

高輝度放射光屈折コントラスト撮影技術における撮影 情報増大のための基礎理論の構築

石綿 元^{*1}

^{*1} 総合研究大学院大学複合科学研究科統計科学専攻（統計数理研究所）

目次

| | | |
|-------|------------------------------|----|
| 第 1 章 | はじめに | 5 |
| 1.1 | 研究目的および研究動機 | 5 |
| 1.2 | 医療画像診断の概要 | 9 |
| 1.3 | 乳がんの画像診断の現状 | 12 |
| 1.4 | X 線画像診断 | 14 |
| 1.5 | 研究概要と本論文の構成について | 15 |
| 第 2 章 | 撮影情報増大のためのアプローチ | 17 |
| 2.1 | 撮影情報量増大の目論見 | 17 |
| 2.2 | 実現へのアプローチ | 18 |
| 第 3 章 | 結晶の構造と X 線回折 | 21 |
| 3.1 | 結晶の構造 | 21 |
| 3.2 | X 線回折理論概要 | 22 |
| 第 4 章 | Ewald-Laue 理論 | 29 |
| 4.1 | 回折の基本方程式からの導出 | 29 |
| 4.2 | ロッキングカーブ | 31 |
| 第 5 章 | 高木-Taupin 理論 | 33 |
| 5.1 | 回折の基本方程式からの導出 | 33 |
| 5.2 | 偏光考慮多波拡張型高木-Taupin 理論 | 34 |
| 第 6 章 | 多波回折実験 (於 SPring-8) | 37 |
| 6.1 | SPring-8 実験 | 37 |
| 6.2 | 実験の結果 | 39 |
| 第 7 章 | 計算機シミュレーションによる多波回折を用いた屈折撮影画像 | 45 |

| | | |
|--------|--|-----|
| 7.1 | 計算機シミュレーションで想定する撮影方法 | 45 |
| 7.2 | 計算機シミュレーション計算の方法 | 46 |
| 7.3 | スーパーコンピュータでの計算 | 47 |
| 7.4 | 計算機シミュレーション計算の結果と問題点 | 50 |
| 第 8 章 | 高木-Taupin 理論とロッキングカーブ | 55 |
| 8.1 | 本研究において高木-Taupin 理論とロッキングカーブの関係を明らかにする理由 | 55 |
| 8.2 | Ewald-Laue 理論と高木-Taupin 理論をめぐる歴史的背景 | 56 |
| 8.3 | 二波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブ | 56 |
| 8.4 | 多波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブ | 60 |
| 第 9 章 | 屈折コントラスト撮影法への三波回折の応用 | 65 |
| 9.1 | 屈折コントラスト撮影法への三波回折の応用 | 66 |
| 9.2 | 従来の屈折コントラスト撮影法に対しての改善点 | 68 |
| 第 10 章 | 撮影画像についての統計的画像処理について | 75 |
| 10.1 | 一般的な画像処理 | 75 |
| 10.2 | CT 技術における逆問題 | 76 |
| 第 11 章 | 医療診断への応用に向けて | 79 |
| 11.1 | 医療応用に向けた三波回折を使う屈折コントラスト撮影法のさらなる優位性 | 79 |
| 第 12 章 | まとめと今後の研究課題 | 83 |
| 12.1 | 本研究において明らかにできたこと | 83 |
| 12.2 | 今後引き続いて研究の必要な事項 | 84 |
| 参考文献 | | 89 |
| 付録 A | 屈折コントラスト撮影法とはどのようなものか | 95 |
| 付録 B | X 線強度振幅の畳み込み計算プログラム | 99 |
| 付録 C | 高木-Taupin 理論によるロッキングカーブを求めるプログラム | 115 |
| C.1 | 二波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブを求めるプログラム | 115 |
| C.2 | 三波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブを求めるプログラム | 118 |

第 1 章

はじめに

1.1 研究目的および研究動機

乳がんの現状と早期発見の重要性 現在、日本人の死亡原因の第一位は「悪性新生物（がん）」である。

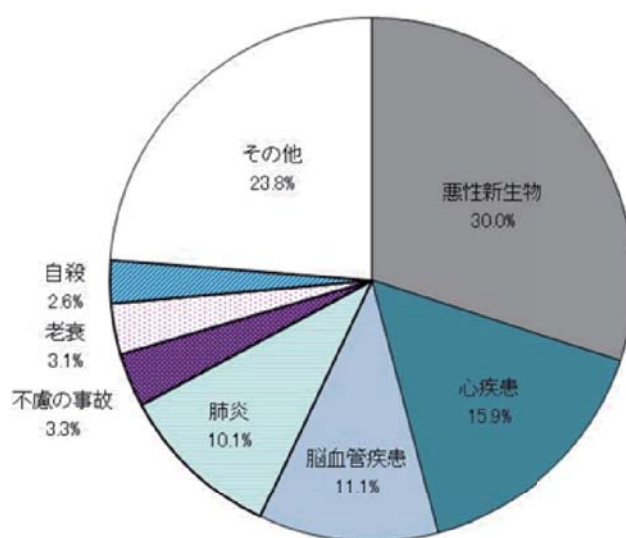


図 1.1 日本人の死因 (厚生労働省平成 20 年人口動態統計月報年計 (概数) の概況¹⁾) より引用

図 1.2 および図 1.3 は、厚生労働省大臣官房統計情報部¹⁾ および国立がん研究センターの公表する最新のがん統計データベース²⁾ の男女部位別死亡率と罹患率の年次推移である。

図 1.3 を見るとわかる通り、近年罹患率が急激に上昇し、女性のがん罹患部位で第一位になっているのが女性の乳がんである。図 1.2 からは、女性の乳がんでは死亡率も上昇を続けていることがわかる。ただ、女性の乳がんはほかの部位に比べて罹患率は第一位であるが、死亡率は一位ではない。

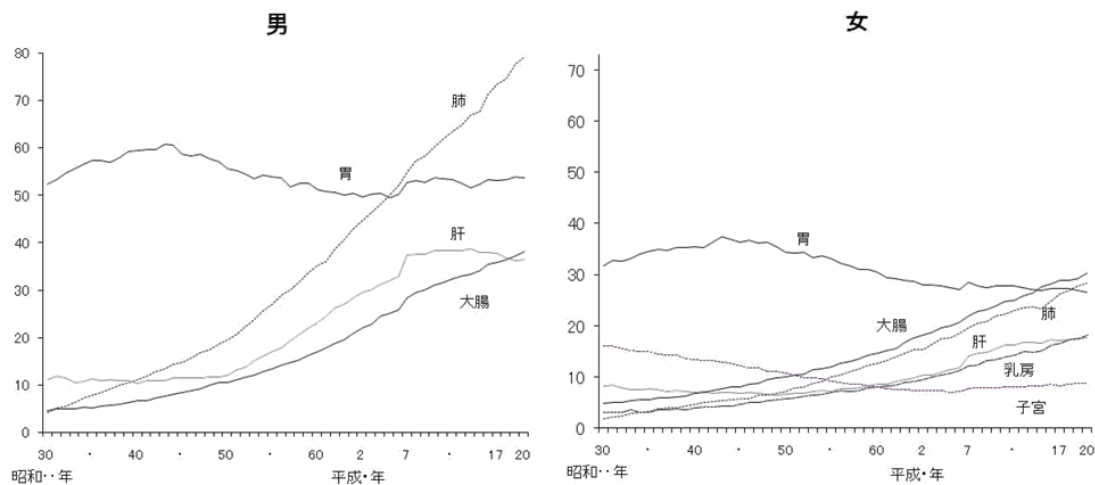
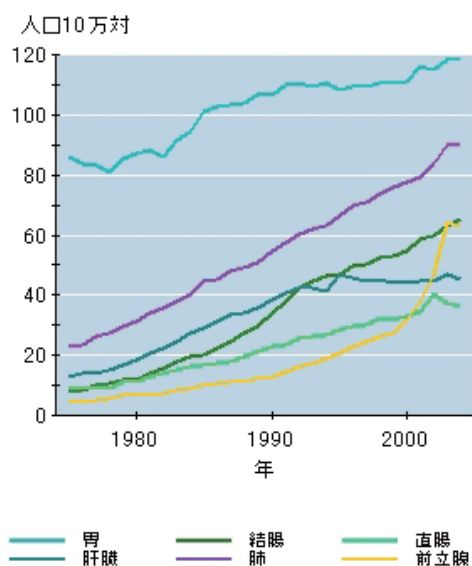


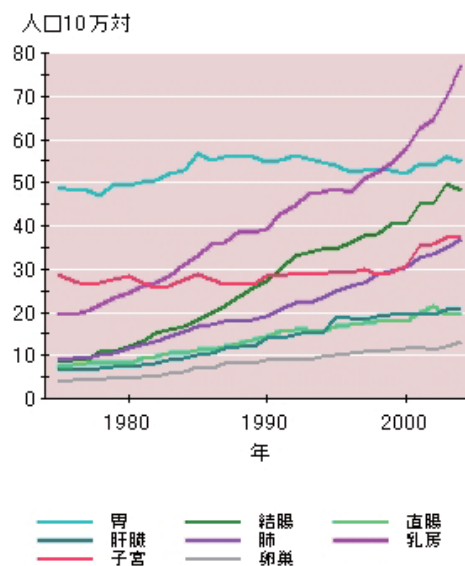
図 1.2 悪性新生物の主な部位別死亡率（人口10万対）の年次推移（厚生労働省平成20年人口動態統計月報年計（概数）の概況¹⁾より引用

部位別がん粗罹患率の推移
（主要部位）
〔男1975年～2004年〕



資料：国立がんセンターがん対策情報センター
Source: Center for Cancer Control and Information Services,
National Cancer Center, Japan

部位別がん粗罹患率の推移
（主要部位）
〔女1975年～2004年〕



資料：国立がんセンターがん対策情報センター
Source: Center for Cancer Control and Information Services,
National Cancer Center, Japan

図 1.3 がんの部位別罹患率の推移（国立がん研究センターがん統計データベース²⁾から引用

しかし、図 1.4 に示すグラフからわかる通り、若年女性では乳がんの罹患率が高齢女性に比べて非常に高い。さらに若年層では乳がんでの死亡率が非常に高く第一位であることがわかる。乳がんの大きな問題点は、全体の罹患率も年々上がっているが、特に若年層での罹患率が高く、若年層において死亡率が上昇していることにある。食生活の欧米化、ライフスタイルの

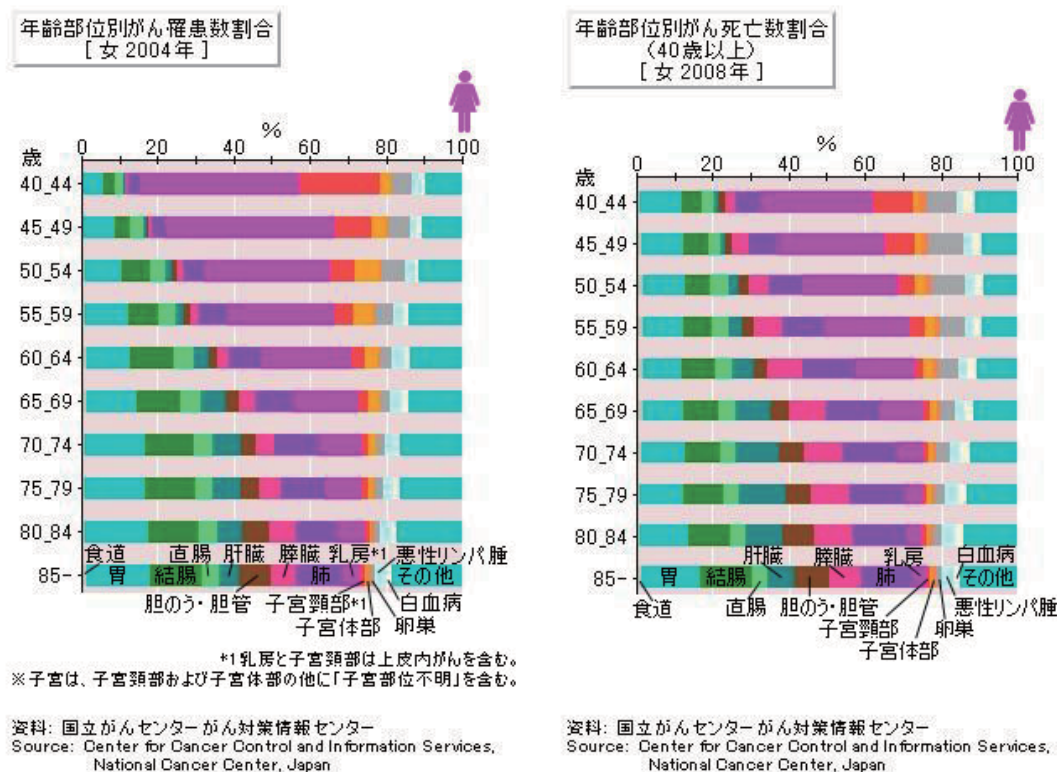


図 1.4 女性の年齢別がんの罹患率と死亡率 (国立がん研究センターがん統計データベース²⁾) から引用

多様化に伴って今後もこの傾向は続くと思われる³⁾。

がんはその治療による効果を得るためには、早期発見・早期治療が重要である。がんの早期発見を目指して各種の検診が行われているが、乳がんに関してみると日本は欧米に比べ、その取り組みが非常に遅れている⁴⁾。特に、乳がん検診において国による施策において画像診断の実施が取り入れられたのは 50 歳以上の場合に 2000 年以降、40 歳以上の場合は 2004 年以降になってからである⁴⁾。それまでの乳がん検診は視触診のみであった。視触診のみでの乳がん検診については、視触診を行う者の主観的感覚に依存し、個人の能力により精度が著しく異なる⁵⁻⁸⁾。したがってその効果は甚だ疑問であったと言わざるを得ず、統計的な取り扱いにおける科学的な公的発表においても死亡率減少効果は認められない相応の根拠があるとされている⁵⁻⁸⁾。

先進国の中で、唯一乳がんによる死亡率が上昇し続けている我が国では、「マンモグラフィー」検診の導入が遅れていた⁴⁾。がんの検診においては画像診断が重要となるが、現在の乳がん検診では、マンモグラフィー検診と視触診を併用することが一般的である^{4, 5, 8)}。しかし、50 歳以降に対するマンモグラフィーによる乳がん検診は明らかに死亡率を減少させるという研究結果が得られている^{5, 8)}が、40 歳代での実績は効果があるが 50 歳以降の場合に比べて劣っている^{5, 8)}。また、それ以前の年齢層である若年層へのマンモグラフィーによる乳がん

検診ではその効果について有効とする確たる根拠は得られていない^{4, 5, 8)}。それは、若年層においては乳腺構造の実質量が多い高濃度乳房であり、そのために現在の技術による撮影レベルでは、異変部位を区別して見つけることができないのである⁵⁾。

つまり、現在の女性の乳がんでは、若年層の罹患率が高いにもかかわらず、若年層では早期発見ができず、さらに若年層での乳がんは進行が速いため治癒率が低く再発・転移を起こしやすいなど予後不良⁸⁾のため、死亡率が上昇している。

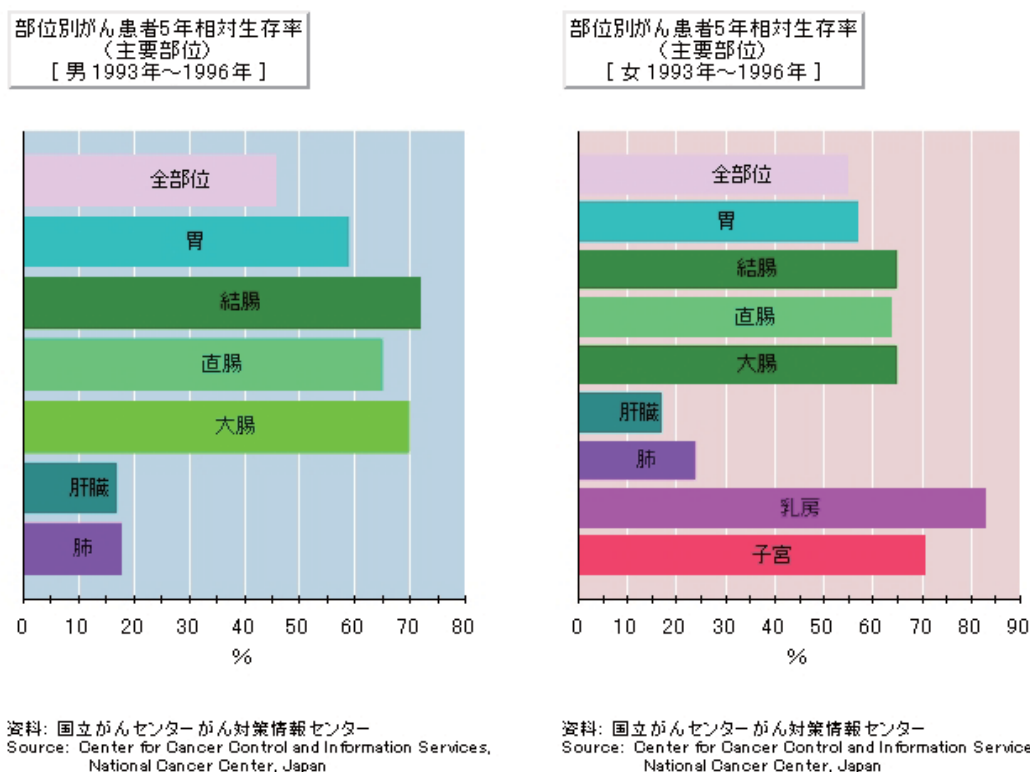


図 1.5 がんの 5 年相対生存率 (国立がん研究センターがん統計データベース²⁾) から引用

さらなる乳がんの特徴として特筆すべき点は、ほかの部位でのがんに比べて早期発見できれば治癒率も高いことである。図 1.5 に示す通り、主要部位の中で 5 年生存率が 80% を超えているのは乳がんだけである。乳がん 1 期での 5 年生存率は 85～95 %、10 年生存率は 75～80% である⁹⁾。また、乳がんでは早期癌と定義されるのは 2cm 以下で転移のない場合¹⁰⁾ であるが、非浸潤がん以外ではリンパ節に転移しやすく微小転移と呼ばれる全身転移が生じている^{9, 11)}。したがって、乳がんに関しては、早期発見・早期治療が非常に重要であり、若年層へも適用できる新しい画像診断技術の確立が急がれているのである。

| 病期 | 5 年生存率 | 10 年生存率 |
|-------|--------|---------|
| I 期 | 85～95% | 70～85% |
| II 期 | 65～80% | 50～70% |
| III 期 | 40～55% | 25～45% |
| IV 期 | 5～15% | 0～5% |

乳がんの病期別生存率⁹⁾

1.2 医療画像診断の概要

1.2.1 医療用画像診断の種類と特徴

医療用画像診断は、レントゲンによって発見された X 線によって始まっている。現在でも単純 X 線による画像診断は医療現場において用いられている重要なものである。さらに、Computed Tomography(CT) が開発され、X 線撮影に CT を用いた X 線 CT、核磁気共鳴 Nuclear Magnetic resonance(NMR) に用いた Magnetic Resonance Imaging(MRI)、Positron Emission Tomography(PET)、超音波エコー検査などが開発され、それぞれの技術における特性や診断部位・目的によって使い分けられている^{12, 13)}。

CT CT は、A.M.Cormack によって 1963 年および 1964 年原理が発表^{14, 15)} され、1972 年に Godfrey Hounsfield によって開発された¹⁶⁾。通常の吸収 X 線撮影に対して CT を用いることにより X 線横断像を 180 度にわたって撮影し、それを再合成することによってその横断面の画像を再合成している。したがって、X 線 CT の場合の一方向からの撮影では、一次元のデータしか得られていない。さらに横断面を移動させていくことによって横断面をスライス面とすることができ、三次元のボリュームレンダリングを行うことができる。また、1989 年にヘリカル CT またはスパイラル CT と呼ばれるらせん走査型の X 線 CT が開発されている¹⁶⁾。

現在の X 線 CT では、各方向からの撮影を吸収 X 線撮影で行っているため、従来の吸収単純 X 線撮影のコントラストと同様に電子密度の高い骨などの構造は明るく、電子密度の低い脂肪などの構造は暗く映る¹³⁾。したがって、画像のコントラストは物質の原子番号によって決まる¹⁷⁾。

X 線 CT によって腹部や胸部の臓器間のコントラストをつけるためには、ヨード剤による造影剤を抹消静脈から注入して行う^{13, 16, 17)}。

MRI 核磁気共鳴とは、強磁場下にある磁気双極子モーメントをもつ粒子の核スピンの特定の周波数の電磁波と共鳴を起こし、電磁波の吸収を起こす現象である。核磁気共鳴を用いた MRI は、人体組成が水分など多くの水素で構成されていることから、水素原子の原子核であ

るプロトンを指標として臓器などのプロトンの存在する環境によって核磁気共鳴の緩和速度の違いが生じるためそれを観測し画像化しているものである^{13, 16, 17)}。したがって、MRIでの画像のコントラストはX線CTのように単純に決まらず、プロトンの密度、縦方向の緩和速度(縦緩和)、横方向の緩和速度(横緩和)の3つによって相対的に決まる^{13, 16, 17)}。そのため画像のコントラスト生成には複雑な処理を経ているが、その分、多様な描画が可能である^{13, 16, 17)}。

MRIによって縦緩和を強調させるために、撮影の際にはガドリニウムキレート剤の造影剤を静脈注入して行われる^{13, 16, 17)}。

CTとMRIの比較 既に概要を解説した通り、X線CTとMRIは、その原理が全く異なるため、得られる画像も異なり、それぞれに適した読影の知識が必要である。撮影目的や撮影部位によってX線CTとMRIの特性を考慮した使い分けがされる。特に骨、体内空気、線繊維化組織、石灰化組織、血管の撮影にはX線CTがMRIよりも画像コントラストを得るために優れている。また、脂肪、リンパ節でもX線CTがスタンダードである¹⁷⁾。一方、血腫、軟骨、骨髄ではMRIが画像コントラストを得るためには優れている¹⁷⁾。

MRIは任意の断面を得ることができ、X線CTは横断画像を基本とする。MRIは強磁場が発生するので、金属類の装着、ペースメーカーなどの体内サポート機器、そのほかの生命維持装置使用患者の場合には使用できない^{13, 16, 17)}。また、相対的にX線CTのほうが検査時間が短いことも特徴であり、磁場の影響を受けないことと併せて緊急性の高い検査にも有利であるが、放射線被ばくが避けられない^{13, 16, 17)}。

したがって、頭部、脊椎、骨盤周辺部などの骨の内部にある構造や被ばくの影響を避けたい場合にMRIが用いられることが多く、胸部、腹部ではX線CTが用いられることが多い¹⁷⁾。

また、X線CT画像の特徴は空間分解能が高いことであり、MRI画像の特徴はコントラスト分解能が高いと評される¹³⁾。空間分解能とは、細かな線の組み合わせが分離した線であることを表現できる指標であり、ラインペア(lp/mm)という尺度で表される¹³⁾。一方、コントラスト分解能とは、別々の組成で構成される組織が異なった階調で表現できる能力を言う¹³⁾。

超音波エコー 超音波エコー検査は、高周波音波を体表面から発波させ、媒質界面での反射波を捉えることで伝搬時間と反射波の大きさを電氣的処理により生体を可視化しているものである¹⁶⁾。超音波は、微弱なパルス音波を使用しており、人体に対し安全である。また、ベッドサイドでリアルタイムに簡単に画像が得られ患者の負担も少ない¹⁶⁾。欠点としては、術者の技量に依存し、画像に客観性がない¹⁶⁾。

PET PETは、陽電子(ポジトロン)を用いた新しい撮影技術である。陽電子は、電子の反物質で電子と同じ質量で電荷が逆のものをいい、1931年にディラックによって理論的に予言され、翌年アンダーソンによって宇宙線の中から発見されている¹⁸⁾。

発生した陽電子は近くにある電子と結合し、光子を互いに水平逆方向に二つ放出して消滅する。陽電子は放射性核種の崩壊によっても発生する。PET では、陽電子を放出する放射性核種を体内に注入し、体内で発生した陽電子が体内の水分などで減衰し電子と結合する際に発生する光子を観測することで画像化している。PET に用いられる放射性核種では、 ^{11}C 、 ^{13}N 、 ^{15}O 、 ^{18}F など体内に一般的に存在する元素の放射性同位体を用いる。したがって、造影剤としての放射性核種の体内注入が避けられない。

PET によるがんの画像化においては、がん化した細胞は増殖速度が早く糖類の取り込みが促進されることを利用して、グルコース様の ^{18}F フルオロデオキシグルコース (FDG) を体内注入して撮影する。

陽電子放出核種が最大飛程距離の半分を平均としてランダムに移動するため撮影誤差となる。したがって、画像の分解能が使用する放射性核種の最大飛程距離の半分程度しか望めない¹⁸⁾。

| 陽電子放出核種 | 陽電子放出後安定核種 | 最大飛程距離 | 半減期 (分) |
|-----------------|-----------------|--------|---------|
| ^{11}C | ^{11}B | 3.88mm | 20.39 |
| ^{13}N | ^{13}C | 5.12mm | 9.96 |
| ^{15}O | ^{15}N | 8.09mm | 2.03 |
| ^{18}F | ^{18}O | 2.17mm | 109.8 |

PET 撮影では、陽電子放出核種の半減期が最大でも 110 分程度と短いものを使うため、放射性核種を病院内において小型サイクロトロンと合成装置において生成する必要がある^{18, 19)}。また、陽電子放出核種を体内注入した PET 撮影患者から医療従事者が受ける被ばくもあり得るため、合理的な運用が求められる。

FDG-PET によるがん診断では、全身の広範囲な検査ができ、画像分解能の範囲内で小さながんの検出が可能である。特に、遠隔転移を検出することが可能であり、糖消費を指標としているため、進行度合いや性質を推定可能である¹³⁾。一方、糖の取り込みが起らないタイプのがんは検出できない。また、糖尿病患者には使えない^{13, 18)}。さらに、もともと多くの糖が消費される脳や心臓、代謝排出系の泌尿器系統へは FDG が集中するため利用できない^{13, 18)}。

近年、PET と X 線 CT を同時に行う PET/CT が開発されている。PET 画像と X 線 CT 画像が同時に撮影できるため、それぞれの課題を補う役割を果たしている。PET/CT の医療機器としては 2003 年の登場であり、PET は 2002 年 4 月から PET/CT は 2006 年 4 月から一部の疾患に対して条件付きでの保険請求も可能になっている^{18, 19)}。

1.2.2 感度と特異度

医療用画像診断を理解する上で、その画像診断技術の良さを判断するために感度と特異度の議論がつかまとう。ここでは、その意味をまとめておく。

| | 本当は疾患があった | 本当は疾患がなかった |
|--------------|-----------|------------|
| 検査・所見で陽性となった | 真陽性 | 偽陽性 |
| 検査・所見で陰性であった | 偽陰性 | 真陰性 |

感度とは、本当に疾患があった患者を正しく陽性と判定した割合である。一方、特異度とは、本当は疾患がなかった場合に正しく陰性と判定した割合である。したがって、次の関係になる。

- 感度 = 真陽性 / (真陽性 + 偽陰性)
- 特異度 = 真陰性 / (偽陽性 + 真陰性)

1.3 乳がんの画像診断の現状

最新の乳がん診断では視触診とマンモグラフィー、超音波エコー、MRI など異なる方法を組み合わせた画像診断、およびそれに基づく穿刺吸引細胞診、針生検を用いて行われる²⁰⁾。

乳がんについての画像診断法には、マンモグラフィー・超音波エコー・CT・MRI・PET がある²¹⁾。これらの技術には、その特性により使い分けがされている²¹⁾。

マンモグラフィー マンモグラフィーは、検診および初期診断において用いられる技術である¹³⁾が、検診の場合の感度は、83% から 95% 程度であり¹³⁾、50 歳以上の女性に対しては特に有効に働くが、40 歳代の女性に対しての有効性は認められるものの 40 歳代を境にして若年者には現状の技術での有効性は根拠がない⁵⁾。リスクファクターの多い女性に対しては、40 歳代からのマンモグラフィー検診が推奨されている¹³⁾。したがって、乳がんの診断においては、補助診断法の一つであり、確定診断にはさらに超音波エコー検査などの追加検査を併用する²¹⁾。

マンモグラフィーの撮影は、乳房を平板にはさみ伸ばした状態で撮影する単純 X 線撮影である²²⁾。平板によって挟んで押して伸ばして撮影するため、一般に硬いとされるがん病変の伸びが周囲組織の自然な伸びを阻害することで構築の乱れが明らかになりやすいという特徴がある²²⁾。マンモグラフィーの標準的な撮影方向は左右それぞれの乳房の頭尾方向と内外斜位方向の合計 4 方向であり、1 方向に対しての被ばく量は 1mGray である¹³⁾。

乳がん診断での CT 乳がん診断において CT が用いられるのは、浸潤範囲の決定、遠隔転移の検査の場合と、手術前の病巣位置同定の際に行われることが多い²²⁾。手術前検査の場合は、MRI での腹臥位姿勢での撮影に対して CT の撮影は仰臥位での検査のために位置の同定に対して優れており、また、乳腺領域リンパ節である腋窩リンパ節などの近隣リンパ節転移の有無は、切除範囲決定に重要なため CT 検査が多用される²²⁾。遠隔転移の検査は、MRI および PET とともに用いられている²²⁾。

乳がん診断での MRI 乳房の MRI 検査は、呼吸や心拍の影響を避けるために腹臥位姿勢で行われる⁴⁾ため、手術前位置同定には CT に対して不利であり、石灰化現象の陰影を得ることもできない²²⁾。しかし、乳房内部の構造を任意のスライス方向で撮影が可能であり、コントラスト分解能が高いため、腫瘍の広がりをつえるために用いられている⁴⁾。

非浸潤がんではマンモグラフィーよりも優れた描画能力があるとされ、多用される方向にあるが、特異度が 35% との報告があり非常に低く、乳がん検診には使うことができない^{4, 13, 19)}。

最新の報告によれば、高齢女性での片側乳がんの対側乳がんに対して早期発見の恩恵を受けられる可能性がある²³⁾とされるが、限定的である。

乳がん診断での超音波エコー 乳がんの性質によって超音波によるエコーに違いが起こるため、乳がんの質的判断ができる特徴があり、位置の特定とがんの広がり診断について利用され、確定診断での針生検の際に、ガイドとしても用いられている^{13, 19)}。現在、マンモグラフィーが有効でない若年層および妊婦に対して視触診で異常を認めた場合に健診で最初に用いられる唯一の技術である¹³⁾。音波の反響を利用しているため、他の技術の画像に比べて鮮明とは言い難く、X 線像に比べるとはるかに劣っている²²⁾。

乳がん診断での PET 乳がんも PET での検出可能ながんとされており、FDG-PET において手術後の全身転移、再発転移などの検出に用いられている¹⁹⁾。また、FDG の取り込みにおいて原発病巣の性質の推定および治療効果の判定ができる¹⁹⁾。糖の代謝に依存しているため、偽陽性が多く、他の画像撮影法と併用することが有用であり、PET/CT が開発されている^{18, 19)}。

マンモグラフィーの重要性 健診および確定診断において最初に行われる乳がん検査法はマンモグラフィーであり、CT、MRI、PET などのそのほかの検査法は、主に確定診断と術前診断、遠隔転移検査などに用いられることが一般的である。

乳がんは、その種類が多く、形態もさまざまである。石灰化現象は、乳がんの形態の一つであるが、石灰化現象の検出は X 線 CT を含めた X 線撮影技術がほかの技術よりも優れている。乳房の脂肪組織、線維化組織なども X 線による撮影において判別できる。したがって、現状では単純 X 線撮影法の一つであるマンモグラフィーによる画像診断は、健診においても診

断においても非常に重要なものである。しかし、若年層に対しては、効果ある画像が得られておらず、さらなる改良が求められているのである。

1.4 X 線画像診断

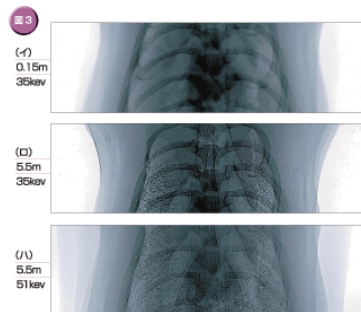


図 1.6 吸収コントラスト撮影と屈折コントラスト撮影²⁴⁾(SPring-8 ホームページから)

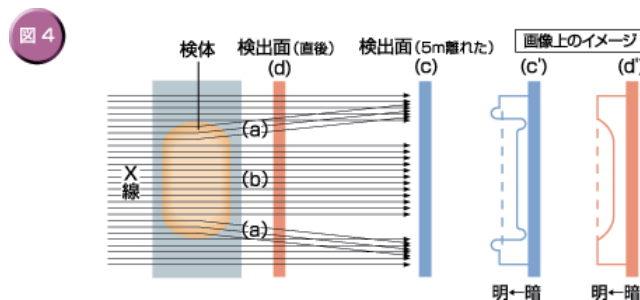


図 1.7 吸収コントラストと屈折コントラストの違い²⁴⁾(SPring-8 ホームページから)

吸収コントラストと屈折コントラストの違い 図 1.7 の (d) の位置での撮影が従来の吸収コントラスト撮影であり、(d') に示されているイメージの通り、X 線の通過してきた物体による吸収の影響によりコントラストが付いている。これは図 1.6 での最上段の写真 (イ) である。

一方、屈折コントラスト撮影では、図 1.7 の (c) の位置のように撮影対象物体から相当離れた位置においては、物体を通過していない直進してきた X 線と、物体の辺縁を通過して物体において起こった微小な屈折により曲げられた X 線とが干渉し、撮影物体の辺縁が強調されるコントラストが生まれる。これは図 1.6 での真ん中の写真 (ロ) である。図 1.6 の下段の写真 (ハ) は、中段の写真 (ロ) と同じ配置でエネルギーを上げた場合である。

屈折コントラスト撮影を行うためには、X 線の角度分散が小さく平行であることが必要であり、SPring-8 のようなコヒーレントな光を用いる必要がある^{24, 25)}。

