

連載 (講義)

Common Data Processing System Version 10 の使用法

— (4) データベース —

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8月27日受理)

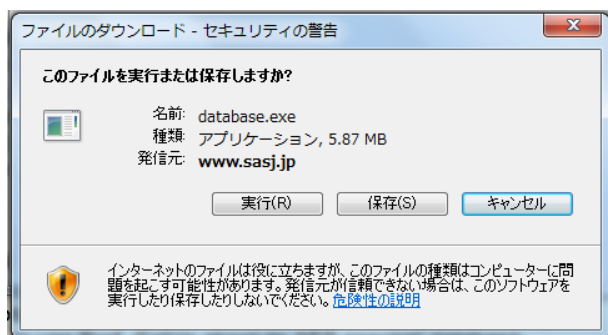
6. データベース

COMPRO では表面分析研究会で収集したスペクトル、分光器の強度軸を校正するための標準スペクトル、後藤先生が取得した AES の標準スペクトル、IMFP など表面分析に必要な物質の物理定数、およびピーク位置に関するデータベースが使用できる。これらのデータベースのうち、物理定数とピーク位置以外のデータベースは、表面分析研究会のホームページの [COMPRO] のメニュー (<http://www.sasj.jp/compro>) からダウンロードする。表示された画面 (下) から <database.exe> をクリックする。

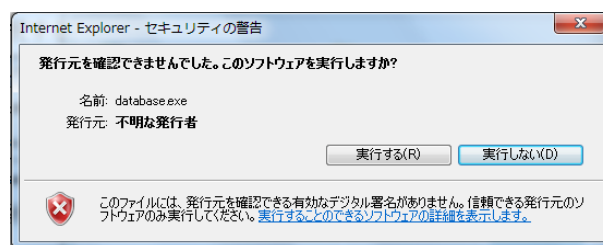
Spectral database

SASJ has constructed the spectral database. If you download <database.exe>, which will automatically dissociate to spectral data files, you can use the SASJ spectral database. The database is created in [c:\SASJ\Database]. The retrieval system of the spectral database is incorporated into the COMPRO11.

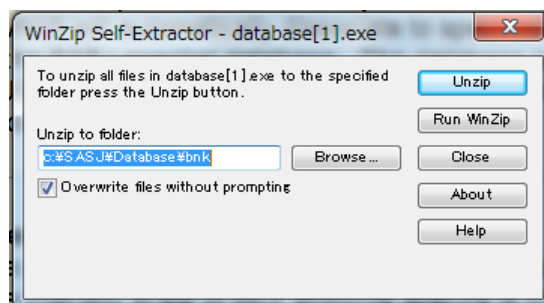
ファイルのダウンロードの画面が現れるので、[実行(R)]を選択する。



セキュリティの警告画面が現れるが、[実行する(R)]を選択する。

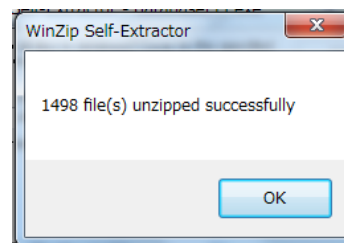


データベースファイルを自動解凍する画面が現れるので[Unzip]を選択する。



自動的に[c:\SASJ\Database\#bnk]にデータベースファイルがインストールされる。なお、保存先のディレクトリー名は変更しない。解凍が終了すると右の画面が出るので[OK]をクリックする。

同様に表示された画面 (下) から <gotodata.exe> をクリックすると後藤先生の絶対 AES スペクトルが[c:\SASJ\Database\#goto]にインストールされる。

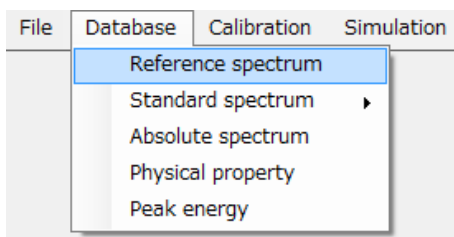


Absolute AES spectral database バージョン情報
 COMPRO also has a database for AES absolute spectra measured by Prof. Goto. The intensity scale of AES absolute spectra is [pA]. If you want to use Prof. Goto's absolute AES spectral database (version 2.1), please download <gotodata.exe>, which will automatically dissociate to AES absolute spectra measured by Prof. Goto. The database is created in [c:\SASJDatabase].

