

技術資料

スペクトルデータベース登録用共通フォーマットのパラメータ記述のための 手引書（訂正版）

吉武道子*、データベース委員会

* 金属材料技術研究所 〒305 つくば市千現1-2-1

本手引書は、JSA Vol. 2, No3 p. 513~522に掲載された手引書の訂正版である。訂正が行われたのは、以下の点である。

1. (3)instrument identifier (測定装置名、text)
KRATOSの島津への合併により、従来のKRATOSまたはSHIMADZUに分類できない装置について、SHIMADZU_KRATOSという記述を認める。
2. (40)known impurity (既知の含有不純物、text)
例の記述の中の%に単位が抜けていたので訂正。
例：'N:0.01wt%, O:0.02wt% by Nissan ARC'
3. (61)comment on spectrum information
(スペクトル情報に関するコメント、text)
この行は、COMPRO中で変換やデータ処理などを行った場合に自動的に記述される。現在のデータベース登録システムでは、一連のデータの場合に、それらのスペクトルのデータベース登録番号がグループとして記録される。この記録は、金材研にあるコンピュータからサーバー上にデータを登録するときに行う。従って、(33)number of lines in block comment (ブロック内コメントの行数、zero or more)において、'28'としている場合には、手入力で記述をする場合にはこの行は何も入れずにリターンキーのみ入力する。スペクトル情報に関するコメントを入れたい場合には、'This spectrum'から始まる記述を避けて、ISO情報フォーマットに要する27行に、コメントを記述した行数を足して(33)に記述する。このようにして提出されたデータは、登録時にこのコメント行が1行自動的に増えて、データベースへの登録番号やランキングなどの情報が入った行が生成する。従って、提出されたデータと登録されたデータをダウンロードしたものとは行数が異なることになる。
4. (66)source beam width x
(励起源ビーム幅 x、real number)

- (67)source beam width y
(励起源ビーム幅 y、real number)
2つまとめて項目を挙げてから説明を付けていたが、それぞれ説明を付けるようにした。
5. (75)analysis width x (分析幅 x、real number)
(76)analysis width y (分析幅 y、real number)
2つまとめて項目を挙げてから説明を付けていたが、それぞれ説明を付けるようにした。
6. (97)number of ordinate values
(測定データ点数、one or more)
「横軸測定データ点数」を「測定データ点数」へ訂正。
7. (98)minimum ordinate value
(縦軸最小値、real number)
(99)maximum ordinate value
(縦軸最大値、real number)
「縦軸」とすべきところが「横軸」になっていたので訂正。
8. <角度の定義の図>
X, Y, Z軸の取り方について、文章による説明を追加。

本手引書の中で、わかりにくい、あるいはこんな例が挙げると良い、というご意見や間違いなどを著者までご連絡下されれば幸いです。わかりやすく、より有用なデータベースが構築できるような手引書に、改訂していく予定です。

Manual for Describing Items in ISO Format Used in
the Network Database (revised version)

M. Yoshitake
National Research Institute for Metals, 1-2-1,
Sengen, Tsukuba, Ibaraki 305

1. 一般的な注意点

#入力は、text, integer, real number などの形式に従い、すべて半角英数字のみ使用する。

#指数記述は '1.1E17' の方式にする。

#具体的記述をしないことが許されている場合、各項目において、unknown (わからない), N/A (適用できない), none (無い) のうち使用が許可されているものを、意味の区別をつけて使用する。

#使用可能な文字は下記の通り (全て半角)。

```
character = ' |!|"|#|$|%|&|'|(|)|*|+|,|
|-|. |/'|0|1|2|3|4|5|6|7|8|9|
:|;|<|=|>|?|@|
'A'|'B'|'C'|'D'|'E'|'F'|'G'|'H'|'I'|'J'|'K'|'L'|
'M'|'N'|'O'|'P'|'Q'|'R'|'S'|'T'|'U'|'V'|'W'|
'X'|'Y'|'Z'|'|'\'|'|'|'|'|_|'|'|
'a'|'b'|'c'|'d'|'e'|'f'|'g'|'h'|'i'|'j'|'k'|'l'|'m'|
'n'|'o'|'p'|'q'|'r'|'s'|'t'|'u'|'v'|'w'|'x'|'y'|'z'|
'{'|'|'|'}'|'-'
```

(注) Q の下、f の上、[] の間は、バックスラッシュです。

#手入力の場合、スペルチェックを必ずかけること。

#提出者が、不明・わからないと思う項目については、項目のリストをデータと共に提出する。

2. 各項目の入力

(1)format identifier (フォーマット識別子、text)

'VAMAS Surface Chemical Analysis Standard Data Transfer Format 1988 May 4' とする。

(2)institution identifier (測定機関名、text)

