

物質科学における量子ビーム計測の進展

有馬 孝尚 (東京大学大学院新領域創成科学研究科/理化学研究所創発物性科学研究センター arima@k.u-tokyo.ac.jp)

量子ビーム計測とは

粒子や放射線を物質に照射し出てくる同種あるいは異種の量子を観測すると、照射する量子と観測する量子の双方のエネルギー、運動量、角運動量の情報から、物質内部のエネルギー、運動量、角運動量の変化を知ることができる。このような粒子線や放射線を用いた物質の計測の歴史は古く、20世紀の初めにはX線による結晶中の原子配列の計測が行われている。中性子、陽電子、ミュー粒子の発見は、昭和の前半の話であり、レーザーやレーザーも放射光光源も昭和中期には発明されている。

一方、量子ビームという呼称が学術界で定着したのは平成になってからである。粒子線や放射線の発生技術の向上により決まった方向に進むビームが得られるようになった上、放射線という言葉が持つ負の印象を避けるという社会学上の意義が加わり、量子ビームという用語が日本で造られたと考えられる。最近ではquantum beamという英語に接する機会も増えてきた。

では、平成時代の30年間で量子ビーム計測自体はどのように変化してきただろうか。本稿では、数点に絞って紹介する。

分解能の向上

量子ビーム計測は物質中のエネルギーや運動量の変化を知ることができることから、結晶性の物質の計測に力を発揮する。すなわち、結晶の熱平衡状態や静的な外場への応答は、原子核、電子、スピン等の周期的な配列、および、そこからの素励起によって記述されるが、量子ビーム計測によってそれらを周波数と波数の空間軸で決定できる。このような量子ビーム計測の精度は、物質に照射する量子と観測する量子の双方について、エネルギー、運動量、スピン角運動量の不確定性をどれだけ小さくできるかに依存する。エネルギーと進行方向とスピン状態がなるべく揃った量子が単位時間に大量に得られれば、それだけ質の良い測定が可能になる。平成時代には、光子ビーム源の技術が格段に進歩した。また、半導体技術の著しい向上により、各種量子の検出器も発展した。極端な例としては、光電子分光のエネルギー分解能が平成時代の間に2桁以上向上している。¹⁾

計測の8次元化へ向けて

物質科学の対象は周期性を有する結晶の熱平衡状態から、周期性を持たない系、空間的に一様でない系、非平衡な状

態へと拡大している。平成時代に量子ビーム計測に起きたもう1つの変化は、このような物質科学全体の傾向と呼応したものと言える。

周期性を持たない系や空間的に一様でない系の観測には、古くから各種顕微鏡が用いられてきた。以前は幾何光学に基づいた結像を利用した顕微鏡が主に使われていたが、平成時代に入り種々の顕微鏡が開発された。量子ビーム計測ではないが、走査型トンネル顕微鏡、原子間力顕微鏡、およびその他の走査型プローブ顕微鏡の出現は表面科学をすっかり変えた。量子ビームを用いた顕微鏡についても様々なタイプのものが開発され続けている。代表的なものとしては、集光した量子ビームを走査する各種走査型顕微鏡²⁾やコヒーレント量子ビームの回折と計算によって実空間像を得る各種コヒーレントイメージング³⁾がある。これらの方法により、組織等の形の計測にとどまらず、元素、電子密度、磁化等の空間分布を計測できるようになった。ここで、量子ビームの微小集光を可能にしたのはビーム源の低エミッタンス化と集光素子の発展であることを追記しておく。また、X線自由電子レーザーの登場は、計算機や情報処理の向上と相まって、生体分子などの一分子計測を可能にした。

非平衡な状態など動的なものの観測には、古くからストロボ写真などの動画が使われてきた。すなわち、時分割計測である。量子ビーム計測においても、現在に至るまで基本的な概念は変わらない。平成時代には、非常に短いパルス幅を持つ量子ビーム源の開発が進み、量子ビーム計測の時間分解能が向上した。光子を用いる計測ではフェムト秒を切る時間領域での計測が始まった。⁴⁾ 電子を用いる計測でもフェムト秒領域の計測が始まりつつある。

周期性を持たない系、空間的に一様でない系、非平衡な状態の観測は、実空間(r)、あるいは、実時間(t)をパラメータとした量子ビームイベントデータの取得を意味する。このとき、個々のイベントデータは運動量(q)とエネルギー(ω)の情報を引き続き有する。すなわち、量子ビーム計測が q と ω の4次元の計測から r と t を加えた8次元の計測に拡張することを意味する。これは、音楽を音階(周波数データ)の時間変化として捉えて楽譜にすると便利であるのと同じ理屈だ。

角運動量の利用

各量子が持つスピン角運動量、あるいはそれに対応する偏光は、以前から量子ビーム計測において利用されてきた。

光の様々な複屈折や二色性、スピン偏極中性子散乱、ミュー粒子スピン回転/緩和などはその代表的な例である。照射された量子のスピン角運動量が物質に受け渡されたかどうかを知ることにより、物質中の角運動量の空間配列(すなわち、磁気秩序)や、物質中の素励起のスピン角運動量の情報が得られる。

