

転送データのNPLフォーマットへの変換
- サポート作業の現状報告 -

福島 整

科学技術庁 無機材質研究所
(1995年4月4日受理)

「省際ネットワーク」プロジェクトの一環として構築が進められている表面分析用データベースの構築には、スペクトルデータを転送用のNPLフォーマットに変換する事が大変重要である。この変換に対するサポート作業の現状を報告するとともに、その中で見出された様々な問題点について論ずる。

1. 序

平成6年度に始まった「省際ネットワーク」プロジェクトの一環としての表面分析のデータベース構築の計画は、表面分析研究会(SASJ)がVAMAS-SCA-JAPAN委員会時代からの活動の中で一貫して押し進めてきたデータバンク構築とその関連作業の成果を問うていると言っても過言ではないであろう。

データベース構築には、様々な面が存在する。その構造、あるいは構築、メンテナンスそして使用の為のソフトウェア群、ハードウェア、利用のためのネットワーク環境、そしてそれらを作成し改善し発展させていくためのヒューマンリソース等である。今までのVAMAS-SCA-JAPAN委員会での活動においては、これらの面全てにおいて試行的な意味合いが強かった。これは、それぞれの面に対して十分な議論を加えるというよりも、議論の出発点としてとりあえずのたたき台を提出しようとする事を目標としていた為であろうと考えられる。過去、国内では、類似した作業を大規模に行おうとする試みはなされていなかった。したがって、何もない処から実用的なものを作り出すための第一歩として、当然の方針であると言える。

この過程で様々な問題点が浮き上がり、VAMAS-SCA-JAPAN委員会およびSASJにおいて、少しずつではあるが解決の為の努力がなされていた。これに対して今回のデータベース構築の計画は、これらの問題点のある程度のレベルで

の解決に対して期限を与える事となり、また今までの様々な議論のレベルが外部からみてどの程度であるかをあきらかにする事にもなる。その意味で、まさに「卒業試験」と言うべき作業であろう。

データベース構築の為には、まずスペクトルを一カ所に集めねばならない(もちろん分散方式というものもあるが)。その為には、測定されたスペクトルを装置付属のプロセッサや記憶装置からデータベース構築のために要求される形式で取り出せなければならない。このデータ転送の作業は、VAMAS-SCA-JAPAN委員会の初期の頃から重要な問題として取り組まれてきた。しかし、インターフェースの利用等のパーソナルコンピュータ(PC)のハードウェアの初歩的な知識が要求される部分もあり、測定者側にはハードルが若干高く感じられた様に思われる。また、過去の活動において装置メーカー側のボランティアに頼る部分が大きく、実質的にユーザー側主導ではなかった事もハードルを高く感じさせた要因であろう。

これに対して、一部委員の積極的な活動により、この転送における問題点が整理され解決に向けて大きく前進している事は、JSA誌の報告¹⁾を見ても明らかである。この活動により、測定者側も装置メーカー側もより問題点を把握し易くなり、VAMAS-SCA-JAPAN委員会やSASJの活動としてもっとも重要な一つであるラウンドロビンの遂行をも容

易にしてきた。しかし今回のデータベース構築においては、参加を表明している会員のデータ転送を一定期間内にある程度のレベルまで確実に可能にせねばならず、その為の作業をメーカーと協力しながら行う必要性が出てきた。

この小文は、実際に行った作業の内容と、進める上で明らかになった問題点についてまとめたものである。

2. データ転送

転送の目的は、測定装置内部のスペクトルデータを、特定の転送形式に従ったテキストとして取り出す事である。実際にはいくつかの手順を経て実行されるわけであるが、その手順の組み合わせや手順自体が装置やPCの種類によって異なる事が問題を複雑にしている。

手順は大きく分けると、以下の3段階にまとめられる。

- 1) 装置内部での、転送用データファイルの準備
- 2) 準備された転送データファイルの外部PCへの取り出し
- 3) 取り出されたデータファイルの転送形式に従ったテキストファイルへの変換

