

2018年度修士論文発表会プログラム 2019年1月21-22日 場所：8号館2階大会議室

発表時間：17分 質疑応答：8分

1月21日

	開始時間	研究室	氏名	タイトル
1	9:00	高エネルギー実験	小西 達也	宇宙線ミュオンを用いた山体透視に向けた新たなシミュレーション手法の開発と透視データの評価
2	9:25	高エネルギー実験	柿本 詩織	Belle II実験ARICH検出器の光反射ミラー部における粒子識別性能の評価
3	9:50	高エネルギー実験	為近 彩智	Belle II実験PhaseIIランにおけるARICH検出器のアライメントおよび $B \rightarrow K^* \gamma$ 崩壊の探索
4	10:15	高エネルギー実験	吉川 広陽	改良型UNI検出器によるポジトロニウム5光子崩壊事象探索実験
5	10:40	素粒子理論	河野 晋之介	カイラル有効模型における真空構造での $U_A(1)$ 量子異常の役割
6	11:05	素粒子理論	隈川 健斗	ダイクォーク模型における重いバリオンの励起エネルギー及びダイクォークの性質
7	11:30	素粒子理論	鈴木 啓介	MINOS実験の解析の再考
休憩				
8	13:00	宇宙理論	井上 裕貴	渦巻銀河における星形成史
9	13:25	宇宙理論	橋詰 享亮	X-ray Emission of Pulsar Wind Nebulae (パルサー星雲のX線放射) (英文)
10	13:50	宇宙物理実験	早川 亮大	TES型X線検出器の多画素集積化に向けた基礎開発とK中間子原子実験への応用
11	14:15	宇宙物理実験	浅井 龍太	すだれコリメータを前段に用いるKirkpatrick-Baezミラーの開発と性能評価
12	14:40	宇宙物理実験	藤谷 麻衣子	マイクロマシン技術を用いた超軽量X線望遠鏡のドライエッチングと化学機械研磨に関する研究
13	15:05	宇宙物理実験	伊師 大貴	マイクロマシン技術を用いた超軽量X線望遠鏡の完成に向けた要素技術の開発
14	15:30	宇宙物理実験	布村 光児	積層配線 TES 型 X 線マイクロカロリメータの X 線性能評価に関する研究
休憩				
15	16:15	原子物理実験	栗山 みさき	多環芳香族炭化水素負イオンの光電子脱離
16	16:40	原子物理実験	吉田 茉生	炭素クラスター負イオンからの再帰蛍光の分光測定
17	17:05	原子物理実験	山田 陽平	中性子星合体による重元素合成の基礎研究としての多価イオン電荷交換分光
18	17:30	原子物理実験	野田 悠祐	極低温移動管法による分子イオンの移動度測定

1月22日

	開始時間	研究室	氏名	タイトル
19	9:00	素粒子理論	石田 和也	Brillouin-Wigner摂動論におけるツリー展開とループ総和法
20	9:25	非線形物理	菅野 皇太	非可積分系におけるトンネル分裂と準位間の大域的結合
21	9:50	量子凝縮系理論	土川 航太	スピン軌道相互作用を持ったリングトラップBose原子系の基底状態
22	10:15	強相関電子論	中村 憲吾	2軌道アンダーソンモデルの数値繰り込み群法による近藤効果の研究
23	10:40	強相関電子論	石飛 尊之	ダイヤモンド構造上の反強四極子秩序に誘起される電気磁気効果
24	11:05	電子物性	大西 翔太	ワイル半金属 $WTe_2$ の特異な電子輸送特性
25	11:30	電子物性	岸本 美晴	新奇Yb系化合物 $Yb_5Ir_6Sn_{18}$ の非フェルミ液体的物性異常の研究
休憩				
26	13:00	ソフトマター	沖山 綾馬	粉体の応力鎖と構造の関係
27	13:25	ソフトマター	柳沢 直也	泡沫の非平衡ダイナミクス～協同的崩壊と緩和～
28	13:50	表界面光物性	一ノ瀬 遥太	高純度単層カーボンナノチューブの分離精製と熱電物性
29	14:15	表界面光物性	岡田 遼太郎	ゲート制御アルカリ金属イオンインターカレーション技術の開発と層状化合物材料への応用
30	14:40	ナノ物性	岡部 碧	3次元ディラック電子系候補物質 $PtSn_4$ のNMR測定
31	15:05	ナノ物性	嶋崎 真佳	バンドル状態のSWCNTの古典分子動力学計算
32	15:30	ナノ物性	本郷 直也	異なる直径の単層カーボンナノチューブ混合フィルムの熱電物性
33	15:55	ナノ物性	高口 裕平	半導体原子層ヘテロ構造の合成と電界発光
34	16:20	ナノ物性	吉村 真太郎	半導体原子層ヘテロ構造の作製と電子輸送特性

**Abstract (A,C)**

**1/21, 2019**

# 宇宙線ミュオンを用いた 山体透視に向けた 新たなシミュレーション手法の開発と 透視データの評価

高エネルギー実験研究室

小西達也

一次宇宙線が大気と衝突する際、原子核反応を起こし $\pi$ 中間子やK中間子を生成する。これらはさらに原子核反応を起こしてその数を増やした後に崩壊し、ミュオン等を生じる。このような現象を空気シャワー現象と呼ぶ。ミュオンは電荷を持ちかつ強い相互作用をしない素粒子であり、電子と比べて非常に重いことから高い透過力を持つ。このような性質を持つミュオンを用いた大規模な物体の透視手法としてミュオンラジオグラフィがある。これはX線を用いたレントゲン写真と同様な原理で、透視対象を透過して来るミュオンフラックスの飛来方向分布を測定することで、対象の密度長分布を推定することができる。既に実用化されており、ピラミッドの隠し部屋探索や炉心溶融を起こした原子炉内部の燃料位置の探索、火山の内部透視による噴火予測の研究等に用いられる。

現在我々の研究室では高エネルギー加速器研究機構および岩手県立大学と共同で岩手山を対象に透視実験を行なっている。1cmの位置分解能を持つ1m四方の2枚の検出器を用いてミュオンの飛跡を検出し、透視を行っている。しかしながら、現状の検出器の構成では透視により山体内部の情報は得られておらず、透視の結果から山体内部の密度を求めると、予想される密度約 $2.7\text{g/cm}^3$ に対して、一桁以上小さい値となってしまっている。図1は岩手山における実データを用いた密度分布である。これは2つのバックグラウンドが影響していると考えられる。一つは電磁シャワーによるバックグラウンド事象であり、もう一つは大気および山体によって散乱されあたかも山体方向から来たかのように誤認識してしまう事象によるものである。図2に大気や山体における散乱事象の概念図を記す。山体のような大規模な物体に対しては、特に精度良く測定することが求められるにも関わらずこれらバックグラウンド事象が著しく影響していると考えられるが、その定量的な見積もりは行われていない。大規模な物体の透視を精度良く行うためにはこれらのバックグラウンド事象に関する理解が必要不可欠となる。

我々の研究室では岩手山の他に、高精度のミュオンラジオグラフィシステム開発の為に筑波山に対しても透過ミュオンの測定を行なってきた[1]。岩手山での測定に用いた

検出器と同様のものを4枚とトロイド磁石を組み合わせた検出器により測定を行っており、トロイド磁石の前後に2枚ずつ検出器を配置し、磁場により曲げられたミュオンを観測することで飛来方向とフラックスに加え運動量情報も得られるようにした。

現在も行なっている岩手山での測定では検出器を2枚用いている。本研究では筑波山の測定で用いた4枚の検出器の内、トロイド磁石より前段2枚の検出器で岩手山での測定を模擬し、バックグラウンド事象の定量的な評価を行なった。事象のヒット位置及び時間差分布を用いた電磁シャワー由来のバックグラウンド事象の排除を行い、さらに独自のシミュレーション手法を開発して散乱による流入・流出による影響の定量的な評価を行なった。

図3では散乱を考慮しない場合に期待される年間イベント数、図4では開発したシミュレーションを用いて散乱を考慮した場合に期待される年間イベント数を示す。

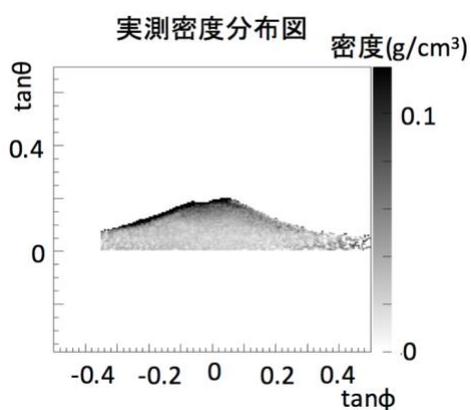


図1：実データを用いた岩手山における密度分布図

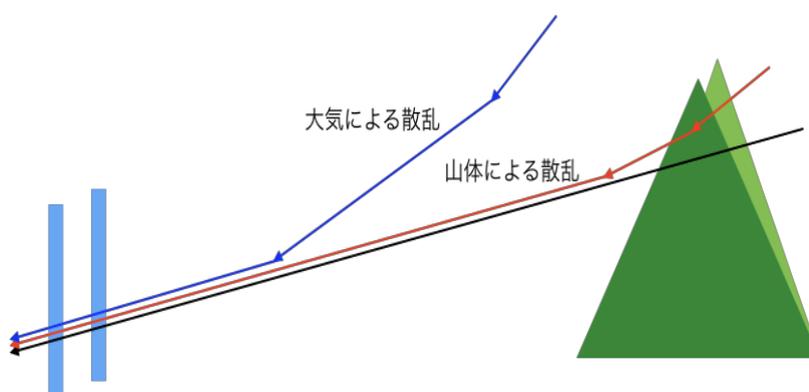


図2：大気及び山体における散乱事象の概念図

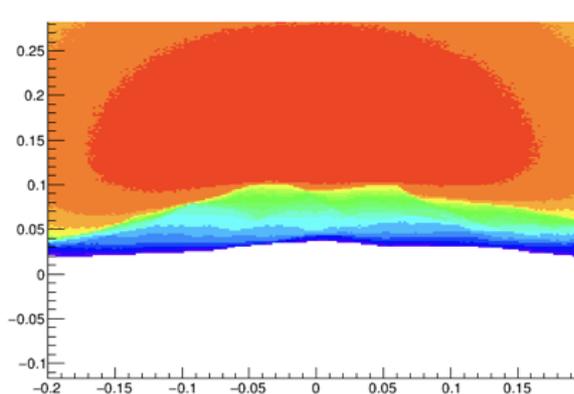


図3：散乱を考慮しない場合に期待される年間イベント数

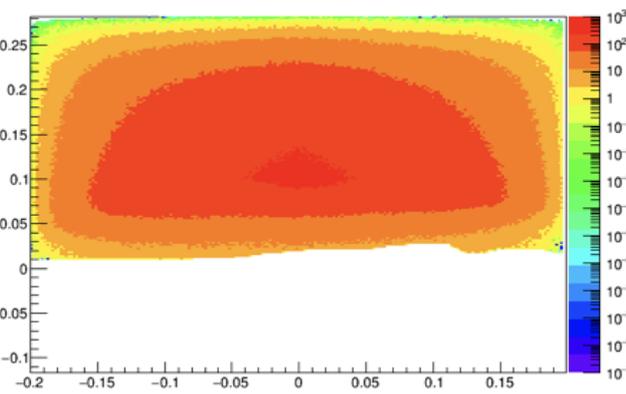


図4：散乱を考慮した場合に期待される年間イベント数

参考文献：

[1] 市川 星磨 首都大学東京大学院 理工学研究科 修士論文(2017)

# Belle II 実験 ARICH 検出器の光反射ミラー部 における粒子識別性能の評価

高エネルギー実験研究室

柿本詩織

茨城県つくば市にある高エネルギー加速器研究機構では Belle II 実験が 2018 年 4 月から本格的に始まった。Belle II 実験は SuperKEKB 加速器を用いて電子・陽電子を加速し衝突させ、大量の B 中間子を生成するルミノシティーフロンティア実験である。B 中間子の崩壊過程を精密に測定することにより崩壊分岐比や CP 対称性等の標準模型からのずれを調べ、新物理を探索することを目的としている。前身の Belle 実験では B 中間子の稀崩壊を測定するにはデータ量が不足していたので、本実験ではルミノシティーを約 50 倍に増やし統計量・精度を向上させる。

Belle II 検出器は各役割に応じた複数の検出器からなる複合型測定器であり、その中でも Endcap 部にある ARICH(Ring Imaging Cherenkov)検出器(図 1)は荷電 K/ $\pi$  中間子の識別の役割を担う。ARICH 検出器は輻射体であるシリカエアロゲルと光検出器 HAPD

(Hybrid Avalanche Photo detector) の 2 層構造になっている。荷電粒子が輻射体を通過する際に円錐状に発生するチェレンコフ光を光検出器 HAPD で 2 次元リングイメージとして検出し、その粒子の質量による違いを用いて粒子識別を行う。

ARICH 検出器では、ARICH 検出器の外周を覆うようにミラー(ガラス素材の反射板)が取り付けられている(図 2)。トラックが ARICH 検出器の端に入射した際、円錐状に放出されたチェレンコフ光の一部が ARICH 検出器の外側に抜けてしまうための全体をとらえることができなくなってしまう。そこでミラーを設置することにより ARICH の端にきた光子を反射させて HAPD で検出することによりリングイメージの全体をつかむことができる。

本研究ではミラーがある場合とない場合でどの程度識別効率に差がでるのかを検証し、さらにミラー設置精度(R 方向に 5 mm 移動させた場合)についての識別効率の関係についても確認した。ミラーが正しい位置にある場合と比べ K 中間子の識別効率はどちらも誤差の範囲内だったが、 $\pi$  中間子の識別効率についてミラーがない場合は約 6%、設置精度が悪い場合は約 4%ほど低下した。そのためミラーは ARICH 検出器に必要であり、またミラー位置のずれの測定と補正を行う必要があることがわかった。

さらに本研究ではミラーが本来の位置からずれた際にチェレンコフ角分布にどのような変化があるのかシミュレーションを行うことにより確認した。シミュレーションの結果をもとに 4 月から 7 月に行われた試運転(phase2)でのデータを解析した結果、ミラーの位置が本来の位置からずれていることがわかった。さらにその位置のずれを考慮してリング

イメージを再構成したところ、チェレンコフ角ピークが 0.998 から 0.999 となり予想値の 1 に近づき、さらにチェレンコフ角ピークの角度分解能についても 4%減少し改善された。

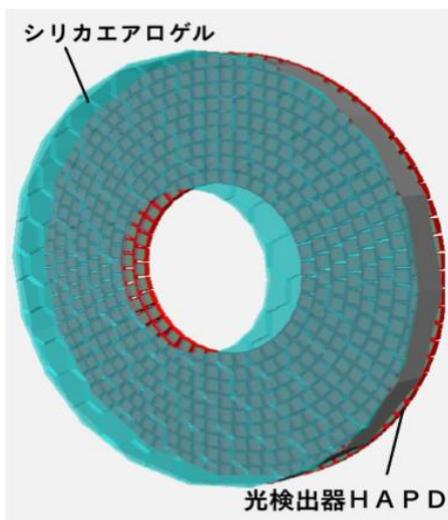


図 1:ARICH 検出器の構造イメージ。輻射体シリカエアロゲルと光検出器 HAPD の 2 層構造になっている。



図 2:ARICH 検出器のミラー。外壁内部に設置されており、これにより ARICH 端にきた光子を反射させ光子数を維持できる。

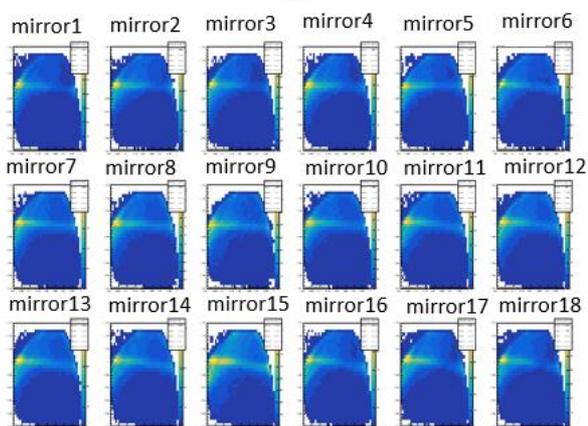


図 3:補正前のチェレンコフ角の一部。ミラーのずれによりばらついている

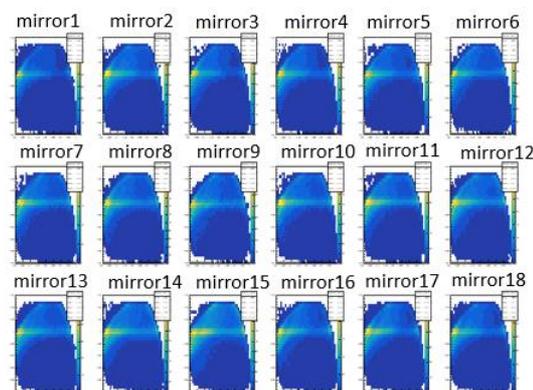


図 4:補正後のチェレンコフ角の一部。チェレンコフ角分布が直線になり改善されたことがわかる。

# Belle II 実験 Phase II ランにおける ARICH 検出器のアライメント および $B \rightarrow K^* \gamma$ 崩壊の探索

高エネルギー実験研究室  
為近彩智

Belle II 実験は、茨城県つくば市にある高エネルギー加速器研究機構(KEK) で稼働し始めた SuperKEKB 加速器を用いて 7GeV に加速した電子と 4GeV に加速した陽電子の衝突により  $B$  中間子対を大量に生成し、崩壊過程を Belle II 検出器を用いて詳細に調べるルミノシティフロンティア実験である。 $B$  中間子の崩壊過程に含まれるごく稀な事象を精密に調べることで、標準模型を超える新しい物理を探索することを目的としている。

先行研究である Belle 実験では  $B$  中間子と反  $B$  中間子の CP 対称性の破れを発見し、2008 年の小林・益川両氏のノーベル物理学賞受賞に貢献した。2010 年 6 月より SuperKEKB 加速器への加速器のアップグレードと Belle II 検出器への検出器のアップグレードを行い、2018 年 4 月から 7 月までの間、Belle II 実験ではコミッショニングの第二段階 (Phase II) として初のビーム衝突によるデータ収集を行った。

Belle II 検出器は複数の検出器から構成される。そのうちのひとつである Aerogel Ring Imaging Cherenkov 検出器 (ARICH) は、荷電  $K$  中間子と荷電  $\pi$  中間子の粒子識別を担う。ARICH はシリカエアロゲル輻射体と光検出器 Hybrid Avalanche Photo-Detector (HAPD) からなり、荷電粒子がシリカエアロゲルを通過する際に放射するチェレンコフ光をリングイメージとして HAPD で観測する (図 1)。荷電粒子の質量の違いに伴うチェレンコフ光のリングイメージの半径の違いから、粒子識別を行う。[1]

ARICH は光子の位置情報を粒子識別に用いるため、設置位置のずれは識別性能の低下をもたらす。本研究では、ARICH 検出器の設置位置のずれを測定および補正するため、モンテカルロシミュレーションにおいて飛跡検出器に対する ARICH 検出器のずれを模擬し、アライメント手法を開発した。また実際のビーム衝突データを用いて、本研究で開発した手法により ARICH 検出器のアライメントを行った。その結果、約 1mm の並進および約  $0.1^\circ$  の回転があることを特定した (図 2)。さらにアライメントを行うことでチェレンコフ角分布の幅が約 7% 狭くなった。これは  $K/\pi$  分解能力の約 7% の向上に対応する。

$B$  中間子の崩壊モードの 1 つである  $B \rightarrow K^* \gamma$  はクォークレベルでは  $b \rightarrow s \gamma$  過程で表される。この崩壊過程はフレーバーを変える中性カレント過程であり、ループを介してのみ発

生ずる (図 3)。このようなループを介した崩壊過程においては、質量の大きな仮想粒子の寄与が大きく新物理に敏感である。

本研究では、Belle II 実験における  $B \rightarrow K^* \gamma$  事象の再発見を目指して、 $B^+ \rightarrow K^{*+} \gamma \rightarrow K^+ \pi^0 \gamma$ 、 $B^0 \rightarrow K^{*0} \gamma \rightarrow K^+ \pi^- \gamma$ 、 $B^+ \rightarrow K^{*+} \gamma \rightarrow K_s \pi^+ \gamma$  の 3 つの崩壊モードの解析を行った。モンテカルロシミュレーションを用いて事象選択条件の最適化、及び事象数の見積もりを行った。その事象選択条件を用いて、Belle II 実験の初のビーム衝突データの解析を行った。その結果、 $B^0 \rightarrow K^{*0} \gamma \rightarrow K^+ \pi^- \gamma$  で 4 つの信号事象候補 (図 4 の  $M_{bc} > 5.27 \text{ GeV}/c^2$  の 4 事象)、 $B^+ \rightarrow K^{*+} \gamma \rightarrow K^+ \pi^0 \gamma$  で 1 つの信号事象候補を観測し、崩壊分岐比をそれぞれ  $\text{BF}(B^0 \rightarrow K^{*0} \gamma) = (2.3 \pm 2.2 \pm 0.3) \times 10^{-5}$ 、 $\text{BF}(B^+ \rightarrow K^{*+} \gamma) = (4.1 \pm 6.7 \pm 2.0) \times 10^{-5}$  と見積もった。この値は、これまでの B ファクトリー実験による世界平均と矛盾がない値である。

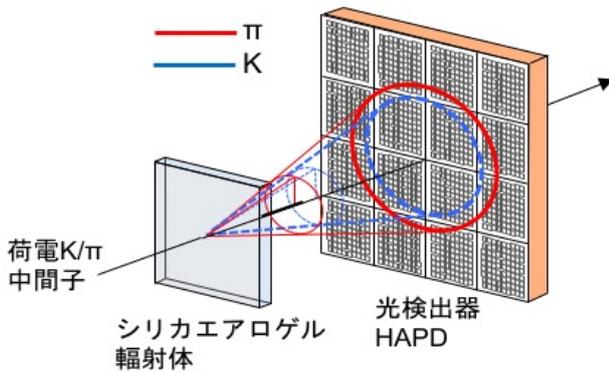


図 1: ARICH 検出器の識別原理図

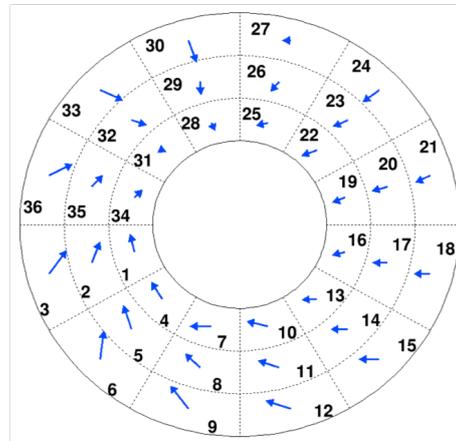


図 2: 測定した ARICH 検出器のずれ

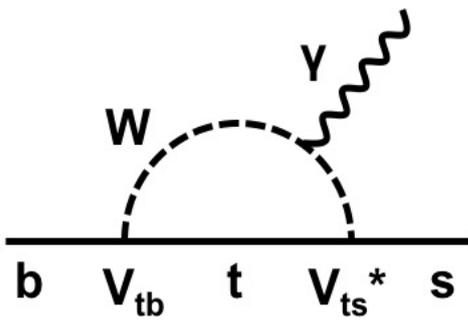


図 3:  $b \rightarrow s \gamma$  の崩壊過程

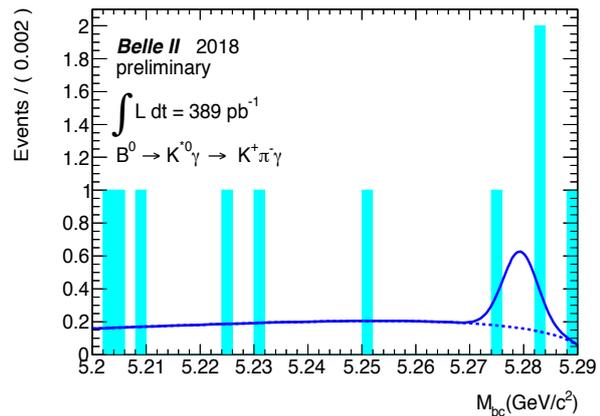


図 4:  $B^0 \rightarrow K^{*0} \gamma \rightarrow K^+ \pi^- \gamma$  事象候補

参考文献：

[1] S. Iwata, Development of the Aerogel RICH counter for a super B-factory experiment, Ph.D Thesis (2016)s

# 改良型 UNI 検出器による ポジトロニウム

## 5 光子崩壊事象探索実験

高エネルギー実験研究室

吉川 広陽

ポジトロニウムは電子と陽電子の電磁相互作用による束縛状態である(図 1)。レプトン系で 1022 keV と低エネルギーなことから、強い相互作用や弱い相互作用の影響が少なく、量子電磁力学のみで記述することができる。ポジトロニウムにはトータルスピン 0 の 1 重項状態と、トータルスピン 1 の 3 重項状態があり、それらはそれぞれパラポジトロニウム、オルソポジトロニウムと呼ばれる。オルソポジトロニウムは荷電共役不変性により奇数本(ほとんどが 3 本)のガンマ線に崩壊する。ポジトロニウムの 5 光子崩壊過程は高次 QED 現象であり、直接観測は世界でもまだ実現されていないユニークな実験である。

我々は多光子崩壊検出器 UNI III を用いて 5 光子崩壊事象の検出実験を行っている。UNI III 検出器の外観写真を図 2 に示す。UNI III 検出器は、検出器中心を囲むように 32 面構造体の 30 面にそれぞれ NaI シンチレーターを配置し、構造体中心で生成したポジトロニウムの崩壊光子を検出する。UNI III 検出器では、前身である UNI II からポジトロニウム生成量の増加とバックグラウンド事象低減を目指し、陽電子線源を中心に配置するポジトロニウム生成部の改良、コンプトン散乱遮蔽用鉛シールドの延長を行った。これにより UNI II 検出器で大きなバックグラウンド事象となっていた 3 光子崩壊事象由来のイベントを抑制することができ、より効率的な 5 光子崩壊事象の検出が可能になっている。

UNI III 検出器を用いたデータ取得は、2017 年 1 月より開始され、これまでに陽電子トリガー数にして  $8.1 \times 10^{12}$  のイベントを得た。我々は得られたデータに対し、性能評価のための 3 光子崩壊事象の解析と 5 光子崩壊事象の解析の 2 種類の解析を行った。解析においては、分解能の向上のために、より精密なエネルギーキャリブレーションおよび時間情報補正を行った。また、5 光子崩

壊事象解析には、より効率的なバックグラウンド排除のために3光子崩壊再構成エネルギーを利用した新たな選別手法を用いて検出効率の向上を図った。

その結果、2イベントの5光子崩壊事象候補を検出した(図3)。GEANT4を用いたシミュレーションによる5光子崩壊事象検出数の期待値は $0.97 \pm 0.06$ イベント、バックグラウンド事象の混入数は $0.32^{+0.44}_{-0.24}$ イベントと見積もられた。これは観測された結果に無矛盾である。

