

軟X線光電子分光側から見た2ビーム利用のアイデア

- SXプローブ × HXプローブ測定

2種類のビームを利用するなら、
ポンプ × プローブ？
プローブ × プローブ？

• Hybrid ringについての検討

SRビームとSPビームを含めた多様な組み合わせが利用可能

異なる性質の光を同時に供給できる光源として考える

→特性の違う2種類のSXを利用した測定。

SRをポンプ、アンジュレーター放射をプローブとした光電子分光

• 新BL11についての検討

SX(~TX)ブランチとHXブランチからの2種類の光が利用可能

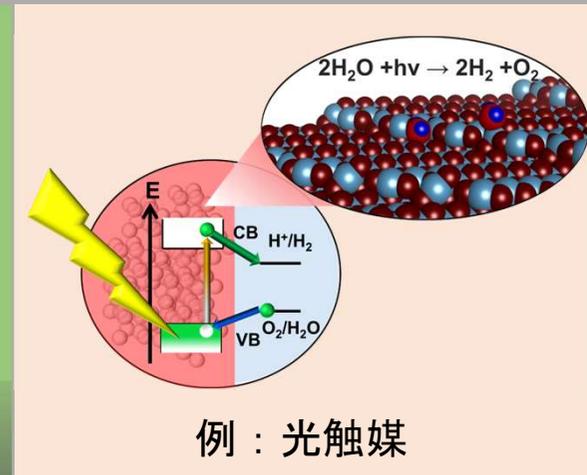
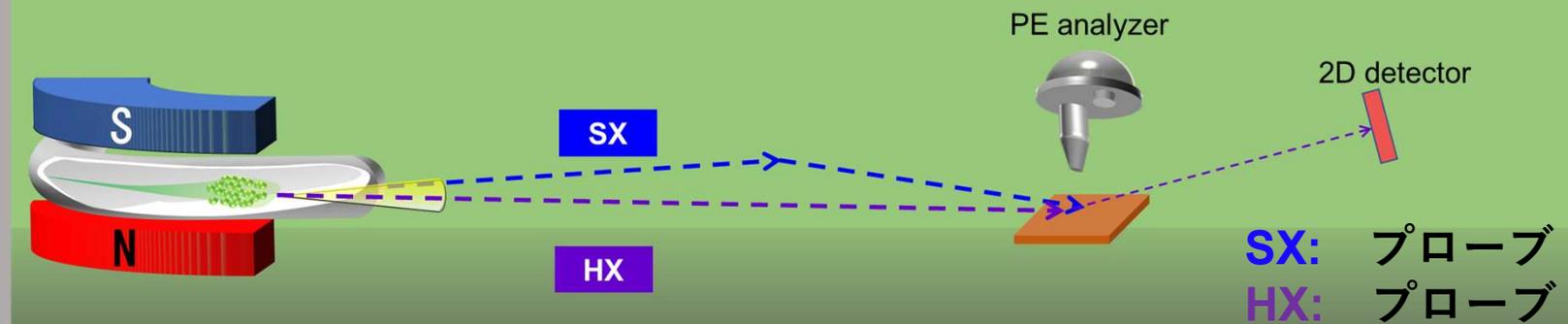
光の特性よりも新しい測定に目を向けてみる

