

## 6-6 物質分子科学研究領域

### 電子構造研究部門

横山利彦（教授）（2002年1月1日着任）

A-1) 専門領域：表面磁性，X線分光学

A-2) 研究課題：

- a) 雰囲気制御型硬X線光電子分光法の開発と固体高分子形燃料電池への応用
- b) X線吸収分光，X線磁気円二色性などを用いた磁性材料等の構造・物性解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) SPring-8 BL36XU で我々が開発した雰囲気制御型硬X線光電子分光装置により固体高分子形燃料電池（PEFC）電極触媒の *in situ* 測定を継続して行っている。2019年も引き続きPEFC電極の硫黄被毒の影響などについて取り組み、光電子分光法により様々な硫黄化学種の電位を計測することで、硫黄化学種が電極・電解質のいずれに存在するかを確定する新しい方法論を開発するなどの成果が上がった。
- b) 分子研シンクロトロン放射光施設 UVSOR-III BL4B を用いた高磁場極低温X線磁気円二色性法（XMCD）を共同利用公開し、様々な磁性薄膜の磁気特性検討について国内外との共同研究を広く実施している。2019年は、強磁性遷移金属窒化物超薄膜の構造・磁性の関する共同研究等を行った。また、X線自由電子レーザー SACLA を用いて、磁性薄膜の元素選択スピンドイナミクスの研究を推進した。さらに、磁性合金等の硬X線 XAFS 測定を行い、局所電子状態・幾何構造解析に関する研究も継続的に進めており、2019年は国際共同研究も実施した。

B-1) 学術論文

**Y. WAKISAKA, D. KIDO, H. UEHARA, Q. YUAN, F. E. FEITEN, S. MUKAI, S. TAKAKUSAGI, Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, T. WADA, M. UO, O. SEKIZAWA, T. URUGA, Y. IWASAWA and K. ASAKURA**, “Development of Surface Fluorescence X-Ray Absorption Fine Structure Spectroscopy Using a Laue-Type Monochromator,” *Chem. Rec.* **19**, 1157–1165 (2018).

**S. IKEMOTO, X. HUANG, S. MURATSUGU, S. NAGASE, T. KOITAYA, H. MATSUI, G. YOKOTA, T. SUDOH, A. HASHIMOTO, Y. TAN, S. YAMAMOTO, J. TANG, I. MATSUDA, J. YOSHINOBU, T. YOKOYAMA, S. KUSAKA, R. MATSUDA and M. TADA**, “Reversible Low-Temperature Redox Activity and Selective Oxidation Catalysis Derived from the Concerted Activation of Multiple Metal Species on Cr and Rh-Incorporated Ceria Catalysts,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 20868–20877 (2019).

**A. ISHIHARA, T. NAGAI, K. UKITA, M. ARAO, M. MATSUMOTO, L. YU, T. NAKAMURA, O. SEKIZAWA, Y. TAKAGI, K. MATSUZAWA, T. NAPPORN, S. MITSUSHIMA, T. URUGA, T. YOKOYAMA, Y. IWASAWA, H. IMAI and K. OTA**, “Emergence of Oxygen Reduction Activity in Zirconium Oxide-Based Compounds in Acidic Media: Creation of Active Sites for Oxygen Reduction Reaction,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 18150–18159 (2019).

**T. UCHIHASHI, S. YOSHIKAWA, E. MINAMITANI, S. WATANABE, Y. TAKAGI and T. YOKOYAMA**, “Persistent Superconductivity in Atomic Layer-Magnetic Molecule van der Waals Heterostructures: a Comparative Study,” *Mol. Syst. Des. Eng.* **4**, 511–518 (2019).

**T. HATTORI, T. MIYAMACHI, T. YOKOYAMA and F. KOMORI**, “Electronic and Magnetic Properties of the Fe<sub>2</sub>N Monolayer Film Tuned by Substrate Symmetry,” *J. Phys.: Condens. Matter* **31**, 255001 (6 pages) (2019).

**T. YOKOYAMA and S. CHAVEANGHONG**, “Anharmonicity in Elastic Constants and Extended X-Ray-Absorption Fine Structure Cumulants,” *Phys. Rev. Mater.* **3**, 033607 (10 pages) (2019).

**L. YU, Y. TAKAGI, T. NAKAMURA, T. SAKATA, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA, S. MASAOKA and T. YOKOYAMA**, “Operando Observation of Sulfur Species Poisoning Polymer Electrolyte Fuel Cell Studied by Near Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 603–611 (2019).

**T. KOITAYA, S. YAMAMOTO, Y. SHIOZAWA, Y. YOSHIKURA, M. HASEGAWA, J. TANG, K. TAKEUCHI, K. MUKAI, S. YOSHIMOTO, I. MATSUDA and J. YOSHINOBU**, “CO<sub>2</sub> Activation and Reaction on Zn-Deposited Cu Surfaces Studied by Ambient-Pressure X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *ACS Catal.* **9**, 4539–4550 (2019).

