

Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2021

多数スペクトルデータを利用した共通ピーク構造の逆推定

○村上 諒^{1*}, 庄野 逸¹, 永田 賢二², 篠塚 寛志², 吉川 英樹²¹電気通信大学 大学院情報理工学研究科, ²物質材料研究機構

Inverse Estimation of Common Peak Structure from Multiple Spectral Data

○Ryo Murakami^{1*}, Hayaru Shouno¹, Kenji Nagata², Hiroshi Shinotsuka², Hideki Yoshikawa²¹The University of Electro-Communications, ²National Institute for Materials Science

X線光電子分光(XPS)において、図1に示すように同一の単相化合物試料を測定しても、計測装置の違いや実験条件により観測スペクトルの形状が異なる。そのため、XPSによる未知試料の同定にあたって、異種装置で得られたXPSデータベースにある単相化合物の観測スペクトルの参照方法が作業者に依存する問題がある。

本研究では、計測によって揺らいだ多数の観測スペクトルからその揺らぎを排除した共通ピーク構造を推定することを目的とする。図1に、本手法の概要図を示す。具体的には、データベースや文献などから単一の化合物に対する複数のスペクトルデータが与えられた状況において、それら全てのデータを統一的に表現することができる共通ピーク構造を求める手法を開発する。化合物由来の共通ピーク構造はVoigt関数の重ね合わせで表現し、計測に由来したスペクトルデータ間での揺らぎを表現するために、強度・位置・幅の三つのパラメータで補正することを考える。特に、バイズ情報量規準を用いることで、Voigt関数のパラメータだけでなく、ピークの個数もスペクトルデータから推定する。本発表では、開発した手法の有効性を検証するために、文献から取得したTiO₂のスペクトルデータ15個を対象に、TiO₂の共通ピーク構造を抽出した結果を紹介する。個別データそれぞれに文献[1]で開発されたピーク分離手法を適用した場合と結果を比較し、本手法で抽出された共通ピーク構造の抽出が安定していること、および抽出されたピーク構造が解釈しやすい形になることを示す。これにより、多相化合物から成る実試料のスペクトルデータから化合物同定や組成比を求める際にも、抽出された共通ピーク構造が重要な役割を果たすことを合わせて紹介する[2]。

文 献

- 1) H. Shinotsuka, R. Murakami, et al., *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **239** (2020) 146903.
- 2) R. Murakami et al., *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **245** (2020) 147003.

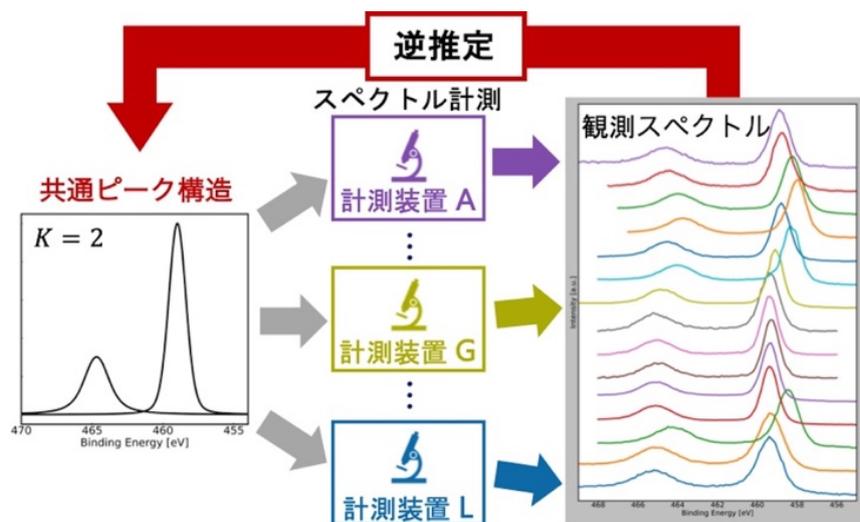


図1. 共通ピーク構造推定の概要図

*E-mail: shouno@ucc.ac.jp