

## 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、意味が分からぬ人は、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。これを例えれば、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。