

【特許請求の範囲】**【請求項 1】**

テラヘルツ波を用いて試料を構成する物質を判別する測定装置であって、
前記試料にテラヘルツ波を照射する照射部と、
前記試料を透過又は前記試料で反射したテラヘルツ波を検出する検出部と、
前記検出部の検出結果を用いて測定スペクトルを取得するスペクトル取得部と、
前記試料の構造の大きさに関する情報を取得する構造取得部と、
前記測定スペクトルと複数のスペクトルとを用いて、前記試料を構成する物質を判別する判別部と、を有し、
前記判別部は、前記情報に基づいて、前記試料の物質の判別に用いる前記測定スペクトルの周波数範囲を設定することを特徴とする測定装置。

10

【請求項 2】

前記判別部は、前記試料上に前記周波数範囲のテラヘルツ波が照射された場合の照射領域が前記試料の構造の大きさ以下となるように、前記測定スペクトルの前記周波数範囲を設定することを特徴とする請求項 1 に記載の測定装置。

【請求項 3】

前記試料の画像を撮像する撮像部を有し、
前記構造取得部は、前記撮像部の撮像結果を用いて前記情報を取得することを特徴とする請求項 1 又は 2 に記載の測定装置。

20

【請求項 4】

前記試料にレーザ光を照射する照射部と、
前記試料を透過又は前記試料で反射したレーザ光を検出する光検出部と、を有し、
前記構造取得部は、前記光検出部の検出結果を用いて前記情報を取得することを特徴とする請求項 1 又は 2 のいずれか一項に記載の測定装置。

【請求項 5】

前記構造取得部は、複数の物質の材質と前記複数の物質それぞれの構造の大きさの代表値とを含むデータベースから前記情報を取得することを特徴とする請求項 1 乃至 4 のいずれか一項に記載の測定装置。

30

【請求項 6】

前記判別部は、前記測定スペクトルと前記複数のスペクトルそれぞれとを比較して、前記複数のスペクトルのうち前記測定スペクトルと一致条件を満たすスペクトルの取得に用いた物質が前記試料を構成する物質であると判別し、前記複数のスペクトルのうち前記測定スペクトルと一致条件を満たすスペクトルがない場合は、前記測定スペクトルの前記周波数範囲を変更することを特徴とする請求項 1 乃至 5 のいずれか一項に記載の測定装置。

【請求項 7】

前記判別部は、前記測定スペクトルの多変量解析を行って前記測定スペクトルの特徴値を抽出し、取得した前記特徴値と予め取得された前記複数のスペクトルの複数の特徴値とに基づいて、前記試料を構成する物質を判別することを特徴とする請求項 1 乃至 6 のいずれか一項に記載の測定装置。

40

【請求項 8】

前記多変量解析は、主成分分析であり、
前記判別部は、前記複数のスペクトルを主成分分析して取得した主成分スコアと、前記測定スペクトルを主成分分析して取得した主成分スコアと、に基づいて前記試料を構成する物質を判別することを特徴とする請求項 7 に記載の測定装置。

【請求項 9】

前記検出部は、前記試料で反射したテラヘルツ波を検出し、

50

前記測定スペクトルおよび前記複数のスペクトルは、反射率スペクトルであることを特徴とする請求項 1 乃至 8 のいずれか一項に記載の測定装置。

【請求項 10】

前記検出部は、前記試料を透過したテラヘルツ波を検出し、前記測定スペクトルおよび前記複数のスペクトルは、透過率スペクトルであることを特徴とする請求項 1 乃至 8 のいずれか一項に記載の測定装置。

【請求項 11】

前記測定スペクトルおよび前記複数のスペクトルは、複素屈折率スペクトルであることを特徴とする請求項 1 乃至 8 のいずれか一項に記載の測定装置。

【請求項 12】

テラヘルツ波を用いて試料の材質又は状態を判別する判別方法であって、前記試料にテラヘルツ波を照射する照射ステップと、前記試料を透過又は前記試料で反射したテラヘルツ波を検出する検出ステップと、前記検出ステップでの検出結果を用いて測定スペクトルを取得するスペクトル取得ステップと、前記試料の構造に関する情報を取得するための構造取得ステップと、前記測定スペクトルと複数のスペクトルとを用いて、前記試料の材質又は状態を判別する判別ステップと、を有し、前記判別ステップでは、前記試料の構造に関する前記情報に基づいて、前記測定スペクトルのうち前記試料を構成する物質の判別に用いる周波数範囲を設定することを特徴とする判別方法。

【請求項 13】

請求項 12 に記載の判別方法をコンピュータに実行させることを特徴とするプログラム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、テラヘルツ波を用いて試料を測定する測定装置および測定方法に関する。

【背景技術】

【0002】

近年、周波数が 30 GHz 以上 30 THz 以下の範囲におよぶ電磁波、いわゆるテラヘルツ波を用いた様々な検査技術が開発されている。特許文献 1 は、試料に照射したテラヘルツ波の反射光を解析することで試料表面の屈折率等を求め、結果を 2 次元的に可視化する技術が開示されている。また、特許文献 2 には、試料を透過したテラヘルツ波の強度分布を、周波数を限定したうえで可視化する技術が開示されている。テラヘルツ波の透過性を活かせること、形状について高い分解能を保ちながら試料の光学特性の分布を調べられることが特徴である。

【0003】

一方、このように測定した試料の光学特性を、予め材質別に得ておいた光学特性と比較して、その材質などを判別する測定方法もある。特許文献 3 は、生体試料の測定でこれを試みたもので、測定した光学特性に適切な前処理を施したのちに多変量解析を行い、測定領域の組織やその状態を推定する方法が開示されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0004】

【特許文献 1】特開 2011-112548 号公報

【特許文献 2】特許第 5291983 号

【特許文献 3】特表 2013-535014 号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

10

20

30

40

50

【 0 0 0 5 】

試料の所望の領域にテラヘルツ波を照射し、得られたスペクトルから試料を構成する物質（構成物質）を判別する場合、測定装置の空間分解能がその精度に影響する。試料に照射されたテラヘルツ波のビーム径が空間分解能の目安である。ビーム径は照射光学系の開口数（NA）を変えることで増減できるが、限度が存在して、波長程度以下には絞ることができず、これがテラヘルツ波を用いた測定の空間分解能の限界を定めている。例えば、比較的容易に扱える300GHz以上3THz以下の周波数範囲帯のテラヘルツ波の波長は、約1mm以上100μm以下の範囲に相当する。

【 0 0 0 6 】

試料の構造の大きさ（以下、スケールとも記す）が空間分解能より小さいと、テラヘルツ波を用いた試料の構成物質の判別の精度が低下することがある。また、試料構造のスケールが空間分解能と同程度の場合でも、慎重な解析が必要なことがあった。得られるスペクトルの形状が試料の構造の影響を受けて変化するため、予め得ておいたスペクトルとの比較対照が難しいからである。こうした場合、測定領域を構成する物質の判別の精度が低下することがある。

