

# UlvacPhi PHI5000 VersaProbe III with AES

## 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

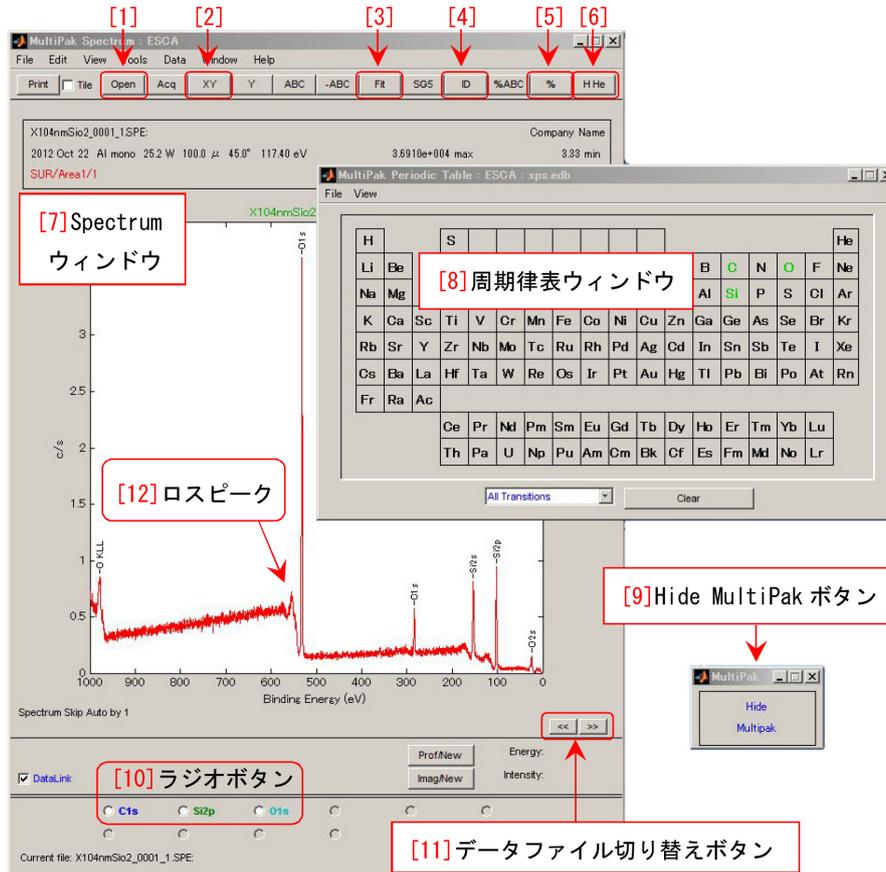


図0 MultiPak 初期ウィンドウ

PHI 5000 VersaProbe III 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。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 E [p.32] 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

<b>第 1 章</b>	<b>光電子スペクトルの解析</b>	<b>1</b>
1.1	光電子スペクトルの解析	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	複数元素の化学状態の定量	7
1.2.1	PET(ポリエチレンテレフタレート) 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クスポート	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
<b>第 2 章</b>	<b>スパッタリングデータの解析</b>	<b>13</b>
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	15
2.1.3	モニタージュビュアーによる立体表示	16

2.1.4	帯電補正 . . . . .	16
2.1.5	化学結合状態の同定 . . . . .	16
<b>第 3 章</b>	<b>マッピングデータの解析</b>	<b>17</b>
3.1	マッピングデータの読み込み . . . . .	17
3.2	単一ピークマッピングデータの解析 . . . . .	17
3.3	複数ピークによるマッピングデータの解析 . . . . .	18
3.3.1	スペクトルレンジ指定によるマップの抽出 . . . . .	18
3.3.2	マップ内の領域指定によるマップの抽出 . . . . .	19
<b>付録 A</b>	<b>帯電補正について</b>	<b>21</b>
A.1	帯電補正 . . . . .	21
A.1.1	帯電補正の概要 . . . . .	21
A.1.2	汚染物質による帯電補正 . . . . .	21
<b>付録 B</b>	<b>化学結合状態同定</b>	<b>23</b>
B.1	化学結合状態の同定 . . . . .	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	データベースのレンジ設定 . . . . .	23
B.1.4	化学結合状態の同定 . . . . .	24
<b>付録 C</b>	<b>NIST(National Institute of Standards and Technology) のデータベース利用法</b>	<b>25</b>
C.1	NIST のデータベースへのアクセスについて . . . . .	25
C.2	NIST データベースの使い方 . . . . .	25
C.2.1	NIST データベース内でのリンクの辿り方 . . . . .	25
C.2.2	Si2p ピークの検索例 . . . . .	26
C.2.3	データベースのソート . . . . .	27
<b>付録 D</b>	<b>実験データのデータベースへの登録</b>	<b>29</b>
D.1	東大 ARIM データベースへのアクセスについて . . . . .	31
<b>付録 E</b>	<b>Gnuplot のインストール方法と使い方</b>	<b>32</b>
E.1	古いバージョンのアンインストール . . . . .	32
E.2	バージョン 5.2.8 のダウンロード . . . . .	33
E.3	バージョン 5.2.8 のインストール . . . . .	34
E.4	Gnuplot の使い方 . . . . .	36
E.4.1	初歩的なグラフ描画 . . . . .	36
E.4.1.1	二次元のグラフ . . . . .	36
E.4.1.2	三次元のグラフ . . . . .	36
E.4.2	パラメーターをコマンドで指定するグラフ描画 . . . . .	37
E.4.2.1	二次元のグラフ . . . . .	37
E.4.2.2	三次元のグラフ . . . . .	37

---

E.4.2.3. 線の色と太さの指定 . . . . .	38
E.4.3 データをファイルから読み込んだでのグラフ描画 . . . . .	38
E.4.3.1. csv ファイルへのエクスポート . . . . .	38
E.4.3.2. データファイルの加工 . . . . .	39
E.4.3.3. Gnuplot 自動実行ファイル (gp ファイル) の作成と実行 . . . . .	40
E.4.4 画像データのエクスポート . . . . .	43
E.4.5 まとめ . . . . .	43
 索引	 45

# 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pek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 「Transition window」 (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pekトル	7
1.13	PET に対する炭素 1s の光電子pekトル	7
1.14	C1s spekトルのカーブフィット	8
1.15	C1s spekトルのピーク分離	8
1.16	pekトルをエクスポート	8
1.17	C1s spekトルの化学状態別組成比	8
1.18	C1s spekトルの化学状態別組成比	9
1.19	O1s spekトルのカーブフィット	9
1.20	O1s spek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 spekトルを読み込んだところ	11
1.27	4 つに分離された C1s spek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pekトル	11

2.1	ファイルセレクトウィンドウ . . . . .	13
2.2	スペクトルウィンドウとプロファイルウィンドウ . . . . .	14
2.3	Si2p ナロウスペクトルの表示 . . . . .	14
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 . . . . .	14
2.6	スペクトルを1つずつ表示したところ . . . . .	15
2.7	「Tools メニュー」の「Montage Viwer」をクリックする . . . . .	15
2.8	「Montage Viwer」の設定画面 . . . . .	15
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 . . . . .	17
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 <sub>2</sub> 単一ピークによるマッピング . . . . .	18
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 . . . . .	18
3.6	ふたつのピークから SiO <sub>2</sub> ピークの範囲を設定したところ . . . . .	18
3.7	抽出された SiO <sub>2</sub> マップ . . . . .	19
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 . . . . .	19
3.10	範囲選択による SiO <sub>2</sub> マップと単体 Si マップの抽出 . . . . .	19
3.11	選択範囲から抽出されたスペクトル . . . . .	20
3.12	図 3.10 「[3] Exit ボタン」をクリックしたところ . . . . .	20
3.13	単体 Si マップの表示色を赤に変えたところ . . . . .	20
3.14	SiO <sub>2</sub> と単体 Si を色分けしたマップ . . . . .	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 . . . . .	21
B.1	化学結合状態同定メニューの立ち上げ . . . . .	23
B.2	SiO <sub>2</sub> にアサインされた光電子ピーク . . . . .	23
B.3	p 型シリコンにアサインされた光電子ピーク . . . . .	23
C.1	Google で「XPS NIST」で検索する . . . . .	25
C.2	第 1 候補でヒットした「NIST XPS Database」をクリックする . . . . .	26
C.3	「Search Menu」をクリックする . . . . .	26
C.4	「Retrieve Data for a Selected Element」をクリックする . . . . .	26
C.5	Binding Energy にチェックを入れて「Go to Step 2」をクリックする . . . . .	26
C.6	周期律表の検索する元素記号をクリックする . . . . .	26
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 . . . . .	26
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 . . . . .	27

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 SiO <sub>2</sub> 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 . . . . .	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	データベース <a href="https://lcnet.t.u-tokyo.ac.jp/data_system/">https://lcnet.t.u-tokyo.ac.jp/data_system/</a> . . . . .	29
D.2	新規ユーザー登録 . . . . .	29
D.3	装置利用規程への承諾 . . . . .	30
D.4	登録フォーム (冒頭) . . . . .	30
D.5	登録フォーム (冒頭) . . . . .	30
E.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	32
E.2	「設定一覧」から「アプリ」をクリック . . . . .	32
E.3	古いバージョンの gnuplot をクリック . . . . .	32
E.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 . . . . .	33
E.5	確認メッセージが表示されるので「はい」をクリック . . . . .	33
E.6	正常に除されたことを示すメッセージ。「OK」をクリック . . . . .	33
E.7	Google で「Gnuplot Homepage」と入力 . . . . .	33
E.8	第 1 候補の「Gnuplot Homepage」をクリック . . . . .	33
E.9	Version 5.2 (prerevious stable) の「Release 5.2.8 (Dec 2019)」をクリック . . . . .	33
E.10	「gp528-win64-mingw.exe」をクリック . . . . .	33
E.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	34
E.12	「gp528-win64-mingw.exe」は, パソコンの「ダウンロード」のフォルダーにある . . .	34
E.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 . . . . .	34
E.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 . . . . .	34
E.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 . . . . .	34
E.16	情報ウィンドウが表示されたら「次へ (N)>」をクリック . . . . .	34
E.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 . . . . .	34
E.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 . . . . .	35
E.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 . . . . .	35
E.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 . . . . .	35
E.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 . . . . .	35
E.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 . . .	35
E.23	インストール中に表示されるウィンドウ . . . . .	35
E.24	情報ウィンドウが表示されたら「次へ (N)>」をクリック . . . . .	36
E.25	セットアップ完了メッセージ . . . . .	36
E.26	デスクトップ上に作成されたアイコン . . . . .	36
E.27	アイコンをダブルクリックして開く画面 . . . . .	36

E.28	「 $y = x^2 \sin x$ 」のグラフをプロットしたところ . . . . .	36
E.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 . .	36
E.30	$x$ のレンジを $-20 \sim 20$ に設定する「set xplane [-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 . . . . .	37
E.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 . . . . .	37
E.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 . . . . .	37
E.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	37
E.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	38
E.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 . . . . .	38
E.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 . . . . .	39
E.37	「Si_SiO2_2021_07_25_XPS.csv」をダブルクリックして開いたところ . . . . .	39
E.38	すべての列の幅を 11 桁にする . . . . .	39
E.39	すべての列に対して小数点以下の桁を 4 にする . . . . .	39
E.40	データ加工後のエクセルファイル . . . . .	39
E.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 . . .	40
E.42	「Si_SiO2_2021_07_25_XPS.dat」の中身 . . . . .	40
E.43	「Si_SiO2_2021_07_25_XPS_00.gp」の中身 . . . . .	41
E.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 . . . . .	41
E.45	ファイル名の変更 . . . . .	41
E.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 . . . . .	41
E.47	3次元グラフ描画のためのデータファイル . . . . .	42
E.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 . . . . .	42
E.49	3次元グラフの画像ファイルへのエクスポート . . . . .	42
E.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 . . . . .	43

# 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

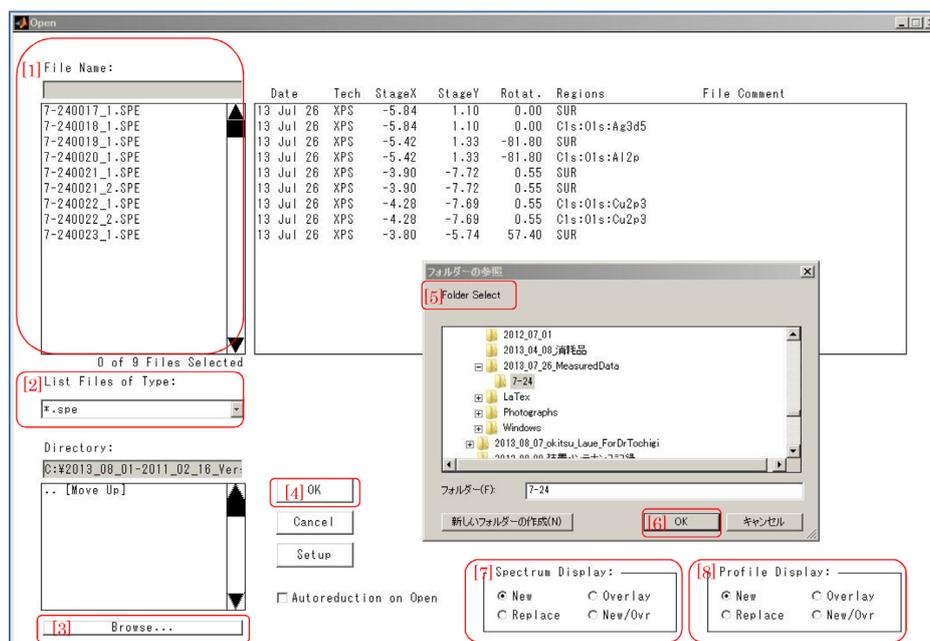


図 1.1 ファイルセレクトウィンドウ

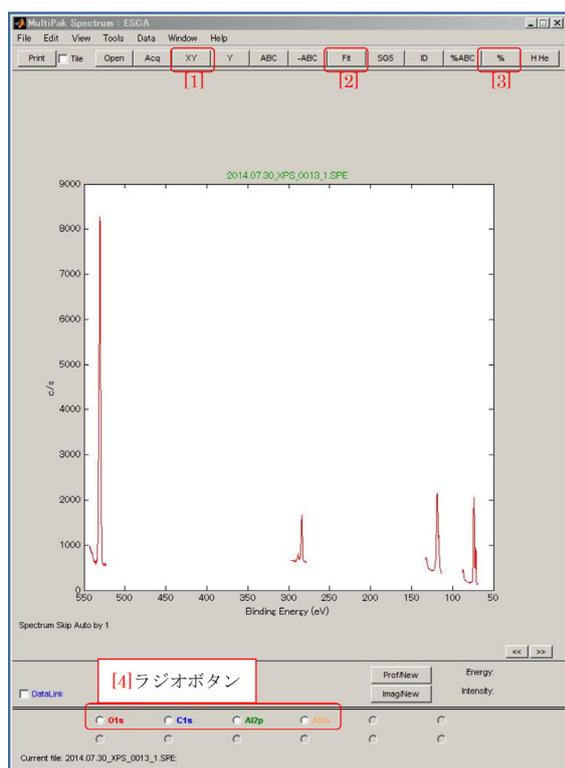


図 1.2 ナロウスペクトルの表示

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。

### 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

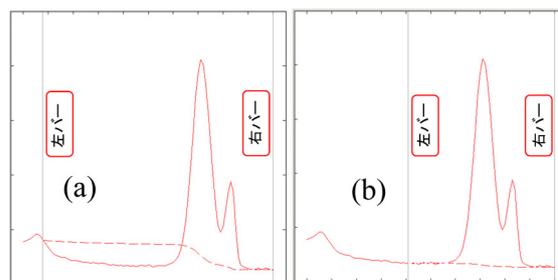
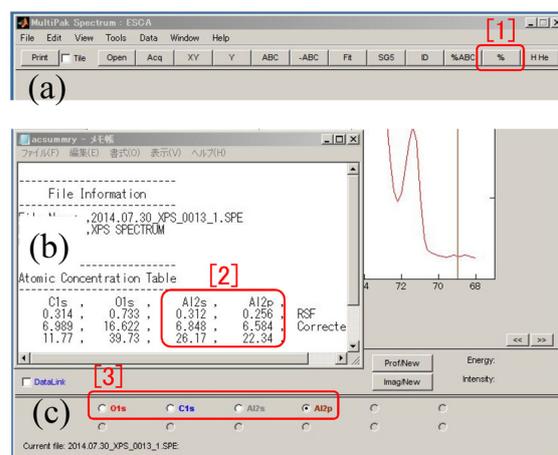


