

解説

表面化学分析におけるソフトウェアと標準化

永富 隆清*

大阪大学 大学院工学研究科 生命先端工学専攻 物質生命工学講座
〒565-0871 吹田市山田丘2-1

*nagatomi@mls.eng.osaka-u.ac.jp

(2005年5月27日受理; 2005年7月19日掲載決定)

電子をプローブあるいは信号として用いた表面分析法によって得られたデータを定量的に解析するソフトウェアの開発について、固体中での電子輸送問題の観点から概説する。さらにソフトウェア開発の現状を踏まえ、トレーサビリティをキーワードとしてソフトウェアと標準化の将来像について述べる。

Software and Standardization in Surface Chemical Analysis

T. Nagatomi*

Department of Material and Life Science, Division of Advanced Science and Biotechnology,
Graduate School of Engineering, Osaka University,
2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka 565-0871, Japan

*nagatomi@mls.eng.osaka-u.ac.jp

(Received: May 27, 2005 ; Accepted: July 19, 2005)

Development of software for quantitative analysis of experimental data obtained by surface analysis techniques, in which electrons are used as a probe or signal, is outlined from a point of view of studies on electron transport phenomena in solids. On the basis of the recent development of software, the relation between software and standardization expected in the future is described in terms of traceability as a keyword.

1. はじめに

近年、パーソナルコンピュータの計算速度が飛躍的に向上し、一昔前には膨大な時間を要した計算を短時間で行えるようになってきた。これに伴い表面分析におけるソフトウェア開発も著しく進歩している。ただし本稿で言うソフトウェアとは装置を制御するためのソフトウェアではなく、得られたデータを物理的モデルに従って解析するためのソフトウェア、いわゆるシミュレータである。本稿では電子をプローブあるいは信号として

用いた表面分析法におけるソフトウェア開発について固体中での電子輸送(散乱)に関する研究という観点から述べ、ソフトウェアと標準化について考える。

なお本稿は、表面分析研究会(SASJ)の第25回研究会(2005年3月3, 4日)での「VAMAS, ISOから標準化へ 今後の展望」と題したSASJ 10周年記念講演会においてお話した内容をまとめたものである。多くの私見が見られる点を御了承いただければ幸いである。

2. 標準化とは？

本稿の執筆は改めて「標準化とは？」と考えるよい機会となった。SASJへ参加するようになって「標準化」という言葉を日常的に聞くようになったものの、正直なところ未だ「標準化とは？」と答えを探しているのが現状である。

今振り返ってみると、筆者にとって標準化との最初の出会いは後藤先生のスペクトルであった。まだスペクトルもまともに測定できない学生の頃、指導教官であった志水隆一先生が、「後藤先生のこの美しいスペクトルを見てみなさい...」といったことをおっしゃられ、スペクトルを拝見させていただいた。もう10年以上前のことであるが、「美しいスペクトル」という言葉を不思議に感じたのを未だによく覚えている。今ではその後藤先生のスペクトルを使用させていただき、このように「標準化」について記事を書いている自分がいるとは想像もしていなかった。あの出来事以来、著者自身もスペクトルを測定し、データも解析する中で、「美しいスペクトル」の意味が何となくではあるが分かるようになってきたのはごく最近のことである。

後藤先生が行われているのは「絶対スペクトル」の測定であり、世の中の「標準」となるスペクトルである。後藤先生のデータを初めて拝見させていただいて以来、筆者の中では「絶対スペクトル」＝「標準スペクトル」の方程式が出来上がってしまった。「絶対」とは「真値」である。従って筆者にとっては「真値」＝「標準」であった。ところが最近になって多くの方々と「標準」についてお話するうちに、自分のイメージしている「標準」が一般的に語られている「標準」と大きくずれていることに気が付き始めた。「標準」とは「真値」ではなくあくまで「トレーサビリティ (traceability)」なのである。traceabilityを辞書で引けば「(跡を)たどれること」とすぐに日本語訳が出てくる。単語として見れば意味を理解することは簡単であるが、「標準」を考えると、特に「世の中の役に立つ標準」あるいは「世の中が求める標準」を考えると、「トレーサビリティ」の意味するところが途端に難しくなる。

本稿では以下、この「トレーサビリティ」をキーワードとして、表面分析におけるソフトウェアと標準化について考えてみる。

3. 表面分析における電子輸送問題と研究の現状

本稿で対象とする表面分析法は、オージェ電子分光法(AES)、X線光電子分光法(XPS)、電子プローブマイクロアナライザー(EPMA)、走査電子顕微鏡(SEM)など、電子をプローブ、あるいは信号として用いる表面分析法である。これら表面分析法を用いた定量分析では、得られたスペクトルやイメージから試料表面の三次元的な組成・構造情報などを如何に正確に引き出せるかが問題となる。そのためには試料本来の特性は勿論のこと、プローブ照射から信号生成・放出までの電子輸送に関する知見が必要となる。