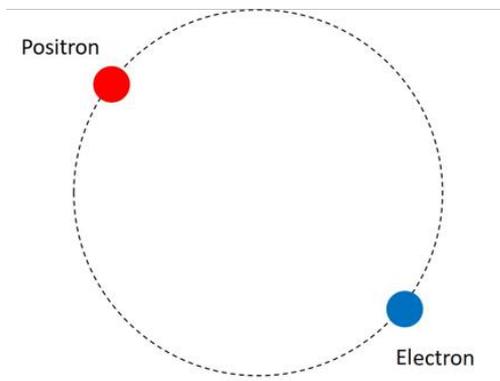


図1 ポジトロニウム概念図

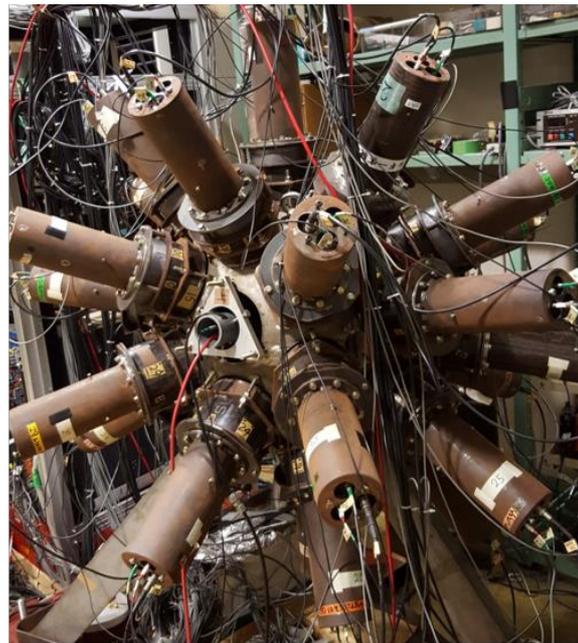


図2 UNI III 検出器外観

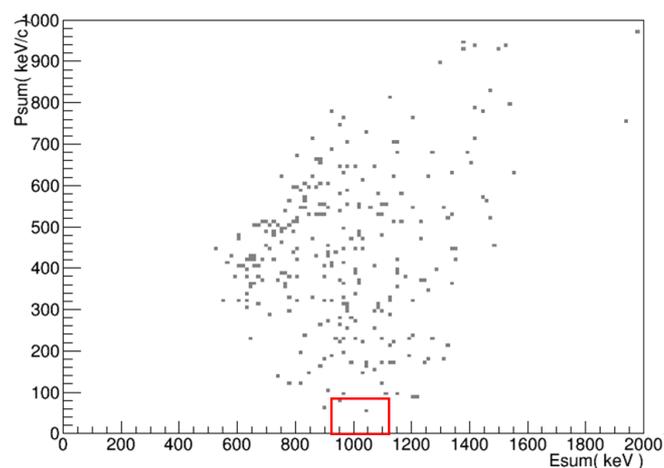


図3 5光子崩壊事象候補イベントの運動量和(縦軸)とエネルギー和(横軸)分布。赤枠内の2イベントが最終的な候補として選択された。

# カイラル有効模型における 真空構造での $U_A(1)$ 量子異常の役割

素粒子理論研究室

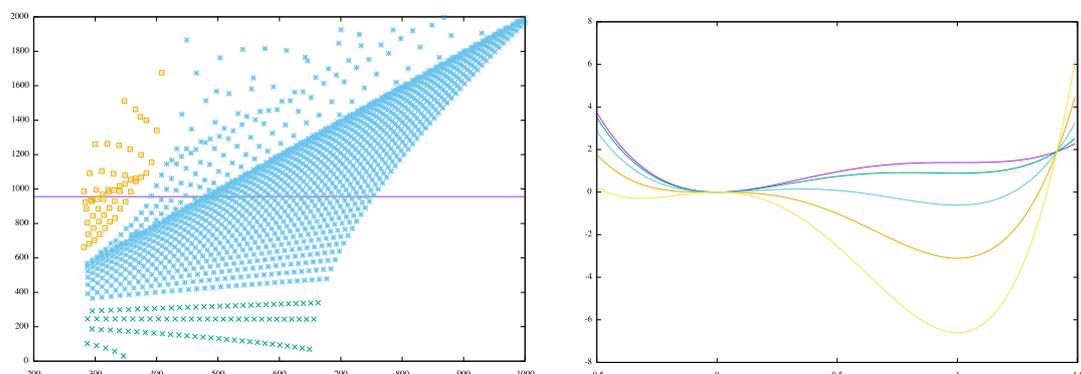
河野 晋之介

粒子の運動量を決めた場合に、その向きに対して右巻きあるいは左巻きにスピンの向きを決めることができる。特に粒子の質量が0ならば粒子の速度は光速になるため、観測者の速度に依らず運動量の向きが決定され、それに伴いスピンの向きも固定される。この様に固定されたスピンをカイラリティと呼ぶ。カイラル対称性とはスピンの向きを固定された粒子に対して独立に変換操作を加えてもラグランジアンが変わらない場合に生じる対称性のことである。

しかし、カイラル対称性は実際には破れている。これは、カイラル対称性があると仮定した場合に縮退する  $\pi$  中間子と  $\sigma$  中間子に質量差があることから見える。その破れ方に自発的な破れがある。自発的な破れとは、ラグランジアンが対称性を持ちながらも、ポテンシャルエネルギーを最小にして真空状態になろうとすると、その対称性を破ってしまうことである。このカイラル対称性が破れると、質量が0である南部ゴールドストーンボソンが出現するとともに、クォークが構成子クォークとしての質量を獲得するようになる。

カイラル対称性を有する模型に、クォークの場を用いた Nambu-Jona-Lasinio 模型と、中間子の場を用いた線形  $\sigma$  模型がある。前者ではクォークの4点相互作用の結合定数  $g_s$  がある臨界値を超えた場合にカイラル対称性の自発的破れを引き起こすことが知られている。同様に、後者では  $\sigma$  場の2次の結合定数  $\mu^2$  が負になる領域で自発的破れを引き起こすことが知られている。しかしこれらの模型において、 $U_A(1)$  量子異常を考慮すると、本来自発的破れを起こさない領域においても破れを引き起こすことがあると言われている。そこで本研究では、2つの模型において量子異常が与える真空構造への影響と、通常の破れとそうでない破れを区別するための条件を導いた。次ページの左図は、NJL 模型を用いて縦軸に  $\eta_0$  の質量 [MeV]、横軸に構成子クォーク質量 [MeV] を示したグラフである。ここでは相互作用の結合定数の大きさすなわちカイラル対称性の破れの種類に応じて  $\eta_0$  の質量を分類している。実験で確認されている  $\eta_0$  の質量 (956 MeV) の紫線に注目すると、クォークの質量増加に伴い、通常でない破れを起こす黄色の

領域から通常の破れを起こす青色の領域に移る様子が見える。このことから NJL モデルにおいてクォーク質量が破れ方を決めることが判明した。



右図は、線形  $\sigma$  模型を用いて縦軸に有効ポテンシャル、横軸に  $\sigma$  場として  $\sigma_0$  の質量を変えたグラフである。 $\sigma_0$  の質量減少に伴い、原点が上に凸から下に凸に移ることから、この模型で破れ方が  $\sigma_0$  の質量に依存することが判明した。

#### 参考文献：

- [1]S. Kono, D. Jido, Y. Kuroda, M. Harada, in preparation
- [2]Nambu, Y and Jona- Lasinio, G, Phys. Rev. 122, 345(1961)
- [3]U. VOGL and W. WEISE, Prog. Part. Nucl. Phys. 27, 195(1991)
- [4]Tetsuo Hatsuda and Teiji Kunihiro Physics Reports 247 (1994)
- [5]Shuntaro Sakai and Daisuke Jido PHYSICAL REVIEW C 88, 064906(2013)
- [6]Shuntaro Sakai and Daisuke Jido Prog. Theor. Exp. Phys. 2017, 013D01
- [7]GEORGE RIPKA, Quarks Bound by Chiral Fields (CLARENDON PRESS・OXFORD, 1997)
- [8]Franz Gross, Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory (John Wiley, Sons, 2008)
- [9]V. Koch, Aspects of Chiral Symmetry, Int. J. Mod. Phys. E (1997)
- [10]Alessandro Bettini, Introduction to Elementary Particle Physics (Cambridge University Press, 2014)
- [11]H. Nagahiro, M. Takizawa, S. Hirenzaki, Phys. Rev. C74, 045203(2006)

# ダイクォーク模型における重いソバリオンの 励起エネルギー及びダイクォークの性質

素粒子理論研究室

隈川 健斗

近年、ハドロン物理ではチャームクォークやボトムクォークといった重いクォークを含むハドロンが実験的に発見されており、エキゾチックハドロンといった現在のクォーク模型では説明が困難なハドロンも発見されているため、単純なハドロン内部構造を見直す必要がある。内部構造の候補としてマルチクォーク構造やハドロン分子構造等があげられるが、特に、重いクォークを1つ含むソバリオンでは、2つの軽いクォークがダイクォークとしてふるまい、クォーク・ダイクォークの束縛状態として記述されることが期待されているように、ダイクォークの存在や性質に注目が集まっている。

ダイクォークはソバリオン内の2つのクォークの仮想的な状態で表すことができる複合粒子であり、ソバリオンをクォーク・ダイクォーク描像で見ることができる。ここでダイクォークのカラー電荷について考えると、ソバリオン全体で“白色”である必要があり、クォークのカラー電荷は対称である**3**であるので、“白色”にするためにはダイクォークのカラー電荷を反対称である **$\bar{3}$** を取る必要がある。これは、クォーク(**3**)と反クォーク( **$\bar{3}$** )で構成されるメソンのカラー構造と同じである。

本研究では、上で記述したカラー近似よりダイクォークを点粒子のように扱うPoint-like modelと、ダイクォークに量子的な広がりを持たせたSizable modelの2つのモデルを考える。Point-like modelではメソンと同じカラー構造を取ることから、重いクォークコニウムをよく再現するポテンシャル

$$V(r) = -\frac{4\alpha_s}{3r}\hbar c + kr + V_0$$

を用いて計算を行う[1]。その際、ポテンシャルパラメータをチャーモニウムの実験値から決め、この値を用いてチャームクォークを1つ含むソバリオン $\Lambda_c$ の励起エネルギーを計算する。すると、同じカラー構造で仮定をしているにもかかわらず

らず、 $\Lambda_c$ 粒子の実験値を再現することはできなかった。そのとき、カラーに依るポテンシャルパラメータ $k$ を変えたところ、およそ半分の値で再現できた。

今研究ではカラー近似のみを考えており、このダイクォーク描像ではメソンとバリオンは同じカラー構造であると仮定しているため、パラメータ $k$ の値を変えることは望ましくない。そこで、Point-like modelの改善策として考えた Sizable modelでは、パラメータ $k$ の値は変えず、ダイクォークにサイズを持たせた[2]。このモデルでは、ダイクォークの広がりパラメータ $\beta$ を $\Lambda_c$ 粒子の1p軌道の励起エネルギーを再現するように求めた。このとき、パラメータは $\beta = 1.0[\text{fm}]$ となり、この結果からダイクォークの平均二乗直径は $1.2[\text{fm}]$ 程度という計算結果が得られた。

この両モデルのパラメータを求めた後、ヘビークォークを1つ含むバリオン( $\Lambda_h, \Xi_h, \Sigma_h, \Xi'_h, \Omega_h$ )についてダイクォーク質量と励起エネルギーの計算を行い、実験値と比較することを系統的に見た。例として、 $\Xi_c$ について $\Lambda_c$ で求めたパラメータを用いて2つのモデルで計算を行うと、予言となる計算値でおおよそ実験値を再現することができた(図1)。また、この2つのモデルによる計算値について比較を行うと、2s軌道において特徴的な違いを見ることができた。最後に、最近発見されたチャームクォークを2つ持つバリオン $\Xi_{cc}$ についても計算を行い、励起スペクトルの予言を行った。

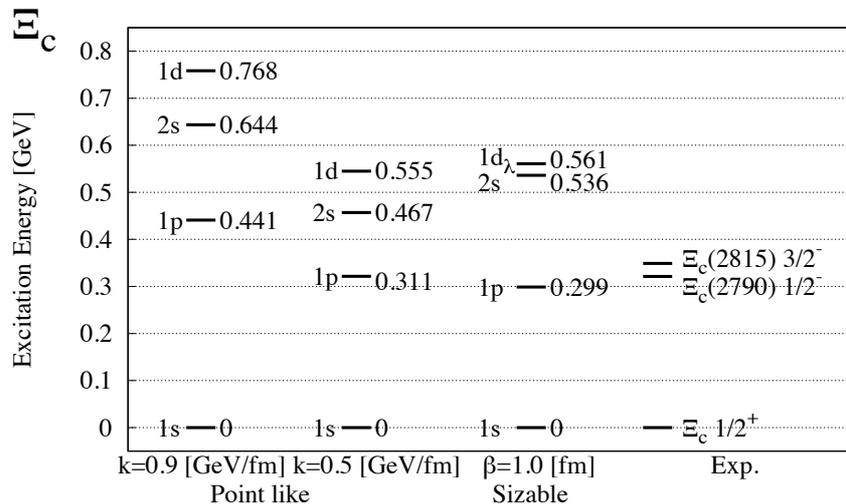


図1:  $\Xi_c$ の計算値と実験値の比較

参考文献:

- [1] Daisuke Jido and Minori Sakashita, PTEP, 2016 (2016) no.8, 083D02.
- [2] Kento Kumakawa and Daisuke Jido, PTEP, 2017 (2017) no.12, 123D01.

# MINOS 実験の解析の再考

素粒子理論研究室

鈴木啓介

素粒子物理学においてニュートリノと呼ばれる素粒子が存在する。この素粒子としての性質のみではなく波としての性質を持つ。この波としての性質に着目した場合に3つの固有状態（質量固有状態）に分けられると考えられている。ニュートリノはこの3つの要素が干渉した状態で存在している。混ざり合った状態は電弱相互作用によって、質量固有状態とは別の3つの固有状態（フレーバー固有状態）として観測されている。我々が観測出来るのはフレーバー固有状態でのニュートリノだけであるので、常に質量固有状態の波が合成されたニュートリノ波を観測しているということであるため、うなりのある波を観測していることを意味する。質量固有状態は位相を持ち、時間・空間発展するためうなりが変化する。フレーバー固有状態のニュートリノの種類が変化して見える現象が生まれる。ニュートリノのフレーバーの変化を観測することで、フレーバー固有状態を形成する質量固有状態の混ざり方や質量固有状態の質量（振動パラメータ）を観測できる。そのため、振動パラメータを観測するための実験が世界中で行われている。

私はこの中で、アメリカのフェルミラボが行った MINOS 実験について研究を行った。MINOS 実験は加速器によって人工的に生成したニュートリノを検出器に飛ばし、その変化を観測する実験である。MINOS 実験の結果に対して、本来1に近づくほど精度の良い実験であることを示す実験の指標値が1から外れた値を持ち、精度が良くないと言われている。また、論文に振動パラメータが、重みのない範囲のみで書かれていることから、本研究ではニュートリノとその反粒子である反ニュートリノに対して、その指標値を改善することを動機として、現象論的に補正を入れて解析を再度行った。また、その解析から得られた振動パラメータが T2K や NOvA といった他の実験が出した最新の結果と比べて如何様なものとなるかを調べた。

**参考文献：**

- [1] MINOS Homepage
- [2] NOvA Homepage
- [3] T2K Homepage
- [4] P.Adamson et al. , arXiv:1403.0867v2
- [5] P.Admason et al. , DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.191801
- [6] P.Adamson et al. ,PHYSICAL REVIEW D77, 0722002 (2008).
- [7] D.G. Michael et al. , arXiv:0805.3170
- [8] Philip R. Bevington, D. Keith Robinson, Data Reduction and Error Analysis for the Physical Science (3rd edition),
- [9] Steve BAKER and Robert D. COUSINS, CLARIFICATION OF THE USE OF CHI-SQUARE AND LIKELIHOOD FUNCTIONS IN FITS TO HISTOGRAMS
- [10] 稲垣宣生, 数理統計学 自然科学の統計学 (第2版) , 裳華房
- [11] 東京大学出版会, 基礎統計学 III 自然科学の統計学 (第12刷)、東京大学教養学部統計学教室

# 渦巻銀河における星形成史

宇宙理論研究室

井上 裕貴

渦巻銀河の観測から、星形成を行なっている渦巻銀河の星形成率 ( $\dot{M}_*$ ) と銀河内の星の総質量 ( $M_*$ ) には相関があることが知られており、赤方偏移で  $z = 0$  から少なくとも  $z \sim 6$  あたりまで成り立っていることが確認されている。この相関のことを星形成銀河の Main Sequence (MS) と呼び、概形は  $\dot{M}_* \propto M_*^\alpha$  でフィッティングされる。MS の傾きを表す  $\alpha$  について、典型的には 0.4 から 1.0 の間の値をとることが多いが、その  $M_*$  依存性や  $z$  依存性については観測によって一致していない。MS について多くの観測は、ベキ ( $\alpha$ ) が一定の直線的な形を示してきた [1, 3, 4]。しかし最近の一部の観測は、 $M_* \sim 10^{10.5} M_\odot$  に見られる、turnover と呼ばれるベキの転換点を示している [2, 5]。turnover が存在する観測においては turnover より高質量側で MS の傾きが緩くなり折れ曲がった形をしており、turnover は  $z$  が小さいほど顕著に現れる。

観測によって MS の形状が異なるだけでなく、MS 進化についての観測結果の理論的裏付けも十分にはなされていない。特に turnover の有無については、未だ結論が出ていない。本論文では銀河中の星形成モデルを構築して MS の進化を再現することで、MS 観測に示唆を与えることを目的とする。

今回モデルを立てる際、銀河はバルジを無視したディスクのみからなる渦巻銀河であり、衝突・合体やガス降着のない孤立系であることを仮定した。また簡単のため、星形成を始める時刻は銀河質量に依らず同時と仮定する。銀河中の星形成率を銀河中のガス質量 ( $M_g$ ) と関連づけ  $\dot{M}_* = \epsilon M_g^N$  で与え、系内のガスの収支の式を  $\dot{M}_g = -a \dot{M}_*$  で与える。ここで  $\epsilon$  は星形成効率を示し、 $a$  はガスの減る正味の割合を示す。簡単のために  $\epsilon$  と  $a$  は定数と仮定する。これらの式を組み合わせ積分することで  $\dot{M}_*$  と  $M_*$  を時間の関数として得ることができる。そして各時刻でプロットすることにより、 $t = 0 - 13$  Gyr あるいは  $t = 0 - 11$  Gyr の範囲で MS の時間発展を再現する。

図に本モデルの結果を示す。turnover を持たない直線に近い MS を表すためには、 $1 \leq N \lesssim 1.2$  である必要がある。対して turnover を持つ折れ曲がった MS を表すためには、 $N \gtrsim 1.5$  である必要がある。しかし baryonic Tully-Fisher 関係とディスク・ハローサイズ関係等の議論から  $\dot{M}_* \propto M_b^{-\gamma} M_g^{1.4}$  を得る。ここで  $M_b = M_* + M_g$ 、 $0.27 \leq \gamma \leq 0.40$  である。この結果から  $N \gtrsim 1.13$  のモデルは否定され、turnover の再現をすることができない。

バルジを持たない孤立系を仮定した本モデルは、turnover を持たない直線的な MS

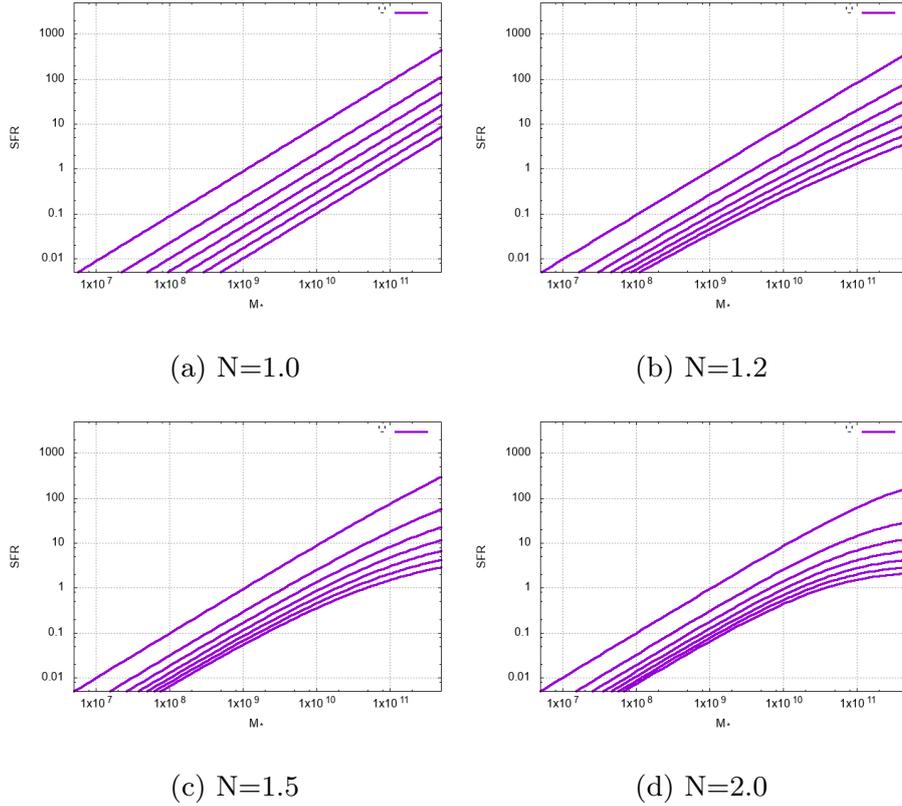


図 1: 本モデルの各  $N$  に対する MS の進化 ( $t = 1 \text{ Gyr}$  から  $2 \text{ Gyr}$  ごとに  $13 \text{ Gyr}$  まで)。 $\epsilon$  は  $M_g(0) = 10^{11} M_\odot$  で  $\dot{M}_*/M_g = 4 \text{ Gyr}^{-1}$  となるよう決定。  $a = 1, M_*(0) = 0$ 。

を支持する。もし一部観測での turnover が実際に存在するならば、バルジの発達や衝突・合体による星形成率への影響を考える必要があることが示唆される。

## 参考文献

- [1] Elbaz, D., Daddi, E., Le Borgne, D., et al. 2007, *A&A*, 468, 33
- [2] Lee, N., Sanders, D. B., Casey, C. M., et al. 2015, *ApJ*, 801, 80
- [3] Noeske, K. G., Weiner, B. J., Faber, S. M., et al. 2007, *ApJ*, 660, L43
- [4] Pearson, W. J., Wang, L., Hurley, P. D., et al. 2018, *A&A*...615A.146P
- [5] Tomczak, A. R., Quadri, R. F., Tran, K.-V. H., et al. 2016, *ApJ*, 817, 118

# パルサー星雲の X線放射 (英文)

宇宙理論研究室

橋詰 享亮

パルサー星雲 (PWN) とは, パルサーの周囲に形成される雲状の天体であり, パルサー風と超新星残骸 (SNR) の相互作用によって生じると考えられている (Kennel & Coroniti 1984a [1]). この相互作用により生じる逆流衝撃波 (RS) がパルサー風の領域と PWN を隔てている. パルサー風は中心に位置するパルサーから生じており, 大量の電子・陽電子とトロイダル磁場を PWN へ運んでいる. 電子・陽電子は, 磁場を持つパルサーの自転によって生じる表面の強い起電力によって, 光速近くにまで加速されて放出される. また, トロイダル磁場はパルサーの持つ双極子磁場の自転による巻き込みによって作られる. これらの粒子と磁場が RS を通して PWN に注入されるため, PWN は高エネルギーの磁化した荷電粒子によって構成されている. 故に, PWN 内ではそれらの粒子によるシンクロトロン放射や逆コンプトン散乱といった非熱的放射をしていると考えられている. また, PWN の X線放射に関してはシンクロトロン放射が支配的である.

典型的な PWN の例としてかに星雲があり, 可視光や電波, X線など様々な波長領域での観測が行われてきた. しかし, X線とその他の波長域による観測ではその形状が大きく異なる. 例えば, 可視光による観測では図 1 の左図のような楕円形の構造となり (可視光星雲), 長軸半径がおおよそ 2 pc の大きさになる. その一方で, チャンドラによる X線での観測においては図 1 の右図のようなトーラスとジェットの構造が見られ (X線星雲), 大きさは可視光星雲のおよそ半分となる. この X線星雲の特徴を説明するためにはパルサー風の軸対称性を考慮し, X線星雲内の状態を調べる必要がある. 本研究では X線星雲のトーラス構造にのみ着目し, その形成のされ方を軸対称性を考慮して調べた.

