

連載 (解説)

# Common Data Processing System Version 10 の使用法 — (2) データ処理 (その1) —

吉原 一紘

オミクロンナノテクノロジージャパン(株)

144-0052 東京都大田区蒲田 5-30-15

k.yoshihara@omicron.jp


(2012年9月14日受理)


## 5 データ処理

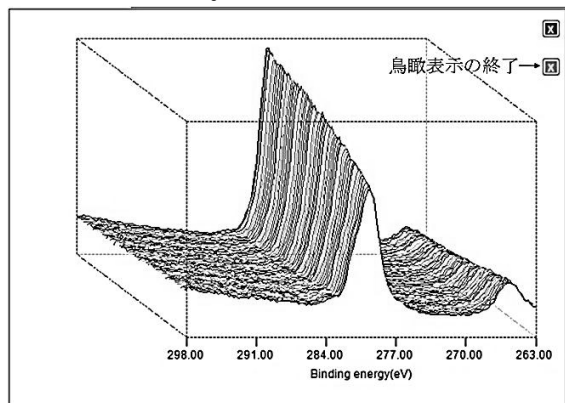
COMPRO10 ではスペクトルデータを読み込むと画面の左側にツールボタンが現れる。ツールボタンをクリックすると画面に表示されたスペクトルデータのデータ処理が行える。

ツールボタンには [information], [display style], [message], [background], [analysis], [thin film], [tool] の7種類がある。一番目の [information] に関しては、既に「4. 5」節で紹介しているので、[display style] から説明する。

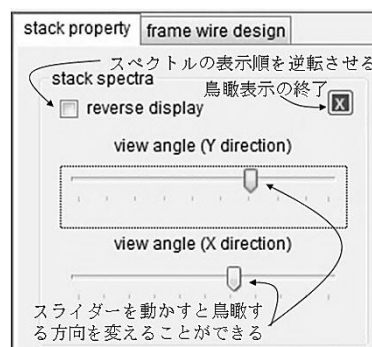
### 5. 1 [display style]

[display style] には二種類のボタンが組み込まれている。  は複数のスペクトルデータの強度を揃えて表示させるボタンで、表示されているスペクトルデータの強度の最大値を [1]、最小値を [0] として表示する。

 は複数のスペクトルデータを高さや横軸をずらして表示させるボタンで、スペクトルデータのセットを鳥瞰図として見ることができる。鳥瞰する方向は、スペクトル表示画面の右側に現れる制御パネルに組み込まれたコントロールで決定できる。



制御パネルの [view angle (Y direction)] のスライダーを右に動かすと下方から見た図が得られる。[view angle (X direction)] のスライダーを右に動かすと右方向から見た図が得られる。




[reverse display] チェックボックスにチェックを入れると、スペクトルの表示順序が逆になる。[frame wire design] タブページをクリックすると、図面に表示されている frame を消去したり、色や太さを変更したりすることができるパネルが現れる。

### 5. 2 [message]

[message] には4種類のボタンが含まれる。

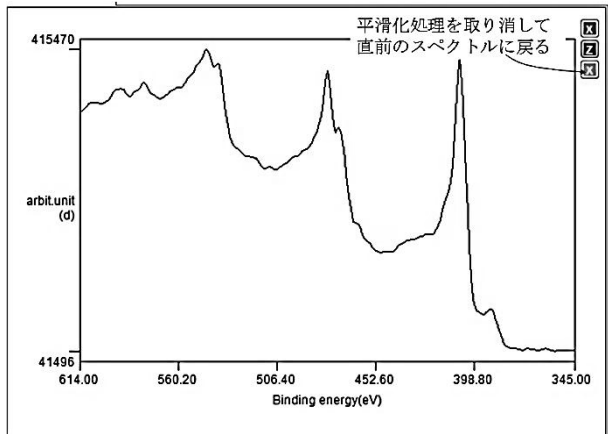
#### (1) 平滑化

表示されているスペクトルデータに対して Savitzky-Golay 法による平滑化ができる。

 ボタンをクリックすると制御パネルに平滑点数を記入するパネルが現れる。平滑化したい点数をボタンの中から選択して、チェックすると、その点数に対応した平滑化を行う。なお、平滑化点数を11点以上選択したい場合には [other] ボタンを選択して点数を選び、[C] ボタンを押す。また、平滑化を繰り返したい場合には、[iteration] の数値を設定して、[C] ボタンを押す。



