

課題番号 :2021B-E19
利用課題名 (日本語) :アナターゼ TiO₂ 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 photoemission spectroscopy of water and gas adsorption reaction processes on anatase TiO₂ surface
利用者名(日本語) :阿部真之, 大野 真也, 勝部 大樹, 稲見 栄一, 坂井田 樹, Kim Kyungmin, 津田 泰孝, 吉越 章隆
Username (English) :M. Abe¹⁾, S. Ohno²⁾, D. Katsube³⁾, E. Inami⁴⁾, I. Sakaida, K. Kim¹⁾, Y. Tsuda⁵⁾, A. Yoshigoe⁵⁾
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, 5) 日本原子力研究開発機構
Affiliation (English) :1) Osaka Univ. 2) Yokohama National Univ. 3) Nagaoka Univ. of Tech. 4) Kochi Univ. of Technol. 5) Japan Atomic Energy Agency
キーワード : 二酸化チタン、TiO₂、X線光電子分光、XPS、分子線、欠陥

1. 概要 (Summary)

二酸化チタン(TiO₂)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、市販のルチル型 TiO₂(110) 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 TiO₂(110)、PLD 法により作製されたアナターゼ型 TiO₂(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(O₂もしくは H₂O)を流して TiO₂ 表面との反応の光電子分光(XPS)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。室温ガス(0.03 eV)および超音速分子線(0.05~

2.3 eV)を利用した。具体的な測定としては、以下の2点を行った。

- ・大気中から導入した表面未処理のアナターゼ TiO₂ への NO 分子線の照射(分子線発生装置のノズル加熱の有無による反応性の検証)
- ・清浄表面および水吸着表面への NO 分子線の照射(ノズル加熱の有無による反応性の検証)

なお、参照試料としてルチル型 TiO₂(110)面において同様の測定も行った。

実験は表面化学実験ステーションにある XPS 装置を用いて行った。

3. 結果と考察 (Results and Discussion)

XPS によって以下の結果が得られた。

- ・NO 分子線の照射により、未処理表面と水吸着表面は N1s 状態が形成されることを確認した
- ・清浄表面の場合、ノズルが非加熱であると N1s 状態が形成されないことから、反応性がないことを確認した
- ・ノズル加熱の有無による反応性の違いを検証したところ、ノズル加熱有りの場合、顕著な N1s スペクトルを確認した
- ・非加熱ノズルの分子線の場合、表面への水吸着の有無で反応の有無が変わることから、NO の反応性には表面の OH 基が関係している可能性があることを確認できた。

以上の結果から、ノズルの加熱により励起される分子振動が TiO₂ 表面上での NO 分子の反応に大きな影響を与えて

いることが示唆されることがわかった。

4. その他・特記事項 (Others)

なし。