

## 2024 年度関東支部講演大会 ポスター講演プログラム

コアタイム: 14:30~15:10(奇数番号)、15:10~15:50(偶数番号)

- P-01 水分解光触媒における酸素発生助触媒への電荷移動の励起波長依存性 (榎本晃大/慶應義塾大学大学院 理工学研究科 基礎理工学専攻)
- P-02 トポケミカルフッ化反応を用いた SrCeF<sub>5</sub> 薄膜の作製とフッ化物イオン伝導性 (萩原 美紅/お茶の水女子大学 近松研究室)
- P-03 SrCeO<sub>3</sub> 薄膜のトポケミカルフッ化反応における結晶構造変化 (中野歩花/お茶の水女子大学 近松研究室)
- P-04 赤外散乱走査型近接場光学顕微鏡を用いた金属有機構造体薄膜の結晶性評価 (松本征大/慶應義塾大学大学院)
- P-05 反応温度の違いによる鉄酸フッ化ビスマス薄膜の結晶構造と化学組成 (佐野瑞歩/お茶の水女子大学)
- P-06 カーボンナノチューブを用いた温泉水中の B, Si, As の吸着除去 (犬塚理奈/東京理科大学 理学研究科 物理学専攻)
- P-07 *In-situ* SERS による CO<sub>2</sub> 光電極上におけるプロトドナーの直接観測 (眞鍋龍ノ介/慶大院理工)
- P-08 合金クラスター触媒の探索に向けた機械学習ポテンシャルの作成 (宮本 健太郎/東京大学, マテリアル工学専攻, 渡邊研究室)
- P-09 組成の違いによる鉄酸フッ化ビスマス薄膜の物性および電子状態変化 (上垣外 明子/お茶大)
- P-10 ウォーターブリッジ現象の分子動力学計算 (日原健/東京理科大学理学研究科物理学専攻)
- P-11 Pd ナノクラスター吸着によるカーボンナノチューブの熱電性能変化 (吉田朱里/東京理科大学大学院理学研究科物理学専攻)
- P-12 CNT の電流ゆらぎの高周波領域に現れる非マルコフ性の解明 (秋元来夢/東京理科大学大学院)
- P-13 Spin-polarized electronic states of (Bi, Pb)/Ge(111) studied by Spin-resolved ARPES (Lars Konermann/Waseda University)
- P-14 大面積ホウ化水素シートの分光評価 (山口 寛月/東京大学物性研究所)
- P-15 Millimeter-scale growth of a YCrB<sub>4</sub> single-crystal and observation of the metallic boron state at the surface (Zhang Xiaoni /東京大学)
- P-16 Cu(111)表面におけるアセチレン脱水素化反応の単一分子レベル観察 (舘田匠馬/東京大学)
- P-17 Au(111)表面への Pd 蒸着と表面構造の実空間観測 (Umi Shin/東京大学金研究室)
- P-18 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)による Pb/Ge(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$  構造の構造解析 (孝橋麟太郎/早稲田大学先進理工学研究科物理学及応用物理学専攻)

- P-19 バイポーラ電気分解による金のアルカリハライド水溶液への抽出 (吉澤 深玖/工学院大学)
- P-20 Au(111)への銀蒸着により作製した表面の原子レベル観察 (兒玉寛俊/東京大学・理化学研究所)
- P-21 ミクロンサイズの(6,5)単層カーボンナノチューブバイオセンサー (立川佳樹/東京理科大学大学院 理学研究科 物理学専攻 梅村研究室)
- P-22 2種のカーボンブラック試料のナノスケール構造と化学特性の比較評価 (有吉悠人/慶應義塾大学大学院)
- P-23 NV センター電子スピンとダイヤモンド表面上の電子スピンの二重共鳴計測 (関口顕/早大理工)
- P-24 水素発生反応触媒に向けたハイエントロピー合金材料の組成最適化手法開発 (大塚耕希/東京大学)
- P-25 常温大気圧下でのカーボンナノチューブのナノメートルラマンイメージングと新規選択則 (藤田優人/慶應義塾大学理工学研究科基礎理工学専攻)
- P-26 走査トンネル顕微鏡を用いた銀表面上における CO<sub>2</sub> の吸着状態の実空間観測 (小粥 徹/東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻)
- P-101 鉛蓄電池の電解液におけるウルトラファインバブルの作用 (尾木佑輝/東京都立科学技術高等学校)
- P-102 Electronic Structure Modification of Rutile TiO<sub>2</sub> (100) by Hydrogen Ion Irradiation (Muhammad Irfandi/東京大学生産技術研究所)
- P-103 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> への水素の吸着・吸蔵とスピン注入に関する研究 (大橋悠生/東京大学)
- P-104 非円筒真空ダクト内面への NEG コーティング (山本将博/高エネルギー加速器研究機構)
- P-105 超伝導体 C<sub>6</sub>CaC<sub>6</sub> における基板誘起 van Hove 特異性 (一ノ倉聖/東京工業大学)
- P-106 表面部分窒化高純度チタン蒸着膜の排気速度測定と放射光ビームラインへの応用 (菊地貴司/高エネルギー加速器研究機構)
- P-107 HIDEN ANALYTICAL 社昇温脱離ガス分析計及び残留ガス分析計 (渡邊泰章/イノベーションサイエンス株式会社)
- P-108 無酸素 Pd/Ti 非蒸発型ゲッター (NEG) を蒸着した溝加工付き ICF フランジの排気性能と再活性性能評価 (狩野 悠/入江工研株式会社)
- P-109 低エネルギー逆光電子分光法による有機半導体中の非占有準位の解析 (塚崎 貴司/アドキャップパキウムテクノロジー株式会社)
- P-110 表面分析装置への使用に最適な超高真空対応 NEG ポンプである CapaciTorr/NEXTorr ポンプシリーズのご紹介 (戸田道夫/サエス・ゲッターズ・エス・ピー・エー 日本支店)

## 水分解光触媒における助触媒への電荷移動の励起波長依存性

慶應義塾大学 ○榎本晃大, 豊島遼, 王梓, 近藤寛

水分解光触媒の量子効率を改善する手段として、助触媒による電荷分離の向上が挙げられる。特に、酸素発生(OER)は律速反応であり、OER 助触媒への効率的な正孔移動が重要となる。CoOOH は正孔を抽出する OER 助触媒として注目されており、Rh@Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 水素発生助触媒と SrTiO<sub>3</sub>:Al 担体と組み合わせた触媒は、紫外光照射下で極めて高い量子効率を示すことが確認された。<sup>1)</sup>しかし、この担体は紫外光のみを吸収するため、可視光励起電荷の CoOOH への移動特性と、それが活性に及ぼす影響は検討されていない。そこで、本研究では紫外光励起、可視光励起の両方が可能な担体を用い、CoOOH 表面への電荷移動の励起波長依存性を調べた。

まず、適当な担体として SrTiO<sub>3</sub>:Rh, Sb<sup>2)</sup>を用い、Rh@Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-CoOOH/SrTiO<sub>3</sub>:Rh, Sb を作製した。次いで、表面敏感に酸化還元状態を分析することができる転換電子収量軟 X 線吸収分光(CEY-SXAS)<sup>3)</sup>により、Co-L 端のその場測定(飽和水蒸気圧, 25 Torr)を紫外光、可視光照射下それぞれについて行った。質量分析(MS)により活性が確認された紫外光照射下では、Co-L3 端のメインピークが時間経過に伴い高エネルギー側へシフトしたことから CoOOH の酸化が確認され、光励起正孔の移動が認められた。一方で、MS による活性が確認されなかった可視光照射下では、同様のピークが時間経過に伴い低エネルギー側へのシフトしたことから CoOOH の還元が確認され、光励起電子の移動が認められた。以上のことから、励起波長に依存して CoOOH への電荷移動が変化することが確認された。また、CoOOH への正孔移動と活性の間に相関関係があることが確認された。特に、活性が確認されなかった可視光照射下においては、OER 助触媒への望ましくない電子移動が確認されており、その原因は励起波長の違いに基づく、光励起電荷の持つエネルギーの低さにあると考えられる。

### 参考文献

- 1) Takata, T.; et al. *Nature* **2020**, *581*, 411-414.
- 2) Niishiro, R.; et al. *Appl. Catal. B*. **2014**, *150*, 187-196.
- 3) Shimizu, H.; et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, *24*, 2988-2996.

## トポケミカル反応による SrCeF<sub>5</sub> 薄膜の作製とフッ化物イオン伝導性

お茶大理<sup>1</sup>, 芝浦工大理工<sup>2</sup>, 北大電子研<sup>3</sup>, 都立大理<sup>4</sup>

○萩原美紅<sup>1</sup>, 中野歩花<sup>1</sup>, 福士英里香<sup>2</sup>, 大口裕之<sup>2</sup>, 片山司<sup>3</sup>, 廣瀬靖<sup>4</sup>, 近松彰<sup>1</sup>

蓄電装置が欠かせない現代社会において、最も主流の電池材料であるリチウム二次電池の資源の枯渇が問題視されており、新しい二次電池の開発需要が高まっている。様々な代替電池が提案される中、広い電位窓と高いエネルギー密度を持ち、埋蔵量が豊富である「フッ化物イオン」を電荷移動イオンとして利用したフッ化物イオン電池が注目されている<sup>1)</sup>。本研究では、高プロトン伝導体として知られるセリウム酸化物 SrCeO<sub>3</sub><sup>2)</sup>に着目し、この薄膜を前駆体としてトポケミカルフッ化反応により SrCeF<sub>5</sub> 薄膜を作製し、そのフッ化物イオン伝導性を調べることで電池材料としての有用性を検討した。

様々に温度条件を変えてフッ化反応させた SrCeO<sub>3</sub> 薄膜の X 線回折測定を行った結果、フッ化時間 1 時間では温度が 200 °C まではペロブスカイト構造であったのに対し、350 °C 以上に上げると蛍石構造の薄膜が得られることが分かった。さらに X 線光電子分光とエネルギー分散型 X 線分光による化学組成解析から、ペロブスカイト構造の薄膜はフッ化が進行せず SrCeO<sub>3</sub> 薄膜のままであったのが、蛍石構造の薄膜では還元的フッ化が進行して SrCeF<sub>5</sub> に変化したことが明らかになった。次に、作製した SrCeF<sub>5</sub> 薄膜の交流インピーダンス測定を 200~400 °C の範囲で行い、この温度範囲で半円状のナイキストプロットが得られることを確認した。解析の結果、SrCeF<sub>5</sub> 薄膜のフッ化物イオン伝導度は、既知のフッ化物イオン伝導体<sup>3)</sup>と比較しても十分高いことが示された。以上の結果より、SrCeF<sub>5</sub> 薄膜がフッ化物イオン電池の固体電解質材料となる可能性が示唆された。

### 参考文献

- 1) M. Nowroozi *et al.*, *J. Mater. Chem. A* **9**, 5980 (2021).
- 2) G. C. Mather and M. S. Islam, *Chem. Mater.* **17**, 1736 (2005).
- 3) N. I. Sorokin and B. P. Sobolev, *Crystallogr. Reports* **52**, 842 (2007).