図 1.6 および図 1.7 の屈折コントラスト撮影では、対象物の辺縁のコントラストが強調されている。図 1.8 には X 線の透過する断面から見た X 線の屈折する強調されるベクトルについて模式的な図を示す。

この撮影法を応用した Anton S. Maksimenko 博士による屈折コントラスト撮影法²⁶⁾は、撮影対象物体とイメージングプレートとの間に角度分析を行うアナライザーを置くことによって撮影対象物体内部でおこる屈折コントラストを強調することに成功している。

屈折コントラストの絶対的優位性 屈折コントラスト撮影法では、異なる物体の間を X 線が通過する際の微小な屈折をコントラストとして使っているため、人体内部の血管や臓器といった軟組織でも高精細なコントラストをつけ、高解像度な画像を得ることが可能であるため、造

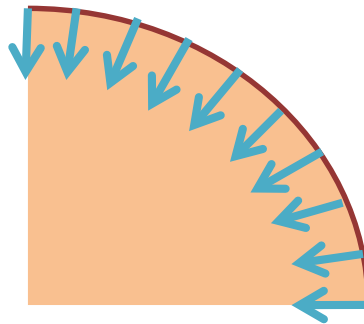


図 1.8 屈折コントラスト撮影において X 線の透過断面から見た強調されるベクトル

影剤を用いる必要がない。吸収コントラスト撮影法では、透過率のコントラストをはっきりさせるために、CT 撮影であれば、ヨード剤を、単純撮影でも消化器系の検査であれば、バリウムを造影剤として使って撮影を行っている。また、X 線撮影以外の撮影法である MRI ではガドリニウムキレート剤を、PET であれば、放射線核種を造影剤として投与される。これら造影剤を使用する撮影に比べて屈折コントラスト撮影法では造影剤による患者の負担やリスクがないといえる。

屈折コントラスト撮影法では、撮影対象物体での微小な屈折によりコントラストをつけているため、厚みのある臓器が重なりあうような複雑な形状の場合は、単純 X 線撮影法のような一方向からの撮影よりも CT での横断撮影による再合成に向いていると言える。また、単一方向からの単純 X 線撮影であるマンモグラフィーでは、乳房を平板で挟み込み、伸ばした形で撮影を行っているため、屈折コントラスト撮影法の対象として非常に適していると言える。

1.5 研究概要と本論文の構成について

本研究は、高輝度放射光を用いた屈折コントラスト撮影法による「マンモグラフィー」の開発を行っている安藤教授（元総研大光科学専攻）のプロジェクトがあり、その屈折コントラスト撮影法から得られる情報の増大を目指して進めてきた。この屈折コントラスト撮影法では生体等の撮影対象を通過して屈折した光を、アナライザーと呼ばれる角度分析のためのシリコン結晶板にあてて回折させ、ロッキングカーブによって対象物での屈折を観測し、ベクトル強度分布情報に変換することで画像の再合成を行うものである。そこで、角度情報を得るために重要なロッキングカーブに注目し、情報量を増やすことができないかを検討してきた。しかし、ロッキングカーブは Ewald-Laue 理論によって導かれた平面波の逆空間での強度分布であるため、平面波面内以外の方向の情報は得られない。したがって、代わりに別方向への反射波を利用することで角度情報を増やすことを考え、シリコン結晶の物理学的な性質からアナライザーでの反射波を多波へと拡張することを試みてきた。また、X 線の撮影画像をコンピュータシ

ミュレーションによって得るために従来技術で用いられてきた平面波理論である Ewald-Laue 理論ではなく近年多波に拡張されている高木-Taupin 理論に基づく動力学理論を用いてきた。なお、屈折コントラスト撮影法については、付録において Anton S. Maksimenko 博士の博士論文²⁶⁾の内容を紹介することで概説する。

本論文は、屈折コントラスト撮影法に多波回折を応用させることで撮影時に得られる情報を増大させることおよび、被ばく量軽減を目指して行われたものであり、第 2 章では、導入として屈折コントラスト撮影法に対して本研究がどのように情報増大のためのアプローチを行ったかを概説する。

第 3 章、第 4 章、第 5 章、第 6 章では、新しく提案する多波回折を用いた撮影法を研究開発していく上で必要な基礎的事項、回折理論、実験などについて学んできた内容について順に解説を行っていく。まず第 3 章では、多波回折が成立する理由であるシリコン結晶構造と X 線回折について説明し、第 4 章では、X 線動力学理論の基礎となっている Ewald-Laue 理論について概観しながら、本研究が対象とした「ロッキングカーブ」について説明する。第 5 章では、近年になって多波回折に拡張され、かつ線形性があり発展性の高い理論として本研究において一貫して注目してきた高木-Taupin 理論について解説し、第 6 章では、SPring-8 において行った多波回折の実験結果を示す。

第 7 章では、第 6 章までの事項をふまえて、新しい多波回折を用いた屈折撮影技術の研究開発を目指して高木-Taupin 理論を回折画像のコンピュータシミュレーション研究に適用していく。第 8 章では、第 7 章を受けてコンピュータシミュレーションによって得られた回折画像について、その応用の可能性を探るためにも本研究によって明らかにすべき必要が生じた事項についての内容を説明し、その過程で明らかになった新しいロッキングカーブの求め方と高木-Taupin 理論の関係について報告する。第 9 章において第 7 章、第 8 章で得られた本研究におけるコンピュータシミュレーション結果を受けて屈折コントラスト撮影法への応用の可能性および有効性について議論を行い、第 10 章で、統計的画像処理と屈折コントラスト撮影法および三波回折を用いた新しい技術との関係を示し、第 9 章および第 10 章の議論を受けて第 11 章では、実際の医療診断における応用に向けて画像診断の実際の医療現場の状況と現状に対する新しい技術の優位性を述べる。第 11 章を本研究のまとめとして考察を行い、今後の研究課題について述べることとする。

第 2 章

撮影情報増大のためのアプローチ

2.1 撮影情報量増大の目論見

「屈折コントラスト撮影法」では、シリコン結晶が使われているアナライザーでの回折波についてロッキングカーブを指標にして低角側と高角側の二か所において撮影を行い、角度分析を行っているため、同一方向の撮影を行うために二回の撮影が必要であり、二度の被ばくが起こる。この二度の被ばくは、ロッキングカーブの角度変化を示す横軸に沿って X 線強度を表す縦軸の半値の点で撮影を行っているためであるが、横軸に沿った一次元の情報量を用いている。したがって、この横軸によって変化される情報量を、「軸」ではなく「面」に拡張し、三次元のロッキングカーブ分布を用いた分析指標を確立することができれば、得られる情報量を増大させることが可能ではないかという点に着目した。

しかし、後述のとおり、ロッキングカーブとは Ewald-Laue 理論によって定義される平面波の解であり、屈折コントラスト撮影法に用いられている X 線は平面波を想定し、X 線の照射、アナライザーでの回折現象、撮影に至るまで同一平面を伝わる X 線を想定している。そのため、この場合のロッキングカーブは、横軸と縦軸の間で展開される二次元のプロファイルである。

そこで、そもそもロッキングカーブとはアナライザーにおける回折の指標であることから、シリコン結晶であるアナライザーとロッキングカーブとを検討し、アナライザーでの回折波をシリコン結晶の結晶構造とブラッグ反射の法則を用いて同時に別方向への回折波を生じさせることができれば従来の同一平面上だけからの撮影情報から脱却できるのではないかと目論んだ。また、多波回折を使うことで、同時に別方向への回折波を得られることから、同一方向情報の二度の撮影を一度に集約することができれば、撮影時の被ばく量の低減にも貢献できると考えた。

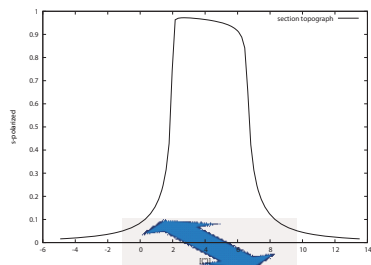


図 2.1 ブラッグ反射のロッキングカーブと想定拡張方向

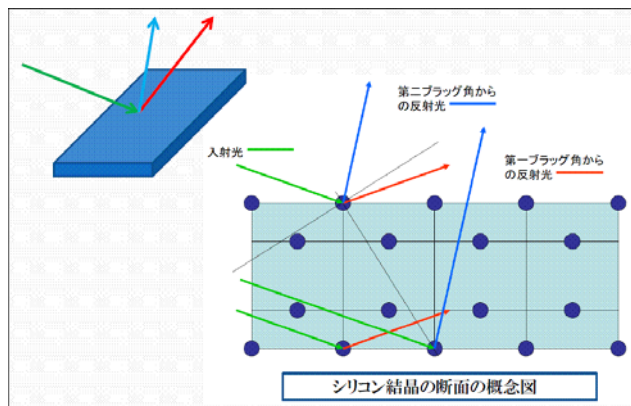


図 2.2 シリコン結晶でのブラッグ反射多波回折の概念図

2.2 実現へのアプローチ

電子線回折の分野に低速電子回折 (LEED: low Energy Electron Diffraction) という技術がある²⁷⁾。これは、結晶表面に対してエネルギーが数十から数百 eV 程度の低速電子を衝突させ、回折現象から結晶表面の構造解析を行うものである。ここで用いられている低速電子は、エネルギーにおいて X 線と比較すると非常に小さいものであるが、回折現象における逆空間を用いた解析法については X 線回折現象とほぼ同じである²⁷⁾。薄膜試料測定分野では、高速電子回折 (HEED: High Energy Electron Diffraction)、高速反射電子回折 (RHEED: Reflection HEED)、を経て超高真空 RHEED へと改良されている²⁷⁾。これらの電子線回折においても Ewald 球を用いて逆格子点との関係から回折方向の計算を行い、入射電子線の視射角変位によるロッキングカーブでの回折強度を測定し、表面構造の決定を行っている。そのため、LEED および RHEED では多重散乱を含む動学的回折理論によってのみ正確に表面構造からの回折強度を記述できる²⁷⁾。

本研究の対象とした屈折コントラスト撮影法は、撮影画像のデータについて X 線動学的理論を基盤として成立しているものである。特に、撮影時のデータの解析の指標はアナライザーでのシリコン結晶による回折現象の X 線動力学理論におけるロッキングカーブを用いるものである。

そこで、アナライザーでのシリコン結晶における X 線回折を、シリコン結晶の結晶構造およびへき開方向の表面構造と、電子線回折技術とその進展などを参考にして X 線においても同時反射について検討することで、別方向のデータを得られるのではないかと着想し、アナライザーでの X 線回折を三波回折に拡張する事を目指した。

X 線回折を三波回折に拡張するためには、従来の平面波理論ではなく、球面波の計算に

も対応し近年になって多波への拡張が行われた高木-Taupin 理論を用いることで実際の撮影画像を想定したコンピュータシミュレーションによる研究を行ってきた。手法としては、高木-Taupin 理論の解である三波ブラッグ回折のピンホールトポグラフと乳がん細胞構造を想定した透過波を高木-Taupin 理論を用いて計算した透過波プロファイルを別々に求め、スーパーコンピュータを用いてそれらの結果を畳み込み積分を行うことによって撮影画像をコンピュータシミュレーションによって作成している。その結果、第 7 章に示す通りブラッグ角に合わせた三波回折を用いた場合の屈折画像は鮮明には得られない事がわかってきた。そこで、鮮明な画像を得るための評価を行うために三波回折の場合の X 線回折強度分布すなわちロッキングカーブについて詳しく知る必要が生じてきたため、従来では Ewald-Laue 理論の解として定義され導出されているロッキングカーブについて三波回折におけるコンピュータシミュレーション計算で用いてきた高木-Taupin 理論により導出するというまったく新しい手法を試みてきた。これにより、三波回折の屈折撮影技術への応用の可能性を議論できるようになったと言える。

第 3 章

結晶の構造と X 線回折

3.1 結晶の構造

3.1.1 結晶と点群

結晶とは、周期的配列をもつ固体である^{27, 28)}。周期的とは、繰り返し構造を持っていることであり、操作を何度か行えば、元に戻るというものである。操作には、恒等、反転、回転、鏡映、水平鏡映、鉛直鏡映、対角鏡映および回映があり、それを対称要素といい²⁹⁻³¹⁾、対称要素によって行う操作を対称操作という³⁰⁻³²⁾。

代数学における群論では結合律の成立、単位元の存在、逆元の存在があれば群をなすと定義する。元とは要素である。結晶の対称操作では、物体の空間的な移動を伴わずに操作によって原子および分子の位置を一致させるために対称要素は必ず一点で交わる必要があり、このような群を点群と呼ぶ^{29, 30)}。また、結晶は単位となる部分の並進によって空間を埋めているために、対称要素のうち回転、および回映の回数に制限が出てくる^{30, 32)}。そのため、結晶での点群の数は 32 だけであり、どんな結晶でもこの中に含まれる^{30, 32)}。この条件を満たさないものは結晶ではない。

3.1.2 基本並進ベクトルと基本単位構造

結晶は、その定義から繰り返し構造を持っているが、この繰り返し構造により、基本単位を定める。結晶の構成要素である原子および分子の位置を点として、任意の要素二点間のベクトルは繰り返し構造により並進ベクトルとなる。それは繰り返し構造の基本単位で定めるベクトルの整数倍になっており、基本単位のベクトルの一次結合で記述できる。この基本単位となるベクトルを基本並進ベクトルと呼ぶ^{30, 31, 33, 34)}。

基本並進ベクトルが作る平行六面体を基本単位格子といい、結晶中での最小の基本格子であり、どんな基本単位格子の取り方をしても同一結晶中であれば、内包する原子の数はど

の基本単位格子で見ても等しくなる。この基本単位格子の内部構造を基本単位構造と呼ぶ^{30, 31, 33, 34}。

3.1.3 結晶面指数とダイヤモンド構造

基本並進ベクトルと直交座標系の間の定数を格子定数と呼び、基本並進ベクトルの方向を結晶軸という。結晶軸の各方向と交わる面について、格子定数を単位として結晶軸との交点を a, b, c とし、その逆数 $1/a, 1/b, 1/c$ の整数比を (hkl) とする。これを面指数と呼ぶ。立方晶系の場合は、面指数 (hkl) で表記した面に垂直な方向を $[hkl]$ と表記し、方向指数と呼ぶ^{34, 35}。

本研究で対象としたシリコン結晶はダイヤモンド構造をとる。図 3.1 にダイヤモンド構造を

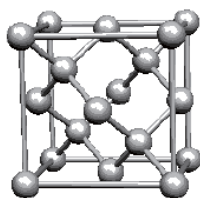


図 3.1 ダイヤモンド結晶構造 (SPring-8 ホームページから)³⁶⁾

示す。ダイヤモンド構造は、二つの面心立方格子を立方の対角線方向に $1/4$ ずらした変形面心立方格子の形をとり、基本単位格子の中に八個の原子を含んでいる。また、シリコン結晶での結晶表面は、 (100) , (110) , (111) などが代表的な方位としてあげられる²⁷⁾。

3.2 X 線回折理論概要

3.2.1 回折とブラッグ条件

結晶の原子間距離と X 線の波長が同程度以下である場合、結晶格子が回折格子の役割を果たし、特定方向への散乱波が干渉によって強めあいの現象を起こす。これを回折と呼ぶ^{28, 31, 34, 35, 37-41}。

X 線の波長が λ として、結晶の積層面方向の間隔が d の格子面に対して入射する場合、図 3.2 のように波面に垂直な入射方向と結晶の為す角を θ_B として結晶格子点で散乱が起こる。この場合、結晶面では隣の結晶格子点からの散乱波とは行路が等しい入射点と対称な点では位相がそろったために強めあう。しかし、積層面方向からの散乱波が同様に干渉を起こすとは限らない。ABC と A'B''C'' の行路差が波長の整数倍の時のみ同位相となり強めあいの条件を満たす。その条件は、

$$A'B''C'' - ABC = DB'' + B''E = 2d \sin \theta_B \quad (3.1)$$

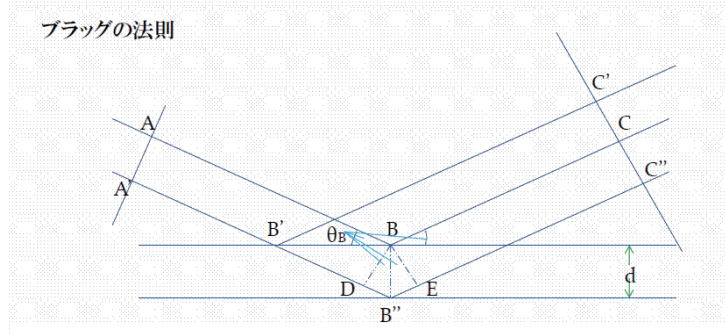


図 3.2 ブラッグの法則

であるため、

$$2d \sin \theta_B = n\lambda \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2)$$

であり、 θ_B をブラッグ角と呼ぶ。 n は、整数である反射次数であり、隣り合う面からの散乱波の行路差に含まれる波数である。この式 (3.2) をブラッグ条件と呼ぶ^{28, 34, 35, 37-43}。

3.2.2 結晶構造因子と電子密度分布

電磁波として振幅 E_0 、波長 λ 、振動数 ν の時刻 t における X 線振幅を E とすると

$$E = E_0 \exp(2\pi i \nu t) \quad (3.3)$$

である。いま、電子 1 および電子 2 での散乱を考える。X 線の入射方向を s_0 ベクトル、散乱方向を s ベクトルとし、電子 1 で散乱された X 線を E_1 、電子 2 で散乱された X 線を E_2 とし、

$$E_1 = E_0 \exp(2\pi i \nu t) \quad (3.4)$$

$$E_2 = E_0 \exp(2\pi i \nu t - i\alpha) \quad (3.5)$$

と表しておく。ここで、 α は、 E_2 の波のほうが E_1 の波よりも距離が長いために位相の遅れを表す。この行路差と波長が等しいとき位相差は 2π ずれるため、式 (3.5) の E_2 は、

$$E_2 = E_0 \exp \left[2\pi i \nu t - i \frac{2\pi}{\lambda} \{ \mathbf{r} \cdot \mathbf{s}_0 - \mathbf{s} \} \right] \quad (3.6)$$

$$= E_0 \exp \left[2\pi i \nu t + 2\pi i \left\{ \mathbf{r} \cdot \frac{\mathbf{s} - \mathbf{s}_0}{\lambda} \right\} \right] \quad (3.7)$$

となり、原点の取り方を変え、位置ベクトル \mathbf{r} を汎用的に拡張し、 E_1 の位置ベクトルを \mathbf{r}_1 、 E_2 の位置ベクトルを \mathbf{r}_2 とすると

$$E_1 = E_0 \exp \left[2\pi i \nu t + 2\pi i \left\{ \mathbf{r}_1 \cdot \frac{\mathbf{s} - \mathbf{s}_0}{\lambda} \right\} \right] \quad (3.8)$$

$$E_2 = E_0 \exp \left[2\pi i \nu t + 2\pi i \left\{ \mathbf{r}_2 \cdot \frac{\mathbf{s} - \mathbf{s}_0}{\lambda} \right\} \right] \quad (3.9)$$

となる。この $\frac{\mathbf{s} - \mathbf{s}_0}{\lambda}$ を散乱ベクトル \mathbf{K} と定義する⁴³⁾。したがって、各電子からの散乱波は干渉し、合成波 $E_1 + E_2$ を作る。これは、 n 個の電子でも同様であり、 n 個の電子での散乱波は

$$E = E_0 \exp(2\pi i \nu t) \sum_{j=1}^n \exp\{2\pi i(\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{K})\} \quad (3.10)$$

となる⁴³⁾。実際に観測できる散乱強度は、振幅の二乗 (式 (3.10) の二乗) であり、波の進行方向 $\exp(2\pi i \nu t)$ 成分は消去されるため、 $\sum_{j=1}^n \exp\{2\pi i(\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{K})\}$ が各方向への散乱強度を表している。これを散乱因子と呼ぶ⁴³⁾。

ここまでは、電子における散乱についての X 線振幅であるが、現実の散乱物体では電子は物体構成原子の周りに電子雲として確率的に存在する。いま、散乱物体を原子として、その電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ 、座標 \mathbf{r} においての微小体積要素 $d\mathbf{r}$ の中に電子が存在する確率を $\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ とすると、電子の確率的存在位置に対する X 線の位相差を考慮すれば、X 線振幅は $\rho(\mathbf{r})$ に比例する^{28, 41, 43)}。また、 $\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ は、連続関数なので、原子全体にわたって積分を行い、

$$\int_{\text{原子全体}} \rho(\mathbf{r}) \exp\{2\pi i(\mathbf{r} \cdot \mathbf{K})\} d\mathbf{r} \equiv f(\mathbf{K}) \quad (3.11)$$

となる^{28, 43)}。この $f(\mathbf{K})$ を原子散乱因子と呼ぶ^{27, 28, 37-41, 43)}。

次に、結晶での X 線散乱を考える。結晶も当然原子から構成されているので散乱因子を定義することができ、結晶内の全原子にわたって原子散乱因子からの散乱振幅の足し算とすることができ、結晶は、周期性によってその特徴を定義されていることは前節での説明のとおりであり、その周期の基本単位である単位格子での散乱因子を三次元に足し合わせることで結晶全体を実現する。

$$\begin{aligned} \int_{\text{結晶全体}} \rho(\mathbf{g}) \exp\{2\pi i(\mathbf{g} \cdot \mathbf{K})\} d\mathbf{g} = \\ \sum_x \sum_y \sum_z \exp\{2\pi i((x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}) \cdot \mathbf{K})\} \int_{\text{単位格子}} \rho(\mathbf{h}) \exp\{2\pi i(\mathbf{h} \cdot \mathbf{K})\} d\mathbf{h} \end{aligned} \quad (3.12)$$

ここで $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ は、並進ベクトルであり、 x, y, z は格子点座標である。したがって、基本となる単位格子での散乱因子は式 (3.12) の内、

$$\int_{\text{単位格子}} \rho(\mathbf{h}) \exp\{2\pi i(\mathbf{h} \cdot \mathbf{K})\} d\mathbf{h} \equiv F(\mathbf{K}) \quad (3.13)$$

であり、この $F(\mathbf{K})$ を結晶構造因子と呼ぶ^{28, 41, 43, 44)}。

一方、先に与えた電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ については、これをフーリエ変換することで構造因子が得られる^{28, 41, 43, 45, 46)}。したがって、式 (3.12) を逆フーリエ変換したものがその結晶における電子密度分布 $\rho(\mathbf{h})$ となり、

$$\rho(\mathbf{g}) = \sum_x \sum_y \sum_z \exp\{2\pi i((x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}) \cdot \mathbf{K})\} \sum_{\mathbf{K}} F(\mathbf{K}) \exp\{2\pi i(\mathbf{h} \cdot \mathbf{K})\} \quad (3.14)$$

という関係が存在している^{27, 28, 38, 39, 43, 45, 46)}。

3.2.3 回折の基本方程式

通常、古典論における電磁波は、Maxwell 方程式で与えられる。ガウス単位系では、電場ベクトル \mathbf{E} 、磁場ベクトル \mathbf{H} 、電流 \mathbf{i} 、磁束密度 \mathbf{B} 、電荷密度 ρ 、電気変位ベクトル \mathbf{D} として、

$$\text{rot} \mathbf{H} = \frac{4\pi \mathbf{i}}{c} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D} \quad (3.15)$$

$$\text{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} \quad (3.16)$$

$$\text{div} \mathbf{B} = 0 \quad (3.17)$$

$$\text{div} \mathbf{D} = 4\pi \rho \quad (3.18)$$

とあらわす⁴⁷⁾。いま、物質中の電磁波を考えると、物質の磁気分極を \mathbf{M} 、電気分極を \mathbf{P} として電気変異ベクトル \mathbf{D} は、

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} \quad (3.19)$$

で与えられる³⁷⁾。また、 $\mathbf{B} = \mathbf{H}$ とし、電荷の保存則

$$\text{div} \mathbf{i} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (3.20)$$

を満たす次の関係

$$\mathbf{i} = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{P} + c \text{rot} \mathbf{M} \quad (3.21)$$

$$\rho = -\text{div} \mathbf{P} \quad (3.22)$$

を用いて、式 (3.15)～式 (3.18) は、

$$\text{rot} \mathbf{H} = +\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D} \quad (3.23)$$

$$\text{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{H} \quad (3.24)$$

$$\text{div} \mathbf{H} = 0 \quad (3.25)$$

$$\text{div} \mathbf{D} = 0 \quad (3.26)$$

と書きかえられる³⁷⁾。

ところで、ガウス単位系における電気感受率 χ は、

$$\mathbf{P} = \frac{1}{4\pi} \chi \mathbf{E} \quad (3.27)$$

で定義される⁴⁷⁾。したがって、式 (3.19) より

$$\mathbf{D} = (1 + \chi) \mathbf{E} \quad (3.28)$$

なので、

$$\mathbf{E} = \left(\frac{1}{1 + \chi} \right) \mathbf{D} \doteq (1 - \chi) \mathbf{D} \quad (3.29)$$

と近似しておく³⁷⁾。式 (3.23) より

$$\begin{aligned} \left(-\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) \text{rot} \mathbf{H} &= \left(-\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) \left(+\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) \mathbf{D} \\ &= -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{D} \end{aligned} \quad (3.30)$$

一方、式 (3.24) より

$$\text{rot} \cdot \text{rot} \mathbf{E} = \left(-\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) \text{rot} \mathbf{H} \quad (3.31)$$

式 (3.29)、式 (3.30) および式 (3.31) により

$$\text{rot} \cdot \text{rot} (1 - \chi) \mathbf{D} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{D} \quad (3.32)$$

ここで、

$$\text{rot} \cdot \text{rot} \mathbf{D} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{D}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{D}) = \nabla^2 \mathbf{D} \quad (3.33)$$

の関係があるので⁴⁸⁾、式 (3.32) は、

$$\nabla^2 \mathbf{D} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{D} = \text{rot} \cdot \text{rot} \chi \mathbf{D} \quad (3.34)$$

とできる。式 (3.34) を回折の基本方程式と呼ぶ^{28, 37, 39-41, 49)}。ここで、 \mathbf{D} が振動数 $\omega = 2\pi\nu$ で振動している電磁波であるので、 $K = (\nu/c)$ として式 (3.34) は、

$$\nabla^2 \mathbf{D} - 4\pi^2 K^2 \mathbf{D} = \text{rot} \cdot \text{rot} \chi \mathbf{D} \quad (3.35)$$

とも表記できる^{28, 37, 39-41, 49)}。

3.2.4 運動学的理論と動力的理論

X線回折理論には結晶内でのX線について各原子からの散乱の相互作用を考慮しない理論である運動学的理論と、多重散乱を考慮する理論である動力的理論がある。

運動学的理論では、結晶表面での回折を一度だけと限定して近似によって表す最も単純な回折理論である⁵⁰⁾。結晶構造解析などでは、おもに運動学的理論が用いられるが、運動学的理論では積分反射強度を算出する際、多重散乱効果のほかにも吸収効果などを考慮していないため、計算領域が大きいと入射X線強度よりも回折後の強度が大きくなるような結果が生じ、この理論では、結晶の大きさが消衰距離よりも大きくなれば実際の回折を正しく説明できなくなる^{39, 51)}。したがって、従来の結晶構造解析などでは、モザイク結晶などの完全性の低い結晶を扱い、単結晶試料に置き換えた場合、非常に小さな結晶の組み合わせと考えられるものや、見たい結晶構造が微小な試料に置き換えられるような場合には運動学的理論が用いられてきた^{39, 51)}。

しかし、結晶が大きい場合は、結晶内部に侵入したX線の多重回折波、結晶表面での屈折波、およびX線の結晶での吸収効果を考慮する必要があり、特に完全結晶を扱う場合は動力的理論を用いる必要がある^{39, 51)}。したがって、X線動力的回折理論は、完全結晶でのX線回折現象を扱う理論であるといえる。

3.2.5 ブラッグケースとラウエケース

X線の結晶による回折波は、結晶表面に入射したX線と回折を起こしたX線がともに結晶の内部を侵入し、反対側へ抜け出るラウエケースと結晶表面で入射方向へ侵入し、回折方向は、結晶の表面の外側へ向かうブラッグケースがある。

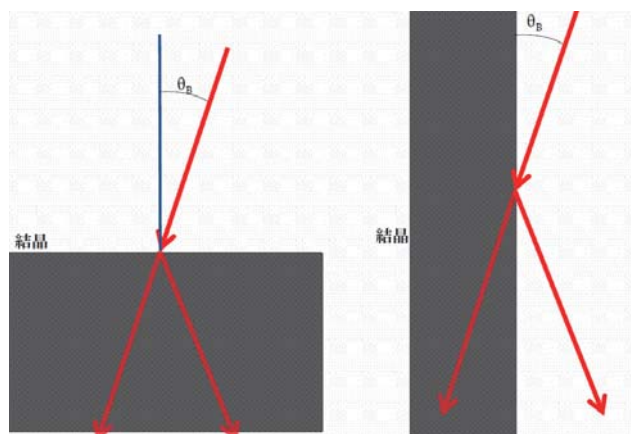


図 3.3 ブラッグケースとラウエケース

第 4 章

Ewald-Laue 理論

4.1 回折の基本方程式からの導出

式 (3.35) に示した回折の基本方程式は、次式である。

$$\nabla^2 D - 4\pi^2 K^2 D = \text{rot} \cdot \text{rot} \chi D$$

いま、結晶内を想定しているため、物質の定数である χ は、格子の周期をもち、周期関数としてフーリエ級数展開ができる。

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_g \chi_g \exp(-2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}) \quad (4.1)$$

また、 χ が周期関数であるとき、回折の基本方程式の解は、次のブロッホ関数で与えられる。

$$D = \sum_h D_h \exp(-2\pi i \mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r}) \quad (4.2)$$

式 (4.2) であらわされるような波をブロッホ波と呼ぶ。ここで、

$$\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h} \quad (4.3)$$

であり、 \mathbf{h}, \mathbf{g} は、それぞれ逆格子ベクトルである。式 (4.1) と式 (4.2) を回折の基本方程式へ代入していく。

$$D(\mathbf{r}) = D_0 \exp[-2\pi i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})] + D_g \exp[-2\pi i(\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r})] \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{r}) D(\mathbf{r}) &= \chi_0 D(\mathbf{r}) + \chi_g D_0 \exp[-2\pi i(\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r})] + \chi_{-g} D_g \exp[-2\pi i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})] \\ &\quad + (\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_g \text{ 以外の波数をもつ項}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

としておき、ベクトル解析の定義により $A(\mathbf{r}) = A \exp(-2\pi i \xi \cdot \mathbf{r})$ のとき

$$\text{rot} A(\mathbf{r}) = i[\xi \times A(\mathbf{r})] \quad (4.6)$$

$$\nabla^2 A(\mathbf{r}) = -(\xi^2) A(\mathbf{r}) \quad (4.7)$$

を用いて $\exp(-2\pi i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})$ を係数に持つ項は、

$$(\mathbf{k}_0^2 - K^2) \mathbf{D}_0 = -\chi_{-g} [\mathbf{k}_0 \times [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{D}_g]] \quad (4.8)$$

$\exp(-2\pi i \mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r})$ を係数に持つ項は、

$$(\mathbf{k}_g^2 - K^2) \mathbf{D}_g = -\chi_g [\mathbf{k}_g \times [\mathbf{k}_g \times \mathbf{D}_0]] \quad (4.9)$$

回折の基本方程式へ代入して整理すると、

$$\sum_h \{(\mathbf{k}_h^2 - K^2) \mathbf{D}_h - \sum_g \chi_{h-g} [\mathbf{k}_h \times [\mathbf{k}_h \times \mathbf{D}_g]]\} \exp(-2\pi i \mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}) = 0 \quad (4.10)$$

となる⁵¹⁾。回折の基本方程式が成り立つためには、すべての h に対して式 (4.10) の $\exp(-2\pi i \mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r})$ の係数がすべて 0 でなければならない^{28, 37-40, 49, 51)}。ここで、ベクトル解析の関係より $[\mathbf{k}_0 \times [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{D}_g]] = \mathbf{k}_0(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{D}_g) - k^2 \mathbf{D}_g$ なので、式 (4.8) および式 (4.9) により

$$\frac{k_h^2 - K^2}{k_h^2} \mathbf{D}_h = \sum_g \chi_{h-g} \mathbf{D}_{\perp \mathbf{k}_h} \quad (4.11)$$

式 (4.11) を動力的理論の基本方程式と呼ぶ^{28, 37-40, 49, 51)}。

二波近似 結晶中における回折波 \mathbf{D}_h の方向が、入射波 \mathbf{D}_0 方向に対してひとつだけと近似して考える。これを二波近似と呼び、このときの動力的理論の基本方程式は、分極因子を C 、結晶中の平均波数を $k = K(1 + \chi_0/2)$ として、

$$(\mathbf{k}_0^2 - k^2) \mathbf{D}_0 - K^2 C \chi_{-h} \mathbf{D}_h = 0 \quad (4.12)$$

$$-K^2 C \chi_h \mathbf{D}_0 + (\mathbf{k}_h^2 - k^2) \mathbf{D}_h = 0 \quad (4.13)$$

分散式 二波近似での式 (4.12) と式 (4.13) の \mathbf{D} が解をもつためには、その係数行列である次の永年方程式を満たさなければならない^{28, 37-40, 49, 51)}。

$$\begin{vmatrix} (\mathbf{k}_0^2 - k^2) & K^2 C \chi_{-h} \\ K^2 C \chi_h & (\mathbf{k}_h^2 - k^2) \end{vmatrix} = 0 \quad (4.14)$$

