

# 光電子収量分光スペクトルの自動解析に向けたアルゴリズム開発

## Algorithm development for automated analysis of photoelectron yield spectra

NIMS<sup>1</sup> ◯柳生 進二郎<sup>1</sup>

NIMS<sup>1</sup>, ◯Shinjiro Yagyū<sup>1</sup>

E-mail: YAGYU.Shinjiro@nims.go.jp

光電子収量分光 (Photoelectron Yield Spectroscopy, PYS) は、材料表面にエネルギーを変えた紫外線を照射し、放出される光電子を計数することによって、エネルギーダイアグラムの作成に必要な仕事関数、価電子帯上端のエネルギー、最高被占軌道 (HOMO) のイオン化エネルギーを計測する手法である。通常、このスペクトルの解析は手動で行われており、解析の自動化が求められている。そこで、これまでの手動解析の手続きを自動化するための  $1/n$ -Plot 法[1]、解析対象領域を切り出すための PW-ROI 法[2]と、その前段階で測定スペクトルの特徴をつかむ PW 法[2]などのアルゴリズムを開発した。特に PW 法は、PYS スペクトルに限らず、様々なスペクトルに適用可能である。

・  $1/n$ -Plot 法： PYS スペクトルの解析はべき乗で増加するモデルに基づいて行われる。手動解析では、モデルに基づいたべき乗数を仮定し、そのべき乗数の逆数で強度を線形化し、傾きとバックグラウンドの2つの直線の交点から閾値を導出する。 $1/n$ -Plot 法は、いくつかの候補となるべき乗の逆数を適用したグラフをそれぞれ作成し、拡張した ReLU 関数でフィッティングを行い、最も適合するべき乗とその閾値を選択することで自動解析を行う。

・ PW 法、PW-ROI 法：

解析領域 (ROI) の抽出には、測定スペクトルにおける特徴を見つける必要がある。その方法としてセグメント回帰 (PW 法) を用いる。PW 法は変化点の前後を直線で近似することから、変化点とその前後の傾きを求めることができる。その傾き情報を利用することで、所望の解析領域を切り出すことができる。

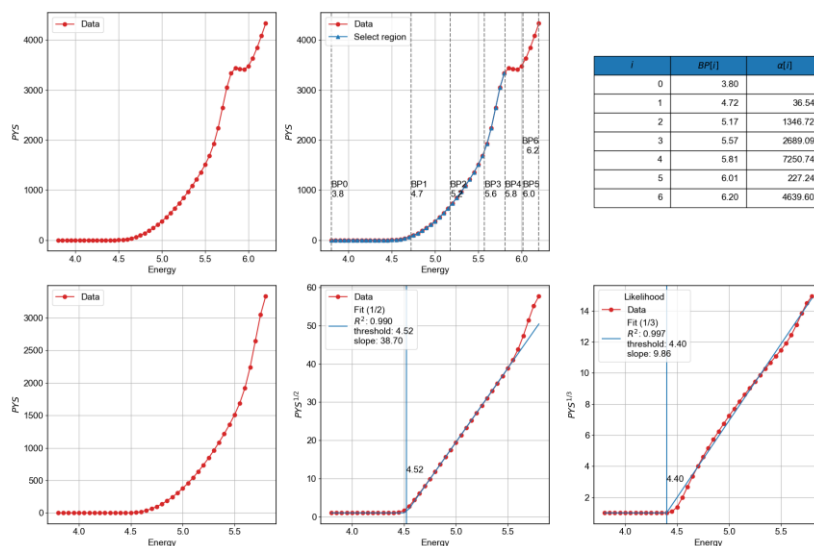


図 得られた PYS スペクトルに、解析領域の切出し処理 (PW-ROI (上段)) 及び、自動 Fitting によって閾値推定処理 ( $1/n$ -Plot 法 (下段)) の例

[1] S. Yagyū, M. Yoshitake, T. Nagata; J. Surface Analysis, 30, 2, 98, (2023),

<https://doi.org/10.1384/jsa.30.98>

[2] S. Yagyū, M. Yoshitake, T. Nagata; J. Surface Analysis, 31, 1, 2, (2024), <https://doi.org/10.1384/jsa.31.2>