

解説

球面自己組織化マップ(SSOM)による XPS, AES スペクトルのクラスタ分類 —ソフトウェア blossom の体験使用—

徳高 平蔵^{a,*}, 中塚 大輔^b
^a 鳥取大学名誉教授, (有) SOM ジャパン
^b 鳥取大学工学部
〒680-0941 鳥取市湖山町北4 丁目637
*tokutaka@somj.com

(2005年4月29日受理; 2005年6月20日掲載決定)

自己組織化マップ(SOM)を XPS と AES スペクトルの分類に応用した. ここに今まで人為的に行っていたデータ分類の自動化に成功した. これは, 表面分析科学も新しく情報処理技術を積極的に導入する時代に入ったことを示している.

A Cluster Classification of XPS, AES Spectra by Spherical Self-Organizing Maps (SSOM) -An Empirical Use of Software “blossom”-

Heizo Tokutaka^{a,*} and Daisuke Nakatsuka^b
^aTottori University, Emeritus Professor, SOM Japan Co. Ltd.
^bTottori University Eng. Dep.
Koyama-Kita, 4-637, Tottori, 680-0941, Japan
*tokutaka@somj.com

(Received: April 29, 2005 ; Accepted: June 20, 2005)

Self-Organizing Maps (SOM) method was applied to the classification of XPS and AES spectra. We have succeeded in the automatic data classification which was carried out by human hand so far. It shows that the times have entered in the age when the surface analysis science, too, should introduce a new information processing technology actively.

1. まえがき

今までに自己組織化マップ(SOM)のスペクトル分析の結果を SASJ の会議でもたびたび報告したし、特別講演の講演記録として JSA 誌[1]にも報告した。ただ今までは平面 SOM を使った解析結果で色々なスペクトルのクラス分けであった。今回は球面 SOM を使用した。球面であるため平面での辺、角の位相の不連続がなくなりスペクトルの分類が平面の場合以上に精度を上げることができた。ただ、平面は一瞥して理解できるが球面では見えている裏側の情報が同時に見えないのが欠点である。しかし、市販ソフト「blossom」[2]は球面を自由に回転できるので使用にあたってはその欠点は除去されている。また、球面の特徴を利用して球面上の位置関係から各入力ベクトルの位相関係を樹状図(デンドログラム)に整理することができた。ここでは COMPRO7[3]に搭載されている SASJ reference スペクトルの内、測定エネルギー範囲を 0-1000 eV の範囲に限定した XPS スペクトル 19 個と、非常に薄いアルミニウムの酸化層での電子線照射による Al LVV オージェ信号の時系列変化のスペクトル分類に用いた。結果はどちらも非常に良くスペクトルの特徴を捉えて分類されていることが分かる。

2. は SOM アルゴリズムについて述べる。3.1 XPS, 3.2 では AES, 4. はまとめである。

2. SOM アルゴリズム

2.1 アルゴリズム

コホネン[4,5]は、生物の神経細胞、主として脳の情報処理の仕方を以下のような簡単な式にまとめて整理した。

$$\vec{m}_i(t+1) = \vec{m}_i(t) + h_{ci}(t) [\vec{x}(t) - \vec{m}_i(t)] \quad (1)$$

この式の意味は、いま神経細胞(ノード) i が時刻 t で処理している情報処理能力を $\vec{m}_i(t)$ とするとき、外部から入力信号が $\vec{x}(t)$ 入ってきた。細胞は、この入力信号を学習して次の時刻には入力信号により近い情報処理能力 $\vec{m}_i(t+1)$ を持つようになる。この式から得られるより詳しいコホネンの自己組織化マップについてはすでに参考文献[1]に詳しく説明した。

2.2 動物マップの場合

多次元入力から 2 次元 SOM マップを作成する例として Table 1 ([1]に完全表掲載)の例を考えて見よう。これは色々な動物をそれぞれ 16 次元の属性で区別する。各属性は有れば 1, 無ければ 0 の値を持つ。つまり、各動物はそれぞれ 16 次元の入力ベクトルを持つ。このデータ集合を用いて作成した自己組織化マップの一例は Fig. 1 に示される。図から分かるように 16 種類の動物は、一般的に知られている分類に従ってクラスタが形成されている。

3. 球面自己組織化マップの AES, XPS スペクトルデータへの応用

3.1 フルスキャン XPS, 20 スペクトルへの応用

前節の動物マップの結果を Fig. 2 の 19 個の XPS スペクトルに適用してみよう。今回はしかし球面 SOM である。前節の場合では、16 次元の表であるが、XPS では、水平軸上のエネルギーステップが次元として考えられる。

