



X 射线光电电子能谱 数据处理及分峰步骤

中国科学院化学研究所

刘芬

2005.10.21



一、在Origin中作图步骤:

1、打开文件，可以看到一系列数据，找到相应元素（如N1s）对应的Region（一个Region 对应一张谱图），一个文件有多个Region。

2、继续向下找到**Kinetic Energy**，其下面一个数据为动能起始值，即谱图左侧第一个数据。用公式

$BE_{\text{始}} = 1486.6 - KE_{\text{始}} - \phi$ 换算成结合能起始值， ϕ 是一个常数值，即荷电位移，每个样品有一个值在邮件正文中给出。

Region 1

2004

5

30

12

48

10

255

0

XPS

Al K-alpha

1486.6

0

0

0

0

0

FAT

30

1E+37

4.453

0

0

0

0

0

N1s

N1s

-1

Kinetic Energy

eV

1072.6

0.05

1



- 3、再下面一个数据是步长值，如0.05或0.1或1，每张谱图间有可能不一样。
- 4、继续向下，可以找到401或801这样的数，该数为通道数，即有401或801个数据点。
- 5、再下面的数据开始两个数据是脉冲，把它们舍去，接下来的401或801个数据都是Y轴数据，将它们copy到B(Y)。

N1s
N1s
-1
Kinetic Energy
eV
1072.6
0.05
1

Counts
pulse counting
0.1
6
0
0
0
0
0
401
2202.52
4127.08
2458.36
2559.72
2523.56
2553.48
2509.8

Origin 7 - UNTITLED - [Data1]

File Edit View Plot Column Analysis Statistics Tools Format Window Help

T Arial 0 B I U x^2 x_2 x_1^2 $\alpha\beta$ A A

Plot

Cut

Copy

Paste

Insert

Delete

Clear

Set As

Set Column Values...

Fill Column with

Sort Column

Sort Worksheet

Normalize...

Frequency Count

Statistics on Columns

Mask

Set as Categorical

Properties...

x = ?, y = ?

Set column values for the selected column

Data1* NUM

开始 ISI Web of... Microsoft ... 7-8 - 记事本 Origin 7 -... XPS Peak P... 15:43

Origin 7 - UNTITLED - [Data1]

File Edit View Plot Column Analysis Statistics Tools Format Window Help

T Arial 0 B I U x^2 x_2 x_1^2 $\alpha\beta$ A A

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19

A(X) B(Y)

Set Column Values

Abs(x) : Absolute value For row 1 to 401

abs() Add Function

col(A) Add Column

Col(A)=

1486.6-1072.6-8.4-0.05*(i-1)

Undo OK Cancel

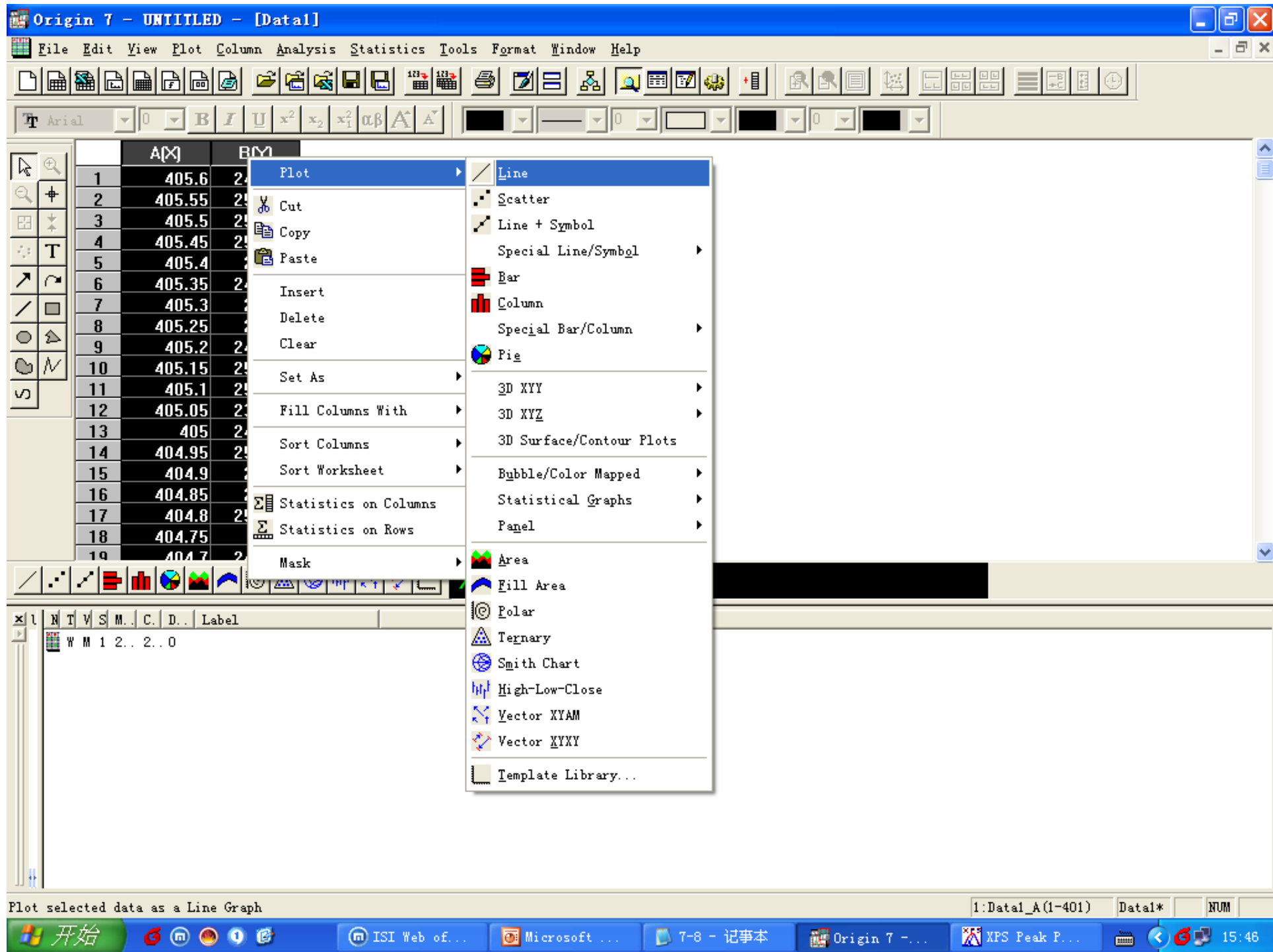
x = ?, y = ?

