

Si (001) 表面に吸着した CO の透過 FT-IR による解析

Analysis of CO adsorption states on Si(001) by transmission FT-IR

○大野 真也¹、田中 一馬¹、田中 正俊¹、吉信 淳² (1. 横国大院工、2. 東大物性研)

°Shinya Ohno¹, Kazuma Tanaka¹, Masatoshi Tanaka¹, Jun Yoshinobu²

(1. Yokohama Nat'l Univ., 2. ISSP, The Univ. of Tokyo)

E-mail: sohno@ynu.ac.jp

固体表面上の CO 分子の吸着、脱離、解離反応等の解析は表面化学における中心的な課題である。半導体表面での研究は遷移金属表面と比べて少ないが、Si(001)面の場合には吸着構造がシンプルな構造であるため典型的なモデル反応系の一つとして興味を持たれている[1,2,3]。Fig. 1 に示す様に化学吸着構造としては(a)ダウンダイマーの Si 原子に吸着した構造(T-CO)と(b)ダイマーの中央に吸着した構造(B-CO)の二種類が安定構造として知られている。量子化学計算によると T-CO がより安定と考えられおり、(c)物理吸着構造も形成し得ると考えられている[4]。

本研究では、吉信らが開発した透過 FT-IR[5]を用いて CO/Si(001)表面の解析を行った。Fig. 2 に基板温度 90 K、曝露量 1.0 L における入射角依存性(表面法線方向からの角度)の結果を示す。ピーク A(2079 cm⁻¹)、ピーク B(2061~2062 cm⁻¹)、ピーク C(2046~2049 cm⁻¹)の三つのピークが観測された。この系の高分解能測定により初めて三つのピークに分解できた。A のピークは面直の遷移ダイポール、B,C のピークは面内の遷移ダイポールと関連づけられるが、詳しい帰属の解明が課題である。本発表では、その端緒として曝露量依存性(<1.5 L)の解析の結果をまとめて報告する。

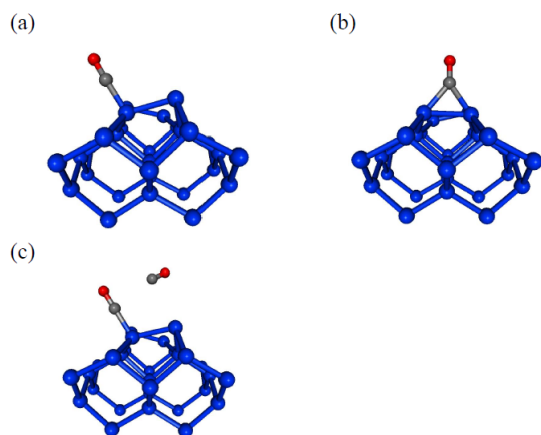


Fig. 1 (a) T-CO, (b) B-CO, (c) T-CO と物理吸着構造[4]

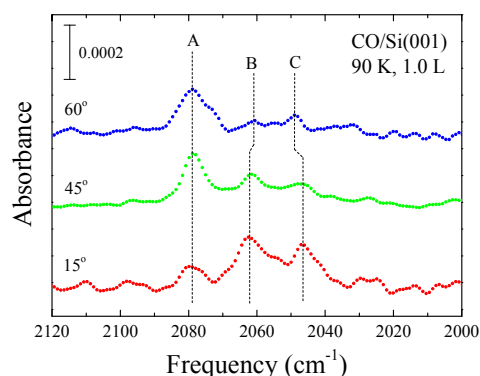


Fig. 2 透過吸収スペクトルの角度依存性 (90 K, 1.0 L)

[1] D. Hu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 1178.

[2] Y. Yamashita *et al.*, Phys. Rev. B **68** (2003) 033314.

[3] T. Momose *et al.*, Surf. Sci. **627** (2014) 29.

[4] F. Bacalzo-Gladden *et al.*, J. Phys. Chem. B **103** (1999) 7270.

[5] M. Furuhashi *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **50** (2011) 115701.