

クラスター分析による表面の異なる化学種の自動識別

Automatic identification for different chemical species on the surface by cluster analysis

阪大院工, °(D)宮崎 雅大, 菅原 康弘, 李 艶君

Osaka Univ., °Masato Miyazaki, Yasuhiro Sugawara and Yan Jun Li

E-mail: u572719c@ap.eng.osaka-u.ac.jp

【背景】 走査型プローブ顕微鏡 (SPM) により、物質表面に吸着した化学種を原子スケールで識別することが可能となり、その分布やダイナミクスに関する研究が盛んに行われている[1]。化学種の特定は SPM による研究の第一歩目ともいえるが、多くの吸着物は似通った球状のコントラストとして観察されるので、表面に存在する複数の化学種を識別することは簡単ではない。また、画像取得の高速化や、複数のチャンネル (表面形状, トンネル電流, 静電気力など) の同時取得などの進歩により、全てのデータを人の手で詳細に解析することは困難になりつつある。

【研究内容】 本研究では、クラスター分析を用いることで複数のチャンネルから表面の異なる化学種を識別する解析ソフトの開発に取り組んだ。同一の化学種とプローブが同一の相互作用を及ぼし合うことを考えると、化学種の識別に複数のチャンネルを利用することは非常に有効である[2]。また本解析ソフトでは、多数のデータを扱えるように、クラスター分析に必要な前処理 (ドリフト補償, ノイズ除去, 原子列の識別など) は自動で行うようにした (Fig. 1)。開発した解析ソフトを用いて、ルチル型 $\text{TiO}_2(110)$ 表面の AFM 像を解析することで、複数のチャンネルの画像から異なる化学種を自動で識別できることを確認した (Fig. 2)。本手法により、複数のチャンネルから化学種を自動で識別することが可能となり、多数のデータに適用することで、人の手による解析では見過ごされていた情報などを発見的に獲得することが期待される。

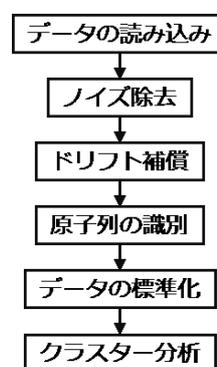


Fig. 1 Flowchart

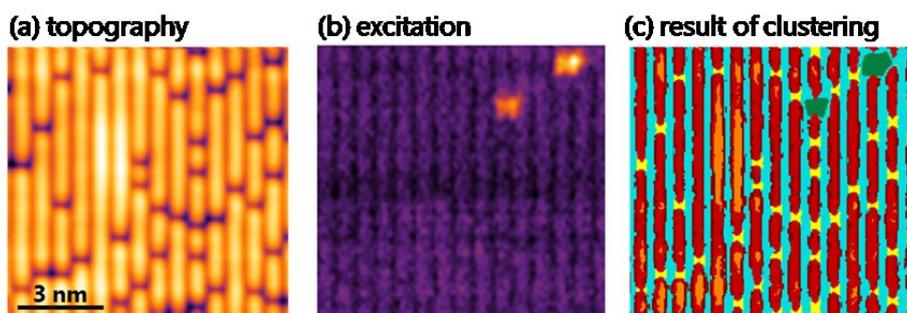


Fig.2 AFM images of the $\text{TiO}_2(110)$ surface. (a) Topography, (b) Excitation, (c) Result of cluster analysis images from the topography and excitation images, in which different chemical species are colored by different colors.

【参考文献】

- [1] H. F. Wen, Y. Adachi, Q. Zhang, M. Miyazaki, Y. Sugawara and Y. J. Li, *J. Phys. Chem. C* **123**, 25756 (2019)
- [2] Q. Zhang, H. F. Wen, Y. Adachi, M. Miyazaki, Y. Sugawara, R. Xu, Z. H. Cheng and Y. J. Li, *J. Phys. Chem. C* **123**, 22595 (2019)