

# 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. ブラッグ・ブレンターノ型粉末回折計の装置収差

### Instrumental aberrations of Bragg-Brentano powder diffractometer

#### 7.1 赤道収差 Equatorial aberration

ブラッグ・ブレンターノ型粉末回折計では、平板の形状を持つ試料が用いられる。平板試料を用いることでローランド Rowland の集光条件は概ね満たされるのだが、厳密に満たされるわけではない。このわずかな集光条件からのずれが、観測される回折ピーク形状の変形や検出可能なレベルのピークシフトの要因となる。この効果は過去には平板試料収差 flat-specimen aberration (Cheary & Coelho, 1992; Ida & Kimura, 1999) として知られていたが、赤道方向へのビームの発散（角度のずれ）の影響は、一次元位置敏感型検出器 (linear position sensitive detector; LPSD) を用いる場合には、検出器の有限なサイズの影響も受けることが明らかにされている (Cheary & Coelho, 1994; Słowik & Zięba, 2001)。

##### 7.1.1 0次元検出器の平板試料収差

##### Flat-specimen aberration for point detector

平板試料収差関数は以下の式で表される。

$$\omega_{FS}(\Delta 2\theta; \Theta) = \begin{cases} \frac{1}{\Phi^2 \cot \Theta} \left( -\frac{2\Delta 2\theta}{\Phi^2 \cot \Theta} \right)^{-1/2} & \left[ -\frac{\Phi^2 \cot \Theta}{2} < \Delta 2\theta < 0 \right], \\ 0 & [\text{elsewhere}] \end{cases} \quad (7.1.1.1)$$

ここで  $\Phi$  は入射ビームの赤道方向への有効発散角であり、試料上での X 線照射範囲が試料からはみださない範囲では発散スリット角  $\Phi_{DS}$  に一致する。

ゴニオメーター半径  $R$ 、試料幅  $W$  のときに、X線照射範囲が試料からはみださない最低のゴニオメーター角度を臨界角  $2\Theta_c$  とすれば、

$$2\Theta_c = 2 \arcsin \frac{[1 - (W/2R)^2] \tan \Phi_{DS}}{W/R}. \quad (7.1.1.2)$$

となる (補足 7.1.A)。かりにゴニオメーター角度 (見かけ回折角)  $2\Theta$  が臨界角  $2\Theta_c$  より低ければ、有効発散角  $\Phi_{\text{eff}}$  は発散スリット幅ではなく、ゴニオメーター半径  $R$  と試料幅  $W$  で決まり、

$$\Phi = \min(\Phi_{DS}, \Phi_{\text{eff}}) \quad (7.1.1.3)$$

$$\Phi_{\text{eff}} = \arctan \frac{(W/R) \sin \Theta}{1 - (W/2R)^2} \quad (7.1.1.4)$$

となる (補足 7.1.B)。

角度  $2\Theta < 2\Theta_c$  の範囲では、入射ビームの「はみ出し」が起きるので、観測される回折ピーク強度は、対称反射モードで  $2\Theta_c \leq 2\Theta$  の「照射体積一定」とみなせる場合の強度に以下の係数：

$$\frac{\Phi_{\text{eff}}}{\Phi_{DS}} = \frac{1}{\Phi_{DS}} \arctan \frac{(W/R) \sin \Theta}{1 - (W/2R)^2}, \quad (7.1.1.5)$$

をかけたものになる。

かりに  $W \ll R$  と  $\Phi_{DS} \sim 0$  を仮定できれば、臨界角は  $2\Theta_c$  以下の式：

$$2\Theta_c \approx 2 \arcsin \frac{R\Phi_{DS}}{W}, \quad (7.1.1.6)$$

で近似され、有効発散角は

$$\Phi_{\text{eff}} \approx \frac{W \sin \Theta}{R}, \quad (7.1.1.7)$$

強度補正因子は

$$\frac{\Phi_{\text{eff}}}{\Phi_{DS}} \approx \frac{W \sin \Theta}{R\Phi_{DS}}. \quad (7.1.1.8)$$

とも書ける。例えば Rigaku MiniFlex 600-C の標準的な測定条件では  $\Phi_{DS} = 1.25^\circ$ 、 $R = 150 \text{ mm}$ 、 $W = 20 \text{ mm}$  であり、臨界角は式 (7.1.1.2) からは  $2\Theta_c = 18.75^\circ$  と見積もられ、式 (7.1.1.6) からは  $2\Theta_c = 18.83^\circ$  と見積もられる。

規格化された平板試料収差関数は

$$\omega_{FS}(z) = \frac{1}{\Phi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \delta \left( z + \frac{2\phi^2}{\tan \Theta} \right) d\phi. \quad (7.1.1.9)$$

と書ける。

平板試料収差関数の1次から4次のキュムラント,  $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4$  は以下の式であたえられる (補足 7.1.C)。

$$\kappa_1 = -\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta}. \quad (7.1.1.10)$$

$$\kappa_2 = \frac{\Phi^4}{45 \tan^2 \Theta}. \quad (7.1.1.11)$$

$$\kappa_3 = -\frac{2\Phi^6}{945 \tan^3 \Theta}. \quad (7.1.1.12)$$

$$\kappa_4 = -\frac{2\Phi^8}{4725 \tan^4 \Theta}. \quad (7.1.1.13)$$

4次のキュムラントが負の値になることは、この関数がガウス型関数 (正規分布の確率密度関数) より「つぶれた」形状であることを意味する。

## 7.1.2 連続走査積算シリコン・ストリップX線検出器の赤道収差 Equatorial aberration for continuous-scan integration of silicon strip X-ray detector

一次元位置敏感型検出器 (LPSD) の赤道収差の形式については、既に報告されているのだが (Cheary & Coelho, 1994; Słowik & Zięba, 2001), シリコン・ストリップX線検出器 (SSXD) を連続走査して積算をする方法 (Panalytical 社は RTMS: real-time multiple strip technology, Rigaku 社は TDI: time-delay integration と呼ぶ) で収集されたデータについて、明示的な装置収差関数の形式は報告されていなかった。

この節では、平板型シリコン・ストリップX線検出器の連続走査で回折データを収集した場合の赤道収差装置関数の厳密な形式と近似的な形式を導いて比較する。ただし  $2\Theta_c < 2\Theta$  を仮定する (補足 7.1.D)。

### 7.1.2.1 赤道収差の厳密形式 Exact formula of equatorial aberration

赤道収差の関係する装置パラメータを Fig. 7.1.2.1 に示す。  $R = \overline{XG} = \overline{GC}$  はゴニオメーター半径,  $\Phi$  は赤道発散角,  $2\Psi$  は SSXD の見込み角度であり, 有効検出器長さを  $2L$  をしたときに  $2\Psi = 2 \arctan(L/R)$  として定義される。

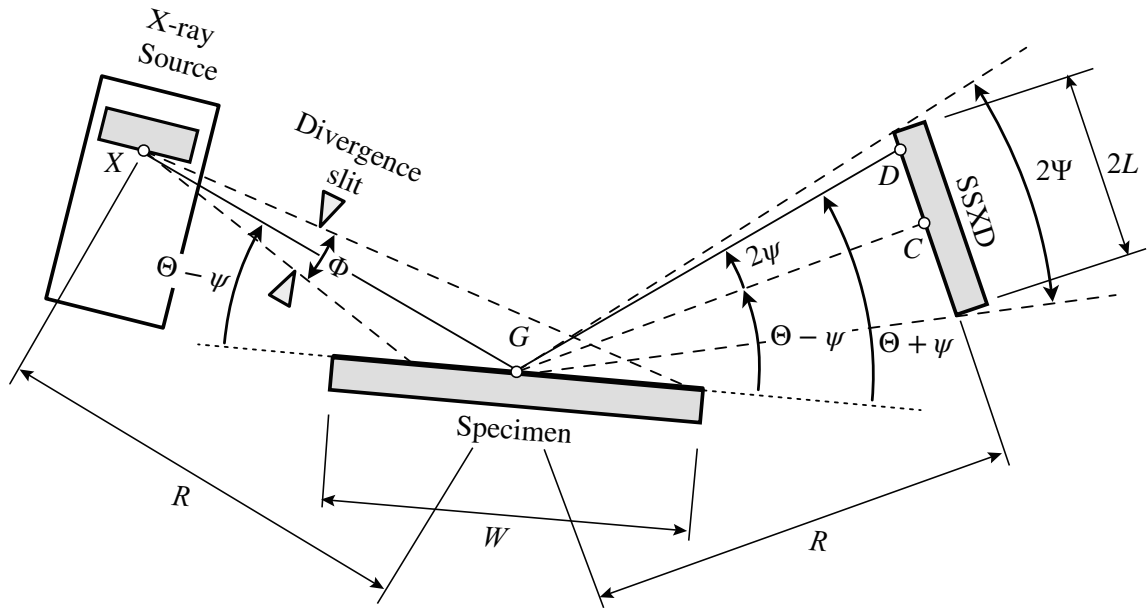


Fig. 7.1.2.1 SSXD の連続走査積算による赤道収差に関する装置パラメーター。R: ゴニオメーター半径,  $\Phi$ : 発散スリットの開き角,  $2\Psi$ : SSXD の見込み角度。中心ストリップ C について入射視射角と出射視射角が  $\Theta - \psi$  のときに, 中心から角度  $2\psi$  ずれた位置にあるストリップ D の検出した強度が見かけ回折角  $2\Theta$  に割り当てられると仮定する。

Fig. 7.1.2.1 に示すように, X線ビームが焦点位置 (X) で発生し, ストリップ検出器 SSXD の中心ストリップ (C) が, これと対称的にゴニオメーター軸 (G) の周りに回転されるとする。試料の入射視射角が  $\Theta - \psi$  であり, 検出器中心ストリップ C に対する出射視射角も  $\Theta - \psi$  であるときに, 中心ストリップから  $2\psi$  ずれた角度にある検出ストリップ D の検出した強度が, 見かけ回折角  $2\Theta$  での強度として積算されるものと仮定する。

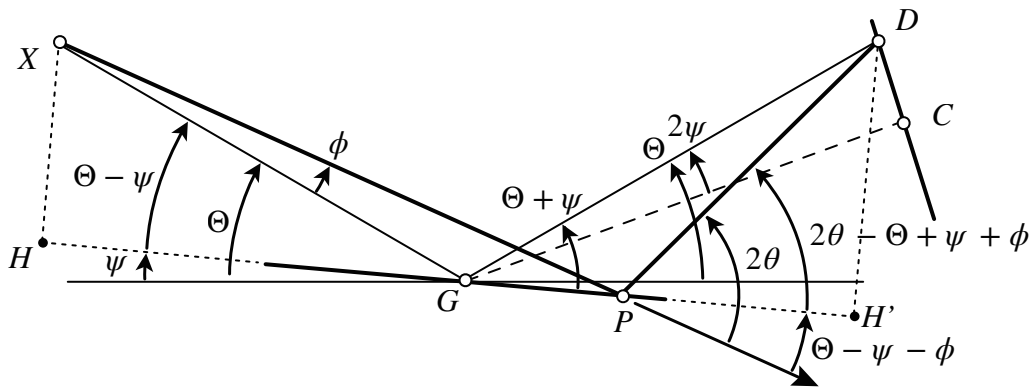


Fig. 7.1.2.2 見かけ回折角  $2\Theta$  と真の回折角  $2\theta$ , 赤道面内ずれ角  $\phi$ , 検出ストリップのオフセット角度  $2\psi$  の間の関係。

Fig. 7.1.2.2 は, 試料の中心 (ゴニオメーター軸) G からずれた試料面上の位置 P で回折したビームの強度を, 検出器中心ストリップ C からずれた位置にある検出ストリップ D が検出する場合を図示するものである。赤道面内の入射ビームのずれ角を  $\phi$  とする。角

$\angle XPD$  の補角（ $180^\circ$  から引いた角度）が「真の回折角」に相当し、この角度を  $2\theta$  と表すことにする。「見かけの回折角」 $2\Theta$  は角  $\angle XGD$  の補角に対応する。

ここでの問題は、見かけの回折角  $2\Theta$  と真の回折角  $2\theta$  の差  $\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta$  を、数式によって表現することである。もしこの値が  $2\Theta$  と  $\phi$ ,  $\psi$  の関数：

$$\Delta 2\Theta = f(2\Theta, \phi, \psi), \quad (7.1.2.1)$$

として表されるとすれば、赤道取差関数  $\omega_E(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi, \Psi)$  は以下の式で表現される。

$$\omega_E(\Delta 2\Theta; 2\Theta, \Phi, \Psi) = \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \delta(\Delta 2\Theta - f(\Theta, \phi, \psi)) g(\phi) h(\psi) d\phi d\psi \quad (7.1.2.2)$$

