

改良型動的 Shirley 法による XPS スペクトル解析の安定化

Stabilization of XPS Spectra's Analysis by using Modified Active Shirley Method

○田中 博美¹, 西澤 侑吾¹, 松本 凌^{2,3}, 吉川 英樹², 田沼 繁夫², 吉原 一紘⁴

(1. 米子高専, 2. 物材機構, 3. 筑波大院, 4. シエンタ オミクロン)

○Hiromi Tanaka¹, Yugo Nishizawa¹, Ryo Matsumoto^{2,3}, Hideki Yoshikawa², Shigeo Tanuma², Kazuhiro Yoshihara⁴

(1.National Institute of Technology, 2.National Institute for Materials Science, 3. Univ. of Tsukuba, 4. Scienta Omicron, Inc.)

hitanaka@yonago-k.ac.jp

1. 緒言

X 線光電子分光法 (XPS : X-ray Photoelectron Spectroscopy) は物質の表面・界面における化学結合状態を同定できるため、製造現場での品質管理などに盛んに導入されつつある。この XPS で得られるスペクトルの解析過程では、バックグラウンド成分を正しく推定する必要がある。最近、我々はこのバックグラウンド成分の推定に動的 Shirley 法⁽¹⁾ を用いると SiO₂/Si 多層薄膜における上部層(SiO₂)の膜厚算出等、定量分析の解が安定することを明らかにした^{(2),(3)}。

一方で現状の動的 Shirley 法では、スペクトルの形状や解析範囲によっては安定解が得られる許容範囲を越え、バックグラウンドがピークを横切ることがある。このときピーク強度がみかけ上“負の値”となり物理的に間違った解釈となる(図 1 (a) 中の波線囲み丸の部分)。特に、解析範囲の始点と終点の強度差が大きいと“負の値”が生じ易い(バックグラウンドの傾きが大きい場合等)。そこで本研究では様々なスペクトル形状や解析範囲でも動的 Shirley 法が正しく適用できるようにするため、アルゴリズムの改良を行った。

2. 実験方法

動的 Shirley 法による XPS バックグラウンド推定の解を安定させるためには、バックグラウンドの初期値(特に端点強度)が重要であることが分かってきた。そこで、この初期値を自動調整できるアルゴリズムを導入する。具体的には、まず XPS スペクトルにおいて下に凸の変曲点を検出する。その中からスペクトルの両端に最も近い変曲点を探す。これらの強度をバックグラウンド計算の端点初期値として採用する。このアルゴリズムを用いるとみかけ上の“負の値”により局所解に落ち込む現象を抑制できる期待される。なお、本手法を“改良型動的 Shirley 法”と呼ぶことに

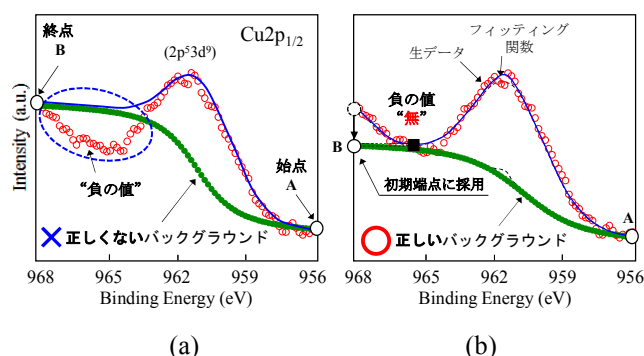


図 1 XPS スペクトルの自動バックグラウンド推定法の問題点と改善結果

[(a) 動的 Shirley 法、(b) 改良型動的 Shirley 法] する。

3. 結果と検討

図 1 に(a) 動的 Shirley 法および (b) 改良型動的 Shirley 法のそれぞれで推定したバックグラウンド形状を示す。XPS スペクトルには Cu2p_{1/2} サテライトピーク(2p⁵3d⁹)を用いた。

図 1 (a) から従来法では、終点 (B 点) が始点 (A 点) に比べて強度が高すぎるとバックグラウンドの推定結果が XPS ピークを横切っていることが分かる(この結果は物理的に正しくない)。

一方、図 1 (b) に示すように改良型動的 Shirley 法では B 点の強度を変曲点位置(■)まで下げて計算を始めた。その結果、推定したバックグラウンドはスペクトルを横切っておらず、最適解に収束していることが分かる。この時、誤差の指標となるカイ二乗値は 0.78 であった。従って改良型動的 Shirley 法は XPS スペクトル自動解析の安定化に効果的であることが明らかとなった。

文 献

- (1) A. Herrera-Gomez, *J. Electron Spectrosc. Relat. Ph.*, **189** (2013) 76.
- (2) 松本, 田中ら., 第 65 回応用物理学会春季学術講演会予稿集, p.05-266 (2015).
- (3) R. Matsumoto, Y. Nishizawa, N. Kataoka, H. Tanaka, H. Yoshikawa, S. Tanuma, K. Yoshihara, *J. Electron Spectrosc. Relat. Ph.*, (in press).