

TiO₂(011)-(2×1) 表面の AFM/STM による研究

Characterization of TiO₂(011)-(2×1) Surface by AFM/STM



東大新領域¹, 阪大院工², 阪大基礎工³, UCL⁴,

○(PC)小野田 穰^{1,2}, Ayhan Yurtsever³, 阿部 真之³, Chi Lun Pang⁴, 杉本 宜昭^{1,2}

Univ. of Tokyo¹, GSE, Osaka Univ.², GSES, Osaka Univ.³, UCL⁴

○(PC)Jo Onoda^{1,2}, Ayhan Yurtsever³, Masayuki Abe³, Chi Lun Pang⁴ and Yoshiaki Sugimoto^{1,2}

E-mail: jonoda@afm.k.u-tokyo.ac.jp

TiO₂は光触媒活性物質として知られており、中でも熱力学的に最安定なルチル型 TiO₂(110)は表面科学の分野では長年よく調べられている。一方、近年、より光学活性な TiO₂(011)に関する研究に注目が集まっており、TiO₂(011)の(2×1)再構成表面の構造モデルとして「回折モデル」が尤もらしいと報告されている(図(a)と(b))。過去の TiO₂(011)-(2×1)の走査トンネル顕微鏡(STM)観察の結果から、探針-試料間距離が近い場合は beanlike 状、遠い場合は zigzag 状の輝点が現れることが分かった。探針と表面を考慮した第一原理計算によってこれらの STM の結果は再現されており、図(c)に示すように zigzag 状の輝点の位置は特定の原子位置とは対応せず表面の電子状態を反映していることが判明した[1]。これに対して、原子間力顕微鏡(AFM)は表面の幾何学的形状を反映するため、我々は AFM/STM による同時観察によって表面の電子状態と幾何学的情報の対応づけができるのではないかと考え実験を行った[2]。図(d)と(e)はそれぞれ高さ一定モードで取得した TiO₂(011)-(2×1)表面の周波数シフト像と時間平均電流像である。これらの結果から、予想に反して、AFM 像は STM 像と似た zigzag 状の輝点を表すことが分かった。当日は表面に吸着した水素の挙動に関する結果も述べる。

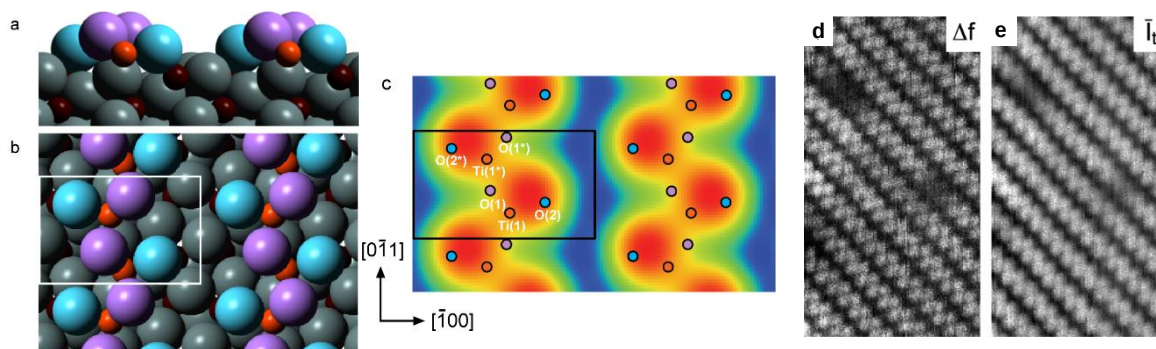


Figure : (a) Side view of the ball model of TiO₂(011)-(2×1) viewed along the $[0\bar{1}\bar{1}]$ direction. (b) Top view of the same model. The top layer O atoms are shown in purple and the second layer are in light blue. All other O atoms are gray. The top Ti atoms are orange whereas all other Ti are shown in dark red. (c) Simulated STM image of the TiO₂(011)-(2×1) surface with the top atoms of the model superimposed¹. Simultaneously recorded AFM (d: frequency shift, Δf) and STM (e: time-averaged current, $\bar{I}_t$) images

[1] T. Woolcot et al., *Phys. Rev. Lett.* **109**, 156105 (2012).

[2] A. Yurtsever et al., *J. Phys. Chem. C* **120**, 3390 (2016).