

連載 (講義)

# Common Data Processing System Version 10 の使用法

## — (6) シミュレーション —

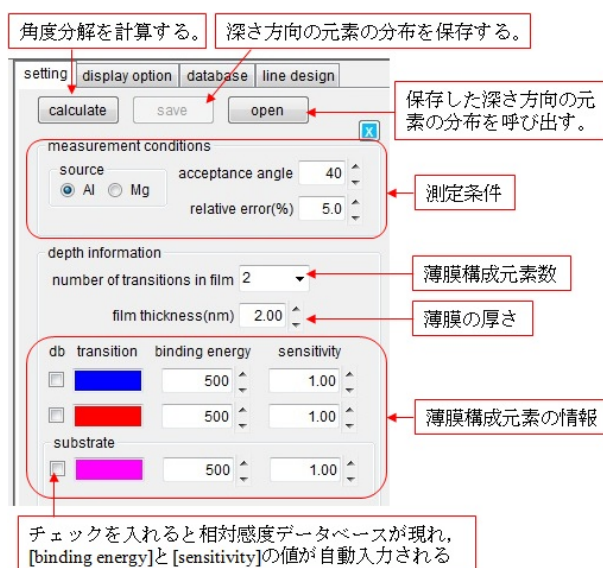
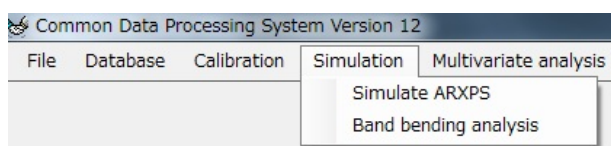
吉原一紘\*

オミクロンナノテクノロジージャパン(株)  
140-0002 東京都品川区東品川3-32-42 ISビル  
\*k.yoshihara@omicron.oxinst.com

(2014年9月22日受理)

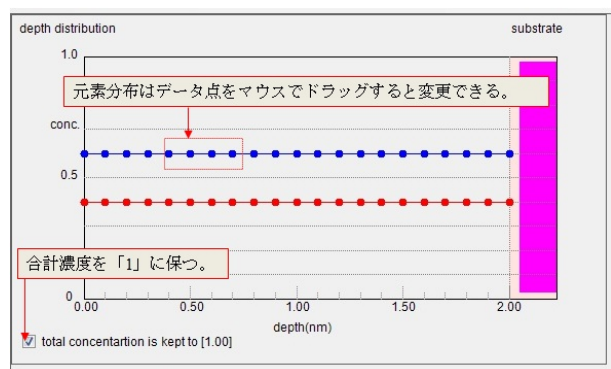
### 8. シミュレーション

COMPRO には角度分解法 XPS (ARXPS) により測定される元素の検出強度の角度分布をシミュレーションする[Simulate ARXPS]と、表面近傍のポテンシャル分布による観測スペクトルの変化をシミュレーションする[Band bending analysis]の二つのシミュレーションソフトが組み込まれている。メニュー画面の[Simulation]をクリックするとシミュレーションの選択画面が現れる。



#### 8.1. [Simulate ARXPS]

[Simulate ARXPS]を選択するとコンピューター画面の左側に下の画面が現れる。

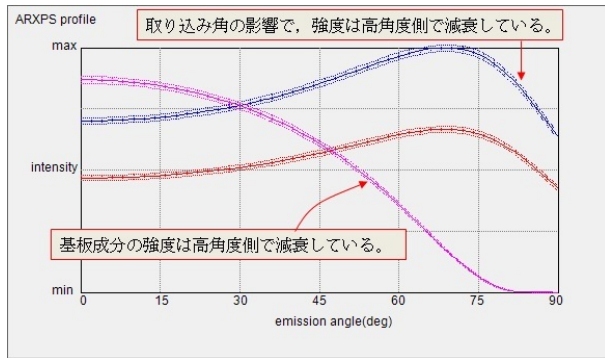


この図は青で示される元素 60%と赤で示される元素 40%が均一に混ざった厚さ 2nm の薄膜がピンクで示される元素の基板上に存在していることを示している。同時にコンピューター画面の右側には次に示

す画面が現れる。この画面を用いて、励起源、測定時の取り込み角、相対誤差が入力できる。薄膜を構成する元素の数、薄膜の厚さ、各元素の遷移、結合エネルギー、相対感度を入力する。なお、チェックボックスにチェックを入れると相対感度データベースが出現し、データベースの値を自動的に入力することが出来る。[calculate]ボタンをクリックすると、上部に示される元素分布に対応した角度分解結果が表示される。

