

Casaxps作图说明

制作人：赵华丽 刘玉萍

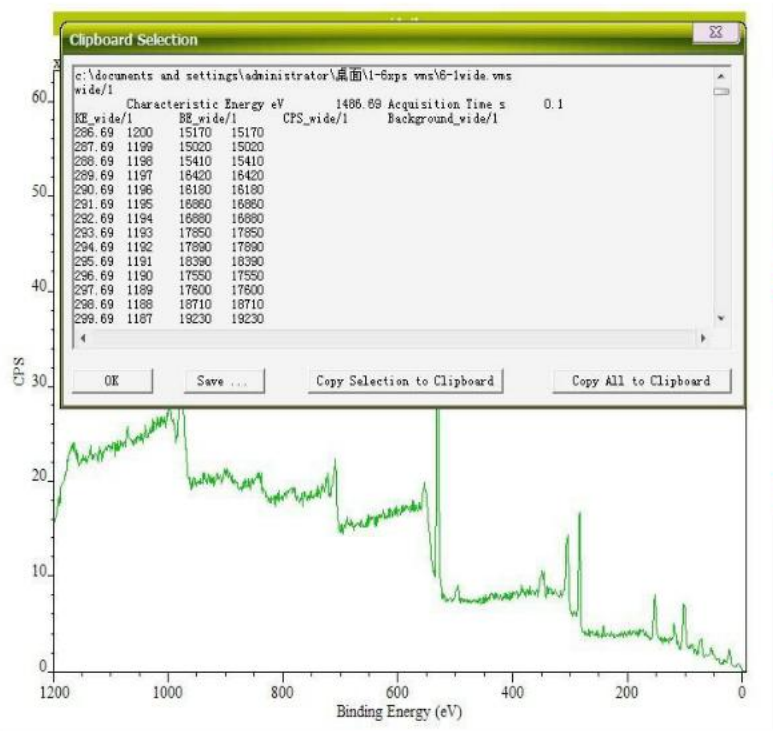
1.不同格式数据之间的转换

(1) 将非filename.vms格式数据转换成filename.vms格式数据

Casaxps处理filename.vms格式的数据，我们的仪器可以直接给filename.vms格式的数据，但一般情况下给出的是filename，不加任何后缀的文件，这种文件可以用记事本，excel，origin等打开，但是不能用Casaxps打开，但是可以转换成可以用casaxps打开的文件，转换方式如下：

将我们给出的原始数据用excel打开，将binding energy和intensity (CPS)
两列数据取出放在一个新建的txt文档下，删掉一些没用的东西，确保数据格式符合X-Y两列。将修改好的txt文档改为dat文档（直接修改后缀），然后将dat文件放在一个只有dat文件的专门文件夹里，这个很重要，如果这个文件夹里有其它格式的文件，那么就无法完成数据的转换。打开casaxps软件，点convert按钮，在专门存放dat数据的文件夹下找到需要转换的文件，打开就完成了转换。记住，一旦打开就会在该文件夹下生成一个filename.vms格式的文件，这样会导致其它文件无法转换，将这个新生成的文件转移到其它文件夹下就可以了，这样新生成的filename.vms文件就可以直接在Casaxps里面打开了。

(2) 将filename.vms格式数据转换成txt格式数据



在Casaxps里面将filename.vms格式的文件打开，
点击 save Tab Ascll to clipboard 按钮,
出现如左界面，
点击copy all to clipboard键，
将clipboard section 界面关闭后，
将复制的数据粘贴到txt文档即可。

Casaxps软件处理filename.vms格式的文件

- 1.用casaxps处理宽谱

能够得到的信息:

(1) 定性分析: 归属宽谱中各个峰。图1为经过峰归属后所得到的xps谱图。

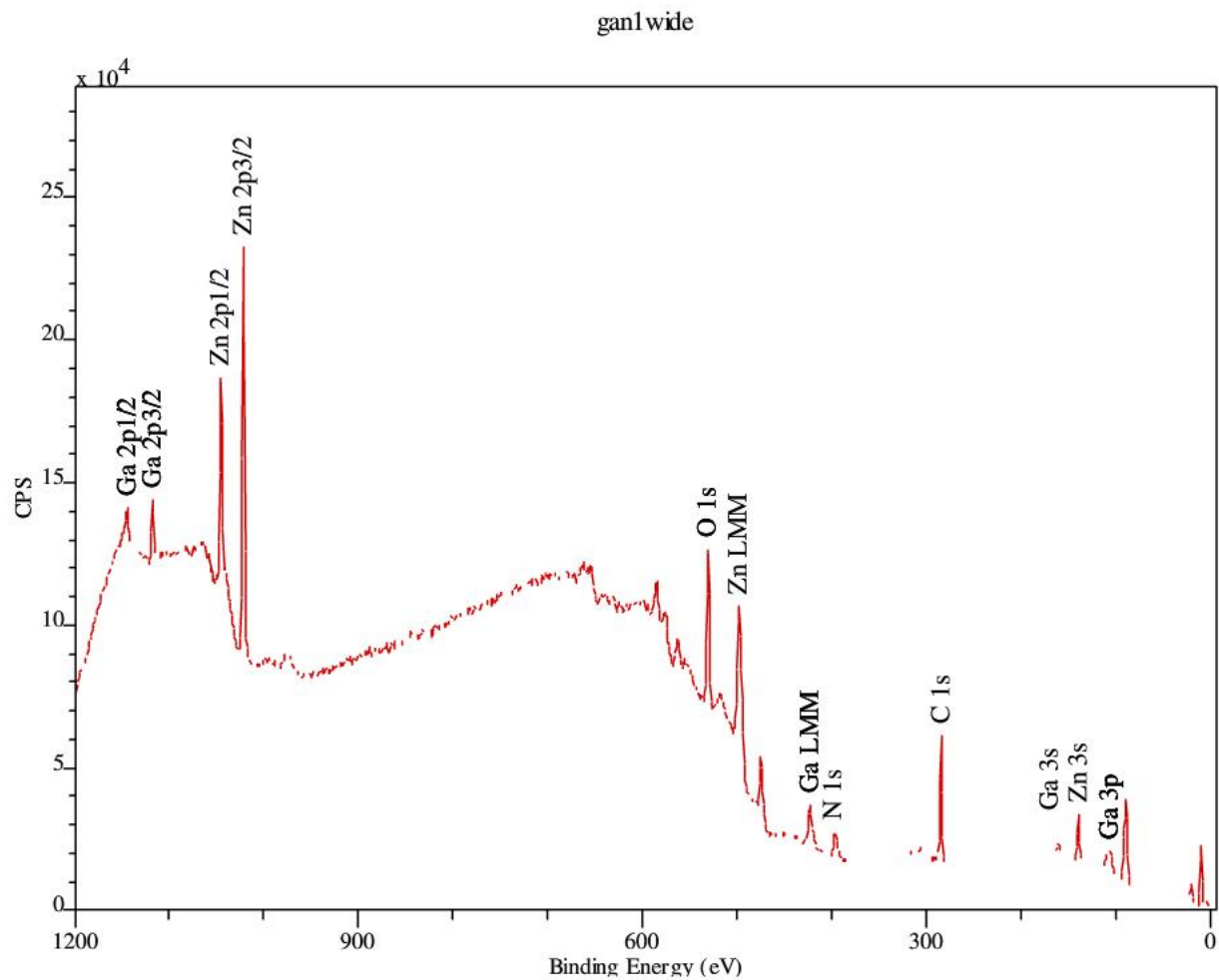


图1 经过峰归属后的xps宽谱

峰归属步骤

打开vms格式文件，点击Options → Elements，出现Element library窗口，点击Periodic table，出现一张元素周期表，点击find peak，宽谱上各个峰就被归属了。但是，这时候归属的峰多，不容易分辨，可以做一些修饰。点击 Options → Annotation，出现Annotation窗口，点击peak labels，会出现很多峰相对应的信息如O1s、C1s等等，点击其中一个，点Apply，峰就被标记出来，这样标记完所有重要而又明显的峰后，再次点击Options → Elements → Periodic table → Clear all elements，峰归属与标记就完成了。然后点击Options → Tile display，出现Tile display parameter窗口，点Display，该窗口的最下面有Title，在空白框里输入想命名的英文文件名，如GaN1 wide，最后就得到图1。

