

連載 (解説)

Common Data Processing System Version 10 の使用法

— (3) データ処理 (その2) —

吉原 一紘*

オミクロンナノテクノロジージャパン(株)

〒144-0052 東京都大田区蒲田 5-30-15

*k.yoshihara@omicron.jp

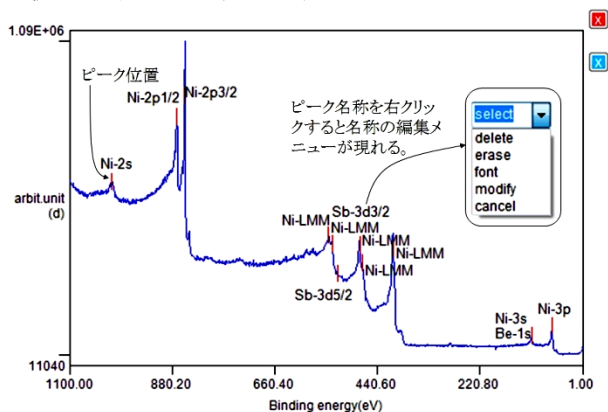
(2013年5月10日受理)

5.3 [analysis]

[analysis]には3種類のボタンが含まれる。

(1) ピークの同定

表示したスペクトルのピーク位置を同定する。👤 をクリックすると、スペクトルのピーク位置を赤線で示し、ピークの名前を COMPRO のデータベースと比較して下図のように示す。



制御パネルにピーク位置と名称を示す表が現れる。不適切だと思われるピークは当該ピークの名前の部分をマウスで右クリックすると除去、修正のメニューが現れるので、それを利用して修正する。チャージアップが生じているときには C-1s または O-1s ピークがスペクトル上であれば、[charge up compensation]グループボッ

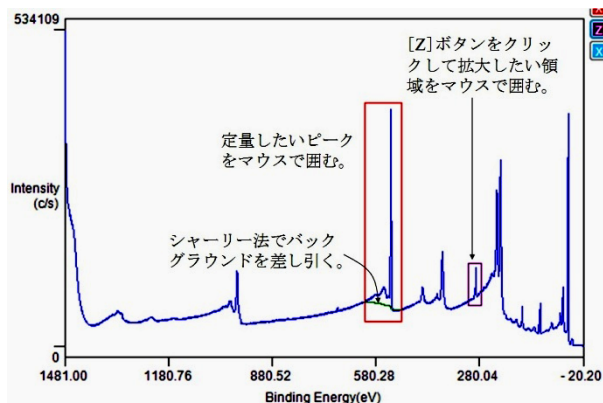
peak energy	element	transition
1009.00	Ni	2s
871.00	Ni	2p1/2
854.00	Ni	2p3/2
545.00	Ni	LMM
537.00	Ni	LMM
537.00	Sb	3d3/2
526.00	Sb	3d5/2
478.00	Ni	LMM
472.00	Ni	LMM

クのボタンでいずれかのピークを選択すると縦線が出現するので、その縦線の位置をピーク上の C-1s または O-1s ピークに合わせ、[shift]ボタンをクリックすると、チャージアップを補正して、ピーク同定結果が表示される。

[save]ボタンをクリックすると同定結果が csv 形式で保存される。ピーク位置を消去したり、ピーク名称を変化したりした後に、[D]ボタンをクリックすると最初の同定結果の表示に戻る。

