

微細なパターンの識別法の数値デモンストレーション

東北大学 大学院工学研究科 応用物理学専攻 岩井俊哉
University of Illinois Paul Voyles, J. Murray Gibson, 大野克嗣

微細な空間構造や中距離的な秩序をより精確に測定する為には、散乱実験などで得られる 2 体空間相関関数より高次の空間相関関数が役立つ。Gibson と Treacy は Transmission Electron Microscopy の実験において微細な空間構造の検出法を考案し、Ge アモルファスの除冷実験で空間構造の微細な変化を検出した^[1]。彼らの考案した物理量 speckle variance $\langle\langle V(\vec{k}) \rangle\rangle$ は次式で表される。

$$\langle\langle V(\vec{k}) \rangle\rangle = \frac{\langle\langle I^2(\vec{k}) \rangle\rangle}{\langle\langle I(\vec{k}) \rangle\rangle^2}. \quad (1)$$

ここで $\langle\langle I(\vec{k}) \rangle\rangle$ は dark field image intensity の空間平均であり、

$$\langle\langle I(\vec{k}) \rangle\rangle = |\phi_0|^2 \int d\vec{r} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 A(\vec{r} - \vec{r}_1) A(\vec{r} - \vec{r}_2) \rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}, \quad (2)$$

と表され、 $\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ は 2 体分布関数であり、 ϕ_0 は原子散乱因子である。また 2 次のモーメント $\langle\langle I^2(\vec{k}) \rangle\rangle$ は

$$\begin{aligned} \langle\langle I^2(\vec{k}) \rangle\rangle &= |\phi_0|^4 \int d\vec{r} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \int d\vec{r}_3 \int d\vec{r}_4 A(\vec{r} - \vec{r}_1) A(\vec{r} - \vec{r}_2) A(\vec{r} - \vec{r}_3) \\ &\quad \times A(\vec{r} - \vec{r}_4) \rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2 + \vec{r}_3 - \vec{r}_4)}, \end{aligned} \quad (3)$$

であり、 $\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4)$ は 4 体分布関数です。また $\vec{k}$ は回折される前後の電子の波数ベクトルの差であり、 $\vec{r}$ は資料の位置ベクトルであり、 A は Airy 関数である。

本研究の目的は、speckle variance を改良し微細な空間構造に対しさらに敏感な物理量を得る事である。そこで、我々は $\langle\langle I^2(\vec{k}) \rangle\rangle$ 中の 4 体分布関数を cumulant 展開し、2 体分布関数と密度で表される低次の相関項をさし引くことで、3 次と 4 次の cumulant で表される物理量 cumulant variance $\langle\langle VC(\vec{k}) \rangle\rangle$ を提案する。

$$\langle\langle VC(\vec{k}) \rangle\rangle = \frac{\langle\langle I^2(\vec{k}) \rangle\rangle - \langle\langle I^2(\vec{k}) \rangle\rangle_L}{\langle\langle I^2(\vec{k}) \rangle\rangle_L}. \quad (4)$$

ここで $\langle\langle I^2(\vec{k}) \rangle\rangle_L$ は次式で表される低次相関項である。

$$\begin{aligned} \langle\langle I^2(\vec{k}) \rangle\rangle_L &= 2|\phi_0|^4 \int d\vec{r} \left\{ \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 A(\vec{r} - \vec{r}_1) A(\vec{r} - \vec{r}_2) \rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \right\}^2 \\ &\quad + |\phi_0|^4 \int d\vec{r} \left| \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 A(\vec{r} - \vec{r}_1) A(\vec{r} - \vec{r}_2) \rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)} \right|^2 \\ &\quad - 2|\phi_0|^4 \int d\vec{r} \left| \int d\vec{r}_1 A(\vec{r} - \vec{r}_1) \bar{\rho} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \right|^4. \end{aligned} \quad (5)$$

ただし $\bar{\rho}$ は密度である。

我々は単純な数値資料を用い、 $\langle\langle VC(\vec{k}) \rangle\rangle$ 及び $\langle\langle V(\vec{k}) \rangle\rangle$ を数値計算した。用いた数値資料は以下の通りである。4×4 正方格子に粒子を置くのだが、ランダムに選んだ 1 つの粒子以外は全て厳密に格子点に置き、ランダムに選んだ 1 粒子のみ格子点からわずかに変位させる。変位の大きさは格子間隔を a とすると、 $D \times a$ であり、方向はランダムに選ぶ。特定の D に対する