固体表面へ電子を照射すると、入射電子は固体内で弾性散乱による進行方向の変化や非弾性散乱によるエネルギー損失を被ることになる。電子の散乱過程は、散乱断面積や平均自由行程、阻止能など、様々な物理量によって記述することができる。非弾性散乱では二次電子やオージェ電子、X線(光子)などが生成される。プローブにX線などの光子を用いた場合には光電子が生成される。これら信号となる電子や光子も固体内で散乱を受けることになり、最終的に表面から放出され検出された信号を用いてスペクトルやイメージを得る。これら一連のプローブ照射から信号検出までの電子(光子)輸送過程を考えることで、スペクトルやイメージから情報を引き出すことができる。

昨年(2004年)は、これら電子輸送に関係した国際会議として次の3つの会議に参加した。

- (1) Electron Scattering in Solids -From Fundamental Concepts to Practical Application-, ESS Workshop (July 4-7, 2004, Debrecen, Hungary).
- (2) 3rd International Symposium on Practical Surface Analysis, PSA-04 (October 4-6, 2004, Jeju, Korea).
- (3) Workshop on Modeling Electron Transport for Applications in Electron and X-ray Analysis and Metrology (November 8-10, 2004, NIST, USA).

これらの国際会議では、最新の電子輸送問題に関する多くの講演・議論が行われた。会議にはこれまでに何度となくお会いした方々も多く参加されていたが、会議で受けた印象はそれまでとは大きく異なっていた。その理由が本稿のタイトルの一部である「ソフトウェア」である。(2)のPSA-04は広く表面分析一般に関する会議であり多くのJSA読者も参加されたため、ここでは(1),(3)について概説する。なお(1),(3)の会議はともに電子輸送問題に特化した会議であった。

(1)のESSワークショップでは、会議名にある通り電子散乱に関する基礎から応用ということで、電子輸送の理論的取り扱いから実験結果の解析、実験技術や手法、ソフトウェアの開発などが議論されたが、ソフトウェア以外のトピックスに関する講演が多かった。対象は主にAES, XPSなどのいわゆる表面電子分光法であった。

これに対して電子輸送問題のモデリングに的が絞られた(3)のNISTでのワークショップでは、(1)同様の基礎やデータベース化も見られたものの、ソフトウェア開発に関する多くの講演が行われた。特に多かったのが、SEMで得られるイメージ(二次元)から試料表面の三次元構造情報を抽出するための像解析ソフトの開発に関する講演であった。SEM像解析のソフトは米国の産官学の研究者が競って開発を進めており、米国の底力を見せ付けられた思いがした。また電子分光に関しても、すでに日本でも用いられているTougaard教授によるQUASES (Quantitative Analysis of Surfaces by Electron Spectroscopy)や、最近開発が進められているWerner教授によるSESSA (Simulation of Electron Spectra for Surface Analysis)に関する報告もあった。また、EPMAのX線スペクトル計算のソフトウェアに関する講演も多数見られた。日本からの参加者は、SASJ 田沼会長、鈴木副会長と著者の3名であった。現地で講演を聞いているうちに、欧米でのソフトウェア開発の勢いに3人そろって唖然とした。特にSESSAに関しては、昨年度開催された3つの国際会議全てで講演を拝聴したが、講演ごとにソフトウェアが着実に進化していることに驚かされた。

現在行われているこれら電子輸送に関する研究は、(1)散乱過程の解明、(2)データベース化、(3)標準化並びに、(4)ソフトウェア開発、の4つに大別できる。(1)から(4)の研究を言い換えると、次のように対応付けることができるのではないだろうか？

- (1)散乱過程の解明 → 誰かが現象(真値)を調べる。
- (2)データベース化 → 誰でも入手できる。
- (3)標準化 → 誰もが正しく(トレーサビリティ)使える。
- (4)ソフトウェア開発 → 誰もが簡単に全てを正しく利用できる。

以下では、これら4つそれぞれについて現状を述べる。

3-1. 散乱過程の解明

プローブ照射から信号検出までの間の一次電子や信号電子の散乱過程は断面積などによって記述できる。表面分析において一次電子や信号電子として用いられる電子のエネルギーは一般に数keV以下の低エネルギー電子である。低エネルギー電子は固体との相互作用が強く、固体内で散乱を受ける確率が高い(断面積が大きい)。これが、表面分析法が表面に敏感な分析法である所以であるものの、その反面、実験的に得られた結果の解析を困難にしている。固体内での電子の多重散乱や試料表面近傍のみで起こる表面励起などのため、プローブ入射から信号放出までに起こる電子の散乱過程全てを解析的に(単純な数式で正確に)取り扱うことが困難となる。結果、実験的に得られたデータの解析においては、モンテカルロ(MC)シミュレーションに代表されるように様々な断面積などを組み合わせて電子の散乱過程をモデル化し、電子軌道を逐一計算するなどの手法が必要となり、解析が難しくなる。