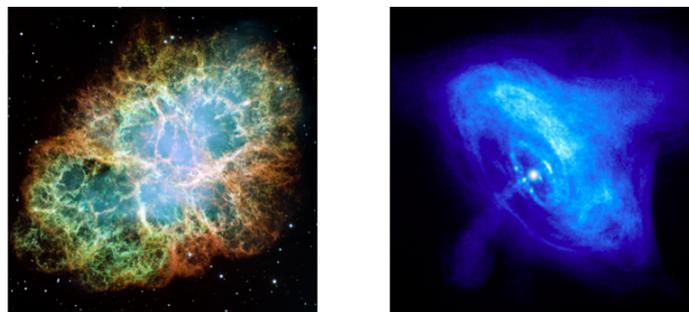


図 1 かに星雲の可視光観測 (左図: (Credit: NASA, ESA, J. Hester, A. Loll (ASU)) [2]) と X線観測 (右図: (Credit: NASA/CXC/ASU/J. Hester et al.) [3])

PWN のトーラス構造を調べるために、X線星雲の領域を赤道平面付近に制限した二つのモデルを用意し、それぞれの中心からの距離とX線輝度の関係を一次元の磁気流体計算を用いて調べた。一つは放射状流モデルであり、X線星雲内において極座標を用いて計算を行えるようにしたものである。これに似た計算は Shibata et al. (2003 [4]) においても行われている。もう片方は回転軸方向の流れを無視した円筒対称流モデルであり、先行研究におけるパルサー星雲の二次元流体シミュレーション (Del Zanna et al. 2004 [5]) の結果を元にモデルを作った。それによると星雲内では流れが赤道平面に片寄り、その方向はパルサーの回転軸に対しておよそ垂直になる。そのため、このモデルにおいてはそのシミュレーション結果に近い簡単な流れを設定し、円筒座標を用いて計算を行えるようにした。また、それぞれのモデルにおいてX線星雲の厚さを変えた場合の計算も行った。

これら二つのモデルの計算結果とチャンドラによる観測との比較を行い、観測のトーラス構造を再現できるかを確認した。その結果、円筒対称流モデルで開き角が  $30^\circ$  の場合において、輝度のピークの位置が最も観測に近くなることが分かった。

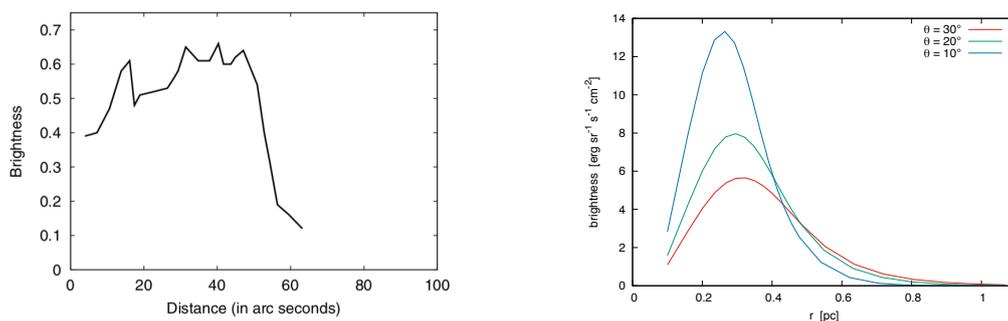


図2 Chandra の観測におけるX線輝度分布 (Shibata et al. 2003 [4]) (左) と円筒対称流モデルにおける輝度分布の計算結果 (右)

## 参考文献

- [1] Kennel C. F., & Coroniti F. V. 1984a, ApJ, 283, 694
- [2] [https://www.nasa.gov/multimedia/imagegallery/image\\_feature\\_1604.html](https://www.nasa.gov/multimedia/imagegallery/image_feature_1604.html)
- [3] <http://chandra.harvard.edu/photo/2002/0052/more.html>
- [4] Shibata S., Tomatsuri H., Shimanuki M., Saito K., & Mori K. 2003, MNRAS, 346, 841-845
- [5] Del Zanna L., Amato E., & Bucciantini N. 2004, A&A, 421, 1063

# TES 型 X 線検出器の多画素集積化に向けた基礎開発と K 中間子原子実験への応用

宇宙物理実験研究室

早川亮大

現代の X 線天文学において、検出器に求められる分光能力は年々増している。例えば、欧州宇宙機関 (European Space Agency: ESA) が 2020 年代後半に打ち上げを予定している ATHENA (Advanced Telescope for High - Energy Astrophysics) 衛星 [2] では、5.9keV の X 線に対してエネルギー分解能 2.5eV が求められている。しかし、CCD などの X 線検出器ではエネルギー分解能が要求値よりも 2 桁ほど悪いため、よりエネルギー分解能が高い検出器が必要とされている。さらに、2030 年代以降の次世代 X 線天文衛星では、10,000 ピクセルを超える素子数を持ちながら、ATHENA 衛星と同等のエネルギー分解能を持つことが要求されるため、検出器の多画素集積化と低発熱量かつ高速読み出し技術の開発が必要とされている。

我々のグループでは、高いエネルギー分解能をもつ検出器として、超伝導遷移端温度計 (Transition Edge Sensor: TES) 型マイクロカロリメータ [1] の開発および運用を進めている。TES 型マイクロカロリメータは超伝導薄膜の相転移時の急激な電気抵抗の変化を利用することで、原理的には 1eV のエネルギー分解能を得ることができる。我々は現在、この TES 型マイクロカロリメータの多画素集積化へ向けて、読み出し配線を三次元的に配置することで配線スペースの削減と、配線間クロストークの削減を狙った積層配線 TES 型マイクロカロリメータの開発を行っている。さらに、マイクロ波 SQUID を用いた新しい高速読み出し技術 [4] を組み合わせることで、次世代 X 線天文衛星の要求を満たすべく、産総研へ断熱消磁冷凍機を導入し、実験環境の構築を行っている。

また、我々のグループでは TES 型 X 線マイクロカロリメータの地上応用の一つとして、ハドロン原子の X 線分光測定プロジェクト (High-resolution Exotic Atom x-ray spectroscopy with TES: HEATES) へ参加している。このプロジェクトは、理化学研究所や NIST など 16 の研究機関及び大学による国際協同プロジェクトである。この測定は強い力の性質を知る上で非常に重要であり、宇宙においても中性子星の状態方程式の決定につながる。また、TES 型 X 線マイクロカロリメータを加速器環境下という過酷な状況下で運用することによって、技術成熟度を上げる目的もある。これまで、準備実験実験として茨城県東海村にある大陽子加速器施設 (J-PARC) K1.8BR ビームラインに設置して、ビーム環境下での TES の性能評価を行い、ビーム無しで  $\Delta E \sim 5.0\text{eV}(@6\text{keV})$ 、ビーム環境下で  $\Delta E \sim 6.7\text{eV}(@6\text{keV})$  を達成してきた。[3]

本研究では、ビーム照射実験へ向けて荷電粒子などが直接基板などへ当たることによる、ピクセルへの熱流入を防ぎつつ、サイエンスデータを取りこぼさないようカロリメータの改良を行った。2018 年 4 月、ビーム照射試験へ向けた最終セットアップを開始し、K1.8BR ビームライン上に TES 冷却システムと標的システムを設置し、TES の最終性能評価を行った。さらに、荷電粒子がピクセルへヒットすることによって発生する、近接ピクセルへの熱流入が引き起こすクロストークイベントと、X 線によるイベントを区別すべく、近接ピクセルの波形を同時に取得する group trigger 機能を、リアルタイム波形処理ソフトウェアへ実装した。2018 年 6 月、同ビームラインにて液体ヘリウムを標的としたビーム照射実験を行い、240 ピクセル中 224 ピクセルで X 線の検出に成功し、約 1 ヶ月のビームタイムで、K 中間子ヘリウムからの X 線をシリコンドリフト検出器 (SDD) に比べ一桁以上良い精度で測定した (図 1)。また、group trigger 機能によって、X 線 (あるいは荷電粒子) の入射したピクセルと同時に、近接ピクセルする 4 ピクセルの信号を同時に取得することに成功し、同時取得された波形の特徴量を用いて、得られたイベントを X 線イベントとそうでないイベントに弁別することで S/N 比を約 2.6 倍にすることができ、エネルギー分解能は動作ピクセルの

平均で、ビームのないときで  $\Delta E \sim 5.3$  eV、ビームのあるときで  $\Delta E \sim 7.9$  eV を得た (図 2)。

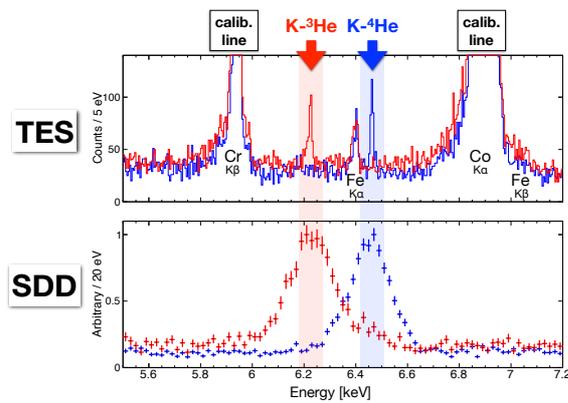


図 1 ビーム照射実験によって得られた K 中間子ヘリウム付近のエネルギースペクトル。赤線は標的が  $^3\text{He}$  のとき、青線は  $^4\text{He}$  のときのスペクトルを表す。上：TES 型 X 線マイクロカロリメータのスペクトル、下：シリコンドリフト検出器 (SDD) のスペクトル。

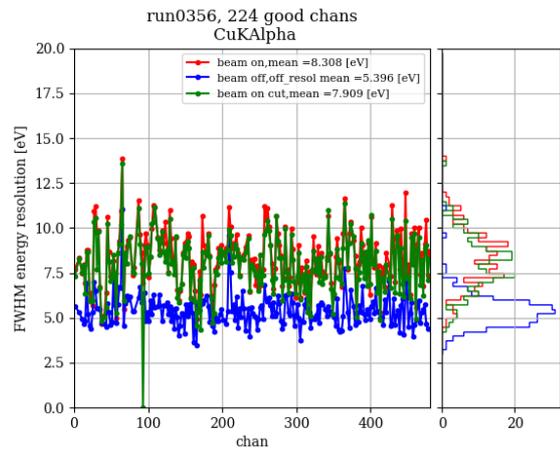


図 2  $\text{CuK}\alpha$  に対する各ピクセルのエネルギー分解能。色はそれぞれ、青：ビームオフ、赤：ビームオン、緑：カット条件を適用したときを表している。

## 参考文献

- [1] K. D. Irwin and G. C. Hilton, 2005 Topics in Appl. Phys. 99, 63
- [2] C. Turon. ESA Space Science Programme, Cosmic Vision 2015-2025, for astrophysics. Highlights of Astronomy, 14:530-531, August 2007.
- [3] T. Hashimoto et al., “Beamline Test of a Transition-Edge-Sensor Spectrometer in Preparation for Kaonic-Atom Measurements” , IEEE Transactions on Applied Superconductivity, Volume 27 Issue 4, 2017, DOI: 10.1109/TASC.2016.2646374
- [4] K. W. Lehnert et al., Evaluation of a Microwave SQUID Multiplexer Prototype. IEEE Transactions on Applied Superconductivity, 17:705-709, June 2007.

# 学位論文要旨 修士 理学

論文著者名 浅井 龍太

論文題名 すだれコリメーターを前段に用いる Kirkpatrick-Baez ミラーの開発と性能評価

X線天文学においてX線望遠鏡の角度分解能の発展は、宇宙の構造と進化を理解する上で必要不可欠な要素である。より高い分解能でのX線観測は、ブラックホール周辺の状態や宇宙ジェットの構造、超新星残骸の進化等をより明らかにするものである。これまで開発されてきた高い角度分解能のX線望遠鏡が与えてきた多くの成果を考えれば、これからのX線望遠鏡の開発ではさらに高い角度分解能での開発が求められるのは必然である。しかし、より口径が大きく回折限界が小さい値をもつ望遠鏡の開発には莫大なコストがかかってしまう。

そこで我々は、より安価でより角度分解能が高いX線望遠鏡を開発するために、前置型スリットを導入した像再成型望遠鏡による超高角分解能X線望遠鏡を開発するための基礎研究を始めた。この望遠鏡は従来の結像集光鏡と二次元検出器のセットの前面に前置型光学系として、「すだれコリメーター」を配置し秒角よりも優れた角度分解能をもつX線望遠鏡の開発を目指すものである。すだれコリメーターとは、2枚の金属製の「すだれ」を間隔をあけて平行に配置し、天体からのX線を通すと縞模様に変化するので、その様子から逆に天体の位置がわかるという仕組みである。

本研究では、この望遠鏡基礎研究として集光部の製作、及び性能評価のための実験を行った。集光部にはKirkpatrick-Baez ミラー (KB ミラー) を起用した。この光学系は回転楕円体形状の凹面鏡を2回反射させた反射望遠鏡で、全反射現象を利用することで色収差がないことが特徴である。本実験では凹面鏡の代わりに10×10 mmの正方形で0.7 mm厚の平面ガラスプレートを使用し、集光面積を稼ぐために、KB光学系を多数積層したミラーを開発することとした。KBミラーの製作は、まず初めに鏡の傾きと位置情報の入った3Dモデルを作成し、傾きに沿って、角度と位置決定の目安となるアライメントバーを作成した。アライメントバーはプレートの枚数分掘られた溝に、配置するプレートに合わせて傾きをつけたものである。次に、KBミラーを収めるためのハウジングの製作を宇宙科学研究所特殊実験棟3F工作室で行った。ハウジングは、122×122×122 mmのアルミ板による立方体で各面にはX線入射用、ミラー調整用の窓が開いている。ガラスプレートの反射面にはタングステン厚み200 Åを目標に蒸着させた。KBミラーの組み立ては、Wミラーをアライメントバーでおおよそその位置に置き、バキュームで掴みながら、レーザーオートコリメーターとオートコリメーターを用いて角度の補正を行いつつ傾きを決定した。ミラーは接着剤でハウジングに接着し、大角度側から計10枚のミラーを組み入れた。

作製したKBミラーのX線による測定は宇宙科学研究所の30 mビームラインで行った。長いビームラインを使用することで天体からのX線に近い、高い平行度をもつX線ビームを作ることができる。実験はWミラーの反射率測定、及び、KBミラーのラスタースキャンを行なった。反射率測定ではX線に対しWミラーを平行に設置し、そこから0.01度ピッチで0度から2度までの反射率を測定した。照射したX線ビームのサイズは、ミラーの回転軸方向と回転軸に垂直方向にそれぞれ2 mm、0.4 mmとした。使用したエネルギーはCu-K $\alpha$ 線 (8.04 keV) である。この角度反射率測定の結果から反射率曲線を描画し、蒸着させたWの膜厚、表面粗さ、及び、密度を誤差付きで求めた。膜厚は $251.77 \pm 0.24$  Å、表面粗さ及び基板の粗さは $6.83 \pm 0.07$  Å、蒸着されたWの密度は $17.753 \pm 0.016$  gm/cm<sup>3</sup>となった。また、反射像からHPWは1.8分角であることが算出された。ラスタースキャンでは大角度側のミラーを基準にアライメントを行い、各ミラーの反射像を6.4 mmピッチで撮像し、KBミラー全体のHPDの測定を行なった。

照射した X 線ビームのサイズは、ミラーの回転軸方向と回転軸に垂直方向にそれぞれ 6.4 mm、1.375 mm とした。使用したエネルギーは Cu-K $\alpha$  線 (8.04 keV) である。

本論文ではこれらの具体的な測定方法、および研究結果について述べる。

# マイクロマシン技術を用いた超軽量 X 線望遠鏡の ドライエッチングと化学機械研磨に関する研究

宇宙物理実験研究室

藤谷 麻衣子

X 線はブラックホールや中性子星、超新星残骸などの宇宙の高エネルギー現象を探る手段である。地球大気によって天体 X 線は吸収されるため、人工衛星などの飛翔体を用いる。さらに観測感度を上げ、画像を取得するために望遠鏡が必要となる。物質の X 線に対する屈折率は 1 よりも僅かに小さく、宇宙 X 線観測では全反射を用いた Wolter I 型望遠鏡が一般的に用いられる。しかし、全反射の臨界角は 1 keV で数 deg と小さく、有効面積を上げるために多くの反射鏡が必要である。

そこで我々はマイクロマシン技術を用いた独自の超軽量 X 線望遠鏡を開発している。図 1(a) のように、厚さ 300  $\mu\text{m}$  の Si 基板にドライエッチングで幅 20  $\mu\text{m}$  の微細穴を形成し、側壁を高温アニールで平滑化して全反射鏡とする。球面に高温塑性変形した基板を、反射率の向上のための重金属を膜付けし、曲率半径の異なる 2 枚の基板を正確に位置合わせして、Wolter I 型望遠鏡とする。基板が薄く、従来より 1 桁以上軽い望遠鏡となる上、鏡を一括して大量生産できるため低コストとなる。我々は試作光学系で世界初の X 線反射結像に成功してきた。課題は角度分解能であり、将来計画に向けて <10 分角 (HPD, Half Power Diameter) が求められる。角度分解能は鏡の形状精度と配置精度が支配的でどちらも <5 分角 (HPD) を目指している。形状精度は大きなうねりに起因する反射光の広がり、正反射成分と、細かいうねりに起因する散乱成分に分けられる。

本修論では、正反射成分を支配するラージスケールで見た反射鏡形状の改善を目指し、新しい装置でのドライエッチングを行った。これまで宇宙科学研究所が所有する装置でドライエッチングの条件だしを行ってきたが、角度分解能は鏡 1 枚照射で 10~20 分角であった。そこで私は図 1(b) に示すような、保護マスク形状に傾斜があることに起因するエッチング傷に着目し、反射鏡の形状改善を試みた。エッチングと保護の強さのバランスなどを調整することで、数回の試作後に従来と同程度の反射面精度で、なおかつ基板端のバリを減らすことに成功した (図 1(c))。

次に私は反射面両端のバリ構造を解消することを目指した。図 1(c) に示すようなバリ構造はエッチング中の傷によって発生し、取り除くことは簡単ではない。そこで私はエッチング後に化学機械研磨で Si 基板を 50-100  $\mu\text{m}$  程度削ることで改善を目指した。その結果、図 1(c) に示すようにバリはなくなり、X 線反射率も低角度側で大幅に上昇した。一方で高い角度側では若干の低下が見られたため、表面を原子間力顕微鏡で調べた所、研磨後に粗さが増していることが分かった。そこで高温アニール処理を施した所、粗さは研磨前と同程度 ( $\sim 0.4$  nm rms @1 $\mu\text{m}$  scale) まで改善し、反射率も向上した。私のこれらの実験結果から、反射面形状を平坦化し、形状精度を改善する目処が立った。

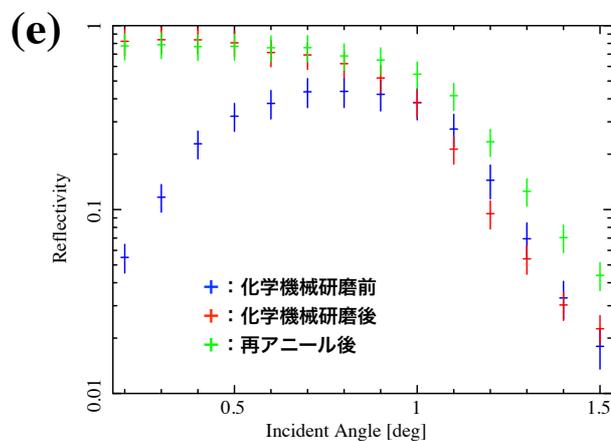
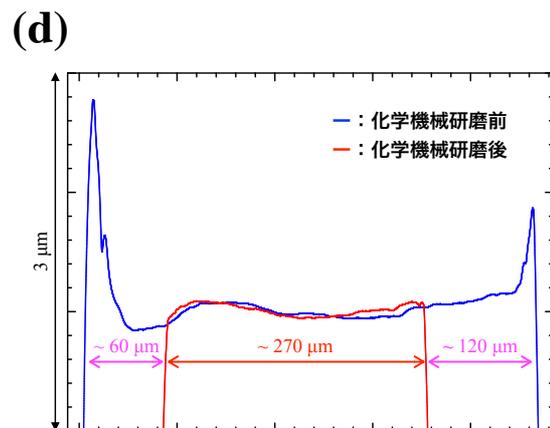
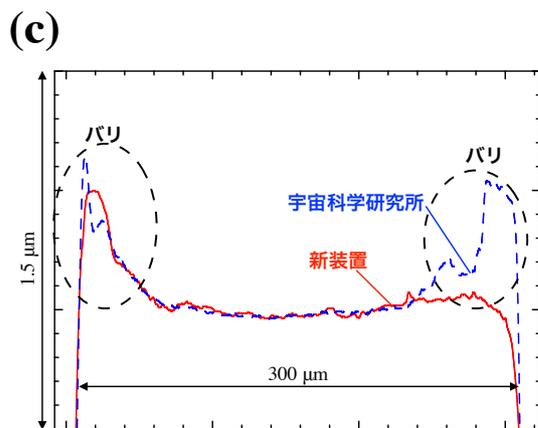
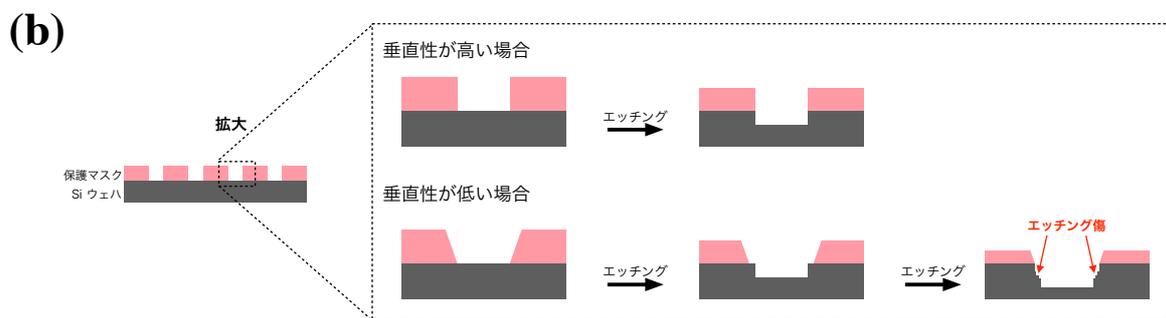
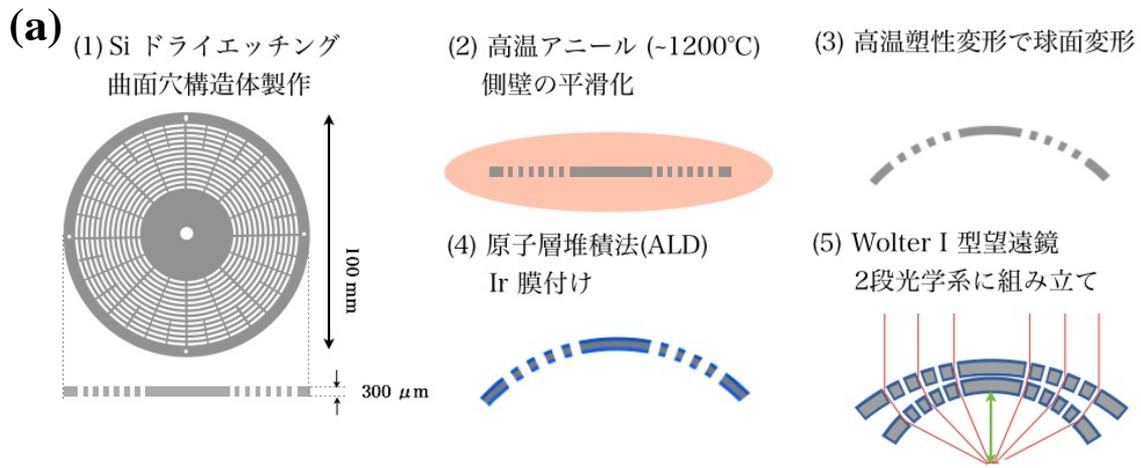


図 1 (a) : 光学系の製作フロー。(b) : エッチング傷の概念図。(c) : 既存装置 (青) と新装置 (赤) で製作した光学系の反射鏡の表面形状プロファイル。(d) : 化学機械研磨前後の反射鏡の表面形状プロファイル。(e) : 化学機械研磨の前後と再アニール後の反射率カーブ。

# マイクロマシン技術を用いた超軽量X線望遠鏡の 完成に向けた要素技術の開発

宇宙物理実験研究室

伊師大貴

X線はブラックホールや超新星残骸、また太陽系惑星における高エネルギー現象を探る手段となる。高感度の宇宙X線観測には、天体からの微弱なX線を集光結像する望遠鏡が不可欠である。人工衛星などの飛翔体を用いた大気圏外での観測が必要なX線天文では、衛星計画の巨大化や中小型衛星のニーズの高まりとともに、高分解能・大面積かつ軽量な望遠鏡が強く求められる。そこで我々はマイクロマシン技術を用いた独自の超軽量X線望遠鏡の開発を行っている [1]。ドライエッチングで厚み  $300\ \mu\text{m}$  の薄い Si 基板に幅  $20\ \mu\text{m}$  の微細穴を多数開け、その側壁をX線反射鏡として利用する。高温アニールで反射鏡の平滑化を行い、高温塑性変形で基板を球面に曲げることで、平行X線を集光する。原子層堆積法 (Atomic Layer Deposition: ALD) で Pt などの重金属を膜付けした後、異なる曲率を持つ基板を2枚重ねれば、宇宙X線で使用される Wolter I 型望遠鏡を得る。我々は世界初のX線反射結像を実証しているが、角度分解能に課題があった [2]。角度分解能の要因は反射鏡の平坦性による形状精度と反射鏡の正確な配置による配置精度に切り分けることができ、1回反射でそれぞれ  $<5$  分角が目標となる。これまでの開発により形状精度は 15 分角、配置精度は 10 分角まで来たが、どちらも 2-3 倍の改善が必要である。本修士論文では、形状精度と配置精度の改善を目指し、高温アニールと高温塑性変形の改良を行い、そして望遠鏡製作に必要な ALD プロセスを確立した。

私は初めに高温アニールを改良した。Si の融点付近 ( $\sim 1100\ ^\circ\text{C}$ ) での自己拡散により反射面を滑らかにするプロセスであり、形状精度に大きく寄与する。従来の 10 時間アニールでは、数  $\mu\text{m}$  以下のスケールでは  $1\ \text{nm rms}$  を切る表面粗さが得られたが、形状精度の改善には数十  $\mu\text{m}$  以上での平坦化が鍵を握る。そこで私は 100 時間のアニールプロセスを行い、鏡形状の変化を触針計と AFM で評価した。50 時間後には  $100\ \mu\text{m}$  スケールの表面粗さが  $5\ \text{nm rms}$  となり、従来と比べて 2-3 倍の改善を示したが、100 時間後では反射面の両端付近の形状変化により逆に悪化した。これはプロセス時間だけではなく、反射面の初期形状もアニールにおいて重要な要素であることを意味する。さらに定量的に評価するため、50 時間後と 100 時間後で同じ場所にある反射鏡 1 枚に  $0.2 \times 1\ \text{mm}^2$  の X 線ビーム (Al  $K\alpha$   $1.49\ \text{keV}$ ) を照射した。メインピークの角度分解能は 50 時間後で FWHM 10 分角、100 時間後で FWHM 3-5 分角と 2-3 倍改善した (図 1 左)。一方、100 時間後にはサブピークが顕著に現れており、HPW (Half Power Width) 10-15 分角とその寄与は大きい。そこで X 線ビームの照射位置を数  $\mu\text{m}$  以下で制御することで、HPW に対して支配的なサブピークの原因となる反射面を探した。例えば、反射面の両端のうち一方を避けて X 線ビームを照射したところ、サブピークの強度のみが減衰した。今後はアニール時間を更に伸ばすことでメインピークの角度分解能を上げ、同時にサブピークを生じている反射面を選択的に削ることが有効である。

私は次に高温塑性変形を最適化した。高温下で Si をプレスすることで結晶面がずれ、塑性変形を可能にする日本発祥の技術である。これまで基板の厚みを従来の 300  $\mu\text{m}$  から 400  $\mu\text{m}$  に増すことで、理想球面からの slope error から予想される配置精度が目標値に近づくことが分かっている。しかし、ドライエッチングで貫通できる基板厚には限界があり、なおかつ垂直性・平坦性の良い微細穴を開けるのは非常に難しい。そこで私は従来の基板厚 300  $\mu\text{m}$  で配置精度を改善するため、これまでに最適化された温度、荷重に加えて、新たにプレス保持時間に着目した。変形治具との高温接触による基板表面および側壁に対する影響を考慮しつつ、保持時間を従来から 2 桁以上伸ばした結果、変形後の基板が設計曲率に近づき、さらに配置精度が 6-8 分角まで改善することを突き止めた。一方、実際に X 線測定を行い、焦点位置から鏡角度を求めたところ、光学系のデザインが切り替わる場所を境に  $\sim 0.2^\circ$  有意にずれていることが分かった (図 1 右)。ここで内側と外側に分けたとき、配置精度は 5-8 分角および 3-5 分角となり、特に外側の配置精度は目標を満たす。光線追跡シミュレーションを用いて角度ズレの影響を見積もったところ、有効面積が減少するため、これは無視できないことも分かった。今後は光学系のデザインの変更、また変形治具の改良が求められる。

私は最後に ALD による Pt 膜付けを確立した。重金属を含むガスと酸化ガスを交互に流すことで、基板表面および微細穴側壁に原子層を 1 層ずつ堆積させる技術である。これまで酸化ガスに  $\text{O}_2$  分子を用いた thermal-ALD による Pt 膜付けは実証したが、X 線反射率から推定された表面粗さは  $2.2 \pm 0.2 \text{ nm rms}$  と更なる改善が求められる [3]。そこで私は酸化ガスに  $\text{O}_2$  プラズマを用いた plasma-ALD を試した。成膜初期は確率的に原子が堆積するため、島状成長が避けられない。thermal-ALD では基板の温度を上げることで熱的に反応を促すが、plasma-ALD ではラジカルの高い反応性を利用する。微細穴側壁に対する成膜が不十分と課題であったが、真空度やガスの流量を調整することで解決した。Pt 膜付け後の X 線反射率から表面粗さは  $1.6 \pm 0.2 \text{ nm rms}$  と求まり、X 線望遠鏡として十分機能することを確かめた。

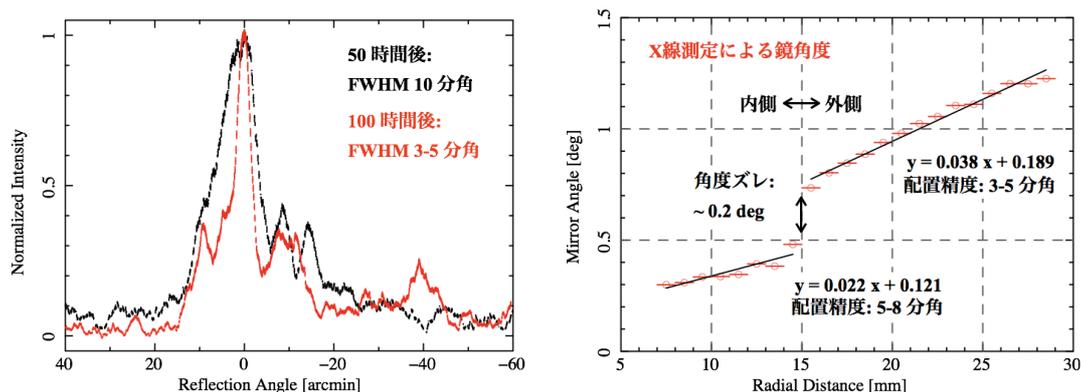


図 1: 超長時間アニール後の鏡 1 枚の X 線反射プロファイルの時間変化 (左) と X 線測定から求めた高温塑性変形後の光学系における反射鏡の角度 (右)。

- [1] Ezo et al., *Microsys. Technol.* 16, 1633 (2010).
- [2] Ogawa et al., *Microsys. Technol.* 23, 1101 (2017).
- [3] Takeuchi et al., *Appl. Opt.* 57, 3237 (2018).