正式名称を大文字にて記入する。略称は禁止する。LIMITED, CO., LTD も含めて正式名称とする。

例: 'SUMITOMO CHEMICAL CO., LTD.', 'SEIKEI UNIVERSITY'

(3)instrument identifier (測定装置名、text)

装置メーカー名 '-' 装置モデル名、とする。装置メーカー名と装置モデル名はハイフンでつなぐ。

装置メーカー名は、JEOL, KRATOS, PHI, RIGAKU, SCIENTA, SSI, VG, VSW SHIMADZU, SHIMADZU_KRATOS から選択する。自作装置の場合は、hand_made とする。

装置メーカー名は、親会社名が変わった場合、ル

ーツ重視方式とする。

(例えば、VG の装置は Fisons だろうが別会社に売られようが VG とする。)

例: 'KRATOS-AXIS-HS', 'VG-3 1 0 F', 'JEOL-JAMP-30'

(4)operator identifier (測定者の名前、text)

姓、コンマ、given name (イニシャルでもフルでも)、ピリオド、middle name (イニシャルでもフルでも) の順で入力する。姓以外は省略してよい。大文字小文字の区別はしなくてよい。

例: 'Crist, B. V.', 'Yoshitake, M.'

(5)experiment identifier (実験識別子、text)

実験の目的、論文の題目に相当するものを80字以内で入力する。

例: 'InGaAs round robin measurement'

(6)number of lines in comment

(コメントラインの行数、zero or more)

現在、'1' に固定している。

(7)comment line (コメント、text)

(6)experiment identifier を補足するようなコメントを入力する。

論文のアブストラクトに相当する。

一連のファイルグループに対する説明などのコメント。

試料名や分析条件など他のパラメータと重複するものは避ける。ラウンドロビン測定により一括提出されたデータの場合は、全体で統一したコメントが設定されること。

セミコロン2つの後にキーワードを記述する。キーワードとキーワードとの間はコンマで区切る。

例: We investigated the damage of the InGaAs surface by ion sputtering. ;In, Ga, As, sputter

(8)experiment mode(実験のモード、text)

NORM, SDP, MAP, MAPDP, MAPSV, MAPSVDP, SDPSV, SEM のうちのどれか。

通常の、スペクトルが1本あるいは複数本入っているものは NORM。

(9)scan mode(スキャンモード、text)

REGULAR, IRREGULAR, MAPPING のうちのどれか。

通常の、エネルギー等間隔での測定データは REGULAR。

(10)number of spectral regions

(スペクトル領域の数、one or more)

(11)number of experimental variables

- (実験変数の数、 zero or more)
 'NORM' のデータでは '0' とする。
- (12)'NORM' のデータでは '7' とする。
- (13)'NORM' のデータでは '29' とする。
- (14)'NORM' のデータでは '30' とする。
- (15)'NORM' のデータでは '31' とする。
- (16)'NORM' のデータでは '34' とする。
- (17)'NORM' のデータでは '35' とする。
- (18)'NORM' のデータでは '36' とする。
- (19)'NORM' のデータでは '40' とする。
- (20)'0' とする。
- (21)'0' とする。
- (22)'0' とする。
- (23)number of blocks (ブロック数、 one or more)
 通常の、スペクトルが1本あるいは複数本入っているものでは、(10)スペクトル領域の数、に等しい。
- (24)block identifier (ブロック識別子、 text)
 '1st block id' とする。
- (25)sample identifier (試料識別子、 text)
 '1st sample id' とする。
- (26)year in full (測定年、 integer)
 西暦で表記し、4桁で記入する。必ず入力すること。
- (27)month (測定月、 integer)
 省略したい場合は '-1' を入れる。
- (28)day of month (測定日、 integer)
 省略したい場合は '-1' を入れる。
- (29)hours (測定時の時、 integer)
 24時制で記入。ただし、測定の現地時間(日本時間)で表記する。
 省略したい場合は '-1' を入れる。
- (30)minutes (測定時の分、 integer)
 省略したい場合は '-1' を入れる。
- (31)seconds (測定時の秒、 integer)
 省略したい場合は '-1' を入れる。
- (32)number of hours in advance of Greenwich Mean Time (グリニッチ標準時との差、 real number)
 日本の場合、'9' とする。
- (33)number of lines in block comment (ブロック内コメント行の行数、 zero or more)
 通常の、ISO情報フォーマットのみの場合には'28' とする。
- (34)ISO specimen information format identifier (ISO試料情報フォーマット識別子、 text)