プローブ入射から信号検出までの一連の過程をモデル化した場合、計算によって得られる結果や実験結果の解析の精度はモデルに依存するのは勿論のこと、モデルに組み込む断面積などの物理量として何を採用するかにも大きく依存する。表1にいくつかの物理量についてまとめる。それぞれの物理量について理論値や実験値、様々な文献値を集めたデータベースや、文献値から求めた経験式など、様々なものが報告されている。ここで最も問題となるのが、多くの場合、どれが正しいか厳密に検証できないことである。固体との相互作用が強いためこれらの現象が多重に起こり、例えば、弾性散乱断面積に相当する「原子が1個存在するときに1回の弾性散乱で電子が散乱される確率は〇〇である。」などの値を、実験的に正確に測定することが極めて困難なためである。実験が困難なため、理論的に得られた値を評価することも難しい。

実験的・理論的に各物理量を単独で評価することが困難なため、現在では以下のような手法を用いて様々な物理量の決定に関する実験的・理論的な研究が行われている。

- (i)実験的に得られたスペクトルなどがあるモデルを仮定して解析し、実験結果から値を抽出する、

Table 1 Physical parameters used for describing electron scattering processes.

電子の 弾性 散乱	弾性散乱断面積	Rutherford, Mott [1]
	弾性散乱平均自由行程	(Mott 断面積は計算に用いるポテンシャルで 値が異なる [2])
	輸送平均自由行程	
電子の 非弾性 散乱	非弾性散乱断面積	Dielectric approach [3], 誘電応答理論 [4]
	非弾性散乱平均自由行程	Seah-Dench [5], TPP-2M [6], 誘電応答理論 [4]
	イオン化断面積	Gryzinski [7], Casnati [8]
	阻止能	Bethe [9], Joy-Luo [10], 誘電応答理論 [4]
	表面励起パラメータ	Oswald [11], Chen [12], Tanuma [13], Werner [14]

Table 2 Theoretical and experimental investigations of electron transport phenomena in solids.

理論的 取り扱い	Tanuma <i>et al.</i>	非弾性散乱平均自由行程 [6]
	Salvat <i>et al.</i>	各種散乱断面積 [15], MC シミュレーション [16]
	Jablonski <i>et al.</i>	弾性散乱断面積 [2], 減衰長 [17]
	Werner <i>et al.</i>	MC シミュレーション [18]
	Yubero <i>et al.</i>	非弾性散乱断面積 [19]
	Tung <i>et al.</i>	非弾性散乱断面積 [20], 表面励起パラメータ [20]
	Ding <i>et al.</i>	非弾性散乱断面積 [21], MC シミュレーション [22]
	Joy <i>et al.</i>	二次電子収率 [23]
	Nagatomi <i>et al.</i>	阻止能[24], エネルギー損失分布[25]
	実験的 取り扱い	Tanuma <i>et al.</i>
Werner <i>et al.</i>		非弾性散乱断面積 [14,18,27], 表面励起パラメータ [14,27]
Tougaard <i>et al.</i>		QUASES の応用 [28]
Gergely <i>et al.</i>		非弾性散乱平均自由行程 [29], 表面励起パラメータ [30]
Kövér <i>et al.</i>		非弾性散乱平均自由行程 [31]
Cumpson <i>et al.</i>		非弾性散乱平均自由行程 [32]
Joy <i>et al.</i>		二次電子収率 [23,33]
Yoshikawa <i>et al.</i>		非弾性散乱断面積 [34]
Nagatomi <i>et al.</i>	非弾性散乱断面積 [25,35,36], 表面励起パラメータ [36]	

- (ii)理論的に得られた値をMC シミュレーションなどに組み込み、実験的に得られたスペクトルなどとの比較により検証する、
- (iii)実験結果から抽出した値と理論値を比較する、

などである。表2に、理論的取り扱い、実験的取り扱いに関して、それぞれ現在までに行われている研究のいくつかをまとめた。この表を見ると分かるとおり、電子散乱に関する研究の多くは欧米が中心となって展開されているのが現状である。理論的な取り扱いの中で最も精力的な研究を行っているグループの一つがSalvat教授等のグループで、彼等のグループでは弾性散乱、非弾性散乱、光イオン化(X線吸収、光電断面積など)などの一連の断面積を全て計算しようと試みている。実験的

な取り扱いとしては、スペクトルなどを解析するために何らかのモデルが必要であり、多くのグループがソフトウェアの開発を行っているか、あるいは開発されたソフトウェアを使用しているのが一つの特徴と言える。

もう一つ、これら散乱過程を記述する物理量の導出に関する実験的・理論的な研究に共通して言えることが、得られた結果のデータベース化の推進である。データベース化を行うために現在では国際的コラボレーションが行われ、国を超えた共同研究が展開されつつある。このデータベース構築を中心となって推進しているのが米国NISTであり、その中心的役割を果たしているのがPowell博士である。次節ではこの「データベース化」について述べる。

Table 3 Databases of physical parameters used for surface chemical analysis.

