

令和 4 年 6 月 13 日現在

機関番号：82118

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K12651

研究課題名(和文)全反射高速陽電子回折によるチタニア表面の光照射反応におけるモルフォロジ変化の解明

研究課題名(英文)Structural analysis for photo-excited Titania surfaces by using total-reflection high-energy positron diffraction

研究代表者

望月 出海(MOCHIZUKI, Izumi)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・助教

研究者番号：30579058

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、anatase型TiO<sub>2</sub>(001)(4×1)表面の構造決定を試み、add-moleculeモデルが、一連のTRHEPD実験結果を説明できることが分かった。これにより、20年間議論されてきたanatase型TiO<sub>2</sub>(001)(4×1)表面の構造モデルの議論に決着をつけた。TRHEPD構造解析において原子配置の精緻かつ高速な解析を可能にするデータ科学的手法の導入にも成功した。今後の研究展開として、anatase型TiO<sub>2</sub>(101)(1×1)表面の、“時間分解”構造解析の手法開発についても掘り下げて行きたい。

研究成果の学術的意義や社会的意義

Anatase型TiO<sub>2</sub>(001)(4×1)表面構造を決定し、add-moleculeモデルが、一連のTRHEPD実験結果を説明できることが分かった。これにより、20年間議論されてきた構造モデルの論争に決着をつけた。また、TRHEPD構造解析において原子配置の精緻かつ高速な解析を可能にする汎用表面構造解析ソフトの開発&導入に成功した。これにより、経験の乏しいユーザーでも経験者に匹敵する解析を、自動かつ簡便に行うことができるようになった。

研究成果の概要(英文)：This study determined the structure of an anatase-type TiO<sub>2</sub>(001)(4×1) surface. We found that the add-molecule model explains TRHEPD experimental results. This settled the 20-year debate on the structural model of the surface. We successfully introduced a data-scientific method which enables precise and fast determination of atomic configurations in TRHEPD structural analysis. In the future, we will develop a new analytical method for the "time-resolved" TRHEPD structural analysis in the study of an anatase-type TiO<sub>2</sub>(101)(1×1) surface.

研究分野：表面科学

キーワード：表面 回折 陽電子 全反射高速陽電子回折(TRHEPD) チタニア

### 1. 研究開始当初の背景

TiO<sub>2</sub>はチタニアとも呼ばれ、担持金属触媒、センサー材料、汚染除去、殺菌、太陽電池などの触媒<sup>1-5)</sup>として実用化されている他、光触媒や触媒担体の研究における標準物質<sup>6)</sup>として扱われている。最近では光励起によるキャリア制御<sup>7)</sup>といった、半導体デバイスの新素材という新たな一面も注目されている。

Anatase 型の TiO<sub>2</sub> (001) (4×1)表面に目を向けると、そうした光相互作用の発現機序の解明が注目されているのに加えて、酸素欠損型キャリアドープによる表面2次元電子状態の形成が報告<sup>7)</sup>され、低次元量子物性発現の舞台としても注目されている。一方で、欠陥によるキャリア注入は、表面構造を破壊し電気伝導を阻害するため、デバイス応用に適さないと考えられていた。ところが最近、LaAlO<sub>3</sub> (001) 基板上に欠陥を伴わない高品質薄膜が合成<sup>8)</sup>されたことで状況が一変し、表面の原子配置、電子状態、光-キャリア励起反応など、詳細な物性解明の研究が進み始めた。

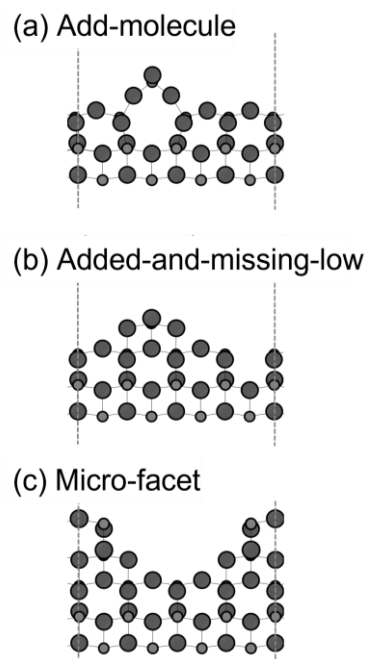
そうした中、Anatase 型 TiO<sub>2</sub> (001) (4×1)表面の原子配置という最も基礎的な問いも、実はまだ決着しておらず、過去20年にわたる研究で複数の構造モデル<sup>9-12)</sup>が提案されてきた。図1に、議論となっている3つの代表的なモデル、(a) add-molecule モデル<sup>9,10)</sup>、(b) added-and-missing-low モデル<sup>11)</sup>、(c) micro-facet モデル<sup>12)</sup>を示した。このように表面の起伏に富んだ複雑さから、実験的に原子配置を確定することが難しく、回折法による原子配置(各原子の位置座標)の精緻な決定が望まれている。

