

計数管を用いたX線小角散乱のスリットと強度の補正

丸 野 重 雄

Corrections of Slit Smearing and Intensity in Small Angle X-Ray Scattering Using Counters

Shigeo MARUNO

In small angle scattering equipment of x-ray using counters an observed intensity which is scattered by sample has errors due to the width and the height of the incident beam depending on the collimating slits, and the counter loss of the detector. For the former methods of the correction are concisely summed up. As a practicable case, the correction of finite slit height and negligible width which was analysed through a suitable expression in numerical approximation method instead of numerical differentiation by Schmidt and Hight was used for the errors. For the latter the problem of counter loss should be understood and evaluated rightly because intensity of x-ray small angle scattering is measured from strong intensity to weak. The form factor influencing counter loss changes by both wave form and voltage applied to x-ray tube. If the voltage is constant and counter loss is not greater than twenty percent, counter loss which due to counter resolving time and form factor is found experimentally. The both corrections are made to get the real scattering value from the experimental value.

It is complicated things that the small angle x-ray scattering correction using counters for slit height smearing, counter resolution error and background noise. Computer is very useful to do directly calculations of these procedures as a practical problem. Computer program is prepared for I. B. M. 7072 (modified 7072) and the errors are corrected continuously. The program is attached the end of this paper.

I 緒 言

X線小角散乱装置を使用してえられた散乱強度曲線には、光学系各種スリットの大きさや形状による誤差の補正が必要である。つまり、実測散乱強度曲線には試料にあたる入射X線の中と高さ起因する散乱誤差が入ってくるのである。この点を十分に理解することなくして得られた結果を正しく評価することはできない。

実測散乱強度曲線に対してこの誤差の補正がおこなわれて後、はじめて解析すべき散乱強度曲線がえられるのであるにもかかわらず、それが複雑で計算にもかなりの労力を要するため、あるいはまたこの問題に対する理解がないために全く検討されない場合が多い。それゆえ、スリット補正についてすでに総括的な説明もあるが¹⁾、この問題をできるだけ系統的に理解できるように記述をおこない、最も一般的に用いられる有限の高さをもった微細線束のスリット系に対する Schmidt and Hight の補正法²⁾ の実際面への適用を考えた。

一方、近年X線発生装置の改良によって、従来の密閉式X線管球からも強いX線源がえられるようになり、計

数管を使つての散乱強度の測定が容易になり、小角散乱の強度測定にも計数管が多く用いられるようになってきた。小角散乱では非常に強い散乱線から弱いものまで、広い範囲の強度の測定が必要であるから、真の実測散乱強度曲線をうるには特に計数数え落しに注意しなければならない。それゆえ、計数数え落しの補正についてX線源の高圧とその波形、電子管回路および計数管の分解時間を考慮した方法を示す。

狭い有限な高さのスリットを用いてえられた実測散乱強度曲線から、そのスリットの補正、計数数え落しの補正、そして空気や試料からの二次(蛍光)X線によるバックグラウンドノイズの補正などを、あわせて一緒に連続的におこなうことができれば、直接解析に供し得る散乱曲線がえられるので、この問題がいままでのように理論的なことだけに終ることなく、小角散乱の実験に実際上大きな助けとなる。このようなことからこれをおこなう電子計算機のプログラムを作成した。プログラムは I. B. M. 7072 (modified 7070) を使った FORTRAN プログラムである。プログラムはこのままでは国産の計算