図 1.3 デフォルトのバックグラウンド (a) を (b) のように修正する

図 1.4 Al<sub>2</sub>s と 2p 両方のピークによる誤った定量結果

左右に右クリック&ドラッグすると、ピークの候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

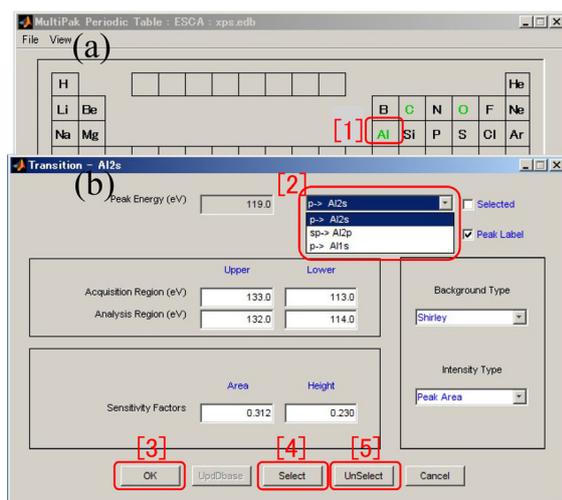


図 1.5 周期律表 (a) の「[1] Al」を [Shift] キーを押しながらクリックして表示された「Transition window」(b)

ラウンドを調整する必要がある。図 1.3 (a) 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&ドラッグして図 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

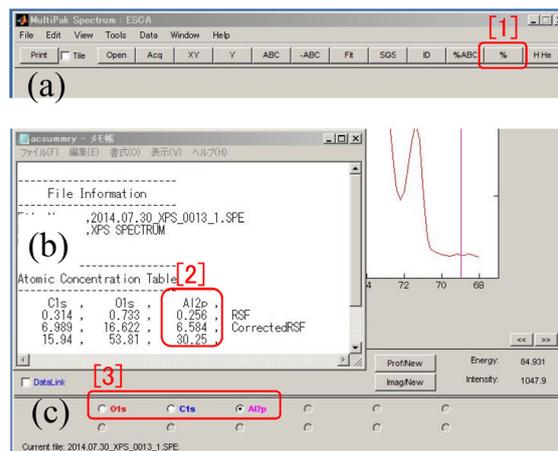


図 1.6 C1s,O1s,Al2p ピークによる定量結果

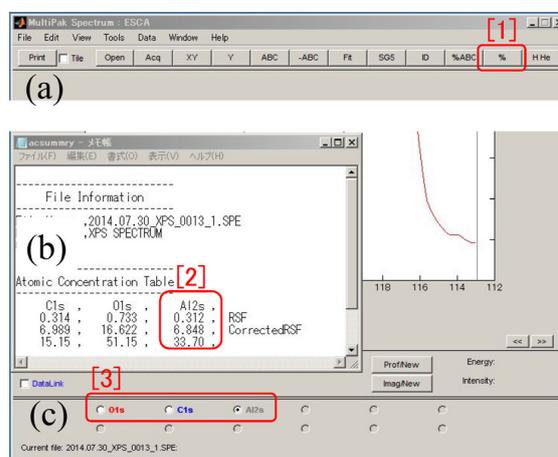


図 1.7 C1s,O1s,Al2s ピークによる定量結果

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

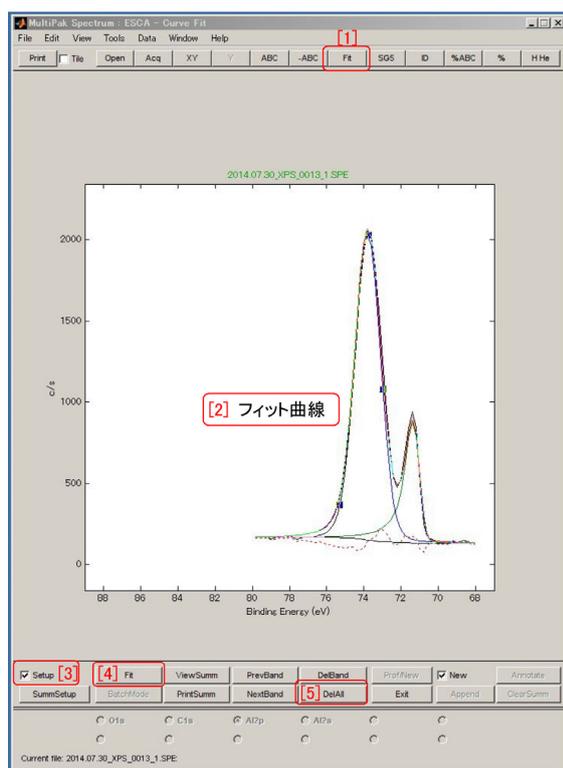


図 1.8 カーブフィットの開始

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で「[1] 左バー」、「[2] 右バー」をクリック&ドラッ

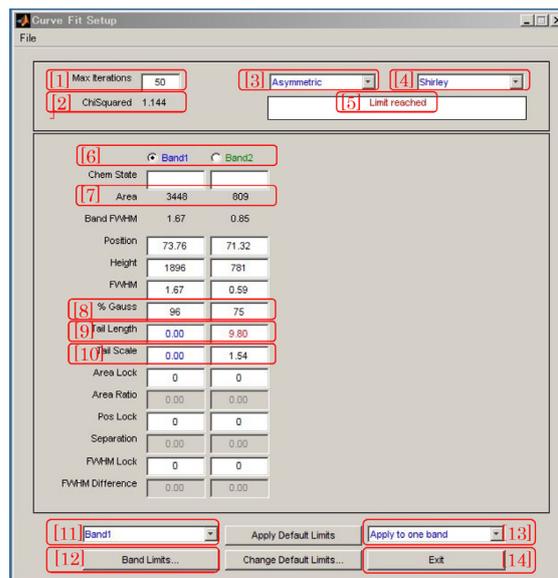


図 1.9 カーブフィット、セットアップ画面

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&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&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。

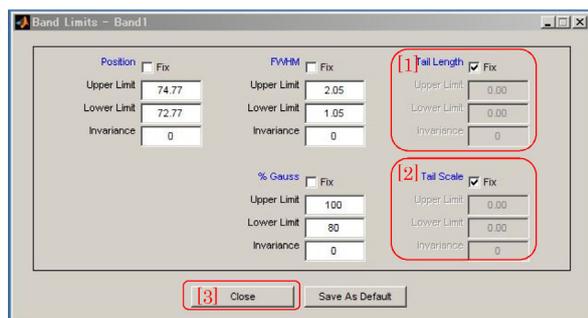


図 1.10 カーブフィット, バンドリミット設定画面

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」が観測される。SiO<sub>2</sub> 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、左側に観測されることになる。

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、ロスピークが観測される場合がある。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<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 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れている。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

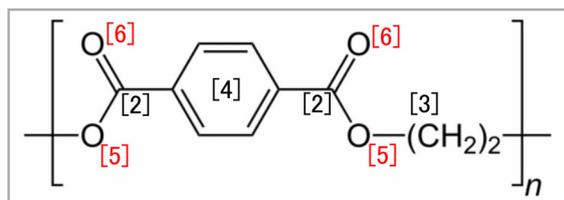


図 1.11 PET の分子構造 (Wikipedia より)

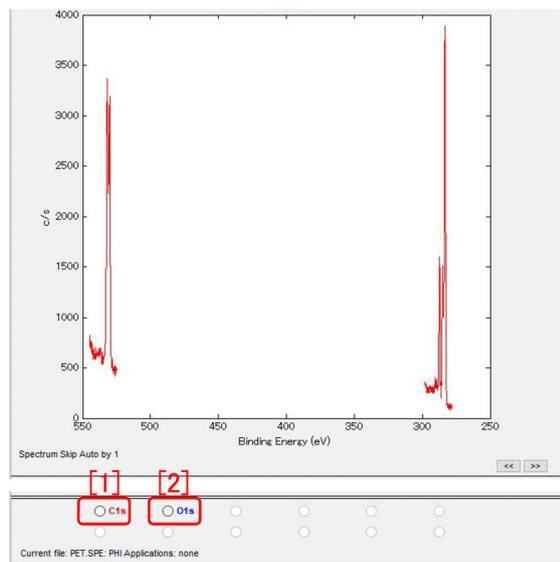


図 1.12 PET に対して取得したナロウスペクトル

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。

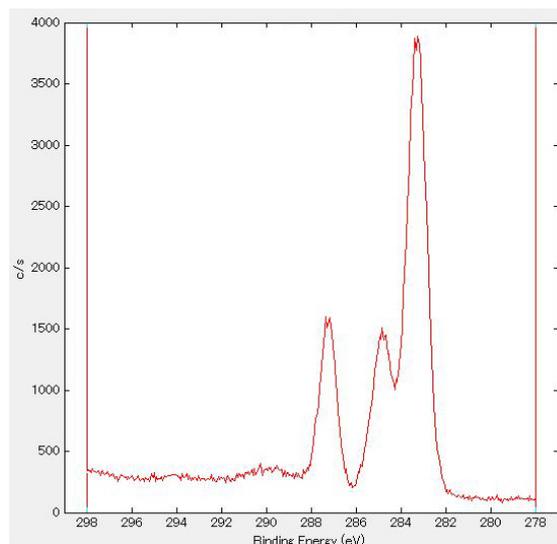


図 1.13 PET に対する炭素 1s の光電子スペクトル

## 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レート)について

ポリエチレンテレフタレート (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、§1.1.4 [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」

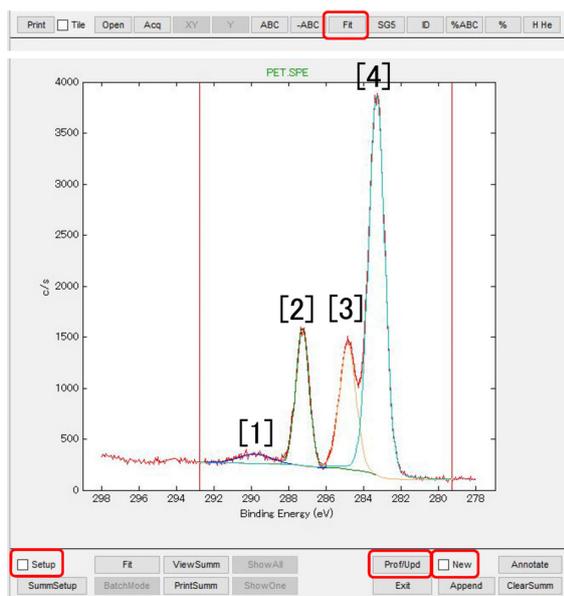


図 1.14 C1s スペクトルのカーブフィット

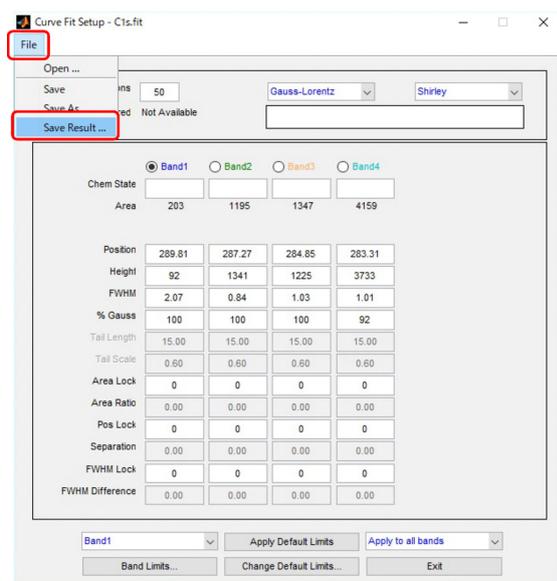


図 1.15 C1s スペクトルのピーク分離

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 §1.3 [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

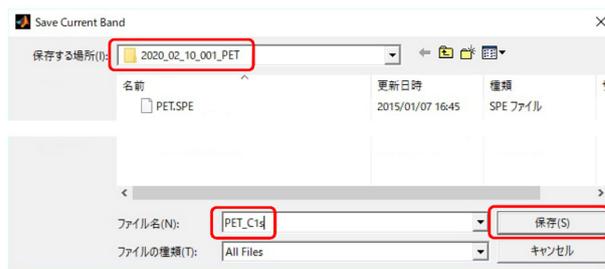


図 1.16 スペクトルをエクスポート

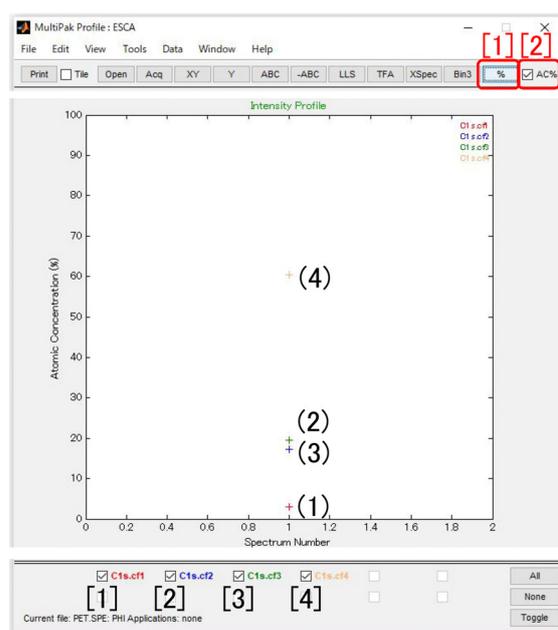


図 1.17 C1s スペクトルの化学状態別組成比

「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

Abscissa	C1s.cf1	C1s.cf2	C1s.cf3	C1s.cf4	RSF	CorrectedRSF
1.00	0.314	0.314	0.314	0.314		
	2.008	2.008	2.008	2.008		
	2.91	17.24	19.51	80.33		

図 1.18 C1s スペクトルの化学状態別組成比

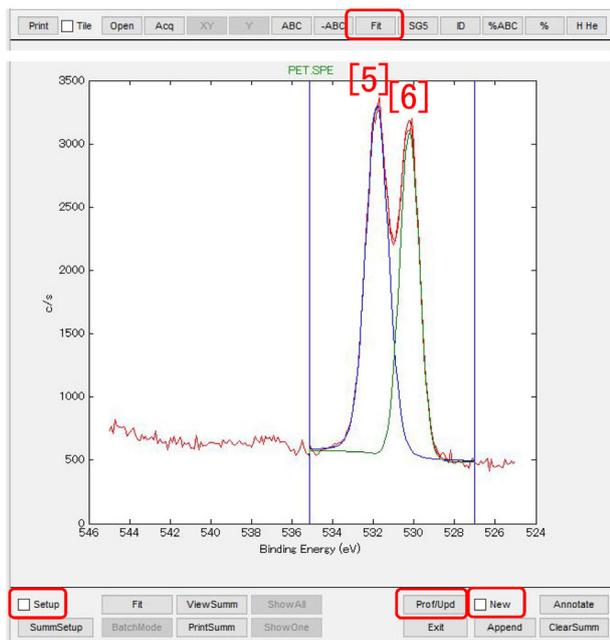


図 1.19 O1s スペクトルのカーブフィット

たときの相対感度因子、「Corrected RSF」は、装置関数とパル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、§1.1.4 [p.4] の記述にしたがってカーブ