これらのスペクトルデータは全て ISO 規格で記述されたテキストデータとして記録されているので、COMPRO を使用しなくても閲覧する事が可能である。また、データベースのファイルは逐次更新されるので、バージョン情報を時々確認していただきたい。新たにホームページからダウンロードすると、データは全て上書きされる。データは更新されているので上書きが望ましいが、上書きを避けたいときには、解凍時に[Overwrite files without prompting]のチェックボックスを外せば良い。

6.1 Reference spectrum database

メニューから[Database]をクリックするとデータベースの選択画面が現れる。



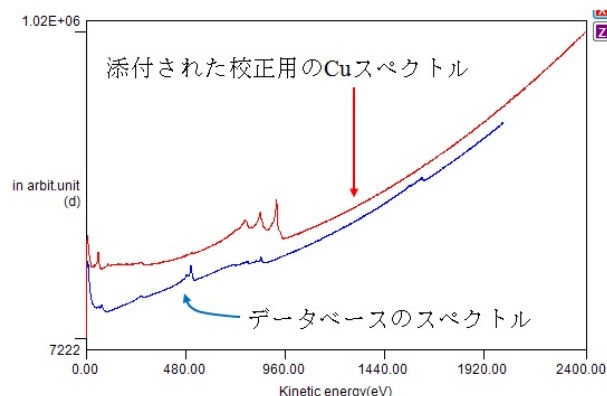
[Reference spectrum]をクリックすると、スクリーンの右側に元素テーブルが現れる。元素テーブルから元素名を選択してクリックすると、その元素を含むスペクトルのリストが表示される。

display

name	element	source	operator	institute	transitions	start	end	clb	
<input type="checkbox"/> 00002878	Si	XPS-AI	NAKAMURA...	FUJITSU LIMIL...	Si 2s	164	142		
<input type="checkbox"/> 00002879	Si	Co	XPS-AI	NAKAMURA...	Si	72	50		
<input type="checkbox"/> 00002881	Si	Co	XPS-AI	NAKAMURA...	Si 2s	1100	-50		
<input type="checkbox"/> 00002882	Si	XPS-AI	NAKAMURA...	FUJITSU LIMIL...	Si 2s	110	94		
<input type="checkbox"/> 00002884	Si	XPS-AI	NAKAMURA...	FUJITSU LIMIL...	Si 2s	110	142		
<input type="checkbox"/> 00002885	Co	XPS-AI	NAKAMURA...	FUJITSU LIMIL...	Co sp	72	50		
<input checked="" type="checkbox"/> 00002907	Ni	Si	C AES-5000	KOJIMAA...	MATSUSHITA...	Si LVV	0	2000	yes
<input type="checkbox"/> 00002910	Si	Ni	Cu AES-5000	KOJIMAA...	MATSUSHITA...	Si LVV	30	130	yes
<input type="checkbox"/> 00002912	Si	Cu	AES-5000	KOJIMAA...	MATSUSHITA...	Si KLL	1480	1760	yes

リストにはファイル名、元素名、手法—線源、取得者名、機関名、遷移名、開始エネルギー、終了エネルギーが示される。最後に[clb]という項目があるが、この項目に<yes>と記入されているスペクトルには、校正用の Cu スペクトルが別なブロックデータ

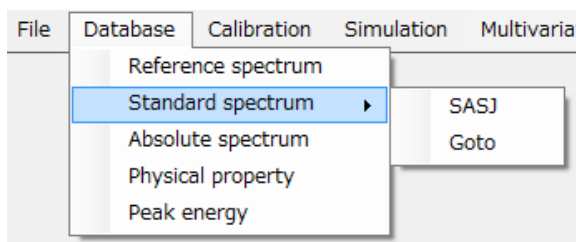
として添付されており、選択すると Cu スペクトルも同時に表示される。



リストのチェックボックスにチェックを入れるか、あるいは[shift]キーを押しながらマウスでドラッグして、[display]ボタンをクリックすると、選択したスペクトルが表示される。Reference spectrum databaseを終了するときには、元素テーブルの赤い[X]ボタンをクリックする。

表示されたスペクトルは、COMPRO 内で自由にデータ処理ができる。なお、論文などでデータベースのスペクトルを引用するときには“COMPRO: 0000 XXX” と記述していただきたい。ここで、0000XXX はファイル名である。