(2) 元素含量分析

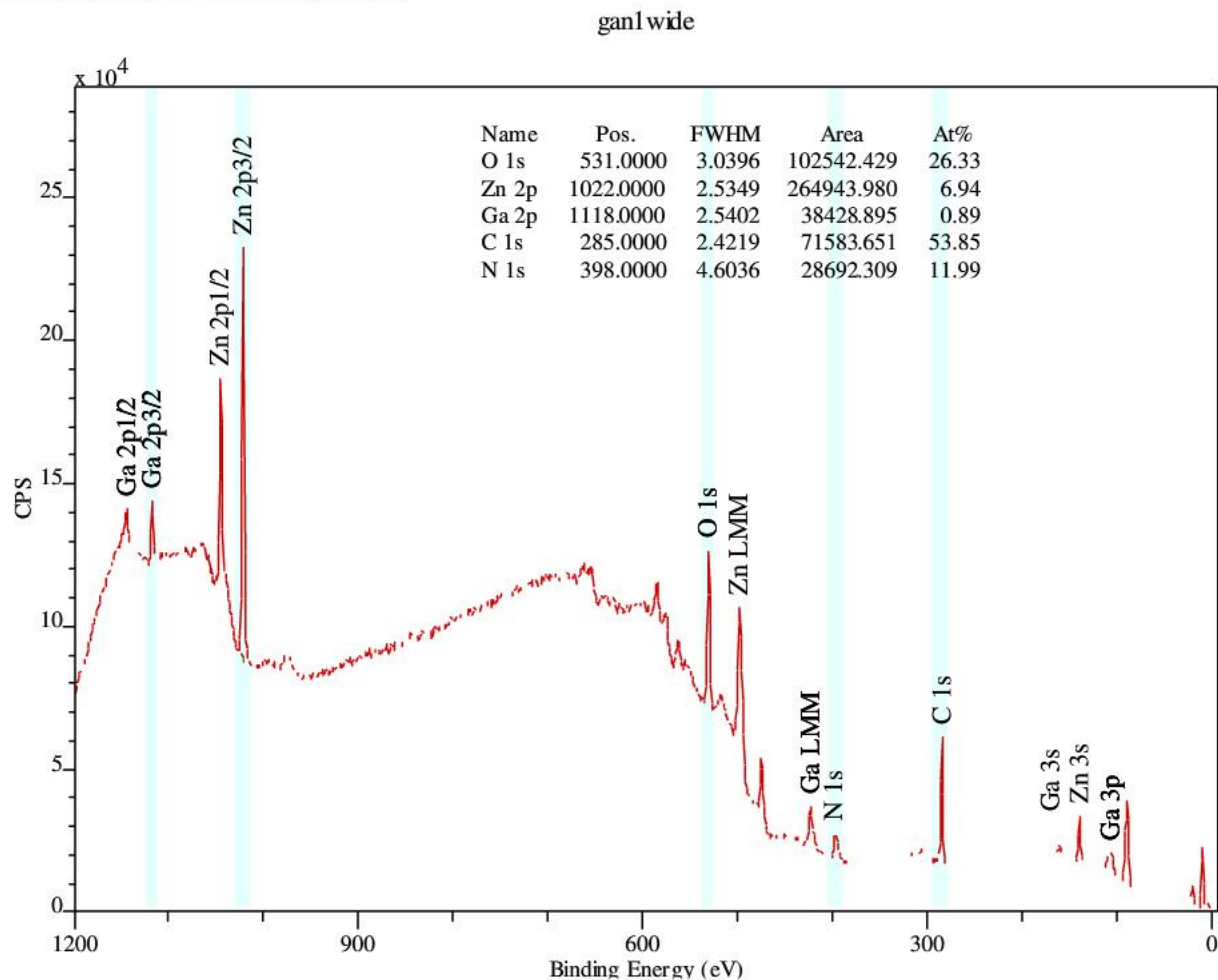


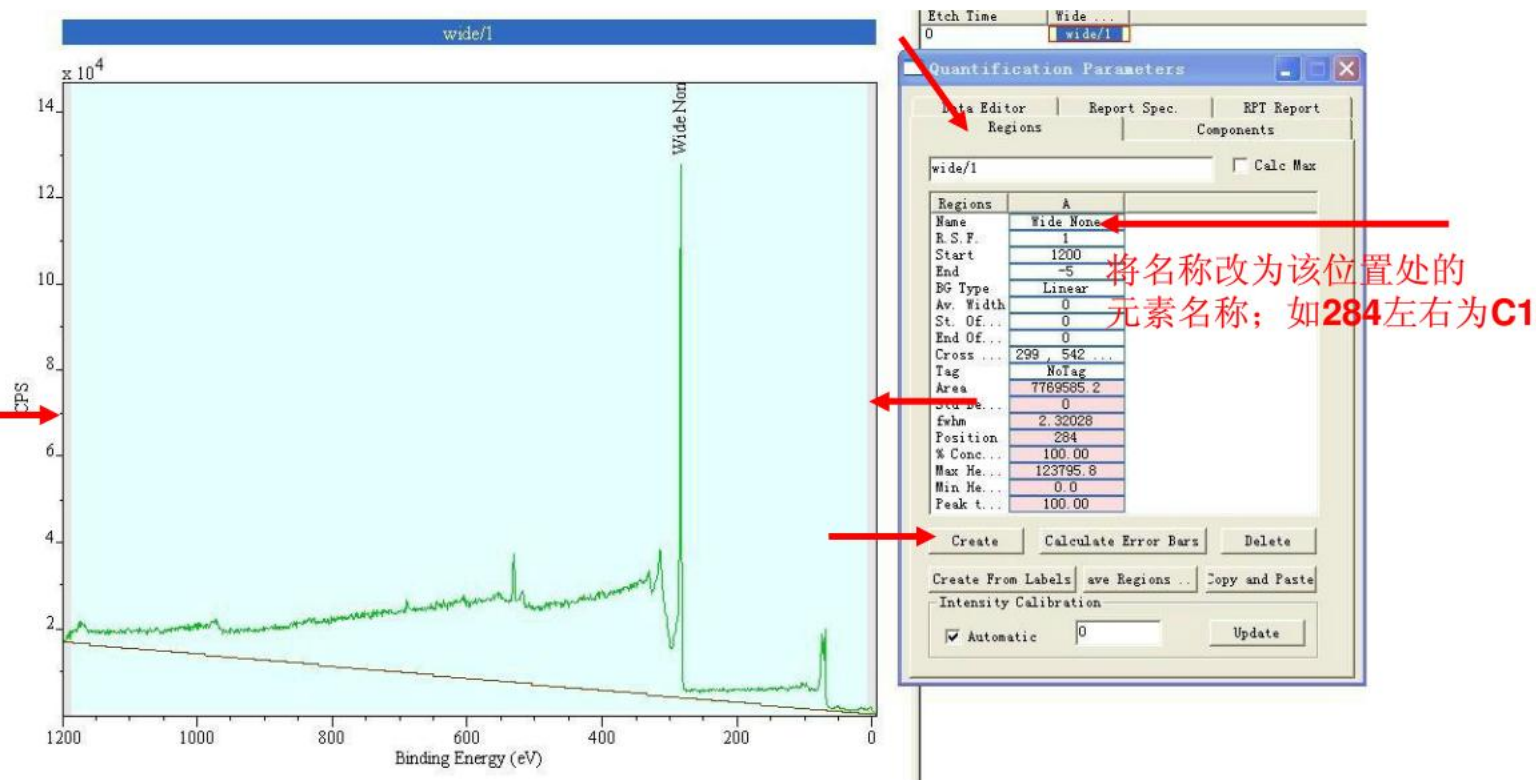
图2 经过峰归属和元素含量分析后的xps宽谱图

含量分析步骤

在峰归属基础上，点击 **Options → Elements → Periodic table → Find peaks**，宽谱上可能有的元素在周期表上为红色，选择想要计算元素含量的元素，点击 **Creat Region**，就计算出了各个元素的含量，然后点击 **Clear all elements**，就得到了图2。

