

入射ビーム強度補正プログラムについて

TOF 中性子粉末構造解析を行ったとき、解析に使用したデータが入射ビーム強度で **normalization** されている時、MEM 解析をする時に必要となります。

GSAS で解析をし、**histogram** を書き出したときに **Incdnt** が 1.0 になっていたらそのデータは **normalization** されている可能性が大です。

しかし、装置のデザインによっては、この値が 1.0 になっていても入射ビーム強度が 1.0 でも補正が必要とならない場合があります。ですので、TOF 粉末回折計で実験を行う際には、装置の概要および、どういうデータ処理がされているか、把握しておく必要があります。

GSAS で構造解析が終わり、しかるべきデータセットから、**Alchemy** を実行して ***.fos** ファイルを作成します。次に、入射ビーム強度のデータを、**X-Y** 形式で用意します。

X: TOF (時間) Y:入射ビーム強度

入射ビーム強度補正プログラムは、データセットと同じフォルダーに置いておくか、ファイル名を入力するときに、フルパスで入力してください。なんのこっちゃか、意味が分からない人は、とりあえず、***.fos** とか、用意した入射ビーム強度ファイルと、このプログラムを同じフォルダーに置いておけばいいです。

入射ビーム強度補正プログラム **itib.exe** を実行すると、コマンドプロンプトが立ち上がります。

まず、補正する ***.fos** ファイル名をきかれますので、入力します。

つぎに、入射ビーム強度ファイルを聞かれますので、ファイル名を入力します。

次に、補正された結果を出力するファイル名を聞かれますので、入力します。

以上で終了です。

Itib.zip には、5つのファイルがあります。

itib.exe: 入射ビーム強度補正プログラム

bank1.fos: テスト用 ***.fos**

test.txt: 入射ビーム強度

testfos.txt: 補正後。これを例えば、**test_new.fos** と変更して **MEM** を実行する。

bank1_o.fos: 入射ビーム強度が考慮されている解析結果から作成した ***.fos**

testfos.txt と **bank1_o.fos** が一致していれば OK.

bank1.fos は Alchemy を実行する際に、入射ビーム強度を乗算せずに出力したもので、bank1_o.fos はちゃんとした方法で Alchemy を実行したものなので、入射ビーム強度補正プログラムを使用した結果と、bank1_o.fos が一致していなければなりません。

inib.exe ←コマンドラインからプログラムを起動

input file name(*.fos)

bank1.fos

input incident beam file

test.txt

output file name

bank1_new.fos

赤文字が入力するところです。

ちなみに、このデータは背面バンクのデータしかないので、MEM を実行してもきれいな図は出てこないと思います。Low-Q の反射が欠如してます。