

K 吸収端 XANES スペクトル分離の自動化

Automated K-edge XANES spectrum separation

株式会社デンソー¹ ○屋内 一馬¹, 森口 七瀬¹, 山口 仁¹, 小野 泰輔¹

DENSO CORP.¹, [○]Kazuma Yanai¹, Nanase Moriguchi¹, Hitoshi Yamaguchi¹, Taisuke Ono¹

E-mail: kazuma.yanai.j2w@jp.denso.com

解析品質の向上と解析時間の短縮のために、スペクトルから波形を自動で分離する手法の開発が盛んに研究されている^[1-2]。特に、XANES スペクトルでは、波形分離することで解析対象の元素に結合する原子の数、対称性、配位子、元素の種類、原子価状態を詳細に得ることができる^[3-4]。しかし、自動で波形分離するためには、事前に参照スペクトルを用意しなければならないので、未知物質のスペクトルを波形分離することはできない。さらに、参照スペクトルなしで統計学的にピークパラメータを決定しようとする、分離するまでに時間がかかる^[2]。そこで、事前情報なく高速に波形分離する手法の開発を目的とした。

分離波形の初期値を得るために、XANES スペクトルの 2 次微分をとった。図 1 の赤点が 2 次微分スペクトルの極大値、青点が極小値を示す。図 1(a)に Fe K 吸収端の XANES スペクトルの 2 次微分スペクトルを示す。赤点と青点のエネルギーと強度に基づき、初期値を決めようとする、ノイズの極大・極小をも観測してしまい、正しく初期値を抽出できないことが分かる。そこで、ノイズ除去するためにスペクトルノイズがガウス分布に基づく仮定の下、スペクトル強度をエネルギーの関数と見立てて、2 次微分スペクトルをガウス過程回帰で平滑化した。図 1(b)にノイズ除去後の 2 次微分スペクトルを示す。平滑化された 2 次微分スペクトルから、分離波形の大まかなピーク位置・半値幅・強度を取得した。これらの初期値を用いた波形分離の結果を図 3 に示す。青点を実測値を、黒線が分離波形の線形和を示す。図 3 から、波形の線形和は実測値をよく再現することが分かる。

波形分離に要した時間は、約 13 秒であった。8GB のメモリ容量で Intel(R) Core(TM) i5-8250 CPU (1.60~1.80 GHz)の PC を用いた。

【参考文献】

- ^[1]M. ishii, 日本結晶学会誌, **62** (2020), 35.
- ^[2]M. Okada *et al.*, *Ann. Conf. Jpn. Soc. A.I.*, **214-OS-10b-2** (2017)
- ^[3]T. Yamamoto, *J. Jpn. Petrol. Instit.*, **57** (2014), 261.
- ^[4]Y. Inada *et al.*, *J. Vac. Soc. Jpn.*, **59** (2016), 17.

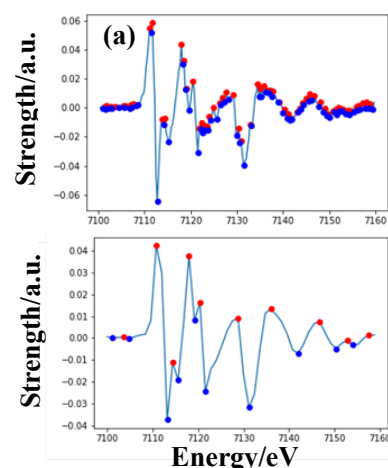


Fig. 1 The second-order differential XANES spectrum of the Fe-K absorption edge with red dots for maxima and blue dots for minima; (a) before smoothing process, (b) after smoothing process.

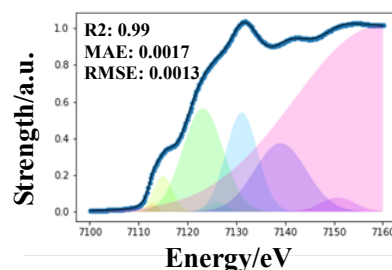


Fig. 2 The XANES spectrum of the Fe-K absorption edge and the results of waveform separation using the Gaussian function.