

■会議報告

The first international workshop on Momentum Microscopy & Spectroscopy for Materials Science 会議報告

松井文彦, 解良聡 (分子科学研究所)

2019年2月22日~23日の二日間に渡り、岡崎コンファレンスセンターにて表題の国際ワークショップを開催しました。年度末、大学では入試などのお忙しい中、60名を超える方々にご参加いただき素晴らしい研究会とすることができました。まずは会への参加・ご講演や発表、議論やアドバイスを通じ、ご協力いただいた多くの方々に御礼申し上げます。

UVSOR-IIIはこれまで施設・ユーザーの協力のもと、丁寧なメンテナンスと性能向上が図られてきており、極端紫外光領域で回折限界の低エミッタンスを達成したフロントティアのリングです。分子研ではこのハイエンドの放射光リングの先端利用を具体化する施策として、2019年度から波数空間分解光電子分光システム (Momentum Microscope) を新しく導入し、本装置を中心に物性科学・分子科学の研究の一拠点を形成する計画を推進しております。本研究会では光電子物性研究分野の連携を強めるとともに本装置を利用した研究展開を進める潜在的なユーザーコミュニティを築きたい、という趣旨で光電子分光関連手法による研究展開を精力的に進めている以下の第一線の先生方にお集まりいただきました。

Keynote lecture :

菅滋正先生 (阪大) “Frontier of Spin- & Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy by Momentum Microscopy”

海外からの招待講演 :

Sergey Subach 先生 (Forschungszentrum Jülich PGI-3) “Dependence of the adsorption height of graphenelike adsorbates on their dimensionality”

Lada V. Yashina 先生 (Lomonosov Moscow State Univ.) “Gap opening and spin dynamics in topological insulators”

国内からの招待講演 :

石田行章先生 (物性研) “Slit-less” ARPES analyzers: Some utilities and prospects in surface photo-electronics

奥田太一先生 (広島大学) “Recent activities and future prospects of spin- and angle-resolved photoemission spectroscopy at HiSOR”

久保園芳博先生 (岡山大学) “Pressure-induced superconductivity in metal doped topological materials and two-

dimensional materials”

Peter Krüger 先生 (千葉大学) “Theoretical advances in angle-resolved photoelectron and resonant Auger electron spectroscopy”

小嗣真人先生 (東京理科大学) “Topological data analysis of labyrinth magnetic domain”

坂本一之先生 (千葉大学, 現大阪大学) “Spin-polarized bands at solid surfaces”

堀場弘司先生 (KEK) “Synchrotron-based ARPES study at VUV-SX combination beamline KEK-PF BL-2 MUSASHI”

松下智裕先生 (理研 SPring-8) “Determination of dopant structure by photoelectron holography”

森川良忠先生 (大阪大学) “First-principles Theoretical Study on Atomic Geometries, Electronic Properties, and Chemical Reactivity of Active Sites at Graphene”

山田洋一先生 (筑波大学) “STM and photoelectron spectroscopy of well-ordered organic systems: Doping and interfaces”

施設側から :

松井文彦 “The Momentum Microscope Project at UVSOR”

解良聡 “Imaging of electron delocalization upon assembling the molecules”

Keynote lecture として、菅大阪大学名誉教授にまず Momentum Microscope および 2次元スピフィルターの特徴とそれを利用した最新の成果について概説いただきました。今回多くの講演にトポロジカル絶縁体 Bi_2Se_3 のディラックコーンが登場しましたが、2次元スピフィルターを用いて観測すると Bi_2Se_3 のほぼすべての価電子帯分散がスピ偏極している様子が分かることが示されました。いまだ実現していない日本の放射光施設への Momentum Microscope の導入と直入射配置による測定システム構築への期待が述べられました。質疑応答ではコメントとして、低エネルギーの放射光施設に導入する計画への積極的な支持がありました。

施設側から松井が Momentum Microscope 導入計画を説明しました。特徴として次の3点を念頭に、Momen-



図1 研究会初日ポスターセッション会場にて。

tum Microscope の設計指針を議論しました。

- 1) 内殻光電子分光による組成・原子構造と真空紫外光電子分光による電子状態の両方の情報を同じ装置で得る
- 2) 直入射による直線・円偏光の利用による原子軌道・スピン構造の解析
- 3) デフォーカス条件による易放射線損傷試料の電子状態測定

2台のアンジュレータを使い、幅広い波長領域をカバーするMUSASHIビームラインについて、堀場准教授（高工研）から紹介がありました。スピン研究で世界をリードするVLEEDの2次元検出拡張について奥田教授（広島大）が紹介されました。ユーザーの立場からも施設の立場からも相乗効果が生まれるような放射光施設間の連携を進めたいところです。

