

技術報告**Common Data Processing System Version 5 の紹介**

吉原一紘

金属材料技術研究所 〒305-0047 つくば市千現 1-2-1

e-mail:kazuhiro@nrim.go.jp

(1998年4月13日受理; 1998年4月24日掲載決定)

Windows95の上で稼働するデータ処理ソフトウェア Common Data Processing System(COMPRO)の Version 5 が利用可能となっているので、その使用方法を解説する。COMPRO は異なった装置で得られたスペクトルを共通の環境で処理することを目的として表面分析研究会の活動の一つとして作成されたものである。

Introduction to Common Data Processing System Version5**K.Yoshihara**

National Research Institute for Metals

1-2-1 Sengen, Tsukuba 305-0047

e-mail:kazuhiro@nrim.go.jp

(Received April 13 1998; accepted April 24 1998)

Common Data Processing System, which runs on Windows95, is the software to share the spectral data acquired on different machines. Common Data Processing System(COMPRO) has been created as one of the activities of the Surface Analysis Society of Japan. The general concept of COMPRO will be introduced in this paper.

1 インストール方法

Common Data Processing System (以後、COMPRO) は、表面分析研究会のインターネットのホームページ (sekimori.nrim.go.jp) にアクセスし、Provides Common Data Processing System という箇所をクリックして、現れたメッセージの Compro50 という箇所をクリックすると Compro_1.exe, Compro_2.exe, Compro_3.exe, Compro_4.exe および Compro_5.exe のリストが現れる。これらのファイルリストをクリックすると自分のコンピューターにダウンロードできる。自分のコンピューターのどのディレクトリーにダウンロードしてもかまわない。これら5種類のファイルは自己解凍ファイルなので、実行するとそれぞれ解凍されて Program Files¥Compro50 というディレクトリーの中にインストール用ファイルが生成される。生成されたファイルの中

に Setup.exe というファイルがあるので、それを実行すると COMPRO50 がインストールされ、「握手アイコン」がタスクバーの中に出てくる。「握手アイコン」をクリックすると COMPRO50 が稼働する。なお、現在のバージョンは 5.33 である。

2 使用方法**2.1 スペクトルの表示**

上部にあるメニューバーの[File]をクリックすると、メニューが出現する。このメニューの中の [Open file] をクリックするとファイルの読み込みダイアログボックスが出現する。ファイルのあるディレクトリーに移動すると、ディレクトリー内にデータ転送フォーマットにより記述されたデータファイル (NPL という拡張子を持っている) があれば、ダイアログボックス内に表示

クスが出現する。自分の分光器で取得した Au または Cu のスペクトルを選択すると、現在のスペクトルに自動的にそのスペクトルが添付される。

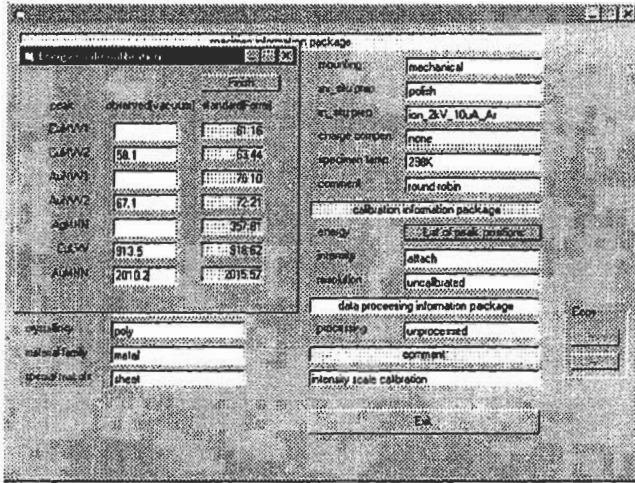


図3 エネルギー軸校正情報の表示

2.3 フォーマットの変換

COMPRO では ISO/VAMAS フォーマットで記述されたスペクトルを取り扱う。従って、他のフォーマットで記述されたデータは ISO/VAMAS フォーマットに変換することが必要である。COMPRO は ASCII コード (テキストコード) で記述されたスペクトルならば、ほとんどすべて ISO/VAMAS フォーマットに変換することが出来る。スペクトル表示画面の [File] をクリックし、メニューの中から [Convert] を選択するとファイル選択用のダイアログボックスが出現するので、その中から変換したいスペクトルを選択すると、ファイルの構造が解析されて、スペクトル画面が表示される。

