

UVSOR SYMPOSIUM 2025

開催日：2025年10月30日（木）～ 2025年10月31日（金）

場 所：岡崎コンファレンスセンター 2階小会議室（ハイブリッド開催）

UVSORシンポジウム

- ◆招待講演1：野口 亮 Assistant Research Fellow（国立台湾大学）
「ARPESで調べる低次元トポロジカル物質の電子状態」
- ◆招待講演2：池本 タ佳 主席研究員（高輝度光科学研究センター）
「赤外ビームラインの現状と展望」
- ◆招待講演3：和田 真一 准教授（広島大学）
「アンジュレータ放射光渦の光子計数領域におけるヤングの二重スリット実験」

VUV-SX領域の光科学による生命科学

- ◆招待講演1：小川 美香子 教授（北海道大学）
「光化学反応を利用したがん治療法の開発」
- ◆招待講演2：藤井 健太郎 上席研究員（量子科学技術研究開発機構）
「高輝度放射光軟X線を用いた量子生命科学研究」
- ◆招待講演3：西田 純 助教（分子科学研究所）
「単一タンパク質の赤外ナノ分光」

〔主催〕 UVSOR 利用者懇談会 自然科学研究機構 分子科学研究所 極端紫外光研究施設

〔共催〕 第7回次期施設建設検討会 フォトンバイオロジープラットフォーム事業

UVSOR シンポジウム 2025 プログラム

一般講演 20 分 (15 分+質疑 5 分) 招待講演 30 分 (25 分+質疑 5 分) *印は学生発表

10 月 30 日 (木)

- 13:00-13:05 開会
- 13:05-13:25 施設報告
解良 聡 (分子科学研究所)
- 座長：松井 (分子研)
- 13:25-13:45 元素置換 Ta_2NiSe_5 において現れる二重ギャップ構造
*HAN Jiyu (東京大学)
- 13:45-14:15 【招待講演 (オンライン)】
ARPES で調べる低次元トポロジカル物質の電子状態
野口 亮 (国立台湾大学)
- 14:15-14:40 休憩
- 14:40-15:30 ポスター ショートプレゼンテーション
座長：田中 (分子研)
- 15:30-16:00 【招待講演】
赤外ビームラインの現状と展望
池本 夕佳 (高輝度光科学研究センター)
- 16:00-16:20 $\text{H}_2\text{Pc}/\text{Fe}_2\text{N}$ 有機-無機ハイブリッド界面における N 原子の電子状態から明らかにする磁気結合状態
*小野 広喜 (名古屋大学)
- 16:20-16:40 励起子絶縁体 TiSe_2 における電子状態の対称性反転
福谷 圭祐 (分子科学研究所)
- 16:40-17:00 休憩
- 17:00-18:30 ポスターセッション (1 階中会議室)
- 18:30-20:00 情報交換会 (1 階中会議室)

10 月 31 日 (金)

- 座長：平 (分子研)
- 9:00-9:20 電子キラリティの検証に向けた高精度光電子円二色測定
高口 博志 (広島大学)
- 9:20-9:40 TGF 電子加速域の位置推定のための指向性チェレンコフ検出器開発
*三輪 聖 (名古屋大学)
- 9:40-10:10 【招待講演】 30 分
アンジュレータ放射光渦の光子計数領域におけるヤングの二重スリット実験
和田 真一 (広島大学)
- 10:10-10:30 CVD グラフェンの方位角ドメイン可視化：光電子顕微鏡技術と AI 技術の融合
田中 慎一郎 (大阪大学)
- 10:30-11:00 休憩
- 11:00-12:00 利用者懇談会
- 12:00 閉会

VUV-SX 領域の光科学による生命科学

第7回次期施設建設検討会、フォトンバイオロジープラットフォーム事業共催

2025 年 10 月 31 日(金) 於:岡崎コンファレンスセンター

<< プログラム >>

13:00-13:10 開会のあいさつ

解良 聡(分子科学研究所 極端紫外光研究施設 施設長)

セッション 1 (座長:荒木 暢)

13:10-13:40 光化学反応を利用したがん治療法の開発

小川 美香子(北海道大学 大学院 薬学研究院)

13:40-14:10 高輝度放射光軟 X 線を用いた量子生命科学研究

藤井 健太郎

(量子科学技術研究開発機構 NanoTerasu センター/量子生命科学研究所)

14:10-14:20 休憩

セッション 2 (座長:泉 雄大/荒木 暢)

14:20-14:50 単一タンパク質の赤外ナノ分光

西田 純(分子科学研究所 メゾスコピック計測研究センター)

14:50-15:10 真空紫外放射光を用いた円二色性分光によるタンパク質の二次構造解析

泉 雄大(分子科学研究所 極端紫外光研究施設)

15:10-15:20 休憩

セッション 3 (座長:泉 雄大)

15:20-15:40 UVSOR-III から切り開く生命科学研究における軟 X 線利用の開拓

-密着型軟 X 線顕微鏡法による鉄元素マッピング-

佐々葉 遼平(大阪大学大学院 生命機能研究科/分子科学研究所)

15:40-16:00 軟 X 線顕微分光による生命科学研究

荒木 暢(分子科学研究所 極端紫外光研究施設)

16:00-16:30 総合討論

Poster Session

Oct.30 (Thu.) 中会議室

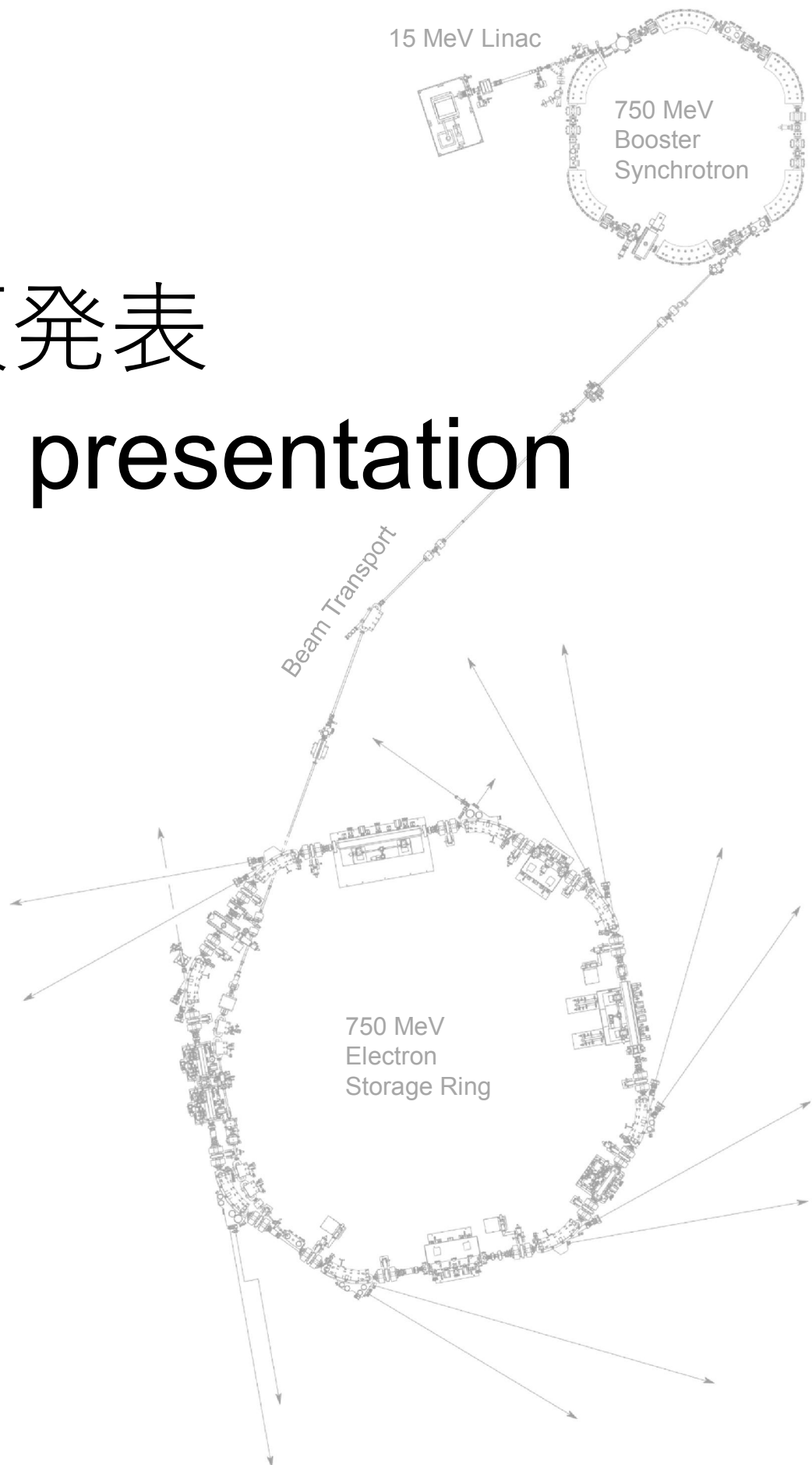
*** 印は学生発表です。**

- [P01] **西野 史 (量子科学技術研究機構)**
ガウス過程回帰を用いた 光電子分光スペクトル解析による試料劣化評価
- [P02] **佐藤 祐輔 (分子科学研究所)**
UVSOR BL6U光電子運動量顕微鏡の現況
- [P03*] **西本 海 (京都大学)**
F-LCSビームを用いたNRF収量の定量評価
- [P04*] **秋山 亮介 (東京科学大学)**
交替磁性体候補物質MnSeの電子状態
- [P05] **的場史朗 (高エネルギー加速器研究機構)**
高感度マイクロチャンネルプレートを用いた粒子検出技術の高度化
- [P06] **田中 慎一郎 (大阪大学)**
UVSOR-BL5Uで観測されたXASスペクトルに現れたスパイクノイズの統計解析とその除去
- [P07*] **山口 和真 (京都大学)**
電極界面におけるイオン液体の構造：In-situ軟X線吸収分光法による研究
- [P08*] **中尾 友彦 (京都大学)**
真空紫外光吸収によりエタノール分子から生成する中間体イオンの遅延解離過程
- [P09*] **西原 快人 (大阪大学)**
顕微角度分解光電子分光を用いたCeCoIn₅の表面電子状態の終端面依存性観測
- [P10*] **藤本 一志 (名古屋大学)**
tdapO₂/Co 有機-無機ハイブリッド界面磁気結合によるCoの磁気特性変調
- [P11*] **三浦 直也 (名古屋大学)**
原子分解能STMおよびXASによるFe/Ge界面の構造・電子状態観測
- [P12*] **岡本 蓮太郎 (大阪大学)**
角度分解光電子分光によるSmAgx/Ag(111)の電子状態
- [P13*] **岡村 尚弥 (名古屋大学)**
原子スケール表面構造変化がNi/Cu(001)超薄膜の電子・磁気状態に及ぼす影響
- [P14] **下ヶ橋 龍之介 (分子科学研究所)**
 π 共役系分子の表面吸着による単結晶グラファイトの対称性変化

- [P15] **彦坂 泰正 (富山大学)**
多電子・イオン同時計測による臭化水素2価イオン状態の解離の研究
- [P16] **北浦 守 (山形大学)**
マグネシウムシリサイド結晶の赤外分光
- [P17] **小林 政弘 (核融合科学研究所)**
VUV-EUV光電離プラズマのビームエネルギー依存性
- [P18*] **森田 雄晴 (東北大学)**
高分解能ARPES / PMMによるワイル半金属PtBi₂の電子状態の観測
- [P19*] **岩井 敦志 (名古屋大学)**
窒素サーファクタント効果によって作製したFe/Co界面の構造と電子・磁気状態の成長順序依存性
- [P20*] **村山 瑠渚 (広島大学)**
残留ガスとの相互作用による放射線発生
- [P21] **伏谷 瑞穂 (名古屋大学)**
ヨードメタンI 3d内殻イオン化の電子・イオンコインシデンス計測
- [P22] **大門 寛 (分子科学研究所)**
原子ホログラフィー顕微鏡CoDELMAによる菊池電子ホログラフィー解析
- [P23*] **一条 悠人 (山形大学)**
マルチモーダル分光によって解き明かすLiCaAlF₆:Ce結晶のNa共添加効果
- [P24*] **桑原 爽健 (山形大学)**
広視野EUV偏光計の開発に向けたビームライン実験計画
- [P25*] **倪 遠致 (名古屋大学)**
層状室温強磁性体AlFe₂B₂の角度分解光電子分光
- [P26*] **近藤 悠貴 (東北大学)**
高対称物質RB₄におけるトポロジカル線ノード電子状態
- [P27*] **橋本 恵里 (青山学院大学)**
光電子運動量顕微鏡を用いたIr(001)単結晶薄膜の評価
- [P28*] **福田 亮平 (名古屋大学)**
角度分解光電子分光によるMg₃Sb_{0.5}Bi_{1.5}単結晶の電子状態の研究
- [P29] **平野 佳穂 (分子科学研究所)**
InドープBi₂Se₃の光電子ホログラフィー
- [P30*] **藤原 千隼 (東北大学)**
ゼロ次元型Li₂HfI₆シンチレータの光学特性の温度依存性

- [P31*] **福島 祥紘（東京科学大学）**
トポロジカル結晶絶縁体薄膜SnTeへのMnドーピングによる表面状態輸送の観測
- [P32*] **浅井 佑哉（広島大学）**
UVSOR-IIIにおける単一電子蓄積実験の現状2025
- [P33] **加藤 政博（広島大学）**
キラルなアンジュレータ光の生体分子構造解析への応用の開拓
- [P34] **長谷川 友里（筑波大学）**
Au(111)上のDNITT単層膜の電子状態における界面の影響
- [P35*] **石田 悠人（千葉大学）**
角度分解光電子分光によるダイマーMott絶縁体の電子構造測定
- [P36] **田所 大輔（京都大学）**
紫外線照射PETの酵素分解
- [P37*] **山口 広（広島大学）**
角度分解光電子分光による電子ドーピング型銅酸化物高温超伝導体Nd_{2-x}Ce_xCuO₄の電子状態の研究

口頭発表 Oral presentation



BL7U

元素置換 Ta_2NiSe_5 において現れる二重ギャップ構造

Two gap structures observed in element-substituted Ta_2NiSe_5

J. Han¹, 合戸洸平¹, 土田駿², 広瀬雄介^{2,3}, 摂待力生², 牧田誠二⁴, 田中清尚⁴,
高橋流ノ介⁵, 渡邊浩^{5,6}, 木村真一^{5,6,7}, 土師将裕¹, 長谷川幸雄¹, 近藤猛¹
¹東大物性研, ²新潟大院自然, ³原子力機構, ⁴分子研, ⁵阪大理, ⁶阪大生命機能
J. Han¹, K. Aido¹, S. Tsuchida², Y. Hirose^{2,3}, R. Settai², S. Makita⁴, K. Tanaka⁴, R. Takahashi⁵,
H. Watanabe^{5,6}, S. Kimura^{5,6,7}, M. Haze¹, Y. Hasegawa¹, T. Kondo¹
¹ISSP, Univ. Tokyo, ²Grad. Sch. Of Sci. & Tech, Niigata Univ., ³JAEA, ⁴UVSOR,
⁵Sch. of Sci., Osaka Univ., ⁶Grad. Sch. of Frontier Biosciences, Osaka Univ.

励起子絶縁体(EI)は、スクリーンが弱い狭ギャップ半導体や半金属において、電子と正孔がクーロン引力によって自発的に結合・凝縮することで実現する量子相であり、凝縮系における多体相互作用の理解において重要な研究対象となっている。 Ta_2NiSe_5 はその代表的物質として知られ、EI転移と同時に構造相転移を伴うことから、電子-正孔クーロン相互作用と電子-フォノン結合のいずれが支配的であるかを区別することが長らく課題とされてきた。従来は、表面へのアルカリ金属蒸着によってキャリアドーピングを行い、励起子ギャップや相転移の変化を調べる試みがなされ、励起子ギャップが縮小し最終的に崩壊すると報告されている。しかし、この方法では表面に生じる電位勾配によりスターク効果が誘起され、純粋なキャリア効果の抽出が困難であった。

本研究では、 Ta_2NiSe_5 に対して元素置換を導入することにより、バルクレベルでのキャリアドーピングを実現し、スターク効果を排除した条件で電子-正孔相互作用の変化を直接的に評価した。角度分解光電子分光、光学伝導度、走査トンネル分光を組み合わせることで電子構造および励起子ギャップのドーピング依存性を多面的に解析した。その結果、従来の予想に反する結果が得られたため、ここに報告する。特に、励起子ギャップとは別にフェルミ準位近傍の小さなギャップが確認され、元素置換 Ta_2NiSe_5 における二重ギャップ構造が明らかとなった。

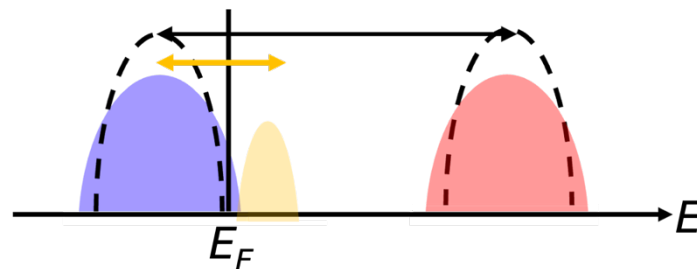


Fig. 1: 元素置換 Ta_2NiSe_5 における二重ギャップ構造。
黒矢印は励起子ギャップを、黄色矢印はフェルミ準位近傍のギャップを示す。

[1] L. Chen *et al.*, Phys. Rev. B **102**, 161116 (2020).

[2] S. Lee *et al.*, ACS Nano **18**, 24784 (2024).

BL5U

ARPESで調べる低次元トポロジカル物質の電子状態

Electronic Structures of Low-Dimensional Topological Materials Investigated by ARPES

野口亮¹

¹国立台湾大学

Ryo Noguchi¹

¹National Taiwan University

トポロジカル物質は、ディラック分散やワイル分散といった特徴的な電子構造をもち、スピントロニクスや量子計算への応用可能性から盛んに研究されている。近年は、擬一次元物質や原子層物質においても多様なトポロジカル量子現象が現れることが明らかとなり、注目を集めている [1]。特に、分子線エピタキシー法 (MBE法) により作製できる表面系では、三次元物質では探索が難しいトポロジカル電子状態を調べるのが可能になる。本発表では、表面合金 Gd/Ag(111) の温度依存電子状態を ARPES によって調べた研究を紹介したい。

表面合金 Gd/Ag(111) は、85 K の転移温度をもつ表面強磁性体であり、そのバンド分散がワイルノードをもつ可能性が指摘されてきた [2]。しかしこれまで、電子構造の温度依存性は実験的に調べられておらず、磁性とワイル分散との関係が明らかになっていなかった。そこで我々は、MBE法によって Gd/Ag(111) 表面合金を作製し、その電子状態の温度依存性を ARPES によって精密に調べた。その結果、表面合金のバンド分散は、単純なストーナー模型では説明できない、特徴的な温度依存性を示すことが分かった [3]。講演ではバンド分散の温度依存性の詳細とその機構を議論する。

[1] R. Noguchi *et al.*, Phys Rev. Lett. **133**, 086602 (2024).

[2] B. Feng, B. *et al.* Phys. Rev. Lett. **123**, 116401 (2019).

[3] R. Noguchi, C. Kim *et al.*, in preparation.

BL6B

赤外ビームラインの現状と展望

Current Status and Future Outlook of Infrared Beamline

池本夕佳

高輝度光科学研究センター

Yuka Ikemoto

Japan Synchrotron Radiation Research Institute

SPring-8の赤外ビームラインBL43IRは、2001年に共用を開始した。顕微分光を中心として、最近では、温度・湿度・延伸などさまざまな試料環境で測定を行うことに注力し、多くの課題を実施してきた。SPring-8ではアップグレード計画が進行しており、アップグレード後は赤外光を十分な強度で取り出すことが困難になることが予想されている。施設は2027年度後半にアップグレードのための停止期間に入るが、それに先立ち、赤外ビームラインは2025年度の公募が最後となった。公募が行われなくなることは施設側の理由だが、一方、赤外線領域の放射光を利用して研究を行う需要は高い。我々は、2023年9月20日に、UVSORとSPring-8の赤外ビームライン合同ユーザズミーティングを開催した。ここで、高い光源スペックを持つBL6Bに、BL43IRのアクティビティを移すことが提言された。本発表では、UVSORの田中清尚准教授、手島史綱氏をはじめ、赤外関係者の協力を得て行っている準備状況を報告する。

SPring-8/BL43IRにおける主要な実験手法は顕微分光である。空間分解能やスペクトルの質を評価するために、これまで毛髪切片を使用しており、同様の測定をUVSOR/6Bでも行った。BL43IRの装置はBRUKER VERTEX70 (FTIR分光器)と HYPERION2000(赤外顕微鏡)、BL6Bの装置はJASCO FT/IR-6100と IRT-7000である。5 μm 程度の厚さにスライスした毛髪切片をBaF₂基板上に置き、室温・透過配置でマッピング測定を行った。図1は毛髪のスペクトルから、CH伸縮振動のピーク(およそ2800~3100 cm^{-1})の積分強度を計算し、2次元表示した結果である。比較のため、光源と検出器を変えて測定しており、(a)はBL6Bの装置で標準光源(グローバーランプ)、1次元アレイ検出器(16素子)を使用、(b)はBL6Bの装置で放射光、単素子の検出機を使用、(c)はBL6Bの装置で放射光、1次元アレイ検出器を使用、(d)はBL43IRで放射光、単素子の検出器を使用した結果である。1次元アレイ、単素子ともにMCT(Mercury Cadmium Telluride)検出器である。図中の白いバーは20 μm を示している。(a)と(c)を測定した際のアパーチャーサイズは125 μm x 15 μm 、(b)は4 μm x 4 μm 、(d)は5 μm x 5 μm であった。また(a)から(d)の測定時間はそれぞれ13分、140分、13分、220分であった。1次元アレイ検出器を用いた場合、素子の数の分、測定時間が短縮されていることがわかる。放射光光源では16素子のうち中心部分にしか光が当たっておらず、一部領域で余分なノイズがのっている。単素子の実験では、BL6BもBL43IRも同程度の空間分解能を達成している。毛髪そのものを測定対象とした課題も多く、BL6Bで実施可能であることが示された。このほか、スペクトルのS/Nなどの評価、湿度・温度を制御する装置可能性、遠赤外領域の測定などを検討している。

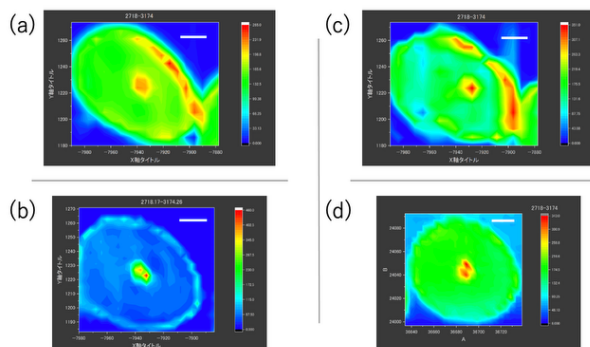


Fig. 1: 毛髪切片のCH伸縮振動ピークの積分強度イメージ。光源や検出器を変えて測定した。

BL4B

H₂Pc/Fe₂N 有機-無機ハイブリッド界面における N原子の電子状態から明らかにする磁気結合状態

Magnetic coupling revealed by the electronic states of nitrogen atoms at H₂Pc/Fe₂N
organic-inorganic hybrid interface

小野広喜¹、梅田佳孝¹、吉田海仁¹、筒井健三郎¹、山本航平²、石山修²、
横山利彦²、水口将輝^{1,3}、宮町俊生^{1,3}

¹名古屋大学、²分子研、³名大未来研、

Hiroki Ono¹, Yoshitaka Umeda¹, Kaito Yoshida¹, Kenzaburo Tsutui¹, Kohei Yamamoto²,
Osamu Ishiyama², Toshihiko Yokoyama², Masaki Mizuguchi^{1,3} and Toshio Miyamachi^{1,3}

¹Department of Materials Science and Engineering, Nagoya University

²Institute for Molecular Science

³Institute of Materials and Systems for Sustainability, Nagoya University

主にC原子やN原子などの軽元素から構成される有機分子と磁性金属からなる有機-無機ハイブリッド界面は、相互作用による界面の電子・磁気状態の変化を制御することで、新規スピン依存伝導現象を創出できると期待される。界面の電子・磁気状態は、界面の局所的な構造に強く依存する。そのため、界面のミクロな構造が電子・磁気状態に与える影響を解明することが求められる。しかしながら、FeやCoなどの磁性基板は有機分子との結合が強く、有機分子単分子膜の配列を制御することが困難であるため、界面のミクロな構造と電子・磁気状態の相関はほぼ明らかになっていない。

本研究では、大表面かつ原子スケールで均一に薄膜を作製可能なFe₂N層を持つ窒化鉄薄膜の表面に二次元平面構造であるフタロシアニン(H₂Pc)を蒸着して、有機-無機ハイブリッド界面を作製した。低速電子線回折(LEED)とX線吸収分光法/X線磁気円二色性(XAS/XMCD)に加え原子スケールで構造と電子状態を測定可能な走査トンネル顕微鏡/分光法(STM/STS)を用いて、マクロとミクロの両面から試料の表面構造と電子・磁気状態を調べた。窒化鉄薄膜はCu(001)表面にN⁺イオンボンバードメント処理を行った後、鉄を室温蒸着して約350°Cで加熱し、作製した。その後、1~3分子層のH₂Pcを室温蒸着し、LEED観察により表面構造のH₂Pc膜厚依存性を調べた。電子・磁気状態はUVSOR BL4BにてFeのL吸収端及びNのK吸収端のXAS/XMCD測定を行い、界面磁気結合状態の蒸着量依存性を評価した。また、窒化鉄薄膜上にH₂Pc単分子膜が規則配列した界面を作製するために、H₂Pc1分子層を室温蒸着後、360Kと420Kでそれぞれ15分加熱し、H₂Pcの拡散を促した。H₂Pc単分子膜の配列はSTMとLEEDを用いて測定し、分子軌道の電子状態はSTSを用いて測定した。

FeのXASのL₃端とL₂端のピーク強度比から得られる窒化鉄の磁化曲線の結果から、H₂Pcを1分子層蒸着した際は、窒化鉄薄膜の垂直磁気異方性が向上することを確認した。しかしながら、2分子層目を蒸着すると窒化鉄薄膜の磁気異方性が分子蒸着前に戻った。この結果より、1分子層積層した試料では、界面で生じた磁気結合により窒化鉄薄膜の垂直磁気異方性が向上したが、2分子層目の蒸着により界面の磁気結合が切れて、窒化鉄薄膜の磁気異方性の向上が消失したことが分かった。単分子層と多分子層積層した試料のNのK吸収端の比較から、H₂PcのLUMO+1, LUMO+2の分子軌道が界面で窒化鉄薄膜の電子軌道と混成していることを明らかにした[1]。加えて、STS測定で得られたH₂PcのLUMO+1, LUMO+2に対応するdI/dVマップから、それぞれの分子軌道で窒化鉄薄膜の電子軌道と強く結合しているH₂Pc中のN原子を明らかにした。本講演では、XASとSTMの結果を組み合わせることで明らかにした界面磁気結合状態について詳しく紹介する。

[1] H. Ono, *et. al.*, J. Phys. Chem. C **127**, 23935–2304 (2023).