平滑化を終了する場合には、[Savitzky-Golay]グループボックスの赤い[X]ボタンをクリックする。平滑化を取り消して、処理前のスペクトルを表示させたい場合には、スペクトル表示画面の右側に出現している緑の[X]ボタンをクリックすると元のスペクトルが現れる。なお、平滑化を何回か繰り返した場合には、緑の[X]ボタンをクリックするごとに、処理直前のスペクトルが出現する。



(2) 微分

表示されているスペクトルデータに対して Savitzky-Golay 法による微分ができる。

DIFF ボタンをクリックすると制御パネルに微分点数を記入するパネルが現れる。微分したい点数をボタンの中から選択して、チェックすると、その点数に対応した微分を行う。なお、微分点数を11点以上選択したい場合には [other] ボタンを選択して点数を選び、[C] ボタンを押す。ただし、微分の場合には [iteration] は選択できない。

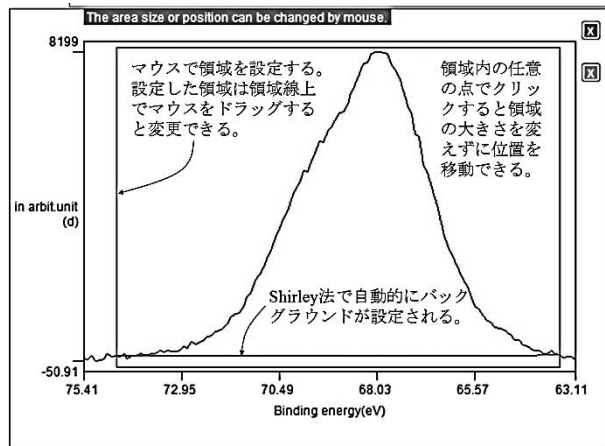


微分を終了する場合には、[Savitzky-Golay]グループボックスの赤い[X]ボタンをクリックする。微分を取り消して、処理前のスペクトルを表示させたい場合には、(平滑化処理と同様に) スペクトル表示画面の右側に出現している緑の[X]ボタンをクリックすると元のスペクトルが現れる。なお、微分を何回か繰り返した場合には、緑の[X]ボタンをクリックするごとに、処理直前のスペクトルが出現する。

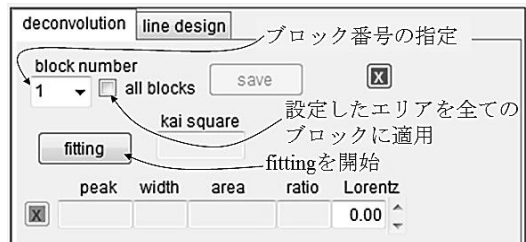
(3) ピーク分離 (ピークフィッティング)

表示されたスペクトルデータを Voigt 関数を用いてピーク分離を行う。

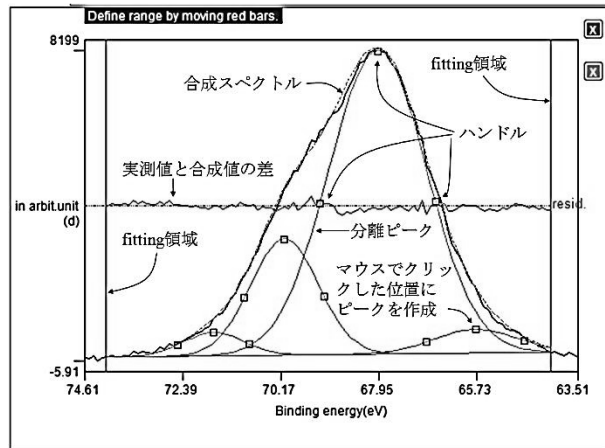
ボタンをクリックするとスペクトルのどの部分をピーク分離するかを設定することが要求される。マウスでエネルギー範囲を設定する。



