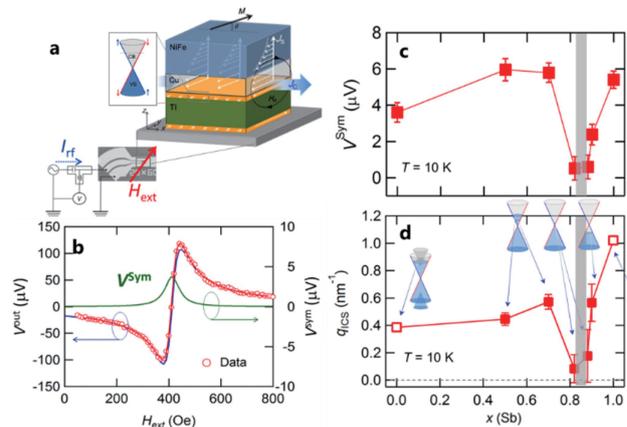


物性研だより

BUSSEIKEN DAYORI

第57巻
第2号
2017年7月

- トポロジカル絶縁体表面で高効率スピン流を生成
- なぜ高温超伝導体は界面で優れた特性を持つか？
-銅酸化物界面で超伝導転移温度が安定に最適化される機構を解明-
- ゲルマニウム単原子シート「ゲルマネン」の原子配置の非対称化
- 3Dプリンタで空間に分布する物理量を可視化する技術を開発
~分子の中の電子密度分布を透明樹脂の中に描写~
- 新種の鉱物、Bunnoite(豊石)について
- 高温高圧下における鉄の水素化の挙動を中性子でその場観察
-地球形成初期にコアへ取り込まれた軽元素問題への挑戦-
- 電子のスピンを自在に操作 ~先端レーザー技術が拓く光スピン制御~
- 結晶構造の乱れによる量子スピン液体状態の安定化



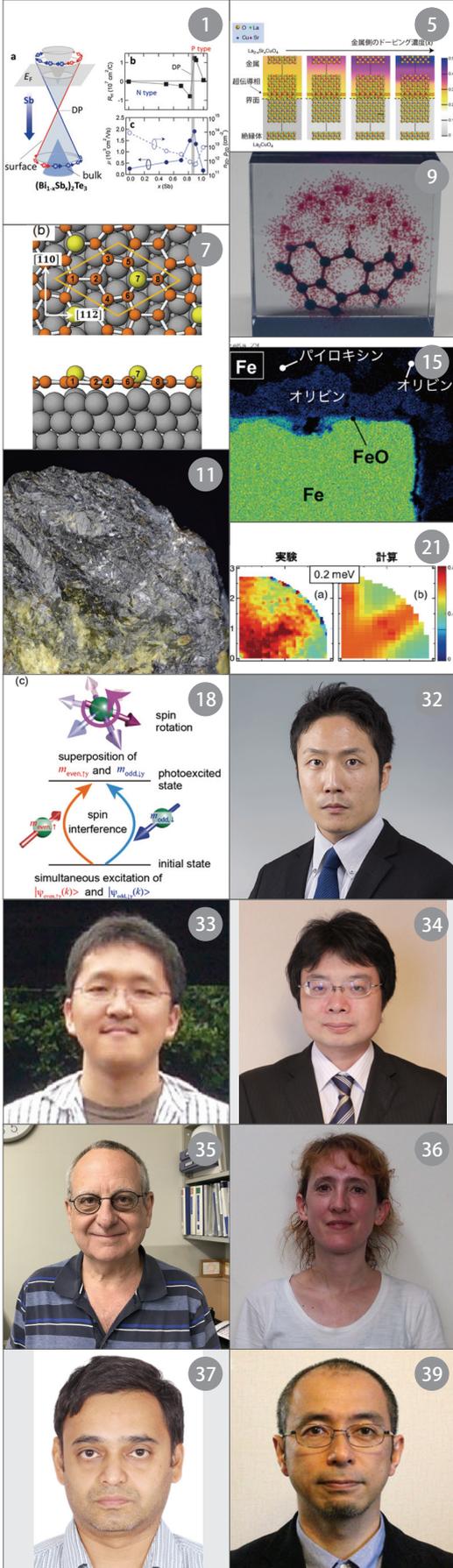
東京大学物性研究所

Copyright ©2017 Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo. All rights Reserved.
ISSN 0385-9843

contents

1	トポロジカル絶縁体表面で高効率スピン流を生成	近藤 浩太、大谷 義近
4	なぜ高温超伝導体は界面で優れた特性を持つか？ —銅酸化物界面で超伝導転移温度が安定に最適化される機構を解明—	三澤 貴宏
7	ゲルマニウム単原子シート「ゲルマネン」の原子配置の非対称化	深谷 有喜、松田 巖
9	3D プリンタで空間に分布する物理量を可視化する技術を開発 ～分子の中の電子密度分布を透明樹脂の中に描写～	山崎 淳、古宇田 光
11	新種の鉱物、Bunnoite(豊石) について	浜根 大輔
14	高温高圧下における鉄の水素化の挙動を中性子でその場観察 —地球形成初期にコアへ取り込まれた軽元素問題への挑戦—	飯塚 理子、八木 健彦、後藤 弘匡
17	電子のスピンを自在に操作 ～先端レーザー技術が拓く光スピン制御～	矢治 光一郎、黒田 健太
20	結晶構造の乱れによる量子スピン液体状態の安定化	酒井 明人、中辻 知
22	国際会議 CEMS-QPEC Symposium on “Emergent Quantum Materials”にて Best Poster Award 及び JPSJ Poster Prize を受賞して	平井 大悟郎
24	文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム平成 28 年度秀でた利用 6 大 成果最優秀賞を受賞して	高橋 竜太、川崎 聖治、リップマー ミック、平井 大悟郎
26	平成 28 年度日本化学会進歩賞を受賞して	上田 顕
28	第 11 回日本物理学会若手奨励賞を受賞して	橋高 俊一郎
30	第 36 回表面科学学術講演会講演奨励賞を受賞して	黒田 健太
32	物性研に着任して	樋口 祐次
33		松永 隆佑
34	物性研を離れて	木俣 基
35	外国人客員所員を経験して	Xenophon Zotos
36		Marie D'angelo
37		Kedar Damle
39	客員所員を経験して	加藤 浩之

	【ISSP ワークショップ】	
41	○Spring-8 BL07LSU が照らした物質機能の起源	
44	○小角・反射率・高分解能研究会 ～JRR-3 の再稼働を見据えて？	
	【研究報告会】	
46	○物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の今と未来」	
	【ISSP ワークショップ】	
49	○5d パイロクロア酸化物研究における最近の展開	
51	【物性研究所談話会】	
53	【物性研究所セミナー】	
	【物性研ニュース】	
67	○人事異動	
	編集後記	



トポロジカル絶縁体表面で高効率スピン流を生成

近藤 浩太、大谷 義近

【背景】

電流とスピン流はスピンホール効果を通じて相互に変換される。この効果は、1971年に M. I. Dyakonov と V. I. Perel によって理論予測されていたが[1]、約 30 年後の 2004 年になって初めて実験的に検証された[2]。その後の約 10 年間で金属薄膜の微細加工技術が著しく発展し、スピンホール効果を利用した磁化反転[3]やマイクロ波発振[4]などの新しい磁化制御手法が次々と実現され、スピンホール効果はスピントロニクス素子に必要不可欠な物理現象のひとつとなった。特に、スピン流から電流が直交方向に生成されるため、電流とスピン流の分離が容易となり、素子構造の簡素化に直結している。さらに、最近ではスピン流を媒介させることで、熱や光から電流を取り出す手法が開拓され環境発電の観点からも注目されている[3, 4]。これらスピンホール効果を利用したスピントロニクス素子では、スピン流と電流間の相互変換効率が素子性能を決定付ける。さらなる低消費電力スピントロニクス素子を実現し、かつデバイスの超薄膜化を目指すためには、これまで以上に高効率な電流-スピン流変換現象の発見が求められている。

ここ数年、スピンホール効果に代わる新たなスピン流生成の原理として、スピン分裂を伴う表面あるいは界面電子状態におけるエデルシュタイン(Edelstein)効果が注目を集めている[5-7]。この効果は、スピンホール効果と同様に電流と垂直方向に偏極したスピン蓄積が生じる現象であるが、その生成原理は全く異なる。トポロジカル絶縁体表面や、ランシュバ効果が存在する界面では、空間反転対称性が破れているためスピン軌道相互作用によって、スピン縮退が解けたバンド構造が形成される。特に、トポロジカル絶縁体表面では、電子スピンにはその進行方向に対して垂直に仮想磁場が作用するため、“スピン運動量ロッキング”という特殊な電子状態が形成される。すなわち一方に流れる電流はすべてその流れの方向に垂直にスピンを向けた電子(スピン偏極電子)を運ぶことになり、理想的にはスピン流の生成効率を 100%近くまで向上させることができると期待される。

【トポロジカル絶縁体表面におけるスピン流生成】

トポロジカル絶縁体の伝導特性は、そのフェルミ準位の位置に強く依存する。図 1(a)に示すように、ディラックコーン(Dirac cone)と呼ばれる二つの円錐形のエネルギー分散の頂点が接するディラック点(Dirac point: DP)よりも高いエネルギーにフェルミ準位があればキャリアが電子の N 型トポロジカル絶縁体になり、低いエネルギー準位にあればキャリアが正孔の P 型トポロジカル絶縁体になる。また、ディラック点からさらに離れた高いエネルギー準位では、バルクの伝導帯、逆に低いエネルギー準位では、バルクの価電子帯の影響を受ける。

トポロジカル絶縁体 $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ (BST)のフェルミ準位 E_F は、Sb 濃度(x)を調整することで、エネルギー分散の形を保ちながら規則的に変化することが知られている。図 1(b)に示すように、Sb 濃度(x)が $0 < x < 0.82$ の BST 薄膜では、10K で測定したホール係数 R_H は負の値を取り、その後、符号が反転し、 $0.88 < x < 1$ では正の値を取る。このように、 E_F は Sb 濃度(x)に依存して N 型から P 型まで規則的に変化し、 $x = 0.84$ 付近でほぼディラック点に一致する。

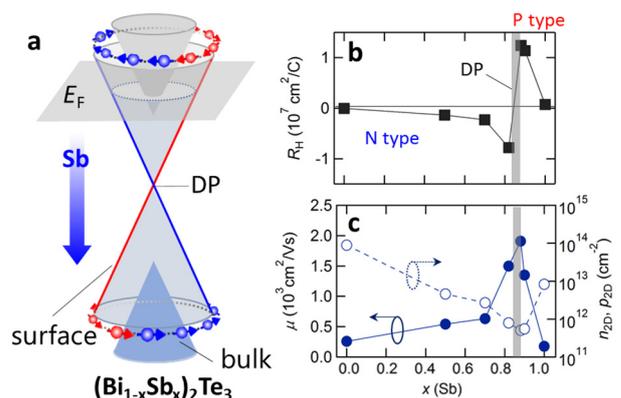


図 1 トポロジカル絶縁体 $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ (BST)薄膜の伝導特性 a, トポロジカル絶縁体 $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ の表面バンドとバルクバンド構造Sb濃度が上昇するほどフェルミ準位は下がる b, ホール係数のSb濃度依存性 c, BST薄膜のキャリア密度(左軸)と移動度(右軸)灰色部分の組成比でフェルミ準位がディラック点近傍にある。

ことが予測される。そこで、界面有効膜厚 t_{int} を 1 nm と仮定した場合のバルク絶縁の変換効率を見積もると、バルク絶縁 BST 薄膜 ($x=0.5, 0.7, 0.9$) において 45~57% となった。この値は、これまで報告されている遷移金属におけるスピンホール効果よりも大きな変換効率である。

最後に、超低消費電力スピントロクスデバイスへの応用という観点から、スピン流伝導度について述べる。スピン流伝導度は(電気伝導度)×(変換効率)で定義され、この値が大きいほど、小さな電流でスピン流生成ができる(=低消費電力)ことを示している。今回測定したバルク絶縁 BST 薄膜 ($x=0.5, 0.7$) では、スピン流伝導度は $18 (\mu\Omega\text{m})^{-1}$ であった。この値はこれまでに遷移金属で報告されているスピン流伝導度 (Pt $34 (\mu\Omega\text{m})^{-1}$, β -Ta $0.8 (\mu\Omega\text{m})^{-1}$, β -W $13 (\mu\Omega\text{m})^{-1}$) [13] と近い値になることがわかった。さらに、遷移金属 (Pt, β -Ta, β -W) では、上記のスピン流伝導度を得るためには、スピン拡散長 (1~2 nm) よりも十分に厚い必要があるため、遷移金属を BST 薄膜の界面膜厚 (~1 nm) と同程度の膜厚にすると、スピン流伝導度は 1/3 程度に減少する。

