

CasaXPS软件应用数据及处理

胡倩倩



分析测试中心 **XPS**机组



报告大纲 OUTLINE

CasaXPS软件
的下载与安装

CasaXPS软件
的界面

数据处理与
报告

报告格式与
导出



1.1 CasaXPS软件的下载

最新版本2.3.16软件的下载网址是: www.casaxps.com/berlin

适用于初学者入门学习的相关视频及pdf文献的下载网址是:

http://www.casaxps.com/help_manual/curve_fitting_polymers.htm

<http://www.casaxps.com/cam7/BeginnersGuide/ABeginnersGuideToCasaXPS.htm>

http://www.casaxps.com/help_manual/



Download the latest version of CasaXPS - 搜狗高速浏览器

http://www.casaxps.com/begin/

下载2.3.16软件

Download the latest version 2.3.16 of CasaXPS (< 2.5 Mb): includes the program file plus Scofield element library and configuration files.

Download Data from The Casa Cookbook (< 6 Mb): includes spectral and image data sets used to create The Casa Cookbook.

Help Files, PDF books and videos are available via 相关学习视频和pdf文献
http://www.casaxps.com/help_manual/

A Beginner Guide to CasaXPS Video is also available under
http://www.casaxps.com/help_manual/curve_fitting_polymers.htm 适于初学者学习

完成 (四四四四:1.80)



