

# デスクトップ型粉末回折装置の研究と適応型逆畳込的处理

## 1. はじめに

米国国立標準技術研究所 (National Institute of Standards and Technology; NIST) から頒布<sup>はんぷ</sup>された標準参照物質 (standard reference material; SRM) のうち, SRM 640d Si 粉末と SRM 660c LaB<sub>6</sub> 粉末について, 研究室で使用する粉末X線回折装置 (Rigaku MiniFlex 600-C) (以下ミニフレ) を用いてX線回折 (XRD) データを取得した。装置製造会社から知らされた装置パラメータと, 「試料」に関するパラメータ (試料の平均厚さ  $t$  と X線線減衰係数  $\mu$  あるいは X線侵入深さ  $\mu^{-1}$ ) に基づいて逆畳込的处理 (deconvolutional treatment; DCT) (e.g. Ida, 2025) を施した。

ミニフレから得られたデータでは, 逆畳込的处理を施しても低角度の領域に現れる Si 111-反射 (Figure 1.1) と, 後に示すLaB<sub>6</sub> 100, 110-反射では, 「低角側に長い裾を引く左右非対称な回折ピーク形状 (asymmetric profile having a longer tail on the lower-angle side)」しか得られなかった。

ミニフレでの測定に用いた試料粉末の赤道方向に沿った幅は  $W = 20$  mm, 試料の平均厚さ (試料ホルダの平均深さ) は  $t = 0.603$  mm, X線侵入深さは  $\mu^{-1} = 0.179$  mm, 試料粉末を保持するためのガラス製試料ホルダのX線侵入深さは  $\mu'^{-1} = 0.127$  mm であった。

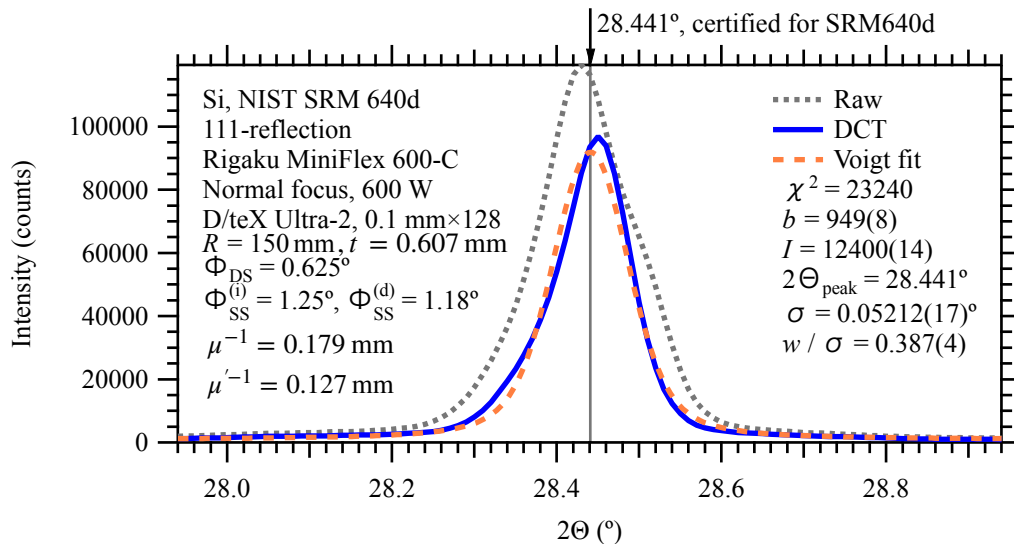


Figure 1.1 Rigaku MiniFlex 600-C を用いて取得された Si (NIST SRM640d) 111 反射の回折ピーク形状 (Raw; 灰色実線 ..... ) と逆畳込的处理後データ (DCT; 青色実線 ——— ) , DCT 曲線に対する Voigt 関数当てはめ (橙色破線 - - - - )

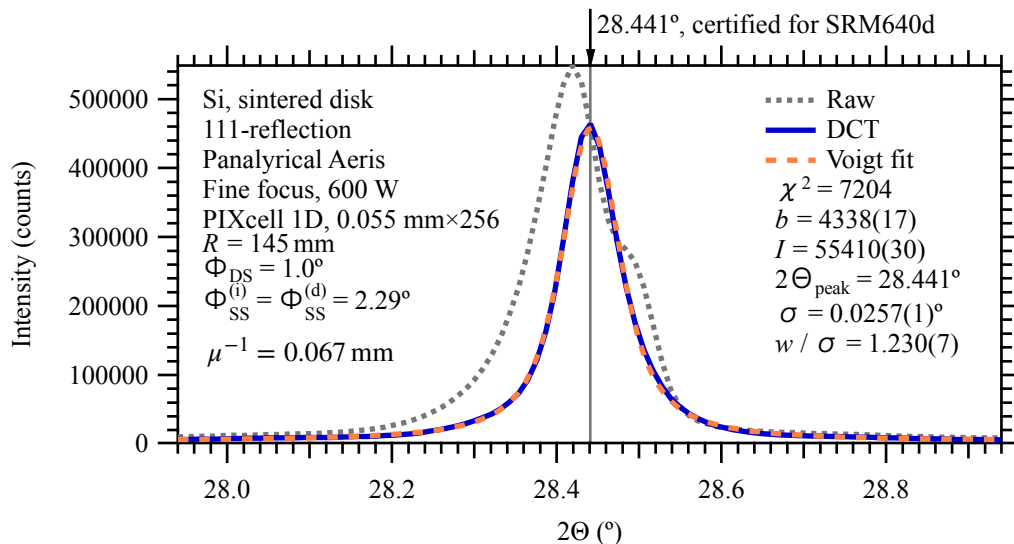


Figure 1.2 Malvern-Panalytical Aeris を用いて取得された Si 焼結体 111 反射の回折ピーク形状 (Raw; 灰色点線 ..... ) と逆畳込的处理後データ (DCT; 青色実線 ——— ) , DCT 曲線に対する Voigt 関数当てはめ (橙色破線 - - - - ) 。

一方で、2025年に名古屋工業大学環境セラミクス分野の共同利用機器として導入された別のX線回折測定装置 (Malvern-Panalytical Aeris) (以下エアリス) に付属する Si 焼結体ディスクについて取得された Si の回折データに対して、製造会社から提供される装置パラメータ情報に基づいて、同じように「逆畳込的处理」を施すと、装置収差による非対称なピーク形状の変形が許容しうるレベルまで修整されただけでなく、装置の角度較正を施さない「出荷時設定」あるいは「納入時設定」のままで NIST の発行する保証書に記載される SRM 640d Si 標準粉末の格子定数 ( $a = 5.43123 \text{ \AA}$ ) と、NIST が仮定する  $\text{CuK}\alpha_1$  X線波長 ( $\lambda = 1.5405929 \text{ \AA}$ )、ブラッグ法則 (Bragg's law) から計算して得られるピーク位置  $28.441^\circ$  と一致した。(Figure 1.2)。(補足 1.A) (補足 1.B)

エアリスで測定した Si 焼結体ディスクの直径は約 30 mm、厚さは約 2 mm であり、入射ビームの「はみ出し効果 spill-over effects」あるいは試料の「有限幅効果 finite-width effects」も、「すり抜け効果 pass-through effects」あるいは「有限厚さ効果 finite-thickness effects」も無視しうるものとした。Si 結晶粒の空間充填率は 100% と仮定して、Si 焼結体の X 線に対する侵入深さは  $\mu^{-1} = 0.067 \text{ mm}$  と見積もられた。

[Figure 1.1](#) と [Figure 1.2](#) とを比較する際に注目すべきことに、加速電圧と放電電流の積として表される X 線出力がいずれも 600 W と同程度であり、実質的な走査速度  $1^\circ/\text{min}$ 、サンプリング間隔  $0.01^\circ$  と同様の測定条件を設定したのに関わらず、ミニフレに比べてエアリスのデータではカウント数が約 5 倍になっていることがある。これは主にミニフレに装着されたソーラー・スリット (Soller slits) の開き角 (ソーラー・スリットに用いられる金属板の間隔と長さの比の逆正接) が、入射側で  $\Phi_{\text{SS}}^{(i)} = 1.25^\circ$ 、回折側で  $\Phi_{\text{SS}}^{(d)} = 1.18^\circ$  であり、エアリスに装着されたソーラー・スリットの開き角  $\Phi_{\text{SS}}^{(i)} = \Phi_{\text{SS}}^{(d)} = 2.29^\circ$  と比べて狭いことによる。

典型的な無機化合物の測定をする場合には、エアリスの設定に比べてミニフレの設定は強度を約 1/5 に減少させるだけでなく、観測される回折強度に寄与しうる結晶粒 (結晶子 クリスタリット crystallite) の数も約 1/5 に減少させるので、二重の意味でデータの統計精度を劣化させる。しかしこの設定は、医薬品薬効成分を含む結晶性の有機化合物や、環境浄化機能応用の拡大が期待されるゼオライト、2025 年にノーベル化学賞を受賞した金属有機分子枠組化合物 (metal organic framework; MOF) のように、単位胞の寸法が大きく、典型的な無機化合物と比較して低角に回折ピークの出現する試料が調査対象になる場合に有効である可能性があることは否定できず、ミニフレの設計に本質的な<sup>かし</sup>瑕疵があるわけではない。

[Figure 1.1](#) と [Figure 1.2](#) 中で灰色の点線で示される「装置がユーザに報告する強度図形」(見かけの回折図形) は、ミニフレとエアリスであまり大きく変わらないように見えるのに対して、装置製造会社から得られる情報に基づいた逆畳込的処理 (DCT) を施した結果 (青色実線) を比較すればミニフレのデータよりエアリスのデータの方が好ましく見える場合は少なくないと想像される。

## 2. 検出器ストリップごとの出力の取得と解析

Rigaku 社に限らず Malvern-Panalytical 社、他の装置製造会社であっても、装置のユーザが装置製造会社から不十分あるいは不正確な情報しか得られない場合は少なくない。しかしミニフレ (MiniFlex) の場合には、ユーザ・インターフェースとして用いられる Windows 10 PC と、主制御部との間の通信に UTP (unshielded twisted pair cable) (LAN ケーブル) が用いられ、通信線のコネクタに RJ45 型が用いられる。

装置に付属するマニュアルにも、主制御装置（奉仕者<sup>サーバ</sup> server）である RINC システムと D/teX システムの IP アドレスが明記され、ユーザ・インターフェス（顧客<sup>クライアント</sup> client）の間の通信には、イーサネット (Ethernet) が用いられ、TCP/IP プロトコルが用いられている。

イーサネット通信の傍受・記録・解析を行い、その情報に基づいて、装置製造会社の通信プロトコルを解釈し、検出ストリップごとの出力の情報を得を得るために独自に計測制御ソフトウェアを開発した。

ミニフレとユーザ・インターフェスの間の通信の傍受と記録のためには、現時点では無料で使用できるプロトコル・アナライザ・ソフトウェア（パケット・キャプチャ・ツール）(Wireshark; <https://www.wireshark.org/>) を利用した。

