

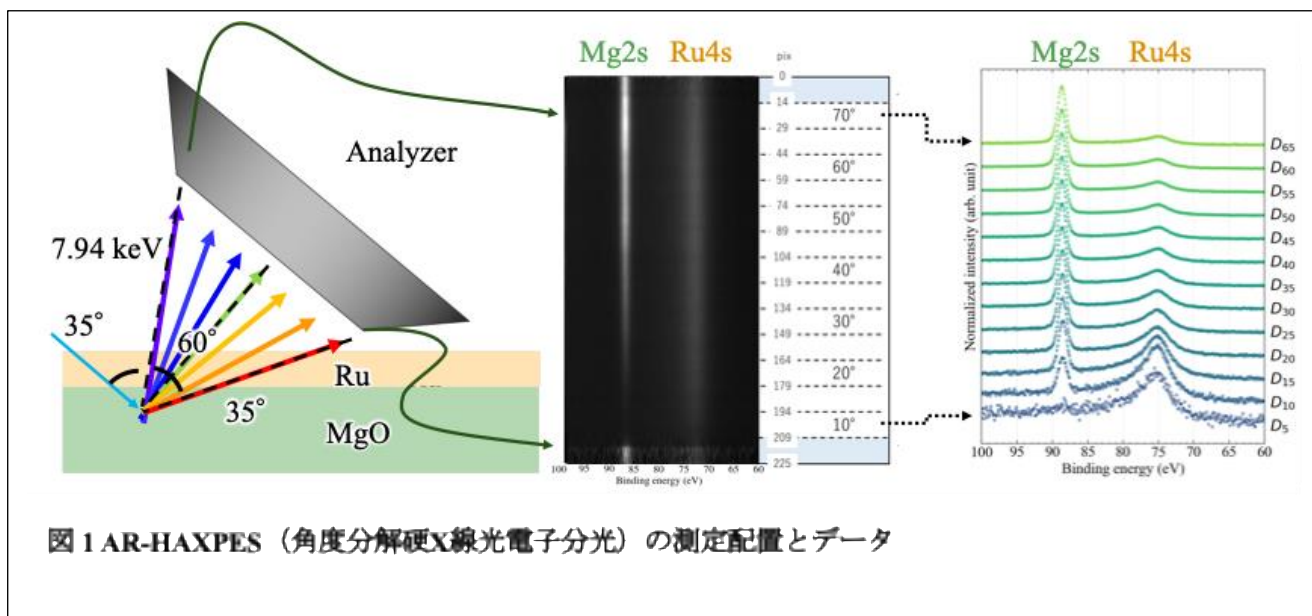
# 硬 X 線光電子分光データのベイズ解析で薄膜の膜厚を推定する

## [1] 要旨

物質深部の電子状態を非破壊で調べる「角度分解硬 X 線光電子分光 (AR-HAXPES)」は、先端材料開発の重要ツールである。しかし、そのデータ解析は複雑で、熟練者の主観や局所的な最適解への陥りやすさが課題であった。最近、ベイズ推論による角度ごとのデータを統合した新しい解析フレームワークが構築された。これは、スペクトル分解の自動化と高精度な膜厚推定を実現して次世代デバイスの構造評価を革新する道につながる。

## [2] 本文

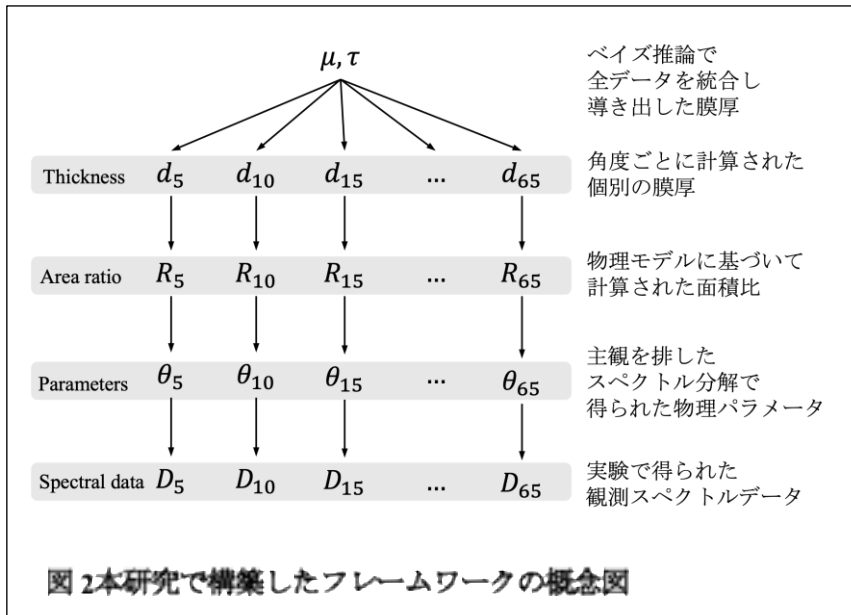
スマートフォンや電気自動車の性能向上を支えているのは、ナノメートル (10 億分の 1 メートル) レベルで制御された最先端の材料技術である。こうしたデバイスの機能は、表面だけでなく、物質内部に埋もれた「界面」や複雑な「積層構造」によって決定づけられる。



