

非熟練ユーザーの光電子分光計測・分析支援に向けた質的調査

A Qualitative Study to Support Photoemission Spectroscopy Measurement and Analysis by Non-expert Users

梶田 拓磨¹
Takuma Masuda

小林 正起²
Masaki Kobayashi

矢谷 浩司²
Koji Yatani

東京大学 工学部¹
The University of Tokyo, Faculty of Engineering

東京大学大学院 工学系研究科²
The University of Tokyo, Graduate School of Engineering

1 はじめに

Einstein がノーベル物理学賞を受賞する契機となった物理現象である光電効果を応用した実験手法の一つに光電子分光法 (photoemission spectroscopy) がある。X 線などの高エネルギーの電磁波を試料に照射した際に試料表面から出てきた電子 (光電子) を解析することで物質表面や内部の電子状態などを調べる光電子分光は、今や物質科学、生命科学、医学、ナノテクノロジーなど様々な分野で欠かせない実験手法となっている [1]。

光電子分光では光源として、物質由来の特性 X 線の他に、放射光と呼ばれる連続的な電磁波 (光) を使用することがある。高輝度な放射光光源を用いることで、計測精度が飛躍的に向上し、計測時間の短縮も見込める。しかし、放射光を用いた光電子分光では、放射光施設において、限られた利用時間内に素早く正確な計測と解析をミスなく遂行する必要があり、特に施設や装置、実験手法に不慣れなユーザーには負担が大きい。

この課題を解決する計測・分析支援ツールを開発するために、筆者らはまず非熟練ユーザーと専門家合計 7 名にインタビューを行った。本稿ではその結果を報告し、今後の展望について述べる。

2 インタビューの主な結果

インタビューにより確かめられた光電子分光の標準的なプロセスは図 1 の通りである。まず、装置を立ち上げ、試料を装置内の測定位置に設置するために位置や角度を調整する。次に、X 線発生装置を起動し、試料に X 線が当たるように装置を動かして、計測を開始する。その後、予め用意したプリセットを使って計測条件を指定し、光電子の数をその運動エネルギー (振動数) 別に計測する。同じ条件でこの操作を繰り返すことで、信号対雑音比 (Signal-to-Noise ratio, SN 比) を上げる。最後に、組み込みのソフトウェアでスペクトルを解析する。

光電子分光で得られたスペクトルで最も重要な情報がピークである。物質中に存在する元素 (の軌道) と 1 対 1 に対応している離散的なピークの位置から元素組成などを判断することができる。したがって、ピーク付近のスペクトルはエネルギーの解像度が高く、また、SN 比が高いことが好ましい。初めに survey scan と呼ばれる計測を行い広いエネルギー範囲に渡る粗いスペクトルを得た後、プリセットを変えてピーク付近に着目して再度計測を行うのが一般的である。

インタビューを通して 2 つの課題が明らかになった。1 つ目は、必要十分な SN 比が定かでないということ

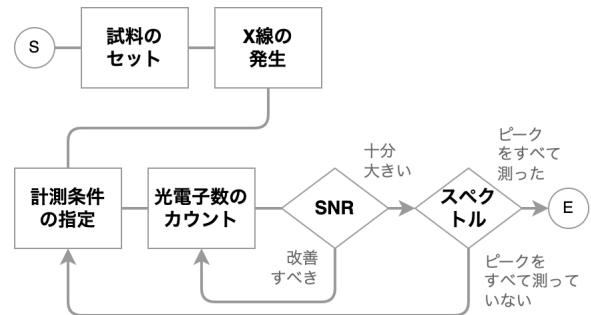


図 1: 光電子分光の標準的なプロセス

ある。先に述べたように光電子分光では SN 比を上げるために計測を繰り返すが、必要な SN 比に関しては現状経験によって定性的に判断されており、非熟練者が判断するのは非常に難しい。実際、専門家 P2 は「どこまで綺麗な SN で、そのスペクトルを取得していいかわからなくて、実際その蓋を開けてみると、全然その SN が足りなくて、(以下略)」と話していた。2 つ目は、スペクトルから次の計測条件を指定するのが難しいということである。「よく見ているとその金の山の横にちっちゃい山があってそっちが酸素か、みたいな感じだった。」と話していた学生 P1 のように所望の元素によるピークとそれ以外の区別がつかない場合や、「何かきちんと取れていないけどもう測定というものをやったらって状態で終わってしまうこともあるわけですね。」と専門家 P2 が指摘するようにエラーが起きていることにそもそも気が付かない場合がある。

これらの課題を踏まえて、SN 比を定量的に計算し可視化する機能と、スペクトルからピークの由来を判定し可視化する機能を実装することにした。

3 今後の方針

今後は 2 つの機能を実装するために、

- SN 比を定量的に計算するアルゴリズム
- スペクトルからピークを検出するアルゴリズム
- ピークがどの構成元素のどの軌道に由来するかを判定するアルゴリズム

を探究し、ネイティブアプリとして機能をまとめ、ユーザースタディを通してその有用性を検証することを予定している。

参考文献

- [1] 日本放射光学会. 2011. 放射光が解き明かす驚異のナノ世界. 講談社.