# 積層配線 TES 型 X 線マイクロカロリメ ータの X 線性能評価に関する研究

宇宙物理実験研究室

布村光児

ビッグバン直後の遠方宇宙で観測されたバリオン量に比べて、近傍宇宙で観測されているバリオン量は半分程度に過ぎない。残りの半分はダークバリオンと呼ばれ、宇宙の大規模構造の形成に深く関わりとされている。ダークバリオンは宇宙流体シミュレーションの結果から数百万度の中高温銀河間物質 (WHIM) として分布されていることが示唆され、OVII, OVIII の輝線を精密 X 線分光することで直接検出することができると考えられるが、CCD などの従来の X 線検出器では、エネルギー分解能が不十分である。加えて空間的に広がった WHIM を捉えるためには広い視野も併せ持っている必要があり、高分解能と広視野の両方を備えた次世代の検出器が必要とされている。

我々のグループでは、ダークバリオン探査を目的とする科学衛星 DIOS への搭載を目指し TES 型マイクロカロリメータの開発を行なっている。TES は超伝導金属の相転移時の急峻な電気抵抗の変化を利用することで、1 eV 台の優れたエネルギー分解能を実現できる検出器である。DIOS では空間的に広がった酸素輝線を検出するために TES アレイ全体で有効面積  $1\text{ cm}^2$  を実現しつつ、単素子について 5.9 keV の X 線に対して 5 eV (FWHM) 以下のエネルギー分解能を達成する必要がある。我々のグループの自作素子ではこれまで  $200\text{ }\mu\text{ m}$  角の単素子で 5.9 keV の X 線に対し 2.8 eV を達成している。さらに我々は、面積とエネルギー分解能の要求を満たすアレイ設計を行い、 $200\times 250\text{ }\mu\text{ m}$  角の TES 温度計の上に  $500\text{ }\mu\text{ m}$  角の吸収体の付いた  $20\times 20$  アレイの実現を目指している。しかしこのような大規模ピクセルの実現には、基板上の配線スペースや、ピクセル間のクロストークが問題となってくる。そこで、我々は Nb の配線を  $\text{SiO}_2$  の絶縁膜を挟んで重ね合わせた超伝導積層配線構造を持った TES アレイの開発を進めている。これまでの開発状況として、昨年までに、360 mK 付近での TES の正常な超伝導転移を確認している。しかし TES として完成させるためには、TES 膜厚の条件出し、TES パターニングの改善、吸収体形成、メンブレン

構造の形成、と種々の条件出しが必要である。

そこで本修士論文ではこれらのプロセス構築を行い、プロセスを完遂した上で X 線性能評価までを行った。まず、Usadel 方程式を用いて TES の膜厚比から転移温度を予測する理論的なモデルを構築し、モデルから Ti/Au の最適な膜厚比を  $\text{Ti/Au} = 60/40 \text{ nm}$  と見積もった。次にエッチャントの再検討を行い、TES の荒れを改善した。次に吸収体としての要求をまとめ、定量的な計算を行うことで Au 吸収体の最適な厚み  $2 \mu\text{m}$  と見積り、吸収体のバリを解消するためレジストをイメージリバーサルレジストへ変更した。最後に、熱浴との弱いサーマルリンクとなるメンブレン形成プロセスの構築を行った。エッチングの条件出しを行い最適なメンブレン加工プロセス条件を確立した。これらのプロセス構築により、初めて完成した基板が  $\text{Ti/Au} = 80/40 \text{ nm}$  の TMU505 である。R-T 測定の結果正常な超伝導転移を確認し、転移温度は  $261 \text{ mK}$  であったため、X 線照射試験へと進んだ。

その結果、我々の研究室では初めて  $20 \times 20$  積層配線 TES カロリメータにおいて 1 ピクセルに X 線照射試験を行い、 $5.9 \text{ keV}$  の X 線に対してエネルギー分解能  $\Delta E = 94.01 \pm 3.19 \text{ eV}$ 、ベースライン分解能  $\Delta E = 37.80 \pm 0.51 \text{ eV}$  を得ることができた。しかし、目標とする分解能 ( $< 5 \text{ eV}$ ) を得ることはできなかった。これはテスト用基板で測定したため、転移温度が想定していたものより  $100 \text{ mK}$  程度高いことや残留抵抗が  $50 \text{ m}\Omega$  と大きいこと、読み出しノイズが  $22 \text{ eV}$  と大きいことなどが原因として考えられる。今後は設計した  $\text{Ti/Au} = 60/40 \text{ nm}$  の TES で再度 X 線照射試験を行うことでエネルギー分解能を改善することができると考えている。

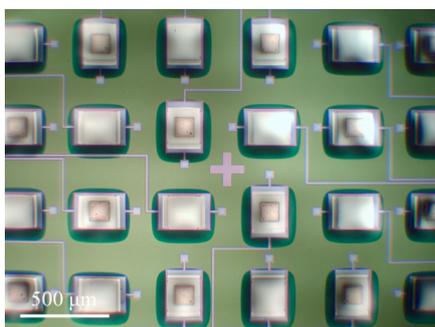


図 1. TMU504 の顕微鏡像

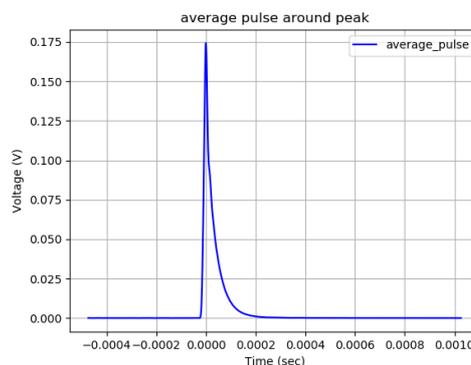


図 2. TMU505 の X 線平均波形

#### 参考文献：

- [1] Y. Ezoe et al., IEEE Trans. Appl. Supercond., 25, 2100805. 2015.

# 多環芳香族炭化水素負イオンの 光電子脱離

原子物理実験研究室  
栗山みさき

宇宙空間など、周りに他の物質が何もない孤立環境下にある分子の冷却は、周りとの相互作用がないため固体や気体中の分子とは異なり、衝突によるエネルギー移動ではなく輻射過程が主である。その詳細は、原子分子物理学における興味だけでなく、星間分子の生成機構を知る上でも重要である。一般に、孤立環境にある高温、すなわち大きな内部エネルギーを持つ分子負イオンは、電子脱離によって中性化する過程と、輻射冷却過程が競合する。後者では、電子遷移に伴う蛍光放出および振動遷移の赤外輻射の二種類の過程によって自らの内部エネルギーを放出し、冷却される。さらに、内部エネルギーが電子脱離しきい値 ( $E_{th}$ ) を超えた負イオンについては、電子脱離による中性化が可能である。電子脱離の速度は内部エネルギーに強く依存し、広い内部エネルギー分布を持つ場合、中性種の収率は近似的に時間の逆数に比例する。

本研究では、孤立環境下におかれた多環芳香族炭化水素 (Polycyclic Aromatic Hydrocarbon, PAH) の冷却過程に注目した。多環芳香族炭化水素類は星間分子の有力な候補であり、星間フラウレンの生成など、分子進化において重要な役割を果たしていると考えられている[1]。また化学進化の過程で分子雲内の PAH 負イオンが電子よりも豊富に存在する場合があります、その後の様々な分子の生成過程に大きな影響を及ぼす可能性が理論的に指摘されている[2]。実験には、典型的な PAH 分子であるテトラセン ( $C_{18}H_{12}$ ) およびペンタセン ( $C_{22}H_{14}$ ) の分子負イオンを用いた。 $E_{th}$  は電子親和力と等しく、それぞれの値は 1.067 eV と 1.392 eV である[3]。

実験は、首都大学東京の静電型イオン蓄積リング (TMU E-ring) を用いて行った。TMU E-ring はレーストラック型のイオン蓄積装置で、装置内部は  $10^{-8}$  Pa 以下の超高真空に保たれており、残留ガスなど粒子との衝突が少ないため秒程度の長時間にわたるイオン蓄積が可能である。イオン源にてレーザー脱着法で負イオンを生成し、電場でおおよそ 15 keV まで加速して TMU E-ring 内に入射し

た. 一定蓄積時間後, 赤外波長領域のレーザー光を周回する負イオンに照射し,  $E_{th}$  以上の内部エネルギー状態に励起されて電子脱離によって生じる中性粒子を, マイクロチャンネルプレートにより検出した.

両者の負イオンについてレーザー誘起中性粒子収量の波長依存性を測定した.  $E_{th}$  以下に光学遷移許容な電子励起準位があるペンタセン負イオンでは  $E_{th}$  以下に対応する波長領域でもレーザー励起による信号, すなわち中性粒子収量の増加および励起後数周にわたる減衰(遅延成分)が確認された. 実験では  $E_{th}$  以下に吸収が報告されていないテトラセン負イオンでは,  $E_{th}$  以上の波長で直接脱離のみが観測された. ペンタセン負イオンについては, レーザーを照射するタイミングを変えて, 蓄積時間依存性も測定した. これをレーザー波長 900 nm から 1020 nm の範囲で 30 nm ごとに行った結果を図に示す. レーザー合流によって収量の増加する時間領域は, レーザー波長が短いほど遅れることが観測された. これは, 内部エネルギー分布の時間変化を反映している.

さらに, イオン源で生成した高温負イオンの自動電子脱離を解析し, 中性粒子収量の減衰から, それぞれの冷却過程を考察した. テトラセン負イオンにおいて, 蓄積時間を  $t$  とするとイオン入射後の中性粒子収量の減衰が  $1/t$  に比例して, power law に従うことから自動電子脱離による depletion cooling が支配的であることが分かった. 一方, ペンタセン負イオンの減衰はテトラセン負イオンよりも早く,  $1/t$  ではなく  $\exp(-kt)/t$  という時間依存性を持つことから再帰蛍光放出による冷却過程が支配的であることが分かった.

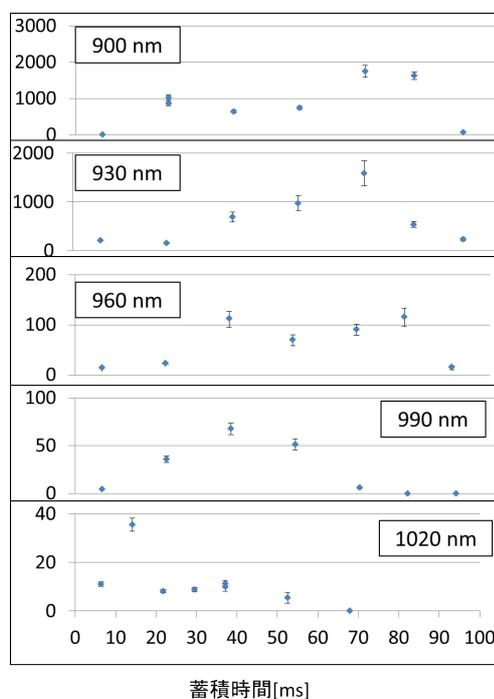


図: ペンタセン負イオンの蓄積時間依存性

#### 参考文献:

- [1] J. N. Bull *et al.*, Phys. Chem. Chem. Phys., **17**, 32464 (2015).
- [2] V. Wakelam *et al.*, Astrophys. J. **680**, 371 (2008).
- [3] R. V. Khatymov *et al.*, JETP Lett. **93**, 437 (2011).

# 炭素クラスター負イオンからの 再帰蛍光の分光測定

原子物理実験研究室

吉田茉生

宇宙空間など周りに他の物質が何もない孤立環境下における分子の冷却過程は、原子分子物理学だけでなく宇宙での分子進化にも関連した重要な事象である。孤立環境下にある高温な負イオンの場合、電子励起エネルギーが電子基底状態の振動エネルギーに変換される内部転換の後、振動遷移により赤外線としてエネルギーを放出して冷却が進むと考えられてきた(図1)。この過程は一般にゆっくりと進み、本研究で対象とする  $C_4^-$ ,  $C_6^-$  のような小さな炭素分子では数ミリ秒程度の時定数となるため、生成直後の高温で不安定な分子は冷却により安定となる前に壊れ、宇宙のような孤立環境下では存在しにくいとされていた。一方、振動緩和の他に、内部転換

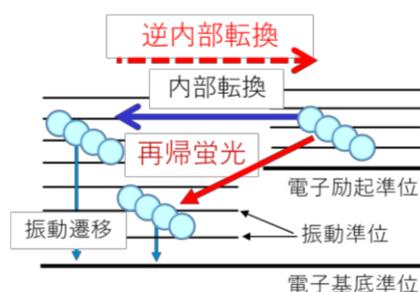


図1 分子の振動過程の模式図  
赤の矢印が新たに分かったポアンカレ蛍光による冷却過程

の逆過程である逆内部転換により、振動エネルギーが電子励起エネルギーに変換された後、電子遷移によって蛍光を放出するエネルギー緩和過程が存在する。この蛍光は再帰蛍光と呼ばれている(図1赤線)。分子が電子脱離しきい値に比べて十分に低エネルギーの電子励起状態を持つ場合、この過程は振動輻射過程に比べはるかに速い数マイクロ秒という時定数をもつ。本過程によって急速に冷却されると、壊れやすい負イオンでも脱離前に安定化することが可能になる。

再帰蛍光放出による冷却過程は1988年に提唱[1]されたものの、長い間、蛍光の直接観測は報告されていなかったが、2015年に首都大学東京にある静電型イオン蓄積リング(TMU E-ring)によって初めて直接観測が成功した[2]。TMU E-ringは、静電場によってイオンを周回させ蓄積させる装置である。真空度は  $10^{-8}$  Pa以下であり、衝突の少ない孤立環境下でイオンを周回することができる。また、リング側面の光学窓に蛍光検出系を設置することで、周回中のイオンから放出された蛍光の検出を可能にした(図2)。

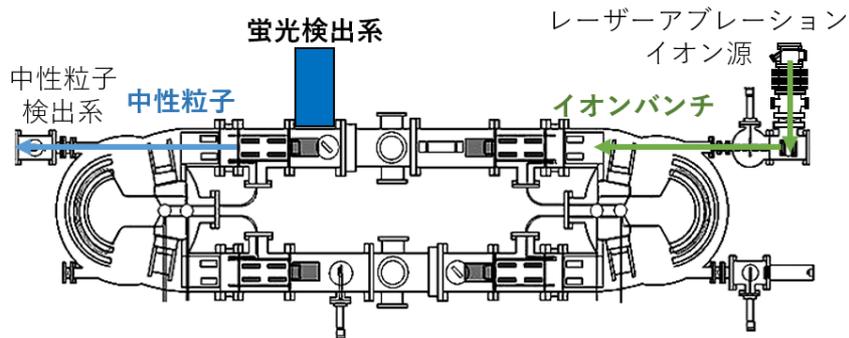


図2 TMU-Ering

本研究ではこの E-ring を用いて、先行研究で行われた再帰蛍光の観測を様々な波長に対して行うことで、蛍光スペクトルを得た。実験では、E-ring 内にレーザーアブレーションイオン源で生成した高温の  $C_n^-$  ( $n: 2-6$ )イオンを入射し、その後集光レンズと光電子増倍管から成る光検出系で蛍光を測定した。光検出系では、観測したい波長ごとに特定の波長領域だけを通すバンドパスフィルターを使用することで、バックグラウンドを減らすだけでなく特定の波長における蛍光測定を可能とした。このフィルターを波長 433 nm から 794 nm までの範囲で合計 9 種類用いて、 $C_4^-$ 、 $C_6^-$ からの再帰蛍光が幅の広い連続的なスペクトルであることを初めて明らかにした(図 3)。得られたスペクトルはマクロな物体の黒体輻射スペクトルとは異なり、分子ごとに個性をもつものであることが分かった。

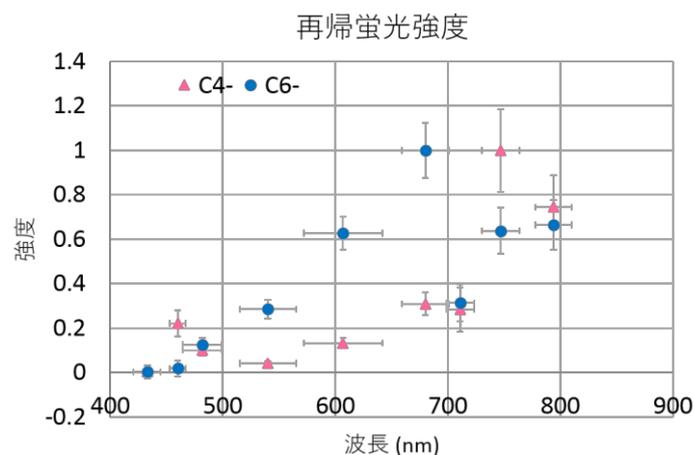


図3 再帰蛍光強度

参考文献：

- [1] A. Léger, *et al.* Phys. Rev. Lett., 60, 921, 1988
- [2] Y. Ebara, *et al.* Phys. Rev. Lett., 117, 133004, 2016

# 中性子星合体による重元素合成機構の 基礎研究としての多価イオン 電荷交換分光

原子物理実験研究室

山田陽平

ビックバン以降、HとHeを原料としたFeまでの重元素合成は恒星内部で行われていることが判っているが、Feよりも重い元素の合成機構は確立していない。これまで超新星爆発が主要な機構とされていたが、連星中性子星合体の寄与の方が重要であるとの主張もあり、未だに議論が戦わされている。中性子星合体による重元素合成を確認する方法として、合体に伴って放出される重力波を検出し、その重力波の放出源と思われる領域を地上から光学望遠鏡によって観測することで合体した天体を特定し、そこから放出される赤外・可視光の強度と発光スペクトルを測定することが考えられていた。実際、2017年8月17日に初めて連星中性子星合体による重力波が検出され、直ちに天体の特定と赤外・可視領域における分光測定が行われた。

実測された発光スペクトルと比較することで重元素合成機構を確認するためには、中性子星合体の直後に光ると予想されるスペクトルの理論的な予想が必要である。しかし、遷移確率と吸収係数を考慮した輻射輸送計算に必要な重元素の分光データは著しく不足している。そのため、GW170817に伴う発光スペクトルは大胆な仮定の下で解析され、定量的には極めて不十分なものであった。

理論的な予想によれば、中性子星合体直後に放出される重元素からの発光には3価程度のランタノイド族多価イオンが大きく寄与するとされている [1]。本研究では、予想される発光への寄与が大きく、先行研究によって低価数のイオンに関する理論計算が行われているErの多価イオンについて実験を行った。

首都大に設置されている14.25 GHz電子サイクロトロン共鳴多価イオン源のプラズマチェンバーに金属Erロッドを挿入し、O<sub>2</sub>プラズマによってErをスパッタしてプラズマ中に供給し、多価Erイオンを生成した。20 kVの電位差で引き出したイオンを磁場によって選別することで、特定価数のイオンビームを衝突

実験用真空槽に導入した。このイオンビームを、新たに設計した衝突セル内で標的気体と衝突させ、衝突領域からの紫外-可視領域の発光スペクトルを Czerny-Turner 型分光器と液体窒素冷却式 CCD カメラの組合せによって観測した。図 1,2 に示すように 4 価および 5 価の Er イオンと Ar および N<sub>2</sub> を衝突させたとき、いずれも 442 nm, 500 nm, および 568 nm に Er イオンからと思われる発光スペクトルが観測された。低価数イオンの電荷移行反応では二電子捕獲が強くなる場合もあることから [2], これは 4 価イオンの一電子捕獲および 5 価イオンの二電子捕獲によって生成した 3 価の Er イオンからの発光と考えることができる。また, 5 価イオン衝突の場合でのみ 454 nm および 611 nm にも発光が観測されたが, これらは 5 価イオンの一電子捕獲によって生成した 4 価の Er イオンからの発光と考えることができる。

古典的オーバーバリアモデルによれば, 5 価および 4 価の多価イオンが Ar および N<sub>2</sub> 標的と衝突して電子が移動する場合, 主量子数  $n = 4$  の軌道への捕獲が選択的に起こるとされている。4 価および 5 価の Er イオンの基底電子配置は  $4f^0$  および  $4f^1$  であるから, 電子捕獲によって生成した 3 価イオンの電子配置は  $4f^1$  と考えられる。これらの開殻電子配置には多数の微細構造準位が存在しているため, 理論的計算は簡単ではないが, 今後の理論研究者に解析を託すことができる実験データの取得に成功したと言える。

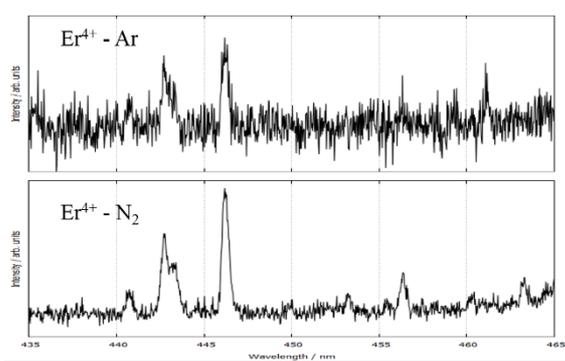


図1. Er<sup>4+</sup> - Ar/N<sub>2</sub>の発光スペクトル

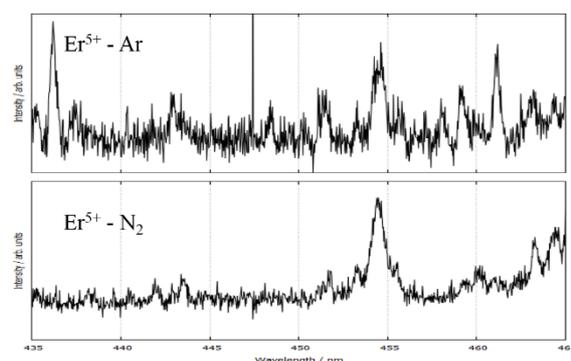


図2. Er<sup>5+</sup> - Ar/N<sub>2</sub>の発光スペクトル

#### 参考文献：

- [1] M. Tanaka, K. Hotokezaka, “Radiative transfer simulations of neutron star merger ejecta”, 2013, ApJ 775, 113.
- [2] K. Ishii, A. Itoh, K. Okuno, “Electron-capture cross sections of multiply charged slow ions of carbon, nitrogen, and oxygen in He”, 2004, PRA 70, 042716.

