

多量のスペクトルデータを利用した参照スペクトルの推定手法の開発

Development of Reference Spectrum Estimation from a Large Amount of Spectral Data

電気通信大学¹, NIMS² ○(M1)村上諒¹, 庄野逸¹, 篠塚寛志², 永田賢二², 吉川英樹²

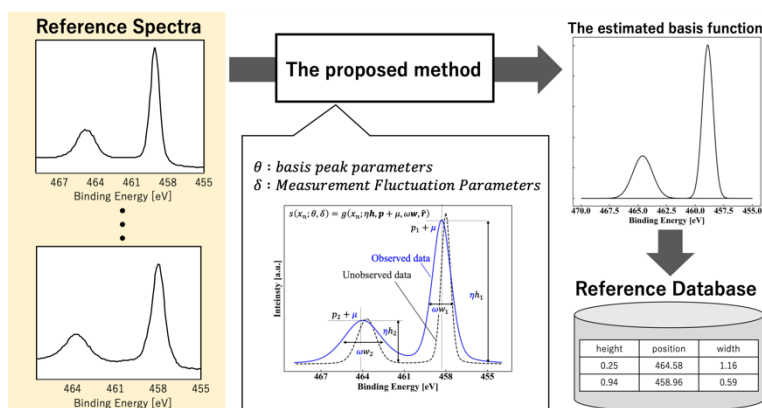
The University of Electro-Communications¹, NIMS², ○Ryo Murakami¹, Hayaru Shouno¹,

Hiroshi Shinotsuka², Kenji Nagata², Hideki Yoshikawa²

E-mail: m2030111@edu.cc.uec.ac.jp

X線光電子分光(XPS)のスペクトルデータから化合物の同定を行う際に、候補となる単相化合物のスペクトル構造（以後、参照スペクトルと呼ぶ）をあらかじめ表現しモデル化しておくことは重要な要素である。そのために、用いるピーク分離手法ができるだけ解析者の恣意性を排除し、汎用的なものであることは必要である。一方で、同一の化合物を測定したとしても、チャージアップや装置のキャリブレーションの影響により、計測データが大きく異なり、用いるピーク分離手法に関わらず、結果として抽出される参照スペクトルの構造が揺らいでしまう問題が考えられる。

本発表では、こうした問題を解決するために、参照スペクトルを系統的に抽出することを目的とする。具体的には、データベースや文献などから単一の化合物に対する複数のスペクトルデータが与えられた状況において、それら全てのデータを統一的に表現することができる参照スペクトルの構造



を求める手法を開発する。化合物由来の参照スペクトルの構造については、擬似 Voigt 関数で表現し、データ間での揺らぎを表現するために、強度・位置・幅の三つのパラメータで補正することを考える。特に、ベイズ情報量規準を用いることで、擬似 Voigt 関数のパラメータだけでなく、ピークの個数もデータから推定する。本手法の枠組みは、多くの計測スペクトルデータから、良質なスペクトルデータを選択するというものではなく、全てのスペクトルデータを利用するものである。そのため、データが多くなればなるほど抽出される構造の推定精度は向上することが見込まれる。これは、マテリアルズインフォマティクスに代表されるように、大規模なデータベースの構築を考える上で、提案手法の優れた点である。また、多相化合物から成る実試料のスペクトルデータから化合物同定や組成比を求める際にも、抽出された参照スペクトルは重要な役割を果たす[1]。本発表では、開発した手法の有効性を検証するために、文献から取得した TiO_2 のスペクトルデータ 15 個を対象に、 TiO_2 の参照スペクトルを抽出した結果を紹介する。個別データそれぞれに文献[2]で開発されたピーク分離手法を適用した場合と結果を比較し、本手法で抽出された参照スペクトル構造の抽出が安定していること、および抽出されたピーク構造が解釈しやすい形になることを示す。

[1] R. Murakami et al., *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, submitted.

[2] H. Shinotsuka et al., *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, Vol.239, 146903, 2020.