

掲示板

## 第2回RSF研究報告会議事録

XPS ワーキンググループ

日時：2016年1月6日（水）12:30～17:15

場所：奈良先端科学技術大学院大学 F-105 会議室

参加者：岡島（NAIST），速水（日鉄住金テクノロジー），島尾（菱電化成），西田（古河電気工業），安野（高輝度光科学研究センター），大村（東北大）（敬称略）

記録：大村

### ●西田より PSA15 以降の進捗について報告

- ・新規データ2件，再測定データ（試料損傷の少ないデータ），再解析データ（バックグラウンド処理しなおし）を加えたデータの紹介
  - 以前のデータよりもバラツキが減少．ただし，装置Cに関しては，損傷のため棄却したPCのデータで規格化しているため，ずれが大きいと思われる．
- ・C1s Shake-up ( $\pi$ - $\pi^*$ ) の影響として面積計算に Shake-up ( $\pi$ - $\pi^*$ ) の利用有無でバラツキを比較
  - $\pi$ - $\pi^*$ を含めると Wagner の流儀ではバラツキが小さくなる傾向．バックグラウンドをかえてもこの傾向は変わらず，2%程度誤差は小さくなる．Linear と Shirley とで有意差はなし．
- ・各機関のバックグラウンド，Shake-up 処理の違い
  - 多くが C1s のみ Shake-up を入れている．PC，PSF でメインピークと Shake-up とで個別にバックグラウンドを引いている場合が多い．1本で引けているのは，比較的高いパスエネルギー（低エネルギー分解能）で測定した場合．

### ●PSA15 での意見を踏まえながらデータ取り扱いについて議論

- ・比ではなく，生の強度そのものを使う
- ・サンプルの凹凸，表面汚染
- ・密度（原子数）を横軸にする
- ・ $\lambda$ の大小とグラフの分散の傾向． $\pi$ - $\pi^*$ 遷移のある PET では上に振れ（O1s / C1s 強度比大）， $\pi$ - $\pi^*$ 遷移のない PMMA では下に振れる（O1s / C1s 強度比小）？
- ・各物質の IMFP が TPP-2M 式のソフトにないか？

### ●O1s Shake-up ( $\pi$ - $\pi^*$ ) の取り扱いについて

- ・大村より，O1s の Shake-up を含めて Shirley と Linear でバックグラウンド処理したデータの紹介
  - Shake-up 入れると Shirley，Linear とともに誤差が大きくなった．一方で，ISO18118 (ARSF) の流儀は Wagner の流儀とは逆で Shake-up を入れると誤差が小さくなった．岡島のデータも同様の結果を示した．
- ・一般的に，Shake-up ピークは C1s では定量計算に含めるが，O1s では入れていない（と思われる）
- ・そもそも，O1s の Shake-up 過程とは？  $\pi$ 電子の影響を受けて発生するもの？（西田） →  $\pi$ - $\pi^*$ 遷移を誘発する可能性があるすべての光電子ピークが Shake-up サテライトをもつのではないか． $\pi$ - $\pi^*$ 遷移を起こす確率は異なると思う．（岡島）

●第46回研究会での発表内容について

- ・Wagner と ISO18118 の優劣ではなく、特徴の違いをサラッと。
- ・具体的な装置名、分析者名はださない (A,B・・・と表記)。
- ・分析・解析方法については一覧表にする。
- ・O1s / C1s 強度比のデータについて、O1s と C1s の生強度のグラフは装置ごとにカウントが全く異なるため、ひとつのグラフにまとめることはできない。生強度のデータをいくつか例示して、議論には平均値で割ったデータを使う。PSA 後に提出されたデータを追加する。
- ・バックグラウンドと Shake-up の取り扱いの差も示す。
  - 岡島, 大村で O1s の Shake-up 有り無しで Shirley, Linear のデータを作る。速水は Shake-up を使わないデータを用意する。ただし、測定範囲が足りないサンプルもある。景山も可能か確認。
- ・試料が損傷した場合のデータも使う。
- ・規格化の方法。PC 強度で規格化するのは、PC のデータがないシリーズがあるため不適。幾何平均、もしくは PVP を使う。幾何平均で装置間のばらつきはどうか？
- ・密度 (原子数?) を横軸にするのは意味があるのか? おそらく、横軸に並べた物質の順番が違和感を生んでいただけであるため、これを密度の順に並べ替えばいいのでは?
  - 密度を横軸にする目的が不明確なので行わない。

以上