

Excel 上で動作する $sp^2/(sp^2+sp^3)$ 比算出のための DLC 薄膜の C-K 端 NEXAFS スペクトル用シミュレーションプログラムの開発

Development of the simulation program, working on Excel,
of C-K edge NEXAFS spectra of DLC film for estimation of $sp^2/(sp^2+sp^3)$ ratio

兵庫県立大学高度産業科学技術研究所 ◯高松 大樹, 遠藤 みなみ, 神田 一浩

University of Hyogo Laboratory of Advanced Science and Technology for Industry

◯Hiroki Takamatsu, Minami Endo, Kazuhiro Kanda

E-mail: renren@lasti.u-hyogo.ac.jp

ダイヤモンドライクカーボン(DLC)薄膜は低摩擦抵抗性(高硬度)や低摩擦係数, 化学的安定性, ガスバリア性, 耐腐食性のような非常に優れた特性を持つことが知られ、自動車部品や電子部品, 医療機器, 宇宙産業など幅広い分野で利用されており、更なる性能向上のための開発研究が日々行われている。DLC 薄膜中の炭素は sp^2 混成軌道を持つ炭素と sp^3 混成軌道を持つ炭素からなり、両者の組成比によって硬度・密度などの膜の特性が異なることが知られており、 sp^2/sp^3 比を決定することは DLC 膜のキャラクタリゼーションにおいて大変重要である。 $sp^2/(sp^2+sp^3)$ 比は吸収端近傍 X 線吸収微細構造(NEXAFS)法を用いて、 π ピークの強度と全体の強度の比から決定することができる。そのためには測定したスペクトルのピーク分離を行う必要があり、このピーク分離は通常データ解析ソフトを用いて行われてきた。本研究では多くのパソコンにインストールされている Microsoft Office の表計算ソフトウェアの Excel を使って高精度で $sp^2/(sp^2+sp^3)$ 比を算出できる C-K 端 NEXAFS スペクトル用の解析シミュレーションプログラムを作製した。

本シミュレーションプログラムでは共鳴ピークフィッティングを行うガウス関数に加え、吸収端近傍の直接イオン化効率のエネルギー依存性をフィッティングする erf 関数を使用でき(図 1)、 σ^* 領域のピーク強度も正確な算出が可能である。そのため、この領域に新たなピークが現れるヘテロ元素含有の DLC 薄膜の分析に有効である。また、斜め補正や正規化, ベースラインを 0 にする作業を自動化することによりデータ解析の大幅な負担軽減を実現した。さらに VBA(Visual Basic for Applications)を用いているため、新しい関数系のピークを任意に追加できるのも本シミュレーションプログラムの利点である。

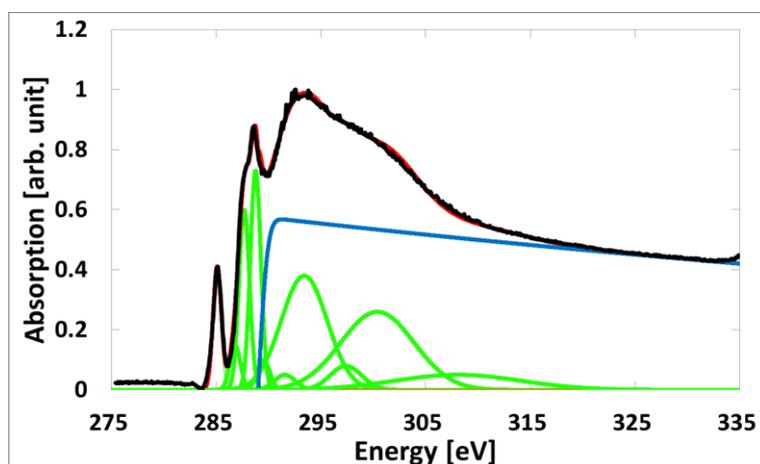


図 1 シミュレーションプログラムによる
ピーク分離