

Pt(533)面における水分子の吸着構造

(京大院理) 長塚直樹・村谷統哉・柴田昂・土屋維智彦・○渡邊一也

Adsorption structure of water on Pt(533) (*Graduate School of Science, Kyoto University*) Naoki Nagatsuka, Toya Muratani, Noboru Shibata, Ichihiko Tsuchiya, ○Kazuya Watanabe

In this work, we study the structure of water layer at Pt step site on Pt(533) by using heterodyne-detected sum-frequency generation spectroscopy under an ultrahigh vacuum. Figure 1 shows $\text{Im } \chi^{(2)}$ spectra in the OH stretching region obtained from H_2O covered Pt(533) at 140 K. A negative band grows with coverage indicating that water forms a hydrogen bond network in which proton is pointing toward the Pt substrate. At less than 0.33 ML, water predominantly forms a one-dimensional chain along the Pt step. While both of zig-zag and L-wire structures have been predicted as the water chain structure in the previous theoretical studies,¹⁾ the dominance of the negative band supports the latter structure. We further studied HD-isotope dependence of the signals and found that the water chain structure depends on the isotope concentration.

Keywords : water; Platinum; sum-frequency generation; vibrational spectroscopy

白金／水界面での水の構造を明らかにすることは水溶液の電極反応機構を考えるうえで重要である．本研究では，超高真空下での Pt(533)表面上の水分子吸着構造をヘテロダイン検出和周波発生振動分光を用いて調べた．Fig. 1 に H_2O を吸着した Pt(533)面の OH 伸縮振動領域の $\text{Im } \chi^{(2)}$ スペクトルを示す．被覆率とともに振幅が増大する負の信号が観測され，プロトンが Pt 基板側に向けた水素結合ネットワークが成長していることを示唆する．0.33 ML 以下において吸着水は，Pt ステップ上に 1 次元鎖を形成することが知られている．これまでこの一次元鎖構造として zig-zag 構造と L-wire 構造が理論的に予測されているが¹⁾，観測された負のバンドは後者の構造を支持する．我々はさらに，信号の HD 同位体依存性も調べ，1 次元鎖の構造が同位体比に依存して変化することを見出した．

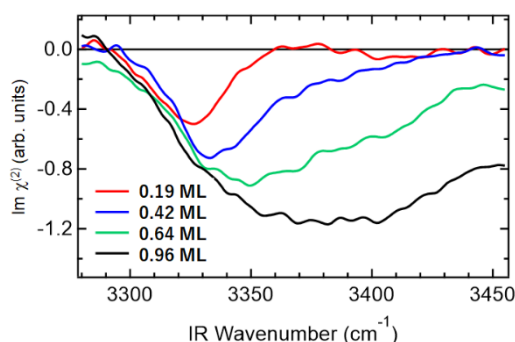


Fig. 1: $\text{Im } \chi^{(2)}$ spectra of H_2O adsorbed on Pt(533) at 138 K.

The water coverage is indicated in the figure.

1) Y. Litman *et al.*, *J. Chem. Phys.* **2018**, *148*, 102320.