ここで  $\delta(x)$  はディラックのデルタ関数であり、 $g(\phi)$  は赤道面内ずれ角  $\phi$  が変化したときの強度変化、 $h(\psi)$  は検出ストリップのオフセット角  $2\psi$  が変化したときの強度変化を表す関数である。ここでは話を単純にするために連続一様分布：

$$g(\phi) = \begin{cases} \frac{1}{\Phi} & \left[-\frac{\Phi}{2} < \phi < \frac{\Phi}{2}\right], \\ 0 & [\text{otherwise}] \end{cases}, \quad (7.1.2.3)$$

$$h(\psi) = \begin{cases} \frac{1}{\Psi} & \left[-\frac{\Psi}{2} < \psi < \frac{\Psi}{2}\right], \\ 0 & [\text{otherwise}] \end{cases}, \quad (7.1.2.4)$$

を仮定するが、必要であれば (a) 非球面補正、(b) 斜入射補正 (Ida, 2016) などを含めることも困難ではないだろう。

Fig. 7.1.2.2 から、以下の関係のあることがわかる。

$$\begin{aligned} \overline{GP} &= \overline{PH} - \overline{GH} = \frac{\overline{XH}}{\tan(\Theta - \psi - \phi)} - \overline{XG} \cos(\Theta - \psi) \\ &= \frac{\overline{XG} \sin(\Theta - \psi)}{\tan(\Theta - \psi - \phi)} - \overline{XG} \cos(\Theta - \psi) \\ &= R \left[ \frac{\sin(\Theta - \psi)}{\tan(\Theta - \psi - \phi)} - \cos(\Theta - \psi) \right] \end{aligned} \quad (7.1.2.5)$$

$$\begin{aligned} \overline{GP} &= \overline{GH'} - \overline{PH'} = \overline{GD} \cos(\Theta + \psi) - \frac{\overline{DH'}}{\tan(2\theta - \Theta + \psi + \phi)} \\ &= \overline{GD} \cos(\Theta + \psi) - \frac{\overline{GD} \sin(\Theta + \psi)}{\tan(2\theta - \Theta + \psi + \phi)} \\ &= \frac{R}{\cos 2\psi} \left[ \cos(\Theta + \psi) - \frac{\sin(\Theta + \psi)}{\tan(2\theta - \Theta + \psi + \phi)} \right]. \end{aligned} \quad (7.1.2.6)$$

そこで、 $\Theta$  と  $\theta$ ,  $\psi$  に関する以下の方程式が導かれる。

$$\frac{\sin(\Theta - \psi)}{\tan(\Theta - \psi - \phi)} - \cos(\Theta - \psi) = \frac{1}{\cos 2\psi} \left[ \cos(\Theta + \psi) - \frac{\sin(\Theta + \psi)}{\tan(2\theta - \Theta + \psi + \phi)} \right]. \quad (7.1.2.7)$$

方程式 (7.1.2.7) を  $2\theta$  について解けば,

$$2\theta = \Theta - \psi - \phi + \arctan \frac{\sin(\Theta + \psi)}{g(\Theta, \phi, \psi)}, \quad (7.1.2.8)$$

$$g(\Theta, \phi, \psi) = \cos(\Theta - \psi) \cos 2\psi + \cos(\Theta + \psi) - \frac{\sin(\Theta - \psi) \cos 2\psi}{\tan(\Theta - \psi - \phi)}, \quad (7.1.2.9)$$

となり,  $\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta$  の厳密解として,

$$\Delta 2\Theta = \Theta + \psi + \phi - \arctan \frac{\sin(\Theta + \psi)}{g(\Theta, \phi, \psi)} \quad (7.1.2.10)$$

が得られる。

ずれ角  $\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta$  が,  $\phi$  と  $\psi$  によってどのように変化するかを Fig. 7.1.2.3 に示す。

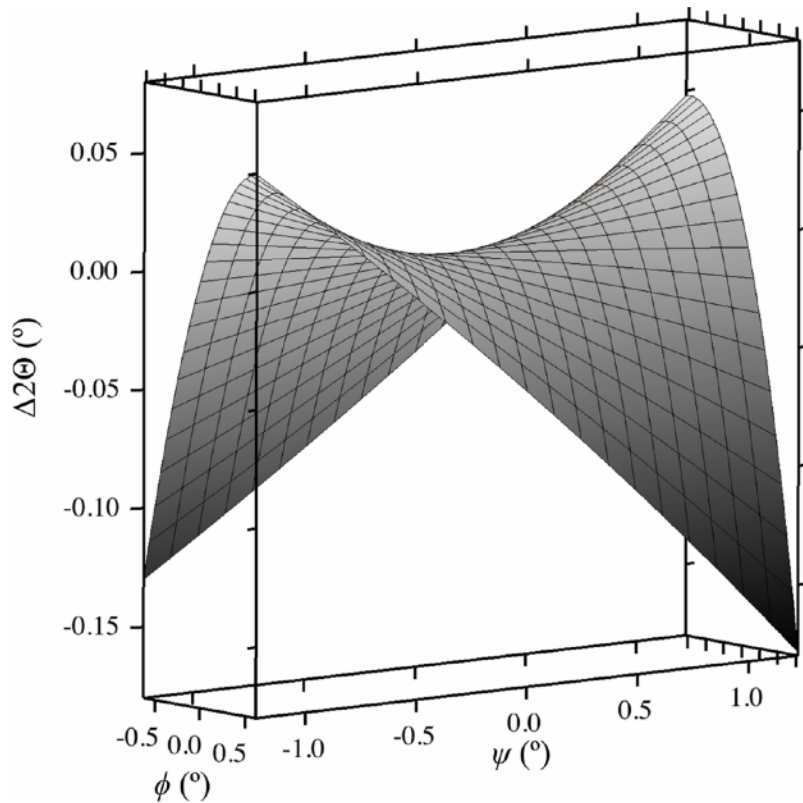


Fig. 7.1.2.3 回折角のずれ  $\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta$  が, 赤道面内ずれ角  $\phi$  と 検出ストリップのオフセット角の半分  $\psi$  によってどのように変化するかを 3次元投影した図。

$\Phi = 1.25^\circ, 2\Psi = 4.89^\circ, 2\Theta = 30^\circ$  の場合。

以上のことから, 厳密な赤道収差関数は, 形式的に以下の数式で与えられる。

$$\omega_E(\Delta 2\Theta; \Theta, \Phi, \Psi) = \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} \delta \left( \Delta 2\Theta - \Theta - \psi - \phi + \arctan \frac{\sin(\Theta + \psi)}{g(\Theta, \phi, \psi)} \right) d\psi d\phi \quad (7.1.2.11)$$

厳密な赤道収差関数の数値的な解を求めることは困難ではない。例えば以下のようにすればよい。

(1) 以下のような  $\phi_i$ ,  $\psi_j$  の値：

$$\phi_i = -\frac{\Phi}{2} + \frac{i-1}{N-1}\Phi \quad (i = 1, \dots, N)$$

$$\psi_j = -\frac{\Psi}{2} + \frac{j-1}{M-1}\Psi \quad (j = 1, \dots, N)$$

について、 $N \times N$  個の  $\Delta 2\Theta_{ij}$  の値を計算する（例えば  $N = 1001$  とする）。

(2)  $\Delta 2\Theta_{ij}$  について、 $N$  個のビン（区分範囲）を持つヒストグラムを描く。 $\Delta 2\Theta_{ij}$  の最小値と最大値がそれぞれ  $\Delta 2\Theta_{\min}$  と  $\Delta 2\Theta_{\max}$  のとき、ビンの幅  $w$  は、以下の式で決めれば良い。

$$w = \frac{\Delta 2\Theta_{\max} - \Delta 2\Theta_{\min}}{N-1}$$

また、 $k$  番目のビンは、以下の範囲をカバーすることとする。

$$\Delta 2\Theta_{\min} + (k-1.5)w \leq \Delta 2\Theta_{ij} < \Delta 2\Theta_{\min} + (k-0.5)w$$

そのようにすれば、1 番目のビン ( $k = 1$ ) には以下の条件：

$$\Delta 2\Theta_{\min} - 0.5w \leq \Delta 2\Theta_{ij} < \Delta 2\Theta_{\min} + 0.5w,$$

を満たす  $\Delta 2\Theta_{ij}$  の値が割り当てられるので最小値  $\Delta 2\Theta_{\min}$  を含むことになり、 $N$  番目のビン ( $k = N$ ) には以下の条件：

$$\Delta 2\Theta_{\max} - 0.5w \leq \Delta 2\Theta_{ij} < \Delta 2\Theta_{\max} + 0.5w,$$

を満たす  $\Delta 2\Theta_{ij}$  の値が割り当てられるので最大値  $\Delta 2\Theta_{\max}$  を含むことになる。

この手順で赤道収差関数の厳密解を 1001-ビンのヒストグラムとして描いたものを Fig. 7.1.2.4 に示す。

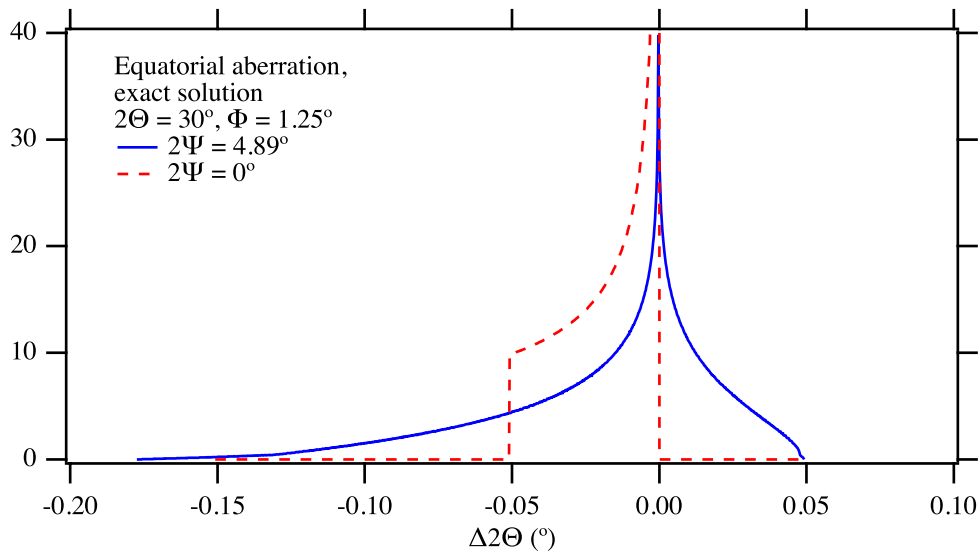


Fig. 7.1.2.4 赤道収差関数の厳密解を 1001-ビンのヒストグラムとして描いたもの（青実線）。 $\Phi = 1.25^\circ$ ， $2\Psi = 4.89^\circ$ ， $2\Theta = 30^\circ$  の場合。参考のため  $2\Psi = 0^\circ$  の場合の平板試料収差関数（赤破線）を描き入れている。

### 7.1.2.2 赤道収差の近似形式 Approximate formula of equatorial aberration

Śłowik & Zięba (2001) の提案した近似形式に従えば、 $\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta$  に関する以下の式が導かれる。

$$\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta \approx -\frac{2\phi(\phi + \psi)}{\tan \Theta} . \quad (7.1.2.12)$$

この形式は、単純に厳密解の 2 次展開としても求めることができる（補足 7.1.E）。式 (7.1.2.12) で表される回折角ずれ  $\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta$  の  $\phi$  と  $\psi$  に対する近似的な依存性を Fig. 7.1.2.5 に示す。Fig. 7.1.2.3 に示した厳密な関係と比較すると、厳密な依存性の主な特徴は再現できているが、わずかなずれが現れていることも確認できる。

赤道収差関数の近似形式は

$$\omega_E(\Delta 2\Theta; \Theta, \Phi, \Psi) = \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} \delta\left(\Delta 2\Theta + \frac{2\phi(\phi + \psi)}{\tan \Theta}\right) d\psi d\phi \quad (7.1.2.13)$$