10

【 0 0 0 7 】

本発明は、かかる課題に鑑みてなされたもので、試料構造のスケールが測定装置の空間分解能と同程度以下の場合でも、精度よく判別を行うことができる測定装置及び測定方法を提供することを目的とする。

【 課題を解決するための手段 】

20

【 0 0 0 8 】

本発明の一側面としての測定装置は、テラヘルツ波を用いて試料を構成する物質を判別する測定装置であって、前記試料にテラヘルツ波を照射する照射部と、前記試料を透過又は前記試料で反射したテラヘルツ波を検出する検出部と、前記検出部の検出結果を用いて測定スペクトルを取得するスペクトル取得部と、前記試料の構造の大きさに関する情報を取得する構造取得部と、前記測定スペクトルと複数のスペクトルとを用いて、前記試料を構成する物質を判別する判別部と、を有し、前記判別部は、前記情報に基づいて、前記試料の物質の判別に用いる前記測定スペクトルの周波数範囲を設定することを特徴とする。

【 発明の効果 】

【 0 0 0 9 】

30

本発明の一側面としての測定装置によれば、試料構造のスケールが測定装置の空間分解能と同程度以下の場合でも、精度よく判別を行うことができる。

【 図面の簡単な説明 】

【 0 0 1 0 】

【 図 1 】 第 1 の実施形態の測定装置の全体構成図。

【 図 2 】 第 1 の実施形態の観察部の構成を説明する図。

【 図 3 】 第 1 の実施形態のビーム径の周波数依存性を説明するための図。

【 図 4 】 第 1 の実施形態の試料の構造と測定スペクトルとの関係を説明するための図。

【 図 5 】 第 1 の実施形態の測定方法のフローチャート。

【 図 6 】 第 2 の実施形態の観察部の構成を説明する図。

40

【 図 7 】 第 3 の実施形態の測定装置の全体構成図。

【 図 8 】 第 4 の実施形態の測定装置の全体構成図。

【 発明を実施するための形態 】

【 0 0 1 1 】

テラヘルツ波を用いた測定によって試料を構成する物質（構成物質）を判別する場合、解析に用いるスペクトルの周波数範囲を広く設定する方が、試料の材質や状態の推定に有利である。周波数範囲の広いテラヘルツ波を用いてスペクトルを取得した方が、情報量が多く、試料の光学特性を比較する範囲が広いほど多様な試料を判別できるからである。

【 0 0 1 2 】

しかしながら、照射したテラヘルツ波の周波数の中で最も低い周波数のテラヘルツ波で

50

の空間分解能が、試料の構造の大きさ（スケール）を上回ると、測定スペクトルは複数の物質の情報を含むため、試料を構成する物質の判別の精度が低下することがある。それを回避するためには、高周波数側の帯域を使用して空間分解能を上げればよいが、その場合、試料に照射されるテラヘルツ波の周波数範囲が狭くなるため、構造が均一で試料の構造のスケールが大きい領域での判別の精度が低下する。

【0013】

そこで、以降の実施形態では、試料の測定点に応じて、判別に用いる測定スペクトルの周波数範囲を変更する。具体的には、以降の実施形態では、試料の構造の大きさに関する情報を取得し、その情報を用いて判別の際に使用する測定スペクトルの周波数範囲を設定する。そして、設定した周波数範囲で、予め取得しておいた複数の物質又は物質の状態ごとのスペクトル（標本スペクトル）との類似の程度を取得し、スペクトルの類似の程度から試料が標本スペクトルの取得に用いた複数の物質のいずれのものにあたるかを判別する。このような構成にすることにより、測定点毎に、判別に用いる測定スペクトルの周波数範囲を適宜設定できるため、試料の構造のスケールが測定系の空間分解能と同程度の場合でも、試料を構成する物質の判別の精度を向上できる。

10

【0014】

ここで、本明細書の「試料の構造」とは、試料上のテラヘルツ波が照射されている領域（照射領域）内における、試料を構成する物質の組合せ及びその配置であると定義する。なお、試料を構成する物質には、組成が異なる物質に限らず、同じ組成の物体であっても照射されたテラヘルツ波の散乱の様子が異なる等、状態が異なる物体も含む。また、「試料の構造の大きさ（スケール）」は、テラヘルツ波の照射領域内における、試料を構成する1つ又は複数の物質それぞれの面積等である。

20

【0015】

以降の実施形態では、試料の構造の大きさに関する情報として、各物質それぞれの面積、又は、任意の方向における長さ等を取得する。たとえば、波長が100 μ m以上1mm以下の周波数領域のテラヘルツ波を用い、同程度の分解能でもって生体試料を測定する場合を考える。直径が10 μ m前後と分解能以下の一般的な細胞や、それらが一様に分布する組織は、同質な材料として扱われる。

【0016】

一方、照射領域内の組織中に直径500 μ mの別の組織があれば、その試料の構造のスケールは500 μ mである。正常な組織中に、生物学上は同じ組織でありながら腫瘍等に変質した異常な組織が存在する場合も同様に考える。

30

【0017】

スケール把握手段の詳細については後述するが、試料の照射領域のスケールを反映した量を可視光の反射率や画像解析から求める。

【0018】

「スペクトルの類似の程度」は、あるスペクトルと別のスペクトルとの一致の度合いを定量的に示したものである。たとえば、多変量解析等により少数の特徴値（特徴量）を算出し、特徴値空間内での距離をもって類似の程度とする。あるいは単純に、複数の周波数におけるスペクトル間の光学特性の差、又は、差もしくは差の二乗を広い周波数範囲にわたって積算・規格化した値等でもよい。構成物質の判別には、あるデータ列が既知の範疇（カテゴリ）のいずれに属するかを統計的に選択する手法を用いる。例えば、先の少数の特徴値とカテゴリの組を事前に学習しておき、測定スペクトルが各カテゴリに属する確率を算出する。この確率を類似の程度と読み替えても良く、最も高い確率値を得たカテゴリを判別結果として採用する。

40

【0019】

（第1の実施形態）

第1の実施形態の測定装置100（以下、「装置100」と呼ぶ）について図面を用いて詳細に説明する。装置100は、試料104にテラヘルツ波201を照射し、試料104で反射した後のテラヘルツ波202の時間波形を取得するテラヘルツ波時間領域分光装

50

置 (THz Time-Domain Spectroscopy 装置: THz-TDS 装置) である。装置 100 は、テラヘルツ波 202 の時間波形から測定スペクトルを取得し、測定スペクトルを用いて試料の構成物質を判別し表示する。代表的な装置構成について述べてから、分解能と測定スペクトルの関係、測定および処理の手順、及びその効果について説明する。

