

粉末X線回折法

名古屋工業大学 先進セラミックス研究センター
井田 隆

7. 装置収差 Instrumental aberrations

実験室で広く用いられる粉末X線回折測定装置の多くは [Figure 7.1.1](#) に示すような ^{プラグ}Bragg-_{プレッター}Brentano 型のデザインによる。Bragg-Brentano 型の装置デザイン固有の **装置収差** instrumental aberration ([補足 7.A](#)) として、**軸発散収差** axial-divergence aberration と **赤道収差** equatorial aberration が知られる。**試料透過性収差** sample-transparency aberration は試料の線減衰係数（または侵入深さ）と試料の厚さに依存して変化するので、装置の幾何学的な情報のみから算出できるわけではないが、数学的には軸発散収差や赤道収差と同じように扱うことができる。

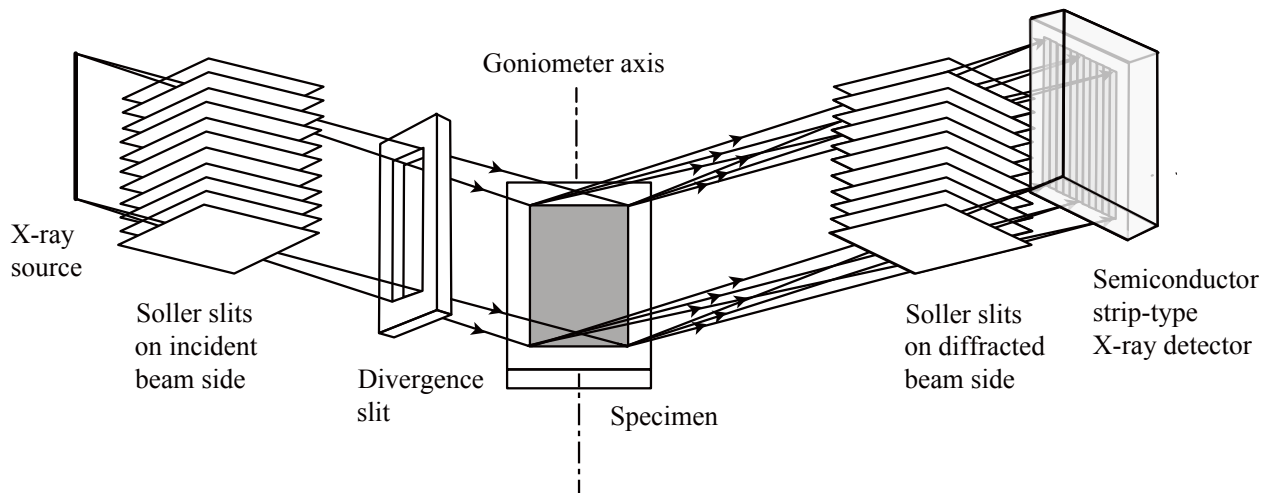


Figure 7.1.1 Bragg-Brentano 型粉末回折測定装置の光学部品の配置。上流側からX線源 (X-ray source), 入射側ソーラー・スリット (Soller slits on incident beam side), 発散スリット (divergence slit), 試料 (specimen), 回折側ソーラー・スリット (Soller slits on diffracted beam side), 半導体ストリップ型X線検出器 (semiconductor strip-type X-ray detector) の順にX線ビームが進行する。

7.1 軸発散収差 axial-divergence aberration

7.1.1 軸方向へのビーム進行方向へのずれと回折角のずれとの関係

X線源（発光位置）から軸（ゴニオメータ回転軸）の方向に沿って角度 α ずれた入射ビームが、試料面で反射され、さらに軸方向へ角度 β ずれた方向へ進行して検出器に捕捉されるとする。このとき、見掛け回折角（ゴニオメータ角度） 2Θ と真の回折角 2θ との差（回折角ずれ） $\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta$ は

$$\Delta 2\Theta = 2\Theta - \arccos(\cos 2\Theta \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta) \quad (7.1.1.1)$$

と表される（補足 7.1.1.A）。

入射ビーム側ソーラー・スリット Soller slits on incident beam side の開き角が $\Phi_{SS}^{(i)}$ 、回折ビーム側ソーラー・スリット Soller slits on diffracted beam side の開き角が $\Phi_{SS}^{(d)}$ と表されるなら、軸発散収差に関する装置函数（軸発散収差函数 axial-divergence aberration function）は、

$$\begin{aligned} \omega_A \left(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi_{SS}^{(i)}, \Phi_{SS}^{(d)} \right) \\ = \frac{1}{\Phi_{SS}^{(i)} \Phi_{SS}^{(d)}} \int_{-\Phi_{SS}^{(d)}}^{\Phi_{SS}^{(d)}} \int_{-\Phi_{SS}^{(i)}}^{\Phi_{SS}^{(i)}} \delta \left(\Delta 2\Theta - f(2\Theta, \alpha, \beta) \right) \left(1 - \frac{|\alpha|}{\Phi_{SS}^{(i)}} \right) \left(1 - \frac{|\beta|}{\Phi_{SS}^{(d)}} \right) d\alpha d\beta \end{aligned} \quad (7.1.1.2)$$

$$f(2\Theta, \alpha, \beta) = 2\Theta - \arccos(\cos 2\Theta \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta) \quad (7.1.1.3)$$

と表現される（補足 7.1.1.B）。式 (7.1.1.2) 中の $\delta(x)$ はディラックのデルタ函数 Dirac delta を表す。

7.1.2 対称ソーラスリット配置の場合の軸方向へのビーム進行方向へのずれと回折角のずれとの関係の二次近似

式 (7.1.1.1) を α と β が小さいことを前提として二次近似形式で表現すれば

$$\Delta 2\Theta \approx -\frac{(\alpha - \beta)^2}{4 \tan \Theta} + \frac{(\alpha + \beta)^2}{4 \cot \Theta} \quad (7.1.2.1)$$

となる（補足 7.1.2.A）。

対称ソーラー・スリット配置（ $\Phi_{SS}^{(i)} = \Phi_{SS}^{(d)} = \Phi_{SS}$ ）の場合には、軸発散収差函数の二次近似形式は以下の数式で表現される。

$$\omega_A(\Delta 2\Theta) = \frac{1}{\Phi_{SS}^2} \int_{-\Phi_{SS}}^{\Phi_{SS}} \int_{-\Phi_{SS}}^{\Phi_{SS}} \delta \left(\Delta 2\Theta + \frac{(a - b)^2}{4 \tan \Theta} - \frac{(a + b)^2}{4 \cot \Theta} \right) \left(1 - \frac{|a|}{\Phi_{SS}} \right) \left(1 - \frac{|b|}{\Phi_{SS}} \right) da db \quad (7.1.2.2)$$

見かけ回折角（ゴニオメータ角） 2Θ に対して $t = \tan \Theta$ とする。 Φ_{SS} はソーラー・スリットの開き角であり，スリットに用いられる金属箔の間隔と長さの比の逆正接 (arctangent) として定義するものとする（[補足 7.1.2.B](#)）。式 (7.1.2.2) で表される軸発散収差函数の二次近似形式については，代数的な手法によって解（解析解）が得られる（[補足 7.1.2.C](#)）。

$2\Theta \leq \frac{\pi}{2}$ のとき，軸発散収差函数 $\omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Psi)$ の二次近似形式の解析解は，以下の一連の式 (7.1.1.6)–(7.1.1.12) で表される。

$$\omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Psi) = \frac{4}{\Psi^2} \begin{cases} 0 & \left[u \leq -\frac{1}{t^2} \right] \\ V_{II}(y_1) - V_{II}(y_0) & \left[-\frac{1}{t^2} < u \leq -\frac{1-t^2}{4t^2} \right] \\ V_{II}(y_c) - V_{II}(y_0) + V_{IV}(y_1) - V_{IV}(y_c) & \left[-\frac{1-t^2}{4t^2} < u < 0 \right] \\ V_{IV}(y_1) - V_{IV}(0) & [0 < u < 1] \\ 0 & [1 < u] \end{cases} \quad (7.1.1.6)$$

$$V_{II}(y) = \frac{2 - (1+t^2)u}{2} \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2u} \right) - \frac{1-t^2}{4} y \sqrt{y^2 + 2u} - \sqrt{2} t \sqrt{y^2 + 2u} \quad (7.1.1.7)$$

$$V_{IV}(y) = \frac{2 + (1+t^2)u}{2} \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2u} \right) + \frac{1-t^2}{4} y \sqrt{y^2 + 2u} - \sqrt{2} y \quad (7.1.1.8)$$

$$y_0 = \sqrt{-2u} \quad (7.1.1.9)$$

$$y_1 = \frac{\sqrt{2}(1-u)}{\sqrt{1 - (1-t^2)u} + t} \quad (7.1.1.10)$$

$$y_c = \sqrt{-\frac{2u}{1-t^2}} \quad (7.1.1.11)$$

$$u \equiv \frac{\Delta 2\Theta}{\Psi^2 t} \quad (7.1.1.12)$$

$2\Theta > \frac{\pi}{2}$ の場合の二次近似収差函数の形状を求めるには，

$$\omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Psi) = \omega_A(-\Delta 2\Theta; \pi - 2\Theta, \Psi) \quad (7.1.1.13)$$

の関係を用いれば良い。

軸発散収差函数はゴニオメータ角 2Θ によって形状が変化し，二次近似形式を用いて計算される函数形状は，[Fig. 7.1.1.1](#) に示すようになる。

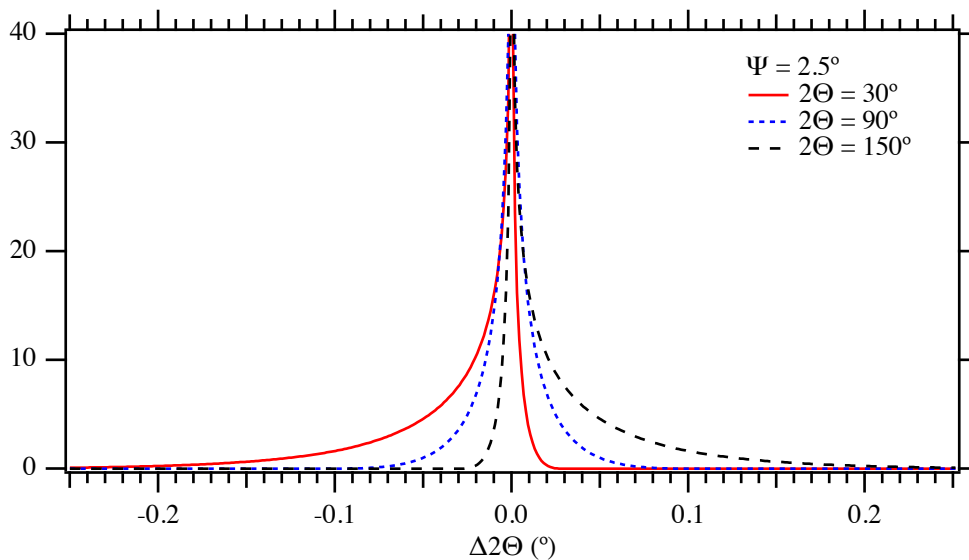


Fig. 7.1.1.1 軸発散収差函数の形状の変化

7.1.2 対称ソーラースリット配置の軸発散収差二次近似形式の平均位置

軸発散収差函数の「平均位置」は、函数の1階キュムラントに相当する。式(7.1.1.5)で表される「対称配置ソーラー・スリットの軸発散収差函数」の平均位置は、以下の式で表される(補足7.1.2.A)。

$$\langle x \rangle_A = \int_{-\infty}^{\infty} x \omega_A(x) dx = \frac{\Psi^2}{12} \left(t - \frac{1}{t} \right) \quad (7.1.2.1)$$

ただし、 $t \equiv \tan \Theta$ とする。この位置は、観測回折ピークがブロードなケースでは、実験データに含まれる「軸発散収差によるピークシフト」にそのまま対応づけられる。

7.1.3 対称ソーラースリット配置の軸発散収差二次近似函数の分散

「対称配置ソーラー・スリットの軸発散収差函数」の分散 σ_A^2 は2階キュムラント $(\kappa_2)_A$ に相当し、その平方根である標準偏差 σ_A は、軸発散収差による線幅ブロードニングの大きさに相当する。

軸発散収差函数の分散 σ_A^2 は、

$$\sigma_A^2 = (\kappa_2)_A = \langle x^2 \rangle_A - \langle x \rangle_A^2 = \frac{17\Psi^4}{1440} \left(t^2 + \frac{6}{17} + \frac{1}{t^2} \right) \quad (7.1.3.1)$$

と表される。ただし、 $t \equiv \tan \Theta$ とする。

7.1.4 対称ソーラースリット配置の軸発散収差二次近似函数の3階キュムラント

「対称配置ソーラー・スリットの軸発散収差函数」の3階キュムラント（3階中心モーメント）は、

$$(\kappa_3)_A = \frac{169\Psi^6}{60480} \left(t^3 + \frac{81t}{169} - \frac{81}{169t} - \frac{1}{t^3} \right) \quad (7.1.4.1)$$

となる。ただし、 $t \equiv \tan \Theta$ とする。

7.1.5 対称ソーラースリット配置の軸発散収差処理のための尺度変換

対称配置ソーラー・スリットによる軸発散収差効果进行处理するための非線形尺度変換として

$$\chi_+ = \frac{\ln [1 + \beta - (1 - \beta)\cos 2\Theta]}{1 - \beta} \quad (7.1.5.1)$$

$$\chi_- = -\frac{\ln [1 + \beta + (1 - \beta)\cos 2\Theta]}{1 - \beta} \quad (7.1.5.2)$$

を用いることにすれば、

$$\frac{d\chi_+}{d2\Theta} = \frac{1}{\tan \Theta + \beta \cot \Theta} \quad (7.1.5.3)$$

$$\frac{d\chi_-}{d2\Theta} = \frac{1}{\cot \Theta + \beta \tan \Theta} \quad (7.1.5.4)$$

となる。

なにかの函数 $w(\chi)$ を利用して、 $w_+(\chi_+) \equiv w(\chi)$ 、 $w_-(\chi_-) \equiv w(-\chi_-)$ と定義することにする。函数 $w_+(\Delta\chi_+)$ を 2Θ 尺度上での函数 $\omega_+(\Delta 2\Theta)$ に変換し、函数 $w_-(\Delta\chi_-)$ を 2Θ 尺度上での函数 $\omega_-(\Delta 2\Theta)$ に変換する。函数 $w(\chi)$ の1階キュムラントが k_1 、3階キュムラントが k_3 であるとする。

反転二重畳み込みモデル函数 $\omega_*(\Delta 2\Theta) = \omega_+(\Delta 2\Theta) * \omega_-(\Delta 2\Theta)$ によって「対称配置ソーラー・スリットの軸発散収差函数」をモデル化する。**逆畳込的处理 deconvolutional treatment** を適用することを前提として、収差函数の1階キュムラントと3階キュムラントの回折角依存性を再現できれば良いとする。

反転二重畳み込みモデル函数 $\omega_*(\Delta 2\Theta)$ の1階キュムラントの「見かけ回折角 2Θ 」依存性は

$$(\kappa_1)_* = (\tan \Theta + \beta \cot \Theta) k_1 - (\cot \Theta + \beta \tan \Theta) k_1 = (1 - \beta) k_1 \left(t - \frac{1}{t} \right) \quad (7.1.5.5)$$

となる。ただし $t \equiv \tan \Theta$ とする。式 (7.1.5.5) に示した「反転二重畳込モデル函数」 $\omega_*(\Delta 2\Theta)$ の1階キュムラントの回折角依存性は、式 (7.1.2.1) に示した「対称配置ソー

