2023 年 7 月 15 日 作成

測定日： 2025 年 7 月 10 日（担当：井田 隆）　　2025 年 7 月 17 日 更新

NIST SRM640d Si 標準粉末の回折測定と逆畳込的処理

※このドキュメントは相互参照型のハイパーテキストを意図しており，Web サイトおよびブックマーク，図表，数式，補足説明へのリンク（参照）を下線付き青文字で表し，（↩）の記号は初出の参照元へのリンクを表す。

1．はじめに

当研究室では 2019 年から市販の粉末X線回折装置 (Rigaku MiniFlex 600-C) に付属する計測制御ユーザ・インターフェス (Rigaku SmartLab Studio II) を利用してきたが，「リアルタイム 2θ 軸補正（角度補正）」と呼ばれる機能が有効化されていることに気がついていなかった。この機能は，NIST 標準 Si 粉末の 111 反射から 533 反射まで 11 本の回折ピークの実測ピーク位置が「理論値」と一致するように，強制的に実測のデータを加工するものである。しかし通常の測定条件では， Si は試料透過性収差のために実測ピーク位置が理論値より必ず低角側にずれるので，その方法（SmartLab Stidio II の角度補正機能）では，擬似ブラッグブレンターノ型回折装置の角度較正を実現することは不可能である。今後はこの機能を無効化して測定を行うこととした。

2．実験

2-1　試料

X線回折測定のための NIST SRM640d Si 試料は 2025 年 5 月 13 日に薄田真琴が調製した。NIST SRM640d 標準 Si 粉末は粉砕せずに，そのままガラス製試料ホルダに充填した。試料ホルダの試料充填部の容積は 0.240 mL であった。この容積は，試料ホルダに水を充填してガラス板で蓋をした状態でメトラー・トレド社の電子天秤 (XS205) により約 10 分間重量を計測し，経時的に指数函数的に変化する重量変化の収束予想値として求めた。試料ホルダに充填された試料の重量は 0.210 gであり，嵩密度は $\rho_{\mathrm{bulk}} = 0.877\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$，試料粉末の平均的な厚さは $t = 0.603\,\mathrm{mm}$，Cu$K\alpha$ X線に対する侵入深さは $\mu^{-1} = 0.179\,\mathrm{mm}$ と見積もられた。Si の計算密度は $\rho_{\mathrm{calc}} = 2.329\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$ であり，粉末の空間充填率は $\rho_{\mathrm{bulk}}/\rho_{\mathrm{calc}} = 0.377$ と見積もられた。ガラス製試料ホルダの密度は概ね $\rho' = 2.2\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$ であ

り，材質は硼珪酸塩ガラスと推測されたが，かりに化学組成を SiO_2 として見積もられる侵入深さは $\mu'^{-1} = 0.127\,\mathrm{mm}$ であった。硼珪酸塩ガラスは SiO_2 以外に Na, B などの元素も含むが，そのことを考慮してもX線侵入深さが大きく変わることはなく，従来の手法では試料ホルダの透過性がまったく無視されていても顕著な問題が認められていなかったことからも，試料ホルダの侵入深さの値の見積もりの正確でないことが深刻な問題を起こすことはないと予想される。計算シミュレーションの結果 (Ida, 2025) でも，試料ホルダの侵入深さの影響が解析結果に強い影響を与えるわけではないことが示されている。試料の赤道方向に沿った幅は $W = 20\,\mathrm{mm}$ であった。

2-2　X線回折測定

X線回折測定には半導体ストリップ型X線検出器 (Rigaku D/teX Ultra2) を装備したゴニオメータ半径 $R = 150\,\mathrm{mm}$ の「擬似ブラッグ・ブレンターノ型回折測定装置」 (Rigaku MiniFlex 600-C) を用いた。純銅ターゲットのX線源 (Canon Electron Tubes & Devices, A-21 Cu) を，加速電圧 40 kV，放電電流 15 mA で使用した。Cu$K\beta$ 線を減衰させるために厚さ 0.023 mm の Ni 箔フィルタを回折ビーム側の行路中に挿入した。

半導体ストリップ型X線検出器 (Rigaku D/teX Ultra2) の検出ストリップ間隔は 0.1 mm，本数は 128 本であり，検出器画角は $2\Psi = 4.89^\circ$ に相当する。

金属箔の間隔と長さの比の逆正接として定義されるソーラースリット角は，入射側が $\Phi_{\mathrm{SS}}^{(\mathrm{i})} = 1.25^\circ$，回折側が $\Phi_{\mathrm{SS}}^{(\mathrm{d})} = 1.18^\circ$ であった。

発散スリットとしては開き角 $\Phi_{\mathrm{DS}} = 0.625^\circ$ のものを用いた。

ユーザインターフェス (Rigaku SmartLab Studio II) を介して「見かけ回折角」
$4.38^\circ - 142.47^\circ$ の範囲にわたって，角速度 $10^\circ/\mathrm{min}$，標本点間隔 0.01° の連続走査積算測定を行った。この際に，ユーザ・インターフェス (SmartLab Studio II) に備えられた角度補正機能は無効化してデータの収集を行った。10 回の走査によって得られたX線回折強度データを積算して用いた。

