



多層積層膜に埋もれた界面反応可視化のための 4D-XPS 計測データ逆解析ソフトウェア開発

Development of inverse analysis software by using 4D-XPS measurement data for
the visualization of reactions in buried multi-layer stack-film interfaces

○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, ⁵Scientia Omicron, ⁶JAEA)

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)法を提案[1]し、計測・解析技術の高度化を進めている。これまで、近大気圧下硬 X 線角度分解光電子分光装置[2]と、Si 基板上的多層積層膜(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)可視化を実証しつつ、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、あらゆる材料系に適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、より一層の計算コストが要求される、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できるようにするソフトウェアを開発したので報告する。XPS スペクトルデータは一本当たり凡そ数 KB、1000 スライス程度とる角度分解データでは数 MB となるため、空間方向に 10000 点かつ時間方向に 100 点を取って合計百万点を取ると、数 GB~数 TB のデータサイズとなる。このようなビッグデータを全てピークフィッティングするためのソフトウェアが必要になるが、まずはマルチコア CPU を利用したマルチスレッド処理を実装することによって、ノート PC でも百万本の XPS スペクトルのピークフィッティング処理を 30 分程度で実現可能にした[図 1(a)]。これに加え、深さ方向解析ソフトウェアについてもマルチスレッド処理の実装を施すことで、100 万の深さ方向分布を一週間程度で解析することができるようになった[図 1(b)]。【参考文献】[1] 豊田他、第 81 回応用物理学会秋季学術講演会 9p-Z24-8 (2020). [2] 横山他、SPRING-8/SACLA Inform. 22, 30 (2017). [3] 豊田他、第 26 回電子デバイス界面テクノロジー研究会(2021).

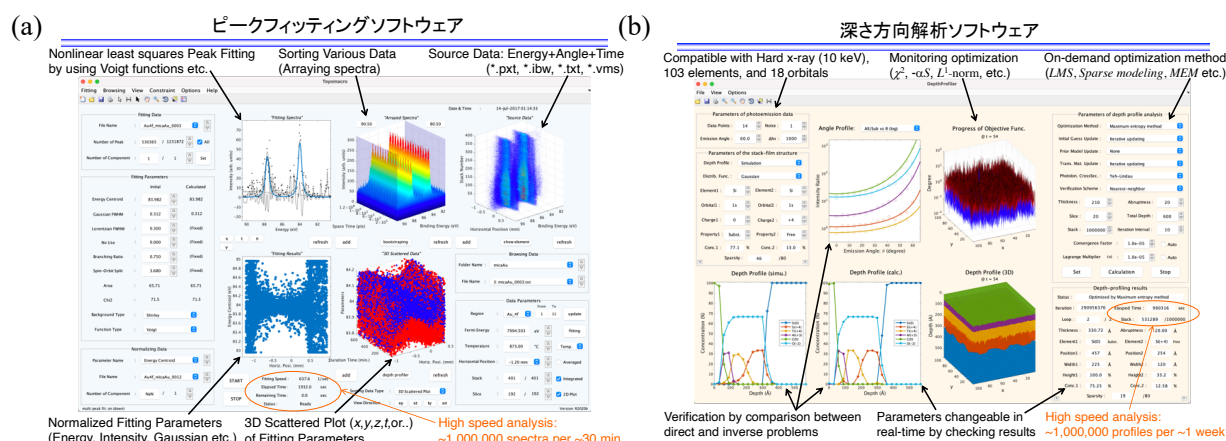


図 1. (a)ピークフィッティングソフトウェア、(b)深さ方向解析ソフトウェア