

Cu(410)表面における分子の吸着状態と反応性

(阪大院・理) ○牧野 隆正, 岡田 美智雄

Adsorption states and reactivity of molecules on Cu(410)

(Osaka Univ.) ○Takamasa Makino, Michio Okada

【序】ステップやキンクのような固体表面の欠陥は、表面の反応性を大きく変化させるため、その特性を明らかにする事は、表面における反応を理解するために非常に重要である。しかし、どのような構造欠陥が、いかなる機構で反応性を決定しているかは未だよく分かっていない。今回、我々は格子欠陥を系統的に導入した Cu(410)表面にエチレン分子 (C₂H₄) ならびに一酸化炭素分子 (CO) を吸着し、その吸着状態と反応性を、赤外反射吸収分光 (IRAS) と昇温脱離法 (TPD) を用いて詳細に調べた。

【実験】試料の清浄化は、Ne⁺イオンによるスパッタリングとアニーリングの繰り返しにより行った。IRAS に用いる赤外光は p-偏光で、試料から反射した赤外光は MCT (HgCdTe) 検出器で検出した。

【結果と考察】Cu(410)面に 96 K で CO を吸着させた時の TPD スペクトルを図 1 に示す。露出量が 5 L (1 L = 1.33 × 10⁻⁴ Pa · s) の時のピーク温度はそれぞれ 138 K (α₁)、170 K (α₂)、210 K (β) である。この TPD スペクトルから安定性の異なる 3 種類の吸着状態が存在していることが分かった。また脱離エネルギーの値から、β ピークはステップエッジに吸着した CO に対応したものであることが分かった。

IRAS の結果を図 2 に示す。露出量が 0.1 L の時、2099 cm⁻¹ に C-O 伸縮振動のピークが現れた。この波数域にピークが観測されたことから、CO はオントップサイトに吸着していることが分かった。そして露出量を増やしていくと 0.5 L で 2048 cm⁻¹ に別のピークが出現し、露出量の増加に伴い低波数側へとシフトした。これはステップエッジに吸着した CO とテラスに吸着した CO の、双極子モーメントのカップリングによるものだと考えられる。以上のことから、β

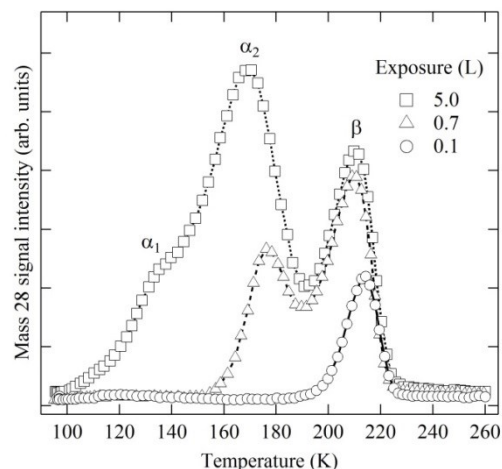


図 1: TPD スペクトル (CO)

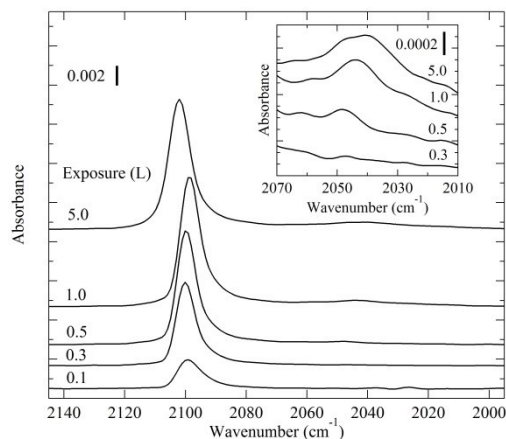


図 2: IRAS スペクトル (CO)

ピークはステップエッジの Cu 原子のオントップサイトに吸着した CO、 α ピークはテラスの Cu 原子のオントップサイトに吸着した CO に対応したものであることが分かった。

次に、Cu(410)面に 93 K で C_2H_4 を吸着させた時の TPD スペクトルを図 3 に示す。露出量が 5 L の時のピーク温度はそれぞれ 124 K (α_1)、154 K (α_2)、196 K (β) である。この TPD スペクトルから安定性の異なる 3 種類の吸着状態が存在していることが分かった。また脱離エネルギーの値から、 β ピークはステップエッジに吸着した C_2H_4 に対応したものであることが分かった。

IRAS の結果を図 4 に示す。0.5 L では 923 cm^{-1} 、 1290 cm^{-1} および 1552 cm^{-1} にそれぞれ CH_2 面外変角振動、 CH_2 面内変角振動、 $C=C$ 伸縮振動に対応するピークが出現した。これら 3 種類の振動モードが観測されたことから、 C_2H_4 は π 結合で吸着していることが分かった。 $C-C$ 伸縮振動に対応するピークは観測されなかった。以上のことから、 β ピークはステップエッジの Cu 原子に π 結合した C_2H_4 、 α ピークはテラスの Cu 原子に π 結合した C_2H_4 に対応したものであることが分かった。

昇温時に CO は解離せず、 C_2H_4 が脱水素化することを確認した。ステップの密度がより高い Cu(210)面では C_2H_4 の脱水素化反応は起こらないという報告がなされており[1]、ステップだけでなくテラスも反応性に重要だと考えられる。

当日は、エチレンと一酸化炭素の共吸着の系についても議論をする予定である。

【参考文献】

[1] D. Yamazaki, M. Okada, F.C. Franco Jr., T. Kasai, Surf. Sci. 605 (2011) 934.

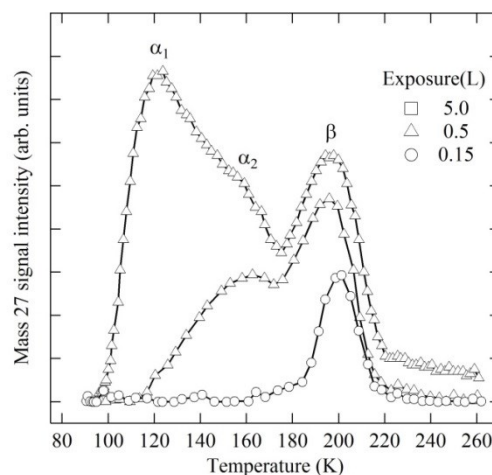


図 3: TPD スペクトル (C_2H_4)

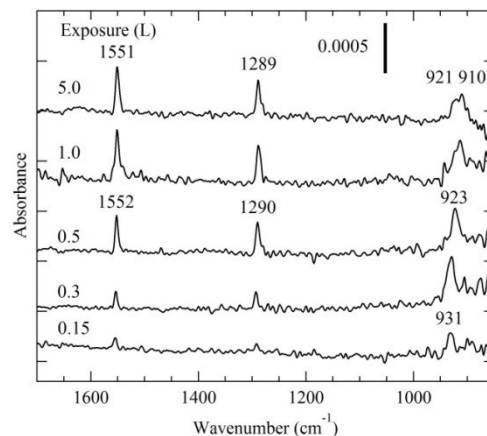


図 4: IRAS スペクトル (C_2H_4)