### アルバックファイ PHI5000 VersaProbe Part 2 解析プログラム「MultiPak」マニュアル

東京大学工学系研究科 総合研究機構 ナノ工学研究センター X線実験室

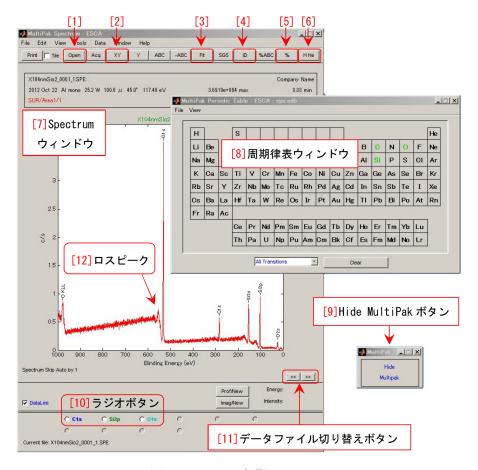


図 0 MultiPak 初期ウィンドウ

PHI 5000 VersaProbe による測定データは、解析用ソフトウェア「MultiPak」で解析できる。このマニュアルでは「MultiPak」の使い方を記述する。

右下の「[9] Hide MultiPak ボタン」をクリックすると MultiPak のすべてのウィンドウを非表示にでき、「Show MultiPak ボタン」(再表示) に切り替わりる。下の「[11] データファイル切り替えボタン」は、複数のデータファイルを読み込んだ場合に、表示するデータファイルを切り替えるときにクリックする。

画面上にある、「[1] Open」(ファイルを開く)、「[2] XY」(XY スケールを元に戻す)、「[3] Fit」(カーブフィットを行う)、「[4] ID」(ピークの自動アサイン)、「[5] %」(元素のモル比を定量する)、「[6] H He」(周期律表を手前に表示する)、などのボタンを頻繁に用いる。

付録 A [p.21] では帯電補正について、付録 B [p.23] では化学結合状態の同定について記述する。付録 C [p.25] ではインターネット上の NIST(National Institute of Standards and Technology) のデータベースを利用する方法について、付録 D [p.29] では、2 次元および 3 次元のグラフ描画用フリーウェア、GnuPlot のダウンロードとインストール、および使い方について記述する。

# 目次

第1章	光電子	スペクトルの解析	1
1.1	光電子	ニスペクトルの解析	1
	1.1.1	スペクトルデータの読み込み	1
	1.1.2	ワイドスキャンスペクトルデータのピークアサイン	2
	1.1.3	ナロウスペクトルによる元素の定量	2
	1.1.4	ピーク分離の開始	4
		1.1.4.1 Fit ボタンのクリック	4
		1.1.4.2 バックグラウンドの調整	4
		1.1.4.3 フィット曲線の作成	4
		1.1.4.4 フィット曲線の調整	4
		1.1.4.5 最小二乗フィットの実行	5
	1.1.5	ピーク分離の最適化	5
		1.1.5.1 ガウシアンでのフィット	5
		1.1.5.2 ガウシアンとローレンツィアンでのフィット	5
		1.1.5.3 非対称フィット	5
	1.1.6	帯電補正	7
	1.1.7	化学結合状態の同定	7
1.2	複数元	元素の化学状態の定量	7
	1.2.1	PET(ポリエチレンテレフタラート) について	7
	1.2.2	光電子スペクトルの読み込み	7
	1.2.3	炭素 1s スペクトルのピーク分離と定量	7
	1.2.4	酸素 1s スペクトルのピーク分離と定量の追加	9
1.3	フィッ	,ティングカーブの読み込みと描画	10
	1.3.1	分離されたフィッティングカーブの 'MultiPak' で読み込み	10
	1.3.2	分離されたフィッティングカーブのアスキー形式でのエキスポート	11
	1.3.3	分離されたフィッティングカーブのエクセルでの読み込みと描画	12
第2章	スパッ	ッタリングデータの解析	13
2.1	スパッ	,タリングデータの解析	13
	2.1.1	スパッタリングデータの読み込み	13
	2.1.2	ナロウスペクトルの選択表示	14
	2.1.3	モンタージュビュアーによる立体表示	15

	2.1.4	带電補正	16
	2.1.5	化学結合状態の同定	16
第3章			17
3.1			17
3.2			17
3.3			18
			18
	3.3.2	マップ内の領域指定によるマップの抽出	19
付録 A	帯電補]	Eについて	21
A.1			21
			21
			21
	11.1.2	17XIII CO O III E III E	
付録 B	化学結合	合 <b>状態同定</b>	23
B.1	化学結合	合状態の同定	23
	B.1.1	化学結合状態同定の概要.................................	23
	B.1.2	化学結合状態同定の開始................................	23
	B.1.3	データベースのレインジ設定	23
	B.1.4	化学結合状態の同定	24
付録 C	NIST(N	ational Institute of Standards and Technology) のデータベース利用法	25
付録 C C.1	`	37)	25 25
	NIST o	)データベースへのアクセスについて	
C.1	NIST の	)データベースへのアクセスについて ータベースの使い方	25 25
C.1	NIST $\sigma$ NIST $\bar{\tau}$ C.2.1	)データベースへのアクセスについて	25 25 25
C.1	NIST ON NIST OF C.2.1	Oデータベースへのアクセスについて	25 25
C.1 C.2	NIST 7 NIST 7 C.2.1 C.2.2 C.2.3	Oデータベースへのアクセスについて ータベースの使い方	25 25 25 26 27
C.1 C.2 <b>付録</b> D	NIST 7 C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot	Oデータベースへのアクセスについて 「ータベースの使い方	25 25 25 26 27
C.1 C.2 <b>付録 D</b> D.1	NIST の NIST ラ C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot 古いバー	Oデータベースへのアクセスについて 「ータベースの使い方	25 25 25 26 27 29
C.1 C.2 <b>付録 D</b> D.1 D.2	NIST の NIST デ C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot 古いバー	Oデータベースへのアクセスについて 「ータベースの使い方	25 25 25 26 27 29 30
C.1 C.2 <b>付録 D</b> D.1 D.2 D.3	NIST の NIST が C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot 古いバー バージョ バージョ	Oデータベースへのアクセスについて データベースの使い方  NIST データベース内でのリンクの辿り方  Si2p ピークの検索例  データベースのソート  のインストール方法と使い方  ージョンのアンインストール  コン 5.2.8 のダウンロード コン 5.2.8 のインストール	25 25 26 27 29 29 30 31
C.1 C.2 <b>付録 D</b> D.1 D.2	NIST の NIST の C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot 古いバー バージョ Gnuplo	のデータベースへのアクセスについて データベースの使い方 NIST データベース内でのリンクの辿り方 Si2p ピークの検索例 データベースのソート のインストール方法と使い方 ージョンのアンインストール コン 5.2.8 のダウンロード コン 5.2.8 のインストール t の使い方	25 25 26 27 29 30 31 33
C.1 C.2 <b>付録 D</b> D.1 D.2 D.3	NIST の NIST の C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot 古いバー バージョ Gnuplo D.4.1	0データベースへのアクセスについて 「ータベースの使い方 NIST データベース内でのリンクの辿り方 Si2p ピークの検索例 データベースのソート  のインストール方法と使い方 ージョンのアンインストール コン 5.2.8 のダウンロード コン 5.2.8 のインストール は の使い方 初歩的なグラフ描画	25 25 26 27 29 30 31 33
C.1 C.2 <b>付録 D</b> D.1 D.2 D.3	NIST の NIST の C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot 古いバー バージョ Gnuplo D.4.1	のデータベースへのアクセスについて データベースの使い方 NIST データベース内でのリンクの辿り方 Si2p ピークの検索例 データベースのソート のインストール方法と使い方 ージョンのアンインストール コン 5.2.8 のダウンロード コン 5.2.8 のインストール t の使い方 初歩的なグラフ描画 D.4.1.1. 二次元のグラフ	25 25 26 27 29 30 31 33 33
C.1 C.2 <b>付録 D</b> D.1 D.2 D.3	NIST の NIST の C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot 古いバー バージョ バージョ Gnuplor D.4.1	Dデータベースへのアクセスについて ニータベースの使い方 NIST データベース内でのリンクの辿り方 Si2p ピークの検索例 データベースのソート のインストール方法と使い方 ージョンのアンインストール コン 5.2.8 のダウンロード コン 5.2.8 のインストール t の使い方 初歩的なグラフ描画 D.4.1.1. 二次元のグラフ D.4.1.2. 三次元のグラフ	25 25 26 27 29 30 31 33 33 33
C.1 C.2 <b>付録 D</b> D.1 D.2 D.3	NIST の NIST の C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot 古いバー バージョ Gnuplot D.4.1	Dデータベースへのアクセスについて データベースの使い方 NIST データベース内でのリンクの辿り方 Si2p ピークの検索例 データベースのソート のインストール方法と使い方 ージョンのアンインストール コン 5.2.8 のダウンロード コン 5.2.8 のインストール は の使い方 初歩的なグラフ描画 D.4.1.1. 二次元のグラフ D.4.1.2. 三次元のグラフ パラメーターをコマンドで指定するグラフ描画	25 25 26 27 29 30 31 33 33
C.1 C.2 <b>付録 D</b> D.1 D.2 D.3	NIST の NIST の C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot 古いバー バージョ Gnuplo D.4.1	Dデータベースへのアクセスについて ボータベースの使い方 NIST データベース内でのリンクの辿り方 Si2p ピークの検索例 データベースのソート のインストール方法と使い方 ージョンのアンインストール コン 5.2.8 のダウンロード コン 5.2.8 のインストール t の使い方 初歩的なグラフ描画 D.4.1.1. 二次元のグラフ D.4.1.2. 三次元のグラフ パラメーターをコマンドで指定するグラフ描画 D.4.2.1. 二次元のグラフ	25 25 26 27 29 30 31 33 33 33
C.1 C.2 <b>付録</b> D D.1 D.2 D.3	NIST の NIST の C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot 古いバー バージョ Gnuplo D.4.1	Dデータベースへのアクセスについて ボータベースの使い方 NIST データベース内でのリンクの辿り方 Si2p ピークの検索例 データベースのソート のインストール方法と使い方 ージョンのアンインストール コン 5.2.8 のダウンロード コン 5.2.8 のインストール t の使い方 初歩的なグラフ描画 D.4.1.1. 二次元のグラフ ルチュン 5.2.8 でカウラフ パラメーターをコマンドで指定するグラフ描画 D.4.2.1. 二次元のグラフ	25 25 26 27 29 30 31 33 33 33 34
C.1 C.2 <b>付録 D</b> D.1 D.2 D.3	NIST の NIST の C.2.1 C.2.2 C.2.3 Gnuplot 古いバー バージョ Gnuplo D.4.1	Dデータベースへのアクセスについて ボータベースの使い方 NIST データベース内でのリンクの辿り方 Si2p ピークの検索例 データベースのソート のインストール方法と使い方 ージョンのアンインストール コン 5.2.8 のダウンロード コン 5.2.8 のインストール t の使い方 初歩的なグラフ描画 D.4.1.1. 二次元のグラフ D.4.1.2. 三次元のグラフ パラメーターをコマンドで指定するグラフ描画 D.4.2.1. 二次元のグラフ D.4.2.2. 三次元のグラフ	25 25 26 27 29 30 31 33 33 33 34 34

iv	目次

		D.4.3.1. csv ファイルへのエクスポート	35
		D.4.3.2. データファイルの加工	36
		D.4.3.3. Gnuplot 自動実行ファイル (gp ファイル) の作成と実行	38
	D.4.4	画像データのエクスポート	40
	D.4.5	まとめ	40
#31			41
糸り			41

# 図目次

0	MultiPak 初期ウィンドウ	i
1.1	ファイルセレクトウィンドウ	1
1.2	ナロウスペクトルの表示	2
1.3	デフォルトのバックグラウンド (a) を (b) のように修正する	2
1.4	Al,2s と 2p 両方のピークによる誤った定量結果	2
1.5	周期律表 (a) の「[1] Al」を [Shift] キーを押しながらクリックして表示された「Tran-	
	sition window $\downarrow$ (b)	3
1.6	C1s,O1s,Al2p ピークによる定量結果	3
1.7	C1s,O1s,Al2s ピークによる定量結果	3
1.8	カーブフィットの開始	4
1.9	カーブフィット, セットアップ画面	4
1.10	カーブフィット, バンドリミット設定画面	6
1.11	PET の分子構造 (Wikipedia より)	7
1.12	PET に対して取得したナロウスペクトル	7
1.13	PET に対する炭素 1s の光電子スペクトル	7
1.14	C1s スペクトルのカーブフィット	8
1.15	C1s スペクトルのピーク分離	8
1.16	スペクトルをエキスポート	8
1.17	C1s スペクトルの化学状態別組成比	8
1.18	C1s スペクトルの化学状態別組成比	9
1.19	O1s スペクトルのカーブフィット	9
1.20	O1s スペクトルのピーク分離	9
1.21	ファイル名指定ウィンドウ...................................	9
1.22	炭素と酸素の化学状態別組成比	10
1.23	炭素と酸素の化学状態別組成比	10
1.24	「MultiPak」読み込みファイル表示画面	10
1.25	フォルダー選択画面	10
1.26	PET の O1s, C1s スペクトルを読み込んだところ	11
1.27	4 つに分離された C1s スペクトル	11
1.28	ファイル名指定ウィンドウ...................................	11
1.29	エクセルで読み込み描画したスペクトル	11

vi 図目次

2.1	ファイルセレクトウィンドウ 13
2.1	スペクトルウィンドウとプロファイルウィンドウ
2.3	Si2p ナロウスペクトルの表示
2.4	「Tools」メニューから「Select Spectra サブメニュー」を選択したところ 14
2.5	スペクトル選択スクロールバーが表示されたところ
2.6	スペクトルを 1 つずつ表示したところ
2.7	「Tools メニュー」の「Montage Viwer」をクリックする
2.8	「Montage Viwer」の設定画面
2.9	スパッタリングを繰り返して取得したスペクトルが立体表示されます 16
3.1	ファイルタイプセレクトウィンドウ
3.2	ファイルオープンウィンドウ17
3.3	Spectrum ウィンドウと Map ウィンドウ。Si2p,単体シリコン単一ピークによるマッ
	ピング 18
3.4	$Si2p$ , $SiO_2$ 単一ピークによるマッピング
3.5	複数ピークによるマッピングデータを開いたところ
3.6	ふたつのピークから $\mathrm{SiO}_2$ ピークの範囲を設定したところ $\dots \dots 18$
3.7	抽出された $SiO_2$ マップ
3.8	ふたつのピークから単体 Si ピークの範囲を設定したところ 19
3.9	抽出された単体 Si マップ
3.10	範囲選択による $\mathrm{SiO}_2$ マップと単体 $\mathrm{Si}$ マップの抽出 $\dots \dots \dots$
3.11	選択範囲から抽出されたスペクトル
3.12	図 $3.10$ 「[3] Exit ボタン」をクリックしたところ
3.13	単体 Si マップの表示色を赤に変えたところ
3.14	$SiO_2$ と単体 $Si$ を色分けしたマップ $\ldots$ 20
A.1	- 帯電補正メニューの立ち上げ 21
A.2	帯電補正画面
B.1	化学結合状態同定メニューの立ち上げ
B.2	$SiO_2$ にアサインされた光電子ピーク $\dots \dots \dots$
B.3	p 型シリコンにアサインされた光電子ピーク 23
C.3	「Search Menu」をクリックする
C.4	「Retrieve Data for a Selected Element」をクリックする
C.1	Google で「XPS NIST」で検索する
C.2	第 1 候補でヒットした「NIST XPS Database」をクリックする
C.5	Binding Energy にチェックを入れて「Go to Step 2」をクリックする
C.6	周期律表の検索する元素記号をクリックする
C.7	検索する光電子ピークにチェックを入れて「Search」をクリックする
C.8	データベースに登録されている単体 Si の光電子ピーク。右の「Click」をクリックする
J.0	と文献が表示される

