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）

小板谷　貴典（助教）
山本　航平（助教）
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不均一触媒その場観察への応用

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。2021 年前半には，PEFC Pt 合金電極の能劣化試験後の硫黄被毒状態に関する雰囲気制御型硬Ｘ線光電子分光法を論文として発表した。NEDO 事業が終了し，より一般的な不均一触媒等について対象を拡げて研究を遂行しているところである。

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。また，磁性薄膜の原子層毎の磁性を解析するべく軟Ｘ線反射率測定技術開発を行っている。

B-1)　学術論文

A. KOIDE, Y. UEMURA, D. KIDO, Y. WAKISAKA, S. TAKAKUSAGI, B. OHTANI, Y. NIWA, S. NOZAWA, K. ICHIYANAGI, R. FUKAYA, S.-I. ADACHI, T. KATAYAMA, T. TOGASHI, S. OWADA, M. YABASHI, Y. YAMAMOTO, M. KATAYAMA, K. HATADA, T. YOKOYAMA and K. ASAKURA, "Photoinduced Anisotropic Distortion as the Electron Trapping Site of Tungsten Trioxide by Ultrafast W L1-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy with Full Potential Multiple Scattering Calculations," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22(5)**, 2615–2621 (2020). DOI: 10.1039/c9cp01332f

Y. UEMURA, A. S. M. ISMAIL, S. H. PARK, S. KWON, M. KIM, Y. NIWA, H. WADATI, H. ELNAGGAR, F. FRATI, T. HAARMAN, N. HÖPPEL, N. HUSE, Y. HIRATA, Y. ZHANG, K. YAMAGAMI, S. YAMAMOTO, I. MATSUDA, T. KATAYAMA, T. TOGASHI, S. OWADA, M. YABASHI, U. HALISDEMIR, G. KOSTER, T. YOKOYAMA, B. M. WECKHUYSEN and F. M. F. DE GROOT, "Femtosecond Charge Density Modulations in Photoexcited $CuWO_4$," *J. Phys. Chem. C* **125(13)**, 7329–7336 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c10525

S. IKEMOTO, S. MURATSUGU, T. KOITAYA and M. TADA, "Chromium Oxides as Structural Modulators of Rhodium Dispersion on Ceria to Generate Active Sites for NO Reduction," *ACS Catal.* **12**, 431–441 (2022). DOI: 10.1021/acscatal.1c03807

T. SUZUKI, Y. KUBOTA, A. NAKAMURA, T. SHIMOJIMA, K. TAKUBO, S. ITO, K. YAMAMOTO, S. MICHIMAE, H. SATO, H. HIRAMATSU, H. HOSONO, T. TOGASHI, M. YABASHI, H. WADATI, I. MATSUDA, S. SHIN and K. OKAZAKI, "Ultrafast Optical Stress on $BaFe_2As_2$," *Phys. Rev. Res.* **3**, 033222 (12 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.033222.

K. TAKUBO, H. MAN, S. NAKATSUJI, K. YAMAMOTO, Y. ZHANG, Y. HIRATA, H. WADATI, A. YASUI, T. MIZOKAWA and D. I. KHOMSKII, "Spin-Orbital Liquid in $Ba_3CuSb_2O_9$ Stabilized by Oxygen Holes," *Phys. Rev. Mater.* **5**, 075002 (7 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.075002

B-3) 総説，著書

T. YOKOYAMA, "Thermal Expansion of FeNi Invar and Zinc-Blende CdTe from the View Point of Local Structure," *Microstructures* **1(1)**, 2021003 (22 pages) (2021). DOI: 10.20517/microstructures.2021.001

B-4) 招待講演

横山利彦,「分子・物質合成プラットフォーム 10年間の成果」, 第 20回ナノテクノロジー総合シンポジウム, 東京ビッグサイト, 2022年 1月.

T. YOKOYAMA, "Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy on Polymer Electrolyte Fuel Cells under Working Conditions," MRM2021, Yokohama (Japan) (online), December 2021.

T. YOKOYAMA, "*Operando* observation of working polymer electrolyte fuel cell studied by ambient pressure hard X-ray photoelectron spectroscopy," The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

T. YOKOYAMA, "Precise EXAFS approaches to invar alloys and negative thermal expansions," Global XAS Journal Club Europe and Asia-Oceania, The International X-ray Absorption Society, online, June 2021.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会会長 (2021.10–2023.9).

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 (1998–2021).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

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).

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ「マテリアルの高度循環のための技術　スポーク機関」業務主任者 (2021–2030).

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ「運営機構横断領域（物質・材料合成）」業務主任者 (2022–2030).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「液体を反応場とした動的オペランド硬X線光電子分光システムの開発」（代表；横山利彦），小板谷貴典（研究分担者）, 山本航平（研究分担者）(2021年–2023年).

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」, 小板谷貴典 (2017年–2021年).

科研費若手研究,「共鳴X線磁気反射率測定による磁性体多層膜の内部構造の解明」, 山本航平 (2021年–2024年).

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–2021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等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月に小板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ダ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。