測定制御プログラムの構築のためには TCP/IP 通信にも対応するグラフ描画ソフトウェア (Wavemetrics Igor Pro) を用いた。

装置製造会社が「ダイレクトビーム・アブソーバ」と称する部品は、厚さ 0.3 mm の銅板を、支持するための厚めの金属板にネジで止める構造であった。その寸法から、減衰させたダイレクト・ビームを検出器が受けきれない可能性があるかと判断した。厚さ 0.5 mm のアルミニウム板を、高速切断機と金床、手鑿<sup>かなとこ</sup>を用いて加工し、ダイレクト・ビームの減衰器<sup>アテニュエイタ</sup> (attenuator)（アッテネータ）として用いた。減衰させたダイレクト・ビームに対して検出ストリップごとに記録した強度プロファイルを [Figure 2.1](#) に示す。薄板の金床加工作業の際には定盤<sup>じょうばん</sup>と 0.04 mm 厚さの「隙間ゲージ」<sup>すきま</sup> (thickness gauge)（シクネス・ゲージ）を用いて平面性を確認した。

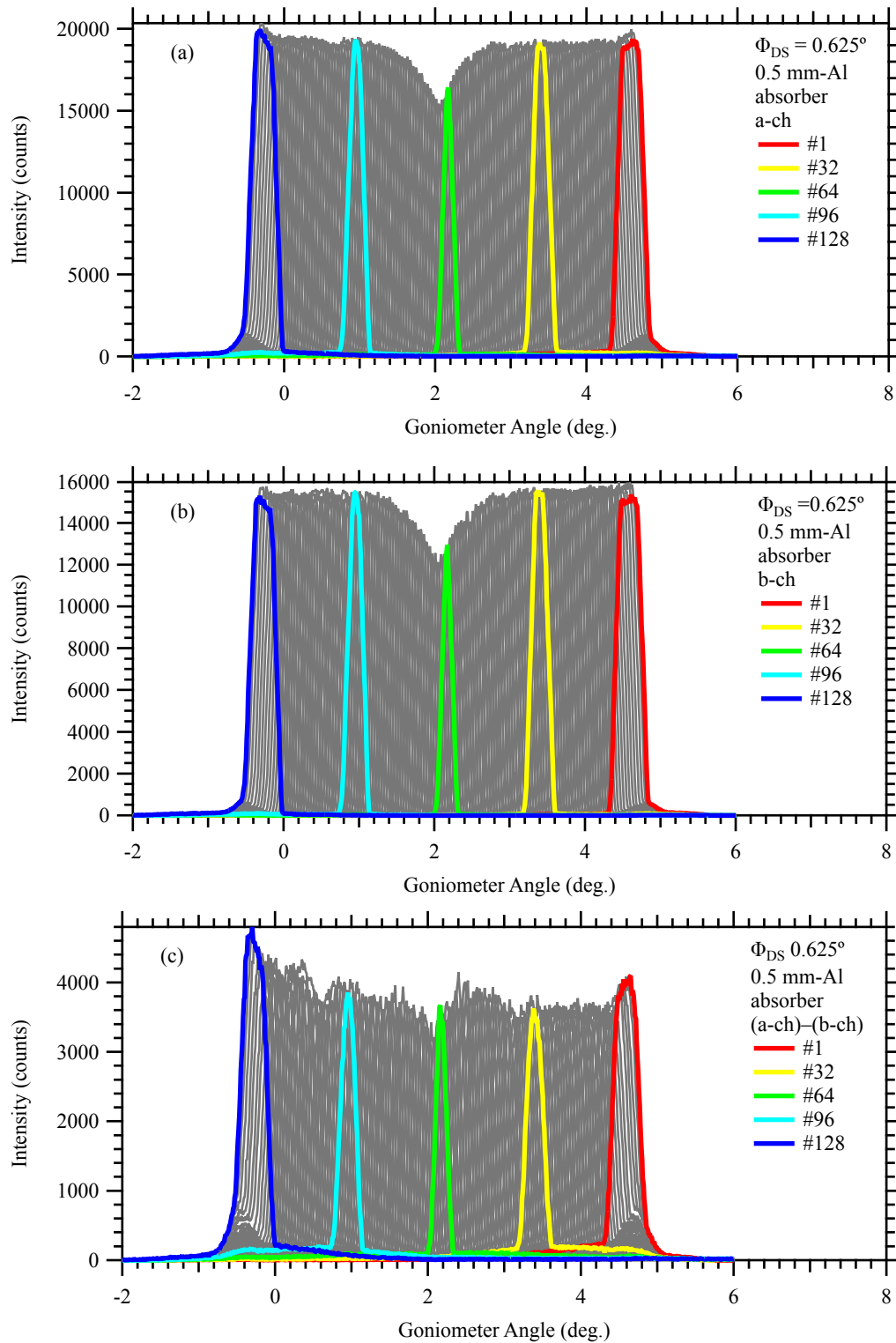


Figure 2.1 SSXD (Rigaku D/teX Ultra-2) の検出ストリップごとのダイレクトビーム強度プロファイル。(a) 比較的低い閾値 (threshold) のパルス高弁別器 (pulse height analyzer) (比較器 comparator) でカウントされた値 (a-ch) と (b) 比較的高い閾値でカウントされた値 (b-ch), (c) は (a) と (b) の差を表す。

Figure 2.1 (a) は比較的低い閾値 (threshold) のパルス高弁別器 (pulse height discriminator; PHD) (ディスクリ) (比較器 comparator) を介してカウントされたパルス数 (a-チャンネル出

力) を表し、[Figure 2.1 \(b\)](#) は比較的高い閾値のパルス高弁別器を介してカウントされたパルス数 (b-チャンネル出力) を示す。

[Figure 2.1 \(c\)](#) は a-チャンネルと b-チャンネルの出力カウント数の差を示す。このように異なる閾値のパルス高弁別器の出力の差分を出力するデバイスはパルス高分析器 (pulse height analyzer; PHA) (パルハイ) あるいはシングル・チャンネル・アナライザ (single channel analyzer; SCA) とも呼ばれ、X線強度測定システムで用いられる場合は多い。

低い閾値のパルス高弁別器は検出回路に対する電磁誘導 (electromagnetic induction; EMI) 雑音 (noise) などによる偽パルスのカウントを抑制するために有効とされる。高い閾値のパルス高弁別器は、X線源から輻射される特性X線以外に、高速に運動する電子が原子核の作る電場の影響を受けて、<sup>ブレイムズシュトゥラールング</sup>擬似的な周回軌道を描くことによる制動輻射 (bremsstrahlung) による白色X線の影響を抑制するために有効であるとも言われる。また結晶分光器や湾曲グラファイト分析器などの回折光学素子を用いる場合には、高閾値パルス高弁別器は高次反射光の混入を抑制することに有効な場合がある。

今回の測定では回折光学素子は用いず、Cu  $K\beta$  線を減衰させる目的でNi箔フィルターを挿入しているので、白色X線もかなり抑制されていると思われる。

一方で、結果的には低閾値パルス高弁別器でカウントされたパルス数の約80%を捨てて、残った20%のみを使う設定の有効性には疑問が残るが、このことについての議論は保留する。

[Figure 2.1](#) では、128本の検出ストリップのうち#1, #32, #64, #96, #128ストリップの出力のみを強調して表示し、他の検出ストリップの出力を灰色の線で示す。半導体ストリップ型X線検出器 (Rigaku D/teX Ultra-2) の128本の検出ストリップに低オフセット角側から#1から#128の番号を付け、ストリップ番号に対して、「減衰されたダイレクトビーム」の強度図形の積分値がどのような変化を見せるかを[Figure 2.2](#)に示す。

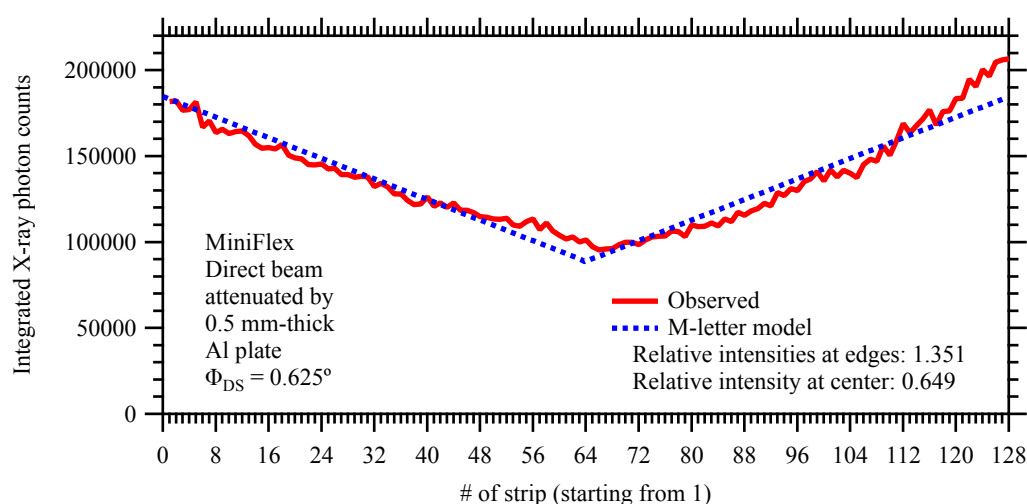


Figure 2.2 128本の検出ストリップごとに積算したダイレクト・ビーム積分強度プロファイル

Figure 2.2 に示した図形から、検出ストリップ数が 128 本の X 線検出器 (Rigaku D/teX Ultra-2) を用いた場合に、64 番目か 65 番目か明確にされていないが「中央ストリップ」の感度が最低で、周縁ストリップの感度が少し高いと解釈される。

装置製造会社がユーザに提供する「ゴニオメータ半径が  $R = 150 \text{ mm}$  であり、検出ストリップ間隔が  $0.1 \text{ mm}$  である」と言う情報は概ね信じられる。

「見かけ回折角  $2\Theta$ 」に対して、オフセット角 (offset angle)  $2\psi$  のオフセンター・ストリップ (off-center strip) が強度 (カウント数) を報告するとき、機械的なゴニオメータ角は  $2\Theta_G = 2\Theta - 2\psi$  であると推定される。128 本の各検出ストリップごとにオフセット角  $2\psi$  の角度補正を施してそれぞれの出力値を積算した強度図形を Figure 2.3 に示す。