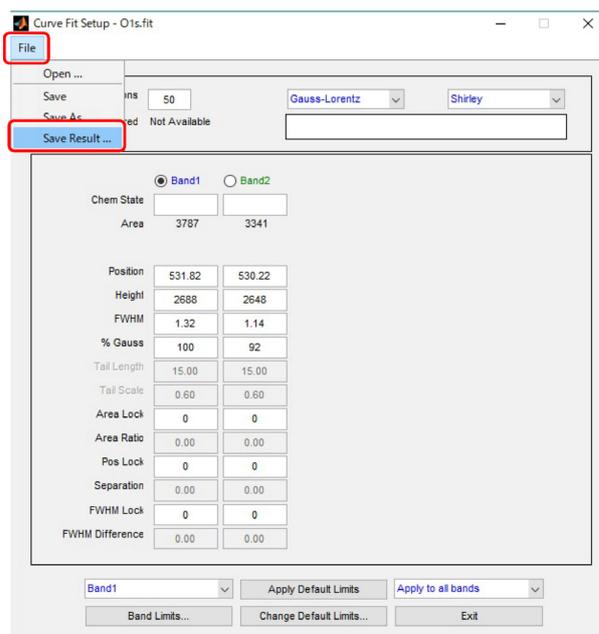


図 1.20 O1s スペクトルのピーク分離

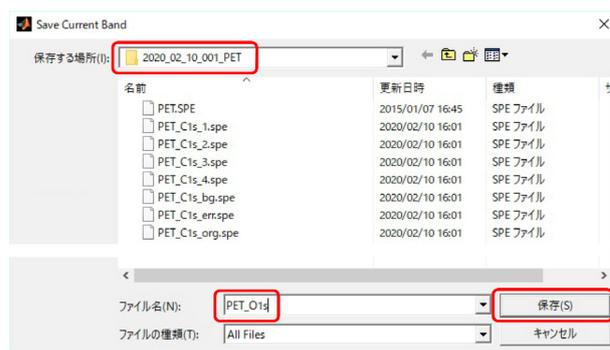


図 1.21 ファイル名指定ウィンドウ

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

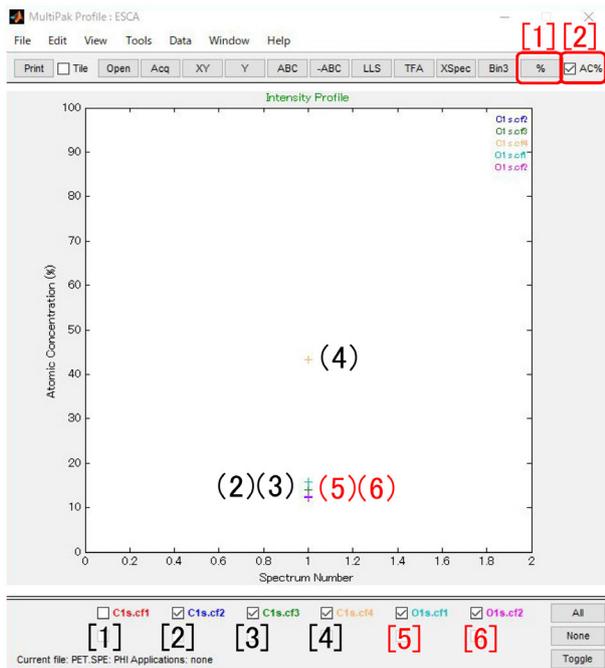


図 1.22 炭素と酸素の化学状態別組成比

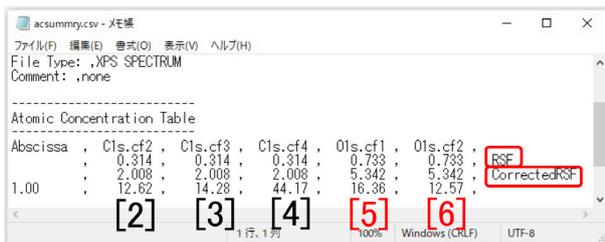


図 1.23 炭素と酸素の化学状態別組成比

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。

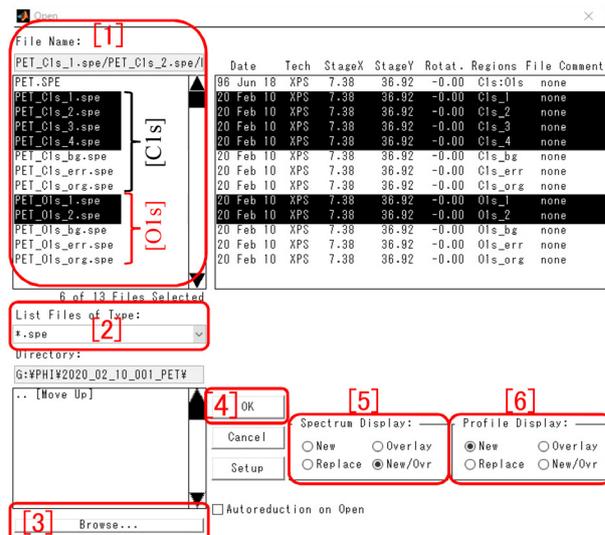


図 1.24 「MultiPak」読み込みファイル表示画面

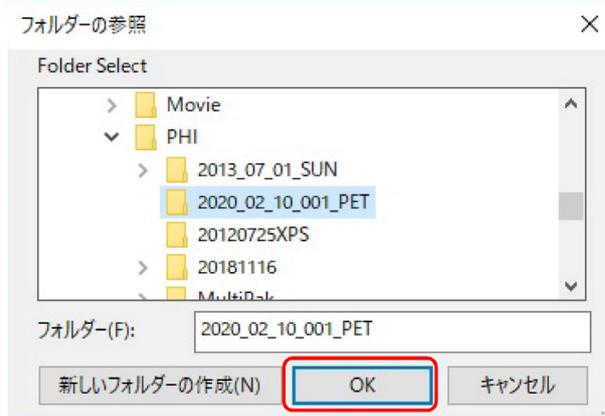


図 1.25 フォルダ選択画面

### 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 'MultiPak' 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]」に対応する分離され

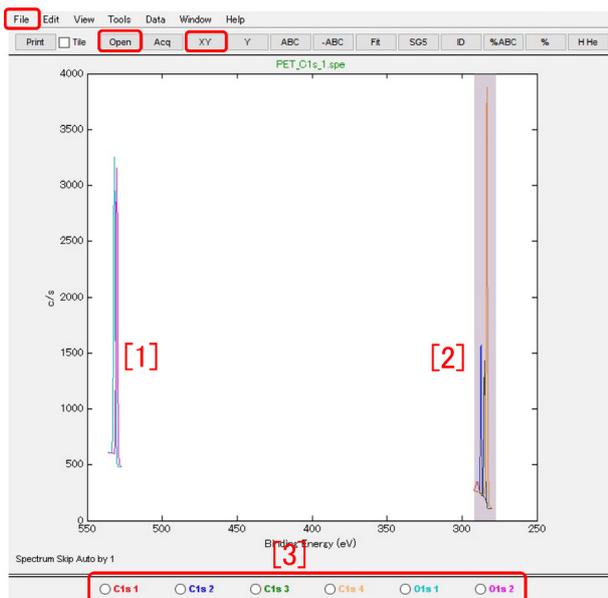


図 1.26 PET の O1s, C1s スペクトルを読み込んだところ



図 1.28 ファイル名指定ウィンドウ

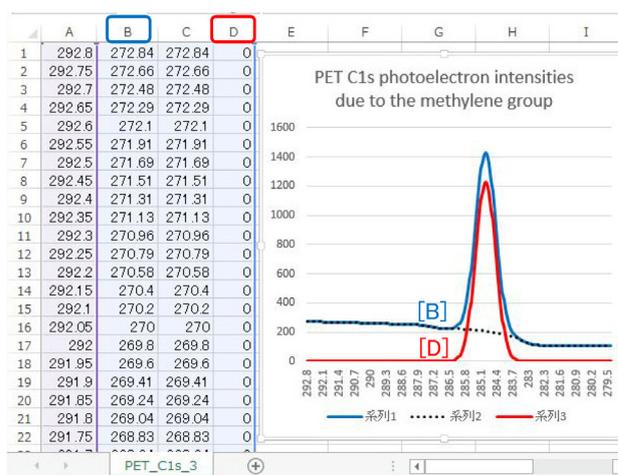


図 1.29 エクセルで読み込み描画したスペクトル

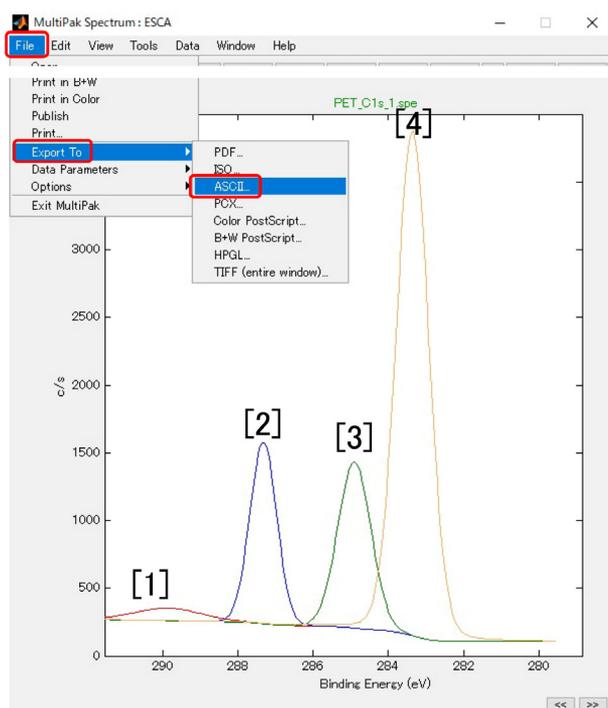


図 1.27 4つに分離された C1s スペクトル

たスペクトルと、バックグラウンド (\_bg.spe), 残差 (\_err.spe) および測定されたままのスペクトル (\_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 1.26 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ASCII形式でのエクスポート

