

Workshop on Resonant Inelastic and Elastic X-ray Scattering

研究代表者：東北大学金研 藤田 全基

研究分担者：量子科学技術研究開発機構 宮脇 淳、藤井 健太郎

Masaki Fujita

Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai 980-8577

Jun Miyawaki, Kentaro Fujii

NanoTerasu Center, National Institute for Quantum Science and Technology, Sendai 980-8579

Keywords: Resonant Inelastic Scattering, Resonant Elastic Scattering

Workshop on Resonant Inelastic and Elastic X-ray Scattering was held at Sakura Hall, Tohoku University in August 2–4, 2023. We had over 100 participants, including 35 from overseas. The program featured 5 plenary talks, 15 invited talks, 11 contributed talks, and 20 poster presentations. On the final afternoon, we organized a NanoTerasu tour, which attracted about 60 participants. Throughout the workshop, there were active discussions and meetings on collaborative research, with a focus on new beamlines at NanoTerasu. The workshop ended on a positive note, with attendees showing keen interest and active involvement throughout.

1. 緒言 (Introduction,)

共鳴非弾性および弾性 X 線散乱 (RIXS および REXS) は、いずれも X 線散乱の原理に基づいた実験手法である。RIXS は、非弾性散乱に注目して物質中の低エネルギー励起を明らかにし、REXS は弾性散乱に注目して回折現象を通じて物質中の周期構造を明らかにする。

RIXS は、結晶場、軌道間励起 (*dd* 励起、*ff* 励起など)、電荷移動励起などの電子状態そのものを反映する低エネルギー励起だけでなく、固体中の磁気励起 (マグノン) やフォノン、分子系の振動励起の観測も可能である。エネルギーだけでなく、X 線の運動量を利用することによって素励起の分散を取得することができる。さらに、*photon-in/photon-out* の分光なので、バルク敏感であり、様々な相 (固体、液体、気体) や様々な外場 (電場、磁場、応力) においても電子状態を測定できることから、*operando* 分光に強みを持つなど、RIXS は他に類を見ない強力な分光手法となっている。

一方、REXS は回折に基づいた手法であるが、従来の X 線回折で研究できる結晶構造を調べられるだけでなく、共鳴効果による散乱断面積の増強を利用して、物質中のスピンや電荷、軌道の空間変調も観察可能であり、これにより、REXS もまた他に類を見ない強力な回折の実験手法となっている。

これらの 2 つの実験手法は同じ散乱の原理に基づいているが、RIXS は分光法として、REXS は回折法として、異なる計測技術として発展してきた。そのため、RIXS と REXS の研究は、理論も含め別々に発展してきたが、X 線散乱という共通の現象から物質研究に必要な電子状態と構造の両方の情報を取得できる点で、完璧な組み合わせと言える。近年は放射光光源や実験技術の向上により、RIXS と REXS の装置の違いが小さくなっており、特に、RIXS 分光器を使用して回折を測定する有用性が認識されるようになったことから、統一的な理解とさらなる融合研究が期待されている。

そこで、先進的な共鳴 X 線散乱法および関連する理論技術を使用して量子材料、磁性、電子秩序、および励起を研究する研究者が集い、議論する場を提供し、両手法の融合的な研究、統一的な理解を目指して、本ワークショップを開催する。対象となる物質は、遷移金属酸化物、銅酸化物・鉄系超伝導体、希土類系、強いスピン軌道相互作用を有する系、ヘテロ構造などが含まれる。

本ワークショップは 2 年おきに開催されており、最近では、2016 年に IFW Dresden で、2018 年に Diamond Light Source で、2021 年には (Covid-19 の影響により 1 年延期された) Brookhaven National Laboratory で開催されている。2023 年の開催では、建設中の NanoTerasu での共同研究を視野に入れて、仙台の地で開催することとした。

2. 開催内容 (Experimental procedure)

本ワークショップは、2023 年 8 月 2-4 日に、東北大学片平キャンパスさくらホールにて、東北大学 金属材料研究所と量子科学技術研究開発機構 次世代放射光施設整備開発センターの共同主催で開催した。一部の海外の発表者を除き、対面形式で実施した。