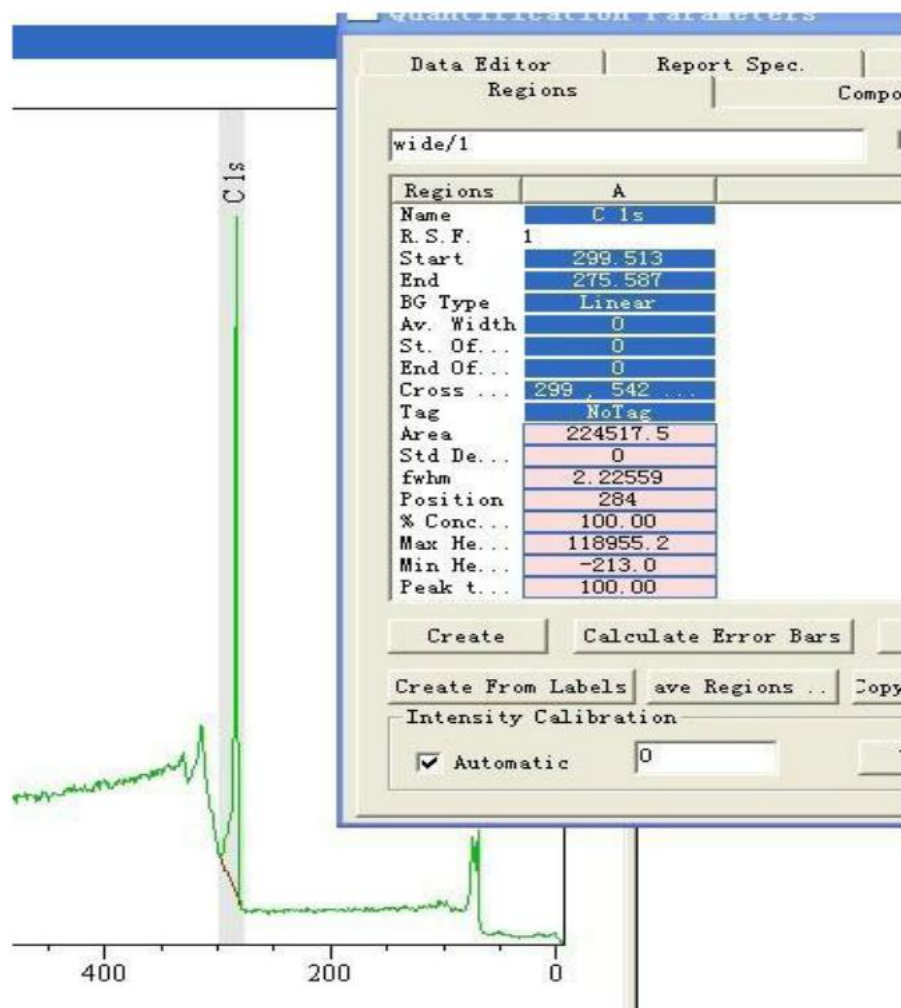
另一种计算含量的方法：

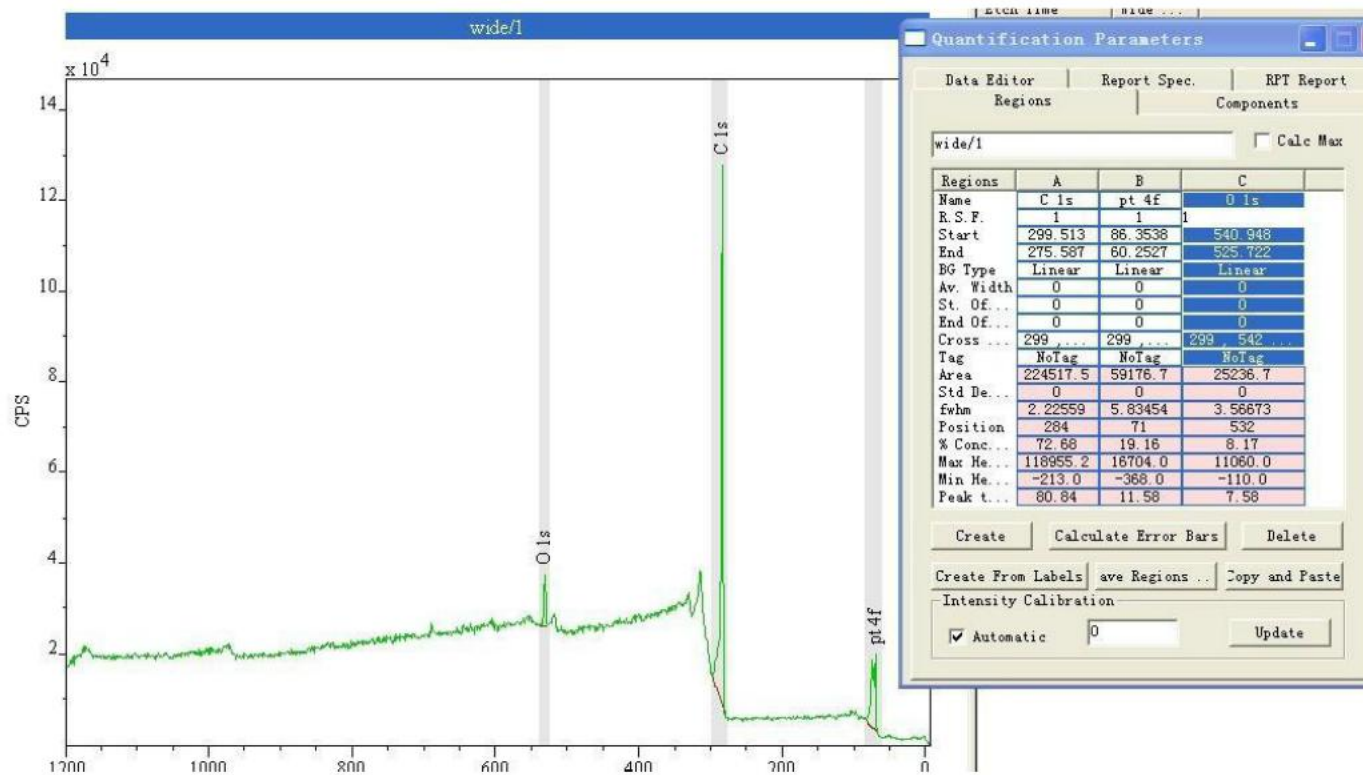
正确识别各峰后，可以按照处理窄谱的方法处理宽谱：点击工作区使其处于激活状态，点击**quantify**  按钮，出现下面界面，点**regions**，再点**creat**，



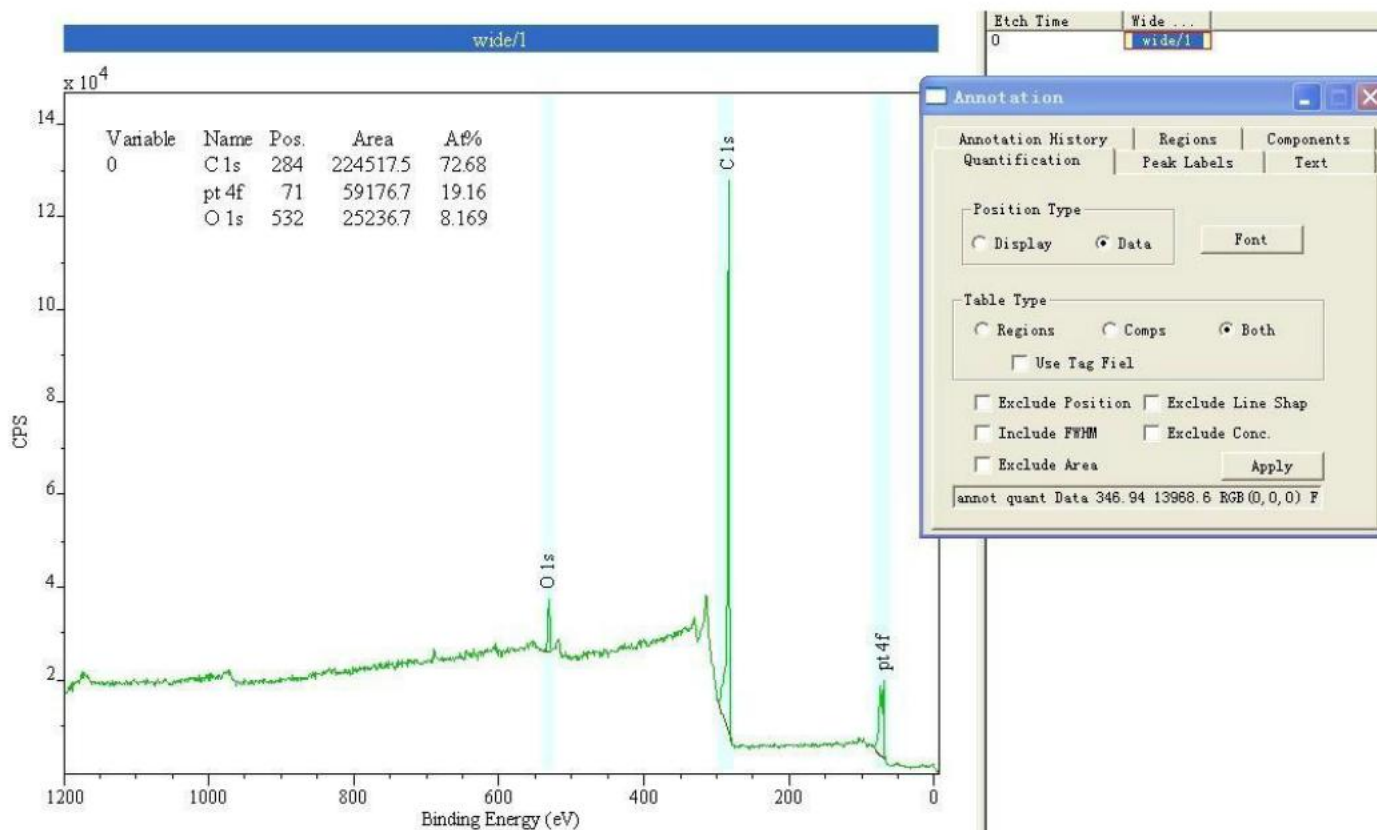
点**creat**出现下面界面后，如图中红箭头所指位置处，左右移动边界，选定要计算含量的区域