これらを非破壊かつ高感度で観察する手法として、SPring-8 などの大型放射光施設で利用される「角度分解硬 X 線光電子分光 (AR-HAXPES)」がある。この手法は、X 線の入射角や光電子の取り出し角を変えながら測定を行うことで、深さ方向の元素分布や化学結合状態を非破壊で分析できる強力なツールである (図 1)。

しかし、AR-HAXPES のデータ解析には多くの課題があった。多層膜からの信号は複雑に重なり合っており、そこから各層の情報を分離・抽出する「スペクトル分解」の工程は、解析者の経験や勘に依存しがちであった。従来の最小二乗法などでは、初期値の選び方によって誤った解 (局所最適解) に陥るリスクがあり、解析結果の客観性が保証しにくいという問題があった。また、角度ごとにデータの信号対雑音比 (信頼性) が異なるにもかかわらず、それらを単純に平均化して膜厚を算出していたため、精度の向上には限界があった。

今回、東京大学と高輝度光科学研究センターの研究グループは、これらの問題を一举に解決する「ベイズ推論」に基づく新しい解析フレームワークを提案した (図 2)。本手法の最大の特長は、二つの先進的な統計手法を統合した点にある。第一に、スペクトル分解に「レプリカ交換モンテカルロ法 (REMC)」



を導入したことである。REMCは、温度の異なる複数の仮想的なレプリカを交換しながら探索を行うことで、複雑なパラメータ空間から大域的な最適解を効率的に見つけ出す手法である。これにより、初期値依存性を排除し、人間の主観が入らない客観的なスペクトル分解が可能となった。第二に、各角度で得られた結果を統合したことである。これによって、測定角度ごとのデータの「不確実性（ノイズレベル）」を自動的に推定し、信頼性の高いデータには

重みを、低いデータには軽みを付けて統合することができる。これにより、ノイズの多い測定データが含まれていても、全体として極めて堅牢で高精度な膜厚推定が可能となった。

今回、ルテニウム（Ru）と酸化マグネシウム（MgO）の積層構造を模したシミュレーションデータを用いて本手法の検証が行われた。その結果、真の膜厚 2.0 nm に対し、推定値は誤差わずか 0.15% という高い精度を達成した。また、推定値の不確実性（誤差範囲）も、従来のように個別の角度だけで解析する場合に比べて低減されることが実証された。この成果は JPSJ の 2026 年 3 月号に掲載された。

本研究の成果は、物理計測と情報科学（AI・機械学習）の融合が、熟練者のノウハウを超えた高精度解析を実現することを示している。今後、この技術は多層膜デバイスの品質管理や、全固体電池の界面解析など、複雑な構造を持つ先端材料の評価において標準的なツールとなることが期待される。材料開発の現場において、解析の自動化・高精度化は新材料発見のスピード（マテリアルズ・インフォマティクス）を加速させる鍵となるだろう。

原論文（2026年2月4日公開済）

Bayesian Analysis of Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy Data: Integrating Spectral Decomposition and Film Thickness Estimation

R. Ota, Y. Yokoyama, Y. Takagi, A. Yasui, M. Mizumaki, and M. Okada, J. Phys. Soc. Jpn. **95**, 034701 (2026).

<情報提供：岡田 真人（東京大学大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻）>