→表面での現象を見ることに焦点を絞る

共鳴光電子分光とCTR散乱の同時測定

新BL11: 共鳴光電子分光とCTR散乱の同時測定

SXとHXの同時照射によるプローブ×プローブ



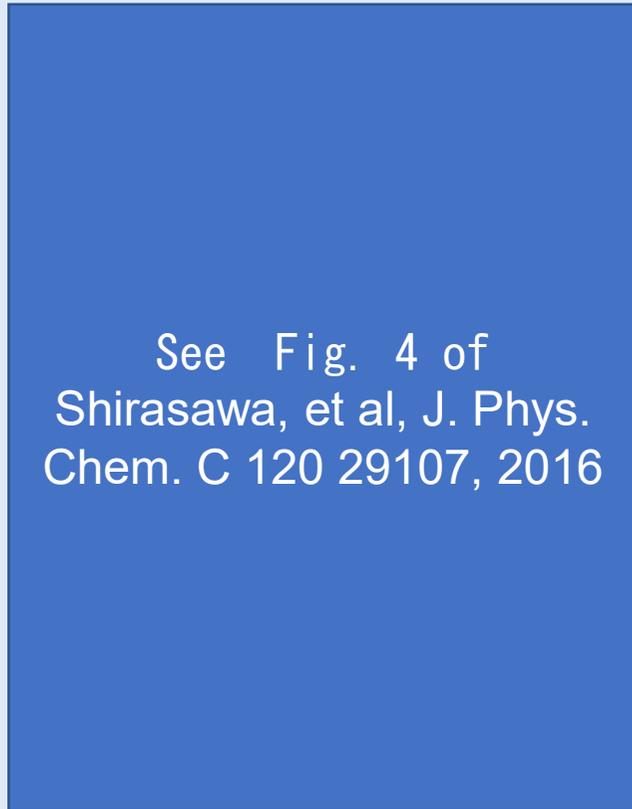
利点:

- ・ 全体の表面構造の変化と特定の原子の電子状態を同時測定が可能
- ・ 表面構造の時間変化と電子状態の相関が測定できる？

結晶表面の構造と電子状態の変化などの測定に使えるのではないかな。

酸化チタンの親水性の理解に使える？

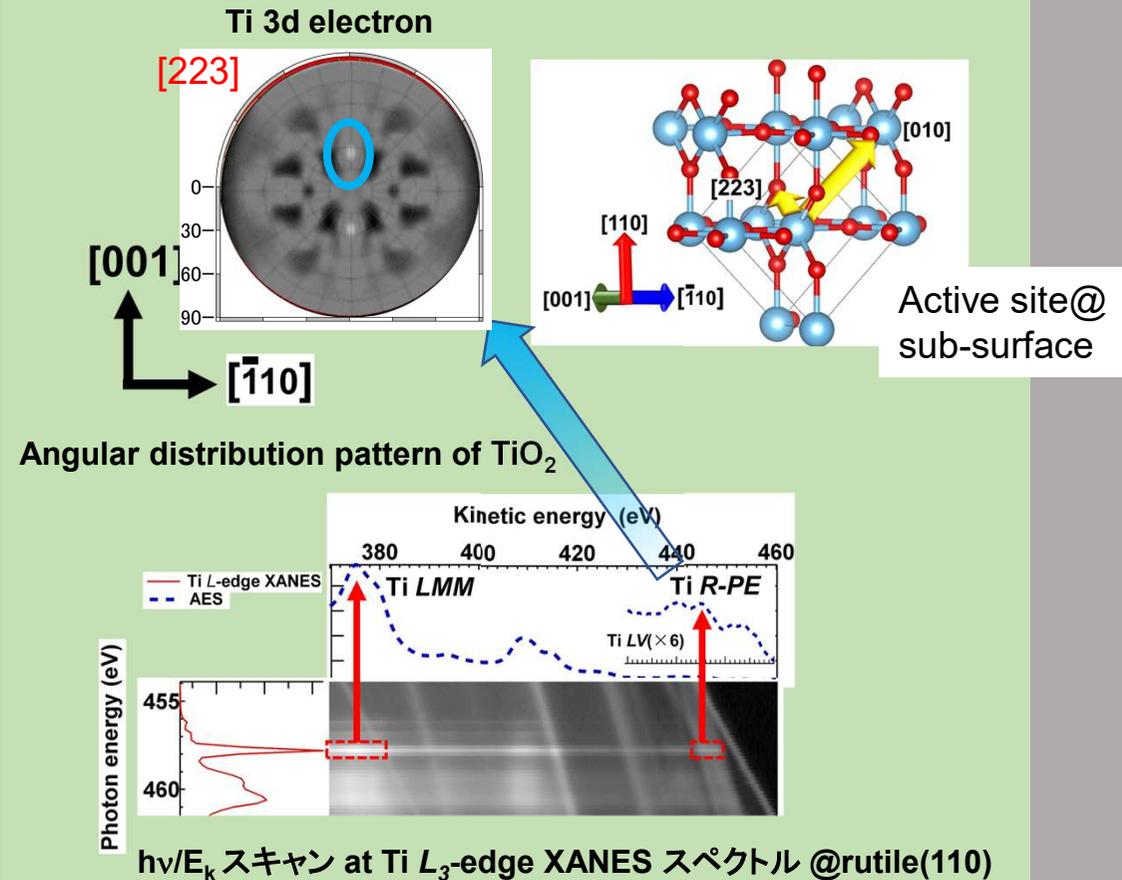
CTR散乱による研究例^①



疎水性及び親水性の場合の表面構造、
表面電子密度分布@rutile(110)

