

電子分光用データ処理システム

(II) 出現電位分光法への応用

小西 亮介*・木下 正生*・岡垣 光則*・加藤 益*

(1980年5月31日受理)

Microcomputer System for Electron Spectroscopy

(II) Application for Appearance Potential Spectroscopy

Ryōsuke KONISHI*, Masao KINOSHITA*, Mitunori OKAGAKI* and Susumu KATO*

(Received May 31, 1980)

Abstract

An appearance potential spectrometer using microcomputer system are described. The method has the following advantages comparing with the conventional experimental procedure. 1) Digital data can be recorded by automatic data collecting system, 2) energy value of spectrum can be measured by using the programable power supply controlled by microprocessor and 3) signal can be detected without using Lock-in-Amp.

1. はじめに

出現電位分光法 (Appearance potential Spectroscopy. APS) は固体表面研究の有力な方法の一つである。¹⁾ この方法をふくめて、一般に電子分光法では超高真空中におかれた試料表面の状態を一定に保つため、短時間に実験を終了する必要がある。したがって実験の進行とデータの収集を自動的に行なうことができれば好都合である。また得られる電子ベクトルのS/Nは、あまり良くないことが多く、種々のデータ処理をする必要がある。

そこでわれわれは、試作した電子分光用データ処理システム²⁾をAPS実験装置に接続し、

- (1) 自動データ収集
- (2) 実験機器の制御
- (3) スペクトルのデータ処理

を試みた。

マイクロコンピュータ・システムを実際にAPS実験に利用するためには、さらに専用の機器や、インターフェースを設置すを必要がある。

超高真空装置、各種電源および増幅回路、マイクロコンピュータ・システムを含む全装置は、かなり複雑なものになっている。そこでわれわれは、まず、実験データの自動収集のみについて実験した。ついで掃引電圧の制御を行って実験精度を向上させた。さらに従来APS法の主役になっていたロックインアンプを除き、マイクロコンピュータ・システムによって微分する分光法を開発した。

2. 実験装置の構成と実験方法

2.1 自動データ収集

* 電子工学科 Department of Electronics

通常のAPS実験により得られるデータはX-Yレコーダを使用して、グラフ上にアナログ的に記録される。³⁾これは簡単かつ確実であるが実験終了後の計算処理には非常に不便である。そこで実験で得られるデータを最初から系統的にデジタル形式で収集すると、後の計算処理が比較的容易になる。このようなことを行なうのを“自動データ収集”と呼ぶことにする。従ってこの場合は実験装置の制御は全く行なわず装置より出力されるデータを収集することのみに注目した。

実際にはロック・イン・アンプの出力をプリアンプで適当な大きさに増幅した後、A/D変換(12bit)を行ない、データを収集する。この方法による実験装置の構成をFig. 1(a)に、その動作フローチャートをFig. 1(b)に示す。動作はFig. 1(b)に示すようにアベレージング個数、測定点数、インターバル等収集条件の設定を行う。次に“LOOP 1”でタイミングを取りながらA/D変換をアベレージングに必要な回数だけ行う。そしてアベレージングを行ない一測定点の値とする。これを必要な回数反復し、測定を終了する。

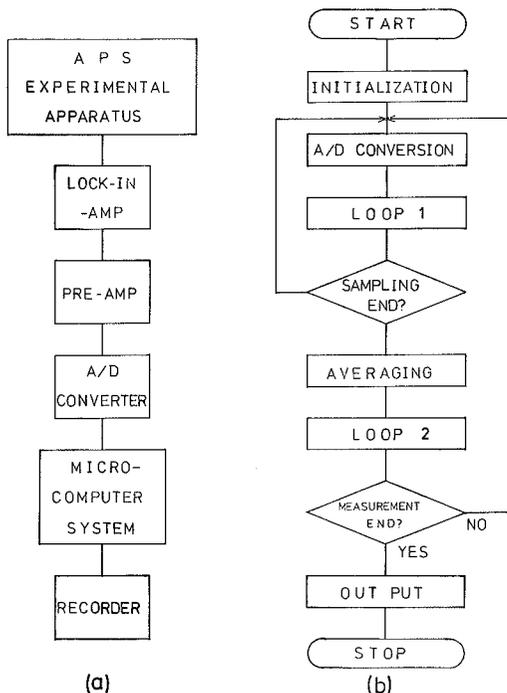


Fig. 1 Automatic data collecting system. Block diagram of system (a) and flow chart for collecting (b).

