

O/Pd(100)-p(2×2) 표면구조 및 수소흡착 효과의 제일원리 이론계산 연구

정성철¹ · 강명호^{1*}

¹포항공과대학교 물리학과, 포항 790-784

(2006년 5월 10일 받음)

0.25 ML의 산소원자가 흡착하여 이루는 O/Pd(100)-p(2×2) 표면의 원자구조를 밀도범함수 이론 계산을 통해 연구하였다. Pd(100) 표면의 fourfold hollow 위치가 가장 안정된 산소 흡착위치로 밝혀졌고 O-Pd 결합거리는 2.15 Å으로 계산되었다. 산소 흡착에 의해 Pd(100) 표면의 첫 번째 층간격 (d_{12})은 +0.8%의 팽창을 보이는데, 이 계산결과는 +3.6%의 팽창을 보고한 LEED 실험 결과와 차이를 보인다. 차이의 원인으로 시료 표면에 수소 불순물이 존재하였을 가능성을 고려하여 계산한 결과, O/Pd(100)-p(2×2)에 수소원자가 흡착할 때 d_{12} 의 팽창이 유발됨을 확인하였다. 수소 흡착량에 따른 구조변화를 분석하여 LEED 시료 표면에 잔존할 것으로 예상되는 수소의 양을 약 0.3 ML로 추정하였다.

주제어 : Pd(100), 산소, 수소, 표면구조, 밀도범함수이론

1. 서 론

산소원자가 흡착된 Pd(100) 표면은 금속표면의 산화 작용과 관련하여 오랫동안 연구되어 왔다 [1-6]. 지금까지 밝혀진 현상들은 산소원자층의 정렬구조 (ordered phase), 표면재구성 (surface reconstruction), 구조변환 (phase transformation) 등에 관한 것이었다. 특히 산소층의 구조는 덮임율 (coverage)의 증가에 따라 0.25 ML, 0.50 ML, 0.68 ML, 0.80 ML에 각각 대응되는 p(2×2), c(2×2), p(5×5), ($\sqrt{5}\times\sqrt{5}$)R27°의 정렬구조 혹은 이들 구조들의 혼합이 보고되었다 [3, 4, 6]. 이들 정렬구조 중, 초기 단계의 산화과정에서 나타나는 잘 배열된 p(2×2) 구조는 Kolthoff의 low-energy electron diffraction (LEED) 실험을 통해 밝혀졌다 [5]: fourfold hollow 위치에 흡착한 0.25 ML의 산소원자는 2.11 Å의 O-Pd 결합거리 (d_0)를 형성하며, Pd(100) 표면에서 +3.6%의 첫 번째 Pd 층간격의 변화 (Δd_{12})와 0.12 Å 간격의 두 번째 Pd 층의 층분리 (rumpling in the second Pd layer: Δz_2)를 일으키는 것으로 보고되었다. 그러나 이러한 p(2×2) 구조의 LEED 결과에 대한 후속 실험연구나 이론계산연구는 아직 보고된 바 없다.

본 연구에서는 밀도범함수이론 (density functional theory: DFT) 계산을 통해 O/Pd(100)-p(2×2)의 흡착구조를 연구하였다. 총에너지 계산 결과, 산소원자는 hollow 위치를 가장 선호하는 것으로 나타났고, 이 때 이웃한 Pd 원자들과 2.15 Å의 결합거리를 형성하였다. 산소 흡착의 결과로 Pd(100) 표면의 첫 번째 층간격 (d_{12})은 결정격자에서의 간격에 비해 +0.8% 팽창하였다. 이전 LEED 실험 결과와 비교할 때, 계산된 $\Delta d_{12}=+0.8\%$ 는 실험값 ($\Delta d_{12}=+3.6\%$)보다 현저히 작게 나왔는데, 이는 깨끗한 Pd(100) 표면의 Δd_{12} 측정값에 대해 오래 지속되어온 논란을 연상시킨다: LEED 실험에서는 3%-5%의 팽창을 보고한 반면 [7-9], 이론 계산에서는 대부분의 금속 표면과 마찬가지로 -1% 정도의 수축을 보고하였다 [10-12]. 이 논란에 대해 최근에 Pd(100) 표면구조에 대한 수소 불순물의 효과를 체계적으로 조사한 LEED 실험에서는 이전 LEED 실험에서 사용된 Pd(100) 시료가 표면에 수소를 포함하고 있을 가능성을 설득력 있게 제시하였고 [13], 이어 수행된 DFT 계산연구에서는 수소의 흡착량에 따른 표면구조 변화를 분석하여 이전 LEED 시료 표면에 존재했을 수소 불순물의 양을 $\Theta_H \sim 0.6-1.0$ ML의 비교적 큰 값으로 예측한 바 있다 [14]. 따라서 산소원자가

