

話題

XPSにおいて発生分布の非対称に与える弾性散乱効果の検討

佐藤仁美*・田中彰博*・村信吾**・城昌利**・田沼繁夫***・吉原一紘****

*アルバック・ファイ	〒253	茅ヶ崎市萩園2500
**電子技術総合研究所	〒305	つくば市梅園1-1-4
***ジャパンエネルギー分析センター	〒335	戸田市新曽南3-17-35
****金属材料技術研究所	〒305	つくば市千現1-2-1

XPSにおいて、光電子放出の角度分布関数における非対称パラメータの値は、固体内での光電子の非弾性散乱のみを考慮した Reilman らの計算値が用いられてきた¹⁾。近年、固体内での弾性散乱も考慮に入れる必要があるという実験結果²⁾がAIに対して得られた。弾性散乱の影響を考慮に入れた非対称パラメータの値も計算されている⁴⁾。本研究では、XPSにおいて光電子の発生分布の非対称に与える弾性散乱効果の検討をより一般的に行うために、6種類の元素に対して、X線の入射方向と光電子の取り出し方向のなす角度を変化させて、s軌道由来の光電子ピーク面積と、p軌道由来の光電子ピーク面積の比の測定を行った。

1. はじめに

XPSにおいて、スペクトルピークの強度は以下の式で示される³⁾(XPSの定量式)

$$I = I_x \cdot \sigma \cdot y \cdot n \cdot T \cdot A \cdot \Phi \cdot \lambda$$

ここで、 I_x は入射X線のフラックス、 σ は励起断面積、 y はメインピークの中の光電子のフラクション、 n は原子密度、 T はアナライザーの透過関数、 A は分析面積、 Φ は角度非対称性因子、 λ は光電子の非弾性平均自由行程である。

光電子の強度分布を表す角度非対称性因子 Φ は、次式で与えられる¹⁾。

$$\Phi = 1 / (4\pi) [1 - \beta / 4(3\cos^2\theta - 1)]$$

β は非対称パラメータ、 θ は入射X線と分光器のなす角度である。 β は原子の電子軌道とX線光子によって決まる定数である。 β の計算値には、Reilman らによって、表にされているものがある¹⁾。これらの値には、固体内での光電子の弾性散乱の影響は考慮されていない。

近年、Baschenko らは、発生した光電子は固体内で弾性散乱の影響を受けるという観点から、X線源に対して分光器の角度を変化させる測定を

AIに関して行った³⁾。Baschenko らは、弾性散乱の影響を考慮に入れた場合と、考慮に入れていない場合の光電子放出の角度分布の計算値も示している。その結果は、弾性散乱の値を考慮に入れた計算値の方が実験値により近い。

Jablonski は、 β の値に固体内での光電子の弾性散乱の影響を加味して、以下の式を導いた⁴⁾。

$$\beta^* = (0.781 - 0.00514Z + 0.000031Z^2) \beta$$

本研究では、XPSにおいて光電子の発生分布の非対称に与える弾性散乱効果の検討をより一般的に行うために、まず、6種類の元素に対して、X線の入射方向と光電子の取り出し方向を変化させて、s軌道由来の光電子ピーク面積と、p軌道由来の光電子ピーク面積の比の値の測定を行った。測定から得られた比の値を、Reilman らの β の値¹⁾をもとにして計算した比の値ならびに、Jablonski の β^* の値⁴⁾をもとにして計算した比の値と比較検討した。

2. 実験

測定は、X線の入射方向と光電子の取り出し方

向のなす角度を 90°、54.7° の 2 カ所で行い、(90° における面積比) と (54.7° における面積比) の比の値を求めた。測定は、Al、Si、Cu、Mo、Ag、Au の 6 元素について行い、結果 1 を表 1 にまとめた。Table 1. の右端の 2 カラムのうち、計算値 1) は、Reilman らの β の値¹⁾ をもとにして計算した比の値、計算値 2) は、Jablonski の β^* の値⁴⁾ をもとにして計算した比の値である。