【0020】

図 1 は、装置 100 の構成を説明する図である。装置 100 は、筐体 115 内に、ステージ 105、遅延部 106、テラヘルツ波検出部 107 (以下「検出部 107」と呼ぶ)、ハーフミラー 111、第 1 の集光部 114、観察部 120、及びテラヘルツ波照射部 130 (以下「照射部 130」と呼ぶ) を有する。照射部 130 は、テラヘルツ波発生部 102 (以下、「発生部 102」と呼ぶ) と、テラヘルツ波 201 を集光して試料 104 に導く光学系である第 2 の集光部 103 と、を有する。また、装置 100 は、筐体 115 の外部に光源 101、スペクトル取得部 108、発振器 109、電源 110、制御部 112、PC 113、記憶部 116、構造取得部 131、及び判別部 132、を有する。

10

【0021】

試料 104 に照射するテラヘルツ波 201 は、フェムト秒オーダの超短パルス光を利用して発生させる。超短パルス光は、光源 101 から出力される。ここで、超短パルス光とは、パルス幅がフェムト秒オーダのパルス光を指す。本実施形態の光源 101 は、パルス幅が 10 フェムト秒以上 100 フェムト秒以下のフェムト秒レーザ光 (以下、単に「光」と呼ぶ) を出力する。

20

【0022】

光源 101 から出力された光は、ハーフミラー 111 で分岐され、一方は発生部 102 に、他方は光遅延部 106 を介して検出部 107 に照射される。発生部 102 は、光が入射することによりテラヘルツ波パルス (以下、単に「テラヘルツ波」と呼ぶ) 201 を発生するテラヘルツ波源である。発生部 102 には、既知の光伝導素子や半導体、非線形光学媒質などを用いることができる。本実施形態では発生部 102 として光伝導素子を用いる。光伝導素子には電源 110 により外部から電圧 (以下、バイアス電圧) が印加される。その状態で光伝導素子に光を照射することで、バイアス電圧に略比例する強度のテラヘルツ波 201 が発生する。発生したテラヘルツ波 201 は集光部 103 によって集光され、試料 104 の表面に照射される。集光部 103 には様々な形態があり得るが、光伝導素子を用いた光源では Si 製のレンズと放物面鏡の組み合わせが典型的に用いられる。

30

【0023】

次いで試料 104 の周辺の構成について説明する。試料 104 は不図示の治具を用いてステージ 105 に配置されている。治具の位置や角度は、試料 104 上におけるテラヘルツ波 201 の照射領域 121 が、試料 104 の所望の測定点と一致するよう適宜調整される。ステージ 105 は制御部 112 からの信号に従って試料 104 を移動させる。試料 104 と照射領域 121 との相対位置を適宜変えることによって、試料 104 上の所望の位置 (測定点) に照射領域 121 を合わせることができる。テラヘルツ波 201 の照射領域 121 には、後述の観察部 120 からの光が焦点を結ぶように構成されている。

40

【0024】

なお、図 1 には大気中を伝播するテラヘルツ波 201 を試料 104 に直接照射する構成を示したが、平板状のテラヘルツ波透過部材 (以下、「窓」とも言う) を試料 104 に密着させ、窓越しにテラヘルツ波 201 を試料 104 に照射する構成としてもよい。窓は治具の一部として試料 104 を固定し、測定点の位置決めを容易にする効果がある。

【0025】

試料 104 で反射した後のテラヘルツ波 202 の検出は、いわゆる時間分解分光法 (THz-TDS 法) の原理を用いて行われる。試料 104 で反射したテラヘルツ波 202 は第 1 の集光部 114 によって集められ、検出部 107 でその強度が検出される。検出部 107 には、既存の様々な構成を使用できるが、本実施形態では光伝導素子を想定した。検出部 107 へのテラヘルツ波 202 の集光には、放物面鏡を用いた第 1 の集光手段 114

50

とS i レンズとを用いるものとした。

【0026】

検出部107としての光伝導素子は、光が照射された極めて短い時間のみ、入射したテラヘルツ波202の強度に略比例した電流を出力する。得られる電流は微弱なため、位相敏感検波により、有用な成分のみを抽出することが行われる。発振器109は位相敏感検波に必要な周期信号の供給源である。周期信号の一部は電源110に出力され、発生部102のバイアス電圧を変調する。他方はスペクトル取得部108に供給され、検出部107の出力から変調成分を抽出するために用いられる。

【0027】

スペクトル取得部108は、検出部107の検出結果を用いて、テラヘルツ波202の時間波形及び測定スペクトルを取得する。具体的には、スペクトル取得部108は、検出部107の検出結果としての、超短パルス光の周期的な照射に対応した時間領域(スロット)の或る時刻におけるテラヘルツ波202の振幅に比例した信号を取得し、時間波形を取得する。そしてスペクトル取得部108は、取得した時間波形と予め参照点において取得しておいた時間波形とを周波数軸上で比を取ることで測定点での周波数スペクトル(以下、測定スペクトル)を算出し、これを判別部132に出力する。

10

【0028】

遅延部106は、テラヘルツ波202が検出部107で検出されるタイミングを変更する変更部である。遅延部106は、光源101から検出部107に入射する光の光路長を制御して、検出部107に光が入射するタイミングを変更する。これにより、スペクトル取得部108は、テラヘルツ波の振幅の時間波形を得ることができる。遅延部106には例えばステージに反射鏡を取り付けたものや、光ファイバを伸縮させるものなどがある。このほか、ほぼ同等な光を発生する光源を2台用意し(1台は発光部用、他方は検出部用)、双方のレーザーパルス同期させたうえで発光のタイミングを変えるという手段で、遅延部106を代替することも可能である。

20

【0029】

なお、発光手段と検出手段とを収める空間及びテラヘルツ波が伝播する空間は、乾燥空気又は窒素等を満たした筐体115の中に格納されている。これは、測定の際に水蒸気によってテラヘルツ波201、202が吸収されることを防ぎ、照射するテラヘルツ波に含まれるノイズを減らすことを目的としている。

30

【0030】

以上の装置100の各部の動作を制御および統括を行うのが制御部112である。制御部112はさらにコンピュータ(PC)113に接続され、測定の指令や結果の授受を仲介する。PC113は、測定条件の設定および結果の表示等の測定者とのインタフェースを担当する。判別部132は、スペクトル取得部108が取得した測定スペクトルと、予め異なる複数の材料及び状態毎に取得しておいた複数の標本スペクトルと、を比較して各測定点における試料の構成物質を判別する。比較検討用の標本データ等は、PC113の記憶部116に格納されており、適宜引き出して使用される。また、記憶部116は、図5の測定方法のフローチャートの各ステップに対応するプログラムが記憶されており、CPUがそのプログラムを読み込んで実行することで各処理が行われる。なお、複数の標本スペクトルは、記憶部116に限らず、取り外し可能な記憶媒体、又はインターネットで接続されるクラウド等に記憶されていても良い。

