粉末X線回折プロファイル関数の開発

名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター 井田 隆

Takashi IDA: Development of Model Profile Functions for Powder X-Ray Diffractometry

A model peak profile function synthesized by multiple convolutions of the intrinsic peak profile with the instrumental functions of a conventional powder X-ray diffractometer has been developed. The general *recipe* for deriving accurate instrumental functions as well as an efficient numerical method for evaluating the convolutions are presented. The validity of the model function has been examined by comparing the experimental peak profiles measured in different conditions. The use of the convoluted model profile function provides a convenient and reliable way to estimate the integrated intensities, intrinsic peak positions and broadenings.

1. はじめに

粉末X線回折データから結晶構造を決定するには、各回折ピークがどの hkl 反射によるものかを決め(指数付け)、それぞれのピークについての積分強度を求めればよい。十分な数の積分強度データ $|I_{hkl}|$ が得られれば、最小二乗法により原子位置や温度因子などの構造パラメータが求められ、また正しい構造因子の位相が決まれば原理的にはFourier変換により電子密度分布が求められるはずであるということは、単結晶を用いた回折法と同じことである。

粉末回折データでは面間隔 d の値の近い反射ピークの裾が重なって各ピークの積分強度を見積もることが困難になる傾向がある。しかし、ピークの形状をモデル化する関数(プロファイル関数)を用いたフィッティング法を利用すれば、バックグラウンドの分離や複数のピークの分解を同時に行えるので、正確な積分強度の評価を実現することができる。そこで、粉末法による構造解析の目的では、細かい実験条件の違いによるピーク形状の変化に柔軟に対応して実測のピーク形状をよく再現できるようなプロファイル関数を開発することが強く望まれていた。

筆者は1997年頃から、実測の粉末回折ピークの形状が「試料の本質的な回折プロファイル」と「装置関数プロファイル」との多重のたたみこみであるという観点から、物理的な意味のあるパラメータによって定量的にピーク形状を表現するようなプロファイル関数の形式を導く体系的な方法論を確立して、これを基盤として粉末X線回折を用いた構造評価の目的で有用なプロファイル関数を開発することに取り組んできた。このような方法で導かれ

る新しいプロファイル関数によれば実測のピーク形状がよく再現できるだけでなく、回折装置の系統誤差によるピークのシフトを自動的に補正できることや、試料の結晶学的な不完全性に基づく本質的なピークの広がり(ブロードニング)をより正確に評価できる可能性があることがわかってきたので紹介したい。

2. 装置関数

はじめに、装置関数の形式を導く一般的な方法について述べる。見かけの回折角 2Θ と真の回折角 2θ とのずれ $\Delta = 2\Theta - 2\theta$ の要因となるパラメータが $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ であり、パラメータ $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ による強度分布関数がそれぞれ $p_1(\alpha_1), p_2(\alpha_2), \dots, p_n(\alpha_n)$ であるとする。

まず、 Δ を $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ の関数 $\Delta(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ として表す。ただし、実際にはTaylor展開の2次形式：

$$\Delta = \Delta_0 + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha_i} \right)_0 \alpha_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial^2 \Delta}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j} \right)_0 \alpha_i \alpha_j \quad (1)$$

で近似すればよい場合が多い。この式で添字の0は「 $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_n = 0$ のときの値」であることを意味する。

このとき、装置関数は回折角の「ずれ」を x として

$$w(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - \Delta(\alpha_1, \dots, \alpha_n)) \times p_1(\alpha_1) \dots p_n(\alpha_n) d\alpha_1 \dots d\alpha_n \quad (2)$$

と表される。ただし、ここで $\delta(x)$ はデルタ関数である。あとはこの積分を解けばよいだけである。なお、 $p_1(\alpha_1), \dots$

$p_n(\alpha_n)$ が規格化されていれば、 $w(x)$ は x について自動的に規格化された関数になる。装置パラメータによる強度分布関数 $p_i(\alpha_i)$ は普通は有限な範囲で値を持つ単純な関数で表されるので、実際の積分の計算は場合分けが面倒だが根気がありさえすれば解ける場合が多い。

