

TiO₂(ルチル)中の水素同位体中心の電子構造

Electric Structure of hydrogen in rutile TiO₂

下村浩一郎¹、門野良典¹

1 KEK ミュオン

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。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、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。

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研究所にな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、ミュオンと電子そ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ゆる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。

