

講義

COMPRO Version6 使用方法 (II)

吉原一紘

金属材料技術研究所

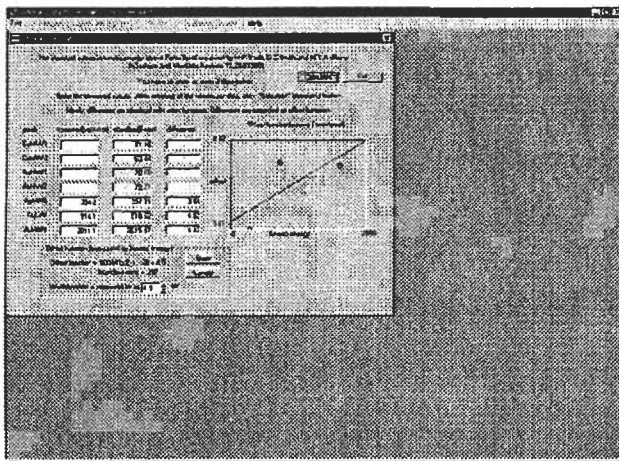
〒305-0047 つくば市千現1-2-1

Common Data Processing System Version6 (COMPRO6)が完成したので、表面分析研究会ホームページにアップロードした。Version6 は Version5 に比べてかなり多くの機能が付加されたため、2回に分けて使用方法を解説することにした。なお、第1回(第6章まで)は Vol6、No2 に掲載されている。

7 エネルギー軸・強度軸の校正

7.1 エネルギー軸の校正用関数の取得

3.2.2 では、スペクトルデータにエネルギー軸校正に関する情報を添付することを練習しました。互いにスペクトルを比較するときには、分光器のエネルギー軸を校正することが必要です。COMPRO6 では Ag, Au, Cu の観測値と標準値との差をエネルギーの一次関数(オフセット関数)として保存します。



{Analyzer} - {Energy} - {AES}を選択して下さい。エネルギー校正用画面が出現します。ここでは、3章と同じように、AgNMM に"354.2"、CuLVV に"914.1"、AuMNN に"2011.1"と記入して、[Calculate] ボタンを押して下さい。

AES の場合は標準ピーク位置はフェルミ基準で与えられていますので、この観測値と標準値の差は仕事関数になります。ただし、物理的な意味での仕事関数ではありませんので、ここではオフセット関数

と定義します。オフセット関数が計算され、結果が表示されます。[Store]ボタンを押して下さい。校正データは[aes_calb.eca]という名前で保存されます。この名前は変更できません。なお、既に[aes_calb.eca]がある場合には、古いファイルを保存するかどうかを聞いてきます。

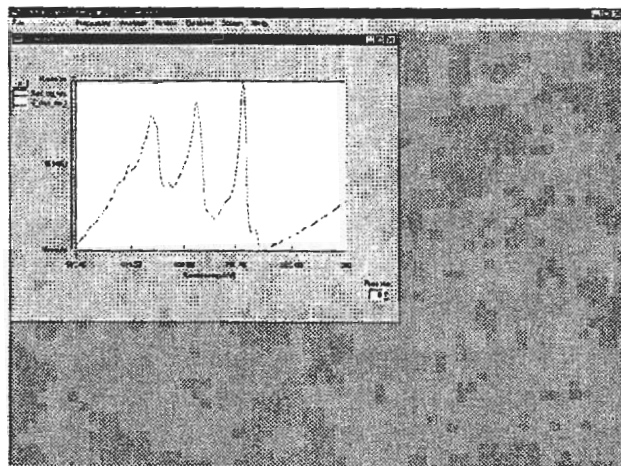
校正データを保存しておけば、その情報は ISO14975 で要求されるエネルギー軸校正情報を記入する際に利用できます。

7.2 エネルギー軸の校正

{Window}から[Aes_co_test.npl]を選択します。このファイルは練習でキャリブレーションデータを添付したものです。強度校正用の Cu スペクトルが添付されているのでリジョン選択用のコンボボックスが現れます。コンボボックスから[Co-Co LMM:550-900]を選んで下さい。[Aes_co.npl]のスペクトルが表示されます。

{Processing} - {Calibration} - {Energy} - {Use attached data}を選択します。添付された校正情報に基づいて校正されたスペクトルが緑色で上書きされます。校正されたかどうかよく分からないと思いますので、拡大してみてください。スペクトル表示領域の左側の[X]ボタンを押して下さい。ファイルを[Compro04]と言う名前で保存するかを聞いてきますが、保存の必要はありませんので[Cancel]を選択して下さい。校正スペクトルは消去されて、元の画面に戻ります。なお、{Use stored function}を選択すれ

ば 7.1 で作成したオフセット関数を利用して校正されます。表示画面は全く同じになります。

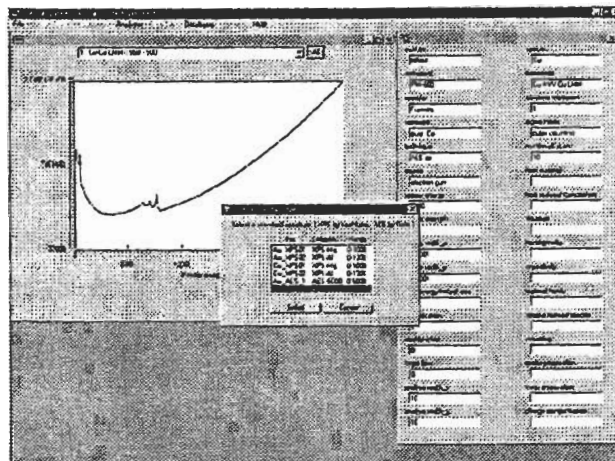


7.3 強度軸の校正

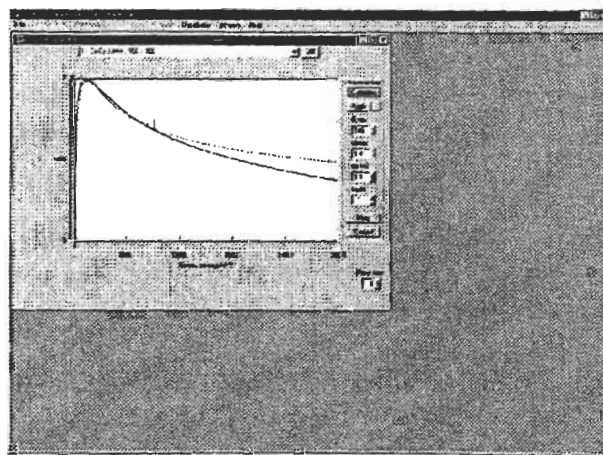
現在表示されているファイルには 3.2.2 で、校正用ファイルとして Cu のスペクトル (Aes_cu_clv.npl) を添付しました。この校正用ファイルを利用して表示スペクトルの強度補正をします。{Processing} - {Calibrate} - {Intensity} - {Use attached file} - {Aes_cu_clv} を選択して下さい。説明文が出ます。[Ok]ボタンを押して下さい。添付されている Cu のスペクトルが表示され、標準スペクトルの選択画面が現れますので、Cu_AES_1 を選択して、[Select]ボタンを押して下さい。このスペクトルは名工大の後藤敬典先生が、電子増倍管の影響を排除した分光器で取得したものです。強度補正は、添付された Cu のスペクトルを後藤先生の取得した Cu のスペクトルで除算したものを補正関数として用います。したがって、校正スペクトルは観測したスペクトルにこの補正関数をかけたものになります。