この方程式によって K と k_0 および K と k_h の関係が定義され、これを分散関係といい、式 (4.14) を分散式と呼ぶ。

分散面と振幅比 逆空間に作られる Ewald 球からのズレである励起不足度は、次のように定義される⁵¹⁾。

$$\xi_0 = |\mathbf{k}_0| - k \quad (4.15)$$

$$\xi_h = |\mathbf{k}_h| - k \quad (4.16)$$

そこで、 $k_0^2 - k^2 \equiv 2K\xi_0$, $k_h^2 - k^2 \equiv 2K\xi_h$ とできるので分散式は、

$$\xi_0\xi_h = \frac{1}{4}K^2C^2\chi_{-h}\chi_h \quad (4.17)$$

とできる。したがって、式 (4.17) より、結晶による電気感受率に依存した ξ_0, ξ_h 程度の大きさの範囲でのみブラッグ条件が満たされることがわかる^{28, 37-40, 49, 51}。

光速との関係について振幅比が、分散関係から次式のように定義される。

$$c \equiv \frac{D_h}{D_0} = \frac{K^2C\chi_h}{(k_h^2 - k^2)} = \frac{(k_0^2 - k^2)}{K^2C\chi_{-h}} \quad (4.18)$$

したがって、漸近面での近似を励起不足度を用いて、

$$\frac{D_h}{D_0} = \frac{2\xi_0}{KC\chi_{-h}} = \frac{KC\chi_h}{2\xi_h} \quad (4.19)$$

となる。

4.2 ロッキングカーブ

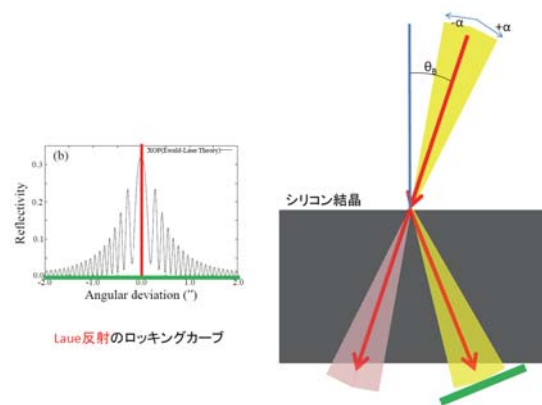


図 4.1 ラウエケースの場合のロッキングカーブ

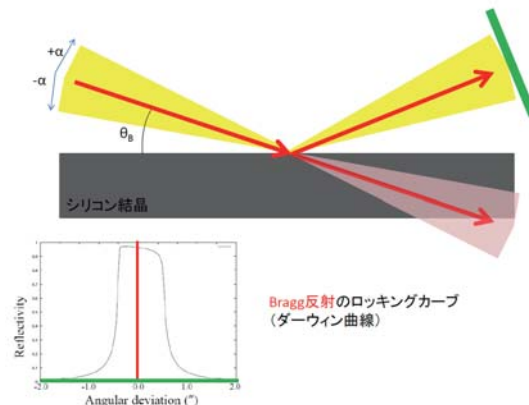


図 4.2 ブラッグケースの場合のロッキングカーブ

図 4.1 左側の振動するグラフがラウエケースの場合のロッキングカーブである。赤い線で入射する場合がブラッグ角を満たしている場合である。ラウエケースの場合に入射する X 線について図の黄色い幅の中で角度をつけた場合に、緑のラインにおいて観測される角度変化を横軸にとった時の X 線の回折強度を表す。図 4.2 左下のシルクハット型のグラフがブラッグケースの場合のロッキングカーブである。赤い線で入射する場合がブラッグ角を満たしている場合である。ブラッグケースで入射する X 線について図の黄色い幅の中で角度をつけた場合の緑色のラインのところで観測される角度変化を横軸にとった時の X 線の回折強度を表す。

式 4.19 での D_h および D_0 は、ブラッグ角近傍での逆空間分散面上の複素振幅である⁵²⁾ ため、ロッキングカーブは Ewald-Laue 理論の解である。

ブラッグケースの場合のロッキングカーブは、ダーウィン曲線とも呼ばれ、屈折コントラスト撮影法で重要な役割を果たしている。

第 5 章

高木-Taupin 理論

5.1 回折の基本方程式からの導出

式 (3.35) に示した回折の基本方程式は、次式である。

$$\nabla^2 D - 4\pi^2 K^2 D = \text{rot} \cdot \text{rot} \chi D$$

高木-Taupin 理論は高木佐知夫によって日本結晶学会誌 6(1971Dec.,VOL.13)⁵¹⁾ において詳しく発表されている。それによると Ewald-Laue 理論と同じく回折の基本方程式より導かれているものであるが、ここでは、その理論の導出の流れについてその概要を引用する。

Ewald-Laue 理論の場合は、完全結晶を扱っていたため電気感受率 χ は完全結晶での周期関数としてフーリエ級数展開を行っていた。ここでは、さらにひずみの効果を加えた形 $\chi(\mathbf{r}) = \chi_p(\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}))$ で式 (4.1) に代入して展開する。

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_h \chi_h \exp(-2\pi i[\mathbf{h} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})]) \quad (5.1)$$

また、 $D(\mathbf{r})$ についても同様にひずみを含めた形で展開する。

$$D(\mathbf{r}) = \sum_h D_h(\mathbf{r}) \exp(-2\pi i[\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r} - \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})]) \quad (5.2)$$

これらを回折の基本方程式に代入していく。ここで、ブロッホ波の波数成分 \mathbf{k}'_h について

$$\mathbf{k}'_h = \text{grad}[\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r} - \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})] \quad (5.3)$$

$$= \mathbf{k}_h - \text{grad}(\mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})) \quad (5.4)$$

の関係を定義し、ベクトル解析の関係

$$\nabla^2 D = \nabla \cdot (\nabla \cdot D) - \nabla \times (\nabla \times D) \quad (5.5)$$

を用いて、

$$\begin{aligned}\nabla^2 \mathbf{D} &= \sum_h \{ \nabla^2 \mathbf{D}_h + 2\pi i \nabla^2 (\mathbf{h} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{D}_h \\ &\quad - 4\pi i ([\mathbf{k}_h - \nabla(\mathbf{h} \cdot \mathbf{u})] \cdot \nabla) \mathbf{D}_h \\ &\quad - 4\pi [\mathbf{k}_h - \nabla(\mathbf{h} \cdot \mathbf{u})]^2 \mathbf{D}_h \} \exp(-2\pi i [\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r} - \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}])\end{aligned}\quad (5.6)$$

$$= \{ -4\pi i (\mathbf{k}' \cdot \text{grad}) \mathbf{D}_h - 4\pi^2 \mathbf{k}_h'^2 \mathbf{D}_h \} \exp(-2\pi i [\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r} - \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}]) \quad (5.7)$$

とあらわす。同様にして、

$$\text{rot} \cdot \text{rot}(\chi \mathbf{D}) = -4\pi^2 \sum_h \sum_g \chi_{h-g} [\mathbf{k}_h' \times [\mathbf{k}_h' \times \mathbf{D}_g]] \exp(-2\pi i [\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r} - \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}]) \quad (5.8)$$

となり、これらを回折の基本方程式へ代入する。

$$\begin{aligned}\sum_h \{ -4\pi i (\mathbf{k}_h' \cdot \text{grad}) \mathbf{D}_h + 4\pi^2 (K^2 - \mathbf{k}_h'^2) \mathbf{D}_h + 4\pi^2 \sum_g \chi_{h-g} [\mathbf{k}_h' \times [\mathbf{k}_h' \times \mathbf{D}_g]] \} \\ \exp(-2\pi i [\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r} - \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}]) = 0\end{aligned}\quad (5.9)$$

式 (5.9) が常に成り立つために、 $\exp(-2\pi i [\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r} - \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}])$ の係数が 0 となる必要がある。

$[\mathbf{D}_g]_h = -1/|\mathbf{k}_h'^2| [\mathbf{k}_h \times [\mathbf{k}_h \times \mathbf{D}_g]]$ として

$$\sum_h -4\pi i (\mathbf{k}_h' \cdot \text{grad}) \mathbf{D}_h + 4\pi^2 (K^2 - \mathbf{k}_h'^2) \mathbf{D}_h + 4\pi^2 K \sum_g \chi_{h-g} [\mathbf{D}_g]_h = 0 \quad (5.10)$$

さらに、

$$\beta_h' = \frac{\mathbf{k}_h' - K}{K} = \frac{\mathbf{k}_h'^2 - K^2}{2K} \quad (5.11)$$

および \mathbf{k}_h 方向の単位ベクトル \mathbf{s}_h を用いて、

$$(\mathbf{s}_h \cdot \text{grad}) \mathbf{D}_h = i2\pi K \beta_h' \mathbf{D}_h - i\pi K \sum_{g \neq h} \chi_{h-g} [\mathbf{D}_g]_h \quad (5.12)$$

とできる。式 (5.12) を高木-Taupin 方程式といい、ひずみを含んだ結晶に対して適用できる理論である。完全結晶の場合、 $\beta_h' = 0$ として与えることができる⁵¹⁾。

5.2 偏光考慮多波拡張型高木-Taupin 理論

従来、高木-Taupin 理論は、ひずみのある結晶などを透過する X 線の回折を扱う場合などに限定的に使われてきた理論であり、偏光の考慮や、多波回折などへの拡張は難しいとされていた。また、多波回折については、結晶内部の透過波の挙動についてブラッグ反射とラウエ反射の干渉が起こるなど非常に複雑な結果が予想され、多波回折についての本格的な研究はあまり行われてこなかった経緯がある。

1987 年に Thokildsen によって高木-Taupin 理論の偏光を無視した多波への拡張が行われ⁵³⁾、さらに偏光を考慮した解析解が Larsen and Thokildsen によって三波へ拡張されている⁵⁴⁾ が、適用が限定的な取り扱いである。

2003 年に東京大学の沖津康平博士により、偏光を考慮し、三波以上の多波回折へ拡張した高木-Taupin 理論が発表された^{55, 56)}。この偏光考慮多波拡張型高木-Taupin 理論は、物体の透過波および回折波の場合の物体の形状特性を選ばず、あらゆる形状に対応し、透過波、回折波組み合わせについても高木-Taupin 理論の線形性により方程式の組み合わせによって数値計算を行うことで解決できるという画期的な理論である。

この理論では、解析的な X 線回折理論ではなく、さまざまな形状や特性の物体の透過波および回折波を逐次計算の数値解によって求めるという手法をとっているため、多くの場合、想定条件によって計算資源を必要とし、計算時間が必要となるが、スーパーコンピュータに代表されるハイパフォーマンスコピューティングが登場し、それらの点については近年特に問題にならなくなっている。

本研究では、数値計算による三波屈折コントラスト撮影技術の計算機シミュレーションを行うために、沖津康平博士による偏光考慮多波拡張型高木-Taupin 理論を用いてきた。沖津康平博士により X 線分析の進歩第 36 集 (2005) X 線回折理論と結晶構造解析の系譜⁵²⁾ に発表されている偏光考慮多波拡張型高木-Taupin 理論について導出を引用する。

高木-Taupin 方程式式 (5.12) に対してユニタリー変換 $D'_h(\mathbf{r}) = D_h \exp[i2\pi \mathbf{h}_h \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})]$ を用いることで動力学理論基本方程式

$$(\mathbf{s}_h \cdot \text{grad}) D'_h(\mathbf{r}) = -i\pi K \sum_{g \neq h} \chi_{h_g - h_h} \exp[i2\pi (\mathbf{h}_h - \mathbf{h}_g) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})] [D'_g(\mathbf{r})]_{s_h} \quad (5.13)$$

を導出している⁵²⁾。ここで、 \mathbf{s}_h は、X 線の進行方向ベクトルである。偏光単位ベクトル \mathbf{e}_h^π および \mathbf{e}_h^σ を \mathbf{s}_h に垂直に定義し、複素振幅ベクトル $D'_h(\mathbf{r})$ および $D'_g(\mathbf{r})$ を電気変異ベクトルでスカラー展開する⁵²⁾。

$$D'_h(\mathbf{r}) = D_h^\pi(\mathbf{r}) \mathbf{e}_h^\pi + D_h^\sigma(\mathbf{r}) \mathbf{e}_h^\sigma \quad (5.14)$$

$$D'_g(\mathbf{r}) = D_g^\pi(\mathbf{r}) \mathbf{e}_g^\pi + D_g^\sigma(\mathbf{r}) \mathbf{e}_g^\sigma \quad (5.15)$$

さらに、偏光因子 S, C を

$$\mathbf{e}_g^{(m)} = S_{h,g}^{(m)} \mathbf{s}_h + C_{h,g}^{\pi,(m)} \mathbf{e}_h^\pi + C_{h,g}^{\sigma,(m)} \mathbf{e}_h^\sigma \quad (5.16)$$

$$m = \pi, \sigma$$

と定義し、式 (5.13) へ代入し、さらに \mathbf{L} をラウエ点からローレンツ点へ向かうベクトル、 $l = \pi, \sigma$ としたユニタリー変換 $D_h^{(l)}(\mathbf{r}) = D_h^{\prime(l)}(\mathbf{r}) \exp(-2\pi \mathbf{L} \cdot \mathbf{r})$ を用いて最終的に

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{s}_h} D_h^{(l)}(\mathbf{r}) = -i\pi K \sum_{h=0}^{n-1} \sum_{m=0}^1 \chi_{h_h - h_g} \exp[i2\pi (\mathbf{h}_h - \mathbf{h}_g) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})] C_{h,g}^{(l,m)} D_g^{(m)}(\mathbf{r}) \quad (5.17)$$

となる。ここで、 $\pi = 0, \sigma = 1$ と定義して用いている。また、 n は、多波回折方向数であり、ベクトル式である式 (5.13) をスカラー展開することに成功したことにより、高木-Taupin 方程式が偏光を考慮して多波回折へと拡張されている⁵²⁾。

第 6 章

多波回折実験 (於 SPring-8)

6.1 SPring-8 実験



図 6.1 SPring-8 管理棟平成 22 年 2 月 7 日

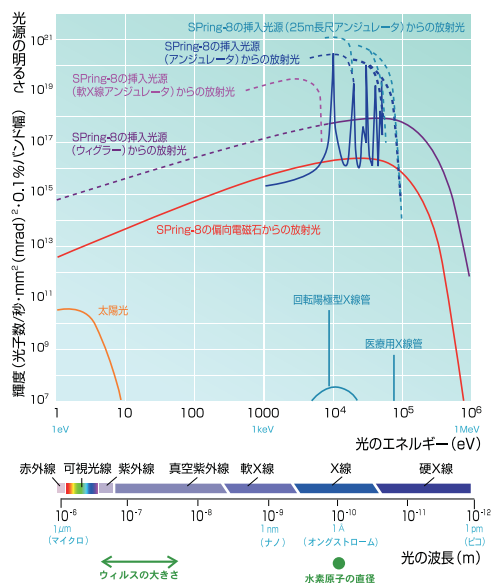


図 6.2 SPring-8 の放射光の波長と明るさ⁵⁷⁾(SPring-8 ホームページから)

屈折撮影画像などのコンピュータシミュレーション研究の基礎に用いている偏光考慮型高木-Taupin 理論は、前章での説明の通り、近年になって拡張されたものであるが、本研究を進める上での中心理論であり非常に重要な位置を占めている。そこで、その理論を実験によって

確認する事を目的として平成 22 年 2 月 1 日から 8 日にかけて沖津康平博士 (東京大学)、依田芳卓博士 (SPring-8/JASRI) の指導のもと太陽光の 1 億倍といわれる世界最高輝度⁵⁷⁾を誇る SPring-8 において実験を行った。

6.1.1 ビームライン (BL09XU) について

図 6.3 に示されているように SPring-8 には蓄積リングの周囲に放射状にビームラインが 47 配置され、それぞれ実験ハッチまでの間にウィグラーやアンジュレータなどの装置が組み合わされ、特徴をもった光が得られるように設計されている⁵⁷⁾。

今回の実験で利用した BL09XU は、周期長 32mm のアンジュレータからの光が得られる核共鳴散乱ビームラインで名称の XU は、X 線アンジュレータを表している⁵⁸⁾。通常は、物質のダイナミクス研究やメタバウアー分光などに利用され、多波回折、表面研究などに利用されている⁵⁸⁾。

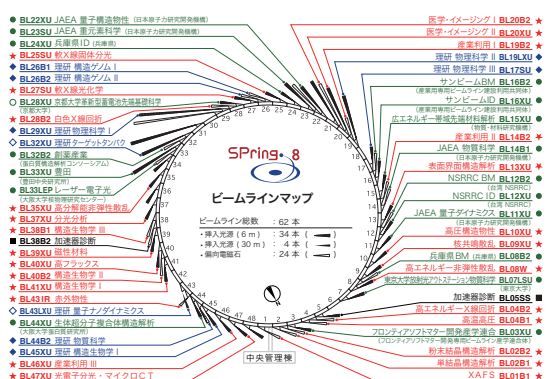


図 6.3 SPring-8 ビームライン⁵⁹⁾(SPring-8 ホームページから)

図 6.4 ビームライン BL09XU 操作盤

6.1.2 実験の方法と概要

実験装置の説明

実験装置を図 6.5 および図 6.6 に示す。図 6.5 の実験台の中央部の拡大写真が図 6.6 である。図 6.6 の中央に見える黒い長方形の物体が 1cm 厚のシリコン結晶である。シリコン結晶背後に見えるペンシル型の装置が放射光の出射口であり、ビームをシリコン結晶後方から照射するラウエケースの配置である。

6 波回折実験の場合の実験装置配置図を過去に発表された論文⁵⁶⁾より引用し図 6.7 に示す。3 波、4 波および 12 波の場合も方向指数によって結晶と入射ビームの方向が変わるが、装置は同様の配置である。



図 6.5 実験装置全景



図 6.6 実験装置拡大図

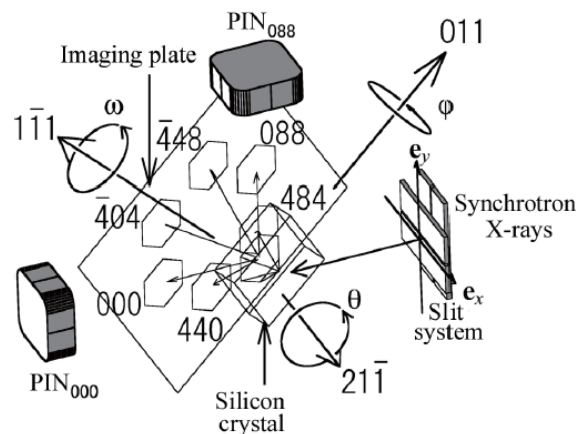


図 6.7 6 波回折実験の実験装置配置⁵⁶⁾(Okitsu K., Imai Y., Ueji Y. and Yoda Y., Acta Cryst. A59, 311-316 (2003) より引用)

6.2 実験の結果

実験結果を図 6.8、図 6.9、図 6.10 および図 6.11 に示す。図 6.8 は、入射光エネルギーが 18.245keV であり、図 6.9、図 6.10 および図 6.11 は、入射光エネルギーが 22keV である。すべての結果に見られる横向きの黒線は露光に関するイメージングプレートを読み取る際の読み取り機の特徴であり、放射光撮影に起因するものではない。

なお、22keV シリーズに見られるはっきりとした方向波以外に構造のある像がみられる。特に 6 波回折の場合に 6 波回折波位置を取り囲むように見られる像であるが、これは、反射がによってできる 6 波回折の Ewald 球のごく近傍に別の回折波方向が存在することを意味していると思われ、エネルギーが高い場合に複雑な多波回折が起こりやすいことを示していると見られる。

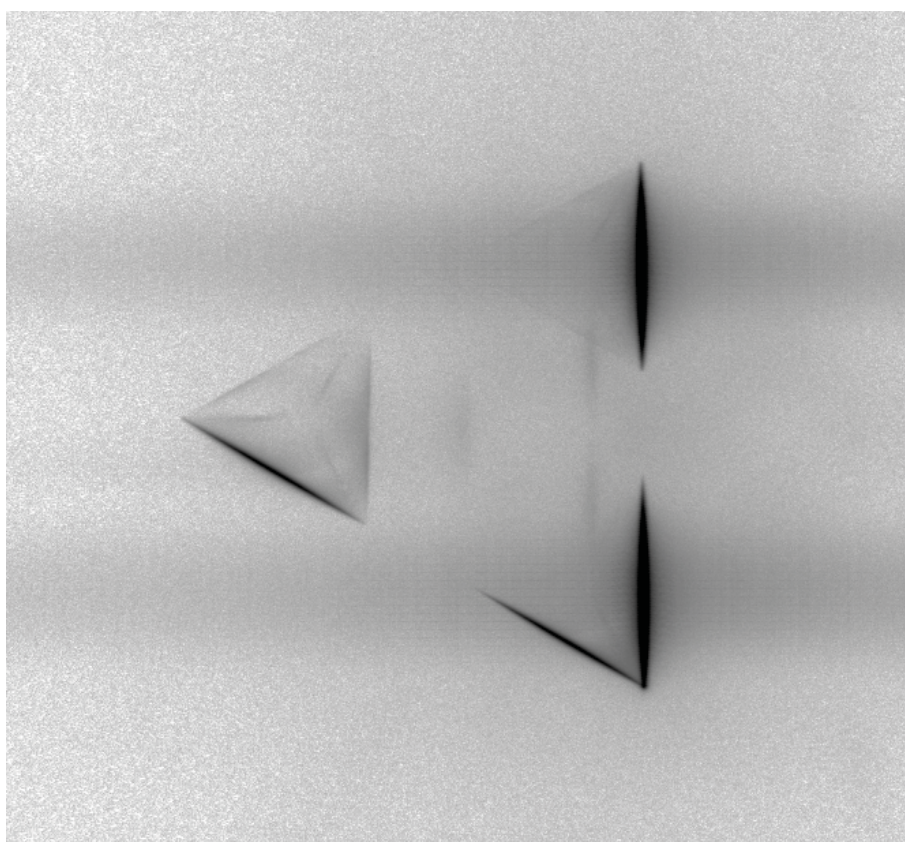


図 6.8 3 波ラウエ回折 18.245keV 実験撮影結果

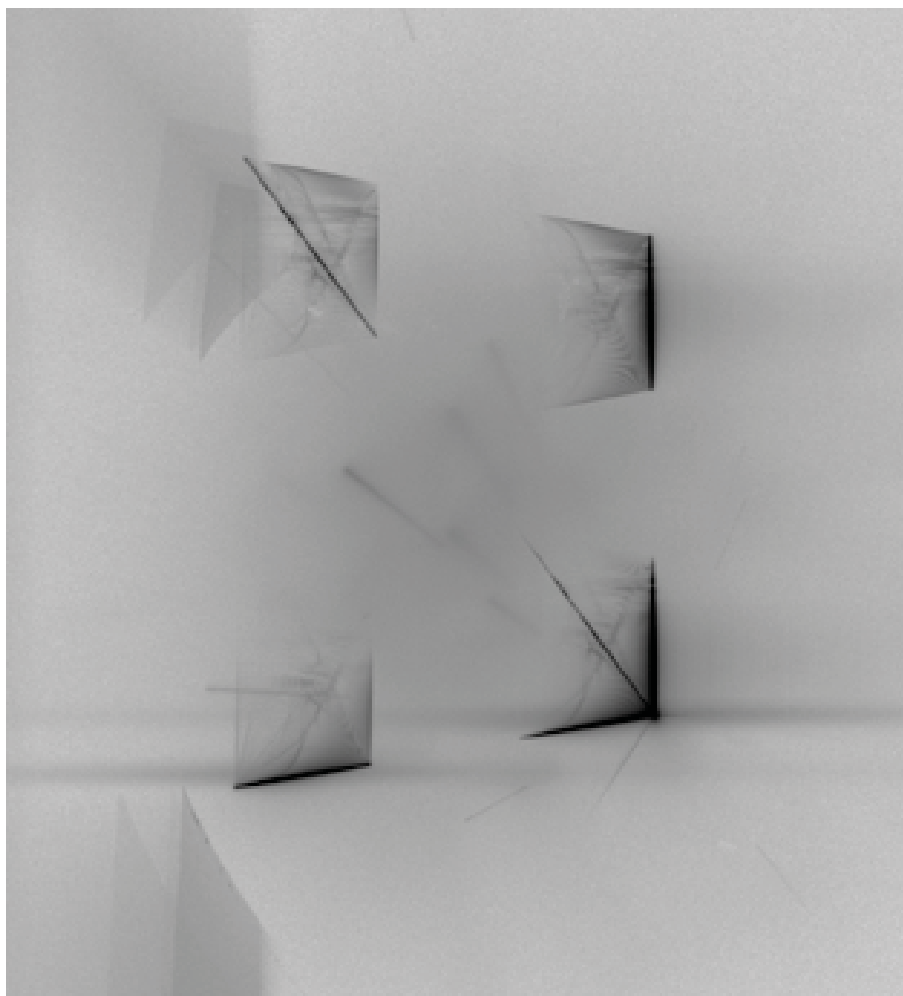


図 6.9 4 波ラウエ回折 22keV 実験撮影結果

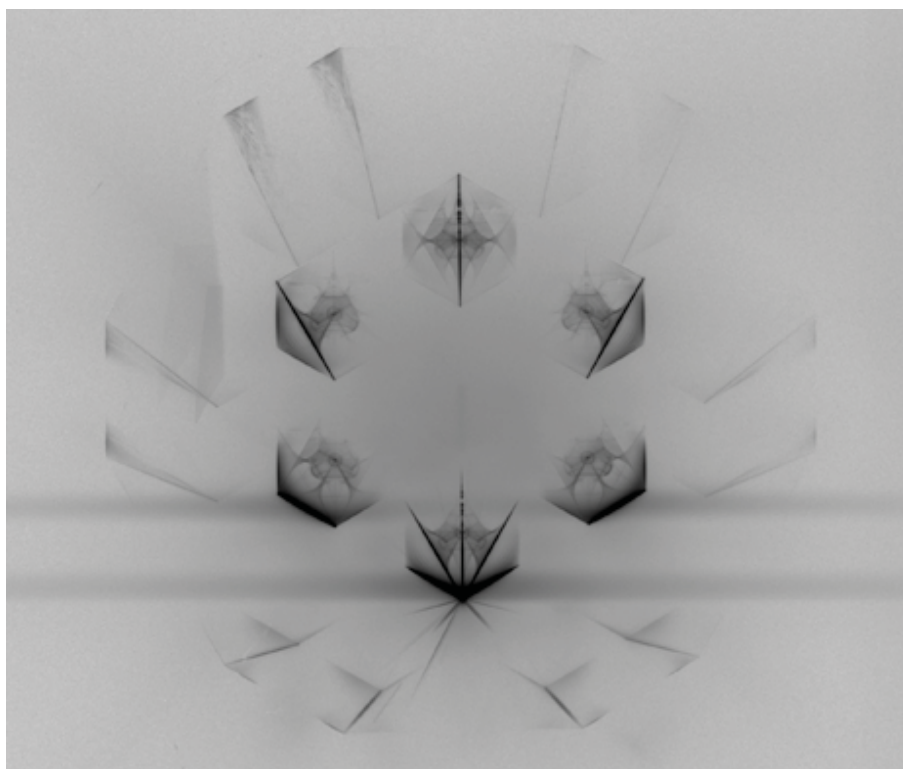


図 6.10 6 波ラウエ回折 22keV 実験撮影結果

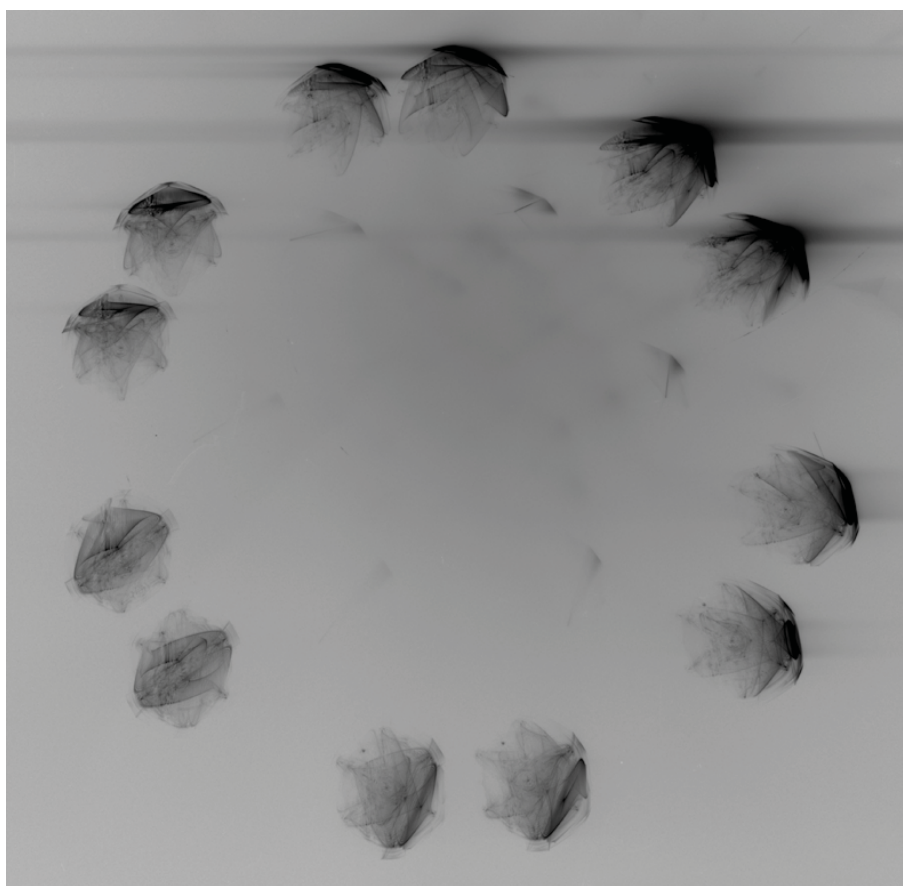


図 6.11 12 波ラウエ回折 22keV 実験撮影結果

第 7 章

計算機シミュレーションによる多波回折を用いた屈折撮影画像

7.1 計算機シミュレーションで想定する撮影方法

前章までに概観してきた X 線動力学理論のなかで、多波へと拡張された高木-Taupin 理論に基づくコンピュータシミュレーションを用いることで三波回折を用いた新しい方法での屈折撮影画像を想定したコンピュータシミュレーションに着手できる。

新しく提案する三波回折を用いた屈折撮影についてコンピュータシミュレーションするために図 7.1 のような光学配置を想定した。

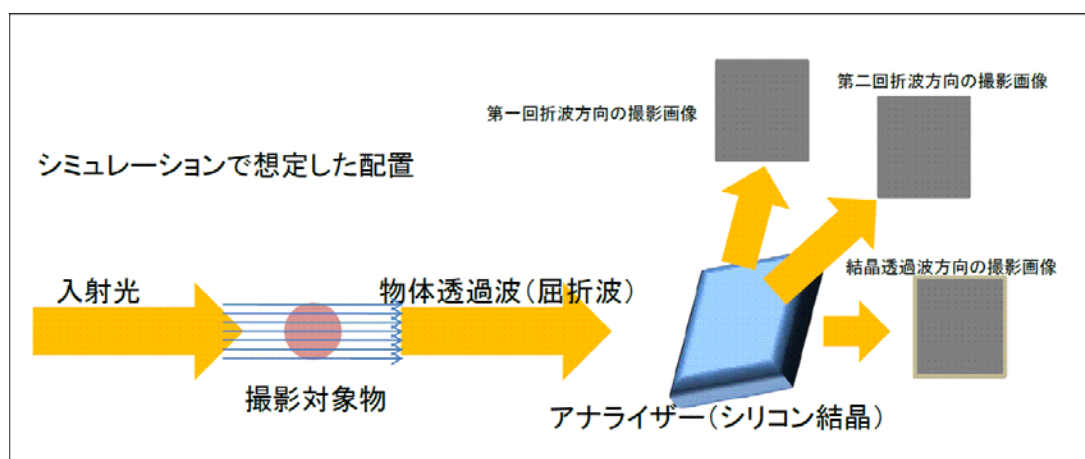


図 7.1 計算機シミュレーションで想定した撮影配置

まず、入射光が撮影対象物体へ透過し、そのあとアナライザーのシリコン結晶で回折を起こす。その際、三波ブラッグ条件を満たすものとして、二方向の回折波方向と透過波の計算方向に X 線の進行方向が分かれる。それぞれの回折波方向での計三枚の撮影画像がディテクター

でとらえられることを想定している。

7.2 計算機シミュレーション計算の方法

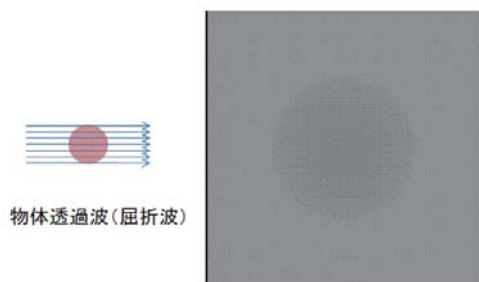


図 7.2 物体透過波の計算機シミュレーション概念図

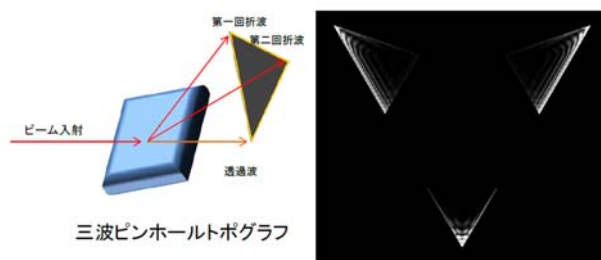


図 7.3 三波ピンホールトポグラフの概念図

前章までの解説の通り、多波高木-Taupin 理論は、電気感受率 χ_o を含むため、X 線の透過物体の電気感受率を与えることができれば、透過プロファイルも計算が可能であった。したがって、新しい屈折撮影法の X 線透過経路の沿って高木理論高木理論を適用すれば撮影画像が得られることがわかる。

さらに、高木-Taupin 理論の大きな特徴の一つが線形性であることが挙げられ、屈折撮影画像の撮影における対象物体の屈折透過波を計算した後、計算で得られた屈折透過波の座標点それぞれがビーム入射としてアナライザーで回折を起こすと考えれば、アナライザーでの回折は、すべてのビームについて独立に計算することも可能である。