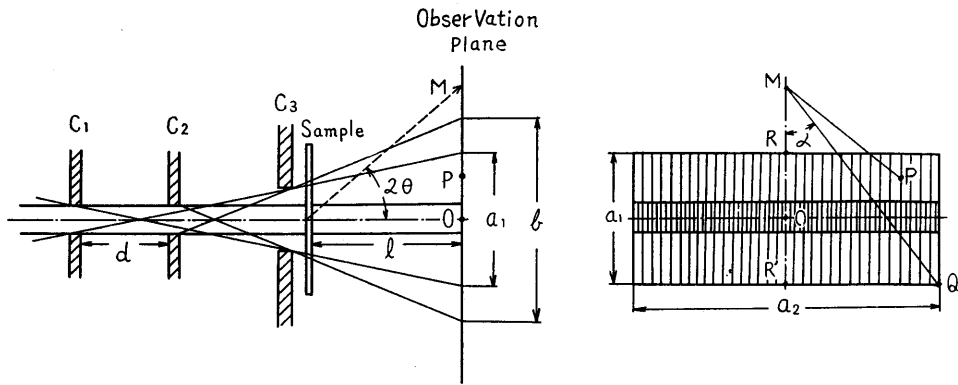


Fig. 1. Slit system for a small angle scattering apparatus and parasitic radiation on observation plane. (a) Top view. (b) Side view from x-ray source (inaccessible part of measurement).

機にすぐ使用することはできないが、多少の改作をすることによって可解と考えられるので記述する。

II. 散乱曲線の補正

小角散乱装置のスリット系 (C₁, C₂, C₃) と入射 X 線による散乱の様態を Fig. 1 に示す。a₁ は inaccessible な領域で、b はスリット C₃ による parasitic 散乱に対する補正が必要な領域である。M 点で観測される散乱強度は散乱角 $\overline{MO}/l = 2\theta$ で表わされる。いま P 点への入射 X 線が試料で散乱されて M 点で観測されるとすると、

散乱角は \overline{MP}/l であるが実際はこれも 2θ として表わされる。それゆえ、実測散乱強度曲線は入射線の大きさや形状による誤差を含むことになる。M 点における 2θ の最大不確定誤差を A とすると

$$A = (\overline{MP} \cos \alpha - \overline{MP} \sin \alpha) / l = (\overline{MQ} - \overline{MR}) / l,$$

また $\tan \alpha = \overline{R'Q} / \overline{R'M} = a_2 / (a_1 + 4l\theta)$,

したがって

$$A = 2\theta \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{a_2}{a_1 + 4l\theta} \right)^2 \right\} + \frac{a_1}{2l} \left\{ 2 + \frac{1}{2} \left(\frac{a_2}{a_1 + 4l\theta} \right)^2 \right\}. \quad (1)$$

一般に l は非常に大きく a₁ は小さいことを考え、 $a_1 \ll 4l\theta$ とすると

$$A = a_1 / l + a_2^2 / 16l^2\theta. \quad (1')$$

A は 2θ が大きいとスリットの中に、 2θ が小さいとスリットの高さに大きく影響されるといえる。つぎに一般的なスリット補正問題を考えてみる。P の座標を (x, y) とし、この点への入射線の強度分布函数を $i_0(X, Y)$ とする ($\int \int i_0(X, Y) = 1$ に normalized)。そして任意の観測点 M において、この入射線による散乱強度への contribution を $I_0(h)$ とすると、全散乱強度は

$$\mathcal{J}(h) = \int \int i_0(X, Y) I_0(h - X, h - Y) dX dY, \quad (2)$$

ここで $h = (2\pi/\lambda) \overline{PM}/l$, $X = (2\pi/\lambda)(x/l)$ および $Y = (2\pi/\lambda)(y/l)$ である。いま求めるべきものは $I_0(h)$ であり、たたみ込み (convolution) 理論を使っての理論解が求められているが実際のでない³⁾。それゆえ、スリット補正の問題をその巾と高さにかけて独立におこなうことを考えてみる。すなわち、実験上適当なスリット系を選ぶことによって、矛盾なく補正問題を解く実際の効果をあげることができるからである。

1. 巾の補正

この補正は、ある巾をもった入射線に対して、その入射線全体と $x=0$ で同じ強度をもった無限に細い入射線を用いて $I(h)$ を計算することである。 $x \sim x + dx$ の間の入射線の fractional power を $f(x)$ (すなわち、 $i_0(X) / \int i_0(X) dX$) とすると、これからの散乱強度への contribution は $I(h - X)$ で、M 点における全散乱強度は

$$\mathcal{J}(h) = \int f(X) I(h - X) dX, \quad (3)$$

ここで $h = (2\pi/\lambda) \overline{OM}/l$, $X = (2\pi/\lambda)(x/l)$ である。

もし $\mathcal{J}(h)$, $I(h - x)$ および $f(x)$ が偶函数であるならば、それらのフーリエ変換の関係式を使って $I(h)$ が求められる

$$I(h) = \frac{2}{\pi} \int I^*(u) \cos(2\pi hu) du.$$

しかし、一般に高さに較べて充分に巾の狭いスリットを用いる場合が多く、したがってこの補正は省略されることが多い。またこの補正をおこなうよりはこの問題を無視できる実験条件を選ぶ方がよい。