40

【0031】

制御部112、構造取得部131、判別部132は、プロセッサ、メモリ、記憶装置、入出力装置などを有する演算装置に含まれる。これらの一部の機能を論理回路などのハードウェアで代替することもできる。なお、演算装置は汎用のコンピュータで構成してもよいし、ボードコンピュータやASICのような専用のハードウェアで構成してもよい。なお、測定方法に関するプログラムは、このコンピュータのメモリに記憶されていても良い。また、制御部112、構造取得部131、判別部132を含むコンピュータとPC113とが一体でもよい。

50

【0032】

図2は本実施形態の観察部120の動作を説明するための図である。観察部120の目的は照射領域121における試料の構造の大きさに関する情報を取得するための測定を行うことにあり、本実施形態では観察用の光照射部203と光検出部204とを用いて達成する。

【0033】

図2(a)に、観察部120の構成を示した。試料104には集光部103(図1参照)からテラヘルツ波201が照射されている。テラヘルツ波201のビームは絞り込まれ、その焦点205はちょうど試料104の表面に位置するように調整されている。一方、試料104から反射されたテラヘルツ波202は、集光部114で集光された後、検出部107(図1参照)で検出される。

10

【0034】

本実施形態の観察部120は、観察用光源としての光照射部203と光検出部204とを有する。光照射部203には、小型かつ軽量で輝度の高いレーザ210を発する半導体レーザが好適である。レーザ210の焦点はテラヘルツ波201の焦点205と一致するように調整される。なお、レーザ210の色(波長)に特別な制限はないが、可視光領域から選択することが望ましい。テラヘルツ波201の焦点205、すなわち試料104上の測定点の位置を目視でき、また、テラヘルツ波201と比較して波長が短いため容易にビーム径を絞ることが可能だからである。

【0035】

光検出部204は、試料104に反射された光照射部203からのレーザ211を検出し、その強度を構造取得部131(図1参照)へと出力する。なお、特定の試料が対象なら、レーザ210として試料104の構造に対してよりコントラストの高い波長を含むレーザを採用することが望ましい。試料104の状態によっては、そのコントラストが不足して違いを検出できないことがある。そうした場合は、テラヘルツ波201のみで判別しているのと同様である。

20

【0036】

詳しい測定手順については後述するが、光照射部203からのレーザ210の照射は、次のタイミングで行われる。最初は、試料104をステージ105にセットする段階である。これは、試料104上の測定位置や範囲を確認ないし調整する目的で行われる。この場合は、光検出部204は動作させなくともよい。また、レーザ210は、試料104の各点で測定スペクトルを取得するための測定を行う前もしくは後にも試料104に照射される。光照射部203から、測定を中心点(すなわち焦点205)に向けてレーザ210を照射し、光検出部204でレーザ211を検出する。そして、光検出部204からの信号を構造取得部131で解析することにより、照射領域121における試料104の構造のスケールに関する情報を取得する。

30

【0037】

このとき光照射部203が照射するレーザ210の軌跡形状の例を、図2(b)および図2(c)に示した。図2(b)のレーザ210の軌跡形状は、前者は測定点205を中心とする円206であり、図2(c)のレーザ210の軌跡形状は、測定点205で交差する十字207である。光照射部203の先端には、微小な鏡が振動することにより、レーザ210の照射位置を変更する簡易走査系が組み込まれている。前述の円周や十字の軌跡形状は、この微小な鏡が照射光のスポットを走査することで形成される。円206及び十字207の大きさは、照射領域121と略等しくなるよう設定される。

40

【0038】

走査用の周期信号は、構造取得部131へと送られている。構造取得部131は、光検出部204の信号を該周期信号に同期して検出することで、照射領域121内の試料104の構造のスケールに関する情報を取得する。たとえば、軌跡形状が円306のレーザ210を照射した際、照射領域121内に2種の物質が隣り合う境界があれば、光検出部204が出力する信号の1周期中に2度の段差が生じる。また、軌跡形状が十字207のレ

50

ーザ 210 を照射した場合は、レーザー 210 が境界を跨ぐと、光検出部 204 の出力信号に段差が生じる。構造取得部 131 は、光検出部 204 の出力信号に生じる段差の数から、試料 104 の構造のおよそのスケールを把握する。レーザー 211 の振幅を調節できるなら、レーザー 211 の振幅を徐々に小さくしていき信号中から段差が無くなる点を見出せば、試料 104 の構造が均一となるスケールを知ることができる。

【0039】

なお、光照射部 203 の先端に簡易走査系が組み込まれていない場合も、ステージ 105 を用いて試料 104 を移動することで、ほぼ同様な効果を得ることができる。すなわち、試料 104 上の焦点 205 の位置を走査しつつ、光検出部 204 の検出結果としての信号を取得する。これは、テラヘルツ波を用いた測定スペクトルの測定と並行して実施してもよいし、別途行ってもかまわない。取り込んだ信号を PC 113 で解析し、各測定点の照射領域 121 について発生した段差の数を求めることで、試料 104 の構造のスケールに関する情報を取得する。

10

【0040】

テラヘルツ波 201 のビーム径の周波数依存性について、図 3 (a) 及び図 3 (b) を参照して説明する。図 3 (a) は、ガウスビームであるテラヘルツ波 201 のビームプロファイル (強度の空間分布) である。横軸はテラヘルツ波 201 の伝搬方向と垂直な方向におけるテラヘルツ波 201 の断面における位置 x 、縦軸は規格化された強度 I である。任意の周波数 のテラヘルツ波 201 の強度分布が、ほぼこの形に従う。強度分布 301 について、テラヘルツ波 201 の強度が、テラヘルツ波 201 の強度の最大値の $1/e^2$ になる 2 点間の距離 302 をビーム径と定義する。

20

【0041】

図 3 (b) に、照射領域 121 におけるテラヘルツ波 201 のビーム径の一例を示した。横軸は周波数 (THz)、縦軸はビーム径 w (mm) である。各点はナイフエッジ法により評価した測定値、実線 (Y 軸) と破線 (X 軸) は、ビーム径がガウス分布に従うとして、各点を通るようフィッティングした結果である。任意の周波数 におけるビーム径 w は、装置 100 の光学系、特に集光部 103 の構成に依存する。絞り込みには限界があり、空間の分解能は最良でも波長程度であることは前述した。本例では、周波数 = 1.8 (THz) のテラヘルツ波のビーム径 w が約 1 (mm) である。図示するように、ビーム径 w は周波数の増加にともない減少する。本例では、周波数 = 0.5 (THz) 付近を境に、より低周波側でビーム径 w が大きく変化していることが見て取れる。

30

【0042】

図 3 (c) に、試料 104 の光学写真像と 2 種類の周波数におけるビーム径を重ねて表示した例を示す。本実施形態の試料 104 は、検体としてのヒト大腸の固定切片を HE 染色して、パラフィン 307 で包埋したものである。試料 104 は、おおまかに 3 つの領域、すなわち左から粘膜下層 305、粘膜層 306、パラフィン 307 を含み構成されている。ここでは、腺癌が生じることで知られる粘膜層 306 に注目する。粘膜層 306 は、元来大腸の内壁を覆う薄い層状の組織であって、試料 104 では幅約 1 (mm) の帯状の領域であることが分かる。