制御パネルの [fitting] ボタンをクリックする。制御パネルにはブロック番号を指定するコンボボックスがある。スペクトルデータに複数のブロックが含まれる場合には、ピーク分離を実施したいブロック番号を指定して表示させてから範囲を設定する。なお、全てのブロックを同一の範囲でピーク分離を実施したいときには [all blocks] のチェックボックスにチェックを入れる。

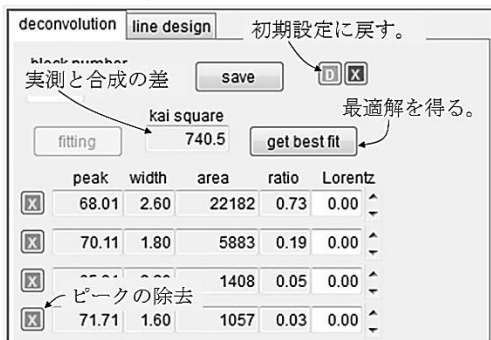


自動的に fitting が開始され、結果がグラフと制御パネルに表示される。



分離ピークには3個のハンドルが設定され、ハンドル位置をマウスで移動すると、それに対応して分離ピークの形状が変化する。分離ピークの総和 (合成スペクトル) が表示され、実測値と合成値の差がグラフの中央部に表示される。エネルギー範囲は垂直の線で表されており、マウスでドラ

ツグすると, fitting 領域を変化させることができ, それに対応して, ピーク分離も自動的に変化する。



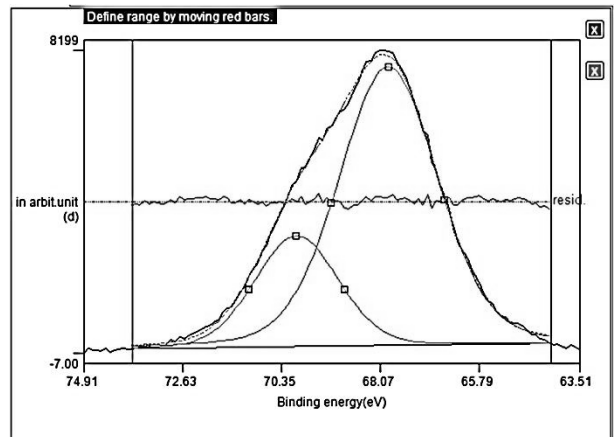
制御パネルには分離されたピーク位置 (peak), ピーク半値幅 (width), ピーク面積 (area) が示される。計算開始時には, ピーク分離は Gauss 関数を使用して行われるので, [Lorentz]パラメーター (Voigt 関数における Lorentz 関数の割合) は <0.00>に設定されているが, 手動で設定値を変化させると, 設定値を初期値として Voigt 関数を用いて再計算する。

実験値と合成値の差は[kai square]テキストボックスに表示される。Gauss-Newton 法における繰り返し計算回数が設定回数 (COMPRO が上限値を既定) 以内で収束しない場合には, [get best fit]ボタンが現れる。計算が収束した場合にはボタンは現れず[got best fit !]ラベルが現れる。

[get best fit]ボタンが現れた場合には, (1) 不適切であると思われるピークを青い[X]ボタンをクリックして除去するか, (2) ピーク形状をハンドルで操作して変更するか, (3) 領域内の任意の場所をクリックして, 新たにピークを作成して, その後ハンドルを操作してピーク形状を操作するか, (4) Lorentz パラメーターを変えるかすると再計算される。fitting がうまくいけば[got best fit !]ラベルが現れる。[got best fit !]ラベルが現れない場合でも, [get best fit]ボタンをクリックすると再計算されて, [got best fit !]ラベルが現れることがある。[got best fit !]ラベルが現れるまで, 上記の操作を繰り返す。[save]ボタンをクリックすると fitting 結果が<csv>形式で保存される。終了する場合には, 赤い[X]ボタンをクリックする。