### 2. 研究の目的

こうした背景から、本課題は、高エネルギー加速器研究機構(KEK)の低速陽電子実験施設(SPF)で行われている全反射高速陽電子回折(TRHEPD, トレプト)法をもちいて、①Anatase 型 TiO<sub>2</sub> (001) (4×1)表面の原子配置を決定することを目的とした。このため本研究では、TRHEPD データ解析において、②原子配置の高精度解析を汎用かつ自動で誰でもできるようになることを目指したデータ科学的手法の開発と導入も同時に進めた。また、チタニア表面の光触媒反応におけるモルフォロジー変化の長年の議論を解決するため、酸素、水素などの雰囲気環境を測定槽内につくり、そこに光照射することで疑似的な触媒反応環境を再現し、その場 TRHEPD 測定することで、反応時の構造変化を明らかにすることを目的として、③O<sub>2</sub> 雰囲気下の紫外光照射によりモルフォロジー変化が期待される anatase 型 TiO<sub>2</sub> (101) (1×1)表面構造解析についても対象とした。

### 3. 研究の方法

TRHEPD は、反射高速電子線回折(RHEED)の陽電子版で、10 keV 程度の高輝度化した陽電子ビーム<sup>15,16)</sup>を試料表面にすれすれ視射角で打ち込み、進行方向に配置したマイクロチャンネルプレート(MCP)と蛍光スクリーンをもちいて回折パターンを得る。本研究では、TRHEPD パターンを取得する際、打ち込むビームの試料面内の方向、すなわちビーム入射方位角を、「一波条件」<sup>18)</sup>と、「多波条件」<sup>18,19)</sup>の方位にセットし、鏡面反射強度の視射角依存性(ロッキング曲線)<sup>13,18)</sup>を測定した。一波条件のロッキング曲線形状は、表面垂直(z)方向の原子配置のみに依存し、



Figs. 1: anatase-TiO<sub>2</sub> (001) (4×1) 表面原子配置モデル. (a) add-molecule モデル. (b) added-and-missing-low モデル. (c) micro-facet モデル. 明灰丸はTi原子. 暗灰丸はO原子. 点線は4倍周期幅のガイドライン.

表面平行 ( $x, y$ ) 方向に依らない<sup>18)</sup>。したがって  $x, y$  面内の原子配置に関するパラメータを考慮することなしに  $z$  方向だけに集中して短時間に構造解析できる。この方法は、例えば構造モデルが複数ある場合のモデル峻別に力を発揮できる。一方、多波条件のロッキング曲線形状は、 $x, y$  方向も含めた 3 次元の原子変位に依存<sup>18,19)</sup>し、 $x, y$  面内の原子配置まで含めた、完全な 3 次元の原子位置座標を決定することができる。

#### 4. 研究成果

##### ① Anatase 型 $\text{TiO}_2$ (001) (4×1) 表面の構造決定

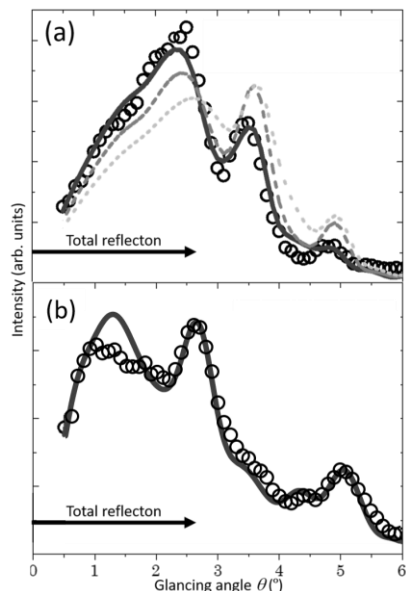
本研究では、anatase 型  $\text{TiO}_2$  (001) (4×1) 表面の構造決定を試み、以下に述べるように、Fig. 1(a) の add-molecule モデルが、一連の TRHEPD 実験結果<sup>20)</sup>を説明できることが分かった。これにより、20 年間議論されてきた anatase 型  $\text{TiO}_2$  (001) (4×1) 表面の構造モデルの議論に決着をつけた。