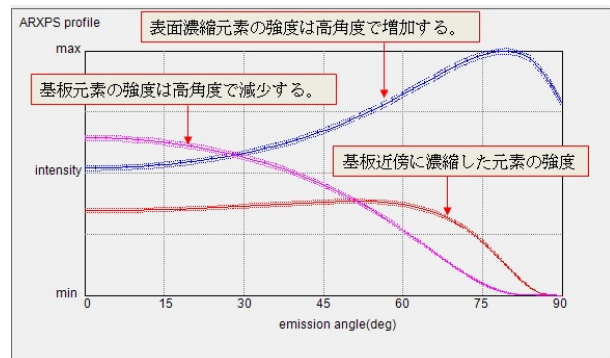
得られた角度分解結果を次図に示す。縦軸は強度、横軸は放出角度である。高角度で薄膜構成元素の強度が小さくなるのは、取り込み角の影響である。なお、IMFP の値は全ての元素に対してデフォルトで 2.5nm が与えられているが、データベースで元素名、遷移を指定すると、TPP-2M 式で計算された値に変更される。

ここで、マウスでデータ点をドラッグして元素分布を変え、青色で示される元素を表面に偏析させた



分布を作成した例を示す。データ点は一点ずつドラッグすることができるが、同時に複数点を移動させたいときには、あらかじめマウスで複数点を囲んでグループを作り、それをドラッグする。

この元素分布に基づいた角度分解のシミュレーション結果を下図に示す。



縦軸の表示は、コンピューターの右側画面の上部のタブから[display option]を選択して[ordinate axis of ARXPS profile]のグループから選択すると変更できる。

元のデータ処理の画面に戻るにはメニューバーから[Return]を選択する。

setting display option database line design

ordinate axis of ARXPS profile

- I\_element 元素の強度
- I\_element / Sum(I\_element) 元素の強度割合
- normalized : [I\_element] 規格化した元素の強度
- ratio : I\_element / I\_reference 元素間の強度比
- normalized ratio : [I\_elm / I\_ref] 規格化した元素間の強度比

### 8.2. [Band bending analysis]

このシミュレーションは物質・材料研究機構の吉川英樹博士が作成したプログラムを COMPRO に組み込んだものである。なお、ファイルの読み込みや画像の表示法は COMPRO で用いられる手法と同一にしてある。

固体内で発生した光電子が放出されるときに、表面近傍のポテンシャルの曲がりにより、どのようにピーク形状が影響されるかをシミュレーションするプログラムである。発生させる光電子スペクトルは Voigt 関数を用いて作成する。表面近傍のポテンシャルの曲がりには、linear (線形関数), quadratic (二次関数), exponential (指数関数) を組み合わせて決定する。ポテンシャルの曲がりには表面から最大 5 層に渡って決定する。[Band bending analysis]を選択すると次の入力画面が現れる。

発生させる光電子スペクトル形状の指定

simulation data customize input data range

source function (Voigt function)

- center energy (eV)
- peak width (eV)
- display range (eV)
- ratio of Lorentzian

measured

- open 実測スペクトルの読み込み
- close

simulation

- open 入力データの保存と読み込み
- close
- save

emission angle 光電子の放出条件

attenuation length (nm)

emission angle

potential of band bending

number of layers 0

	type	a	depth (nm)	potential (eV)
No.1 layer				
No.2 layer				
No.3 layer				
No.4 layer				
No.5 layer				