以上から、トポロジカル絶縁体の表面を用いた電荷-スピン変換現象をスピンホール効果の代わりに用いることで、スピントロクス素子の超薄膜化と低消費電力化を同時に実現する可能性が期待される。

【今後の展開】

本稿ではトポロジカル絶縁体表面状態を用いたスピン流の生成およびスピン流検出に関する実験研究を紹介した。このような特殊な表面状態を用いることで、従来のスピンホール効果と同等以上の効率でスピン流生成やスピン流の電氣的検出が実現できることが理論と実験の両面から解明されてきた。前述したように、それらの変換効率は、フェルミ速度、スピン緩和時間が重要な物理因子となる。特にスピン緩和時間は、スピン分裂した界面に緩和時間の短い金属などを接合した場合には、変換効率が大きく変化することが実験的にも示されている。これらの物理因子は、従来のスピンホール効果の大きさを決定する物理要因とは異なるものであり、これまでスピントロクス分野で注目されてこなかった物質群へ目を向ける良いきっかけを与える。ここでは触れなかったが、界面を用いる大きな利点は、外部電界により界面近傍の電子状態を制御できることである。そのため、今後電場による界面スピン流・電流変換機能の制御に関する研究が一層盛んになることが予想される。

【謝辞】

本研究成果は、理化学研究所(理研)創発物性科学研究センター強相関量子伝導研究チームの吉見龍太郎基礎科学特別研究員、強相関界面研究グループの川崎雅司グループディレクター(東京大学大学院工学研究科教授)、強相関物性研究グループの十倉好紀グループディレクター(東京大学大学院工学研究科教授)、東北大学金属材料研究所の塚崎敦教授らとの共同研究によるものである。

- [1] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, *Sov. Phys. JETP* **13**, 467 (1971).
- [2] Y. K. Kato, *et al.*: *Science* **306**, 1910 (2004). J. Wunderlich, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **94**, 047204 (2005).
- [3] K. Uchida, *et al.*: *Nature* **455**, 778 (2008), *Appl. Phys. Lett.* **97**, 172505 (2010)., H. Adachi, *et al.*: *Phys. Rev. B* **83**, 094410 (2011).
- [4] K. Uchida, *et al.*: *Nature Commun.s* **6**, 5910 (2015).
- [5] V. M. Edelstein, *Solid State Commun.* **73**, 233-235 (1990).
- [6] C. H. Li, *et al.*: *Nature Nanotech.* **9**, 218 (2014).
- [7] A. R. Mellnik, *et al.*: *Nature* **511**, 449 (2014).
- [8] L. Liu, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **106**, 036601 (2011).
- [9] K. Kondou, *et al.*: *Nature Phys.* **12**, 1027-1031 (2016).
- [10] M. Miyamoto, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **109**, 166802 (2012).
- [11] S. Souma, *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **109**, 186804 (2012).
- [12] Y. Zhang, *et al.*: *Nature Physicis* **6**, 584-588 (2010).
- [13] A. Hoffman, *IEEE Transactions on Magnetics* **49**, 5172 (2013).



原因を明らかにすることができれば、界面自由度を利用することで超伝導転移温度を制御できる可能性があることを示しています。発見以来 30 年近くにわたって精力的に研究が行われていて、もう研究されつくされたと思っていた銅酸化物高温超伝導体の界面で発見されたこの現象の驚きの大きさは、この論文のアブストラクトの最後にある次の表現からも伺い知ることができると思います[1]。

"cuprate superconductors have not run out of surprises"

3. 界面での超伝導の自発的最適化機構の解明

我々は、銅酸化物高温超伝導体の界面で発見した転移温度一定の謎を解くために、まずは界面を記述するもっとも基本的な理論模型として積層したハバード模型の解析を行いました[2]。この際に、実験で用いられている銅酸化物を忠実に再現する第一原理的な計算結果を参考にして理論模型を構築しました。通常銅酸化物をシミュレーションするときは周期性を利用して、計算規模を削減することができますが、界面では積層方向に周期性がないために、計算規模が莫大になります。この困難はスーパーコンピュータを用いることで克服し、世界でも類をみない最大規模かつ最高精度のシミュレーションを実行しました。

その結果、固体の場合とは異なり、界面では超伝導の大きさが常に一定に保たれることを見出しました[図 2 (a)]。これは、界面の実験結果と非常によく一致する結果です。さらに、バルク結晶の場合の計算結果[図 2 (b)]と比較することによって、バルク結晶の場合に内在していた相分離への不安定性が、界面という層状構造をとることで解消して、「層間相分離」というメカニズムによって、界面では超伝導が最適になる電子濃度に自動的に保たれ、超伝導の大きさがバルク結晶の場合の最適値になるという、モデルの詳細によらない普遍的な機構があることを発見しました[図 3]。この界面での超伝導の最適化機構解明は、バルク結晶を含めた銅酸化物の超伝導そのものが、相分離やキャリア濃度の不均一性と密接に関わって生じているという、今までバルク物質だけでは難しかった高温超伝導機構の解明にも役立つものです。またバルク固体と異なり、界面では超伝導を最適化するにあたって注意深い制御の必要がないことを意味しており、高特性超伝導を探索する研究の新しい方向性を示しています。

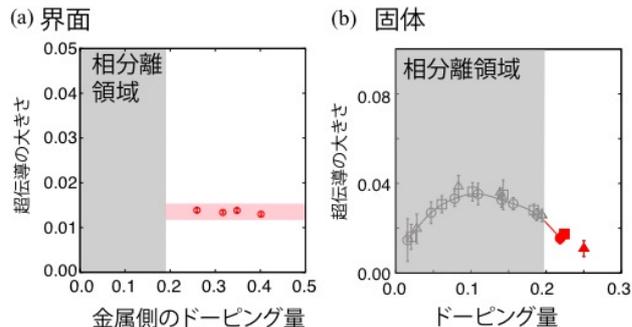


図 2：界面に対する理論模型の解析 I

(a) 銅酸化物高温超伝導体の界面を記述する理論模型を解析して、界面での超伝導の大きさを、金属側のドーピングに対してプロットした図。超伝導の大きさ(超伝導相関の遠距離部分)が、金属側のドーピング量を変化させても一定でほとんど変化していないことがわかります。さらに、この大きさはバルク結晶の場合の最大値に対応している[(b)を参照]、超伝導の大きさが界面で自動的に最適化されていることがわかりました。

(b) 固体(2次元ハバード模型)での超伝導の大きさのドーピング依存性の計算結果。灰色の相分離領域では、超伝導は安定に存在出来なため、相分離領域の端(～0.2)のところで超伝導の大きさが固体の場合の最適値になります。界面では、ほとんどこの最適値の値に自動的に保たれていることがわかりました。

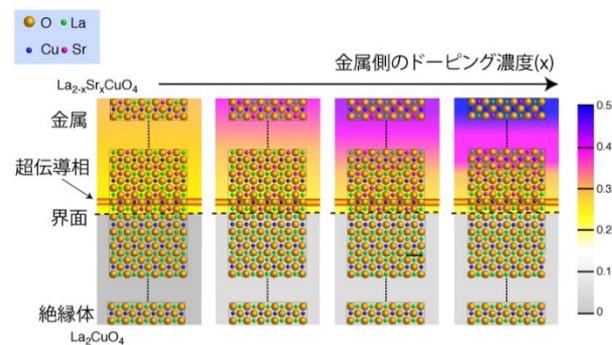


図 3：界面に対する理論模型の解析結果 II

銅酸化物高温超伝導体の界面を記述する理論模型の解析結果の模式図。金属側のドーピング量を変えても(上部の色が金属側のドーピング濃度を表しています)、界面でのドーピング濃度及び、超伝導の大きさが一定に保たれることを明らかにしました。また、超伝導は主に界面での銅の2次元平面で生じていることを明らかにしました。カラー目盛りの数値はおおよそ銅原子あたりのキャリア濃度です。

4. 終わりに

今までの超伝導研究は、転移温度の高い新たな化合物を探索するというバルク物質合成による研究が主流でした。しかし高温超伝導だけが持ち、その機構の本質から生じる特性を生かした制御が、人工構造において可能であることがこの研究でわかりました。シミュレーションの助けを借りて得られる理論的指針のもとに、界面のような人工構造

ゲルマニウム単原子シート「ゲルマネン」の原子配置の非対称化

日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター 深谷 有喜
極限コヒーレント光科学研究センター 松田 巖

最近、グラフェンのハニカム構造の骨格をそのままに、炭素原子を同じ周期表 IV 族のより重い元素で置き換えた新奇原子シートの創製が試みられている。このうち、シリコンとゲルマニウム原子で置き換えられた原子シートは、二重結合の接尾辞を意味する“ene”をつけて、それぞれ“silicene(シリセン)”と“germanene(ゲルマネン)”と呼ばれる。シリセン、ゲルマネンもまたグラフェンと同様に線形のエネルギー分散を持つディラックコーンを有し、極めて高いキャリア移動度を発現することが理論的に予想されている[1,2]。これに加え、重元素由来の強いスピン軌道相互作用と、 sp^3 混成軌道に伴うバックリング配置(座屈構造)の相乗効果により、二次元トポロジカル絶縁体や量子スピンホール効果等の新奇なスピン物性の発現も期待されている[3]。

グラフェンはグラファイト(黒鉛)から剥離したものであり、元来自然界に存在するものである。しかしシリセンやゲルマネンでは、グラフェンにおけるグラファイトのような母材が存在しないため、それらは人工的に合成するほかない。1994 年にはシリセン、ゲルマネンの先駆的理論研究[1]が報告されていたものの、試料合成の困難さからこれらは理論的な研究対象としてみなされていた。しかし、2012 年の Ag(111)表面[4,5]および ZrB₂(0001)薄膜表面上[6]でのシリセンの合成の成功を契機に、自然界には存在しない人工的な原子シートの研究分野が一気に開花した。2014 年にはゲルマネンも合成され[7]、現在では様々な基板表面でのシリセン、ゲルマネンの報告が相次いでいる。

今回研究対象とした Al(111)表面上のゲルマネンは 2015 年に報告された[8]。80°C に保たれた Al(111)表面上に Ge 原子を 1 原子層分蒸着すると、広く均一なゲルマネンが自己組織化する。このゲルマネンは、理想的な Al(111)の単位格子に対して 3×3 の超周期構造をとる。当初、走査型トンネル顕微鏡(STM)と第一原理計算を用いた複合的な解析から、ゲルマネンの単位格子に含まれる 8 個の Ge 原子当たり 2 個が真空側に緩和したバックリング構造を形成すると考えられていた(図 1(a))。この構造モデルでは、 $\langle 110 \rangle$ に対して鏡面対称性をもつことが特徴である。しかし、ゲルマネンの物性を決定する重要な構造パラメータである

バックリングの大きさや基板との間隔などの詳細は不明なままであった。そこで我々は、表面敏感な構造解析手法である全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法を用いて詳細な原子配置の決定を試みた[9]。

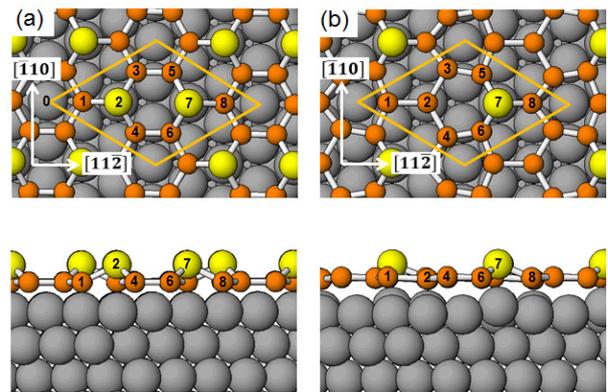


図1 Al(111)基板表面上のゲルマネンの構造モデル ((a): これまでに予想されていたもの、(b): 今回の新たに提唱したもの)。オレンジと黄色の丸はいずれも Ge 原子を表しているが、真空側に突出したものを黄色で強調している。灰色の丸は Al 原子である。

本研究で用いた TRHEPD 法は反射高速電子回折(RHEED)の陽電子版である(図 2)[10]。陽電子は電子の反粒子であり、電子と同じ質量、電荷、スピンを持つが、電荷の符号は電子とは逆のプラスである。したがって、全ての物質の結晶ポテンシャルは陽電子に対して障壁として働くため、陽電子ビームの物質中への侵入深さは電子に比べて低く抑えられる。特に、低視射角入射の場合には全反射が起こり、その時の侵入深さは 1 Å 以下(原子 1 個分)になる。この表面感性が TRHEPD 法が原子シートの構造解析に有用たるゆえんである。