得到如下图：按照此方法将其与需要计算含量的元素的区域画出来





在**Annotation**窗口下，点**Quantification**，选上如图的选项，点**Apply**就会得到含量报告。



补充说明

gan1wide

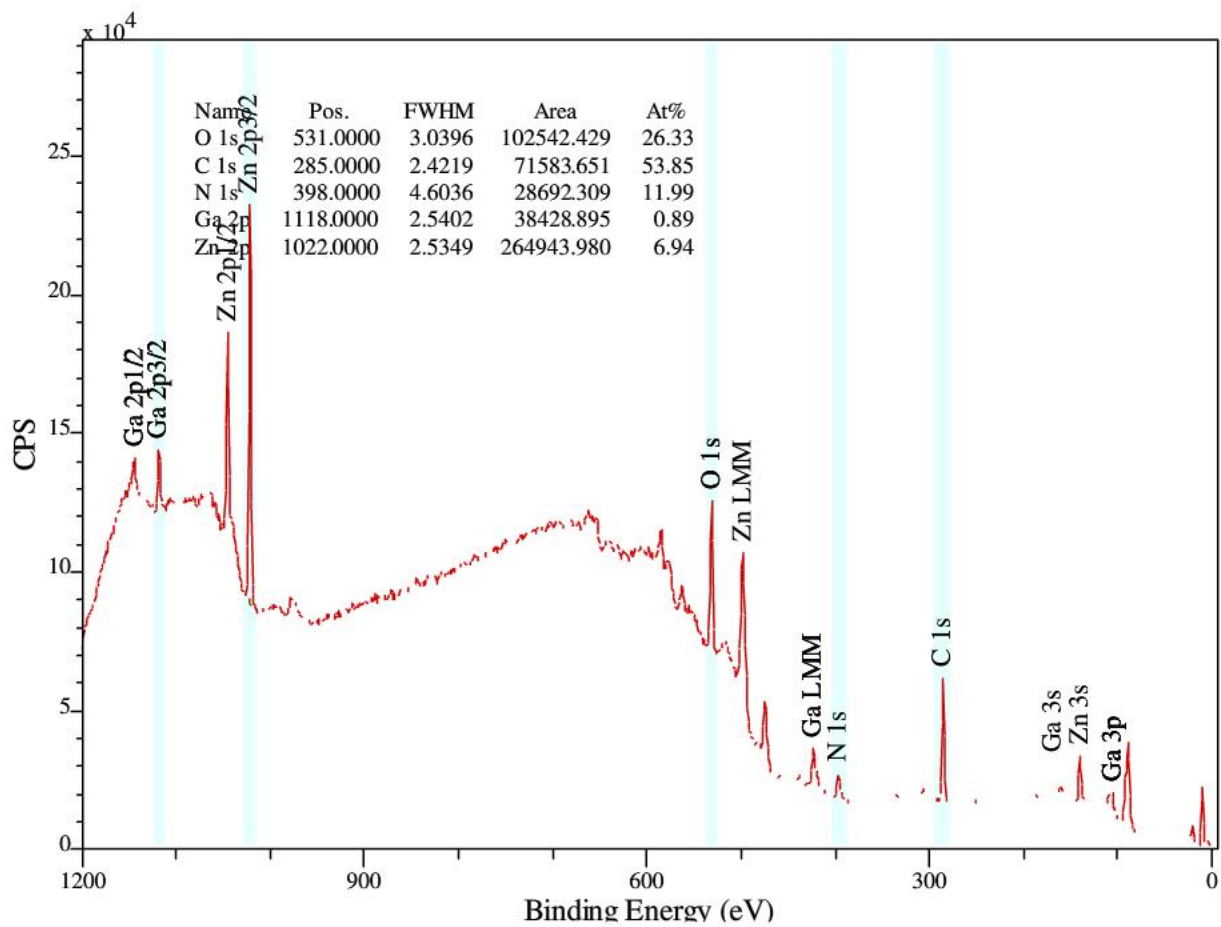
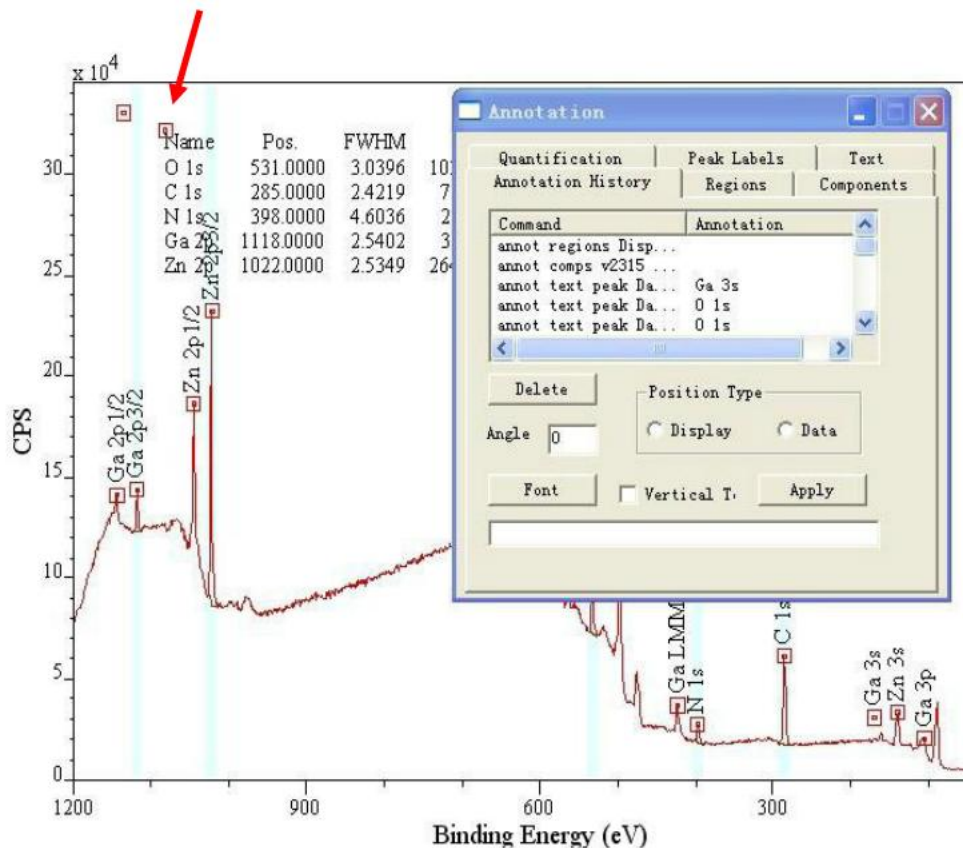


图3 元素含量和峰重合在一起

图3元素含量和峰重合，看不清，怎样将它们分开呢？

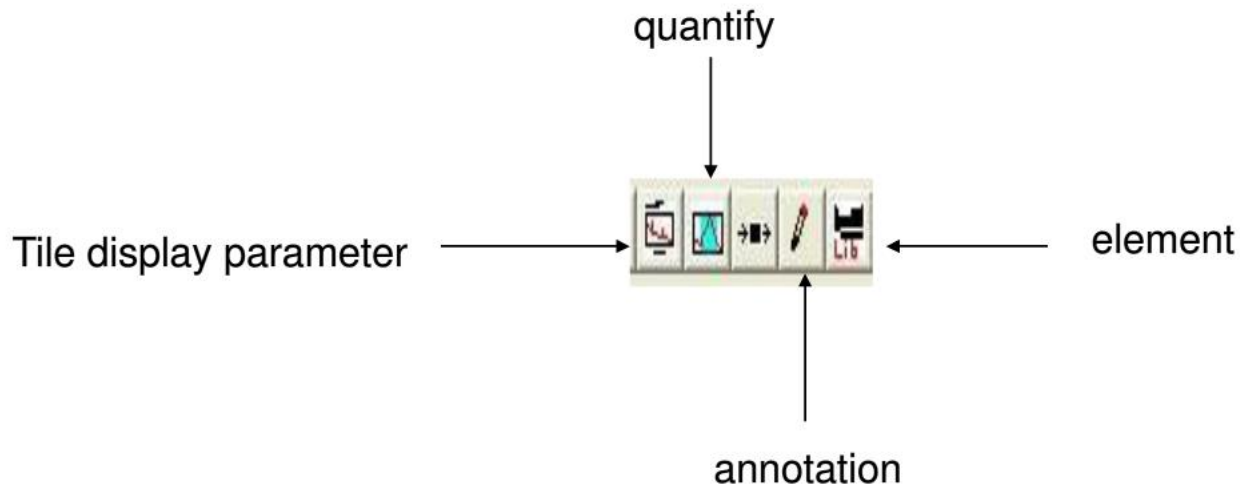


方法1：如左所示快捷键，任意点击一个按钮可以将谱图移动，按自己的需要来点击这两个按钮，直至达到要求为止。



方法2：如左图，在annotation窗口下，点击annotation history,将其激活，会出现左图，有红色方框的说明能够移动，点住name上的红色方框，向右移动即可。