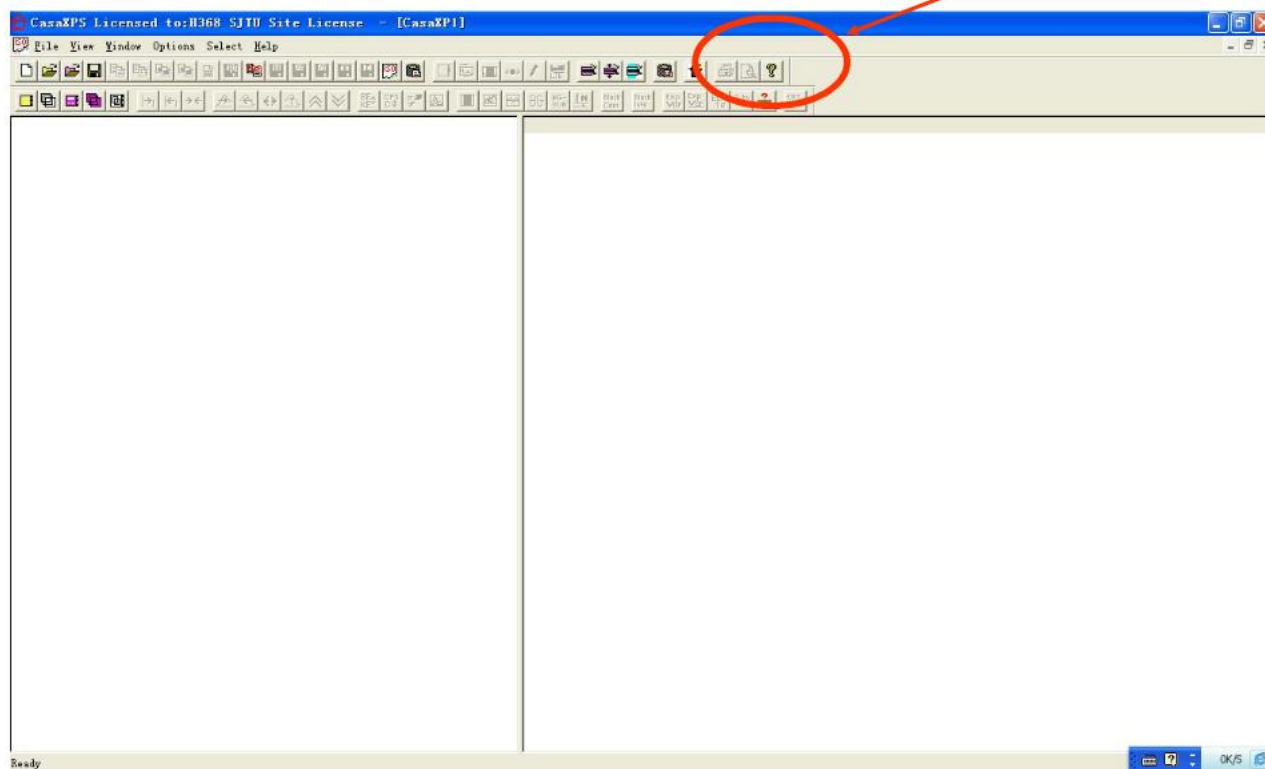
1.2 CasaXPS软件的安装

打开casaXPS软件文件夹----打开CasaXPS.exe



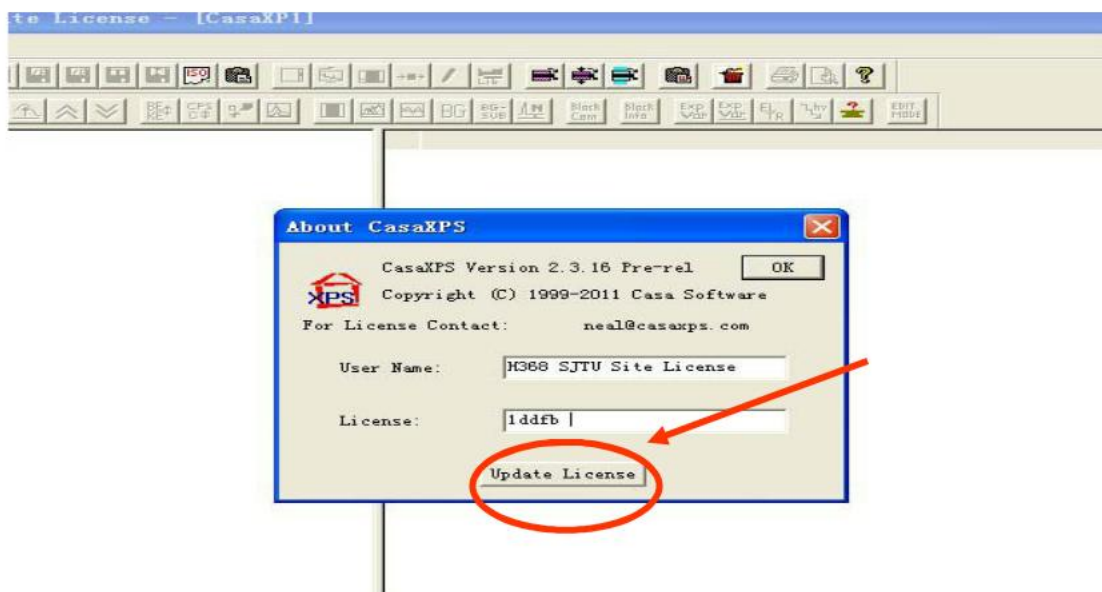


选择右上角的?按钮





输入用户名和密码——点击Update License按钮即可



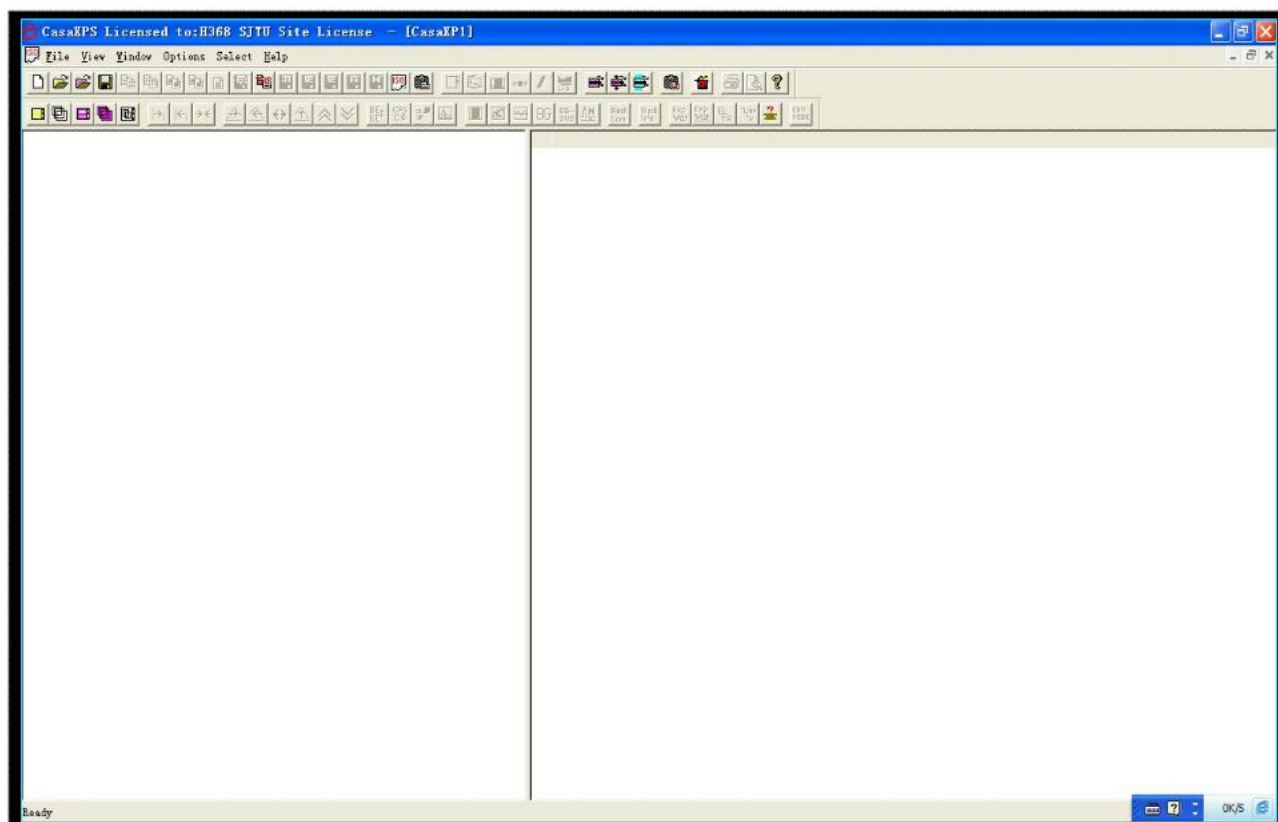
用户名: H368 SJTU Site License

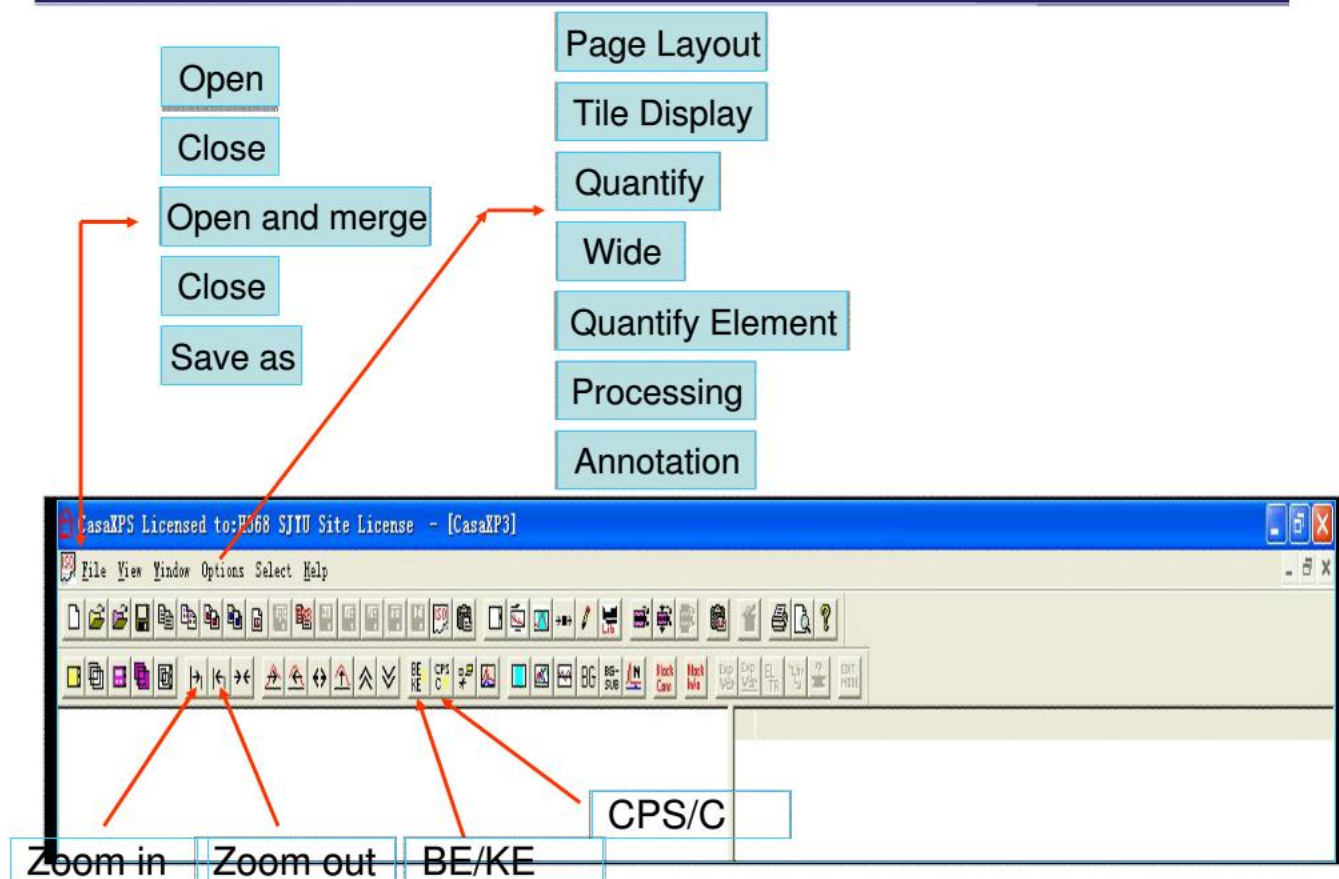
密码: 1ddfb



2. CasaXPS软件的界面

- 原始数据: vms格式
- File----Open (打开单个vms文件)
 - Open and merge (打开多个vms文件)
 - Close (关闭vms文件)
 - Save as (存储vms文件)







- 快捷键:

F1 ----先点亮单个元素，再按快捷键F1，即可选中相应的元素
(或者直接双击相应的元素)

F2 ----先同时点亮几个元素，再按快捷键F2，即可对比相应的元素

F3 (Zoom out) ----缩小所选区域

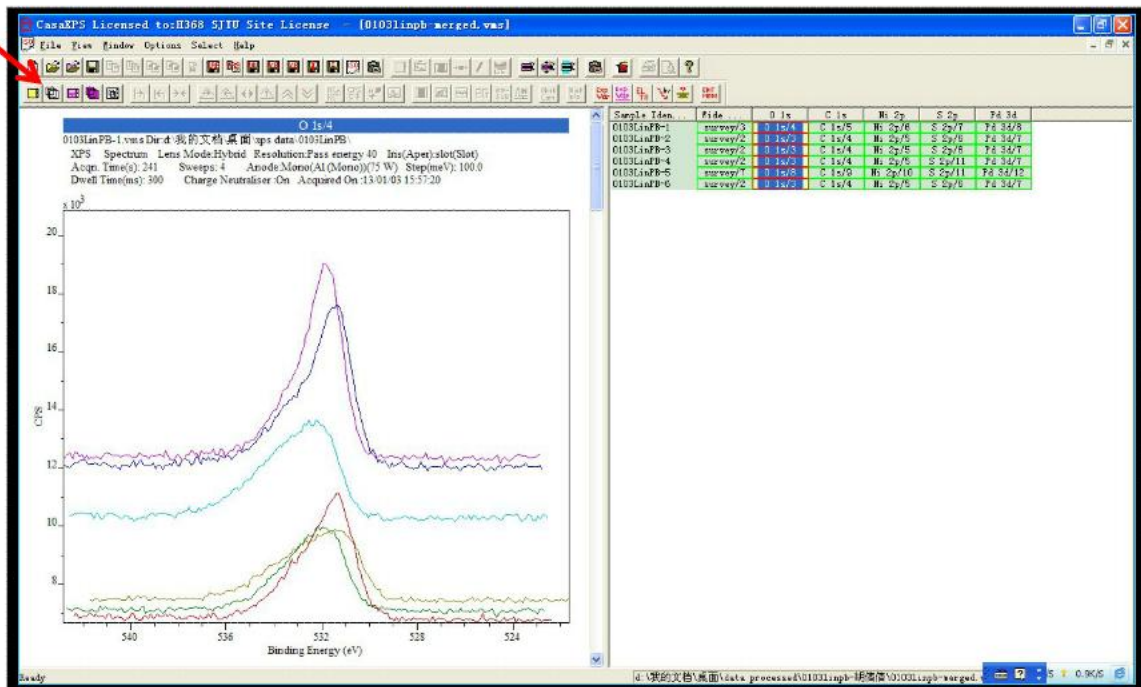
F5 (Page Layout) ----可以选择16种不同的页面布局

BE/KE ----对数据的横坐标进行BE (结合能) 和KE (动能) 的转换

CPS/C ----对数据的纵坐标进行CPS (计数率) 和C (总数量) 的转换，一般用CPS作纵坐标



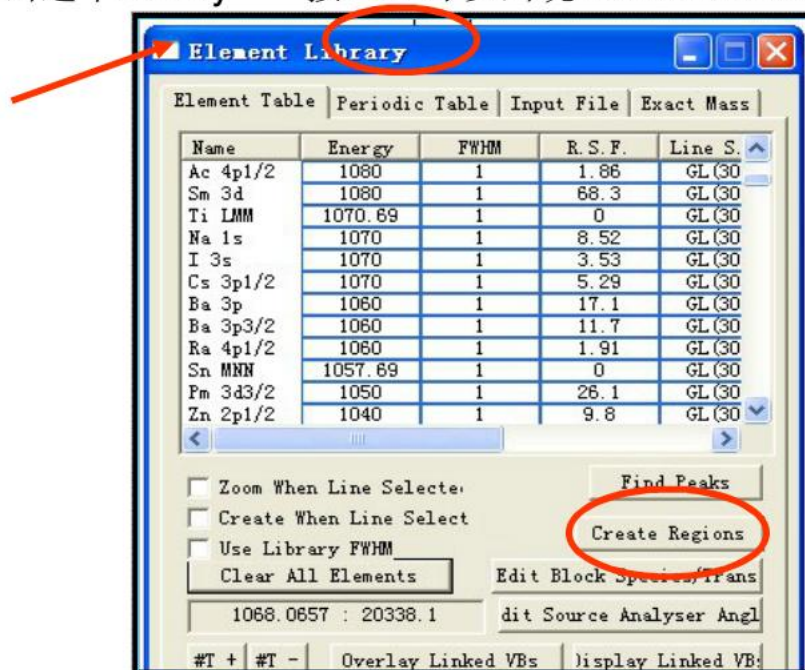
- 多个图叠加：有多组数据，对比同一元素，可以先全选中这一列，再点击左上角的符号。





