



令和 3 年 7 月 9 日

熊本大学
東京大学
高輝度光科学研究センター
科学技術振興機構 (JST)

世界初！XMCD のベイズ分光で、隠れた元スペクトルを再現
－磁石材料の新しいスペクトル解析法の開発－

- 磁石材料の X 線磁気円二色性 (XMCD: X-ray Magnetic Circular Dichroism) スペクトルから磁性評価をするため、ベイズ推定を組み込んだ新しい解析法 (ベイズ分光法) を開発しました。
- ベイズ分光法により、左右円偏光 X 線で得られる 2 つの元スペクトルの差分である XMCD スペクトルだけから、元の X 線吸収スペクトルを再現することに世界で初めて成功しました。
- これまで点推定であった磁性を表す物理量 (磁気モーメント) の誤差評価もベイズ分光法で実現しました。今後、磁性材料の研究に貢献することが期待できます。

(概要説明)

熊本大学大学院自然科学教育部の山崎大雅 (博士前期課程 2 年)、同産業ナノマテリアル研究所の赤井一郎 教授、東京大学大学院新領域創成科学研究科の岡田真人教授らの研究グループは、磁石材料のニッケルフェライト (注 1) を想定した人工 XMCD スペクトル解析にベイズ分光法 (注 2) を適用しました。その結果、左右円偏光 X 線 (注 3) で計測される X 線吸収 (XA: X-ray Absorption) スペクトル (注 4) の差分である XMCD スペクトル (注 5) だけから、元の XA スペクトルを再現することに成功しました。さらに、そのスペクトル解析で得た各スペクトル成分のスペクトル強度の事後確率分布 (注 6) から、磁気モーメント (注 7) とその誤差の推定に成功しました。今後本手法は、新規材料の磁気特性の解明に応用され、磁石材料研究に貢献することが期待されます。

本研究は、科学技術振興機構 (JST) 戦略的創造研究推進事業 CREST 研究領域「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用」(研究総括: 雨宮慶幸 (高輝度光科学研究センター 理事長)) の研究課題「データ駆動科学による高次元 X 線吸収計測の

革新」(研究代表者:赤井一郎(熊本大学産業ナノマテリアル研究所教授))と同領域の研究課題「ベイズ推論とスパースモデリングによる計測と情報の融合」(研究代表者:岡田真人(東京大学大学院新領域創成科学研究科教授))の支援を受けて行いました。本研究成果は「Science and Technology of Advanced Materials: Methods」に令和3年7月7日に掲載されました。

(説明)

ベイズ推定(注8)は因果律(注9)をさかのぼって現象の原因を評価する方法で、データ駆動科学(注10)における学理構築法です。本研究では、スペクトル分解にベイズ推定を組み込んだベイズ分光法を用いて、磁石材料の磁性評価のために計測されるX線磁気円二色性(XMCD)スペクトルの新解析法を開発しました。

XMCDスペクトルは、左回りと右回り円偏光X線によるスペクトル変化を高感度に検出するために、左右円偏光X線それぞれで計測される2つのX線吸収(XA)スペクトルの差分スペクトルとして計測されます。しかしその結果スペクトルは複雑化してしまい、従来のスペクトル解析(注11)では、元の2つのXAスペクトルの再現は不可能でした。

そこで本研究では、ベイズ分光法を用いれば、XMCDスペクトルから因果律をさかのぼって、元の2つのXAスペクトルの再現が可能であることを実証しました。その実証には、2つのXAスペクトルが正しく再現されるかを評価する必要があるため、計測データを模倣してノイズを重ねさせて合成した人工XMCDスペクトルを解析対象としました。想定した磁石材料はニッケルフェライト(NiFe_2O_4)で、そのニッケルイオンのL吸収端(注12)を想定しました。

