

エクステンディッド・アブストラクト

電子分光シミュレーター SESSA の使い方

三浦 薫,^{*1} 吉川 英樹²

¹ 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 ナノテクノロジープラットフォームセンター
〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

² 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 表面化学分析グループ
〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

* MIURA.Kaoru@nims.go.jp

(2017年8月21日受理; 2018年3月5日掲載決定)

Guide of SESSA for Electron Spectroscopy

Kaoru Miura^{*1} and Hideki Yoshikawa²

¹ Center for Nanotechnology Platform, National Institute for Materials Science (NIMS)
1-2-1, Sengen, Tsukuba, Ibaraki 305-0047, Japan

² Surface Chemical Analysis Group, Research Center for Advanced Measurement and Characterization
National Institute for Materials Science (NIMS), 1-2-1, Sengen, Tsukuba, Ibaraki 305-0047, Japan

* MIURA.Kaoru@nims.go.jp

(Received: August 21, 2017; Accepted: March 5, 2018)

目次

1. SESSA使用の背景
2. SESSAとは
3. SESSAシミュレーションの概要
4. SESSAの画面構成
5. SESSAの起動から結果の出力まで
6. 出力されるデータ
7. 変更可能なパラメータ
8. Command History File
9. 不可解なことが起きたときの回避策
10. まとめ

1. SESSA使用の背景

XPSデータ解析アルゴリズムを開発するにあたり、実機マシンタイムの確保が困難であったため、

SESSA※1により発生させた XPSスペクトル
(シミュレーション スペクトル)

を用いた。

※1 <https://www.nist.gov/srd/nist-standard-reference-database-100>

Users' Guide(全80頁)はダウンロード出来る

<https://www.nist.gov/sites/default/files/documents/srd/Users-Guide-SESSA-Version-2-0-October-9-2014.pdf>

2. SESSAとは

■NIST の Database

the **S**imulation of **E**lectron **S**pectra for **S**urface **A**nalysis

の頭文字を繋げた略語

■**オー**ジ**E**電子分光 及び **X**線光電子分光 による定量分析のためのシミュレーター

■ 価格: \$900.00

■ 制作者:

Wolfgang S. M. Werner and W. Smekal

Vienna University of Technology,

and

Cedric J. Powell

National Institute of Standards and Technology

3. SESSAシミュレーションの概要

(1)起動/初期設定

(2) 試料情報入力

- 1) 組成、層構成
- 2) 原子密度、その他

(3)測定条件入力

- 1) Source
- 2) Analyzer
- 3) Region

(4)測定

(5)データ出力

※ (1)~(5)の自動化(バッチ処理)可

□ (1)→(5)の流れで、シミュレーションを行う。

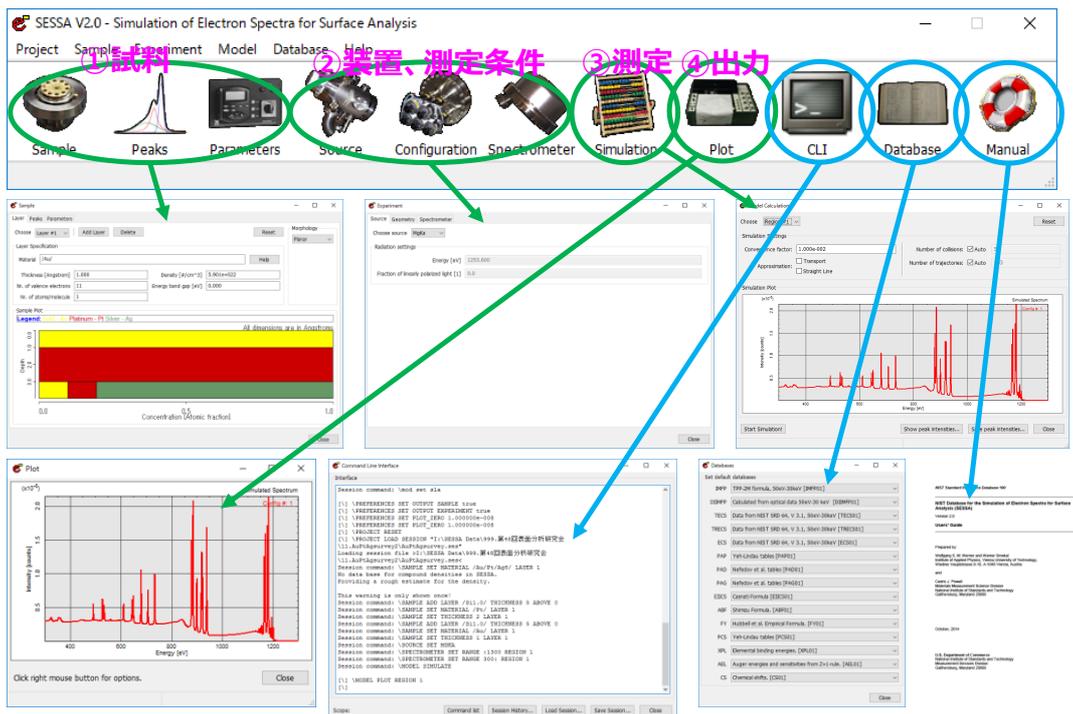
※ 設定/入力の要・不要

太字: 必須

斜体: 必要なことが多い

標準: 必要に応じて~通常は初期値のまま

4. SESSAの画面構成



5-1. SESSAの起動と初期設定

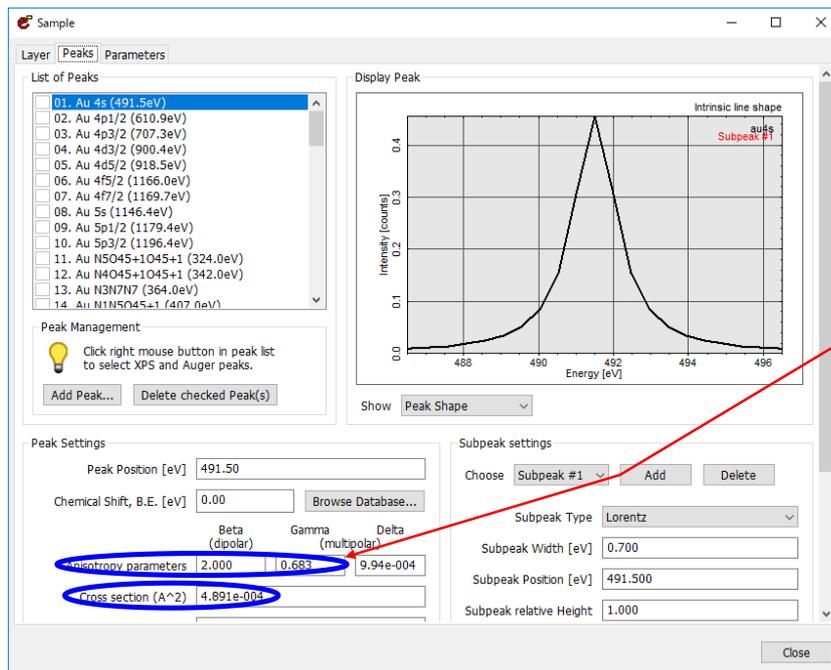
① 起動~main menu が立ち上がる
 ② 初期設定~Preference Settings で、sample と experiment にチェックを入れる
 ③ 初期設定~Reset 後、使用する

※ Load/Save~Command History (SESファイル<*.ses>) の活用

5-2-1. 試料情報

- ④ 試料組成を入力 ex. SiO₂:/Si/O2/
 必要であれば、
 a) 層の追加
 b) 原子密度の変更

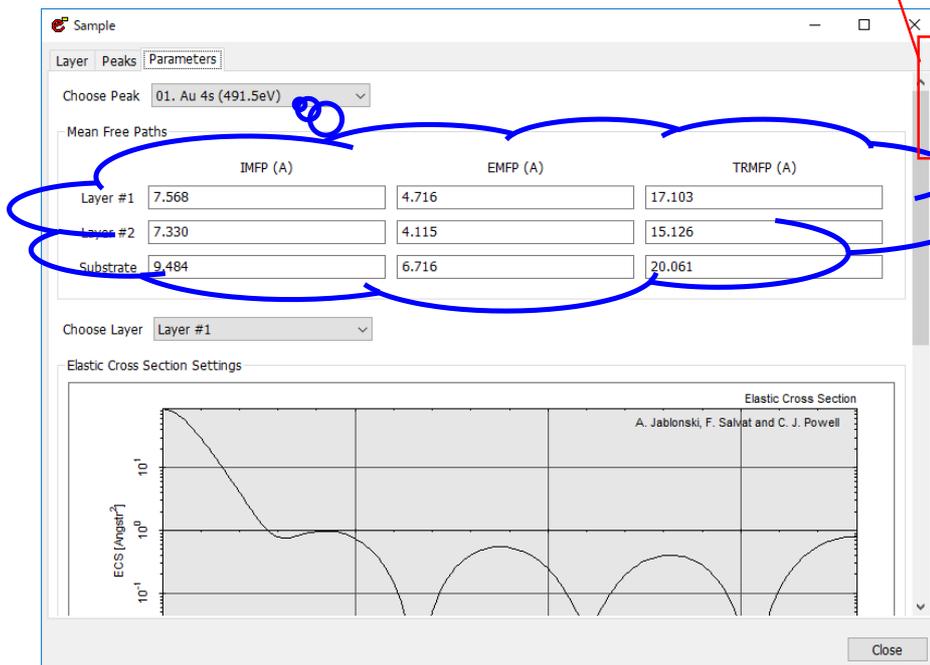
(5-2-2. 非対称性パラメータ、イオン化断面積)



