=1,NN
254: NI=NN+I
255: NN1=NDW+1
256: CAB=AB(I,NN1)
257: SAB=AB(NI,NN1)
258: DAB=CAB**2+SAB**2
259: ABAMPL=SQRT(DAB)
260: COAB(I)=CMPLX(CAB,SAB)
```

```

261:      CALL COARG(COAB(I),ABARG)
262:      PABARG=ABARG/PAI
263:      WRITE(6,603)CAB,SAB,ABAMPL,ABARG,PABARG
264: 603   FORMAT(5X,2F10.7,3(5X,F10.7))
265:      56 CONTINUE
266:C    CALCULATION OF PEAK POSITIONS (P.P),INTENSITY MAXIMA,INTEGRAL
267:C    BREADTHS,CENTERS OF GRAVITY (C.G.) AND DIFFERENCE BETWEEN
268:C    P.P. AND C.G.
269:      WRITE(6,650)
270:      WRITE(6,669)
271: 669   FORMAT(5X,69HPEAK POSITION MAXIMUM OF I. INTEG. BREADTH CENTER OF
272: 1GRAV. P.P.-C.G.)
273:      DO 60 I=1,NN
274:      CALL COARG(CRT(I),THETA)
275:      CALL COARG(COAB(I),XAI)
276:      RR=REAL(CRT(I))**2+AIMAG(CRT(I))**2
277:      TANAL=TAN(XAI)*(1.0+RR)/(1.0-RR)
278:      PAIF=PAI/2.0
279:      PAIS=3.0*PAI/2.0
280:      PAIT=2.0*PAI
281:      IF(XAI.GE.0.0.AND.XAI.LE.PAIF)ALPHA=ATAN(TANAL)
282:      IF(XAI.GT.PAIF.AND.XAI.LE.PAI)ALPHA=PAI+ATAN(TANAL)
283:      IF(XAI.LE.-PAIF.AND.XAI.LT.0.0)ALPHA=ATAN(TANAL)
284:      IF(XAI.LE.-PAI.AND.XAI.LT.-PAIF)ALPHA=-PAI+ATAN(TANAL)
285:      R=SQRT(RR)
286:      R4=RR**2
287:      SIKH=SIN(XAI)
288:      TXAI=2.0*XAI
289:      SQCR=1.0-2.0*RR*COS(TXAI)+R4
290:      CRR=SQRT(SQCR)
291:      SINP=2.0*R*SIKH/CRR
292:      IF(XAI.GE.0.0.AND.XAI.LT.PAIF)ANGP=ARSIN(SINP)
293:      IF(XAI.GE.PAIF.AND.XAI.LT.PAI)ANGP=PAI-ARSIN(SINP)
294:      IF(XAI.LE.-PAIF.AND.XAI.LT.0.0)ANGP=ARSIN(SINP)
295:      IF(XAI.LE.-PAI.AND.XAI.LT.-PAIF)ANGP=-PAI-ARSIN(SINP)
296:      PHAIM=THETA+ALPHA-ANGP
297:      CX=COS(PHAIM)
298:      CY=SIN(PHAIM)
299:      EXPY=CMPLX(CX,-CY)
300:      S=COAB(I)/(1.0-CRT(I)*EXPY)
301:      FIM=2.0*REAL(S)-REAL(COAB(I))
302:      AINTE=2.0*PAI*REAL(COAB(I))
303:      BRINT=AINTE/FIM
304:      BA=1.0+2.0*R*COS(THETA)+RR
305:      BB=R*SIN(THETA)
306:      BC=1.0+R*COS(THETA)
307:      BD=BB/BC
308:      ONMOM=PAIT*(AIMAG(COAB(I))*ALOG(BA)+2.0*REAL(COAB(I))*ATAN(BD))
309:      PHAIG=ONMOM/AINTE
310:      DPEAK=PHAIM-PHAIG
311:      WRITE(6,607)PHAIM,FIM,BRINT,PHAIG,DPEAK
312: 607   FORMAT(7X,F10.5,4X,F10.5,4X,F10.5,5X,F10.5,5X,F10.5)
313:      60 CONTINUE
314:      WRITE(6,672)
315: 672   FORMAT(///,10X,2HSB)
316:      DO 81 J=1,NNN
317:      SB=0.0
318:      DO 82 I=1,NN
319:      SB=SB+COAB(I)*CRT(I)**J
320:      82 CONTINUE
321:      WRITE(6,600)SB
322:      81 CONTINUE
323:C    CALCULATION OF DIFFRACTED INTENSITY
324:      DO 1 L=N2,N4
325:      PHAI(L)=-PAI+2.0*PAI*(L-1)/FLOAT(N1)

```

