

課題番号 : 2021A-E17  
利用課題名 (日本語) : アナターゼ TiO<sub>2</sub> 表面における水およびガス吸着反応過程のリアルタイム光電子分光  
Program Title (English) : Real-time photoelectron spectroscopy of water and gas adsorption reaction process on the surface of anatase TiO<sub>2</sub>  
利用者名 (日本語) : 阿部真之<sup>1)</sup>, 大野 真也<sup>2)</sup>, 勝部 大樹<sup>3)</sup>, 稲見 栄一<sup>4)</sup>, 神野崇馬<sup>1)</sup>, 坂井田<sup>2)</sup>, Kim Kyungmin<sup>1)</sup>  
Username (English) : M. Abe<sup>1)</sup>, S. Ohno<sup>2)</sup>, D. Katsube<sup>3)</sup>, E. Inami<sup>4)</sup>, S. Jinno<sup>1)</sup>, I. Sakaida<sup>2)</sup>, K. Kim<sup>1)</sup>  
所属名 (日本語) : 1) 大阪大学, 2) 横浜国立大, 3) 長岡技術科学大学 4) 高知工科大学  
Affiliation (English) : 1) Osaka Univ., 2) Yokohama National Univ. 3) Nagaoka Univ. of Tech. 4) Kochi Univ. of Technol.

## キーワード :

### 1. 概要 (Summary)

二酸化チタン(TiO<sub>2</sub>)は光触媒の材料として知られているが、色素増感太陽電池の電極材料など幅広い応用が期待される重要な物質である。表面科学分野では、走査トンネル顕微鏡や各種の分光法を用いた研究により多くの知見が得られている。しかしながら、二酸化チタンで低指数面の表面構造モデルがほぼ確立しており、様々な欠陥構造や物性、現象の理解が進んでいるルチル型構造に対し、アナターゼ型構造では表面構造モデルは未だに確立しておらず、研究はあまり進んでいない。従って、ルチル型と光触媒としての機能性が高いアナターゼ型を触媒材料として、どの様に複合的に有効に利用するかという問いに対して、原子レベルでの明確な指針はまだ得られていない状況にある。本研究では、市販されている(100)、(001)、(110)方位のルチル型 TiO<sub>2</sub> 基板をリファレンスにして、パルスレーザー堆積法(PLD)法により作製された数十 nm 程度のアナターゼ薄膜を測定対象とし、水分子およびガス分子との表面反応の解析を世界に先駆けて推進することを目的としている。

### 2. 実験(目的,方法) (Experimental)

測定試料として、ルチル型 TiO<sub>2</sub>(100)、ルチル型 TiO<sub>2</sub>(001)、ルチル型 TiO<sub>2</sub>(110)、PLD 法により作製されたアナターゼ型 TiO<sub>2</sub>(001)薄膜(成膜条件により欠陥密度等を制御する)を用いた。水分子およびガス分子(O<sub>2</sub> もしくは H<sub>2</sub>O)を流して TiO<sub>2</sub> 表面との反応の光電子分光によるリアルタイム計測を行った。超音速分子線により、改変した表面の反応性の変化についても検討を行った。

具体的には以下の詳細な実験を行った。

- ・真空中にて清浄化したルチル型 TiO<sub>2</sub>(100)、ルチル型 TiO<sub>2</sub>(001)表面の XPS 測定
- ・準大気圧(~40 Pa)にて水曝露したルチル型 TiO<sub>2</sub>(100)、ルチル型 TiO<sub>2</sub>(001)表面の XPS 測定
- ・大気中から導入したままのルチル型 TiO<sub>2</sub>(001)表面の XPS 測定

### 3. 結果と考察 (Results and Discussion)

表面再構成作製条件を確立できていなかったルチル型 TiO<sub>2</sub>(100)、ルチル型 TiO<sub>2</sub>(001)の2種類の表面について、スパッタとアニールによる表面再構成作製条件を確立し、低速電子線回折により表面構造の評価を行った。その結果、ルチル型 TiO<sub>2</sub>(100)は(1×3)の超周期構造、ルチル型 TiO<sub>2</sub>(001)は c(4×4)の超周期構造となっていることを確認した。この表面に対し、XPS 測定を行うことで、O1s、Ti2p、valence band に関する清浄表面の基礎的な情報を取得した。この表面に水を吸着させると、これまでの結果と同様に、O1s において、高結合エネルギー側に OH 結合を示す状態の増加が観測された。そのため、ルチル型 TiO<sub>2</sub>(100)表面、ルチル型 TiO<sub>2</sub>(001)表面においても、水分子は表面で解離吸着していることがわかった。

大気中から導入したままのルチル型 TiO<sub>2</sub>(001)表面を XPS 測定した結果とこれまでの結果を比較すると、valence band のスペクトルにおいて、OH<sub>3</sub>σ を示すスペクトルが顕著に表れていることが確認できた。このスペクトルは他の表面では観測できていないことから、ルチル型 TiO<sub>2</sub>(001)表面に特有のものであると考えられる。また、この結果からルチル型 TiO<sub>2</sub>(001)表面は他の表面と比較して、水分子の吸着活性や吸着構造が大きく異なっていることが推測される。

#### 4. その他・特記事項 (Others)

これまでの成果と併せて JST 新技術説明会で発表予定。