

# 原子配置の正確な決定に基づく物質表面特性の理解に関する連携の調査研究

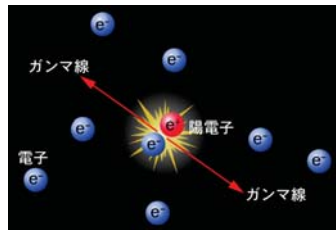
Investigation of possible cooperative researches for the properties of material surfaces based on the structural analysis by positron diffraction

## 概要

「陽電子(電子の反粒子)」をもちいた、表面原子の配置に極めて高い感度を達成する陽電子回折法、とりわけ全反射高速陽電子回折(TRHEPD)は、KEK物構研においてJAEAおよびQSTと共同で整備が進み、画期的な成果が生まれています。本かけはし調査研究では、さまざまな機関で行われている物質表面特性・機能解明の研究を、陽電子回折の優れた表面原子配置決定力と密に連携させ、格段に進展させる可能性を調査しました。

## ● 陽電子 (e<sup>+</sup>)

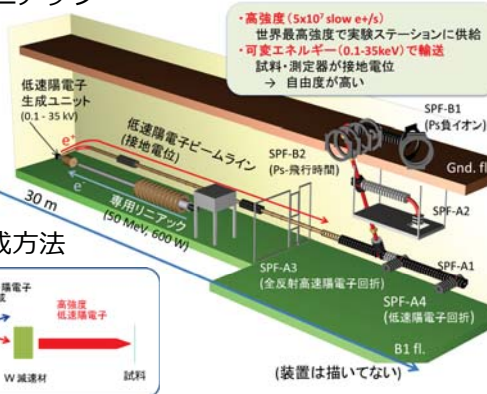
- 電子の“反粒子”
- 質量などの性質は電子と同じだが、電荷だけプラスで異なる
- 電子と出会うと対消滅 ⇒  $\gamma$  線
- 放射性同位元素からの自然放出を使うか、加速器でつくる



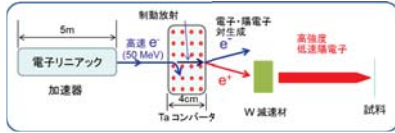
## ● KEK低速陽電子実験施設

- 陽電子生成専用リニアック

エネルギー: 45 MeV  
パルスビーム: 50Hz  
時間幅: 1  $\mu$ s  
(強度  $\sim 10^7$  e<sup>+</sup>/s)  
または、1~10 ns  
(強度  $\sim 10^6$  e<sup>+</sup>/s)

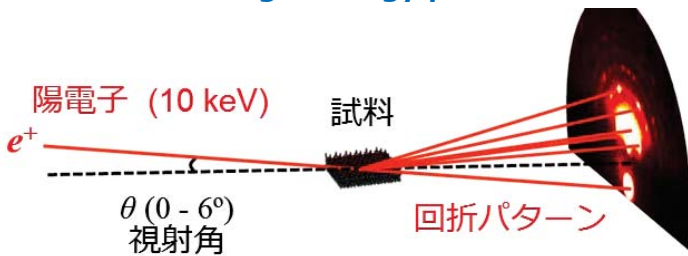


- 陽電子ビームの生成方法

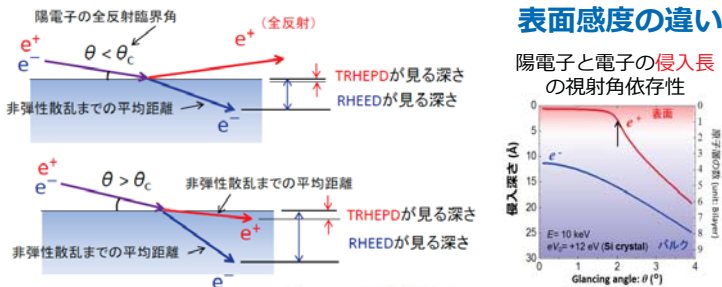


## ● 全反射高速陽電子回折 (TRHEPD)

Total-reflection high-energy positron diffraction



- 視射角を変えたときの電子と陽電子の進み方と



これまで原子配置の詳細が定められていなかった様々な表面構造を、表面超高感度なTRHEPD法をもちいて徐々に決定している。

## ● 陽電子回折ではこんなコトができます

ルチル型チタニア(110) (1x2)表面構造確定 (2016)

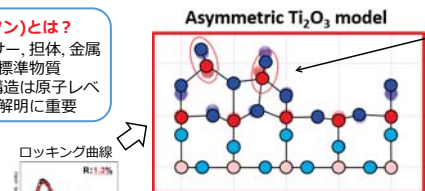
“30年来残された謎であった光触媒TiO<sub>2</sub>表面の原子配置を最表面に超高感度なTRHEPDで決定”

**TiO<sub>2</sub> (酸化チタン)とは?**  
 ✓ 光触媒、気体センサー、担体、金属酸化物触媒などの標準物質  
 ✓ 単結晶 TiO<sub>2</sub> 表面構造は原子レベルの触媒プロセス解明に重要

ルチル型 TiO<sub>2</sub> (110) (1x2)表面



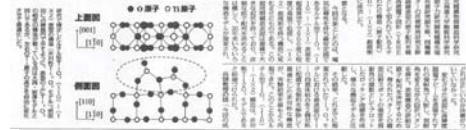
30年構造確定しなかった



I. Mochizuki et al., *PCCP* 18, 7085 (2016)

新聞にも掲載されました (科学新聞 2016年3月11日)

30年未解明の光触媒TiO<sub>2</sub>表面  
高工ネ研、北大など原子配置決定



Picked up as a research news of “Chemistryworld”

(Royal Society of Chemistry, 24 March 2016\*)

\* <http://www.rsc.org/chemistryworld/2016/03/surface-bulk-analysis-positron-spectroscopy-titanium-dioxide-structure>

This work was supported by JSPS KAKENHI Grant Numbers (S)24221007, (B)26800170.



## 金属基板上グラフェンとその界面構造決定 (2016)

“グラフェンと金属の間の界面構造を世界で初めて実験的に解明” - グラフェンをもちいた新規材料開発に道 -

**最表面の原子配置決定と共に、グラフェンの機能発現に重要な界面の構造を解明した**

Y. Fukaya, et al., *Carbon* 103, 1 (2016)

KEK低速陽電子実験施設は、フォトンファクトリーを通じて共同利用実験が可能です。詳細は当施設のホームページを <http://pfwww.kek.jp/slowpos/> ご覧の上、兵頭もしくは望月までご連絡下さい。