除算が行われ、画面に除算結果が表示されます。画面の右側の [Transmission] フレーム内に COMPRO6 ではこの除算された関数形を電子増倍管の特性値で表すようにしています。計測方式が analogue か pulse counting かで異なりますが、[E_{max}]は 2 次電子増倍効率が最大となる電圧、[D_{max}]は [E_{max}]における 2 次電子増倍係数、[delta2]は平均の 2 次電子増倍係

数、[multi]は増倍段数です。なお、これは AES の場合ですが、XPS の場合の補正関数は ToE^n の形で表され、画面上で To および n を変えられるようになっています。ここで E は電子の運動エネルギーです。



添付した Aes_cu_clv.npl は pulse counting 方式で計測していますので、それに対応した変数が調整できます。ここでは [E_{max}]に "140", [D_{max}]に "1.4", [delta2]に "1.1"を設定し、[Calculate]ボタンを押して下さい。緑色で補正関数が表示されます。高エネルギー側での一致が良くありませんので、この表記方法が現実に応用できるかどうかは検討しなければなりません。あるいは単純な関数形で表す方式もオプションで採用できるようにしておくことが必要かも知れません。



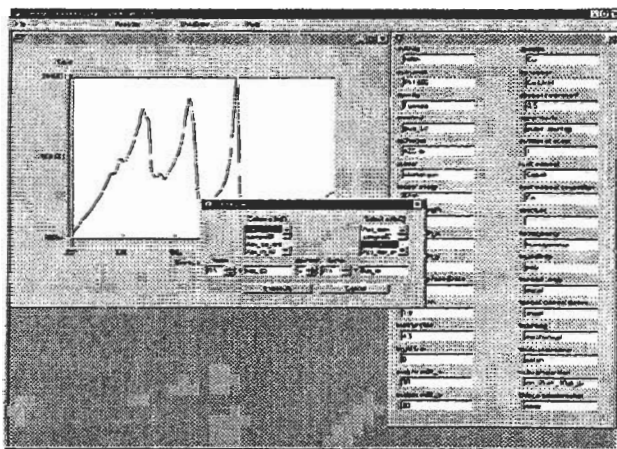
[Transmission]フレーム内の [Apply]ボタンを押して

下さい。この補正関数で補正した、Aes_co_test.nplの形が緑色で表示されます。左側の[X]ボタンを押して下さい。補正の必要はありませんので、ファイル名入力画面で[Cancel]を押して下さい。元のスペクトルに戻ります。

強度補正関数を、COMPRO6の中に保存しておくことも可能です。自分の測定器で取得したAuまたはCuのワイド領域のスペクトルを表示させ、{Analyzer} - {Intensity}を選択し、確認メッセージで[Ok]を押すと、標準スペクトル選択画面が現れます。計算の後、[Transmission]フレームで[Store]ボタンを押すと強度補正関数が保存されます。

8 スペクトルの加減乗除

{Window} - {Synthesize}を選択して下さい。今までに使用したスペクトルの選択画面が現れます。



[Select a file(1)]から[Aes_co]を選択し、[Select a file(2)]から[Aes_ni]を選択して下さい。[factor]は両方とも"0.5"として下さい。中央の[operator]は[+]として下さい。この意味はAes_coの50%とAes_niの50%を足しあわせたスペクトルを合成せよということです。[operator]は[+], [-], [*], [/]の4種類から選択できます。[Execute]ボタンを押して下さい。

Aes_coとAes_niと合成されたスペクトル[Syn]が同時に表示されます。スペクトル表示領域の左側の[X]

ボタンを押して下さい。合成ファイルの名前を聞いてきますので、デフォルト(Compro04)をそのまま入力して下さい。

{Windows} - {Overlay}から今作成したCompro04とAes_coniを選んで同時表示させて下さい。両者が良く一致していることが分かります。この演算は、合成スペクトルを作成するばかりでなく、[operator]で[-]を選択することにより、差スペクトルを作成して微量成分を同定するときに用いることができます。

9 データベース

9.1 ピーク位置データベース

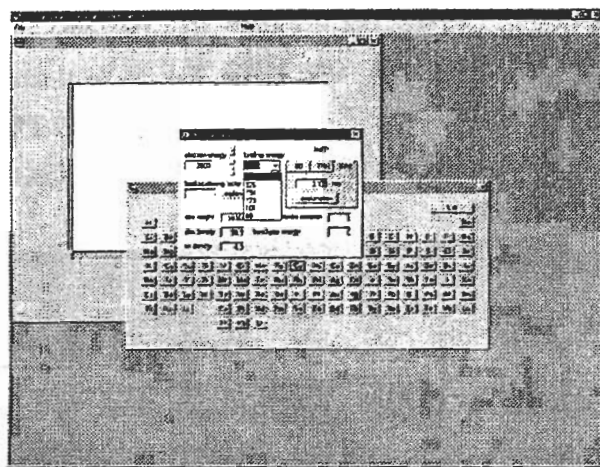
{Database} - {Peak}をクリックして下さい。周期律表が現れます。周期律表の[Co]ボタンを押して下さい。[AES], [AES-diff], [XPS-Al], [XPS-Mg]の4つのボタンが現れます。[AES]ボタンを押して下さい。ピーク位置とその遷移が現れます。強度の大きいピークは赤色で表示されます。同様に[AES-diff], [XPS-Al], [XPS-Mg]のボタンを押してみてください。周期律表の[Exit]ボタンを押して下さい。

9.2 物理定数データベース

{Database} - {Physical data}をクリックして下さい。周期律表が現れます。周期律表の[Co]ボタンを押して下さい。Coの背面散乱係数や非弾性散乱自由行程などの基本的なパラメータが出現します。