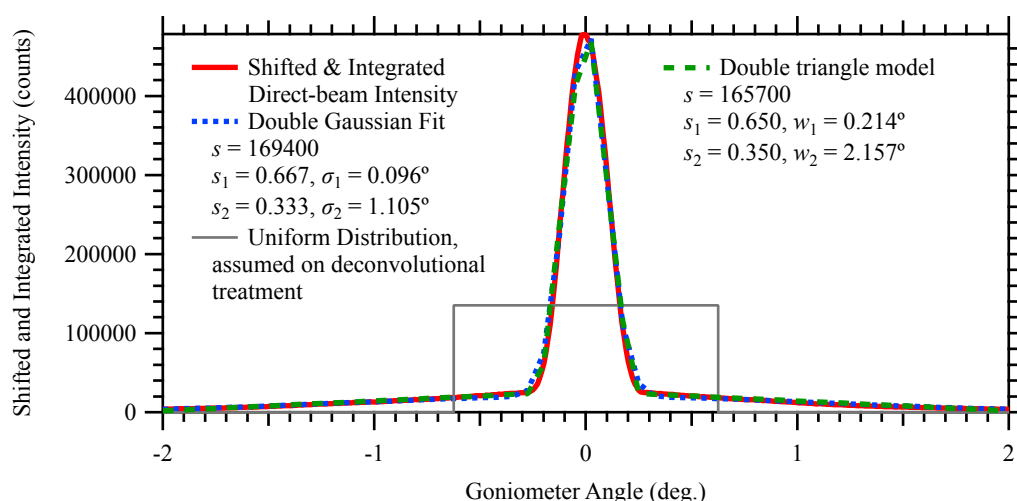


Figure 2.3 Shifted and integrated intensity profile based on the information given from a manufacture company to the author

ミニフレ (MiniFlex) を用いる場合もエアリス (Aeris) を用いる場合も、出力されるデータを解析するために、Figure 2.3 中で灰色の矩形 (長方形) として示す連続一様分布 (e.g. [統計分布モデル \(2\) 連続分布](#)) を仮定していた。このことは、筆者の提案するデータ処理法 (逆畳込的处理) を、ミニフレから得られたデータに適用したときに、あまり有効に機能しないように見えたこと (Figure 1.1) と、エアリスから得られたデータに対して、問題なく機能しているように見える結果になったこと (Figure 1.2) とに関連する可能性は低くない。

Figure 2.3 に示した実測ダイレクトビームの強度プロファイル (赤線) は、幅の狭い (鋭い) ピーク形状と幅の広いピーク形状を足し合わせたもののように見える。幅の異なる二重ガウス型関数モデルと二重二等辺三角形モデルを当てはめた結果を Figure 2.3 ではそれぞれ青色点線と緑色破線で示す。いずれのモデルも、半値全幅 (full width at half maximum; FWHM) 約  $0.2^\circ$  の鋭い強度分布と、半値全幅約  $2^\circ$  程度のぼやけた強度分布とを 65:35 程度の比率で重ね合わせたようなものであることを示した。

### 3. 非対称化関数モデルの構築

左右非対称な回折ピーク形状の「非対称性」を定量的に表現して、逆畳込的处理により修整するための数式化を試みる。このためには観測されたピーク形状を「左右対称なピーク形状モデル」と「左右非対称な装置関数形状モデル」との畳込として表現すれば良い。

「左右対称なピーク形状モデル」としては、フォークト (Voigt) 関数を用いる。フォークト関数はガウス型 (Gaussian) 関数 (正規分布 normal distribution の確率密度関数) とローレンツ型 (Lorentzian) 関数 (コーシー分布 Cauchy distribution の確率密度関数) の畳込 (convolution) として定義される。このことは以下の式 (3.1)–(3.3) のように表される。

$$f_{\text{Voigt}}(x; \sigma, \gamma) \equiv f_{\text{Gauss}}(x; \sigma) * f_{\text{Lorentz}}(x; w) \quad (3.1)$$

$$f_{\text{Gauss}}(x; \sigma) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3.2)$$

$$f_{\text{Lorentz}}(x; w) \equiv \frac{1}{\pi w} \left(1 + \frac{x^2}{w^2}\right)^{-1} \quad (3.3)$$

ただし、 $\sigma$  はガウス型関数成分の標準偏差 (standard deviation),  $w$  はローレンツ型関数成分の半値半幅 (half width at half maximum; HWHM) に相当する値である。

グラフ作成ソフトウェア (Wavemetrics, Igor Pro) にもフォークト関数は付属するが、Igor Pro でのフォークト関数の実装は、やや変則的なので注意すべきである。 ([補足 3.A](#))

フォークト関数  $f_{\text{Voigt}}(x; \sigma, w)$  は、尺度化複素補誤差関数 (scaled complex complementary error function) (ファデーヴァ関数) (Faddeeva function)  $f_{\text{Faddeeva}}(x; \sigma, w)$  の値の実部と等価であり、ファデーヴァ関数  $f_{\text{Faddeeva}}(x; \sigma, w)$  の値は<sup>べき</sup>冪級数展開 (power series expansion) と連分数展開 (continued fraction expansion) とを組み合わせることで高効率に高精度な値が得られることは 1990 年には知られていた (Poppe & Wijers, [1990a](#), [1990b](#))。このことを数式で表現すれば、以下の式 (3.4)–(3.7) のようになる。

$$f_{\text{Voigt}}(x; \sigma, w) = \frac{\text{Re}[f_{\text{Faddeeva}}(iz)]}{\sqrt{2\pi}\sigma} \quad (3.4)$$

$$z \equiv \frac{x + iw}{\sqrt{2}\sigma} \quad (3.5)$$

$$f_{\text{Faddeeva}}(z) \equiv e^{-z^2} \text{erfc}(-iz) \quad (3.6)$$

$$\text{erfc}(x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt \quad (3.7)$$

非商用目的では無料で利用できるとされる <sup>サイバイ</sup> SciPy ライブラリ (Virtanen et al., [2020](#)) に含まれる `scipy.special.voigt_profile()` メソッドを使えば、フォークト関数は容易に計算できる。

「左右非対称な装置収差関数形状モデル」（非対称化関数 *asymmetrizing function*）として、指数分布の確率密度関数を平均ピーク位置の分シフトした関数に相当する「シフト型裁断指数関数 (*shifted truncated exponential function*)」を用いることを試みる。

非対称化関数が含まれるパラメータのうち  $\gamma$  を非対称性パラメータとする。  $0 < \gamma$  のときには右側（プラス側）に長い裾を引く非対称性を表し、

$$f_{sTE}(x; \gamma) \equiv \begin{cases} \frac{1}{|\gamma|} e^{-\frac{x}{|\gamma|}+1} & \left[ -1 < \frac{x}{|\gamma|} \right] \\ 0 & \left[ \frac{x}{|\gamma|} \leq -1 \right] \end{cases} \quad (3.8)$$

とする。  $\gamma < 0$  のときには左側（マイナス側）に長い裾を引く非対称性を示し、

$$f_{sTE}(x; \gamma) \equiv \begin{cases} \frac{1}{|\gamma|} e^{\frac{x}{|\gamma|}-1} & \left[ \frac{x}{|\gamma|} < 1 \right] \\ 0 & \left[ 1 \leq \frac{x}{|\gamma|} \right] \end{cases} \quad (3.9)$$

とする。式 (3.8) と (3.9) をまとめて

$$f_{sTE}(x; \gamma) \equiv \begin{cases} \frac{1}{|\gamma|} e^{-\frac{x}{\gamma}+\text{sign}(\gamma)} & \left[ -1 < \frac{x}{\gamma} \right] \\ 0 & \left[ \frac{x}{\gamma} \leq -1 \right] \end{cases} \quad (3.10)$$

と表現することもできる。

式 (3.10) で表される sTE 関数の  $\nu$  階キユムラント  $\kappa_\nu^{(sTE)}$  は

$$\kappa_\nu^{(sTE)} = \begin{cases} 0 & [\nu = 1] \\ \gamma^\nu (\nu - 1)! & [1 < \nu] \end{cases} \quad (3.11)$$

と表される。

ただし、非対称化パラメータ  $\gamma$  の符号によって形式を変更することは、NumPy (Harris et al., 2020) などの数値計算ライブラリを利用する場合に、コーディングを少し複雑にする面もある。赤道・透過性収差を処理するためのソフトウェアを構築する場合には、 $\gamma < 0$  のときに限定して

$$f_{sTE}(x; \gamma) \equiv \begin{cases} \frac{1}{|\gamma|} e^{\frac{x}{|\gamma|}-1} & \left[ \frac{x}{|\gamma|} < 1 \right] \\ 0 & \left[ 1 \leq \frac{x}{|\gamma|} \right] \end{cases} \quad (3.12)$$

とする実装もありうる。

式 (3.12) で表されるシフト型裁断指数関数  $f_{sTE}(x; \gamma)$  の形状を Figure 3.1 に示す。

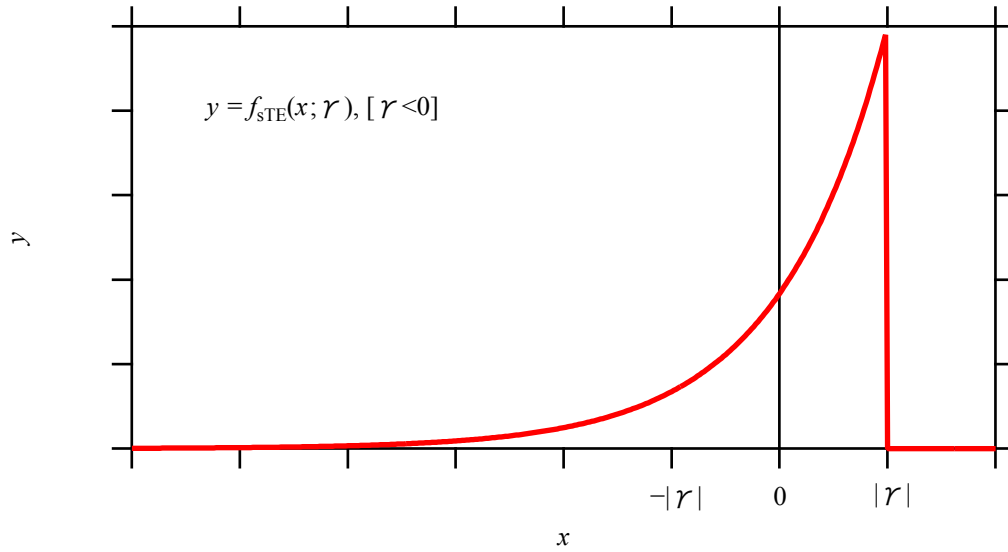


Figure 3.1 シフト型裁断指数関数  $f_{sTE}(x; \gamma)$  の形状，非対称パラメータ  $\gamma$  が負の値をとる場合。  $x < 0$  の部分の面積と  $0 < x$  の部分の面積が等しく，平均位置はゼロになる。

## 4. 非対称化フォークト (Voigt) 関数

式 (4.1) のように非対称化 Voigt 関数 (asymmetrized Voigt function) を定義する。

$$f_{aVoigt}(x; \sigma, w, \gamma) \equiv f_{Voigt}(x; \sigma, w) * f_{sTE}(x; \gamma) \quad (4.1)$$

$$f_{sTE}(x; \gamma) \equiv \begin{cases} \frac{1}{|\gamma|} e^{-\frac{x}{\gamma} + \text{sign}(\gamma)} & \left[ -1 < \frac{x}{\gamma} \right] \\ 0 & \left[ \frac{x}{\gamma} \leq -1 \right] \end{cases} \quad (3.10)$$

ただし， $\sigma$  はガウス型関数の標準偏差 (standard deviation)， $w$  はローレンツ型関数の半値半幅 (half width at half maximum; HWHM)， $\gamma$  は非対称性を表すパラメータであり， $\gamma < 0$  の時は左側に長い裾を引き， $0 < \gamma$  の時は右側に長い裾を引く非対称性を表すとする。

