

## 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)

A-1) 専門領域：量子物理学, 原子分子光物理学, 量子情報科学, 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) 超高速量子シミュレータの開発
- g) バルク固体の極限コヒーレント制御

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 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) ほぼ絶対零度まで冷やした極低温のルビジウム原子集団にAPMを適用することによって、60万個の粒子の量子多体問題を近似無しに1ナノ秒(ナノ=10<sup>-9</sup>)以内でシミュレートできる世界最速の「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。

#### B-1) 学術論文

**M. MIZOGUCHI, Y. ZHANG, M. KUNIMI, A. TANAKA, S. TAKEDA, N. TAKEI, V. BHARTI, K. KOYASU, T. KISHIMOTO, D. JAKSCH, A. GLÄTZLE, M. KIFFNER, G. MASELLA, G. PUPILLO, M. WEIDEMÜLLER and K. OHMORI**, “Ultrafast Creation of Overlapping Rydberg Electrons in an Atomic BEC and Mott-Insulator Lattice,” *arXiv* 1910.05292 (2019).

**H. KATSUKI, Y. OHTSUKI, T. AJIKI, H. GOTO and K. OHMORI**, “Engineering Quantum Wave-Packet Dispersion with a Strong Non-Resonant Femtosecond Laser Pulse,” *arXiv* 1910.08241 (2019).

#### B-4) 招待講演 (\* 基調講演)

**K. OHMORI**, “Ultrafast many-body electron dynamics in an ultracold atomic BEC and Mott insulator lattice,” Topical Conference on Quantum Computing 2019 (TCQC2019), Kyoto Brighton Hotel, Kyoto (Japan), December 2019.\*

**K. OHMORI**, Panel Discussion on Quantum Simulation, Topical Conference on Quantum Computing 2019 (TCQC2019), Kyoto Brighton Hotel, Kyoto (Japan), December 2019.\*

**K. OHMORI**, “Ultrafast many-body electron dynamics in an ultracold atomic BEC and Mott insulator lattice,” Annual Conference Series “Frontiers in Synthetic Quantum Systems; 2019 Focus: Quantum Simulations in Optical Lattices and Beyond,” Tian-Ping Hotel, Shanghai (China), December 2019.\*

大森賢治, 「量子力学に残された100年の謎に迫る」, 第123回分子科学フォーラム, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎(日本), 2019年12月.\*

大森賢治, 「量子力学100年の謎と量子テクノロジー」, 自然科学研究機構 教育研究評議会, 東京(日本), 2019年11月.

**K. OHMORI**, “Ultrafast many-body electron dynamics in an ultracold atomic BEC and Mott insulator lattice,” The Conference “Quantum Computing in Near Term,” Programme on “Quantum Simulation—from Theory to Applications,” Erwin Schrödinger International Institute for Mathematics and Physics (ESI), Universität Wien, Vienna (Austria), October 2019.

**K. OHMORI**, “Japan’s quantum-technology policy and its international strategy,” The EU Quantum Flagship event: “Exploring and Making Quantum Technology,” Aalto University, Helsinki (Finland), October 2019.\*

**K. OHMORI**, Panel Discussion: International Cooperation in Quantum Technology, The EU Quantum Flagship event: “Exploring and Making Quantum Technology,” Aalto University, Helsinki (Finland), October 2019.\*

大森賢治,「アト秒・ナノメートル精度の超高速量子シミュレータの開発と量子コンピューティングへの応用」, JST 戦略的創造研究推進事業 新技術説明会 ～情報処理～, JST 東京本部別館, 東京 (日本), 2019年9月.\*

**K. OHMORI**, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” The 14<sup>th</sup> Femtochemistry Conference, Jin Jiang Hotel, Shanghai (China), August 2019.\*

**K. OHMORI**, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” P&A AMO Seminar, Rice University, Houston (USA), July 2019.

**K. OHMORI**, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” TSRC Workshop “Quantum Dynamics and Spectroscopy in Condensed-Phase Materials and Bio-Systems,” Telluride Science Research Center (TSRC), Telluride (USA), June 2019.

**K. OHMORI**, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” International Symposium: Highly-excited States and Non-covalent Interactions, The University of Manchester, Manchester (U.K.), June 2019.\*

**K. OHMORI**, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” The 4<sup>th</sup> International Workshop on Rydberg Atoms and Molecules, Hangzhou (China), June 2019.\*

**K. OHMORI**, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” IAS Workshop “Quantum Simulation of Novel Phenomena with Ultracold Atoms,” The Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong (China), May 2019.

大森賢治,「量子シミュレーションの国内外の動向と展望」, JST CRDS, JST 東京本部別館, 東京 (日本), 2019年4月.

大森賢治,「量子シミュレーションの国内外の動向と課題」, 日本物理学会 第74回年次大会シンポジウム「量子シミュレーションの最前線: 極低温粒子系から探る宇宙・ハドロン・物性物理」, 九州大学, 福岡 (日本), 2019年3月.\*

大森賢治,「量子力学に残された100年の謎に迫る」, 経団連 第1回産学連携セミナー, 経団連会館, 東京 (日本), 2019年2月.

溝口道栄,「極低温ボース-アインシュタイン凝縮体の超高速リユードベリ励起」, 岐阜大学, 岐阜市 (日本), 2019年9月.

#### B-6) 受賞, 表彰

大森賢治, 文部科学大臣表彰 科学技術賞 (2018).

大森賢治, 松尾財団宅間宏記念学術賞 (2017).

大森賢治, 独フンボルト賞 (2012).

大森賢治, アメリカ物理学会フェロー表彰 (2009).

大森賢治, 日本学士院学術奨励賞 (2007).

大森賢治, 日本学術振興会賞 (2007).

大森賢治, 光科学技術研究振興財団研究表彰 (1998).

大森賢治, 東北大学教育研究総合奨励金 (1995).

香月浩之, 英国王立化学会 PCCP 賞 (2009).

香月浩之, 光科学技術研究振興財団研究表彰 (2008).

#### B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学研究会委員 (2002–2006).

分子科学会設立検討委員 (2005–2006).

分子科学会運営委員 (2006–2007, 2010–2017).

原子衝突研究協会運営委員 (2006–2007).

学会の組織委員等

14<sup>th</sup> International Conference on Spectral Line Shapes 国際プログラム委員 (1998).

21<sup>st</sup> International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions 準備委員, 組織委員 (1999).

The 5<sup>th</sup> East Asian Workshop on Chemical Reactions 組織委員長 (2001).

分子構造総合討論会実行委員 (1995).

第19回化学反応討論会実行委員 (2003).

原子・分子・光科学 (AMO) 討論会プログラム委員 (2003–).

APS March meeting; Focus Topic Symposium “Ultrafast and ultrahighfield chemistry” 組織委員 (2006).

APS March meeting satellite “Ultrafast chemistry and physics 2006” 組織委員 (2006).

第22回化学反応討論会実行委員 (2006).

European Research Council (ERC), Invited Panel Evaluator (2007).

European Research Council (ERC), Invited Expert Referee (2007–).

8<sup>th</sup> Symposium on Extreme Photonics “Ultrafast Meets Ultracold” 組織委員長 (2009).

The 72<sup>nd</sup> Okazaki Conference on “Ultimate Control of Coherence” 組織委員 (2013).

A Peter Wall Colloquium Abroad and The 73<sup>rd</sup> Okazaki Conference on “Coherent and Incoherent Wave Packet Dynamics” 組織委員 (2013).

1<sup>st</sup> International Symposium on Advanced Photonics “Quantum Many-Body Science and Technology” 組織委員 (2016).

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

QuantERA (<https://www.quantera.eu>), Invited Remote Reviewer (2017–).

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

2<sup>nd</sup> International Symposium on Advanced Photonics “Attosecond Science” 組織委員 (2018).

ゴードン会議 (Gordon Research Conference: GRC) “Quantum Control of Light and Matter,” 2019 副議長, 2021 議長 (2017–).

