

データ駆動型のコロイド結晶成長に向けた数値情報抽出

Numerical data extraction for data driven crystal growth of colloidal particles

名大未来機構¹, 東北大金研², 沓掛健太郎¹, 野澤純², 郭素霞², 宇田聡², 井上憲一¹

Nagoya Univ., Tohoku Univ.

Kentaro Kutukake¹, Jun Nozawa², Suxia Guo², Satoshi Uda², and Kenichi Inoue¹

E-mail: kutukake@mirai.nagoya-u.ac.jp

【はじめに】規則的に配列したコロイド粒子（コロイド結晶）は、フォトニック結晶への応用が期待されている。またその結晶成長プロセスが光学顕微鏡で観察可能であることから、ガラス相転移や核形成など相転移に関わる様々な物理現象を理解するためのモデルとしても活発に研究されている。我々は、ビックデータに基づく（すなわちデータ駆動型の）コロイド結晶成長機構の解明を目指している。本研究では、結晶成長動画からコロイド粒子移動を数値情報として抽出し、拡散係数を求めたので報告する。

【方法】コロイド粒子として粒径 500nm の緑色蛍光修飾された Polystyrene を使い、スライドガラス上の粒子運動を光学顕微鏡で観察した。撮影された動画はフレームごとに、画像処理により粒子の輝度ムラ補正および 2 値化による粒子領域の抽出を行った後、粒子クラスターごとにナンバリングし、その重心座標を求めた。このとき粒子クラスターの画像ピクセル数からクラスターに含まれる粒子数を求めた。さらに、時間的に連続するフレーム間の比較で、最もユークリッド距離が近いものを同一クラスターとして追跡し、移動距離を求めた。ここで、同一クラスターが競合する場合は移動距離が最も大きくなる組合せをとらないものとした。画像処理パラメータの最適化やアルゴリズムの改善により、追跡エラーとなる粒子の割合は最終的に 1/1000 以下を得た。

【結果】図 1 に 4 フレーム間 (0.13 sec) でのクラスター移動距離の頻度分布を示す。1 粒子および 2 粒子クラスターそれぞれ約 7 万、8 千のクラスター移動を解析した。移動距離が 0 近傍の分布には、粒子がスライドガラスに固着してしまったものが含まれるため、以降の解析では除外した。両分布をガウス関数でフィッティングし、拡散の式から拡散係数を求めると、それぞれ 0.097 および $0.071 \mu\text{m}^2/\text{s}$ と求めた。従来の手動で粒子を追跡する方法に比べて、格段に多い数の粒子を解析することで極めて正確な値を求めることが可能となった。

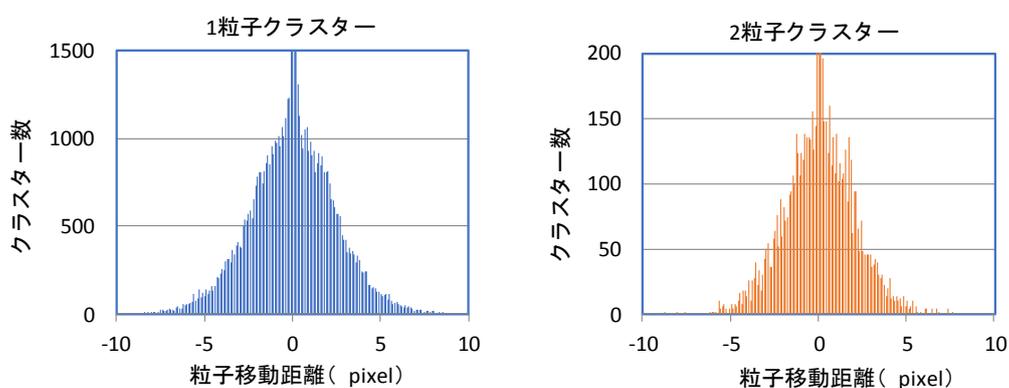


図 1 4 フレーム間 (0.13 sec) でのクラスター移動距離の頻度分布