[III~22]

Cu(111) 표면에서 수소원자의 흡착 및 추출반응: 수소원자 입사각에 따른 효과

박 영 세, 이 지 화
서울대학교 공업화학과

수소원자와 구리표면의 상호작용은 가장 간단한 화학흡착계이면서도 표면과학의 기본개념들을 풍부하게 포함하고 있다. 최근 U. Bischler 등은 수소원자의 Cu(110) 표면에 대한 sticking probability를 노출 수소원자 flux 측정과 열탈착실험을 통해 0.18라고 보고하였으며, 수소원자의 표면 accommodation에 있어서 phonon으로의 에너지전환 그리고 모멘텀의 수평성분으로의 전환이 중요하다고 하였다.[1] 한편 기상의 수소원자는 이미 구리표면에 흡착한 수소원자를 떼어내는 Eley-Rideal 반응기구에 의한 추출반응을 일으킨다.[2, 3] 본 연구에서는 Cu(111) 단결정 표면에 낮은 온도에서 중수소원자를 흡착시켰으며 TPD (Temperature Programmed Desorption) 실험을 통해서 중수소원자의 노출시간에 따른 흡착량변화 관찰과 열탈착 스펙트럼의 분석을 함께 행하였다. 또, 구리표면 노출시에 중수소원자의 입사각을 달리함으로서 입사각에 따른 초기 sticking probability의 차이를 관찰할 수 있었으며, 이 차이를 중수소원자의 trapping과 표면 포텐셜에너지의 corrugation과 연관지어 토론하였다. 아울러 기상 수소원자의 표면에 대한 입사각변화가 Eley-Rideal 반응기구에 의한 기흡착 수소원자 추출의 반응단면적에 미치는 영향도 알아보았다.

모든 실험은 기저압력 3.0×10^{-10} Torr의 UHV (Ultrahigh Vacuum) 장치에서 이루어졌다. 중수소원자빔은 길이 60 mm, 직경 2.5 mm의 Ta foil (두께 0.02 mm) tube를 직접전류를 가해서 가열하고 여기에 중수소분자를 흘려보내 얻었으며 원자빔의 방향성을 더욱 개선하기 위해 Cu(111) 시료와 tube 사이에 직경 2 mm의 aperture를 하나 더 두었다.

원자입사각이 표면에 수직일 때 열탈착 스펙트럼을 Fig. 1에 도시하였고 Fig. 2에는 중수소원자 노출량에 따른 열탈착 스펙트럼의 피크면적을 입사각 수직일 때와 수직에서 60° 기울였을 경우에 대해서 나타내었다. 입사각 0° 인 경우 노출량 1 L부터 질서있게 변화하던 탈착 스펙트럼이 100 L 이상부터 다른 양상을 나타내었는데 300 L에서는 오히려 흡착량이 줄어들며 피크 최대점의 온도도 낮은 쪽으로 이동하였다. 이는 중수소의 흡착량이 증가함에 따라 Cu(111) 표면의 reconstruction이 유도되기 때문이라고 사료된다. 입사각 60° 와 0° 의 초기 sticking probability의 비는 Fig. 2의 흡착곡선에서 초기기울기를 비교함으로서 얻어진다. 입사각 0° 일때 60° 보다 3.3배나 큰 sticking probability를 보였으며 흡착곡선의 증가경향도 60° 인 경우와 달랐다. 중수소원자의 수직방향 에너지가 클수록 흡착이 잘 된다는 것은 이 과정이 에너지 corrugation이 작은 표면에서 normal energy scaling에 가까운 trapping-mediated 흡착에 의한 것이라는 것을 의미한다. 한편 기흡착 수소원자의 추출반응은 입사각을 기울일수록 그 반응단면적이 커졌다. 즉, 이 추출반응에서는 trap된 수소원자가 반응에 크게 기여하지 않음을 알 수 있다.