* [전자우편] kang@postech.ac.kr

흡착된 Pd(100) 시료에 대해서도 이러한 수소오염의 가능성을 고려하여 수소원자의 흡착이 표면구조에 미치는 영향을 계산해 보았다. 그 결과 수소원자의 표면 흡착을 가정하였을 때 이전 LEED 실험에서 측정한 O/Pd(100)-p(2×2) 표면 구조상수들을 보다 잘 설명할 수 있었고, 나아가 수소의 흡착량에 따른 O/Pd(100)-p(2×2)의 구조변화를 정량적으로 분석하여 LEED 시료 표면에 [5] 잔존하는 수소의 양을 $\theta_H \sim 0.3$ ML로 추정할 수 있었다.

II. 계산 방법

DFT 총에너지 계산은 Vienna *ab-initio* simulation package (VASP)를 이용하여 수행하였다 [15]. 밀도함수는 generalized gradient approximation (GGA)을 적용하였고 [16], ultrasoft 슈도퍼텐셜을 사용하였다 [17]. 29.1 Ry의 차단 에너지를 갖는 평면파(plane wave)를 기저로 사용하였다. Pd(100) 표면은 다섯 층의 주기적인 slab으로 구성하였으며, 진공영역은 여섯 층의 Pd slab에 해당하는 간격으로 구성하였다. 이러한 slab의 윗면에 산소와 수소원자를 흡착시켰다. Pd의 격자상수는 계산값 3.96 Å을 사용하였다. p(2×2) 표면의 Brillouin-zone 적분은 (6×6×1) k 점 그리드를 사용하였다. 흡착원자와 표면 두 층의 Pd 원자들의 평형 위치는 각 원자에 남은 힘의 성분이 1×10^{-2} eV/Å 이내로 수렴될 때까지 이완시켰고, 아래 세 층의 Pd 원자들은 결정격자 위치에 고정하였다. 유사한 계산 방식이 본 연구진의 H/Pd(100) 연구에서 성공적으로 사용된 바 있으며 [14], 이들 계산 상수들의 테스트 결과 hollow 위치의 산소흡착에 대해 흡착에너지는 0.02 eV 이내로, Δd_{12} 와 Δz_2 는 각각 0.1%와 0.003 Å 이내로 수렴되었다 [18].

III. 결과 및 고찰

O/Pd(100)-p(2×2)의 흡착구조를 표면위의 높은 대칭성을 갖는 hollow, bridge, top 위치에서 조사하였고, 그 결과 각각의 위치에서 1.17 eV, 0.83 eV, -0.28 eV의 흡착에너지가 계산되었다. 흡착에너지는 O₂ 분자 상태를 기준으로 산소원자 당 흡착에너지 증가로 정의하였다. 계산된 hollow 위치의 안정성은 실험 결과들과 잘 일치한다 [1, 2, 5]. Hollow 위치에