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、この名前で作成される。

### 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

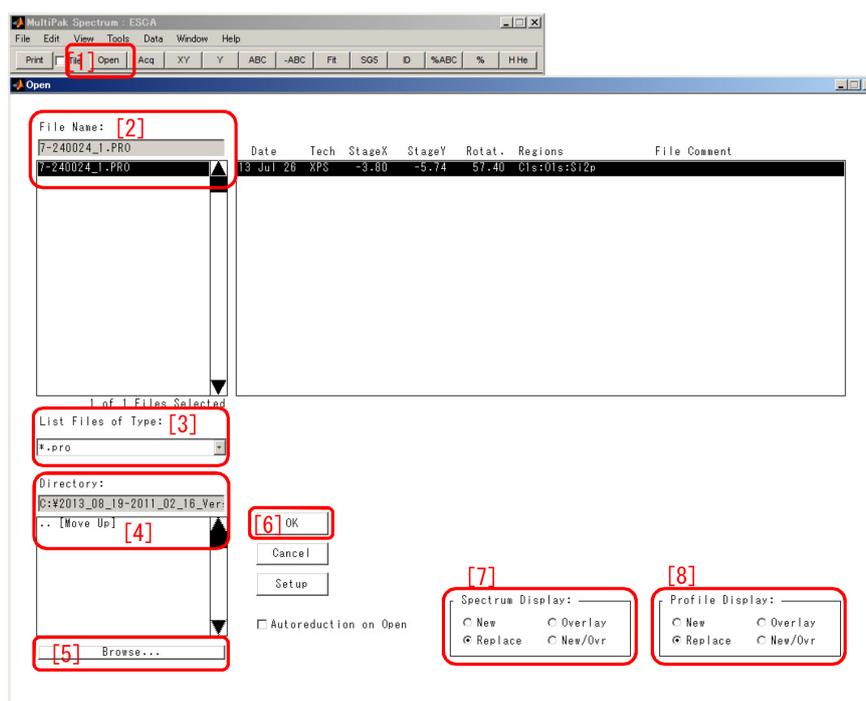


図 2.1 ファイルセレクトウィンドウ

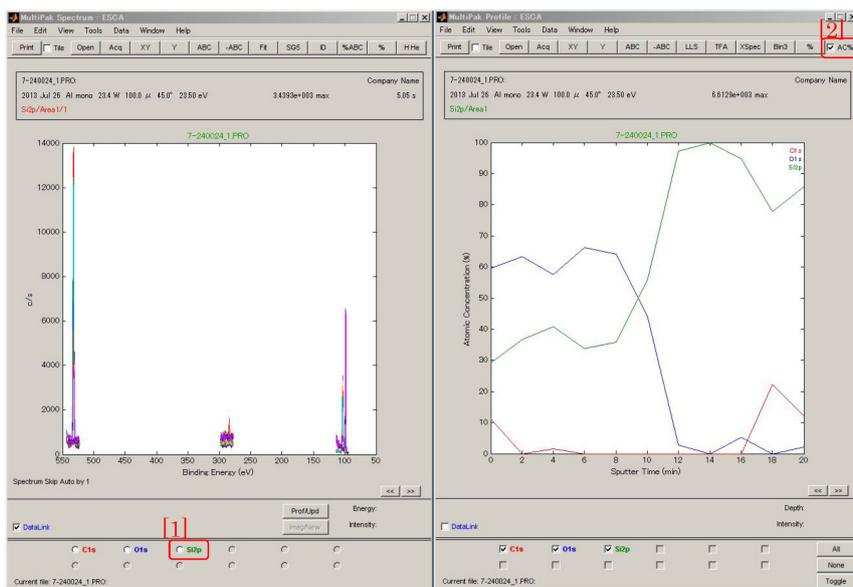


図 2.2 スペクトルウィンドウとプロファイルウィンドウ

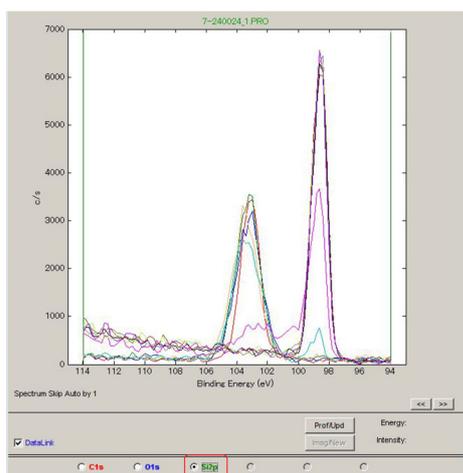


図 2.3 Si2p ナROWSPECTRUMの表示

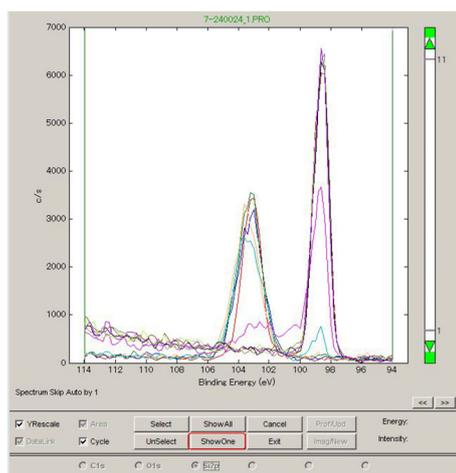


図 2.5 スペクトル選択スクロールバーが表示されたところ

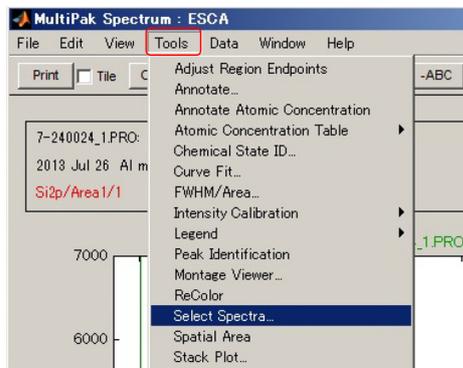


図 2.4 「Tools」メニューから「Select Spectra サブメニュー」を選択したところ

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

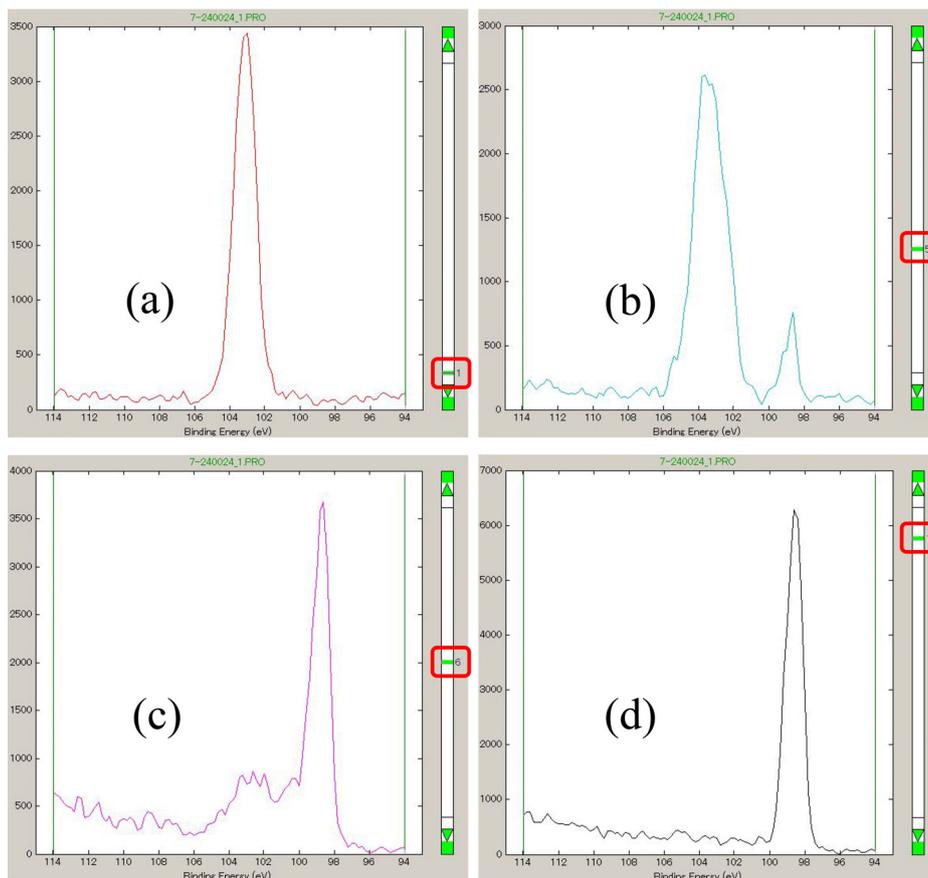


図 2.6 スペクトルを1つずつ表示したところ

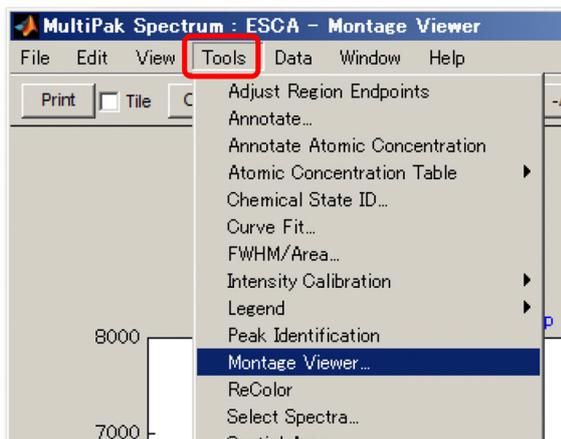


図 2.7 「Toolsメニュー」の「Montage Viwer」をクリックする

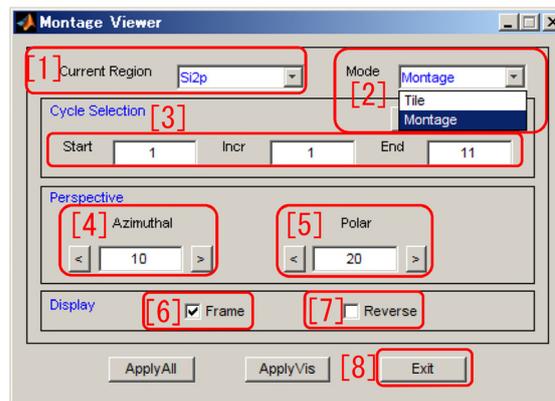


図 2.8 「Montage Viwer」の設定画面

### 2.1.2 ナROWSPE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」をクリックすると、図 2.5 のようにスペクトルの右側にス

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。

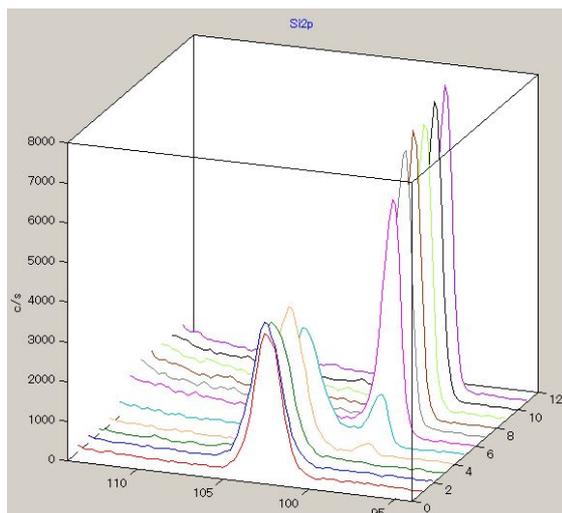


図 2.9 スパッタリングを繰り返して取得したスペクトルが立体表示されます

クローラバーが表示される。

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 モンタージュビュー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 Viewer」をクリックすると図 2.8 が表示される。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 [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ー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:

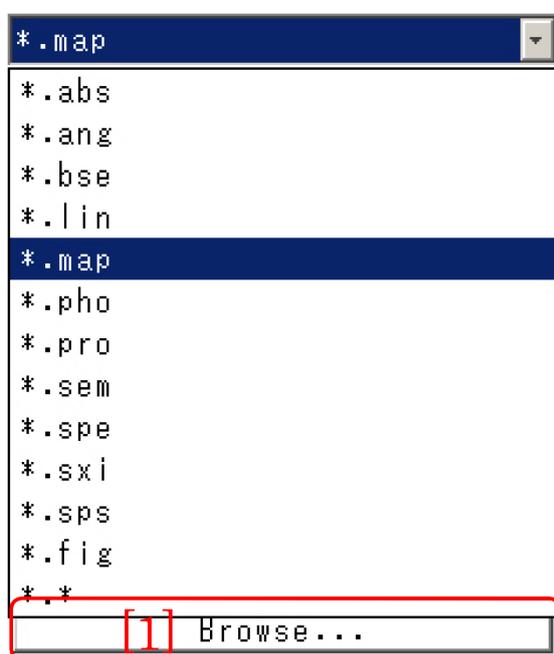


図 3.1 ファイルタイプセレクトウィンドウ

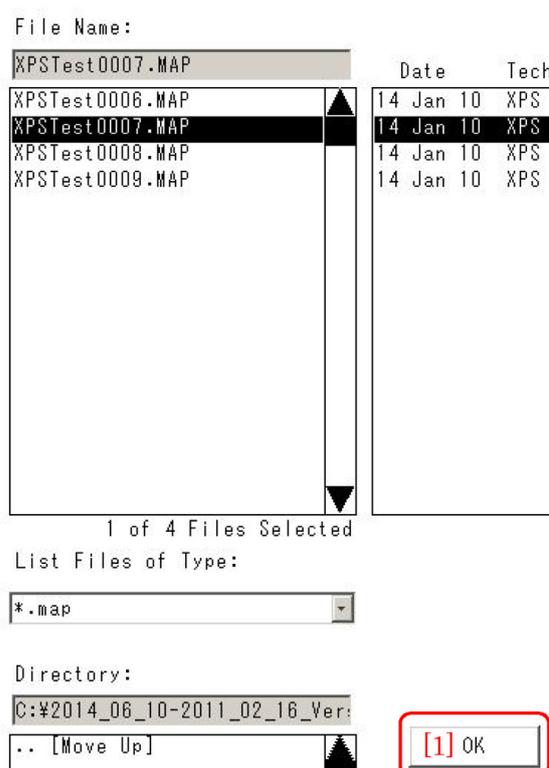


図 3.2 ファイルオープンウィンドウ

### 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ら「[4]

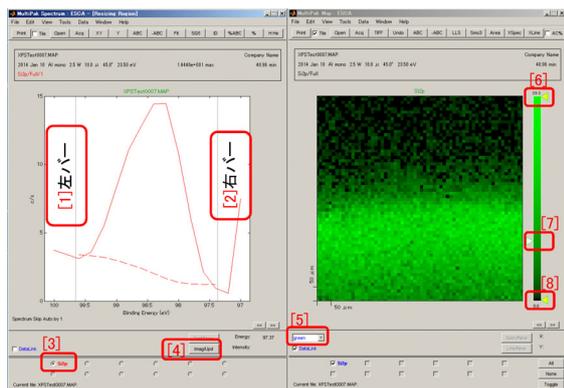


図 3.3 Spectrum ウィンドウと Map ウィンドウ。Si2p, 単体シリコン単一ピークによるマッピング

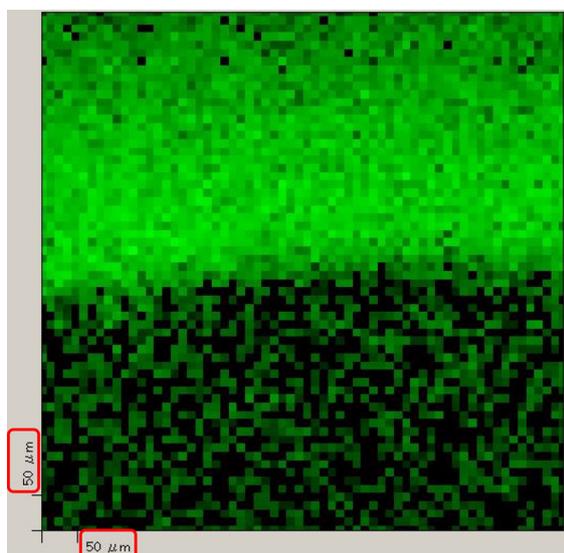


図 3.4 Si2p, SiO<sub>2</sub> 単一ピークによるマッピング

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<sub>2</sub> 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。

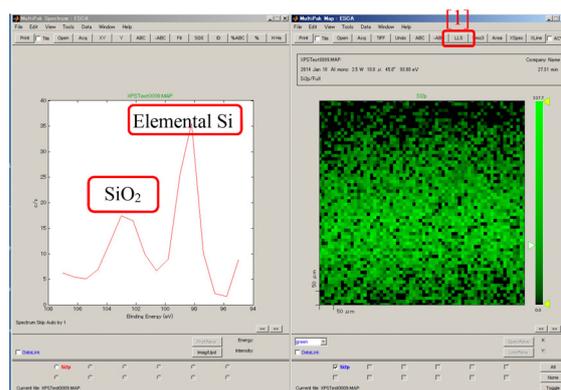


図 3.5 複数ピークによるマッピングデータを開いたところ

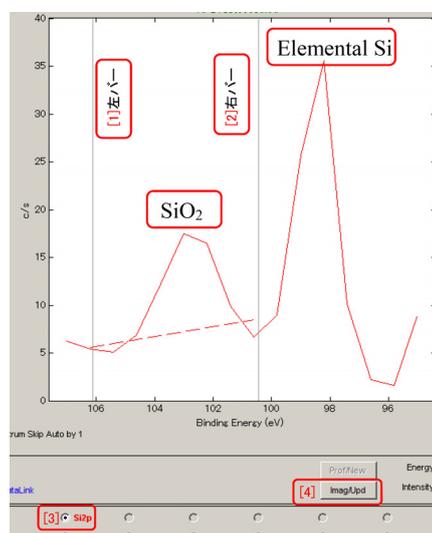


図 3.6 ふたつのピークから SiO<sub>2</sub> ピークの範囲を設定したところ

### 3.3 複数ピークによるマッピングデータの解析

#### 3.3.1 スペクトルレンジ指定によるマップの抽出

図 3.5 は、Si2p, SiO<sub>2</sub> 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] 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 SiO<sub>2</sub> ピークの範囲を選択したところである。このあと右下「4] Imag/Upd ボタン」をクリックすると、図 3.7 の

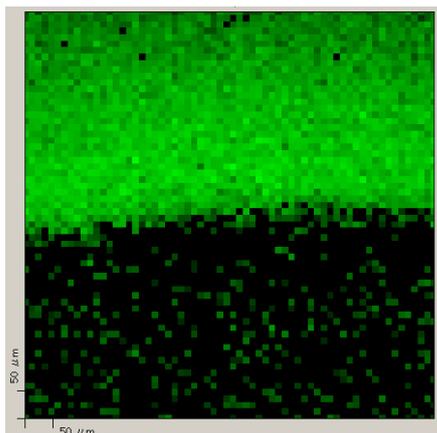
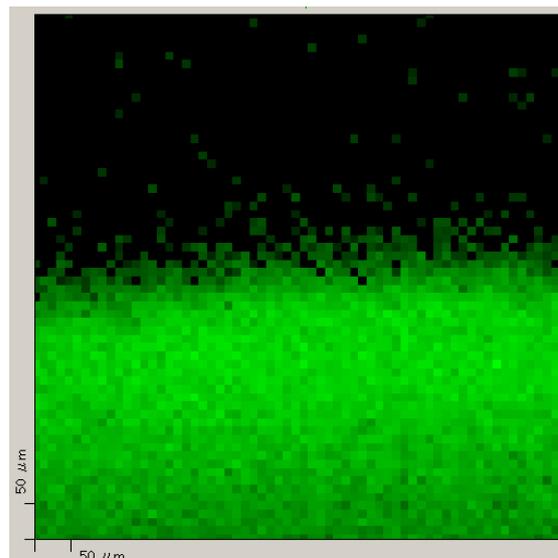
図 3.7 抽出された SiO<sub>2</sub> マップ

図 3.9 抽出された単体 Si マップ

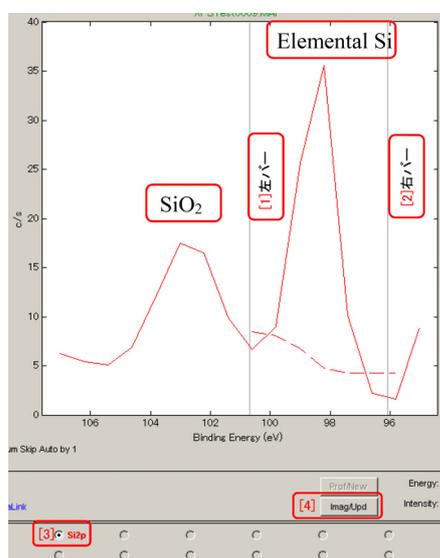
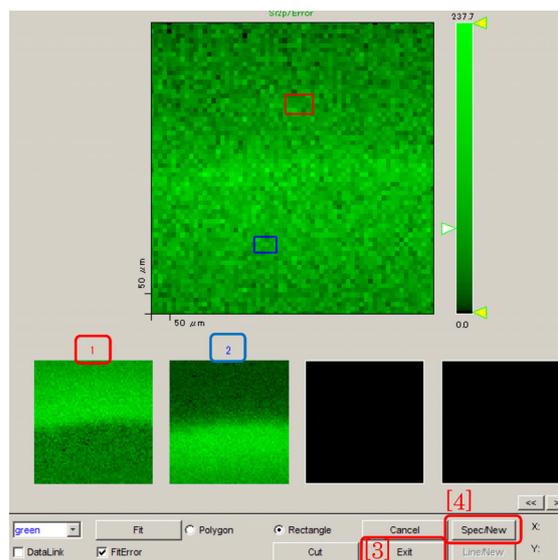


図 3.8 ふたつのピークから単体 Si ピークの範囲を設定したところ

図 3.10 範囲選択による SiO<sub>2</sub> マップと単体 Si マップの抽出

ように SiO<sub>2</sub> 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<sub>2</sub> 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 3.10 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