このうち、1)または3)が不必要な場合もある。また、1)と3)を装置付属のコンピュータで同時に行え2)が不要な場合もある。多くのユーザーがもっとも困難を感じるのは、おそらく2)であろう。これに関しては、PCと装置付属のコンピュータをつなぐ事が必要な場合が多く(運の良いユーザーは、フロッピーディスクのやりとりで済む)、この部分には若干のハードウェアの知識が要求されるからである。困ったことに、最近のPCはアプリケーションソフトの利用が中心のユーザーを想定しているようで、PCに付属しているマニュアルにハードウェアのそれが無い場合も増えている。したがって、必要な知識は成書や経験者から得ることになるが、幸いなことに本誌にその基礎に関する解説の連載が始まっている。この記事を参照するなどしてユーザー自身がトライしてみる事で、ほとんどの場合ハードルをクリアすることが出来

るであろう。

とにかくトライしてみることが重要である。失敗しても、装置にもPCにもダメージが起きることはまず無いと言って良い。

さて、2)のハードルを越えて、外部PCの中に(ということは、そのPCの中のハードディスクやフロッピーディスクの上に)スペクトルデータをめでたくセーブ出来ても、3)の問題が残っている。そして、多くの場合セーブされたデータは使用された測定装置あるいはメーカー固有の構造を持っており、互いに異なっているのが普通である。また、それぞれに含まれているスペクトルに付随した情報(パラメータ)の種類も記述形式も多くの場合共通ではない。

この問題を解決する為に、M.P. Seahらは1988年に転送用データフォーマット(いわゆるVAMASフォーマット、あるいはNPLフォーマットとも呼ばれる)を提案した²⁾。どんな装置から転送されるデータも必ずこの形式に変換したテキストにしておくことで、異なる装置ユーザー間でのデータの共用化が出来る。また、個々の装置の仕様から生ずる制約から切り離して、測定データを様々な活用することが可能となる。現在、ISO/TC-201の活動の一環として提案されているISOフォーマットも、以上の考えに基づくものであり、NPLフォーマットの拡張型がドラフトとして提案されている。COMPROももちろんこのISOフォーマットを強く意識したものとなっており、ver. 3.1では原則としてNPLフォーマットのみ利用となっている。

データベース構築においても、提出されるデータがNPL(ISO)フォーマットである事を前提とした作業が進められている。したがって3)の作業、すなわちデータ変換が早急に進めねばならない要の作業として浮かび上がってきた。

COMPROの古いバージョンでは、各装置メーカーの協力により、いくつかの装置についてその装置独自のフォーマットが読み込める仕様となっていた。また、COMPRO ver. 3.1でも、それと同様のルーチンが同梱されており、ある程

度の対策はうたれている。しかし、それでは対応しきれていないフォーマットが存在する事などで、一部ユーザー側からNPLフォーマットへの変換のきめ細かな対応に関する要望があった。

3. データ変換に対する作業

3.1 問題の洗い出し

ユーザーに対するきめ細かな対応を行う為には、各ユーザーの各装置それぞれに対応したソフトを製作する（基本的に1装置に対してソフト1本）方針を取る必用がある。その為には、変換を含めた転送の成否の状況を把握しておくことが早急に必用となった。

これに先だって、1994年11月末の研究會においてデータベースへのスペクトルの提供に材料別分科會が協力して対応するとともに、希望するユーザーに対してデータ変換を個別に対応する事が決められた。これに基づき、材料別分科會幹事の方で12月中に以下の項目で緊急調査を行った。

- 1) データ転送がどの段階まで実施可能か
 - A. COMPROで読めるデータが転送されている。
 - B. 転送は出来ているがCOMPROで読めるかどうか未確認。
 - C. 転送してフロッピー上にセーブできてはいるが、COMPROで読める形に変換できていない。
 - D. 転送が出来ない。
- 2) 使用している装置のメーカー名、型式および購入時期

その結果を基に、回答を寄せた機関のうちの1)-Cに該当する処へ連絡し、データをセーブしたフロッピーを提供して頂いて作業を進めることとした。本稿執筆時点でフロッピーを提供して下さった機関は、(株)帝人、日立製作所、京セラ(株)、(株)アイテス、(株)ジャパンエネルギー分析センターの5機関である。この他、金属材料技術研究所および富士ゼロックス(株)の2機関から参考データを提供して頂いた。