と表現される。



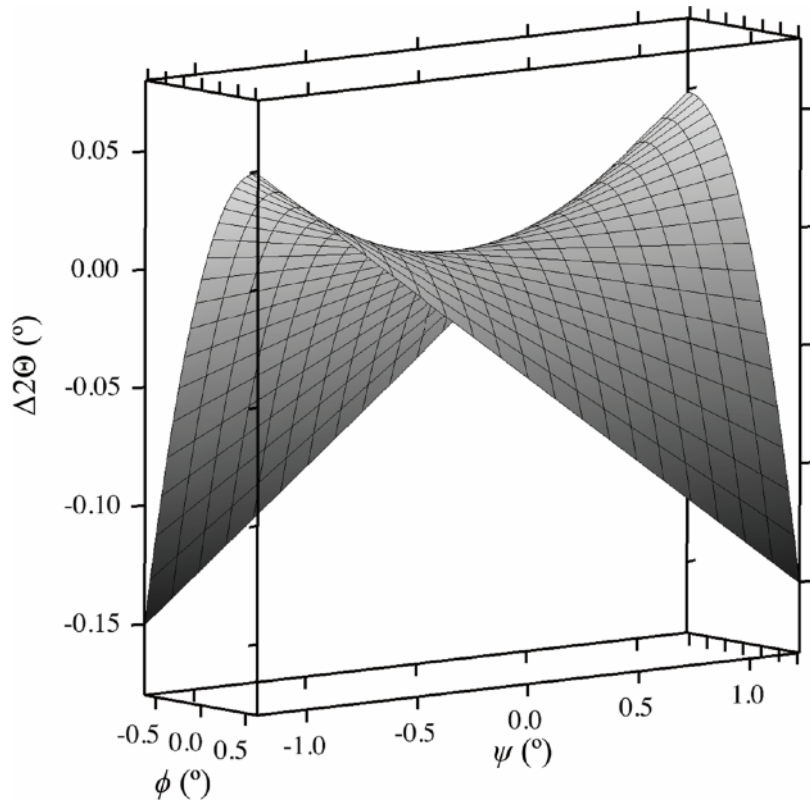


Fig. 7.1.2.5 回折角のずれ  $\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta$  が、赤道面内ずれ角  $\phi$  と検出ストリップのオフセット角の半分  $\psi$  によってどのように変化するか、式 (7.1.2.12) で表される近似的な関係を 3次元投影した図。  $\Phi = 1.25^\circ, 2\Psi = 4.89^\circ, 2\Theta = 30^\circ$  の場合。

赤道収差関数の近似形式については、1次から4次のキュムラント  $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4$  の解析的な表現：

$$\kappa_1 = \langle \Delta 2\Theta \rangle = -\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta}, \quad (7.1.2.14)$$

$$\kappa_2 = \frac{\Phi^2}{\tan^2 \Theta} \left( \frac{\Phi^2}{45} + \frac{\Psi^2}{36} \right), \quad (7.1.2.15)$$

$$\kappa_3 = -\frac{\Phi^4}{\tan^3 \Theta} \left( \frac{2\Phi^2}{945} + \frac{\Psi^2}{90} \right), \quad (7.1.2.16)$$

$$\kappa_4 = -\frac{\Phi^4}{\tan^4 \Theta} \left( \frac{2\Phi^4}{4725} - \frac{2\Phi^2\Psi^2}{945} - \frac{\Psi^4}{5400} \right) \quad (7.1.2.17)$$

を得ることができる (補足 7.1.F)。

赤道収差関数の近似形式については、以下のように明示的な表現も得ることができる (補足 7.1.G)。

$$\omega_E(\Delta 2\Theta; \Theta, \Phi, \Psi) = \begin{cases} \frac{2 \tan \Theta}{\Phi \Psi} \ln \frac{\phi_U}{\phi_L} & [\Delta 2\Theta_{\min} < \Delta 2\Theta < \Delta 2\Theta_{\max}] \\ 0 & [\text{otherwise}] \end{cases}, \quad (7.1.2.18)$$

ここで

$$\Delta 2\Theta_{\min} = -\frac{\Phi^2 + \Phi\Psi}{2 \tan \Theta}, \quad (7.1.2.19)$$

$$\Delta 2\Theta_{\max} = \begin{cases} \frac{\Phi^2}{8 \tan \Theta} & [\Psi \leq 2\Phi] \\ -\frac{\Phi^2 + \Phi\Psi}{2 \tan \Theta} & [2\Phi < \Psi] \end{cases}, \quad (7.1.2.20)$$

$$\phi_L = \max \left\{ -\frac{\Psi}{4} + \sqrt{D}, \frac{\Psi}{4} - \sqrt{D} \right\}, \quad (7.1.2.21)$$

$$\phi_U = \min \left\{ \frac{\Phi}{2}, \frac{\Psi}{4} + \sqrt{D} \right\}, \quad (7.1.2.22)$$

$$D = \frac{\Psi^2}{16} - \frac{\Delta 2\Theta \tan \Theta}{2}. \quad (7.1.2.23)$$

式 (7.1.2.21) と式 (7.1.2.22) 中の関数  $\max\{a, b\}$  と  $\min\{a, b\}$  は、それぞれ  $a$  と  $b$  のうち大きい値あるいは小さい値を返す関数である。

$2\Theta = 30^\circ$ ,  $\Phi = 1.25^\circ$  and  $2\Psi = 4.89^\circ$  として、式 (7.1.2.18)–(7.1.2.23) の明示的な表現で計算された装置関数を Fig. 7.1.2.6 に示す。

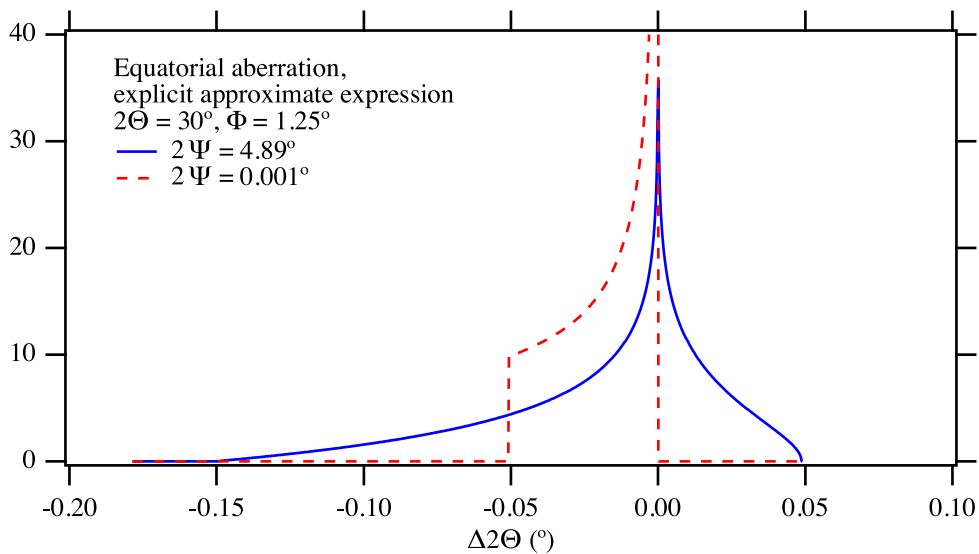


Fig. 7.1.2.6 明示的な表現を使って計算された赤道収差関数の近似形式。  $\Phi = 1.25^\circ$ ,  $2\Psi = 4.89^\circ, 0.01^\circ$ ,  $2\Theta = 30^\circ$  とする。

### 7.1.2.3 赤道収差の近似形式に関するスケール変換

#### Scale transform about approximate equatorial aberration

逆畳み込み処理に用いるためには、以下のスケール変換の形式を用いることとする。

$$\chi = \begin{cases} \ln \frac{\sec \Theta}{\sec \Theta_c} & [2\Theta_c \leq 2\Theta] \\ \ln \frac{\tan \Theta}{\tan \Theta_c} & [2\Theta < 2\Theta_c] \end{cases} \quad (7.1.2.24)$$

以下の関係：

$$d\chi = \begin{cases} \frac{\tan \Theta d\Theta}{\sin \Theta \cos \Theta} & [2\Theta_c \leq 2\Theta] \\ \frac{d\Theta}{\sin \Theta \cos \Theta} & [2\Theta < 2\Theta_c] \end{cases} = \begin{cases} \frac{\tan \Theta d2\Theta}{2} & [2\Theta_c \leq 2\Theta] \\ \frac{d2\Theta}{\sin 2\Theta} & [2\Theta < 2\Theta_c] \end{cases}, \quad (7.1.2.25)$$

$$w_E(\chi; \Theta, \Phi, \Psi) d\chi = \omega_E(\Delta 2\Theta; \Theta, \Phi, \Psi) d2\Theta, \quad (7.1.2.26)$$

から，変換後のスケール  $\chi$  では赤道収差関数は以下のように表現される。

$$w_E(\chi; \Theta, \Phi, \Psi) = \frac{d2\Theta}{d\chi} \omega_E(\Delta 2\Theta; \Theta, \Phi, \Psi) = \frac{2}{\tan \Theta} \omega_E\left(\frac{2\chi}{\tan \Theta}; \Theta, \Phi, \Psi\right) \\ = \begin{cases} \frac{2}{\Phi\Psi} \ln \frac{\phi_U}{\phi_L} & [\chi_{\min} < \chi < \chi_{\max}] \\ 0 & [\text{elsewhere}] \end{cases} \quad (7.1.2.27)$$

$$\chi_{\min} = \frac{\tan \Theta}{2} \Delta 2\Theta_{\min} = -\frac{\Phi\Psi + \Phi^2}{4} \quad (7.1.2.28)$$

$$\chi_{\max} = \frac{\tan \Theta}{2} \Delta 2\Theta_{\max} = \begin{cases} \frac{\Phi\Psi - \Phi^2}{4} & [2\Phi < \Psi] \\ \frac{\Psi^2}{16} & [\Psi \leq 2\Phi] \end{cases} \quad (7.1.2.29)$$

$$\phi_L = \max \left\{ \frac{\Psi}{4} - \sqrt{\frac{\Psi^2}{16} - \chi}, -\frac{\Psi}{4} + \sqrt{\frac{\Psi^2}{16} - \chi} \right\} \quad (7.1.2.30)$$

$$\phi_U = \min \left\{ \frac{\Phi}{2}, \frac{\Psi}{4} + \sqrt{\frac{\Psi^2}{16} - \chi} \right\} \quad (7.1.2.31)$$

同じスケール変換を平板試料収差関数：

$$\omega_{FS}(\Delta 2\Theta; \Phi) = \begin{cases} \frac{\tan \Theta}{\Phi^2} \left( -\frac{2\Delta 2\Theta \tan \Theta}{\Phi^2} \right)^{-1/2} & \left[ -\frac{\Phi^2}{2 \tan \Theta} < \Delta 2\Theta < 0 \right] \\ 0 & [\text{elsewhere}] \end{cases}, \quad (7.1.2.32)$$

に適用すれば，変換後のスケールでの収差関数の表現として

$$\begin{aligned}
w_{\text{FS}}(\chi; \Phi) &= \begin{cases} \frac{2}{\Phi^2} \left( -\frac{4\chi}{\Phi^2} \right)^{-1/2} & \left[ -\frac{\Phi^2}{2 \tan \Theta} < \frac{2\chi}{\tan \Theta} < 0 \right] \\ 0 & \text{[elsewhere]} \end{cases} \\
&= \begin{cases} \frac{2}{\Phi^2} \left( -\frac{4\chi}{\Phi^2} \right)^{-1/2} & \left[ -\frac{\Phi^2}{4} < \chi < 0 \right] \\ 0 & \text{[elsewhere]} \end{cases} \quad (7.1.2.33)
\end{aligned}$$

が得られる。

**(補足 7.1.A) 低回折角領域での有効赤道発散角  $\Phi_{\text{eff}}$**

**Effective equatorial divergence angle  $\Phi_{\text{eff}}$  for lower diffraction angles**

ゴニオメーター半径  $R$  試料幅  $W$  の場合の有効赤道発散角  $\Phi_{\text{eff}}$  は以下の式で与えられる。

$$\begin{aligned}
\Phi_{\text{eff}} &= \arctan \frac{\sin \Theta}{\cos \Theta - W/2R} - \arctan \frac{\sin \Theta}{\cos \Theta + W/2R} = \arctan \frac{\frac{\sin \Theta}{\cos \Theta - W/2R} - \frac{\sin \Theta}{\cos \Theta + W/2R}}{1 + \frac{\sin^2 \Theta}{\cos^2 \Theta - W^2/4R^2}} \\
&= \arctan \frac{\sin \Theta (\cos \Theta + W/2R) - \sin \Theta (\cos \Theta - W/2R)}{1 - W^2/4R^2} = \arctan \frac{(W/R) \sin \Theta}{1 - (W/2R)^2}
\end{aligned}$$

**(補足 7.1.B) 臨界角  $2\Theta_c$  Critical diffraction angle  $2\Theta_c$**

$\Phi_{\text{eff}} < \Phi_{\text{DS}}$  の条件は

$$\begin{aligned}
\arctan \frac{(W/R) \sin \Theta}{1 - (W/2R)^2} < \Phi_{\text{DS}} &\Leftrightarrow \frac{(W/R) \sin \Theta}{1 - (W/2R)^2} < \tan \Phi_{\text{DS}} \\
\Leftrightarrow \sin \Theta < \frac{[1 - (W/2R)^2] \tan \Phi_{\text{DS}}}{W/R} \\
\Leftrightarrow 2\Theta < 2 \arcsin \frac{[1 - (W/2R)^2] \tan \Phi_{\text{DS}}}{W/R}
\end{aligned}$$

とも書けるので、臨界角  $2\Theta_c$  は

$$2\Theta_c = 2 \arcsin \frac{[1 - (W/2R)^2] \tan \Phi_{\text{DS}}}{W/R}$$

によって与えられる。

**(補足 7.1.C) 平板試料収差関数のキュムラント Cumulants of flat-specimen aberration function**

平板試料収差関数：

$$\omega_{\text{F}}(\Delta 2\Theta; \Theta) = \begin{cases} \frac{1}{\Phi^2 \cot \Theta} \left( -\frac{2\Delta 2\theta}{\Phi^2 \cot \Theta} \right)^{-1/2} & \left[ -\frac{\Phi^2 \cot \Theta}{2} < \Delta 2\Theta < 0 \right], \\ 0 & \text{[elsewhere]} \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \omega_F(z) = \frac{1}{\Phi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \delta\left(z + \frac{2\phi^2}{\tan \Theta}\right) d\phi \quad (7.1.C.1)$$

