原子間力顕微鏡を用いたルチル型 TiO₂(110) 表面上の 吸着酸素単原子の電荷状態の解明

Discovering the charge state of oxygen adatom on rutile TiO_2 (110) surface

with atomic force microscopy

阪大院工¹ ^O(M2)安達 有輝¹, (P)温 煥飛¹, (D)張 全震¹, 宮崎 雅人¹, 内藤 賀公¹, 李 艶君¹, 菅原 康弘¹

Osaka Univ.¹, °Yuuki Adachi¹, Huan Fei Wen¹, Quanzhen Zhang¹, Masato Miyazaki¹, Yoshitaka Naitoh¹, Yan Jun Li¹, Yasuhiro Sugawara¹

E-mail: adachiyuuki7@ap.eng.osaka-u.ac.jp

[研究背景] 現在、二酸化チタン TiO₂は、光触媒や金属微粒子触媒の固定担体として最もよく 用いられている材料となっている。また、酸素分子は、私たちの身の回りに存在し、表面に 吸着し、電子を受け取ることで活性な振る舞いを示す気体としてよく知られている。そのた め、TiO₂の触媒反応機構を理解する上で、TiO₂表面上の酸素分子の電荷状態の理解は重要と なってくる[1]。そこで、今回、そのメカニズム解明のために、TiO₂表面上に吸着する酸素分 子の電荷状態解明を原子スケールで行った。

[実験方法・結果] 走査型トンネル顕微鏡は、バイアス電 Eを印加し電流を検出するため、画像化時に電荷状態を 変化させてしまう可能性がある。そこで、本研究では、 超高真空・極低温環境で周波数変調方式原子間力顕微鏡 (FM-AFM)を、バイアス電圧を印加せずに、電荷状態の画 像化を行った。試料にはルチル型 TiO₂(110)を用い、酸素 の曝露は室温で行った。図1はルチル型 TiO₂(110)表面上 に吸着した酸素原子の表面凹凸像を示している[2]。明る い輝点は 0_{ad}²⁻であり、少し明るい輝点は 0_{ad}⁻である。この 図から吸着酸素は電子を受け取ることで解離吸着し、2 種類の電荷状態を持つことがわかる。今後は、さらにこ の表面上に金ナノ微粒子を担持させて、電子状態や電荷 状態の解析を進めていくことにより、触媒の反応機構や 金属酸化物上の金属ナノ微粒子の触媒機構を解明する。



Figure 1 | NC-AFM image of rutile $TiO_2(110)$ surface exposed by oxygen at room temperature. O and Ti atom rows on TiO_2 (110) are observed as bright and dark rows, respectively. Oxygen molecules are adsorbed and dissociated on TiO_2 (110) surface. Two types of oxygen adatoms with negative charges are observed on Ti atom rows (O_{ad}^- and O_{ad}^{2-}). O_{ad}^{2-} shows the brighter feature than O_{ad}^- . ($V_S = 0 \text{ V}, 2.0 \times 3.5 \text{ nm}^2$, scale bar 0.5nm)

参考文献

- Q. Z. Zhang, Y. J. Li, H. F. Wen, Y. Adachi, M. Miyazaki, Y. Sugawara, R. Xu, H. Z. Cheng, J. Brndiar, L. Kantorovich, I. Štich, *J. Am. Chem. Soc* 140 (46), pp 15668-15674 (2018).
- [2] Y. J. Li, Y. Adachi, M. Miyazaki, Q. Z. Zhang, H. F. Wen, Y. Naitoh, and Y. Sugawara, Vacuum and Surface Science 61, 10, pp.1-6 (2018).