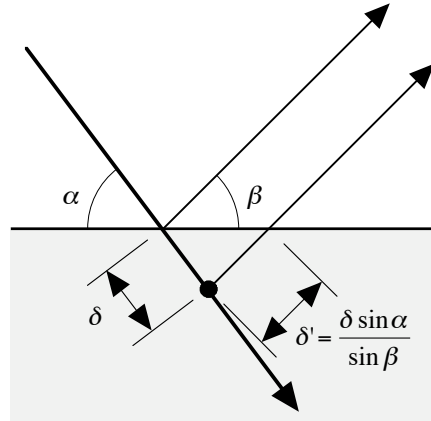


非対称反射の強度補正

検出器多連装型の粉末回折計による平板試料の回折強度測定では、入射角一定で出射角のみを変化させて回折強度を測定する「非対称反射法」が用いられます。反射法では入射角よりも低い回折角の強度は測定できないので、入射角は 5° や 8° など、比較的lowめの角度を選びます。なお、ここでは図の角度 α を入射角、角度 β を出射角と呼ぶことにします（一般的には $90^\circ - \alpha$ が入射角と定義されます）。

実験室の粉末回折計では入射角と出射角が等しいという条件を保ちながら、両方を変化させて強度を測定する「対称反射法」（ $2\theta - \theta$ スキャン）が用いられるのが普通です。

非対称反射法での回折強度は対称反射の場合に比べて、ほとんどの場合強くなります。



X線が線吸収係数 μ の媒質を距離 d 進むと強度が $\exp(-\mu d)$ 倍になります（Lambertの法則）。図の黒丸の位置で回折されたX線が、試料の中を通過する距離は $(\delta + \delta')$ です。侵入深さ（線吸収係数の逆数）よりも十分に厚い試料は、厚さ無限大とみなすことができ、回折強度が

$$\int_0^\infty \exp[-\mu(\delta + \delta')] d\delta = \int_0^\infty \exp\left[-\mu\delta\left(1 + \frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\right)\right] d\delta = \frac{1}{\mu} \left(1 + \frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\right)^{-1}$$

に比例します。対称反射の場合 $\alpha = \beta$ ですから、この値は一定の値 $(2\mu)^{-1}$ です。したがって非対称反射と対称反射の強度の比は線吸収係数によらず、

$$2 \left(1 + \frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\right)^{-1} = 2 \left[1 + \frac{\sin\alpha}{\sin(2\theta - \alpha)}\right]^{-1}$$

です。この値は $\alpha < 2\theta < 2\alpha$ のごく限られた範囲で1より小さい値をとりますが、 $2\alpha < 2\theta < 180^\circ$ の広い範囲にわたって1より大きい値になります。

非対称反射法で測定した回折強度データを対称反射の場合と比較したいときは、 $\frac{1}{2} \left[1 + \frac{\sin\alpha}{\sin(2\theta - \alpha)}\right]$ をかけてやれば良いでしょう。

この件に関する文献としては

Toraya, H., Huang, T. C. and Wu Y. (1993). "Intensity enhancement in asymmetric diffraction with parallel-beam synchrotron radiation", *J. Appl. Cryst.* **26** 774-777.

を参照してください。