通常は初期値のまま

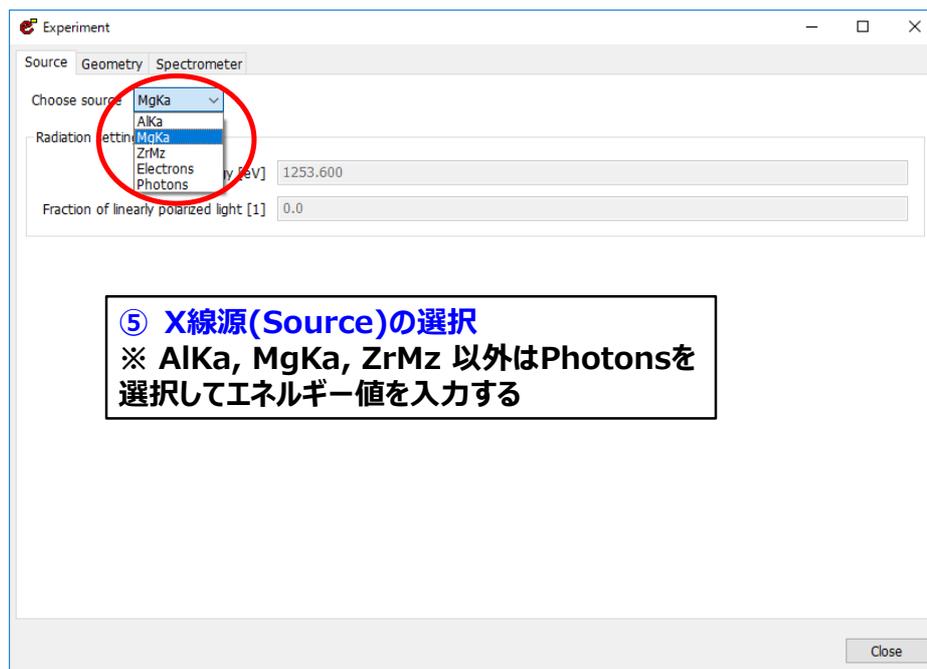
Gamma に入力した値が Beta の設定値となり、Delta に入力した値が Gamma の設定値となる。Delta は変更出来ない。

(5-2-3. IMFP, EMFP, TRMFP)



