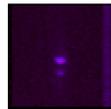
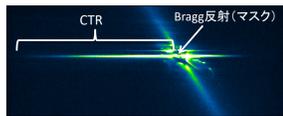
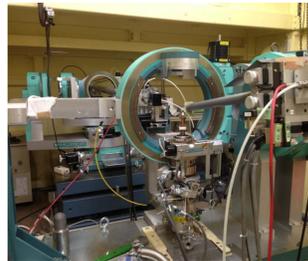
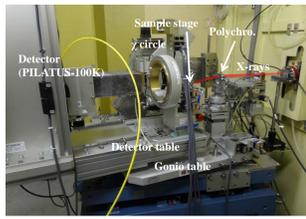


期間: 2015.10 - 2018.9
 課題責任者: 若林裕助(大阪大学)
 実験組織: 高橋敏男, W.Voegeli, 荒川 悦雄(学芸大),
 白澤 徹郎(産総研), 中村 将志(千葉大), 矢野陽子(近畿大)
 実験ステーション: 3A, 4C, AR-NE7A, AR-NW2A

目的:

表面は触媒反応や電気化学反応の場であり、界面はトランジスタに代表される電子デバイスの機能を生じる場である。白金を使わない触媒や、シリコンに変わる電子デバイス材料等、新しい素材の応用を目指す試みが盛んになっている今日、多様な物質の表面や界面に対する原子レベルでの構造理解、及びそれに基づく物性の微視的理解の重要性と需要は過去に高く高まっている。本課題では、このような重要性を持つ表面・界面を構造物性の立場で理解する事を目的とする。



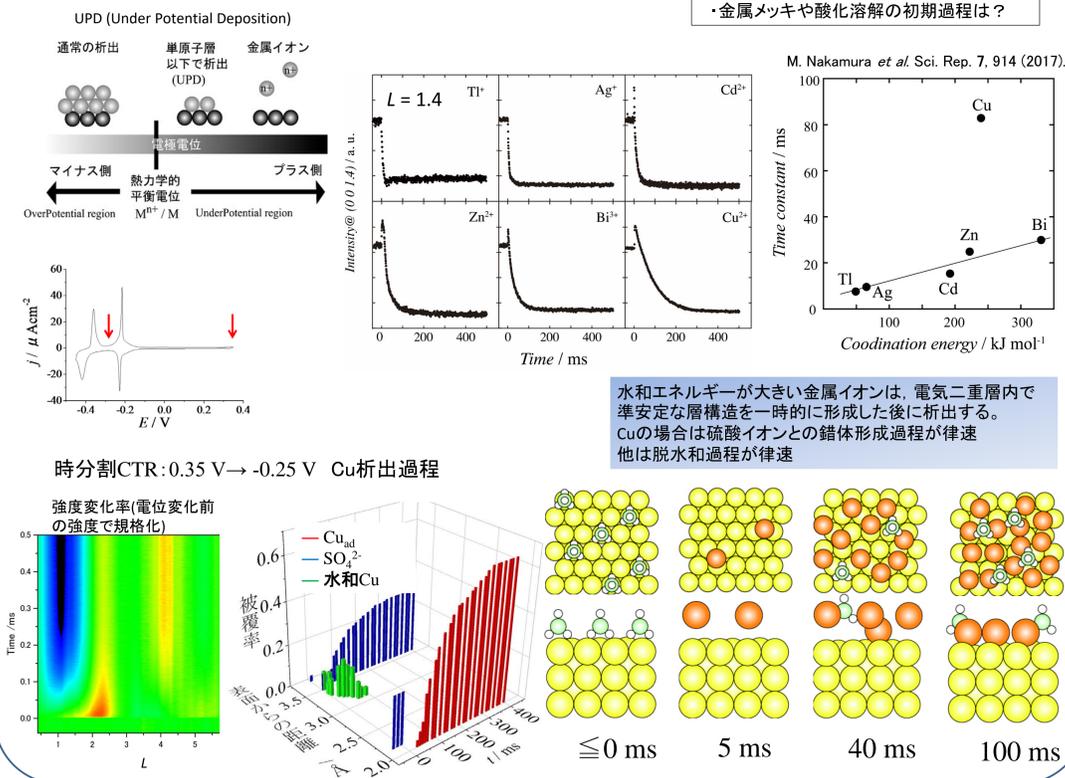
LaNiO₃/LaAlO₃ 2層膜 (0,0,2.625)

