

粉末回折ピーク形状の「尖り度」を特徴づける新しいパラメータ

井田 隆

名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター

〒 507-0071 岐阜県多治見市旭ヶ丘 10-6-29

New parameters to specify the sharpness of powder diffraction peak profiles

Takashi Ida

Ceramics Research Laboratory, Nagoya Institute of Technology

Asahigaoka 10-6-29, Tajimi 507-0071 Japan

New parameters to specify the sharpness of symmetric powder diffraction peak profiles are proposed. The parameters are defined through the ν -th order moment of the Fourier transform of the profile function. The exact solutions about typical model profile functions and theoretical size-broadening profile with statistical size-distribution are presented. Examination of the difference between the theoretical size-broadening profile and the Lorentzian function with the common sharpness parameters suggests that the order of $\nu = -1/2$ is suitable to approximate the size-broadening profile with alternative model functions.

[Received January 31, 2007; Accepted March 9, 2007]

1. はじめに

粉末回折ピークの形状は、重要性の高い順に以下の特性: (i) 「積分強度」, (ii) 「ピークの位置」, (iii) 「線幅」, (iv) 「非対称性」, (v) 「尖り度」によって特徴づけられる。結晶学的な平均構造（結晶構造）を決定するために必要なデータは各回折線の積分強度だけであるが、単位胞（単位格子）の寸法を決めるためにはピークの位置に関する情報が重要である。回折線幅（半値幅あるいは積分幅など）は、構造の周期性がどの程度の距離にわたって保たれているか（可干渉性）という情報を含む。回折ピーク形状の非対称性は、多くの場合に主に測定装置の特性に由来するものである。

ピーク形状の「尖り度」は、線幅とは独立な特徴であり、単峰性のピーク形状の場合には、頂上付近の形状が鋭く、裾が広がっているほど尖り度が高いとみなされる。微結晶集合体からの粉末回折ピーク形状は、粒径分布が広いほど尖り度の高いものになることが経験的に知られており (Plévert & Louër, 1990), 理論的にもそれが裏付けられている (Langford *et al.*, 2000)。したがって、観測された回折ピーク形状の尖り度から、結晶粒径分布の広がりに関する情報が得られることが期待される。

実測の回折ピーク形状は装置の影響を受けて本来の回折ピーク形状から変形しているが、実験室型の粉末回折

計や軌道放射光粉末回折計でどのようにピーク形状が変形するかについては最近研究が進み、装置の影響を畳み込んだピーク形状モデルを用いたあてはめ計算 (Ida & Kimura 1999) や、フーリエ変換を用いたデコンボリューション法 (Ida & Toraya, 2000) を適用することにより装置の影響を補正することができるようになってきた。

一般的に、ピーク形状関数の4次のキュムラント（あるいはモーメント）が求められる場合には、数学的に明確に定義される「尖度」kurtosisによって形状の尖り具合を表すことができる。しかし、実際に観測される回折ピーク形状は一般にローレンツ Lorentz 型関数（コーシー Cauchy 分布関数）を成分として含み、この場合には1次以上のキュムラントを定義することができない。したがって実測の回折ピーク形状の尖り具合を特徴づけるためには kurtosis と異なる尺度が必要となる。本稿では尖り具合を表すことができる任意のパラメータを「尖り度」と呼ぶことにする。

粉末回折ピーク形状の尖り度を特徴づけるパラメータとして既にいくつかの形式が提案されてきた。Langford ら (2000) は積分幅 B と半値全幅 W の比 (B/W) を「尖り度を特徴づけるパラメータ」として提案している。ここで積分幅はピーク形状の面積をピーク強度で割った値として定義される。筆者は、粒径分布評価を目的とした場合に有効な「フーリエ初期勾配」 A と積分幅の比 (A/B)

を尖り度パラメータとして提案した (Ida *et al.*, 2003)。しかし, Sánchez-Bajo ら (2006) は, A/B によってピーク形状を特徴づける方法では, 近似関数を用いた結晶粒径評価の際に系統的なずれが生じる場合があることを指摘している。

尖り度を表すために, どのようなパラメータを用いるのが適切であるかについて, 現時点では明確にされていない。本稿では, 左右対称なピーク形状モデル関数の尖り具合を特徴づけるために著者が考案した新しいパラメータを紹介し, 今までに提案されたパラメータと比較する。この新しいパラメータは, 結晶粒径の統計分布を考慮した理論回折ピーク形状に対しても, 経験的なピーク形状モデル関数に対しても容易に評価できる特徴があり, 理論回折ピーク形状を計算の容易なモデル関数で近似する場合に便利である。

2. 尖り度パラメータ

原点に位置し, 規格化された左右対称なピーク形状関数 $f(k)$ について考える。つまり, 以下の関係が満たされるとする。

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(k) dk = 1 \quad (1)$$

$$f(k) = f(-k) \quad (2)$$

この場合, フーリエ変換:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(k) \exp(2\pi i k x) dk \quad (3)$$

は, やはり左右対称な実関数となる。フーリエ初期勾配 A と積分幅 B は以下の式:

$$A \equiv \lim_{x \rightarrow 0} \left| \frac{\partial F(x)}{\partial x} \right| \quad (4)$$

$$B \equiv \frac{1}{f(0)} = \left[\int_{-\infty}^{\infty} F(x) dx \right]^{-1} \quad (5)$$

で定義され, いずれもピークの幅に比例する。

以下の式で, ピークの幅に比例する別のパラメータ C_ν を定義することができる。

$$C_\nu \equiv \left[B \int_{-\infty}^{\infty} |x|^\nu F(x) dx \right]^{-1/\nu} \quad [\nu \neq 0] \quad (6)$$

$$\begin{aligned} C_0 &\equiv \lim_{\nu \rightarrow 0} \left[B \int_{-\infty}^{\infty} |x|^\nu F(x) dx \right]^{-1/\nu} \\ &= \exp \left[-B \int_{-\infty}^{\infty} F(x) \ln |x| dx \right] \end{aligned} \quad (7)$$

この線幅パラメータは, 特に $\nu = 2$ の場合に, ピーク形状関数 $f(k)$ の原点での曲率 $f''(0)$ と以下の式で関係づけることができる。

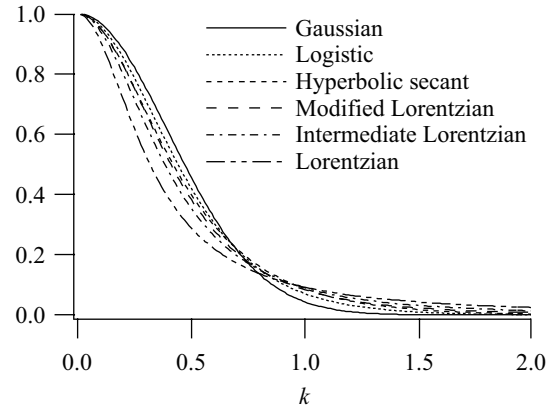


Fig. 1 Profiles of the Gaussian, logistic distribution, hyperbolic secant, modified Lorentzian, intermediate Lorentzian and Lorentzian functions.