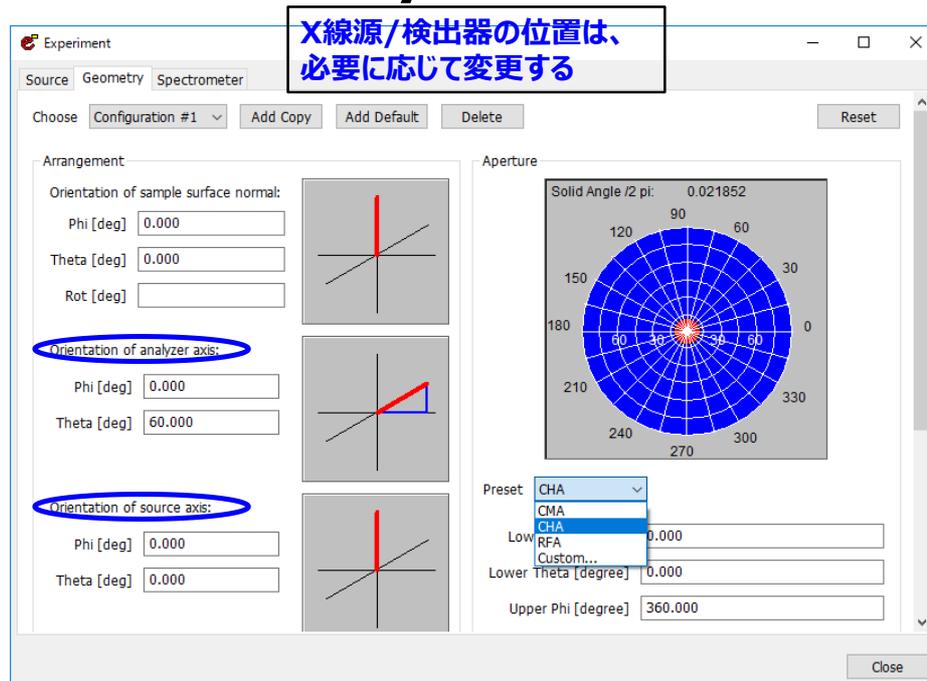
通常は初期値のまま

5-3-1. X線源(Source)



⑤ X線源(Source)の選択
※ AlKa, MgKa, ZrMz 以外はPhotonsを選択してエネルギー値を入力する

5-3-2. X線源/検出器の位置



X線源/検出器の位置は、必要に応じて変更する

5-3-3. エネルギー範囲

⑥ エネルギー範囲の設定
※ 現設定値の範囲外を設定する時には注意が必要
※ Multi Region 測定も可、領域の重畳はNG

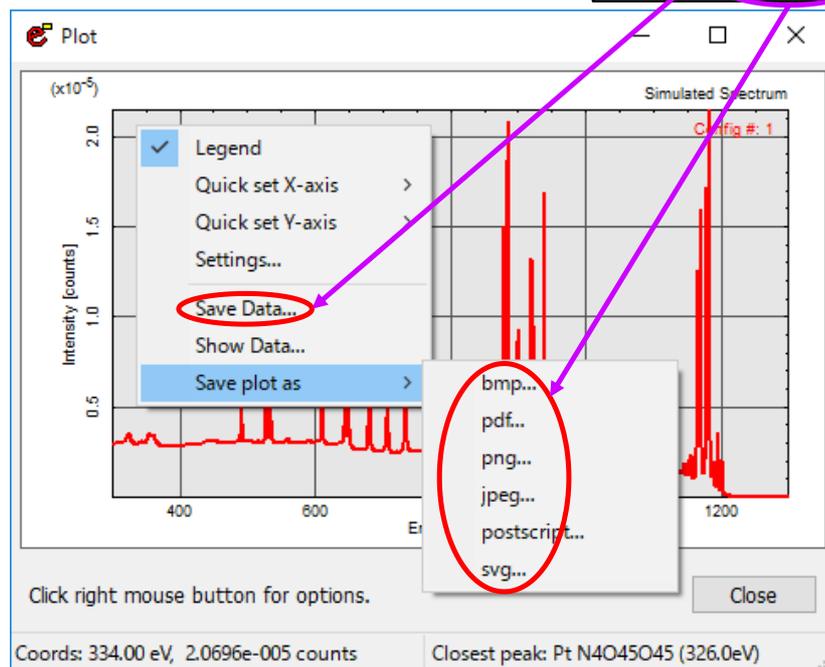
5-4. シミュレーション

※ double click で PLOT画面が開く

Start Simulation! GO!

5-5. 結果の出力

⑧ データ出力
 スペクトルデータ出力(.dat, .xls)
 スペクトル画像出力



6. 出力されるデータ

(1) PROJECT Commands から出力されるデータ(ファイル)

1) session file

コマンド履歴

filename.ses

2) output file

a) 試料構造

[filenames]_sam_lay.txt

b) 信号-電子発生、輸送

[filenames]_sam_peak.txt

[filenames]_sam_par.txt

c) 測定条件、設定

and preferences settings

[filenames]_exp.txt

[filenames]_prefs.txt

d) 参照文献、注記

[filenames]_refs.txt

[filenames]_rems.txt

e) filenames ending with .spc, .pi, .adf

f) filenames ending with _g

g) Files that can be loaded into the program **GNU PLOT**

(2) PLOT Commands から出力されるデータ(数値、グラフ)

1) DATA file (*.dat)

