

XPS データセットの自動解析による GaN 初期酸化過程解析のハイスループット化

High-throughput analysis of the initial oxidation process of GaN using data sets and automated peak fitting

NIMS¹ °原田善之、角谷正友、篠塚寛志、登坂弘明、松波成行、田沼繁夫、吉川英樹

NIMS DPFC, °Y. Harada, M. Sumiya, H. Shinotsuka, H. Tosaka, S. Matsunami, S. Tanuma, H. Yoshikawa,

E-mail: HARADA.Yoshitomo@nims.go.jp

従来の XPS によるスペクトル解析においては、解析プログラムにおけるピーク分離の解の探索に際して、バックグラウンドの手動除去やピークの位置や半値幅などのピークパラメータの初期値の手動指定を初期作業として必要とするため、ピーク分離の解が変化するなど解析者依存性が生じるといった問題がある。また、一連の測定で得られる多数本のスペクトルから成るデータセットを解析する場合は、人手の作業に多大な時間を要すると言った問題も生じる。そこで本研究では、NIMS 材料データプラットフォームセンター (DPFC) が開発しているデータセットの判読化のためのフォーマット変換および可視化の自動処理システムを用い、国際標準 ISO 14975 に準拠した VAMAS フォーマットで出力されたデータを可読化された数値データと XML 形式のメタデータに自動分離した。これにより、数百本ある一連の XPS スペクトル群をデータセット単位で自動分離した。その上で得られた数値データ群を、DPFC が開発したベイズ情報量基準 (BIC) を用いた自動ピーク解析プログラム[1]を用いることで、解析者依存性を排除したピーク分離を行った (図 1)。本実験では、GaN 表面初期酸化過程の解析を対象として、XPS チャンバ内に O₂ ガスを注入した状態での GaN の XPS O1s スペクトルの時間変化のデータ群[2]を自動解析した結果を示す。この方法により、人手では膨大な時間と手間から非常に困難であった解析が数時間程度で実現可能となる。本講演では、この DPFC での XPS データセットの自動処理を紹介するとともに、解析から得られた各ピークが示す化学結合状態、GaN 面方位による酸化傾向の時系列分析結果について報告する。

謝辞 本研究の O1s スペクトルは SPring-8 JAEA BL23SU の研究課題 (2018A3834, 2019B3834) で行われたものを使用した。

References

- [1] H. Shinotsuka, et al., J. Elec.Spec. Vol239, 146903(2020).
[2] M. Sumiya et al., J. Phys. Chem. C (to be submitted) .

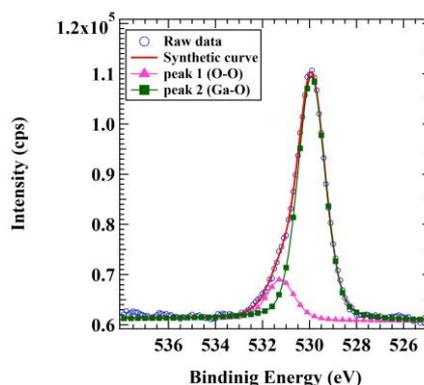


Fig.1 Example of peak fitting result of O1s peaks of c-GaN by using NIMS XPS analysis program [1].