



中华人民共和国国家标准

GB/T 41073—2021/ISO 19830:2015

表面化学分析 电子能谱 X射线 光电子能谱峰拟合报告的基本要求

Surface chemical analysis—Electron spectroscopies—Minimum reporting
requirements for peak fitting in X-ray photoelectron spectroscopy

(ISO 19830:2015, IDT)

2021-12-31 发布

2022-07-01 实施

国家市场监督管理总局 发布
国家标准化管理委员会

目 次

前言	III
引言	IV
1 范围	1
2 规范性引用文件	1
3 术语和定义	1
4 符号和缩略语	2
5 相关数据采集参数报告	2
5.1 概述	2
5.2 谱仪	3
5.3 仪器分辨	3
5.4 检测器	3
5.5 X射线源	3
5.6 元素标识	4
5.7 谱图能量范围	4
5.8 谱图能量步长	4
5.9 荷电补偿	4
6 单谱峰拟合参数报告	4
6.1 概述	4
6.2 本底范围	4
6.3 本底积分范围	4
6.4 本底类型	4
6.5 拟合本底应用	5
6.6 设置峰参数	5
6.7 峰面积和峰高度	5
6.8 峰面积比和峰高比	5
6.9 半高峰宽	5
6.10 峰形	5
6.11 峰不对称参数	6
6.12 峰拟合处理	6
6.13 残差谱	6
7 多重谱峰拟合	6
7.1 概述	6
7.2 多重谱数据集的峰拟合方法	6
7.3 约束传播	6
7.4 本底传播	7
8 卫星峰扣除	7

9	双峰扣除	8
10	谱的去卷积.....	8
11	拟合质量与不确定度.....	8
11.1	概述	8
11.2	拟合质量	8
11.3	结合能的不确定度	8
11.4	峰面积的不确定度	8
附录 A (资料性)	报告峰拟合示例	9
附录 B (资料性)	多层数据集峰拟合报告	12
附录 C (资料性)	报告峰拟合参数模板	14
附录 D (资料性)	统计方法	15
参考文献	17

前 言

本文件按照 GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第 1 部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

本文件等同采用 ISO 19830:2015《表面化学分析 电子能谱 X 射线光电子能谱峰拟合报告的基本要求》。

本文件增加了“规范性引用文件”一章。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由全国微束分析标准化技术委员会(SAC/TC 38)提出并归口。

本文件起草单位：中国科学院化学研究所、中国石油化工股份有限公司石油化工科学研究院。

本文件主要起草人：赵志娟、邱丽美、刘芬、章小余、王岩华。

引 言

许多材料表面所获得的 X 射线光电子能谱 (XPS) 谱图比较复杂,且常含有重叠或者不能分辨的峰。分辨不足可能是由于仪器参数、X 射线线宽、跃迁的自然线宽或者所有因素共同作用所致。因此,经常有必要使用数学方法拟合 XPS 谱图中的某些或所有峰,来确定每个峰包络线中所含各组分峰的位置与强度。产生总的峰包络线并对存在的各化学态进行定量,这通常是识别化学态的第一步。因此,分析者必须确认峰拟合后报告的每个峰的位置(用于确定化学态)与峰面积(用于精确定量)。

该数学方法应用模型峰与本底形状,为了获得实验数据的最优拟合,定义的参数是可变的。最常见模型峰的峰形是高斯与洛伦兹函数的组合。

峰拟合后应报告的参数大多是定义那些曲线的参数。其他因子由分析者选择,以确保峰拟合处理结果符合峰包络线的化学意义描述,或者使拟合过程所需的时间最短。分析者所做的操作包括:

- 选择在拟合中固定的参数值;
- 确定拟合中可变参数值的范围;
- 将一个参数值与另一个参数值进行数学关联。

峰拟合是一种获得可能与分析表面化学性质相关的定量与定性结果的纯数学处理。拟合结果将依赖于分析者对参数和约束的选择,该选择会影响分析者从峰拟合结果中获得的解释性结论。因此,报告这些参数和约束是重要的。这将允许其他分析者进行如下操作:

- 评估由峰拟合所得结论的可靠性与有效性;
- 对同一数据集重复峰拟合处理可以得到相同的结果;
- 对由类似样品获得的数据重复峰拟合过程,可以进行数据集的有效比较。

大多数用于 XPS 数据处理的软件包都包含峰拟合程序。这些程序允许操作者选择合适的参数以及使用所需的约束条件进行拟合处理。很可能软件会提供报告这些信息的输出以及方便拷贝用于其他谱图拟合处理的输出。这样的输出将便于报告合适的参数。

本文件不提供用于 XPS 峰拟合或者将峰拟合处理结果与被分析表面化学性质关联的说明。事实上,在本文件的示例中,所示拟合不代表可以进行拟合的唯一方法,甚至不代表最佳的峰拟合方法。这些示例只是用于说明制定本文件的目的。

表面化学分析 电子能谱 X 射线 光电子能谱峰拟合报告的基本要求

1 范围

本文件规定了如何报告 X 射线光电子能谱的峰拟合及其结果。

本文件适用于单个谱图或一组相关谱图的拟合,例如在深度剖析测试中采集获得的一组相关谱图。本文件提供了一个应报告的参数列表,以实现可重复的峰拟合或对多个谱进行拟合与比较。

本文件不提供峰拟合的操作说明,也不提供应采用的拟合步骤。

2 规范性引用文件

本文件没有规范性引用文件。

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件。

3.1

非弹性本底 background, inelastic

由于单次或多次非弹性散射过程,原本处于一种能量的粒子现以较低能量被发射时在谱图中的强度分布。

[来源:ISO 18115-1,4.50]

3.2

Shirley 本底 background, Shirley

在动能高于和低于该峰或有意义峰处拟合测量谱时计算的本底,这样在给定动能处的本底是与本底以上较高动能处的总峰面积成固定比例的成分。

[来源:ISO 18115-1:2010,4.54]

3.3

Tougaard 本底 background, Tougaard

用相对于能量损失的微分非弹性散射截面模型和表面区发射原子的三维分布模型所得到的强度分布。

[来源:ISO 18115-1:2010,4.57]

3.4

通能 pass energy

位于能量分析器中的能量色散区被测粒子的平均动能。

[来源:ISO 18115-1:2010,4.325]

3.5

峰拟合 peak fitting

调整峰合成所产生的谱图与测得的谱图相一致的步骤。