BL5U

励起子絶縁体TiSe₂における電子状態の対称性反転

Symmetry reversal in the electronic states of excitonic insulator TiSe₂

福谷圭祐^{1,2}、中澤遼太郎¹、石田悠³ 田中清尚^{1,2}、解良聡^{1,2,3}

¹分子研、²総研大、³千葉大

Keisuke Fukutani^{1,2}, Ryotaro Nakazawa¹, Yuto Ishida³, Kiyohisa Tanaka^{1,2} and Satoshi Kera^{1,2,3}

¹Institute for Molecular Science, ²The Graduate University for Advanced Studies, ³Chiba University

半導体等において外部励起に伴い生成される電子と正孔の束縛状態である励起子は、太陽電池や発光ダイオードなどの量子デバイスの動作原理の根幹を担うだけでなく、生体での光合成においてもエネルギー伝達を担う等、広範な物理現象を媒介する準粒子であり、その生成メカニズムの解明と制御、並びに励起子を介した新奇物性の発現機構解明は科学の諸分野の発展において重要な鍵となる基幹的課題である。近年、これらの励起子が狭バンドギャップ半導体や半金属において自発的に生成され、低温で凝縮する励起子絶縁体(EI)と呼ばれる新奇物性の存在が明らかになりつつある[1-10]。通常の半導体においては外部励起を必要とする励起子生成(電子-正孔の結合)が、EIにおいては、エネルギー利得の生じる基底状態として存在することから、EIは基底状態と励起状態の反転した半導体と認識することができ、このような特異物性を示す物質の基礎理解は今後、多様な分野において技術的ブレイクスルーに繋がり得る有望な知見をもたらすと考えられる。

中でも、長年にわたり間接遷移型EIの有力候補として活発な議論が続いている物質として1T型の遷移金属ダイカルコゲナイド(TMDC)であるTiSe₂が挙げられるが[11-12]、この物質においては、フォノン凍結を伴う電荷密度波(CDW)の生成に加えて、励起子が自発的に生成・凝縮しているかについては様々な報告・主張がなされており[13-15]、未だ本問題解決の兆しは見えない。本研究では、励起子が基底状態において自発的に生成されるための必要条件となる電子・正孔の結合選択則に着目し、偏光依存角度分解光電子分光(ARPES)を用いて価電子帯・伝導体の軌道対称性の決定を行なった結果、CDW転移に伴う電子状態の対称性反転を観測した。講演ではこのような電子・正孔の対称性反転においてフォノンの果たす役割、並びに対称性反転が電子・正孔の結合選択性に及ぼす影響を考察することにより、TiSe₂におけるEI相発現の妥当性について議論する。

引用文献 [1] Y. Wakisaka *et al.*, PRL **103** (2009). [2] K. Seki *et al.*, PRB **90**, 155116 (2014). [3] Y.F. Fu *et al.*, Nat. Commun. **8**, 14408 (2017). [4] K. Okazaki *et al.*, Nat. Commun. **9**, 4322 (2018). [5] K. Fukutani *et al.*, PRL **123**, 206401 (2019). [6] P.A. Volkov *et al.*, npj Quantum Materials **6**, 52 (2021). [7] K. Sugimoto *et al.*, PRL **120**, 247602 (2018). [8] S. Lee *et al.*, ACS Nano **18**, 24784 (2024). [9] T. Kaneko *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn **94**, 012001(2025). [10] K. Fukutani *et al.*, Nat. Phys. **17**, 1024 (2021). [11] H. Cercellier *et al.*, PRL **99**, 146403 (2007). [12] C. Monney *et al.*, PRB **81**, 2791 (2010). [13] D. Jeong *et al.*, PRB **109**, 125117 (2024). [14] M. D. Watson *et al.*, PRL **122**, 076404 (2019). [15] D. Pashov *et al.*, Npj Comput. Mater. **11**, 152 (2025).

BL1U

電子キラリティの検証に向けた高精度光電子円二色測定

High-Precision Measurements of Photoelectron Circular Dichroism Study
for Examining the Electronic Chirality高口博志¹, 金安達夫², 彦坂泰正³, 和田真一^{1,4}, 加藤政博^{2,4}, 鈴木喜一⁵¹広島大学, ²分子研UVSOR, ³富山大学, ⁴広島大学HiSOR, ⁵北海道医療大学H. Kohguchi¹, T. Kaneyasu², Y. Hikosaka³, S. Wada^{1,4}, M. Kato^{2,4}, and Yoshi-ichi Suzuki⁵¹Hiroshima University, ²Institute for Molecular Science UVSOR, ³University of Toyama, ⁴Hiroshima University HiSOR, ⁵Health Sciences University of Hokkaido

一般的に分子キラリティは、その分子が、実像では異なるが鏡像とは一致する配置をもつといった構造的分子対として定義され、典型的には不斉炭素を有する分子はキラル分子に分類される。光電子円二色性(PECD)は、キラル分子が左右円偏光によって異なる光電子散乱分布を示すことから、分子キラリティの新しい高感度検出手段として研究が行われている。我々は、光電子散乱分布測定で得られるPECDパラメーターが、分子の電子状態と放出される光電子運動エネルギー(PKE)に依存することに着目して、構造論的キラリティを超えた電子キラリティの検証を目的として光イオン化実験を行っている。PECD研究に対しては、光イオン化に用いる円偏光を広い波長域で供給する分子研UVSORのBL1Uビームラインは、高い優位性を持つ。特に、多くのキラル分子でPECD信号が顕著に現れるイオン化しきい値近傍(真空紫外領域[1])で円偏光を自在に制御できることが、本研究目的達成にとってBL1Uビームラインを利用する最大の利点となっている。

本研究では、BL1UビームラインにVMI(Velocity Map Imaging)法による光電子イメージング装置を設置して、オキシラン置換種体を対象としたPECD測定を行った。オキシランは、PECDを顕著に示す代表的なキラル分子であり、メチルオキシランは多くのPECD測定が行われている。高精度散乱理論によるPECDパラメーター値との比較を行うために、その状態依存性・エネルギー依存性・置換種依存性についてPECD測定を実施した。実験では、50 nmから130 nmまでの複数の波長で円偏光アンジュレータ光を照射して、光電子散乱分布を測定した。各光イオン化波長で得られた光電子散乱分布の例を図1に示す。PECDデータは、右・左円偏光で得られた光電子イメージデータの差分画像から得た前方(散乱角 $\theta < 90^\circ$)と後方(散乱角 $\theta < 180^\circ$)散乱強度の非対称度により定量化される。この差分計算の前提となる全イメージ信号強度の規格化とバックグラウンド補正が、PECDパラメーター精度に大きな影響を及ぼし、このデータ解析に起因する誤差は各依存性の考察に制約を与えた。

BL1Uビームラインでは、非常に高い計測数の光電子信号が得られたが、これまで使用していた一般的な撮像システムは10 kcpsを超える光電子画像信号を計測・転送できる仕様ではなかったため、パルスエネルギーを抑制して光電子計測レートを1 kcps以下にする条件下での測定にとどまっていた。この技術的問題を解決するために、新たにイベント駆動式の撮像システムを採用して、光電子信号の高速計測・転送を実現したことで、明瞭な状態依存性およびエネルギー依存性を示すPECDデータを測定することができた。[2]。

PECD信号は、長波長イオン化による低いPKE領域で最も顕著であり、これは最高被占軌道(HOMO)およびHOMO-1から放出された電子によるものと同定できる。PECD強度はPKEによって変動し、さらに、PECDの符号(図1の青・赤)は他のイオン化終状態によって異なる様子を示した。置換基依存性を含めて、本測定結果は、キラリティは電子状態特有の物理量であることを示唆している。

参考文献

[1] Beaulieu et al. Faraday Discuss. 194, 325 (2016).

[2] 高口博志, 他, 第37回日本放射光学会年会, 11C1-2 (2024).

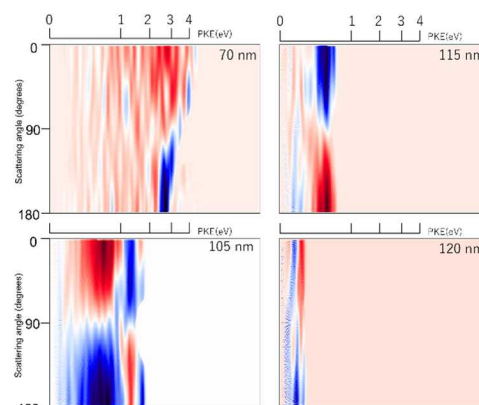


Fig. 1: S-メチルオキシランの光電子円二色性(PECD)の波長依存性($\lambda = 70$ nm, 105 nm, 115 nm, 120 nm)。上側スケール: 光電子運動エネルギー(PKE)、縦軸: 散乱角度($0 \sim 180^\circ$)。

BL1U

TGF電子加速域の位置測定のための 指向性チェレンコフ検出器開発

Development of a directional Cherenkov detector to measure the location of
the electron acceleration region of lightning gamma ray flashes

三輪聖¹, 馬場萌花¹, 大口真奈里¹, 中澤知洋^{1,7}, 大熊佳吾¹, 和田有希²,
Ting Wu³, 齊藤正宗¹, 田中敦也¹, 大宮悠希¹, 伊藤大将¹, 西村悠太¹,
坂井晃生¹, 小林勇仁¹, 藏原昂平⁷, 王道洪³, 一方井祐子⁴, 榎戸輝揚^{5,6}

¹名大理, ²阪大工, ³岐大工, ⁴金大人社, ⁵京大理, ⁶理研, ⁷名大KMI

Sei Miwa¹, Moeka Baba¹, Manari Oguchi¹, Kazuhiro Nakazawa^{1,7}, Keigo Okuma¹, Yuuki Wada²,
Ting Wu³, Masamune Saito¹, Atsuya Tanaka¹, Yuki Omiya¹, Daisuke Ito¹, Yuta Nishimura¹,
Kosei Sakai¹, Yuto Kobayashi¹, Kohei Kurahara⁷, Daohong Wang³, Yuko Ikkatai⁴, Teruaki Enoto^{5,6}

¹Dept. of Sci., Nagoya Univ., ²Dept. of Tech., Osaka Univ., ³Dept. of Tech., Gifu Univ.,
⁴Col. of Hum. Soc. Sci., Kanazawa Univ., ⁵Dept. of Sci., Kyoto Univ., ⁶RIKEN, ⁷KMI Nagoya Univ.

雷雲内の静電場で加速され雪崩増幅した電子による 0.1–30 MeVの制動放射ガンマ線を雷ガンマ線と呼ぶ。その一種であるTGF (Terrestrial Gamma-ray Flash)は、雷放電と同期して短時間に大量のガンマ線が放射される現象であるが、発生源となる電子の起源や加速域の位置、増幅率は未解明である。我々は電子加速域の位置特定を目的とし、雷活動が活発な冬季日本海沿岸部にて下向きTGFの地上観測を行っている。

我々はTGF観測用に独自の指向性チェレンコフ検出器を開発している。アクリルロッドの両端に光センサMPPCを配置して、ガンマ線がアクリルでコンプトン散乱して生じた反跳電子が放出するチェレンコフ光を読み出し、カウント数の比からその到来方向を求める。4本のロッドを組み合わせてTGFの到来方向を得る。中性子施設KUANSの即発ガンマ線(0.1–8 MeVの連続成分)を用いた較正実験から、ロッド両端のカウント比はガンマ線入射角の $\tanh$ 関数に従うことが分かっている。

本装置を用いて我々は、すでに複数のTGFを観測している。2024年度の冬季には石川県金沢市内の指向性チェレンコフ検出器4台を半年間運用し、3個のTGFを観測した。このうち11月29日と12月8日のイベントでは、我々の観測により加速域の高度が1–2 kmであることが判明した。これは世界初の測定である。岐阜大の低周波電波アレイ FALMAおよび高周波アレイ DALMAの放電データと合わせたところ、加速域は雷雲中の負電荷帯付近であることが示唆される。

検出器のさらなる改良の指針を得るため、我々はUVSORのBL1Uで、直径1 mmの単色ガンマ線ビームを用いてロッドの角度応答の高精度測定を実施した。まず検出器応答の場所依存性と角度依存性を区別して評価した。6.6 MeVガンマ線を用いて1本のロッドを端から端までスキャンし、各位置でのカウント数を測定した結果、アクリル部分に照射した場合のカウント数の位置依存性は小さく、チェレンコフ光の信号の場所依存性は小さいことが分かった。また、MPPC付近に照射した場合にはチェレンコフ光ではなく反跳電子を直接読み出し、カウント数が急激に増加することが分かった。次に検出器の角度応答のエネルギー依存性を評価した。6.6 MeV, 3.3 MeVの単色ガンマ線を用いて複数の角度で1本のロッドを端から端までスキャンすることで角度応答を得たところ、この結果も $\tanh$ 関数に従うことが確認できた。また、3.3 MeVの方が6.6 MeVよりわずかに角度依存性がなまることを確認できた。

今後はより高精度なTGFの加速域の位置特定のため、UVSORで実施した角度応答の高精度評価で判明した検出器の特性を踏まえて検出器の改良を試みる。2025年12月にはその改良方針を検討する測定を実施する。来年度には改良した検出器で金沢での観測を実施し、さらに高精度でTGFの位置を決定したい。

BL1U

アンジュレータ放射光渦の光子計数領域における ヤングの二重スリット実験

Young's double-slit experiments in the photon-counting regime with undulator vortex radiation

和田真一^{1,2}、太田寛之²、加藤政博^{3,4}

¹ 広島大院先進理工、² 広島大理、³ 広島大放射光、⁴ 分子研

Shin-ichi Wada^{1,2}, Hiroyuki Ohta², and Masahiro Katoh^{3,4}

¹Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University, ²Faculty of Science, Hiroshima University, ³HiSOR, Hiroshima University, ⁴Institute for Molecular Science

「光渦」という名称の光が存在します。20世紀末に理論的に予測された、新しい光の形態の一つです (Fig. 1)。最新の加速器技術で生成した放射光を用いて、200年以上前に開発された古典的な波の計測手法であるヤングの二重スリット実験で計測する、という新・旧織り交ぜることで、光の粒の一つ一つが「渦」を持っていることを明らかにすることができました[1]。

近年、円偏光アンジュレータの高調波の位相構造が螺旋状であり、いわゆる光渦となっていることが理論的・実験的に示された。UVSORのBL1Uは円偏光アンジュレータの高調波を可視・紫外領域で発生し、これを光学素子を介することなく大気中に取り出せることから、これまでアンジュレータ放射光渦の先導的な実験が実施されてきた。中でもダブルスリットを通過した光渦は、螺旋波面構造に由来する特異な断裂構造をもった回折模様を形成することが実証された。そこで本研究では単一光子レベルでもこのような光渦の特徴を有するのかを実証する目的で、光子カウンティングによるヤングの回折実験を実施した。

実験はUVSOR BL1Uの低カレントモードによる2光子の同時検出が極めて少ない条件下で実施し、ゲートICCDカメラを用いることで光子をカウンティング検出した。アンジュレータからの放射光を大気に取り出し、超狭帯域バンドパスフィルターを通すことで、光渦の性質を持つ第二高調波 (355 nm) 成分だけを透過させた。またこのフィルターで大きく減光することで、光子が一つずつ通過するような条件を作り出した。

円偏光アンジュレータから得られる基本波は通常の高ス分布であるのに対して、二次光は図2(a)に示すようにその光スポットは中心が抜けたドーナツ状のものであった。これは中心部に光強度がない位相特異点をもつ光渦の特徴を示している。この特異点を二重スリットの中央に配置した場合での回折干渉縞の結果を図2(b)に示す。単一光子カウンティング条件下でも干渉縞中央部での断裂と歪みといった光渦の特徴を示すことが明らかになった。

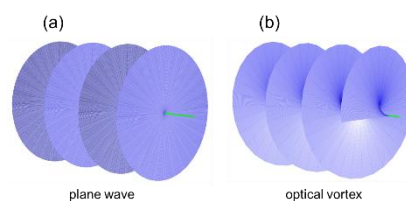


Fig. 1: (a) normal light (plane wave) and (b) optical vortex.

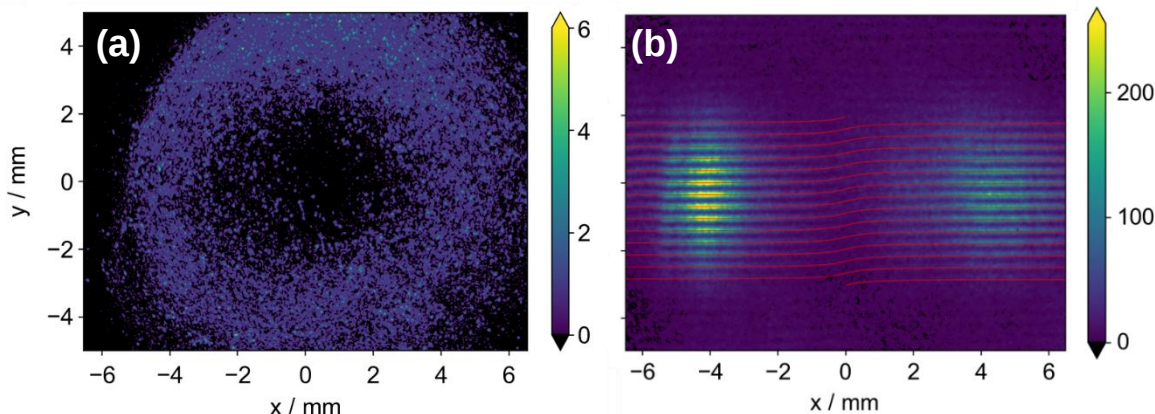


Fig. 2: (a) Beam profile and (b) double-slit interference fringes of the undulator vortex radiation obtained by photon counting integration.

BL6U

CVDグラフェンの方位角ドメイン可視化 : 光電子顕微鏡技術とAI技術の融合

Microspectroscopic Measurements and Analysis Using Photoelectron Momentum Microscopy:
A Study Concerning the Azimuthal Orientation Distribution of CVD Graphene

阪大産研、分子研UVSOR^A, 横国大院理工^B

田中慎一郎[○] 菅滋正[・] 染井裕貴^A, 佐藤祐輔^A, 松井文彦^A 今堀樹^B, 青柳良英^B, 大野真也^B

SANKEN, The University of Osaka, UVSOR IMS.^A, Grad. Sch. Eng. Sci., Yokohama Nat'l Univ.^B

S. Tanaka, S. Suga, Y. Somei^A, Y. Sato^A, F. Matsui^A, I. Imahori^B, Y. Aoyagi^B, S. Ohno^B

光電子運動量顕微鏡(Photoelectron Momentum Microscopy)は、実空間と波数空間の大量の多次元データを効率的に取得できるが故に旧来の手法では解析が困難な場合があり、新しい解析技術の開発が急務である。本発表では、CVDグラフェンの顕微ARPESについて、PMMと最先端の機械学習ライブラリを基盤に新たに開発した解析プログラムを組み合わせを行った研究成果を発表する。Fig.1(a)と(b)左(抜粋)はPMMで測定したCVDグラフェンの光電子角度分布の位置依存性データである。グラフェンの π バンドが観測されており、グラフェンの方位をこのスペクトルから求めることができる。我々は、グラフェンの面方位角決定を自動的に行うプログラムを新たに開発した。Fig.1(b)右は、六角形の点を円対称Gaussian関数でConvoluteしたシミュレーション関数であり、実験を概ね再現する。パラメータの最適化には、実測データとのCosine Similarityを損失関数として勾配降下法を用い、コーディングにはPyTorchを用いて実装した。Fig.1(c)はこれにより求めたグラフェンの面方位実空間分布とその勾配(gradient)であり、Fig.1(d)は勾配の絶対値のMapである。これはグラフェンのドメインおよびそのドメインバウンダリーを可視化したものと言える。

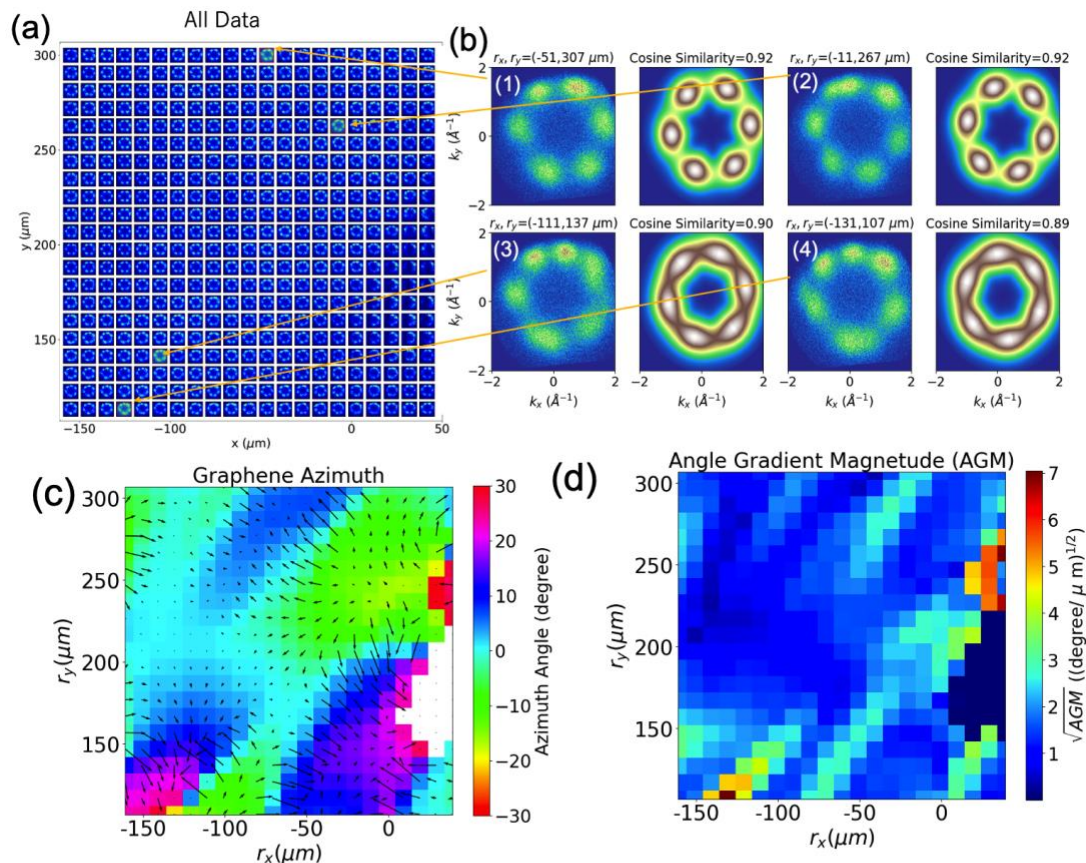


Figure 1 (a): Position-dependent photoelectron intensity maps of the CVD graphene, (b) :Detailed view of indicated regions of (a) (left) and the simulation after the optimization (right). (c): Spatial map of the azimuthal angle of graphene and their gradients (arrows). (d): Spatial map of the angle gradient's magnitude.