C.9	下の赤いフレーム内に論文の著者と雑誌名が表示される	27
C.10	データベースに登録されている $\mathrm{SiO}_2$ の光電子ピーク。右の $[\mathrm{Click}]$ をクリックすると	07
~	文献が表示される	27
C.11	下の赤いフレーム内に論文の著者と雑誌名が表示される	27
C.12	データベースのソート	27
D.1	Windows 画面左下の「スタートボタン」をクリック。下から 2 番目の「設定」をク リック	29
D.2	「設定一覧」から「アプリ」をクリック	29
D.3	古いバージョンの gnuplot をクリック	29
D.4	(a) で「アンインストール」をクリックすると, (b) が開くので「アンインストール」	
	をクリック	30
D.5	確認メッセージが表示されるので「はい」をクリック	30
D.6	正常に除されたことを示すメッセージ。「OK」をクリック	30
D.7	Google で「Gnuplot Homepage」と入力	30
D.8	第1候補の「Gnuplot Homepage」をクリック	30
D.9	Version 5.2 (prerevious stable) の「Release 5.2.8 (Dec 2019)」をクリック	30
D.10	「 $gp528$ -win $64$ -mingw.exe」をクリック $\dots$	30
D.11	「 ${ m gp}528 ext{-win}64 ext{-mingw.exe}$ 」のダウンロードが終了するとブラウザーに右上に表示さ	
	れる	31
D.12	「 $\mathrm{gp}528 ext{-win}64 ext{-mingw.exe}$ 」は、パソコンの「ダウンロード」のフィルダーにある	31
D.13	セキュリティーの警告が出るが「はい」をクリックして続行	31
D.14	言語選択は日本語になっているのでそのまま「OK」をクリック	31
D.15	使用許諾契約書で「同意書」にチェックを入れて「次へ $(N)>$ 」をクリック $\dots$	31
D.16	情報ウィンドウが表示されたら「次へ $(N)>$ 」をクリック $\dots$	31
D.17	インストールの設定ウィンドウが表示されたら「次へ (N)>」をクリック	31
D.18	コンポーネントの選択ウィンドウが表示されたら「次へ $(N)>$ 」をクリック $\ldots$	32
D.19	グループ設定ウィンドウが表示されたら「次へ $(N)>$ 」をクリック $\ldots$	32
D.20	追加タスクの選択ウィンドウが表示されたら「デスクトップ上にアイコンを作成」に	
	チェックを入れ「次へ $(N)$ >」をクリック $\ldots$	32
D.21	追加タスクの選択ウィンドウが表示されたら「次へ $(N)>$ 」をクリック $\dots$	32
D.22	インストールの準備完了ウィンドウが表示されたら「インストール」をクリック	32
D.23	インストール中に表示されるウィンドウ	32
D.24	情報ウィンドウが表示されたら「次へ $(N)>$ 」をクリック $\dots$	33
D.25	セットアップ完了メッセージ	33
D.26	デスクトップ上に作成されたアイコン	33
D.27	アイコンをダブルクリックして開く画面	33
D.28	$\lceil y = x^2 \sin x$ 」のグラフをプロットしたところ	33
D.29	二次元の正規分布曲線「 $z=\exp[-(x^2+y^2)/10]$ 」のグラフをプロットしたところ	33
D.30	$x$ のレンジを $-20 \sim 20$ に設定する「set xrane [-20:20]」とタイプしてから「 $y=$	
	$x^2 \sin x$ 」のグラフをプロットしたところ	34

viii 図目次

D.31	「set isosamples $50,50$ 」とタイプしてから「 $z=\exp[-(x^2+y^2)/10]$ 」のグラフをプ	
	ロットしたところ	34
D.32	「 $ m set\ hidden 3d$ 」のコマンドを入力してから,「 $ m z=exp[-(x^2+y^2)/10]$ 」のグラフを	
	プロットし直したところ	34
D.33	線の色と太さを指定をして「 $z=\exp[-(x^2+y^2)/10]$ 」のグラフをプロットしたところ	34
D.34	「Montage viewer」表示した,スパッタリングを繰り返して測定された光電子スペク	
	トル	35
D.35	「File」「Export To」「ASCII」を順にクリックして,光電子スペクトルを ASCII 形	
	式で保存する	35
D.36	エクセルで取り込める「 $\operatorname{csv}$ 」の拡張子で $\operatorname{ASCII}$ データを保存する $\ldots$	36
D.37	「Si_SiO2_2021_07_25_XPS.csv」をダブルクリックして開いたところ	36
D.38	すべての列の幅を 11 桁にする	36
D.39	すべての列に対して小数点以下の桁を 4 にする	36
D.40	データ加工後のエクセルファイル	36
D.41	加工後のエクセルファイルを「 $pm$ 」の拡張子で保存。拡張子を「 $dat$ 」に変える	37
D.42	「Si_SiO2_2021_07_25_XPS.dat」の中身	37
D.43	「Si_SiO2_2021_07_25_XPS_00.gp」の中身	37
D.44	「Si_SiO2_2021_07_25_XPS_00.gp」をダブルクリックすることにより, 描画されたグ	
	ラフ	38
D.45	ファイル名の変更	38
D.46	(a) gp ファイルをダブルクリックして表示された (b) グラフ	38
D.47	$3$ 次元グラフ描画のためのデータファイル $\dots$	38
D.48	${ m gp}$ ファイルダブルクリックして描画された $3$ 次元グラフ $\ldots$	39
D.49	$3$ 次元グラフの画像ファイルへのエクスポート $\dots$	39
D.50	gp ファイルダブルクリックして描画された 3 次元グラフ	40

### 第1章

## 光電子スペクトルの解析

#### 1.1 光電子スペクトルの解析

#### 1.1.1 スペクトルデータの読み込み

表紙,図0左上「[1]Open ボタン」をクリックすると,図1.1が表示される。

最初に図 1.1 左下の「[3] Browse ボタン」をクリックすると、右の「[5] Folder Select ウィンドウ」が開く。フォルダーを選択して「[6] OK ボタン」をクリックすると、左の「[2] List Files of Type: プルダウンメニュー」で選択した種類のファイルが、図 1.1 左上の「[1] File Name ボックス」に表示される。スペクトルデータを指定するには、図 1.1 左,「[2] List Files of Type: プルダウンメニュー」で「\*.spe」を選択する。 そのほか「\*.pro」(スパッタリングデータ)、「\*.lin」

(ラインプロファイルデータ)、「\*.map」(マッピングデータ) などを選択できる。 左上「[1] File Name ボックス」でファイルを選択し ([Shift] または [Ctrl] キーを押すと複数選択できる)、下の「[4] OK ボタン」をクリックするとファイルを開くことができる。

下の「[7] Spectrum Display ラジオボタン」ではスペクトル表示,右下「[8] Profile Display ラジオボタン」ではプロファイル表示のモードを選択できる。プロファイル表示は,スパッタリングによる深さ方向の元素組成分布などのグラフを表示するウィンドウである。「New」を選択すると新しいウィンドウに表示し,「Replace」を選択すると,表示されているデータを消去して新し

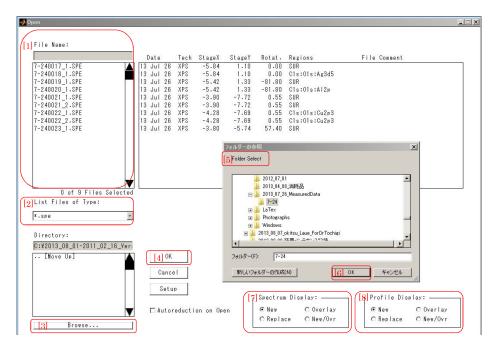


図 1.1 ファイルセレクトウィンドウ

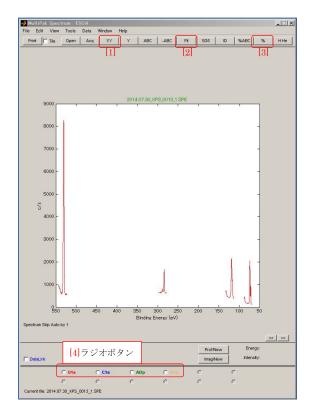


図 1.2 ナロウスペクトルの表示

いウィンドウに表示する。「Overlay」を選択する と、新しいデータを表示されているデータと重ね て表示し、「New/Ovr」を選択すると、新しく開 く複数のデータを重ねて表示する。

#### 1.1.2 ワイドスキャンスペクトルデータのピー クアサイン

ワイドスキャン (Survey scan) のデータを読み 込んだあと、表紙、図 0 上の「[4] ID ボタン」をク リックすると、スペクトルのピークを自動アサイ ンすることができる。「[4] ID ボタン」のクリッ クだけではアサインされなかった O2s のピーク は、表紙、図 0 右「[8] 周期律表ウィンドウ」の 「O」のボタンを 2 度クリックすることにより、ア サインされる。一般に既にピークがアサインされ ている元素のボタンを 2 度クリックすると、「[4] ID ボタン」のクリックだけではアサインされな かった同じ元素の別のピークが表示される。

上の方法を実行してもアサインされないピークがある場合は、まずピーク付近を左右に左クリック&ドラッグして拡大する。拡大されたピークを左右に右クリック&ドラッグすると、ピークの候

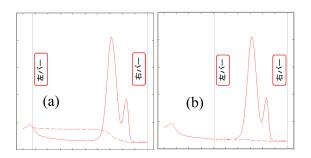


図 1.3 デフォルトのバックグラウンド (a) を (b) のように修正する

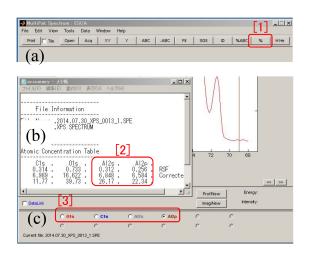


図 1.4 Al,2s と 2p 両方のピークによる誤った 定量結果

補が次々に表示されるので、その中から確からしいピークを選択する。その後、その元素のボタンを2度クリックすると、別のピーク位置が表示される。

#### 1.1.3 ナロウスペクトルによる元素の定量

図 1.2 は測定されたナロウスペクトル (ピーク 近傍の高分解能スペクトル) のファイルを開いた ところである。

図 1.2 下 [4] ラジオボタン」にチェックを入れると,指定されたピーク近傍を図 1.3 のように拡大表示できる。チェックを外すと,元の表示に戻る。また,図 1.2 上の「[1] XY ボタン」をクリックして元のスケールに戻すこともできる。

元素の定量は,図 1.2 上の「[3] % ボタン」を クリックすることにより行えるのだが,その前 に図 1.3 に示すように,赤い破線で示されるバッ クグラウンドを調整する必要がある。図 1.3 (a)

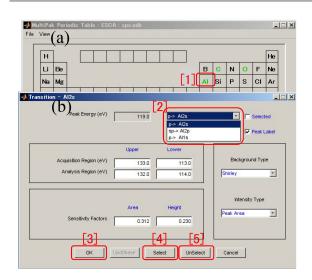


図 1.5 周期律表 (a) の「[1] Al」を [Shift] キーを押しながらクリックして表示された「Transition window」(b)

ではバックグラウンドより低い部分がマイナス の値として積分されてしまうので,「左バー」を クリック&ドラックして図 1.3 (b) のように修正 する。必要ならば右バーの位置も変える。これを すべてのピークに対して施した後、図 1.4 (a) 右 上「[1] % ボタン」のクリックにより行った定量 結果が,図 1.4 (b) である。Al に対しては Al2p と Al2s の両方のピークが測定されているため、 図 1.4 (c) 「[3] ラジオボタン」は Al2p と Al2s の両方に対して表示されている。MultiPak は, 測定されたすべてのピークに対して積分強度を Corrected RSF(装置固有のパラメーターとパス エネルギーの値によって修正された感度因子)で 割り算することにより定量結果を計算する。こ のため、図 1.4 (b) 「[2]」では、Al のモル分率 (%) が Al2p と Al2s について重複されて計算さ れている。これを避けるためには、以下のように する。

図 1.5 (a) 周期律表ウィンドウで,[Shift] キーを押しながら「[1] Al」をクリックすると,図 1.5 (b) が表示される。「[2] プルダウンメニュー」で「p-> Al2s」を選択したあと「[5] Unselect」「[3] OK」の順にクリックすると図 1.6 (c) 下の「[3] ラジオボタン」では,Al2s は表示されなくなる。図 1.3 のように各ピークについてバックグラウン

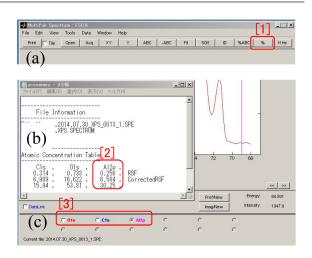


図 1.6 C1s,O1s,Al2p ピークによる定量結果

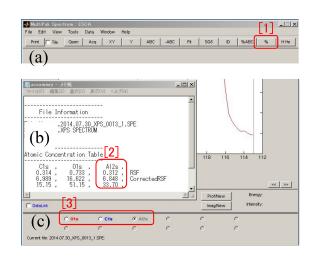


図 1.7 C1s,O1s,Al2s ピークによる定量結果

ドを修正したあと,図 1.6 (a) 右の「[1] % ボタン」をクリックすると,図 1.6 (b)「[2]」のように Al2p の積分強度だけを用いた定量結果が計算され表示される。

このあと Al2s の積分強度だけを用いた定量を行うには、以下のようにする。図 1.5 (b) 「[2] プルダウンメニュー」で、まず「p-> Al2s」を選択したあと「[4] Select」をクリックする。次に「sp-> Al2p」を選択したあと「[5] Unselect」「[3] OK」の順にクリックすると、図 1.7(c) 「[3] ラジオボタン」には Al2s だけが表示されるようになる。図 1.3 のように各ピークについてバックグラウンドを修正したあと、図 1.7(a) 右「[1] % ボタン」をクリックすると、図 1.7(b) 「[2]」のように Al2s の積分強度だけを用いた定量結果が計算され表示

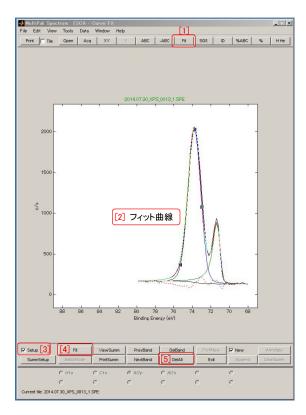


図 1.8 カーブフィットの開始

される。

#### 1.1.4 ピーク分離の開始

ピーク分離のプロセスは、かなり煩雑である。 とりあえず、以下の手順でトライするとよい。図 1.8 のようにふたつのピークの合成であらわされ ると思われるスペクトルを、なるべく合理的、定 量的に二つの成分に分けることを目的とし、図 1.9 「[7] Area」の値の比が、その成分比になる。 モル分率 (%) で表示させるには、§1.2 [p.7] の記 述を参照。図 1.9 左上「[2] ChiSquared」の値が 1 に近づくほど、残差が小さくなったことを意味 する。勘と経験にかなり支配される作業である。

#### 1.1.4.1 Fit ボタンのクリック

図 1.8 上の「[1] Fit ボタン」をクリックすると,図 1.9 が表示される。図 1.8 中央に「[2] フィット曲線」が既に表示されるようであれば,下の「[5] Del All ボタン」をクリックして一旦これを消す。

#### 1.1.4.2 バックグラウンドの調整

図 1.8 左下「[3] Setup」からチェックを外すと、図 1.3 [p.2] のようにスペクトルが表示されるの

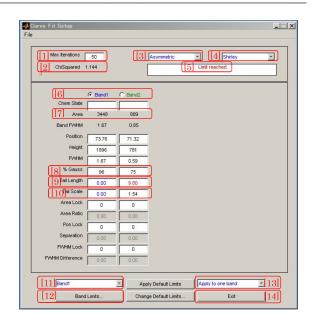


図 1.9 カーブフィット, セットアップ画面

で「[1] 左バー」,「[2] 右バー」をクリック&ドラッグして,赤い破線で表示されるバックグラウンドを調整する。

#### 1.1.4.3 フィット曲線の作成

図 1.8 左下「[3] Setup」にチェックを入れ、スペクトルのピークと思しき部分 (この場合は 2 箇所) を右クリックする。

#### 1.1.4.4 フィット曲線の調整

図 1.8 中央「[2] フィット曲線」に表示される四 角いマークをクリック&ドラッグして、フィット 曲線の高さと幅を調整する。四角いマークが表示 されたフィット曲線に現在フォーカスがあるのだ が,これは,図1.9「[6] ラジオボタン」および左 下の「[11] プルダウンメニュー」と連動する。右 のフィット曲線にフォーカスを移すには、図1.8 フィット曲線をクリックする、図 1.9 「[6] ラジオ ボタン」のチェックを付け替える,図 1.9 左下の 「[11] プルダウンメニュー」の選択を変更する, の いずれの手段でも行える。図 1.8 中央「[2] フィッ ト曲線」の下に表示される赤い破線は、測定され たスペクトルとフィット曲線を重ね合わせたスペ クトルの残差である。これをなるべく小さくする ように、2つのフィット曲線の高さと幅を、まず 手作業で調整する。