## SrCeO<sub>3</sub> 薄膜のトポケミカルフッ化反応における結晶構造変化

お茶大理<sup>1</sup>, 北大電子研<sup>2</sup>, 都立大理<sup>3</sup>

○中野歩花<sup>1</sup>, 萩原美紅<sup>1</sup>, 片山司<sup>2</sup>, 廣瀬靖<sup>3</sup>, 近松彰<sup>1</sup>

遷移金属酸化物へのフッ素ドーピングは、電気・磁気・光・イオン伝導などの新たな物性を見出す上で有用なアプローチである。その中でも、フッ素樹脂をフッ素源としたトポケミカルフッ化反応は、他のフッ素試薬より安全性が高く、還元的フッ化反応が可能であることから注目されている<sup>1)</sup>。本研究では、BaBiO<sub>3</sub> 薄膜のトポケミカルフッ化反応の先行研究<sup>2)</sup>をもとに、結晶構造やカチオン価数の類似性から SrCeO<sub>3</sub> 薄膜でもフッ素ドーピングが可能であると考え、ポリフッ化ビニリデンをフッ素源として SrCeO<sub>3</sub> 薄膜のトポケミカルフッ化反応を行った。反応温度や反応時間を変えることで、結晶構造変化や反応の様子を調べた。

1 時間でフッ化した SrCeO<sub>3</sub> 薄膜の X 線回折測定の結果から、200 °C までは薄膜のピーク位置が前駆体と変化せず、ペロブスカイト構造を保っていた。250 °C、300 °C の反応では、それまでのピークに加え低角側に新たなピークが出現した。このピークは蛍石構造を示しており、250–300 °C 付近では構造が混合している様子が確認された。350 °C 以上では、ペロブスカイト構造のピークは消失し、完全に蛍石構造へと変化した。また、250 °C でフッ化した薄膜において、深さ分解 X 線光電子分光測定により、Ce 価数が界面付近では Ce<sup>3+</sup>、表面付近では前駆体と同じ Ce<sup>4+</sup> であることが確認された。またエネルギー分散型 X 線分光法測定より、混合構造での薄膜中のフッ素は界面近傍に多く存在することが観測された。以上の結果から、SrCeO<sub>3</sub> 薄膜では、低温かつ短時間でフッ化が可能であるとともに、フッ素の導入は表面からではなく基板と薄膜との界面から進行することが明らかになった。

### 参考文献

- 1) H. Yamamoto *et. al.*, *Inorg. Chem.* **62**, 2116 (2023).
- 2) A. Chikamatsu *et. al.*, *ACS Omega* **3**, 13141 (2018).

## 赤外散乱走査型近接場光学顕微鏡を用いた金属有機構造体薄膜の結晶性評価

慶應義塾大学大学院理工学研究科<sup>1</sup>

○松本征大<sup>1</sup>, 清水智子<sup>1</sup>

金属有機構造体(MOF)薄膜は金属イオンと有機配位子からなる多孔性材料であり, ガスセンサ, 汚染物質フィルターなど様々な応用が期待されている. 材料の機能創出にはナノレベルの構造の精密制御が必須であり, そのためには実用環境におけるナノスケールの構造評価が欠かせない. これまでに MOF 薄膜のナノスケールでの化学組成評価は実現されておらず, ナノレベルでの結晶性や欠陥の有無, ガス吸着に伴うフレームワークの構造変化や吸着サイトの分布が明らかになっていない. 本研究では, これらを明らかにする評価技術として赤外散乱走査型近接場光学顕微鏡 (IR s-SNOM)に着目し, MOF 薄膜に対する IR s-SNOM の有用性の検討と薄膜のナノレベルでの結晶性評価を行った. 薄膜の作製には先行研究[1]と同様に Langmuir-Trough 装置を使用した. メタノールとクロロホルムの混合溶媒に 5, 10, 15, 20-tetrakis(4-carboxyphenyl) porphyrinato-cobalt(II) (CoTCPP; Fig. 1(a))とピリジンを溶解させ, 展開液を作製した. 塩化銅(II)水溶液の液相上に展開液を滴下して MOF 薄膜 NAFS-1 を作製し, Si 基板に転写した. 作製した試料について, AFM 像 (Fig. 1(b)) 中の各点における IR s-SNOM スペクトル (Fig. 1(c)) を取得した. 取得した IR s-SNOM スペクトルは FT-IR スペクトルとピーク波数が一致した. このことは MOF 薄膜に対する IR s-SNOM の有用性を示す. また, 全てのスペクトルで  $1300\text{ cm}^{-1}$  および  $1700\text{ cm}^{-1}$  に欠陥を示すピークが観測され, 微結晶が集まり薄膜が形成されていることが示唆された.

### 参考文献

1) R. Makiura et al., Nature Mater. 9, 565 (2010).

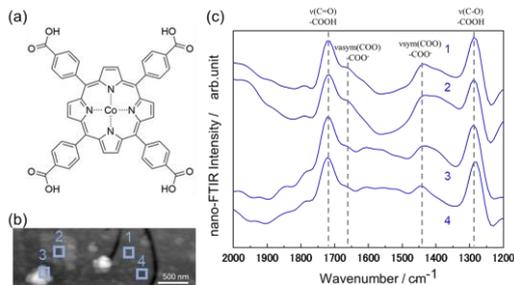


Fig. 1 (a) Chemical structure of CoTCPP. (b) AFM image of the NAFS-1 film. (c) IR s-SNOM spectra of the NAFS-1. Spectra are numbered according to the locations indicated in the AFM image.

## 反応温度の違いによる鉄酸フッ化ビスマス薄膜の結晶構造と化学組成

お茶大理<sup>1</sup>, 北大電子研<sup>2</sup>, 都立大理<sup>3</sup>

○佐野瑞歩<sup>1</sup>, 上垣外明子<sup>1</sup>, 片山司<sup>2</sup>, 廣瀬靖<sup>3</sup>, 近松彰<sup>1</sup>

近年, 遷移金属酸化物薄膜を簡便にフッ化する方法として, フッ素樹脂であるポリフッ化ビニリデン(PVDF)をフッ素源としたトポケミカルフッ化反応が注目されている<sup>1)</sup>. 薄膜における PVDF を用いたトポケミカルフッ化反応では, 金属フッ化物などの不純物相を形成することなく, 単相の遷移金属酸フッ化物を合成できる. さらに, PVDF は室温, 空气中で安定であり, 還元試薬としても機能する. これまで我々は, 室温マルチフェロイック特性を示す鉄酸ビスマスに着目し,  $\text{Bi}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{FeO}_{2.9}$  エピタキシャル薄膜に PVDF を用いたフッ化反応において, 反応温度の違いにより薄膜の結晶構造を制御できることを明らかにした<sup>2)</sup>. 本研究では, 反応温度の違いによる結晶構造と化学組成の関係を調べた.

X線回折の結果では, 250 °C, 300 °Cではペロブスカイト構造を保ったまま c 軸長が伸長すること, 350 °Cでは蛍石構造になることが確かめられた. また, エネルギー分散型 X線分析の結果から, 250 °C, 300 °Cでフッ化したペロブスカイト構造の薄膜では反応温度の上昇に伴ってフッ素量が微増した一方で, 350 °Cでフッ化した蛍石構造の薄膜ではフッ素量が大きく増加したとともに, 酸素の存在も一定量観測された. これらの結果から, 350 °Cでフッ化させた薄膜では蛍石構造の四面体サイトにフッ素が入ったのと同時に, 酸素も蛍石構造の中に存在していることが示された.

発表では, フッ化温度を変えたときのバンドギャップと結晶構造と化学組成の関係についても議論する予定である.

### 参考文献

- 1) T. Katayama *et al.*, J. Mater. Chem. C **2**, 5350 (2014).
- 2) 佐野 瑞歩ら, 第 70 回応用物理学会春季学術講演会, 2023 年 3 月, 16p-PA09-2.

## カーボンナノチューブを用いた温泉水中の B, Si, As の吸着除去

東京理科大学 理学研究科 物理学専攻

○犬塚理奈, 櫻井龍一郎, 入田賢, 山本貴博

2001 年に制定された水質汚濁防止法[1]は, 温泉施設から排出される温泉水にも適用され, 温泉水中に含まれるホウ素(B)が特に大きな問題となっている。また, 温泉を飲食に利用する際には, 食品衛生法[2]により, 特にヒ素(As)などを基準値以内に抑える必要がある。さらに, 温泉中のケイ素(Si)などの成分による配管の詰まりも問題となっている。以上より, 排水時に温泉水中の一部元素の除去が求められる。我々のグループでは, カーボンナノチューブ (CNT) が様々な元素を吸着するメカニズムについて理論的な研究を進めてきた。そこで, 本研究では, 温泉水に含まれる元素のうち, B, As, Si に着目して, それらの CNT への吸着について理論・シミュレーションならびに実験的研究を行なった。

シミュレーションでは, 密度汎関数理論を基礎とした第一原理計算を用いて, CNT に B, As, Si 化合物が吸着したときのエネルギーを計算した結果, CNT 中の原子空孔に安定的に吸着することが明らかとなった。一方, 実験では, 温泉サンプルに CNT を浸漬させ, 誘導結合プラズマ質量分析装置(ICP-MS)を用いて, 漬前前後で B と Si の濃度を測定した。その結果, CNT 浸漬後に B および Si の濃度の減少が確認された。また, 温泉中の他元素の影響を考慮し, 対象元素のみの溶液を用いて実験を行った。Si に関しては温泉中の方が減少率は大きかったのに対して, B に関しては温泉中の方が減少率は小さかった。本研究では, CNT の吸着材料としての性能を最大限に引出し, 温泉が抱える問題解決への可能性を示す。

### 参考文献

[1] Water Pollution Control Law related materials, Ministry of the Environment, Japan.