$$\frac{1}{C_2^2} = -\frac{Bf''(0)}{4\pi^2} \quad (8)$$

定義の異なる線幅パラメータの比, B/W あるいは A/B によって尖り度を表すことができるのと同様に, B/C_ν も尖り度を表すパラメータとなる。

3. 初等的なピーク形状関数の尖り度

この節では, 6種類の初等的なピーク形状関数: ガウス型, ロジスティック分布, 双曲正割, 修正ローレンツ型, 中間ローレンツ型, ローレンツ型関数の尖り度を比較する。後述するように, この一連の関数は, 見た目での順に尖り度が増す傾向がある。

3.1 ガウス型関数

積分幅 B_G のガウス型 Gaussian 関数 (正規分布関数) $f_G(k; B_G)$ とそのフーリエ変換 $F_G(x; B_G)$ は以下の式で表される。

$$f_G(k; B_G) = \frac{1}{B_G} \exp\left(-\frac{\pi k^2}{B_G^2}\right) \quad (9)$$

$$F_G(x; B_G) = \exp\left(-\pi B_G^2 x^2\right) \quad (10)$$

関数 $f_G(k; B_G)$ の尖り度パラメータは以下の値をとる。

$$\left(\frac{B}{W}\right)_G = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\ln 2}} = 1.06447 \quad (11)$$

$$\left(\frac{A}{B}\right)_G = 0 \quad (12)$$

$$\left(\frac{B}{C_\nu}\right)_G = \frac{1}{\pi^{(1+1/\nu)/2}} \left[\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right) \right]^{1/\nu} \quad (13)$$

ここで $\Gamma(x)$ は以下の式で定義されるガンマ関数である。

Table 1 Relative values of sharpness parameters for Gaussian, logistic distribution, hyperbolic secant, modified Lorentzian, intermediate Lorentzian and Lorentzian functions.

Function	B/W	A/B	$B/C_{-1/2}$	B/C_0	$B/C_{1/2}$	B/C_1	B/C_2
Gaussian	0.67766	0	0.85721	0.75295	0.68673	0.63662	0.56419
Logistic distribution	0.72230	0	0.86518	0.78500	0.73069	0.69106	0.63662
Hyperbolic secant	0.75933	0	0.88087	0.81385	0.77132	0.74245	0.70711
Modified Lorentzian	0.77688	0	0.88889	0.82436	0.78125	0.75	0.70711
Intermediate Lorentzian	0.83069	0	0.91389	0.86526	0.83337	0.81057	0.77970
Lorentzian	1	1	1	1	1	1	1

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} \exp(-t) dt \quad (14)$$

特に、 $\nu = 1/2, 0, 1/2, 1, 2$ の場合、尖り度パラメータは以下の値をとる。

$$\left(\frac{B}{C_{-1/2}}\right)_G = \frac{\sqrt{\pi}}{[\Gamma(1/4)]^2} = 0.134838$$

$$\left(\frac{B}{C_0}\right)_G = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{\gamma}{2}\right) = 0.211375$$

$$\left(\frac{B}{C_{1/2}}\right)_G = \frac{[\Gamma(3/4)]^2}{\pi^{3/2}} = 0.269676$$

$$\left(\frac{B}{C_1}\right)_G = \frac{1}{\pi} = 0.318310$$

$$\left(\frac{B}{C_2}\right)_G = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} = 0.398942$$

ここで γ はオイラー Euler の定数であり、以下の式で定義される。

$$\begin{aligned} \gamma &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{j} - \ln n \right) \\ &= 0.57721566490153286060 \dots \end{aligned} \quad (15)$$

3.2 ロジスティック分布関数

ロジスティック logistic 分布関数は、双曲正割 hyperbolic secant 関数の二乗と等価であり、積分幅 B_{SH2} の規格化された形式が

$$f_{SH2}(k; B_{SH2}) = \frac{1}{B_{SH2}} \operatorname{sech}^2 \frac{2k}{B_{SH2}} \quad (16)$$

と表される。ここで $\operatorname{sech} x$ は双曲正割関数で、以下の式により定義される。

$$\operatorname{sech} x = \frac{2}{e^x + e^{-x}} \quad (17)$$

この関数のフーリエ変換は

$$F_{SH2}(x; B_{SH2}) = \frac{\pi^2 B_{SH2} x}{2} \operatorname{cosech} \frac{\pi^2 B_{SH2} x}{2} \quad (18)$$

で与えられる。この式で $\operatorname{cosech} x$ は双曲余割 hyperbolic cosecant 関数で、以下の式により定義される。

$$\operatorname{cosech} x = \frac{2}{e^x - e^{-x}} \quad (19)$$

ピーク形状関数 $f_{SH2}(k; B_{SH2})$ の尖り度パラメータ $(B/W)_{SH2}$, $(A/B)_{SH2}$ は以下の値をとる。

$$\left(\frac{B}{W}\right)_{SH2} = \frac{1}{\ln(1+\sqrt{2})} = 1.13459 \quad (20)$$

$$\left(\frac{A}{B}\right)_{SH2} = 0 \quad (21)$$

ロジスティック分布関数については、任意の ν に対する B/C_ν の単純な表現は得られないが、 $\nu = -1/2, 0, 1/2, 1, 2$ の場合に以下のような値をとる。

$$\left(\frac{B}{C_{-1/2}}\right)_{SH2} = \pi \left[\zeta\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \right]^{-2} = 0.137697$$

$$\left(\frac{B}{C_0}\right)_{SH2} = \frac{2}{\pi^2} \exp\left[\frac{4}{\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{t \ln t}{\sinh t} dt\right] = 0.220372$$

$$\left(\frac{B}{C_{1/2}}\right)_{SH2} = \frac{9}{4\pi^5} \left[\zeta\left(\frac{5}{2}, \frac{1}{2}\right) \right]^2 = 0.28694$$

$$\left(\frac{B}{C_1}\right)_{SH2} = \frac{28}{\pi^4} \zeta(3) = 0.345528$$

$$\left(\frac{B}{C_2}\right)_{SH2} = \frac{\sqrt{2}}{\pi} = 0.450158$$

ここで $\zeta(s)$ はリーマン Riemann のゼータ関数、 $\zeta(s, \nu)$ はフルヴィッツ Hurwitz のゼータ関数（一般化されたリーマンのゼータ関数とも呼ばれる）であり、それぞれ

$$\zeta(s) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k^s} \quad (22)$$

$$\zeta(s, \nu) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(\nu + k)^s} \quad (23)$$