【0043】

また、図 3 (c) には、周波数 = 0.5 (THz) におけるテラヘルツ波 201 の照射範囲 303 と、周波数 = 1.8 (THz) におけるテラヘルツ波 201 の照射範囲 304 と、を示した。照射範囲 303 の直径は 2.6 (mm)、照射範囲 304 の直径は 1 (mm) である。照射範囲 303 には粘膜下層 305、粘膜層 306、パラフィン 307 の各組が混在するのに対し、照射範囲 304 は粘膜層 306 のみを含んでいる。そのため、粘膜層 306 に着目するのであれば、試料 104 上にテラヘルツ波が照射された場合の照射領域が、照射範囲 304 より狭い周波数範囲 1.8 (THz) の測定スペクトルを用いて試料の構成物質を判別すべきである。なぜなら、試料 104 の構造のスケールがビーム径に近づくと、異なる材質部分又は状態部分の間で測定スペクトルの混合が生じることがあるからである。これについて、図 4 を参照して詳細に説明する。

40

50

【0044】

図4(a)に、3種の物質402、403、404を含む試料401の模式図を示した。試料401表面の点405、406、407の各点は、測定時のテラヘルツ波201の焦点を表している。各点405、406、407の周囲には、テラヘルツ波201の照射範囲を示した。照射範囲409、411、413は、周波数 ν_1 での光束径 w_1 の照射範囲である。照射範囲408、410、412は、周波数 ν_2 での光束径 w_2 の照射範囲である。なお、周波数 ν_2 は周波数 ν_1 より大きい。

【0045】

図4(b)は、各点405、406、407での測定で得た測定スペクトルの例を示している。スペクトルの横軸は周波数、縦軸は反射率とした。測定スペクトル415は点405を焦点としてテラヘルツ波201を照射して取得した反射率スペクトル、測定スペクトル416は点406を焦点としてテラヘルツ波201を照射して取得した反射率スペクトルである。測定スペクトル417は、点407を焦点としてテラヘルツ波201を照射して取得した反射率スペクトルである。また、標本スペクトル418は物質403単独での反射率スペクトルである。

10

【0046】

点407を焦点とした場合、周波数 ν_1 での照射範囲409よりも広い範囲に物質404が均等に分布する。測定スペクトル417は、物質404単独での反射率スペクトル(不図示)と良く一致するため、照射範囲409の構成物質の判別は容易である。これは点405を焦点として照射範囲412にテラヘルツ波を照射した場合も同様で、測定スペクトル415は物質402単独での反射率スペクトル(不図示)と良く一致する。このことは、光束径 w_1 と光束径 w_2 との何れのテラヘルツ波を用いても同様である。そのため、点405、407を測定点として取得した測定スペクトルから、試料104の構成物質の判別を行う場合は、測定スペクトルの周波数範囲を広く設定する。

20

【0047】

一方、点406を焦点とした場合は、先の図3(c)と似た状況、すなわち試料104の構造のスケールと光束径(照射範囲410)とが同程度となっている。光束径 w_2 の照射範囲412は物質403の領域のみをカバーしているが、光束径 w_1 の照射範囲411では物質402、404の領域も含んでいる。そのため、測定スペクトル416は、標本スペクトル418と高周波側421(ν_2 ν_3)では一致条件を満たすものの、低周波側420(ν_1 ν_2)では乖離する。これは、測定した反射率スペクトル416が各物質のスペクトルの混合であることに一因がある。その割合は光束径 w ()の照射範囲に含まれる各物質の面積比に略比例し、面積比は測定点の位置によって変わる。このため、試料104の構造のスケールが光束径と同程度の状況において、低周波側のスペクトルは試料104の構成物質の判別に適していない。この場合、高周波側(周波数範囲421)の測定スペクトル及び標本スペクトルを用いて判別する必要がある。

30

【0048】

ただ、試料104の全ての測定点で周波数範囲を限定すると、試料104のその他の部分での判別精度が低下してしまう。そこで、本実施形態では、試料104の構造のスケールに関する情報を取得して、試料104に対するテラヘルツ波201の照射位置に応じて、測定点毎に、判別に用いる測定スペクトルの周波数範囲を設定する。

40

【0049】

ここで、測定の際に任意の周波数範囲のテラヘルツ波を試料104に照射できるなら、物理的な光束径の制御を通じて先に述べたスペクトルの混合を回避できることになる。しかし、その様にするには、発光素子や絞り、光学フィルタなど、大規模な光学系を追加する必要がある。また、テラヘルツ波201の光束径は、波長によって最小値が決まるため、所望の光束径に絞ることができないことがある。そのため、本実施形態のように、照射するテラヘルツ波の周波数範囲は変えずに、着目する測定スペクトルの周波数範囲を数値的に選択することが望ましい。なお、ここでは測定スペクトルとして反射率スペクトルを例にとったが、透過率スペクトル又は屈折率スペクトル、吸収係数スペクトルでも

50

よい。

【0050】

本実施形態における測定方法のフローチャートを図5(a)～図5(c)に示した。図5(a)は測定開始から終了までの大まかな手順を示している。試料104の測定範囲が決まれば、テラヘルツ波を照射する位置を変えながら測定する測定プロセスの繰り返しとなる。測定方法を図5(b)に示した。各測定点でスペクトルが得られたら、予め取得しておいた既存の材料ごとのスペクトルと比較し、測定した試料に該当する材料の候補を推定する。その識別手順を図5(c)に示した。

【0051】

なお、測定スペクトルを用いて試料104の構成物質を判別するには、事前に判別器を作成、用意しておく必要がある。判別器とは、予め取得しておいた既存の物質毎の標本スペクトルを用いて判別を行うためのサブルーチン等のことである。判別器の作成方法は図5に含まれていないが、判別の成否にかかわるので後述する。

10

【0052】

ステップS501では、試料104をステージ105に配置して、試料104と照射領域121との相対位置を調整する。具体的には、不図示の治具を用いて試料104の測定面の高さや傾きを適正な位置にセットし、また所望の測定点がテラヘルツ波の照射領域121に来るように平面上の位置を調整する。調整終了後、試料104の表面を撮像しておく和良好的(ステップS502)。

【0053】

ステップS503では、測定する試料104の種類及び測定回数、判別に用いる測定スペクトルの種類等の測定条件を設定する。試料104の任意の領域を測定する場合は、測定したい範囲及び測定点の間隔等も測定情報として設定する。これらの測定情報は、ユーザによって選択され、PC113に入力される。PC113は、この入力内容を受けて、測定結果を識別する際に使う判別器及び関連データを記憶部116から引き出して用意する。引き続きステップS504では、入力した測定条件に基づいて装置100がテラヘルツ波を用いて試料104の測定を行う。