一方、量子ビームの軌道角運動量の知見はほとんど皆無であった。平成時代に入り、レーザーのラゲル-ガウスモードが軌道角運動量を有することが明らかにされ、⁵⁾このような光の性質や応用が盛んに研究されるようになった。現在では、軌道角運動量を持つレーザーを簡単に作ることができる。軌道角運動量を有する光の応用としては、光ピンセットや量子情報などの分野が先行している。電子ビームについても軌道角運動量を付与することが可能となり、干渉実験などが行われている。これらの軌道角運動量を持つビームと物質との相互作用については解明の途上であり、今後の展開が楽しみである。

計測の高度化とビッグデータの出現

平成時代には量子ビーム計測用の大型施設としてSPring-8, SACLA, J-PARCなどが新設され、ビーム源の性能の向上につながっている。計測の精度向上にはビーム搬送系や検出器の性能なども重要な要素となる。量子ビームの検出器には様々なタイプのもがあり、それぞれ独自の発展を遂げている。その方向性を3つにまとめてみる。

第一は零次元検出から位置敏感な2次元検出への移行である。2次元検出器を用いることで、単位時間に取得できるデータ量が格段に増え、計測にかかる時間が短くなる。また、走査型以外の方式の顕微鏡・イメージングでは2次元検出器が必須となる。例えば、CMOSイメージセンサーを用いた電子直接検出カメラの出現は電子顕微鏡の高画質化に大きく寄与している。

第二は積算型から高速読み出し型への移行である。到達した量子を積算して検出する場合は、多かれ少なかれ非線形性の問題が生じる。例えば計数の飽和は非線形性の典型的な原因となる。各ピクセルのデータを高速に読み出すことでこの問題が低減される。また、検出器のダイナミックレンジが広くなり、弱いピークの観測や正確なイメージングを行う際の大きな利点となる。

第三は、エネルギーやスピンを選別した計測である。検出する量子のエネルギーやスピンを選別することで、測定対象とのエネルギーや角運動量の受け渡しを知ることができる。特に、非弾性散乱や光電子分光では、量子のエネルギーをいかに精度よく分別するかが測定のエネルギー分解

能を決める。スピン選別については、光計測の分野では偏光解析と同義であり、旋光現象の観測やX線磁気散乱信号の取得といった場面で必須となっている。電子のスピン検出については、Mott検出器やVLEED (Very Low Energy Electron Diffraction) 検出器⁶⁾が実用化され、光電子分光による電子バンドのスピン分裂の観測に威力を発揮している。また、エネルギーやスピンの選別はノイズの低減にもつながる。電子顕微鏡の分野では、イメージング用のエネルギーフィルターの技術が大きく進歩した。⁷⁾これによって、非弾性散乱に起因する雑音信号の少ない電子顕微鏡像が得られるようになった。

これまで述べてきたように、光源の高度化によるビームフラックスの増加、2次元検出器の利用、時分割計測や微小プローブの走査型計測等により、量子ビーム計測で大容量データが得られるようになった。量子ビーム計測ビッグデータの出現は解析手法にも影響を与えている。もはや研究者が直接すべての生データを見て解析することはかなわず、計算機による自動処理や統計学的な取り扱いが必要となっている。機械学習や深層学習といった方法も使われ始めているが、これらはブラックボックス化を伴うことを覚悟しないといけない。今後は、X-AIの研究の進捗と歩調を合わせた形での解析方法の革新が望まれる。

データの大容量化を受けて、データの表示方法も変わりつつある。論文公表が印刷媒体からWeb上に事実上移行したことと相まって、Y軸に検出強度をとる伝統的なグラフからカラープロットへの移行が急速に進んだ。カラープロットは全体像を俯瞰しながら印象的に見せるのに適しているが、その反面、カラーコードの種類と閾値の設定により読み手の印象を操作することもできてしまう。このような点について、生命科学分野ではデータ表示に関してすでに一定の基準があるようだ。物理学分野においても、心理学の考え方を取り入れつつ、ガイドラインを作成すべき時期が来ているように思われる。あるいは、より簡便な方法として、カラープロットの元となる生データの公開が強く推奨されるようになるかもしれない。

参考文献

- 1) T. Kiss et al., Phys. Rev. Lett. **94**, 057001 (2005).
- 2) P. G. Evans et al., Science **295**, 1042 (2002).
- 3) J. Miao et al., Nature **400**, 342 (1999).
- 4) M. Hentschel et al., Nature **414**, 509 (2002).
- 5) L. Allen et al., Phys. Rev. A **45**, 8185 (1992).
- 6) R. Bertacco et al., Rev. Sci. Instrum. **70**, 3572 (1999).
- 7) J. Bihl et al., Proc. 49th Annual EMSA (San Francisco Press Inc., 1991) p. 354.

(2018年10月4日原稿受付)