$\gamma < 0$  のとき，  $\frac{x}{\gamma} \in (-\infty, 1)$ ，  $-\frac{x}{\gamma} + 1 \in (0, \infty)$ ，  $e^{-\frac{x}{\gamma} + 1} \in (0, 1)$  と書ける。

$0 < \gamma$  のときは  $\frac{x}{\gamma} \in (-1, \infty)$ ，  $\frac{x}{\gamma} + 1 \in (0, \infty)$ ，  $e^{-\frac{x}{\gamma} - 1} \in (0, 1)$  と書ける。

非対称化 Voigt 関数は， $\gamma < 0$  のとき

$$f_{aVoigt}(x; \sigma, w, \gamma) = \frac{1}{|\gamma|} \int_{-\infty}^{\gamma} f_{Voigt}(x - y; \sigma, w) e^{\frac{y}{|\gamma|} - 1} dy \quad (4.2)$$

と書ける。関数の非対称性が特別に強い場合を除けば，変数変換

$$e^{\frac{y}{|\gamma|}-1} \equiv z \Leftrightarrow \frac{y}{|\gamma|} - 1 = \ln z \Leftrightarrow y - |\gamma| = |\gamma| \ln z \Leftrightarrow y = |\gamma| + |\gamma| \ln z$$

$$\Leftrightarrow y = |\gamma|(1 + \ln z) \quad (4.3)$$

$$dy = \frac{|\gamma| dz}{z}$$

$$y : -\infty \rightarrow \gamma$$

$$z : 0 \rightarrow 1$$

を用いた置換積分の形式：

$$f_{a\text{Voigt}}(x; \sigma, w, \gamma) = \int_0^1 f_{\text{Voigt}}(x + \gamma(1 + \ln z); \sigma, w) dz \quad (4.4)$$

を用いれば、積分範囲を有限区間に限定し、計算効率も高くなる。

非対称化フォクト関数は、 $\gamma > 0$  の時は

$$f_{a\text{Voigt}}(x; \sigma, w, \gamma) = \frac{1}{|\gamma|} \int_{-|\gamma|}^{\infty} f_{\text{Voigt}}(x - y; \sigma, w) e^{-\frac{y}{|\gamma|}-1} dy \quad (4.5)$$

と書けて、変数変換

$$e^{-\frac{y}{|\gamma|}+1} \equiv z \Leftrightarrow y = -|\gamma|(1 - \ln z) \quad (4.6)$$

$$dy = \frac{\gamma dz}{z} = e^{-\frac{y}{|\gamma|}+1} \frac{dz}{z}$$

$$y : -|\gamma| \rightarrow \infty$$

$$z : 0 \rightarrow 1$$

を用いた置換積分の形式：

$$f_{a\text{Voigt}}(x; \sigma, w, \gamma) = \int_0^1 f_{\text{Voigt}}(x + \gamma(1 + \ln z); \sigma, w) dz \quad (4.7)$$

を用いれば良い。

非対称化フォクト関数は、非対称化パラメータ  $\gamma$  の符号によらず、

$$f_{a\text{Voigt}}(x; \sigma, w, \gamma) = \int_0^1 f_{\text{Voigt}}(x + \gamma(1 + \ln z); \sigma, w) dz \quad (4.8)$$

とも書ける。

標本点数  $n_z$  の中点法数値積分を用いる場合には

$$f_{a\text{Voigt}}(x; \sigma, w, \gamma) \approx \frac{1}{n_z} \sum_{j_z=0}^{n_z-1} f_{\text{Voigt}}\left(x + \gamma(1 + \ln z_j); \sigma, w\right) \quad (4.9)$$

$$z_j = \frac{j_z + 0.5}{n_z} \quad (4.10)$$

とすれば良い。

## 5. 非対称化フォークト関数を用いた NIST SRM660c LaB<sub>6</sub> データの解析

ミニフレ (MiniFlex) を用いて取得された NIST SRM660c LaB<sub>6</sub> 標準粉末の回折ピーク形状について調べる。

Figure 5.1 に LaB<sub>6</sub> 100-反射の逆畳込的処理 (DCT) 後図形にフォークト (Voigt) 関数と非対称化フォークト (aVoigt) 関数を当てはめた結果を示す。

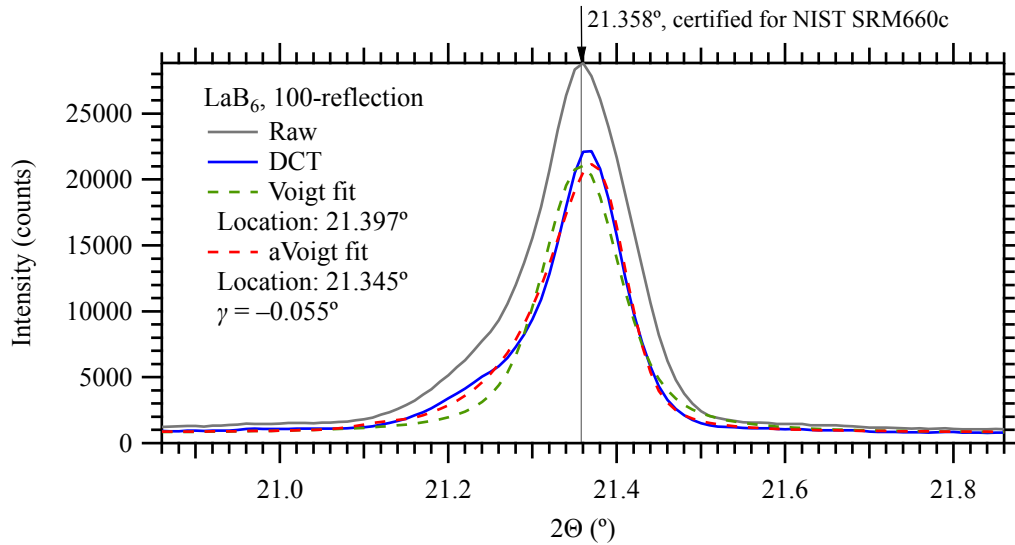


Figure 5.1 LaB<sub>6</sub> 100 反射に対するフォークト (Voigt) 関数フィット (緑色破線) と非対称化フォークト (aVoigt) 関数フィット (赤色破線)

非対称化フォークト (aVoigt) 関数により逆畳込的処理 (DCT) 後の強度図形の非対称性の主な特徴は概ね再現された。

検出器画角が  $2\Psi$ , 発散スリット角が  $\Phi_{DS}$  のとき, 赤道収差の 3 階キュムラントは二次近似形式では

$$\kappa_3^{(E)} = -\frac{2\Phi_{DS}^6}{945 \tan^3 \Theta} \left( 1 + \frac{21\Psi^2}{2\Phi_{DS}^2} \right) \quad (5.1)$$

と表される (Ida, 2026)。回折角に依存しない非対称化関数モデルの 3 階キュムラントが  $k_3$  と表される場合, 非対称化パラメータ  $\gamma$  は

$$2\gamma^3 \approx k_3^3 + \kappa_3^{(E)} \cot^3 \Theta \quad (5.2)$$

$$\gamma \approx 2^{-1/3} \text{sign} \left( k_3^3 + \kappa_3^{(E)} \cot^3 \Theta \right) \left| k_3^3 + \kappa_3^{(E)} \cot^3 \Theta \right|^{1/3} \quad (5.3)$$

と表される。

NIST SRM 660c 標準 LaB<sub>6</sub> 粉末の回折強度データに逆畳込処理を施し、個別ピーク形状フィッティング (individual peak profile fitting; IPPF) により最適化された非対称化パラメータ  $\gamma$  の回折角依存性を [Figure 5.2](#) に示す。

検出器画角  $2\Psi = 4.89^\circ$  として式 (5.1) と (5.3) から見積もられた回折角非依存成分は  $k_3 = 0.000^\circ$  であり、 $\cot \Theta$  に比例する成分を赤道面内発散角に対応させた値は

$$\gamma \approx -\frac{\Phi_{DS}'^2 \cot \Theta}{6}$$

の関係から、 $\Phi_{DS}' = 1.16^\circ$  と見積もられた。ミニフレに設置した発散 (制限) スリットの公称開き幅は  $\Phi_{DS} = 0.625^\circ$  であり、ミニフレを用いる場合には筆者が従来前提としていた仮定が根本的に成立しないことがわかった。

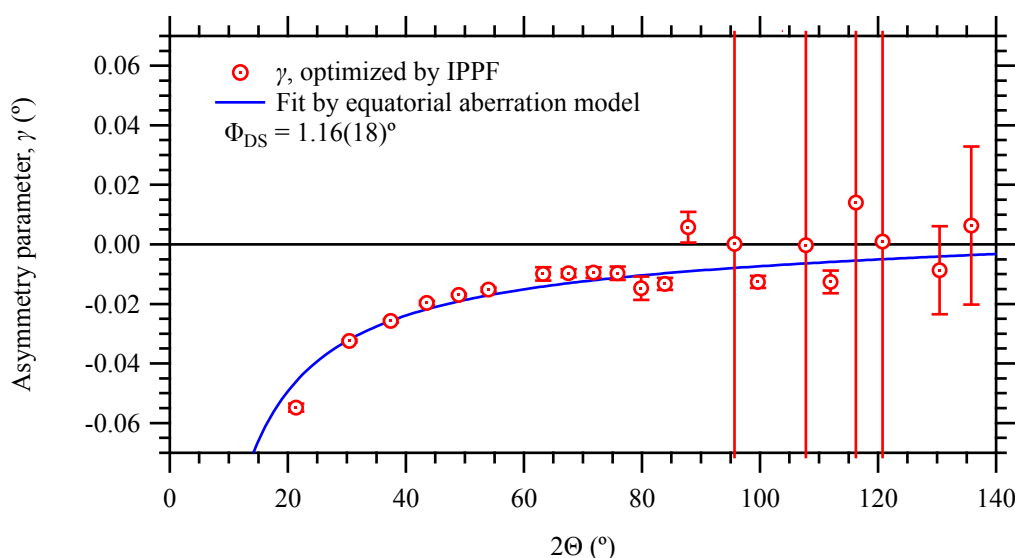


Figure 5.2 NIST SRM 660c LaB<sub>6</sub> の個別回折ピーク形状分析により得られた過剰非対称性パラメータの回折角依存性

## 6. 二重非対称化フォークト関数

[Figure 5.1](#) に示したように、ミニフレ (MiniFlex) を用いて取得された NIST SRM660c LaB<sub>6</sub> 標準粉末の逆畳込処理 (DCT) 後の 100-回折ピーク形状の非対称性の「主な特徴」は非対称化フォークト関数で再現されたが、DCT 曲線の形状には明確なずれが残った。

装置製造会社から装置について正確な情報の得られない場合に、ユーザが適切に対処できるような適応的な (adaptive) な方法論を構築することを試みる。逆畳込処理後の LaB<sub>6</sub> 100-反射回折ピーク形状に、以下のように表される二重非対称化フォークト関数を当てはめた。

$$f_{\text{daVoigt}}(x) = b + s_1 f_{\text{aVoigt}}(x - x_1; \sigma, w, \gamma) + s_2 f_{\text{aVoigt}}(x - x_2; \sigma, w, \gamma) \quad (6.1)$$