# 極低温移動管法による 分子イオンの移動度測定

原子物理実験研究室

野田悠祐

緩衝気体を満たした容器（移動管）に均一電場をかけ、そこにイオンを入射すると、気体分子との衝突を繰り返して熱化したあと、電場の向きに沿って一定の速度で移動する。このようにイオン群と粒子を衝突させ、通常のビーム実験では困難な数 eV 以下の実験を可能とする手法を移動管法と呼ぶ。本研究室ではこの移動管を極低温（4.3 - 77 K）に冷却することで 0.5 - 10 meV 程度の極低エネルギーでのイオン-粒子間の衝突を実現している。この極低温移動管法によって、通常のイオンビーム実験では困難な極低エネルギー領域におけるイオンと気体分子との相互作用ポテンシャルやイオン衝突のダイナミクスが研究できる。これまで様々な単原子イオンや二原子から四原子程度の小さな分子イオンについて、低温 He 気体中でのイオン移動度を測定してきた。これまでに測定した中では  $H^+$ ,  $He^+$ ,  $N^+$  を除く単原子イオンについては低電場領域で移動度が分極極限  $K_{pol}$  と呼ばれる一定値に漸近していくのに対し  $N_2^+$  を除く分子イオンは低電場領域で  $K_{pol}$  を下回る値を取ったり、移動度が極小構造を持つなど、様々な特異的な挙動を示すことが観測された。しかしながら、三原子分子イオンのデータは少なく、特に H 以外の原子が含まれる分子イオンについては  $CO_2^+$  および  $NO_2^+$  に関する測定例しかない [1]。これらより大きい分子イオンのデータには  $CH_3CO^+$  などのものがあるが、それらは全て分極極限よりかなり小さい値をとった。本研究では分子イオンのサイズによる移動度の挙動の変化を調べることを目的に、三原子イオンとしては比較的大きい  $CS_2^+$  の移動度を 77 K に冷却された He 気体中で測定し、その実効温度依存性を  $CO_2^+$  の移動度の実効温度依存性と比較した。

図 1 に示したように  $CS_2^+$  の移動度は  $CO_2^+$  の移動度より約 20 % ほど小さくなった。この違いは各分子イオンの幾何学的なサイズに影響されていると考えられ、移動度は分子イオンの断面積に反比例するので、剛体球近似に基づいて各分子イオンの断面積を計算したところ、その断面積比は  $CO_2^+ : CS_2^+ = 1 : 1.2$  となり、実験結果を説明することができた。

また、イオン移動度計算ソフトウェア MOBCAL が小さな分子イオンに対しても有効であるかを確認した。MOBCAL による理論計算では各原子間ポテンシャルの和で近似的な粒子間ポテンシャルを表すので、原子数の多い分子イオンには有効であるという結果が得られている。しかし、原子数が少ない分子イオンに対してはポテンシャルの近似が悪くなり、実験値とのずれが大きくなると予想されていた[2][3]。N<sub>2</sub><sup>+</sup>、CO<sub>2</sub><sup>+</sup>、CS<sub>2</sub><sup>+</sup>の各分子イオンに対して MOBCAL によりイオン移動度を計算した。CS<sub>2</sub><sup>+</sup>の実効温度依存性を実験値と比較したものを図 2 に示す。移動度の値は 5 %ほど小さく、ピークをとる実効温度の値は 50 K ほど高温側にシフトしたものの、定性的にはイオン移動度の挙動を再現できることが判った。このことから MOBCAL は小さい分子イオンに対しても或る程度は有効であると考えられる。

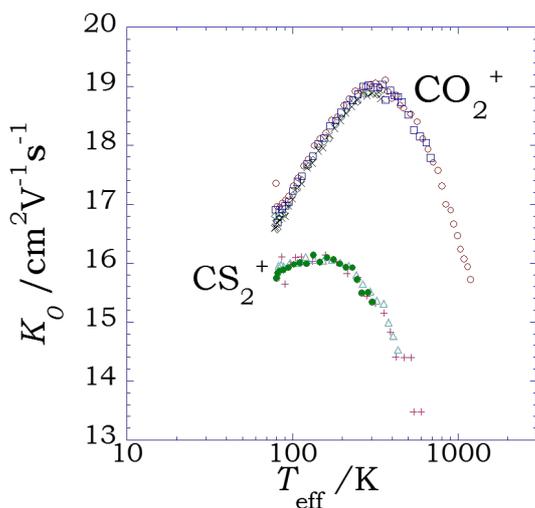


図 1. 77K の He 気体中における CO<sub>2</sub><sup>+</sup> および CS<sub>2</sub><sup>+</sup>の移動度の実効温度依存性.

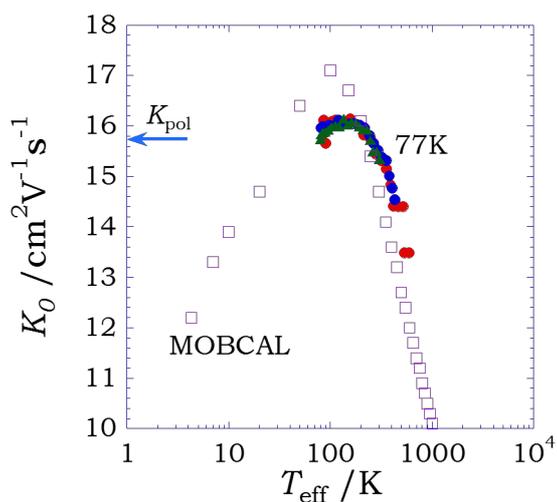


図 2. CS<sub>2</sub><sup>+</sup>の移動度の実測値と MOBCAL による計算値の比較.

#### 参考文献：

- [1] H. Hidaka. Doctor thesis, Tokyo Metropolitan University, 2003.
- [2] M. F. Mesleh, *et al.*, J. Phys. Chem. **100**, 16082 (1996).
- [3] A. A. Shvartsburg, and M. F. Jarrold, Chem. Phys. Lett. **261**, 86 (1996).

**Abstract (B,D)**

**1/22, 2019**

# Brillouin-Wigner 摂動論における ツリー展開とループ総和法

素粒子理論研究室  
石田 和也

量子力学において、時間依存する摂動論では永年項と呼ばれる量子補正が出現し、それは長時間領域での摂動論を破綻させることで知られている。この永年項問題に対していくつかの回避法[1, 2]が研究されているが、これらはいずれも量子遷移の観点からループグラフに相当する量子補正をうまく再総和することによって摂動論を改善するという共通点を持ち、これは量子力学においても量子補正の再総和が可能であることを示唆する。

本研究では量子力学における時間依存しない摂動論を中心に量子補正の再総和の可能性を議論した。エネルギー固有値問題に対する最も素朴な近似解法として Rayleigh-Schrödinger (RS) 摂動論[3]は素朴な摂動展開として最も古くから研究されている。それに対して、射影演算子の観点から構築される Brillouin-Wigner (BW) 摂動論[4]は RS 摂動論の自己エネルギー(量子補正)の再総和理論としてみなすことができ、エネルギーについての幾何級数型の自己無撞着方程式を与える。しかし BW 摂動公式にはまだ自己エネルギー以外の量子補正を多分に含んでおり、もしそれら全ての量子補正について再総和できた場合、それは BW 摂動論より高次の量子補正を正確に取り込んだ理論となる。したがってそれは高精度・高収束する解を与えるだろうと期待できる。

そして本研究では再帰グリーン関数による  $N$  準位系の BW 摂動論に現れる全ての量子補正の総和法を考案した。再帰グリーン関数によるエネルギー固有値・固有状態の記述は、それらに含まれる量子補正の系統的な分離・再総和を可能にし、複雑な量子遷移を簡潔してくれる。再総和の結果、理論に現れるダイアグラムは固有状態をグラフの頂点とする paths と cycles で表現されることが分かり、本研究ではこれらのダイアグラムをそれぞれ trees と single loops と呼称する。注目すべきことに、その再総和された摂動公式は有限連分数の形で厳密な自己無撞着方程式を与え、これは理論に現れる量子補正を最大限に再総和すると BW 摂動論は厳密な理論へ姿を変えることを意味する。また、この再総和され

た摂動公式の有効性を確認するため、本研究では解の収束性・厳密性の観点から  $N=7$  の場合の数値計算を行った。

図 1 では、それぞれ従来の BW (青折れ線) と再総和された BW 摂動論 (赤折れ線) が与えるエネルギー固有値の相対誤差の幾何平均を摂動次数  $m$  でプロットした。この数値計算例では明らかに、再総和された BW 公式による結果は従来の BW 公式よりも速く収束していく様子が見取れ、量子補正の再総和の効果が現れている。

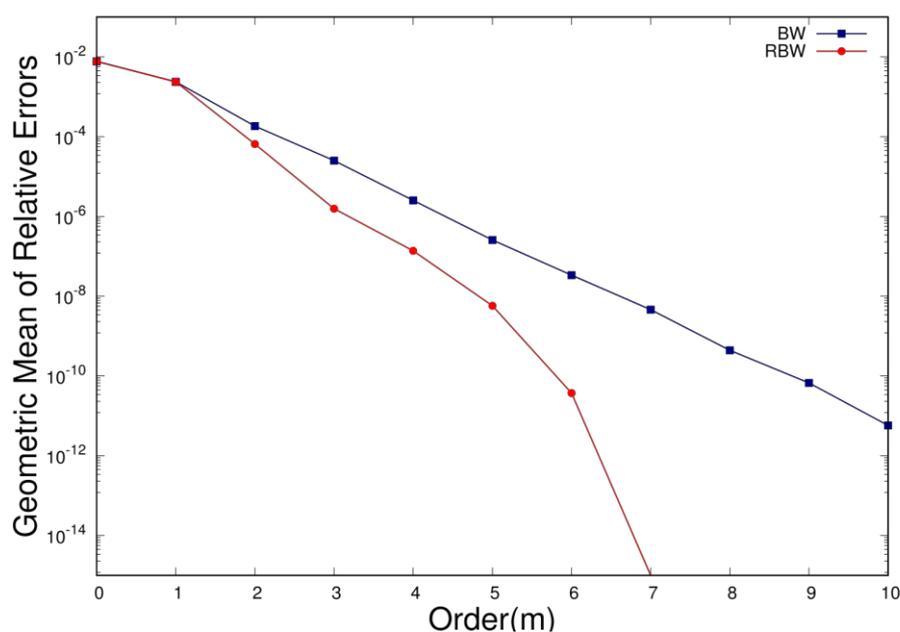


図 1 : 結合定数  $\lambda = 0.01$  のときの各エネルギーに関する相対誤差の幾何平均

#### 参考文献 :

- [1] L. Y. Chen, N. Goldenfeld and Y. Oono, Renormalization group and singular perturbations: Multiple scales, boundary layers, and reductive perturbation theory, Phys. Rev. E., 54 (1996), 376-394. doi: 10.1103/PhysRevE.54.376.
- [2] S. Iso, H. Ohta and T. Suyama, Secular Terms in Dyson Series to All-Orders of Perturbation, KEK-TH-2017/arXiv:1712.00943 [hep-th]
- [3] J. J. Sakurai, Jim Napolitano Modern Quantum Mechanics, 2nd edition, Pearson Education, Upper Saddle River, NJ (2011).
- [4] I. Hubač, S. Wilson, Brillouin-Wigner Methods for Many-Body Systems, Springer, New York, 2010.

# 非可積分系におけるトンネル分裂と状態間の大域的結合

非線形物理研究室

菅野皇太

トンネル効果とは、古典力学で禁止された領域への量子力学的な遷移である。古典力学で禁止される領域は、ポテンシャル障壁、または動的障壁 [1] によってつくられる。トンネル効果の研究には、2重井戸型ポテンシャルをもつモデルがよく用いられる。2重井戸型ポテンシャル系で量子力学の状態を考えると、左右の井戸に対称性がある場合、トンネルダブレットと呼ばれる準縮退した対称固有状態  $|\psi^+\rangle$  と反対称固有状態  $|\psi^-\rangle$  のペアが現れる。それに対し、左右それぞれの井戸に局在する状態は、それらトンネルダブレットを用いて

$$|\psi^l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi^+\rangle + |\psi^-\rangle)$$

$$|\psi^r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi^+\rangle - |\psi^-\rangle)$$

のように与えられ、この2つの状態は、周期  $2\pi/\Delta E$  で左右の井戸を行き来する。ここで  $\Delta E$  はエネルギー分裂と呼ばれ、準縮退しているダブレットペアの固有エネルギーの差である。エネルギー分裂の値が大きい程、トンネル効果に駆動された状態の往来が頻繁に起こり、トンネル確率の大きさも大きくなる。

考える系が1次元系するとき、対応する古典力学は可積分であり、すべて軌道は規則的な振る舞いを示す。1次元2重井戸ポテンシャル系におけるトンネル効果は、左右の井戸を隔てるエネルギー障壁を越えて現れるもので、それぞれの井戸上の規則軌道に局在する対称固有関数と反対称固有関数のダブレットペアの間で起こる。また、トンネル分裂は左右の井戸を往来するインスタントンと呼ばれる虚時間に沿って走る複素軌道を用いて半古典的に評価することができる。

一方、系が2次元系になると、対応する古典力学は一般には非可積分になり、規則軌道に加えてカオス的な振る舞いを示す軌道が出現し、その位相空間は両者が混在する混合位相空間を形成する。その結果、例えば2次元2重井戸ポテンシャル系においては、1次元系同様、エネルギー障壁を越え現れるトンネル効果に加えて、規則軌道による束縛によって生じる動的障壁にしみ出るトンネル効果、すなわち、動的トンネル効果が問題になってくる。特に、古典カオスの存在は後者の意味でのトンネル効果に顕在化することが期待される。

1次元系のトンネル効果は既に十分が理解が成されているのに対し、2次元系（あるいはそれ以上の自由度をもつ系）のトンネル効果には系の非可積分性が関与するため、現在でも十分な理解に至ってない。Tomsovicらは非可積分系のエネルギー分裂のふるまいを調べるために、カオスの強度を摂動パラメータによって変えることのできる、2自由度非可積分系のエネルギー分裂を調べた [2]。エネルギー分裂の摂動パラメータに対する依存性を調べると、可積分系に近い領域では、摂動パラメータの変化に対してエネルギー分裂の変化が連続的かつ滑らかなものになるのに対し、カオスの強度が大きくなるにつれて、摂動パラメータに対してのエネルギー分裂の変化には激しいスパイクが現れることを発見した。Tomsovicらは、このスパイクはダブレットを形成する2つの規則状態と、それとは別のカオス状態がエネルギー的に接近し、擬交差を引き起こすことによって生じることを突き止め、このトンネル分裂の増大の機構を Chaos-assisted tunneling（以下 CAT と略記）と呼んだ。ダブレットペアを構成する2状態がエネルギー的に孤立している場合のエネルギー分裂は、通常の2重井戸の場合同様、注目している2状態のみによる近似が有効であるが、カオス状態がダブレットペアに接近し擬交差を生じる領域では、カオス状態を含む局所3準位モデルがトンネル分裂を記述する。また、トンネルダブレットと他の準位が擬交差を引き起こすことによって、エネルギー分裂を増大させる機構には、

CAT の他に、位相空間の非線形共鳴が関与する Resonance-assisted tunneling(以下 RAT と略記) と呼ばれる機構も存在する。

CAT および RAT は、系の可積分性がトンネル効果に顕在化するひとつの有力な考え方として広く認識されるものであるが、パラメータ変化に対するトンネル分裂のスパイク発生は、可積分系においても現れるため、スパイク生成をただちに系の非可積分性に帰することはできない。先行研究 [3] では、非可積分系のトンネル分裂のふるまいを調べるために、1次元単振り子系と激力振動子系と呼ばれる、カオスの生じる非可積分系のトンネル分裂のふるまいを比較し、CAT や RAT の機構では想定されていない、エネルギー的に離れた数多くの状態との結合が、注目するトンネル分裂の大きさを支配していることを見出した。CAT および RAT は、トンネルダブレットと直接擬交差を起こす状態のみがトンネル確率増大の要因と考えるものであるが、新たに見出された機構は、状態間の大域的結合がトンネルを支配し、直接の擬交差が起こるパラメータ領域のみならず広く定常的にトンネル異常が発生していると考えられるものであり、両者の物理的描像は全く異なる。本研究では、以下のハミルトニアンで与えられる系を用いて、写像力学系で見いだされた大域的な状態間結合が、より一般の連続時間系でも存在するか否かを調べた。

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}_1 + \frac{1}{2}\hat{p}_1 + V(q_1, q_2)$$
$$V(q_1, q_2) = (q_1^2 - 1)^2 + q_2^2 + \lambda q_1^2 q_2^2$$

ここではまず、文献 [3] と同様に、注目するトンネルダブレットと直接擬交差を起こす状態との結合を局所的に抑制した際のトンネルダブレットの応答を調べることにより、文献 [3] で見いだされた大域的な結合の有無を検証した。さらに、Pechukas-Yukawa によって導入された、レベルダイナミクス [4,5] を基に、パラメータ変化によってトンネルダブレットが受ける相互作用の様子を調べた。レベルダイナミクスは、エネルギーレベルを粒子の位置、対角摂動要素を粒子の運動量と見立て、エネルギーレベルの”運動方程式”を与えるものであるが、その運動量の変化を調べることにより力（相互作用）の及ぶ領域を知ることができる。その結果、注目するダブレットは、擬交差を起こす摂動パラメータの領域のみならず、さまざまな摂動パラメータの領域で、幅広い準位から相互作用を受けることが判明した。

## 参考文献

- [1] M. J. Davis and E. J. Heller: J. Chem.Phys, **75** (1981), 246.
- [2] S. Tomsovic and D. Ullmo: Phys. Rev. E, **50** (1994), 145.
- [3] Y. Hanada, A. Shudo and K. Ikeda: Phys. Rev. E, **91** (2015), 042913.
- [4] P. Pechukas: Phys. Rev. Lett, **51**, (1984), 943.
- [5] T.Yukawa: Phys. Rev. Lett,**54** (1985),17.

# スピン軌道相互作用を持った リングトラップ Bose 原子系の基底状態

量子凝縮系理論研究室

土川航太

レーザー冷却や蒸発冷却等の実験技術を組み合わせて数  $10\mu\text{K}$  程度まで冷却された原子気体のことを冷却原子系と呼ぶ。極低温の状態では量子力学の効果が顕著に現れることに加え、冷却原子系は実験的に制御できるパラメーターも豊富である。さらに 2011 年、 $^{87}\text{Rb}$  原子の Bose-Einstein 凝縮体 (BEC) に対して実験的に冷却電子系にスピン軌道相互作用 (Spin-Orbital-Coupling : SOC) を合成する方法が発見された [1]。この SOC は線形な運動量とスピンの結合としてハミルトニアンに  $\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の形で現れるので、Spin and Linear-Momentum coupling (SLM) と呼ぶ。スピン軌道相互作用については、スピンホール効果やトポロジカル絶縁体、トポロジカル超伝導などの複雑かつ興味深い現象を数多く引き起こすことが知られており、物性物理学でも活発に研究されている。そこで、物性物理学で研究されている多体系などを冷却原子系で模倣し、その複雑な振る舞いを実験的に調べる量子シミュレーションなどの研究も行われている。また、スピン軌道相互作用を合成する実験技術の向上により、ただ電子系を模倣した系だけではなく、スピン軌道相互作用を持つ Bose 系という新しい物理系の動力学も調べるのが可能になった。

その一方で、近年新たに  $\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  の形をした、スピンと角運動量を合成させたスピン軌道相互作用 (Spin and Orbital-Angular-Momentum coupling : SOAM) の重要性が提唱された [2]。先行研究では、リング状にトラップされた BEC に対して Laguerre-Gaussian レーザーを用いることでラマン遷移を誘起させ、SOAM を合成させている。また、昨年 Laguerre-Gaussian レーザーを用いて SOAM を持つスピン 1 の Bose 原子系を作り出す実験が成功した [3]。

本研究では、スピン 1/2 をもつ BEC のスピン軌道相互作用が SLM の形で与えられる場合の基底状態 (図 1) と SOAM の形で与えられる場合の基底状態 (図 2) について変分法を用いて相図を作成し、平面波相やストライプ相が現れる

ことを確認した。また、レーザーパラメータやスピン間相互作用の大きさに加え、粒子密度を変化させることで相図にどのように変化や傾向が生じるのかについて解析した。

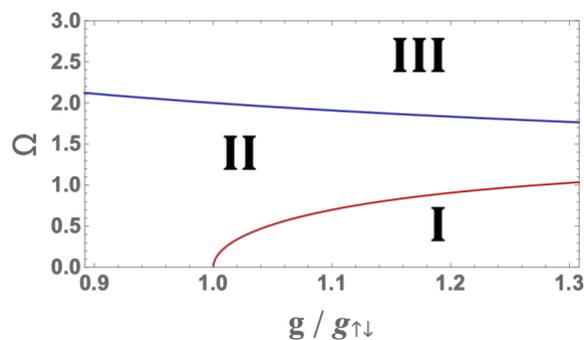


図 1: SLM を持った Bose 原子系の基底状態の相図. 縦軸はレーザーパラメータ  $\Omega$ , 横軸は相互作用パラメーター  $g$  と  $g_{\uparrow\downarrow}$  の比である.

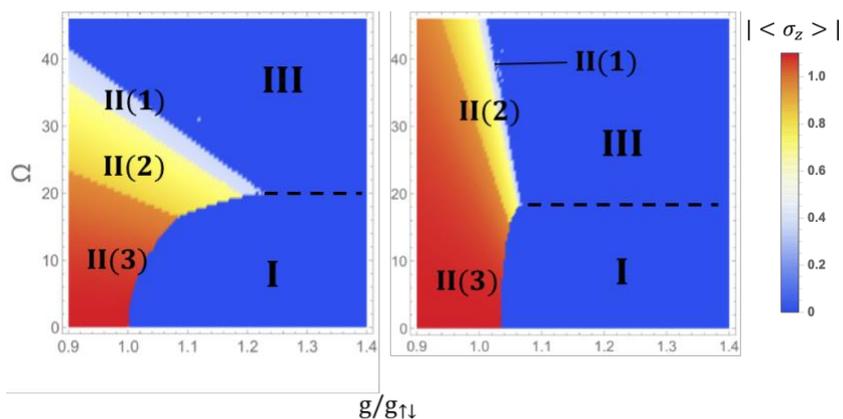


図 2: SOAM を持った Bose 原子系の基底状態の相図. 縦軸はレーザーパラメータ  $\Omega$ , 横軸は相互作用パラメーター  $g$  と  $g_{\uparrow\downarrow}$  の比である. また, 右の図は粒子密度を 10 倍にした図である.

#### 参考文献 :

- [1] Y. J. Lin, *et al.*, Nature. **471**, 83(2011).
- [2] K. Sun, *et al.*, Phys. Rev. A **91**, 063627(2015).
- [3] H.-R. Chen, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **121**, 113204 (2018)

# 2軌道アンダーソンモデルの数値繰り込み群法による近藤効果の研究

強相関電子論研究室  
中村憲吾

微量の磁性不純物を含む金属が電気抵抗極小を示す現象は1930年代から知られていたが、その機構は1964年に近藤淳によって解明された。近藤は、1つの不純物スピンの1種類の伝導電子バンドと相互作用するモデルを扱ったが、その後、複数チャンネルの伝導電子と混成する場合に興味に移った。そして、不純物スピンの過剰遮蔽によって非フェルミ液体状態が現れることが指摘され[1]、マルチチャンネル近藤効果の研究が盛んになった。当初、理論研究が先行したが、1987年にコックスが、電気四極子の自由度を用いれば、立方晶U系化合物で2チャンネル近藤効果が生じることを指摘し[2]、これによって2チャンネル近藤効果の実験が進展した。実際、非フェルミ液体状態の振る舞いが、ThやYをUで置換したTh(U)Be<sub>13</sub>, Th(U)Ru<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>, Y(U)Pd<sub>3</sub>において観測された[3-5]。

しかし、その後、2チャンネル近藤モデルでは説明のできない振る舞いが発見され[6]、Th(U)Ru<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>の非フェルミ液体的な振る舞いの原因は2チャンネル近藤効果ではなく、量子相転移付近の量子揺らぎに起因する可能性が指摘された[7]。磁場や圧力などの制御パラメータを変化させた時、量子揺らぎによって秩序相から無秩序相への量子相転移が起こる点は量子臨界点と呼ばれるが、量子臨界点近傍では、非従来型の異方的超伝導や非フェルミ液体といった新奇な量子現象が現れるため、盛んに研究されており、現代の物性物理学において重要な研究対象となっている。

本研究では、数値繰り込み群 (NRG) 法を用いて、2軌道アンダーソンモデルの量子臨界点を探索した。モデルハミルトニアンは以下ようになる。

$$H = \sum_{k\tau\sigma} \epsilon_k c_{k\tau\sigma}^\dagger c_{k\tau\sigma} + V \sum_{k\tau\sigma} (c_{k\tau\sigma}^\dagger f_{\tau\sigma} + \text{h.c.}) + H_{\text{imp}}.$$

ここで、 $c_{k\tau\sigma}$ は波数ベクトル $\mathbf{k}$ 、軌道 $\tau(=a,b)$ 、スピン $\sigma(=\uparrow,\downarrow)$ の伝導電子の消滅演算子、 $\epsilon_k$ は伝導電子の運動エネルギー、 $f_{\tau\sigma}$ は局在電子の消滅演算子、 $V$ は伝導電子と局在電子の混成である。 $H_{\text{imp}}$ は不純物ハミルトニアンを表し、

$$H_{\text{imp}} = U \sum_{\tau} n_{\tau\uparrow} n_{\tau\downarrow} + U n_a n_b + J \sum_{\sigma\sigma'} f_{a\sigma}^\dagger f_{b\sigma'}^\dagger f_{a\sigma'} f_{b\sigma} + J' (f_{a\uparrow}^\dagger f_{a\downarrow}^\dagger f_{b\uparrow} f_{b\downarrow} + \text{h.c.}) + \epsilon_f n$$

である。ここで、 $n_{\tau\sigma} = f_{\tau\sigma}^\dagger f_{\tau\sigma}$ ,  $n_\tau = n_{\tau\uparrow} + n_{\tau\downarrow}$ ,  $n = n_a + n_b$ ,  $\epsilon_f$ は局在電子のエネルギー準位、 $U$ は軌道内クーロン相互作用、 $U'$ は軌道間クーロン相互作用、 $J$ は交換相互作用、 $J'$ はペアホッピング相互作用を表している。 $U=U'+J+J'$ の関係に注意する。

局在電子数 $n=2$ のハーフフィリングの場合を考えると、局所基底状態 ( $H_{\text{imp}}$ の固有状態) は全部で6つ現れ、立方対称下では、 $\Gamma_1$ 一重項、 $\Gamma_3$ 二重項、 $\Gamma_5$ 三重項に分かれる。 $J$ ,  $J'$ を変化させた時の局所基底状態相図を図1に示す。本研究では、2軌道アンダーソンモデルをNRG法によって解析し、 $J$ - $J'$ 平面上で量子臨界点を探索する。

局所基底状態が $\Gamma_5$ 三重項の時、スピン自由度が残っているので、伝導電子はそれを遮蔽し、基底状態としてスピン近藤-芳田一重項が現れる。 $\Gamma_1$ 一重項と $\Gamma_5$ 三重項の境界付近に、結晶場一重項とスピン近藤-芳田一重項の競合による量子臨界点が存在することはよく知られている。一方、局所基底状態が $\Gamma_3$ 二重項の場合、伝導電子は軌道自由度を遮蔽するため、軌道近藤-芳田一重項が現れる。そして、 $\Gamma_1$ 一重項と $\Gamma_3$ 二重項の境界付近に、結晶場一重項と軌道近藤-芳田一重項の競合による量子臨界点を見出した。図1の赤色の曲線は、NRG法によって求めた量子臨界点を結んだ量子臨界曲線である。本研究では、予備計算段階ではあるが、多極子感受率も求めたので、その結果についても簡単に議論する。

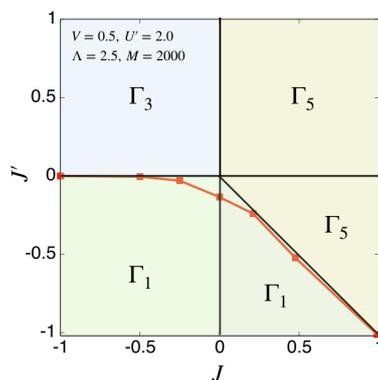


図1:  $J$ - $J'$ 面上での局所基底状態相図。赤色曲線上の■は、数値繰り込み群によって求めた量子臨界点。 $M$ はNRG法で残す状態数、 $\Lambda$ はカットオフパラメーターである。

### 参考文献:

- [1] P. Nozières and A. Blandin, J. Phys. **41**, 193 (1980).
- [2] D. L. Cox, Phys. Rev. Lett. **59**, 1240 (1987).
- [3] F. G. Aliev et al., Solid State Commun. **91**, 775 (1994).
- [4] H. Amitsuka and T. Sakakibara, J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 736 (1994).
- [5] C. L. Seaman et al., Phys. Rev. Lett. **67**, 2882 (1991).
- [6] H. Amitsuka et al., Physica B **281&282**, 326 (2000).
- [7] S. Yotsuhashi, K. Miyake, and H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 389 (2002).