'ISO Specimen Information Format 1995 September 22' とする。

- (35)host material (試料の通称名称、 text)
 母材に混ぜたようなもの場合は母材の通称名。薄膜、多層膜の場合は基板ではなく、分析している層の通称名。大文字小文字は問わない。結晶面は書かない。
 例: 'stainless steel', 'nylon', 'alumina', 'galium arsenide', 'galium arsenide', 'gold copper alloy', '6061 Al'
- (36)IUPAC chemical name (IUPACで決められた呼び名、 text)
 unknown, N/A, noneを区別して記述する。unknownを許す。
- (37)chemical abstracts registry number (ケミカルアブストラクトの登録番号、 text)
 unknown, N/A, noneを区別して記述する。unknownを許す。
- (38)host material composition (試料の元素組成、 text)
 試料の組成を、元素名、組成の順で記入する。組成の表示方法は一般的に用いられている方法による。たとえば、結晶構造が既知の場合、組成比を整数比で表示する(Al₂O₃など)。結晶構造が既知で一部原子が置換している場合、置換した原子と置換された原子の組成比の和が1となるように表示する(In_{0.52}Ga_{0.48}Asなど)。異種原子が固溶している場合、それぞれの値の和が1または100となるように表示する(Fe_{0.74}Cr_{0.18}Ni_{0.08}またはFe₇₄Cr₁₈Ni₈など)。また、きちんとした整数比の化合物でなくて、組成がわからない場合は構成元素を '-' でつないで列記し、最後にも '-' をつける。単体の場合、元素名のみを記入する(Feなど)。結晶面などは書かない。
 例: 'W(CO)₆', 'Al₂(MoO₄)₃', 'Al₂O₃, sapphire', 'Al₂O₃, gamma', 'Ti-C-N'
- (39)bulk purity (試料のバルク純度、 text)
 純度を%や小数など数値で記入する。分析をした機関なども記述したほうがよい。
 unknown, N/A を区別して記述する。unknownを許す。
 例: '99.995% checked by Nissan ARC', '0.998'
- (40)known impurity (既知の含有不純物、 text)
 既知の不純物元素名およびその濃度(わかっている場合)等を、わかる範囲でコメントとして記

述（半角80文字以内）。at% や wt%、ppm や単位体積当たりの原子数で記入し、分析をした機関なども記述したほうがよい。

unknown, N/A, none を区別して記述する。unknown を許す。

例：'N:0.01wt%, O:0.02wt% by Nissan ARC',
'B:5E18 atoms/cm³'

(41)structure(結晶構造、text)

結晶構造および格子定数などを記入する。記入のしかたは任意。

unknown, N/A, を区別して記述する。unknown を許す。

例：'face centered cubic, a=0.698nm'

(42)form of products(製品時の形、text)

試料が製品化された時の製品の形 (Magnetic Disk、とか、Can 等) を記入する。分からない時は、unknown を記入。

unknown, N/A, を区別して記述する。unknown を許す。

例：'car window', 'cooking pan'

(43)supplier(試料供給元、text)

試料供給元。自作は 'home-made'、自社製品は自社の会社名を記入する。

unknown, N/A, を区別して記述する。unknown を許す。

例：'Japan Energy'

(44)lot number(試料のロット番号、text)

試料の製造ロット番号。不明の場合は unknown。
unknown, N/A, を区別して記述する。unknown を許す。

例：'No. 521 purchased on 18 May 1995'

(45)homogeneity(試料の均一性、text)

homogeneous, inhomogeneous, unknown, N/A のどれかを記入する。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

(46)crystallinity(結晶性、text)

以下のいずれかを記入する。

single の場合、single に続けて '_' の次に結晶面を記述する。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

single	: 単結晶
poly	: 多結晶
amorphous	: アモルファス
unknown	: 不明
N/A	: 適用できない

(47)material family(物質群、text)

以下のいずれかを記入する。いずれにも属さない場合は、優先順位に従い、新たに群の名称を記述する。その際、それぞれの単語は "_" でつなぐなければならない (super_conductive のように)。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

metal	: 金属
inorganic	: 無機化合物
organic	: 有機化合物
polymer	: ポリマー
semi	: 半導体
bio	: 生物(体)材料
composite	: 混合物
super_conductive	: 超伝導材料

(48)special material classes

(物質の形態のクラス分け、text)

以下のいずれかを記入し、どこにも該当しない場合は、 '_' でつないで新たにクラスを記述する。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

rod	: rod または ingot
sheet	: sheet または foil
film_single	: 基板の上に形成された単層の膜またはコーティング層
film_multi	: 基板の上に形成された2層以上の膜またはコーティング層
sintered	: 焼結体
wafer	: ウェーハー
powder	: 粉末
fiber	: ファイバー

(49)sample mounting(試料のマウント方法、text)

以下のいずれかを記入する。どこにも該当しない場合は、新たに方法を記述する。その際、複数の単語からなる記述の場合は、単語を '_' でつなぐ。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

mechanical	: ねじやバネなどを用いて機械的に固定
mechanically_under_grid	: バネによりグリッドに機械的に押さえて固定
conductive_adhesive	: 導電性の接着物により固定
nonconductive_adhesive	: 導電性の接着物により固定

