

KEK 物構研 低速陽電子実験施設(SPF)
低速陽電子実験施設研究会 (2021.2.9)

Slow Positron Facility Workshop

KEK 物構研 低速陽電子実験施設 (SPF) は、2019 年 4 月より、物構研の正式な組織になりました (実験施設長: 小杉信博物構研所長 (兼))。体制や実験設備が漸次整備される中、世界最高レベルの低速陽電子ビームを共同利用に提供しています。低速陽電子は、物構研の放射光、中性子、ミュオンと並んで 4 つの量子ビームの一翼を担い、2020 年に組織された量子ビーム連携研究センターの活動にも貢献しています。

当実験施設では 2017 年と 2018 年に TIA 連携「かけはし」による調査研究の研究会を「陽電子回折研究会」として開催してきましたが、今年も同様の研究会を「低速陽電子実験施設研究会」と改称して開催いたします。

多くの皆様のご参加を歓迎いたします。

(<https://www2.kek.jp/imss/event/2021/02/09spf/>)

研究会世話人: 永井康介 (KEK 物構研低速陽電子実験施設・
東北大学金属材料研究所)

連絡先: 兵頭俊夫 (KEK 物構研低速陽電子実験施設)
hyodot@post.kek.jp, 029-864-5658

主催: KEK 物構研 低速陽電子実験施設 (<https://www2.kek.jp/imss/spf/>)

共催: KEK 物構研 低速陽電子実験施設ユーザーアソシエーション (SPF-UA)

協賛: 日本陽電子科学会 日本表面真空学会 原子衝突学会

日時: 2021 年 2 月 9 日 (火) 13 時より

場所: Zoom Webinar による開催

(参加申込: https://zoom.us/webinar/register/WN_X-5GSedBTEGxTQqI2ab4ig)

参加費: 無料

お問い合わせ: hyodot@post.kek.jp

プログラム

(講演 15 分, 質疑応答 5 分)

13:00 「低速陽電子実験施設長 あいさつ」

“Greetings from the Director of the Slow positron Facility”

小杉信博 (物構研)

13:05 「物構研 低速陽電子実験施設の近況」

“Present Status of the Slow Positron Facility (SPF)”

永井康介 (物構研)

13:15 「汎用試料準備チェンバーの整備」

“The current set-up of a general-purpose sample-preparation chamber at the slow positron facility (SPF)”

望月出海 (物構研)

13:35 「TRHEPD を用いた Pb/Si(111)表面超構造の構造と原子密度解析」

“Atomic-density dependence of structure for Pb/Si(111) surface superstructure by

- TRHEPD”
高山あかり (早大)
- 13:55 「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」
“Structure analysis of metal-doped graphene on SiC(0001) studied by total-reflection high energy positron diffraction”
武田朋也 (早大)
- 14:15 「陽電子回折による二次元フラットバンドマテリアルの構造特定」
“Structure determination of a two-dimensional flat band material using positron diffraction”
高村由紀子 / Antoine Fleurence (北陸先端大)
- 14:35 「グラフェン/ホイスラー合金ヘテロ構造の XMCD 及び TRHEPD による分光学的研究」
”Spectroscopic studies of graphene/Heusler alloy heterostructure by using XMCD and TRHEPD”
Songtian Li (量研)
- 14:55 「2DMAT : 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)むけデータ解析ソフト」
“2DMAT:Data-analysis software for total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)”
星 健夫 (鳥取大)
- 15:15 休憩 (20 分)
- 15:35 「3 層遅延線アノード検出器を用いた低速電子回折図形の観測と低速陽電子回折実験への応用」
“Observation of low-energy electron diffraction patterns using a three-layer delay-line anode detector and its application to low-energy positron diffraction experiments”
和田 健 (物構研)
- 15:55 「LEED を用いた Pd(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Pb の構造決定と将来の KEK での LEPD 実験」
“Structure determination of Pd(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Pb using LEED and future LEPD experiment at KEK”
Rezwan Ahmed (物構研)
- 16:15 「TRHEPD で観測された非対称 TiO₂(110) (1x2) の DFT による表面電子状態」
“Surface electronic structure of asymmetric TiO₂(110) (1x2) observed by TRHEPD using DFT”
朝倉清高 (北大)
- 16:35 「静的な周期磁場を通過するポジトロニウムの超微細構造の共鳴遷移」
“Hyperfine resonance of positronium passing through a static periodic magnetic field”
永田祐吾 (東理大)
- 16:55 「ポジトロニウム負イオンのしきい光脱離の赤外レーザー分光」
“Threshold photodetachment IR laser spectroscopy of positronium negative ions”
満汐孝治 (産総研)
- 17:15 「Ps のレーザー冷却実現に向けた光源開発及び温度測定実験」
“Development of Laser Systems for Cooling Ps and Temperature Measurement”
小林拓豊 (東大)
- 17:35 (終了)

低速陽電子実験施設研究会 (2021.2.9)

Slow Positron Facility Workshop

講演概要集

物構研 低速陽電子実験施設 の近況

Present Status of the Slow Positron Facility (SPF)

○永井康介, 和田健, 望月出海, 兵頭俊夫

KEK 物質構造科学研究所, 低速陽電子実験施設

Y. Nagai, K. Wada, I. Mochizuki, T. Hyodo

Slow Positron Facility, Institute for Material Structure Science

低速陽電子実験施設 (SPF)では、電子線形加速器(リニアック)を用いて生成した低速陽電子ビームを磁場輸送して共同利用に供している。歴史を遡ると、PF入射器系(現在のKEK加速器研究施設第5研究系)によって電子・陽電子入射器棟のメインリニアック北端に建設された、低速陽電子源とビームラインが発端である。1992年暮れに低速陽電子の初ビームが観測されており、最近、当時の運転記録で確認できる12月18日を初ビーム記念日と定めた。1994年には共同利用が始まった。1997年の物質構造科学研究所(以下物構研)設立にあわせて所属が放射光第一研究系に移った。その後、実験施設の移転があり、近年は電子・陽電子入射器棟の南端で、独立の専用電子リニアックとビームラインを用いて共同利用実験を行なっている。

低速陽電子は、放射光、中性子、ミュオンと並んで物構研の4つの量子ビームの一翼を担ってきたが、2019年度よりSPFが物構研における正式な組織となった(図1)。しかし未だ極めて小さな組織なので、独自の共同利用システムは持っておらず、放射光共同利用の一環として課題の募集や審査が行われている。2020年4月に発足した量子ビーム連携研究センター(CIQus, サイキュース)の活動にも貢献している。CIQuSは、物構研が4つの量子ビームを備えているメリットをいかしたマルチプローブ連携研究の推進を目的とするセンターである。

