

Overview : 結晶多形および表面・界面

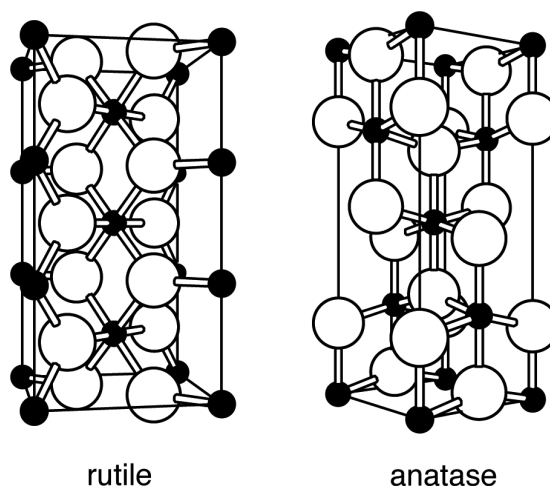
Overview: Polymorphs and Surfaces of Titanium Oxide

○大西 洋(神戸大理)

○Hiroshi Onishi (Kobe Univ.)

E-mail: oni@kobe-u.ac.jp

代表的な酸化チタン化合物であるルチルとアナターゼの結晶構造を右図に示す。いずれの構造でもチタンカチオンは6個の酸素アニオンと結合し(6配位)、酸素アニオンは3個のチタンカチオンと結合している(3配位)。ルチルを構成する TiO_6 ユニットは正八面体に近く、Ti-O 結合長は195 pm と 198 pm でほとんど等しい。八面体中心を占めるチタン原子は2個の酸素原子を結ぶ対角線上に位置するので O-Ti-O 結合角は 180° である。アナターゼの Ti-O 結合長は 194 pm と 197 pm



でルチルと変わらないが、チタン原子が八面体の中心からはずれており O-Ti-O 結合角が 155° まで歪んでいる。この歪みのためにアナターゼ結晶は大きな応力にさらされており、結晶構造モデルを組み上げようとするとき球(原子)から棒(結合)が抜けてしまうほどである。

熱力学的に安定なルチル(110)結晶面を対象とした表面科学実験が1970年代から進展し、well-defined 金属酸化物表面のプロトタイプとみなされている。ヘテロエピタキシャル膜や天然鉱物結晶を利用して well-defined なアナターゼ結晶面の実験研究も進んでいる。一方で Ti カチオンの 3d 原子軌道を正しく取り入れる電子状態シミュレーションが2000年ごろから急速に発展し、現在では実験とシミュレーションを併用した精緻な研究が可能である。

次の研究開発ステージをひらくために必要な基礎研究は、凝縮相(液体・固体)や濃密気体と二酸化チタンの界面を、あたかも真空中の表面であるかのように、原子スケールで精緻に計測評価する実験技術とシミュレーション手法の開拓であろう。