산소원자가 흡착된 표면구조를 Fig. 1에, 그 때의 구조상수들을 Kolthoff의 LEED 실험 결과와 [5] 함께 Table I에 나타내었다. 산소원자는 Pd 원자들과 $d_0=2.15$ Å의 결합거리를 형성하였다. Pd(100) 표면은 첫 번째 층간격이 $\Delta d_{12}=+0.8\%$ 의 팽창을 보였는데, 이는 깨끗한 Pd(100) 표면의 $\Delta d_{12}=-1.4\%$ 의 수축으로부터 증가된 것이다. 두 번째 Pd 층은 Fig. 1에서 볼 수 있듯이 산소원자로 인해 $\Delta z_2 \sim 0.17$ Å의 간격으로 층분리되며, 분산된 Pd 원자들의 높이는 산소원자의 수직 아래에 위치한 Pd 원자가 가장 낮다. 이는 O-Pd 결합으로 인해 Pd-Pd 배후결합이 약화된 결과로 여겨진다. 본 연구에서 계산된 O/Pd(100)-p(2×2) 구조상수들은 LEED 실험 결과와 비교적 일치하나, d_0 , Δd_{12} , Δz_2 는 실험값의 오차범위를 벗어나 차이를 보이고 있다. 특히 Δd_{12} 에 대한 3% 가량의 차이는 깨끗한 Pd(100) 표면에서 보고된 실험과 이론 사이의 불일치와 유사한 것이다 [7-12]. 이 불일치의 원인으로 Pd(100) 시료 표면에 남아있는 수소를 지적한 최근 연구결과로 볼 때 [13, 14] 산소가 흡착된 Pd(100) 시료

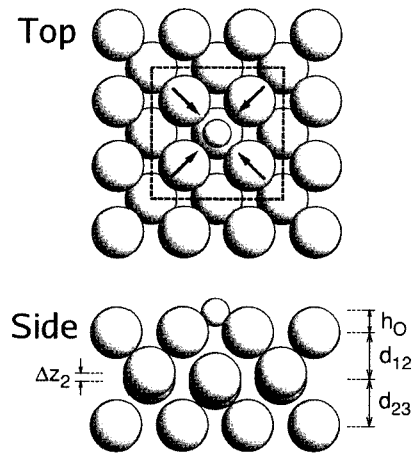


Fig. 1. Schematic diagram of O/Pd(100)-p(2×2). In the top view the adsorbed oxygen atom attracts its four nearest Pd atoms as indicated by arrows, thus resulting lateral displacement of the top-layer Pd atoms from their bulk positions. Dashed lines indicate a (2×2) unit cell. In the side view h_0 represents the vertical height of oxygen atoms from the first Pd layer, d_{12} and d_{23} represent the first and second interlayer spacing, respectively. Since the surface layers are rumpled by oxygen adsorption, the height of a layer is defined as the average height of all atoms in the layer, Δz_2 represents the rumpling in the second Pd layer, defined as the maximum separation in the vertical direction among Pd atoms.

Table I. Structural parameters of O/Pd(100)-p(2×2) shown in Fig. 1. d_o and h_o represent the O-Pd bond length and the vertical height of oxygen atoms, respectively. Δd_{12} (Δd_{23}), Δx_1 , and Δz_2 represent the change of the first (second) interlayer spacing relative to the bulk value, the lateral displacement of the top-layer Pd atoms, and the rumpling in the second Pd layer, respectively.

Methods	d_o (Å)	h_o (Å)	Δd_{12} (%)	Δd_{23} (%)	Δx_1 (Å)	Δz_2 (Å)
Present theory	2.15	0.85	+0.8	-0.3	0.008	0.168
LEED ^a	2.11±0.03	0.83±0.02	+3.6±0.8	0±0.8	0±0.015	0.115±0.010

^aReference [5].

에도 수소가 불순물로 남아있을 가능성을 예상할 수 있다. 따라서 이 가능성을 확인하기 위해 수소를 도입하여 O/Pd(100)-p(2×2)의 흡착구조를 조사하였다.

깨끗한 Pd(100) 표면위의 수소의 흡착 위치는 hollow이고, 1 ML의 수소로 표면이 포화된 이후에는 수소가 표면 아래로 침투함이 알려져 있다 [1, 11, 19]. 따라서 hollow 위치에 존재하는 0.25 ML의 산소를 감안하여 O/Pd(100)-p(2×2) 표면위에 존재하는 수소의 양을 0.75 ML까지 조사하였다. 먼저, 0.25 ML의 수소에 대한 흡착위치를 조사한 결과 안정된 세 지점을 발견하였고 이들의 위치를 Fig. 2에 나타내었다. Hollow(1)과 hollow(2)는 각각 산소원자로부터 먼 hollow 위치와 가까운 hollow 위치이다. Hollow(O)는 산소원자 위에 흡착하여 수산화기 (hydroxyl : OH)가 형성되는 위치이다. 각 위치에서 수소원자의 흡착에너지는 OH가 형성된 hollow(O)에서 0.85 eV로 가장 크게 계산되었다. 표면에 OH가 형성되기 위해서는 활성화 에너지가 필요할