(2) 定量

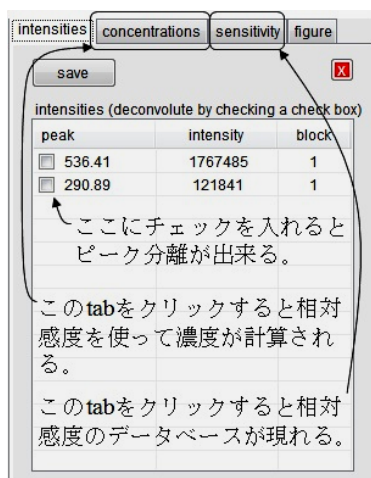
表示したスペクトルの定量分析を行う。👤 をクリックして、マウスで定量したいピークを囲むと、シャリー法でバックグラウンドを差し引いた面積が制御パネルに表示される。なお、微分系のスペクトルの場合はピーク高さが表示される。領域の大きさはマウスで領域の線上をドラッグすることで変更できる。ピークの指定を取り消したいときには、マウスで囲んだ領域内で右クリックする。ピークが小さく、マウスで囲むことが難しい場合には[Z]ボタンをクリックし、領域を指定して、再度[Z]ボタンをクリックすると指定領域が拡大される。その後、拡大されたピークをマウスで囲む。ピーク指定後に青い



[X]ボタンをクリックすると元の画面に戻る。

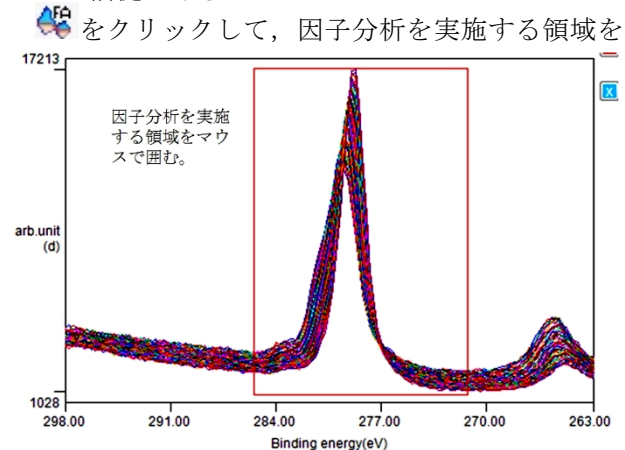
[intensities],[concentrations],[sensitivity],[figure] の tab からなるテーブルが制御パネルに現れる。
[intensities]の tab には、ピーク位置とピーク面積（微分ピークの場合はピーク高さ）が示される。ピーク位置のカラムのチェックボックスにチェックを入れると、ピーク分離画面が現れ、ピーク分離が出来る。複数ブロックが同時表示されているときには、ブロック番号が表示される。[save]ボタンをクリックすると、定量結果を csv 形式で保存することが出来る。

[concentrations]の tab をクリックすると、相対感度を用いた定量値が表示される。 [sensitivity]の tab をクリックすると相対感度データベースが利用できる。ブロックが複数あるスペクトルを解析したときに、[figure]の tab をクリックすると、濃度、ピーク面積、ピーク位置がブロックごとにどのように変化するかを表示する。



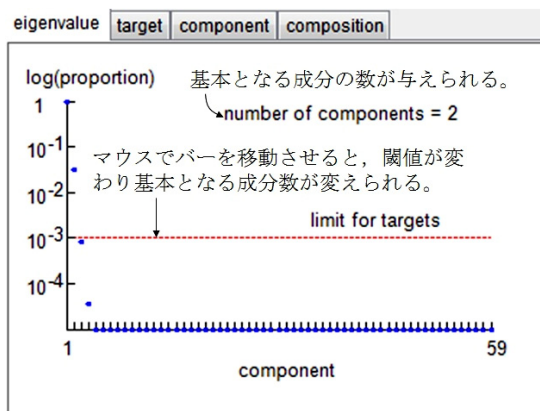
(3) 因子分析 (factor analysis)

スパッタリングや照射損傷のように時間経過と共に変化するスペクトル群を解析する際に、スペクトル群を構成する基本となる成分の数とその成分のスペクトルを求め、それらが時間と共にどのように変化するかを求める方法が因子分析である。因子分析を適用するためには、一連のスペクトルが基本となる成分のスペクトルの線形結合で表すことが出来ることが前提である。