により定義される。

3.3 双曲正割関数

積分幅 B_{SH} の双曲正割関数 $f_{SH}(k; B_{SH})$ とそのフーリエ変換 $F_{SH}(x; B_{SH})$ は以下の式で表される。

$$f_{SH}(k; B_{SH}) = \frac{1}{B_{SH}} \operatorname{sech} \frac{\pi k}{B_{SH}} \quad (24)$$

$$F_{SH}(x; B_{SH}) = \operatorname{sech}(\pi B_{SH} x) \quad (25)$$

双曲正割関数の尖り度パラメータ $(B/W)_{SH}$, $(A/B)_{SH}$ は以下の値をとる。

$$\left(\frac{B}{W}\right)_{SH} = \frac{\pi}{2 \ln(2 + \sqrt{3})} = 1.19275 \quad (26)$$

$$\left(\frac{A}{B}\right)_{SH} = 0 \quad (27)$$

この関数も B/C_v の一般形について単純な表現は得られないが, $v = -1/2, 0, 1/2, 1, 2$ の場合に以下のような値をとる。

$$\left(\frac{B}{C_{-1/2}}\right)_{SH} = \frac{1}{4} \left[\zeta\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right) - \zeta\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{4}\right) \right]^{-2} = 0.140194$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{B}{C_0}\right)_{SH} &= \frac{1}{\pi} \exp\left[\gamma - \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \ln(1+2k)}{1+2k}\right] \\ &= 0.228473 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{B}{C_{1/2}}\right)_{SH} &= \frac{1}{16\pi^2} \left[\zeta\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{4}\right) - \zeta\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{4}\right) \right]^2 \\ &= 0.302896 \end{aligned}$$

$$\left(\frac{B}{C_1}\right)_{SH} = \frac{4}{\pi^2} G = 0.371227$$

$$\left(\frac{B}{C_2}\right)_{SH} = \frac{1}{2} = 0.5$$

ここで G はカタラン Catalan 定数であり,

$$G \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} = 0.915965594177 \dots \quad (28)$$

で与えられる。

3.4 修正ローレンツ型関数と中間ローレンツ型関数

修正ローレンツ型 modified Lorentzian 関数と中間ローレンツ型 intermediate Lorentzian 関数は, いずれも後述するピアソン・セブン Pearson VII 関数の特別な例に相当する (Young & Wiles, 1982)。

積分幅 B_{ML} の修正ローレンツ型関数とそのフーリエ変換は以下の式で表される。

$$f_{ML}(k; B_{ML}) = \frac{1}{B_{ML}} \left(1 + \frac{\pi^2 k^2}{4B_{ML}^2}\right)^{-2} \quad (29)$$

$$F_{ML}(x; B_{ML}) = (1 + 4B_{ML}|x|) \exp(-4B_{ML}|x|) \quad (30)$$

修正ローレンツ型関数の尖り度パラメータは以下の式:

$$\left(\frac{B}{W}\right)_{ML} = \frac{\pi}{4\sqrt{2^{1/2}-1}} = 1.22033 \quad (31)$$

$$\left(\frac{A}{B}\right)_{ML} = 0 \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{B}{C_v}\right)_{ML} &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{v}{2} + 2\right) \Gamma\left(\frac{v+1}{2}\right) \right]^{1/v} \\ & \quad [v \neq 0] \end{aligned} \quad (33)$$

で与えられ, 特に, $v = -1/2, 0, 1/2, 1, 2$ の場合の値は以下ようになる。

$$\left(\frac{B}{C_{-1/2}}\right)_{ML} = \frac{\pi}{2} \left[\Gamma\left(\frac{7}{4}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) \right]^{-2} = 0.141471$$

$$\left(\frac{B}{C_0}\right)_{ML} = \frac{1}{4} \exp\left(\frac{1}{2} - \gamma\right) = 0.231423$$

$$\left(\frac{B}{C_{1/2}}\right)_{ML} = \frac{1}{2\pi} \left[\Gamma\left(\frac{9}{4}\right) \Gamma\left(\frac{3}{4}\right) \right]^2 = 0.306796$$

$$\left(\frac{B}{C_1}\right)_{ML} = \frac{3}{8} = 0.375$$

$$\left(\frac{B}{C_2}\right)_{ML} = \frac{1}{2} = 0.5$$

積分幅 B_{IL} の中間ローレンツ型関数とそのフーリエ変換は以下の式で表される。

$$f_{IL}(k; B_{IL}) = \frac{1}{B_{IL}} \left(1 + \frac{4k^2}{B_{IL}^2}\right)^{-3/2} \quad (34)$$

$$F_{IL}(x; B_{IL}) = \pi B_{IL} |x| K_1(\pi B_{IL} |x|) \quad (35)$$

ここで $K_n(x)$ は n 次の第2種変形ベッセル Bessel 関数 (マクドナルド McDonald 関数とも呼ばれる) である。

中間ローレンツ型関数の尖り度パラメータは以下の式:

$$\left(\frac{B}{W}\right)_{IL} = \frac{1}{\sqrt{2^{2/3}-1}} = 1.30477 \quad (36)$$

$$\left(\frac{A}{B}\right)_{IL} = 0 \quad (37)$$

$$\left(\frac{B}{C_\nu}\right)_{LL} = \frac{2}{\pi} \left[\frac{2}{\pi} \Gamma\left(\frac{\nu+3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right) \right]^{1/\nu} \quad [\nu \neq 0] \quad (38)$$

で与えられ、 $\nu = -1/2, 0, 1/2, 1, 2$ の場合に以下の値をとる。

$$\left(\frac{B}{C_{-1/2}}\right)_{LL} = 8\pi \left[\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) \right]^{-4} = 0.145451$$

$$\left(\frac{B}{C_0}\right)_{LL} = \frac{1}{2\pi} \exp(1-\gamma) = 0.242903$$

$$\left(\frac{B}{C_{1/2}}\right)_{LL} = \frac{2}{\pi} \left[\frac{2}{\pi} \Gamma\left(\frac{7}{4}\right) \Gamma\left(\frac{3}{4}\right) \right]^2 = 0.327264$$

$$\left(\frac{B}{C_1}\right)_{LL} = \frac{4}{\pi^2} = 0.405285$$

$$\left(\frac{B}{C_2}\right)_{LL} = \frac{\sqrt{3}}{\pi} = 0.551329$$

3.5 ローレンツ型関数

積分幅 B_L のローレンツ型 Lorentzian 関数とそのフーリエ変換は以下の式で表される。

$$f_L(k; B_L) = \frac{1}{B_L} \left(1 + \frac{\pi^2 k^2}{B_L^2} \right)^{-1} \quad (39)$$

$$F_L(x; B_L) = \exp(-2B_L|x|) \quad (40)$$

この関数の尖り度パラメータは以下の式：

$$\left(\frac{B}{W}\right)_L = \frac{\pi}{2} = 1.5708 \quad (41)$$

$$\left(\frac{A}{B}\right)_L = 2 \quad (42)$$

$$\left(\frac{B}{C_\nu}\right)_L = \frac{1}{2} \left[\Gamma(\nu+1) \right]^{1/\nu} \quad [\nu \neq 0] \quad (43)$$