図 7.2 に示すように撮影対象物体について形状と電気感受率 χ_o を与え、高木-Taupin 方程式を解くことにより、物体透過後の X 線の振幅情報を得ることができる。この場合の電気感受率 χ_o は、乳線細胞の場合を想定して元素組成比により与えている。

一方、それとは別に図 7.3 のようにアナライザーでの回折について透過波のほかに二方向にブラッグ条件を満たすように三波の入射波条件を与え、シリコン結晶での単一ビームでの回折波について高木-Taupin 方程式を計算し、同様に回折後の X 線振幅情報を得ることができる。

これら二つの計算結果について物体透過後の計算の座標点それぞれをビーム入射としてアナライザーへの入射波の境界条件とできる。ここで、高木-Taupin 理論の線形性により計算順序を取り替えることができ、高木-Taupin 理論を用いた物体の透過波について x, y を座標として $D_{\text{透過}}(\mathbf{r}) \equiv f(x, y)$ と表しておく (図 7.2 の座標)。この x, y のすべての座標点それぞれが X 線の透過ビーム一つとして、それぞれがアナライザーで回折現象を起こす。そこで、単一ビーム入射の場合のアナライザーでの回折現象後の三波ピンホールトポグラフである高木-Taupin 理

論の解を a, b を座標として $D_{\text{回折}}(\mathbf{r}) \equiv g(a, b)$ としておき (図 7.3 の座標)、ディテクターで得られる振幅の座標を k, l として $h(k, l)$ としておくと、

$$h(k, l) = \int_b \int_a g(a, b) \cdot f(k - a, l - b) da db \quad (7.1)$$

とでき、これによりピンホールトポグラフと物体透過トポグラフの畳み込み計算によって実現できるとわかる。また、計算機を用いたシミュレーションを行う場合は、座標の値は離散値であり、座標の全領域を $-n \sim n$ として次の式で計算を行う。

$$h'(k, l) = \sum_{b=-n}^n \sum_{a=-n}^n g(a, b) \cdot f(k - a, l - b) \quad (7.2)$$

式 (7.2) に基づき三波高木-Taupin 理論の解である三方向のピンホールトポグラフを透過方向および回折二方向それぞれに対して撮影物体透過時点での透過振幅とアナライザーでの回折振幅の二つの X 線強度振幅の畳み込み計算を行うことで、三波回折を用いた場合での屈折撮影を想定した振幅のコンピュータシミュレーションができ、想定した撮影画像が入手できる。

なお、図 7.2、図 7.3 のともに右側に示した図は、いずれも高木-Taupin 理論の解である X 線振幅強度情報を絶対値二乗の強度情報に変換したコンピュータシミュレーション結果である。

また、最終的な画像としての解像度を上げるためには相応の計算グリッドが必要であり、逐次数値計算を行う高木理論の場合は、計算グリッドは自由に増やせるが、畳み込み計算を行う場合、計算時間および計算リソースを考慮したプログラム開発が必要となる。統計数理研究所にはスーパーコンピュータがあり、自由に利用できることから、スーパーコンピュータでの MPI を用いた並列計算によって高速かつ大規模な畳み込み計算の開発を行った。

7.3 スーパーコンピュータでの計算

7.3.1 スーパーコンピュータの利用

科学技術計算などで必要とされるハイパフォーマンスコンピューティングと呼ばれる大規模計算処理を行うために開発されたスーパーコンピュータと呼ばれる計算機がある。一般にスーパーコンピュータとは、通常のパーソナルコンピュータよりも計算性能が高く、高速に大量のデータを処理できるように設計されたコンピュータのことを指しているが、現在では、複数の中央演算処理装置 (CPU) を同時に実行することで計算速度を上げるように設計された並列計算機を指す。並列計算機には、分散メモリ型系列計算機と共有メモリ型並列計算機があり、また、CPU にはスカラープロセッサとベクトルプロセッサがある。

並列計算機を用いて計算する場合には、複数の CPU を同時に実行させなければ高い計算性能は得られないため専用の並列プログラム開発が必要となる。自動並列処理を用いる場合も

あるが、それぞれの CPU に対して計算を意図的に割り当て並列化していく手法がメッセージパッシングインターフェース (MPI) である。

7.3.2 統計数理研究所のスーパーコンピュータ

統計数理研究所には、分散メモリ型並列計算機、共有メモリ型並列計算機がともに導入されており、2009 年 12 月までは、HP-XC4000(ismxc)、HITACHI-SR11000(ismsr)、SGI-Altix(ismaltx)、NEC-SX6(ismsx) および SGI-Prism(ismprism) が稼働しており、ismxc が分散メモリ型 PC クラスタ機であり、ismaltx、ismsr、ismsx が共有メモリ型であった。また、ismsx がベクトルプロセッサを搭載しており、ismsr がスカラープロセッサをソフトウェアによりベクトル化を行う疑似ベクトル機であった。2010 年 1 月からのスーパーコンピュータは Fujitsu PRIMERGY RX200S5(ismrx) と Fujitsu SPARC Enterprise M9000(ishment) で構成されており、ismrx が分散メモリ型計算機で、ishment が共有メモリ型計算機である。

7.3.3 東京大学物性研究所のスーパーコンピュータ

東京大学物性研究所には、HITACHI-SR11000(sumire) と SGI-Altix(itadori) が導入され、計算機リプレースのために 2010 年 3 月に停止されるまで供されていた。このうち sumire については、統計数理研究所 ismsr とベンダーが同じであるため、同じサブルーチンライブラリーが利用でき、プログラムを共通に実行できる利点があった。したがって、東京大学沖津康平博士の受け入れにより共同利用登録を行い、本研究において併用を行った。特に、統計数理研究所の立川移転にかかる計算機リプレースによる ismsr 停止後から東京大学物性研究所計算機リプレースにかかる sumire 停止までの間については、sumire を中心にプログラム開発を行った。

7.3.4 MPI による並列計算

並列計算処理を行うための規格である MPI は、mpich という規格に基づき、プログラムの中で全 CPU が行う演算と指定された CPU のみが行う演算や、全 CPU に同時に別の演算を行わせるなどの命令をプログラムの中で演算とは別に指定して実行させることができる方法である。その大きな特徴は、プログラムの計算途中で CPU 同士の計算ノード間の通信を行わせることができること、である。並列計算処理を効果的に行うためには、この MPI を用いて計算を並列化することが求められる。

このように MPI とは、複数の CPU を用いて計算を並列化することで計算時間の高速化を図るものであるが、すべてのプログラムのすべての部分を並列化することは通常できない。たとえば、すぐ前の演算に依存した結果を順次利用するような計算などは、並列化に向いていな

い場合が多く、仮に並列化できたとしても CPU 間での通信が多数発生してしまい、逆に計算が遅くなってしまう場合もある。また、アムダールの法則と呼ばれる計算時間短縮の限界があり、並列化しても並列数の分だけ早くなるとは限らない。⁶⁰⁻⁶⁶⁾

7.3.5 計算に用いた並列計算プログラムの概説

計算においては、統計数理研究所スーパーコンピュータ ismxc をメインに開発を行い、2010 年 1 月からは ismr_x にチューニングし直している。

高木-Taupin 理論によって得られた物体透過波の計算結果と同じく高木-Taupin 理論によって得られたアナライザーでの三波回折波の計算結果がファイルに書き出してある。なお、物体透過波の計算結果については領域分割を行い、各 CPU にはそれぞれ割り当てられた部分のデータのみが与えられている。

まず、三波回折高木-Taupin 理論の解から同一回折波方向の σ 偏光の場合だけを読み込み MPI _ BCAST によって全 CPU に同じデータをばらまいておく。次に、各 CPU は、それぞれ自分の割り当てられた物体透過波の計算結果を読み込んでおく。最終書き出しデータと同じ大きさの配列を確保し、その配列内で x 軸一方向だけの畳み込み計算を行う。

$$t(k, y) = \sum_{a=-n}^n g(a, b) \cdot f(k - a, y) \quad (7.3)$$

この配列 $t(k, y)$ は、全 CPU が持っているが、領域分割により $f(x, y)$ の領域が y 軸方向に異なっているため、全 CPU で中身が異なっている。つぎに、式 (7.4) に相当する計算を行うために

$$h'(k, l) = \sum_{b=-n}^n g(a, b) \cdot t(k, l - b) \quad (7.4)$$

全 CPU が持っている配列 $t(k, y)$ を MPI _ ALLREDUCE を用いて MPI _ SUM で演算をしながら全 CPU ヘデータを引き渡ししながら足し合わせる通信を行うことで図 7.4 のように畳み込み計算が完成し、式 (7.2) を並列計算により実現できる。同様にして同一回折波方向の π 偏光の場合の畳み込みを行い、最後に σ 偏光の場合の畳み込み結果と π 偏光の場合の畳み込み結果をそれぞれ二乗し足し合わせることで、その方向への回折波の屈折撮影画像を得ている。

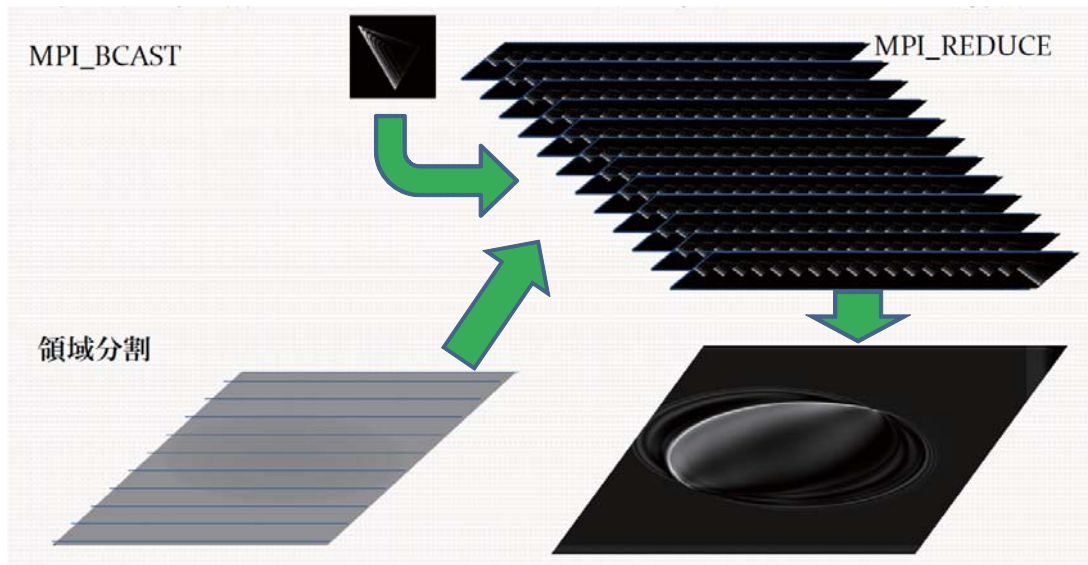


図 7.4 並列計算による畳み込み積分計算概念図

7.4 計算機シミュレーション計算の結果と問題点

図 7.5 は、三波回折を用いた畳み込み計算の結果のうち透過波方向についてのもので、図 7.6 は、第一回折波方向、図 7.7 は、第二回折波方向の計算結果を示す。なお、この結果は、三波のブラッグケース回折を用いており、透過波以外はシリコン結晶の外部である。高木-Taupin 方程式を解く場合の条件は、次のとおりである。

| | |
|-----------|-------------|
| 入射光エネルギー | 18.4752keV |
| シリコン結晶の厚さ | 1mm |
| 回折波方向指数 | 000,088,880 |

従来の屈折撮影画像と同じくブラッグ反射後の X 線をディテクターでとらえたとした図 7.6 と図 7.7 が想定する三波回折を用いた場合の屈折撮影画像である。

計算機シミュレーションにより求めたこれらの図 7.6 と図 7.7 の二つの想定撮影画像は、いずれも図が重なって見え、このままでは、撮影画像として適切ではないことが分かる。

また、ここでの計算では、ブラッグ反射の際のブラッグ角を正確に合わせてあるが、従来技術のように、ブラッグ角からずらすことによって、図の重なりの変化について調べると、一部の角度で比較的重なりが減った画像が得られてきたため、三波回折での回折強度分布について明らかにするべきという結論に至った。



図 7.5 計算機シミュレーションによる三波回折の場合の透過方向の屈折撮影画像

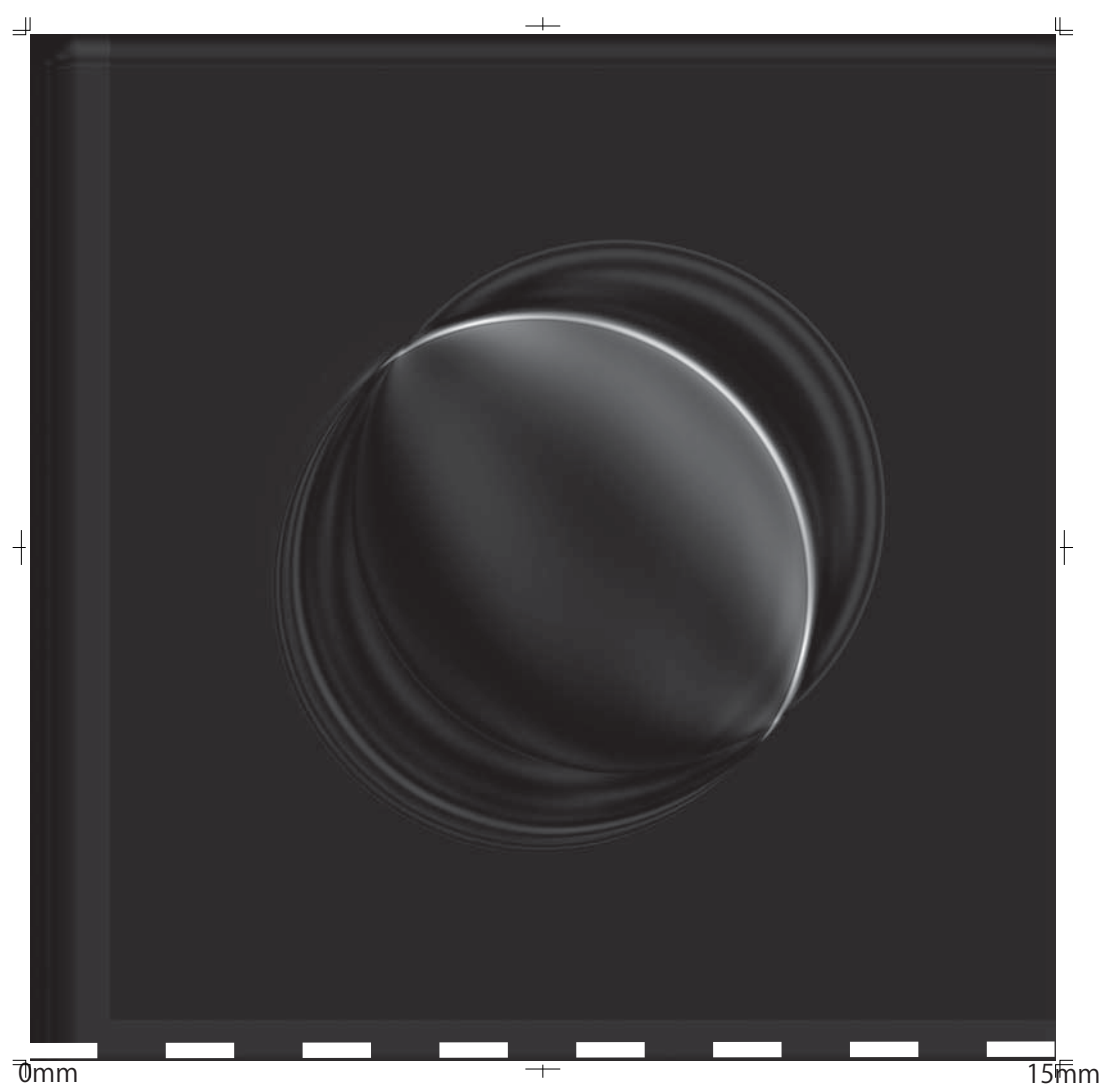


図 7.6 計算機シミュレーションによる三波回折の場合の第一回折波方向の屈折撮影画像

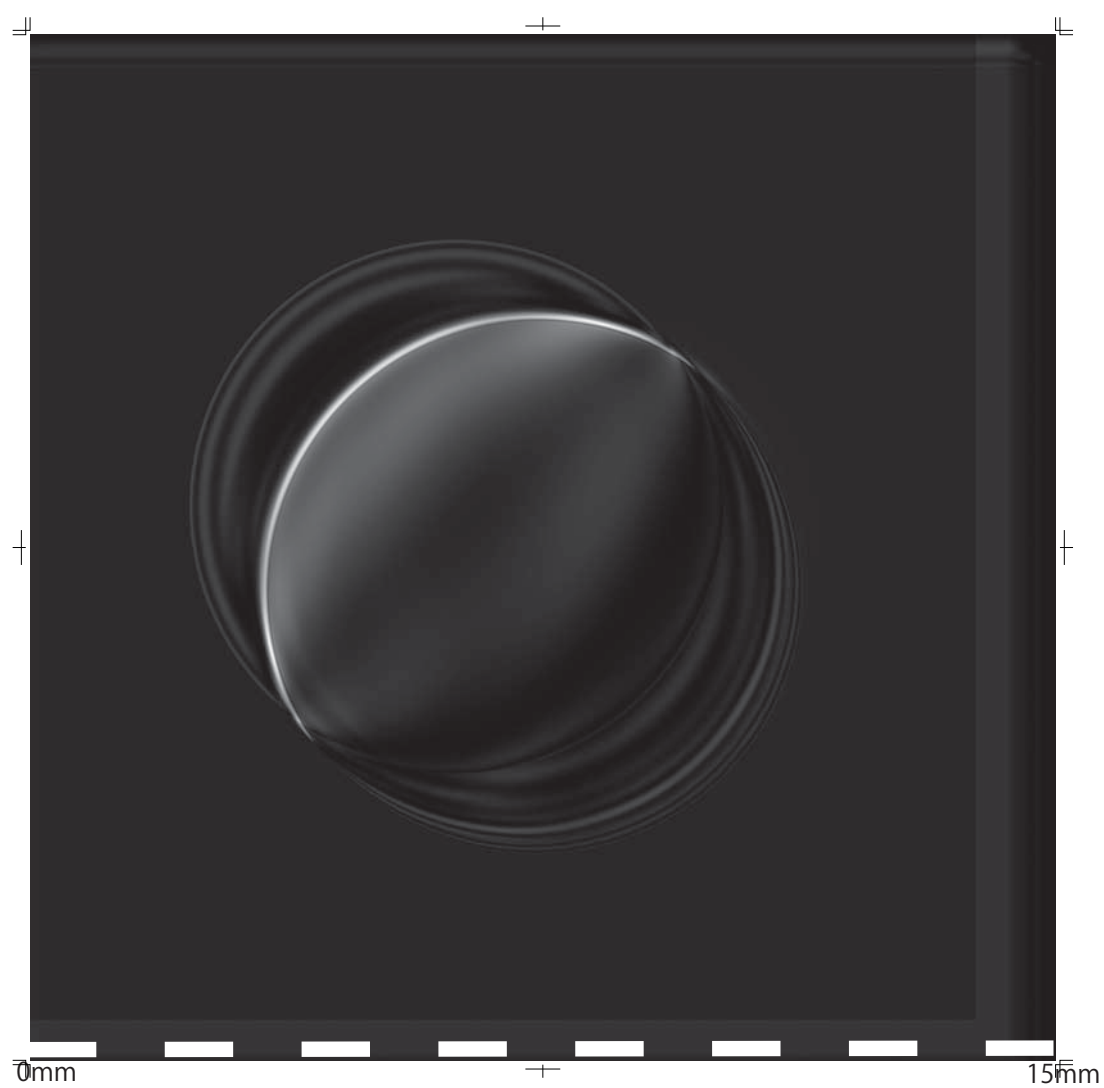


図 7.7 計算機シミュレーションによる三波回折の場合の第二回折波方向の屈折撮影画像

第 8 章

高木-Taupin 理論とロッキングカーブ

8.1 本研究において高木-Taupin 理論とロッキングカーブの関係を明らかにする理由

第 5 章において説明を行った偏光考慮多波拡張型高木-Taupin 理論をもとに第 6 章でも示した「ピンホールトポグラフ」の計算結果を用いて第 7 章に示したコンピュータシミュレーション画像は成り立っている。第 7 章で示した通り、コンピュータシミュレーションには偏光考慮多波拡張型高木-Taupin 理論の結果を用い、高木-Taupin 理論の線形性より各地点でのビーム X 線の計算結果を畳み込み計算することで得られている。この畳み込み計算の際に用いたシリコン結晶でのビーム反射波のトポグラフを「ピンホールトポグラフ」と言い、結晶に入射したビームの出射面での X 線の強度振幅を表している。この「ピンホールトポグラフ」は、高木-Taupin 理論の解であることは前章までに説明してきたとおりであるが、一方で「ロッキングカーブ」は、Ewald-Laue 理論の解であり、逆空間の X 線強度分布であることも第 3 章にて説明を行った通りである。ここで、前章で示した問題点を克服する手段としてこの「ピンホールトポグラフ」と「ロッキングカーブ」との関係はどのようなものかを Ewald-Laue 理論と高木-Taupin 理論の関係をもとに明らかにしていく必要が生じた。なぜなら、従来の屈折コントラスト撮影法で「ロッキングカーブ」が果たしている役割と同様に X 線強度分布の指標となるものが必要になってきたからである。

さらに、Ewald-Laue 理論と高木-Taupin 理論の関係性については、球面波と平面波の関係を含めて一般的な理解がされておらず、さらには、高木-Taupin 理論からロッキングカーブを求めることはまったく新しい手法である。

なお、本章での回折波は、条件を簡略する為にすべて対称 Laue 反射の場合で計算を行った。

また、本章は、G. Ishiwata, K. Okitsu, M. Ishiguro; Acta Crystallographica Section A (2010) 「Three-beam X-ray rocking curves calculated from computer-simulated pinhole topographs」⁶⁷⁾ の内容である。

8.2 Ewald-Laue 理論と高木-Taupin 理論をめぐる歴史的背景

平面波入射を扱う Ewald-Laue 理論は 1917 年に Ewald によって導出され⁶⁸⁾、1931 年に Laue によって完成された理論⁶⁹⁾であるが、Ewald により、1960 年第後半に三波に拡張されている^{70,71)}。球面波入射の X 線セクショントポグラフ実験により観測されるペンデル縞は、Ewald-Laue 理論に基づき導出された加藤球面波理論によって説明される^{37,72)}。加藤球面波理論は、球面波を平面波のコヒーレントな重ね合わせと考え、各平面波の結晶面内での挙動を平面波理論で求めてから、フーリエ変換で合成していく理論^{37,72)}であり、1961 年に吸収を考慮しない場合^{73,74)}、1968 年に吸収を考慮する場合^{75,76)}の球面波理論が発表された。また、2001 年には Heyroth 他のグループによって、実験による三波ピンホールトポグラフが観測され、Ewald-Laue 理論の球面波入射の解の重ね合わせによるコンピュータシミュレーションと一致することが確認された⁷⁷⁾。

X 線三波回折のロッキングカーブについての研究は、結晶構造因子の位相情報抽出ができると考えられているために、非常に重要であると認識されている⁷⁸⁻⁸³⁾。

一方で、高木佐知夫 (1962) および Taupin (1964) によって新しい動力学的理論 (Takagi-Taupin 理論) が発表された^{51,84-86)}。この理論は、従来ひずみをもった結晶での回折を記述する特殊理論として扱われてきた^{28,87)}が、Ewald-Laue 理論と同じく Maxwell 方程式から導出される回折の基本方程式により導出されているものである^{51,84-86)}。高木-Taupin 理論に基づく球面波入射の計算によって得られたセクショントポグラフの X 線強度振幅は加藤球面波理論で与えられたものと同じであり、1968 年には Authier と Simon によって高木-Taupin 理論における平面波入射の場合と球面波入射の場合の間にフーリエ変換の関係があることが示されている⁸⁸⁾。

さらに、高木-Taupin 理論は 1987 年には Thorkildsen によって偏光を考慮しない形で三波へ拡張され⁵³⁾、1998 年に Larsen と Thorkildsen によって偏光を考慮した三波理論⁵⁴⁾へ発展し、2003 年には東京大学の沖津博士による 12 波までの n 波回折の偏光考慮多波拡張型の高木-Taupin 理論が発表されている^{55,56,89)}。

8.3 二波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブ

二波回折の場合の出射面でのプロファイルを「セクショントポグラフ」と呼ぶ。高木-Taupin 理論での完全結晶によるセクショントポグラフの X 線強度プロファイルを計算する場合、境界条件として、X 線入射点一点のみで透過波が有限の振幅を持つようにデルタ関数の境界条件を与える。デルタ関数は、その定義から、位相のそろった同じ振幅の平面波をフーリエ変換して得られるものであり、この境界条件で得られる解は、平面波入射の解をフーリエ変換したも

のに他ならない。したがって、球面波入射で得られる解をフーリエ変換することによって平面波の解であるロッキングカーブの振幅が得られるはずである。

8.3.1 二波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブを求める方法

前述の考察に基づきセクショントポグラフに対してフーリエ変換を行う。本研究でのフーリエ変換には高速フーリエ変換を用いた。

本来、フーリエ変換の定義は式 (8.1) の通りである。

$$F(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \exp(-i2\pi xk) dx \quad (8.1)$$

ここで、 $F(k)$ は逆空間の関数、 $f(x)$ は実空間の関数であり、 k は単位 $[m^{-1}]$ の逆空間の値、 x は単位 $[m]$ の実空間の値である。これを、コンピュータで数値計算するにあたり、データを離散化して扱うために離散フーリエ変換として式 (8.2) の近似を行う。

$$F(k_i) = \Delta x \sum_{j=-\infty}^{\infty} f(x_j) \exp(-i2\pi x_j k_i) \quad (8.2)$$

ここで、 k_i は i 番目の k の値、 x_j は j 番目の x の値であり、 $x_j = j\Delta x$ である。

いま、フーリエ変換したい関数である対称 Laue 反射のセクショントポグラフの振幅は、 $-l/2$ から $l/2$ の範囲のボルマンファン内でのみ値を持ち、それ以外ではゼロである。したがって、計算範囲を有限にできるため、式 (8.3) が成り立つ。

$$F(k_i) = \Delta x \sum_{j=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}-1} f(x_j) \exp(-i2\pi x_j k_i) \quad (8.3)$$

この、式 (8.3) が通常の離散フーリエ変換である。ここで、セクショントポグラフの幅が l であることを考慮すると $x_j = jl/n$ であるので、式 (8.3) へ代入し、式 (8.4) としておく。

$$F(k_i) = \Delta x \sum_{j=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}-1} f(x_j) \exp(-i2\pi \frac{jl}{n} k_i) \quad (8.4)$$

ところで、セクショントポグラフの幅を l は、入射波と回折波の間の距離であり、ブラッグ角を θ_B 、および結晶の厚さを T とすると次式で決まる。

$$l = 2T \sin \theta_B \quad (8.5)$$

また、目的とするロッキングカーブとは、ブラッグ角周りの回折強度プロファイルである。いま、Ewald-Laue 理論と高木-Taupin 理論から求めたロッキングカーブの比較を行うにあたり、

ロッキングカーブの刻み幅をそろえる必要がある。入射光の波長 λ を全体の幅 L で割ることにより刻み幅 $\Delta\theta[\text{rad}]$ が求まる (式 (8.6))。

$$\Delta\theta = \frac{\lambda}{L} \quad (8.6)$$

したがって、式 (8.6) を用いて $\Delta\theta$ を調整するためには、入射光の波長 λ は決まっているので、 L の値で調整する必要がある。この入射光の幅 L に式 (8.5) のセクショントポグラフの幅 l そのものを用いると式 (8.6) の調整ができなくなるため、フーリエ変換を行うセクショントポグラフの幅 l よりも大きな値となる幅 L を用いれば、フーリエ変換後の出力データの刻み幅となる $\Delta\theta$ を細かくすることができる。セクショントポグラフの幅の外側はボルマンファンの領域外なので、この L は、 l の外側にゼロ領域を付け足すことによって実現できる。

また、フーリエ変換での離散幅 Δx を決めているのは l に対する計算回数 n であり、この n は、フーリエ変換を行う関数を反映させるだけの十分な大きさが必要である。

ここで、通常のフーリエ変換である式 (8.3) では、入力データの個数によらず出力計算回数を調整することもできるため、 l に対する計算回数 n を入力としても出力データの刻み幅 $\Delta\theta$ を細かくすることができるが、入力データの個数と出力データの個数が同じ高速フーリエ変換ルーチンを用いる場合、入力データの刻み幅である l に対する計算回数 n 、すなわち l/n と同じ刻み幅を持ってかつ、 $\Delta\theta$ の調整を行うために l の外側にゼロ領域を付け足した幅 L としたデータを代入する必要がある。したがって、幅 L に対する計算回数を N として式 (8.7) となる。

$$\frac{L}{N} = \frac{l}{n} \quad (8.7)$$

このデータ数 N は、高速フーリエ変換に代入するデータの個数 N である。つまり、幅 l であるデータ数 n の周りにゼロ領域を付加することにより、幅 L であるデータ数 N としたものを高速フーリエ変換ルーチンへ代入することができる。

二波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブ計算結果 (対称ラウエ反射)

球面波入射条件による二波回折における高木-Taupin 方程式の解であるセクショントポグラフが図 8.1 であり、図 8.1 を前節の方法によってフーリエ変換したものが図 8.2 である。一方、図 8.3 は、European Synchrotron Radiation Facility(ESRF) の公表するフリーソフトウェア XOP2.3 で Ewald-Laue 理論によるロッキングカーブである。

図 8.2 と図 8.3 を比較するとよく一致していることが分かり、高木-Taupin 理論からもロッキングカーブを導けることが分かる。

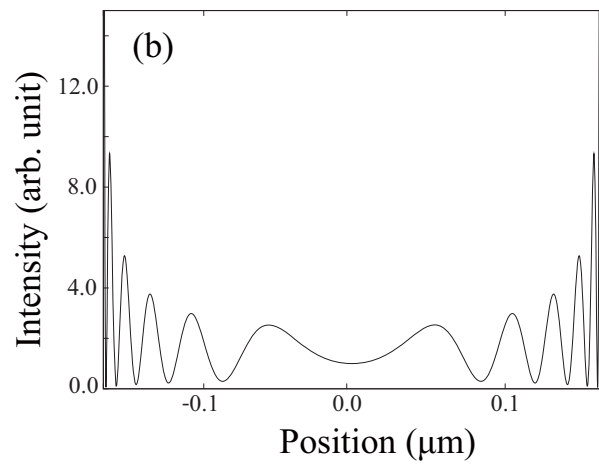


図 8.1 二波回折における高木理論の解であるセクショントポグラフ

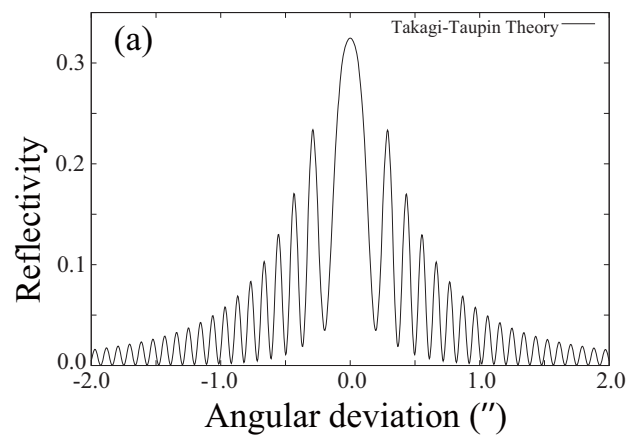


図 8.2 二波回折における高木理論の解であるセクショントポグラフをフーリエ変換したもの

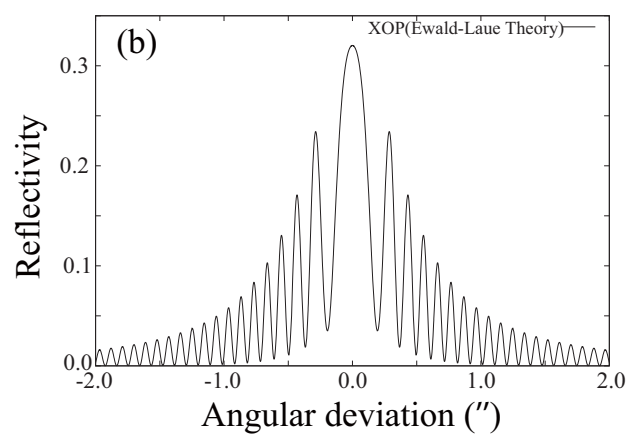


図 8.3 二波回折における Ewald-Laue 理論の解であるロッキングカーブ

8.4 多波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブ

多波回折での高木-Taupin 理論での完全結晶によるピンホールトポグラフの X 線強度プロファイルを計算する場合も二波回折の時と同様に境界条件を与える。そのため、二波回折の場合と同様にしてピンホールトポグラフのフーリエ変換により多波回折のロッキングカーブが求まる。ただし、多波回折の場合は、結晶出射面上での座標と回折方向に垂直な方向面上の座標との間および、その逆空間での Ewald 球上の座標との間に適切な座標変換が必要になる。

本節の多波回折では、前章までの研究の流れによって必要とされている三波回折について行った。

8.4.1 三波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブを求める方法

結晶出射面での X 線の振幅を入射方向の透過波を ($p = o$)、回折方向を ($p = h, g$) として、式 (8.8) で表す。

$$D_p^{(l)}(\mathbf{r}_e) \exp(-i2\pi \mathbf{K}_p \cdot \mathbf{r}_e) = \int_{\Delta \mathbf{K}_p} \mathcal{D}_p^{(l)}(\Delta \mathbf{K}_p) \exp[-i2\pi(\mathbf{K}_p - \Delta \mathbf{K}_p) \cdot \mathbf{r}_e] d\Delta \mathbf{K}_p, \quad (8.8)$$

ここで $p \in \{o, h, g\}, l \in \{\sigma, \pi\}$.