ここでは、Fig. 2 のすべての XPS データは 1 eV ステップで 0 eV から 1000 eV までの結合エネルギー

Table 1 16 kinds of animals and their 16 property values (Complete table is in ref.[1]).

	dove	hen	duck	goose	owl	hawk	eagle	fox	dog	wolf	cat	tiger	lion	horse	zebra	cow
hunt	0	0	0	0	1	1	1	1	0	1	1	1	1	0	0	0
2legs	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
...
...
herbivo	0.5	0.5	0.5	0.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
nocturnal	0	0	0	0	1	0	0	0.5	0	1	0.5	0.5	0	0	0	0
swim	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
stripes	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0

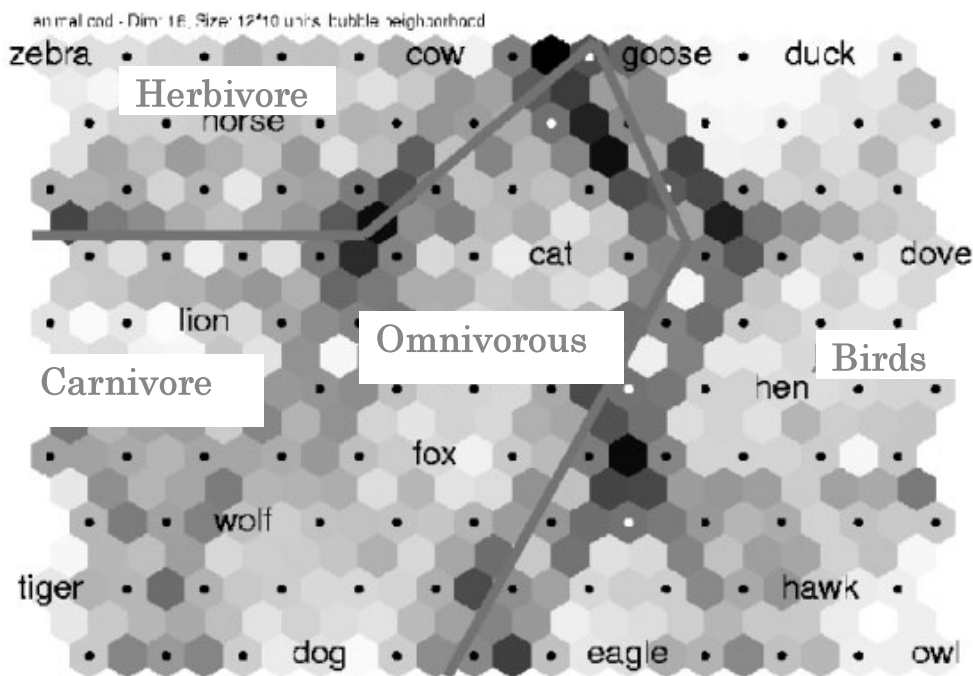


Fig. 1 The animal map which was made by using a plane SOM.