マウスで囲む。

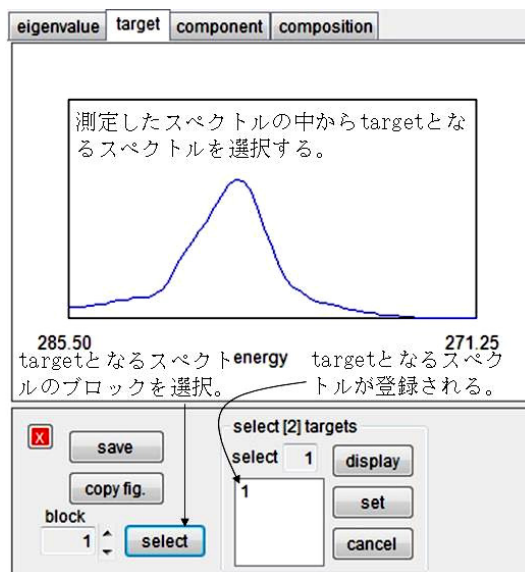
制御パネルに固有値解析の結果が現れ、固有値が一定以上（閾値のデフォルトの値は 10^{-3} であるが、閾値を示すバーをマウスで移動させることにより変更できる）の値を有する成分の数が表示される。表示のスペクトル群の場合は「2」個である。



画面の下部のパネルに現れる [save] ボタンをクリックすると、解析結果が csv 形式で保存される。また、[copy fig.] ボタンをクリックすると画像が jpg 形式で保存される。

次に基本となる成分のスペクトルを求める。COMPRO で採用している因子分析法は、実測されたデータ群の中から基本となるスペクトルに近似していると思われるスペクトルをあらかじめ”target”として選択し、それに最も近似するスペクトルを数学的に合成して基本成分とするという方法である。表示されている例では、成分数は「2」と決定しているので、2本のスペクトルを測定したスペクトル群の中から”target”として選択する。

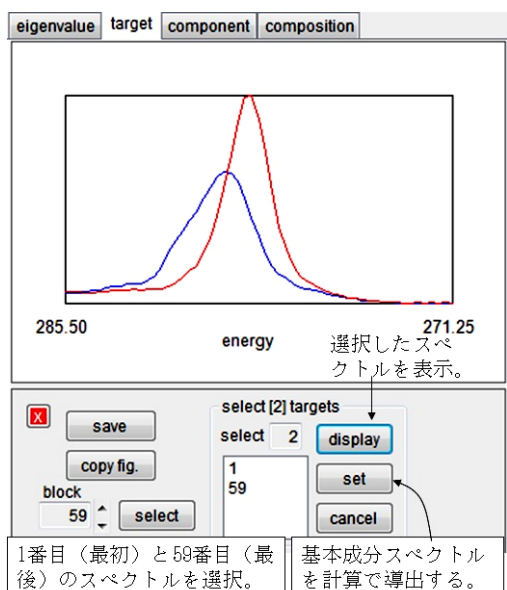
[target] タブをクリックするとスペクトルのブロックを選択する画面が図の下部に表示される。ブロッ



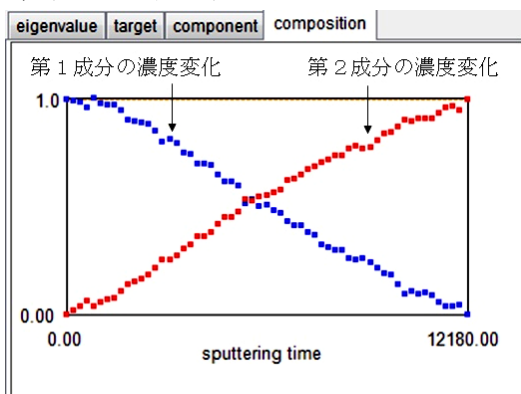
ク番号を変えると、対応するブロックのスペクトルが表示されるので、スペクトル形状を観察しながら指定された成分数の数だけスペクトルを選択する。

スペクトルを選択すると、選択したブロック番号が記録される。

表示されている例では、target として測定開始時と測定終了時に取得したスペクトルを選択した。指示されている本数のスペクトルを選択後[display]ボタンをクリックすると選択したスペクトルが同時表示される。