の1次キュムラント  $\kappa_1$  は

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} z \omega_F(z) dz = \frac{1}{\Phi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} z \delta\left(z + \frac{2\phi^2}{\tan \Theta}\right) d\phi dz \\ &= \frac{1}{\Phi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left(-\frac{2\phi^2}{\tan \Theta}\right) d\phi = -\frac{4}{\Phi \tan \Theta} \int_0^{\frac{\Phi}{2}} \phi^2 d\phi = -\frac{4}{\Phi \tan \Theta} \left[\frac{\phi^3}{3}\right]_0^{\frac{\Phi}{2}} \\ &= -\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta} \end{aligned} \quad (7.1.C.2)$$

となり, 2次キュムラント  $\kappa_2$  は

$$\begin{aligned} \kappa_2 &= \int_{-\infty}^{\infty} z^2 \omega_E(z) dz - \kappa_1^2 = \frac{1}{\Phi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} z^2 \delta\left(z + \frac{2\phi^2}{\tan \Theta}\right) d\phi dz - \kappa_1^2 \\ &= \frac{1}{\Phi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left(-\frac{2\phi^2}{\tan \Theta}\right)^2 d\phi - \kappa_1^2 = \frac{8}{\Phi \tan^2 \Theta} \int_0^{\frac{\Phi}{2}} \phi^4 d\phi - \kappa_1^2 \\ &= \frac{8}{\Phi \tan^2 \Theta} \left[\frac{\phi^5}{5}\right]_0^{\frac{\Phi}{2}} - \kappa_1^2 = \frac{\Phi^4}{20 \tan^2 \Theta} - \kappa_1^2 = \frac{\Phi^4}{20 \tan^2 \Theta} - \frac{\Phi^4}{36 \tan^2 \Theta} \\ &= \frac{\Phi^4}{45 \tan^2 \Theta}, \end{aligned} \quad (7.1.C.3)$$

3次キュムラント  $\kappa_3$  は

$$\begin{aligned} \kappa_3 &= \langle z^3 \rangle - 3\langle z^2 \rangle \langle z \rangle + 2\langle z \rangle^3 = \langle z^3 \rangle - 3\left(\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2\right) \langle z \rangle - \langle z \rangle^3 \\ &= \langle z^3 \rangle - 3\kappa_2 \kappa_1 - \kappa_1^3 \\ &= \frac{1}{\Phi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} z^3 \delta\left(z + \frac{2\phi^2}{\tan \Theta}\right) d\phi dz - 3\kappa_2 \kappa_1 - \kappa_1^3 \\ &= \frac{1}{\Phi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left(-\frac{2\phi^2}{\tan \Theta}\right)^3 d\phi - 3\left(\frac{\Phi^4}{45 \tan^2 \Theta}\right) \left(-\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta}\right) - \left(-\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta}\right)^3 \\ &= -\frac{16}{\Phi \tan^3 \Theta} \int_0^{\frac{\Phi}{2}} \phi^6 d\phi + \frac{\Phi^6}{90 \tan^3 \Theta} + \frac{\Phi^6}{216 \tan^3 \Theta} \\ &= -\frac{\Phi^6}{56 \tan^3 \Theta} + \frac{17\Phi^6}{1080 \tan^3 \Theta} \\ &= -\frac{2\Phi^6}{945 \tan^3 \Theta}, \end{aligned} \quad (7.1.C.4)$$

4次キュムラント  $\kappa_4$  は

$$\begin{aligned} \kappa_4 &= \langle z^4 \rangle - 4\langle z^3 \rangle \langle z \rangle - 3\langle z^2 \rangle^2 + 12\langle z^2 \rangle \langle z \rangle^2 - 6\langle z \rangle^4 \\ &= \langle z^4 \rangle - 4\left(\langle z^3 \rangle - 3\langle z^2 \rangle \langle z \rangle + 2\langle z \rangle^3\right) \langle z \rangle - 12\langle z^2 \rangle \langle z \rangle^2 + 8\langle z \rangle^4 \\ &\quad - 3\langle z^2 \rangle^2 + 12\langle z^2 \rangle \langle z \rangle^2 - 6\langle z \rangle^4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \langle z^4 \rangle - 4\kappa_3 \langle z \rangle - 3\langle z^2 \rangle^2 + 2\langle z \rangle^4 \\
&= \frac{1}{\Phi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left( -\frac{2\phi^2}{\tan \Theta} \right)^4 d\phi - 4 \left( -\frac{2\Phi^6}{945 \tan^3 \Theta} \right) \left( -\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta} \right) - 3 \left( \frac{\Phi^4}{20 \tan^2 \Theta} \right)^2 \\
&\quad + 2 \left( -\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta} \right)^4 \\
&= \frac{32}{\Phi \tan^4 \Theta} \int_0^{\frac{\Phi_F}{2}} \phi^8 d\phi - \frac{4\Phi^8}{81 \times 5 \times 7 \tan^4 \Theta} - \frac{3\Phi^8}{16 \times 25 \tan^4 \Theta} + \frac{\Phi^8}{8 \times 81 \tan^4 \Theta} \\
&= \frac{32}{\Phi \tan^4 \Theta} \left[ \frac{\phi^9}{9} \right]_0^{\frac{\Phi}{2}} + \frac{3\Phi^8}{8 \times 81 \times 5 \times 7 \tan^4 \Theta} - \frac{3\Phi^8}{16 \times 25 \tan^4 \Theta} \\
&= \frac{\Phi^8}{16 \times 9 \tan^4 \Theta} + \frac{\Phi^8}{8 \times 27 \times 5 \times 7 \tan^4 \Theta} - \frac{3\Phi^8}{16 \times 25 \tan^4 \Theta} \\
&= \frac{107\Phi^8}{16 \times 27 \times 5 \times 7 \tan^4 \Theta} - \frac{3\Phi^8}{16 \times 25 \tan^4 \Theta} = -\frac{32\Phi^8}{16 \times 27 \times 25 \times 7 \tan^4 \Theta} \\
&= -\frac{2\Phi^8}{27 \times 25 \times 7 \tan^4 \Theta} = -\frac{2\Phi^8}{4725 \tan^4 \Theta} \tag{7.1.C.5}
\end{aligned}$$

で与えられる。

#### Appendix 7.1.D 赤道収差関数に関する $2\Theta_c < 2\Theta$ の制限

##### Restriction $2\Theta_c < 2\Theta$ for equatorial aberration function

赤道収差に関して逆畳み込み処理を施す可能性について検討する。臨界角  $2\Theta_c$  を

$$2\Theta_c = 2 \arcsin \frac{R\Phi}{W}, \tag{7.1.D.1}$$

とすれば、 $2\Theta < 2\Theta_c$  のときの有効発散角は

$$\Phi_{\text{eff}} = \begin{cases} \frac{W \sin \Theta}{R} & [2\Theta < 2\Theta_c], \\ \Phi & [2\Theta_c \leq 2\Theta] \end{cases}, \tag{7.1.D.2}$$

と表され、近似収差関数のキュムラントは

$$\kappa_1 = -\frac{\Phi_{\text{eff}}^2}{6 \tan \Theta} = -\frac{W^2 \sin^2 \Theta}{6R^2 \tan \Theta} = -\frac{W^2 \sin \Theta \cos \Theta}{6R^2} = -\frac{W^2 \sin 2\Theta}{12R^2} \tag{7.1.D.3}$$

$$\kappa_2 = \frac{\Phi_{\text{eff}}^2}{\tan^2 \Theta} \left( \frac{\Phi_{\text{eff}}^2}{45} + \frac{\Psi^2}{144} \right) = \frac{W^2 \sin^2 \Theta}{R^2 \tan^2 \Theta} \left( \frac{W^2 \sin^2 \Theta}{45R^2} + \frac{\Psi^2}{144} \right) \tag{7.1.D.4}$$

$$\begin{aligned}
\kappa_3 &= -\frac{\Phi_{\text{eff}}^4}{\tan^3 \Theta} \left( \frac{2\Phi_{\text{eff}}^2}{945} + \frac{\Psi^2}{360} \right) = -\frac{W^4 \sin^4 \Theta}{R^4 \tan^3 \Theta} \left( \frac{2W^2 \sin^2 \Theta}{945R^2} + \frac{\Psi^2}{360} \right) \\
&= -\frac{2W^6 \sin^3 \Theta \cos^3 \Theta}{945R^6} - \frac{W^4 \Psi^2 \sin \Theta \cos^3 \Theta}{360R^4} \tag{7.1.D.5}
\end{aligned}$$

$$\kappa_4 = -\frac{\Phi_{\text{eff}}^4}{\tan^4 \Theta} \left( \frac{\Phi_{\text{eff}}^4}{4725} - \frac{\Phi_{\text{eff}}^2 \Psi^2}{1890} - \frac{\Psi^4}{86400} \right). \tag{7.1.D.6}$$

となる。スケール変換のために適切な数式を導くことが困難である。

1次と3次のキュムラントを再現するために、以下の関係：

$$(a \sin \Theta + b)^3 \cos^3 \Theta + (a \sin \Theta - b)^3 \cos^3 \Theta = 2a^3 \sin^3 \Theta \cos^3 \Theta + 6ab^2 \sin \Theta \cos^3 \Theta \quad (7.1.D.7)$$

を利用できる可能性は残る。以下のような関係を仮定できる。

$$2a^3 = -\frac{2W^6}{945R^6} \quad (7.1.D.8)$$

$$6ab^2 = -\frac{W^4\Psi^2}{360R^4} \quad (7.1.D.9)$$

$$a = -\frac{W^2}{\sqrt[3]{945R^2}} = -\frac{W^2}{3\sqrt[3]{35R^2}} \quad (7.1.D.10)$$

$$b^2 = -\frac{W^4\Psi^2}{360R^4} \times \frac{1}{6a} = \frac{W^4\Psi^2}{360R^4} \times \frac{3\sqrt[3]{35R^2}}{6W^2} = \frac{\sqrt[3]{35}W^2\Psi^2}{720R^2}$$

$$\Rightarrow b = \pm \frac{\sqrt[6]{35}W\Psi}{6\sqrt{20}R} \quad (7.1.D.11)$$

$$\int \frac{\sec \Theta d2\Theta}{(a \sin \Theta + b)} = \frac{2}{a} \int \frac{\sec \Theta d\Theta}{(\sin \Theta + b/a)} \quad (7.1.D.12)$$

$$\frac{b}{a} = \pm \frac{\sqrt[6]{35}W\Psi}{6\sqrt{20}R} \times \left( -\frac{3\sqrt[3]{35}R^2}{W^2} \right) = \mp \frac{\sqrt[6]{35^3}R\Psi}{2\sqrt{20}W} = \mp \frac{\sqrt{35}R\Psi}{2\sqrt{20}W} \quad (7.1.D.13)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{\sec \Theta d\Theta}{(\sin \Theta + c)} &= \frac{\ln |c + \sin \Theta|}{1 - c^2} - \frac{\ln(1 + \sin \Theta)}{2 - 2c} - \frac{\ln(1 - \sin \Theta)}{2 + 2c} \\ &= \frac{\ln(c + \sin \Theta)^2 - (1 + c) \ln(1 + \sin \Theta) - (1 - c) \ln(1 - \sin \Theta)}{2 - 2c^2} \end{aligned} \quad (7.1.D.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\Theta} \left[ \frac{1}{2 - 2c^2} \ln \frac{(c + \sin \Theta)^2}{(1 + \sin \Theta)^{1+c} (1 - \sin \Theta)^{1-c}} \right] \\ &= \frac{1}{2 - 2c^2} \left[ \frac{2 \cos \Theta}{c + \sin \Theta} - \frac{(1 + c) \cos \Theta}{1 + \sin \Theta} + \frac{(1 - c) \cos \Theta}{1 - \sin \Theta} \right] \\ &= \frac{\cos \Theta}{2 - 2c^2} \\ &\times \frac{2 - 2 \sin^2 \Theta - (1 + c)(c + \sin \Theta)(1 - \sin \Theta) + (1 - c)(c + \sin \Theta)(1 + \sin \Theta)}{(c + \sin \Theta)(1 + \sin \Theta)(1 - \sin \Theta)} \\ &= \frac{\cos \Theta}{2 - 2c^2} \times \frac{2 - 2 \sin^2 \Theta - (c + \sin \Theta) \left[ (1 + c)(1 - \sin \Theta) - (1 - c)(1 + \sin \Theta) \right]}{(c + \sin \Theta) \cos^2 \Theta} \\ &= \frac{1}{2 - 2c^2} \times \frac{2 - 2 \sin^2 \Theta - (c + \sin \Theta)(2c - 2 \sin \Theta)}{(c + \sin \Theta) \cos \Theta} \\ &= \frac{1}{1 - c^2} \times \frac{1 - \sin^2 \Theta - (c + \sin \Theta)(c - \sin \Theta)}{(c + \sin \Theta) \cos \Theta} \\ &= \frac{1}{1 - c^2} \times \frac{1 - \sin^2 \Theta - c^2 + \sin^2 \Theta}{(c + \sin \Theta) \cos \Theta} \\ &= \frac{1}{1 - c^2} \times \frac{1 - c^2}{(c + \sin \Theta) \cos \Theta} \\ &= \frac{1}{(c + \sin \Theta) \cos \Theta} . \end{aligned} \quad (7.1.D.15)$$