表示されたスペクトルが異常 (スペクトルに属さない値がスペクトルの一部として表示される) であれば、[Delete from left/right] というボタンをクリックすると不必要な値を削除することが出来る。また、表示されたブロックがスペクトルでない場合には [Delete displayed block] というボタンをクリックすると、表示されたブロックは除去される。以下は「指アイコン」の指示に従って、入力していけば良い。指示された項目すべてを入力すると、[Select version] というフレ

ームが現れ、フォーマットとして [Partially] または [ISO] のいずれかを選択することが要求される。従来、VAMAS フォーマットとして簡略型のフォーマット [Partially] を使う場合が多かったが、今後は完全型 [ISO] を用いることが推奨される。ここでは、[ISO] を選択することを薦める。[Partially] あるいは [ISO] のいずれかの選択をすると、装置の条件に関する入力画面が現れる。この画面では、市販装置のモデルの一覧が現れる。自分の装置名をクリックすると、右側にその装置の基本的な測定条件が示されるので、そのまま良ければ [Enter values] をクリックすると、表示されたデータがスペクトルに記録される。なお、表示された項目を修正したいときにはその項目をクリックすると、項目修正画面が現れるので、その画面上で修正することが出来る。また、自分の装置名が無いときには、[Add model] をクリックすると新しく登録できる。[Enter values] をクリックすると、装置名やオペレーター名の入力が必要される。全ての入力が終わると変換が完了し、スペクトル表示画面に戻る。

なお、詳しい情報の入力方法に関しては既に児島らによる解説があるのでそれを参照していただきたい⁽¹⁾。

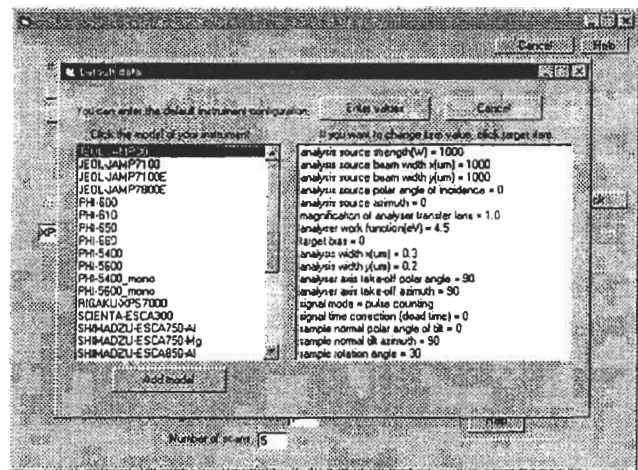


図4 装置定数に関する既定値選択画面

2.4 スペクトルの拡大

ある特定の領域を拡大したいときには2種類の方法がある。一つはスペクトルの上で拡大し

たい領域をマウスの左ボタンをクリックしながらドラッグすると四角が現れる。マウスのボタンを離すと、四角で囲まれた領域が拡大される。拡大を解消して元のスペクトルに戻るにはマウスの右ボタンをクリックする。拡大されるエネルギー範囲はスペクトルの右上に示される。もう一つの方法は、スペクトル表示画面上でメニューの[Processing]をクリックし、現れたリストの中から[Zoom]を選択する方法である。[Zoom]を選択するとスペクトルの右上に拡大したいエネルギー範囲を入力できるボックスが現れる。スペクトルの右下の溝をクリックして縦のカーソル棒を出現させるか、あるいはエネルギー値をボックスの中に入れることにより拡大したい領域を決めることができる。カーソル棒の位置とボックスの値は連動している。カーソル棒は溝の部分をドラッグすると移動できる。領域の入力が終了したら[Zoom]というボタンをクリックするとカーソル棒で囲まれた領域が拡大される。拡大を解除するには、マウスの右ボタンをクリックする。