2020年12月現在、SPF施設長は小杉信博物構研所長が兼任している。施設のメンバーは、東北大学とのクロスアポイントの永井康介(教授)、和田健(准教授)、望月出海(助教)、兵頭俊夫(ダイヤモンドフェロー)である。CIQuSに11月に採用されたRezwan Ahmed(博士研究員)もメンバーに加わった。また、長嶋泰之東京理科大学教授(客員教授)、一宮彪彦名古屋大学名誉教授(協力研究員)にもご協力をいただいている。

SPFの専用リニアックの管理・運転は加速器研究施設第5研究系によってなされ、低速陽電子生成部から下流側の管理・運転はPFとSPFによってなされている。加速された電子の制動放射からの対生成によって陽電子を生成し、負の陽電子仕事関数をもつWの薄膜を用いて陽電子のエネルギー3eVにそろえる。それをその場で、実験に応じて35keVまでの任意のエネルギーに静電加速してエネルギー可変低速陽電子ビームとし、実験ステーションまで磁場輸送する。現在、専用リニアックは~50MeV、<600Wで運転をしており、パルス幅1 μ sの長パルスモードで低速陽電子ビーム強度は最大 5×10^7 slow-e⁺/s程度、パルス幅10ns程度の短パルスモードでは最大 5×10^6 slow-e⁺/s程度である。2020年夏の停止期間中に低速陽電子生成部の改修と改良を行ない、さらに強度が増大した(詳細は解析中)。

現在共同利用に供している実験ステーションは、全反射高速陽電子回折(TRHEPD, トレプト)、低速陽電子回折(LEPD, レプト)、ポジトロニウム飛行時間(Ps-TOF)、汎用ステーションの4つである。汎用ステーションでは、かつてはポジトロニウム負イオン実験が行なわれていたが、現在はポジトロニウムのレーザー冷却実験が行なわれている。近年の共同利用実験課題数は10~15課題程度、登録ユーザー数は30~40名程度で、年間3000時間程度のビームタイムを共同利用実験に配分している。

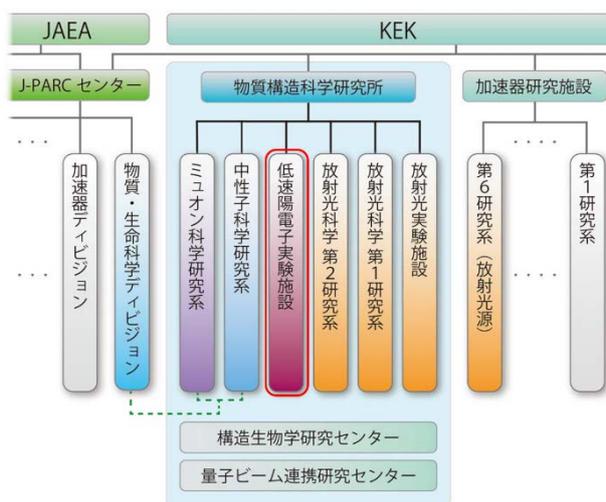


図1 KEK 物質構造科学研究所の組織図

汎用試料準備チェンバーの整備

The current set-up of a general-purpose sample-preparation chamber at the slow positron facility (SPF)

○望月出海¹, 和田健¹, アフメドレズワン², 兵頭俊夫¹, 永井康介^{1,3}

¹ 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所低速陽電子実験施設

² 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所量子ビーム連携研究センター

³ 東北大学金属材料研究所

Izumi Mochizuki¹, Ken Wada¹, Ahmed Rezwani², Toshio Hyodo¹, and Yasuyoshi Nagai^{1,3}

¹ Slow Positron Facility, Institute of Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization (KEK)

² Center for Integrative Quantum Beam Science, Institute of Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization (KEK)

³ Institute for Materials Research, Tohoku University

低速陽電子実験施設 (SPF) の全反射高速陽電子回折 (TRHEPD, トレプト) 装置は、原子層状物質や触媒表面物質の構造解明などハイ-インパクトな成果をあげており、ユーザーアクティビティも高い。また現在、新規ユーザー獲得のための環境整備として、スパコン&データ駆動科学とコラボしたユーザーフレンドリーな汎用・高速・高精度解析ソフトの開発、そして試料準備チェンバーの整備に力を入れている。

この試料準備チェンバーは、外部ユーザーが各研究室で使用しているのと同様の試料作製・表面評価ツールを備えたものを目指している。すなわち、①様々な最先端材料の試料作製に対応でき、②表面が正しく作られたか判断できる必要十分な評価システムがあり、③表面の清浄性を担保できる試料搬送システムを備えた「汎用試料準備チェンバー」である。その整備に関して、進捗をまとめると以下ようになる。

2018 年度

試料準備に必要な機器を取り付けるための様々なポートを備えた超高真空チェンバーをテストホールに設置し、そこに真空計, TMP, イオンポンプなどの真空排気系を整備した。

2019 年度

チェンバー内で最低限の試料準備を可能にするため、ユーザー用電源盤, 試料マニピュレータ (通電&EB 加熱に対応, 冷却は未対応), RHEED, 3 源 EB 加熱型蒸着装置, Ar⁺イオンスパッタ装置, O₂ ガス導入器を整備した。また試料搬送用トランスファーベッセルの設置を完了し、本チェンバーで作った試料を TRHEPD 測定チェンバーまで超高真空を破らずに搬送できるようになった。

2020 年度 (現在まで)

試料交換&ストック用ロードロック室, 水晶振動子膜厚計, フィラメント加熱型簡易蒸着装置×3, 追加試料ホルダ×3 を整備した。また SPF 共同利用実験での装置利用を開始した。

現状、表面評価システムとしては RHEED しか整備されておらず、LEED, AES, XPS などを頼りに試料作製しているユーザーは、現場で研究者や大学院生らが非常に苦労する状態にある。チェンバーが違えば試料準備は全く同じには行かないが、せめて標準的な試料評価システムを整備し、ユーザーの慣れた手法で、試料準備を短期間でマスターできるようにしたい。第一歩として、本年度内に LEED 装置を導入する予定である。

また今後、低速陽電子のみならず、物構研 CIQuS における放射光・中性子・ミュオンの 4 ビームと協奏した成果の創出、マルチプローブユーザー発掘といった新タスクに応えるべく、他の量子ビーム装置と試料輸送方式を共通化し、連携していく方針となっている。

TRHEPD を用いた Pb/Si(111)表面超構造の構造と原子密度解析

Atomic-density dependence of structure for Pb/Si(111) surface superstructure by TRHEPD