2-3　逆畳込的処理

前節に記した方法で収集された粉末回折データに対して，当研究室で開発された逆畳込的処理ソフトウェア exterm6.4 を用いて，逆畳込的処理 (deconvolutional treatment) を適用した。

X線源分光強度分布の影響の逆畳込処理では既往の報告 (Deutsch et al., 2004) に従い Cu$K\alpha_1$ ピーク主成分を相対半値全幅 $\Delta\lambda/\lambda = 0.000284$ のローレンツ型函数としたが，逆畳込による Cu$K\alpha_2$ ピークおよび Cu$K\alpha_1$ ピーク副成分の除去の際に導入される統計誤差の影響を抑制するため，畳込処理では Cu$K\alpha_1$ ピークを相対半値全幅 $\Delta\lambda/\lambda = 0.00035$ のローレンツ型函数とした。

ゴニオメータ半径を R，試料の赤道方向に沿った幅を W，試料の平均的な厚さを t，発散スリットの開き角を Φ_{DS}，半導体ストリップ型X線検出器の画角を 2Ψ，試料の線減衰係数を μ，試料ホルダの線減衰係数を μ' とする。

擬似 Bragg-Brentano 型の粉末回折測定装置の連続走査積算測定によって得られる強度データについて赤道・透過性収差函数の ν 階冪平均 s_ν を，標本点数 $n_z \times n_\psi \times n_\phi$ の中点法 (mid-point method) による数値積分で求めるために，以下の数式を用いた。

$$s_\nu \approx \frac{1}{n_\psi n_z n_\phi \Phi_{\mathrm{DS}}} \left[1 - \exp\left(-\frac{2\mu t}{\sin\Theta}\right)\right] \sum_{i=1}^{n_\psi} \left(\phi_i^{(\mathrm{U})} - \phi_i^{(\mathrm{L})}\right) \sum_{j=1}^{n_z} \frac{1}{u_j} \sum_{k=1}^{n_\phi} f_{ijk}^{\nu}\, g_{ijk} \tag{2.3.1}$$

ここで $\phi_i^{(\mathrm{L})}$ と $\phi_i^{(\mathrm{U})}$ は入射ビームの赤道方向ずれ角 ϕ の取りうる角度の下限 (lower limit) と上限 (upper limit) を意味する。反射位置深さ $-z_j$ に対して $u_j = \exp(2\mu z_j/\sin\Theta)$ とする。f_{ijk} は，「見かけ回折角」 2Θ と「真の回折角」 $2\theta_{ijk}$ との差を意味し，g_{ijk} は相対強度に相当する値を意味する。これらの値は以下の一連の式を用いて計算した。

$$\phi_i^{(\mathrm{L})} = \max\left\{-\frac{\Phi_{\mathrm{DS}}}{2}, \Theta_{\mathrm{G},i} - \arctan\frac{\sin\Theta_{\mathrm{G},i} + t/R}{\cos\Theta_{\mathrm{G},i} - W/2R}\right\} \tag{2.3.2}$$

$$\phi_i^{(\mathrm{U})} = \min\left\{\frac{\Phi_{\mathrm{DS}}}{2}, \Theta_{\mathrm{G},i} - \arctan\frac{\sin\Theta_{\mathrm{G},i}}{\cos\Theta_{\mathrm{G},i} + W/2R}\right\} \tag{2.3.3}$$

$$f_{ijk} = 2\Theta - 2\theta_{ijk} \tag{2.3.4}$$

$$g_{ijk} = \begin{cases} \exp\left(-\mu l_{ijk} - \mu' l'_{ijk}\right) & \left[\left(|x_{ijk}^{(\mathrm{r})}| \le \frac{W}{2}\right) \wedge \left(\Phi_{\mathrm{DS}} < 2\Theta_{\mathrm{G},i}\right) \wedge \left(0 < \Theta^{(\mathrm{e})}\right)\right] \\ 0 & [\text{otherwise}] \end{cases} \tag{2.3.5}$$

$$l_{ijk} = l_{ijk}^{(\mathrm{i})} + l_{ijk}^{(\mathrm{e})} \tag{2.3.6}$$

$$l'_{ijk} = l'^{(\mathrm{i})}_{ik} + l'^{(\mathrm{e})}_{ijk} \tag{2.3.7}$$

$$2\Theta_{\mathrm{G},i} = 2\Theta - 2\psi_i \tag{2.3.8}$$

$$2\theta_{ijk} = \Theta_{ik}^{(\mathrm{i})} + \Theta_{ijk}^{(\mathrm{e})} \tag{2.3.9}$$

$$\Theta_{ik}^{(\mathrm{i})} = \Theta_{\mathrm{G},i} - \phi_{ik} \tag{2.3.10}$$

$$\Theta_{ijk}^{(\mathrm{e})} = \arctan \frac{z_i^{(\mathrm{d})} - z_j}{x_i^{(\mathrm{d})} - x_{ijk}^{(\mathrm{r})}} \tag{2.3.11}$$