結果として、Al(111)表面上のゲルマネンの構造はそもそも対称的ではなく非対称なものであることがわかった。ロッキング曲線(視射角に対する回折スポット強度)の実験値を図 3 の白丸で示す。先に提案された対称的な構造モデルが正しいとすると、 $[11\bar{2}]$ と $[\bar{1}10]$ の両入射方位で測定した一对のロッキング曲線(例えば、図 3(b)における -1/3 1/3 と 1/3 -1/3 スポット)は同じ形状になるべきであるが、実際の測定ではそうはならなかった。したがってゲルマネン

3D プリンタで空間に分布する物理量を可視化する技術を開発 ～分子の中の電子密度分布を透明樹脂の中に描写～

附属計算物質科学研究センター 山崎 淳、古宇田 光

【背景】

コンピュータとプログラムの発展に伴い、多数の原子からなり複雑な構造を持つ分子構造のシミュレーションが可能となっています。分子構造と分子機能の関係を検討する場合、分子を構成する原子間の結合を担う電子密度分布(電子雲)が重要なカギを握っています。シミュレーションで得られた電子雲のデータはモニタ上では示すことができますが、より電子の役割の理解を深めるためには電子雲を描写した分子模型を製作することが考えられます。すでに、透明なガラスの中にレーザダメージでドットを形成して、基本的な電子軌道に存在する電子雲を描写する技術が開発されていますが、複雑な電子構造の描写はできず、原子や原子間結合を示す構造体を同時に描写することはできませんでした。

【電子雲の可視化】

この課題を解決するため、電子雲のように空間に分散する物理量を、3D プリンタで出力可能なドット形状と密度に変換するプログラムを開発しました。このプログラムにより、インクジェット型の 3D プリンタ[1]を用いて、透明な樹脂中に物理量を描写することが可能となりました。[2]

具体例として、フラレン(C₆₀)の場合を示します。まず、密度汎関数法(DFT)による分子シミュレーション計算により、フラレン分子の電子密度分布を計算します。つぎに、計算結果から得る電子密度等のデータを、分子モデリング・可視化ソフトウェア[3]を用い、3次元グリッド中の物理量を定義するためのフォーマットである cube ファイル[4]に変換します。この cube ファイルを、新たに開発したプログラムで 3D プリンタ出力に必要な STL(Standard Triangulated Language)ファイルに変換しました。この変換した STL ファイルを用い、インクジェット型 3D プリンタでフラレンの分子模型を製作しました。製作に用いた STL データを可視化した図面を図 1 に、3D プリンタで作製した分子模型を図 2 に示します。上半分は電子雲、下半分は、電子雲に炭素原子の球と炭素原子間結合を示す棒(ボールスティックタイプ)の分子模型を重ねて作製しました。本分子模型により、「結合の手の数合わせのために、炭素原子間の特定の結合部分に示されていた 2 重結合は、実際には結合部分に電子密度の差があるわけではない」といった概念を直感的に理解することが可能となります。

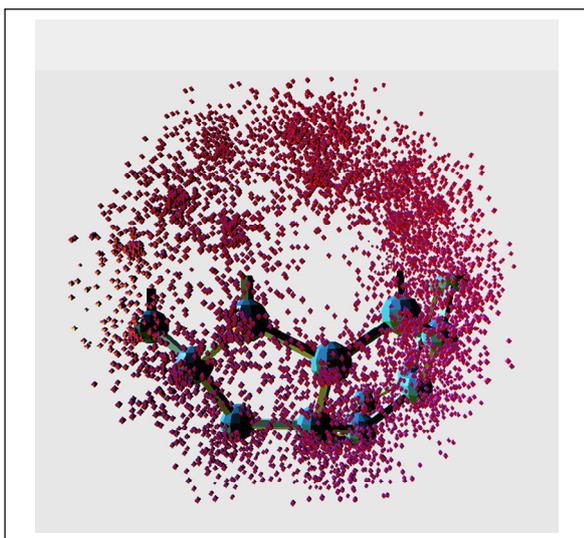


図 1 STL ファイルを可視化ソフトで出力したフラレンの電子雲シミュレーション結果。上半分は電子雲、下半分は電子雲にボールスティックタイプの炭素原子模型を重ねている。



図 2 3D プリンタで透明樹脂中に形成した、フラレン(C₆₀)の電子雲を描写した分子模型(5cm 角)。図 1 のデータを用いて作製した。



【応用】

スーパーコンピュータによる高度な計算により、複雑な結晶構造を持つ磁石や超伝導物質の中の電子雲の状態と特性の関係が明らかになってきています。それらの複雑な結晶構造と電子雲の模型を本技術により 3D プリンタで可視化し、より高い性能を持つ材料開発のアイデア創出に活用しています。また、学会発表や研究会、授業等での説明の補助ツールとして、電子を可視化した本分子模型を用いることで、分子の中の電子の役割の理解を促すことが可能です。また、本技術は、電子密度以外に、温度、電場、磁場、強度等の空間分布、建物や車の周囲の気流、空に浮かぶ雲、宇宙に広がる銀河などを透明樹脂中に描写することも可能であり、今後、CAE(Computer Aided Engineering)を含めた幅広い領域での応用が期待されます。

【謝辞】

本研究は、文部科学省「HPCI 戦略プログラム：分野 2 新物質・エネルギー創成」(H23-27)で取り組んだ、スーパーコンピュータ「京」の計算結果を 3D プリンタで可視化する基本技術を、現在、取り組んでいる文科省「ポスト「京」重点課題「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」(H27-31)と、「元素戦略磁性材料研究拠点：基盤的計算機シミュレーション手法の検討」(H24-33)のプロジェクト間連携で、応用技術に発展させた成果です。また、株式会社クロスアビリティの長代新治様、千田範夫様、古川祐貴様、古賀良太様との共同研究として実施されています。

<参考>

- [1] 今回の試作は StratasysLtd.社製 Objet500Connex3(代理店：丸紅情報システムズ株式会社)で作成。
- [2] 山崎淳、古宇田光、長代新治、千田範夫、古賀良太、月刊化学(2017.3)、39-42.
- [3] 分子モデリング・可視化ソフトウェアは Winmostar™ (株式会社クロスアビリティ製)を利用。
- [4] cube ファイルは量子化学計算ソフト Gaussian(<http://gaussian.com/>)で使われるデータ出力形式。

新種の鉱物、Bunnoite(豊石)について

電子顕微鏡室 浜根 大輔

はじめに

2016年12月1日、「新種の鉱物、Bunnoite(豊石)」のプレスリリースが公開された。新種誕生のニュースは瞬く間に全国に広がり、各新聞社の紙面に掲載されたほか、TVニュースとしても取り上げられた。この新種は鉱物学者：豊遙秋博士の名を元に誕生している。豊博士の栄誉が世間へ伝わり、筆頭著者としてたいへんうれしく思う。そしてこのたびは物性研だよりへの執筆依頼を受けた。学術誌ではないこの場では多少ざっくばらんに書いてもよいだろうか。発見の経緯や命名に関するエピソードにも触れよう。以下に新種の鉱物 Bunnoite(豊石)を紹介したい。

豊石について

高知県吾川郡いの町の北には加茂山という小山がそびえている。そこは二億年以上前には海底の砂や泥であった。それが海洋プレートの運動によって陸側へ押しつけられ、そこからググッと地表に上がってきて今の姿になっている。そうして出来た加茂山には鉄やマンガンを多く含む鉱物が濃集しており、昭和の初め頃には資源として盛んに採掘された。その堀跡は山の至る所に残されており、豊石もそういった場所から見つかった。豊石は濃緑色の葉片状結晶となることが多く、完全な劈開と松脂光沢がその特徴である(図1)。新種という華やかな文言に比してその見た目は地味であることは否めないが、私は「渋い」と評している。

豊石はマンガン・アルミニウム・ケイ素・酸素・水素という地球ではきわめてありふれた元素で構成されながらも、その化学組成と結晶構造は全く新規のものであった。鉱物は化学組成と結晶構造で定義されており、そのどちらか、もしくは両方が新規なら新種(=新鉱物)となる。これまで私に関わった数多くの新鉱物の中で、化学組成も結晶構造も新規だったものは豊石だけである。豊石の研究は私にとって初めての経験であり、また楽しかった。

豊石の理想化学式は $Mn^{2+}_6AlSi_6O_{18}(OH)_3$ と表すことができ、その結晶構造は三斜晶系の対称性を持つ。図2に豊石の結晶構造を示す。豊石の結晶構造は四面体シートと八面体シートの互層構造となっており、四面体シート内では6個の四面体が結合したフラグメントが並び、八面体シ

トは菱共有した八面体の綫状組織とそれをつなぐダイマーからなっている。この結晶構造は豊石が初めてなので、「豊石型構造」と名乗ることができる。その字面はちょっと格好が良い。

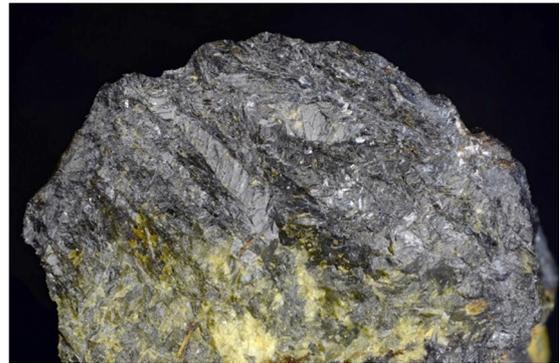


図1. 豊石結晶の拡大写真。全体が豊石の結晶。写真の横幅は約5ミリ。

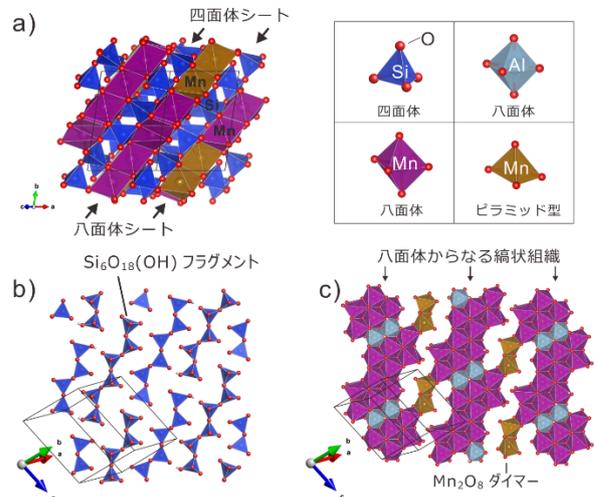


図2. 豊石の結晶構造。四面体と八面体を主としたシートが交互に重なる。八面体シート内ではピラミッド型の多面体がペアになって、八面体で出来ている列をつなぐという結晶構造が特徴的。

名前に関するエピソード

新鉱物は国際鉱物学連合の新鉱物・命名・分類委員会において審査を受け、その承認を得る必要がある。もちろん名前やその理由も審査される。ここでは豊石の名前について、関係するエピソードを交えて紹介したい。

豊石とアカトレ石は見た目が異なるものの、実は両者はデータとしての区別が難しい。どちらも格子サイズが大きめな三者晶系なのでX線回折線の数が多く、天然物であるが故のコンタミもあって決め手に欠く。分析データはどうか。分析データは主に酸化物重量として出てくるのでその比較が大切であるが、豊石とアカトレ石の酸化物重量は顕著な差がない(表1)。ただ豊石の酸化物重量を使ってアカトレ石型の組成式を組むとわずかなズレが生じる。一方でその程度のズレは誤差と考えることも可能で、判断が難しい。装置の調整と分析を何度繰り返しても結果は同じであった。そうなるとそのわずかなズレが決定的な違いのように思えてくる。いつしか高知県産アカトレ石は本来のアカトレ石とは似て非なる別の鉱物であるという確信を抱くようになり、集中して調べるようになっていた。そうして豊石という新鉱物が誕生した。論文は *Mineralogy and Petrology* 誌の2016年12月号に出版された[1]。

表1. 豊石とアカトレ石の理想酸化物重量の比較。

	豊石	アカトレ石
SiO ₂	41.72	37.17
Al ₂ O ₃	5.90	7.88
MnO	49.25	49.37
H ₂ O	3.13	5.57
Total (wt%)	100	100

おわりに

セレンディピティというほどではないが、新鉱物の研究は些細な出来事を契機として唐突に始まることが多い。豊石の場合は写真がきっかけであり、空腹の猫が新鉱物発見の端緒を開いたこともあった。いずれにしても鉱物はそれ自体や名前にもエピソードが満載されている。最近ではインターネットで情報が簡単に手に入るようになった。もしお気に入りの鉱物ができたなら名前の由来だけでも調べてみるとよいだろう。そこにはおもしろい物語が潜んでいるかもしれない。

