

ベイズ推論が繋ぐ陽電子回折と表面構造解析

Bayesian inference in surface structure analysis by positron diffraction

東大総文¹, JST さきがけ² ○ 中西 (大野) 義典^{1,2}

UTokyo¹, JST PRESTO² ○ Yoshinori Nakanishi-Ohno^{1,2}

E-mail: nakanishi@phys.c.u-tokyo.ac.jp

陽電子回折による表面構造解析にベイズ推論を適用することについて議論する。参考として X 線回折にベイズ推論を用いて薄膜の構造を調べた研究を挙げる [1]。陽電子回折だけでも様々な計測方法や計測条件があるが、それらをデータの取扱いという観点から包括的に議論する。

試料物質の周辺に陽電子検出器を並べて、陽電子を試料に入射すると、陽電子の反射方向に関するデータが得られる。検出陽電子数は反射方向に関して特徴的なパターン $\{(\theta_j, \varphi_j; I_j)\}$ をもつ。ここで、 j 番目の検出器が置かれた方向を試料から見た仰角 θ_j と方位角 φ_j により記述し、その検出器により検出された陽電子数を I_j と表した。このようなパターンは構造解析の分野では回折パターンと呼ばれ、物質の構造を反映したデータとして取り扱われる。

回折パターンは試料の性質だけでなく陽電子の入射方向によっても異なる。入射方向も仰角 (視射角) $\theta_i^{(L)}$ と方位角 $\varphi_i^{(L)}$ により記述し、混同を避けるため反射方向を記述する仰角と方位角はそれぞれ $\theta_j^{(R)}$ と $\varphi_j^{(R)}$ と改める。こうして、回折パターンを拡大解釈してデータセット $\{(\theta_i^{(L)}, \varphi_i^{(L)}, \theta_j^{(R)}, \varphi_j^{(R)}; I_{ij})\}$ として取り扱うことにより包括的な議論を行う。ここで、 I_{ij} は方向 i から入射して方向 j に反射して検出される陽電子数である。陽電子回折計測には全反射高速陽電子回折 (TRHEPD) 法と低速陽電子回折 (LEPD) 法がある。TRHEPD 法は入射仰角 (視射角) $\theta^{(L)}$ の小さいことが特徴である。また特定のスポット、たとえば鏡面反射の場合 ($\theta^{(L)} = \theta^{(R)}$, $\varphi^{(L)} + \pi = \varphi^{(R)}$) について、仰角 θ を変えて検出陽電子数 I をプロットしたものはロッキング曲線と呼ばれている。ロッキング曲線をプロットする際の一波条件・多波条件と呼ばれる計測条件の差は入射方位角 $\varphi^{(L)}$ の差であり、方位角 φ も変えて検出陽電子数 I をプロットしたものは方位角プロットと呼ばれている。その一方で、LEPD 法は試料表面に垂直に入射する ($\theta^{(L)} = \pi/2$) ので、定義により入射方位角 $\varphi^{(L)}$ によらず同一の回折パターン $\{(\theta_j^{(R)}, \varphi_j^{(R)}; I_j)\}$ が得られる。

いずれにせよ、データセット $\{(\theta_i^{(L)}, \varphi_i^{(L)}, \theta_j^{(R)}, \varphi_j^{(R)}; I_{ij})\}$ が与えられたとき、4 個の角度変数を入力とみなし、検出陽電子数 I を出力とみなし、計算機を用いて入出力関係を明らかにすることは、機械学習の分野で教師有り学習と呼ばれていることそのものである。機械学習では多くの場合、データや計算資源が不十分であることを理由に、何らかのパラメータをもつモデルを仮定して、最適化技法を用いてパラメータ値を求めることにより入出力関係を推定する。モデルが必要な状況は同じであるが、陽電子回折のデータ解析で用いるモデルは散乱・回折理論が適切であると考えられる。なぜなら、データを生成する陽電子回折計測が量子力学に基づく散乱・回折理論に着想を得て設計されているからである。量子力学の特徴の一つは確率論と密接な関係があることであり、したがって、統計科学の分野で確率論と密接な関係があるベイズ推論との相同性は期待される。

参考文献

- [1] “Bayesian inference of metal oxide ultrathin film structure based on crystal truncation rod measurements”, M. Anada, Y. Nakanishi-Ohno, M. Okada, T. Kimura, and Y. Wakabayashi, *Journal of Applied Crystallography* **50**, 1611–1616 (2017).