その後、データを出力し実験を終了する。

この方法で得られた結果の例をFig. 2に示す。下がアベレージング512回のデータである。下の方がS/Nは改善されているが充分であるとはいえない。それはサンプリングの周期が速いため充分なアベレージング効果がでていないためと考えられる。

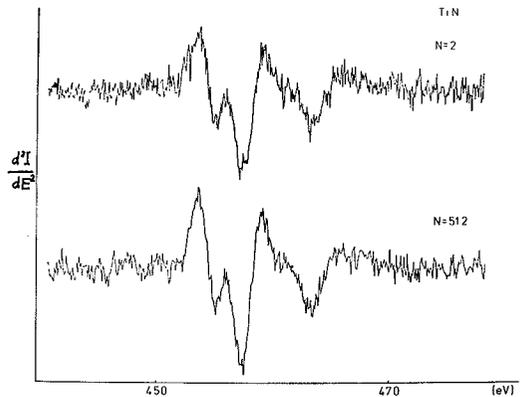


Fig. 2 APS data collected by the system shown in Fig. 1.

2.2 オンライン機器の制御

2.2.1 実験装置

実際のAPS実験で得られるデータはスイープ電圧の関数としてとられる。(APS実験は試料にあるエネルギーの電子を照射し、試料からの2次電子放出量の変化を観察している。この時に電子のもつエネルギーを制御するのがスイープ電圧である。しかし2.1の方法では測定値は時間の関数として収集されている。APSスペクトルは出現電位や、形状が表面状態の影響を強く受けるので正確な加速電圧の設定が必要である。また、従来ロック・イン・アンプを使用して信号検出を行なっているが、変調微分法をもちいるためスペクトル形状に“拡がり効果”⁴⁾が生じる。従って分解能の改善や誤差を出来るだけ少なくするために加速電圧を直接制御し、ロック・イン・アンプを使用しなくても信号検出が可能な手法を試みた。Fig. 3にその構成図を示す。また動作のフローチャートをFig. 4に示す。これはマイコンからの指令で0~100Vまで25mVステップで設定できる。またA/DコンバータはFig. 1(a)のものとは異なり、12bit UP/DOWNカウンタとV/Fコンバータで積分型のA/Dコンバータを構成している。カウンタの

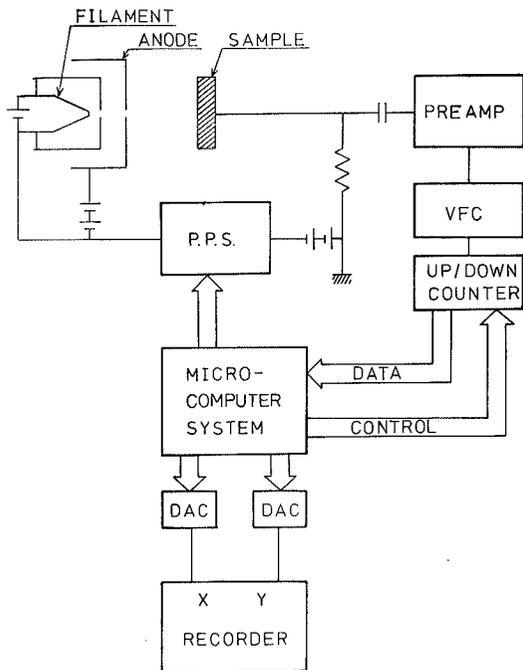


Fig. 3 APS experimental apparatus using Microcomputer System.