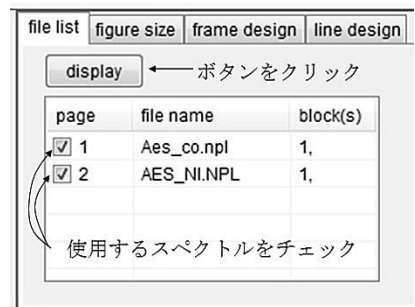
二つのピークを除去し, Voigt 関数で再計算を行って, 最適解が得られた画面を示す。



[line design]タブページをクリックすると, グラフの線のデザインやバックグラウンドの表示の有無などを変えることができる。

#### (4) スペクトル同士の演算

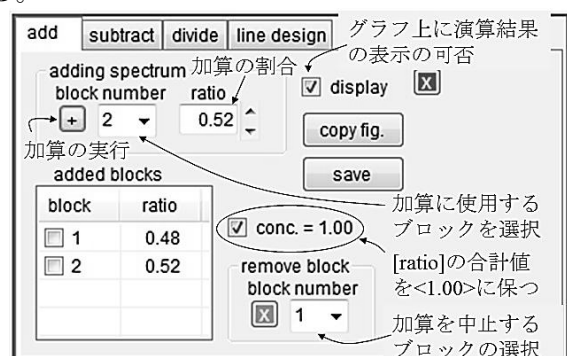
ボタンをクリックすると表示されたスペクトル同士の加算, 減算, 除算ができる。複数のブロックが含まれるスペクトルの場合は, 演算に使用するブロックは制御パネルで指定する。スペクトルが一つのブロックしか含まない場合には, 別なスペクトルを画面に同時表示させる必要がある。その場合には, ファイル選択画面で演算に使用するスペクトルにチェックを入れ, [display]ボタンをクリックする。



制御パネルには加算, 減算, 除算の選択ページがある。

#### (4-1) 加算

スペクトル同士を一定の割合を掛けて, 加算する。

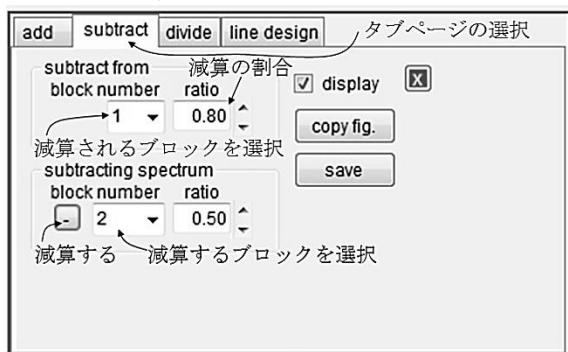


制御パネルで[add]タブページを選択する。加算に使用するブロックを選択し, [+]ボタンをクリックすると[added blocks]テーブルにブロック

番号と加算の割合が記入される。加算の割合は [ratio] テキストボックスの値で設定できる。[conc. = 1.00] チェックボックスにチェックを入れると、スペクトルの加算割合の合計値を <1.00> に保つことができる。加算に用いたブロックを取り消す場合には [remove block] グループボックス内で block 番号を指定して、緑の [X] ボタンをクリックすると加算を取り消すことができる。演算結果は制御パネルの下部に表示される。[copy fig.] ボタンをクリックすると表示されたグラフを <jpg> 形式で保存ができる。演算結果はスペクトル表示画面にも表示される。スペクトル表示画面の表示を取りやめるには [display] チェックボックスのチェックを外す。[save] ボタンをクリックすると、演算結果を ISO 形式のファイルに変換して保存ができる。演算を中止する場合には赤い [X] ボタンをクリックする。

#### (4-2) 減算

あるスペクトルから別なスペクトルを一定の割合を掛けて、減算する。



制御パネルで [subtract] タブページを選択する。[subtract from] グループボックス内で、減算されるスペクトルを選択し、減算の割合を [ratio] テキストボックスで指定する。[subtracting spectrum] グループボックス内で、減算するスペクトルを選択し、減算の割合を [ratio] テキストボックスで指定し、[-] ボタンをクリックすると