結果を [Figure 6.1](#) に示す。

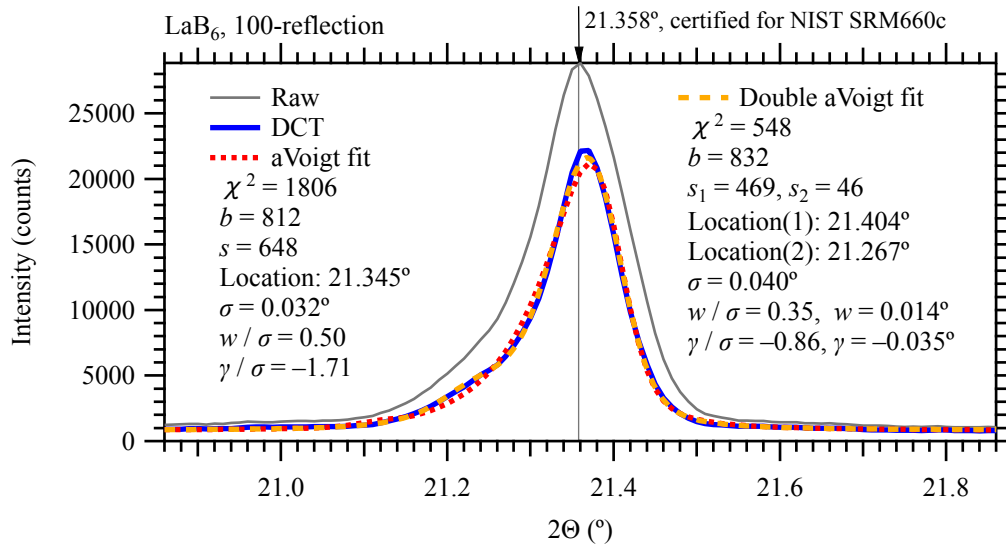


Figure 6.1 NIST SRM 660c LaB<sub>6</sub> 標準粉末 100-反射の観測回折図形 (Raw) (灰色実線) と発散スリット角  $\Phi_{DS} = 0.625^\circ$  と仮定した逆畳込の処理後の図形 (DCT) (青実線) , 単一非対称化フォークト関数当てはめ (aVoigt fit) (赤点線) , 二重非対称化フォークト関数当てはめ (double aVoigt) (橙色破線)

このことは非対称化関数として, シフト補正裁断指数関数

$$f_{sTE}(x; \gamma) \equiv \begin{cases} \frac{1}{|\gamma|} e^{-\frac{x}{\gamma}-1} & \left[ 1 < \frac{x}{\gamma} \right] \\ 0 & \left[ \frac{x}{\gamma} \leq 1 \right] \end{cases} \quad (3.8)$$

の代わりに

$$f_{dsTE}(x; \rho, \delta, \gamma) = (1 - \rho) f_{sTE}(x; \gamma) + \rho f_{sTE}(x - \delta; \gamma) \quad (6.2)$$

と表現される二重シフト補正裁断指数関数を用いれば良いことを示唆する。式 (6.2) で表される関数  $f_{dsTE}(x; \rho, \delta, \gamma)$  の平均ピーク位置は

$$s_1^{(dsTE')} = \rho \delta \quad (6.3)$$

であることから, 平均位置を原点に置く非対称化関数の候補として

$$f_{dsTE}(x; \rho, \delta, \gamma) = (1 - \rho) f_{sTE}(x - \rho\delta; \gamma) + \rho f_{sTE}(x - \delta - \rho\delta; \gamma) \quad (6.4)$$

が得られる。

Figure 6.1 に示した個別ピーク形状当てはめ (IPPF) で最適化された  $f_{dsTE}(x; \rho, \delta, \gamma)$  関数の形状を Figure 6.2 に示す。

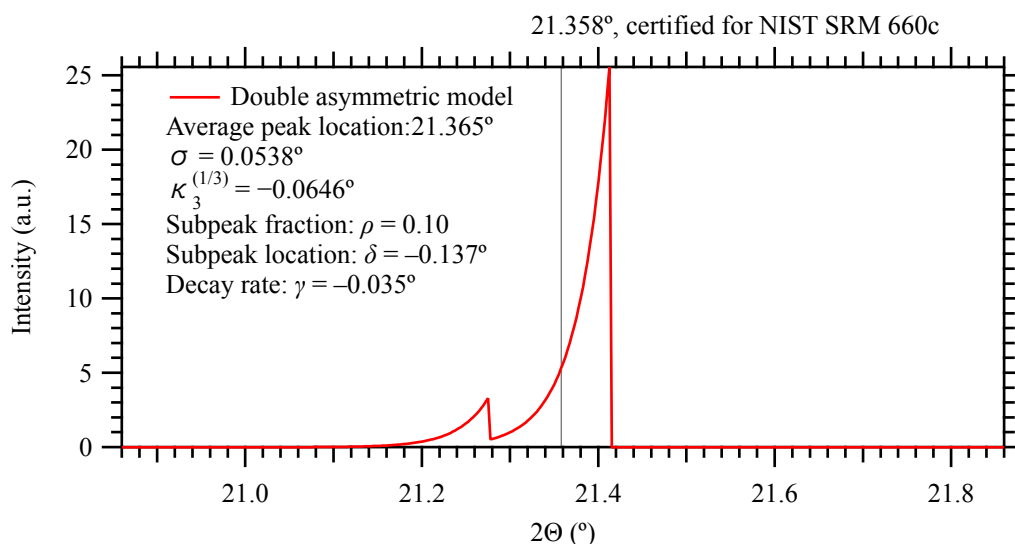


Figure 6.2 LaB<sub>6</sub> 100-反射に当てはめた非対称化フォークト関数に用いた二重シフト裁断指数関数の形状

Figure 6.1 に示した個別ピーク形状当てはめ (IPPF) の結果から、副ピーク成分の相対強度は  $\rho = 0.100$  と固定できることは自明だが、副ピークの相対位置  $\delta$  としてどのような値を用いるべきかは必ずしも自明ではない。

裁断指数関数の減衰幅が  $\gamma = (\gamma/\sigma) \times \sigma \approx -0.87 \times 0.040^\circ \approx -0.035^\circ$  に相当することと、個別ピーク形状当てはめ (IPPF) により推定される副ピーク位置の主ピーク位置からのずれが  $\delta \approx -0.137^\circ$  であったことから、局所的には以下の関数：

$$f_{\text{Deconv}}(\Delta 2\Theta; \gamma, \rho, \delta) = (1 - \rho) f_{\text{sTE}}(\Delta 2\Theta - \rho\delta; \gamma) + \rho f_{\text{sTE}}(\Delta 2\Theta - \delta - \rho\delta; \gamma) \\ \approx 0.90 \times f_{\text{sTE}}(\Delta 2\Theta + 0.014^\circ; -0.035^\circ) + 0.10 \times f_{\text{sTE}}(\Delta 2\Theta + 0.151^\circ; -0.035^\circ) \quad (6.5)$$

について逆畳込的な処理を施せば良い。

大域的な尺度変換のためには、ピーク形状の非対称な変形の主要因が、赤道収差に関する主ピーク成分によるとみなして、尺度は

$$\chi_{\text{EQ}} \propto -\ln \cos \Theta \quad (6.6)$$

とする。このとき

$$\frac{d\chi_{\text{EQ}}}{d2\Theta} \propto \frac{\cot \Theta}{2} \quad (6.7)$$

の関係が成立する。

## 7. 逆畳込的な処理での適応型非対称化関数の利用

ミニフレ (Rigaku MiniFlex 600-C) を用いて取得した NIST SRM 660c 標準 LaB<sub>6</sub> 粉末の回折データに対して発散スリット角  $\Phi_{\text{DS}} = 0.625^\circ$  を仮定した逆畳込的な処理を施し、さらに前節で導いた二重非対称化関数について  $2\Theta \approx 21.358^\circ$  での局所的な逆畳込的な処理を施した結果を Figure 7.1 に示す。

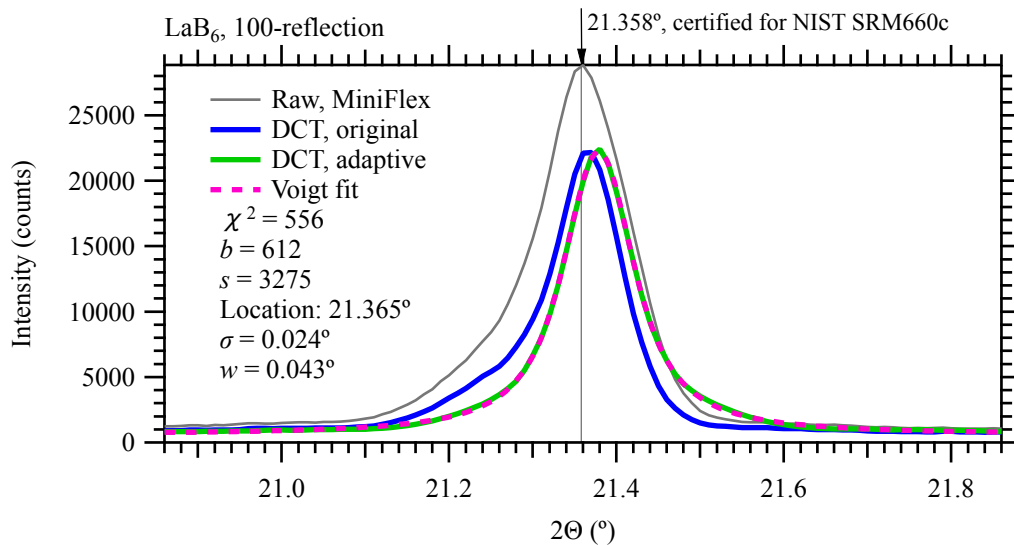


Figure 7.1 Rigaku MiniFlex 600-C を用いて取得された NIST SRM 660c 標準 LaB<sub>6</sub> 粉末 100-反射の回折図形 (Raw) (灰色実線) と発散スリット角  $\Phi_{DS} = 0.625^\circ$  を仮定した逆畳込的処理後の図形 (DCT, original) (青色実線), 適応型非対称化関数についての逆畳込的処理後図形 (DCT, adaptive) (緑色実線), 適応型非対称化関数について逆畳込的処理を施した図形にフォークト関数を当てはめた図形 (Voigt fit) (赤色破線)

Figure 7.1 に示すように装置製造会社から得られた装置パラメータに関する情報に基づく逆畳込的処理を施した後に、二重非対称化関数を用いた逆畳込的処理を重ねて用いることにより、ミニフレを用いて取得された回折データを処理する場合であってもエアリス (Aeris) を用いて取得された回折データと同様に、ほぼ左右対称な回折ピーク形状が得られた。

一方で、装置製造会社から断片的で不正確かも知れない装置パラメータに関する情報しか得られなかったとしても、その情報を用いた逆畳込的処理を施してはじめて左右対称な回折ピーク形状を得る手法が成立したことも事実である。