しかし、現時点では以上のような関係を利用できるかがまだ不明瞭である。

ここでは  $2\Theta_c \leq 2\Theta$  の制限を用いることにするので、スケール変換  $(2\Theta, Y) \rightarrow (\chi, \eta)$  は以下の関係で表されることになる。

$$\chi = 2 \ln \frac{\sec \Theta}{\sec \Theta_c} \quad (7.1.D.16)$$

$$\frac{d\chi}{d2\Theta} = \tan \Theta \Rightarrow \frac{d\chi}{\tan \Theta} = d2\Theta \quad (7.1.D.17)$$

$$\eta = YC(2\Theta)\tan \Theta \quad (7.1.D.18)$$

### (補足 7.1.E) 赤道収差関数の近似形式の導出

#### Derivation of approximate formula of equatorial aberration function

式 (7.1.2.9) と 式 (7.1.2.10) で示したように、回折角ずれ  $\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta$  は以下の式で表される。

$$\Delta 2\Theta \equiv 2\Theta - 2\theta = \Theta + \psi + \phi - \arctan \frac{\sin(\Theta + \psi)}{g} \quad (7.1.E.1)$$

$$g = \cos(\Theta - \psi) \cos 2\psi + \cos(\Theta + \psi) - \frac{\sin(\Theta - \psi) \cos 2\psi}{\tan(\Theta - \psi - \phi)}, \quad (7.1.E.2)$$

$$g_0 = 2 \cos \Theta - \frac{\sin \Theta}{\tan \Theta} = \cos \Theta. \quad (7.1.E.3)$$

偏微分  $\partial \Delta 2\Theta / \partial \phi$  は

$$\frac{\partial \Delta 2\Theta}{\partial \phi} = 1 - \left[ 1 + \frac{\sin^2(\Theta + \psi)}{g^2} \right]^{-1} \left[ -\frac{\sin(\Theta + \psi)}{g^2} \right] \frac{\partial g}{\partial \phi} = 1 + \frac{\sin(\Theta + \psi)}{g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)} \frac{\partial g}{\partial \phi}, \quad (7.1.E.4)$$

$$\frac{\partial g}{\partial \phi} = -\frac{\sin(\Theta - \psi) \cos 2\psi}{\sin^2(\Theta - \psi - \phi)}. \quad (7.1.E.5)$$

と表される。 $\partial g / \partial \phi$  と  $\partial \Delta 2\Theta / \partial \phi$  の  $\phi = 0$ ,  $\psi = 0$  での値を  $(\partial g / \partial \phi)_0$  と  $(\partial \Delta 2\Theta / \partial \phi)_0$  で表すことにすれば、

$$\left( \frac{\partial g}{\partial \phi} \right)_0 = -\frac{1}{\sin \Theta}, \quad (7.1.E.6)$$

$$\left( \frac{\partial \Delta 2\Theta}{\partial \phi} \right)_0 = 1 + \frac{\sin \Theta}{g_0^2 + \sin^2 \Theta} \left( \frac{\partial g}{\partial \phi} \right)_0 = 1 + \frac{\sin \Theta}{\cos^2 \Theta + \sin^2 \Theta} \times \left( -\frac{1}{\sin \Theta} \right) = 0. \quad (7.1.E.7)$$

また、偏微分  $\partial \Delta 2\Theta / \partial \psi$  は

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta 2\Theta}{\partial \psi} &= 1 - \left[ 1 + \frac{\sin^2(\Theta + \psi)}{g^2} \right]^{-1} \left[ \frac{\cos(\Theta + \psi)}{g} - \frac{\sin(\Theta + \psi)}{g^2} \frac{\partial g}{\partial \psi} \right] \\ &= 1 - \frac{\cos(\Theta + \psi)g - \sin(\Theta + \psi)(\partial g / \partial \psi)}{g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)}, \end{aligned} \quad (7.1.E.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial \psi} &= \sin(\Theta - \psi) \cos 2\psi - 2 \cos(\Theta - \psi) \sin 2\psi - \sin(\Theta + \psi) \\ &\quad - \frac{-\cos(\Theta - \psi) \cos 2\psi - 2 \sin(\Theta - \psi) \sin 2\psi}{\tan(\Theta - \psi - \phi)} - \frac{\sin(\Theta - \psi) \cos 2\psi}{\sin^2(\Theta - \psi - \phi)}. \end{aligned} \quad (7.1.E.9)$$

と表され、 $\partial g / \partial \psi$  と  $\partial \Delta 2\Theta / \partial \psi$  の  $\phi = 0$ ,  $\psi = 0$  での値を  $(\partial g / \partial \psi)_0$  と  $(\partial \Delta 2\Theta / \partial \psi)_0$  で表すことにすれば、



$$\left(\frac{\partial g}{\partial \psi}\right)_0 = \frac{\cos \Theta}{\tan \Theta} - \frac{1}{\sin \Theta} = \frac{\cos^2 \Theta - 1}{\sin \Theta} = -\sin \Theta, \quad (7.1.E.10)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \psi}\right)_0 = 1 - \frac{\cos \Theta g_0 - \sin \Theta (\partial g / \partial \psi)_0}{g_0^2 + \sin^2 \Theta} = 1 - \frac{\cos^2 \Theta - \sin \Theta \times (-\sin \Theta)}{\cos^2 \Theta + \sin^2 \Theta} = 1 - 1 = 0 \quad (7.1.E.11)$$

となる。

2次偏微分  $\partial^2 \Delta 2\Theta / \partial \phi^2$  は

$$\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \phi^2} = \frac{\partial}{\partial \phi} \left[ 1 + \frac{\sin(\Theta + \psi)}{g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)} \frac{\partial g}{\partial \phi} \right] = -\frac{2 \sin(\Theta + \psi) g}{[g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)]^2} \left(\frac{\partial g}{\partial \phi}\right)^2 + \frac{\sin(\Theta + \psi)}{g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)} \frac{\partial^2 g}{\partial \phi^2} \quad (7.1.E.12)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \phi^2} = -\frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\sin(\Theta - \psi) \cos 2\psi}{\sin^2(\Theta - \psi - \phi)} = -\frac{2 \sin(\Theta - \psi) \cos 2\psi \cos(\Theta - \psi - \phi)}{\sin^3(\Theta - \psi - \phi)}. \quad (7.1.E.12)$$

と表され、 $\partial^2 g / \partial \phi^2$  と  $\partial^2 \Delta 2\Theta / \partial \phi^2$  の  $\phi = 0$ ,  $\psi = 0$  での値を  $(\partial^2 g / \partial \phi^2)_0$  と  $(\partial^2 \Delta 2\Theta / \partial \phi^2)_0$  で表せば、

$$\left(\frac{\partial^2 g}{\partial \phi^2}\right)_0 = -\frac{2 \cos \Theta}{\sin^2 \Theta}, \quad (7.1.E.13)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \phi^2}\right)_0 = -2 \sin \Theta \cos \Theta \left(-\frac{1}{\sin \Theta}\right)^2 + \sin \Theta \left(-\frac{2 \cos \Theta}{\sin^2 \Theta}\right) = -\frac{4}{\tan \Theta} \quad (7.1.E.14)$$

となる。

2次偏微分  $\partial^2 \Delta 2\Theta / \partial \psi \partial \phi$  は

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \psi \partial \phi} &= \frac{\partial}{\partial \psi} \left[ 1 + \frac{\sin(\Theta + \psi)}{g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)} \frac{\partial g}{\partial \phi} \right] \\ &= \frac{\cos(\Theta + \psi)}{g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)} \frac{\partial g}{\partial \phi} - \frac{\sin(\Theta + \psi)}{[g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)]^2} \left[ 2g \frac{\partial g}{\partial \psi} + 2 \sin(\Theta + \psi) \cos(\Theta + \psi) \right] \frac{\partial g}{\partial \phi} \\ &\quad + \frac{\sin(\Theta + \psi)}{g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)} \frac{\partial^2 g}{\partial \psi \partial \phi}, \end{aligned} \quad (7.1.E.15)$$

ここで

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial \psi \partial \phi} &= -\frac{\partial}{\partial \psi} \frac{\sin(\Theta - \psi) \cos 2\psi}{\sin^2(\Theta - \psi - \phi)} \\ &= \frac{\cos(\Theta - \psi) \cos 2\psi + 2 \sin(\Theta - \psi) \sin 2\psi}{\sin^2(\Theta - \psi - \phi)} - \frac{2 \sin(\Theta - \psi) \cos 2\psi \cos(\Theta - \psi - \phi)}{\sin^3(\Theta - \psi - \phi)}. \end{aligned} \quad (7.1.E.16)$$

となり、 $\partial^2 g / \partial \psi \partial \phi$  と  $\partial^2 \Delta 2\Theta / \partial \psi \partial \phi$  の  $\phi = 0$ ,  $\psi = 0$  での値を  $(\partial^2 g / \partial \psi \partial \phi)_0$  と  $(\partial^2 \Delta 2\Theta / \partial \psi \partial \phi)_0$  で表せば

$$\left(\frac{\partial^2 g}{\partial \psi \partial \phi}\right)_0 = \frac{\cos \Theta}{\sin^2 \Theta} - \frac{2 \cos \Theta}{\sin^2 \Theta} = -\frac{\cos \Theta}{\sin^2 \Theta} \quad (7.1.E.17)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \psi \partial \phi}\right)_0 = \cos \Theta \left(-\frac{1}{\sin \Theta}\right) - \sin \Theta \left[ 2 \cos \Theta (-\sin \Theta) + 2 \sin \Theta \cos \Theta \right] \left(-\frac{1}{\sin \Theta}\right)$$

$$\begin{aligned}
& + \sin \Theta \left( -\frac{\cos \Theta}{\sin^2 \Theta} \right) \\
= & -\frac{2}{\tan \Theta} \tag{7.1.E.18}
\end{aligned}$$