濱田雅史¹, 武田朋也¹, 辻川夕貴¹, 阪田大志郎², 望月出海³, 星健夫², 兵頭俊夫³, ○高山あかり¹

¹早大先進理工, ²鳥取大院工, ³KEK 物構研

M. Hamada¹, T. Takeda¹, Y. Tujikawa¹, T. Sakata², I. Mochizuki³, T. Hoshi², T. Hyodo³ and ○A. Takayama¹

¹Waseda Univ., ²Tottori Univ., ³KEK-IMSS-SPF

Si(111)に Pb を 1/3 ML または 1/6 ML 蒸着した構造は、どちらも $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 周期の回折パターンが観測されることが知られており、計算によれば蒸着量 1/6 ML の構造がエネルギー的に安定であることが予測されている[1]。Pb が周期格子を形成する 1/3 ML とは異なり、1/6 ML は、最表面に Pb と Si がおよそ 1:1 の割合で存在するモザイク構造であることが STM 測定により報告されているが[2]、モザイク構造の解析の難しさから 1/6 ML の構造は定かではない。

本研究では、全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法とデータ駆動科学による解析[3]から、Pb/Si(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 構造における Pb の原子密度に対する表面構造の変化について構造解析を行った。Si(111)上に 1 ML の Pb を蒸着後、アニールの時間と温度を変えて作製した (590°C 3 秒, 420°C 120 秒), 異なる蒸着量の試料について測定し、それらを解析した。図 1 にそれぞれの RHEED 回折パターンを示す。

どちらの試料においても $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 周期の回折パターンが観測されており、明確な違いはない。一方で、これらの試料について TRHEPD 測定を行った結果、原子層間距離のみを反映した一波条件における 00 スポットの視射角依存性(ロッキング曲線)は、図 2 に示すように大きく異なった。解析の結果、590°C で 3 秒アニールした試料 (赤丸) は、Pb の原子密度から 1/6 ML モザイク構造であると結論付けた。ロッキング曲線が異なることか、420°C で 120 秒アニールした試料 (黒四角) は、Pb 原子密度の異なる構造が現れていると考えられる。

本講演では、データ駆動科学を用いた解析手法の詳細とこれらの構造の詳細な解析結果を示し、Pb 蒸着量の違いによる構造変化について議論する。



図 1. アニール時間の異なる試料の RHEED パターン。(左) 590°C 3 秒 (右) 420°C 120 秒。

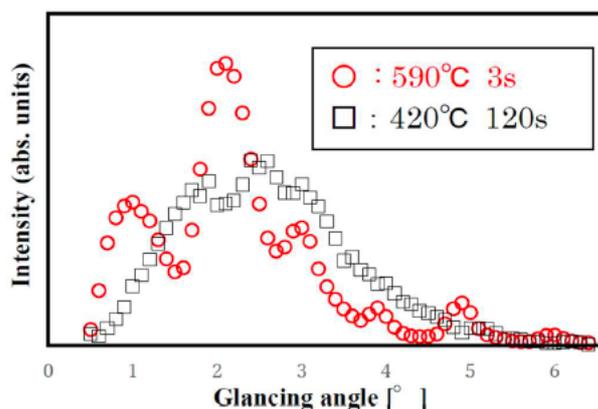


図 2. TRHEPD 実験で測定した一波条件における 00 スポットのロッキングカーブ

[1] T-L. Chan, *et al.*, PRB, **68**, 045410 (2003).[2] J.M. Gomez-Rodriguez, Surf. Sci., **377-379** (1997) 45-49.

[3] K. Tanaka, *et al.*, Acta Physica Polonica A **137**,188 (2020).

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

Structure analysis of metal-doped graphene on SiC(0001) studied by total-reflection high energy positron diffraction

○武田朋也¹, 濱田雅史¹, 辻川夕貴¹, 望月出海², 星健夫³, 兵頭俊夫², 高山あかり¹

¹早稲田大学, ²KEK 物構研, ³鳥取大学院工

○T. Takeda¹, M. Hamada¹, Y. Tujikawa¹, I. Mochizuki², T. Hoshi³, T. Hyodo² and A. Takayama¹

¹Waseda Univ., ²KEK-IMSS-SPF., ³Tottori Univ.

SiC 上グラフェンに Pb 原子を蒸着させた系においては, これまで STM による表面観察および ARPES による電子状態測定が報告されているが[1, 2], Pb 蒸着によるホールドープ的なバンド変化の起源についての解釈は異なっており議論が続いている。本研究では, Pb 蒸着 SiC 上グラフェンのバンド構造の変化について, 構造の観点から議論を行うため, 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法による実験とデータ駆動科学を用いた構造解析を行った。

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において, 層間距離に着目した解析を行うため, 一波条件でのロッキング曲線[(00)スポット強度の視斜角依存性]を測定した。試料は, SiC 基板上の単層グラフェンおよびバッファ層 (0 層グラフェン) に, 室温及び低温(100K)で Pb を蒸着したものを用いた。図 1(a)に, Pb 蒸着前の単層グラフェンにおける TRHEPD 測定の結果を示す。この実験結果を再現するような構造モデルをデータ駆動科学的解析手法[3]を用いて探索した結果, 図 1(b)の構造モデルを得た。この構造モデルは, TRHEPD により決定された 2 層グラフェンの層間距離とは値が異なっており[4], 単層と 2 層では安定な層間距離が異なると考えられる。この試料に室温で Pb 蒸着後アニール(675°C)を行った結果, ロッキング曲線に変化は見られず[図 1(c)], 単層グラフェンへの室温蒸着とアニールでは Pb による終端が起きないことを見出した。一方, バッファ層に Pb を低温(100K)蒸着後アニール(800°C超)した試料では, ロッキング曲線が変化することがわかった。また, 800°C以上のアニール後も Pb が試料に残留することを光電子分光により観測し, この条件下では Pb 終端が起きていると考えられる。講演では, 解析手法の詳細および実験結果を示し, Pb 終端のプロセスに関わる蒸着時の温度や層数の影響について TRHEPD 測定の結果を基に議論する。

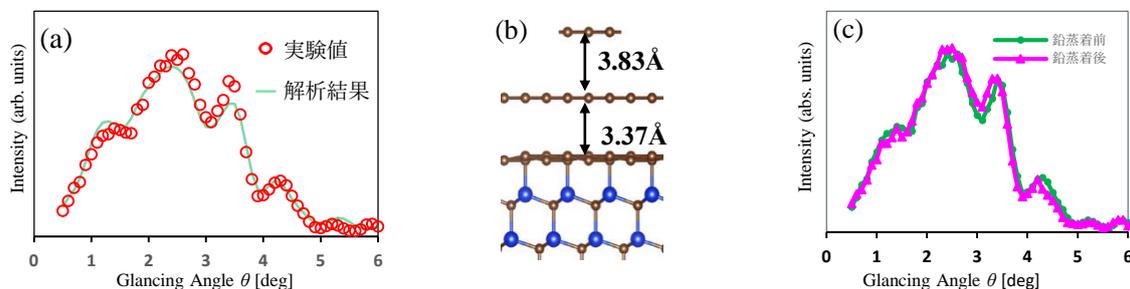


図 1. SiC 上単層グラフェンにおける Pb 蒸着前の(a)ロッキング曲線および(b)構造モデル, (c) Pb 蒸着前後のロッキング曲線

[1] A. Yurtsever, *et al.*, *Small*, **29** (2016) 3882.[2] Y. Tsujikawa, *et al.*, *AIP Advances*, **10** (2020) 085314.