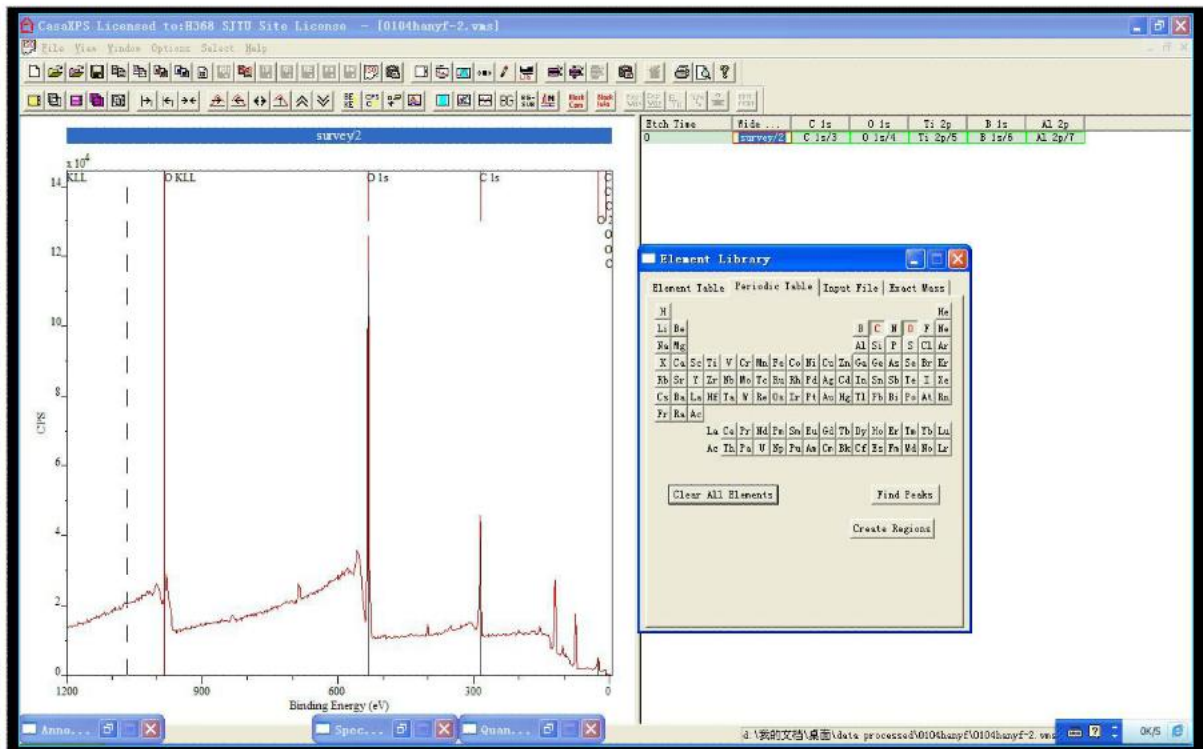
3.1 全谱扫描分析

- 双击选中survey ---- 按F10 可以出现Element Library



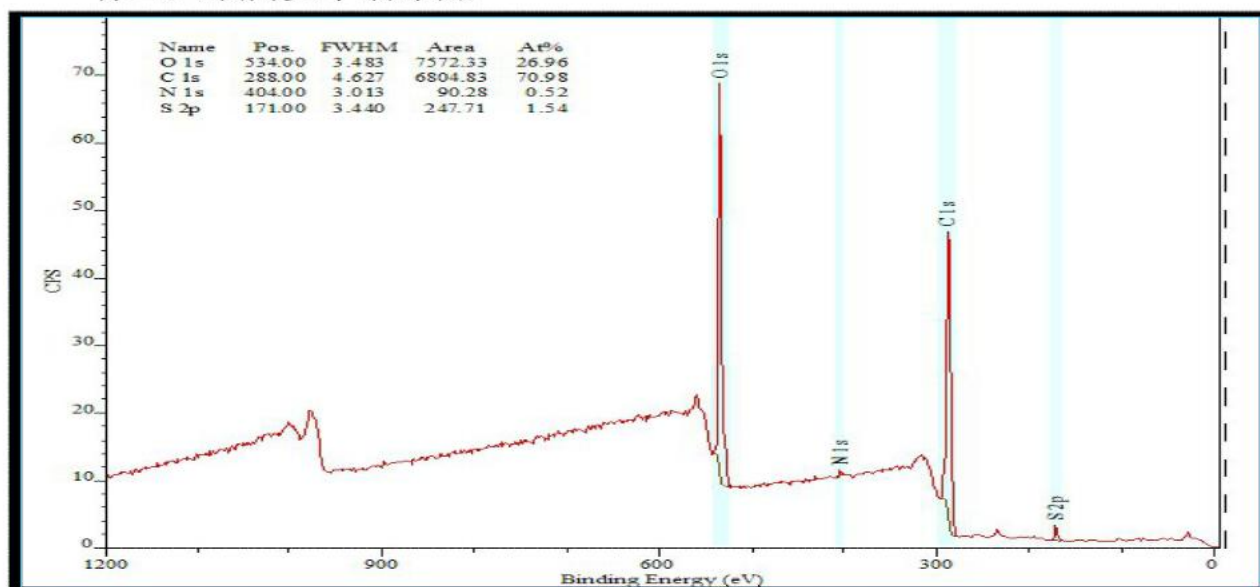


- 单击Periodic table （或者Element table） ----选择相应的元素





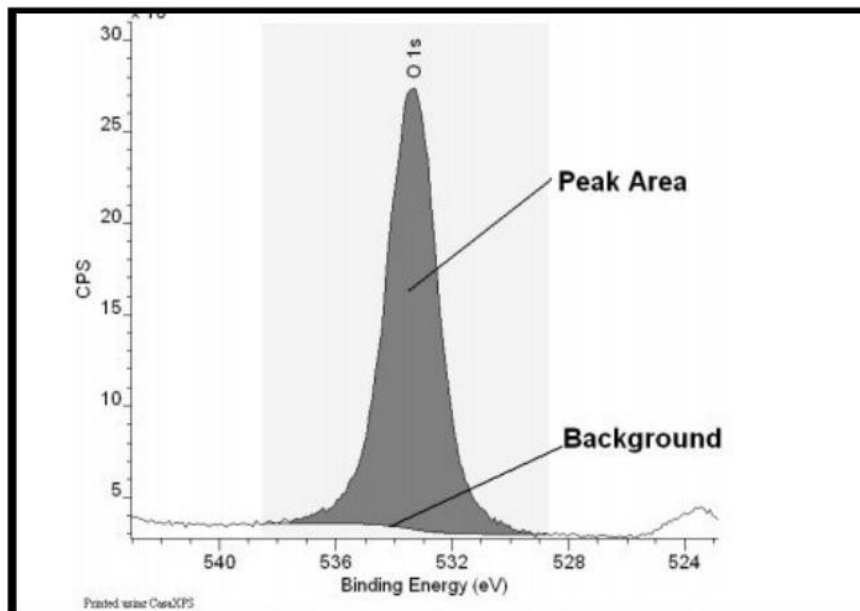
- 单击Create regions, 即可产生相应元素的区域 (并含有峰名: 如C 1s)
- 使用Quantify键可以进入每个区域进行调节并调整区域的大小
- Atomic% 会相应的发生变化
- 有些区域需要手动添加





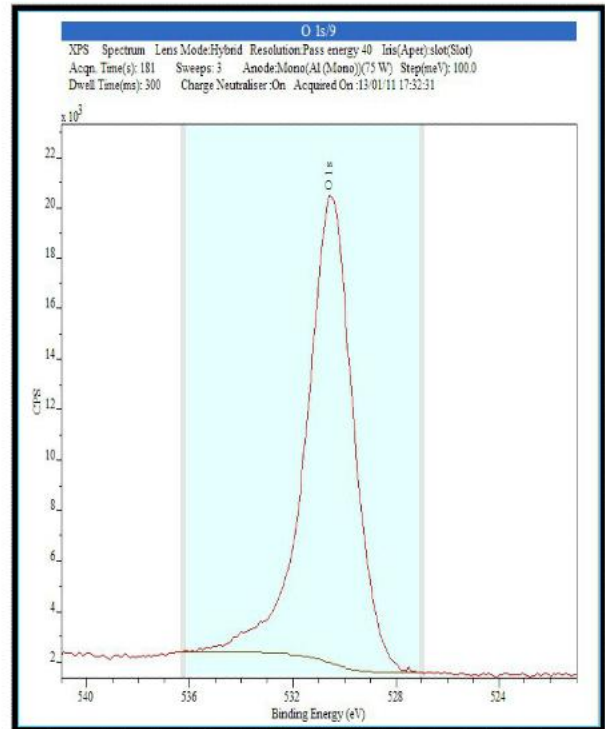
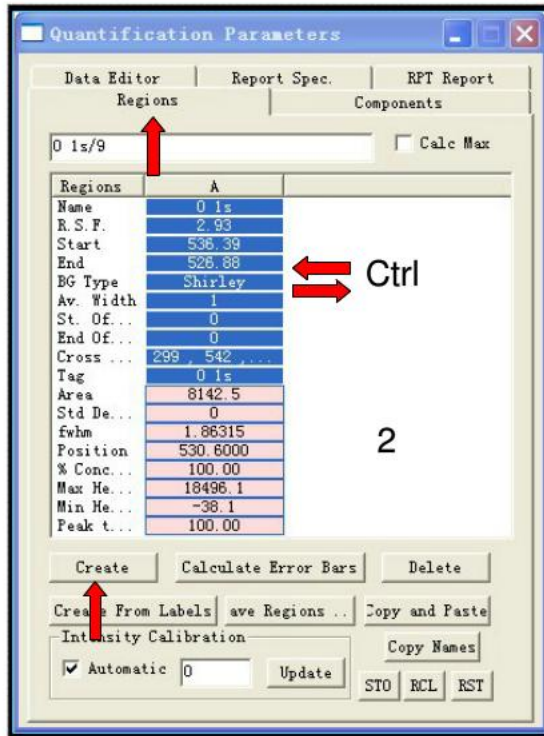
3.2 区域和背景

- 量化区域的主要目标是界定能量的范围，除去不属于峰的背景



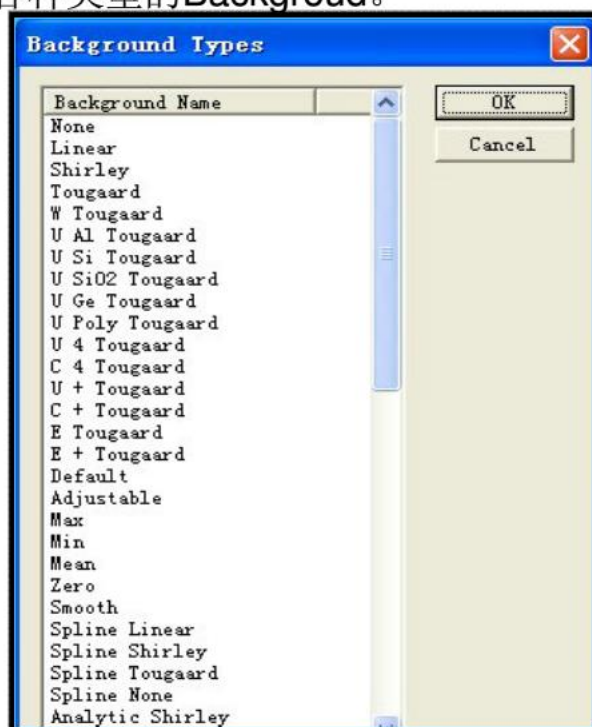


- 选择Options----Quantify----Regions----Create----调整区域的范围





- 点击end----按住键盘上的Ctrl----点击BG Type，会出现下面的对话框，可以选择各种类型的Background。





- Linear一般多用于**聚合物**；Shirley一般多用于**金属元素**，尤其是单峰， 可以用两个单独的区域来表达一个双峰（doublets）。
- ‘OS’ 指offset Shirley （合并了 linear和Shirley, 只在 v.2.3.13版本中出现），可能主要用于双峰。
- 在选择背景格式的时候要小心，因为选择不同的**background**会对数据产生不同的分析效果。
- 对于同一批数据，所选用的background必须是同一种格式的。
- 一个图里面可以有二个区域，但是这两个区域不能重叠。



3.3峰形

- CasaXPS软件默认的峰形是GL(30)，这个主要用于 Kratos 系统。
- 对于来自SSI系统的数据，GL(15) 应该能够提供更好的拟合。
 - 要改变系统中默认的GL(30)，首先要在Casa文件夹中找到 CasaXPS.lib文件。
 - 用Excel打开文件，把GL(30) 整列变成 GL(15)。
- GL(x) 是高斯-洛仑兹峰形，这里的X代表洛仑兹的百分含量。
 - GL(0) 代表 100% 高斯峰形，Analyzer resolution is Gaussian。
 - GL(100) 代表 100% 洛仑兹峰形，X射线线指洛仑兹线。