NIST Scientific and Technical Databases	NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy
-Surface Data-	NIST Electron Elastic-Scattering Cross-Section Database
http://www.nist.gov/srd/surface.htm	NIST Electron Inelastic-Mean-Free-Path Database
NIST Physical Reference Data	NIST Electron Effective-Attenuation-Length Database
http://physics.nist.gov/PhysRefData/contents.html	Tables of X-Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients
UK Surface Analysis Forum	Binding Energies and XPS/AES spectra
On-line databases	X-ray transmission, absorption and emission data
http://www.uksaf.org/data.html	Particle/Surface interactions, including scattering data and SIMS
Prof. Joy (University of Tennessee)	Electron Solid Interaction Database
http://pciserver.bio.utk.edu/metrology/hm/download.shtml	(Secondary electron yields, Backscattered electron yields, Electron stopping powers, X-ray ionization cross-sections X-ray fluorescent yields)
	Mott Scattering Cross-Sections

3-2. データベース化

「データベース構築」とは必要なデータを「誰でも入手できる」環境を構築することである。ここでは海外でのデータベース構築を中心に紹介するが、日本以外で構築されたデータベースを紹介すること、さらに著者自身もNISTなどが中心となって構築しているデータベースを利用することがあることに複雑な思いがある。

表3は表面分析に関係するいくつかのデータベースをまとめたものである。データベース構築に関してはNISTが果たしている役割が大きい。Werner教授によるSESSAのフリー版もNISTから公表される予定である。質量吸収係数を例に挙げたNIST Physical Reference Dataも膨大なデータベースを提供している。UK Surface Analysis Forumでは多くのデータベースへのリンクがはられている。Joy教授によるElectron Solid Interaction Databaseには二次電子収率や阻止能などが収められており、132件の文献から膨大なデータを集めた322ページにもわたるデータベースである。ただし集められた二次電子収率などの値にはばらつきが大きく、どの値を使用するかはユーザーに依存する。Joy教授はこれら文献値をもとにしたデータベースだけでなく自らも二次電子収率の測定を試

みており、また、COMPRO(Common Data Processing System)に含まれる後藤先生のデータから二次電子収率を求めることも試みているようである。

いずれにしても、これらデータベースの構築が海外のグループ、特にNISTが中心となって推し進めていることは否定できない。そのような中、イオン照射によるスパッタリング収率などの基礎データのデータベース構築がSASJのSERDプロジェクトで進められていることは特筆に値すると言える。ここで紹介したデータベースは海外で構築されているものばかりであるが、これらデータベースを見られたJSAの読者やSASJのメンバーが、「実用表面分析に役立つデータベース」について考え、「日本でもデータベースを構築すべき」と思い、SASJやJSAがその議論の場となることを期待している。

3-3. 標準化

表4は、これまでに成立したISO TC201 Surface Chemical Analysis (SCA)に関わるISO規格のうちAES, XPSに関する規格のリストである。既にこれだけの規格が成立したのもVAMAS-SCAの活動の賜物であると言える。これら規格を大きく分けると表4にあるように、「データフォーマット」に

Table 4 ISO for AES and XPS published by TC201 Surface chemical Analysis (SCA).

規格番号	標題	分類
14975	Information formats	データ
14976	Data transfer format	フォーマット
15470	XPS - Description of selected instrumental performance parameters	
15471	AES - Description of selected instrumental performance parameters	
15472	XPS - Calibration of energy scales	
17973	Medium-resolution AES - Calibration of energy scales for elemental analysis	装置
17974	High-resolution AES - Calibration of energy scales for elemental and chemical-state analysis	
18115	Vocabulary	用語
18118	AES and XPS - Guide to the use of experimentally determined relative sensitivity factors for the quantitative analysis of homogeneous materials	定量法
19318	XPS - Reporting of methods used for charge control and charge correction	
21270	XPS and AES - Linearity of intensity scale	装置

関する規格, 「装置」に関する規格, 「用語」, そして「定量法」と4つに大別できる. ここでこれら4つに大別したISOとソフトウェアの関係について考えてみる.

図1はISOの観点から見たISOとソフトウェアの関係である. まず全てに共通する「用語」がある. 用語のうち, 様々な物理量に対して「データベース」が構築できる. 「データフォーマット」は「装置」間のデータ転送などに必要である. 装置から得られたデータを用いて定量分析を行うためには, 装置のエネルギー軸や強度軸の較正が必要となる. 装置の較正を行うためには基準となるデータベースが必要であり, 定量分析においては非弾性散乱平均自由行程などのデータベースの活用が不可欠であり, データベースの汎用性の向上にはデータベースのフォーマットの定義も必要となる. このようにそれぞれ定義されたISOは独立ではなく共通しており, ISOを活用するためにはデータベースが必要である.

ここでISOの観点から本稿の題目にもある「ソフトウェア(シミュレータ)」を考える. ソフトウェア内で用いられる用語は一般的に定義された用語である. 様々な装置から得られたデータをソフトウェアにより定量解析するためにはデータフォーマットが必要である. 解析には装置の較正はもちろんのこと, 実験条件や各装置特有のパラメータも必要である. また, データを物理モデルに従って解析するためには当然データベースも必要となる. 即ち, ソフトウェア(シミュレータ)は全てが重なり合う位置に相当すると言え, それだけソフトウェアの果たす役割も大きいことになる. 次にソフトウェア(シミュレータ)開発の現状について述べる.