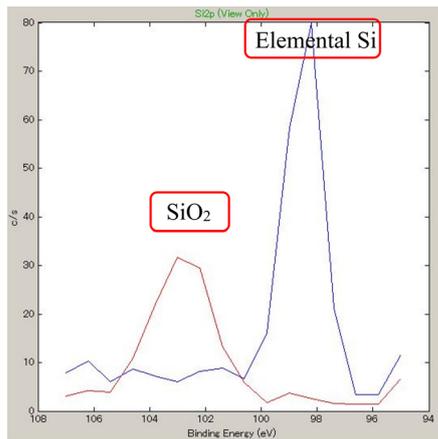


図 3.11 選択範囲から抽出されたスペクトル

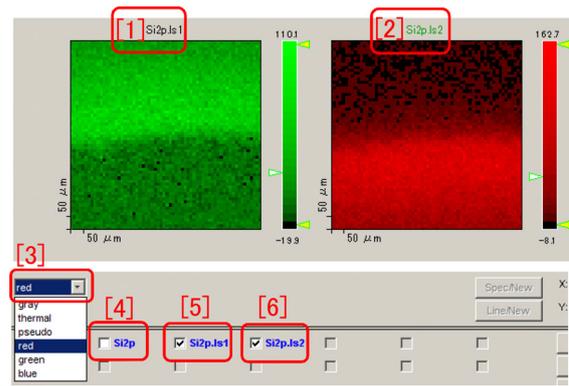


図 3.13 単体 Si マップの表示色を赤に変えたところ

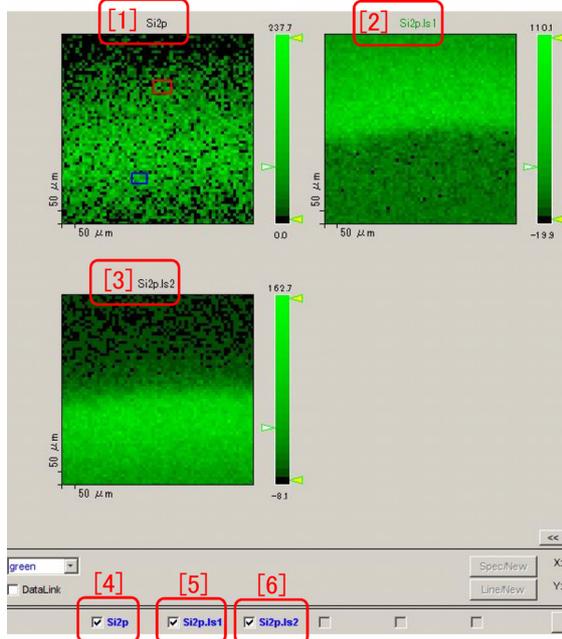
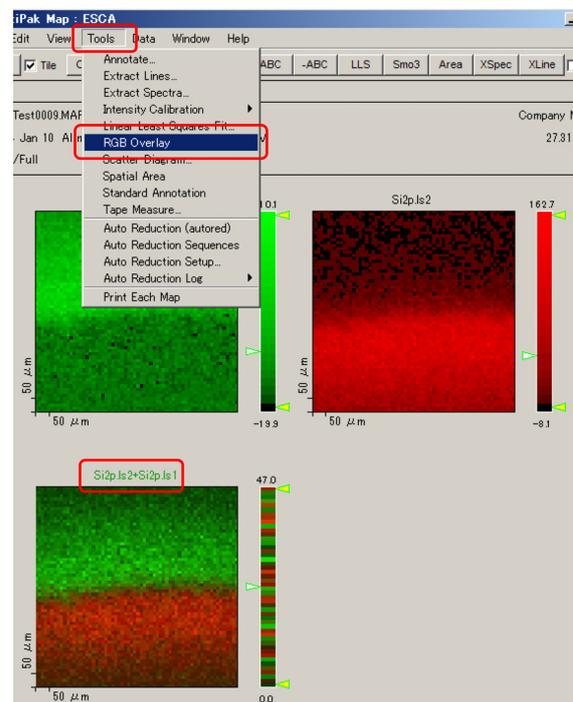


図 3.12 図 3.10 「[3] Exit ボタン」をクリックしたところ

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

クスからチェックを外し、「[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

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のように、SiO<sub>2</sub> 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

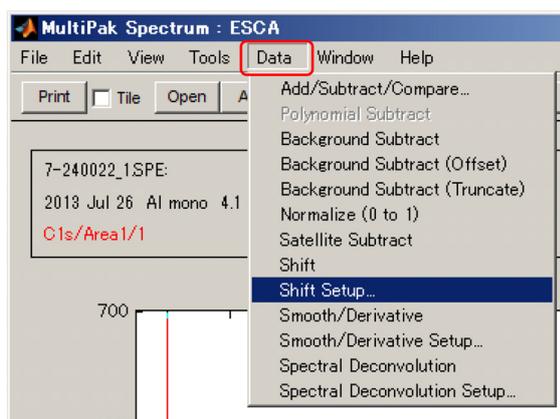


図 A.1 帯電補正メニューの立ち上げ

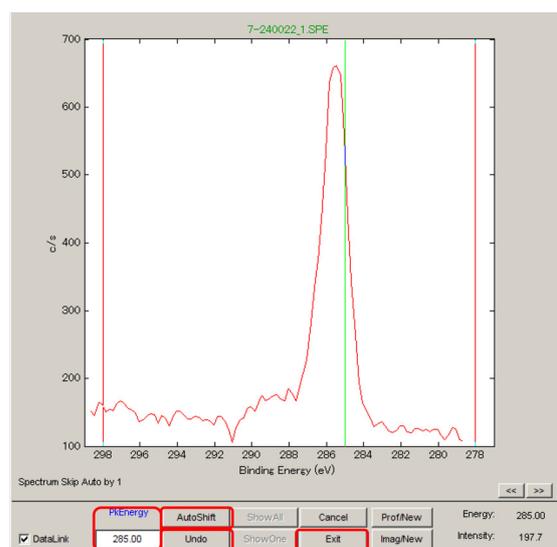


図 A.2 帯電補正画面

### 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除去されており、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レート (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 (およびオーグ電子)

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 ~ 285.0eV 程度で、284.8eV 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、284.8eV 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

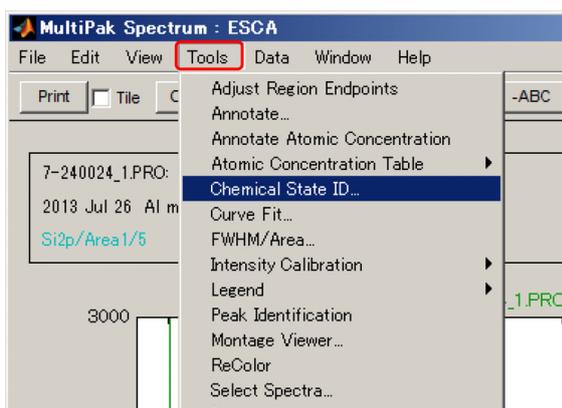


図 B.1 化学結合状態同定メニューの立ち上げ

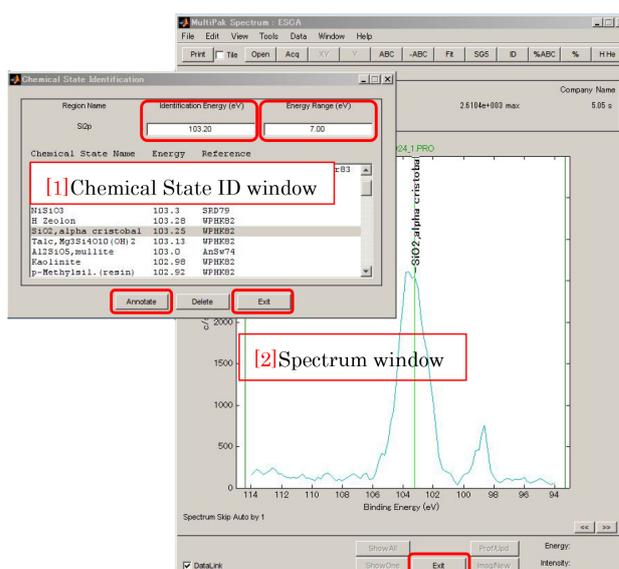


図 B.2 SiO<sub>2</sub> にアサインされた光電子ピーク

## 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で、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ある。

「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

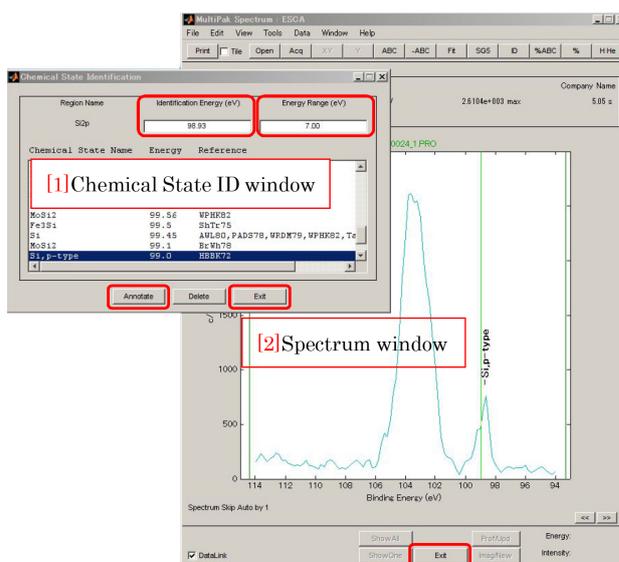


図 B.3 p 型シリコンにアサインされた光電子ピーク

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<sub>2</sub>(α クリストバライト) 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 D.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 D.2 [p.29] 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る。元素記号をクリックすることにより、その元

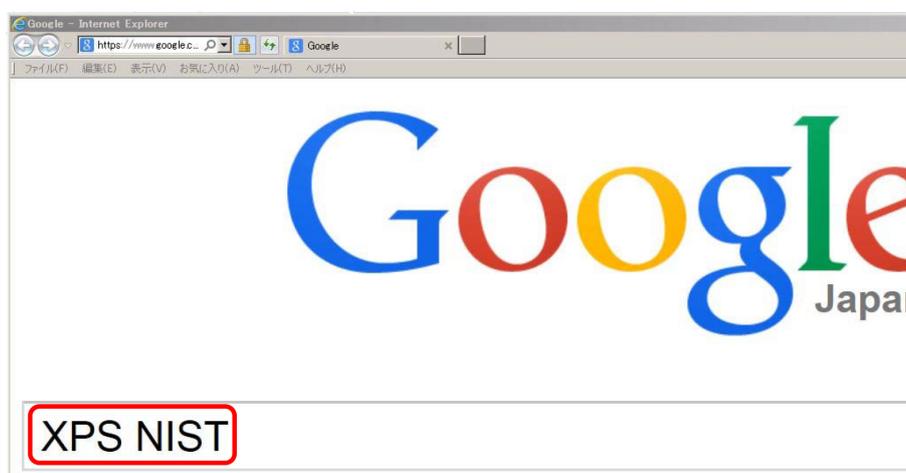


図 C.1 Google で「XPS NIST」で検索する

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

[srdata.nist.gov/xps/](http://srdata.nist.gov/xps/) ▾ 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

The screenshot shows the NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy Database homepage. On the left is a navigation menu with 'Search Menu' highlighted. The main content area displays the database title and version (20, Version 4.1). On the right, there are options to 'Retrieve data for a selected element' and a 'Step 1. Choose type of data:' section where 'Binding Energy' is selected. A 'Go to Step 2' button is also visible.

図 C.3 「Search Menu」をクリックする

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

This screenshot shows the search results page. The left navigation menu is visible. The main content area lists several options, with 'Retrieve Data for a Selected Element' highlighted in a red box.

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

The screenshot shows a periodic table with the element Silicon (Si) highlighted in a red box. Above the table, it says 'Step 2. Select an element for binding energy:'. The table is color-coded by groups: IA, IIA, IIIB, IVB, VB, VIB, VIIB, VIII, IB, IIB, IIIA, IVA, VA, VIA, VIIA, VIIIA.

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:  
Click on checkbox(s) and then click on Search button to retrieve data for desired line(s).

1s  2p  2p, sat  2p,sat  2p1/2  2p3/2  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

素を含む物質の XPS データにアクセスすることができる。

### 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。

図 C.8 の上から第 4 行目は、単体 Si の 2p 光

Si	2p	SiC	100.80	<a href="#">Click</a>
Si	2p	SiC	100.70	<a href="#">Click</a>
Si	2p	SiC	100.40	<a href="#">Click</a>
Si	2p	Si	99.20	<a href="#">Click</a>
Si	2p	Si	99.60	<a href="#">Click</a>
Si	2p	Si	99.30	<a href="#">Click</a>

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
Classes:	element, II-VI semiconductor, IV semiconductor
Citation:	
Author Name(s):	Finster J., Klinkenberg E.-D., 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

Si	2p	(-Si(CH3)(C6H5)O)-n	102.10	<a href="#">Click</a>
Si	2p	(Si(CH3)(C6H5)-O)-n	102.10	<a href="#">Click</a>
Si	2p	SiO2	103.80	<a href="#">Click</a>
Si	2p	SiO2	103.70	<a href="#">Click</a>
Si	2p	SiO2	103.40	<a href="#">Click</a>
Si	2p	SiO2	103.20	<a href="#">Click</a>
Si	2p	SiO2	103.50	<a href="#">Click</a>

図 C.10 データベースに登録されている SiO<sub>2</sub> 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

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「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

General:	
Element:	Si
Formula:	SiO2
XPS Formula:	
Name:	silicon(IV) dioxide
CAS Registry No:	7631-86-9
Classes:	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	Formula	Energy (eV)	Details ?
Si	2p	Tm/Si	98.00	<a href="#">Click</a>
Si	2p	Tm/Si	98.00	<a href="#">Click</a>
Si	2p	Gd5Si3	98.10	<a href="#">Click</a>
Si	2p	Si	98.40	<a href="#">Click</a>
Si	2p	Si/Ba	98.40	<a href="#">Click</a>
Si	2p	FeSi	98.60	<a href="#">Click</a>
Si	2p	GdSi	98.60	<a href="#">Click</a>

図 C.12 データベースのソート

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<sub>2</sub> の Si2p 光電子ピークが 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. Interface 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] Spec-

tral Line」 「[2] Formula」 「[3] Energy を昇冪 (しょうべき) ないしは降冪 (こうべき) の (eV)」 をクリックすることにより, データ 順に, 並べ替えることができる。

## 付録 D

# 実験データのデータベースへの登録



図 D.1 データベース [https://lcnet.t.u-tokyo.ac.jp/data\\_system/](https://lcnet.t.u-tokyo.ac.jp/data_system/)



図 D.2 新規ユーザー登録

(準拠法、裁判管轄)

第18条  
この約款の成立、効力、履行及び解釈に関しては、特段の定めのない限り日本国法に準拠するものとします。

2 この約款、ARIM共用設備等の利用に関する一切の紛争については、東京地方裁判所を第一審の専属管轄裁判所とします。  
附則  
この約款は、令和5年1月23日から適用します。

[1]  利用規則に同意する

[2] [利用者登録画面へ進む](#)

図 D.3 装置利用規程への承諾

## ご利用登録フォーム

当部門の設備利用申請には事前に利用者登録が必要です。  
下記のフォームより必要事項をご記入の上、登録してください。

### 利用申請者情報

氏名	姓	沖津	名	康平
フリガナ	セイ	オキツ	メイ	コウヘイ

所属機関  東京大学の方  学外の方

学部・学科

例：大学院工学系研究科〇〇専攻  
工学部〇〇科

研究室名

図 D.4 登録フォーム (冒頭)

メールアドレス

※確認用

生年  ▼

パスワード

[確認画面へ](#)

図 D.5 登録フォーム (冒頭)

## D.1 東大 ARIM データベースへのアクセスについて

以下は、東大 ARIM プロジェクトデータベースの URL である。[https://lcnet.t.u-tokyo.ac.jp/data\\_system/](https://lcnet.t.u-tokyo.ac.jp/data_system/) VersaProbe III の利用料金は、このデータベースに、実験データを登録することにより、\4,000/h となる。何らかの事情で登録しない場合の利用料金は、\8,000/h である。

装置利用の申請が受け付けられると、課題番号とユーザー ID およびパスワードが提供される。

## 付録 E

# Gnuplot のインストール方法と使い方

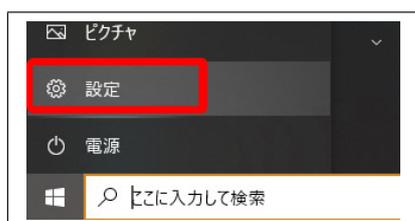


図 E.1 Windows 画面左下の「スタートボタン」をクリック。下から 2 番目の「設定」をクリック



図 E.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。

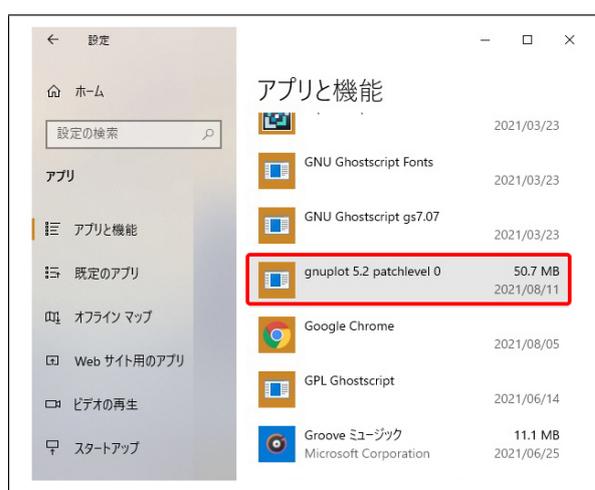


図 E.3 古いバージョンの gnuplot をクリック

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。

### E.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 E.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 E.2 が開くので, 「アプリ」をクリックする。図 E.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 E.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 E.4 (b) が表示されるので, ここでも「アンインストール」をクリックする。図 E.5 が