ラー・スリットの軸発散収差函数」の1階キュムラントの見かけ回折角 2Θ 依存性と一致する。

函数 $\omega_*(\Delta 2\Theta)$ の3階キュムラントの見かけ回折角 2Θ 依存性は

$$(\kappa_3)_* = (\tan \Theta + \beta \cot \Theta)^3 k_3 - (\cot \Theta + \beta \tan \Theta)^3 k_3 \quad (7.1.5.6)$$

となる。 $t \equiv \tan \Theta$ として、式 (7.1.5.6) を変形すれば、

$$\begin{aligned} (\kappa_3)_* &= (t + \beta/t)^3 k_3 - (1/t + \beta t)^3 k_3 \\ &= k_3 (t^3 + 3\beta t + 3\beta^2/t + \beta^3/t^3 - 1/t^3 - 3\beta/t - 3\beta^2 t - \beta^3 t^3) \\ &= k_3 [(1 - \beta^3)t^3 + 3(\beta - 3\beta^2)t + 3(\beta^2 - \beta)/t + (\beta^3 - 1)/t^3] \\ &= k_3(1 - \beta^3) \left[t^3 + \frac{3\beta(1 - \beta)t}{1 - \beta^3} - \frac{3\beta(1 - \beta)}{(1 - \beta^3)t} - \frac{1}{t^3} \right] \\ &= k_3(1 - \beta^3) \left[t^3 + \frac{3\beta t}{1 + \beta + \beta^2} - \frac{3\beta}{(1 + \beta + \beta^2)t} - \frac{1}{t^3} \right] \end{aligned} \quad (7.1.5.7)$$

となる。式 (7.1.5.7) で表される見かけ回折角 2Θ 依存性を式 (7.1.4.1) :

$$(\kappa_3)_A = \frac{169\Psi^6}{60480} \left(t^3 + \frac{81t}{169} - \frac{81}{169t} - \frac{1}{t^3} \right) \quad (7.1.4.1)$$

と比較すれば、軸発散収差函数の3階キュムラントの回折角依存性を一致させる尺度変換を導くためには、

$$\frac{3\beta}{1 + \beta + \beta^2} = \frac{81}{169} \quad (7.1.5.8)$$

を満たす β を求めれば良いことがわかる。 β の値を決めるための方程式は

$$\beta^2 - \left(\frac{169}{27} - 1 \right) \beta + 1 = 0 \Rightarrow \beta^2 - \frac{142}{27} \beta + 1 = 0 \quad (7.1.5.9)$$

となり、二次方程式として表される。

式 (7.1.5.9) の二次方程式の判別式 (discriminant) は

$$\frac{D}{4} = \frac{71^2}{27^2} - 1 = \frac{71^2 - 27^2}{27^2} = \frac{44 \times 98}{27^2} \quad (7.1.5.10)$$

と表され、式 (7.1.5.9) の方程式の解は

$$\beta = \frac{71}{27} \pm \sqrt{\frac{D}{4}} = \frac{71}{27} \pm \frac{14\sqrt{22}}{27} \quad (7.1.5.11)$$

となる。ここでは $0 < \beta < 1$ と想定し、 β の絶対値が小さくなる値として、

$$\beta = \frac{71 - 14\sqrt{22}}{27} = 0.197562 \quad (7.1.5.12)$$

を選択する。

7.1.6 特異点を一致させた成分函数モデル

二重畳込収差函数モデルの特異点の位置 (singularity point) を原点 ($\Delta 2\Theta = 0$) から変化させない形式を採用することとする。成分函数モデルとして、「ガンマ分布の確率密度函数」 $f_{\Gamma}(\chi; \gamma, \alpha)$ を用いる。各成分モデル函数は、以下の形式をとる。

$$w_{\pm}(\chi_{\pm}) = f_{\Gamma}(\pm\chi_{\pm}; \gamma, \alpha) \quad (7.1.6.1)$$

$$f_{\Gamma}(\chi; \gamma, \alpha) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(\alpha)\gamma} \left(\frac{\chi}{\gamma}\right)^{\alpha-1} \exp\left(-\frac{\chi}{\gamma}\right) & [0 < \chi] \\ 0 & [\chi \leq 0] \end{cases} \quad (7.1.6.2)$$

$\chi_{+} = \frac{\ln [1 + \beta - (1 - \beta)\cos 2\Theta]}{1 - \beta}$ 尺度での函数 $w_{+}(\chi_{+}) = f_{\Gamma}(\chi_{+}; \gamma, \alpha)$ の平均位置 (1階キュムラント) と3階のキュムラントを k_{1+}, k_{3+} とすれば,

$$k_{1+} = \langle \chi_{+} \rangle = \alpha\gamma \quad (7.1.6.3)$$

$$k_{3+} = \langle (\chi_{+} - \langle \chi_{+} \rangle)^3 \rangle = 2\alpha\gamma^3 \quad (7.1.6.4)$$

一般的に函数 $w_{+}(\chi_{+})$ の n 階キュムラント k_{n+} は

$$k_{n+} = (n-1)! \alpha\gamma^n \quad (7.1.6.5)$$

と表される。任意階数のキュムラントが単純な数式で表現されることは、ガンマ分布確率密度函数を利用することの動機づけの一つになる。

$$\frac{\Delta 2\Theta}{\Delta \chi_{+}} = \tan \Theta + \beta \cot \Theta = t + \frac{\beta}{t} \quad (7.1.6.6)$$

の関係から、 χ_{+} 尺度を 2Θ 尺度に変換した場合に、装置収差函数が $w_{+}(\Delta \chi_{+})$ から $\omega_{+}(\Delta 2\Theta)$ に変換されるとすれば、函数 $\omega_{+}(\Delta 2\Theta)$ の平均位置 (1階キュムラント) と3階キュムラントは

$$\kappa_{1+} = \alpha\gamma \left(t + \frac{\beta}{t} \right) \quad (7.1.6.7)$$

$$\kappa_{3+} = 2\alpha\gamma^3 \left(t + \frac{\beta}{t} \right)^3 = 2\alpha\gamma^3 \left(t^3 + 3\beta t + \frac{3\beta^2}{t} + \frac{\beta^3}{t^3} \right) \quad (7.1.6.8)$$

となる。

$\chi_{-} = -\frac{\ln [1 + \beta + (1 - \beta)\cos 2\Theta]}{1 - \beta}$ 尺度での函数 $w_{-}(\chi_{-}) = f_{\Gamma}(-\chi_{-}; \gamma, \alpha)$ の平均位置 (1階キュムラント) と3階キュムラントを k_{1-}, k_{3-} とすれば,

$$k_{1-} = \langle \chi_{-} \rangle = -\alpha\gamma \quad (7.1.6.9)$$

$$k_{3-} = \langle (\chi_- - \langle \chi_- \rangle)^3 \rangle = -2\alpha\gamma^3 \quad (7.1.6.10)$$

であり,

$$\frac{\Delta 2\Theta}{\Delta \chi_-} = \beta \tan \Theta + \cot \Theta = \beta t + \frac{1}{t} \quad (7.1.6.11)$$

の関係から, χ_- 尺度を 2Θ 尺度に変換した場合に 函数 $w_-(\Delta \chi_-)$ が函数 $\omega_-(\Delta 2\Theta)$ に変換されるなら, 函数 $\omega_-(\Delta 2\Theta)$ の平均位置と 3階キユムラントは

$$\kappa_{1-} = -\alpha\gamma \left(\beta t + \frac{1}{t} \right) \quad (7.1.6.12)$$

$$\kappa_{3-} = -2\alpha\gamma^3 \left(\beta t + \frac{1}{t} \right)^3 = -2\alpha\gamma^3 \left(\beta^3 t^3 + 3\beta^2 t + \frac{3\beta}{t} + \frac{1}{t^3} \right) \quad (7.1.6.13)$$

となる。

畳込の任意の階のキユムラントは, 成分函数の同じ階のキユムラントの和に等しい。このことを「畳込におけるキユムラントの可加算性 (additivity)」と呼ぶ。函数 $\omega_+(\Delta 2\Theta)$ と $\omega_-(\Delta 2\Theta)$ の畳み込みの平均位置 (1階キユムラント) と 3階キユムラントは

$$\kappa_{1*} = \kappa_{1+} + \kappa_{1-} = \alpha\gamma \left(t + \frac{\beta}{t} \right) - \alpha\gamma \left(\beta t + \frac{1}{t} \right) = \alpha(1-\beta)\gamma \left(t - \frac{1}{t} \right) \quad (7.1.6.14)$$

$$\begin{aligned} \kappa_{3*} &= \kappa_{3+} + \kappa_{3-} = 2\alpha\gamma^3 \left(t^3 + 3\beta t + \frac{3\beta^2}{t} + \frac{\beta^3}{t^3} \right) - 2\alpha\gamma^3 \left(\beta^3 t^3 + 3\beta^2 t + \frac{3\beta}{t} + \frac{1}{t^3} \right) \\ &= 2\alpha(1-\beta^3)\gamma^3 \left(t^3 + \frac{3\beta t}{1+\beta+\beta^2} + \frac{3\beta/t}{1+\beta+\beta^2} + \frac{1}{t^3} \right) \end{aligned} \quad (7.1.6.15)$$

となる。軸発散収差函数に対して 1階と 3階のキユムラントを一致させるには, 式 (7.1.2.1), (7.1.4.1) :

$$\langle x \rangle_A = \int_{-\infty}^{\infty} x w_A(x) dx = \frac{\Psi^2}{12} \left(t - \frac{1}{t} \right) \quad (7.1.2.1)$$

$$\langle \kappa_3 \rangle_A = \frac{169\Psi^6}{64 \times 27 \times 5 \times 7} \left(t^3 - \frac{1}{t^3} \right) + \frac{81\Psi^6}{64 \times 27 \times 5 \times 7} \left(t - \frac{1}{t} \right) \quad (7.1.4.1)$$

の関係と式 (7.1.6.14), (7.1.6.15) とを比較して,

$$\alpha(1-\beta)\gamma \left(t - \frac{1}{t} \right) = \frac{\Psi^2}{12} \left(t - \frac{1}{t} \right) \quad (7.1.6.16)$$

$$\begin{aligned} &2\alpha(1-\beta^3)\gamma^3 \left(t^3 + \frac{3\beta t}{1+\beta+\beta^2} - \frac{3\beta/t}{1+\beta+\beta^2} - \frac{1}{t^3} \right) \\ &= \frac{169\Psi^6}{64 \times 27 \times 5 \times 7} \left(t^3 - \frac{1}{t^3} \right) + \frac{81\Psi^6}{64 \times 27 \times 5 \times 7} \left(t - \frac{1}{t} \right) \end{aligned} \quad (7.1.6.17)$$

の関係が満たされれば, 1階と 3階のキユムラントを同時に一致させられることがわかる。式 (7.1.5.12) で β の値が

$$\beta = \frac{71 - 14\sqrt{22}}{27} \approx 0.197562 \quad (7.1.5.12)$$

と確定していることを前提として、

$$\alpha(1 - \beta)\gamma = \frac{\Psi^2}{12} \quad (7.1.6.18)$$

$$2\alpha(1 - \beta^3)\gamma^3 = \frac{169\Psi^6}{64 \times 27 \times 5 \times 7} \quad (7.1.6.19)$$

とから α と γ が決まる。式 (7.1.6.19) を式 (7.1.6.18) で徐せば

$$2(1 + \beta + \beta^2)\gamma^2 = \frac{169\Psi^4}{16 \times 9 \times 5 \times 7} \quad (7.1.6.20)$$

となるから、 γ の解は、

$$\gamma = \frac{13\Psi^2}{12\sqrt{70(1 + \beta + \beta^2)}} \approx 0.116439\Psi^2 \quad (7.1.6.21)$$

となる。また、式 (7.1.6.18) と (7.1.6.21) から、 α の解は、

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\Psi^2}{12(1 - \beta)\gamma} = \frac{\Psi^2}{12(1 - \beta)} \times \frac{12}{13\Psi^2} \sqrt{70(1 + \beta + \beta^2)} \\ &= \frac{\sqrt{70(1 + \beta + \beta^2)}}{13(1 - \beta)} \approx 0.891883 \end{aligned} \quad (7.1.6.22)$$

である。

Fig. 7.1.1.1 に示した例に沿って、ガンマ分布確率密度函数の反転二重畳込モデルによる数値計算により得られる強度曲線は、Fig. 7.1.6.1 のようになる (補足 7.1.6.A)。

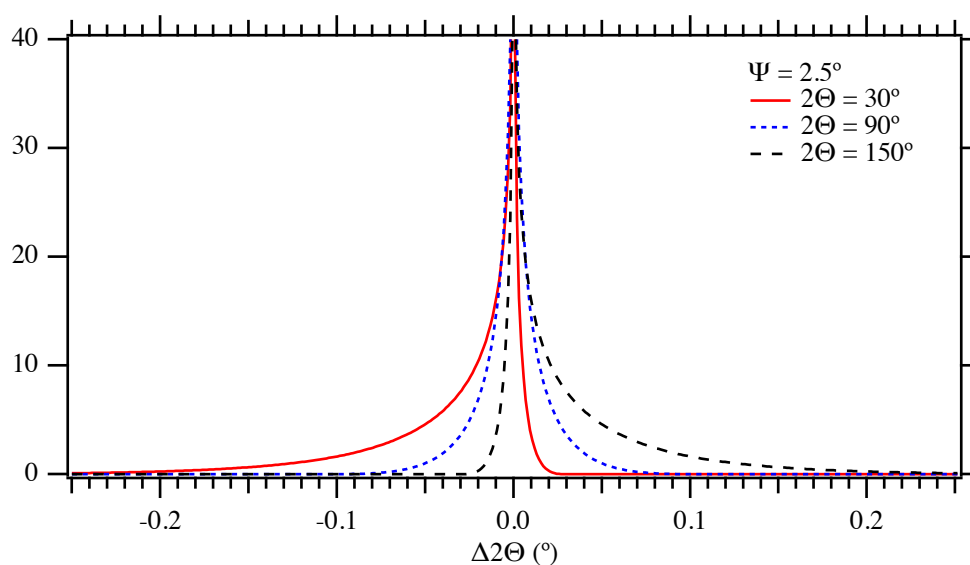


Fig. 7.1.1.1 軸発散収差函数の形状の変化 (再掲)

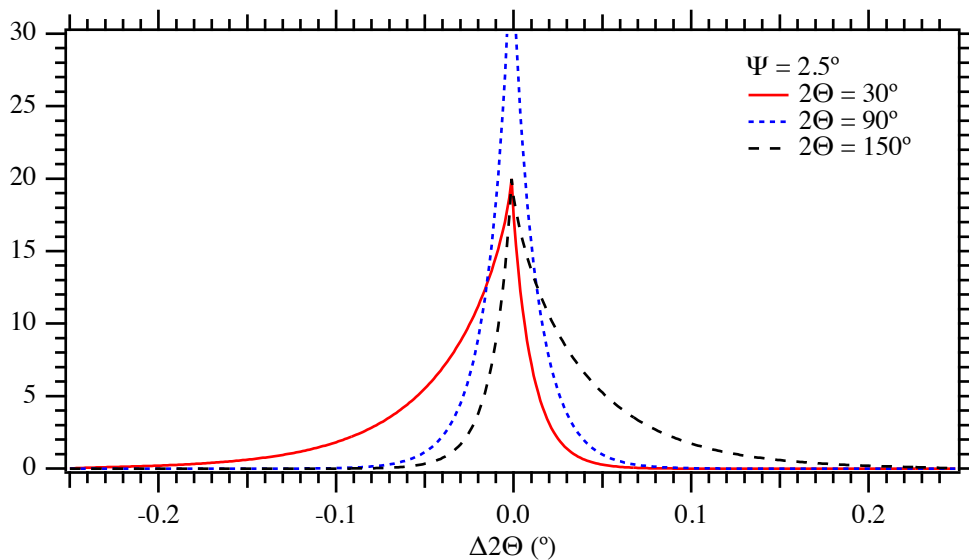


Fig. 7.1.6.1 二重畳込による軸発散収差モデルの形状

7.1.7 二重畳込モデル成分函数のフーリエ変換

ガンマ分布の確率密度函数のフーリエ変換 Fourier transform は

$$\begin{aligned}
 W(k) &= \frac{1}{\Gamma(\alpha)\gamma} \int_0^{\infty} \left(\frac{x}{\gamma}\right)^{\alpha-1} \exp\left(-\frac{x}{\gamma}\right) \exp(2\pi i k x) dx \\
 &= \frac{(1 + 2\pi i k \gamma)^\alpha}{(1 + 4\pi^2 k^2 \gamma^2)^\alpha} = \frac{1}{(1 - 2\pi i k \gamma)^\alpha}
 \end{aligned} \tag{7.1.7.1}$$