で与えられ、 $\nu = -1/2, 0, 1/2, 1, 2$ の場合に以下の値をとる。

$$\left(\frac{B}{C_{-1/2}}\right)_L = \frac{1}{2\pi} = 0.159155$$

$$\left(\frac{B}{C_0}\right)_L = \frac{1}{2} \exp(-\gamma) = 0.28073$$

$$\left(\frac{B}{C_{1/2}}\right)_L = \frac{\pi}{8} = 0.392699$$

$$\left(\frac{B}{C_1}\right)_L = \frac{1}{2} = 0.5$$

$$\left(\frac{B}{C_2}\right)_L = \frac{1}{\sqrt{2}} = 0.707107$$

3.6 初等ピーク形状関数の尖り度の比較

積分幅 1 で規格化されたガウス型関数とロジスティック分布、双曲正割、修正ローレンツ型、中間ローレンツ型、ローレンツ型関数の形状と尖り度パラメータの値を Fig. 1 と Table 1 に示す。ただし Table 1 では、各関数の尖り度パラメータの値をローレンツ型関数についての値で割った相対値を示す。図から、これらの関数は見た目でもこの順に尖り度が増す傾向が認められ、Table 1 に示すいずれの尖り度パラメータもこれと矛盾しない傾向を示す。ただし、フーリエ勾配と積分幅の比 (A/B) は、ローレンツ型関数では有限の値を持つが、それ以外の関数については値がゼロになる。双曲正接関数と修正ローレンツ型関数の (B/C_2) の値は等しく、この尺度を用いた場合に尖り度が等しいとみなされる。これら 2 つの関数の原点での曲率が等しいことは Fig. 1 から確認できる。

4. 可変ピーク形状モデルの尖り度

4.1 フォークト関数

フォークト Voigt 関数はガウス型関数とローレンツ型関数の畳み込みとして定義される。積分幅 B のフォークト関数は、積分形式：

$$f_{\text{voigt}}(k; B, \rho) = \int_{-\infty}^{\infty} f_G(k-t, b_G) f_L(t; b_L) dt \quad (44)$$

あるいはフーリエ変換形式：

$$f_{\text{voigt}}(k; B, \rho) = 2 \int_0^{\infty} \exp(-\pi b_G^2 x^2 - 2b_L x) \cos(2\pi kx) dx \quad (45)$$

により表される。ただし、

$$b_G = B \exp(\rho^2) \operatorname{erfc}(\rho) \quad (46)$$

$$b_L = \sqrt{\pi} \rho b_G \quad (47)$$

とする。ここで $\operatorname{erfc}(x)$ は誤差補関数 complementary error function であり、以下の式で定義される。

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} \exp(-t^2) dt \quad (48)$$

式 (44), (45) は以下の解を持つ。

Table 2 Relative values of sharpness parameters for the Voigt function to those of the Lorentzian function. The integral breadths of the component Gaussian and Lorentzian functions, b_G and b_L , for the normalized Voigt profile are also listed. The relative values of A/B are equivalent to the values of b_L .

ρ_V	b_G	b_L	B/W	$B/C_{-1/2}$	$B/C_{1/2}$	B/C_1	B/C_2
0	1	0	0.67766	0.84721	0.68673	0.63662	0.56418
0.1	0.93302	0.10367	0.69788	0.87984	0.73952	0.69291	0.62330
0.2	0.85881	0.21471	0.72163	0.90982	0.79283	0.75130	0.68694
0.3	0.77648	0.33278	0.74971	0.93606	0.84427	0.80937	0.75298
0.4	0.68517	0.45678	0.78302	0.95770	0.89103	0.86388	0.81799
0.5	0.58420	0.58420	0.82228	0.97430	0.93040	0.91131	0.87755
0.6	0.47354	0.71031	0.86748	0.98600	0.96046	0.94875	0.92709
0.7	0.35441	0.82695	0.91614	0.99344	0.98092	0.97493	0.96344
0.8	0.23049	0.92196	0.96096	0.99976	0.99291	0.99060	0.98606
0.9	0.10907	0.98164	0.99079	0.99995	0.99985	0.99806	0.99709
1	0	1	1	1	1	1	1

$$f_{\text{Voigt}}(k; B, \rho) = \frac{1}{b_G} \operatorname{Re} \left[\operatorname{wofz} \left(\frac{\sqrt{\pi} k}{b_G} + i\rho \right) \right] \quad (49)$$

$$\operatorname{wofz}(z) \equiv \exp(-z^2) \operatorname{erfc}(-iz) \quad (50)$$

ここで $\operatorname{wofz}(z)$ はスケールされた複素誤差補関数あるいは Faddeeva 関数と呼ばれる関数である。 $\operatorname{Re}[z]$ は複素数 z の実数部をとる演算を意味する。

フォークト関数の尖り度パラメータ $(A/B)_{\text{Voigt}}$ は、

$$\left(\frac{A}{B} \right)_{\text{Voigt}} = 2\sqrt{\pi}\rho \exp(\rho^2) \operatorname{erfc}(\rho) \quad (51)$$

$$= 2\sqrt{\pi}\rho \operatorname{wofz}(i\rho) \quad (52)$$

となり、 ν が整数または半整数の場合には、以下のように尖り度パラメータ $(B/C_\nu)_{\text{Voigt}}$ の解析的な表現が得られる。

$$\left(\frac{B}{C_{-1/2}} \right)_{\text{Voigt}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2\rho} \operatorname{erfc}(\rho) \left[K_{1/4} \left(\frac{\rho^2}{2} \right) \right]^{-2}$$

$$\left(\frac{B}{C_{1/2}} \right)_{\text{Voigt}} = \frac{\rho^3 \exp(-2\rho^2)}{2\pi^{3/2} [\operatorname{erfc}(\rho)]^3} \left[K_{3/4} \left(\frac{\rho^2}{2} \right) - K_{1/4} \left(\frac{\rho^2}{2} \right) \right]^2$$

$$\left(\frac{B}{C_1} \right)_{\text{Voigt}} = \frac{1 - \sqrt{\pi}\rho \exp(\rho^2) \operatorname{erfc}(\rho)}{\pi \exp(2\rho^2) [\operatorname{erfc}(\rho)]^2}$$

$$= \frac{1 - \sqrt{\pi} \operatorname{wofz}(i\rho)}{\pi [\operatorname{wofz}(i\rho)]^2}$$

$$\left(\frac{B}{C_2} \right)_{\text{Voigt}} = \frac{[\sqrt{\pi}(1+2\rho^2) \exp(\rho^2) \operatorname{erfc}(\rho) - 2\rho]^{1/2}}{\sqrt{2\pi^{3/4}} \exp(3\rho^2/2) [\operatorname{erfc}(\rho)]^{3/2}}$$