x l N T V S M C D Label

W M 6 2. 2.0

1: Data1_A(1-0) Data1* NUM

开始 ISI Web of... Microsoft ... 7-8 - 记事本 Origin 7 -... XPS Peak P... 15:44



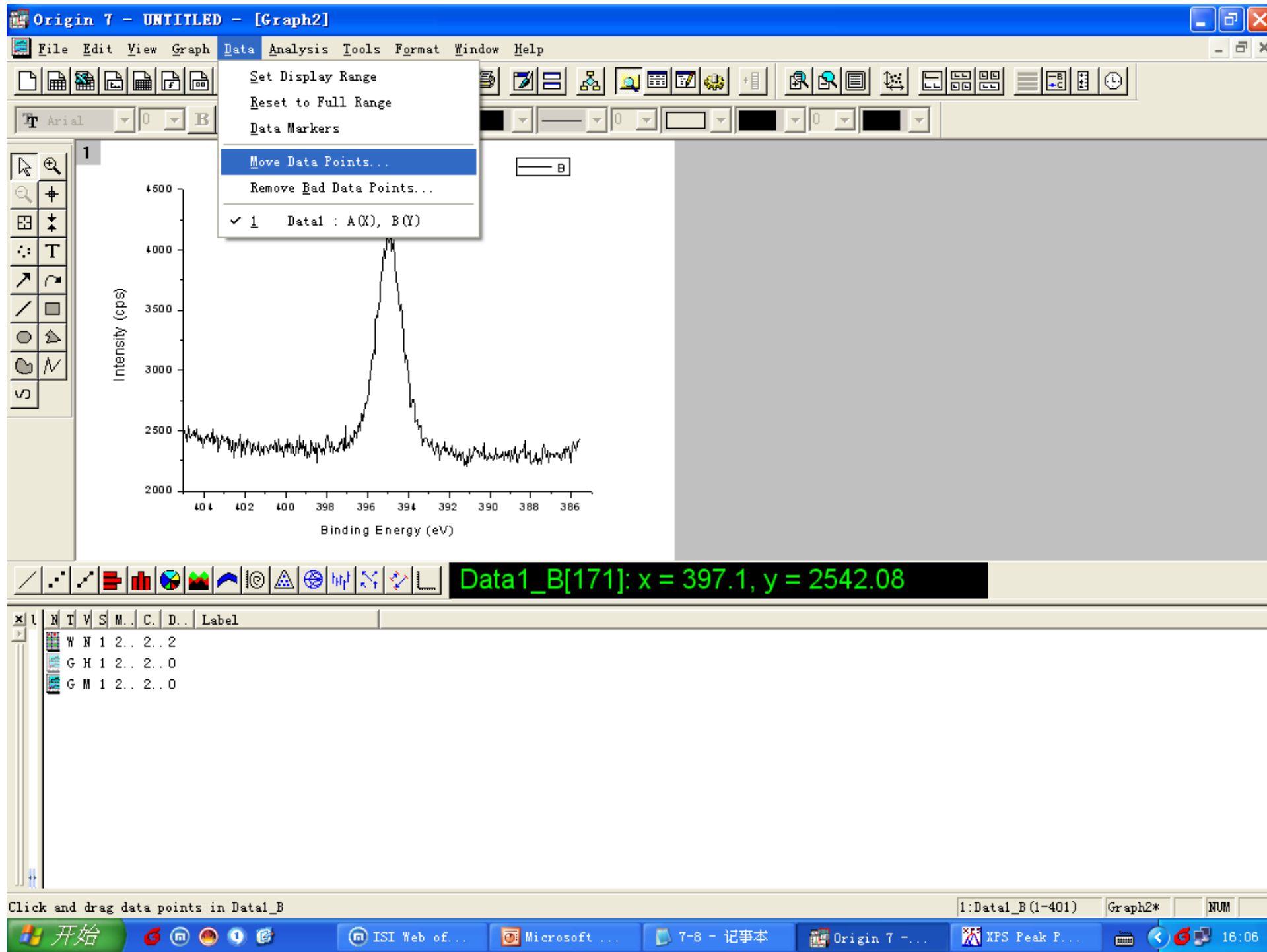


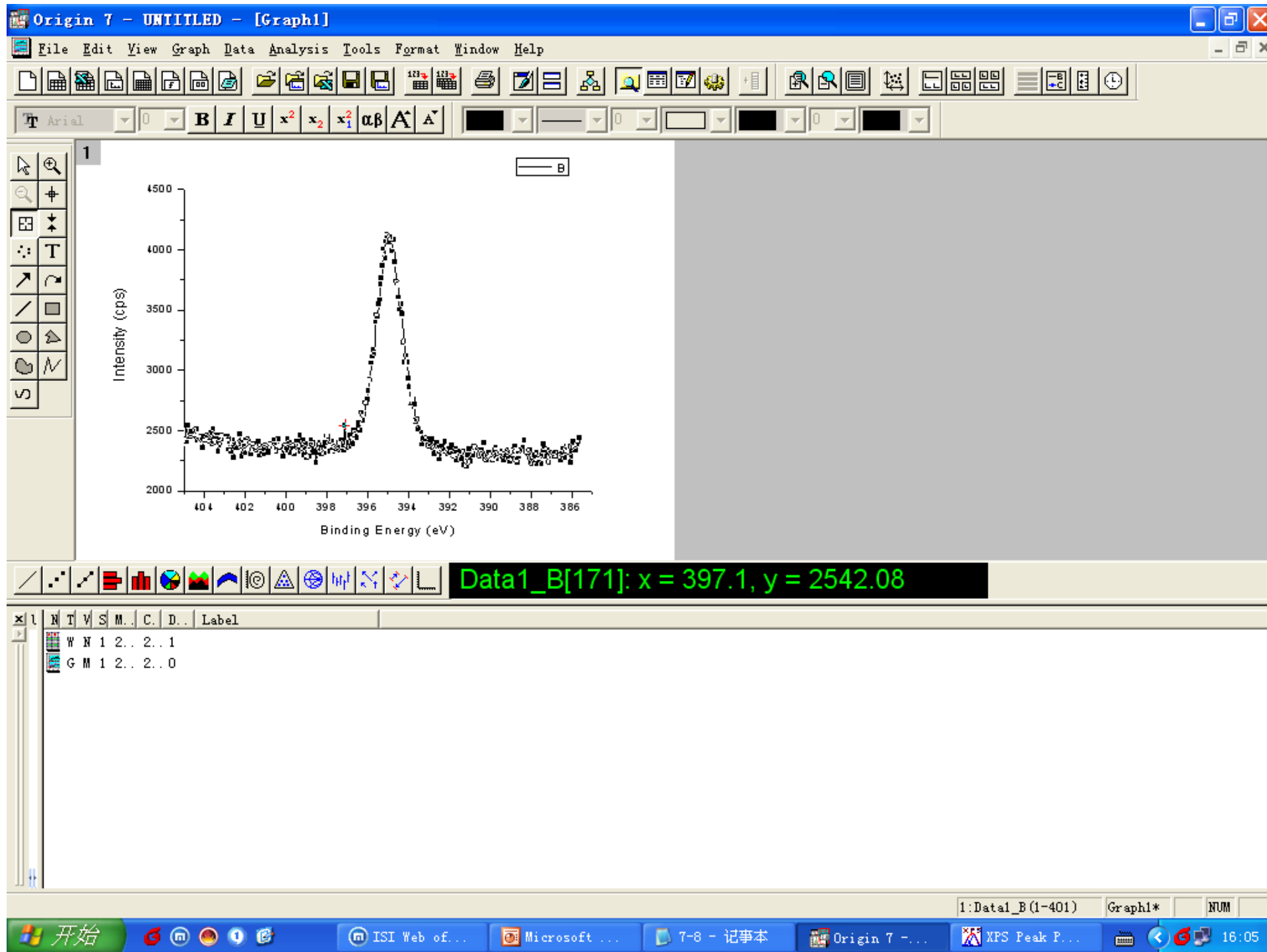
6、**X轴**：点A(X)，再点右键，然后点set column values，出现一个对话框，在from中填1，在to中填401(通道数)，在col(A)中填 $BE_{\text{始}} - 0.05 \cdot (i-1)$ ，或直接填 $1486.6 - KE_{\text{始}} - \varphi - 0.05 \cdot (i-1)$ ，最后点do it。