原子構造の変化を追う

共鳴光電子分光による研究例

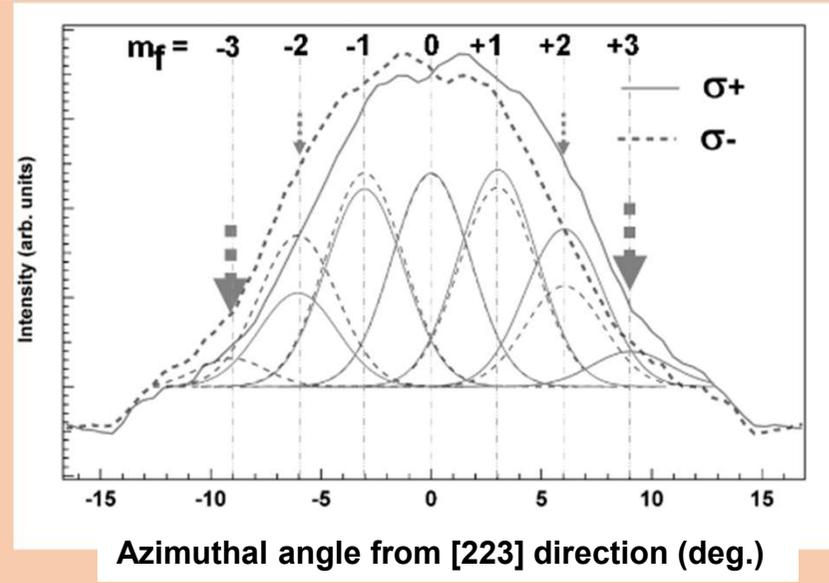


特定サイトの電子状態変化を追う

原子層毎の構造解析 × 特定原子サイトの電子状態解析 + 時間分解
→ 表面構造と特定サイトの電子状態の時間変化の理解

この二つを組み合わせた場合に考えられる2つのアイデア

1. 円偏光軟X線を用いた
機能発現電子の原子軌道解析
→構造と機能を発現する
電子の原子軌道の解明

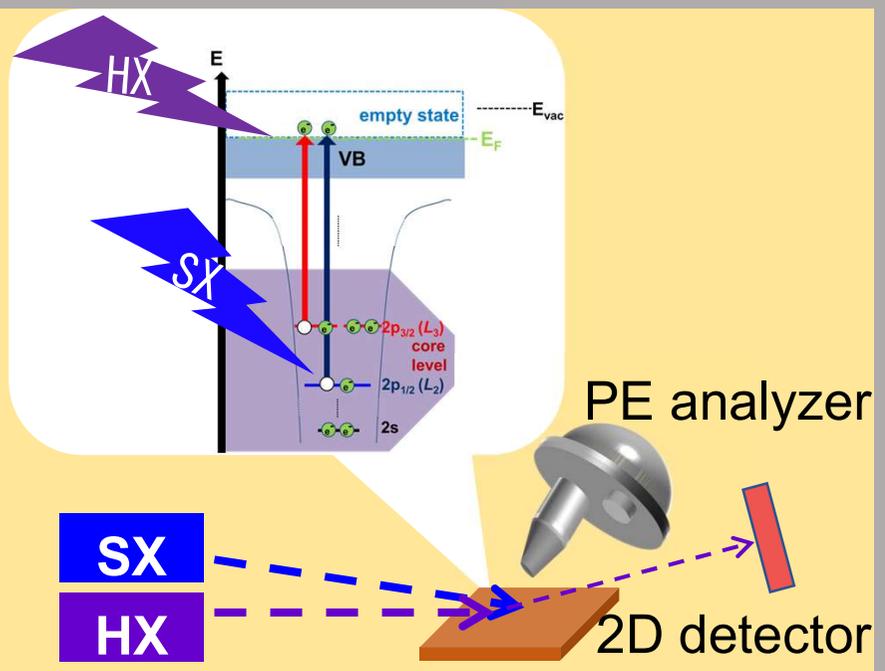


[223]方位の前方収束ピーク解析による原子軌道@rutile(110)