プログラムは大きく分けて 5 つのセッションに分かれ、各セッションに最近の研究動向を概観する plenary talk と、関連する注目度の高い研究テーマに関する invited talk を配置した。さらに、参加者からの興味深い研究成果を contributed talk として取り上げ、RIXS/REXS に関連する実験・理論的手法を用いた量子物質や磁性、電子秩序、励起状態に関する最近の研究を広く網羅する形とした。また、ポスター発表のセッションも設け、より多くの参加者に発表、議論の場を提供することとした。最終日の午後には、世界最高の性能を目指す RIXS 装置を含む新たなビームラインが建設中である NanoTerasu の見学会を実施した。

図1、図2に口頭及びポスター発表のプログラムを示す。発表件数は、plenary talk が5件、invited talk が15件、contributed talk が11件、ポスター発表が20件であった。

RIXS/REXS Wrokshop 2023 – Program (final)						
	Wednesday, August 2nd		Thursday, August 3rd		Friday, August 4th	
-9:05	Registration					
9:05-9:20	Opening Remarks (Chair: Masaki Fujita (Tohoku University)) Dr. Wataru Usami , Director of ASLS, OST Prof. Takahiko Sasaki , Director of IMR, Tohoku University	9:00-9:45	Mark P. M. Dean (Brookhaven National Laboratory) Electronic structure, magnetic interactions, and charge order in low valence nickelates probed by RIXS	9:00-9:45	Jinghua Guo (Lawrence Berkeley National Laboratory) Opportunities and challenges for the in-situ/operando soft X-ray spectroscopy in energy, catalysis and chemical science	
9:20-10:05	Ke-Jin Zhou (Diamond Light Source) Spin and charge excitations in quantum materials probed by RIXS	9:45-10:15	Yao Wang (Clemson University) Manipulation of Magnetic Excitations and Entanglement Enabled by nRIXS	9:45-10:15	Jonathan Pelicciari (Brookhaven National Laboratory) Resonant inelastic X-Ray Scattering to study thin films of quantum materials	
10:05-10:35	John Chang (University of Zurich) Magnon-magnon interactions in Soft-Magnet Insulators	10:15-10:45	Atsushi Haseki (Osaka Metropolitan University) Manipulation of Magnetic Excitations and Entanglement Enabled by nRIXS	10:15-10:45	Wei-Sheng Lee (SLAC National Accelerator Laboratory) RIXS Studies on Charge-Order Phenomena in Cuprate and Nickelate Superconductors	
10:35-11:05	Yinying Peng (Peking University) Charge order and its dynamics in overdoped Cuprates	10:45-11:15	Break	10:45-11:15	Break	
11:05-11:35	Break	11:15-11:45	Hakuto Suzuki (Max-Planck-Institut, Tohoku University) Distinct spin and orbital dynamics in Sr_2RuO_4	11:15-11:45	Thorsten Schmitt (Paul Scherrer Institut) Spin-excitation anisotropy in the nematic state of doped FeS_2	
11:35-12:05	Di-Jing Huang (National Synchrotron Radiation Research Center) Excitonic excitations of cuprate superconductors probed with high-resolution RIXS	11:45-12:05	Naoya Iwahara (Chiba University) Magnetic excitations in resonant inelastic X-ray scattering spectra of spin-orbit Mott insulators	11:45-12:05	Wenliang Zhang (Paul Scherrer Institut) Observation of the Pauli Magnon Band in the Ferromagnetic Topological Metal FeSb_2 by Resonant Inelastic X-ray Scattering	
12:05-12:25	Hiroyuki Yamase (National Institute for Materials Science) Plasmon excitations and plasmarons in cuprate superconductors	12:05-12:25	Subhyan Roychowdhury (Lawrence Berkeley National Laboratory) DeepQDOS: A fast and accurate first-principles method for the simulation and analysis of resonant inelastic X-ray scattering	12:05-12:25	Octave Duros (Sorbonne Université) Expression and determination of the crystal electric field in the quantum spin-ice candidate $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$	
12:25-13:30	Lunch	12:25-13:30	Lunch	12:25-13:50	Lunch	
13:30-14:30	Poster session	13:30-14:30	Poster session	13:50-14:10	Yi Tseng (Massachusetts Institute of Technology) Exciton dephasing mediated by charge-transfer dynamics in van der Waals semiconductors	
14:30-15:15	Urs Staub (Paul Scherrer Institute) Resonant Scattering to Study Ultrafast Dynamics of Spins and Electrons and the Relation to the Dynamics of the Lattice	14:30-15:15	Matteo Mitrano (Harvard University) Towards a quantum X-ray spectroscopy of light-driven quantum materials	14:10-14:30	Yuan Wei (Paul Scherrer Institut) Spin-orbit excitations controlling the magnetic phase transition in the van der Waals antiferromagnet FePSe_3	
15:15-15:45	Tsuyoshi Kimura (University of Tokyo) Graciously polarized resonant x-ray diffraction of multiferroic CuO	15:15-15:45	Giacomo Cosulich (SLAC National Accelerator Laboratory) Ultrafast Resonant X-ray Spectroscopy Reveals Light-Enhanced Charge Density Wave Coherence in a High-TC Superconductor			
15:45-16:15	William Windsor (Fritz Haber Institute of the Max Planck Society) Towards control of ultrafast spin dynamics in 4f antiferromagnets	15:45-16:15	Nicolas Jaouen (Synchrotron SOLEIL) Magnetic chirality in multilayers probed by Soft X-ray (coherent) scattering	15:00-17:00	NanoTerasu tour	
16:15-16:45	Break	16:15-16:45	Break			
16:45-17:15	David Hawthorn (Fritz-Haber Institute of Water Order) Orbital/Magnetic and Charge Density Wave Orders in Cuprate Superconductors Probed by Resonant Elastic X-ray Scattering	16:45-17:15	Eugenio Paris (Paul Scherrer Institute) Ultrafast Dynamics in Quantum Materials Using Time-resolved Resonant Inelastic X-ray Scattering at SwissFEL Pixa			
17:15-17:35	Hsiao-Yu Huang (National Synchrotron Radiation Research Center) Quantum critical scaling of charge order in $\text{La}_2\text{NiO}_4/\text{SrCuO}_4$ revealed by high-resolution RIXS	17:15-17:35	Kenji Tautsat (OST) Theoretical study of magnetic excitations in a photoexcited Mott insulator on a square lattice			
17:35-17:55	Miriam Garcia Fernandez (Diamond Light Source) Low energy orbital excitations in A-site ordered NdMnAsO_2	17:35-17:55	Iyvek Kumar Bhatiary (Brookhaven National Laboratory) Spectroscopic signature of 3D magnetism in a van der Waals ferromagnet FeSeTe_2			
		18:30-20:30	Workshop Dinner			