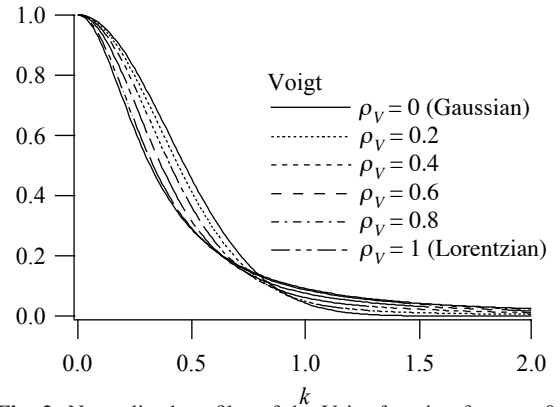


Fig. 2 Normalized profiles of the Voigt function for $\rho_V = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1..$

$$= \frac{[\sqrt{\pi}(1+2\rho^2) \operatorname{wofz}(i\rho) - 2\rho]^{1/2}}{\sqrt{2\pi^{3/4}} [\operatorname{wofz}(i\rho)]^{3/2}}$$

ただし $(B/C_0)_{\text{Voigt}}$ については式が複雑になるので省略した。フォークト関数の形状は成分関数の線幅の比

$b_L/b_G = \sqrt{\pi}\rho$ のみによって変化する。

パラメータ ρ によるフォークト関数の形状の変化にどのような特徴が現れるかを理解しやすくするために、以下の式で定義されるパラメータ ρ_V を導入する。

$$\rho_V \equiv \frac{b_L}{b_L + b_G} = \frac{\sqrt{\pi}\rho}{1 + \sqrt{\pi}\rho} \quad (53)$$

$0 \leq \rho_V \leq 1$ の範囲でパラメータ ρ_V を変化させることにより、フォークト関数がとりうるすべての形状をカバーすることができる。また、このパラメータ ρ_V から形状パラメータ ρ は、

$$\rho = \frac{\rho_V}{\sqrt{\pi}(1 - \rho_V)} \quad (54)$$

の関係により容易に導かれる。 ρ_V を変化させたときのフォークト関数の形状と尖り度パラメータの変化を

Table 3 Relative values of sharpness parameters for the Pearson VII function to those of the Lorentzian function.

ρ_{P7}	μ	B/W	A/B	$B/C_{-1/2}$	B/C_0	$B/C_{1/2}$	B/C_1	B/C_2
0	∞	0.67766	0	0.84723	0.75297	0.68673	0.63662	0.56419
0.2	5	0.70910	0	0.85971	0.77490	0.71642	0.67291	0.61143
0.4	2.5	0.75084	0	0.87734	0.80504	0.75621	0.72051	0.67106
0.6	1.66667	0.80737	0	0.90289	0.84740	0.81074	0.78439	0.74852
0.8	1.25	0.88603	0	0.94102	0.90853	0.888755	0.87270	0.85279
1	1	1	1	1	1	1	1	1
1.2	0.83333	1.17554	∞	1.09627	1.14471	1.17463	1.19525	1.22232
1.4	0.71429	1.47393	∞	1.26800	1.39583	1.47319	1.52600	1.59477
1.6	0.625	2.07893	∞	1.69254	1.91263	2.08095	2.19494	2.34251
1.8	0.55556	3.9094	∞	2.75212	3.49090	3.92384	4.25152	4.59086
2	0.5	∞	∞	∞	∞	∞	∞	∞

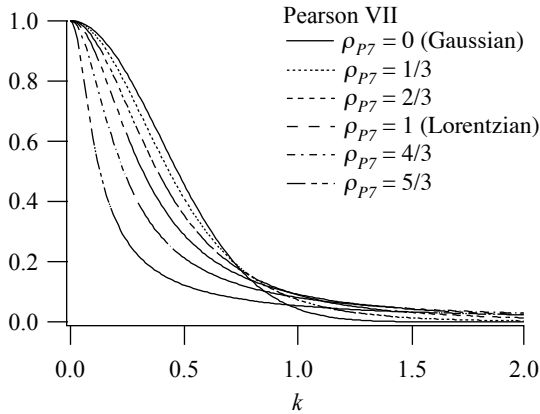
**Fig. 3** Normalized profiles of the Pearson VII function for $\rho_{P7} = 0, 1/3, 2/3, 1, 4/3, 5/3$.

Fig. 2 と Table 2 に示す。

4.2 ピアソン・セブン関数

ピアソン・セブン Pearson VII 関数は以下の式で表される (Hall *et al.*, 1977)。

$$g_{P7}(k; \gamma_{P7}, \mu) = \frac{\Gamma(\mu)}{\sqrt{\pi} \Gamma(\mu - 1/2) \gamma_{P7}} \left(1 + \frac{k^2}{\gamma_{P7}^2} \right)^{-\mu} \quad (55)$$

ここで、 γ_{P7} はピークの幅に比例し、 μ はピーク形状の尖り具合に対応するパラメータである。ピアソン・セブン関数は、 $\mu = 1$ のときローレンツ型、 $\mu = 3/2$ のとき中間ローレンツ型、 $\mu = 2$ のとき修正ローレンツ型、 $\mu \rightarrow \infty$ の極限でガウス型関数に一致する。

ピアソン・セブン関数の形状パラメータは $1/2 < \mu < \infty$ の範囲で定義することができ、 $1/2 < \mu < 1$ の範囲ではローレンツ型関数より尖ったピーク形状もモデル化しうることを注意しておきたい。 $\mu \rightarrow 1/2$ の極限でピアソン・セブン関数は「無限に尖った」ピーク形状となるが、この状況は「ピアソン極限」と呼ばれることがある。実用的な解析プログラムでピアソン・セブン関数の形状パラメータのとりうる範囲が $1 \leq \mu < \infty$ と限定されている例もあるようだが、この限定はローレン

ツ型に近いピーク形状へのあてはめ計算を不安定にするだけでなく、現実に観測されうる「超ローレンツ型形状」(ローレンツ型関数よりも尖ったピーク形状) をモデル化する可能性を放棄するものであり、不合理である。

