

# 1 原子当たりエネルギー依存 SIMS スペクトルからの 有機材料の分子構造情報抽出

～変化するマススペクトルから試料の化学情報を得る～

工学研究科 材料・放射光工学専攻、情報科学研究科

○准教授 もりたにこうすけ 盛谷浩右、教授 なかむらともみち 中村知道、教授 いぬい のりお 乾 徳夫

## キーワード

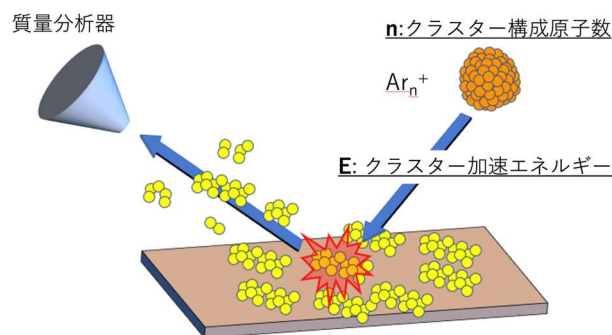
分析、ToF-SIMS、多変量解析、クラスタリング、ガスクラスタライオンビーム (GCIB)

## 研究概要

二次イオン質量分析法 (SIMS) は試料にイオンビーム (一次イオン) を照射し、スパッタされる二次イオンを質量分析することで、試料の組成や分子構造を分析する手法です。高感度な測定が可能で、試料の前処理を行うことなく表面の化学分析ができるという特徴があります。特に、近年数千個の原子や分子から成る巨大クラスタのイオンビームを一次イオンとすることで、有機材料の化学分析も可能になっています。しかし、SIMS から得られるスペクトルには分子イオンやフラグメントイオン等による大量のピークが含まれるため、それらを正確に解釈し分子構造を解析することは、多くの場合困難です。私達はクラスタの1原子当たりエネルギーに依存して変化する SIMS スペクトルのパターンについて検討しました。クラスタ衝突により試料に与えられるダメージは、クラスタの加速エネルギー (E) をクラスタ構成原子数 (n) で割った値、つまり1原子当たりエネルギー  $E/n$  に依存します。 $E/n$  が小さい場合、試料分子の化学結合は切れにくく、大きい場合は切れやすくなります。そこで、各マスピークの  $E/n$  依存曲線の類似性を元にクラスタリングし、 $E/n$  依存 SIMS スペクトルから試料の分子構造に関する情報の抽出を試みています。

$E/n$  : 大 → 分子解離 : 大

小 → 分子解離 : 小



Arクラスタ-SIMSの概念図

## アピール ポイント

本研究室では、 $E/n$  (1~20 eV) を 0.1 eV レベルの分解能で精密に制御できるクラスタイオンビームをプローブとした TOF-SIMS 装置を開発してきました。この装置に搭載した  $E/n$  変動連続自動測定システムにより精密な  $E/n$  依存 SIMS データを取得することができます。取得した大量のデータは数理統計的手法を用いて解析し、試料の詳細な分子構造を特定します。また、Ar の他に水やメタノールなど、様々な種類のクラスタを一次イオンとして利用することができます。