# ダイヤモンド構造上の反強四極子秩序 に誘起される電気磁気効果

強相関電子論研究室  
石飛尊之

近年、d、f電子系で観測される多極子秩序が関心を集めている。電子の原子軌道がもつ縮退は結晶場によって解かれるが、立方晶系など対称性の高い結晶では縮退が残り、多極子モーメントが活性化する。dまたはf電子を奇数個もつ系では、クラマースの定理から必ず磁気双極子モーメントを持つが、偶数個の電子をもつ系では磁気双極子モーメントを持たず、高次のモーメントのみが活性化する場合がある。実際に、f<sup>2</sup>電子配置のPr<sup>3+</sup>イオンを含む立方晶系のいくつかの化合物では、電気四極子( $O_{20}$ ,  $O_{22}$ )及び磁気八極子( $T_{xyz}$ )のモーメントをもつ $\Gamma_3$ 二重項が結晶場基底状態となる[1]。その例であるカゴ状物質Pr $T_2X_{20}$  ( $T = \text{Ti, Ir, V}$ ,  $X = \text{Zn, Al}$ 等)は、Prイオンがダイヤモンド構造を形成する立方晶系であり、四極子秩序と思われる相転移や超伝導転移、四極子近藤効果など興味深い現象が観測されている[1-2]。PrV<sub>2</sub>Al<sub>20</sub>、PrIr<sub>2</sub>Zn<sub>20</sub>などでは四極子秩序が反強的であることがわかっているが、その詳細な秩序変数は解明されておらず、重要な課題の一つである。

本研究では、Pr $T_2X_{20}$ 系での反強四極子秩序が空間反転対称性を破ることに注目し、その秩序変数が電気磁気効果の異方性により同定されることを示した。一般に、空間反転対称性を持たない金属では、電場に対して磁化が応答する場合がある。これは、電場により生じる電流は磁化と同じく時間反転に対して奇で、電流と磁化が結合できるためである。電流と磁化は空間反転に対する偶奇性が異なるため、系が空間反転対称性を持つ場合には磁化は生じない。また、電流と磁化は鏡映操作に対する変換性も異なることから、磁化の応答の異方性は鏡映対称性の有無を反映する[3-4]。これを踏まえ、本研究では秩序変数と可能な応答を整理し、四極子秩序を考慮した $\Gamma_8$ 強束縛模型を用いて誘起磁化を計算し、秩序変数が同定可能であることを示した。図1に電流の方向に生じる磁化の方向依存性を示す。電流方向がx = y面内であるときには、秩序変数が $O_{22}$ の場合にのみ磁化が生じる。これは、反強 $O_{22}$ の秩序は[110]の鏡映対称性

を破り、 $O_{20}$ の秩序は破らないことを反映している。この異方性から、電流誘起磁化の測定により、反強四極子秩序の秩序変数を同定することができる。これが本研究の第一の、そして主要な結果である。

第二に、四極子近藤格子モデルを平均場近似によって解析し、秩序変数の相図を得た。図2に化学ポテンシャル $\mu$ と混成の強さ $J$ に対する秩序変数の相図を示す。ハーフフィリングに近い場合に強 $O_{20}$ 秩序が、それ以外の場合に反強 $O_{22}$ 秩序が得られた。反強 $O_{22}$ 秩序は主要な反強 $O_{22}$ モーメントに加え、小さな強 $O_{20}$ モーメントを伴い[5]、この場合に $\Gamma$ 点付近にワイル点が生じること、フェルミ面上にワイル点がある場合には磁化の応答が大きくなることがわかった。発表では、生じる磁化の大きさの評価、 $\mu$ - $J$ 相図と多極子感受率との関係などについても議論する。

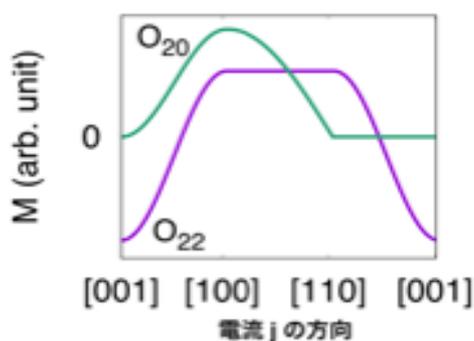


図 1. 反強四極子秩序下で電流の方向に生じる磁化の電流方向依存性。紫色は  $O_{22}$  秩序、緑色は  $O_{20}$  秩序下での応答である。

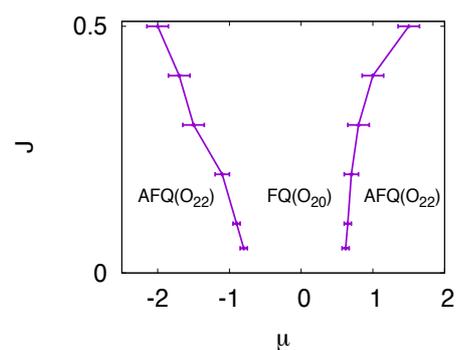


図 2. 四極子近藤格子模型の平均場近似による  $\mu$ - $J$  相図。伝導電子の最近接ホッピングの大きさを単位としている。

### 参考文献：

- [1] T. Onimaru and H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 082002 (2016).
- [2] A. Sakai and S. Nakatsuji, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 063701 (2011).
- [3] S. Hayami et al., Phys. Rev. B **98**, 165110 (2018).
- [4] H. Watanabe and Y. Yanase, Phys. Rev. B **98**, 245129 (2018).
- [5] K. Hattori and H. Tsunetsugu, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 034709 (2014).

# ワイル半金属 $\text{WTe}_2$ の特異な電子輸送特性

電子物性研究室

大西翔太

ワイル半金属は、線形分散で特徴付けられる特異なワイル点を波数空間に持つトポロジカル物質の一種である。角度分解光電子分光による、Fermi arc と呼ばれるワイル点をつなぐ表面状態の観測により、 $\text{WTe}_2$  がこれに属することが最近明らかとなった。2014年に、 $\text{WTe}_2$  において巨大な磁気抵抗が報告され[1]、この系の電子状態を理解するための研究が盛んに行われ始めた。 $\text{WTe}_2$  の結晶構造（空間群  $Pmn2_1$ ）は空間反転対称性を破っており、強いスピン軌道相互作用により、キャリアは波数ベクトルに依存したスピン方向を持ち（spin texture と呼ばれる）、フェルミ面上を運動することがバンド計算により指摘されている。 $\text{WTe}_2$  の電子状態は十分に理解されておらず、以上の特徴的な電子物性の原因は未だ解明されていない。そこで私は、 $\text{WTe}_2$  の電子状態を明らかにするため、単結晶 試料を用いて、①強磁場中の電気抵抗の異方性、②磁性不純物が伝導特性に与える効果の2点に着目し調べた。

$\text{WTe}_2$  の純良な単結晶を得るため、Te フラックス法を用いて育成方法の試行錯誤を繰り返した結果、図1に示すような  $3.0 \times 0.5 \times 0.01 \text{mm}^3$  程度の大きさの単結晶試料を得ることができた。電気抵抗  $\rho$  (T) の測定により得られる残留抵抗比  $\rho(300\text{K}) / \rho(T \rightarrow 0)$  は1330に達しており、世界最高レベルの品質を持った単結晶であることがわかった。この試料を用いて、強磁場中の電気抵抗の異方性を温度を変化させながら行った。超強磁場下での電気抵抗測定を行うため、東京大学国際超強磁場科学研究施設における56Tに達するパルス磁場も利用した。

育成した単結晶の磁気抵抗は、図2より、1.4Kにおいて、56Tの磁場下で  $4 \times 10^5$  に達することがわかった[2]。これはこれまでに報告された磁気抵抗の中で最も高い値となっており、純良な単結晶であることを反映している。伝導キャリアの

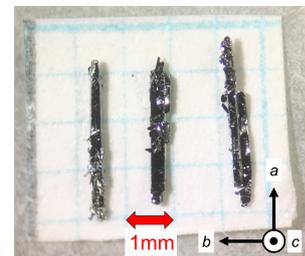


図1 育成に成功した

$\text{WTe}_2$  単結晶

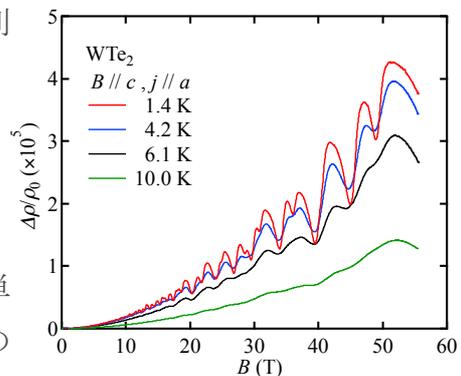


図2 磁気抵抗の磁場依存性

散乱機構を調べるために、Kohler プロットを用いて磁気抵抗測定データを解析した。格子欠陥等の単一の散乱機構が働いている場合には、温度を変えても同一曲線上にのるはずである。WTe<sub>2</sub>のデータは、明らかに温度依存しており、温度上昇とともに散乱強度が大きくなっていることが初めて明らかとなった[2]。これは「Kohler 則の破れ」と呼ばれ、複数の散乱機構が働いていることを示している。格子欠陥等による弾性散乱に付け加えて、温度上昇とともに、電子格子非弾性散乱が関与している可能性がある。

単結晶の純良化により、フェルミ面上を伝導キャリアがサイクロトロン運動することに起因する明瞭な磁気抵抗の量子振動(SdH 振動と呼ばれる)の観測に成功した。量子振動の振幅は約 50%に達しており、過去の報告の中で最大である。量子振動のフーリエスペクトルには、4つの基本振動(2つのホール面(振動数  $F^1$ ,  $F^4$ )と2つの電子面( $F^2$ ,  $F^3$ )に帰属)および、 $F^1+F^4$ に対応する振動が観測された[2]。後者のピーク強度が磁場上昇とともに顕著に増大することがわかった。2つのホール面間をキャリアがトンネルしながら周回運動する、磁気貫通効果(magnetic breakdown)に起因している証拠を得た。

磁性不純物イオンがキャリアの伝導現象にもたらす効果を調べるために、(W<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>)Te<sub>2</sub> 単結晶育成を行った。フラックス法による Fe イオンのドーピングおよびその同定は難しく、蛍光 X 線分析で確認できたドーピング量  $x$  は  $x < 0.4\%$  である。電気抵抗の温度依存性において、 $T < 20\text{K}$  の低温で  $-\log T$  に比例する増大を見出した(図 3)。これは近藤効果が発現していることの証拠であり、ワイル半金属における近藤効果の初めての観測である。近藤効果を説明する

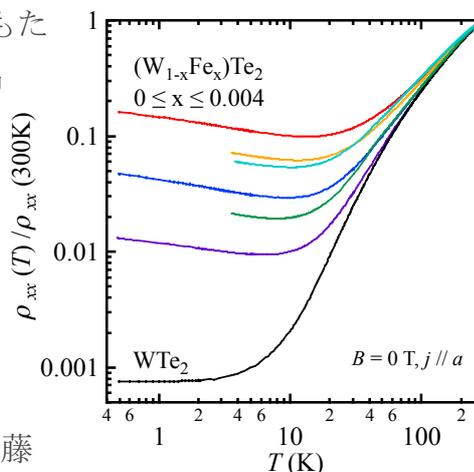


図 3 磁気抵抗の磁場依存性

る Hamann モデル(スピン 1/2)を用いて解析し、近藤温度  $T_K=1.7\text{K}$  を得た。

以上の世界最高レベルの純良単結晶を用いた電子輸送効果の測定により、ワイル半金属 WTe<sub>2</sub>の伝導キャリアの重要な特性を明らかにすることが出来た。

#### 参考文献：

- [1] M. N. Ali *et al.* Nature **514**, 205 (2014).
- [2] S. Onishi *et al.* AIP advances **8**, 101330 (2018).

# 新奇 Yb 化合物 $\text{Yb}_5\text{Ir}_6\text{Sn}_{18}$ の 非フェルミ液体的物性異常の研究

電子物性研究室

岸本 美晴

希土類化合物やアクチノイド系化合物では、化合物中の  $f$  電子と伝導電子の間に働く複数の相互作用が拮抗することで興味深い物性を示す。例えば磁性を安定化し  $f$  電子を局在させようとする RKKY 相互作用と遍歴性をもたらす近藤効果の複数の相互作用が競合することによって伝導電子の有効質量が約 100 ~ 1000 倍増強された重い電子状態や非従来型超伝導状態、非フェルミ液体的異常などが現れ、長年にわたり精力的に研究が行われてきた。それと同時に研究対象となる新たな新奇物質開発がすすめられてきた。近年これらの強相関電子系では、希土類元素の  $f$  電子が持つ多極子自由度や、価数の自由度に起因する新奇な物性異常に注目が集まっており、14 種の希土類に対して、複数  $f$  電子を持つ系へと研究対象が広がっている。特に 2 価と 3 価の価数状態を持つ Yb、Sm、Eu 系においては、磁気的自由度と価数自由が複雑に関係したような新たな強相関電子状態が発見されはじめており、注目を集めている。そこで、本研究では Yb 化合物において新奇な強相関電子状態を示す新物質開発に取り組んだ。その結果、以下に述べるように  $\text{Yb}_5\text{Ir}_6\text{Sn}_{18}$  における低温物性において非フェルミ液体的挙動を示すことを初めて明らかにすることに成功した。

Yb 化合物における新奇物質開発の方針として、籠状構造を持つ充填型スクテルダイトや  $\text{YbTr}_2\text{Zn}_{20}$  のいわゆる 1-2-20 化合物等における物性研究を踏まえ、同様に希土類サイトを対称性の良い籠で囲むような結晶構造を持つ  $R_3\text{Tr}_4\text{X}_{13}$  及び関連物質に注目して物質探査を行った。これらの系は、同じ組成比の化合物、そして類似構造を含め少なくとも 5 つ以上の多彩な結晶構造を持つことが知られている [1, 2]。物性としても超伝導状態の研究、あるいは近年ではカイラルを持つ構造への奇妙な構造相転移を示す系としても注目を集めているが、Yb 系における低温物性測定は行われていなかった。

$\text{Yb}_5\text{Ir}_6\text{Sn}_{18}$  の単結晶育成は Sn-自己フラックス法を用いて行い大きな単結晶を得ることに成功した。当初の目的では物性報告が全くない  $\text{Yb}_3\text{Ir}_4\text{Sn}_{13}$  の育成を目指したが、実際の構造や組成分析、そして複数回の結晶育成からは、 $\text{Yb}_3\text{Ir}_4\text{Sn}_{13}$  の相は確認できなかった。しかし、図 1 に示すような空間群  $P4_2/nmc$ 、格子定数が  $a = 9.7292$  Å,  $c = 13.8095$  Å の大きな単位胞を持った正方晶の

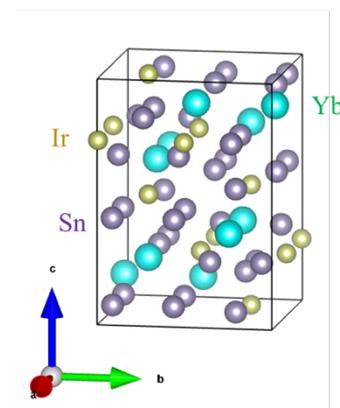


図 1  $\text{Yb}_5\text{Ir}_6\text{Sn}_{18}$  の結晶構造

結晶構造の  $\text{Yb}_5\text{Ir}_6\text{Sn}_{18}$  であることを明らかにした。この結晶構造は、立方晶の  $R_5T_6\text{Sn}_{18}$  によく似た内部構造を持ち、 $R_5T_6\text{Sn}_{18}$  と同様に籠状構造を持つ新しい構造であることを初めて明らかにした。格子定数は正方晶として  $a$  と  $c$  が異なるが、詳しくその構造を立方晶の構造と比較すると、立方晶の  $a$  と正方晶の  $c$  の値がほぼ同じ値を取り、 $a$  は立方晶の格子定数の約  $1/\sqrt{2}$  倍の値となっている。このことを踏まえた上で、相対的な元素位置の比較をすることで、正方晶と立方晶は元素位置がわずかにずれ、対称性が低下した構造に対応するという結論を得た。このような格子定数の関係などの構造パラメータの類似性は、X線によるラウエ写真を用いた方位確定を困難にする上、結晶性としてドメイン構造をとる可能性が考えられるが、磁気抵抗の角度依存性測定により区別できることを発見し単結晶全体としてドメインがないことを確認することに成功した。

それによって決定した方位を用いて電気抵抗、磁化、比熱の測定を行なった。電気抵抗の 300 K から 0.5 K までの測定によってゼロ磁場において 5 K 以下の低温で  $T^2$  に乗らない非フェルミ液体的異常を発見した。0 T と 0.2 T においては  $T^{1.2-1.3}$  に比例し、5 T、9 T と印加磁場を大きくすると  $T^2$  に乗るフェルミ液体的振る舞いが見られた。0.1 T の磁場中での帯磁率の温度依存測定においては、50 K 以上ではキュリーワイス則に乗り、そこから見積もられた有効磁気モーメントから Yb の価数は 3 価ではなく、約 2.7 程度の中間価数、または価数揺動状態にある可能性を示唆する結果を得た。さらに異常な点は、キュリーワイス則によるフィッティングから得られたワイス温度  $\theta_p$  は -254 K と極めて大きな負の値を持つ。一方で 2 K までの低温において反強磁性等の磁気秩序は見られず、フラストレーション系に見られるような特異な帯磁率の温度依存性を示すことが明らかになった。さらに降温に従い 50 K 付近から飽和し、10 K 付近から再び上昇し始め 2 K まで発散していく。そして 5 K 以下で  $T^{0.5}$  に比例する非フェルミ液体的挙動を示すことが明らかになった。また 7 T の磁場中の帯磁率の温度依存測定では 300 K から 20 K 付近まで 0.1 T と同じ振る舞いを示し、それより低温側では 0.1 T での振る舞いと比べて帯磁率が飽和していく振る舞いが見られる。  $T = 2$  K での磁化カーブにおいては、磁化は 7 T まで飽和せず上昇し続ける振る舞いが見られる。ゼロ磁場、0.4 K から 10 K までの比熱の温度依存測定においては 2 K 以下で  $-\log T$  的に  $C/T$  が上昇していく、非フェルミ液体異常が見られた。

以上より各物性の温度依存性から、非フェルミ液体的異常の起源について、2次元反強磁性揺らぎと価数揺動の2つが考えられる。しかし  $\text{Yb}_5\text{Ir}_6\text{Sn}_{18}$  は3次元的な結晶構造であること、価数揺動状態を示すことから、非フェルミ液体的異常は価数揺動に起因すると考えられる。

#### 参考文献：

- [1] G.P. Espinosa, Mat. Res. Bull. **15**, 791 (1980).
- [2] A.S. Cooper, Mat. Res. Bull. **15**, 799 (1980).

# 粉体の応力鎖と構造の関係

ソフトマター研究室

沖山 綾馬

砂や小麦粉など粒子径の分布のある巨視的な粒子集団のことを粉体という。粉体は、薬品や食品、建設材料などとして扱われるだけではなく、工業や自然災害などに関わっており、我々の生活に密接に関係している。粉体は固体粒子の集まりであるにも関わらず液体や気体のような流動性を持っている。このようなダイナミクスは摩擦や非弾性衝突による非平衡系によるため統計力学的な記述が難しく、粉体の持つ性質によって引き起こされる現象には、理解が進んでいないものが数多く存在している。

また粉体は、粒子径分布と摩擦の効果により、内部の構造は不均一な構造を持っていて、安定状態であっても粒子同士の接触点の分布に規則性はない。なおかつ粉体に対して働く外力や粒子自身による自重にたいする応答は、粒子同士の接触点を介してのみ伝えられる。そのため接触ネットワークを介して力を強く伝えている部分と、力をほとんど伝えていない部分が構造に生じる。このような大部分の力を伝えている内部応力のネットワーク構造は **force chain** として知られている。**force chain** は粉体特有の構造であり、その力応答を調べることは外部からはわからないような構造の変化や摩擦の効果を定量的に解析することが可能であるため、粉体のダイナミクスを明らかにするため近年着目されている。しかしながら未だ明らかになっていない粉体のダイナミクスは存在し **force chain** に対する理解や深い目線からのアプローチが必要だと考えられる。

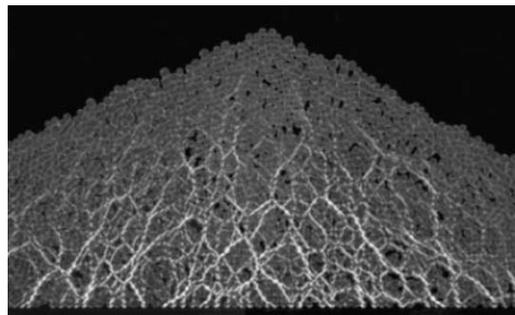


図 1 粉体の堆積物に生じる force chain[1]

一般的に **force chain** を観測する方法の一つとして光弾性法が使われる。アクリルなど透明で一様な物質に力を加えて光を入射させると、屈折率異方性が生じることで複屈折を起こす、この複屈折を利用してサンプルにかかる応力分布を観測できる。今回、我々は光弾性法により **force chain** を観測できるような、二分散系ディスクによる二次元粉体モデルを作成した。

今回我々は、粒子径分散度を変化させることにより、二分散系において結晶のような格子を作る **order** と粉体や流体のような無秩序な構造である **disorder**、またその中間構造である **order & disorder** の三つの構造を作り、分散度の変化に伴う **force chain** と構造との関係に着目して実験を行った。

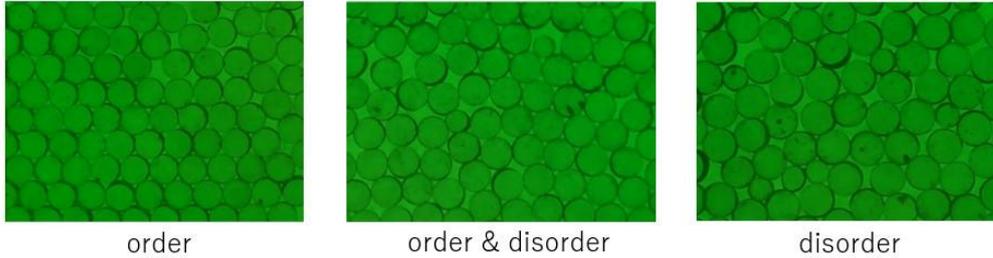


図 2 二分散系モデルの各構造

実験では解析により、粒子単位の構造の規則性を表すパラメータとしてボンド配向パラメータ

$$\psi_{\ell}^j = \frac{1}{n_j} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\ell\theta_{j\mathbf{k}})$$

を各粒子において計算した（ただし、 $n_j$ は粒子 $j$ の接触粒子数であり、 $\theta_{j\mathbf{k}}$ は粒子 $j$ と $\mathbf{k}$ の中心を結ぶベクトルと水平軸の間の角度、 $\ell$ は我々が興味を持っている対称性のタイプを指定する）。そして二粒子間における接触力の大きさとボンド配向パラメータの差に着目すると、order では二粒子のボンド配向パラメータがほぼ等しい部分に力が強くかかっている、order & disorder では力がボンド配向パラメータに依存せず分布している、disorder ではボンド配向パラメータの差が大きい部分に力が強くかかっていることを観測した。つまり分散度が変わるにつれて、構造の揃った部分から構造の欠陥の部分に力が移行していていることを確認した。発表では、これらの結果と考察について述べる。

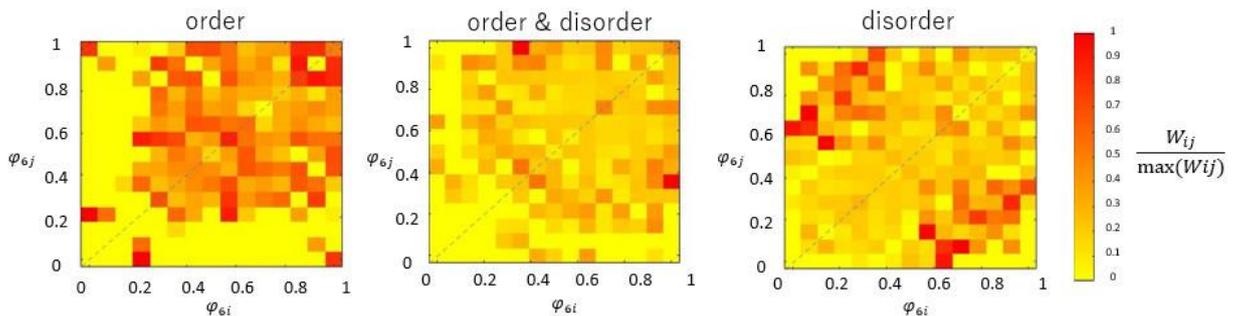


図 3 各構造におけるボンド配向パラメータと接触力の関係

参考文献

- [1] Zuriguel, I., and T. Mullin. Proc. R. Soc. A (2008).
- [2] K E Daniels, J E Kollmer, and J G Puckett. Rev Sci Instrum, 88(5):051808, 2017.
- [3] S. Luding, Adv. Compl. Syst. 04, 379 (2001)

# 泡沫の非平衡ダイナミクス

## ～協同的崩壊と緩和～

ソフトマター研究室

柳沢 直也

泡沫(foam)とは液体中に気泡(bubble)が混み合って内包された状態である。泡沫は気体と液体の 2 つの相の性質をもつため、多様な物性を示し、機能性も高い。ビールの泡や洗剤など日常生活の多くの場面で使われている。

### 1. 泡沫の協同的崩壊ダイナミクス

泡沫中の気泡が割れるとき、パチッという音が発生する。この音を測定し解析することによって泡沫中の気泡が協同的に崩壊するという現象の存在が間接的に明らかになったが、そのメカニズムは不明であり、この現象を理解する観点も分かっていない。そこで本研究では高速度カメラを用いて擬 2 次元泡沫における協同的崩壊現象の直接観察を行い、そのダイナミクスの液体分率( $\phi$ )依存性などを調べた。その結果、協同的崩壊には 2 つのモードが存在することがわかった。一つは伝播モード(破れた液膜がプラトー境界に素早く吸収され、この強い衝撃が原因で、同じプラトー境界を共有していた液膜が破れる)で、もう一つは貫通モード(伝播モードによってプラトー境界から放出された液滴が、泡沫の内側に向かって飛び出し、遠くにある別の液膜を突き破り、この貫通の衝撃によって液膜に穴が生じ、液膜が破れる)である(図 1)。協同的崩壊気泡数は  $\phi$  に対して指数関数的に減少し、粘性