図 2 (a) の白抜丸は、一波条件の TRHEPD ロッキング曲線の実験値を示した。また、そこに重ねて、図 1(a)-(c) のモデルの原子配置から再現計算したロッキング曲線を示した。それぞれ、実線は add-molecule モデル<sup>9,10)</sup>、破線は added-and-missing-low モデル<sup>11)</sup>、点線は micro-facet モデル<sup>12)</sup>に対応している。

Added-and-missing-low モデル (破線) と micro-facet モデル (点線) は、全反射領域内の  $\theta = 2.2^\circ$  付近のピークの高さや位置、そして  $\theta = 3.5^\circ$  付近に現れているピークの高さを再現できず、曲線形状の一致度を示す信頼因子 ( $R$ )<sup>18)</sup>は、それぞれ 3.1%、5.2%と算出された。どちらも経験的に構造モデルが正しいと判断できる“2%以下”という値を超えてしまっており、一致は良くなかった。一方で、add-molecule モデル (実線) による曲線は、実験結果を概ね良く再現できており、 $R$  値も 1.4%と算出された。すなわち add-molecule モデルのみで、 $R$  値 2%を切る結果を得ることができた。

続いて、図 2(b) に多波条件のロッキング曲線の実験値を白抜丸で示した。加えて、add-molecule モデルの面内  $x, y$  座標まで含めた 3 次元の原子位置座標を初期値として、最表面から 7 原子までの  $x, y, z$  座標 (21 個) をパラメータとして最適化した計算結果 (実線) を重ねて示した。このフィッティング解析の結果、 $R$  値は 1.8%と算出された。

このように、anatase 型  $\text{TiO}_2$  (001) (4×1) 表面の TRHEPD 構造解析を行ったところ、計算結果は概ね実験を再現するに至り、基本構造として add-molecule モデルの組成と原子配置<sup>9)</sup>が正しいことが明らかになった。一方で、多波条件の解析 (図 2. (b)) は、原子配置の最適化計算後においても、最も表面感度の高い全反射条件下の  $\theta = 1^\circ \sim 1.8^\circ$  付近の曲線形状に違いが見られており、実験と計算の一致が十分とは言えない部分も見られる。この原因について調査中であるが、その理由として、本表面は超高真空環境に晒されると表面の O 原子が抜けて欠陥が導入されるとの報告もある。O 原子の欠損によるランダムな欠陥、すなわち“表面の荒れ”が生じたことで、表面敏感な全反射条件における反射強度が減衰した可能性がある。この改善には、酸素雰囲気下 ( $1 \times 10^{-3}$  Pa 程度) の TRHEPD 測定が有効と考えており、現在、その測定を準備している。また今後、最表面層の Ti, O 原子の欠損を原子密度としてパラメータに含めた、( $x, y, z, d$ ) の 28 変数のフィッティング解析も進め、これらの情報を集約して add-molecule モデルの正しい 3 次元原子位置座標を確定する必要がある。



Figs. 2: anatase- $\text{TiO}_2$  (001) (4×1) 表面の TRHEPD ロッキング曲線. (a)一波条件. (b)多波条件. 白抜丸は実験結果. それぞれ実線, 破線, 点線, は add-molecule モデル, added-and-missing-low モデル, micro-facet モデルによる計算結果.

