



X 線光電子分光における時空間計測・解析手法の開発 III Development of *spatiotemporal* measurement and analysis methods in x-ray photoelectron spectroscopy III

○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、吉川 彰¹、鈴木 哲²、横山 和司²

(東北大学¹、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)

○S. Toyoda¹, T. Yamamoto², M. Yoshimura³, H. Sumida⁴, S. Mineoi⁴, M. Machida⁵,
A. Yoshigoe⁶, A. Yoshikawa¹, S. Suzuki², and K. Yokoyama²

(¹Tohoku Univ., ²Univ. of Hyogo, ³SPRING-8 Service, ⁴Mazda, ⁵Scienta Omicron, ⁶JAEA)

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

我々は、X 線光電子分光(XPS)データの時空間計測・解析技術に立脚し、埋もれた物質界面における化学反応や材料機能の”動態”を直接観察する手法を確立することを目的とし、近大気圧下硬 X 線角度分解光電子分光(Near-Ambient Pressure Hard x-ray Angle-Resolved PhotoEmission Spectroscopy: NAP-HARPES)装置[1]を用いて、Si 基板上の多層積層膜(Carbon(5nm)/AlOx(5nm)/TiOx(10nm)/SiOx(?nm))界面の深さ方向分布・時系列解析を行ってきた[2]。図 1(a)に XPS における時空間計測・解析法のコンセプトを示す。角度分解 XPS による深さ方向プロファイリングの原理図、スパースモデリング[3]により最大エントロピー法(MEM)[4]解析の事前情報を決定して時間分割法に拡張する方法、開発した GUI を利用して逆問題を解き、高次元スペクトルデータ(Z)→角度プロファイル(Y)→深さプロファイル(X)へと変換するスキームを明示した。図 1(b)には、モデル試料である多層積層膜界面の深さ方向分布時系列解析の動画デモを示した。1 秒露光で取得した NAP-HARPES スペクトルデータをモンテカルロ法的一种である Bootstrap 法[5]により 10 回再標本化した後に、スパースモデリングにより決定した事前情報の深さ方向分布を 10 回 Jackknife[6]平均化することで、計測ノイズ起因の揺らぎが抑えられ、多層積層膜に埋もれた界面が環境変化に応じて動く様を映像化できた。本手法を用いることで、短時間露光によりビッグデータ化して見えにくくなった計測結果から、界面動態を見極めるために適切な露光時間を正しく理解できる。さらに、本モデル試料から得られた解析結果を用い、汎用 XPS 装置かつあらゆる元素・化学結合状態で時空間計測を可能にするべく、GUI プログラムコードを抽象化し、解析技術の社会実装を進めた。

【参考文献】 [1] K. Yokoyama *et al.*, SPRING-8/SACLA Inform. **22**, 30 (2017). [2] 豊田他、第 80 回応用物理学会秋季学術講演会 18a-E318-14 (2019). [3] R. Tibshirani, J. Royal Stat. Soc. B **58**, 267 (1996). [4] A.K. Livesey *et al.*, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **67**, 439 (1994). [5] B. Efron, Ann. Statist. **7**, 1 (1979). [6] M. H. Quenouille, Ann. Math. Statist. **20**, 355 (1949).

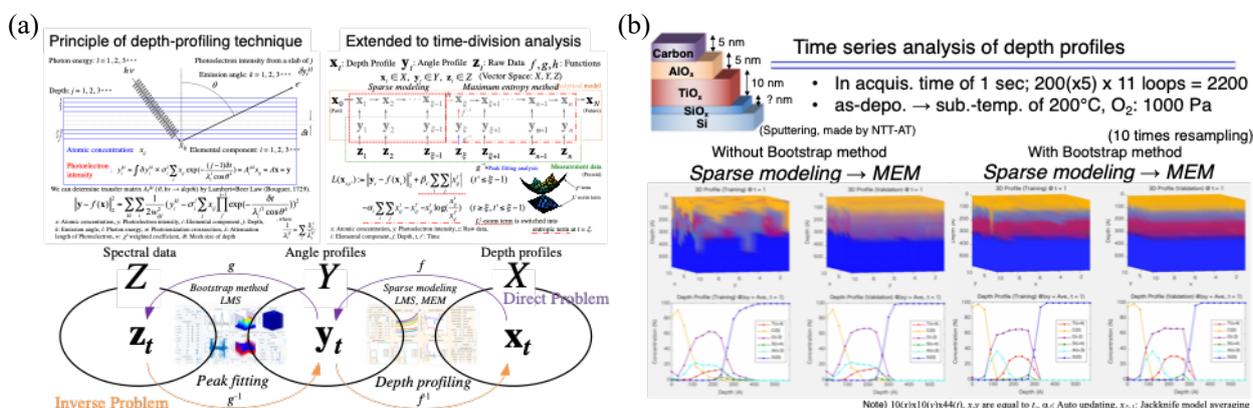


図 1. (a)時空間計測・解析法のコンセプト、(b)多層積層膜界面深さ方向分布時系列解析の動画デモ