となる。

最後に、2次偏微分  $\partial^2 \Delta 2\Theta / \partial \psi^2$  の値は

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \psi^2} &= \frac{\partial}{\partial \psi} \left[ 1 - \frac{\cos(\Theta + \psi)g - \sin(\Theta + \psi)(\partial g / \partial \psi)}{g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)} \right] \\
&= -\frac{-\sin(\Theta + \psi)g + \cos(\Theta + \psi)(\partial g / \partial \psi) - \cos(\Theta + \psi)(\partial g / \partial \psi) - \sin(\Theta + \psi)(\partial^2 g / \partial \psi^2)}{g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)} \\
&\quad + \frac{\cos(\Theta + \psi)g - \sin(\Theta + \psi)(\partial g / \partial \psi)}{[g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)]^2} \left[ 2g \frac{\partial g}{\partial \psi} + 2 \sin(\Theta + \psi) \cos(\Theta + \psi) \right] \\
&= -\frac{-\sin(\Theta + \psi)g - \sin(\Theta + \psi)(\partial^2 g / \partial \psi^2)}{g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)} \\
&\quad + \frac{\cos(\Theta + \psi)g - \sin(\Theta + \psi)(\partial g / \partial \psi)}{[g^2 + \sin^2(\Theta + \psi)]^2} \left[ 2g \frac{\partial g}{\partial \psi} + 2 \sin(\Theta + \psi) \cos(\Theta + \psi) \right], \tag{7.1.E.19}
\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 g}{\partial \psi^2} &= \frac{\partial}{\partial \psi} \left[ \sin(\Theta - \psi) \cos 2\psi - 2 \cos(\Theta - \psi) \sin 2\psi - \sin(\Theta + \psi) \right. \\
&\quad \left. - \frac{-\cos(\Theta - \psi) \cos 2\psi - 2 \sin(\Theta - \psi) \sin 2\psi}{\tan(\Theta - \psi - \phi)} - \frac{\sin(\Theta - \psi) \cos 2\psi}{\sin^2(\Theta - \psi - \phi)} \right] \\
&= \frac{\partial}{\partial \psi} \left[ -\sin(\psi - \Theta) \cos 2\psi - 2 \cos(\psi - \Theta) \sin 2\psi - \sin(\psi + \Theta) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\cos(\psi - \Theta) \cos 2\psi - 2 \sin(\psi - \Theta) \sin 2\psi}{\tan(\psi + \phi - \Theta)} + \frac{\sin(\psi - \Theta) \cos 2\psi}{\sin^2(\psi + \phi - \Theta)} \right] \\
&= -\cos(\psi - \Theta) \cos 2\psi + 2 \sin(\psi - \Theta) \sin 2\psi \\
&\quad + 2 \sin(\psi - \Theta) \sin 2\psi - 4 \cos(\psi - \Theta) \cos 2\psi \\
&\quad - \cos(\psi + \Theta) \\
&\quad - \frac{-\sin(\psi - \Theta) \cos 2\psi - 2 \cos(\psi - \Theta) \sin 2\psi - 2 \cos(\psi - \Theta) \sin 2\psi - 4 \sin(\psi - \Theta) \cos 2\psi}{\tan(\psi + \phi - \Theta)} \\
&\quad + \frac{\cos(\psi - \Theta) \cos 2\psi - 2 \sin(\psi - \Theta) \sin 2\psi}{\sin^2(\psi + \phi - \Theta)} \\
&\quad + \frac{\cos(\psi - \Theta) \cos 2\psi - 2 \sin(\psi - \Theta) \sin 2\psi}{\sin^2(\psi + \phi - \Theta)} - \frac{2 \sin(\psi - \Theta) \cos 2\psi \cos(\psi + \phi - \Theta)}{\sin^3(\psi + \phi - \Theta)} \\
&= -5 \cos(\psi - \Theta) \cos 2\psi + 4 \sin(\psi - \Theta) \sin 2\psi - \cos(\psi + \Theta) \\
&\quad + \frac{5 \sin(\psi - \Theta) \cos 2\psi + 4 \cos(\psi - \Theta) \sin 2\psi}{\tan(\psi + \phi - \Theta)} + \frac{\cos(\psi - \Theta) \cos 2\psi - 2 \sin(\psi - \Theta) \sin 2\psi}{\sin^2(\psi + \phi - \Theta)} \\
&\quad + \frac{\cos(\psi - \Theta) \cos 2\psi - 2 \sin(\psi - \Theta) \sin 2\psi}{\sin^2(\psi + \phi - \Theta)} - \frac{2 \sin(\psi - \Theta) \cos 2\psi \cos(\psi + \phi - \Theta)}{\sin^3(\psi + \phi - \Theta)} \\
&= -5 \cos(\psi - \Theta) \cos 2\psi + 4 \sin(\psi - \Theta) \sin 2\psi - \cos(\psi + \Theta)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{5 \sin(\psi - \Theta) \cos 2\psi + 4 \cos(\psi - \Theta) \sin 2\psi}{\tan(\psi + \phi - \Theta)} + \frac{2 \cos(\psi - \Theta) \cos 2\psi - 4 \sin(\psi - \Theta) \sin 2\psi}{\sin^2(\psi + \phi - \Theta)} \\
& - \frac{2 \sin(\psi - \Theta) \cos 2\psi \cos(\psi + \phi - \Theta)}{\sin^3(\psi + \phi - \Theta)}
\end{aligned} \tag{7.1.E.12}$$

となり、 $\partial^2 g / \partial \psi^2$  と  $\partial^2 \Delta 2\Theta / \partial \psi^2$  の  $\phi = 0$ ,  $\psi = 0$  での値を  $\left(\partial^2 g / \partial \psi^2\right)_0$  と  $\left(\partial^2 \Delta 2\Theta / \partial \psi^2\right)_0$  で表せば

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^2 g}{\partial \psi^2}\right)_0 &= -6 \cos \Theta + \frac{5 \sin \Theta}{\tan \Theta} + \frac{2 \cos \Theta}{\sin^2 \Theta} - \frac{2 \sin \Theta \cos \Theta}{\sin^3 \Theta} \\
&= -6 \cos \Theta + 5 \cos \Theta + \frac{2 \cos \Theta}{\sin^2 \Theta} - \frac{2 \cos \Theta}{\sin^2 \Theta} = -\cos \Theta
\end{aligned} \tag{7.1.E.13}$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \psi^2}\right)_0 &= -\frac{-\sin \Theta g_0 - \sin \Theta \left(\partial^2 g / \partial \psi^2\right)_0}{g_0^2 + \sin^2 \Theta} \\
&\quad + \frac{\cos \Theta g_0 - \sin \Theta \left(\partial g / \partial \psi\right)_0}{(g_0^2 + \sin^2 \Theta)^2} \left[ 2g_0 \left(\frac{\partial g}{\partial \psi}\right)_0 + 2 \sin \Theta \cos \Theta \right] \\
&= -\frac{-\sin \Theta \cos \Theta - \sin \Theta (-\cos \Theta)}{\cos^2 \Theta + \sin^2 \Theta} \\
&\quad + \frac{-\cos^2 \Theta - \sin \Theta (-\sin \Theta)}{(\cos^2 \Theta + \sin^2 \Theta)^2} \left[ 2 \cos \Theta (-\sin \Theta) + 2 \sin \Theta \cos \Theta \right] \\
&= 0
\end{aligned} \tag{7.1.E.14}$$

となる。

以上をまとめると、以下の関係がある。

$$\begin{aligned}
(\Delta 2\Theta)_0 &= 0, \quad \left(\frac{\partial \Delta 2\Theta}{\partial \phi}\right)_0 = 0, \quad \left(\frac{\partial \Delta 2\Theta}{\partial \psi}\right)_0 = 0, \\
\left(\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \phi^2}\right)_0 &= -\frac{4}{\tan \Theta}, \quad \left(\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \phi \partial \psi}\right)_0 = -\frac{2}{\tan \Theta}, \quad \left(\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \psi^2}\right)_0 = 0
\end{aligned} \tag{7.1.E.15}$$

したがって、回折角ずれ  $\Delta 2\Theta$  と  $\phi$ ,  $\psi$  は以下の関係：

$$\begin{aligned}
\Delta 2\Theta &\approx (\Delta 2\Theta)_0 + \left(\frac{\partial \Delta 2\Theta}{\partial \phi}\right)_0 \phi + \left(\frac{\partial \Delta 2\Theta}{\partial \psi}\right)_0 \psi \\
&\quad + \left(\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \phi^2}\right)_0 \frac{\phi^2}{2} + \left(\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \phi \partial \psi}\right)_0 \phi \psi + \left(\frac{\partial^2 \Delta 2\Theta}{\partial \psi^2}\right)_0 \frac{\psi^2}{2} \\
&= -\frac{2(\phi^2 + \phi \psi)}{\tan \theta}
\end{aligned} \tag{7.1.E.16}$$

で近似されることになる。

### (補足 7.1.F) 赤道収差関数近似形式のキュムラント

#### Cumulants of approximate equatorial aberration functions

赤道収差関数近似形式の 1 次キュムラント  $\kappa_1$  は

$$\kappa_1 = \int_{-\infty}^{\infty} z w_E(z) dz = \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} z \delta\left(z + \frac{2\phi^2 + 2\phi\psi}{\tan \Theta}\right) d\psi d\phi dz$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} \left( -\frac{2\phi^2 + 2\phi\psi}{\tan\Theta} \right) d\psi d\phi = -\frac{4}{\Phi\Psi \tan\Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_0^{\frac{\Psi}{2}} \phi^2 d\psi d\phi \\
&= -\frac{4}{\Phi\Psi \tan\Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left[ \phi^2\psi \right]_0^{\frac{\Psi}{2}} d\phi = -\frac{2}{\Phi \tan\Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \phi^2 d\phi = -\frac{4}{\Phi \tan\Theta} \int_0^{\frac{\Phi}{2}} \phi^2 d\phi \\
&= -\frac{4}{\Phi \tan\Theta} \left[ \frac{\phi^3}{3} \right]_0^{\frac{\Phi}{2}} = -\frac{4}{\Phi \tan\Theta} \left( \frac{\Phi^3}{24} \right) = -\frac{\Phi^2}{6 \tan\Theta}
\end{aligned} \tag{7.1.F.1}$$

となる。変数の2乗平均  $\langle z^2 \rangle$  は

$$\begin{aligned}
\langle z^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} z^2 \omega_E(z) dz = \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} z^2 \delta \left( z + \frac{2\phi^2 + 2\phi\psi}{\tan\Theta} \right) d\psi d\phi dz \\
&= \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} \left( -\frac{2\phi^2 + 2\phi\psi}{\tan\Theta} \right)^2 d\psi d\phi = \frac{4}{\Phi\Psi \tan^2\Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} (\phi^4 + 2\phi^3\psi + \phi^2\psi^2) d\psi d\phi \\
&= \frac{8}{\Phi\Psi \tan^2\Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left[ \phi^4\psi + \frac{\phi^2\psi^3}{3} \right]_0^{\frac{\Psi}{2}} d\phi = \frac{8}{\Phi\Psi \tan^2\Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left( \frac{\phi^4\Psi}{2} + \frac{\phi^2\Psi^3}{24} \right) d\phi \\
&= \frac{1}{\Phi \tan^2\Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left( 4\phi^4 + \frac{\phi^2\Psi^2}{3} \right) d\phi = \frac{2}{\Phi \tan^2\Theta} \int_0^{\frac{\Phi}{2}} \left( 4\phi^4 + \frac{\phi^2\Psi^2}{3} \right) d\phi \\
&= \frac{2}{\Phi \tan^2\Theta} \left[ \frac{4\phi^5}{5} + \frac{\phi^3\Psi^2}{9} \right]_0^{\frac{\Phi}{2}} = \frac{2}{\Phi \tan^2\Theta} \left( \frac{\Phi^5}{40} + \frac{\Phi^3\Psi^2}{72} \right) = \frac{1}{\tan^2\Theta} \left( \frac{\Phi^4}{20} + \frac{\Phi^2\Psi^2}{36} \right)
\end{aligned} \tag{7.1.F.2}$$

となるので、2次キュムラント  $\kappa_2$  は

$$\begin{aligned}
\kappa_2 &= \int_{-\infty}^{\infty} z^2 \omega_E(z) dz - \left[ \int_{-\infty}^{\infty} z \omega_E(z) dz \right]^2 = \frac{1}{\tan^2\Theta} \left( \frac{\Phi^4}{20} + \frac{\Phi^2\Psi^2}{36} \right) - \frac{\Phi^4}{36 \tan^2\Theta} \\
&= \frac{1}{\tan^2\Theta} \left[ \frac{(9-5)\Phi^4}{4 \times 5 \times 9} + \frac{\Phi^2\Psi^2}{36} \right] = \frac{1}{\tan^2\Theta} \left( \frac{\Phi^4}{45} + \frac{\Phi^2\Psi^2}{36} \right).
\end{aligned} \tag{7.1.F.3}$$

となる。

変数の3乗平均  $\langle z^3 \rangle$  は

$$\begin{aligned}
\langle z^3 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} z^3 \omega_E(z) dz = \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} z^3 \delta \left( z + \frac{2\phi^2 + 2\phi\psi}{\tan\Theta} \right) d\psi d\phi dz \\
&= \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} \left( -\frac{2\phi^2 + 2\phi\psi}{\tan\Theta} \right)^3 d\psi d\phi \\
&= -\frac{8}{\Phi\Psi \tan^3\Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} (\phi^6 + 3\phi^5\psi + 3\phi^4\psi^2 + \phi^3\psi^3) d\psi d\phi \\
&= -\frac{16}{\Phi\Psi \tan^3\Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left[ \phi^6\psi + \phi^4\psi^3 \right]_0^{\frac{\Psi}{2}} d\phi = -\frac{16}{\Phi\Psi \tan^3\Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left( \frac{\phi^6\Psi}{2} + \frac{\phi^4\Psi^3}{8} \right) d\phi \\
&= -\frac{1}{\Phi \tan^3\Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} (8\phi^6 + 2\phi^4\Psi^2) d\phi = -\frac{1}{\Phi \tan^3\Theta} \int_0^{\frac{\Phi}{2}} (16\phi^6 + 4\phi^4\Psi^2) d\phi
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{\Phi \tan^3 \Theta} \left[ \frac{16\phi^7}{7} + \frac{4\phi^5\Psi^2}{5} \right]_0^{\frac{\Phi}{2}} \\
&= -\frac{1}{\Phi \tan^3 \Theta} \left( \frac{\Phi^7}{7 \times 8} + \frac{\Phi^5\Psi^2}{5 \times 8} \right) = -\frac{1}{\tan^3 \Theta} \left( \frac{\Phi^6}{56} + \frac{\Phi^4\Psi^2}{40} \right) \tag{7.1.F.4}
\end{aligned}$$