と書ける。函数 $w_{\pm}(\chi_{\pm})$ のフーリエ変換 $\mathfrak{W}_{\pm}(\xi_{\pm})$ は、

$$\mathfrak{W}_{\pm}(\xi_{\pm}) = \int_0^{\infty} w_{\pm}(\chi_{\pm}) e^{2\pi i \xi_{\pm} \chi_{\pm}} d\chi_{\pm} = \frac{1}{(1 \mp 2\pi i \xi_{\pm} \gamma_{\pm})^\alpha} \tag{7.1.7.2}$$

と表される。フーリエ変換が単純な数式で表現されることも、ガンマ分布確率密度函数をモデル成分函数として利用する動機付けの一つになる。

なお、 $w_{\pm}(\chi_{\pm})$ を対称化した函数のフーリエ変換は、

$$\left| \mathfrak{W}_{\pm} \right| (\xi_{\pm}) = \left| \mathfrak{W}_{\pm}(\xi_{\pm}) \right| = \frac{1}{(1 + 4\pi^2 \xi_{\pm}^2 \gamma_{\pm}^2)^{\alpha/2}} \tag{7.1.7.3}$$

となり、ピアソン セブン Pearson VII 函数 (ステューデント Student t 分布の確率密度函数) と同形になる。(補足 7.1.7.A)

7.1.8 対称配置の軸発散収差函数の4階キュムラント

軸発散収差函数の4階冪平均 (4乗平均) は、

$$\langle x^4 \rangle_A = \int_{-\Psi}^{\Psi} \int_{-\Psi}^{\Psi} \left[-\frac{(a-b)^2}{4t} + \frac{(a+b)^2}{4/t} \right]^4 \frac{1}{\Psi} \left(1 - \frac{|a|}{\Psi} \right) \frac{1}{\Psi} \left(1 - \frac{|b|}{\Psi} \right) da db \quad (7.1.8.1)$$

として代数的に計算することは可能であり，4階キュムラントも代数計算で求めることが可能なはずだが，ここでは数値的な手法（電子計算機を使う手法）により解くこととする。

4階キュムラントは，一般的に

$$\begin{aligned} (\kappa_4)_A &= \left\langle (x - \langle x \rangle)^4 \right\rangle - 3 \left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle^2 \\ &= \langle x^4 \rangle - 4 \langle x^3 \rangle \langle x \rangle - 3 \langle x^2 \rangle^2 + 12 \langle x^2 \rangle \langle x \rangle^2 - 6 \langle x \rangle^4 \end{aligned} \quad (7.1.8.2)$$

と表され， $\langle x \rangle$ ， $\langle x^2 \rangle$ ， $\langle x^3 \rangle$ ， $\langle x^4 \rangle$ から計算できる。

軸発散収差函数の1階キュムラント（平均）は定数 A_1 を用いて

$$(\kappa_1)_A = A_1 \Psi^2 (\tan \Theta - \cot \Theta) \quad (7.1.8.3)$$

と表され，2階キュムラント（分散）は定数 A_2, B_2 を用いて

$$(\kappa_2)_A = A_2 \Psi^4 (\tan^2 \Theta + B_2 + \cot^2 \Theta) \quad (7.1.8.4)$$

3階キュムラント $(\kappa_3)_A$ は定数 A_3, B_3 を用いて

$$(\kappa_3)_A = A_3 \Psi^6 (\tan^3 \Theta + B_3 \tan \Theta - B_3 \cot \Theta - \cot^3 \Theta) \quad (7.1.8.5)$$

と表される。これらと同様に，4階キュムラント $(\kappa_4)_A$ は定数 A_4, B_4, C_4 を用いて

$$(\kappa_4)_A = A_4 \Psi^8 (\tan^4 \Theta + B_4 \tan^2 \Theta + C_4 + B_4 \cot^2 \Theta + \cot^4 \Theta) \quad (7.1.8.6)$$

と表されるはずである。

一般的に開き角 Ψ の対称配置ソーラー・スリットの場合の軸発散収差函数の k 階^{べき}平均 $\langle x^k \rangle$ は

$$\begin{aligned} \langle x^k \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^k \omega_A(x) dx \\ &= \frac{1}{\Psi^2} \int_{-\Psi}^{\Psi} \int_{-\Psi}^{\Psi} \left[-\frac{(a-b)^2}{4 \tan \Theta} + \frac{(a+b)^2}{4 \cot \Theta} \right]^k \left(1 - \frac{|a|}{\Psi} \right) \left(1 - \frac{|b|}{\Psi} \right) da db \end{aligned} \quad (7.1.8.7)$$

として二重積分で表現される。 $\langle x^k \rangle$ を数値的に計算する場合には，例えば $N = 200$ として

$$\langle x^k \rangle \approx \frac{4}{N^2} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \left[-\frac{(a_i - b_j)^2}{4 \tan \Theta} + \frac{(a_i + b_j)^2}{4 \cot \Theta} \right]^k \left(1 - \frac{|a_i|}{\Psi} \right) \left(1 - \frac{|b_j|}{\Psi} \right) \quad (7.1.8.8)$$

$$a_i = -\Psi + \frac{2(i + 0.5)\Psi}{N} \quad (7.1.8.9)$$

$$b_j = -\Psi + \frac{2(j + 0.5)\Psi}{N} \quad (7.1.8.10)$$

のように素朴に二重数値積分の形式で計算しても良い。1階から4階までの^{べき}冪平均 $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle x^3 \rangle$, $\langle x^4 \rangle$ の値が得られれば、1階から4階までのキュムラントは

$$\kappa_1 = \langle x \rangle \quad (7.1.8.11)$$

$$\kappa_2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (7.1.8.12)$$

$$\kappa_3 = \langle x^3 \rangle - 3\langle x^2 \rangle \langle x \rangle + 2\langle x \rangle^3 \quad (7.1.8.13)$$

$$\kappa_4 = \langle x^4 \rangle - 4\langle x^3 \rangle \langle x \rangle - 3\langle x^2 \rangle^2 + 12\langle x^2 \rangle \langle x \rangle^2 - 6\langle x \rangle^4 \quad (7.1.8.14)$$

として計算される。

$2\Theta = 0.5^\circ, 1.5^\circ, \dots, 179.5^\circ$ の180通りの場合について、式(7.1.8.8)–(7.1.8.10)によりモーメント $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle x^3 \rangle$, $\langle x^4 \rangle$ を 200×200 メッシュ ($N = 200$) の数値積分で計算する。さらに式(7.1.8.11)–(7.1.8.14)によりキュムラント κ_1 , κ_2 , κ_3 , κ_4 を計算する。キュムラント κ_1 , κ_2 , κ_3 , κ_4 の回折角 2Θ 依存性をそれぞれ式(7.1.8.3)–(7.1.8.6) で表される計算式の係数を曲線当て嵌め (curve fitting) により最適化する方法で得る。1階から3階までのキュムラントを代数的な方法で求めた結果 (解析解) と数値的な方法で求めた結果 (数値解) とを以下に示す。

	A_i	B_i	C_i
1階キュムラント, 解析解	$\frac{1}{12} = 0.0833333$		
1階キュムラント, 数値解	0.083338		
2階キュムラント, 解析解	$\frac{17}{1440} = 0.0118056$	$\frac{6}{17} = 0.352941$	
2階キュムラント, 数値解	0.011807	0.35290	
3階キュムラント, 解析解	$\frac{169}{60480} = 0.00279431$	$\frac{81}{169} = 0.47929$	
3階キュムラント, 数値解	0.0027949	0.47923	
4階キュムラント, 数値解	0.00080158	0.56014	-0.46268

数値的には、対称配置ソーラー・スリットの軸発散収差の4階キュムラントは、

$$\kappa_4 = 0.00080158\Psi^8 (\tan^4 \Theta + 0.56014 \tan^2 \Theta - 0.46268 + 0.56014 \cot^2 \Theta + \cot^4 \Theta) \quad (7.1.8.15)$$

として表現される。

また、このような数値計算手法を用いれば、入射ビーム側ソーラー・スリット開き角 $\Phi_{SS}^{(i)}$ と、回折ビーム側ソーラー・スリット開き角 $\Phi_{SS}^{(d)}$ の異なる非対称配置ソーラー・スリットによる軸発散収差のキュムラントについて数値的な解を求めることも可能である。

7.1.9 数値計算による軸発散収差函数のキュムラントの算出

ブラッグ・ブレンターノ型の粉末X線回折測定装置では、観測される回折強度の統計精度を劣化させずに軸発散収差の影響を軽減するためには、入射ビーム側ソーラー・スリット開き角 $\Phi_{SS}^{(i)}$ と回折ビーム側ソーラー・スリット開き角 $\Phi_{SS}^{(d)}$ の等しい対称配置にすることが最適設計であることは自明であるが、現実にはソーラー・スリットを非対称に配置した装置も市販されている。

2019年以降に筆者が占有的に使用することを許可された実験室型粉末X線回折装置 (Rigaku MiniFlex 600-C) では、入射ビーム側ソーラー・スリット開き角は $\Phi_{SS}^{(i)} = 1.25^\circ$ である一方で、回折ビーム側ソーラー・スリット開き角は $\Phi_{SS}^{(d)} = 1.18^\circ$ であり、わずかに非対称な設計が施されている。 ([補足 7.1.9.A](#))

数値計算によって軸発散収差函数のキュムラントを算出することを前提とすれば、ソーラー・スリットが非対称に配置された装置にも対応しうる。非対称配置ソーラー・スリット配置であっても軸発散収差函数は式 ([7.1.1.2](#))

$$\begin{aligned} \omega_A \left(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi_{SS}^{(i)}, \Phi_{SS}^{(d)} \right) \\ = \frac{1}{\Phi_{SS}^{(i)} \Phi_{SS}^{(d)}} \int_{-\Phi_{SS}^{(d)}}^{\Phi_{SS}^{(d)}} \int_{-\Phi_{SS}^{(i)}}^{\Phi_{SS}^{(i)}} \delta(\Delta 2\Theta - f(2\Theta, \alpha, \beta)) \left(1 - \frac{|\alpha|}{\Phi_{SS}^{(i)}} \right) \left(1 - \frac{|\beta|}{\Phi_{SS}^{(d)}} \right) d\alpha d\beta \quad (7.1.1.2) \end{aligned}$$

で表される。したがって、回折角ずれ $\Delta 2\Theta$ の k 階乗平均 $\langle (\Delta 2\Theta)^k \rangle$ を

$$\langle (\Delta 2\Theta)^k \rangle = \frac{1}{\Phi_{SS}^{(i)} \Phi_{SS}^{(d)}} \int_{-\Phi_{SS}^{(d)}}^{\Phi_{SS}^{(d)}} \int_{-\Phi_{SS}^{(i)}}^{\Phi_{SS}^{(i)}} [f(2\Theta, \alpha, \beta)]^k \left(1 - \frac{|\alpha|}{\Phi_{SS}^{(i)}} \right) \left(1 - \frac{|\beta|}{\Phi_{SS}^{(d)}} \right) d\alpha d\beta \quad (7.1.9.1)$$

$$f(2\Theta, \alpha, \beta) = 2\Theta - \arccos(\cos 2\Theta \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta) \quad (7.1.1.3)$$

として計算すれば良い。

$-1 < x_0 < \dots < x_{m-1} < 1$, $\sum_{i=0}^{m-1} w_i = 2$ となるような標本点位置 $\{x_i\}$ と重みを $\{w_i\}$ を生成する `scipy.special.roots_legendre()` メソッドを用いる場合には、

$$\langle (\Delta 2\Theta)^k \rangle \approx \frac{1}{4} \sum_{i=0}^{m-1} w_i \sum_{j=0}^{m-1} w_j [f(2\Theta, \alpha_i, \beta_j)]^k \left(1 - \frac{|\alpha_i|}{\Phi_{SS}^{(i)}} \right) \left(1 - \frac{|\beta_j|}{\Phi_{SS}^{(d)}} \right) \quad (7.1.9.2)$$

$$f(2\Theta, \alpha_i, \beta_j) = 2\Theta - \arccos(\cos 2\Theta \cos \alpha_i \cos \beta_j + \sin \alpha_i \sin \beta_j) \quad (7.1.9.3)$$

$$\alpha_i = \frac{(1 - x_i) \Phi_{SS}^{(i)} + (1 + x_i) \Phi_{SS}^{(i)}}{2} \quad (7.1.9.4)$$

$$\beta_j = \frac{(1 - x_j) \Phi_{SS}^{(d)} + (1 + x_j) \Phi_{SS}^{(d)}}{2} \quad (7.1.9.5)$$

として $s_k = \langle (\Delta 2\Theta)^k \rangle$, $k = 0, 1, 2, 3, 4$ を計算すれば, 一階から四階のキュムラント $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4$ は

$$\begin{aligned}\kappa_1 &= \frac{s_1}{s_0} \\ \kappa_2 &= \frac{s_2}{s_0} - \frac{s_1^2}{s_0^2} \\ \kappa_3 &= \frac{s_3}{s_0} - \frac{3s_2s_1}{s_0^2} + \frac{2s_1^3}{s_0^3} \\ \kappa_4 &= \frac{s_4}{s_0} - \frac{4s_3s_1}{s_0^2} - \frac{3s_2^2}{s_0^2} + \frac{12s_2s_1^2}{s_0^3} - \frac{6s_1^4}{s_0^4}\end{aligned}$$

として求められる。

(補足 7.A) 装置収差とは? (↔)

装置収差 インストルメンタル アブレイション instrumental aberration という言葉の意味がわかりにくければ, カメラや眼鏡, 望遠鏡, 顕微鏡などに用いられる屈折光学系 (透明なガラスや樹脂で作られるレンズ) による画像の「暈け (暈け)」「変形・歪み」のようなものと見做せば良いかもしれない。屈折光学系の収差の代表的なものに, 光の波長に依存する色収差 いろしゆうさ クロマティック アブレイションズ chromatic aberrations と光の波長に依存しない単色収差 たんしよく モノクロマティック アブレイションズ monochromatic aberrations (または幾何学収差 ジオメトリカル アブレイションズ geometrical aberrations) とがある。単色収差は, ピン暈け (defocus) とそれ以外の 5 ザイデル収差 (five Seidel aberrations) に分類される場合もある。ピン暈け (defocus) は収差に含めず, それ以外の 5 単色収差, (i) 球面収差 スフェリカル spherical aberration, (ii) コマ収差 コウマ Coma, (iii) 非点収差 アスティグマティズム astigmatism, (iv) 像面湾曲 ぞうめんわんきよく フィールド カーヴェチュア field curvature, (v) 歪曲 (歪曲収差) わいきよく distortion (樽型歪曲 わいきよくしゆうさ barrel distortion または糸巻き型歪曲 たるがたわいきよく バレル ディストーション pincushion distortion) のみを収差と呼ぶ場合もある。 (↔)