: 非導電性の接着物により固定

powder_compact_In

: 粉末を In の foil, pressure pad に押さえつける

powder_put_into

: 粉末を導電性物質 (銅ブロックなど) に穴を開けて押し込む

(50)ex situ preparation

(装置外での試料調整法、text)

以下のいずれかを記入する。どこにも該当しない場合は、新たに方法を記述する。その際、複数の単語からなる記述の場合は、単語を '_' でつなぐ。また、複数の方法の記述は、個々の方法を '+' でつなぐことによって行う。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

none : 何もしない

polish : 研磨

cleavage : 劈開

ion : FIB などイオンによる切断・加工

powder_compact_steel_pad

: ステンレスのパッドを用いて粉末を固める

acetone : アセトンによる脱脂

例 : 'cleavage', 'polish+acetone', 'polish;mechanically with 1 micron diamond paste'

(51)in situ preparation

(装置内での試料調整法、text)

以下のいずれかを記入する。どこにも該当しない場合は、新たに方法を記述する。その際、複数の単語からなる記述の場合は、単語を '_' でつなぐ。また、複数の方法の記述は、個々の方法を '+' でつなぐことによって行う。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

none : 何もしない

ion : イオンスパッタリング

'_' に続いて、加速電圧、イオン電流、イオン種を '_' でつないで記述する

cleavage : 劈開

heating : (測定前の)加熱

scratch : 引っ掻き

(52)charge control conditions(text)

以下のいずれかを記入する。どこにも該当しない場合は、新たに方法を記述する。その際、複数の単語からなる記述の場合は、単語を '_' でつなぐ。また、複数の方法の記述は、個々の方法を

'+' でつなぐことによって行う。装置を使ったものだけでなく試料を傾斜した場合やバイアスをかけた場合なども、チャージアップをさけるために行った手法であれば、角度情報やバイアス情報の項目とは別にここにも記述する。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

none : 何もしない

flood : 低エネルギー電子ビームを照射する

'_' に続いて、加速電圧、電流を '_' でつないで記述する

screen : メッシュや金属箔などで覆う

(53)sample temperature (測定中の試料温度、test)

数字の場合、単位も書く。

例: '400K', '298K', 'room temperature'

(54)comment on sample information

(試料情報に関するコメント、text)

試料を測定する価値、どうしてその試料を測定しようと思ったかや、試料の素性、履歴などについて記入する。(79)species label や (38)host material composition など、他のパラメータと重複するものは避ける。他に記述する項目のない場合に使用する。

例: 'moon stone brought by apollo 11', 'meteorite fallen at Tsukuba in 1996', 'specimen for evaluation of ion irradiation damage'

(55)ISO calibration information format identifier

(ISO校正情報フォーマット識別子、text)

'ISO Calibration Information Format 1995 September 22' とする。

(56)energy scale calibration

(エネルギー軸に関する校正、test)

以下のいずれかを記入する。どれにも該当しない場合は、新たに方法を記述する。その際、複数の単語からなる記述の場合は、単語を '_' でつなぐ。また、エネルギー軸と帯電補正の両方が行われているときは、それぞれの方法を '+' でつなぐことによって行う。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

XPS_Cu_Au_Ag : SIA 14, 488(1989) の XPS の Cu, Au, Ag の値を使用

XPS_Cu_Au : SIA 14, 488(1989) の XPS の Cu, Au の値を使用

XPS_Cu_Ag : SIA 14, 488(1989) の XPS の Cu, Ag の値を使用

XPS_Au_Ag : SIA 14, 488(1989) の XPS の Au, Ag の値を使用
 XPS_Cu : SIA 14, 488(1989) の XPS の Cu の値を使用
 XPS_Au : SIA 14, 488(1989) の XPS の Au の値を使用
 XPS_Ag : SIA 14, 488(1989) の XPS の Ag の値を使用
 AES_Cu_Au_Ag : SIA 15, 293(1990) の AES の Cu, Au, Ag の値を使用
 AES_Cu_Au : SIA 15, 293(1990) の AES の Cu, Au の値を使用
 AES_Cu_Ag : SIA 15, 293(1990) の AES の Cu, Ag の値を使用
 AES_Au_Ag : SIA 15, 293(1990) の AES の Au, Ag の値を使用
 AES_Cu : SIA 15, 293(1990) の AES の Cu の値を使用
 AES_Au : SIA 15, 293(1990) の AES の Au の値を使用
 AES_Ag : SIA 15, 293(1990) の AES の Ag の値を使用
 Charge_Cls : 吸着炭素の Cls=285.0 eV として補正
 Charge_Ols : Ols ピークの値で補正、ピーク値を記述
 Charge_flood : 低速電子銃で補正
 uncalibrated : 補正していない