参考文献

1. D. Nishio-Hamane et al., *Mineral. Petrol.* **110**, 917 (2016).

の量を求めたところ、温度を保持してからおよそ 10 時間後には約 0.79 wt.%の水素が含まれていることが分かった。この重水素量は、町田ら[8]の 6.3 GPa, 988K で求められた重水素量 2.24 wt.%よりも少なく、放射光 X 線を用いて 10 GPa 以上で求められた値と比べても、非常に小さな値となった。その理由としては、今回の実験の温度圧力条件が低いこと、また鉄と水素の単純系ではなく反応に水が関与する多成分系であるために、水素化物の生成速度が遅かったことが考えられる。図 2 に示す回収試料の SEM 観察からは、水分を含む試料系にのみ、鉄中に溶け込んでいた水素が減圧中に発泡して抜けた跡を示す丸い空孔が粒界に沿って見られた。さらに SiO_2 と MgO , Fe が反応してできた鉄に富んだケイ酸塩のオリビン $(\text{Fe}, \text{Mg})_2\text{SiO}_4$ と鉄との間に、酸化鉄 FeO の薄い層が確認された。このことから、 $\text{Mg}(\text{OH})_2$ から吐き出された水と鉄との酸化還元反応により、 FeH_x とともに生成した FeO が鉄の周囲に被膜を形成したために、鉄の水素化が阻害されたと考えられる。

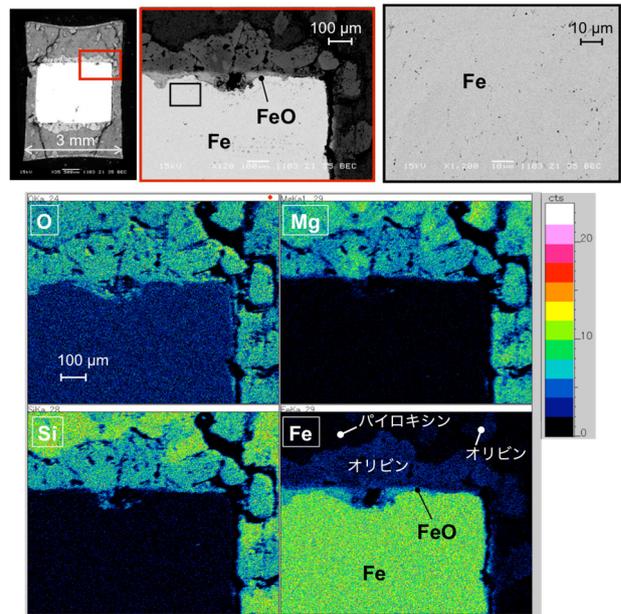


図 2 鉄-ケイ酸塩-水系の高温高压中性子実験で得られた回収試料の電子像 (上図、赤枠および黒枠がそれぞれの拡大図)と (下図)SEM-EDS による元素マッピング分析の結果。鉄中には水素が抜けた後の空孔が見られた。ケイ酸塩部分には、 MgO と SiO_2 が反応してオリビン $(\text{Fe}, \text{Mg})_2\text{SiO}_4$ とパイロキシン MgSiO_3 が生成し、水素を含んだ鉄の周りを酸化鉄 FeO の薄い層が覆っていた。

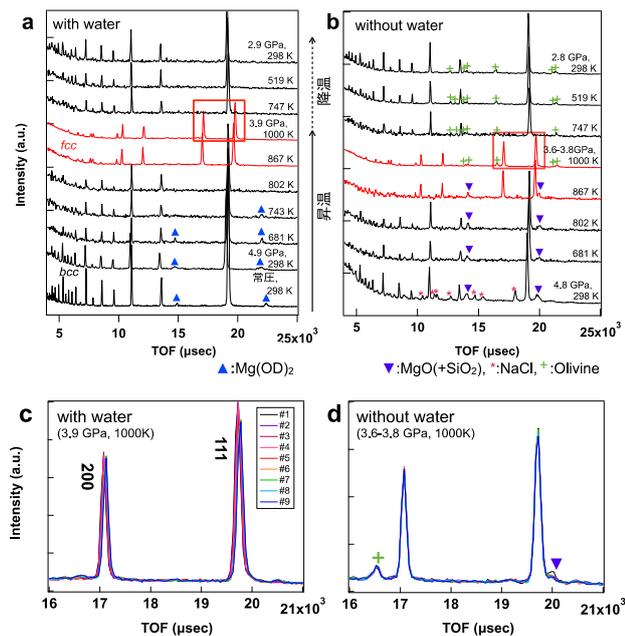


図 1 中性子回折パターンの温度-圧力-時間変化。(a)水を含んだ系と(b)水を含まない系。水を含んだ系では、温度圧力の変化とともに含水鉱物 $\text{Mg}(\text{OH})_2$ の脱水を経て、鉄が *bcc* 相 (黒線) から *fcc* 相 (赤線) へ相転移が起きた。(c),(d) 3.9 GPa-1000 K で 10 時間保持した時の *fcc* 相の 111 と 200 回折ピーク (a)と (b)の図中の太枠で囲った部分)の変化。#1~#9 はそれぞれ約 1 時間毎に得られた回折線。水を含んだ系でのみ徐々にシフトしていき、水素を取り込んだことによる顕著な体積膨張が観察された。

本研究の結果から、高温高压下で含水鉱物の脱水が起きて水が供給されれば、~4 GPa, 1000K という比較的低い温度圧力条件下の固体の鉄にも有意に水素が溶け込むことが明らかになった。このことは、太陽系で地球が形成された時に、始源物質が集積して徐々に温度が上がっていく初期の段階で、水素は他の軽元素に先駆けて鉄へと溶け込み始めていたことを示唆している。これを基に我々は、原始地球が進化する過程で、まず初めに鉄に水素が固溶し、温度が更に上がって熔融した鉄水素化物に他の軽元素が次々と溶け込みながら地球の中心へ沈んでいき、コアを形成したという地球史のコア-マントル分化過程における新たなシナリオを提唱した。

今後の展開

今後の展望として、コア-マントルの分離過程や他の軽元素の溶融鉄への溶解の可能性をより詳しく検証していくためには、純鉄とケイ酸塩の系ばかりではなく、水素化した鉄とケイ酸塩との間での複数の軽元素の分配を調べることも重要となる。さらに、より高い温度圧力領域を調べることも必要である。本研究の結果は、地球コアにおける軽元素の謎について、これからの研究の展開に大きな示唆を与えるものであると捉えている。PLANET を用いた中性

電子のスピンを自在に操作～先端レーザー技術が拓く光スピン制御～

著者：矢治 光一郎、黒田 健太

【はじめに】

電子は、電気的な性質である電荷と磁気的な性質であるスピンという二つの性質を併せ持つ。従来のエレクトロニクス分野では、電子の電荷としての性質のみを利用してきたが、これと併せてスピンも制御できれば、より高速かつ低消費電力でデバイス応用できるのではないかと考えられ活発に研究が行われている。これまでスピンを制御するために磁場、電場、光、熱がよく使われてきた。一方、電子には位相があり、この自由度もスピン制御のために利用できるのではないかと考えられる。

強いスピン軌道相互作用によってスピン偏極した表面状態を持つ物質の代表例として、トポロジカル絶縁体やラッシュバ型スピン分裂をもつ表面が挙げられる。これらの表面電子状態ではスピン方向は電子の運動量によって決まるというのが標準的なモデルである。ところが電子の軌道に着目すると、その対称性によって結合するスピンの向きが異なる「スピン軌道エンタングルメント」という状態にある。本研究では、スピン軌道エンタングルメント状態にある電子バンドからレーザーの偏光を利用してアップスピン電子とダウンスピン電子を同時に光励起して重ね合わせることで、自在にスピンの向きを制御できることを解明した[1,2]。

【実験結果】

試料には、その表面電子状態が強いスピン軌道相互作用によりスピン偏極していることが知られている Bi および Bi₂Se₃ 単結晶を用いた。実験は東京大学物性研究所・極限コヒーレント光科学研究センターにおいて開発されたレーザー光励起によるスピン・角度分解光電子分光 (laser-SARPES) 装置を用いて行われた[3]。図 1(a)の幾何学配置で測定された Bi(111)単結晶薄膜表面の $\bar{\Gamma}\bar{M}$ 鏡映面上におけるスピン分解バンド図を図 1(b,c)に示す[4]。鏡映面垂直方向のみに表面電子状態のスピン偏極が観測され、 $\bar{\Gamma}$ 点に対してスピンの向きは反転している。ところが、*p* 偏光励起と *s* 偏光励起では観測される全てのスピン偏極の向きが反対になっている。光学遷移のパリティ選択則によると、*p* 偏光励起(ベクトルポテンシャルの対称性が偶)では始状

態が鏡映面に対して対称な波動関数 ($|\psi_{\text{sym}}\rangle$) を、*s* 偏光励起(ベクトルポテンシャルの対称性が奇)では始状態が鏡映面に対して非対称な波動関数 ($|\psi_{\text{asym}}\rangle$) を選択的に励起する。したがって、*p* 偏光と *s* 偏光でスピンの向きが反転するという事は、波動関数の対称成分と非対称成分がそれぞれ反対向きのスピンと結合していることを意味している。そして、Bi(111)のスピン縮退が解けた表面電子状態の固有関数は、 $|\psi_{\text{sym},\uparrow}\rangle$ と $|\psi_{\text{asym},\downarrow}\rangle$ あるいは $|\psi_{\text{sym},\downarrow}\rangle$ と $|\psi_{\text{asym},\uparrow}\rangle$ の線形結合で書ける。一般に、スピン軌道相互作用と鏡映

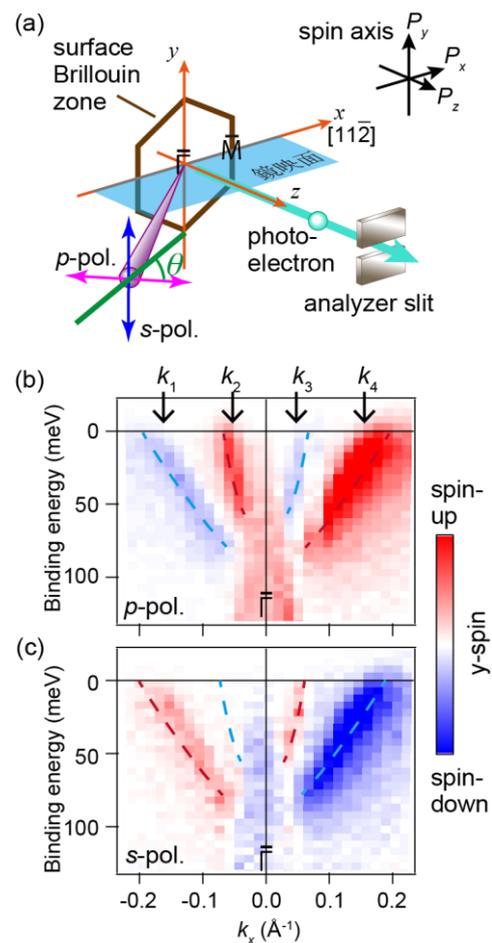


図 1 (a) SARPES 測定の幾何学配置の概略図。(b) *p* 偏光条件および(c) *s* 偏光条件で測定された Bi(111)のラッシュバ分裂表面電子状態のスピン分解バンド図。赤色と青色はお互いに反対向きのスピンをあらわす[4]。点線は表面電子バンドを示したガイド線。

アップスピン電子(スピノル $|\uparrow_y\rangle$ と定義)とダウンスピン電子(スピノル $|\downarrow_y\rangle$ と定義)の重ね合わせは、その複素係数の比の絶対値 u と位相差 α をパラメータとして、 $|\uparrow_y\rangle + ue^{i\alpha}|\downarrow_y\rangle$ とあらわされる。ここで、 y 方向をスピン量子化軸にとっている。この式は、アップスピン状態とダウンスピン状態を重ね合わせることで任意の方向を向いたスピン状態を作り出すことができるということを意味している。したがって、直線偏光の回転角 θ を変化させれば同時励起される $|\psi_{\text{sym},\uparrow}(k)\rangle$ と $|\psi_{\text{asym},\downarrow}(k)\rangle$ の比を変えることができ、 θ に依存して光電子のスピンベクトルの方向が回転する。

【まとめと展望】

本研究では、スピン軌道エンタングルメント状態にある電子バンドからアップスピン電子とダウンスピン電子を同時に光励起すると、それらの干渉により任意の向きのスピンを作り出すことができる“光スピン制御”の基本原理を解明した。今回のデモンストレーションでは、励起光として 7eV の光を利用したため、光励起された電子は光電子として真空中に飛び出してしまっていたが、励起光のエネルギーをもっと低くすれば電子を固体内に留めておくことができる。この場合でも同様の概念が使えると予想している。本研究成果は、光だけでなく電子の位相の自由度も利用したスピン制御の新しい概念として多岐にわたる応用と発展が期待される。

【謝辞】

本研究は、辛埴、小森文夫、原沢あゆみ、豊久宗玄、石田行章、中山充大、近藤猛、小林功佳の各氏との共同研究により行われました。また、真空紫外レーザー光システムの開発では、渡部俊太郎、Chuangtian Chen の各氏にお世話になりました。本研究は JSPS 科研費 26287061、15K17675 の助成を受けて行われました。

【参考文献】

1. K. Kuroda, K. Yaji, M. Nakayama, A. Harasawa, Y. Ishida, S. Watanabe, C.-T. Chen, T. Kondo, F. Komori and S. Shin, Phys. Rev. B **94** (2016) 165162.
2. K. Yaji, K. Kuroda, S. Toyohisa, A. Harasawa, Y. Ishida, S. Watanabe, C. T. Chen, K. Kobayashi, F. Komori and S. Shin, Nat. Commun. **8** (2017) 14588.