2. 高さの補正

i) $I(h)$ が既知で無限な高さ $f(Y)$ を高さ y における入射線の fractional power とすると、M での全散乱強度は

$$\mathcal{J}(h) = \int f(Y) I(\sqrt{h^2 + Y^2}) dY, \quad (4)$$

ここでも $h = (2\pi/\lambda)(\overline{OM}/l)$ で $Y = (2\pi/\lambda)(y/l)$ である。

もし $I(h)$ が gaussian 分布 $\{I(h) = A \exp(-k^2 h^2)\}$ で、そして入射線の強度が高さに関係なく一定 C であれば、(4)式は $\mathcal{J}(h) = (C\sqrt{\pi}/k) I(h)$ 。

つぎに散乱強度曲線のすそが h^{-4} にしたがって変化するという考えにもとずき、かつ入射線強度が高さによらず一定 K であるとすると、 $I(h) = K/h^4$ で(4)式は $\mathcal{J}(h) = (\pi K/2)(1/h^3)$ 。すなわち、実測散乱強度は h^{-3} にしたがって変化する。

ii) 巾が充分狭く無限な高さ

入射 X 線をモノクロメーターで単色化し、スリットで細くしぼって使用することが多いだけに、いろいろな人によって研究されてきた^{4)~7)}。

しかし、実際におこなうとなるといずれも相当な手間がかかる。散乱像が散乱角 $2\theta = 0$ から単調に減少し、 $f(Y)$ が散乱強度 $I(h)$ が無視できるところまで変らないか、または散乱像が ring からなり、強度一定な入射線の高さがこの ring の直径より大きいならば、 $f(Y) = \text{constant}(C)$ で(4)式は

$$\mathcal{J}(h) = 2C \int_0^\infty I(\sqrt{h^2 + Y^2}) dY,$$

結局つぎの関係式がえられる。

$$\mathcal{J}(h) = -\frac{1}{C\pi} \int_0^\infty \frac{\mathcal{J}'(\sqrt{h^2 + u^2})}{\sqrt{h^2 + u^2}} du, \quad (5)$$

これを実際におこなうにはつぎのごとくする。実測散乱曲線を図形に応じて各 h ごとに適当に区切り、 u を適当に選んで実測散乱強度曲線の勾配 $\mathcal{J}'(\sqrt{h^2 + u^2})/\sqrt{h^2 + u^2}$ を測定し、(5)式を計算するのである。いずれにしても大変手間がかかり、かつ接線を引くときなどに誤差が入りやすい。

3. 巾が充分に狭く有限な高さの補正

小角散乱の実験にはほとんどこのようなスリット系を使用するとみなしてもよい。この補正についてはいろいろな条件をもうけて近似解をうる試みがなされた⁵⁾⁸⁾。

Kratky ら⁹⁾ は(4)式の $f(Y)$ として gaussian weight facion $w(Y) = (2p/\sqrt{\pi}) \exp(-p^2 h^2)$ を使い、 $N(h) = \mathcal{J}(h) \exp(-p^2 h^2)$ と置くことにより*、つぎの関係式をえた

$$I(h) = -\frac{\exp(p^2 h^2)}{p\sqrt{x}} \int_0^\infty \frac{N'(\sqrt{h^2 + u^2})}{\sqrt{h^2 + u^2}} du, \quad (6)$$

ここで p はスリットの高さによってきまる常数で、小さな p は高いスリットに、大きな p は低いスリットに対応

* 通常 $\mathcal{J}(h) = \text{constant} \cdot \exp(-p^2 h^2)$ のような分布をするものと考え、 $N(h)$ は急激に減少する函数である。また、 $w(Y) = 1$ は(5)式で $C = 1$ としたときに相当し、そのとき

$$I(h) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\mathcal{J}'(\sqrt{h^2 + u^2})}{\sqrt{h^2 + u^2}} du \text{ である。}$$

