

TASSA-JAPAN レポート(案)

## 多項式を用いたピーク位置決定法

1. 範囲 本レポートは、X線光電子分光スペクトルまたはオージェ電子分光スペクトルのピーク最大強度のエネルギー値を決定するための手法を示したものである。

### 2. 意義

- 2.1 ピークの最大強度のエネルギー値(ピーク位置)を決定する。
- 2.2 本手法は近似関数を用いるので、S/Nの低いスペクトルに対しても適用が可能である。
- 2.3 この記述の適用により生ずる問題は、すべて適用者の責任に記するものである。

### 3. 用語

#### 3.1 関連用語

ピーク, ピーク位置, 多項式

### 4. 適用範囲

#### 4.1 適用スペクトル

データが離散的に与えられた電子分光スペクトル、スペクトルデータの処理(バックグラウンド除去、スムージング等)の有無は問わない。

### 5. 内容

5.1 対象とするピークの上部30%のデータ点を4次関数で近似し、その変極点のエネルギー値をピーク位置とする。

#### 5.2 手順

- 1) 目的とするピークの最大強度点および両側のバックグラウンド領域を含むように適切な範囲を設定する(Fig 1)。
- 2) 選択した範囲中の最大強度 $I_{max}$ 、最低強度 $I_{min}$ を求める。最大強度点の両側のカウント数が $I_{min} + 0.7 \times (I_{max} - I_{min})$ 以上となる範囲をフィッティング領域とする(Fig 2)。
- 3) 2)で決定した領域中のデータ点数が6点以上あれば、このデータ点に対して4次関数近似を行い、最大強度点付近で極大(ローカルマキシマム)となるエネルギー値を求める。この値が本手法で

求めたピーク位置となる。

5.3 上記データ点数が6点未満のスペクトルは本手法によるピーク位置決定手法に適さない。

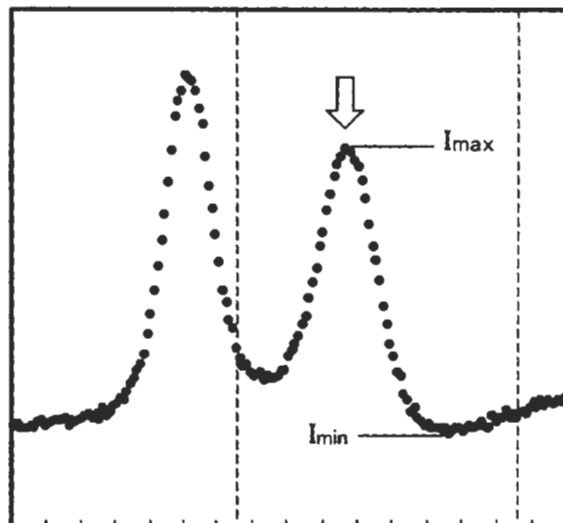


Fig 1. Example of selecting the peak area.

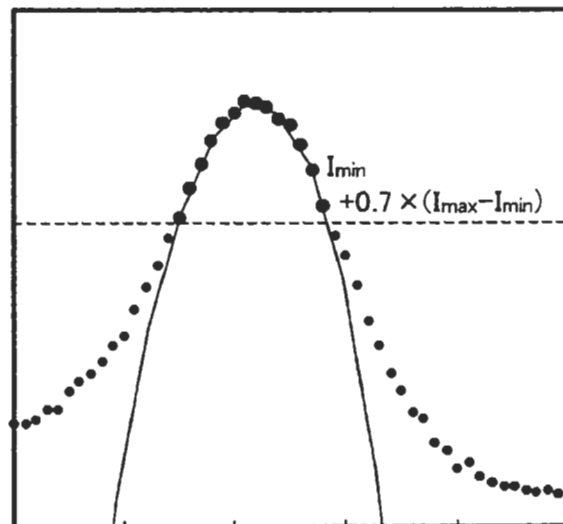


Fig 2. Fitting area with polynomial.

### 参考文献

K. Dohmae, *J. Surf. Anal.*, 4, 392(1998).

提案者(堂前和彦、豊田中研)