**J. TANG, S. YAMAMOTO, T. KOITAYA, A. YOSHIGOE, T. TOKUNAGA, K. MUKAI, I. MATSUDA and J. YOSHINOBU**, “Mass Transport in the PdCu Phase Structures during Hydrogen Adsorption and Absorption Studied by XPS under Hydrogen Atmosphere,” *Appl. Surf. Sci.* **480**, 419–426 (2019).

**J. TANG, S. YAMAMOTO, T. KOITAYA, Y. YOSHIKURA, K. MUKAI, S. YOSHIMOTO, I. MATSUDA and J. YOSHINOBU**, “Hydrogen Adsorption and Absorption on a Pd-Ag Alloy Surface Studied Using In-Situ X-Ray Photoelectron Spectroscopy under Ultrahigh Vacuum and Ambient Pressure,” *Appl. Surf. Sci.* **463**, 1161–1167 (2019).

B-3) 総説, 著書

横山利彦, 高木康多, 中村高大, 唯美津木, 宇留賀朋哉, 岩澤康裕, 「専用ビームラインの研究から～ BL36XU (電気通信大学) ～オペランド大気圧硬X線光電子分光による固体高分子形燃料電池の劣化・被毒機構追跡」, *SPRING-8/SACLA 利用者情報* **24**, 257–262 (2019).

**T. URUGA, M. TADA, O. SEKIZAWA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA**, “SPRING-8 BL36XU: Synchrotron Radiation X-Ray-Based Multi-Analytical Beamline for Polymer Electrolyte Fuel Cells under Operating Conditions,” *Chem. Rec.* **19**, 1444–1456 (2019).

横山利彦, 「燃料電池における反応を解明する」, 「放射光利用の手引——農水産・医療, エネルギー, 環境, 材料開発分野などへの応用——」, 東北放射光施設推進会議推進室編集, アグネ技術センター, p. 110–116 (2019).

横山利彦, 「大気圧環境下の試料を光電子分光法で評価する」, 「放射光利用の手引——農水産・医療, エネルギー, 環境, 材料開発分野などへの応用——」, 東北放射光施設推進会議推進室編集, アグネ技術センター, p. 257–263 (2019).

高木康多, 横山利彦, 岩澤康裕, 「雰囲気制御型硬X線光電子分光による固体高分子形燃料電池電極のオペランド計測」, *表面と真空* 2019 特集「オペランド計測による電池・燃料電池の動的過程」, **62**, 1–6 (2019).

**T. KOITAYA, S. YAMAMOTO, I. MATSUDA and J. YOSHINOBU**, “Surface Chemistry of Carbon Dioxide on Copper Model Catalysts Studied by Ambient-Pressure X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **17**, 169–178 (2019).

B-4) 招待講演

横山利彦, 「ミクロの世界をのぞく～光を使って～」, 唐津市民講座, 唐津, 2019年9月.

横山利彦, 「XAFS の展望」, 日本XAFS 研究会夏の学校 2019, 唐津, 2019年9月.

**T. YOKOYAMA**, “Thermal Expansion and Elasticity Softening of Alloys,” Invited Seminar in University of Science and Technology Beijing, Beijing (China), May 2019.

横山利彦, 「XAFS 基礎」, Nanotech CUPAL 第8回KEK 放射光利用技術入門コース, つくば, 2019年3月.

小坂谷貴典, 「軟X線雰囲気光電子分光を用いたメタン転換反応のオペランド観測」, 2019年日本表面真空学会学術講演会, つくば, 2019年10月.

**K. YAMAMOTO**, “Element specific observation of photo-induced magnetization dynamics by using x-ray free electron laser,” The Japan Society of Applied Physics, Sapporo (Japan), 2019年9月.

B-6) 受賞, 表彰

中川剛志, 日本物理学会第4回若手奨励賞 (2010).

高木康多, 日本物理学会第2回若手奨励賞 (2008).

中川剛志, 日本表面科学会第3回若手研究者部門講演奨励賞 (2006).

上村洋平, 第21回日本放射光学会奨励賞 (2017).

山本航平, 第46回応用物理学会講演奨励賞 (2019).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本XAFS 研究会会長 (2015–2020).

日本XAFS 研究会幹事 (2001–2007, 2010–2014).

日本放射光学会評議員 (2004–2005, 2008–2010, 2011–2012, 2014–2015, 2018–2019).

Executive Committee member of the International X-Ray Absorption Society (2003.7–2009.8).

学会の組織委員等

第14回XAFS 討論会実行委員長プログラム委員長 (2011).

XAFS 討論会プログラム委員 (1998–2019).

第15回X線吸収微細構造国際会議プログラム委員 (2011–2012).

日本放射光学会年会組織委員 (2005), プログラム委員 (2005, 2011, 2019, 2020).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省科学技術・学術審議会研究開発基盤部会委員 (2019–).

