6-5 光分子科学研究領域

光分子科学第二研究部門

大 森 賢 治(教授)(2003年9月1日着任)

DE LÉSÉLEUC, Sylvain(特任准教授)

富田 隆文(助教)

周 鳥居 論来 (特任助教)

松原 卓也(特任助教)

田村 光(特任助教)

BHARTI, Vineet (特任研究員)

CHAUHAN, Vikas Singh(特任研究員)

JAUNET-LAHARY, Titouan(特任研究員)

岡田 満哉 (特別訪問研究員)

藤川 武敏(特命専門員)

川本 美奈子(特任専門員)

鈴井 光一 (特任専門員)

牧野 茜 (特任専門員)

松尾 友紀子 (特任専門員)

犬飼 和久 (特任専門員)

酒井 志帆 (特任専門員)

伊神 賢人(特任専門員)

POITRINAL, Martin (インターンシップ)

TETTEKPOE, Jean-Samuel (インターンシップ)

MARTIN, Romain (インターンシップ)

VILLELA ESCALANTE, Rene Alejandro (インターンシップ)

DENECKER, Tom $(\langle 1 \rangle \beta - \langle 2 \rangle \gamma \gamma)$

栂岡 雅人 (インターンシップ)

PRAVONGVIENGKHAM. Methkam (インターンシップ)

北出 聡太 (インターンシップ)

渡部 元輝 (インターンシップ)

GUILLEMANT, Oscar (インターンシップ)

DUBON, Joaquin (インターンシップ)

GANESAN, Karthikeyan (インターンシップ)

MAITY, Arnab (インターンシップ)

CHAUHAN, Anjali (インターンシップ)

STAINER, Lea-Marina (インターンシップ)

WEDOWSKI, Roxana (インターンシップ)

KOCIK, Robin (インターンシップ)

KETAIAM, Kittisak (インターンシップ)

SIRIWORAKOONCHAI, Phatwarach (インターンシップ)

BRAUN, Eduard $(1 \vee 9 - \vee 9 \vee 7)$

TRAUTMANN, Arno (インターンシップ)

WEBER, Sebastian (インターンシップ)

ROUSSEL, Mathis (インターンシップ)

LERICHE, Axel-Ugo (インターンシップ)

TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh(大学院生)

田中 愛登 (大学院生)

中井 愛里(技術支援員(派遣))

片岡 賢輔(技術支援員(派遣))

西岡 稚子(事務支援員)

越田 陽子(事務支援員)

山岸 芽衣(事務支援員)

A-1) 専門領域:量子物理学、量子コンピュータ、量子シミュレータ、原子分子光物理学、物理化学

A-2) 研究課題:

- a) アト秒精度のコヒーレント制御法の開発
- b) 量子論の検証実験
- c) コヒーレント分子メモリーの開発
- d) 分子ベースの量子情報科学
- e) 強レーザー場非線形過程の制御
- f) バルク固体の極限コヒーレント制御
- g) 超高速量子シミュレータの開発
- h) 超高速量子コンピュータの開発

- a) コヒーレント制御は、物質の波動関数の位相を操作する技術である。その応用は、量子コンピューティングや結合選択的な化学反応制御といった新たなテクノロジーの開発に密接に結び付いている。コヒーレント制御を実現するための有望な戦略の一つとして、物質の波動関数に波としての光の位相を転写する方法が考えられる。例えば、二原子分子に核の振動周期よりも短い光パルスを照射すると、「振動波束」と呼ばれる局在波が結合軸上を行ったり来たりするような状態を造り出す事ができる。波束の発生に際して、数フェムト秒からアト秒のサイクルで振動する光電場の位相は波束を構成する各々の振動固有状態の量子位相として分子内に保存されるので、光学サイクルを凌駕する精度で光の位相を操作すれば波束の量子位相を操作することができる。我々はこの考えに基づき、独自に開発したアト秒位相変調器(APM)を用いて、二つのフェムト秒レーザーパルス間の相対位相をアト秒精度で操作するとともに、このパルス対によって分子内に発生した二つの波束の相対位相を同様の精度で操作する事に成功した。さらに、これらの高度に制御された波束干渉の様子を、ピコメートルレベルの空間分解能とフェムト秒レベルの時間分解能で観測する事に成功した。
- b) APM を用いて、分子内の2個の波束の量子干渉を自在に制御する事に成功した。また、この高精度量子干渉をデコ ヒーレンス検出器として用いる事によって、熱的な分子集団や固体中の電子的なデコヒーレンスを実験的に検証した。 さらに、固体パラ水素中の非局在化した量子状態(vibron)の干渉を観測し制御する事に成功した。
- c) 光子場の振幅情報を分子の振動固有状態の量子振幅として転写する量子メモリーの開発を行なった。ここでは、フェムト秒 光パルス対によって分子内に生成した2個の波束間の量子位相差をアト秒精度で操作し、これらの干渉の結果生成した第3

の波束を構成する各振動固有状態のポピュレーションを観測することによって、光子場の振幅情報が高精度で分子内に転写されていることを証明することができた。また、フェムト秒光パルス対の時間間隔をアト秒精度で変化させることによって波束内の固有状態のポピュレーションの比率を操作できることを実証した。さらに、固体パラ水素中の振動量子状態(vibron)の位相情報の2次元分布を操作し可視化することによって、固体2次元位相メモリーの可能性を実証することに成功した。

- d) 分子メモリーを量子コンピュータに発展させるためには、c)で行ったポピュレーション測定だけでなく、位相の測定を行う必要がある。そこで我々は、c)の第3の波束の時間発展を別のフェムト秒パルスを用いて実時間観測した。これによって、ポピュレーション情報と位相情報の両方を分子に書き込んで保存し、読み出すことが可能であることを実証した。振動固有状態の組を量子ビットとして用いる量子コンピュータの可能性が示された。さらに、分子波束を用いた量子フーリエ変換を開発した。
- e) 分子の振動波束を構成する振動固有状態の振幅と位相を強レーザー場で制御することに成功した。
- f) バルク固体中の原子の超高速2次元運動をフェムト秒単位で制御し画像化する新しい光技術を開発した。
- g) ほぼ絶対零度 (~50 ナノケルビン) まで冷やした極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶にアト秒精度のコヒーレント制御法を適用することによって,3万個の粒子の量子多体問題を近似無しに1ナノ秒 (ナノ=10⁻⁹) 以内でシミュレートできる世界唯一・最速の「超高速量子シミュレータ」を開発することに成功した。それぞれ異なる研究分野で発展してきた「超高速化学」と「極低温物理」の手法を融合させた世界初の試みであり、材料科学・固体物理・溶液化学など広範囲の領域に波及効果を及ぼす新しい方法論として期待されている。
- h) 上記の人工原子結晶とアト秒精度のコヒーレント制御法を組み合わせた世界唯一·最速の「超高速量子コンピュータ」 の開発を進めており、新規特許出願3件を行っている。

B-1) 学術論文

V. BHARTI, S. SUGAWA, M. MIZOGUCHI, M. KUNIMI, Y. ZHANG, S. DE LÉSÉLEUC, T. TOMITA, T. FRANZ, M. WEIDEMÜLLER and K. OHMORI, "Picosecond-Scale Ultrafast Many-Body Dynamics in an Ultracold Rydberg-Excited Atomic Mott Insulator," *Phys. Rev. Lett.* **131**, 123201 (12 pages) (2023). DOI: 10.1103/PhysRevLett.131.123201

V. BHARTI, S. SUGAWA, M. KUNIMI, V. S. CHAUHAN, T. P. MAHESH, M. MIZOGUCHI, T. MATSUBARA, T. TOMITA, S. DE LÉSÉLEUC and K. OHMORI, "Strong Spin-Motion Coupling in the Ultrafast Quantum Many-Body Dynamics of Rydberg Atoms in a Mott-Insulator Lattice," *arXiv* 2311.15575 (2023). DOI: 10.48550/arXiv.2311.15575

B-3) 総説, 著書

富田隆文, シルヴァン ド レゼルック, 大森賢治, 「単一原子をレーザー制御する超高速量子コンピューター 特集 "2022 年日本の光学研究" 」, 光学 , **52(6)**, (2023).

富田隆文, 松原卓也, シルヴァンド レゼルック, 大森賢治, 「冷却リュードベリ原子列の超高速レーザー制御 超高速量子コンピュータへの展開」, *応用物理*, **93(2)**, 89–95 (2024).

B-4) 招待講演(*基調講演)

大森賢治,「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」,第3回量子コンピューティング EXPO(春)、東京ビッグサイト、東京都江東区、2023年5月.

大森賢治,「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」,第 7回 SEMI 量子コンピューター協議会,SEMI Japan,東京都千代田区,2023年5月.

大森賢治,「Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit」, 13th RIKEN QUANTUM COMPUTING(RQC)Colloquium, 理化学研究所, 埼玉県和光市, 2023年6月.

大森賢治,「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」,マイクロフォトニクス研究会 第 10 回レーザー学会「小型集積レーザー」専門委員会、分子科学研究所、愛知県岡崎市、2023年 9月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, あいちモノづくりエキスポ 2023, Aichi Sky Expo, 愛知県常滑市, 2023 年 10 月.

大森賢治,「量子力学に残された 100年の謎に迫る」, 真和中学・高等学校文化記念講演会, 真和中学校・高等学校, 熊本県熊本市, 2023年 10月.

大森賢治,「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, VACUUM2023真空展併設真空フォーラム・シンポジウム, 東京ビッグサイト, 東京都江東区, 2023年12月.

大森賢治,「量子力学 100年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」,第32回豊田理研懇話会,豊田理化学研究所井口洋夫記念ホール、愛知県長久手市,2023年12月.

大森賢治、「アト秒ナノメートル領域の時空間光制御に基づく冷却原子量子シミュレータの開発と量子計算への応用」、光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP) 第6回シンポジウム、伊藤国際学術研究センター、東京都文京区、2024年2月. 大森賢治、「世界に羽ばたく大森量子コンピュータ・スタートアップいよいよ始動へ」、三菱UFJ銀行、麹町ガーデンタワー、東京都千代田区、2024年3月.

大森賢治,「アト秒ナノメートル領域の時空間光制御に基づく冷却原子量子シミュレータの開発と量子計算への応用」、ムーンショット目標 6公開シンポジウム 2024、ベルサール秋葉原、東京都千代田区、2024年 3月.

K. OHMORI, "Ultrafast Quantum Computing with Ultracold Atom Arrays at Quantum Speed Limit," 17th International Conference on Squeezed States and Uncertainty Relations (ICSSUR 2023), Taipei (Taiwan), June 2023.*(オープニングセレモニープレナリー講演)

K. OHMORI, "Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit," Colloquium Lecture, Institute of Atomic and Molecular Sciences (IAMS), Taipei (Taiwan), June 2023.

K. OHMORI, "Japan's Policy on Quantum Technology and Innovation," Online Training: Quantum Technology for Policymakers, EU Quantum Flagship, Online, July 2023.

K. OHMORI, "Large-scale and high-coherence fault-tolerant quantum computer with dynamical atom arrays," Moonshot Goal 6 International Symposium 2023, Tokyo (Japan), July 2023.