#### 1.1.4.5 最小二乗フィットの実行

図 1.8 左下「[4] Fit ボタン」をクリックすると,最小二乗フィットが行われ,結果が図 1.9 に表示される。

#### 1.1.5 ピーク分離の最適化

図 1.9 左上「[1] Max Iterations ボックス」に は図 1.8 左下「4 Fit ボタン」を 1 度クリックした とき、最大何回の最小二乗フィットをかけるかを 設定できる。図 1.9 左上「[2] ChiSquared」の値を 1に近づけることを目標に、最小二乗フィットを 行う。求めようとする量は、図 1.9 「[7] Area」の 比率である。モル分率 (%) でを表示させるには、 §1.2 [p.7] の記述を参照。図 1.9 上「[3] プルダウ ンメニュー」では、「Gauss」(ガウス曲線でフィッ トを行う),「Gauss-Lorentz」(ガウス曲線とロー レンツ曲線でフィットを行う), 「Asymmetric」 (ガウス曲線とローレンツ曲線に左右非対称パ ラメータを考慮してフィットを行う)の3通り から選択できる。図 1.9 右上「[4] プルダウンメ ニュー」では、バックグラウンドの差し引き方を 選択することができる。「Shirley」が選択されて おり、これまたは「IteratedShirley」が一般的に 推奨される。

#### 1.1.5.1 ガウシアンでのフィット

図 1.9 上「[3] プルダウンメニュー」で「Gauss」を選択するとガウシアンのみでカーブフィットが行われる。

ガウシアンは、いわゆる正規分布曲線で、釣り 鐘のような形状をしている。正規分布は、測定誤 差の分布を与える関数であり、左右対称な測定曲 線の分布が「測定誤差」であると解釈する場合に は、最もシンプルでわかりやすいフィッティング 法である。図 1.9 中央「[8] % Gauss」、「[9] Tail Length」、「[10] Tail Scale」の 3 つの項目はグ レー表示になり、フィッティングパラメーターに は含まれない。

# 1.1.5.2 ガウシアンとローレンツィアンでのフィット

図 1.9 上「[3] プルダウンメニュー」で「Gauss-Lorentz」を選択するとガウシアンとローレンツィアンによるカーブフィットが行われる。

ローレンツィアンは、ガウシアンよりピークの 先端が尖った曲線である。左右対称のスペクト ルが得られたときに、ガウシアン単独よりもガウ シアンとローレンツィアンの配合比、図 1.9 中央 「[8] % Gauss」)をフィッティングパラメーター に含めた方が残差が少なくなることが、経験的 に知られている。図 1.9 中央「[9] Tail Length」、 「[10] Tail Scale」はグレー表示となり、フィッ ティングパラメーターには含まれない。

#### 1.1.5.3 非対称フィット

図 1.9上「[3] プルダウンメニュー」で「Asymmetric」を選択するとガウシアンとローレンツィアンを配合しスペクトルの非対称性をも考慮したカーブフィットが行われる。

絶縁体に対しては光電子ピークの形状はほぼ左 右対称ですが、金属の試料に対するピークは、多 くの場合、左側にテールを引く。これは、光電子 が飛び出してくる過程で自由電子に運動エネル ギーを奪われるためだと考えられている。

自由電子は、小さな電場によって容易に加速され得る電子である。フェルミエネルギー (熱的平衡による充填率が 1/2 のエネルギー) がエネルギー準位のバンドの中に存在することにより、金属は高い電気伝導度を示す。これに対して絶縁体は、エネルギー準位が存在しない(電子に対するシュレンディンガー方程式が解を持たない)禁制帯の中にフェルミエネルギーがあり、価電子帯にある電子は、バンドギャップを超える大きなエネルギーしか受け取ることができない。試料内部から試料表面まで飛行する光電子から無限小のエネルギーを奪いうる自由電子が、金属には無数にあり、絶縁体にはほとんどなく、半導体はその中間である。

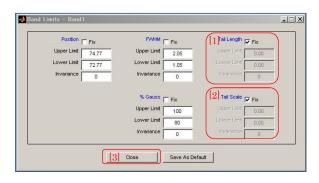


図 1.10 カーブフィット, バンドリミット設定画面

上の事情によるスペクトルの非対称性を考慮し、金属に対して、左側のテールの横方向の長さ、図 1.9 中央 [p.4] 「[9] Tail Length」と高さ「[10] Tail Scale」をフィッティングパラメーターに含めるのが、非対称フィットである。

ちなみに、この冊子の表紙、図0のスペクトルは酸化皮膜で覆われたシリコンウェハーに対して測定されたものだが、O1sの左側に「[12] ロスピーク」が観察される。 $SiO_2$  は絶縁体であり、価電子帯と伝導体の間にバンドギャップがある。絶縁体の場合、試料表面から深いところから飛び出した光電子は、バンドギャップ以上のエネルギーであれば、受け取ることができる。そのため、表紙、図0に示した「[12] ロスピーク」が、バンドギャップの値に応じて、左側に観察されることになる。

ただし、ロスピークの有無で、導体か絶縁体をはっきり区別できるわけではない。試料が金属であっても、半導体であっても、ロスピークが観察される場合がある。試料表面から2~3 nm 以内の深さにある原子から飛び出した光電子は、メインピークとして観測される。光電子を放出する原子が、試料のごく表面にしか存在しない場合、メインピークのみしか観測されない。光電子を励起する X線は、サンプル表面からミクロンオーダーまで浸透するするので、深いところからも光電子は放出される。しかし、試料表面に到達するまでに、試料内の電子に運動エネルギーを奪われることになる。表紙の図0に見られる鋭いメインピークの左側(高エネエルギー側)に、スペクトルの

持ち上がりが観測されるが、これは深いところから放出された光電子によるものである。試料表面に到達するまでに、試料中電子のエネルギー分布と状態密度に依存して、光電子が失い得るエネルギーに確率分布が生じることになり、これが最大になったところにロスピークが観測される。

図 1.8 [p.4] は、表面に酸化膜を持つアルミニウ ムに対して測定された光電子スペクトルである。 左側のピーク (Band1) は  $Al_2O_3$  のピークで,右 側のピーク (Band2) は酸化していないアルミニ ウムによるピークである。Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> は絶縁体なの で、光電子が自由電子に運動エネルギーを奪われ ることがないと考え、図 1.9 [p.4] 中央「[9] Tail Length」,「[10] Tail Scale」をゼロに設定する縛 りをかけてある。こういう設定をする場合には、 これらの値にゼロを入力し, 図 1.9 [p.4] 右下「[13] プルダウンメニュー」で「Apply to one band」を 選択した上で 図 1.9 [p.4] 左下 [12] Band Limits ボタン」をクリックして、図 1.10 を表示させる。 図 1.10 「[1] Tail Length Fix」, 「[2] Tail Scale Fix」にチェックを入れ、「[3] Close ボタン」を クリックする。図 1.8 [p.4] 左下「[4] Fit」をク リックすると、図 1.9 [p.4] で Band1 の「[9] Tail Length」と「[10] Tail Scale」の値 (0.0) が青い 数字で表示される。

図 1.9 [p.4] では、右上に「[5] Limit reached」 の文字が赤く表示さている。 これは, この値が 図 1.10 で設定されている「Upper Limit」ない しは「Lower Limit」に達してしまい、最小二乗 フィットが止まってしまったことを意味する。図 1.8 [p.4] では, 2 つのピークの谷間の部分で, 黒い 実線で表示された測定スペクトルと2つのフィッ ト曲線の和をとった赤い曲線との間にズレが見 られる。ところが、Band2の「[10] Tail Length」 が Limit の値に達してしまい、これ以上の最小二 乗フィットができなかったのである。図 1.9 [p.4] 右下「[13]」プルダウンメニューで「Apply to one band」を選択した上で、左下「[11] プルダウンメ ニュー」で「Band2」を選択する。この状態で、 左下の「[12] Band Limits ボタン」をクリックし て,図1.10を表示させ,「Tail Length」のLimit

$$\begin{array}{c|c}
O^{[6]} & O^{[6]} \\
\hline
O_{[5]} & O^{[6]} \\
\hline
O_{[5]} & (CH_2)_2 \\
n
\end{array}$$

図 1.11 PET の分子構造 (Wikipedia より)

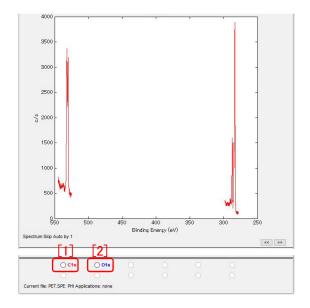


図 1.12 PET に対して取得したナロウスペクトル

の値を変更する。図 1.10 「[3] Close ボタン」を クリックしてから図 1.8 [p.4] 左下「[4] Fit ボタン」をクリックすると,さらに最小二乗フィット を行うことができる。

うまくいかない場合は,図 1.9 [p.4] 右下「[14] Exit ボタン」をクリックして,やり直す。

#### 1.1.6 帯電補正

PHI5000 VersaProbe では、帯電補正は通常必要ではないのだが、これを行う場合は、付録 A [p.21] を参照。

#### 1.1.7 化学結合状態の同定

スペクトルのピーク位置から化学結合状態を同定するには、付録 B [p.23] を参照。また、付録 C [p.25] の記述を参照して、NIST のデータベースを活用することも検討するのがよい。

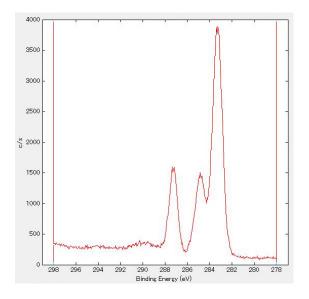


図 1.13 PET に対する炭素 1s の光電子スペクトル

#### 1.2 複数元素の化学状態の定量

#### 1.2.1 PET(ポリエチレンテレフタラート) につ いて

ポリエチレンテレフタラート (PET) は、ペットボトルなどの材料として広く用いられている。 分子の構造は図 1.11 に示されるとおりである。

「[2] 酸素と二重結合したカルボニル基の炭素」,「[3] メチレン基の炭素」,「[4] ベンゼン環の炭素」,「[5] 二つの炭素と結合した酸素」,「[6] 炭素と二重結合したカルボニル基の酸素」が,図 1.11 から,2:2:6:2:2 の比率で含まれていることがわかる。

#### 1.2.2 光電子スペクトルの読み込み

図 1.12 は、PET に対して得られた C1s と O1s の光電子スペクトルを MultiPak で開いたところです。左下「[1]C1s」ラジオボタンのクリックで、図 1.13 の C1s スペクトルを拡大表示させることができる。

#### 1.2.3 炭素 1s スペクトルのピーク分離と定量

図 1.14 [p.8] は、C1s スペクトルのピーク分離を行う画面である。図 1.14 [p.8] 上の「Fit」のクリックと同時に図 1.15 [p.8] の画面が表示され、 $\S1.1.4$  [p.4] の記述にしたがってカーブフィットを行うことができる。

これが終了してから図 1.15 [p.8] 左上「File」

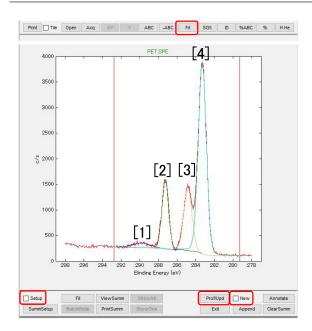


図 1.14 C1s スペクトルのカーブフィット

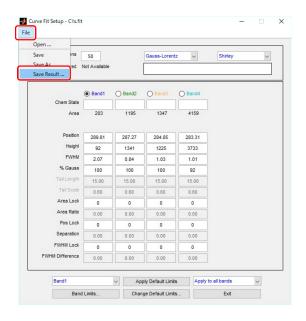


図 1.15 C1s スペクトルのピーク分離

を開き「Save Result...」をクリックすると,図 1.16 が表示される。保存するフォルダーを選択し「PET\_C1s」のファイル名で,右下「保存 (S)」をクリックする。図 1.24 [p.10] 「[1]」の赤枠内「[C1s]」に示す 7 つのファイルが,別々に保存される。これ以降の操作については  $\S1.3$  [p.10] を参照。

図 1.14 左下「Setup」をアンチェック、右下「New」をアンチェックしたあと、その左にある



図 1.16 スペクトルをエキスポート

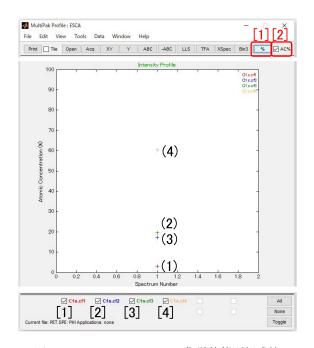


図 1.17 C1s スペクトルの化学状態別組成比

「Prof/New」または「Prof/Upd」をクリックすると、図 1.17 が表示される。

図 1.17 下の「[1], [2], [3], [4]」にチェックが入り,かつ右上「[2] AC%」がチェックされていると,図 1.11 [p.7] および図 1.14 「[1], [2], [3], [4]」に対応する元素の組成が,図 1.17 のグラフ領域に「(1), (2), (3), (4)」の「+ マーク」で示される。ただし「[1]」は, $\pi$ - $\pi$ \* 遷移に由来するものであり,図 1.11 [p.7] に,対応する原子はない。

図 1.17 右上「[2] AC%」にチェックを入れて、その左の「[1] %」をクリックすると、ウィンドウズの「メモ帳」が開き、図 1.18 が表示される。「[1], [2], [3], [4]」の下段に表示されているのは、化学結合状態のモル分率 (%) である。図 1.18 右の赤枠内「RSF」は、フッ素 1s の感度を 1 とした

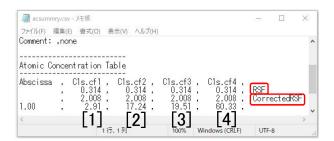


図 1.18 C1s スペクトルの化学状態別組成比

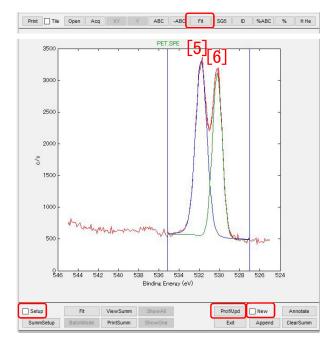


図 1.19 O1s スペクトルのカーブフィット

ときの相対感度因子、「Corrected RSF」は、装置関数と パスエネルギーで補正された感度因子である。ただし感度因子は化学結合状態にまでは依存しないと考えられており、すべてのピークに対して同じ値である。モル分率 (%) は、図 1.14のようにフィッティングされたカーブの積分強度を、「Corrected RSF」で割り算して、合計が100%になるように計算されている。

#### 1.2.4 酸素 1s スペクトルのピーク分離と定量の 追加

図 1.12 [p.7] 左下「[2] O1s」ラジオボタンをクリックすると、図 1.19 のように、O1s スペクトルのピーク分離を行う画面が開く。図 1.19 上の「Fit」のクリックと同時に、図 1.20 の画面が表示され、 $\S1.1.4$  [p.4] の記述にしたがってカーブ

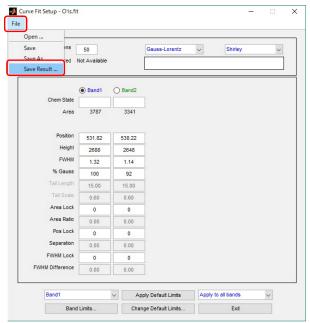


図 1.20 Ols スペクトルのピーク分離



図 1.21 ファイル名指定ウィンドウ

フィットを行うことができる。

これが終了してから図 1.20 左上「File」を開き「Save Result...」をクリックすると,図 1.21 が表示される。保存するフォルダーを選択し「PET\_O1s」のファイル名で,右下「保存 (S)」をクリックする。図 1.24 「[1]」の赤枠内「[O1s]」に示す 5 つのファイルが別々に保存される。これ以降の操作については §1.3 [p.10] を参照。

炭素 1s の場合と同様に、図 1.19 左下「Setup」をアンチェック、右下「New」をアンチェックしたあと、その左にある「Prof/Upd」をクリックすると、図 1.22 が表示される。

