

# スパースモデリングにより電子のさざなみを見る —走査トンネル顕微・分光法による準粒子干渉計測 の高速・高精度化—

ナノスケール物性研究部門 吉田 靖雄、土師 将大 (現、京都大学)、長谷川 幸雄

表面に束縛された二次元電子は、ステップや不純物などで散乱され、干渉することによって、電子定在波を形成する。この現象は、およそ四半世紀前に、走査トンネル顕微法・走査トンネル分光法 (STM/STS) 用いて、貴金属の (111) 表面において初めて観察された [1, 2]。最近ではその適応範囲が広がり、非従来型超伝導体 [3, 4]、トポロジカル絶縁体 [5]、ワイル半金属 [6] などにおいて、フェルミ面、バンド分散、超伝導ギャップの対称性などの性質を調べるために用いられており、(衣を着た電子、準粒子による) 準粒子干渉 (QPI) 計測と呼ばれている。STM は、原子スケールで局所的な観察を得意とする手法であるが、この QPI 計測は、定在波によって空間的に起こる電子状態の変調から、マクロな情報を引き出すという手法であり、角度分解光電子分光 (ARPES) と相補的な測定手法であると考えられている。また、ARPES が不得意とする、フェルミレベル以上の非占有準位の観察や超低温・強磁場中での測定 [4, 7] が可能である。QPI 計測を用いると、STM という一つの実験手法から、マイクロとマクロの情報を同時に引き出すことが可能になるため、多電子系の物性研究において近年広く用いられ始めている。

しかし、その一方で、その普及を妨げる幾つかの問題も存在している。まず、物理的に意味のある情報を得るためには測定するデータ数が膨大になる点である。低波数の電

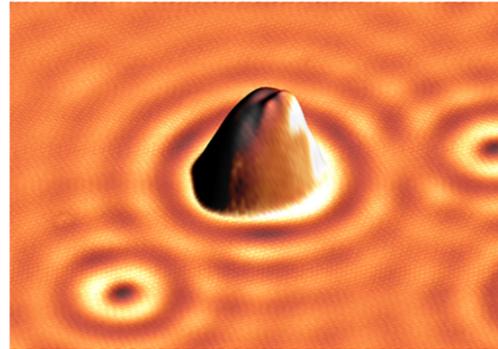


図 1. 銀の(111)表面において得られた STM 像。散乱体の周辺に電子定在波が観察されている。

子状態に関する情報を得るには、長周期の電子定在波の観測が必要となり、広い範囲でのトンネルスペクトル測定が要求される。一方、ブリルアンゾーン全域の情報を得ようとするれば、原子間隔でのトンネルスペクトル測定が必要である。よって、長周期の電子定在波が観測できるほどの領域を原子間隔のメッシュで区切った全てのピクセルでトンネルスペクトル測定を行うとすれば、とにかく時間がかかる。例えば、測定したい表面の領域を 256 行 256 列のメッシュで区切った場合、 $256 \times 256 = 65536$  点の測定が必要となる。一点での IV 特性もしくは、微分伝導度 ( $dI/dV$ ) の電圧  $V$  依存性カーブの測定時間に 3 秒かけるとすれば、全点の測定を終えるには、55 時間を要する。

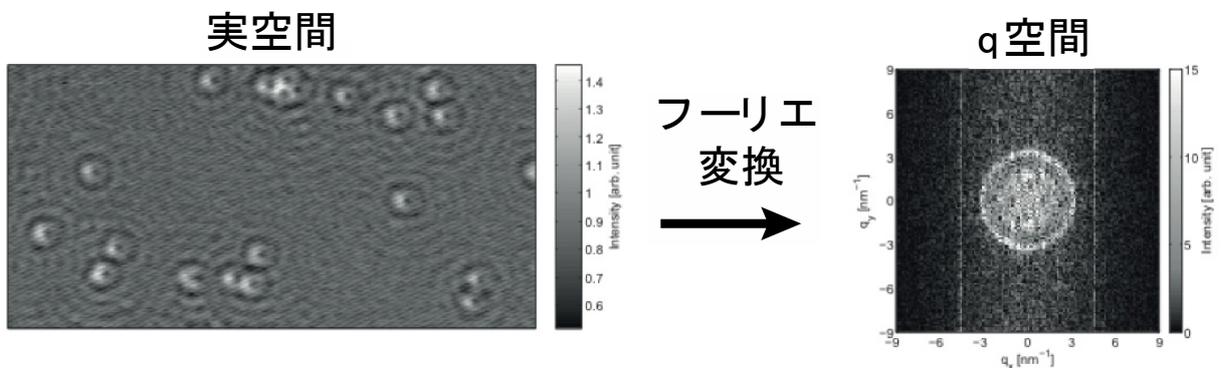


図 2. 銀の(111) 表面において得られた局所状態密度像と、その二次元フーリエ変換によって得られた散乱ベクトルパターン。パラボリックな等方的バンド分散を反映して、円形の散乱ベクトルパターンが現れる。



おり、元データの約 1/9 のデータ数でも、元データと同程度の必要な情報が得られるということが明らかになった。これは、少なくとも 銀の(111) 表面の定在波に関しては、長い QPI 計測の測定時間を 1/9 まで落とせることを意味しており、QPI 計測の高速化が実現可能であることを示している。また、散乱ベクトルパターンの散乱ベクトル空間における解像度は、実空間での測定範囲の広さに比例して高くなるため、この手法を用いて、同じ測定時間で、できる限り広い範囲での測定を行うならば、高分解能化も可能となることを示している。現在は、本研究で明らかになったランダム計測の有効性を確かめるべく、ランダムな QPI 計測を行い、スパースモデリングにより解析を行うという研究が進行中である。この手法が確立すれば、将来 QPI 計測がより一般的な測定手法になる可能性を秘めている。

近年、データ駆動科学と呼ばれる学融合的な分野が注目を集めており、通常は別々に研究することの多い様々な分野の自然科学の研究者と情報科学の研究者が共同参画し密接に連携している。データ駆動科学は、自然科学で得られる高次元の計測データから効率的に科学的知見を得るために、分野によらない普遍的な方法論を探求する。本研究では、生物学や地学を中心に発展したスパースモデリングと呼ばれるデータ解析の方法論を、我々の手法である STM/STS に適用した。このような手法が、物性物理学においても有効であることを示した本研究は、データ駆動型物質科学の嚆矢となるであろう。

## 謝辞

本研究は東京大学大学院新領域創成科学研究科岡田研究室の中西(大野)義典氏(現、東京大学大学院総合文化研究科)助教と岡田真人教授、東京大学大学院総合文化研究科の福島孝治教授との共同研究として行われた。研究における主な解析手法の考案と改良・計算は中西氏、土師将大氏によって行われた。本研究は、科研費新学術領域研究「スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成」(公募研究：極低温走査トンネル顕微鏡を用いた物性物理学実験へのスパースモデリングの適用、研究代表：吉田靖雄)の支援のもとに行われた。

## 参考文献

- [1] Y. Hasegawa, and P. Avouris, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1071 (1993).
- [2] M. Crommie, C. Lutz, and D. Eigler, *Nature* **363**, 524 (1993).
- [3] J. E. Hoffman, *et al.*, *Science* **297**, 1148 (2002).
- [4] T. Hanaguri, *et al.*, *Science* **323**, 923 (2009).
- [5] T. Zhang, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 266803 (2009).
- [6] H. Inoue, *et al.*, *Science* **351**, 1184 (2016).
- [7] M. Hamidian, *et al.* *Nature* **532**, 343 (2016).
- [8] Y. Nakanishi-Ohno, *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 093702 (2016).

