

XPS データセットにおけるピーク分離および解析の現状とその課題

○原田善之*、角谷正友、篠塚寛志、登坂弘明、吉川英樹、田沼繁夫

NIMS 材料データプラットフォームセンター

Current status and issues of peak separation and analysis in XPS Datasets

○Y. Harada*, M. Sumiya, H. Shinotsuka, H. Tosaka, H. Yoshikawa, S. Tanuma

NIMS Material Data Platform Center

従来の XPS によるスペクトル解析においては、バックグラウンドの端点の手動設定やピークの位置や半値幅などのピークパラメータの初期値の手動指定を初期作業として必要とするため、ピーク分離の解に解析者依存性が生じる問題がある。

さらに、XPS や AES などの表面分析装置においては、古くは Depth profile など、あるパラメータを変化させながら連続して多数のスペクトルを測定し、その変化を追いかけることが行われてきた。現在においては、さらに温度、圧力、反応性ガスなど多岐にわたるパラメータ下で測定が行われている。このような測定の場合、手作業で解析を行うには自ずと限界が生じる。そこで、多数のスペクトル解析について、スペクトル群をデータセット化し、そのデータセットに対して自動解析を試みた。

データセット化に関して、現在、NIMS 材料データプラットフォームセンター (NIMS-DPFC) において、一連の測定データからデータセットを構築する Research Data Express (RDE) というサービスが所内で展開されている¹⁾。昨年までの各種報告では、この RDE サーバに搭載されている GaN 各表面の初期酸化過程スペクトルデータセット (約 2000 本のスペクトルデータからなる)^{3),4)} に対し、BIC 自動ピーク分離法 (以降 BIC 法)²⁾ を用いたリアルタイム分析について報告してきた。

しかしながら、ある一連の意味を持つデータセットにおいては、その意味を考慮した、いわゆるバッチ処理的な解析を行うことが望ましい。そこで本研究では、データセット単位での XPS 分析手法の適用とその自動化について検討したのでこれを紹介する。これにより、複数のデータを含む、データセット単位でのハイスループット化、特徴量理解が可能となる。

スペクトル解析には、BIC 法とともに、主成分分析 (PCA) からターゲット変換 (TFA) を行う 2 種類の方法

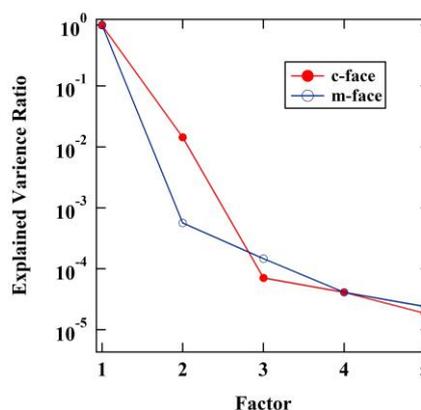


Fig. 1. GaN, c 面、m 面 O₂ ガス照射データセットにおける PCA 寄与率

で解析を試みている。Fig.1 は、c 面及び m 面 GaN 上に O₂ ガスを照射したセットにおける各成分の寄与率である。面により成分の寄与率が異なることから、酸化傾向も異なることがわかる。

さらに本講演では、これら解析手法および結果について紹介するとともに、解析から得られた各スペクトルのピーク分離結果、化学結合状態、各面および各ガスによる酸化傾向について報告する。さらに、第一原理計算結果^{3),4)} と本解析結果との比較とその物理的意味についても議論する。

文 献

- 1) <https://dpfc-dcs.nims.go.jp/Login.html> (最終アクセス 2021/0828)
- 2) H. Shinotsuka, et al., J. Elec.Spec. Vol239, 146903(2020). 10.1016/j.elspec.2019.146903
- 3) M. Sumiya et al., J. Phys. Chem. C 124 [46] (2020) 25282-25290, 10.1021/acs.jpcc.0c07151.
- 4) M. Sumiya et al., Appl. Phys. Lett. (to be submitted) .

*E-mail: HARADA.Yoshitomo@nims.go.jp