図 1.22 左下「[1]」のチェックボックスをアン

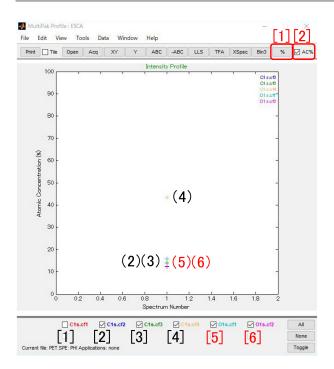


図 1.22 炭素と酸素の化学状態別組成比



図 1.23 炭素と酸素の化学状態別組成比

チェックしてあるが、これは  $\pi$ - $\pi$ \* 遷移に由来するもので、対応する原子が特定できないためである。

図 1.22 右上「(2) AC%」にチェックが入っていると、グラフ領域には「(2)、(3)、(4)」および「(5)、(6)」の「+マーク」が表示され、炭素と酸素の化学結合状態別の組成比が表示される。「(2)、(3)、(5)、(6)」と「(4)」の比率が、ほぼ 1:3で、図 1.11 [p.7] の分子モデル通りであることが分かる。ここで、図 1.22 右上「[1] %」をクリックすると、図 1.23 が表示される。図 1.23 下の「[2]、[3]、[4]」、「[5]、[6]」は、図 1.11 [p.7]、図 1.14 [p.8]、および図 1.19 [p.9] の「[2]、[3]、[4]」の炭素、「[5]、[6]」の酸素、のモル分率(%)を表示している。

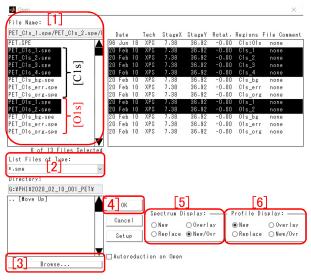


図 1.24 「MultiPak」読み込みファイル表示画面

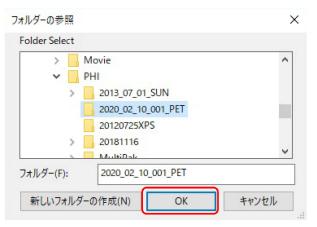


図 1.25 フォルダー選択画面

# 1.3 フィッティングカーブの読み込み と描画

# 1.3.1 分離されたフィッティングカーブの 'Mul-tiPak' で読み込み

表紙の図 0 左上「[1] Open」をクリックすると図 1.24 が表示される。「[2]」の赤枠内で「\*.spe」の拡張子を選択し、左下「[3] Browse」をクリックすると図 1.25 が表示される。ここで、図 1.16 [p.8]、図 1.21 [p.9] の左上で指定したのと同じフォルダーを選択して、図 1.25 「OK」をクリックすると、図 1.24 「[1]」の赤枠内に、ファイル名が表示される。「[C1s]」の 7 つのファイルは、図 1.14 [p.8] 「[1], [2], [3], [4]」に対応する分離さ

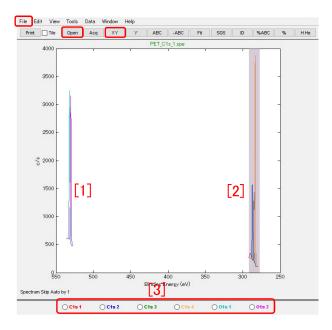


図 1.26 PET の O1s, C1s スペクトルを読み 込んだところ

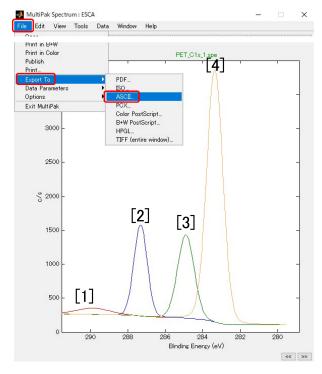


図 1.27 4 つに分離された C1s スペクトル

れたスペクトルと、バックグラウンド ( $_{\text{bg.spe}}$ ),残差 ( $_{\text{err.spe}}$ ) および測定されたままのスペクトル ( $_{\text{org.spe}}$ ) のデータファイルである。

図 1.24 中央下「[5]」の赤枠内で「New/Ovr」にチェックを入れ,「[4] OK」をクリックすると,



図 1.28 ファイル名指定ウィンドウ

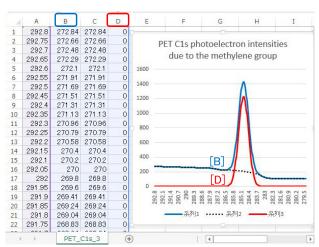


図 1.29 エクセルで読み込み描画したスペクトル

図 1.26 が表示される。「[3]」のラジオボタンに チェックを入れると、ひとつのスペクトルだけが 表示され、もう一度同じラジオボタンをクリック するともとの表示に戻る。

「[1]」にはピーク分離された O1s スペクトルが,「[2]」にはピーク分離された C1s スペクトルが表示されている。「[2]」の近傍を水平にクリック&ドラッグすると,C1s スペクトルが図 1.27 のように拡大表示される。

# 1.3.2 分離されたフィッティングカーブのアスキー形式でのエキスポート

図 1.27 左上「File」を開き「Export To」を選択し「ASCII」をクリックすると,図 1.28 が表示される。ファイル名を「PET\_C1s\_1234.csv」と指定し,右の「保存 (S)」をクリックするとエクセルで読み込めるデータが,この名前で保存される。

# 1.3.3 分離されたフィッティングカーブのエク セルでの読み込みと描画

保存したファイルをダブルクリックして開いたのが、図 1.29 [p.11] である。図 1.29 [p.11] 左の [A], [B], [C], [D] のカラムは,「[A]: バインディングエネルギー (eV)」「[B]: 図 1.27 [3] のカーブ」

「[C]: バックグラウンド」「[D]: [B]-[C]」である。図 1.27 [p.11] 「[3]」のカーブは,ガウス曲線とローレンツ曲線で対称フィットされたままの曲線ではなく,バックグラウンドとフィッティング曲線の和であることに注意を要する。

### 第2章

# スパッタリングデータの解析

#### 2.1 スパッタリングデータの解析

#### 2.1.1 スパッタリングデータの読み込み

表紙、図 0 上の「[1] Open ボタン」(図 2.1 左上の「[1] Open ボタン」) をクリックすると、図 2.1 が表示される。

最初に図 2.1 左下の「[5] Browse ボタン」をクリックすると「[4] Folder Select ウィンドウ」が開く。フォルダーを選択して「[6] OK ボタン」をクリックすると「[3] List Files of Type: プルダウンメニュー」で選択した種類のファイルが,図 2.1 左上の「[2] File Name ボックス」に表示される。スパッタリングデータを指定するには,図 2.1 左,

「[3] List Files of Type: プルダウンメニュー」で「\*.pro」を選択する。「[2] File Name ボックス」でファイルを選択し ([Shift] または [Ctrl] キーを押すと複数選択できる)、「[6] OK ボタン」をクリックするとファイルを開くことができる。

図 2.1 「[7] Spectrum Display ラジオボタン」ではスペクトル表示ウィンドウ (図 2.2[p.14] 左)を開くときの,図 2.1 「[8] Profile Display ラジオボタン」ではプロファイル表示ウィンドウ (図 2.2[p.14] 右)を開くときの,モードを選択できる。プロファイル表示ウィンドウは,スパッタリングによる深さ方向の元素組成分布のグラフを表示するウィンドウである。「New」を選択すると

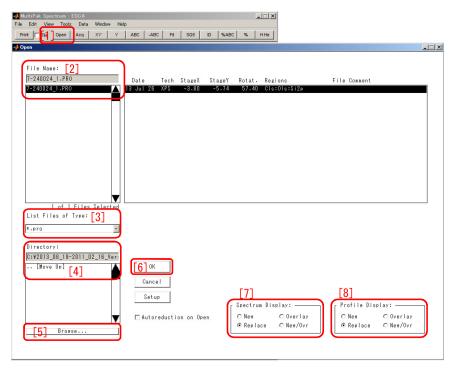


図 2.1 ファイルセレクトウィンドウ

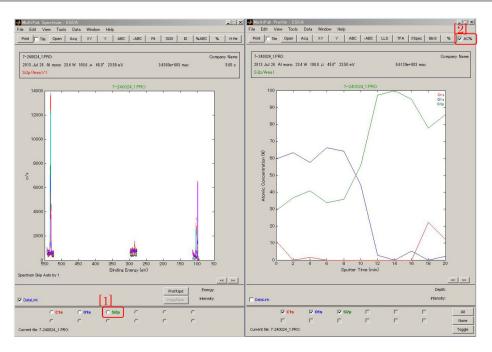


図 2.2 スペクトルウィンドウとプロファイルウィンドウ

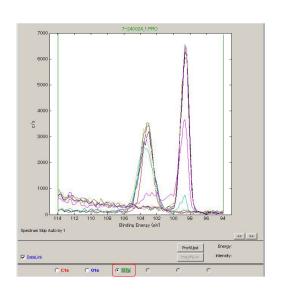


図 2.3 Si2p ナロウスペクトルの表示

新しいウィンドウに表示し、「Replace」を選択すると、表示されているデータを消去して新しいウィンドウに表示する。「Overlay」を選択すると新しいデータを表示されているデータと重ねて表示し、「New/Ovr」を選択すると新しく開く複数のデータを重ねて表示する。

図 2.2 左下の「[1] Si2p ラジオボタン」にチェックを入れると,図 2.3 のようにスパッタリングを繰り返して得られた Si2p スペクトルが拡大表示

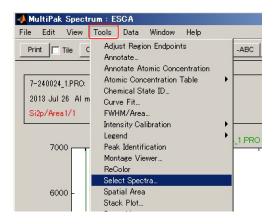


図 2.4 「Tools」メニューから「Select Spectra サブメニュー」を選択したところ

される。図 2.2 右上の「AC% チェックボックス」にチェックを入れると 図 2.2 右の縦軸を元素組成 (%) に切り替えることができる。チェックを外した状態では、縦軸はスペクトルの積分強度である。

#### 2.1.2 ナロウスペクトルの選択表示

図 2.3 ではスパッタリングを繰り返して得られたスペクトルが重ねて表示されているが,個々のスペクトルを表示させるには,図 2.4 のように「Tools メニュー」から「Select Spectra サブメニュー」を選択する。「Select Spectra」をク

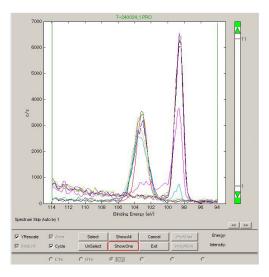


図 2.5 スペクトル選択スクロールバーが表示 されたところ

リックすると,図 2.5 のようにスペクトルの右側 にスクロールバーが表示される。

図 2.5下の「Select One ボタン」をクリックし、図 2.6 のようにスクロールバー上の赤枠で囲ったスライダーを上下にスクロールするか、スクロールバーの上または下の緑の三角形をクリックすることにより、スペクトルを 1 本だけ選んで表示させることができる。図 2.6 (a), (b), (c), (d) においてスライダーの右側の数字は、それぞれ 1, 5, 6, 10 となっている。このデータは、最初にスパッタリングする前のスペクトルを 1 本測定しているので、これらの数字から 1 を引くとスパッタリング回数になる。

#### 2.1.3 モンタージュビュアーによる立体表示

図 2.7 のように、「Tools メニュー」の中の「Montage Viwer」をクリックすると図 2.8 が表示され

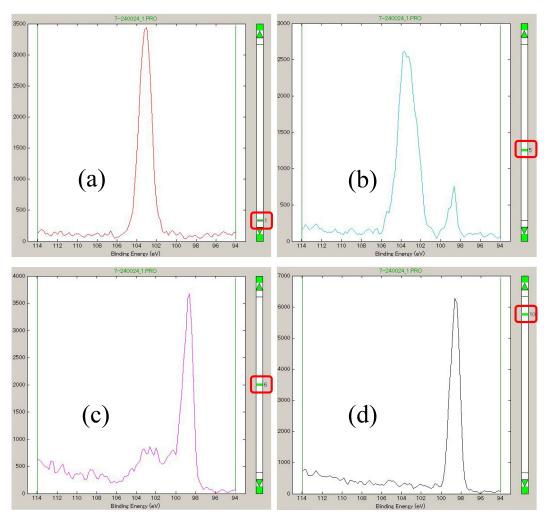


図 2.6 スペクトルを 1 つずつ表示したところ

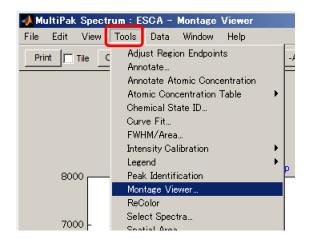


図 2.7 「Tools メニュー」の「Montage Viwer」をクリックする

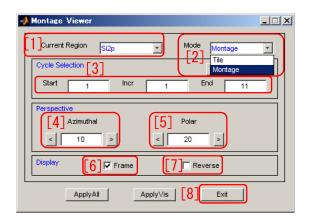


図 2.8 「Montage Viwer」の設定画面

る。右上「[2] Mode プルダウンメニュー」から「Montage」を選択すると図 2.9 のように、スペクトルを立体表示させることができる。

複数のスペクトル領域を測定した場合には,「[1] Current Region プルダウンメニュー」で,表示させるスペクトルを選択できる。「[3] Cycle Selection ボックス」ではスペクトルの開始

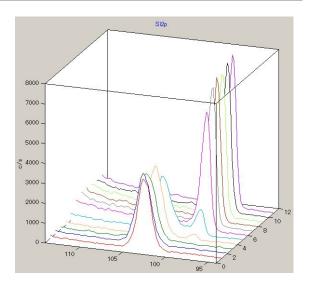


図 2.9 スパッタリングを繰り返して取得した スペクトルが立体表示されます

[Start],ステップ [Incr],最終 [End] 番号を指定できる。「[4] Azimutal」「[5] Polar」では鉛直軸および水平軸周りの回転角を,ボタンのクリックないしは数値の入力で指定できる。「[6] Frameチェックボックス」をアンチェックするとフレームを非表示にでき,「[7] Reverse チェックボックス」にチェックを入れるとスペクトルの表示の順序を逆転させられる。右下「[8] Exit ボタン」をクリックするとモンタージュビュアーを終了することができる。

#### 2.1.4 帯電補正

PHI5000 VersaProbe では、帯電補正は通常 必要ではないのだが、これを行う場合は、付録 A[p.21] を参照。

#### 2.1.5 化学結合状態の同定

スペクトルのピーク位置から化学結合状態を同 定するには、付録 B[p.23] を参照。

### 第3章

### マッピングデータの解析

List Files of Type:

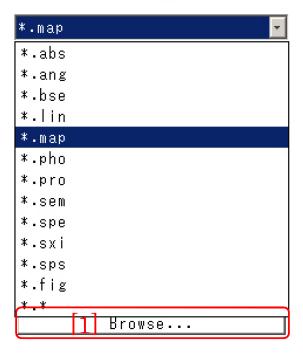


図 3.1 ファイルタイプセレクトウィンドウ

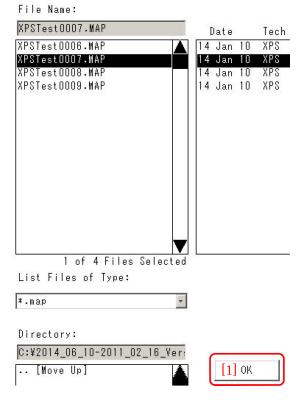


図 3.2 ファイルオープンウィンドウ

#### 3.1 マッピングデータの読み込み

表紙,図0上の「[1]Open ボタン」(図2.1[p.13] 左上の「Open ボタン」)をクリックするとファイル読み込み画面が表示される。図3.1は、その左にある、ファイルタイプ選択プルダウンメニューを開いたところである。「[1] Browse ボタン」をクリックしてフォルダーを選んだあと、マッピングデータの拡張子「\*.map」を選択する。図3.2のようにマッピングデータファイル名が表示されるので、選択して右下の「[1] OK ボタン」をクリックする。

# 3.2 単一ピークマッピングデータの解析

図 3.3 [p.18] は,マッピングデータを読み込んで表示される「MultiPak Spectrum ウィンドウ」(左)と「MultiPak Map ウィンドウ」(右)である。マッッピングデータは単体 Si の範囲だけで測定されている。「[3] Si2p ラジオボタン」にチェックを入れると「[1] 左バー」「[2] 右バー」が表示される。 これらを左右にクリック&ドラッグすることによりバックグラウンドを調整してか

