

解説

Common Data Processing System Version 12 の紹介

吉原 一紘*

シエンタ オミクロン (株)

140-0013 東京都品川区南大井 6-16-4

* Kazuhiro.Yoshihara@ScientaOmicron.com

(2016年12月19日受理; 2017年1月23日掲載決定)

Common Data Processing System (COMPRO) はバージョンアップを重ね、現在は Windows (7, 8, 10) 上で動く Version 12 (COMPRO12) が公開されている。JSA 19 巻の第 1 号から始まって 7 回に渡って Version 10 (COMPRO10) の使用方法を紹介してあるので、今回は COMPRO12 の主な変更点を紹介する。

以前のバージョンの COMPRO は ISO フォーマット構造のデータ以外を読み込む際には、煩雑な変換手続きが必要であったが、COMPRO12 からは CSV と Excel 形式のファイルは簡単な変換手続きで読み込むことが出来るようになった。また、チャージアップなどによるエネルギー軸の補正、active Shirley 法によるバックグラウンド差し引き、ピークフィッティング処理の改善、絶対オージェスペクトルデータベースの充実などの改良が付け加わった。さらに、COMPRO12 に搭載されている全てのデータ処理方法のマニュアルがインターネットで表示されるようになった。

The Introduction of Common Data Processing System Version 12

K. Yoshihara*

Scienta Omicron, Inc.

6-16-4, Minami-Oi, Shinagawa-ku, Tokyo 140-0013, Japan

* Kazuhiro.Yoshihara@ScientaOmicron.com

(Received: December 19, 2016; Accepted: January 23, 2017)

Common Data Processing System (COMPRO) has been upgraded many times, and the latest one is Version 12 (COMPRO12), which runs on Windows (7, 8, and 10). The usage of COMPRO10 has been explained as a series of lectures which started in JSA Vol. 9 (2012), No1. Therefore, in this paper, the key changes of COMPRO12 from COMPRO10 are only introduced.

Before version 12, the ISO formatted data file was only accepted by COMPRO, and data files with other format structures must be converted to ISO formatted structure by cumbersome procedures. COMPRO12 can read CSV and Excel files only by the simple conversion process. The abscissa scale shifting process is newly attached, and can compensate the shifting of energy position by charge-up. The background subtraction by active Shirley process is included, and the peak fitting process is improved. The displaying procedure of absolute Auger spectral database is enriched. The usage of data processing procedures included in COMPRO12 is displayed by the internet.

1. はじめに

Common Data Processing System (COMPRO) はスペクトルデータ処理用のソフトウェアとして、1989年から作成が開始された。COMPRO を用いること

により、データ構造が異なるスペクトルデータを ISO 規格のデータ構造に変換することができ、多くの研究者が提案した多様なデータ処理法を利用することができる。また、ISO 規格に基づくエネルギー

軸や強度軸の校正が可能である。さらに、COMPRO はスペクトルデータベースや表面分析に必要な物理定数のデータベースを備えている。

COMPRO はバージョンアップを重ね、現在は Windows (7, 8, 10) 上で動く Version 12 (COMPRO12) が公開されている。JSA 19 巻の第 1 号から始まって 7 回に渡って Version 10 (COMPRO10) の使用法を紹介してあるので、今回は COMPRO12 の主な変更点を紹介する。

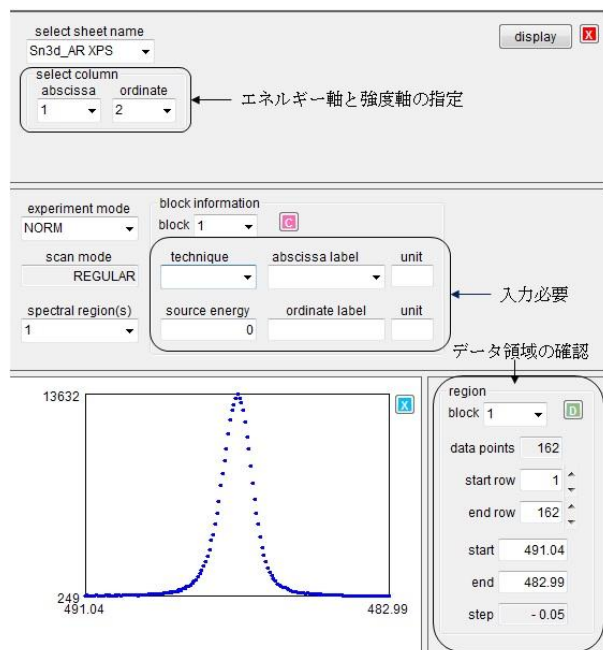
2. COMPRO12 のインストール

COMPRO12 を使用するには、コンピュータの画面の解像度が 1024×768 以上が必要で、推奨値は 1280×768 以上である。OS は Windows 7, 8, 10 である。

COMPRO12 は表面分析研究会のホームページ (<http://www.sasj.jp/COMPRO>) からダウンロードできる。<setupCompro12.exe>をクリックすると、実行するか、ダウンロードするかを聞いてくるので、そのまま実行しても、適当なディレクトリーに保存してから実行しても良い。なお、COMPRO は使用者の意見を反映させて小さなバージョンアップが随時行われる。既に COMPRO12 をインストールしてある場合には、新しいバージョンをインストールしようとする、Windows が警告を表示するので、古いバージョンの COMPRO12 をアンインストールしてからインストールを実行する必要がある。インストールに成功するとデスクトップに COMPRO のアイコンが現れるので、それをクリックすれば COMPRO12 が起動する。

3. COMPRO で取り扱えるデータファイル

ISO 規格である ISO14976 で規定されている構造を持つデータファイルは[File] - [Open]メニューから読み込むことができる。ISO14976 の構造でなくても CSV や Excel 形式で保存されたデータファイルならば読み込むことが出来る。これらのファイルの構造が 2 列構造 (エネルギー値を記述している列とカウント数を記述している列の 2 列からなる構造) の場合は、[File] - [Open]メニューで読み込むと、ユーザーの簡単な入力 (technique, abscissa label, source energy, ordinate label) 画面を経て ISO14976 に変換されて表示される。データ領域は自動的に判定されてスペクトルが表示されるが、データ点数、データ領域の開始行、終了行を確認することが必要である。