装置関数は極端に言えば装置ごとに異なっているのだが、以上のようなレシピに従えば、あまり深い洞察は必要とされず、誰でもほぼ機械的に正しい装置関数が求められるのではないと思われる。以下の節では、このような方法に従って実験室型粉末X線回折計の装置関数を求めた実例¹⁾³⁾について紹介する。

2.1 軸発散効果の装置関数

実験室型粉末回折計は図1のような光学系を持っており、図1の配置では水平面からずれたビームが一对のソーラースリットにより制限される構成になっている。制限されているとは言っても、残ったビームのずれは回折ピーク形状にかなり強い影響を及ぼし、回折ピークの形状が低角反射では低角側に長い裾をひき、高角反射では逆にやや高角側に裾をひく要因になっている。この効果のことを軸発散効果と呼ぶ。

軸発散効果の定性的な説明についてはすでに知られていたが、⁴⁾ この効果を表す装置関数という意味では、極端に単純化された定性的なモデルしか知られておらず、実測の回折ピーク形状の定量的な解釈は困難であった。筆者は以下の方法に従って、1998年に初めて実験室型粉末回折計について軸発散効果の装置関数の正確な形式を導いた。¹⁾

まず、入射ビームと回折ビームが垂直方向へそれぞれ角度 α 、 β ずれたときについて考えて、見かけの回折角 2Θ と真の回折角 2θ の関係を求める。単純な幾何学的な考察から

$$\cos 2\theta = \cos 2\Theta \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta \quad (3)$$

であることが導かれる。

つぎに、 $\Delta \equiv 2\Theta - 2\theta$ を α と β の関数 $\Delta(\alpha, \beta)$ として表す。式(3)を 2θ について解くことによって、

$$\Delta = \arccos \left(\frac{\cos 2\theta}{\cos \alpha \cos \beta} - \tan \alpha \tan \beta \right) - 2\theta \quad (4)$$

図1 実験室型粉末X線回折計の模式図。(Schematic illustration of a conventional powder X-ray diffractometer.)

の形が導かれるが、さらにTaylor展開の2次形式を導くと、

$$\Delta = -\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2 \tan 2\theta} + \frac{\alpha\beta}{\sin 2\theta} \quad (5)$$

という簡単な式が得られる。

垂直方向へのずれ角 α 、 β による強度の分布はソーラースリットにより制限されているので、本来なら左右対称の二等辺三角形で表されるような強度分布になるはずであるが、これを半値幅の等しい Gaussian 関数(半値幅 $2\sqrt{\ln 2} \psi$):

$$f_G(x; \psi) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \psi} \exp \left[-\left(\frac{x}{\psi} \right)^2 \right] \quad (6)$$

で近似することにすれば、デルタ関数 $\delta(x)$ を用いて装置関数を

$$w_A(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - \Delta) f_G(\alpha) f_G(\beta) d\alpha d\beta \quad (7)$$

と書ける。この積分の解は

$$w_A(x) = \frac{2}{\pi \psi^2} \exp \left[\left(t - \frac{1}{t} \right) \frac{x}{\psi^2} \right] K_0 \left[\left(t + \frac{1}{t} \right) \frac{|x|}{\psi^2} \right] \quad (8)$$

となる。ただし、ここで $t \equiv \tan \theta$ とした。 $K_0(x)$ は第2種変形Bessel関数という特殊関数であるが、信頼性の高い数値計算ルーチンを手に入れることは容易である。⁵⁾ やや複雑な形をしているが、この関数はこのままで規格化された形式になっている。また、回折角 2θ に応じて、低角反射では低角側に裾を引き、高角反射では高角側に裾を引くという挙動をはほぼ忠実に再現することができる上に、パラメータ ψ はソーラースリットによる角度制限の大きさという明確な意味を持っている。

2.2 平板試料効果の装置関数

集中法による測定の場合に、試料面が焦点円の曲率に応じて湾曲していれば試料面のどの位置からの反射も同じ回折角を持つ。しかし実際の測定では表面が平面的な形状の試料を用いるので、これが収差の原因になる。この収差によって、測定されるプロファイルが低角側に裾を引き、ピークの位置も平均的には低角側にシフトする。この効果を平板試料効果と呼ぶ。