[set]ボタンをクリックすると、選択したスペクトルに最も近似するスペクトルを数学的に合成して基本成分を決定し、基本成分が時間とともにどのように変化するかを表示する。



[component]タブをクリックすると、合成された基本成分のスペクトルが表示される。"target"として選択したスペクトルに近似しているか否かを確認できる。

因子分析法はスペクトル群が基本成分の線形合成で表せることが前提である。この前提に合わない

ときには「表示されているスペクトル群は因子分析には適さない」という警告文が現れる。

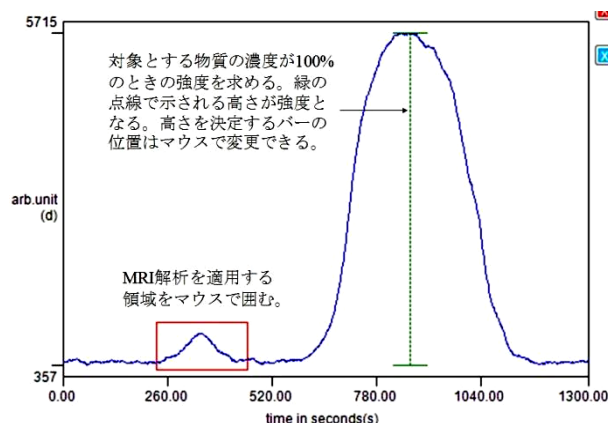
5. 4 [thin film]

[thin film]には4種類のボタンが含まれる。

(1) MRI モデルによる depth profile 解析

MRI モデルは Hofmann により提案された、depth profile の界面の形状は mixing, roughness, information depth によって決定されるというモデルである。このモデルに基づき、界面の形状をシミュレーションにより求めて、それを実測値と比較して、真の界面構造を推定する方法である。

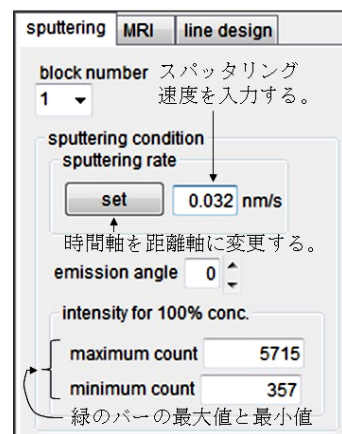
ボタンをクリックして MRI 解析を行う領域をマウスで囲む。なお、表示されているスペクトルは depth profile である必要がある。depth profile 以外のスペクトルでは「MRI 解析は適用できない」という警告文が現れる。



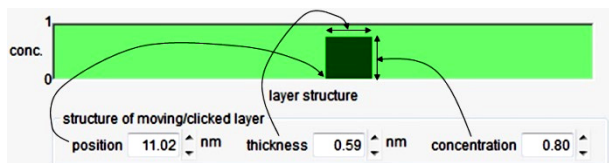
MRI 解析を実施するためには基準となるピーク強度として、対象とする物質の濃度が 100%の時の強度を求める必要がある。画面上で緑のバーを移動させてバーの高さを設定する。バーの高さ（最大値と最小値）は制御パネルに表示される。

depth profile は横軸が時間なので、それを距離に変換する必要がある。

スパッタリング速度を入力して[set]ボタンをクリックすると、横軸は距離に変換され、スペクトルの表示範囲はMRIで解析する領域に拡大される。さらに、スペクトル表示領域下部に現れる層構造の入力画面の背景色が薄緑