3. 結果と考察

光電子発生に続いて、光電子が弾性散乱の影響を受けるものと仮定すると、発生する光電子の分布は一様に近づくはずである。Al 2s,2p、Cu 3s,3p、Mo 3s,3p、Ag 3s,3p、Ag 4s,4p、Au 4s,4p の場合にはこのような傾向を持っていた。この分の結果からすれば、弾性散乱の影響は確かに現れている。

従って、弾性散乱の影響は考慮する必要があり、その程度は物質に依存する。しかし、Si 2s,2p、Cu 2s,2p においては、測定の結果は一様分布から遠ざかっていた。この理由については検討中である。原因としては、固体内の原子配列の結晶性による光電子の回折効果等も考えられる。

参考文献 1) R. F. Reilman, A. Msezane and S. T. Manson, *J. Electron Spectrosc.*, **8**, 389 (1976), 2) *PHI Technical Bulletin* 8602 2/86; The Asymmetry Parameter in Photoelectron Spectroscopy, Physical Electronics Inc. (1986) 3) O. A. Baschenko, G. V. Machavariani and V. I. Nefedov, *J. Electron Spectrosc.*, **34**, 305 (1984), 4) A. Jablonski, *Surf. Interface Anal.*, **14**, 659 (1989)

Table 1. Peak area ratio when changing the angle between the incident X-ray and photoelectron detector as 90 and 54.7

	Raw Data (cps · eV)				(s/p)90° / (s/p)54.7°	計算値 1)	計算値 2)
	90deg	54.7deg	(s/p)90°	(s/p)54.7°			
Al 2s	2297000	1055400	1.62	1.51	1.07	1.21	1.16
Al 2p	1414000	697200					
Si 2s	1186000	8010000	1.54	1.17	1.32	1.19	1.15
Si 2p	7680000	6850000					
Cu 2s	1015600	891800	0.148	0.116	1.27	1.11	1.08
Cu 2p	6866000	7633500					
Cu 3s	466500	356500	0.360	0.350	1.03	1.09	1.07
Cu 3p	1297500	1020000					
Mo 3s	440250	442000	0.164	0.162	1.01	1.07	1.05
Mo 3p	2688800	2727000					
Ag 3s	375200	355700	0.345	0.405	0.851	1.08	1.05
Ag 3p _{3/2}	1088500	879000					
Ag 4s	375000	205775	0.236	0.242	0.976	1.06	1.04
Ag 4p	1586000	849600					
Au 4s	287200	229600	0.372	0.358	1.04	1.07	1.05
Au 4p _{3/2}	772200	641200					

A Study of Elastic Scattering Effects on Asymmetrical Distribution of X-ray Photoelectron Emission

H. Satoh*, A. Tanaka*, S. Ichimura**,
M. Jo**, S. Tanuma*** and
K. Yoshihara****

*ULVAC-PHI Inc., 2500 Hagisono
Chigasaki 253, Kanagawa Japan

**Electrotechnical Laboratory, 1-1-4
Umesono Tsukuba 305, Ibaraki Japan

***Japan Energy Analysis Center Inc., 3-
17-35 Niizominami Toda 335, Saitama
Japan

****National Research Institute for Metals,
1-2-1 Sengen Tsukuba 305, Ibaraki Japan

When the asymmetry parameter β is discussed in studies of angular distribution function of X-ray photoelectron emission from solids, it is common to consider only inelastic scattering. Calculated values of β by Reilman et al.¹⁾, in which elastic scattering was neglected, have been used when spectral data are used for quantification.

Recently, an experimental result for Al was obtained³⁾, which showed that effects of elastic scattering in solids should be taken into account.

In this study, in order to investigate elastic scattering effects on asymmetrical distribution of X-ray photoelectron emission, the authors measured the ratios of the peak area of photoelectrons from the "s" orbital to that of photoelectrons from the "p" orbital for six elements, by changing the angle between the directions of the incident X-ray and photoelectron detector.

The obtained data were compared to calculated ratios. First, the data were compared to the calculated ratios which were obtained by using β values of Reilman et al.¹⁾. Moreover, they were compared to the calculated ratios by using β^* values of Jablonski⁴⁾ which consider the effects of elastic scattering.

When elastic scattering effect on photoelectron emission in solids are considered, the angular distribution of photoelectron will become uniform. Most of our experimental results matched this tendency as stated above, but some results did not.