適応的な逆畳込的処理を施した LaB<sub>6</sub> 100-反射データのピーク位置は NIST 保証書記載値から  $0.007^\circ$  高角側にずれた。このずれは許容範囲と見做せないわけでないが、例えば NIST SRM 640d 標準粉末の実測データに同様の適応型逆畳込的処理を施して装置の角度較正をし直せば、このずれの大部分も修整されることが予想された。

## 8. 局所的な逆畳込的処理の大域化

ミニフレ (Rigaku MiniFlex) を用いて収集された NIST SRM 660c LaB<sub>6</sub> 100-反射の非対称なピーク形状は、「見かけ回折角」  $2\theta = 21.36^\circ$  付近では、局所的に式 (6.5) のように

$$f_{\text{Deconv}}(\Delta 2\theta; \gamma, \rho, \delta) = (1 - \rho) f_{\text{sTE}}(\Delta 2\theta - \rho\delta; \gamma) + \rho f_{\text{sTE}}(\Delta 2\theta - \delta - \rho\delta; \gamma) \quad (6.5)$$

のように表され、式 (6.5) 中のパラメータ  $\gamma, \rho, \delta$  には

$$\gamma_{(2\Theta \approx 21.36^\circ)} = -0.035^\circ \quad (8.1)$$

$$\rho = 0.10 \quad (8.2)$$

$$\delta_{(2\Theta \approx 21.36^\circ)} = -0.137^\circ \quad (8.3)$$

のような値を当てはめれば良いことがわかった。

「見かけ回折角」  $2\Theta = 21.36^\circ$  に対する逆正接関数の値は  $\cot \Theta = 5.30$  である。

式 (8.1)–(8.3) のうち式 (8.1) と式 (8.3) は尺度に直接関係する。

$\gamma \propto \cot \Theta$ ,  $\delta \propto \cot \Theta$ ,  $2\Theta = 21.36^\circ$  として

$$\gamma(2\Theta) = - (0.035^\circ / 5.30) \cot \Theta \approx -0.0070^\circ \cot \Theta \quad (8.4)$$

$$\delta(2\Theta) = - (0.137^\circ / 5.30) \cot \Theta \approx -0.0258^\circ \cot \Theta \quad (8.5)$$

と表されるとすれば式 (8.1) と式 (8.3) は成立する。

$$\chi = -2 \ln \cos \Theta \quad (8.6)$$

を用いれば,

$$\frac{\Delta \chi}{\Delta 2\Theta} = \tan \Theta \Rightarrow \Delta 2\Theta = \Delta \chi \cot \Theta \quad (8.7)$$

となる。

数値計算を用いることを前提とすれば, 間隔  $2\Theta_{\text{step}}$  の見かけ回折角  $2\Theta_i$  と観測強度  $y_i$  の組  $\{2\Theta_i, y_i\}$  ( $i = 0, \dots, n-1$ ) のデータに対して, 尺度変換後のデータの組  $\{\chi_i, \eta_i\}$  は

$$\left( \frac{d\chi}{d2\Theta} \right)_i = \tan \Theta_i \quad (8.8)$$

$$\chi_i = \begin{cases} 0 & [i = 0] \\ \sum_{i=1}^{n-1} \left( \frac{d\chi}{d2\Theta} \right)_{i-1} 2\Theta_{\text{step}} & [i = 1, \dots, n-1] \end{cases} \quad (8.9)$$

$$\eta_i = \frac{y_i}{C(2\Theta_i)} \left( \frac{d\chi}{d2\Theta} \right)_i^{-1} \quad (8.10)$$

となる。ただし  $C(2\Theta)$  は粉末回折強度についての幾何学的な補正因子であり, ミニフレのように回折光学素子を用いない装置の場合には

$$C(2\Theta) = \frac{\sin 2\Theta \sin \Theta}{1 + \cos^2 2\Theta} \quad (8.11)$$

と表される。

非対称化関数についての逆畳込的处理を「ミニフレ補整 MiniFlex shaper」と呼ぶことにする。(補足 8.A)

## 9. 装置の角度較正

NIST SR640d Si 標準試料の粉末回折データに対して、逆畳込的处理とミニフレ補整 (MiniFlex shaper) を適用し、ミニフレ (MiniFlex) の角度 ( $2\Theta$  値) の再較正を試みた。

当初は装置製造会社から得られた装置パラメータに基づく逆畳込的处理を施した後、フォークト (Voigt) 関数を当てはめて  $hkl$ -反射の回折ピーク位置  $2\Theta_{hkl}$  を求めた。

X線波長  $\lambda$  と  $hkl$  面間隔  $d_{hkl}$ 、ブラッグの式  $\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta_{hkl}$  から計算で求められる回折ピーク位置  $2\theta_{hkl}$  からのずれ  $\Delta 2\Theta_{hkl} = 2\Theta_{hkl} - 2\theta_{hkl}$  に対して定数・余弦・正弦・倍角余弦・倍角正弦項モデル

$$\Delta 2\Theta_{hkl} = \Delta 2\Theta_0 + \Delta 2\Theta_1 \cos \Theta_{hkl} + \Delta 2\Theta_2 \sin \Theta_{hkl} + \Delta 2\Theta_3 \cos 2\Theta_{hkl} + \Delta 2\Theta_4 \sin 2\Theta_{hkl} \quad (9.1)$$

を当てはめた。

ミニフレでは  $2\Theta$  軸に取り付けられる回転体に偏心荷重 (eccentric weight) があり、 $\Theta$  軸に取り付けられる回転体にも偏心荷重がある。カウンター・ウェイト (counter weight) は取り付けられておらず、重力の影響で軸にかかるトルクが角度  $2\Theta$  によって変化する。 $2\Theta$  軸と  $\Theta$  軸は中間歯車で接続されている。 $2\Theta$  軸の偏心荷重の影響は  $2\Theta$  値に対して  $360^\circ$  周期で変動し、 $\Theta$  軸の偏心荷重の影響は  $2\Theta$  値に対して  $720^\circ$  周期で変動する。式 (9.1) の第二項と第三項は長い周期の変動に対応する意味を持つ。また式 (9.1) の表現は二次までのフーリエ係数 (Fourier coefficients) をパラメータとしていると見ることにもできる。

Cu  $K_\alpha$  線源で実際に観測できる Si の回折ピークは 11 本の反射しかなく、5 パラメータの最適化は当然のようにオーバー・フィッティング (over fitting) (過学習) の様相を示すが、角度補正式に用いる目的では問題ないと判断した。

ミニフレ補整を適用する前に用いていた角度補正式では、 $\Delta 2\Theta_0 = -0.3341^\circ$ 、 $\Delta 2\Theta_1 = +0.1168^\circ$ 、 $\Delta 2\Theta_2 = +0.4172^\circ$ 、 $\Delta 2\Theta_3 = +0.1887^\circ$ 、 $\Delta 2\Theta_4 = -0.0897^\circ$  としていた。これらの数値に物理的な意味はないと思われる。

[Figure 9.1](#) にミニフレ補整を施す前の  $2\Theta$  角度補正曲線を赤色点線で示す。

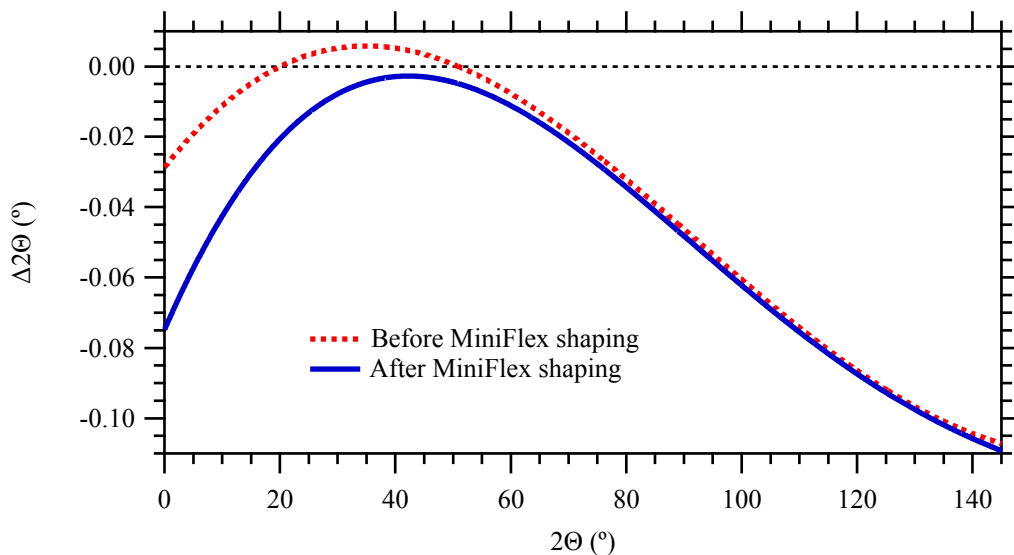


Figure 9.1 装置パラメータを用いた逆畳込処理後の回折ピーク図形にフォークト関数を当てはめて導かれた定数・余弦・正弦・倍角余弦・倍角正弦モデル（角度補正曲線）の回折角依存性（赤色点線 .....）とミニフレ補正を適用した場合に得られた曲線（青色実線 ———）

NIST SRM 640d Si 粉末の回折データに対して予備的な角度補正と逆畳込的処理，ミニフレ補整 (MiniFlex shaper) を適用し，改めてフォークト関数を当てはめる個別ピーク形状分析 (IPPF) を行なった。その結果から， $2\theta$  角度補正式のパラメータとして

$$\Delta 2\theta_0 = -0.9132^\circ, \Delta 2\theta_1 = +0.6243^\circ, \Delta 2\theta_2 = +1.0012^\circ, \Delta 2\theta_3 = +0.2142^\circ, \Delta 2\theta_4 = -0.2844^\circ$$

という値が求められた。

確認のため，改めてミニフレが吐き出す Si 回折データに上記の  $2\theta$  角度補正を施し，装置と試料のパラメータに基づく逆畳込的処理，ミニフレ補整を施した。装置パラメータに基づく逆畳込的処理とミニフレ補正を合わせて「適応型逆畳込的処理」(adaptive deconvolutional treatment; aDCT) と呼ぶことにする。Si の aDCT データにフォークト関数を当てはめた。Figures 9.2, 9.3, 9.4 に Si 111, 422, 533-反射についての個別ピーク形状分析の結果を示す。個別ピーク形状分析の際に，誤差はミニフレ補整後の見かけカウント数の平方根と同一視できると仮定した。この仮定に問題があることは明白だが，最適化されたパラメータについて見積もられた誤差の値からは，極端に見当はずれな仮定ではないように思われる。なお，結果的にピーク位置が NIST 保証書記載値と一致したのは当然だが，(1)  $2\theta$  角度補正，(2) 装置と試料のパラメータによる逆畳込的処理，(3) ミニフレ補整のいずれも特段の問題なく機能したことが確認された意味はある。