$$x_{ik}^{(\mathrm{i})} = R \left(\frac{\sin \Theta_{\mathrm{G},i}}{\tan \Theta_{ik}^{(\mathrm{i})}} - \cos \Theta_{\mathrm{G},i} \right) \tag{2.3.12}$$

$$x_{ijk}^{(\mathrm{r})} = - \frac{z_j}{\tan \Theta_{ik}^{(\mathrm{i})}} \tag{2.3.13}$$

$$x_i^{(\mathrm{d})} = R \left(\cos \Theta_{\mathrm{G},i} - \sin \Theta_{\mathrm{G},i} \tan 2\psi_i \right) \tag{2.3.14}$$

$$z_i^{(\mathrm{d})} = R \left(\sin \Theta_{\mathrm{G},i} + \cos \Theta_{\mathrm{G},i} \tan 2\psi_i \right) \tag{2/3.15}$$

$$x_{ijk}^{(\mathrm{e})} = x_{ijk}^{(\mathrm{r})} - \frac{z_{ij}}{\tan \Theta_{ijk}^{(\mathrm{e})}} \tag{2.3.16}$$

$$l_{ik}^{\prime(\mathrm{i})} = \begin{cases} 0 & \left[-W/2 \leq x_{ik}^{(\mathrm{i})} \right] \\ \left(-W/2 - x_{ik}^{(\mathrm{i})} \right) / \cos \Theta_{ik}^{(\mathrm{i})} & \left[x_{ik}^{(\mathrm{i})} < -W/2 \right] \end{cases} \tag{2.3.17}$$

$$l_{ijk}^{(\mathrm{i})} = \begin{cases} -z_j / \sin \Theta^{(\mathrm{i})} & \left[-W/2 \leq x_{ik}^{(\mathrm{i})} \right] \\ \left(x_{ijk}^{(\mathrm{r})} + W/2 \right) / \cos \Theta^{(\mathrm{i})} & \left[x_{ik}^{(\mathrm{i})} < -W/2 \right] \end{cases} \tag{2.3.18}$$

$$l_{ijk}^{\prime(\mathrm{e})} = \begin{cases} 0 & \left[x_{ijk}^{(\mathrm{e})} \leq W/2 \right] \\ \left(x_{ijk}^{(\mathrm{e})} - W/2 \right) / \cos \Theta_{ijk}^{(\mathrm{e})} & \left[W/2 < x_{ijk}^{(\mathrm{e})} \right] \end{cases} \tag{2.3.19}$$

$$l_{ijk}^{(\mathrm{e})} = \begin{cases} -z_j / \sin \Theta_{ijk}^{(\mathrm{e})} & \left[x_{ijk}^{(\mathrm{e})} \leq W/2 \right] \\ \left(W/2 - x_{ijk}^{(\mathrm{r})} \right) / \cos \Theta_{ijk}^{(\mathrm{e})} & \left[W/2 < x_{ijk}^{(\mathrm{e})} \right] \end{cases} \tag{2.3.20}$$

$$\psi_i = -\frac{\Psi}{2} + \frac{i - 1/2}{n_\psi} \Psi \tag{2.3.21}$$

$$z_j = \frac{\sin \Theta}{2\mu} \ln u_j \tag{2.3.22}$$

$$u_j = \exp \left(-\frac{2\mu t}{\sin \Theta} \right) + \frac{j - 1/2}{n_z} \left[1 - \exp \left(-\frac{2\mu t}{\sin \Theta} \right) \right] \tag{2.3.23}$$

$$\phi_{ik} = \phi_i^{(\mathrm{L})} + \frac{k - 1/2}{n_\phi} \left(\phi_i^{(\mathrm{U})} - \phi_i^{(\mathrm{L})} \right) \tag{2.3.24}$$

これ以外の点については，すでに報告した方法 (Ida, 2025) と同様の方法を用いた。

連続走査積算測定の赤道透過性収差の 1 階から 4 階のキュムラント，$\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4$ を

$$\kappa_1 = \frac{s_1}{s_0} \tag{2.3.25}$$

$$\kappa_2 = \frac{s_2}{s_0} - \frac{s_1^2}{s_0^2} \tag{2.3.26}$$

$$\kappa_3 = \frac{s_3}{s_0} - \frac{3s_2s_1}{s_0^2} + \frac{2s_1^3}{s_0^3} \tag{2.3.27}$$

$$\kappa_4 = \frac{s_4}{s_0} - \frac{4s_3s_1}{s_0^2} - \frac{3s_2^2}{s_0^2} + \frac{12s_2s_1^2}{s_0^3} - \frac{6s_1^4}{s_0^4} \tag{2.3.28}$$

として計算した。

連続走査積算測定の赤道透過性収差についての逆畳込的処理のためのモデル装置函数としては，以下の式で定義される裁断指数函数 (truncated exponential function) $f_{\exp}(x)$ を用いた。

$$f_{\exp}(x) \equiv \begin{cases} \mathrm{e}^x & [x < 0] \\ 0 & [0 \leq x] \end{cases} \tag{2.3.29}$$