また付加的情報として、ここでは 2DMAT の機能を利用して、TRHEPD 解析から求めた原子位置座標を初期値として、第一原理 DFT 計算 (Quantum ESPRESSO) によるエネルギー的な構造安定化計算も行った。この結果も、add-molecule モデルを初期値とした計算が、他と比較してエネルギー的に最安定である結果が得られている。

これらに関連する TRHEPD 構造解析の成果について、物理学会・表面学会・陽電子科学会、その他講演会等で発表した。また再測定の結果を踏まえた上記構造解析を進め、本成果をまとめて論文投稿する予定である。

## ② 2DMAT による TRHEPD 構造解析の高度化

本研究では、TRHEPD 構造解析において原子配置の精緻かつ高速な解析を可能にするデータ科学的手法の導入にも成功した。具体的には、鳥取大・星准教授らを中心に、これまで共同開発を進め、最近ついにリリースされた汎用構造解析ソフト「2DMAT」をもちいて、アナターゼ型  $\text{TiO}_2(001)(4\times 1)$  表面に対して原子位置座標の自動フィッティング解析 (①の結果) を行った。ここでは例えば、2DMAT の機能として、偏微分をもちいない高速な原子位置座標の最適化手法である Nelder-Mead 法を TRHEPD 解析に応用し、これまで手計算や熟練者の経験に大きく依存していたフィッティング解析を、汎用 PC 上で高速・高精度に自動で行う手法を導入するに至った。これにより、これまでほとんど不可能であった 20 変数以上の原子位置座標の同時フィッティング計算を、ごく短時間 (①の解析は通常 PC で 2 時間程度) で行うことが可能となった。また例えば、スパコンによる構造パラメータを絨毯爆撃的に大域検索する「グリット検索法」と、各パラメータ変数の相関を表す固有値解析を複合することで、各変数の不確かさを統計的に正しく見積もる手法 (感度解析) も開発した。

本ソフトを利用することで、上述のような精緻な原子位置座標決定を、誰もが同じように利用でき、同じ結論を得られるという利点は、非常に重要な成果と考えている。これらに関連する成果について物理学会・表面学会・陽電子科学会、国際学会等で発表し、成果投稿も行った。

## ③ Anatase 型 $\text{TiO}_2(101)$ 表面構造と光照射による酸素欠損導入による経時変化

本研究において、構造未解決である anatase 型  $\text{TiO}_2(101)(1\times 1)$  表面についても、TRHEPD によるデータ取得と構造解析を進めた。この表面では、光照射前の欠陥の無い清浄な表面と、紫外光照射下における TRHEPD 測定データの比較から、最表面 O 原子の欠損に起因すると考えられるロッキング曲線形状の経時的な変化を観測した。そこで、このように構造が時間的に連続的に変化する現象を、漸次的変化とみなして数理的に解析する手法についても 2DMAT 上で取り扱えないか議論を開始している。まだ具体的な成果をあげる段階には至っていないが、今後の研究展開として、新たに、“時間分解”構造解析の手法開発についても、本研究をきっかけに掘り下げて行きたいと考えている。

- 1) S. J. Tauster, S. C. Fung, R. T. K. Baker and J. A. Horsley, *Science* **211**, 1121 (1981).
- 2) B. Karunakaran, P. Uthirakumar, S. J. Chung, S. Velumani and E. K. Suh, *Materials Characterization* **58**, 680 (2007).
- 3) J. Huang and M. Haruta, in *Bridging Heterogeneous and Homogeneous Catalysis: Concepts, Strategies, and Applications*, ed. C. Li and Y. Liu, Wiley-VCH, Weinheim, p. 397-424 (2014).
- 4) A. Fujishima and K. Honda, *Nature* **238**, 37 (1972).
- 5) A. Fujishima, K. Nakata, T. Ochiai, A. Manivannan and D. A. Tryk, *The Electrochem. Soc. Interface* **22**, 51 (2013).
- 6) U. Diebold, *Surf. Sci. Rep.* **48**, 53 (2003).
- 7) T. C. Rödel et al., *Phys. Rev. B* **92**, 041106 (2015).
- 8) M. Emori et al., *Phys. Rev. B* **85**, 035129 (2012).
- 9) M. Lazzeri and A. Selloni, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 266105 (2001).
- 10) W. Yuan, H. Wu, H. Li, Z. Dai, Z. Zhang, C. Sun, and Y. Wang, *Chem. Mater.* **29**, 3189 (2017).
- 11) G. S. Herman, M. R. Sievers, and Y. Gao, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3354 (2000).