Plenary Speaker

Invited Speaker

Contributed Speaker

図1 ワークショップのプログラム。

Poster Presentation List			
	Presenter	Affiliation	Title
1	Asakura, Daisuke	National Institute of Advanced Industrial Science and Technology	Transition-metal <i>L</i> -edge RIXS studies of cathode materials for Li-ion batteries: Relation between the charge-transfer effect and electrode performance
2	Fujii, Kentaro	National Institutes for Quantum Science and Technology	Cu <i>L</i> -edge RIXS Spectra of Cu-Proteins
3	Fujiwara, Hidenori	Osaka University	Probing spin-polarized electronic structures of halfmetallic Heusler alloys using RIXS-MCD
4	Geprägs, Stephan	Walther-Meißner-Institut	Control of magnetic properties in iridate thin films by variation of strain and thin film thickness
5	Horio, Masafumi	University of Tokyo	Comparative RIXS investigation of five- and six-fold oxygen-coordinated 214-type cuprates
6	Jia, Xun	Chinese Academy of Sciences	Orbital excitations on the cusp of Mott-band insulator crossover in 1T-TaS ₂
7	Juhin, Amélie	IMPMC-CNRS	Magnetic properties of binary ferrofluids investigated by RIXS-MCD spectroscopy
8	Li, Hao	University of Tokyo	The role of oxygen species on water uptake by hydrophobic materials
9	Miyawaki, Jun	National Institutes for Quantum Science and Technology	Construction of Ultrahigh Energy Resolution 2D-RIXS at NanoTerasu: Advancements and Current Progress
10	Nakata, Suguru	University of Hyogo	Charge order in cuprates revealed by resonant inelastic x-ray scattering
11	Onishi, Hiroaki	Japan Atomic Energy Agency	Spin quadrupole excitations in frustrated ferromagnetic chain
12	Soh, Jian-Rui	Ecole Polytechnique Federale Lausanne	Entangled spin-orbital-lattice order in Ba ₂ MgReO ₆
13	Takahashi, Yoshihiro	Osaka Metropolitan University	LDA+DMFT approach to resonant inelastic x-ray scattering in strongly correlated magnetic systems
14	Thomas-Hunt, Jack	Aarhus University	High resolution spin texture imaging in spin caloritronics device structures: New opportunities for REXS at 4th generation light sources.
15	Tomasello, Bruno	University of Kent	Role of magneto-crystalline anisotropies in complex rare-earth garnets
16	Tomiyori, Yusuke	University of Tokyo	The Study on Water Repellent Behavior of Hydrophobic Coatings by Soft X-ray Spectroscopy
17	Yamaguchi, Tatsuya	Osaka Metropolitan University	Cu <i>L</i> ₃ -edge resonant inelastic x-ray scattering on isostructural copper oxides CaCu ₃ Fe ₄ O ₁₂ and EuCu ₃ Fe ₄ O ₁₂
18	Yamasaki, Yuichi	National Institute for Materials Science	Anisotropic Magnetic Dipole Detectable by Resonant X-ray Scattering
19	Zhang, Yujun	Chinese Academy of Sciences	Hard X-ray High Energy Resolution Spectroscopy Beamline at High Energy Photon Source
20	Su, Jia-Syuan	National Yang Ming Chiao Tung University	Momentum-resolved RIXS studies on high-temperature superconductor Bi2212