```
326:      CX=COS(PHAI(L))
327:      CY=SIN(PHAI(L))
328:      EXPY=CMPLX(CX,-CY)
329:      S=0.0
330:      DO 2 I=1,NN
331:      S=S+COAB(I)/(1.0-CRT(I)*EXPY)
332:    2 CONTINUE
333:      SS=0.0
334:      DO 3 I=1,NN
335:      SS=SS+REAL(COAB(I))
336:    3 CONTINUE
337:      FI(L)=2.0*REAL(S)-1.0
338:      1+2.0*(1.0-SS)
339:    1 CONTINUE
340:      WRITE(6,650)
341:      WRITE(6,670)
342: 670 FORMAT(10X,33HANGLES AND DIFFRACTED INTENSITIES)
343:      DO 410 I=N2,N3
344:      II=I-1
345:      INN=N3+I-N2+1
346:      IN=N3+II-N2+1
347:      WRITE(6,640)II,PHAI(I),FI(I),IN,PHAI(INN),FI(INN)
348: 640 FORMAT(5X,2(I5,2F12.5,5X))
349: 410 CONTINUE
350:      GO TO 99
351:      END
```

```
352:      SUBROUTINE HALSL(A,X,NR)
353:  C TO SOLVE HIGHER ORDER POLYNOMIAL EQUATION
354:  COMPLEX A,B,C,FX,X,XS
355:  DIMENSION A(20),B(20),C(20),X(20),XS(20)
356:  C A IS COEFFICIENTS OF ALGEBRAIC EQUATION
357:  C NR-1 IS ORDER OF EQUATION
358:      EPSD=0.1D-8
359:      EPSD=0.1D-15
360:      CALL CJARTD(A,NR,EPSD,X,ILL)
361:      IF(ILL.NE.30000.AND.ILL.NE.1) GO TO 10
362:      WRITE(6,651) ILL
363: 651 FORMAT(10X,4HILL=,I5)
364:      RETURN
365:    10 CONTINUE
366:      DO 11 I=1,NR
367:      C(I)=A(I)
368:    11 CONTINUE
369:      N=NR-1
370:      INR=NR
371:      IN=N
372:      IX=1
373:    29 CONTINUE
374:      IF(IX.EQ.NR) RETURN
375:      FX=A(NR)
376:      DO 20 I=1,N
377:      FX=FX+A(I)*X(IX)**(NR-I)
378:    20 CONTINUE
379:      RFX=REAL(FX)
380:      AIFX=AIMAG(FX)
381:      SQFX=RFX**2+AIFX**2
382:      AMPFX=SQRT(SQFX)
383:      IF(AMPFX.GT.EPSD) GO TO 40
384:      B(1)=C(1)
385:      DO 30 I=1,IN
386:      J=I+1
387:      B(J)=C(J)+X(IX)*B(I)
```

```
388: 30 CONTINUE
389: DO 31 I=1,INR
390: C(I)=B(I)
391: 31 CONTINUE
392: IX=IX+1
393: GO TO 29
394: 40 CONTINUE
395: INR=NR-IX+1
396: IN=INR-1
397: CALL CJARTD(C,INR,EPD,XS,ILL)
398: IF(ILL.NE.30000.AND.ILL.NE.1) GO TO 50
399: WRITE(6,651) ILL
400: RETURN
401: 50 CONTINUE
402: DO 51 I=1,IN
403: J=IX-1+I
404: X(J)=XS(I)
405: 51 CONTINUE
406: GO TO 29
407: END

408: SUBROUTINE ARLOGC(A,B,C,D)
409:C A+IB IS A COMPLEX NUMBER
410:C LOG(A+IB)=C+ID
411: COMPLEX CAB
412: CAB=CMPLX(A,B)
413: CALL COARG(CAB,D)
414: SQAB=A**2+B**2
415: C=0.5*ALOG(SQAB)
416: RETURN
417: END