[2] Specifications and Standards for Foods, Additives, etc., Ministry of Health, Labour and Welfare, Japan.

## In-situ SERS による CO<sub>2</sub> 光電極上におけるプロトドナーの直接観測

慶大院理工<sup>1</sup> ○眞鍋龍ノ介<sup>1</sup>, 豊島遼<sup>1</sup>, 近藤寛<sup>1</sup>

二酸化炭素 (CO<sub>2</sub>) の資源化を目的として、光電極触媒を用いた光電気化学的 CO<sub>2</sub> 還元が注目されている。p 型窒化ガリウム (p-GaN) に金ナノ粒子 (AuNPs) を担持した Au/p-GaN 光電極触媒は、AuNPs のプラズモン共鳴により可視光を吸収し、その特異な電子構造によって CO<sub>2</sub> 還元の高い活性を示す<sup>1)</sup>。CO<sub>2</sub> 還元にはプロトドナーが必要であるが、その構造や化学状態は明らかでない。本研究では電気化学環境下における *in-situ* 表面増強ラマン分光 (*in-situ* SERS) により AuNPs 近傍に存在するプロトドナーの直接観測を試みた。

Au/p-GaN 触媒は、先行研究を参考に作製した<sup>1)</sup>。紫外可視吸収分光から、作製した Au/p-GaN 触媒は AuNPs のプラズモン共鳴により 575 nm に吸収極大を示した。*In-situ* SERS は定電圧条件で行った。Au/p-GaN 触媒を作用極、Ag/AgCl 電極を参照極とし、溶液は CO<sub>2</sub> 飽和 NaHCO<sub>3</sub> 0.5 M とした。

SERS スペクトルの電位応答から、AuNPs 表面近傍の炭酸水素イオン (HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>) や炭酸イオン (CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>) の炭酸化学種の存在を確認した (Fig.1)。また、CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> のピーク面積変化より、CO<sub>2</sub> 還元の活性が最大となる -1.3 V にて CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> の存在量が最大になった。これは Au/p-GaN 触媒上での CO<sub>2</sub> 還元において、HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> がプロトドナーとして作用した後に、CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> へと変化するためであると考えられる (CO<sub>2</sub> + 2e<sup>-</sup> + HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> → CO + CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> + OH<sup>-</sup>)<sup>2)</sup>。

### 参考文献

- 1) Duchene, S, J.; et al. *Nano. Lett.* **2018**, *18*, 2545-2550.
- 2) Chen, Y.; et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 19969-19972.

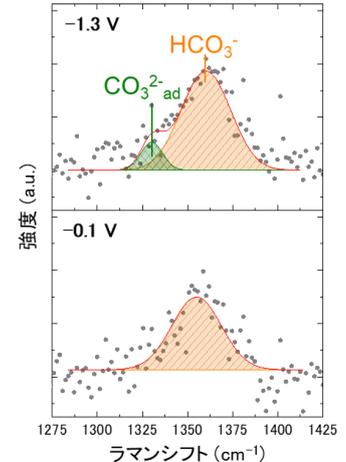


Fig.1 SERS スペクトル

## 合金クラスター触媒の探索に向けた機械学習ポテンシャルの作成

東大工<sup>1</sup>      ○宮本健太郎<sup>1</sup>, 清水康司<sup>1</sup>, 渡邊聡<sup>1</sup>

近年優れた特性を示す多成分系高濃度合金としてハイエントロピー合金(HEA) [1]が注目されている。他方、HEAは組成や配置の数が膨大であるため、所望の目的に適したHEAを密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算によって網羅的に探索するのは現実的でない。そこで我々は、HEAの触媒への応用に着目し、予測精度と計算コストの両立が期待できる機械学習ポテンシャルを用いて触媒性能の高いHEAを探索する手法を開発する研究を進めている。

本講演では、二酸化炭素の還元反応の触媒活性が高いHEAの探索を試みた結果を報告する。この反応の活性と選択性は一酸化炭素(CO)分子および水素(H)原子の吸着エネルギーと高い相関関係があるとの報告[2]を踏まえ、これらの吸着エネルギーを予測する機械学習ポテンシャルを作成した。機械学習ポテンシャル作成の教師データには、Co、Ni、Cu、Rh、Ag、Ir、Pt、Auの9原子種中の最大5原子種を含むバルク結晶(スーパーセル中の原子数8個)および最大4原子種を含む八面体形状のクラスター(原子数19個)において原子配置の異なる多様なモデルのDFT計算結果を用いた。ここでクラスターに対する計算結果を含めたのは、平坦平面だけでなく凹凸のある表面上での触媒活性についても予測したかったからである。これらの教師データとグラフニューラルネットワークベースのアーキテクチャを用いて機械学習ポテンシャルを作成したところ、2元および3元合金モデルの教師データから4元・5元合金モデルのエネルギーを二乗平均平方根誤差(RMSE)約20meV/atomの精度で予測することができた。また、2元・3元合金の八面体形状クラスター(原子数19個)上の水素原子吸着エネルギーについてもRMSE0.20eVの精度で予測することができた。

本研究は、JST e-ASIA 共同研究プログラムの支援を受けたものである。

### 参考文献

- 1) M.-H. Tsai and J.-W. Yeh, Mater. Res. Lett. 2 (2014) 107.
- 2) J. K. Pedersen, et al., ACS Catal. 10 (2020) 2169.

## 組成の違いによる鉄酸フッ化ビスマス薄膜の物性および電子状態変化

お茶大理<sup>1</sup>, 東大理<sup>2</sup>, 東工大フロ研<sup>3</sup>, 日大理工<sup>4</sup>, 東北大多元研<sup>5</sup>, 北大電子研<sup>6</sup>, 都立大理<sup>7</sup>

○上垣外明子<sup>1</sup>, 佐野瑞歩<sup>1</sup>, 若山悠有佑<sup>2</sup>, 重松圭<sup>3</sup>, 出村郷志<sup>4</sup>, 組頭広志<sup>5</sup>,  
片山司<sup>6</sup>, 廣瀬靖<sup>7</sup>, 近松彰<sup>1</sup>

近年、バリウムドープ鉄酸ビスマス  $\text{Bi}_{1-x}\text{Ba}_x\text{FeO}_{3-x/2}$  の酸素の一部をフッ素で置換した酸フッ化物多結晶体が合成され、 $x = 0.2$  の酸フッ化物が Néel 温度が 770 K 以上の G 型反強磁性体であることが報告された<sup>1)</sup>。また、第一原理計算より、 $x = 0.25$  の鉄酸フッ化ビスマスがマルチフェロイック特性を示すことが予測されている<sup>2)</sup>。しかし実際に合成された多結晶体には不純物相が存在する上リーク電流も大きく、この多結晶のままでは誘電特性を測定することはできない。そこで本研究では、 $\text{Bi}_{1-x}\text{Ba}_x\text{FeO}_{3-x/2}$  ( $x = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ ) 単結晶薄膜をトポケミカルフッ化反応によりフッ化し、単結晶薄膜の状態で鉄酸フッ化ビスマス薄膜を作製することで誘電測定を可能にし、誘電特性と電子分光法による電子状態を評価した。

はじめに X 線回折測定を行い、いずれの薄膜もペロブスカイト型構造をもつエピタキシャル薄膜であることを確認した。次に X 線光電子分光法 (XPS) 測定とエネルギー分散型 X 線分光法測定を行い、 $x$  の値によってフッ化後の薄膜のフッ素含有量が異なることを確かめた。誘電測定では、 $x = 0.2, 0.3$  の酸フッ化物薄膜が室温で強誘電性を示すことが明らかになった。特に  $x = 0.2$  の薄膜では、残留分極値が  $\sim 9 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  であった。多結晶体で Néel 温度 770 K 以上の G 型反強磁性体であったことから、鉄酸フッ化ビスマスが室温マルチフェロイック物質であることが示唆された。さらに  $x = 0.2, 0.3$  の価電子帯 XPS スペクトルには、それぞれ  $\sim 6$  eV、 $\sim 5.5$  eV にフッ化前のものにはない新たな準位が観測され、スペクトル形状も異なっていた。これらの結果は、鉄酸フッ化ビスマス薄膜が組成によって異なる物性および電子状態をもつことを示している。

### 参考文献

- 1) O. Clemens *et al.*, Inorg. Chem. **53**, 12572 (2014).
- 2) S. Rahimi *et al.*, Phys. Rev. B **106**, 115205 (2022).

## ウォーターブリッジ現象の分子動力学計算

東京理科大学 理学研究科 物理学専攻<sup>1</sup> ○(M2)日原 健<sup>1</sup>, 木岡 夕星<sup>1</sup>, 山本 貴博<sup>1</sup>

水は私たちの身の回りに存在し生活に欠かせない身近な物質でありながら、科学的に未解明な物性が多い物質でもある。水の未解明現象の1つにウォーターブリッジ(WB)現象と呼ばれる現象がある[1]。WB現象は、純水で満たされたビーカーを2つ用意し、それらの注ぎ口を接触させた後に2つのビーカー中の水にキロボルト程度の電圧を印加すると、2つの注ぎ口の間には水の架橋(WB)が形成される現象である。WBの直径は電圧の増加にともない大きくなり、ブリッジは切れにくくなる。WB形成のメカニズムについては様々な可能性が報告されているが、コンセンサスのとれた結論には至っていない[2]。そこで本研究では、高電場下での水の分子動力学シミュレーションを行うことで、水のミクロ構造について解析を行った。その結果、ウォーターブリッジは「水が分極し始める電場」よりもずっと小さな電場によって形成されることが分かった。この結果は従来の考え「水の分極によってWBが形成される」ことを覆す結果である。講演では、WB形成前後での「水の粘性変化」について報告する。

### 参考文献

- 1) E. C. Fuchs, P. Woisetschläger, A. G. Holler, and F. Kreuzer. mstrong, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40**, 6112 (2007).
- 2) Jakob Woisetschlagler, Karl Gatterer, and Elmar C. Fuchs, *Exp Fluids* **48**, 121-131 (2010).