K. OHMORI, "Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit," ICPEAC (International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions)2023, Ottawa (Canada), July 2023.*(オープニングセレモニープレナリー講演)

K. OHMORI, "Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit," The 15th Femtochemistry Conference—Dynamics of Complex Molecular Processes in Chemistry, Biology & Physics (FEMTO15), Berlin (Germany), August 2023.

K. OHMORI, "Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit," 11th Bonn Humboldt Award Winners' Forum 2023 "Quantum Science: from Foundations to Instrumentation," The Wolfgang Paul Lecture Hall, Kranz Parkhotel Siegburg, Bonn, Siegburg (Germany), October 2023.

K. OHMORI, "Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit," Friedrich-Alexander-Universität Physics Colloquium, Friedrich-Alexander-Universität, Erlangen (Germany), November 2023.

K. OHMORI, "Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit," Extraordinary invited talk, Peter Grünberg Institut Forschungszentrum Jülich, Jülich (Germany), November 2023.

B-5) 特許出願

US2023/0281498A1,「量子シミュレーターおよび量子シミュレーション方法 (Quantum Simulator and Quantum Simulation Method)」, 酒井寛人 (浜松ホトニクス), 大森賢治 (自然科学研究機構), 安藤太郎 (浜松ホトニクス), シルヴァンドレゼルック, 富田隆文, 素川靖司 (自然科学研究機構), 大竹良幸, 豊田晴義 (浜松ホトニクス), 2021年. (公開日 2023年9月7日) US2023/0317309A1,「量子シミュレーターおよび量子シミュレーション方法 (Quantum Simulator and Quantum Simulation Method)」, 酒井寛人 (浜松ホトニクス), 大森賢治 (自然科学研究機構), 安藤太郎 (浜松ホトニクス), シルヴァンドレゼルック, 富田隆文, 素川靖司 (自然科学研究機構), 大竹良幸, 豊田晴義 (浜松ホトニクス), 2021年. (公開日 2023年10月5日)

B-6) 受賞, 表彰

Sylvain de LÉSÉLEUC, 第12回自然科学研究機構若手研究者賞(2023).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

European Science Foundation (ESF), ESF College of Expert Reviewers (2018–).

European Commission, HORIZON 2020, EU Future and Emerging Technologies, Scientific and Industrial Advisory Board (SIAB) (2017–).

Center for Quantum Engineering, Research and Education (CQuERE), TCG, CREST (India), Scientific Advisory Board (2021–). 日本分光学会代議員 (2022–).

欧州研究会議 (European Research Council: ERC, EU) パネル評価者/外部評価者 (2007-).

学会の組織委員等

原子・分子・光科学 (AMO) 討論会プログラム委員 (2003-).

iSAP HAMAMATSU (International Symposium on Advanced Photonics) 組織委員 (2016-).

米国ゴードン研究会議 (Gordon Research Conference: GRC, USA) "Quantum Control of Light and Matter," 2023 議長 (2019–2023) (2021 議長にて開催予定が Covid-19 パンデミックのため 2023 年に延期).

文部科学省,学術振興会,大学共同利用機関等の委員等

文部科学省 科学技術·学術審議会 専門委員 (2015-).

文部科学省 科学技術・学術審議会 量子科学技術委員会 主査代理 (2015-2023), 主査 (2023-).

文部科学省 研究計画·評価分科会 臨時委員 (2023-).

科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業 (CREST) 研究領域「量子状態の高度な制御に基づく革新的量子技術 基盤の創出」(研究総括: 荒川泰彦) 領域事後評価委員 (2023-2024).

日本学術振興会 特別研究員等審査会委員等 (2022-2023).

学会誌編集委員

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, IOP, UK, Section Editor for Quantum Technologies (2019–) and Executive Editorial Board (2021–).

競争的資金等の領域長等

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」、「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュー 9」, プロジェクト・マネージャー (PM) (2022–).

内閣府「ムーンショット型研究開発制度 | 「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュー タ」、「大規模冷却原子型量子コンピュータプラットフォームの開発および統合」、課題推進者 (PI) (2022-).

文部科学省「光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP)」量子情報処理・大規模基礎基盤研究、「アト秒ナ ノメートル領域の時空間光制御に基づく冷却原子量子シミュレータの開発と量子計算への応用」、研究代表者 (2018-).

理科教育活動

講演講師「量子力学に残された 100年の謎に迫る」真和中学・高等学校文化記念講演会 (2023).

その他

大森賢治個人で年額(換算)およそ17億円にも上る極めて高額の外部資金を獲得(上記の「競争的資金等の領域長 等 | および下記 [B-10] 競争的資金 | の項を参照) することで、分子研の財政に多大な貢献をもたらすともに、分子 研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

分子研大森グループの量子コンピュータ開発の成果を用いた事業化のニュースが日本経済新聞・朝刊(2024年2月27日) 1面トップ記事、および日本経済新聞・電子版(2024年2月27日)トップ記事としてハイライトされるとともに、同日の日 本経済新聞・電子版のアクセスランキング「総合」および「朝刊・夕刊から」の両方で首位にランクされた。その他にも読 売新聞、中日新聞、産経新聞、FNN ニュースなど、多くのメディアで大々的に報道された。また、欧米中等、海外の多 くのメディアでも大々的に報道された。これによって分子研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献. 自然科学研究機構本部と分子科学研究所が中心となり、分子研大森グループの量子コンピュータ開発の成果を用 いた事業化のための協議体「事業化検討プラットフォーム」を立ち上げ、日本政策投資銀行(DBJ)、日立製作所、 富士通, NEC, 浜松ホトニクス, 豊田通商, 岡崎信用金庫をはじめとする12社の参画を得ている。これによって, 国内外の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

4-6新聞報道に記載されている通り、NHK、読売新聞、日本経済新聞などを始めとする全国区の主要なニュースメ ディアに度々露出している。特に最近は、研究成果だけでなく、読売新聞、日本経済新聞、NHK、日経サイエン スなど主要メディアの「人もの記事」に次々に登場している。つい最近にも日本経済新聞の名物インタヴュー記事「人 間発見」において、大森の半生を辿った5回連載記事が掲載され、全国的に大きな反響を呼んだ。これらの極めて 頻繁な全国区の報道によって、一般社会に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献 (web ニュース等については、https://ohmori.ims.ac.jp/kenjiohmori/ を参照)

文部科学省 科学技術・学術審議会 量子科学技術委員会の主査代理 専門委員(2015-2023). 同委員会の主査(2023-現在), ならびに文部科学省 研究計画・評価分科会 臨時委員(2023- 現在)として, 量子テクノロジー開発および 分子研UVSOR を含む量子ビーム(放射光施設・大型レーザー施設)利用推進に関する政策検討に大きく貢献.

量子科学技術分野における世界最高レベルの学術会議である米国ゴードン研究会議(Gordon Research Conference: GRC, USA) "Quantum Control of Light and Matter" の 2023 年会議 議長, 2021 年会議 議長 (Covid-19 パンデミックのため 2023 年に 延期)、2019年会議 副議長、およびGRC の評議会メンバー(2019-2021)として 2017年から 2023年の長期に渡り、GRC の 運営に貢献することによって,量子科学技術分野における分子研の国際的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献. 冷却原子型・量子コンピュータ開発において従来技術を一気に2桁上回る超高速2量子ビットゲート(量子コンピュー ティングの心臓部である計算素子)を達成し、Nature Photonics 2022年10月号の表紙を飾るとともに、日米欧中を中心に世界中の200件以上のニュース報道(2023年10月以降〜現在も継続)でハイライトされが、この報道は2023年10月以降も継続している。これらの報道によって分子研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献、上記の超高速2量子ビットゲートの成果を受けて、日本の学術会議はもとより、米国を代表する量子技術開発コンソーシアムであるChicago Quantum Exchange (CQE)、シカゴ大学、マサチューセッツ工科大学(MIT)、ハーバード大学などの米国の量子技術開発の最重要拠点の数々や、ドイツのフンボルト財団、ユーリッヒ研究機構、原子物理分野で由緒ある大規模な国際会議ICPEAC(今年の開催地:オタワ)などから、次々にコロキウムや全体講演(Plenary Lecture)等に招待され、世界のアカデミアで大反響を呼んでおり、分子研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献、上記の超高速2量子ビットゲートの成果を受けて、応用物理学会機関誌「応用物理」や日本光学会誌「光学」に解説記事が掲載された他、「日本物理学会誌」、自動車技術会誌「自動車技術」などからも、次々に解説記事を依頼されるなど、物理学、光学、自動車技術など様々な研究分野に強烈なインパクトを与え、分子研の全国的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献、

分子研・大森グループと米国を代表する量子テクノロジー企業であるColdQuanta (現Infleqtion)社 (https://coldquanta.com)との間で量子コンピュータ開発における協業を進めており(2022年2月18日-),米国の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

NHKより量子をテーマにした取材を継続的に受け、この過程で大森を主役としたNHKテレビ番組(大森グループの超高速量子コンピュータの開発秘話・特集:2023年6月26日おはよう東海「愛知発! 量子コンピューター」/2023年6月20日まるっと「Google 超え超高速コンピューター 岡崎発!量子コンピューター技術」)に出演するなど、一般社会に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

東京ビッグサイトで開催された第3回量子コンピューティングEXPO(春)(2023年5月11日)において,大森グループの超高速量子コンピュータに関する特別講演を行うことによって,日本の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

2023年 5月 17日にSEMI Japan (東京・千代田区) に招かれ、大森グループの超高速量子コンピュータに関する招待講演を行うことによって、日本の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

経済産業省からの依頼で、量子コンピュータ開発の現状と展望に関するインタヴュー (2023年5月29日)を受けることによって、経済産業省における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

理研量子コンピュータセンター (RQC) コロキウム (2023年6月21日) に日本人として初めて招かれ、コロキウム講演を行うことによって、日本の学術界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

EU量子フラッグシッププログラムが主催する各国の政策立案者を対象にした研究会(2023年7月6日)において、 米国ホワイトハウスOSTP代表者と共に、日本政府代表者として招かれ、日本の量子技術政策に関する招待講演と パネル討論を行うことによって、世界の量子技術関係者に対する分子研のプレゼンス向上に大きく貢献。

自然科学研究機構・研究基盤戦略会議メンバーに対して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー (2023年9月14日)を行うことによって、自然科学研究機構全体に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

文部科学省・基礎基盤研究課に対して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究 開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー(2023年9月19日)を行うことによって、日本政府に対する分子研 のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。 インドを代表する新しい研究機関TCG CREST, The Center for Quantum Engineering Research and Education (CQuERE)のScientific Advisory Board メンバー (2021–) (2024年よりArtur Ekert 英オックスフォード大教授の後任として委員長に就任予定)として、分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

あいちモノづくりEXPO (2023年10月5日)で招待講演(特別講演)を行うことによって、東海地方の産業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

熊本市の真和中学校・高等学校で「量子力学 100年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」に関する招待講演を 行うことによって、小中高生世代の啓蒙と分子研の知名度向上に貢献、

