

データベース開発計画 日程と当面の課題

関根 哲

日本電子株式会社
〒196 昭島市武蔵野3-1-2

我々は表面分析データベースの開発を始めてから早くもこの4月で2年目に入った。骨格、細部について仕様を固め、いろいろな作業を並行してどんどん進めて行かなければならない大切な時期である。今後の日程を概観し、当面の課題について言及する。

1. はじめに

我々は表面分析データベースの開発を始めて早くもこの4月で2年目に入った。骨格、細部について仕様を固め、いろいろな作業を並行してどんどん進めて行かなければならない大切な時期である。今回はデータベース計画についての特集を組み、担当者からの現状報告、進捗報告、会議報告、提案などを掲載した。

本稿では、今後のスケジュールを概観し、当面の課題をピックアップし、問題点の整理に役立たせたいと思う。

2. 日程

大まかな目標日程を図1に示した。1期で一通り原形を完成し、2期で見直し、量の充実、システムのバージョンアップ、独立へ向けての準備を行う。大体こんな推移を進めることができれば開発計画は成功と言える。

3. 当面の課題

1) データの質の確保

第1は横軸較正の問題である。XPSでは、金属、半導体などの試料ではあまり問題はないと考えられるが、チャージアップする試料についての較正法などは検討を要する。AESは問題である。もともと真空レベル基準で測定してきたので、XPSで観測されるフェルミ基準のピーク値とは異なる値となり直接比較できない。AESでは、1) 0から3000eV程度までとXPSに比べて高運動エネルギーまで扱うこと、および、2) アナライザー

のパスエネルギーが高い値を使用することが多いので高エネルギー領域で相対論効果が大きくなること、などにより相対論補正が必要となる。もし、この補正を行わなければ、同じピークを測定しても、高いパスエネルギーで測定したときと低いパスエネルギーで測定したときで、異なるピークエネルギー値となる。更にAESの微分スペクトルでは、微分条件とエネルギー分解能によってピークエネルギー値は違ってしまう。これらを踏まえた較正法を検討しなければならない。

第2は強度軸の較正である。Seahらの提案した基準スペクトルとの比をとる方法は、強度軸の較正のかなり有効な方法である。しかし問題が無いわけではない。ひとつはアナライザー内散乱電子によるバックグラウンドがある程度大きいとき、Seahらの方法ではこの影響を排除できない。また、比スペクトルをとった後、関数で近似してノイズを排除しなければならないが、これに適する関数形にはまだ検討の余地がある。

第3として、データの質の確保のため、他にどんな付帯情報が必要なのかも検討しなければならない。

2) スペクトル測定の手引き

試料の準備、前処理、表面汚染の除去、典型的な測定条件、試料チャージアップにたいする対応など、材料別にマニュアルの作成が望まれる。同じ試行錯誤を多くのひとが繰り返さないで、効率良くスペクトルを集めるためである。

3) サーバー内データ構造

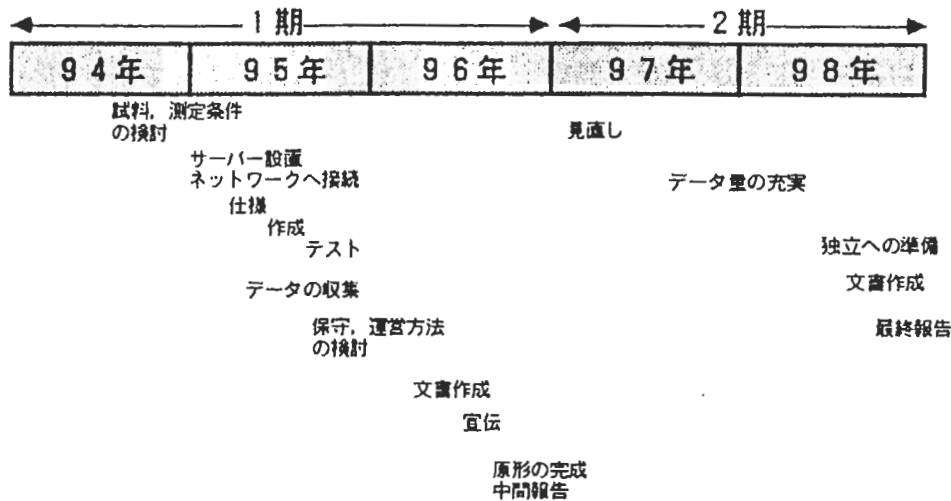


図 1. 開発計画の日程

これはデータベースの作りやすさ、使いやすさ、保守のしやすさをきめる重要な問題である。多面的な検討を行い、仕様を決定したい。

4) キーワード体系

目的のスペクトルを選択するための検索構造の検討と検索項目の洗いだしを行いたい。検索項目は変更、追加に対応できることが望まれる。

5) オペレーションイメージ

実際にこのデータベースをどんな画面を用いて操作するかを検討し、オペレーションフローの仕様を決めたい。これはユーザーに直接関係するので本データベースシステムの評価を左右する重要な項目である。またマルチベンダー環境でどれだけ対応できるか、即ちシステムの柔軟性にも関係する。