連続走査積算測定の赤道透過性収差の３階キュムラントを無効化する逆畳込的処理のために，以下の数式で表される尺度変換を用いた。

$$\chi_3 = -2^{1/3} \int \frac{\mathrm{d}2\Theta}{\kappa_3^{(1/3)}} \tag{2.3.30}$$

ただし，$\kappa_3^{(1/3)}$ は以下の数式で定義される還元３階キュムラント (reduced 3rd order cumulant) を表す。

$$\kappa_3^{(1/3)} \equiv \mathrm{sign}(\kappa_3)\,|\,\kappa_3\,|^{1/3} \tag{2.3.31}$$

ここで $\mathrm{sign}(x)$ は符号函数 (signal function) と呼ばれる函数であり，以下の式で定義される。

$$\mathrm{sign}(x) \equiv \begin{cases} 1 & [x > 0] \\ 0 & [x = 0] \\ -1 & [x < 0] \end{cases} \tag{2.3.32}$$

尺度 χ_3 上で裁断指数函数について逆畳込的処理を施した。

このとき，ピーク位置の平均シフトに相当する１階キュムラント κ_1 の影響のかなりの部分も無効化されるが，以下の式で表される $\Delta\kappa_1(2\Theta)$ の分が残される。

$$\Delta\kappa_1(2\Theta) = \kappa_1(2\Theta) - \int \frac{\mathrm{d}2\Theta}{\kappa_1(2\Theta)} \tag{2.3.33}$$

残された１階キュムラントの影響を修正するために，３階キュムラント無効化処理後のデータ $\{2\Theta_i, Y_i\}$ に対して $2\Theta_i' \leftarrow 2\Theta_i - \Delta\kappa_1(2\Theta_i)$ の変換により得られる $\{2\Theta_i', Y_i\}$ のデータに対する補間処理によって $\{2\Theta_i, Y_i'\}$ データを作成し，以下の解析に用いた。

2-4　個別ピーク形状あてはめ

Si の 111, 220, 311, 400, 331, 422, 511/333, 440, 531, 620, 533 反射の 11 反射について，NIST SRM640d の保証書に記載されるピーク位置の ±1° の範囲のデータを抽出し，個別ピーク形状あてはめ (individual peak profile fitting) を行った。

ピーク形状モデルとしては，以下の数式で表される函数を用いた。

$$f_{\mathrm{fit}}(x; b, I, x_0, \sigma, w) = b + I\, f_{\mathrm{Voigt}}(x - x_0; \sigma, w) \tag{2.4.1}$$

ここで b は定数背景強度 (constant background)，I はピーク積分強度 (integrated intensity)，x_0 はピーク位置である。Voigt（フォークト） 函数 (Voigt function) $f_{\mathrm{Voigt}}(x; \sigma, w)$ は以下のように定義される。

$$f_{\mathrm{Voigt}}(x; \sigma, w) \equiv f_{\mathrm{Gauss}}(x; \sigma) * f_{\mathrm{Lorentz}}(x; w) \tag{2.4.2}$$

$$f_{\mathrm{Gauss}}(x; \sigma) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \tag{2.4.3}$$

$$f_{\mathrm{Lorentz}}(x; w) \equiv \frac{1}{\pi w}\left(1 + \frac{x^2}{w^2}\right)^{-1} \tag{2.4.4}$$

函数 $f_{\mathrm{Gauss}}(x; \sigma)$ は，平均 0，標準偏差 σ の正規分布（標準正規分布）の確率密度函数（ガウス型函数; Gaussian function）を表し，函数 $f_{\mathrm{Lorentz}}(x; w)$ は，ピーク位置 0，半値半幅 w のコーシー分布 (Cauchy distribution) の確率密度函数（ローレンツ型函数; Lorentzian function）を表す。

3．結果

3-1　逆畳込的処理の結果

逆畳込的処理前後の回折強度図形を Figure 3.1.1 に示す。

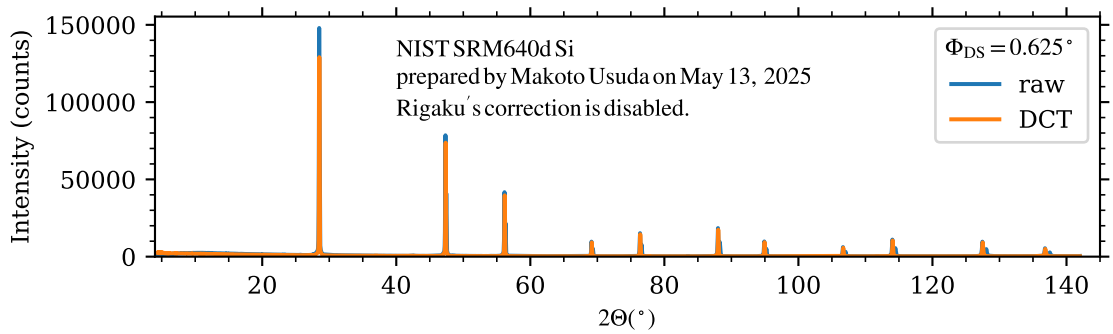

Figure 3.1.1 逆畳込的処理前後の回折強度図形。処理前のデータを raw，処理後のデータを DCT として示す。

Figure 3.1.1 では，逆畳込的処理後に特に低角のピーク強度の低下が見られるが，これは主に Cu$K\alpha_2$ ピークが除去されていることによる。

