

多重ピークを基底関数とした 多元素 XPS スペクトル解析に向けたベイズ推定 Bayesian Estimation for Multi-element XPS Spectrum Analysis using Basis Functions with Multiple Peaks

東大¹, NIMS², 電通大³ °(M1)町田惇¹, 永田賢二², (M1)村上諒³,
篠塚寛志², 庄野逸³, 吉川英樹², 岡田真人^{1,2}

Univ. of Tokyo¹, NIMS², Univ. of Electro-Communications³, °Atsushi Machida¹, Kenji Nagata²,
Ryo Murakami³, Hiroshi Shinotsuka², Hayaru Shouno³, Hideki Yoshikawa², Masato Okada^{1,2}

E-mail: machida@mns.k.u-tokyo.ac.jp

XPS は物質の表面分析で広く使われている測定手法であるが、その分析では、操作者の恣意性が分析結果に含まれるという問題がある。先行研究では、未知試料から得られた XPS データに対して、遺伝的アルゴリズムと勾配法を組み合わせた方法により、参照スペクトルを用いて、化合物の組成比およびその他のパラメータを推定する手法を提案し、参照スペクトルのデータから自動的に分析できることを示した[1]。本研究では新たに交換モンテカルロ法を利用したベイズ推定を先行研究[1]に導入することで、さまざまなパラメータの最適値だけでなくその信頼区間を推定する手法を提案する。

各スペクトルは擬似 Voigt 関数の重ね合わせで表現するとし、また、バックグラウンドは Shirley 法を用いて表す。ここでは、化合物ごとに事前に知られた多重ピーク情報から基底関数を構築し、各種パラメータの補正值や組成比を推定パラメータとし、化合物の組成比を推定する。また、XPS データはカウントデータであることを利用し、データ生成分布はポアソン分布を用いた。以上の設定で、4つの化合物 SrCO₃, SrO, SrTiO₃, TiO₂ が含まれる試料を想定した3つの core level に対応する人工データを生成した。これを同時にフィッティングすることで、各化合物の組成比を信頼区間つきで推定でき(図左下)、さらに多くの化合物の組み合わせ候補の中から最も適切な組み合わせを確率付きで推定できることを明らかにした(図右下)。

参考文献

[1] R. Murakami, et al., Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena 245 (2020) 147003.