2.5 データ処理

スペクトル表示画面上でメニューの[Processing]をクリックすると[Zoom][Deconvolution][Differentiate][Smoothing][Background][Peak fitting][Qualify][Quantify][Calibrate][Depth profile analysis]の選択メニューが現れる。DeconvolutionはGauss関数でのDeconvolutionが出来る。また、Jansson法によるDeconvolutionも可能である。微分はSavitzky-Golay微分法で行われ、微分結果は元のスペクトルに重ねて示される。結果が表示されると[Proceed]と[X]の二種類のボタンが現れる。[X]ボタンをクリックすると元の画面に戻り、[Proceed]を選択すると、処理したスペクトルの名前を記入するダイアログボックスが現れる。入力した名前は[Windows]メニューの中にしまわれている。なお、処理の取り消しはマウスの右ボタンをク

リックしてもよい。スムージングはSavitzky-Golay法またはSprine関数法の2種類で行うことができる。

スペクトル表示画面上でメニューの[Processing]をクリックし[Background]を選択すると[Linear],[Shirley],[Tougaard],[Sickafus]の選択画面がでる。通常2本の垂直カーソル棒が現れ、それを移動させるとその範囲でバックグラウンドが差し引かれる右上に[Intensity=count*eV]という表示があり、ここにバックグラウンドを差し引いた面積が表示される。数値の前のボックスをクリックすると面積がメモリーに登録される。水平カーソル棒、垂直カーソル棒のいずれのドラッグを終了(マウスの左ボタンを離す)しても、[Proceed]と[X]の二種類のボタンが現れる。[X]ボタンをクリックすると元の画面に戻り、[Proceed]を選択すると、処理したスペクトルの名前を記入するダイアログボックスが現れる。入力した名前は[Window]メニューの中にしまわれている。なお、処理の取り消しはマウスの右ボタンをクリックしてもよい。また、メニュー画面から[Processing]→[Peak fitting]と選択していくと、ピークフィッティングを行うことが出来る。ただし、市販のソフトとは異なり、完全な自動化にはなっておらず、手動部分が残されている。

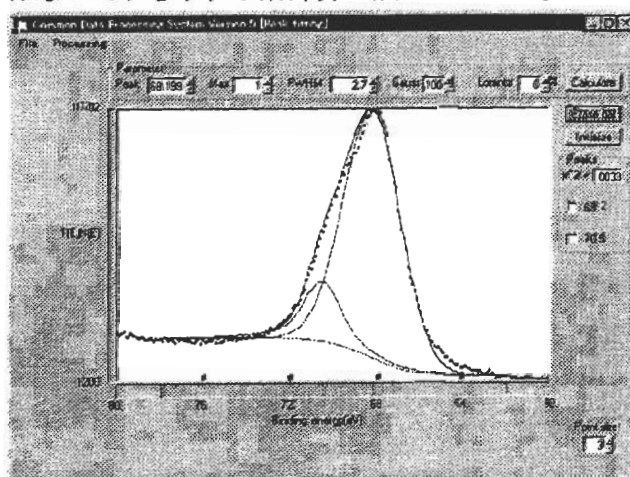


図5 ピークフィッティング

メニューの中から[Qualify]を選択すると[Element]と[Peak]の選択肢が現れる。[Element]を選択すると右上方に元素名が現れる。元素名の

横にあるスクロールバーをクリックすると原子番号順に元素名が変化する。あるいは元素名を記入してもよい。元素名を変化させると、それに対応してピーク値が出現する。メインピークは赤字で示される。なお、XPS の場合、オージェピークは青字で示される。一方[Peak]を選択すると垂直カーソル棒が現れる。それをドラッグすると垂直カーソルの位置に対応して、Peak 値が右上に表示され、そのピーク値を持つ元素名が表示される。赤字の元素名は表示されているピークが主ピークであることを示している。ピーク値が現れているボックスのスクロールバーをクリックすると垂直カーソル棒は連動して移動する。定量を選択すると相対感度による濃度の計算ができる。