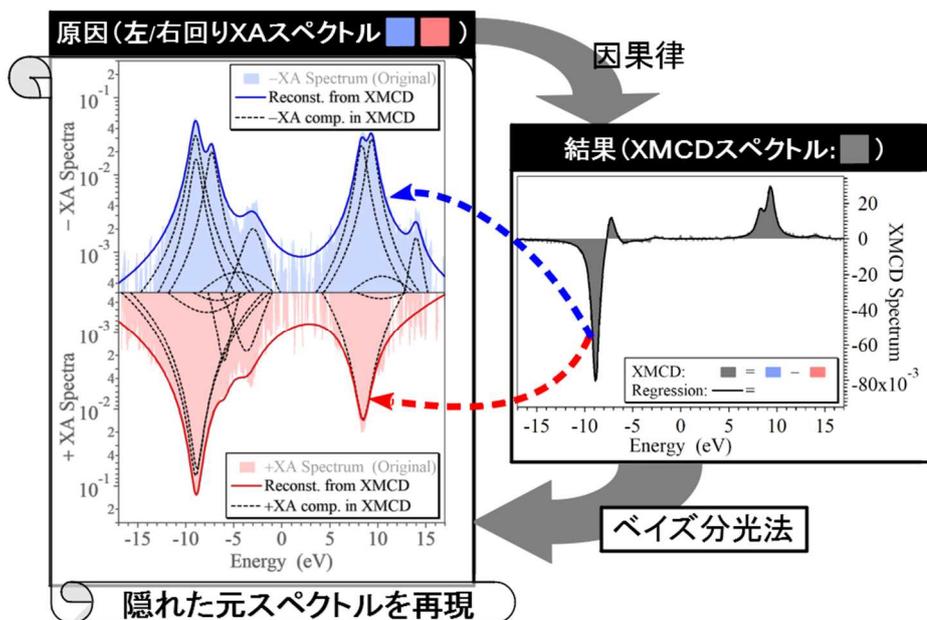


図:ベイズ分光法によるXMCDスペクトル(右)から、隠された元の左右回りXAスペクトル(左)の再現を実現

ベイズ分光法の最大の利点は、因果律の結果にあたる計測スペクトルに対し、その結果を与える原因（物理モデル）の候補が複数提唱できる場合、計測データだけから、先入観なくそのモデル選択（注13）ができることです。本研究ではそれを用いて、XMCDスペクトルを解釈するために必要となる、左右円偏光XAスペクトルそれぞれのスペクトル要素数を推定するモデル選択を行いました。その結果、図に示したように、左右円偏光それぞれのXAスペクトルの再現に成功しました。このようにベイズ推定に基づいて因果律をさかのぼることが実現され、左右円偏光XAスペクトルのスペクトル構造が評価可能となることから、磁石材料のスピン分裂状態の抽出分解が実現できます。

また、ベイズ分光法のもう1つの利点は、全ての推定量の事後確率分布が評価できることです。これまで磁石材料の磁性を特徴づける磁気モーメントの大きさの評価は、XMCDスペクトルの積分で行われてきましたが、得られる値は点推定（注14）となり、その推定精度の評価は不可能でした。それに対し本研究で用いたベイズ分光法では、左右円偏光それぞれのXAスペクトル強度が分離・抽出できることから、磁気モーメントの誤差評価を実現しました。

このように、XMCDスペクトル解析にベイズ分光法を適用することで、従来解析法で得られなかった隠れた物性情報の分離・抽出が可能となりました。今後、様々な磁性材料の磁性計測に応用することで、新たな発展が期待できます。