## Pd ナノクラスタ吸着によるカーボンナノチューブの熱電性能変化

東京理科大学大学院 理学研究科 物理学専攻<sup>1</sup> ○吉田朱里<sup>1</sup>, 山本貴博<sup>1</sup>

近年、高い熱電性能が報告されたカーボンナノチューブ(CNT)は、スーパーグローブ(SG)法により大量合成が可能になり、SG-CNTの熱電デバイスへの応用が産業的にも注目されている[1]。しかしSG-CNTは多くの欠陥が含まれるため、CNT本来の高い熱電出力因子( $PF$ )が活かされていない問題がある。そこで近年、Pd水溶液に浸漬してPd原子をSG-CNTに吸着し、原子空孔を修復することによって $PF$ が上昇することが報告された[2]。さらにPd水溶液の濃度を上げると吸着したPdクラスタが大きくなるとともに $PF$ が上がることも明らかになった。しかしこの $PF$ 上昇がPdクラスタのサイズ変化に起因しているのかは不明である。そこで本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算と非平衡グリーン関数法を組み合わせたランダウ理論を用いることで、CNTにPdクラスターが吸着した系の熱電特性を調査し、Pdクラスタのサイズと $PF$ 増加の関係を明らかにすることを目的とする。

原子空孔を有する半導体(16,0)CNTにPdクラスターを1個吸着させた結果、化学ポテンシャルがバンドエッジ近傍に位置するとき、 $PF$ が上昇する結果が得られた。さらにPdクラスタのサイズを増大させると、電気伝導度 $G$ は増加したが、ゼーベック係数 $S$ は減少したため、 $PF$ (=数式)はクラスタサイズに依らずほとんど一定となった。これらの原因はキャリアの移動による化学ポテンシャルの移動にあると考えられる。以上から水溶液の濃度上昇に伴う $PF$ 上昇はパラジウムクラスタのサイズには起因せず、修復された欠陥数の増加に起因することがわかった。以上から、本研究ではSG-CNTの $PF$ を効率的に向上させるためには、欠陥サイトでPdをクラスター化させずに、より多くの欠陥にPdクラスターを吸着させることが望ましいと結論づけられる。

### 参考文献

- 1) Y. Nakai, *et al.*, Phys. Express 7, 025103 (2014).
- 2) 上島 貢, プラスチック成形加工学会誌, 7, 30 (2018).

## CNTの電流ゆらぎの高周波領域に現れる非マルコフ性の解明

所属 東京理科大学大学院 理学研究科 物理学専攻<sup>1,2,3</sup> ○秋元来夢<sup>1</sup>, 住吉亜衣菜<sup>2</sup>, 山本貴博<sup>3</sup>

系のサイズが小さくなると各種物理量の「ゆらぎ」が顕在化する。ブラウン運動などの平衡ゆらぎに関しては20世紀に盛んに研究が行われ「揺動散逸定理」へと発展した。一方、電流ノイズのような非平衡ゆらぎに関しては研究の進展が遅れていたものの、この20年で非平衡ゆらぎに関する熱力学的制限(例えば、熱力学的不確定性関係)などが発見され、非平衡ゆらぎの中に潜む法則性や物理情報を見出すことに注目が集まっている。そこで本研究では、実在する小さな系として「カーボンナノチューブ(CNT)」を対象に、有限温度で必ず存在する内因的ノイズとして、原子熱振動(フォノン)が引き起こす電流ノイズについて理論的に研究を行う。特に、

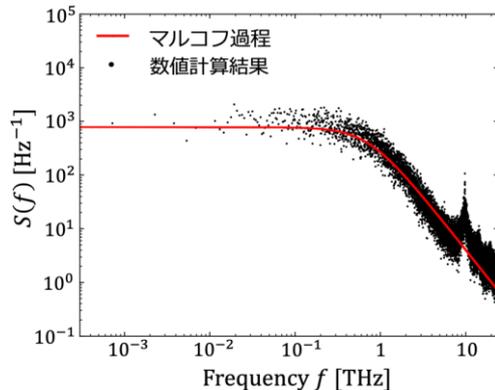


図1 (5,5) CNTのパワースペクトル密度

これまで未解明であった「高周波領域の特徴的周波数( $f \approx 10\text{THz}$ )に出現する大きなノイズ」の解明を目指す。図1に、室温でのCNT(直径  $6.94\text{\AA}$ , 長さ  $275.7\text{nm}$ )の電流ノイズのパワースペクトル密度 $S(f)$ を示すが、図中の赤線は、フォノン散乱を受けた電子輸送過程がマルコフ過程であると仮定した場合の $S(f)$ を示す。数値計算結果(黒点)は赤線に概ね従う。一方、 $f \approx 10\text{THz}$ において明らかに赤線(マルコフ過程)から外れるピークが存在すること(非マルコフ効果)が分かる。そこでCNTのフォノンモード分解を行い、各々の固有モードに対する電流ゆらぎへの応答を調べた。その結果、この非マルコフ効果によるピークがCNTのラジアルブリージングモード(RBM)による電子の散乱が原因であることが明らかとなった。講演では、RBMによる散乱が非マルコフ的な電流ノイズを生み出す物理的メカニズムについて発表する。

## Spin-polarized electronic states of (Bi, Pb)/Ge(111) studied by Spin-resolved ARPES

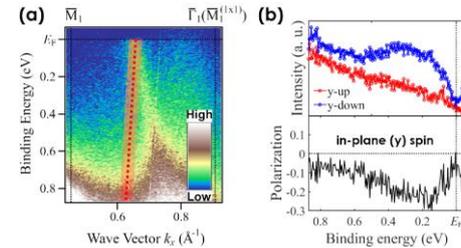
Waseda Univ.<sup>1</sup>, HiSOR, Hiroshima Univ.<sup>2</sup>, SL Center, Saga Univ.<sup>3</sup>

○L. Konermann<sup>1</sup>, H. Abe<sup>1</sup>, K. Sumida<sup>2</sup>, K. Miyamoto<sup>2</sup>, T. Okuda<sup>2</sup>, M. Imamura<sup>3</sup>, K. Takahashi<sup>3</sup>,  
A. Takayama<sup>1</sup>

The combination of the Rashba effect and superconductivity in single atomic layer (SAL) systems, like in the recently discovered (Tl,Pb) systems on semiconductor substrates, sparked great interest in the topic of atomic layer superconductivity. Outside of (Tl,Pb) alloy systems, (Bi,Pb) SAL alloy systems were also proposed as candidate structures for Rashba superconductivity. In our study so far, we were able to successfully fabricate a (Bi,Pb)/Ge(111)-2×2 SAL structure in addition to other (Bi,Pb)/Ge(111) SAL structures. From ARPES measurements of these structures, we found that the metallic band dispersions of theoretical predictions differ from the ones we observed [1,2]. Yet as of now, it is still unknown whether these bands exhibit Rashba-type spin-splitting or not. For this, we performed spin-resolved ARPES measurements to determine the spin characteristics of these metallic bands.

We performed the spin-resolved ARPES measurements mainly at BL-9B of HiSOR. Figure 1 (a) shows the band dispersion along the  $\bar{\Gamma}$ - $\bar{M}$  line, taken at  $h\nu = 14$  eV. To discuss the spin-polarization of this metallic band, we measured the spin-resolved energy distribution curves (EDCs) at various  $k$  regions. Figure 1 (b) shows the spin-resolved EDC at  $k_x = 0.66 \text{ \AA}^{-1}$ , which is measured at the dashed line in Figure 1 (a). We found that these bands mainly exhibit in-plane spin-polarization. In this presentation, we will provide detailed results of these band structures and discuss the possibility of Rashba spin-splitting.

[1] L. Konermann *et al.*, JVSS Kanto Meeting, P08 (2023). [2] L. Konermann *et al.*, JVSS Annual Meeting, 1Da07 (2023).



**Fig.1.** (a) Band dispersion of the (Bi,Pb)/Ge(111)-2×2 structure along the  $\bar{\Gamma}$ - $\bar{M}$  line. (b) the spin-resolved EDCs for the in-plane (y) spin components, as well as its energy dependent spin-polarization at the area marked in red in (a).

## 大面積ホウ化水素シートの分光評価

東大物性研<sup>1</sup>, 産総研<sup>2</sup>, 分子研 UVSOR<sup>3</sup>, 筑波大数物<sup>4</sup>

○山口寛月<sup>1</sup>, 新部正人<sup>1</sup>, 鷲見寿秀<sup>1</sup>, Xiaoni Zhang<sup>1</sup>, 堀尾眞史<sup>1</sup>, 安藤康伸<sup>2</sup>, 山浦淳一<sup>1</sup>, 中村永研<sup>3</sup>, 田中清尚<sup>3</sup>, 近藤剛弘<sup>4</sup>, 松田巖<sup>1</sup>

ホウ化水素 (HB) は六員環からなる二次元物質であり、水素貯蔵物質<sup>(1)</sup> や二酸化炭素転換触媒<sup>(2)</sup> としての機能が評価されている。また、HB のバンド構造は半金属的<sup>(3)</sup> であり導電性物質としても活用が期待されている。しかしながら、合成から得られる HB は粉末状であり、導電性物質としての活用には適した形状でなかった。

そこで合成条件を変更することで、本研究では大面積 HB シートの合成に成功した。HB シートは自立シートとしてでなく Ni メッシュや Si 基板上へも得ることができた。また、その分光評価を赤外、可視紫外、X 線を用いた吸収分光測定を行い、評価した。また、X 線吸収分光 (XAS) の結果について理論計算を行うことで、その電子構造を特定した。加えて、X 線回折 (XRD) を行うことで HB シートの結晶構造の評価を行った<sup>(4)</sup>。

その結果、本実験で得られた HB シートは XAS の結果から吸収端近傍に特徴的なスペクトルのピークが確認でき、これは六員環構造の面直方向に由来することが分かった。このスペクトルはバルク敏感な透過法では二つのピークが確認できる一方で、表面敏感な TEY 法では一本のみしか確認できなかった。この結果は試料表面では欠陥や不純物によって構造が乱れているものの試料内部では良好な試料が得られているためであると考えられる。内部構造が分かる XRD からは Debye - Scherrer 環が複数確認でき、これらは二次元構造の積層方向によるものであり、積層規則の異なる構造が存在すると考えられる。

### 参考文献

- 1) R. Kawamura *et al.*, Nat. Commun. **10** (2019) 4880.
- 2) T. Goto *et al.*, Commun. Chem. **5** (2022) 118.
- 3) I. Tateishi *et al.*, Phys. Rev. Materials **3** (2019) 024004.
- 4) K. Yamaguchi *et al.*, Phys. Rev. Materials *submitted*.