なお、[File] - [Open]メニューで読み込めない構造は[File] - [Convert to ISO format]メニューで読み込むよう警告が出るので、要請に従って変換する必要がある。これによりほとんど全てのデータファイルが COMPRO で読み込むことができる。前述したように CSV ファイルや Excel ファイルは[File]-[Open]メニューで読み込めるが、エネルギー軸とカウント軸の組み合わせ数が複数ある場合には、[File]-[Convert to ISO format]メニューの方が便利である。

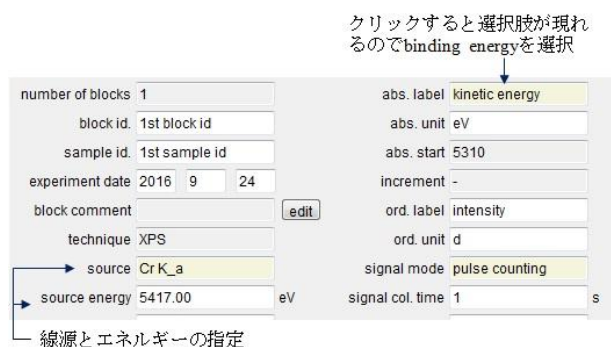
以前のバージョンでは構造解析が出来なかったファイルにも COMPRO12 では対応できるように修正したが、もし読み込めないファイルがある場合には著者まで連絡してほしい。



4. ISO14976 構造

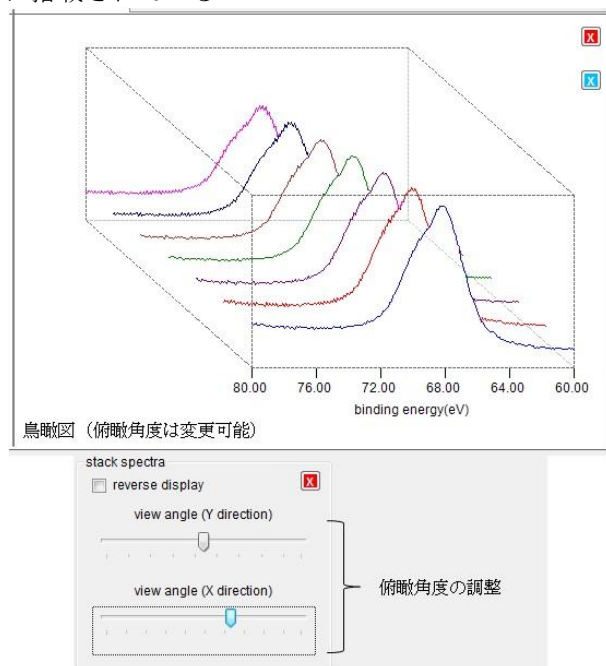
COMPRO でファイルを読み込むと、データは全て ISO14976 構造に変換されて、スペクトルが表示される。SOR 光を励起源として取得されたスペクトルにはエネルギー軸が運動エネルギーで記述されているものがあるが、COMPRO では XPS スペクトルのデータ処理は全て束縛エネルギーで行うことを原則としているので、運動エネルギーで記述されたスペクトルは束縛エネルギーに変換することを勧め

るメッセージが現れる。この場合には、画面左のツールバーの **ISO** をクリックすると、表示されているスペクトルの **ISO14976** 構造の全ての項目が表示され、（書き換え可能な項目は）書き換えることが出来る。横軸を運動エネルギーから束縛エネルギーに変換するには画面の中で、線源とエネルギーを指定して、運動エネルギーを束縛エネルギーに変更する。**[abs. label]**の項目をクリックすると **combo box** が現れる。**combo box** に表示される選択項目を**[kinetic energy]**から**[binding energy]**に変更すれば良い。



5. スペクトルデータの表示 ([display style])

複数のブロックからなるスペクトルデータを表示する際に、**[Normalize]**と**[Stack]**により表示方法を変えることが出来る。**[Normalize]**は最高カウント数を<1>、最低カウント数を<0>にして、全てのブロックのスペクトルの高さを揃えて表示する方法で、**[Stack]**は複数のスペクトルを鳥瞰図として同時表示する方法である。これらの機能は既に **COMPRO11** に搭載されている。

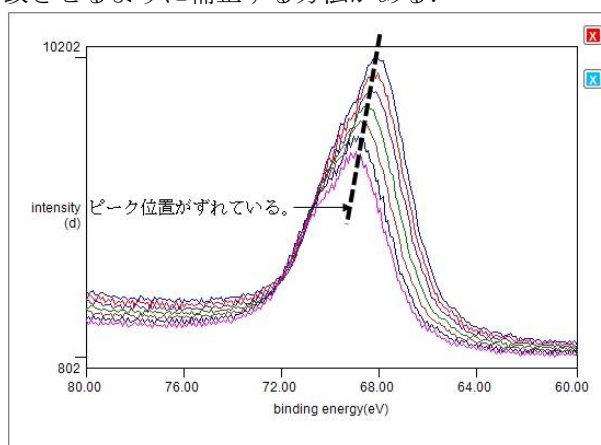


COMPRO12 には新たにエネルギー軸をシフトさせる機能が加わった。

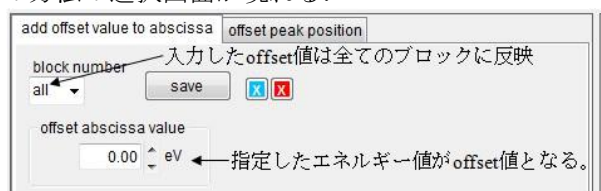
エネルギー軸のシフト

SOR 光で励起する場合のように励起光のエネルギーが確定できないとき、あるいはチャージアップによりエネルギー位置がずれるなどしたときには、エネルギー軸のズレを補正することが必要となる。

ズレを補正するには、エネルギー値に一定の値を **offset** 値として付加して補正する方法と、スペクトル中に出現するピーク位置を標準値（参照値）に一致させるように補正する方法がある。