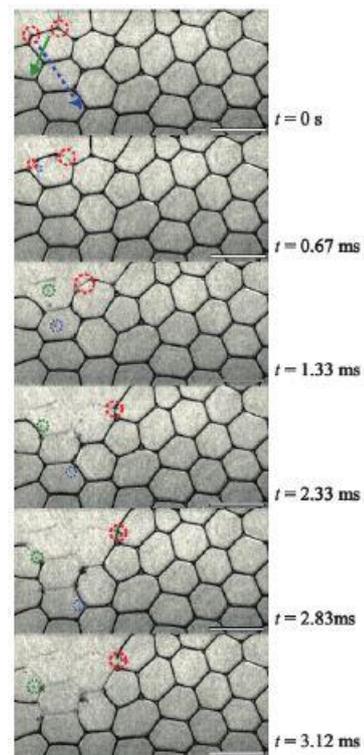


図 1 : 協同的崩壊の様子 ( $\phi=0.0099$ )。赤円が伝播モード、青と緑円が貫通モードを表す。

に依存しないこともわかった。 $\phi$  が 0.015 程度では貫通モードで放出された液滴が液膜で跳ね返りを繰り返しながら速度を落とし、最終的に液膜に吸収されるという挙動も観察された。また協同的崩壊が起きる  $\phi$  の範囲で液膜の崩壊速度が浸透圧と線形な関係になることもわかり、プラトー境界の負圧が崩壊の大きな要因であることがわかった。協同的崩壊は泡沫の安定性の制御に深く関係

しており、応用に大きく繋がる研究となった[2]。

## 2. 泡沫の微小変形時(液体注入時)における協同的緩和ダイナミクス

泡沫の液体分率が増加すると、気泡は丸くなり、気泡同士の押し押し合いが弱くなる。粒子(泡沫では気泡)同士の接触がちょうどなくなる時の粒子の空隙率(または充填率)をジャミング転移点( $\phi_c$ )という。 $\phi_c$ 近傍では臨界挙動などの興味深い物理が現れるため、エマルジョンやコロイド、粉体などの分野で盛んに研究が行われている。本研究では、泡沫に液体を近づけると浸透圧で液体を吸収する現象を利用して、泡沫の微小変形時(液体注入時)における緩和ダイナミクスの $\phi$ 依存性などを画像解析プログラムを用いて調べた。

その結果、 $\phi_c$ に近い状態では泡沫においても、平均接触気泡数が4に近づくなどのジャミング特有の性質を示すことがわかった。また液体分率が增大するにつれて

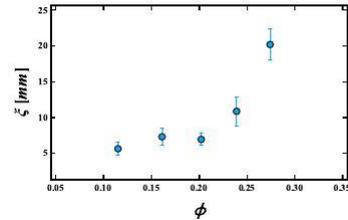


図2: 協同的 T1 イベントの相関長  $\xi$  と  $\phi$  の関係。

T1(気泡の再配置)が頻繁に起こるようになり、その緩和時間も増大することがわかった。さらに $\phi_c$ 近傍では T1 が協同的に起こるようになり、その相関長が急激に増大することがわかった(図2)。 $\phi_c$ に近づくと、構造緩和のダイナミクスが協同的になるという実験結果はこれまでに報告されておらず、ジャミングの物理の発展に大きく繋がる研究となった[3]。

## 3. 泡沫の大変形(空気注入時)におけるアフィン・ノンアフィン緩和ダイナミクス

泡沫に空気を注入すると気泡が膨らみ、膨らんだ気泡が割れると泡沫に大きな欠陥ができる。本研究では、空気注入を大変形として、その緩和ダイナミクスと $\phi$ との関係を調べた。その結果、dry 状態では、空気注入によって大きく引き伸ばされて変形した気泡が元にもどることから、アフィン緩和することがわかった。一方 wet 状態では変形した気泡が元にもどるとともに、再配置を繰り返して欠陥を埋めることから、ノンアフィン緩和することがわかった(図3)。

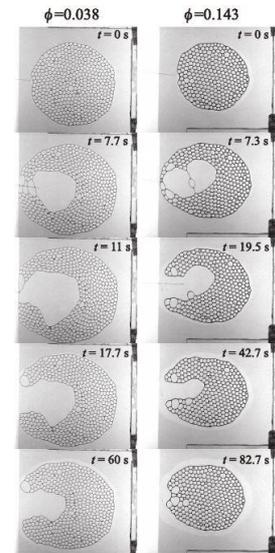


図3: 大変形時(空気注入時)における緩和ダイナミクスの様子。左: dry、右: wet

[1] R. Kurita, Y. Furuta, N. Yanagisawa and N. Oikawa. Phys. Rev. E 95, 062613 (2017)

[2] N. Yanagisawa and R. Kurita. Submitted

[3] N. Yanagisawa and R. Kurita. in preparation

# 高純度単層カーボンナノチューブの 分離精製と熱電物性

表界面光物性研究室

一ノ瀬遥太

持続可能な社会を実現するため安全で高性能な熱電変換材料が求められる中、1次元物質が最大の熱電変換性能を持つという理論的な提案が Hick と Dresselhaus によってなされている[1]. 同論文では、状態密度が発散するファンホーブ特異点 (vHS) を有する1次元電子構造と低次元化による熱伝導の低下が、熱電変換性能の向上の要因としている。これまで低次元化による熱伝導の低下に関する実験的知見は多いが、1次元電子構造に由来する熱電変換性能の向上に関する実験的知見は殆どない。1次元電子構造に由来する熱電物性の増大を実験的に検証し、そのメカニズムを解明することは実用的・学問的にも重要な課題である。

単層カーボンナノチューブ (SWCNT) は1次元電子構造を持つ代表的な1次元物質であり非常に安定な物質であることから、前述の背景を実験的に調べるには最適な物質であると考えられる。特にイオン液体を用いた電気二重層キャリア注入法による研究は、精密なフェルミレベル制御が可能であり、フェルミレベルと熱電物性の関係解明を可能としている[2-3]. 近年、様々な種類の SWCNT に対して研究がなされ、半導体型 SWCNT は比較的高い熱電物性を示すことが分かってきた。

しかし、従来の研究において半導体型のゼーベック係数の最大値は、実験と理論で1桁もの大きな乖離が存在していた。その結果、SWCNT 特有の1次元性による熱電物性の増大を実験的に検証することやその物性を理論と対比しながら詳細に議論することは困難であった。その原因は、従来の試料の半導体型純度が95%程度と低かったからと考えられる。純粋な半導体型のゼーベック係数は数 mV/K だが、金属型が微量 (~1%) でも混入するとゼーベック係数が1桁以上低下するという理論計算も報告されている[4-5]. しかし、比較的高純度に分離可能なゲルクロマトグラフィ分離法[6]ですら、残留する数%の金属型を完全に分離する技術は確立しておらず、よって半導体 SWCNT そもそもの熱電特性を実験的に正確に突き止められていなかった可能性がある。

したがって本研究では、1種類のカイラリティ純度を99%以上まで高めた高純度 SWCNT を精製する技術を確立し、こうして高純度化した試料を用いることで今までは議論が困難であった1次元電子構造と熱電特性との関係の理解を深めることを目的に研究を行った。

はじめに高純度精製に向けて、ゲルクロマトグラフィ分離法の改良を行った。本研究では pH に着目し、使用する溶液中に二酸化炭素を溶かし込むことで、pH を精密に制御し、金属型と半導体型の pH に対する応答の違いを利用してそれらを完全に分離することを試みた。二酸化炭素による微小な pH の変化がゲルクロマトグラフィ分離に与える効果を明らかにし、従来の方法では分離不可能であった試料に

対しても半導体型と金属型に完全に分離することが可能であることを見出した。この効果を利用した分離技術を新たに開発し、その結果、金属型を完全に除去した高純度単一カイラリティ(6,5)を得ることに成功した。この(6,5)の純度は99%以上であり、報告値と比較しても最高純度のものを得ることに成功した。

得られた高純度(6,5)を用いてその熱電物性を複数のパラメータを変化させて調べた。まず、高純度(6,5)に定量的に金属型を混合させ純度依存性を調べた結果、金属型の存在によりゼーベック係数のフェルミレベル依存性の振る舞いが大きく変化し、絶対値も大幅に減少することを実験的に明らかにした(図1)。さらにはキャリア注入が均一になされる薄膜条件にて理論予想に匹敵する1mV/Kを超える巨大なゼーベック係数を観測した(図2)。この結果から、理論的に予想されている熱電物性に近い値を実験的にも観測しうることを明らかにした。

また1次元性を議論するため熱電伝導率 $L_{12}$ と呼ばれる独立な物理量に着目しその解析を行った。その結果、高純度試料において $L_{12}$ はファンホーブ特異点付近でピークを持ち、キャリア注入量を増やすに従って減少する振る舞いを見ることが分かった(図3)。 $L_{12}$ の振る舞いは電気伝導度の微分項となっており、値が減少するのは、1次元系にしか見出すことはできない為、1次元性由来の熱電物性の観測が示唆されている。

本研究においては、世界最高純度の単一カイラリティSWCNT分離技術の開発に成功した。また、その試料を用いることで初めて、理論的に予想されているSWCNTのゼーベック係数の値・フェルミレベル依存性の振る舞いを実験的に得ることに成功した。さらには物理量 $L_{12}$ において、1次元性由来の性質と示唆される振る舞いを見出した。

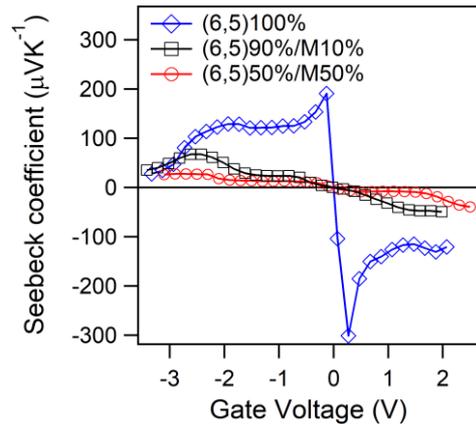


図1 ゼーベック係数のゲート電圧依存性

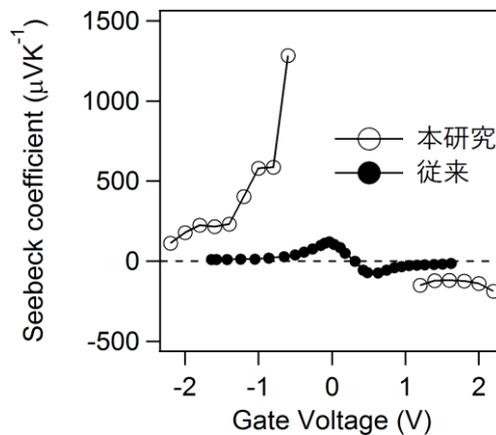


図2 巨大なゼーベック係数の観測

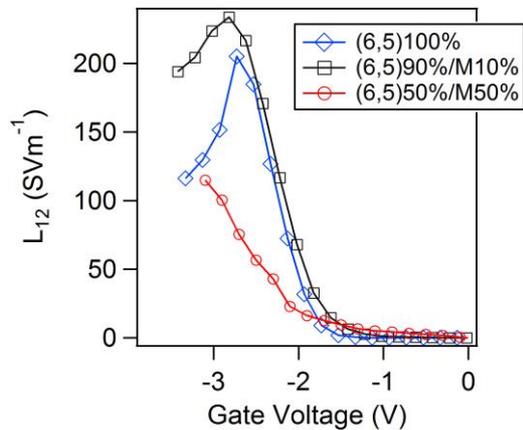


図3  $L_{12}$ の1次元性

[1] Hicks, et al., *Phys. Rev. B* **47**, 16631 (1993)  
 [2] Oshima, et al., *APL* **107**, 043106 (2015)  
 [3] Yanagi, et al., *Nano Lett.* **14**, 6437 (2014)

[4] Hayashi, et al., *APEX* **9**, 025102 (2016)  
 [5] Yamamoto, et al., *JPSJ* **87**, 024707 (2018)  
 [6] Yomogida, et al., *Nat. Commun.* **7**, 12056 (2016)

# ゲート制御アルカリ金属イオン インターカレーション技術の開発と 層状化合物材料への応用

表界面光物性研究室  
岡田 遼太郎

層状化合物材料の層間にアルカリ金属イオンを挿入するアルカリ金属イオンインターカレーションは、材料の表面だけでなく層状構造内部も含めた材料全体にキャリア注入が可能となるキャリア注入法であり、1970年代において既に、代表的な層状化合物材料である遷移金属ダイカルコゲナイド (TMDCs) に様々なアルカリ金属をインターカレートすることで半導体 TMDCs を超伝導転移させるといった報告がされるなど、非常によく知られた物性制御手法である[1, 2]。一方で、本研究室ではゲート絶縁体としてイオン液体を用いた電気二重層 (Electric double layers, EDL) キャリア注入法によって様々な半導体材料のフェルミレベルを自在に制御し、物性研究を行ってきた[3-6]。EDL キャリア注入法では試料とゲート電極の間にゲート絶縁体を挟み、ゲート電圧を印加することでゲート絶縁体中のカチオンとアニオンがゲート電極界面と試料界面にそれぞれ移動し、電気二重層を形成することで試料にイオンと対になるキャリアが注入される。このゲート絶縁体にアルカリ金属イオン電解質を用いると、正のゲート電圧印加時、非常に小さなイオン半径を持つアルカリ金属イオンが試料に接近することで、わずか 1 nm 以下の層間にイオンがインターカレートされ、層状構造内部にも電気二重層構造を形成することができ、材料全体の物性制御が可能となる。これがゲート制御アルカリ金属イオンインターカレーションである (図 1)。

本研究室では単層以外の層状化合物材料も研究対象としており、イオン液体を用いた手法ではその表面のみにしかキャリアを注入できず、キャリア注入量に限界がある。一方、ゲート制御アルカリ金属イオンインターカレーションは、材料全体

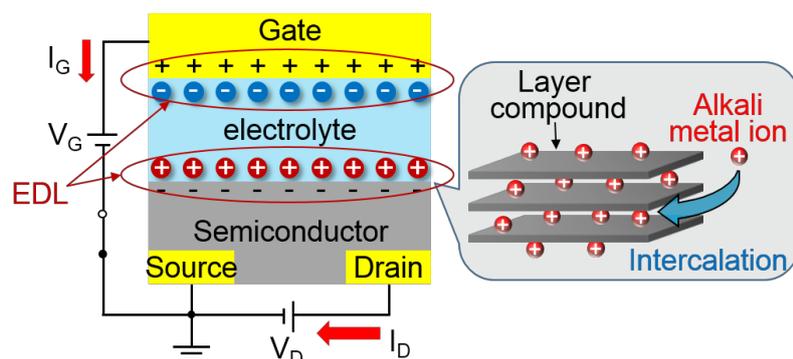


図 1: ゲート制御アルカリ金属イオン  
インターカレーションのイメージ

への高密度キャリア制御が可能であり、超伝導転移など、様々な層状化合物材料の高キャリア密度における物性研究に応用が期待されることから、同技術開発は重要である。よって本研究は、ゲート制御アルカリ金属イオンインターカレーション技術を開発し、それを層状化合物材料の物性制御に応用することを目的として進めた。

はじめにゲート制御アルカリ金属イオンインターカレーション技術の開発に取

り組んだ。インターカレーションを検出し易い半導体 TMDCs の二硫化モリブデン ( $\text{MoS}_2$ ) を試料として用いた。人工合成大面積 ( $\sim 1 \text{ cm}$ )  $\text{MoS}_2$  結晶から機械的剥離 (劈開) 法によって薄膜を取り出し、基板に転写して電極を蒸着することで測定デバイスを作製した (図 2)。カリウムイオン電解質を塗布してゲート電圧を印加しインターカレーションを起こさせ、さらにゲート電圧を印加したまま電解質を凍らせることで、インターカレーション状態を保ったまま 4 端子法による電気抵抗温度特性測定を可能とさせた。低温にする際の体積変化によりデバイスが損傷し抵抗測定ができなくなるという問題が多く発生したが、最も体積変化が大きく試料の損傷の原因であった電解質をカバーガラスで保持し滴下量を最小限に抑えたほか、導電性ペーストの選択や温調速度の最適化など、断線の原因を一つずつ取り除き、改良を繰り返したことで、最終的に低温測定に成功した。

実際にカリウムイオンインターカレーションに成功し電気伝導度を  $10^4$  以上上昇させ、繰り返しの温度変調においても断線せずに電気抵抗温度特性測定に成功した実験結果を示す (図 3)。インターカレーションおよび抵抗温度特性測定を繰り返す行うことで半導体から金属、さらに超伝導転移したと見られる振る舞いの観測に成功している。超伝導と見られる振る舞いを示したデバイスでは磁場依存性を測定し、極低温領域における抵抗減少が超伝導転移由来の振る舞いであることを確認した。

以上より本研究では、ゲート制御アルカリ金属イオンインターカレーション技術の開発に成功し、さらにそれを用いて多層  $\text{MoS}_2$  結晶薄膜の半導体・金属・超伝導転移を観測することに成功した。今後、同技術を他の層状化合物材料にも適用することで、高密度キャリア注入下における新規物性解明へと発展させていきたい。

- 参考文献：
- [1] J.A. Woollam, et al., *Physical Review B*, **13** (1976) 3843.
  - [2] J.A. Woollam, et al., *Materials Science and Engineering*, **31** (1977) 289.
  - [3] K. Yanagi et al., *Advanced Materials*, **23** (2011) 2811.
  - [4] K. Yanagi et al., *Physical Review Letters*, **110** (2013) 086801.
  - [5] M. Sugahara et al., *Applied Physics Express*, **9** (2016) 075001.
  - [6] H. Kawai, [R. Okada](#) et al., *Applied Physics Express*, **10** (2017) 015001.

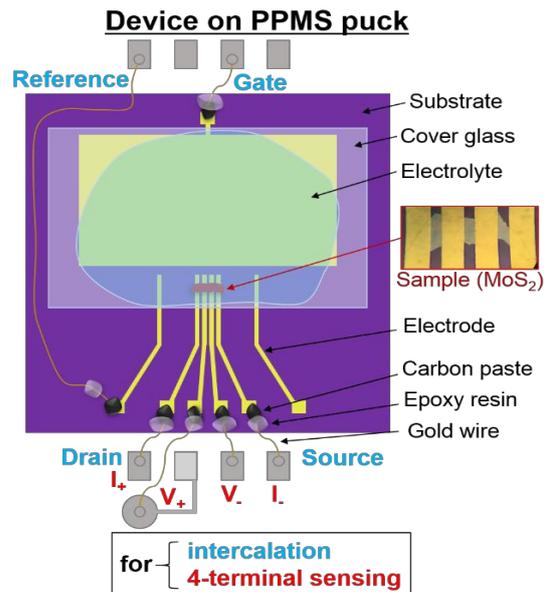


図 2：デバイス概略図

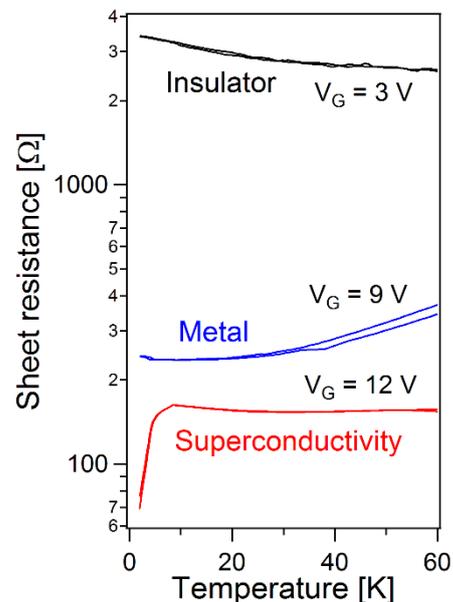


図 3：様々なゲート電圧印加時における電気抵抗温度特性

## 学位論文要旨 (修士 (理学・工学))

論文著者名 岡部碧

論文題名: 3次元ディラック電子系候補物質 PtSn<sub>4</sub> の NMR による研究

グラフェンに代表されるディラック電子系は、その特徴的なバンド構造がランダウ準位に特異性を引き起こすことが理論的に知られており、その結果、フェルミレベルがディラックノード近傍に存在するとき、グラフィイトで観測されるように大きな軌道反磁性を引き起こすことが期待される。最近、角度分解光電子分光 (ARPES)により、大きな反磁性を示す PtSn<sub>4</sub> [1]が、そのバンド構造にディラックコーンを持つことが報告された [2]。PtSn<sub>4</sub>では、ディラックノードはフェルミレベルから数 10 meV 程度の位置に存在すると報告され、PtSn<sub>4</sub> が大きな反磁性を持つ原因はそのディラック分散に起因する可能性がある。我々はバルク敏感な測定手法である磁化測定と核磁気共鳴 (NMR) 法を用いて、PtSn<sub>4</sub> の大きな反磁性の起源を実験的に理解することを目的に研究を行った。

本研究で用いた単結晶試料は、Sn フラックス法によって合成した。PtSn<sub>4</sub> は結晶軸の 3 方向に対して異方的であるので、磁化率測定を結晶軸の 3 方向に対して行った。単結晶 NMR 測定は、局所的な電子構造を調べるために <sup>195</sup>Pt ( $I=1/2$ )核と <sup>119</sup>Sn ( $I=1/2$ )核の 2 つのサイトで行った。

その結果、一般的な金属は NMR で測定される緩和率  $1/T_1$  とナイトシフト  $K$  の温度依存性に関して Korringa 則にのっとった振る舞いをするのが期待される。しかし、Fig.1 に見られるように <sup>195</sup>Pt 核においてはその振る舞いから顕著に逸脱しており、これはディラック分散に起因する特徴として説明がつく。一方、磁化率の起源解明には通常、ナイトシフト  $K$  と磁化率  $\chi$  が線形になることから、磁化率に対する寄与の分解を行うことで可能だが、PtSn<sub>4</sub> では両者の関係が線形にならなかったため (Fig.2)、この方法を利用できなかった。そこで、第一原理計算ソフトウェア WIEN2k による状態密度計算を利用して解析を行った結果、PtSn<sub>4</sub> の大きな反磁性はディラック分散による軌道反磁性の影響を強く受けていることが判明した。

[1] E. Mun *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 035135 (2012).

[2] Y. Wu *et al.*, Nature Physics **12**, 667 (2016).

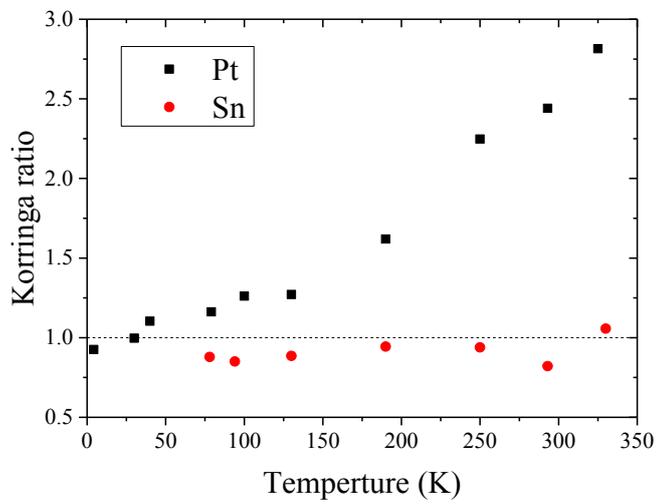


Fig.1 PtSn<sub>4</sub> の Korringa ratio  $\mathcal{K} = (1/T_1TK^2)(\hbar/4\pi k_B)(\gamma_e/\gamma_n)^2$  の温度依存性  
 一般的な金属では Sn 核の結果のように  $\mathcal{K}=1$  付近で温度依存性がない。  
 しかし、Pt 核では、Korringa ratio から大きく逸脱していることがわかる。

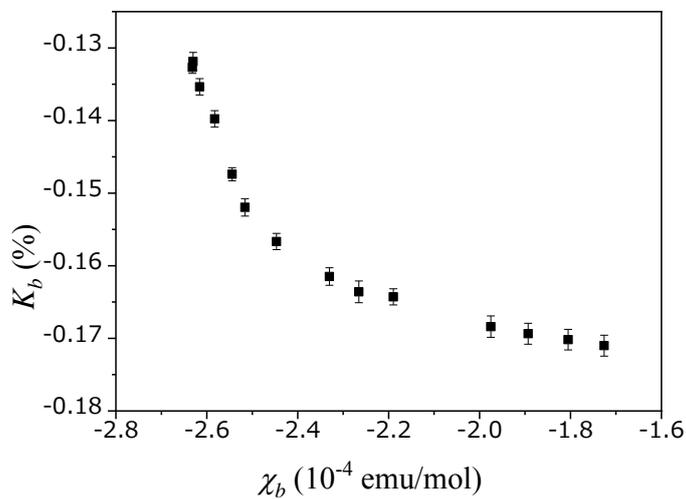


Fig.2 Pt 核  $b$  軸方向の  $K$ - $\chi$  プロット  
 一般的には  $K$ - $\chi$  プロットは線形になるが、PtSn<sub>4</sub> は 100 K から 130 K 付近で折れ曲が  
 っている。他の核種・軸においても同様に線形でない。

## 学位論文要旨 (修士 (理学・工学))

論文著者名 嶋崎 真佳

論文題名：バンドル状態の単層カーボンナノチューブの古典分子動力学計算

### [研究背景・目的]

カーボンナノチューブは六方格子構造の二次元炭素物質であるグラフェンを、円筒状に丸めた一次元物質である。とくに 1 層の円筒面からなるカーボンナノチューブを単層カーボンナノチューブ(SWCNT)と呼ぶ。SWCNT はその形状による多くの興味深い性質を持つ。たとえば SWCNT 内部には一次元的な空洞があり、この内部にほかの原子を内包することで新奇な物性を発現する例がある。

一例として細い直径の SWCNT 内部では酸素分子が 1 列に配列して、低温でハルデン磁性体と呼ばれる磁石の性質を失った状態になる[1]。ほかにも、細い SWCNT 内部では水分子は低温でアイスナノチューブというバルクとは異なった構造の氷になり、また強く扁平化を加えた SWCNT の内部ではアイスナノリボンという新しい構造の氷になることが知られている[2,3]。

1本のSWCNTにチューブ軸に垂直方向から圧力をかけると扁平化したSWCNTができ、その扁平化したSWCNT内部では圧力印加前の円筒SWCNT内部とは異なった分子の振る舞いが見られることが計算によって明らかになっている。しかし実際のSWCNT試料はバンドルと呼ばれる束を作った状態で存在する。そのため、バンドルに圧力をかけた場合の振る舞いを検討する必要がある。本研究では、SWCNTバンドルについての古典分子動力学(MD)シミュレーションによる研究を行った。特に、バンドル構造の温度依存性と、圧力印加によるバンドル構造の変化を調べた。