## Cu(111)表面におけるアセチレン脱水素化反応の単一分子レベル観察

東京大学<sup>1</sup>, 理化学研究所<sup>2</sup>

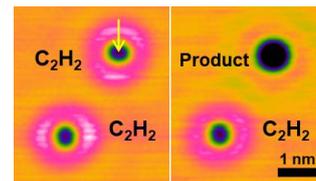
○ 館田匠馬<sup>1,2</sup>, 李民喜<sup>1,2</sup>, 稲垣万貴<sup>2</sup>, 勝部大樹<sup>2</sup>,  
数間恵弥子<sup>1,2</sup>, 金有洙<sup>1,2</sup>

アセチレンは基礎化学品として様々な化学製品の原料としても用いられる[1]。アセチレンを原料とした化学において、触媒表面での C-H 結合の解離のしやすさは反応生成物や触媒不活性化に影響すると考えられ、特に化学気相成長法を用いたグラフェンの表面合成では、Cu(111)に比べてCu(100)では不純物が多く生成され、表面構造の違いが反応に影響している可能性が示唆されている[2]。本研究は、表面におけるアセチレンの脱水素化過程を単一分子レベルで明らかにすることを目的とし、Cu(111)単結晶表面に吸着したアセチレン単一分子の脱水素化反応を走査トンネル顕微鏡 (STM) により観測した。アセチレン単一分子の上に STM 探針を配置し+3.0 V の電圧を印加すると、分子の反応が観察された (Fig. 1)。また、トンネル電流の変化から、2つの水素がほぼ同時に解離していることが明らかとなり (Fig. 2)、C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> から C<sub>2</sub> への反応を選択的に誘起できることを解明した。本発表ではさらに、Cu(100)表面における反応と比較するため、密度汎関数理論による計算結果と先行研究による実験結果[3]を提示し、方位面の違いによって生まれる反応過程の違いについて議論する。

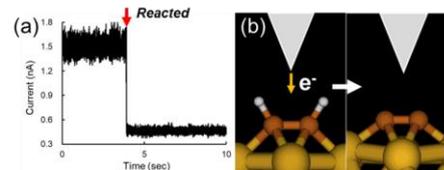
### 参考文献

- 1) Schobert, H., *Chem. Rev.* **114**, 1743 (2013).
- 2) Ogawa, Y. et al., *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 219 (2011).
- 3) L. J. Lauhon and W. Ho, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 7 (2000)

本研究は環境省「地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業」の支援の下で実施された。



**Fig.1** Dehydrogenation reaction of acetylene induced with tunneling current.



**Fig.2** (a) Current trace measurement. (b) Schematic illustration of dehydrogenation reaction with STM tip.

## Au(111)表面へのPd蒸着と表面構造の実空間観測

東京大学金研究室<sup>1</sup>, 理化学研究所<sup>2</sup>, ○申宇美<sup>1,2</sup>, 兒玉寛俊<sup>1,2</sup>, 李民喜<sup>1,2</sup>, 数間恵弥子<sup>1,2</sup>, 金有洙<sup>1,2</sup>

### 【研究背景と目的】

パラジウム-金 (Pd-Au) 合金は高い触媒活性や単一金属にはない特異な触媒機能を持ち、優れた触媒として注目を集めている<sup>[1]</sup>。Pd-Au 合金の高い触媒機能は合金化に伴う原子組成や電子状態の微細な変化によってもたらされるが、その詳細は明らかになっていない。そのため、表面状態の解析や分子の吸着特性の解析などの研究が行われてきた<sup>[2][3]</sup>。本研究では、Pd-Au 合金構造の原子組成の変化が電子状態や表面特性に与える影響を原子レベルで解明することを目的として、Au 表面に Pd を蒸着し表面構造の変化を実空間観測した。

### 【実験手法】

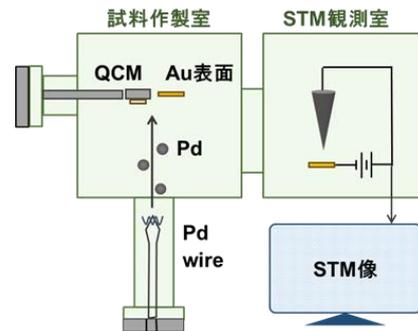
試料表面は Au(111)/mica 表面を加熱により清浄化し、Pd 原子を物理蒸着させることで作製し、超高真空 ( $1.0 \times 10^{-11}$  torr)、低温下 (77K) で走査型トンネル顕微鏡 (STM) により表面観察を行った。(図 1)

### 【結果と考察】

はじめに、Au(111)/mica 表面の清浄化検討を行い、Au(111)のヘリングボーン構造および原子像を観測した。その後、Au 表面に Pd を物理蒸着し、Pd の構造や Au 表面の構造の変化を STM で観察した。さらに蒸着後の試料表面を加熱し、Pd の構造の安定性を調べた。これらの解析により蒸着後の加熱条件による表面構造の変化を評価した。

### 参考文献

1) *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 8099–8139. 2) *ACS Nano*, **2010**, *4*, 1637–1645. 3) *ACS Catal.* **2019**, *9*, 9, 8757–8765  
本研究は環境省「地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業」の支援の下で実施された。



## 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)による Pb/Ge(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 構造の構造解析

早大先進理工<sup>1</sup>, 高エネ研物構研<sup>2</sup>

○孝橋麟太郎<sup>1</sup>, 庄司誠<sup>1</sup>, Lars Konermann<sup>1</sup>, 望月出海<sup>2</sup>, 高山あかり<sup>1</sup>

Ge(111)基板上に Pb を 4/3ML 蒸着した Pb/Ge(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$  構造は、巨大 Rashba 型の電子状態を持ち<sup>1)</sup>、超伝導発現の可能性も指摘されている<sup>2)</sup>。これまで LEED-IV 法を用いた構造解析により、その構造は $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$  周期内で H<sub>3</sub> サイトに 1 つ、T<sub>1</sub> サイトに 3 つの Pb 原子が配置する  $\beta$  構造であることが 2 つの研究グループにより報告された[図 1(a)]<sup>3,4)</sup>。一方、その構造の詳細は一致せず、構造決定には至っていない。本研究では、Pb/Ge(111)- $\beta$  構造の構造決定を目的とし、全反射高速陽電子回折(TRHEPD)による構造解析を行なった。

実験は高エネルギー加速器研究機構低速陽電子実験施設で行った。図 1(b)に、一波条件で測定した Pb/Ge(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$  構造の(00)スポット回折強度の視射角依存性(ロッキング曲線)を示す。先行研究の構造モデルから計算したロッキング曲線と比較すると、Huang らの提案する構造モデル<sup>[3]</sup> (H<sub>3</sub> サイトと T<sub>4</sub> サイトの Pb 原子の高低差が大きいモデル)の方が実験結果を比較的再現しているが、どちらの構造モデルも高角度側で実験結果との相違が見られた。高角度側での違いは、Ge 基板の構造緩和は小さい( $\sim 0.05\text{\AA}$ )という先行研究の構造モデルが対応しないことを示唆している。講演では、実験および構造解析の詳細な結果を示し、本研究で決定した Pb/Ge(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$  構造について議論する。

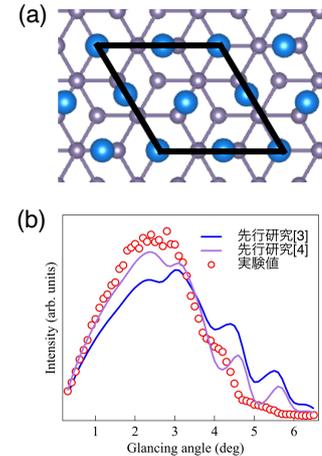


図1 (a) Pb/Ge(111)- $\beta$ 構造. (b) ロッキング曲線の実験結果と先行研究の比較(一波条件)

1) K. Yaji, *et al.*, Nat Commun **1**, 17 (2010).

2) H. Huang, *et al.*, Supercond. Sci. Technol., **33** 075007 (2020).

3) H. Huang, *et al.*, PRL., **62**, 559 (1989).

4) T. Aruga, *et al.*, J. Phys., Condens. Matter, **23**, 435001 (2011).

## 交流電気分解法による都市鉱山廃品からの金の抽出

工学院大学化学応用学専攻<sup>1</sup>, 工学院大学基礎・教養科<sup>2</sup> ○吉澤深玖<sup>1</sup>, 高見知秀<sup>2</sup>

携帯電話 1 台には約 48 mg の金が含まれているが、これは 52.8 kg の鉱石を採掘した量に相当して<sup>1)</sup>、日本で毎年廃棄される使用済み携帯電話すべてから金を回収することができれば、約 80 億円相当の金を得られることになる<sup>1)</sup>。通常、金の抽出・回収には王水が使用されるが<sup>2)</sup>、王水は毒物及び劇物取締法の危険物に指定されていて、回収過程で有害な塩素ガスが発生する可能性もあるため、王水を使わずに金を安全に回収する方法の開発が環境化学の分野で期待されている。一方、我々は交流電気分解法を用いれば金を塩化カリウム水溶液に溶解させることが出来ることを見出した<sup>3)</sup>。そこで本研究では、交流(AC)バイポーラ電気分解法を用いて、王水や強酸を用いずに電子廃棄物から金を回収する手法を開発したので報告する。

Fig. 1 に装置の概略図を示す。AC generator (GW Instek AFG-2005)で 200 Hz の交流信号を生成して、bipolar power supply (NF BP4610)で 60 V に増幅してカーボン電極間に印加して sample の交流電気分解を行うことで Fig. 2 に示す塩化金酸黄色水溶液が得られた。この研究を推進するには、より高出力の電源が必要である。

### 参考文献

- 1) 環境省 平成 24 年版 環境・循環型社会・生物多様性白書第 1 部第 4 章第 3 節  
「我が国に眠る地上資源の発掘・活用」  
<https://www.env.go.jp/policy/hakusyo/h24/html/hj12010403.html>
- 2) R. Sousa, M. J. Regufe, A. Fiúza, M. M. Leite, A. Futuro, *Extract. Indust. Soc.*, **9**, 101018 (2022).
- 3) K. Oya, K. Aoshika, M. Ageishi, H. Magara, S. Ogawa, Y. Takakuwa, and T. Takami, *Chem Lett.*, **50**, 191 (2021).

