

XPS スペクトル解析における 未知成分の推定手法の開発

Development of Analysis Method

for Unknown Components Estimation in XPS spectral analysis

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

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、既知の単相化合物を計測したスペクトル（以下、参照スペクトル）と多相化合物のスペクトルを照合し、化合物の成分比率を推定する場合が多い。先行研究として、我々は、参照スペクトルを複数ピークの線形和から成る基底関数でモデル化[1]し、多相化合物のスペクトルと照合し、化合物の成分比率を全自動で推定する手法を開発した[2]。しかしながら、実際の解析現場では計測スペクトルに未知成分が混在することがよくある。このため、計測スペクトルに含まれるすべての参照スペクトルを準備することが困難な場合がある。

参照スペクトル群に欠落が生じている場合でもスペクトル解析を行うことができる手法の開発は、スペクトルの全自動解析を実現するための重要な課題である。そこで本研究では、下図に示すように参照スペクトル群の欠落部分を未知成分として、自動的にスペクトル解析を行う手法の開発を目的とした。提案手法は、先行研究[2]を拡張させ、未知成分を任意の Voigt 関数の足し合わせで表現しており、既知/未知成分のピークパラメータだけでなく、未知成分を表現するピークの個数まで推定することが可能である。

本発表では、文献パラメータに基づいて生成した人工データにおいて、提案手法の有用性を示す。提案手法により、計測スペクトルに含まれる成分が未知の参照スペクトルを含む場合でも自動解析を行うことが可能となった。特に本研究では、未知成分のピーク本数およびピークのエネルギー位置を精度良く推定できることを示した。この結果より、提案手法による解析結果から未知成分の化合物種の同定が可能であることを示した。

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

[2] R. Murakami et al., *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **245** (2020) 147003.