[3] K. Tanaka, *et al.*, *Acta Physica Polonica A* **137** (2020), 188-192 [4] Y. Endo, *et al.*, *Carbon*, **157** (2020) 857.

全反射高速陽電子回折による二次元フラットバンド材料の構造特定
**Structure determination of a two-dimensional flat band material
using total-reflection high-energy positron diffraction**

○高村(山田) 由起子, アントワーン・フロランス

北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス系

Yukiko Yamada-Takamura and Antoine Fleurence

School of Materials Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology (JAIST)

グラフェンに類似した性質を持つ IV 族元素の蜂の巣格子としてシリセンやゲルマネンが知られている。Si(111)ウェハを基板として二ホウ化ジルコニウム (ZrB_2) 薄膜をエピタキシャル成長すると、薄膜表面に基板から拡散したケイ素を原料とした蜂の巣格子「シリセン」が自発形成されることが、走査トンネル顕微鏡 (STM) 観察と内殻光電子分光測定などの実験結果から構築した構造モデルを用いた第一原理電子状態計算と角度分解光電子分光 (ARPES) 測定の結果の比較から明らかとなった[1,2]。

それでは、Ge(111)ウェハを基板とした場合には、同様に ZrB_2 薄膜表面に「ゲルマネン」が形成されるのであろうか？この単純な問いに答えるために薄膜を成長し、STM 観察を行い、内殻光電子分光測定を行った結果、Si 基板の場合と同様に薄膜表面に二次元 Ge 層が形成されることは分かったものの、その構造の特定は困難を極めた。最近になってようやく、この二次元 Ge 層の構造が「二重三角格子」である、と物構研 低速陽電子実験施設のビームライン SPF-A3 おける全反射高速陽電子回折(TRHEPD)測定の結果、特定することができた[3]。興味深いことに、二重三角格子の電子状態にはカゴメ格子と同じ起源をもつ「フラットバンド」が発現する可能性がある[4]。基板上に二重三角格子が形成された場合にその電子状態がどうなるのか、ARPES 測定と第一原理電子状態計算を行なった結果についてご紹介する。

謝辞

共同研究者であるライナー・フリードライン博士、深谷有喜博士（日本原子力研究開発機構）、チチェン・リー先生（淡江大学）、尾崎泰助先生（東京大学物性研究所）、吉信淳先生（東京大学物性研究所）、山根宏之博士（理化学研究所放射光科学総合研究センター）、小杉信博先生（高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所）に深く感謝の意を表します。

引用文献

[1] A. Fleurence, *et al.*, Phys. Rev. Lett. 108, 245501 (2012).

[2] C.-C. Lee, *et al.*, Phys. Rev. B 90, 075422 (2014).

[3] A. Fleurence, *et al.*, Phys. Rev. B 102, 201102(R) (2020).

[4] C. C. Lee, A. Fleurence, Y. Yamada-Takamura, and T. Ozaki, Phys. Rev. B (2019).

グラフェン/ホイスラー合金ヘテロ構造の XMCD 及び TRHEPD による分光学的研究 Spectroscopic studies of graphene/Heusler alloy heterostructure by using XMCD and TRHEPD

○李松田¹, K. V. Larionov², P. B. Sorokin², 雨宮健太³, 圓谷志郎¹, 桜庭裕弥⁴, 望月出海³,
和田健³, 河裾厚男¹, 境誠司¹

¹量研, ²ロシア科技大, ³高エネ研, ⁴物材研

S. Li¹, K.V. Larionov², P. B. Sorokin², K. Amemiya³, S. Entani¹, Y. Sakuraba⁴, I. Mochizuki³, K. Wata³,
A. Kawasuso¹, and S. Sakai¹

¹QST, ²MISiS, ³KEK, ⁴NIMS

「夢の素材」と呼ばれるグラフェンは、厚さが究極的に薄くしなやかで強く、ユニークな物理、光学、電気的性質を持つため、様々な分野で応用に関する研究開発を進められています。その中で、スピンの散乱が生じにくいことや電子を高速かつ低抵抗で流すことができることなどスピンの輸送に適した性質から、グラフェンはスピントランジスタや超高記録密度磁気メモリなど次世代の省エネ・高集積化スピントロニクスデバイスへの応用に有望なスピントロニクス材料として注目されています[1, 2]。しかし、これまでに研究されたグラフェンを用いたスピントロニクスデバイスでは、上記の性質から期待されるような高い性能は実現されておらず、応用に向けた道筋は見えていません。このような低い性能の原因として、従来のグラフェンスピントロニクスデバイスでは、デバイスの中でグラフェンと積層して用いられる磁性体の材質がスピン偏極率が低い一般的な磁性材料(ニッケルやコバルト等)に限られてきたことが考えられます。

このような状況の下、我々はハーフメタルと呼ばれ 100%のスピン偏極率を持つ磁性材料であるホイスラー合金に着目し、グラフェンとホイスラー合金を積層する技術の開発に取り組み、厚さが一原子層のグラフェンがホイスラー合金の表面を完全に被覆したグラフェン/ホイスラー合金ヘテロ構造(右図)の作製に成功しました [3]。さらに、グラフェン/ホイスラー合金ヘテロ構造の界面の電子・磁気的状態を XMCD および TRHEPD 分光により調べた結果、グラフェンとホイスラー合金が接する界面においても、ホイスラー合金が本来持っている磁性や高いスピン偏極率が失われていないことや、ディラックコーンと呼ばれるグラフェンのスピン輸送を担う電子状態が保たれていることが分かりました。これらの結果から、今後、グラフェン/ホイスラー合金ヘテロ構造を用いることで、グラフェンスピントロニクスデバイスの飛躍的な高性能化の実現が期待できます。

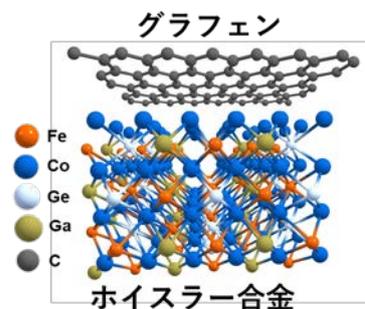


図. グラフェン/ホイスラー合金ヘテロ構造の模式図

参考文献：

- [1] Han, *et al*, Nat. Nanotech. **10**, 794-807 (2014)
- [2] Bertolazzi, *et al*, Adv. Mater. **10**, 1806663 (2019)
- [3] Li *et al*, Adv. Mater. **32**, 2070043 (2020)

