

日時：2015年6月24日(水)～2015年6月26日(金)

場所：物性研究所本館6階 大講義室(A632)

研究会提案代表者：吉信 淳 (物性研)

共同提案者：金光 義彦 (京大化研)、腰原 伸也 (東工大)、常行 真司 (東大理)、中村 潤児 (筑波大)、  
福谷 克之 (東大生産研)、松本 吉泰 (京大理)、小森 文夫、柴山 充弘、末元 徹、森 初果、  
山室 修、秋山 英文、杉野 修、野口 博司、原田 慈久、松田 巖、リップマー・ミック (以上、物性研)

物性から「機能」を引き出し利用できるようにするためには、物質の基底状態・平衡状態の静的電子物性を基盤として、励起状態・非平衡状態、さらには化学反応や生体系に至る動的な性質に踏み込む必要がある。「機能物性」では、伝統的な物性物理が対象としてきた電子・スピン・格子と、それらの動的過程だけでなく、原子・イオンの移動や原子の組み替え(反応)を含めて、マルチスケール・階層的複合構造をもつ物質システムを扱う必要がある。これらを俯瞰する基礎学理を構築するためには、物理・化学・生物・計算科学・工学など既存の学問分野に留まることなく、融合科学・学際科学を構築することが必要であろう。

機能物性融合科学研究会シリーズの3回目となる本短期研究会では、次のような観点から、研究者や大学院生が、依頼講演(29件)とポスター発表(40件)を行った。

- (1)不均一系(表面、界面)における反応と輸送(触媒、光触媒、結晶成長など)
- (2)固体内および界面における電荷ダイナミクス(電子正孔対の生成と分離、輸送・移動など)
- (3)原子やイオンの輸送(水素吸収脱離、プロトン伝導、電気化学など)
- (4)分子系における反応と輸送(単分子、生体分子など)

参加者数は、初日76名(学内51名、学外25名)、二日目85名(学内56名、学外29名)、三日目50名(学内32名、学外18名)であった。三日目の最後に、3回の研究会シリーズ全体を貫く「機能物性」と物性研の将来計画について活発に意見交換が行われた。

初日のセッション1では表面界面における反応と輸送について講演があった。松本氏は、光触媒としての金属酸化物表面における電荷トラップと反応について概観した後、超高速表面分光による結果を発表した。高村氏は、近年注目を集めている新しい二次元物質の一つであるシリセンのZrB<sub>2</sub>/Si(111)表面における成長について報告した。八田氏は、自ら開発した温度可変型4端子プローブによる半導体表面の低次元金属の電気伝導について報告した。セッション2は、単分子物性や分子膜を応用したデバイスに関連した講演である。冨田氏は表面やブレイクジャンクションで形成された単一分子結合系のキャリア輸送について、スピントロニクスや熱電素子などへの応用について概観した。木口氏は、単分子接合を使ったダイオードやスイッチについて具体例を示した。平野氏は、半導体微細加工技術を利用して脂質二重膜を含むチップを作製し、さらに脂質二重膜に機能性タンパク質分子を包埋させた。このデバイスを用いてイオンチャンネル電流の測定を行い、阻害剤などの効果が検証できること示した。米田氏は、単一分子デバイスを目指してダブルデッカー型分子のスピン制御についてSTMによる研究を発表した。二日目の朝、竹谷氏は有機半導体単結晶デバイスにおけるドーピングメカニズムと伝導について光電子分光による結果を含めて議論を行った。

二日目午前は、凝縮系におけるダイナミクスについて発表と議論が行われた。腰原氏は、最新の放射光やレーザーを用いて、隠れた状態を光励起で見つけ出すという切り口で凝縮系での光エネルギー変換過程について講演した。金光氏は、太陽電池におけるキャリアの生成、分離、輸送において、動作中のキャリア挙動の観察が重要であると報告した。赤木氏は、第一原理計算にもとづいた計算物理の立場から、固液界面の構造とダイナミクスについて講演した。倉橋氏は、スピン・