3. K. Yaji, A. Harasawa, K. Kuroda, S. Toyohisa, M. Nakayama, Y. Ishida, A. Fukushima, S. Watanabe, C. Chen, F. Komori and S. Shin, Rev. Sci. Instrum. **87** (2016) 053111.
4. 矢治光一郎、黒田健太、小森文夫、辛埴、固体物理 **52**, 559 (2017).



乱れに極めて敏感です。その結果、理想的なパイロクロア構造における Pr^{3+} イオンは磁気的な二重項としての性質を有する一方、構造の乱れがある場合はこの二重項が2つの非磁性一重項状態に分裂すると考えられます。波数に依存しない非弾性中性子散乱の存在は、構造の乱れによる二重項の分裂が生じていることを強く示唆しています。一方、我々の実験とほぼ時期を同じくして、新しい理論が定式化され、この構造の乱れによる二重項の分裂は、 Pr^{3+} に量子揺らぎを促す実効的な横磁場がかかっていることに対応するため、この乱れによる2重項の分裂が量子スピ液体を安定化することが示されました[3]。そこで、古典スピアイス状態をもたらす強磁性相互作用に、乱れに起因する実効的横磁場を加えたスピモデルを用いて実験結果を解析したところ、全ての実験結果を合理的に説明可能であることが分かりました(図 3(b)(d))。このことは、今回用いた試料中に存在する結晶構造の乱れが、量子スピ液体状態を安定化している可能性を強く示唆しています。

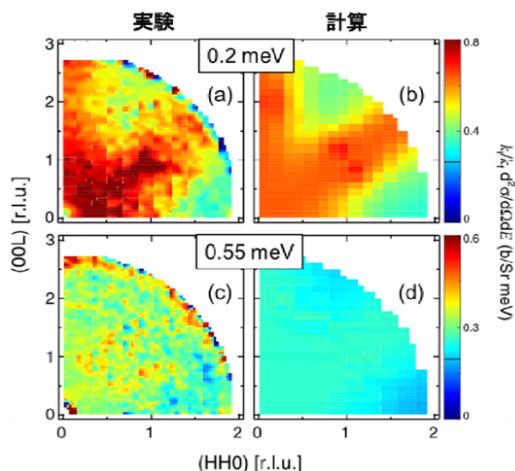


図 3. 絶対零度近傍(50 ミリケルビン)における非弾性中性子散乱強度マップ
 (a)(b)低エネルギー領域(0.2meV)における実験および計算結果。散乱強度は波数に強く依存し、またそのパターンはスピアイス相関を持つ磁性体に特有のものである。(c)(d)高エネルギー領域(0.55meV)における実験および計算結果。散乱強度は波数に依存しない。

今後の展開

今回、スピアイス関連物質 $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ において、結晶構造の乱れにより量子スピ液体状態が安定化している可能性を実験的に見出しました。従来の研究では、構造の乱れはスピンのガラス状態への凍結を引き起こし、量子スピ液体の形成を阻害するものと考えられてきました。この

定説に一石を投じる今回の成果は、量子スピ液体を示す磁性材料の開発に新たな指針を与えるものと期待できます。今回見出した乱れによる量子スピ液体と、純良試料で期待される量子スピ液体の相違点を明らかにすることは、量子スピ液体の全容を解明する上で大変重要です。最近の研究により、Pr と Zr の組成比を制御することによって、パイロクロア構造の乱れを広範囲に制御できることが分かってきました。組成比の精密制御により乱れのより少ない試料を合成し、これを用いた詳細な物性測定を行うことで、量子スピ液体の理解が飛躍的に向上すると考えられます。これにより、将来的には、量子スピ液体のエンタングルメントを利用したスピントロニクス、量子コンピュータの次世代デバイスへの応用などに繋がるものと期待されます。

[1] J.-J. Wen, S. M. Koohpayeh, K. A. Ross, B. A. Trump, T. M. McQueen, K. Kimura, S. Nakatsuji, Y. Qiu, D. M. Pajerowski, J. R. D. Copley, and C. L. Broholm, *Phys. Rev. Lett.* 118, 107206 (2017).
 [2] K. Kimura, S. Nakatsuji, J.-J. Wen, C. Broholm, M. B. Stone, E. Nishibori & H. Sawa, *Nature Communications* 4, 1934 (2013).
 [3] Lucile Savary and Leon Balents *Phys. Rev. Lett.* 118, 087203 (2017).

[関連論文]

“Visible” 5d Orbital States in a Pleochroic Oxychloride”,
Daigorou Hirai, Takeshi Yajima, Daisuke Nishio-
Hamane, Changsu Kim, Hidefumi Akiyama, Mitsuaki
Kawamura, Takahiro Misawa, Nobuyuki Abe, Taka-
hisa Arima, and Zenji Hiroi, *J. Am. Chem. Soc.* 139,
10784 (2017).



受賞の様子と賞状。(左)“Best Poster Award”が東京大学 岩佐義宏教授から、
(右)“JPSJ Poster Prize”が上田和夫 JPSJ 編集委員長から授与された。



参考文献

- [1] A. Fujishima and K. Honda, *Nature*, **238**, 37 (1972).
- [2] A. Kudo and Y. Miseki, *Chem. Soc. Rev.* **38**, 253 (2009).
- [3] リップマーミック、応用物理、75、303 (2003).
- [4] 高橋竜太、松本祐司、セラミック、45、724(2010).
- [5] 高橋竜太、リップマーミック、固体物理、52、105(2017).
- [6] S. Kawasaki, R. Takahashi, T. Yamamoto, M. Kobayashi, H. Kumigashira, J. Yoshinobu, F. Komori, A. Kudo, and M. Lippmaa, *Nat. Commun.* **7**, 11818 (2016).





他の受賞者との集合写真。前列中央が上田氏

受賞対象論文：

- [1] “Hydrogen-Bond-Dynamics-Based Switching of Conductivity and Magnetism: A Phase Transition Caused by Deuterium and Electron Transfer in a Hydrogen-Bonded Purely Organic Conductor Crystal”, A. Ueda, S. Yamada, T. Isono, H. Kamo, A. Nakao, R. Kumai, H. Nakao, Y. Murakami, K. Yamamoto, Y. Nishio, H. Mori, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 12184 (2014). (highlighted in JACS spotlights)
- [2] “Modulation of a Molecular π -Electron System in a Purely Organic Conductor that shows Hydrogen-Bond-Dynamics-Based Switching of Conductivity and Magnetism”, A. Ueda, A. Hatakeyama, M. Enomoto, R. Kumai, Y. Murakami, H. Mori, *Chem. Eur. J.* **21**, 15020 (2015).
- [3] “Unexpected Formation of *ortho*-Benzoquinone-fused Tetraselenafulvalene (TSF): Synthesis, Structures, and Properties of a Novel TSF-based Donor-acceptor Dyad”, A. Ueda, H. Kamo, H. Mori, *Chem. Lett.* **44**, 1538 (2015).

受賞記念論文：

- [4] “Development of Novel Functional Organic Crystals by Utilizing Proton- and π -Electron-Donating/Accepting Abilities”, A. Ueda, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **90**, 1181 (2017).



伝導の発見です。CeCu₂Si₂($T_c = 0.6$ K)は1979年に史上初めて発見された非従来型の超伝導体で、近年までCeCoIn₅や銅酸化物高温超伝導体との類似性から磁気揺らぎを引力としたラインノード d 波超伝導体であると考えられてきました。研究を開始した2012年当時は、ラインノードが $\langle 110 \rangle$ 方向にある $d_{x^2-y^2}$ 型と $\langle 100 \rangle$ 方向の d_{xy} 型に議論は絞られており、ギャップ対称性の問題は最終局面を迎えていました。この問題に決着をつけるために、CeCu₂Si₂の純良単結晶の比熱を40 mKの極低温まで測定し、磁場中で準粒子の励起構造を調べました。その結果、予想外なことに、極低温比熱の温度・磁場・磁場角度依存性はいずれもフルギャップ超伝導体に典型的な振る舞いを示すことを見出しました。一見ラインノード的であった中間温度領域の比熱の温度依存性($C/T \propto T$)は大小2つのギャップを仮定すれば説明可能であることを数値計算から示し、CeCu₂Si₂が予想外の多バンドフルギャップ超伝導体であることを発表しました。本研究成果は最古の重い電子系超伝導体のギャップ対称性に関する従来の定説を覆すものであり、新たな超伝導発現機構の必要性を強く示唆しています。

重い電子系ではフルギャップ超伝導の前例がなかったにもかかわらず、実は元祖の重い電子系超伝導体でフルギャップ超伝導が実現していたという事実は大変な驚きでした。その発見は、小さい方のギャップを検出できる80 mK以下の極低温まで実験を行ったからこそ成し遂げられたもので、極低温実験環境を構築した直後に研究の機会を得られたことが幸運でした。そして何より、最近までCeCu₂Si₂は試料の質が問題となってきましたが、2010年にドイツのGeibel教授のグループにより純良単結晶の育成手法が確立され、その試料を提供して頂けたことが大きかったと思っています。改めて、多くの関係者の方々のご支援に感謝申し上げます。

最後に、物性研究所の助教に着任してから早7年半が経ちました。これまでは研究に集中してきましたが、そろそろ「卒業」も意識する時期となってきました。チャンスは限られる時代ですが、今回の受賞を励みに次の一步を踏み出していきたいと思っています。思う存分研究に打ち込める物性研究所だからこそ、試行錯誤に多くの時間を費やして独自の技術や装置を発展させることができました。最近では共同利用の研究を契機に思いがけない発見もあり、新たな研究テーマの開拓に繋げることもできました。様々なテーマの研究に携わる機会が多いことも物性研究所に在籍する研究者の特権だと思います。今後も物性研究所で培っ

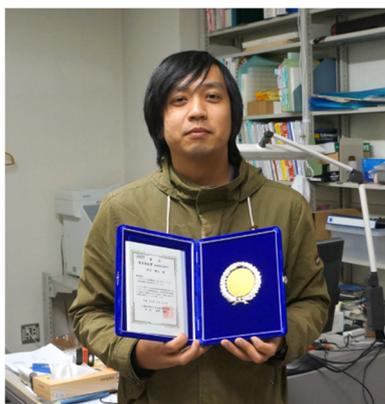
た経験・技術を存分に活かし、独自のアプローチで物性物理学の発展に貢献していきたいと考えています。

受賞対象論文

- [1] "Superconducting gap structure of CeIrIn₅ from field-angle-resolved measurements of its specific heat" S. Kittaka, Y. Aoki, T. Sakakibara, A. Sakai, S. Nakatsuji, Y. Tsutsumi, M. Ichioka, and K. Machida Phys. Rev. B **85**, 060505(R) (2012).
- [2] "Multiband superconductivity with unexpected deficiency of nodal quasiparticles in CeCu₂Si₂" S. Kittaka, Y. Aoki, Y. Shimura, T. Sakakibara, S. Seiro, C. Geibel, F. Steglich, H. Ikeda, and K. Machida Phys. Rev. Lett. **112**, 067002 (2014).
- [3] "Evidence for chiral d -wave superconductivity in URu₂Si₂ from the field-angle variation of its specific heat" S. Kittaka, Y. Shimizu, T. Sakakibara, Y. Haga, E. Yamamoto, Y. Onuki, Y. Tsutsumi, T. Nomoto, H. Ikeda, and K. Machida J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 033704 (2016).



