

## Anatase TiO<sub>2</sub> の価電子バンド構造

杉田真理・江森万里・小澤健一<sup>A</sup>・坂間弘

上智大学 理工学研究科 ・ 東京工業大学 理工学研究科<sup>A</sup>

[はじめに] アナターゼ型二酸化チタン TiO<sub>2</sub> はルチル型に比べて光触媒活性が高いことが知られているが、電子構造について不明な部分がおおく、まだ理由が明らかにされていない。そこで我々は、その理由を探ることを目的として、アナターゼ型 TiO<sub>2</sub> の価電子帯の電子構造を角度分解光電子分光 (ARPES) により決定した。

[実験方法] アナターゼ型 TiO<sub>2</sub> は、格子整合した LaAlO<sub>3</sub>(100) 基板の上に、PLD 法により成膜した[1]。得られた TiO<sub>2</sub> は、約 500nm の厚さの c 軸配向アナターゼ型エピタキシャル薄膜であった。ARPES 測定は、BL-1C(旧)と BL-11D において行った。直線偏光ビームを入射角 15° と 65° で入射することにより、s と p 偏光が強い条件で Γ-Z 軸の電子構造を決定した。また、測定は室温と液体窒素温度で行った。

[結果] 図1は、PLD 法で作製した TiO<sub>2</sub> 薄膜を X 線回折により評価した結果である。アナターゼ型を特徴づけるピークのみが観測されており、薄膜がルチル型を含まないアナターゼ型であることを示している。ARPES スペクトルには、主に O 2p 軌道からなるバンドからのエミッションが 3~9 eV に観測された。図2は、ARPES 測定から得られたアナターゼ型 TiO<sub>2</sub> の電子構造である。O2p 軌道由来の Pπバンドとσバンドはすでに報告されていたが、今回我々はその中間領域にある複数のバンドを初めて実験的に見出した。さらに、p 偏光と s 偏光による測定で、対称性の異なるバンドをそれぞれ分けて決定することができた。

[1] 長田、田野倉、市川、坂間、2004 年秋季第65回応用物理学会学術講演会、2a-H-9

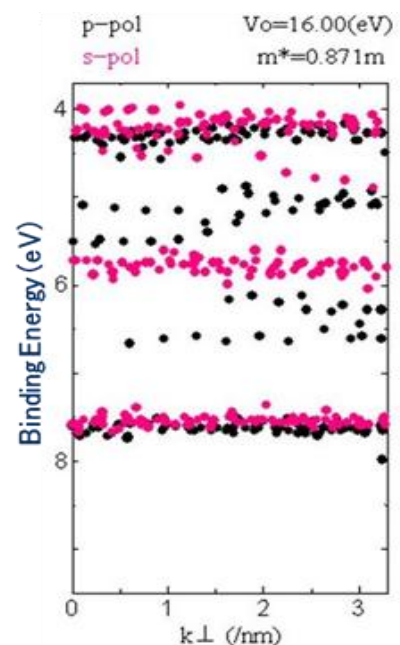
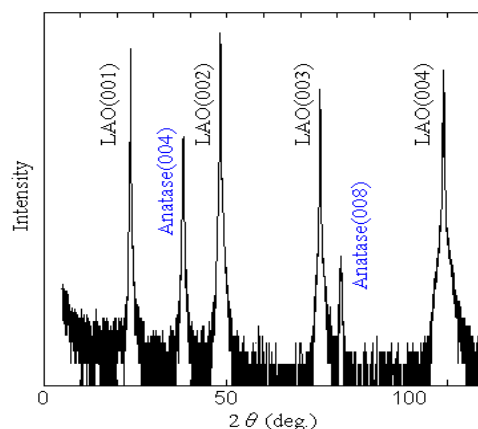


図1 LaAlO<sub>3</sub>上に成長させたアナターゼ型 TiO<sub>2</sub> の X 線回折パターン 図2 ARPES により決定したアナターゼ型 TiO<sub>2</sub> の電子構造