2) POSTSCRIPT file

3) PDF file

4) PNG file

5) **GIF file ← 出力出来ない(バグ?)**

6) BMP file

7) JPG file

8) SVG file

※ [filenames] には、output file に付けたファイル名が自動的に入る

7. 変更可能なパラメータ

I. Sample

- (1) sample composition and morphology
 - 1) Layer Specification
 - a) material
 - b) thickness [Angstrom]
 - c) density [$\#/cm^3$]
 - d) Energy band gap [eV]
 - e) Nr. of valence electrons
 - f) Nr. of atoms/molecule
 - 2) Layer
 - Multi Layer
 - 3) Morphology
 - a) PLANAR
 - b) ROUGHNESS
 - c) ISLANDS
 - d) SPHERES
 - e) LAYERED_SPHERES
- (2) Peaks
 - 1) List of Peaks
 - a) Add
 - b) Delete
 - 2) Peak Settings
 - a) Peak Position [eV]
 - b) Chemical Shift, B.E. [eV]
 - c) cross section [A^2]
 - d) asymmetry parameter beta
 - e) asymmetry parameter gamma
 - f) asymmetry parameter delta
 - 3) Subpeak settings
 - a) Subpeak Type
 - b) Subpeak Width [eV]
 - c) Subpeak Position [eV]
 - d) Subpeak relative Height
 - e) Subpeak Asymmetry
- (3) sample interaction parameters for a given peak in a given layer
 - 1) IMFP[A]
 - 2) EMFP[A]
 - 3) TRMFP[A]

7. 変更可能なパラメータ (続き)

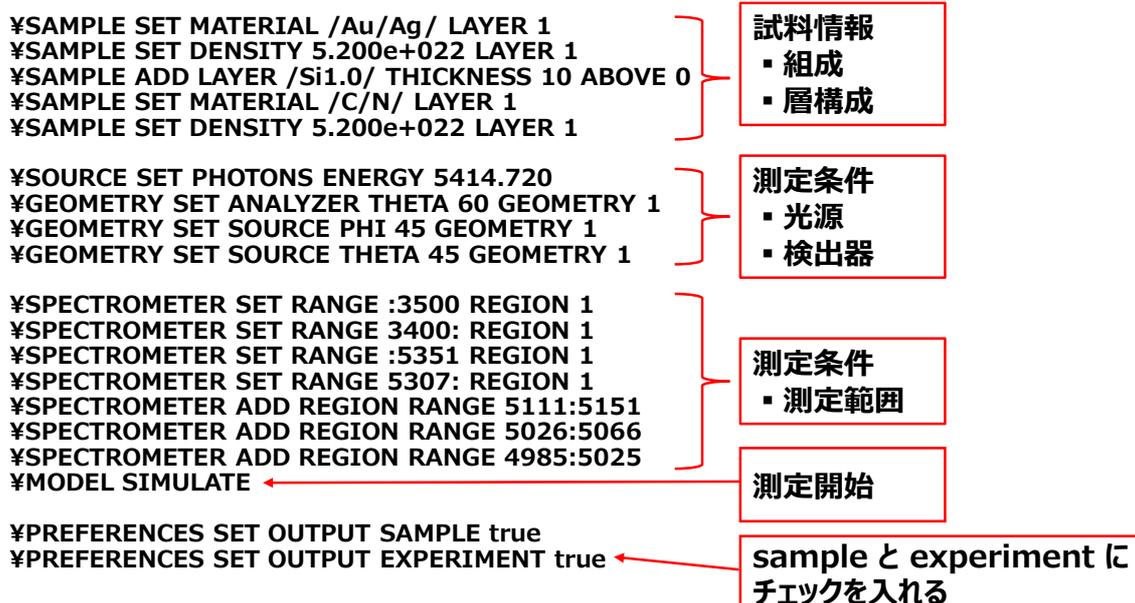
II. Experiment

- (1) excitation source settings
 - 1) AlKa
 - 2) MgKa
 - 3) ZrMz
 - 4) Electrons
 - 5) Photons
 - 6) Polarization
 - a) PHI
 - b) THETA
- (2) Arrangement
 - 1) Orientation of sample surface
 - normal
 - a) PHI
 - b) THETA
 - c) POLARIZATION
 - 2) Orientation of analyzer axis
 - a) PHI
- (3) ANALYZER
 - 1) CMA
 - 2) CHA
 - 3) RFA
 - 4) Custom
- (4) Spectrometer
 - 1) Lower bound [eV]
 - 2) Higher bound [eV]
- (5) elastic scattering
 - 1) Mott cross section
 - 2) neglect of elastic deflections (straight line approximation, SLA)
 - 3) an isotropic transport cross section