Quantification Parameters

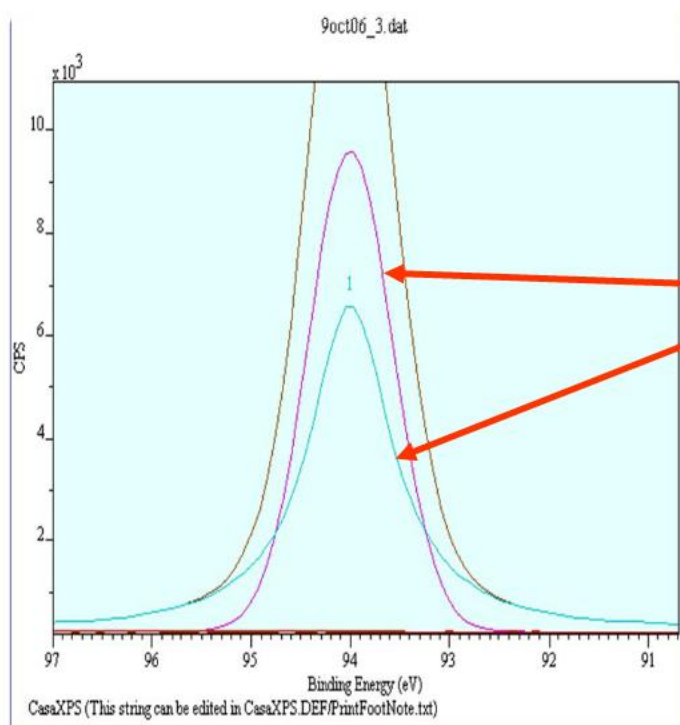
Data Editor | Report Spec. | RPT Report

Regions | Components

C 1s/12 [RMS = 1060.49; D. of F. = 74] [Eff. RSF =

Component	A	B	C
Name	C 1s	C 1s	C 1s
R.S.F.	1	R.S.F. = 1	1
Line Shape	GL(30)	GL(30)	GL(30)
Area	4963.4	Area = 7...	774.4
Area Constr.	0.0, 10...	Area Con...	0.0, 10...
fwhm	1.10999	fwhm = 1...	0.80243
fwhm Constr.	0.2, 5	fwhm Con...	0.2, 5
Position	283.6511	Position...	284.1889
Pos. Constr.	296.5, ...	Pos. Con...	296.5, ...
Tag	C 1s	C 1s	C 1s
Comp Index	-1	-1	-1
Asymmetry...	0.0000	0.0000	0.0000
% Concentr.	30.17	43.93	4.71

Create | Marquardt | Paste
Copy All | Simplex | Paste Replace
Copy | Fit Components | Monte Carlo
Cut | Use RMS | Fit Spline BG | Copy and Fit
STO | BCL | RST | Fit Step BG | Copy Names



Purple: Gaussian
Blue: Lorentzian
same peak areas



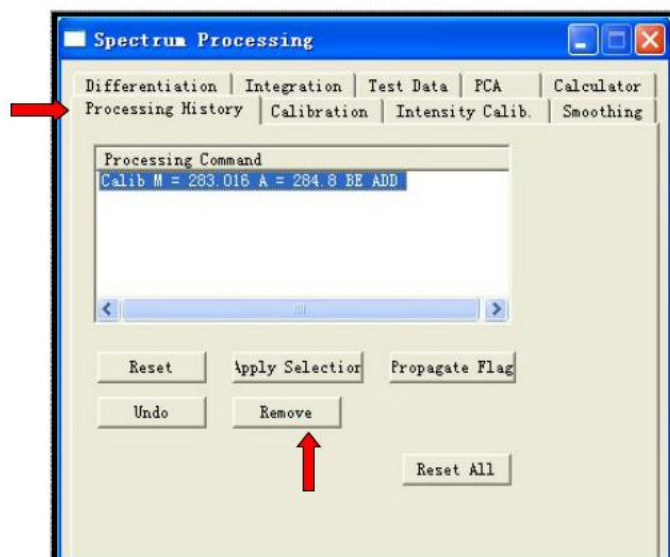
3.4 校准数据

- 一般用**C 1s**校准数据；
- 首先对全谱进行校准，先点亮全谱----Options----Processing，会出现 Spectrum Processing的对话框（如下图）----Calibration----在True处输入284.8----在Measurement处输入真实峰的结合能位置----Apply；
- 其次对单个元素谱峰进行校准，方法和对全谱的校准是一样的。





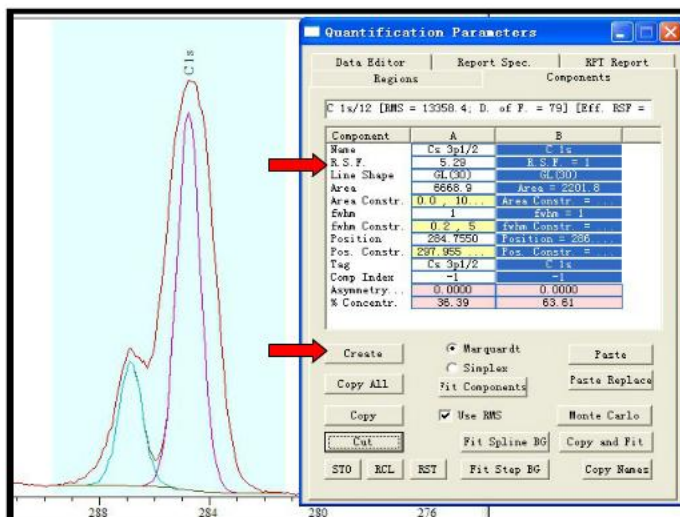
- 先点亮全谱或某个元素谱----Options----Processing, 会出现Spectrum Processing的对话框（如下图）---- Processing History----点亮某条 Processing Command----Remove





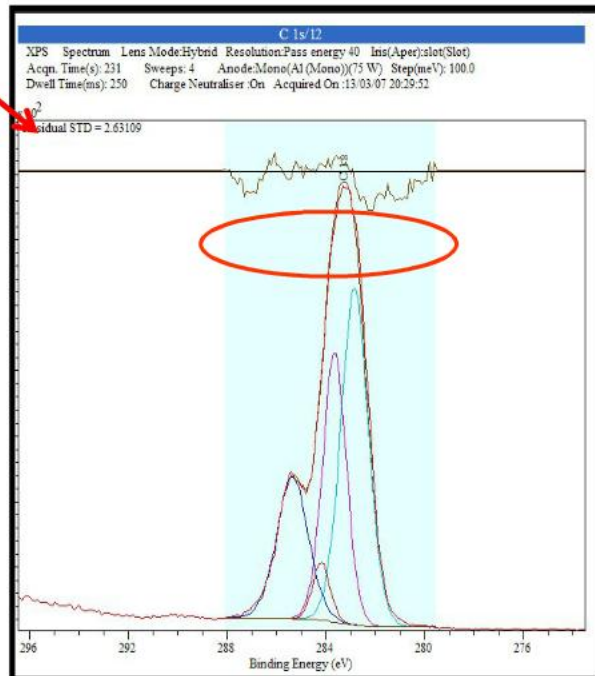
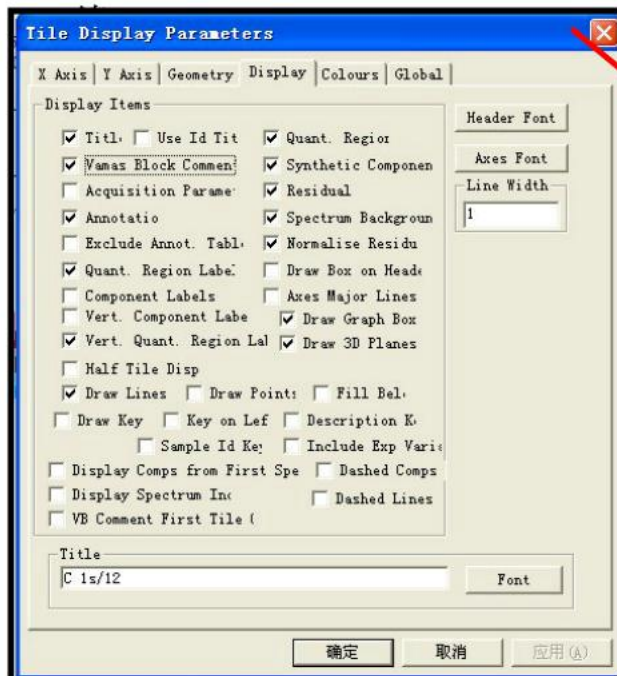
3.5 拟合数据 (Peaks/Components)

- 点亮要分峰的元素谱峰----Quantify----Regions----Create----调整区域的范围----Components----Create。
 - 如果峰是在元素表里选择的，每个分峰都会有相应的名字（比如：Au4f7/2）；
 - 也可以在分峰表里‘Name’那一栏里输入“Au 4f 7/2”等来获得相应的RSF值；



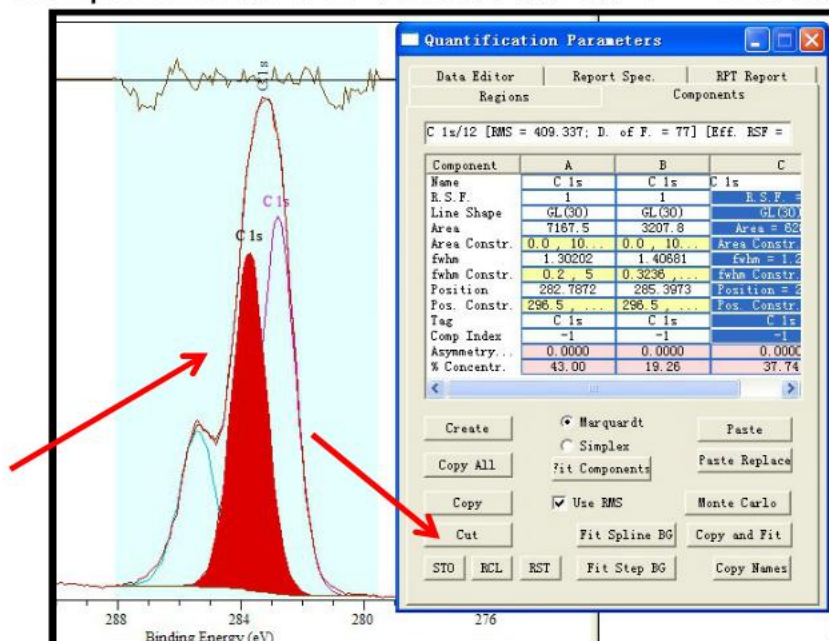


- Components---Create可以点击Quantify---Tile Display Parameters---Display---Residual，红圈处线条越接近直线，Residual值越小，拟合的效果越好；
- 如果有比较大的负向的峰值出现的话，说明这里需要插入一个新的