計画:

•BL-3AのSGU光は多くのペロブスカイト酸化物、有機半導体のCTR散乱を広い逆空間の領域で測定するのに十分な強度を持つ。これを利用して、物質表面の静的な構造を高い空間分解能で観測する測定を行う。
 対象: 有機半導体の表面緩和、金属酸化物超薄膜の界面構造
 時分割測定のための参照データ取得

•1秒の時間分解能での時分割測定が2013S2-001(課題責任者: 松下正)で開発された回折計で実現可能になった。これを利用して、触媒反応や電気化学反応の時分割測定を実施する。
 対象: 固液界面の電気二重層、電気化学反応、光誘起結晶成長過程

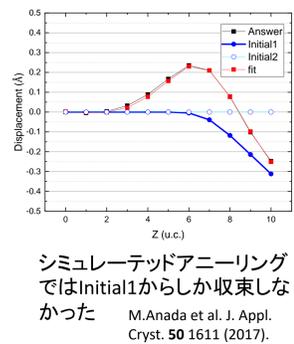
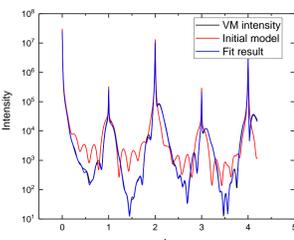
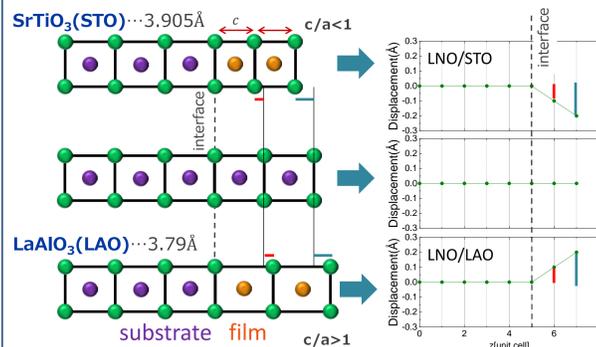
金属の析出過程に見られる中間体



ベイズ推定を用いた解析法の開発

レプリカ交換モンテカルロ法を適用
 → 基板の構造を初期値にして正解に収束

良いfitが得られなければ、モデルが間違っていると思える。



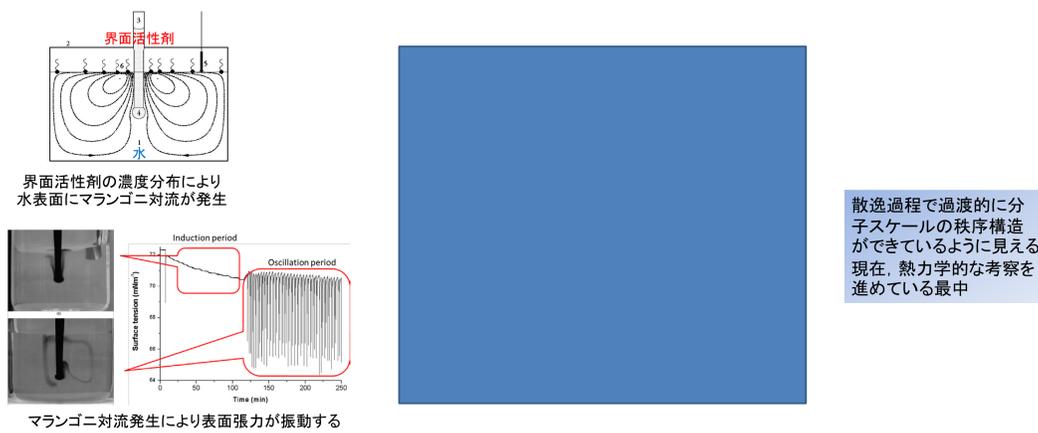
適用例: SiC(0001)上のグラフェン (名大 楠, 乗松)