8. Command History File

- (1)入力や選択、操作の履歴が、filename.ses として記録される。
- (2)テキストエディタで編集出来るバッチファイル。
- (3)Project/Load で読んで実行させ、Project/Save で実行履歴を保存出来る。
- (4)多層膜等複雑な構造の試料やパラメータ変更が多数ある時、条件を変えて多数の計算を行う場合などで有用。
- (5)試料・測定条件設定から出力まで自動化出来るのでお薦めの使い方。

8-1. Command History File の例(1/3)



8-1. Command History File の例(2/3)

```
¥PROJECT SAVE OUTPUT "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_hr(Cr)_"  
¥PREFERENCES SET ENERGY_SCALE BINDING  
¥PREFERENCES SET PLOT_ZERO 1.000000e-008  
¥PROJECT SAVE OUTPUT "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_hr(Cr)_K2B_"  
  
¥MODEL PLOT REGION 1  
¥PLOT SAVE BMP "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Au4f(Cr)_K2B.bmp" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥PLOT SAVE PDF "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Au4f(Cr)_K2B.pdf" PAGESIZE "A4"  
¥PLOT SAVE JPG "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Au4f(Cr)_K2B.jpg" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥MODEL PLOT REGION 2  
¥PLOT SAVE BMP "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_C1s(Cr)_K2B.bmp" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥PLOT SAVE PDF "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_C1s(Cr)_K2B.pdf" PAGESIZE "A4"  
¥PLOT SAVE JPG "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_C1s(Cr)_K2B.jpg" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥MODEL PLOT REGION 3  
¥PLOT SAVE BMP "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Ag3d(Cr)_K2B.bmp" WIDTH 800 HEIGHT  
600  
¥PLOT SAVE PDF "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Ag3d(Cr)_K2B.pdf" PAGESIZE "A4"  
¥PLOT SAVE JPG "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Ag3d(Cr)_K2B.jpg" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥MODEL PLOT REGION 4  
¥PLOT SAVE BMP "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_N1s(Cr)_K2B.bmp" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥PLOT SAVE PDF "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_N1s(Cr)_K2B.pdf" PAGESIZE "A4"  
¥PLOT SAVE JPG "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_N1s(Cr)_K2B.jpg" WIDTH 800 HEIGHT 600
```

入力情報出力
横軸をBEに変更

各ピークのスเปクトル
出力(画像3種)
[横軸BE]

8-1. Command History File の例(3/3)

```
¥PREFERENCES SET ENERGY_SCALE KINETIC  
¥PREFERENCES SET PLOT_ZERO 1.000000e-008  
  
¥MODEL PLOT REGION 1  
¥PLOT SAVE DATA "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Au4f(Cr).dat"  
¥PLOT SAVE BMP "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Au4f(Cr).bmp" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥PLOT SAVE PDF "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Au4f(Cr).pdf" PAGESIZE "A4"  
¥PLOT SAVE JPG "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Au4f(Cr).jpg" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥MODEL PLOT REGION 2  
¥PLOT SAVE DATA "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_C1s(Cr).dat"  
¥PLOT SAVE BMP "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_C1s(Cr).bmp" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥PLOT SAVE PDF "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_C1s(Cr).pdf" PAGESIZE "A4"  
¥PLOT SAVE JPG "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_C1s(Cr).jpg" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥MODEL PLOT REGION 3  
¥PLOT SAVE DATA "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Ag3d(Cr).dat"  
¥PLOT SAVE BMP "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Ag3d(Cr).bmp" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥PLOT SAVE PDF "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Ag3d(Cr).pdf" PAGESIZE "A4"  
¥PLOT SAVE JPG "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_Ag3d(Cr).jpg" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥MODEL PLOT REGION 4  
¥PLOT SAVE DATA "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_N1s(Cr).dat"  
¥PLOT SAVE BMP "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_N1s(Cr).bmp" WIDTH 800 HEIGHT 600  
¥PLOT SAVE PDF "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_N1s(Cr).pdf" PAGESIZE "A4"  
¥PLOT SAVE JPG "E:¥00_out¥TiCNonAuAg_N1s(Cr).jpg" WIDTH 800 HEIGHT 600
```

