

2 元系酸化物の XPS ケミカルシフトの検討

荒井 正浩、石井 忠男、薄木 智亮
住友金属工業(株)総合技術研究所 〒660 尼崎市扶桑町 1-8

XPS Chemical Shifts for Some Binary Oxides

Masahiro Arai, Tadao Ishii and Noriaki Usuki
Corporate R & D Labs., Sumitomo Metal Industries, LTD.
1-8 Fuso- cho Amagasaki 660

1.はじめに

実用の金属、鉄鋼材料には様々な合金元素が添加されており、その表面に生成する酸化物も酸素以外に2種類以上の元素を含む複合酸化物となる。しかし、このような複合酸化物のケミカルシフトに関する報告はほとんどない[1]。

そこで本研究では、代表的な酸化物として Mg、Si、Al の単体酸化物と 2 元系酸化物のケミカルシフトを XPS で求めた。その結果、両者のシフト量に差異が認められたので、この差異の発現機構も併せて検討した結果を報告する。

2.実験

MgO(100)、SiO₂(100)、Al₂O₃(1-102)の3種類の単体酸化物(単結晶)と、これらから構成される2元系酸化物(多結晶) MgO+SiO₂、2MgO+SiO₂、MgO+Al₂O₃、2SiO₂+3Al₂O₃ を供試材とした。

XPS 測定には VG 製 ESCALAB220i-XL を用い、非単色化 Al K α 線励起とした。光電子の束縛エネルギーは金蒸着法 (Au 4f_{7/2}=84.0eV) により決定した。

3.結果および考察

測定結果例として、MgO、SiO₂とこれらから構成される2種類の2元系酸化物の O 1s スペクトルを Fig.1 に示す。このように、単体酸化物と2元系酸化物ではピーク位置、すなわちケミカルシフト量が異なった。ピーク幅も異なり、2元系酸化物で広がった。

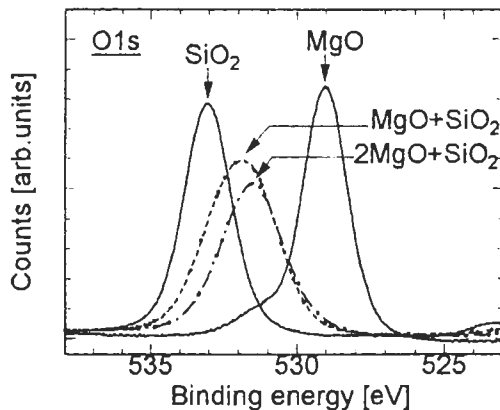


Fig.1 O 1s スペクトル

光電子ピーク間の束縛エネルギー差は、単体酸化物と2元系酸化物でよく一致した。この結果から、2元系酸化物を構成する各酸化物中の元素は、単体酸化物の場合と同じ価数にあると考えられる。にもかかわらず、ケミカルシフト量が異なることは、2元系酸化物内で何らかの相互作用が働いていることを示唆している。

各酸化物の O 1s 束縛エネルギーと Delamar の方法[2]から見積もった酸-塩基性度の指標となる表面等電点 (Isoelectric Point of Solid Surface, IEPS) の関係を Fig.2 に示す。このように、光電子ピークの束縛エネルギーは表面等電点と良い相関が認められた。酸化物に含まれる金属元素についても同様の相関が認められた。したがって、2元系酸化物のケミカルシフトは、元素の価数に加えて、構成酸化物間に働く酸-塩基相互作用にも依存すると考えられる。

4.まとめ

2元系酸化物の XPS ケミカルシフト量が単体酸化物のシフト量と異なった。このことから、複合酸化物中の元素の価数を、そのケミカルシフト量から一義的に決定することはできないと考えられる。

参考文献

- [1]金子、杉之原:日本金属学会誌 41, 375 (1977).
- [2] M. Delamar: J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 53, c11 (1990).

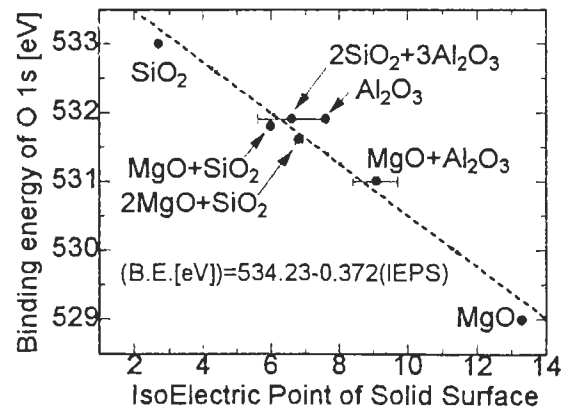


Fig.2 O 1s 束縛エネルギーと表面等電点の関係