(補足 7.1.1.A) 軸発散収差の数学形式の導出 (↔)

平面状の試料の法線方向が z 軸と一致し, ゴニオメータ軸が y 軸と一致するとする。見かけ回折角 2Θ として, 試料面の中心位置が $\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, X 線発光位置が $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} -R \cos \Theta \\ 0 \\ R \sin \Theta \end{pmatrix}$, 仮想的な検出位置が $\mathbf{C} = \begin{pmatrix} R \cos \Theta \\ 0 \\ R \sin \Theta \end{pmatrix}$ にある配置について考える。発光位置から軸方向への角度 α ずれた方向へ進行する入射ビームは, 試料面上の $\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 \\ R \tan \alpha \\ 0 \end{pmatrix}$ で反射される。さらに xz 面から角度 β ずれた方向へ進行する回折ビームは「軸方向への位置ずれ」のみが許容されるとすれば, $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} R \cos \Theta \\ R \tan \alpha + R \tan \beta \\ R \sin \Theta \end{pmatrix}$ の位置で検出される。このとき, 「入射ビームと回折ビームとのなす角度」を意味する「真の回折角 2θ 」と「入射ビームの進行方向を表すベクトル $\mathbf{P} - \mathbf{X}$ 」と「回折ビームの進行方向を表すベクトル $\mathbf{D} - \mathbf{P}$ 」との間には,

$$(\mathbf{P} - \mathbf{X}) \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{P}) = |\mathbf{P} - \mathbf{X}| |\mathbf{D} - \mathbf{P}| \cos 2\theta \quad (7.1.1.A.1)$$

の関係がある。

$$\mathbf{P} - \mathbf{X} = \begin{pmatrix} R \cos \Theta \\ R \tan \alpha \\ -R \sin \Theta \end{pmatrix} \quad (7.1.1.A.2)$$

$$\mathbf{D} - \mathbf{P} = \begin{pmatrix} R \cos \Theta \\ R \tan \beta \\ R \sin \Theta \end{pmatrix} \quad (7.1.1.A.3)$$

$$(\mathbf{P} - \mathbf{X}) \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{P}) = R^2 (\cos^2 \Theta + \tan \alpha \tan \beta - \sin^2 \Theta) = R^2 (\cos 2\Theta + \tan \alpha \tan \beta) \quad (7.1.1.A.4)$$

$$|\mathbf{P} - \mathbf{X}| = R \sqrt{1 + \tan^2 \alpha} = R \sec \alpha \quad (7.1.1.A.5)$$

$$|\mathbf{D} - \mathbf{P}| = R \sqrt{1 + \tan^2 \beta} = R \sec \beta \quad (7.1.1.A.6)$$

の関係から、式 (7.1.1.A.1) の関係は

$$\cos 2\Theta + \tan \alpha \tan \beta = \sec \alpha \sec \beta \cos 2\theta$$

$$\Leftrightarrow \cos 2\Theta \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta = \cos 2\theta$$

$$\Leftrightarrow 2\theta = \arccos(\cos 2\Theta \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta) \quad (7.1.1.A.7)$$

となり、見かけ回折角 2Θ と真の回折角 2θ との差 $\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta$ は、見かけ回折角 2Θ と入射ビームの軸方向ずれ角 α 、回折ビームの軸方向ずれ角 β の函数として、

$$\Delta 2\Theta = f(2\Theta, \alpha, \beta) = 2\Theta - \arccos(\cos 2\Theta \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta) \quad (7.1.1.A.8)$$

と表される。 (\leftrightarrow)

(補足 7.1.1.B) 装置収差函数の一般的な数学形式 (\leftrightarrow)

伝統的 (traditional) ^{トラディショナル} な粉末 X 線回折強度データは、本来は X 線回折写真のように 2 次元の図形として可視化 (visualize) ^{ヴィジュアライズ} されるはずの回折強度の情報を、1 次元の軸の上に投影 (射影) (projection) ^{プロジェクション} あるいは写像 (mapping) ^{マッピング} のような操作によって変換をしたようなものと見做してもよい。この場合にスリットなどの光学部品 ^{オプティカル エレメント} optical elements の有限な幅や向きなどの 3 次元以上の構造情報を持つ立体物の影響、一般的に「収差」と呼ばれることの数学的な表現を求めることは困難と思われるかもしれない。しかし高校数学程度の知識と現代的な計算機 ^{コンピュータ} computer システムを利用できる技術を持てば、このことは特別に困難なことではないと知れることになる。

例えば軸発散収差の場合には、軸方向への入射ビームと回折ビームのずれ ^{デヴィエーション} deviation の角度を α, β (α はギリシャ文字小文字のアルファ alpha; β はギリシャ文字小文字のベータまたはベータ beta) とし、見掛け回折角を 2Θ (つー・しー ^{みか} た; Θ はギリシャ文字大文字のシータ Theta) としたときに、「見掛け回折角」 2Θ と「真の回折角」 2θ (θ はギリシャ文字小文字のシータ theta) の差 $\Delta 2\Theta = 2\Theta - 2\theta$ が、 $2\Theta, \alpha, \beta$ を変数 ^{ヴァリアブルズ} variables (arguments) ^{アーギュメント} とする函数 ^{ファンクション} function として

$$\Delta 2\Theta = f(2\Theta, \alpha, \beta) \quad (7.1.1.B.1)$$

と表されるとする。また α が変化したときのビーム強度変化が $g(\alpha)$ 、 β が変化したときのビーム強度変化が $h(\beta)$ のような一変数函数として表されるとする。 α の取り得る値の範囲が $-A$ から A ($\alpha \in [-A, A]$) であるとする。 β の取り得る値の範囲が $-B$ から B ($\beta \in [-B, B]$) であるとする。この場合装置収差函数 $\omega(\Delta 2\Theta; 2\Theta, A, B)$ (ω はギリシャ文字小文字のオメガ omega) は

$$\omega(\Delta 2\Theta; 2\Theta, A, B) = \int_{-A}^A \int_{-B}^B \delta(\Delta 2\Theta - f(2\Theta, \alpha, \beta)) g(\alpha) h(\beta) d\beta d\alpha \quad (7.1.1.B.2)$$

と表現される。ただし、ここで $\delta(x)$ はディラックのデルタ函数 ^{ディラック デルタ ファンクション} Dirac delta function である。

式 (7.1.1.B.2) の表現は、コンピュータ 計算機 computer を使えば数値的 numerical 数値的に解くことができる。なにかの近似 アプロクサイメーション approximation を使えば積分が代数的 アルジェブレイク algebraic に解ける場合もあるが、そのことが取り立てて重要と言うほどではないかもしれない。しかし、数値的な計算は、コーディングのミスや、使用する計算システム固有の機械誤差などによって誤った結果を出力する危険を常に伴う。実際には、ある程度以上の計算ステップを踏む数値計算アプリケーションを開発するためには、複数の異なるアプローチを用いてクロス・チェックをすることが事実上必須となる。 (↔)

(補足 7.1.2.A) 軸発散収差による回折角ずれ $\Delta 2\Theta$ の二次近似形式 (↔)

式 (7.1.1.1) の関係

$$\Delta 2\Theta = 2\Theta - \arccos(\cos 2\Theta \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta) \quad (7.1.1.1)$$

の二次近似形式を求めるには、「逆三角関数の微分公式」を用いれば良いが、そのことにわずら煩わしさを感じるのであれば、式 (7.1.1.1) を

$$\cos(2\Theta - \Delta 2\Theta) = \cos 2\Theta \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta \quad (7.1.2.A.1)$$

のように書き直して「三角関数の微分の公式」だけを使うのでも良い。以下では簡略化のために $\Delta 2\Theta$ を Δ と表記する。

式 (7.1.2.A.1) に $\alpha = \beta = 0$ を代入すれば、

$$\cos(2\Theta - \Delta_{00}) = \cos 2\Theta \quad (7.1.2.A.2)$$

となる。ただし、 $\alpha = \beta = 0$ のときの Δ の値を Δ_{00} と表記する。式 (7.1.2.A.2) から、

$$\Delta_{00} = 0 \quad (7.1.2.A.3)$$

となることがわかる。

式 (7.1.2.A.1) の両辺を α で偏微分すれば、

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} \sin(2\Theta - \Delta) = -\cos 2\Theta \sin \alpha \cos \beta + \cos \alpha \sin \beta \quad (7.1.2.A.4)$$

となる。式 (7.1.2.A.4) に $\alpha = \beta = 0$ を代入すれば、

$$\left(\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} \right)_{00} \sin(2\Theta - \Delta_{00}) = 0 \quad (7.1.2.A.5)$$

となる。ただし、 $\alpha = \beta = 0$ のときの $(\partial \Delta / \partial \alpha)$ の値を $(\partial \Delta / \partial \alpha)_{00}$ と表記する。式 (7.1.2.A.5) から、

$$(\partial \Delta / \partial \alpha)_{00} = 0 \quad (7.1.2.A.6)$$

となることがわかる。

式 (7.1.2.A.1) の両辺を β で偏微分すれば、

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \beta} \sin(2\Theta - \Delta) = -\cos 2\Theta \cos \alpha \sin \beta + \sin \alpha \cos \beta \quad (7.1.2.A.7)$$

となる。式 (7.1.2.A.7) に $\alpha = \beta = 0$ を代入すれば、

$$\left(\frac{\partial \Delta}{\partial \beta} \right)_{00} \sin(2\Theta - \Delta_{00}) = 0 \quad (7.1.2.A.8)$$

となる。ただし、 $\alpha = \beta = 0$ のときの $(\partial \Delta / \partial \beta)$ の値を $(\partial \Delta / \partial \beta)_{00}$ と表記する。式 (7.1.2.A.8) から、

$$(\partial \Delta / \partial \beta)_{00} = 0 \quad (7.1.1.A.9)$$

となることがわかる。

式 (7.1.2.A.4) の両辺を α で偏微分すれば,

$$\frac{\partial^2 \Delta}{\partial \alpha^2} \sin(2\Theta - \Delta) - \left(\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} \right)^2 \cos(2\Theta - \Delta) = -\cos 2\Theta \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta \quad (7.1.2.A.10)$$

となる。式 (7.1.2.A.10) に $\alpha = \beta = 0$ を代入すれば,

$$\left(\frac{\partial^2 \Delta}{\partial \alpha^2} \right)_{00} \sin 2\Theta = -\cos 2\Theta \quad (7.1.2.A.11)$$

となる。ただし、 $\alpha = \beta = 0$ のときの $(\partial^2 \Delta / \partial \alpha^2)$ の値を $(\partial^2 \Delta / \partial \alpha^2)_{00}$ と表記する。式 (7.1.2.A.11) から,

$$(\partial^2 \Delta / \partial \alpha^2)_{00} = -\cot 2\Theta \quad (7.1.2.A.12)$$

となることがわかる。

式 (7.1.2.A.4) の両辺を β で偏微分すれば,

$$\frac{\partial^2 \Delta}{\partial \alpha \partial \beta} \sin(2\Theta - \Delta) - \frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} \frac{\partial \Delta}{\partial \beta} \cos(2\Theta - \Delta) = \cos 2\Theta \sin \alpha \sin \beta + \cos \alpha \cos \beta \quad (7.1.2.A.13)$$

となる。式 (7.1.2.A.13) に $\alpha = \beta = 0$ を代入すれば,

$$\left(\frac{\partial^2 \Delta}{\partial \alpha \partial \beta} \right)_{00} \sin 2\Theta = 1 \quad (7.1.2.A.14)$$

となる。ただし、 $\alpha = \beta = 0$ のときの $(\partial^2 \Delta / \partial \alpha \partial \beta)$ の値を $(\partial^2 \Delta / \partial \alpha \partial \beta)_{00}$ と表記する。式 (7.1.2.A.14) から,

$$(\partial^2 \Delta / \partial \alpha \partial \beta)_{00} = \csc 2\Theta \quad (7.1.2.A.15)$$

となることがわかる。

式 (7.1.2.A.7) の両辺を β で偏微分すれば,

$$\frac{\partial^2 \Delta}{\partial \beta^2} \sin(2\Theta - \Delta) - \left(\frac{\partial \Delta}{\partial \beta} \right)^2 \cos(2\Theta - \Delta) = -\cos 2\Theta \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta \quad (7.1.2.A.16)$$

となる。式 (7.1.2.A.16) に $\alpha = \beta = 0$ を代入すれば,

$$\left(\frac{\partial^2 \Delta}{\partial \beta^2} \right)_{00} \sin 2\Theta = -\cos 2\Theta \quad (7.1.2.A.17)$$

となる。ただし、 $\alpha = \beta = 0$ のときの $(\partial^2 \Delta / \partial \beta^2)$ の値を $(\partial^2 \Delta / \partial \beta^2)_{00}$ と表記する。式 (7.1.2.A.17) から,

$$(\partial^2 \Delta / \partial \beta^2)_{00} = -\cot 2\Theta \quad (7.1.2.A.18)$$

となることがわかる。

一般的に二変数関数の 2 次近似形式が

$$\Delta \approx \Delta_{00} + \left(\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} \right)_{00} \alpha + \left(\frac{\partial \Delta}{\partial \beta} \right)_{00} \beta + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \Delta}{\partial \alpha^2} \right)_{00} \alpha^2 + \left(\frac{\partial^2 \Delta}{\partial \alpha \partial \beta} \right)_{00} \alpha \beta + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \Delta}{\partial \beta^2} \right)_{00} \beta^2 \quad (7.1.2.A.19)$$

と書けることと、式 (7.1.2.A.3), (7.1.2.A.6), (7.1.2.A.9), (7.1.2.A.12), (7.1.2.A.15), (7.1.2.A.18) とから,

$$\Delta \approx -\frac{\cot 2\Theta}{2} \alpha^2 + (\csc 2\Theta) \alpha \beta - \frac{\cot 2\Theta}{2} \beta^2 = -\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2 \tan 2\Theta} + \frac{\alpha \beta}{\sin 2\Theta}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-\alpha^2 \cos 2\Theta + 2\alpha\beta - \beta^2 \cos 2\Theta}{2 \sin 2\Theta} \\
&= \frac{-\alpha^2 \cos^2 \Theta + \alpha^2 \sin^2 \Theta + 2\alpha\beta - \beta^2 \cos^2 \Theta + \beta^2 \sin^2 \Theta}{4 \sin \Theta \cos \Theta} \\
&= \frac{-(\alpha - \beta)^2 \cos^2 \Theta + (\alpha + \beta)^2 \sin^2 \Theta}{4 \sin \Theta \cos \Theta} = -\frac{(\alpha - \beta)^2}{4 \tan \Theta} + \frac{(\alpha + \beta)^2}{4 \cot \Theta}
\end{aligned} \tag{7.1.2.A.20}$$

のように「二次近似形式」が求められる。(↔)

(補足 7.1.2.B) ソーラー・スリット開き角の定義 (↔)

本稿ではソーラー・スリットの開き角を「スリットに用いられる金属箔の間隔と長さの比の逆正接 (arctangent)」として定義する。X線回折装置製造会社の Malvern-Panalytical (Philips) 社の装置仕様ではこれと同じ定義が用いられるが、リガク (理学電機) 社の装置仕様では、この値を2倍した値を「ソーラー・スリット角」と称するので、注意する必要がある。(↔)

