

## 線形代数と SEM

関 口 隆 史

筑波大学 数理物質系



世の中ではコロナの対処法が確立して、大学でも対面授業が徐々に増えてきている。私はここ数年、学部で線形代数と大学院の量子力学を受け持っており、対面授業で学生の反応を確かめながら授業を行うことに嬉しさを感じている。学生時代落研に所属していた手前、授業の枕は大事にしており、導入部で学生の興味

を引くことができた時は「しめたっ！」という気持ちになるが、話が学生にしみ込んでいかないと「今日はすべったな」となってしまう。このように対面授業は、教師の側にも面白さがある。さて、生物学や工学の目覚ましい発展から比べると物理学や数学の進歩は緩やかで、そのおかげか授業の準備や試験問題の作成に大きな苦勞はないところが救いである。とは言っても授業内容の進歩は確実にある。今から40年前、私の学生時代、理学系の線形代数は教養の数学の先生が教えていた。このため、論理の完備性や定理の証明に多くの時間が割かれており、まさに数学的思考法を習得するのが目的だったが、今では理学工学系の先生が担当し、その内容は固有値問題や線形写像といった応用展開にまで広がっている。志ある学生であれば、役に立つ線形代数を学ぶことができる。量子力学も桜井の教科書が出てからは、微積に頼るSchrödingerの形式に加えて行列量子力学（すなわち線形代数）のDiracの手法が取り入れられ、量子力学の本質が理解しやすくなった。桜井の教科書では、Stern-Gerlachの実験から話が展開するが、これこそがまさに計測の神髄だと思っている。

Stern-Gerlachとは、銀原子のビームを不均一磁場中に通すと、スピンの値に従ってビームが離散的に分布する実験である。すなわち、この計測器にかければスピンの値が一義的に決定できる。銀原子をある状態ベクトルで表すと、計測器の観測はベクトルに作用する行列として書くことができる。さらに素晴らしいのは交換関係もすんなりと説明できることである。ある測定Aが次の測定Bに影響を与えるかどうかは、行列の掛け算が交換可能か、

$$[A, B] = AB - BA = 0$$

かどうかで表現できる。振り返って、私が武器にしている走

査電顕（SEM）もこの範疇の計測器である。すなわち、試料から出てきた二次電子・反射電子の集団のうち、検出器で検出可能なエネルギーや方向を持ったものを取り出し、それに増幅率をかけて像としている。だからSEM観察は、試料の状態ベクトルに検出器のアクセプタンスという行列をかける演算として数学的に表現できる。いったん検出器に電子を取り込むと、電子の軌道やエネルギーが変化し、元の状態には戻れないところも線形代数的である。さて、これからが問題である。「どうしたら、線形代数の考えをSEMの発展に活かせるのか？」これが今考えていることである。口の悪い友人には、「SEMの像を解釈するのは屑籠から宝を見つけるようなものだ。」と言われている。線形代数をベースにした新しい計測法が提案できれば、SEMの複数検出器から得られた画像を演算し、知りたい物理量の固有値を求めることができるであろう。現在流行のAI解析も線形代数が基礎になっていると聞く。AIは、力任せに多次元の行列を変形して因子同士の相関を引き出すのだと想像している。翻って我々は、見通しの良い基底を定め、これを使って展開できる固有ベクトルと演算行列を作ることで、固有値を導き出す。まさにstate of artsである。うまくいけば、二次電子・反射電子以外の第3の特性像が作れるかもしれない。半導体のドーパント分布像や元素マッピングだけでなく、壊れる前の素子を観察して不良予測ができるSEM、細胞を観察して病気診断のできるSEMが実現できればこんな面白いことはない。このような希望のもと、どのような基底を取ったらSEM像の価値が上がるのかを考え、固有値を導き出せるような理想の電子検出器を模索している。コロナ禍が明けようとしている現在、意に反して世の中は不安定になりつつあるものの、想像力をたくましくして、明るい未来を希求していければと願っている。

関口隆史 (Takashi Sekiguchi)

1984年東北大学大学院理学研究科物理学専攻中退（理学博士）、1984年東北大学金属研究所助手、助教授を経て、2000年金属材料技術研究所主任研究官（2001年物質・材料研究機構に改組）、グループリーダー、主席研究員、2018年より筑波大学数理物質系教授、2017年瀬藤賞受賞、2005-07年、2017-19年理事