2DMAT: 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)むけデータ解析ソフト

2DMAT:Data-analysis software for

total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)

○星健夫¹, 本山裕一², 花田貴³, 一ノ瀬颯人¹, 小西優祐⁴, 吉見一慶²

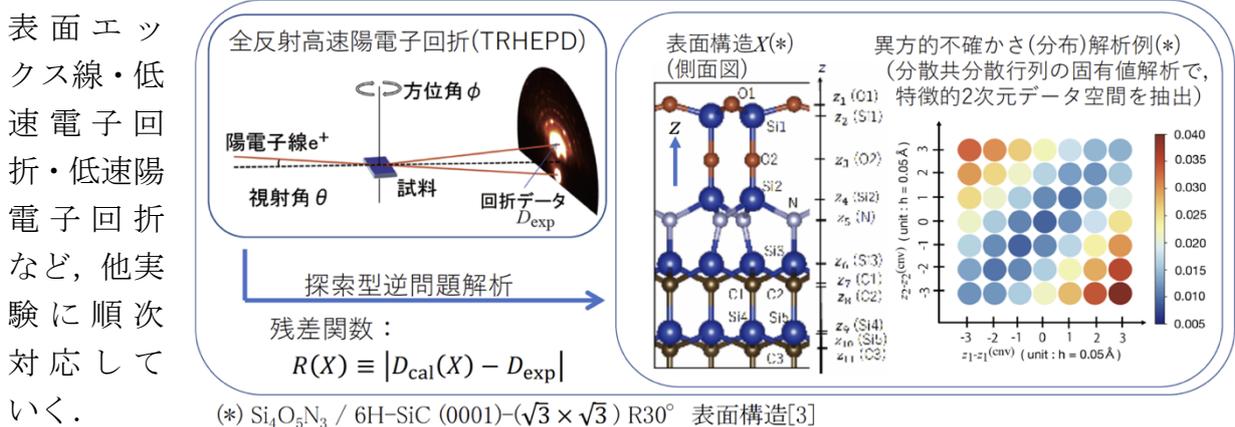
¹鳥取大学, ²東京大学, ³東北大学, ⁴株式会社アカデメイア

T. Hoshi¹, Y. Motoyama², T. Hanada³, H. Ichinose¹, Y. Konishi⁴, K. Yoshimi²

¹Tottori U., ²U. Tokyo, ³Tohoku U., ⁴Academeia Inc.

我々は、スーパーコンピュータ利用を前提とした高速・高信頼な測定データ解析ソフトウェア「2DMAT」(「ツーディーマツト」)を開発している[1, 2]. 現在, 兵頭俊夫・望月出海(KEK 物構研 SPF)らと共同で, 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)実験を対象とした2次元物質(表面)構造解析に取り組んでいる(図1, [1-5]). 現状を報告する. 一般に測定データ解析では, 測定量(生データ) D から目的状態量(知りたい量) X を計算する. 測定量 D が目的量 X の関数(順問題関数, $D_{\text{cal}} \equiv D_{\text{cal}}(X)$)として与えられることを仮定し, 汎用な探索型逆問題解析を行う. 数理的には, 実測定量 D_{exp} と計算測定量 $D_{\text{cal}}(X)$ の残差関数 $R \equiv R(X) \equiv |D_{\text{cal}}(X) - D_{\text{exp}}|$ に対する最適化問題に帰着される. 高信頼解析として, 試料・実験装置由来の不確かさ(uncertainty)を, 残差関数の分布として陽に計算する. TRHEPDでは, 測定量 D はロッキングカーブを, 状態量 X は試料表面領域の原子座標を指す. プログラムは並列化 Python を基盤としている. 2019年開発版が現在使われている[3-5]が, プログラム高度化プロジェクト(2020年)で機能強化したプログラムが近日公開される. 数理手法として, 逐次最適化[1]・グリッド型探索[1]・ベイズ最適化・レプリカ交換型モンテカルロ法が実装されている. 実験研究者向けに, マニュアル(日本語・英語)も整備している. 数理手法は汎用であり, 今後,

図1 2DMAT: 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)むけデータ解析ソフト



[1] Tanaka, *et al.*, Acta. Phys. Pol. A 137, 188 (2020); JJAP Conf. Ser., in press; <http://arxiv.org/abs/1910.05743> [2] 東大物性研ソフトウェア開発・高度化プロジェクト 2020年度課題「二次元物質構造解析むけ実験データ解析の高度化」 <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/news/802/> [3] 星他, 物理学会, 2020年9月. [4] 濱田他, 物理学会, 2020年9月. [5] 中司他, 物理学会, 2020年9月.

3層遅延線アノード検出器を用いた低速電子回折図形の観測と 低速陽電子回折実験への応用

Observation of low-energy electron diffraction patterns using a three-layer delay-line anode detector and its application to low-energy positron diffraction experiments

○和田健¹, 白澤徹郎², 望月出海¹, Rezwan Ahmed¹, 前川雅樹³, 河裾厚男³, 兵頭俊夫¹

¹ 高エネルギー加速器研究機構, ² 産業技術総合研究所, ³ 量子科学技術研究開発機構

K. Wada¹, T. Shirasawa², I. Mochizuki¹, R. Ahmed¹, M. Maekawa³, A. Kawasuso³, and T. Hyodo¹

¹ High Energy Accelerator Research Organization (KEK),

² National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST),

³ National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology (QST),

低速電子回折 (LEED) は結晶表面の構造解析の確立された手法である。LEED の陽電子版の低速陽電子回折 (LEPD) は、LEED よりも表面敏感で多重散乱が少なく、X 線回折と同様な単純な散乱因子を持つため、理想的な表面構造解析手法であると理論家により予想されている[1]。例えば重元素を含む系やより複雑な構造など、LEED では解析が困難な表面でもその構造解析が LEPD によって可能となることが期待されている。ただし、反粒子のため十分な強度と適切な品質のビームを得るのが困難である。

我々は、電子線形加速器 (リニアック) を用いて生成した高強度低速陽電子ビームを用いた LEPD の実験システムを開発し、Ge(001)-2×1 構造による LEPD パターンの観測に成功した[2]。ただし、検出器の特性により十字状の不感領域が存在するため実験効率が悪く、また、測定に長時間を要する。

現在、検出器の不感領域の問題を解決する、センターホール付きの3層遅延線アノード検出器 (その外観から Hexanode と呼ばれる) [3]の導入を行なっている。同検出器により、十字状のデッドエリアの無い LEED パターンの取得試験を行ない、Ge(001)-2×1 構造と Si(111)-7×7 構造からの明瞭な回折パターンを得た。この Hexanode を、新たに開発した LEPD レンズ系に組み込んで LEPD パターンの取得試験を開始した。このレンズ系は、以前より全長が約 2.5 倍程度長いこと、検出器において、レンズ最上流部からの消滅γ線によるバックグラウンドを一桁近く低減することができる。また、KEK 物質構造科学研究所量子ビーム連携研究センター(CIQuS)によって開始された異なるプローブ間での試料ホルダの共通化の議論を見据えながら、新検出器にあわせた試料マニピュレータ/ホルダの開発の検討を進めている。

さらに、LEPD ビーム強度の増大のために、磁場輸送された低速陽電子ビームを回折実験用に非磁場領域に取り出す新たなシステムの開発と動作試験を行ない、以前より一桁効率化できることがわかった。

引用文献

[1] S. Y. Tong, *Suf. Sci.* 457, L432 (2000).