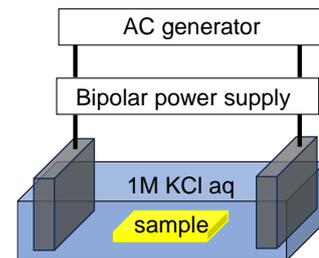


Fig. 1: Schematics of the AC electrolysysis used in this study.



Fig. 2: Photo of the HAuCl<sub>4</sub> aq prepared by the AC electrolysysis.

## Au(111)への銀蒸着により作製した表面の原子レベル観察

東京大学・理化学研究所

○兒玉寛俊, 申宇美, 李民喜, 数間恵弥子, 金有洙

**【研究背景と目的】** 金銀合金は低温で一酸化炭素の酸化反応を活性化する触媒として知られている。反応のメカニズム解明には合金表面の実空間での構造解析<sup>1,2)</sup>が必要である。本研究では合金表面の作製と原子レベルでの観察を行った。

**【実験の方法】** 実験は、超高真空( $\sim 5 \times 10^{-11}$  Torr)、液体窒素温度( $\sim 77$  K)の下で、走査トンネル顕微鏡(STM)を用いて行った。試料は基板に Au(111)/mica を用いて、Ar<sup>+</sup>スパッタと加熱により清浄面を獲得し、銀を真空蒸着させた後加熱した。

**【結果と考察】** 蒸着直後は銀が金のステップエッジ上に多く凝集していたが、加熱によりテラス上に分散し、銀が分布した島状や帯状の新たな構造が確認された。島状構造上では金と銀が混合した構造が見られた(図1)。銀が一樣に分布したテラス上では、Au(111)とは異なる原子配列がみられ、新しい表面構造が形成したと考えられる。

**【まとめと展望】** 本研究では、STMを用いた金銀合金表面の実空間観測を行った。今後は、蒸着量、加熱温度、加熱時間を変化させて表面観察を行うとともに、走査トンネル分光法により表面の電子状態の詳しい解析を行っていく。また合金表面における分子反応の単原子レベルでの観察・解析を行う。

**【参考文献】** 1) M. M. Dovek, C. A. Lang, J. Nogami, C. F. Quate, Phys. Rev. B 40, 11973 (1989).  
2) H. Cercellier *et al.*, Phys. Rev. B 73, 195413 (2006).

本研究は環境省「地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業」の支援の下で実施された。

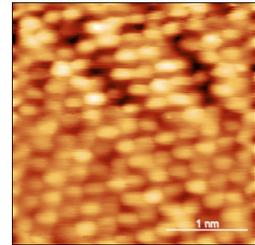


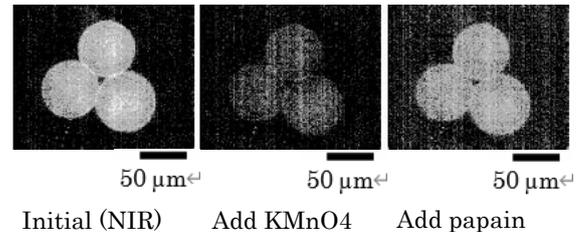
図1: 島状構造上における原子レベルのSTM像 (条件 40 mV, 300 pA)

## ミクロンサイズの (6, 5) 単層カーボンナノチューブバイオセンサー

### ～生体分子添加による近赤外フォトルミネッセンス応答の定量検出～

東京理科大学<sup>1</sup>, 帝京平成大学<sup>2</sup> ○立川 佳樹<sup>1</sup>, 伊藤 雅浩<sup>2</sup>, 入田 賢<sup>1</sup>, 梅村 和夫<sup>1</sup>

単層カーボンナノチューブ (SWNT) は、可視光によって励起されるとキラリティ固有のフォトルミネッセンス (PL) を示す。キラリティは SWNT の構造と光学/電気特性を定義し、例えば、(6,5) SWNT をカルボキシメチルセルロース (CMC) で包括した場合の励起波長と発光波長は、それぞれ 570 nm と 990 nm である。SWNT の PL 強度は、SWNT の周囲の pH に応じて急激に変動する。本実験では SWNT を CMC で分散させた後、それらをマイクロビーズ表面に取り付け、機能化ビーズをカバーガラス上に化学修飾固定することでマイクロサイズ SWNT センサーを作製した。実験では、ビーズ上の (6, 5) SWNT の PL は、近赤外顕微鏡 (励起波長 575 nm, 発光波長 1055 nm) で液中観察した。初期状態の PL を測定したのち、 $\text{KMnO}_4$  を滴下して SWNT を酸化させると PL 強度は減少し、パパイン蛋白質溶液を滴下して SWNT を還元させると PL 強度が回復した。この PL 応答は同一のビーズについて継続的に定量測定することができた。これらの結果はミクロンサイズの SWNT バイオセンサー作製の基盤技術となりうる。



## 2種のカーボンブラック試料のナノスケール構造と化学特性の比較評価

慶大理工<sup>1</sup>, 旭カーボン(株)<sup>2</sup> ○有吉悠人<sup>1</sup>, 砂子田茉莉<sup>1</sup>, 藤田優人<sup>1</sup>, 青木崇行<sup>2</sup>, 清水智子<sup>1</sup>

カーボンブラック (CB) は自動車タイヤ, ゴム製品, インク, プラスチックの製造など幅広く工業応用されている物質である。対象製品の特性を改善し, リサイクルシステムを確立するためには, カーボンブラックの特性を正しく評価する必要があるが, その構造の複雑さにより特性評価は困難である。本研究ではアサヒサーマル(AT)とSB960(SB)の2種類のCB試料について, 一次粒子と凝集体の構造および化学的特性を, 走査型プローブ顕微鏡といくつかの分光手法により評価した。原子レベルで平坦な固体表面に分散した凝集体に対し, 原子間力顕微鏡と走査型トンネル顕微鏡により構造の評価を行ったところ, 多様なサイズの一次粒子が観察された。粒子表面, 特に小さな一次粒子には積層されたグラフェンシート間に観察されるはずのエッジや溝, ステップがなく, これは広く受け入れられている結晶子モデルと矛盾する。これらの観察結果はラマン分光法と X 線光電子分光法 (XPS) の測定結果により裏付けられた。さらに, XPS では欠陥のある  $sp^3$  カーボンやカルボキシ基, ヒドロキシ基の存在も明らかになった。フーリエ変換赤外分光法 (Fig. 1) からは C=O 二重結合と, 酸素含有官能基の存在が確認された。推測される官能基は試料の親水性と疎水性に一致した。本研究での包括的な特性評価手法は他のカーボンブラックや炭素材料にも適用可能と考えられる。

### 参考文献

1) F. Yiran, *et. al.*, *J. Clean. Prod.*, **247**, 119115(2020).

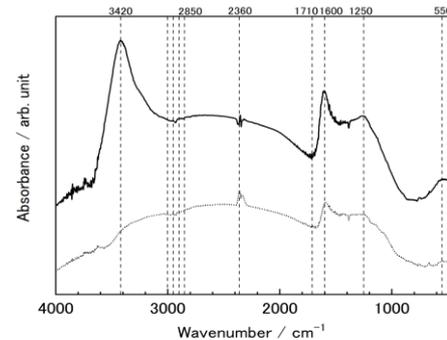


Fig. 1 Fourier-transform infrared spectra of SB. Solid and dotted lines represent without and with heat treatment at 900 °C , respectively.

## NV センター電子スピンとダイヤモンド表面上の電子スピンの二重共鳴計測

早大理工<sup>1</sup>, 都立大都市環境<sup>2</sup>, 東北大 CIES<sup>3</sup>

○関口顕<sup>1</sup>, 臼井俊太郎<sup>1</sup>, 齋藤大樹<sup>1</sup>, 三宅悠斗<sup>1</sup>, 田中学<sup>2</sup>, 品田高宏<sup>3</sup>, 川原田洋<sup>1</sup>, 谷井孝至<sup>1</sup>

【要旨】ダイヤモンド中の浅い窒素-空孔中心 (NV センター) の電子スピン ( $S=1$ ,  $M_s=\pm 1$ ) は優れたコピーレンス特性をもち、ナノスケールの高分解能磁気プローブとして注目されている [1]。表面のダングリングボンド (電子スピン), 表面に結合した分子の核スピンや安定ラジカル (電子スピン) との磁気的な相互作用を介して NV センターの電子スピン状態を特定することにより, 表面上の分子の存在や構造解析 (NMR/ESR) に利用できる。私たちは, 電子線リソグラフィと低エネルギー窒素イオン注入を用いて, 表面近傍に浅い単一 NV センターを規則配列形成し, その規則配列を上記の量子計測に用いている [2-4]。今回, 規則配列中の単一 NV センターを用いて, 電子二重共鳴 (DEER) 計測によって, ダイヤモンド表面のダングリングボンド電子スピンと NV センター電子スピンの共鳴を検出し, ダングリングボンドの面密度を推定したので, その結果を報告する。なお, 本研究は文科省科研費 (22H01921, 23H00169) による助成を受けた。

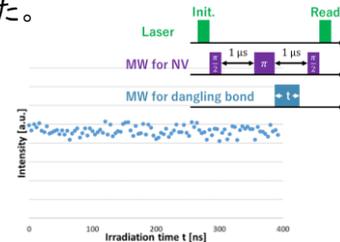
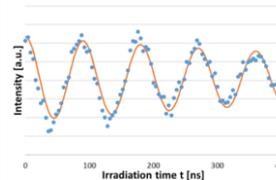
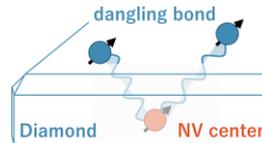
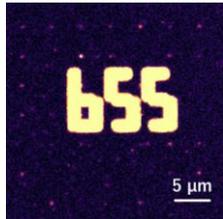


Fig.1 Confocal image of NV Fig.2 shallow single NV

Fig.3 DEER signal with(left) and without(right) dangling bonds

- 1) Kai, Z., et al, Phys. Rev. B104,224412(2021)
- 2) R. Fukuda, New J. Phys. 20, 083029 (2018).