ゴードン会議 (Gordon Research Conference: GRC) 評議会メンバー (2019–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

内閣府 量子技術イノベーション戦略・ロードマップ検討グループメンバー (2019–).

文部科学省 科学技術・学術審議会 量子科学技術委員会 専門委員 (主査代理) (2015–).

文部科学省 科学技術・学術審議会 量子科学技術委員会 量子情報処理 (主に量子シミュレーション) に係るロードマップ検討グループメンバー (2017–).

日本学術振興会 日仏先端科学シンポジウム PGM (2010–2012).

日本学術振興会 HOPE ミーティング 事業委員 (2012–2016).

日本学術振興会 日独学術コロキウム 学術幹事 (2013–2014).

学会誌編集委員

*Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, IOP, Editorial Board (2018–).

*Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, IOP, International Advisory Board (2015–2017).

## その他

長い伝統と世界的な権威を誇る米国のゴードン会議 (Gordon Research Conference: GRC) の副議長 (2019)、議長 (2021)、評議会メンバー (2019-) として分子研の国際的な認知度の向上に貢献。

第 123 回分子科学フォーラム (2019 年 12 月 13 日, 岡崎コンファレンスセンター 大隈ホール) において, およそ 200 名の超満員 (立ち見多数) の聴衆の前で「量子力学に残された 100 年の謎に迫る」と題した一般公開講演を行い, 市民への分子研の研究力アピールに貢献。

内閣府および文部科学省からの依頼で, 内閣府 量子技術イノベーション戦略のロードマップ策定を担当 (2019-)。

内閣府および文部科学省からの依頼で, 量子テクノロジーに関する日欧 2 者間会議の議長として日欧の今後の協力体制の構築に貢献 (2019 年 12 月 17 日, 京都プライトンホテル)。

日本政府代表 (内閣府および文部科学省) として EU 量子フラッグシップ全体会議 (2019 年 10 月, ヘルシンキ) に招かれ, 招待講演・パネルディスカッションを通じて量子テクノロジー分野における日米欧の今後の協力体制の構築に貢献。

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・専門委員として, 量子テクノロジー開発および量子ビーム (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貢献。

JST CRDS からの依頼で, 量子シミュレーションの国内外の動向と展望に関するレクチャー (2019 年 4 月 22 日, JST 東京本部別館) を行い, 内閣府 量子技術イノベーション戦略の戦略プロポーザルの提案に貢献。

分子研 国際諮問委員会において文科省 Q-LEAP プログラムにおける超高速量子シミュレータ開発に関するプレゼンを行うとともに諮問委員のラポッターに対応し, 分子研の研究力アピールに貢献。

自然科学研究機構 教育研究評議会 (2019 年 11 月 28 日, 自然科学研究機構 本部) において「量子力学 100 年の謎と量子テクノロジー」に関する講演を行い, 分子研の研究力アピールに貢献。

文部科学省からの依頼で, 林芳正文部科学大臣と欧州連合 (EU) Carlos Moedas 欧州委員 (研究・科学・イノベーション担当) との間の「量子技術分野の今後の協力に関する合意」 (2018 年 1 月 8 日, ブリュッセル) に貢献。

文部科学省からの依頼で, 日米間の「量子技術分野の今後の協力」のための米国国立科学財団 (NSF) および米国エネルギー省 (DOE) との日米政府間会議 (2018 年 3 月 9 日, ワシントン DC) に出席し, 林芳正文部科学大臣と NSF の France A. Córdova 長官との会談 (2018 年 5 月 1 日, ワシントン DC) における量子技術分野での日米協力に関する意見交換の実現に大きく貢献。

EU の Quantum Technology Flagship の一環として開催された European Quantum Technologies Community Meeting (2018 年 4 月 19 日, ZEISS Forum, Oberkochen, Germany) に日本の量子科学技術コミュニティの代表として招かれ, 日本・EU・米国の各代表・政府関係者とのパネルディスカッションにおいて, 量子科学技術分野における日・米・EU 間の協力について議論。

平成 16 年度安城市シルバーカレッジ「原子のさざ波と不思議な量子の世界」。

岡崎市立小豆坂小学校 第 17 回・親子おもしろ科学教室「波と粒の話」。

立花隆+自然科学研究機構シンポジウム 爆発する光科学の世界——量子から生命体まで——「量子のさざ波を光で制御する」。

## B-8) 大学での講義, 客員

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

## B-10) 競争的資金

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-2028年).

科研費 特別推進研究,「アト秒精度の超高速コヒーレント制御を用いた量子多体ダイナミクスの探求」,大森賢治(2016年-2021年).

科学技術振興機構さきかけ研究(受託研究),「極低温ドレスト原子集団の超精密制御による非可換トポロジカル量子現象の探索」,素川靖司(2016年-2020年).

科学技術振興機構CREST 研究,「アト秒精度の凝縮系コヒーレント制御」,大森賢治(2010年-2016年).

科研費 基盤研究(A),「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御法を用いた量子/古典境界の探索」,大森賢治(2009年-2011年).

科研費 特別研究員奨励費,「非線形波束干渉法の開発とデコヒーレンスシミュレーターへの応用」,大森賢治(2009年-2010年).

科研費 特別研究員奨励費,「極低温原子分子の超高速コヒーレント制御」,大森賢治(2008年-2010年).

## B-11) 産学連携

浜松ホトニクス(株),「超高速量子シミュレータの開発」,大森賢治(2016年-).

(株)日立製作所,「超高速量子シミュレータの開発」,大森賢治(2018年-).

## C) 研究活動の課題と展望

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4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 分子ベースの量子情報科学の開拓: 高精度の量子位相操作によって分子内の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実現を目指す。さらに, 単一分子の操作を目指して, 冷却分子の生成を試みる。
- ④ レーザー冷却された原子集団のコヒーレント制御: レーザー冷却された原子集団への振幅位相情報の書き込みとその時間発展の観測・制御。さらに極低温分子の生成とコヒーレント制御。これらを通じて, 量子多体問題のシミュレーション実験, 量子情報処理, 極低温化学反応の観測と制御を目指す。

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）

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) 有機半導体薄膜の電荷輸送機構の研究
- c) 有機半導体薄膜の界面電子単位接合機構の研究
- d) 機能性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
- e) 機能性分子薄膜の振動状態と電子励起計測
- f) 自己組織化と分子認識機能の分光研究
- g) 分子薄膜の作製と評価：成長ダイナミクス，構造と分子配向

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 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。2014年度より新たに超短パルスレーザー光を励起源として電子状態を測定し，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開始した。2019年より新型運動量分解光電子顕微鏡の開発をUVSOR 施設の中期計画として進める。
- b) 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し，分子間相互作用の大きさ・ホール有効質量など，バンド伝導移動度を評価した。有機単結晶ヘテロ界面の成膜に成功し，エネルギー分散関係の検出に成功した。温度依存測定による準粒子評価を進めている。  
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。
- c) 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。極めて高感度に光電子を捕捉し，評価可能な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。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単位形成までを統括検討し，エネルギー単位接合機構の解明を目指している。数値解析による定量評価を実施した。
- d) 高配向有機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，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いる。多様な有機薄膜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評価してきた。また理論計算から，二次元角度分解測定により分子軌道の可視化が行え，配向分子系（固体）における分子計測の新たなツールとなりうることを提案した。新たに放射光を利用した波数分解光電子

放射顕微測定を実施するとともに、局在電子系における一電子近似の限界を検討し、弱相互作用系の物理を議論している。UVSOR 施設における新型運動量分解光電子顕微鏡の利用が不可欠である。

- e) 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開始した。
- f) 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機構の解明を目指している。また超分子系の固相膜を作製し、自己組織化や原子・分子捕獲などによる電子状態への影響を測定することで、分子認識機能について分光学的に研究している。プローブ顕微鏡実験を共同研究で推進し、構造と電子状態の相関研究を開始した。
- g) 有機分子薄膜(高分子薄膜)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), 高分解能低速電子線回折 (SPALED), 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。

#### B-1) 学術論文

**H. YAMANE, F. MATSUI, T. UEBA, T. HORIGOME, S. MAKITA, K. TANAKA, S. KERA and N. KOSUGI**, “Acceptance-Cone-Tunable Electron Spectrometer for Highly-Efficient Constant Energy Mapping,” *Rev. Sci. Instrum.* **90**, 093102 (7 pages) (2019).

