

掲示板

2014 年度実用表面分析講演会(PSA14)における XPS-WG 議事録

日時：2014 年 10 月 27 日 20:00～ ナイトセッション

場所：御殿場高原 時之栖（ときのすみか）Hotel Brush Up 第二会議室（御殿場市）

1. XPS-WG 内 3 テーマについて紹介及び有機物損傷 G 活動概況報告

初参加者に XPS-WG 内 3 テーマについて紹介した。有機物損傷グループはメンバー欠席のため、今回は現在の活動状況（メール討議と測定）報告のみ行った。

有機物損傷グループ活動概況報告

- ・先行文献の再確認とその時の測定条件を調査
- ・実験用試料の検討
monoAl 線源の場合損傷に時間がかかるため、比較的損傷しやすい PVC が有力候補、先行文献との再現性を確認するため、試料を PVC に決定。
- ・損傷実験用ホルダーと試料の配布...永富、高野、相馬、大和、島、石川に配布。
- ・先行文献の追試...現在配布されたホルダーと試料で各自測定中。

2. テーマ別討議

定量グループ議事録

参加者：大村 和世（東北大学）、西田 真輔（古河電気工業株）、景山 大輝（日本板硝子株）、安野 聡（高輝度光科学研究センター）、當麻 肇（株日産アーク）、風間 美里（旭化成株）、塩沢 一成（株三井化学分析センター）、岡嶋 康雄（奈良先端技術大学）、田中 章泰（日本電子株）、速水 弘子（日鉄住金テクノロジー株）（敬称略）

- (1) 定量問題の歴史的経緯（別表）について
- ・主流な方法は二つあることを確認。
 - ・Wagner または Scofield の既存データベースを活用（市販装置）
 - ・ISO18118
 - ・上記二つの考え方・特徴・利点および欠点などを引き続き調べる。
- (2) ISO18118 (JIS0167)の方法を可能な範囲で各自確かめる。
- ・装置の透過関数を測定 ← COMPRO を活用
 - ・ISO の精神で標準試料を測定 ← 現案は Au, Cu または Co, Ni
 - ・合金試料を測定←未定
 - ・バックグラウンド決定 ← Tougaard 法または Shirley 法
 - ・元素相対感度係数による定量
 - ・原子相対感度係数による定量
 - ・平均マトリクス相対感度係数による定量

(3) リーダーの決定：岡島氏に決定

(別表) ISOとWagnerの相対感度係数

	ISO18118, JIS K0167	Wagner, 市販装置ユーザー
信頼性 ↑ 低い ↓ 高い	<p>元素絶対感度係数 EASF $S_i^{EASF} = I_i^{ref}$ 参照物質のピーク強度そのもの Seahの論文JESRP 120, 93 (2001)では純物質のピーク強度そのものを相対感度係数と呼んでいる。式(13)と(14)の間あたり。</p>	
	<p>元素相対感度係数 ERSF: ISO18118 の式(A.4) $S_i^{ERSF} = \frac{I_i^{ref}}{I_{key}^{ref}}$ keyとなる物質のピーク強度との強度比 ISOのよれば式(A.4)は「よく使われる」 ←本当か？</p>	
	<p>化合物を使う場合の元素相対感度係数 $S_i^{ERSF} = \frac{I_i^{ref}}{X_i^{ref} I_{key}^{ref}}$ 化合物中の原子比率で校正したもの</p>	
	<p>原子相対感度係数 ARSF $S_i^{ARSF} = \frac{I_i^{ref}/N_i^{ref}}{I_{key}^{ref}/N_{key}^{ref}}$ 原子数密度比を補正 原子1つあたりのピーク強度比に相当</p>	<p>化学量論的に正しい相対感度係数 $S_i^{Wagner} = \frac{I_i/n_i}{I_{F1s}/n_{F1s}}$ nは整数</p>
	<p>平均マトリクス相対感度係数 (week matrix approach) $S_i^{AMRSF(w)} = \frac{I_i^{ref}/N_i^{ref}}{I_{key}^{ref}/N_{av}}$ AMRSFで $\frac{Q_{av}\lambda_{av}}{Q_i^{ref}\lambda_i^{ref}} = 1$ とみなせるとき</p>	<p>化合物が異なればイオン化断面積σや脱出深さλは変化するが、二つの元素の比σ1/σ2やλ1/λ2は一定であろう。 (Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy)</p>
<p>平均マトリクス相対感度係数 AMRSF $S_i^{AMRSF} = \frac{I_i^{ref}/N_i^{ref}Q_i^{ref}\lambda_i^{ref}}{I_{key}^{ref}/N_{av}Q_{av}\lambda_{av}}$ マトリクス効果を「仮想平均マトリクス試料のパラメタ」で校正 AMRSFが最も信頼性の高いRSF (田沼さんの意見?)</p>	<p>正確さに疑問あり (田中さんの問題意識?) ISOのマトリクス効果との関係は? 化合物の表面状態の影響は?</p>	

目指す方向の対応関係が不明

ISO18118

元素絶対感度係数

$$S_i^{EASF} = I_i^{ref}$$

元素相対感度係数

$$S_i^{ERSF} = \frac{I_i^{ref}}{I_{key}^{ref}}$$

ISO18118いわく
よく使われている(!?)
誰も使っていないのでは?