418: SUBROUTINE COARG(A,THETA)
419:C TO OBTAIN ARGUMENT OF COMPLEX NUMBER A
420: COMPLEX A
421: PAI=3.141592653589793
422: RA=REAL(A)
423: AIA=AIMAG(A)
424: EPS=0.1E-5
425: ABRA=ABS(RA)
426: ABIA=ABS(AIA)
427: IF(ABRA.LT.EPS)RA=0.0
428: IF(ABIA.LT.EPS)AIA=0.0
429: IF(RA.EQ.0.0.AND.AIA.GT.0.0)THETA=PAI/2.0
430: IF(RA.EQ.0.0.AND.AIA.LT.0.0) THETA=-PAI/2.0
431: IF(RA.GT.0.0.AND.AIA.EQ.0.0)THETA=0.0
432: IF(RA.LT.0.0.AND.AIA.EQ.0.0)THETA=PAI
433: IF(RA.EQ.0.0.OR.AIA.EQ.0.0) RETURN
434: TANA=AIA/RA
435: IF(RA.GT.0.0.AND.AIA.GT.0.0)THETA=ATAN(TANA)
436: IF(RA.LT.0.0.AND.AIA.GT.0.0)THETA=PAI+ATAN(TANA)
437: IF(RA.GT.0.0.AND.AIA.LT.0.0)THETA=ATAN(TANA)
438: IF(RA.LT.0.0.AND.AIA.LT.0.0) THETA=ATAN(TANA)-PAI
439: RETURN
440: END
```

DIMENSION OF Q MATRIX = 8

PROBABILITIES OF P MATRIX  
 .00000 .10000 .10000 .10000 .00000

PROBABILITIES OF F MATRIX  
 2  
 .22500 .22500 .22500 .22500 .02500 .02500 .02500 .02500

COEFFICIENTS OF CHARACTERISTIC EQUATION  
 1.0000000 .0000000 .0000000 .0000000 .0000000 .0000000  
 .0000000 .0000000 -.7300000 .0000000 .0000000 .0000000  
 .0000000 .0000000 .0000000 .0000000 .0000000 .0000000

B(M)  
 1.0000000 .0000000  
 -.5000000 .0000000  
 .1150000 .0000000  
 -.2300000 .0000000  
 .6625000 .0000000  
 -.3650000 .0000000  
 .0839500 .0000000  
 -.1679000 .0000000  
 .4836250 .0000000  
 -.2664500 .0000000

CHARACTERISTIC VALUES	AMPLITUDES	ARGUMENTS	ARGUMENTS/PAI
.0000000 -.9243378	.9243378	-1.5707963	-.5000000
.0000000 .9243378	.9243378	1.5707963	.5000000
.9243378 -.0000000	.9243378	.0000000	.0000000
-.9243378 .0000000	.9243378	3.1415927	1.0000000

VALUES OF FX  
 -.00000 .00000  
 -.00000 -.00000  
 -.00000 -.00000  
 .00000 -.00000

COEFFICIENTS C(I)	AMPLITUDES	ARGUMENTS	ARGUMENTS/PAI
.1932342 -.0624245	.2030672	-.3124681	-.0994617
.1932342 .0624245	.2030672	.3124681	.0994617
.0524935 .0000000	.0524935	.0000000	.0000000
.4685723 .0000000	.4685723	.0000000	.0000000

PEAK POSITION	MAXIMUM OF I.	INTEG. BREADTH	CENTER OF GRAV.	P.P.-C.G.
-1.58318	5.03943	.24093	-1.69170	.10852
1.58318	5.03943	.24093	1.69170	-.10852
.00000	1.33508	.24705	.00000	-.00000
3.14159	11.91733	.24705	.00000	3.14159

SB	
-.50000	-.00000
.11500	.00000
-.23000	.00000
.66250	.00000
-.36500	.00000

## ANGLES AND DIFFRACTED INTENSITIES

0	-3.14159	12.16667	50	-.00000	1.35185
1	-3.07876	7.52870	51	.06283	.83212
2	-3.01593	3.61124	52	.12566	.39281
3	-2.95310	2.02611	53	.18850	.21449
4	-2.89027	1.32461	54	.25133	.13485
5	-2.82743	.96804	55	.31416	.09354
6	-2.76460	.76674	56	.37699	.06928
7	-2.70177	.64455	57	.43982	.05352
8	-2.63894	.56694	58	.50265	.04238
9	-2.57611	.51665	59	.56549	.03389
10	-2.51327	.48445	60	.62832	.02700
11	-2.45044	.46522	61	.69115	.02109
12	-2.38761	.45609	62	.75398	.01583
13	-2.32478	.45563	63	.81681	.01106
14	-2.26195	.46344	64	.87965	.00677
15	-2.19911	.48004	65	.94248	.00313
16	-2.13628	.50701	66	1.00531	.00061
17	-2.07345	.54736	67	1.06814	.00019
18	-2.01062	.60653	68	1.13097	.00390
19	-1.94779	.69435	69	1.19381	.01602
20	-1.88496	.82957	70	1.25664	.04623
21	-1.82212	1.05104	71	1.31947	.11842
22	-1.75929	1.44819	72	1.38230	.29954
23	-1.69646	2.24796	73	1.44513	.80697
24	-1.63363	3.92005	74	1.50796	2.36580
25	-1.57080	5.05556	75	1.57080	5.05556
26	-1.50796	2.36580	76	1.63363	3.92005
27	-1.44513	.80697	77	1.69646	2.24796
28	-1.38230	.29954	78	1.75929	1.44819
29	-1.31947	.11842	79	1.82212	1.05104
30	-1.25664	.04623	80	1.88496	.82957
31	-1.19381	.01602	81	1.94779	.69435
32	-1.13097	.00390	82	2.01062	.60653
33	-1.06814	.00019	83	2.07345	.54736
34	-1.00531	.00061	84	2.13628	.50701
35	-.94248	.00313	85	2.19911	.48004
36	-.87965	.00677	86	2.26195	.46344
37	-.81681	.01106	87	2.32478	.45563
38	-.75398	.01583	88	2.38761	.45609
39	-.69115	.02109	89	2.45044	.46522
40	-.62832	.02700	90	2.51327	.48445
41	-.56549	.03389	91	2.57611	.51665
42	-.50265	.04238	92	2.63894	.56694
43	-.43982	.05352	93	2.70177	.64455
44	-.37699	.06928	94	2.76460	.76674
45	-.31416	.09354	95	2.82743	.96804
46	-.25133	.13485	96	2.89027	1.32461
47	-.18850	.21449	97	2.95310	2.02611
48	-.12566	.39281	98	3.01593	3.61124
49	-.06283	.83212	99	3.07876	7.52870