것으로 예상되는데, electron energy loss spectroscopy 실험에서는 산소와 수소가 공존하는 Pd(100) 표면에서 OH가 약 300 K 이상에서 형성됨을 예측한 바 있다 [20]. 한편, O/Pd(100)-p(2×2)에 대한 LEED 실험은 150 K에서 이루어졌다 [5]. 따라서 이 시료에 수소가 존재할지라도 OH의 형성가능성은 낮다고 볼 수 있다. Hollow(O) 위치에서 계산된 1.17 Å의 산소원자의 높이 (h_o)도 LEED 실험의 측정값 ($h_o=0.83$ Å)과 차이를 보이고 있어 이 예상을 뒷받침해준다. LEED 시료에서의 OH 형성가능성을 배제했을 때 0.25 ML의 수소는 흡착에너지가 hollow(2) 보다 0.18 eV 더 큰 hollow(1)을 선호할 것으로 예상된다. Hollow(1) 위치가 hollow(2) 보다 안정됨은 O-Pd과 H-Pd 결합이 각각 형성된 상태에서는 산소와 수소가 서로 반발함을 의미한다.

다음으로 0.5 ML의 수소가 흡착하는 경우를 계산하였다. 여기에서 고려한 두 가지 흡착구조는 Fig. 3에

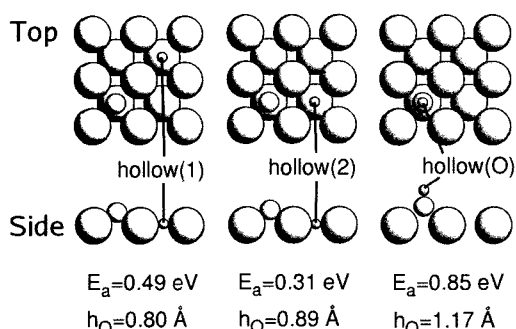


Fig. 2. Equilibrium structures of H+O/Pd(100)-p(2×2) at $\Theta_H=0.25$ ML. In each structure hydrogen adsorption site is indicated. Adsorption energy of hydrogen atom E_a and the vertical height of oxygen atoms h_o are also included. Here, E_a is defined as the energy gain per hydrogen atom relative to a free H_2 molecule.

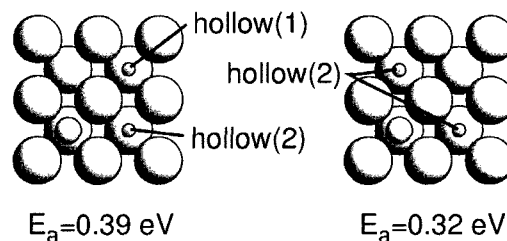


Fig. 3. Equilibrium structures of H+O/Pd(100)-p(2×2) at $\Theta_H=0.5$ ML. In each structure hydrogen adsorption sites are indicated and the adsorption energy of hydrogen atom E_a is included.

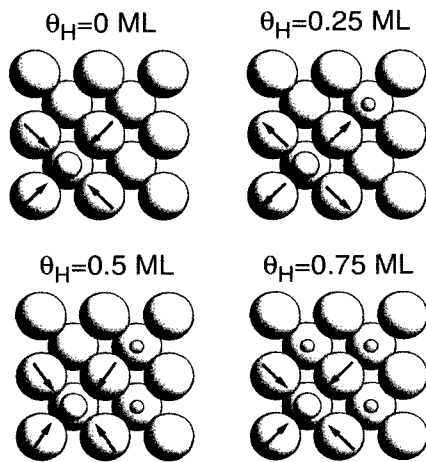


Fig. 4. Equilibrium structures of H+O/Pd(100)-p(2×2) at different H coverages. The hydrogen adsorption geometries are regarded as the configuration of hydrogen atoms remaining on the O/Pd(100)-p(2×2) sample used in previous LEED experiment (Ref. 5). Arrows represent the directions of lateral displacement of the top-layer Pd atoms from their bulk positions.

