

電子状態計算による ZrO₂-CeO₂ 材料の XPS・XAFS 解析

(豊田中央研究所)

田嶋一郎、堂前和彦、野中敬正、長井康貴、妹尾与志木、広瀬美治

Theoretical Calculation for XPS and XAFS Spectra of ZrO₂-CeO₂.

(TOYOTA Central R&D Laboratories Inc.)

Ichiro Tajima, Kazuhiko Dohmae, Takamasa Nonaka, Yasutaka Nagai, Yoshiki Seno, Yoshiharu Hirose

1. 電子状態計算により、ZrO₂-CeO₂ 材料の XPS(X 線光電子分光)・XAFS(X 線吸収微細構造) 実験測定結果をシミュレーション解析した。

2. 計算方法: DV-X (密度汎関数)法¹、FEFF(多重散乱)法²

計算対象: 単斜晶 m-ZrO₂, 正方晶 t-ZrO₂, 立方晶 c-CeO₂ および
立方晶 c-CZ (ZrO₂-CeO₂ 蛍石型構造を仮定)

XPS: PHI-5500 の Mg-K 線を用いて測定

Zr-K XAFS: SPring-8 産業用専用ビームライン(BL16B2) で測定³

3. (1) O_{2p}, Zr_{4d}, Ce_{5d} 軌道からの光電子放出を主成分とする計算結果は、
m-ZrO₂, c-CeO₂, c-CZ の価電子帯に相当する XPS を再現できた(図 1)。
(2) t-ZrO₂ と c-CZ の EXAFS 領域もある程度含めた XAFS の微細な相違を、
Zr_{1s} 電子遷移確率および多重散乱法で解析した(図 2)。

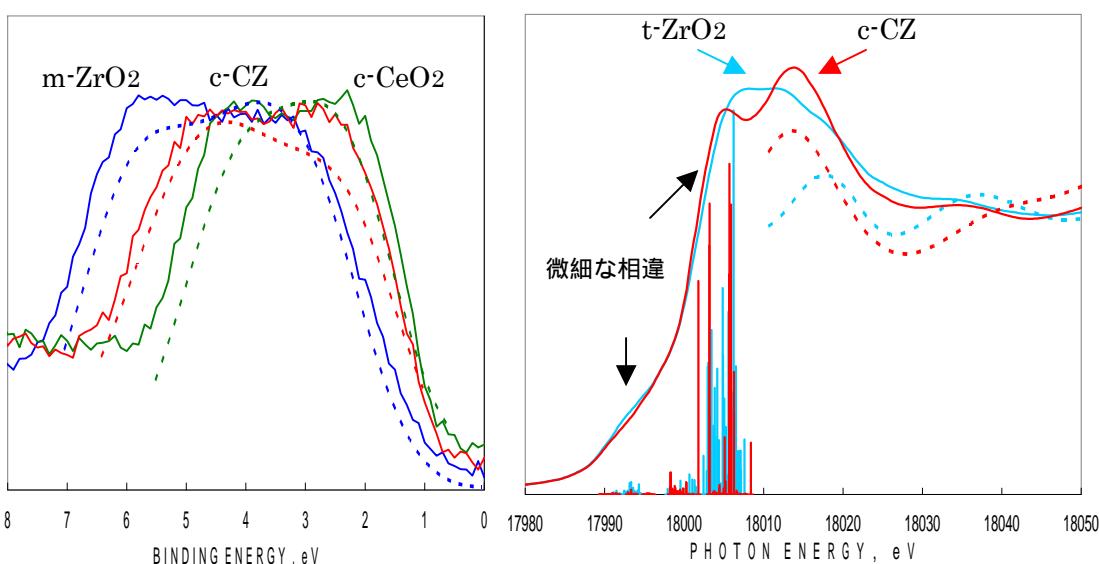


図 1 m-ZrO₂, c-CeO₂, c-CZ の XPS 解析

(実線は実測値, 点線は計算曲線)

図 2 t-ZrO₂ と c-CZ の XAFS (Zr-K) 解析

(実線は実測値, 棒線は遷移確率, 点線は計算曲線)

1. Hirohiko Adachi, Advances in Quantum Chemistry, 37, 1 (1999).
2. S.I.Zabinsky, J.J.Rehr, A.Ankudinov, R.C. Albers and M.J.Eller, Phys.Rev. B, 52, 2995(1995).
3. Yasutaka Nagai, Takashi Yamamoto, Tsunehiro Tanaka, Satohiro Yoshida, Takamasa Nonaka, Tokuhiko Okamoto, Akihiko Suda, and Masahiro Sugiura, Catalysis Today, 2679, 1 (2002).