**R. NEMOTO, P. KRUEGER, A. HARTINI, T. HOSOKAI, M. HORIE, S. KERA and T. YAMADA**, “Well-Ordered Monolayer Growth of Crown-Ether Ring Molecules on Cu(111) in Ultra-High Vacuum: A STM, UPS, and DFT Study,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 18939–18950 (2019).

**R. SCHLESINGER, F. BUSSOLOTTI, J. YANG, S. SADOFEV, A. VOLLMER, S. BLUMSTENGEL, S. KERA, N. UENO and N. KOCH**, “Gap States Induce Soft Fermi Level Pinning upon Charge Transfer at ZnO/Molecular Acceptor Interfaces,” *Phys. Rev. Mater.* **3**, 074601 (8 pages) (2019).

**S. PARK, T. SCHULTZ, A. HAN, A. ALJARB, X. XU, P. BEYER, A. OPITZ, R. OVSYANNIKOV, L.-J. LI, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, S. KERA, P. AMSALEM and N. KOCH**, “Electronic Band Dispersion Determination in Azimuthally Disordered Transition-Metal Dichalcogenide Monolayers,” *Commun. Phys.* **2**, 68 (6 pages) (2019).

**T. KIRCHHUEBEL, O. L. A. MONTI, T. MUNAKATA, S. KERA, R. FORKER and T. FRITZ**, “The Role of Initial and Final States in Molecular Spectroscopies,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 12730–12747 (2019).

**Y. NAKAYAMA, R. TSURUTA, N. MORIYA, M. HIKASA, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, Y. MIZUNO, T. SUZUKI, T. KOGANEZAWA, T. HOSOKAI, T. UEBA and S. KERA**, “Widely Dispersed Intermolecular Valence Bands of Epitaxially Grown Perfluoropentacene on Pentacene Single Crystals,” *J. Phys. Chem. Lett.* **10**, 1312–1318 (2019). (*Front Cover selected*)

**M. SCHWARZE, C. GAUL, R. SCHOL, F. BUSSOLOTTI, A. HOFACKER, K. S. SCHELLHAMMER, B. NELLI, B. D. NAAB, Z. BAO, D. SPOLTRE, K. VANDEWAL, J. WIDMER, S. KERA, N. UENO, F. ORTMANN and K. LEO**, “Molecular Parameters Responsible for Thermally Activated Transport in Doped Organic Semiconductors,” *Nat. Mater.* **18**, 242–248 (2019).

B-4) 招待講演 (\* 基調講演)

S. KERA, "Energy and spatial distribution of frontier orbital state for organic thin films," 2<sup>nd</sup> International Conference on Materials Research and Innovation (ICMARI), Bangkok (Thailand), December 2019.

S. KERA, "A perspective of frontier orbital state for weakly bound molecules on the surface," 25<sup>th</sup> Users' Meeting & Workshops at NSRRC; Workshop II: Scientific Opportunities of Soft X-Ray/VUV Nano-Spectroscopy & Nano-Imaging at TPS, Hsinchu (Taiwan), September 2019.

S. KERA, "Photoelectron spectroscopy of semiconducting organic molecules," 18<sup>th</sup> European Conference on Applications of Surface and interface Analysis (ECASIA), Dresden (Germany), September 2019.\* [Keynote]

S. KERA, "Evolution of  $\pi$  orbital state upon assembling the molecules on the surface," 14<sup>th</sup> International Symposium on Functional  $\pi$ -Electron Systems (F $\pi$ 14), Berlin (Germany), June 2019.

S. KERA, "Imaging electron delocalization upon assembling the molecules," 1<sup>st</sup> international workshop on momentum microscopy and spectroscopy, Okazaki, February 2019.

S. KERA, "Electronic band dispersion of perovskite single crystal: MAPbI<sub>3</sub>," International Workshop on Organic Semiconductors and Related Materials, Chiba, January 2019.

解良 聡, 「有機半導体の輸送電荷の特徴: 光電子分光法による電子状態測定から」, 第4回固体化学フォーラム, 岡崎, 2019年6月.

解良 聡, 「有機半導体分子の電子状態の特徴とその局在性の変遷」, 日本学術振興会マイクロビームアナリシス第141委員会第176回研究会, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2019年5月.

解良 聡, 「分子集合体における電子局在性」, 第17回SPRING-8 ユーザー協同顕微鏡ナノ材料科学研究会・第14回日本表面真空学会放射光表面化学研究部会・第3回日本表面真空学会プローブ顕微鏡研究部会合同シンポジウム, つくば, 2019年3月.

解良 聡, 「光電子分光法による有機半導体の物性・機能評価」, 第13回応化談話会節分サロン, 東大, 東京, 2019年2月.

解良 聡, 「有機半導体結晶における電子格子相互作用」, 第32回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 福岡国際会議場, 福岡, 2019年1月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

UVSOR 利用者懇談会世話人 (2012–2014).

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).

学会の組織委員等

The 17<sup>th</sup> Japan-Korea Molecular Science Symposium, Chair (Nagoya 2019).

第32回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムプログラム委員会委員長, 同実行委員会副委員長 (2019).

The 9<sup>th</sup> Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications, International Program Committee (Germany 2018).

The 9<sup>th</sup> International Conference of Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces, Advisory Panel (Singapore 2017).

The 16<sup>th</sup> Japan-Korea Molecular Science Symposium, Co-Chair (Busan, Korea 2017).

第 28, 29, 30, 31 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 (2014, 2015, 2016, 2017).

第 75, 76, 77, 78 回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2014, 2015, 2016, 2017).

第 61, 62, 63, 64 回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2014, 2015, 2016, 2017).

The 4<sup>th</sup> Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-Chair (Soochow, China 2016).

学協会連携分子研研究会「表面科学の最先端技術と分子科学(第7回真空・表面科学若手研究会)」運営委員 (2016).

第 76 回岡崎コンファレンス “Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications” 主催者 (2016).

MPI-PKS 国際重点研究会 “Prospects and Limitations of Electronic Structure Imaging by Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy,” Co-Chair (Dresden, Germany 2016).

JSPS-NSFC Joint 3<sup>rd</sup> Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Chair (IMS, Okazaki 2015).

JSPS-NSFC Joint 2<sup>nd</sup> Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-chair (Soochow Univ., China 2014).

第 27 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2013).

JSPS-NSFC Joint 1<sup>st</sup> Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-chair (Tokyo Univ. of Sci., Japan 2013).

UVSOR 研究会「UVSOR 有機固体専用ラインの今後の展開」主催者 (2012).

The 4<sup>th</sup> Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA4), Local Committee (Chiba, Japan 2007).

21 世紀 COE プログラム若手主導研究会主催者 (2006).

Workshop on Electrical and Electronic Properties in Crystalline Thin Films of Small-Molecules, Co-chair (Chiba, Japan 2005).

UVSOR 研究会「有機薄膜の放射光利用研究：BL8B2 の歩みと今後の展開」主催者 (2007).

学会誌編集委員

真空誌編集委員 (2008–2009).

*Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, Guest Editor (2014).

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

その他

千葉大学工学部工学同窓会部会幹事 (2008–2013).

#### B-8) 大学での講義, 客員

京都大学大学院理学研究科, 客員教授, 「化学特別講義」, 2019 年

広島大学大学院理学研究科, 客員教授, 「放射光科学特論 II」, 2019 年.

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–2019 年.

蘇州大学, 客員教授, 2014 年 4 月–2019 年.