- 12) Y. Liang, S. Gan, and S. A. Chambers, and Eric I. Altman, *Phys. Rev. B* **63**, 235402 (2001).
- 13) A. Ichimiya, *Solid State Phenom.* **28/29**, 143 (1992).
- 14) A. Kawasuso and S. Okada, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2695 (1998).
- 15) K. Wada, T. Hyodo, A. Yagishita, M. Ikeda, S. Ohsawa, T. Shidara, K. Michishio, T. Tachibana, Y. Nagashima, Y. Fukaya, M. Maekawa and A. Kawasuso, *Eur. Phys. J. D* **66**, 37 (2012).
- 16) M. Maekawa, K. Wada, Y. Fukaya, A. Kawasuso, I. Mochizuki, T. Shidara and T. Hyodo, *Eur. Phys. J. D* **68**, 165 (2014).
- 17) Y. Fukaya, M. Maekawa, A. Kawasuso, I. Mochizuki, K. Wada, T. Shidara, A. Ichimiya and T. Hyodo, *Appl. Phys. Express* **7**, 056601 (2014).
- 18) A. Ichimiya, *Surf. Sci.* **192**, L893 (1987).
- 19) Y. Horio, Y. Takakuwa and S. Ogawa, *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **12**, 380 (2014).
- 20) 望月出海, (公財) 日本板硝子工学助成会, **38**, 192 (2020).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Tanaka K., Hoshi T., Mochizuki I., Hanada T., Ichimiya A., Hyodo T.	4. 巻 137
2. 論文標題 Development of Data-Analysis Software for Total-Reflection High-Energy Positron Diffraction (TRHEPD)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Acta Physica Polonica A	6. 最初と最後の頁 188 ~ 192
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.12693/APhysPoIA.137.188	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hoshi Takeo, Sakata Daishiro, Oie Shotaro, Mochizuki Izumi, Tanaka Satoru, Hyodo Toshio, Hukushima Koji	4. 巻 271
2. 論文標題 Data-driven sensitivity analysis in surface structure determination using total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 108186 ~ 108186
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2021.108186	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計23件（うち招待講演 3件/うち国際学会 5件）

1. 発表者名 中司湧星, 濱田雅史, 田中和幸, 篠原彩, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 10pJ1-2_全反射高速陽電子回折(TRHEPD)を用いたSi405N3/6H-SiC (0001)-( 3 × 3) R30 ° 多層表面構造解析
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会 (2020/9/10)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 星健夫, 田中和幸, 阪田大志郎, 尾家翔太郎, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫
2. 発表標題 11aJ1-1_全反射高速陽電子回折(TRHEPD)を用いたSi405N3/6H-SiC (0001)-( 3 × 3) R30 ° 多層表面構造解析
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会 (2020/9/11)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 濱田雅史, 武田朋也, 辻川夕貴, 坂田大志郎, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 11aJ1-3全反射高速陽電子回折法とデータ駆動科学を用いたPb/Si(111)表面超構造の構造解析
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会 (2020/9/11)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 濱田雅史, 辻川夕貴, 望月出雲, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法とデータ駆動科学によるPb/Si(111)表面超構造の構造解析
3. 学会等名 2020年日本表面真空学会学術講演会 (2020/11/19)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 和田健, 望月出海, 兵頭俊夫, 永井康介
2. 発表標題 KEK低速陽電子実験施設報告
3. 学会等名 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」 (2020/12/11)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 阪田大志郎, 尾家翔太郎, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫, 福島孝治, 星健夫
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)におけるデータ駆動科学と Si <sub>405</sub> N <sub>3</sub> / 6H-SiC (0001)-( 3× 3) R30° 多層表面
3. 学会等名 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」 (2020/12/11)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 望月出海, 和田健, アハメッドレズワン, 兵頭俊夫, 永井康介
2. 発表標題 汎用試料準備チェンバの整備
3. 学会等名 低速陽電子実験施設研究会 (2021/2/9)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 濱田雅史, 武田朋也, 辻川夕貴, 阪田大志郎, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 TRHEPD を用いたPb/Si(111)表面超構造の構造と原子密度解析
3. 学会等名 低速陽電子実験施設研究会 (2021/2/9)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 武田朋也, 濱田雅史, 辻川夕貴, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折によるPb 蒸着SiC 基板上グラフェンの構造解析
3. 学会等名 低速陽電子実験施設研究会 (2021/2/9)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 永井康介, 和田健, 望月出海, Rezwan Ahmed, 長嶋泰之, 兵頭俊夫, 一宮彪彦, 五十嵐教之, 二谷浩明, 小菅隆, 齋藤裕樹, 石井晴乃, 永谷康子, 古川和朗, 峠暢一, 諏訪田剛, 榎本嘉範, 白川明広, 設楽哲夫, 岩瀬広, 河裾厚男, 前川雅樹, 白澤徹郎, 満汐孝治, 石田明, 周健治, 星健夫
2. 発表標題 低速陽電子実験施設報告
3. 学会等名 2020年度量子ビームサイエンスフェスタ (2021/3/10)
4. 発表年 2021年