[2] K. Wada, T. Shirasawa, I. Mochizuki, et al., *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* 16, 313 (2018).

[3] O. Jagutzki, A. Cerezo, A. Czasch, et al., *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, 49, 2477 (2002).

LEEDを用いたPd(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Pbの構造決定と将来のKEKでのLEPD実験
 Structure determination of Pd(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-Pb using LEED and future LEPD experiment at KEK

○Rezwan・アハメド¹, 荒田昌宏², 中川剛志², 水野清義², 望月出海³, 兵頭俊夫³, 和田健³
¹KEK 物質構造科学研究所 量子ビーム連携研究センター
²九州大学 総合理工学研究院 物質理工学専攻, ³KEK 物質構造科学研究所 低速陽電子実験施設
 ○Rezwan Ahmed¹, Masahiro Arata², Takeshi Nakagawa², Seigi Mizuno², Izumi Mochizuki³,
 Toshio Hyodo³, Ken Wada³
¹Center for Integrative Quantum Beam Science, IMSS, KEK,
²Interdisciplinary Graduate School of Engineering Sciences, Kyushu University, ³SPF, IMSS, KEK

Introduction- The study of bimetallic surfaces is of great interest as it exhibits a variety of interesting physical and chemical properties.[1] The 2D honeycomb structure of Pb atoms (plumbene), promises intriguing physical and electrical properties due to its predicted large bandgap with robust structure and enhanced catalytic activity. Previously, Yuhara et al have examined the formation of plumbene structure on Pd(111) using STM.[2] However, detail structural analysis is missing and also the band structure is not experimentally determined. Hence, we explored the structure of Pb adsorbed Pd(111) surface using LEED in details and propose LEPD study for further elucidating the structure.

Experimental Procedure- The experiment was carried out in UHV chamber equipped with LEED and AES optics at Kyushu University. Pb is thermally evaporated on Pd(111) to form the ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° structure. The experimental condition is varied, and different sets of *I-V* data were recorded for structural analysis. Several models were analyzed to compare the experimental data with theoretical *I-V* curves and the best fit structures were proposed. An overview of the experimental procedure shown in Fig. 1

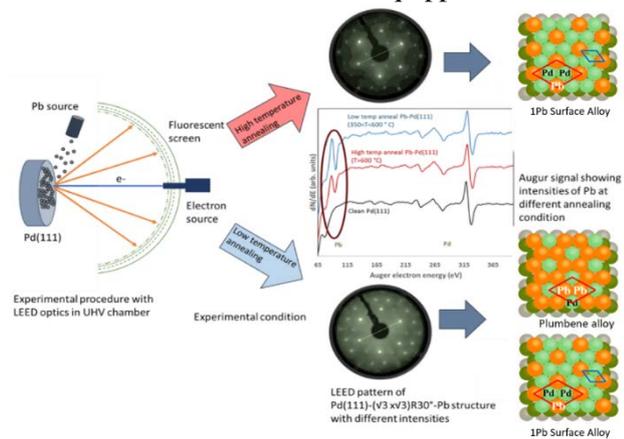


Fig. 1 Schematic diagram for the experimental procedure

Results and Discussion- We have determined the Pb-Pd “1Pb surface alloy” structure with lowest *R_p* factor after annealing > 600 °C. However, when annealing temperature ≤ 500 °C we have obtained honeycomb “plumbene alloy” structure as well as the “1Pb surface alloy” structure, both with lowest *R_p* factor. Although the AES data clearly suggests that plumbene structure is dominant but using LEED analysis we cannot clearly differentiate single structure. It is expected that the “1Pb surface alloy” structure may coexist as metastable phase undergoing spontaneous transition between structures as they are quite similar. However, to solve this conundrum, we suggest LEPD analysis as scattering factors for high-atomic-number atoms are more reliable in the case of the positron than the electron which we plan to carry out at the KEK facility.

Reference

- [1] J. G. Chen et al. *Surf. Sci. Rep.*, vol. 63, no. 5, pp. 201–254, 2008.
 [2] J. Yuhara et al. *Adv. Mater.*, vol. 31, no. 27, pp. 1–6, 2019.

TRHEPD で観測された非対称 $\text{TiO}_2(110) (1 \times 2)$ の DFT による表面電子状態
Surface electronic structure of asymmetric $\text{TiO}_2(110) (1 \times 2)$ observed by TRHEPD
using DFT

岩崎正弥 三輪（有賀）寛子, ○朝倉清高.

¹北海道大学触媒科学研究所

Masaya Iwasawaki, Hiroko Ariga-Miwa, Kiyotaka Asakura,

Institute for Catalysis, Hokkaido University

これまでに TRHEPD (Total Reflection High Energy Positron Diffraction) 法で明らかになった非対称 $\text{TiO}_2(110) (1 \times 2)$ 構造の電子状態をしらべて、非対称構造になる原因をさぐった。

$1 \times 2 \times 8$ ユニットセルについて、密度汎関数計算を行った。その結果、対称 $\text{TiO}_2(110)(1 \times 2)$ に較べて、 $1 \times 2 \times 8$ ユニットセル当たり、 0.2eV エネルギーが安定化していた。

一方、図 1 に示すように状態密度をしらべると、対称構造では、Fermi レベルを横切っていたが、非対称構造になることで、EF を横切るバンドはなくなり、バンドギャップ内に状態密度を持つバンドが生じた。