15 MeV Linac

750 MeV
Booster
Synchrotron

ポスター発表 Poster presentation

Beam Transport

750 MeV
Electron
Storage Ring



PF BL-13B

ガウス過程回帰を用いた

光電子分光スペクトル解析による試料劣化評価

西野史¹, 北村未歩¹, 福士英里香², 大口裕之², 岩澤英明^{1,3,4}, 堀場弘司¹

¹QST NanoTerasuセンター, ²芝浦工業大学 工学部,

³ QST 関西光量子科学研究所 放射光科学研究センター, ⁴HiSOR

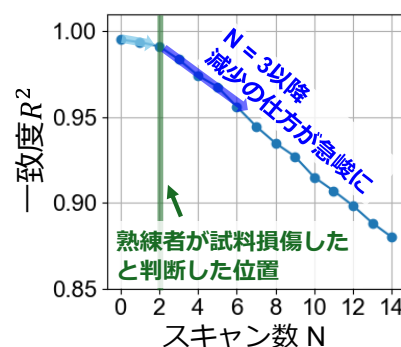
E-mail: nishino.fumi@qst.go.jp

光電子分光(PES)は、物質の電子構造を直接観察できる強力な手法として広く利用されている。近年では有機材料や金属水素化物などに対する利用も進んでいるが^[1]、このような低伝導性材料は光照射に伴う光電子放出が試料劣化を生じさせ、スペクトル形状が時間とともに変化することがよく知られている^[2]。この変化はスペクトルから得られるピーク位置・強度・線幅等に影響を与え、本質的な電子状態の議論を困難にする。

従来、このような試料劣化の有無は熟練の研究者が目視比較により判断してきた。しかし統一的な判断基準は存在しないため、初めて光電子分光測定を行う人にとってはハードルが高いこと、電子状態が全く未知な新規材料では測定中の逐次試料劣化有無の評価が困難であること、が試料劣化に伴う光電子分光における課題となっている。

そこで本研究では、このようなスペクトル変化を客観的に評価することを目的とし、機械学習手法であるガウス過程回帰(GPR)を用いたスペクトルの形状評価を試みた^[3]。評価対象には、Photon Factory BL-13Bで測定した、スキャン数に対し試料劣化に伴う形状変化が観測されたLiH価電子帯スペクトルを用いた。

まず測定初期のスペクトルをGPRでフィッティングし、それを未劣化な基準スペクトルと仮定した。スキャン数の異なる各スペクトルと基準スペクトルとの一致度(R^2)を算出し、一致度の低下を試料劣化の指標とした(図)。本発表では結果の詳細及び本手法の特徴について報



スキャン数に対する一致度 R^2 のプロット。

告する。[1]Kundrata *et al.*, Beilstein J. Nanotechnol. **10**, 1735 (2019). [2] B. Boudaïffa *et al.*, Science **287**, 1658 (2000). [3] H. Iwasawa *et al.*, Sci. Rep. **14**, 20970 (2024).

BL6U, BL7U

UVSOR BL6U光電子運動量顕微鏡の現況

Current status of photoelectron momentum microscope at UVSOR BL6U

佐藤祐輔^{1,2}、染井裕貴²、松井文彦^{1,2}

¹ 分子研UVSOR、² 総研大

Yusuke Sato^{1,2}, Yuki Somei², and Fumihiko Matsui^{1,2}

¹UVSOR Synchrotron Facility, Institute for Molecular Science, ²The Graduate University for Advanced Studies

光電子運動量顕微鏡(photoelectron momentum microscope)は、光電子顕微鏡の鏡筒にエネルギー分析器を組み合わせた光電子分光装置である[1-3]。運動量顕微鏡では試料から放出される広範囲の光電子を捕集でき、試料の実空間・波数空間像を容易に取得することができる。現在 UVSOR BL6Uでは放射光運動量顕微鏡の開発が進められている[2]。BL6Uの放射光運動量顕微鏡では、エネルギー分析器として二重半球型のアナライザーを導入しており、入射光のエネルギーを変化させることによるkz方向バンド測定や、二重半球化によるBL7Uブランチからの直入射配置での測定[4]等の特色を持っている。

本発表では現在開発中の放射光運動量顕微鏡について開発の現況を概観し、特色ある測定の例として、実空間分解した光電子分光スペクトル測定(Fig. 1)と、BL7Uブランチの直入射偏光を用いた軌道分解測定(Fig. 2)について議論する。また、現在開発中であるスピン分解測定やその高度化、得られる多次元データの解析の高度化等といった、今後の測定の展望に関しても議論する予定である。

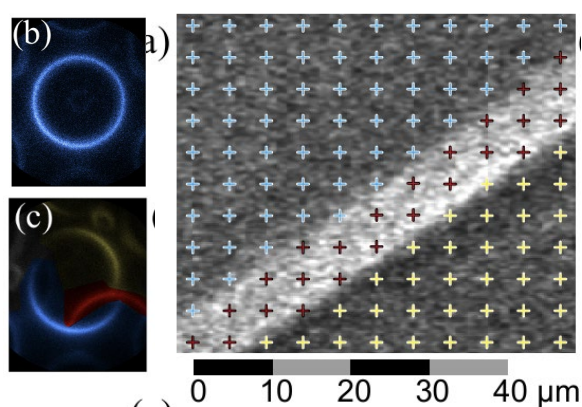


Fig. 1: グラファイトの実空間分解
光電子分光スペクトル測定

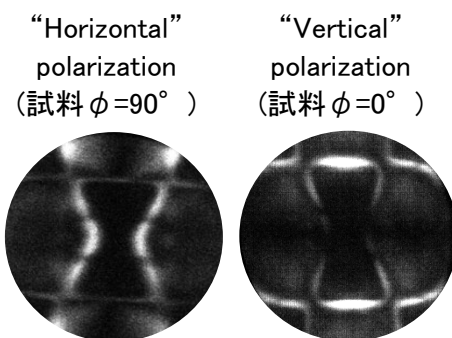


Fig. 2: BL7Uブランチを使用した
Cu(110)表面の軌道分解測定

- [1] C. Tusche et al. Ultramicroscopy **159**, 520 (2015). [2] F. Matsui et al. Jpn. J. Appl. Phys. **59**, 067001 (2020).
[3] K. Yaji and S. Tsuda, e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. **22**, 46 (2024). [4] K. Hagiwara et al. J. Synchrotron Radiat. **31**, 540 (2024).

BL1U

F-LCS ビームを用いた NRF 収量の定量評価

Quantitative Evaluation of NRF Yield by Using F-LCS beam in UVSOR

西本 海¹, 大垣 英明¹, 全 炳俊¹, 早川 岳人², 静間 俊行², Mohamed Omer³

¹京大, ²量研, ³原子力機構

Kai Nishimoto¹, Heishun. Zen¹, Hideaki Ohgaki¹, Takehito Hayakawa², Toshiyuki Shizuma², and
Mohamed Omer³

1Kyoto University

2National Institutes for Quantum Science and Technology

3Japan Atomic Energy Agency

1. 研究目的

我々は核共鳴蛍光散乱(NRF)と UVSOR の BL1U からのレーザーコンプトン(LCS)ガンマ線を用いて、同位体分布の CT イメージを取得する手法(NRF-CT)を開発し、208Pb の 3 次元 NRF-CT イメージの取得に世界で初めて成功した[1]。現在複数の同位体の同時検出と定量評価を目指し、電子ビームを円偏光アンジュレータ磁場により旋回させることで、小径のコリメータでもエネルギー幅を拡大させるとともに、エネルギー分布の空間依存性を無くす F-LCS ガンマ線を提案し、そのエネルギー空間分布が、通常の LCS ガンマ線に比べて一様という事を、NRF 収量の定量評価を行う事で検証する事を目指して実験を続けている[2]。

2. 実験方法

F-LCS ガンマ線の発生のために、UVSOR の BL1U の円偏光アンジュレータ磁場を $K=0.2$ で励磁し、 $1.896\mu\text{m}$ の波長のファイバーレーザー(出力約 35W, CW)を用いて、最大エネルギー5.54MeV の F-LCS ガンマ線を発生させた。吸収サンプルとして、直径 8 mm の 208Pb または天然鉛を配置し、その下流に 207, 208Pb の高濃縮ロッドをウィットネスターゲットとして置き、そこからの NRF ガンマ線を 2 台の大型の Ge 検出器にて測定した。このデータをもとに定量評価として、5512keV での NRF ピークの減少度から天然鉛における 208Pb の同位体存在度を導出し、文献値と比較することで F-LCS ガンマ線の NRF 実験への適性を検証する。

3. 実験結果と考察

表 1 に測定結果から導出した 208Pb の同位体存在度を示す。表からわかる通り、文献値にはどちらのガンマ線を用いた測定でも 1σ の誤差の範囲には入っていないため、定量評価のために必要な入射ガンマ線及び透過ガンマ線の量の測定に問題があるものと考えられる。原因の一つに散乱ガンマ線が LaBr₃ 測定器に入射されているおそれがあることが挙げられる。

今後の実験では PHITS によるシミュレーションを用いて実験セットアップの改善や実験中での測定精度の確認方法の確立にも取り組む。

Table 1: Isotopic abundance of 208Pb

	²⁰⁸ Pb-5512keV
LCS	$57.4 \pm 2.9\%$
F-LCS	$63.9 \pm 4.9\%$
Natural Abundance	52.4%

BL7U

交替磁性体候補物質MnSeの電子状態

Electronic structure of altermagnetic candidate MnSe

秋山亮介¹、田中清尚²、平原徹¹

¹ 東京科学大、² 分子研UVSOR

Ryosuke Akiyama¹ Kiyohisa Tanaka², and Toru Hirahara¹

¹ Institute of Science Tokyo, ² UVSOR Synchrotron Facility, Institute for Molecular Science

交替磁性体(altermagnet)は反強磁性体のようにスピンの反平行に整列した秩序をもち、正味の磁化が打ち消されるにもかかわらず、強磁性体のような時間反転対称性の破れに起因した現象を発現する新奇な磁性である[1]。これまで我々のグループでは、代表的な交替磁性体であるMnTeに着目し、その磁化状態および電子構造の実験的解明を進めてきた。その結果、MnTeをBi₂Te₃基板上にエピタキシャル成長させた場合、最表面がBi-Te原子層で終端されること、さらにこの終端構造がMnTeに弱い強磁性的特徴を誘起することを明らかにした。これらの成果は、終端面の構造が交替磁性体の磁氣的性質に強く影響することを示唆するものである。MnTeと類似の化学組成を持つMnSeもまた、交替磁性体の有力な候補物質として注目されている。特にwurtzite型結晶構造を有するw-MnSeについては、交替磁性の対称性条件を満たすことが予言されている。しかし、w-MnSeは構造的には準安定相であるため、その合成報告例は限られており[2,3]、この系の交替磁性に関する研究はこれまで主として第一原理計算に基づく理論的検討にとどまっているのが現状である[3,4]。したがって、高品質w-MnSe薄膜を実験的に作製し、その電子構造を直接観測することは、この系で理論的に予測されている交替磁性の有無を検証するうえで重要なステップである。

そこで本研究では、Bi₂Se₃基板上へのMnおよびSeの共蒸着による、w-MnSe薄膜の作製およびその電子構造の実験検証を試みた。得られた薄膜の格子定数は4.12Åであり、文献値[3]と良く一致した。文献[3]ではエピタキシャルw-MnSeの安定成長には適切なバッファ層の選択が必須であると指摘しており、本研究の結果はBi₂Se₃層がその機能を果たし得ることを示している。電子状態の観察のため、作製した試料についてUVSOR BL7Uにて励起光エネルギー $h\nu = 15\sim 26$ eV、測定温度 $T = 11$ Kの条件下でin situ角度分解光電子分光(ARPES)測定を行った。その結果、 Γ -M方向と Γ -K方向で明確

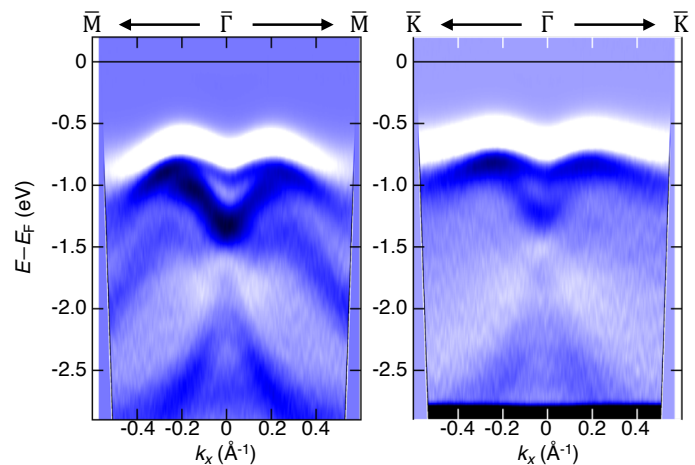


図: Γ -M方向および Γ -K方向に沿って測定した $h\nu = 21$ eV, $T = 11$ KにおけるMnSe/Bi₂Te₃の電子状態。

なバンド分散の異方性が観測された(図)。特に Γ -M方向では、交替磁性体特有のバンドのスピンスplitに対応すると考えられる電子構造が確認されたのに対し、 Γ -K方向ではこのsplitが抑制されていた。この結果は、 Γ -K方向が交替磁性によるスピンスplitが対称性的に禁止されるnodal lineに対応するという理論予想とも整合的であり、この試料が交替磁性体であることを示唆している。またMnTe/Bi₂Te₃系とのアナロジーから、本試料の最表面はBi-Se原子層で終端されている可能性が考えられる。こうしたBi-Se、Bi-Te原子層終端面が電子状態や磁化特性に及ぼす影響の詳細な検討は、終端修飾が交替磁性体の磁氣的性質を変調するメカニズムを統一的に理解するための重要な課題である。その初期的な考察や展望については、ポスターにて報告する予定である。

- [1] L. Šmejkal *et al.*, Phys. Rev. X, **12**, 031042 (2022).
- [2] Sines *et al.*, Angew. Chem., Int. Ed., **49**, 4638–4640 (2010).
- [3] Grzybowski *et al.*, Nanoscale, **16**, 6259 (2024).
- [4] Bezzerga *et al.*, Adv. Funct. Mater., 2505813 (2024).

BL5B

高感度マイクロチャンネルプレートを用いた粒子検出技術の高度化

Enhancement of Particle Detection Technology Using High-Sensitivity Microchannel Plates

的場史朗 KEK IMSS

Shiro Matoba
KEK IMSS

マイクロチャンネルプレート(MCP)は、直径 $10\mu\text{m}$ 程度の電子増倍孔が二次元に配列された鉛ガラス製の検出器である。荷電粒子や短波長の光子等が孔の内壁に衝突すると、孔の中で二次電子が発生・増幅され、電子パルスとして検出される。MCPは大面積、高空間分解能、高速検出が可能であることから、基礎研究から産業分野まで非常に幅広い分野で利用されている。MCPは紫外線やX線の検出器としても利用されており、人工衛星や探査機からの惑星大気観測のための撮像素子としても採用されている。MCPの表面にCsIをコーティングすると 100nm 以上の波長領域では検出効率が数十倍向上することが知られているが、多くの天体大気中の主要成分であるヘリウムイオンや酸素イオンからの輝線が集中する 100nm 以下では1.2倍にしか向上しない[1]。そのため、天体大気の動的な姿を理解するための決定的な観測手法とはなっていない。本実験では、EUV検出器としての有用性を検証するために、分子研UVSORのBL5Bにてテーパ型MCP[2]を用いて $32\sim 190\text{nm}$ の波長域におけるEUV検出効率を測定した。分光されたEUVは、直径 1mm のピンホールを通過し、MCPに入射される。MCPは高輝度では計数率が飽和するため、モリブデンメッシュとカプトン薄膜で光を減衰させた。高次光を減衰させるために厚さ 300nm のアルミホイルまたは厚さ 1.5mm のLiF窓を挿入した。測定に用いたMCPは、通常型、テーパ型、CsIコート通常型、CsIコートテーパ型の4つの領域に分かれた特注品である。

図1に、テーパ型MCP(T-MCP)、CsIコート型MCP(CsI-MCP)、テーパ型CsIコート型MCP(TCSI-MCP)の測定カウント数のノーマル型MCP(N-MCP)に対する強度比を示す。テーパ型MCPの検出効率は、すべての測定波長域でノーマル型MCPより高い。特に短波長域では、テーパ型MCPはCsIコート型MCPよりも高い検出効率を示した。さらに、テーパ付きMCPとCsIコーティングの相乗効果により、MCPの検出効率が向上することが確認された。これらの結果は、テーパ付きMCPが紫外線検出のための強力なツールであることを示している。

今後は、製造メーカーとも協力して、MCPの母材料やコーティング・形状等を根本から見直し、大型化、高検出効率、高ゲイン、高計数率耐性、耐候性についての特性を飛躍的に向上させることを目的として開発を進めて行く予定である。

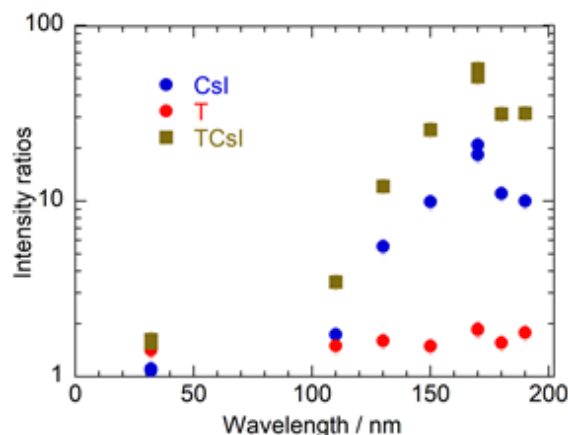


Fig. 1: 通常型MCPの単位時間当たり紫外光収率で規格化したテーパ型MCP (T), CsIコーティングMCP (CsI), テーパ型CsIコーティングMCP (TCsI)の紫外光収率。

[1] K. Yoshioka *et al.*, Rev. Sci. Instrum. 83, (2012) 083117.

[2] S. Matoba *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 112201

BL5U

UVSOR-BL5Uで観測されたXASスペクトルの スパイクノイズの統計解析とその除去

Statistical analysis and removal of the spike-like noises in the XAS spectra taken at BL5U of UVSOR

田中慎一郎¹, 田中清尚²

阪大産研¹、分子研UVSOR²

Shin-ichiro Tanaka¹, Kiyohisa Tanaka²

¹SANKEN, The University of Osaka, ²UVSOR Synchrotron Facility, Institute for Molecular Science,

分光実験においてノイズは避けられない問題である。放射光利用研究において、限られたマシンタイムの中で研究を効率的に進めるためには、発生したノイズの特徴を分析し、その知見をビームラインスタッフだけではなくユーザー間で共有することが重要である。我々は、2025年9月第1週のUVSOR BL-5Uでのマシンタイムにおいて電子収量法を用いた表面XAFSスペクトル測定を行った際、顕著なノイズを観察した。そこで、このノイズについて詳しく分析した結果およびpost-processにおいて数値的に除去するための手法について発表する。

図1(a)はSi(001)c(4x2)表面(T=40K)で測定した $E_k=80\text{eV} \pm 0.87\text{eV}$ の部分電子収量スペクトルの2例である。明らかに、正の方向のみでスパイクノイズが観察されている。マシンタイム中の全ての測定データについて、強度の微分を取り閾値を設定することでノイズを分離し、シグナルに対する相対強度およびノイズの時間間隔のヒストグラムを取ったものがそれぞれ図1(b),(c)である。相対強度は正規分布を示し、ノイズ間隔は(ごく初期の数え落としがあり得る領域を除き)、時定数95秒のExponential decayを示している。これは、現象がポワソン過程であること、すなわち、95秒に平均1回の割合で確率的に起こる現象であることを示している。これは、このノイズが1分おきに定期的に蓄積リングに電子を入射するTop-up運転をその直接的な原因とするものではないことを示唆している。実際、図1(d)に、ノイズが発生する時刻から秒のみを取り出して分布を取ると、ほぼフラットであり周期的な構造を持っていないことがわかる。ノイズの真の原因についての検討、および機械学習の手法を用いてさらに洗練されたノイズ除去のアルゴリズムについて詳しく講演で述べる。

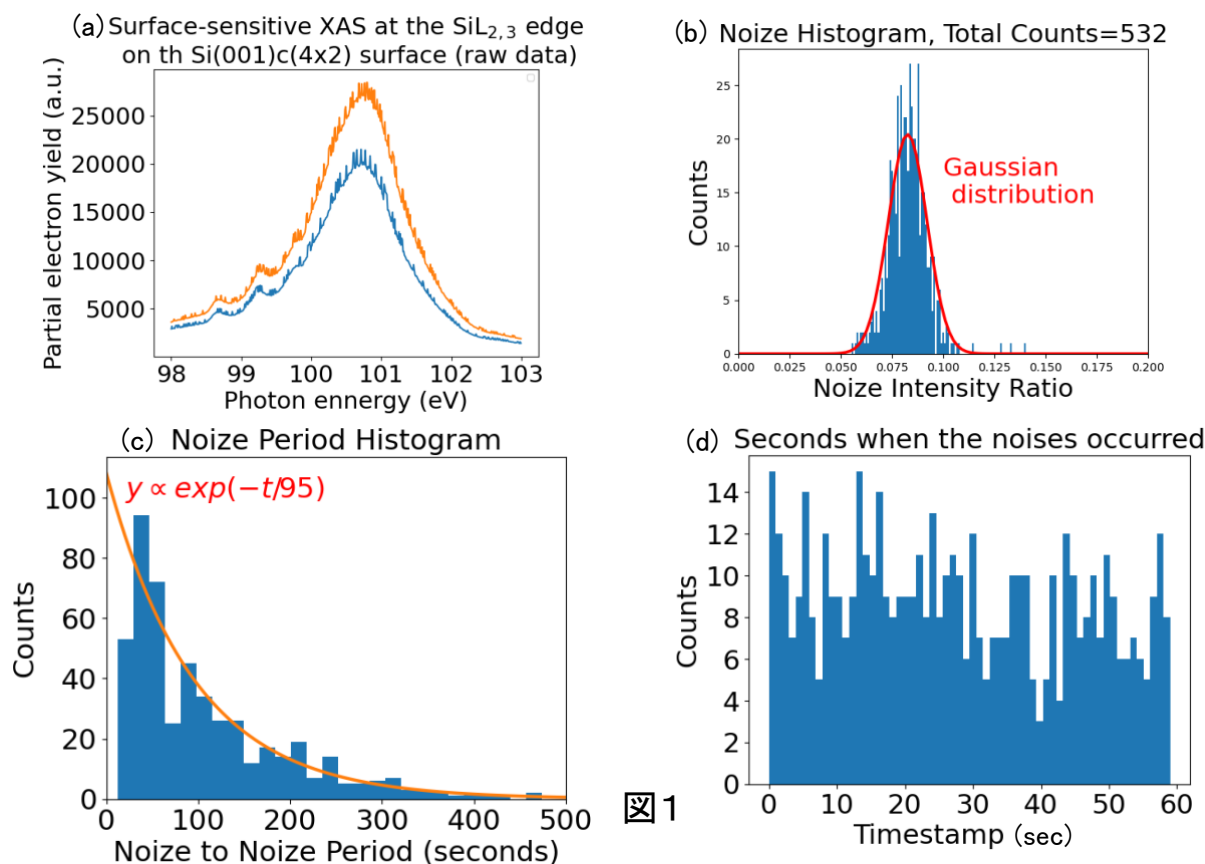


図1

電極界面におけるイオン液体の構造: In-situ軟X線吸収分光法による研究

The structure of ionic liquids at the electrode interface
studied using in-situ soft X-ray absorption spectroscopy

山口和真¹、長坂将成²、西 直哉¹

¹ 京大院工、² 分子研

Kazuma Yamaguchi¹, Masanari Nagasaki², and Naoya Nishi¹

¹Graduate School of Engineering, Kyoto University,

²Institute for Molecular Science

イオン液体 (IL) は室温付近に融点を持つ塩であり、高い電気伝導率や広い電位窓、難燃性などの特異的な性質を示すことから、二次電池の電解液として有望視されている。二次電池の負極表面では、電解液の還元分解によって固体被膜 (SEI被膜) が形成されるが、このSEI被膜は電解液の過剰な還元分解を抑制する一方、Liイオンを伝導する役割を果たす [1]。しかしながら現在、このSEI被膜の構造や内部のLiイオンの伝導機構は、電池セルを分解し負極表面を洗浄した残渣物の解析から、推定されている。還元耐性の高いカチオンを有するILである[C₄mpy⁺][FSA⁻] (Fig. 1) では、アニオンであるFSA⁻が優先的に還元分解され、LiFやLi₂Oが生成することがex-situ観察から言われているが、本当に負極表面で生成しているかはわからない。そこで本研究では電極/電解液界面のin-situ軟X線吸収分光法 (XAS) を開発し、(i) SEI被膜構造、(ii) SEI被膜近傍のLiイオンの溶媒和構造をin-situで解明することを目的とした。

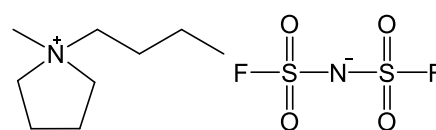


Fig. 1 Structures of [C₄mpy⁺][FSA⁻] (1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis(fluorosulfonyl)imide)