装置面からみると、フロッピーを提供して頂いたのは、アルバック・ファイが3件 (PHI-610, PHI-670, PHI-5600ci)、SSIが1件 (M-Probe)、JEOLが1件 (JAMP-7100E) である。

また、アルバック・ファイの装置のうち、転送データがメーカー提供の変換ソフト「PHIC」(これは、バイナリ形式をテキスト形式に変換するだけで、NPLフォーマットへの対応はなされていない) 出力以外であるケースが2件あった(いずれもPHI-610)。これに対しては、同社の岩井秀夫氏のご好意によるVMS形式 (COMPROの古いバージョン用のデータ形式) への変換ソフト「MACS」の提供があった。このVMS形式ファイルはCOMPRO ver.3.1でも読み込みが可能であるため、対応するユーザーには「MACS」をご紹介させていただくことで対策とさせて頂いた。このソフトは、アルバック・ファイへ連絡すれば、無償で提供して頂ける。

JEOLの転送データについては、パラメータファイルとバイナリで書かれたスペクトル本体のファイルの二つで構成されている。これらに対して、それぞれのファイルの読み出しルーチンを、同社の関根哲氏より提供して頂いた。これにより、対策が大変楽になり、作業を迅速に進めることが出来た。

この他に、SCIENTAが2件 (ESCA-300)、VGが2件 (ESCALab MkII, 220i-XL)、アルバック・ファイが1件 (PHI-670)、JEOLが2件 (いずれもJAMP-7100E)、島津製作所が1件 (ESCA-850)、SSIが1件 (SSX-100) それぞれ1)-CあるいはDに対応するという回答があった。

このうち、SCIENTAはCOMPROの古いバージョンで読み込みが可能であったことからメーカーに連絡を取り、ユーザーに対する対策を依頼し承諾を得た。

島津製作所に関しては、鳥取大学工学部の徳高教授による対策協力の申し出がSASJにあり、そちらにお任せすることとなった。

VGに関しては、データ転送に関して連絡があったのは1機関のみであり、こちらに関しては現在引き続きフォロ

一中である。また、もう1機関は、COMPROの古いバージョンで読み込みが可能でフォーマットが転送されていることがわかり、今回はとりあえず対策外とした。さらに3月の研究会で、別の1機関の問い合わせがあった。

SSIに関しては、引き続き(株)伯東にてデータ変換サービスを行う旨の連絡が入った為、拡張子「.MRS」のファイル名で出力されるテキストデータに対する変換のみに対応することとした。

残りのアルバック・ファイ1件、JEO L2件に関しては、現在の処該当機関の当事者との接触がなく、対応がとれていない。

3.2 変換ソフト作製作業と問題点

ご送付頂いた各装置の転送データファイルとNPLフォーマットを比較検討することで、いくつかの問題点が明確になった。そのうちの主な点を以下にまとめる。

1) NPLフォーマットに必用なデータの変換時の書き込み

NPLフォーマット上のパラメータのうち多くの部分がどの装置の転送データファイル上にも無く、変換時にあらたに書き込む必要があった。

幸いにして、あらたに書き込まねばならないパラメータは、ほぼどの装置にも共通であり、一連の実験を行う上でほぼ固定された値を取るものばかりであった。そのため、変換ソフトに装置メーカーに共通な形式の専用パラメータファイルの一つ準備し、必要に応じて内容を書き換えて使用する仕様とした。このパラメータファイルについては変換時に必須なものばかりであるので、章を改めて説明する。また、その他のNPLフォーマットに含まれるパラメータに対しては、ISOフォーマットとの関連も深いので、あらためて説明と討論の機会を持ちたい。

この中で対応に苦慮したのは、測定された元素と線の名前(1s、KLL等)の記入であった。これは、この情報が全てのメーカーのデータファイルに入っているわけではないこと、ユーザーそ

れそれぞれで書き方が違ってNPLフォーマットに自動的に変換する事が困難であった事による。そのため、変換時に対話形式でこのデータを書き込む仕様とし、ルーチンを作製した。