20

【0054】

その後、スペクトル取得部108が、時間波形を取得し、得られた時間波形をフーリエ変換して測定スペクトルが算出される。また、ステップS504では、観察部120による可視光を用いた測定領域121の測定も行う。ステップS505では、構造取得部131が、観察部120の光検出部204の検出結果を用いて試料104の構造のスケールに関する情報を取得する。ステップS504、S505は、ステップS503で指定した測定点の全ての測定が終了するまで繰り返し行われる。

30

【0055】

ステップS506では、判別部132が、各測定点について、試料104の構成物質を判別する。判別部132の判別には、ステップS504で得た測定スペクトル、ステップS505で得た試料104の構造のスケールに関する情報、及びスペクトルの種類などをもとに決めた判別器を用いる。最後に、ステップS507では、得られた結果、すなわち1点の測定であれば測定スペクトルや判別結果を、任意の領域の測定であれば判別結果の分布等の結果を表示し、一連の測定を終了する。

40

【0056】

試料104を測定するステップS504の詳細なフローチャートを、図5(b)に示した。領域を測定するよう設定した場合、以降は繰り返しの作業(ステップS511)となる。ステップS512では、制御部112がステージ105を動作させて、試料104上の測定点を装置100の照射領域121に一致させる。ついで、ステップS513では、観察部120により照射領域121における試料104の構造のスケールを測定する。その後、ステップS514で照射部130がテラヘルツ波201を試料104に照射する。ステップS515では、スペクトル取得部108が、検出部107の検出結果を用いてテラヘルツ波202の時間波形を取得する。

50

【0057】

ステップS516ではテラヘルツ波202の時間波形を用いて測定スペクトルを取得する。測定スペクトルとしては、たとえば、測定で取得した時間波形と参照用の時間波形の周波数軸上の比からは(複素振幅)反射率スペクトルが求まる。参照用の時間波形は、例えば、試料104の位置に反射ミラーを置き、これにテラヘルツ波201を照射して反射ミラーで反射したテラヘルツ波202を検出した検出結果から取得できる。屈折率スペクトル、吸収係数スペクトルは、この反射率スペクトルから算出する。透過部材(窓)越しの測定の場合はスペクトルの取得方法がやや複雑になるが、窓から試料104への複素振幅反射率をまず求め、ついで大気中での反射率に変換し、最後に屈折率や吸収係数へ変換する。以上のステップS512~S516を、全ての測定箇所を実施したならループを抜ける(ステップS517)。

10

【0058】

また、各点の構成物質を判別するステップS506の詳細を図5(c)に示した。ここでも、領域を測定するよう設定した場合、以降は繰り返しの作業(ステップS521)となる。

【0059】

ステップS522では、判別部132が、先にステップS505で取得しておいた試料104の構造のスケールに関する情報をもとに、判別で用いる適切なスペクトル周波数範囲を決定する。続くステップS523では、判別部132が、ステップS503で指定した試料104の種類、判別に用いるスペクトルの種類、及び、ステップS522で設定した周波数範囲から、最適な判別器を決定する。ステップS524では、判別部132が、測定スペクトルの前処理を行う。これを換言すると、判別部132は、ステップS516で得た測定スペクトルを識別用に加工する。具体的には、測定スペクトルから、判別に用いる周波数範囲の値を抽出し、所定の周波数間隔毎に平均してデータ数を減らし、さらにステップS523で決定した判別器に付属する関連データを用いて、主成分軸上の主成分スコアへと変換する。

20

【0060】

ステップS525では、先のステップS524で求めた主成分スコア値をステップS523で決定した判別器にかける。その結果、例えば、物質402、403、404である事後確率が順に10%、75%、15%となった場合は、測定スペクトルは、物質403のスペクトルと類似の程度が最も高いことが分かる。よって、測定点は物質403である可能性が最も高いと推定できる。以上のステップS522~S525を、全ての測定箇所を実施したらループを抜ける(ステップS526)。

30

【0061】

ここで判別器について説明する。あるデータ列が既知のカテゴリのいずれに属するかを求める統計的な手法として、様々な種類の判別器が提案されている。ここでは、多変量解析の一種である主成分分析(Principal Component Analysis: PCA)と線形判別分析(Linear Discriminant Analysis: LDA)とを組み合わせて作成した判別器を用いた。PCAは特徴抽出によるデータ点数圧縮を目的とし、LDAは判別を目的としている。

40

【0062】

LDAは、判別器の作成の際に事前の学習が必要であり、物質の種類毎又は状態毎に用意した複数の標本スペクトルを含むデータ列を所定の手順で計算することで、データ列から物質の種類又は状態への対応づけを行う。この学習作業は、データ列の条件を揃える必要がある。そこで、スペクトルの種類や試料の種類、周波数範囲毎に予め判別器を作成し、PC113の記憶部116に格納しておく。その他の判別手法としては、単純ベイズ分類、サポートベクターマシン、決定木学習であるAdaBoostやRandom Forest、人工ニューラルネット、といったものが挙げられる。試料の特性や装置の性能に適したものを適宜選択する。

【0063】

50

本実施形態では、構造取得部 131 が試料 104 の構造の大きさに関する情報を取得し、取得した情報を用いて、判別に用いる測定スペクトルの周波数範囲を決定する。このような構成にすることにより、測定点毎に、試料 104 の構造のスケールに応じて適した周波数範囲での判別を行うことができるため、周波数範囲を変更しない場合と比較して判別の精度を向上できる。

【0064】

(第2の実施形態)

第2の実施形態の測定装置について、図6を参照して説明する。本実施形態は、観察部 120 の構成および動作が第1の実施形態と異なる。その他の構成は、装置 100 と同様である。本実施形態の観察部 120 は、撮像部 601 を有し、試料 104 の照射領域 121 を含む領域 602 を撮像する。撮像結果としての画像は、ユーザが適宜モニタ可能なように構成するとよい。構造取得部 131 は、観察部 120 が取得した画像の照射領域 121 にあたる部分を解析し、試料 104 の構造のスケールに関する情報を求める。本実施形態の測定装置について、第1の実施形態と共通する部分については説明を省略する。

10

【0065】

図6(a)は、本実施形態における観察部 120 の構成を説明する図である。照射部 130 は、テラヘルツ波 201 を試料 104 上の焦点 205 に集光して照射する。照射領域 121 で反射して返ってきたテラヘルツ波 202 は、集光部 114 を経て検出部 107 で検出される。

【0066】

観察部 120 は、光照射部 203 と撮像部 601 とを有する。光照射部 203 からは、試料 104 上の測定点の位置を確認するためのレーザ 210 が焦点 205 に向けて照射される。たとえば、図5に示した測定方法の、試料 104 をセットするステップ(S501)において、光の照射と位置確認および試料位置の調整が行われる。