(57)intensity scale calibration (強度軸の校正、text)
 以下のいずれかを記入する。どれにも該当しない場合は、新たに方法を記述する。その際、複数の単語からなる記述の場合は、単語を '_' でつなぐ。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

JSSS1 : 表面科学、15, 751(1994) の方法で校正
 JSSS2 : 表面科学、16, 26(1995) の方法で校正
 JES : J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 50, 134(1990) の方法で校正
 NPL_A1 : NPL calibration procedure for AES で校正
 NPL_X1 : NPL calibration procedure for XPS で校正

uncalibrated : 補正していない

(58)resolution calibration
 (エネルギー分解能の校正、text)
 以下のいずれかを記入する。どれにも該当しない場合は、新たに方法を記述する。その際、複数の単語からなる記述の場合は、単語を '_' でつなぐ。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

uncalibrated : 補正していない

(59)ISO data processing information format identifier
 (ISO校正情報フォーマット識別子、text)
 'ISO Data Processing Information Format 1995 September 22' とする。

(60)data-handling procedure (データ処理方法、text)
 以下のいずれかを記入する。どれにも該当しない場合は、新たに方法を記述する。その際、複数の単語からなる記述の場合は、単語を '_' でつなぐ。追加説明が必要な場合は ';' を入れて説明を記述する。

unprocessed : 処理していない

(61)comment on spectrum information
 (スペクトル情報に関するコメント、text)
 この行は、COMPRO 中で変換やデータ処理などを行った場合に自動的に記述される。現在のデータベース登録システムでは、一連のデータの場合に、それらのスペクトルのデータベース登録番号がグループとして記録される。この記録は、金材研にあるコンピュータからサーバー上にデータを登録するときに行う。従って、(33)number of lines in block comment (ブロック内コメントの行数、zero or more) において、'28' としている場合には、手入力で記述をする場合にはこの行は何も入れずにリターンキーのみ入力する。スペクトル情報に関するコメントを入れたい場合には、'This spectrum' から始まる記述を避けて、ISO 情報フォーマットに要する27行に、コメントを記述した行数を足して(33)に記述する。このようにして提出されたデータは、登録時にこのコメント行が1行自動的に増えて、データベースへの登録番号やランキングなどの情報が入った行が生成する。従って、提出されたデータと登録されたデータをダウンロードしたものとは行数が異なることになる。

(62)technique (測定手法、text)
 'AES dir', 'AES diff', 'XPS', 'UPS', 'SIMS',

'SIMS energy spec', 'SNMS', 'SNMS energy spec', 'ISS', 'ELS', 'EDX', 'FABMS', 'FABMS energy spec', 'XRF' のうちのどれかを記入する。

(63)source label (励起源の種類、text)

モノクロメータを利用したらそれがわかるように記述する。

例: 'Al K_alpha, mono' (モノクロの場合)

'Al K_alpha' (モノクロでない場合)

'electron gun' (電子線励起の場合)

(64)source energy

(励起源のエネルギー、real number)

source energy (XPS の場合: K α 線の特徴エネルギー、AES の場合: 加速電圧) を入力する。単位は eV。NPL フォーマットでは指数表示を許しているが、検索の都合上、ここでは指数表示は許さない。

例: '1253.6'(XPS Mg の場合), '1486.6'(XPS Al の場合), '5000'(AES の場合)

(65)source strength (励起源強度、real number)

AES では試料位置におけるファラデーカップ (アスペクト比 3 以上の穴にビームを落としたとき) 電流を nA 単位で、XPS では X 線出力を W 単位で書く。

指数表示も可。不明の場合は '1E37' を入れる。

例: '5000', '1E4'

(66)source beam width x

(励起源ビーム幅 x、real number)

一次ビームの試料表面位置でのビームに垂直な平面上での大きさを記入する。スポットビームの場合、直径を記入し単位を $\mu\text{m}\phi$ (ビーム直径を x と y とに記述)、ラスタビームの場合、ラスタ範囲を記入し単位を $\mu\text{m} \times \mu\text{m}$ とする。x と y の向きは問わない。

指数表示も可。不明の場合は '1E37' を入れる。

(67)source beam width y

(励起源ビーム幅 y、real number)

一次ビームの試料表面位置でのビームに垂直な平面上での大きさを記入する。スポットビームの場合、直径を記入し単位を $\mu\text{m}\phi$ (ビーム直径を x と y とに記述)、ラスタビームの場合、ラスタ範囲を記入し単位を $\mu\text{m} \times \mu\text{m}$ とする。x と y の向きは問わない。

指数表示も可。不明の場合は '1E37' を入れる。

(68) source polar angle

(励起源の極角、real number)

励起源ビームと Z 軸のなす角をさす。(X、Y、Z 軸については添付図を参照)。

不明の場合は '1E37' を入れる。

(69)source azimuth angle

(励起源の方位角、real number)