2) NPLフォーマットの解釈

次の問題点は、NPLフォーマットの解釈が人それぞれで違う事である。

NPLフォーマットはスペクトルデータだけでなく、画像データ(マッピング)やデプスプロファイルデータ等様々なデータに対しても用いられるように、様々な工夫がなされている。したがって、扱うデータによってパラメータの並びに変更可可能な仕様となっており、どんなパラメータの並びを用いるかはユーザーの選択にまかされている。このことから、考えうるNPLフォーマットの全ての場合に対応している様な入出力仕様(過去、フルフォーマットと呼ばれた仕様がこれにあたる)のソフトであれば全く問題はない。しかし、今まではスペクトル1本あるいは複数本が収納されたファイルのみを扱って来たことから、パラメータの並びを1種類に固定した入出力仕様をとる事が可能であり、その様にされてきた(簡易フォーマットと呼ばれた仕様)。COMPRO ver.3.1も、簡易フォーマットを採用している。

この簡易フォーマットの仕様には、SASJの会員間でも過去若干の相違があった様である。したがって、ある会員の簡易フォーマットはCOMPRO ver.3.1では読めないという問題点が存在していた。これは例えば、inclusion or exclusion prefix numberをいくつ指定するかという問題である。COMPRO VER.3.1は7つ指定が必要であって、そのprefix numberはソフト中で固定されている。したがって、異なる仕様を選ぶと、NPLフォーマットとしては正しいのにCOMPROでは読めないというトラブルが出現することとなる。

この点に関しては、作業の効率から簡易フォーマットを使用することとし、仕様はCOMPRO ver.3.1で読み込みが可能である事として作業を進めた。

3) XPSのエネルギー軸の取り方

過去、装置の仕事関数の問題が取り上げられた事が出発点となり、AESのデータとの相互比較を容易にする事を考慮して、転送されるスペクトルデータの横軸を運動エネルギーで記述する仕様がCOMPRO ver.3.1に採用されている。したがって、XPSのデータをNPLフォーマットに変換する場合、エネルギー軸は運動エネルギーに変換する必要がある。

この問題は、AESとの表示の簡便性を考えての仕様であることは理解できるが、それはCOMPRO上で対応すべき問題であり、転送フォーマットにまでその仕様を要求すべきかどうかは、議論の余地がある。

3.3 パラメータファイル

図1は、パラメータファイルの一例である。このパラメータファイル中のパラメータの種類と並びは、どの変換ソフトにも共通である。

1行目から3行目(機関名、装置名、オペレータ名)まではソース中に書き込まれても良い内容であるが、ソース自体の変更はなるべく避けるという観点から、パラメータファイルで変更出来るようにした。

4行目以降が、実際の装置あるいは実験に共通でほとんどの場合固定されているパラメータである。これらのパラメータは、多くの場合、一連の実験の間でほとんど変わらないと思われる。各行の右側にコメントがついているが、これはそれぞれのパラメータの意味である。

5, 6行目は、試料上の入射X線スポットサイズ、あるいは入射電子線のビームサイズである。これは、信号を取り出すサイズに関する記述とは違う。

それに関するパラメータは、13, 14行目のデータである。これは、インプットレンズによる試料上の取り込みの広がりを入射ビームの広がり(入射X

National Institute for Research of Inorganic Materials

PHI-5600

Sei Fukushima

```
1200      ' analysis source strength (nA:AES) (W:XPS)
100       ' analysis source beam width x (um)
200       ' analysis source beam width y (um)
30        ' analysis source polar angle of incidence (degree)
0         ' analysis source azimuth (degree)
100       ' magnification of analyser transfer lens
4.23      ' analyser work function (eV)
0         ' target bias
100       ' analysis width x (um)
100       ' analysis width y (um)
90        ' analysis axis take off polar angle (degree)
0         ' analysis axis take off azimuth (degree)
0         ' sample normal polar angle of tilt (degree)
0         ' sample normal tilt azimuth (degree)
0         ' sample rotation angle (degree)
4.00E-9   ' signal time correction
```

