

## 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)

小坂谷 貴典 (助教)

山本 航平 (助教)

中村 高大 (特任研究員)

CHAVEANGHONG, Suwilai (特任研究員)

石川 あずさ (事務支援員)

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* 測定を行っている。2020年前半には、兼ねてから開発を続けていた繰返し型時刻記録法に基づいた時間分解雰囲気制御型硬X線光電子分光法を論文として発表した。また、PEFC Pt合金電極の硫黄被毒の影響について取り組み成果が上がった。2019年度でNEDO事業が終了し、より一般的な触媒等について対象を拡げる計画である。
- 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。2020年前半は、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YNAMIXの研究を推進した。さらに、磁性合金等の硬X線 XAFS 解析と局所電子状態・幾何構造解析に関する研究も継続的に進めており、2020年前半に中国との国際共同研究と国内民間企業との共同研究を実施した。

B-1) 学術論文

**S. KITOU, T. MANJO, N. KATAYAMA, T. SHISHIDOU, T. ARIMA, Y. TAGUCHI, Y. TOKURA, T. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, K. SUGIMOTO and H. SAWA**, "Collapse of the Simple Localized  $3d_1$  Orbital Picture in Mott Insulator," *Phys. Rev. Res.* **2**, 033503 (8 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.2.0335032020

**T. NAKAMURA, Y. TAKAGI, S. CHAVEANGHONG, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA**, "Quick Operando Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy for Reaction Kinetic Measurements of Polymer Electrolyte Fuel Cells," *J. Phys. Chem. C* **124**, 17520–17527 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c04871

- K. KAWAGUCHI, T. MIYAMACHI, T. IIMORI, Y. TAKAHASHI, T. HATTORI, T. YOKOYAMA, M. KOTSUGI and F. KOMORI**, “Realizing Large Out-of-Plane Magnetic Anisotropy in L10-FeNi Films Grown by Nitrogen-Surfactant Epitaxy on Cu(001),” *Phys. Rev. Mater.* **4**, 054403 (7 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.4.054403
- Y. SONG, Q. SUN, T. YOKOYAMA, H. ZHU, Q. LI, R. HUANG, Y. REN, Q. HUANG, X. XING and J. CHEN**, “Transforming Thermal Expansion from Positive to Negative: The Case of Cubic Magnetic Compounds of (Zr,Nb)Fe<sub>2</sub>,” *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 1954–1961 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b03880
- K. YAMAMOTO, S. E. MOUSSAOUI, Y. HIRATA, S. YAMAMOTO, Y. KUBOTA, S. OWADA, M. YABASHI, T. SEKI, K. TAKANASHI, I. MATSUDA and H. WADATI**, “Element-Selectively Tracking Ultrafast Demagnetization Process in Co/Pt Multilayer Thin Films by the Resonant Magneto-Optical Kerr Effect,” *Appl. Phys. Lett.* **116**, 172406 (5 pages) (2020). DOI: 10.1063/5.0005393
- Y. SHIOZAWA, T. KOITAYA, K. MUKAI, S. YOSHIMOTO and J. YOSHINOBU**, “The Roles of Step-Site and Zinc in Surface Chemistry of Formic Acid on Clean and Zn-Modified Cu(111) and Cu(997) Surfaces Studied by HR-XPS, TPD, and IRAS,” *J. Chem. Phys.* **152**, 044703 (12 pages) (2020). DOI: 10.1063/1.5132979
- J. YOSHINOBU, K. MUKAI, H. UEDA, S. YOSHIMOTO, S. SHIMIZU, T. KOITAYA, H. NORITAKE, C.-C. LEE, T. OZAKI, A. FLEURENCE, R. FRIEDLEIN and Y. YAMADA-TAKAMURA**, “Formation of BN-Covered Silicene on ZrB<sub>2</sub>/Si(111) by Adsorption of NO and Thermal Processes,” *J. Chem. Phys.* **153**, 064702 (11 pages) (2020). DOI: 10.1063/5.0011175
- T. KOITAYA, A. ISHIKAWA, S. YOSHIMOTO and J. YOSHINOBU**, “C–H Bond Activation of Methane through Electronic Interaction with Pd(110),” *J. Phys. Chem. C* **125**, 1368–1377 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c09537
- Y. ISHII, K. YAMAMOTO, Y. YOKOYAMA, M. MIZUMAKI, H. NAKAO, T. ARIMA and Y. YAMASAKI**, “Soft X-Ray Vortex Beam detected by In-Line Holography,” *Phys. Rev. Appl.* **14**, 064069 (9 pages) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevApplied.14.064069
- S. CHAVEANGHONG, T. NAKAMURA, Y. TAKAGI, B. CAGNON, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA**, “Sulfur Poisoning Pt and PtCo Anode and Cathode Catalysts in Polymer Electrolyte Fuel Cells Studied by Operando Near Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 3866–3873 (2021). DOI: 10.1039/D0CP06020H
- Y. WAKISAKA, H. UEHARA, Q. YUAN, D. KIDO, T. WADA, M. UO, Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, Y. KAMEI, S. KURODA, A. OHIRA, S. TAKAKUSAGI and K. ASAKURA**, “Extracting the Local Electronic States of Pt Polycrystalline Films Surface under Electrochemical Conditions Using Polarization-Dependent Total Reflection Fluorescence X-Ray Absorption Fine Structure Spectroscopy,” *Electron Struct.* **2**, 044003 (2020). DOI: 10.1088/2516-1075/abd1ca