UP/DOWN は信号検出においてマイコンの指令で切換えが可能である。

実験は測定条件の設定（スイープ速度，スイープ範囲）を行ない P P S (Programable Power Supply) より初期電圧を発生させる。次にインターバルを決め，その間の信号を検出する。検出された信号をメモリに格納し，X-Yレコーダへ出力し，1測定点での測定を終了する。これを必要な回数反復し，実験を終了する。この方法は加速電圧を正確に決定できるだけでなく，ロック・イン・アンプを使用していないため変調微分法による特有の拡がり効果を減少させれるため A P S スペクトルの微細構造もより正確に反映されると思われる。更にスイープ電圧のスイープ開始，停止が測定の開始および終了であり，マイコンで直接実験を制御できる。以下各ブロックの説明を行う。

プリアンプ — 検出される信号は A/D コンバータ (V/F コンバータ) の入力レンジと比較して非常に小さいのでプリアンプで適当な振幅まで増幅しなければならない。構成を Fig. 5 (a) に示す。ヘッド・アンプで差動増幅された後，レンジ切換用アッテネータを通り

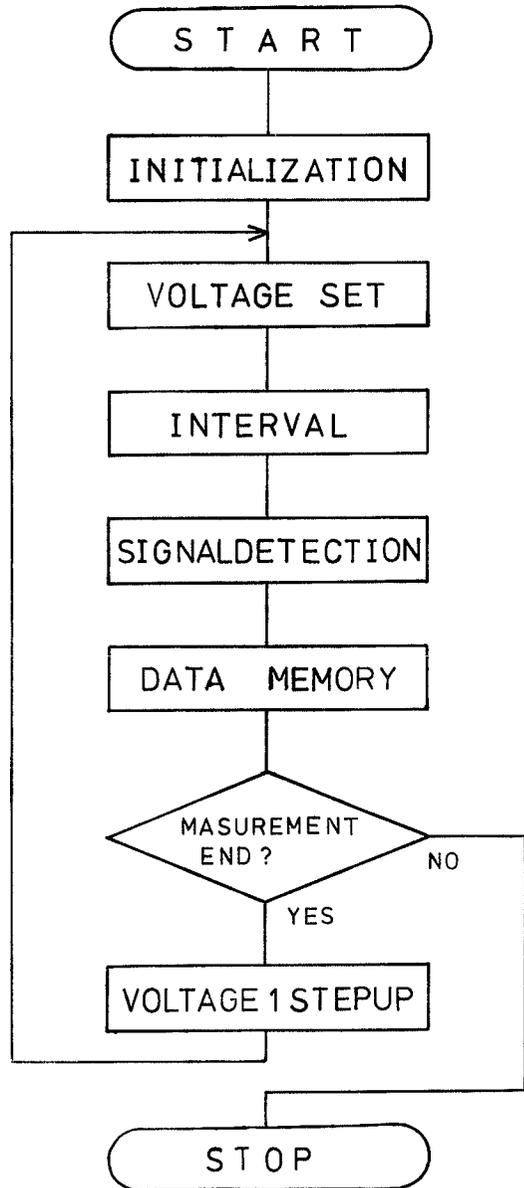


Fig. 4 Flow chart for the system shown in Fig. 3.

ミドルアンプで A/D コンバータ (V/F コンバータ) の入力レンジまで増幅する。

さらにバイアスを注入し，コンバータの入力レンジ以上の信号が入力されない様に，出力を 0 ~ 10 V にリミッ

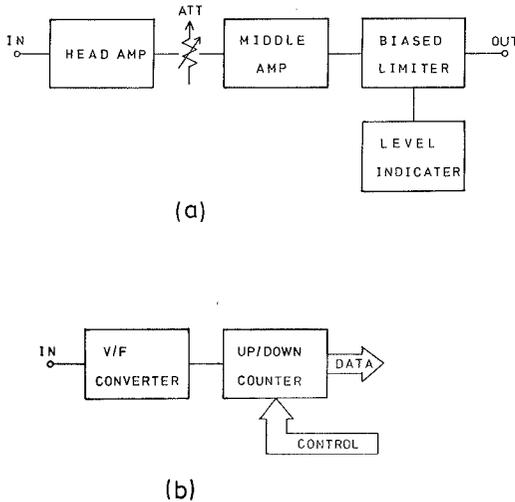


Fig. 5 Block diagram of pre-amplifier (a) and block diagram of A/D converter.