図1の配置で水平方向への発散角をパラメータとして考えれば、前の節と同じ筋道に従って

$$w_F(x) = \begin{cases} 1/\sqrt{-4\gamma_F x} & \text{for } -\gamma_F < x < 0, \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases} \quad (9)$$

という形式が容易に導かれる。²⁾ ここで、発散/散乱スリットの開き角 Φ_H に対して、 $\gamma_F \equiv \Phi_H^2/2 \tan \theta$ と定義した。

2.3 試料の透過性の効果の装置関数

X線に対する吸収係数が高い試料ではあまり問題にならないが、とくに有機物などX線をかなり透過する試料では、X線が試料の内部に深く侵入できることが収差の

原因となる．このような場合には試料の表面から奥の方にずれた位置からの反射の寄与が無視できない．奥にずれた位置からの反射についての回折角は表面での反射に比べて必ず高角側にずれるので，結果として回折プロファイルが低角側に裾を引くような寄与が現れる．

試料の表面からの回折位置のずれをパラメータとして，試料による X 線の吸収の効果を考慮することにすれば，試料の透過性による収差関数は次の式で表されることが自然に導かれる．³⁾

$$w_T(x) = \begin{cases} \gamma_T^{-1} \exp(x/\gamma_T) & \text{for } -u_T < x < 0, \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases} \quad (10)$$

ただし，試料の線吸収係数 μ ，厚さ T ，ゴニオメータ半径 R に対して，

$$\begin{aligned} \gamma_T &\equiv \sin 2\theta / 2\mu R \\ u_T &\equiv 2T \cos \theta / R \end{aligned} \quad (11)$$

と定義する．

2.4 CuK α 線の分光特性

CuK α 線源の分光学的なプロファイルは，次のような 2 つの Lorentzian 型関数の和によって近似される．

$$w_X(x) = \sum_{i=1}^2 f_i f_L(x; x_i, \gamma_i) \quad (12)$$

$$f_L(x; x_i, \gamma_i) = \frac{1}{\pi \gamma_i} \left[1 + \left(\frac{x - x_i}{\gamma_i} \right)^2 \right]^{-1} \quad (13)$$

$$x_2 = 2 \arcsin \frac{\lambda_2 \sin(x_1/2)}{\lambda_1} \quad (14)$$

$$\gamma_i = \frac{\Delta \lambda_i}{\lambda_i} \tan \frac{x_i}{2} \quad (15)$$

ここで f_i ， λ_i ， $\Delta \lambda_i$ は，それぞれ K α_i ピークの強度，波長，半値幅で， $f_1 = 2/3$ ， $f_2 = 1/3$ ； $\lambda_1 = 1.5405981 \text{ \AA}$ ， $\lambda_2 = 1.54443 \text{ \AA}$ ； $\Delta \lambda_1 = 0.00058 \text{ \AA}$ ， $\Delta \lambda_2 = 0.00077 \text{ \AA}$ という値⁶⁾を用いればよい．

2.5 受光スリットの幅

図 1 のように X 線源としては線焦点 (line focus) の配置が用いられ，もう一方の焦点位置には受光スリットが設置される．線源が線焦点であるとは言っても現実には有限の幅を持っているのであるが，通常は受光スリット幅が X 線源の有効幅に比べて広いので，装置の基本的な分解能はほぼ受光スリットの幅 W_R とゴニオメータ半径 R の比で決まると考えてよい．装置の分解能がプロファイルに及ぼす影響は，以下の Gaussian 関数 (正規分布関数) で表現されるとする．

$$w_R(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \gamma_R} \exp \left[- \left(\frac{x}{\gamma_R} \right)^2 \right] \quad (16)$$

$$\gamma_R = \frac{\arctan(W_R/R)}{2\sqrt{\ln 2}} \quad (17)$$

3. たたみこみの計算

以上のように回折計の装置関数の形式を導くことができたとしても，実際にどのようにたたみこみを計算するかは大きな問題である．

特殊な場合にはたたみこみを解析的に解くことができた，高精度な近似形式が得られることもあるが，一般的には解けるとは限らないので，数値的な計算が必要になる．

たたみこみの定義式：

$$f(x) \otimes g(x) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(x-y) g(y) dy \quad (18)$$