図 E.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

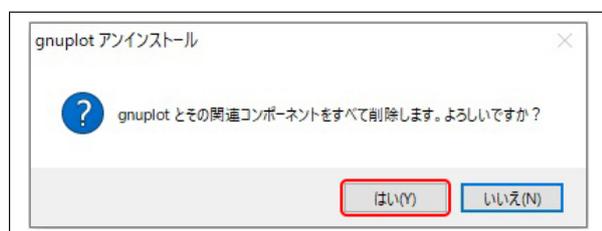


図 E.5 確認メッセージが表示されるので「はい」をクリック

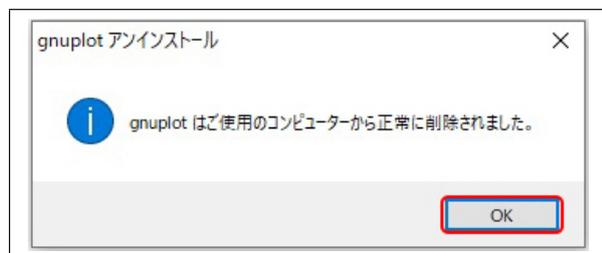


図 E.6 正常に除されたことを示すメッセージ。「OK」をクリック



図 E.7 Google で「Gnuplot Homepage」と入力



図 E.8 第 1 候補の「Gnuplot Homepage」をクリック

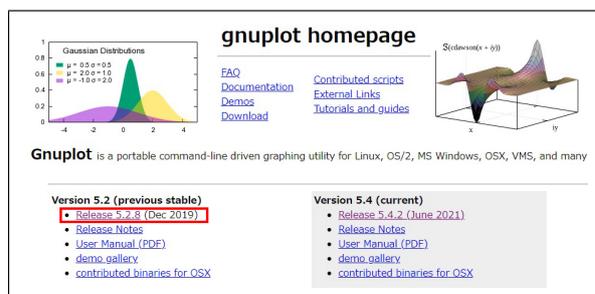


図 E.9 Version 5.2 (prerevious stable) の「Release 5.2.8 (Dec 2019)」をクリック

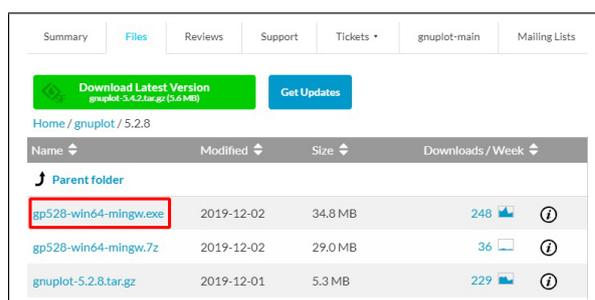


図 E.10 「gp528-win64-mingw.exe」をクリック

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 E.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。

## E.2 バージョン 5.2.8 のダウンロード

図 E.7 は Google で「Gnuplot Homepage」と入力したところである。図 E.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 E.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 E.10 が表示されたら、「gp528-win64-mingw.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の右上に図 E.11 が表示される。こ

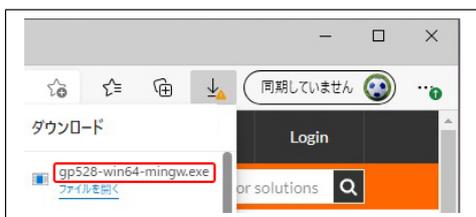


図 E.11 「gp528-win64-mingw.exe」のダウンロードが終了するとブラウザに右上に表示される



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

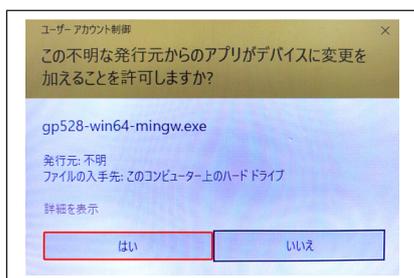


図 E.13 セキュリティの警告が出るが「はい」をクリックして続行

ここで「ファイルを開く」はクリックしない。

### E.3 バージョン 5.2.8 のインストール

「gp528-win64-mingw.exe」は、図 E.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、セキュリティの警告が図 E.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 E.14-図 E.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 E.14 では「日本語」のまま「OK」、図 E.15 では「同意する」にチェックを入れて「次へ (N)>」、

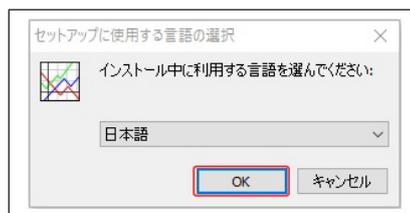


図 E.14 言語選択は日本語になっているのでそのまま「OK」をクリック

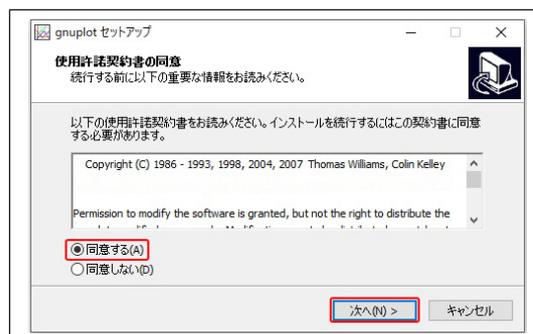


図 E.15 使用許諾契約書で「同意書」にチェックを入れて「次へ (N)>」をクリック

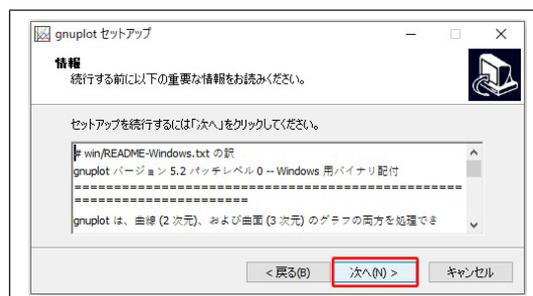


図 E.16 情報ウィンドウが表示されたら「次へ (N)>」をクリック

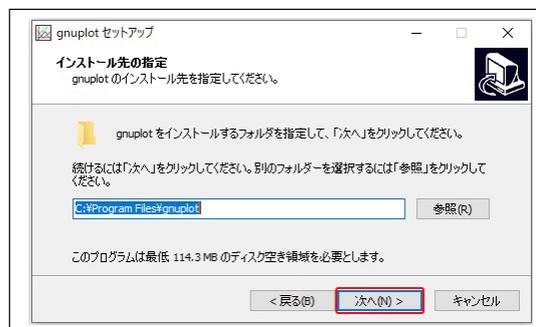


図 E.17 インストールの設定ウィンドウが表示されたら「次へ (N)>」をクリック

図 E.16, E.17, E.18, E.19 では、「次へ (N)>」を

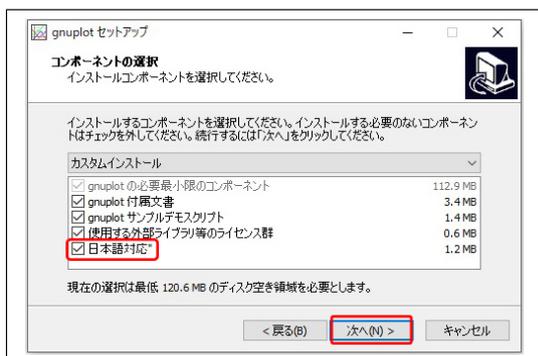


図 E.18 コンポーネントの選択ウィンドウが表示されたら「次へ (N)>」をクリック

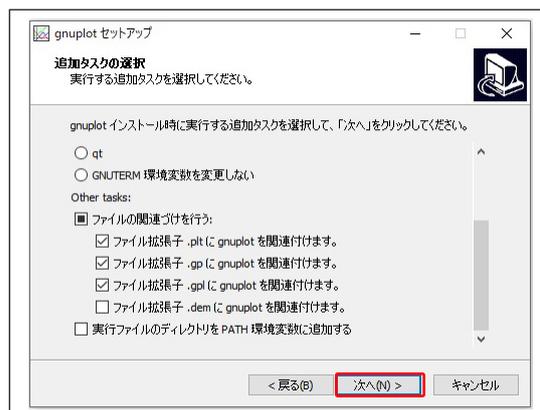


図 E.21 追加タスクの選択ウィンドウが表示されたら「次へ (N)>」をクリック



図 E.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

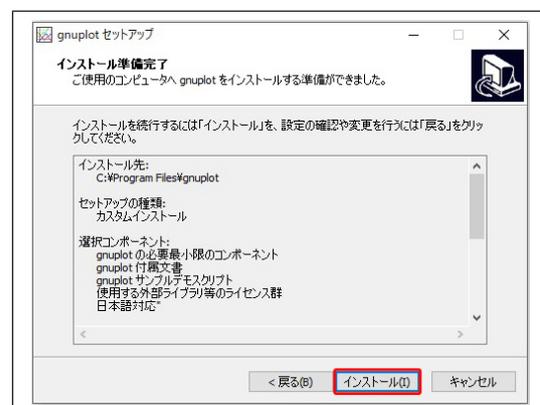


図 E.22 インストールの準備完了ウィンドウが表示されたら「インストール」をクリック

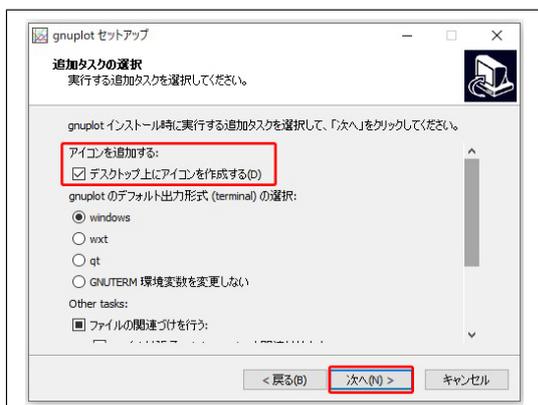


図 E.20 追加タスクの選択ウィンドウが表示されたら「デスクトップ上にアイコンを作成」にチェックを入れ「次へ (N)>」をクリック

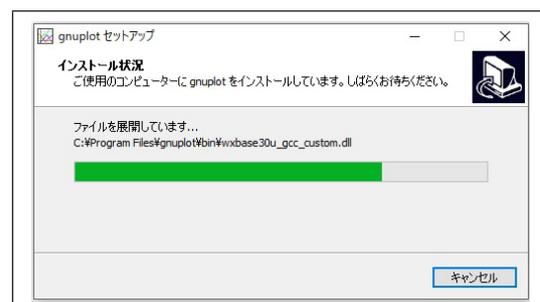


図 E.23 インストール中に表示されるウィンドウ

をクリックする。ただし、図 E.18 では、「日本語対応」にチェックを入れる。図 E.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 E.21 では、そのまま「次へ (N)>」、図 E.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 E.23 が表示される。図 E.24 では、そのまま「次へ (N)>」をクリックする。図 E.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 E.26 のアイコンが新しく表示される。

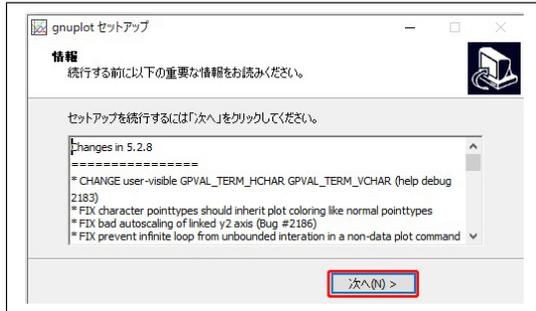


図 E.24 情報ウィンドウが表示されたら「次へ(N)>」をクリック



図 E.25 セットアップ完了メッセージ



図 E.26 デスクトップ上に作成されたアイコン



図 E.27 アイコンをダブルクリックして開く画面

## E.4 Gnuplot の使い方

### E.4.1 初歩的なグラフ描画

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

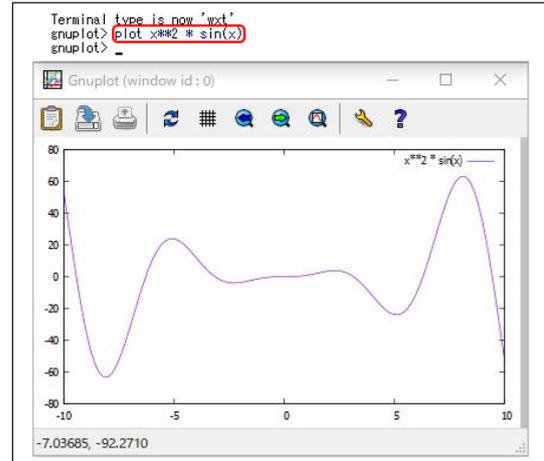


図 E.28 「 $y = x^2 \sin x$ 」のグラフをプロットしたところ

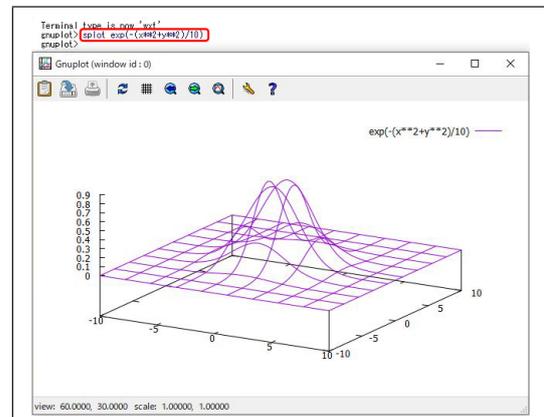


図 E.29 二次元の正規分布曲線「 $z = \exp[-(x^2 + y^2)/10]$ 」のグラフをプロットしたところ

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。

#### E.4.1.1. 二次元のグラフ

図 E.28 は、図 E.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。

#### E.4.1.2. 三次元のグラフ

図 E.29 は、図 E.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

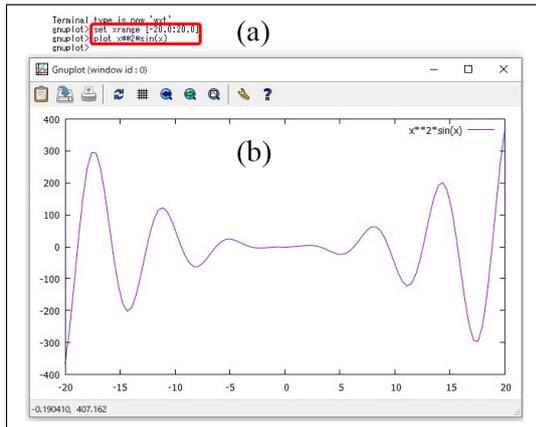


図 E.30  $x$  のレンジを  $-20 \sim 20$  に設定する「set xrange [-20:20]」とタイプしてから「 $y = x^2 \sin x$ 」のグラフをプロットしたところ

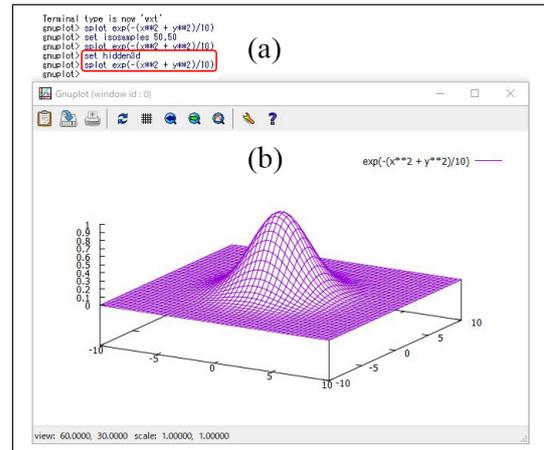


図 E.32 「set hidden3d」のコマンドを入力してから、「 $z = \exp[-(x^2 + y^2)/10]$ 」のグラフをプロットし直したところ

