



# Pd, PdAu合金表面における水素吸放出へのCOキャップ効果

## INTRODUCTION

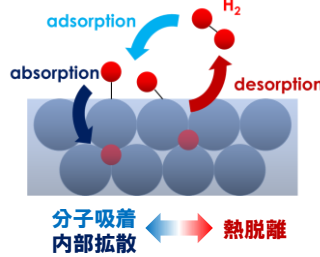
### 研究の背景

- Pd(110)やPd<sub>70</sub>Au<sub>30</sub>(110)には欠陥サイトだけでなくPd表面テラスからも水素が吸蔵・脱離される
- Pd(110)へのCO吸着と温度条件によって表面再構成→CO吸着がH<sub>2</sub>の吸着・脱離に影響?

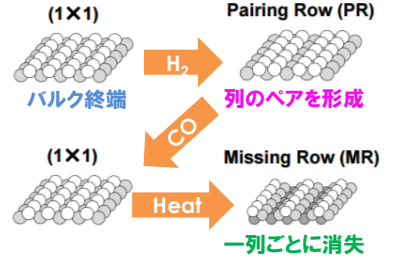
### 研究目的

Pd系水素吸蔵材料におけるCO吸着効果を調べる

水素吸蔵金属



Pd(110)表面再構成



## CONTROL OF DESORPTION TEMPERATURE ON PALLADIUM

### Pd(110)表面再構成による水素脱離温度制御

S. Ohno et al., J. Phys. Chem. C 119, 11732 (2015)

### CO曝露および温度による表面構造の制御

低速電子線回折(LEED)による表面の観察

H<sub>2</sub>曝露(120K)→CO曝露(120K)→温度変化

PR (1x1) MR

### 表面構造と水素脱離量の関係

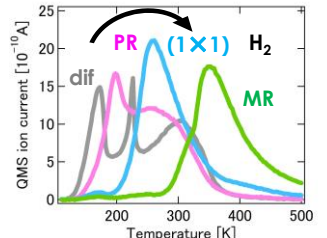
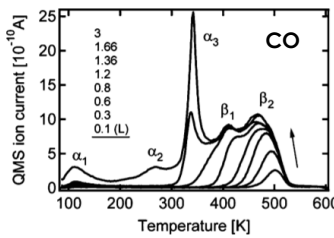
昇温脱離法(TDS): 昇温過程における脱離量解析

→CO吸着により脱離温度上昇

COキャップ効果のプロセス:

欠陥キャップ→表面再構成(PR→(1x1))  
→表面再構成((1x1)→MR)

昇温脱離スペクトル(TDS)



peak temperature (K)	160	200	270	375
CO coverage (ML)	0	0.2	0.5	1
surface structure	PR	PR	(1x1)	MR
exit site	defect	terrace	terrace	terrace

## CO CAP DYNAMICS ON Pd<sub>70</sub>Au<sub>30</sub>

### Pd<sub>70</sub>Au<sub>30</sub>(110)におけるCOキャップ効果の機構解明

S. Ogura et al., J. Phys. Chem. C 121, 3373 (2017)

### 昇温脱離法(TDS)

Pdと同様、CO吸着により脱離温度上昇

### 反射型赤外吸収分光(RAIRS)

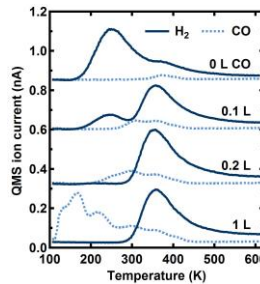
Z. Li et al., Surf. Sci. 601, 1898 (2007)

- 2110~2121 cm<sup>-1</sup>: Auオントップ(Au隣接)
- 2095~2106 cm<sup>-1</sup>: " (Pd隣接)
- 2079~2087 cm<sup>-1</sup>: Pdオントップ(Au隣接)
- 2067~2077 cm<sup>-1</sup>: " (Pd隣接)
- 1955~1981 cm<sup>-1</sup>: Pd-Auブリッジ
- 1897~1938 cm<sup>-1</sup>: Pd-Pdブリッジ

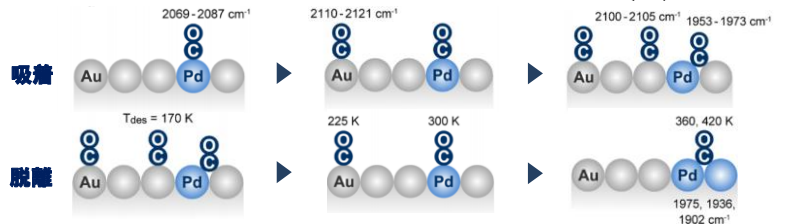
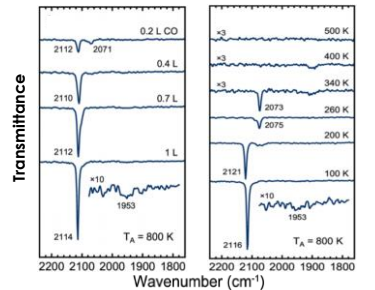
### CO吸着サイト

表面Pd原子を含むサイトに吸着したCOが水素吸放出をブロック

TDSスペクトル



RAIRSスペクトル



## CONCLUSIONS

### 結論

- Pd(110)表面再構成を介して、CO曝露および温度条件による水素脱離温度の制御が可能
- 表面Pd原子を含むサイトに吸着したCOが吸着サイトを変えながら水素の吸放出をブロックする

→ 吸蔵水素の安定化

