

理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的
マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築
2017年度採択研究者

2019年度 実績報告書

永村 直佳

物質・材料研究機構 先端材料解析研究拠点
主任研究員

多次元 X 線イメージングを活用した原子層機能デバイスの
物性制御法探索基盤プロセスの構築

§ 1. 研究成果の概要

画像計測において、信号処理やデータ解析に情報科学の知見を取り入れて測定の高高度化を図る試みは世界中で活発に行われている。我々はこの試みを、自ら開発を手掛けた「走査型光電子顕微鏡」という高輝度放射光を用いた先端計測に展開し、測定の高速度化・効率化とともに測定装置の限界性能を引き出すことで新材料開発を加速させることに挑んでいる。

本年度は、空間3次元に加えてデバイス動作中のオペランド計測を組み合わせた多次元マッピング測定に対して、得られた光電子スペクトルビッグデータのピーク成分推定に機械学習を活用し、高速自動解析に特化した低計算コスト重視のアルゴリズム開発と手法のブラッシュアップに取り組んだ。その結果、ピーク成分のモデル関数の選択肢が広がり、通常の光電子分光ユーザーが使いやすい、より汎用性の高いアルゴリズムが提案できた。

さらに、この高速自動解析手法を実際の実験データに適用して、従来の手動解析では扱えなかった情報を得ることに成功した。具体的には、2次元原子層材料の遷移金属ダイカルコゲナイド類で構成され、現存のデバイスよりも急峻なスイッチング動作が期待できるトンネル電界効果トランジスタ構造内の空間電荷分布を、光電子ピークシフトの空間分布として分析を行った。我々が開発した高速自動解析手法により、約8000本もの光電子スペクトルを1時間程度で解析することが可能になり、その結果バブルやレジスト残渣といった欠陥やチャネルの膜厚によって電荷分布に偏りが生じることが明白に可視化された。

今後はスペクトルの高速自動解析のオープン化・測定装置制御システムへの組み込みや、電池材料など、より多彩な物質の電荷分布・組成マッピングを試していく予定である。

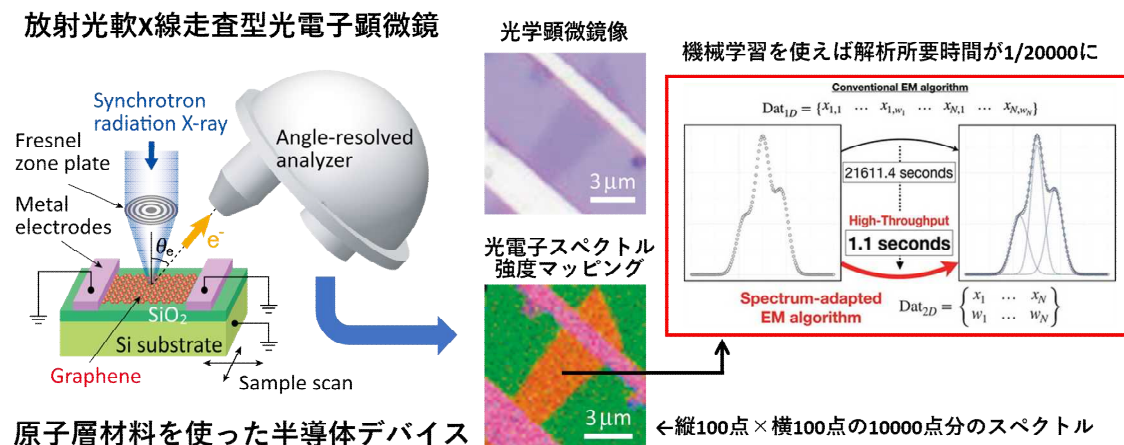


図1 本研究における取組みの概念図。図は本年度の成果(N. Nagamura *et al.* Carbon 152 680 (2019), T. Matsumura *et al.* STAM 20 733 (2019))より。