



4D-XPS 計測ビッグデータの逆解析による 多層積層膜に埋もれた界面の高解像度可視化

High-resolution visualization of the buried multi-layer stack-film interfaces by
inverse analysis of 4D-XPS measurement Big data

○豊田 智史¹、吉村 真史²、住田 弘祐³、三根生 晋³、町田 雅武⁴、

吉越 章隆⁵、吉川 彰¹、鈴木 哲⁶、横山 和司⁶

(東北大¹、SP8サービス²、マツダ³、シエンタオミクロン⁴、原子力機構⁵、兵庫県大²)

○S. Toyoda¹, M. Yoshimura², H. Sumida³, S. Mineoi³, M. Machida⁴, A. Yoshigoe⁵,

A. Yoshikawa¹, S. Suzuki⁶, and K. Yokoyama⁶

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

E-mail: satoshi.toyoda.d5@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[1]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[2]。また、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、その実現可能性を順逆解析双方向の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技術を開発した[3]。XPSスペクトルのデータは1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100万点を取ると、数GB～数TBのデータサイズ(1億本程度)となる。このような4D-XPS計測ビッグデータを全てピークフィッティングするために、64コアCPUを利用したマルチスレッド計算処理を実装し、1億本のXPSスペクトルのピークフィッティング処理を1日弱程度でできるようにした[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計算処理を実装して、800万の深さ方向分布を1週間程度で解析を可能にし、多層積層膜に埋もれた界面の高解像度化に成功した[図1(b)]。【参考文献】[1] 横山他、SPRING-8/SACLA Inform. 22, 30 (2017). [2] 豊田他、第68回応用物理学会春季学術講演会 Z03 T9 (2021). [3] 豊田他、第27回電子デバイス界面テクノロジー研究会(2022).

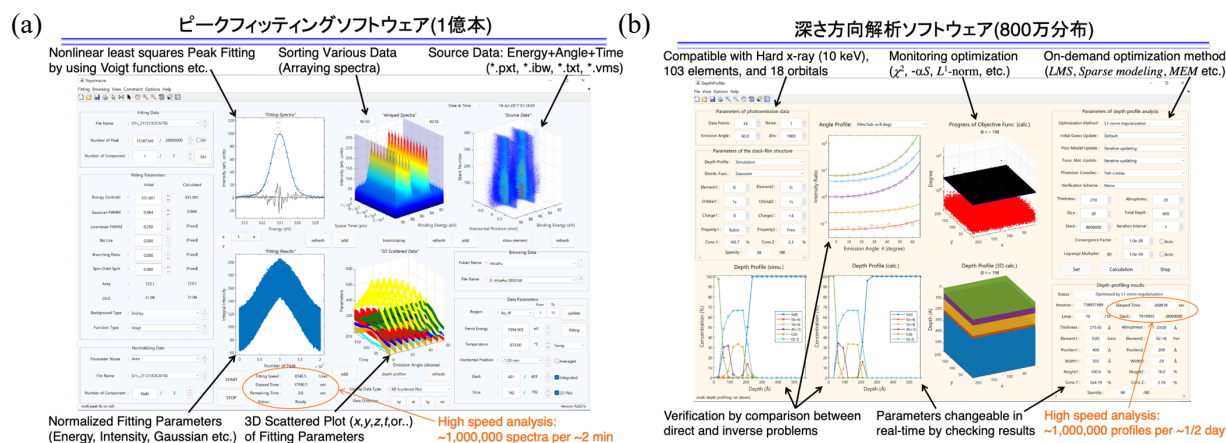


図 1. (a)ピークフィッティングソフトウェア、(b)深さ方向解析ソフトウェア