[C₄mpy⁺][FSA⁻]にLiFSAを0.5 M溶解させた電解液を用いた。この電解液を2枚のSiC膜 (一方の内表面にはPt薄膜を修飾) で挟んだ薄膜セルに注入した。擬似参照極と対極にはPt線とPtコイルをそれぞれ用いた。この薄膜セルをチャンバー内に入れ、Heで加圧することで液膜厚を数10 nmまで薄くし、透過法を用いてXAS測定を行った [2]。測定したエネルギー領域は各イオンの構成元素であるN, O, FのK吸収端 (以下、N, O, F K-edge) とした。電位は0, -2.0, -2.5 V (vs Pt) の3つで測定した。XASスペクトルの帰属のため、GSCF3 [3]を用いて、内殻励起計算を行った。

Fig. 2に電極/IL界面におけるF K-edgeのXASスペクトルを示す。XASスペクトルに電位依存性が見られたことから、このスペクトルは各電位における電極表面の電解液構造の変化を反映している。0 V (Fig. 2 黒線) ではFSA⁻由来の688 eVと692 eVに2つの鋭いピークが見られた。この2つのピークはFig. 2 赤線に示すLiFSAのXASスペクトルや内殻励起計算の結果と一致した。電位を負に印加することで、692 eVのピークはブロードニングし、692 eVのピークトップに対して688 eVのピークは強度が低下、694 eV以降の高エネルギー領域では強度が増加した。内殻励起計算の結果から、688 eVの強度の低下はLiイオンの濃縮の影響であることが示唆された。また還元分解しやすいFSA⁻の分解生成物として挙げられるLiFのXASスペクトル (Fig. 2 橙線) から、高エネルギー領域の強度の増加はSEI被膜由来であることが示唆された。このSEI被膜形成による高エネルギー側の立ち上がりは、AIMDでFSA⁻を分解させて生じたLiFや・SO₂NSO₂F⁻、LiSO₂Fなどの内殻励起計算の結果にも見られた。XASスペクトルでは同様にN, O K-edgeにも電位依存性が見られた。当日はN, O, F K-edgeの3つのスペクトルについて電極表面の電解液構造を詳細に議論する。

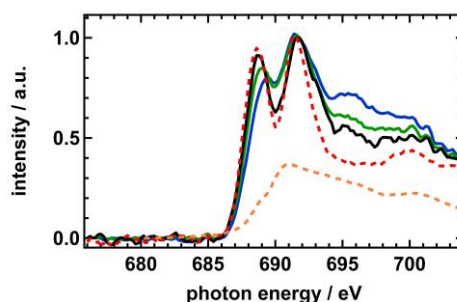


Fig. F K-edge XAS spectra for the IL/Pt interface at the 0 (black line), -2 (green line), and -2.5 (blue line) V and LiFSA (red dot line) and LiF [4] (orange dot line)

BL7B

真空紫外光吸収によりエタノール分子から生成する 中間体イオンの遅延解離過程

Delayed fragmentation of intermediate ions generated by vacuum ultraviolet light absorption
of ethanol molecules

中尾 友彦¹, 柳川屋 拓真¹, 岩山 洋士², 金安 達夫², 間嶋 拓也¹

¹京大院工, ²分子研UVSOR

Tomohiko Nakao¹, Takuma Yanagaway¹, Hiroshi Iwayama², Tatsuo Kaneyasu², Takuya Majima¹

¹Graduate School of Engineering, Kyoto University,

²UVSOR Synchrotron Facility, Institute for Molecular Science

我々はこれまで、MeVエネルギーの高速イオン衝突に伴う気相分子の解離過程を調べてきた。最近、電離・励起から μs 程度の寿命で遅延解離する過程を分析可能な実験手法を確立し、遅延解離メカニズムの解明に取り組んでいる。その中で、気相エタノール分子において、1価中間体イオンを経由する遅延解離過程が測定された。遅延解離が起きるためには、分子が十分な内部自由度を有する必要があると予想される [1]。しかし、エタノールから生成した中間体は比較的限られた内部自由度しか持たないため、長い寿命を示す理由がわかっていなかった。そこで本研究では、光イオン化を用いて、光子エネルギーに依存した情報を取得し、励起エネルギーと遅延解離の関係を明らかにすることを目的に、放射光を用いた気相エタノール分子の遅延解離の測定を試みた。新たに実験を始めることから、まずは測定装置の立ち上げや試験的な測定から実施した。特に、どのエネルギー領域で遅延解離が観測しやすいかも不明であったため、複数のビームラインで測定を試みた。

実験はUVSORのBL3B, BL4B, BL5B, BL7Bにて実施した。励起源として真空紫外光(VUV)から軟X線までの領域で単色光を利用し、気相エタノール分子の漏れ出し分子線と交差させた。光イオン化により生成した解離片について、光電子をスタート信号として用いる飛行時間(TOF)型質量分析器によりリストモード測定を行い、同時検出された複数の解離片の相関関係を分析した。

図1に、解離片が2個検出されたイベントにおける正イオンと中性粒子のTOF相関マップを示す。図中の斜めに長く伸びる分布が遅延解離を示しており、別途SIMIONにより計算した相関と比較することで経路を同定できる。18.0 eVのVUV吸収では(1) $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}^+ \rightarrow \text{CHO}^+ + \text{CH}_4$, (2) $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}^+ \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{H}_2\text{O}$, (3) $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}^+ \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}_2\text{H}_2$, (4) $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}^+ \rightarrow \text{CH}_3^+ + \text{CO}$ の計4経路における遅延解離がみられた。また光子エネルギーを掃引した測定では、図のように観測される経路に変化がみられ、各経路のエネルギー閾値が求められた。この閾値は、各反応経路におけるエネルギー障壁に対応するものと考えられる。現在、反応経路の量子化学計算と併せて、解離メカニズムの考察を進めている。

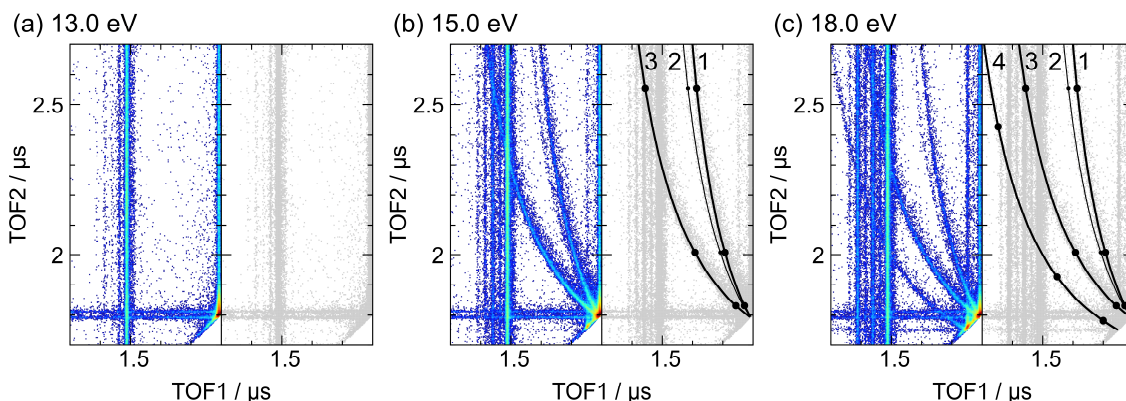


図1 VUV吸収により気相エタノール分子から生成した解離片のTOF相関マップ

[1] T. Nakao *et al.*, J. Chem. Phys. **161**(5), 054302 (2024).

BL5U, KEK-PF BL-28A

顕微角度分解光電子分光を用いた CeCoIn₅の表面電子状態の終端面依存性観測

Surface Termination Dependence of the Electronic Structure in CeCoIn₅ Measured by Micro-ARPES西原快人¹, 中村拓人^{2, 1}, 大坪嘉之³, 宮川玲緒¹, 小泉遼介⁴, 高橋哲平⁴,
横山淳⁴, 小澤健一⁵, 田中清尚⁶, 木村真一^{2, 1, 6}K. Nishihara¹, T. Nakamura^{2, 1}, Y. Ohtsubo³, R. Miyagawa¹, R. Koizumi⁴,
T. Takahashi⁴, M. Yokoyama⁴, K. Ozawa⁵, K. Tanaka⁶ and S. Kimura^{2, 1, 6}¹Sci., Univ. Osaka, ²FBS, Univ. Osaka, ³QST, ⁴Sci., Ibaraki Univ., ⁵KEK, ⁶IMS

重い電子系物質は、近藤効果とRKKY相互作用が拮抗する量子臨界点近傍で非従来型超伝導や非フェルミ液体的なふるまいが観測されており、多彩な特異物性の研究の舞台となっている [1]。近年では、典型的な重い電子系物質CeRh₂Si₂において終端面に応じて異なる c - f 混成強度を示唆するスペクトルが観測されており [2]、CeCoIn₅においても第一原理計算から表面電子状態の終端面依存性が示唆されている [3]。

そこで我々は、CeCoIn₅の劈開面に現れるいくつかの終端面で、最表面Ce原子がそれぞれ異なる環境に置かれることを利用し、その表面電子状態から重い電子系の物性に影響する c - f 混成をどの原子由来の伝導電子が支配しているかを特定することを目的とした。具体的にはCeCoIn₅劈開面において、 $4d$ - $4f$ 共鳴で表面敏感性が高い光エネルギー($h\nu = 122$ eV)かつマイクロ集光した放射光 [4]を用いた顕微角度分解光電子分光測定($T = 8.6$ K)を行い、機械学習(k-means clustering)を活用したスペクトル分類を行ったので報告する。

観測されたARPESスペクトルに基づき、試料上の各点を分類して得られたClusterを図1(a)に示す。図1(b)に示す各Clusterで得られた典型的な $\bar{X}$ 点近傍でのEDCスペクトルにおいて、図1(c)に示すようにCo $3d$ ピーク面積とCe $4f^{1/4f^0}$ ピーク面積比の間に正の相関が見られた。この結果は、図1(d)に示すように表面のCe原子がCo原子に囲まれているCo終端面では、他の終端面に比べてCe $4f$ 電子の遍歴性が高いことを示していると考えられる。一方で、Coピーク強度が抑制されているCluster 1では、 $4f^0$ ピーク強度が強くてCe $4f$ 電子の局在性が高いことが示唆されている。このことは、Ce-InあるいはIn₂終端面であり、表面のCe原子がCo原子に囲まれていないことを表していると考えられる。Cluster 2ではこれらの中間的なスペクトルが得られており、Cluster 1とCluster 4が混在していると考えられる。これらの結果は c - f 混成にCo $3d$ 電子が関与することを示唆している。

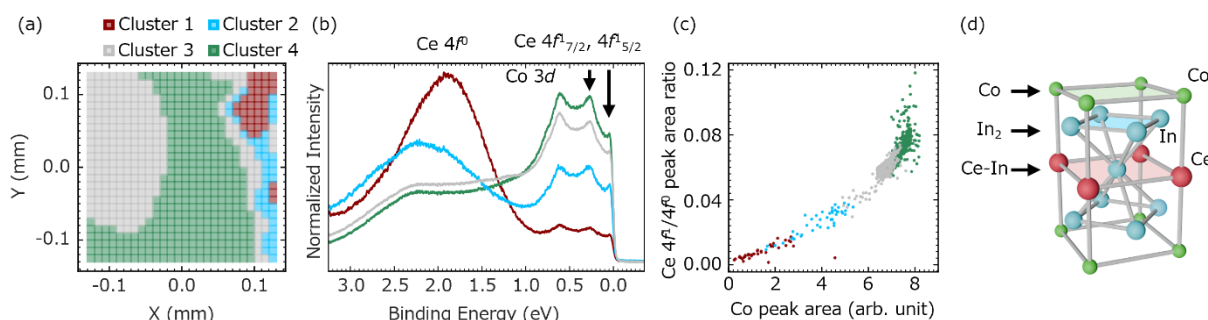
[1] P. Gegenwart, Q. Si and F. Steglich, *Nat. Phys.* **4**, 186 (2008). [2] G. Poelchen *et al.*, *npj Quantum Mater.* **5**, 70 (2020).[3] R. Kurlito *et al.*, *PRB* **104**, 125104 (2021).[4] M. Kitamura *et al.*, *RSI* **93**, 033906 (2022).

図 1 CeCoIn₅劈開面のARPESスペクトルの空間分布 k-means clusteringによる分類結果の(a) 実空間マップおよび(b) 平均EDCスペクトル($\bar{X}$ 点, 積分強度で規格化). プロットカラーは(a), (b)で共通. (c) CeCoIn₅結晶構造と期待される終端面.

BL4B

tdapO₂/Co 有機-無機ハイブリッド界面磁気結合による Coナノ島の磁気特性変調

Tuning magnetic properties of Co nano islands via magnetic coupling
at tdapO₂/Co organic-inorganic hybrid interface

藤本一志¹、小野広喜¹、吉田海仁¹、筒井健三郎¹、山本航平²、前島尚行²、
石山修²、横山利彦²、珠玖良昭⁴、阿波賀邦夫⁴、水口将輝^{1,3}、宮町俊生^{1,3}

¹名大院工、²分子研、³名大未来研、⁴名大院理

Kazushi Fujimoto¹, Hiroki Ono¹, Kaito Yoshida¹, Kenzaburo Tsutsui¹, Kohei Yamamoto²,
Naoyuki Maejima², Osamu Ishiyama², Toshihiko Yokoyama², Yoshiaki Shyuku⁴, Kunio Awaga⁴,
Masaki Mizuguchi^{1,3}, and Toshio Miyamachi^{1,3}

¹Department of Materials Science and Engineering, Nagoya University,

²Institute for Molecular Science, ³Institute of Materials and Systems for Sustainability,
Nagoya University, ⁴Graduate School of Science, Nagoya University

スピントロニクスは電子のもつ電荷とスピン自由度を制御・操作することにより新規スピン依存伝導現象の発現を目指す研究分野である。その中でも、有機分子は長いスピン寿命を持つために次世代のスピントロニクスデバイス材料として注目されている。有機-無機ハイブリッド界面において、高いスピン偏極率を持つ強磁性金属と有機分子が界面で混成することで、有機分子にスピン偏極電流が注入され、有機分子がスピン分極する[1]。そのため、分子のスピン偏極を利用したスピンフィルターへの応用が期待されており、そのスピン輸送特性といった分子の特性に焦点が当てられてきた。しかし、分子と表面の相互作用が磁性基板の磁気特性をどのように変化させるかという点は、同様に重要でありながら、その詳細なメカニズムについてはいまだ明らかになっていない。これらの界面現象は、微視的な分子の吸着構造に依存するため、その構造と結果として生じる電子・磁気状態の相関を解明するためには、高い空間分解能で調べるのが不可欠である。本研究では、強磁性Coナノ島と、2つの異なる配位子を持つフェナントロリン誘導体tdapO₂によって形成されるハイブリッド構造に着目し、この構造と電子・磁気状態の相関関係について詳細に調べた。

まず、Arスパッタリングおよびその後の加熱処理によりCu(111)清浄表面を準備し、その後超高真空中でCoを室温蒸着することによりCoナノ島を作製した。また、tdapO₂分子を数分子層室温で積層することによりtdapO₂分子/Coナノ島有機-無機ハイブリッド構造を作製した。走査トンネル顕微鏡(STM)を用いてtdapO₂分子のCoナノ島への吸着構造とその電子状態をミクロに観察し(測定温度: 80 K)、有機-無機界面形成に伴うCoナノ島の電子・磁気状態の変化をX線吸収分光法/X線磁気円二色性(XAS/XMCD)測定により元素選択的に調べた。分子科学研究所UVSOR BL4Bにて測定温度 7.2 K、印加磁場 0~±5 Tの条件下でXAS/XMCD測定を行った。

XAS/XMCD測定から、面内磁化容易軸を持つCoナノ島[2]にtdapO₂分子を積層させると、垂直磁気異方性が顕著に増大し、スピン再配列転移(SRT)が起こることがわかった。この結果は、tdapO₂分子とCoナノ島の界面で電子が混成し、Coの電子状態が大きく変化したことで、垂直磁気異方性が増加したことを強く示唆している。さらに走査トンネル分光(STS)測定によりCoナノ島上に吸着したtdapO₂分子のdI/dVスペクトルを調べると、-0.4 V付近にtdapO₂分子の分子軌道に由来すると思われるピークが現れた。一方、Coナノ島自体のdI/dVスペクトルでは、-0.3 V付近に3d_{z²}軌道由来の強いピークが見られた[3]。これらのエネルギー準位が非常に近いことから、tdapO₂分子の分子軌道がCoナノ島の3d_{z²}軌道と混成していると考えられる。また、STM観察により、Coナノ島上にtdapO₂分子が規則的配列することが確認された。講演では、これらのtdapO₂分子の吸着構造と、Coナノ島で起こるSRTとの具体的な相関について詳しく議論する。

[1] S. Sanvito, Nat. Phys. **6**, 562 (2010).

[2] M. Zheng *et al.*, J. Phys. Condens. Matter, **12**, 783 (2000).

[3] L. Diekhoner *et al.*, Phys. Rev. Lett. **90**, 236801 (2003).

BL4B

原子分解能STMおよびXASによる Fe/Ge界面の構造・電子状態観測

Observations of structural and electronic properties of Fe/Ge interfaces
by atomic-resolution STM and XAS

三浦直也¹、Shi Qing¹、山本航平²、石山修²、横山利彦²、水口将輝^{1,3}、宮町俊生^{1,3}

¹ 名大院工、² 分子研、³ 名大未来研

Naoya Miura¹, Qing Shi¹, Kohei Yamamoto³, Osamu Ishiyama³, Toshihiko Yokoyama³,
Masaki Mizuguchi^{1,2}, and Toshio Miyamachi^{1,2}

¹ Graduate School of Engineering, Nagoya University, ² Institute for Molecular Science,

³ Institute of Materials and Systems for Sustainability, Nagoya University

グラフェンやシリセン、ゲルマネンなどの14族単元素2次元構造は、可変なバンドギャップなどの優れた物理的特性が予測されており、近年盛んに研究が行われている。その中で、Geの単原子層が形成するゲルマネンは、グラフェンを除くその他の14族単原子層材料と比較して成長例が多く、比較的成長しやすい可能性が示唆されている。これまでに、Ag/Ge(111)などの系で偏析法によるゲルマネンの形成が報告されており[1]、蒸着源を用いることなく、通常の超高真空チャンバー内で調整可能である点でも産業利用に向けて注目を集めている。

本研究では、Fe/Ge(111)系において偏析法によりGe原子層膜/Fe界面を形成して、強磁性体であるFeとの界面においてGeの電子状態や磁気状態を変調させ、その起源を走査トンネル顕微鏡(STM)によりミクロに解明することを目的としている。そこで、Feの膜厚や加熱温度を系統的に制御して作製したFe/Ge(111)表面の構造と電子状態を、超高真空中、液体窒素温度(80 K)の条件下でのSTMおよび走査トンネル分光法(STS)により原子分解能で調べた。また、X線吸収分光(XAS)によってGe/Fe界面における化学状態を調べた。

超高真空間でのAr⁺スパッタリングと通電加熱によるアニール処理によってGe(111)表面の清浄化を行った。その後、MBE法により約0.5~50原子層(ML)のFeを室温蒸着してFe/Ge(111)表面を作製した。結果、Fe蒸着前のGe(111)は特有のc(2x8)再配列構造をとり、約0.8 eVのバンドギャップを持つことが確認された。Ge(111)-c(2x8)表面にFeを1 ML以下蒸着した場合、Feナノ島が形成されるが、加熱温度の上昇に伴い、先行研究と同様にFeGe合金のナノ島が形成された[2]。その際、Ge基板表面のGeがナノ島に移動し、表面のGeが少なくなることで表面構造がp(2x2)構造に変化した。このp(2x2)構造の領域でもバンドギャップは見られたが、c(2x8)構造よりもバンドギャップはやや狭かった。これはダングリングボンドによる表面準位によると考えられる。Feを4~50 ML蒸着した場合には、膜厚に関わらず、加熱温度上昇に伴って、FeとGeの表面自由エネルギーの大きな差(Fe: 2.9 J/m², Ge: 0.8 J/m²)に起因するGe偏析による表面構造の変化が見られた。Feを50 ML蒸着した試料では、520 Kで加熱すると表面の大部分が、Geが1~数原子層表面偏析したと考えられるp(2x2)構造を示した。520 Kよりも加熱温度を高くすると、Geが十分な量(数原子層以上)表面偏析したと考えられるc(2x8)構造を示した。Ge偏析によって形成されたc(2x8)表面やp(2x2)表面のSTS測定を行った結果、エネルギーピーク位置や、バンドギャップ幅等、基板Ge-c(2x8)表面とは電子状態が異なることが分かった。Ge/Fe界面形成における下部FeGe層との電子混成によってGe原子層の電子状態が変調を受けたと考えられる。また、Feを50 ML蒸着後970 Kで加熱した試料に対してXAS測定を行った結果、Ge Ledgeのピークを観測したことから、Geの偏析が裏付けられた。

[1] J. Yuhara *et al.*, ACS Nano, **12** 11632 (2018).

[2] H. -C. Hsu *et al.*, Appl. Surf. Sci. **355**, 778-783 (2015)

BL7U

角度分解光電子分光によるSmAg_x/Ag(111)の電子状態

Electronic structure of SmAg_x/Ag(111) revealed by angle-resolved photoemission spectroscopy

岡本蓮太郎¹, 中村拓人^{2, 1}, 山口紘佳¹, 西原快人¹, 大坪嘉之³,

志賀大亮⁴, 田中清尚⁵, 組頭広志⁴, 木村真一^{2, 1, 5}

¹阪大理, ²阪大生命機能, ³QST, ⁴東北大多元研, ⁵分子研

Rentaro Okamoto¹, Takuto Nakamura^{2, 1}, Hiroka Yamaguchi¹, Kaito Nishihara¹, Yoshiyuki Ohtsubo³, Daisuke Shiga⁴, Kiyohisa Tanaka⁵, Hiroshi Kumigashira⁴, Shin-ichi Kimura^{2, 1, 5}

¹Dept. Phys., Univ. Osaka, ²FBS, Univ. Osaka, ³QST, ⁴IMRAM, Tohoku Univ., ⁵IMS

希土類単原子層合金は、 f 電子と伝導電子間とのRKKY相互作用により安定した長距離磁気秩序を形成することに加え、半導体との界面における安定性やトポロジカルなバンド構造から新たな二次元強磁性材料として期待されている[1, 2]。

希土類元素の一つであるSmは磁性を持たないSm²⁺イオンと磁性を持つSm³⁺イオンがエネルギー的に拮抗しており、Smイオンの平均価数は非整数となり、温度や磁場、電子数などに敏感な価数揺動状態を取ることが知られる[3]。一方で、磁性を持つ一部の希土類単原子層物質では、磁気秩序に由来して伝導を担うバンドが交換分裂により縮退が解け、ディラック半金属状態になることが理論・実験双方から提案されている[4]。

そこで本研究では、価数揺動と磁性由来のバンド分裂が期待できる物質として、Ag(111)上にSmAg_xを作製し、角度分解光電子分光法(ARPES)により、磁性発現の起源となる電子状態の観測を行った。図1 (a)にSmAg_x/Ag(111)のARPESイメージを示す。赤線で示した Γ 点对称の直線的なホールバンドに加え、0.8 – 1.0 eV付近にSm²⁺の局在した $4f$ 電子の状態が観測された。これらは希土類単原子層合金に特徴的なバンド分散である。図1 (b)にFermi準位近傍の Γ 点付近のEDCの温度依存性を示す。25 Kと16 Kの間でEDCが変化し、低温で電子状態が変化していることが示唆された。この変化は磁気転移によるバンド分裂に由来すると考えられる。発表では、Sm 3d内殻XPS測定によるSm価数の評価の結果も合わせて紹介し、詳細な表面電子状態について議論する。

[1] M. Ormaza et al., Nano Lett. **16**, 4230 (2016).

[2] M. Blanco-Rey et al., PRR **4**, 013237 (2022).

[3] R. C. Boderio, The University of the Basque Country, PhD thesis.

[4] B Feng et al., PRL **123**, 116401 (2019).