となり，3次キュムラント  $\kappa_3$  は

$$\begin{aligned}
\kappa_3 &= \int_{-\infty}^{\infty} z^3 w_E(z) dz - 3 \left[ \int_{-\infty}^{\infty} z^2 w_E(z) dz \right] \left[ \int_{-\infty}^{\infty} z w_E(z) dz \right] + 2 \left[ \int_{-\infty}^{\infty} z w_E(z) dz \right]^3 \\
&= -\frac{1}{\tan^3 \Theta} \left( \frac{\Phi^6}{56} + \frac{\Phi^4\Psi^2}{40} \right) - 3 \left[ \frac{1}{\tan^2 \Theta} \left( \frac{\Phi^4}{20} + \frac{\Phi^2\Psi^2}{36} \right) \right] \left( -\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta} \right) \\
&\quad + 2 \left( -\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta} \right)^3 \\
&= -\frac{1}{\tan^3 \Theta} \left( \frac{\Phi^6}{56} + \frac{\Phi^4\Psi^2}{40} - \frac{\Phi^6}{40} - \frac{\Phi^4\Psi^2}{72} + \frac{\Phi^6}{108} \right) \\
&= -\frac{1}{\tan^3 \Theta} \left( \frac{\Phi^6}{8 \times 7} + \frac{\Phi^4\Psi^2}{8 \times 5} - \frac{\Phi^6}{8 \times 5} - \frac{\Phi^4\Psi^2}{8 \times 9} + \frac{\Phi^6}{4 \times 27} \right) \\
&= -\frac{1}{\tan^3 \Theta} \left[ \frac{(135 - 189 + 70)\Phi^6}{8 \times 27 \times 5 \times 7} + \frac{(9 - 5)\Phi^4\Psi^2}{8 \times 9 \times 5} \right] \\
&= -\frac{1}{\tan^3 \Theta} \left( \frac{2\Phi^6}{27 \times 5 \times 7} + \frac{\Phi^4\Psi^2}{2 \times 9 \times 5} \right) = -\frac{1}{\tan^3 \Theta} \left( \frac{2\Phi^6}{945} + \frac{\Phi^4\Psi^2}{90} \right). \tag{7.1.F.5}
\end{aligned}$$

となる。

変数の4乗平均  $\langle z^4 \rangle$  は

$$\begin{aligned}
\langle z^4 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} z^4 \omega_E(z) dz = \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} z^4 \delta \left( z + \frac{2\phi^2 + 2\phi\psi}{\tan \Theta} \right) d\psi d\phi dz \\
&= \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} \left( -\frac{2\phi^2 + 2\phi\psi}{\tan \Theta} \right)^4 d\psi d\phi \\
&= \frac{16}{\Phi\Psi \tan^4 \Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} \left( \phi^8 + 4\phi^7\psi + 6\phi^6\psi^2 + 4\phi^5\psi^3 + \phi^4\psi^4 \right) d\psi d\phi \\
&= \frac{32}{\Phi\Psi \tan^4 \Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left[ \phi^8\psi + 2\phi^6\psi^3 + \frac{\phi^4\psi^5}{5} \right]_0^{\frac{\Psi}{2}} d\phi = \frac{32}{\Phi\Psi \tan^4 \Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left( \frac{\phi^8\Psi}{2} + \frac{\phi^6\Psi^3}{4} + \frac{\phi^4\Psi^3}{160} \right) d\phi \\
&= \frac{1}{\Phi \tan^4 \Theta} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \left( 16\phi^8 + 8\phi^6\Psi^2 + \frac{\phi^4\Psi^4}{5} \right) d\phi = \frac{2}{\Phi \tan^4 \Theta} \left[ \frac{16\phi^9}{9} + \frac{8\phi^7\Psi^2}{7} + \frac{\phi^5\Psi^4}{25} \right]_0^{\frac{\Phi}{2}} \\
&= \frac{1}{\Phi \tan^4 \Theta} \left( \frac{\Phi^9}{16 \times 9} + \frac{\Phi^7\Psi^2}{8 \times 7} + \frac{\Phi^5\Psi^4}{16 \times 25} \right) = \frac{\Phi^4}{\tan^4 \Theta} \left( \frac{\Phi^4}{16 \times 9} + \frac{\Phi^2\Psi^2}{8 \times 7} + \frac{\Psi^4}{16 \times 25} \right), \tag{7.1.F.6}
\end{aligned}$$

となり，4次キュムラント  $\kappa_4$  は

$$\begin{aligned}
\kappa_4 &= \langle z^4 \rangle - 4\langle z^3 \rangle \langle z \rangle - 3\langle z^2 \rangle^2 + 12\langle z^2 \rangle \langle z \rangle^2 - 6\langle z \rangle^4 \\
&= \frac{\Phi^4}{\tan^4 \Theta} \left( \frac{\Phi^4}{16 \times 9} + \frac{\Phi^2 \Psi^2}{8 \times 7} + \frac{\Psi^4}{16 \times 25} \right) - 4 \left[ -\frac{1}{\tan^3 \Theta} \left( \frac{\Phi^6}{56} + \frac{\Phi^4 \Psi^2}{40} \right) \right] \left( -\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta} \right) \\
&\quad - 3 \left[ \frac{1}{\tan^2 \Theta} \left( \frac{\Phi^4}{20} + \frac{\Phi^2 \Psi^2}{36} \right) \right]^2 + 12 \left[ \frac{1}{\tan^2 \Theta} \left( \frac{\Phi^4}{20} + \frac{\Phi^2 \Psi^2}{36} \right) \right] \left( -\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta} \right)^2 - 6 \left( -\frac{\Phi^2}{6 \tan \Theta} \right)^4 \\
&= \frac{\Phi^4}{\tan^4 \Theta} \left( \frac{\Phi^4}{16 \times 9} + \frac{\Phi^2 \Psi^2}{8 \times 7} + \frac{\Psi^4}{16 \times 25} \right) + \frac{\Phi^4}{\tan^4 \Theta} \left( -\frac{\Phi^4}{4 \times 3 \times 7} - \frac{\Phi^2 \Psi^2}{4 \times 3 \times 5} \right) \\
&\quad - \frac{3\Phi^4}{\tan^4 \Theta} \left( \frac{\Phi^2}{4 \times 5} + \frac{\Psi^2}{4 \times 9} \right)^2 + \frac{\Phi^4}{\tan^2 \Theta} \left( \frac{\Phi^4}{4 \times 3 \times 5} + \frac{\Phi^2 \Psi^2}{4 \times 27} \right) - \frac{\Phi^8}{8 \times 27 \tan^4 \Theta} \\
&= \frac{\Phi^4}{\tan^4 \Theta} \left( \frac{\Phi^4}{16 \times 9} + \frac{\Phi^2 \Psi^2}{8 \times 7} + \frac{\Psi^4}{16 \times 25} \right) + \frac{\Phi^4}{\tan^4 \Theta} \left( -\frac{\Phi^4}{4 \times 3 \times 7} - \frac{\Phi^2 \Psi^2}{4 \times 3 \times 5} \right) \\
&\quad - \frac{\Phi^4}{\tan^4 \Theta} \left( \frac{3\Phi^2}{16 \times 25} + \frac{\Phi^2 \Psi^2}{8 \times 3 \times 5} + \frac{\Psi^4}{16 \times 27} \right) + \frac{\Phi^4}{\tan^2 \Theta} \left( \frac{\Phi^4}{4 \times 3 \times 5} + \frac{\Phi^2 \Psi^2}{4 \times 27} \right) - \frac{\Phi^8}{8 \times 27 \tan^4 \Theta} \\
&= \frac{\Phi^8}{16 \times 9 \tan^4 \Theta} + \frac{\Phi^6 \Psi^2}{8 \times 7 \tan^4 \Theta} + \frac{\Phi^4 \Psi^4}{16 \times 25 \tan^4 \Theta} - \frac{\Phi^8}{4 \times 3 \times 7 \tan^4 \Theta} - \frac{\Phi^6 \Psi^2}{4 \times 3 \times 5 \tan^4 \Theta} - \frac{3\Phi^8}{16 \times 25 \tan^4 \Theta} \\
&\quad - \frac{\Phi^6 \Psi^2}{8 \times 3 \times 5 \tan^4 \Theta} - \frac{\Phi^4 \Psi^4}{16 \times 27 \tan^4 \Theta} + \frac{\Phi^8}{4 \times 3 \times 5 \tan^4 \Theta} + \frac{\Phi^6 \Psi^2}{4 \times 27 \tan^4 \Theta} - \frac{\Phi^8}{8 \times 27 \tan^4 \Theta} \\
&= \frac{\Phi^8}{16 \times 9 \tan^4 \Theta} - \frac{\Phi^8}{4 \times 3 \times 7 \tan^4 \Theta} - \frac{\Phi^8}{16 \times 25 \tan^4 \Theta} + \frac{\Phi^8}{4 \times 3 \times 5 \tan^4 \Theta} - \frac{\Phi^8}{8 \times 27 \tan^4 \Theta} \\
&\quad + \frac{\Phi^6 \Psi^2}{8 \times 7 \tan^4 \Theta} - \frac{\Phi^6 \Psi^2}{4 \times 3 \times 5 \tan^4 \Theta} - \frac{\Phi^6 \Psi^2}{8 \times 3 \times 5 \tan^4 \Theta} + \frac{\Phi^6 \Psi^2}{4 \times 27 \tan^4 \Theta} \\
&\quad + \frac{\Phi^4 \Psi^4}{16 \times 25 \tan^4 \Theta} - \frac{\Phi^4 \Psi^4}{16 \times 27 \tan^4 \Theta} \\
&= \frac{\Phi^8 (3 \times 25 \times 7 - 4 \times 9 \times 25 - 81 \times 7 + 4 \times 9 \times 5 \times 7 - 2 \times 25 \times 7)}{16 \times 27 \times 25 \times 7 \tan^4 \Theta} \\
&\quad + \frac{\Phi^6 \Psi^2 (27 \times 5 - 2 \times 9 \times 7 - 9 \times 7 + 2 \times 5 \times 7)}{8 \times 27 \times 5 \times 7 \tan^4 \Theta} + \frac{\Phi^4 \Psi^4 (27 - 25)}{16 \times 27 \times 25 \tan^4 \Theta} \\
&= -\frac{2\Phi^8}{16 \times 81 \times 25 \times 7 \tan^4 \Theta} + \frac{16\Phi^6 \Psi^2}{8 \times 27 \times 5 \times 7 \tan^4 \Theta} + \frac{2\Phi^4 \Psi^4}{16 \times 27 \times 25 \tan^4 \Theta} \\
&= -\frac{2\Phi^8}{27 \times 25 \times 7 \tan^4 \Theta} + \frac{2\Phi^6 \Psi^2}{27 \times 5 \times 7 \tan^4 \Theta} + \frac{\Phi^4 \Psi^4}{8 \times 27 \times 25 \tan^4 \Theta} \\
&= -\frac{1}{\tan^4 \Theta} \left( \frac{2\Phi^8}{4725} - \frac{2\Phi^6 \Psi^2}{945} - \frac{\Phi^4 \Psi^4}{5400} \right) \tag{7.1.F.7}
\end{aligned}$$

となる。

### (補足 7.1.G) 赤道収差関数近似形式の明示的な表現

#### Explicit formula of approximate equatorial aberration function

赤道収差関数近似形式は

$$w_E(z; \Theta, \phi, \psi) = \frac{2}{\Phi\Psi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{-\frac{\Psi}{2}}^{\frac{\Psi}{2}} \delta \left( z + \frac{2\phi(\phi + \psi)}{\tan \Theta} \right) d\psi d\phi \tag{7.1.G.1}$$

と表される。デルタ関数の変数が積分変数となるように、積分変数  $\psi$  について以下の関係を使った置換積分をする。

$$z + \frac{2\phi(\phi + \psi)}{\tan \Theta} \equiv y$$

$$2\phi(\phi + \psi) = (y - z) \tan \Theta \Rightarrow \psi = \frac{(y - z) \tan \Theta}{2\phi} - \phi \Rightarrow d\psi = \frac{dy \tan \Theta}{2\phi}$$

$$\psi : \quad -\frac{\Psi}{2} \quad \rightarrow \quad \frac{\Psi}{2}$$

$$y : \quad z + \frac{2\phi(\phi - \Psi/2)}{\tan \Theta} \quad \rightarrow \quad z + \frac{2\phi(\phi + \Psi/2)}{\tan \Theta}$$

この変数変換により、式 (7.1.G.1) は以下のように書き直せる。

$$\omega_E(z; \Theta, \Phi, \Psi) = \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \int_{z + \frac{2\phi(\phi - \frac{\Psi}{2})}{\tan \Theta}}^{z + \frac{2\phi(\phi + \frac{\Psi}{2})}{\tan \Theta}} \delta(y) \frac{\tan \Theta}{2\phi} dy d\phi$$

$$= \frac{1}{\Phi\Psi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \frac{\tan \Theta}{2\phi} \int_{z + \frac{2\phi(\phi - \frac{\Psi}{2})}{\tan \Theta}}^{z + \frac{2\phi(\phi + \frac{\Psi}{2})}{\tan \Theta}} \delta(y) dy d\phi. \quad (7.1.G.2)$$

ここで、デルタ関数についての一般的な関係：

$$\int_a^b \delta(x) dx = \begin{cases} 1 & [a \leq 0 \leq b] \\ -1 & [b \leq 0 \leq a], \\ 0 & [\text{otherwise}] \end{cases} \quad (7.1.G.3)$$