について Simpson 法や Gauss-Legendre 法などのいわゆる「数値積分」⁵⁾を実行することは，一見素朴な数値計算の方法であるように見える．数値積分は被積分関数，ここでは $f(x-y) g(y)$ の有限な標本点 $\{y_i; i = 1 \dots N\}$ での値から積分値を求めるもので，標本点の数を増やしていけば限りなく正解に近付くことが保証されている．

しかし，非線形最小二乗法によるプロファイルフィッティングに利用することを考えると，あまり多くの標本点を取って計算時間を増やすことは望ましくない．その一方で，標本点の数を少なくすると計算されたプロファイルに標本点の間隔をもった余計な波うちが現れる傾向がある．この問題はかなり深刻で，見た目では目立たない波うちであっても，非線形最小二乗法の収束の効率が極端に低下する場合がある．

うまい方法がないかと考えているうちに， $f(x)$ と $g(x)$ の原始関数がわかっているときには，それを利用できるのではないかと思いついた．⁷⁾例えば， $f(x)$ と $g(x)$ の原始関数をそれぞれ $F(x)$ ， $G(x)$ とすれば，

$$\xi = G \left(x [F(x) - F(x-y)] / [F(x) - F(0)] \right) \quad (19)$$

という変数変換を施せば

$$\frac{d\xi}{dy} = f(x-y) g(y) \quad (20)$$

という関係が $y = 0$ と $y = x$ で満たされるから， ξ についての積分は被積分関数がほぼ一定の値を取り数値積分が容易になると考えられる．

図 2 には Lorentzian 関数と平板試料効果装置関数のたたみこみを，実際に変数変換を用いた数値積分によって計算した例を示す．数値積分の標本点としてはたった 3 点しか使っていないが，変数変換を施した数値積分では

図2 Lorentzian と平板試料効果装置関数のたたみこみ。(Convolution of Lorentzian and flat-specimen aberration functions.) 白丸は厳密解で、点線/実線は変数変換前/後の3点 Gauss-Legendre 積分の結果を示す。

厳密解とほとんど区別がつかないほどよく一致した結果が得られている。

ここではあらかじめ「たたみこまれる関数」の厳密な原始関数がわかっている場合を想定したが、原始関数の厳密解の代わりにかなり粗い近似解を使っても計算が効率化されることがわかっている。³⁾ また、ここで行っているのは単なる置換積分に過ぎないから、数値計算に用いる標本点の数を増やせば限りなく正解に近づくという性質は失われていない。

4. 実験データの解析

実際にたたみこみにより計算されるプロファイル関数を用いて実測のピーク形状に対するフィッティングを行ってみた。プロファイル関数は Lorentzian, Gaussian, 軸発散効果, 平板試料効果, 透過性効果関数を4重にたたみこんだ形式を持つものであるが、パソコンを使って実用的な計算速度で非線形最小二乗フィッティングを実行できる。実際のたたみこみ計算の詳細については原論文³⁾を参照されたい。

4.1 発散/散乱スリット幅によるプロファイルの変化

粉末回折用の標準試料である LaB_6 (NIST SRM660) について、開き角の異なる発散/散乱スリットを用いて回折プロファイルを測定し比較を行った。²⁾ なお、精密な格子定数の見積もりが可能であるかを検討するために、自作の簡便な装置で測定時の温度を $299 \pm 1 \text{ K}$ に制御した。

図3に3通りの条件で測定された回折ピークの形状とフィッティングの結果を示す。ここで、フィッティングを行っているとはいっても、実測のピーク形状と形を合わせるための可変パラメータはいっさい用いていないことを強調しておきたい。わずかなずれは残っているが、実測と計算された形状の変化の挙動は非常によく一致しており、ここで用いたモデルが妥当であることを強く支持した結果になっている。

モデルプロファイル関数は装置関数の影響をあらわに

図3 LaB_6 の 111 反射を3通りの発散/散乱スリット角 ($\Phi_H = 0.5, 1, 2^\circ$) で測定したプロファイルと計算プロファイル。(Peak profiles of LaB_6 111 reflection measured with 3 different divergence/scattering slit angles. Measured data and calculated profiles are plotted by open circles and solid lines, respectively.) 下部には差プロットを示している。