References

1. U. Bischler, P. Sandl, E. Bertel, T. Brunner, and W. Brenig, Phys. Rev. Lett. 70, 3603 (1993).
2. C. T. Rettner, Phys. Rev. Lett. 69, 383 (1992).
3. C. T. Rettner, Phys. Rev. Lett. 74, 4551 (1995).

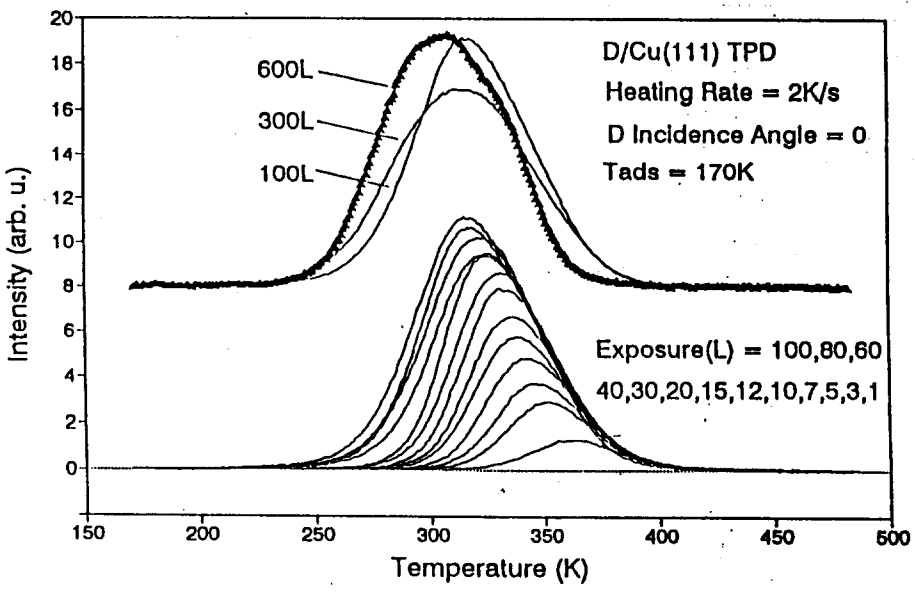

Fig. 1. Thermal desorption spectra for D/Cu(111).

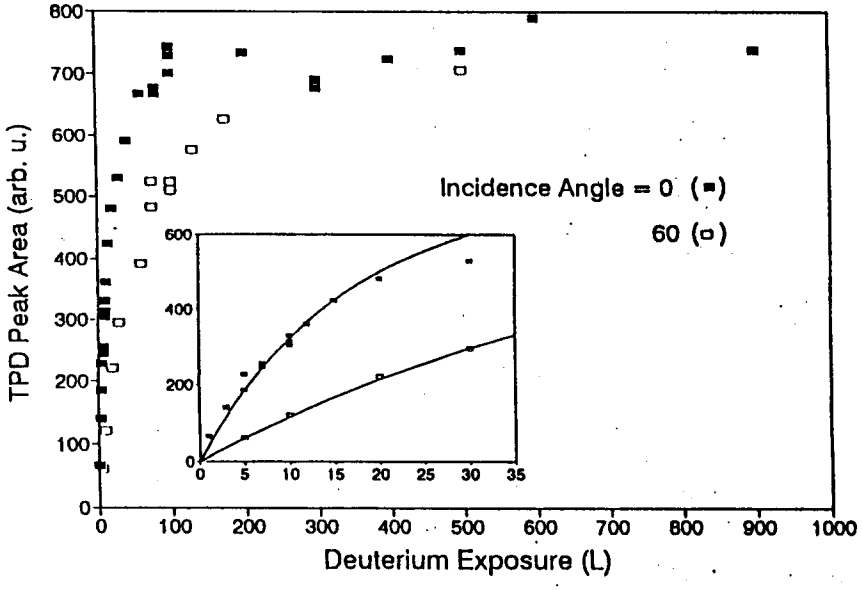

Fig. 2. Peak area of thermal desorption spectra as a function of atomic deuterium exposure (1 L ≡ 10^{-6} Torr·s).