[binding energy]の矢印をクリックして下さい。Coの束縛エネルギーの一覧表が現れます。[926]を選択して下さい。[backscattering factor]が[1.412]と表示されます。[IMFP] (非弾性散乱平均自由行程) は[SD] (Seah-Denchの式)、[TNH] (Tokutaka-Nishimori-Hayashiの式)、[TPP] (Tanuma-Penn-Powellの式) で計算された値が表示されます。現在は、[TPP]で計算された2500eVの電子のCo中での平均自由行

程を[TPP]で計算した[3.139]nm が表示されています。
[electron energy]を[2500]から"1500"に変更して下さい。
[backscattering factor]は[1.275]に、[IMFP]は[2.102]
に変わります。また、計算式は[explanation]ボタン
を押すと表示されます。周期律表の[Exit]ボタンを
押して下さい。

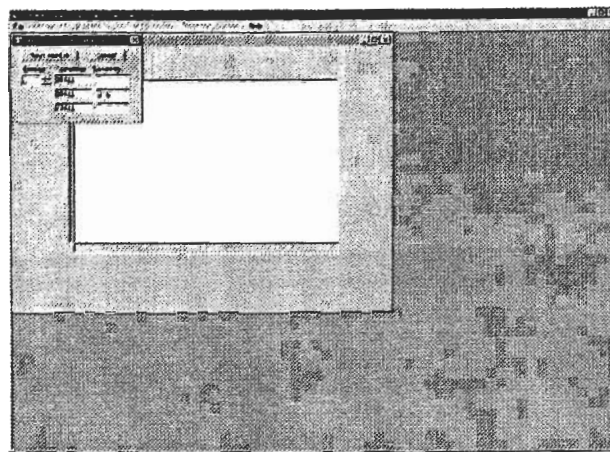


9.3 感度係数データベース

定量計算に用いる感度係数のデータベースを作成したり、修正します。{Database} - {Sensitivity} - {Create}を選択して下さい。[Sensitivity for AES], [Sensitivity for AES diff], [Sensitivity for XPS_Al], [Sensitivity for XPS_Mg]の4種類のボタンが現れます。[Sensitivity for AES diff]を押して下さい。[Li]のピーク位置と対応する遷移が表となって現れます。[50-KLL]の[Sensitivity]に"0.16"と記入してリターンキーを2度押して下さい。[Be]が現れます。[Sensitivity]に"0.10"と記入してリターンキーを押して下さい。このようにして入力していきます。今回はここで終了して、[Save and Exit]を押して下さい。データベースの名前を問い合わせてきますので、デフォルトの[MYsensbase]をそのまま選択して下さい。

作成した MYsensbase は[Li], {Be}しか入っていません。引き続き入力したい方は、{Database} - {Sensitivity} - {Upgrade}を選択し、[Sensitivity for AES diff] を押して、現れたコンボボックスから

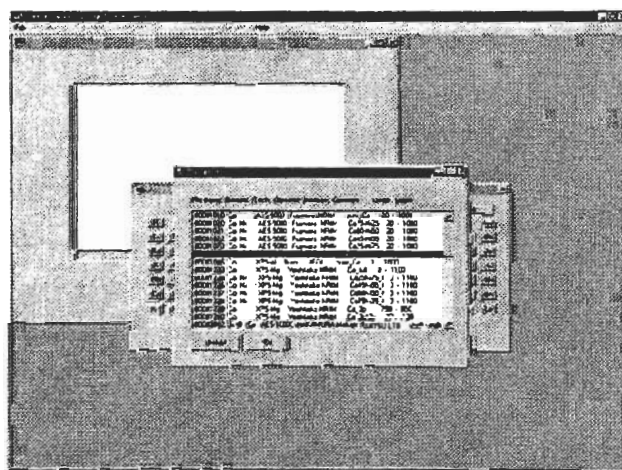
[MYsensbase]を選択し、志水、吉原編「実用オージェ電子分光法」の付表を利用して入力して下さい。不要な人は{Database} - {Sensitivity} - {Delete}を選択し、[Sensitivity for AES diff] を押して、現れたコンボボックスから[MYsensbase]を選択して、[Delete]ボタンを押して[Yes]を選択して下さい。MYsensbase は消去されます。



9.4 スペクトルデータベース

スペクトルデータベースには表面分析研究会が作成しているデータベースと、ユーザーが自分で作るデータベースとがあります。

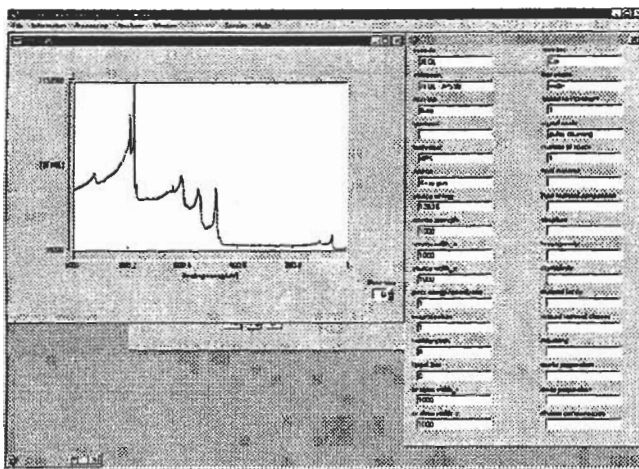
9.4.1 表面分析研究会データベース



{Database} - {Spectra} - {SASJ Database}をメニューから選択して下さい。メニューは{Standard}, {Goto}, {Reference}と{Inquiry items}に分かれます。{Standard}は COMPRO が装置の強度補正用に添付

してある標準スペクトルです。このメニューを選択するとリストが表示されます。{Goto}は名工大後藤先生が特別な装置で取得したスペクトルが集めてあります。ここでは、{Reference}を選択して下さい。