している。すなわち、入射線の vertical variation と $(2p/\sqrt{\pi}) \exp(-p^2 h^2)$ との対応によって p がきめられる。微分項を含む(6)式に対して、Schmidt and Hight²⁾ は近似計算によるうまい数学的取扱いによって、それを含まぬ(7)式を導いた

$$I(h) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi} p \Delta h} \right) \left(\frac{1}{j^2} \right) \left[j\sqrt{2j+1} \mathcal{J}(j\Delta h) - \sum_{i=0}^{\infty} T_{ij} \cdot \mathcal{J}[(i+j)\Delta h] \right], \quad (7)$$

ここで Δh は微小間隔で $\Delta h = h_{i+1} - h_i$ と定義され、任意の h の値は $h = j\Delta h$ 、それより大きな h の値 (h_i) は $h_i = (i+j)\Delta h$ であらわされている。また

$$T_{ij} = (i+j) \left(\frac{\Delta^2 i j}{\Delta h} \right) \exp\{-p^2 \Delta h^2 (i^2 + 2ij)\}, \quad (7')$$

$$\left(\frac{\Delta^2 i j}{\Delta h} \right) = -\sqrt{(i+j)^2 + 2(i+1)j} + 2\sqrt{i^2 + 2ij} - \sqrt{(i-1)^2 + 2(i-1)j}.$$

入射線の強度分布より実験的に p がきめられるから、実測散乱強度曲線について適当な Δh がきまると、(7') の T_{ij} を table 化しておくことができる。したがって散乱強度を読みとり、III で説明する計数数え落としとバックグラウンドノイズの補正をしてやることによって、ただちに(7)式を計算することができる。

III. 計数強度の補正

強い散乱 X 線強度を計数管を用いて測定するときの計数数え落しは、計数管の分解時間のみならず X 線管球にかかる高圧やその波形、および計数回路にも影響される¹⁰⁾¹¹⁾。それゆえ、使用する X 線装置についてそれらの補正が迅速におこなわれなければならない。もし計数数え落しの補正量が 20% を越えなければ、毎秒平均 N 個と計数されるべきものが数え落しのために n 個と観測された¹²⁾

$$N = n / (1 - nk\tau_0), \quad (8)$$

ここで k は form factor で τ_0 は計数管の分解時間である。さらにまた、 k は X 線管球にかかる高圧およびその波形によって変る。 $k\tau_0 = \tau$ とすると

$$N = n / (1 - n\tau). \quad (8')$$

つぎに二つの異なった強度の X 線を観測し、それを n_1 および n_2 とすると

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{N_1}{N_2} \cdot \frac{1 - n_1\tau}{1 - n_2\tau} \cong \frac{N_1}{N_2} \{1 - (n_1 - n_2)\tau - n_1 n_2 \tau^2\} \cong \frac{N_1}{N_2} \{1 - (n_1 - n_2)\tau\}. \quad (9)$$

すなわち、比例計数管やシンチレーション計数管では τ_0 が 10^{-6} sec., ガイガー計数管では 10^{-4} sec. 程度で、 k は 1~3.5 程度の範囲にあるから、計数が前者では 10^5 c.p.s., 後者では 10^3 c.p.s. 以下のとき τ^2 の項は無視できる。

X 線管球にかかる高圧を一定にして、二つの観測強度を箱で加減し (たとえば Cu_{ka} に対して N_i 箱など), 測定された値の比 n_1/n_2 を $n_1 - n_2$ に対してプロットす

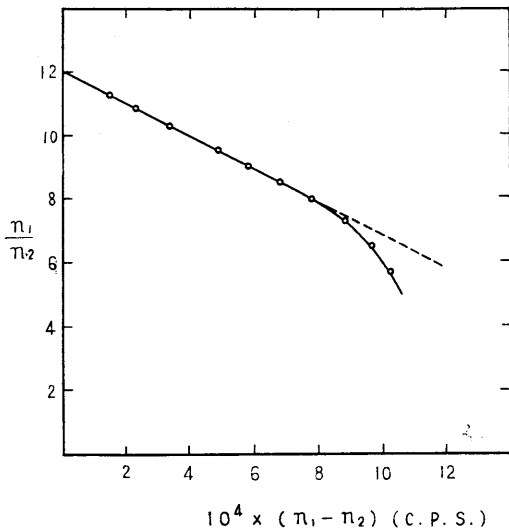


Fig.2. Calibration curve for counting loss. The ratio of the observed counting rates, n_1 and n_2 , for two reflections plotted against the difference in observed counting rates.