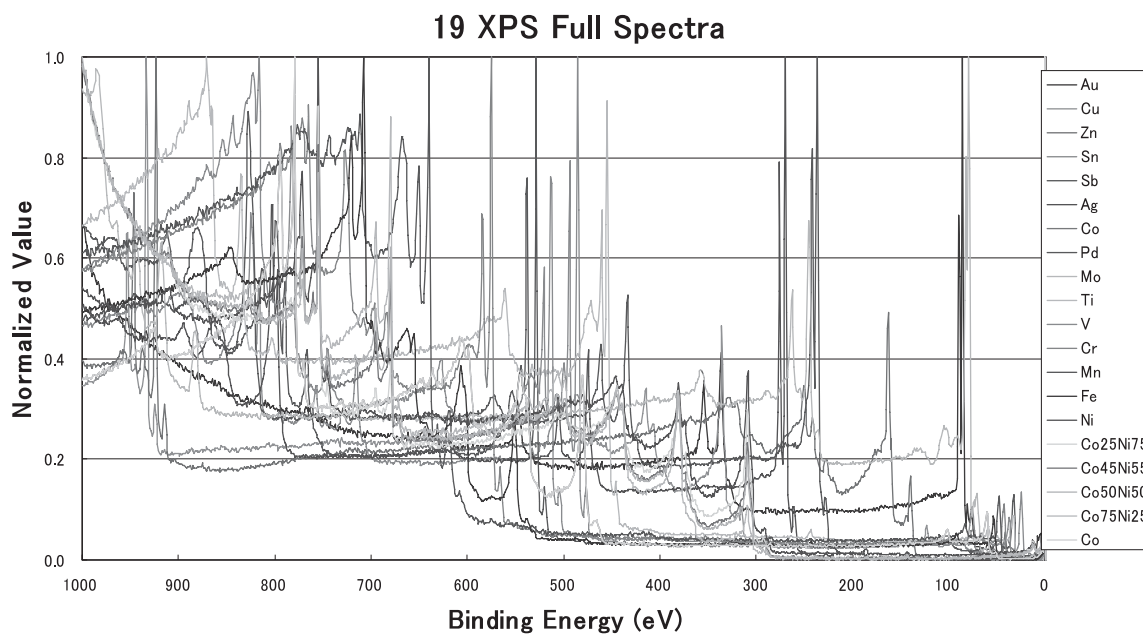


Fig. 2 The XPS spectrum data in the energy range of 0 - 1000 eV from 19 samples. From right, peak positions are Mo,Au (<100), Pd,Ag (200-300), Ti,Sn (400-500), V, Sb,Cr (500-600), Mn, (600-700), Fe, Ni,Co (700-800),Zn,Cu (900-1000). Positions of CoNi alloys are not described here.

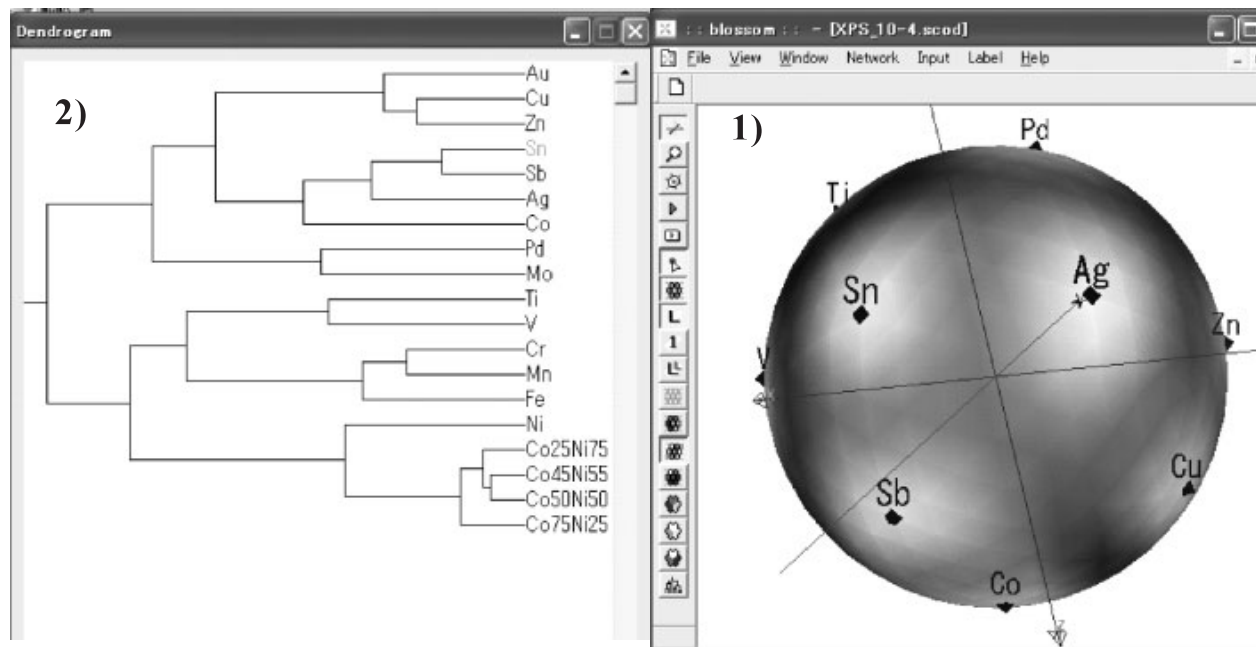


Fig. 3 The analytical results by the spherical SOM using 19 samples of XPS data of Fig. 2, where 1) is the spherical mapping with 19 labels and 2) is the dendrogram which was based on the right.