$D_p^{(l)}(\mathbf{r}_e)$ は、結晶出射面位置ベクトル \mathbf{r}_e における X 線の l 偏光状態での p 方向波の振幅である。 \mathbf{K}_p は、ラウエ点 L_a から逆空間格子点 H_p に向かう方向ベクトル $\overrightarrow{L_a H_p}$ である。 σ と π は偏光を表す。 K は、真空中の X 線の波数であり、 $\Delta \mathbf{K}_p$ は、ラウエ点 L_a から S_p 上の点 Q_p へ向かう方向ベクトル $\overrightarrow{L_a Q_p}$ であり、 S_p は、 \mathbf{K}_p に垂直な面である。ここで、 Q_p は、 H_p を中心として K を半径とする球面上であるが、 S_p 上の面と近似する。 $\mathcal{D}_p^{(l)}(\Delta \mathbf{K}_p)$ は、波数ベクトル $\mathbf{K}_p - \Delta \mathbf{K}_p$ の場合の X 線の振幅である。 $\int_{\Delta \mathbf{K}_p} d\mathbf{K}_p$ は、 S_p 上での積分を意味している。

いま、単位ベクトルを次のように定義する。

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_p &= \mathbf{K}_p / K, \\ \mathbf{e}_p^{(\sigma)} &= \frac{\mathbf{s}_p \times [\mathbf{s}_{(p+1)'} - \mathbf{s}_p]}{|\mathbf{s}_p \times [\mathbf{s}_{(p+1)'} - \mathbf{s}_p]|}, \\ \mathbf{e}_p^{(\pi)} &= \mathbf{s}_p \times \mathbf{e}_p^{(\sigma)}. \end{aligned}$$

ここで、 $(p+1)'$ は、 h, g と o を順番に取り換えたものである。

式 (8.8) を $\mathbf{r}_e = s_p \mathbf{s}_p + e_p^{(\sigma)} \mathbf{e}_p^{(\sigma)} + e_p^{(\pi)} \mathbf{e}_p^{(\pi)}$ と $\Delta \mathbf{K}_p = \eta_p^{(\sigma)} \mathbf{e}_p^{(\sigma)} + \eta_p^{(\pi)} \mathbf{e}_p^{(\pi)}$ で取り換えて表

すと次式になる。

$$D_p^{(l)}(\mathbf{r}_e) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{D}_p^{(l)}(\Delta \mathbf{K}_p) \exp \left[i2\pi(\eta_p^{(\sigma)} e_p^{(\sigma)} + \eta_p^{(\pi)} e_p^{(\pi)}) \right] d\eta_p^{(\sigma)} d\eta_p^{(\pi)}. \quad (8.9)$$

したがって、逆空間での X 線の振幅 $\mathcal{D}_p^{(l)}(\Delta \mathbf{K}_p)$ は、 $D_p^{(l)}(\mathbf{r}_e)$ のフーリエ変換によって次のように与えられる。

$$\mathcal{D}_p^{(l)}(\Delta \mathbf{K}_p) = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{Min}(e_p^{(\pi)})}^{\text{Max}(e_p^{(\pi)})} \int_{\text{Min}(e_p^{(\sigma)})}^{\text{Max}(e_p^{(\sigma)})} D_p^{(l)}(\mathbf{r}_e) \exp \left[-i2\pi(\eta_p^{(\sigma)} e_p^{(\sigma)} + \eta_p^{(\pi)} e_p^{(\pi)}) \right] de_p^{(\sigma)} de_p^{(\pi)}. \quad (8.10)$$

二波回折の場合でも指摘を行った通り、一般にフーリエ変換は無限区間範囲の積分であるが、 $D_p^{(l)}(\mathbf{r}_e)$ は、X 線の透過範囲内であるボルマン三角錐の内側でしか値を持たないため、積分区間を有限にできる。

ところで、整数 i と j として位置ベクトルを $\mathbf{r}_e = i\mathbf{a} + j\mathbf{b}$ と定義し、ベクトル \mathbf{a} と \mathbf{b} を次のように定義する。

$$\mathbf{a} = (\mathbf{s}_g - \mathbf{s}_o) \frac{t}{n \cos \Theta_B}, \quad (8.11)$$

$$\mathbf{b} = (\mathbf{s}_h - \mathbf{s}_o) \frac{t}{n \cos \Theta_B}, \quad (8.12)$$

ここで n は、結晶の厚さを t として計算の層を t/n とした時の分割数である。三波の高木-Taupin 方程式は t/n ごとに X 線の振幅を出射面に向かって逐次計算を行う。 Θ_B は、ベクトル \mathbf{n} と \mathbf{s}_p の間の角度を表している。この \mathbf{n} 結晶表面に垂直なベクトルであり、 $\mathbf{n} = \mathbf{a} \times \mathbf{b} / |\mathbf{a} \times \mathbf{b}|$ と定義される。実際にコンピュータシミュレーションによって計算されたピンホールトポグラフ $D_p^{(l)}(i, j)$ は、 $D_p^{(l)}(i, j) = D_p^{(l)}(i\mathbf{a} + j\mathbf{b}) \left[= D_p^{(l)}(\mathbf{r}_e) \right]$ と定義され、さらに $D_p^{(l)}(i, j)$ は S_p 上への写像である。ベクトル \mathbf{a} と \mathbf{b} を S_p 上へ写像したベクトル \mathbf{a}_p と \mathbf{b}_p を次のように定義する。

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_p &= \mathbf{a} + A_p \mathbf{s}_p \\ &= A_p^{(\sigma)} \mathbf{e}_p^{(\sigma)} + A_p^{(\pi)} \mathbf{e}_p^{(\pi)}, \end{aligned} \quad (8.13)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_p &= \mathbf{b} + B_p \mathbf{s}_p \\ &= B_p^{(\sigma)} \mathbf{e}_p^{(\sigma)} + B_p^{(\pi)} \mathbf{e}_p^{(\pi)}. \end{aligned} \quad (8.14)$$

ここで $A_p, B_p, A_p^{(l)}$ と $B_p^{(l)}$ ($l \in \{\sigma, \pi\}$) は、 m を単位として式 (8.13) と式 (8.14) を解くことで得られる係数である。したがって、 $D_p^{(l)}(i, j)$ は、 S_p 上の座標 $\mathbf{r}_p = i\mathbf{a}_p + j\mathbf{b}_p$ に写される。

S_p 上の逆空間ベクトル \mathbf{a}_p^* と \mathbf{b}_p^* の定義は、次のとおりである。

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_p^* &= -\frac{\mathbf{s}_p \times \mathbf{b}_p}{\mathbf{s}_p \cdot (\mathbf{a}_p \times \mathbf{b}_p)M} \\ &= A_p^{*(\sigma)} \mathbf{e}_p^{(\sigma)} + A_p^{*(\pi)} \mathbf{e}_p^{(\pi)},\end{aligned}\quad (8.15)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_p^* &= \frac{\mathbf{s}_p \times \mathbf{a}_p}{\mathbf{s}_p \cdot (\mathbf{a}_p \times \mathbf{b}_p)N} \\ &= B_p^{*(\sigma)} \mathbf{e}_p^{(\sigma)} + B_p^{*(\pi)} \mathbf{e}_p^{(\pi)},\end{aligned}\quad (8.16)$$

また、 $\mathbf{a}_p \cdot \mathbf{a}_p^* = 1/M$ 、 $\mathbf{b}_p \cdot \mathbf{b}_p^* = 1/N$ および $\mathbf{a}_p \cdot \mathbf{b}_p^* = \mathbf{b}_p \cdot \mathbf{a}_p^* = 0$ であり、このうち M と N は、式 (8.17) の和記号 \sum の範囲である。また、 $A_p^{*(l)}$ と $B_p^{*(l)}$ は、 m^{-1} の単位を持ち式 (8.15) と式 (8.16) の解から得られる係数である。式 (8.10) における \mathbf{r}_e を \mathbf{r}_p で取り替えても同じなので、二次元逆空間 S_p 上の位置 $k_i \mathbf{a}_p^* + k_j \mathbf{b}_p^*$ での $\mathcal{D}_p'^{(l)}(k_i, k_j)$ は、次式のようにあらわすことができる。

$$\mathcal{D}_p'^{(l)}(k_i, k_j) = \frac{\mathbf{s}_p \cdot (\mathbf{a}_p \times \mathbf{b}_p)}{2\pi} \sum_{i=\text{Min}(i)}^{\text{Max}(i)} \sum_{j=\text{Min}(j)}^{\text{Max}(j)} \mathcal{D}_p'^{(l)}(i, j) \exp[-i2\pi(ik_i/M + jk_j/N)], \quad (8.17)$$

ここで $M = \text{Max}(i) - \text{Min}(i) + 1$ 、 $N = \text{Max}(j) - \text{Min}(j) + 1$ 。

ロッキングカーブとは、 $\mathbf{e}_o^{(\sigma)}$ 軸および $\mathbf{e}_o^{(\pi)}$ 軸周りの結晶の回転角である $\Delta\omega$ と $\Delta\psi$ の関数である。 S_p 上では、端数 K として $\omega_{\text{step}} K \mathbf{e}_o^{(\sigma)}$ と $\psi_{\text{step}} K \mathbf{e}_o^{(\sigma)}$ で表される。ここで、 ω_{step} と ψ_{step} は、 $\mathbf{e}_o^{(\sigma)}$ 軸および $\mathbf{e}_o^{(\pi)}$ 軸周りの角度刻み幅である。 S_p 上へ写されたベクトル $\mathbf{a}_p^{*'}$ と $\mathbf{b}_p^{*'}$ 次式で計算される。

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_p^{*'} &= \omega_{\text{step}} K \mathbf{e}_o^{(\sigma)} + A_p^{*'} \mathbf{n} \\ &= A_p^{*'\sigma} \mathbf{e}_p^{(\sigma)} + A_p^{*'\pi} \mathbf{e}_p^{(\pi)},\end{aligned}\quad (8.18)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_p^{*'} &= \psi_{\text{step}} K \mathbf{e}_o^{(\pi)} + B_p^{*'} \mathbf{n} \\ &= B_p^{*'\sigma} \mathbf{e}_p^{(\sigma)} + B_p^{*'\pi} \mathbf{e}_p^{(\pi)}.\end{aligned}\quad (8.19)$$

ここで、 $A_p^{*'}, B_p^{*'}, A_p^{*'(l)}$ と $B_p^{*'(l)}$ は、 m^{-1} の単位を持つ係数であり、式 (8.18) と式 (8.19) の解によって求まる。 $\mathcal{D}_p'^{(l)}(k_i, k_j)$ は、 $\Delta\omega (= k_i' \omega_{\text{step}})$ および $\Delta\psi (= k_j' \psi_{\text{step}})$ の関数として表現すれば、 $\mathcal{D}_p''^{(l)}(\Delta\omega, \Delta\psi)$ となる。 $k_i \mathbf{a}_p^* + k_j \mathbf{b}_p^* = k_i' \mathbf{a}_p^{*'} + k_j' \mathbf{b}_p^{*'}$ であるから、実数 k_i' と k_j' は、式 (8.17) で求まった $\mathcal{D}_p'^{(l)}(k_i, k_j)$ の座標の値である整数 k_i と k_j との間に次式の行列計算

が成り立っている。

$$\mathbf{MX} = \mathbf{M}'\mathbf{X}',$$

$$\text{ここで } \mathbf{M} = \begin{pmatrix} A_p^{*(\sigma)} & B_p^{*(\sigma)} \\ A_p^{*(\pi)} & B_p^{*(\pi)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} k_i \\ k_j \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{M}' = \begin{pmatrix} A_p^{*'}(\sigma) & B_p^{*'}(\sigma) \\ A_p^{*'}(\pi) & B_p^{*'}(\pi) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}' = \begin{pmatrix} k'_i \\ k'_j \end{pmatrix}.$$

この $\mathbf{X}' = \mathbf{M}'^{-1}\mathbf{MX}$ を解くことによって k'_i および k'_j を求めることによって、ピンホールトポグラフをフーリエ変換した後の座標を決定している。

三波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブ計算結果 (対称ラウエ反射)

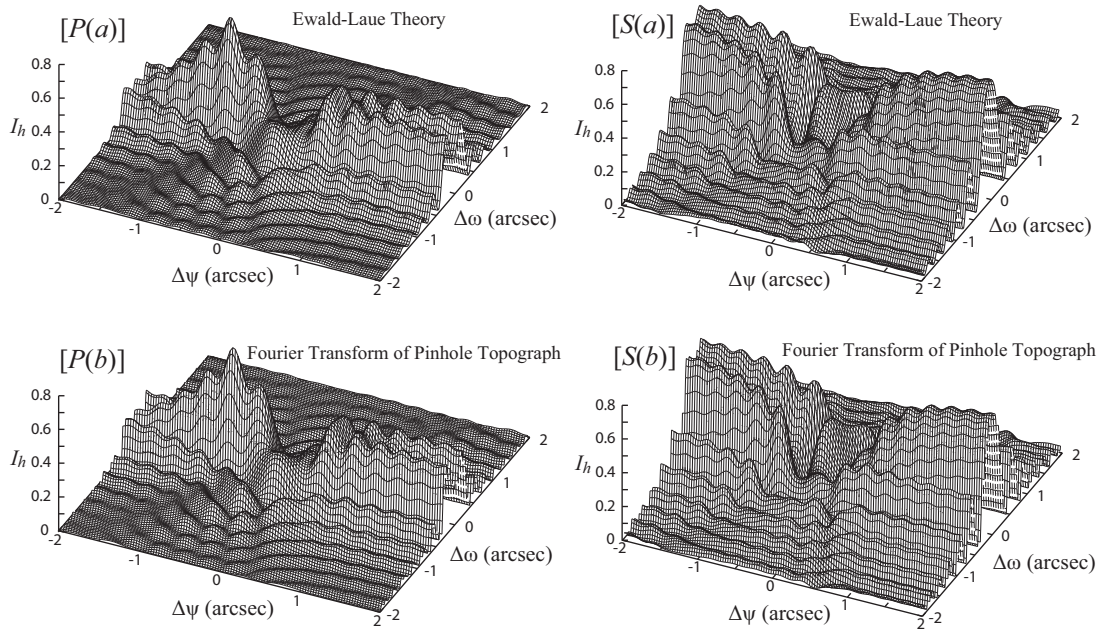


図 8.4 三波回折における Ewald-Laue 理論でのロッキングカーブと高木-Taupin 理論から求めたロッキングカーブ

図 8.4 $P(a)$, $P(b)$ は、入射波が π 偏光の場合、 $S(a)$, $S(b)$ は、入射波が σ 偏光の場合の計算結果であり、(a) は、Ewald-Laue 理論により計算した結果であり、(b) は、高木-Taupin 理論により計算したピンホールトポグラフを前節で説明した通りの方法により二次元高速フーリエ変換を行った結果である。どちらの計算方法で計算を行っても説明の必要がないほど一致していることが分かる。したがって、高木-Taupin 理論を用いることで、多波回折の場合や、複雑な形状を透過した後であっても回折強度を求めることができる。

第 9 章

屈折コントラスト撮影法への三波回折の応用

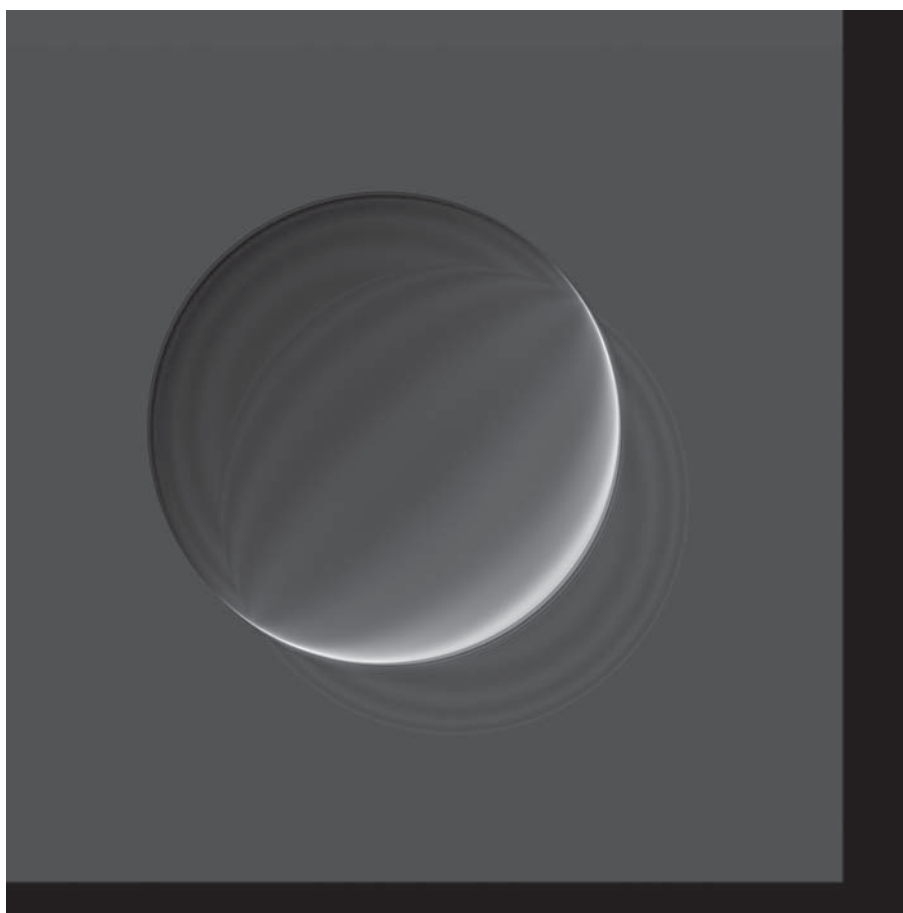


図 9.1 画像の重なりの改善がみられる計算機シミュレーションによる三波回折の場合の第二回折波方向の屈折撮影画像

回折波をブラッグ角からずらしていくことで、図 9.1 に示すように画像の重なりが改善する可能性がみられる。

9.1 屈折コントラスト撮影法への三波回折の応用

9.1.1 鮮明な画像を得るために



図 9.2 三波回折における画像の重なりについての考察

三波回折を用いた屈折コントラスト画像をコンピュータシミュレーションした結果、鮮明な画像が得られず、重なった画像となることがわかった。この画像をよく見てみると、一定の方向への重なりが見られる。このことから、この重なりの原因がどこにあるのかを考察した。第7章に示した通り、三波屈折コントラスト画像の計算では、高木-Taupin 方程式によるボルマンファンの計算を行い、その底面である三波回折のピンホールトポグラフを用いている。その三波ピンホールトポグラフでは、図 9.2 に赤丸で示すようにボルマンファンの内側に向けて第一回折波も第二回折波も拡がりが見られる。

通常の屈折コントラスト画像を得る場合は二波回折を用いているが、二波回折の場合のボルマンファンはトライアングルであり、セクショントポグラフはトライアングルの底辺であり、一次元的である。したがって、三波の場合も一次元的に先鋭的な回折波が得られれば、画像の重なりが改善されると推察する。

では、三波回折においてそのような回折波が得られることはあるのだろうか。

そこで、SPring-8 での実験結果から、三波回折の場合の観測結果をみると、エネルギーを 18.245keV での結果では、結晶での回折について構造が見えるが、エネルギーを 22keV とした時の結果については、構造がみられず、回折方向への先鋭化した結果が得られている。

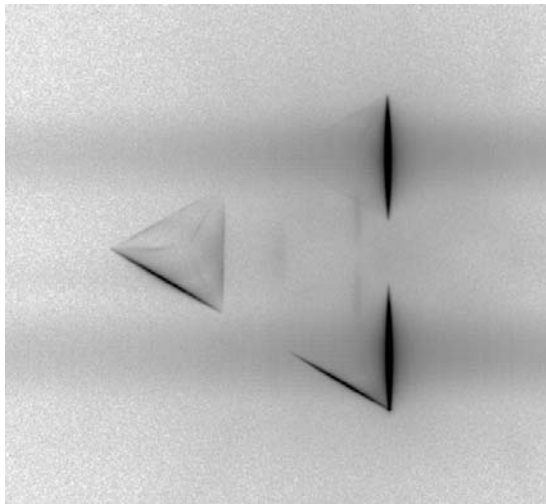


図 9.3 三波回折実験結果 (18.245keV)



図 9.4 三波回折実験結果 (22keV)

このように、ボルマンファン内部の結晶構造が反映しないような鋭い回折波を得ることができれば、画像の重なりが改善される可能性があると言える。

ただし、実験結果である図 9.4 は、対称ラウエケースの場合であるため、対称ブラッグケースでの回折方向へ先鋭化した X 線の得られる反射指数および入射 X 線エネルギーについて探索する必要がある。

9.2 従来の屈折コントラスト撮影法に対しての改善点

9.2.1 従来技術からの問題提起

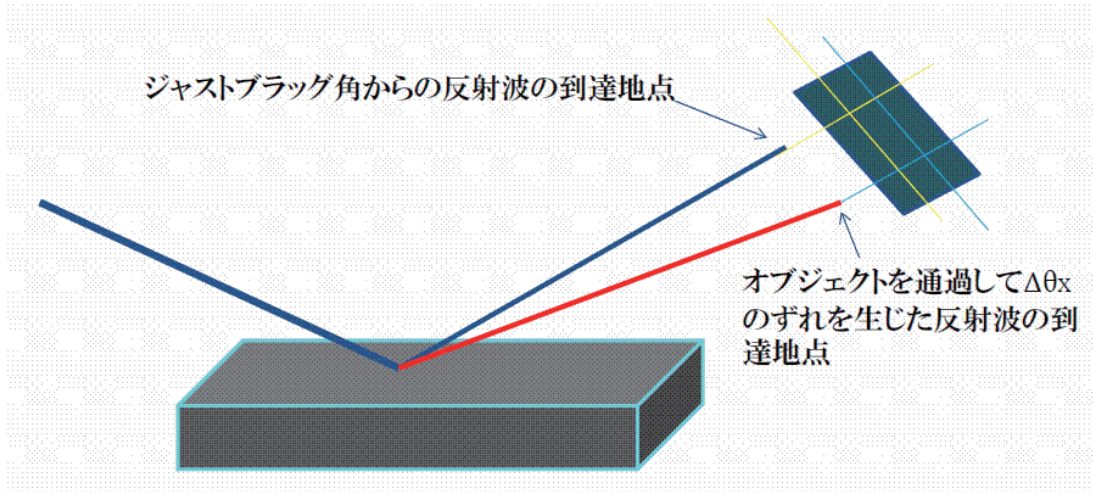


図 9.5 従来技術からの問題提起

従来技術では、撮影対象物体を通過したブラッグ角から微小なズレを起こしている光線について、その二次元的なズレについてロッキングカーブを用いることによる一次元方向のコントラストの解析によって一次元的にしかそのズレを特定できない。

図 9.5 に示すように青色の回折波方向がブラッグ角での回折方向として赤色の回折は方向がブラッグ角からのズレを含む回折波方向を示しているが、そのズレは、図の右上に示す通り、青色の交差点から黄色の交差点へズレタ時には、二次元面内でのズレであり、ズレ方向の次元は二次元である。

新たに得られる情報とは 従来技術の屈折コントラスト撮影法によって得られる撮影物体による屈折を考える。物体界面での入射光と境界面の法線ベクトルとの間の角を α としてスネルの法則より

$$\frac{\sin \alpha}{n} = \frac{\sin(\alpha + \delta\alpha)}{n + \delta n} \quad (9.1)$$

$$= \frac{\sin \alpha \cos \delta\alpha + \cos \alpha \sin \delta\alpha}{n + \delta n} \quad (9.2)$$

$$= \frac{\sin \alpha + \delta\alpha \cos \alpha}{n + \delta n} \quad (9.3)$$

ここで、 n は媒質での X 線の屈折率であり、 $\delta\alpha$ は、屈折による入射角 α の増分、 δn は、媒質の屈折率の変化分である。 $\delta\alpha$ は、微小量なので、 $\cos \delta\alpha \doteq 1$ および、 $\sin \delta\alpha \doteq \delta\alpha$ とした。し

たがって、

$$n \sin \alpha + \delta n \sin \alpha = n \sin \alpha + \delta \alpha n \cos \alpha \quad (9.4)$$

ゆえに、

$$\delta \alpha = \tan \alpha \frac{\delta n}{n} \quad (9.5)$$

である。ここで、屈折後の X 線の微小変化ベクトルを

$$\begin{pmatrix} \tan \alpha \frac{\delta n}{n} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (9.6)$$

と表し、この時の法線ベクトルは、

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} \sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (9.7)$$

で与えられる二次元の平面内であり、観測できる屈折角も二次元面内にある。

ところが、物体界面において屈折を起こす X 線は、任意方向へ三次元的に屈折を起こしている。したがって、入射光と境界面の法線ベクトルの間の角を三次元的に扱おうと横方向 (x) 成分の角度を α 、縦方向 (y) 成分の角度を β として、法線ベクトル \mathbf{N} は、

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} \sin \alpha \cos \beta \\ \sin \alpha \sin \beta \\ \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (9.8)$$

とできる。また、二次元の場合と同様に屈折後の X 線の微小変化ベクトルを

$$\begin{pmatrix} \tan \alpha \cos \beta \frac{\delta n}{n} \\ \tan \alpha \sin \beta \frac{\delta n}{n} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (9.9)$$

と表せる。ここで、 $\beta = 0$ の場合が二次元の場合であるが、三次元の場合の角度変化は、式 (9.9) より

$$\delta \theta_x = \tan \alpha \cos \beta \frac{\delta n}{n} \quad (9.10)$$

$$\delta \theta_y = \tan \alpha \sin \beta \frac{\delta n}{n} \quad (9.11)$$

とできる。

さらに、X 線の屈折ポイント \mathbf{r} における微小屈折角 $d\theta_x, d\theta_y$ は、

$$d\theta_x = \frac{\text{grad } n(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \tan \phi(\mathbf{r}) \cos \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (9.12)$$

$$d\theta_y = \frac{\text{grad } n(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \tan \phi(\mathbf{r}) \sin \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (9.13)$$

いま、X 線の屈折率は、ほぼ 1 であり、 $\tilde{n} = 10^{-6}$ 程度として $n(\mathbf{r}) = 1 - \tilde{n}\mathbf{r}$ とする。また、ベクトル解析の定義式

$$\text{grad} = \nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i}, \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j}, \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k} \right) \quad (9.14)$$

より、

$$d\theta_x = -\nabla \tilde{n}(\mathbf{r}) \tan \phi(\mathbf{r}) \cos \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (9.15)$$

$$d\theta_y = -\nabla \tilde{n}(\mathbf{r}) \tan \phi(\mathbf{r}) \sin \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (9.16)$$

したがって、微小屈折変化が積算された観測される物体透過による屈折波は経路積分によって

$$\begin{aligned} \Delta\theta_x &= \int_S d\theta_x \\ &= - \int_S \nabla \tilde{n}(\mathbf{r}) \tan \phi(\mathbf{r}) \cos \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (9.17)$$

$$\begin{aligned} \Delta\theta_y &= \int_S d\theta_y \\ &= - \int_S \nabla \tilde{n}(\mathbf{r}) \tan \phi(\mathbf{r}) \sin \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (9.18)$$

である。従来技術では、 $\psi(\mathbf{r})$ 成分が観測できず、 $\Delta\theta_y$ によるコントラストは得られない。任意の撮影物体の屈折率分布による X 線の屈折波は、任意の方向に屈折を起こすため、三波回折を用いることで、 $\Delta\theta_y$ のコントラストが描画できることが期待できる。

9.2.2 三波回折の回折波ごとのロッキングカーブ

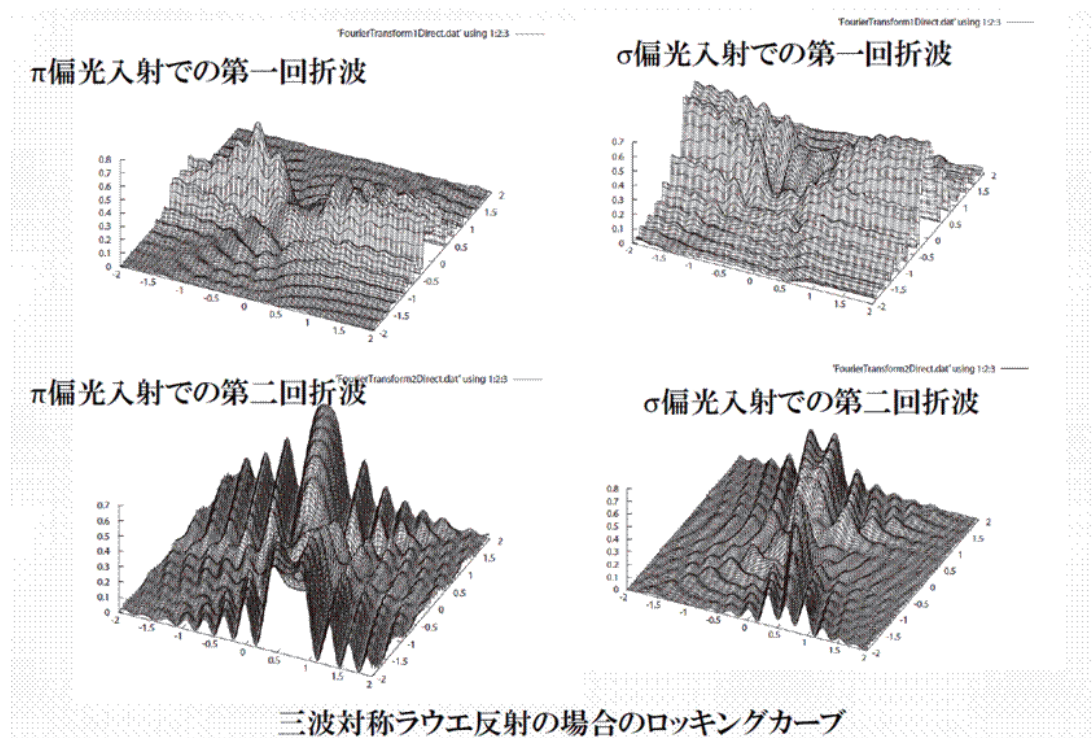


図 9.6 第一回折波と第二回折波および入射偏光状態の違い (鳥瞰図)

前章では、高木-Taupin 方程式の解からロッキングカーブを求めることができた。Anton S. Maksimenko 博士による屈折コントラスト撮影法では、ロッキングカーブの半分の値をとる角度に合わせて二度の撮影を行うことにより、屈折コントラストを強調することで、撮影物体での微小屈折角を抽出している。

三波回折を屈折コントラスト撮影法に対して用いる場合のロッキングカーブは第一回折波については前章で示した通りである。しかし、前章でのロッキングカーブの結果から、入射時点の偏光条件によって、ロッキングカーブの形状が異なることがわかっている。また、三波回折を用いることは第二回折波での撮影画像も同時に得られることが利点であるため、第一回折波と第二回折波でのロッキングカーブを比較している必要があると言える。

現時点で得られている対称ラウエ反射の場合で、第二回折波を入射偏光条件を変えて求めた。図 9.6 に入射偏光条件の違いと回折波の違いを鳥瞰図で示し、その等高線図を図 9.7 に示す。結果をみると、 π 偏光入射の第一回折波と σ 偏光入射の第二回折波の形状がほとんど同じで、互いに交差する方向に角度を持っていることがわかる。また、 σ 偏光入射の第一回折波と π 偏光入射の第二回折波でも同様の関係がみられる。

従来技術での屈折コントラスト撮影法における CT での角度解析では、ロッキングカーブの

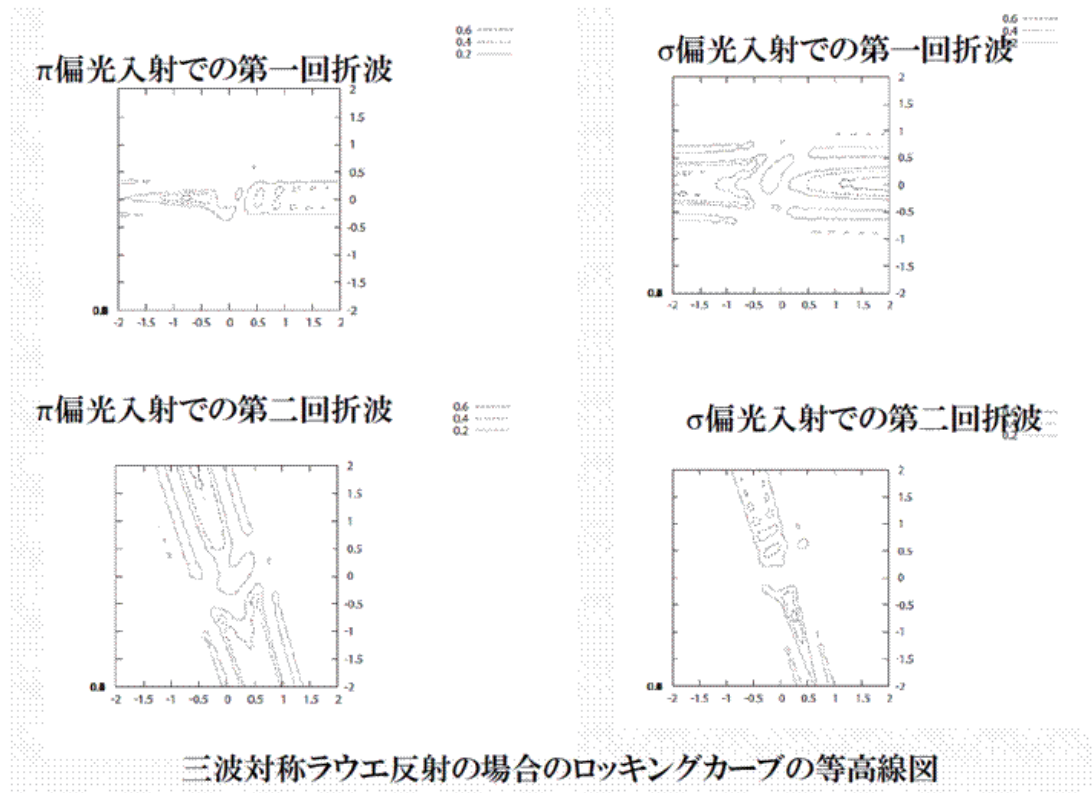


図 9.7 第一回折波と第二回折波および入射偏光状態の違い (等高線図)

