

## 密度ベースクラスタリングを用いた 2次元 X線回折測定の高速度化 Acceleration of 2-Dimensional X-Ray Diffraction Analysis with Density-Based Clustering

早大先<sup>1</sup>, 物材機構<sup>2</sup> ○(D) 山下 晶洸<sup>1,2</sup>, 長田 貴弘<sup>2</sup>, 柳生 進二郎<sup>2</sup>, 朝日 透<sup>1</sup>, 知京 豊裕<sup>2</sup>

Waseda Univ.<sup>1</sup>, NIMS<sup>2</sup>, °Akihiro Yamashita<sup>1</sup>, Takahiro Nagata<sup>2</sup>, Shinjiro Yagyu<sup>2</sup>, Toru Asahi<sup>1</sup>,  
Toyohiro Chikyow<sup>2</sup>

E-mail: yacfcj@asagi.waseda.jp

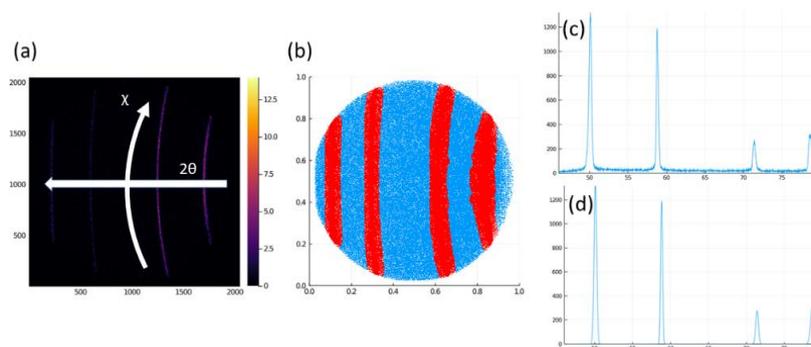
薄膜材料の研究において 2次元 X線回折(2D-XRD)は、試料中の結晶面間隔や配向性などを一度に測定できる有用な測定手法の一つである。しかしながら薄膜自体の膜厚の薄さや多結晶の場合は XRD パターンの回折ピークの S/N 比はバルク体に比べて低く、結果として測定時間が長くなりやすい。数点を測定する場合には、この長時間測定は問題となりにくい、多様な成膜条件を 1枚の薄膜で検証できるコンビナトリアル手法[1]を用いた場合は、XRD の測定点が増えるために問題となる。今回我々は、密度ベースクラスタリングを用いることで、低 S/N データからでも XRD パターンを分離できること、そして密度情報に着目することで短時間測定でも配向性についての情報が得られることを報告する。

我々は、XRD パターンの強度変化は 2D-XRD 上では回折ピークの疎密変化としても捉えられることに着目した。2D-XRD の画像(Fig. 1(a))を散布図へと変換し、密度ベースクラスタリングの一手法である Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise (DBSCAN)[2]を適用して XRD パターンの分離を行った(Fig. 1(b))。分離されたそれぞれの XRD パターンを  $\chi$  軸について積分し、ガウス関数でフィッティングを行った結果(Fig. 1(d))とオリジナルの 2D-XRD データから作成した XRD チャート(Fig. 1(c))を比較し、DBSCAN が適切な領域で XRD パターンを分離したことを確認した。また Ordering Points To Identify the Clustering Structure(OPTICS)[3]を用いることで配向度の情報も取得できることを確認したので、これらについて当日は報告する。

[1] P. Ahmet, Y.-Z. Yoo, K. Hasegawa, et. al., *Applied Physics A* **79**, 837-839 (2004)

[2] M. Ester, H. P. Kriegel, J. Sander, and X. Xu, Proceedings of the 2nd International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, Portland, OR, AAAI Press, 226-231 (1996)

[3] M. Ankerst, M. Breunig, H. Kriegel, et. al., *ACM SIGMOD Record*, **28**(2), 49-60 (1999)



**Figure 1. (a) 2D-XRD data of poly-silicon. (b) separated diffraction pattern signals (red) and noise signals (blue). 2θ-ω XRD chart of (c) original data and (d) fitted separated diffraction signals.**