る。Fig.2 は使用したシンチレーションカウンタについて測定したものである。そしてFig.2より τ として 4.13×10^{-6} sec. がえられた。このようにして求められた τ を用いることによって実際に測定される条件での計数数え落しを(9)式によって補正することができる。それゆえ、この τ の値は同じ計数管を使用してもX線管にかかる高圧や波形が変われば異なった値をとる。IV. のプログラムでは counter resolution error の補正と表示して、このようにして求められる τ を使用することとした。

一方、小角散乱におけるバックグラウンドノイズは、試料からの二次(蛍光)X線やCompton散乱というよりは主に空気による散乱と考えてよい。これについて計数管を用いる測定法においてもX線が通る途中を真空にする試みがなされてきている。また試料によるX線の吸収は $I = (AtI_0/\cos\theta) \exp(-\mu t/\cos\theta)$ として表わされる。ここで I は試料透過後のX線強度、 A は常数、 I_0 は入射X線強度、 t は試料の厚み、 μ は試料の線吸収係数そして 2θ は散乱角である。しかし、散乱角が非常に小さいから散乱角に対する相対的影響差は少ない。さらにまた、測定方法を多少工夫して吸収効果を実験的に補正したりするので(たとえば試料をそのために計数管の直前において補正の目やすとする)、IV. の計算ではこの頃の

Order of cards

Program I: Prepares T_{ij} table on tape in unit 14. Header card, (Option cards, if desired), Program cards No. 101 through 117, A blank card, Control card No. 1.

Program II. Reads T_{ij} from tape unit 14 and corrects the observed intensity for counter resolution error, background noise and slit height smearing. Header card, (Option cards, if desired), Program cards No. 118 through 182, A blank card, Control card No.2 and 3, Data cards.

自動的補正は実測強度読み取りに加味することとして省略した。

IV. 計算プログラム

実測強度曲線から巾が十分に狭く有限な高さのスリット、計数数え落としおよびバックグラウンドノイズの補正をあわせて連続的に起こない、解析に供し得る散乱強度曲線を迅速にうるため、I.B.M. 7072 (modified 7070) を使って Fortran 電子計算機プログラムを作成した¹³⁾¹⁴⁾。その順序は、まず実測散乱強度曲線の解析条件をきめて T_{ij} を計算し、つぎに計数数え落とし{(8)式},バックグラウンドノイズ、そして(7)式を計算するのである。なお、 p の値については装置のメーカーがある限られた条件でよいから手持ちのスリット系についてえられる p の値を、あらかじめtableにして用意されるところまでゆけば非常に便利であろうと思われる。

使用上の問題点と使用した記号の説明

a) プログラム I の T_{ij} の計算に用いる j_{max} がプログラム II の主計算に使用される j_{max} より小さいと machines top. それゆえ、前者を J_{max} (Control card No.1) とし、後者の j_{max} (Control card No.3) と区別した。それで $j_{max} \leq J_{max}$ で使用することが必要である。

b) 比例計数管およびシンチレーション計数管では(8)式の使用はほとんど問題はないが、 τ が大きいガイガー計数管では入射X線近辺の強い散乱線の測定に、数え落しが20%を越えることもしばしばである。そのとき正確には(8)式は使用できないがそれでは實際上非常に不都合を生ずる。それゆえ、そのときも最低限の補正としてその関係式を使い、とくに $1 - n\tau \leq 0$ のとき $n \times 10 = N$ として計算を継続できるようにした。

c) プログラムの中の PO, PT, P, および DHO, DHT, DH はそれぞれ同じ意味で本文の p および Δh を表す。このような区別は誤まった指令やデータなどをチェックして、計算が正しくおこなわれるようにするためのものである。

d) BN および RT はバックグラウンドノイズおよび Fig.2 から求められた τ である。K₁, K₂ は Control card No.3 における j_{min} , j_{max} である。A(J) は実測散乱強度で、後記 A(j) と同じものである。