(補足 7.1.2.C) 対称ソーラー・スリット配置の軸発散収差函数二次近似形式の解析解 (↔)

式 (7.1.2.2) で表される対称ソーラー・スリット配置の軸発散収差函数の二次近似形式：

$$\omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi_{SS}) = \frac{1}{\Phi_{SS}^2} \int_{-\Phi_{SS}}^{\Phi_{SS}} \int_{-\Phi_{SS}}^{\Phi_{SS}} \delta \left(\Delta 2\Theta + \frac{(a-b)^2}{4t} - \frac{(a+b)^2 t}{4} \right) \left(1 - \frac{|\alpha|}{\Phi_{SS}} \right) \left(1 - \frac{|\beta|}{\Phi_{SS}} \right) d\alpha d\beta \tag{7.1.2.2}$$

ただし

$$t \equiv \tan \Theta$$

と表される場合、その解は代数的な手法で求められる。

変数変換

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha = \frac{x+y}{\sqrt{2}} \\ \beta = \frac{x-y}{\sqrt{2}} \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} x = \frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}} \\ y = \frac{\alpha-\beta}{\sqrt{2}} \end{array} \right\} \tag{7.1.2.C.1}$$

を用いれば、式 (7.1.2.2) は

$$\begin{aligned}
&\omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi_{SS}) \\
&= \frac{1}{\Phi_{SS}^2} \int_{-\sqrt{2}\Phi_{SS}}^{\sqrt{2}\Phi_{SS}} \int_{-\sqrt{2}\Phi_{SS}-|y|}^{\sqrt{2}\Phi_{SS}-|y|} \delta \left(\Delta 2\Theta - \frac{x^2 t}{2} + \frac{y^2}{2t} \right) \left(1 - \frac{|x+y|}{\sqrt{2}\Phi_{SS}} \right) \left(1 - \frac{|x-y|}{\sqrt{2}\Phi_{SS}} \right) dx dy \\
&= \frac{4}{\Phi_{SS}^2} \int_0^{\sqrt{2}\Phi_{SS}} \int_0^{\sqrt{2}\Phi_{SS}-y} \delta \left(\Delta 2\Theta - \frac{x^2 t}{2} + \frac{y^2}{2t} \right) \left(1 - \frac{x+y}{\sqrt{2}\Phi_{SS}} \right) \left(1 - \frac{|x-y|}{\sqrt{2}\Phi_{SS}} \right) dx dy
\end{aligned} \tag{7.1.2.C.2}$$

と書き直せる。この変数変換を図示すれば Fig. 7.1.2.C.1 のようになる。

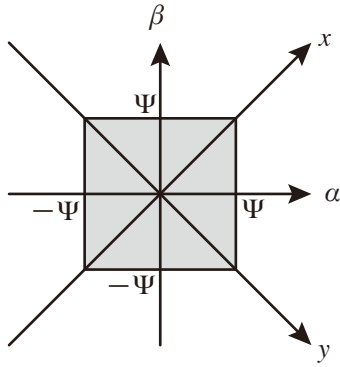


Fig. 7.1.2.C.1 式 (7.1.2.C.1) で表される積分変数の変換と積分範囲

式 (7.1.2.C.2) で $t = \tan \Theta$ の代わりに $1/t = \cot \Theta = \tan(\pi/2 - \Theta)$ を入れた場合に、同時に $\Delta 2\Theta$ を $-\Delta 2\Theta$ に置き換えれば同形になる。つまり、

$$\omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi_{SS}) = \omega_A(-\Delta 2\Theta; \pi - 2\Theta, \Phi_{SS}) \quad (7.1.2.C.3)$$

の関係がある。従って、 $0 < 2\Theta < \frac{\pi}{2} \Leftrightarrow 0 < t < 1$ の場合の形式のみを求めれば良い。

式 (7.1.2.C.2) に対して、以下の変数変換：

$$\begin{aligned} -\Delta 2\Theta - \frac{y^2}{2t} + \frac{x^2 t}{2} = u &\Leftrightarrow x^2 = \frac{2}{t} \left(\Delta 2\Theta + u + \frac{y^2}{2t} \right) \Leftrightarrow x^2 = \frac{1}{t^2} \left[2(\Delta 2\Theta + u)t + y^2 \right] \\ \Leftrightarrow x = \frac{1}{t} \sqrt{2(\Delta 2\Theta + u)t + y^2} &\quad (7.1.2.C.4) \end{aligned}$$

を用いれば

$$\begin{aligned} dx &= \frac{du}{\sqrt{2(\Delta 2\Theta - u)t + y^2}} \\ x : 0 &\rightarrow \sqrt{2}\Phi_{SS} - y \\ u : -\Delta 2\Theta - \frac{y^2}{2t} &\rightarrow -\Delta 2\Theta - \frac{y^2}{2t} + \frac{(\sqrt{2}\Phi_{SS} - y)^2 t}{2} \end{aligned}$$

から、式 (7.1.2.C.2) は

$$\begin{aligned} \omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi_{SS}) &= \frac{4}{\Phi_{SS}^2} \int_0^{\sqrt{2}\Phi_{SS} - \Delta 2\Theta - \frac{y^2}{2t} + \frac{(\sqrt{2}\Phi_{SS} - y)^2 t}{2}} \int_{-\Delta 2\Theta - \frac{y^2}{2t}} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi_{SS}} \left(\frac{\sqrt{2(\Delta 2\Theta + u)t + y^2}}{t} + y \right) \right] \\ &\times \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi_{SS}} \left| \frac{\sqrt{2(\Delta 2\Theta + u)t + y^2}}{t} - y \right| \right] \frac{\delta(-u) du dy}{\sqrt{2(\Delta 2\Theta - u)t + y^2}} \quad (7.1.2.C.5) \end{aligned}$$

となり、

$$\int_a^b f(u) \delta(u) du = \int_a^b f(u) \delta(-u) du = \begin{cases} f(0) & [a < 0 < b] \\ -f(0) & [b < 0 < a] \\ 0 & [\text{otherwise}] \end{cases} \quad (7.1.2.C.6)$$

の関係から、式 (7.1.2.C.5) の積分が 0 でない値を持つのは、

$$\begin{aligned}
-\Delta 2\Theta - \frac{y^2}{2t} < 0 < -\Delta 2\Theta - \frac{y^2}{2t} + \frac{t}{2} (\sqrt{2}\Phi_{SS} - y)^2 \\
\Leftrightarrow -\frac{y^2}{2t} < \Delta 2\Theta < -\frac{y^2}{2t} + \frac{t}{2} (\sqrt{2}\Phi_{SS} - y)^2
\end{aligned} \tag{7.1.2.C.7}$$

の範囲に限られる。この範囲は Fig. 7.1.2.C.2 中、赤線で囲まれた範囲の意味を持つ。

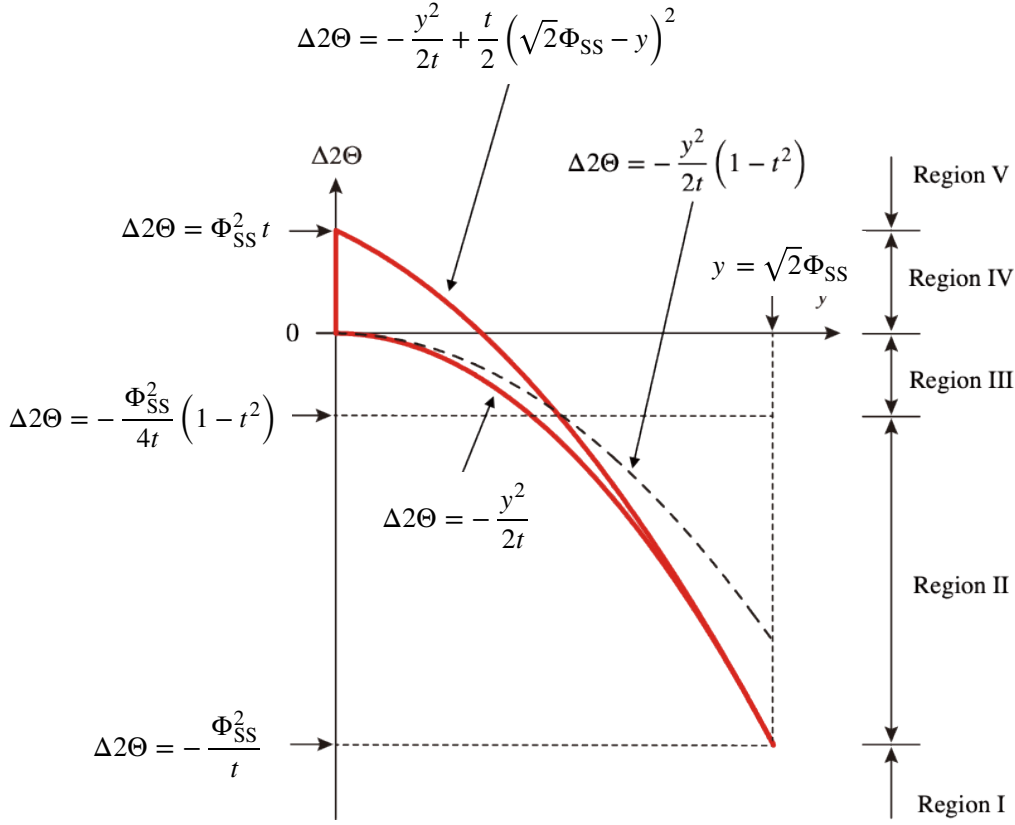


Fig 7.1.2.C.2 式 (7.1.2.C.5) の積分が 0 でない値を持つ $\Delta 2\Theta, y$ の範囲と、式 (7.1.2.C.5) 中の絶対値記号をはずすときに符号が変わる境界。積分は赤線で囲まれた領域で 0 でない値を持つ。破線の上の領域では絶対値記号をはずすときに符号は変わらず、破線の下領域では符号が変わる。

また、式 (7.1.2.C.5) :

$$\begin{aligned}
\omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi_{SS}) &= \frac{4}{\Phi_{SS}^2} \int_0^{\sqrt{2}\Phi_{SS} - \Delta 2\Theta - \frac{y^2}{2t} + \frac{(\sqrt{2}\Phi_{SS} - y)^2 t}{2}} \int_{-\Delta 2\Theta - \frac{y^2}{2t}} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi_{SS}} \left(\frac{\sqrt{2(\Delta 2\Theta + u)t + y^2}}{t} + y \right) \right] \\
&\times \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi_{SS}} \left| \frac{\sqrt{2(\Delta 2\Theta + u)t + y^2}}{t} - y \right| \right] \frac{\delta(-u) du dy}{\sqrt{2(\Delta 2\Theta - u)t + y^2}} \tag{7.1.2.C.5}
\end{aligned}$$

の中絶対値記号をはずすときに符号が変わらない条件は、

$$\frac{\sqrt{2\Delta 2\Theta t + y^2}}{t} \geq y \Rightarrow 2t\Delta 2\Theta + y^2 \geq y^2 t^2 \Rightarrow \Delta 2\Theta \geq -\frac{y^2}{2t} (1 - t^2)$$

であり、Fig. 7.1.2.C.2 中の破線で示した放物線より上の領域になる。

$\Delta 2\Theta$ の上限を表す放物線：

$$\Delta 2\Theta = -\frac{y^2}{2t} + \frac{t}{2} \left(\sqrt{2}\Phi_{SS} - y \right)^2$$

と絶対値記号をはずすときに符号の変わる境界を表す放物線：

$$\Delta 2\Theta = -\frac{y^2}{2t} \left(1 - t^2 \right)$$

との交点の y 座標は

$$\begin{aligned} -\frac{y^2}{2t} + \frac{t}{2} \left(\sqrt{2}\Phi_{SS} - y \right)^2 &= -\frac{y^2}{2t} \left(1 - t^2 \right) \Rightarrow \frac{t}{2} \left(\sqrt{2}\Phi_{SS} - y \right)^2 = \frac{y^2 t}{2} \\ \Rightarrow \frac{y^2 t}{2} - \sqrt{2}\Phi_{SS} y t + \Phi_{SS}^2 t &= \frac{y^2 t}{2} \Rightarrow y = \frac{\Phi_{SS}}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

であり、この時の $\Delta 2\Theta$ の値は $\Delta 2\Theta = -\frac{\Phi_{SS}^2}{4t} \left(1 - t^2 \right)$ となる。

[Fig. 7.1.2.C.2](#) から、 $\Delta 2\Theta \leq -\Phi_{SS}^2/t$ の領域 (Region I) と $\Phi_{SS}^2 t \leq \Delta 2\Theta$ の領域 (Region V) では $\omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi_{SS}) = 0$ であることがわかる。また、 $-\Phi_{SS}^2/t < \Delta 2\Theta < \Phi_{SS}^2 t$ の範囲では、さらに $\Delta 2\Theta$ について3つの領域 (Regions II, III, IV) に分けて扱う必要のあることもわかる。

$2\Theta \leq \frac{\pi}{2}$ のとき、軸発散収差函数 $\omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi_{SS})$ は、以下のように表される ([補足 7.1.2.C.1](#))

([補足 7.1.2.C.2](#)) ([補足 7.1.2.C.3](#)) 。

$$\omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi_{SS}) = \frac{4}{\Phi_{SS}^2} \begin{cases} 0 & \left[u \leq -\frac{1}{t^2} \right] \\ V_{II}(y_1) - V_{II}(y_0) & \left[-\frac{1}{t^2} < u \leq -\frac{1}{4t} \left(\frac{1}{t} - t \right) \right] \\ V_{II}(y_c) - V_{II}(y_0) + V_{IV}(y_1) - V_{IV}(y_c) & \left[-\frac{1}{4t} \left(\frac{1}{t} - t \right) < u < 0 \right] \\ V_{IV}(y_1) - V_{IV}(0) & [0 < u < 1] \\ 0 & [1 < u] \end{cases} \quad (7.1.2.C.8)$$

$$V_{II}(y) = \frac{2 - (1 + t^2)u}{2} \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2u} \right) - \frac{1 - t^2}{4} y \sqrt{y^2 + 2u} - \sqrt{2t} \sqrt{y^2 + 2u} \quad (7.1.2.C.9)$$

$$V_{IV}(y) = \frac{2 + (1 + t^2)u}{2} \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2u} \right) + \frac{1 - t^2}{4} y \sqrt{y^2 + 2u} - \sqrt{2}y$$

$$y_0 = \sqrt{-2u} \quad (7.1.2.C.11)$$

$$y_1 = \frac{\sqrt{2}(1 - u)}{\sqrt{1 - (1 - t^2)u + t}} \quad (7.1.2.C.12)$$

$$y_c = \sqrt{-\frac{2u}{1 - t^2}} \quad (7.1.2.C.13)$$

$$u \equiv \frac{\Delta 2\Theta}{\Phi_{SS}^2 t} \quad (7.1.2.C.14)$$

(↔)

(補足 7.1.2.C.1) $0 < \Delta 2\Theta < \Phi_{SS}^2 t$ の領域 (Region IV) (↔)

ここではソーラー・スリット角 Φ_{SS} を Φ と表記する。回折角ずれ $\Delta 2\Theta$ が $0 < \Delta 2\Theta < \Phi^2 t$ の範囲にある領域 (Region IV) では、[Fig. 7.1.2.C.2](#) に示すように式 (7.1.2.C.5) の積分変数 y の下限は 0 であり、上限を y_1 とすれば、

$$\begin{aligned} \Delta 2\Theta &= -\frac{y_1^2}{2t} + \frac{t}{2} (\sqrt{2}\Phi - y_1)^2 = -\frac{y_1^2}{2t} + \frac{t}{2} (y_1^2 - 2\sqrt{2}\Phi y_1 + 2\Phi^2) \\ &= -\frac{1-t^2}{2t} y_1^2 - \sqrt{2}\Phi t y_1 + \Phi^2 t \\ &= \begin{cases} -\frac{1-t^2}{2t} \left(y_1 + \frac{\sqrt{2}\Phi t^2}{1-t^2} \right)^2 + \frac{\Phi^2 t}{1-t^2} & [t < 1] \\ -\sqrt{2}\Phi \left(y_1 - \frac{\Phi}{\sqrt{2}} \right) & [t = 1] \end{cases} \end{aligned} \quad (7.1.2.C.1.1)$$