20

【0067】

本実施形態では、観察部 120 に試料 104 を撮像する撮像部 601 が追加される。撮像部 601 は、小型のCCDカメラ又は内視鏡等を用いるとよい。撮像部 601 は、筐体 115 内で、且つ、テラヘルツ波 201、202 を遮らない位置に配置される。その撮像範囲 602 は、焦点 205 近傍の照射領域 121 が含まれるように調整されている。撮像部 601 による撮像のタイミングは、制御部 112 によって制御されており、取得した画像は構造取得部 131 へと送られる。

30

【0068】

観察部 120 及び試料 104 の別の配置例を図6(b)に示した。図6(b)の構成は、試料 104 を窓 603 越しに測定する構成である。試料 104 は、窓 603 と測定したい面(測定面) 604 とが接するように配置される。テラヘルツ波 201 は、該測定面 604 上の焦点 205 に向けて集光されながら照射され、照射領域 121 で反射して返ってきたテラヘルツ波 202 は、検出部 107 により検出される。前述の構成と同様に、測定点の確認用に、焦点 205 に向けて光照射部 203 からレーザ 210 が照射される。

【0069】

また、観察部 120 は、筐体 115 内にあり、且つ、撮像部 601 がテラヘルツ波 201、202 を遮らないように配置される。また、撮像部 601 の撮像範囲 602 が、焦点 205 近傍の照射領域 121 を含むように構成される。なお、試料 104 が薄片状であるなど、測定面 604 の試料の構造を試料 104 の裏面から観察できる場合には、観察部 120 を、窓 603 の試料 104 側に配置してもよい。

40

【0070】

撮像部 601 による撮像は、図5のステップS513のスケール測定の段階において行う。観察部 120 が試料 104 上の撮像範囲 602 の画像を取得後、その撮像結果を構造取得部 131 は、照射領域 121 内の面積比を算出するために画像解析によって物質を粗く分類する。そして、照射領域 121 におけるテラヘルツ波 201 の焦点を中心とする関心領域(Region of Interest: ROI)を設定し、その直径を変え

50

ながら試料104を構成する物質毎の面積比を調べる。ある物質が大部分を占めたら、その時のROIの直径を試料104の構成のスケールに関する情報とする。

【0071】

別案として、ステップS501で試料表面の広範囲・高精細画像を撮像しておき、ステップS513で画像から照射領域121の焦点を中心とする関心領域を切り出し、同様な画像解析を施して試料104の構造のスケールに関する情報を取得する手法もある。また、より簡便には、前述の面積比の平方根を求めて試料104の構造のスケールに略比例する指標としてもよい。いずれの手法をとるかは、撮像部601の性能及び処理速度等に依存する。

【0072】

本実施形態の構成では、構造取得部131が試料104の構造の大きさに関する情報を取得し、取得した情報を用いて、判別に用いる測定スペクトルの周波数範囲を決定する。このような構成にすることにより、測定点毎に、試料104の構造のスケールに応じて適した周波数範囲での判別を行うことができるため、周波数範囲を変更しない場合と比較して判別の精度を向上できる。また、照射領域121を撮像した画像をもとに、試料104の構造のスケールに関する情報を取得する。そのため、試料104が筐体115内に格納されていて試料面等を目視し難い場合においても照射領域121を確認できるため、測定が容易になるという利点もある。

【0073】

(第3の実施形態)

第3の実施形態の測定装置700(以下、「装置700」と呼ぶ)について、図7を参照して説明する。装置700は、判別器としての識別フィルタやその関連データのデータベースをPC113の外部の記憶媒体701が有している点が第1、第2の実施形態と異なる。なお、図7には筐体115の内部の構成を記載していないが、これは第1の実施形態と同様である。本実施形態の測定装置はデータベース(DB)701を有している。該DB701は、様々な種類の物質について、種類又は状態別に、各物質の構造の代表的なスケール(大きさの代表値)と、スケールに基づいて作成された識別フィルタとが格納されている記憶媒体である。また、DB701は、PC113と接続されており、測定及び試料104の構成物質の判別のための解析の際に、PC113が所望するデータにアクセスできるよう構成されている。

【0074】

識別フィルタは、判別を行う前に用意しておく必要がある。判別する可能性のある物質と周波数範囲がそれぞれ複数あるため、それらに対応する識別フィルタを全て記憶するDB701のサイズは膨大なものとなりうる。一方、試料となる物質が定めれば解析の際に必要なデータ(識別フィルタ)は一部分でよい。PC113はステップS503で入力された試料の種類をもとに、適切な範囲のデータをDB701から抽出して記憶部116に読み込む。なお、ここまでDB701は、装置700と一体の構成として説明したが、交換可能な外部の記憶装置(メディア)、又はネットワーク経由で接続されていてもよい。

【0075】

以上の様に、本実施形態では、試料の種類別に、各試料の構造の大きさの代表値を記憶するデータベースを備える。そして、判別部132が、測定した試料104の構成物質を判別する際に使用する測定スペクトルの周波数範囲を、データベースから抽出したデータから取得した試料104の構造の大きさに関する情報を用いて設定する。そのため、本実施形態によれば、測定点毎に、試料104の構造のスケールに適した周波数範囲での判別を行うことができるため、周波数範囲を変更しない場合と比較して判別の精度を向上できる。

【0076】

また、大容量のDB701と高速アクセスが可能な記憶部116とを併用することで、広範囲な試料104の構成物質の判別を高速に行うことができる。また、識別フィルタの更新や追加が容易となる利点がある。

10

20

30

40

50

【 0 0 7 7 】

なお、試料の構造の大きさに関する情報の取得には、DB701から取得できるデータに加えて、観察部120の測定結果も併せて用いてもよい。また、観察部120を有さず、DB701から得られるデータのみから試料104の構造の大きさに関する情報を取得する構成でもよい。

【 0 0 7 8 】

(第4の実施形態)

第4の実施形態の測定装置800(以下、「装置800」と呼ぶ)について、図8を参照して説明する。上述の実施形態は、試料104で反射したテラヘルツ波202を検出する反射系の測定装置であったのに対し、本実施形態は透過系の構成を有する。発生部102から発生したテラヘルツ波201は、照射部830の集光部803によって集光され、試料804に照射される。試料804は、ステージ805に不図示の治具を用いて固定されている。治具には、試料804を透過したテラヘルツ波810が通過する孔が形成される。試料804を通過したテラヘルツ波810は、集光部806によって集められ、検出部107によって検出される。また、先の実施形態と同様、観察部120によって試料804上の照射領域807が観察され、その観察結果を用いて構造取得部131が、照射領域807における試料804の構造のスケールに関する情報を取得する。

【 0 0 7 9 】

試料804は、平板状で表面が平滑であり、テラヘルツ波を良く透過する物質で構成される。また、その厚みは、既知か別途測定によって調べておく必要がある。つまり、固有の加工装置で所定の厚みに切り出される試料片や、セル状の治具で等間隔に把持される試料(液体も含む)、各種の基板、などが本実施形態の試料に適している。本実施形態では、試料804の透過率スペクトルを測定する。比較および判別は、透過率スペクトルを用いてもよいし、試料804の厚みの値を用いて算出した複素屈折率スペクトル、すなわち実部の屈折率スペクトルと虚部の消衰係数スペクトルとを用いてもよい。