中部経済連合会と北海道経済連合会に対して大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー (2023年10月11日)を行うことによって、中部地方と北海道の産業界・財界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

名古屋市経済局に対して大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー (2023年11月29日)を行うことによって、名古屋市行政における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

日本表面真空学会と日本真空工業会が主催する VACUUM2023 真空展「真空フォーラム・シンポジウム」(東京ビッグサイト, 2023年12月1日) において招待講演を行うことによって、国内の真空関連業界における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

豊田理研懇話会において招待講演(2023年12月12日)を行い、史上最多の354名の聴講者に対して「量子力学100年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」に関する招待講演を行うことによって、トヨタグループをはじめとする産業界における分子研の知名度向上に大きく貢献。

特許庁からの依頼で、量子コンピュータ開発の現状と展望に関するインタヴュー (2024年1月2日)を受けることによって、分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献、

真空工業会技術フォーラムに対して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発 状況に関するレクチャーおよびラボツアー (2024年2月15日)を行うことによって、分子研のプレゼンス向上と研 究力アピールに大きく貢献。

ムーンショット目標 6 の国際的な知名度向上,世界の研究者への広報活動強化のため,Nature にムーンショット目標 6 の特集記事が掲載された。その中で,ムーンショット事業の認知度向上に大きく貢献し,注目を浴びている大森プロジェクトは,独立して 2 ページにわたり取り上げられ(「Orchestrating a quantum leap using cold atoms」,Focal Point on Quantum Computing in Japan,Nature,Vol. 626,No. 8001,雑誌及びオンライン掲載 2024年 2 月 29日),ムーンショット目標 6 及び分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

三菱UFJ銀行に対して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャー (2024年3月15日)を行うことによって、分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献、

B-8) 大学等での講義, 客員

Heidelberg University(ドイツ), 客員教授(フンボルト賞受賞者), 2012年-.

B-10) 競争的資金

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」、「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」、 大森賢治 (2022 年度 – 2030 年度). 内閣府「ムーンショット型研究開発制度」、「大規模冷却原子型量子コンピュータプラットフォームの開発および結合」、 大森賢治 (2022年度-2030年度).

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」,「Novel techniques and tools for high-fidelity operation of a cold-atom based, fault-tolerant, quantum computer」, Sylvain de LÉSÉLEUC (2022年度-2030年度).

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」、「高忠実度ゲート操作および誤り訂正のための光学的・量子制御技術の開 発」、富田隆文 (2022年度-2030年度).

文部科学省「光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP)」量子情報処理・大規模基礎基盤研究、「アト秒ナノメート ル領域の時空間光制御に基づく冷却原子量子シミュレータの開発と量子計算への応用」、大森賢治(2018年度-2028年度).

B-11) 産学連携

共同研究、浜松ホトニクス(株)、「高精度光技術を用いた量子シミュレータの研究」、大森賢治(2016年-).

(株)日立製作所、「動的量子ビットを用いた量子コンピュータの研究」、大森賢治(2023年度-).

ColdQuanta, Inc. d.b.a. Infleqtion (米国), 「超高速量子コンピュータの開発」、大森賢治 (2023 年度 –).

研究活動の課題と展望 C)

今後我々の研究グループでは、APM を高感度のデコヒーレンス検出器として量子論の基礎的な検証に用いると共に、 より自由度の高い量子位相操作技術への発展を試みる。そしてそれらを希薄な原子分子集団や凝縮相に適用するこ とによって、「アト秒量子エンジニアリング」と呼ばれる新しい領域の開拓を目指している。 当面は以下の 5 テーマの 実現に向けて研究を進めている。

- ① デコヒーレンスの検証と抑制: デコヒーレンスは、物質の波としての性質が失われて行く過程である。量子論におけ る観測問題と関連し得る基礎的に重要なテーマであるとともに、テクノロジーの観点からは、反応制御や量子情報処 理のエラーを引き起こす主要な要因である。その本質に迫り、制御法を探索する。
- ②量子散逸系でのコヒーレント制御の実現:①で得られる知見をもとにデコヒーレンスの激しい凝縮系でのコヒーレン ト制御法を探索する。
- ③原子・分子ベースの量子情報科学の開拓:アト秒精度の超高速コヒーレント制御技術によって、原子・分子内の電子・ 振動固有状態を用いるユニタリ変換とそれに基づく量子情報処理の確立を目指す。さらに、単一原子・分子の操作・ 読み出し技術の開発を進める。
- ④ 超高速量子シミュレータの開発:ほぼ絶対零度(~50 ナノケルビン)まで冷やした極低温のルビジウム原子をミクロン レベルで整列させた人工原子結晶とアト秒精度の超高速コヒーレント制御技術を組み合わせた世界唯一・最速の「超 高速量子シミュレータ」のさらなる高機能化を目指す。
- ⑤ 超高速量子コンピュータの開発:極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶とアト秒精 度の超高速コヒーレント制御技術を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子コンピュータ」の開発を進める。

これらの研究の途上で量子論を深く理解するための何らかのヒントが得られるかもしれない。その理解はテクノロ ジーの発展を促すだろう。我々が考えている「アト秒量子エンジニアリング」とは、量子論の検証とそのテクノロジー 応用の両方を含む概念である。

光分子科学第三研究部門

解良 聡(教授)(2014年4月1日着任)

福谷 圭祐 (助教) 下ヶ橋 龍之介 (特任助教) WONGKANYA, Ratchada (インターンシップ) 西野 史 (大学院生) PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela (大学院生) 神谷 美穂 (事務支援員)

A-1) 専門領域:表面物理学, 有機薄膜物性

A-2) 研究課題:

- a) シンクロトロン放射光・レーザー光励起による弱相互作用系の電子状態計測
- b) 配向分子薄膜の光電子放出強度の理論解析と分子軌道撮影法の開発
- c) 有機半導体薄膜の電荷輸送機構の研究
- d) 有機半導体薄膜の界面電子準位接合機構の研究
- e) 自己組織構造体の作製と分子機能の分光研究
- f) 機能性分子薄膜の振動状態と電子励起計測
- g) 低次元電子相関物質の物性機構解明

- a)機能性分子薄膜の弱相互作用による電子状態変化を計測する技術開発を進めている。弱相互作用を定量的に評価するため、蒸気圧の低い大型分子対応の気相光電子分光実験装置を開発し、分子集合による電子状態の違いに関する議論を進めている。超短パルスレーザー光を励起源とする二光子光電子分光装置を構築し、ホール緩和や励起子拡散など、電荷ダイナミクス関連の研究を進めている。UVSORではBL7Uにおける低エネルギー励起光を用いた角度分解光電子分光(ARPES)による分子界面電子状態の計測法開拓を推進しつつ、BL6Uにおける光電子運動量顕微鏡(PMM)の装置開発と分子系への最適化のためのパラメータ調整を進めている。
- b) 高配向分子薄膜からの光電子放出強度の角度依存性について、多重散乱理論による強度解析を行い、有機分子薄膜構造の定量的解析を行うための方法論を検討してきた。その後、高配向試料では広波数空間二次元分解測定が分子軌道の可視化に対応することが指摘され、新たな量子計測ツールになりうると期待されている。前述の放射光を利用した PMM 装置による高効率計測が強力である。特に単層膜界面の分子配向に依存した電子波のポテンシャル散乱と干渉問題を定量化し、局在電子系における一電子近似の限界を吟味しつつ、弱相互作用系の物理現象を議論するための新たな方法論の構築を目指している。
- c) 有機半導体のバンド分散関係:良質な配向有機結晶膜を作製し、価電子エネルギーバンド分散を測定する技術を確立した。分子間相互作用の大きさ、ホール有効質量、バンド伝導移動度の定量的評価と、分子結晶特有の物理モデルの構築を進めている。多体効果による電子構造への影響を検出し、非自明な機能開拓へ向けた研究を進めている。有機半導体結晶における振電相互作用の運動量異方性の検出に成功した。

有機半導体の電荷振動結合:配向有機超薄膜の作製により、大型の分子薄膜系における光電子スペクトルの高エネルギー分解測定を実現する方法論を開拓して、分子薄膜における伝導ホールと分子振動の結合状態を初めて実測し、ホッピング移動度(そのポーラロン効果を含む)を分光学的に得る方法を開拓した。これらの物理量を実測することで、準粒子描像に基づいた輸送機構の解明を目指している。

- d) 本質的には絶縁物である有機分子が n 型/p 型半導体として機能する起源を明らかにすべく研究を進めている。極めて高効率に光電子を捕捉し評価可能な高感度紫外光電子分光装置を開発し、バンドギャップに生じる 10ppm レベルの状態密度検出に成功した。価電子帯トップバンドの状態密度分布がガウス型から指数関数型に変化し、基板フェルミ準位まで到達している様子をとらえた。また低エネルギー逆光電子分光装置の導入により、伝導帯構造を合わせて評価することが可能となり、ドナー・アクセプター半導体分子間の弱い vdW 結合から、分子と金属原子の局所的な強い化学結合によるギャップ準位形成までを統括検討し、エネルギー準位接合機構の解明を目指している。
- e) 表面場で織り成すパイ共役分子系の超格子構造や、分子薄膜の自己組織化により発現する各種機能の解明を目指す。 新規な共有結合性有機構造体の作製、自己組織化や原子・分子捕獲などによる有機無機複合構造体の作製に挑戦している。各種分子機能の起源について解明するため、電子状態の局在性の視点で構造との相関を各種先端分光法を駆使して研究を進めている。2022 年度より、キラル分子によるスピン選択性の定量的電子構造評価に向けた高配向キラル二次元膜の研究を開始した。分子薄膜や低次元物質の電子状態を議論する上で、試料調整方法の確立が鍵である。光電子放射顕微鏡(PEEM)、走査プローブ顕微鏡(STM)、高分解能スポット解析型低速電子線回折(SPALEED)、準安定励起原子電子分光(MAES)、X線定在波法(XSW)、軟X線吸収分光(NEXAFS)等を用い、基板界面における単分子膜成長から結晶膜成長までの多様な集合状態について構造(分子配向)と成長を観察している。
- f) 低速電子エネルギー損失分光により、機能性分子薄膜の振動状態と電子励起状態を測定し、弱相互作用による振動 構造への影響を調べている。国際共同による二次元検出器を利用したフォノン分散実験を進めている。
- g) 電子が物質中の様々な準粒子と相互作用することにより発現する特異物性はその複雑性・多様性から根本起源が未解明であるものが多い。二次元 ARPES や PMM 法などの電子と準粒子の直接観測を可能とする分光法を用いて、主に励起子絶縁体や電荷密度波物質の電子物性の解明・制御を目指した研究プロジェクトの立ち上げを行なっている。

B-1) 学術論文

- T. YAMADA, S. KANAZAWA, K. FUKUTANI and S. KERA, "Growth of Transition-Metal Cobalt Nanoclusters on 2D Covalent Organic Frameworks," *J. Phys. Chem. C* 128(3), 1477–1486 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c07435
- S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," *Electron. Struct.* 5(3), 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32
- F. MATSUI, K. HAGIWARA, E. NAKAMURA, T. YANO, H. MATSUDA, Y. OKANO, S. KERA, E. HASHIMOTO, S. KOH, K. UENO, T. KOBAYASHI, E. IWAMOTO, K. SAKAMOTO, S. TANAKA and S. SUGA, "Soft X-Ray Photoelectron Momentum Microscope for Multimodal Valence Band Stereography," *Rev. Sci. Instrum.* 94(8), 083701 (2023). DOI: 10.1063/5.0154156
- Z. G. MA, Y. SHEN, K. ZHANG, L. X. CAO, H. REN, W. S. CHEN, H. X. WEI, Y. Q. LI, S. KERA and J. X. TANG, "Regulated Crystallization with Minimized Degradation for Pure-Red Lead-Free Perovskite Light-Emitting Diodes," *J. Mater. Chem. C* 11(29), 9916–9924 (2023). DOI: 10.1039/d3tc01743e

O. ENDO, F. MATSUI, S. KERA, W.-J. CHUN, M. NAKAMURA, K. AMEMIYA and H. OZAKI, "Hole Doping to Perylene on Au(110): Photoelectron Momentum Microscopy," *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* 21(3), 236–240 (2023). DOI: 10.1380/ejssnt.2023-024

B-3) 総説, 著書

解良 聡, 「有機半導体の電子構造における多体効果」, 有機半導体の開発と最新動向, 第23章 (2024).