### [計算手法・結果]

本研究では、有限長のSWCNTバンドルについてMD計算を行った。構造モデルとして、3本のSWCNTが互いに等距離に平行に並んでいるバンドルを考えた。SWCNTのチューブ壁面内の炭素同士のポテンシャル関数として、Optimized Tersoffポテンシャルを用いた。異なるSWCNT間の炭素同士には12-6 Lennard Jonesポテンシャルを課した。温度制御には速度スケーリング法を用いた。

まず、カイラル指数が(11,11)、(6,5)および(10,0)のSWCNTバンドルについて、300K一定での計算を行った。その結果、MDシミュレーションにおいて300KでVan der Waals相互作用によるバンドル構造が保たれることがわかった。また、カイラル指数(6,5)、(10,0)のバンドルは構造が一定にならず、バンドルが振れてはほどけるといふ振る舞いが見られた。次にそれらのバンドルの構造の温度依存性を調べるため、温度を300Kから1Kまで低下させる計算を行った。図1にSWCNTバンドルの低温構造を示す。低温において(11,11)

および(10,0)バンドルは、バンドル長が長いものでは SWCNT が平行に並び、短いものでは SWCNT が互いにななめに並ぶ構造となっている。(6,5)バンドルは低温でねじれた構造をとった。これはカイラル型 SWCNT のらせん状の構造に起因するものだと考えられる。そこでカイラル指数(5,6)の SWCNT バンドルを用いて同様の計算を行ったところ、(6,5)バンドルとは逆向きのねじれた構造をとった。

次に SWCNT バンドルに一軸加圧する計算を行った。300K 一定のもと、SWCNT バンドルを 2 枚の剛体グラフェンで挟み、外力を加えることで加圧された SWCNT バンドルの振る舞いを調べた。圧力は 3.8GPa から 38MPa の範囲で変化させて計算を行った。その結果、SWCNT バンドルは、200MPa 程度の圧力で崩れることがわかった。

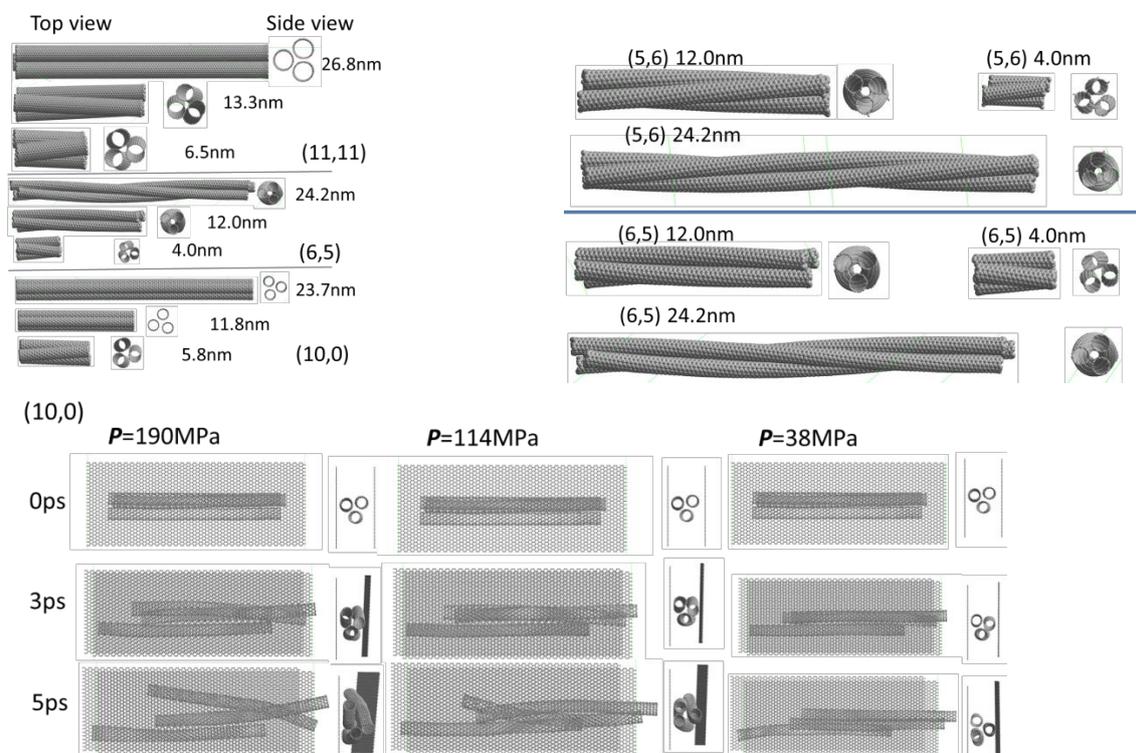


Fig.1 (左上)1K における SWCNT バンドルの構造

Fig.2 (右上)1K における(5,6)(6,5)バンドルの構造の比較

Fig.3 (下)一軸圧によるバンドル構造の変化

[結論]

SWCNT バンドルについて MD シミュレーションによる計算機実験を行った。カイラル型の SWCNT によるバンドルが低温においてねじれた構造をとることがわかった。また、バンドル状態が 200MPa 程度の一軸圧によって壊れることがわかった。

[1] M. Hagiwara, *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn., **83**, (2014)113706  
 [2] Y. Maniwa, *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn., **71** (2002)2863-2866  
 [3] H. Kyakuno, *et al.*, J. Phys. Chem. C 122(2018)18493-18500

## 学位論文要旨 (修士 (理学)・工学))

論文著者名 本郷 直也

論文題名：直径の異なる単層カーボンナノチューブの混合フィルムの熱電物性

### [研究背景・目的]

近年、廃熱を電気エネルギーに変換する熱電発電が注目されている。本研究では、フレキシブルな熱電材料として単層カーボンナノチューブ(SWCNT)に着目した。SWCNTは柔軟でフレキシブルであること、軽量でかつ高い機械的強度をもつといった特徴が熱電材料として注目されている材料である。

SWCNTはグラフェンのリボン状シートを巻いて繋げた構造をしており、グラフェンシートの巻き方により多彩な構造をとる。この構造の違いにより金属型と半導体型に大別され、熱電物性はバンド構造に敏感であるためSWCNTの構造で大きく変化すると考えられる。

先行研究において、半導体型がリッチなSWCNTフィルムにおいてゼーベック係数 $S$ が $170 \mu\text{V/K}$ とビスマス・テルル系に匹敵する高い値を持つことが報告されている[1]。また、金属型と半導体型の混合フィルムにおいて構成SWCNTの平均直径によりゼーベック係数はほとんど変化しないこと[2]、SWCNTの方向をそろえる延伸処理により、ゼーベック係数はほとんど変化しないが抵抗率が減少すること[3]が報告されている。本研究では、フィルムを構成するSWCNTの直径分布の効果を明らかにすることを目的に、平均直径が異なる2種類SWCNTを混合したフィルム試料を作製し、その構造と熱電物性の相関を調査した。

### [実験方法]

SWCNTの平均直径が $1.41\text{nm}$ のArcSO試料と $2.7\text{nm}$ のSG試料、およびそれらの混合試料のフィルムを作製し、構造、ゼーベック係数 $S$ 、電気抵抗率 $\rho$ を測定した。フィルムは、試料を一旦溶液に超音波分散した後、減圧濾過の方法を用いて作製した。構造は、放射光を用いたX線回析(XRD)実験により評価した(施設: KEK-PF BL8B)。XRD用試料は、石英キャピラリーに詰め、真空中高温脱気処理後封入された。 $S$ および $\rho$ は、試料を真空下で高温脱気処理後、空气中に放置してキャリアドーピングを行いながら時間変化を追跡した。①2種類のSWCNTからなる混合試料の混合割合の効果、②分散に用いた超音波出力の効果、③分散液としてエタノールのみを使用した場合と界面活性剤(コール酸ナトリウム:SC)を用いた場合の違い、などについて検討した。

### [結果]

Fig. 1にゼーベック係数 $S$ の $\rho$ の依存性を示した。全てのエタノール分散試料の $S$ の最大値は $45\sim 55 \mu\text{V/K}$ とほぼ一定値になった。一方、界面活性剤(SC)分散試料は、 $30\sim 35 \mu\text{V/K}$ と有意に小さい値を示した。このような分散液の影響と比べて、直径の異なるSWCNTの混合割合による $S$ の最大値の変化はずっと小さい。また、分散に用いた超音波の出力が増加

したとき、 $S$ の値はほとんど変化しないが、 $\rho$ が減少する傾向が見られた(Fig.1 右図)。

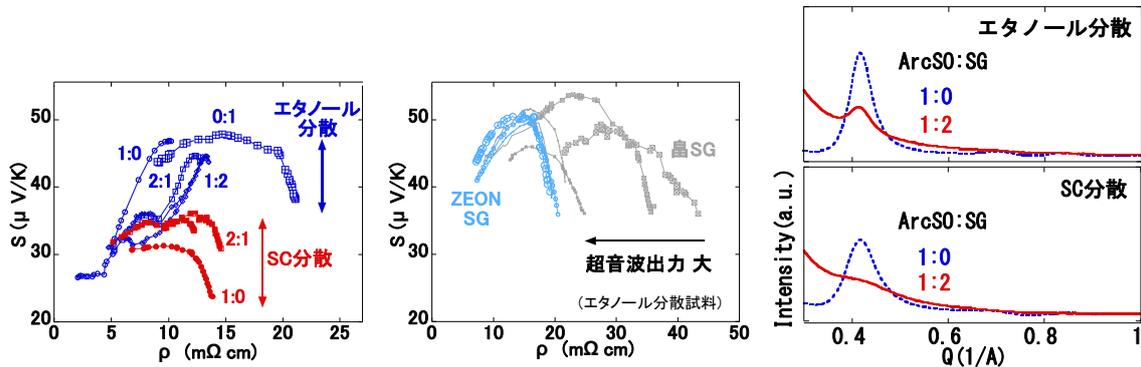


Fig.1 ArcSO-SG 混合試料の $S$ と $\rho$ の相関。左) エタノール分散と SC 分散試料。比は ArcSO と SG の混合比。 右) SG 試料における分散超音波出力による変化。

Fig.2 混合試料の XRD パターン。上) エタノール分散。下) SC 分散。

#### [考察]

Fig. 2 に ArcSO と SG の混合フィルムの XRD パターンを、エタノール分散と界面活性剤 (SC) 分散の場合について比較した。SC 分散試料の方がピークがブロードであり、界面活性剤を用いることにより、2 種類の SWCNT が混在したバンドルが形成されたこと、SC 分散試料の方がバンドルが細いことが示唆され、この影響により $S$ が減少した可能性がある。一方、エタノール分散では SWCNT バンドルの構造はほとんど変化がない。また、Fig.1 右図のエタノール分散試料において、超音波出力の増大により $\rho$ が減少した理由としては、複雑に絡まり合った SWCNT が超音波でほどけ試料内の SWCNT 同士の接合数が減ったことなどが考えられる。

#### [結論]

エタノール分散では、直径が異なる SWCNT が混合されたバンドルを有効に作製できないことがわかった。超音波出力の増大で $S$ は変化せず $\rho$ が減少することから、パワーファクターを可改善する方法として有効であることが示唆された。一方、界面活性剤を用いることにより混合バンドルが合成できる可能性が示唆されたが、 $S$ の減少が見られた。今後その起源の解明が課題である。

#### [参考文献]

1. Y. Nakai *et al.*, APEX 7, (2014) 025103
2. 上田智大 首都大学東京ナノ物性研究室 2015 年度修士論文  
「単層カーボンナノチューブの熱電物性の研究：直径依存性」
3. 沢辺健太郎 首都大学東京ナノ物性研究室 2018 年度修士論文  
「単層カーボンナノチューブフィルムの構造と熱電物性」

## 学位論文要旨(修士(理学))

論文著者名 高口 裕平

論文題名：半導体原子層ヘテロ構造の合成と電界発光

異なる固体物質の接合界面では、高品質な二次元電子系や層間励起子など様々な興味深い光・電子物性が研究されてきた。近年、原子サイズの厚みを持つ二次元物質においても、同様の接合が実現され注目を集めている。例えば、遷移金属ダイカルコゲナイド

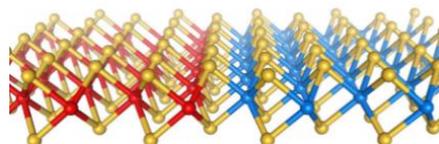


図1 TMDC 面内ヘテロ構造の模式図

(TMDC)原子層を面内で接合した面内ヘテロ構造では、接合部に一次元的な界面が形成される[1-3]。このような接合界面では、キャリアや励起子の一次元閉じ込め効果、長寿命な層間励起子の形成、そしてバレー電気磁気効果など、TMDCの特異な電子構造や一次元界面に由来する物性が期待される。このような現象を検証するため、界面での電子輸送や発光特性を調べていくことが重要となる。しかしながら、従来の面内ヘテロ構造試料では、合成の難しさに加え、試料の結晶サイズ、合金化、そして結晶性などにも課題があり、物性研究はほとんど進んでいない。特に、界面の合金化の抑制と結晶性向上の両立が困難であり、物性研究における課題となっていた。この課題を解決するために、本研究では、高結晶性かつ急峻な界面をもつ TMDC 面内ヘテロ構造の合成方法の確立と電界発光 (EL)を利用した発光特性の評価を目的とした。

本研究では、高い結晶性と大面積な試料の合成が可能な学気相成長(CVD)を利用し、さらに原料の供給法を改善した合成法の開発を進めてきた。ヘテロ構造の合成では、2種類の金属酸化物( $\text{MoO}_2$ ,  $\text{WO}_3$ )と反応促進剤として塩を石英管内に別々に設置し、不活性ガス下で磁石を利用して動かせるようにした。これにより、成長基板を取り出すことなく連続的に異なる TMDC を成長させることが可能となった。電気炉温度、水素濃度、原料比率・位置、原料切り替えタイミングを最適化することで、 $\text{WS}_2/\text{MoS}_2$ 、 $\text{WSe}_2/\text{MoSe}_2$  面内ヘテロ構造の合成を行ってきた。特に、補助剤として塩を用いることで、従来の合成温度( $1000\sim 1200^\circ\text{C}$ )と比較して低温( $800^\circ\text{C}\sim 850^\circ\text{C}$ )での合成が可能となり、合成過程での結晶性低下を軽減させた。合成した試料は、原子間力顕微鏡、ラマン散乱、発光分光により評価を行った。また EL を観測するために、電極蒸着後にイオンゲルを試料に塗布し、電気二重層発光ダイオード(EDLED)を作製した[4]。

図2に、合成した  $\text{WSe}_2/\text{MoSe}_2$  面内ヘテロ構造の光学顕微鏡像、発光強度マッピング、ラマン・発光スペクトルを示す。光学顕微鏡像(図2a)では、三角形の結晶の内部において、コントラストの暗い内側の領域が  $\text{WSe}_2$ 、明るい外側の領域が  $\text{MoSe}_2$  であることが

PL 強度マッピング(図 2b)、ラマンスペクトル(図 2c)より確認できる。また、最初に成長した  $\text{WSe}_2$  の端から  $\text{MoSe}_2$  が成長したことが分かる。また界面近傍の発光スペクトル(図 2d)では、1.55 eV の  $\text{MoSe}_2$  と 1.65 eV の  $\text{WSe}_2$  の励起子発光ピークが同時に観測される。これは、界面で混晶化せずに組成が急峻に変化していることを意味している。

図 3 に  $\text{WSe}_2/\text{MoSe}_2$  を使用した 2 端子 EDLED デバイスの模式図と光学顕微鏡像、4.0 V 印加時の発光像と EL スペクトルを示した。電極に電圧を印加することで電解質中のイオンが電極・試料表面に移動し、TMDC 内に p-i-n 接合が形成される。さらに、電極から注入された電子とホールの再結合を通じて EL が観測される。図 3b に示すように、上下の電極間の中心付近に接合界面が存在する。4.0 V の電圧印加時では、界面付近で EL が観測された。興味深いことに、EL スペクトルは PL と異なる 4 つのピークを示し、印加電圧に依存して強度が変化する。これらのピークは、界面での層間励起子の形成、界面歪みによるバンドギャップ変調などの影響を反映していると考えられる。本研究成果は、高品質な一次元界面を用いた物性の理解や将来的なデバイス応用への展開が期待される。

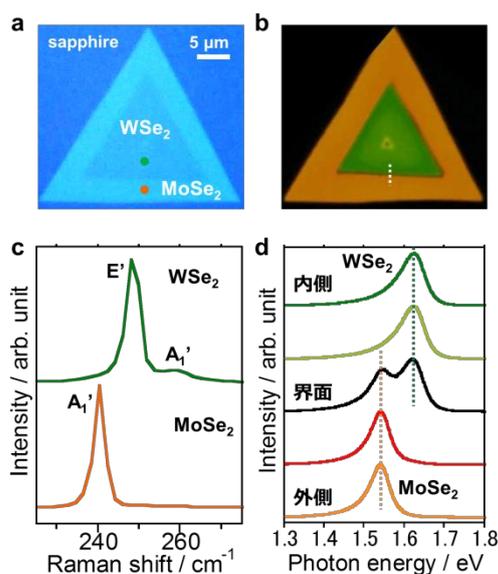


図 2 合成した  $\text{WSe}_2/\text{MoSe}_2$  面内ヘテロ構造の(a)光学顕微鏡像、(b)発光強度マッピング(緑 :  $\text{WSe}_2$ 、橙 :  $\text{MoSe}_2$ )、(c)ラマンスペクトル、(d)界面近傍(b内の点線上)の発光スペクトル

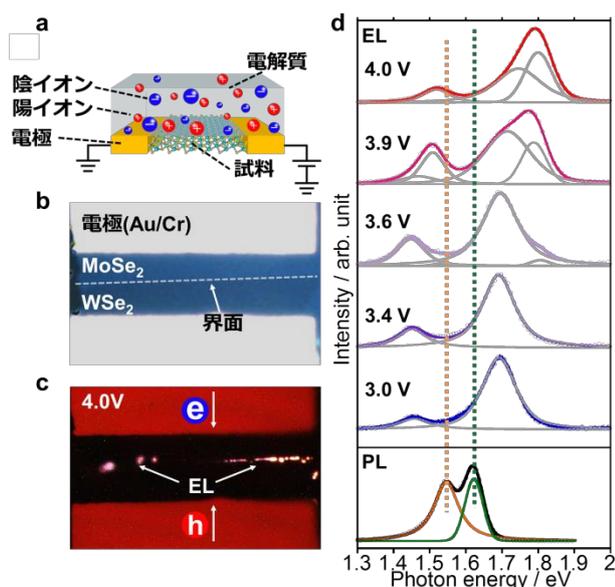


図 3 (a)EDLED デバイスの模式図。(b)  $\text{WSe}_2/\text{MoSe}_2$  デバイスの光学顕微鏡像。(点線は界面を表す)と(c)4.0 V 印加時の EL 像、(d)界面の PL と EL スペクトル(印加電圧 3.0 ~ 4.0 V)。

- [1] M.-Y. Li, *et al.*, *Science*, **349**, 524 (2015). [2] Y. Gong, *et al.*, *Nat. Mater.*, **13**, 1135 (2014)., [3] Y. Kobayashi, *et al.*, *Nano Res.* **10**, 1007 (2015). [4] J. Pu, *et al.*, *Adv. Mater.*, **30**, 1707627 (2018).

## 学位論文要旨 (修士 (理学))

論文著者名 吉村 真太郎

論文題名：半導体原子層ヘテロ構造の作製と電子輸送特性

従来の固体物質において、異なる半導体が接合した半導体ヘテロ構造は、キャリア閉じ込め、整流特性、トンネル効果などの界面特有の現象への興味から、多くの研究が展開されてきた。近年、グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイドなどの原子層物質が発見され、さらに異なる原子層を積層させたヘテロ構造（原子層ヘテロ構造）が大きな注目を集めている。原子層ヘテロ構造は、格子定数に依存しないファンデルワールス力での接合が可能であり、積層角度による物性変調、二次元の状態密度に起因する物性などから基礎と応用の両面で様々な研究が報告されてきた。例えば、N型半導体の  $\text{MoS}_2$  と P型半導体の  $\text{WSe}_2$  の積層ヘテロ構造では、界面においてバンド間トンネル電流が観測されており、将来の低電力エレクトロニクスのためのトンネルトランジスタに原子層半導体の応用が期待されている[1]。

原子層積層ヘテロ構造の初期の研究では、原子層の作製に剥離法が利用されてきた。しかしながら、この剥離法では、試料の面積・層数・積層角の制御やその再現性などに関して課題を持っている。一方、近年、化学気相成長法(CVD法)により、 $100\ \mu\text{m}$  程度の大面积かつ均一な単層の単結晶原子層試料を作製することが可能になってきた。また、CVD法で合成した試料は特定の結晶端が形成されるため、積層角の評価や制御も容易となる。このような背景の元、本研究では  $\text{MoS}_2$  と  $\text{WSe}_2$  を CVD法で作製し、転写により積層させ、PN接合界面の整流特性やトンネル効果等の観測と理解を目的とした。

単層  $\text{MoS}_2$  と  $\text{WSe}_2$  は、遷移金属原料に  $\text{MoO}_2$  と  $\text{WO}_3$ 、カルコゲン原料の硫黄(S)とセレン(Se)を用いて、シリコン基板上に CVD法により合成した。合成した試料を、ポリマーを利用し、シリコン基板上に転写することで積層ヘテロ構造を作製した。電極は、フォトリソグラフィでパターンニングし、 $\text{MoS}_2$  と  $\text{WSe}_2$  に Au/Ni と Au/Pd/Cr をそれぞれ蒸着した。試料は光学顕微鏡観察、ラマン・発光分光、電気伝導測定により評価を行った。

図 2 に、作製した  $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$  積層ヘテロ構造の光学顕微鏡像と発光強度マップとスペクトルを示す。発光強度マップより、光学顕微鏡像の青と赤の点線で囲まれた部分が  $\text{MoS}_2$  と  $\text{WSe}_2$  にそれぞれ対応し、 $\text{MoS}_2$  と  $\text{WSe}_2$  が  $50\ \mu\text{m}$  程度の範囲で重なっていることが分かる。積層部分では、 $1.89\ \text{eV}$  付近に単層  $\text{MoS}_2$ 、 $1.60\ \text{eV}$  付近に単層  $\text{WSe}_2$  の励起子発光が観測された。また積層界面において、 $\text{MoS}_2$  の発光強度が低下している。これは、接合界面での電

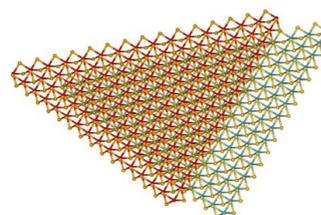


図 1:  $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$  積層ヘテロ構造の模式図。

荷やエネルギーの移動が起因しており、先行研究と同様の結果となった[2]。本手法では、このような積層ヘテロ構造が、大面積かつ大量に作製可能という利点がある。

次に、作製した試料に電極を蒸着し、その電流電圧特性を測定した。単層  $\text{MoS}_2$  と単層  $\text{WSe}_2$  の特性は、電圧の正負で共に同程度の電流値を示す(図 3a)。一

方、 $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$  積層ヘテロ構造は  $\text{WSe}_2$  側に正の電圧を印加すると、電流値が大幅に上昇した(図 3a,b)。電流電圧特性は、0.4~0.6 V において拡散電流より再結合電流の理想特性と片対数グラフでの傾きが一致する(図 3c)。この特性は、P 型半導体の  $\text{WSe}_2$  と N 型半導体の  $\text{MoS}_2$  の積層構造で PN 接合が形成したことを示している。一方、0.7 V 以上では拡散電流や再結合電流の理想特性より電流値は低下する。この低下は、PN 接合界面以外の抵抗を考慮することで再現できる。一方、負電圧側では、理想特性と異なり -1 V 以下で電流値が増加していく。剥離試料を利用した先行研究との比較より[1]、この電流値の増加は接合界面でトンネル電流が流れた影響と解釈できる。これらの成果は、TMDC 原子層の積層界面を利用した光・電子物性の研究や、将来のトンネルトランジスタ応用への展開が期待される。

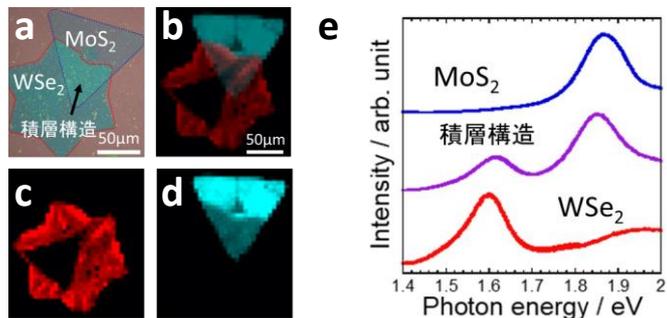


図 2 : シリコン基板上の  $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$  積層ヘテロ構造の(a)光学顕微鏡像、(b-d)発光強度マップと(e)発光スペクトル。

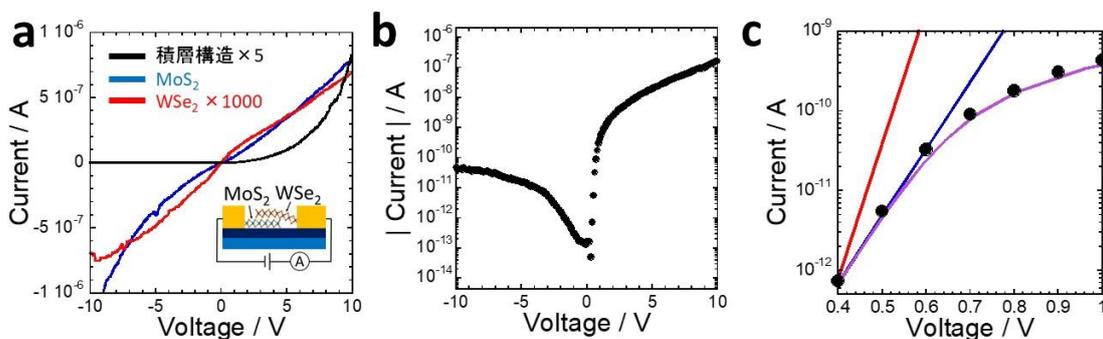


図 3 : (a)規格化した(青)単層  $\text{MoS}_2$ 、(赤)単層  $\text{WSe}_2$ 、および(黒)  $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$  積層ヘテロ構造の電流電圧特性。(b, c)  $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$  積層ヘテロ構造における、(黒)測定した電流電圧特性、理想的な PN ダイオードの(赤)拡散電流、(青)再結合電流、および(紫)PN 接合以外の抵抗を考慮した再結合電流の電流電圧特性。

[1] T. Roy, *et al.*, ACS Nano, 9, 2071-2079 (2015), [2] M.-H. Chi, *et al.*, ACS Nano, 8, 9649-9656 (2014)