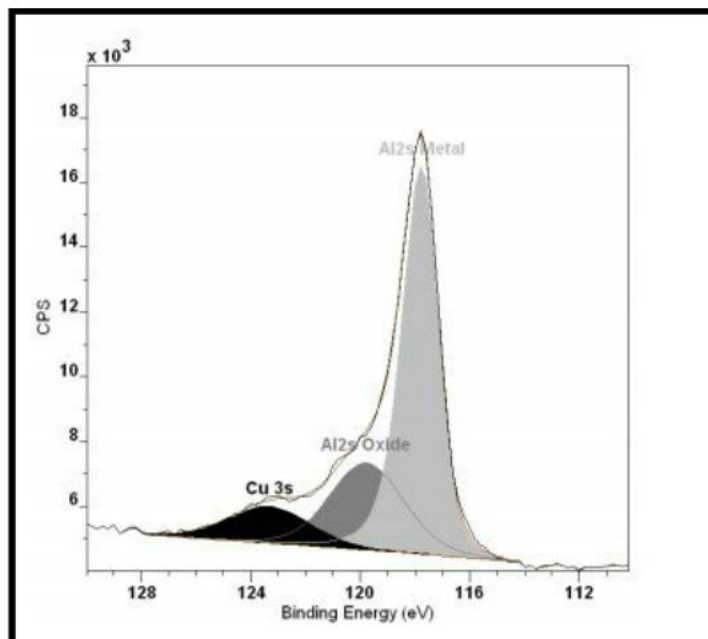


- 可以拖动峰的顶部来改变峰的面积和峰的位置；
- 也可以拖动峰的边缘来改变峰的半峰宽（FWHM）；
- 根据需要的Components 的次数，重复上述操作；
- Components 的峰也可以选择相应的峰----Cut来删除。





- 分峰不仅可以用于单个元素峰，也可以用于重叠的峰；
- 比如下图中的铜和铝峰：





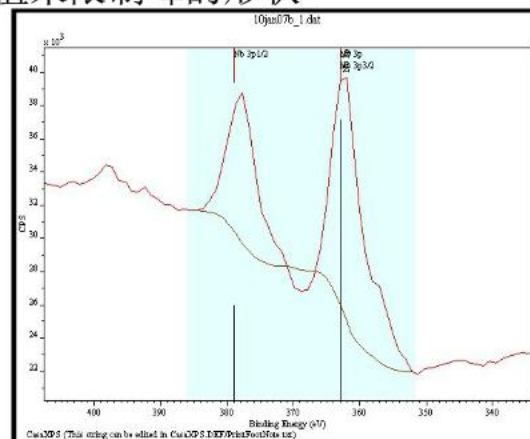
3.6 自旋轨道裂分

Table 2. Spin-orbit splitting parameters.

Subshell	j values	Area ratio
s	$1/2$	—
p	$1/2, 3/2$	1 : 2
d	$3/2, 5/2$	2 : 3
f	$5/2, 7/2$	3 : 4

- 可以用上表中的面积比或其他理论值来限制峰的形状

Component	A	B
Name	C 1s	C 1s
R.S.F.	1	1
Line Shape	GL(30)	GL(30)
Area	7167.5	3207.8
Area Constr.	0.0, 10...	0.0, 10...
fwhm	1.30202	1.40681
fwhm Constr.	0.2, 5	0.3236, ...
Position	282.7872	285.3973
Pos. Constr.	296.5, ...	296.5, ...
Tag	C 1s	C 1s
Comp Index	-1	-1
Asymmetry Index	0.0000	0.0000
% Concentr.	43.00	19.26





3.7 限制（componets）

- 在输入一些数值后，按enter键，才能保证输入的数值有效。
- Position (eV)
 - 一般在知道化学位移的情况下进行峰位置的限制；
 - 峰位置的数据形式是（X，Y），这里的X是下限，Y是上限；
 - A+1.4的意思是该峰的位置比A峰的位置高1.4 eV。

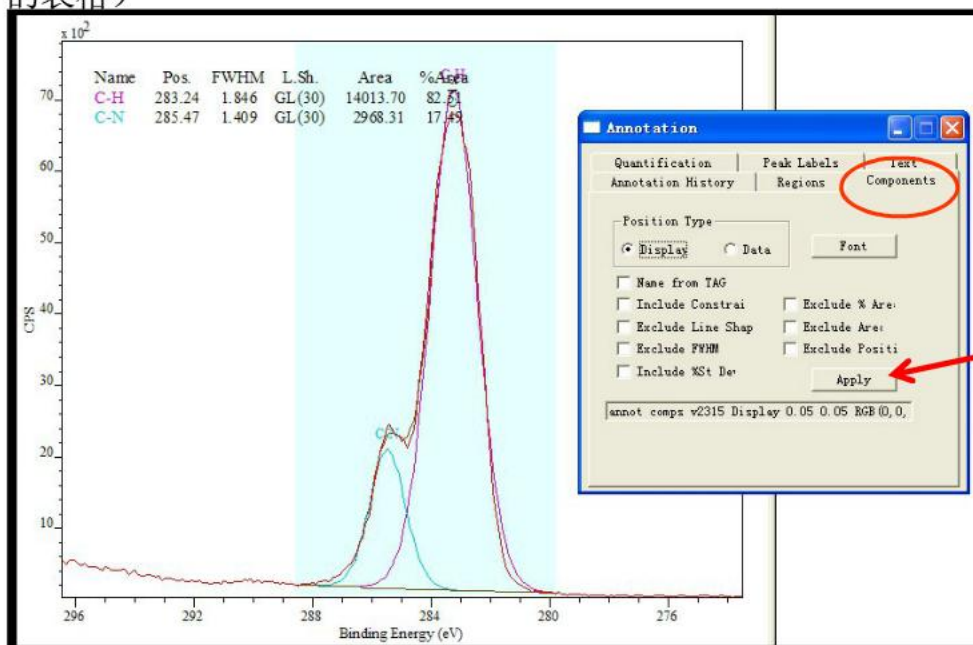
Component	A	B
Name	C 1s	C 1s
R.S.F.	R.S.F. = 1	1
Line Shape	GL(30)	GL(30)
Area	Area = 7167.5	3207.8
Area Constr.	Area Constr. = 0	0.0, 10
FWHM	FWHM = 1.30202	1.40681
FWHM Constr.	FWHM Constr. = 0	0.3236
Position	Position = 282.7872	285.3973
Pos. Constr.	296.5, 273.5	296.5
Tag	C 1s	C 1s
Comp Index	-1	-1
Asymmetry Index	0.0000	0.0000
% Concentr.	43.00	19.26

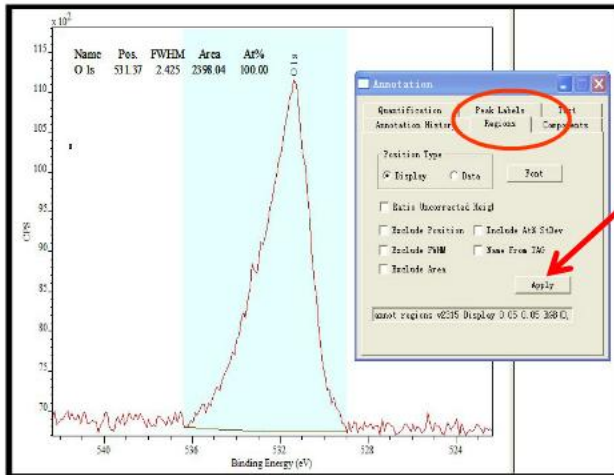
- FWHM 会随着化学位移的改变而变化
- 面积 4f 7/2 峰的面积=4f5/2峰的面积*1.3333（4:3 ratio）；
 - 3p 5/2峰的面积= 3d 3/2峰的面积*1.5（3:2 ratio）；
 - 2p 3/2峰的面积= 2p 1/2峰的面积*2（2:1 ratio）；
 - A*1.333 限制了该峰的面积是A峰的1.333倍。



3.8 Components列表

- 每个单峰都要有一个特定的名字;
- Options----Annotation-----Components---Apply (建立对比components的表格)



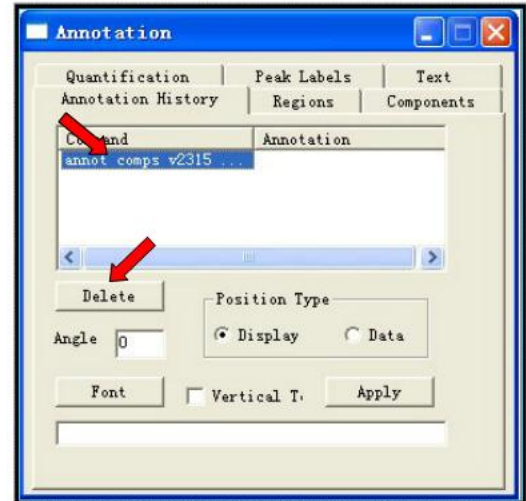


- Options----Annotation---Regions----Apply (建立对比regions的表格)

- Options----Annotation-----Annotation History----Delete (删除表格)

- 拖拽着个红色的标志可以移动表格的位置

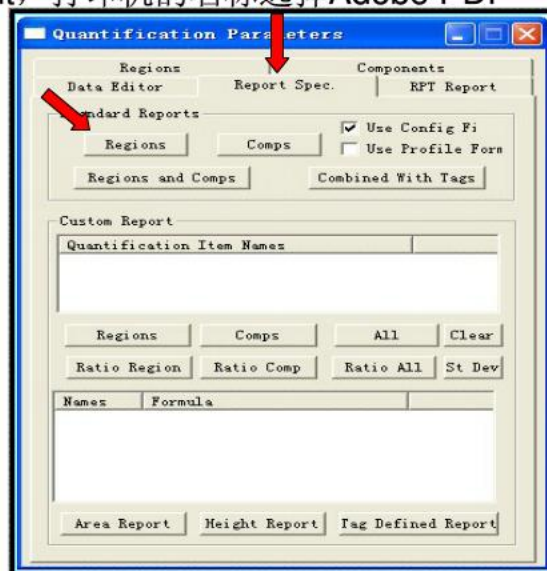
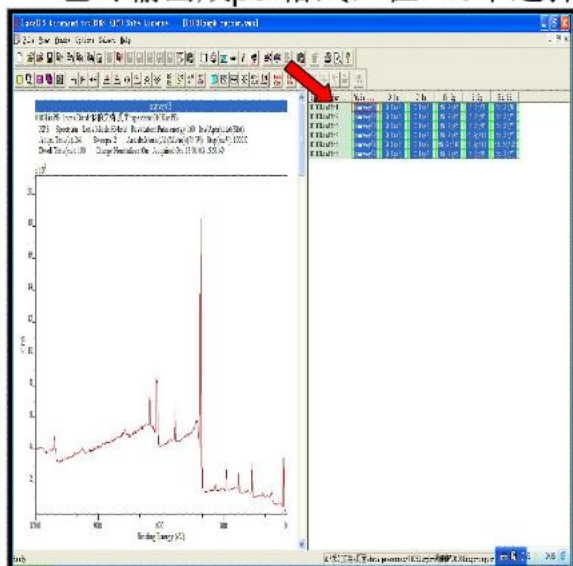
Name	Pos.	FWHM	L.Sh.	Area	%Area
C-H	283.24	1.846	GL(30)	14013.70	82.51
C-N	285.47	1.409	GL(30)	2968.31	17.49