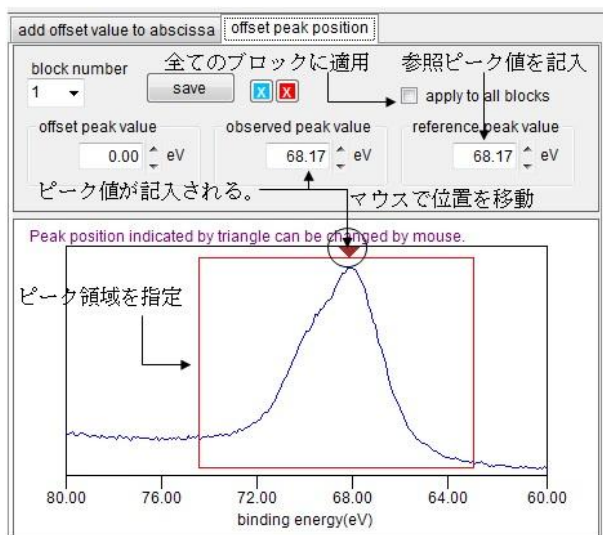


画面左のツールバーの をクリックすると **[add offset value to abscissa]**と**[offset peak position]**の二つの方法の選択画面が現れる。

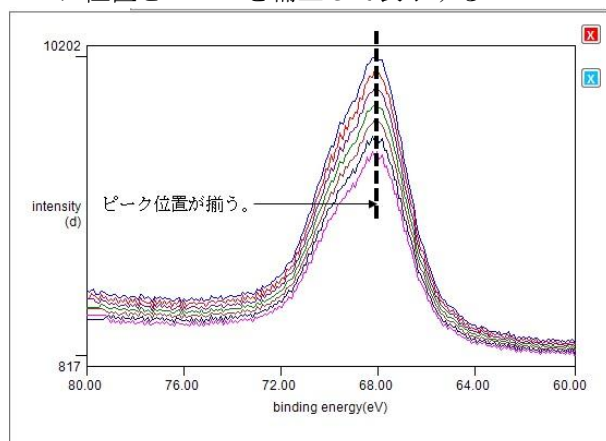


[add offset value to abscissa]を選択すると、**[offset abscissa value]**に表示されている値を変更することができ、**[offset abscissa value]**に入力した値だけ、エネルギー軸をシフトできる。なお、**[block number]**で **[all]**を選択すると入力した**[offset abscissa value]**の値は全てのブロックに反映され全てのブロックのスペクトルのエネルギー値を同じ値だけシフトする。

[offset peak position]を選択すると、観測されたピーク位置と参照ピーク位置との差をエネルギー軸のオフセット量として求め、エネルギー軸のズレを補正することが出来る。




[apply to all blocks]をクリックすると、他のブロックのデータにも自動的にピーク位置を判定し、参照ピーク位置とのズレを補正して表示する。



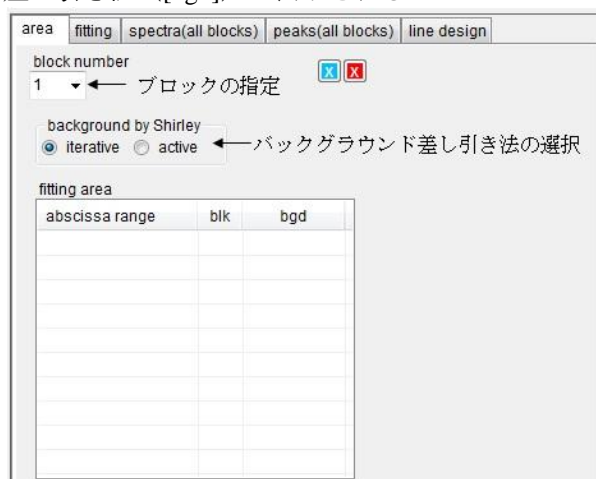
6. スペクトルデータの処理 ([massage])

スペクトルデータの微分、平滑化、ピークフィッティング、合成（スペクトル同士の加算、減算、除算）が可能である。これらは既に COMPRO11 に搭載されている。COMPRO12 で大きく変わった点は、ピークフィッティングである。COMPRO12 から新たに搭載された active Shirley によるバックグラウンド差し引きによるピークフィッティングが可能となると同時に、iterative Shirley でも pseudo Voigt 関数が容易に使えるように変更された。

ピークフィッティング

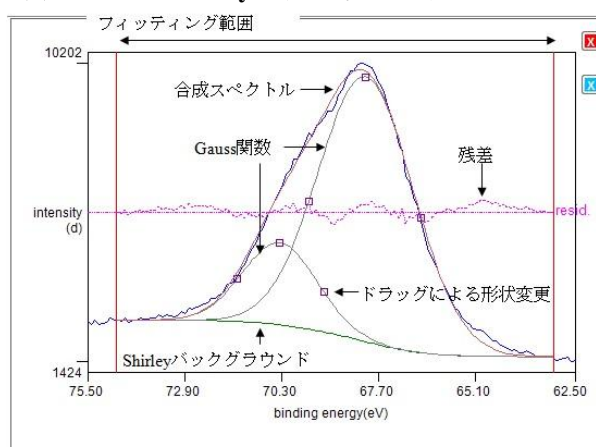
画面左のツールバーのをクリックするとバックグラウンド差し引き法として[iterative Shirley]か[active Shirley]の選択画面が現れる。デフォルトは[iterative Shirley]になっている。[fitting area]のリストには 実行したフィッティング領域 ([abscissa

range]), ブロック番号 ([blk]), バックグラウンド差し引き法 ([bgd]) が表示される。

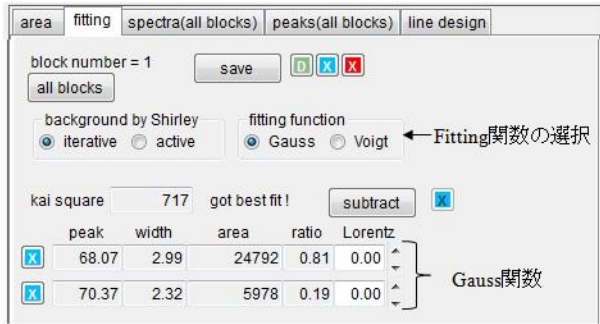


指定したブロック（第1番目のブロックがデフォルト）のスペクトルが表示されるので、マウスでフィッティングしたい領域を囲むと指定した方法でバックグラウンドが差し引かれたスペクトルに対して、自動的にフィッティングが行われ、[fitting]のタブページが開かれて結果が表示される。