図 2 ポスター発表のリスト

3. 成果 (Results)

参加者は合計で 100 名以上と非常に多く、海外からの参加者も 35 名程度（オンライン発表の 4 名を含む）と積極的な参加があった。図 3 に参加者の集合写真を示す。1 日目午前と 2 日目午前の plenary talk では、DLS、NSLS-II にある最新の超高分解能 RIXS 装置での成果を含む固体中の素励起に関する最新の研究動向に関する発表があり、続く invited/contributed talk では、SLS、ESRF、DLS、NSLS-II、TPS などの高分解能 RIXS 装置での成果が銅酸化物超伝導体や Fe 超伝導体などを中心に発表された。3 日目午前の plenary talk では、ALS における in-situ や operando RIXS の展開について発表があり、RIXS のユニークな性能を活用した路線も注目を集めた。1 日目午後、2 日目午後の plenary talk では、REXS に関する最新の研究動向に関する発表があり、続く invited/contributed talk を含め、XFEL を用いた時間分解 RIXS/REXS の大きな進展が話題の中心であった。ポスター発表では、企業展示もあり、活発かつ深い議論が各所に見られた。全体を通じて、2 日半にわたるワークショップでは、常時 70 名以上の参加者があり非常に盛況であった。

最終日の午後には NanoTerasu の見学会を実施し、約 60 名の参加者があった。NanoTerasu では、BL02U で世界最高の分解能を目指す超高分解能 RIXS が建設中であり、また BL07U には SPring-8 から移設された高効率の RIXS 装置がインストール準備中だったこともあり、参加者からの注目が高か

った。ビームラインやRIXS分光器を見ながら活発な議論が行われ、早期の実現を期待する声が多く、ワークショップの良い締めくくりができたと考えている。



図3 参加者の集合写真

4. まとめ (Conclusion)

Workshop on Resonant Inelastic and Elastic X-ray Scattering を 2023 年 8 月 2-4 日に開催した。本ワークショップはシリーズとして開催されており、2018 年までは対面形式で開催されていたが、2021 年はオンライン形式であった。2023 年は、5 年ぶりに対面での開催が実現し、参加者間で活発な議論が交わされた。研究者間の交流は非常に有意義であり、特に NanoTerasu を軸として、東北大学金属材料研究所や量子科学技術研究開発機構との共同研究や技術連携に関して、新たな展開が生まれる転機になったと考えている。

謝辞 (Acknowledgement)

本ワークショップに参加された講演者、聴講者の皆様に感謝します。本ワークショップは、東北大学金属材料研究所と量子科学技術研究開発機構次世代放射光施設整備開発センターの共同主催で開催しました。関係者の皆様に感謝いたします。また、GIMRT や前回主催の BNL からの支援に御礼申し上げます。