励起源ビームが水平面に落とす影と Y 軸がなす角を Y 軸プラス方向から時計回りに測る。(X、Y、Z 軸については添付図を参照)。

不明の場合は '1E37' を入れる。

(70)analyser mode (分析器の動作モード、text)

以下のどちらかを記入する。

FAT: Fixed Analyzer Transmission

別名 CAE モード。

分光器内に入射する電子を、分光器内を通過するエネルギーが一定になるように減速するモード。分解能がエネルギーによらず一定 ($\Delta E = \text{constant}$) となる。通常、XPS 測定に用いられる。CHA で標準的に用いられるモードであるが、CHA は後述の FRR モードの動作も可能であるのでよく確認すること。

FRR: Fixed Retarding Ratio

別名 CRR モード。

分光器内に入射する電子を、エネルギーによらず一定の比率で減速するモード。エネルギーに対する相対的分解能が一定 ($\Delta E/E = \text{constant}$) となる。通常、AES 測定に用いられるが、AES 測定でも FAT モードを使用することもある。CMA で標準的に用いられるモード。但し、ダブルパス CMA は、一般の動作モードと異なるので注意すること。

(71)pass energy and retarding ratio

(パスエネルギーまたは減速比、real number)

FAT モードで測定した場合は、パスエネルギー (eV) を記入する。

FRR モードで測定した場合は、減速比を記入する。

不明の場合は '1E37' を入れる。

(72)magnification of lens

(アナライザートランスファーレンズの倍率、real number)

CMA で測定した AES では、通常 '1' を入力する。

XPS では、微小領域の場合に注意を要する。

不明の場合は '1E37' を入れる。

(73)work function (仕事関数、real number)

項目名としては仕事関数となっているが、実際にはオフセット関数。

AES ではデータがフェルミ基準で扱われている場合 4.5、真空基準で扱われている場合 0 を入れる。わからない場合は 1E37。

XPS では転送データが Kinetic energy でかかれている場合には、正しい結合エネルギー値を得るには work function はきちんと入っている必要がある。転送データを Binding energy で記述することを許し、その場合には work function の値は 4.5 を入れる。わからない場合は 1E37 を入れる。

転送フォーマットへの変換時にこの値を利用している場合には、この値は存在しているはずなので、その値を尊重する。

(74)target bias (試料バイアス、real number)

試料バイアス電位を V 単位で記入する。

現在の装置では、試料電流を測定したりできるように試料とチャンバー（アース）とは絶縁されていて、試料と導通のある端子が電流計につないだりできるように用意されている。通常、この端子とチャンバーをケーブルやBNCでつないで試料電位をアースにしてスペクトルを測定しているが、この端子とアースの間に電池や低電圧電源をつなぐことにより試料電位をアースと異なる電位にすることができる。オージェで一次電子線の電流を測定するときにはたいがい、試料から発生した二次電子が真空中に逃げて測定値を狂わさないように、試料に数十ボルト程度のプラス電位をかけて二次電子を引きつけて試料電流を測定している。特殊な実験のために試料に電位をかけて測定した場合のためにこの欄があり、試料バイアスをかけると試料から発生した電子が加速されたり減速されたりするので、スペクトルのエネルギー軸が試料バイアス分だけずれる。

(75)analysis width x (分析幅 x、real number)

分光器が見込む試料上での分光器軸に垂直な面の縦横の長さ(単位: μm)。

分光器の入射スリットの長さを、トランスファーレンズの倍率で割ったもの(単位: μm)。矩形の場合、長辺方向を x、短辺方向を y とする。楕円の場合は長径方向を x、短径方向を y とし、円形の場合には直径を記入する。但し、analysis source beam width が analysis width より狭い場合

には、analysis source beam width と同じ値を記入する。

不明の場合は '1E37' を入れる。

(76)analysis width y (分析幅 y、real number)

分光器が見込む試料上での分光器軸に垂直な面の縦横の長さ(単位: μm)。

分光器の入射スリットの長さを、トランスファーレンズの倍率で割ったもの(単位: μm)。矩形の場合、長辺方向を x、短辺方向を y とする。楕円の場合は長径方向を x、短径方向を y とし、円形の場合には直径を記入する。但し、analysis source beam width が analysis width より狭い場合には、analysis source beam width と同じ値を記入する。

不明の場合は '1E37' を入れる。

(77)analyser axis take off polar angle

(分析器の極角、real number)

Z 軸プラス方向と分光器の軸とのなす角度。(X、Y、Z 軸については添付図を参照)

CMA の場合、CMA の軸との角度を記述する。

不明の場合は '1E37' を入れる。

(78)analyser axis take off azimuth

(分光器の方位角、real number)