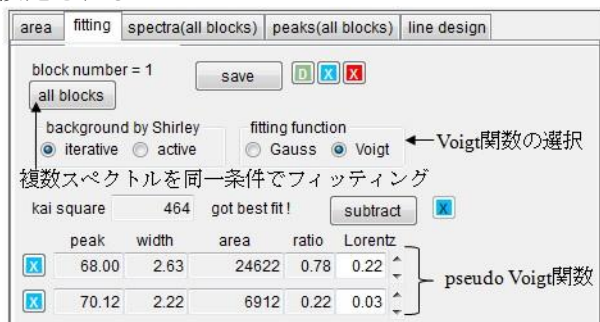
(1) iterative Shirley で差し引いた場合



[fitting]のタブページにはピークフィッティングの結果が表示される。デフォルトでは Gauss 関数を用いてフィッティングされる。フィッティングに使った Gauss 関数のピーク位置、幅、面積、面積比が表示される。表示された関数に付属している青い[X]ボタンをクリックすると、関数を除去できる。また、画面の任意の場所をクリックすれば新たな Gauss 関数をクリックした場所に付加することが出来る。Gauss 関数の高さ、幅、位置は Gauss 関数に付属しているハンドルで変更できる。[subtract]ボタンをクリックするとバックグラウンドが差し引かれたスペクトルが表示される。

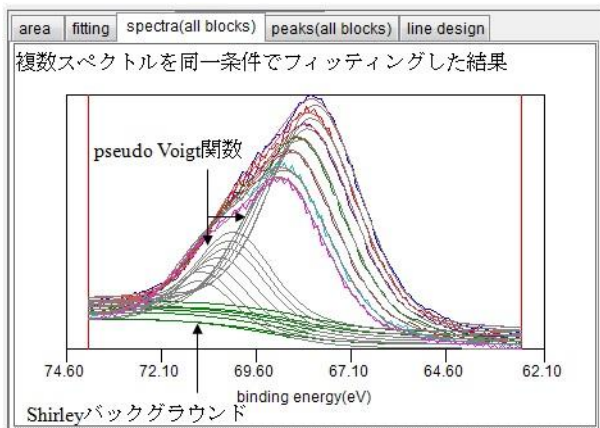


Fitting 関数に[Voigt]を選択すると pseudo Voigt 関数 $(1-\alpha)\times\text{Gauss} + \alpha\times\text{Lorentz}$ を用いたフィッティングが行われ、最適な Lorentz 関数の割合 (α) が設定される。

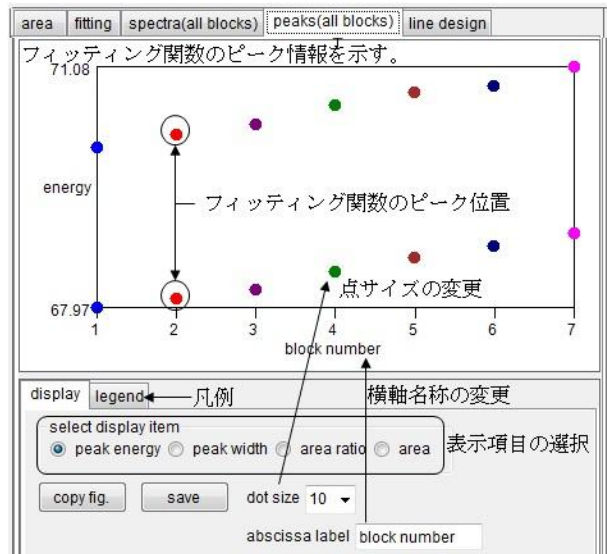


pseudo Voigt 関数を用いた場合に、Gauss 関数を用いた場合よりも収束が悪い場合には、自動的に Gauss 関数に戻る。ただし、Lorentz 関数の割合を手動により設定させれば、pseudo Voigt 関数によるフィッティングは可能である。

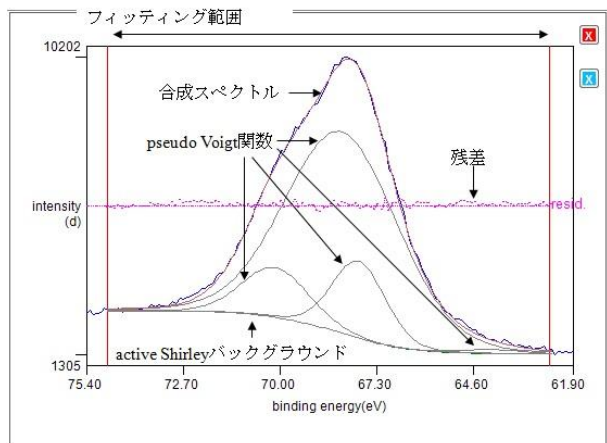
[all blocks]ボタンをクリックすると、(複数ブロックの場合には) 複数スペクトルを同一条件 (同一範囲, 同一フィッティング関数) でフィッティングする。結果は[spectra (all blocks)]と[peaks (all blocks)]タブに表示される。[spectra (all blocks)]タブでは複数スペクトルを同一条件でフィッティングした結果が表示される。



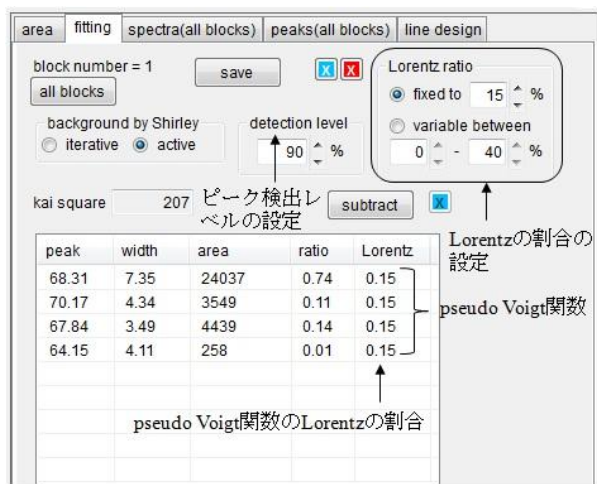
[peaks (all blocks)]タブでは、フィッティング関数の各ピークの位置 ([peak energy]), ピーク幅 ([peak width]), ピーク面積比 ([area ratio]), ピーク面積 ([area]) を選択して表示することが出来る。



