

X線反射率データ解析ブレークスルーの可能性

Possible breakthrough in the analysis of X-ray reflectivity data

物材機構, °桜井健次

National Institute for Materials Science °Kenji Sakurai

E-mail: SAKURAI.Kenji@nims.go.jp

X線反射率法は100年以上の長い歴史を持ち、現在では薄膜・多層膜の膜厚や密度を精密評価する技術として多くの実材料に応用されているが、古くて新しい未解決問題の1つとして位相問題が知られている。同じX線反射率のプロファイルを与える数学的な解は、常に複数存在する(図1)[1]。薄膜の基本的な層構造が既知で、解析に使用するモデルに確信が持てる場合には、他の可能性を排除した上で、問題なく精密なパラメータの決定を行うことができるが、試料に未知要素が多い場合は必ずしも解釈は容易ではない。この種の逆問題を解くための位相回復の方法は、かなり以前から提案されてきており、実空間と逆空間のそれぞれの束縛条件のもとで反復改良を行うアルゴリズム等も研究されている。また、モデルに過度に依存するリスクを回避する観点から、全プロファイルのパラメータフィッティングに代え、周波数フィルタリングによって一部のパラメータが寄与する特徴のみを抽出して解析する方法も検討されている[2]。しかし、どのような試料系にも適用可能な最終的なデータ解析法はいまだ見出されていない。高輝度な新光源の登場は、高品位の実験データの取得を可能とし、とりわけ位相項の情報が部分的であっても得られるようになれば、大きなブレークスルーが期待される。加えて、位相問題そのものではないが、部分的または完全にコヒーレントなX線による薄膜表面および界面の解析の新たな展開にも大いに関心を持たれる。既に研究が進んでいるX線光子相関分光法やコヒーレントX線回折イメージングを表面、薄膜・多層膜に特化して発展させる研究をはじめとして、新光源により新たな研究領域が続々開拓されるのではないかな。

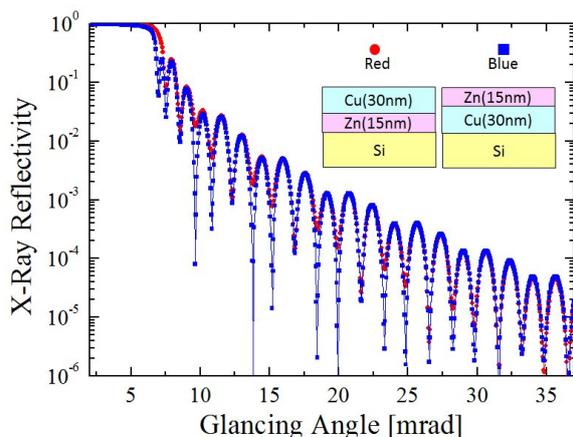


図1 薄膜の層構造が違っていても酷似したX線反射率のプロファイルが得られる例

上層密度の違いを反映する臨界角近傍を別とすれば、実データでの識別は難しい。

(参考)

[1] 桜井健次編「X線反射率法入門」講談社サイエンティフィク (2009).

[2] K. Sakurai et al., Trans MRS-Japan, 33, 523-528 (2008).