比較的高角の領域の回折強度図形の変化を Figure 3.1.2 に示す。

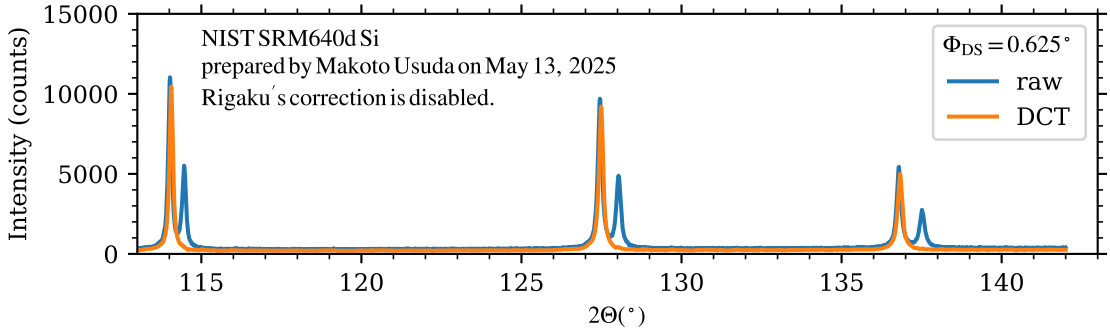

Figure 3.1.2　逆畳込的処理による高角の領域の回折強度値の変化

Figure 3.1.2 は逆畳込的処理により Cu$K\alpha_2$ 副ピークが選択的に除去されていることを示す。Cu$K\alpha_1$ ピーク強度もわずかに低下しているが，やや線幅の広いローレンツ型函数を畳み込んだことによると推測される。また逆畳込的処理後にわずかに Cu$K\alpha_1$ ピークが高角側にシフトしているが，これは試料の透過性により低角側にシフトしていたピーク位置が逆畳込的処理により修正されることによる。

低角領域での回折強度図形の変化を Figure 3.1.3 に示す。

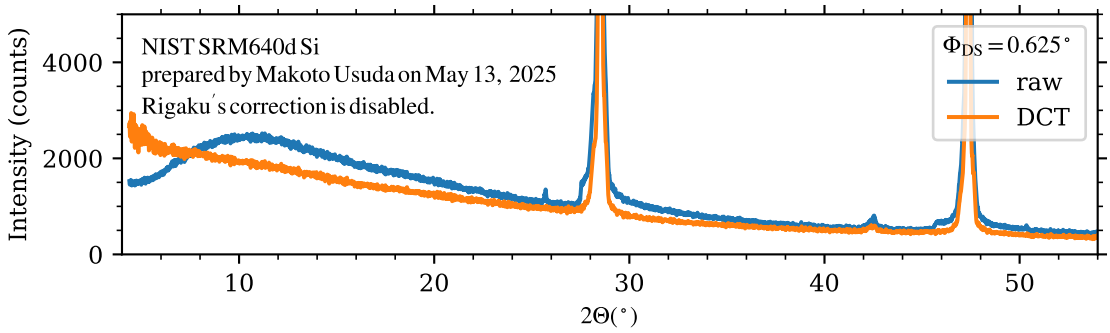

Figure 3.1.3 逆畳込的処理による比較的低角領域での回折強度図形の変化

逆畳込的処理前のデータでは 10° 付近から低角側へ向けてゆるく強度が低下しているが，これは主にはみ出し効果によるものと考えられる。逆畳込的処理ソフトウェア exterm6.4 にははみ出し効果によって喪失された強度を自動復元する機能を搭載したが，確かに処理後のデータでは背景強度が単調に変化する挙動を示しており，喪失強度自動復元機能も良好に作動しているように思われる。

Figure 3.1.3 から，25.8° 付近の Cu$K\beta$(111) ピークと 27.6° 付近の NiK-吸収端 (111) 構造，45.8° 付近の NiK-吸収端 (220) 構造は効果的に除去されていることが確認できる。42.6°

付近の Cu$K\beta$(220) ピークも減衰しているが，やや幅の広いピークが残されているように見える。

逆畳込的処理前のデータでは 10° 付近から低角側へ向けてゆるく強度が低下しているが，これは主にはみ出し効果によるものと考えられる exterm6.4 にははみ出し効果によって喪失された強度を自動復元する機能を搭載したが，確かに処理後のデータでは単調に変化する

