

XPSにおけるポリマーのC1sスペクトルのシミュレーション Simulation of core-level C1s spectra of polymers in XPS

遠藤一央, 前田茂宏
Kazunaka Endo and Shigehiro Maeda

三菱製紙(株)筑波研究所
Mitsubishi Paper Mills LTD, Tsukuba Research Laboratory

46 Wadai, Tsukuba-city, Ibaraki 300-42

MO計算からポリマーのXPSの内殻C1sスペクトルをシミュレーションする。PE, PVA, PVC, PAA, PVAC, PMMA等のオリゴマーモデルを用いて非経験HONDO7プログラムで計算する。計算結果のKoopmans値を結合エネルギーに対応させ、分解能を

1.3eVとして理論スペクトルを与え、観測スペクトルと対比する。更にコポリマー(エチレン, ビニルアルコール共重合体や塩化ビニル, 酢酸ビニル共重合体)のシミュレーションも行う。