ギーの範囲で測定されている。したがって、各スペクトルは1001次元の入力ベクトルである。垂直軸は0と1の間で正規化されているスペクトルデータであるので前節の動物マップの場合とは少し趣が異なる。このデータを使用して球面SOMで解析した。結果をFig. 3に示す。球面SOMの見方については、例えば球面SOMの場合も平面SOMと同様に、球面の色の濃淡はスペクトルグループの相違の度合を示している。1) 右はラベル付けされた球面マップ。2) 左は右に基づいて作成した樹状図(デンドログラム)。デンドログラムはFig. 4に詳しく示されている。点線で切れば6グループに分かれている。ここで、Au, Cu, Znは同一のG1グループに属しているが、Fig. 3の右図の球面SOM図ではAuの存在が示されていない。しかし、これは球面の裏側にAuが位置しているためで、球面を回転させれば、Au, Cu, Znが同一グループに属している表示が現れる。そして代表的なG3, G4, G6の例をそれぞれFig. 5, 6, 7に示されている。そして、Fig. 2では大変複雑で人手では不可能なスペクトルの分類が球面SOMの使用によりこの場合6グループへの分類が可能になった。

3.2 電子線照射されためっき鋼板表面からのAlのAES信号のスペクトル変化

今度は3.1と同様の実験を、荒井らが実験した[6]めっき鋼板の表面に形成されている非常に薄いアルミニウムの酸化層での電子線照射によるAl LVV オージェ信号の時系列変化のスペクトル分類に用いた。結果をFig. 8に示す。これをやはり球面SOM「blossom」を用いて解析した。デンドログラムの結果をFig. 9に示す。デンドログラムで分かれたG1とG2のグループのスペクトルはFig. 10に示す。スペクトル中央に下向きの山が2つあるが、右側が上がっているのがG1で、左側が上がっているのがG2である。これは人手でも出来るが、球面SOMを使うと人為的でなく自動的にかつ速やかに分類できる。Fig. 9のデンドログラムで2グループ以上の細かい分類は人手では多分不可能な挑戦であると考えられる。こうして本報告のような系統的なスペクトル分類の後、物理化学的な考察が加えられれば、スペクトル分析の更なる飛躍が期待されるものと確信する。そして、G1とG2が分かれる時間を、例えば、アルミニウム酸化膜の電子線損傷が顕著になる時間と定義することができれば、SOM法による分類が、電子線損傷に関する共通判断基準の手段になりうる可能性がある。今後の検討にゆだねたい。

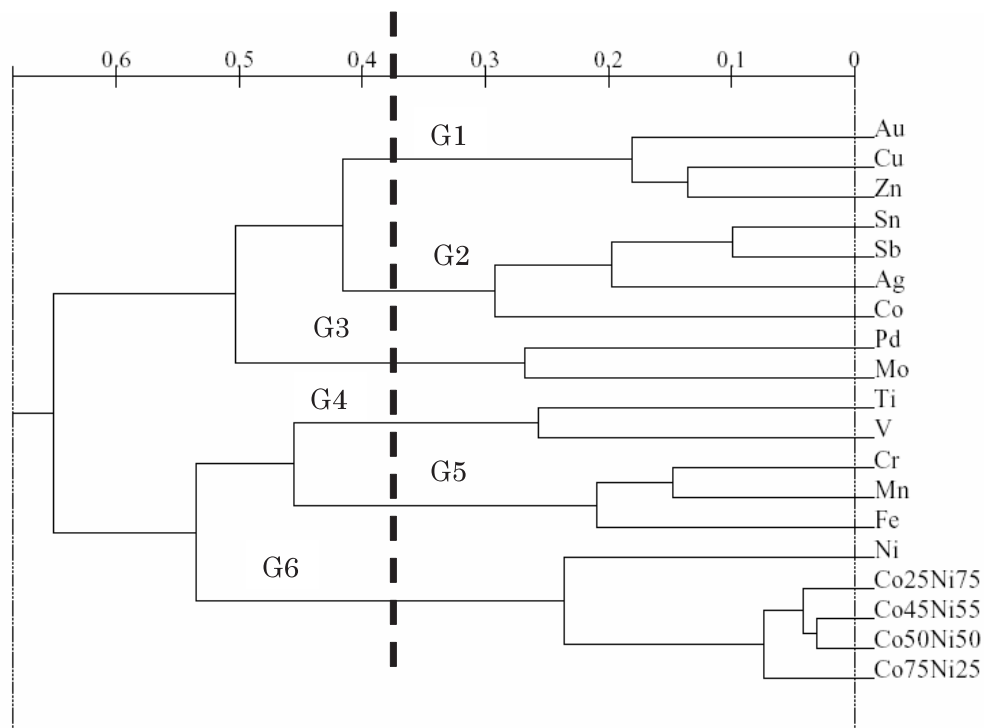


Fig. 4 The dendrogram obtained from the spherical SOM. It separates into six groups from G1 to G6 when cutting it by the dotted line.