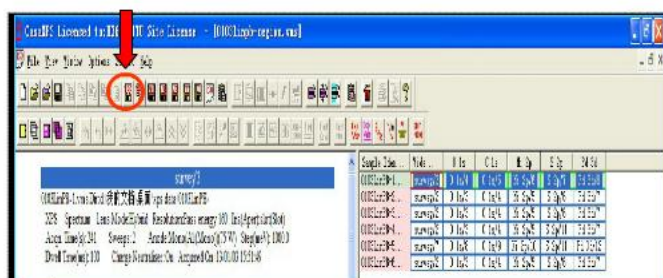
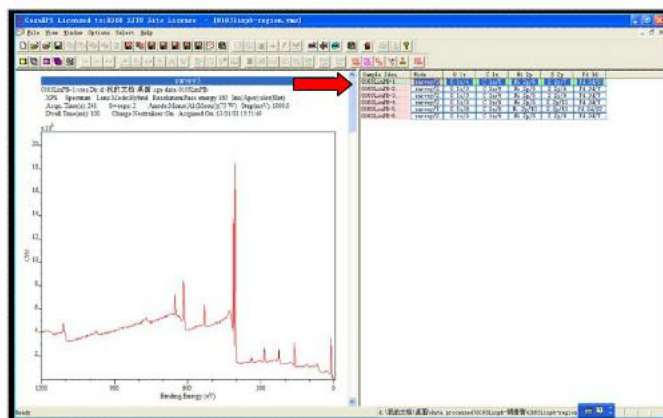
3.9 生成报告

- 安装Adobe Acrobat 7.0 Professional 软件，可以将数据输出成pdf格式；
- 元素组成报告的生成：在给所有的元素都做完Region后，全选元素----Options----Quantify----Report Spec----Regions----File----save as 存储成txt格式；
- 也可输出成pdf格式，在File中选择Print，打印机的名称选择Adobe PDF





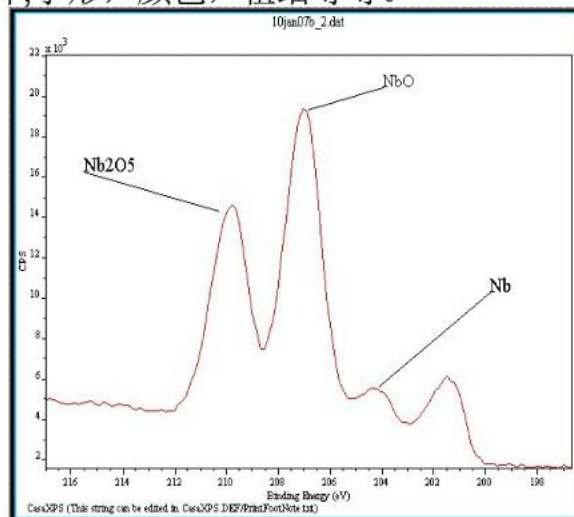
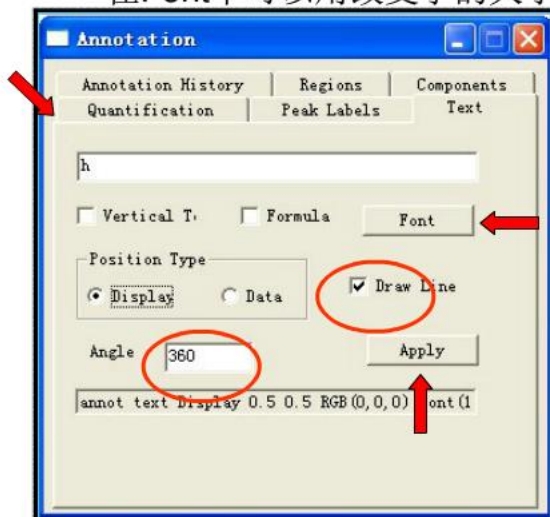
- 原始数据的生成：点亮要输出的相应的行（包括全谱和各个分谱）----
Ctrl+P----打印机的名称选择Adobe PDF ----确定
- 点亮要输出的相应的行（包括全谱和各个分谱）----左边红色的按钮---命名





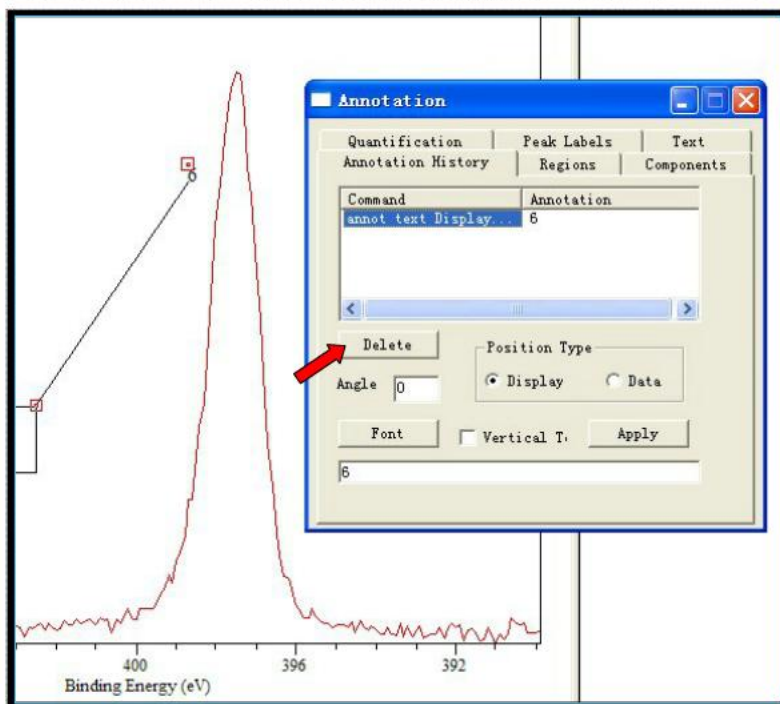
3.10 插入文本

- Annotation----Text---Apply;
- 如果需要的话，可以选择Draw Line来添加线条；
- 还可以通过改变Angle来改变字的方向；
- 在Font中可以用改变字的大小,字体,字形，颜色，粗细等等。





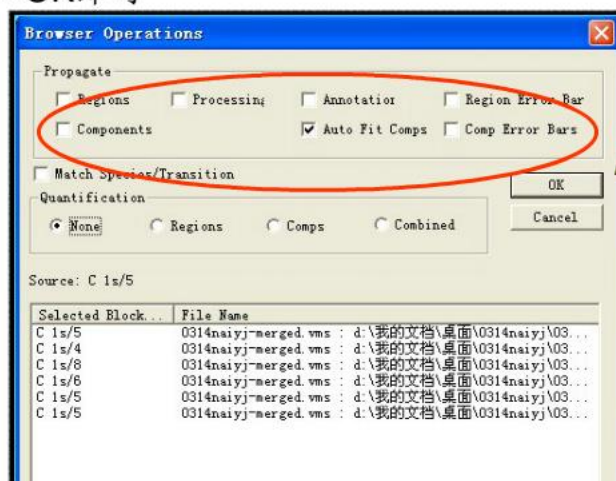
- Options----Annotation----Annotation History, 点住红色方框可以对线条的位置进行改变;
- 还可以对已经建立的线条和文本进行删除: 先选中----Delete;





3.11 传递处理 (Propagating Analyses)

- 可以用到这个方法的地方包括以下几处：
Regions; Components; Processing and more; Careful propagating
- 对某一个元素做完相应的处理操作后----选中整个一列-----鼠标点击右键-----选择相应的操作----OK即可





4.数据的组成

数据包中包括三种格式的数据文件：**vms**、**pdf**及**txt**三种格式。这三种格式的文件，名字相同的为同一个样品的数据或结果。其中，**vms**文件是原始数据或处理过的数据，需要用**Casa XPS**软件打开；**pdf**文件为校准后的图谱；**txt**文件则为校准后图谱的**ASCII**格式的数据文件。

在**vms**文件中文件名的末端带有“**merged**”字样的文件是经过能量校准过的（以**C 1s=284.8eV**为标准。而其余的文件为原始数据。

文件名中含有“**Qreport**”字样的文件是样品表面元素组成报告。**%At conc**数据栏给出的是元素的摩尔百分比；而 **%Mass conc**数据栏给出元素的质量百分比。



文件(F) 编辑(E) 查看(V) 收藏(A) 工具(T) 帮助(H)

后退 搜索 文件夹

地址(D) E:\XPS 数据\0227LiY 转到

名称	大小	类型	修改日期
0227LiY-A-spectra	51 KB	Adobe Acrobat 7.0 ...	2013-2-28 16:31
0227LiY-B-spectra	50 KB	Adobe Acrobat 7.0 ...	2013-2-28 16:32
0227LiY-C-spectra	51 KB	Adobe Acrobat 7.0 ...	2013-2-28 16:32
0227LiY-Qreport	28 KB	Adobe Acrobat 7.0 ...	2013-2-28 16:36
0227LiY-A	40 KB	CasaXP Document	2013-2-27 14:44
0227LiY-B	47 KB	CasaXP Document	2013-2-27 14:44
0227LiY-C	40 KB	CasaXP Document	2013-2-27 14:43
0227LiY-merged	123 KB	CasaXP Document	2013-2-28 16:36
0227LiY-A-spectra	90 KB	文本文档	2013-2-28 16:32
0227LiY-B-spectra	90 KB	文本文档	2013-2-28 16:32
0227LiY-C-spectra	90 KB	文本文档	2013-2-28 16:33
0227LiY-Qreport	4 KB	文本文档	2013-2-28 16:36