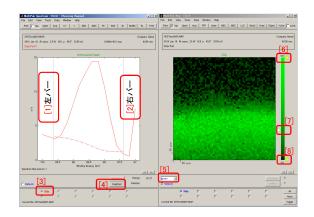


図 3.3 Spectrum ウィンドウと Map ウィンドウ。Si2p, 単体シリコン単一ピークによるマッピング

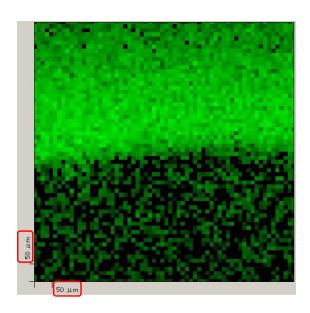


図 3.4 Si2p, SiO<sub>2</sub> 単一ピークによるマッピング

ら「[4] Imag/Upd ボタンボタン」をクリックすると右の「Map ウィンドウ」の単体 Si マップをやや鮮明にすることができる。

図 3.3 「[5] 表示色選択プルダウンメニュー」から,表示色を選択することができる。「[6]」「[7]」「[8]」の右または左向きの三角形を上下にスライドさせることにより,階調の調整を行うことができる。

図 3.4 は、 $SiO_2$  単一ピークにより得られたマッピングデータを同様に表示している。

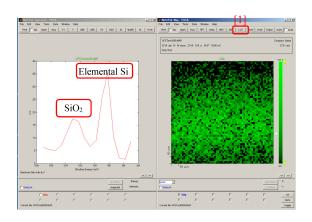


図 3.5 複数ピークによるマッピングデータを 開いたところ

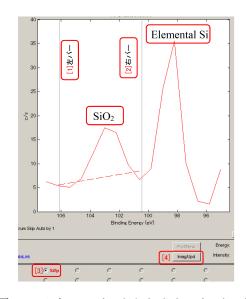


図 3.6 ふたつのピークから  $\mathrm{SiO}_2$  ピークの範囲を設定したところ

# 3.3 複数ピークによるマッピングデータの解析

# 3.3.1 スペクトルレインジ指定によるマップの 抽出

図 3.5 は、Si2p、 $SiO_2$  と単体 Si によるふたつ のピークを含む範囲で取得したマッピングデータ を読み込んだところである。

図 3.6 は、「[3]  $\mathrm{Si2p}$  ラジオボタン」のクリックにより表示された「[1] 左バー」「[2] 右バー」をクリック&ドラッグして  $\mathrm{SiO}_2$  ピークの範囲を選択したところである。 このあと右下「[4]  $\mathrm{Imag/Upd}$  ボタン」をクリックすると、図 3.7 の

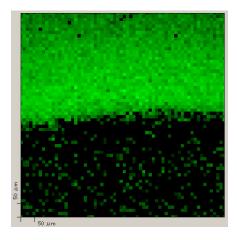


図 3.7 抽出された SiO<sub>2</sub> マップ

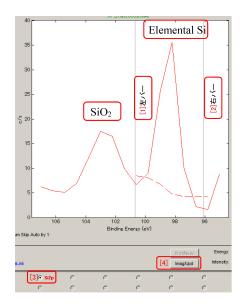


図 3.8 ふたつのピークから単体 Si ピークの範囲を設定したところ

ように  $SiO_2$  マップを抽出することができる。

図 3.8 は,同様にして単体 Si のピーク範囲を選択したところである。右下「[4] Imag/Upd ボタン」をクリックすると,図 3.9 のように単体 Si のマップを抽出することができる。

#### 3.3.2 マップ内の領域指定によるマップの抽出

図 3.5 右上の「[1] LLS ボタン」をクリックして図 3.10 緑色の画像上の「赤」と「青」の矩形領域をクリック&ドラッグして選択することにより,左下の [1] と [2] のように,指定した領域のスペクトル,すなわち  $SiO_2$  のピークと単体 Si のピークによるマップの抽出を行うことができる。

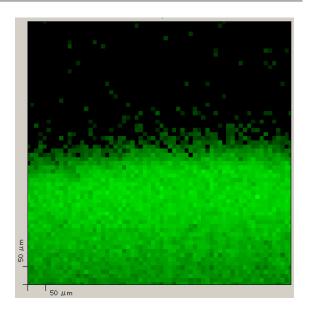


図 3.9 抽出された単体 Si マップ

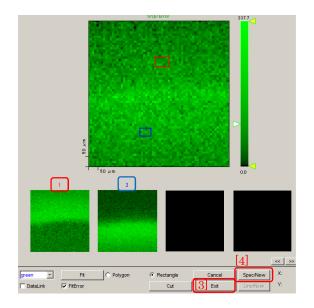


図 3.10 範囲選択による  $SiO_2$  マップと単体 Si マップの抽出

図 3.10 右下の「[4] Spec/New ボタン」をクリックすることにより、[1] と [2] のマップを得るのに使ったスペクトルを図 3.11 [p.20] のように表示させることができる。

図 3.10 右下「[3] Exit ボタン」をクリックすると、図 3.12 [p.20] が表示される。「[1] Si2p」「[2] Si2p.ls1」「[3] Si2p.ls2」のマップの表示、非表示は、「[4] Si2p」「[5] Si2p.ls1」「[6] Si2p.ls2」のチェックボックスにより設定することができる。

図 3.13 では、「[4] Si2p」のチェックボックスか

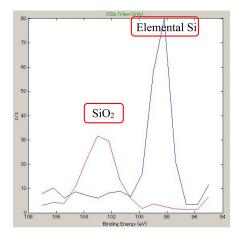


図 3.11 選択範囲から抽出されたスペクトル

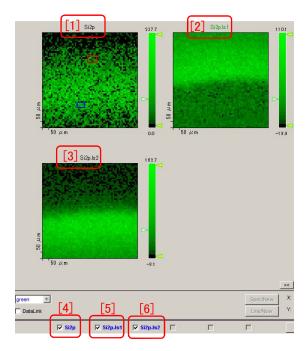


図 3.12 図 3.10 「[3] Exit ボタン」をクリック したところ

らチェックを外し、「[5] Si2p.ls1」「[6] Si2p.ls2」をチェックした状態で、「[1] Si2p.ls1」と「[2] Si2p.ls2」のマップを表示させている。「[2] Si2p.ls2」のマップをクリックしたあと、「[3] 表示

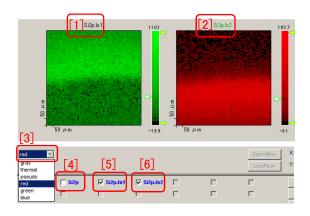


図 3.13 単体 Si マップの表示色を赤に変えたところ

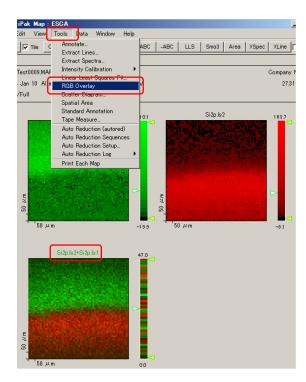


図 3.14 SiO<sub>2</sub> と単体 Si を色分けしたマップ

色選択プルダウンメニュー」から赤を選ぶことに より、単体 Si マップを赤く表示させている。

図 3.14 のように、「Tools メニュー」から「RGB Overlay」を選択してクリックすると左下のように、 $SiO_2$  と単体 Si のマップを緑と赤で色分けして表示させることができる。

### 付録 A

### 帯電補正について

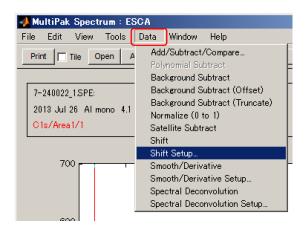


図 A.1 帯電補正メニューの立ち上げ

# 

図 A.2 帯電補正画面

#### A.1 帯電補正

#### A.1.1 帯電補正の概要

Phi5000 VersaProbe では,低速電子中和銃と 低速 Ar イオン中和銃を併用することにより表面 電荷がほぼ完全に取り除かれており,絶縁体試料 に対しても帯電補正を行う必要はほとんどない。 帯電中和銃は,PET ボトルの材料である ポリエ チレンテレフタラート (PET; 絶縁体) のピーク が正しい値になるように,オーバーホールの度に 調整されている。

ただし 1960 年代以降, 帯電した絶縁体試料に対する光電子分光スペクトルをどのように補正するかについては, 多くの議論がなされてきた。ピークのエネルギー値が確定している物質を用いて帯電補正を行うと, ピークシフトの値をより厳密に議論することができる。

電子が放出されて、試料表面に一定のプラス電荷が存在する場合、光電子(およびオージェ電子)

は、常に一定の運動エネルギーを失うことになる と考えられる。このため、バインディングエネル ギーが既知のピークのピークシフトを評価し、こ れを他のピークに対しても適用すればよいことに なる。

一般に、試料を大気中で準備した場合、試料表面は空気中の有機物で汚染される。この汚染物質の C1s ピークは、284.6 ~ 285.0eV であることが経験的に知られている。この汚染物質による帯電補正は古くから行われている方法である。この方法について記述する。

#### A.1.2 汚染物質による帯電補正

図 A.1 は、MultiPak のスペクトルウィンドウで C1s ピークの画面を表示させ、「Data メニュー」から「Shift Setup サブメニュー」を選択したところである。これにより、図 A.2 に示す

ような帯電補正画面が、MultiPak のスペクトル ウィンドウ内に立ち上がる。

前述のように、汚染物質の C1s ピークは  $284.6 \sim 285.0 \text{eV}$  程度で、284.8 eV である として補正することが推奨されている。この値を図 A.2 [p.21] の「PkEnergy テキストボックス」に入力する。大きなピークであれば、図 A.2 [p.21] 「AutoShift ボタン」の クリックで、284.8 eV を示す緑の縦線に自動

的にピークが一致する。また,緑の縦線を左右 にクリック&ドラッグして手動でピークに一致 させることもできる。この操作は,図 A.2 [p.21] 「Undo ボタン」のクリックにより取り消すこと ができる。

図 A.2 [p.21] 「Exit ボタン」をクリックすると C1s のピークシフトと同じシフトが他のピークに 対しても適用され、Shift Setup(帯電補正) のモードを終了する。

### 付録 B

### 化学結合状態同定

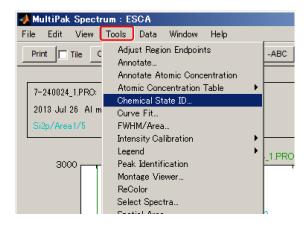


図 B.1 化学結合状態同定メニューの立ち上げ

### B.1 化学結合状態の同定

#### B.1.1 化学結合状態同定の概要

MultiPak は、これまでに測定された光電子ピークのデータベースを持っており、Phi5000 VersaProbe で測定された光電子ピークを過去のデータと照らし合わせることにより、化学結合状態を見積もることができる。

#### B.1.2 化学結合状態同定の開始

図 B.1 は、MultiPak のスペクトラルウィンドウに Si2p ピーク付近のスペクトルを表示させ、「Tools メニュー」から「Chemical State ID サブメニュー」を選択したところです。

「Chemical State ID」をクリックすることにより、図 B.2、図 B.3 の左にある「[1] Chemical State ID window」を開くことができる。

#### B.1.3 データベースのレインジ設定

図 B.2 および図 B.3 の「[1] Chemical State ID window」上の「Identification Energy(eV) テキ

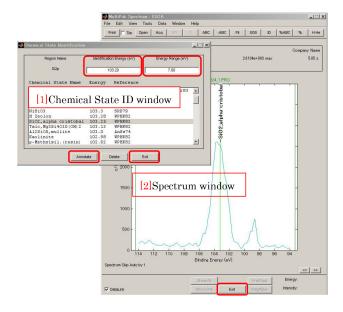


図 B.2 SiO<sub>2</sub> にアサインされた光電子ピーク

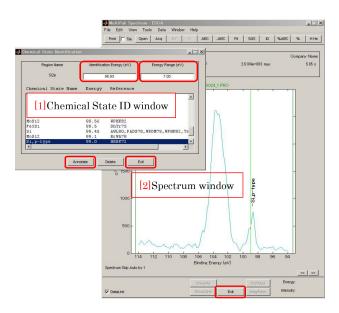


図 B.3 p型シリコンにアサインされた光電子ピーク

ストボックス」には,図 B.2 および図 B.3 の「[2] Spectrum window」に表示される,緑色の縦のラインのエネルギーが表示される。ここに数値をタイプすることにより,緑色の縦のラインを移動させることもできる。右隣の「Energy Range(eV) テキストボックス」の値は,エネルギーレンジの幅である。

#### B.1.4 化学結合状態の同定

図 B.2[p.23], 図 B.3[p.23] の「[2] Spectrum window」に表示される緑色の縦線を,左右にクリック&ドラッグしてスペクトルのピークの位置に合わせると,データベースの文献値が「[1] Chemical State ID win-

dow」に表示される。「Annotate ボタン」をクリックすると物質名をピークの上に表示させることができる。「Delete ボタン」でこれを消去できる。

図 B.2[p.23] では,左側のピークが  $SiO_2(\alpha \ D)$  リストバライト)に,図 B.3[p.23] では,右側のピークが p 型シリコンにアサインされている。

「[1] Chemical State ID window」右下の「Exit ボタン」をクリックするとこのウィンドウを閉じることができる。

「[2] Spectrum window」下の「Exit ボタン」を クリックすると化学結合状態同定モードを終了す ることができる。

### 付録C

# NIST(National Institute of Standards and Technology) のデータベース利用法

#### C.1 NIST のデータベースへのアクセス について

アメリカ国立標準技術研究所 (NIST; National Institute of Standards and Technology )のホームページには、X線光電子分光分析 (XPS)のデータベースが置いてあり、誰でもアクセスできるようになっている。過去の測定データが数多く蓄積されていることもまた、光電子分光分析 (XPS)のメリットのひとつなので、活用すべきである。付録 B [p.23] に、Multipak が持っているデータベースの利用法を記述してあるが、これと併用することが推奨される。

図 C.1 は、サーチエンジン「Google」のホームページで「XPS NIST」と入力したところである。 図 C.2 のように NIST XPS Database の URL が第 1 候補としてヒットする。

#### C.2 NIST データベースの使い方

#### C.2.1 NIST データベース内でのリンクの辿り方

図 C.2 [p.26] でヒットした NIST XPS Database の URL をクリックすると,図 C.3 のような画面が表示されるので,左上から 3 番目の「Search Menu」をクリックする。図 C.4 が表示されたら,赤枠で囲った「Retrieve Data for a Selected Element」をクリックする。図 C.5 が表示されるので,「Binding Energy」にチェックを入れて,下の「Go to Step 2」をクリックすると,図 C.6 のような元素の周期律表が表示され

XPS Home
Introduction
Search Menu
Data Field
Definitions
Version History
Disclaimer
Acknowledgments
Contact Information
FAQs
Rate Our Products

#### NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy Database

NIST Standard Reference Database 20, Version 4.1

Data compiled and evaluated by

Alexander V. Naumkin, Anna Kraut-Vass, Stephen W. Gaarenstroom, and Cedric J. Powell

図 C.3 「Search Menu」をクリックする

XPS Home
Introduction
Search Menu
Data Field
Definitions
Version History
Disclaimer
Acknowledgments
Contact Information
FAQs
Rate Our Products

- ▼ XPS Home
- Identify Unknown Spectral Lines
- Retrieve Data for Selected Elements
- Retrieve Data for a Selected Element
- Display Wagner Plot
- Retrieve Data for Selected Compounds
- Retrieve Data by Scientific

図 C.4 「Retrieve Data for a Selected Element」をクリックする

る。元素記号をクリックすることにより、その元素を含む物質の XPS データにアクセスすることができる。



図 C.1 Google で「XPS NIST」で検索する

#### NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) Database .

srdata.nist.gov/xps/ マこのページを訳す

The **NIST XPS** Database gives access to energies of many photoelectron and *A* electron spectral lines. The database contains over 29000 line positions, chemic shifts, doublet splittings, and energy separations of photoelectron and ...

