

## 時空間分割 X 線光電子分光による界面反応場の計測解析技術開発

Development of measurement and analysis techniques in the interfacial reaction field by space-time division x-ray photoelectron spectroscopy

東北大 NICHe 豊田 智史

NICHe, Tohoku Univ. Satoshi Toyoda

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

近年、X 線光電子分光(XPS)ハードウェア技術の進展によって、広い範囲の光電子出射角度のデータを容易に取得できるようになってきており、バルク敏感性を有する硬 X 線励起での角度分解計測(HARPES: Hard x-ray Angle-Resolved PhotoEmission Spectroscopy)も実験室ベースで可能となった[1]。これに加えて、光電子分光器のインプットレンズ付近に作動排気システムを導入することにより大気圧に近い(NAP: Near Ambient Pressure)条件下で、軟 X 線を用いた ARPES 計測も実現され[2]、さらには、角度積分型では大気圧以上の条件での測定も達成されている[3]。将来的な技術の進展によって、バルク結晶成長中における界面反応場の時空間計測も視野に入ってきた。

一方で、XPS スペクトルを時空間分割で取得するとデータ量は飛躍的に増大し、解析に要する時間コストもまた膨大になっていくことが予想される。そこで、ピークフィッティングおよび深さ方向分布解析の高速処理を可能にするソフトウェアを開発した[4]。マルチコア CPU の並列処理アルゴリズムを活用することで、100 万本のピークフィッティング解析を 30 分程度、100 万分布の深さ方向分布を 1 週間程度で解析可能となった。図 1 に示すように、様々な元素種で構成される多層積層膜界面における界面酸化/還元と表面電極エッチング/成長過程が同時に起きている状況をシミュレーションにより検証できた。さらに、XPS 計測分析からものづくりへフィードバックするためには、ある時空間上の様々な元素種の濃度を機能特性と紐づけて、次の実験条件を決定する必要がある。そこで、機械学習の分野で知られるベイズ最適化[5]をアプリ実装し、次の実験条件を多次元パラメータ空間上で推定できるようにした(図 2)。ロボティクスの活用により、ものづくりの自動化・自律化も期待できる。

[1] A. Regoutz *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **89**, 073105 (2018). [2] F. Mangolini *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **83**, 093112 (2012). [3] P. Amann *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **90**, 103102 (2019). [4] 豊田智史他、表面と真空、64 巻 2 号 p.86-91、2021 年。[5] B. Shields, *et al.* Nature **590**, 89 (2021).

[謝辞] 本研究は、東北大の横田有為准教授、吉川彰教授、兵庫県立大学の鈴木哲教授、横山和司教授、SPRING-8 サービスの吉村真史博士、シエンタオミクロンの町田雅武博士との共同で行われました。この場をお借りして感謝申し上げます。

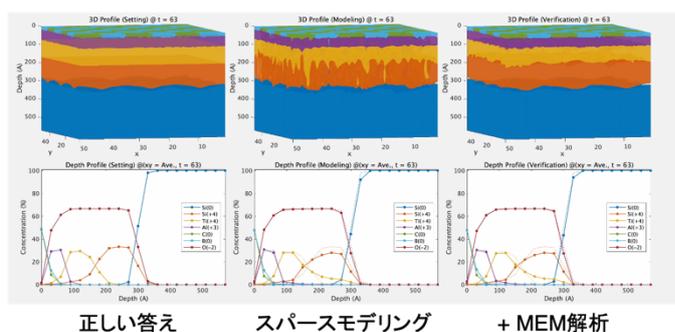


図 1. 多層積層膜に埋もれた界面反応場の逆解析シミュレーション検証結果

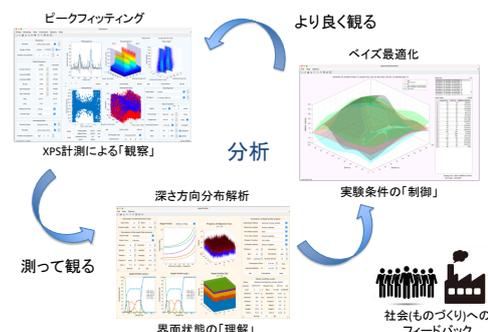


図 2. XPS 計測分析からものづくりへのフィードバック