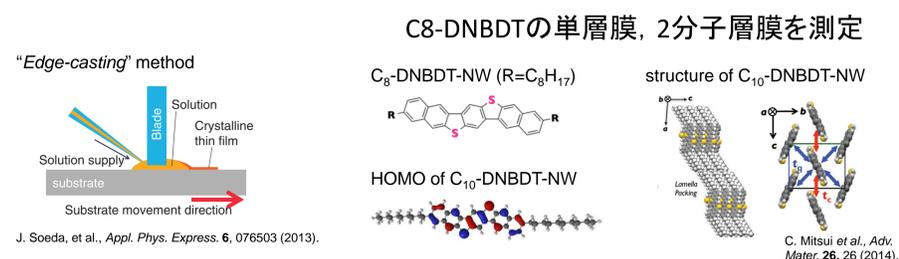
MC法の利点

- 解の確率密度が得られる → 精度・確度の評価に自信が持てる
- 拘束条件をかなり自由に設定できる。
- 他の実験結果から、大体この位、というような見積りも組み込む事ができる。

マランゴニ対流発生に伴う自己組織化膜形成過程



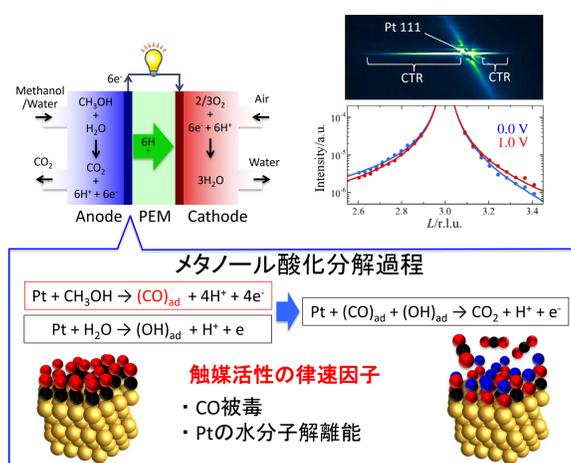
塗布型有機半導体膜の構造 (東大 竹谷)



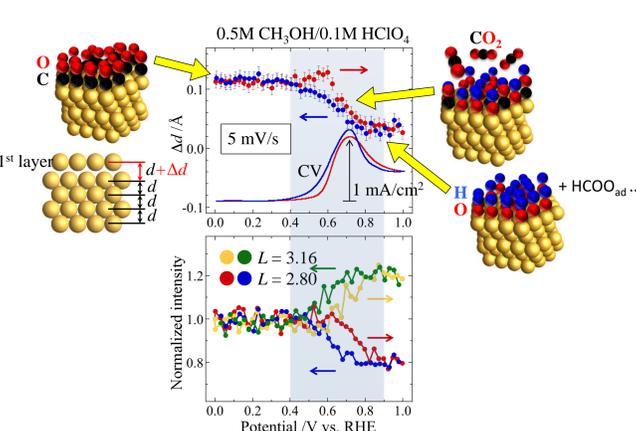
メタノール燃料電池の触媒活性

固液界面での時分割CTR測定

T. Shirasawa *et al.* J. Phys. Chem. C 121, 24726-24732 (2017).



CTR-CV同時測定



時間発展の測定から、CO被毒が律速因子と結論

まとめと今後

時分割、空間分解、どちらも成果が出始めてきた。測定後の解析に時間がかかるためどうしても実験から出版までにタイムラグがあるが、解析法の開発による高速化を期待したい。

今後の予定

- (1) 解析法の高度化を進め、乱れを正しく取り扱えるように開発を進めたい。
- (2) 固液界面の時定数がちょうどこの手法に向いているようなので、そこに力を注ぐ。
- (3) 電池材料やグラフェンなど、応用に関連しそうな方向を狙う。