半値のところで撮影を二度行うことで屈折角を強調しているが、入射偏光状態も合わせて従来と同様に半値のところでの撮影を組み合わせを行うことができれば、従来得られている屈折コントラスト情報に加え、CT 画像合成時に得られる情報は式 (9.18) の $\Delta\theta_y$ のコントラストによる画像合成が可能になると見込まれる。

9.2.3 なぜ多波回折を用いることが有利なのか

従来の屈折コントラスト撮影法では、おもに CT に対する技術開発とマンモグラフィーに対する技術開発がおこなわれている。CT に対する技術開発では、一次元情報の取得の際に屈折コントラスト撮影法を行い、ロッキングカーブを指標にして撮影対象物体での微小角度変化を抽出している。

CT での画像合成に用いられる横断画像の作成に対して従来の方法で得られる二次元の屈折コントラスト情報に加えて、前節までの説明の通り、新たな次元の屈折角の抽出が可能になり、三次元画像にする場合に、撮影間隔とは別に三次元の屈折率分布が得られると言え、後章で解説する CT 技術の拡張が見込まれる。

一方、後章で解説する通り、マンモグラフィーでの撮影に対しては、単純撮影であることから撮影の回数を減らし、被ばく量の低減を期待できる。従来の屈折コントラスト撮影法では、

屈折画像に対してコントラストをつける必要がある性質上、二波回折のロッキングカーブを指標にしてその半値の地点における撮影を行う。同一方向の撮影に対してアナライザーの微妙な角度調整によって二度の撮影が必要になる。医療診断応用に向けて重要なことは、画像の解像度を上げることとともに、まず何よりも放射線被ばくを抑えることが最も重要なことだが、三波回折を用いることは、ブラッグ反射の回折波がアナライザーより二方向へ分かれることから、二方向の画像を同時に得ることができる。また、この回折画像は、回折方向が違っているため、ロッキングカーブの半値のような地点での二度の撮影によらずとも同時に撮影されたそのままの状態でもコントラストを付けることが可能であると言える。

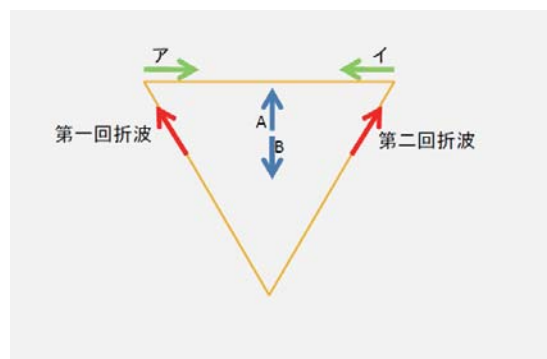


図 9.8 三波回折により撮影時におけるコントラストの方向

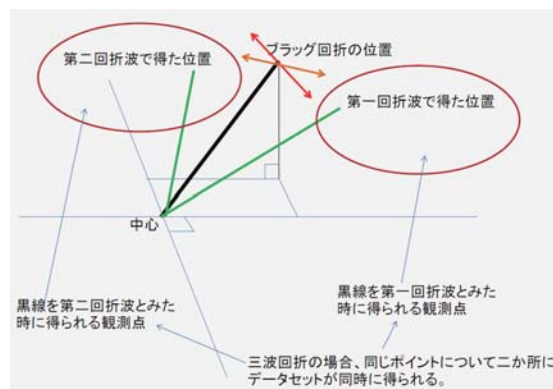


図 9.9 三波回折時における各回折波ごとの回折方向の関係

図 9.8 において二波回折の場合の回折方向が A の方向であるとしたときに、従来のロッキングカーブを指標にした二度の撮影によってつけられるコントラストは図 9.8 の A および B の方向であり、それぞれが逆のコントラストとなるように撮影を行う。三波回折を用いることで回折波はそれぞれ角度をもって回折を起こし、図 9.8 のアおよびイの方向に対してコントラストを同時につけることが可能であるといえる。

第 10 章

撮影画像についての統計的画像処理 について

10.1 一般的な画像処理

解像度 医療用画像において、解像度には空間分解能とコントラスト分解能および時間解像度がある^{90, 91)}。時間解像度は、心臓の鼓動についての時間間隔イメージングなどで用いられる⁹⁰⁾が、ここでは、X 線単純撮影および CT/MRI における画像解像度では空間分解能とコントラスト分解能が重要である。空間分解能とは、画素に対して撮影対象物体を区別できる程度の意味で、1 画素に対して撮影物体のどのくらいの大きさが相当しているかが描画の際に重要である⁹⁰⁾。コントラスト分解能とは、最大濃度と最小濃度の間の階調の区別である⁹⁰⁾。

Modulation Transfer Function(MTF) と画像解像度 一般の医療用 X 線撮影画像において線源からの X 線がピンホールを通してボケが生じる場合、点像分布関数 Point Spread Function(PSF) といい、スリットを通してボケが生じる場合、線像分布関数 Line Spread Function(LSF) と呼ぶ⁹²⁻⁹⁶⁾。これには、

$$\text{LSF}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \text{PSF}(x, y) dy \quad (10.1)$$

の関係があり、

$$\text{MTF}(u) = \frac{|\int_{-L/2}^{L/2} \text{LSF}(x) \cos(2\pi(n/L)x) dx|}{\int_{-L/2}^{L/2} \text{LSF}(x) dx} \quad (10.2)$$

で求める画像解像特性を評価する指標がある⁹²⁻⁹⁶⁾。

これは、従来の X 線撮影技術に用いられている光源からのコヒーレント性の低い X 線について吸収撮影の際に、撮影対象物体のエッジを抽出する際の指標となる。しかし、高輝度放射

光を用いる屈折コントラスト撮影技術における撮影画像では、高コヒーレント光を用いるため、光の直進性が高く、PSF および LSF によるボケが生じにくい、そのために撮影対象物体を通過した X 線の微小屈折角のコントラストを抽出できる。

エッジの抽出 一般的なデジタル画像処理において、輪郭をはっきりさせるためには、エッジの抽出を行う。二次元画像でのエッジの抽出には x と y の二次元方向にそれぞれ微分フィルターにより行われる。つまり、急激な画素値の変化を捉え、エッジとして抽出している。一般的な一次微分フィルターは、画素 $f(x, y)$ に対して

$$\frac{d}{dx}f(x, y) = f(x + 1, y) - f(x, y) \quad (10.3)$$

$$\frac{d}{dy}f(x, y) = f(x, y + 1) - f(x, y) \quad (10.4)$$

とあらわされ、値が大きいほどその画素付近にエッジが存在する。さらに、画素値の変化量の変化を捉える二次微分フィルターなど、さまざまなフィルターが開発されており、エッジを抽出する画像処理の手法がある^{97, 98)}。

10.2 CT 技術における逆問題

CT の基礎理論 CT は、1963 年から 1964 年にかけて A.M.Cormack により原理が発表^{14, 15)} され、1972 年に Godfrey Hounsfield によって開発された¹⁶⁾ 技術である。CT では、撮影対象物を透過した一次元情報を持つ撮影データを周囲全体にわたって集め、それらを逆問題とすることで、撮影対象物体の構造を再構成するものである。

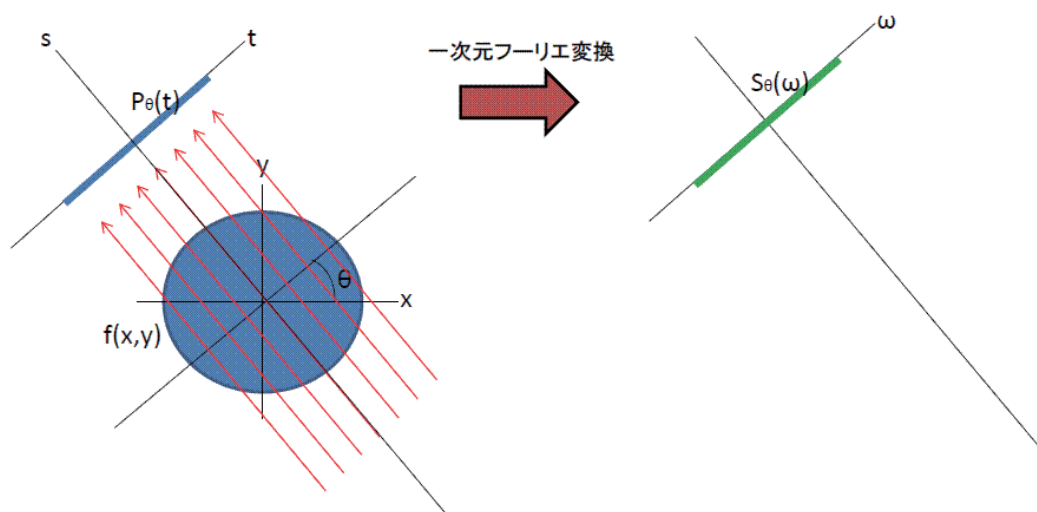


図 10.1 CT 撮影データの一次元変換

図 10.1 左図に示す通り、撮影対象物体の二次元平面 $f(x, y)$ を透過した X 線の撮影像を

$P_\theta(t)$ とすると、

$$P_\theta(t) = \int f(x, y) ds \quad (10.5)$$

で表せ、ここで、撮影対象物体の直交座標 x, y と角度 θ 回転した座標 t, s の関係は、

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ s \end{bmatrix} \quad (10.6)$$

において変換できる。さらに、一次元フーリエ変換の定義より図 10.1 の変換は、

$$S_\theta(\omega) = \int P_\theta(t) e^{-i2\pi\omega t} dt \quad (10.7)$$

であるので、

$$S_\theta(\omega) = \int \int f(t, s) e^{-i2\pi\omega t} ds dt \quad (10.8)$$

であり、図 10.2 より

$$S_\theta(\omega) = F(\omega \cos \theta, \omega \sin \theta) = F(u, v) \quad (10.9)$$

二次元フーリエ変換の定義式から

$$f(x, y) = \int \int F(u, v) e^{i2\pi(ux+vy)} du dv \quad (10.10)$$

となり二度のフーリエ変換を経て撮影像の再構成ができ、これが CT の画像構成である^{26, 96)}。したがって、撮影対象物体の撮影平面の全周囲にわたる撮影により $P_\theta(t)$ を集める必要がある。

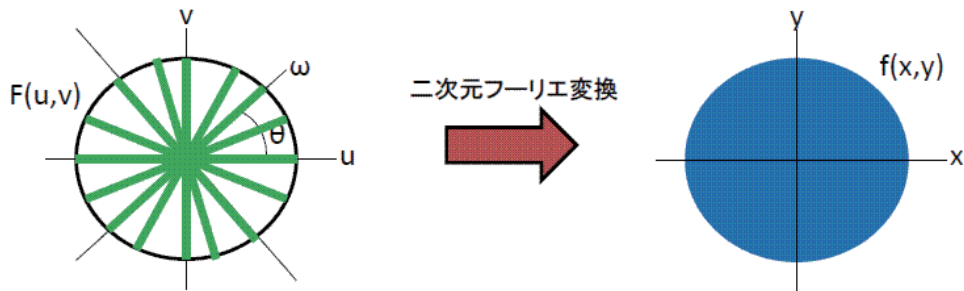


図 10.2 CT 撮影データの二次元変換

従来の CT 技術では、全周囲にわたって集める $P_\theta(t)$ は、吸収 X 線像であるが、Anton S. Maksimenko 博士の技術では屈折コントラスト撮影を用い、各 $P_\theta(t)$ ごとにロッキングカーブの半値の点での撮影を二度にわたって行うことで、微小屈折角の抽出を行う。それは式 (9.17) における $\psi = 0$ の場合であり、この時の $\Delta\theta_x$ を式 (10.5) での $P_\theta(t)$ と定義することで、CT 画像の際構成を行うのが Anton S. Maksimenko 博士の技術である。

三波回折への適用 三波回折で期待される新たに得られる情報とは、前章で解説した通り、式 (9.17) および式 (9.18) で表される。

式 (9.17) および式 (9.18) よりベクトル式をスカラー式へ変形すれば、

$$\begin{aligned}\Delta A \equiv \Delta \theta_x &= - \int_S \nabla \tilde{n}(\mathbf{r}) \tan \phi(\mathbf{r}) \cos \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= - \int_S |\nabla \tilde{n}(\mathbf{r})| \cos \phi(\mathbf{r}) \cos \psi(\mathbf{r}) \tan \phi(\mathbf{r}) \cos \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= - \int_S |\nabla \tilde{n}(\mathbf{r})| \sin \phi(\mathbf{r}) \cos \psi(\mathbf{r}) \cos \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}\end{aligned}\quad (10.11)$$

$$\begin{aligned}\Delta B \equiv \Delta \theta_y &= - \int_S \nabla \tilde{n}(\mathbf{r}) \tan \phi(\mathbf{r}) \sin \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= - \int_S |\nabla \tilde{n}(\mathbf{r})| \cos \phi(\mathbf{r}) \cos \psi(\mathbf{r}) \tan \phi(\mathbf{r}) \sin \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= - \int_S |\nabla \tilde{n}(\mathbf{r})| \sin \phi(\mathbf{r}) \sin \psi(\mathbf{r}) \cos \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}\end{aligned}\quad (10.12)$$

である。式 (10.5) における $P_\theta(t)$ に用いる一次元データを式 (10.11) での ΔA として

$$P_\theta(t) \equiv P_\theta^{\Delta A}(t) \equiv \Delta A \quad (10.13)$$

のように定義することで CT 情報のセットが得られる。また、それとは別に式 (10.5) における $P_\theta(t)$ に用いる一次元データを式 (10.12) での ΔB として

$$P_\theta(t) \equiv P_\theta^{\Delta B}(t) \equiv \Delta B \quad (10.14)$$

のように定義することができるもうひと組の CT 情報のセットも得られる。 $P_\theta^{\Delta A}(t)$ でのコントラスト情報と $P_\theta^{\Delta B}(t)$ でのコントラスト情報は異なるため、二組の屈折コントラスト撮影による CT 再構成画像が得られることが期待できる。

三波回折を用いることにより、ロッキングカーブの半分の値に相当する地点は 4 箇所増加する。また、入射光の偏光条件を変えれば 8 箇所とることができる。また、第一回折方向と第二回折方向ではその間の角度によってロッキングカーブが交差方向にあることがわかっているため、式 (10.11) および式 (10.12) での ϕ と ψ を分離抽出することが可能である。

第 11 章

医療診断への応用に向けて

11.1 医療応用に向けた三波回折を使う屈折コントラスト撮影法のさらなる優位性

11.1.1 屈折コントラスト撮影技術のさらなる向上を目指して

撮影対象物体によって透過 X 線が屈折させられる方向は任意の方向である。

二波回折の場合の屈折コントラスト撮影法では、平面波理論でのロッキングカーブを用い、その半値のところで二度別々に撮影することによって屈折コントラストを強調し、撮影対象物体での微小な屈折角を解析している。このときに用いられているロッキングカーブは平面波 X 線の面内であり、カーブの横軸である角度変化は一次元方向である。

三波回折を用いることによって第一回折波と第二回折波ではそれぞれ別方向のロッキングカーブが存在し、その両方を用いることによって、二波回折の場合に一次元方向しか解析できなかった撮影対象物体による透過 X 線の微小屈折角を二次元方向に解析することが可能になると言える。

二次元方向とも解析できるようになると、撮影対象物体による屈折の方向が確定するため、より正確に物体の構造を明らかにすることができる。

MRI に対する X 線 CT の欠点克服の可能性

MRI においては、体内に存在する水素原子（プロトン）の核スピンの磁場中にある時にパルスのラジオ波を照射することで乱れを生じさせ、ラーモア歳差運動へ戻る緩和を縦方向と横方向に分けて時間差を利用して観測している⁹⁹⁻¹⁰¹⁾。MRI での造影剤であるガドリニウムキレート剤は、このうちの縦方向の緩和時間を短縮させる役割を果たしている¹⁷⁾。つまり MRI では、図 11.1 に示す通り、核スピンの回転角を二次元で別々にとらえており、縦緩和画像と横緩和画像の二種類の画像が得られ、その両方を用いて撮影対象物体の構造を表現している

99–101)。このことにより、任意の断面を描画することが容易にできる。

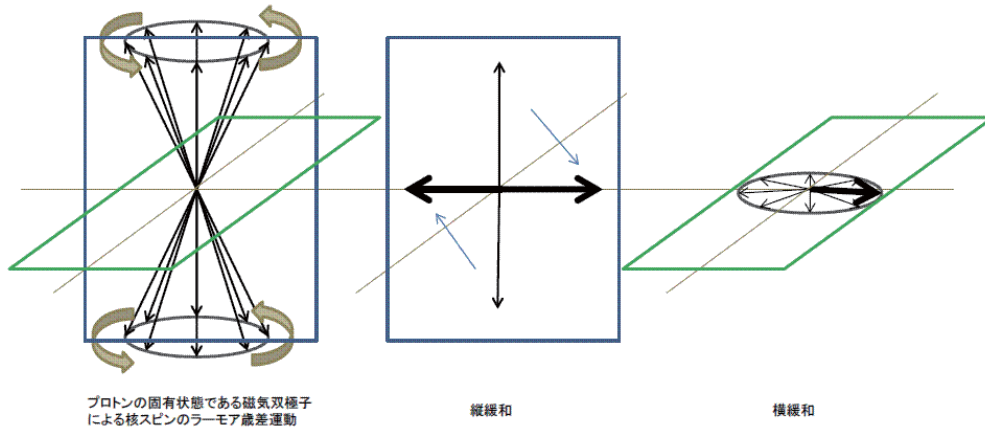


図 11.1 MRI の縦緩和と横緩和

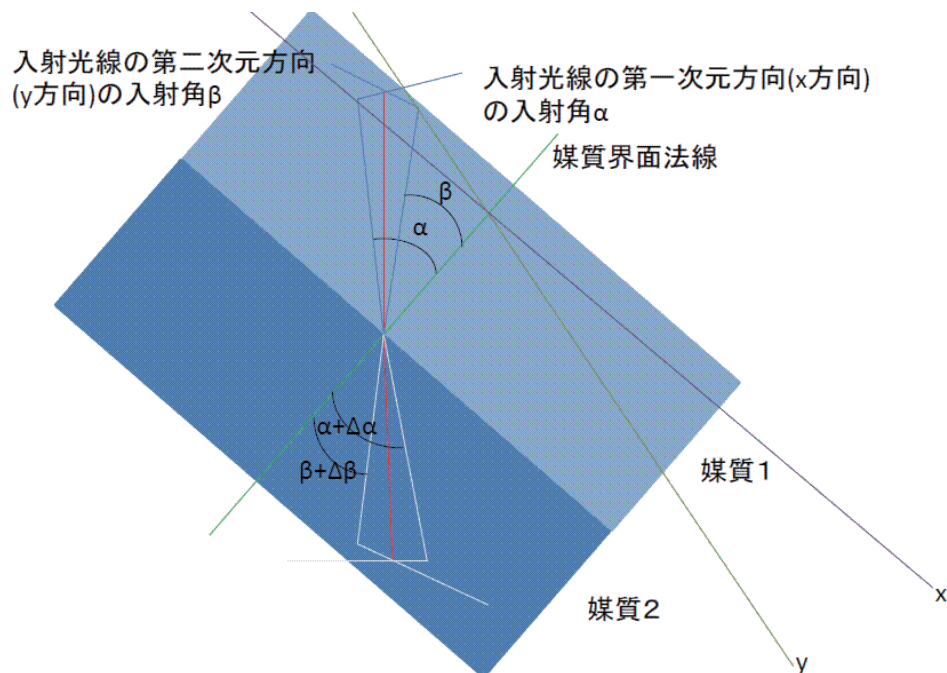


図 11.2 X 線の二次元屈折

屈折コントラスト撮影法における撮影物体での微小な屈折は、図 11.2 に示すように任意方向へ二次元的に曲げられる。従来の屈折コントラスト撮影法では、このうちの一次元方向の屈折しか観測できないが、前章までの説明の通り三波回折を用いることによって二次元方向を両方とも観測できることが期待できる。撮影対象物体によって曲げられる微小屈折角が二次元でとらえられるようになることで、MRI における縦緩和と横緩和の構造を持ち込むことができるようになる可能性があり、横断面でしか捉える事が出来ない従来 X 線 CT の MRI に対する弱

点を改善できることが考えられ、画像診断において新たな情報を提供することができるようになると期待される。

マンモグラフィーでの被ばく量低減の可能性

マンモグラフィーは、単純 X 線撮影である。現状の吸収 X 線撮影を用いたマンモグラフィーの撮影において、片側乳房について少なくとも二方向からの撮影を行っていることは、すでに述べた通りであるが、この撮影について従来法での屈折コントラスト撮影法を用いると、一方向について角度分析のため二度の撮影を行うので、被ばく回数は倍増する。そこで、屈折コントラスト撮影法に対して三波回折を用いることで、一度の撮影において第一回折波と第二回折波からの画像が同時に得られるため、同時に別々の方向にコントラストが得られることから、従来のようにロッキングカーブの半値でのコントラストを強調し解析するための二度の撮影を減らせる可能性があり、被ばく量の低減につなげることができることが期待できる。

第 12 章

まとめと今後の研究課題

12.1 本研究において明らかにできたこと

屈折コントラスト撮影法による撮影からの情報をより多く引き出すために三波回折を屈折コントラスト撮影法へ応用することを目的として研究を進めた。三波回折を用いて物体を撮影したことを想定したコンピュータシミュレーションを行うに当たっては、多波高木-Taupin 方程式を用いることで実現できた。そこでは、多波高木-Taupin 方程式の線形性を利用して、撮影対象物体の透過波の X 線振幅とアナライザーシリコン結晶での単一ビームによる三波回折ピンホールトポグラフでの X 線振幅をそれぞれ求めておき、それらをたたみこみ積分することで、三波回折屈折コントラスト撮影画像のコンピュータシミュレーション結果を得た。その際には、二次元データと二次元データのたたみこみ計算を行うために計算量が非常に大きくなってしまいが、MPI を用いたスーパーコンピュータでの並列計算に持ち込むことで、計算資源の活用と計算時間の短縮の効果を得ることができた。

三波回折を用いた屈折コントラスト撮影画像については、コンピュータシミュレーション結果からブラッグ角に合わせた場合での結果について画像が重なりを起こしてしまい、そのままでは撮影技術に用いることができないことがわかった。したがって、画像の重なりを起こさせない条件を探るために三波回折での X 線強度分布を知る必要が出てきた。従来技術の基礎である Ewald-Laue 理論で定義されている回折強度曲線 (ロッキングカーブ) と、本研究でのコンピュータシミュレーション計算で用いた高木-Taupin 理論との関係を調べた結果、フーリエ変換の関係にあることがわかったため、高木-Taupin 理論によってロッキングカーブを求める新しい方法として三波屈折コントラスト撮影画像をコンピュータシミュレーションする際に用いた高木-Taupin 理論の解であるピンホールトポグラフをフーリエ変換することで Ewald-Laue 理論から直接導出したロッキングカーブとまったく同じ結果を得られることを明らかにすることができた。

さらに、三波回折について第一回折波、第二回折波を入射偏光条件を σ と π に変えて別に

求めてみると、 σ 偏光入射での第一回折波は、 π 偏光入射での第二回折波と構造が酷似しており、 π 偏光入射での第一回折波は、 σ 偏光入射での第二回折波と構造が酷似していることがわかった。さらに、第一回折波と第二回折波では方向が異なるため、ロッキングカーブでもその方向が異なり、互いに交差する方向であることがわかった。

高木-Taupin 理論からロッキングカーブを求められるようになったため、三波回折を用いた屈折コントラスト撮影法を開発するために重なる起らない屈折コントラスト撮影を実現するための条件を探索することが容易になったと言える。乳がん診断に用いられるマンモグラフィは、乳房を平板で挟み伸ばすことで撮影を行うため、撮影対象を薄い状態に持ち込める。このため、屈折撮影技術の微小な角度変化にコントラストを付けることによる内部構造の描画について単純撮影対象として非常に適していると言え、マンモグラフィ撮影画像の改善においても屈折コントラスト撮影法は貢献できるが、そこに三波回折を持ち込むことによって、ロッキングカーブ指標での二度の撮影を減らすことができれば、被ばく量も撮影時の患者の負担も減らすことが可能になると言える。また、屈折コントラスト撮影法は CT へ拡張されているが、CT は、二次元横断画像を一元的に取得した情報を再合成することで撮影間隔により集め、複雑な内部構造を三次元描画することが可能な技術のため、微小な角度変化情報により複雑な形状の一次的情報を得ることに屈折コントラスト撮影法は適しており、それを全周域で再合成することで従来の吸収コントラスト法よりもすぐれた画像が得られる。これを三波回折へ拡張することで横断画像におけるコントラスト情報を二次元的に扱うことがきる可能性があり、屈折情報を二次元化することで MRI での縦緩和、横緩和の構造を持ち込むことが可能になれば、X 線 CT の MRI に対する弱点である任意断面形状の描画を実現できる可能性があることを指摘しておく。

12.2 今後引き続いて研究の必要な事項

三波回折を用いた屈折コントラスト撮影技術の開発のために、回折波での鮮明な画像を得ることが不可欠である。

三波回折での回折波は、ピンホールトポグラフでみるとボルマンファンの内側方向へ拡がりをもつ構造がみられる。この拡がりをもったピンホールトポグラフの X 線振幅を撮影対象物体の透過波の X 線振幅に対してたたみこみ計算を行って三波回折を用いた屈折コントラスト撮影画像をコンピュータシミュレーションしている。

三波回折を用いた屈折コントラスト撮影画像のコンピュータシミュレーション結果において画像が重なりを起こす原因が、回折波のボルマンファンの内側への拡がりにあると推察する。

本文で指摘した通り、エネルギーとシリコン結晶の回折結晶面の関係においてラウエ反射での実験結果から見ても回折波方向に先鋭度の高い回折波が得られる可能性がある。

実験で得られた先鋭度の高い回折波は、厚さ 1cm のシリコン結晶による対称ラウエ反射の

場合であったが、屈折コントラスト撮影法には、ブラッグ反射が適しているため、ブラッグ反射での先鋭度の高い回折波が必要であるといえる。ボルマンファンの内側に生じる構造は、結晶での多重回折による干渉からの影響と考えられるため、ブラッグ反射においてもアナライザー結晶を薄いものにすることを提案したい。

したがって、三波回折を用いた屈折コントラスト撮影画像を実現するために、入射 X 線のエネルギー、アナライザーでの結晶面の組み合わせおよびアナライザーに用いる結晶の厚みの条件を探索する必要がある。

謝辞

本研究を遂行するに当たって、東京大学大学院総合研究機構所属の沖津康平博士および統計数理研究所石黒真木名誉教授にご指導をいただきました。

特に沖津先生には共同研究者として X 線動力学理論と多波回折についてきめ細かく辛抱強く指導していただきました。本研究は、高輝度放射光を用いた屈折コントラスト撮影法における情報量増大を目指したものであり、そのために、X 線多波回折を利用した三波回折による屈折コントラスト撮影を中心に行ったため、X 線多波動力学理論は欠かすことのできないものでした。X 線動力学理論の研究の中で X 線多波回折は、世界的にも研究者が非常に少なく、現在国内では沖津先生だけが研究を行っている分野です。多波回折を屈折コントラスト撮影への応用を提案したものの、多波回折そのものの文献はほとんど無く、多波回折に関する研究を進めることは不可能に思われましたが、本研究を進めることができたのは、沖津先生の指導を受けることができたために尽きます。ここに深謝し、重ねて厚くお礼を申し上げます。

石黒先生には指導教員としてゼミを通じ、研究の進展について常に心配りをいただいております。また、研究を進めるにあたっての問題点に重要で適切な助言を肝要な場面でいつもいただきながら進めることができました。さらに、研究環境や研究支援についても強力なバックアップをしていただきました。誠にありがとうございました。

さらに、田村義保教授には副指導教員として見守っていただき、本年 4 月より指導教員として最終指導を引き受けていただいております。本論文を適切にまとめられるよう助言もいただき、感謝いたしております。

また、菊田惺志東京大学名誉教授には、研究内容の中核部分に関して貴重な助言をいただいております。高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所杉山弘助教には多波研究についての相談を受けていただき沖津康平博士をご紹介いただきました。予備審査を通じて統計数理研究所三分一史和准教授には有益なアドバイスをしていただきました。さらに、審査においては統計数理研究所瀧澤由美准教授に全般的な調整をしていただいております。それぞれにありがたく、感謝いたしております。

総合研究大学院大学先導科学研究科の渡辺正勝教授には入学前から総合研究大学院大学での研究について相談に乗っていただくなど適切なアドバイスをしていただいております。ま

た、葉山本部での研究を許可していただき、私自身にとって最高の研究環境を得ることができました。ありがとうございました。さらに、実際に受け入れていただきました佐々木顕教授にも御礼申し上げます。

本研究では、その遂行に関してスーパーコンピュータを多用しております。本文でも示した通りスーパーコンピュータは、統計数理研究所南麻布庁舎時代は ismxc, ismsr, ismsx, ismaltix を使っており、立川移転後は ismrx, isment を使っており、また、東京大学物性研究所 sumire を併用させていただいておりました。これらのスーパーコンピュータをはじめとするコンピュータやネットワークを利用するにあたり、統計数理研究所統計科学技術センター計算資源室(蛭田様、田中様)・ネットワーク室(早坂様、中村様)には様々な相談を持ち込み、解決の支援をいただきました。さらに、本研究で用いた文献資料は、統計数理研究所統計科学技術センター図書室、総合研究大学院大学附属図書館のほか、その多くを神奈川県立川崎図書館および横浜市立大学医学情報センターに依存しております。このような多方面に研究資源の提供をいただけたことに感謝いたしております。

総合研究大学院大学は、研究所の集合体であり、統計数理研究所はその一部ですが、総合研究大学院大学本部とこれら基盤機関の相互の研究支援によって本研究はその端緒につくことができました。また、統計数理研究所では、スーパーコンピュータの研究利用を自由に認めていただき、好きなだけ使うことができました。さらに、総合研究大学院大学および統計数理研究所の研究支援のもと理化学研究所播磨研究所での SPring-8 実験を行うことができるなど、格別の研究環境の下、本研究において様々な支援を受けることができました。このような多くの支援を受けて本研究が進められたことに感謝いたしております。

励ましながら支えてくれた祖母田中早穂子と泉下の母へも————。

参考文献

- [1] 厚生労働省平成 20 年人口動態統計月報年計（概数）の概況
<http://www.mhlw.go.jp/toukei/saikin/hw/jinkou/geppo/nengai08/>
- [2] 国立がん研究センターがん対策情報センター統計グラフデータベース
<http://ganjoho.jp/professional/statistics/>
- [3] 乳がん診療二頁の秘訣 光山昌珠 編集 金原出版 横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [4] これからの乳がん診療 2008-2009 園尾博司監修 金原出版 横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [5] 科学的根拠に基づく乳がん診療ガイドライン 4 検診・診断 日本乳がん学会編 金原出版 横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [6] Kanemura S., Tuji I., Ohuchi N., Takei H., Yokoe T., Koibuchi Y., Ohnuki K., Fukao A., Satomi S. and Hisamichi S., Jpn. J. Cancer Res.1999;90(6):607-613
- [7] Kuroishi T., Hirose K., Suzuki T. and Tominaga S. Breast Cancer 2000;7(1):1-8
- [8] 最新エビデンスに基づく乳がん診療ガイド 安達洋祐著 金原出版 横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [9] がん治療と化学療法 有森和彦 監修 じほう 横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [10] 臨床・病理 乳がん取り扱い規約 第 15 版 2004 年 6 月 日本乳がん学会編 金原出版 横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [11] 乳がん診療ガイドラインの解説 日本乳がん学会 編 金原出版 横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [12] 画像診断学 中村仁信 編集 南山堂 横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [13] 画像診断シークレット第二版 E.Scott Pretorius, Jeffrey A. Solomon 著 大友邦 南学 監訳 横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [14] A.M.Cormack., J. Appl. Phys. 34, No.9 2722-2727 (1963).
- [15] A.M.Cormack., J. Appl. Phys. 35, No.10 2908-2913 (1964).