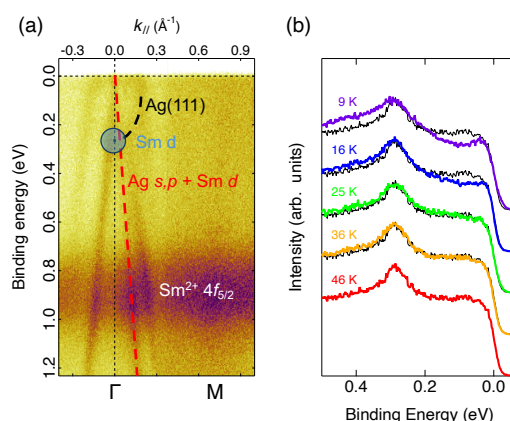


図1. (a) SmAg_x/Ag(111)のARPESイメージ (Γ M, $h\nu = 35$ eV, $T = 12.3$ K)、(b) Γ 点付近のEDCの温度依存性 ($h\nu = 35$ eV, $T = 46$ K)のスペクトルを黒線で重ねて示す。

BL4B

原子スケール表面構造変化が Ni/Cu(001)超薄膜の 電子・磁気状態に及ぼす影響

Impacts of atomic-scale surface structural changes
on the electronic and magnetic properties of Ni/Cu(001) ultrathin films

岡村尚弥¹, 筒井健三郎¹, 前島尚行², 石山修²,

横山利彦², 水口将輝^{1,3}, 宮町俊生^{1,3}

¹名大院工, ²分子研, ³名大未来研

Naoya Okamura¹, Kenzaburo Tsutsui¹, Naoyuki Maejima², Osamu Ishiyama²,

Toshihiko Yokoyama², Masaki Mizuguchi^{1,3}, and Toshio Miyamachi^{1,3}

¹Nagoya University, ²Institute for Molecular Science

³Institute of Materials and Systems for Sustainability, Nagoya University

磁性薄膜は情報記録やスピントロニクスデバイスの中核材料として高い重要性を持つ。磁性多層膜のヘテロ界面は新たな機能性の発現に寄与しており、その性能はナノスケール、さらには原子スケールでの界面構造に大きく依存することが知られている。これまでに磁性多層膜の界面構造と磁気特性の相関を明らかにするため、多くの研究が進められているが、界面構造のミクロな差異が磁気特性に及ぼす影響を系統的に調べた研究はほとんど行われていない。そこで、本研究では Cu(001)単結晶表面上に Ni 超薄膜を成長させた試料を用いて表面構造の変化が電子・磁気状態に与える影響を調べた[1]。室温成長した Ni/Cu(001)超薄膜は膜厚 6 原子層程度でナノスケールの島状構造が高密度に形成されることが報告されており、加熱処理により表面粗さを系統的に制御するのに適した系である。顕著な電子・磁気状態の発現への表面構造の寄与を調べるために走査トンネル顕微鏡(STM)、低速電子線回折(LEED)および X 線吸収分光法/X 線磁気円二色性(XAS/XMCD)を用いて試料の表面構造と電子・磁気状態を調べた。

Ar⁺スパッタリングとその後の加熱処理により清浄化した Cu(001)表面に Ni 超薄膜を超高真空中、室温で蒸着した後に、370, 420, 450, 490, 590 K で加熱処理を行い、STM 観察を液体窒素温度(約 80 K)にて行った。STM 観察の結果、加熱処理後の Ni 超薄膜表面は Ni 原子の表面拡散が促進されて平坦化され、加熱温度 490 K では表面平坦性が著しく向上することがわかった。STM 分光測定によって電子状態を評価したところ、加熱温度が 450 K になるとピーク強度が増大し始め、490 K でピーク構造が最も顕在化することがわかった。さらに、磁気状態を評価したところ、表面構造が平坦化した 450 K 加熱後の膜では、室温の場合に比べ面直磁化が弱まり面内磁化が増大する傾向が見られた。本発表では表面構造の平坦化が電子・磁気状態に与える影響について議論する。

[1] K. Tsutsui, N. Okamura, *et al.*, *Vacuum* **241**, 114642 (2025).

[2] W. L. O' Brien, *et al.*, *Phys. Rev. B* **49**, 15370 (1994).

BL6U

π 共役系分子の表面吸着による単結晶グラファイトの対称性変化

Modification of symmetry on single crystal graphite due to surface adsorption of π -conjugated molecules

下ヶ橋龍之介¹、佐藤祐輔^{1,2}、解良聡^{1,2}、松井文彦^{1,2}

¹ 分子研、² 総研大

Ryunosuke Sagehashi¹, Yusuke Sato¹, Satoshi Kera^{1,2}, and Fumihiko Matsui¹

¹Institute for Molecular Science, ²The Graduate University for Advanced Studies

炭素原子で構成されたシート状物質であるグラフェンは6回対称性を有している。一方、これらがAB積層（図（a））した単結晶グラファイトでは表面で3回対称性を示す。しかし、このようにAB積層した層状物質では劈開する層によって互いに鏡対称となる表面が現れるため、3回対称性を反映した光電子マッピングの取得は困難であった。ここでUVSOR・BL6Uで開発された光電子運動量顕微鏡（PMM）では μm オーダーの微小領域での測定が可能であることから、3回対称性を反映した単結晶グラファイト表面の光電子マッピングが実現した[1]。

本研究では単結晶グラファイトを真空中（ $<10^{-7}$ Pa）でテープ劈開し、その表面に π 共役系分子であるマンガンフタロシアニン（MnPc）分子を2層程度吸着させた試料を用いてPMMによる光電子分光測定を実施した。図（b, c）は入射光68 eVで得られた単結晶グラファイトおよびMnPc吸着時の光電子マッピング（束縛エネルギー2.7 eV）であり、MnPc吸着時も単結晶グラファイトの π バンドが確認できる。L点では表面の対称性低下によりバルクの縮退が解ける。図（d, e）は3回対称性で等価となるL点でそれぞれ積算した光電子スペクトル（それぞれL+点、L-点と呼称）を示している。単結晶グラファイトの清浄面では過去の報告と同様の3回対称性による約260 meVのエネルギー差が生じているが、MnPc吸着時にはそのエネルギーシフトは現れなかった。本講演では対称性変化を中心に、MnPc吸着によって生じた単結晶グラファイト表面の電子状態への影響について議論する。

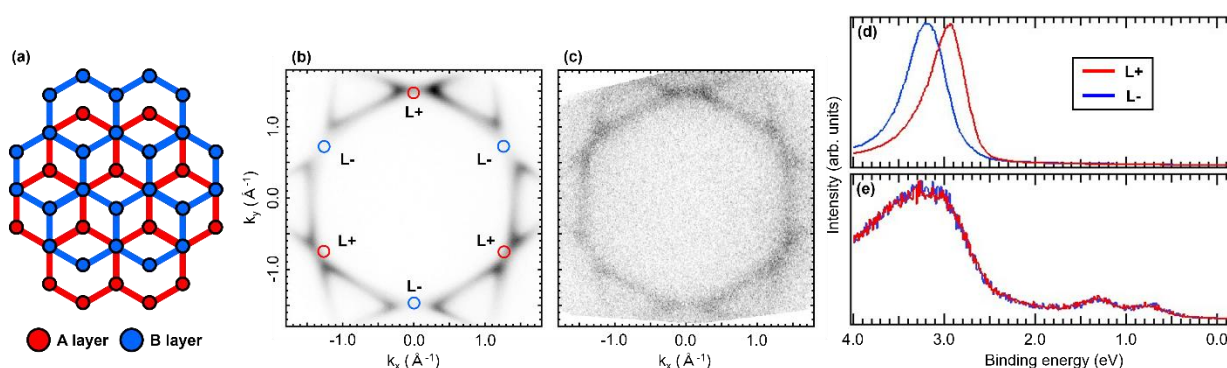


Fig. 1: (a) AB積層の模式図。(b, c) 単結晶グラファイト清浄面 (b) およびMnPc吸着時 (c) の光電子マッピング。(d, e) 単結晶グラファイト清浄面 (d) およびMnPc吸着時 (e) に対する、L+点（赤線）とL-点（青線）での光電子スペクトル。

[1] F. Matsui and S. Suga, Phys. Rev. B, **105** 235126 (2022).

BL4B

多電子・イオン同時計測による臭化水素2価イオン状態の解離の研究

Dissociation of HBr^{2+} Studied by Multielectron-Ion Coincidence Spectroscopy

彦坂泰正

富山大

Yasumasa Hikosaka
University of Toyama

原子や分子の軟X線領域の光吸収では、内殻電子の励起・イオン化とその後続過程によって複数の電子が放出され、高価数のイオンが生成する。このような多電子放出過程を詳細に理解するためには、放出される全ての電子の運動エネルギーを分析し、それらの間のエネルギー相関を観測することが有効である。磁気ボトル型電子エネルギー分析は、電子捕集効率が極めて高い電子分光手法であり、その利用によって従来よりも格段に良好な多電子同時計測を行うことが可能となった。これまでに、希ガスや簡単な分子の多電子放出過程への多電子同時計測の適用によって、多電子放出のメカニズムの理解に大きな進展が得られている。この磁気ボトル型電子分析器にイオン検出を導入することにより、多電子とイオンの超高効率な同時計測を実現できる[1,2]。これにより、高価数のイオンの生成機構やその解離ダイナミクスについてのより詳細な知見の獲得が可能となった[3-5]。

本研究では、磁気ボトル型電子分析器を用いた多電子・イオン同時計測をHBrのBr3d空孔状態からのオーজে崩壊に適用した。内殻光イオン化・オーজে過程によって放出される2つの電子の運動エネルギーを決定することで生成する HBr^{2+} 状態を特定し、その解離と安定性を同時計測されるイオン種によって判別した(図1)。

本研究は、科学研究費補助金(24K00555, 24K08344, 25H00623)の支援を受けて実施された。

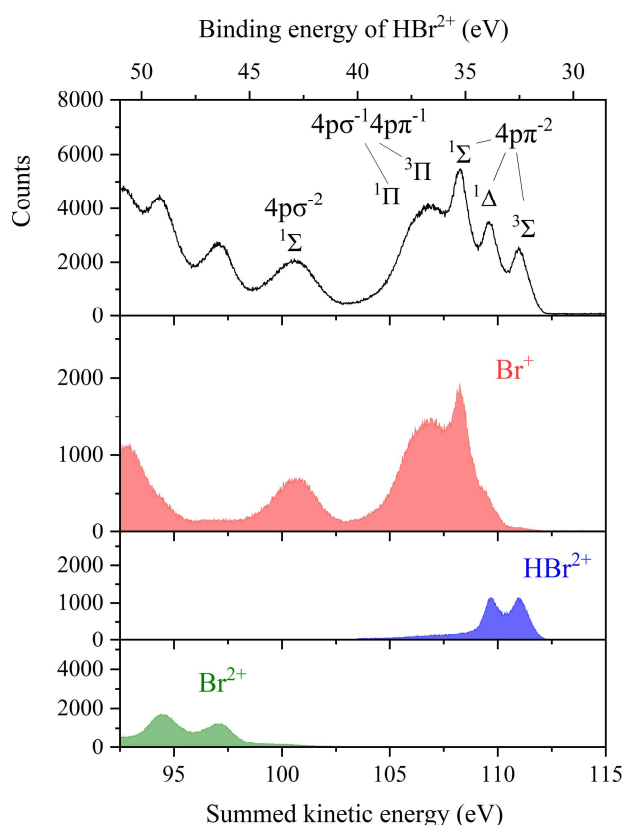


図1 光電子・オーজে電子同時計測によって得られた HBr^{2+} スペクトル(最上段)とそれに対して各イオン種でフィルターされたスペクトル(下3段)。

- [1] Y. Hikosaka, J Electron Spectrosc. Rel. Phenom. **255**, 147158 (2022).
- [2] Y. Hikosaka and S. Fritzsche, Phys. Rev. Lett. **134**, 103001 (2025).
- [3] Y. Hikosaka, Phys. Rev. A, **106**, 062814 (2022).
- [4] Y. Hikosaka, J. Chem. Phys., **158**, 214306 (2023).
- [5] Y. Hikosaka, J. Chem. Phys., **160**, 024304 (2024).

BL1B&BL6B

マグネシウムシリサイド結晶の赤外分光

Infrared Spectroscopy of Mg_2Si Crystals北浦 守¹、島野 航輔²、鵜殿治彦²¹山形大理、²茨城大院工Mamoru Kitaura¹, Kosuke Shimano, Haruhiko Uono¹¹Yamagata Univ., ²Ibaraki Univ.,

マグネシウムシリサイド(Mg_2Si)は、地球上に豊富に埋蔵された元素からなる環境負荷の小さな環境半導体として知られる。この物質は、熱電発電素子や赤外線受光素子として実用化するための研究が進められており、その過程では基礎物性や半導体特性が調べられている[1-3]。半導体特性を左右するキャリアの供給源である格子欠陥や不純物も DFT 計算を中心に調べられており[4,5]、真性欠陥の一種である格子間マグネシウム原子およびマグネシウム空孔がそれぞれ n 型伝導および p 型伝導を担うと考えられている。一方、実験からも半導体特性を左右する真性欠陥の起源は調べられているが、理論計算と比べると決定的なデータが極めて少ないように思われる。これは、キャリア濃度の極めて低い高純度試料の育成が困難であり、幅広いキャリア濃度にわたって真性欠陥とその挙動が調べられていないためである。我々は 10^{15} cm^{-3} オーダーのキャリア濃度の n 型試料を用いて赤外吸収分光を UVSOR の BL1B と BL6B で行ってきた。その結果、テラヘルツ領域吸収分光の結果から真性欠陥に関する情報を得ることができた。UVSOR シンポジウム 2025 ではその結果を報告する。図 1 にテラヘルツ領域吸収スペクトルを示す。テラヘルツ領域には 3 本の吸収線が観測される。我々の知る限り、これらの吸収線は過去に報告されていない。この吸収線は極低温で弱められ 30K 未満で消滅した。その活性化エネルギーを見積もったところ、 $13.6 \pm 5.5 \text{ meV}$ (ピーク 1)、 $6.7 \pm 1.6 \text{ meV}$ (ピーク 2)、 $7.5 \pm 1.4 \text{ meV}$ (ピーク 3)であり、不確かさの範囲でほぼ同じであった。試料が n 型であったことを考慮すると 3 本の吸収線は非常に浅いドナーに起因すると考えられる。なお、測定試料の陽電子消滅寿命スペクトルも測定してマグネシウム空孔がほとんど存在しないことは確認しており、3 本の吸収線をマグネシウム空孔とは関係ない。

キャリア密度と移動度の温度変化はこれまで調べられている[1]。それらの結果によれば、非常に浅いドナーが存在しており、そのドナーのイオン化が 8-9 meV の活性化エネルギーによって起こることが報告されている。その活性化エネルギーは本研究で得られた値と比較的よく一致しており、テラヘルツ領域吸収スペクトルに観測された 3 本の吸収ピークは極低温でイオン化するような浅いドナーに起因すると考えられる。測定に用いた結晶は n 型伝導を示すことから 3 本の吸収ピークは格子間マグネシウムに起因するかもしれない。この仮説を裏付けるために、キャリア濃度の異なる n 型と p 型の試料においてテラヘルツ分光を行う予定である。

BL1B と BL6B での実験では田中准教授と手島技術職員にお世話になりました。お二人には感謝申し上げます。

参考文献

- [1] K. Sekino et al., Phys. Proc. **11**, 171 (2011).
- [2] H. Uono et al., J. Phys. Chem. Solids **74**, 311 (2013).
- [3] H. Uono et al., Jpn. J. Appl. Phys. **54**, 07JIB06 (2015).
- [4] N. Hirayama et al. Jpn. J. Appl. Phys. **54**, 07JC05 (2015).
- [5] N. Hirayama et al. Jpn. J. Appl. Phys. **56**, 05DC05 (2017).

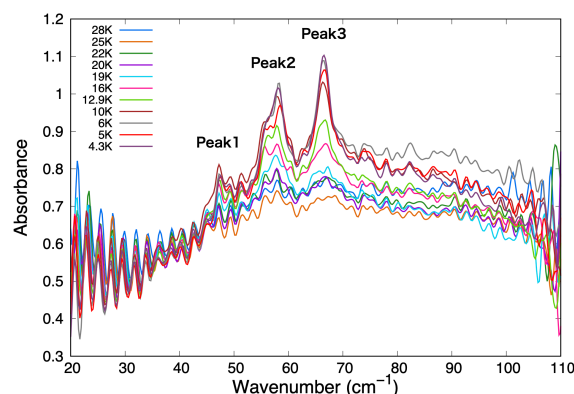


Fig.1: 高純度 n 型マグネシウムシリサイド結晶のテラヘルツ領域吸収スペクトルとその温度変化。

BL1U

VUV-EUV光電離プラズマのビームエネルギー依存性

Beam energy dependence of VUV-EUV photoionized plasma characteristics

小林政弘¹、吉村信次¹、千村大樹¹、太田紘志^{2,3}、清水康平³、金安達夫³、鈴木直之¹、森田繁¹、小林憲正⁴、高橋淳一⁵、加藤政博^{3,6}

¹ 核融合研、² 高輝度光科学研究センター、³ 分子研
UVSOR、⁴ 横国大、⁵ 神戸大、⁶ 広島大

Masahiro Kobayashi¹ Shinji Yoshimura¹, Hiroki Chimura¹, Hiroshi Ota^{2,3}, Kohei Shimizu³, Tatsuo Kaneyasu³, Naoyuki Suzuki¹, Shigeru Morita¹, Kensei Kobayashi⁴, Jun-ichi Takahashi⁵, and Masahiro Katoh⁶

¹National Institute for Fusion Science,

² Japan Synchrotron Radiation Research Institute (JASRI): HOME

³ UVSOR Synchrotron Facility, Institute for Molecular Science

⁴ Yokohama National University, ⁵ Kobe University, ⁶ Hiroshima University

宇宙におけるプラズマ生成の主要なプロセスは光電離であり、電場印加による実験室プラズマとはその生成過程が大きく異なる。また将来の核融合炉の装置壁付近では光電離・励起が重要になると予想される。これまでレーザーを用いた光電離プラズマ実験が行われてきたが、光エネルギーが離散的な値に限定されており、またパルス幅数 μ ～数フェムト秒、繰り返し周波数は10Hz程度であり、従ってプラズマの維持時間が短い。本研究では放射光施設における光エネルギーの連続可変性と高繰り返し運転(数十MHz)の利点を活かし、光電離プラズマの特性理解を目指して実験装置の構築を行っている[1]。光とガスとの相互作用を促進し、光電離プラズマを効率的に生成するためには、高輝度光を高圧ガスに照射する必要がある。これまで多段の差動排気により、光学フィルターによる真空遮断を用いずにガスセルを直接ビームラインに接続できる装置を構築してきた。これにより、高輝度光を直接高圧のガス試料に照射することが可能になった。図1に得られた光電離プラズマの可視カメラによる画像を示す。ビームに沿って光電離プラズマの発光が観測された。図2はラングミュアプローブによって光軸から1mmの位置で計測したプラズマの電子温度・密度を示す。電子温度はガス圧の上昇とともに減少するが、ビームエネルギーに対して複雑な変化をすることが分かった。電子密度については、ガス圧の増加に伴って最初は増加するが、あるガス圧以上では飽和あるいは減少している。また、ビームエネルギーが増加するに従って密度が減少する傾向にあることが分かった。これらのプラズマパラメータの変化は光電離断面積のエネルギー依存性とプラズマ中での原子過程等に起因していると考えられる。このようなビームエネルギー依存性についての系統的な実験はこれまでに例が無く、光電離プラズマ特性の理解に関に向けて、極めて重要な結果であると考えられる。会議では分光計測結果についても報告する。

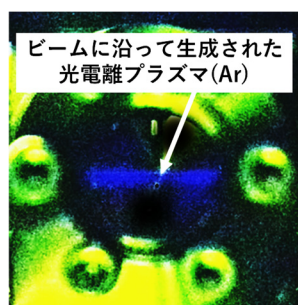


図1 光ビーム(20eV)に沿って生成された光電離プラズマ(Ar、10Pa)。

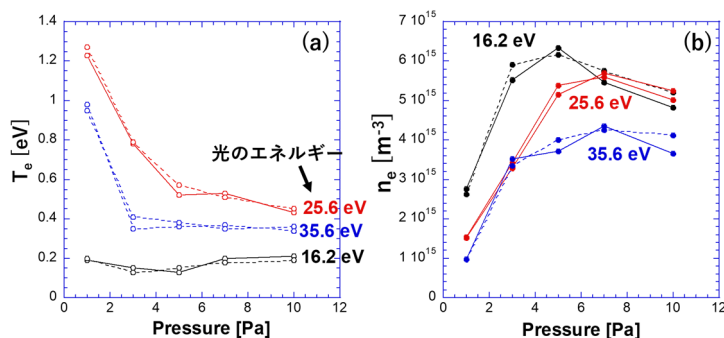


図1 光電離プラズマの(a)電子温度、(b)電子密度のガス圧とビームエネルギー依存性. (Ar)

[1] M.

BL6U, 7U

高分解能 ARPES / PMM による ワイル半金属 PtBi_2 の電子状態の観測

Observation of electronic states in Weyl semimetal PtBi_2 using high-resolution ARPES

森田雄晴¹, 中山耕輔¹, 加藤剛臣², 柳沢幸紀¹, 相馬清吾^{2,3}, 萩原健太⁴,

松井文彦^{4,5}, 田中清尚^{4,5}, 小澤健一⁶, 志賀大亮⁷, 組頭広志⁷,

T. K. Kim⁸, C. Cacho⁸, 高橋 隆¹, 工藤一貴^{9,10}, 佐藤宇史^{1,2,3,11,12}

¹ 東北大院理, ² 東北大 WPI-AIMR, ³ 東北大 CSIS, ⁴ 分子研 UVSOR,

⁵ 総研大, ⁶ KEK 物構研, ⁷ 東北大多元研, ⁸ Diamond Light Source,

⁹ 阪大院理, ¹⁰ 阪大 OTRI, ¹¹ 東北大 SRIS, ¹² 東北大 MathCCS

Yusei Morita¹, Kosuke Nakayama¹, Takemi Kato², Koki Yanagizawa¹, Seigo Souma^{2,3},

Kenta Hagiwara⁴, Fumihiko Matsui^{4,5}, Kiyohisa Tanaka^{4,5}, Kenichi Ozawa⁶,

Daisuke Shiga⁷, Hiroshi Kumigashira⁷, Timur K. Kim⁸, Cephise Cacho⁸,

Takashi Takahashi¹, Kazutaka Kudo^{9,10}, and Takafumi Sato^{1,2,3,11,12}

¹Dept. Phys., Tohoku Univ., ²WPI-AIMR, Tohoku Univ., ³CSIS, Tohoku Univ., ⁴UVSOR,

⁵SOKENDAI, ⁶KEK-PF, ⁷IMRAM, Tohoku Univ., ⁸Diamond Light Source, ⁹Dept. Phys., Osaka

Univ., ¹⁰OTRI, Osaka Univ., ¹¹SRIS, Tohoku Univ., and ¹²MathCCS, Tohoku Univ.

空間反転対称性の破れた結晶構造を持つワイル半金属 PtBi_2 は、約 0.6 K において超伝導を示すことが知られている。さらに最近では、10 K を超すような比較的高温で表面超伝導が生じる可能性が示唆されている[1]。本研究では、このような特異な超伝導現象の起源やワイル点をはじめとするトポロジカルな電子状態の解明を目的に、 PtBi_2 の高分解能 ARPES 実験を行った。

図 1 に異なる 2 種類の Bi 終端面(A, B)で測定した k_x - k_y 面内の ARPES 強度プロットを示す。終端面 A では A 点中心の六角形のフェルミ面がよく観測されている一方で、終端面 B では三角形のフェルミ面が強く観測されて

おり、終端面によって電子構造が大きく変化することを見出した。また、バンド分散の測定から二つの終端面で共通して存在するバルクバンドの特定にも成功した。講演では、空間反転対称性の破れた系に特徴的なラシュバ的なバルクバンドの分裂やワイル半金属性の証拠となるワイルコーンの存在について議論する。

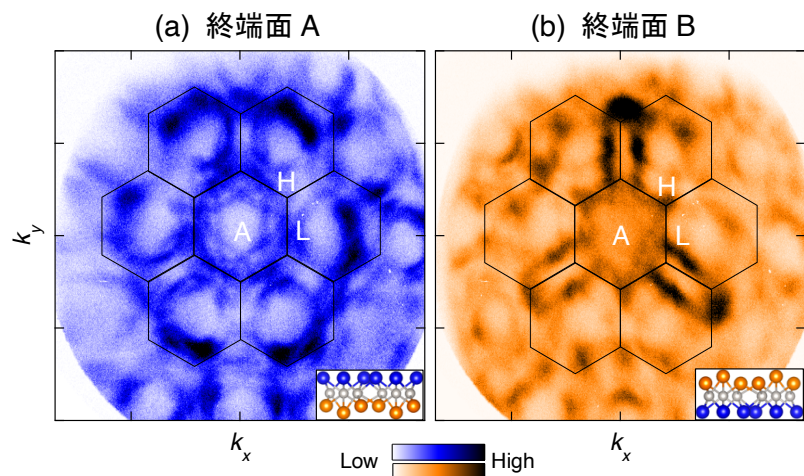


図 1 : 常伝導状態($T = 40$ K)において、異なる終端面で測定した PtBi_2 のフェルミ面。

[1] A. Kuibarov *et al.*, Nature **626**, 294-299 (2024).

