

談話室

表面分析データベース

吉原 一 紘

金属材料技術研究所
〒305 つくば市千現 1-2-1

(1995年11月30日受理)

Surface Analysis Database

Kazuhiro YOSHIHARA

National Research Institute for Metals
1-2-1 Sengen, Tsukuba 305

(Received November 30, 1995)

近年、精力的に研究開発されている薄膜などに代表される先端材料はその表面組成が物性に大きな影響を与えている。このような表面組成を解析するために、オージェ電子分光法、X線光電子分光法、2次イオン質量分析法などの表面分析法がさまざまな産業分野で多用されている。しかし、これらは分析法としての歴史が浅く、表面組成決定法の確立のために必要となるスペクトルデータベースの整備が強く求められているにもかかわらず、電子の平均自由行程や背面散乱係数などの物理パラメーターの不統一、基準スペクトルデータの欠如などの原因で整備が遅れていた。1982年にベルサイユにおける先進国首脳会議において、表面分析法に関する標準化

を目指したプロジェクト (VAMAS-SCA プロジェクト) が発足したことに伴い、表面分析法の標準化、規格化を目指した国際共同研究が開始された。わが国ではオージェ電子分光法やX線光電子分光法が実用的にはどの程度の精度で測定されるかというような課題を分担してラウンドロビンなどを実施した。これらの成果はすでに報告書としてまとめられている (たとえば Journal of Surface Analysis, Vol.1(1995)) ので、興味のある方はそれらを参照されたい。このラウンドロビンを行う過程で、互いのスペクトルデータをデジタルベースで比較しない限り微量成分情報や化学結合状態などに関する正確な情報が伝わらないということになり、そのために各社の異なった規格で記録されたデジタルデータを共通の形式に変換し、それを共通のコンピューターで処理をするソフトウェア (Common Data Processing System) を開発した。このソフトウェアは Windows 環境で作動するもので、データの変換プログラムばかりでなく、これまでのラウンドロビンで検討された分光器特性を補正する方法や標準的なデータ処理法などが搭載されており、データの共有化を進めるためのツールとして使用されている。

これらの研究により、表面分析ではデータの共有化が可能となってきたという認識が醸成されてきた。一方、米国の情報スーパーハイウェイ構想に刺激されて、わが国でも情報のネットワーク化が重要であるということになり、平成6年度より、科学技術庁が音頭をとって省庁間の枠を越えた情報のネットワーク化を図るために新たにネットワーク基幹線を開設する計画 (省際ネットワーク推進制度) が開始された。そこで、データの共有化が

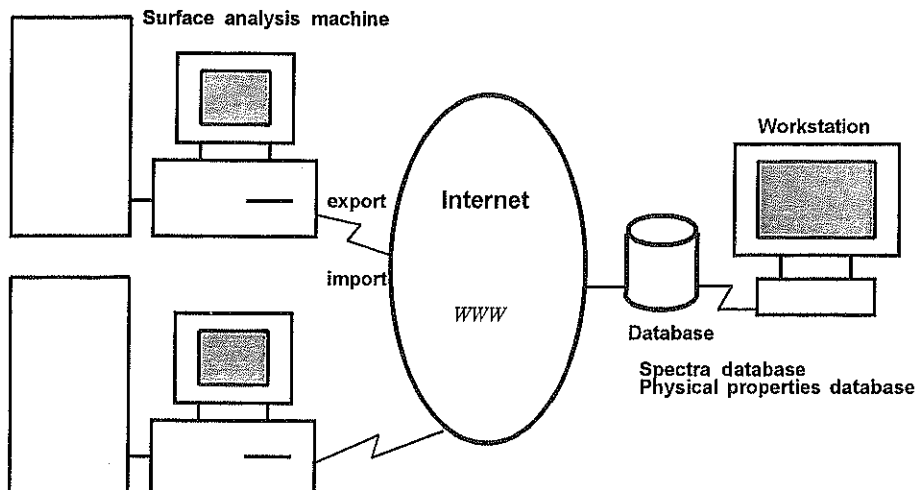


図1 表面分析データベースの概念図

可能ということならば、表面分析もこのネットワーク化に参画するよにということ、平成6年度より開始されたこのプロジェクトのもとで、オージェ電子スペクトルやX線光電子スペクトル、および電子やイオンと固体との相互作用に関する物理パラメーターなどの収集方策に関する調査が実施され、表面分析データベースの整備を実施することを目的とした研究が開始された。

オージェ電子スペクトルやX線光電子スペクトルデータなどの収集には、表面分析に関係する業務を実施している約100機関の方々が「表面分析研究会」という任意団体を組織して協力していただいている。現在、表面分析研究会の方々の協力により、試料の選定、データ取得法の決定などが進んでおり、すでに取得したデータの一部はデータベース化され、金属材料技術研究所に設置したワークステーションの中に蓄積された。ワークステーションに格納されたスペクトルデータはインディックスに記録され、インディックスの項目を検索することにより、参照したいスペクトルを引き出すことができるようになってい。システム図を 図1 に示す。

また、スペクトルの収集過程を通じて、試料ごとのデータ取得方法の規格化なども議論されており、これらの成果は成文化され TASSA レポート (Testing and Standards for Surface Analysis Report) して蓄積されつつある。なお、TASSA レポートは Journal of Surface

Analysis 誌に掲載されている。現在 ISO (国際標準化機構) では表面化学分析の国際標準化を進めるためにわが国を幹事国として、第201技術委員会が組織されているが、ここでの議論の基は、常に今まで蓄積された関連文書である。わが国はこのような標準的な手続きに関する文書は著しく少なく、ISO 活動においては標準化に関する基盤整備ができていないことが痛感されていた。このデータベース構築を期にこのようなデータ取得法の成文化、規格化が進展していくことが期待されている。