アンサンブルをつくるサンプル数を 10 とした。ただし数値資料では $a = 2.5[\text{\AA}]$ 粒子半径 $0.5[\text{\AA}]$ として、粒子分布関数をガウス場で表した。 $\langle\langle VC(\vec{k}) \rangle\rangle$ 及び $\langle\langle V(\vec{k}) \rangle\rangle$ の D 依存性を図 1 から 4 に示す。図 1,2 はそれぞれ $D = 0.025$ と $D = 0.05$ の $\langle\langle VC(\vec{k}) \rangle\rangle$ の波数空間 ($-4\pi \leq k_x, k_y \leq 4\pi$ [$1/\text{\AA}$]) 上での鳥瞰図である。図 3,4 はそれぞれ $D = 0.025$ と $D = 0.1$ の $\langle\langle V(\vec{k}) \rangle\rangle$ の同波数空間上での鳥瞰図である。 $\langle\langle V(\vec{k}) \rangle\rangle$ では $D = 0.05$ と $D = 0.025$ の相違が小さいので、 $D = 0.05$ でなく $D = 0.1$ を示した。また $\langle\langle V(\vec{k}) \rangle\rangle$ より $\langle\langle VC(\vec{k}) \rangle\rangle$ の方がパターンの絶対値が大きく、 D に依存して系統的にパターンが変化していることがわかる。従って $\langle\langle V(\vec{k}) \rangle\rangle$ より $\langle\langle VC(\vec{k}) \rangle\rangle$ の方が D に敏感だと言ってよいであろう。

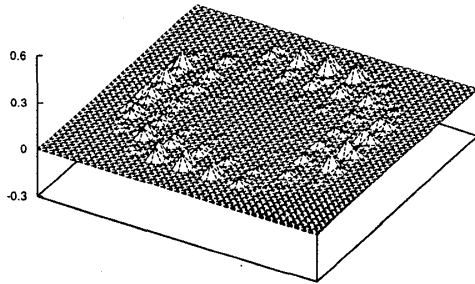


図 1: $\langle\langle VC(\vec{k}) \rangle\rangle$ の鳥瞰図 $D = 0.025$

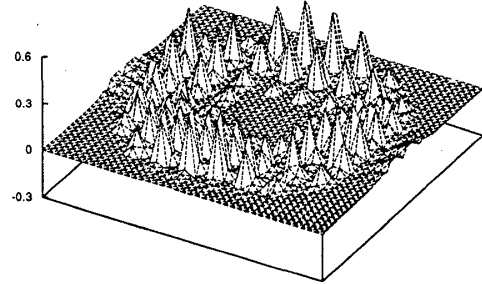


図 2: $\langle\langle VC(\vec{k}) \rangle\rangle$ の鳥瞰図 $D = 0.05$

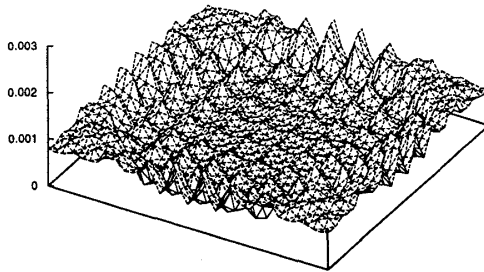


図 3: $\langle\langle V(\vec{k}) \rangle\rangle$ の鳥瞰図 $D = 0.025$

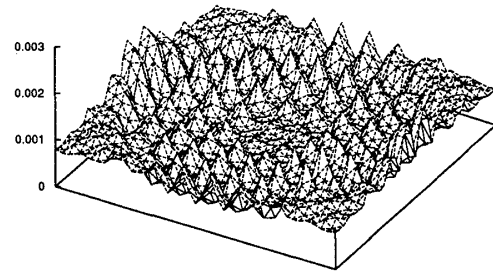


図 4: $\langle\langle V(\vec{k}) \rangle\rangle$ の鳥瞰図 $D = 0.10$

ノイズ安定性についても調べ、 $\langle\langle VC(\vec{k}) \rangle\rangle$ の方が $\langle\langle V(\vec{k}) \rangle\rangle$ よりも安定であることを報告した。またこれらのパターンと空間構造には何らかの相関がある。その対応関係を理解することは、4 体空間相関関数の理解と同程度に難しい問題であり、今後の研究課題である。

[1] J.M. Gibson and M.M.J. Treacy, Phys. Rev. Lett. **78**, 1074(1997).