分光器の軸が水平面に落とす影と Y 軸がなす角を Y 軸プラス方向から時計回りに測る。(X、Y、Z 軸については添付図を参照)。

CMA の場合、CMA の軸との角度を記述する。

不明の場合は '1E37' を入れる。

(79)species label

(スペクトルに現れている元素、text)

スペクトルに現れている元素を記入する。複数の元素が存在している場合、それぞれの元素の元素記号を '-' で区切り、最後にも '-' を記入する。強度の大きい元素から順番に入力するほうがよいが、そう順序にこだわる必要はない。ただし、コンタミは最後に記述する。不純物かコンタミかは提出者の判断でよい。バレンスのみのスペクトルの場合は、元素が規定できないので、スペースを 1 個を入れる。

例: 'As-Al-Ga-', '-'

(80)transition label

(スペクトルに現れている遷移、text)

XPS のワイドスキャンデータの transition label にオージェピークも入れる。

3p1/2, 3p3/2 の区別や M5N45N45, M4N45N45 な

どL-S分裂の区別は原則的に必要ない。登録するピークはそれぞれを '-' で区切り、最後に '-' を入れる。

登録するピークの順序はある元素の遷移をまとめて入れたり、低運動エネルギー側から入れたり、順序は問わない。

例: 'As3d-Al2p-Ga3d-'

(81)charge of detected particle

(検出粒子の電荷、integer)

電子分光では '-1'。

(82)abscissa label (横軸ラベル、text)

電子分光のスペクトルでは、'Kinetic energy' か 'Binding energy'。

(83)abscissa units (横軸単位、units)

手法に応じて、'eV'、'u'、's' のいずれか。

電子分光のスペクトルの場合は 'eV'。

(84)abscissa start (横軸スタート値、real number)

ヘッダーの後に続く最初のデータ点のエネルギー値。

(85)abscissa increment

(エネルギーステップ幅、real number)

ヘッダーの後に続く最初のデータ点と次のデータ点とのエネルギーのステップ幅。

(9)scan mode が 'REGULAR' の場合のみを考えているので、ステップ幅はどのデータ点間をとっても同じ。

(86)number of corresponding variables

(縦軸の数、one or more)

'1' を入力する。

(87)corresponding variable label

(縦軸のラベル、text)

縦軸は何を表しているかということを記述する。電子増倍管を用いている通常の測定では、強度を任意の単位(物理的意味を持たない単位)で表しているため、COMPRO のコンバータを使った場合、'strength in arbit. unit' となるようになっている。'counts per channel' の例もある。意味が分かれば基本的には何でも良い。

(88)corresponding variable units

(縦軸の単位、units)

ヘッダーの後に入っているデータの数値が counts per second (cps, c/s) になっているのか counts で入っているのかを記述する欄。counts で入っている場合には、(これが物理的意味を持つ単位でない) 'd'(dimensionless - just a number,

eg, counts per channel) を、counts per second で入っている場合には 'c/s' を記入する。

単位としては、手法により以下のものがあることになっている。

c/s :counts per second

d :dimensionless - just a number, eg, counts per channel

degree :angle in degrees

eV :electron volts

K :Kelvin

micro C :microcoulombs

micro m :micrometres

m/s :metres per second

n :not defined here - may be given in a label

nA :nanoamps

ps :picoseconds

s :seconds

u :unified atomic mass units

V :volts

後藤先生のように、オージェ電子を電子増倍管などで増幅せずに計測している場合は nA など物理的意味を持つ単位が入る。

(89)signal mode (シグナルモード、text)

'analogue' か 'pulse counting' のどちらかを記入する。

(90)signal collection time

(シグナル収集時間(s)、real number)

一点当たりの測定時間(dwell time per sweep)のこと。

通常は、ms オーダー。秒単位で入力する。

PHIの装置でマルチレンジの時に、sweepとcycleを入れるようになっているが、この項目の値は、積算しないで1点のデータを取るときの時間であり、(sweep 掛ける cycle)の値を number of scans to compile this block に記入する。

例: 100ms の測定ならば、'0.1'。

(91)number of scans to compile this block

(繰り返し測定回数、one or more)

signal collection time と number of scans to compile this block の掛け算がそのエネルギーでの合計測定時間となる。

(92)signal time correction

(シグナル収集時間補正(s)、real number)

パルスカウント計測の数え落としに対応する、

不感時間。電子増倍管に入る電子の数と、増幅されて計測される電子の数は基本的には比例していなければならないが、電子増倍管に入る電子の数が多くなると比例関係が成り立たず、本来計測されるべき値から x % だけ少なくカウントされたとき、このようなことが起こる原因に基づくパラメータ τ を用いて

$$-N\tau = \ln(1-x/100)$$

という関係式が近似的に成立しています。この項目は τ の値を入れる欄です。詳しくは、オージェの装置特性ラウンドロビン結果を報告した表面科学、Vol. 15 No. 6 p. 376(1994) や M. P. Seah and M. Tosa, Surf. Interface Anal., Vol. 18, p. 240(1992) を参照。

