

Cu 合金単結晶清浄表面の構造と組成

Structure and composition of copper alloy surfaces

○津田泰孝¹、Jessiel Siaron Gueriba²、牧野隆正¹、Siti Zulaehah²、吉越章隆³、Wilson Agerico Diño²、岡田美智雄¹

(1. 阪大院理、2. 阪大院工、3. 原子力機構)

○Yasutaka Tsuda¹、Jessiel Siaron Gueriba²、Takamasa Makino¹、Siti Zulaehah²、Akitaka Yoshigoe²、Wilson Agerico Diño²、Michio Okada¹

(1. Osaka Univ. Grad. Sch. Sci, 2. Osaka Univ. Grad. Sch. Eng. 3. JAEA)

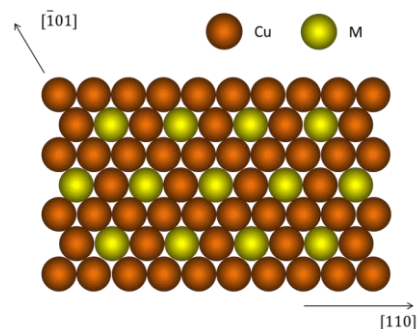
E-mail: tsuday12@chem.sci.osaka-u.ac.jp

http://www.chem.sci.osaka-u.ac.jp/lab/okada/

合金表面における構造および組成は、表面偏析のために理想的なバルクのものとは異なる場合があることが知られている[1]。合金表面における反応性には表面の電子状態が大きく影響するため、合金表面の構造を決定することは、合金表面における反応を調査する上で重要である。我々はこれまでに銅合金表面の酸化過程を調査し、その過程で銅合金清浄表面の組成を、放射光 X 線光電子分光法(SR-XPS)を用いた実験により得た。本研究ではさらに、銅合金清浄表面の組成を密度汎関数法に基づく第一原理計算によって理論的に計算した。実験的、理論的手法で得た結果を比較し、表面構造や表面組成を決定することが本研究の目的である。

実験は大型放射光施設 SPring-8 BL23SU に設置された日本原子力研究開発機構の表面化学反応解析装置(SUREAC2000)を用いて行った[1]。合金試料は Cu₃Pd(111), Cu₃Pt(111)を用いた。表面反応室の到達真空度は 3×10^{-8} Pa 以下であった。Cu 合金試料表面は、Ar⁺イオンスパッタリングと加熱のサイクルを繰り返すことにより清浄化した。清浄化した試料表面を SR-XPS により測定した。理論計算には、第一原理計算コード Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP)を用い、交換相関汎関数は Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)を使用した。Cu₃Pd(111), Cu₃Pt(111)に関して7層のスラブを仮定し、表面第1層、第2層の原子比率を変化させながら表面エネルギーを計算した。

Cu₃Pd, Cu₃Pt はいずれも、単位格子として L1₂ 構造をとる合金であり、その理想的な(111)断面において Cu が 75%、Pd (Pt)が 25%含まれる(図)。一方で表に示すように Cu₃Pd(111)表面においては表面に 50%程度の Pd が偏析していることが、実験および理論計算の結果からわかった。これらの結果は実験、理論において互いに良い一致を示していることから、その正当性が確かめられた。当日は Cu₃Pt(111)表面においても同様の比較を行った結果を報告する予定である。

図 Cu₃M 合金の(111)バルク断面(M=Pd, Pt)表 Cu₃Pd(111)表面近傍の Pd 組成

	1st layer	2nd layer
Experimental	0.41	0.22
Theoretical	0.50	0.25

[1] M. Okada, Y. Tsuda, K. Oka, K. Kojima, W. A. Diño, A. Yoshigoe, H. Kasai, *Scientific Reports*, 2016, 6, 31101.

謝辞：本研究は高輝度光科学研究センター（課題番号 2018A3831、2018A3801、2017B3831、2017A3831、2017A3801、2016B3831、2016B3801、2016A3820、2016A3801）の許可を得て、日本原子力研究開発機構が提供する施設共用制度（課題番号 2018A-E17、2017B-E13、2017A-E14、2016B-E14、2016A-E24）のもと文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業として行われました。