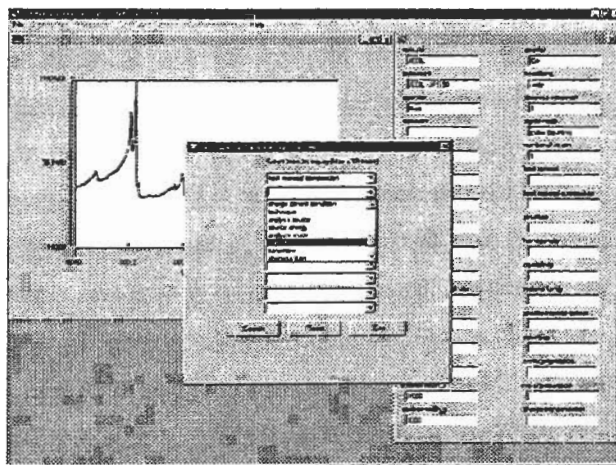
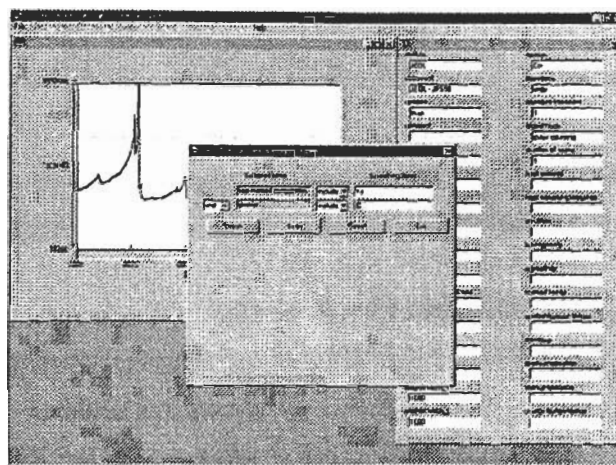
周期律表が現れますので、[Co]を選択して下さい。Co 金属、Co を含む合金、Co 化合物などのリストが表示されます。リストにはファイル番号、含有元素名、分析手法、測定者、測定機関、コメント、測定開始エネルギー、測定終了エネルギーが表示されます。[1045]を選択して[Select]ボタンを押して下さい。CoのXPSスペクトルが表示されます。



周期律表がスペクトル表示フォームの下に隠れていますので、見つけてフォームをクリックして下さい。周期律表が前面に現れます。[Exit]ボタンを押して下さい。あるいは、画面の左隅に最小化されているスペクトルのリスト表示フォームの[X]ボタンを押すか、フォームを通常大きさに戻し、そのフォーム上の[Exit]ボタンを押して下さい。どの方法でも周期律表を用いたデータベースの検索を終了できます。

{Database} - {Spectra} - {SASI Database} - {Inquiry items}を選択して下さい。表面分析研究会が構築したスペクトルデータベースは、インターネットで検索できます。ここでは、インターネットと全く同じ方法で検索できるようになっています。インターネッ

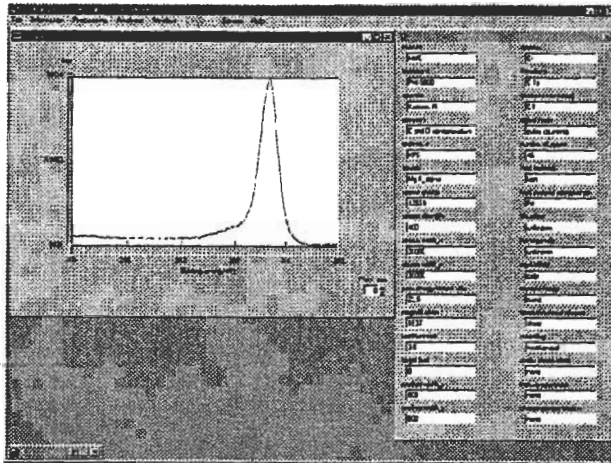
トでは検索項目が選択できるようになっています。現れたフォームは検索項目を入力する画面です。項目のコンボボックスの矢印をクリックすると、検索項目が現れます。ここでは、[host material composition]を選択して下さい。次に[species]を選択して下さい。[Search]を押して下さい。検索項目入力フォームが現れます。[host material composition]に"Fe"、[species]に"C"と記入して下さい。他の選択項目は変えないで下さい。[include]や[and]の意味はおわかりになると思いますが、後で変更して試してみてください。



これは「Fe 表面上の C のスペクトルを検索せよ」という検索条件です。[Search]ボタンを押して下さい。条件に合致したスペクトルは5本あるということが表示されます。[Display list]ボタンを押して下さい。リストの中から[2490]を選択して、[Display spectrum]ボタンを押して下さい。スペクトルが表示

されます。また、[Display information]ボタンを押すと[2490]のスペクトル情報が表示されます。

最小化されているリスト表示フォームの[X]ボタンを押して押し下して下さい。データベースの検索は終わりです。



9.4.2 自分で作るデータベース

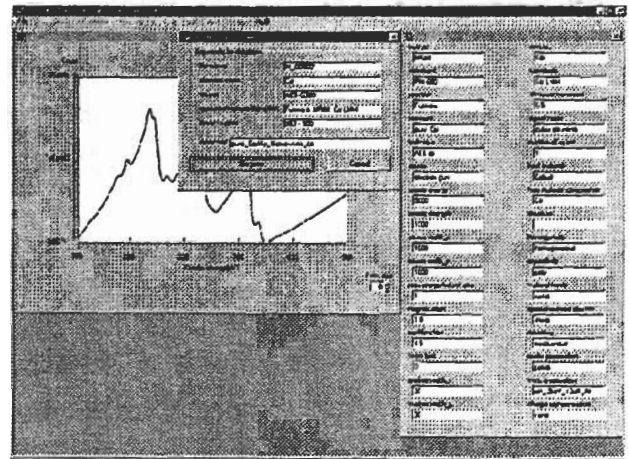
自分で取得したスペクトルデータをデータベース化したいことがあります。このようなときには、そのデータを表面分析研究会にお送りいただけるとありがたいのですが、ここでは COMPRO6 の中に自分だけのスペクトルデータベースを作る方法を説明します。

データベース化したいスペクトルを表示させます。ここでは{Window}メニューから[Aes_co]を選択して表示させて下さい。{Database} - {Spectra} - {My database} - {Add spectrum}を選択して下さい。表示されたスペクトルがデータベースとして登録される時に必要な項目が表示されます。この項目は表面分析研究会のデータベースと同じ内容になっています。表示された項目はこの画面では変更できません。これは、ファイルの内容を自動的に読み込んで表示するためです。ただし、[Comment]は変更可能です。[Register]を押して下さい。表示されたスペクトルは[M_000001]という番号で登録されました。登録される場所は表面分析研究会のデータベースがあるデ