3-2　個別ピーク形状分析の結果

逆畳込的処理後のデータから NIST SRM640d の保証書に記載されたピーク位置の ±1° の範囲のデータを抽出し個別ピーク形状分析を行った結果のうち，111, 422, 533-反射の回折強度図形をそれぞれ Figure 3.2.1, Figure 3.2.2, Figure 3.2.3 に示す。

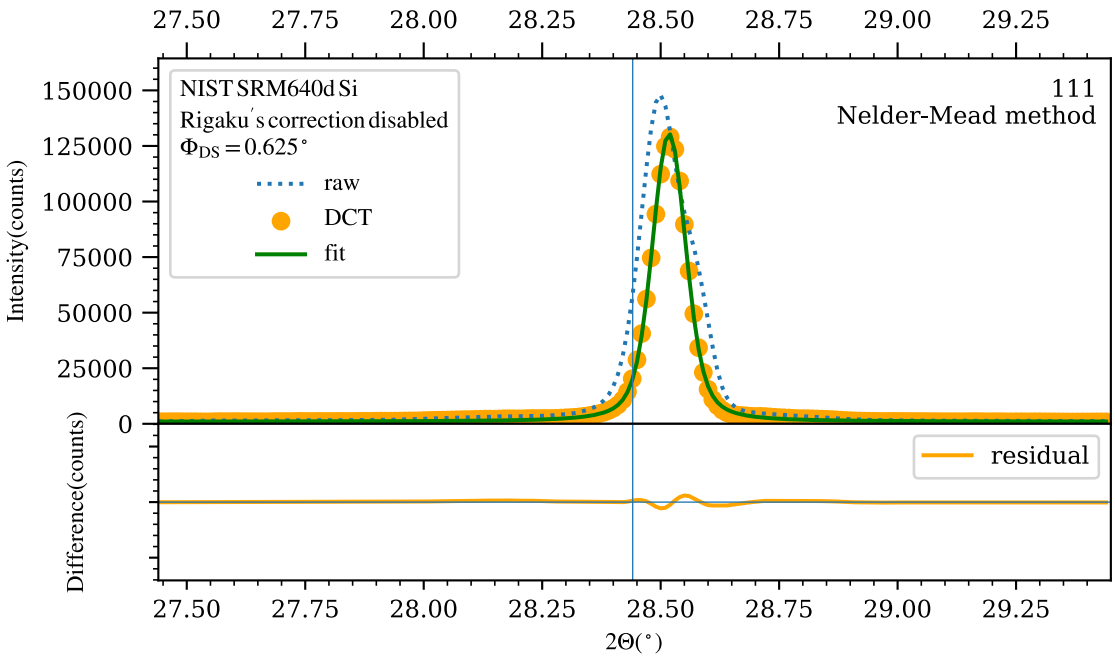

Figure 3.2.1 Si 111-反射に対する個別ピーク形状当てはめの結果。垂直線は NIST SRM640d 保証書に記載されたピーク位置を示す。

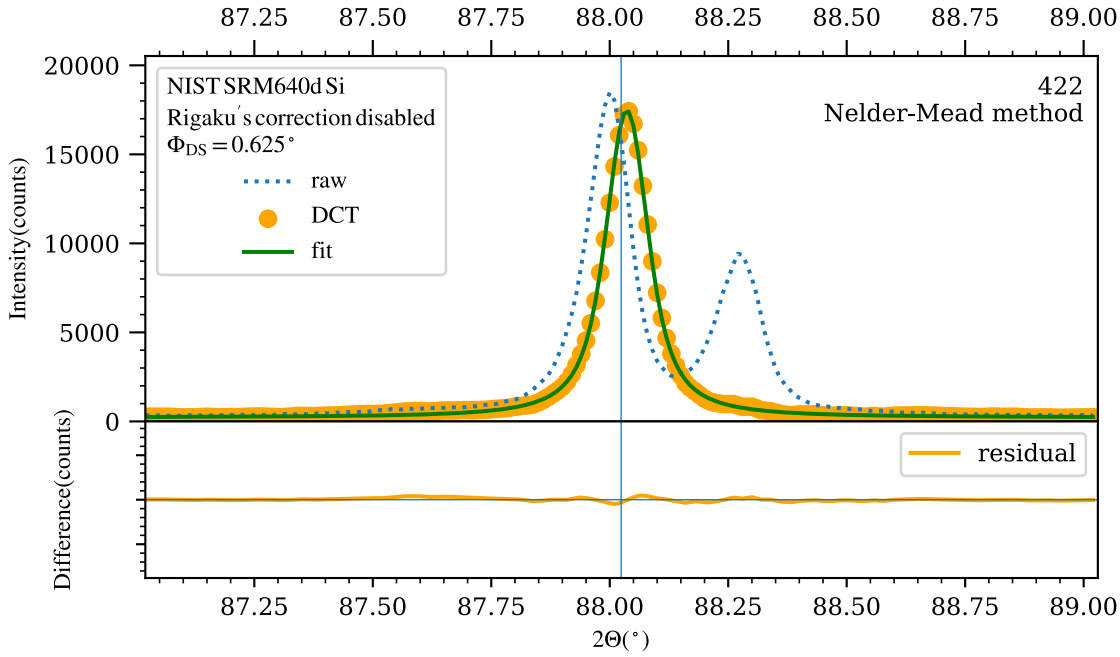

Figure 3.2.2 Si 422-反射に対する個別ピーク形状当てはめの結果。垂直線は NIST SRM640d 保証書に記載されたピーク位置を示す。

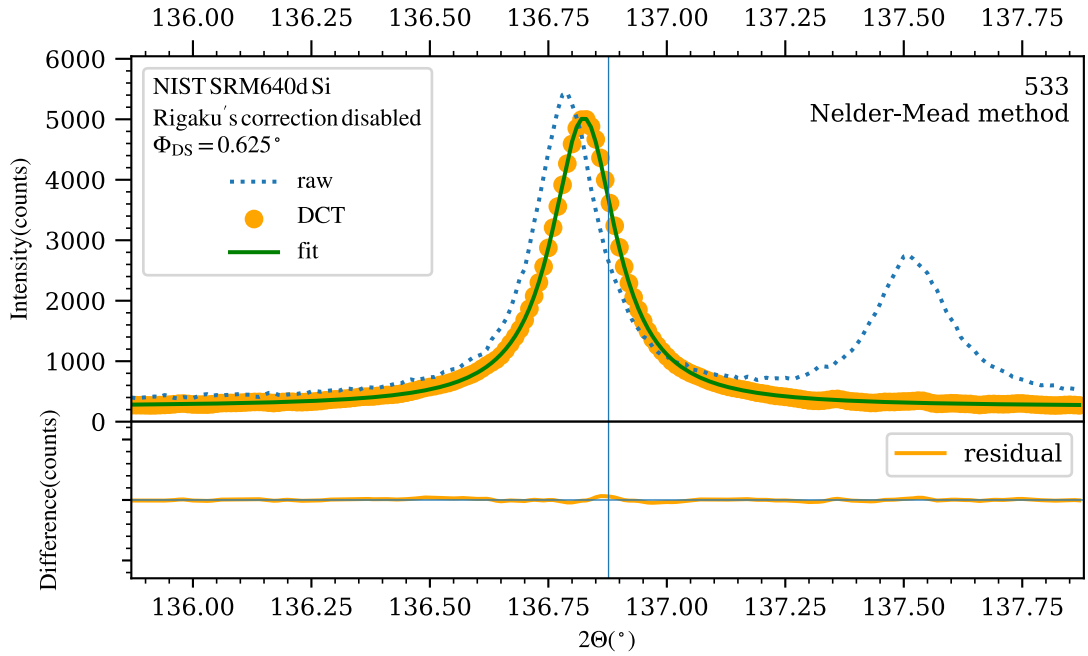

Figure 3.2.3 Si 533-反射に対する個別ピーク形状当てはめの結果。垂直線は NIST SRM640d 保証書に記載されたピーク位置を示す。

111, 422, 533 反射に共通して逆畳込的処理後のピーク形状は左右対称なフォークト函数で概ね再現されているが，111, 533 反射のピーク位置は保証書記載値から無視できないずれを示している。

Si の 11 本のピークについて，最適化されたピーク位置の保証書記載値からのずれ $\Delta 2\Theta$ の回折角依存生に対して，以下の式で表される素朴ピークシフトモデルをあてはめた。

$$\Delta 2\Theta = \Delta 2\Theta_0 + \frac{2\Delta S \cos\Theta}{R} \tag{3.2.1}$$

ただし $\Delta 2\Theta_0$ は 2Θ 軸のオフセット誤差，ΔS は試料位置の法線方向へのずれを表す。

Figure 3.2.4 に観測された角度のずれに素朴ピークシフトモデルをあてはめた結果を示す。最適化されたパラメータの値は $\Delta 2\Theta_0 = -0.156^\circ$，$\Delta S = 0.315\,\mathrm{mm}$ となった。

