



Title	Machine Learning-assisted Analysis of Nanobeam X-ray Diffraction Data for Bulk GaN Crystal Structure Characterization
Author(s)	Wu, Zhendong
Citation	大阪大学, 2026, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/105529
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

論 文 内 容 の 要 旨

氏 名 （ 武 振 東 ）	
論文題名	Machine Learning-assisted Analysis of Nanobeam X-ray Diffraction Data for Bulk GaN Crystal Structure Characterization (バルク GaN 結晶構造評価のための機械学習を用いたナノビーム X 線回折データ解析に関する研究)
論文内容の要旨	
This thesis explores the methodology and application of unsupervised machine learning for providing a physically interpretable connection between high-dimensional nanobeam X-ray diffraction (nanoXRD) data and the underlying crystal structures of wafer-scale GaN samples. Motivated by early observations that similarities in diffraction profiles reflect local structural environments, this work aims to develop machine learning-assisted approaches capable of characterizing nanoscale defects and revealing crystal structures across large spatial regions. To address this aim, nanoXRD measurements were at first combined with dimensionality reduction techniques to construct an interpretable, data-driven characterization framework. A comprehensive evaluation of nanoXRD datasets on GaN crystals showed that unsupervised learning yields results that are significantly more stable and robust than those from conventional peak-fitting methods, especially when diffraction profiles are complex or distorted by microstructural defects. Through a systematic comparison of embedded data structures and measured diffraction patterns, the study identified similarity and continuity as the two fundamental principles governing the relationship between the data space and the crystal structure. Building on these principles, two complementary analysis approaches were developed. A similarity-based clustering framework enables reliable identification of growth domains and microstructural groupings across wafer-scale GaN crystal samples. In parallel, a continuity-aware framework, centered on the originally proposed neighborhood-based similarity metric, detects and visualizes structural transitions across interfaces and boundaries, including subtle features that conventional analyses often fail to capture. The combined results demonstrate that machine learning can uncover previously hidden structural features, map gradual or abrupt transitions, and provide physically meaningful interpretations of nanoXRD data. This work thus establishes a new methodological foundation for nanoXRD-based crystal analysis and offers broader potential for next-generation materials research, including extensions to diverse material systems, multimodal measurements, and autonomous data-driven characterization workflows.	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 （ 武 振 東 ）			
論文審査担当者	(職)	氏 名	
	主 査	教 授	酒 井 朗
	副 査	教 授	中 村 芳 明
	副 査	教 授	浜 屋 宏 平
	副 査	准教授	藤 平 哲 也

論文審査の結果の要旨

本論文は、バルク GaN 結晶を対象としたナノビーム X 線回折 (nanoXRD) データに対し、教師なし機械学習手法を適用することで、高次元回折データと結晶構造との間に物理的に解釈可能な対応関係を構築する新しい解析手法の確立を目的としている。申請者は、nanoXRD により取得される回折プロファイルの類似性が局所的な結晶構造や欠陥状態を反映するという着想に基づき、次元削減およびクラスタリングを中心としたデータ駆動型解析フレームワークを体系的に構築した。

その結果、従来広く用いられてきたピークフィッティングに基づく解析手法と比較して、複雑な回折プロファイルや微細構造欠陥を含むデータに対しても、より安定かつ再現性良く結晶構造情報を抽出できることを明確に示した。特に、解析結果が測定ノイズや局所的なプロファイル変動に対して頑健である点は、nanoXRD データの実用的解析において重要な意義を有する。さらに、埋め込み空間におけるデータ構造と実空間の結晶構造との対応関係を詳細に検討することにより、「類似性」と「連続性」が nanoXRD データ解釈における本質的原理であることを明確にし、これを実験データに基づいて検証した点は、本研究の独創性を示す顕著な成果である。

これらの知見を基に、ウェハスケール GaN 結晶中の成長領域や微細構造を高い信頼性で同定する類似性に基づくクラスタリング手法と、界面や結晶粒界における構造遷移を高感度に検出・可視化する連続性指向型解析手法を新たに提案し、それらの有効性を実測データにより実証している。本研究は、nanoXRD データ解析に機械学習を導入することで、従来困難であった結晶構造評価を可能にするとともに、今後の材料科学研究における大規模データ解析や自律的材料評価手法への発展的展開も期待できるものであり、学術的および工学的意義は極めて高い。

以上の理由により、本論文は博士 (工学) の学位論文として価値のあるものと認める。