# 物性研究所セミナー

標題:放射光セミナー:タンパク質の立体構造で生命を理解する-がん抑制や神経回路形成を例として

日時: 2015年7月22日(水) 午後1時~

場所:物性研究所本館 6 階 第1会議室 (A636) TV会議 SPring-8会議室

講師:深井 周也

所属:東京大学放射光連携研究機構生命科学部門構造生物学研究室

要旨:

生命の設計図は DNA であるが、生命現象の現場で中心的な役割を担うのはタンパク質である。タンパク質が多様な生体分子と相互作用して複合体を形成することで、物理的あるいは化学的なシグナルを受容、伝達そして応答し、様々な生命現象が引き起こされる。したがって、生命を理解するには、無数に存在するタンパク質複合体の作動機構を理解する必要がある。放射光連携研究機構生命科学部門では、タンパク質複合体の立体構造決定によりその作動機構を明らかにし、様々な生命現象の理解を進めてきた。本セミナーでは、最近プレスリリースをおこなった「がん抑制の仕組み」「神経回路形成の仕組み」に関する研究成果について紹介したい。

標題:理論セミナー:Interatomic potential of iron based on machine learning

日時: 2015 年 7 月 24 日(金) 午後 4 時~午後 5 時 場所: 物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師:尾崎 泰助

所属:東京大学物性研究所

要旨:

Prediction of crystal structures for alloys and compounds with arbitrary composition of elements has not been widely performed yet, while current first-principles electronic structure calculations based on density functional theories (DFT) might have enough accuracy in predicting crystal structures in most cases. One of reasons for that is due to a large computational cost to explore vast configuration space in structural prediction by using molecular dynamics and Monte Carlo simulations based on DFT. In this talk, we report an ongoing research to develop an accurate interatomic potential of iron using a neural network (NN) method being a machine learning technique as a first step towards structural prediction of magnetic intermetallic compounds. Behler et al. proposed a way of developing accurate interatomic potentials using NN by letting NN learn a series of DFT calculations [1]. In addition to two- and threebody structural symmetry functions as structural fingerprint proposed by Behler, we further introduce four kinds of spin symmetry functions to develop interatomic potentials using NN which can treat crystal and spin structures on the same footing. The total energies of reference systems with an arbitrary spin structure, BCC, FCC, HCP, simple cubic, diamond, and their distored structures with ferro-, antiferro-, and non-magnetic, random spin structures, were carefully calculated by using a constraint scheme, which has been newly developed, based on non-collinear DFT [2], and all the calculated data were assembled to form a database as reference. By providing the database as a training set, we trained NN with a feed-forward network structure of four layers using a back propagation, stochastic minibatch decent, and residual minimization method. It is found that the mean difference between the reference DFT data and NN is 9.6 meV/atom, which suggests that a highly accurate interatomic potential can be developed for magnetic systems. We also discuss how the potential can be utilized to simulate crystal and spin dynamics on the same footing.

[1] J. Behler and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 98, 146401.

[2] http://www.openmx-square.org/

標題:第31回 極限コヒーレント光科学セミナー:コヒーレントフォトン技術によるイノベーション創出

日時:2015年7月31日(金) 午後3時~午後4時

場所:物性研究所本館 6 階 第 1 会議室 (A636)

講師:湯本 潤司

所属:東京大学 理学系研究科

#### 要旨:

レーザー技術の進歩により、レーザーの電気から光への変換効率が飛躍的に向上しつつある。そして、「フォトンコスト」は劇的に低下し、金属やガラスの切断、融着など、様々な製造現場にレーザーが導入されつつある。しかしながら、レーザー光による切断を考えた場合、その現象は、「非線形」、「非平衡」、「開放系」という非常に難しい物理であり、その本質は、未解明の部分が多く、今後のレーザー加工技術の性能向上、また、それによって製造された製品の信頼性確保などの点で、基礎に立ち戻った取り組みが求められている。さらに、フェムト秒領域の極短パルス光を用いた場合は、非熱的なレーザー加工が期待され、これまでのレーザー加工技術を大きく変える可能性が秘められている。

