

視覚情報による薄膜材料探索効率化に向けた、2次元X線回折手法の自動解析技術の開発



Automated Cluster Analysis of 2-dimensional X-ray Diffraction for Composition Spread Oxide Thin Film Fabricated by Combinatorial Synthesis, Aiming to Visual Information-guided Material Discovery

早大先¹, 物材機構² ^{O(DC)}山下 晶洸^{1,2}, 長田 貴弘², 柳生 進二郎², 朝日 透¹, 知京 豊裕²

Waseda Univ.¹, NIMS², ^{O(DC)}Akihiro Yamashita^{1,2}, Takahiro Nagata¹, Shinjiro Yagyu², Toru Asahi¹,

Toyohiro Chikyow²

E-mail: yacfcj@asagi.waseda.jp

機械学習などを活用したデータ駆動による材料探索は、従来手法に比べて大幅な時間短縮が期待できる。しかしそのための材料データ収集、整理は非常に手間がかかる。これを自動化する手法は研究されてきているが、多様な構造情報を持ち、薄膜材料開発において物性理解に重要な手法である2次元X線回折手法(2D-XRD)に対しては進んでいない。そこで我々は、2D-XRDデータセットを、Non-negative matrix factorization (NMF)を用いて分類し、Variational AutoEncoder (VAE)を用いて分類結果を視覚化する方法を検討している。今回はInとGaの組成割合や成膜条件の異なる $(\text{Ga}_x\text{In}_{1-x})_2\text{O}_3$ 酸化物半導体薄膜に対して行った結果を報告する。

回折ピークを特定し、各XRDデータを分類してデータセットを作成するのは非常に手間がかかる。NMFを用いることで、XRDデータを自動的に分類できることが報告されている[1]。しかし先の報告で用いられたデータは1枚の3元系組成傾斜試料から得た1次元XRDであったため、分類結果は組成の違いによるXRDパターンの差異に基づいていた。そのため実際の薄膜材料探索で重要となる、基板などの組成以外の試料作製条件の、NMF分類への影響は未知数である。加えて薄膜試料の場合は、

結晶面の優先配向が物性と強い相関を持つ場合もあるため、回折角の情報だけではなく、結晶面の傾き・回転に関しても分類できると物性予測への展開が期待できる。今回実施例として、InとGaの組成割合や成膜条件の異なる $(\text{Ga}_x\text{In}_{1-x})_2\text{O}_3$ 酸化物半導体薄膜の2D-XRDデータセットに対してNMFを行っている。その結果、2D-XRDであってもNMFにより自動的な分類ができることを確認した。さらに、この分類結果を基に、VAEを用いて各データの違いの度合いの可視化を試みている。VAEは確率分布に従う潜在変数へ変換することで分布図を作成でき、この分布図とNMFによる分類、さらに物理条件との対応を調べることで、組成や成膜条件の影響を視覚的に把握できるようになる。これにより、実際の薄膜材料探索が容易になると期待される。

[1] C. J. Long, et. al., Rev. Sci. Instrum. 80, 103902 (2009)

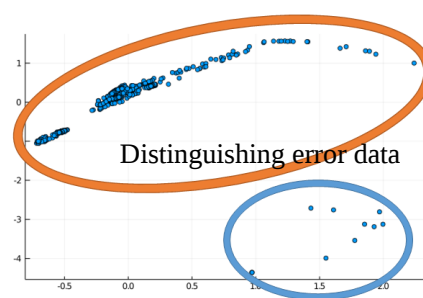


Fig. Distribution of 2D-XRD