タで制限する。またレベルインジケータで、出力がこのレンジを越えた時、オーバーまたはアンダーを表示する。

A/D コンバーター——Fig. 5 (b) にその構成を示す。ここでは V/F コンバータを使用し、その入力レンジは 0~10V であり、100KHz/V でアナログ入力をパ

ルス列に変換する。これを 16bit の U/D カウンターでカウントし A/D 変換を行う。カウンタの制御は全てマイコンからの指令で行う。

プログラマブル電源 (PPS) —— PPS は測定系の中心をなす装置であり、そのブロック図を Fig. 6 に示す。出力範囲は 0~100V であり、最大電流は 50mA 程度である。製作にあたって次の点を考慮した。

- 1) 0~100V が可変出来ること。
- 2) 設定精度が 0.1V 以上あること。
- 3) マイコンで自由に制御できること。
- 4) マイコンの指令で出力電圧を变調できること。
- 5) 普通のスイープ電源としての使用もできること。
- 6) 1KV 程度のバイアス電圧が重畳できること。

基礎電圧発生には 12bit D/A コンバータを使用している。電圧値の設定を簡便化するために 1bit を 25mV とし 49bit で 0.1V の設定とし PPS の最高電圧は実際には 102.4V とした。またデータセレクターを設けてマイコン使用を行わない時、PPS に内蔵のプリセッTABLE カウンタを使用し、普通のスイープ電源として使用出来る様になっている。データセレクタと D/A コンバータはフォト・カプラーを使用して絶縁しているのでバイアス電圧を重畳することが可能である。

D/A コンバーター——測定したデータを X-Y レコーダに出力するには、電圧値に変換する必要がある。ま

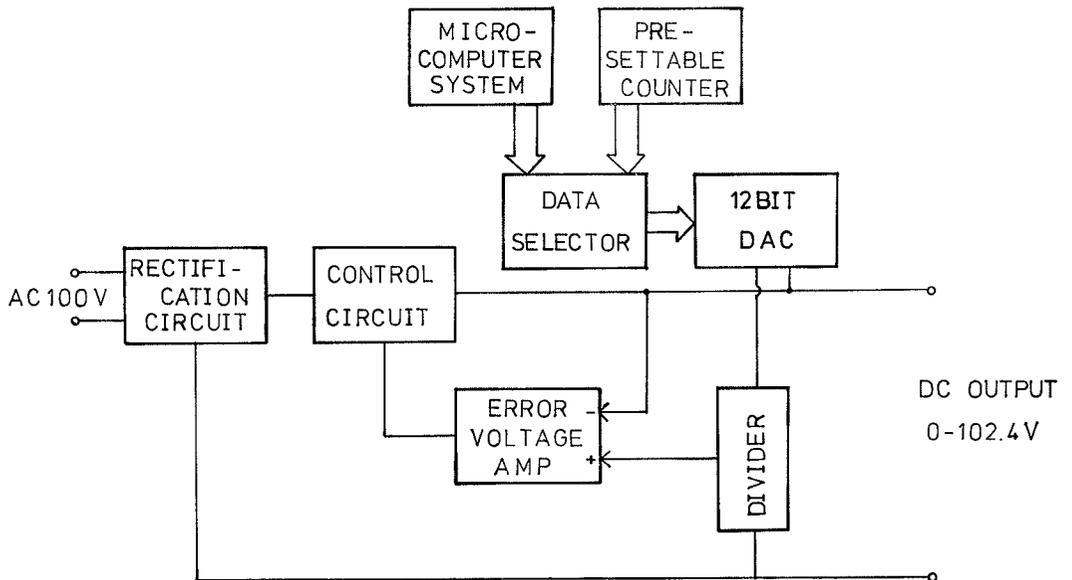


Fig. 6 Block diagram of Programmable Power Supply.

