

話題

## XPS 元素 SOM マップによるデータマイニング (データ発掘)

池田佳弘, 堀慶史, 森田佳憲, 藤村喜久郎, 徳高平蔵, Kwaw Obu-Cann, 吉原一紘\*

鳥取大学工学部電気電子工学科 〒680-8552 鳥取市湖山町南 4-101

金属材料技術研究所\* 〒305-0047 つくば市千現 1-2-1

[tokutaka@ele.tottori-u.ac.jp](mailto:tokutaka@ele.tottori-u.ac.jp)

(2001年1月22日受付)

コホネンによって開発された自己組織化マップ(SOM)手法は、いくつかの化学分析問題に適用され有望な結果を導いている。正確に分かっているスペクトルデータを使用して作られた SOM は、未知のスペクトルデータの構成も決定することができる。本文では、この手法を XPS データに適用し、元素の推定を行う。

## Data Mining by Self-Organizing Maps using XPS Spectra of 77 Elements

Yoshihiro Ikeda, yoshifumi hori, Yoshinori Morita, Kikuo Fujimura,

Heizo Tokutaka, Kwaw Obu-cann, Kazuhiro Yoshihara\*

Department of Electrical and Electronic Engineering, Tottori University, 4-101 Koyama, Tottori, 680-8552, Japan

\*National Research Institute for Metals, 1-2-1 Sengen, Tsukuba 305-0047, Japan

[tokutaka@ele.tottori-u.ac.jp](mailto:tokutaka@ele.tottori-u.ac.jp)

(Received: January 22, 2001)

The Self-Organizing Maps (SOM) method that was developed by Kohonen has been examined preliminarily by applying to some problems of chemical analysis, leading to promising results. The composition of an unknown sample can also be determined precisely by SOM that has been constructed using spectra from samples of known composition. In this paper, this method is applied to the XPS data, and the element is identified.

### 1. はじめに

自己組織化マップ(SOM)は、非線形多変量のデータに含まれる有用な情報を可視化するための効率的な処理方法である。最近、SOM を化学スペクトル分析の解析分野へ応用することにより、この SOM が有効な手段であることがわかってきた。特に未知合金組成の推定に、有効な結果を得ている。

本稿では、Mg 励起の 77 元素の XPS スペクトル(アルバックファイ社製)を使用して SOM マップを作成し、未知元素スペクトルの元素名を同定する。

### 2. SOM による化学スペクトル解析

従来の化学スペクトル解析では、スペクトルに含まれているピークのエネルギー位置、高さや半値幅、ピーク数などを決定して、それらを分析手段としていた。SOM を利用するスペクトル解析では、サンプルデータとしていくつかのスペクトルを利用する。SOM に使用するスペクトル間では、始めと終わりのエネルギーを合わせ、エネルギー測定間隔も同じに合わせる。SOM を用いた場合、以下の事が期待できる。

- SOM 作成に使用したサンプル以外のスペクトルを予測する
- 未知合金スペクトルの組成を予測する。
- スペクトルの 2 次元マップ(SOM)への写像によるデータの可視化と分類が可能。

### 3. SOM による未知元素の推定

#### 3. 1 XPS 元素マップの作成

元素マップの作成には、77 個の元素(化合物も含む)の XPS スペクトルデータを使用した。まず前処理として、Mg 励起の 1eV~960eV(1eV きざみ)の信号値の最大値と最小値を用いて各エネルギーでの信号値を規格化した。この処理を行ったデータを 960 次元と考えると SOM の入力サンプルデータとした。この元素マップを用いることで、様々な元素の推定が可能になる(Fig1)。

#### 3. 2 元素分析

XPS 元素マップを使用して、COMPRO6<sup>1)</sup>の Mg 励起のスペクトルデータを未知のスペクトルデータとして、元素の推定を行う。まず、データの前処理を行う。1eV~960eV(1eV きざみ)の信号を規格化し、SOM\_PAK<sup>2)</sup>のデータ書式に準じたファイルにする。このとき SOM から調べたいデータに最も近いユニット(BMU: Best Match Unit)を探し出し、データを引き出す。

Compro6 のいくつかの元素をテストデータとして検証を行った。このとき、元素マップに使用したデータとテストデータのバックグラウンドを合わせた。

Fig1 には、テストデータの BMU を大きな丸でマークした。ラベルのついたユニットの近くにあることがわかる。この 2 つのスペクトルを Fig2 で比較すると、似たようなスペクトル波形が得られている。