3-4. ソフトウェア開発

もともとシミュレータは, 電子の散乱過程をモデル化して計算し, 実験結果をどの程度再現できるか比較検討することで, モデルの妥当性を検証して散乱過程を考察することを目的として開発されてきた. そのため, これまでのシミュレータ開発の多くは高精度なシミュレータの開発が大きな流れであったと言える. シミュレータ開発では定量分析への応用も課題の一つであったものの, 散乱過程の考察を行うために最も重要なのは「真値」であり標準化, 即ち「トレーサビリティ」ではなかった. ところが現在では, 高精度なシミュ

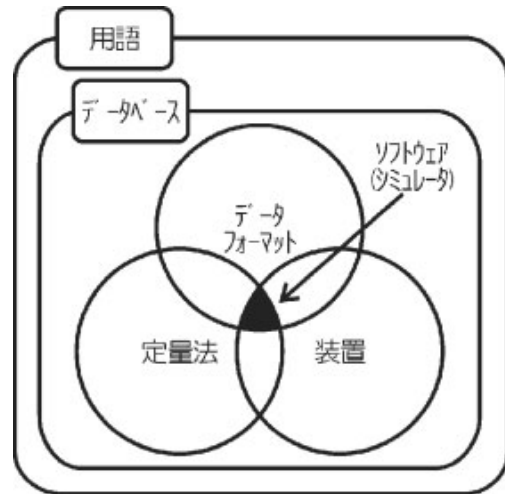


Fig. 1 Schematic representing the relation between the software and ISO.

レータを開発して散乱過程を調べる研究も行われている一方で, ある程度の精度を確保しながらモデルを簡略化, 即ち計算時間を短縮することでソフトウェア化する流れも顕著になってきた.

表5にいくつかのソフトウェア(シミュレータ)を示す. QUASESは既に日本でも使用されており, ご存知の方も多と思われる. QUASESでは簡略化されたスペクトルの解析モデルである Tougaard法がバックグラウンド除去に用いられている. Tougaard法ではバックグラウンドの形状を決めるために微分非弾性散乱断面積(DIMFP)を用いるが, 遷移金属やポリマー, 半導体などグループ分けを行い, それぞれに対してユニバーサルなDIMFPを用いている点がもう一つの大きな特徴である[37]. これらの特徴によりスペクトルの解析が高速化されており, また, スペクトル解析においてユーザーの任意性も排除されていることから, QUASESを用いて同じデータを解析すれば誰が解析しても同じ結果が得られることになる. 「トレーサビリティ」の観点から言えばQUASESのようなソフトウェアも一種の「標準化」であると言える.

近年開発が進められている SESSA についても電子輸送問題を厳密に取り扱う一方, モデルの簡略化, 計算速度向上のための新しい計算アルゴリズムの提案などが行われ, モデルの精度を確保しつ

Table 5 Simulators developed for calculating electron and X-ray spectra.

QUASES	Quantitative Analysis of Surfaces by Electron Spectroscopy
SESSA	Simulation of Electron Spectra for Surface Analysis
DTSA	Desk Top Spectrum Analyzer
Casino	Monte Carlo Simulation of Electron Trajectory in Solids
PENELOPE	Penetration and Energy Loss of Positrons and Electrons

つ計算速度の向上が試みられている。対象となる分析法は当初のXPS, AES, 反射電子エネルギー損失分光法(REELS)に加え, 最近ではEPMAへの拡張も試みられている。SESSAのもう一つの特徴がデータベースの充実である。DIMFPにはPennのアルゴリズム(光学データ)[38], Tougaardのユニバーサル曲線[37], IMFPにはTPP-2M [6], Pennのアルゴリズム(光学データ)[38], (微分)弾性散乱断面積にはTFDポテンシャルMott断面積[1]やNISTが提供するデータベース(NIST SRD 64, V3.0, DHFポテンシャル)[2], イオン化断面積にはCasnati [8], Gryzinski [7], Worthington-Tomlin[39]など, 数々のデータが組み込まれている。これら一般に用いられているデータをデータベース化してソフトウェアへ組み込むことで, よりトレーサビリティの向上が達成できることになる。

その他, DTSAやCasino, PENELOPEなどX線スペクトル計算のシミュレータなども開発されている。PENELOPEはモデルの簡略化よりもむしろ高精度なスペクトル計算を目指したソフトウェアである。筆者等も, 高精度でX線スペクトルを計算できるシミュレータの開発を行っており, モデルの簡略化により比較的短時間で $\pm 10\%$ の精度で絶対スペクトルを計算できるものの[40], 簡便なシミュレータとは言い難い。これに対してNISTで開発されているDTSAは多くのデータベースを持ち, エネルギー分散型から波長分散型まで種々の検出器に対して短時間である程度の精度のスペクトル計算が行えるシミュレータに仕上がっている。

このように現在数々のシミュレータの開発が進められており, ここ数年目を見張る勢いである。「トレーサビリティ」の観点から言えば, シミュレータを用いること自体が一種の「標準化」に相当すると言える。シミュレータ開発もデータベー