7、此时即可以作出N1s谱图。

8、画出来的图有可能有一些尖峰，那是脉冲，应把它们去掉，方法为点Data-Move Data Points，然后按键盘上的

↓ 或 ↑ 箭头去除脉冲。







二、分峰步骤

- 1、将所拷贝数据转换成**TXT**格式：把所需拟合元素的数据引入Origin后，将column A和B中的值复制到一空的记事本文档中（即成两列的格式，左边为结合能，右边为峰强），并存盘。如要对数据进行去脉冲处理或截取其中一部分数据，需在Origin中做好处理。

2C-xps - 记事本

文件(F) 编辑(E) 格式(O) 查看(V) 帮助(H)

107.3	853.28
107.25	799.56
107.2	819.84
107.15	860.6
107.1	835.2
107.05	863.52
107	815.48
106.95	839.16
106.9	878.72
106.85	826.04
106.8	831.24
106.75	831
106.7	812.32
106.65	821.48
106.6	783.8
106.55	821.24
106.5	810.12
106.45	817.16
106.4	773.36
106.35	777.56
106.3	806.76
106.25	807.72
106.2	806.36
106.15	868.24
106.1	853.12
106.05	910.6
106	873.6
105.95	840.96
105.9	772.56
105.85	823.2
105.8	833.76
105.75	876.48
105.7	858.92
105.65	840.76
105.6	855.56
105.55	903
105.5	951.92
105.45	865.12
105.4	872.16
105.35	900.64
105.3	880.28

开始

ISI Web of... Microsoft ... 2C-xps - ... Origin 7 -... XPS Peak P...

16:09



2、打开XPS Peak，引入数据：点Data---Import (ASCII)，引入所存数据，则出现相应的XPS谱图。

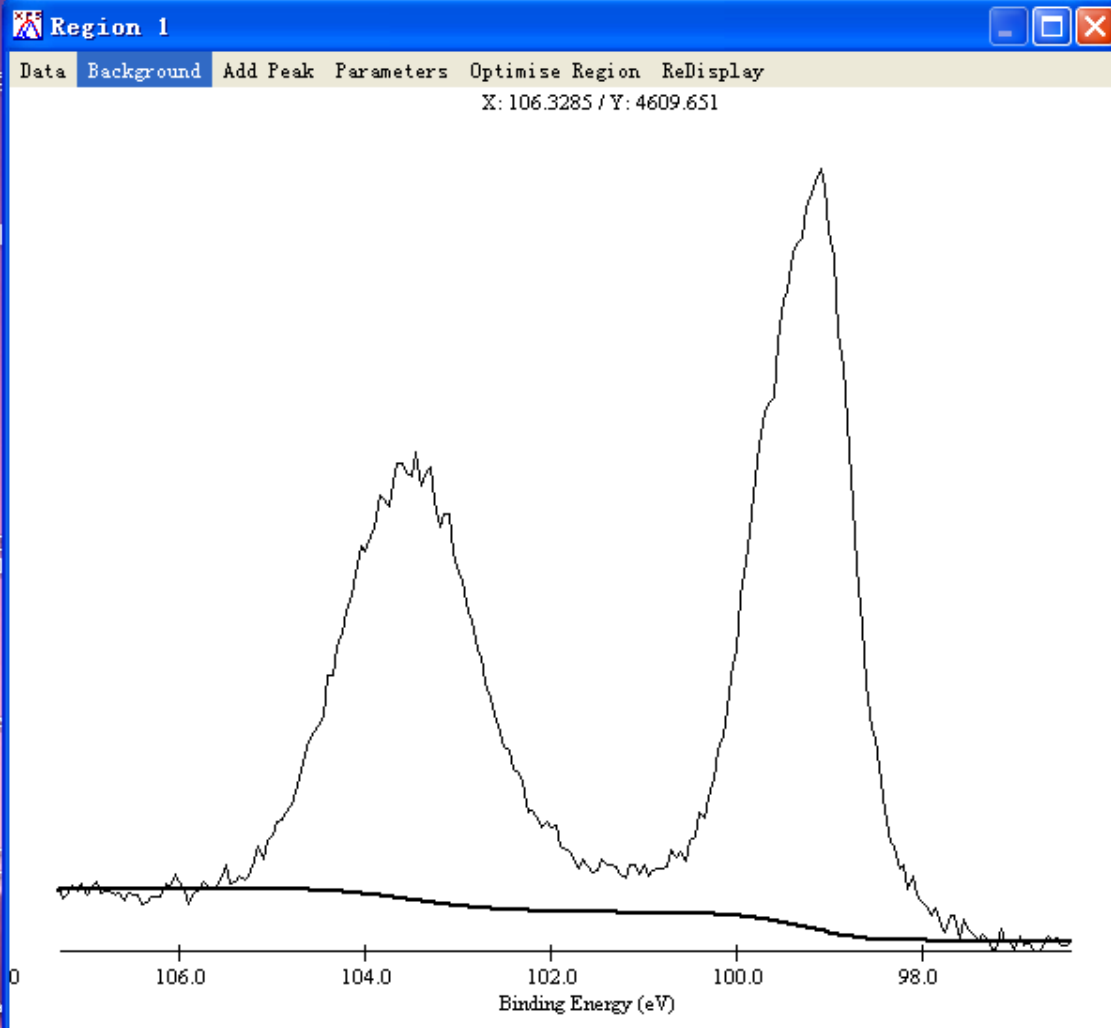
The screenshot displays two windows from the XPS software suite. The 'XPS Peak Fit' window is in the foreground, showing a menu with options: Import (Kratos), Import (ASCII), Export (Spectrum), Export (Peak Parameters), Export to clipboard, Print Spectrum, and Print with peak parameters. The 'XPS Peak Processing' window is visible in the background, featuring buttons for 'Open XPS', 'Save XPS', 'Options', and 'Close'. It includes a 'Description' field, an 'Optimise All' button, and a table for peak data.