2. SXで吸収端を励起した際のCTR散乱
の取得

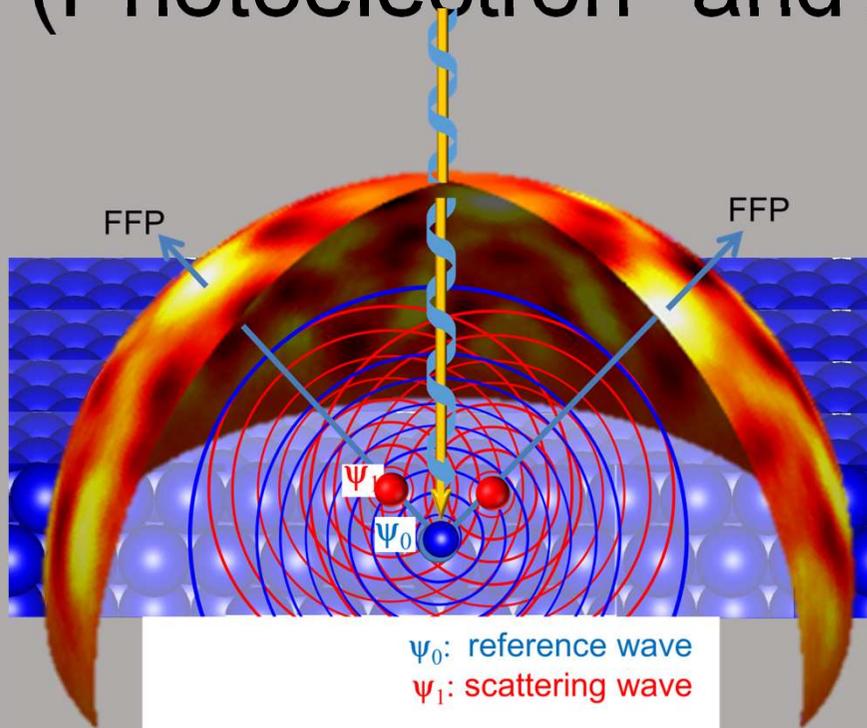
→非占有準位へ電子が励起された際の
最表面とその下層の電子密度変化の観測

バルクに比べて、表面は局在化した電子や欠陥が多い
通常は存在しない準位からの散乱もみられるかもしれない
ただし、アイデアなので利用価値は不明



光電子の放出角度分布による構造解析

光電子・Auger電子回折法 (Photoelectron- and Auger electron- Diffraction)