```
1.000      EXP3(1)=CMPLX(1.0,0.0)
2.000      DO 1 L=N2,N4
3.000      PHAI(L)=-PAI+2.0*PAI*(L-1)/FLOAT(N1)
4.000      DO 5 I=1,N6
5.000      PS(I)=PHAI(L)*I
6.000      CX(I)=COS(PS(I))
7.000      CY(I)=SIN(PS(I))
8.000      5 CONTINUE
9.000      DO 6 I=2,N6
10.000     EXP3(I)=CMPLX(CX(I-1),-CY(I-1))
11.000     6 CONTINUE
12.000     SC=CMPLX(0.0,0.0)
13.000     DO 70 I=1,N6
14.000     SC =SC+C(I)*EXP3(I)
15.000     70 CONTINUE
16.000     SAA=CMPLX(0.0,0.0)
17.000     DO 80 I=1,N
18.000     SAA=SAA+SA(I)*EXP3(I)
19.000     80 CONTINUE
20.000     CSC=CONJG(SC)
21.000     F1(L)= SC*CSC
22.000     F3=CSC*SAA
23.000     F4 = F3/F1(L)
24.000     RF4=REAL(F4)
25.000     F5(L)=2.0*RF4-1.0
26.000     1 CONTINUE
27.000     DO 410 I=N2,N3
28.000     IN=N3+I-N2+1
29.000     WRITE(6,610)I,PHAI(I),F5(I),IN,PHAI(IN),F5(IN)
30.000     610 FORMAT(5X,2(I5,2F12.5,5X))
31.000     410 CONTINUE
32.000     GO TO 99
33.000     1000 CONTINUE
34.000     END
```