ス同様, 電子輸送問題の研究のみならず標準化にとっても不可欠であるものの, その多くが海外で進められているのが現状である。最近では大阪工業大学志水隆一先生のグループにおいてユーザーフレンドリーなシミュレータの開発が進められている[41]ものの, 表面分析の分野においては, それ以外, 国内では殆ど試みられていない。今後国内においてもソフトウェア開発への取り組みが不可欠であり, 実用表面分析に携わっておられる方が多数を占めるSASJこそが, その中心的役割を果たしていけるのではないだろうか。

4. ソフトウェアと標準化

最後に「ソフトウェアと標準化」の将来像について考えてみる。ISOから見たソフトウェアについては図1のところで述べた通り, 全てが重なり合う位置に相当すると言える。しかしながら上述した通り, ソフトウェア(シミュレータ)を用いること自体が一種の標準化でありトレーサビリティの向上へつながることから, ソフトウェアを中心に考えることもできる。このソフトウェアを中心とした観点から「ソフトウェアと標準化」の将来像を模式的に示したのが図2である。

真値を追求する電子輸送問題に関する学術的研究を行うためにはソフトウェアが必要である。逆に電子輸送問題をモデル化してソフトウェアへ組み込むことでソフトウェアの精度が向上する, あるいはモデルを簡略化することでソフトウェアを用いた定量解析における計算時間の短縮へとつながる。電子輸送過程を記述する物理量等についてはデータの評価など学術的な過程を経てデータベースが構築され実用化される。後藤先生の標準(絶対)スペクトルもデータベースの一部であり, 構築された物理量のデータベースや標準スペクト

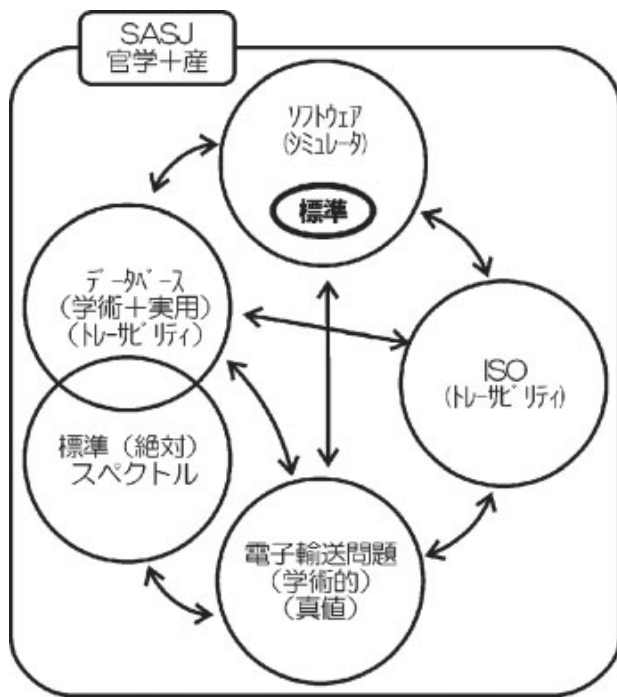


Fig. 2 Schematic representing the relation between software and standardization expected in the future.

ルは電子輸送問題に関する研究に用いることができる。また、これらデータベースをソフトウェアへ組み込むことでトレーサビリティが向上する。あくまでトレーサビリティに重点を置く ISO ではあるが、当然 ISO が成立するためには学術的根拠が必要となる。ISO によるトレーサビリティの向上にはデータベースの利用も不可欠であり、さらに成立した ISO はソフトウェアへ組み込むことが可能である。

今後必要となる標準とは何であろうか？今回標準について考えるうちに(正しいかどうかは別として)ISO はガイドラインであるという認識に至った。表面分析を行うと装置や実験者によって異なる結果が得られる。これら得られた結果を、装置や実験者、場合によっては分析法にもよらず同じ土俵で議論するために必要となるのが ISO である。しかしながら昨今の科学技術の進歩に比べ ISO 成立には時間を要し、かつ分析対象は多種多様でありすべての分析対象を細かくカバーする ISO を成立させることは現状では殆ど不可能である。そのような状況であるからこそガイドラインとしての

ISO が必要とも言える。ISO のガイドラインに従い、データベースを参照しながら物理的モデルに則ってデータを解析できるのがソフトウェアである。多種多様な分析対象を高いトレーサビリティで分析するための有力なツールである「ソフトウェア」が「標準」となる日が来るのではないだろうか？

表面分析に関する ISO をはじめ世界の標準化は、各国の標準研究所や大学など官学が中心となって進められているという印象を受ける。これに対して SASJ は表面分析の分野において世界でも珍しく、実用分析に携わっておられる産業界からの会員が多い研究会である。どんな「標準」を成立させても分析の実務に役立たなければ意味がないと考えると、産官学全てがそろった SASJ が今後必要となる「標準」を議論し提案していただける場とも言える。将来の「標準」の一つの形として「ソフトウェア」を中心とした「標準」も有り得るのではないだろうか？