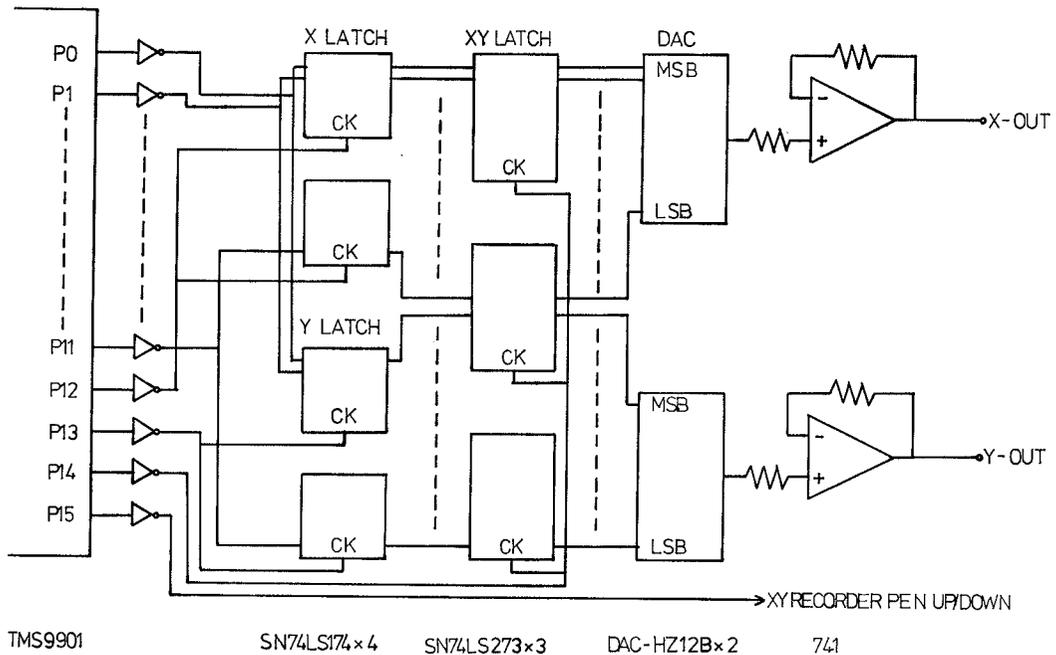


Fig. 7 Block diagram of D/A converter and its interface.

た信号出力用 (Y軸) の2組の D/A コンバータが必要である。ブロック図を Fig. 7 に示す。TMS9900 専用プログラマブル・システム・インターフェース素子であり、 $P_0 \sim P_{11}$ がデータポートである。 P_{12} が X ラッチ、 P_{13} が Y ラッチ、 P_{14} が XY ラッチ、 P_{15} がペン UP/DOWN である。X データ、Y データを別々に転送し、X ラッチ、Y ラッチにラッチする。ここで X 軸、Y 軸データの出力のバラツキを防ぐためにもう一段ラッチが設けられている。そこで X ラッチにデータがラッチされた後、2 段目の XY ラッチに同時にデータをラッチし、2 つの D/A コンバータを同時に駆動する。その後、ペンの追従する間、DELAY を取る。

2.2.2 シミュレーション

オンライン制御機器を A P S 装置に接続する前に、ダイオードと抵抗とを組み合わせた回路を用いて簡単なシミュレーション実験を行ない動作の確認を行った。

(Fig. 8) これはダイオードの両端の電位が順電圧を越えると、導通し抵抗が短絡されるのを利用して、A P S の出力特性、即ちネックの出現を模擬するものである。抵抗を上から順に R_1 、 R_2 、 R_3 とし順電圧を V_D 、印加電圧を V_s とすると、

$$V_s = (R_1 + R_2 + R_3) / R_1 \cdot V_D$$

のときにネックが出現する。また傾きはダイオードが OFF のとき $dI_1/dE = 1/(R_1 + R_2 + R_3)$ 、ダイオードが ON のとき、 $dI_2/dE = 1/(R_2 + R_3)$ となる。