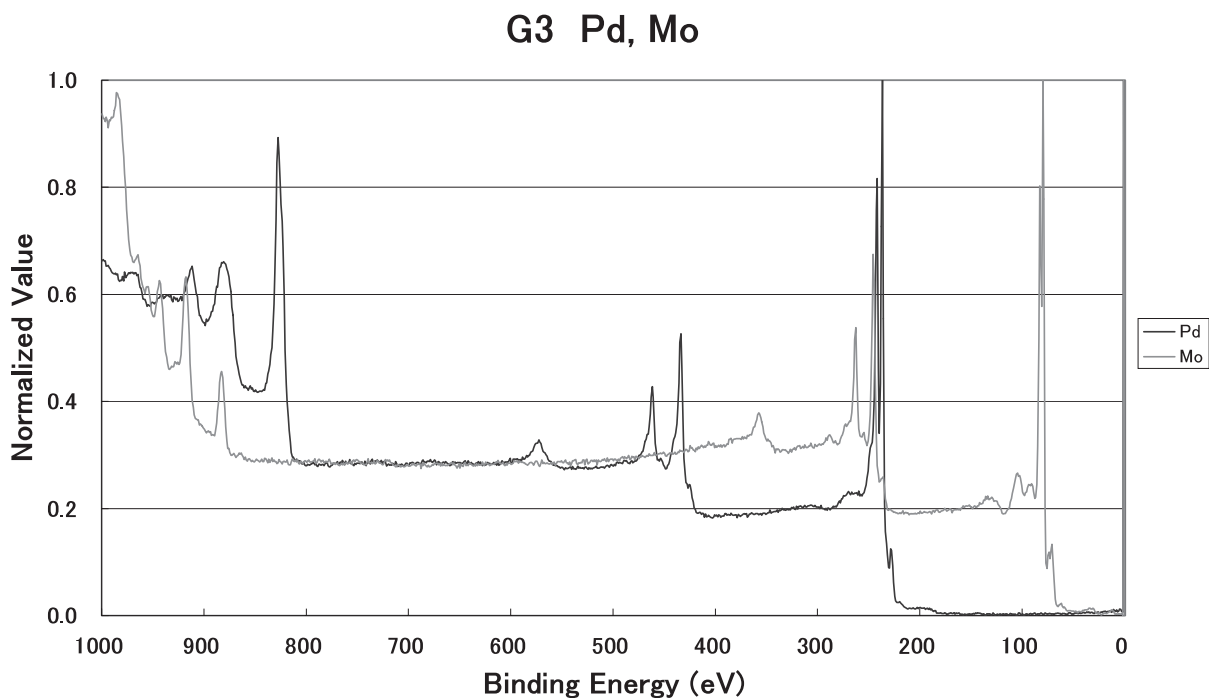


Fig. 5 The spectra of Pd and Mo of G3 in the dendrogram of Fig. 4. Peak positions from right are Mo and Pd in this order.