横軸をKEに変更

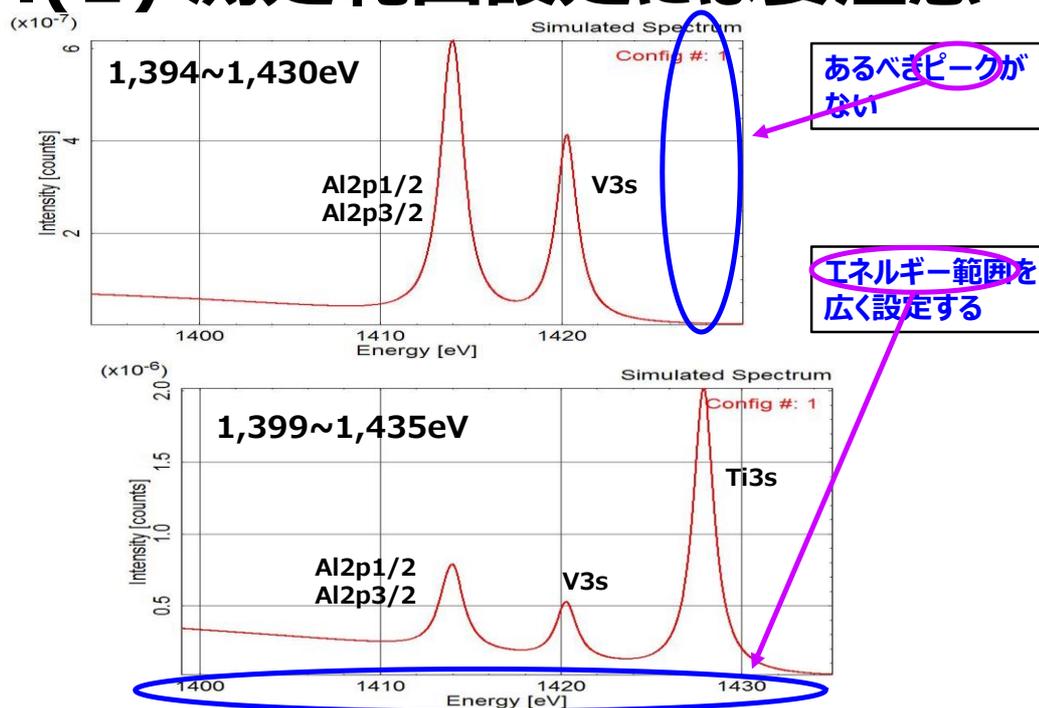
各ピークの強度/エネルギー
データ出力
スเปクトル出力(画像3種)
[横軸KE]

9. 不可解なことが起きたときの回避策

- (1)測定範囲設定には要注意 → 確認&広く設定
- (2)ファイル名の長さやディレクトリの深さに制約あり(保存出来ない) → 短くする ~ 長さ×階層数に制限?
- (3)Copy&Paste → Ctrl+C/Vだけ使えるところあり
- (4)In化合物測定時出力ファイル異常 → 測定範囲を狭める
※ 400~1,500eV...NG、500~1,500eV...OK
- (5)Help/Web が繋がらない → 未解決
- (6)Kinetic で計算して plot 表示すると Binding 表示するなど、不可解なこと多々あり → Reset, SESSA 再起動
- (7)原因不明で動かなくなることが間々ある → 再インストール

(1)、(4)、(6)について具体的な回避策を示す。

9.(1) 測定範囲設定には要注意



9.(4) 出力ファイル異常

○ In 600~1,500eV

× In 400~1,500eV

**出力ファイル異常 (この一例だけ)
-> 測定範囲を狭めると正常に出力**

Sessa Error
Error 1002: File not found!
OK

9.(6) 表示異常

Model Calculation

Choose Region #1

Simulation Settings

Convergence factor: 1.000e-002

Approximation: Transport Straight Line

Simulation Plot

Intensity [counts] (x10⁻³)

Energy [eV]

Simulated Spectrum

Config # 1

Click right mouse button for options.