2.2.3 信号検出法

一般的に信号は微分した形で検出される。ロック・イン・アンプを使用した従来の方法は変調微分を行なうが、ここではマイコンのプログラムによって微分波形を求めることにする。

a. 数値微分法

これは普通の A/D 変換を行った後、隣接する 2 つの測定点間で差を取り微分スペクトルを得る方法である。Fig. 9 に結果を示す。N 番目の測定点を N+1 番目の測定点の差を取らずに、N と N+a ($a < 1$) として遅延させる量を増加させると変化は大きくなる。

b. 差分法

これは A/D 変換時に微分値を得る方法である。この動作フローチャートを Fig. 10 に示す。一般的には“DELAY 1 = 0” とするが、場合によっては“DELAY 1 \neq 0” とすることも可能である。フローチャートにおいて“VHI”とは PPS の出力電圧をわずかに高くす

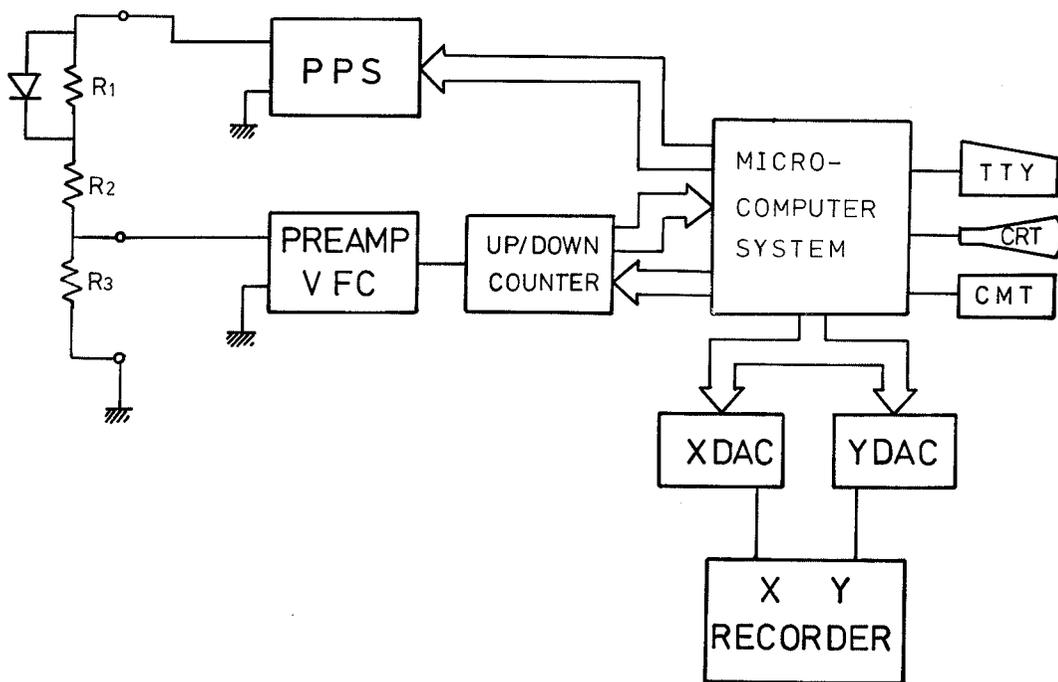


Fig. 8 Block diagram of simulation system.

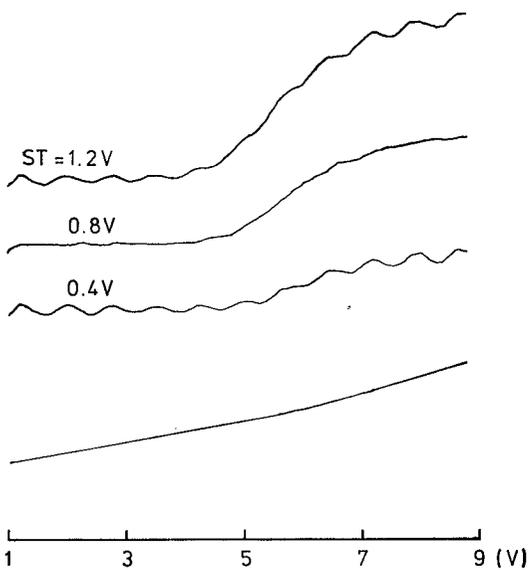


Fig. 9 The results of numerical differentiation.