Region	Peaks	Σ	$\Sigma \delta^2$
1			
2			
3			
4			
5			
6			
7			
8			
9			
10			

The Windows taskbar at the bottom shows the '开始' (Start) button and several open applications: Microsoft PowerPoint, ISI Web of Knowledge, and XPS Peak Processing. The system clock indicates the time is 17:04.



3、选择本底：点Background，因软件问题， High BE和Low BE的位置最好不改，否则无法再回到Origin，此时本底将连接这两点，Type可根据实际情况选择，一般选择Shirley 类型。



Region 0

Boundary

High BE Low BE

107.3 96.4

No. of Ave. Pts at end-points Background Type

9 Shirley

Area (I* ϵ V) 8401.844

Shirley+Linear (0 for Shir.)

Slope 0 Optimise

For Tougaard only

B1 3000 Optimise

Accept Close

XPS Peak Processing

Open XPS Save XPS Options Close

Description

Optimise All

Region	Peaks	Σ	$\Sigma \delta^2$
1			
2			
3			
4			
5			
6			
7			
8			
9			
10			



Media Player Classic

反间谍专家

Norton Inter...

Microsoft Office Ex...



4、加峰:

点Add peak, 出现小框, 在Peak Type处选择s、p、d、f等峰类型 (一般选s), 在Position处选择希望的峰位, 需固定时则点fix前小方框, 同法还可选半峰宽 (FWHM)、峰面积等。各项中的constraints可用来固定此峰与另一峰的关系, 如Pt4f_{7/2}和Pt4f_{5/2}的峰位间距可固定为3.45, 峰面积比可固定为4:3等。点Delete peak可去掉此峰。然后再点Add peak选第二个峰, 如此重复。



XPS Peak Processing

Open XPS Save XPS Options Close

Description

Region	Peaks	Optimise All						Σ
1	0							Σδ ² 1.730709E+08
2								
3								
4								
5								
6								
7								
8								
9								
10								



XPS Peak Processing

Open XPS Save XPS Options Close

Description

Optimise All

Region	Peaks			Σ	Σδ ²
	0	1	2		
1					840903.8
2					
3					
4					
5					
6					
7					
8					
9					
10					



- 5、拟合：选好所需拟合的峰个数及大致参数后，点 **Optimise region** 进行拟合，观察拟合后总峰与原始峰的重合情况，如不好，可以多次点 **Optimise region**。
- 6、参数查看：拟合完成后，分别点另一个窗口中的 **Rigion Peaks** 下方的0、1、2等可看每个峰的参数，此时**XPS**峰中变红的为被选中的峰。如对拟合结果不 **region** 满意，可改变这些峰的参数，然后再点 **Optimise**。