B-4) 招待講演

- S. KERA, "Many body effects define the material properties of molecular solids," Nanospec FY2023, Okazaki (Japan), March 2024.
- **S. KERA**, "Deep insight into organic semiconductors by itinerant characteristics of the electronic structure," International conference on Materials science, engineering and technology, Singapore (Singapore), September 2023.
- **S. KERA**, "Impact of vibronic coupling on the electronic structure of organic semiconductor crystals," 41st International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics, Campinas (Brazil), July 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

VUVX(International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-Ray Physics) 真空紫外光物理およびX線物理国際会議国際諮問委員 (2014–).

SRI(International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation)シンクロトロン放射装置技術国際会議国際 諮問委員 (2018–).

AOF (Asia Oceania Forum for Synchrotron Radiation Research) アジア・オセアニア放射光研究評議会庶務委員 (2021-).

学会の組織委員等

第36回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 組織委員会委員 (2023-2024).

文部科学省,学術振興会,大学共同利用機関等の委員等

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 機関代表者 (2019-).

KEK 加速器・共通基盤研究施設運営会議委員 (2021-2024).

KEK 物質構造科学研究所運営会議委員 (2021-2024).

東京大学物性研究所附属極限コヒーレント光科学研究センター軌道放射物性研究施設運営委員会委員 (2022–2024).

科学技術交流財団あいちシンクロトロン光センター運営委員会委員 (2023-2025).

量子科学技術研究開発機構 NanoTerasu 共用ビームライン整備検討委員会委員 (2023-).

学会誌編集委員

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board (2015–).

B-8) 大学等での講義, 客員

東北大学大学院理学研究科,委嘱教授,「強相関電子物理学特論」,2020年4月-.

千葉大学大学院融合科学研究科,連携客員教授,2014年9月-.

千葉大学大学院融合科学研究科、「ナノ創造物性工学特論II | 2014年9月-

蘇州大学, 客員教授, 2014年4月-.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(S),「階層的準粒子の先端計測による可知化と分子材料研究の変革」,解良 聡 (2023 年度 -2027 年度). 科研費基盤研究(C)、「基底状態観測と物質設計に基づく定常励起子の制御」、福谷圭祐 (2022 年度-2024 年度).

C) 研究活動の課題と展望

機能性分子の高配向試料作製法と精密電子状態計測で蓄積したノウハウを集結し、分子集合体における「電子の真 の姿を見出すこと」でその機能・物性の根源を理解することを主眼とし、様々な放射光利用先端分光法や独自に開発 した分光装置群を駆使して多角的に研究を進めている。2021年度に福谷助教が着任し、低次元物性と精密計測に関 する研究力を強化した。分子結晶や界面の階層性に着目し、電子物性の多体効果問題に挑戦する。一方、UVSOR 施設長として国内コミュニティの基盤強化を推進するための利用支援に注力している。2019年度から技術開発を進 めているPMM装置について、スピン検出機能追加による第二期R&Dを開始した。松井教授らと共に多彩な計測機 能をもつ複合システムの完成を目指す。ドイツの装置開発拠点であるユーリッヒ研究所との学術協定によって、装置 開発とその利用展開についての国際共同研究を推進するとともに、国内では分子固体系のオールジャパン体制(実験 班,理論班)を構築し,戦略的に上記装置を利用した新奇実験を牽引する。2023年度後期より下ヶ橋特任助教を採 用し、科研費基盤(S)課題による研究推進を強化した。40周年記念事業を遂行し、施設長期計画として次世代研究 施設UVSOR-IV の建設に向けた準備を多面的に進めている。国内外施設およびコミュニティの意見交換と情報収集 に邁進している。

長 坂 将 成(助教)(2007年4月1日着任)

神谷 美穂 (事務支援員)

A-1) 専門領域:物理化学, 軟X線分光学

A-2) 研究課題:

- a) 軟 X 線吸収分光法による溶液の局所構造解析
- b) 軟 X 線吸収分光法の生物化学分野への展開
- c) 溶液の軟 X 線吸収分光法の低エネルギー領域への開拓
- d) 時間分解軟 X線吸収分光法によるエネルギー・電子移動のオペランド計測

- a) 2 keV 以下の軟 X線領域には炭素,窒素,酸素の K 吸収端や遷移金属の L 吸収端が存在するため,軟 X線吸収分光 (XAS) 法は溶液の局所構造を元素選択的に調べることができる有用な手法である。我々は液体層の精密厚さ制御法 (20~2000 nm) を独自に開発することで,溶液の XAS 測定を実現した。更に,XAS スペクトルのエネルギーシフト の高精度測定と量子化学に基づく内殻励起計算から,異なる元素ごとに溶液中の分子間相互作用を調べる手法を確立した。最近では、PNIPAM 高分子が純水や純メタノールでは溶解するのに対して,メタノールと水の混合溶液では溶解しなくなる,共貧性溶媒効果のメカニズムを O-K 吸収端 XAS 測定から調べた。
- b) XAS 法を生物化学分野へ展開するには、生体試料が機能を発現する状態で測定すると共に、生体試料とその周りの 溶媒分子を考慮した比較的大きな分子系での内殻励起計算が必要である。我々が開発した液体セルは実環境下で XAS 測定が行えるため、生体試料の測定に適している。現在、ミオグロビン溶液の N-K 吸収端 XAS 測定を目指して、 溶液調製を行っている。また、溶液中の生体分子の内殻励起計算を実現するために、分子動力学計算により得た複 数の分子配置を基にして、その内殻励起計算を行う方法論を開発した。これにより、液体エタノールの C-K 吸収端 XAS スペクトルが、実験で得られたスペクトル形状を良く再現することを確かめた。
- c) 200 eV 以下の低エネルギー領域には、Li, Bの K 吸収端や Si, P, S, Clの L 吸収端が存在するため、化学研究において重要である。しかしながら、低エネルギー領域では、目的の一次回折光の透過率が極端に小さくて、一次回折光の強度変化が高次回折光の寄与に埋もれてしまうため、XAS 測定は不可能であった。そこで、Si が含まれていない高分子ナノ膜を開発すると共に、液体セルを満たすアルゴン光路長を 2.6 mm にできる超薄型液体セルを開発することで、低エネルギー領域の溶液の XAS 測定の実現を目指している。最近では、高分子ナノ膜の軟 X 線透過測定を行い、Si-L 吸収端においても十分な軟 X 線透過率を示すことを実証した。
- d) 超高速レーザーと放射光から発生する軟 X線パルスを 70 ps の時間分解能で同期するシステムを構築して、溶液光化 学反応のオペランド XAS 測定を実現した。これにより、鉄フェナントロリン水溶液の N-K 吸収端 XAS スペクトル において、光励起後の高スピン状態から低スピン状態に緩和する過程の経時変化を、金属錯体の配位子の電子状態 変化から観測することに成功した。現在、異種金属錯体間での蛍光共鳴エネルギー移動や、二元分子系における光電子移動の機構解明に、時間分解 XAS 法を適用するための実験条件の検討を行っている。

B-1) 学術論文

Y. KUDO, F. KUMAKI, M. NAGASAKA, J. ADACHI, Y. NOGUCHI, N. KOGA, H. ITABASHI and M. HIYAMA,

"Experimental and Theoretical Study for Core Excitation of Firefly Luciferin in Carbon K-Edge Spectra," J. Phys. Chem. A 128(3), 611-617 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpca.3c07504

B-3) 総説, 著書

長坂将成、「軟X線吸収分光法による液体の分子間相互作用の解明」、放射光、36(4)、176-184 (2023).

B-4) 招待講演

長坂将成、「軟X線吸収分光法によるバイオ研究の現状と展望」、UVSOR シンポジウム 2023 特別企画講演「バイオ系 における光科学の展開」、岡崎、2023年12月.

M. NAGASAKA, "Chemical Processes in Solutions Probed by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy," International Symposium on X-Ray Spectroscopies of Synchrotron Radiation, Toyama (Japan), March 2024.

M. NAGASAKA, "Operando Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Observing Chemical Processes in Solutions," UVSOR-III + MAX IV International Workshop: Frontier of Soft X-Ray Spectroscopy for Chemical Processes in Solutions, Okazaki (Japan), October 2023.

M. NAGASAKA, "Time-Resolved Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Observing Photochemical Reactions in Solutions," Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment 2023 (LSC 2023), OPTICS & PHOTONICS International Congress 2023, Yokohama (Japan), April 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本放射光学会放射光 60周年記念シンポジウム現地実行委員 (2023).

UVSOR-III + MAX IV International Workshop: Frontier of Soft X-Ray Spectroscopy for Chemical Processes in Solutions, Chair (2023).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「励起キャリア移動の指向性制御による高効率光触媒表面の構築」(代表:吉田真明), 長坂将成 (研究分担者) (2021年度-2023年度).

科研費基盤研究(A)、「人工光合成をめざす半導体光触媒:オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明」(代表;大 西 洋), 長坂将成(研究分担者) (2022年度-2024年度).

科研費基盤研究(B),「難分解性有機物資源化を可能にするグラファイト担持型超強力酸化触媒活性種の開発」(代表; 山田泰之), 長坂将成(研究分担者) (2022年度-2024年度).