図 C.2 第1候補でヒットした「NIST XPS Database」をクリックする

Retrieve data for a selected XPS Home element. Introduction Search Menu Step 1. Choose type of data: Data Field Binding Energy Definitions Version History O Auger Kinetic Energy Disclaimer O Auger Parameter Acknowledgments O Doublet Separation Contact Information O Surface/Interface Core-**FAQs** Level Shift Rate Our Products O Chemical Shift: Go to Step 2

図 C.5 Binding Energy にチェックを入れて「Go to Step 2」をクリックする

#### C.2.2 Si2p ピークの検索例

図 C.6 の周期律表で Si の元素記号をクリックすると、図 C.7 が表示される。「2p」のチェックボックスにチェックを入れて、左下の「Search」をクリックすると、図 C.8 のような画面が表示される。

Step 2	2. Sel	ect a	n ele	ment	for bi	inding	ener	gy:									
IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	V	IΒ	V	III	IΒ	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII
<sup>1</sup> H	'H										<sup>2</sup> He						
$^3\underline{\mathrm{Li}}$	⁴ <u>Be</u>					ansiti						5 <u>B</u>	<u>6</u> C	<sup>7</sup> <u>N</u>	<u>8</u> 0	9 <u>F</u>	<sup>10</sup> Ne
<sup>11</sup> Na					Ietalloids onmetals				<sup>13</sup> <u>A</u> l	<sup>14</sup> Si	<sup>15</sup> P	<sup>16</sup> S	<sup>17</sup> <u>Cl</u>	<sup>18</sup> A1			
<sup>19</sup> <u>K</u>	<sup>20</sup> <u>Ca</u>	<sup>21</sup> Sc	<sup>22</sup> <u>Ti</u>	<sup>23</sup> <u>V</u>	<sup>24</sup> <u>Cr</u>	<sup>25</sup> <u>Mn</u>	<sup>26</sup> <u>Fe</u>	<sup>27</sup> <u>Co</u>	<sup>28</sup> <u>Ni</u>	<sup>29</sup> Cu	<sup>30</sup> Zn	<sup>31</sup> <u>Ga</u>	<sup>32</sup> <u>Ge</u>	<sup>33</sup> <u>As</u>	<sup>34</sup> Se	<sup>35</sup> <u>Br</u>	<sup>36</sup> <u>K</u> 1
<sup>37</sup> Rb	$^{38}\underline{Sr}$	<sup>39</sup> Y	$^{40}Zr$	<sup>41</sup> Nb	<sup>42</sup> Mo	<sup>43</sup> Tc	44 <u>Ru</u>	45 <u>Rh</u>	<sup>46</sup> Pd	<sup>47</sup> Ag	<sup>48</sup> Cd	<sup>49</sup> <u>In</u>	<sup>50</sup> Sn	<sup>51</sup> Sb	<sup>52</sup> <u>Te</u>	<sup>53</sup> I	<sup>54</sup> Xe
<sup>55</sup> Cs	<sup>56</sup> <u>Ba</u>	<sup>57</sup> La	$^{72}$ Hf	<sup>73</sup> <u>Ta</u>	$^{74}\underline{W}$	75 <u>Re</u>	<sup>76</sup> Os	<sup>77</sup> <u>Ir</u>	<sup>78</sup> <u>Pt</u>	<sup>79</sup> Au	<sup>80</sup> Hg	<sup>81</sup> <u>Tl</u>	<sup>82</sup> <u>Pb</u>	<sup>83</sup> <u>Bi</u>	<sup>84</sup> Po	85At	86Rn
<sup>87</sup> Fr	<sup>88</sup> Ra	<sup>89</sup> Ac	<sup>104</sup> Rf	<sup>105</sup> Db	<sup>106</sup> Sg	$^{107}$ Bh	<sup>108</sup> Hs	<sup>109</sup> Mt									
lanthanides 58Ce 59Pr 60Nd 61Pm 62Sm 63Eu 64Gd 65Tb 66Dy 67Ho 68Er 69Tm 70Yb 71Lu																	
actinides 90Th 91Pa 92U 93Np 94Pu 95Am 96Cm 97Bk 98Cf 99Es 100Fm 101Md 102No 103Lr																	

図 C.6 周期律表の検索する元素記号をクリックする

• Available photoelectron line(s) for Si:<br/>Click on checkboxe(s) and then click on Search button to retrieve data for desired line(s).

 $\square$  1s  $\square$  2p  $\square$  2p, sat  $\square$  2p,sat  $\square$  2p1/2  $\square$  2p3/2  $\square$  2s

Search

図 C.7 検索する光電子ピークにチェックを入れて「Search」をクリックする

図 C.8 の上から第 4 行目は,単体 Si の 2p 光電子ピークが 99.20 eV であると計測されていることを示している。その右にある赤枠で囲った

	-			
Si	2p	SiC	100.80	Click
Si	2p	SiC	100.70	Click
Si	2p	SiC	100.40	Click
Si	2p	Si	99.20	Click
Si	2p	Si	99.60	Click
Si	2p	Si	99.30	Click

図 C.8 データベースに登録されている単体 Si の光電子ピーク。右の「Click」をクリックすると文献が表示される

General:	
Element:	Si
Formula:	Si
XPS Formula:	
Name:	silicon
CAS Registry No:	7440-21-3
<u>Classes</u> :	element, II-VI semiconductor, IV semiconductor
Citation:	
Author Name(s):	Finster J., Klinkenberg ED., Heeg J.
Journal:	Vacuum 41, 1586 (1990)

図 C.9 下の赤いフレーム内に論文の著者と雑誌名が表示される

		12 2 / /		
Si	2p	(-Si(CH3)(C6H5)O-)n	102.10	Click
Si	2p	(Si(CH3)(C6H5)-O-)n	102.10	Click
Si	2p	SiO2	103.80	Click
Si	2p	SiO2	103.70	Click
Si	2p	SiO2	103.40	Click
Si	2p	SiO2	103.20	Click
Si	2p	SiO2	103.50	Click

図 C.10 データベースに登録されている  $SiO_2$  の光電子ピーク。右の [Click] をクリックすると文献が表示される

「Click」をクリックすると、図 C.9 が表示される。図 C.9 下の赤く囲った部分には、単体 Si の 2p 光電子ピークが 99.20 eV であると計測した論文に関する情報が示されている。著者 J. Finster、E.-D. Klinkenberg、J. Heeg が論文誌「Vacuum」第 41 巻 (1990 年)、1586 ページから始まる論文にこのデータを報告したことが記されている。

図 C.8 をスクロールダウンすると、図 C.10 を表示させることができる。図 C.10 上から 3 行目にあるデータは、 $SiO_2$  の Si2p 光電子ピークが

Cananala	
General:	
Element:	Si
Formula:	SiO2
XPS Formula:	
Name:	silicon(IV) dioxide
CAS Registry No:	7631-86-9
<u>Classes</u> :	anhydride, IV- VI semiconductor, oxide
Citation:	
Author Name(s):	Kibel M.H., Leech P.W.
Journal:	Surf. Interface Anal. 24, 605 (1996)

図 C.11 下の赤いフレーム内に論文の著者と 雑誌名が表示される

	[1]	[2]	[3]	
Element	Spectral Line	<u>Formula</u>	Energy (eV)	Details ?
Si	2p	Tm/Si	98.00	Click
Si	2p	Tm/Si	98.00	Click
Si	2p	Gd5Si3	98.10	Click
Si	2p	Si	98.40	Click
Si	2p	Si/Ba	98.40	Click
Si	2p	FeSi	98.60	Click
Si	2p	GdSi	98.60	Click

図 C.12 データベースのソート

103.80eV に観測されたことを示している。赤枠で囲った「Click」をクリックすると,図 C.11 が表示される。赤枠で囲った下半分には出典が示されている。著者 M. H. Kibel, P.-W. Leech により論文誌「Surf. Interfase Anal.」第 24 巻 (1996年),605 ページから始まる論文にこのデータが報告されたことが記されている。

東京大学図書館の電子ジャーナルは非常に充実 しており、東大内からこれにアクセスすることが できる。たいていの論文はここから検索して、無 料でダウンロードすることができる。

#### C.2.3 データベースのソート

図 C.12 は,データベースをスクロール アップした最上部である。「[1] Spectral Line」「[2] Formula」「[3] Energy (eV)」 をクリックすることにより,データを 昇 冪 (しょうべき) ないしは降 冪 (こう べき) の順に, 並べ替えることができる。 以上

## 付録 D

## Gnuplot のインストール方法と使い方



図 D.1 Windows 画面左下の「スタートボタン」をクリック。下から 2 番目の「設定」をクリック



図 D.2 「設定一覧」から「アプリ」をクリック

Gnuplot(グニュープロット,ニュープロット)は、2次元および3次元のグラフを描画できるフリーソフトウェアである。1986年に最初のバージョンがリリースされた。Gnuplotチームにより現在もバージョンアップが行われており、UNIX、LINUX、Windows、MacOSに対応している。計算データ、測定データをグラフ化するツールとして、世界的に広く用いられている。



図 D.3 古いバージョンの gnuplot をクリック

本章では,これのダウンロードとインストール の仕方,および使い方を記述する。

## D.1 古いバージョンのアンインス トール

本章では、Gnuplot5.2.8 のインストールの仕方を記述するが、これ以外のバージョンの Gnuplot がインストールされている場合には、まずこれをアンインストールする必要がある。

図 D.1 は、Windows の画面左下にあるスタートボタン付近を示している。スタートボタンをクリックしたあと設定ボタンをクリックすると、図 D.2 が開くので、「アプリ」をクリックする。図 D.3 が表示されるので、古いバージョンのGnuplot にマウスカーソルを合わせてクリックし、図 D.4 (a) を表示させる。「アンインストール」をクリックすると、図 D.4 (b) が表示されるので、ここでも「アンインストール」をクリック



図 D.4 (a) で「アンインストール」をクリックすると、(b) が開くので「アンインストール」をクリック



図 D.5 確認メッセージが表示されるので「は い」をクリック



図 D.6 正常に除されたことを示すメッセージ。「OK」をクリック



図 D.7 Google で「Gnuplot Homepage」と入力



図 D.8 第 1 候補の「Gnuplot Homepage」を クリック

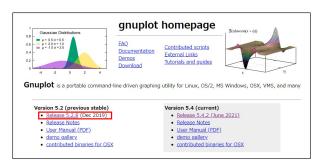


図 D.9 Version 5.2 (prerevious stable) の「Release 5.2.8 (Dec 2019)」をクリック

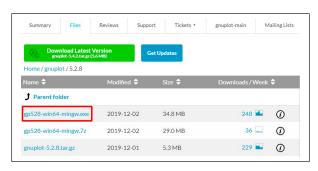


図 D.10 「gp528-win64-mingw.exe」をクリック

する。図 D.5 が表示されたら「はい」をクリック し、アンインストールを開始する。正常に終了す ると、図 D.6 が表示されるので、「OK」をクリッ クしてアンインストールを終了する。

### D.2 バージョン 5.2.8 のダウンロード

図 D.7 は Google で「Gnuplot Homepage」と 入力したところである。図 D.8 のように,第 1 候補でヒットした Gnuplot Homepage をクリッ クする。図 D.9 が表示されたら安定したバー ジョンの最新版である Version 5.2.8 をクリック する。図 D.10 が表示されたら,「gp528-win64mingw.exe」をクリックするとダウンロードが始 まり,終了するとブラウザーの右上に図 D.11 が



図 D.11 「gp528-win64-mingw.exe」のダウンロードが終了するとブラウザーに右上に表示される

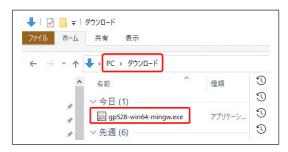


図 D.12 「gp528-win64-mingw.exe」は、パソコンの「ダウンロード」のフィルダーにある



図 D.13 セキュリティーの警告が出るが「は い」をクリックして続行

表示される。ここで「ファイルを開く」はクリッ クしない。

#### D.3 バージョン 5.2.8 のインストール

「gp528-win64-mingw.exe」は,図 D.12 のように「PC/ダウンロード」のフォルダーにダウンロードされている。「gp528-win64-mingw.exe」をダブルクリックすると,セキュリティーの警告が図 D.13 のように表示されるが,「はい」をクリックして続行する。このあと,図 D.14-図 D.25 が順に表示されるので,以下の記述にしたがってインストールしてゆく。

図 D.14 では「日本語」のまま「OK」, 図 D.15 で



図 D.14 言語選択は日本語になっているので そのまま「OK」をクリック



図 D.15 使用許諾契約書で「同意書」にチェックを入れて「次へ (N)>」をクリック

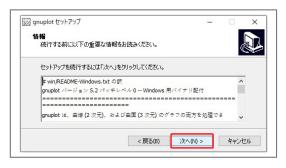


図 D.16 情報ウィンドウが表示されたら「次  $\land$  (N)>」をクリック



図 D.17 インストールの設定ウィンドウが表示されたら「次へ (N)>」をクリック

は「同意する」にチェックを入れて「次へ(N)>」,



図 D.18 コンポーネントの選択ウィンドウが表示されたら「次へ(N)>」をクリック

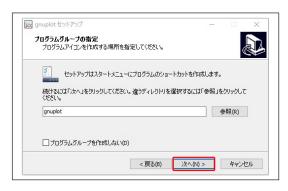


図 D.19 グループ設定ウィンドウが表示されたら「次へ (N)>」をクリック



図 D.20 追加タスクの選択ウィンドウが表示 されたら「デスクトップ上にアイコンを作成」 にチェックを入れ「次へ (N)>」をクリック

図 D.16, D.17, D.18, D.19 では,「次へ (N)>」を クリックする。ただし,図 D.18 では,「日本語対 応」にチェックを入れる。図 D.20 では,「デスクトップの上にアイコンを作成する (D)」にチェックを入れて「次へ (N)>」,図 D.21 では,そのま



図 D.21 追加タスクの選択ウィンドウが表示されたら「次へ (N)>」をクリック



図 D.22 インストールの準備完了ウィンドウ が表示されたら「インストール」をクリック

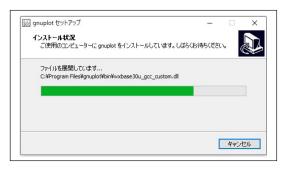


図 D.23 インストール中に表示されるウィンドウ

ま「次へ (N)>」,図 D.22 では「インストール (I)」をクリックする。

Gnuplot インストール中は,図 D.23 が表示される。図 D.24 では,そのまま「次へ (N)>」をクリックする。図 D.25 では,「完了 (F)」をクリックしてインストールを終了する。デスクトップには,図 D.26 のアイコンが新しく表示される。



図 D.24 情報ウィンドウが表示されたら「次  $\land$  (N)>」をクリック



図 D.25 セットアップ完了メッセージ



図 D.26 デスクトップ上に作成されたアイコン



図 D.27 アイコンをダブルクリックして開く画面

## D.4 Gnuplot の使い方

#### D.4.1 初歩的なグラフ描画

図 D.27 は,デスクトップ上のアイコン (図 D.26) をダブルクリックして,開いたウィンドウ

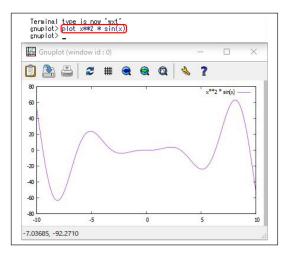


図 D.28 「 $y = x^2 \sin x$ 」のグラフをプロット したところ

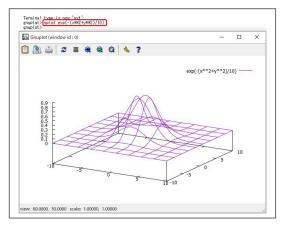


図 D.29 二次元の正規分布曲線「 $z=\exp[-(x^2+y^2)/10]$ 」のグラフをプロットしたところ

である。コマンドプロンプトに Gnuplot の命令 をタイプするのが、最も基本的な使い方である。

#### D.4.1.1. 二次元のグラフ

図 D.28 は,図 D.27 のコマンドプロンプトで,「plot  $x^{**}2^{*}\sin(x)$ 」と入力して,[Enter] キーをタイプしたところである。「plot」は,二次元のグラフを描画する命令である。 $y=x^{2}\sin(x)$  が,横軸 x,縦軸 y で,プロットされている。

#### D.4.1.2. 三次元のグラフ

図 D.29 は、図 D.27 のコマンドプロンプトで、「splot exp(-( $x^{**2} + y^{**2}$ )/10)」と入力して、[Enter] キーをタイプしたところである。「splot」は、三次元のグラフを描画する命令である。z =

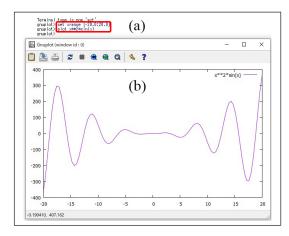


図 D.30 x のレンジを  $-20 \sim 20$  に設定する「set xrane [-20:20]」とタイプしてから「 $y = x^2 \sin x$ 」のグラフをプロットしたところ

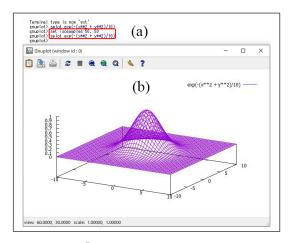


図 D.31 「set isosamples 50, 50」とタイプ してから 「 $z=\exp[-(x^2+y^2)/10]$ 」のグラフ をプロットしたところ