6.2 Standard spectrum database



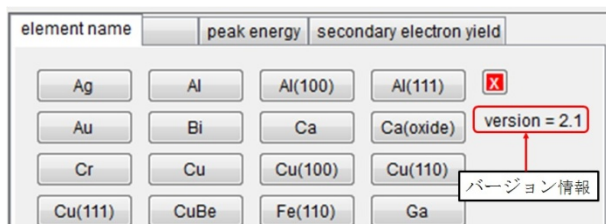
[Standard spectrum]をクリックすると[SASJ]と[Goto]を選択するサブメニューが現れる。[SASJ]をクリックすると double pass 分光器を使用して取得した Au と Cu の XPS スペクトルと、後藤先生が作製された標準分光器を用いて取得した Au, Ag と Cu の AES スペクトルのリストが現れる。

name	element	source	operator	institute	transitions	start	end	cb.
<input type="checkbox"/> AU_XPS01	Au	XPS-Mg	Yoshitake	NRIM	FAT 0.4eV	0	1000	
<input type="checkbox"/> AU_XPS02	Au	XPS-AI	Yoshitake	NRIM	FAT 0.4eV	0	1300	
<input type="checkbox"/> CU_XPS01	Cu	XPS-Mg	Yoshitake	NRIM	FAT 0.4eV	0	1000	
<input type="checkbox"/> CU_XPS02	Cu	XPS-AI	Yoshitake	NRIM	FAT 0.4eV	0	1300	
<input type="checkbox"/> AU_AES_1	Au	AES-5000	GOTO	NIT	FRR 0.0023	0	5000	
<input type="checkbox"/> AG_AES_1	Ag	AES-5000	GOTO	NIT	FRR 0.0023	0	5000	
<input type="checkbox"/> CU_AES_1	Cu	AES-5000	GOTO	NIT	FRR 0.0023	0	5000	

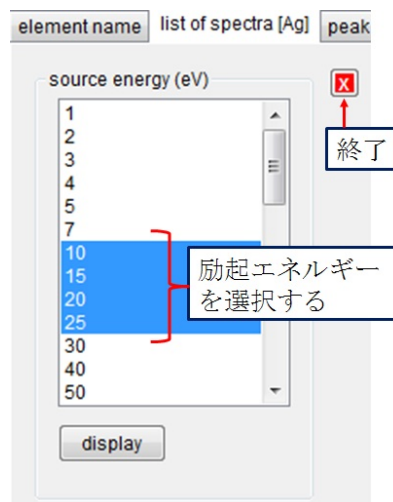
標準スペクトルを用いると自分の分光器の透過特性を求めることができる。透過特性の求め方は参考文献[1, 2]を参照していただきたい。Standard spectrum databaseを終了するときには、[display]ボタンの右の赤い[X]ボタンをクリックする。

6.3 Absolute spectrum database

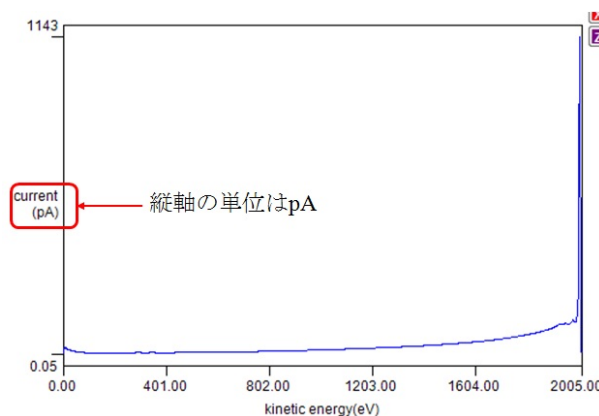
後藤先生が作製された分光器は、発生した二次電子強度を電流値として測定できるため、この分光器で測定された AES スペクトルは「絶対 AES スペクトル」と称されている。[Absolute spectrum]をクリックすると、スクリーンの右側に元素名や化合物名を表すボタンのリストが現れる。元素名ボタンの横にある赤い[X]ボタンをクリックするとデータベースが終了する。データベースのバージョンが終了ボタンの下に示されているので、表示値がホームページのバージョンと異なるときは、最新バージョンをダウンロードすることを勧める。



