

角度分解光電子分光による $\text{Ni}_2\text{P}(0001)$ 単結晶表面の研究

猪股裕幸¹⁾, 中台康博¹⁾, 枝元一之¹⁾, 小澤健一²⁾

(¹⁾ 立教大学理学部, (²⁾ 東京工業大学大学院理工学研究科

【目的】

ガソリンや軽油などに含まれる硫黄・窒素成分は大気汚染の原因となるため、原油からの精製過程における水素化脱硫反応や水素化脱窒素反応が重要である。現在、それらの触媒としてNiやCoを促進剤として添加したWやMoの硫化物が用いられているが、最近これに代わるものとして金属リン化合物が見出された。中でも Ni_2P は特に高い活性を示すことが見出され、かつ安価でもあることから注目を浴びている。 Ni_2P の触媒特性を明らかにするためには、表面原子組成や表面電子状態の知見を得ることが必要である。本研究は、 $\text{Ni}_2\text{P}(0001)$ 表面の電子状態を角度分解光電子分光により明らかにすることを目的として行った。

【実験】

実験は、KEK・PF, BL-1C でARPES- を用いて行なった。 $\text{Ni}_2\text{P}(0001)$ 清浄表面は、 Ar^+ スパッタ (3 kV, 30 min) と600 °C アニール (5 min) を繰り返すことにより得た。

【結果】

Fig.1 は、清浄表面における価電子帯スペクトルの入射光エネルギー($h\nu$)依存性を示したものである。スペクトルはどの $h\nu$ でもフェルミ準位で立ち上がることから、 Ni_2P は金属的な電子構造を持っていることが示される。0~3 eV にNi 3dとP 3pの混成バンドが観測される。7.5 eV ピークは、 $h\nu$ が大きくなるにつれ増強し、 $h\nu = 68 \sim 69$ eVで極大となる。これはNi 3p-3d励起による共鳴によるものと同定され、このことから7.5 eVのピークは二正孔束縛状態に起因するサテライトピークであることがわかる。 $h\nu = 70$ eV 以上ではNi $M_{23}VV$ オージェピークがサテライトから分離する。

表面に酸素を吸着させた前後のP 2p とNi 3p内殻準位のスペクトルを比べると、Ni 3pの強度は弱まるだけであったが、P 2pでは表面シフト成分が高結合エネルギー側にシフトした。このことから、(0001)表面ではP原子が酸素と反応してリン酸化物を形成することが分かった。

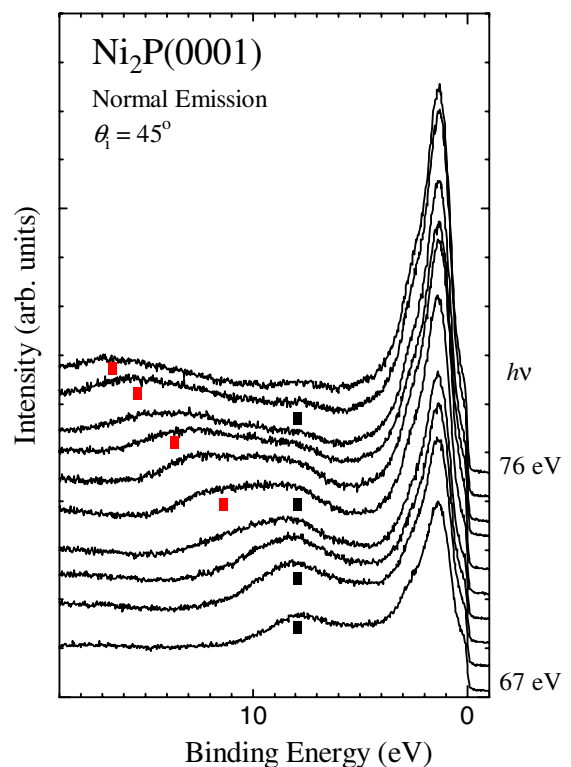


Fig.1 価電子帯スペクトルの入射光エネルギー依存。