

テクニカルノート

表計算ソフトを用いたスペクトル処理

堂前 和彦

(株)豊田中央研究所

〒480-1192 愛知県愛知郡長久手町

e-mail : kdohmae@mosk.tytlabs.co.jp

(2002年2月21日 受理)

Spectral analysis with the spreadsheet software

Kazuhiko Dohmae

TOYOTA Central Research and Development Labs.

Nagakute-cho, Aichi Pref. 480-1192, Japan

(Received; Feb 21, 2002)

レポートや OHP の作成で図中に XPS や AES 等のスペクトルを貼り付けることが多々あると思います。最近の XPS や AES のデータ処理システムであれば (Windows ベースの) PC 上で動作しており、データ処理したスペクトルでもコピー & ペーストによって他のソフトに簡単に貼り付けることができる。しかし、筆者のように少し古いタイプの装置 (PHI-5500 & Apollo Domain-3500) を使っていたりすると、PC 上でスペクトルを作成するには、テキストに変換したデータを PC に転送し表計算ソフトやグラフ作成ソフトを用いて図を描くことになる。このような作業は、生データはともかくデータ処理したスペクトルを PC 上で利用できるようにするには少なからず手間がかかってしまう。また、機種によっては生データしか PC 上に転送できないものもあるようだ。このような場合、簡単なデータ処理を行ったスペクトルの図示化をする場合は PC 側でその作業ができること効率が良い。ここでは代表的な表計算ソフトである MS-Excel を用いてスペクトルのスムージング処理と Shirley のバックグラウンド除去処理を行う例を説明する。

スムージング処理

スペクトルのスムージング手法にはカーブフィッティング法、フーリエ変換法、移動平均法等の種類があるが、ここでは最も一般的な移動平均法のひとつである Savitzky-Golay 法によるス

ムージング処理を示す(前の二者は表計算ソフトで実行するには複雑すぎる)。Savitzky-Golay 法の考え方はスムージング対象となるデータ点の前後のデータに対して、最小二乗法により近似関数(一般的には三次関数)を求め、その関数値から新たなデータ値を求めるというものである。実際の計算では毎回最小二乗法で関数を求める必要はなく、スムージング点数に応じた係数を用いた加重平均を計算すればよい。

Fig.1 にスムージング計算例をしたワークシートを示す。B 列が元のデータ、H 列がスムージング後のデータで、図中スペクトルの黒点と実線にそれぞれ

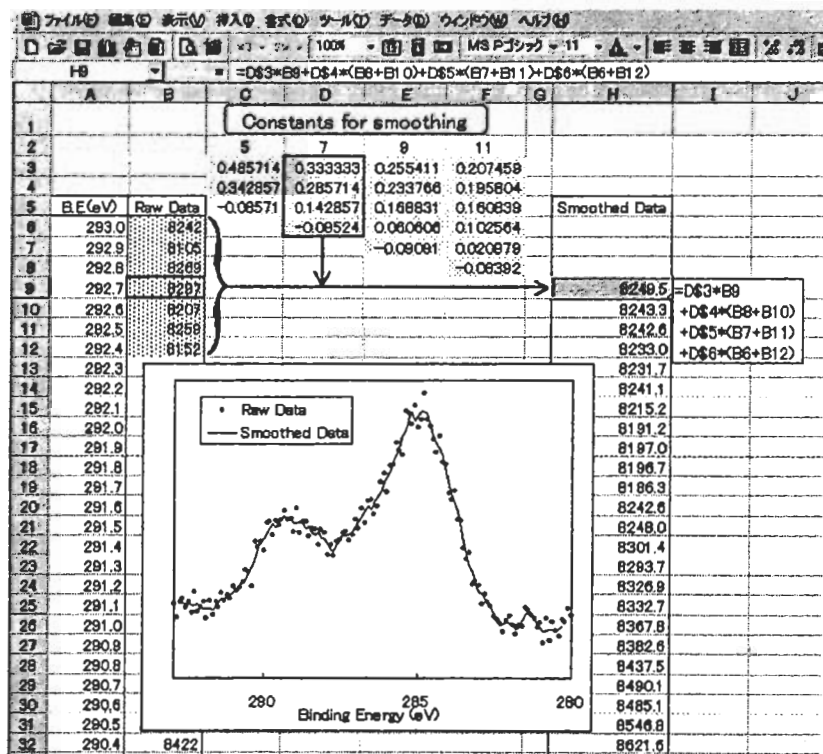


Fig.1 Worksheet for smoothing calculation.