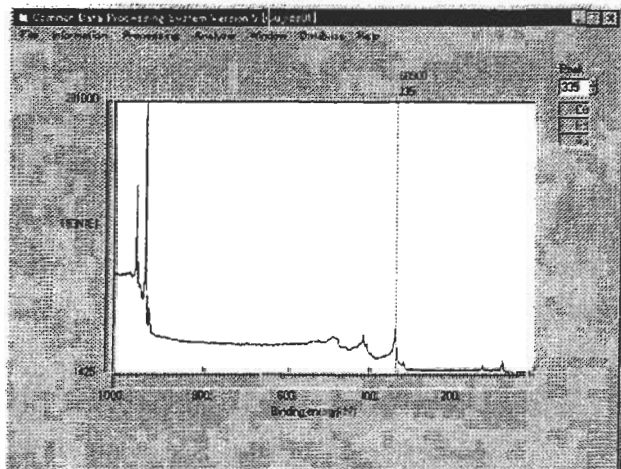


図6 定性に際し、ピーク位置データベースの利用

2.6 分光器の校正

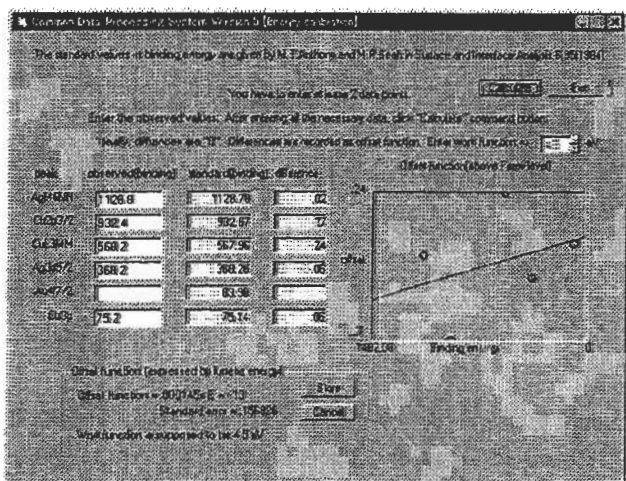


図7 オフセット関数の計算

スペクトル表示画面のメニューで[Analyzer]-[Energy scale]を選択すると[AES]と[XPS]の選択肢が現れる。[XPS]の場合は、さらに[Al]と[Mg]に分かれる。Au, Ag, Cu の標準値が記述されているので、それに対応した観測値を記入すると offset function を計算して表示する。[Store]ボタンをクリックすると offset function が記録される。Cu または Au のスペクトルを利用すると強度軸の校正ができる。スペクトル表示画面のメニューで[Analyzer]-[Intensity scale]を選択すると、表示されているスペクトルが Au または Cu かを確認するメッセージが現れた後、標準スペクトルのリストが現れる。標準スペクトルのリストから、表示されているスペクトルに対応したスペクトルを選択すると、表示スペクトルが標準スペクトルで割られて、その結果が画面上に表示される。結果は関数の形 (AES の場合は電子増倍管の特性をパラメーターとしている) で保存されるので、パラメーターを変化させて、[Calculate]ボタンをクリックして最適な関数を求める。関数が見つかったら、[Store]ボタンをクリックして保存する。

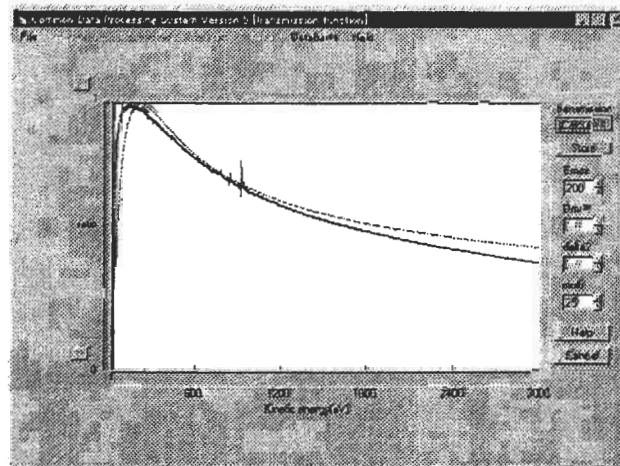


図8 強度軸校正関数の計算

表示されているスペクトルが、校正情報を持っているか、あるいは COMPRO に校正情報が保存されている場合 ([Analyzer]メニューで作成した関数を保存した場合) には、メニューから[Processing]-[Calibrate]を選択すると、表示スペクトルの校正ができる。なお、オフセット関数、