ピアソン・セブン関数の積分幅 B_{P7} は、幅パラメータ γ_{P7} と以下の式により直接関係づけることができる。

$$B_{P7} = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(\mu - 1/2) \gamma_{P7}}{\Gamma(\mu)} \quad (56)$$

積分幅 B_{P7} と形状パラメータ μ を引数とするピアソン・セブン関数の形式は、

$$f_{P7}(k; B_{P7}, \mu) = \frac{1}{B_{P7}} \left\{ 1 + \pi \left[\frac{\Gamma(\mu - 1/2) k}{\Gamma(\mu) B_{P7}} \right]^2 \right\}^{-\mu} \quad (57)$$

となる。形状パラメータを変化させたときのピアソン・セブン関数の形状の変化を Fig. 3 に示す。ただし、ここでは μ の代わりに、その逆数 $\rho_{P7} \equiv 1/\mu$ で定義される形状パラメータを用いた。

ピアソン・セブン関数の尖り度パラメータは以下の式で与えられる。

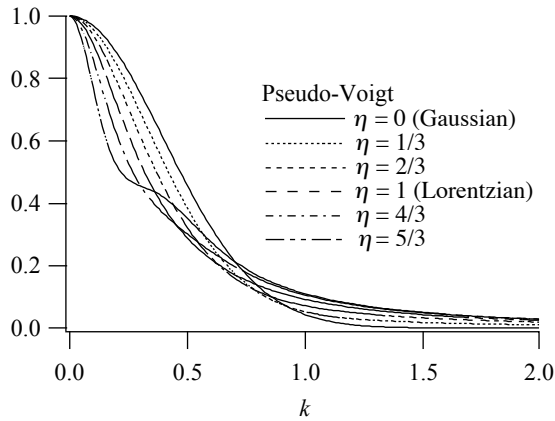
$$\left(\frac{B}{W} \right)_{P7} = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(\mu - 1/2)}{2\sqrt{2^{1/\mu} - 1} \Gamma(\mu)} \quad (58)$$

$$\left(\frac{A}{B} \right)_{P7} = \begin{cases} 0 & [1 < \mu] \\ 2 & [\mu = 1] \\ \infty & [1/2 < \mu < 1] \end{cases} \quad (59)$$

$$\left(\frac{B}{C_v} \right)_{P7} = \frac{\Gamma(\mu - 1/2)}{\sqrt{\pi} \Gamma(\mu)} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \Gamma(\mu)} \Gamma\left(\mu + \frac{\nu}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\nu + 1}{2}\right) \right]^{1/\nu} \quad [\nu \neq 0] \quad (60)$$

Table 4 Relative values of sharpness parameters for the pseudo-Voigt function to those of the Lorentzian function.

η	B/W	A/B	$B/C_{1/2}$	B/C_0	$B/C_{1/2}$	B/C_1	B/C_2
0	0.67766	0	0.84721	0.75295	0.68673	0.63662	0.56419
0.2	0.72436	0.27611	0.87538	0.79265	0.73264	0.68685	0.62211
0.4	0.77797	0.51416	0.90487	0.83652	0.78513	0.74552	0.69088
0.6	0.84015	0.71416	0.93562	0.88521	0.84571	0.81492	0.77359
0.8	0.91313	0.87611	0.96743	0.93943	0.91642	0.89823	0.87456
1	1	1	1	1	1	1	1
1.2	1.10513	1.08584	1.03274	1.06781	1.10033	1.12696	1.15912
1.4	1.23497	1.13363	1.06467	1.14368	1.22300	1.28949	1.36613
1.6	1.39938	1.14336	1.09419	1.22814	1.37636	1.50439	1.64402
1.8	1.61429	1.11504	1.11855	1.32065	1.57354	1.80060	2.03219
2	1.90718	1.04867	1.13317	1.41783	1.83629	2.23224	2.60355


Fig. 4 Normalized profiles of the pseudo-Voigt function for $\eta = 0, 1/3, 2/3, 1, 4/3, 5/3$.

$$\left(\frac{B}{C_0}\right)_{pV} = \frac{\Gamma(\mu - 1/2)}{2\sqrt{\pi}\Gamma(\mu)} \exp\left[\frac{\psi(\mu) - \gamma}{2}\right] \quad (61)$$

ここで $\psi(x)$ は次式で定義されるディ・ガンマ関数

$$\psi(x) = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)} \quad (62)$$

であり、変数が正の整数あるいは半整数のときには以下の値を取る。

$$\psi(n) = \sum_{r=1}^{n-1} \frac{1}{r} - \gamma \quad (63)$$

$$\psi\left(\pm n + \frac{1}{2}\right) = 2 \sum_{r=1}^{n-1} \frac{1}{2r-1} - \ln 4 - \gamma \quad (64)$$

形状パラメータ $\rho_{pV} = 0, 0.2, \dots, 2$ に対するピアソン・セブン関数の尖り度パラメータの値を Table 3 に示す。

4.3 擬フォークト関数

擬フォークト pseudo-Voigt 関数は、半値幅の等しいローレンツ型関数とガウス型関数の重み付きの和として定義され、以下の形式で表される (Wertheim *et al.*, 1974)。

$$g_{pV}(k; W_{pV}, \eta) = (1-\eta)f_G\left(k; \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\ln 2}}W_{pV}\right) + \eta f_L\left(k; \frac{\pi}{2}W_{pV}\right) \quad (65)$$

ここで W_{pV} は半値全幅 FWHM であり、 η はローレンツ型成分の割合を表す。フォークト関数と同様にガウス型 ($\eta = 0$) からローレンツ型 ($\eta = 1$) まで形状を連続的に変化させることができる一方で、フォークト関数と比較して計算が容易であるために、回折ピーク形状分析の目的では頻繁に用いられる。

擬フォークト関数は、ローレンツ型関数よりも尖った形状 ($\eta > 1$) やガウス型関数よりもつぶれた形状 ($\eta < 0$) をモデル化しうることが示唆されている (Wertheim *et al.*, 1974)。実際には、 $\eta < 0$ の場合、擬フォークト関数のピークの裾が負の値をとってしまうことは漸近挙動から明らかであり、回折ピークモデルとして用いるのは不適切である。しかし、 $\eta > 1$ の側については、確かにある程度の範囲まで、擬フォークト関数によって「ローレンツ型関数よりも尖った形状」をモデル化することが可能である。ピアソン・セブン関数と同様に、実用的な解析プログラムで $0 \leq \eta \leq 1$ と制限される例を見受けるが、制限を用いるとすれば $0 \leq \eta$ とする方が良いであろう。