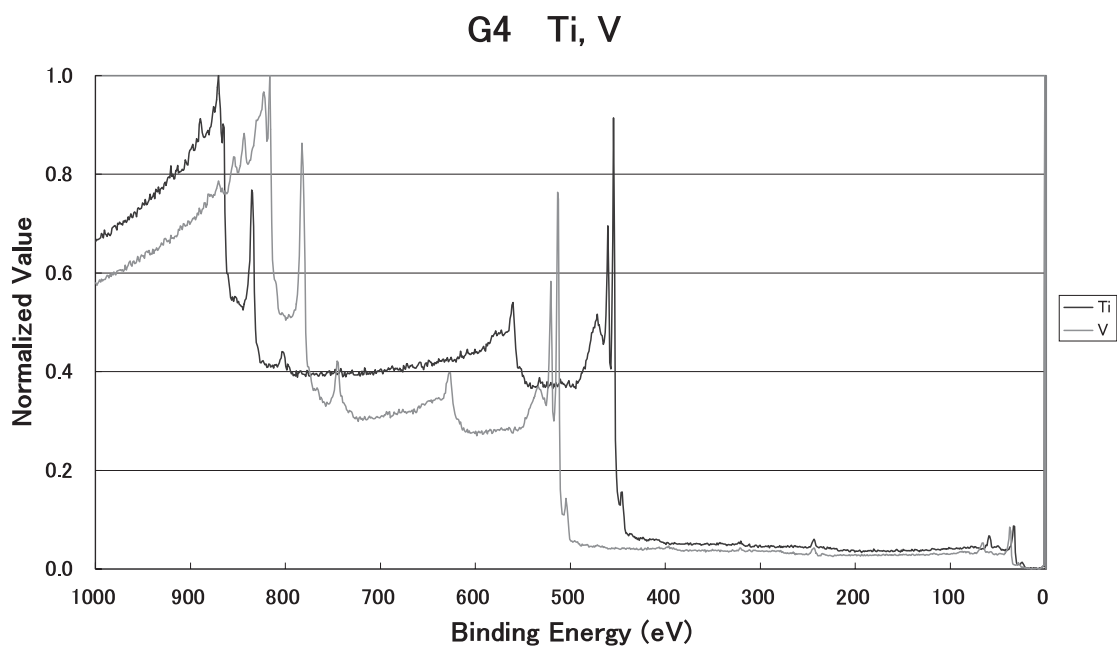


Fig. 6 The spectra of Ti and V of G4 in the dendrogram of Fig. 4 Peak positions from right are Ti and V in this order.

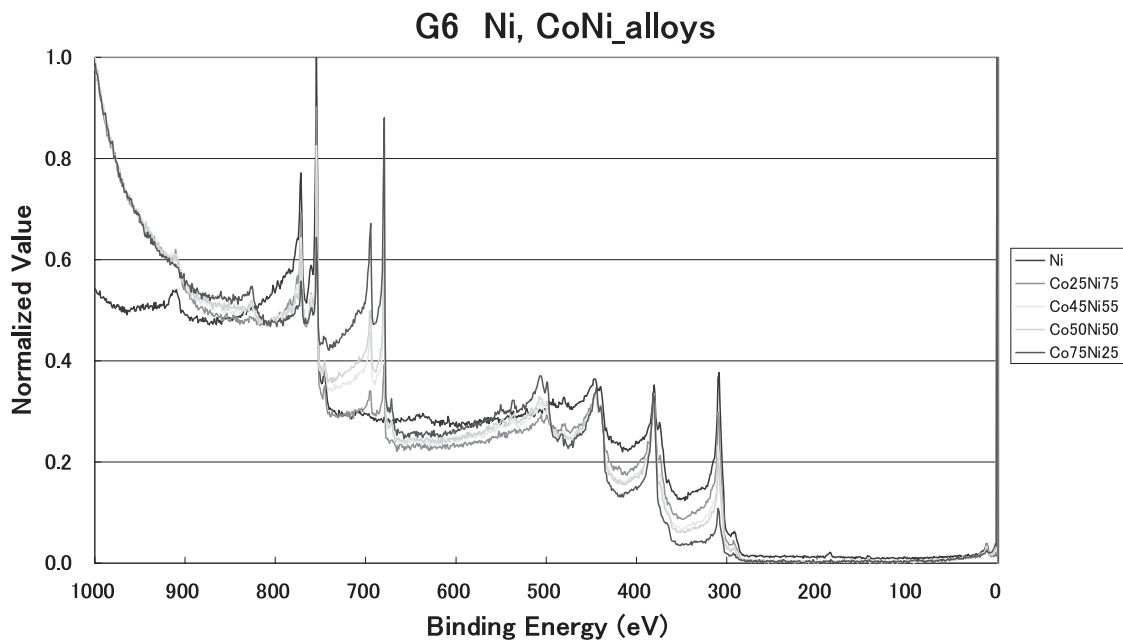


Fig. 7 Spectra of four CoNi alloys and Ni of G6 in the dendrogram of Fig. 4.

