

表面化学分析におけるデータ解析の自動化

Keywords: 表面化学分析、X線光電子分光、データ解析、自動化

材料データプラットフォームセンター 副センター長

吉川 英樹

YOSHIKAWA.Hideki@nims.go.jp | https://samurai.nims.go.jp/profiles/yoshikawa_hideki



研究の背景 機能性材料やデバイスのハイスループットな新規開発を実現するためには、開発の羅針盤となる材料の電子構造や化学結合状態を迅速に知ることが重要である。電子構造や化学結合状態を知る手法として、X線光電子分光に代表される電子分光法が適している。しかしながら、電子分光法はそのデータ解析が難解とされハイスループット化が困難である。

研究の狙い X線光電子分光に代表される電子分光法のデータ解析を自動化しハイスループット化するための基盤技術の開発を行う。

最先端研究トピックス

《電子分光スペクトルのデータ解析の自動化のための基盤技術の開発》

① 電子分光スペクトルの自動ピーク分離技術

電子分光スペクトルは、複雑な多重ピーク構造を持つ上に、信号電子が物質内で非弾性散乱を受けることで生じるバックグラウンドも大きい。そのため、データ解析の第1段階で、ピーク群およびバックグラウンドの分離が不可欠で、本研究ではその自動化のアルゴリズムの開発とソフトウェアへの実装を行った。この新規のデータ解析ソフトウェアによって、Si基板上のSiO₂ナノ薄膜のXPS測定の前データ解析において、解析者の判断を介することなく定量的かつ再現性に優れたデータ解析を自動で行えることを実証した(図1参照)。

② 電子分光スペクトルのシミュレーターの要素技術開発

電子分光スペクトルは、信号電子の情報深さや試料の内部構造等の条件に支配されるため、定量評価にはシミュレーターの利用が重要である。シミュレーター内の基礎物理関数を精密かつハイスループットで求める手法を開発した。情報深さの導出に使用する非弾性平均自由行程をエネルギー損失関数から精密に評価する方法を開発した。エネルギー損失関数が未知の物質については、多変量解析を使って反射エネルギー損失スペクトルの実験結果からエネルギー損失関数を導出する技術を開発した。

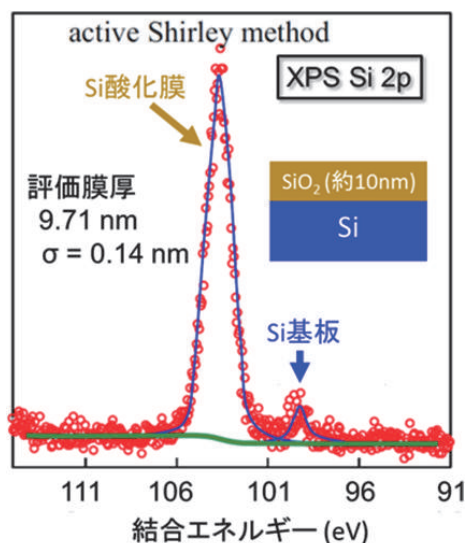


図1 Si上の約10nm厚のSiO₂膜におけるXPSスペクトルのバックグラウンドとピークの自動分離技術 [参考文献 2]

文献

- [1] 吉川英樹, 田沼繁夫, 表面科学, **36** (2015) 521.
 [2] R.Matsumoto, Y.Nishizawa, N.Kataoka, H.Tanaka, H.Yoshikawa, S.Tanuma, K. Yoshihara, J. Electron Spectros. Relat. Phenom. **207** (2015) 55.

まとめ

- XPSにおける自動ピーク分離技術の実施例
- 信号電子の観察深さの導出に使用するエネルギー損失関数の精密評価法の開発とシミュレーターの精度向上
- 信号電子の観察深さの導出に使用するエネルギー損失関数の精密評価法の開発とシミュレーターの精度向上

実用化への目標

- XPSに代表される電子分光スペクトルのハイスループットな定量解析を実現し、電子分光スペクトルのスパースモデリングとそのデータベース化を目指す。その電子分光スペクトルデータベースと材料物性データベースを融合することで、データ駆動型の材料研究であるマテリアルズ・インフォマティクスを加速する。