その一方、最近、欧米では、「Industry 4.0」や「Industrial Network」という取り組みが話題になっている。これは、製造技術と情報ネットワークの融合による製造現場での革新を目指したもので、ターゲットの一つとして mass production から mass customization へのコンセプトの転換も上げられている。さらにその先に進めるためには、デジタル化と加工技術の融合だけではなく、材料や素材、更には学理も含めたトータルソルーションとして考える必要がある。 我々は、文科省/JST COI Stream プログラムの一つとし、「コヒーレントフォトン技術によるイノベーション拠点」を推進している。(2013年11月から9年間のプログラム)このプログラムでは、参画企業と協力し、ターゲットを明確にしたレーザー技術の究極を追求するとともに、現在のレーザー光加工技術を、「光で切るとは、何か」という基礎に立ち返り、そこでの知見を、新しいテクノロジー、イノベーションにまで発展させることを目指している。

我々の取り組みを紹介すると共に、産学連携についても議論させていただきたい。

標題:ナノサイエンス・セミナー: Hydrogen Storage in Graphene

日時:2015年8月5日(水) 午後1時~午後2時

場所:物性研究所本館6階第5セミナー室(A615)

講師: Prof. Stefan Heun

所属: Istituto Nanoscienze-CNR and Scuola Normale Superiore

### 要旨:

The realization of innovative hydrogen storage materials has worldwide strategic importance. Graphene has recently attracted attention as a promising hydrogen storage medium. Indeed, graphene is lightweight, chemically stable, and exhibits attractive physico-chemical properties for hydrogen adsorption. Furthermore, the interaction between hydrogen and graphene can be controlled by chemical functionalization.

The energetics of the chemisorption of hydrogen on graphene can be modified by the local curvature of the graphene sheet. Based on scanning tunneling microscopy (STM) we report on site-selective adsorption of atomic hydrogen on convexly warped regions of monolayer graphene grown on SiC(0001). This system exhibits an intrinsic curvature owing to the interaction with the substrate [1]. We show that at low coverage hydrogen is found on convex areas of the graphene lattice [2]. No hydrogen is detected on concave regions. These findings are in agreement with theoretical models which suggest that both binding energy and adsorption barrier can be tuned by controlling the local curvature of the graphene lattice. This curvature-dependence combined with the known graphene flexibility may be exploited for storage and controlled release of hydrogen at room temperature.

Theoretical studies regarding metal atoms (e.g. Ti) deposited on graphene suggest that such materials can adsorb up to 8 wt% gravimetric density of hydrogen. We investigate the deposition of Ti on graphene and its potential for hydrogen storage [3]. The Ti atoms form small islands (diameter  $\sim 10$  nm). The Ti-covered graphene was exposed to molecular hydrogen, and then the sample temperature was increased while measuring the mass-sensitive desorption. These desorption spectra show two peaks at  $210^{\circ}$ C and  $290^{\circ}$ C. Their intensity increases with increasing Ti coverage. Our data demonstrate the stability of hydrogen binding at room temperature and show that the hydrogen desorbs at moderate temperatures  $^{-}$  both ideally matching technical requirements for hydrogen storage. To further increase the hydrogen uptake of these samples we have recently increased the active surface for hydrogen adsorption by decreasing the size of the Ti-islands and increasing their density [4].

- 1.S. Goler, C. Coletti, V. Piazza, P. Pingue, F. Colangelo, V. Pellegrini, K. V. Emtsev, S. Forti, U. Starke, F. Beltram, and S. Heun, Carbon 51, 249 (2013).
- 2.S. Goler, C. Coletti, V. Tozzini, V. Piazza, T. Mashoff, F. Beltram, V. Pellegrini, and S. Heun: J. Phys. Chem. C 117, 11506 (2013).
- 3.T. Mashoff, M. Takamura, S. Tanabe, H. Hibino, F. Beltram, and S. Heun: Appl. Phys. Lett. 103, 013903 (2013).
  4.T. Mashoff, D. Convertino, V. Miseikis, C. Coletti, V. Piazza, V. Tozzini, F. Beltram, and S. Heun: Appl. Phys. Lett. 106, 083901 (2015).