（注1） ニッケルフェライト

ニッケルを含む酸化鉄を主成分とする磁石材料の1つ。

（注2） ベイズ分光法

因果律をさかのぼるベイズ推定を適用したスペクトル解析法。

（注3） 左右円偏光 X線

X線の電場方向が電波に伴って回転するもので、左右回りの2通りがあり、電子のスピン状態を選択するのに用いられます。

（注4） X線吸収（XA）スペクトル

X線を用いて計測される吸収スペクトルで、エネルギーによって原子の種類が選択できます。

（注5） XMCDスペクトル

左右円偏光 X線で計測される XAスペクトルの差分スペクトルで磁性を計測する手法です。

（注6） 事後確率分布

ベイズ推定で評価できる推定量の誤差分布で、計測データに基づいて評価されます。

（注7） 磁気モーメント

材料の磁性の大きさを表すもので、電子軌道由来とスピン由来のものがあります。

（注8） ベイズ推定

ベイズの定理を用いた推定法で、データ駆動科学では、因果律の原因

と結果の間にベイズの定理を適用します。

(注9) 因果律

自然現象を司る原理で、結果は原因に基づくものであるという考え方。

(注10) データ駆動科学

計測データを起点とし、ベイズ推定等の機械学習を駆使して新しい科学研究を進める方法。

(注11) 従来のスペクトル解析

従来は因果律によって決まった結果に、計測ノイズがランダムに重畳するとして、その誤差を最小にする最小二乗法等が用いられてきました。しかしスペクトル解析等の非線形回帰では、得られる解が最適解である統計的確認が得られません。

(注12) L吸収端

各原子のL殻であるp軌道を始状態とするX線吸収。

(注13) モデル選択

データ駆動科学のベイズ推定によって実現できるもので、計測データから評価できる統計量であるベイズ自由エネルギーを規準として複数の候補から、データを説明するのに最適な物理モデルを先入観なしに推定することができます。データ駆動科学の学理構築法の要です。

(注14) 点推定

物理量の推定で、最適解として1つの値を推定する方法ですが、推定値の信頼性(例えば有効桁が何桁か?)が評価できません。

(論文情報)

論文タイトル : Bayesian spectroscopy of synthesized soft X-ray absorption spectra showing magnetic circular dichroism at Ni-L₃,-L₂ edges

著者名 (*責任著者) : Taiga Yamasaki^{1,*}, Kazunori Iwamitsu², Hiroyuki Kumazoe³, Masato Okada^{4,5}, Masaichiro Mizumaki⁶, Ichiro Akai^{3,*}

1. 熊本大学大学院 自然科学教育部 理学専攻
2. 熊本大学 技術部
3. 熊本大学 産業ナノマテリアル研究所
4. 東京大学 大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻
5. 物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点
6. 高輝度光科学研究センター

掲載雑誌 : Science and Technology of Advanced Materials: Methods

DOI : 10.1080/27660400.2021.1932108

URL : <https://doi.org/10.1080/27660400.2021.1932108>

<お問い合わせ先>

<研究に関すること>

熊本大学 産業ナノマテリアル研究所

教授 赤井一郎

Tel : 096-342-3296, E-mail : iakai[at]kumamoto-u.ac.jp

東京大学 大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻

教授 岡田真人

Tel : 04-7136-4085, E-mail : okada [at]edu.k.u-tokyo.ac.jp

高輝度光科学研究センター (JASRI) 分光推進室 先端分光計測チーム

主幹研究員 水牧仁一郎

Tel : 0791-58-2785, E-mail : mizumaki [at]spring8.or.jp

<JSTの事業に関すること>

科学技術振興機構 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ

嶋林ゆう子

Tel : 03-3512-3531, E-mail : crest[at]jst.go.jp

<報道に関すること>

熊本大学 総務部 総務課 広報戦略室

Tel : 096-342-3269, E-mail : sos-koho[at]jimukumamoto-u.ac.jp

東京大学大学院新領域創成科学研究科 広報室

Tel : 04-7136-5450, E-mail : press[at]k.u-tokyo.ac.jp

高輝度光科学研究センター (JASRI) 利用推進部 普及情報課

Tel : 0791-57-2785, E-mail : kouhou[at]spring8.or.jp

科学技術振興機構 広報課

Tel : 03-5214-8404, E-mail : jstkoho[at]jst.go.jp