物質に光を照射した際に光電子が放出される。
光電子は波として広がり、周辺原子による散乱される。

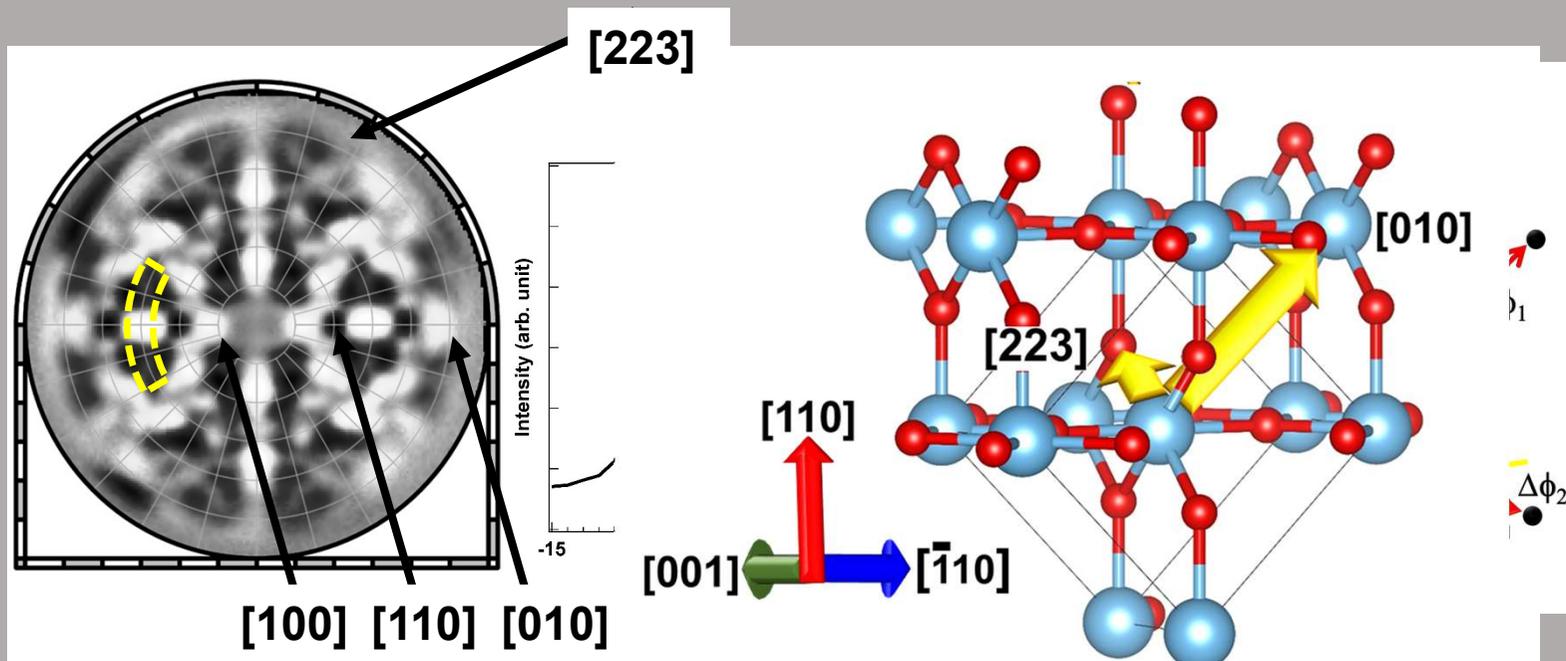
直接の波と散乱された波が干渉することで干渉模様として観測される。

$$I(\theta, \varphi) = |\Psi_0 + \Psi_1|^2$$

干渉模様を解析することで、
元素選択的な原子構造局所構造の解析が可能

放出された光電子の始状態を観測

放出角度分布は円偏光励起により
円二色性(CDAD: Circular Dichroism of Angular Distribution)が現れる。



Ti LMM Auger電子の放出角度分布の円二色性@rutile(110)

rutile(110)におけるTi周辺の構造

$$\Delta\phi = \tan^{-1} \frac{m^*}{kR \sin^2 \theta} \cong \frac{m^*}{kR \sin^2 \theta}$$

