

## KEK 物構研低速陽電子実験施設の陽電子回折ステーション

### Positron Diffraction Stations at Slow Positron Facility of IMSS, KEK

KEK 物構研、兵頭俊夫

Materials Structure Science, KEK, Toshio Hyodo

E-mail: hyodot@post.kek.jp

材料表面の研究は、特性の研究と原子配列の研究によって成り立っている。X 線回折に代表される量子ビーム回折は、高い精度で実験のみから原子配列の座標を定めることができる。中でも、RHEED の陽電子版である全反射高速陽電子回折(TRHEPD, トレプト)と LEED の陽電子版である低速陽電子回折 (LEPD、レプト) は、表面感度が最も高い手法である[1]。ともに、高輝度ビームを使った世界唯一の装置が KEK 物構研で稼働している。そこでは専用リニアックで加速した電子ビームからの電子・陽電子対生成で陽電子を作り、陽電子仕事関数が負の金属を用いて単色にしている。それをさらにレンズで収束し負の仕事関数による再減速を行って回折実験に用いる。

TRHEPD は 1992 年に一宮[2]により提案され 1998 年に河堀・岡田[3]により実現された (当初は RHEPD と呼ばれていた)。LEPD は 1980 年代初めに米国で実現された。ともに放射性同位体からの陽電子を用いていた時代は、強度、したがって測定時間に難があった。

TRHEPD は全反射を利用すると最表面だけのデータが得られる。さらに、臨界角を超えると物質中に侵入して表面に近づくように屈折するので、プローブ深さの限度を最表面から連続的に調節できる。常用のロッギング曲線解析は、試料の方位設定で各原子の座標の面直成分と面内 2 成分を独立に定められる。従来から R-因子を評価関数とする熟練者による試行錯誤の解析が行われているが、計算科学／データ科学による大域探索型解析とその高効率・高速化の試みも始まった[4, 5]。半導体表面上の吸着金属[1]や単原子層物質[6]の構造解析は TRHEPD の最も得意とするところである。TRHEPD は最近、金属基板上のグラフェン、シリセン、ゲルマネンなど単原子層状物質の座屈の詳細と単原子シート・基板間距離[7]や、複雑なルチル型  $\text{TiO}_2$  (110) (1×2) 表面構造[1]を決定した。また、Ca をインターカレートした 2 層グラフェンの構造に新しい知見を与えた[8]。これまでのロッギングカーブ解析に加えて、新しく方位角プロット法が開発されつつある[9]。

物構研では LEPD ステーションも運用が始まった[10]。LEPD では全反射を利用しないが、次のような利点がある。電子に比べて弾性散乱／非弾性散乱の比が小さいので表面感度が高く、後方散乱の角度依存性が極めて単調なので解析の精度が高い。さらに陽電子は内殻に近づかないので重い原子でも散乱因子の精度が保たれ、正確に原子位置を決定できる可能性がある。

文献:

- [1] Y. Fukaya, et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52**, 013002 (2019) ; 兵頭俊夫、固体物理 2018 年 11 月号 p.141. [2] A. Ichimiya, *Solid State Phenom.* **28/29**, 143 (1992). [3] A. Kawasuso and S. Okada, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2695 (1998). [4] 星健夫、本シンポジウム. [5] 中西(大野)義典、同. [6] 松田巖、同. [7] 深谷有喜、同. [8] 遠藤由大、同 (高山あかり). [9] 望月出海、同. [10] 和田健、同.