

# 逆畳み込み・畳み込み計算による粉末回折データ処理

## Powder Diffraction Data Processing by Deconvolution-Convolution Calculation

名古屋工業大学・先進セラミックス研究センター 井田 隆

Takashi Ida, *Advanced Ceramics Research Center, Nagoya Inst. Tech.*

### Introduction

実測の粉末回折ピーク形状 ( $2\theta$ - $I$  図形) は試料固有の本質的な回折ピーク形状と X 線源の分光強度分布, 装置ばやけ・収差との畳み込みで表現できると理解されてきた。

正しくは, X 線源の分光強度分布の影響は対数正弦スケール ( $\ln \sin \theta$ ) で畳み込みとして表現される。それを前提とすれば逆畳み込み計算により分光強度分布由来の偽ピークを除去するのは容易である。

Bragg-Brentano ジオメトリの装置収差のうち, 平板試料収差は対数正割スケール ( $\ln \sec \theta$ ), 試料透過性収差は対数正接スケール ( $\ln \tan \theta$ ) で畳み込みとして表現される。最も目立つ軸発散収差の影響は複雑だが, 近似的に二重のスケール変換・畳み込みで表現される。

### Method

スケール変換・逆畳み込み・畳み込み処理:

$$\eta(\xi) \leftarrow \int_{-\infty}^{\infty} I(2\theta) \frac{d2\theta}{df(2\theta)} e^{2\pi i \xi f(2\theta)} df(2\theta)$$

$$I'(2\theta) \leftarrow \frac{df(2\theta)}{d2\theta} \int_{-\infty}^{\infty} \eta(\xi) \frac{\gamma_2(\xi)}{\gamma_1(\xi)} e^{-2\pi i \xi f(2\theta)} d\xi$$

スケール変換関数を  $f(2\theta)$  とする。

分光形状処理では,  $\gamma_1(\xi)$  を現実的な分光強度図形,  $\gamma_2(\xi)$  を仮想的な単一ピーク図形の  $f(2\theta)$  スケール上での Fourier 変換とする。

収差処理では,  $\gamma_1(\xi)$  を収差関数の  $f(2\theta)$  スケール上での Fourier 変換,  $\gamma_2(\xi)$  を  $\gamma_1(\xi)$  の複素絶対値とする。

### Results

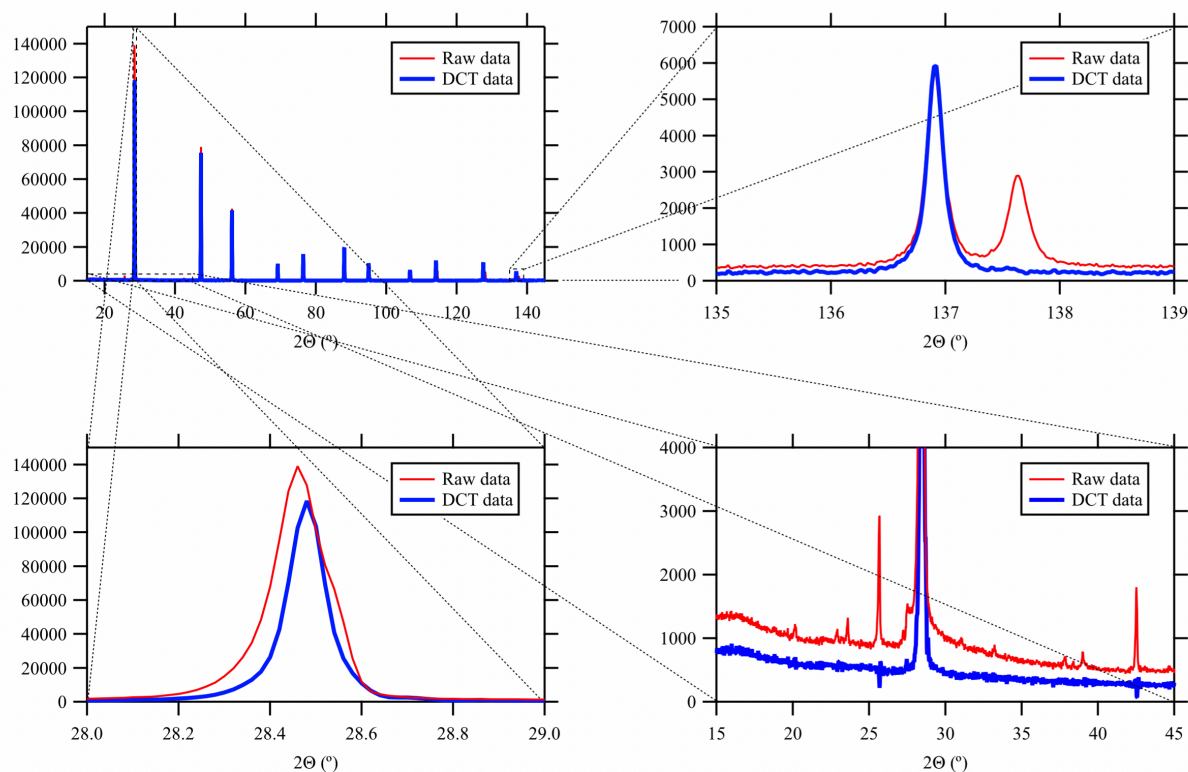


Fig. 1 逆畳み込み・畳み込み処理による粉末回折強度図形の変化。

装置収差によるピークシフトと非対称な変形が修整され, 偽ピークが除去される (ように見える)。

### 参考文献

T. Ida et al., *Powder Diffr.* **33**, 80–87 (2018a); T. Ida et al., *Powder Diffr.* **33**, 108–114 (2018b); T. Ida et al., *Powder Diffr.* **33**, 121–133 (2018c).