カードの順やデータの指令などは英文で記述する方が意味が明確であるので以下そのようにする。

But also, program I and II can be combined to form a single continuous program. Header cards, (Optional card, if desired), Program cards No. 101 through No. 182 but leave out the card No. 117, A blank card, Control card No. 1, 2 and 3, Data cards.

Control cards and Data cards

Control card No. 1: word 1 (column 1-10) p

word 2 (column 11-20) Δh

word 3 (column 21-30) J_{max}

if no decimal point is given,

p , unit position is at column No. 3 —(F10.7)

h , unit position is at column No. 16 —(F10.4)

J_{max} , unit position is at column No. 30—(I 10)

Control card No. 2: word 1 (column 1-10) p

word 2 (column 11-20) Δh

Control card No. 3: word 1 (column 1-10) BN—(F10.3)

word 2 (column 11-20) RT—(F10.7)

word 3 (column 21-30) j_{min} —(I 10)

word 4 (column 31-40) j_{max} —(I 10)

Data cards: five intensity in words 1-5.

Note: All numbers have to be right-justified. Please decimal point as required. $J_{max} \leq 500$. Intensity data are to be punched 5 on each, arranged in the decreasing order of j (or h). The time unit for BN, A(j) and RT to be common. If A(j) is given in c.p.s., then RT should be c.p.s.. Any other information for reference purpose can be punched in the unused parts of the control cards and data cards without disturbing the program.

Important: Tell the operator to have the console alternation switch No. 3 ON when compiling the program. Number of output (to be punched in the header card) is zero for the program I, $j_{max}-j_{min} + 8$ for the program II.

本稿を終えるにあたり、筆者が米国デューク大学に在職中にいろいろな便宜を計って下さり、本研究のためにも助言を惜まられなかった同校化学科教授 W.R. Krigbaum 氏ならびに R.J. Roe 博士、また本稿をまとめるにあたり御配慮をいただいた金属工科大谷南海男教授に心より感謝の意を表するものである。

文 献

- 1) A. Guiner and G. Fournet, Small Angle Scattering of X-Rays, John Wiley & Sons p.110(1955).
- 2) P. W. Schmidt and R. Hight, Jr, Acta Cryst., 13, 480(1960).
- 3) K. Kranjc, Acta Cryst., 7,709(1954).
- 4) A. Guiner and G. Fournet, Nature, 160,341(1947).
- 5) A. Guiner and G. Fournet, J. Phys. Radium, 8,83 (1947).
- 6) C. G. Shull and L. C. Ross, J. appl. Phys., 18,295 (1948).
- 7) J. W. M. Dumond, Phys. Rev., 72,83(1947).
- 8) R. E. Franklin, Acta Cryst., 7,709(1954).
- 9) O. Kratky, G. Porod and L. Kohovec, Z, Elektrochem., 55,53(1951).
- 10) H. Klug and L. Alexander, X-Ray Diffraction Procedures, John Wiley & Sons p. 280(1954).
- 11) H. Maruyama, The RIGAKUDENKI J., 7,160 (1965).
- 12) W. Cochran, Acta Cryst., 3,268(1950).
- 13) D.D. McCracken, a guide to FORTRAN Programming, John Wiley & Sons (1963).
- 14) I. B. M., System Reference Library by I. B. M. (1962).