BL4B

窒素サーファクタント効果によって作製したFe/Co界面の構造と電子・磁気状態の成長順序依存性

Growth sequence dependence of structural, electronic and magnetic properties of the Fe/Co interface fabricated by nitrogen surfactant effect

岩井敦志¹、小野広喜¹、石青¹、梅田佳孝¹、
前島尚行²、石山修²、横山利彦²、水口将輝^{1,3}、宮町俊生^{1,3}
名大院工¹、分子研²、名大未来研³

Atsushi Iwai¹, Hiroki Ono¹, Qing Shi¹, Yoshitaka Umeda¹, Naoyuki Maejima², Osamu Ishiyama²,
Toshihiko Yokoyama², Masaki Mizuguchi^{1,3}, and Toshio Miyamachi^{1,3}
Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.¹, IMS², IMASS, Nagoya Univ.³

はじめに

近年、環境問題や資源問題の観点から、レアアースフリーな磁性材料の開発が求められている。その候補の一つであるL1₀型FeCo規則合金(L1₀-FeCo)は、ネオジム磁石を上回る垂直磁気異方性を有すると理論的に予測されており、次世代のレアアースフリー磁性材料として注目を集めている。しかしながら、L1₀-FeCoは非平衡相であるため、Fe/Co間の相互拡散に起因する規則度の低下によって、十分な垂直磁化は未だ実現されていない。そこで我々は、原子レベルで高品質なFe/Co界面を形成する手法として窒素サーファクタント効果に着目した。窒化物特有の強い面内磁化に加え、窒素原子が表面に偏析する性質を利用することで、原子スケールで制御されたFe/Co界面の作製が期待できる¹⁾。これまでに我々は、窒素処理したCu(001)基板上にFeを蒸着して窒化鉄原子層(Fe₂N)を形成し、その上にCoを1原子層蒸着した系の、界面構造および電子・磁気状態を調べてきた。その結果、加熱に伴い窒素サーファクタント効果によりCoNが生成され(N-Co/Fe)、垂直磁気異方性の増大が確認された。しかしながら600 Kでの加熱では相互拡散によりFe₂Nの生成が進行し、Fe/Co界面が急激に劣化することが明らかとなった²⁾。そこで本研究では、窒化コバルト原子層(Co₂N)にFeを積層する(N-Fe/Co)ことでより高品質なFe/Co界面の作製を試みた。

実験方法

N⁺ボンバードメント処理を行ったCu(001)基板上にCoを室温蒸着後、約600 Kで加熱することによりCo₂Nを作製した。その後Feを室温・低温(−100°C)で積層した系のミクロな構造・電子状態を走査型トンネル顕微鏡および走査トンネル分光(STM/STS)により調べた。また、Feを低温(約−100°C)で積層した系のマクロな電子・磁気状態を、放射光軟X線吸収分光法/磁気円二色性(XAS/XMCD)により調べた。

実験結果

STM観察の結果、Feを室温で蒸着した場合には表面拡散が促進され、2原子層以上の高さを持つFeナノ島が形成されることが確認された。一方、低温蒸着では表面拡散が抑制され、1原子層高さのFeナノ島が均一に成長している様子が観察された。さらにFeナノ島のSTS測定において、窒化物に特徴的なピーク³⁾が確認されたことから、窒素サーファクタント効果によって表面にFeN(N-Fe/Co)が形成されていることが示唆された。STM観察の結果を踏まえ、Co₂N上にFeを低温蒸着させた系のXAS/XMCD測定を行った。元素選択的にCoの磁気特性を調べたところ、Feの積層によって垂直磁気異方性が増大することがわかった。Fe/Co界面由来の垂直磁化が発現したと考えられる。

1) K. Kawaguchi *et al.*, Phys. Rev. Mater. **4**, 1054403 (2020), Jpn. J. Appl. Phys. **61** SL1001 (2022).

2) Y. Umeda *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **63**, 04SP80 (2024).

3) K. Ienaga *et al.*, Phys. Rev. B **96**, 085439 (2017).

加速器

残留ガスとの相互作用による放射線発生

Radiation generated by interaction with residual gas

村山瑠渚¹、島田美帆^{2,3}、宮内洋司^{2,3}、加藤政博^{1,3,4}

広島大先進理¹、KEK²、HiSOR³、UVSOR⁴

Runa Murayama¹, Miho Shimada^{2,3}, Hiroshi Miyauchi^{2,3}, Masahiro Katoh^{1,3,4}

Hiroshima Univ¹, KEK², HiSOR³, UVSOR⁴

広島大学の小型放射光源 HiSOR は、老朽化や最新の放射光源と比較した際の光源性能面での競争力の低下が進んでおり、先進性と競争力を有する新しい光源加速器を適正な予算規模内で早急に実現する必要がある。現在の HiSOR は巨大な 180 度偏向電磁石が放射線防護の機能を有しているが、次期計画では曲げ角の小さな小型偏向磁石が採用される予定であり、遮蔽壁の設置が必要となってくる。よって、加速器本体に加えて放射線防護についても合理的な設計が要求される。

我々は放射線防護検討の基礎となる知見を得るために小型電子ストレージリングにおけるビーム損失とそれによる放射線発生の研究を進めている。その第一段階として、周回電子と残留ガスとの相互作用の結果失われた電子により生成される放射線とその伝搬を計算機シミュレーションより調べた。シミュレーションモデルとして UVSOR を簡略化したものを用い、計算には PHITS を使用した。

シンポジウムではその最新の結果を報告するとともに、今後の UVSOR における放射線計測実験計画について述べる。

BL4B

ヨードメタンI 3d内殻イオン化の電子・イオンコインシデンス計測

Electron-ion coincidence measurements of I 3d inner-shell ionization of iodomethane

伏谷瑞穂¹、彦坂泰正²、菱川明栄¹

¹名古屋大、²富山大

Mizuho Fushitani¹, Yasumasa Hikosaka², and Akiyoshi Hishikawa¹

¹Nagoya University, ²University of Toyama

極紫外やX線の波長域における多光子吸収過程では、価電子だけでなく内殻電子も光吸収に関与する多彩な非線形光学応答を示す。特に、2光子目以降の光吸収過程においては、多価イオンにおける内殻準位が中間状態や終状態となりうるため、こうした非線形光学応答の詳細な理解のためには、多価イオンの基底状態および内殻励起状態に関する知見が不可欠となる[1]。しかしながら、原子の多価イオンとは異なり、多くの分子多価イオンでは、分子内クーロン反発による解離が起こるため、分子多価イオンを始状態として準備し、1光子吸収による内殻イオン化によって内殻準位を調べることは容易ではない。一方、内殻空孔崩壊によって生じるオージェ電子は多価イオンの様々な電子状態を反映した運動エネルギーを示す[2]。そこで、本研究では、最も基本的なハロゲン化アルキルであるヨードメタン(CH₃I)を対象に、そのI 3d空孔準位からのオージェカスケード過程で生じるオージェ電子を磁気ボトル型電子・イオンコインシデンス分光器[3]により精密に測定することで、ヨードメタンの3価イオンにおける電子状態の束縛エネルギーを実験的に決定することを目指した。

UVSORのBL4Bから得られた極紫外光(700 eV)をヨードメタンの漏れ出し分子線に照射し、発生した電子およびイオンを磁気ボトル型電子・イオンコインシデンス分光器[3]により測定した。図1aにI 3d内殻イオン化によって生じたI 3d⁻¹準位からI 4d⁻¹ 2e⁻¹準位へのオージェ電子[4]と同時計測された電子スペクトルを示す。21 eV付近に観測されたブロードなピークはI 4d⁻¹ 2e⁻¹準位からオージェ崩壊によって生じた電子信号に対応し、そのエネルギー位置から3価イオンの基底状態2e⁻³準位へのオージェ遷移であると帰属した。

一方、I 3d⁻¹準位からI 4d⁻²準位へのオージェ電子[4]と同時計測された電子スペクトルには、25 eV付近にブロードなピークが観測された(図1b)。このピークは、I 4d⁻²準位からオージェ崩壊によって生じた電子信号に対応し、そのエネルギー位置から3価イオンのI 4d⁻¹ 2e⁻²準位へのオージェ遷移であると帰属した。また、I 4d⁻²準位からのオージェ・カスケードによって生じた解離イオンの分布はI 4d⁻¹準位から生じるイオン分布に比べて、2価および3価イオンのヨウ素原子の生成が支配的となることを見出した(図2)。

これらの結果は、ヨードメタンの極紫外非線形イオン化過程[5]の解明に大きく寄与すると期待される。

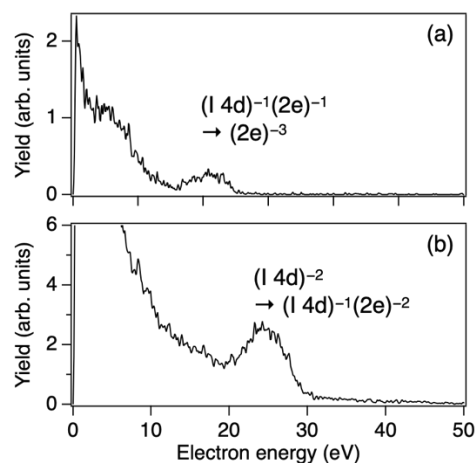


Fig. 1: Auger electron spectra of CH₃I formed by (a) I 4d⁻¹ 2e⁻¹ and (b) I 4d⁻² core-hole decays, respectively.

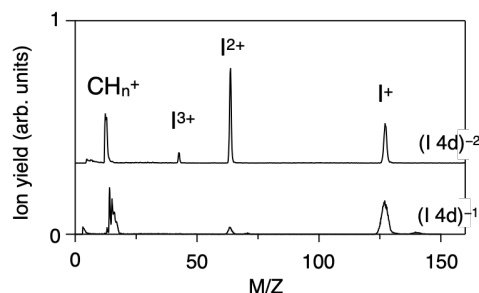


Fig. 2: Ion time-of-flight mass spectra of CH₃I obtained for I 4d⁻² (top) and I 4d⁻¹ (bottom) core-hole decays, respectively.

[1] 伏谷, 彦坂, 菱川, 放射光学会誌, 印刷中

[2] M. Fushitani *et al.*, J. Chem. Phys. **160** 174307 (2024).

[3] Y. Hikosaka, J. Electron Spectrosc. Relat. Ph. **255** 147158 (2022).

[4] R. Forbes *et al.*, J. Chem. Phys. **149** 094304 (2018).

[5] M. Fushitani *et al.*, manuscript in preparation

Off-line

原子ホログラフィー顕微鏡 CoDELMA による 菊池電子ホログラフィー解析

Kikuchi electron holography analysis using atomic holography microscope CoDELMA

大門 寛^{1,2}、桃野浩樹³、松田博之²、松井文彦²、久保田亜紀子²、
平野佳穂²、益田有⁴、森口幸一⁴、小粥啓子⁴、橋本由介⁵、松下智裕⁵
¹豊田理研、²分子研、³米子高専、⁴アプコ、⁵奈良先端大

Hiroshi Daimon^{1,2}, Hiroki Momono³, Hiroyuki Matsuda², Fumihiko Matsui², Akiko Kubota², Kaho Hirano², Yu Masuda⁴, Koichi Moriguchi⁴, Keiko Ogai⁴, Yusuke Hashimoto⁵ and Tomohiro Matsushita⁵

¹Toyota Physical and Chemical Research Institute, ²Institute for Molecular Science, ³National Institute of Technology, Yonago, ⁴APCO Ltd., ⁵Nara Institute of Science and Technology,

光電子ホログラフィーや蛍光X線ホログラフィーなどの「原子分解能ホログラフィー」は、従来は不可能であったドーパントなどの孤立した原子周りの局所立体原子配列の解析を可能にする強力な手法であり、JSPS 科研費新学術領域研究「3D 活性サイト科学」(2014 – 2019 年度)で推進してきた[1]。これまでは放射光や中性子線を励起源として測定が行われてきたが、電子線励起で行うことができると普及が促進されるため、本研究では電子線励起でも $\pm 50^\circ$ という広い立体角に渡ってホログラムが一度に表示できる原子ホログラフィー分析器 CoDELMA(図1)[2]を開発している。SEM の電子線の太さはナノサイズであるため、個々のナノ領域の組成分析と元素ごとの立体原子配列構造解析が世界で初めて測定できるようになる。

一昨年は天然グラファイトからきれいなホログラムが得られ、ホログラフィー変換によってグラファイトのハニカム原子配列がきれいに再構築されたことを報告した。昨年度は、Panasonic グラファイトからのホログラムマッピングを示し、数 μm サイズのドメインごとのホログラフィー解析が可能な顕微鏡機能があることを報告した。今回は、 Bi_2Se_3 試料からの菊池電子ホログラムを解析し、原子番号の違いを利用して Bi 周りの立体的な原子配列が観測できることを報告する。

Bi_2Se_3 結晶は、Se-Bi-Se-Bi-Se の 5 層(Quintuple layer: QL)がファンデルワールス力で積み重なった構造を取っている。図2で観測された 4 つの層(①、②、③、④)は、それぞれ①QL 内の Bi-Bi、②QL 間の Bi-Se、③QL 間の短い Bi-Bi、④QL 間の長い Bi-Bi に良く対応していて、原子番号が大きく異なれば、重い元素(Bi)だけの周りの立体的な原子配列が分かることが明らかになった。これは X 線回折における重原子法に対応しており、複雑な構造への応用上重要な成果である。

[1] H. Daimon, J. Phys. Soc. Jpn., 87, 061001 (2018). DOI: 10.7566/JPSJ.87.061001

[2] H. Matsuda, H. Momono, L. Toth, Y. Masuda, K. Moriguchi, K. Ogai, H. Daimon, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 264, 147313 (2023).

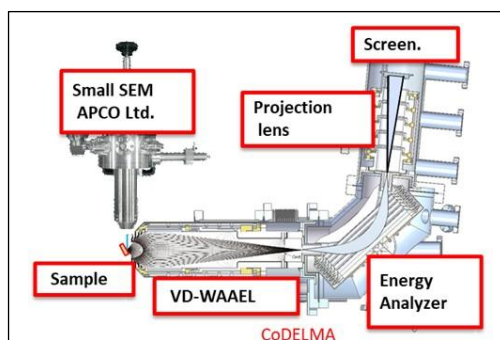


Fig. 1: 原子ホログラフィー分析器
CoDELMA

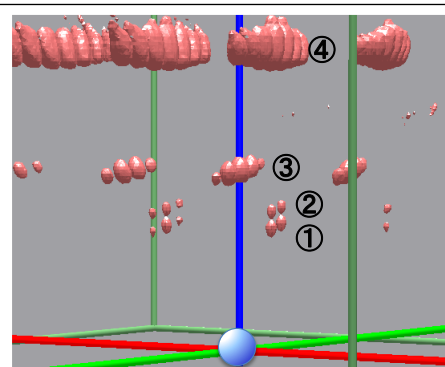


Fig. 2: Bi_2Se_3 試料の菊池電子ホログラフィー解析

BL1U&3B

マルチモーダル分光によって解き明かす LiCaAlF₆:Ce の Na 共添加効果

Unraveling Na Co-Doping Effect on LiCaAlF₆:Ce Crystals
by Multimodal Spectroscopy

一条 悠人¹、鴨志田 梢¹、北浦 守¹、平 義隆^{2,3}、鎌田 圭^{4,5}、
金 敬鎮^{4,5}、横田 有為^{4,5}、吉川 彰^{4,5}、大西 彰正¹

¹山形大、²分子研 UVSOR、³総研大、⁴東北大金研、⁵東北大 NICHe

Yuto Ichijo¹, Kozue Kamoshida¹, Mamoru Kitaura¹, Yoshitaka Taira^{2,3}, Kei Kamada^{4,5,6},
Kyoung Jin Kim^{4,5}, Yui Yokota^{4,5}, Akira Yoshikawa^{4,5}, Akimasa Ohnishi¹

¹Yamagata Univ., ²UVSOR, ³SOKENDAI, ⁴IMR, Tohoku Univ. ⁵NICHe, Tohoku Univ.

中性子を検出する際に使われる ³He ガスが近い将来枯渇されている[1]。³He ガスに代わる材料として LiCaAlF₆:Ce (LiCAF:Ce)結晶が期待されている。この物質は中性子吸収断面積の大きな Li を含み潮解性がなく発光寿命が短いため、中性子検出用の固体素子(シンチレータ)への応用が検討されてきた。一方、LiCAF:Ce では発光中心である Ce の含有量が少なく発光量が少ないことが問題であった。この問題を解決する方法として不純物の共添加効果が調べられ、中でも Na を共添加した LiCAF:Ce では Ce³⁺発光の発光量が増加することが報告された[2]。Na の共添加は LiCAF:Ce の問題点を克服する最良の方法であるが、その特性改善の機構は未解明のまま残されていた。本研究では、LiCAF:Ce と LiCAF:Ce,Na において、光学特性、Ce イオンと空孔型欠陥の局所構造を調べた。光学特性と空孔型欠陥の局所構造を調べるために UVSOR の BL3B と BL1U でそれぞれ真空紫外分光[3]と GiPALS[4]を行った。Ce イオンの局所構造を調べるために PF の BL6C で XAFS を行った。

LiCAF:Ce と LiCAF:Ce,Na の吸収スペクトルを図 1 に示す。測定時の試料温度は 13 K であった。吸収スペクトルには 270 nm 付近にピークが観測される。これは Ce³⁺イオンの 4f-5d 遷移による吸収である。Na の共添加によって Ce³⁺イオンの 4f-5d 吸収は明らかに増加した。Na の共添加によって LiCAF 中に含まれる Ce³⁺イオンの濃度が増えたことを示しており、Ce-L_{III} 端 XANES の結果と定性的に一致した。また、Ce-L_{III} イオンの 4f-5d 吸収スペクトルを拡大して見ると、Na の共添加によってスペクトル形状が変化しており、ゼロフォノン線やフォノンサイドバンドが強められていた。母体フォノンによる微細構造が Ce³⁺イオンの 4f-5d 吸収に現れており、Ce³⁺イオン周りの構造的な乱れが Na の共添加によって抑制されたと考えられる。Ce³⁺イオンが Ca²⁺サイトを占めるとき、負電荷を持つカチオン空孔が電荷補償体として導入される。一方、Na⁺イオンが Ca²⁺サイトを占める場合でも実行的に負電荷が導入されるので、カチオン空孔の形成が抑えられて Ca²⁺サイトを占める Ce³⁺イオンがより増加したと考えられる。

先行研究ではカチオン空孔が Li サイトに生じると考えられていたが、GiPALS の結果は Li 単空孔が存在せず大きな空孔凝集体が形成されることを示していた。このような空孔凝集体の存在が Ce³⁺サイトの構造的な乱れを引き起こしたと思われる。現在、空孔凝集体の起源を解き明かすために DFT 計算を用いてモデリングを行っている。

BL3B での実験では技術職員の矢野氏にお世話になりました。感謝申し上げます。

参考文献

- [1] 藤原健, 産総研計量標準報告 9, 439 (2018)
- [2] Y. Yokota et al., Cryst. Growth Des. 11, 4775 (2011).
- [3] K. Fukui et al., J. Synchrotron. Rad. 21, 452 (2014).
- [4] K. Fujimori et al., Appl. Phys. Express 13, 085505 (2020).

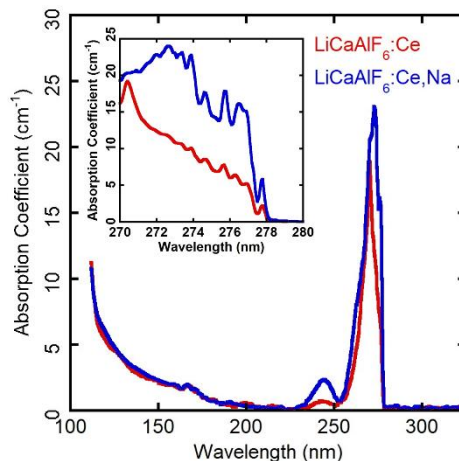


Fig.1: 13 K で測定した LiCAF:Ce(赤線)および LiCAF:Ce,Na(青線)の吸収スペクトル。

BL5B

広視野EUV偏光計の開発に向けたビームライン実験計画

Experimental Plan Using a Beamline for the Development of a Wide-Field
EUV Polarimeter

桑原爽健¹、郡司修一¹、北浦守¹、千葉巧明¹、高橋アキラ¹、中村永研²
¹ 山形大理、²分子研UVSOR

Soken Kuwabara¹, Shuichi Gunji¹, Mamoru Kitaura¹, Komei Chiba¹, Akira Takahashi¹,
and Eiken Nakamura²

¹Yamagata Univ, ²UVSOR Synchrotron Facility, Institute for Molecular Science,

極紫外線(EUV)領域での宇宙観測において、広視野かつ偏光を同時に測定できる衛星は未だ計画されていない。その大きな理由は、それを可能とする優れた検出原理の開拓が遅れているためである。そこで我々は検出器の広視野化を実現できるLobster Eye Opticsと偏光によって反射率が異なる物質を組み合わせた新しいEUV偏光計の開発を目指している。そこで本研究では、現在我々が考案している検出器の原理を実験的に検証する。そのために、強く偏光したEUV光を出力できる BeamLine5B (BL5B)を利用した実験を計画している。我々は本ビームラインに以下に示したチェンバーを取り付けて実験を行う予定である。このチェンバーの中には金属が蒸着されたミラーが入っている。そのミラーはビーム軸に対して数十度の範囲で自由に傾けることができると同時に、ビーム軸に対して360度回転させることもできる。そしてその回転角をチェンバーの外から自動で制御できるようになっている。またミラーの下流にはMicro Channel Plate(MCP)が取り付けられている。そのため、チェンバーに入ったEUV光はミラーで反射され、その反射光はMCPで検出される。BL5BのEUV光は偏光しているため、ミラーの角度を変えると、反射率が変化する。特にビーム軸に対してミラーを360度回転させると、MCPで検出される光子数は偏光成分に応じて周期的(サインカーブ状)に変調することが期待される。

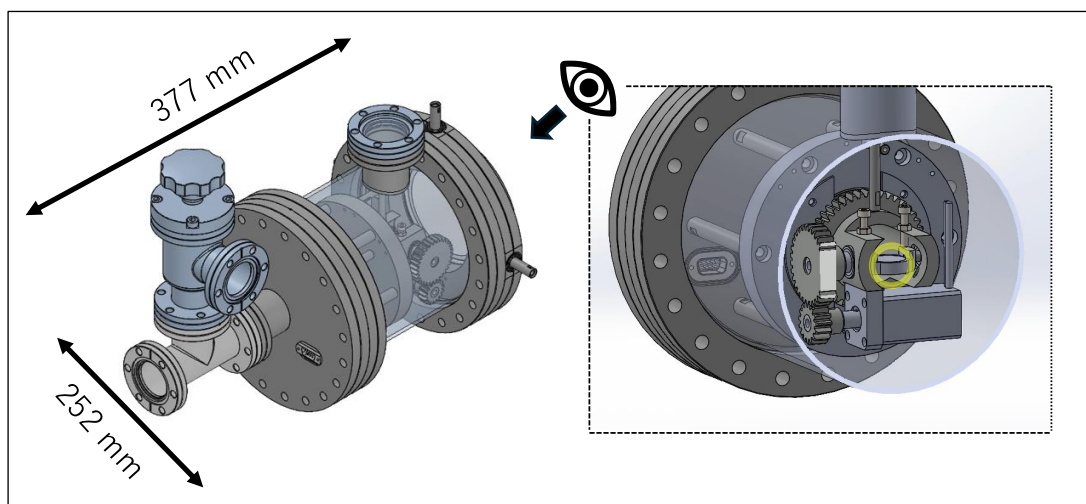


Fig. 1: チェンバー構造の概略図。丸で囲んだ部分がミラーステージを示している。

実験では、エネルギー範囲を10 eVから100 eVまで10 eV刻みで変化させ、ミラーの傾きを15 度から30 度の範囲で3 度ずつ変化させて反射強度を測定する。これらのデータを解析することで、EUV領域における偏光度測定の実験原理および検出特性を明らかにし、広視野EUV偏光計の実現に向けた設計指針を得ることを目指す。さらに、将来的には本実験結果をもとに光学シミュレーターでLEOを設計し、それを使った広視野EUV偏光観測装置の開発へと発展させる予定である。

BL5U

層状室温強磁性体 AlFe_2B_2 の角度分解光電子分光

Angle-resolved photoemission study of layered room-temperature ferromagnet AlFe_2B_2

倪 遠致^{1,2}、高倉将一²、田中清尚³、仲武昌史⁴、

H. Pazniak⁵、T. Ouisse⁵、伊藤孝寛^{1,2}

¹ 名大院工、² 名大SRセ、³ 分子研UVSOR、

⁴ あいちSR、⁵ LMGP, Grenoble INP, France

Y. Ni¹, S. Takakura², K. Tanaka³, M. Nakatake⁴, H. Pazniak⁵, T. Ouisse⁵, T. Ito^{1,2}

¹Nagoya Univ., ²NUSR, ³IMS/UVSOR, ⁴AichiSR, ⁵LMGP, Grenoble INP., France

AlFe_2B_2 は強い磁気熱効果と室温近傍における強磁性転移を示し、磁気冷凍への応用が期待されることから注目されている[1]。その磁気構造や磁気輸送特性については、Cmmm 対称性を有する斜方晶構造のa軸方向を磁化容易軸とする強磁性を示すことが予測されている[1]。この系の電子状態については DFT 計算と角度分解光電子分光 (ARPES) 測定による研究例がある [2]。

しかしながら、DFT 計算と ARPES の電子状態には定性的な違いがあり、さらに強磁性転移に伴う電子状態の変化については未だ報告例が存在しない現状にある。そこで本研究では、優れた磁気輸送特性と電子状態の関わりを明らかにすることを目的として強磁性相転移温度 (TC $\sim$ 270 K) 前後における ARPES 測定を行った。

図1に得られた強磁性 (常磁性) 相 (a,c (b,d)) AlFe_2B_2 のフェルミ面イメージ (a,b) および Γ X ライン上のバンド構造 (c,d) を示す。観測した強磁性相のバンド構造は Liu らの報告 [2]と類似するものの、Z 点近傍の2枚のフェルミ面や Γ X ライン上の小さな電子面など、これまで報告されていない詳細な電子状態が存在することを見出した。さらに、室温常磁性相においては電子状態の明確な変化が観測されることを見出した。講演では観測した電子状態の変化について詳細に議論する予定である。

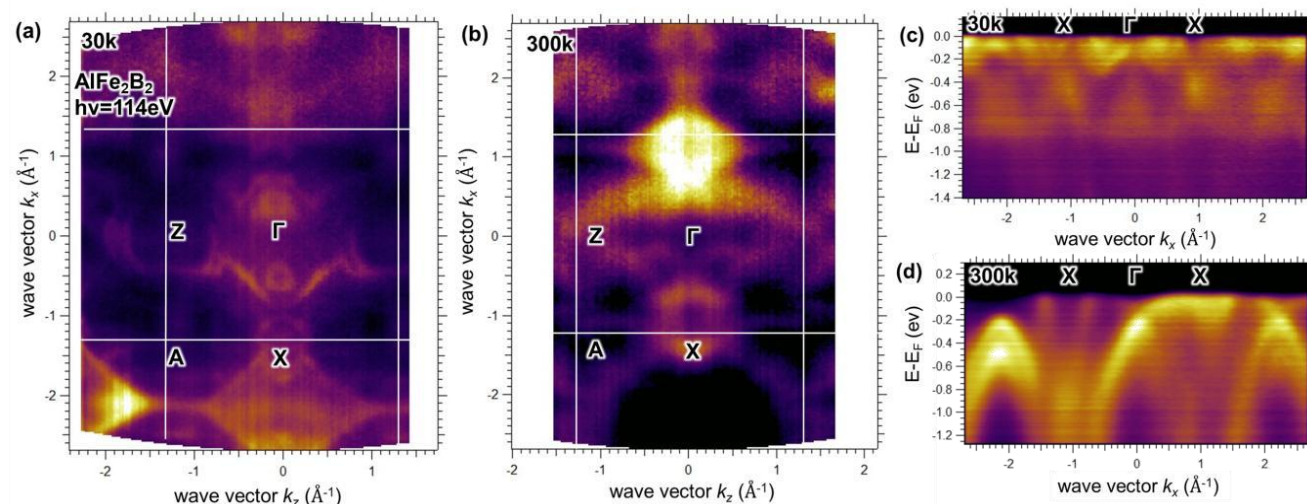


Fig. 1: T = 30 K (a,c) および室温 (b,d) における ARPES 測定 ($h\nu = 114$ eV) により得られた AlFe_2B_2 の強磁性相および常磁性相における Γ XAZ 面内フェルミ面イメージ (a,b) および Γ X ライン上のバンド構造 (c,d)。

[1] X. Tan et al., J. Am. Chem. Soc. **135**, 9553 (2013).