標題:放射光セミナー:「チオール自己組織化単分子膜の高度機能化に向けた基礎研究:光励起と複官能基化」

日時: 2015年9月1日(火) 午前11時~

場所:物性研究所本館 6 階 第 1 会議室 (A636) T V 会議 SPring-8 会議室

講師:加藤 浩之

所属:大阪大学大学院 理学研究科

## 要旨:

発光や受光を担う分子デバイスにおいて、電子/正孔の生成と動的挙動は、光電変換特性を決める重要な要素である。 本研究では、まず官能基を付加した自己組織化単分子膜(SAM)を作製し、分子配向や電子準位を明らかにした上で、光励 起電子のダイナミクスにおける基板一励起子間の相互作用について研究してきた。

アルカンチオールの末端にクアテルチオフェン(4T)を結合させた分子は、メルカプト基が Au(111)基板と Au-S 結合を

形成し、アルキル鎖を介して 4T 部位が層状に配列する吸着様式 (4TCnS-SAM)をとる(図1)。よって、アルキル鎖長 n を変化させる と、4T 層と基板の距離が変化することが期待される。実験では、赤外反射吸収分光(IRAS)を用いて SAM 内の分子配向を明らかにし、紫外光電子分光(UPS)や 2 光子光電子(2PPE)分光を用いて HOMO/LUMO 由来の準位が 4T 部位にある事を確認した。くわえて、ポンプープローブパルス光間に遅延時間を設けた時間分解 2PPE 分光によって、4T 部位で励起した電子の緩和過程を測定した。その結果、励起電子の減衰速度がアルキル鎖長 n に強く依存することを明らかにした(図2)。講演では、緩和過程の定量解析を基に、4T 励起状態と Au 基板間の相互作用について議論する。また、今後の展開に関連し、SAM の複官能基化に向けた挑戦についても紹介する。

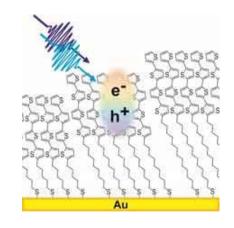


図1.4T終端アルカンチオール自己組織化単分子膜 (4TCnS-SAM)の吸着構造と光励起の模式図。

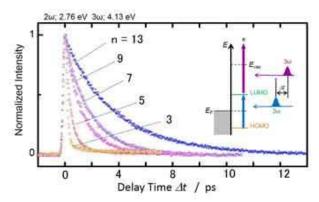


図 2. 時間分解 2PPE 分光を用いて測定した 4TCnS-SAM における励起電子の減衰曲線。減衰速度は、アルキル鎖長 n によって著しく変化する。

標題:理論セミナー: New Route to Room-Temperature Superconductivity: Kondo Singlet State with  $T_K$  well beyond 1,000K in the Proton-Embedded Electron Gas

日時: 2015 年 9 月 11 日(金) 午後 4 時~午後 5 時 場所: 物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師: Prof. Yasutami TAKADA

所属: ISSP, The University of Tokyo

要旨:

Hydrogen in metals has attracted much attention for a long time from both basic scientific and technological points of view. Its electronic state has been investigated in terms of a proton embedded in the electron gas mostly by the local spin density approximation (LSDA) to the density functional theory (DFT). At high electronic densities, it is well described by a bare proton H<sup>+</sup> screened by metallic electrons (charge resonance), while at low densities two electrons are localized at the proton site to form a closed-shell negative ion H<sup>-</sup> protected from surrounding metallic electrons by the Pauli exclusion principle. However, no details are known about the transition from H<sup>+</sup> to H<sup>-</sup> in the intermediate-density region.

In my talk, by accurately determining the ground-state electron density n(r) by diffusion Monte Carlo (DMC) simulations with the total electron number N up to 170 combined with LSDA up to  $N\rightarrow\infty$ , I will give a complete picture of the transition, in particular, a sharp transition from H<sup>+</sup> screening charge resonance with a short screening length to Kondo-like spin-singlet resonance with a very long screening length. The emergence of the Kondo singlet state is confirmed by the presence of an anomalous (oscillation-period shortened) Friedel oscillation characteristic to the Kondo singlet state with quantitatively determining its Kondo temperature  $T_K$ , which is well beyond 1,000K for the electronic density parameter  $r_s$  in the region of 3-8.