(2) active Shirley で差し引いた場合




active Shirley は pseudo Voigt 関数でフィッティングしながらバックグラウンドを決定していく方法なので、ユーザーはフィッティングした結果を変更できない。すなわち、バックグラウンド曲線とフィッティングした pseudo Voigt 関数は一体のものである。pseudo Voigt 関数の Lorentz 関数の割合の設定法は「固定[fixed to]」と「変動[variable between]」の2種類がある。ピーク検出の感度 ([detection level]) は変更できる。これらの数値を変更することによりピークフィッティングで求められるピーク位置や高さなどを変更することが出来る。これらの数値の範囲や意味は次節で述べる。

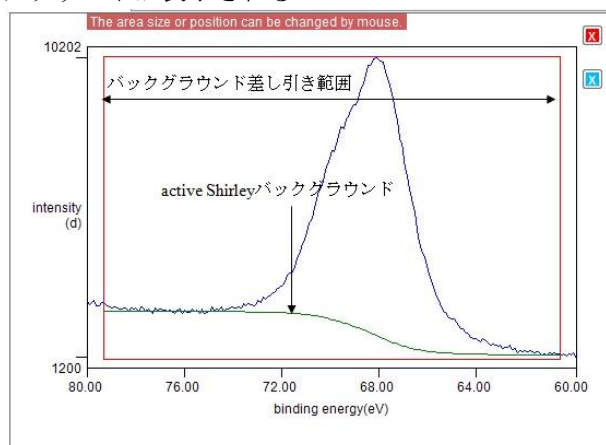


7. バックグラウンド差し引き ([background])

バックグラウンド差し引き法として iterative Shirley, active Shirley, Sickafus が搭載されている。この中で COMPRO12 から搭載された手法は active Shirley である。ここでは active Shirley を紹介する。active Shirley については松本らによる解説[1]があるので原理やアルゴリズムについてはそれを参照されたい。

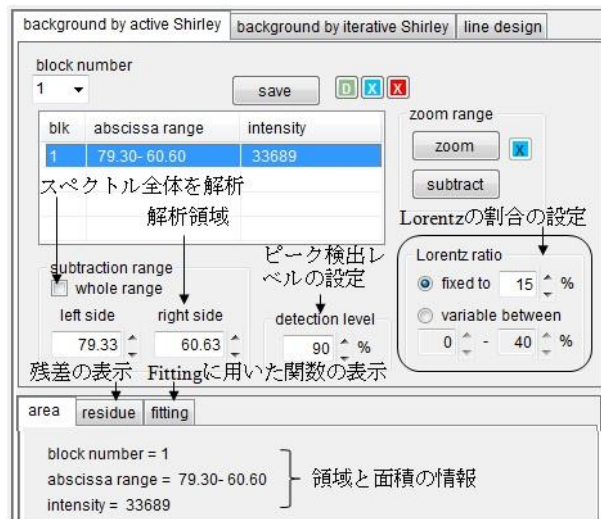
active Shirley

画面左のツールバーのをクリックすると active Shirley の制御パネルが現れる。バックグラウンドを差し引きたい領域をマウスで囲むと、バックグラウンドが表示される。



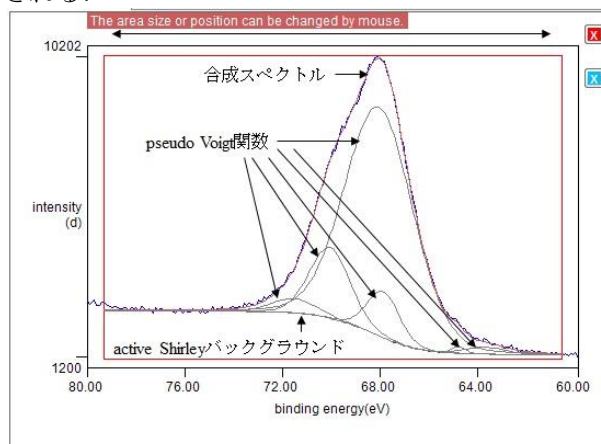
active Shirley ではピークフィッティングを行いながらバックグラウンドを設定していくが、フィッティングに用いる関数形は pseudo Voigt 関数を用いる。制御パネルの[Lorentz ratio]ボックスの中で、pseudo Voigt 関数の Lorentz 関数の割合やピーク検出レベルの設定が出来る。Lorentz 関数の割合の設定法は「固定[fixed to]」と「変動[variable between]」の2種類が

ある。固定の場合のデフォルト値は 15% であるが、ユーザーが変更できる。「変動」の場合は上限と下限が設定できる。デフォルト値は 0%~40% である。[detection level]ボックスの値でピーク検出の敏感さを設定できる。デフォルトは 90% にしてある。これは、元のスペクトルの最大値の 10% 以上の強度を持つピークをピークとして抽出するという意味である。



結果表示パネルにはブロック番号 ([blk]), バックグラウンド差し引き領域 (abscissa range), バックグラウンド差し引き後の面積 ([intensity]) が表示される。ここで, [left side]と[right side]の値を変更するとバックグラウンド差し引き領域を変更する事が出来る。[zoom]ボタンをクリックするとバックグラウンド差し引き領域が拡大されて表示される。[subtract]ボタンをクリックするとバックグラウンドが差し引かれたスペクトルが表示される。

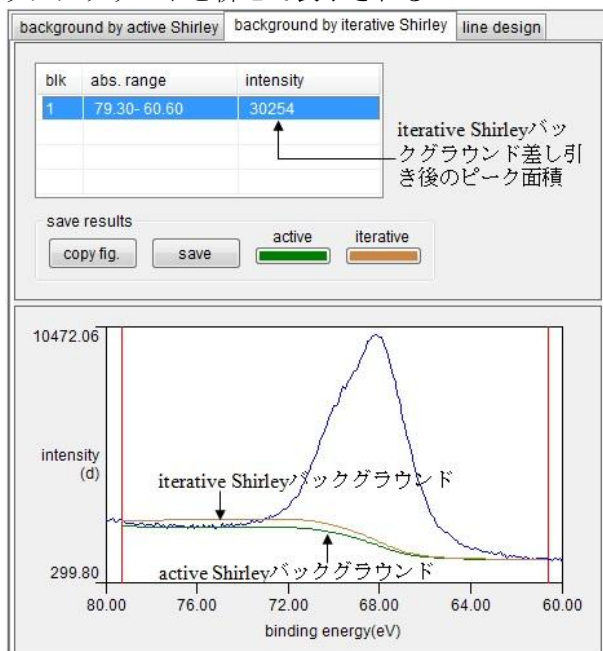
[residue]または[fitting]のタブをクリックするとフィッティングに用いた pseudo Voigt 関数が重ね書きされる。