## B-10) 競争的資金

科研費挑戦的萌芽研究,「有機デバイス材料の個性を知る:移動度の直接評価」,解良 聡(2008年-2009年),  
科研費若手研究(A),「分子性固体における電荷輸送とその動的現象の解明」,解良 聡(2008年-2010年),  
科研費基盤研究(B),「パイ共役分子による低次元超格子ヘテロ界面構造とその電子状態」,解良 聡(2011年-2013年),  
日本学術振興会二国間交流事業共同研究費(NSFC),「有機タンDEM光電子デバイスの有機半導体の本性を活用した高性能化」,解良 聡(2013年-2015年),  
科研費基盤研究(A),「精密電子状態評価による有機半導体界面に特徴的な電子機能の解明」,解良 聡(2014年-2016年),  
科研費基盤研究(A),「分子集合体における電子局在性とその電子-フォノン相互作用の影響」,解良 聡(2018年-),  
科研費国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(B)),「光電子波数顕微鏡法で切り拓くナノスピン・オービトロニクス」,解良 聡(2019年-).

## C) 研究活動の課題と展望

機能性分子に代表される弱相互作用物質系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,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て進めている。シンクロトロン放射光を利用した各先端分光法(角度分解光電子分光法,共鳴光電子分光法,軟X線吸収分光法,X線定在波分光法など),高感度紫外光電子分光法,気相光電子分光法,レーザー励起二光子光電子分光法,低エネルギー逆光電子分光法,スポット分析型低速電子線回折法を用いた実験を進めている。今年度はメンバーが総替わりし,新たに博士研究員2名による新体制でスタートした。継続的な国際共同研究により研究成果の発信力を維持した。次年度は助教の確保が責務である。一方,UVSOR放射光施設の施設長として国内の当該コミュニティの基盤強化を推進するためのユーザー支援に注力している。UVSOR施設は放射光を利用した分子科学研究分野で国際的な競争力があり,欧米の先端放射光施設と相補的な国際共同研究拠点として貢献している。放射光利用実験の新規軸として,運動量分解光電子顕微鏡(Momentum Microscope)装置を導入する。装置導入において,欧米からの遅れを取り戻すべく基本設計に独自性を含めるため,開発メーカーとの議論を進めてきた。また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を締結し,装置開発とその利用展開についての共同研究を推進することで同意した。予算的な支援として国際共同研究加速基金(B)の獲得に成功した。次年度は本装置の利用を推進するが,有機固体系のオールジャパン体制(実験班,理論班)を構築し,戦略的に新奇実験を牽引する。国内の量子ビーム関連施設の将来計画が随所で俄かに動きだし,UVSOR施設についても次世代施設UVSOR-IVの計画立案に奔走した。次年度は具体的な予算獲得の方策を検討する段階に移行する。

## 長坂将成(助教)(2007年4月1日着任)

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液体の局所構造解析
- b) 低エネルギー領域の軟X線吸収分光測定のための検出器の開発
- c) 電極固液界面の局所構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 1 keV 以下の軟X線領域には化学研究に重要な C, N, O の K 吸収端や遷移金属 (Mn, Fe など) の L 吸収端が存在するため、液体の局所構造を元素選択的に調べられる有望な光領域である。しかしながら、軟X線の液体による吸収が大きく、液体層を 1  $\mu\text{m}$  以下にしなければ軟X線吸収分光 (XAS) 測定が不可能であった。我々は液体層の厚さを 20 nm ~ 2000 nm の範囲で調整できる透過型液体セルを独自に開発して、液体試料の XAS 測定に成功した。更に、量子化学に基づく内殻励起計算の結果と、XAS によるピークシフトを比較することで、異なる元素ごとに液中の分子間相互作用を調べる手法を確立した。本年度は微小不均一性を示すアセトニトリル水溶液の XAS 測定を行い、水とアセトニトリルの双極子相互作用により、アセトニトリルのクラスターが生成することで、中間の濃度領域で微小不均一性が現れることを明らかにした。
- b) 200 eV 以下の低エネルギー領域には、Li-K, B-K, P-L, S-L 吸収端があるため重要であるが、回折格子により分光された一次光の透過率が非常に小さく、高次光に埋もれてしまうため、XAS 測定は困難であった。そこで、試料を透過した軟X線を金基板に照射して、放出される Au 4f 光電子の運動エネルギー分析により、一次光由来の光電子強度だけを収量する新しいタイプの検出器を開発した。
- c) Au(111) 電極上の水の局所構造を調べるために、蛍光収量型の電気化学セルを開発した。これにより、異なる電位における水の構造変化と、電極表面での酸化物形成を、O-K 吸収端 XAS 測定から調べた。

B-1) 学術論文

**M. NAGASAKA, H. YUZAWA, N. TAKADA, M. AOYAMA, E. RÜHL and N. KOSUGI**, "Laminar Flow in Microfluidics Investigated by Spatially-Resolved Soft X-Ray Absorption and Infrared Spectroscopy," *J. Chem. Phys.* **151**, 114201 (7 pages) (2019).  
**J. REN, D. S. ACHILLEOS, R. GOLNAK, H. YUZAWA, J. XIAO, M. NAGASAKA, E. REISNER and T. PETIT**, "Uncovering the Charge Transfer between Carbon Dots and Water by In Situ Soft X-Ray Absorption Spectroscopy," *J. Phys. Chem. Lett.* **10**, 3843–3848 (2019).

B-4) 招待講演

**M. NAGASAKA**, "Soft X-Ray Absorption Spectroscopy of Liquid for Understanding Chemical Processes in Solution," Japan-Korea Molecular Science Symposium "Advances in Materials and Molecular Sciences," Nagoya (Japan), July 2019.  
長坂将成, 「軟X線 XAFS の使いどころ：何が観えて何が解かるのか」, 日本化学会第 99 春季年会特別企画講演「化学者のための放射光ことはじめ——XAFS 構造解析の基礎と先端応用」, 甲南大学, 兵庫, 神戸, 2019年3月。  
長坂将成, 「軟X線 XAFS による溶液反応のその場観測」, 電磁波励起反応場第 188 委員会 2019 年度第 1 回ワークショップ「マイクロ波「その場」観察の新展開」, 東京工業大学大岡山キャンパス, 東京, 2019年5月。

長坂将成,「液体の軟X線吸収分光測定の実状と今後の展望」,第25回HiSOR研究会「小型放射光リングによる多彩な量子ビームの発生と応用」,広島大学,広島,東広島,2019年10月.

長坂将成,「軟X線吸収分光法による溶液反応のオペランド観測」,日本表面真空学会放射光表面科学研究部会「放射光を利用したオペランド表面界面観測の最先端:構造から機能・反応へ」,つくば国際会議場,茨城,つくば,2019年10月.

#### B-6) 受賞,表彰

長坂将成,第25回井上研究奨励賞(2009).

長坂将成,第4回分子科学会優秀講演賞(2010).

長坂将成,第18回日本放射光学会奨励賞(2014).

長坂将成,平成27年度電気化学会論文賞(共同受賞)(2015).

長坂将成,分子科学研究奨励森野基金(2016).

長坂将成,日本化学会第31回若い世代の特別講演会特別講演証(2017).

長坂将成,第10回分子科学会奨励賞(2017).

長坂将成,自然科学研究機構若手研究者賞(2019).

#### B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会行事委員(2013–2015,2017–2019).

学会の組織委員等

第14回XAFS討論会プログラム委員(2011),実行委員(2011).

日本放射光学会第7回若手研究会共同世話人(2014).

International Workshop on Trends in Advanced Spectroscopy in Materials Science (TASPEC), Organizing Committee (2018).

#### B-10) 競争的資金

科研費若手研究(スタートアップ),「共鳴X線光電子分光法による分子クラスターの電子状態の解明」,長坂将成(2007年–2008年).

科研費若手研究(B),「表面共吸着系の電子状態の同時観測法の開発と電極反応への展開」,長坂将成(2009年–2010年).

科研費若手研究(A),「軟X線吸収分光法による電極固液界面の局所電子構造の解明」,長坂将成(2011年–2013年).