XPS Peak Processing

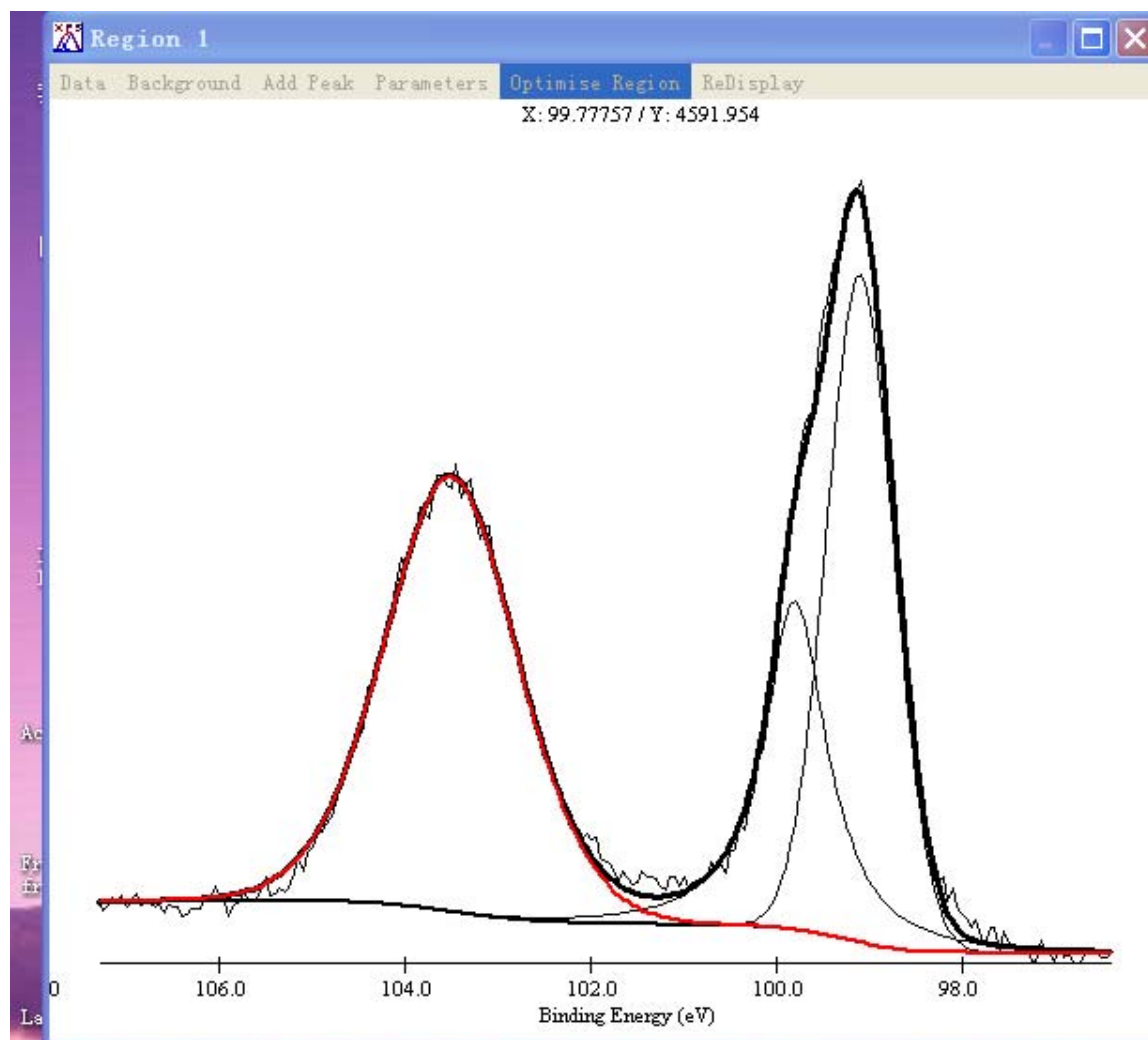
Open XPS Save XPS Options Close

Description

Region	Peaks			Optimise All										Σ	Σδ ²
	0	1	2												
1														1018855	
2														1018855	
3															
4															
5															
6															
7															
8															
9															
10															

Σ 1018855

Σ 1018855



Peak 1

Peak Type **p** S.O.S. **0**

Position

103.510001 ☐ Fix **Optimise**

< > **Constraints**

FWHM

1.7 ☐ Fix **Optimise**

< > **Constraints**

Area

3813.314 ☐ Fix **Optimise**

< > **Constraints**

% Lorentzian-Gaussian (0:G, 100:L)

40 ☐ Fix **Optimise**

< > **Constraints**

Optimise Peak

ReDraw

Delete Peak

Cancel

Accept

XPS Peak Processing

Open XPS

Save XPS

Options

Close

Description

Region	Peaks		Optimise All										$\Sigma \delta^2$	
1	0	1	2										Σ	820391.6
2														820391.6
3														
4														
5														
6														
7														
8														
9														
10														

Media Player Classic

反间谍专家

Norton Inter...

Microsoft Office Ex...

开始

Microsoft PowerP...

