



## X線光電子分光スペクトル解析のためのDatabase

X線光電子分光法 (XPS) は測定スペクトルのエネルギー値から材料の化学結合状態を求めることができる表面分析装置です。正確にピーク位置から化合物の帰属を行うためには、X線光電子分光データベースの利用が有効です。機器メーカーからの「XPS Hand Book」もありますが、より詳細な化学結合状態を求める上で以下の代表的なDatabaseを活用してみてください。

### ■ NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy Database(Ver.5)

<https://srdata.nist.gov/xps/>

2023年11月にアメリカ国立標準技術研究所 (NIST) よりリリースされました最新のXPSのDatabase (22,000以上の化学シフト値のデータ収録) です。スペクトル表示は在りませんが、各元素の化合物に対するエネルギー値が分かります。



光電子ピーク、Augerピークなどで検索可能

Element	Z	Compound	Orbital	Energy (eV)
Cu	29	[Cu(C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> )(CS <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ]	2p <sub>3/2</sub>	932.90
Cu	29	[CuCl <sub>2</sub> (P(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ]	2p <sub>3/2</sub>	932.30
Cu	29	[CuCl <sub>2</sub> (P(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ]	2p <sub>3/2</sub>	933.50
Cu	29	[CuBr <sub>2</sub> (P(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ]	2p <sub>3/2</sub>	932.80
Cu	29	[CuBr <sub>2</sub> (P(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ]	2p <sub>3/2</sub>	933.20
Cu	29	Cu(OH) <sub>2</sub>	2p <sub>3/2</sub>	934.40
Cu	29	Cu(OH) <sub>2</sub>	2p <sub>3/2</sub>	935.10
Cu	29	Cu(OH) <sub>2</sub>	2p <sub>3/2</sub>	932.70
Cu	29	Cu(OH) <sub>2</sub>	2p <sub>3/2</sub>	934.70
Cu	29	CuSiO <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub>	2p <sub>3/2</sub>	935.20

化合物

エネルギー値

図2 Cu化合物のエネルギー値表示画面

図1 元素選択画面

図1に示す元素選択画面よりユーザーは元素、エネルギー、電子軌道等で化学シフト値 (図2参照) の検索ができます。

### ■ The XPS Polymer Database

(G.Beamson, D.Briggs編集)

高分子化合物のDatabaseは110種以上の高分子の構成元素の光電子分光スペクトル (図4に示すC1sスペクトルなど) および各官能基の化学シフト量 (図5) から構成されています。(本Database利用希望者は下記に連絡して下さい)

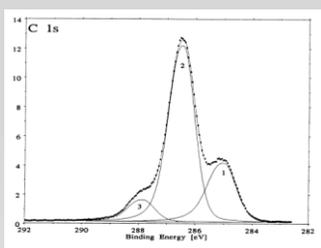


図4 Ethylcellulose C1sスペクトル

Functional group	Chemical shift			Number of examples
	Min.	Max.	Mean	
C-O-C	1.13	1.75	1.45	18
C-OH	1.47	1.75	1.55	5
C-O-C-O	1.12	1.98	1.54	21
C-O-C-O	2.81	2.97	2.89	1
C-O-C-O	2.83	3.06	2.93	5
C-O-C-O	3.66	4.23	3.99	31
HO-C-O	4.18	4.33	4.26	2
O-C-O	4.30	4.34	4.32	2

図5 C1s (285.0 eV) に対する官能基のシフト量

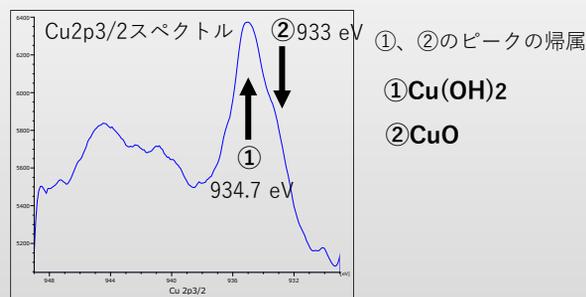


図3 Database (図2) を用いたスペクトル帰属例

- ①、②のピークの帰属
- ①Cu(OH)<sub>2</sub>
- ②CuO



図6は図4,5を参考にコピー用紙測定C1sスペクトルの各ピークの帰属の実施例

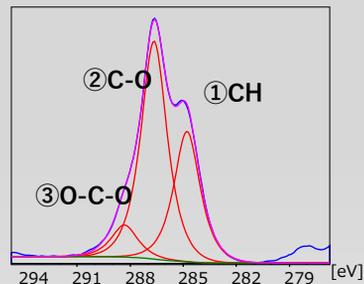


図6 Databaseを参考に波形分離結果の帰属

X線光電子分光装置利用の方は窓口担当scoop-groups@go.tuat.ac.jpまでお問合せ下さい。