B-3) 総説, 著書

- T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA**, “Operando Observation of Sulfur Species that Poison Polymer Electrolyte Fuel Cell Studied by Near Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *SPring-8 Research Frontiers 2019*, 64–65 (2020).
- T. URUGA, M. TADA, O. SEKIZAWA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA**, “Status of Synchrotron Radiation X-Ray-Based Multi-Analytical Beamline BL36XU for Fuel Cell Electrocatalysis Research at SPring-8,” *Synchrotron Radiation News* **33**, 26–28 (2020).

山本航平,「第40回真空紫外・X線物理国際会議(VUVX2019)報告」,放射光 **32**, 333–335 (2019).

**Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, T. KATAYAMA, S. NOZAWA and K. ASAKURA**, “Tracking the Local Structure Change during the Photoabsorption Processes of Photocatalysts by the Ultrafast Pump-Probe XAFS Method,” *Appl. Sci.* **10**, 7818 (16 pages) (2020). DOI: 10.3390/app10217818

#### B-4) 招待講演

横山利彦,「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被毒硫黄状態追跡」,第126回触媒討論会「界面分子変換の機構と制御」,オンライン開催,2020年9月.

**T. YOKOYAMA**, “Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy on Polymer Electrolyte Fuel Cells under Working Conditions,” APXPS2020 (7<sup>th</sup> Annual Ambient-Pressure X-Ray Photoemission Spectroscopy Workshop 2020), Pohang Accelerator Laboratory, Korea (online), December 2020.

横山利彦,「文科省ナノテクノロジープラットフォームの現状と次期マテリアルDXプラットフォームへの期待」,計算科学研究センター・ナノテクノロジープラットフォーム事業合同ワークショップ——データ科学に基づく理論・計算化学と実験科学の協働を目指して——,分子科学研究所,2021年1月.

**K. YAMAMOTO**, “Photo-Induced Magnetization Dynamics Observed with Synchrotron Radiation and Free Electron Lasers,” Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment 2020 (LSC2020), online, March 2020.

小坂谷貴典,「軟X線雰囲気光電子分光を用いた不均一触媒反応のオペランド分光測定」,ISSPワークショップ「次世代放射光へのイノベーション」,東京大学物性研究所,柏,2020年2月.

#### 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).

日本放射光学会評議員(2004–2005, 2008–2010, 2011–2012, 2014–2015, 2018–2019, 2020–2021).

学会の組織委員等

XAFS 討論会プログラム委員(1998–2020).

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).

広島大学放射光科学研究センター運営委員(2018–2019).

広島大学放射光科学研究センター協議会委員(2020–).

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).

本多記念会本多フロンティア賞選考委員(2016, 2019).

公益信託分子科学研究奨励森野基金推薦委員(2018–).

#### 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がけ研究「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-2021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, 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.

#### B-11) 産学連携

共同研究, 新報国製鉄(株),「インバー合金特性」,横山利彦(2020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イナミクス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。