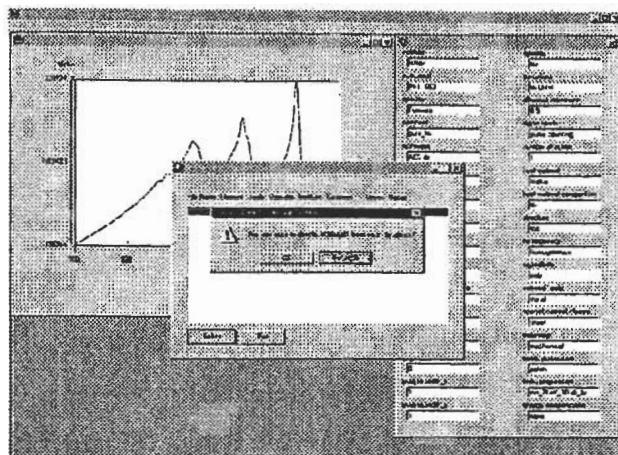
レクトリー [c:\vamaswin\bnk] の中の [MyDatabase] というディレクトリーです。

同じように[Aes_ni]を選択して登録して下さい。登録番号は[M_000002]に自動的に増えます。

{Database} - {Spectra} - {My database} - {Refer}を選択して下さい。登録した2本のスペクトルのリストが現れます。[M_000002]を選択して[Select]ボタンを押して下さい。Aes_co スペクトルが[M_000002]として表示されました。画面の左隅に最小化されているリスト表示フォームを通常の大きさに戻して下さい。[Exit]ボタンを押して下さい。



ータベースの登録したデータを消去することができます。{Database} - {Spectra} - {My database} - {Delete}を選択して下さい。登録した2本のスペクトルのリストが現れます。[M_000002]を選択して[Select]ボタンを押して下さい。確認メッセージが出ますので[Ok]ボタンを押して下さい。これで削除します。なお、既に登録した番号は使用できません。すなわち、[M_000002]は欠番になり、次に登録するスペクトルは[M_000003]となります。ただし、登録したデータが1本もなくなった場合には、登録番号は[M_000001]から再び始まるようになります。同様の操作で[M_000001]を消去して下さい。これで専用データベースは全く新しい状態になりました。

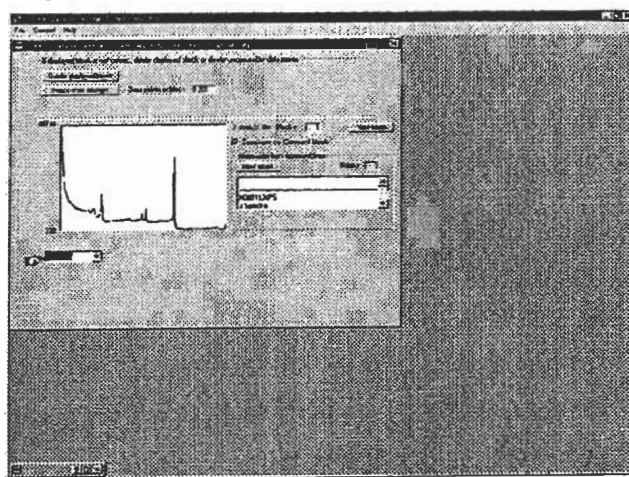


10 ファイル構造の変換

COMPRO6 は ASCII コードで記述されたスペクトルデータ（デブスプロファイルデータも含む）を ISO14975 および ISO14976 規格の構造に変換します。ただし、全ての ASCII コードで書かれたファイルが変換できるとは限りませんので、変換できないファイルがありましたら、該当ファイルを kazubiro@nrim.go.jp にお送り下さい。

10.1 マニュアル変換

{File} - {Convert} を選択して下さい。添付の SampleData.EXE には変換練習用ファイルが含まれています。[Xps_ag_Mg.vgo] を選択して下さい。ファイルの構造を自動的に判定して、スペクトル領域であると判定した箇所を表示します。



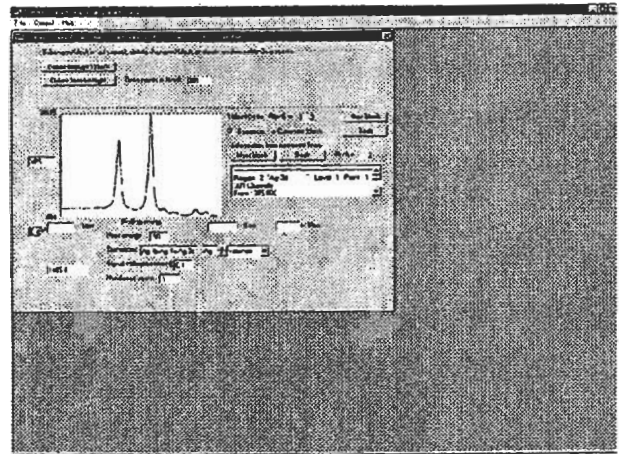
[Data points] が [1201] 個あると判定しています。また、

このファイルは 3 個のブロック（リジョン）からなっており、現在表示されているのは第 1 ブロックであるとしています。[Information from comment lines] フレームには第 1 ブロックに対応するコメントが記述されています。まず表示されているスペクトルがおかしくないかどうかを判定して下さい。COMPRO6 では数値が連続するとスペクトルと判定しますので、しばしば余分な数値がデータとしてスペクトルに付加されています。その場合は [If displayed block is not correct, delete displayed block or delete undesirable data points] フレームの中にある [Delete displayed block] ボタンまたは [Delete from left/right] ボタンを押して下さい。[Delete displayed block] ボタンを押すと、表示されているスペクトルは全てコメントであると解釈し、スペクトルを消去します。[Delete from left/right] ボタンを押すとデータリストが表示され、不要なデータ列を指定すると消去できます。このデータは問題ありませんが、練習してみます。[Delete from left/right] ボタンを押して下さい。[Delete from left], [Delete from right], [Data list in the block] が現れます。[Data list in the block] の上から 4 番目の [42368.0000] をクリックして下さい。[Delete from left] に [4] という数字が現れ、[Data points] が [1177] に変わりました。これはスペクトルの左側から 4 個の数字はコメントと見なすということです。[Display deleted result] ボタンを押して下さい。左側が欠落したスペクトルが表示されます。これで不要なデータが削除されました。今回はこの作業は不要ですので [Cancel "Delete"] ボタンを押して下さい。元に戻ります。

