

RHEED による Pd(100)表面の水素位置決定

○川村 隆明^{1*}, 深谷 有喜², 福谷 克之^{1,2}¹東京大学生産技術研究所, ²原子力機構先端基礎研

A feasibility study of hydrogen positions on Pd(100) by RHEED

○Takaaki Kawamura^{1*}, Yuki Fukaya² and Katsuyuki Fukutani^{1,2}¹Institute of Industrial Science, University of Tokyo, ²Advanced Science Research Center, JAEA

水素からの散乱振幅が小さいため、これまで直接水素からの散乱を考慮せずに、金属表面の水素位置決定が行われてきた。しかし、電子に対する水素からの散乱振幅は前方散乱ではかなり大きくなる。我々は、このことを利用すれば、RHEED (反射高速電子回折) では表面水素の位置決定が可能であることを、Ni (111) 面を例にとって示した¹⁾。今回は、より重い原子 Pd について、表面水素の位置決定が可能であるか否かを多重散乱理論に基づく計算を用いて調べた。

Behm ら²⁾ の LEED の結果によると、Pd(100) 表面の水素は、被覆率 0.5ML 以下では c(2x2) 構造を形成し、およそ 1ML で 1x1 構造になる。彼らは被覆率が 0.5ML のとき (1/2, 1/2) 回折スポット強度が最大になると報告している。Wilke ら³⁾ の DFT 計算によると、被覆率 1ML の水素は Pd 最上層から高さ 0.11Å の 4-fold hollow site にあり、最上層と第 2 層の Pd の間隔は約 5% 広がっているとき、最も安定である。

上記の Behm らと Wilke らの結果を考慮して、RHEED 強度の水素位置依存性を計算した。結果の一例を図に示す。水素は、被覆率が 0.5ML、4-fold hollow site にあって c(2x2) 構造を形成しているとし、水素の高さを変えたときの (-1/2, 1/2)-反射強度を視射角に対してプロットしたもの (ロッキング・カーブ) である。電子の入射エネルギーは 10keV、方位は [10] ([011] 結晶軸) から 47.14° ずらし、温度は 77K とした。水素の高さは、0.11Å (実線)、0.20Å (点線)、0.30Å (破線)、0.40Å (一点鎖線) と変化させた。また最上層と第 2 層の Pd の間隔は 5% 広がっているとした。

このロッキング・カーブの差異を見積もるために、判別関数を用いた。判別関数は回折法でよく用いられる信頼因子(R-factor)に対応するもので、今回、LEED で広く用いられている Pendry の R-factor に対応するものを用いた⁴⁾。判別関数が 0.1 以上のときは判別が可

能であると考えられるので、表の結果を使うと水素の高さを 0.1Å 以下の精度で求めることが可能である。

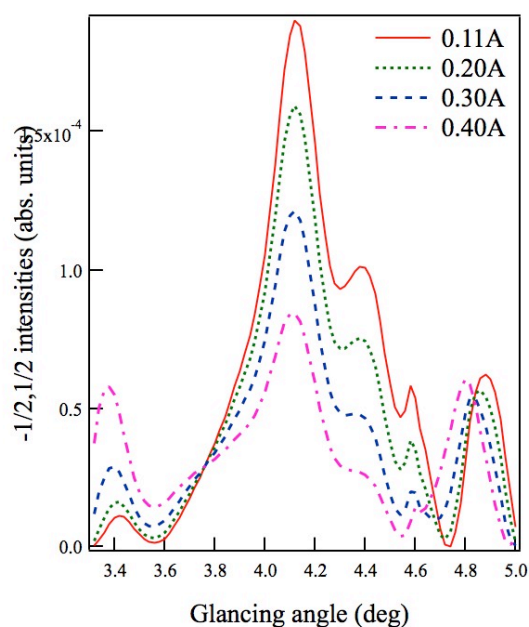


図 : (-1/2, 1/2)-反射のロッキング・カーブ

0.11Å vs. 0.2Å	0.2Å vs. 0.3Å	0.3Å vs. 0.4Å
0.185	0.296	0.293

表 : (-1/2, 1/2)-反射強度の判別関数

文 献

- 1) T. Kawamura and K. Fukutani: Surf. Sci. **688**, 7 (2019).
- 2) R.J. Behm, K. Christmann and G. Ertl: Surf. Sci. **99**, 320 (1980).
- 3) S. Wilke, D. Hennig, R. Löber, M. Methfessel and M. Scheffler: Surf. Sci. **307-309**, 76 (1994).
- 4) J.B. Pendry: J. Phys. C **13**, 937 (1980).

*E-mail: tkawamur@iis.u-tokyo.ac.jp