住友財団基礎科学研究助成,「下部臨界温度を持つ溶液の局所構造解析とその起源の解明」,長坂将成(2014年–2015年).

光科学技術研究振興財団研究助成,「軟X線吸収分光法による電極固液界面の紫外光励起過程の解明」,長坂将成(2015年–2016年).

科研費基盤研究(C),「マイクロ流路を用いた溶液反応の時間分解軟X線分光法の開発」,長坂将成(2016年–2018年).

旭硝子財団研究奨励(第1分野),「オペランド軟X線吸収分光法による電気二重層の局所構造変化の解明」,長坂将成(2017年–2018年).

自然科学研究機構新分野創成センター先端光科学研究分野プロジェクト,「軟X線吸収分光法による光化学系IIタンパク質の酸素発生中心の構造解析」,長坂将成(2018年,2019年).

科研費基盤研究(B),「超高速軟X線吸収分光法による光化学系IIタンパク質の光合成反応の機構解明」,長坂将成(2019年–2021年).

公益財団法人村田学術振興財団研究助成,「軟X線吸収分光法によるリチウムイオン電池のオペランド測定」,長坂将成(2019年–2020年).

## 光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

加藤 政 博(教授) (2000年3月1日着任, 2004年1月1日昇任～2019年3月31日)\*  
(特任教授) (2019年4月1日着任)

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-3) 研究活動の概略と主な成果

- 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。
- b) 自由電子レーザー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。次世代の放射光源である回折限界リングや高繰り返し極紫外自由電子レーザーに関する基礎研究を進めた。
- c) 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。
- d) 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。
- e) 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継続している。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ている。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。
- f) アンジュレータ放射光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。

B-1) 学術論文

L. GUO and M. KATOH, "pn-Type Substrate Dependence of CsK<sub>2</sub>Sb Photocathode Performance," *Phys. Rev. Accel. Beams* **22**, 033401 (6 pages) (2019).

**H. ZEN, H. OHGAKI, Y. TAIRA, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, I. DAITO, J.-I. YAMAZAKI, T. KII, H. TOYOKAWA and M. KATOH**, “Demonstration of Tomographic Imaging of Isotope Distribution by Nuclear Resonance Fluorescence,” *AIP Adv.* **9**, 035101 (7 pages) (2019).

**H. KAWAGUCHI and M. KATOH**, “Orbital Angular Momentum of Liénard–Wiechert Fields,” *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2019**, 083A02 (18 pages) (2019).

**Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH**, “Coherent Control in the Extreme Ultraviolet and Attosecond Regime by Synchrotron Radiation,” *Nat. Commun.* **10**, 4988 (5 pages) (2019).

**T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH**, “Controlling the Orbital Alignment in Atoms Using Cross-Circularly Polarized Extreme Ultraviolet Wave Packets,” *Phys. Rev. Lett.* **123**, 233401 (5 pages) (2019).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

**M. KATOH**, “Optical Vortex Emitted from Free Electrons in Nature,” *SPIE Proc. 11099, Light in Nature VII*, 1109903 (2019).

B-4) 招待講演

**M. KATOH**, “Spatial Structure of Radiation from Relativistic Electrons,” The 38<sup>th</sup> JSST Annual International Conference on Simulation Technology, Miyazaki (Japan), November 2019.

**M. KATOH**, “Structured light beams from synchrotron,” International Conference on Materials and Systems for Sustainability 2019, Nagoya (Japan), November 2019.

B-6) 受賞, 表彰

島田美帆, 第8回日本加速器学会奨励賞 (2011).

平 義隆, 第7回日本物理学会若手奨励賞 (2012).

肥田洋平, 第9回日本加速器学会年会賞 (ポスター部門) (2012).

丹羽貴弘, 第9回日本加速器学会年会賞 (ポスター部門) (2012).

平 義隆, 第9回日本加速器学会年会賞 (口頭発表部門) (2012).

梶浦陽平, 第10回日本加速器学会年会賞 (ポスター部門) (2013).

稲垣利樹, 第11回日本加速器学会年会賞 (ポスター部門) (2014).

伊藤圭也, 第12回日本加速器学会年会賞 (ポスター部門) (2015).

宮内智寛, 第12回日本加速器学会年会賞 (ポスター部門) (2015).

高嶋圭史, 保坂将人, 山本尚人, 加藤政博, 竹田美和, 第20回超伝導科学技術賞 (未踏科学技術協会) (2016).

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 (2008–2009, 2014–2017).

日本放射光学会評議員 (2006–2009, 2010–2012, 2013–2015, 2016–2018, 2019–).

学会の組織委員等

日本加速器学会組織委員 (2004–).

日本放射光学会第13回年会プログラム委員長 (2000).

日本加速器学会第10回年会プログラム委員長(2013).  
文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等  
日本学術振興会科学研究費委員会専門委員(2015–2016).  
日本学術振興会審査・評価部会委員(2017).  
高エネルギー加速器研究機構ERL計画推進委員会委員(2009–).  
高エネルギー加速器研究機構ERL計画評価専門委員会委員長(2017).  
高エネルギー加速器研究機構Photon Factory Machine Advisory Committee 委員(2017).  
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–).  
学会誌編集委員  
日本放射光学会誌編集委員(2001–2002).

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋大学シンクロtron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–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「電子ビームのレーザー微細加工によるコヒーレント光発生」, 加藤政博(2008年–2010年).  
文部科学省光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発プロジェクト 量子ビーム基盤技術開発プログラム, 高度化ビーム技術開発課題, 「リング型光源とレーザーを用いた光発生とその応用」, 加藤政博(2008年–2012年).  
科研費基盤研究(B), 「超狭帯域真空紫外コヒーレント放射光源の開発」, 加藤政博(2011年–2013年).  
科研費基盤研究(B), 「シンクロtron放射による真空紫外コヒーレント光渦ビームの発生」, 加藤政博(2014年–2016年).  
科研費基盤研究(A), 「渦放射光発生技術の高度化と利用への展開」, 加藤政博(2017年–).

C) 研究活動の課題と展望

UVSORは2000年以降の高度化により, 既に低エネルギーのシンクロtron光源としては世界的にも最高レベルの性能に到達した。この光源性能を100%引き出すための安定性の向上を目指し, パルス六極磁石による高度な入射方式の開発やビーム不安定性抑制法の開発を名古屋大学と協力し継続している。また老朽化対策や将来計画に関する検討にも積極的に取り組む。自由電子レーザー及び外部レーザーを用いたコンプトン散乱ガンマ線の発生とその利用法の開拓に, 名古屋大学, 京都大学, 量子技術研究開発機構, 山形大学などと協力し取り組んでいる。発生法の開発から, 核共鳴蛍光イメージング法の開発, 光子光子相互作用に関する基礎物理学実験, 陽電子消滅法による材料評価など, 応用技術へ重心を移す。放射光による光渦の生成については, 広島大学, 名古屋大学などと協力し, その光学的特性の詳細評価, さらに放射光光渦同士と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を継続して進める。また, 深紫外・真空紫外域の光渦ビームを用いた光渦と物質系の相互作用に関する実験研究を九州シンクロtron光センター, 富山大学などと協力し継続して進める。二連アンジュレータを用いた孤立原子系の量子状態制御は今後幅広い波長域へ展開できる可能性があり, 外部資金の獲得にも努め, 引き続き世界を先導する研究に注力する。