回転状態を選別した酸素分子線を用いて、Si、Al、Ni 表面における解離吸着ダイナミクスの詳細を明らかにした。

二日目の午後前半は水素の関係する物性と材料について討論を行った。福谷氏は、酸化物および Pd における水素原子の輸送と電子状態について報告した。水素の荷電状態と運動性が鍵を握ることが強調された。折茂氏は、錯体水酸化物での Li イオンの伝導現象について報告した。その機構解明は電池応用につながる。樋口氏は放射光 X 線構造解析によるタンパク質の構造解析、特にヒドロゲナーゼの反応機構とプロトン移動について、構造生物学の立場から講演した。重田氏は、第一原理計算に基づいて、チトクロム c 酸化酵素の機能解明について報告した。上田氏は、水素結合ユニットを有する有機伝導体を合成し、水素結合により物性や機能発現が大きく変化することを報告した。

二日目午後のセッション 5 のテーマは不均一触媒である。中村氏は、表面科学の成果を如何に触媒設計に活かすかという観点から、二酸化炭素からのメタノール合成反応や、グラファイトに担持した Pt クラスタを例に講演した。森川氏は、第一原理計算に基づいた不均一触媒反応や、液体 Ga における GaN 成長機構などを例に原子論的立場から表面反応と結晶成長について発表した。朝倉氏は、可視光応答型半導体光触媒における励起ダイナミクスを放射光および X 線自由電子レーザーを用いて観測した。先駆的実験であるが、理論的な解釈が難しくこの分野の更なる発展が不可欠である。山本氏は、ポンププローブ型時間分解放射光軟 X 線光電子分光を用いたキャリアダイナミクス観測について報告した。光触媒反応は励起、キャリア移動、反応など数ステップを経由して起こるプロセスであり、時間および空間分解したダイナミクス観測が重要である。

三日目午前のセッション 6 は電気化学とイオン輸送についてである。魚崎氏は、電気化学の基礎とエネルギー変換に関してチュートリアル講演を行った。これは、このあとの講演を理解するための基礎となった。星氏は、遷移金属ステップ表面を試料として酸素還元反応触媒の高活性化に向けた系統的研究を発表した。尾形氏は大規模な第一原理的シミュレーションにより、固液界面や有機無機界面における原子・分子・イオン種の動的挙動について報告した。杉野氏は、「機能物性」の概念について理論的な立場からレビューを行い、さらに計算による高精度反応シミュレーションの課題について議論した。

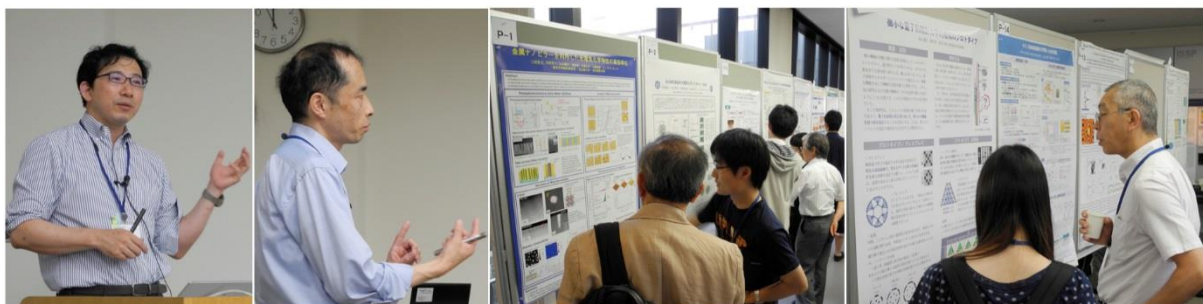
三日目午後前半は、材料と生体分子に関するセッションである。塚田氏は、機能物性が物質科学と材料科学のクロスオーバー領域に位置することを示し、理論と実験によるコラボレーションにより材料についてミクロな理解が進むことを示した。大胡氏は、ヘムタンパクの構造と機能について、X 線精密構造解析とそれに基づく電子状態解析の詳細を報告した。大場氏は、大規模第一原理計算による半導体ヘテロ界面のバンドアラインメントや格子欠陥による特性を予測し、物質開発への展開について講演した。リップマー氏は、半導体光触媒において重要な酸化物表面と水との相互作用について、局所プローブ顕微鏡による結果に基づき議論した。

初日と二日目の夕刻に行われたポスターセッションでは、若手研究者や大学院生を中心に最新の成果が報告された。各ポスターの前で、発表者との熱い議論や意見交換が行われた。

