

課題番号 :2015B-E22
利用課題名 (日本語) :放射光 XPS による Ni 基金属間化合物触媒の表面解析
Program Title (English) :Surface Characterization of Ni-based intermetallic catalysts by XPS using synchrotron radiation
利用者名(日本語) :許 亜¹⁾ 櫻井 惇也¹⁾ 池上 拓哉¹⁾ 中田 和秀¹⁾ 吉越 章隆²⁾
Username (English) :Ya XU¹⁾ Junya SAKURAI¹⁾ Takuya Ikegami¹⁾ Kadzuhide Nakata¹⁾ Akitaka YOSHIGOSHI²⁾
所属名(日本語) :1) 物質・材料研究機構水素利用材料ユニット, 2) 原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門
Affiliation (English) :1) Hydrogen Materials unit, National Institute for Materials, 2) Quantum Beam Science Center, Japan Atomic Energy Agency
キーワード：超音速酸素分子線, 酸化ダイナミクス, 放射光 XPS, Ni₃Al 基金属間化合物触媒

1. 概要 (Summary)

Ni 基金属間化合物は貴金属触媒を代替する新しい触媒材料として有望である。反応初期の表面構造、化学状態の解析は Ni 基金属間化合物触媒の触媒特性の発現機構の解明は不可欠である。本研究では、超音速酸素分子線を Ni₃Al(111),(110),(210)単結晶清浄表面に照射しながら、表面の化学状態の変化をリアルタイム放射光 XPS で測定し、原子配列が異なる結晶表面における酸素吸着、初期酸化挙動を調べた。

2. 実験(目的,方法) (Experimental)

最近提案者らは、優れた耐熱性を持つ Ni₃Al、NiTi、Ni₃Fe などの Ni 基金属間化合物がメタン、メタノールから水素を発生させる反応に高い触媒活性と選択性を示すことを見出した。Ni 基金属間化合物は**貴金属触媒を代替する新しい触媒材料として有望と考えられる**。本研究では、放射光 X 線光電子分光を利用して Ni₃Al 基金属間化合物の水素製造触媒活性発現の機構を解明することを目的とする。

Ni₃Al の表面酸化挙動は水素製造触媒特性に大きな影響を与える。これまでの実験、Ni₃Al(210)単結晶に酸素分子線の照射により Al と Ni 原子の酸化初期挙動を調べた。今回は引き続き、Ni₃Al(111),(110),(210)単結晶を用いて、原子配列が異なる結晶表面における酸素吸着、初期酸化挙動を調べた。酸素吸着、酸化初期のダイナミクスの解析を試みた。

具体的には、Ni₃Al 単結晶に対し、清浄表面を得

るため、超高真空チェンバ中で加熱し、Ar スパッタリングを繰り返し行った。LEED により清浄表面になることを確認した。酸素分子線（並進運動エネルギー 1.0eV）を照射し、放射光 XPS 測定で表面酸化膜の形成過程を調べた。また、表面酸素吸着量を評価するため、Cu(100)を用いて、同様な実験を行った。

3. 結果と考察 (Results and Discussion)

図 1 は超音速酸素分子線を Ni₃Al(111), (110), (210) 清浄表面に照射しリアルタイム XPS で測定した O1s スペクトルの時間変化である。O1s スペクトルはいずれの結晶面も酸素分子線の照射に伴い強くなり、低結合エネルギー側にシフトすることが分かった。このシフトは Ni の酸化によるものと考えられる。O1s スペクトルの面積強度から、酸素吸着量を求めた。各結晶面の酸素吸着量を酸素分子線の照射量の関数として解析した結果、最稠密面(111)には酸素吸着量は一番少ない、面内の原子間距離が大きい(210)面には酸素吸着量は一番多いことが分かった。また、Al2p, Ni3p スペクトル測定の結果から、酸素分子線照射により、Al は優先的に酸化されますが、その後 Ni も酸化されることが分かった。

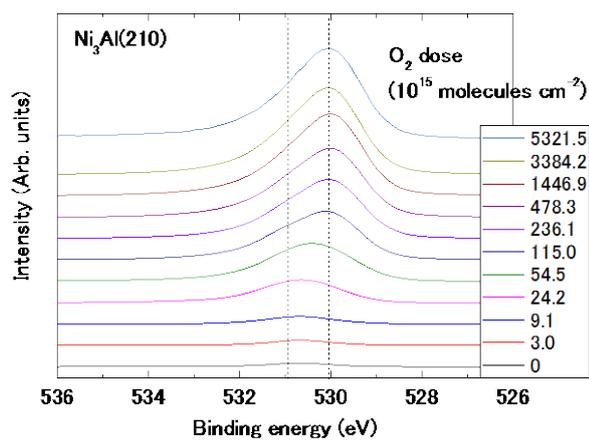
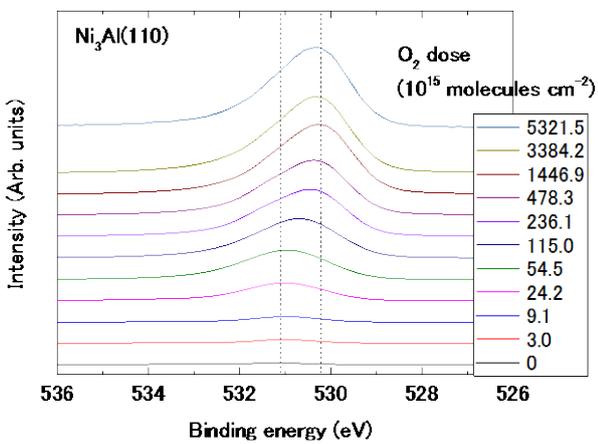
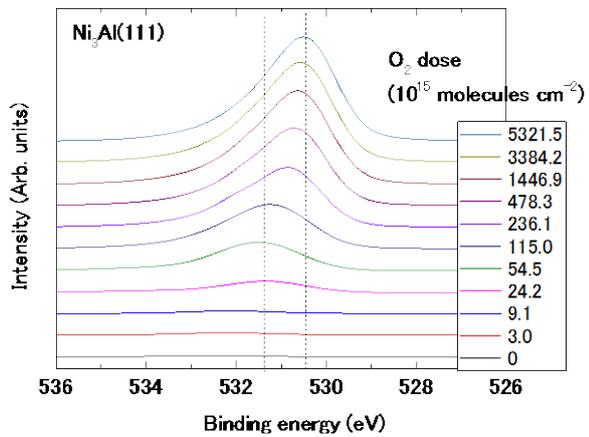


図1 Ni₃Al(111)、(110)、(210)における酸素分子線(並進エネルギー1.0 eV)を照射する際 O1s スペクトルの時間変化

4. その他・特記事項 (Others)

なし