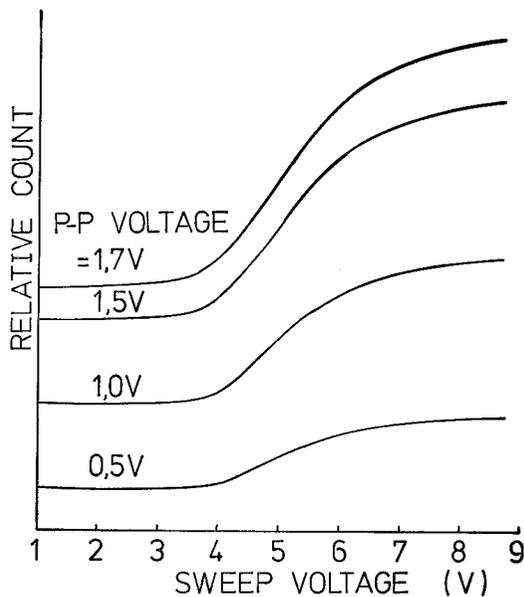


Fig. 10 The results of differential method.

ることで“VLOW”はわずかに低くすることである。
“UP”とはカウンタを加算にセットすることで“DO

WN”とはカウンタを減算にセットすることである。ま

だ“CSTART”はカウンタ起動，“CSTOP”はカウンタ停止である。このフローチャートを実行すると高压側で加算，低压側で減算が行なわれ，実質的なカウンタの値はその差となり微分信号が得られる。

即ち $N(C) = N(H) - N(L)$

$N(C)$ ：カウンタの値

$N(H)$ ：“VHI”でのカウント値

$N(L)$ ：“VLOW”でのカウント値

Fig. 11 はこの方法によって得られた結果である。これは微小振幅を5周期として，振幅値を変化させた波形である。このように振幅値を増加させて行くと波形の立ち上がりが早くなってきているのがわかる。これは差分する値の幅が広くなり，微小振幅値の上限がネックに重なるのが早くなるからである。

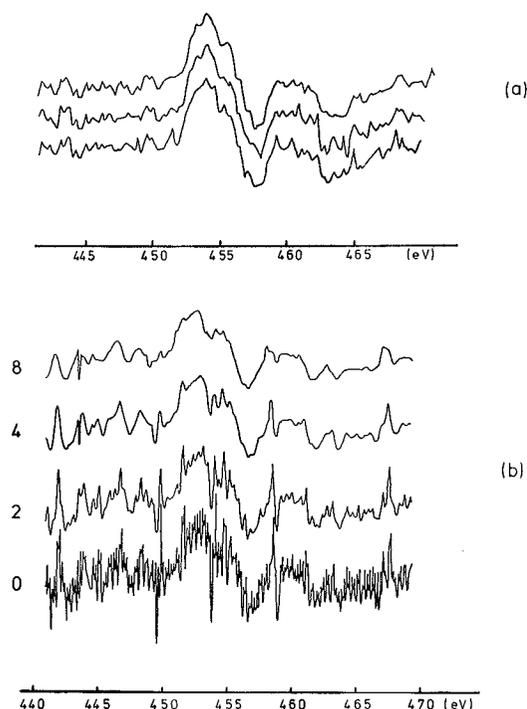


Fig. 11 Ti- $L_{3,2}$ APS spectra by difference method (a) and by numerical differentiation (b).

2.2.4 APS実験

実際の定験装置は Fig. 3 に示されている。測定法は前に説明した方法を用いた。差分法による結果を Fig. 11 (a) に，数値微分法による結果を Fig. 11 (b) に

示す。差分法は1測定点の測定に約 3 sec を要している。数値微分法では約 200msec. である。またスweep速度は差分法が 0.083V/sec., 数値微分法が約0.5V/sec. である。従って数値微分法の方がかなりスweep速度が大きい。差分法についてはスペクトルの変化にくらべ，速い変化の雑音は重畳しておらず，またバックグラウンドの変動はスペクトルの強度と比較して1/10 程度でかなり良好である。しかし 445V, 450V 付近のバックグラウンドの再現性のある変動は従来の方法によるものはあらわれず，雑音によるものと思われる。したがって同様の変動がスペクトルに重畳した場合，微細な変化と誤認するおそれがある。