光源加速器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)

加 藤 政 博 (特任教授 (クロスアポイントメント*)) (2019 年 4 月 1 日着任)

石原 麻由美 (事務支援員)

加茂 恭子(事務支援員)

横田 光代(事務支援員)

*広島大学放射光科学センター

A-1) 専門領域:ビーム物理学,加速器科学,放射光科学

A-2) 研究課題:

- a) シンクロトロン光源の研究
- b) 自由電子レーザーの研究
- c) 相対論的電子ビームからの電磁放射の研究
- d) 量子ビームの発生と応用に関する研究

- a) シンクロトロン光源 UVSOR の性能向上に向けた開発研究を継続している。電子ビーム光学系の最適化による電子ビーム輝度の大幅な向上,電子ビーム強度を一定に保つトップアップ入射の導入などに成功し,低エネルギー放射光源としては世界最高水準の光源性能を実現した。高輝度放射光発生のために真空封止アンジュレータ3台,可変偏光型アンジュレータ3台を設計・建設し,稼働させた。UVSOR の将来計画に関する設計研究に着手し,既存加速器の更なる高度化の可能性を検討した後,新しい光源加速器の設計を開始し,これまでに電子エネルギー1 GeV,周長約70 m の放射光源の基礎設計を完了した。高エネルギー加速器研究機構などと連携し,持続可能な加速器の実現を目指して加速器要素技術の開発に着手した。
- b) 自由電子レーザーや関連技術に関する研究を継続している。蓄積リング自由電子レーザーとして世界最高の出力を 記録した。また、共振器型自由電子レーザーに関する基礎研究を進め、レーザー発振のダイナミクスやフィードバッ ク制御に関する先駆的な成果を上げた。外部レーザーを用いて電子パルス上に微細な密度構造を形成することでコ ヒーレント放射光を極紫外領域やテラヘルツ領域において生成する研究を継続している。この手法により一様磁場 中から準単色テラヘルツ放射光を発生することに世界に先駆けて成功した。電子パルス上に形成された密度構造の 時間発展に関するビームダイナミクス研究により先駆的な成果を上げた。
- c) 高エネルギー電子ビームによる光渦の生成に成功し、その原理の解明に世界に先駆けて成功した。自然界での光渦の生成の可能性について、研究を進めると共に、深紫外・真空紫外領域での物質系と光渦の相互作用に関する基礎研究を進めている。
- d) 外部レーザーと高エネルギー電子線を用いた逆コンプトン散乱によるエネルギー可変、偏光可変の極短ガンマ線パルス発生に関する研究を進めた。パルス幅数ピコ秒以下の超短ガンマ線パルスの生成、エネルギー可変性の実証に成功した。光陰極を用いた電子源の開発を進めた。また、これら偏極量子ビームの応用研究の開拓を進めている。

e) アンジュレータ放射光波束の時間構造に着目した研究に原子分子物理学研究者と共同で取り組み. 2 連のアンジュ レータからの自然放射を用いた孤立原子の量子状態制御に世界で初めて成功した。放射光の時間構造や干渉性の実 験的検証を進めた他、単一電子からの放射の観測など、全く新しい放射光利用法の開拓に向けた実験研究を進めて いる。

B-1) 学術論文

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," Electron. Struct. 5(3), 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

M. KATOH, H. OTA, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI, Y. OKANO, E. SALEHI, Y. TAIRA, A. MANO, M. FUJIMOTO, Y. TAKASHIMA, M. HOSAKA, F. SAKAMOTO, T. KANEYASU and H. ZEN, "Light Source Developments at UVSOR BL1U," J. Phys.: Conf. Ser. 2687, 032005 (2024). DOI: 10.1088/1742-6596/2687/3/032005

E. SALEHI and M. KATOH, "Bayesian Optimization of the Dynamic Aperture in UVSOR-IV Design Study," J. Phys.: Conf. Ser. 2687, 032030 (2024). DOI: 10.1088/1742-6596/2687/3/032030

S. WADA, H. OHTA, A. MANO, Y. TAKASHIMA, M. FUJIMOTO and M. KATOH, "Young's Double-Slit Experiment with Undulator Vortex Radiation in the Photon-Counting Regime," Sci. Rep. 13, 22962 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-49825-4

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, S. WADA, H. KOHGUCHI, H. OTA, E. NAKAMURA, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, M. HOSAKA and M. KATOH, "Frequency-Domain Interferometry for the Determination of Time Delay between Two Extreme-Ultraviolet Wave Packets Generated by a Tandem Undulator," Sci. Rep. 13, 10292 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-37449-7

E. SALEHI, M. HOSAKA and M. KATOH, "Time Structure of Undulator Radiation," J. Adv. Simulat. Sci. Eng. 10(1), 164-171 (2023). DOI: 10.15748/jasse.10.164

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, S. WADA, M. FUJIMOTO, H. OTA, H. IWAYAMA and M. KATOH, "Time Domain Double Slit Interference of Electron Produced by XUV Synchrotron Radiation," Sci. Rep. 13, 6142 (2023). DOI: 10.1038/ s41598-023-33039-9

B-4) 招待講演

M. KATOH, "Spatiotemporally structured synchrotron radiation," SPIE Nanoscience + Engineering 2023, UV and Higher Energy Photonics: From Materials to Applications 2023, San Diego (USA), August 2023.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本加速器学会評議員 (2020-).

日本放射光学会評議員 (2022-).

文部科学省,学術振興会,大学共同利用機関等の委員等

高エネルギー加速器研究機構教育研究評議会評議員 (2021-2023).

高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設運営委員 (2018-).

B-8) 大学等での講義, 客員

名古屋大学シンクロトロン光研究センター, 客員教授, 2018年4月-. 高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設, 客員教授, 2018年4月-. 核融合科学研究所, 客員教授, 2022年4月-.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究(萌芽),「広帯域インコヒーレント放射光の可干渉性を利用する革新的光技術の探索」,加藤政博 (2022 年度-2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR は 2000 年以降の継続的な高度化により,低エネルギーのシンクロトロン光源としては世界的にも最高レベルの性能に到達したが,国内外では新しい光源の建設稼働が相次ぎ,更なる競争力の向上が求められている。現在の加速器の更なる高度化の可能性を検討した結果,現在の性能を大幅に上回る高度化改造は困難であると結論づけ,新規に回折限界を目指す光源加速器の建設について検討を進めている。基礎設計は概ね完了し,概念設計レポートの作成を行った。今後は詳細設計レポートの作成を進める。また,高エネルギー加速器研究機構や名古屋大学シンクロトロン光研究センター,広島大学放射光科学研究センターなどと連携し,持続可能な加速器施設を目指した省エネルギー化や運転の自動化などを念頭に,次期光源に必要とされるハードウエア技術開発を進める。

高エネルギー自由電子を用いた光発生として、自由電子レーザーやレーザーコンプトン散乱ガンマ線、コヒーレントシンクロトロン放射の発生法の開発や高度化、それらの利用法の開拓に取り組んできた。最近では光子の時空間構造やその干渉性の実験的検証やその利用法の開拓に挑戦している。放射光による光渦の生成、さらに放射光光渦同士の合成によるベクトルビーム発生など、UVSORの研究環境を活用して世界に先駆けた研究ができた。また、二連アンジュレータから放射される光子の時間構造を利用した量子状態制御について先駆的な成果が出ている。相対論的自由電子からの電磁放射の時空間構造の制御とその応用というこれまで全く着目されていなかった領域を切り拓きつつあり、引き続き基礎研究を進めるとともに幅広く応用展開の可能性を探っていきたい。

電子ビーム制御研究部門(極端紫外光研究施設)

平 義 隆 (准教授) (2020年4月1日着任)

小澤 舜ノ介(特別共同利用研究員)

塩原 慧介(特別共同利用研究員)

脇田 幸哉(特別共同利用研究員)

石原 麻由美 (事務支援員)

加茂 恭子(事務支援員)

横田 光代(事務支援員)

A-1) 専門領域:ガンマ線計測, 陽電子計測, 光渦計測

A-2) 研究課題:

- a) 超短パルスガンマ線の発生と利用研究
- b) 軸対称偏光レーザーを用いたガンマ線の発生と計測技術開発

- a) 世界の放射光施設でも UVSOR の独自技術である超短パルスガンマ線を用いた陽電子消滅分光法によるバルク材料の原子スケール欠陥分析に関する研究である。超短パルスガンマ線は、フェムト秒レーザーと 750MeV 電子ビームの 90 度衝突逆トムソン散乱によって発生し、そのパルス幅はサブピコ秒からピコ秒オーダーである。この超短パルス性とバックグラウンドの低さを活かしたガンマ線の利用研究として、陽電子消滅分光法による材料中の欠陥分析をユーザーに提供している。陽電子は、対生成と呼ばれる現象によって材料内部でガンマ線から発生し、材料中の欠陥に捕獲される。欠陥の大きさによって陽電子の寿命が変化するために、陽電子寿命を測定することで材料中の欠陥を非破壊で分析することができる。さらに、ガンマ線は物質に対する透過率が高いために厚さ数 cm のバルク材料の欠陥分析を行うことが可能である。陽電子寿命測定法のユーザー利用が現在行われており、放射性同位元素から発生する陽電子を直接試料に照射する従来の方法では実施困難な金属材料の応力負荷及び水素脆化時の欠陥形成のその場測定手法の開発を進めている。応力負荷時の測定については論文の執筆を開始している。また、逆トムソン散乱では、円偏光レーザーを使うことで円偏光ガンマ線が発生する。円偏光ガンマ線の円偏光度はガンマ線ピームの断面で一様ではなく、散乱角度によって変化する。原子力機構、量研機構、名古屋大学、及び京都大学の研究者らと共同で磁気コンプトン散乱を用いたガンマ線の偏光測定を行った。理論計算通り、ガンマ線の散乱角によって偏光が変化することを実測することができた。この結果を論文にまとめ Phys. Rev. A に発表した。一方で、パルスではない連続ガンマ線を用いたユーザー利用も行っており、ユーザー執筆の論文が発表された。
- b) 本研究課題では、特殊な偏光状態であるラジアル偏光やアジマス偏光の軸対称偏光レーザーを用いた逆トムソン散乱によって発生するガンマ線の偏光分布を明らかにする。直線偏光及び円偏光レーザーを用いると、直線偏光及び円偏光のガンマ線が発生する事は既に実験的に確かめられているが、軸対称偏光レーザーを使用した場合にどのような偏光状態のガンマ線が発生するのかは理論的にも実験的にも確認されていない。軸対称偏光レーザーは、Altechna 社の S-waveplate を用いて直線偏光のレーザーから変換する。最初の実験として、ガンマ線の空間分布を 2次元検出器(AdvaPIX TPX3)で測定した。軸対称偏光レーザーを用いると、直線偏光及び円偏光のガンマ線とは異

なる空間分布になることが確認された。今後、ガンマ線の偏光分布の測定手法の開発を進める。具体的には、直径 1 mm の鉛コリメータを用いて空間的に広がったガンマ線の一部を切り出し、鉄ターゲットに照射する。ガンマ線が直線偏光の場合、コンプトン散乱ガンマ線の断面積が方位角方向に変化し、偏光軸に対して 90 度方向に散乱されるガンマ線の割合が高い。そのため、ガンマ線検出器を方位角方向に複数配置し、散乱ガンマ線の方位角分布を測定する事でガンマ線偏光軸を測定できる。現在シミュレーションを進めており、検出器の固定治具を製作した後に実験を行う。

B-1) 学術論文

H. OHGAKI, K. ALI, T. KII, H. ZEN, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, M. FUJIMOTO and Y. TAIRA, "Generation of Flat-Laser Compton Scattering Gamma-Ray Beam," *Phys. Rev. Accel. Beams* **26**, 093402 (2023). DOI: 10.1103/physrevaccelbeams.26.093402

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," *Electron. Struct.* 5(3), 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

Y. TAIRA, S. ENDO, S. KAWAMURA, T. NAMBU, M. OKUIZUMI, T. SHIZUMA, M. OMER, H. ZEN, Y. OKANO and M. KITAGUCHI, "Measurement of the Spatial Polarization Distribution of Circularly Polarized Gamma Rays Produced by Inverse Compton Scattering," *Phys. Rev. A* 107(6), 063503 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevA.107.063503 平 義隆、「UVSOR-III におけるガンマ線誘起陽電子消滅分光法の開発」、*陽電子科学*、20、3 –9 (2023).