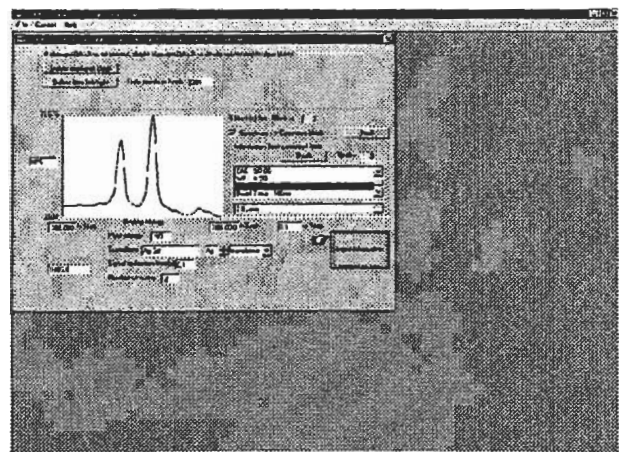
”指” アイコンの指示に従い入力していきます。[Abscissa] をクリックして [Binding energy] を選択して下さい。[XPS] が自動的に表示され、[Source energy] に”指” アイコンが移動します。[Information from comment lines] の表示されているコメントのバーを移動させ、最終行のコメントを見て下さい。[Mg source] という記述がありますので、[1486.6] を選択

して下さい。”指”アイコンは[Start]に移ります。[Information from comment lines]の表示されているコメントの中の[From : 1200.000]をクリックして下さい。[1200.000]が[Start]の箇所に表示され、”指”アイコンは[End]に移ります。同様に[To : 0.000]をクリックして下さい。[End]に[0.000]が入り、[Step]に[1]が入ります。もしコメントラインの中にこのような情報が記載されていない場合は、数値を入力して下さい。なお、[End]の入力の代わりに[Step]を入力してもかまいません。これらは連動しています。”指”アイコンは[Pass energy]に移ります。コメントの[CAE : 50]をクリックして下さい。[50]が入りました。”指”アイコンは[Transitions]に移ります。元素の[Li]を[Ag]に変更して下さい。[Transitions]の矢印をクリックすると、遷移リストが現れます。このスペクトルはワイドスペクトルですので、全てのピークが観測されています。全ての遷移をクリックして下さい。[Transitions]には"Ag 4p-Ag 4s-Ag 3d-Ag 3p-Ag 3s-Ag MNN-valence band-"と記入されています。この書き方は COMPRO6 の指定です。確認後、リターンキーを押して下さい。”指”アイコンは[Signal collection time(s)]に移ります。コメントでは[Dwell Time : 100ms]となっていますが、単位は's'ですので、手入力で"0.1"と入力して、リターンキーを押して下さい。”指”アイコンは[Number of scans]に移ります。コメントで[1 scan]をクリックして下さい。[1]が入りました。リターンキーを押して下さい。”指”アイコンは[Next block]ボタンに移ります。[Next block]ボタンを押して下さい。第2ブロックが表示されます。

第2ブロックのデータ点数は[301]です。コメントは第2ブロックに属するものが表示されます。”指”アイコンは[Start]のところに移っています。コメントの[From : 385.000]をクリックして下さい。[Start]に[385.000]が入ります。”指”アイコンは[End]に移ります。コメントの[To : 355.000]をクリックして下さい。[End]に[355.000]が入ります。”指”アイコン



は[Pass energy]に移ります。コメントの[CAE : 10]をクリックして下さい。[Pass energy]に[10]が入ります。”指”アイコンは[Transitions]に移ります。前の記述を全て消して、Ag の遷移リストから[368-3d5/2]をクリックして下さい。[Transitions]に[Ag 3d-]と記入されました。リターンキーを押して下さい。”指”アイコンは[Signal collection time(s)]に移ります。変更はしませんので、リターンキーを押して下さい。”指”アイコンは[Number of scans]に移ります。コメントの[10 Scans]をクリックして下さい。[Number of scans]に[10]が入ります。リターンキーを押して下さい。”指”アイコンは[Next block]ボタンに移ります。このとき[Back]ボタンが現れます。[Back]ボタンを押すと直前のブロック（この場合は第1ブロック）へ戻ることが出来ます。間違いがあったときや、確認したいときにお使い下さい。[Next block]ボタンを押して下さい。第3ブロックが表示されます。

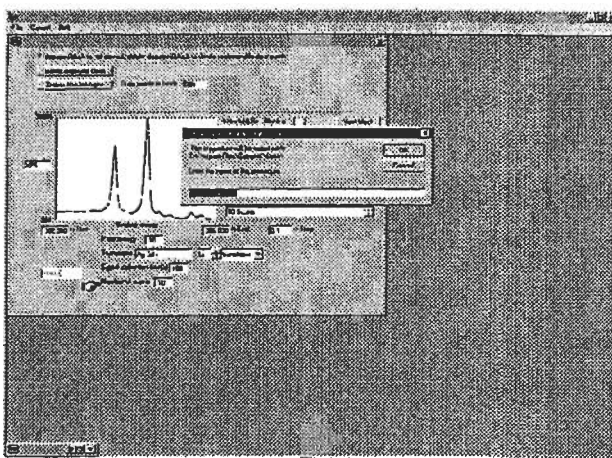


第3ブロックも全く同じように入力して下さい。第

2ブロックと異なるのは[Pass energy]が[50]と、[Number of scans]が[2]となるだけです。[Number of scans]の後にリターンキーを押して下さい。”指”アイコンが[Input information]ボタンを示します。

[Input information]ボタンを押して下さい。[Select version]フレームが現れます。[partially]と[ISO]というオプションボタンが現れます。[partially]はCOMPRO Version4 以前のファイル構造です。データを旧バージョンのCOMPROしか持っていない方に転送するときのみお使い下さい。通常は[ISO]を選択して下さい。ISO14976 に準拠した形式に変換されます。[ISO]を選択すると、3.1 で説明した装置の一覧表が現れます。ここでは[Vg-ESCALAB MK-2/200_Twin-Anode_Large-Area]を選択して下さい。[Enter values]ボタンを押して下さい。表示された値がISO14976規格に従って入力されます。

最後に、共通条件を入力します。聞いてくる順序に従って、入力して下さい。[Insitute]の名前としては、“SASJ”、[Instrument]にはデフォルト、[Operator]にはご自分の名前、[Comment]には“Sample data”と記入して下さい。最後にファイル名を聞いてきます。デフォルトは[Xps_ag_Mg]ですが、ここでは“Xps_ag_Mg_test1”として下さい。変換が成功したという表示が出ます。



変換結果を確認します。{File} - {Open}メニューから、[Xps_ag_Mg_test1.npl]を選択して下さい。マルチリジョンスペクトルですので、ブロックごとに表示させ確認して下さい。スペクトルが表示できたら、{Information}メニューを選択して、Informationを確認して下さい。ただしこのファイルには3.2に記述したISO14975に関する情報は入力されていません。したがって、[Information packages]を押すと、情報が添付されていないが入力するかというメッセージが出ます。[Yes]ボタンを押せば入力できますが、今回は[No]を選択します。