となる。

式 (7.1.2.C.1.1) を y_1 について解けば、 $t < 1$ のとき、

$$\begin{aligned} \Delta 2\Theta &= -\frac{1-t^2}{2t} \left(y_1 + \frac{\sqrt{2}\Phi t^2}{1-t^2} \right)^2 + \frac{\Phi^2 t}{1-t^2} \Rightarrow \frac{1-t^2}{2t} \left(y_1 + \frac{\sqrt{2}\Phi t^2}{1-t^2} \right)^2 = \frac{\Phi t}{1-t^2} - \Delta 2\Theta \\ y_1 &= \sqrt{\frac{2t}{1-t^2} \left(\frac{\Phi^2 t}{1-t^2} - \Delta 2\Theta \right) - \frac{\sqrt{2}\Phi t^2}{1-t^2}} = \frac{\sqrt{2}}{1-t^2} \left[\sqrt{t(1-t^2) \left(\frac{\Phi^2 t}{1-t^2} - \Delta 2\Theta \right) - \Phi t^2} \right] \\ &= \frac{\sqrt{2}}{1-t^2} \left[\sqrt{\Phi^2 t^2 - t(1-t^2)\Delta 2\Theta - \Phi t^2} \right] \end{aligned} \quad (7.1.2.C.1.2)$$

となり、 $t = 1$ のとき、

$$y_1 = \frac{\Phi^2 - \Delta 2\Theta}{\sqrt{2}\Phi} \quad (7.1.2.C.1.3)$$

となる。式 (7.1.2.C.1.2) を変形して、

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{\sqrt{2} \left[\Phi^2 t^2 - t(1-t^2)\Delta 2\Theta - \Phi^2 t^4 \right]}{(1-t^2) \left[\sqrt{\Phi^2 t^2 - t(1-t^2)\Delta 2\Theta} + \Phi t^2 \right]} = \frac{\sqrt{2} \left[\Phi^2 (t^2 - t^4) - t(1-t^2)\Delta 2\Theta \right]}{(1-t^2) \left[\sqrt{\Phi^2 t^2 - t(1-t^2)\Delta 2\Theta} + \Phi t^2 \right]} \\ &= \frac{\sqrt{2}t (\Phi^2 t - \Delta 2\Theta)}{\sqrt{\Phi^2 t^2 - t(1-t^2)\Delta 2\Theta} + \Phi t^2} \end{aligned} \quad (7.1.2.C.1.4)$$

とすれば、 $t < 1$ の場合のみでなく $t \leq 1$ でも使える形式が得られる。さらに、

$$u \equiv \frac{\Delta 2\Theta}{\Phi^2 t} \Leftrightarrow \Delta 2\Theta = \Phi^2 t u \quad (7.1.2.C.1.5)$$

を定義すれば、式 (7.1.2.C.1.4) は

$$y_1 = \frac{\sqrt{2t}(\Phi^2 t - \Phi^2 t u)}{\sqrt{\Phi^2 t^2 - \Phi^2 t^2(1-t^2)u + \Phi t^2}} = \frac{\sqrt{2}\Phi t(1-u)}{\sqrt{1-(1-t^2)u+t}} \quad (7.1.2.C.1.6)$$

と書き換えられる。

この領域 (Region IV) ($0 < \Delta 2\Theta < \Phi^2 t \Leftrightarrow 0 < u < 1$) では、式 (7.1.2.C.5) の内側の積分を

$$\int_a^b \delta(x)f(x) dx = f(0) \quad \text{for } a < 0 < b$$

の関係から解いた形式：

$$\begin{aligned} \omega_A(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi) &= \frac{4}{\Phi^2} \int_0^{y_1} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi} \left(\frac{\sqrt{2t\Delta 2\Theta + y^2}}{t} + y \right) \right] \\ &\quad \times \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi} \left| \frac{\sqrt{2t\Delta 2\Theta + y^2}}{t} - y \right| \right] \frac{dy}{\sqrt{2t\Delta 2\Theta + y^2}} \end{aligned}$$

の中での絶対値記号をはずすときに符号が変わらない。回折角ずれ $\Delta 2\Theta$ を記号 z で置き換える。

軸発散試料収差函数を表す式 (7.1.2.C.5) を、以下のように書き直せる。

$$\omega_A(z) = \frac{4}{\Phi^2} \int_0^{y_1} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi} \left(\frac{\sqrt{2zt + y^2}}{t} + y \right) \right] \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi} \left(\frac{\sqrt{2zt + y^2}}{t} - y \right) \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt + y^2}}$$

このことから、

$$\begin{aligned} \frac{\Phi^2 \omega_A(z)}{4} &= \int_0^{y_1} \left[1 - \frac{\sqrt{2}\sqrt{2zt + y^2}}{\Phi t} + \frac{1}{2\Phi^2} \left(\frac{2zt + y^2}{t^2} - y^2 \right) \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt + y^2}} \\ &= \int_0^{y_1} \left[1 - \frac{\sqrt{2}\sqrt{2zt + y^2}}{\Phi t} + \frac{1}{2\Phi^2} \left(\frac{2zt + y^2}{t^2} + 2zt - 2zt - y^2 \right) \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt + y^2}} \\ &= \int_0^{y_1} \left[1 - \frac{\sqrt{2}\sqrt{2zt + y^2}}{\Phi t} + \frac{2zt + y^2}{2\Phi^2} \left(\frac{1}{t^2} - 1 \right) + \frac{zt}{\Phi^2} \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt + y^2}} \\ &= \int_0^{y_1} \left[1 + \frac{zt}{\Phi^2} - \frac{\sqrt{2}\sqrt{2zt + y^2}}{\Phi t} + \frac{1-t^2}{2\Phi t^2} (2zt + y^2) \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt + y^2}} \\ &= \int_0^{y_1} \left[\left(1 + \frac{zt}{\Phi^2} \right) \frac{1}{\sqrt{2zt + y^2}} - \frac{\sqrt{2}}{\Phi t} + \frac{1-t^2}{2\Phi^2 t^2} \sqrt{2zt + y^2} \right] dy \end{aligned}$$

$$= \left(1 + \frac{zt}{\Phi^2}\right) \int_0^{y_1} \frac{dy}{\sqrt{y^2 + 2zt}} - \frac{\sqrt{2}y_1}{\Phi t} + \frac{1-t^2}{2^2 t^2} \int_0^{y_1} \sqrt{y^2 + 2zt} dy \quad (7.1.2.C.1.7)$$

と変形する。

式 (7.1.2.C.1.7) は、以下の2つの数学公式：

$$\int \frac{dx}{\sqrt{x^2 \pm a^2}} = \ln \left(x + \sqrt{x^2 \pm a^2} \right) \quad (7.1.2.C.1.8)$$

$$\int \sqrt{x^2 \pm a^2} dx = \frac{1}{2} \left[x \sqrt{x^2 \pm a^2} \pm a^2 \ln \left(x + \sqrt{x^2 \pm a^2} \right) \right] \quad (7.1.2.C.1.9)$$

を用いれば解ける。

$$V_{IV}(y) \equiv \left(1 + \frac{zt}{\Phi^2}\right) \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2zt} \right) - \frac{\sqrt{2}y}{\Phi t} + \frac{1-t^2}{4\Phi^2 t^2} \left[y \sqrt{y^2 + 2zt} + 2zt \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2zt} \right) \right] \quad (7.1.2.C.1.10)$$

とすれば、

$$\frac{\Phi^2 \omega_A(z)}{4} = V_{IV}(y_1) - V_{IV}(0) \quad (7.1.2.C.1.11)$$

となる。ここで、式 (7.1.2.C.1.5) の関係：

$$u \equiv \frac{\Delta 2\Theta}{\Phi^2 t} = \frac{z}{\Phi^2 t} \Leftrightarrow z = \Delta 2\Theta = \Phi^2 t u \quad (7.1.2.C.1.5)$$

の関係から、

$$y' = \frac{y}{\Phi t} \Leftrightarrow y = \Phi t y' \quad (7.1.1.E.1.12)$$

とすれば、式 (7.1.2.C.1.10) から

$$\begin{aligned} V_{IV}(y) &= \left(1 + ut^2\right) \ln \left(\Phi t y' + \sqrt{\Phi^2 t^2 y'^2 + 2ut^2 \Phi^2} \right) - \sqrt{2} y' \\ &\quad + \frac{1-t^2}{4\Phi_{SS}^2 t^2} \left[\Phi t y' \sqrt{\Phi_{SS}^2 t^2 y'^2 + 2\Phi^2 ut^2} + 2\Phi^2 t^2 u \ln \left(\Phi t y' + \sqrt{\Phi^2 t^2 y'^2 + 2\Phi^2 ut^2} \right) \right] \\ &= \left(1 + ut^2\right) \ln \left[\Phi t \left(y' + \sqrt{y'^2 + 2u} \right) \right] - \sqrt{2} y' \\ &\quad + \frac{1-t^2}{4} \left\{ y' \sqrt{y'^2 + 2u} + 2u \ln \left[\Phi t \left(y' + \sqrt{y'^2 + 2u} \right) \right] \right\} \\ &= \left(1 + ut^2\right) \ln \left[\Phi t \left(y' + \sqrt{y'^2 + 2u} \right) \right] - \sqrt{2} y' \\ &\quad + \frac{1-t^2}{4} y' \sqrt{y'^2 + 2u} + \frac{(1-t^2)u}{2} \ln \left[\Phi t \left(y' + \sqrt{y'^2 + 2u} \right) \right] \\ &= \left[1 + \frac{(1+t^2)u}{2} \right] \ln \left[\Phi t \left(y' + \sqrt{y'^2 + 2u} \right) \right] + \frac{1-t^2}{4} y' \sqrt{y'^2 + 2u} - \sqrt{2} y' \end{aligned} \quad (7.1.2.C.1.13)$$

となり、式 (7.1.2.C.1.7) に対応する積分の上限は

$$y_1' = \frac{\sqrt{2}(1-u)}{\sqrt{1-(1-t^2)u+t}} \quad (7.1.2.C.1.14)$$

となる。あらためて、

$$V_{IV}(y) = \frac{2+(1+t^2)u}{2} \ln\left(y + \sqrt{y^2+2u}\right) + \frac{1-t^2}{4} y \sqrt{y^2+2u} - \sqrt{2}y \quad (7.1.2.C.1.15)$$

$$y_1 = \frac{\sqrt{2}(1-u)}{\sqrt{1-(1-t^2)u+t}} \quad (7.1.2.C.1.16)$$

とする。

この領域 (Region IV) ($0 < \Delta 2\Theta < \Phi^2 t \Leftrightarrow 0 < u < 1$) での取差函数の値 $\omega_A(\Delta 2\Theta)$ を計算するためには

$$\omega_A(\Delta 2\Theta; \Phi) = \frac{4}{\Phi^2} [V_{IV}(y_1) - V_{IV}(0)] \quad (7.1.2.C.1.17)$$

$$V_{IV}(y) = \frac{2+(1+t^2)u}{2} \ln\left(y + \sqrt{y^2+2u}\right) + \frac{1-t^2}{4} y \sqrt{y^2+2u} - \sqrt{2}y \quad (7.1.2.C.1.15)$$

$$y_1 = \frac{\sqrt{2}(1-u)}{\sqrt{1-(1-t^2)u+t}} \quad (7.1.2.C.1.16)$$

$$u \equiv \frac{\Delta 2\Theta}{\Phi^2 t} \quad (7.1.2.C.1.5)$$

$$t = \tan \Theta$$

とすれば良い。 (↔)

(補足 7.1.2.C.2) $-\frac{\Phi_{SS}^2}{t} < \Delta 2\Theta < -\frac{\Phi_{SS}^2}{4t} (1-t^2)$ の領域 (Region II) (↔)

ここではソーラー・スリット角 Φ_{SS} を Φ と表記する。回折角ずれ $\Delta 2\Theta$ が $-\frac{\Phi^2}{t} < \Delta 2\Theta < -\frac{\Phi^2}{4t} (1-t^2)$ の範囲にある領域 (Region II) では、[Fig. 7.1.2.C.2](#) に示すように式 (7.1.2.C.5) の積分変数 y の下限は $y_0 = \sqrt{-2t\Delta 2\Theta}$ であり、上限を y_1 とすれば、式 (7.1.2.C.1.5) のように

$$u \equiv \frac{\Delta 2\Theta}{\Phi^2 t} \quad (7.1.2.C.1.5)$$

として、式 (7.1.2.C.1.6) で示したように、

$$y_1 = \frac{\sqrt{2}\Phi t (1-u)}{\sqrt{1-(1-t^2)u+t}} \quad (7.1.2.C.1.6)$$

と表される。

この領域 (Region II)

$$\begin{aligned} -\frac{\Phi^2}{t} < \Delta 2\Theta < -\frac{\Phi^2}{4t} (1-t^2) &\Leftrightarrow -\frac{\Phi^2}{t} < \Phi^2 u t < -\frac{\Phi^2}{4t} (1-t^2) \\ \Leftrightarrow -\frac{1}{t^2} < u < -\frac{1-t^2}{4t^2} & \quad (7.1.2.C.2.1) \end{aligned}$$

では、式 (7.1.2.C.5) 中の絶対値記号をはずすときに符号が反転する。回折角ずれ $\Delta 2\Theta$ を記号 z で置き換えれば、軸発散試料収差函数を表す式 (7.1.2.C.5) を、以下のように書き直せる。

$$\omega_A(z) = \frac{4}{\Phi^2} \int_{y_0}^{y_1} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi} \left(\frac{\sqrt{2zt+y^2}}{t} + y \right) \right] \left[1 + \frac{1}{\sqrt{2}\Phi} \left(\frac{\sqrt{2zt+y^2}}{t} - y \right) \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt+y^2}} \quad (7.1.2.C.2.2)$$

このことから、

$$\begin{aligned} \frac{\Phi^2 \omega_A(z)}{4} &= \int_{y_0}^{y_1} \left[1 - \frac{\sqrt{2}y}{\Phi} - \frac{1}{2\Phi^2} \left(\frac{2zt+y^2}{t^2} - y^2 \right) \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt+y^2}} \\ &= \int_{y_0}^{y_1} \left[1 - \frac{\sqrt{2}y}{\Phi} - \frac{1}{2\Phi^2} \left(\frac{2zt+y^2}{t^2} + 2zt - 2zt - y^2 \right) \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt+y^2}} \\ &= \int_{y_0}^{y_1} \left[1 - \frac{\sqrt{2}y}{\Phi} - \frac{2zt+y^2}{2\Phi^2} \left(\frac{1}{t^2} - 1 \right) - \frac{zt}{\Phi^2} \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt+y^2}} \\ &= \int_{y_0}^{y_1} \left[1 - \frac{zt}{\Phi^2} - \frac{\sqrt{2}y}{\Phi} - \frac{1-t^2}{2\Phi^2 t^2} (2zt+y^2) \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt+y^2}} \\ &= \int_{y_0}^{y_1} \left[\left(1 - \frac{zt}{\Phi^2} \right) \frac{1}{\sqrt{2zt+y^2}} - \frac{\sqrt{2}y}{\Phi \sqrt{2zt+y^2}} - \frac{1-t^2}{2\Phi^2 t^2} \sqrt{2zt+y^2} \right] dy \\ &= \left(1 - \frac{zt}{\Phi^2} \right) \int_{y_0}^{y_1} \frac{dy}{\sqrt{y^2+2zt}} - \frac{\sqrt{2}}{\Phi} \left[\sqrt{y^2+2zt} \right]_{y_0}^{y_1} - \frac{1-t^2}{2\Phi^2 t^2} \int_{y_0}^{y_1} \sqrt{y^2+2zt} dy \end{aligned} \quad (7.1.2.C.2.3)$$