擬フォークト関数の尖り度パラメータは以下の式で与えられる。

$$\left(\frac{B}{W}\right)_{pV} = \frac{\pi}{2\left[\sqrt{\pi \ln 2}(1-\eta) + \eta\right]} \quad (66)$$

$$\left(\frac{A}{B}\right)_{pV} = 2\eta\left[\sqrt{\pi \ln 2}(1-\eta) + \eta\right] \quad (67)$$

$$\left(\frac{B}{C_v}\right)_{pV} = \frac{\left[\left(\sqrt{\pi \ln 2}\right)^{v+1}(1-\eta)\left(B/C_v\right)_G^v + \eta\left(B/C_v\right)_L^v\right]^{1/v}}{\left[\sqrt{\pi \ln 2}(1-\eta) + \eta\right]^{1+1/v}} \quad (68)$$

$$[v \neq 0] \quad (68)$$

$$\left(\frac{B}{C_0}\right)_{pV} = \frac{1}{\pi w_{pV}} \exp\left[-\left(\frac{1}{2} + \frac{\eta}{\pi w_{pV}}\right) \gamma\right] + \left(1 - \frac{2\eta}{\pi w_{pV}}\right) \frac{\ln(\ln 2)}{2} \quad (69)$$

ローレンツ型成分の割合 η の変化に対するピーク形状と尖り度パラメータの変化を Fig. 4 と Table 4 に示す。

尖り度パラメータ $(A/B)_{pV}$ は η に対して単調に変化せず、

$$\eta = \frac{\sqrt{\pi \ln 2}}{2(\sqrt{\pi \ln 2} - 1)} = 1.55116$$

において極大

$$\frac{\pi \ln 2}{2(\sqrt{\pi \ln 2} - 1)} = 2.28899$$

をとる。また、Fig. 4 から、 $\eta = 5/3$ の場合には見た目でやや奇妙な形状になっていることがわかる。擬フォークト関数では「ローレンツ型関数よりもわずかに尖った形状」をモデル化できるが、実際に使用できるのは概ね $\eta < 1.55$ の範囲に限定されると考えて良い。

擬フォークト関数を、特定の尖り度によって特徴づけられるピーク形状をモデル化するための近似関数として応用する場合には、尖り度パラメータから形状パラメータ η を求められれば都合が良い。一般的な次数 ν に対する尖り度 (B/C_ν) から形状パラメータ η を求めるためには高次の方程式を解く必要があるが、尖り度パラメータ (B/W) と (A/B) 、 $(B/C_{-1/2})$ 、 (B/C_1) からは一次方程式あるいは二次方程式を解くことによって即座に形状パラメータ η を求めることができる。

5. サイズブロードニング形状

5.1 球形結晶子のサイズブロードニング形状

ストークス・ウィルソンの理論 (Stokes & Wilson, 1942) によれば、結晶粒の形状が球あるいは回転楕円体、楕円体で表される場合、その有限なサイズから理論的に予測される回折ピーク形状は球形の結晶子によるものと等価である。球形結晶子からの理論回折ピーク形状は以下の式で表される。

$$f_S(k; D) = \begin{cases} \frac{3D}{s^2} \left(1 - \frac{\sin s}{2s} + \frac{\sin^2 s}{4s^2}\right) & [k \neq 0] \\ \frac{3D}{4} & [k = 0] \end{cases} \quad (70)$$

$s \equiv 2\pi kD$

ここで D は回折ベクトル方向に沿った有効長であり、

球形結晶子の場合には直径に一致する (Langford & Wilson, 1978)。回転楕円体の場合には、回折ベクトルと対称軸のなす角度が α のとき、有効長は

$$D = \left(D_{\parallel}^2 \cos^2 \alpha + D_{\perp}^2 \sin^2 \alpha\right)^{-1/2} \quad (71)$$

で与えられる。ここで、 D_{\parallel} と D_{\perp} はそれぞれ対称軸方向に沿った直径と垂直方向に沿った直径である。楕円体形状の場合に 3 主軸と回折ベクトルのなす角をそれぞれ $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ とすると有効長は

$$D = \left(D_1^2 \cos^2 \alpha_1 + D_2^2 \cos^2 \alpha_2 + D_3^2 \cos^2 \alpha_3\right)^{-1/2} \quad (72)$$

となる。ここで、 D_1, D_2, D_3 はそれぞれの主軸に沿った直径である (Popa, 2005)。

楕円体形状結晶粒からの回折ピーク形状関数のフーリエ変換は

$$F_S(x; D) = \begin{cases} 1 - \frac{3|x|}{2} + \frac{|x|^3}{2D^3} & [|x| < D] \\ 0 & [D \leq |x|] \end{cases} \quad (73)$$

で与えられる。積分幅は

$$B_S = \frac{4}{3D} \quad (74)$$

であり、尖り度パラメータは

$$\left(\frac{A}{B}\right)_S = \frac{9}{8} = 1.125 \quad (75)$$

$$\left(\frac{B}{C_\nu}\right)_S = \begin{cases} \frac{4}{3} \left[\frac{8}{(\nu+1)(\nu+2)(\nu+4)} \right]^{1/\nu} & [\nu \neq 0] \\ \frac{4}{3} \exp\left(-\frac{7}{4}\right) = 0.231699 & [\nu = 0] \end{cases} \quad (76)$$

となる。半値全幅についての単純な表現は得られないので、 (B/W) を尖り度パラメータとして用いることには困難があり、これは次節で扱われる粒径の統計分布を考慮に入れたサイズブロードニング形状についても同様である。

5.2 対数正規サイズ分布に従う球形結晶子集合体のサイズブロードニング形状

メジアン m 、対数標準偏差 ω の対数正規分布の確率密度関数は

$$f_{LN}(D; m, \omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D\omega}} \exp\left\{-\frac{[\ln(D/m)]^2}{2\omega^2}\right\} \quad (77)$$

で与えられる。直径 D が対数正規サイズ分布に従う球形結晶子からのサイズブロードニング形状 (SLN 形状)

は

$$f_{SLN}(k; m, \omega) = \int_0^{\infty} f_S(k; D) f_{LN}(D; m e^{3\omega^2}, \omega) dD \quad (78)$$

で与えられ (Ida *et al.*, 2003), そのフーリエ変換は

$$F_{SLN}(x; m, \omega) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{\ln(|x|/m) - 3\omega^2}{\sqrt{2\omega}} \right] - \frac{3|x|}{4m} e^{-2.5\omega^2} \operatorname{erfc} \left[\frac{\ln(|x|/m) - 2\omega^2}{\sqrt{2\omega}} \right] + \frac{|x|^3}{4m^3} e^{-4.5\omega^2} \operatorname{erfc} \left[\frac{\ln(|x|/m)}{\sqrt{2\omega}} \right] \quad (79)$$

となる (Ungár *et al.*, 2001).