元素名のボタンをクリックすると、励起エネルギーのリストが現れ、テーブル名が[list of spectra[yy]]となる。ここで yy は選択したボタンに対応する元素名である。元素名のボタンの横にある赤い[X]ボタンをクリックするとデータベースが終了する。



リスト上で励起エネルギーをマウスでクリックするか、あるいは[shift]キーを押しながらマウスでドラッグして[display]ボタンをクリックするとスペクトルが表示できる。Ag を 2000V で励起したときに得られる AES スペクトルを下に示す。縦軸は[current(pA)]で示される。ISO14976 では電流値は nA で示す事になっているが、後藤先生の測定値は pA で表されているので、COMPRO では pA で示してある。

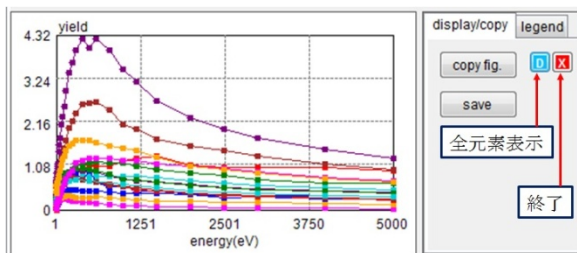


[Absolute spectrum database]はスペクトルデータベース以外に後藤先生から報告されているオージェピークエネルギー位置と二次電子放出係数に関するデータベースがあり、対応するテーブルのタブ名をクリックすると表示できる。

[peak energy]タブをクリックすると AES ピーク位置を記述した表が現れる。表の下部にある[save]ボタンをクリックすると、表示されている表を<csv>形式で保存できる。[save]ボタンの横にある赤い[X]ボタンをクリックするとデータベースが終了する。

[secondary electron yield]タブをクリックすると二次電子放出係数のデータベースが表示される。行は励起エネルギー、列は元素名か化合物名になっている。表の下部には二次電子放出係数のグラフが表示される。

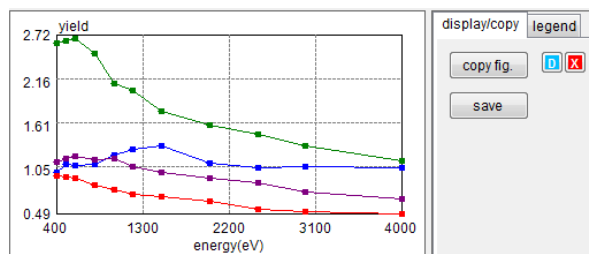
グラフの縦軸は二次電子放出係数、横軸は励起エネルギーである。デフォルトでは全ての元素の値が表示される。



element name	peak energy		secondary electron yield			
source energy	Ca	CaO	Cr	Cu(111)	CuBe	GaP
5000	0.38	1.02	0.48	0.69	1.04	0.54
4000	0.39	1.09	0.51	0.71	1.18	0.58
3000	0.41	1.1	0.55	0.79	1.37	0.65
2500	0.41	1.09	0.58	0.9	1.51	0.7
2000	0.42	1.15	0.67	0.96	1.62	0.77
1500	0.45	1.36	0.73	1.03	1.8	0.85
1200	0.45	1.32	0.76	1.11	2.05	0.86
1000	0.46	1.25	0.82	1.21	2.14	0.86
800	0.49	1.13	0.88	1.2	2.51	0.86
400	0.52	1.04	0.97	1.23	2.7	0.86
300	0.54	0.98	0.98	1.21	2.68	0.86
			0.99	1.17	2.65	0.86
			1.01	1.13	2.42	0.87

表示したい領域をマウスでドラッグする。

ドラッグした領域の放出係数が表示される。



[legend]タブをクリックすると、グラフの各線の凡例が表示される。青い[D]ボタンをクリックすると全ての元素の係数が再表示される。[copy fig.]ボタンをクリックすると表示画面を<jpg>形式で保存できる。[save]ボタンをクリックすると二次電子放出係数のデータを<csv>形式で保存できる。[default]ボタンの横にある赤い[X]ボタンをクリックするとデータベースが終了する。

