



X線光電子分光装置で構造解析？

■X線光電子分光法の測定範囲

X線光電子分光法（XPS）で得られる情報は下記のとおりですが、このうち5）の構造解析に関して見逃されがちです。

- 1) 物質表面の元素組成・定量
- 2) 表面化学結合状態→状態分析（Chemical Shift）⇒高エネルギー分解能測定
- 3) 深さ方向での元素分布、化学結合状態変化
⇒Arイオンエッチング、試料傾斜測定
- 4) 二次元的元素濃度分布⇒マッピング
- 5) 構造解析

図1に測定エネルギー（波長）と検出される遷移の型を示します。光電子スペクトルのピークは測定化合物に対し特徴的な形状を示す場合があります。一般に構造の変化を如実に反映するのは最外殻軌道のスペクトルです。図1に示すようにXPS測定では最外殻軌道（価電子帯）スペクトル測定が可能です。この価電子帯スペクトル測定を行うことにより構造解析することができます。

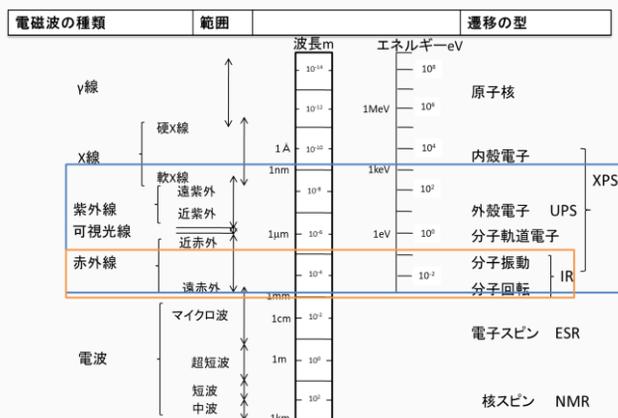


図1：測定エネルギー（波長）と検出される遷移の型

■構造解析

構造の違いを示すX線光電子分光スペクトル

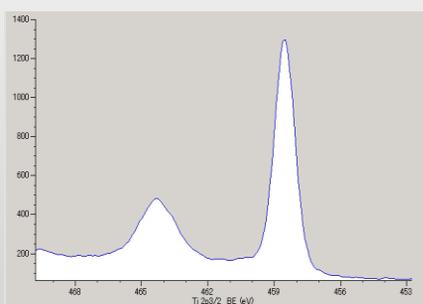
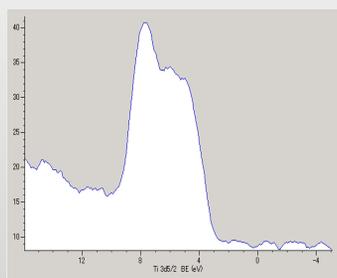
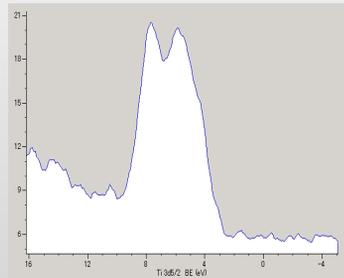


図2：Ti2p 光電子スペクトル



アナターゼ構造



ルチル構造

図3：価電子帯スペクトル

光触媒作用を示すチタニア（TiO₂）材料は現在広く用いられています。TiO₂材料評価で重要なことは化学結合状態よりその構造にあります。XPSでTiO₂材料を測定しますと図2に示す光電子スペクトル（Ti2p）が得られます。しかしTiO₂の結晶構造の違いがありましてもTi2pスペクトルに違いは観測されません。

結晶構造の違いを明確に反映しているのは最外殻軌道（価電子帯）です。XPSで価電子帯を測定した結果を上図に示します。TiO₂にはアナターゼ構造とルチル構造があります。上図に示すように、これら構造の違いを反映した価電子帯スペクトルが得られます。XPSではこのように価電子帯スペクトルのから構造の違いが分かります。

スコップへご要望等御座いましたら窓口担当scoop-groups@go.tuat.ac.jpまでお問合せ下さい。