三日目午後後半は、物性研の「機能物性」構想について森所員が紹介した後、過去に行われた機能物性研究会シリーズについて簡単な報告があった。それらを受けて、出席者間で活発な意見交換を行った。多くの意見や、物性研に対する要望があり、たいへん有意義であった。物性研が目指す「機能物性」研究においては、単に応用を主眼とした研究ではなく機能を引き出すための基盤的研究をしっかりと行うこと、物性研内部だけではなく外部との連携にも配慮して進めることが重要である、とまとめることができる。

最後に、本短期研究会の準備と運営において、物性研事務の方々、各研究室のスタッフや学生諸君にご協力をいただいた。この場を借りて感謝したい。なお、本短期研究会の詳細(要旨集のダウンロードを含む)は、下記の URL を参照していただきたい。

<http://yoshinobu.issp.u-tokyo.ac.jp/2015ReactionTransport.html>



発表風景と集合写真

## プログラム (敬称略)

2015/6/24 (水曜日)

13:00-13:15 はじめに (所長、提案代表者)

### セッション1：表面界面における反応と輸送 (座長：松田 巖)

- O-1 13:15-14:00 松本 吉泰 (京大院) 「金属酸化物表面における電荷トラップと反応」  
O-2 14:00-14:30 高村(山田)由起子 (北陸先端大) 「エピタキシャル二次元材料の形成における反応と輸送」  
O-3 14:30-15:00 八田 振一郎 (京大院) 「温度可変型 4 端子プローブでみる表面低次元金属の電気伝導」

<休憩>

### セッション2：単分子物性/分子素子 (座長：小森 文夫)

- O-4 15:15-16:00 芎田 博一 (阪大院) 「単一分子接合のキャリア輸送機構」  
O-5 16:00-16:30 木口 学 (東工大院) 「単分子接合におけるダイオード、スイッチング特性」  
O-6 16:30-17:00 平野 愛弓 (東北大院) 「半導体微細加工で創る脂質二分子膜イオンチャンネルチップ」  
O-7 17:00-17:30 米田 忠弘 (東北大多元研) 「単分子・分子デバイスに向けた反応を用いた電荷輸送制御」

### ポスターセッション (物性研本館 6F ラウンジ)

17:30-18:30 ポスターセッション発表者 (奇数番号+P-34, P-40)

2015/6/25 (木曜日)

O-8 9:00-9:30 竹谷 純一 (東大院新領域) 「有機半導体におけるドーピングメカニズムとキャリア伝導」  
(座長：松本吉泰)

### セッション3 凝縮系ダイナミクス (座長：松本 吉泰)

- O-9 9:30-10:15 腰原 伸也 (東工大院) 「電荷分離反応と電荷輸送のナノ機構 -新観測技術で何が観測できるか?-」  
O-10 10:15-10:45 金光 義彦 (京大化研) 「太陽電池におけるキャリア生成、分離、輸送」  
O-11 10:45-11:15 赤木 和人 (東北大 AIMR) 「固液界面の構造とダイナミクスへの計算科学からのアプローチ」  
O-12 11:15-11:45 倉橋 光紀 (NIMS) 「量子状態選別酸素分子ビームによる表面反応スピン・立体効果の解析」

<昼食>

### セッション4 水素の関係する物性と材料 (座長：常行 真司)

- O-13 13:00-13:45 福谷 克之 (東大生産研) 「水素の輸送と電子状態」  
O-14 13:45-14:15 折茂 慎一 (東北大 AIMR/金研) 「錯体水素化物での高速イオン伝導現象-その機構解明と電池応用」  
O-15 14:15-14:45 樋口 芳樹 (兵庫県立大) 「ヒドロゲナーゼの水素活性化反応機構とプロトン移動」  
O-16 14:45-15:15 重田 育照 (筑波大院) 「第一原理計算に基づく酵素機能解析：チトクロムc酸化酵素のプロトンポンプを例として」  
O-17 15:15-15:45 上田 顕 (東大物性研) 「水素結合を活用した特異な純有機伝導体の開発と物性・機能開拓」

<休憩>

セッション5 不均一触媒 (座長: 福谷 克之)