取り入れたものであるから、フィッティングにより見積もられるピーク位置は原理的に「装置関数の影響を受ける前の本来のピーク位置」を意味するはずである。このピーク位置を図の中で矢印で示した。実測の(見かけの)ピーク位置は実験条件によりかなり変化しているが、確かにこの矢印の位置は極めてよく一致している。ここでは変化の目立つ 111 反射ピークだけを示しているが、他の回折ピークについても同様の結果が得られており、このことは、プロファイル関数を用いることにより装置の系統誤差が自動的に補正されていることを意味しているように思われる。

この3通りの測定について、プロファイルフィッティングにより求めた各回折ピークの位置から格子定数を見積もった値 a_{obs} を図4に白丸でプロットした。格子定数の値は、もちろん本来ならば回折角によらず一定になるはずだが、ここで求められた値には、明らかに回折角に依存した系統的な挙動が現れている。これは、いわゆるピーク位置の系統誤差のうちで、プロファイル関数では

考慮していない (i) ゴニオメータのゼロ調整誤差と (ii) 試料面位置のゴニオメータ中心からのずれの影響によるものと考えられる。

このことを考慮すれば、ここで見積もられた「見かけの格子定数」 a_{obs} は以下の式で表されるような回折角依存性を持つことが予想される。

$$a_{\text{obs}} = \frac{a_{\text{true}} \sin(\theta - \Delta 2\theta_0/2 + (S/R) \cos \theta)}{\sin \theta} \quad (21)$$

ただし、ゴニオメータ半径を R とする。この式には「真の格子定数」 a_{true} とゼロ調整誤差角 $\Delta 2\theta_0$ 、試料位置のずれ S がパラメータとして含まれているが、これらをすべて可変パラメータとして最小二乗法により a_{obs} のプロットにあてはめたものを図4では点線で示している。この図から、たしかに a_{obs} の挙動はこの式によりよく表されていることがわかる。また、フィッティングにより見積もられるゼロ調整誤差角と試料位置のずれは、いずれの場合でもそれぞれ約 -0.05° 、 -0.05 mm と見積もられた。この3つの測定は同じ装置を用いて同一試料について引き続き測定されたものなので、これらの値がほぼ一致していることはリーズナブルである。

図4 LaB₆の各ピーク位置から見積もられた格子定数(白丸)と回折角依存性(点線). (The lattice constant estimated by the peak positions (open circles) and the dependence on the diffraction angle (dotted lines).)

式(21)の形から、フィッティング曲線を $2\theta \rightarrow 180^\circ$ に外挿した値が真の格子定数 a_{true} の値に対応することがわかる。図4中にも示したように「真の格子定数」は3測定のそれぞれから、4.15687(2)、4.15693(2)、4.15685(2) Åと見積もられ、温度制御の誤差と試料の熱膨張率を考慮に入れば、試料に添付されている保証値4.15695(6) Åと実験誤差の範囲でいずれも一致するものであった。

従来は、精密な格子定数を求めるためには試料にあらかじめ格子定数のわかっている標準試料を均一に混合する方法(内部標準法)を用いることが常識であったが、ここでは格子定数を決めるために内部標準を用いていないだけでなく、標準試料そのものをまったく使っていないにもかかわらず正確な格子定数が見積もられていることには注目すべきであろう。しかも測定自体は最も一般的な市販の粉末回折計を用いたものであり、簡便な温度制御装置以外に特殊な装置はいっさい使用していない。

4.2 試料の透過性によるプロファイルの変化

試料の透過性の効果について実験的に調べるために、結晶構造そのものは変化させずに透過性のみがコントロールされた試料を以下のように調製した。³⁾

X線に対する透過性の低い LaB₆ 試料を、透過性が高く非晶質のデンプン ($[\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5]_n$) で希釈する。LaB₆の粉末と水溶性デンプンの所定量に少量の水を加えてよく練ると、均一性の高いペーストができる。このペーストを凍結乾燥すると煎餅状の試料が得られるので、これを粉碎すれば LaB₆ がむらなく希釈された粉末試料を得ることができる。試料の透過性は LaB₆ とデンプンの質量吸収係数と混合比、試料ホルダに充填した粉末の見かけの

図5 LaB₆/デンプン混合試料の実測プロファイルと計算プロファイル. (Experimental and calculated peak profiles of LaB₆/starch mixture.) 下部には差プロットを示している。

