

EXAFS のスパースモデリング

(¹熊大・²筑波大・³あいち SR・⁴SAGA-LS・⁵東大)

○赤井一郎¹・熊添博之¹・五十嵐康彦²・Fabio Iesari³・岩満一功¹・岡島敏浩³・妹尾与志木⁴・岡田真人⁵

Sparse modeling of extended X-ray absorption fine structure

(¹Kumamoto Univ., ²Univ. Tsukuba, ³Aichi SR, ⁴SAGA-LS, ⁵Univ. Tokyo)

○Ichiro Akai,¹ Hiroyuki Kumazoe,¹ Yasuhiko Igarashi,² Fabio Iesari,³ Kazunori Iwamitsu,¹ Toshihiro Okajima,³ Yoshiki Seno,⁴ Masato Okada⁵

To analyze extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) data, we propose a Bayesian sparse modeling method with basis functions¹⁾ representing two-body multiple scattering of photoelectron waves by the Hedin-Lundqvist potential²⁾. This method does not require a structural model in advance, and we can analyze the respective long-range partial distribution function with the correct interatomic distances together with identifying the respective elements. In addition, this method has high noise tolerance and is especially useful for the materials with weak X-ray absorption and for analysis of severe signal-to-noise ratio EXAFS data. By applying this method to analyze the EXAFS data measured at the K-edge of Y atoms in a YO_xH_y epitaxial thin-film crystal³⁾, the radial distances of the first nearest O atom (Y-O) and the second nearest Y atoms (Y-Y) were correctly estimated, and the ratio of these radial distances indicated that the interstitial O-site is tetrahedral⁴⁾ in the fcc lattice structure of Y atoms. These results are based on the research supported by JST, CREST, JPMJCR1861 and JPMJCR1761.

Keywords : EXAFS; Sparse modeling; Bayesian inference; Information criterion

本発表では、Hedin-Lundqvist ポテンシャル²⁾による光電子波の2体多重散乱を表す基底関数¹⁾を用いて、拡張X線吸収微細構造(EXAFS)データを解析するベイジアン・スパースモデリングについて報告する。この解析法では、材料の構造モデルを事前に必要とせず、配位原子の元素種を識別した上で、正しい原子間距離で長距離の部分動径分布関数を高いノイズ耐性で解析することが可能で、特に、X線吸収量が弱く、S/N比が厳しいEXAFSデータの解析に有効である。また本解析法を、 YO_xH_y エピタキシャル薄膜結晶³⁾でY原子のK吸収端において計測されたEXAFS解析に適用して、第1近接O原子(Y-O)と第2近接Y原子との動径距離(Y-Y)を正しく推定し、その原子間距離の比から、Y原子のfcc格子構造の中で、O原子が四面体配置で位置する⁴⁾ことが分かった。本講演の成果は、JST, CREST, JPMJCR1861, JPMJCR1761の支援を受けた研究に基づく。

- 1) A. Filipponi, *J. Phys.: Cond. Mat.* **1994**, 6, 8415; A. Di Cicco, GNXAS: Extended Suite of Programs for Advanced X-Ray Absorption Data-Analysis: Methodology and Practice, TASK Publishing, Gdansk, Poland, 2009.
- 2) L. Hedin, B. I. Lundqvist, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **1971**, 4, 2064.
- 3) R. Shimizu, H. Oguchi, T. Hitosugi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **2020**, 89, 051012.
- 4) H. Kumazoe, Y. Igarashi, F. Iesari, R. Shimizu, Y. Komatsu, T. Hitosugi, D. Matsumura, H. Saitoh, K. Iwamitsu, T. Okajima, Y. Seno, M. Okada, I. Akai, *AIP Adv.* **2021**, 11, 125013.