図1 パラメータファイルの内容例

線のスポットサイズ、あるいは電子ビームのラスタ範囲)のうちの小さい方(互いにオーバーラップしている部分)のサイズに関する記述である。

7, 8行目は、励起ビームの入射のジオメトリーに関する数値である。これは、サンプルを乗せるステージを基準として決定される。

図2の上に、Seahの論文²⁾から引用した角度の取り方を示す図を示す。ステージを水平においたとき、その水平面内でオペレータに向かう方向(オペレータから見ると、手前側)をy軸とし、それに直行した水平面内にx軸を取る。交点はステージの回転軸に取り、それから装置上面方向にz軸をとる。

この座標軸に対して、z軸と入射ビームを含む面をとる。このときの、z軸と入射ビームとのなす角が polar angleである。またこの面が、入射ビームがyz平面にある場合からz軸の周囲に何度回転しているかが、azimuthの値となる。

14, 15行目は、信号の取り出し角に関する記述である。これも、先の説明において「入射ビーム」を「レンズと原点を結ぶ直線」に置き換えるだけで、定義する事ができる。

16, 17, 18行目は、試料表面の法線方向に関する記述である。図2の下に、その説明が示されている。この場合も、「入射ビーム」を「試料表面の法線」に置き換えればよい。ただし、試料はこのほかにもう一つ自由度を持っている。それは、試料面内での回転である(傾けた状態で、試料面を回転させる事ができる)。この回転角度が、rotation angleである。

先の角度の記述は、全てステージが基準であって、試料表面が基準ではない。したがって、試料の持っているジオメトリーに関する記述あって、初めて励起ビーム、検出器と試料との正確な位置関係が把握されるわけである。

これら角度の数値は、いずれも度(degree)で記述する。

このほか、使用しているインプットレンズの倍率(CMAでは1とする)を9行目、仕事関数を10行目、試料にバイ

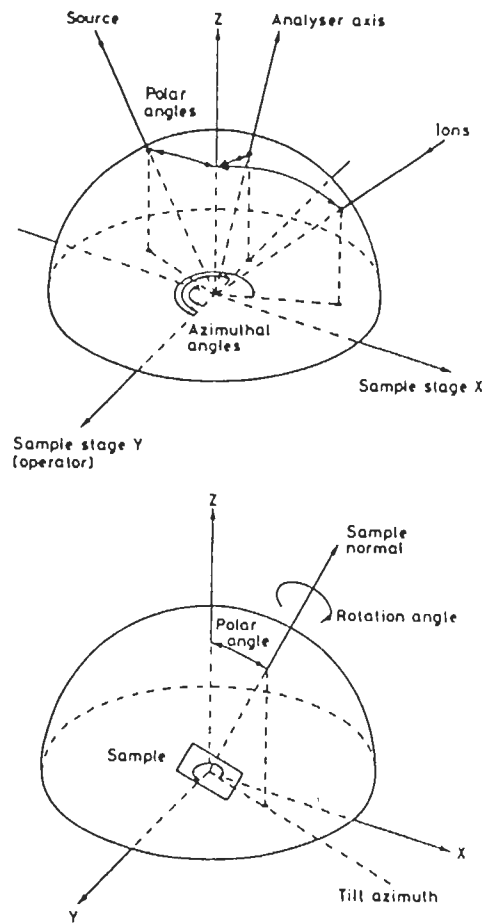


図2 パラメータファイル中に記述すべき様々な角度の値の取り方²⁾

アスをかけている場合はその値を11行目、検出器の時定数(数え落としの補正に必要なデータ)を19行目に、それぞれ記述してこのファイルが出来上がる。

これらのデータが本当に必要なデータであるのか、あるいは重要度が他のパラメータに対してどうであるか等については、今後の研究会や本誌での議論に待つ部分が大きいこともつけ加え

ておく必要がある。

4. 今後の課題

4.1 PCの仕様の問題

残念ながら、ソースはN^o BASICで書かれたもので、それ以外の言語によるバージョンは今の所存在しない。ただし、入出力用ファイルのパス指定の仕様を変更するだけで、容易にQuickBASICへ変換できるので（変換用ソフトが存在する）、QuickBASICでの提供に対応するにはさほど時間はかからない。以上により、DOSマシンに対してはほぼ対応できるものと考ええる。