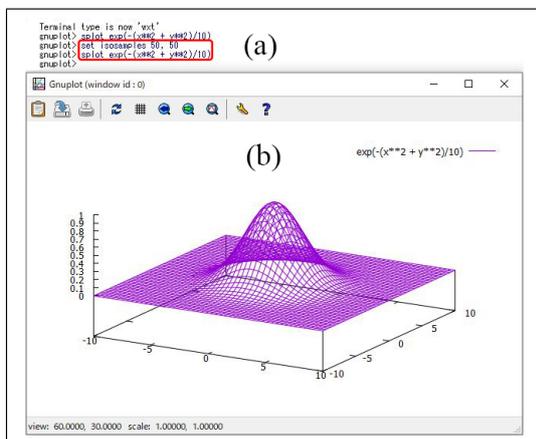


図 E.31 「set isosamples 50, 50」とタイプしてから「 $z = \exp[-(x^2 + y^2)/10]$ 」のグラフをプロットしたところ

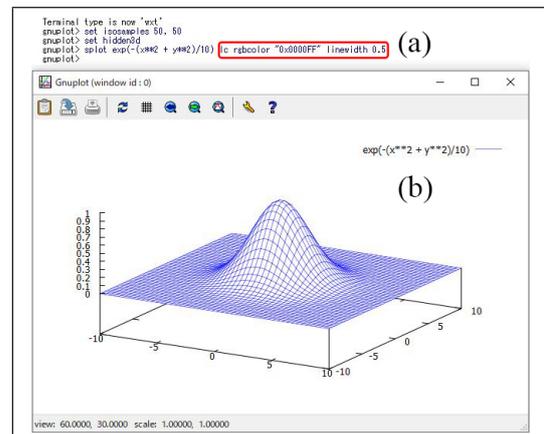


図 E.33 線の色と太さを指定をして「 $z = \exp[-(x^2 + y^2)/10]$ 」のグラフをプロットしたところ

ある。 $z = \exp[-(x^2 + y^2)/10]$  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。

#### E.4.2 パラメーターをコマンドで指定するグラフ描画

図 E.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。

##### E.4.2.1. 二次元のグラフ

図 E.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 E.30 (b) である。「set xrange」は、 $x$  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。

##### E.4.2.2. 三次元のグラフ

図 E.29 の描画のあと、図 E.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 E.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

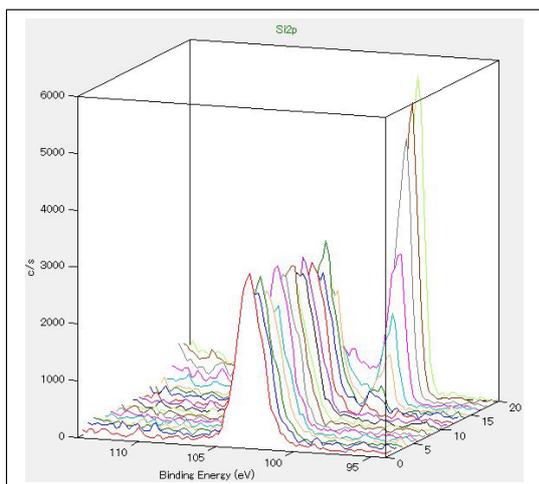


図 E.34 「Montage viewer」表示した、スパッタリングを繰り返して測定された光電子スペクトル

印キーを  $N$  回タイプすることで、よびだすことができる。

図 E.31 (b) を表示させたあと、図 E.32 (a) のように「set hidden3d」とタイプして、再度「splot exp(-(x\*\*2 + y\*\*2)/10)」を実行して表示されたのが、図 E.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。

#### E.4.2.3. 線の色と太さの指定

図 E.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 E.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

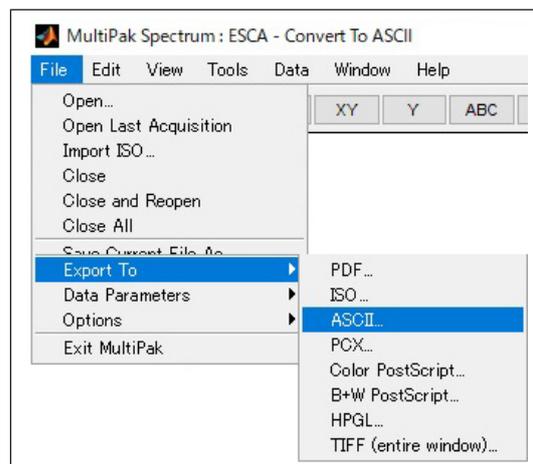


図 E.35 「File」「Export To」「ASCII」を順にクリックして、光電子スペクトルを ASCII 形式で保存する

省略して記述することもできる。

#### E.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 E.27 [p.36] 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。

##### E.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 E.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 E.35 のようにクリ

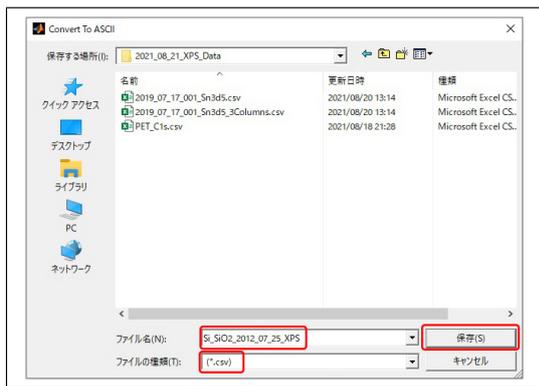


図 E.36 エクセルで取り込める「csv」の拡張子で ASCII データを保存する

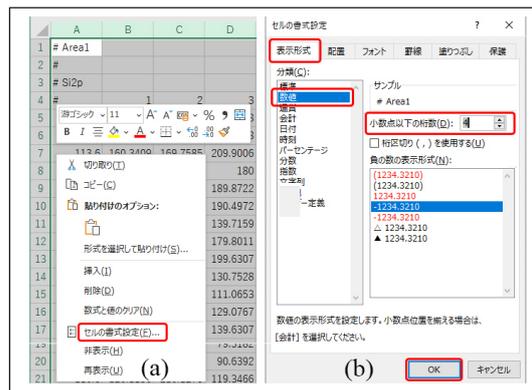


図 E.39 すべての列に対して小数点以下の桁を 4 にする

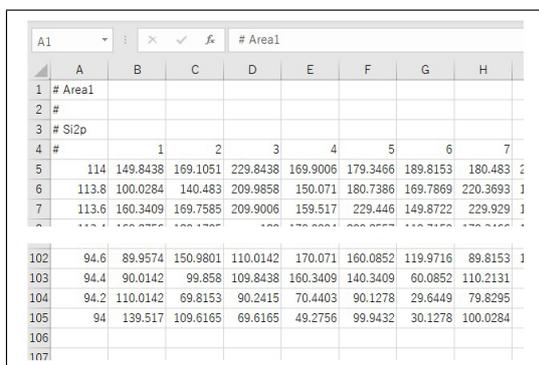


図 E.37 「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS.csv」をダブルクリックして開いたところ

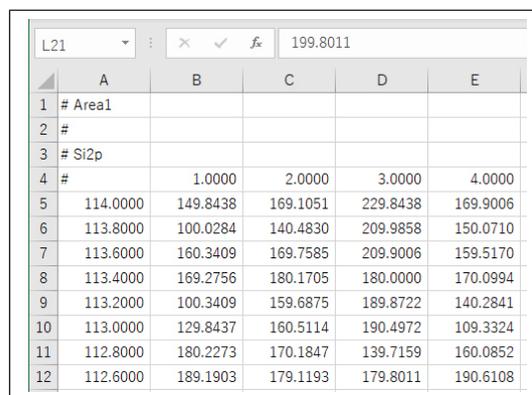


図 E.40 データ加工後のエクセルファイル

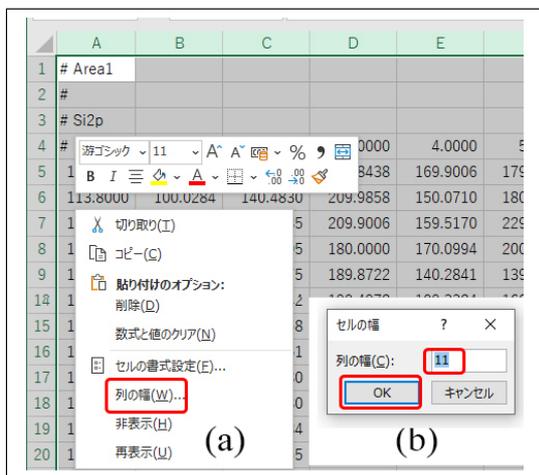


図 E.38 すべての列の幅を 11 桁にする

ックすると、図 E.36 が表示される。ここで、「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS.csv」のファイル名で、データを保存する。

図 E.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~A4 セルの「#」は、ファ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 1~4 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。

#### E.4.3.2. データファイルの加工

図 E.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 E.38 (b) を表示させて、11 桁に設定する。

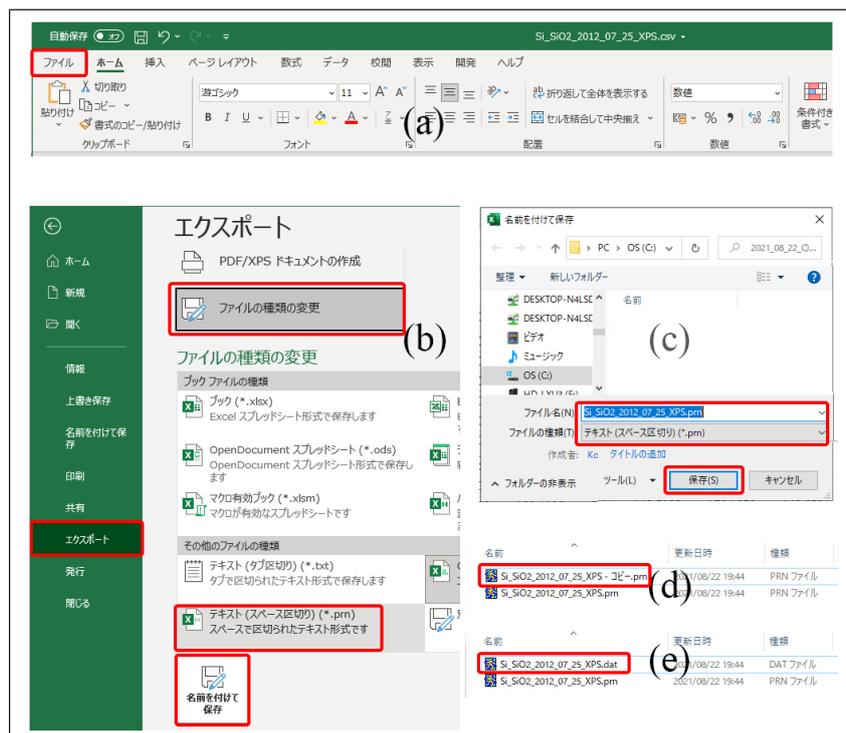


図 E.41 加工後のエクセルファイルを「pm」の拡張子で保存。拡張子を「dat」に変える

	Area1				
1					
2					
3	#	Si2p1			
4	#		1.0000	2.0000	3.0000
5		114.0000	149.8438	169.1051	229.8438
6		113.8000	100.0284	140.4830	209.9858
7		113.6000	160.3409	169.7535	209.9006
8		113.4000	169.2756	180.1705	180.0000
9		113.2000	100.3409	159.6875	189.8722
10		113.0000	129.8437	160.5114	190.4972
11		112.8000	180.2273	170.1847	139.7159
12		112.6000	189.1903	179.1193	179.8011
13		112.4000	170.7812	180.5398	199.6307
14		112.2000	110.2131	110.0142	130.7528
15		112.0000	99.8295	129.9858	111.0653
16		111.8000	119.6023	240.4261	129.0767
17		111.6000	100.0568	179.8580	139.6307
18		111.4000	80.5398	119.8580	120.5682

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

さらに、図 E.39 (a) で、すべての列をクリック&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 E.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 E.38, 図 E.39 の加工により、エクセルデータのすべてのセルが、図 E.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 E.41 (a) 左上の「ファイル」をクリックすると、図 E.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 E.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 E.41 (d) のようにコピーしたあと、図 E.41 (e) のように、拡張子「pm」を Gnuplot で読める「dat」に変更する。図 E.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 E.42 である。

### E.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 E.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

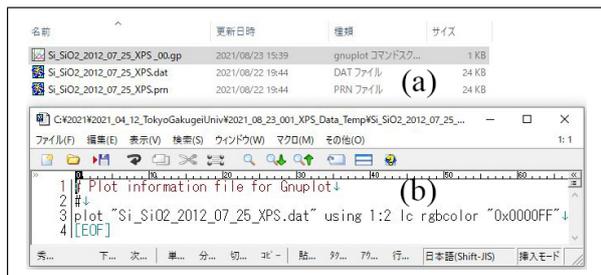


図 E.43 「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS\_00.gp」の中身

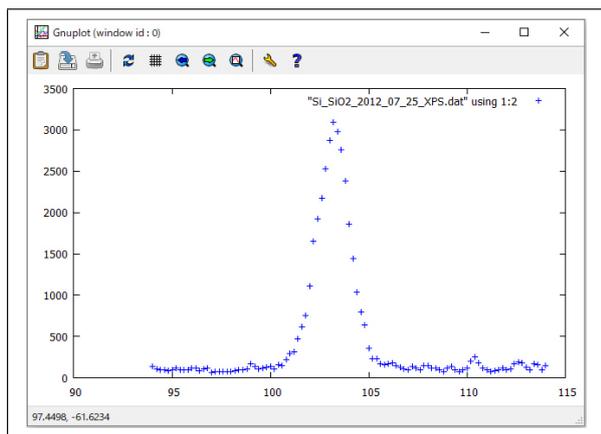


図 E.44 「Si\_SiO2\_2021\_07\_25\_XPS\_00.gp」をダブルクリックすることにより、描画されたグラフ



図 E.45 ファイル名の変更

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 E.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 E.44 である。図 E.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

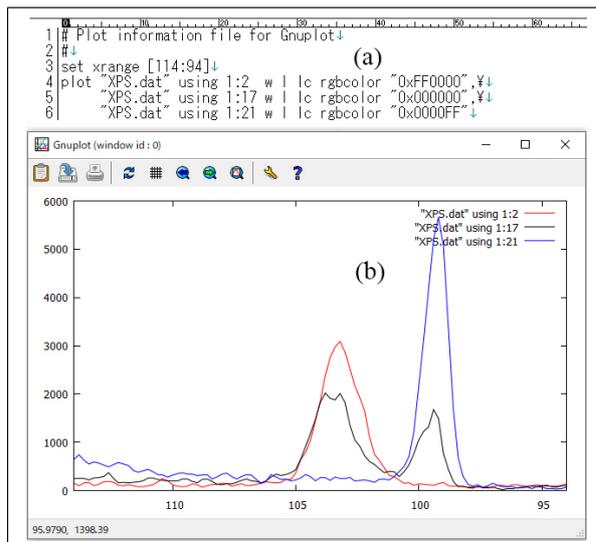


図 E.46 (a) gp ファイルをダブルクリックして表示された (b) グラフ

とることを指定している。「u 1:2」のように省略形で記述してもよい。「lc rgbcolor "0x0000FF"」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 E.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 E.45 (a)] のファイル名を、図 E.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 E.46 (a)、これをダブルクリックして描画されたのが図 E.46 (b) である。

図 E.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 E.34 [p.38] 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 E.46 (a) 4,5,6 行目の末尾は「,\n」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 E.46 (b) の赤、黒、青