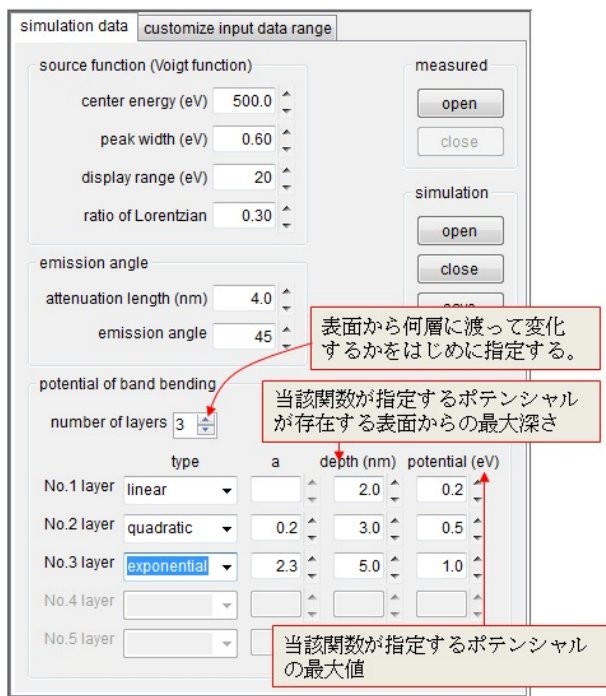
表面近傍のポテンシャルの曲がり指定

例として、発生させる光電子スペクトルの中央値は 500eV, ピーク幅は 0.6eV, 表示させる幅は 20eV, Voigt 関数の Lorentz 部分を 0.3(30%)と入力する。

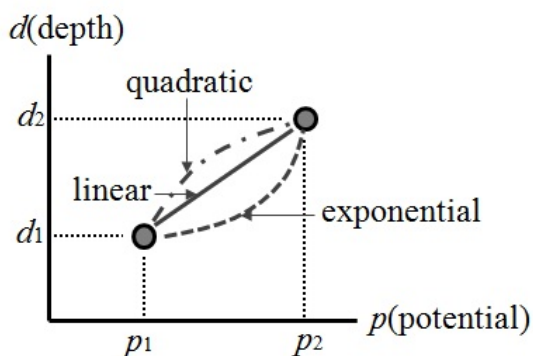
減衰長さを 4.0nm, 放出角度を 45 度, ポテンシャルの曲がり表面から 3 層に渡って, 直線, 二次関数, 指数関数で設定する。設定画面を次に示す。

ポテンシャル設定の際のパラメーターを使用して, ポテンシャル (p) と表面からの深さ (d) の関係を以下に述べるような数式で記述する。

使用するパラメーターの値を次図の例で示すと,



表面から第一層 (No.1 layer) は linear で、 $d_1=0, p_1=0, d_2=2.0, p_2=0.2$ , 第二層 (No.2 layer) は quadratic で  $a=0.2, d_1=2.0, p_1=0.2, d_2=3.0, p_2=0.5$ , 第三層 (No.3 layer) は exponential で  $a=2.3, d_1=3.0, p_1=0.5, d_2=5.0, p_2=1.0$  となる。次図にポテンシャル ( $p$ ) と深さ ( $d$ ) の関係を表すパラメーターを模式的に示す。



これらのパラメーターを用いてそれぞれのポテンシャルの形状を次式で表す。

linear の場合 :

$$d = \text{gradient} \cdot (p - p_1) + d_1$$

ここで  $\text{gradient} = (d_2 - d_1) / (p_2 - p_1)$  である。

quadratic の場合 :

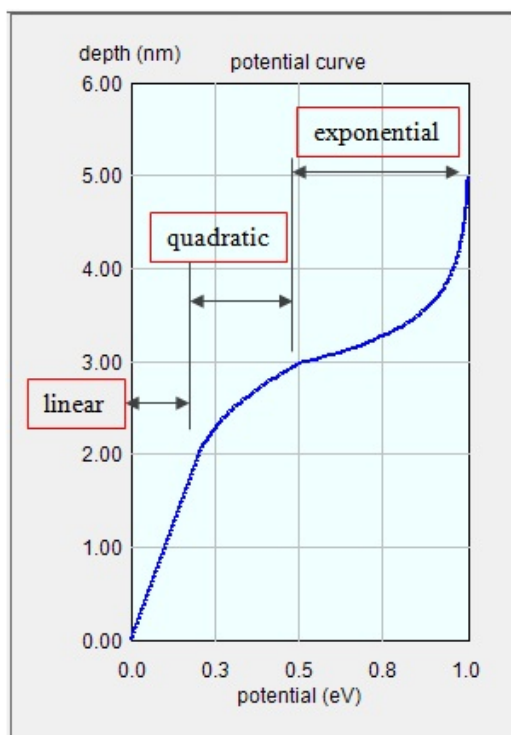
$$d = (\text{gradient} + a(p - p_2)) \cdot (p - p_1) + d_1$$

exponential の場合 :