1. 発表者名 濱田雅史, 武田朋也, 辻川夕貴, 坂田大志郎, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 Pb/Si(111)- 3× 3 表面超構造における構造の原子密度依存性: 全反射高速陽電子回折法とデータ駆動科学による構造解析
3. 学会等名 日本物理学会, 第76回年次大会 (2021/3/12)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 I. Mochizuki, Y. Fukaya, Y. Endo, A. Takayama, S. Hasegawa, A. Ichimiya, and T. Hyodo
2. 発表標題 Recent studies of Surface Structure Analysis with Total-Reflection High-Energy Positron Diffraction (TRHEPD) at Slow-Positron Facility, KEK
3. 学会等名 International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (SLOPOS-15), Prague, Czech (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 I. Mochizuki, K. Wada, Y. Fukaya, T. Shirasawa, Y. Endo, A. Takayama, S. Hasegawa, A. Ichimiya, Y. Nagashima, M. Maekawa, A. Kawasuso, A. Ishida, N. Toge, K. Furukawa, Y. Nagai, T. Hyodo
2. 発表標題 Present Status of the Slow Positron Facility of Institute of Materials Structure Science, KEK
3. 学会等名 Poster No. 30, International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (SLOPOS-15), Prague, Czech (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Tanaka, T. Hoshi, I. Mochizuki, A. Ichimiya, and T. Hyodo
2. 発表標題 Data-scientific software for the surface structure analysis by total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)
3. 学会等名 Poster No. 26, International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (SLOPOS-15), Prague, Czech (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中司湧星, 田中和幸, 篠原彩, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法とデータ駆動科学を用いたCu/Si(111)表面超構造の原子配列解析
3. 学会等名 1Ca10, 2019年日本表面真空学会学術講演会(つくば国際会議場)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中司湧星, 田中和幸, 篠原彩, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法による単原子層銅シリサイドCu/Si(111)の構造解析
3. 学会等名 11aK21-7, 日本物理学会2019年秋季大会(岐阜大)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Tanaka, T. Hoshi, I. Mochizuki, A. Ichimiya, and T. Hyodo
2. 発表標題 Data-scientific software for the surface structure analysis by total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)
3. 学会等名 S-0819, The 4th Japan-China Joint Workshop on Positron Science (JWPS 2019), Nara, Japan (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 望月出海
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折法によるルチル型 TiO <sub>2</sub> (110)-(1×2)表面原子配置の決定
3. 学会等名 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」(京大熊取)(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中和幸, 尾家翔太郎, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫, 星健夫
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折実験データ解析によるSiONの構造探索
3. 学会等名 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」(京大熊取)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中和幸, 尾家翔太郎, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫, 星健夫
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)実験データ解析によるSi405N3/6H-SiC (0001) (r3 x r3) R30表面構造決定
3. 学会等名 19aB42-81297, 日本物理学会第75回年次大会(2020年)(名古屋大:現地開催中止)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 星健夫, 望月出海, 岩本晴道, 一ノ瀬颯人, 阪田大志郎, 吉見一慶, 本山裕一, 福島孝治
2. 発表標題 汎用データ解析ソフト2DMATと全反射高速陽電子回折実験への適用
3. 学会等名 第6回計測インフォマティクス研究会(人工知能学会第2種研究会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 望月出海
2. 発表標題 低速陽電子実験施設における全反射高速陽電子回折(TRHEPD)装置
3. 学会等名 スパコンを用いた実験データ解析の新展開:量子ビームによる2次元物質構造解析への適用(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Takeda, M. Hamada, Y. Tujikawa, I. Mochizuki, T. Hoshi, T. Hyodo, A. Takayama
2. 発表標題 The layer-number dependence on structure of graphene/SiC studied by TRHEPD
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9) (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

低速陽電子実験施設 <a href="https://www2.kek.jp/imss/spf/">https://www2.kek.jp/imss/spf/</a>
--

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------