

データの類似度に基づいた X 線吸収スペクトルの解析

鈴木雄太^{1,2}, 日野英逸³, 小飼真人⁴, 小野寛太²

1. 総合研究大学院大学, 2. KEK 物質構造科学研究所, 3. 統計数理研究所, 4. 東京理科大学

機械学習や情報処理技術を材料開発に応用する Materials Informatics の発展に伴い、材料創製および機能解析の効率化が進んでいる。X 線吸収スペクトル (XAS) の測定は、材料の組成、電子状態といった情報が非破壊に得られるほか、空間マッピングやオペランド測定が可能なることもあり、材料研究において広く普及している。XAS の測定は自動化が進み、24h に 1 万本以上のスペクトルが取得されることも珍しくない。一方、XAS スペクトルのデータ解析 (スペクトルからの物理量推定) は、様々な条件におけるシミュレーションや文献のスペクトルと目視で見比べ、計測された XAS スペクトルがどれに似ているか判断する方法で行われている。このためしばしばデータ解析が研究の時間的ボトルネックとなるほか、解析者の主観や思い込みといったバイアスが含まれる可能性がある。我々は、この状況が生じている本質的な問題点は、XAS スペクトルを比較するための類似度が確立されていないという点にあると考えている。本講演では、物理量が近い物質の XAS スペクトルは似ているというシンプルな仮定を導入し、XAS スペクトルの類似度に基づいた自動データ解析法を紹介する¹。

はじめに、似た物理量の物質のスペクトルは似ているという仮定を検証するため、次元削減と呼ばれる手法を用いて、異なる物理量に対応したスペクトルの類似度を 2 次元で可視化した (図 1)。次元削減の手法には、シンプルな線形アルゴリズムである多次元尺度構成法²を用いた。本研究では、例として、価数および結晶場パラメータ $10Dq$ を変化させながらシミュレーションした Mn の $2p$ XAS を用いた。図 1 において、価数が異なるスペクトルはデータ空間において明瞭に分離しており、また $10Dq$ の値に対応して類似度が変化している。この結果から、導入した仮定が妥当であることが確認された。

加えて、実験データへの適用可能性を検証するために、物理量が同定された MnO の XAS スペクトルを文献³より用いた (図中 右上の赤丸)。このプロットは図中において専門家による同定結果に非常に近い位置に配置されていることから、データの類似度に基づいて半自動で XAS データ解析が行えることが示された。

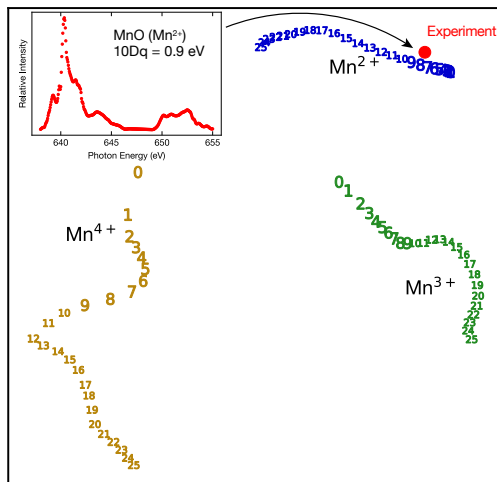


図 1 Mn $2p$ XAS スペクトルの次元削減結果

図中の各点が 1 本の XAS スペクトルに対応し、点同士の距離はスペクトル同士の類似度に対応している。図中の数字は 10 倍された結晶場パラメータ (eV) の値を示す。

1. Suzuki, Y., Hino, H., Kotsugi, M. & Ono, K. *npj Comput. Mater.* **5**, 39 (2019).
2. Borg, I. & Groenen, P. *Modern multidimensional scaling: theory and applications*. (Springer, 1997).
3. de Groot, F. & Kotani, A. *Core Level Spectroscopy of Solids*. (CRC Press, 2008).