10.2 自動変換

次々と同じ形式のファイルを変換したいとき、あるいはリジョン数が非常に多いファイルなどは自動変換が出来ると便利です。このためには、COMPROに変換方式を記憶させておく必要があります。COMPROはこの機能を備えています。ただし、この方法は10.1のマニュアル変換ほど正確には変換できない項目があります。

{File} - {Convert}メニューから[Xps_ag_Mg.vgo]を選択して下さい。第1ブロックのスペクトルが表示されます。{File} - {Automatic conversion} - {Register process}メニューを選択して下さい。表示されたスペクトルが正しいかどうかを聞いてきますので、[Yes]を選択します。[Abscissa]を選択せよというメッセージが出ますので[Ok]ボタンをクリックします。[Abscissa]から[Binding energy]を選択します。[Source energy]から[1486.6]を選択します。[Start energy]が記述してあるコメントラインを特定せよという指示が出ます。[Ok]を押して下さい。なお、Start energyがコメントラインに書かれていないファイルは自動変換できません。そのときは[Cancel]ボタンを押して下さい。10.1と同様の作業で、[Start]と[End]をコメントから選んでクリックして入力して下さい。[Pass energy]もコメントをクリックすることにより入力

して下さい。[Transitions]については前回は手入力をしました。手入力の場合は手入力した値がそのままデフォルト値として使用されます。しかし、このファイルは遷移に関する記述がコメントとして存在していますので、それをクリックします。コメントから[Region : 1 "wide " Level : 1 Point : 1]を選択して下さい。[Transitions]の表示に[wide-]と記入されました。ただし、これは COMPRO の正規の書き方ではありません。正規の書き方は 10.1 を参照して下さい。[Signal collection time(s)]は"0.1"と手入力して、リターンキーを押して下さい。手入力の場合は手入力した値がそのままデフォルト値として使用されます。[Number of scans]は前回と同様にコメントから選んでクリックして入力して下さい。

マルチリジョンファイルの自動変換の登録は、第1ブロックと第2ブロックの登録が必要です。第1ブロックの入力が終了すると第2ブロックのスペクトルを表示し、表示されたスペクトルが正しいかどうかを聞いてきますので、[Yes]を押して下さい。[Start]と[End]の値をコメントをクリックすることにより入力せよという指示が出ますので[Ok]を押して下さい。[Start]と[End]の値をコメントをクリックすることにより入力して下さい。引き続き[Pass energy]の値をコメントをクリックして入力して下さい。次は[Transition]です。コメントに対応するものがあります。[Region : 2 "Ag-3d " Level : 1 Point : 1]です。このコメントをクリックして下さい。[Transitions]の項目に[Ag 3d-]が入り、COMPRO の指定を満足しています。[Signal collection time(s)]は"0.1"をそのままにして、リターンキーを押して下さい。最後に[Number of scans]をコメントをクリックすることにより入力して下さい。最後にこの変換システムに名前をつけます。変換プログラムファイルはデータファイルのあるところに保存されます。名前は[MyConversion]です。Extension はつけないで下さい。[Ok]を押してデフォルトで保存して下さい。この変換プログラムは、今後、同型のファイルの変換

に使用できます。

作成した自動変換プログラムで変換します。{File} - {Automatic conversion} - {Use registered process}を選択し、ファイル選択画面から、作成した[MyConversion.cnv]を選択して下さい。自動的に第1ブロックを変換します。[Next block]ボタンを押して下さい。第2ブロックを変換します。[Next block]ボタンを押して下さい。第3ブロックを変換します。[Input information]ボタンを押して下さい。あとは前回と同じです。変換後のファイル名は"Xps_ag_mg_test2"として下さい。

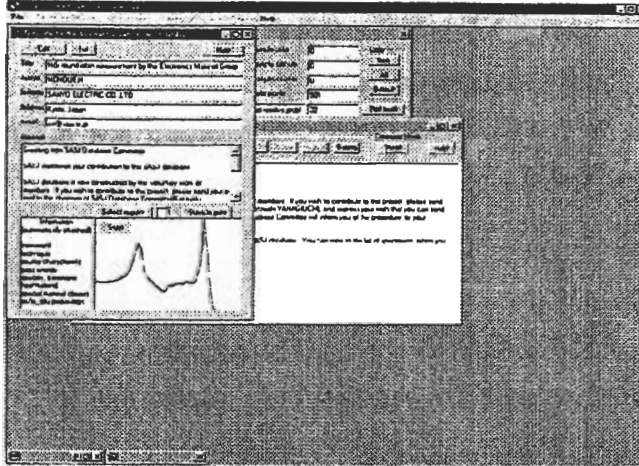
{File} - {Exit from Conversion}を選択して下さい。元のスペクトル表示画面に戻ります。

11 データベースへの投稿

表面分析研究会ではデータベース委員会がデータベースの収集管理を行っています。データベース委員会では、スペクトルデータを会員が投稿する際には、同時にアブストラクトを Journal of Surface Analysis 誌へ投稿することを推奨しています。COMPRO Version6 には、アブストラクトの投稿を容易にするための機能が付与されています。

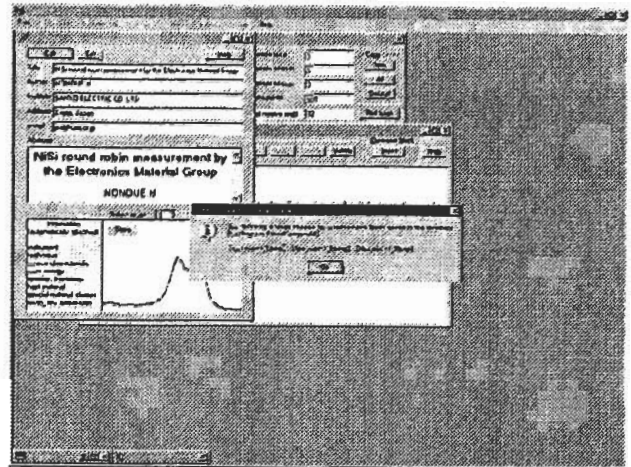
いま、練習用として添付されたファイルのうち、仮に Xps_nisi.npl をデータベース委員会に投稿すると仮定します。このファイルをもう一度、ディレクトリーから読み込み、第1リジョンを選択して下さい（実際にはどのリジョンでも結構です）。メニューの{Information}を選択して下さい。[Comment]の横にある[We investigate ...]と書かれた箇所をクリックし、(attach comment box)を選択して下さい（p11 を参照して下さい）。画面にエディターが現れますので、p11 で練習したときと同様に、[Open]ボタンを押して、[Greetnig.txt]を選択して下さい。Greetnig.txt の内容がエディターに表示されます。