当日は安定化の機構についてさらに突っ込んだ議論できればと思っている。

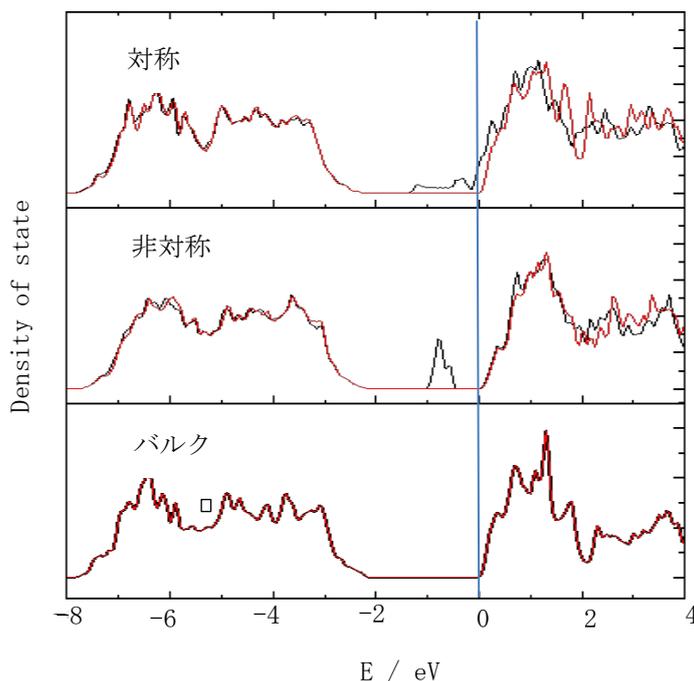


図 1 $\text{TiO}_2(1 \times 2)$ の状態密度 (DOS) 上から対称、非対称およびバルクの電子構造である。

赤は Up spin 黒は Down spin である。

文献

[1] I. Mochizuki, H. Ariga, Y. Fukaya, K. Wada, M. Maekawa, A. Kawasuso, T. Shidara, K. Asakura and T. Hyodo
“Phys.Chem.Chem.Phys., 18(10), 7085-7092., 2016.

[2] H. Onishi and Y. Iwasawa, Surface Science, 313(1-2), 1994.

静的な周期磁場を通過するポジトロニウムの超微細構造の共鳴遷移 Hyperfine resonance of positronium passing through a static periodic magnetic field.

○永田祐吾¹, 満汐孝治², 飯塚太郎¹, 鞠谷温人¹, L. Chiari³, 田中文¹, 長嶋泰之^{1,4}

¹東理大理, ²産総研, ³千葉大工, ⁴高エネ研

Y. Nagata¹, K. Michishio², T. Iizuka¹, H. Kikutani¹, L. Chiari³, F. Tanaka¹, Y. Nagashima^{1,4}

¹Dept. of Phys. Tokyo Univ. of Sci., ²AIST, ³Fac. of Eng. Chiba Univ., ⁴KEK

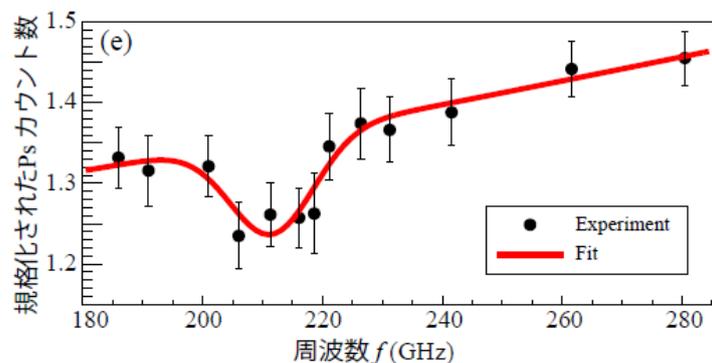
原子分光の多くはレーザー光やマイクロ波によって行われるが、原子ビームと静的な周期場(以下、静周期場と呼ぶ)を用いた方法もある。速度 v を持つ原子は、周期長 a の静周期場を通過すると周波数 $f=v/a$ の振動場を受ける。 f と原子のエネルギー準位差に相当する周波数が一致した場合、原子の共鳴遷移が起こる。これを運動誘起共鳴(MIR)と呼ぶことにする。

MIR の多くの研究は、結晶の周期電場を用いており、多価イオンの EUV、あるいはそれ以上の周波数の共鳴遷移が観測されてきた。一方、磁場による MIR では、周期的に配列した電流等による周期磁場によって、Rb 原子のマイクロ波領域の共鳴遷移が観測されてきた。

本研究では、電子と陽電子の二体束縛系であるポジトロニウム(Ps)の基底状態の超微細構造を MIR によって共鳴遷移させる実験を行った。実験には東京理科大学で開発されたエネルギー可変 Ps ビームを用いた[1]。

Ps の超微細構造の MIR を効率的に誘起する条件を Rabi 振動から考えると、10 周期の磁場を用意する場合、0.1 T 以上の強い磁場が必要となる。それを実現するために強磁性体の鉄箔と銅箔を交互に重ね、さらに穴を開けたものを SmCo 磁石で着磁した多層磁気格子を開発した。Ps はこの穴を通過することで、結晶による MIR で見られる原子との衝突は起らずに周期磁場と相互作用できる(コヒーレンスを維持できる)。このため、ポジトロニウムのような反物質を含む系でも MIR が観測可能となる。反粒子を含む系の MIR は初めての試みであり、さらに超微細構造遷移周波数は 203 GHz という THz 波帯にあつて、この点でも新しいチャレンジである。

実験では長寿命の *o*-Ps のカウント数を、Ps の速度を変えながら測定した。図 1 は実験結果である[2]。*o*-Ps が MIR によって短寿命の *p*-Ps に遷移すると、自己消滅によって検出器に届かなくなる。データには 211 GHz 付近に、くぼみが見られる。これは Ps の MIR による共鳴遷移を表している。この成果によって MIR によるポジトロニウムの他の超微細構造遷移や、その他の粒子の共鳴遷移の研究への道筋をつけることに成功した。



引用文献

[1] K. Michishio et al., Rev. of Sci. Instrum. **90**, 023305 (2019).

[2] Y. Nagata et al., Phys. Rev. Lett. **124**, 173202 (2020).

