

# 理学系研究科研究奨励賞を受賞して

理学系研究科物理学専攻 近藤研究室 田中 宏明

この度、理学系研究科研究奨励賞(修士課程)を受賞いたしました。この賞は、修士課程を修了した学生のうち、研究活動において特に顕著な業績を挙げた者に授与されるものです。受賞対象となった私の研究成果[1]、特に実験手法として用いた角度分解光電子分光について紹介していきます。

角度分解光電子分光(angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES)は、光電効果を利用した電子状態観測の手法です。固体結晶試料に仕事関数より高いエネルギーを持つ紫外光・X線を入射することで電子を光電子に励起し、エネルギーと運動量の保存則から固体結晶中の電子状態を明らかにします。…というように説明されるのですが実際にはこんなに簡単ではありません。エネルギーの保存則は(固体結晶中でのエネルギー)+(励起光のエネルギー)=(光電子のエネルギー)であり容易に理解できるのですが、運動量保存則はそうはいきません。(いわゆる)運動量 $\mathbf{p}$ は連続的な並進対称性に対応する保存量ですが、固体結晶にそのような対称性はありません。その代わりになるのは離散的な並進対称性と Bloch 波数ベクトル  $\mathbf{k}$ (もしくは結晶運動量 $\hbar\mathbf{k}$ )になります。

ARPES における運動量保存則というのはこの Bloch 波数ベクトル  $\mathbf{k}$  と光電子運動量の関係なのですが、これを数式として表すことはできないと私は理解しています。Bloch 波数ベクトルに対応する離散並進対称性の選び方は任意性があり、選び方と関係なく一意に決まる光電子運動量と選び方に依存する Bloch 波数ベクトルに完全な対応関係を構築することはできません。この点を普遍的に説明することは(おそらく誰も)できておらず、私の研究における根本的な疑問として今も残っています。

ARPES における一般論としては、電子構造の「主たる周期」に対応する並進対称性をとると、結晶運動量 $\hbar\mathbf{k}$  と光電子運動量に対応すると考えられています。「主たる周期」としては基本的に最小の単位格子をとることが多く、この点に関し気を付けるべきは底心・体心・面心・菱面のようなセンタリングがあり慣用単位格子・基本単位格子が異なる場合です。カゴメ格子積層結晶  $\text{Fe}_3\text{Sn}_2$ (空間群  $R\bar{3}m$ )に関する私の研究[1]も、カゴメ格子面を反映した慣

用単位格子とそれより小さくカゴメ面を反映しない基本単位格子の違いに注目した議論が主な成果となっています。ARPES における運動量保存則といえば自明なものようですが、一見当たり前のものも研究の対象になりうるということを感じました。

ARPES で用いる「主たる周期」は「基本的に」最小の単位格子ですが、そうではない例も沢山あります。最近まで取り組んでいた研究[2]では、インターカレートした場合・AB 積層結晶の場合に ARPES スペクトルの周期が基本単位格子と対応しないことを示し、その起源として波動関数の形状効果を議論しています。バンド分散が直接観測できると形容される ARPES ですが、そのスペクトルにはまだまだ調べるべき事柄が残されています。博士課程ではこうしたテーマをより深く議論できることを目指しています。

最後になりましたが、修士課程の研究でお世話になった共同研究者の皆さま、放射光施設のスタッフの皆さまに深く御礼申し上げます。今後ともどうぞよろしくお願いいたします。

[1] Hiroaki Tanaka *et al.*, Phys. Rev. B **101**, 161114 (R) (2020).

[2] Hiroaki Tanaka, Shota Okazaki *et al.*, *submitted*.