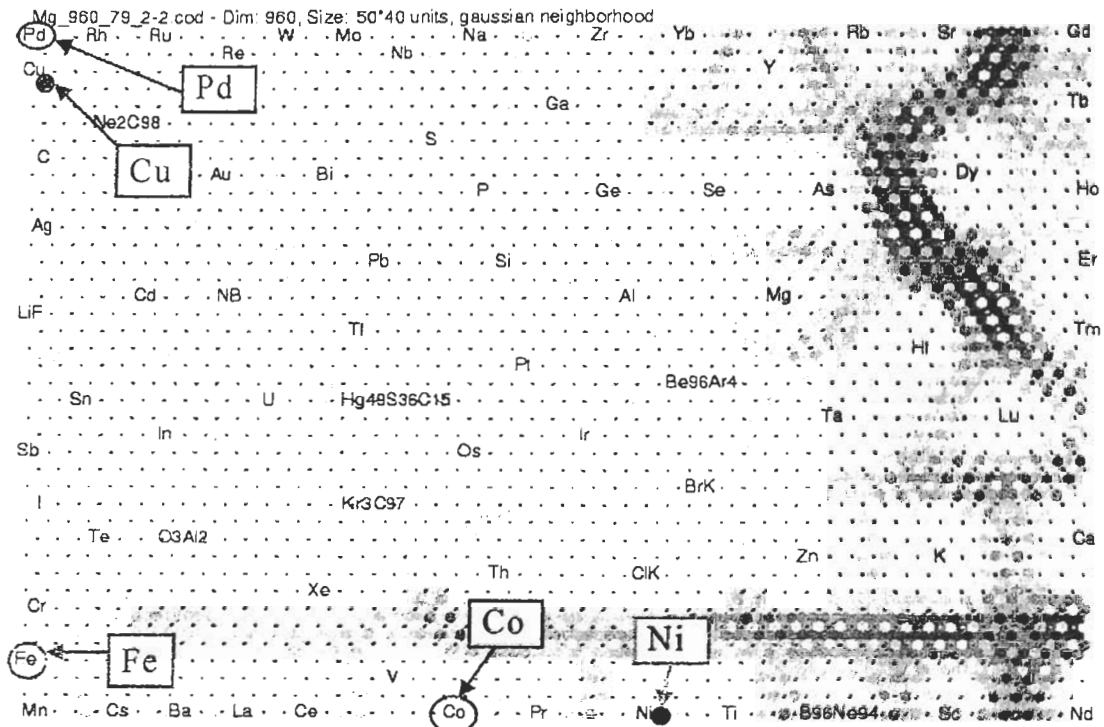


図 1 : XPS 元素マップ  
Fig1 : XPS Elements MAP

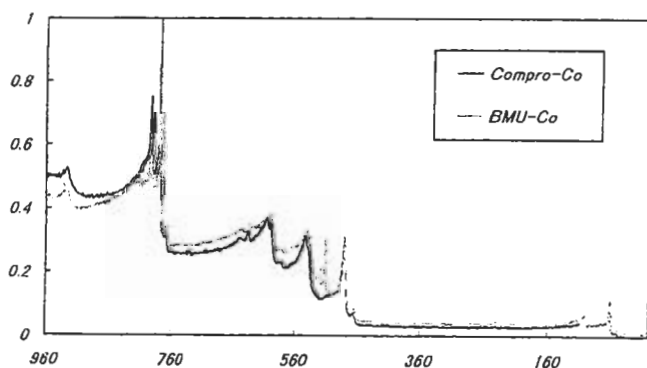


図 2 : Compro6 と BMU のスペクトルの比較  
Fig2 : Comparison of spectrum data of Compro6 and BMU

#### 4. 解析精度、効率の向上

##### 4. 1 バックグラウンド

77 元素の XPS スペクトルを使用して XPS 元素マップを作成したことで、様々な元素の推定が可能になった。ここで更に解析の精度を高めるにはバックグラウンドを合わせるのが有用である。しかし、バックグラウンドを引くという物理的な作業は、時間がかかる上に客観的平等性が損なわれる可能性があり自動解析の前処理としてはあまり好ましくない。そこでこのバックグラウンドの生成も自動で行うことによって解析精度の向上を図った。自動生成する手段として入力であるスペクトルデータの近似多項式を考える。

##### 4. 2 近似多項式によるバックグラウンド

入力データの近似多項式をバックグラウンドとし (Fig3), バックグラウンドより上のみを抽出、再度、規格化したものが Fig4 である。近似多項式は元となる

スペクトルに対して誤差二乗和が最小のものが生成されるようになっている、従って Fig3 のように波形の凹凸が滑らかなところはそれに沿い、激しいところではその特徴の下を通るような曲線となる。項数は大きいほどスペクトルにフィットするが大きすぎるとグラフの末端が発散し始める。従っていろいろと試した結果、今回の場合の項数は 10 とした。近似多項式の生成には MATLAB を使用した。

この近似多項式によるバックグラウンド処理を施したスペクトルデータ (Fig4) は従来のバックグラウンド処理によるものと比べてピークを強調するように生成されている。従って SOM による解析のみならず他の解析分野での応用も期待される。

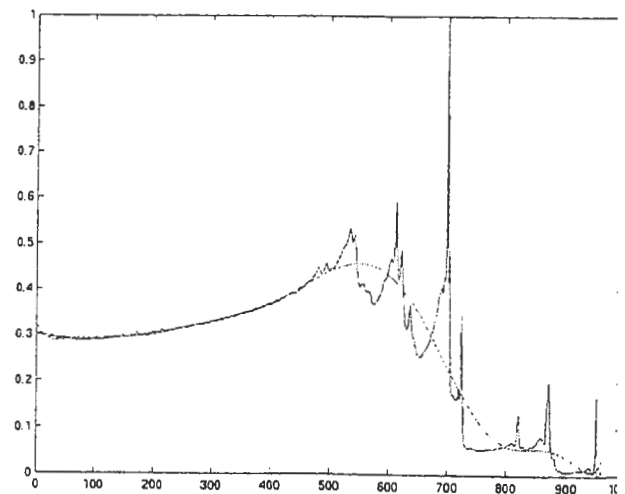


図 3 : Zn スペクトルとバックグラウンド  
Fig3 : Zn spectrum data with background