나타내었다. $\theta_H=0.25$ ML의 경우처럼 hollow(O) 위치의 흡착을 배제했을 때, hollow(1)을 포함하는 구조가 포함하지 않은 구조보다 수소원자 당 0.07 eV 더 안정하였다. 따라서 수소원자는 산소원자로부터 멀리 떨어진 hollow 위치에 존재할 것으로 예측된다. $\theta_H=0.75$ ML의 경우에는 산소원자가 없는 모든 hollow 위치에 수소원자가 흡착된 구조를 계산하였다. Fig. 4는 0.25 ML, 0.5 ML, 0.75 ML의 수소가 이전 LEED 시료에 존재할 것을 가정하였을 때의 평형구조를 보여준다.

표면에 존재하는 수소가 O/Pd(100)-p(2×2) 구조에 어떠한 변화를 일으키는지 살펴보자. Table II에 표면 구조상수들을 수소 덮임율의 증가에 따라 나타내었다. 수소가 없는 경우를 기준으로 볼 때, $\theta_H=0.25$ ML에서는 h_0 , Δd_{12} , Δz_2 의 변화가 눈에 띈다. 산소원자의

높이 h_0 는 0.05 Å 감소하였는데, 이는 O-Pd 결합거리 d_0 의 감소와 산소원자와 결합한 Pd 원자들의 수평이동과 (Fig. 4) 연관된 변화이다. 첫 번째 Pd 표면층은 $\Delta d_{12}=+3.5\%$ 의 팽창을 보였다. 두 번째 Pd 층의 층분리 Δz_2 는 0.04 Å 가량 감소하였다. 이는 수소원자가 흡착되면 산소의 경우와 마찬가지로 Pd-Pd 배후결합이 약화되어 수직아래에 위치한 Pd 원자의 상대적인 높이가 낮아지는데, 그로인해 기존의 산소로 인한 층분리 효과가 상쇄된 결과이다. $\theta_H=0.5$ ML와 0.75 ML에서는 Δd_{12} 의 증가를 제외한 다른 구조상수들의 뚜렷한 변화를 찾아볼 수 없다. 결국 표면에 흡착된 수소는 산소원자의 결합구조 d_0 , h_0 를 비롯한 대부분의 Pd 표면구조에 영향을 미치지 않는 대신 d_{12} 의 상당한 증가, 즉 Pd 표면의 격자팽창을 크게 유발한다.

수소의 양에 따른 표면구조 변화를 분석하여 LEED 실험의 시료에 존재할 것으로 예측되는 수소의 양을 추정해 보았다. Fig. 5에 수소 덮임율의 증가에 따른 Δd_{12} 의 변화를 나타내었다. Δd_{12} 는 수소가 없을 때의 $\sim 1\%$ 에서 $\theta_H=0.75$ ML의 $\sim 7\%$ 까지 수소의 양에 따라 대략 선형적으로 증가한다. 이러한 선형증가 경향은 산소가 없는 Pd(100) 표면에서도 보고된 바 있다 [14]. LEED 실험결과인 $\Delta d_{12}=+3.6\%$ 는 계산된 선형 보간선을 통해 0.30 ML의 수소흡착에 대응되었다. Fig. 6에는 수소 덮임율의 증가에 따른 Δz_2 의 변화를 나타내었다. Δz_2 는 수소가 없을 때 ~ 0.17 Å 이었고 0.25 ML의 수소로 인해 ~ 0.13 Å 으로 감소하였다가, 수소의 양이 0.75 ML까지 증가하면서 ~ 0.15 Å 에 도달하였다. 모든 수소 덮임율에서 Δz_2 는 수소가 없을 때보다 실험값 ~ 0.12 Å 에 더 근접하였고, 특히 Δd_{12} 의 경우와 마찬가지로 $\theta_H=0.25$ ML에서 실험값에 가장 근접하였다. 따라서 Kolthoft의 LEED 실험의 O/Pd(100)-p(2×2) 시료에 [5] 수소가 존재한다면 약 0.3 ML 정도일 것으로 추정할 수 있다. 수소 잔존량 0.3 ML는 이전 LEED 실험에서 사용한 깨끗한 Pd(100) 시료에 [7-9] 잔존할 것으로 예측된 0.6

Table II. Calculated structural parameters of H+O/Pd(100)-p(2×2) at different H coverages. The hydrogen adsorption sites are shown in Fig. 4. All parameters are defined in the captions of Table I and Fig. 1.