となる。式 (7.1.2.C.2.3) は以下の公式：

$$\int \frac{dx}{\sqrt{x^2 \pm a^2}} = \ln \left(x + \sqrt{x^2 \pm a^2} \right) \quad (7.1.2.C.1.8)$$

$$\int \sqrt{x^2 \pm a^2} dx = \frac{1}{2} \left[x \sqrt{x^2 \pm a^2} \pm a^2 \ln \left(x + \sqrt{x^2 \pm a^2} \right) \right] \quad (7.1.2.C.1.9)$$

を用いれば解ける。

$$\begin{aligned} V_{II}(y) &\equiv \left(1 - \frac{zt}{\Phi^2} \right) \ln \left(y + \sqrt{y^2+2zt} \right) - \frac{\sqrt{2}\sqrt{y^2+2zt}}{\Phi} \\ &\quad - \frac{1-t^2}{4\Phi^2 t^2} \left[y \sqrt{y^2+2zt} + 2zt \ln \left(y + \sqrt{y^2+2zt} \right) \right] \end{aligned} \quad (7.1.2.C.2.4)$$

とすれば、

$$\frac{\Phi^2 \omega_A(z)}{4} = V_{II}(y_1) - V_{II}(y_0) \quad (7.1.2.C.2.5)$$

となる。さらに、

$$u \equiv \frac{\Delta 2\Theta}{\Phi^2 t} = \frac{z}{\Phi^2 t} \quad (7.1.2.C.1.5)$$

$$y' = \frac{y}{\Phi t} \quad (7.1.2.C.1.12)$$

を用いれば、式 (7.1.2.C.2.4) から

$$\begin{aligned} V_{II}(y) &\equiv \left(1 - \frac{zt}{\Phi^2}\right) \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2zt}\right) - \frac{\sqrt{2}\sqrt{y^2 + 2zt}}{\Phi} \\ &\quad - \frac{1-t^2}{4\Phi^2 t^2} \left[y\sqrt{y^2 + 2zt} + 2zt \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2zt}\right) \right] \\ &= \left(1 - ut^2\right) \ln \left(\Phi t y' + \sqrt{\Phi^2 t^2 y'^2 + 2\Phi^2 t^2 u}\right) - \frac{\sqrt{2}\sqrt{\Phi^2 t^2 y'^2 + 2\Phi^2 t^2 u}}{\Phi} \\ &\quad - \frac{1-t^2}{4\Phi^2 t^2} \left[\Phi t y' \sqrt{\Phi^2 t^2 y'^2 + 2\Phi^2 t^2 u} + 2\Phi^2 u t^2 \ln \left(\Phi t y' + \sqrt{\Phi^2 t^2 y'^2 + 2\Phi^2 t^2 u}\right) \right] \\ &= \left(1 - ut^2\right) \ln \left(\Phi t y + \Phi t \sqrt{y'^2 + u}\right) - \sqrt{2}t \sqrt{y'^2 + 2u} \\ &\quad - \frac{1-t^2}{4} y' \sqrt{y'^2 + 2u} - \frac{1-t^2}{2} u \ln \left(\Phi t y' + \sqrt{\Phi^2 t^2 y'^2 + 2\Phi^2 t^2 u}\right) \\ &= \frac{2 - (1+t^2)u}{2} \ln \left(y' + \sqrt{y'^2 + 2u}\right) - \sqrt{2}t \sqrt{y'^2 + 2u} - \frac{1-t^2}{4} y' \sqrt{y'^2 + 2u} \end{aligned} \quad (7.1.2.C.1.13)$$

$$y'_0 = \frac{\sqrt{-2zt}}{\Phi t} = \frac{\sqrt{-2\Phi^2 t^2 u}}{\Phi t} = \sqrt{-2u} \quad (7.1.2.C.1.14)$$

と書き直せる。 (↔)

(補足 7.1.2.C.3) $-\frac{\Phi_{SS}^2}{4t} (1-t^2) \leq \Delta 2\Theta < 0$ の領域 (Region III) (↔)

ここではソーラー・スリット角 Φ_{SS} を Φ と表記する。回折角ずれ $\Delta 2\Theta$ が $-\frac{\Phi^2}{4t} (1-t^2) \leq \Delta 2\Theta < 0$ の範囲にある領域 (Region III) は、 $t \neq 1$ の場合のみ出現する。

$$\Delta 2\Theta \geq -\frac{y^2}{2t} (1-t^2) \Rightarrow \frac{y^2}{2t} (1-t^2) \geq -\Delta 2\Theta \Rightarrow y \geq \sqrt{-\frac{2t\Delta 2\Theta}{1-t^2}} = y_c \quad (7.1.2.C.3.1)$$

の場合には式 (7.1.2.C.5) の絶対値記号をはずすときに符号が変化せず

$$y < \sqrt{-\frac{2t\Delta 2\Theta}{1-t^2}} = y_c \quad (7.1.2.C.3.2)$$

の場合には、式 (7.1.2.C.5) の絶対値記号をはずすときに符号が反転する。

Fig. 7.1.2.C.2 に示すように式 (7.1.2.C.5) の積分変数 y の下限は $y_0 = \sqrt{-2t\Delta 2\Theta}$ であり、上限を y_1 とすれば、式 (7.1.2.C.1.5) のように

$$u \equiv \frac{\Delta 2\Theta}{\Phi^2 t} \quad (7.1.2.C.1.5)$$

として、式 (7.1.2.C.1.6) で示したように、

$$y_1 = \frac{\sqrt{2}\Phi t (1-u)}{\sqrt{1-(1-t^2)u+t}} \quad (7.1.2.C.1.6)$$

と表される。

この領域 (Region III)

$$-\frac{\Phi^2}{4t}(1-t^2) \leq \Delta 2\Theta < 0 \Leftrightarrow -\frac{\Phi^2}{4t}(1-t^2) \leq \Phi^2 t u < 0 \Leftrightarrow -\frac{1-t^2}{4t^2} \leq u < 0 \quad (7.1.2.C.3.3)$$

では、式 (7.1.2.C.5) の中の絶対値記号をはずすときに $y < y_c$ の領域では符号が反転し、 $y_c \leq y$ の領域では符号が変化しない。回折角ずれ $\Delta 2\Theta$ を記号 z で置き換えれば、軸発散試料収差函数を表す式 (7.1.2.C.5) を、以下のように書き直せる。

$$\begin{aligned} \omega_A(z) = & \frac{4}{\Phi^2} \int_{y_c}^{y_1} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi} \left(\frac{\sqrt{2zt+y^2}}{t} + y \right) \right] \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi} \left(\frac{\sqrt{2zt+y^2}}{t} - y \right) \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt+y^2}} \\ & + \frac{4}{\Phi^2} \int_{y_0}^{y_c} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}\Phi} \left(\frac{\sqrt{2zt+y^2}}{t} + y \right) \right] \left[1 + \frac{1}{\sqrt{2}\Phi} \left(\frac{\sqrt{2zt+y^2}}{t} - y \right) \right] \frac{dy}{\sqrt{2zt+y^2}} \end{aligned} \quad (7.1.2.C.3.4)$$

このことから、

$$\begin{aligned} V_{IV}(y) \equiv & \left(1 + \frac{zt}{\Phi^2} \right) \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2zt} \right) - \frac{\sqrt{2}y}{\Phi t} \\ & + \frac{1-t^2}{4\Phi^2 t^2} \left[y \sqrt{y^2 + 2zt} + 2zt \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2zt} \right) \right] \end{aligned} \quad (7.1.2.C.1.10)$$

$$\begin{aligned} V_{II}(y) \equiv & \left(1 - \frac{zt}{\Phi^2} \right) \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2zt} \right) - \frac{\sqrt{2}\sqrt{y^2 + 2zt}}{\Phi} \\ & - \frac{1-t^2}{4\Phi^2 t^2} \left[y \sqrt{y^2 + 2zt} + 2zt \ln \left(y + \sqrt{y^2 + 2zt} \right) \right] \end{aligned} \quad (7.1.2.C.2.4)$$

とすれば、

$$\frac{\Phi^2 \omega_A(z)}{4} = V_{IV}(y_1) - V_{IV}(y_c) + V_{II}(y_c) - V_{II}(y_0) \quad (7.1.2.C.3.5)$$

となる。 (↔)

(補足 7.1.2.A) 軸発散収差函数の平均位置 (↔)

ここではソーラー・スリット角 Φ_{SS} を Φ と表記する。式 (7.1.1.5) の軸発散収差函数

$$\omega_A(x) = \frac{1}{\Phi^2} \int_{-\Phi}^{\Phi} \int_{-\Phi}^{\Phi} \delta \left(x + \frac{(a-b)^2}{4t} - \frac{(a+b)^2 t}{4} \right) \left(1 - \frac{|a|}{\Phi} \right) \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) da db \quad (7.1.2.A.1)$$

の平均位置 $\langle x \rangle_A$ は、以下のように求められる。

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_A &= \int_{-\infty}^{\infty} x \omega_A(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{1}{\Phi^2} \int_{-\Phi}^{\Phi} \int_{-\Phi}^{\Phi} \delta \left(x + \frac{(a-b)^2}{4t} - \frac{(a+b)^2 t}{4} \right) \left(1 - \frac{|a|}{\Phi} \right) \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) da db dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \stackrel{\uparrow}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \left[y - \frac{(a-b)^2}{4t} + \frac{(a+b)^2 t}{4} \right] \frac{1}{\Phi^2} \int_{-\Phi}^{\Phi} \int_{-\Phi}^{\Phi} \delta(y) \\
& \begin{array}{l} x+(a-b)^2/4t-(a+b)^2t/4 \equiv y \\ x=y-(a-b)^2/4t+(a+b)^2t/4 \\ dx=dy \end{array} \\
& \times \left(1 - \frac{|a|}{\Phi} \right) \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) da db dy \\
& = \frac{1}{\Phi^2} \int_{-\Phi}^{\Phi} \int_{-\Phi}^{\Phi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[y - \frac{(a-b)^2}{4t} + \frac{(a+b)^2 t}{4} \right] \delta(y) dy \left(1 - \frac{|a|}{\Phi} \right) \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) da db \\
& \stackrel{\uparrow}{=} \frac{1}{\Phi^2} \int_{-\Phi}^{\Phi} \int_{-\Phi}^{\Phi} \left[-\frac{(a-b)^2}{4t} + \frac{(a+b)^2 t}{4} \right] \left(1 - \frac{|a|}{\Phi} \right) \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) da db \\
& \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0) \\
& = \frac{1}{4\Phi^2 t} \int_{-\Phi}^{\Phi} \int_{-\Phi}^{\Phi} \left[-(a-b)^2 + (a+b)^2 t^2 \right] \left(1 - \frac{|a|}{\Phi} \right) \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) da db \\
& = \frac{1}{4\Phi^2 t} \int_{-\Phi}^{\Phi} \int_{-\Phi}^{\Phi} \left(-a^2 + 2ab - b^2 + a^2 t^2 + 2ab t^2 + b^2 t^2 \right) \left(1 - \frac{|a|}{\Phi} \right) \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) da db \\
& = \frac{1}{4\Phi^2 t} \int_{-\Phi}^{\Phi} \int_{-\Phi}^{\Phi} \left[-(1-t^2)a^2 + 2ab(1+t^2) - b^2(1-t^2) \right] \left(1 - \frac{|a|}{\Phi} \right) \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) da db \\
& = \frac{1}{2\Phi^2 t} \int_{-\Phi}^{\Phi} \int_0^{\Phi} \left[-(1-t^2)a^2 + 2ab(1+t^2) - b^2(1-t^2) \right] \left(1 - \frac{a}{\Phi} \right) \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) da db \\
& = \frac{1}{2\Phi^2 t} \int_{-\Phi}^{\Phi} \int_0^{\Phi} \left[\frac{(1-t^2)a^3}{\Phi} - (1-t^2)a^2 - \frac{2a^2 b(1+t^2)}{\Phi} + 2ab(1+t^2) + \frac{ab^2(1-t^2)}{\Phi} - b^2(1-t^2) \right] \\
& \quad \times da \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) db \\
& = \frac{1}{2\Phi^2 t} \int_{-\Phi}^{\Phi} \left[\frac{(1-t^2)a^4}{4\Phi} - \frac{(1-t^2)a^3}{3} - \frac{2a^3 b(1+t^2)}{3\Phi} + a^2 b(1+t^2) + \frac{a^2 b^2(1-t^2)}{2\Phi} - ab^2(1-t^2) \right]_0^{\Phi} \\
& \quad \times \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) db \\
& = \frac{1}{2\Phi^2 t} \int_{-\Phi}^{\Phi} \left[\frac{(1-t^2)\Phi^3}{4} - \frac{(1-t^2)\Phi^3}{3} - \frac{2\Phi^2 b(1+t^2)}{3} + \Phi^2 b(1+t^2) + \frac{\Phi b^2(1-t^2)}{2} - \Phi b^2(1-t^2) \right] \\
& \quad \times \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) db \\
& = \frac{1}{2\Phi^2 t} \int_{-\Phi}^{\Phi} \left[-\frac{(1-t^2)\Phi^3}{12} + \frac{\Phi^2 b(1+t^2)}{3} - \frac{\Phi b^2(1-t^2)}{2} \right] \left(1 - \frac{|b|}{\Phi} \right) db \\
& = \frac{1}{\Phi t} \int_0^{\Phi} \left[-\frac{(1-t^2)\Phi^2}{12} - \frac{b^2(1-t^2)}{2} \right] \left(1 - \frac{b}{\Phi} \right) db \\
& = \frac{1}{\Phi t} \int_0^{\Phi} \left[-\frac{(1-t^2)\Phi^2}{12} + \frac{b(1-t^2)\Phi}{12} - \frac{b^2(1-t^2)}{2} + \frac{b^3(1-t^2)}{2\Phi} \right] db \\
& = \frac{1}{\Phi t} \left[-\frac{b(1-t^2)\Phi^2}{12} + \frac{b^2(1-t^2)\Phi}{24} - \frac{b^3(1-t^2)}{6} + \frac{b^4(1-t^2)}{8\Phi} \right]_0^{\Phi}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\Phi t} \left[-\frac{(1-t^2)\Phi^3}{12} + \frac{(1-t^2)\Phi^3}{24} - \frac{(1-t^2)\Phi^3}{6} + \frac{(1-t^2)\Phi^3}{8} \right] \\
&= \frac{(1-t^2)\Phi^2}{t} \left(-\frac{1}{12} + \frac{1}{24} - \frac{1}{6} + \frac{1}{8} \right) = \frac{(t^2-1)\Phi^2}{12t} \\
&= \frac{(1-t^2)\Phi^2}{t} \times \frac{-2+1-4+3}{24} \\
&= \frac{\Phi^2}{12} \left(t - \frac{1}{t} \right)
\end{aligned} \tag{7.1.2.A.2}$$

(↔)

(補足 7.1.6.A) 二重畳込モデルの数値計算 (↔)