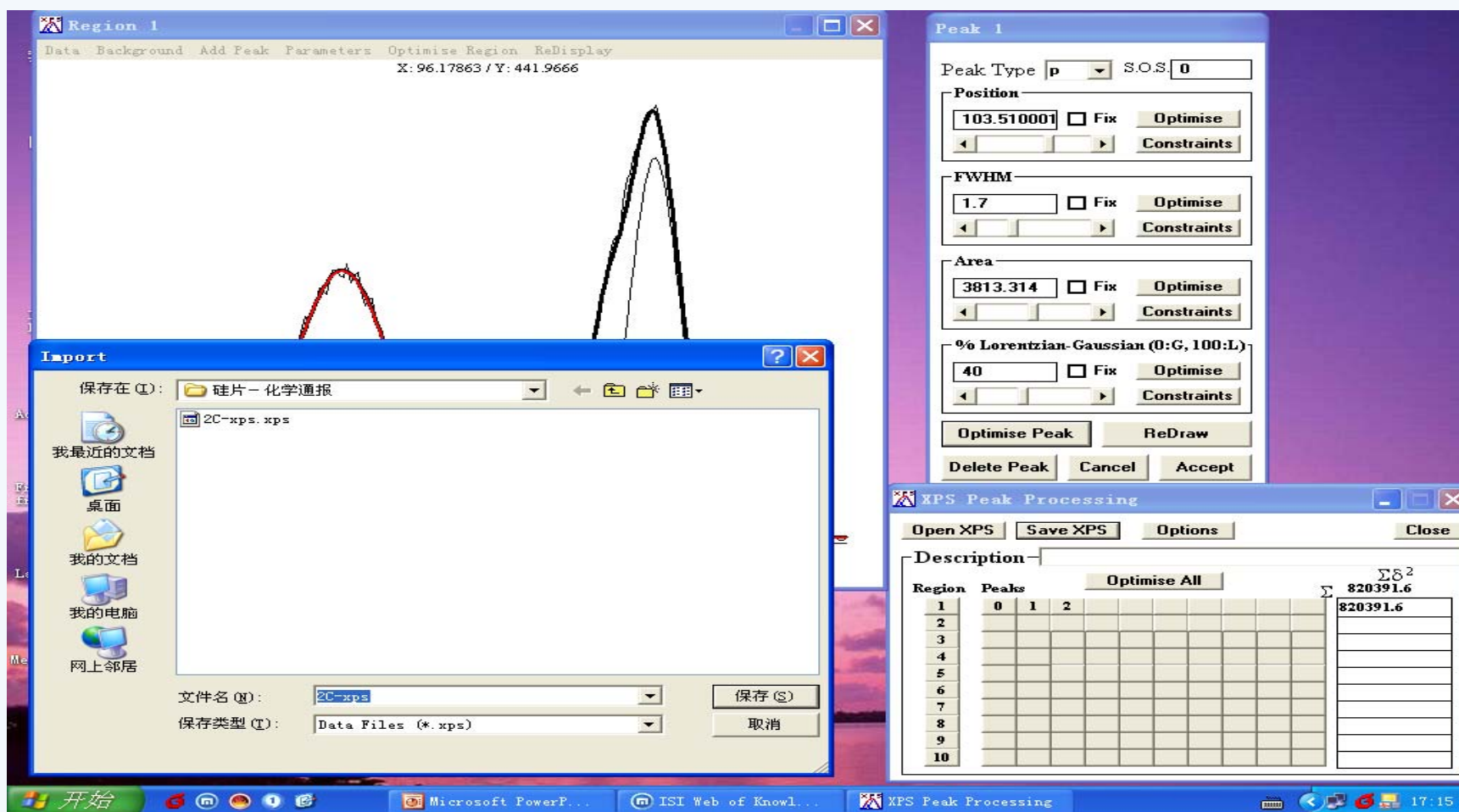
ISI Web of Knowl...