θ_H (ML)	d_0 (Å)	h_0 (Å)	Δd_{12} (%)	Δd_{23} (%)	Δx_1 (Å)	Δz_2 (Å)
0	2.15	0.85	+0.8	-0.3	0.008	0.168
0.25	2.14	0.80	+3.5	-0.2	0.002	0.133
0.5	2.14	0.83	+5.4	+0.6	0.008	0.144
0.75	2.14	0.84	+7.1	+0.4	0.012	0.149

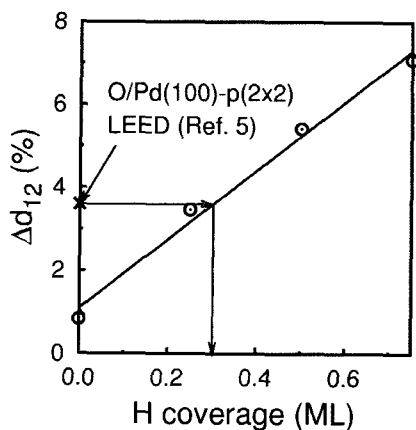


Fig. 5. Change of the first interlayer spacing Δd_{12} of H+O/Pd(100)-p(2x2) as a function of H coverage. The hydrogen adsorption sites are shown in Fig. 4. Circles represent the calculated points which fit to a linear curve. The amount of remaining hydrogen atoms in previous LEED sample is interpolated from the linear relation.

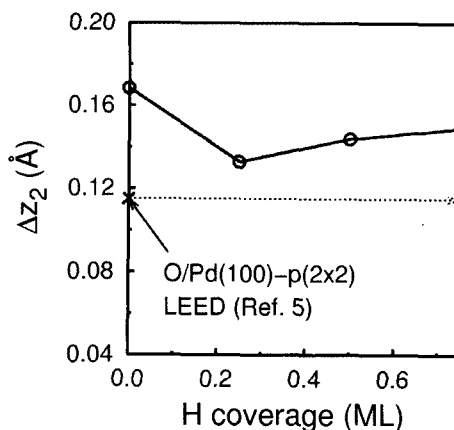


Fig. 6. Rumpling in the second Pd layer Δz_2 of H+O/Pd(100)-p(2x2) as a function of H coverage. The hydrogen adsorption sites are shown in Fig. 4. Circles represent the calculated points. For comparison, previous LEED data for O/Pd(100)-p(2x2) is included.

ML-1.0 ML에 비해서는 [14] 적은 양이다.

IV. 결 론

DFT 계산을 수행하여 O/Pd(100)-p(2x2) 표면의 흡착구조를 연구하였다. Hollow 위치에 흡착한 산소원자는 Pd 원자들과 2.15 Å의 결합거리를 형성하였고 두 번째 Pd 층에서 ~0.17 Å의 층분리를 유발하였다. 수소원자를 흡착시킨 표면에 대해 계산한 결과, 수소가 없는 경우에 비해 LEED 실험에서 측정된 O/Pd(100)-p(2x2)의 구조결과에 더 일치하였다. 수소의 흡착량에 따른 구조변화의 분석을 통해 LEED 실험에서 사용한 시료의 수소 잔존량을 약 0.3 ML로 추정할 수 있었다. 본 연구는 수소 불순물이 Pd(100) 시료만 아니라 산소가 흡착된 Pd(100) 시료에도 존재할 수 있음을 보여준다.

감사의 글

본 연구는 교육인적자원부의 재원으로 한국학술진흥재단의 지원을 받아 수행되었다 (KRF-2005-041-C00129).

참고 문헌

[1] C. Nyberg and C. G. Tengstedt, Surf. Sci.

126, 163 (1983).

[2] K. H. Rieder and W. Stocker, Surf. Sci. 150, L66 (1985).

[3] S. L. Chang and P. A. Thiel, J. Chem. Phys. 88, 2071 (1988).

[4] G. W. Simmons, Y. N. Wang, J. Marcos, and K. Klier, J. Phys. Chem. 95, 4522 (1991).