PDF

VMS

TXT

相同样品

文件和文件夹任务

- 创建一个新文件夹
- 将这个文件夹发布到 Web
- 共享此文件夹

其它位置

- XPS 数据
- 我的文档
- 共享文档
- 我的电脑
- 网上邻居

详细信息

0227LiY

文件夹

修改日期: 2013年3月1日 星期五, 14:15



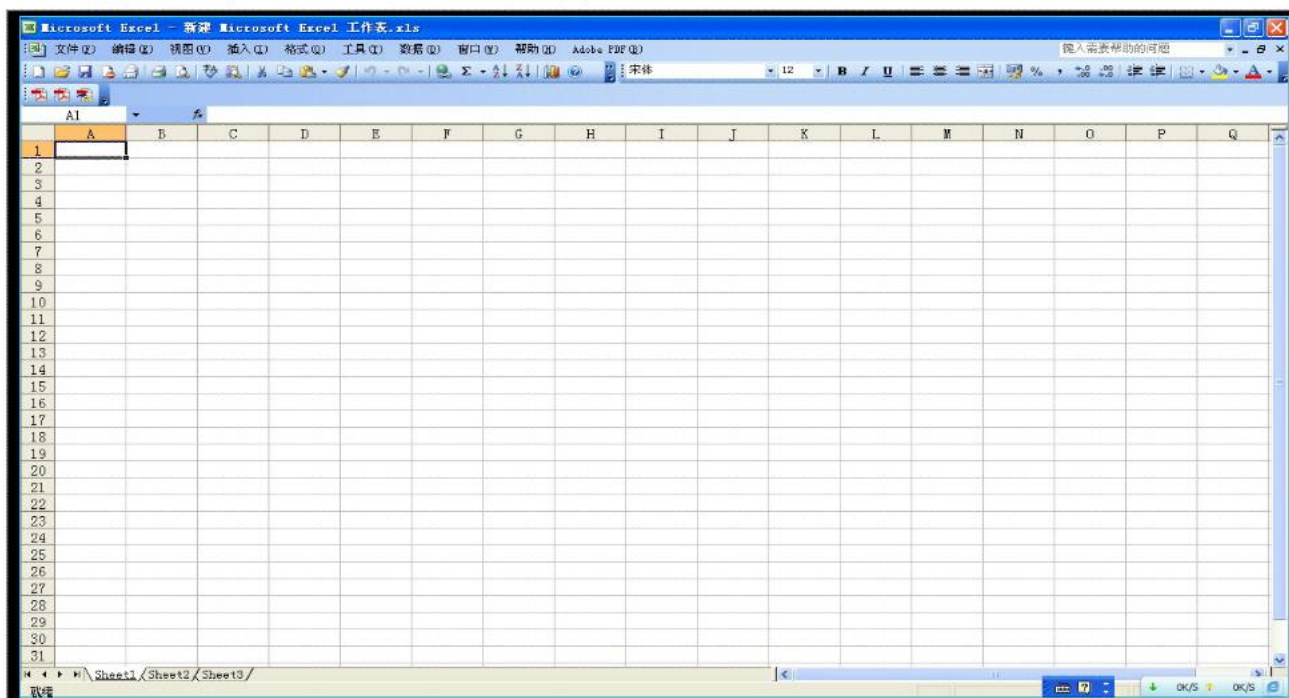
txt文件的打开（使用excel软件）

打开excel软件----选项文件----选项打开（文件类型选择文本文件） ----选择相应的txt文件----- 选择下一步 直到完成即可。



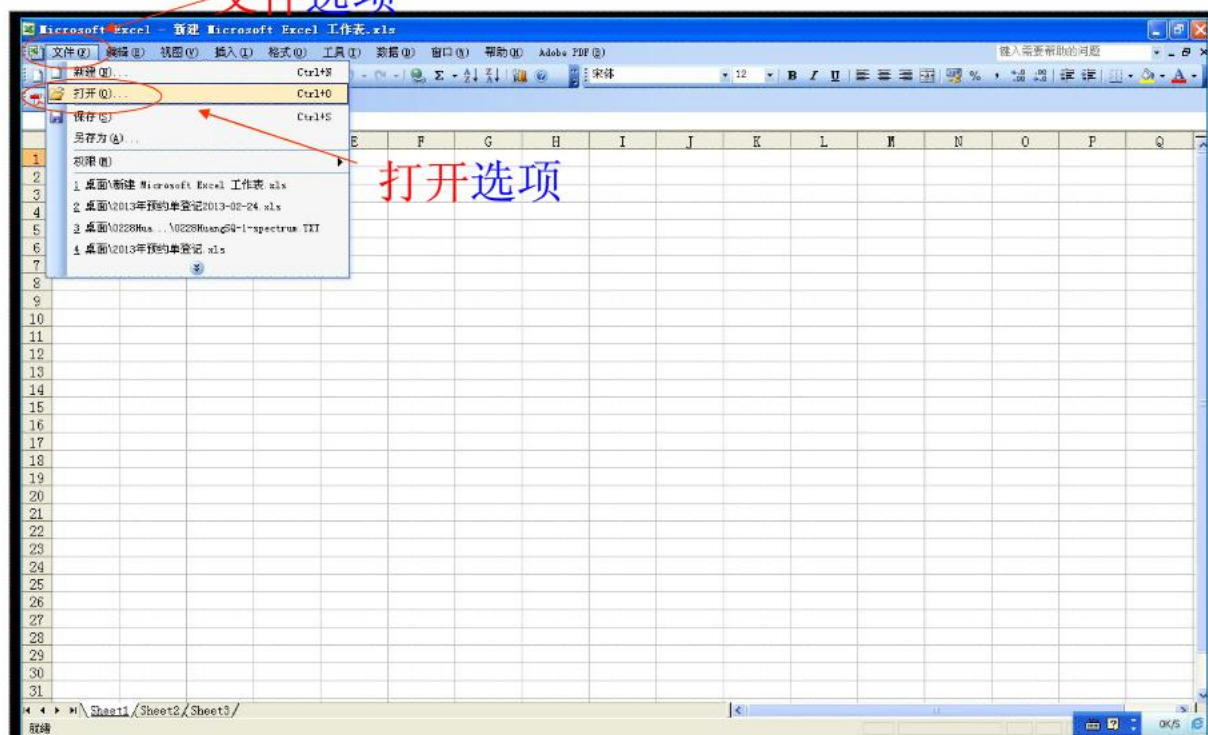
示例

1.新建一个空白的excel文件



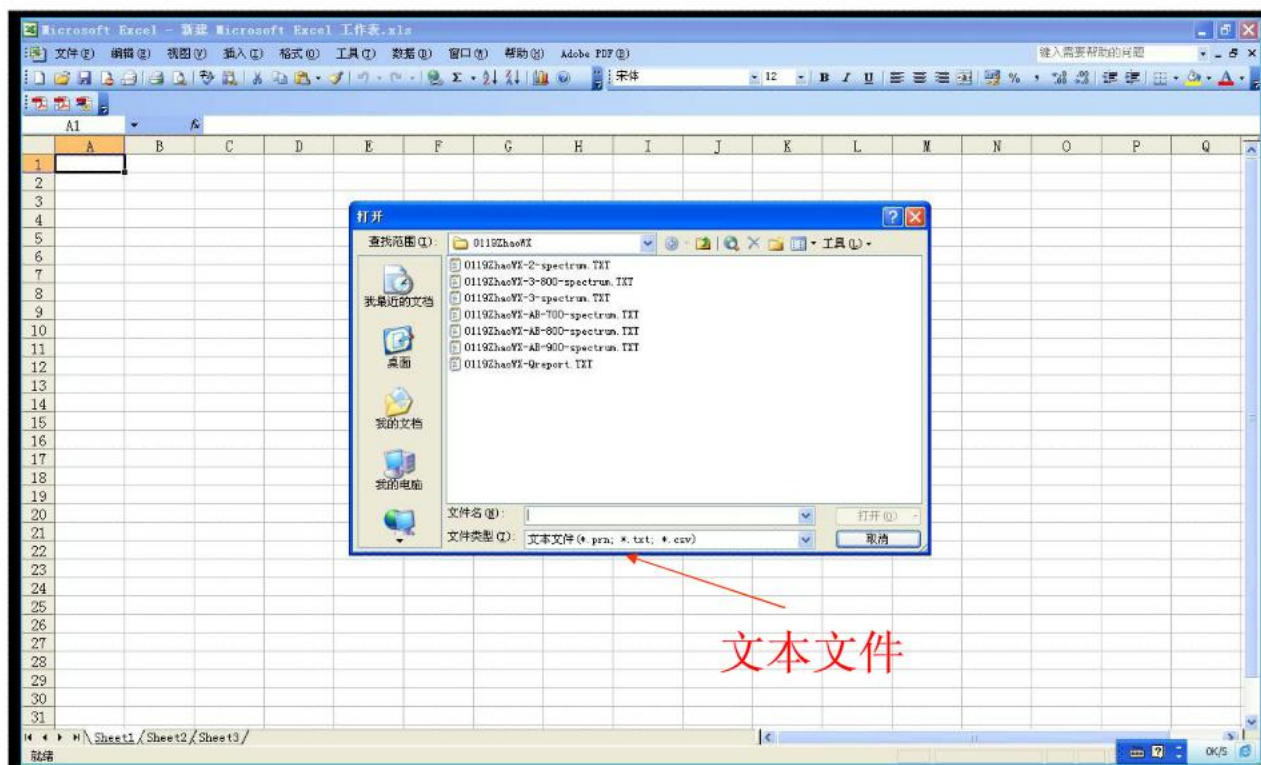


2. 选项文件----选项打开

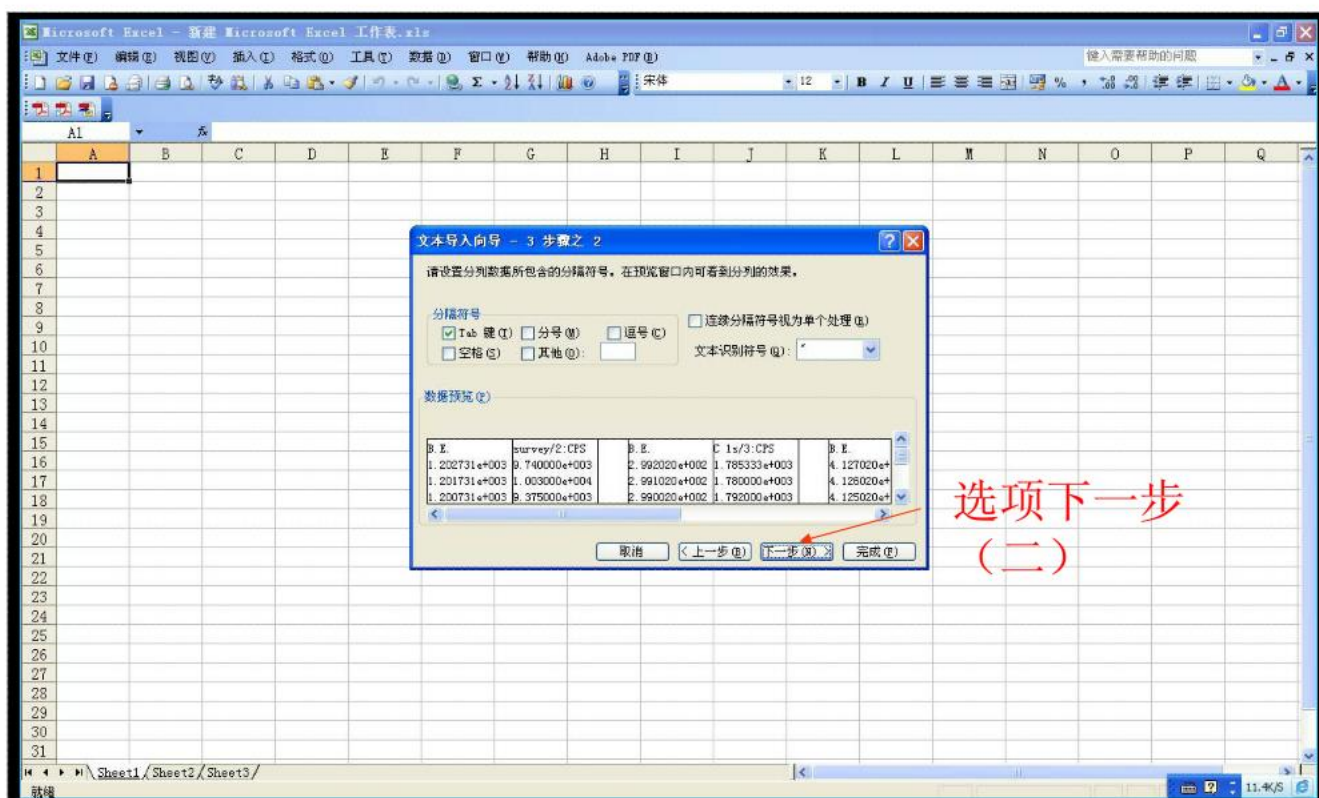


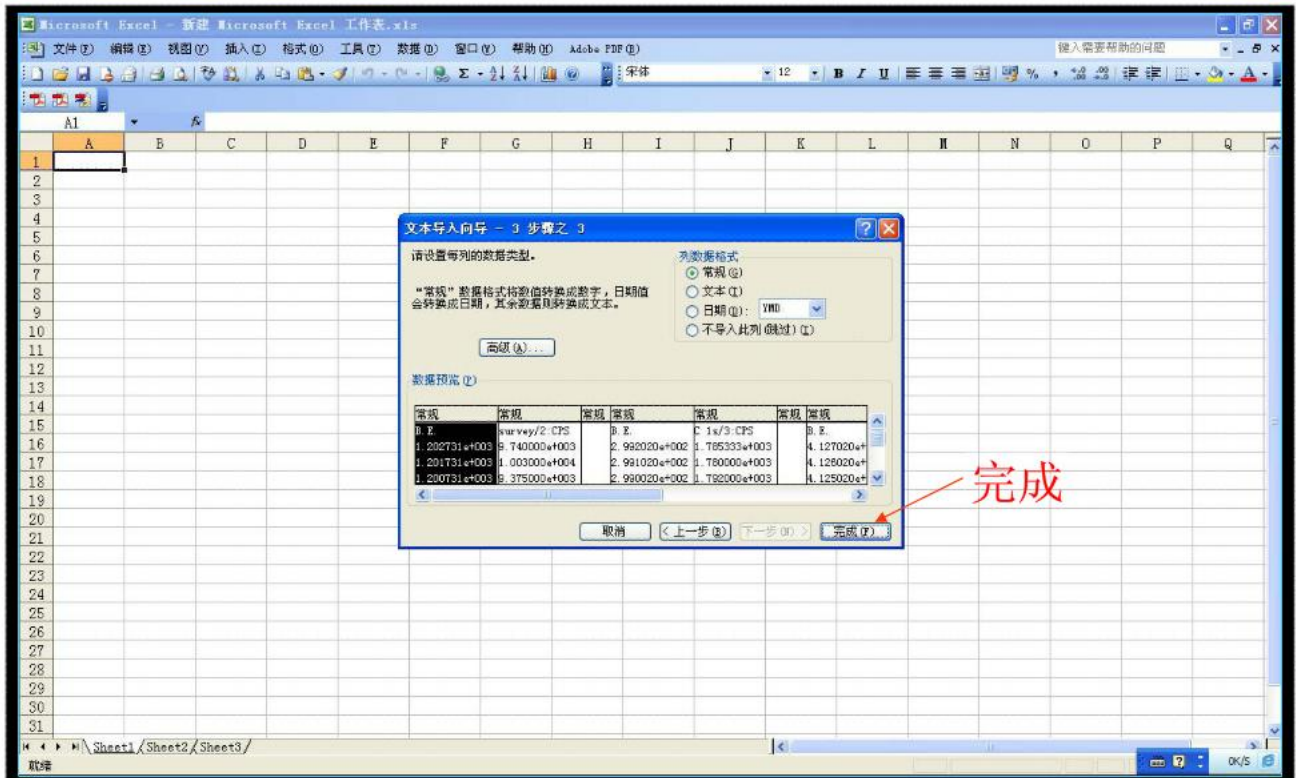


3.选择相应的txt文件（文件类型选择文本文件）











最后完成的数据

Microsoft Excel - 0228HuangSQ-1-spectrum.TXT

文件(F) 编辑(E) 视图(V) 插入(I) 格式(O) 工具(T) 数据(D) 窗口(W) 帮助(H) Adobe PDF(P)

全谱

元素名

	A1	B1	C1	D1	E1	F1	G1	H1	I1	J1	K1	L1	M1	N1	O1	P1	Q1
		B.E.	Survey/2:CPS	B.E.	C 1s/5:CPS		B.E.	Er 4d/6:CPS	B.E.	Tm 4d/7:CPS	B.E.	Yb 4d/8:CPS	B.E.	Co 4d/9:CPS			
1		1.20E+03	2.45E+04	2.95E+02	1.35E+03		2.19E+02	9.93E+02	2.19E+02	9.25E+02	2.29E+02	9.82E+02	3.59E+02	1.35E+03			
2		1.20E+03	2.52E+04	2.95E+02	1.35E+03		2.19E+02	8.85E+02	2.19E+02	9.19E+02	2.29E+02	9.65E+02	3.59E+02	1.38E+03			
3		1.20E+03	2.57E+04	2.95E+02	1.38E+03		2.19E+02	9.32E+02	2.19E+02	9.53E+02	2.29E+02	9.69E+02	3.59E+02	1.39E+03			
4		1.20E+03	2.50E+04	2.95E+02	1.36E+03		2.19E+02	9.38E+02	2.19E+02	9.51E+02	2.29E+02	9.42E+02	3.59E+02	1.37E+03			
5		1.20E+03	2.49E+04	2.95E+02	1.35E+03		2.19E+02	9.43E+02	2.19E+02	9.08E+02	2.29E+02	9.43E+02	3.59E+02	1.35E+03			
6		1.19E+03	2.58E+04	2.95E+02	1.30E+03		2.18E+02	9.20E+02	2.18E+02	9.23E+02	2.28E+02	9.43E+02	3.58E+02	1.37E+03			
7		1.19E+03	2.58E+04	2.95E+02	1.33E+03		2.18E+02	9.48E+02	2.18E+02	9.23E+02	2.28E+02	9.14E+02	3.58E+02	1.43E+03			
8		1.19E+03	2.55E+04	2.95E+02	1.34E+03		2.18E+02	9.74E+02	2.18E+02	9.38E+02	2.28E+02	9.79E+02	3.58E+02	1.39E+03			
9		1.19E+03	2.58E+04	2.95E+02	1.36E+03		2.18E+02	9.63E+02	2.18E+02	9.51E+02	2.28E+02	9.26E+02	3.58E+02	1.46E+03			
10		1.19E+03	2.58E+04	2.95E+02	1.40E+03		2.18E+02	9.64E+02	2.18E+02	9.27E+02	2.28E+02	9.90E+02	3.58E+02	1.43E+03			
11		1.19E+03	2.58E+04	2.94E+02	1.39E+03		2.18E+02	9.26E+02	2.18E+02	9.29E+02	2.28E+02	9.69E+02	3.58E+02	1.42E+03			
12		1.19E+03	2.58E+04	2.94E+02	1.33E+03		2.18E+02	8.86E+02	2.18E+02	9.23E+02	2.28E+02	9.41E+02	3.58E+02	1.40E+03			