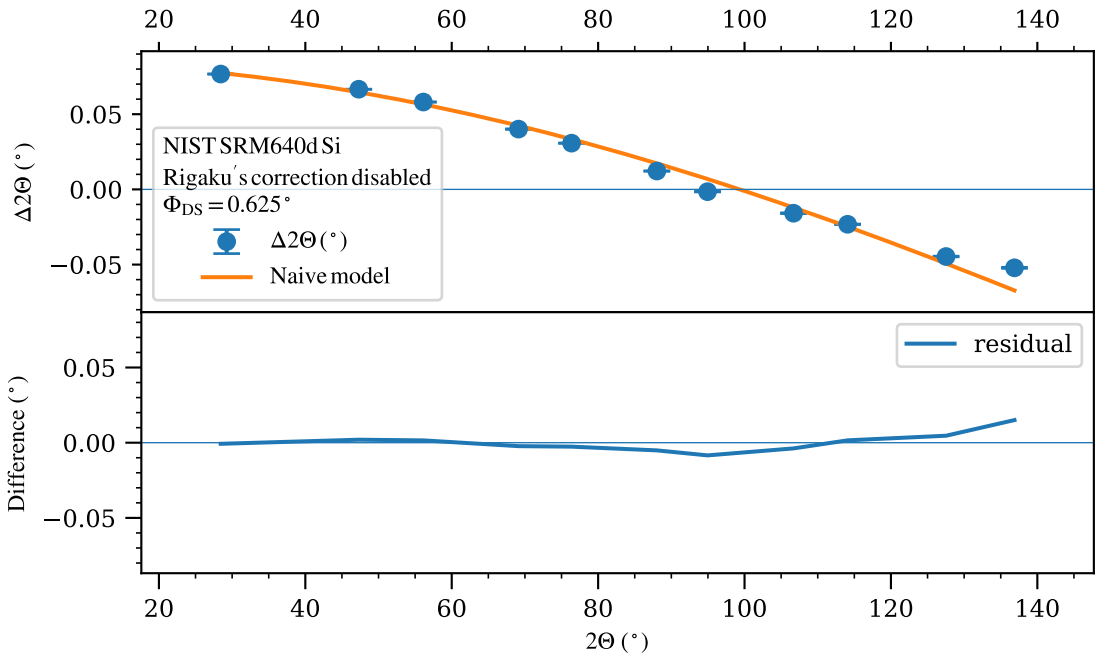

Figure 3.2.4 NIST SRM 640d Si, 逆畳込的処理後データのピーク位置ずれ $\Delta 2\Theta$の回折角依存性に対する素朴ピークシフトモデルの当て嵌め解析結果（↩）

4．考察

最適化されたオフセット誤差の値 $\Delta 2\Theta_0 = -0.156^\circ$ も試料の位置ずれの値 $\Delta S = 0.315\,\mathrm{mm}$ もやや非常識に大きい。

Figure 4.1 に試料位置に蛍光板を設置して撮影した写真と，蛍光板と装置の基準面との間に 0.3 mm 厚さのスペーサを挿入して撮影した写真を示す。鮮明な画像ではないが，確かに装置の基準面の位置が本来あるべき位置から 0.3 mm 程度ずれていることを示唆する結果となった。

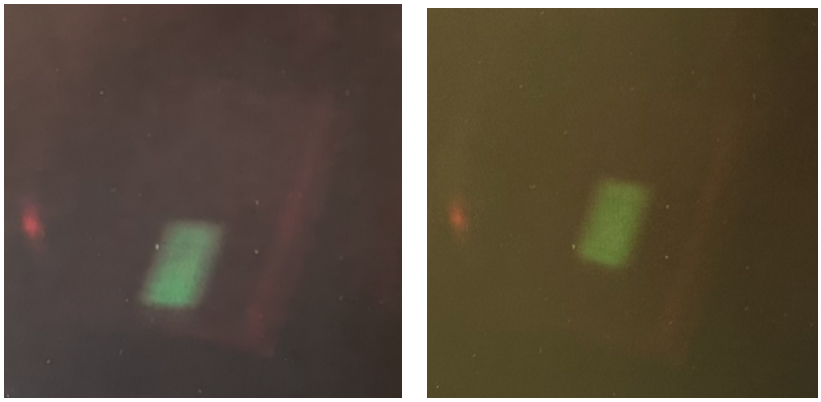

Figure 4.1 試料台に蛍光板を設置して撮影された画像（左）と試料台と蛍光板の間に 0.3 mm 厚さのスペーサを挿入して撮影された画像（右）。いずれも画面の中心が試料の中心と概ね一致するとみてよい。

ただし試料表面位置がゴニオメータ回転軸から 0.3 mm ずれた位置にあると言うのは，やや非常識な状況であり，伝統的な粉末回折データ処理ソフトウェアも，逆畳込的処理ソフトウェア exterm6.4 も前提としている赤道透過性収差に関する幾何学的な前提がそもそも成立しなくなる可能性がある。

現実的な運用のしかたとして，試料台の基準面と試料ホルダの間に 0.3 mm 厚さのスペーサを挟み込んだ状態で測定を行うことが考えられる。そのようにすれば式 (3.2.1) の右辺第２項の影響（試料位置ずれ効果）が軽減され，伝統的な粉末回折データ処理ソフトウェアも，逆畳込的処理ソフトウェア exterm6.4 も有効に利用しうることが期待される。

参考文献

Deutsch, M., Förster, E., Hölzer, G., Härtwig, J., Hämäläinen, K., Kao, C.-C., Huotari, S., & Diamant, R. (**2004**). “X-Ray Spectrometry of Copper: New Results on an Old Subject”, Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology, **109**(1), 75–98. DOI: https://doi.org/10.6028/jres.006 . (↩)

Ida, T. (**2025**). “Deconvolutional treatment about sample transparency aberration interfered by opaque and translucent sample holders in Bragg-Brentano geometry”, Powder Diffraction, **40**, 105–991. DOI: https://doi.org/10.1017/S088571562500003X. (↩)