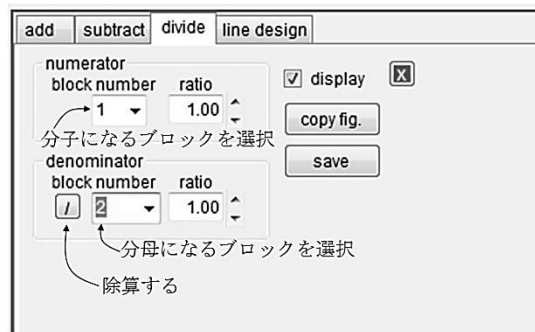
$[\text{ratio}] \times [\text{subtract from}] - [\text{ratio}] \times [\text{subtracting}]$  の式に基づいて演算され、結果が表示される。演算結果は制御パネルの下部と ([display] チェックボックスにチェックが入っていれば) スペクトル表示画面に表示される。

#### (4-3) 除算

あるスペクトルと別なスペクトルの比を求める。

制御パネルで [divide] タブページを選択する。[numerator] グループボックス内で分子となるスペクトルを選択する。除算に占める割合を [ratio] テキストボックスで指定する。[denominator] グル

ープボックス内で分母となるスペクトルを選択する。除算に占める割合を [ratio] テキストボックスで指定して [/] ボタンをクリックする。演算結果は制御パネルの下部と ([display] チェックボックスにチェックが入っていれば) スペクトル表示画面に表示される。

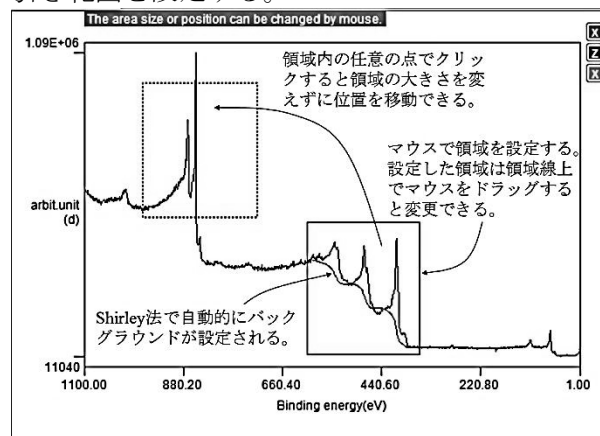


## 5.2 [background]

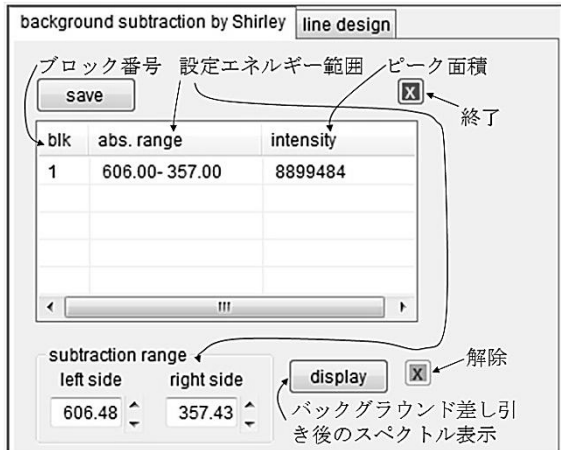
[background] には 2 種類のボタンが含まれる。

### (1) Shirley 法

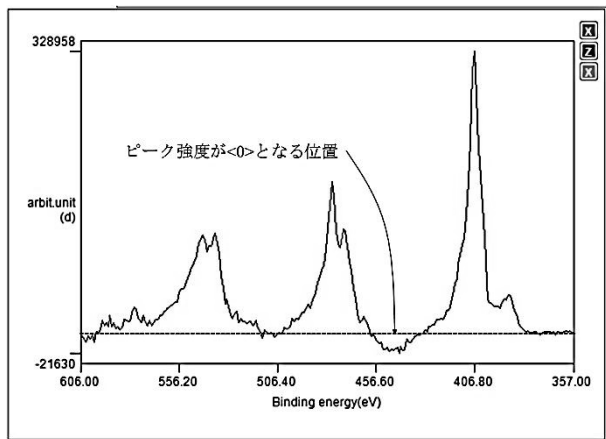
ボタンをクリックすると、スペクトルのどのエネルギー範囲のバックグラウンドを差し引くかを設定することが要求される。マウスで差し引き範囲を設定する。