[2] Z. Liu et al., Phys. Rev. B **101**, 245129 (2020).

BL5U, BL7U

希土類四ホウ化物 RB_4 のトポロジカル線ノード電子状態 ：マイクロARPES

Topological nodal-line electronic states of rare-earth tetraborides RB_4 studied by micro-focused ARPES

近藤悠貴¹, 本間飛鳥¹, 大隅拓海¹, 星野銀太¹,
相馬清吾^{2,3}, 是常隆¹, 瀬川耕司⁴, 佐藤宇史^{1,2,3,5,6}
東北大院理¹, 東北大WPI-AIMR², 東北大CSIS³, 京産大理⁴,
東北大SRIS⁵, 東北大MathCCS⁶

Yuki Kondo¹, Asuka Honma¹, Takumi Osumi¹, Ginta Hoshino¹,
Seigo Souma^{2,3}, Takeshi Koretsune¹, Koji Segawa⁴, Takafumi Sato^{1,2,3,5,6}

¹Department of Physics, Tohoku University ²WPI-AIMR, ³CSIS, ⁴Department of Physics, Kyoto
Sangyo University, ⁵SRIS, ⁶MathCCS

結晶のノンシンモルフィックな対称性によって保護された線ノード電子状態はスピン軌道相互作用に対して頑強なエネルギー縮退を示すことが知られている。しかしながら、この線ノード電子状態が示すトポロジカルな性質については報告例が少なく[1]、その物性には依然として不明な点が多い。そこで我々は、結晶のノンシンモルフィックな対称性を活用して意図的にゼロギャップのノード状態を設計することを目指した。希土類四ホウ素化物 RB_4 (R: 希土類元素)は直交する2つのグライド対称性を有する高対称な結晶構造(図1(a))を持ち、その対称性に起因したブリルアンゾーン境界における電子状態の縮退が期待される。我々は、 RB_4 におけるグライド対称性に保護された電子状態の縮退構造を明らかにする目的で、 GdB_4 ($T_N = 42$ K), TbB_4 ($T_{N1} = 44$ K, $T_{N2} = 24$ K), DyB_4 ($T_N = 20.3$ K)に着目し、常磁性相及び反強磁性相においてマイクロARPES測定を行なった。その結果、DFT計算によって予測されたブリルアンゾーン境界に位置する広範な線ノード電子状態を観測した(図1(c))。さらに、一部の波数領域において、線ノードのトポロジカルな非自明性を示唆する表面状態も観測した。

本発表では、結晶の対称性と電子状態の縮退の関係、さらに観測されたバルク/表面電子状態におけるトポロジカル性の起源について、理論計算による解釈を交えて詳しく議論する。

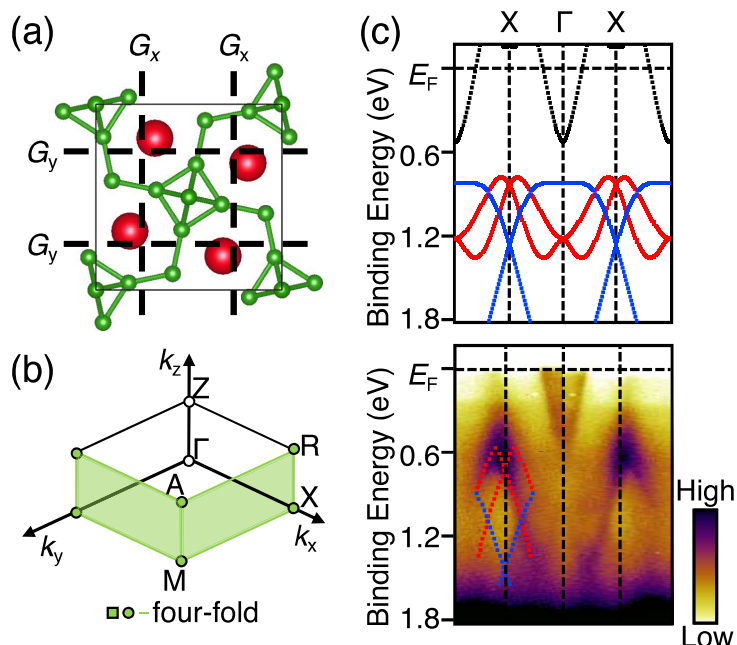


図1 (a) RB_4 の結晶構造。グライド対称性 G_x , G_y を点線で示した。(b) RB_4 のブリルアンゾーン。電子状態の縮退領域を緑で示した。(c) Γ -X軸におけるDFT計算およびARPES結果。点線はバンドのガイドライン。

[1] X. P. Yang *et al.*, Nat. Commun. 15, 7052 (2024).

BL6U

光電子運動量顕微鏡を用いたIr(001)単結晶薄膜の評価

Characterization of single-crystal Ir(001) thin films using photoelectron momentum microscope

橋本恵里¹、黒坂洋人¹、西尾雄大¹、濱松冬生¹、
矢部颯斗¹、萩原健太²、佐藤祐輔²、松井文彦²、
黄晋二¹

¹青山学院大、²分子研UVSOR

Eri Hashimoto¹, Hiroto Kurosaka¹, Yudai Nishio¹,

Kenta Hagiwara², Yusuke Sato², Fumihiko Matsui², and Shinji Koh¹

¹ Aoyama Gakuin University, ² UVSOR Synchrotron Facility, Institute for Molecular Science

Irは白金族に属する遷移金属であり、高い融点と化学的安定性、低い炭素固溶度を併せ持ち、ダイヤモンドやグラフェンの化学気相成長における下地基板として用いられる。さらに、重元素で強いスピン軌道相互作用を示し、Ir(111)の表面ではラシュバ分裂 [1] の観測が報告されている。さらに、Ir(001)表面にAuの単原子層を蒸着することで二次元スピンフィルタ [2,3] として機能し、光電子運動量顕微鏡 (Photoelectron momentum microscope: PMM) と組み合わせることで高分解能のスピン分解光電子分光測定を実現している。バルク単結晶Irは極めて高価であるため、これに代替し得る、高い表面平坦性と結晶性を併せ持つIr薄膜の実現が望まれている。本研究では、二次元スピンフィルタへの応用を念頭に、Ir(001)薄膜の作製、評価を行った。

DCマグネトロンスパッタリング法により、単結晶LSAT ((LaAlO₃)_{0.3}(SrAlTaO₆)_{0.7}) 基板上にIr薄膜を成長させた。従来、ダイヤモンドの下地基板用途としてはMgO基板が用いられることが多いが、格子不整合度が約9%と大きい、そこで、より格子不整合度が小さい (約0.7%) LSAT基板を選択した。成長温度を1150°C、成長時間を60 minとして約450 nmのIr(001)薄膜を得た後、H₂雰囲気下1000°C、360 minの条件でポストアニールを行い、結晶性の向上を図った。X線回折2θ/ω測定により(001)配向を確認し、極点測定によりLSAT(001)上でのエピタキシャル成長を確認した。また、ロッキングカーブの半値全幅は0.108°であり高い結晶性を有することが明らかになった。図1にIr(001)薄膜の原子間力顕微鏡像を示す。表面平均粗さRa値は0.4 nmで、高い表面平坦性が得られている。図2に価電子帯光電子分光測定 ($h\nu = 100$ eV) によって得られたIr薄膜のフェルミ面近傍のバンド構造を示す。低バックグラウンドかつ鮮明なパターンが得られ、単結晶性の高さを裏付けた。以上のように、本研究では高い品質のIr(001)単結晶薄膜の成膜条件を確立した。ポスターでは異なる成膜条件で成膜したIr薄膜との比較検討についても報告する。

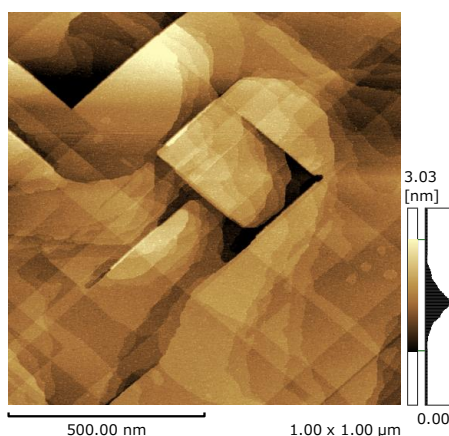


Fig. 1: AFM image of Ir(001) thin film.

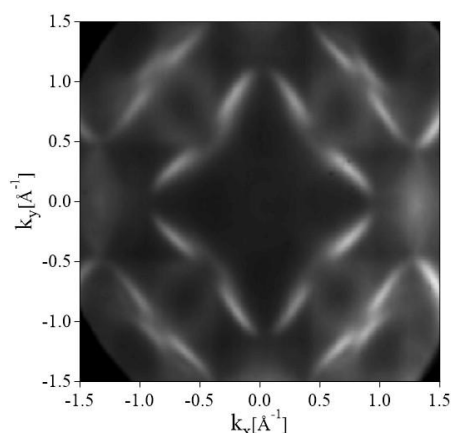


Fig. 2: Fermi surface of the Ir(001) thin film.

[1] A. Varykhalov *et al.*, Phys. Rev. Lett., **108**, 066804 (2012).

[2] L. Kirschner *et al.*, Phys. Rev. B, **88**, 125419 (2013).

[3] D. Kutnyakhov *et al.*, Ultramicroscopy, **130**, 63–69 (2013).

BL7U

角度分解光電子分光による $\text{Mg}_3\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}$ の電子状態の研究

Angle-resolved Photoemission Study of $\text{Mg}_3\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}$

福田亮平^A, 倪遠致^A, 田中清尚^B, 後藤陽介^C, 村田正行^C, 李哲虎^C,
臼井秀知^D, 伊藤孝寛^{A,E}

名大院工^A, 分子研 UVSOR^B, 産総研^C, 島根大院自然^D, 名大 SR セ^E

R. Fukuta^A, Y. Ni^A, K. Tanaka^B, Y. Goto^C, M. Murata^C, C. H. Lee^C, H. Usui^D, T. Ito^{A,E}

^AGrad. Sch. Eng., Nagoya Univ., ^BIMS/UVSOR, ^CAIST, ^DShimane Univ., ^ENUSR

Mg_3Bi_2 は Sb ドープに伴い高い熱電特性を示し、母物質 Mg_3Bi_2 はノードライン金属候補物質として知られる興味深い系である。特に、n 型 $\text{Mg}_3\text{Sb}_{0.6}\text{Bi}_{1.4}$ において Bi_2Te_3 に匹敵する熱電特性が報告されたことを契機に、300 – 500 K で高い熱変換効率を有する低温熱電変換素子への応用の観点から近年 $\text{Mg}_3(\text{Sb},\text{Bi})_2$ が注目されている [1,2]。一方で、物性測定からは電子的なキャリア (n 型) が期待されるのに対して、これまでの ARPES 観測においては Γ 点近傍におけるホール的なフェルミ面のみが報告されており、特異な物性と電子状態の関わりについては未だ明らかになっていない現状にある。そこで本研究では、 $\text{Mg}_3(\text{Sb},\text{Bi})_2$ の中でも特に良い熱電特性を示す n 型 $\text{Mg}_3\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}$ に着目して角度分解光電子分光 (ARPES) を用いた電子状態の直接観測を行った。

測定は UVSOR-III BL7U において励起エネルギー $h\nu = 17$ eV を用いて行った。清浄試料表面は超高真空中で $\text{Mg}_3\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}$ 単結晶を劈開することで得た。ここで、p 型 Mg_3Sb_2 においては、Mg 欠陥によるホールドープ効果が、高温相において Mg サイトからの電子ドープ効果として生じることに伴いフェルミ面が消失する「リフシツ転移」の存在が示唆されている [3] ことから、 $\text{Mg}_3\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}$ における温度依存性についてもあわせて調べた。

$\text{Mg}_3\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}$ おける ARPES 測定から、室温においては非常に小さなホール面を形成するバンドが Γ 点において観測されることを見出した。さらに、降温に伴いホール面のサイズが増大し、ホール面の内側に電子面の存在を示唆する構造が観測されることが明らかになった。また、観測される電子状態変化は $T = 250$ K ~ 200 K において急激に生じており、それ以下の温度領域においては電子状態変化が軽微になることを見出した。観測された電子状態変化は、 Mg_3Sb_2 におけるリフシツ転移の起源とされる連続的な化学ポテンシャルシフトとは異なる傾向を示すことから、起源の異なるものであると考えている。講演では n 型 $\text{Mg}_3\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}$ において観測された温度依存性について詳細に議論する予定である。

[1] H. Tamaki *et al.*, Adv. Mater. 28 (2016) 10182.

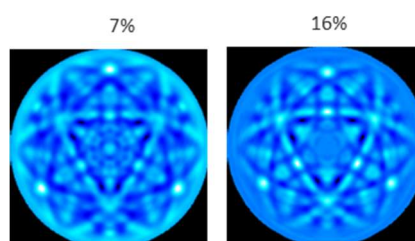
[2] K. Imasato *et al.*, Energy Environ. Sci. 12 (2019) 965.

[3] S. Xie *et al.*, App. Phys. Lett. 124 (2024) 093902.

SPRing-8 BL25SU

InドーピングBi₂Se₃の光電子ホログラフィーPhotoelectron Holography of In-doped Bi₂Se₃平野 佳穂¹, 田中 一光², 松田博之¹松井文彦¹, 久保田亜紀子¹橋本由介², 松下智裕², 大門 寛^{1,2}分子研¹, 奈良先端大²K. Hirano¹, I. Tanaka², H. Matsuda¹, F. Matsui², A. Kubota¹, Y. Hashimoto²T. Matsushita², H. Daimon^{1,2}IMS¹, NAIST²

近年、トポロジカル絶縁体 (Topological Insulator, TI) は、物性物理学の分野において革新的な電子状態を示す新規材料として注目を集めている。TIは、バルクが絶縁体でありながら、表面やエッジにおいてはスピン分極した伝導状態が存在するという特異な性質を持ち、スピントロニクスや量子コンピューティングへの応用において極めて有望である。特にInをBiサイトに置換するInドーピングBi₂Se₃系は、トポロジカル性の制御が可能な材料として注目されている。実験的研究では、In濃度 x を変えた試料ごとに測定したARPESや抵抗の温度依存性、中赤外吸収の測定結果から、 $x \approx 3-7\%$ でトポロジカル相転移が起こると述べられている[1,2]。一方、第一原理計算に基づいたトポロジカル相転移のドーピング濃度の見積もりは $x \approx 12.5\%$ [3]となっており、実験値と一致していない。これはInをBiサイトにランダムに置換して計算しており、局所的な原子配置や歪みを考慮していないことが要因と考えられる。トポロジカル性の制御のためには、局所構造の把握が重要である。そこで我々は着目原子周りの局所的な3次元原子配置を測定できる手法である光電子ホログラフィーを用いて解析した。光電子ホログラフィーは、特定元素の内殻電子をX線で励起し、放出された光電子が周囲の原子に散乱されることで生じる干渉パターン(ホログラム)を解析することで、光電子放出原子を中心とした局所構造を3次元的に再構成できる手法である。解析には2次元表示型分析器DIANA(SPRing-8 BL25SUに設置)で2016年に測定したデータを使用した。DIANAは光電子の角度分布を $\pm 60^\circ$ の広い立体角で測定が可能な装置である。Bi 4fとSe 3dの電子をそれぞれ円偏光で励起し、396 eV~600 eVの運動エネルギーでの2次元光電子回折パターン(ホログラム)を取得した。Fig.1.にBi 4fとSe 3dの、運動エネルギー600 eVでのホログラムを示す。ポスター発表では、実験ホログラムから再生して得た原子位置の情報から、局所的な配置とIn周辺の環境について議論する。

Fig.1. Bi 4f holograms of 7% and 16% In-doped Bi₂Se₃.

[1] M. Brahlek, N. Bansal, N. Koirala, S.-Y. Xu, M. Neupane, C. Liu, M. Z. Hasan, and S. Oh, Topological-Metal to Band-Insulator Transition in (Bi_{1-x}In_x)₂Se₃ Thin Films. Phys. Rev. Lett. 109, 186403 (2012).

[2] L. Wu, M. Brahlek, R. V. Aguilar, A. Stier, C. Morris, Y. Lubashevsky, L. Bilbro, N. Bansal, S. Oh, and N. Armitage, A sudden collapse in the transport lifetime across the topological phase transition in (Bi_{1-x}In_x)₂Se₃. Nature Phys. 9, 410 (2013).

[3] J. Liu and D. Vanderbilt, Topological phase transitions in (Bi_{1-x}In_x)₂Se₃ and (Bi_{1-x}Sb_x)₂Se₃. Phys. Rev. B 88, 224202 (2014).

BL3B

ゼロ次元型 Li_2HfI_6 シンチレータの光学特性の温度依存性

Temperature dependence of the optical properties of a zero-dimensional lithium hafnium iodide scintillator

藤原千隼^{1,2}、黒澤俊介^{2,3,4}、山路晃
広^{2,3}、吉川彰^{2,3}

¹東北大工、²東北大金研、³東北大
NICHe、⁴大阪大学

Chihaya Fujiwara^{1,2}, Shunsuke Kurosawa^{2,3,4}, Akihiro Yamaji^{2,3} and Akira Yoshikawa^{2,3}

¹Department of Materials Science, Graduate School of Engineering, Tohoku University, ²Institute for Materials Research, Tohoku University, ³New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University,

⁴Institute of Laser Engineering, Osaka University

0次元(0D)ハロゲン化物蛍光体は、その高い発光効率から様々な光学デバイスへの応用が期待されている。我々は0Dハロゲン化物蛍光体の1つである、 A_2BX_6 型($\text{A}=\text{Cs}, \text{Rb}, \text{K}, \text{Na}, \text{Li}$; $\text{B}=\text{Hf}, \text{Zr}$; $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) [1–2] の材料群に着目し、Aサイトを中性子捕獲断面積のおおきいLiとすることで、中性子シンチレータの応用として Li_2HfI_6 シンチレータを開発した。しかしながら、 Li_2HfI_6 の発光波長は550–600 nmとほかの A_2BX_6 ヨウ化物の発光波長と比較し、50–100 nm短波長で発光することが明らかとなった。本研究では Li_2HfI_6 の発光特性の温度依存性により、その短波長シフトの起源を明らかにしたので報告する。

Li_2HfI_6 単結晶はブリッジマン・ストックバーガー法を用いて育成した。育成した Li_2HfI_6 結晶の結晶相は、粉末X線回折分析(p-XRD)によって測定した。また合成した Li_2HfI_6 の発光メカニズムを評価するため、分子科学研究所、UVSOR、ビームラインBL3Bにて、フォトルミネッセンス特性の温度依存性を10–350 K にわたり測定した。さらに、 Li_2HfI_6 の電子物性を明らかにするため、VASPコード [3] に基づく第一原理計算を行った。

粉末X線回折(P-XRD)の結果から、育成した結晶は Li_2HfI_6 の単一相であることが確認された。DFT計算により、 Li_2HfI_6 の価電子帯上端と伝導帯下端は、Iの5p軌道とHfの5d軌道から構成されており、これは A_2BX_6 の材料の典型的構成と等しい。またバンドギャップエネルギーをAサイトをCsとした Cs_2HfI_6 と比較した結果、0.02 eV程度の違いであり、発光波長の違いへの影響はほとんどないことが明らかとなった。Fig. 1に、 Li_2HfI_6 のフォトルミネッセンススペクトルの温度依存性を示した。温度の上昇に伴い、低エネルギー側の自己束縛励起子(STE)状態の発光から、高エネルギー側の自由励起子(FE)状態の発光へのピークシフトが観測された。したがって Li_2HfI_6 の発光波長が A_2BX_6 ヨウ化物の中で比較的短波長である原因は、他の多くの A_2BX_6 系材料が室温でもSTE発光を主とするのに対し、 Li_2HfI_6 は室温(300 K)ではFE発光が支配的になるためであると考えられる。

[1] S. Kodama, et al., J. Alloys Compd., vol. 970, (2024) 172506.

[2] S. Nagorny, “” Physics, vol. 3, no. 2, (2021) pp. 320–351.

[3] P. Giannozzi et al., J. Phys. Condens. Matter, vol. 29, (2017), p. 465901.

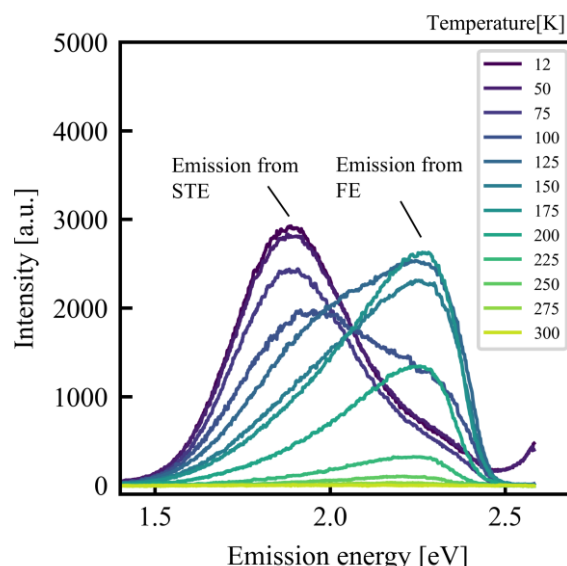


Fig.1. Li_2HfI_6 の発光特性の温度依存性、励起波長は460 nmで固定

トポロジカル結晶絶縁体薄膜 SnTe への Mn ドープによる 表面状態輸送の観測

Observation of surface-state transport by Mn doping into a topological
crystalline insulator SnTe thin film

福島祥紘¹, 一ノ倉聖^{1,2}, 佐々木泰祐², 平原徹¹

¹東京科学大理, ²NIMS

Y. Fukushima¹, S. Ichinokura^{1,2}, T. Sasaki², T. Hirahara¹

¹Dept. Phys., Science Tokyo, ²NIMS.