一些常用的快捷键



这些快捷键相关的操作在**option**下均可以找到

2.用casaxps处理精细谱

能够得到的信息：分峰、拟合、含量计算

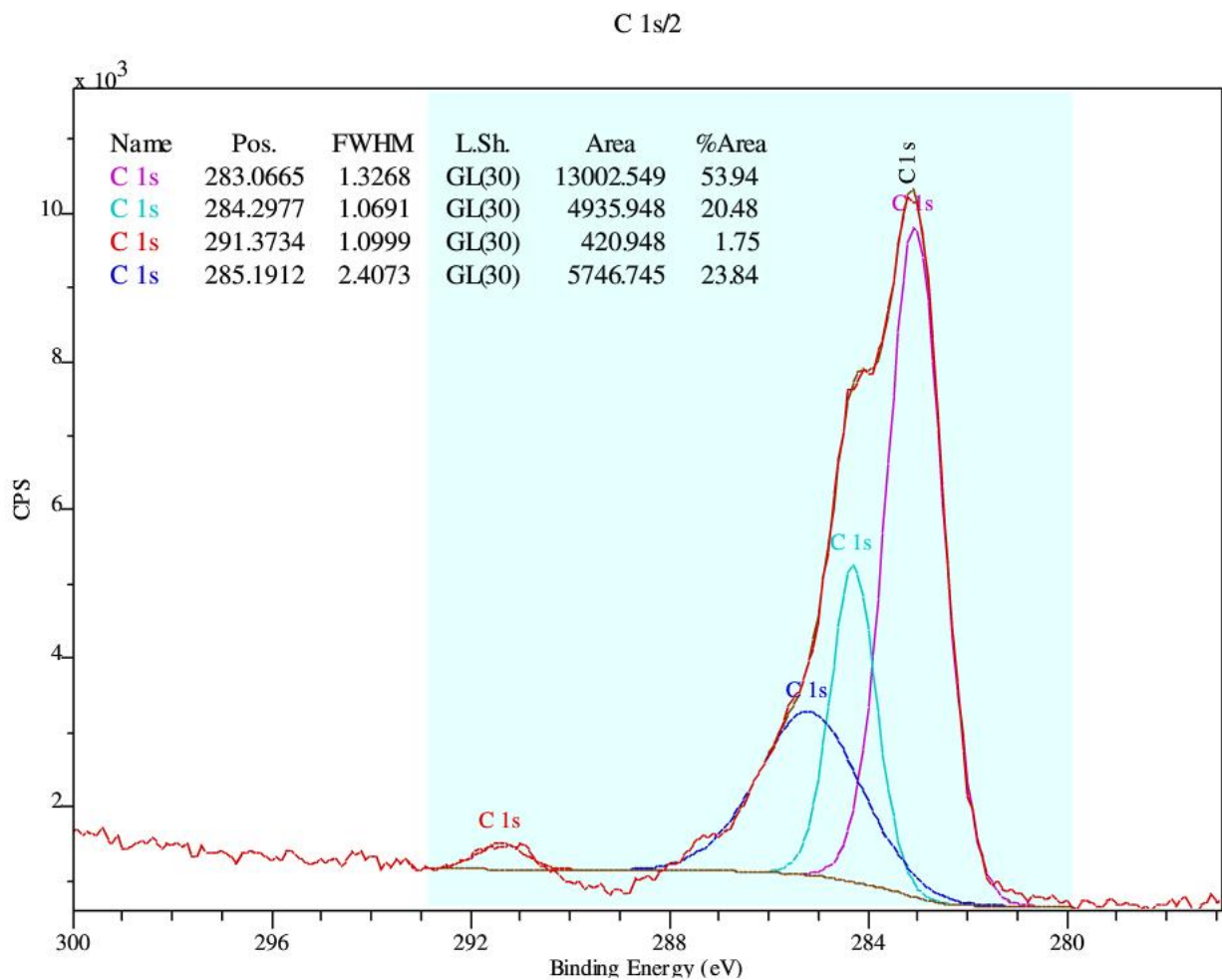

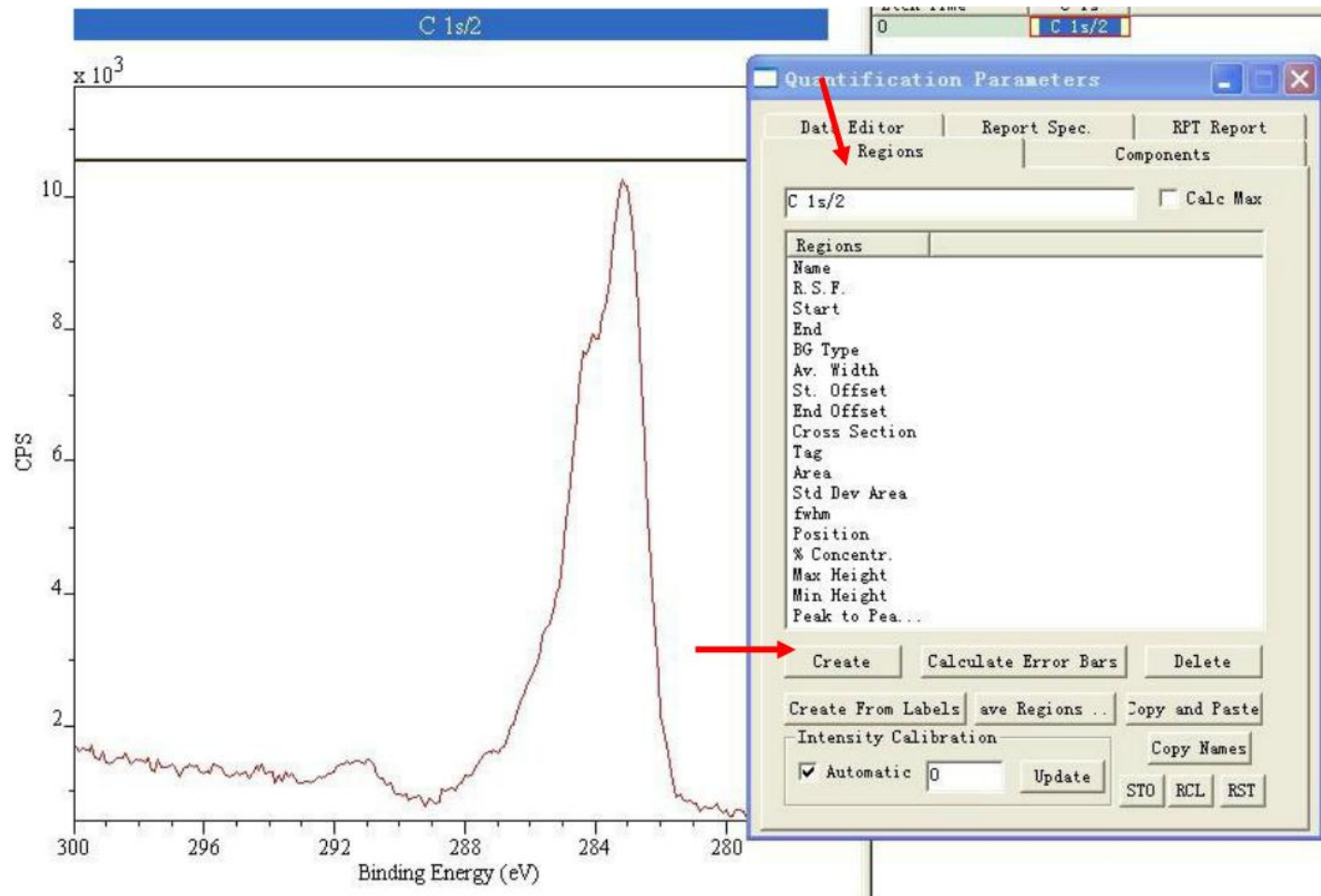


图4 经过分峰、拟合、含量计算后的xps精细谱

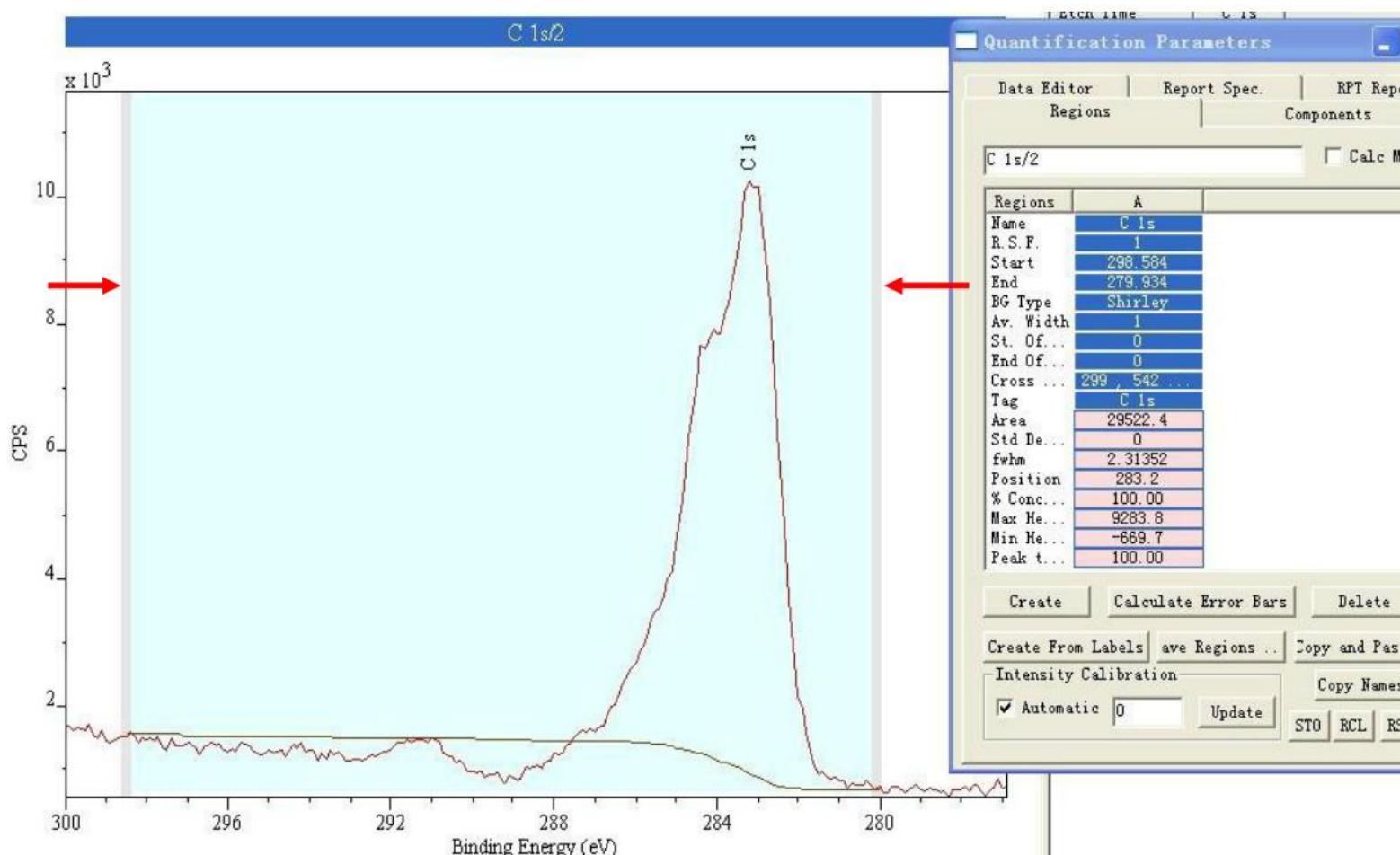
具体操作步骤

扣背底 → 分峰、拟合 → 含量计算

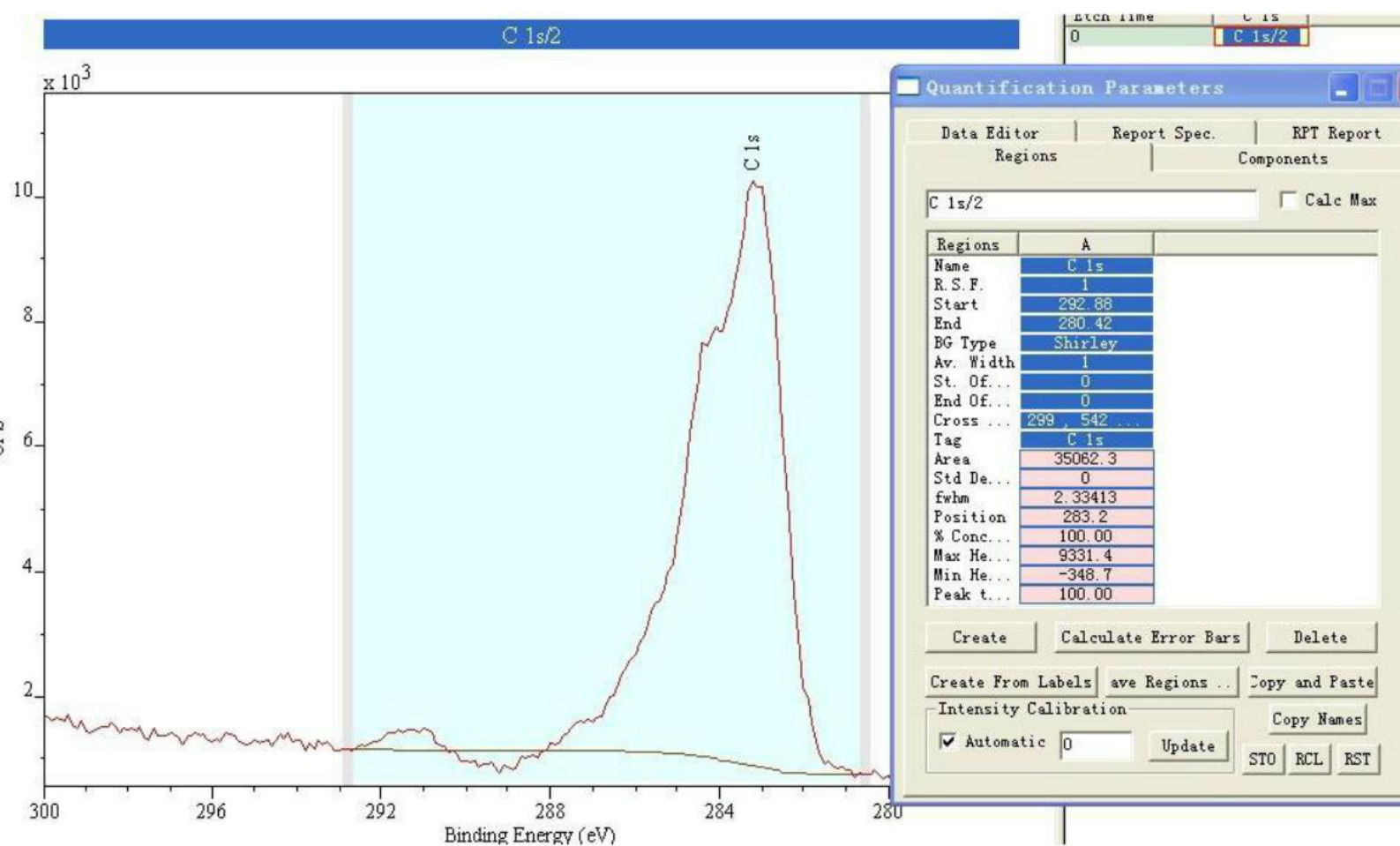
打开vms格式的窄谱文件，点击工作区使其处于激活状态，点击quantify  按钮，出现下面界面，点regions，再点creat，