\*) 2019年4月1日広島大学放射光科学センター教授

## 電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

松 井 文 彦（主任研究員）（2018年4月1日着任）

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) 電子分光装置の新規開発とビームラインの高度化
- b) 光電子回折・分光に関する現象の解明と測定手法開発
- c) 表面電子物性・化学特性にかかわる新奇現象の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ① UVSOR オリジナルの Momentum Microscope (MM) 導入計画推進を主務とする。MMを開発した 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いる。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。電子物性研究に有力な 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現する MM をデザインし、今年度は FZJ や装置メーカーと打ち合わせを重ね導入を実現した。②他方、受け入れ予定の BL6U では従来型の静電半球分析器に機械式電子軌道ディフレクタを組み合わせた広角取込み角度分解光電子分光システムを完成させ、これを利用した成果が国際学会での招待講演に繋がった。③並行して全天球エネルギー・スピン分析器を考案、特許出願し開発中である。①は価電子帯光電子分光用の high-end 型、②は汎用型の波数分解光電子分光装置、③は内殻光電子ホログラフィー用の角度・スピン分解光電子分光装置という位置づけである。
- b) 連続的なエネルギー可変性が放射光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。① UVSOR の測定系チームとともに光学系のオゾン洗浄を行い、分子科学で重要となる C 吸収端の光を供給できるようにした。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。また、吸収端にてグラファイトの  $\pi$  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。共鳴 Auger 電子スペクトルに価電子帯分散があらわれる現象の発見は重要であり国際学会で招待講演の内容となった。②光エネルギー可変性を活かし  $k_z$  分散測定や偏光特性を活かした原子軌道波動関数解析の知見は BL6U での共同研究推進の基盤となっている。
- c) 光電子回折・分光を用いて  $\text{Mo}_4\text{O}_{11}$  や層状物質など低次元物質の電子構造相転移の研究している。層状物質は容易に劈開でき、その表面の電子状態の研究が盛んであるが、劈開容易面とバルクの平均構造は全く別物であることをいくつかの系について明らかにしてきた。試料作製・物性評価グループとの共同研究を進め、アルカリ金属ドーブ系など嫌気性の試料を取り扱い、上述のビームラインで測定できる装置を構築した。

B-1) 学術論文

**F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, T. OHIGASHI, H. YAMANE and N. KOSUGI, "Identification of Twinning-Induced Edges on the Cleaved Graphite Crystal Surface," *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 114704 (3 pages) (2019).**

**F. MATSUI, K. YASUDA, N. MAEJIMA, H. MATSUI, T. MATSUSHITA and H. DAIMON**, “Chemical and Magnetic Properties of Polycrystalline Iron Surface Revealed by Auger Electron Holography, Spectroscopy, and Microscopy,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, 110602 (8 pages) (2019).

**T. KINOSHITA, T. MURO, T. MATSUSHITA, H. OSAWA, T. OHKOCHI, F. MATSUI, H. MATSUDA, M. SHIMOMURA, M. TAGUCHI and H. DAIMON**, “Progress in Photoelectron Holography at SPring-8,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, 110503 (11 pages) (2019).

**D. Y. USACHOV, A. V. TARASOV, F. MATSUI, M. MUNTWILER, K. A. BOKAI, V. O. SHEVELEV, O. Y. VILKOV, M. V. KUZNETSOV, L. V. YASHINA, C. LAUBSCHAT, A. COSSARO, L. FLOREANO, A. VERDINI and D. V. VYALIKH**, “Decoding the Structure of Interfaces and Impurities in 2D Materials by Photoelectron Holography,” *2D Materials* **6**, 045046 (2019).

**E. UESUGI, T. UCHIYAMA, H. GOTO, H. OTA, T. UENO, H. FUJIWARA, K. TERASHIMA, T. YOKOYA, F. MATSUI, J. AKIMITSU, K. KOBAYASHI and Y. KUBOZONO**, “Fermi Level Tuning of Ag-Doped Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Topological Insulator,” *Sci. Rep.* **9**, 5376 (8 pages) (2019).

**H. YAMANE, F. MATSUI, T. UEBA, T. HORIGOME, S. MAKITA, K. TANAKA, S. KERA and N. KOSUGI**, “Acceptance-Cone-Tunable Electron Spectrometer for Highly-Efficient Constant Energy Mapping,” *Rev. Sci. Instrum.* **90**, 093102 (7 pages) (2019).

**M. TAGUCHI, F. MATSUI, N. MAEJIMA, H. MATSUI and H. DAIMON**, “Disorder and Mixed Valence Properties of Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub> Studied by Photoelectron Diffraction and X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Surf. Sci.* **684**, 53–56 (2019).

**T. GREBER, A. P. SEITSONEN, A. HEMMI, J. DREISER, R. STANIA, F. MATSUI, M. MUNTWILER, A. A. POPOV and R. WESTERSTRÖM**, “Circular Dichroism and Angular Deviation in X-Ray Absorption Spectra of Dy<sub>2</sub>ScN@C<sub>80</sub> Single-Molecule Magnets on *h*-BN/Rh(111),” *Phys. Rev. Mater.* **3**, 014409 (5 pages) (2019).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

**Y. FUJITA, H. OTA, T. MATSUSHITA, T. MURO, Y. SENBA and F. MATSUI**, “Mapping Nanometer and Micrometer-Scale Structures at Graphite Surface by Photoelectron Diffraction,” *Surf. Interface Anal.* **51**, 74–78 (2019).

**Y. HASHIMOTO, M. TAGUCHI, S. FUKAMI, H. MOMONO, T. MATSUSHITA, H. MATSUDA, F. MATSUI and H. DAIMON**, “Site-Sensitive X-Ray Photoelectron Spectroscopy of Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> by Photoelectron Diffraction,” *Surf. Interface Anal.* **51**, 115–119 (2019).

B-3) 総説, 著書

**R. EGUCHI and F. MATSUI**, “Graphite and Intercalated Compound Superconductors: Atomic and Electronic Structures,” in *Physics and Chemistry of Carbon-Based Materials: Basis and Applications*, Y. Kubozono, Ed., Springer Nature; Singapore Pte Ltd., Chapter 1, pp. 1–28 (2019).

B-4) 招待講演

**F. MATSUI**, “Resonant Auger electron diffraction and resonant photoelectron spectroscopy,” ALC’19, Kyoto (Japan), October 2019.

B-5) 特許出願

特願 2019-190516, 「球面収差調整カソードレンズ, 球面収差補正静電型レンズ, 電子分光装置, 及び光電子顕微鏡」, 松田博之, 松井文彦(自然科学研究機構), 2019年.

B-7) 学会および社会的活動

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-).

12<sup>th</sup> International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '19 出版委員 (2018-2020).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会マイクロビームアナリシス第 141 委員会企画幹事 (2014-).

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(B), 「軌道磁気量子数計測法の確立と低次元電子物性研究への応用」, 松井文彦 (2017年-2020年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型), 「3D活性サイト科学のプラットフォーム構築による総括と研究支援」(代表: 大門寛), 松井文彦(研究分担者) (2014年-2019年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型), 「3D活性サイト科学の海外拠点・国際ネットワーク構築」(代表: 大門寛), 松井文彦(研究分担者) (2015年-2019年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型), 「顕微光電子ホログラフィーによる活性サイトの時間分解3D原子イメージング」(代表: 木下豊彦), 松井文彦(研究分担者) (2014年-2019年).

科研費国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(B)), 「光電子波数顕微鏡法で切り拓くナノスピン・オービトロニクス」(代表: 解良 聡), 松井文彦(研究分担者) (2019年-2022年).

## 大 東 琢 治 (助教) (2011 年 8 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：X線光学

A-2) 研究課題：

- a) 走査型透過軟X線顕微鏡ビームラインの発展
- b) 走査型透過軟X線顕微鏡を用いた応用手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) リチウム K 吸収端 (~55 eV) の高分解能吸収分光の実現に向けて、高次光フィルター機能を備えた高効率の集光光学素子 (Fresnel zone plate) の開発を行なった。これを用いた光学系の評価を行なった結果、エネルギー分解能 ( $E/\Delta E$ ) は約 1,700 で、空間分可能 83 nm であることが判った。これを用いてリチウムイオン電池電極を FIB 加工した試料に分布する、リチウムの化学状態分析を行なった。
- b) JAMSTEC 高知コア研、極地研究所、SPring-8、JAXA、そして分子研の5機関での分析機器において、試料の大気非暴露条件下を維持したまま分析を行うことのできる“施設間横断型分析システム”の構築を行い、これを用いて大気非暴露条件下でリチウムイオン電池の観察を行なった。ここで得られた成果は論文として、現在投稿中である。

B-1) 学術論文

**K. SHINOHARA, S. TONE, T. EJIMA, T. OHIGASHI and A. ITO**, “Quantitative Distribution of DNA, RNA, Histone and Proteins Other than Histone in Mammalian Cells, Nuclei and a Chromosome at High Resolution Observed by Scanning Transmission Soft X-Ray Microscopy (STXM),” *Cells* **8**, 164 (20 pages) (2019).