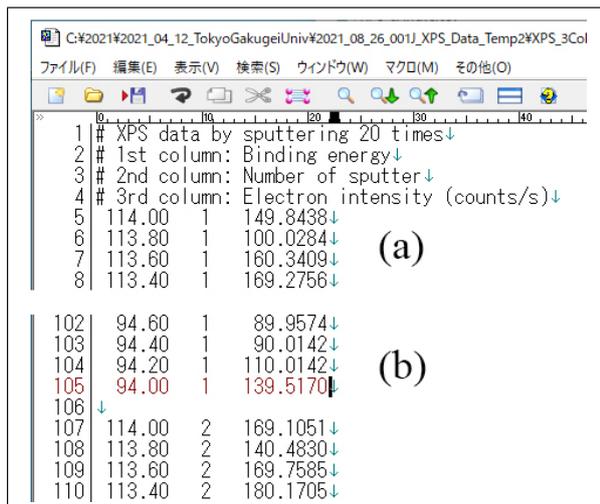


図 E.47 3次元グラフ描画のためのデータファイル

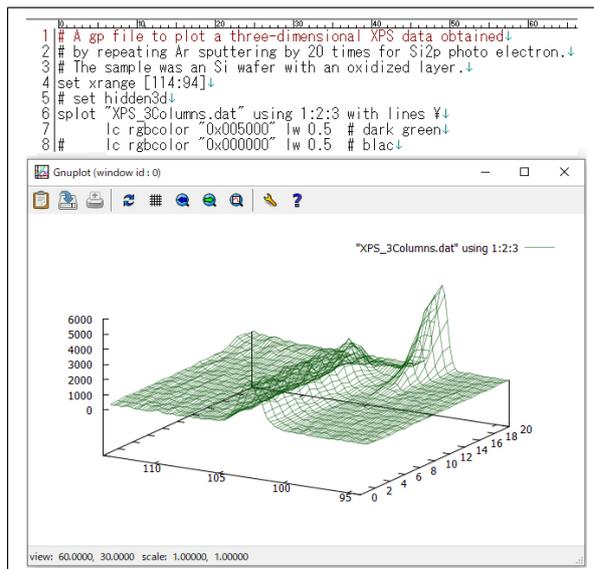


図 E.49 3次元グラフの画像ファイルへのエクスポート

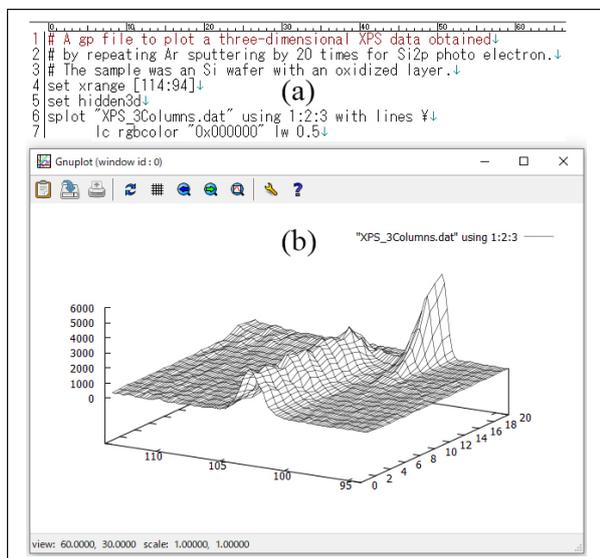


図 E.48 gp ファイルダブルクリックして描画された3次元グラフ

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、 $\text{SiO}_2$  の、青のピークは、Si 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  $\text{SiO}_2$  酸化膜が剥がれて Si が露出したことによる。

図 E.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 E.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（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 E.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との間の106行目は、空行になっている必要がある。

図 E.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 E.48 (b) である。図 E.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 E.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 E.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 E.49 (b) である。図 E.49 (a) の5行目「hidden3d」がコメントアウトされ

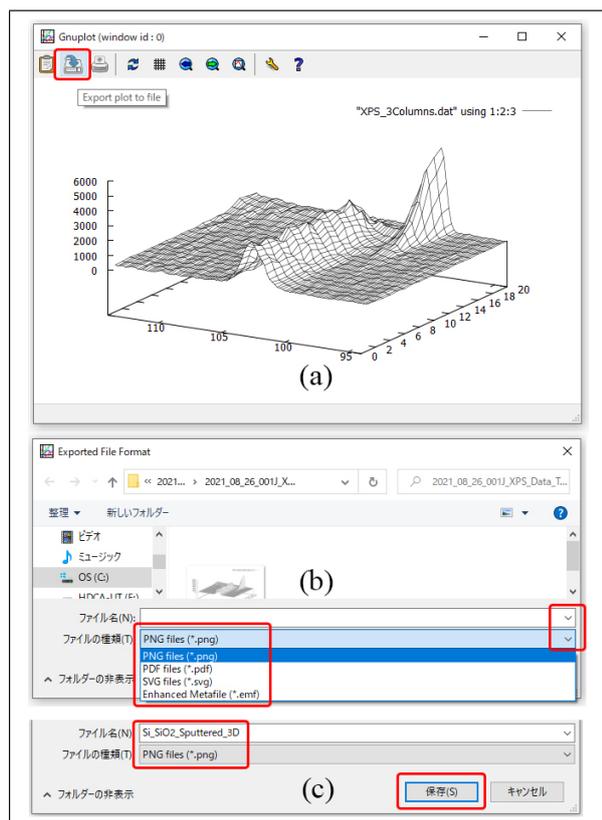


図 E.50 gp ファイルダブルクリックして描画された 3 次元グラフ

ているので、グラフの手前だけを描画するオプ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。

#### E.4.4 画像データのエクスポート

図 E.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 E.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 E.50 (c) が開く。ファイル名を「Si\_SiO2\_Sputtered\_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 E.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。

#### E.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 などの検索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だった。

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

*.lin	ラインプロファイルデータファイルの拡張子	1
*.map	マッピングデータファイルの拡張子	1
*.pro	スパッタリングデータファイルの拡張子	13
*.pro	スパッタリングデータファイルの拡張子	1
*.spe	スペクトルデータファイルの拡張子	1
[Ctrl]	キーを押すと複数のデータファイルを選択できる	1
[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		
	ガウシアン比率を示すフィッティングパラメーター	5
	の文字が赤く表示されている	6
% ボタン		
	のクリックで元素のモル分率を表示	i
0x000080		38
0x0000FF		38
0x008000		38
0x00FF00		38
0x800000		38
0xFF0000		38

## A

AC%	チェックボックス	
	からチェックを外すと縦軸はスペクトルの積分強度	15
	にチェックを入れると右の縦軸は元素組成 (%)	14
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	のピーク	6
Annotate	ボタン	24
Apply to one band		6
	を選択した上で Band Limits ボタンをクリック	
	をクリックして Limit の値を変更する	6
Area		
	の値の比が成分比になる	4
Ar	イオンスパッタ	39
Ar	スパッタリング	42
ASCII	形式	38
ASCII	ファイル	38
Asymmetric		
	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

## B

Band Limits	ボタン	6
Binding Energy		25
Browse	ボタン	1, 13

## C

Chemical State ID		23
Chemical State ID win-ow		24
Chemical State ID window		
	上の Identification Energy(eV) テキストボックス	23
	右下の Exit ボタンをクリックしてウィンドウを閉じる	24
ChiSquared		
	が 1 に近づくように最小二乗フィットを実行	4, 5
Close	ボタン	
	をクリックしてから Fit ボタン	
	のクリックでさらに最小二乗フィットを実行	7
Corrected RSF		9
csv		39

## D

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		38
Excel		10-12
Exit	ボタン	7
	のクリックで Shift Setup(帯電補正)を終了	22
Export To		38

## F

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

## G

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		32-34, 36, 43
Google	で検索	25
gp	ファイル	41-43
GUI		43

## H

Hide MultiPak	ボタン	
	MultiPak の画面を非表示にする	i

## 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

## L

lc(line color)		41
lc(linecolor)		38, 41
Limit reached	の赤い文字	6
line color(lc)		41
linecolor(lc)		38, 41
linewidth		38
List Files of Type:	プルダウンメニュー	1, 13
Loss peak		i
lw(linewidth)		38

## M

Map	ウィンドウ	17
-----	-------	----

Max Iterations ボックス	5
Montage viewer	38, 39
MultiPak	38, 39
Map ウィンドウ	17
Spectrum ウィンドウ	17
のスペクトラルウィンドウ	23
は光電子ピークのデータベースを持っている	23
初期ウィンドウ	i
MultiPak 解析プログラム	i
<b>N</b>	
National Institute of Standards and Technology	25
New	
を選択すると新しいウィンドウに表示	1, 14
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	2, 14
NIST	7, 25
NIST(National Institute of Standards and Technology)	25
NIST データベース	25
NIST のデータベース	i
<b>O</b>	
Open ボタン	13, 17
データファイルを開く	1
ファイルを開く	i
OS	43
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	2, 14
<b>P</b>	
PET	7, 21
Phi5000 VersaProbe	38
PkEnergy テキストボックス	22
plot	36
Profile Display ラジオボタン	1
pt(ポイント)	38
p 型シリコン	24
にアサインされた光電子ピーク	23
<b>R</b>	
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	2, 14
Retrieve Data for a Selected Element	25
rgbcolor	38, 41
RSF	9
<b>S</b>	
Search Menu	25
Select One ボタン	16
hidden3d	38
set hidden3d	37
set isosamples	37
set xrange	37
set yrange	37
Setup チェックボックス	4
からチェックを外してバックグラウンドを調整する	4
Shirley	
バックグラウンドの差し引き方(推奨)	5
Show MultiPak ボタン	
MultiPak の画面を再表示する	i
Si2p ナロースペクトル	13
Si2p ピーク	39
Si2p ラジオボタン	
にチェックで Si2p スペクトルを拡大表示	14
SiO <sub>2</sub>	23, 25, 27
にアサインされた光電子ピーク	23
SiO <sub>2</sub> ( $\alpha$ クリスタバライト)	24
SiO <sub>2</sub> 酸化膜	42
Spectrum Display ラジオボタン	1
Spectrum window	
下の Exit ボタンをクリックして化学結合状態同定モードを終了	24
Spectrum ウィンドウ	17
splot	37, 38
<b>T</b>	
Tail Length	
が Limit の値に達してしまう	6
は光電子ピーク左側のテールの長さである	5, 6
Tail Length Fix チェックボックス	6
Tail Scale	6
の文字が赤く表示されている	6
は光電子ピーク左側のテールの高さである	5, 6
Tail Scale Fix チェックボックス	6
Tools メニュー	
Chemical State ID サブメニュー	
をクリックして Chemical State ID window を開く	23
Select Spectra を選択	13, 15
<b>U</b>	
u(using)	41
Undo ボタン	22
UNIX	43
Upper Limit	
に到達すると最小 2 乗フィットが止まってしまう	6
using(u)	41
<b>W</b>	
w l(with line)	41
with line(w l)	41
<b>X</b>	
XPS 装置(光電子分光装置)	38
XY ボタン	
をクリックすると元のスケールに戻せる	i, 2
<b>あ</b>	
赤い破線	
で示される残差をなるべく小さくするようにする	4
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曲線の残差	4
アメリカ国立標準技術研究所	25
アンインストール	32
インストール	34
エクスポート	38, 42
エクセル	10-12
汚染物質の C1s ピーク	
が 284.6 ~ 285.0eV であることが知られている	21
オペレーティングシステム)	43
<b>か</b>	
カーブフィット	
セットアップ画面	4
の開始	4
カーブフィット, バンドリミット設定画面	6, 8
解析プログラム MultiPak	i
ガウシアン(正規分布)	38
ガウシアンでのフィット	5
ガウシアンとローレンツィアンでのフィット	5
化学結合状態同定	24
化学結合状態の同定	i, 7, 16, 23

の概要	23
メニューの立ち上げ	23
化学状態別組成比	9, 10
拡大されたピークを左右に右クリック&ドラッグ	
ピークの候補を次々に表示	2
過去のデータと照らし合わせて化学結合状態を見積ることができる	23
グニュープロット	32
グラフィック・ユーザー・インターフェイス	43
光電子	
p型シリコンにアサインされた光電子ピーク	23
SiO <sub>2</sub> にアサインされた光電子ピーク	23
スペクトル	
から計算された元素のモル分率	3
データの読み込み	1
の解析	1
の非対称性を考慮するのが Asymmetric フィット	6
ピークのデータベースを MultiPak は持っている	23
光電子強度 (counts/sec)	39
光電子スペクトル	38, 42
光電子分光装置 (XPS 装置)	38
国立標準技術研究所	25
コメントアウト	39, 41-43
コメント文	39
<hr/>	
さ	
サーベイスキャン (Survey scan)	
=ワイドスキャン	2
最小二乗フィットの実行	5
酸化していないアルミニウムによるピーク	6
三原色	38
三次元のグラフ	37, 38
サンプル表面は一般に空気中の有機物で汚染される	21
四角いマークが表示されたフィット曲線にフォーカスがある4	
指定されたピーク近傍を拡大表示	
するにはラジオボタンにチェックを入れる	2
自動実行ファイル (gp ファイル)	41-43
周期律表	i, 25, 26
周期律表ウィンドウ	
元素ボタン 2 度クリックでアサインされなかった別の	
ピークを表示	2
シリコンウェハー	42
新規ユーザー登録	29
スクロールバー	16
の上のスライダーを上下にスクロール	
するとひとつのスペクトルを選んで表示	16
スパッタ回数	39
スパッタリング	38
データの解析	13
データの読み込み	13
データファイルの拡張子*.pro	1, 13
スペクトル	
から計算された元素のモル分率	3
選択スクロールバーが表示されたところ	13
データの読み込み	1
データファイルの拡張子*.spe	1
のピークを自動アサイン	
ID ボタン	i, 2
を 1 つずつ表示したところ	13
ウィンドウ	13
正規分布 (ガウシアン)	38
正規分布曲線	35
線の色の指定	38
線の太さの指定	38
相対感度因子	9
装置利用規程	29

た	
帯電補正	i, 7, 16, 21
には低速電子銃と低速 Ar イオン銃を併用	21
の概要	21
メニューの立ち上げ	21
画面	21, 22
ダウンロード	33
単一ピークによるマッピング	17
単体 Si	24, 25, 27
チェックを外すと元のスケールに戻る	2
データファイル切り替えボタン	
表示するデータファイルの切り替え	i
データベース	29
データベース NIST	25
データベースのソート	27
データベースのレンジ設定	23
電子ジャーナル	27
登録フォーム	29
<hr/>	
な	
ナロウスペクトル	
の選択表示	15
による元素の定量	2
の表示	2
二次元のグラフ	35-37
ニュープロット	32
<hr/>	
は	
バインディングエネルギー	41
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	9
バックグラウンドの差し引き方 (推奨)	
IteratedShirley	5
Shirley	5
バックグラウンドの調整	4
ピークの候補を次々に表示するには	
拡大されたピークを左右に右クリック&ドラッグ	2
ピーク付近を左右に左クリック&ドラッグして拡大	2
ピーク分離の開始	4
ピーク分離の最適化	5
ファイルセレクトウィンドウ	1, 13
ファイルタイプセレクトウィンドウ	17
フィット曲線	4
の作成	4
の高さと幅を調整する	4
の調整	4
は Del All ボタンのクリックで消せる	4
フェルミエネルギー	5
フォーカスを移す	
にはフィット曲線をクリックする	4
にはプルダウンメニューの選択を変更する	4
にはラジオボタンのチェックを付け替える	4
プラス電荷	
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	
21	
プロファイルウィンドウ	13
ポイント (pt)	38
補正された感度因子	9
ポリエチレンテレフタレート	7
<hr/>	
ま	
マッピング	
単一ピークマッピングデータの解析	17
抽出された SiO <sub>2</sub> マップ	18
データの解析	17
データの読み込み	17
複数ピークによるマッピングデータの解析	18

ふたつのピークから SiO <sub>2</sub> ピークの範囲を設定したところ	18	立体表示	16
マッピングデータファイルの拡張子*.map	1	利用規程	29
メインピーク	6	ローレンツィアン	
モニタージュビュアー	16	ガウシアンより先端が尖った曲線です	5
		ロスピーク	i, 6
<b>ら</b>		<b>わ</b>	
ラインプロファイルデータファイルの拡張子*.lin	1	ワイドスキャン	
ラジオボタンにチェック		=サーベイスキャン (Survey scan)	2
でピーク近傍を拡大表示	2	スペクトルデータのピークアサイン	2