- O-18 16:00-16:45 中村 潤児 (筑波大院) 「環境エネルギー分野の触媒開発と学理」
- O-19 16:45-17:15 森川 良忠 (阪大院) 「第一原理シミュレーションによる不均一触媒の研究」
- O-20 17:15-17:45 朝倉 清高 (北大触媒センター) 「可視光応答型水分解 WO<sub>3</sub> 触媒における励起構造の Pump-Probe XAFS 観察」
- O-21 17:45-18:15 山本 達 (東大物性研) 「酸化物半導体のエネルギー変換過程におけるキャリア輸送ダイナミクスのリアルタイム観測」

ポスターセッション および交流会 (物性研本館 6F ラウンジ)

- 18:30-19:30 ポスターセッション発表者 (偶数番号)
- 19:00-20:00 交流会

2015/6/26 (金曜日)

セッション6 電気化学とイオン輸送 (座長: 中村 潤児)

- O-22 9:30-10:15 魚崎 浩平 (NIMS) 「電気化学の基礎とエネルギー変換」
- O-23 10:15-10:45 星永 宏 (千葉大院) 「電極表面構造の規整による酸素還元反応の高活性化」
- O-24 10:45-11:15 尾形 修司 (名古屋工大) 「固液界面、有機無機界面に関する第一原理的な大規模シミュレーション」
- O-25 11:15-11:45 杉野 修 (東大物性研) 「次世代高精度化学反応系シミュレーション構築への課題と展望」

<昼食>

セッション7 材料と生体分子の科学 (座長: 杉野 修)

- O-26 13:00-13:45 塚田 捷 (東北大 AIMR) 「物質科学と材料研究」
- O-27 13:45-14:15 大胡 恵樹 (帝京大医) 「ヘムモデルの構造と電子状態」
- O-28 14:15-14:45 大場 史康 (東工大応セラ研) 「半導体における格子欠陥特性の理論予測の高精度化と物質探索への展開」
- O-29 14:45-15:15 Mikk Lippmaa (東大物性研) "The structure of water on oxide surfaces"

<休憩>

セッション8 物性科学新分野 (機能物性) と物性研将来計画 (座長: 吉信 淳)

- 15:20-15:35 森 初果 (東大物性研): 新センター構想「機能物性」
- 15:35-15:40 森 初果 (東大物性研): 機能物性「光機能」研究会の報告
- 15:40-15:45 山室 修 (東大物性研): 機能物性「ソフトダイナミクス」研究会の報告
- 15:45-16:30 討論

ポスター発表:

2015/6/24 (水曜日) (奇数番号+P-34, P-40)

- P-1 川崎 聖治 (東大・物性研) 金属ナノピラーを利用した光電気化学特性の高効率化
- P-3 岡 真悠子 (東大・理) エピタキシャル歪み下における ZrO<sub>2</sub> 系薄膜の構造変化とイオン伝導性に関する第一原理計算
- P-5 深澤 守 (東大・物性研) 有機薄膜のための非破壊液体金属 4 探針電気伝導測定装置の開発
- P-7 山本 良幸 (東大・理) 拡散量子モンテカルロ法によるルチル型 SiO<sub>2</sub> 中水素原子の最安定状態の解析
- P-9 吉田 順哉 (東大・物性研) 水素結合を媒介とした動的分子配列変化を起こす有機伝導体の対アニオン依存性



