

HAXPES 組成算出方法

SPring-8 BL46XU

JASRI 産業利用・産学連携推進室

- ①測定ピークの積分強度を求める。 ※Shirley[1]や Tougaard[2]など適切なバックグラウンド処理を行うこと。
※対象ピークの測定条件(パスエネルギー、エネルギーステップ)が揃っているか注意すること。
※測定ピークのスキャン回数を揃える、もしくは cps にすること。

- ②相対感度係数による規格化 ①で求めた測定ピーク(元素軌道)の積分強度(I_x)に対応する相対感度係数(S_x)を Table1[3]から読み取る。測定ピークの積分強度を対応した相対感度係数で除すること。

$$I_x/S_x$$

対象となる全ての元素軌道において相対感度係数による規格化を実施する。

※Table 1 は X 線の励起エネルギーが 7.94 keV の時。それ以外のエネルギーの時は文献[3]を参照すること。文献[3]に対応するものが無い場合、かなり簡易的ではあるが文献[4,5]などのイオン化断面積を使用することも対応が可能。

- ③組成(atomic %)の算出 組成を求めたい元素軌道の②で規格化した I_x/S_x を対象となる全ての規格化された元素軌道を合算したもの($\sum_j I_j/S_j$)により除する。

$$X(\text{atomic } \%) = \frac{I_x/S_x}{\sum_j I_j/S_j} \times 100$$

Example 構成元素 Si, O における Si の組成

Si 1s の積分強度 320000

O 1s の積分強度 56000

Table 1 から Si 1s と O 1s の相対感度係数を読み取る

Si 1s 11.3

O 1s 1.0

Si 1s の組成は

$$\text{Si1s}(\text{atomic } \%) = \frac{I_{\text{Si1s}}/S_{\text{Si1s}}}{I_{\text{Si1s}}/S_{\text{Si1s}} + I_{\text{O1s}}/S_{\text{O1s}}} \times 100$$

$$\{(320000/11.3)/(320000/11.3+56000/1) \times 100=33.6 \text{ atomic } \%$$

Table 1 相对感度係数($h\nu = 7.94$ keV)

Element	1s	2p _{3/2}	Element	2p _{3/2}	3d _{5/2}
Li	0.01		Cu	3.8	
C	0.28		Zn	6.0	
N	0.52		Ga	6.2	0.042
O	1.0		Ge	6.3	
F	1.5		As	8.0	0.072
Na	5.2	0.008	Se	10.7	0.11
Mg	5.4	0.016	Sr	12.5	0.21
Al	7.9	0.025	Zr	16.2	0.42
Si	11.3	0.042	Nb	20.3	0.48
P	12.0	0.071	Mo	20.5	0.61
S	18.1	0.13	Ru	31.4	0.58
Cl	22.2	0.19	Pd	29.3	1.1
K	33.3	0.45	Cd	56.8	2.2
Sc	43.2	0.58	In	52.2	2.6
Ti	28.2	0.55	Sn	51.2	2.8
V	66.0	0.74	Sb	71.7	4.2
Cr	36.6	1.0	Hf		17.8
Mn	48.6	1.5	Ta		20.3
Fe	31.7	1.9	W		27.0
Co		2.1	Ir		42.6
Ni		3.4	Pb		99.8

Reference

1. D. A. Shirley, Phys. Rev. B 5, 4709 (1972).
2. S. Tougaard, Surf. Sci. 216, 343 (1989).
3. S. Yasuno, H. Oji, Y. Watanabe and I. Hirose, Surf. Inter. Anal. 52, 869 (2020)
4. J. H. Scofield, Theoretical Photoionization Cross Sections from 1 to 1500 KeV Lawrence Livermore Lab. Rept. 1973, UCRL-51326
5. Trzhaskovskaya MB, Yarzhemsky VG. Atomic Data and Nuclear Data Tables. 119, 99 (2018)