

光電子収量分光 (PYS) の閾値の自動判定の検討

Determination of threshold of photoelectron yield spectroscopy (PYS)

物材機構¹ ○柳生進二郎¹・吉武道子¹・知京 豊裕¹・長田 貴弘¹

NIMS¹, °Shinjiro Yagyū¹, Michiko Yoshitake¹, Toyohiro Chikyow¹, Takahiro Nagata¹

E-mail: YAGYU.Shinjiro@nims.go.jp

有機半導体や電極材料開発において、電子・ホールが移動する価電子帯や HOMO のエネルギーレベルの調整が重要である。この値は、光電子分光収量分光法 (PYS: 試料にエネルギーを変えた紫外光を照射し、放出される電子の数を計測する) の光電子放出閾値から求められる。この閾値は、Fowler の光電効果の理論をもとに、PYS 強度の平方根をとり、その傾きとバックグラウンドとの交点から求める解析法がよく使われている。現状では、この解析方法を自動化したものはなく、解析者が一つ一つのスペクトルを見て、閾値を求めている。そのために、解析者の経験などから値に違いが生じることがあるため、解析の自動化が求められている。前回¹⁾、Fowler の式による最小二乗回帰(Fitting)と、Fowler の式よりパラメータを変えて計算したデータによる機械学習の 2 つの自動解析の方法で、測定データ(Au)にて検討を行なった。機械学習の方がこれまで人が解析してきた値に近い結果を導き出していることを報告した。本報告では、機械学習の手順を示すとともに、機械学習の肝であるデータと、機械学習と Fitting の違いについて検討する。材料分野においては、データは少ないので理論的に構築されたシミュレーションの計算結果をデータにし、機械学習が行われている²⁾。シミュレーションでは、計算パラメータが目的変数 (ラベル) となり、計算で得られた結果が説明変数 (特徴量) となる。本研究でも計算パラメータの大きさや分割数やノイズなど、計算によりいくつかのデータセットを生成し、それを学習させた識別機により、実測定スペクトルの予測比較を行った。

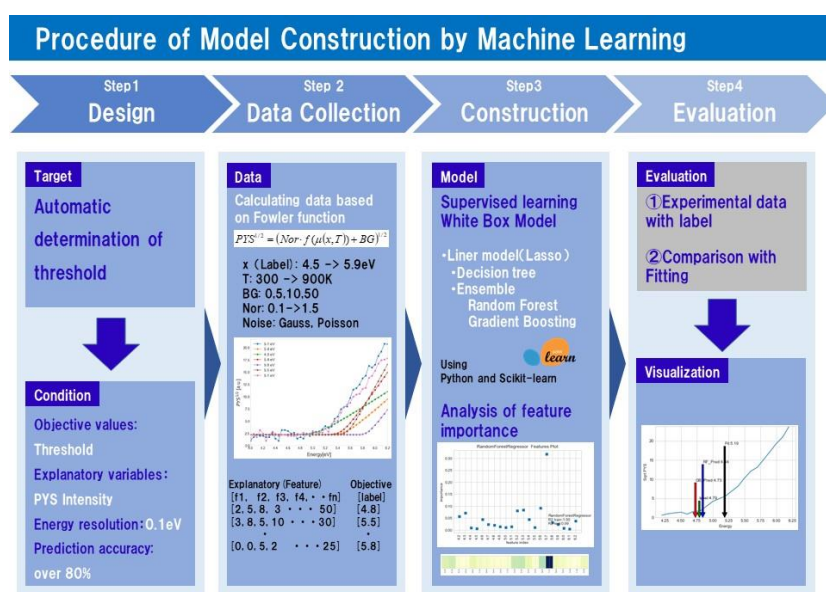


図 機械学習の手順

¹⁾ 柳生 進二郎, 吉武道子, 知京豊裕: “光電子収量分光 (PYS)の閾値の自動判定”, 65 回応用物理学会春季学術講演会.

²⁾ 小久保信彦, 原田俊太, 田川美穂, 宇治原徹: “SiC 溶液成長における熱流体解析と機械学習を用いた最適化手法の提案”, 65 回応用物理学会春季学術講演会.