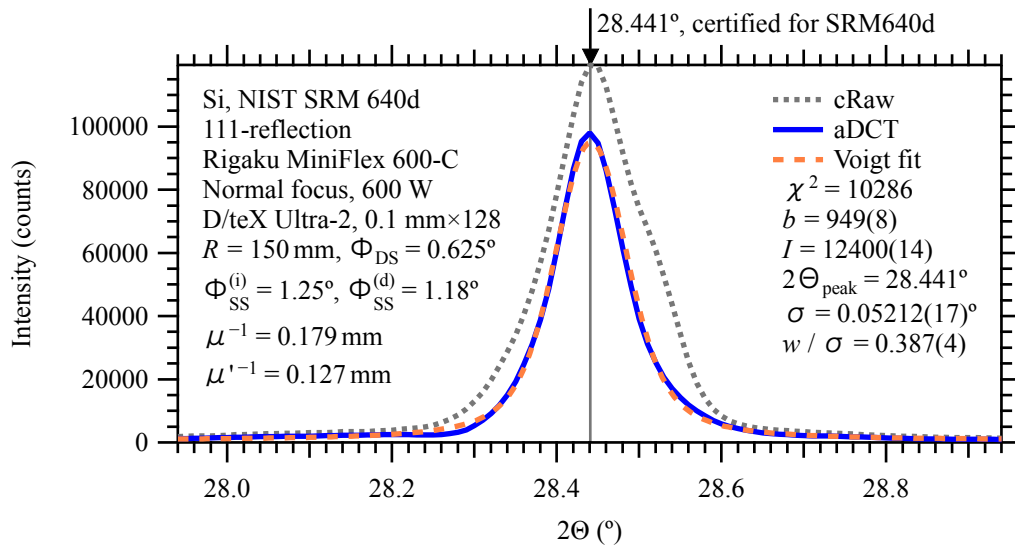


Figure 9.2 Si 111-反射についての  $2\theta$  角度補正後データ (cRaw) 逆畳込的处理後ミニフレ補正を施したデータ (aDCT), aDCT データに Voigt 関数を当てはめた曲線 (Voigt fit)

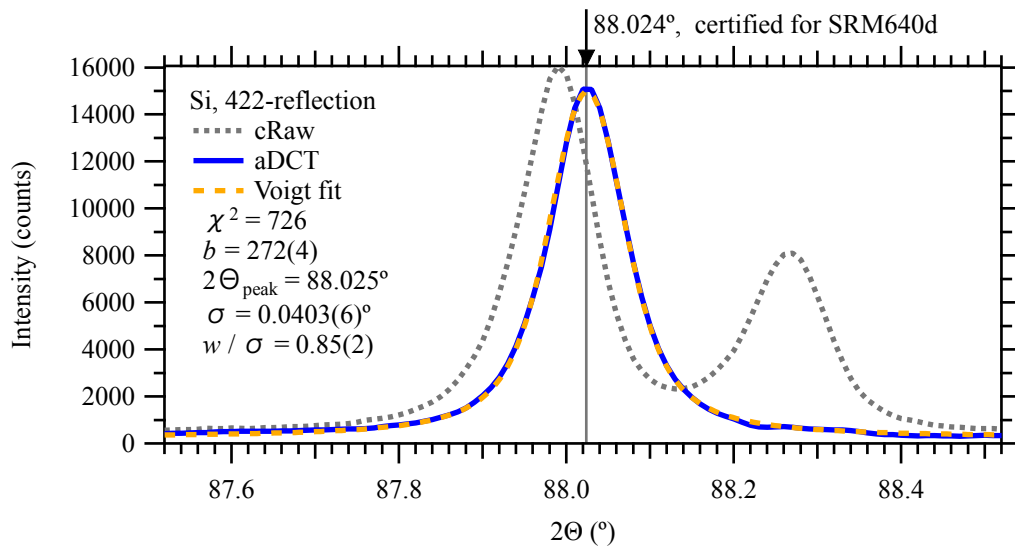


Figure 9.3 Si 422-反射についての  $2\theta$  角度補正後データ (cRaw) 逆畳込的处理後ミニフレ補正を施したデータ (aDCT), aDCT データに Voigt 関数を当てはめた曲線 (Voigt fit)

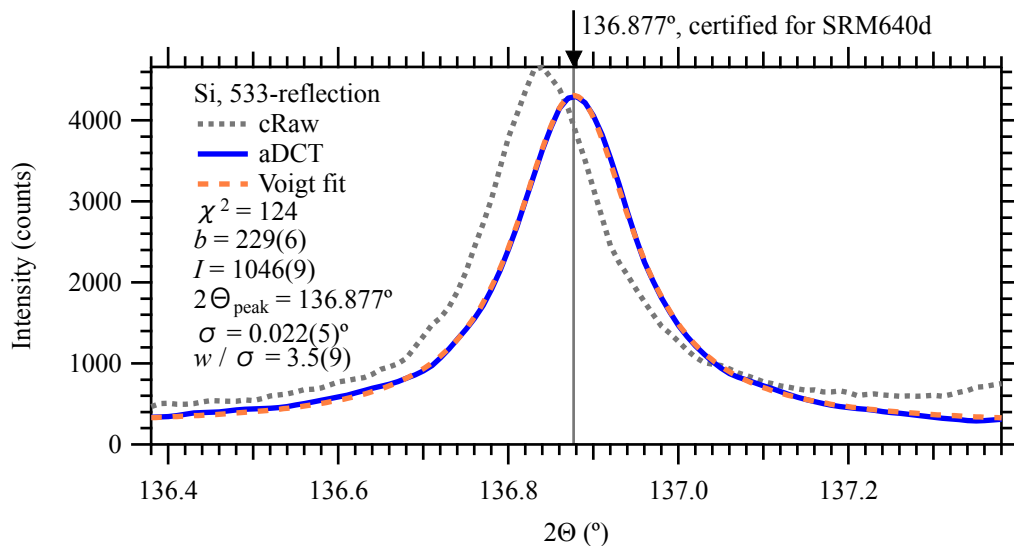


Figure 9.4 Si 533-反射についての  $2\theta$  角度補正後データ (cRaw) 逆畳込的処理後ミニフレ補正を施したデータ (aDCT), aDCT データに Voigt 関数を当てはめた曲線 (Voigt fit)

## 10. LaB<sub>6</sub> 粉末回折データへの適用

NIST SR660c LaB<sub>6</sub> 標準試料の粉末回折データに対して、 $2\theta$  角度補正と適応型逆畳込的処理を適用した。LaB<sub>6</sub> 粉末の平均厚さは  $t = 0.205$  mm, 試料粉末の X 線侵入深さは  $\mu^{-1} = 0.030$  mm, ガラス製試料ホルダの侵入深さは  $\mu^{-1} = 0.128$  mm と見積もられた。

適応型逆畳込的処理を施した後、フォークト (Voigt) 関数を当てはめた。

[Figure 10.1](#), [10.2](#), [10.3](#) に LaB<sub>6</sub> の 100, 321, 500/430-反射について、ミニフレの吐き出すデータに  $2\theta$  角度補正を施したデータ (corrected raw data; cRaw), 適応型逆畳込的処理を適用したデータ (adaptively & deconvolutionally treated data; aDCT), フォークト関数を当てはめた結果 (Voigt fit) を示す。

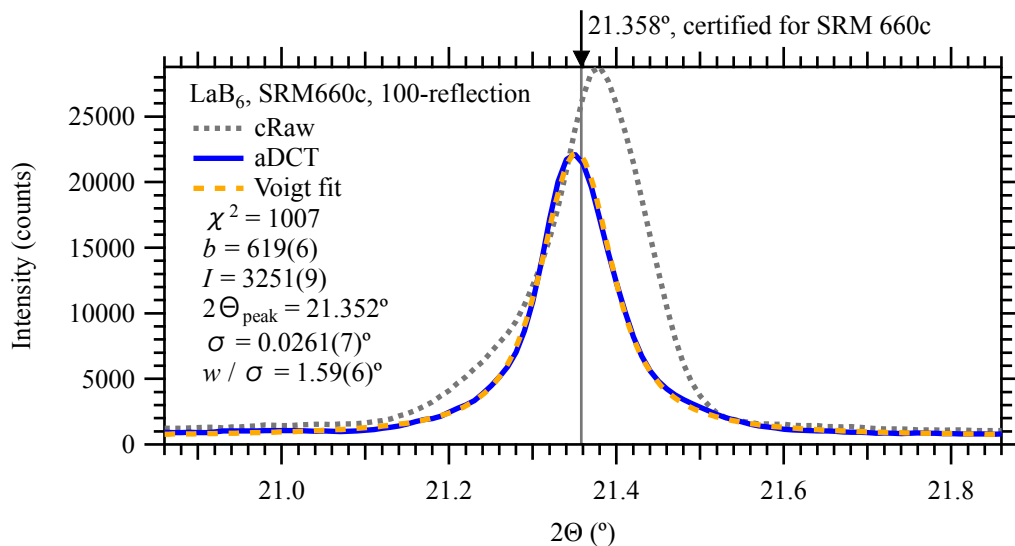


Figure 10.1 NIST SRM660c LaB<sub>6</sub> の粉末回折データに 2 $\theta$  角度補正を加えた結果 (cRaw), 適応型逆畳込処理を施した結果 (aDCT) の 100-反射ピークとフォークト関数当てはめ (Voigt fit)

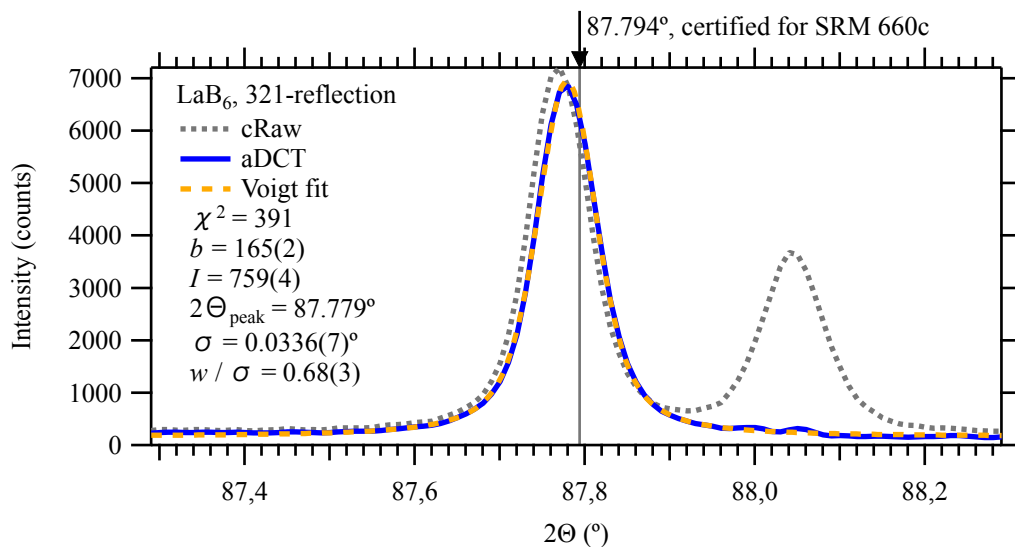


Figure 10.2 NIST SRM660c LaB<sub>6</sub> の粉末回折データに 2 $\theta$  角度補正を加えた結果 (cRaw), 適応型逆畳込処理を施した結果 (aDCT) の 321-反射ピークとフォークト関数当てはめ (Voigt fit)

