提供：Optical Solutions
株式会社オプティカルソリューションズ
〒101-0032
東京都千代田区岩本町 2-15-8（MAS 三田ビル 3 階）
TEL：03-5833-1332　FAX：03-3865-3318
http://www.osc-japan.com/

表面のランダム面における面粗さの表現につて

株式会社タイコ
牛山善太

前回から、本連載において物質の表面荒さの表現についての解説を始めさせていただいた。今回ではランダムな構造を持つ物質表面において、その表面荒さの表現方法について考えさせていただこう。勿論、ランダムな荒さの形をそのまま数学的に表現することは出来ないので、統計的な数字を扱うことになる。様々な面の拡散性を扱う場合には重要な考え方となる。

１．　ランダム面における面粗さの表現

プロファイルがランダムな面に対してはこれまでの様な一定の関数を用いる表現は難しいが統計的な表現を行なうことはできる。1 次元表面形状関数 z(x)の変りに表面凹凸高さの確率分布関数 P(z)を用いることにする。ｚなる事象の起こる確率が P(z)で表されている。例えば、P(z)の区間 z_1 から z_2 までの積分は、（P(z)は積分中に変化するｚのそれぞれの値に対する、その現象の生起する確率であるから、その連続的な和である積分は、）高さｚが z_1 から z_2 の間に存在する確率を表わす。

この分布関数のタイプについてはいろいろなものが想定できるが、中心極限定理からガウス分布を用いるのが一般的である。ガウス分布に限らず統計的標準偏差σは、ｎ個のサンプルを考えれば、平均値を x_i として、

$$\sigma = \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(x_i - \bar{x} \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \tag{1}$$

と表わされ、これまでの rms 値と同じものを表わす。因みに、本連載前回（第８回）で示した rms 荒さを表す連続的な式は以下の通りである。

$$\sigma = \left\{ \lim_{L \to \infty} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \left(z(x) - \bar{z} \right)^2 dx \right\}^{1/2} \tag{8-9}$$

一般的にこの標準偏差を用いてガウス分布は以下のように表わされる。

$$P(z)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(\frac{-z^2}{2\sigma^2}\right) \qquad (2)$$

負から正への無限大についての P(z)の積分値は、全てのｚの値に対する、その存在する確率の和であるから、１になる。

この領域でのｚの平均値を求めるにはある微小な範囲でのｚの出現の確率 P(z)に、高さの値ｚを掛けて積分して行けば良い。例えば離散的に考えてｎ回試行してある区間に現象が起こる（この場合、高さがその区間に存在する）回数をｋとすれば、確率について P=k/n となるので、z_1 からｚ$_n$ のｎ種類の現象が起こる確率は、これらを合計して、

$$\bar{z}=\frac{z_1k_1}{n}+\cdots+\frac{z_nk_n}{n}=z_1P_1+\cdots z_nP_n$$

となる。また、一般的にガウス分布となる P(z)は偶関数であり、$zP(z)$は奇関数×遇関数＝奇関数となるので、

$$\bar{z}=\int_{-\infty}^{\infty}zP(z)dz=0 \qquad (3)$$

である。すると前回における算術平均式、

$$\sigma_a=\lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2}\left|z(x)-\bar{z}\right|dx \qquad (8\text{-}8)$$

から算術平均が、

$$\sigma_a=\int_{-\infty}^{\infty}|z|P(z)dz \qquad (4)$$

また、rms が(8-9)式から定義できて、

$$\sigma=\left\{\int_{-\infty}^{\infty}z^2P(z)dz\right\}^{\frac{1}{2}} \qquad (5)$$

となる。さて、ここで(5)式に(2)式を代入してみると（(2)式中のσをσ'と表記しなおして）、

$$\sigma = \left[\frac{1}{\sigma'\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} z^2 \exp\left(\frac{-z^2}{2\sigma'^2} \right) dz \right]^{\frac{1}{2}} \qquad (6)$$

ここで、不定積分の公式、

$$\int x^n \exp(ax^2) dx = \frac{x^{n-1}\exp(ax^2)}{2a} - \frac{n-1}{2a} \int x^{n-2} \exp(ax^2) dx \qquad (7)$$

を利用して、

$$\sigma = \left[\frac{1}{\sigma'\sqrt{2\pi}} \left\{ \left[-\sigma'^2 z \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma'^2} \right) \right]_{-\infty}^{\infty} + \sigma'^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma'^2} \right) dz \right\} \right]^{\frac{1}{2}} \qquad (8)$$

である。さらに、(3)式と同様に(8)式中括弧第１項の定積分は０になり、また定積分の公式から、

$$\int_{0}^{\infty} \exp(-a^2 x^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a} \qquad (9)$$

なので、

$$\sigma = \left[\frac{1}{\sigma'\sqrt{2\pi}} \sigma'^2 2 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma' \right]$$

$$= [\sigma'] \qquad (10)$$

となり、ガウス分布(2)式における標準偏差と、この場合の rms 面粗さが同一のものであることが理解できる。

２．　サンプリングによる粗さの表現

　実際のサンプリング（測定）・データから上述の面粗さ係数を求めるためには、離散的な(1)式と同じ表現が用いられることになる。参考のために以下にそれらの式を挙げる。

$$\hat{\sigma}_a = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left|z_n - \hat{\bar{z}}\right| \tag{11}$$

$$\hat{\sigma} = \left\{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(z_n - \hat{\bar{z}}\right)^2\right\}^{\frac{1}{2}} \tag{12}$$

ただし、

$$\hat{\bar{z}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} z_n \tag{13}$$

である。また、算術平均的面傾きについては(前回(13)式参照)、

$$\hat{\bar{m}}_a = \frac{1}{N-1}\sum_{n=2}^{N}\left|\frac{z_n - z_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} - \hat{\bar{z}}'\right| \tag{14}$$

rms 面傾きについては(前回(14)式参照)、

$$\hat{\bar{m}} = \left\{\frac{1}{N-1}\sum_{n=2}^{N}\left(\frac{z_n - z_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} - \hat{\bar{z}}'\right)^2\right\}^{\frac{1}{2}} \tag{15}$$

ただし傾きの平均値として(前回(12)式参照)、

$$\hat{\bar{z}}' = \frac{1}{N-1}\sum_{n=2}^{N}\left(\frac{z_n - z_{n-1}}{x_n - x_{n-1}}\right) \tag{16}$$

である。

参考文献

1) J.C.Stover:Optical Scattering(SPIE Press,Bellingham,1995)

2) E.F.Church & P.Z.Takacs:SCATTERING THEORY,HAND BOOK OF OPTICSI (McGraw-Hill,New York,1995)