点**creat**出现下面界面后，如图中红箭头所指位置处，左右移动边界，选定要分峰的区域，即**扣背底**



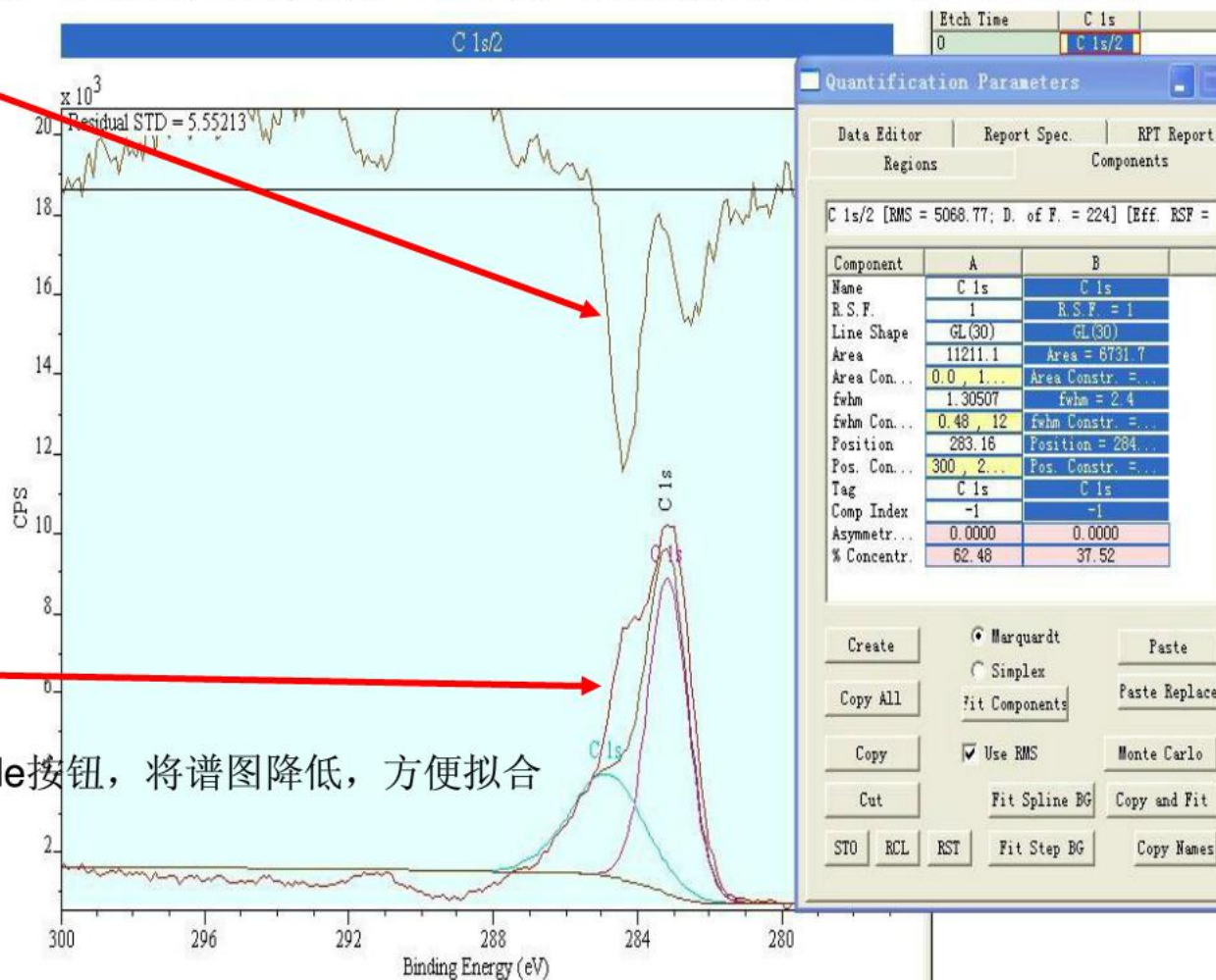
扣背底后出现下面界面



点component，在component状态下点击creat，根据谱图特点点击creat分出一个峰后先拟合一下，再点击creat分第二个峰，拟合

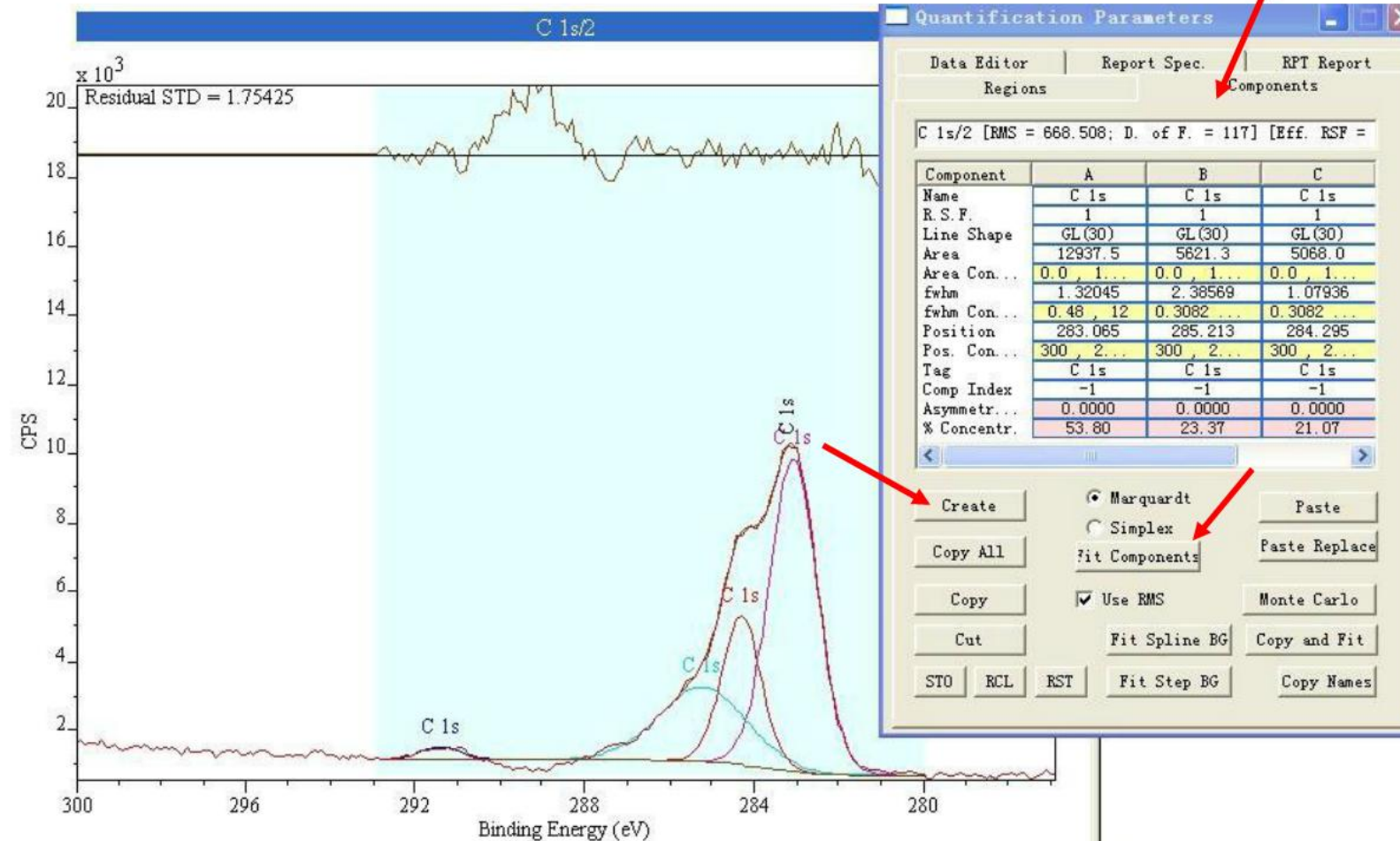


点下residual按钮，出现红箭头所指曲线，该曲线越平缓拟合的越好，STD值越小拟合越好



按下increase Yscale按钮，将谱图降低，方便拟合