This study not only reveals interesting competition between charge and spin resonances, enriching the century-old paradigm of metallic screening to a point charge, but also discovers a long-sought novel high- $T_K$  system. Note that according to heavy-fermion physics, superconductivity occurs in a Kondo lattice near quantum critical point at a temperature as high as  $0.1T_K$ . Thus, if a macroscopic number of protons are embedded into a metal (like in the metal hydrides) and those hydrogens are so synthesized as to be arranged in the form of a periodic Kondo lattice with the host metal in this intermediate-density region, we may expect the occurrence of superconductivity at  $T_c$  near  $0.1T_K$  (which is of the order of the room temperature) at the ambient pressure, contrary to the case of solid hydrogen or sulfur hydrides under very high pressures in which  $r_s$  is about 1.4.

Reference: YT, R. Maezono, and K. Yoshizawa, arXiv1507.06432.

標題:強磁場セミナー:グラフェンのサイクロトロン共鳴における多体効果

日時: 2015 年 9 月 25 日(金) 午後 3 時~午後 4 時

場所:物性研究所本館 6 階 第 1 会議室 (A636)

講師:浅野 建一

所属:大阪大学理学研究科

## 要旨:

放物線形のエネルギー分散を持つ電子系に対するサイクロトロン共鳴には相互作用効果が現れない。この事実は Kohn の定理として知られている。しかし、グラフェンに代表される Dirac 電子系(線形のエネルギー分散を持つ二次元電子系) には、この Kohn の定理を適用できないので、サイクロトロン共鳴に電子間相互作用の効果が現れる。

本講演では、グラフェン系のサイクロトロン共鳴に現れる多体効果を、少数電子系の数値的対角化で調べた結果について説明する。まず、単層グラフェン系については、N=0のランダウ準位から N=1のランダウ準位への遷移に対応するサイクロトロン共鳴にほとんど多体効果が現れず、Kohnの定理が近似的に成立しているとみなせることが分かった。その一方で、N=-1から N=2への遷移に対応するサイクロトロン共鳴には相互作用効果が現れる。時間に余裕があれば、二層グラフェン系に対する結果についても述べたい。

標題:理論インフォーマルセミナー・新物質セミナー:The dynamics of a quantum spin liquid

日時: 2015年9月28日(月) 午後1時~

場所:物性研究所本館6階第5セミナー室(A615)

講師: John Chalker

所属: University of Oxford

#### 要旨:

I will describe recent theoretical results on the dynamics of a remarkably simple, exactly solvable model — the Kitaev honeycomb model — that has a spin liquid ground state. In this system, magnetic moments are "dissolved" by quantum fluctuations and reform as new degrees of freedom: mobile fermions and flux lines of an emergent gauge field. I will discuss the implications of this reorganisation, known as quantum number fractionalisation, for measurements of dynamics such as the inelastic neutron scattering response.

標題:光・量子融合連携プログラム合同研究会:極限レーザー・放射光技術の融合から、光エネルギー変換の科学へ

日時: 2015年10月9日(金) 午前9時30分~

場所:東京大学フューチャーセンター 1階多目的ホール

## 要旨:

近年の極限的なレーザー技術の進展により、テラヘルツから可視、軟 X 線にわたる広い波長領域での光が得られるようになっている。また、放射光における先端的な計測技術も着実に進展しており、X 線を用いた時間分解や顕微分光計測が可能となっており、今後は光源の垣根を越えたさまざまな利用法の開発が大きな課題となっている。このような背景の下で、平成25年度から文部科学省「光・量子融合連携研究開発プログラム 」が開始され、レーザー技術と放射光技術の融合による物質科学の創成を目指した二つの研究課題「極限レーザーと先端放射光技術の融合による軟 X 線物性科学の創成(課題責任者:辛埴)」「レーザー・放射光融合による光エネルギー変換機構の解明(課題責任者:足立伸一)」が採択された。これら二つの研究課題に携わる研究グループによる合同研究会を開催し、レーザーと放射光を共通基盤とした新しい物質科学の創成を目指して、現状報告と今後の方向性についての議論を行う。