OPTION LIST SOURCE DECK		
C	PREPARATION OF T(I,J) TAPE ON UNIT 14	101
	READ INPUT TAPE 3, 16, PD, DHO, JMAX	102
16	FORMAT (F10.7, F10.4, I10)	103
	WRITE TAPE 5, PD, DHO, JMAX	104
	PHSQ = PD*PD*DHO*DHO	105
	DIMENSION T(500)	106
	DO 30 J = 1, JMAX	107
	Y = J	108
	M = JMAX + 1 - J	109
	DO 20 I = 1, M	110
	X = I	111
20	T(I) = (X+Y)*(2.0*SQRTF(2.0*X+Y*X*X)	112
	1-SQRTF(2.0*(X-1.0)*Y+(X-1.0)*(X-1.0))	113
	2-SQRTF(2.0*(X+1.0)*Y+(X+1.0)*(X+1.0))	114
	3/EXPE(PHSQ*(X*X+2.0*X+Y))	115
30	WRITE TAPE 5,J,(T(I),I=1,M)	116
	END	117
CALL FORTRAN S. MARINO		
OPTION LIST SOURCE DECK		
C	LOW ANGLE X-RAY INTENSITY CORRECTION FOR COUNTER RESOLUTION ERROR,	118
C	BACKGROUND NOISE AND SLIT HEIGHT SMEARING	119
	DIMENSION W(500),A(500),G(500)	120
	READ INPUT TAPE 3,19,P,DH	121
	REWIND 5	122
	READ TAPE 5, PT, DHT, JMAXT	123
	IF (P-PT) 60,40,60	124
60	TYPE 15,PT,DHT	125
	STOP 33333	126
40	IF (DH-DHT) 60,50,60	127
50	READ INPUT TAPE 3,11,BN,RT,K1,K2,(A(J),J=K1,K2)	128
	IF (K2-JMAXT) 53,53,49	129
49	TYPE 18,JMAXT	130
18	FORMAT (31HT(I,J) TAPE PREPARED FOR JMAX = I3)	131
	STOP 44444	132
53	WRITE OUTPUT TAPE 4,12,BN,RT,P,DH	133
C	RESOLUTION AND BACKGROUND CORRECTION	134
	DO 34 J = K1,K2	135
	DENOM = 1.0-RT*A(J)	136
	IF (DENOM) 61,61,31	137
61	TYPE 13,J	138
	B = A(J)*10.0	139
	GO TO 38	140
31	B = A(J)/DENOM	141
38	IF (B-BN) 32,33,33	142
32	G(J) = 0.0	143
	GO TO 34	144
33	G(J) = B-BN	145
34	CONTINUE	146
C	SLIT CORRECTION	147
	PIPH = 1.7724539*P*DH	148
	N = K2-1	149
	DO 62 J = K1,N	150
	M = K2-J	151
	Y = J	152
	PIPHY = PIPH*Y*Y	153
51	READ TAPE 5,K,(W(I),I=1,M)	154
	IF (K-J) 51,36,35	155
35	TYPE 17,J	156
17	FORMAT (11HSECTION T(I13, 18H) ON TAPE IN ERROR)	157
	STOP 44444	158
36	S = 0	159
	DO 37 I = 1,M	160
	L = I*J	161
37	S = S+G(L)*W(I)	162
	Q = (Y*G(J)*SQRTF(1.0+2.0*Y)-S)/PIPHY	163
	HY = DH*Y	164
62	WRITE OUTPUT TAPE 4,14,J,A(J),G(J),Q,HY	165
	Y = K2	166
	HY = DH*Y	167
	Q = G(K2)*SQRTF(1.0+2.0*Y)/(Y*PIPH)	168
	WRITE OUTPUT TAPE 4,14,K2,A(K2),G(K2),Q,HY	169
11	FORMAT (F10.3,F10.7,2I10/(5F10.0))	170
14	FORMAT (I3,2F18.3,F19.3,F17.4)	171
13	FORMAT (60HEITHER THE RESOLUTION TIME OR THE OBSERVED INTENSITY PD	172
	1R J = I3, 9H IN ERROR)	173
15	FORMAT (27HT(I,J) TAPE PREPARED FOR P =F9.7, 14H AND DELTA H =F6.4)	174
12	FORMAT (21H BACKGROUND NOISE F10.3/	175
	121H RESOLUTION TIME F10.7/	176
	221H P F10.7/	177
	321H DELTA H F10.4///	178
	472H J OBSERVED COUNTING-CORRECTED SLIT-CORRECTED	179
	5 H)	180
19	FORMAT (F10.7,F10.4)	181
	END	182