

放射光 X 線回折パターンの特徴抽出と空間マッピング (II)
Feature extraction and spatial mapping of synchrotron radiation
X-ray diffraction pattern (II)

理研 AIP¹, 明治大², コベルコ科研³, 量研⁴

○沓掛健太郎¹ 神岡武文², 世木隆³, 佐々木拓生⁴, 藤川誠司⁴, 高橋正光⁴

RIKEN¹, Meiji Univ.², KOBELCO Res. Inst.³, QST⁴

°Kentaro Kutsukake¹, Takefumi Kamioka², Takashi Segi³,

Takuo Sasaki⁴, Seiji Fujikawa⁴, Masamitsu Takahashi⁴

E-mail: kenraro.kutsukake@riken.jp

【はじめに】近年、実験・計測機器の性能向上に伴い、得られる計測データの量は飛躍的に増加しており、特に、大強度ビームによる高速・短時間測定が可能な放射光実験では顕著である。そこで、得られた大量データを有効活用し、測定対象に関する情報を余すことなく抽出することが求められている。我々は、X 線回折パターンの試料表面でのマッピングを対象とし、機械学習によって多数の複雑なパターンから特徴を抽出し、マッピングに応用することを検討している[1]。今回、新たに得られた特徴量成分に対して検討・考察を行ったので報告する。

【方法】実験には放射光施設 SPring-8、ビームライン BL11XU の X 線回折計を使用し、測定試料には μm スケールでの組成分布を持つ SiGe 薄膜を用いた。直径約 $1\ \mu\text{m}$ に集光した X 線ビームを用いて、試料の局所的な X 線回折パターンを 2 次元検出器によって測定した。試料面内の XY 座標は高精度ピエゾステージで制御し、 $5\ \mu\text{m}$ ステップで $31 \times 31 = 961$ 点のマッピングを行った。得られた X 線回折パターン (30×30 画素) を様々な成分数の非負値行列分解 (NMF) によって機械学習した。

【結果】4 成分で学習したときの成分パターンを図 1 (a) に示す。パターンは (220) 近傍の逆格子空間に対応し、図中左上の Si 基板のピークから右下にかけて広がる分布が SiGe 薄膜からの回折である。図中で、左上-右下方向が SiGe 組成、左下-右上方向が配向に対応する。NMF によって得られたパターンは、X 線回折の観点からは、成分 1 と 2 が SiGe 組成、成分 3 と 4 が配向に相当する。そこで、各 X 線回折パターンの成分濃度の差 (Comp. 2-Comp. 1) および (Comp. 3-Comp. 4) の試料表面内分布を求めた (図 1 (b), (c))。得られた空間分布は、それぞれ SiGe 組成および配向の空間分布を表しているが、パターン中の特定ピークの位置を求める従来の解析方法と比較して、より試料の特徴を捉えた分布が得られたと考える。

【謝辞】本研究の一部は、文部科学省委託事業ナノテクノロジープラットフォーム課題 (課題番号: A-18-QS-0005) の QST 微細構造解析プラットフォームおよび理化学研究所革新知能統合研究センターの支援を受けて実施した。実験試料では、名大の宇佐美教授、深見氏、東洋アルミの中原氏、マルワン氏にご協力いただいた。

[1] 沓掛他、2019 年春季応用物理学会講演会、9p-W321-12

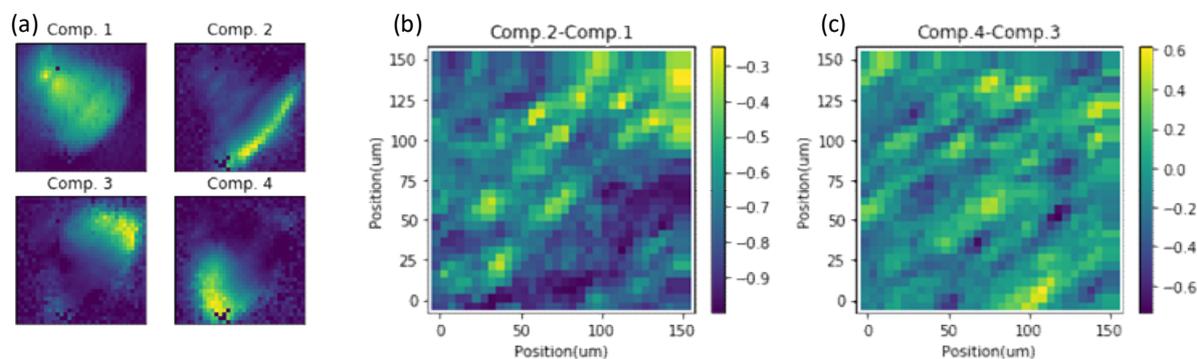


図 1 (a) NMF によって得られた X 線回折の成分パターン。強度は log 表示。(b) (c) 試料表面内の成分濃度差の分布