

「陽電子回折による表面科学の新展開と高速化データ駆動科学」

2019 年 3 月 9 日 (土) 13 : 30 ~ 18 : 00

陽電子は電子と異なり、結晶に対して斥力ポテンシャルを持つ。そのため、陽電子ビーム、特に高速陽電子ビームの結晶に対する屈折率は 1 よりも小さくなる。このことは、陽電子ビームは結晶表面で全反射を起こす可能性があることを示している。実際に、10 KeV の陽電子ビームはシリコン表面に対して、全反射臨界角が視射角で 2° と大きく、また、全反射領域でのビームの進入深さも 1\AA 以下となり、非常に表面敏感なプローブとなりうる。したがって、高速陽電子ビームを用いることで、結晶表面の構造と物性を、バルクの影響なしに測定できる利点がある。近年、この特徴を生かした全反射高速陽電子回折(TRHEPD)による表面構造解析や、表面物性測定の結果が数多く発表されてきた。

さらに最近、KEK 物質構造研究所の低速陽電子実験施設において、高強度の陽電子ビームの利用が可能になり、これを用いた陽電子回折による表面構造解析の成果も多くなっている。しかし陽電子回折においても動力的回折効果は無視できず、回折強度からの構造解析には試行錯誤が欠かせず、時間がかかる。一方、計算機利用において、ベイズ推論法や超並列アルゴリズムを用いた超高速計算技術が可能となり、これらを構造解析と組み合わせることにより、その場構造解析も夢ではなくなってきた。本シンポジウムでは陽電子回折にベイズ推論や超高速計算技術を組み合わせることによる表面構造解析の新しい展開について議論し、表面構造解析の発展に繋げることを目的として、8 件の招待講演と 1 件の一般講演で構成した。

最初の講演は KEK の兵頭俊夫先生により、「KEK 物構研低速陽電子実験施設の陽電子回折ステーション」と題して、高強度陽電子ビーム回折装置と、これを用いた最近の数多くの成果について総合的に紹介され、TRHEPD が表面科学研究の道具としていかに強力な手法であるかを強調された。続いて鳥取大の星健夫先生により、「陽電子回折における高速化データ駆動科学」と題して、陽電子回折強度のデータを表面結晶構造の大域探索から、Nelder-Mead 法による局所解析への道筋を示す手法について詳しい解説がなされた。

以上の総合的な基調講演に続いて、前半は、陽電子回折による表面構造解析の基礎的な部分を中心に最近の成果を示す 2 件の講演と 1 件の原著講演が行われた。後半はベイズ推論の詳細および、表面構造解析とその物性研究への応用を主とした 4 件の講演が行われた。

前半の望月出海先生 (KEK) の講演では、従来行われていた回折強度の視射角依存性による構造解析とは異なる、全反射領域における回折強度の方位角依存性を、チタニアの表面構造解析に応用し、全反射条件では、最上層の原子位置だけを決定できる非常の強力な手法であることを示すとともに、入射角を変化させることで、構造の深さ依存性も測定できる利点も強調した。また、和田健先生 (量研高崎) は、高強度陽電子ビームを用いた低速陽電子

回折(LEPD)装置を世界で初めて開発し、Ge(001)c(4×2)表面からの極めて鮮明なLEPDパターンの撮影に成功し、そのI-V曲線から表面構造の解析を試みるとともに、陽電子ホログラフィーによる構造解析についても紹介した。原著講演は大同工大の堀尾吉巳先生に反射高速電子回折における表面近傍の電子波動場を用いた構造解析の試みで、TRHEPDにおいても、その手法の可能性が期待できるものであり、多くの関心が集まった。

後半は、中西(大野)義典先生(東大総文)によるベイズ推論の詳細な解説により、陽電子回折への応用が紹介された。続く3件の講演では、グラフェン、シリセン、ゲルマネン、ボロフェンなどの2次元物質を中心とした構造解析の成果とその物性についての議論が展開された。深谷有喜先生(原子力機構先端基礎研)はこれらの2次元物質の構造と基板物質との強い相関を詳細に研究した成果を示した。高山あかり先生(早大理工)は2層グラフェン層間にCaをインターカレートした層間化合物の構造を決定するとともに、超伝導転移温度との関係を紹介した。松田巖先生(東大物性研)は固体表面上に形成させた2次元物質の構造と物性の重要性について、グラフェンやボロフェンおよび最近作製に成功した単原子シートCu₂Siにおけるディラック電子系についての詳細な研究成果を紹介した。以上の講演は、多くの関心を集め、熱のこもった議論が展開された。

講演会場には、平均して30-40名の聴衆者があり、当初予想した来場者数(50名)よりやや少なかったものの、全ての講演において非常に活発な議論が展開され、充実したシンポジウムとなった。

最後に、お忙しい中、快く招待講演をお引き受けいただいた先生方に感謝いたします。

世話人 服部 梓(阪大産研)、一宮 彪彦(名大)