

用語解説(52)

『本特集のための用語解説』

田中彰博

アルバック・ファイ(株) ☎253 茅ヶ崎市萩園 2500

EELFS (電子エネルギー損失微細構造)—固体表面における新しい局所構造解析

略語表

EELFS [i:lfz] イールフス 電子エネルギー損失スペクトルの微細構造。

ELNES [elnez] エルネス エネルギー損失の吸収端付近での構造。

EXAFS [igzafz] エグザフス X線吸収端から離れた波長域でのX線吸収係数変化の微細構造。

EXELFS [egzelfz] エグゼルフス エネルギー吸収端から離れたエネルギー損失量変化の微細構造。

SEXAFS [segzafz] セグザフス 表面敏感な EXAFS。

XAFS [zafz] ザフス X線吸収の微細構造。

XANES [zeinz] ゼインズ X線吸収端近くでの吸収の微細構造。

その場観察偏光全反射蛍光 EXAFS 法による表面の非対称・異方性構造解析

バルク内 固体の内部。

配位不飽和 ある原子に対して他の原子が並んでいる配置が一部分満たされていないこと。

表面自身のもつ非対称性 固体が表面で途切れてなくなっていること。

非等方性 原子配置との関係で、回りとの作用の仕方が異なる。

Debye-Waller (デバイワラー因子) 回折線強度を温度の関数として表わすための値。この値 σ は回折線の強度を $\exp(-\sigma)$ として表わす。

カーブフィッティング (curve fitting) 解析 EXAFS の場合には、振動の周期と振幅を合わせて振動を表わし実験結果と一致させる作業。周期に対応して結合距離 R_j を求め、振幅に対応して配位数 N_j^* を求める。

電子収量法 この解説中では、試料から発生する2次電子量を用いて吸収端付近の強度振動を測定する方法。

degitch 計算などにより、適当なフィルターをかけて雑音など急激に変化するデータ成分を除去する演算手法。

two (three, four)-fold hollow site 二つ (三つ, 四つ) 折りとなる、窪みになった格子位置。

担持触媒 ゼオライト, アルミナ, シリカなど多孔性物質の表面に金属などを乗せた触媒。

Co (oct) 自分自身を中心とする正八面体の頂点の位置に他の分子や原子が配位しているコバルト原子。

Co (tetra) 自分自身を中心とする正四面体の頂点の位置に他の分子や原子が配位しているコバルト原子。

ML Mono-Layer (単原子層) の略語。

pre-edge peak 実験結果には、吸収端よりもエネルギーの高い側で吸収係数の増大が観察される。吸収端における吸収係数の増大が観察される少し低エネルギー側(前)に観察されているピークのこと。

マイクロプローブ ESCA

キャラクターゼーション 繰返し同じ物質・性能を作り出せる、分析結果と物質の性能が対応する評価。

対陰極 陰極の向かい側にある電極という意味で、電子を当てる陽極のことである。X線回折で多く用いられる言葉である。

CXAES Continuous X-ray excitation Auger Electron Spectroscopy の略。オージェ電子の励起に制動放射X線を用いる方法。バックグラウンドが低いので信号量は少ないがピークを明瞭に観察できる。

E-X 像 Energy vs X-axis (position) 画像。たとえば、平面の横軸にエネルギーの値を、縦軸に測定位置をとり、光電子信号の強度を画面の明るさで表現した画像。

サイクロトロン運動 荷電粒子が磁場中で行う一定周期の円運動。荷電粒子のエネルギーが変わっても周期は変わらない。

CMA Cylindrical Mirror Analyzer (Analyser) の略。日本語名は同軸円筒鏡分光器。

FAB Fast Atom Beam または Fast Atom Bombardment の略。

CCD Charge Coupled Device の略。テレビカメラなどの撮像素子として利用されている。

PSD Position Sensitive Detector (位置敏感検出器) の略。この場合には、検出器の場所によりエネルギー値が異なることを利用して、異なったエネルギーのデータを同時に得ることができる検出器。

DV-X α 分子軌道法による銅 XPS スペクトルの解析

blg 空間群 (space-group) による記述の一つ。分子の波動関数は、分子がもつ対称性を反映したものになるので、波動関数の記述にあらかじめ対称性について記述しておくことと便利である。そこで、空間群を用いて対称性を記述し、波動関数の表現に用いている。bは縮重がなく主軸回り回転の対称性(逆)、添字1は主軸に垂直な二回対称または鏡映についての対称性(正)、g(またはu)の添字は反像に関する対称性正(逆)を示す。

SCF 計算 SCF は、自己無撞着場 (Self Consistent Field) の略語。 n 個の電子が存在している系を考える。この系では、第1の電子は他の ($n-1$) 個の電子が作る場の中で運動している。このような形で、第1の電子に関する波動方程式を解く。第2の電子も、やはり他の ($n-1$) 個の電子が作る場の中を運動している。この波動方程式を解く際には、第1の電子に関する解を繰入れる。このようにしながら、 n 個の電子について順に波動

方程式を解く。一巡りして、再び第一の電子についての波動方程式を解いたときに、先に求めた同じ電子についての解と一致しているならば、同じ電子についての二つの解は矛盾しない。このようになって、「自己無撞着である」もしくは「自己完結している」(Self-Consistent である) という。このような解(場)を求める計算方法のことを自己無撞着場の方法または Method of the Self-Consistent Field という。略して、SCF 計算という。