[5] D. Kolthoff, D. J. Rgens, C. Schwennicke, and H. Pfn r, Surf. Sci. 365, 374 (1996).

[6] G. Zheng and E. I. Altman, Surf. Sci. 504, 253 (2002).

[7] R. J. Behm, K. Christmann, G. Ertl, M. A. Van Hove, P. A. Thiel, and W. H. Weinberg, Surf. Sci. Lett. 88, L59 (1979).

[8] J. Quinn, Y. S. Li, D. Tian, H. Li, F. Jona, and P. M. Marcus, Phys. Rev. B 42, 11348 (1990).

[9] J. Burchhardt, E. Lundgren, M. M. Nielsen, J. N. Andersen, and D. L. Adams, Surf. Rev. Lett. 3, 1339 (1996).

[10] M. Methfessel, D. Hennig, and M. Scheffler, Phys. Rev. B 46, 4816 (1992).

[11] S. Wilke, D. Hennig, and R. L. ber, Phys. Rev. B 50, 2548 (1994).

[12] A. Eichler, J. Hafner, and G. Kresse, J.

- Phys.: Condens. Matter. **8**, 7659 (1996).
- [13] S. H. Kim, H. L. Meyerheim, J. Barthel, J. Kirschner, Jikeun Seo, and J. S. Kim, Phys. Rev. B **71**, 205418 (2005).
- [14] S. C. Jung and M. H. Kang, Phys. Rev. B **72**, 205419 (2005).
- [15] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
- [16] J. P. Perdew, in *Electronic Structure of Solids '91*, edited by P. Ziesche, and H. Eschrig (Akademie Verlag, Berlin, 1991).
- [17] D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **41**, 7892 (1990).
- [18] 본 연구에서는 계산의 효율성을 위해 원자를 한 면에만 흡착시킨 비대칭 slab 구조를 사용해 supercell 부피를 줄였다. 비대칭 slab 구조에서는 흡착면에 발생하는 dipole moment에 기인하는 비정상적인 퍼텐셜 기울기가 형성될 수 있는데, 본 연구에서는 0.25 ML의 산소원자가 흡착한 경우 $+0.04 \text{ eV}/\text{\AA}$, 1 ML의 수소원자가 흡착한 경우 $+0.01 \text{ eV}/\text{\AA}$ 의 전기장이 계산되었다. 이들 전기장이 계산결과에 미치는 효과는 미미한 것으로서, 일곱 층으로 구성된 대칭 slab 계산결과와의 비교에서 나타나는 표면구조상수의 차이는 본문에 언급된 계산 상수들의 수렴성 안에 포함되는 것을 확인하였다.
- [19] M. Wilde, M. Matsumoto, K. Fukutani, and T. Aruga, Surf. Sci. **482**, 346 (2001).
- [20] C. Nyberg and C. G. Tengstedt, J. Chem. Phys. **80**, 3463 (1984).

First-Principles Theoretical Study of the Surface Structure of O/Pd(100)-p(2×2) and the Effect of H Impurities

Sung Chul Jung¹ and Myung Ho Kang^{1*}

¹*Department of Physics, Pohang University of Science and Technology, Pohang 790-784*

(Received May 10, 2006)

We have performed density functional theory calculations for the surface structure of O/Pd(100)-p(2×2), formed by the adsorption of oxygen atoms of 0.25 ML. The oxygen atoms adsorb preferentially at the fourfold hollow site, and the calculated O-Pd bond length is 2.15 Å. The first interlayer spacing (d_{12}) of Pd(100) expands by +0.8% due to the oxygen adsorption, which differs from the experimental value of +3.6% reported by a previous LEED study. Assuming that the LEED sample was possibly contaminated by hydrogen atoms, we also examined the effect of hydrogen impurities on the surface structure. Hydrogen atoms adsorbed on O/Pd(100)-p(2×2) are found to result in large expansions of d_{12} of Pd(100). Our analysis estimates the amount of hydrogen atoms remaining on the LEED sample as ~0.3 ML.

Keywords : Pd(100), Oxygen, Hydrogen, Surface structure, Density functional theory

* [E-mail] kang@postech.ac.kr