[JSA]ボタンを押して下さい。文章をコメントブロック内に挿入したかという警告が出ます。これは、JSA に投稿するスペクトルのコメントブロックには、スペクトルの概要等が記述されていることが望ましいというデータベース委員会の推奨によるものです。今回は練習ですので、無視をして[Yes]を選択して下さい。JSA 投稿用のテンプレートが現れます。

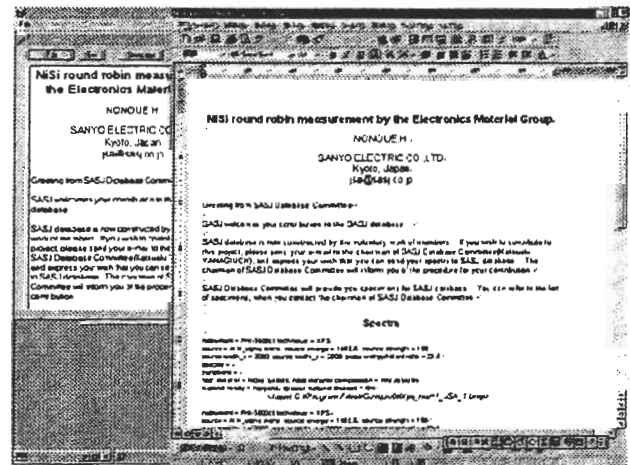


[Title], [Author], [Institute]には{Information}の[Experiment], [Operator], [Institute]が転記され、[Abstract]には Greeting.txt が転記されています。[Address] と [e-mail] 欄に [Kyoto, Japan]、[jsa@sasj.or.jp]と記入して下さい。第1リジョンのスペクトルが表示されています。これはマルチリジョンのスペクトルですので、JSA に掲載したいスペクトルを選ぶことができます。[Select region]ボタンを押して下さい。表示されているスペクトルが第2リジョンとなりました。[Store to print]ボタンを押して下さい。画面に[Store]という文字が表示されます。これにより自動的にスペクトルがビットマップとして保存されます。取り消したいときには再度[Store to print]を押して下さい。[Store]という文字が消去されます。第3リジョンまで表示させ、[Store to print]ボタンを押して下さい。スペクトル表示領域の横には、基本情報が自動的に添付されるということが説明されています。[Edit]ボタンを押して下さい。三種類のスペクトルデータがビットマ

ップとして、Compro6 のディレクトリーに保存されているという情報が出ます。[Ok]をクリックして下さい。

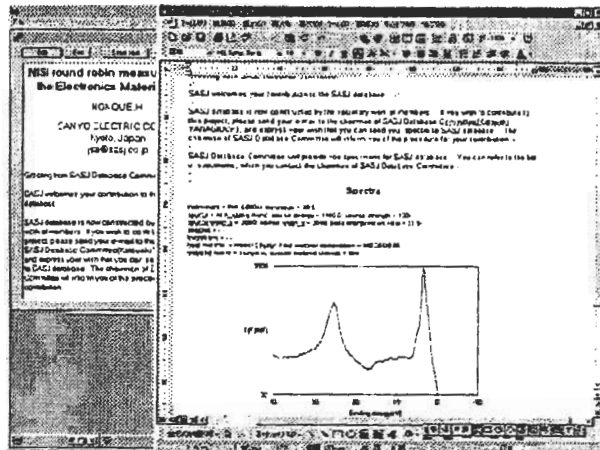


あなたのコンピュータに Word(97 以降)がインストールされているときには、Word が自動的に立ち上がります。スペクトルのビットマップを該当個所に挿入して下さい。挿入位置は<Insert C:\Program Files\Compro6\Xps_nisi+1_JSA_1.bmp>というように表示されていますので、そこに Word の「{挿入} - {図} - {ファイルから}」を選択して、ディレクトリー(C:\Program Files\Compro6)より該当のビットマップを選択・挿入してください。



対応する三カ所にビットマップを挿入して下さい。スペクトルにはデフォルトの情報が添付されています。文書を保存して Word を終了して下さい。文書名はデフォルトでは[Xps_nisi+1_JSA.rtf]

となっていますが、リッチテキストファイルで保存するとファイルサイズが大変大きくなりますので、Wordの標準形式[.doc]を選択して保存して下さい。保存場所は[c:\¥Program Files¥Compro6¥Data]として下さい。



もとのテンプレートが現れますが、この場合は[Store text]と[Store spectra]というボタンが付け加わります。[Store text]ボタンを押すと、Documentがrich textの形で保存できます。{Word}で文章を作成したときには必要ありませんが、{Word}が立ち上がらないようなときにはお使い下さい。rich textの形式ですので、どのようなワープロでも読むことが可能です。[Store spectra]ボタンはスペクトルのビットマップを保存しておくためのものです。ビットマップを保存しておくとお変ファイルサイズがおおきくなり、ハードディスクにとって有益ではありませんので、編集後は自動的に消去されますが、もし保存したければ、このボタンを押していただくと、適当なディレクトリーに保存することが出来ます。今回は押さないで[Exit]ボタンを押して下さい。簡易エディターに戻ります。さらに簡易エディター上で[Exit]を押して、簡易エディターを終了して下さい。最後に、{Information}の画面で{Save and Exit}を押して下さい。

データベースへスペクトルを投稿する際には、このシートを作成してスペクトルデータとともに送付

下さい。シートはJSAに掲載されます。

12 終了

{File} - {Exit}を選択して下さい。これまでに作成したファイルを保存するかどうかを聞いてきます。ここでは、[Compro3]のみを保存しますので、[Compro3]が表示されたときに[Yes]を選択して下さい。ファイル保存用のダイアログボックスが現れますので、名前を{Aes_coni_diff}として下さい。これで保存されました。保存は{File} - {Save}を選択されても行われます。

おわりに

なお、この本で説明しなかった機能のうち、主なものは以下のとおりです。

{File}メニューの{Export figure}は、現在表示されているスペクトルの図面をビットマップにして保存する方法です。

{File}メニューの{Close}は画面に表示されたスペクトルを消去します。

{File}メニューの{Print}は画面をそのまま印刷します。印刷画面の大きさ、フォントの大きさは{Print}メニューの中の{Property}メニューを選択して調整して下さい。

COMPRO6は表面分析研究会の会員の意見を反映させて、改良されています。おかしいところ、もっと改良して欲しいところなどがありましたら是非ご意見をkazuhiko@nrim.go.jpまでお寄せ下さい。