から、式 (7.1.G.2) の収差関数を以下のように書き直すことができる。

$$\omega_E(z; \Theta, \Phi, \Psi) = \frac{\tan \Theta}{2\Phi\Psi} \int_{-\frac{\Phi}{2}}^{\frac{\Phi}{2}} \frac{1}{\phi} \left\{ \begin{array}{l} 1 \quad \left[ z + \frac{2\phi(\phi - \Psi/2)}{\tan \Theta} < 0 < z + \frac{2\phi(\phi + \Psi/2)}{\tan \Theta} \right] \\ -1 \quad \left[ z + \frac{2\phi(\phi + \Psi/2)}{\tan \Theta} < 0 < z + \frac{2\phi(\phi - \Psi/2)}{\tan \Theta} \right] \\ 0 \quad [\text{otherwise}] \end{array} \right\} d\phi. \quad (7.1.G.4)$$

この積分の変数  $\phi$  についての有効積分範囲を Fig. 7.1.F.1 に示す。対称性から、式 (7.1.G.4) を以下のように書き直すことができる。

$$\omega_E(z; \Theta, \Phi, \Psi) = \frac{\tan \Theta}{\Phi\Psi} \int_0^{\frac{\Phi}{2}} \frac{1}{\phi} \left\{ \begin{array}{l} 1 \quad \left[ z + \frac{2\phi(\phi - \Psi/2)}{\tan \Theta} < 0 < z + \frac{2\phi(\phi + \Psi/2)}{\tan \Theta} \right] \\ 0 \quad [\text{otherwise}] \end{array} \right\} d\phi. \quad (7.1.G.5)$$

式 (7.1.G.5) で、不等式：

$$z + \frac{2\phi(\phi - \Psi/2)}{\tan \Theta} < 0 < z + \frac{2\phi(\phi + \Psi/2)}{\tan \Theta} \quad (7.1.G.6)$$

は、以下のように書き直せる。

$$\begin{aligned}
& \frac{z \tan \Theta}{2} + \phi \left( \phi - \frac{\Psi}{2} \right) < 0 < \frac{z \tan \Theta}{2} + \phi \left( \phi + \frac{\Psi}{2} \right) \\
& \Leftrightarrow \left( \phi - \frac{\Psi}{4} \right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z \tan \Theta}{2} < 0 < \left( \phi + \frac{\Psi}{4} \right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z \tan \Theta}{2} \\
& \Leftrightarrow \begin{cases} \left( \phi - \frac{\Psi}{4} \right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z \tan \Theta}{2} < 0 \\ 0 < \left( \phi + \frac{\Psi}{4} \right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z \tan \Theta}{2} \end{cases} .
\end{aligned} \tag{7.1.G.7}$$

二次方程式の判別式  $D$  は

$$D = \frac{\Psi^2}{16} - \frac{z \tan \Theta}{2} . \tag{7.1.G.8}$$

として与えられる。  $D < 0$  の場合、有効な積分範囲が存在しないので、装置関数の値はゼロになる。

収差関数がゼロでない値をとる変数  $z$  の最大値  $z_{\max}$  は、放物線：

$$\left( \phi - \frac{\Psi}{4} \right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z_{\max} \tan \Theta}{2} = 0 \tag{7.1.G.9}$$

と直線： $\phi = \Phi/2$  の交点の位置で決まる。

$2\Phi < \Psi$  の場合、積分範囲の上限  $\phi = \Phi/2$  の位置が放物線の軸の位置  $\phi = \Psi/4$  より小さいということになり、以下の関係が導かれる。

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{\Phi}{2} - \frac{\Psi}{4} \right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z_{\max} \tan \Theta}{2} = 0 \Rightarrow \frac{\Phi^2}{4} - \frac{\Phi\Psi}{4} + \frac{z_{\max} \tan \Theta}{2} = 0 \\
& \Rightarrow z_{\max} = \frac{\Phi\Psi - \Phi^2}{2 \tan \Theta}
\end{aligned} \tag{7.1.G.10}$$

$\Psi \leq 2\Phi$  の場合、放物線の底の値で  $z_{\max}$  が決まり、以下の関係が導かれる。

$$\left( \phi - \frac{\Psi}{4} \right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z_{\max} \tan \Theta}{2} = 0, \tag{7.1.G.11}$$

$$-\frac{\Psi^2}{16} + \frac{z_{\max} \tan \Theta}{2} = 0 \Rightarrow z_{\max} = \frac{\Psi^2}{8 \tan \Theta} . \tag{7.1.G.12}$$



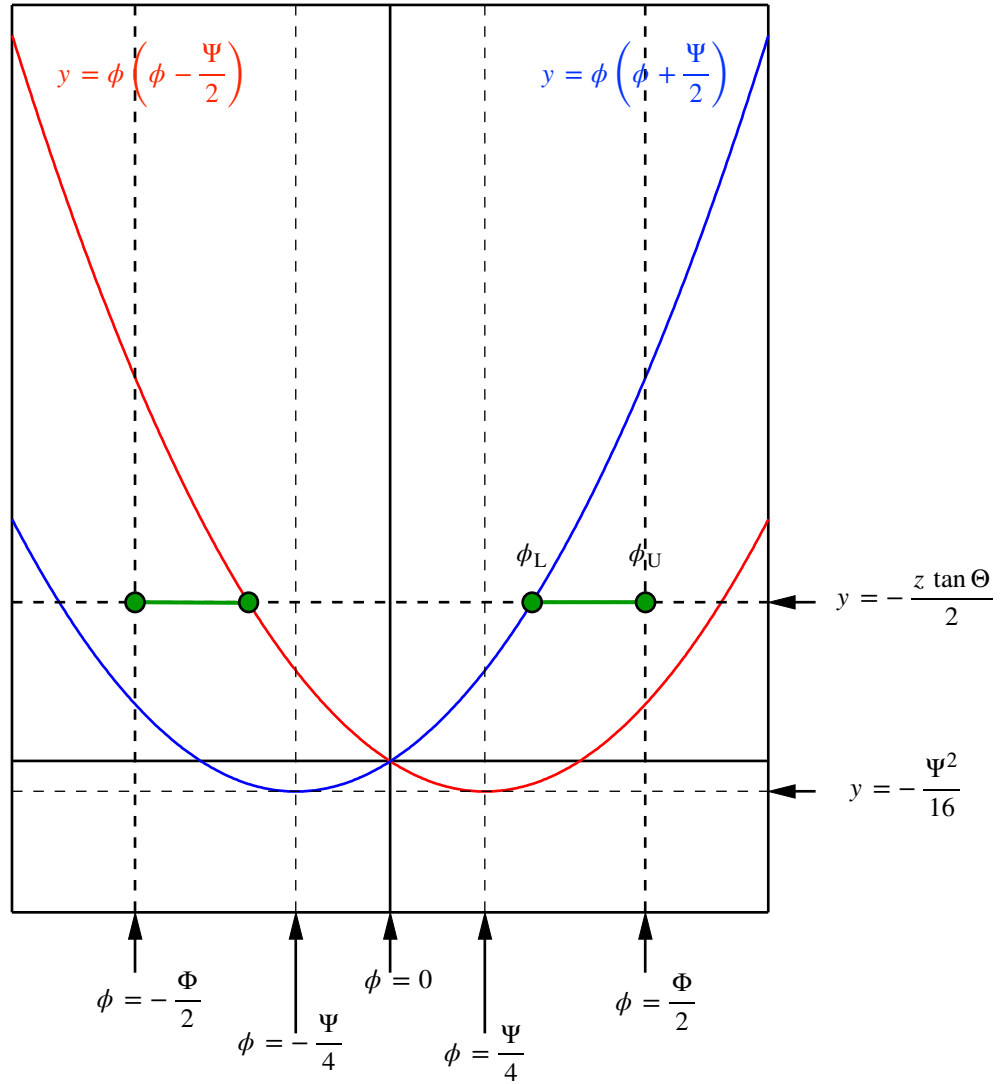


Fig. 7.1.G.1 Valid integral range about  $\phi$  in eq. (7.1.G.4).

取差関数がゼロでない値をとる変数  $z$  の最小値  $z_{\min}$  は、常に放物線：

$$\left(\phi + \frac{\Psi}{4}\right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z_{\min} \tan \Theta}{2} = 0 \quad (7.1.G.13)$$

と直線  $\phi = \Phi/2$  の交点で決まるので、

$$\begin{aligned} \left(\frac{\Phi}{2} + \frac{\Psi}{4}\right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z_{\min} \tan \Theta}{2} = 0 &\Rightarrow \frac{\Phi^2}{4} + \frac{\Phi\Psi}{4} + \frac{z_{\min} \tan \Theta}{2} = 0 \\ \Rightarrow z_{\min} = -\frac{\Phi\Psi + \Phi^2}{2 \tan \Theta} \end{aligned} \quad (7.1.G.14)$$

となる。

式 (7.1.G.4) は

$$\omega_E(z; \Theta, \Phi, \Psi) = \frac{\tan \Theta}{\Phi\Psi} \int_{\phi_L}^{\phi_U} \frac{d\phi}{\phi} = \frac{\tan \Theta}{\Phi\Psi} [\ln \phi]_{\phi_L}^{\phi_U} = \frac{\tan \Theta}{\Phi\Psi} \ln \frac{\phi_U}{\phi_L}, \quad (7.1.G.15)$$

のように単純化して表現できる。ここで  $\phi_L$  と  $\phi_U$  は有効な積分範囲の下限と上限である。

有効積分範囲の下限  $\phi_L$  は、 $0 < z < z_{\max}$  のとき

$$\left(\phi_L - \frac{\Psi}{4}\right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z \tan \Theta}{2} = 0 \Rightarrow \phi_L = \frac{\Psi}{4} - \sqrt{\frac{\Psi^2}{16} - \frac{z \tan \Theta}{2}}, \quad (7.1.G.16)$$

となり、 $z_{\min} < z < 0$  のとき

$$\left(\phi_L + \frac{\Psi}{4}\right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z \tan \Theta}{2} = 0 \Rightarrow \phi_L = -\frac{\Psi}{4} + \sqrt{\frac{\Psi^2}{16} - \frac{z \tan \Theta}{2}} \quad (7.1.G.17)$$

となる。この2つの数式をまとめて

$$\phi_L = \max \left\{ \frac{\Psi}{4} - \sqrt{\frac{\Psi^2}{16} - \frac{z \tan \Theta}{2}}, -\frac{\Psi}{4} + \sqrt{\frac{\Psi^2}{16} - \frac{z \tan \Theta}{2}} \right\}. \quad (7.1.G.18)$$

と表現することができる。

有効積分範囲の上限  $\phi_U$  は、

$$\left(\phi_U - \frac{\Psi}{4}\right)^2 - \frac{\Psi^2}{16} + \frac{z \tan \Theta}{2} = 0 \Rightarrow \phi_U = \frac{\Psi}{4} + \sqrt{\frac{\Psi^2}{16} - \frac{z \tan \Theta}{2}}, \quad (7.1.G.19)$$

あるいは

$$\phi_U = \frac{\Phi}{2}, \quad (7.1.G.20)$$

であるが、まとめて

$$\phi_U = \min \left\{ \frac{\Phi}{2}, \frac{\Psi}{4} + \sqrt{\frac{\Psi^2}{16} - \frac{z \tan \Theta}{2}} \right\} \quad (7.1.G.21)$$

と表現することができる。

## 参考文献 7.1

Cheary, R. W. & Coelho, A. (1992). "A Fundamental Parameters Approach to X-ray Line-Profile Fitting," *J. Appl. Crystallogr.* **25**, 109–121. [doi: [10.1107/S0021889891010804](https://doi.org/10.1107/S0021889891010804)]

Cheary, R. W. & Coelho, A. (1994). "Synthesizing and Fitting Linear Position-Sensitive Detector Step-Scanned Line Profiles," *J. Appl. Crystallogr.* **27**, 673–681. [doi: [10.1107/S0021889893014165](https://doi.org/10.1107/S0021889893014165)]

Ida, T., (submitted). "Equatorial aberration of powder diffraction data collected with a Si strip X-ray detector by a continuous scan integration method," *J. Appl. Crystallogr.*

Ida, T. (2006). "Experimental Estimation of Uncertainties in Powder Diffraction Intensities with a Two-dimensional X-ray Detector," *Powder Diffr.* **31**, 216–222. [doi:[10.1017/S0885715616000324](https://doi.org/10.1017/S0885715616000324)]

Ida, T. & Kimura, K. (1999). “Flat-Specimen Effect as a Convolution in Powder Diffractometry with Bragg-Brentano Geometry,” *J. Appl. Crystallogr.* **32**, 634–640. [doi: [10.1107/S0021889899003222](https://doi.org/10.1107/S0021889899003222)]

Słowik, J. & Zięba, A. (2001). “Geometrical Equatorial Aberrations in a Bragg-Brentano Powder Diffractometer with a Linear Position-Sensitive Detector,” *J. Appl. Crystallogr.* **34**, 458–464. [doi: [10.1107/S0021889801007877](https://doi.org/10.1107/S0021889801007877)]