文部科学省科学技術・学術審議会基礎基盤研究部会研究基盤整備・高度化委員 (2017–2018).

文部科学省元素戦略と大型研究施設の連携に関するシンポジウム企画委員 (2017–2019).

日本学術振興会学術システム研究センター化学班専門研究員 (2010–2012).

文部科学省ナノテクノロジー・ネットワーク運営委員 (2007–2011).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2004–2005, 2008–2009, 2015–2016).

日本学術振興会科学研究補助金学術創成研究費評価委員 (2008).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員会実験課題審査部会委員 (2003–2009), 同化学材料分科会主査 (2005–2009).

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 機関代表者 (2012–2018).

名古屋工業大学人事部会外部委員 (2015).

広島大学放射光科学研究センター外部評価委員 (2017).

広島大学放射光科学研究センター運営委員 (2018–).

#### 学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集幹事 (編集委員長) (2005–2006).

日本放射光学会誌編集委員 (2004–2006).

#### 競争的資金等の領域長等

科学研究費補助金特定領域研究「分子スピン」総括班事務局 (2003–2006).

#### その他

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム「分子・物質合成プラットフォーム代表機関」業務主任者 (運営責任者) (2012–2021).

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム「分子・物質合成プラットフォーム実施機関」業務主任者 (実施責任者) (2012–2021).

文部科学省ナノテクノロジー・ネットワーク「中部地区ナノテク総合支援」業務主任者 (拠点長) (2007–2011).

本多記念会本多フロンティア賞選考委員 (2016, 2019).

本多記念会本多記念研究奨励賞選考委員 (2012, 2013, 2015).

公益信託分子科学研究奨励森野基金推薦委員 (2018–).

#### B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「物性科学概論」, e-learning, 2019年.

#### B-10) 競争的資金

科研費研究活動スタート支援, 「放射光X線を用いた強磁性体の光誘起磁性ダイナミクスの元素選択的観察」, 山本航平 (2019年–2021年).

科学技術振興機構さきかけ研究「革新的触媒の科学と創製」領域, 「オペランド観測に基づくメタン転換触媒および反応場の設計」, 小坂谷貴典 (2017年–2020年).

科研費若手研究(B), 「モデル合金触媒における動的表面構造変化と反応性に関する研究」, 小坂谷貴典 (2017年–2019年).

受託研究, 科学技術振興機構ACCEL 研究「自己組織化技術に立脚した革新的分子構造解析」, 「ナノテクノロジープラットフォーム・結晶スポンジ法による分子構造解析」, 横山利彦 (2017年–2018年).

受託研究, NEDO 固体高分子形燃料電池利用高度化技術開発事業「普及拡大化基盤技術開発」触媒・電解質・MEA 内部現象の高度に連成した解析, セル評価 (2015年–2017年), MEA 性能創出技術開発 (2018年–2019年), 横山利彦.

科研費基盤研究(A) (一般), 「微量元素高速時間分解X線吸収分光の開発と機能性材料への展開」, 横山利彦 (2015年–2017年).

受託研究, NEDO 固体高分子形燃料電池実用化推進技術開発「基盤技術開発」MEA 材料の構造・反応物質移動解析, 「時空間分解X線吸収微細構造 (XAFS) 等による触媒構造反応解析」, 横山利彦 (2011年–2014年).

科研費基盤研究(A), 「キラル光電子顕微鏡の開発」, 横山利彦 (2010年–2012年).

C) 研究活動の課題と展望

2002年1月着任以降、磁性薄膜の表面分子科学的制御と新しい磁気光学分光法の開発を主テーマとして、高磁場極低温X線磁気円二色性(UVSOR)や紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の発明、広域X線吸収微細構造(EXAFS)法と経路積分法によるインバー等磁性合金の熱膨張などで成果を上げてきた。2011年度から、SPring-8の超高輝度硬X線を利用した燃料電池のin situ 雰囲気制御型硬X線光電子分光の開発を行い、2017年度には完全大気圧での光電子分光観測に世界で初めて成功した。光電子分光は、燃料電池中の各構成成分の電位を電極なしに観測可能な有効手法であることを示し、今後もこれを中心課題に据えた研究を推進する。さらに、2013年度からは放射光やX線自由電子レーザーを用いた(超)高速時間分解X線吸収法の開発的研究を行ってきた。2017年11月に高木康多助教が転出、2018年4月に上村洋平助教が転出したが、2018年6月に小坂谷貴典助教が着任し、雰囲気制御光電子分光等を用いた表面化学反応機構解明を目標とした研究への展開、さらには、2019年4月に山本航平助教が着任し、SACLA/SPring-8を利用して、磁性薄膜のフェムト秒超高速スピンドYNAMICSおよびコヒーレントX線回折・共鳴X線磁気散乱による磁性薄膜イメージング研究を進めている。