- [1] “Generation of Transient Photocurrents in the Topological Surface State of Sb_2Te_3 by direct optical excitation with midinfrared pulses”, K. Kuroda, J. Reimann, J. Gdde, and U. Hfer, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 076801 (2016).
- [2] “Ultrafast energy- and momentum-resolved surface Dirac photocurrents in the topological insulator Sb_2Te_3 ”, K. Kuroda, J. Reimann, K. A. Kokh, O. E. Tereschenko, A. Kimura, J. Gdde, and U. Hfer, *Phys. Rev. B* **95**, 081103(R) (2017).
- [3] “Momentum space view of the ultrafast dynamics of surface photocurrents on topological insulators”, K. Kuroda, J. Reimann, J. Gdde, and U. Hfer, *Proc. SPIE* **10102**, 101020Q-1 (2017).



物性研に着任して

極限コヒーレント光科学研究センター 松永 隆佑

2017年7月1日付で極限コヒーレント光科学研究センターに准教授として着任いたしました。

思い返せば子供のころ好きだった教科は数学や歴史だったはずで、あと文章を書くのも好きでしたが、物理を含む理科全般はむしろ苦手な方だった記憶しかありません。その私が大学入学後すぐに自分の数学の才能のなさを思い知って、半ば逃げるように進んだのが物理の道でした。しかし大学の物理にはなかなかついていくことができず、「なぜ講義も教科書もこんなにわかりにくい説明ばかりなのか」「こんな難しい事を勉強して一体何になるのか」と思いながら、講義をさぼってサークル活動に没頭し、悶々と過ごしてばかりいました。レーザーになんとなく惹かれて光科学に関わり、大学院にも進学しましたが、当初は博士課程に進むことは全く考えられませんでした。しかし研究に長時間携わるようになって机の上の勉強からいったん離れ、実験室で自分の手を動かして作業していくことで、世界中のまだ誰も知らない自然科学の最先端に触れることができ、その結果を一つの作品のようにまとめあげて人に伝えることの楽しさを知ってからどんどん研究の面白さへのめりこんでいきました。かつて教科書を読んでもなかなか頭に入ってこなかった量子力学や統計力学の難しい概念が、研究者の実際の会話にどう組み込まれ活用されているかに直に触れるたびに少しずつ腑に落ちるようになって、全体の雰囲気や掴めるようになってから物理学への興味が本格化していったように思います。研究のために教科書を手にとって勉強するようになり、一つ一つ理解を進めて今に至りますが、振り返ってみればむしろ勉強するために研究があったのかもしれない。

今でも夜遅くや休日まで研究に時間を費やすとき、ふと「自分のこの研究テーマは本当に価値があるのか」「他の人には面白さがわからないんじゃないか」と思い返す瞬間がたびたびやってきます。頭の片隅には、学問をどこか冷めた目で見ると大学生の頃の自分がまだいるように感じます。この私の「初心」は一見すると疫病神のようにネガティブですが、この批判的な初心が私の研究を監視してくれることが、「専門家だけでなく多くの人に意義や面白さが伝わるような研究がしたい」「もっとわかりやすく表現したい」

という原動力になっている気がしています。初心忘るべからずを胸に、怠惰な学生だった過去の自分に研究の楽しさと物理学の面白さを思い知らせるような仕事をしていきたいと思います。

物理学と研究への興味という点でかなり晩成だった私のやる気を引き出して下さったのは、大学院生の頃に師事した京都大学化学研究所の金光義彦先生でした。金光先生は物性研の故塩谷繁雄先生の下で光物性を学び、学位を取得されました。当時の六本木と今の柏の違いはありますが、かつて師匠の育った物性研で私が新しく研究室を立ち上げ、研究と教育を任される立場になったことは感慨深く思います。私も物性研での研究活動を通して、物理学の基礎と研究の思考プロセスをよく学んだ学生を世に送り出し、次世代の研究者を育てていくことに貢献したいと思っています。いつか光物性の初学者向けの教科書を書くことがひとつの夢です。天才的な先人達が遺した名著の数々には及ばなくても、人一倍苦労して物理を学んだ私だからこそ書ける教科書があるのではないかと考えています。

とはいえ現状は今後のことを考えながら四苦八苦し、研究室の立ち上げで七転八倒しながら、A棟とD棟の間で右往左往する毎日です。この短い期間の間にも色んな方々に支えられながらようやく仕事を進めています。今後ともよろしくお願い致します。



外国人客員所員を経験して

Marie D'angelo
Paris Institute for Nanosciences
University Pierre and Marie Curie / National Center for Scientific Research
4 place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France
dangelo@insp.jussieu.fr

I had the opportunity to stay at the Institute for Solid State Physics as a visiting professor in the group of Professor Iwao Matsuda from May to August 2017.

I first met Professor Iwao Matsuda in Elettra, the Italian synchrotron, sixteen years ago. At that time I was a PhD student in Paris, working on silicon carbide surfaces using Photoelectron Spectroscopy and Scanning Tunneling Microscope. After that, I had several opportunities to meet Prof. Matsuda in Elettra. I really appreciated his way of working: very dynamical, rigorous, efficient and demanding also, but always the beamtimes were quite enjoyable with lot of fun and laughs.

Thus, at the end of my PhD I decided to join Professor Shuji Hasegawa's group in which Professor Matsuda was working then. I spent two years in the University of Tokyo as a postdoctoral researcher and went back to France in 2005 when I got a position as Associate Professor in the Paris Institute of Nanosciences.

Since then, I have been collaborating with Professor Matsuda on different thematics of surface science and we already worked together on perovskite oxides, topological insulators or wide band gap semiconductors.

During my four-month stay at ISSP, I had the opportunity to use the Time-Resolved Photoemission facility of the BL07LSU beamline in SPring-8. This state-of-the-art setup combines ultra-short laser pulse, synchrotron radiation light and time-of-flight analyzer, allowing measurement of carriers dynamics in crystals as fast as the 50 ps range (the pulse- width of the synchrotron

radiation). This time, we performed experiments on cubic silicon carbide 3C-SiC(001) surface and we could evidence an effect of surface reconstructions on the relaxation of the surface photovoltage. This first results of time-resolved photoemission on silicon carbide surfaces encourage us to go further and will lead to new experiments on BL07LSU in the coming years.

I would like to mention here that this study was part of the international collaboration work of Ms. Myriam Lachheb, a French M1 student from Pierre and Marie Curie University who spent three months in ISSP. For the last two years, Professor Matsuda has welcomed and trained three master students from my university. I am really grateful to him and to ISSP to give such unique opportunity to young people to work in a stimulating environment on world top-class experimental setups and in a country that for most of them, they didn't know before.

I believe that with this kind of initiative we are sowing seeds that will bear beautiful fruits in near future.

To end with, I would like to thank all people in ISSP that have made my stay in ISSP -and more generally in Japan- very pleasant, enjoyable and fruitful. I have been welcomed in the best conditions with my family and we will be going back to France with our heads full of precious memories.

My sincerely thanks to ISSP and Professor Iwao Matsuda for this wonderful opportunity.

外国人客員所員を経験して

Kedar Damle

Department of Theoretical Physics

Tata Institute of Fundamental Research

To start with the basics: I spent the last three months at ISSP (today is my last day here), having taken up an invitation to spend some time here as a Visiting Professor. Although the initial invitation from the University of Tokyo was for a year's appointment at ISSP, my colleague at ISSP, Masaki Oshikawa, who had been in touch with me about this possibility, readily agreed to a curtailed three month appointment and set in motion the well-oiled ISSP machinery that works behind the scenes to make such visits possible in practical terms.

After a hectic couple of weeks making arrangements for this unusually long (from my point of view!) absence from my home base, the Tata Institute of Fundamental Research in Mumbai (India), where I serve on the Natural Sciences Faculty, I arrived here looking forward to the possibility of spending time discussing physics with Masaki (whose work I have long admired from afar) and his group, but frankly a bit apprehensive about the thought of living for three months in a culture whose three scripts I cannot read, and language I cannot understand-- the thought of being effectively illiterate for three months weighed heavily somewhere in the subconscious, since I was aware that Japan has a long and proud tradition of carrying on in all spheres of activity using their own language as the primary means of communication and record-keeping.

Japan did not disappoint in this regard, nor did ISSP. Coming from a country that has ended up adopting English as the primary means of communication and dissemination of information at least in university settings, it was quite an education to see a whole new world, where every conceivable book has a Japanese edition (often much much smaller in size than the

corresponding English edition---and this has nothing to do with typeset as far as I can tell---rather, it is perhaps a tribute to the high information density of Kanji), seminars are in Japanese unless the speaker specifically warns the audience by submitting an abstract in English, keyboards, in spite of having only the usual limited number of keys, are used at breathtaking pace to produce a variety of Kanji characters (and perhaps Hiragana and Katakana characters as well?) whose number vastly exceeds the available keys---how this is done remains a mystery to me, although I have shamelessly peered over Masaki's shoulder on multiple occasions in the last three months while he wrote emails predominantly in Kanji script at breakneck speed sitting at the back of some seminar---loudspeakers embedded into the false ceilings of the building helpfully provide a detailed Japanese summary of the day's colloquium an hour or so before it is to begin, and every supermarket trip becomes a game of roulette, with one never quite knowing what's being proclaimed in bright red letters on that attractive looking package of chips!

At this point, the uninitiated reader will perhaps find it hard to imagine how an effectively unlettered person could possibly function over the period of an extended visit at a level that would make such a visit fruitful and productive in professional terms. But for the initiated, who have already experienced the perhaps uniquely Japanese combination of enormous attention to detail (the Japanese are one people who truly have nothing to learn from "The Checklist Manifesto" of Atul Gawande), incredibly warm hospitality, and ingrained helpfulness and unflinching politeness that goes well beyond the ordinary, it will come as no surprise that I look back on three months well-spent, with old projects taking on new



twists, new ones starting from discussions over coffee with Masaki and his group, and the unexpected bonus of having Naoki Kawashima and some of his group willing and interested in helping me explore something I've been wanting to clear up for some time now.

This is hardly the forum to dwell on details of these discussions, or our hopes for bringing to fruition some of what we discussed at ISSP---Time will tell, and the interested can always check on the arXiv in perhaps a year's time from now! Rather, let me close this note by doffing my hat (yes, I did go and buy a hat, since this is a country where hats and caps of all manner are worn at the slightest hint of the sun!) to the people at ISSP, who, for me, have been the personification of the warm hospitality, ingrained helpfulness and unfailing politeness, and the attention to detail which I mentioned earlier: These are the administrators working in the Division of Condensed Matter Theory, the International Liaison Office, the Kashiwa International Office, and the Kashiwa Campus Central Administration.

To all of them I say here:

"Arigatou Gozaimasu".

July 19 2017

客員所員を経験して

大阪大学大学院理学研究科 加藤 浩之

2016 年度後期に松田巖所員のホストで客員准教授としてお世話になりました。また、客員期間中は松田巖所員をはじめ、吉信淳所員、森初果所員、そして各研究室のスタッフの方々と、とても有益な実験と議論をさせていただきました。厚く御礼申し上げます。

客員所員として、「電子-プロトン相関分子膜の創出と機能性の研究」の課題を進めました。電子-プロトン相関分子の研究は、森所員のグループが世界に先駆けて成功させた金属的な導電性を示す分子性結晶に端を発します。分子はカテコール(Cat)とテトラチアフルバレン(TTF)が融合した分子(Cat-TTF)の誘導体であり、結晶は Cat-TTF 誘導体から部分的に脱水素化して得られる層状結晶です。ここで重要なことは、水素結合(\cdots)で結ばれた 2 つの Cat 部位の間で、水酸基が $O-H\cdots O$ の配置を取り、H 原子がプロトン(H^+)として安定位置へシフトすることです。TTF 部位は電子を供与し易く、電子を受けた Cat 部位は H^+ を放出し易くなります。このため、電子-プロトン相関が生じ、結晶中の H^+ 位置に応じた電子状態の変化が生まれ、導電性に大きな変化が現れます。それでは、この興味ある分子の単分子膜を表面上に実現したら、能動的に H^+ 移動を誘起して物性を制御できるのではないだろうか。このような命題を基に、松田所員を中心とする共同研究がスタートし、本研究課題にたどり着くことができました。この共同研究にあたり、吉信所員から所外の私にお声を掛けていただいたことを、とても感謝しております。物性研究所は常に物性研究の中心にありますが、これは、新たな課題へ挑戦する研究グループを柔軟に所内外のメンバーで立ち上げる(本研究のような)取り組みや、それを支援する客員所員の制度が充実していることに裏打ちされているのではないかと思います。