k : wave number,

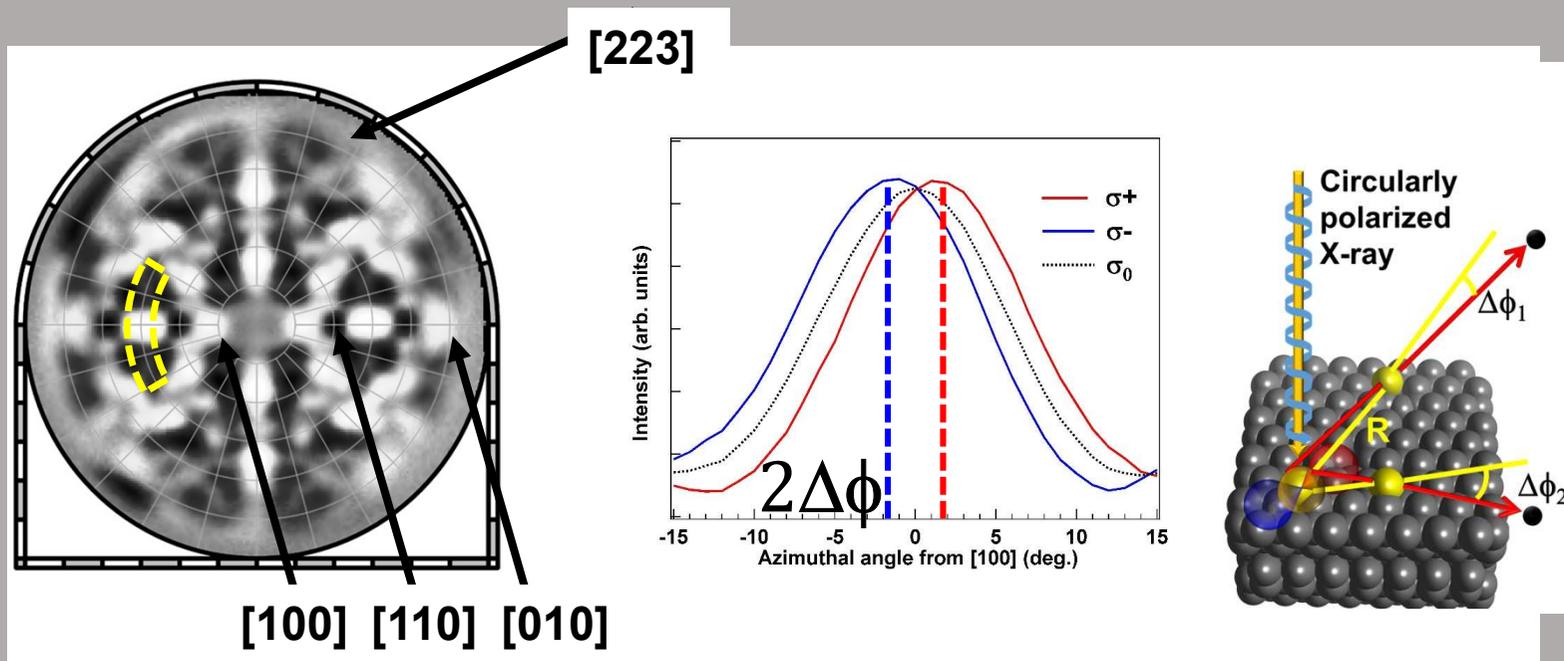
R : distance from emitter to scatterer m^* : effective magnetic quantum number

θ : polar angle between scatterer direction & incident X-ray axis

円偏光の角運動量を受け取ると、光電子の終状態の磁気量子数が変化
→解析すれば、始状態を明らかにできる。

放出された光電子の始状態を観測

放出角度分布は円偏光励起により
円二色性(CDAD: Circular Dichroism of Angular Distribution)が現れる。



Ti LMM Auger電子の放出角度分布の円二色性@rutile(110)

rutile(110)におけるTi周辺の構造

$$\Delta\phi = \tan^{-1} \frac{m^*}{kR \sin^2 \theta} \cong \frac{m^*}{kR \sin^2 \theta}$$

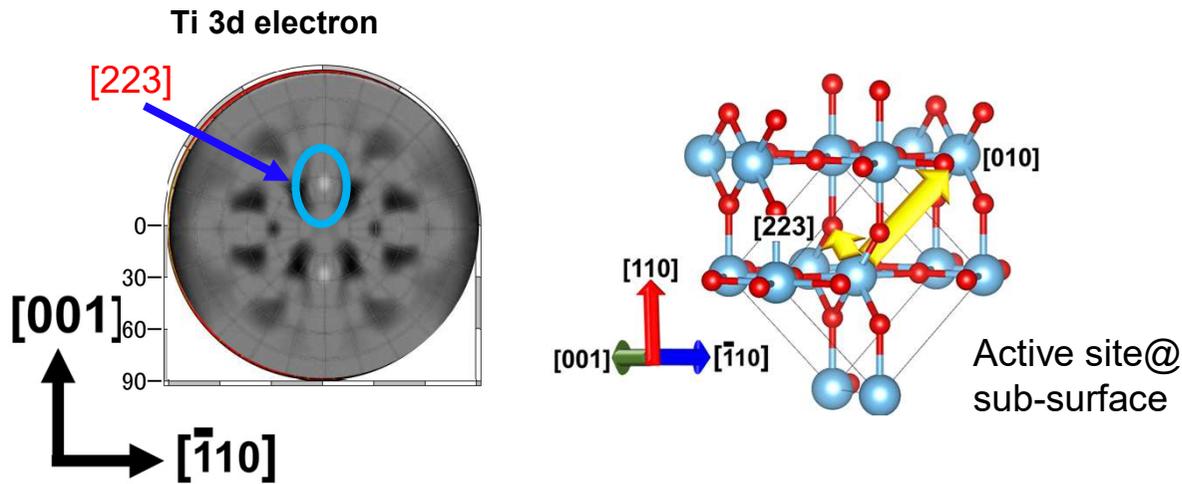
k : wave number,

R : distance from emitter to scatterer m^* : **effective magnetic quantum number**