- [16] 画像診断 FIRST AID 山下康行 編集 メディカル・サイエンス・インターナショナル
横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [17] 臨床画像 SPECIAL CT と MRI の使い分け-効率的画像診断の strategy メジカルビュー
社 横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [18] 必携!がん診療のための PET/CT 日下部きよ子 編集 金原出版 横浜市立大学医学情報セ
ンター蔵書
- [19] 別冊医学のあゆみ乳腺疾患 伊藤良則 戸井雅和 編集 医歯薬出版 横浜市立大学医学情報
センター蔵書
- [20] 臨床画像 4 月増刊号 最新分類に基づく画像による悪性腫瘍の病期診断 2010 Vol.26 2010
メジカルビュー社
- [21] 乳がんテキスト 野口昌邦 著 南江堂 横浜市立大学医学情報センター蔵書
- [22] 乳腺画像診断法 X 線・超音波と病理 松江寛人 廣田映五 編著 金原出版 横浜市立大学医
学情報センター蔵書
- [23] Medical Tribune Vol.43, No.19 2010 年 5 月 13 日 メディカルトリビューン
- [24] SPring-8 ホームページ

[http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/
publications/news/no03_99/](http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/publications/news/no03_99/)
- [25] 岩波講座物理の世界 シンクロトロン放射光 上坪宏道 太田俊明 共著 岩波書店 統計数理
研究所図書室蔵書
- [26] Maksimenko Anton 総研大甲第 822 号 先端科学研究科光科学専攻博士論文 CT Recon-
struction on the Base of the Refraction Contrast Theory, Experiment and Results
- [27] 表面科学シリーズ 3 表面の構造解析 八木克道 編 丸善 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [28] X 線回折・散乱技術上 菊田惺志 著 東京大学出版会 総合研究大学院大学附属図書館蔵書
- [29] 化学者のための群論 L.H.Hall 著 渡辺啓 民永徹 共訳 廣川書店 神奈川県立川崎図書館
蔵書
- [30] X 線結晶学の基礎 平林真 岩崎博 共訳 丸善 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [31] 化学・薬学のための X 線解析入門 平山令明 著 丸善 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [32] 物性物理学のための群論 G.Burns 著 中村輝太郎 澤田昭勝 共訳 培風館 神奈川県立川崎
図書館蔵書
- [33] 結晶・表面の基礎物性 黒川司 著 日刊工業新聞社 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [34] 材料科学者のための固体物理学入門 志賀正幸 著 内田老鶴圃 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [35] サイエнтиフィックアメリカン編レーザーと光 3 見えない光 藤岡知夫 訳 共立出版 神
奈川県立川崎図書館蔵書
- [36] SPring-8 ホームページ

http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/press_release/2007/070518_fig/fig2.html

- [37] 回折と散乱 加藤範夫 著 朝倉書店 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [38] X線結晶学 上 仁田勇 監修 丸善 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [39] X線結晶学 下 仁田勇 監修 丸善 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [40] X線の回折 三宅静雄 著 朝倉書店 横浜国立大学附属図書館蔵書
- [41] キッテル固体物理学入門 上 宇野良清 津屋昇 森田章 山下次郎 共訳 丸善
- [42] 回折結晶学と材料科学 東北大学金属材料研究所小川研究室成果刊行会編 アグネ技術センター 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [43] X線結晶構造解析 大橋裕二 著 裳華房 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [44] 表面・界面の物理 曽根純一 編 丸善 総合研究大学院大学附属図書館蔵書
- [45] X線結晶構造解析 安岡則武 著 化学同人 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [46] 生命系のためのX線解析入門 D.Dlow 著 平山令明 訳 化学同人 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [47] 大学演習電磁気学 霜田光一 近角聡信 西川哲司 平川浩正 共著 裳華房 総合研究大学院大学附属図書館蔵書
- [48] 物理のための数学 和達三樹 著 岩波書店
- [49] X線回折技術 高良和武 菊田惺志 共著 東京大学出版会 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [50] 表面科学シリーズ 1 表面科学入門 小間篤 八木克道 塚田まさる 青野正和 編著 丸善 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [51] 高木佐知夫 日本結晶学会誌 13 248 (1971) 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [52] X線回折理論と結晶構造解析の系譜 沖津康平 著 X線分析の進歩第36集 (2005)
- [53] Thorkildsen G., Acta Cryst. A43, 361-369 (1987).
- [54] Larsen H. B. and Thorkildsen G., Acta Cryst. A54, 129-136 (1998).
- [55] Okitsu K., Acta Cryst. A59, 235-244 (2003).
- [56] Okitsu K., Imai Y., Ueki Y. and Yoda Y., Acta Cryst. A59, 311-316 (2003).
- [57] SPring-8 ホームページ

http://www.spring8.or.jp/ja/about_us/whats_sr/sp8_features/publicfolder_view

- [58] 利用研究促進部門 構造物性2グループ 依田芳卓 SPring-8 ホームページ

http://www.spring8.or.jp/pdf/ja/ann_rep/07/066.pdf

- [59] SPring-8 ホームページ

http://www.spring8.or.jp/ja/facilities/bl/map/publicfolder_view

- [60] 並列プログラミング入門 MPI 版 青山幸也 著 理化学研究所
- [61] チューニング技法入門 青山幸也 著 理化学研究所
- [62] 実践 MPI-2 ウィリアムグロップ 他 著 畑崎隆雄 訳 ピアソンエデュケーションジャパン
- [63] 並列計算法入門 日本計算工学会編 丸善
- [64] Using MPI, William Gropp, Ewing Lusk, and Anthony Skjellum, The MIT Press
- [65] MPI-The Complete Reference Volume 1 The MPI Core second edition, Marc Snir, Steve Otto, Steven Huss-Lederman, David Walker, and Jack Dongarra, The MIT Press
- [66] MPI-The Complete Reference Volume 2 The MPI Extensions, William Gropp, Steven Huss-Lederman, Andrew Lumsdaine, Ewing Lusk, Bill Nitzberg, William Saphir, and Marc Snir, The MIT Press
- [67] Ishiwata G., Okitsu K. and Ishiguro M., Accepted to Acta Cryst. A (2010).
- [68] Ewald P. P., Ann. Phys. 4. Folge, 54, 519-597 (1917).
- [69] Laue M. v., Ergeb. Exakten Naturwiss, 10, 133-158 (1931).
- [70] Ewald P. P. and Heno Y., Acta Cryst. A24, 5-15 (1968).
- [71] Heno Y. and Ewald P. P., Acta Cryst. A24, 16-42 (1968).
- [72] X 線回折と構造評価 加藤範夫 著 朝倉書店 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [73] Kato N., Acta Cryst. 14, 526-532 (1961a).
- [74] Kato N., Acta Cryst. 14, 627-636 (1961b).
- [75] Kato N., J. Appl. Phys. 39, 2225-2230 (1968a).
- [76] Kato N., J. Appl. Phys. 39, 2231-2237 (1968b).
- [77] Heyroth F., Zellner J., Hoche H.R., Eisenschmidt C., Weckert E. and Drakopoulos M., J. Phys. D Appl. Phys. 34, A151-A157 (2001).
- [78] Colella R., Comments Cond. Mat. Phys. 17, 175-198 (1995a).
- [79] Colella R., Comments Cond. Mat. Phys. 17, 199-215 (1995b).
- [80] Weckert E. and Hummer K., Acta Cryst. A53, 108-143 (1997).
- [81] Weckert E. and Hummer K., Cryst. Res. Technol. 33, 653-678 (1998).
- [82] Shen Q. and Wang, J., Acta Cryst. D, 59, 809-814 (2003).
- [83] Chang S. L., X-Ray Multiple-Wave Diffraction, Theory and Application. Springer(2004).
- [84] Takagi S., Acta Cryst. 15, 1311-1312 (1962).
- [85] Takagi S., J. Phys. Soc. Jpn. 26, 1239-1253 (1969).
- [86] Taupin D., Bull. Soc. Fr. Mineral. Cristallogr. 87, 469-511 (1964).

-
- [87] Authier A., Dynamical Theory of X-Ray Diffraction, Revised Edition. Oxford University Press(2004).
- [88] Authier A. and Simon D., Acta Cryst. A24, 517-526 (1968).
- [89] Okitsu K., Yoda Y., Imai Y., Ueji Y., Urano Y. and Zhang X. W., Acta Cryst. A62, 237-247 (2006).
- [90] 日本生体医工学会編画像情報処理 (1) 鳥脇純一郎 編著 コロナ社
- [91] 日本生体医工学会編画像情報処理 (2) 鳥脇純一郎 編著 コロナ社
- [92] 医用画像に携わる方へここから始まる医用デジタル画像の世界 船水憲一 著 日本放射線技師会出版会
- [93] よくわかる医用画像工学 石田隆行 偏 オーム社
- [94] 医用画像工学 岡部哲夫 藤田広志 編集 医歯薬出版
- [95] 基礎放射線画像工学 内田勝 監修 オーム社
- [96] C 言語による画像再構成の基礎 橋本雄幸 篠原広行 共著 医療科学社
- [97] 基礎からわかる画像処理 田中成典 監修 工学社
- [98] 確率モデルによる画像処理技術入門 田中和之 著 森北出版
- [99] 先端放射医療技術と計測 電気学会放射波の医療応用と計測技術調査専門委員会 編 コロナ社
- [100] NMR イメージング 巨瀬勝美 著 共立出版 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [101] これから学ぶ人のための NMR 医学 湯浅龍彦 監訳 西村書店 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [102] 高速フーリエ変換のアルゴリズム Henri J. Nussbaumer 著 佐川雅彦 本間仁志 共訳 科学技術出版社 神奈川県立川崎図書館蔵書
- [103] 行列計算パッケージ LAPACK の手引き 小国力 訳 丸善 統計数理研究所図書室蔵書

付録 A

屈折コントラスト撮影法とはどのようなものか

屈折コントラスト撮影法について Anton S. Maksimenko 博士の博士論文第二章から、その概要について以下に示す。

Anton S. Maksimenko 博士の論文による屈折コントラスト撮影法の理論の概要 Anton S. Maksimenko 博士による CT での撮影を想定した屈折コントラスト撮影法は、従来からある屈折コントラスト撮影法での撮影技術から撮影対象物体での X 線の屈折を抽出する方法である。図 A.1 に示すように通過経路によって異なる微小変化量 $\Delta\theta_x$ をオブジェクトがない場合の

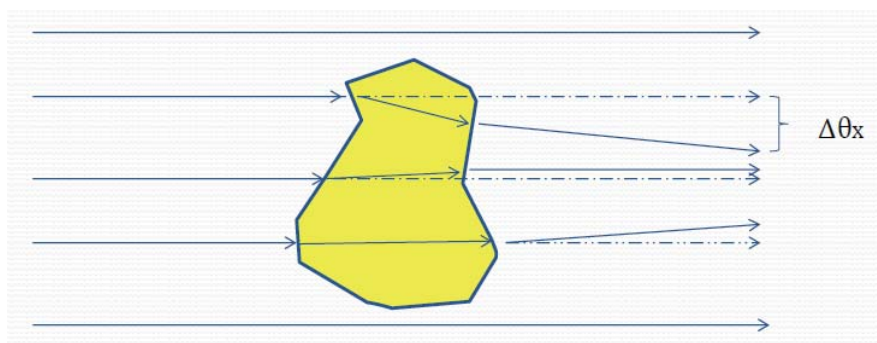


図 A.1 屈折コントラスト撮影法で抽出するコントラスト

X 線の通過経路と比べてオブジェクトを通過した X 線はどのくらい曲げられたかを測定する。

屈折コントラスト撮影法における撮影対象物体を透過した X 線についてアナライザーと呼ばれるシリコン結晶により角度分析し、 $\Delta\theta_x$ の抽出を行っている。図 A.2 に示す配置によって物体の撮影は行われ、アナライザーでの回折波について図 A.3 に示すアナライザーのシリコン結晶でのロッキングカーブを用いることで屈折コントラストを抽出している。図 A.3 は、

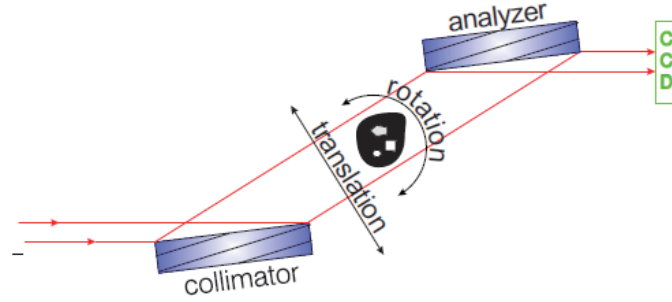


図 A.2 撮影物体とアナライザーおよび CCD カメラの配置 (Anton S. Maksimenko 博士論文²⁶⁾ から引用)

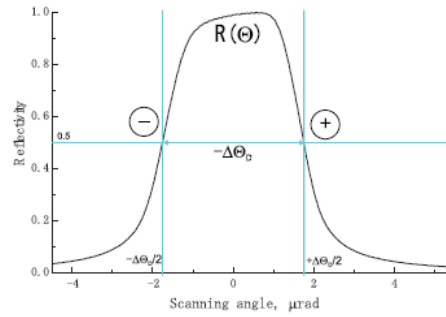


図 A.3 アナライザーシリコン結晶のロッキングカーブと + と - での撮影ポイント (Anton S. Maksimenko 博士論文²⁶⁾ から引用)

アナライザーのシリコン結晶における回折強度曲線 (ロッキングカーブ) である。図の - および + の点においてそれぞれ撮影を行う。

アナライザーにおける回折波の強度は、

$$I_B = I_R R(\Theta_B + \Theta) \quad (\text{A.1})$$

で表す (Anton S. Maksimenko 博士論文、式 (2.10))。ここで、 $R(\Theta)$ は、アナライザーでの反射率、 I_R は、アナライザーに入射する物体を透過したことによる屈折および物体での吸収や消衰などの減衰を反映した入射波の強度である。屈折コントラスト撮影法では、オブジェクトを通過することによる微小なずれ角 $\Delta\Theta_X$ を観測するため、ロッキングカーブの半値のところで測定を行う。ジャストブラッグ角での完全回折波の反射強度を生じるロッキングカーブでの幅を $R(\Delta\Theta_D)$ として、

$$I_B = I_R R\left(\Theta_B \pm \frac{\Delta\Theta_D}{2} + \Delta\Theta_X\right) \quad (\text{A.2})$$

である回折強度 I_B を測定することで $\Delta\Theta_X$ の影響を抽出する。

ロッキングカーブの - での角度を Θ_- 、+ での角度を Θ_+ として、それぞれのアナライザー

での回折強度は、二項までのテイラー展開を用いて、

$$I_- = I_R \left(R(\Theta_-) + \frac{dR}{d\Theta}(\Theta_-) \Delta\Theta_X \right) \quad (\text{A.3})$$

$$I_+ = I_R \left(R(\Theta_+) + \frac{dR}{d\Theta}(\Theta_+) \Delta\Theta_X \right) \quad (\text{A.4})$$

したがって、求める $\Delta\Theta_X$ は、次式で求められる (Anton S. Maksimenko 博士論文、式 (2.16))。

$$\Delta\Theta_X = \frac{I_+ R(\Theta_-) - I_- R(\Theta_+)}{I_- \frac{dR}{d\Theta}(\Theta_+) - I_+ \frac{dR}{d\Theta}(\Theta_-)} \quad (\text{A.5})$$

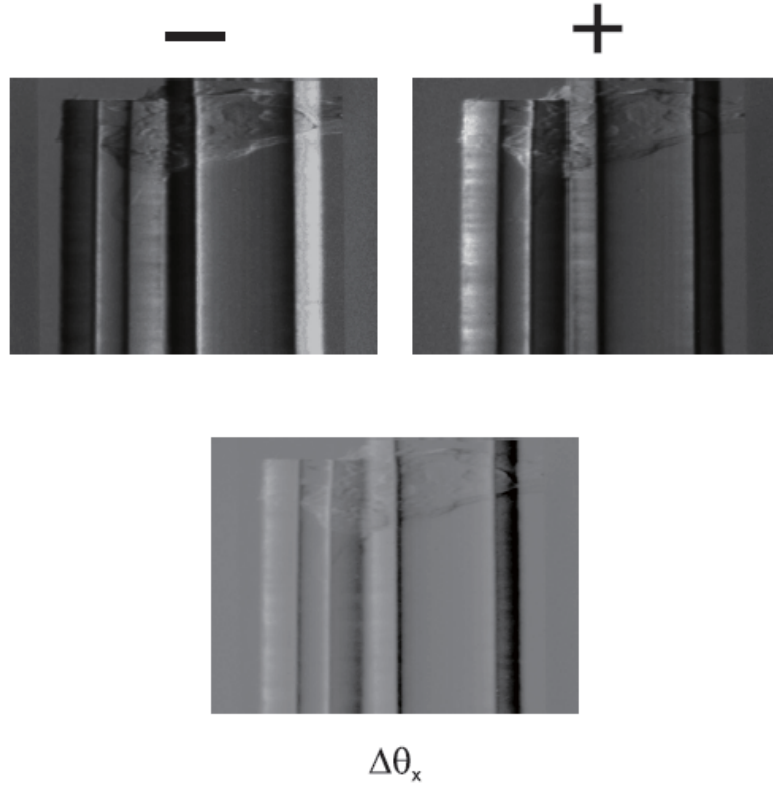


図 A.4 実際の撮影画像と $\Delta\Theta_X$ (Anton S. Maksimenko 博士論文²⁶⁾ から引用)

図 A.4 は、Anton S. Maksimenko 博士の博士論文に示されているロッキングカーブ + および - での撮影画像と抽出した $\Delta\Theta_X$ のコントラストである。

Anton S. Maksimenko 博士による屈折コントラスト撮影法は、コンピュータトモグラフィー (CT) 撮影技術の改良を目指したものである。CT では、各撮影において一次元方向のデータを集め、それを再合成する技術であり、全周囲方向からの撮影が必要であり、全周囲を m 等分した撮影の場合、この m 枚の画像それぞれの撮影について、屈折コントラストを用いてい

るため、 m 枚それぞれにロッキングカーブの $+$ および $-$ での撮影が必要であり、 $2m$ 回の撮影が必要であり、 $2m$ 回の被ばくが生じる。

× 線強度振幅の畳み込み計算プログラム

なお、並列計算を行うに当たり、次の区切り線でプログラムを分割して記述してある。

すべての CPU で同時に実行する部分

No.0 の CPU だけが計算を行う部分（ファイルの書き出しなど）

No. 0 の CPU 以外の CPU が同時に計算を行う部分

[illegible]

```

data
& HxMax, HyMax, HzMax / 0, +8, +8 /
LambdaMeter = 12.397639D0 / EnergyKeV * 1.0D-10
KVectorLengthMeterInv = 1.0D0 / LambdaMeter
ARecipMeterInv = 1.0D0 / ALatticeMeter
HMaxLength = ARecipMeterInv * DSqrt(Real(
&          HxMax**2 + HyMax**2 + HzMax**2, 8))
ThetaBMaxRad = DASin(HMaxLength / 2.0D0
&          * 2.0D0 / DSqrt(3.0D0) /
&          KVectorLengthMeterInv )
GcosThetaBMax = Dcos(ThetaBMaxRad)
ZStepHeightMeter = ThicknessOfObjectRegionMeter
&          / ZMaxNumberObject
XStepLengthMeter = ZStepHeightMeter * DTan(ThetaBMaxRad)
&          / 2.0D0 * DSqrt(3.0D0) * 2.0D0
YStepLengthMeter = XStepLengthMeter * DSqrt(3.0D0) / 2.0D0
&          * GcosThetaBMax
XMaxNumberObject = FieldSize / XStepLengthMeter
YMaxNumberObject = FieldSize / YStepLengthMeter
YStep = IDInt( Real(YMaxNumberObject, 8)
&          / Real(NumberOfChildCPU, 8) )
YStepMod = Mod(YMaxNumberObject, NumberOfChildCPU)
if (myrank .le. YStepMod) then
    YMin = myrank
    YMax = YMin + YStep * NumberOfChildCPU
Else
    YMin = myrank
    YMax = YMin + ( YStep - 1 ) * NumberOfChildCPU
end if
ZInt = ZMaxNumberDash
Pi2I = - 2.0D0 * Pi * ImagUnit
DThetaXarcsec = 0.01092685874D0
DThetaXrad = DThetaXarcsec / 3600.0D0 * Pi / 180
DThetaYarcsec = 0.01049685874D0
DThetaYrad = DThetaYarcsec / 3600.0D0 * Pi / 180

```

[illegible]


```

        if (myrank .Ne. 0) then
C-----ObjectData-read-----
        do IISTep = 1, NumberOfChildCPU
            GMod0 = 0
            GMod1 = IISTep
            CrystalSurfaceFile(IISTep)
&      = 'SpCrystalSurface00_10mmPole_'
&      // X3Character(GMod0)
&      // 'deg_'
&      // X3Character(GMod1)
&      // '.dat'
        end do
        open (2, Action = 'read',
&           Form = 'Unformatted',
&           File = CrystalSurfaceFile(myrank),
&           Status = 'Old')
        do 55 YConvStep = YMin, YMax, NumberOfChildCPU
            Ry = YStepLengthMeter * YConvStep
            DERY = CDEXP(Pi2I * KVectorLengthMeterInv *
&           DThetaYrad * Ry)
            XMin = IDInt(- Real(YConvStep, 8) / 2.0D0)
            XMax = XMin + XMaxNumberObject - 1
            ALLOCATE(DNew(XMin :
&           XMin + XMaxNumberObject - 1))
        do 33 XConvStep = XMin, XMax
            Rx = XStepLengthMeter * XConvStep +
&           YStepLengthMeter * 0.50D0 * YConvStep
            DERx = CDEXP(Pi2I * KVectorLengthMeterInv *
&           DThetaXrad * Rx)
            read (2)
&           DNew(XConvStep)
            DNew(XConvStep) = DNew(XConvStep) * DERY * DERx
        do YIntStep = 0, ZInt
            XIntMin(0) = 0
            XIntMax(0) = ZInt - YIntStep

```


[illegible]

[illegible]

[illegible]

```

DERy = CDEXP(Pi2I * KVectorLengthMeterInv *
&              DThetaYrad * Ry)
      XMin = IDInt(- Real(YConvStep, 8) / 2.0D0)
      XMax = XMin + XMaxNumberObject - 1
      ALLOCATE(DNew(XMin :
&              XMin + XMaxNumberObject - 1))
do 59 XConvStep = XMin, XMax
Rx = XStepLengthMeter * XConvStep +
&    YStepLengthMeter * 0.50D0 * YConvStep
DERx = CDEXP(Pi2I * KVectorLengthMeterInv *
&              DThetaXrad * Rx)
      read (2)
&      DNew(XConvStep)
      DNew(XConvStep) = DNew(XConvStep) * DERy * DERx
do YIntStep = 0, ZInt
  XIntMin(0) = 0
  XIntMax(0) = ZInt - YIntStep
  do XIntStep = XIntMin(0), XIntMax(0)
    DConvolutionSolution(
&      XConvStep + XIntStep,
&      YConvStep + YIntStep
&    ) =
&    DConvolutionSolution(
&      XConvStep + XIntStep,
&      YConvStep + YIntStep
&    ) +
&    DBmpCal(
&      XIntStep,
&      YIntStep
&    ) *
&    DNew(XConvStep)
  end do
end do
59 continue
DEALLOCATE(DNew)
!XConvStep-routine

```

[illegible]


```

&          XwriteStep,
&          YwriteStep
&          ) =
&          CDABS(DCS)**2
77      continue
78      continue
        close (11)
        open (12, Action = 'read',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'CrystalSurfaceConvoSolution1.dat',
&          Status = 'Old')
        do 87 YwriteStep = 1, YMaxNumberObject + ZMaxNumberDash
            XwriteMin = IDInt(- Real(YwriteStep, 8) / 2.0D0)
            XwriteMax = XwriteMin + XMaxNumberObject
&            + ZMaxNumberDash - 1
        do 88 XwriteStep = XwriteMin, XwriteMax
            read (12) DCS
                DCDABSSolution(
&          XwriteStep,
&          YwriteStep
&          ) =
&          DCDABSSolution(
&          XwriteStep,
&          YwriteStep
&          ) +
&          CDABS(DCS)**2
88      continue
87      continue
        close (12)

```

```

C-----
        open (9, Action = 'write',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'CrystalSurfaceConvoSolution.dat',
&          Status = 'New')
C-----

```


[illegible]

付録 C

高木-Taupin 理論によるロッキングカーブを求めるプログラム

C.1 二波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブを求めるプログラム

セクショントポグラフのフーリエ変換プログラム フーリエ変換には高速フーリエ変換を用いており、高速フーリエ変換は、統計数理研究所スーパーコンピュータ HITACHI-SR11000 に装備されている HITACHI matrix/mpp および Linux パソコン上に netlib からインストールした fftpack を用いた。一次元高速フーリエ変換サブルーチンライブラリーの定義式¹⁰²⁾：

$$f_j = \sum_{k=0}^{N-1} x_k \exp\left(-\frac{2\pi j k}{N} i\right) \quad (j = 0, \dots, N-1) \quad (\text{C.1})$$

```

Implicit none
C=====
C
C              Initialize
C
C      Integer      RW, I, J, NJN, M, NH,
C      &             NFW, NF, N, IOPT(2), IERR1, IERR2
C      Real(8)      Pi, Readx, ThetaS, ThetaP,
C      &             DataXS(1:2048), DataXP(1:2048),
C      &             K, Lambda, DeltaK, LS, LP, KI(-1024:1024),
C      &             ASCK(-1024:1024)
C      Complex(8)   Im,
```

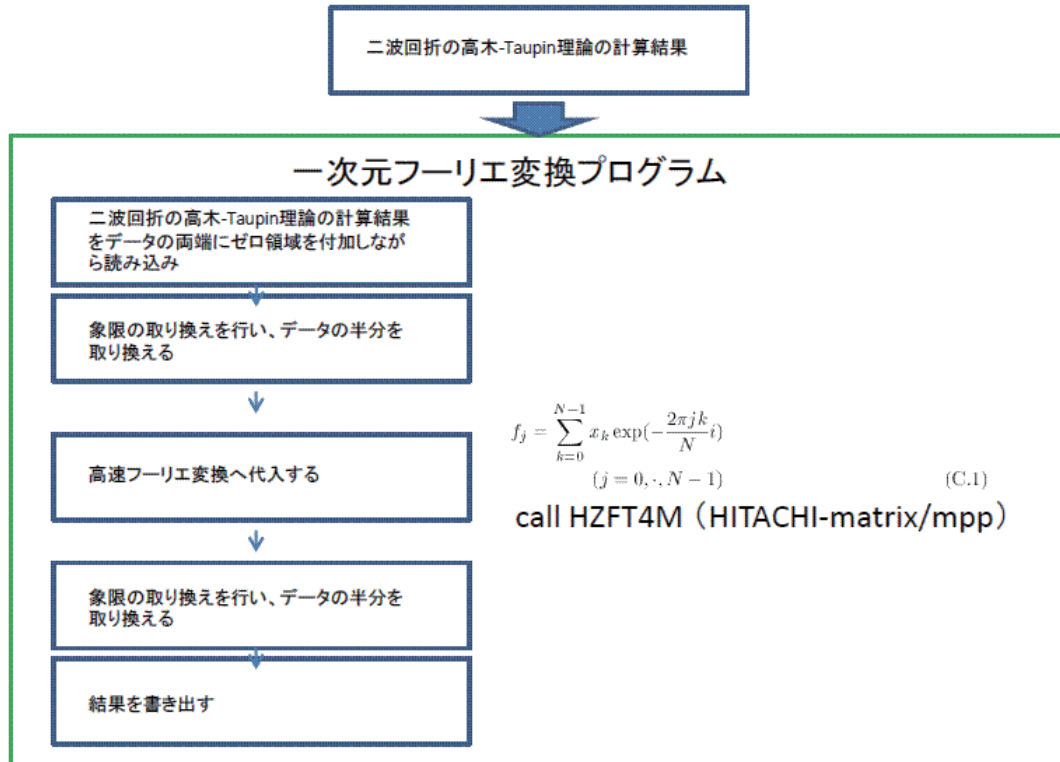


図 C.1 一次元フーリエ変換に関する計算手続き

```

&          DHS(1:2048), DHP(1:2048),
&          DJS(1:2048), DJP(1:2048),
&          DKS(-1024:1024), DKP(-1024:1024),
&          WK1(12289), WK2(2048), IWK(2052)
Character*25 Fname1, Fname2

C=====
C          Parameter
      Parameter  (Pi = 3.1415926535897932385D0)
      Parameter  (Im = (0.0D0, 1.0D0))
C=====
C          File Open
      Fname1 = 'SS44020S.DAT'
      Fname2 = 'SS44020P.DAT'
      open (1, File = Fname1, Status = 'Old')
      open (2, File = Fname2, Status = 'Old')
C=====

```

```

C                               Main Routine

      NJN = 2048
      NH = NJN / 2
C=====
C                               File Read

      do 10 RW = 1, NJN
        M = MOD(RW + NH, NJN)
        read (1, 11) DataXS(RW), DHS(M + 1)
        read (2, 11) DataXP(RW), DHP(M + 1)
11      Format (3E19.9)
10      continue
C=====

      LS = (DataXS(NJN) - DataXS(1)) / Real(NJN, 8)
      LP = (DataXP(NJN) - DataXP(1)) / Real(NJN, 8)
      Lambda = 1.0331D-10
      K = 1.0D0 / Lambda
      DeltaK = 1.0D0 / (LS * Real(NJN,8))
C=====
C                               Write File Open

      open (3, File = 'DHSFTK.dat', Status = 'New')
      open (4, File = 'DHPFTK.dat', Status = 'New')
C=====
C                               Chane DHS,DHP

      do 20 I = - NH, NH -1
        KI(I) = I * DeltaK
20      continue
C                               FFT

      NFW = 5
      NF = 11
      N = NJN
      IOPT(1) = 1
      IOPT(2) = 1

      call HZFT4M(DHS, N, NF, IOPT, DJS, WK1, WK2, IWK, IERR1)

```

```

      IOPT(2) = 2
      call HZFT4M(DHP, N, NF, IOPT, DJP, WK1, WK2, IWK, IERR2)

      open (10, File = 'IERR.txt', status = 'New')
      write (10, *) IERR1, IERR2
      close(10)
      do 40 J = 0, NJN - 1
          M = MOD(J + NH, NJN)
          DHS(J) = DJS(M + 1)
          DHP(J) = DJP(M + 1)
40    continue
      do 30 I = - NH, NH - 1
          DKS(I) = DHS(I + NH)
          DKP(I) = DHP(I + NH)
30    continue
C          Write
      do RW = - NH, NH - 1
          ASCK(RW) = KI(RW) / K / PI * 180.0D0 * 3600.0D0
          write (3, 12) ASCK(RW), CDABS(DKS(RW))**2
          write (4, 12) ASCK(RW), CDABS(DKP(RW))**2
      end do
12    Format (E13.6, 3X, E19.9)
      close(1)
      close(2)
      close(3)
      close(4)
      stop
      end

```

C.2 三波回折の場合の高木-Taupin 理論によるロッキングカーブを求めるプログラム

フーリエ変換の部分 フーリエ変換には高速フーリエ変換を用いており、高速フーリエ変換は、統計数理研究所スーパーコンピュータ Fujitsu PRIMERGY RX200S5 に装備されている

Fujitsu-SSL2 を用いた。二次元高速フーリエ変換サブルーチンライブラリーの定義式¹⁰²⁾：

$$g(k_x, k_y) = \sum_{j_x=0}^{N_x-1} \sum_{j_y=0}^{N_y-1} f(j_x, j_y) \exp\left(-\frac{2\pi k_x j_x}{N_x} i\right) \exp\left(-\frac{2\pi k_y j_y}{N_y} i\right) \quad (k_x = 0, \cdot, N_x - 1 : k_y = 0, \cdot, N_y - 1) \quad (C.2)$$

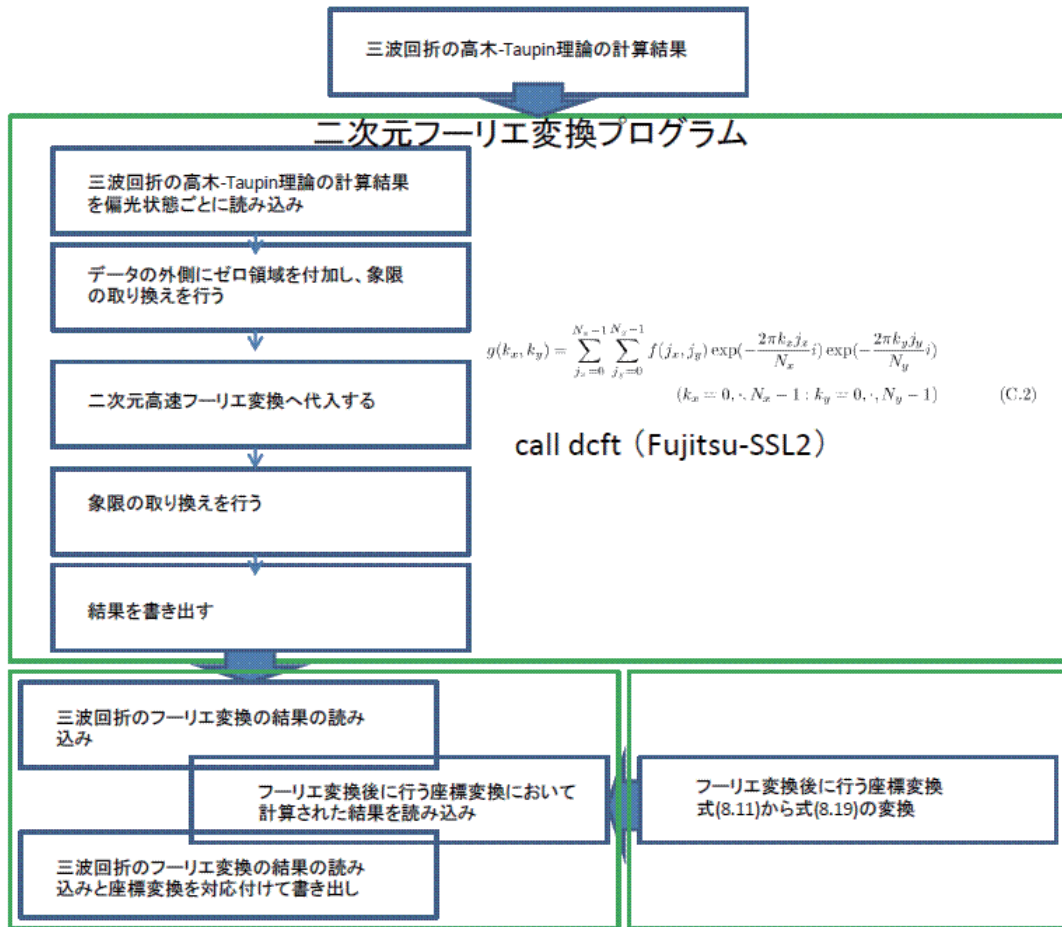


図 C.2 二次元フーリエ変換に関する計算手続き

```
implicit none
integer
&      NumberOfWaves, DefoltData,
&      ISuffix, KSuffix, SuffixAppend,
&      DuoMin, DuoMax, ZeroMax, AllData,
&      ADPower,
&      HalfData, HalfNumb,
&      XInt, YInt, XIntMin, XIntMax,
```

```

&          XIntNew, YIntNew,
&          XNextInt, YNextInt, Ki, Kj,
&          ND(2), ISN, ICON
integer, ALLOCATABLE::
&          PSuffixNatural( : , : )
real (8), ALLOCATABLE::
&          EAxis1( : , : ),
&          EAxis2( : , : ),
&          FAxis1( : , : ),
&          FAxis2( : , : ),
&          EAxis3( : , : ),
&          EAxis4( : , : ),
&          FAxis3( : , : ),
&          FAxis4( : , : ),
&          EAxis5( : , : ),
&          EAxis6( : , : ),
&          FAxis5( : , : ),
&          FAxis6( : , : )
complex (8), ALLOCATABLE::
&          AmplitudeNew( : , : , : ),
&          AmplitudeValue( : , : ),
&          DAxis1( : , : ),
&          DAxis2( : , : ),
&          DAxis3( : , : ),
&          DAxis4( : , : ),
&          DAxis5( : , : ),
&          DAxis6( : , : ),
&          FChange1( : , : ),
&          FChange2( : , : ),
&          FChange3( : , : ),
&          FChange4( : , : ),
&          FChange5( : , : ),
&          FChange6( : , : )
character
&          ReadingFile(0 : 0)*50