 $\exp[-(x^2+y^2)/10]$  のグラフが描画されている。 x は横方向の軸, y は奥行きの軸, z は縦の軸である。三次元のグラフは,図の中央付近をクリック&ドラッグして,3D 回転させることができる。

### D.4.2 パラメーターをコマンドで指定するグラ フ描画

図 D.27 のコマンドプロンプトで、パラメータ を指定してグラフを描画することができる。

#### D.4.2.1. 二次元のグラフ

図 D.30 (a) で、赤枠で囲ったように「set xrange [-20.0:20.0]」と入力し [Enter] してから「plot  $x^{**}2^{*}\sin(x)$ 」とタイプ、[Enter] して描画させたのが、図 D.30 (b) である。「set xrange」は、

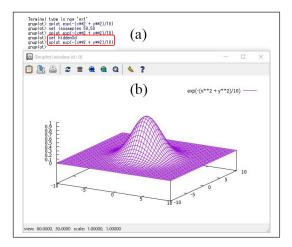


図 D.32 「set hidden3d」のコマンドを入力してから、「 $z = \exp[-(x^2 + y^2)/10]$ 」のグラフをプロットし直したところ

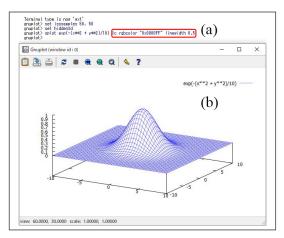


図 D.33 線の色と太さを指定をして「 $z=\exp[-(x^2+y^2)/10]$ 」のグラフをプロットしたところ

x 軸の描画範囲を設定するコマンドである。「set yrange」で y 軸の範囲も設定できるが、ここでは特に設定せず、gnuplot に描画レンジを自動設定させている。

#### D.4.2.2. 三次元のグラフ

図 D.29 の描画のあと,図 D.31 (a) のように,「set isosamples 50, 50」とタイプし,メッシュの数を  $50 \times 50$  にセットした上で,グラフを再描画したのが,図 D.31 (b) である。「splot exp(- $(x^{**2} + y^{**2})/10$ )」は上矢印キーを 2 度タイプしてから,[Enter] キーをヒットすることにより入力されている。N 回前にタイプしたコマンドは,上矢印キーを N 回タイプすることで,よび

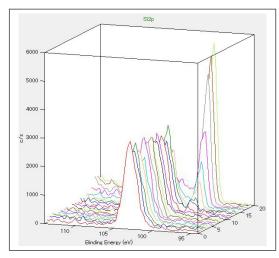


図 D.34 「Montage viewer」表示した, スパッタリングを繰り返して測定された光電子スペクトル

だすことができる。

図 D.31 (b) を表示させたあと、図 D.32 (a) のように「set hidden3d」とタイプして、再度「splot  $\exp(-(\mathbf{x}^{**2} + \mathbf{y}^{**2})/10)$ 」を実行して表示されたのが、図 D.32 (b) である。「set hidden3d」は、三次元グラフの手前側だけを表示するコマンドである。

#### D.4.2.3. 線の色と太さの指定

図 D.33 (a) で,グラフの線の色を「lc rgb-color "0x0000FF"」のように指定し,線の太さを「linewidth 0.5」と指定して,二次元の正規分布曲線 (ガウシアン) をプロットしたのが,図 D.33 (b) である。

「lc」は「linecolor」の省略形で、「linecolor」とフルスペールで入力してもかまわない。「rgbcolor」は、色を赤 (red)、緑 (green)、青 (blue) の明るさで指定することを宣言するコマンドで、6 桁の 16 進数で三原色の明るさを指定する。"0xFF0000"ならば赤、"0x00FF00"ならば緑、"0x0000FF"ならば青となる。"0x800000"ならば暗い赤、"0x008000"ならば暗い緑、"0x000080"ならば暗い青となる。また、"0x000000"ならば黒となる。 「linewidth」は、線の太さを「ポイント (pt)」単位で指定するオプションで、「lw」と省略して記述することもできる。

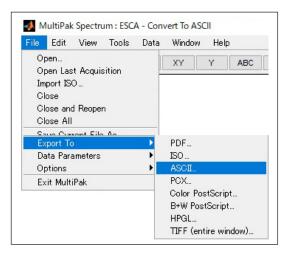


図 D.35 「File」「Export To」「ASCII」を順にクリックして、光電子スペクトルを ASCII 形式で保存する

### D.4.3 データをファイルから読み込んでのグラ フ描画

データファイルから数値を読み込んでグラフを描画する際、図 D.27 [p.33] の画面で、コマンドを打ち込んでグラフを描画することもできるが、フォルダーを移動するコマンドなどを多くタイプしなければならず、非常に面倒になる。「gp」の拡張子を持つファイルにコマンドを記述して、データファイルがあるフォルダーに置いておくと、このファイルをダブルクリックするだけで、グラフを描画することができる。以下では、この方法によるグラフ描画について記述する。

#### D.4.3.1. csv ファイルへのエクスポート

実験装置によって取得されたデータの場合,解析用ソフトウェアには,エクセルで読み込むことができる ASCII ファイルに,計測データをエクスポートする機能がついていることが多い。本節では,光電子分光装置 (XPS 装置)UlvacPhi Phi5000 VersaProbe で取得した実験データを,解析用ソフトウェア「MultiPak」からエクスポートした場合について記述する。

図 D.34 は,解析ソフトウェア「MultiPak」の Montage viewer のモードで表示されたもので,スパッタリングを繰り返して得られた光電子スペクトルである。図 D.35 のようにクリックすると,図 D.36 が表示される。ここで,

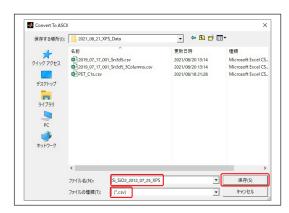


図 D.36 エクセルで取り込める「csv」の拡張 子で ASCII データを保存する

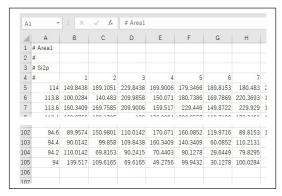


図 D.37 「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS.csv」を ダブルクリックして開いたところ



図 D.38 すべての列の幅を 11 桁にする

「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS.csv」のファイル名で, データを保存する。

図 D.37 は、「 $Si_SiO2_2021_07_25_XPS.csv$ 」のファイルをダブルクリックして、エクセルで開いたところである。 $A1\sim A4$  セルの「#」は、ファ

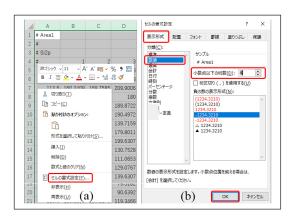


図 D.39 すべての列に対して小数点以下の桁 を 4 にする

L21						
4	А	В	С	D	Е	
1	# Area1					
2	#					
3	# Si2p					
4	#	1.0000	2.0000	3.0000	4.0000	
5	114.0000	149.8438	169.1051	229.8438	169.9006	
6	113.8000	100.0284	140.4830	209.9858	150.0710	
7	113.6000	160.3409	169.7585	209.9006	159.5170	
8	113.4000	169.2756	180.1705	180.0000	170.0994	
9	113.2000	100.3409	159.6875	189.8722	140.2841	
10	113.0000	129.8437	160.5114	190.4972	109.3324	
11	112.8000	180.2273	170.1847	139.7159	160.0852	
12	112.6000	189.1903	179.1193	179.8011	190.6108	

図 D.40 データ加工後のエクセルファイル

イルを開いたあとにタイプしたものである。このデータ配列を、のちに Gnuplot で読み込めるように加工するが、Gnuplot は「#」で始まる行を、コメント文と解釈して無視する。第  $1\sim4$  行目を、コメントアウトするために、先頭に「#」の文字をタイプしてある。矩形状の配列の左上と左下を表示している。1 列目の数値はバインディングエネルギー (eV) で、4 行目の数値は、スパッタ回数である。表は、20 回の Ar イオンスパッタと、Si2p ピーク付近のスペクトル測定を繰り返した結果で、表内部の値は、光電子強度 (counts/sec)である。

#### D.4.3.2. データファイルの加工

図 D.38 (a) で、すべての列を選択し、右クリックして開いたメニューから、「列の幅」を選択する。図 D.38 (b) を表示させて、11 桁に設定する。さらに、図 D.39 (a) で、すべての列をクリック&

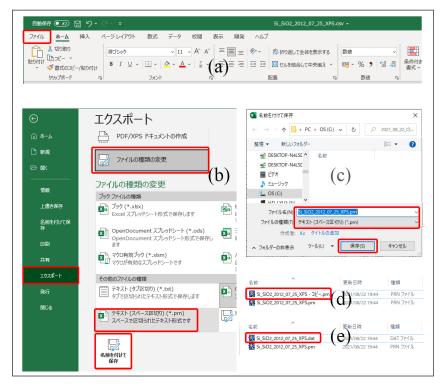


図 D.41 加工後のエクセルファイルを「pm」の拡張子で保存。拡張子を「dat」に変える

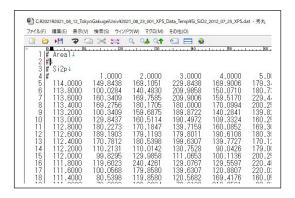


図 D.42 「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS.dat」の中身



図 D.43 「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS\_00.gp」 の中身

ドラッグして選択したあと、右クリックしてメニューを表示させる。「セルの書式設定 (F)」をクリックすると、図 D.39 (b) が表示される。左上の「表示形式」のタブを開いて「数値」を選択し、小数点以下の桁数を 4 桁に設定して「OK」をクリックする。図 D.38、図 D.39 の加工により、エクセルデータのすべてのセルが、図 D.40 のように、全 11 桁、小数点以下 4 桁に設定される。

データは、スペースで区切られた「pm」の拡張 子のファイルとして保存する。図 D.41 (a) 左上 の「ファイル」をクリックすると、図 D.41 (b) が 開く。「エクスポート」,「ファイルの種類の変更」の順にクリックし,さらに「テキスト (スペース区切り)(\*.pm)」を選択して「名前をつけて保存」をクリックする。図 D.41 (c) の画面が開くので「Si\_SiO2\_2012\_07\_25\_XPS.pm」のファイル名で保存する。このファイルをウィンドウズのエクスプローラーで図 D.41 (d) のようにコピーしたあと,図 D.41 (e) のように,拡張子「pm」を Gnuplotで読める「dat」に変更する。図 D.41 (e) に赤枠で囲ったファイル「「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS.dat」の中身が,図 D.42 である。

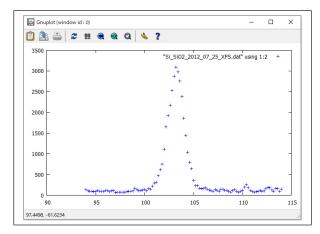


図 D.44 「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS\_00.gp」 をダブルクリックすることにより、描画された グラフ



図 D.45 ファイル名の変更

# D.4.3.3. Gnuplot 自動実行ファイル (gp ファイル) の作成と実行

「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS\_00.gp」のあるフォルダーが、「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS.dat」があるフォルダーと同じであることが、図 D.43 (a) に、示されている。Gnuplot 自動実行ファイル「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS\_00.gp」を、デスクトップにある秀丸エディタのアイコン(付録?? §??参照)の上に、クリック&ドラッグして開いたところが、図 D.43 (b) である。

「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS\_00.gp」をダブルクリックして描画されたグラフが、図 D.44 である。図 D.43 (b) の,1 行目と 2 行目は「#」から始まっているため,コメントアウトされており,3 行目だけが実行される。「using 1:2」は,ファイルの 1 列目の値を x 軸に,2 列目の値を y 軸にとることを指定している。「x 1:2」のように省略形で記述してもよい。「x 1:2」のx 2000000FF"」

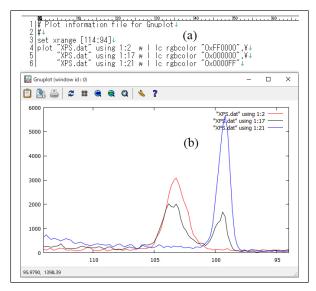


図 D.46 (a) gp ファイルをダブルクリックして表示された (b) グラフ

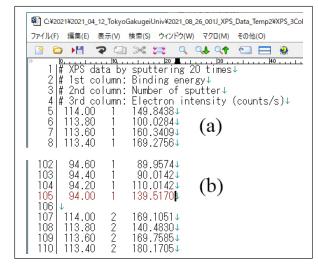


図 D.47 3 次元グラフ描画のためのデータファイル

は、青でプロットするよう指定している。ファイルから読み込んだデータを、何も指定せずに描画した場合、図 D.44 のように、一つひとつの点が「+」マークでプロットされる。

「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS\_00.gp」と「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS.dat」[図 D.45 (a)] のファイル名を、図 D.45 (b)「XPS\_00.gp」と「XPS.dat」に変更したところである。「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS\_00.gp」を編集したのが図 D.46 (a)、これをダブルクリックして描画されたのが図 D.46 (b) である。

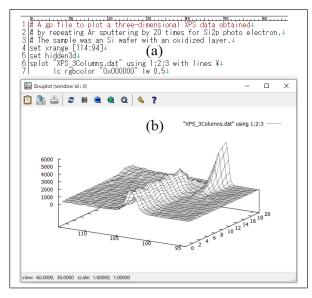


図 D.48 gp ファイルダブルクリックして描画 された 3 次元グラフ

図 D.46 (a) 3 行目の「set xrange [114:94]」で x 軸の描画レンジを指定している。X 線光電子分光 (XPS) 測定では,図 D.34 [p.35] のように,左側を大きなバインディングエネルギーにとることが多く,これに則って描画レンジを指定している。

図 D.46 (a) 4,5,6 行目の末尾は「、\」で終わっているが、これはコマンドの記述が次の行に続くことを示している。「w l」は「with lines」の省略形、「lc」は「linecolor」の省略形である。これらの光電子スペクトルは、酸化膜が付いたシリコンウェハーに対して Ar スパッタリングを繰り返して得られたものである。図 D.46 (b) の赤、黒、青のスペクトルは、スパッタリングを、それぞれ1回、16回、20回行ったあと測定されたものである。赤のピークは、 $SiO_2$ の、青のピークは、 $SiO_2$ の、青のピークは、 $SiO_2$ の、青のピークは、 $SiO_2$ の、青のピークは、 $SiO_3$ のピークであり、赤、黒、青とスペクトルが変化したのは、Ar スパッタリングにより、ウェハー表面の $SiO_3$  酸化膜が剥がれてSi が露出したことによる。

図 D.47 は,三次元グラフ描画に用いるデータファイルである。図 D.47 (a) の最初の 4 行は先頭文字が「#」であることから,コメント文である。20 回の Ar スパッタリングを繰り返して得られたデータであること,1 列目が結合エネルギー

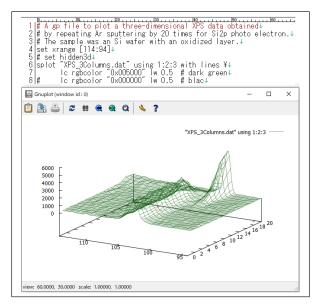


図 D.49 3 次元グラフの画像ファイルへのエクスポート

(バインディングエネルギー), 2 列目がスパッタリング回数, 3 列目が光電子強度であることが記述されている。図 D.47 (b) は, 1 回のスパッタを行ったあとのデータと 2 回のスパッタを行ったあとのデータの間の 106 行目は, 空行になっている必要がある。

図 D.48 (a) の gp ファイルをダブルクリックして描画されたのが、図 D.48 (b) である。図 D.47 のファイルの 1, 2, 3 列目をそれぞれ x, y, z の値としてプロットされている。図 D.48 (a) の 1, 2, 3 行目の先頭は、「#」であり、コメントアウトされている。この部分には、gp ファイルがどのようなグラフを描画するのか、記述しておくことが推奨される。4 行目では、x の描画レンジを114~94 に設定しており、y とz の描画レンジは、Gnuplot の自動設定に任せている。6 行目と 7 行目は、1 行に記述してもかまわないが、6 行目の末尾に「\」(半角スペースと\記号)を記述することにより、6 行目と 7 行目が、1 行のコマンドとして認識される。

図 D.49 (a) の gp ファイルをダブルクリックして表示されたのが、図 D.49 (b) である。図 D.49 (a) の 5 行目「hidden3d」がコメントアウトされているので、グラフの手前だけを描画するオプ