在component状态下点击creat, 直至分出所有峰, 点击 Fit component, 出现以下界面。

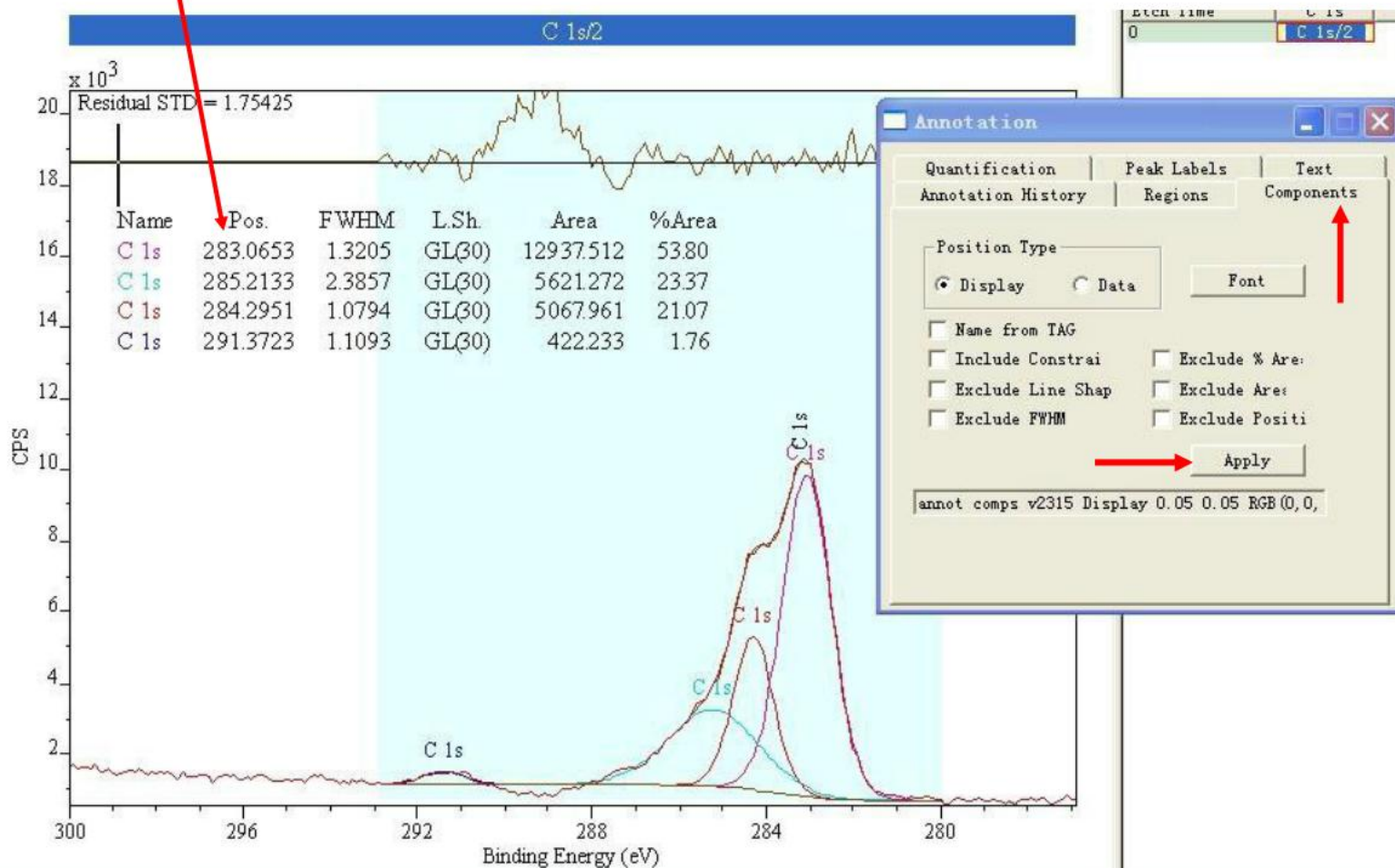


点annotation
含量计算



按钮，激活component，点apply，出现以下界面。完成分峰、拟合、

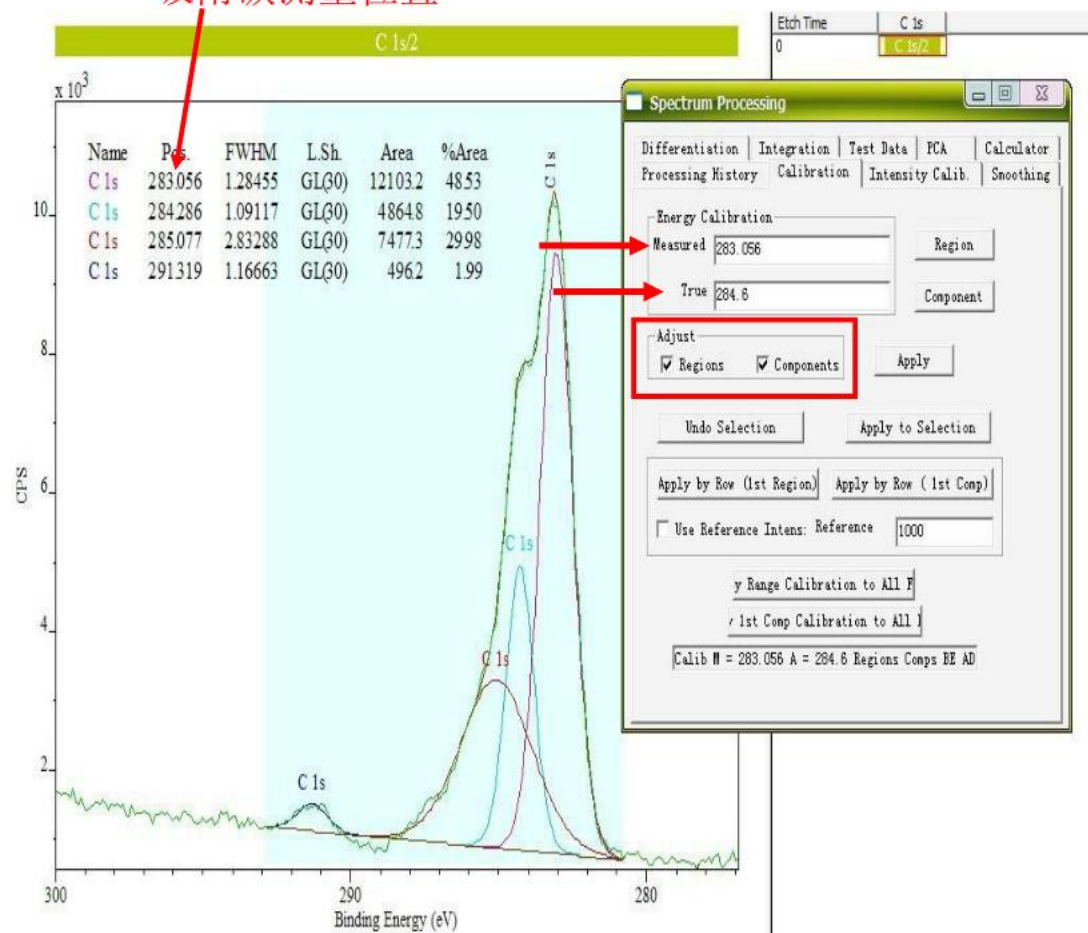
吸附碳位置



荷电校正

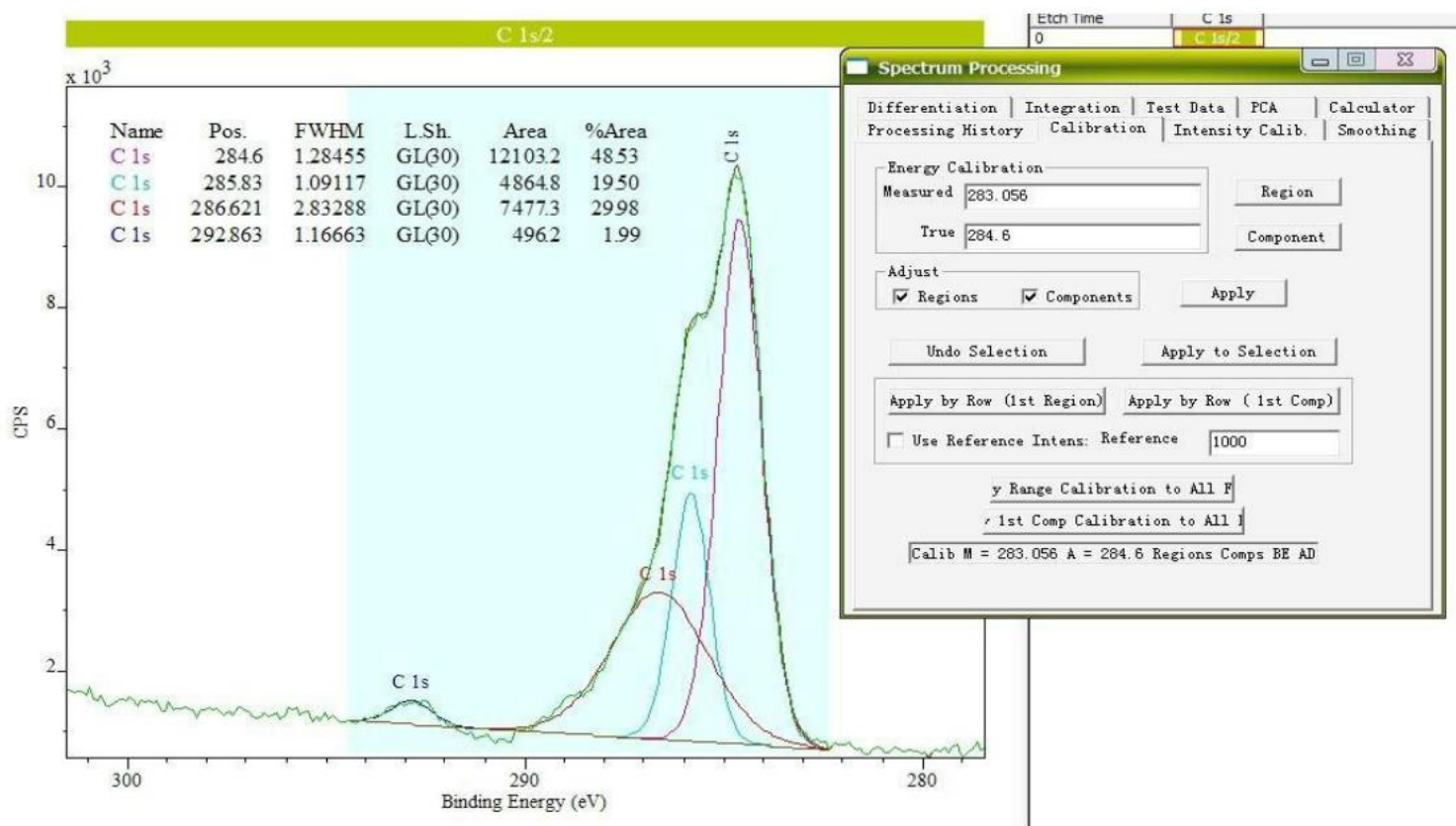
由于在测试过程中会发生结合能的偏移，完成分峰拟合含量计算之后就要进行荷电校正。我们的仪器一吸附碳的结合能**284.6eV**作为标准，进行校正，步骤如下：