なお、[residue]タブをクリックするとフィッティングに用いた関数を総和した値（合成スペクトル）と実測値の差が表示され、[fitting]タブをクリックするとフィッティングに用いた pseudo Voigt 関数のピーク位置、ピーク幅、Lorentz 割合、ピーク面積、ピーク面積比が表示される。

No	position	height	width	Lorentz	area	ratio
1	68.15	6917	3.31	0.15	25170.59	0.75
2	79.05	121	2.50	0.15	173.16	0.01
3	73.57	61	0.21	0.15	14.15	0.00
4	71.38	535	2.53	0.15	1494.77	0.04

[background by iterative Shirley]タブをクリックすると、同一解析範囲を iterative Shirley でバックグラウンドを差し引いた結果が、active Shirley によるバックグラウンドと併せて表示される。




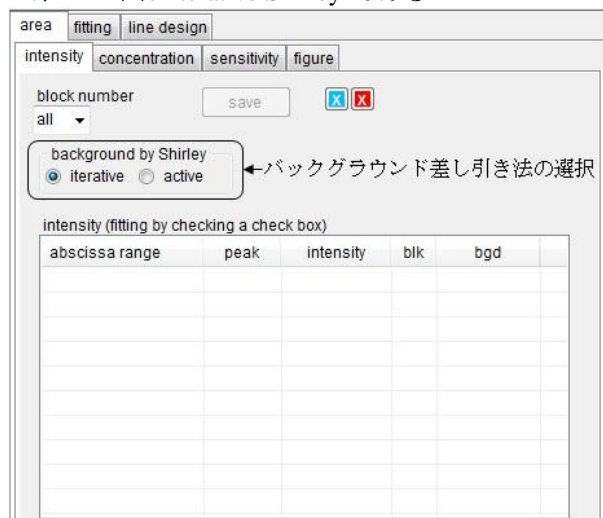
COMPRO12 の中では、面積強度を必要とするデータ処理を行う際のバックグラウンドの差し引き方は iterative Shirley か active Shirley かのいずれかを選択できるようになっている。

8. データ解析 ([analysis])

データ解析には、定性、定量、因子解析が搭載されている。定性解析は COMPRO に搭載されているピーク値データベースとの参照によって行われるが、ピーク値データベースは研究会会員により提供された値を用いているが、必ずしも十分でないので、データベースの充実が課題である。また、定量解析に用いられる感度係数のデータベースも不十分である

ので、研究会会員の協力が求められる。

画面左のツールバーの  をクリックすると定量法の制御パネルが現れるが、6章で述べたようにバックグラウンド差し引き法の選択が必要である。デフォルトは iterative Shirley である。



9. 薄膜解析 ([thin film])

薄膜解析には、MRI 法、Thickogram、Tougaard 法、2 角度分析法が搭載されている。いずれも薄膜の膜厚を求める方法である。COMPRO12 からは、Thickogram と 2 角度分析法に関しては、面積強度を求める際に iterative Shirley か active Shirley を選択する画面が表示されるようになった。デフォルトは iterative Shirley である。なお、Thickogram に関してはこれまでは同スペクトル上のピーク同士を比較する方法に限られていたが、COMPRO12 からは異なったブロックのスペクトルのピーク同士も比較することが出来るようになった。

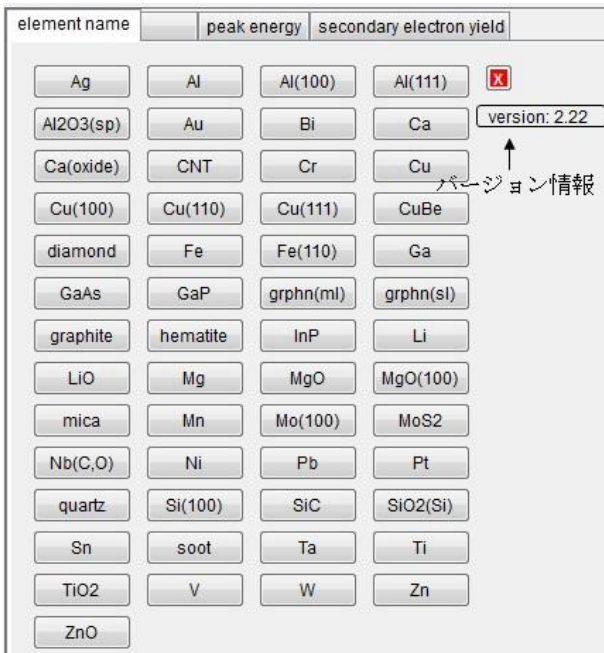
10. データベース

COMPRO12 の画面上部にあるメニューバーから [Database] を選択すると、データベースとして搭載されている [Reference spectrum], [Standard spectrum], [Absolute spectrum], [Physical Property], [Peak energy] の選択が可能となる。この中で [Reference spectrum], [Standard spectrum], [Absolute spectrum] は随時更新され、表面分析研究会のホームページ (<http://www.sasj.jp/COMPRO>) から最新版がダウンロードできる。データベースをダウンロードせずに COMPRO を使用すると、ダウンロードするように警告が出る。なお、これらデータベースは随時更新されるので、ホームページに表示されているバージョン情報に注意してほしい。

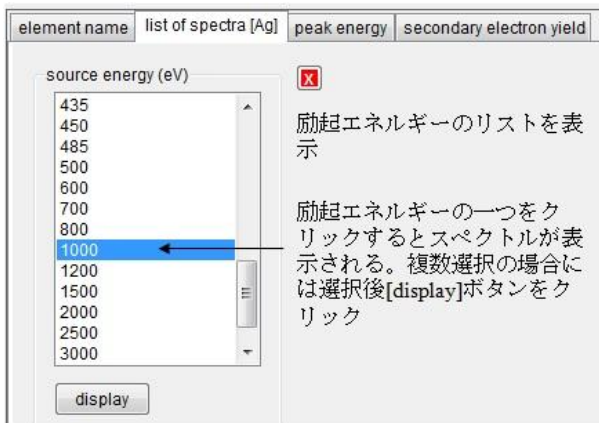
COMPRO12 から表示方法などが大きく変わったのは後藤先生から提供された AES の[Absolute spectrum]データベースである。