**M. Y. ISMAIL, M. PATANEN, J. A. SIRVIO, M. VISANKO, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, M. HUTTULA and H. LIIMATAINEN**, “Hybrid Films of Cellulose Nanofibrils, Chitosan and Nanosilica—Structural, Thermal, Optical, and Mechanical Properties,” *Carbohydr. Polym.* **218**, 87–94 (2019).

**F. MATSUI, S. MAKITA, H. MATSUDA, T. OHIGASHI, H. YAMANE and N. KOSUGI**, “Identification of Twinning-Induced Edges on the Cleaved Graphite Crystal Surface,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 114704 (3 pages) (2019).

B-4) 招待講演

**T. OHIGASHI**, “Development of in-situ sample cells for scanning transmission X-ray microscopy,” The 23<sup>rd</sup> International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Cheng Mai (Thailand), June 2019.

**T. OHIGASHI**, “Recent Status and Developments of a Scanning Transmission X-Ray Microscopy Beamline in UVSOR-III Synchrotron,” 25<sup>th</sup> NSRRC User’s Meeting and Workshop, Hsinchu (Taiwan), September 2019.

**T. OHIGASHI**, “Recent developments and researches by using scanning transmission X-ray microscopy in UVSOR synchrotron,” 7<sup>th</sup> International Conference of Sabaragamuwa University of Sri Lanka, Belihuloya (Sri Lanka), November 2019.

## B-7) 学会および社会的活動

### 学会の組織委員等

SpectroNanoscropy Workshop, Organizing Committee (2014-).

X線結像光学研究会幹事 (2015-).

第 32回日本放射光学会年会シンポジウム組織委員会 (2018-2019).

International Conference on X-ray Optics and Applications 2017 プログラム委員 (2016-2017).

第 26回バイオイメージング学会学術集会プログラム委員 (2017).

第 13回X線結像光学研究会組織委員会 (2015).

第 27回日本放射光学会年会シンポジウム組織委員会 (2013).

分子研研究会 (学協会連携)・放射光学会第 8回若手研究会「軟X線イメージングの描く未来」主催 (2015).

### 学会誌編集委員

*Synchrotron Radiation News*, Editor (2017-).

日本放射光学会誌編集委員 (2012-2014).

### その他

出前授業「X線で見える小さな世界～塗り薬からはやぶさ2まで～」岡崎市立常盤中学校 (2019).

第一回KITサイエンスカフェ講師 (2018).

## B-8) 大学での講義, 客員

立命館大学 SR センター, 特別研究員, 2018年-.

## B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C) (一般), 「走査型透過軟X線顕微鏡による超軽元素2次元化学状態分析法の開発」, 大東琢治 (2016年-2018年).

## B-11) 産学連携

共同研究, (株)住友ゴム工業, 「走査型透過X線顕微鏡を用いたポリマー中の薬品・添加剤の分散及び化学状態解析」, 大東琢治 (2017年-).

## 光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

田中清尚（准教授）（2014年4月1日着任）

A-1) 専門領域：物性物理学，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 高温超伝導体の電子状態の解明
- b)  $\mu$ フォーカス角度分解光電子分光と新規スピン分解角度分解光電子分光装置の開発
- c) 角度分解光電子分光における低温技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) UVSOR BL5Uにおいて、鉄系高温超伝導体  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  の角度分解光電子分光測定を行った。近年新しく報告され注目を集めている  $\text{C}_4$  相の組成においてのみ、特異な超伝導ギャップを観測した。具体的には  $\Gamma$  点近傍のホール面を形成するバンドの一つがほぼ完全に抑制されていること、さらに電子面を形成しているバンドに顕著な運動量空間依存性を観測した。この結果により、中性子散乱で  $\text{C}_4$  相においてのみ観測されている異常な振る舞いが、フェルミ面間のネスティングを考慮することで説明できることが判明した。
- b) ビームラインとエンドステーションの全面的な更新を行っていた UVSOR BL5U は2016年度より高分解能角ビームラインとしてユーザー利用を開始し、2018年度に試料直前に最終集光ミラーを配置することでビームを  $400 \text{ (H)} \times 120 \text{ (V)} \mu\text{m}$  から  $23 \text{ (H)} \times 40 \text{ (V)} \mu\text{m}$  に集光することに成功している。今年度は試料を動かすことなく電子状態の運動量空間依存性を測定できるディフレクターの開発が終了し、BL5U で利用できるすべての励起光エネルギー・レンズモードにおいて、ディフレクターの使用が可能となった。さらに試料位置のモーター制御と連動した光電子取得ソフトウェアを開発・実装し、光電子強度の空間依存性をマッピングできるようになった。この開発により微細な試料や不均一な試料の測定が可能となった。また高効率スピン分解角度分解光電子分光測定の計画も進めている。
- c) 角度分解光電子分光実験の高エネルギー分解能測定には、試料をどれだけ冷却できるかが重要となる。BL5U 用に開発した冷却可能な5軸マニピュレータは、これまで試料部において  $3.8 \text{ K}$ 、参照用金部で  $3.2 \text{ K}$  という放射光施設の光電子分光装置としては世界でもトップクラスの低温を実現している。現在 UVSOR で最も高分解能な測定が可能である BL7U では、これまで試料を  $12 \text{ K}$  までしか冷却することができなかったため、その性能を十分に生かすことができていなかったが、新たに6軸マニピュレータの開発を進め、試料部において  $4.5 \text{ K}$ 、参照用金部で  $4.2 \text{ K}$  を達成した。現在さらなる低温化を目指して、ソフトウェアによる熱伝導解析を行っている。

B-1) 学術論文

**T. ADACHI, S. IDETA, Z. TIN, H. USUI, K. TANAKA, S. MIYASAKA and S. TAJIMA**, “Electronic Structure of  $\text{Sr}_{1-y}\text{Ca}_y\text{Fe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$  ( $x = 0.25, y = 0.08$ ) Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 084701 (8 pages) (2019).

**Y. OHTSUBO, Y. YAMASHITA, K. HAGIWARA, S. IDETA, K. TANAKA, R. YUKAWA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, K. MIYAMOTO, T. OKUDA, W. HIRANO, F. IGA and S. KIMURA**, “Non-Trivial Surface States of Samarium Hexaboride at the (111) Surface,” *Nat. Commun.* **10**, 2298 (7 pages) (2019).

S. YAMANAKA, K. TONAMI, M. IWASHITA, K. YOSHIDA, R. TAKEUCHI, S. IDETA, K. TANAKA, K. MASE, K. YAMADA, H. YOSHIDA and Y. NAKAYAMA, “High Sensitivity Detection of the Frontier Electronic States of  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  Single Crystals by Low Energy Excitation,” *Appl. Phys. Express* **12**, 051009 (5 pages) (2019).

K. TANAKA, N. HIEU, G. VINCINI, T. MASUI, S. MIYASAKA, S. TAJIMA and T. SASAGAWA, “Quantitative Comparison between Electronic Raman Scattering and Angle-Resolved Photoemission Spectra in  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$  Superconductors: Doping Dependence of Nodal and Antinodal Superconducting Gaps,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 044710 (6 pages) (2019).

