

# 情報量基準を用いた XPS スペクトルの自動スパースモデリング

## Automatic sparse modeling of XPS spectrum using information criteria

NIMS<sup>1</sup>, 米子高専<sup>2</sup>, <sup>○</sup>篠塚 寛志<sup>1</sup>, 吉川 英樹<sup>1</sup>, (B)村上 諒<sup>2</sup>, (B)仲村 和貴<sup>2</sup>, 田中 博美<sup>2</sup>,  
吉原 一紘<sup>1</sup>

NIMS<sup>1</sup>, NIT, Yonago college<sup>2</sup>, <sup>○</sup>Hiroshi Shinotsuka<sup>1</sup>, Hideki Yoshikawa<sup>1</sup>, Ryo Murakami<sup>1</sup>, Kazuki Nakamura<sup>1</sup>, Hiromi Tanaka<sup>2</sup>, Kazuhiro Yoshihara<sup>1</sup>

E-mail: SHINOTSUKA.Hiroshi@nims.go.jp

近年は分析装置の高感度化・高分解能化に伴い測定がハイスループット化され、大量のスペクトルデータが蓄積される時代にある。大量のスペクトルデータを人の手で解析することは困難であり、しかも解析者によって答えがばらつくという課題がある。そのため極力人の手を介さず、機械的・自動的なスペクトル解析手法が必要とされている。

我々は、ノイズが大きく複雑な XPS スペクトルにおいても、従来経験的に得てきた解と整合する解を自動で抽出するアルゴリズムを開発した[1]。最急降下法に基づくピークフィッティングは一般に初期値依存性が強い。そこで我々は、スペクトルに適用するスムージングの程度を系統的に変化させることで多様な初期モデルを設定し、active Shirley 法に基づいてバックグラウンドならびにピークを最適化したモデルを 155 通り得た。それらのモデルに対してベイズ情報量基準 (BIC)[2]を適用し、各モデルをランク付けした。

アルミナのカーボンコンタミの C1s スペクトルに本手法を適用した結果を示す。Fig. 1 (a)は各モデルのピーク本数に対して BIC 値をプロットした図で、フィッティングの良さと罰則項のトレードオフにより、BIC 値が極小となるモデルが見つかる。BIC 最小となるモデルのフィッティング結果は Fig. 1 (b)の通りである。このモデルは手作業でスペクトル解析した結果と遜色なく、この手法は XPS スペクトルの全自動解析ツールとして有用であることが確かめられた。

[1] H. Shinotsuka et al., *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **239**, 146903 (2020).

[2] G. Schwarz, *Annals of Statistics* **6**, 461 (1978)

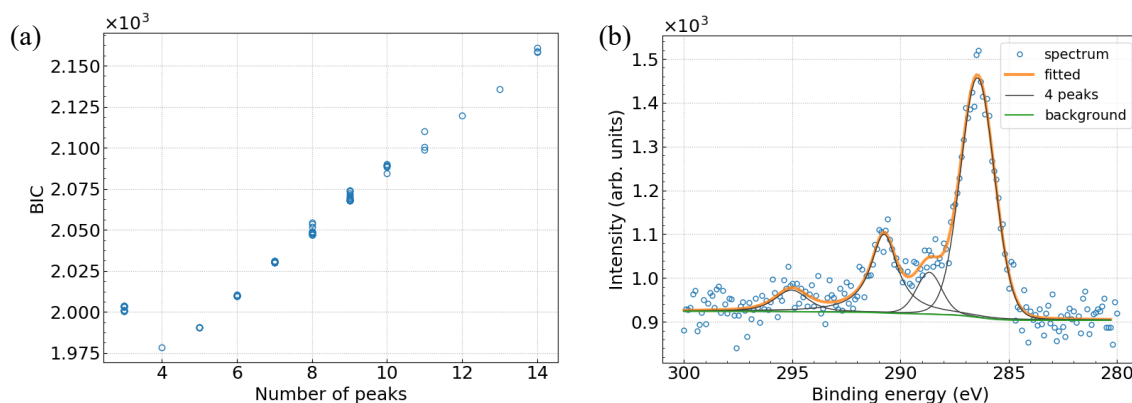


Fig. 1. (a) BIC values as a function of the number of peaks for the C1s spectrum from surface contamination on Alumina. (b) Fitting results when minimizing BIC.