原子相対感度係数

$$S_i^{ARSF} = \frac{I_i^{ref}/N_i^{ref}}{I_{key}^{ref}/N_{key}^{ref}}$$

平均マトリクス相対感度係数
(week matrix approximation)

$$S_i^{AMRSF(w)} = \frac{I_i^{ref}/N_i^{ref}}{I_{key}^{ref}/N_{av}}$$

平均マトリクス相対感度係数

$$S_i^{AMRSF} = \frac{I_i^{ref}/N_i^{ref}Q_i^{ref}\lambda_i^{ref}}{I_{key}^{ref}/N_{av}Q_{av}\lambda_{av}}$$

相対感度係数 s の使い方

$$X_i = \frac{I_i/S_i}{\sum_j I_j/S_j}$$

Wagner

化学量論的に正しい
「相対」感度係数

$$S_i^{Wagner} = \frac{I_i/n_i}{I_{F1s}/n_{F1s}}$$

マトリクス効果とは?
Qλの効果? それ以外?

スペクトルデータベースグループ議事録

参加者：吉川 英樹 (NIMS), 勝見 百合 (YKK), 陰地 宏 (高輝度光科学研究センター), 木村 昌弘 (JX 日鉱日石金属(株)), 高野 みどり (パナソニック(株)AIS 社) (敬称略)

(1) Excel 形式のスペクトルデータフォーマットの現案についての再確認と今後の作業

- ・データフォーマットの基本的な以下の考え方を再確認
 - a) ISO14976 の形式を踏襲して, 多次元のデータ行列と見なせるスペクトルデータを”ブロック”と呼ばれる最小単位とそのブロックが複数個連なった形式で記録する.
 - b) 「入力の手軽さ」, 「拡張性の高さ」, 「高速なデータ検索」を実現するための工夫を常に行う.
 - c) 最終的なデータの長期保存および高速検索は, Excel ファイルを xml 形式に変換をしたデータベースで実現する.
- ・原案を吉川よりメンバーに送り, 再度メンバー全員で項目名称の整合性のクロスチェックを行う.
- ・Excel ファイルを xml に変換するソフトウェアの作成作業は, 11 月に作業を開始して年末までに最初のバージョンを作成する予定 (吉川談, 担当 渡部)

(2) 記録するスペクトルの具体例を作っていく今後の方策

- ・スペクトルを公開するにあたっての問題点についての議論
 - a) 企業の場合: 試料が社外のものであれば問題はない.
 - b) SPring-8 や米子高専の場合: 論文化した後であれば問題はない. 論文化にあたって JSA 誌への寄稿を SPring-8 の JASRI で検討をして頂く (担当: 陰地).
- ・XPS WG の過去の活動で測定したスペクトルデータ (TiO₂ や酸化銀のスペクトルなど) をまずは提供してもらおう (担当: 高野)
- ・ZnO について種々の形態の試料の入手を今後検討する (担当: 勝見, 吉川).
- ・スペクトルデータを取得するための推奨する測定レシピを今後検討する.
吉川と田中 (博美) の方で叩き台の案を作って, それをメンバーに送り検討を行う.
- ・既存の論文にあるスペクトルをデータベース化する際の問題点についての議論
論文のデータをデジタイズで数値化し記録する際に, 引用元を明記にしかつ商用化しないのであれば問題は無し.
- ・論文のデータをデジタイズするソフトウェアを後日吉川より紹介する.

(3) 記録するデータのファイルやフォルダの扱い

- ・スペクトルデータのファイル名は, SASJ, 年, 月, 日, 時, 分, スペクトル識別記号, 登録者識別番号の順 (例: SASJ201410271534AAC1) に文字を並べてファイル名を決める.
- ・スペクトル識別番号は, アルファベットのみで記載する
- ・スペクトル申請者が, 「年, 月, 日, 時, 分, スペクトル識別記号」の形で申請番号を決め, SASJ 側担当者がその申請番号を使って, 「SASJ, 申請番号, 登録者識別番号」の形式で登録番号を決める.
なお, 登録者識別番号は, 万一, 同一の申請番号を複数の申請者が使った場合に (登録番号の二重登録を避ける為) 連番の数値を設定するもので, その事態が無ければ登録者識別番号は不要とする.
- ・ファイルをフォルダ別に整理する際, 年単位のフォルダは作るがそれ以下の下位フォルダは作らない.