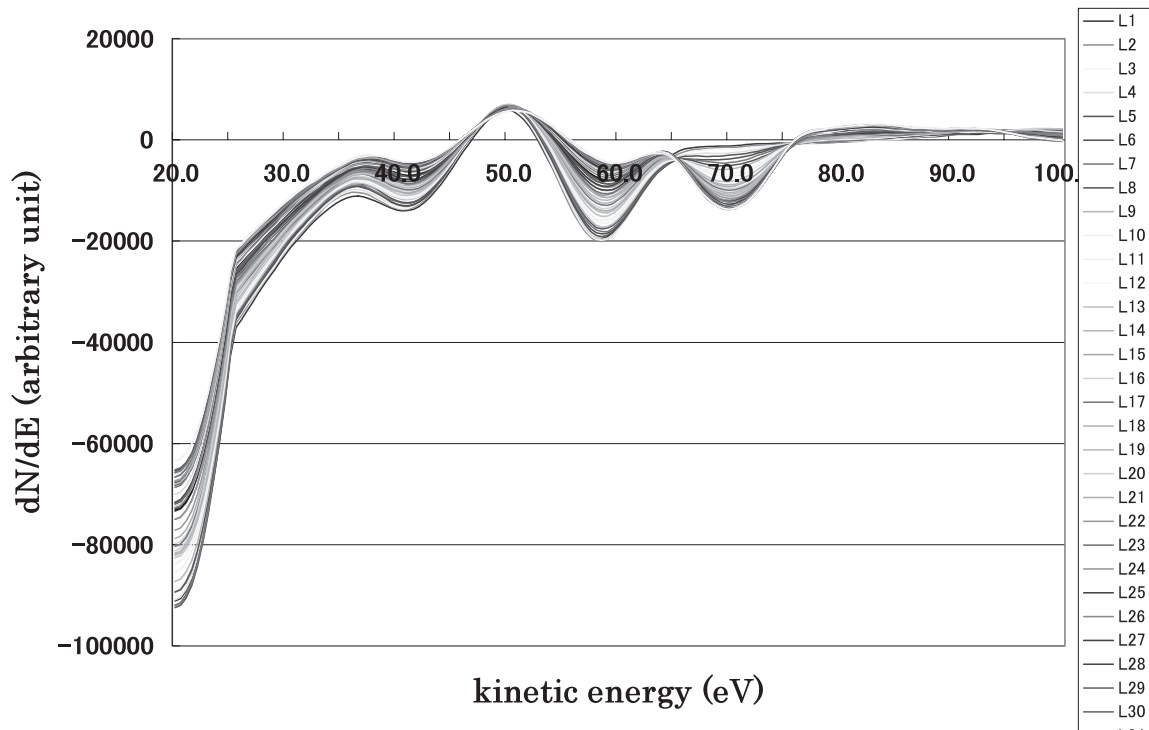


Fig. 8 The spectral change of the Al LVV AES signal from the galvanized steel sheet surface where an electron beam (5 kV, 20 nA) was irradiated (from Mr. M. Arai of Sumitomo Metal Industries, Ltd.).

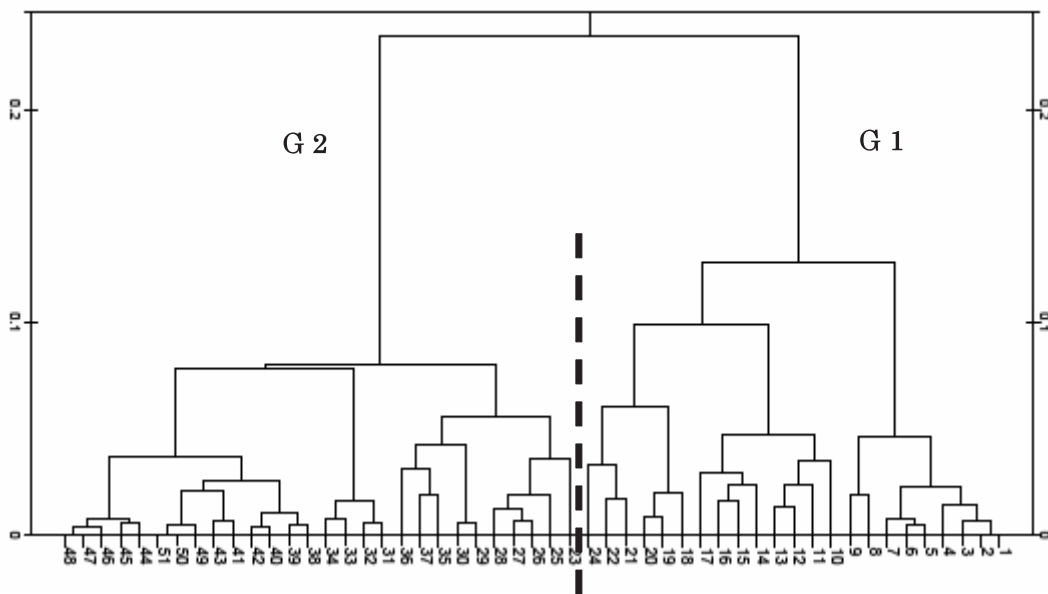


Fig. 9 The dendrogram obtained from spherical SOM. It separates into G1 and G2 when cutting it by the dotted line. The lowest number is the time series of the electron irradiation.