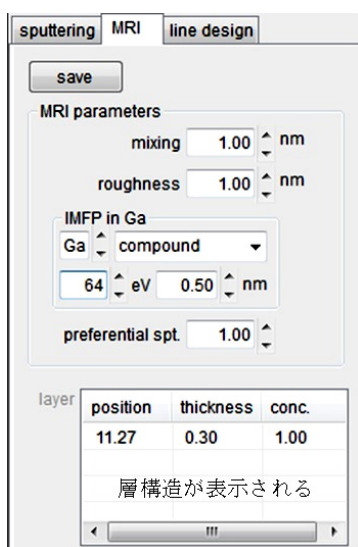


に変わり入力可能になる。



層構造の入力画面上をマウスでクリックすると、層構造を示す濃い緑のボックスが現れ、それに対応した depth profile が MRI モデルで計算されて、スペクトルに濃緑の線で書き込まれる。層構造を示すボックスの位置、高さ、厚さはマウスで変更できる。また入力画面の下部にあるテキストボックスの値を変更しても変えられる。濃い緑のボックス以外の場所をクリックすると新たにボックスを作ることができるし、それを移動して既存の濃い緑のボックスと合体させることもできる。また、ボックスが不適当だと思われる時には、マウスでそのボックスを右クリックすると消去できる。

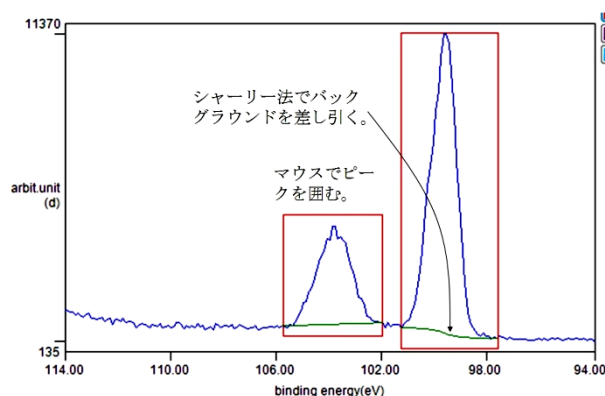
制御パネルは、横軸が距離に変換されると自動的に[MRI]タブに変わり、MRI モデルに必要なパラメーターの入力画面となる。パラメーターを変更しながら、MRI モデルで計算された depth profile と実験値が最適となる値を求める。最適かどうかの判断はユーザーの目視に依存する。なお、IMFP データは COMPRO のデータベースを利用して計算されている。



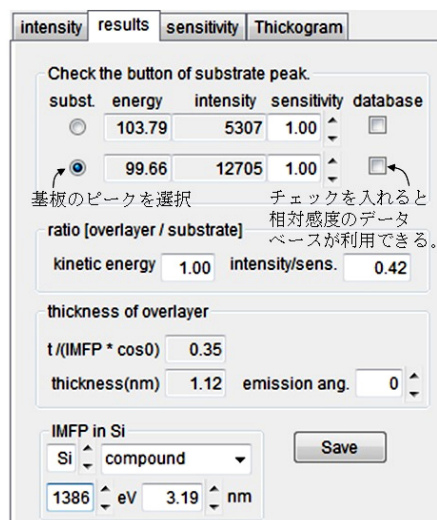
(2) Thickogram による膜厚の決定

Thickogram は Cumpson によって提案された方法で、単層の薄膜の膜厚を求める方法である。単層の薄膜の厚さは、基板から放出される電子と、薄膜から放出される電子の運動エネルギーが大きく違わなければ簡単に求められる。しかし、それらが、大きく違うときには解析が複雑となり、簡単に膜厚を求めることはできない。Thickogram はその複雑な解析を図面上で処理して、膜厚を求める方法である。

Thickogram ボタンをクリックして、基板と薄膜からの光電子のピークをマウスで囲む。



制御パネルには指定されたピークの強度（面積）が示される。制御パネルの[deconv.]ボタンをクリックすると指定したピークのピーク分離が出来る。次に基板に対応するピークを指定すると、Thickogram による解析が行われ、膜厚が与えられる。ただし、COMPRO では Cumpson が提案した式の解を図上で求めることはせず、繰り返し計算により求めている。