密度とから計算できる。

図5はX線の侵入深さ(線吸収係数の逆数) μ^{-1} が0.34 mmと1.19 mmと見積もられた2種類の試料の321-反射の実測ピークプロファイルに対するフィッティングの結果を示す。試料の厚さは0.5 mmなので、侵入深さが試料の厚さと同程度かそれ以上ということになり、反射法としては極端に透過性の高い条件で測定されている。

さて、図5に見られるように、試料の透過性が高くなるとプロファイルは大きく変形し、見かけ上低角側へピークがシフトするが、このような変化を計算プロファイルが非常によく再現できており、実測と計算とのずれに系統的な挙動がほとんど含まれていない。

このフィッティングにおいて、計算プロファイルでは形状に影響を及ぼすパラメータはすべて固定した値を用いている。原理的には試料の濃度や密度の不均一性、試料の結晶学的な不完全性、寸法測定や密度評価の誤差などもプロファイルに影響を及ぼすはずであるから、このように実測と計算が一致することは予想以上のことであった。

なお、前節と同様の方法でLaB₆の格子定数を見積もると、2つの測定でそれぞれ4.15709 (12) Å, 4.15702 (7) Åとなり、やはりいずれの測定についても見積もられる格子定数は実験誤差の範囲で保証値と一致した。つまり、透過性が高い試料であっても標準試料を用いずに精密な格子定数を見積もることが可能である。標準試料を用いずにここまで正確な格子定数が見積もられるのは重原子を含み高角反射まである程度の積分強度を示すような物質に限られてくると思われるが、一度ゼロ調整誤差角 $\Delta 2\theta_0$ を求めておいて(このとき標準試料でなくても重原子を含む物質でありさえすればよい)、以後はこれを固定したパラメータとして扱うという方法を取れば、重原子を含まない試料についても精度の高い格子定数評価が可能である。もちろん、標準試料を使うことができるのならば、はじめは標準試料の測定を行って同様の解析を行い、格子定数を固定したフィッティングによりゼロ調整誤差角 $\Delta 2\theta_0$ を求めておくという方法(外部標準法)も推奨できる。

5. おわりに

装置関数をたたみこんだ形式の粉末回折プロファイル関数を利用すれば、実測プロファイルとよく一致することから積分強度をより正確に見積もることができるというだけでなく、系統誤差を補正したピーク位置を簡便な方法で正確に評価することができる。

また、完全結晶を仮定したプロファイルモデルで実際にLaB₆試料の回折ピークプロファイルをほぼ完璧に再現できたということは、逆に任意の試料の結晶学的な不完全性を、実測と計算のピーク形状のずれとして高感度に検出しようということを意味している。

ここで紹介した研究の主な部分は、筆者が姫路工業大学理学部に在籍している間に行った。方法論の実験的な検証については木村啓作教授(姫路工業大学)との共同研究として実施したものである。

文 献

- 1) T. Ida: *Rev. Sci. Instrum.*, **69**, 2268 (1998).
- 2) T. Ida and K. Kimura: *J. Appl. Cryst.*, **32**, 634 (1999).
- 3) T. Ida and K. Kimura: *J. Appl. Cryst.*, **32**, 982 (1999).
- 4) 虎谷秀穂:「実験化学講座 10 回折」丸善(1992).
- 5) W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling: "Numerical Recipes", Cambridge Univ. Press (1986).
- 6) A. H. Compton and S. K. Allison: "X-rays in Theory and Experiment", D. VAN NOSTRAND (1935).
- 7) T. Ida: *Rev. Sci. Instrum.*, **69**, 3837 (1998).

プロフィール

井田 隆 Takashi IDA

名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター
Ceramics Research Laboratory, Nagoya Institute of Technology

〒507-0071 岐阜県多治見市旭ヶ丘10-6-29

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

TEL. 0572-27-6811, FAX. 0572-27-6812

e-mail: ida@crl.nitech.ac.jp

最終学歴：東京大学大学院理学系研究科化学専攻
修士課程

専門分野：X線結晶学, 固体物理学, 物理化学

現在の研究テーマ：粉末回折の方法論

趣味：サッカー, 音楽, 水彩画