- 3) Y. Ueda, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 62.SG (2023)
- 4) Akirabha, C., et al 2023 Appl. Phys. Express 16 082006

## 水素発生反応触媒に向けたハイエントロピー合金材料の組成最適化手法開発

東大工<sup>1</sup>      ○大塚耕希<sup>1</sup>, 清水康司<sup>1</sup>, 渡邊聡<sup>1</sup>

ハイエントロピー合金 (HEA) は、元素の組み合わせによって多様な表面サイトを有することや、高い安定性により長時間の使用にも耐えうることから、構造材料だけでなく触媒材料としての応用も検討されている [1]。多元素系の広大な組成空間の中に高い機能性を持つ材料が存在すると期待されるが、効率的に材料探索を進めるためには理論計算に基軸を置いた機械学習と最適化アルゴリズムを組み合わせた方法論の開発が有効と考えられる。本研究では、HEA ナノ粒子の安定性及び水素発生反応に対する活性に着目して、以下のような方法で組成最適化手法の開発を行った。

まず初めに、密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算を援用して、八面体クラスターモデルでの全エネルギーおよび水素原子の吸着エネルギーを算出した。候補元素には 9 種類の遷移金属を使用した。次に、これらの DFT 計算データをもとに、任意の原子配列を持つクラスターの全エネルギー及び水素原子の吸着エネルギーを予測する機械学習モデルを作成した。全エネルギー予測ではニューラルネットワークポテンシャルと合金ナノ粒子用に提案された単純なモデルである結合中心モデル [2] を比較し、訓練データよりも大きな構造に対する柔軟性を評価した。吸着エネルギー予測でも複数の特徴量の生成法を比較・検討した。続いて、作成したモデルを使用し、組成に対応した構造を収集するモンテカルロサンプリングを行うプログラムを作成した。これによって算出される形成自由エネルギーおよび水素発生反応活性を目的関数とし、進化戦略アルゴリズムやベイズ最適化を利用した組成最適化を行った。

### 参考文献

- 1) T. Fujita, Mater. Trans., 64, 2386 (2023).
- 2) Z. Yan, M. G. Taylor, A. Mascareno, G. Mpourmpakis, Nano Lett., 18, 2696 (2018).

## 常温大気圧下でのカーボンナノチューブのナノメートルラマンイメージングと新規選択則

慶大<sup>1</sup>, 理研<sup>2</sup> ○藤田優人<sup>1,2</sup>, 早澤紀彦<sup>2</sup>, Balois-Oguchi Maria Vanessa<sup>2</sup>, 田中拓男<sup>2</sup>,  
清水智子<sup>1</sup>

ラマン分光は試料の化学種を調べられる分光手法である。通常は伝搬光をプローブとして使用するが、近接場光を用いることでナノメートルスケールの空間分解能を持つラマン分光(探針増強ラマン分光:TERS)が実現できる。近年、近接場光によるラマン選択則の変化が報告されている。本研究ではカーボンナノチューブ(CNT)を用いて偏光方向を考慮しつつ、TERSの選択則を調べた。

実験は常温大気圧下で行った。通常の顕微ラマン分光を行ったところ、欠陥に由来するDバンドは確認できなかったが、単層CNT上に探針を固定してTERSスペクトルを取得したところ、Dバンドの出現が確認された(Fig. 1)。また単層CNTのTERSイメージングを行ったところ、CNTが存在する領域全てでDバンドが観測された。1 nm程度の空間に閉じ込められた光によりラマン選択則が変化したことが示唆される。

CNTの選択則を考える上で重要になるのが励起光の偏光方向である。本研究では、CNTはその軸に対して垂直な偏光で励起されており、この場合バンド構造内のカッティングラインを1つまたぐように電子遷移が生じる<sup>1</sup>。また近接場光の高い波数成分により、電子励起とラマン散乱の両方で非垂直電子遷移が起きることが示唆された。ラマン散乱時に運動量を補完する欠陥の役割を近接場光が担っているため、その結果TERSスペクトルでDバンドが観測されたと考えられる<sup>2</sup>。

### 参考文献

- 1) M. Takase et al., Nat. Photonics 7, 550 (2013).
- 2) Y. Fujita et al., submitted

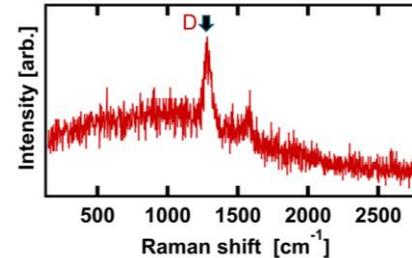


Fig. 1 Tip-enhanced Raman spectrum from a CNT.

## 走査トンネル顕微鏡を用いた銀表面上における CO<sub>2</sub> 分子の吸着状態の実空間観測

東京大学<sup>1</sup>, 理化学研究所<sup>2</sup> ○小粥 徹<sup>1,2</sup>, 李 民喜<sup>1,2</sup>, 稲垣 万貴<sup>2</sup>, 数間恵弥子<sup>1,2</sup>, 金 有洙<sup>1,2</sup>

近年、金属触媒を用いた CO<sub>2</sub> 還元反応の研究が盛んに行われている。金属触媒反応では用いる金属種によって生成物が異なることが報告されているが、その理由は未解明である[1]。また既往研究の多くは巨視的な分析に留まり、金属表面と CO<sub>2</sub> 分子の微視的な相互作用に関する分析が不足している。本研究では金属触媒反応における複数の素過程の中で、第一段階である吸着過程に着目し、分子分解能を持つ走査トンネル顕微鏡を用いて Ag(110) 上に吸着した CO<sub>2</sub> 分子を実空間観測し、分子の吸着状態の微視的な分析を行なった。

実験は、超高真空極低温 ( $5 \times 10^{-11}$  torr, 6 K) の下で走査トンネル顕微鏡 (STM) を用いて行なった。試料は基板に Ag(110) を用いて、Ar<sup>+</sup> スパッタと加熱により清浄面を獲得し、基板温度 < 30 K で CO<sub>2</sub> を蒸着し作製した。その結果 CO<sub>2</sub> 分子は Ag(110) 表面上において島を形成し、島は二つの異なる吸着状態の分子 (P, L) からなる単位格子を持つことがわかった (Fig 1)。さらに分子と基板の相互作用について分析するため、P、L 分子それぞれの直上に探針から電圧を印可し、その前後での形態変化を観測すると、探針直下の分子の脱離現象が確認された。しかし脱離する電圧の閾値には違いが見られた。この脱離エネルギーの違いは、P と L で分子と基板の間に存在する相互作用が異なることによって生じたと考えられる。

### 参考文献

1) Alexander Bagger et al., ACS Catal. 12, 2561(2022)

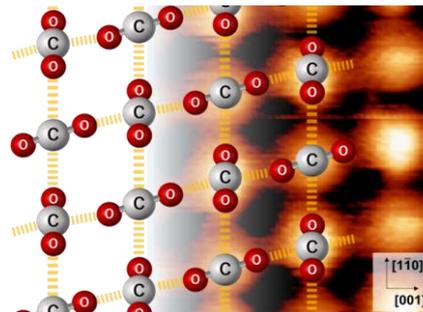


Fig 1. Ag(110)表面上の CO<sub>2</sub> 分子の STM 像 (Vt = 20 mV, I = 100 pA) と吸着モデル

## 鉛蓄電池の電解液におけるウルトラファインバブルの作用

東京都立科学技術高等学校<sup>1</sup> ○尾木佑輝<sup>1</sup>

### Effects of ultra-fine bubbles in the electrolyte of lead-acid batteries

Tokyo Metropolitan High School of Science and Technology<sup>1</sup> ○Ogi Yuki<sup>1</sup>

#### 【諸言】

鉛蓄電池は、使用可能温度の広さ、信頼性、放電時の安定性から自動車のバッテリーやバックアップ電源などに用いられている。しかし、充放電を繰り返すことで硫酸鉛が電極表面で硬質化してしまうサルフェーションという現象が発生してしまう。それを改善するため、リグニンスルホン酸ナトリウム塩を添加するという手法が一般的に取られている。<sup>1)</sup>

本研究では近年、応用研究が盛んなウルトラファインバブル(以後「UFB」という)を鉛蓄電池の電解液に添加し、UFB が鉛蓄電池に寄与する作用について評価した。

#### 【結果】

炭素皮膜抵抗(10Ω)を用い放電時間を比較したところ、通常に比べ放電時間が 1.72 倍増加した。

また、充放電後の陽極表面を観察したところサルフェーションの原因物質である硫酸鉛(II)が大幅に抑制されたことがわかった。(図1に示す)

サルフェーション抑制機構には、UFB の自己圧壊作用や表面電位特性などが複合的に作用していると考えられる。詳細については当日発表する。



図1 充放電後の陽極表面の

茶色:電極(陽極)

白色:硫酸鉛(II)

#### 【参考文献】

- 1) 「リグニン製品 | ケミカル製品 | 日本製紙グループ」参照  
2024年3月25日。  
<https://www.nipponpapergroup.com/products/chemical/lignin/liгноsulfonate/san.html>

## Electronic Structure Modification of Rutile TiO<sub>2</sub>(100) by Hydrogen Ion Irradiation

Univ. of Tokyo<sup>1</sup>, Kyoto Univ.<sup>2</sup>, JAEA<sup>3</sup>      OMuhammad Irfandi<sup>1</sup>, Takahiro Ozawa<sup>1</sup>, Gyeong Cheol Lim<sup>2</sup>, Mitsuhiro Maesato<sup>2</sup>, Katsuyuki Fukutani<sup>3</sup>

TiO<sub>2</sub> has promising applications in solar conversion and hydrogen storage<sup>1,2</sup>. However, the interaction between hydrogen and TiO<sub>2</sub> requires further investigations in the aspects of electrical conductivity and electronic properties. The experimental investigation was conducted by means of simultaneous in-situ electrical conductivity and x-ray/ultraviolet photoelectron spectroscopy (XPS/UPS) in the ultrahigh vacuum environment. We employed hydrogen ion irradiation to achieve a high doping concentration of hydrogen in TiO<sub>2</sub>(100). The results show that hydrogen ion irradiation at 295 K increases the TiO<sub>2</sub> conductivity and increases the formation of Ti<sup>3+</sup> chemical state. The donated electron from hydrogen to TiO<sub>2</sub> induces an in-gap state (IGS) at 1 eV below Fermi level which acts as a small polaron center. In contrast, the hydrogen ion irradiation at 125 K decreases the TiO<sub>2</sub> conductivity but increases the Ti<sup>3+</sup> chemical state. The low-temperature irradiation induces an in-gap state at 1.3 eV below Fermi level, which is suggested to be a less-conducting state.

