

Sn酸化物に対する還元処理の検証 ～XPSと計算シミュレーションの比較から～

価電子帯スペクトルからの電子状態解析

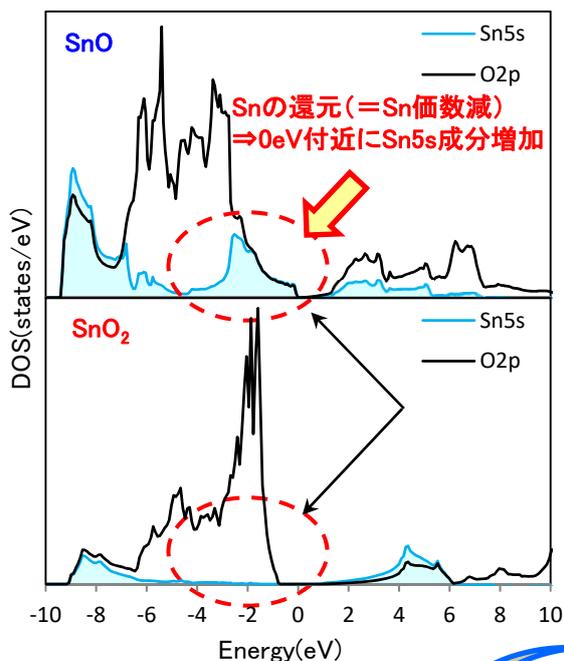
測定法 : XPS・計算シミュレーション
 製品分野 : 酸化物半導体・日用品
 分析目的 : 化学結合状態評価・電子状態評価

概要

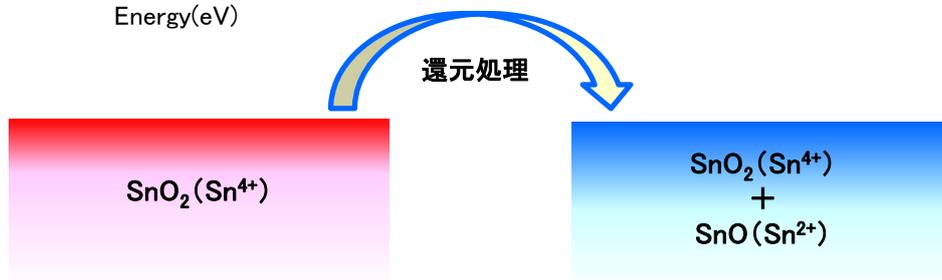
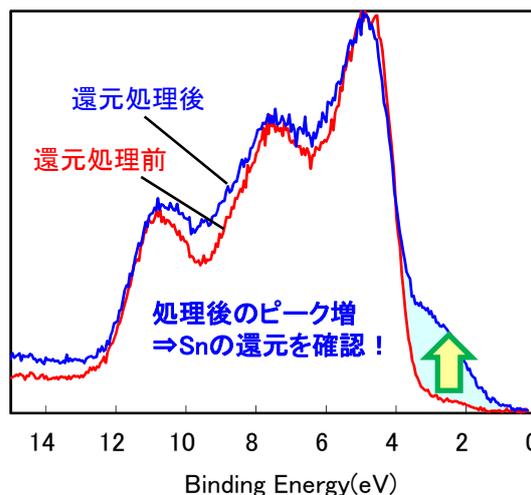
XPSは内殻準位からの光電子スペクトルより物質の組成・結合状態を評価する手法です。一方でフェルミ準位近傍には最外殻電子の状態を反映した価電子帯スペクトルが現れます。本資料では、Sn酸化物に対して第一原理計算によって算出した状態密度とXPSによって取得した価電子帯スペクトルを比較、考察することで、Sn酸化物に対する還元処理の検証を行った事例をご紹介します。計算シミュレーションを用いることで取得したXPSスペクトルの理解を深めることが可能です。

データ

■ 第一原理計算によるSnO、SnO₂の状態密度



■ 還元処理前後のSnO₂の価電子帯スペクトル(XPS)



✓ 計算シミュレーションはXPSによる価電子帯スペクトルの解釈に有用です

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人
MIST 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp
 URL : <https://www.mst.or.jp/>