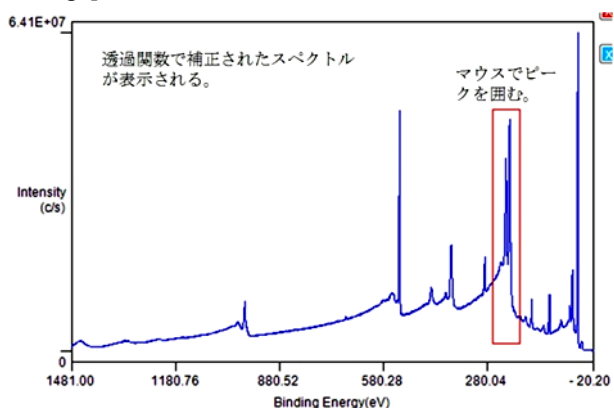


Thickogram では基板と薄膜のピークの運動エネルギーの比と強度（相対感度で補正）の比を基に、 $\text{thickness} / (\text{IMFP} \times \cos(\text{emission_angle}))$ の値を与える。IMFP データは COMPRO のデータベースを利用して計算されるので、その値を入れると薄膜の厚さが求められる。[Thickogram]タブをクリックすると、Cumpson が提唱した図面上での解析方法とその結果が表示される。

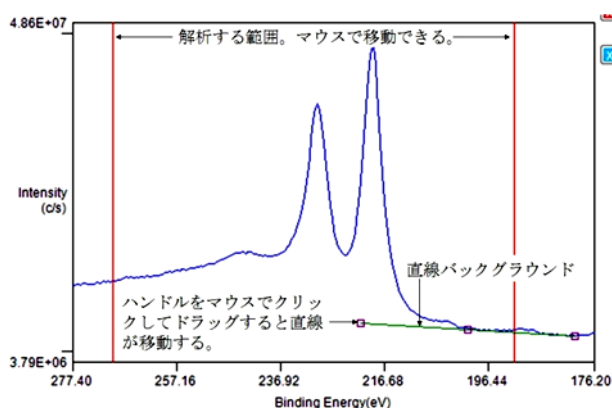
(3) Tougaard 法によるバックグラウンド解析

Tougaard は薄膜の構造とそのエネルギー損失関数を仮定することによりバックグラウンドを算出し、それを実測データと比較して薄膜の構造を求める方法を提案した。

ボタンをクリックすると表示されたスペクトルが透過関数補正されて表示される。デフォルトの透過関数は $E^{-0.7}$ であるが、制御パネルの [transmission function] グループボックスで変更できる。解析に使用するピークをマウスで囲み、[set range] ボタンをクリックする。



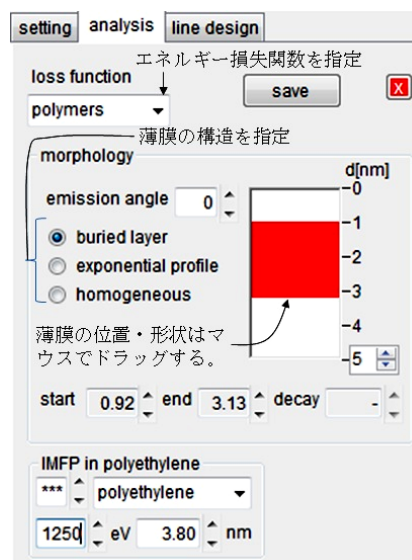
指定したピーク領域が拡大される。Tougaard 法では、高運動エネルギー側のバックグラウンドを直線で近似して差し引く必要があるため、この画面で直線バックグラウンドを指定する。



解析する範囲は赤い縦線をマウスでドラッグすることにより変更できる。高運動エネルギー側のバックグラウンドを示す直線は、直線上のハンドルをマウスでクリックしてドラッグして移動させ、最適な位置に移動させる。最適かどうかの判断はユーザーの目視に依存する。