5. おわりに

以上、「ソフトウェアと標準」について筆者の思うところを述べた。これまで「標準化」の実務に直接携わったこともない筆者にとって今回の執筆は大変よい勉強の機会となった。特に、第25回研究会で配布された特別資料にあった吉原初代会長による「口伝から標準化へ」[42]と「一通の開催通知」[43]、「新春座談会「一通の開催通知」をめぐって」[44]は非常に興味深く、「標準化とは？」と考える上で大変参考となった。さらに最近出版された JSA に掲載されている2代目会長一村氏並びに3代目会長田沼氏による巻頭言[45,46]でも将来の標準化について述べられており大変考えさせられた。しかしながら執筆の最終段階となった今でも「本当の標準とは？」という命題に対する明確な答えには至らなかった。この命題とは長い付き合いになりそうである。

本稿で述べた内容の多くは、SASJ で言うところのナイトセッションでお話した内容である。「SASJ ではナイトセッションで本当のアイデアが湧いてくる」とよく耳にする。そう思いながら吉原初代会長の「一通の開催通知」を拝見すると写真の半分は懇親会のようなものである。VAMAS-SCA の活動を直接経験したことのない筆者にとっては、VAMAS-SCA の流れを受けて設立された SASJ はこういったところも受け継いだのかと思う。SASJ の

ナイトセッションでは会員の方々が老若問わず議論を行っている。また会員を見ても、これからの表面分析を支えていく若手会員も非常に多い。そういう研究会であるからこそ、みんなで議論しながら将来の「本当の標準」を考えていけるのではないだろうか？本稿がそういった議論の種の一つにでもなれば幸いである。

最近ではナノテクノロジーに関する標準化が始まるという話も聞いている。分析対象が微細化・高精度化される昨今、表面分析においても今後ナノテクノロジーに関連した標準化は避けて通れないかもしれない。その他バイオテクノロジーや有機材料など、科学技術の進展は表面分析の標準化にとって大きな難題を提示している。VAMAS-SCAから20年、その流れを受けたSASJが設立されて10年、当初は反対も多かったという表面分析の標準化も多くの方々の苦勞と努力により20件を超える規格を成立させて現在に至っている。標準化の今後の10年について考えるいい機会ではないだろうか？

分析装置の測定の自動化が進んでいる。もし「標準」となる「ソフトウェア(シミュレータ)」が完成したら、データの測定から定量解析までボタン一つでできる時代がやってくるかもしれない。興味を覚える反面、怖い気もするのは筆者だけであろうか？

参考文献

- [1] N. F. Mott and H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions* (Oxford, London, 1965) 6th ed; Y. Yamazaki, Ph. D Thesis, Osaka University, 1977; S. Ichimura and R. Shimizu, *Surf. Sci.* **112**, 386 (1981).
- [2] A. Jablonski, F. Salvat and C. J. Powell, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **33**, 409 (2004).
- [3] R. H. Ritchie, *Phys. Rev.* **106**, 874 (1957).
- [4] D. Pines, *Elementary Excitations in Solids* (W. A. Benjamin, New York, 1964).
- [5] P. M. Seah and W. A. Dench, *Surf. Interface Anal.* **1**, 2 (1979).
- [6] S. Tanuma, C. J. Powell and D. R. Penn, *Surf. Interface Anal.* **35**, 268 (2003); S. Tanuma, C. J. Powell and D. R. Penn, *Surf. Interface Anal.* **36**, 1 (2004).
- [7] M. Gryzinski, *Phys. Rev. A* **13**, 305 (1976); M. Gryzinski, *Phys. Rev. A* **13**, 322 (1976); M. Gryzinski, *Phys. Rev. A* **13**, 336 (1976).
- [8] E. Casnati, A. Tartari and C. Baraldi, *J. Phys. B* **15**, 155 (1982).
- [9] M. Inokuti, *Rev. Mod. Phys.* **43**, 297 (1971).
- [10] D. C. Joy and S. Luo, *Scanning* **11**, 176 (1989).
- [11] R. Oswald, Ph.D thesis, University of Tübingen, 1997.
- [12] Y. F. Chen, *Surf. Sci.* **380**, 199 (1997).
- [13] S. Tanuma, S. Ichimura and K. Goto, *Surf. Interface Anal.* **30**, 212 (2000).
- [14] W. S. M. Werner, W. Smekal, C. Tomastik and H. Störi, *Surf. Sci.* **486**, L461 (2001).
- [15] F. Salvat, *Phys. Rev. A* **68**, 012708 (2003).
- [16] C. S. Campos, M. A. Z. Vasconcellos, X. Llover and F. Salvat, *Phys. Rev. A* **66**, 012719 (2002).
- [17] A. Jablonski, *J. Vac. Sci. Technol. A* **8**, 106 (1990); A. Jablonski and C. J. Powell, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **100**, 137 (1999); A. Jablonski and C. J. Powell, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **107**, 201 (2000); C. J. Powell and A. Jablonski, *Surf. Interface Anal.* **33**, 211 (2002).
- [18] W. S. M. Werner, *Surf. Interface Anal.* **31**, 141 (2001).
- [19] F. Yubero, J. M. Sanz, B. Ramskov and S. Tougaard, *Phys. Rev. B* **53**, 9719 (1996); A. C. Simonsen, F. Yubero and S. Tougaard, *Phys. Rev. B* **56**, 1612 (1997).
- [20] C. M. Kwei, C. Y. Wang and C. J. Tung, *Surf. Interface Anal.* **26**, 682 (1998).
- [21] Z. J. Ding and R. Shimizu, *Surf. Sci.* **222**, 313 (1989); Z. J. Ding, *Phys. Rev. B* **55**, 9999 (1997).
- [22] R. Shimizu and Z. J. Ding, *Rep. Prog. Phys.* **55**, 487 (1992).
- [23] D. C. Joy, *J. Microsc.* **147**, 51 (1987).
- [24] T. Nagatomi, R. Shimizu and R. H. Ritchie, *Surf. Sci.* **419**, 158 (1999).
- [25] T. Nagatomi, R. Shimizu and R. H. Ritchie, *J. Appl. Phys.* **85**, 4231 (1999).
- [26] S. Tanuma, S. Ichimura, K. Goto and T. Kimura, *J. Surf. Anal.* **9**, 285 (2002).
- [27] W. S. M. Werner, W. Smekal, T. Cabela, C. Eisenmenger-Sittner and H. Störi, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **114-116**, 363 (2001); W. S. M. Werner, *Surf. Interface Anal.* **35**, 347 (2003); W. S. M. Werner, *Surf. Sci.* **526**, L159 (2003).
- [28] S. Tougaard and F. Yubero, *Surf. Interface Anal.* **36**, 824 (2004); A. P. Grosvenor, B. A. Kobe, N. S. McIntyre, S. Tougaard and W. N. Lennard, *Surf. Interface Anal.* **36**, 632 (2004).
- [29] G. Gergely, *Prog. Surf. Sci.* **71**, 31 (2002).
- [30] G. Gergely, M. Menyhard, S. Gurban, A. Sulyok, J.

