

## 光電子収量分光 (PYS) の閾値の自動判定

### Automatic determination of photoelectron yield spectroscopy (PYS) threshold

物材機構<sup>1</sup> ○柳生進二郎<sup>1</sup>, 吉武道子<sup>1</sup>, 知京豊裕<sup>1</sup>・長田貴弘<sup>1</sup>

NIMS<sup>1</sup> ○Shinjiro Yagyū<sup>1</sup>, Michiko Yoshitake<sup>1</sup>, Toyohiro Chikyow<sup>1</sup>, Takahiro Nagata<sup>1</sup>

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

半導体やその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であるイオン化ポテンシャル (IP) は重要な物性値である。この値は、光電子分光収量法 (Photoelectron Yield Spectroscopy (PYS)) のスペクトルの閾値 (IP) より求めることができる。(PYS は、試料に徐々にエネルギーを増加させた紫外光を照射し、試料から放出される光電子数を計測する手法ある。) 閾値の導出には、Fowler の光電効果の理論をもとに、光電子放出強度 (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用いられる。現状では、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。このため、解析者の経験などによる推定の違いや解析時間などの課題があり、解析の自動化が求められている。これまで、我々は、機械学習を用いた自動解析方法と従来の回帰 (Fitting) による解析方法を実際の測定データ (理研計器社製 AC-3 装置にて測定した材料名やその素性、閾値を求めた 87 個 (Au : 31, Au 以外の金属 : 16, 酸化物・半導体 : 15, 有機物 : 25)) に適用し、その予測性能について評価した。本報告では、機械学習による予測と検証データとの詳細な比較検討について報告する。

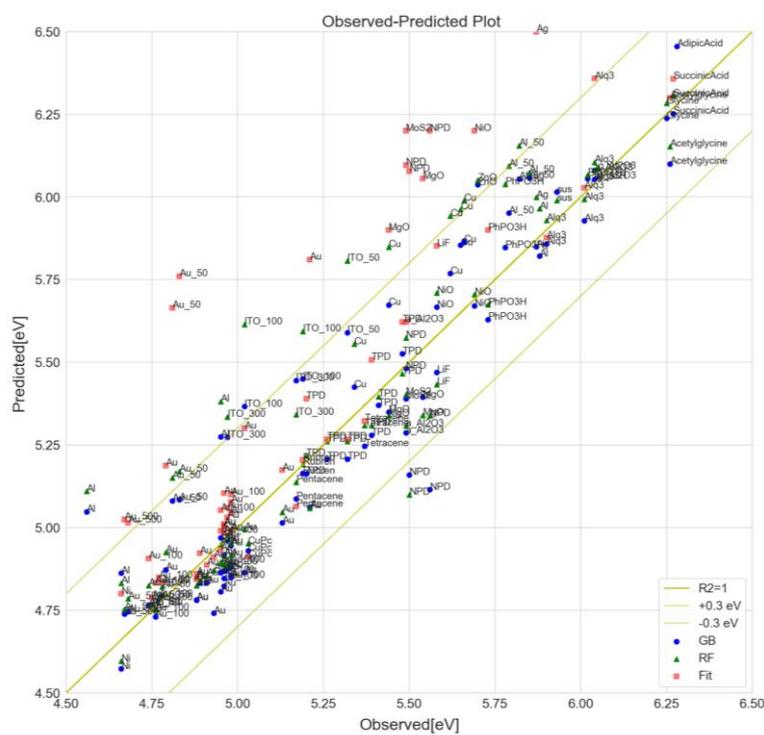


Fig. Observed-Predicted Plot of our validation data. Predictions are carried out by machine learning models (Gradient boosting, Random forest) and fitting.