Absolute spectrum データベース

メニューの[Data base] - [Absolute spectrum]をクリックすると現在[Absolute spectrum]データベースに登録されている化合物・元素名を記したボタンが現れるので、その一つをクリックする。なお、現在COMPRO に搭載されているデータベースのバージョン情報が示されているので、表面分析研究会のホームページに示されているデータベースのバージョン情報と比較・確認の上、最新のバージョンに更新することをお勧めする。



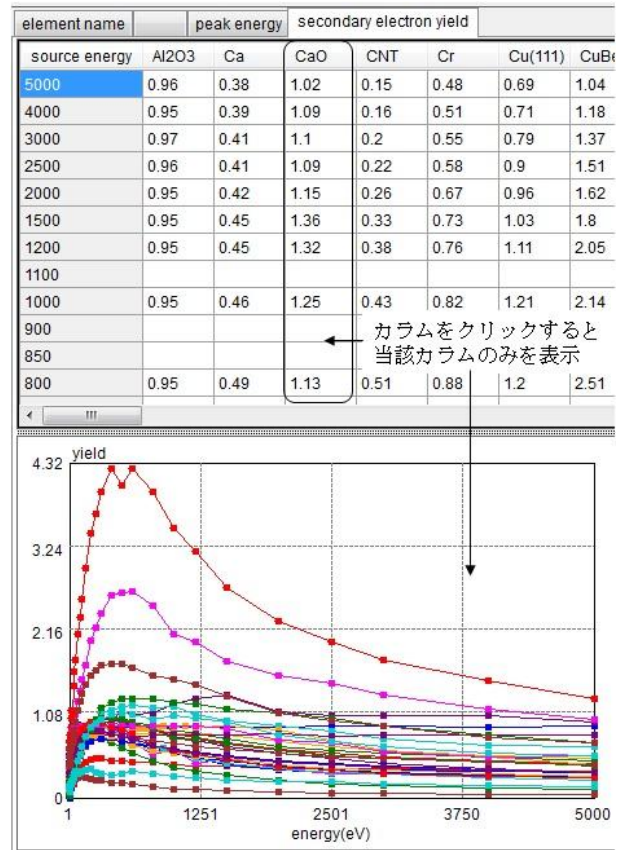
クリックした化合物・元素の励起エネルギーのリストが出現するので、その一つ（複数選択も可能）を選択すると、スペクトルが表示される。



[peak energy]タブをクリックすると観測されたピークエネルギーのデータベースが表示される。

element name	peak energy		secondary electron yield				
	Al(100)	Al(Al2O3)	O(Al2O3)	Bi	O(Bi)	Ca	O(Ca)
KVV			501.2(2)		503.6(4)		506.4
LVV	63.3(2)	44.7	49.9(1)				
KLL	1388.1...	1380.3...					
MVV						17.6(1)	

[secondary electron yield]タブをクリックすると二次電子放出率のデータベースとグラフが表示される。



11. エネルギー軸・強度軸の校正

COMPRO12 の画面上部にあるメニューバーから [Calibration] を選択すると ISO で規定されたエネルギー軸・強度軸の校正方法に従って装置を校正することができる。エネルギー軸の校正法として ISO17973: AES (medium resolution), ISO17974: AES (high resolution), ISO15472: XPS が規定されている。強度軸の校正法として ISO21270: Linearity,

ISO24236: Repeatability (AES), ISO24237: Repeatability (XPS)が規定されている。COMPRO12ではGUIのマイナーな変更のみである。

12. シミュレーション

COMPRO12の画面上部にあるメニューバーから[Simulation]を選択すると、ARXPSで得られるデブスプロファイルのシミュレーション[Simulate ARXPS]とバンド構造の曲がりによるスペクトル変調のシミュレーション[Band bending analysis]が実施できる。COMPRO12ではGUIのマイナーな変更のみである。

13. 多変量解析

COMPRO12の画面上部にあるメニューバーから[Multivariate analysis]を選択すると主成分解析[Principal component analysis]とクラスター分析[Cluster analysis]が実施できる。COMPRO12ではGUIのマイナーな変更のみである。

14. 付録

COMPRO12の画面上部にあるメニューバーから[Appendix]を選択するとフーリエ変換[Fourier transform]と行列計算[Matrix calculation]が実施できる。スペクトル解析とは直接の関係は無いが、データ処理の基礎となる数学手法なので搭載してある。COMPRO12ではGUIのマイナーな変更のみである。

15. Help

COMPRO12の画面上部にあるメニューバーから[Help] - [Help]をクリックするとCOMPROに搭載されている全てのデータ処理方法の解説やマニュアルがインターネットで表示される。

画面の左側に項目が現れる。項目をクリックすると、次図に示すようにさらに細かい項目が現れ、データ処理の具体的な解説やマニュアルが表示される。また、画面上部にある[Search]をクリックすることにより、項目の検索も可能である。なお、最後の項目に[Algorithms for data processing]という項目があり、COMPROで用いたデータ処理法の数学的な基礎を記述してあるので参考になれば幸いである。

[Help] - [Mail to COMPRO]をクリックするとユーザーが使用しているメーカーが起動し、不明な点の問い合わせ、問題点の指摘、修正希望などをCOMPROの管理者に送信することが出来る。寄せ

られた意見がCOMPROの発展につながるので気軽に連絡していただければ幸いである。

[Help] - [Version]をクリックするとダウンロードしたCOMPRO12の発行日とバージョンが表示される。COMPROは随時更新されているので、ホームページに記載されているバージョンと自分のPCにダウンロードしてあるバージョンとを比較して、最新版のバージョンでない場合には、更新をお勧めする。

項目をクリックするとマニュアル等が表示される。

16. 参考文献

- [1] 松本凌, 西澤侑吾, 片岡範行, 田中博美, 吉川英樹, 田沼繁夫, 吉原一紘, *J. Surf. Anal.* **22**, 155 (2016).