【 0 0 8 0 】

本実施形態の装置800は、構造取得部131が試料804の構造の大きさに関する情報を取得し、取得した情報を用いて、判別に用いる測定スペクトルの周波数範囲を決定する。このような構成にすることにより、測定点毎に、試料804の構造のスケールに応じて適した周波数範囲での判別を行うことができるため、周波数範囲を変更しない場合と比較して判別の精度を向上できる。また、装置800のように試料804を透過したテラヘルツ波810を測定する透過系の測定装置では、一般に、反射系と比較して取得するスペクトルの精度が高いという利点がある。

【 0 0 8 1 】

(第5の実施形態)

第5の実施形態について説明する。本実施形態は、観察部120を持たず、ステップS503などで入力した条件と識別フィルタの出力とを用いて試料の構造のスケールを判断する点が先の実施形態と異なる。なお、本実施形態では、観察部120を有する構成としても良いし、観察部120を有さない構成としてもよい。観察部120を有さない方が、コンパクトな装置にできる利点がある。

【 0 0 8 2 】

本実施形態では、判別が困難であった測定点について、スケールの異なる別の識別フィルタで判別を行う。まず、第1の実施形態のステップS503と同様の手順で入力した試料の種類から、その試料の構造が持つ様々なスケールを把握し、対応する識別フィルタを準備する。これらは第3の実施形態のデータベースから取得する構成としても良い。ついで、対応する識別フィルタのうち最もスケールの大きい、すなわちスペクトルの周波数範囲の広い識別フィルタを用いて、測定したスペクトルを処理し、判別結果と事後確率の推定値を求める。推定値が所定の値(例えば0.6=60%)より低い場合は、一致条件を満たさないとして、設定したスケールが適当ではなかったと判断し、より小さな周波数範囲で同様に判別結果と事後確率を求める。分布測定の結果を得る場合には、測定点毎にこ

10

20

30

40

50

の手順を繰り返す。推定値が所定の値を上回らない場合は、判別不可（不明）として処理する。すなわち、これは、測定点の近傍が想定外の物質や構造を有するか、異なる物質との境界を含んでいる場合である。

【0083】

また別の形態として、全測定点について、複数の判別器で判別を行う構成がある。網羅的な判別作業の後、測定点毎に事後確率が最大となる物質を、最終的な判別結果として採用する。いずれの場合も、構造のスケールに関する情報として、予め取得しておいた複数の物質の情報と事後確率とを用いている。また、判別器のうち、最も広い周波数範囲のスペクトルを用いて取得した判別器を用いてから、事後確率から測定スペクトルの周波数範囲を設定する構成でもよい。

10

【0084】

更なる別の形態として、入力した試料の種類から適切なスケール、ひいては識別フィルタを1つだけ選択し、全ての測定スペクトルを判別する形態も考えられる。試料内の構造のスケールの違いを無視するため、判別の精度は先の実施形態に劣るが、構成はより簡便である。

【0085】

本実施形態の判別部132では、測定スペクトルと予め取得しておいた標本スペクトルとの類似の程度を取得し、測定スペクトルが標本スペクトルのいずれのものにあたるかを判別する。その際、判別部132は、判別に用いる測定スペクトルの周波数範囲に対応するように作成された複数の判別器を備える。測定スペクトルが複数の標本スペクトルの何れにあたるかの判別は、周波数範囲の異なる複数の判別部132が取得した類似の程度の指標が高いものを選んで決定する。類似の程度の指標としては、上述した事後確率を用いる。

20

【0086】

このように、本実施形態は、予め取得しておいた複数の物質の情報及び事後確率から試料の構造の大きさに関する情報を取得し、取得した情報を用いて、判別に用いる測定スペクトルの周波数範囲を設定する。このような構成にすることにより、測定点毎に、試料804の構造のスケールに応じて適した周波数範囲での判別を行うことができるため、周波数範囲を変更しない場合と比較して判別の精度を向上できる。

【0087】

以上、本発明の好ましい実施形態について説明したが、本発明はこれらの実施形態に限定されず、その要旨の範囲内で種々の変形及び変更が可能である。また、上述の各実施形態は適宜組み合わせることができる。

30

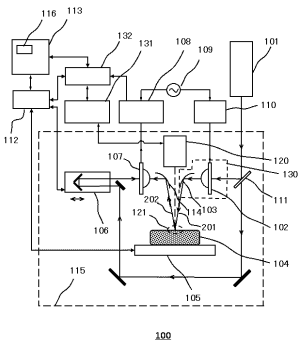
【符号の説明】

【0088】

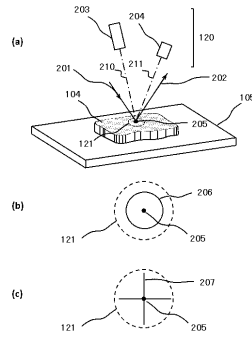
- 100 測定装置
- 104 試料
- 107 検出部
- 108 スペクトル取得部
- 130 照射部
- 131 構造取得部
- 132 判別部

40

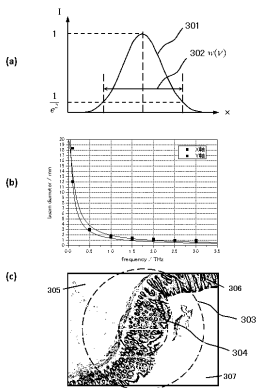
【 図 1 】



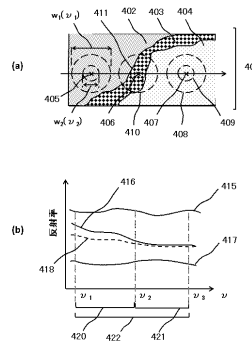
【 図 2 】



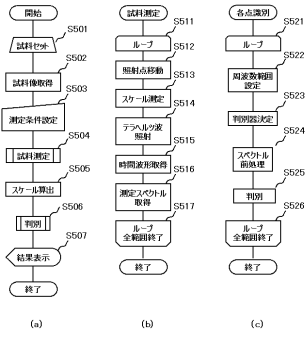
【 図 3 】



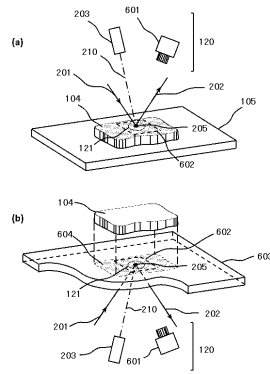
【 図 4 】



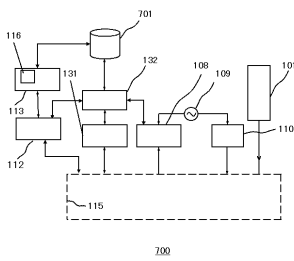
【 図 5 】



【 図 6 】



【 図 7 】



【 図 8 】

