テクニカルレポート No.013

XPSによる仕事関数評価

仕事関数（WF）は材料表面の電気特性を評価する上で重要なパラメータであり、材料の反応性や安定性の推察に役立てることができます。本資料では、X線光電子分光装置（XPS）を用いた仕事関数の評価例を紹介します。XPSでは、元素分析や結合状態分析が可能であり、仕事関数がどのような組成・結合状態に由来するかを調べることができます。

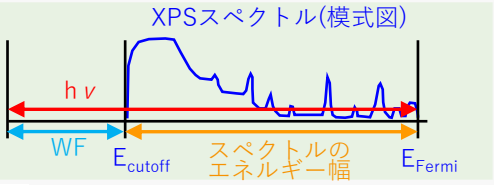
■Au, Ag, Cuの仕事関数評価

材料表面にX線（hν）を照射すると光電子が放出されます。光電子の運動エネルギーの最大値（E_{Fermi}）及び最小値（E_{cutoff}）を測定することにより、下記の関係式から仕事関数が得られます。

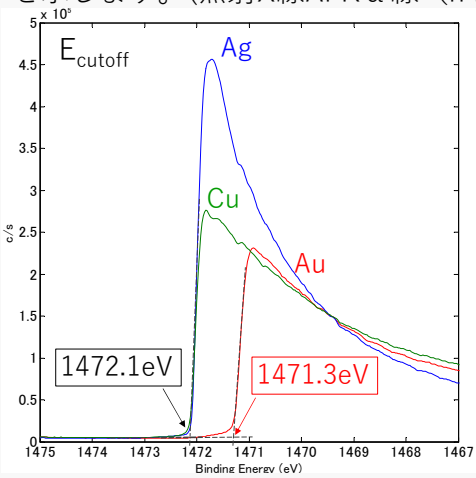
$$WF = h\nu - (E_{Fermi} - E_{cutoff})$$

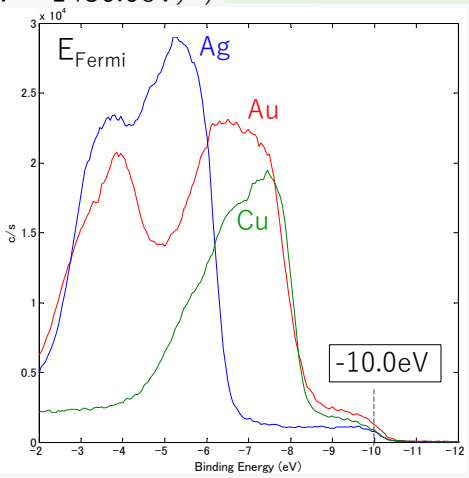
（$E_{Fermi} - E_{cutoff}$：スペクトルのエネルギー幅）

仕事関数測定の原理図



以下にAu、Ag、Cuの金属箔表面の仕事関数評価例を示します。（照射X線Al Kα線（hν = 1486.6eV））





（Auの場合）
WF = 1486.6 – (1471.3-(-10.0))
= 5.3 (eV)

	WF(eV)
Au	5.3
Ag	4.5
Cu	4.5

※スペクトルは結合エネルギーで表示。
低運動エネルギーの光電子検出のため、負の電圧（-10V）を印加し測定。

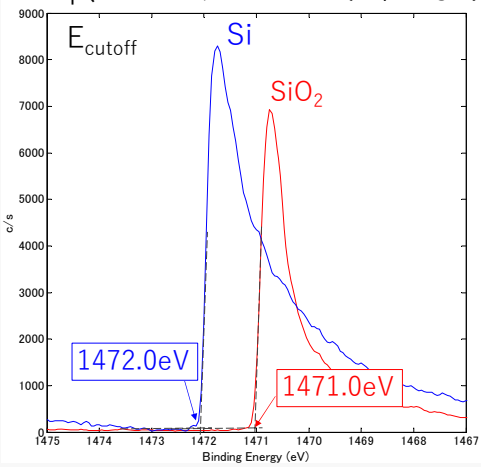
■Si, SiO_2のイオン化ポテンシャル評価

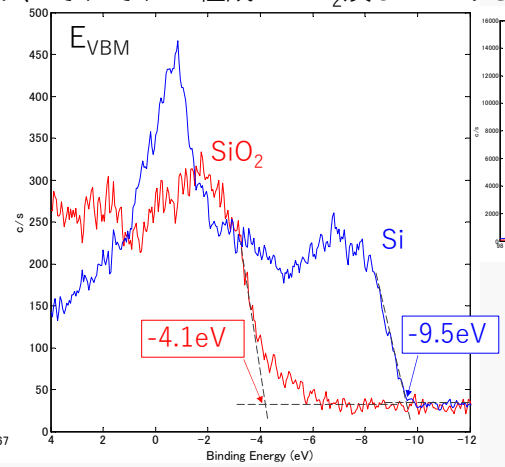
半導体の場合は価電子帯上端のエネルギー位置（E_{VBM}）及びE_{cutoff}を測定することにより、次の関係式からイオン化ポテンシャル（IP）が得られます。

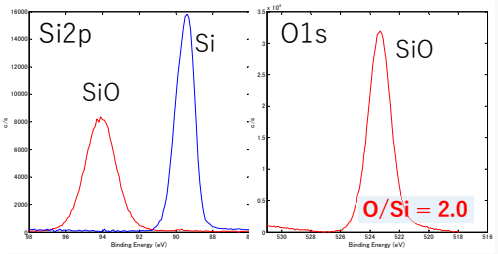
$$IP = h\nu - (E_{VBM} - E_{cutoff})$$

以下にSiO_2/Si基板のSiO_2表面、及びイオンスパッタでSiO_2を除いたSi表面におけるイオン化ポテンシャル評価例を示します。

Si2p、O1sのナロースペクトルより、それぞれの組成がSiO_2及びSiであることが確認できます。







	IP(eV)
SiO_2	11.5
Si	5.1

本手法により材料表面の仕事関数、イオン化ポテンシャルを調べることができます。
また、これらの物性値がどのような表面状態に由来するかを把握することが可能です。

連絡先：機器分析評価センター
（HP） https://www.iac.ynu.ac.jp/
（電話） 045－339－4406 （E-mail） iac@ynu.ac.jp