トポロジカル結晶絶縁体 (TCI) は、時間反転対称性ではなく結晶鏡映対称性によって表面状態が保護されているトポロジカル絶縁体 (TI) である。TI については磁性を導入したときにトポロジカル表面状態のディラックバンド上にギャップが開き[1]、量子異常ホール効果が観測された[2]。しかし TCI に磁性を導入した場合の電子状態変化および輸送特性との関連はあまり研究されていない。

そこで今回我々は、 Γ 点および M 点にディラックコーンを有する TCI の代表物質 SnTe(111)薄膜において磁性元素 Mn を添加し in situ で ARPES および輸送測定を行い、トポロジー・磁性・輸送特性の相関を研究した。SnTe は Bi₂Te₃(111)薄膜/Si(111)を基板として作製し、その後 SnTe に Mn と Te を共蒸着した。Fig. 1 に SnTe (a)および Mn ドープ SnTe (b)のフェルミ面 (上) とバンド分散 (下) を示す。SnTe ではホールバンドが Γ 点および M 点に観測され、Sn 欠陥に起因してバルクがホールドープされていることを示唆している。一方、Mn 添加した試料では円形のフェルミ面が Γ 点および M 点で確認され、Mn による電子ドープで表面状態の電子的なディラックコーンが Γ 点に出現することが分かった。ホール測定においては、SnTe では伝導キャリアがホールだったのに対し、Mn ドープ SnTe では強磁性のヒステリシスを伴うマルチキャリア輸送が観測された。この結果はバルクが絶縁体であり複数の表面状態ディラックコーンがフェルミ準位を横切る、理想的な強磁性 TCI を実現できたことを示している。

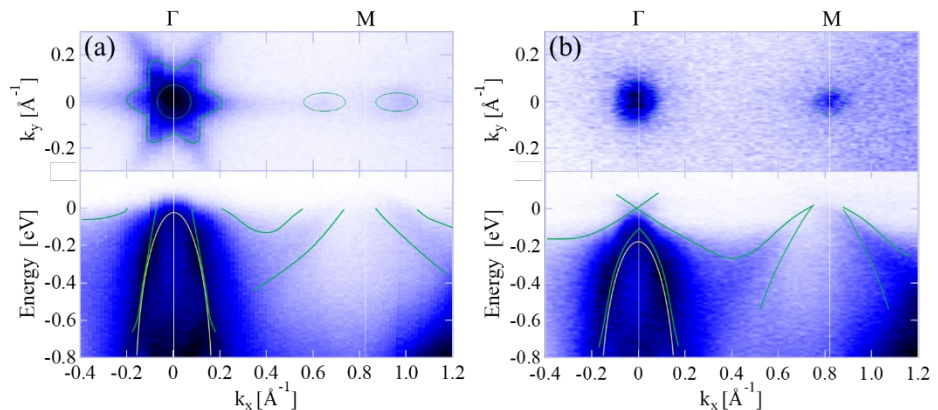


Fig. 1: ARPES measurement results for (a) SnTe and (b) Mn-doped SnTe.

Color guide: Yellow represents bulk bands, while green represents surface bands.

BL1U

UVSOR-Ⅲにおける単一電子蓄積実験の現状2025

Status of Single Electron Storage Experiment at UVSOR-Ⅲ in 2025

浅井佑哉^{1,4}、島田美帆^{2,3}、宮内洋司^{2,3}、金安達夫⁴、加藤政博^{1,3,4}

¹広島大先進理、²高工研KEK、³広島大HiSOR、⁴分子研UVSOR

Yuya Asai^{1,4}, Miho Shimada^{2,3}, Hiroshi Miyauchi^{2,3}, Tatsuo Kaneysu, and Masahiro Katoh^{3,4}

¹Grad. Ach. Ad. Sci. Eng. Hiroshima Univ., ²KEK, ³HiSOR, ⁴UVSOR Synchrotron Facility

我々は、放射光の量子性・可干渉性の応用の可能性を探っている。その一環で単一光子レベルでの放射光の特性を実験的に調べることを目的として、放射光源リングに単一電子を蓄積[1, 2]し、その放射を観測する実験に取り組んでいる。実験は、分子科学研究所の放射光源UVSORにおいて行っている。2021年度からの取り組みの結果、単一電子蓄積技術は確立できた[3]。2023年度にはUVSORの光源開発用ビームラインBL1Uにおいて、単一電子が放射する紫外線領域でのアンジュレータ光のスペクトル特性を観測することにも成功した[4]。2025年度は単一電子からの放射を光子統計的な観点から調べようとしている。

これまでのシンポジウムでも報告してきたが、単一電子蓄積状態におけるアンジュレータ放射はポアソン分布に従い、単一電子がアンジュレータを一度通過する際に基本波として放射される光子数は微細構造定数程度[5]である。すなわち、電子が光子を放出したとしても、ほとんどの場合、光子は高々一つしか放出されない。しかしポアソン分布であるならば、まれにはあるが、二つ以上の光子を同時に放出している場合があるはずである。そこで我々は、2つの光子が同時に放出される事象を実験的に観測することを試み、これに成功した。

実験は分子科学研究所の放射光源加速器UVSOR-Ⅲ ビームラインBL1Uにて行った。実験配置の概要をFigure 1に示す。背景光の影響を減らすため、紫外線領域（水平偏光355 nm）のアンジュレータ光を、サファイア窓を通して大気中に取り出した。本実験では、ビームスプリッターを用いて光子を確率的に分岐させる方法と、直角ミラーを用いて光子の進行方向を空間的に分岐させる方法の2通りで実施した。

シンポジウムでは実験の最新の結果を報告する。

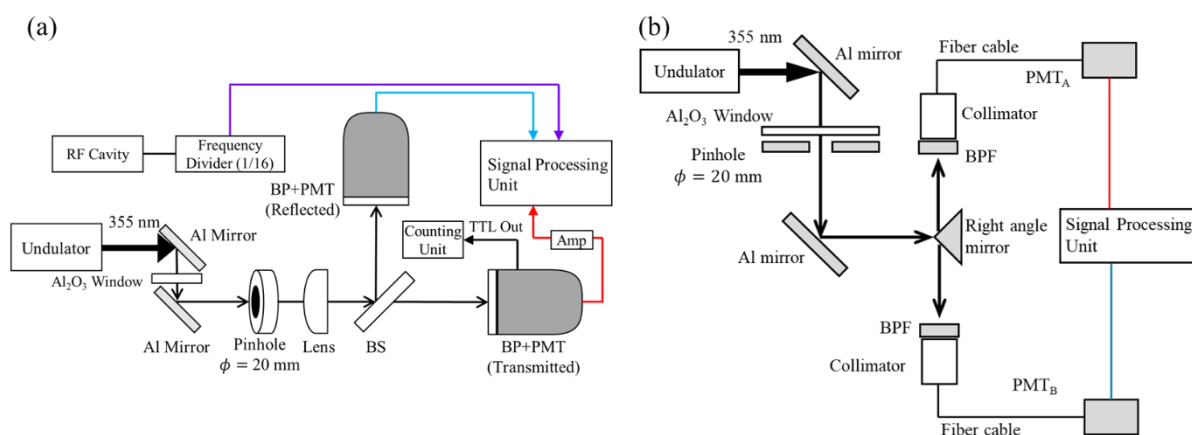


Fig. 1: 実験セットアップの概略図

- [1] A. Romanov *et al.*, JINST **16** P1 (2009)
- [2] R. Klein *et al.*, Metrologia **47** R33 (2010)
- [3] R. Shinomiya *et al.*, UVSOR Activity Report 2021, UVSOR-49, 40 (2022)
- [4] Y. Asai *et al.*, UVSOR Activity Report 2022, UVSOR-50, 42 (2023)
- [5] K. J. Kim, AIP Conf. Proc. 184, 567 (1989)

BL1U

キラルなアンジュレータ光の生体分子構造解析 への応用の開拓

Exploring the application of chiral synchrotron radiation from undulator for biomolecular
structure analysis

松尾 光一¹、川口 秀樹²、青山 空弥¹、橋本 聡¹、黒田 健太¹、
太田 紘志^{3,4}、加藤 政博^{1,3}

¹広島大学、²室蘭工業大学、³分子科学研究所、
⁴高輝度光科学研究センター

Koichi Matsuo¹, Hideki Kawaguchi², Kuya Aoyama¹, Satoshi Hashimoto¹,
Kenta Kuroda¹, Hiroshi Ota³, Masahiro Katoh^{1,3}

¹HiSOR, Hiroshima University, ²Faculty of Science and Engineering, Muroran Institute of Technology,
³UVSOR, Institute for Molecular Science, ⁴JASRI

タンパク質、DNA、多糖類などの生体分子の立体構造は、キラル(分子の掌性)という重要な構造要素を内包しており、これら分子の物性・機能の発現に密接に関わっている。この分子キラルを観測できる手法として円二色性(CD)法があり、紫外領域に発色団を持つ生体分子の立体構造研究に活用され、特にタンパク質ではその二次構造解析、多糖類ではその立体配座解析で威力を示している。CD分光法は、スピン角運動量(SAM: s)を持つ左・右円偏光を用いるが、軌道角運動量(OAM: l)を持つ左・右光渦もキラリティを観測する手法として期待されている[1-3]。しかし、紫外領域での光渦の発生は困難であるため、生体分子のキラリティと光渦との相互作用観測の報告例は少ない。最近我々は、放射光アンジュレータ[4, 5]を用いて紫外領域の光渦を生成し、三角アパチャーによる回折像をCCDカメラで観測したところ、右回りおよび左回りの光渦に特徴的な散乱パターンを確認した。本研究では、紫外光渦と生体分子との相互作用の観測に向け、放射光アンジュレータを用いた紫外吸収実験システムを構築し標準試料に対する観測を試み、また時間領域差分法を用いた光渦とキラル構造体との相互作用を理論的に検証した。

紫外領域の円偏光($s = \pm 1$)と光渦($l = \pm 1$)は、BL1Uの放射光ヘリカルアンジュレータの1次光と2次光をそれぞれ利用した[3,4]。アンジュレータの二次光である光渦は、 $s = l + 1$ または $s = l - 1$ である。アンジュレータからの円偏光あるいは光渦の吸収測定システムは、アイリス、角柱セル(キラル試料)、レンズ、ミニ分光器から構成される。ミニ分光器は、可視から紫外領域までの広い波長範囲で信号強度を検出できるため、アンジュレータからの広帯域の光(ピンクビーム)の吸収測定が可能である。キラル標準試料として、1R型と1S型の10 カンファースルホン酸(CSA)の右・左光渦の吸収を290nmで観察した結果、CSAの円二色性と渦二色性は共に、1R型と1S型でそれぞれ正と負を示し、渦二色性の方でも正と負を示したが、強度の増加が観測された。

周波数領域での電磁界解析法の一つであるモーメント法を用いて、円偏光の光渦場(または円偏光場)の中心にヘリカルコイルを置いたモデルをシミュレーションし、光渦(または円偏光)とコイルとの相互作用を、散乱強度を用いて定量評価した。散乱強度から渦二色性(または円二色性)を理論的に解析した結果、渦二色性の発現には光渦場に対するキラル試料の位置が強く影響することが示唆された。

参考文献

- [1] Brulot *et. al.*, Sci. Adv., **2**, e1501349(2016)
- [2] Ni *et. al.*, ACS Nano, **15**, 2893(2021)
- [3] Rouxel *et. al.*, Nat. Photonics, **16**, 570 (2022)
- [4] Katoh *et. el.*, Sci. Rep., **7**, 6130 (2017) & Phys. Rev. Lett., **118**, 094801 (2017)
- [5] Kaneyasu & Katoh *et. al.*, Phys. Rev. A, **95**, 023413(2017)

BL4B

Interfacial effects on the electronic states of a DNTT monolayer on Au(111)

Yuri Hasegawa¹, Takayuki Yano², Keisuke Fukutani³, Hiroshi Iwayama²,
Satoshi Kera^{2,3}, Frederik Schiller⁴, Enrique Ortega⁴

University of Tsukuba¹, UVSOR Synchrotron Facility²,

Institute for Molecular Science³, Material Physics Center⁴

The interfacial electronic state of organic/metal systems plays a crucial role in charge injection and transport process. One important phenomenon is the hole-vibration coupling that appears as a fine structure in the highest occupied molecular orbital (HOMO) peak observed by ultraviolet photoemission spectroscopy (UPS). This feature provides insight into the molecular charge reorganization energy, which governs carrier injection and hopping transfer. Such vibronic structures are typically observed for gaseous molecules, but they can also occur for adsorbed molecules on inert substrate [1]. In the latter case, the peak intensity is modified from that in gas phase. So far, variation in reorganization energy has mainly been attributed to interface interactions, but detailed studies remain limited [2]. In this study, we measured the HOMO peak and C 1s and S2p core level of a DNTT monolayer on Au(111) using high-resolution UPS (BL4B, UVSOR) and XPS (Al K α source), respectively, to investigate the interfacial effect on hole-vibration coupling.

Fig. 1(a) shows the UPS spectra of HOMO region for a DNTT monolayer on Au(111). The HOMO peak exhibits an asymmetric line shape, suggesting the presence of hole-vibration coupling during photoemission. As shown in Fig. 1 (b), the XPS C1s spectrum of DNTT reveals a shoulder on the lower binding-energy side at the monolayer (a nominal coverage of 3 Å), which gradually disappears with increasing coverage. In contrast, the simulated C1s peak of a DNTT monomer exhibits the C-S related component on the higher binding-energy side. This opposite feature indicates an energy shift of the C 1s components upon adsorption, reflecting changes in the charge distribution at the interface. These observations indicate that molecular adsorption on Au(111) induces interfacial electronic state which may influence the molecular reorganization energy. Observation of such modification highlighted by C1s peak provides a new perspective on the role of interfacial effects in organic molecules on metal substrates. Comparison with gas-phase spectra in future work will further clarify the role of interfacial electronic state for the hole-vibronic coupling.

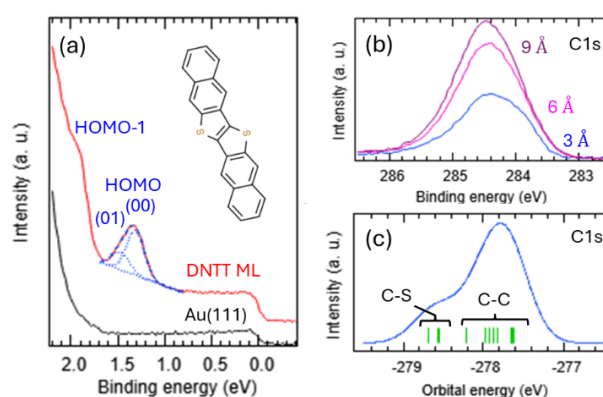


Fig. 1: (a) HOMO region of UPS ($h\nu=40\text{eV}$) for monolayer DNTT and Au(111) with fitting curves. The molecular structure of DNTT is shown in the inset. (b) XPS (AlK α) spectra of C 1s of DNTT/Au(111) with increasing nominal coverage. (c) Simulated spectra of C1s of DNTT monomer (Gaussian B3-LYP/6-31++Gdp).

- [1] S. Kera *et al.*, Prog. Surf. Sci. **84** (2009) 135
[2] P. B. Paramanov *et al.*, Phys. Rev. B, **78** (2008) 041403 (R)

BL7U

角度分解光電子分光による有機 Mott 絶縁体 β' -(BEDT-TTF)₂ICl₂ の電子構造測定

Electronic band structure observation of organic Mott insulator β' -(BEDT-TTF)₂ICl₂ by angle-resolved photoelectron spectroscopy

石田悠人¹、福谷圭祐^{2,3}、中澤遼太郎²、小林拓矢⁴、

牧田誠二²、田中清尚^{2,3}、谷口弘三⁴、解良聡^{1,2,3}

¹千葉大、²分子研、³総研大、⁴埼玉大

Yuto Ishida¹, Keisuke Fukutani^{2,3}, Ryotaro Nakazawa², Takuya Kobayashi⁴,

Seiji Makita², Kiyohisa Tanaka^{2,3}, Hiromi Taniguchi⁴, Satoshi Kera^{1,2,3}

¹Chiba Univ. ,²IMS ,³SOKENDAI ,⁴Saitama Univ.

有機分子結晶は、柔軟かつ軽量の固体であり、無機物質にはない構造多様性や環境適合性を併せ持つ。その中でも強相関有機分子結晶は、超伝導^[1]・スピン液体^[2]・Mott 絶縁体^[3]等の多彩な量子物性を示すことが知られている。これらの物性は電子の多体効果に強く依存しており、その起源を明らかにするためには、電子バンド構造を直接観測することが不可欠である。しかし有機結晶は光や熱による脆弱性が高く、角度分解光電子分光 (ARPES) による詳細な研究例は極めて限られている。

我々は強相関有機分子結晶 β' -(BEDT-TTF)₂ICl₂^[4]に注目し、ARPES 測定を行なった。本物質は 22K 以上で Mott 絶縁体であると知られている。Fig.1 に ARPES 測定による光電子強度プロットと二階微分プロットを示す。Binding energy = 0.4, 0.7 eV に結晶周期に整合した周期的分散をもつバンドが観測された。一電子近似で得られる金属的なバンドと異なり、観測結果から価電子帯最上部の平坦なバンドが得られた。この結果は電子相関による Mott ギャップが形成されていることを示唆するものである。発表では、複数の高対称方位の測定結果の報告と、Mott 絶縁体形成の起源について議論を行なう。

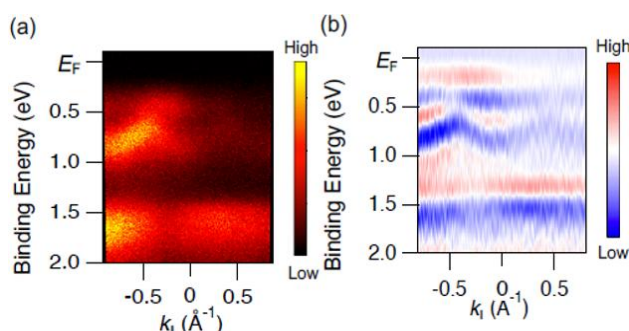


Fig.1 : $h\nu = 40$ eV, $T = 150$ K 条件下における

β' -(BEDT-TTF)₂ICl₂結晶の ARPES 結果

(a)光電子強度プロットと(b)二階微分プロット

- [1] H. Taniguchi *et al.* J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 468 (2003). [2] S. Tang *et al.* Angew. Chem. Int. Ed. **63**, e202310147 (2024). [3] K. Kanoda *et al.* Rev. Condens. Matter Phys. **2**, 167 (2011). [4] H. Kobayashi *et al.* Chem. Lett. **15**, 89 (1986).

紫外線照射PETの酵素分解

Enzymatic Degradation of UV-Irradiated PET

田所大輔¹、今井友也¹、加藤政博^{2,3}

¹京大生存圏、²UVSOR、³HiSOR

Daisuke Tadokoro¹, Tomoya Imai¹, and Masahiro Katoh^{2,3}

¹RISH, Kyoto Univ., ²UVSOR, ³HiSOR

PET (ポリエチレンテレフタレート)分解酵素による使用済みPETのバイオリサイクルの社会実装が進んでいる。PET製品は自然環境下で紫外線 (UV) 暴露されており、UV劣化が酵素分解に与える影響の調査は重要だ。本研究は、UV照射PETの酵素分解メカニズムを明らかにすることを目的とする。

波長 $\lambda = 220, 310, 370$ nmの紫外光をアモルファスPETフィルムに照射した。被照射フィルム (UV-PET) に対し、小角・広角X線同時測定 (SAXS & WAXD)を行った。PET分解酵素はFAST-PETase (PDB: 7SH6) [1]を用いて、酵素分解時のUV-PETの重量変化を測定した。

Figure 1にUV-PETの重量変化を示した。UV未照射に比べて、UV-PETの分解速度はそれぞれ遅くなった。酵素分解初期 ($< \sim 1$ day)はPET表面の密度ゆらぎ構造によって重量減少率が緩やかであることは筆者らのこれまでの研究から明らかとなっている [2]。波長220 nmでは非照射PETと比べて分解初期の重量減少率が更に緩やかとなったことに対して、波長370 nmでは分解初期の重量減少率の緩やかさはなく、直線的な重量減少を示した。Figure 2にUV-PETのSAXS曲線を示した。波長220 nmでは未照射PETと比べて、散乱ベクトル $q = \text{ca. } 0.3$ (1/nm)に緩やかなショルダーが出現した。波長370 nmでは $q = \text{ca. } 0.2$ (1/nm)より低角側の強度が少し減少するとともに、面対数プロットの傾きがわずかに増加した。

高分子へのUV照射によって、架橋 (crosslink)と光化学分解 (chain scission)反応が同時に起きる。PETでは、 $\lambda = 220, 310$ nmでcrosslink反応が優先的に進み、 $\lambda = 370$ nmではchain scission反応が進むことが知られている [3, 4]。波長220 nm照射によって表面にアモルファス中の配向が形成され、そのために分解初期の分解速度が極めて遅くなったと考えられる (crosslink)。対して、波長370 nm照射では、表面の高密度領域 (WAXD曲線の広角側)が優先的に光化学分解を受け、表面の配向が緩和されることによって分解初期の分解速度の遅延がなくなった可能性がある (chain scission)。本研究を進め、PETの表面層のみに対してchain scission単一反応が進行する紫外光照射条件を特定し分解速度を加速する前処理技術の開発を目標とする。発表当日は、WAXD測定および示差走査型電子顕微鏡観察 (SEM)による解析結果を併せて報告する。

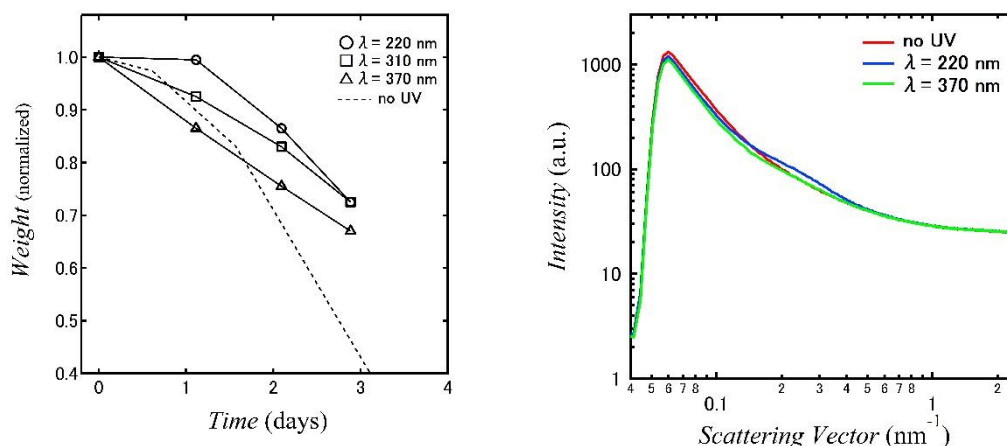


Fig. 1: Weight loss of UV-PET by enzymatic degradation. Fig. 2: SAXS profiles of UV-PET.

- [1] H. Lu *et al.*, Nature, **604** 662–667 (2022).
- [2] D. Tadokoro *et al.*, Polymer Journal, in press (2025).
- [3] M. Day *et al.*, Journal of Applied Polymer Science, **16** 191–202 (1972).
- [4] A. Kubota *et al.*, Mass Spectrometry, **14** A0168 (2025).

BL7U

角度分解光電子分光による電子ドーピング型銅酸化物 高温超伝導体 $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ の電子状態の研究

Electronic states of the electron-doped high- T_c cuprate $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$
studied by angle-resolved photoemission spectroscopy

山口 広¹, 有田 将司², 佐藤 仁^{1,2}, D-J. Song³, 田中 清尚⁴,
島田 賢也^{1,2,5,6}, 出田 真一郎^{1,2}

Hiroshi Yamaguchi¹, Masashi Arita², Hitoshi Sato^{1,2}, D-J. Song³, Kiyohisa Tanaka⁴,
Kenya Shimada^{1,2,5,6} and Shinichiro Ideta^{1,2}
Grad. Sch. Ad. Sci. Hiroshima Univ¹, HiSOR², Univ. of British Columbia³, UVSOR-IMS⁴,
RISE, Hiroshima Univ.⁵, WPI-SKCM^{2,6}

銅酸化物高温超伝導の起源には電子ボソン相互作用や強い電子相関が大きく寄与しているが[1-3]、電子ドーピング系銅酸化物高温超伝導の発現機構については、ホールドーピング系よりも研究報告が多くない。高温超伝導を発現する機構について、ホールドーピング系銅酸化物では、角度分解光電子分光(ARPES)により、ノード方向による準粒子強度の温度変化について研究されており、超伝導転移温度(T_c)における準粒子強度の減少が報告されている[4]。この結果は、 t - J モデルを基にした共鳴原子価結合(RVB)理論と整合する結果を示唆しているが、未だ高温超伝導を発現する基底状態について理解は十分に得られていない。

我々は、電子ドーピング系銅酸化物である $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO)の電子状態を、ARPESおよび角度分解逆光電子分光により観測し超伝導の微視的機構について調べてきた [6]。本研究では、ノード方向におけるNCCOの準粒子強度をARPESにより詳細に観測し、 T_c 前後で準粒子強度がどのように変化するかを調べた。本発表では、実験結果の詳細を示すとともに、電子ドーピング系銅酸化物における基底状態についての起源も含め議論する。

- [1] A. Lanzara *et al.*, *Nature* **412**, 510 (2001).
- [2] J. P. Carbotte *et al.*, *Nature* **401**, 354 (1999).
- [3] H. F. Fong *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 316 (1995).
- [4] S. Kudo *et al.*, *Phys. Rev. B* **92**, 195135 (2015).
- [5] C.-P. Chou *et al.*, *J. Phys. Chem. Solids* **69**, 2993-2995 (2008).
- [6] H. Yamaguchi *et al.*, arxiv:2505.12639.