ポジトロニウム負イオンのしきい光脱離の赤外レーザー分光 Threshold photodetachment IR laser spectroscopy of positronium negative ions

○満汐孝治¹, 久間 晋², 永田祐吾³, Luca Chiari⁴,
飯塚太郎³, 三上力久³, 東 俊行², 長嶋泰之^{3,5}

¹産総研, ²理研, ³東理大理, ⁴千葉大工, ⁵高エネ研

K. Michishio¹, S. Kuma², Y. Nagata³, L. Chiari⁴, T. Iizuka³, R. Mikami³, T. Azuma², Y. Nagashima^{3,5}

¹AIST, ²RIKEN, ³Dept. of Phys. Tokyo Univ. of Sci., ⁴Fac. of Eng. Chiba Univ., ⁵KEK

ポジトロニウムは電子とその反粒子である陽電子の束縛状態である。ポジトロニウムにさらに 1 個の電子が結合すると、ポジトロニウムの負イオンが形成される。この奇妙なイオンは、質量の等しい点状粒子のみから構成される最も単純な三体束縛系の一つであり、その遷移エネルギーを精密に測定することで、量子三体系の計算手法や複雑な量子電磁力学計算を検証することができる。ポジトロニウム負イオンの存在は、陽電子ビームを荷電変換用の炭素薄膜[1]に入射することで実験的に見出されていたが、生成効率が低いために実験が難しく、その性質は殆ど明らかになっていなかった。最近、アルカリ金属原子を蒸着した W 表面に陽電子を入射すると、高い効率でポジトロニウム負イオンに変換されることが分かり、この負イオンを利用した新たな実験研究が可能となってきた[2]。そこで、我々は、KEK IMSS の低速陽電子施設から供給される高強度短パルス状陽電子ビームとナノ秒パルスレーザーを用いて、ポジトロニウム負イオンのレーザー分光技術を発展させ、電子光脱離[3]や形状共鳴[4]などの諸性質を明らかにした。さらに、研究室規模で運用が可能な蓄積型陽電子パルス化装置を導入してレーザー分光装置を新たに立ち上げ、ポジトロニウム負イオンの分光学的研究を進めている[5]。

本研究では、波長可変の赤外 OPO/OPA パルスレーザーを用いて、ポジトロニウム負イオンの電子光脱離しきいエネルギーの分光を行った。実験では、蓄積型陽電子パルス化装置で作成した短パルス状陽電子ビームを用いた。これを Na 蒸着 W 箔膜に入射してポジトロニウム負イオンに変換し、中赤外レーザー光線で照射して光脱離を誘起した。レーザーを 3.70 μm – 3.85 μm の範囲で掃引して光脱離によって形成されるポジトロニウムの強度変化を測定することで、光脱離が起こるしきいエネルギーを決定した[6]。測定結果は相対論・量子電磁力学補正を含めた理論計算[7]と矛盾がなかった。

引用文献

- [1] A. P. Mills, Jr., Phys. Rev. Lett. 46, 717 (1981).
- [2] Y. Nagashima, Phys. Rep. 545, 95–123 (2014).
- [3] K. Michishio *et al.*, Phys. Rev. Lett. 106, 153401 (2011).
- [4] K. Michishio *et al.*, Nature Commun. 7, 11060 (2016).
- [5] K. Michishio *et al.*, Rev. Sci. Instrum. 90, 023305 (2019).
- [6] K. Michishio *et al.*, Phys. Rev. Lett. 125, 063001 (2020).
- [7] G. W. F. Drake, and M. Grigorescu, J. Phys. B 38, 3377–3393 (2005).

Ps のレーザー冷却実現に向けた光源開発及び温度測定実験

Development of Laser Systems for Cooling Ps and Temperature Measurement

○小林拓豊¹, 田島陽平¹, 魚住亮介¹, 蔡恩美^{1,6}, 周健治¹, 吉岡孝高¹, 石田明², 橋立佳央理², 難波俊雄³, 浅井祥仁², 五神真², 山田恭平², 大島永康⁴, オロークブライアン⁴, 満汐孝治⁴, 伊藤賢志⁴, 鈴木良一⁴, 兵頭俊夫⁵, 望月出海⁵, 和田健⁵
¹東大工, ²東大理, ³東大素セ, ⁴産総研, ⁵高工研, ⁶高麗大学

○T. Kobayashi¹, Y. Tajima¹, R. Uozumi¹, E. Chae^{1,6}, K. Shu¹, K. Yoshioka¹, A. Ishida², K. Hashidate², T. Namba³, S. Asai², M. Kuwata-Gonokami², K. Yamada², N. Oshima⁴, B. E. O'Rourke⁴, K. Michishio⁴, K. Ito⁴, R. Suzuki⁴, T. Hyodo⁵, I. Mochizuki⁵, K. Wada⁵

¹School of Engineering UTokyo, ²School of Science UTokyo, ³ICEPP UTokyo, ⁴AIST, ⁵KEK, ⁶Korea University

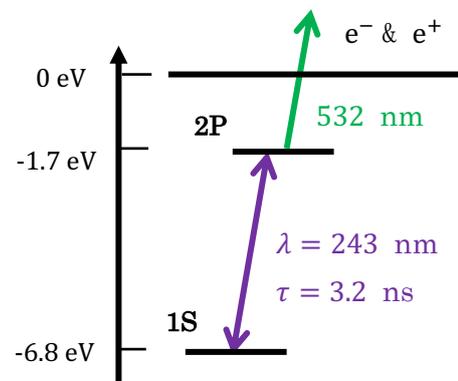
ポジトロニウム (Ps) は、電子とその反物質である陽電子からなる水素様原子である。Ps は二体のレプトンからなるシンプルな系であるため、基礎物理学の精密検証に重要な研究対象である。Ps を 10 K 以下まで冷却することができれば、その原子特性の精密測定による素粒子標準模型の検証や物質反物質間非対称性の探索、さらに、反物質を含む系で初めてのボース・アインシュタイン凝縮の実現など、重要な応用につながることを期待されている。我々は、Ps のレーザー冷却の実現を目指して研究を進めている。

Ps は最も質量の軽い原子であり、広いドップラー幅 (室温で約 500 GHz) を持つ。また、対消滅により有限の寿命 (スピン 3 重項で 142 ns) で崩壊する。この短い寿命の中で、広い速度分布をもつ Ps の効果的な冷却を実現するためには、今までにない特殊な光源が必要になる。我々は、独自に光源を設計してプロトタイプ機を製作し、性能を評価した[1]。

Ps のレーザー冷却実験は SPF-B1 ビームラインを使用し行っている。Ps は、短パルスモード (時間幅 10 ns, 繰り返し 50 Hz) で生成された陽電子ビームをシリカエアロゲルに入射して生成する。開発した冷却レーザーは SPF に運搬し、陽電子ビームに同期した運用を実現した。

Ps の温度は 1S-2P 遷移の励起スペクトルの測定により評価する。陽電子照射に同期して、波長可変ナノ秒紫外レーザー (243 nm) とナノ秒

Nd:YAG レーザーの第二高調波 (532 nm) を照射することで、1S-2P 遷移を誘導した上で、2P 状態の Ps を電離させる (図 1) ことができる。これにより、陽電子照射から 250 ns 後の Ps の温度を 9×10^2 K と評価することができた。現在、冷却レーザーを照射した場合のデータの解析を進めている。



引用文献

[1]Y. Tajima et al., In Conference on Lasers and Electro-Optics, OSA Technical Digest, paper JTh2E.12 (2020).

図 1 Ps のエネルギー準位図。243 nm と 532 nm の 2 つのパルスレーザーを温度測定に利用する。