ソーラー・スリット角 Φ_{SS} を Φ と表記する。二重畳込モデルでは、

$$\beta = \frac{71 - 14\sqrt{22}}{27} \approx 0.197562 \tag{7.1.5.12}$$

$$\gamma = \frac{13\Phi^2}{12\sqrt{70(1+\beta+\beta^2)}} \approx 0.116439\Phi^2 \tag{7.1.6.21}$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{70(1+\beta+\beta^2)}}{13(1-\beta)} \approx 0.891883 \tag{7.1.6.22}$$

として、 2Θ 尺度での高角側成分の線幅パラメータは

$$\gamma_+ = \gamma \left(\tan \Theta + \frac{\beta}{\tan \Theta} \right) \tag{7.1.6.A.1}$$

低角側成分の線幅パラメータは

$$\gamma_- = \gamma \left(\beta \tan \Theta + \frac{1}{\tan \Theta} \right) \tag{7.1.6.A.2}$$

となる。ガンマ分布の確率密度関数

$$f_{\Gamma}(\chi; \gamma, \alpha) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(\alpha)\gamma} \left(\frac{\chi}{\gamma} \right)^{\alpha-1} \exp\left(-\frac{\chi}{\gamma}\right) & [0 < \chi] \\ 0 & [\chi \leq 0] \end{cases} \tag{7.1.6.2}$$

を用いて、 2Θ 尺度での高角側成分関数は

$$\omega_{A+}(\Delta 2\Theta) = f_{\Gamma}(\Delta 2\Theta; \gamma_+, \alpha) \tag{7.1.6.A.2}$$

低角側成分関数は

$$\omega_{A-}(\Delta 2\Theta) = f_{\Gamma}(-\Delta 2\Theta; \gamma_-, \alpha) \tag{7.1.6.A.3}$$

と表される。 $\Phi = 2.5^\circ$, $2\Theta = 30^\circ$ の場合の各成分関数の形状を [Fig. 7.1.6.A.1](#) に示す。

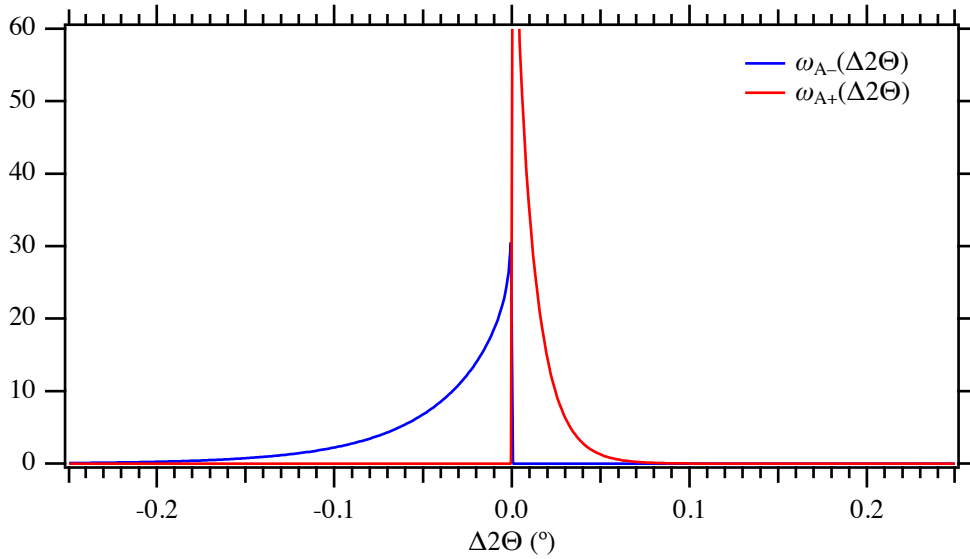


Fig. 7.1.6.A.1 $\Phi = 2.5^\circ$, $2\Theta = 30^\circ$ の場合の低角側成分函数 $\omega_{A-}(\Delta 2\Theta)$ と高角側成分函数 $\omega_{A+}(\Delta 2\Theta)$ の形状

Fig. 7.1.6.1 に示したグラフでは, $N = 500$ として,

$$\Delta 2\Theta_j = -0.25^\circ + 0.50^\circ \times \frac{j+0.5}{N} \quad (j = 0, 1, \dots, N-1)$$

に対して

$$\omega_{+,j} = \omega_+(\Delta 2\Theta_j)$$

$$\omega_{-,j} = \omega_-(\Delta 2\Theta_j)$$

を計算し,

$$\omega_{*,i} = d\Delta 2\Theta \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \begin{array}{l} \omega_{+, \frac{3N}{2}+i-j} \omega_{-,j} \quad \left[0 \leq \frac{3N}{2} + i - j < N \right] \\ \omega_{+, \frac{N}{2}+i-j} \omega_{-,j} \quad \left[0 \leq \frac{N}{2} + i - j < N \right] \\ \omega_{+, -\frac{N}{2}+i-j} \omega_{-,j} \quad \left[0 \leq -\frac{N}{2} + i - j < N \right] \end{array} \right\}$$

$$d\Delta 2\Theta = \frac{0.50^\circ}{N}$$

として畳込の計算を行なった。

k 階のモーメントを

$$s_k = \langle x^k \rangle = d\Delta 2\Theta \sum_{j=0}^N (\Delta 2\Theta_j)^k \omega_{*,j}$$

として, 4 階までのキュムラント κ_k を

$$\kappa_1 = \frac{s_1}{s_0}$$

$$\kappa_2 = \frac{s_2}{s_0} - \frac{s_1^2}{s_0^2}$$

$$\kappa_3 = \frac{s_3}{s_0} - \frac{3s_2s_1}{s_0^2} + \frac{2s_1^3}{s_0^3}$$

$$\kappa_4 = \frac{s_4}{s_0} - \frac{4s_3s_1}{s_0^2} - \frac{3s_2^2}{s_0^2} + \frac{12s_2s_1^2}{s_0^3} - \frac{6s_1^4}{s_0^4}$$

として求めた。また還元キュムラント $\kappa_k^{(1/k)} \equiv \text{sign}(\kappa_k) |\kappa_k|^{1/k}$ を求めた。 $\Phi = 2.5^\circ$, $2\Theta = 30^\circ$ の場合について解析解と二重畳込モデルを比較すると、以下の結果が得られた。

	解析解	二重畳込モデル
s_0	0.985	0.989
κ_1 (°)	-0.031	-0.031
$\kappa_2^{1/2}$ (°)	0.043	0.044
$\kappa_3^{(1/3)}$ (°)	-0.054	-0.050
$\kappa_4^{(1/4)}$ (°)	0.096	0.096

(↔)

(補足 7.1.7.A) フーリエ変換の数値計算 (↔)

函数 $f(x)$ のフーリエ変換 $\mathfrak{F}(\xi)$ は普通

$$\mathfrak{F}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{2\pi i \xi x} dx$$

のように表されるが、実際に計算機を使ってフーリエ計算を行うときには、

$$\mathfrak{F}(\xi_k) = \Delta x \sum_{j=0}^{N-1} f(x_j) e^{2\pi i \xi_k x_j}$$

$$x_j = x_0 + j\Delta x$$

$$\xi_k = k \Delta \xi$$

$$\Delta \xi = \frac{1}{N\Delta x}$$

$$k = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, 0, \dots, \frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2}$$

と表されるように、有限和を用いた計算をする。このように離散的な数値で計算を行うことは、本来のフーリエ変換とは少し意味が違うので、「離散フーリエ変換」とも呼ばれる。 $f(x_j) = f_j$, $\mathfrak{F}(\xi_k) = \mathfrak{F}_k$ として式 () を書き直せば、

$$\begin{aligned} \mathfrak{F}_k &= \Delta x \sum_{j=0}^{N-1} f_j e^{2\pi i \xi_k (x_0 + j\Delta x)} = \Delta x e^{2\pi i \xi_k x_0} \sum_{j=0}^{N-1} f_j e^{2\pi i \xi_k x_j} = \Delta x e^{2\pi i \xi_k x_0} \sum_{j=0}^{N-1} f_j e^{2\pi i \frac{k}{N\Delta x} j\Delta x} \\ &= \Delta x e^{2\pi i \xi_k x_0} \sum_{j=0}^{N-1} f_j e^{\frac{2\pi i k j}{N}} \end{aligned}$$

とも書ける。

N の値が2の整数冪(2^n)で表されるとき、「高速フーリエ変換アルゴリズム」を利用できるようになり、計算の効率が高くなる。 N の値が2の整数冪(2^n)で表されない場合の高速フーリエ変換アルゴリズムも存在するが、そのことに重要な意味はない。

また、函数 $\mathfrak{F}(\xi)$ の逆フーリエ変換 $f(x)$ は、

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{F}(\xi) e^{-2\pi i \xi x} d\xi$$

と表されるが、離散逆フーリエ変換では、

$$f_j = \frac{\Delta\xi}{N} \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \mathfrak{F}_k e^{-2\pi i \xi_k x_j} = \frac{1}{N^2 \Delta x} \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \mathfrak{F}_k e^{-\frac{2\pi i k j}{N}} = \frac{1}{N^2 \Delta x} \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \mathfrak{F}_k e^{-\frac{2\pi i k j}{N}}$$

とする。

フーリエ変換と逆フーリエ変換の形式は対称な構造を持っているが、離散フーリエ変換と離散逆フーリエ変換では、多くの場合に対称でない形式が使われる。(↔)

(補足 7.1.9.A) 非対称ソーラースリットの用いられる事情 (↔)

入射側ソーラースリットの開き角を $\Phi_{SS}^{(i)}$ 、回折側ソーラースリットの開き角を $\Phi_{SS}^{(d)}$ としたとき、観測される回折強度は $\Phi_{SS}^{(i)} \Phi_{SS}^{(d)}$ に比例し、ランダム配向した結晶粒が回折条件を見たと観測される回折強度に寄与する確率も $\Phi_{SS}^{(i)} \Phi_{SS}^{(d)}$ に比例する。観測される回折強度に現れる統計的誤差として (1) 観測される回折強度の平方根に比例する計数統計誤差と (2) 観測される回折強度に寄与する結晶粒の数の平方根の逆数に比例する粒子統計誤差 (標本化統計誤差) とが知られる。一方で軸発散収差によるピークシフトは近似的に $\Phi_{SS}^{(i)2} + \Phi_{SS}^{(d)2}$ に比例するので、統計誤差を増大させずに軸発散収差の影響を低減させるためには対称ソーラースリット配置 ($\Phi_{SS}^{(i)} = \Phi_{SS}^{(d)}$) が最適である。しかし、市販の粉末X線回折装置には、Rigaku MiniFlex 600-C のように、非対称にソーラースリットを配置するものが存在する。

ソーラー・スリット Soller slits は、一定の長さ・幅・厚さを持つ多くの金属薄板を等間隔に隔てながら配列させた構造を持つ (英語の表現では slits という複数形が用いられる)。このような幾何学的な構造を実現するためには、金属薄板を隔てながら固定するための「スペーサー」と呼ばれる直方体形状 (短冊状) の金属部品 (通常、外部から直接は視認しづらい位置に配置される) の工作精度を確保することが、極めて重要である。その一方で、この部品の数 (部品点数) は多くなるので、部品あたりのコスト削減が僅かなものであっても、総合的なコスト削減のために効果がある。

X線装置製造会社が、スペーサーを他社が商品として販売するものとして購入するとする。どの商品を選択するか判断するための基準となる主な事柄に、(1) 安価に購入できること、(2) 工作精度が保証されること、(3) 安定して供給を受け続けられることなどがある。

ソーラー・スリットに用いる金属薄板は、薄ければ薄いほど良い。現実に用いられる金属板が有限の厚さを持つことは「ただビームを遮るだけの意味しかない」面も持つ。一方で、金属薄板が薄すぎると「X線の透過する割合が増して、スリットとしての意味がなくなる」ことと「機械的な強度を確保することが困難になり、組立作業が困難になる」面がある。ある程度の厚みを持つ金属薄板を用いることを合理化するためには「間隔を広げれば良い」ことになる。また、間隔を広げても開き角を必要な範囲まで制限できるようにするためには「長くすれば良い」ことになる。

しかし、装置に組み込む光学部品が長大化すればするほど、ユーザーの利用できる作業空間 working space が狭くなり、駆動のために必要な動力も機構部品に必要なコストも増大する。ソーラー・スリットの設計は、X線発生部と検出器の占有する空間を避け、他の光学部品の占める空間も考慮し、「ユーザーになるべ

く広い作業空間を提供する」ことを動機として、「ギリギリの長さの設計」がされる。市販の粉末X線回折装置では、入射側と回折側に「異なる長さ」のソーラー・スリットの用いられる場合がある。

入射側と回折側で「異なる長さ」のソーラー・スリットを用いるのであれば、入射側と回折側で「異なる厚さ」のスペーサーを用いることが必然となる。

例えば、装置の入射側でソーラー・スリットの占有できる「長さ方向の寸法」が23 mm 程度だったとする。

この場合に0.5 mmの厚さの安定した品質のスペーサーを用いれば、開き角 $\Phi_{SS}^{(i)} = \frac{180^\circ}{\pi} \arctan \frac{0.5}{23} = 1.25^\circ$

を実現することができる。一方で、装置の回折側でソーラー・スリットの占有できる「長さ方向の寸法」が34 mm だったとする。この場合に、もし0.75 mmの厚さのスペーサーを利用できれば、開き角は $\Phi_{SS}^{(d)}$

$= \frac{180^\circ}{\pi} \arctan \frac{0.75}{34} = 1.26^\circ$ となる。しかし、「0.75 mm厚さのスペーサー」は、工業規格に合致する製品として販売されていない。

工業規格に合致する製品として販売される「0.7 mm厚さのスペーサー」を用いるとする。この場合回折側

ソーラー・スリット開き角は $\frac{180^\circ}{\pi} \arctan \frac{0.7}{34} = 1.18^\circ$ になってしまうが、そのことは現実には大きな問題にはならない。

例えば開き角 1.25° 設定の対称ソーラー・スリット設定を仮定して見掛け回折角 $2\Theta = 20^\circ$ 付近の回折ピーク

シフトを見積もるために、式(7.1.2.2)と $t = \tan \Theta = \tan \left(20^\circ \times \frac{\pi}{360^\circ} \right) = 0.1763$ を用いれば

$$\Delta 2\Theta = \left(\frac{180^\circ}{\pi} \right) \times \frac{1}{12} \left(1.25^\circ \times \frac{\pi}{180^\circ} \right)^2 \times \left(0.1763 - \frac{1}{0.1763} \right) \approx -0.0123^\circ$$

となる。

一方で入射側開き角 1.25° 、回折側開き角 1.18° の非対称ソーラー・スリット設定を前提として、見掛け回折角 $2\Theta = 20^\circ$ 付近の回折ピークシフトを見積もるために、式(7.1.2.1)を用いれば、

$$\Delta 2\Theta = \left(\frac{180^\circ}{\pi} \right) \times \frac{\left(1.25^\circ \times \frac{\pi}{180^\circ} \right)^2 + \left(1.18^\circ \times \frac{\pi}{180^\circ} \right)^2}{24} \times \left(0.1763 - \frac{1}{0.1763} \right) \approx -0.0117^\circ$$

となる。

これら2つの値のわずかな違い $0.0123^\circ - 0.0117^\circ = 0.0006^\circ$ を検知する実験技術や解析能力を持つ顧客が現実に出現することは「ありえないわけではない」のだろうが、確率はかなり低いと考えて良い。 (↔)

参考文献

Ida, T. (1998). "Formula for the asymmetric diffraction peak profiles based on double Soller slit geometry", *Rev. Sci. Instrum.* **69**, 2268–2272. [doi: [10.1063/1.1148930](https://doi.org/10.1063/1.1148930)]