

クラスター分析による表面の化学種の自動識別

Automatic identification of chemical species on the surface by cluster analysis

阪大院工, °(D) 宮崎 雅大, 菅原 康弘, 李 艶君

Osaka Univ., °Masato Miyazaki, Yasuhiro Sugawara and Yan Jun Li

E-mail: u572719c@ap.eng.osaka-u.ac.jp

【背景】走査型プローブ顕微鏡 (SPM) により、物質表面に吸着した化学種を原子スケールで識別することが可能となり、その分布やダイナミクスに関する研究が盛んに行われている[1]。化学種の特定は SPM による研究の第一歩目ともいえるが、多くの吸着物は似通った球状のコントラストとして観察されるので、それらを識別することは簡単ではない。また画像取得の高速化や、複数のチャネル (表面形状、トンネル電流、静電気力など) の同時取得などの進歩により、全てのデータを人の手で詳細に解析することは困難になりつつある。

【研究内容】本研究では、クラスター分析を用いることで複数のチャネルから表面の異なる化学種を自動で識別する解析ソフトの開発に取り組んだ。化学種の識別に複数のチャネルを利用することは非常に有効であり[2]、それらを統計学的に処理することで自動かつ高精度に化学種を識別することを目指した。また本解析ソフトでは、多数のデータを扱えるように、クラスター分析に必要な一連の前処理 (ドリフト補償、ノイズ除去、原子列の識別など) を自動で行えるようにした。開発した解析ソフトを用いて、ルチル型 $\text{TiO}_2(110)$ 表面の原子間力顕微鏡 (AFM) 像を解析することで、複数のチャネルの画像から異なる化学種を自動で識別できることを確認した (Fig. 1) [3]。本手法により、複数のチャネルから化学種を自動で識別することが可能となり、多数のデータに適用することで、人の手による解析では見過ごされていた情報などを発見的に獲得することが期待される。

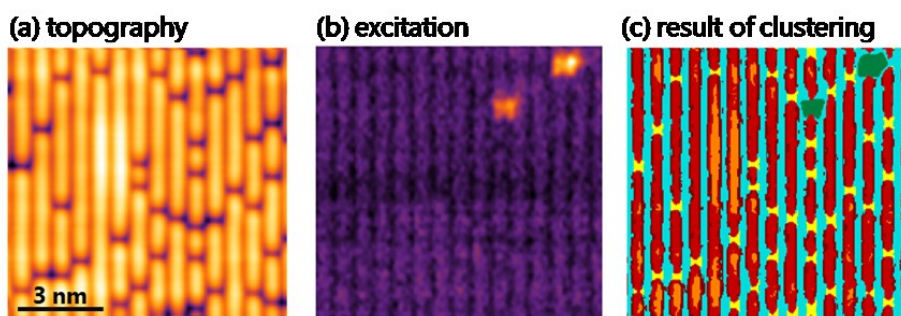


Fig.1 AFM images on $\text{TiO}_2(110)$ surface. (a) Topography, (b) Excitation, (c) Result of cluster analysis images from the topographic and excitation images, in which different chemical species are colorized by different colors.

【参考文献】

- [1] H. F. Wen, Y. Adachi, Q. Zhang, M. Miyazaki, Y. Sugawara and Y. J. Li, *J. Phys. Chem. C* **123**, 25756 (2019)
- [2] Q. Zhang, H. F. Wen, Y. Adachi, M. Miyazaki, Y. Sugawara, R. Xu, Z. H. Cheng and Y. J. Li, *J. Phys. Chem. C* **123**, 22595 (2019)
- [3] 宮崎 雅大、菅原 康弘、李 艶君、第 81 回応用物理学会 秋季学術講演会, 9a-Z06-8 (2020)