強度軸校正関数の詳細については、解説⁽²⁾を参照されたい。

2.7 スペクトルの重ね書き

COMPRO に表示させたスペクトルはメニューの[Window]のリストに保存されている。これらを重ね書きしたい場合には、[Overlay]を選択する。[Overlay]を選択すると表示させたいファイル名が表示されるので、重ね書きしたいファイル名をクリックする。二つ以上のファイル名がクリックされると[Overlay selected files]ボタンが使用可能となるので、それをクリックすると重ね書きされる。AES スペクトルと XPS スペクトルを同時表示する場合には横軸は[Kinetic energy]になる。Al 励起と Mg 励起の Ni スペクトルを重ね合わせた結果を示す。

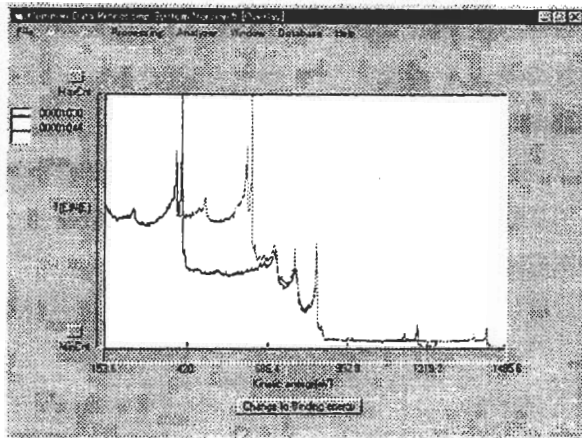


図9 Al 励起と Mg 励起の Ni スペクトルを重ね合わせた画面

励起線のエネルギーが違う場合には、横軸表示は[Kinetic energy]が基準となる。これは、分光器では運動エネルギーを基準として測定されているからである。しかし、XPS の場合には[Binding energy]を基準として比較することが頻繁に行われるので、[Change to Binding Energy]というボタンをクリックすると、横軸が[Binding energy]表示に変換される。

領域の拡大は、マウスの右ボタンを押しながら拡大したい領域をドラッグするか[Processing]メニューの[Zoom]をクリックすることにより実行できる。なお、スペクトルの左側にあるスペ

クトルの名前をクリックすると、スペクトルをエネルギー軸に沿って移動することが出来る。

2.8 深さ方向分析

1) MRI モデルによる深さ分析の解析

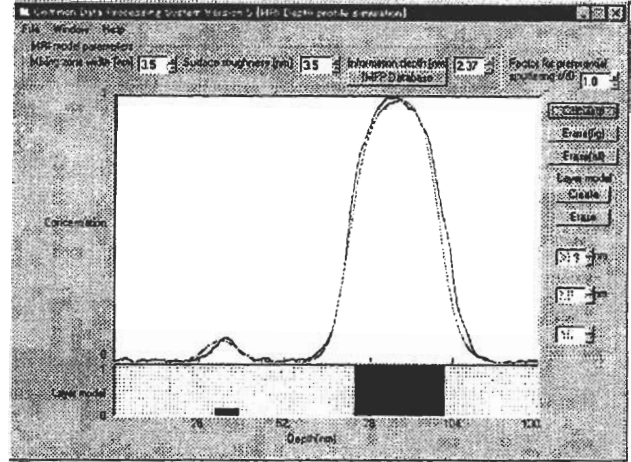


図10 MRI モデルによる層解析

横軸が時間軸のデプスプロファイルの場合は、メニューの[Process]をクリックし、[Depth profile analysis]というメニューから[MRI simulation]をクリックすると、横軸を長さに変換するために、スパッタリング速度を入力するダイアログボックスが現れる。スパッタリング速度を入力するとシミュレーション計算画面が現れる。

この計算は層状態を仮定し、それを元にしてデプスプロファイルを Mixing, Roughness, IMFP を変化させて計算し、実測といかに合うかを計算するものである。