最近ではコンピューターのネットワーク化が著しく進展しており、この表面分析データベースもできるだけ多くの研究者・技術者が気軽に利用できることを目的として、外部からインターネットでアクセスすることを可能とした。また、これらのデータの中から目的のスペクトルデータをインターネット上で効率よく検索するためのソフトウェアは NTT ソフトウェア研究所と共同で開発している。

インターネットで "http://sekimori.nrim.go.jp/" としてアクセスすると、データベースなどの情報が記されたホームページが開かれ、これからデータベースが検索できる。スペクトルデータは、インディックス項目 (たとえば元素名、化合物名、装置名など) を入力すると対応するスペクトルが検索でき、図2 に示すように表示される。現在は、だれでも自由にインターネットでアクセス

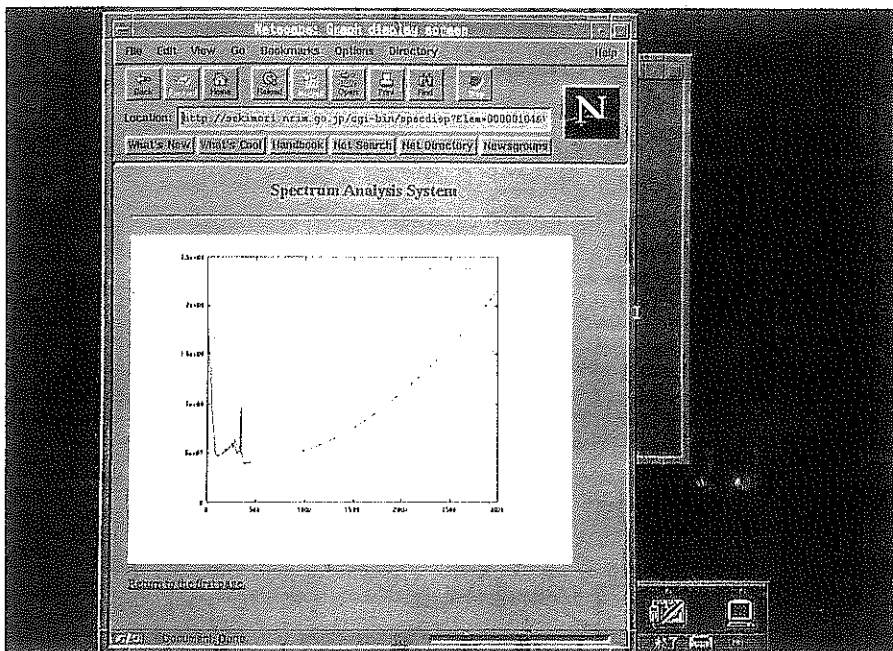


図2 インターネットで表示されたスペクトルデータ

でき、希望のスペクトルを表示させることができるが、データ取得に協力していただいた表面分析研究会の会員の方は、配布された Common Data Processing System という Windows 上で稼働するソフトウェアを用いて、表示させたスペクトルデータを自分のコンピュータに転送(コピー)することができるようにしている。コピーされたデータはデータ処理などに使用できる。

なお、表面分析に必要な脱出深さや背面散乱係数などの物理パラメータも物質ごとに格納されている。このデータベースは現在まだ試験運転中であるが、最終目標はあらゆる試料のあらゆる表面状態をあらゆる装置で取得したスペクトルデータを収集することとしている。このようなデータベースができれば、未知物質の表面状態がデータベースを検索することにより容易に同定できるであろう。

データベースを作るということは「科学」ではないと考える人もいるが、表面分析データベースを作成することは、データをいかに正確に取得し、それをいかに正確に記述して伝達するかという研究の集大成であり、これは「科学」の基本である。できるだけ多くの方がデータベース構築計画に参加していただくことを希望している。

表面分析データベースのインターネット化により、多くの研究者や技術者がデータを共有できるプラットフォームが形成されることになる。このプラットフォームを経由して皆が自由に情報交換をすることができる時代が近々訪れることを期待している。

なお、表面分析研究会への入会希望の方、および Common Data Processing System を使用希望の方は、著者までご連絡くだされば幸いです。

Bookstand

金 属 を 知 る

西川 精一 著

(発行 丸善 (1995年 7月) B6判 110ページ 1,339円)

金属は生活になくてはならないものであるが、その性質や製法は知っているようでよく知らないのが現状ではないだろうか。表面分析などにおいても金属の分析は盛んに行われているが(産業界でも研究でも)、必ずしもその性質をよく知っているわけではない。その性質を知って分析などを行うことは技術者にとっては有用であろう。そういったうえで、コンパクトにまとまっている本書は最適であろう。内容は以下のようになっている。

1. 金属の歴史, 2. 金属も“変相”する, 3. 金属結晶の原子の並び方, 4. 金属は輝く, 5. 重い金属と軽い金属, 6. 金属の熱の食い方, 7. 金属は伸び縮みする, 8. 金属は電気, 熱をよく伝える, 9. 金属と磁石, 10. 硬く, 強く粘り金属, 11. 金属も腐る, 12. 合金とは, 13. 金属及び合金の熱処理, 14. 金属の意外性, 多様性, 15. 鉱石から金属へ, 16. 金属, 生物, 工業化社会

これらが、わかりやすく簡潔に述べられており、技術者や学生が金属の性質を知るのに気楽に読める本として薦められる。

(田沼繁夫)