

2023 秋季学術講演大会シンポジウム開催報告

T9「薄膜・表面物理における研究手法の最新動向」

世話人：小川修一（日本大学）、影島博之（島根大学）

本シンポジウムは、2023年9月21日13:30から18:05、熊本県熊本市の熊本城ホール A304 会場にて開催した。近年、薄膜・表面物理における研究手法の進展には目覚ましいものがあり、その広がりには従来の理論と実験というカテゴリーだけでなく、DX という新しいカテゴリーにまで広がっている。このことから、本シンポジウムでは、これら三つのカテゴリーから、応用物理学会には馴染みのない方々も交えて、招待講演者としてご講演いただいた。

前半の最初の3件はDXに関する講演であった。トップバッターは高輝度光科学研究センターの河口彰吾先生から「放射光粉末回折実験に関する自動化と現状」と題して、Spring8における粉末法による結晶構造解析の自動化についてご発表いただいた。放射光施設では放射光管理区域であることやビームタイムが決まっていることから、試料のセットアップや位置合わせ、試料の取り替え、試料のアンピルへの封入作業の自動化装置が開発され、ユーザーへの負担の大幅な軽減と、より広いユーザーが気軽に利用できる環境が整ってきているとのことであった。

続いて、シエンタオミクロンの豊田智史先生から「多次元XPSビッグデータに基づく自動化された順逆解析による多層積層薄膜界面動態の高解像度可視化」と題して、薄膜が多層積層した試料の膜厚分布を、XPSに関する実験データから予測同定する技術の詳細が紹介された。近年の測定技術の進歩により、一度の測定での膨大なデータをコンピュータで解析することを実現するとともに、不確定性の高いノイズの多いデータから高精度な解析を実現することを可能としたとのことであった。

三番目は、大阪大学の小野寛太先生から「X線計測・解析の自動化」と題して、X線計測と解析の自動化の最新の取り組みが紹介された。X線計測は近年の装置技術の進歩により、実験室での長時間連続実験が可能となっているが、研究計画の策定が極めて困難になっている。そこで、ここに機械学習の技術を導入することにより、人間の介在を極力少なくする大幅な効率向上を実現しているとのことであった。

前半最後と後半の最初は、理論手法に関する講演であった。理論の一番目は、筑波大学の太谷実先生から「固液界面における電気化学反応シミュレーション技術の開発」と題して、電解液を利用した電池の電極界面での現象を探ることのできる第一原理計算手法の開発状況が講演された。従来の第一原理計算技術では不可能だった固液界面の第一原理計算を物理的な境界条件に即して進めることができる条件を整えることができた、とのことであった。

後半最初、理論の二番目は、大阪大学の濱田幾太郎先生から「ファンデルワールス密度汎関数の表面・界面への応用」と題して、ファンデルワールス力を第一原理計算に取り入

れる手法の状況が講演された。従来の第一原理計算技術ではファンデルワールス力を取り扱うことが全くできなかったが、ファンデルワールス力と共有結合やイオン結合と共存したような複雑な系の計算が高精度でも実行可能となっている、とのことであった。

この後は実験に関して3件の講演があった。後半二番目、実験の最初は、分子研の湊丈俊先生から「エネルギー移動界面の物性と反応機構」と題して、プローブ顕微鏡を用いた電解液を利用した電池の固体電極の固液界面の直接観測技術の現状紹介があった。プローブ顕微鏡技術の進展は目覚ましく、近年は反応を起こしている固体電極表面の実空間形状の微視的測定にとどまらず、電解液の界面近傍秩序層の測定も可能となっている、とのことであった。

実験の二番目は、原子力機構先端基礎研の深谷有喜先生から「全反射高速陽電子回折による最表面構造研究」と題して、全反射高速陽電子回折、通称 TRHEPD の最新状況の紹介があった。近年は陽電子源として加速器を利用することから大幅な輝度の向上と、精度の向上が実現しているとのことである。そして、様々な固体表面の構造に関して、極めて敏感な高い精度の測定を実現しているとのことであった。

実験の最後は、関西学院大学の日比野浩樹先生から「表面顕微鏡法を用いた二次元物質のナノスケール構造解析」と題して、低エネルギー電子顕微鏡(LEEM)を中心とした手法による固体表面上の二次元物質の構造解析が講演された。固体表面上の二次元物質は、その原子スケールの薄さから観察が極めて難しいが、LEEM を用いると二次元物質の種類や層数、さらには層の重ね合わせ方の実空間分布、結晶性や結晶方位と配向まで、判定することが可能であるとのことであった。

最後は、世話人の島根大学影島博之から「クロージング」として、シンポジウムの総括が行われた。

普段本学会で発表されていない講演も多く、また本学会参加者には直接著名な講演者に会うことのできる貴重な機会であったこともあり、本シンポジウムの現地参加者は60人程度、またオンライン参加者は30人程度、で合計90名程度と、多くの聴衆に恵まれ、成功裏に終了した。

(文責：影島博之 (島根大学))