一方、マッキントッシュ用およびHP用の変換ソフトの希望も存在しており、この対策は今後の課題である。これらは、基本的には機種に依存したハードウェア的なデータ入出力仕様に依存する部分の変更で対応出来るはずである。しかし、実際に対応するハードウェア上で走らせて動作確認をする作業が必須であり、機種をいかに準備するかの問題を解決する必要がある。

もっともこの問題は、その機種からDOSマシン用のテキストファイルへデータあるいはメディアの変換を行う事で解決でき、既に多くの機関ではこの方法を採用している。しかし、データベースにたどり着くまでに必要なデータ変換の回数は少なければ少ないほど良いわけで、余力を割くに十分な課題であると考ええる。

4.2 変換可能なフォーマットと変換ソフトのライブラリ

VAMAS-SCA-JAPAN委員会の活動から蓄積されてきたNPLフォーマットあるいはVMSフォーマットに変換可能な装置側のデータ例とその為の変換ルーチンを、整理しライブラリ化する事が現在計画されている。対象とするのはSASJの会員が使用している装置とし、現在稼働しているものおよび今後導入された新機種も対象とする。従って、そのうち使われなくなるであろう旧式な装置についても記録を残そうということになる。

これは、単に現在のSASJの会員に対

するデータ転送の保証となるだけではない。このデータ転送と変換の確立に関する活動は、ISOで検討されている転送のための標準フォーマットを実用化し普及させる為の基礎的な活動となる。また、表面分析に関する発展途上国では先進国から旧式の装置を導入する可能性も高く、それらの状況に対する対策としても大きな意味がある。

どの様な形式でライブラリを整備するか最終的な案は、まだ存在しない。現在は、変換ソフトあるいはルーチンとそれを読み出せるデータファイルいくつかをセットとして保存するという方針でとりあえずの作業が進められている。これは、装置側のデータファイルの形式が多様であるために、出力ファイルの形式が一定しているにもかかわらず、現在の処ソフトの出力ルーチンを共通化できていない為である。

したがって、変換ソフトをこの問題にあわせて再度バージョンアップする事で、効率の良い整備が可能となるかもしれない。

なお、ISOフォーマットが固まった段階で、現在のNPLフォーマットからISOフォーマットへの変換に対する対策も、今後の重要な検討課題と言える。

4.3 さらに将来に向けて

まず、NPLフォーマット（ISOフォーマット）が最適な転送フォーマットであるかどうかについて、さらに十分な検討が進められねばならない。

まず、NPLフォーマットに含まれている、あるいはISOフォーマットに含めようとしているパラメータの種類である。

次に、パラメータの並べ方（データ構成）である。現在のNPLフォーマットは、フレキシビリティを持たせるためにヘッダ部分のパラメータの個数が可変である。しかし、単にパラメータをシリアルに並べただけであるため、特定のパラメータをファイルの中から拾い出すのに大変不便である（検索に不便である）。この点に関しては、やはり昨年11月の研究会において提案された城昌利氏（電子技術総合研究所）のアイデアが大変有効である。このよう

な工夫と提案を今後とも繰り返し検討し、必要に応じてそれに対応したシステムを試作して従来システムとの比較検討を行う事が重要である。

これらは、ISO/TC-201 SC3で現在討論されているが、ISOは基本的に学術的な討論の場ではなく、取り決めを作るための単なる交渉の場である事に注意すべきであろう。日本が、この作業に将来も積極的に貢献しようとしていくのであれば、その時代の分析現場の要求に即したパラメータの並びを常に把

握し、ISOの改訂に常に前向きでなければなるまい。それを積極的にサポート出来るのはSASJであることを、我々は常に意識すべきであろう。

参考文献

- 1) 古川洋一郎、竹内豊：*J. of Surf. Anal.*, 1, 62 (1995)
- 2) W.A.Dench, L.B.Hazell, M.P.Seah and the VAMAS Community, *Surf. and Intef. Anal.*, 13, 63 (1988)