(93)sample normal polar angle of tilt

(試料法線の極角、 real number)

Z 軸プラス方向と試料法線とのなす角度。(X、Y、Z 軸については添付図を参照)

不明の場合は '1E37' を入れる。

(94)sample normal tilt azimuth

(試料法線の方位角、 real number)

試料法線が水平面に落とす影と Y 軸がなす角を Y 軸プラス方向から時計回りに測る。(X、Y、Z 軸については添付図を参照)。

不明の場合は '1E37' を入れる。

(95)sample rotation angle

(試料回転角、 real number)

単結晶試料の時に意味を持つパラメータとして想定されている。試料回転角を時計回りに記述するが、特定の方向を基準にした場合には、(33) のブロック内コメント行の数を増やして、方向をコメントとして記入する。

元々のフォーマット作成時には試料を回転しながらデプスプロファイルを取るというテクニックがなかったため、回転させる、回転させない、の意味ではない。

(96)number of additional numerical parameters

(追加パラメータの数、 zero or more)

'0' とする。

(97)number of ordinate values

(測定データ点数、 one or more)

(98)minimum ordinate value

(縦軸最小値、 real number)

(99)maximum ordinate value

(縦軸最大値、 real number)

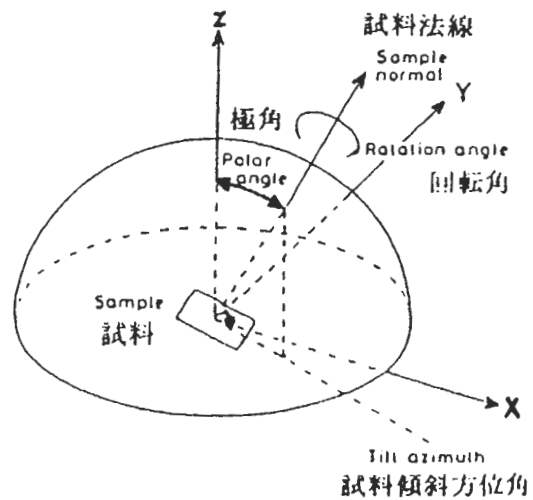
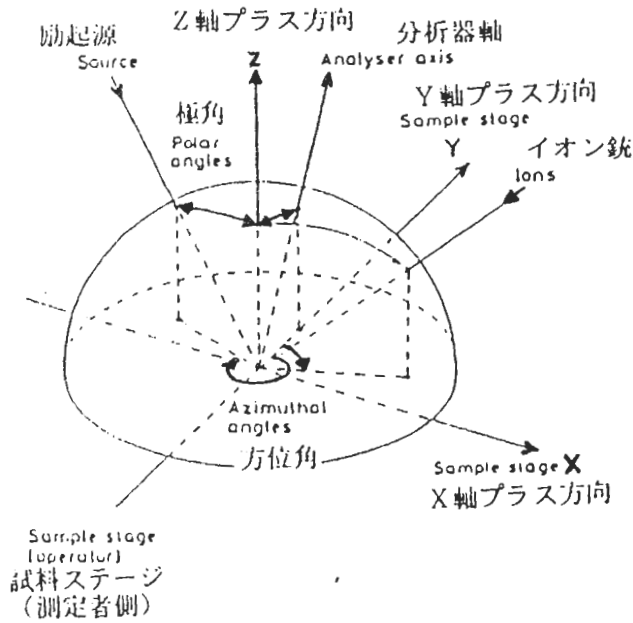
この後にデータの数値が並ぶ

*なお、(12)～(19) は ISO フォーマットへの移行期における暫定的入力形式である。

次のページに角度の定義の図を掲載した。

<角度の定義の図>

試料ステージ上、測定者側から試料を越えて向こう側に向かう軸をY軸プラス方向とする。水平面上でY軸と直交し、試料ステージから測定者の右側に向かう軸をX軸プラス方向とする。試料ステージから鉛直方向上向きをZ軸プラス方向とする。極角はZ軸プラス方向となす角を指す。方位角は、Y軸プラス方向を基準として上から見て時計回りにとる。



3. 1996年度データベース委員

- 関根哲 (委員長: 日本電子)
- 飯田浩 (住ベテクノリサーチ (株))
- 伊藤久司 ((株) 東レリサーチセンター)
- 奥出進也 (NKK)
- 児島淳子 ((株) 松下テクノリサーチ)
- 武内豊 (電気化学工業 (株))
- 野々上寛 (三洋電機 (株))
- 柳内克昭 (TDK (株))
- 吉武道子 (金属材料技術研究所)
- B. V. Crist (丸文 (株))