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

理研 AIP[1]，明治大[2]，名大未来機構[3]，名大院工[4]，東洋アルミ[5]，量研[6]
○沓掛健太朗[1] 神岡武文[2]，井上憲一[3]，深見昌吾[4]，宇佐美徳隆[4]，
中原正博[5]，ダムリン マルワン[5]，佐々木拓生[6]，藤川誠司[6]，高橋正光[6]
RIKEN [1], Meiji Univ.[2], Nagoya Univ.[3], Toyo Aluminium K.K.[4], QST[5]
○Kentaro Kutsukake[1], Takefumi Kamioka[2], Kenichi Inoue[3], Shogo Fukami[3], Noritaka Usami[3], Masahiro Nakahara[4], Marwan Dhamrin[4], Takuo Sasaki[5], Seiji Fujikawa[5], Masamitu Takahasi[5]
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。本研究では、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た。
【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 μm に集光した X 線 μ ビームを用いて、試料からの局所的な 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、5μm ステップで 31×31=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)を非負値行列分解(NMF)によって機械学習した。
【結果】図 1 に、(a)X 線回折パターンを 2 成分で学習したときの成分パターンと(b)全 961 パターンの成分濃度分布を示す。X 線回折パターンは(220)近傍の逆格子空間を表わし、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。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 が完全緩和 SiGe、成分 2 が歪み SiGe に相当するが、教師なし機械学習の結果として、このような明確な意味を持つ成分が得られたことは興味深い。さらに、全パターンの成分濃度は一方向に分布した(図 1(b))。そこで成分濃度の差(Comp. 2-Comp. 1)の試料表面内分布を求めた(図 1(c))。得られた空間分布は、特定のピークの強度や位置をプロットした従来指標の空間分布と比較して、ドメイン構造がより明確であり、試料が持つ特徴を良く反映していると推測される。
【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・解析ではコベルコ科研の世木氏にご協力いただいた。

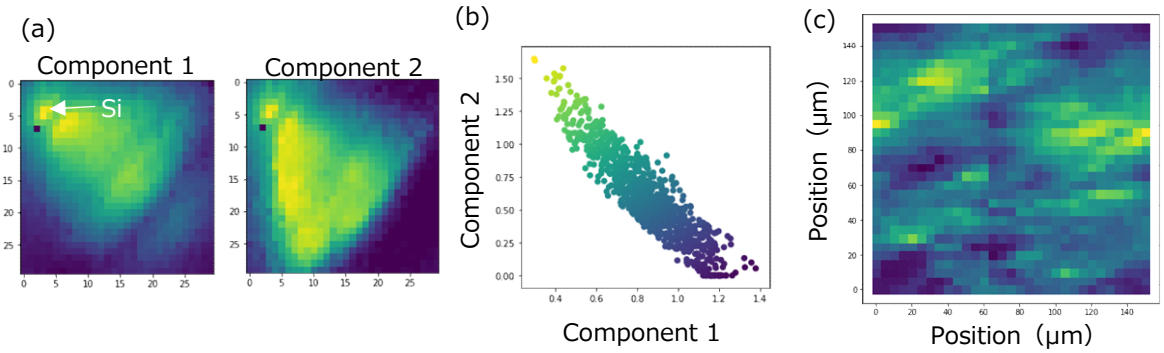

図 1　(a)NMF によって得られた X 線回折の成分パターン。強度は log 表示。(b)各 X 線回折パターンの成分濃度分布、(c)試料表面内での成分濃度差の分布

© 2019年 応用物理学会