θ : polar angle between scatterer direction & incident X-ray axis

円偏光の角運動量を受け取ると、光電子の終状態の磁気量子数が変化
→解析すれば、始状態を明らかにできる。

機能発現電子の局在化サイトと原子軌道の可視化



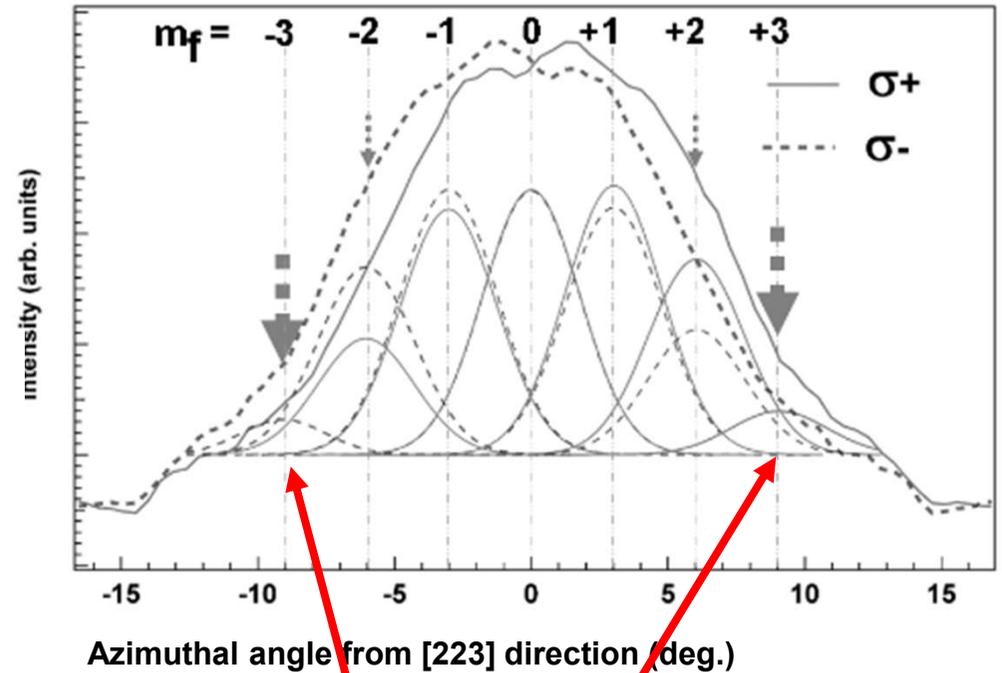
Tiの3d共鳴光電子の放出角度分布、ルチル型酸化チタンの結晶構造と方位

Projection-type electron spectroscopy collimator analyzer

See, F. Matsui, H. Matsuda, Rev. Sci. Instrum. 92, 07330 (2021)

ただ、光電子の全方位の放出角度分布をとるのは非常に時間が掛かるため、広取り込み角の光電子アナライザーがあると便利

→例えば、UVSORの松井教授と松田研究員が開発中のPESCATORAは $\theta = \pm 0 \sim 58^\circ$ のシグナルを一度の取得できる。



[223]方位のTiの共鳴光電子による前方収束ピークと原子軌道解析結果@rutile(110)

ルチル型酸化チタンの機能発現電子の始状態には、 $m = \pm 2$ の成分が含まれる
→d軌道から放出された光電子

CTR散乱での構造と電子の始状態変化の時間変化の測定
→機能発現サイトの理解を深める

まとめ

- 新BL11についての検討

光電子分光とCTR散乱の同時測定

-界面の特異なサイトの構造や電子状態の理解に使える？

円偏光軟X線を用いた機能発現電子の原子軌道解析

→機能を発現する電子の原子軌道と表面構造の解明