装置には独自性が求められる一方で、様々な新奇量子物性を示す高品質な試料を提供するchemistと共同でサイエンスを開拓していく作業は重要です。久保園教授（岡山大）は、化学ドーブや加圧格子変調を通じて有機分子や層状物質での超伝導発現を研究されています。Yashina教授（モスクワ大）は結晶育成と放射光分光実験の両方を進めています。坂本教授（千葉大、現大阪大学）は放射光照射によるトポロジカル絶縁体へのホールドーブ効果を見出しています。いずれも電子・スピン状態と同時に組成・原子構造を明らかにし、超伝導発現やギャップ形成の機構理解に繋げることの重要性を再認識させる研究紹介でした。

芳香族 π 共役系の分子軌道を可視化する分子軌道トモグラフィー技術[Puschnig, Science (2009)]も考案から10年を経ました。有機半導体吸着種・薄膜の電子状態について研究紹介がありました。Subach博士（Forschungszentrum Jülich）はトモグラフィー法の原理について説明し、さらに分子軌道の波動関数の位相情報について得た例を示しました。山田博士（筑波大）は化学ドーブによる構造変化やエキシトン緩和過程のダイナミクス、筆者の一人解良（分子研）は有機分子が機能を発現するにあたり基

板上にてそれぞれがどのような相互作用をしているか明らかにする重要性を示しました。

実験を正確に理解するにはtheoristからの支援が欠かせません。Krüger教授（千葉大）は光電子放出過程における光電子出射波（source wave）と遷移行列の正確な記述の重要性について、有機分子からの光電子およびNi単結晶表面からのAuger電子の場合を例に説明されました。森川教授（大阪大）は、グラフェン上に吸着した芳香族分子が感じる鏡像ポテンシャルの発現機構について理論的に解明したほか、白金単原子がグラフェン端部に触媒活性を示す機構を第一原理計算によって調べた例を紹介されました。理論グループが食指を動かしたくなるような実験拠点にしていきたいところです。

測定で得られたデータから有益な知見を拾い出すには情報技術に基づいた地道なシステム構築が必要となります。ARPESのデータ変換ソフトを公開されている石田博士（東大物性研）にはレーザー光電子分光における光電効果の長波長近似の問題について紹介していただきました。光電子ホログラフィー解析ソフトを公開されている松下博士（高輝度光科学研究センター）には高エネルギー分解能光電子ホログラフィーによるサイト選択的原子配列像可視化でドーパント構造形成プロセスや機能発現に関する知見が得られた例を紹介いただきました。

Momentum Microscopeからは膨大な多次元データが得られます。手作業では拾いきれない物理量を引き出す方法論として機械学習の応用が議論されていますが、今回トリとして小嗣准教授（東京理科大）にpersistent homology解析による磁区ドメインの定量評価について解説いただきました。アイディア次第で色々な展開が期待できそうです。

ポスターセッションにおいても多くの方に発表していただきました。教職員から6件、博士研究員・学生から15件、UVSORビームラインから3件の発表がありました。うち学部4回生にも4件ポスター発表していただくなど若手の参加も目立つ顔ぶれとなりました。

次の開催時期や形態についてはこれから議論が必要で

すが、負担のない範囲でシリーズ化し、実際の実験ステーション立ち上げの暁には、成果発表会の場として展開していければと思います。企業からも2名の方の参加がありました。若手や産業界からの口頭発表も織り交ぜ、すそ野を拡げていければと思います。

2日目昼にプログラムが終わり、希望者に UVSOR 施設案内を行いました。

研究会準備において初動に、もたついた点など反省点がありますが、多忙な時期に多数の方に集まっていたことができたのは、一つは Momentum Microscope の期待の大きさかと思います。こうした参加者の広がり貴重な財産であり、ユーザコミュニティ構築の第一歩となった

かと思います。また放射光施設の垣根を越えて本邦の各施設から本研究会に参加いただき、講演・議論を通じてインプットを頂けたのはありがたい限りです。記念に撮影した集合写真を掲げました。私事ですが、筆者の一人（松井）はこれまで長年大学に在籍する放射光ユーザーの立場から最近 UVSOR に異動しました。もう一人の筆者（解良）の新しい施設長とともに、今後も UVSOR の充実化と、本領域を発展させる第2弾・第3弾の企画を考えていきたいと思っています。施設とともに今後の展開のご支援をぜひお願いしたいと思います。最後に準備にあたって UVSOR スタッフの強力なバックアップに助けられました。どうもありがとうございました。