

デコンボリューションによる電子スペクトルの分解能向上処理

福島 整

科学技術庁無機材質研究所
〒305 茨城県つくば市並木1-1

様々な電子スペクトルを化学状態分析へ応用する場合、ピークの形状や位置が示す微細な変化を捉えることが大変重要である。分光系の機械的な分解能自体は今や極限近くに達しているが、これらの観測したい変化は分光系の分解能より小さい場合が多い。

色々な分解能向上処理法の応用が、この様な状況に対して検討されている。しかし、時間空間における繰り返し計算的な方法以外のほとんどの処理法は、正確で実用的な結果を得るための最適処理条件を得るのが難しい。最近のマイコンの発展は、この繰り返し計算によるすすみ具合を監視しながらデコンボリューションを実行する事を可能にした。

この報告で利用したアルゴリズムはJansson法[1]と呼ばれるものであり、疑似デコンボリューション法の一つである。この方法は、結果に対して副次構造

を生じないという大変大きな利点を持っている。また、そのおかげで、デコンボリューションの効率が若干悪いという軽い欠点もある。下図にセルフ・デコンボリューションの条件（100%デコンボリューション）での処理結果を示す。300回の繰り返し（およそ10分）計算でもJansson法では副次構造を示さず、また他の繰り返しによる方法（ここではvan Cittert法）よりも結果におけるピークの幅は若干広い。

発表では、いくつかのX線光電子スペクトルへの応用例も示す。

[1] P.A.Jansson : "Deconvolution with Application in Spectroscopy" Academic Press (1986)

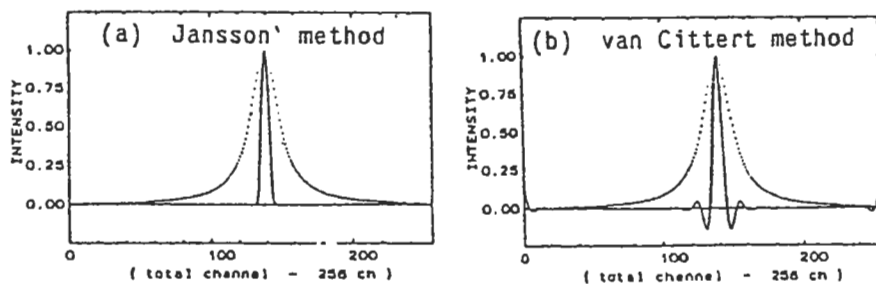


Fig. Comparison between two self-deconvolution results by Jansson' method (a) and van Cittert' method (b). These data were normalized by their peak height.