```


[illegible]

```

&          Form = 'Unformatted',
&          Status = 'Old'
&      )
      ALLOCATE(
&          AmplitudeNew
&          (1 : SuffixAppend, DuoMin : DuoMax, DuoMin : DuoMax),
&          AmplitudeValue(0 : SuffixAppend - 1, 0 : 1)
&      )
C+++++
C-----Syoki format-----
      do 366 YIntNew = DuoMin, DuoMax
      do 367 XIntNew = DuoMin, DuoMax
      do 368 KSuffix = 0, 1
      do 369 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
          AmplitudeNew(
&              PSuffixNatural(ISuffix, KSuffix),
&              XIntNew, YIntNew
&          ) =
&              (0.0D0, 0.0D0)
369      continue
368      continue
367      continue
366      continue
C+++++
C-----Data Dainyu-----
      do 372 YInt = 0, DefoltData
          XIntMin = 0
          XIntMax = DefoltData - YInt
      do 373 XInt = XIntMin, XIntMax
      do 374 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
      do 375 KSuffix = 0, 1
          read (50)
&          AmplitudeValue(ISuffix, KSuffix)
&          AmplitudeNew(
&              PSuffixNatural(ISuffix, KSuffix),

```

```

&          XInt - HalfNumb, YInt - HalfNumb) =
&          AmplitudeValue(ISuffix, KSuffix)
375      end do
374      end do
373      continue
372      continue
      close (50)
C+++++
      DEALLOCATE(AmplitudeValue)
C+++++
C-----Syougen Irekae-----
      ALLOCATE(
&          DAxis1(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          DAxis2(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          DAxis3(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          DAxis4(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          DAxis5(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          DAxis6(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax)
&          )
      do 552 YNextInt = DuoMin, DuoMax
      do 553 XNextInt = DuoMin, DuoMax
          DAxis1(
&          (MOD(XNextInt + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(YNextInt + ZeroMax, AllData))
&          ) =
&          AmplitudeNew(1,
&          XNextInt,
&          YNextInt
&          )
          DAxis2(
&          (MOD(XNextInt + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(YNextInt + ZeroMax, AllData))
&          ) =
&          AmplitudeNew(2,
&          XNextInt,

```

```

&          YNextInt
&          )
    DAxis3(
&          (MOD(XNextInt + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(YNextInt + ZeroMax, AllData))
&      ) =
&      AmplitudeNew(3,
&          XNextInt,
&          YNextInt
&      )
    DAxis4(
&          (MOD(XNextInt + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(YNextInt + ZeroMax, AllData))
&      ) =
&      AmplitudeNew(4,
&          XNextInt,
&          YNextInt
&      )
    DAxis5(
&          (MOD(XNextInt + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(YNextInt + ZeroMax, AllData))
&      ) =
&      AmplitudeNew(5,
&          XNextInt,
&          YNextInt
&      )
    DAxis6(
&          (MOD(XNextInt + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(YNextInt + ZeroMax, AllData))
&      ) =
&      AmplitudeNew(6,
&          XNextInt,
&          YNextInt
&      )

```

553 continue

```

552 continue
      DEALLOCATE(AmplitudeNew, PSuffixNatural)
C#####FFT#####
      ALLOCATE(
&          EAxis1(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          EAxis2(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          FAxis1(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          FAxis2(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          EAxis3(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          EAxis4(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          FAxis3(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          FAxis4(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          EAxis5(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          EAxis6(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          FAxis5(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          FAxis6(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax)
&      )
do 554 YNextInt = 0, ZeroMax
  do 555 XNextInt = 0, ZeroMax
    EAxis1(XNextInt, YNextInt) =
&      real(DAxis3(XNextInt, YNextInt))
    FAxis1(XNextInt, YNextInt) =
&      dimag(DAxis3(XNextInt, YNextInt))
    EAxis2(XNextInt, YNextInt) =
&      real(DAxis4(XNextInt, YNextInt))
    FAxis2(XNextInt, YNextInt) =
&      dimag(DAxis4(XNextInt, YNextInt))
    EAxis3(XNextInt, YNextInt) =
&      real(DAxis3(XNextInt, YNextInt))
    FAxis3(XNextInt, YNextInt) =
&      dimag(DAxis3(XNextInt, YNextInt))
    EAxis4(XNextInt, YNextInt) =
&      real(DAxis4(XNextInt, YNextInt))
    FAxis4(XNextInt, YNextInt) =
&      dimag(DAxis4(XNextInt, YNextInt))

```

```

      EAxis5(XNextInt, YNextInt) =
&          real(DAxis3(XNextInt, YNextInt))
      FAxis5(XNextInt, YNextInt) =
&          dimag(DAxis3(XNextInt, YNextInt))
      EAxis6(XNextInt, YNextInt) =
&          real(DAxis4(XNextInt, YNextInt))
      FAxis6(XNextInt, YNextInt) =
&          dimag(DAxis4(XNextInt, YNextInt))
555  continue
554  continue
      DEALLOCATE(
&          DAxis1, DAxis2,
&          DAxis3, DAxis4,
&          , DAxis5, DAxis6
&      )
      ALLOCATE(
&          DAxis1(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          DAxis2(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          DAxis3(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          DAxis4(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          DAxis5(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax),
&          DAxis6(0 : ZeroMax, 0 : ZeroMax)
&      )
      ND(1) = AllData
      ND(2) = AllData
      ISN = +1
      call dcft(EAxis1, FAxis1, ND, 2, ISN, ICON)
      call dcft(EAxis2, FAxis2, ND, 2, ISN, ICON)
      call dcft(EAxis3, FAxis3, ND, 2, ISN, ICON)
      call dcft(EAxis4, FAxis4, ND, 2, ISN, ICON)
      call dcft(EAxis5, FAxis5, ND, 2, ISN, ICON)
      call dcft(EAxis6, FAxis6, ND, 2, ISN, ICON)
      do 556 YNextInt = 0, ZeroMax
          do 557 XNextInt = 0, ZeroMax
              DAxis1(XNextInt, YNextInt) =

```

```

&      cmplx(EAxis1(XNextInt, YNextInt),
&      FAxis1(XNextInt, YNextInt))
      DAxis2(XNextInt, YNextInt) =
&      cmplx(EAxis2(XNextInt, YNextInt),
&      FAxis2(XNextInt, YNextInt))
      DAxis3(XNextInt, YNextInt) =
&      cmplx(EAxis3(XNextInt, YNextInt),
&      FAxis3(XNextInt, YNextInt))
      DAxis4(XNextInt, YNextInt) =
&      cmplx(EAxis4(XNextInt, YNextInt),
&      FAxis4(XNextInt, YNextInt))
      DAxis5(XNextInt, YNextInt) =
&      cmplx(EAxis5(XNextInt, YNextInt),
&      FAxis5(XNextInt, YNextInt))
      DAxis6(XNextInt, YNextInt) =
&      cmplx(EAxis6(XNextInt, YNextInt),
&      FAxis6(XNextInt, YNextInt))
557  continue
556  continue
      DEALLOCATE(
&      EAxis1, EAxis2,
&      FAxis1, FAxis2
&      EAxis3, EAxis4,
&      FAxis3, FAxis4
&      EAxis5, EAxis6,
&      FAxis5, FAxis6
&      )
C-----FFT kokomade-----
C-----Syougen Irekae-----
      ALLOCATE(
&      FChange1(DuoMin : DuoMax, DuoMin : DuoMax),
&      FChange2(DuoMin : DuoMax, DuoMin : DuoMax),
&      FChange3(DuoMin : DuoMax, DuoMin : DuoMax),
&      FChange4(DuoMin : DuoMax, DuoMin : DuoMax)
&      FChange5(DuoMin : DuoMax, DuoMin : DuoMax),

```

```

&          FChange6(DuoMin : DuoMax, DuoMin : DuoMax)
&          )
do 40 Kj = DuoMin, DuoMax
  do 45 Ki = DuoMin, DuoMax
    FChange1(Ki, Kj) =
&          DAxis1(
&          (MOD(Ki + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(Kj + ZeroMax, AllData))
&          )
    FChange2(Ki, Kj) =
&          DAxis2(
&          (MOD(Ki + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(Kj + ZeroMax, AllData))
&          )
    FChange3(Ki, Kj) =
&          DAxis3(
&          (MOD(Ki + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(Kj + ZeroMax, AllData))
&          )
    FChange4(Ki, Kj) =
&          DAxis4(
&          (MOD(Ki + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(Kj + ZeroMax, AllData))
&          )
    FChange5(Ki, Kj) =
&          DAxis5(
&          (MOD(Ki + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(Kj + ZeroMax, AllData))
&          )
    FChange6(Ki, Kj) =
&          DAxis6(
&          (MOD(Ki + ZeroMax, AllData)),
&          (MOD(Kj + ZeroMax, AllData))
&          )
45    continue

```



```

40      continue
      DEALLOCATE(
&          DAxis1, DAxis2,
&          DAxis3, DAxis4,
&          , DAxis5, DAxis6
&      )
C=====
      open (24, Action = 'Write',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData00.dat',
&          Status = 'New')
      open (25, Action = 'Write',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData01.dat',
&          Status = 'New')
      open (26, Action = 'Write',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData10.dat',
&          Status = 'New')
      open (27, Action = 'Write',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData11.dat',
&          Status = 'New')
      open (28, Action = 'Write',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData20.dat',
&          Status = 'New')
      open (29, Action = 'Write',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData21.dat',
&          Status = 'New')
C=====
      do 206 Kj = DuoMin, DuoMax
      do 207 Ki = DuoMin, DuoMax
          Write (24)

```

```

&          real(Ki, 8), real(Kj, 8), FChange1(Ki, Kj)
      Write (25)
&          real(Ki, 8), real(Kj, 8), FChange2(Ki, Kj)
      Write (26)
&          real(Ki, 8), real(Kj, 8), FChange3(Ki, Kj)
      Write (27)
&          real(Ki, 8), real(Kj, 8), FChange4(Ki, Kj)
      Write (28)
&          real(Ki, 8), real(Kj, 8), FChange5(Ki, Kj)
      Write (29)
&          real(Ki, 8), real(Kj, 8), FChange6(Ki, Kj)
207   continue
206   continue
      close (24)
      close (25)
      close (26)
      close (27)
      close (28)
      close (29)
      DEALLOCATE(
&          FChange1, FChange2,
&          FChange3, FChange4,
&          FChange5, FChange6
&          )
      stop
      end

```

フーリエ変換後に行う座標変換についてのプログラム (主要計算部分抜粋) このプログラムでは、連立一次方程式を解く際に netlib からのフリーサブルーチンソフトウェア LAPACK を用いている。コールサブルーチンの使い方は、行列計算パッケージ LAPACK 利用の手引¹⁰³⁾ に詳しい。

```

C#####
C      ZMaxNumber = 2047
      ZMaxNumber = 1023

```

```

C      ZMaxNumber = 511
C#####
      Lambda = 12.397639D0 / EnergyKeV * 1.0D-10
      KVectorLength = 1.0D0 / Lambda
      ARecip = 1.0D0 / ALattice
      HMaxLength = ARecip * DSqrt(Real(
&          HxMax**2 + HyMax**2 + HzMax**2, 8))
      ZStepHeight = Thickness / ZMaxNumber
      ThetaBMaxRad = DASin(RatioOfSinThetaBMax
&          * HMaxLength / 2.0D0 / KVectorLength)
      StepLength = ZStepHeight / DCos(ThetaBMaxRad)
      XYStepLength = ZStepHeight * DTan(ThetaBMaxRad)
      XStepLength = ZStepHeight * DTan(ThetaBMaxRad)
&          / DSqrt(DXLengthDash**2 + DYLengthDash**2)
      YStepLength = XStepLength * XYUnitRatio
      Do 10 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
          SxBorrmannVector(ISuffix)
&      = XStepLength * XRealShiftArray(ISuffix)
&      + YStepLength * YRealShiftArray(ISuffix)
&          * XCosAngleRadXY
          SyBorrmannVector(ISuffix)
&      = YStepLength * YRealShiftArray(ISuffix)
&          * XSinAngleRadXY
          SzBorrmannVector(ISuffix) = ZStepHeight
          SxBorrmannUnit(ISuffix) = SxBorrmannVector(ISuffix)
&          / StepLength
          SyBorrmannUnit(ISuffix) = SyBorrmannVector(ISuffix)
&          / StepLength
          SzBorrmannUnit(ISuffix) = SzBorrmannVector(ISuffix)
&          / StepLength
      10 End Do
C=====
C      Main Routine
      Do 51 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
          ExVector(ISuffix)

```

```

&    = SyBorrmannUnit(ISuffix)
&    * (
&        SzBorrmannUnit(
&            Mod(ISuffix + HighestNumber, NumberOfWaves)
&        )
&    - SzBorrmannUnit(ISuffix)
&    )
&    - SzBorrmannUnit(ISuffix)
&    * (
&        SyBorrmannUnit(
&            Mod(ISuffix + HighestNumber, NumberOfWaves)
&        )
&    - SyBorrmannUnit(ISuffix)
&    )
    EyVector(ISuffix)
&    = SzBorrmannUnit(ISuffix)
&    * (
&        SxBorrmannUnit(
&            Mod(ISuffix + HighestNumber, NumberOfWaves)
&        )
&    - SxBorrmannUnit(ISuffix)
&    )
&    - SxBorrmannUnit(ISuffix)
&    * (
&        SzBorrmannUnit(
&            Mod(ISuffix + HighestNumber, NumberOfWaves)
&        )
&    - SzBorrmannUnit(ISuffix)
&    )
    EzVector(ISuffix)
&    = SxBorrmannUnit(ISuffix)
&    * (
&        SyBorrmannUnit(
&            Mod(ISuffix + HighestNumber, NumberOfWaves)
&        )

```

```

&      - SyBorrmannUnit(ISuffix)
&    )
&    - SyBorrmannUnit(ISuffix)
&    * (
&      SxBorrmannUnit(
&        Mod(ISuffix + HighestNumber, NumberOfWaves)
&      )
&    - SxBorrmannUnit(ISuffix)
&    )
  EVectorLength = DSqrt(
&      ExVector(ISuffix) ** 2
&      + EyVector(ISuffix) ** 2
&      + EzVector(ISuffix) ** 2
&    )
  ExBorrmannUnit(ISuffix, 0) =
&    ExVector(ISuffix) / EVectorLength
  EyBorrmannUnit(ISuffix, 0) =
&    EyVector(ISuffix) / EVectorLength
  EzBorrmannUnit(ISuffix, 0) =
&    EzVector(ISuffix) / EVectorLength
  ExBorrmannUnit(ISuffix, 1) =
&    SyBorrmannUnit(ISuffix) * EzBorrmannUnit(ISuffix, 0)
&    - SzBorrmannUnit(ISuffix) * EyBorrmannUnit(ISuffix, 0)
  EyBorrmannUnit(ISuffix, 1) =
&    SzBorrmannUnit(ISuffix) * ExBorrmannUnit(ISuffix, 0)
&    - SxBorrmannUnit(ISuffix) * EzBorrmannUnit(ISuffix, 0)
  EzBorrmannUnit(ISuffix, 1) =
&    SxBorrmannUnit(ISuffix) * EyBorrmannUnit(ISuffix, 0)
&    - SyBorrmannUnit(ISuffix) * ExBorrmannUnit(ISuffix, 0)
51 End Do

  open (10, action = 'write',
&      form = 'formatted',
&      position = 'append',
&      file = 'CPolSPol.dat',
&      status = 'new')

```

```

Do 30 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
  Do 31 JSuffix = 0, NumberOfWaves - 1
    Do 32 MSuffix = 0, 1
      ARMatrix(1, 1) = SxBorrmannUnit(ISuffix)
      ARMatrix(1, 2) = ExBorrmannUnit(ISuffix, 0)
      ARMatrix(1, 3) = ExBorrmannUnit(ISuffix, 1)
      ARMatrix(2, 1) = SyBorrmannUnit(ISuffix)
      ARMatrix(2, 2) = EyBorrmannUnit(ISuffix, 0)
      ARMatrix(2, 3) = EyBorrmannUnit(ISuffix, 1)
      ARMatrix(3, 1) = SzBorrmannUnit(ISuffix)
      ARMatrix(3, 2) = EzBorrmannUnit(ISuffix, 0)
      ARMatrix(3, 3) = EzBorrmannUnit(ISuffix, 1)
      BRVector(1) = ExBorrmannUnit(JSuffix, MSuffix)
      BRVector(2) = EyBorrmannUnit(JSuffix, MSuffix)
      BRVector(3) = EzBorrmannUnit(JSuffix, MSuffix)
C!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
      Call DGESV (3, 1, ARMatrix, 3, IPIVOT, BRVector, 3, NFO)

      SPolFactor(ISuffix, JSuffix, MSuffix)      = BRVector(1)
      CPolFactor(ISuffix, JSuffix, 0, MSuffix) = BRVector(2)
      CPolFactor(ISuffix, JSuffix, 1, MSuffix) = BRVector(3)
      write (10, 2000)
    &      SPolFactor(ISuffix, JSuffix, MSuffix),
    &      CPolFactor(ISuffix, JSuffix, 0, MSuffix),
    &      CPolFactor(ISuffix, JSuffix, 1, MSuffix)
  32   End Do
  31   End Do
  30 Continue
2000  format ('SPol  =', E20.7,
&          ' CPol0 =', E20.7,
&          ' CPol1 =', E20.7)
      close (10)
      NxVector = 0.0D0
      NyVector = 0.0D0
      NzVector = 1.0D0

```

```

do 33 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
    ARMatrix(1, 1) = SxBorrmannUnit(ISuffix)
    ARMatrix(1, 2) = ExBorrmannUnit(ISuffix, 0)
    ARMatrix(1, 3) = ExBorrmannUnit(ISuffix, 1)
    ARMatrix(2, 1) = SyBorrmannUnit(ISuffix)
    ARMatrix(2, 2) = EyBorrmannUnit(ISuffix, 0)
    ARMatrix(2, 3) = EyBorrmannUnit(ISuffix, 1)
    ARMatrix(3, 1) = SzBorrmannUnit(ISuffix)
    ARMatrix(3, 2) = EzBorrmannUnit(ISuffix, 0)
    ARMatrix(3, 3) = EzBorrmannUnit(ISuffix, 1)
    BRVector(1) = NxVector
    BRVector(2) = NyVector
    BRVector(3) = NzVector
C!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
    Call DGESV (3, 1, ARMatrix, 3, IPIVOT, BRVector, 3, NFO)

    SnCoefficient(ISuffix) = BRVector(1)
    Cn0Coefficient(ISuffix) = BRVector(2)
    Cn1Coefficient(ISuffix) = BRVector(3)
33 continue
C#####
    BetaAngularStepRad = BetaAngularStepArcsec
    &                      * Pi / (180.0D0 * 3600.0D0)
C#####
    do 34 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
        do 35 MSuffix = 0, 1
            AlphaN(MSuffix, ISuffix)
            &      = - (KVectorLength * BetaAngularStepRad
            &      *   SPolFactor(ISuffix, 0, MSuffix) )
            &      /   SnCoefficient(ISuffix)
35 continue
34 continue
C!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
    VectorAx = 1.0D0 * XStepLength
    VectorAy = 0.0D0

```

```

VectorAz = 0.0D0
VectorBx = 1.0D0 * XCosAngleRadXY * XStepLength
VectorBy = 1.0D0 * XSinAngleRadXY * XStepLength
VectorBz = 0.0D0
C!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
do 36 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
    ARMatrix(1, 1) = SxBorrmannUnit(ISuffix)
    ARMatrix(1, 2) = ExBorrmannUnit(ISuffix, 0)
    ARMatrix(1, 3) = ExBorrmannUnit(ISuffix, 1)
    ARMatrix(2, 1) = SyBorrmannUnit(ISuffix)
    ARMatrix(2, 2) = EyBorrmannUnit(ISuffix, 0)
    ARMatrix(2, 3) = EyBorrmannUnit(ISuffix, 1)
    ARMatrix(3, 1) = SzBorrmannUnit(ISuffix)
    ARMatrix(3, 2) = EzBorrmannUnit(ISuffix, 0)
    ARMatrix(3, 3) = EzBorrmannUnit(ISuffix, 1)
    BRVector(1) = VectorAx
    BRVector(2) = VectorAy
    BRVector(3) = VectorAz
C!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
    Call DGEV (3, 1, ARMatrix, 3, IPIVOT, BRVector, 3, NFO)

    GammaA(0, ISuffix) = BRVector(2)
    GammaA(1, ISuffix) = BRVector(3)
36 continue
do 37 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
    ARMatrix(1, 1) = SxBorrmannUnit(ISuffix)
    ARMatrix(1, 2) = ExBorrmannUnit(ISuffix, 0)
    ARMatrix(1, 3) = ExBorrmannUnit(ISuffix, 1)
    ARMatrix(2, 1) = SyBorrmannUnit(ISuffix)
    ARMatrix(2, 2) = EyBorrmannUnit(ISuffix, 0)
    ARMatrix(2, 3) = EyBorrmannUnit(ISuffix, 1)
    ARMatrix(3, 1) = SzBorrmannUnit(ISuffix)
    ARMatrix(3, 2) = EzBorrmannUnit(ISuffix, 0)
    ARMatrix(3, 3) = EzBorrmannUnit(ISuffix, 1)
    BRVector(1) = VectorBx

```



```

        BRVector(2) = VectorBy
        BRVector(3) = VectorBz
C!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
        Call DGESV (3, 1, ARMatrix, 3, IPIVOT, BRVector, 3, NFO)

        GammaB(0, ISuffix) = BRVector(2)
        GammaB(1, ISuffix) = BRVector(3)

37 continue
    do 38 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
        PrimeDenominator(ISuffix)
&      = AllData
&      * (GammaA(0, ISuffix) * GammaB(1, ISuffix)
&      - GammaA(1, ISuffix) * GammaB(0, ISuffix))
38 continue
    do 39 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
        A1Simply(ISuffix)
&      = AlphaN(0, ISuffix) * Cn0Coefficient(ISuffix)
&      + KVectorLength * BetaAngularStepRad
&      * CPolFactor(ISuffix, 0, 0, 0)
        A2Simply(ISuffix)
&      = AlphaN(0, ISuffix) * Cn1Coefficient(ISuffix)
&      + KVectorLength * BetaAngularStepRad
&      * CPolFactor(ISuffix, 0, 1, 0)
        B1Simply(ISuffix)
&      = AlphaN(1, ISuffix) * Cn0Coefficient(ISuffix)
&      + KVectorLength * BetaAngularStepRad
&      * CPolFactor(ISuffix, 0, 0, 1)
        B2Simply(ISuffix)
&      = AlphaN(1, ISuffix) * Cn1Coefficient(ISuffix)
&      + KVectorLength * BetaAngularStepRad
&      * CPolFactor(ISuffix, 0, 1, 1)
        A1Prime(ISuffix)
&      = GammaB(1, ISuffix)
&      / PrimeDenominator(ISuffix)
        A2Prime(ISuffix)

```

```

&      = - GammaB(0, ISuffix)
&      / PrimeDenominator(ISuffix)
      B1Prime(ISuffix)
&      = - GammaA(1, ISuffix)
&      / PrimeDenominator(ISuffix)
      B2Prime(ISuffix)
&      = GammaA(0, ISuffix)
&      / PrimeDenominator(ISuffix)
39 continue
  do 40 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
    CRMatrix(1, 1) = A1Prime(ISuffix)
    CRMatrix(1, 2) = B1Prime(ISuffix)
    CRMatrix(2, 1) = A2Prime(ISuffix)
    CRMatrix(2, 2) = B2Prime(ISuffix)
    DRVector(1) = A1Simply(ISuffix)
    DRVector(2) = A2Simply(ISuffix)
C!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
    Call DGESV (2, 1, CRMatrix, 2, IPIVOS, DRVector, 2, NFO)

    X1(ISuffix) = DRVector(1)
    Y1(ISuffix) = DRVector(2)
40 continue
  do 42 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
    CRMatrix(1, 1) = A1Prime(ISuffix)
    CRMatrix(1, 2) = B1Prime(ISuffix)
    CRMatrix(2, 1) = A2Prime(ISuffix)
    CRMatrix(2, 2) = B2Prime(ISuffix)
    ERVector(1) = B1Simply(ISuffix)
    ERVector(2) = B2Simply(ISuffix)
C!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
    Call DGESV (2, 1, CRMatrix, 2, IPIVOS, ERVector, 2, NFO)

    X2(ISuffix) = ERVector(1)
    Y2(ISuffix) = ERVector(2)
42 continue

```

```

        open (16, Action = 'Write',
C      &          Form = 'unformatted',
        &          Form = 'formatted',
        &          Position = 'Append',
        &          File = 'ParaTestWrite.dat', Status = 'New')
        do 41 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
C      Write (16)
        Write (16, 703)
        &      X1(ISuffix),
        &      Y1(ISuffix),
        &      X2(ISuffix),
        &      Y2(ISuffix)
41 continue
703      Format (4E20.7)
        close (16)
        stop
        end

```

座標変換とフーリエ変換結果を対応させるプログラム

```

implicit none
integer
&      NumberOfWaves,
&      ISuffix, KSuffix,
&      SuffixAppend,
&      DuoMin, DuoMax,
&      AllData, DefoltData,
&      ADPower,
&      XDefInt, YDefInt,
&      K0Int, K1Int,
&      WMin(0:1), WMax(0:1),
&      KiMinInt, KiMaxInt,
&      KjMinInt, KjMaxInt,
&      WKi, WKj,
&      Ki, Kj

```

```

      real (8)
&          XRead, YRead,
&          APos1(0 : 11), APos2(0 : 11),
&          BPos1(0 : 11), BPos2(0 : 11),
&          XDefMod, YDefMod,
&          KiMin, KiMax, KjMin, KjMax,
&          X1(0 : 11), X2(0 : 11),
&          Y1(0 : 11), Y2(0 : 11),
&          BetaAngularStepArcsec(0:1)
      real (8), Allocatable::
&          Intensity(:, :, :),
&          NPosX( : , : , : ), NPosY( : , : , : )
      complex (8), ALLOCATABLE::
&          AmplitudeDef( : )
      parameter (
&          NumberOfWaves = 3,
&          DefoltData = 1023,
&          ADPower = 13      !8192
&          )
      AllData = 2 ** ADPower
      open (11, Action = 'read',
&          Form = 'Formatted',
&          File = 'ParaTestWrite.dat', Status = 'old')
      do 41 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
         read (11, 703)
&          X1(ISuffix),
&          Y1(ISuffix),
&          X2(ISuffix),
&          Y2(ISuffix)
41 continue
703       Format (4E20.7)
         close (11)
C|||||
C=====
DuoMax = AllData / 2
```

```

DuoMin = - (DuoMax - 1)
WMin(0) = -100
WMax(0) = 100
WMin(1) = -100
WMax(1) = 100
SuffixAppend = NumberOfWaves * 2
BetaAngularStepArcsec(0) = 0.020D0
BetaAngularStepArcsec(1) = 0.020D0
C=====
C|||||
    open (24, Action = 'Read',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData00.dat',
&          Status = 'Old')
    open (25, Action = 'Read',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData01.dat',
&          Status = 'Old')
    open (26, Action = 'Read',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData10.dat',
&          Status = 'Old')
    open (27, Action = 'Read',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData11.dat',
&          Status = 'Old')
    open (28, Action = 'Read',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData20.dat',
&          Status = 'Old')
    open (29, Action = 'Read',
&          Form = 'Unformatted',
&          File = 'FourierTransData21.dat',
&          Status = 'Old')
C=====

```

```

        ALLOCATE(
&      AmplitudeDef(
&          1 : NumberOfWaves * 2
&          ),
&      Intensity(0:NumberOfWaves - 1,
&          DuoMin : DuoMax,
&          DuoMin : DuoMax
&          )
&      )
C|||||
do 206 Kj = DuoMin, DuoMax
do 207 Ki = DuoMin, DuoMax
    Read (24)
&      XRead, YRead, AmplitudeDef(1)
    Read (25)
&      XRead, YRead, AmplitudeDef(2)
    Intensity(0, Ki, Kj)
&      = CDabs(AmplitudeDef(1))**2
&      + CDabs(AmplitudeDef(2))**2
    Read (26)
&      XRead, YRead, AmplitudeDef(3)
    Read (27)
&      XRead, YRead, AmplitudeDef(4)
    Intensity(1, Ki, Kj)
&      = CDabs(AmplitudeDef(3))**2
&      + CDabs(AmplitudeDef(4))**2
    Read (28)
&      XRead, YRead, AmplitudeDef(5)
    Read (29)
&      XRead, YRead, AmplitudeDef(6)
    Intensity(2, Ki, Kj)
&      = CDabs(AmplitudeDef(5))**2
&      + CDabs(AmplitudeDef(6))**2
207    continue
206    continue

```

```

        close (24)
        close (25)
        close (26)
        close (27)
        close (28)
        close (29)
C|||||
        DEALLOCATE(AmplitudeDef)
C|||||
        do 204 ISuffix = 0, NumberOfWaves - 1
            APos1(ISuffix) = X2(ISuffix) /
&            (X2(ISuffix) * Y1(ISuffix) -
&            X1(ISuffix) * Y2(ISuffix))
            APos2(ISuffix) = Y2(ISuffix) /
&            (X2(ISuffix) * Y1(ISuffix) -
&            X1(ISuffix) * Y2(ISuffix))
            BPos1(ISuffix) = X1(ISuffix) /
&            (X2(ISuffix) * Y1(ISuffix) -
&            X1(ISuffix) * Y2(ISuffix))
            BPos2(ISuffix) = Y1(ISuffix) /
&            (X2(ISuffix) * Y1(ISuffix) -
&            X1(ISuffix) * Y2(ISuffix))
204    continue
        open (5, Action = 'write',
&            Form = 'Formatted',
&            File = 'Test01.dat',
&            Status = 'New')
        write(5, 150)APos1(1), APos2(1), BPos1(1), BPos2(1)
150    Format(4E19.9)
        close (5)
C|||||
        ALLOCATE(
&            NPosX(0:NumberOfWaves - 1,
&            DuoMin : DuoMax,
&            DuoMin : DuoMax

```

```

&          ),
&      NPosY(0:NumberOfWaves - 1,
&          DuoMin : DuoMax,
&          DuoMin : DuoMax
&      )
&  )
&  )

C|||||
do 376  Kj = DuoMin, DuoMax
do 377  Ki = DuoMin, DuoMax
do 378  ISuffix = 1, 1
  NPosX(ISuffix, Ki, Kj) =
&      APos1(ISuffix) * Kj - APos2(ISuffix) * Ki
  NPosY(ISuffix, Ki, Kj) =
&      BPos1(ISuffix) * Kj - BPos2(ISuffix) * Ki
378      continue
377      continue
376      continue

C|||||
  open (14, Action = 'Write',
&      Form = 'Formatted',
&      File = 'FourierTransformation0.dat',
&      Status = 'New')
  open (15, Action = 'Write',
&      Form = 'Formatted',
&      File = 'FourierTransform1Direct.dat',
&      Status = 'New')
  open (16, Action = 'Write',
&      Form = 'Formatted',
&      File = 'FourierTransformation2.dat',
&      Status = 'New')

C|||||
  KiMin = ((real(WMin(0), 8)) * X1(ISuffix)
&      + (real(WMin(1), 8)) * X2(ISuffix))
  KiMax = ((real(WMax(0), 8)) * X1(ISuffix)
&      + (real(WMax(1), 8)) * X2(ISuffix))

```



```

        KjMin = ((real(WMin(0), 8)) * Y1(ISuffix)
&            + (real(WMin(1), 8)) * Y2(ISuffix))
        KjMax = ((real(WMax(0), 8)) * Y1(ISuffix)
&            + (real(WMax(1), 8)) * Y2(ISuffix))
        KiMinInt = abs(int(KiMin)) - 1
        KiMaxInt = abs(int(KiMax)) + 1
        KjMinInt = abs(int(KjMin)) - 1
        KjMaxInt = abs(int(KjMax)) + 1
        open (6, Action = 'write',
&            Form = 'Formatted',
&            File = 'Test02.dat',
&            Status = 'New')
        write(6, 151)KiMinInt, KiMaxInt, KjMinInt, KjMaxInt
151  Format(4I6)
        close (6)
        do 208 Kj = WMax(1), WMin(1), -1
            do 209 Ki = WMin(0), WMax(0)
                Write (14, 2010)
&                NPosX(0, Ki, Kj) * BetaAngularStepArcsec(0),
&                NPosY(0, Ki, Kj) * BetaAngularStepArcsec(1),
&                Intensity(0, Ki, Kj)
                Write (15, 2010)
&                - NPosX(1, Ki, Kj) * BetaAngularStepArcsec(0),
&                NPosY(1, Ki, Kj) * BetaAngularStepArcsec(1),
&                Intensity(1, Ki, Kj)
                Write (16, 2010)
&                NPosX(2, Ki, Kj) * BetaAngularStepArcsec(0),
&                NPosY(2, Ki, Kj) * BetaAngularStepArcsec(1),
&                Intensity(2, Ki, Kj)
209        continue
            Write (14, 5700)
            Write (15, 5700)
            Write (16, 5700)
208        continue
2010        format (3E16.6)

```

```
5700      Format ()  
      close (14)  
      close (15)  
      close (16)  
      DEALLOCATE(Intensity)  
      stop  
      end
```