H. SHIONO, S. ISHIHARA, K. MIMURA, H. SATO, E. SCHWIER, K. SHIMADA, M. TANIGUCHI, S. IDETA, K. TANAKA, T. ZHUANG, K. MATSUMOTO, K. HIRAOKA and H. ANZAI, “Temperature Dependence of the Kondo Resonance Peak in Photoemission Spectra of  $\text{YbCdCu}_4$ ,” *AIP Conf. Proc.* **2054**, 040013 (4 pages) (2019).

#### B-4) 招待講演

田中清尚, 「UVSORにおける高温超伝導体の超伝導ギャップ測定, 先端磁気分光と理論計算の融合研究: 『界面多極子相互作用』が拓く新しい学理」, 東京, 2019年6月.

#### B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本放射光学会プログラム副委員長 (2019).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2014–2016).

日本放射光学会誌編集委員 (2016–). (出田真一郎)

#### B-10) 競争的資金

科研費若手研究 (スタートアップ), 「高温超伝導体の反射型テラヘルツ時間領域分光」, 田中清尚 (2008年–2009年).

科研費若手研究 (B), 「電荷・スピンストライブ秩序相を有する高温超伝導体の電子構造」, 田中清尚 (2012年–2014年).

グローバルCOEプログラム「物質の量子機能解明と未来型機能材料創出」萌芽的研究, 「鉄系超伝導体における低エネルギー電荷応答」, 田中清尚 (2012年).

自然科学研究機構新分野創成センターイメージングサイエンス研究分野プロジェクト, 「ディフレクターを用いた新しい高分解能運動量空間電子状態イメージング」, 田中清尚 (2015年).

科研費若手研究 (B), 「角度分解光電子分光及びフェムト秒時間分解電子線回折による高温超伝導起源の解明」, 出田真一郎 (2015年–2016年).

#### C) 研究活動の課題と展望

これまで整備・立ち上げを進めてきたUVSORのBL5Uの高分解能角度分解光電子分光ビームラインはユーザー利用を開始した。現在、高分解能を利用した角度分解光電子分光実験を行っており成果が出始めている。今年度は角度分解光電子分光装置の電子レンズ部(ディフレクター)の開発が完了し、昨年度導入した $\mu$ フォーカスビームと合わせることで微小な試料や不均一な試料の測定が可能となった。新しい高効率スピン分解測定手法の開発も進めている。

## 光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

岩 山 洋 士（助教）（2010年4月1日着任）

A-1) 専門領域：軟X線分子分光，光化学反応動力学

A-2) 研究課題：

- a) 液晶相物質の in situ 透過型軟X線吸収分光法の開発
- b) X線自由電子レーザーを用いた時間分解・透過型軟X線吸収分光法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 液晶分子は分子が凝集し集団となることで複屈折などの機能を有する材料であり，分子1個の性質を調べただけではその機能・物性解明には不十分である。水などの液相のX線吸収スペクトル計測を可能にした UVSOR BL3U の液体セルを用いて，in situ 液晶相での液晶分子を対象に透過型X線吸収スペクトル計測を行っている。実験で用いた試料は，代表的な液晶分子であり棒状形状を有する 4-Cyano-4'-pentylbiphenyl (5cb) を用いた。また固相・液晶相また液晶相・液体相の相転移温度がそれぞれ 22 °C, 35 °C と常温付近であるため，試料温度を制御することで3つの相での XAS 測定を行った。

固相・液晶相・液体相でX線吸収スペクトルのピークシフトが観測されたが，このエネルギーシフトから局所的な液晶分子周辺の弱い相互作用による電子状態の変化を理解するためには，高精度な理論計算と比較する必要がある。内殻空孔状態を計算することができるソフトウェア Stobe を導入し，量子化学計算を行えるよう環境を整え，スペクトルのピークアライメントを行った。

ベンゼン環由来の C 1s→ $\pi^*$  に対応するピークの温度変化に着目すると，固相から液晶相相転にともない高エネルギーシフトしていることが明らかになった。ベンゼン分子の先行研究例によると，このエネルギーシフトは分子間のベンゼン環間の  $\pi$ - $\pi$  相互作用が弱くなっていることに相当する。観測された高エネルギーシフトは固相から液晶相になり分子位置の秩序を失い，分子間の相互作用が弱くなったためと考えられる。

- b) X線自由電子レーザー SACLA BL1 を利用した液体試料用の pump-probe 法による時間分解・透過型軟X線吸収分光器の開発を提案し，2019年度 SACLA 基盤開発プログラムに採択され研究を進めている。化学反応の多くは溶液内で起こり，また光合成をはじめとした光化学反応また生命現象は細胞液内でおこることを考えると，固相・気相に加え液相を研究対象に加えることは重要である。特に，軟X線領域は生命において重要な炭素，窒素，酸素元素の K 殻吸収端を含む。SACLA BL1 の利用可能な基本波（1次光）の光エネルギーは約 40 ~ 120 eV であり，これまで軟X線吸収分光は難しいと思われていたが，我々は5次光，すなわち 600 eV までレーザー発振していることを気体試料 Ar(2p) および CO<sub>2</sub>(Cl<sub>1s</sub>, O1s) の透過型X線吸収スペクトルにより明らかにし，本 BL にて透過型軟X線吸収分光法が可能であることを示した。

B-1) 学術論文

**T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH,** “Controlling the Orbital Alignment in Atoms Using Cross-Circularly Polarized Extreme Ultraviolet Wave Packets,” *Phys. Rev. Lett.* **123**, 233401 (5 pages) (2019).

**Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA and M. KATOH**, “Coherent Control in the Extreme Ultraviolet and Attosecond Regime by Synchrotron Radiation,” *Nat. Commun.* **10**, 4988 (5 pages) (2019).

**H. FUKUZAWA, R. R. LUCCHESI, X. J. LIU, K. SAKAI, H. IWAYAMA, K. NAGAYA, K. KREIDI, J. R. HARRIES, Y. TAMENORI, Y. MORISHITA, I. H. SUZUKI, N. SAITO and K. UEDA**, “Probing Molecular Bond-Length Using Molecular-Frame Photoelectron Angular Distributions,” *J. Chem. Phys.* **150**, 174306 (5 pages) (2019).

**H. IWAYAMA and J. R. HARRIES**, “Resonant-Auger-State-Selected Dissociation Dynamics and Dissociation Limits of N 1s  $\rightarrow$   $\pi^*$  Core Excited N<sub>2</sub> Molecules Studied Using a Two-Dimensional Auger-Electron-Photoion Coincidence Method,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **232**, 40–44 (2019).

**K. FUCHIZAKI, T. SAKAGAMI and H. IWAYAMA**, “Pressure-Induced Local Symmetry Breaking upon Liquid–Liquid Transition of GeI<sub>4</sub> and SnI<sub>4</sub>,” *J. Chem. Phys.* **150**, 114501 (11 pages) (2019).

**J. R. HARRIES, H. IWAYAMA, S. KUMA, M. IIZAWA, N. SUZUKI, Y. AZUMA, I. INOUE, S. OWADA, T. TOGASHI, K. TONO, M. YABSHI and E. SHIGEMASA**, “Superfluorescence, Free-Induction Decay, and Four-Wave Mixing: Propagation of Free-Electron Laser Pulses through a Dense Sample of Helium Ions,” *Phys. Rev. Lett.* **121**, 263201 (5 pages) (2018).

#### B-6) 受賞, 表彰

岩山洋士, 原子衝突若手奨励賞 (2018).

#### B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第 27 回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2014).

第 28 回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2015).

第 32 回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2019).

日本物理学会領域1運営委員(原子・分子分科) (2018–2019).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2010–2012, 2018– ).

#### B-10) 競争的資金

松尾学術研究助成, 「極端紫外レーザー光によるクラスター発光分光分析」, 岩山洋士 (2010年).

科研費若手研究(B), 「自由電子レーザー励起によるレーザープラズマ光源の研究開発」, 岩山洋士 (2012年–2014年).

科研費若手研究(B), 「高温ガスセルを用いた振動励起した分子の光電子分光法の開発」, 岩山洋士 (2016年–2018年).