

4D-XPS 法による多層積層膜に埋もれた界面反応可視化の 逆解析シミュレーション検証

Simulation verification of the inverse analysis by using 4D-XPS method to make
reactions in the buried multi-layer stack-film interfaces visible

○豊田 智史¹、山本 知樹²、吉村 真史³、住田 弘祐⁴、三根生 晋⁴、町田 雅武⁵、
吉越 章隆⁶、鈴木 哲²、横山 和司²、大橋 雄二¹、黒澤 俊介¹、鎌田 圭¹、
佐藤 浩樹¹、山路 晃広¹、吉野 将生⁷、花田 貴⁷、横田 有為⁷、吉川 彰⁷

(東北大NICHe¹、兵庫県大²、SP8サービス³、マツダ⁴、シエンタオミクロン⁵、原子力機構⁶、東北大金研⁷)

○S. Toyoda¹, T. Yamamoto², M. Yoshimura³, H. Sumida⁴, S. Mineoi⁴, M. Machida⁵,

A. Yoshigoe⁶, S. Suzuki², K. Yokoyama², Yuji Ohashi¹, Shunsuke Kurosawa¹, Kei Kamada¹,

Hiroki Sato¹, Akihiro Yamaji¹, Masao Yoshino⁷, Takashi Hanada⁷, Yuui Yokota⁷, and A. Yoshikawa⁷,

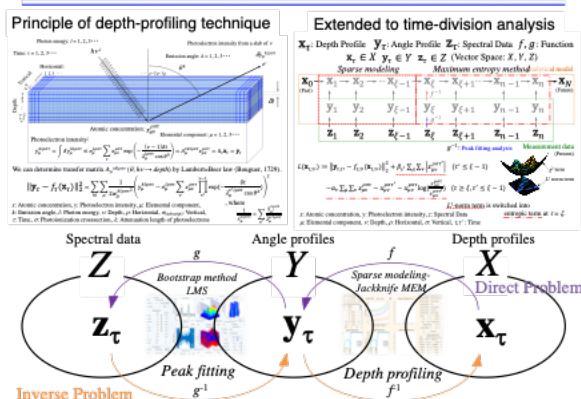
(¹NICHe Tohoku Univ., ²Univ. of Hyogo, ³Spring-8 Service, ⁴Mazda, ⁵Scienta Omicron,

⁶JAEA, ⁷IMR Tohoku Univ.)

E-mail: toyoda@imr.tohoku.ac.jp

我々は、埋もれた物質界面における化学反応や材料機能の”動態”を直接計測する手法を確立することを目的とし、4次元時空間計測を可能とするX線光電子分光(4D-XPS)法を開発している(図1(a))。これまで、近大気圧下硬X線角度分解光電子分光装置[1]と、Si基板上の多層積層膜(Carbon(5nm)/AlO_x(5nm)/TiO_x(10nm)/SiO_x(?nm))をモデル試料として用いることによって、深さ方向分布・時系列(2次元)可視化を実証した[2]。これに加え、本実証実験により得られた時空間計測システムの多次元データを元に、逆解析シミュレーションの高速化を実現し、放射光ベースの先端計測装置だけでなく、汎用装置にも利用でき、さらに、あらゆる材料系に応用できる化学結合状態の時空間解析ソフトウェアを構築した[3]。本発表では、より一層の計算負荷が要求される、面内分布を有した埋もれた多層膜界面反応の4次元時空間可視化について、その実現可能性を逆解析シミュレーションにより検証した結果を報告する(図1(b))。界面SiO_x層の厚みが面内方向に三角関数で変化し、かつ、時間方向にも指数関数で変化する、といった酸化還元反応を模擬した構造モデルを仮定したところ、数%のポアソンノイズ付の光電子強度角度分布データでも、逆解析シミュレーションによって再現できることを明らかにした。【参考文献】[1] 横山他、SPRING-8/SACLA Inform. **22**, 30 (2017). [2] 豊田他、第25回電子デバイス界面テクノロジー研究会(2020). [3] 豊田他、第67回応用物理学会春季学術講演会 14p-D215-1 (2020).

(a) How can we solve the Inversion Problem of 4D-XPS ?



(b) Simulation of interfacial chemical reaction dynamics

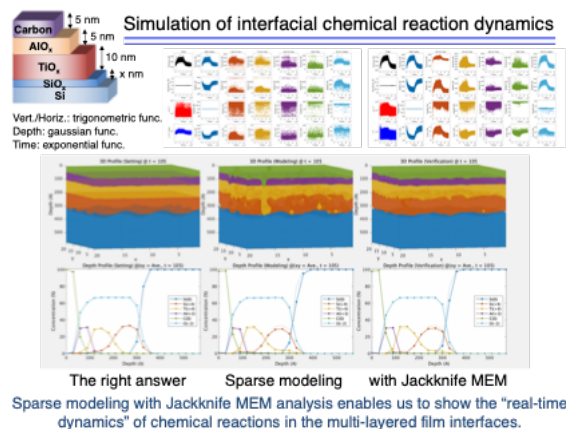


図1. (a)4D-XPS 法のコンセプト、(b)多層積層膜に埋もれた界面反応の逆解析シミュレーション検証