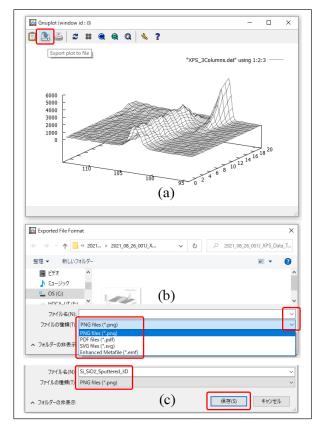


図 D.50 gp ファイルダブルクリックして描画 された 3 次元グラフ

ションは無効になっている。また、6 行目での色の指定が、"0x005000"で、暗い緑になっている。また、6 行目のように、行の末尾に「#」を記述すると、それ以降がコメント文として認識される。コメント文は日本語で記述してもかまわない。

#### D.4.4 画像データのエクスポート

図 D.50 (a) 左上に赤枠で囲った「Export plot to file」ボタンをクリックすると、図 D.50 (b) が開く。右側の下向きマークをクリックすると、左のようにファイルの種類を選択するプルダウンメニューが開く。例えば「PNG files(\*.png)」を選択すると、図 D.50 (c) が開く。ファイル名を「Si\_SiO2\_Sputtrered\_3D.png」のように指定し、右下の「保存 (S)」をクリックすると、この名前で図 D.50 (a) のグラフを、画像データとして保存することができる。

#### D.4.5 まとめ

本節では、Gnuplot の使い方について記述 した。初期のバージョンには、gp ファイルを ダブルクリックするだけでグラフを描画する機能はなく、コマンドをすべてタイプする必要があった。しかし、gp ファイルにコマンドを書き込んでおいて、これをダブルクリックするだけでグラフを描画できるようになってから、格段に使いやすくなった。Gnuplot には、非常に多くのコマンドやオプションが用意されているが、これらを記憶する必要はなく、Google などのサーチエンジンで調べてコマンドを、gp ファイルの書きためてゆき、不要なコマンドやオプションは「#」により、コメントアウトすればよい。

Windows 上で動作するグラフソフトは、商用のものやシェアウェアが多くあったが、3次元グラフを描画できるものは少なく、あっても非常に高価でった。

Gnuplot による 3 次元グラフは,その中央をクリック&ドラッグすることにより 3D 回転させることができる。3D 回転の機能は,パソコンのハードウェアに高いスペックを要求すが,これの向上が近年著しい。パソコンの処理能力は,5年でおよそ一桁のペースで向上しており,最近10年ほどで3D 回転の機能を備えたソフトウェアの使い勝手が,大きく改善されている。パソコンのハードウェアウェアの機能がソフトウェアに追いついてきているのである。

Gnuplot は、もともと、GUI(グラフィック・ユーザー・インターフェイス)を備えていない UNIX 上で開発された。 MacOS や Windows が広く支持されたのは、OS(オペレーティングシステム) そのものが GUI を持つソフトウェアを動作させる前提で開発されたことによる。しかし最初のバージョンから 30 数年を経た現在、Gnuplot にもまた、GUI に近い操作性が付与されている。gp ファイルをダブルクリックするだけでグラフが描画できるようになったのは、最近のことである。

Gnuplot を使いこなすスキルを、身につけることを推奨したい。フリーウェアであり、最新バージョンがいつでも無料で入手できることから、身につけたスキルは、生涯の財産となる。

# 索引

記号/数字		D
*.lin ラインプロファイルデータファイルの拡張子	1	Database
*.map マッピングデータファイルの拡張子	1	Data メニュー
*.pro スパッタリングデータファイルの拡張子	13	Shift Setup サフ
*.pro スパッタリングデータファイルの拡張子	1	Del All ボタン
*.spe スペクトルデータファイルの拡張子	1	をクリックすると
[Ctrl] キーを押すと複数のデータファイルを選択できる	1	Delete ボタン
[Shift] キーを押すと複数のデータファイルを選択できる	1	
% Gauss		$\mathbf{E}$
ガウシアンの比率を示すフィッティングパラメータ・	- 5	Energy Range(eV)
の文字が赤く表示されている	6	VersaProbe
% ボタン		Excel
のクリックで元素のモル分率を表示	i	Exit ボタン
$0 \times 000080$	35	のクリックで Sh
0x0000FF	35	Export To
0x008000	35	
0x00FF00	35	<u>F</u>
0x800000	35	File Name ボックス
0xFF0000	35	[Shift] キーを押っ
		Fit ボタン
<u>A</u>		カーブフィットを
AC% チェックボックス		Folder Select ウィン
からチェックを外すと縦軸はスペクトルの積分強度	14	C
にチェックを入れると右の縦軸は元素組成 (%)	14	$\frac{\mathbf{G}}{\tilde{\mathbf{G}}}$
$Al_2O_3$ のピーク	6	Gauss
Annotate ボタン	24	ガウシアンのみて
Apply to one band	6	釣り鐘のような形
を選択した上で Band Limits ボタンをクリック		Gauss-Lorentz
をクリックして Limit の値を変更する	6	ガウシアンとロー Couplet
Area の値の比が成分比になる	4	Gnuplot Google で検索
Ar イオンスパッタ	36	gp ファイル
Ar スパッタリング	39	GUI
ASCII 形式	35	001
ASCII ファイル	35	Н
Asymmetric	30	Hide MultiPak ボタ
はスペクトルの非対称性を考慮したフィットである	5 6	MultiPak の画面
(6) (7) (7) (3) (7) (1) (1) (2) (3) (3) (3) (4) (4) (4) (4) (4) (4) (4) (4) (4) (4	, ,	
В		I
Band Limits ボタン	6	Identification Energ
Binding Energy	25	ID ボタン
	1, 13	スペクトルのピー
	, -	IteratedShirley
C		バックグラウント
Chemical State ID	23	
Chemical State ID win-ow	24	$\mathbf{L}$
Chemical State ID window		$lc(line\ color)$
上の Identification Energy(eV) テキストボックス	23	lc(linecolor)
右下の Exit ボタンをクリックしてウィンドウを閉し	じる	Limit reached の赤い
24		line color(lc)
ChiSquared		linecolor(lc)
が 1 に近づくように最小二乗フィットを実行	4, 5	linewidth
Close ボタン		List Files of Type:
をクリックしてから Fit ボタン		Loss peak
のクリックでさらに最小二乗フィットを実行	7	lw(linewidth)
Corrected RSF	9	ъ. г
CSV	36	<u>M</u>

<u> </u>	
Database	25
Data メニュー	
Shift Setup サブメニュー	21
Del All ボタン	4
をクリックするとフィット曲線を消せる	4
Delete ボタン	24
E	
Energy Range(eV) テキストボックス	24
VersaProbe	35
Excel	10-12
Exit ボタン (世界はて) たぬこ	7
のクリックで Shift Setup(帯電補正) を終了	22
Export To	35
To the state of th	
<u>F</u>	
File Name ボックス	1, 13
[Shift] キーを押すと複数のファイルを選択できる	13
Fit ボタン	4, 5
カーブフィットを行う	i
Folder Select ウィンドウ	1, 13
<u>G</u>	
Gauss	5
ガウシアンのみでフィットを行う	5
釣り鐘のような形状の正規分布曲線	5
Gauss-Lorentz	5
ガウシアンとローレンツィアンでフィットを行う	5
Gnuplot 29–31,	33, 40
Googleで検索	25
gpファイル	38-40
GUI	40
H	
Hide MultiPak ボタン	
MultiPak の画面を非表示にする	i
maron an opening of the form	
I	
Identification Energy(eV) テキストボックス	24
ID ボタン	
スペクトルのピークを自動アサイン	i, 2
IteratedShirley	-, -
バックグラウンドの差し引き方 (推奨)	5
ハリノノノノ T S 在 O ST C ST (IE来)	0
L	
lc(line color)	38
lc(linecolor)	35, 39
Limit reached の赤い文字	6
line color(lc)	38
linecolor(lc)	35, 39
linewidth	35
List Files of Type: プルダウンメニュー	1, 13
Loss peak	i
lw(linewidth)	35
Ъ./г	
M	
Map ウィンドウ	17

42 索引

Max Iterations ボックス	5	   にアサインされた光電子ピーク	23
Montage viewer	35, 36	$\operatorname{SiO}_2(\alpha \ \mathcal{O} \ \mathcal{J} \ \mathcal$	24
MultiPak	35, 36	SiO <sub>2</sub> 酸化膜	39
Map ウィンドウ	17	Spectrum Display ラジオボタン	1
Spectrum ウィンドウ	17	Spectrum window	
のスペクトラルウィンドウ	23	下の Exit ボタンをクリックして化学結合状態	
は光電子ピークのデータベースを持っている	23	ドを終了	24
初期ウィンドウ	i	Spectrum ウィンドウ	17
MultiPak 解析プログラム	i	splot	34, 35
N		<u>T</u>	
National Institute of Standards and Technolog	y 25	Tail Length	
New を選択すると新しいウィンドウに表示	1, 14	が Limit の値に達してしまう は光電子ピーク左側のテールの長さである	5, 6
New/Ovr	1, 11	Tail Length Fix チェックボックス	6
を選択すると新しく開く複数のデータを重ねて	表示2, 14	Tail Scale	6
NIST	7, 25	の文字が赤く表示されている	6
NIST(National Institute of Standards and		は光電子ピーク左側のテールの高さである	5, 6
Technology)	25	Tail Scale Fix チェックボックス	6
NIST データベース	25	Tools メニュー	
NIST のデータベース	i	Chemical State ID サブメニュー	J> ∏∏ )
0		をクリックして Chemical State ID windo 23	wを開く
Open ボタン	13, 17	Select Spectra を選択	14
データファイルを開く	10, 11		
ファイルを開く	i	<u>U</u>	
OS	40	u(using)	38
Overlay		Undo ボタン	22
を選択すると新しいデータを表示されているデ		UNIX	40
ねて表示	2, 14	Upper Limit	
P		に到達すると最小2乗フィットが止まってしま	ミラ 6 38
PET	7, 21	using(u)	30
Phi5000 VersaProbe	35	w	
PkEnergy テキストボックス	22	w l(with line)	39
plot	33	with line(w l)	39
Profile Display ラジオボタン	1		
pt(ポイント)	35	<u>X</u>	
p型シリコン	24	XPS 装置 (光電子分光装置)	35
にアサインされた光電子ピーク	23	XY ボタン	
R		をクリックすると元のスケールに戻せる	i, 2
Replace		   あ	
を選択すると表示されているデータを消去して新	新しい	<del>3</del>	
ウィンドウに表示	1, 14	が Work	· Z 1
Retrieve Data for a Selected Element	25	は測定されたスペクトルとフィット曲線を重ね	
rgbcolor	35, 38	曲線の残差	4
RSF	9	アメリカ国立標準技術研究所	25
~		アンインストール	29
<u>S</u>		インストール	31
Search Menu	25	エクスポート	35, 39
Select One ボタン hidden3d	15	エクセル	10-12
set hidden3d	$\frac{35}{34}$	汚染物質の C1s ピーク	7 01
set isosamples	34	が 284.6 ~ 285.0eV であることが知られてい。	
set xrange	34	オペレーティングシステム) 	40
set yrange	34	か	
Setup チェックボックス	4	<del></del>	
からチェックを外してバックグラウンドを調整、	する 4	^ / / / / /	4
Shirley		の開始	4
バックグラウンドの差し引き方 (推奨)	5	カーブフィット, バンドリミット設定画面	6, 8
Show MultiPak ボタン MultiPak の画面を再集デオス		解析プログラム MultiPak	j
MultiPak の画面を再表示する Si2p ナロウスペクトル	i 13	ガウシアン (正規分布)	35
Si2p ピーク	36	ガウシアンでのフィット	5
Si2p ラジオボタン	50	ガウシアンとローレンツィアンでのフィット	5
にチェックで Si2p スペクトルを拡大表示	14	化学結合状態同定 化学結合状態の同定 i,	7 16 22
	3, 25, 27	1,	7, 16, 23

<b>少</b> 柳	00		01
の概要	23	の概要	21
メニューの立ち上げ	23	メニューの立ち上げ	21
化学状態別組成比	9, 10		21, 22
拡大されたピークを左右に右クリック&ドラッグ		ダウンロード	30
ピークの候補を次々に表示	2	単一ピークによるマッピング	17
過去のデータと照らし合わせて化学結合状態を見積る			24 - 27
できる	23	チェックを外すと元のスケールに戻る	2
グニュープロット	29	データファイル切り替えボタン	
グラフィック・ユーザー・インターフェイス	40	表示するデータファイルの切り替え	
光電子		データベース NIST	25
p 型シリコンにアサインされた光電子ピーク	23	データベースのソート	27
$\mathrm{SiO}_2$ にアサインされた光電子ピーク	23	データベースのレインジ設定	23
スペクトル		電子ジャーナル	27
から計算された元素のモル分率	3		
データの読み込み	1	<u>な</u>	
の解析	1	ナロウスペクトル	
の非対称性を考慮するのが Asymmetric フィ	ット 6	の選択表示	14
ピークのデータベースを MultiPak は持ってい		による元素の定量	-
光電子強度 (counts/sec)	36	の表示	-
光電子スペクトル	35, 39		32–34
光電子分光装置 (XPS 装置)	35	ニュープロット	29
国立標準技術研究所	25		2,
	6, 38–40	は	
コメント文	36		39
	30		
さ		が既知のピークで帯電によるピークシフトを評価	21
		パスエネルギー	ç
サーベイスキャン (Survey scan) =ワイドスキャン	2	バックグラウンドの差し引き方 (推奨)	_
		IteratedShirley	5
最小二乗フィットの実行	5	Shirley	5
酸化していないアルミニウムによるピーク 三原色	6	バックグラウンドの調整	4
	35	ピークの候補を次々に表示するには	
三次元のグラフ	34, 35	拡大されたピークを左右に右クリック&ドラッグ	2
サンプル表面は一般に空気中の有機物で汚染される	21	ピーク付近を左右に左クリック&ドラッグして拡大	2
四角いマークが表示されたフィット曲線にフォーカス	へかめる4	ピーク分離の開始	4
指定されたピーク近傍を拡大表示		ピーク分離の最適化	Ę
するにはラジオボタンにチェックを入れる	2	ファイルセレクトウィンドウ	1, 13
自動実行ファイル (gp ファイル)	38–40	ファイルタイプセレクトウィンドウ	17
	i, 25, 26	フィット曲線	4
周期律表ウィンドウ	) Ed =	の作成	4
元素ボタン2度クリックでアサインされなかった		の高さと幅を調整する	4
ピークを表示	2	の調整	4
シリコンウェハー	39	は Del All ボタンのクリックで消せる	4
スクロールバー	15	フェルミエネルギー	5
の上のスライダーを上下にスクロール		フォーカスを移す	
するとひとつのスペクトルを選んで表示	15	にはフィット曲線をクリックする	4
スパッタ回数	36	にはプルダウンメニューの選択を変更する	4
スパッタリング	35	にはラジオボタンのチェックを付け替える	4
データの解析	13	プラス電荷	
データの読み込み	13	が試料表面に存在すると光電子は運動エネルギーを	失う
データファイルの拡張子*.pro	1, 13	21	
スペクトル		プロファイルウィンドウ	13
から計算された元素のモル分率	3	ポイント (pt)	35
選択スクロールバーが表示されたところ	14	補正された感度因子	G
データの読み込み	1	ポリエチレンテレフタラート	7
データファイルの拡張子*.spe	1		
のピークを自動アサイン		ま	
ID ボタン	i, 2	 マッピング	
を1つずつ表示したところ	14	単一ピークマッピングデータの解析	17
ウィンドウ	13	抽出された $SiO_2$ マップ	18
正規分布 (ガウシアン)	35	データの解析	17
正規分布曲線	32	データの読み込み	17
線の色の指定	35	複数ピークによるマッピングデータの解析	18
線の太さの指定	35	ふたつのピークから $SiO_2$ ピークの範囲を設定した	
相対感度因子	9	あたりのピークから SIO2 ピークの配面を放定した ろ	ے کے ۔ 18
		つ マッピングデータファイルの拡張子*.map	10
た		メインピーク	ı
带電補正 i, 7	7, 16, 21	モンタージュビュアー	15
には低速電子銃と低速 Ar イオン銃を併用	21		10

5		ロスピーク	i. 6
ラインプロファイルデータファイルの拡張子*.lin	1	· · · <del>-</del> · ·	-, -
ラジオボタンにチェック		わ	
でピーク近傍を拡大表示	2	ワイドスキャン	
立体表示	15	=サーベイスキャン (Survey scan)	2
ローレンツィアン		スペクトルデータのピークアサイン	2
ガウシアンより先端が尖った曲線です	5		