2) Logistic 関数による解析

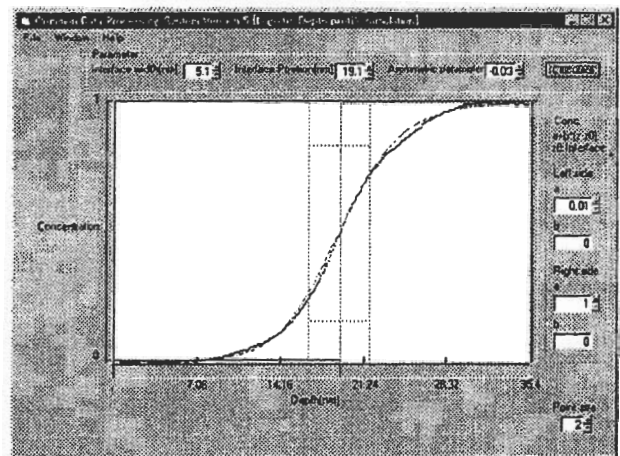


図11 Logistic 関数による界面解析

[Logistic function]をクリックすると、界面分布を Logistic 関数で近似した画面が現れる。界面幅、界面位置などを微調整することにより、ベストフィットのカーブが得られる。

2. 9 データベースの利用

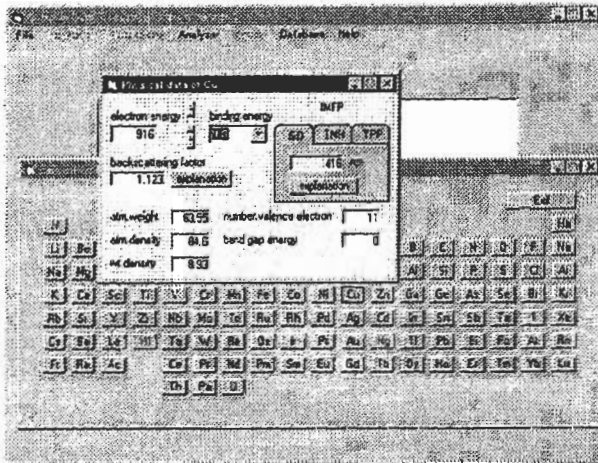


図12 物理定数データベース

COMPRO は物理パラメータのデータベース、ピーク値のデータベース、標準および参照用スペクトルデータベースを持っている。ただし参照用スペクトルデータベースを利用するにはインターネットで COMPRO のダウンロード用ファイルとともに[Bankdata.EXE]をダウンロードし解凍しておく必要がある。また、インターネットで表面分析研究会のホームページにアクセスするショートサーキットメニューもある。[Peak energy]をクリックすると元素表が現れる。それをクリックすれば各元素の AES および XPS ピークが表示される。赤字は主ピークである。

[Physical data]を選択すると同様に元素表が現れる。それをクリックすれば各元素の Backscattering factor と IMFP が計算される。[SD], [TNH], [TPP]はそれぞれ IMFP の計算方式である。[explanation]というボタンをクリックすると計算式の説明文が現れる。スペクトルデータベースがインターネットからダウンロードされていれば、スペクトルデータベースが利用できる。[Standard]は強度校正用の標準スペクトル、[Goto]は後藤らによる絶対オージェスペクトル、

[Reference]は参照用のスペクトルである。[Reference]をクリックすると元素表が現れ、元素の一つをクリックすると、それに対応したスペクトルのリストが出現する。表示したいスペクトル名をクリックすればスペクトル表示画面に表示される。

3 おわりに

COMPRO は装置に組み込まれている市販のソフトとは異なり、異なったスペクトルデータを共通で扱うことを目的としている。また、原則にしたがってデータ処理をする事を目的としており、データ処理過程ができるだけ外に見えるようにしている。したがって、市販のソフトに比べると使い勝手や、自動化などの点から見るとかなり不満を持たれるかもしれないが、表面分析研究会活動の一つの成果ということでご容赦願いたい。なお、データの処理過程には当方の理解不足による誤りがある可能性があるため、気が付いた点があればご指摘願いたい。