査読コメント, 質疑応答

査読者 1. 吉川 英樹 (物質・材料研究機構)

本解説は、最新バージョン (version 12) の COMPRO の機能がまとめられており、COMPRO の普及を推進する SASJ が発行する JSA 誌において、掲載の価値が十分にあると考えます。掲載にあたり、以下の点をご検討頂きますようお願い致します。

[査読者 1-1]

本記事には、Introduction (はじめに) にあたる部分がなく、アブストの内容が Introduction の内容を含んでいます。従いまして、Introduction (はじめに) の節を追加して頂き、代わりにアブストの部分を、COMPRO の前のバージョンとは異なる特徴を中心とした書き方にされた方が良いと思います。

[著者]

「はじめに」の節を追加し、そこに COMPRO 開発の簡単な経緯を述べるようにしました。代わりにアブストラクトの部分を COMPRO12 に加わった新しい機能を紹介する内容に変更しました。

[査読者 1-2]

本文中に「デコンボリューション」「コンボリューション」の表現が見られます。ここでの「コンボリューション」は、数学上の定義である「畳み込み積分」の意味ではなく、「スペクトルの足し算」という意味で使われています。また「デコンボリューション」は、「畳み込み積分の逆演算」という意味ではなく、「スペクトルの減算」という意味で使われています。これは数学上の定義から外れますので、「コンボリューション」は「ピーク合成」、「デコンボリューション」は「ピーク分離」または「ピークフィッティング」の用語に替えた方が良いと思います。なお、COMPRO のキャプチャー像での説明等で、「デコンボリューション」「コンボリューション」という用語を使わざるを得ない部分については、数学上の定義とは異なる旨の注を入れるのが良いと思います。

[著者]

ご指摘の通り、数学的な意味での「デコンボリューション」・「コンボリューション」ではありませんので、「フィッティング」・「合成」に変更しました。なお、タイトルはピークフィッティングとし

ました。併せて COMPRO の GUI の部分も [deconvolution] という表示は全て [fitting] という表示に変更しました。なお、変更後のバージョンは 2 月中旬を目途にホームページにアップロードします。

査読者 2. 佐藤 美知子 (富士通クオリティラボ)

COMPRO の使い方については、本解説の要旨にも書かれていますが、Vol.19, No.1 (2012) から Vol.21, No.3 (2015) まで、Vol.19, No.3 と Vol.20, No.3 (PSA-13 Proceedings 号) を除き「Common Data Processing System Version 10 の使用法 (1) ~ (7)」として JSA 誌に解説が連載されています。Vol.19, No.3 には ISO フォーマットについての解説がありますので、読者の方々には、一緒に参照されることをお勧めします。また、Version 12 における主な変更点の一つである動的 Shirley 法については、Vol.22, No.3 に解説が掲載されています。

COMPRO 開発は、使用法 (1) の冒頭で説明されているように、共同試験の際に、異なる機種で測定されたデータを共通のデータ構造に変換して取り扱うために始まりましたが、バージョンアップを重ねるうちに、多様なデータ処理法を利用できるプラットフォームへと変貌した感があります。普段は装置附属のソフトウェアでデータ処理をするだけになりがちですが、世界の研究者が提案した優れた処理法を利用できる環境を提供して下さる吉原様のご活動に敬服いたします。

本解説では、Version 12 の主な変更点が紹介されており、JSA 読者に有意義な記事と考えます。提唱されて間もない動的 Shirley 法によるバックグラウンド差し引きが追加され、後藤先生のご提供による二次電子放出率が数値とグラフで見られるようになっています。また、実際に表面分析データを取り扱うことのある読者には、COMPRO を試用して改善を望む点などを洗い出して吉原様にご対応いただくことにより、COMPRO をさらに有用なものにしてほしいと思います。

[査読者 2-1]

動的 Shirley 法の解説でも同じ表現となっていました。[detection level] の説明において「デフォルトは 90% にしてあるが、これはスペクトルの最大値から測って 90% の範囲内に最大強度を持つピークのみを検出する」という意味である。」の意味がよく理

解できませんでした。敏感さを表すということから、%値が高い方が敏感であるとするれば、スペクトルの最大値の10%以上の強度を最大強度とするピークを検出すると言い換えることはできますでしょうか？ また、ここでの強度はゼロレベルからの強度でしょうか？

なお、ABS樹脂のC 1s スペクトルのバックグラウンドを動的 Shirley 法で差し引くことを試みたのですが、十分な強度があると経験的に考えられるピークがピークとして認識されず、また[detection level]値を変えても結果に変化が見られませんでした。ABS樹脂のスペクトルには $\pi \rightarrow \pi^*$ サテライトピークが見られるため、アンダーシュートを生じないバックグラウンド差し引きを期待しておりました。

[著者]

検出レベルの表現に関しては、ご指摘の通り分かりにくい表現となっていましたので、7節の「active Shirley」にある文章を「[detection level]ボックスの値でピーク検出の敏感さを設定できる。デフォルトは90%にしてある。これは、元のスペクトルの最大値の10%以上の強度を持つピークをピークとして抽出するという意味である。」と修正しました。なお、ここでの強度はゼロレベルからの強度ですので、文中には「元の」という文言を付け加えました。ただし、正確には平滑化したスペクトルの強度ですので観測値とは異なります。

期待していたピークが分離されなかったというご指摘ですが、active Shirley 法のアルゴリズムの開発者には同様の問題が発生することは連絡してあります。現状での解決方法の一つは Lorentz ratio を種々変えることではないかと思えます。そこで、6節の「2) active Shirley で差し引いた場合」に「これらの数値を変更することによりピークフィッティングで求められるピーク位置や高さなどを変更することが出来る。」という文言を付け加えました。

[査読者 2-2]

Thickogram 解析時に、エネルギー値の離れたピーク（例えばC 1s と Au 4f）を用いる場合、両ピークを同時に表示させるとバックグラウンドの端点の細かい調整ができませんでした。各々のスペクトル解析で求めた面積強度を使用する方法はないのでしょうか？

[著者]

wide range のスペクトルを用いた場合にピーク領域が正しく設定できないときには、スペクトル画面の右側にある[Z]ボタンをクリックしてピーク領域近傍を拡大していただければ領域設定は容易になると思われます。なお、2月中旬を目途にアップロード予定の改良版 COMPRO12 はブロックが異なるスペクトルでも Thickogram で解析できるようにしました。そこで、9節に「Thickogram に関してはこれまでは同一スペクトル上のピーク同士を比較する方法に限られていたが、COMPRO12 からは異なったブロックのスペクトルのピーク同士も比較することが出来るようになった。」という文章を付け加えました。