

固体表面におけるプロトンと電子の振る舞い

福谷克之
東京大学生産技術研究所

Behavior of proton and electron at solid surfaces

Katsuyuki Fukutani
Institute of Industrial Science, University of Tokyo

水素はプロトンと電子からなる最も簡単な元素であり、固体表面に吸着して表面の電子状態を変化させるとともに、水素自身が運動し拡散や化学反応を起こす。その意味で、水素は電子としての側面とプロトンとしての側面という 2 面性を持つ元素である。水素の運動においては、ゼロ点振動やトンネル過程などプロトンの量子効果が顕著なものも特徴の一つである。さらに水素は中程度の電気陰性度を持つため、正にも(H^+)負にも(H^-)帯電することで表面に電荷移動を生じることから、電子的にも 2 面性を持つ元素と言える [1]。

固体表面において水素は、解離して原子状に吸着する場合と分子のまま分子状に吸着する場合がある。遷移金属表面では、水素は自発的に解離し原子状に化学吸着し、それとともに仕事関数が増大する場合が多い。このことから、金属表面では表面から水素へ電荷移動が生じると考えられる。吸着した水素は表面上をまたは表面から内部へ拡散する。我々のグループでは、共鳴核反応法[2]を用いて水素の内部への拡散を調べてきた。水素拡散における分子キャップ効果[3]、表面構造効果[4]、表面の電子状態効果[5]などを明らかにした。これらにより、表面により水素吸蔵の制御が可能となる。一方、水素が分子状に吸着する場合、水素分子の慣性モーメントは小さいため回転の運動エネルギーが大きく、水素分子は回転運動を保持する[6,7]。これは 1 種の量子効果であり、このため水素分子は量子回転子と呼ばれる。金属酸化物表面では、水素はアニオンまたはカチオンにそれぞれ H^+ と H^- として吸着する可能性が考えられ、それに伴い水素と表面の間に電荷移動が生じる。典型的な遷移金属酸化物である $SrTiO_3$ の(001)表面には、 SrO 面と TiO_2 面の 2 種類の終端面が存在する。また TiO_2 では、ルチル型、アナターゼ型の結晶多型がある。我々のグループでは、1光子および2光子光電子分光を用いて、これらの表面における水素吸着と電子状態変化を調べている[8-10]。講演では、これらの結果を紹介する。

1. K. Fukutani et al., Chem. Rec. 17 (2017) 233.
2. M. Wilde, K. Fukutani, Surf. Sci. Rep. 69 (2014) 196.
3. S. Ogura et al., JPCC 117 (2013) 9366; 121 (2017) 3373.
4. S. Ohno et al., JPCC 119 (2015) 11732.
5. K. Namba et al., in press.
6. K. Fukutani et al., Prog. Surf. Sci. 88 (2013) 279.
7. S. Ohno et al. PRB 97 (2018) 085436.
8. K. Fukuda et al., JPSJ 84 (2015) 064716.
9. K. Takeyasu et al., JCP 140 (2014)084703.
10. S. Ogawa et al., PRB 96 (2017) 085303.