Shirley 法で自動的にバックグラウンドが設定される。ただし、低運動エネルギー側のピーク強度が高運動エネルギー側のピーク強度に比べて小さいときには、Shirley 法ではなく、直線でバックグラウンドが設定される。



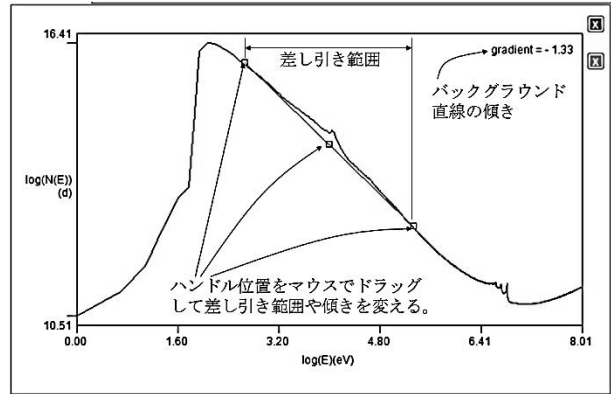
制御パネルの表に、ブロック番号、設定エネルギー範囲、ピーク面積の順に結果が表示される。エネルギー範囲設定時に複数のスペクトルが表示されているときには、表示スペクトルが設定エネルギー範囲を含んでいれば、同時にバックグラウンドの差し引きが行われ、結果が表示される。設定エネルギー範囲は制御パネルの[subtraction range]グループボックスにも表示され、[left side]と[right side]のテキストボックスの値を手動で変更することができる。[subtraction range]グループボックス内のエネルギー範囲表示値はグラフ上の位置を示しているため、表の値とは異なっている。制御パネル内の[display]ボタンをクリックすると、バックグラウンドを差し引いた後のスペクトル形状を表示する。制御パネル内の緑の[X]ボタンをクリックすると、元のスペクトル表示に戻る。[save]ボタンをクリックすると、バックグラウンド差し引き結果を<csv>形式で保存する。



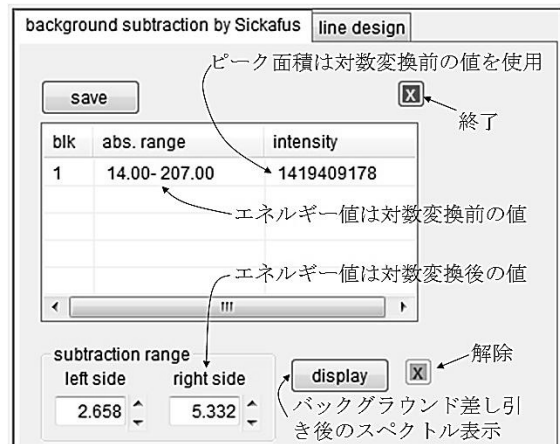
(2) Sickafus 法

Sickafus 法はオージェ電子分光法に適用できる。

ボタンをクリックすると、強度軸、エネルギー軸を対数スケールにして、グラフを再表示する。3個のハンドルが付いたバックグラウンドの直線が default で描かれるので、マウスでハンドルをドラッグして差し引き範囲や傾きを調整する。



Sickafus のバックグラウンドは  $n(E) = kE^{-m}$  と表すことができるので ( $n(E)$ は電子の数,  $E$ は電子の運動エネルギー,  $k$ は定数) 強度軸, エネルギー軸を対数にして直線を引くと、傾き  $m$  を求めることができる。



制御パネルの表に表示されるエネルギー範囲やピーク面積の値は対数変換前の値を用いているが、[subtraction range]グループボックス内の領域表示値は、グラフ上の位置を表すために対数変換後の値を用いて表示している。制御パネル内の[display]ボタンをクリックすると、バックグラウンドを差し引いた後のスペクトル形状を表示する。表示されたスペクトルの強度軸とエネルギー軸は対数変換前の値になる。制御パネル内の緑の[X]ボタンをクリックすると、元のスペクトル表示に戻る。