6) COMPROの位置づけ

共通データ処理環境システム (COMPRO) から本データベースのスペクトルにアクセスし、これらを処理可能にするよう、データベース構造に対する考慮が必要である。

7) 保守の手順とツール

スペクトルの追加、削除、編集、データのバックアップ、設計変更に対する柔軟性など、保守に関する検討も設計時点でなされねばならない。また保守に必要なツールも同時に開発しておきたい。

8) 数の確保と材料の選択

このデータベースは実用材料のスペクトルを多数収納しサービスできることを目標にしているので、産業界で使われている多くの材料のスペクトルを集めたい。そして最も役に立ちそうな材料から始めたい。

9) ランク

データベースに収納されるスペクトルは、縦軸、横軸ともに正確に校正されていることが望ましいが、その分測定は手間がかかる。場合によってはそれほど正確に校正されていなくとも役に立つことがある。この様な観点から校正の程度に応じてランクを設けることが必要となるが、具体的にランク分けの基準を作成しなければならない。校正されているか否か？校正されているとしたらどの程度の精度に収まっているか？などである。

4. さいごに

上に述べたように、大変多くの項目について議論して決めていかなければならない。表面分析研究会の会員は日本全国に分散しており頻繁に合うことは出来ない。遠方にいるもの同志が議論して作業していくためには、コンピュータコミュニケーションの利用が必須であろう。環境を整え、遠方の仲間との議論と作業を進め、この壮大な計画を成功させましょう。

最後に、我々はどんなデータベースを開発したいのか、また、しているのかをたえず振り返ってやる必要があるのではないだろうか？ 将来スペクトルデータベースが稼働したときどのような使い方をするだろうか？ 物理パラメータはどんなものが必要で、どんな使い方をしているだろうか？ このようなことを十分シミュレーションして、将来必要なものをできるだけ多く発見しておいて、仕様に反映させておくことが大切である。このためには質量分析スペクトルや核磁気共鳴スペクトルなど先行している分野を覗いてみることも参考になるであろう。

査読者との議論

査読者：

田沼繁夫（ジャパニウム分析センター）

一村信吾（電子技術総合研究所）

田沼：スペクトルデータのみ集めるのか？ それともある一定の操作でピークを抽出し、そのデータベースもつくるのでしょうか？これがあればNISTのデータベースの様な使い方もできるのですが？また、逆引きは簡単になりますね？

筆者：まずスペクトルデータを集めることが目標です。このためには標準化がしっかりなされていなければなりません。異なる基準で測定されたデータでは価値が低いからです。データベースの開発は標準化の実験の場です。そしてしっかり標準化されたスペクトルデータが集まれば、ピークを抽出し、NISTのデータベースの様なデータベースをつくることは容易です。それは次の段階の重要なテーマとなるでしょう。他にもいろいろなデータが生成できることでしよう。

田沼：データの質の確保と言うことで、縦軸／横軸の問題について述べておられますが、その他の項目もはっきり列挙するべきではありませんか？

筆者：指摘の通り他にもたくさんデータの質に関係する要因はあります。いくつかデータが

集まりはじめて今一番問題となっていることが縦軸／横軸の問題です。これを解決すれば、その先に横たわる問題も見えてくるでしょう。また「データベース用のスペクトルとしてふさわしい測定条件とはなにか？」を検討することも大変重要です。使ってもらうことが目的ですから、使う側の要求に合った測定条件で測定されていることも要求されます。「データの質の確保」はとても大きなテーマなので別途独立して扱う方が良いでしょう。

一村：キーワード体系については、4月のデータベース委員会である程度リストアップが済んだと思いますが、それをオープンにして議論する必要はありませんか？

筆者：ある程度リストアップできました。議論していきたいと思います。パラメータの中で、検索に使うパラメータと、検索には使わないが、検索後表示されるパラメータと、検索にも使われず表示もされないパラメータとに分類されます。どれが検索に必要なのか良く検討する必要があります。また、検索パラメータは多ければ良いと言うものでもありません。多いとデータ提出時にそれだけインプットしなければなりませんから負担が重くなります。