表の最上部の行に元素名が表示されている。そのうちの一つの元素名をクリックすると、その元素に対応した二次電子放出係数のみがグラフに表示される。

source energy	Ca	CaO	Cr	Cu(111)	CuBe
5000	0.38	1.02	0.48	0.69	1.04

この名前の一つをクリックする。

複数の元素のデータを同時に表示させたい場合は元素名を連続してクリックする。

element name	peak energy		secondary electron yield			
source energy	Ca	CaO	Cr	Cu(111)	CuBe	GaP
5000	0.38	1.02	0.48	0.69	1.04	0.54
4000	0.39	1.09	0.51	0.71	1.18	0.58
3000	0.41	1.1	0.55	0.79	1.37	0.65
2500	0.41	1.09	0.58	0.9	1.51	0.7
2000	0.42	1.15	0.67	0.96	1.62	0.77
1500	0.45	1.36	0.73	1.03	1.8	0.85
1200	0.45	1.32	0.76	1.11	2.05	0.86
1000	0.46	1.25	0.82	1.21	2.14	0.86

複数元素を表示したい場合には、元素名を連続してクリックする。

グラフのある領域を拡大して表示させたい場合には、テーブルの上をマウスでドラッグする。

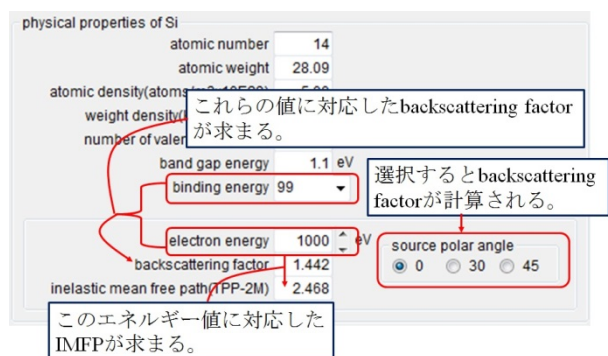
6.4 Physical property database

[Physical property]をクリックすると元素名と化合物名が選択できる画面が現れる。



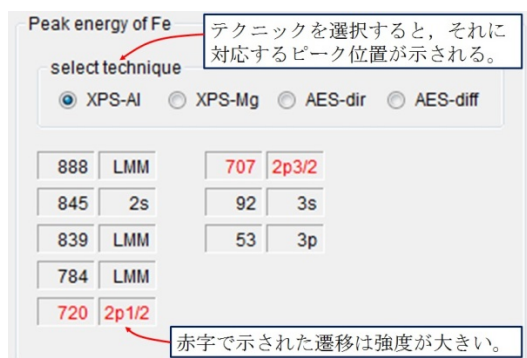
化合物名が選択できる

化合物名はリスト内に記述されている。赤い[X]ボタンをクリックするとデータベースが終了する。元素テーブルのボタン、あるいはリスト内の化合物名をクリックすると選択した元素あるいは化合物の物理定数が表示される。IMFPはTPP-2M式を用いて計算される。



6.5 Peak energy database

[Peak energy]をクリックすると元素テーブルが現れる。元素テーブルから元素名を選択してクリックすると、その元素のピークデータが示される。Peak energy database を終了するときには、元素テーブルの赤い[X]ボタンをクリックする。



ピークデータはXPS (Al励起とMg励起)とAES (直接と微分)の4種類が記録されている。ボタンでテクニックを選択すると、それに対応したピーク位置と遷移が表示される。赤字で表示された遷移は強度の大きい遷移である。

6.6 データベース用データの投稿

Reference spectrum database の有用性を増すためには、登録スペクトル数を充実させることが最も重要である。そのために、表面分析研究会の会員やCOMPROの利用者からのスペクトルデータの積極的な投稿を期待している。公開しても問題が無いと思われるスペクトルデータを取得された場合には、yoshihara.kazuhiro@apost.plala.or.jp にスペクトルデータ (ISO14976形式が望ましいが、変換に手間がかかるようであれば csv 形式や Excel ファイルでも良い) を添付ファイルとして送付していただきたい。なお、投稿の際に、同じ分光器で取得した Cu のスペクトルを同時に送付していただくと、6.1で述べたように、スペクトルの表示リストの[clb]の項目に[yes]が表示される。

参考文献

- [1] 吉武道子, 吉原一紘, 共通データ処理環境用 XPS 2次基準スペクトルのエネルギー特性評価, 表面科学 **16**, 434 (1995).
- [2] M.Yoshitake and K.Yoshihara, Round Robin on Spectrometer Transmission Calibration for AES in the Common Data Processing System, *Surf. Interface Anal.* **25**, 209 (1997).