B-4) 招待講演

Y. TAIRA, "Development of gamma-ray-induced positron annihilation spectroscopy at UVSOR-III," 16th International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (SloPos-16), Orleans (France), July 2023.

B-6) 受賞, 表彰

平 義隆, 日本陽電子科学会奨励賞 (2023).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

ビーム物理研究会 若手の会 幹事 (2020-).

日本加速器学会組織委員 (2022-2023).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2018年9月-.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B) (一般),「超短パルスガンマ線を用いた陽電子寿命運動量相関測定法の開発と利用研究の推進」, 平 義隆 (2021年度-2023年度).

194 研究活動の現状

C) 研究活動の課題と展望

陽電子消滅分光法に関しては、陽電子寿命測定法と寿命運動量相関測定法に加えて、同時計数ドップラー拡がり法 やスピン偏極陽電子の発生と計測技術開発を行い、分析技術の拡充を図る。計算上はパルス幅数ピコ秒のガンマ線 が発生していると考えられるが、超短パルスガンマ線のパルス幅計測手法の開発も行う。軸対称偏光レーザーを用 いたガンマ線発生に関しては、ガンマ線の偏光分布の測定技術を開発する。

光物性測定器開発研究部門(極端紫外光研究施設)

松 井 文 彦 (主任研究員) (2018年4月1日~2021年11月15日) (教授) (2021年11月16日昇任)

萩原 健太 (特任研究員 (IMS フェロー)) 松田 博之 (特任研究員) 大門 寛 (研究員) 佐々葉 遼平 (特別共同利用研究員) 石原 麻由美 (事務支援員) 加茂 恭子 (事務支援員) 横田 光代 (事務支援員)

A-1) 専門領域:表面物性物理学,電子分光計測技術,放射光科学

A-2) 研究課題:

- a) 電子分光装置・マルチモーダルスピン分析器の新規開発を突破口とした UVSOR の高度化
- b) 運動量分解光電子分光に関する新規現象を基盤とした測定手法確立
- c) 新奇表面電子物性・化学特性・スピン科学の応用展開
- d) 諸分光手法の融合による電子状態計測データベース構築と利用コミュニティーの開拓

- a) ① UVSOR オリジナルの Momentum Microscope (MM) 拠点構築を主務とする。MM は空間・波数空間・エネルギーの幅広い範囲での高分解能測定を可能にするユニークな分析器である。電子物性研究に適した VUV/EUV 領域での高強度・可偏光などといった UVSOR の光源特性を活かした測定機能を実装する MM の導入を実現し、論文・プレスリリースを通じて成果発信を続けている。②並行して全天球電子レンズ及び電子エネルギー・スピン分析器を考案し国際特許出願した。上記の MM は 3 Å⁻¹ までの波数空間の一括測定ができるため価電子帯研究で有効な運動エネルギー 36 eV 以下の領域では全天球をカバーすることができるが、原子配列を研究するのに有効な運動エネルギー 500 eV 以上の領域ではせいぜい 15° の領域でしかない。新規分析器は 2 keV でも全天球の放出光電子を取り込むことができ、後段のスピン偏向器でスピンの 3 次元ベクトル解析ができるようになる。①は high-end 型価電子帯光電子分光装置、②は内殻光電子ホログラフィー測定装置である。両者を融合させ、スピン 3 次元ベクトル解析を実・逆空間で自在にマッピングできる唯一無二の装置を構築する。
- b) 物性評価に適した光波長帯の連続的なエネルギー可変性が UVSOR の最大の特徴である。BL6U は軟 X 線領域(45–700 eV)をカバーする直線偏光ビームラインである。③分子科学で重要となる CNO 吸収端の光を用い,元素選択的な共鳴励起によって価電子帯の原子軌道構成を解明できる共鳴光電子分光の実験を成功させた。特に,吸収端にてグラファイトの π バンドが選択的に励起される様子を波数空間上で可視化したが,共鳴 Auger 電子スペクトルに価電子帯分散が重なる現象の発見は重要である。グラフェンから π 共役系分子への展開に歩を進め,お家芸としての共鳴光電子回折法を確立しつつある。本年は「運動量分解光電子顕微鏡法」を新たに確立しグラファイトの単原子層ステップの可視化に成功し,プレスリリースを行った。④光エネルギー可変性を活かした k_c 分散測定による全

Brillouin 域価電子帯分散マッピングや偏光特性を活かした原子軌道波動関数解析技術は BL6U での共同研究推進の基盤であるが、さらに精緻な測定を行い、表面特有の電子状態や現象の情報を引き出す研究展開を進めている。

- c) BL7U は真空紫外領域(6-40 eV)をカバーする偏光可変ビームラインである。ブランチ化を行い、新たに PMM に直入射配置で導入することに成功した。軟 X線の照射位置と同じ場所で真空紫外光による全立体角光電子分光を行うことができる。特にバンドを構成する原子軌道の対称性を直接的に解析することができる新しい手法の展開が始まった。二つのアンジュレータ光源を駆使する包括的な光電子分光ステーションの構築が実現した。この直入射配置を活用した PMM 展開について解説した論文が受理された(プレスリリース準備中)。高対称の光励起実験が可能となり、価電子帯を構成する原子軌道の情報が得られること、および解析で問題となる散乱現象の見分け方を早速実証実験で示すことに成功した(2024.01 放射光学会にて発表)。
- d) 光電子回折・分光を用いて典型的な高温超伝導体 Bi2212 や代表的層状物質 TaSe2, TiSe2 の相転移前後の電子状態をとらえた。graphite 表面の単原子ステップの顕微像の撮影に成功した(Phys. Rev. B 2022)は大きな前進である。新たに確立した顕微 ARPES/ARPES 顕微法の論文(J. Phys. Soc. Jpn. 2022)および(Rev. Sci. Instrum. 2023)は両方とも Editor's Choice に選定された。劈開試料表面の局所部分の精密分析の成功は今後の共同研究を呼び込む重要な成果である。共同研究先から Ir 単結晶薄膜の電子状態評価の依頼を受け、バンド分散の測定に成功した。この薄膜は新しいスピン 2 次元フィルターとして有望な材料であり、上記で述べたスピン 3 次元ベクトル解析への応用展開につながるものである。

B-1) 学術論文

T. UCHIYAMA, H. GOTO, E. UESUGI, A. TAKAI, L. ZHI, A. MIURA, S. HAMAO, R. EGUCHI, H. OTA, K. SUGIMOTO, A. FUJIWARA, F. MATSUI, K. KIMURA, K. HAYASHI, T. UENO, K. KOBAYASHI, J. AKIMITSU and Y. KUBOZONO, "Semiconductor–Metal Transition in Bi₂Se₃ Caused by Impurity Doping," *Sci. Rep.* 13(1), 537 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-27701-5

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," *Electron. Struct.* 5(3), 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

F. MATSUI, K. HAGIWARA, E. NAKAMURA, T. YANO, H. MATSUDA, Y. OKANO, S. KERA, E. HASHIMOTO, S. KOH, K. UENO, T. KOBAYASHI, E. IWAMOTO, K. SAKAMOTO, S. TANAKA and S. SUGA, "Soft X-Ray Photoelectron Momentum Microscope for Multimodal Valence Band Stereography," *Rev. Sci. Instrum.* **94(8)**, 083701 (2023). DOI: 10.1063/5.0154156

O. ENDO, F. MATSUI, S. KERA, W.-J. CHUN, M. NAKAMURA, K. AMEMIYA and H. OZAKI, "Hole Doping to Perylene on Au(110): Photoelectron Momentum Microscopy," *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* 21(3), 236–240 (2023). DOI: 10.1380/ejssnt.2023-024

B-4) 招待講演

松井文彦,「光電子運動量顕微鏡による電子状態研究:『観察・ミル』から『解明・ワカル』へ」, 2023 年度物質科学研究討論会, 土岐, 2024年 3 月.

松井文彦,「放射光研究の最近の動向 光電子分光法を中心に」,R026先端計測技術の将来設計委員会第12回研究会,東京,2023年6月.

B-5) 特許出願

US2024-0047190, "Electrostatic Deflection Convergence-Type Energy Analyzer, Imaging-Type Electron Spectroscopic Device, Reflecting Imaging-Type Electron Spectroscopic Device, And Spin Vector Distribution Imaging Device," H. MATSUDA and F. MATSUI (National Institutes of Natural Sciences), 2021年.

4170694, "Electrostatic Deflection Convergence-Type Energy Analyzer, Imaging-Type Electron Spectroscopic Device, Reflecting Imaging-Type Electron Spectroscopic Device, And Spin Vector Distribution Imaging Device," H. MATSUDA and F. MATSUI (National Institutes of Natural Sciences), 2021年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会理事 (2021.5-2023),協議員 (2023-2025).

日本放射光学会庶務幹事 (2021.9-2023).

学会の組織委員等

表面構造に関する国際学会 ICSOS 国際アドバイザー委員 (2017-).

文部科学省,学術振興会,大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会R026先端計測技術の将来設計委員会運営委員 (2019-).

学会誌編集委員

日本表面真空学会出版委員(2013-).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「全角取り込み光電子分光法の開発」, 松田博之 (2021年度-2025年度).

科研費挑戦的研究(開拓),「ドーパントの価数ごとの立体原子配列を観測する小型測定装置の研究」(代表:松下智裕), 松井文彦(研究分担者)(2021年度-2025年度).

B-11) 産学連携

共同研究, SPECS Surface Nano Analysis GmbH, 「Development of 2D-projection analyzers」, 松井文彦 (2022年度-2024年度).

共同研究, 三菱ケミカル (株), 松井文彦 (2020年度-).