13		1.19E+03	2.58E+04	2.94E+02	1.34E+03		2.18E+02	9.42E+02	2.18E+02	9.48E+02	2.28E+02	9.62E+02	3.58E+02	1.41E+03			
14		1.19E+03	2.57E+04	2.94E+02	1.35E+03		2.18E+02	9.26E+02	2.18E+02	9.32E+02	2.28E+02	9.26E+02	3.58E+02	1.37E+03			
15		1.19E+03	2.60E+04	2.94E+02	1.29E+03		2.18E+02	9.63E+02	2.18E+02	9.30E+02	2.28E+02	9.35E+02	3.58E+02	1.40E+03			
16		1.18E+03	2.60E+04	2.94E+02	1.37E+03		2.17E+02	9.22E+02	2.17E+02	9.29E+02	2.27E+02	9.23E+02	3.57E+02	1.40E+03			
17		1.18E+03	2.57E+04	2.94E+02	1.33E+03		2.17E+02	9.50E+02	2.17E+02	9.30E+02	2.27E+02	9.32E+02	3.57E+02	1.40E+03			
18		1.18E+03	2.58E+04	2.94E+02	1.32E+03		2.17E+02	9.27E+02	2.17E+02	9.18E+02	2.27E+02	9.46E+02	3.57E+02	1.40E+03			
19		1.18E+03	2.61E+04	2.94E+02	1.33E+03		2.17E+02	9.07E+02	2.17E+02	9.55E+02	2.27E+02	9.52E+02	3.57E+02	1.40E+03			
20		1.18E+03	2.58E+04	2.94E+02	1.39E+03		2.17E+02	8.99E+02	2.17E+02	9.57E+02	2.27E+02	9.03E+02	3.57E+02	1.39E+03			
21		1.18E+03	2.61E+04	2.93E+02	1.39E+03		2.17E+02	8.98E+02	2.17E+02	9.29E+02	2.27E+02	9.26E+02	3.57E+02	1.38E+03			
22		1.18E+03	2.60E+04	2.93E+02	1.36E+03		2.17E+02	9.48E+02	2.17E+02	9.37E+02	2.27E+02	9.59E+02	3.57E+02	1.42E+03			
23		1.18E+03	2.62E+04	2.93E+02	1.27E+03		2.17E+02	9.35E+02	2.17E+02	9.41E+02	2.27E+02	9.49E+02	3.57E+02	1.40E+03			
24		1.18E+03	2.60E+04	2.93E+02	1.36E+03		2.17E+02	9.31E+02	2.17E+02	9.26E+02	2.27E+02	9.32E+02	3.57E+02	1.39E+03			
25		1.18E+03	2.64E+04	2.93E+02	1.42E+03		2.17E+02	9.18E+02	2.17E+02	9.37E+02	2.27E+02	9.18E+02	3.57E+02	1.37E+03			
26		1.17E+03	2.65E+04	2.93E+02	1.37E+03		2.16E+02	9.40E+02	2.16E+02	9.32E+02	2.26E+02	9.23E+02	3.56E+02	1.40E+03			
27		1.17E+03	2.57E+04	2.93E+02	1.32E+03		2.16E+02	9.37E+02	2.16E+02	9.41E+02	2.26E+02	9.38E+02	3.56E+02	1.37E+03			
28		1.17E+03	2.63E+04	2.93E+02	1.35E+03		2.16E+02	9.61E+02	2.16E+02	9.14E+02	2.26E+02	9.55E+02	3.56E+02	1.33E+03			
29		1.17E+03	2.65E+04	2.93E+02	1.29E+03		2.16E+02	9.19E+02	2.16E+02	9.25E+02	2.26E+02	9.86E+02	3.56E+02	1.36E+03			
30		1.17E+03	2.70E+04	2.93E+02	1.31E+03		2.16E+02	9.17E+02	2.16E+02	9.33E+02	2.26E+02	9.04E+02	3.56E+02	1.41E+03			
31																	

0228HuangSQ-1-spectrum/



谢 谢！

胡倩倩 xiaoqingxiake@126.com



**Instrumental Analysis
Center of SJTU**