18p-A13-10

分子衝突による酸素吸着 Ru(0001)表面構造の変化

Collision induced Structural Change of O adlayer formed at Ru(0001) surface

コベルコ科研¹, 原研², 京大院¹, [°]高橋 真¹, 寺岡 有殿², 有賀 哲也³

Kobelco Res. Inst. Inc.¹, JAEA², Kyoto Univ.², ^oS. Takahashi¹, Y. Teraoka², T. Aruga³

E-mail: takahashi.shin@kki.kobelco.com

【序】Ru(0001)表面における酸素分子の解離吸着ダイナミックスや酸素吸着構造解析は古くから 多くの実験的・理論的研究がなされている。室温かつ超高真空条件下で Ru(0001)を酸素雰囲気に 暴露した場合、解離吸着は 0.5ML で飽和する。これは飽和吸着面で形成される p(2×1)-O 構造によ る酸素分子の解離が抑制されるためと考えられている¹。このため、より高い被覆率を得るために は、高い酸素分圧条件下における暴露、または強い酸化剤である NO₂雰囲気への暴露などが必要 である。本研究では高い運動エネルギーを有する酸素分子線照射を行い、0.5ML 以上の高被覆率 領域における酸素分子解離吸着過程と吸着構造を検討した。

【実験】実験はすべて SPring-8 に設置されている原研専用ビームライン BL23SU 表面化学実験ス テーションにおいて実施した。酸素雰囲気に暴露することで得た 0.5 ML の Ru(0001)酸素吸着表面 を作製し、この酸素吸着表面に対して超音速酸素分子線を表面垂直方向から照射した。一定照射 量ごとに高分解能 O 1s, Ru 3d_{5/2} 内殻光電子スペクトルを測定した。O 1s スペクトルのピーク面積 強度比から被覆率を算出し、Ru 3d_{5/2} スペクトルから酸素原子の吸着状態を評価した。

【結果と考察】図1(a)に超音速酸素分子線照射(並進運動エネルギー2.2 eV)による酸素吸着曲線を示す。図1(b)に Ru 3d_{5/2}表面内殻スペクトルに現れる各ピーク成分 S(1O), S(2O), S(3O)の相対

強度比変化を示す。S は第一原子層の Ru 原子、()内の 数字は O の配位数を示している。ただし、S(10)につい てはバルク成分を含んでいる。被覆率約 0.6 ML までは S(20), S(30) 共に強度比が増加し、p(2×1)-O から p(2×2)-3Oへの変化を示している。一方、被覆率約 0.6 ML 以上では S(20)の強度比が減少傾向に転じ、さらに飽和 吸着以降の分子線照射でもその傾向は継続している。こ の変化は p(1×1)-O の成長を示唆している。被覆率 0.5~ 0.75 ML の領域では、p(2×1)-O と p(2×2)-3O が混合した 吸着構造が安定であり、これまでに p(1×1)-O が混合し た吸着構造が報告された例はない。高い運動エネルギー を有する分子の衝突が吸着原子の拡散を誘起した結果 と考えられる。



Fig. 1(a) shows O uptake curve obtained by O_2 dosage with translational energy of 2.2 eV. Fig. 1(b) shows a peak area intensity ratios of S(1O), S(2O) and S(3O) peaks in the Ru $3d_{5/2}$ surface core-level spectra as a function of O_2 dosage

1) C. Stampfl and M. Scheffler, *Phys. Rev. B.*, vol. 54, 2868, 1996.