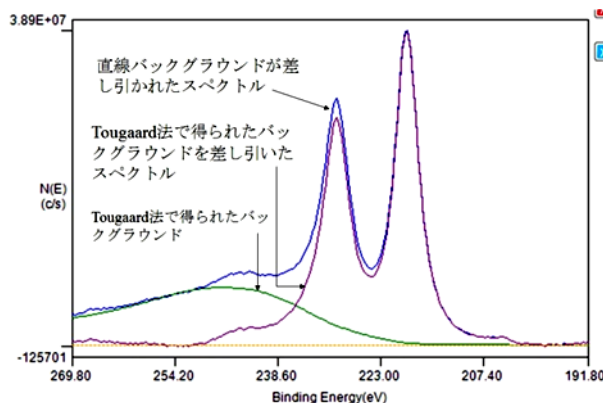
解析する範囲、および直線バックグラウンドの位置を確定した後、制御パネル上の [analysis] ボタンをクリックすると [analysis] タブが現れるので、エネルギー損失関数、薄膜の形状、IMFP を指定する。なお、表示されているスペクトルは直線バックグラウンドが差し引かれた形状である。

エネルギー損失関数は、コンボボックスをクリックして metals/oxides, polymers, silicon oxide, silicon, germanium, aluminum の中から選択する。薄膜の形状は、buried layer, exponential profile, homogeneous の中




から選択する。薄膜の形状を選択すると、薄膜の形状を表す赤いボックスが現れる。赤いボックスをマウスでドラッグすると薄膜の形状や位置を変えることができる。IMFP データは COMPRO のデータベースを利用して計算される値が用いられる。入力したデータに対応してバックグラウンドが計算されスペクトルに上書きされる。

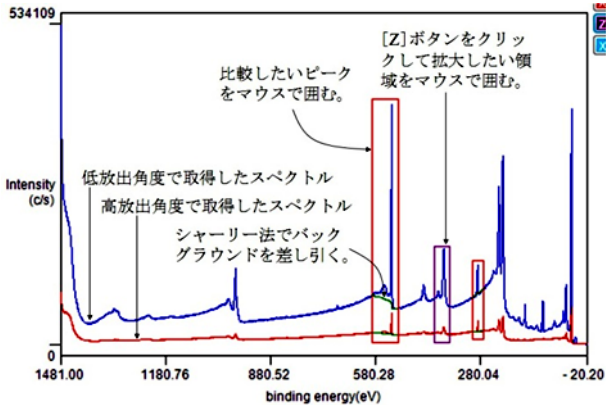
グラフ上には、①高運動エネルギー側の直線バックグラウンドが差し引かれたスペクトル、② Tougaard 法で得られたバックグラウンドが差し引かれたスペクトル、③ Tougaard 法で得られたバックグラウンド、が描かれるので、薄膜の位置・形状をマウスで変化させながら、最も良くバックグラウンドを差し引くことが出来る薄膜構造を決定する。最適かどうかの判断はユーザーの目視に依存する。



