

TiO₂ 表面構造と触媒機能

Surface structure of TiO₂ in the aspect of catalysis

有賀寛子¹, 望月出海², 深谷有喜³, 和田健², 兵頭俊夫², 朝倉清高¹

¹北海道大学触媒化学研究センター, ²物質構造科学研究所低速陽電子実験施設,

³日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター

触媒担体や光触媒、電子デバイスとして広く用いられている二酸化チタンの化学特性や物性は、表面もしくはバルクの欠陥により大きく変化する。つまり、この欠陥の構造、化学状態、及び、分布が、触媒や光触媒特性に対しどう寄与するかを明らかにすることが、二酸化チタンの化学特性や物性を制御する上で重要な課題となっている。この表面の研究には走査プローブ顕微鏡に加え、放射光が重要な役割を果たしてきた。近年、ミュオンや陽電子などの量子ビームが注目され、欠陥構造などの原子レベル解析が行われている。本稿では、陽電子を用いた全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法による TiO₂(110) (1×2) 構造解析について述べる。TiO₂(110)表面は rutile 型 TiO₂ の最安定表面であり、最もよく研究された酸化物表面である[1]。この表面を超高真空下で高温処理すると、TiO₂ の組成からずれた(1×2)周期の超構造(欠陥構造)が形成されることが知られている。この構造について、多くの表面科学的手法が用いられ、4 つのモデルが提案されてきた。この中でも大西と岩澤[2]が主張する added row 構造が最有力とされているが、近年、収差補正 TEM の観察により、柴田らは、Ti₂O モデルを示唆するデータを得ている[3]。この(1×2)構造が決まっていない理由は、表面構造を調べる手法の表面敏感性あるいは元素識別能力が不足しているためと考えられる。TRHEPD は、表面敏感で表面の原子分布を反映した構造解析ができる。そこで、TiO₂(110) (1×2) 構造を作製し、TRHEPD 測定を行った。TRHEPD のロッキングカーブの解析から、ほぼ、added row モデルにより実験結果を再現することがわかった。他のモデルでは、ここまで再現することができず、added row モデルの妥当性を強く指示している[4]。また、本研究は TRHEPD が有力な表面構造解析手段であることを実証している。

[1] U. Diebold, Surf. Sci. Reports, 48, 53 (2003). [2] H. Onishi and Y. Iwasawa, Surf. Sci., 313, L783 (1994). [3] N. Shibata, A. Goto, S.-Y. Choi, T. Mizoguchi, S. D. Findlay, T. Yamamoto and Y. Ikuhara, Science, 322, 570 (2008). [4] 朝倉清高, 有賀寛子, 望月出海, 深谷有喜, 和田健, 兵頭俊夫 PF ニュース in press (2014)