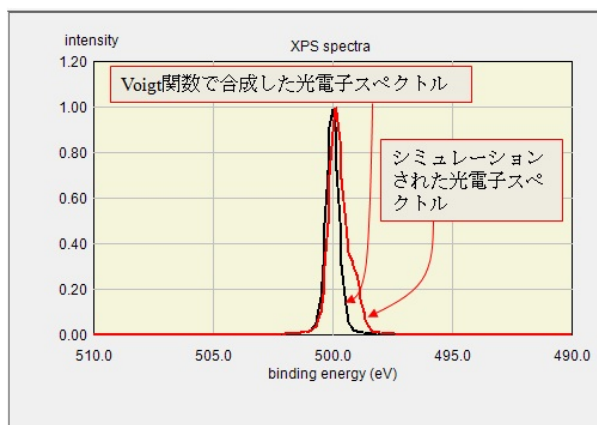
$$d = \frac{(d_1 - d_2)(\exp(a \cdot p) - \exp(a \cdot p_1))}{(\exp(a \cdot p_1) - \exp(a \cdot p_2))} + d_1$$

としてポテンシャルが計算される。

今回の条件で計算された表面近傍のポテンシャル分布は以下のように表示される。



この表面近傍におけるポテンシャルの曲がりにより光電子スペクトルが変形する様子をシミュレーションした結果が次図のように表示される。

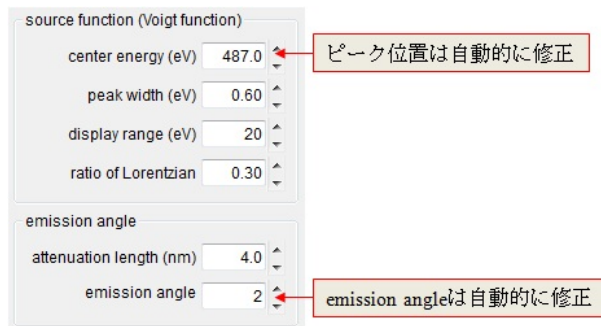


シミュレーションに用いた Voigt 関数, 及びポテンシャル分布とそれに用いた変数は[simulation] グループにある[save]ボタンをクリックすると<csv>形式で保存される. なお, [open]ボタンをクリックすると, 保存したファイルを読み出して, 画面上に表示する.

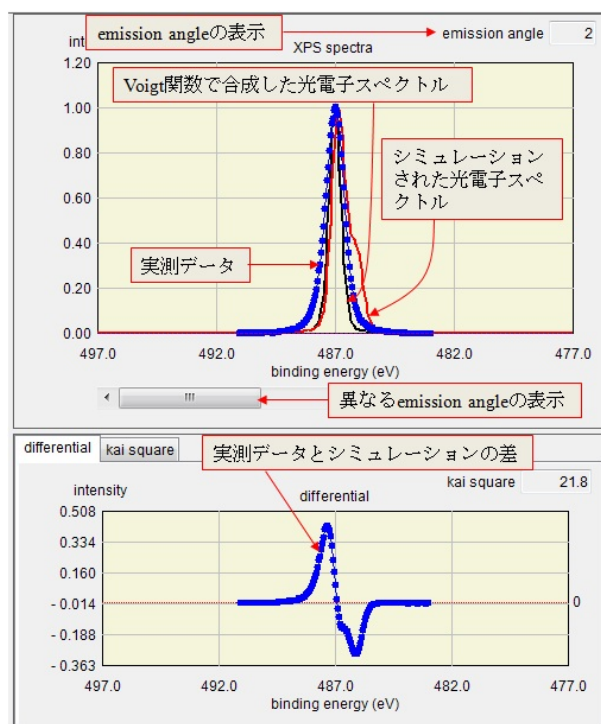
シミュレーションで得られたスペクトルと実際に測定したスペクトルを比較することが出来る. 測定したスペクトルは<csv>形式で保存されたスペクトル, または ISO14976 形式で保存されたスペクトルならば[measured]グループの[open]ボタンをクリックすると読み込むことが出来る. <csv>形式で保存されたスペクトルは[energy]と[intensity]の2列から構成されていないといけない. 取り込み角を変えて取得されたスペクトルも読み込むことが出来る. ISO14976 形式では複数ブロックとして記述すれば良いが, <csv>形式では以下のように emission angle ごとに行をブロック化して記述されていないといけない.

energy	intensity	emission angle
30		
491.04	137.00	
490.99	120.00	
490.94	120.00	
490.89	131.00	
490.84	145.00	
490.79	127.00	
490.74	125.00	
60		
483.04	118.00	
482.99	125.00	
491.04	68.00	
490.99	69.00	
490.94	73.00	
490.89	79.00	
490.84	75.00	

