

## 4D07

### 白金ステップ表面上における水分子の構造決定

(千葉大院・工、\*JASRI/SPring-8) ○中村将志、佐藤成真、星永宏、  
Jia Mei Soon\*、坂田修身\*

#### 【序】

金属表面に吸着した水分子は、腐食や触媒反応などの表面化学反応に対し重要な役割を果たしている。このため、様々な金属表面上における水分子の構造物性に関する研究が行われてきた。金属表面と水分子の相互作用は非常に弱いため、表面上を容易に拡散しバイレイヤーと呼ばれる2次元の氷のような構造に成長していく。理論計算の発展も助けとなり、これらの2次元氷や水クラスター構造の研究が盛んに行われている。水の吸着エネルギーは表面サイトにより異なる。特にステップやキックなどに優先的に吸着しやすいことが知られている。また、ステップサイトは触媒反応などで活性点となることが多いため、詳細な構造を明らかにすることが重要である。吸着エネルギーの差を利用すれば、特定の表面サイトだけに選択的に水分子を吸着させ、従来なし得なかった低次元構造をつくることが可能である。本研究では表面X線回折法によりステップを周期的にもつPt(211)表面を用いて水分子の吸着構造の決定を行った。

#### 【実験】

アルゴンスパッタリングおよびアニールにより清浄なPt(211)表面を作成した。Pt(211)は1200 K以上のアニールで1x2構造へ再構成するが、本研究では1x1表面に水分子を1 ML吸着させた後、試料を155 Kまで昇温した。これにより、テラスに吸着した水分子は脱離し、ステップだけに吸着させることができる。昇温脱離スペクトルにおいてもステップだけに吸着した水分子の脱離を確認した。測定は25 Kで行った。表面X線回折実験はSPring-8 BL13XUにおいて回折計に搭載された超高真空装置を用いて行った。波長20 keV、入射角一定モードで21本のCrystal Truncation Rod (CTR)の測定を行った。

#### 【結果および考察】

図1に清浄表面およびステップに水分子が吸着したPt(211)表面からのロッド強度分布を示す。水の吸着により強度分布に変化が生じていることが分る。他のロッドも同様に、水の吸着により強度分布が異なった。はじめに清浄表面の構造解析を行った。構造最適化後のモデルを図2Aに示す。表面層は層間隔を縮める方向に緩和しており、

このような表面緩和は他の単結晶表面で数多く報告されている。

水吸着後の構造については、種々の吸着モデルを構築し構造解析を行った。ステップに水分子が吸着したモデルが実験結果とよく一致した。さらにDFT 計算ではステップにおける水分子はジグザク構造を形成することが報告されているため[1]、ステップに2種類の水分子を含むモデルを用いたところ、図2Bに示すモデルが最もよい一致を得た。Pt-O 距離が225 pmでステップ原子に直接吸着した水( $O_1$ )とPt-O 距離が264 pmの水( $O_2$ )が、互い違いにステップラインに沿って1次元構造を形成している。水分子間の距離は280 pmであり、水素結合によって鎖状に吸着していることが明らかとなった。

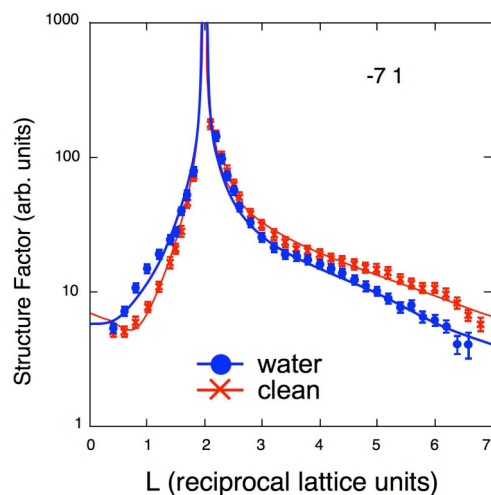
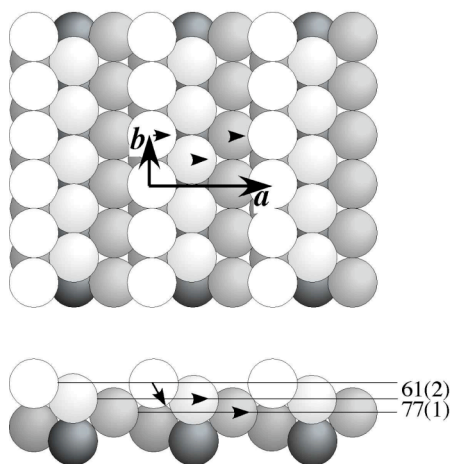


図1 清浄表面及び水が吸着したPt(211)表面からの(-7 1)ロッド

**A clean surface**



**B 1D water**

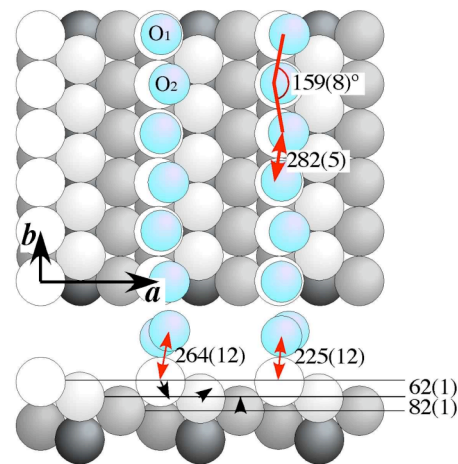


図2 構造最適化後のモデル

【参考文献】

[1] S. Meng, E. G. Wang, S. Gao, *Phys. Rev. B* **69**, 195404 (2004).