吸附碳测量位置



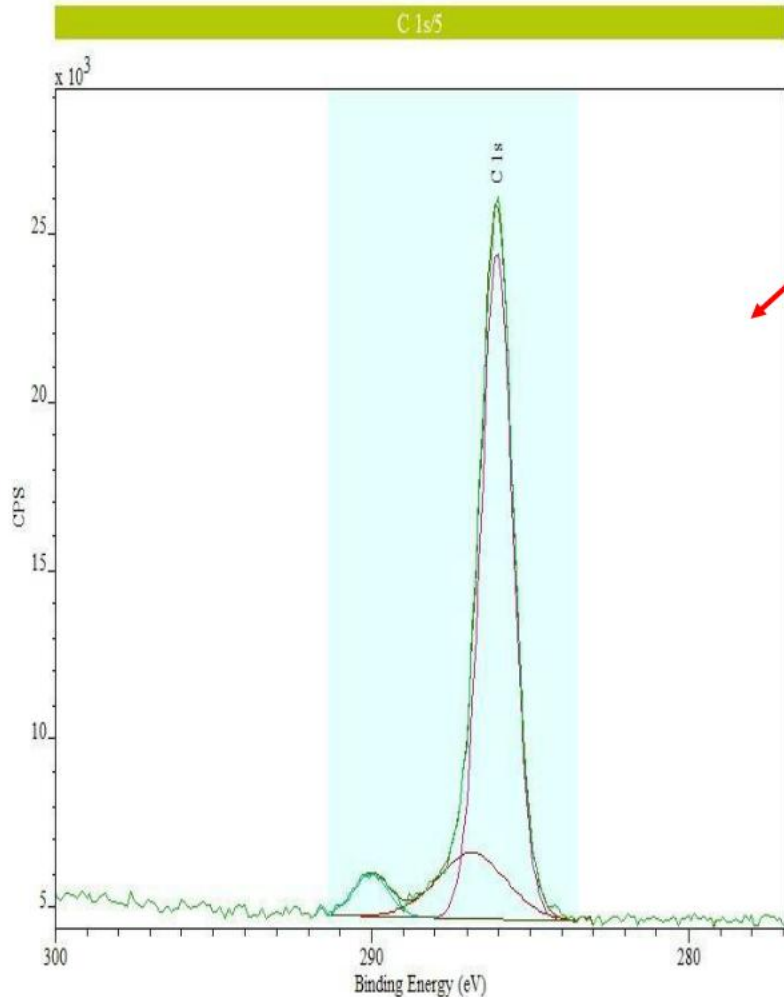
点击processing按钮，出现如右边窗口，点击calibration，在measured后面的空格中输入吸附碳测量值，在true后面的空格中输入标准值284.6，将有图红色框中的两个选项打钩，点apply即可

下面的结果就是经过校正后的最终结果



点processing History, 点击该窗口下的remove, 可以撤销此次校正过程

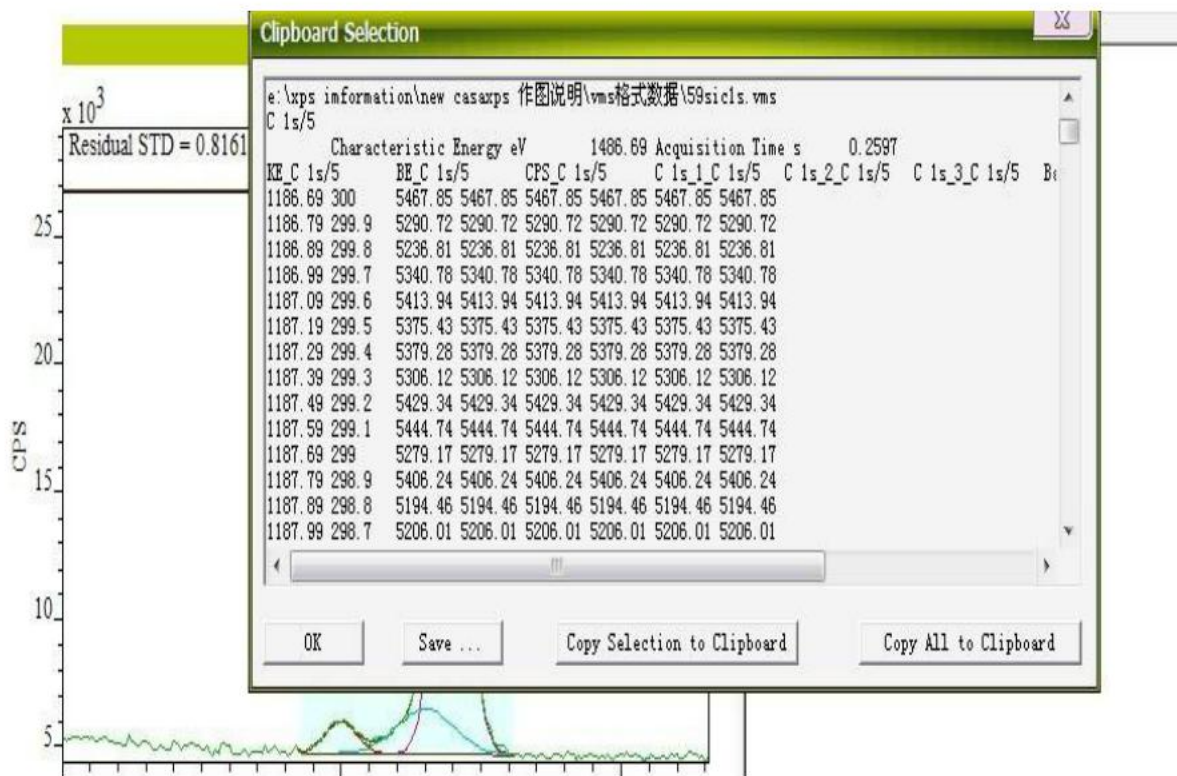
3.将拟合好的数据保存为.TXT格式



在Casaxps里面已经拟合好的C1s谱

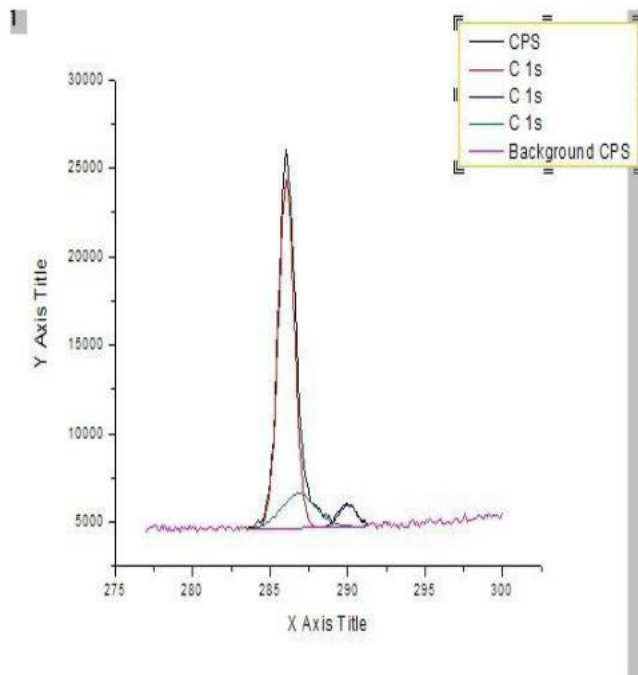
保存方式如下：

点击 **save Tab Ascll to clipboard**按钮 出现如下界面，点击**copy all to clipboard**键，将clipboard section 界面关闭后，**将复制的数据粘贴到txt文档即可。**



如果该步操作无法进行，可能是没有输入该软件的用户名和序列码，点击**help**下拉菜单**about Casaxps**,输入正确的用户名和序列号（用户名和序列号保存在SN.txt文本文件中），其它到处操作如上。

将从**casaxps**转换出的数据导入到**origin**后的谱图



导入到**origin**后可以像处理其它数据一样，去掉第一列（动能列），修改一下坐标，作图，标注峰名称，就得到可以应用的最终结果。

谢谢！