H^+ 移動を起こして導電性を大きく変える分子膜を表面上に構築するために、本研究課題では 2 つの指針を立てました：(i) Cat-TTF 誘導体を H^+ ドナー分子膜とし、 H^+ アクセプターとなる官能基を高密度に表面側に構築、(ii) 大気中でも安定した分子膜。通常、清浄表面に吸着した分子膜は、大気に曝すと基板表面が酸化するなどの影響で、その構造を保つことが出来ません。よって、指針 ii は、注目

する分子を、単に清浄表面に吸着するだけでは実現しません。これに対し、金基板上的アルカンチオレート自己組織化単分子膜(SAM)は大気中や溶液中でも、化学的に安定に存在することが知られています。ですので、 H^+ アクセプターとなる官能基で終端したアルカンチオレート SAM を基板側に構築すれば、指針 i と ii を同時に満足することができると考えられます。 H^+ アクセプターとなる官能基には、いくつかの候補がありますが、 H^+ 移動したときの確認し易さから、まずは、イミダゾールで終端した SAM(Im-SAM)を採用しました。イミダゾールは H^+ を受け取るとイミダゾリウムカチオンとして安定化することが知られています。一方、先述のように Cat-TTF 誘導体は電子供与的な TTF 部位の作用で H^+ ドナーとして働くと考えられます。よって、可能性として、 H^+ ドナーである Cat-TTF 誘導体膜と H^+ アクセプターである Im-SAM とに H^+ の安定サイトがそれぞれ存在し、 H^+ 移動前後の状態を作り分けられると期待されます。

実験でも、森研究室からご提供いただいた Cat-TTF 誘導体を Im-SAM 上に成膜することができて、これを物性研究所の方々と、詳しく分析することが出来ました。分析では、まず吉信研究室の吉本真也所員に、X 線光電子分光による定量解析を行っていただきました。これによって、Im-SAM に吸着した Cat-TTF 誘導体膜が単分子層であることを確定することが出来ました。私の方で行った振動分光の結果と合わせて検討すると、分子膜の設計どおり、Cat 部位の OH 基が強い水素結合で Im-SAM に吸着していることが結論されます。一方、松田研究室の山本達所員には、放射光を用いた X 線吸収分光を行っていただきました。結果として、やはり設計どおり、Im-SAM 中のイミド N 原子が Cat 部位の OH 基と水素結合していることを確認することができました。

次に、「 H^+ 移動を誘起できるか」が焦点となりますけれども、残念ながら今のところ答えはノーです。この検証でも、吉本所員にご尽力いただきました。分子膜への印加電場を走査して得られる導電特性の変化から H^+ 移動の有無を検討しましたが、測定可能な範囲で H^+ 移動の痕跡を確認することは出来ませんでした。問題は、現状の分子膜

が H⁺移動を起こすのに必要な電場に耐えられず、膜構造が変化してしまうことにあると考えています。この解決には、H⁺移動を起こす電場強度を知る必要がありますが、理論計算からそのヒントを得ることができました。2016年度前期に客員所員を勤められた立川仁典教授(横浜市立大)に共同研究に加わっていただき、電界中にある Cat 分子とイミダゾール分子間の H⁺移動について、孤立二量体として高精度の量子計算を行っていただきました。結果は、現在の印加電場の 2~3 倍です。本課題では Cat-TTF 誘導体を用いているので、H⁺移動はもっと低い電界で起きるはずですが、したがって、H⁺移動を誘起するために、分子膜の構造安定性を向上することと、より水素結合が強くて H⁺移動しやすい官能基の分子膜を構築することで対処できるであろうと考えています。この分子膜の構築には、市販試薬では困難ですので、現在、森研究室の上田頭所員に試薬の合成を進めていただいています。本研究課題は、今後も「H⁺移動による物性制御」の実現に向けて、研究を進めていきたいと考えています。

客員所員の期間中は、とても高いレベルの研究を進めることができました。くわえて、プロフェッショナルな方々との研究はとても良い刺激になりましたし、本活動を進める中で物性研究所を中心とする研究者の皆様とより強い研究交流のネットワークを築けたことが、私にとって何よりの恩恵であったと感じております。この度、このような素晴らしい研究機会を与えてくださった関係者の皆様に、改めて御礼を申し上げます。

ISSP ワークショップ

SPring-8 BL07LSU が照らした物質機能の起源

日時：2017年3月8日（水） 10:00~17:30

場所：東京大学物性研究所 6階大講義室

世話人：和達 大樹、辛 埴、小森 文夫、松田 巖、原田 慈久

報告：和達 大樹

東京大学物性研究所軌道放射物性研究施設ではSPring-8に播磨分室を設置し、建設・整備を行った高輝度軟X線ビームラインBL07LSUを利用して放射光利用実験を行っています。本ISSPワークショップでは、時間分解光電子分光、3次元ナノ光電子分光、軟X線発光分光の3つのエンドステーションとフリーポートを利用した共同利用実験からの最新の研究報告に加え、時間分解測定やオペランド測定から生まれる新しい研究分野、あるいは化学反応、生体系の研究への具体的なアプローチなど、「物質機能の解明」を基軸として将来的な方向性を明確に打ち出すことを目指した研究会を行いました。この背景には、最近の物性物理学において物質の基底状態を追う物性研究のみでなく励起状態・非平衡状態などの動的な性質への関心が急速に

高まっていることがあります。最近放射光分光測定においても、励起状態・非平衡状態の時間分解測定や、動作・反応中でのオペランド観測などが盛んとなっており、これらの新しい測定法の開発によって物性物理学の新局面が生まれつつあります。本ワークショップでは、時間分解測定やオペランド測定から生まれる新しい研究分野や、化学反応や生体系の研究への具体的なアプローチへの期待など、将来的な方向性を明確に打ち出せることを目指しました。参加者は70名であり、一日にわたり非常に活発で有意義な議論がなされました。また、ポスターセッションも開催され、優秀な学生発表者2名にポスター賞を授与するなど、次世代の人材育成にも重点を置きました。



Session1 では、広島大の木村氏 (VSX 懇談会会長) と JASRI 常務理事の田中氏の挨拶の後、東京大学連携研究機構放射光分野融合国際卓越拠点の有馬機構長による東大アウトステーションビームラインの概要についての説明がありました。放射光連携研究機構は 2016 年 11 月 30 日をもって発展的に解消し、12 月 1 日より連携研究機構放射光分野融合国際卓越拠点に移行したことなども報告されました。

Session2 ではまず、東大物性研の平田氏による偏光スッチングを利用した磁性研究についての講演がありました。SPring-8 BL07LSU における軟 X 線領域で初めての光学遅延変調法による磁気光学カー効果の測定などが報告されました。次に東大分生研の深井氏による放射光が切りひらく生命機能解明の講演がありました。放射光を用いた構造生物学の進展から、X 線自由電子レーザーを使った構造解析までの展開が示されました。次に、東大工の三村氏による「高精度ミラーを用いた軟 X 線のナノ集光」の特別講演がありました。軟 X 線領域におけるミラーを二段で用いる集光システムの開発などが紹介されました。その後、ポスター発表を行う大学院生によるポスターショートプレゼンテーション 16 件を行い、昼食休憩を挟んでポスターセッションとなりました。BL07LSU を利用した研究と今後の利用を目指した研究など多岐にわたるポスター発表があり、多くの活発な議論が行われました。最後にポスター賞のための投票を行いました。

Session3 では 2 件の長期課題からの講演がありました。東大の尾嶋氏による省エネ・創エネ・蓄電デバイスのオペランドナノ分光の講演では、電池材料に対する電圧印加によるオペランド充放電実験などへの取り組みが示されました。東大物性研の山本氏によるオペランド軟 X 線分光の高度化・協奏が拓く触媒科学の講演では、二酸化炭素の水素化反応や中間水の観測などが紹介されました。その後、東大工の山崎氏により「コヒーレント共鳴軟 X 線散乱による磁気テクスチャの観測」の特別講演がありました。共鳴軟 X 線小角散乱による磁気スキルミオンなどのスピントクスチャの観測、スパースモデリングによる高速ダイナミクス計測などへの展開が示され、コヒーレンスの高い軟 X 線光源の必要性などが強く感じられました。

Session4 では 3 件の一般課題からの講演がありました。東北大の吹留氏による高速光・電子デバイス開発を指向した二次元電子系の時間分解光電子分光の講演では、グラフェンのキャリアダイナミクスの研究が報告されました。東大物性研の宮脇氏による弱強磁性 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ の共鳴非弾性軟 X 線散乱における磁気円二色性の講演では、磁場中で

の測定により $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ の弱強磁性の起源が明らかにされる様子が示されました。奈良先端大の田口氏による顕微高分解能二次元光電子分光による局所構造と電子状態の解析の講演では、機能性物質における活性サイトの構造物性解析の事例が紹介されました。

最後に東大物性研の辛氏による閉会挨拶とポスター賞の授与式も行われ、東大物性研松田研究室博士課程 3 年の久保田雄也氏と、同原田研究室修士課程 2 年の王浩氏がポスター発表賞を受賞しました。本ワークショップは、最先端の研究活動を通じて、次世代の人材育成にも大きく貢献しています。

今年は 70 名という多くの参加者により活発な討論がされ、SPring-8 BL07LSU さらには物質機能に焦点を当てた物性研究に多くの注目が集まっていることが顕著に表れていました。今後、新物質や新規デバイスなどの合成・開発研究とより密接に手を携えながら、BL07LSU などの放射光や次世代の軟 X 線光源を駆使することにより、物質科学の新分野開拓につなげてゆくことの必要性を強く感じさせるワークショップでした。





写真1：ワークショップ風景



写真2：懇親会の一コマ



写真3：集合写真



【プログラム】

4月3日(月)

- 13:00-13:10 Opening
- 13:10-13:35 笠松秀輔 (東京大学) 縞状ドメイン構造を有する強誘電体薄膜キャパシタにおける「負のキャパシタンス」発現の第一原理シミュレーション
- 13:35-14:00 柚木清司 (理化学研究所) 幾何学的フラストレーションがない正方格子スピン 1/2 反強磁性ハイゼンベルグ模型の励起スペクトル: マグノン vs. スピノン
- 14:00-14:25 濱本雄治 (大阪大学) van der Waals 密度汎関数法による有機-固体界面の鏡像状態の研究
- 14:25-14:50 横田泰之 (理化学研究所) 古典 MD 計算と原子間力顕微鏡によるイオン液体/固体界面の構造評価
- 14:50-15:05 break
- 15:05-15:55 大関真之 (東北大学) 【特別講演】 今日から始めるスパースモデリング-計測革命と計算革命-
- 15:55-16:05 吉見一慶 (東京大学) 東京大学物性研究所2016年度ソフトウェア開発・高度化プロジェクトについて
- 16:05-16:30 三澤貴宏 (東京大学) 多変数変分モンテカルロ法のオープンソフトウェア mVMC の開発
- 16:30-18:00 Poster Session
- 18:30-20:30 懇親会

4月4日(火)

- 10:00-10:50 横山大作 (東京大学) 【特別講演】 大規模ゲーム木探索における並列・分散計算の適用
- 10:50-11:05 break
- 11:05-11:30 石塚良介 (大阪大学) MD/DFT 自己無撞着法を用いたイオン液体の有効電荷解析
- 11:30-11:55 優乙石 (理化学研究所) 全原子細胞質モデルと大規模分子動力学計算による細胞内生体分子ダイナミクスの理論的解明
- 11:55-12:20 原田隆平 (筑波大学) 生物学的レアイベントを再現/予測する効率的構造サンプリング手法の開発
- 12:20-13:30 lunch
- 13:30-13:55 吉田恒也 (京都大学) 強相関トポジカル絶縁体・超伝導体の研究
- 13:55-14:20 古賀昌久 (東京工業大学) $SU(N)$ ハバード模型における秩序相の解析
- 14:20-14:45 山門英雄 (和歌山大学) 超球面探索法の結晶構造予測への応用
- 14:45-15:10 森田悟史 (東京大学) テンソルネットワーク法の並列計算ライブラリの開発
- 15:10-15:25 break
- 15:25-15:50 村島隆浩 (東北大学) 複雑流体のための大規模マルチスケールシミュレーションの開発
- 15:50-16:15 徳田直子 (名古屋大学) 3次元ゲノム動力学シミュレーションによる転写活性分布解析
- 16:15-16:40 樋口祐次 (東北大学) 大規模粗視化分子動力学法を用いたポリエチレンにおけるラメラ構造の変形・破壊シミュレーション
- 16:40-16:45 Closing