なお、Version4 と Version 5 の主な相違点を表にして示す。

表1 Version4 と Version5 の主要相違点

項目	Version4	Version5
環境 (OS)	Windows3.1	Windows95
データ構造	省略型 VAMAS	ISO/VAMAS
データ構造変換	主要装置のデータ	ASCII ファイル対象
データ型	スペクトル	スペクトル デプス
データ処理	スペクトル解析	スペクトル解析 デプス解析
データベース	物理定数 スペクトル	物理定数 スペクトル ピーク位置

最後に Version5 作成にあたり、バグの解析に多大な時間を割いていただいた児島淳子さん、野々上寛さん、MRI モデルを組み込んで頂いた Siegfried Hofmann さん、および Logistic 関数組み込みに際して指示を頂いた田沼繁夫さん、田中彰博さんに感謝の意を表します。

参考文献

- (1) 児島淳子、データベース委員会、JSA, 4, 86(1998)
- (2) 吉原一紘、JSA, 1,5(1995)

査読者との質疑応答

野々上寛 (三洋電機)

Compro Version5 を使用するに当たって必要な情報が網羅されており、大変貴重な資料です。私が本年1月に頂いた Version 5.20 と比較して大幅に機能が增强されているようで、大変感激いたしました。ご苦勞をお察し申し上げます。JSA に掲載する上では、以下の点をご配慮頂ければよりわかりやすくなるのではないのでしょうか。

(1) 基本的には、Compro Version5 は、Version4 からのバージョンアップです。Version5 および本解説を利用される多くの方は Version 4 を使われた事があると思います。ですから、Version 4 からの主な変更点、追加機能等の一覧があれば大変理解の助けになると思います。

著者

ご指摘の通りですので、対照表を文末に付け加えました。

(2) 2. 5 データ処理で、ピークフィッティングのやり方がよくわかりません。少なくとも、どのメニューの何を選択すべきかを明記頂けませんか？

著者

書き方が不十分でした。付け加えます。

(3) JSA 4, 86(1998) で、児島氏が「Compro Version5 を用いた提出データ入力の手引き」を書かれております。Compro Version5 を使用する上で、本解説と併用すべきだと思いますので、「参考文献」として紹介されたいかがでしょうか。

著者

本解説は使用方法のみを書いたために、参考文

献等は省略することにしていましたが、ご指摘の文献を付け加えます。

児島淳子 (松下テクノ)

この論文は COMPRO Version 5 の多様な機能をサンプルで紹介されており、かつ COMPRO Version 5 を使う場合のファーストステップガイドともなる大変有益なものだと思います。

(1) 分光器の標準値や offset function などは、すでに過去の JSA において何度も紹介はされていますが、初めて読まれる方もいらっしゃると思いますので、参考文献をある程度紹介していただけたほうがいいのではないのでしょうか。

著者

JSA へ掲載した解説記事を参考文献として付け加えます。

(2) (2. 1 スペクトルの表示の15行目)「カーソル棒はドラッグして・・・10本まで」とありますが、同様に水平のカーソル棒の本数も表示されてはどうでしょうか？また、手元にある Version5.2 でやってみると、垂直は11本(水平は6本)表示されてしまいましたが・・・？

著者

水平のカーソル棒に関しても付け加えます。また、10本ではなく11本でした。申し訳ありませんでした。

(3) スペクトルの重ね書きにおいて、AES と XPS の重ね書きの場合に、kinetic energy 表示のみというのは原理的にも納得がいくのですが、励起エネルギーが同じ場合でも特にオージェピークなど、binding energy だけでなく kinetic energy 表示をしたい場合もあるのではないかと思います。いかがでしょうか？

著者

気がつきませんでした。ご指摘に従って、検討します。

(4) また今回の論文とは直接関係ないのですが、分光器のオフセット関数を計算するメニューで出力される Standard Error が、市販のソフト (Excel や Origin) で計算したものと若干値が異なっているようなのですがどうしてでしょうか? 傾きと切片は同じです。

著者

これは、計算の時の端数整理などが効いているのだと思いますが、検討させてください。