SLN ピーク形状の積分幅は

$$B_{SLN} = \frac{4}{3m} e^{-3.5\omega^2} \quad (80)$$

で与えられ, 尖り度パラメータは

$$\left(\frac{A}{B} \right)_{SLN} = \left(\frac{A}{B} \right)_S e^{\omega^2} = \frac{9}{8} e^{\omega^2} \quad (81)$$

$$\left(\frac{B}{C_v} \right)_{SLN} = \left(\frac{B}{C_v} \right)_S \exp \left[\frac{(\nu+1)\omega^2}{2} \right] \quad (82)$$

で与えられる。いずれの尖り度パラメータも ω のみの関数であり, その逆関数の形式も容易に導かれる。

筆者は, $\omega = \sqrt{\ln(16/9)} = 0.758528$ の場合に SLN 形状の尖り度 $(A/B)_{SLN}$ がローレンツ型関数と一致し, 実際に近い形状が得られることを示した (Ida *et al.*, 2003)。一方で Sánchez-Bajo ら (2006) の報告からは, 最小二乗法によってローレンツ型関数に近いとみなされる SLN 形状はむしろ $\omega \sim 0.698$ に近いことが示唆される。

SLN 形状の尖り度 $(B/C_v)_{SLN}$ がローレンツ型関数と一致する場合の対数標準偏差を以下の式で表すことができる。

$$\omega = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\nu+1} \left[\ln \frac{3}{8} + \frac{1}{\nu} \ln \frac{(\nu+4)\Gamma(\nu+3)}{8} \right]} & [\nu \neq 0] \\ \sqrt{\frac{7}{2} + 2 \ln \frac{3}{8} - 2\nu} & [\nu = 0] \end{cases} \quad (83)$$

尖り度パラメータ $(B/C_v)_{SLN}$ の次数 $\nu = -1/2, 0, 1/2, 1, 2$ に対して, それぞれ

$$\omega = 2\sqrt{\ln(512/147\pi)} = 0.642377, \quad 2\sqrt{7/2 + 2\ln(3/8) - 2\nu} = 0.619605, \quad \sqrt{(4/3)\ln(54675\pi/131072)} = 0.600433,$$

$\sqrt{\ln(45/32)} = 0.583889, \quad \sqrt{(1/3)\ln(81/32)} = 0.556391$ などとなるが, 式 (83) は $-3 < \nu \leq -1$ のときにも形式的には適用できる。このことは, ローレンツ型形状による規格化処理を施すことによって, 尖り度の定義をさらに拡張しうることを示唆する。

この理論回折ピーク形状関数について, 尖り度 (B/W) を簡単な数式で表すことはできないが, ローレンツ型関数と一致する場合の対数標準偏差を数値計算により求めた結果は $\omega = 0.6581$ となり, $(B/C_{-1/2})$ と比較的近い値をとる。一般的には計算の困難な尖り度 (B/W) の代わりに $(B/C_{-1/2})$ を尖り度の尺度として用いる方が有利だと思われる。

6. 尖り度の規格化

前節の結果から, 尖り度をローレンツ型関数の尖り度で規格化すれば適用範囲が広がることが予想される。規格化された尖り度の一般形は

$$\beta_\nu = \frac{(B/C_\nu)}{(B/C_\nu)_L} = 2B \left[\frac{B}{\Gamma(\nu+1)} \int_{-\infty}^{\infty} |x|^\nu F(x) dx \right]^{1/\nu} \quad [\nu \neq 0] \quad (84)$$

$$\beta_0 = \frac{(B/C_0)}{(B/C_0)_L} = 2B \exp(\gamma) \lim_{\nu \rightarrow 0} \left[B \int_{-\infty}^{\infty} |x|^\nu F(x) dx \right]^{1/\nu} = 2B \exp \left[\gamma + B \int_{-\infty}^{\infty} F(x) \ln|x| dx \right] \quad (85)$$

という式で与えられる。例えばガウス型関数の場合,

$$(\beta_\nu)_G = \frac{2}{\pi^{(1+1/\nu)/2}} \left[\frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \Gamma \left(\frac{\nu+1}{2} \right) \right]^{1/\nu} \quad [\nu \neq 0]$$

$$(\beta_0)_G = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp \left(\frac{\gamma}{2} \right) = 0.75295$$

となる。

7. 結論

本稿では, 新しい発想に基づいて回折ピーク形状の尖り具合を特徴づけるパラメータを定義した。この尖り度パラメータは, 伝統的なピーク形状モデル関数の多くについて厳密解が得られるとともに, 粒径の統計分布を仮定した理論回折ピーク形状モデルについて単純な形式が得られる。この特徴は, モデル関数を使ったフィッティ

ング計算の結果から粒径分布に関する情報を得るために好都合である。

[参考文献]

- Hall, M. M. Jr., Veeraraghavan, V. G., Rubin, H. & Winchell, P. G. (1977). *J. Appl. Cryst.*, **10**, 66-68.
- Ida, T., Shimazaki, S., Hibino, H. & Toraya, H. (2003). *J. Appl. Cryst.*, **36**, 1107-1115.
- Ida, T. & Kimura, K. (1999). *J. Appl. Cryst.*, **33**, 1311-1316.
- Ida, T. & Toraya, H. (2000). *J. Appl. Cryst.*, **35**, 58-68.
- Langford, J. I., Louër, D. & Scardi, P. (2000). *J. Appl. Cryst.*, **33**, 964-974.
- Langford, J. I. & Wilson, A. J. C. (1978). *J. Appl. Cryst.*, **11**, 102-113.
- Plévert, N. C. & Louër, D. (1990). *J. Chim. Phys.*, **35**, 338-346.
- Popa, N. C. (2005). *XX Congress of the International Union of Crystallography*. Florence, Italy.
- Sánchez-Bajo, F., Ortiz, A. L. & Cumbreira, F. L. (2006). *Acta Materialia*, **54**, 1-10.
- Stokes, A. R. & Wilson, A. J. C. (1942). *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, **38**, 312-322.
- Ungár, T., Gubicza, J., Ribárik, G. & Bolbély, A. (2001). *J. Appl. Cryst.*, **34**, 298-310.
- Warren, B. E. (1969). *X-ray Diffraction*. New York: Dover.
- Wertheim, G. K., Butler, M. A., West, K. W. & Buchanan, D. N. E. (1974). *Rev. Sci. Instrum.*, **45**, 1369-1371.
- Williamson, G. K. & Hall, W. H. (1953). *Acta Metall.*, **1**, 22-31.
- Young, R. A. & Wiles, D. B. (1982). *J. Appl. Cryst.*, **15**, 430-438.