対応している。C~F列に5,7,9,11のデータ点に対するスムージング係数を示してある。この図の例では7点スムージングの場合を示してある。加重平均の使い方はH9セルの数式(右隣のテキストボックスまたは数式バー)を見てもらえばおおよそわかると思うが、各係数列の一番上に示した値(Fig.1のD3)をスムージングデータの中心値(同B9)に乘じ、順次前後のデータ点に乘じた値の和をとる。数式中の'S'記号は絶対座標を意味している。なお、式からもわかるようにスペクトル両端の数点は数式が適用できないので、スペクトルの範囲を狭めるか、外挿する必要がある。

バックグラウンド処理

Shirley のバックグラウンドの基本的な考え方は、バックグラウンドの増加分はより高エネルギー側(低結合エネルギー側)のピーク面積に比例する、というものである。本来、この考え方ではピークの面積が決まらなないとバックグラウンドも決まらないため、正確な(Shirley の)バックグラウンドを求めるためには繰り返し計算が必要となる。ここでは簡便に1回のみの計算を示す(繰り返し計算は表計算ソフトでも簡単に実行できる)。Fig.2 にバックグラウンド除去計算のワークシートを、Fig.3 にその考え方を示す。

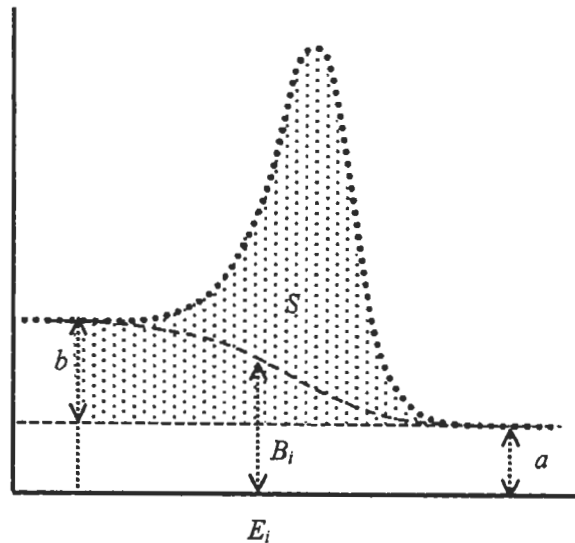


Fig.3 Shirley method

Fig.2 では B 列, D 列, F 列(8 行目から)がそれぞれ元のデータ, バックグラウンド, バックグラウンドを除去したデータである。スペクトルの両端の強度(Fig.3 の a, b)がそれぞれ D2 セル, D3 セルに、ピーク面積の初期値(Fig.3 の網掛け部分;S)が D5 セルに代入してある。エネルギー E_{i-1} におけるバックグラウンドを B_{i-1} , E_i (E_{i-1} の低結合エネルギー側)におけるカウント数を N_i とすると、バックグラウンドの値を B_i は、

$$B_i = B_{i-1} - b * (N_i - a) / S \quad (1)$$

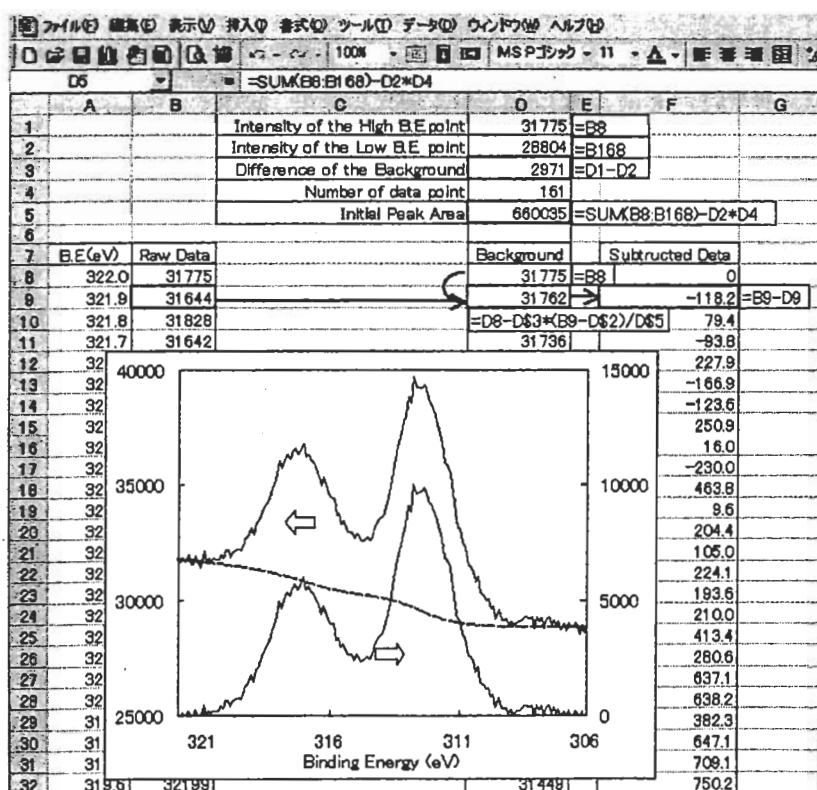


Fig.2 Worksheet of Shirley method

で得られる。B列のデータからD列の値を減じることで、バックグラウンド除去したスペクトルが得られる。繰り返し計算を行うには、F列で求めたピークの面積をD6セルに入力し(1)式のaの代わりに B_i を用いて再度バックグラウンド計算を行えばよい。

以上、表計算ソフトを用いた簡単なスペクトル処理の方法を示したが、ここで紹介したファイルの入手を希望される方は、筆者までご連絡ください。