

Cu(111)表面におけるアセチレンの脱水素化反応に関する単一分子レベル研究

(東大¹・理研²) ○舘田 匠馬^{1,2}・李 民喜^{1,2}・稲垣 万貴²・勝部 大樹²・数間恵弥子^{1,2}・金 有洙^{1,2}

Single-molecule study of acetylene dehydrogenation on Cu(111) surface (¹The Univ of Tokyo, ²RIKEN) ○Shoma Tateda^{1,2}, Minhui Lee^{1,2}, Maki Inagaki², Daiki Katsube², Emiko Kazuma^{1,2}, Yousoo Kim^{1,2}

Acetylene is used as a carbon source in the synthesis of graphene[1] and silicon carbide[2] by chemical vapor deposition. For these syntheses using acetylene, a dehydrogenation reaction occurs on the surface as the first step of the reaction. In this study, we deposited acetylene on Cu(111) single crystalline surface and investigated the dehydrogenation reaction of a single acetylene molecule by scanning tunneling microscopy (STM). The combination of the STM analysis and density functional theory calculation allows us to elucidate the process of the dehydrogenation reaction. When the tunneling current was applied at the bias of 3.0 V from the STM tip above a single acetylene molecule, the dehydrogenation reaction was observed (Fig. 1). The current trace measurements show that the two hydrogen atoms dissociated at one step or almost simultaneously (Fig. 2).

Keywords : Surface Reaction; Single-molecule study; Dehydrogenation; Scanning Tunneling Microscope; Density Functional Theory

アセチレンは化学気相成長法によるグラフェン[1]や炭化ケイ素[2]の合成において炭素源として利用される。これらの合成では、反応の第一段階として表面における脱水素化が進行すると考えられる。本研究は、表面におけるアセチレンの脱水素化過程を単一分子レベルで明らかにすることを目的とし、Cu(111)単結晶表面に吸着したアセチレン単分子の脱水素反応を走査トンネル顕微鏡 (STM) により観測した。STM による反応の解析と密度汎関数理論を用いた計算を比較することで、単一分子の脱水素反応の反応過程を解明した。アセチレン単分子の上に STM 探針を配置し+3.0 V の電圧を印加すると、分子の反応が観察された (Fig. 1)。また、トンネル電流の変化から、2つの水素がほぼ同時に解離していることが明らかとなった (Fig. 2)。

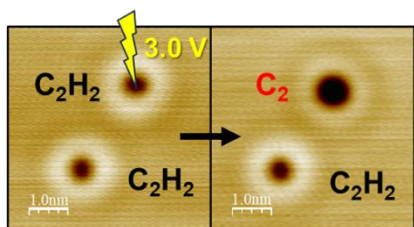


Fig.1 Dehydrogenation reaction of acetylene induced with tunneling current.

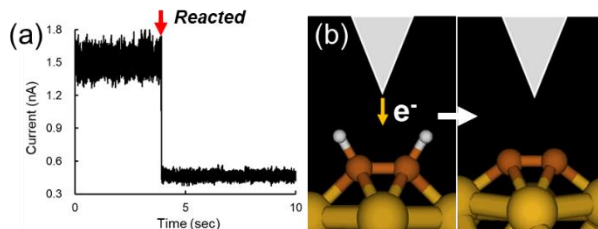


Fig.2 (a) Current trace measurement. (b) Schematic illustration of dehydrogenation reaction with STM tip.

[1] H. Ago *et al.*, *Appl. Phys. Express* **2013**, 6, 075101. [2] C. F. Wang and D. S. Tsai, *Mater. Chem. Phys.* **2000**, 63, 196.

本研究は環境省「地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業」の支援の下で実施された。