

# 酸化亜鉛表面への分子吸着 —一面方位に依存した化学活性の違い— Molecular Adsorption on ZnO

## —Surface Termination Dependence on Chemical Reactivity—

小澤健一<sup>1</sup>, 宗像紫織<sup>2</sup>, 枝元一之<sup>2</sup>, 江森万里<sup>3</sup>, 杉田真理<sup>3</sup>, 坂間 弘<sup>3</sup>, 間瀬一彦<sup>4</sup>  
1 東京工業大学, 2 立教大学, 3 上智大学, 4 物質構造科学研究所

金属酸化物表面の反応性は、表面の構造や原子組成により大きく異なることが知られている。ZnO もその一つである。ウルツ鉱型結晶構造をとる ZnO には、c 軸に垂直に結晶を切った時に現れる(0001)と(000-1)表面、および c 軸と平行な(10-10)表面が安定に存在する。(10-10)表面は同数の Zn と O 原子により、(0001)と(000-1)表面は理想的には Zn 原子と O 原子のみでそれぞれ終端されている。本研究では、様々な分子(水、メタノール、エタンチオール、テトラチアフルバレンであり、いずれも Lewis 塩基性を持つ)の ZnO 表面での反応性を光電子分光により検証し、Zn と O 原子の表面反応における役割を明らかにした。光電子分光測定は、BL-13A の SES200 光電子分光装置を用いて行った。

Fig. 1 は、テトラチアフルバレンとエタンチオール吸着面の S 2p 内殻準位スペクトルと、その強度から求めた吸着量の表面 Zn 密度に対するプロット図である。ZnO 表面の吸着活性は、全ての分子に共通して、表面 Zn 原子密度に比例して高くなる。これに対して、解離に対する反応性は表面 O 原子密度に比例する。このことから、Lewis 塩基分子は Zn 原子との結合により表面に束縛され、隣接 O 原子により分解反応が促進されることが分かる。

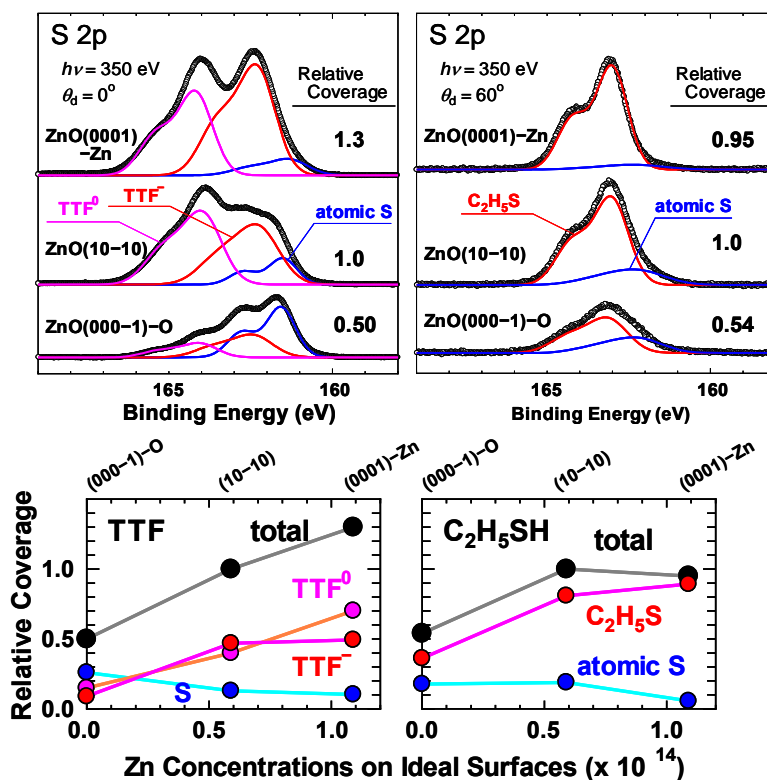


Fig. 1 (top) S 2p spectra of the ZnO surfaces covered with tetrathiafulvalene and ethanethiol. (bottom) Relative coverages of adsorbates plotted against the surface Zn concentration of the ideal ZnO surfaces.