

原子間力顕微鏡を用いたルチル型酸化チタン表面上の酸素原子の電荷状態と結合状態の制御

Tip-Induced Control of Charge and Molecular Bonding of Oxygen Atoms on the Rutile TiO_2 (110) Surface with Atomic Force Microscopy

阪大院工¹, King's College London², Slovak Academy of Sciences³

○(D) 安達 有輝¹, 温 煥飛¹, 張 全震¹, 宮崎 雅大¹, 菅原 康弘¹, H. Sang², J. Brndiar³, L. Kantorovich², I. Štich³, 李 艶君¹

Osaka Univ.¹, King's College London², Slovak Academy of Sciences³ ○Yuuki Adachi¹, Huan Fei Wen¹, Quanzhen Zhang¹, Masato Miyazaki¹, Yasuhiro Sugawara¹, Hongqian Sang², Ján Brndiar³, Lev Kantorovich², Ivan Štich³, and Yan Jun Li¹

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

[研究背景] 現在、二酸化チタンは、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非常に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、二酸化チタンの触媒反応機構を理解する上で、酸素分子と二酸化チタンの反応機構の理解は極めて重要となってくる[1]。そこで、今回、そのメカニズム解明のために、原子間力顕微鏡を用いて、二酸化チタン表面上に吸着した酸素分子の電荷状態と結合状態の制御を原子スケールで行った。

[実験方法・結果] 本研究では、超高真空・極低温環境で動作する周波数変調方式原子間力顕微鏡 (FM-AFM) を用いた。画像化の際には、特に、酸素分子の反応を誘起しないために、探針・試料間に印加する電圧として全て 0V を用いて、画像化を行った。試料にはルチル型 TiO_2 (110) を用い、酸素の曝露を室温で行った。図 1 はルチル型 TiO_2 (110) 表面上に吸着した酸素分子に対して、静電気力分光法を用いて電荷操作を行った様子を示している[2]。本研究結果から、酸素分子に対して 2 個の電子を注入したり、抜き取ったりことによって解離結合制御が可能であり、1 個の電子を注入したり、抜き取ったりことによって個々の酸素原子の電荷状態を制御できるということがわかった。さらに、密度汎関数理論の結果から、結合制御には酸素分子に存在する反結合軌道の電子の存在が大きく関わっていることがわかった。今後は、さらに、この表面上に金ナノ微粒子を担持させて、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。

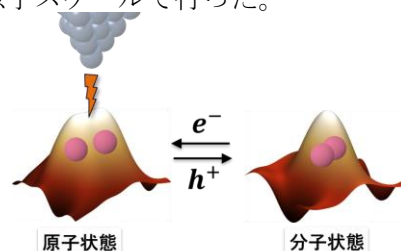


Figure 1 | Schematic image of tip-induced control of molecular bonding of oxygen atoms on the rutile TiO_2 (110) surface with NC-AFM.

参考文献

- [1] 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. Adachi, H. F. Wen, Q. Z. Zhang, M. Miyazaki, Y. Sugawara, H. Q. Sang, J. Brndiar, L. Kantorovich, I. Štich, Y. J. Li, *ACS NANO* **13** (6), pp. 6917-6924 (2019).