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR 型 Momentum Microscope (MM) 利用研究を推進する。顕微角度分解光電子分光, 共鳴光電子分光, 3D 波数空間分解光電子分光法を協力研究に供するとともに自身の表面物性科学研究を進める。軟 X 線ビームラインと VUV ビームライン両方を同時に MM に導く two-beam MM 実験ステーションの構築に成功した。2023 年度は両方での運用が始まった。現在 2D スピンフィルタの最適化を進め,両ビームラインを利用したスピンを含めた電子状態解析環境の構築を進めている。基礎研究として磁性薄膜・キラル分子膜の電子状態・原子構造研究を進める。

MM 開発の先駆者がいる Forschungszentrum Jülich (FZJ) の電子物性部門 (PGI-6) と学術協定を結び、表面電子物性 の共同研究を進めてきたおかげで、UVSORでもMMが順調に立ち上がった。時間分解型のMM 開発を進めるドイツ・ DESY のM. Hoesch らとも共同研究を密にし、こちらからスピン研究に関して相手から時間分解測定法に関して経験 技術交流を進めている。本装置を活かした実験を積極的に進めるユーザーコミュニティ構築のための第1回(2019)・ 第 2回 (2020.10) 国際ワークショップ・第 3回 (2022.10) 国際会議特別セッション共催, 第 4回 (2023.7) 分子研研究会 と継続的に開催し、東アジア圏でのMM 開発グループの萌芽のネットワークが密になった。今年はDESY にて招待 講演を行った。UVSOR の国内外からのビジビリティを高めるとともに、他のビームラインにも先端拠点を目指す機 運と風土の定着を活動指針として進めている。

各種分光研究で取得されるデータを有効活用するためのデータフォーマット策定や公開のためのインフラつくりの重 要性が近年認識されてきている。多量のデータを協力研究の研究者と共同で解析するために、データ解析ソフトや 手法の整備を進めている。学会(放射光学会),産学連携委員会(R026先端計測),計測コミュニティー(XAFS)な どでデータフォーマット整備の活動に加わっている。UVSOR 放射光利用を産業界を含めた広い潜在的ユーザーに拡 大する機会ととらえている。

田 中 清 尚(准教授)(2014年4月1日着任)

ZHU, Yupeng (特別訪問研究員)

小山 正太郎 (特別共同利用研究員)

三田 愛也 (特別共同利用研究員)

河野 健人(特別共同利用研究員)

增田 圭亮 (特別共同利用研究員)

石原 麻由美 (事務支援員)

加茂 恭子(事務支援員)

横田 光代(事務支援員)

A-1) 専門領域:物性物理学, 放射光科学

A-2) 研究課題:

- a) 新規スピン分解角度分解光電子分光装置の開発
- b) 高温超伝導体の電子状態の解明
- c) UVSOR ビームラインの高精度化

- a) UVSOR BL5Uでは高効率スピン分解角度分解光電子分光測定の開発を進めている。これまで試料の面内 1 軸方向ではあるが Au(111) 表面バンドのラッシュバ分裂をスピン分解してイメージスペクトルを取得することに成功し、運動量空間分解能や検出効率なども既存システムを大きく上回ることも確認できている。ただし、測定時には頻繁にスピンターゲットの磁化操作をする必要があり、このままではユーザー利用を開始することは困難であることが判明した。スピンターゲットの磁化操作を不要とするために、スピンの向きをあらゆる方向に変更できるスピンマニピュレータを導入したが、スピンマニピュレータのパラメータ整備が必要となっている。2023 年度にこれまで整備された 1 軸方向に加えて、特定の励起光エネルギーのみではあるがもう 1 軸の整備をした。その結果、試料面内方向の完全なスピン情報を得ることができるようになり、Au(111)のフェルミ面において、直行する 2 軸方向のスピン成分が連続的に変化する様子の観測に成功した。
- b) UVSOR BL7Uにおいて、銅酸化物高温超伝導体 Bi2213 の角度分解光電子分光測定を行った。超伝導転移温度の上下でのスペクトルを比較することで、超伝導によるスペクトラルウェイト変化の運動量空間依存性とホール濃度依存を導出することに成功した。これまで長い間有効とされてきたフェルミアーク描像を否定する結果が得られており、高温超伝導が超伝導ギャップよりも超流動密度に強く影響を受けていることを示唆している。
- c) 放射光のビームラインでは使用する励起光エネルギーを設定したときに、毎回エネルギーとビームスポット位置が再 現されることが、高精度な実験、あるいは測定の自動化を実現する上で欠かせない。BL5Uでは励起光スキャン、空 間スキャンプログラムなど早くから測定の自動化に取り組んできたが、エネルギーの再現性があまりよくないことが 問題となっていた。そこでレイトレースシミュレーションも駆使しながら、再現性を悪化させる原因を調査する実験 を行ったところ、回折格子の角度制御において、機械的な動作の問題があることが判明した。そこでこの問題を回 避するための特別なモーター制御を開発・導入し、再現性を確保することに成功した。今後は同様の整備を他の光 電子ビームライン(BL7U)でも予定している。

B-1) 学術論文

P. RAN, B. LIN, C. HONG, B. WANG, X. XIE, C. JIANG, K. TANAKA and R. H. HE, "Observation of Novel In-Gap States on Alkali Metal Dosed Ti₂O₃ Film," J. Appl. Phys. 135(9), 095303 (2024). DOI: 10.1063/5.0191245

R. NAKAZAWA, A. MATSUZAKI, K. SHIMIZU, I. NAKAMURA, E. KAWASHIMA, S. MAKITA, K. TANAKA, S. YASUNO, H. SATO, H. YOSHIDA, M. ABDI-JALEBI, S. D. STRANKS, S. TADANO, P. KRÜGER, Y. TANAKA, H. TOKAIRIN and H. ISHII, "Reliable Measurement of the Density of States Including Occupied In-Gap States of an Amorphous In-Ga-Zn-O Thin Film via Photoemission Spectroscopies: Direct Observation of Light-Induced In-Gap States," J. Appl. Phys. **135(8)**, 085301 (2024). DOI: 10.1063/5.0185405

Y. P. ZHU, X. CHEN, X. R. LIU, Y. LIU, P. LIU, H. ZHA, G. QU, C. HONG, J. LI, Z. JIANG, X. M. MA, Y. J. HAO, M. Y. ZHU, W. LIU, M. ZENG, S. JAYARAM, M. LENGER, J. DING, S. MO, K. TANAKA, M. ARITA, Z. LIU, M. YE, D. SHEN, J. WRACHTRUP, Y. HUANG, R. H. HE, S. QIAO, Q. LIU and C. LIU, "Observation of Plaid-Like Spin Splitting in a Noncoplanar Antiferromagnet," Nature 626(7999), 523-528 (2024). DOI: 10.1038/s41586-024-07023-w T. ITO, T. OUISSE, M. MITA, K. TANAKA, L. JOUFFRET, H. PAZNIAK and S. QUESSADA, "Electronic Structure of the Surface States of the Zr₃SnC₂ MAX Phase," Phys. Rev. B 108(23), 235145 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.108.235145 T. NAKAMURA, H. SUGIHARA, Y. CHEN, R. YUKAWA, Y. OHTSUBO, K. TANAKA, M. KITAMURA, H.

KUMIGASHIRA and S. KIMURA, "Two-Dimensional Heavy Fermion in a Monoatomic-Layer Kondo Lattice YbCu₂," Nat. Commun. 14(1), 7850 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-43662-9

A. HONMA, D. TAKANE, S. SOUMA, K. YAMAUCHI, Y. WANG, K. NAKAYAMA, K. SUGAWARA, M. KITAMURA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, K. TANAKA, T. K. KIM, C. CACHO, T. OGUCHI, T. TAKAHASHI, Y. ANDO and T. SATO, "Antiferromagnetic Topological Insulator with Selectively Gapped Dirac Cones," Nat. Commun. 14(1), 7396 (2023). DOI: 10.1038/s41467-023-42782-6

K. YANAGIZAWA, K. SUGAWARA, T. KAWAKAMI, R. ANDO, K. YAEGASHI, K. NAKAYAMA, S. SOUMA, K. TANAKA, M. KITAMURA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI and T. SATO, "Switching of Charge-Density Wave by Carrier Tuning In Monolayer TiTe2," Phys. Rev. Mater. 7(10), 104002 (2023). DOI: 10.1103/ PhysRevMaterials.7.104002

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," Electron. Struct. 5(3), 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

M. HORIO, X. PEIAO, M. MIYAMOTO, T. WADA, K. ISOMURA, J. OSIECKI, B. THIAGARAJAN, C. M. POLLEY, K. TANAKA, M. KITAMURA, K. HORIBA, K. OZAWA, T. TANIGUCHI, M. FUJITA and I. MATSUDA, "Influence of Oxygen Coordination Number on the Electronic Structure of Single-Layer La-Based Cuprates," Phys. Rev. B 108(3), 035105 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.108.035105

H. TANAKA, A. V. TELEGIN, Y. P. SUKHORUKOV, V. A. GOLYASHOV, O. E. TERESHCHENKO, A. N. LAVROV, T. MATSUDA, R. MATSUNAGA, R. AKASHI, M. LIPPMAA, Y. ARAI, S. IDETA, K. TANAKA, T. KONDO and K. KURODA, "Semiconducting Electronic Structure of the Ferromagnetic Spinel HgCr₂Se₄ Revealed by Soft-X-Ray Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy," Phys. Rev. Lett. 130(18), 186402 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevLett.130.186402

C. HONG, W. ZOU, P. RAN, K. TANAKA, M. MATZELLE, W.-C. CHIU, R. S. MARKIEWICZ, B. BARBIELLINI, C. ZHENG, S. LI, A. BANSIL and R.-H. HE, "Anomalous Intense Coherent Secondary Photoemission from a Perovskite Oxide," *Nature* 617, 493–498 (2023). DOI: 10.1038/s41586-023-05900-4

B-4) 招待講演

K. TANAKA, "Angle-resolved photoemission study in UVSOR synchrotron radiation," International Workshop on Advanced Spectroscopy in Materials Science, Jinhua (China), November 2023.