- Toth, D. Varga and S. Tougaard, Surf. Interface Anal. **33**, 410 (2002); G. Gergely, M. Menyhard, A. Sulyok, G. T. Orosz, B. Lesiak, A. Jablonski, J. Tóth and D. Varga, Surf. Interface Anal. **36**, 1056 (2004).
- [31] L. Kövér, S. Tougaard, J. Tóth, D. Verga, O. Dragoun, A. Kovalík and M. Ryšavý, J. Surf. Anal. **9**, 281 (2002).
- [32] P. J. Cumpson, Surf. Interface Anal. **31**, 23 (2001).
- [33] D. C. Joy and Y. Lin, Abstracts book of Workshop of Modeling Electron Transport for Application in Electron and X-ray Analysis and Metrology (Nov. 8-10, 2004, NIST, USA) pp.16.
- [34] H. Yoshikawa, Y. Irokawa and R. Shimizu, J. Vac. Sci. Technol. A **13**, 1984 (1995).
- [35] T. Nagatomi, Z. J. Ding and R. Shimizu, Surf. Sci. **359**, 163 (1996); T. Nagatomi, T. Kawano and R. Shimizu, J. Appl. Phys. **83**, 8016 (1998); T. Nagatomi, T. Kawano, H. Fujii, E. Kusumoto and R. Shimizu, Surf. Sci. **416**, 184 (1998); T. Nagatomi, Y. Takai, B. V. Crist, K. Goto and R. Shimizu, Surf. Interface Anal. **35**, 174 (2003).
- [36] T. Nagatomi, Abstracts book of 3rd International Symposium of Practical Surface Analysis (PSA-04) (Jeju, Korea, October 4-6, 2004) pp.37.
- [37] S. Tougaard, Surf. Interface Anal. **25**, 137 (1997).
- [38] R. H. Ritchie and A. Howie, Phil. Mag. **36**, 463 (1977); D. R. Pen, Phys. Rev. B **35**, 482 (1987).
- [39] C. R. Worthington and S. G. Tomlin, Proc. Phys. Soc. A. **69**, 401 (1956).
- [40] T. Nagatomi, T. Hibi, Y. Takai, K. Obori, S. Awata and T. Yurugi, Jpn. J. Appl. Phys. **42**, 6663 (2003); T. Nagatomi, Surf. Interface Anal. (*to be published*).
- [41] A. Yoshioka, Ph. D Thesis, Osaka Institute of Technology, 2004.
- [42] K. Yoshihara, J. Surf. Anal. **3**, 1 (1997).
- [43] K. Yoshihara, J. Surf. Anal. **3**, 138 (1997).
- [44] K. Yoshihara, S. Ichimura, S. Sekine, A. Tanaka. Y. Honma, S. Tanuma and M. Suzuki, J. Surf. Anal. **3**, 2 (1997).
- [45] S. Ichimura, J. Surf. Anal. **12**, 1 (2005).
- [46] S. Tanuma, J. Surf. Anal. **11**, 52 (2004).