- P-11 中前 秀一 (東大・物性研) 量子井戸キャリア密度の空間的な揺らぎの定量測定
- P-13 岩田 孝太 (大阪大・工) Si(111)表面上単一有機分子の室温原子間力顕微鏡測定
- P-15 畠山 遼子 (東大・総合文化) 微小な量子熱統計力学的機械のプロトタイプ
- P-17 佐藤 暢哉 (東大・理) 2 次元的電子状態をもつペロブスカイト型酸水素化物  $\text{KTiO}_2\text{H}$  の理論予測
- P-19 山本 駿玄 (東大・物性研) Ag(111)表面における物理吸着酸素の構造と電子状態
- P-21 宮田 佳典 (東大・物性研) 走査トンネル顕微鏡による Pb/Ge(111)系の近接効果に関する研究
- P-23 KIM HOWON (東大・物性研) Site-specific atomic-scale Josephson coupling studied by a scanning tunneling microscopy
- P-25 土師 将裕 (東大・物性研) スピン偏極 STM を用いた W(110)上の 2 層 Mn 薄膜の磁気構造と電子状態の観察
- P-27 浜田 雅之 (東大・物性研) 走査トンネルポテンショメトリー法の開発
- P-29 染谷 隆史 (東大・物性研) フェムト秒域時間分解光電子分光法と三温度モデル解析による SiC(000-1) 面成長グラフェンの電子格子相互作用の研究
- P-31 加藤 史明 (京大・理) Pt(111)上の結晶氷薄膜における H/D 交換反応の膜厚依存性
- P-33 木内 久雄 (東大・工) X 線光電子・吸収分光による窒素ドーパグラファイトに化学吸着した  $\text{CO}_2$  の観測
- P-34 向井 孝三 (東大・物性研) HREELS によるシリセン/ZrB<sub>2</sub>/Si(111)のフォノン分散とシリセンの構造
- P-35 吉田 靖雄 (東大・物性研) 積層欠陥が Co ナノアイランドの磁気異方性と電子状態に及ぼす影響
- P-37 山本 航平 (東大・物性研) 共鳴軟 X 線散乱でみた La<sub>1/3</sub>Sr<sub>2/3</sub>FeO<sub>3</sub> の磁気秩序の膜厚依存性
- P-39 正能 大起 (東大・物性研) Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 薄膜の dewetting の In-situ 観察
- P-40 野口 秀典 (物質・材料研究機構) 電気化学和周波発生分光法を用いた電極/溶液界面電子構造のプロープ

2015/6/25 (木曜日) (偶数番号)

- P-2 高橋 竜太 (東大・物性研) Ag<sub>6</sub>O<sub>8</sub>AgNO<sub>3</sub> 結晶の光電気化学エピタキシー合成
- P-4 樋山 みやび (東大・物性研) オキシシフェリン光ルミネッセンスにおける発光反応経路と振動構造
- P-6 杉本 宜昭 (東大・新領域) 室温で動作する原子スイッチの組立
- P-8 吉本 真也 (東大・物性研) F4-TCNQ 分子吸着エチレン終端 Si(100)表面の電子状態と電気伝導度
- P-10 塩足 亮隼 (東大・新領域) Cu 表面上における水分子による NO 還元反応の STM 観測
- P-12 古府 麻衣子 (東大・物性研) パラジウムおよびそのナノ粒子中の水素の拡散ダイナミクス
- P-14 丸山 伸伍 (東北大・工) イオン液体超薄膜の作製とその伝導度
- P-16 辺見 茂 (ベタマグネティックソフトウェア) 異種金属及び電界液を解析対象としたガルバニック腐食電流有限要素法
- P-18 東野 寿樹 (東大・物性研) 非共有結合性相互作用を用いた大気安定有機トランジスタ
- P-20 長塚 直樹 (東大・生産研) アナターゼ型 TiO<sub>2</sub>(101)表面における欠陥誘起電子状態
- P-22 吉田 正裕 (東大・物性研) EL 絶対値計測による多接合太陽電池の発光量子効率評価と性能診断
- P-24 塩澤 佑一郎 (東大・物性研) 亜鉛で修飾した Cu(111)表面におけるギ酸の吸着と解離
- P-26 吉澤 香奈子 (東大・物性研) ルチル型酸化半導体中の不純物水素の電子状態と余剰電子状態
- P-28 丹羽 秀治 (東大・物性研) その場軟 X 線共鳴発光分光による酸素吸着前後の鉄フタロシアニンの電子状態解析
- P-30 大谷 優介 (物質・材料研究機構) 色素増感太陽電池における Ru/有機色素混合系の共増感効果
- P-32 芳倉 佑樹 (東大・物性研) F4-TCNQ 分子のエチレン終端 Si(100)-(2×1)表面における吸着状態
- P-36 植田 寛和 (物質・材料研究機構) 極低温氷表面上での水素分子のオルソ・パラ転換における温度依存性
- P-38 小坂谷 貴典 (東大・物性研) 雰囲気光電子分光法による Cu(997)表面における二酸化炭素の活性化および水素化のオペランド観測