

ポリマーの二次イオン質量スペクトルの解析 (MO計算からの考察)

遠藤一央, 星 孝弘⁺, 小林直也, 三浦偉俊, 工藤正博^{*}

Kazunaka Endo, Takahiro Hoshi⁺, Naoya Kobayashi, Hidetoshi Miura, and Masahiro Kudo^{*}

三菱製紙(株)筑波研究所

+) アルバックファイ(株)分析室

*) 成蹊大学工学部

Mitsubishi Paper Mills LTD, Tsukuba Research Laboratory

46 Wadai, Tsukuba-city, Ibaraki 300-42

+) Analytical Lab., ULVAC-PHI INC., 2500 Hagisono, Chigasaki 253

*) Department of Appl. Phys., Seikei Univ., Tokyo 180

ポリマーのオリゴマーモデル(3または5mer)のMO計算の次数からTOF-SIMSの1次イオンによってポリマーの結合切断がどこで起こりやすいかを予測する。またポリマーの結合切断によって生じた2次イオン(質量数100以下)の正しい構造をMO計算

から考える。ポリマーはPE, PP, PS, PVA, PVF, PVC, PAM, PVME, PMMA, PTFEである。前者の計算は半経験的AM1(Ver.6)プログラム, 後者はHONDO7プログラムを用いている。