ブラ $\langle \phi |$ とケット $|\phi \rangle$ 二つ合わせてブラケット $\langle \phi | \phi \rangle$ ϕ, ϕ は波動関数で、 ϕ の共役複素数関数を ϕ^* とする。このとき $\langle \phi | \phi \rangle = \int \phi^* \cdot \phi dv$ と定義される。これをベクトル記述して数値計算をする場合には、 $\langle \phi |$ も $|\phi \rangle$ も複素数を成分とするベクトルとして記述される。このとき、ケットは ϕ と同じ成分値による縦ベクトルであり、ブラは ϕ の共役複素数を成分とする横ベクトルである。ブラケットは、これら二つのベクトルの内積である。

acac (アセチルアセトン: acetylaceton) アセトンのメチル基 (CH_3 -) に着いている水素の一つをアセチル基 (CH_3CO -) で置換した構造をもつ β ジケトンで、化学式は ($\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{COCH}_3$) である。二つのアセチル基を結ぶメチレン基 ($-\text{CH}_2-$) の水素の一つが一方のケト基 ($>\text{C}=\text{O}$) の酸素と結びつく ($\text{CH}_3\text{COCH}=\text{C}(\text{OH})\text{CH}_3$) というエノール型構造もある。この分子は、エノール基 ($=\text{C}-\text{OH}$) の水素を放出する酸として働く。金属イオンと結びつくとき、この分子がもつ二つの酸素は金属イオンを蟹のハサミのように挟む安定な化合物(キレート)を作る。このとき acetylaceton は酸として働くので、英語記述は acetylacetonate になる。Cu (acac)₂ [cupric acetylacetonate] は、銅イオンが二つのアセチルアセトンによって挟まれたキレートになっている。

レーザープラズマパルス軟X線を用いた光電子分光法

時間分解計測 実時間計測とはほぼ同義語である。短時間ごとに同じ測定パラメータを繰返し用いてデータを得る。時間とともに変化する現象を測定する。

YAG Yttrium Aluminium Garnet の略語。

XPS 化学修飾法による材料表面官能基の解析

ヘテロ原子 周囲とは異質な原子。

コロナ放電 原子の周囲にある電子をすべて取り去ってしまうような条件で作られる放電。

2 軸延伸 縦横両方向に引き延ばすこと。丈夫なポリマーフィルムを作成する方法の一つ。

化学修飾法 特別な感応基に特異的に反応する、しかも周囲とは異なった元素などが着くような試薬を反応させることによって、その感応基を際立たせる方法。

ブラズマ処理 原子の周囲にある電子の一部を取り去ったイオンを用いて、真空中または大気中で行う化学処理。

側鎖 ポリマーにおいて長く連なった部分が主鎖であり、主鎖からのびる比較的短い炭素鎖を側鎖という。

キャスト法 鋳物と同じように、平らな基板上にポリ

マー(試薬)を薄く流し出して試料を作成する方法。

反応率 収率 (Yield) とほぼ同義語。表面に存在する感応基を反応させたときに、反応した感応基量のもとも存在する感応基量に対する割合。

求核種 感応基以外の部分を「核」と呼び、核との親和性の高い化学種を「求核種」という。

中間体 出発物質から最終生成物を作る間にできる物質の総称。特に、化学反応の間にある、ケミカルポテンシアルが極大となっているような準安定化合物を指すこともある。

接触角 平らな基板の上にある液体が、基板と接触している点でなしている基板表面と液体表面との角。液体内部で測定する。完全に濡れているときには 0° であり、まったく濡れない場合には 180° である(接触角の測定は、いろいろな表面評価法の中で最も容易に実験できる方法の一つである)。

モノマーユニット ポリマーを作成するために用いたモノマー分に対応する構成単位。たとえばポリエチレンならば ($-\text{CH}_2\text{CH}_2-$) がモノマーユニットである。

エッチングも角度分解測定も使わない電子分光による深さ方向データ解析

不動態 鉄に濃硫酸を反応させると、初期には反応して水素を発生するが、すぐに反応しなくなってしまう。このとき鉄の表面にはきわめて薄い硫酸と反応しない皮膜が生成している。このようにして反応を抑制するきわめて薄い皮膜を不動態皮膜という。表面分析がまだなく、きわめて薄い皮膜であることだけがわかっていた頃に名付けられたために、このような名前が当てはめられた。

LB 膜 Langmuir-Blodgett 膜。研究室の Blodgett 嬢が作成したことからの名前がある。水面に渡した単分子膜をガラスなどの平らな基板に累積したもの。

バックグラウンド オージェ電子分光法やX線光電子分光法などの電子分光法で取り扱うバックグラウンドには、マトリクスバックグラウンド、ピークバックグラウンド、2次電子カスケードバックグラウンド¹⁾の3種類がある。

マトリクスバックグラウンドは主として弾性散乱電子由来のバックグラウンドであるが、考察する所定のピークよりもエネルギーの高い側からエネルギーの低い側へとなだらかにのび広がっている。

ピークバックグラウンドは、光電子ピークやオージェ電子ピークのところから、エネルギーの低い側に向かっての、これらのピークに由来する電子信号の盛り上がりである。

2次電子カスケードバックグラウンドは、別名シカフス (Sickafus¹⁾) のバックグラウンドという。エネルギーの高い電子がつつぎつつぎに真の2次電子を放出してエネルギーを失いながら発生するので、「カスケード」と名付けられている。数電子ボルトから数十電子ボルトというエネルギー範囲に巨大な電子信号の山を築く。

文 献

1) E. N. Sickafus: Phys. Rev. B, 16, 1436 (1977).