Close

Start Simulation! Show peak intensities... Save peak intensities... Close

Intensity [counts] (x10⁻³)

Energy [eV]

Simulated Spectrum

Config # 1

5330 5340 5350 5360

**出力(plot)画面の横軸異常
保存ファイルではOK**

10. まとめ

(1)SESSAはシミュレーターとしては有用であるが、不可解なことも多々ある。**SESSA 使用におけるポイント**は、

- 1) **Reset** 後、使用する
- 2) Preference Settings で、**sample と experiment にチェック**を入れる
- 3) **Command History** (SESファイル<*.ses>) の活用
- 4) **困ったら、Reset、再起動、再インストール**

(2)SESSAは

- 1) どこでも使える
- 2) マシントイムを気にしなくて良い
- 3) 試料の制約がない：高価、作製困難、有毒物
→実機測定前の事前確認(問題点の把握)

査読コメント, 質疑応答

査読者 1. 木村昌弘 (JX 金属)

本稿を興味深く読ませていただきました。中盤以降、具体的な内容が記載されていて、とても読みやすい記事になっていると思います。

SESSA は、まだ一般には普及していないシミュレータですが、うまく使えば研究者だけでなく、企業の分析従事者や学生の方にも役に立つのではないかと思います。そういう見方からすると、導入の部分を少し補足していただけるとよいと感じました。

[査読者 1-1] 「1. SESSA 使用の背景」

実際に行なったことはここに記載されている通りだったのだと思いますが、読む側からすると、一番最初に、SESSA とは「いったい何?」「どういうときに使えるもの?」ということが書かれてある方がよいのではないかと思います。ここに書かれていることは、例えば「SESSA の応用例」として、本稿の最後に、研究会でご発表された内容にも触れて詳し

く紹介していただけると興味深いと思います。

[著者]

SESSA が一般的にどのように使われているかという情報は持ち合わせていません。使用感として、利点・応用の可能性を「10.まとめ」に記述しています。

[査読者 1-2] 「2. SESSA とは」

先ほども述べましたが、この項目を最初に読みたいです。また、おそらく読む方はこのページを見て本稿を読み進めるか止めるかを判断することになると思いますので、ここは、分かりやすく日本語で記述していただければと思いました。

[著者]

修正しました。

[査読者 1-3] 「5-2-1. 試料情報」

層構造だと何層ぐらいまで対応できるのでしょうか? 層構造以外にどういう構造に対応できるので

しょうか? 記載があると、利用したい方のイメージが湧くかもしれません。

[著者]

Si 基板上に Si を積んだところ 49 層までは積めました。50 層目でエラーが生じプログラムが動作を終了しました。

層構造以外に、①平滑面である、②粗面である、③平滑面上に島状構造を有する、④平滑面上に球状構造を有する、⑤平滑面上に層構造を有した球状構造を有する、表面構造に対応しています。

[査読者 1-4] 「5-2-2.非対称性パラメータ、イオン化断面積」

不可解な現象については、作者へ報告したり、修正依頼など出すことは可能なのでしょうか?

[著者]

Prof. Dr. Werner に問い合わせる予定にしています。

査読者 2. 渡部大介 (アルバック・ファイ)

本記事は XPS スペクトルシミュレーション用のアプリケーションである SESSA の概要と簡単な使い方を解説しています。電子分光スペクトルのシミュレーションに興味を持っているユーザにとって最初の導入として有益な情報を含むため、掲載を進めます。

しかし、形式が通常の記事の体裁でないこともあり、読者にどのような情報を与えようとしているのか分かりにくいところがありますので、以下の点に対して検討をいただけますでしょうか?

[査読者 2-1]

「1.SESSA 使用の背景」において、SESSA を初めて知ったユーザにとって、通常どのような用途に用いるのか、ユーザにとってどのような利点があるのかなどの情報は最初に疑問を持つ事項だと思います。そのため、まず導入部として通常 SESSA がどのような用途で用いられてどのような利点があるのかを記載していただけないでしょうか?

[著者]

貴重なご意見を頂き、ありがとうございます。

SESSA が一般的にどのように使われているかという情報は持ち合わせていません。使用感として、

利点・応用の可能性を「10.まとめ」に記述しています。

[査読者 2-2]

「Analyzer」で CMA や SCA などの選択できるという情報はユーザにとって有益です。また、Custom を選択したときにどのような設定を入力できるのか、これらのが分かるとさらに有益です。

[著者]

7.変更可能なパラメータ(続き) II Experiment の (3)Analyzer-1,2 にありますように、CMA と CHA(SCA)を選択できます。Custom では、アパーチャーの方位角と極角を設定することが出来ます。

設定条件の違いが結果にどのような影響を与えるのか、については、Custom で使用したことがありませんので、知見を持ち合わせていません。

[査読者 2-3]

本アプリケーションを用いて、オージェピークのエネルギー位置と強度のシミュレーションは可能なのでしょうか?

[著者]

可能です。