数値微分法によるスペクトルは図に示した „O” のグラフが微分のみを行ったもので，他は移動平均処理を行ったものである。微分だけのスペクトルはスペクトルの変化に比べ，速い変化の雑音が重畳している。またパルス状の雑音も確認される。これはスweep速度が差分法に比べ速いため雑音成分も正確に微分処理してしまったためと考えられる。そこで図に示すように移動平均処理を行うと雑音の低減が認められた。しかしバックグラウンドの変動は差分法に比べてかなり大きい。

以上従来の方法と比較して，S/N，スweep速度の点で改善の余地はあるが，一応ロック・イン・アンプによらない方法で信号の検出が可能となった。

S/N が充分でない理由として，マイクロコンピュータの発生する雑音が測定装置に誘導していることが考えられる。この雑音については，フォト・アイソレーション等により，アース分離を行なうなどの方法で低減することが可能であると思われる。また従来の方法ではロック・イン・アンプの入力に高いQを有るバンドパスフィルターを付加して雑音成分を低減させている。しかしこの方法では付加していない。それに代わる方法として計算機処理によってデジタルフィルタ処理等を行なうことが考えられる。

2.2 データ処理

APS スペクトルは普通信号成分に比べ大きな雑音が重畳して上述の2方法で収集，記録されたデータは十分な雑音除去が行なわれていない場合がある。このような場合，実験終了後，計算処理によって雑音の除去を行なわねばならない。また実験者がデータの評価を行なうには，X-Yレコーダに再びアナログ形式に変換して出力するが，この場合スペクトルの強度を一定にしたり，

エネルギー値をそろえたりすれば相対的な比較が容易になる。更にいくつかのスペクトルの合成、減算が出来れば、さらに微細な構造についての比較、評価が可能になる。これらのデータ処理は信号データがデジタル形式で記録されているのでアナログ形式に比べオンラインで処理が可能である。すなわち実験中にオンライン処理でデジタルの手法により雑音除去等を行ないながら、よりS/Nのよいデータを迅速に得ることも可能である。この点については目下研究を進めている。

4. おわりに

前報²⁾の、マイクロコンピュータ・システムを実際にAPS実験に応用し電子分光スペクトルを求めた。この方法は、従来の実験法に比較して、つぎのような利点を有している。

- (1) 自動データ収集により、デジタル化されたデータを記録させることができる。
 - (2) マイクロプロセッサ制御によるPPSを利用し、スペクトルのエネルギー値の測定精度を向上させ得る。
 - (3) ロック・イン・アンプを使用しないで、信号検出を行なうことができる。
- さらに、このシステムを改良して、S/Nの向上、雑

音の除去、データ評価などを行うことが可能であり、目下研究を進めている。

ここで利用したマイクロコンピュータ・システムは本研究室尾崎知幸技官が主として、設計、試作、整備にあたったものである。なおハードウェア、ソフトウェアの両面にわたって学生豊田具幸、宮本秀幸、喜多川繁、守田守の諸君の協力を得た。この研究の大部分は昭和53、54年度文部省科学研究費補助金(試験研究)「団体表面解析方法としてのAPSの実用化に関する研究」(課題番号385054)によって遂行された。ここに記して厚く御礼申し上げます。

参考文献

- 1) たとえば, N. B. Hannay (ed) : Treatise on Solid State Chemistry, Vol. 6A Chap. 2 (Plenum Press, New York, 1976), 加藤益・小西亮介: 応用物理, 47 (1978) 339.
- 2) 尾崎知幸・宮元秀幸・喜多川繁・守田守・加藤益: 鳥取大学工学部研究報告, 11 (1980) 62.
- 3) たとえば 小西亮介・川本恭士・加藤益: 真空 22 (1979) 311.
- 4) 小西亮介・加藤益: 日本真空協会関西支部研究例会資料第3回 (1976) 25.