K. TANAKA, "Development of spin-resolved ARPES at UVSOR," MBS Workshop 2023, Norrtälje (Sweden), June 2023.

C) 研究活動の課題と展望

開発中のスピン分解ARPESシステムは、目標としていたイメージでのスピン分解スペクトルの取得に成功し、運動量空間分解能や検出効率なども既存システムを大きく上回ることも確認できている。ユーザー利用を目指して、スピンの向きをあらゆる方向に変更できるスピンマニピュレータを導入したが、電子レンズ系のパラメータ整備に時間がかかっている。xyz 軸のうち 2 軸まで整備が完了しつつあるが、できるだけ早期にパラメータの整備を完了してユーザー利用開始を目指す予定である。

光化学測定器開発研究部門(極端紫外光研究施設)

暢(主任研究員)(2023年1月1日着任)

石原 麻由美 (事務支援員)

加茂 恭子(事務支援員)

横田 光代(事務支援員)

A-1) 専門領域:放射光科学

A-2) 研究課題:

- a) 軟 X 線吸収分光を基礎とした生命科学へのアプローチ
- b) 液中観察のためのX線分光顕微鏡と試料環境開発
- c) 夾雑環境生体試料の定量化学状態マッピング

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 軟X線吸収分光を基礎とした生命科学へのアプローチ; UVSOR の次期計画を念頭に, 既存の軟X線ビームラインを 利用したトライアルとして、以下の2つの試料システムについて Scanning Transmission X-ray Microscopy (STXM) による実験を行った。

光合成タンパク質の超複合体の測定を行い、鉄のL吸収端X線吸収スペクトル(XAS)において十分なレベルの信 号を検出でき、スペクトルを正しく測定できることを確認したが、マンガンについては限られたビームタイム内では 検出できなかった。更に実験を行い、鉄およびマンガンの共鳴X線散乱の実験に繋げたいと考えている。

極限環境下で乾眠することが知られているクマムシについて、その微視的解剖学の観点から、樹脂に包埋した超薄 切片試料について STXM 観察を行った。炭素、窒素、酸素の K 吸収端ではエネルギーを変化させる(特定の吸収 構造に合わせる)ことでオルガネラに対応すると思われる微細構造が観察され、Scanning Electron Microscopy (SEM) で観察された構造にほぼ対応していることを確認した。今後、相補的な観点で用いる SEM との対比などを共同研究 者と議論し、① STXM でしか見えない構造があるのか? ② SEM で観察されている構造の特定に STXM が寄与で きるか? といったことを明らかにし、研究を進めたい。

X線のコヒーレンスを生かしたイメージングについて現在の UVSOR および次期リングでの実現を検討するために. 先行する海外施設での装置見学および実験を年度末に行い、計画を立案する。

b) 液中観察のためのX線分光顕微鏡と試料環境開発; Diamond Light Source において硬X線顕微分光によって液中セ ルを使ったバクテリアに金ナノ粒子が担持されたポリマー粒子を添加した試料の観察を行った。金の酸化状態を XAS スペクトル測定から決定した。今後、軟X線領域での STXM でも同様の試料の観察を計画している。 Transmission Electron Microscopy (TEM) 用に開発されたセルを利用した実験であり、今後の STXM 実験の参考に なるものであった。TEM 用の液体セルの活用または、独自セルの開発の2つの観点で計画を進める。試料自体を走 査する STXM の場合,液中セル自体を揺さぶることになるため,今後,集光 X線の走査または結像型による試料を 固定した状態での測定を模索する。また、液体エタンなどを冷媒に用いた急速凍結による試料準備のオプションも 併せて検討する。

c) 夾雑環境生体試料の定量化学状態マッピング; 実際の細胞中の測定について, 軟 X 線を使って行うことの実現性と他の手法と比べた利点を検討するため, 様々な試料システムについて岡崎 3 機関や外部の共同研究者と議論を行ってきた。来年度からはバイオプロジェクトして UVSOR のビームタイムを確保し, フィージビリティ研究を STXM や共鳴散乱法を使って行う計画である。細胞中の「夾雑環境」で, これまで高分子研究や皮膚への薬剤の浸透などで発揮された化学状態弁別性とメソスケールの空間分解能を生かした定量分析をどう実現するかを検討する。軟 X 線と組み合わせる手法の選択が重要となる。

B-1) 学術論文

C. VOLLMER, D. KEPAPTSOGLOU, J. LEITNER, A. B. MOSBERG, K. EL HAJRAOUI, A. J. KING, C. L. BAYS, P. F. SCHOFIELD, T. ARAKI and Q. M. RAMASSE, "High-Spatial Resolution Functional Chemistry of Nitrogen Compounds in the Observed UK Meteorite Fall Winchcombe," *Nat. Commun.* 15(1), 778 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-45064-x E. HARDING, T. ARAKI, J. ASKEY, M. HUNT, A. VAN DEN BERG, D. RAFTREY, L. ABALLE, B. KAULICH, E.

MACDONALD, P. FISCHER and S. LADAK, "Imaging the Magnetic Nanowire Cross Section and Magnetic Ordering within a Suspended 3D Artificial Spin-Ice," *APL Mater.* **12(2)**, 021116 (2024). DOI: 10.1063/5.0176907

K. EUSTERHUES, J. THIEME, S. NARVEKAR, T. ARAKI, M. KAZEMIAN, B. KAULICH, T. REGIER, J. WANG, J. LUGMEIER, C. HÖSCHEN, T. MANSFELDT and K. UWE TOTSCHE, "Importance of Inner-Sphere P-O-Fe Bonds in Natural and Synthetic Mineral-Organic Associations," *Sci. Total Environ.* **905**, 167232 (2023). DOI: 10.1016/j. scitotenv.2023.167232

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," *Electron. Struct.* 5(3), 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

B-4) 招待講演

T. ARAKI, "UVSOR BL4U STXM Beamline: Status and Future Outlook," UVSOR-III + MAX IV International Workshop Frontier of Soft X-Ray Spectroscopy for Chemical Processes in Solutions, Okazaki, 2023年10月.

荒木 暢, 「Soft X-Ray Spectromicroscopy: Current Status and Future Perspectives」, 第 15 回日本放射光学会若手研究会 「放射光と顕微鏡技術・機械学習との交差点」、吹田市, 2023年 9月.

B-8) 大学等での講義, 客員

Diamond Light Source, Visiting Scientist, 2023年-.

岩 山 洋 士(助教)(2010年4月1日着任)

石原 麻由美 (事務支援員)

加茂 恭子(事務支援員)

横田 光代(事務支援員)

A-1) 専門領域: 軟 X 線構造解析, 軟 X 線顕微鏡法, ソフトマター, X 線非線形光学

A-2) 研究課題:

- a) 軟 X 線共鳴散乱法によるソフトマターのメゾスコピック構造解析
- b) 密着型軟 X 線顕微鏡法による生体試料の XAFS イメージング
- c) X線自由電子レーザーを用いた溶液表面における二次高調波発生による化学状態分析

- a) 高分子、液晶、コロイドなどのソフトマターは、メゾスコピック領域に特徴的な構造を持ち、多くの物性はその構造に由来する。偏光顕微鏡などで観察できない数 nm から数 100nm 程度のメゾスコピック領域の構造をしらべる手法として、X線小角散乱法が用いられ、多くの成果が挙げられている。しかしながら、X線小角散乱は試料の電子密度の変調に対して敏感であるが、電子密度の近い多成分系における特定の成分の構造や、ねじれ構造などの観測は難しい。X線共鳴過程を用いることで元素・分子種・分子配向に選択制を有する散乱光をえることができる。しかしソフトマターの主成分である軽元素(炭素、窒素、酸素など)のX線共鳴エネルギーは、0.1 eV~1 keV の軟 X線領域であり、X線小角散乱法で使用する 10 keV 程度のX線とは一致しない。そのため、我々は軟 X線領域の共鳴散乱光を観測できるための手法(共鳴軟 X線散乱法)を行っている。我々は UVSOR のビームライン BL3U において、共鳴軟 X線散乱装置の開発し、高分子や液晶の構造解析を行っている。本年度は、炭素、窒素、酸素の K 殻吸収端の内殻共鳴に相当する軟 X線を用いて、エポキシ樹脂の架橋構造の解析や、多成分系の有機薄膜の成分ごとの解析、キラル液晶のモルフォロジーの解析を行った。また、放射光施設 Photon Factory との共同研究開発事業にも参画し、より高機能な共鳴軟 X線散乱装置の開発を進め、真空漕の組み上げおよび検出器の動作試験を行った。
- b) 2023 年度より、軟 X 線による生体試料の可視化を実現すべく密着型軟 X 線顕微鏡の開発を始めた。本研究では、口腔上皮細胞の炭素 K 殻吸収端領域の密着型 X 線顕微鏡による XAFS イメージングを行った。露光時間 10 秒で、光エネルギー 280 eV ~ 320 eV まで 0.1 eV 刻みで 400 枚撮像した。画像のエネルギー依存性を調べることで、画素 1 pixel ごとの XAFS スペクトルを得ることに成功した。機械学習法を用いて、スペクトルを7つに分類し、細胞外、細胞膜、細胞核、小胞体に由来する構造などが無染色で観測できた。このように XAFS イメージングおよび機械学習によるスペクトル分類により、染色することなく生体試料を観測することができることを示した。
- c) X線自由電子レーザーSACLA BL1を利用した液体試料を対象とした実験装置の開発を進めている。本年度は、Nevada 大の Craig Schwartz らと液体表面からの二次高調波発生の実験を行った。液体表面などの界面においては、空間対称性の破れより、二次高調波が発生する。そのため、二次高調波を観測することで表面敏感な実験を行うことができる。特に液体表面は気液界面であるため、反応場として重要であり、その化学状態を測定する手法は重要である。また軟X線の共鳴過程を利用することで、表面の特定の元素の化学状態を選択的に観測できる長所がある。

そのため、SACLA BL1 を利用して、高強度の軟 X 線パルスを鉄硝酸水溶液の超薄膜フラットジェットに照射しのその反射光を、斜入射分光器で分光観測した。現在解析中である。

B-1) 学術論文

H. ONO, Y. UMEDA, K. YOSHIDA, K. TSUTSUI, K. YAMAMOTO, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, M. MIZUGUCHI and T. MIYAMACHI, "Intermolecular Interaction Induced Magnetic Decoupling at an Organic-Inorganic Interface," *J. Phys. Chem. C* **127(49)**, 23935–23940 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c05966

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, S. WADA, H. KOHGUCHI, H. OTA, E. NAKAMURA, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, M. HOSAKA and M. KATOH, "Frequency-Domain Interferometry for the Determination of Time Delay between Two Extreme-Ultraviolet Wave Packets Generated by a Tandem Undulator," *Sci. Rep.* 13(1), 10292 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-37449-7

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, S. WADA, M. FUJIMOTO, H. OTA, H. IWAYAMA and M. KATOH, "Time Domain Double Slit Interference of Electron Produced by XUV Synchrotron Radiation," *Sci. Rep.* 13(1), 6142 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-33039-9

F. ALLUM, Y. KUMAGAI, K. NAGAYA, J. HARRIES, H. IWAYAMA, M. BRITTON, P. H. BUCKSBAUM, M. BURT, M. BROUARD, B. DOWNES-WARD, T. DRIVER, D. HEATHCOTE, P. HOCKETT, A. J. HOWARD, J. W. L. LEE, Y. LIU, E. KUKK, J. W. MCMANUS, D. MILSESEVIC, A. NIOZU, J. NISKANEN, A. J. ORR-EWING, S. OWADA, P.A. ROBERTSON, A. RUDENKO, K. UEDA, J. UNWIN, C. VALLANCE, T. WALMSLEY, R. S. MINNS, D. ROLLES, M. N. R. ASHFOLD and R. FORBES, "Direct Momentum Imaging of Charge Transfer Following Site-Selective Ionization," *Phys. Rev. A* 108(4), 043113 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevA.108.043113

S. KERA, F. MATSUI, K. TANAKA, Y. TAIRA, T. ARAKI, T. OHIGASHI, H. IWAYAMA, M. FUJIMOTO, H. MATSUDA, E. SALEHI and M. KATOH, "Prospects Required for Future Light-Source Facilities: A Case of UVSOR Synchrotron Facility," *Electron. Struct.* 5(3), 034001 (2023). DOI: 10.1088/2516-1075/acdf32

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

原子衝突学会学会誌編集員 (2020-).

B-11) 産学連携

共同研究, 三菱ケミカル(株), 岩山 洋 (2023年度).