XPS Peak分峰步骤

1． 将所拷贝数据转换成所需格式：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。

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。

3． 选择本底：点Background，在所出现的小框中的High BE和Low BE下方将出现本底的起始和终点位置（因软件问题，此位置最好不改，否则无法再回到Origin），本底将连接这两点，Type可据实际情况选择。

4． 选峰：点Add peak，出现小框，在Peak Type处选择s、p、d、f等峰类型（如C1s峰则选s，S2p峰则选p），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Pt4f7/2和Pt4f5/2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。

5． 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． 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。如对拟合结果不满意，可改变这些峰的参数，然后再点Optimise region。

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． 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。

9． 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。

10． 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。

首先扫描全谱，由于荷电存在使结合能升高，因此要通过C结合能289.6eV对全谱进行荷电校正，然后对感兴趣的元素扫描高分辨谱，将所得结果与标准图谱对照，由结合能确定元素种类，由化学位移确定元素得化学状态，为了是结果准确在每一次扫描得结果分别进行荷电校正。XPS谱图中化学位移的分析一般规律为：

1、原子失去价电子或因与电负性高的原子成键而显正电时，内层电子结合能升高。

2、原子获得电子而荷负电时，内层电子结合能减小。

3、氧化态越高，结合能越大。

4、价层发生某种变化时，所有内层电子化学位移相同 。

5、对于XPS峰主量子数n小的壳层比n大的峰强，n相同的角量子数l大的峰强，n，l相同的j大的峰强。

定量分析

选取最强峰的面积或强度作为定量计算的基础，多采用灵敏度因子法，因为各元素产生光电子时的含量强度和含量不一定成正比，从而利用灵敏度因子对强度进行修正，其做法为：以峰边、背景的切线交点为准扣除背景，计算峰面积或峰强，然后分别除以相应元素的灵敏度因子法，就可得到各元素的相对含量，这个相对含量是原子个数相对含量即摩尔相对含量。

XPS图谱的分峰处理

由于在制备过程中外界条件不可能完全均匀一致，因而对于同一元素可能存在不同的化学态，而各化学态产生的峰又有可能相互重叠，这样就对定性、定量分析带来了不便，因而在进行数据分析时需要对可能存在重叠的峰进行分峰处理，目前有很多数据处理软件可以进行分峰运算，其原理都是利用高斯－洛沦兹函数，其中XPSpeak为一位台湾学者编写的程序，其采用图形用户界面（GUI），用于XPS分峰处理操作方便，简单易学。