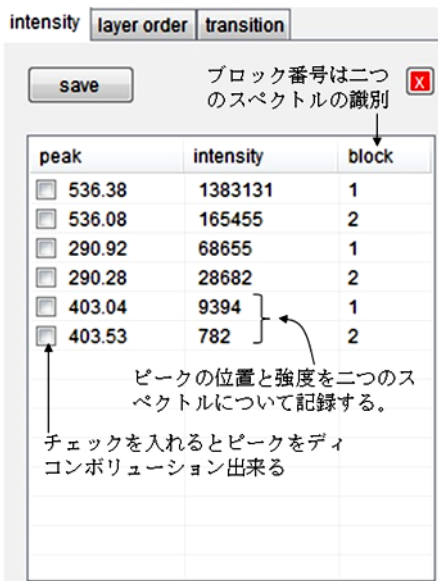
(4) 二角法による多層膜の構造の推定

二角法とは基板の上に複数個の層が形成されているときに、低放出角度と高放出角度で測定したスペクトル強度の比から多層膜の層順を推定する方法である。

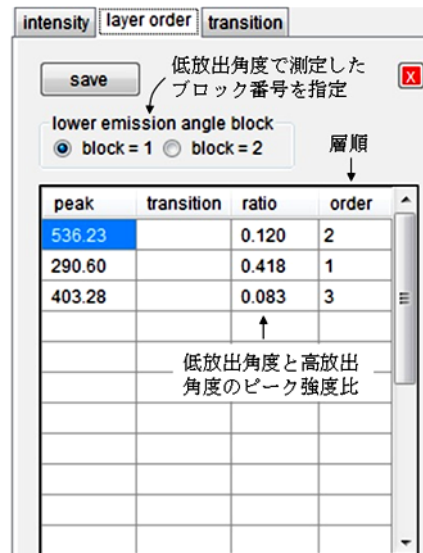
低放出角度と高放出角度で測定したスペクトルを同時表示させ、 ボタンをクリックして、比較したいピークをマウスで囲む。



二つのスペクトル上で、マウスで強度を比較したいピークを同時に囲むと、シャリー法でバックグラウンドを差し引いた面積が制御パネルに表示される。領域の大きさはマウスで領域の線上をドラッグすることで変更できる。ピークの指定を取り消したいときには、マウスで囲んだ領域内で右クリックする。ピークが小さく、マウスで囲むことが難しい場合には[Z]ボタンをクリックし、二つのスペクトルを含むように領域を指定して、再度[Z]ボタンをクリックすると指定領域が拡大される。その後、拡大されたピークをマウスで囲む。このときも二つのスペクトルを含むようにピークの領域を指定する。ピーク領域指定後に青い[X]ボタンをクリックすると元の画面に戻る。



制御パネルに、二つのスペクトルのそれぞれについてピーク位置、ピーク強度が表示される。[layer order]タブをクリックすると、測定したピークについて層順が表示される。




表示されている二つのピークのうちで、低放出角度で取得したスペクトルのブロック番号を指定する。COMPRO はピーク強度が大きい方のスペクトルを低放出角度で取得したスペクトルであるとしているが、そうで無い場合にはここで変更する。この場合には、第1層は 290.60eV のピークに対応する元素、第2層は 539.23eV のピークに対応する元素、第3層は 403.28eV のピークに対応する元素であると推定される。

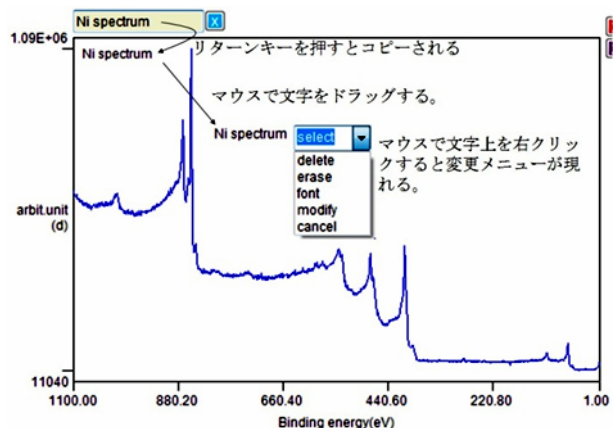
[transition]タブをクリックすると transition 名のデータベースが現れるので、transition 名を選択すると[layer order]の表に記入される。

5. 5 [tool]

[tool]には2種類のボタンが含まれる。


(1) 文字の記入

スペクトルの表示画面に文字を記入することが出来る。 をクリックすると図のフレームの左上部にテキストボックスが現れるので、文字を記入してエンターキーを押す。取り消しする場合には、テキストボックスの横の青い[X]ボタンをクリックする。



テキストボックスに記入された文字はスペクトル表示画面の左隅にコピーされる。スペクトル表示画面にコピーされた文字はマウスでドラッグして、希望の場所に移動させることができる。文字の大きさなどの変更は文字上でマウスを右クリックするとコンボボックスが現れるので、メニューを指定して実行する。

(2) スペクトル表示画面のコピー

 をクリックすると、現在のスペクトル表示画面を jpg 形式で保存できる。