

ルチル型二酸化チタン中の水素の電子状態

SATテクノロジー・ショーケース2016

■ はじめに

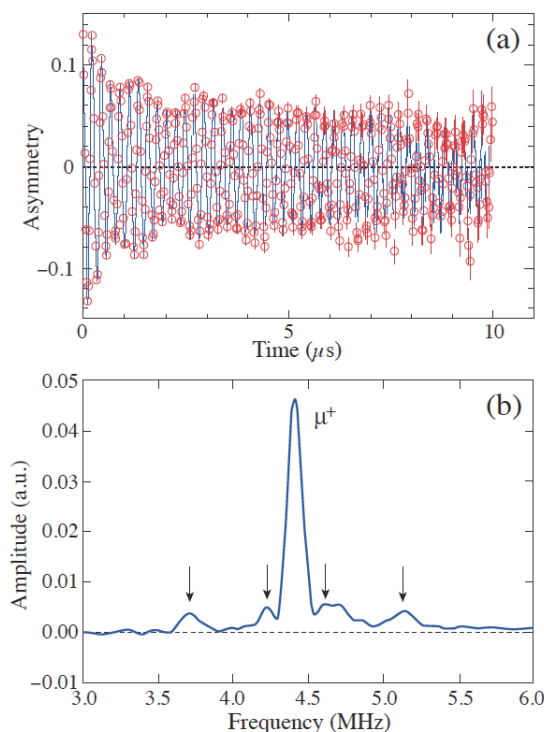
二酸化チタンは光触媒物質として、様々な分野に応用されている。そのバンドギャップは、3.4eV程度であり、半導体としてとらえることも可能である。可視光利用のためのバンドギャップコントロール等のためには、その性質を微視的に理解することが重要であるが、現在でも議論されている大きな問題として、通常の作成方法では強いn型電気伝導性を示し、その起源が明らかでないことが上げられる。

この状況を大きく変えたのが最近の理論計算による仮説であった。それは二酸化チタンのなかでドナーとなっているのは水素ではないかという指摘である。なるほど水素はどこにでもある元素であって合成のありとあらゆる局面で結晶中に忍び込む可能性がある。しかも微量であればこれほど捕まえにくい元素もない。なにしろ半導体の伝導性は1 ppm以下のドナーあるいはアクセプター原子で制御されるのであるから、問題となる水素の濃度もこの程度である。そこで我々はさっそくこの仮説の当否を微視的に検証すべく、二酸化チタンのミュオニウムの電子状態を観測する実験を行った。ミュオニウムとは水素原子の中の陽子をミュオンで置き換えた状態であり、半導体結晶中では孤立水素原子の軽い同位体とみなす事ができる。特にその電子状態は小さな同位体補正(0.4%)を除けば水素のそれを完全にシミュレートするので、ミュオニウムの電子状態を研究することは水素のそれと全く等価である。さらにミュオニウムを使う大きなメリットとして、試料外から持ち込まれるミュオンの数は「不純物」濃度としては超希薄極限であるため、実際に水素を入れて信号を捕らえられるような濃度で問題になる水素同志の相互作用や固溶の不均一さといった問題から完全に自由である。この驚異的な感度はもちろんミュオンが放射性同位体であることによる。

■ 活動内容

本研究は、J-PARC物質生命実験施設のミュオンビームラインから供給される良質のミュオンビームを用いて行われた。さらに補足的なデータをスイスのPSI研究所にあるミュオンビームを用いて取得した。ミュオンは絶縁体中でしばしば、ミュオニウムを形成するが、そのイオン化の温度依存性、ミュオンと電子との結合の強さを示す超微細相互作用定数などを測定することで、絶縁体中での孤立水素の電子状態についての知見が得られる。近年酸化亜鉛等でミュオニウムのエネルギー準位が伝導帯の直ぐ下にあ

るいわゆる浅いドナーであることが明らかになってきているが、ルチル型二酸化チタンの場合も同様の性質を示すべく束縛されたミュオニウムの存在が確認された。ただしその電子構造は簡単な水素原子のようなものではなく、周辺の酸素原子との結合系として捉えられることが、詳細な角度依存性のデータから明らかになってきている。



ルチル型二酸化チタン中のミュオニウムの信号

代表発表者 下村 浩一郎 (しもむら こういちろう)
 所 属 高エネルギー加速器研究機構
 物質構造科学研究所・ミュオン科学研究施設
 問合せ先 〒305-0301 つくば市大穂 1-1
 TEL: 029-864-4706 FAX: 029-864-4623
 Koichiro.shimomura@kek.jp

■キーワード: (1) 光触媒
 (2) 水素
 (3) 電子状態
 ■共同研究者: 門野 良典 (かどのりょうすけ)
 所 属 高エネルギー加速器研究機構
 物質構造科学研究所
 ミュオン科学研究施設