XPS Peak Processing

17:14



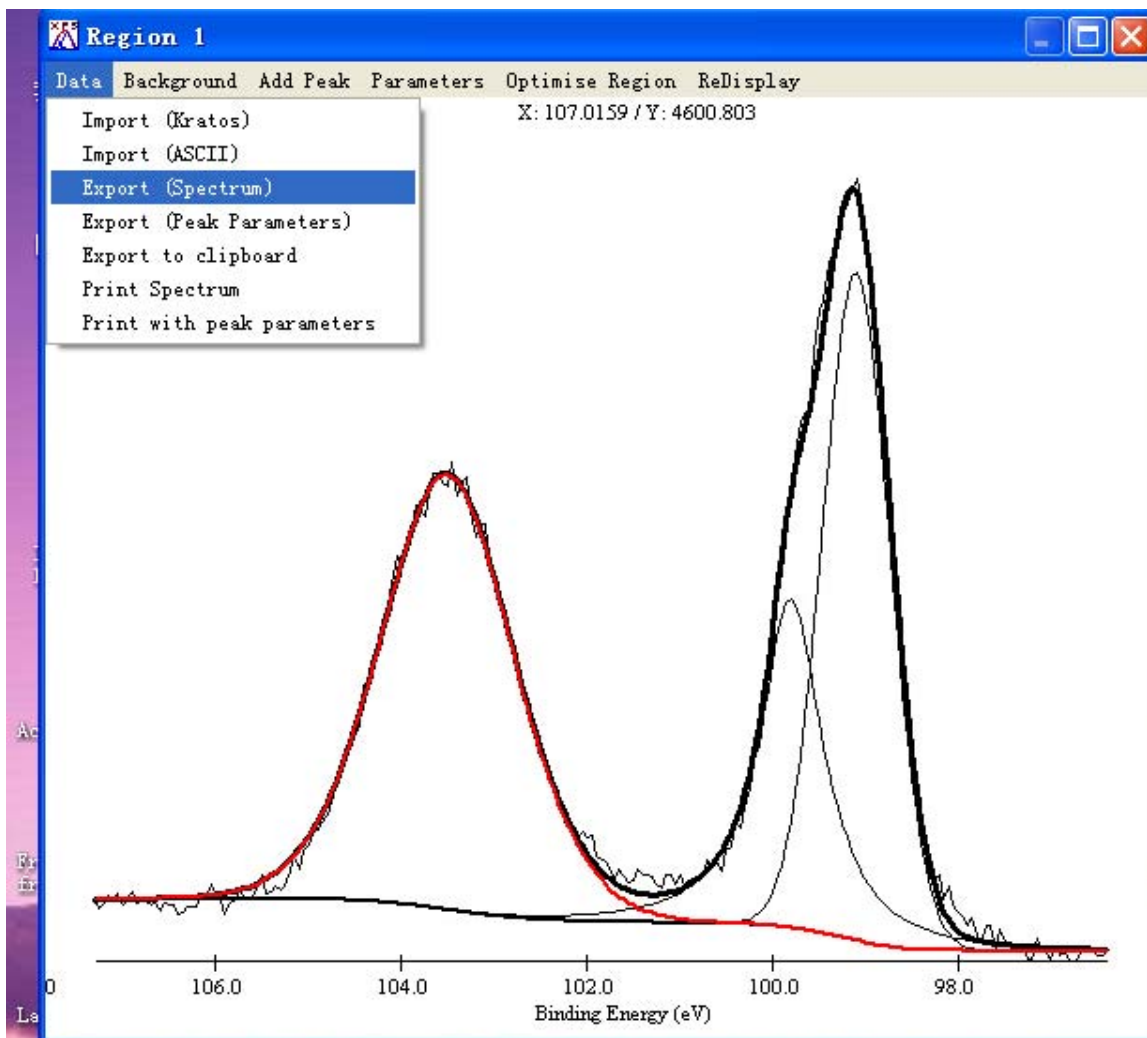
7、点Save XPS存图，下回要打开时点Open XPS就可以打开这副图继续进行处理。





8、数据输出：

- ④ 点Data——Print with peak parameters可打印带各峰参数的谱图，通过峰面积可计算此元素在不同峰位的化学态的含量比。
- ④ 点Data——Export to clipboard，则将图和数据都复制到了剪贴板上，打开文档（如Word文档），点粘贴，就把图和数据粘贴过去了。
- ④ 点Data——Export（spectrum），则将拟合好的数据存盘，然后在Origin中从多列数据栏打开，则可得多列数据，并在Origin中作出拟合后的图。



Peak 1

Peak Type **p** S.O.S. **0**

Position
 ☐ Fix **Optimise**
 Constraints

FWHM
 ☐ Fix **Optimise**
 Constraints

Area
 ☐ Fix **Optimise**
 Constraints

% Lorentzian-Gaussian (0:G, 100:L)
 ☐ Fix **Optimise**
 Constraints

Optimise Peak **ReDraw**

Delete Peak **Cancel** **Accept**

XPS Peak Processing

Open XPS **Save XPS** **Options** **Close**

Description

Optimise All

Region	Peaks	0	1	2								$\Sigma \delta^2$
1	0	1	2									Σ 820391.6
2												820391.6
3												
4												
5												
6												
7												
8												
9												
10												





将拟合好的数据重新引回到Origin:

The screenshot shows the Origin 7 software interface. The title bar reads 'Origin 7 - UNTITLED - [Data1]'. The menu bar includes File, Edit, View, Plot, Column, Analysis, Statistics, Tools, Format, Window, and Help. The toolbar contains various icons for file operations, data manipulation, and plotting. A black arrow points from the 'Data' window to the 'Fit' button in the toolbar. The 'Data' window displays a table with columns A[X] and B[Y], and rows 1 through 19. The status bar at the bottom shows 'x = ?, y = ?'.

	A[X]	B[Y]
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18		
19		

Read ASCII file data into the current window

Windows taskbar: 开始, ISI..., Micr..., 2C-x..., Orig..., XPS..., xps..., 实验..., 16:37

