Ag (110) 上に合成した TiO₂ 超薄膜の電子状態:X 線吸収端近傍微細構造

The electronic structure of TiO_2 ultrathin film on Ag(110): Near Edge X-ray Absorption Fine Structure Study

〇杉崎裕一¹,中村卓也¹,石田周平¹,枝元一之^{1,2},掛札洋平¹,小澤健一³,間瀬一彦⁴
Rikkyo Univ.¹,Reserch Center for Smart Molecules,Rikkyo Univ.²,Tokyo Institute of Technology³,
High Energy Accelerator Research Organization⁴

E-mail: y.sugizaki@rikkyo.ac.jp

【はじめに】光触媒として知られる酸化チタン (TiO_2) は、2次元ナノシートとすることでその機能が向上する。ナノシート型酸化チタンの結晶構造は、バルク構造と異なるレピドクロサイト型構造をである。しかしながら、単結晶として得られておらず、光触媒と関係する電子状態は未明である。そこで本研究では、レピドクロサイト型酸化チタンと格子の整合性の高い Ag(110)上に酸化チタン薄膜を合成し、X線吸収端近傍微細構造(NEXAFS)によってその電子状態を観測した。

【実験・結果・考察】実験は高エネルギー加速器研究機構フォトンファクトリーBL-13B にて行った。 5.0×10^6 Torr の酸素雰囲気下で Ag(110)清浄面に Ti 原子を電子ビーム蒸着(Omicron EMF3)し、その後、基板を 500° C30 分加熱することで TiO_2 薄膜を合成した。Fig.1 はこの手法によって合成した膜厚 5.0Å の (1×1) TiO $_2$ /Ag(110)の LEED 像である。下地の (1×1) 周期と一致した (1×1) TiO $_2$ は膜厚 $3.9\sim11$ Å において観測された。格子の整合性の観点から、下地と一致した (1×1) TiO $_2$ はレピドクロサイト型である可能性が高い。Fig.2 は O K-edge NEXAFS スペクトル図である。555eV ならびに 568eV 近傍にピークを観測していることから、 TiO_2 を形成していることが NEXAFS からも分かる。この時、532eV ならびに 534eV にそれぞれ t_{2g} および e_g 軌道への遷移を観測している。これらのピークが分裂して観測されることから、加熱により TiO_2 薄膜は結晶性の高い構造を形成していることが分かる。この時、結晶構造を反映した $540\sim550eV$ の領域におけるピークはルチル型やアナターゼ型とも異なるピーク形状を形成していることを明らかにした。



520 530 540 550 560 570 580 Photon Energy (eV)

Fig.1 (1×1)TiO₂/Ag(110) LEED 像(膜厚 5.0Å)

Fig.2. O K-edge NEXAFS スペクトル

【謝辞】本研究は高エネ研共同利用実験の一環として行われた(課題番号:2012S2-006)。また、本研究は、文部科学省(MEXT)私立大学戦略的研究基盤形成支援事業ならびに立教大学学術推進特別重点資金(立教 SFR)の援助を受けた。