

## 多重ピークを基底関数とした 多元素 XPS スペクトル解析の手法開発

### Development of multi-element XPS spectral analysis using basis function of multiple-peaks

米子高専<sup>1</sup>, 物材機構<sup>2</sup> ○(B)村上 諒<sup>1</sup>, 仲村 和貴<sup>1</sup>, 田中 博美<sup>1</sup>,  
篠塚 寛志<sup>2</sup>, 永田 賢二<sup>2</sup>, 吉川 英樹<sup>2</sup>

National Institute of Technology, Yonago College<sup>1</sup>, NIMS.<sup>2</sup>, °Ryo Murakami<sup>1</sup>, Kazuki Nakamura<sup>1</sup>,  
Hiromi Tanaka<sup>1</sup>, Hiroshi Shinotsuka<sup>2</sup>, Kenji Nagata<sup>2</sup>, Hideki Yoshikawa<sup>2</sup>

E-mail: natsu8199916@gmail.com

近年、オペランド分析や3次元分析などの測定技術の高度化に伴い、大量のスペクトルを自動解析する手法の開発が求められている。その際、既知の単相化合物の参照スペクトルと照合し、化合物の成分比率を推定するケースが多いが、その推定作業のすべてを自動化することが困難であり、解析者の恣意性が含まれるという問題がある。本研究では、参照スペクトルを多重ピークから成る基底関数でモデル化し多相化合物のスペクトルと照合することで、化合物の成分比率を全自動で推定する手法を開発した。モデル化された参照スペクトルを利用することにより、装置によるエネルギー分解能の違いや試料の表面電荷に依存するピークシフト量の違いの補正を容易にし、他機関の装置で計測したデータや文献のデータを活用することが可能となった。なお多数のデータ点から成るスペクトルを少数のピーク関数でモデル化することはスパースモデリングと解釈でき、そのピーク本数およびピークパラメータの候補と分布を推定する手法が提案され、XPS スペクトル解析においてその有効性が示された[Nagata 2012, Shinotsuka 2019]。

多相化合物の XPS スペクトルの解析を本手法で行った際に、特定の単元素のスペクトルのみを解析すると、参照スペクトル間の差異が小さいほど成分比率の解が大きくばらつくことが確認された。そこで、Fig.1 に示すように多元素のスペクトルを同時解析することによって、解のばらつきを抑制できることが明らかになった。

[Nagata 2012] Kenji Nagata, et al., *Neural Networks*, **28**, 82-89, 2012.

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

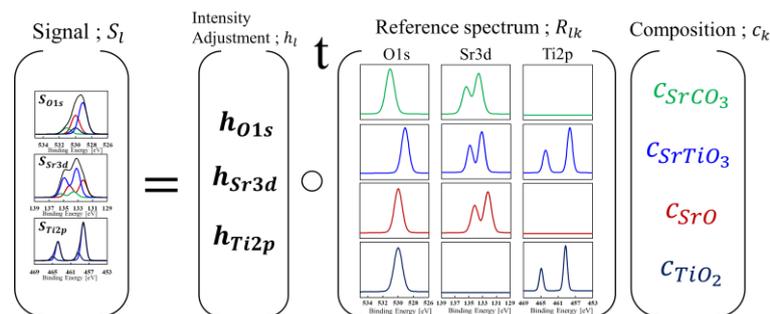


Fig.1. Simultaneous analysis model of multi-element XPS spectra measured in multiple energy bands