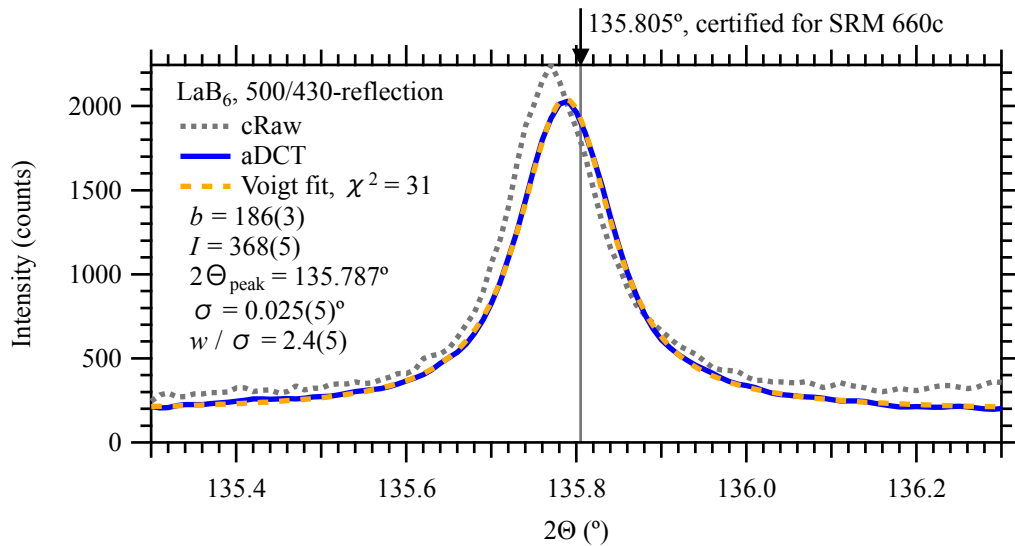


Figure 10.3 NIST SRM660c LaB<sub>6</sub> の粉末回折データに 2θ 角度補正を加えた結果 (cRaw), 適応型逆畳込処理を施した結果 (aDCT) の 500/430-反射ピークとフォークト関数当てはめ (Voigt fit)

ミニフレ (Rigaku MiniFlex) を用いて取得された NIST SRM 660c LaB<sub>6</sub> 粉末の回折データであっても、適応型逆畳込的処理を施すことにより、左右対称な回折ピーク形状は得られた。

しかし、得られたピーク位置は、NIST 保証書記載位置から系統的にずれた値を示した (Figure 10.4)。

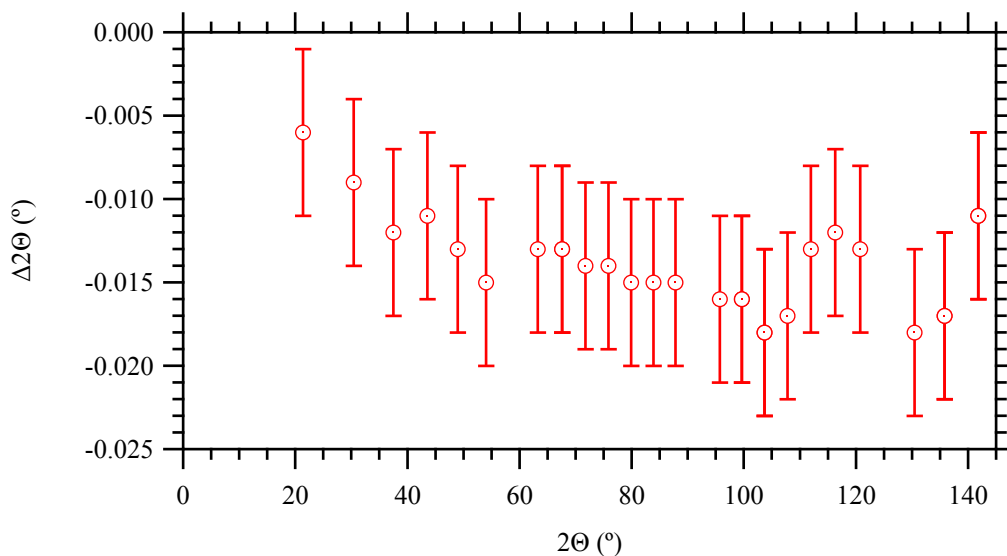


Figure 10.4 適応型逆畳込的処理後の LaB<sub>6</sub> ピークのシフトの回折角依存性

試料位置ずれ  $\Delta S$  によるピークシフトは

$$\Delta 2\theta = \frac{2\Delta S \cos \theta}{R}, \quad (10.1)$$

試料が十分に厚い時、線減衰係数  $\mu$  の試料のピークシフトは

$$\Delta 2\Theta = -\frac{\sin 2\Theta}{2\mu R}, \quad (10.2)$$

と表される。

## 11. まとめ

粉末 X 線回折装置 (Rigaku MiniFlex 600-C) を用いて取得した NIST SRM 660c 標準 LaB<sub>6</sub> 粉末の 100-反射は装置と試料のパラメータを用いた逆畳込的处理を施しても低角側に長い裾を引く非対称なピーク形状を示したが、適応型二重シフト補正裁断指数関数モデルに関する逆畳込的处理を適用することにより、ほぼ左右対称なピーク形状の得られる可能性はあることが確かめられた。

粉末 X 線回折装置製造会社として国際的に比較的高いシェアを持つ Bruker AXS 社の製品を用いて取得されたデータに対して逆畳込的处理を施すとどのような結果になるかには関心を持たれる。

### (補足 1.A) 「修整」の表記 (↔)

「逆畳込的处理」は、基本的には線形変換であり情報を増やしも減らしもせず、測定結果を見やすくするだけの機能しか持たない。「修整」の表記はお見合い写真など良く見えるように加工する場合に用いられ、英語では <sup>リタッチ</sup>retouch の意味に近い。(↔)

### (補足 1.B) 回折角の計算 (↔)

回折ピーク位置の計算 NIST の発行する保証書に記載される SRM 640d Si 標準粉末の格子定数  $a = 5.43123 \text{ \AA}$  と、NIST が仮定する CuK $\alpha_1$  X 線波長  $\lambda = 1.5405929 \text{ \AA}$ 、ブラッグ法則 (Bragg's law) から、以下のようなコードを実行すれば良い。

```
import numpy as np
def fDeg2T(h,k,l):
    a,lam = 5.43123,1.5405929
    return 360/np.pi*np.arcsin(0.5*np.sqrt(h**2+k**2+l**2)*lam/a)
print(f" deg2T = {fDeg2T(1,1,1):.3f}")
```

(↔)

### (補足 3.A) Igor Pro でのフォークト関数 VoigtFunc() と VoigtPeak() (↔)

Igor Pro の関数ライブラリでは、フォークト関数は VoigtFunc(X,Y) あるいは VoigtPeak(w,x) のように参照できるが、scipy.special.voigt.profile メソッドのように Faddeeva 関数を使って

$$f_{\text{Voigt}}(x, \sigma, w) \equiv \frac{\text{Re} [f_{\text{Faddeeva}}(z)]}{\sqrt{2\pi}\sigma} \quad (3.A.1)$$

$$z = \frac{x + iy}{\sqrt{2}\sigma}$$

$$f_{\text{Faddeeva}}(z) = e^{-z^2} \text{erfc}(-iz)$$

とした方がわかりやすいと思われる。ここで  $\sigma$  は正規分布の標準偏差 (standard deviation) に相当する値であり、 $\gamma$  はローレンツ型関数の半値半幅 (half width at half maximum; HWHM) に相当する。

Igor Pro でのフォークト関数当てはめではパラメータの自動推定が行われるので扱いやすいが、ガウス型関数の半値全幅 (full width at half maximum; FWHM)  $(FWHM)_G = 2\sqrt{\ln 2} \sigma$  と、ローレンツ型関数の半値全幅  $(FWHM)_L = 2\gamma$  に対して  $(FWHM)_L / (FWHM)_G = \gamma / \sqrt{\ln 2} \sigma$  の値がピーク形状を特徴づけるパラメータとして用いられる。 (↔)

#### (補足 8.A) 「補整」の表記 (↔)

「補整」の表記が用いられる典型的な例に、女性が体型を美しく見えるように着用する「補整下着」(shaping underwear / shapewear) がある。「ミニフレ補整」(MiniFlex shaper) の働きには「補整下着」の働きと似た面があり「補整」の表記は「補正」(correction) とは異なる意味合いを持たせることを意図する。 (↔)

## 参考文献

Harris, C.R., Millman, K.J., van der Walt, S.J., Gommers, R., Virtanen, P., Cournapeau, D., Wieser, E., Taylor, J., Berg, S., Smith, N.J., Kern, R., Picus, M., Hoyer, S., van Kerkwijk, M.H., Brett, M., Haldane, A., Fernández del Río, J., Wiebe, M., Peterson, P., Gérard-Marchant, P., Sheppard, K., Reddy, T., Weckesser, W., Abbasi, H., Gohlke, C., and Oliphant, T.E. (2020) “Array Programming With NumPy” *Nature* **585**, 357–362.

[DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>] (↔)

Ida, T. (2025) “Deconvolutional treatment about sample transparency aberration interfered by opaque and translucent sample holders in Bragg–Brentano geometry”, *Powder Diffraction*, **40**(2), 105–113.

[DOI: <https://doi.org/10.1017/S088571562500003X>] (↔)

Ida, T. & Kimura, K. (1999) “Flat-specimen effect as a convolution in powder diffractometry with Bragg-Brentano geometry”, *Journal of Applied Crystallography*, **32**, 635–640 .

[DOI: <https://doi.org/10.1107/S0021889899003222>] (↔)

Poppe, G.P.M., & Wijers, C.M.J. (1990a) “More efficient computation of the complex error function”, *ACM Transactions on Mathematical software*, **16**(1), 38–46.

[DOI: <https://doi.org/10.1145/77626.77629>] (↔)

Poppe, G.P.M., & Wijers, C.M.J. (1990b) “Algorithm 680: evaluation of the complex error function”, *ACM Transactions on Mathematical software*, **16**(1), 47.

[DOI: <https://doi.org/10.1145/77626.77630>] (↔)

Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T. E., Haberland, M., Tyler Reddy, T., Cournapeau, D., Burovski, E., Peterson, P., Weckesser, W., Bright, J., van der Walt, S.J., Brett, M., Wilson, J., Millman, K. J., Mayorov, N., Nelson, A.R.J., Jones, E., Kern, R., Larson, E., Carey, C.J., Polat, İ, Feng, Y., Moore, E.W., VanderPlas, J., Laxalde, D., Perktold, J., Cimrman, R., Henriksen, I., Quintero, E.A., Harris, C.R, Archibald, A.M., Ribeiro, A.H., Pedregosa, F., van Mulbregt, P. (2020). “SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python.” *Nature Methods*, **17**, 261–272.

[DOI: <https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2>] (↔)