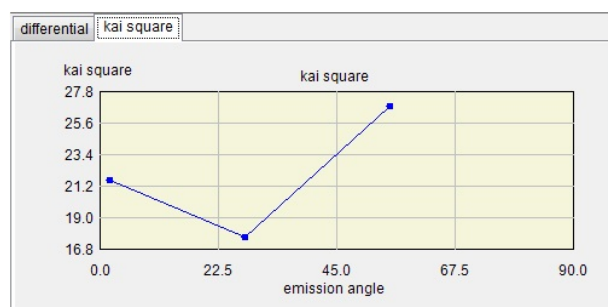
例として, emission angle を 2°, 30°, 60° と変えたときの実測スペクトルを用いて, シミュレーション結果と比較した画面を示す. [measured]グループの[open]ボタンをクリックして実験データを読み込むと, シミュレーションに用いるピーク位置が自動的に実験データのピーク位置になる.



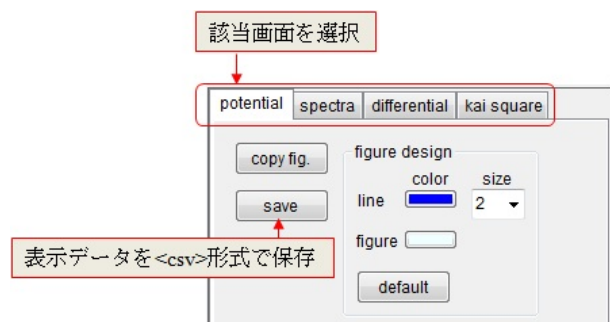
なお, [peak width]や[ratio of Lorentzian]は手動入力が必要である. ポテンシャル分布を設定するとスペクトルが表示される.



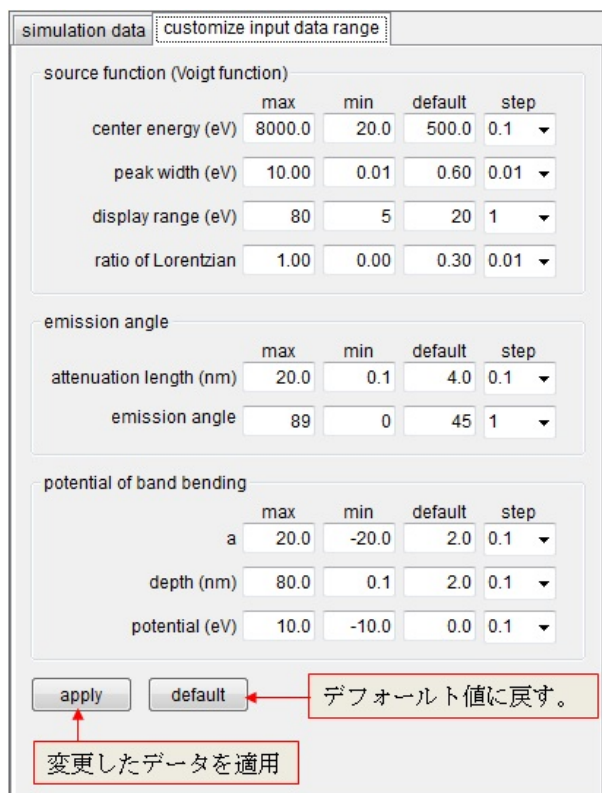
スペクトルの下部には実測スペクトルとシミュレーションの差が表示される. この差を小さくするように Voigt 関数のパラメーターやポテンシャルの曲がりを手動で調整することを行う. 比較表示をする画面の[kai square]タブをクリックすると, emission angle と kai square の関係が表示される.



画面の表示色を変更したいときには次図に示すパネルで、変更したい画面を選択して線色等を指定すれば変更できる。



Voigt 関数やポテンシャルの形状を決定するときの画面で入力条件がデフォルト値と大きく異なるときには、入力が出来なくなる。その場合には [customize input data range] タブをクリックするとデフォルト値を変更できる。



この画面を利用して、入力データ範囲を変更すれば大きく異なったデータにも対応できる。

元のデータ処理の画面に戻るにはメニューバーから [Return] を選択する。

### 8.3. COMPRO からのお願い

シミュレーションは表面分析において今後重要性を増してくると思われませんが、現在のところ、COMPRO にはここで解説した2種類のシミュレーションソフトしか組み込まれていません。会員の方々から「このようなシミュレーションを組み込んでほしい」、あるいは「こんなシミュレーションソフトを作ったが COMPRO で試してほしい」というようなご意見・ご提案がございましたら、著者までご連絡ください。