### 参考文献

- 1) Wang et. al., Advanced Functional Materials 2013, 23, 5444-5450
- 2) Sun et. al., The Journal of Physical Chemistry C 2011, 115, 25590-25594

## Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> への水素の吸着・吸蔵とスピン注入に関する研究

東京大学生産研<sup>1</sup>, 原子力機構先端研<sup>2</sup> ○大橋悠生<sup>1</sup>, 小澤孝拓<sup>1</sup>, 越田裕之<sup>1</sup>,  
植田寛和<sup>1</sup>, 加藤 弘一<sup>1</sup>, ビルデ マーカス<sup>1</sup>, 福谷克之<sup>1,2</sup>

水素は陽子1個と電子1個からなる最も単純な元素であり、電子は電荷とスピンの性質を持つ。吸着・吸蔵した水素-材料間の電子の相互作用によって材料の電子状態に影響を与える。我々は単一の電子スピン状態を選別できるスピン偏極水素原子ビーム (SPH) [1]を開発した。SPHによって吸着したスピン偏極した水素がトポロジカル絶縁体表面の Dirac 電子へ角運動量を受け渡すことでスピン流-電流変換現象である逆エデルシュタイン効果 [2]を引き起こすと考えている。

本研究では、3D トポロジカル絶縁体である Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> の水素吸着・吸蔵状態の評価と SPH を用いたスピン注入を行った。Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 薄膜に原子状水素曝露すると、水素の表面吸着とファンデルワールスギャップへのインターカレーションが起こることを示唆する結果が得られた。SPH による Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> へのスピン注入の実験では表面に流れる電流を確認した。スピンの向きを反転させた結果から、90 K の Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 薄膜にスピン注入すると、スピン方向で反転する起電力は 3.6  $\mu\text{V}$ 、反転しない起電力は 0.5  $\mu\text{V}$  であることがわかった。

### 参考文献

- 1) Y. Nagaya, et. al., J. Chem. Phys. **155**, 194201 (2021).
- 2) Lee, K.W, Lee, C.E. Sci Rep **10**, 14504 (2020).

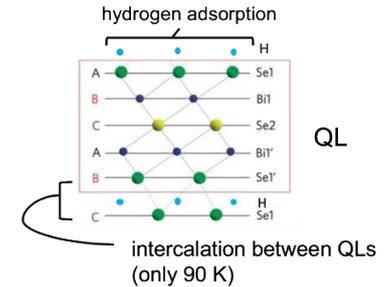


図1. 水素が吸着・吸蔵した Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>

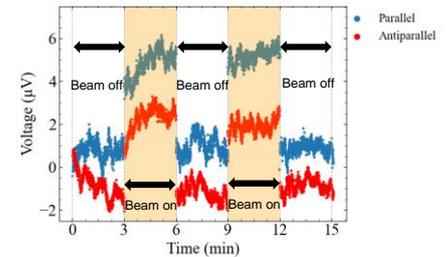


図2. 90 K の SPH 照射時の試料表面の電圧測定結果

## 非円筒真空ダクト内面への NEG コーティング

高エネルギー加速器研究機構<sup>1</sup>, 総合研究大学院大学<sup>2</sup>

○山本将博<sup>1,2</sup>, 谷本育律<sup>1,2</sup>, 本田融<sup>1,2</sup>, 内山隆司<sup>1</sup>, 渡辺瑠合<sup>2</sup>

150~200°C程度の低温活性化で排気作用を有する Ti-Zr-V 系の NEG コーティングは, 1990 年代後半に CERN で開発, Large Hadron Collider (LHC) で利用・実用化<sup>1)</sup> されて以来, 特に近年は MAX-IV や SIRIUS など高輝度放射光蓄積リングのビームダクトなどに積極的に採用されている<sup>2)</sup>. ビームダクト壁そのものに排気作用がある NEG コーティングは小口径のビームダクト内の排気や, 光刺激脱離や電子刺激脱離も低く抑えられるため, これらに起因して起きるビーム不安定性などの問題も抑制できる利点がある. KEK-PF では, これまで NEG コーティングの研究開発を進め, 非円筒対称のビームダクトに対するコーティングの検討, 実験, 評価を行なった.



図: Molflow+によるコーティングシミュレーション (左), 非円筒真空ダクト内面へのスパッタリングの様子 (中央), 成膜面スクラッチ後の表面 SEM 観察 (右)

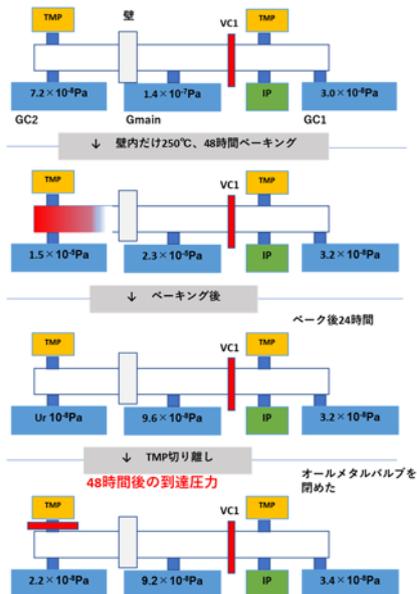
### 参考文献

- 1) C. Benvenuti et al., J.Vac. Sci. Technol. A 16, 148-154 (1998).
- 2) C. Herbeaux et al., Proceedings of EPAC08, Genoa, Italy (2008), THPP147.

## 表面部分窒化高純度チタン蒸着膜の排気速度測定と放射光ビームラインへの応用

KEK 物構研 PF<sup>1</sup>, 総研大<sup>2</sup>, 筑波大<sup>3</sup> ○菊地貴司<sup>1</sup>, 片岡竜馬<sup>1</sup>, 田中宏和<sup>1</sup>,  
若林大佑<sup>1,2</sup>, 大東琢治<sup>1,2</sup>, 仁谷浩明<sup>1,2</sup>, 上園波輝<sup>3</sup>, 櫻井岳暁<sup>3</sup>, 間瀬一彦<sup>1,2,3</sup>

高真空中で加熱すると反応性の高い表面が生成し、残留ガスを排気する材料を非蒸発型ゲッター (NEG) と呼ぶ。真空容器の内面に NEG を蒸着すると、ベーキング後に真空容器が NEG ポンプとなり、無電力で  $10^{-7}$  Pa 以下を維持できる。NEG 蒸着の利点は、活性な残留ガスを排気できることに加えて、真空容器からの脱ガスを低減できること、NEG ポンプ設置のためのスペースが必要ないこと、専用電源、電流導入が必要ないこと、装置を小型化できること、電源消失時の安全安心を確保できること、である。我々は、新しい NEG 蒸着法の開発に取り組み、表面部分窒化高純度チタンを蒸着した真空容器は、真空排気、 $185^{\circ}\text{C}$ 、6 時間ベーキング、真空封止すると  $10^{-7}$  Pa 台の超高真空を維持すること、真空封止下で  $\text{H}_2$ 、 $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{O}_2$ 、 $\text{CO}$ 、 $\text{CO}_2$  の分圧は  $10^{-8}$  Pa 程度以下に保たれること、高純度  $\text{N}_2$  導入、大気曝露、真空排気、 $185^{\circ}\text{C}$ 、6 時間ベーキングのサイクルを 30 回くりかえしても残留ガスを排気することを見出した。本研究では表面を部分的に窒化した高純度チタンを ICF203 ブランクフランジに蒸着して、排気速度を測定した。その結果、 $150^{\circ}\text{C}$ ベーキングで残留ガスを排気し、 $250^{\circ}\text{C}$ までベーキングすると有意に  $\text{H}_2$  を排気することを見出した。さらにビームライン配管内面に表面部分窒化高純度チタンを蒸着し、 $250^{\circ}\text{C}$ ベーキングしたところ、真空封じ切り状態で、 $2.2 \times 10^{-8}$  Pa の超高真空を維持できることを確認した (図)。



イオンポンプなしで $10^{-8}$ Pa台を達成  
⇒約100万円の節約

## 無酸素 Pd/Ti 非蒸発型ゲッター（NEG）を蒸着した溝加工付き ICF フランジの排気性能及び再活性化性能評価

1) 入江工研、2) KEK 物構研、3) 総研大

○狩野悠 1)、矢部学 1)、加藤良浩 1)、正岡裕介 1)、濱中健一 1)、菊地貴司 2)、間瀬一彦 2, 3)

加速器や電子顕微鏡、光電子分光装置など  $1 \times 10^{-8}$  Pa 程度の超高真空が必要な装置では、完全オイルフリー、無騒音、無振動、省スペース、省エネルギー、低コストでありながら、 $10^{-7}$  Pa 以下の超高真空下において高い排気速度を持つ真空ポンプが求められている。KEK の間瀬らはこうした要求に応えるために新しい非蒸発型ゲッター（NEG）である無酸素 Pd/Ti を開発した[1]。無酸素 Pd/Ti は  $133^{\circ}\text{C}$ 、12 時間のベーキング後に室温迄冷却すると  $\text{H}_2$  と  $\text{CO}$  を排気し、真空排気とベーキング、大気導入のサイクルを繰り返しても排気速度が低下しない[2]。本研究では、無酸素 Pd/Ti 非蒸発型ゲッター（NEG）技術の製品化を目的として 24 本の溝を切削加工した ICF203 フランジに無酸素 Pd/Ti 膜を蒸着し、オリフィス法で排気速度測定を複数回実施し再活性化後の性能のばらつきを評価した結果を報告する。

### 参考文献

- 1) T. Miyazawa *et al.*, J. Vac. Sci. Technol. A **36**, 051601 (2018).
- 2) T. Kikuchi *et al.*, AIP Conf. Proc. **2054**, 060046 (2019).