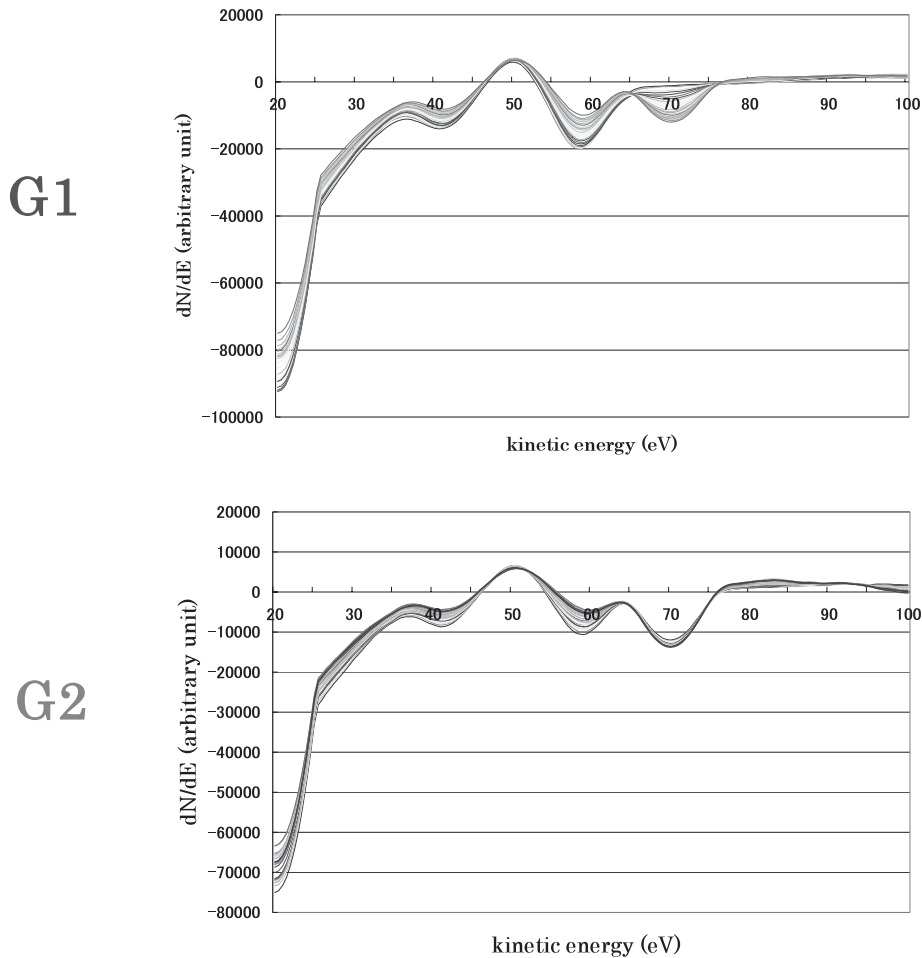


Fig. 10 The spectra data separation by G1 and G2 in Fig. 9.

4. まとめ

ここではCompro7に掲載されているXPSの0-1000 eVの範囲でのスペクトルデータと、めっき鋼板の表面に形成されている非常に薄いアルミニウムの酸化層での電子線照射によるAl LVV オージェ信号の時系列変化のスペクトル分類に球面SOMを試みた。XPSスペクトルの場合にはMg励起の19サンプルを用意した。この場合、球面SOMによるクラスタ分類は非常に有効に働くことを示すことができた。また、AlのAESスペクトルの電子線照射による劣化スペクトルの分類も成功であった。SOM_PAK[7]を使用して平面SOMでも解析したがやはり端、角の影響で細かいクラスタリングは球面SOMの方が優れていることが分かった。このように球面SOMはXPS, AESの大量のスペクトルの分類に有効であることを示した。同様の分類はもちろん、他種のスペクトルの分類にも可能である。

参考文献

- [1] 徳高平蔵, J. Surf. Anal. **10**, 256 (2003) .
- [2] blossom, <http://www.somj.com>.
- [3] Compro7, <http://www.sasj.jp/COMPRO/index.html>.
- [4] T. Kohonen, Self-Organizing Maps
Springer Series in Information Sciences, Volume 30 (2001).
T. コホネン, 自己組織化マップ 3版(2001), 徳高平蔵, 他 訳, シュプリンガー・フェアラーク東京 (2005).
- [5] 徳高平蔵, 岸田 悟, 藤村喜久郎,
自己組織化マップの応用 - 多次元情報の2次元可視化 -, 海文堂出版 (1999).
- [6] 荒井正浩, 浜中真人, 速水弘子, 木村隆, 西田憲二, 田沼繁夫, 2003年度実用表面分析講演会 (PSA-03)講演資料, p.19 (2003).
- [7] SOM_PAK, http://www.cis.hut.fi/research/som_pak/.