【ポスター発表リスト】

- P-1 “磁化率の計算によるスピングャップ解析” 坂井徹(兵庫県立大学)
- P-2 “金属ナノクラスターの長寿命化を実現するグラフェン担体材料の開発” 長谷川瞬(北海道大学)
- P-3 “相境界決定のための高効率 2-相シミュレーションの提案” 瀧崎員弘(愛媛大学)
- P-4 “高分子材料の破壊と補強に関する粗視化 MD シミュレーション” 萩田克美(防衛大学校)
- P-5 “Pascal と Knights Landing の性能比較” 中川恒 (ISSP)
- P-6 “高強度フェムト秒レーザー照射二層ベンゼンの剥離ダイナミクスの第一原理計算” 内田一樹(東京理科大学)
- P-7 “解析接続の中間表現による虚時間データの圧縮” 品岡寛(埼玉大学)
- P-8 “テンソルネットワーク法における General Entanglement Branching” 原田健自(京都大学)
- P-9 “分子動力学法を用いた希薄高分子溶液の流れ解析” 浅野優太 (ISSP)
- P-10 “GUI 支援ツール C-Tools による第一原理シミュレーションのユーザビリティ向上について” 吉澤香奈子(高度情報科学技術研究機構)
- P-11 “Bi 酸化物ならびに貴金属のヘテロ構造におけるラシュバ効果の第一原理計算” 山口直也(金沢大学)
- P-12 “ドーナツ状ナノ Fe₃O₄ 薄膜の磁化特性・ドメイン構造の計算” 小畑修二(東京電機大学)
- P-13 “スパースモデリングによる量子モンテカルロデータの解析接続” 大槻純也(東北大学)
- P-14 “ラシュバ・ドレッセルハウス型スピン軌道相互作用が誘起する六重 Q 磁気秩序” 岡田健(東京大学)
- P-15 “スピントロニクス材料および分子性磁性体の原子構造、磁気状態、電子状態の解析” 小田竜樹(金沢大学)
- P-16 “4 体相関を埋め込んだ AGP 波動関数理論” 川崎愛理 (ISSP)
- P-17 “相関電子系への強電場照射による超伝導秩序の増大とその動的安定性” 井戸康太(東京大学)
- P-18 “Selective segregation at grain-boundary structural units in MgO スピン系の厳密対角化パッケージの並列化と高精度化” 井上和俊(東北大学)
- P-19 “ジルコニア表面における欠陥誘起の酸素還元反応活性” 山本良幸 (ISSP)
- P-20 “半導体中ミュオニウムの電子構造計算” 見波将(金沢大学)
- P-21 “Weak phonon-mediated pairing in BiS₂ superconductor from first-principles” 明石遼介(東京大学)
- P-22 “量子格子模型プログラムパッケージ HΦ と数値ライブラリ Kω の応用：スピン液体近傍における熱励起とスピン励起” 山地洋平(東京大学)
- P-23 “長距離相互作用に近似を用いたモンテカルロ法” 五十嵐亮(東京大学)
- P-24 “ナノグラフェンからの二次電子放出の量子動力学機構” 上田純裕(東京理科大学)
- P-25 “希土類永久磁石における化合物磁性：第一原理計算と有限温度モデル計算” 松本宗久 (ISSP)
- P-26 “フラストレート量子スピン鎖の磁気励起とスピン伝導” 大西弘明(日本原子力研究開発機構)
- P-27 “テンソルネットワーク法によるカゴメ格子量子スピンモデルの磁化過程計算” 大久保毅 (ISSP)
- P-28 “実空間密度汎関数法にもとづく Car-Parrinello 分子動力学法の GPGPU 実装” 重田育照(筑波大学)
- P-29 “[n]CPP 分子の光学特性” 野口良史 (ISSP)
- P-30 “CO₂ Dynamics from Formate Decomposition on Cu(111)” 森川良忠(大阪大学)

ISSP ワークショップ

5d パイロクロア酸化物研究における最近の展開

日時：2017年8月2日

場所：物性研究所6階セミナー室（本館A615室）

世話人：岡山大学 小林 達生、物性研 広井 善二

本研究会は、最近活発に研究が行われている一連の 5d パイロクロア酸化物について、その電子物性の理解を深めるために企画された。5d⁵系の Ln₂Ir₂O₇は九工大の松平グループや中辻グループにより all-in/all-out(AIAO)型反強磁性相への金属絶縁体転移を示す系として注目され、時間反転対称性の破れに伴うワイル半金属状態の出現が期待されている。5d³系の Cd₂Os₂O₇は同様の AIAO 磁気秩序と金属絶縁体転移を示し、その転移機構は未だに未解明の問題である。両者の物性は極めてよく似ているため共通の物理があると思われるが、電子フィリングの違いからフェルミ面の詳細は異なっており、謎として残されている。さらにこれらの物質においては、強磁性金属的な AIAO 磁壁の存在が示唆され、興味深い研究対象となっている。一方、5d²系の Cd₂Re₂O₇は 2001 年に超伝導が見つかった以来、活発な研究が行われたが、最近になって新たな理論提案があり大きな注目を集めている。本物質では高温で空間反転対称性を破る構造転移があり、これが「スピン軌道結合金属」特有のフェルミ液体不安定性による遍歴多極子転移で

あるとされ、超伝導には奇パリティ成分が含まれると期待される。さらに高圧下で高温の相転移を抑えたときに多極子パリティ揺らぎが増強され、エキゾチックな超伝導状態が出現すると予想されており。現在、実験および電子状態計算が進行中である。また、5d^{0.5}系の CsW₂O₆においては、電荷不均化と 3 量体分子軌道形成を伴う新しいタイプの金属絶縁体転移が見つかった。以上のように、様々な電子フィリングをもつ 5d パイロクロア酸化物を舞台として、5d 電子特有の多彩な電子物性が明らかになりつつある。

本研究会では、これらの 5d パイロクロア酸化物系およびその他の 5d 電子系物質について集中的な討議が行われ、特にパイロクロア酸化物を舞台とした電子の特異な振舞いについて理解を深めることができた。さらに 5d 電子系における物質開発、物性探索の現状と展望について議論が行われた。参加人数は 40 名程度となり、所外から講演者以外の参加者も多く、非常に有意義な研究会となった。

プログラム

10:00	広井善二		はじめに
10:10	大槻 匠	物性研	パイロクロア型イリジウム酸化物 Pr ₂ Ir ₂ O ₇ の新展開 -バルクから薄膜へ-
10:40	門野 良典	物構研	Cd ₂ Os ₂ O ₇ の All-In-All-Out 基底状態における電荷スピン交差ダイナミクス
11:10	廣瀬 陽代	物材機構	Cd ₂ Os ₂ O ₇ における磁壁の物性
11:30	平井 大悟郎	物性研	5d 系における多極子秩序 -ダブルペロブスカイトの物性-
12:00	昼食		
13:10	岡本 佳比古	名大	型パイロクロア酸化物 CsW ₂ O ₆ の相転移
13:40	天野 春樹・澤 博	名大	放射光単結晶 X 線回折でみたβ型パイロクロア CsW ₂ O ₆ の構造相転移
13:50	田中・瀧川	物性研	単結晶 CsW ₂ O ₆ の ¹³³ Cs-NMR 測定
14:00	求 幸年	物工	電子相関が引き起こすスピン軌道物性



14:30	休憩		
15:00	山浦 淳一	東工大	$\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ の構造と物性 -これまでの理解とこれからの展望-
15:30	松林 康仁	物性研	結晶育成、高圧ラマン散乱、ドハース・ファンアルフェン効果実験
15:50	小林 達生	岡山大	$\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ における高圧下での超伝導状態
16:10	長谷川 巧	広島大	第一原理計算で探る $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ の構造不安定性
16:40	播磨 尚朝	神戸大	フェルミ面について
17:10	議論		



標題：Structural and Dynamical Transition in Functional Materials

日時：2017年6月21日(水) 午後4時～午後5時

場所：柏図書館メディアホール

講師：Dr. Ramaprosad Mukhopadhyay

所属：Bhabha Atomic Research Centre, Mumbai, India

要旨：

Phase transition in condensed matter is an interesting phenomenon from both experimental and theoretical point of view. It can occur either on application of temperature, pressure or field. There exists variety of nomenclature to delineate various kinds of transitional behavior, particularly regarding order of a transition etc. Phase transition has been studied by using macroscopic and microscopic probes. Dynamical transition, viz, order-disorder, sublattice melting, etc. is related to motion of atoms and molecules, leads to many applications. In this context, diffusion or reorientation of a molecular species is of interest in various functional materials. Diffusion is actually a stochastic process. Such a process over a time scale ca 10^{-10} - 10^{-13} sec is conveniently studied using neutron scattering technique. It is particularly suited for studying the dynamics in hydrogenous materials (viz. organic, polymer, soft matter and biological systems etc.) as hydrogen has large scattering cross section. It offers unique possibility of analyzing spatial dimensions of atomic or molecular processes in their development over time. The time-scale of the dynamical motion, its geometry as well as the nature of the hindering potential can be obtained from the neutron scattering data. Molecular dynamics simulation studies are very useful for further insight in the underlying processes as it does not suffer limitations of an experimental setup.

We have studied various systems, for examples, atomic or molecular diffusion (translation and rotation) in crystalline systems, confinement of molecules in nano pores, like clay, zeolites, molecular sieves, metal organic framework etc; polymer based membranes, molecular magnets; nano-metal clusters; micelles and vesicles (a model biological systems) etc. Some of the recent results as obtained from neutron scattering experiments and molecular dynamics (MD) simulation will be discussed.

物性研究所セミナー

標題：理論インフォーマルセミナー：Density of States and Gap of Generic Quantum Hamiltonians

日時：2017年4月12日(水)～

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Dr. Ramis Movassagh

所属：IBM

要旨：

We propose a method, inspired by Free Probability Theory and Random Matrix Theory, that predicts the eigenvalue distribution of quantum many-body systems with generic interactions [1]. At the heart is a “Slider”, which interpolates between two extremes by matching fourth moments. The first extreme treats the non-commuting terms classically and the second treats them ‘free’. By ‘free’ we mean that the eigenvectors are in generic positions. We prove that the interpolation is universal. We then show that free probability theory also captures the density of states of the Anderson model with an arbitrary disorder and with high accuracy [2]. Theory will be illustrated by numerical experiments.

[Joint work with Alan Edelman]

Time permitting we will prove that quantum local Hamiltonians with generic interactions are gapless [3]. In fact, we prove that there is a continuous density of states arbitrary close to the ground state.

The Hamiltonian can be on a lattice in any spatial dimension or on a graph with a bounded maximum vertex degree. We calculate the scaling of the gap with the system’s size in the case that the local terms are distributed according to gaussian β -orthogonal random matrix ensemble.

References:

[1] Phys. Rev. Lett. 107, 097205 (2011)

[2] Phys. Rev. Lett. 109, 036403 (2012)

[3] R. Movassagh “Generic Local Hamiltonians are Gapless”, (2017) arXiv:1606.09313v2 [quant-ph]

標題：セミナー：新学術領域研究 J-Physics トピカルミーティング「局在多極子と伝導電子の相関による新現象」

日時：2017年4月17日(月) 午前9時～2017年4月18日(火) 午後4時

場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632)

要旨：

これまでスピン自由度による量子物性・量子相が精力的に研究されてきたが、最近の研究により電子の持つ多極子自由度が特異な現象の起源となることが理解されて始めている。特に、原子サイトに局在した多極子が伝導電子と混成することにより、新しい金属相、たとえば、異常金属状態や非従来型の重い電子超伝導が誘起され大変注目を集めている。また局在 f 電子の価数の量子臨界ゆらぎが特異な磁気相関を誘起することも明らかになってきた。さらには、この多極子の自由度を単一の原子サイトからマルチサイトのクラスターに拡張することで、反強磁性体で近年発見された巨大異常ホール効果の一般的な理解に役立つこともわかってきた。

本研究会では J-Physics 新学術領域の研究活動が3年目に入るこの節目の時期に、これまでの成果と現状の課題を共有することで今後の研究指針を明らかにし、領域内外の研究協力をより活発にすることを目的にする。



標題：極限コヒーレント光科学セミナー：X-ray spectromicroscopy: A powerful technique for probing nanostructures

日時：2017年4月21日(金) 午後1時30分～

場所：SPring-8 会議室 (TV 会議 物性研究所第一会議室)

講師：Dr. Carla Bittencourt

所属：Universite de Mons

要旨：

Engineering of surfaces and interfaces of nanostructures remains a central goal of modern solid state physics and chemistry, since atomically controlled interfaces play a key role in the performance of nanodevices. Limitations in characterisation and theoretical modelling tools have been a major obstacle to the development of controllable device interfaces. Technology is now entering a period of convergence between theory and characterisation tools, traditional spectroscopic techniques are being combined with microscopy to characterise individual nanoobjects.

In the first part of this talk we will discuss nanoscale spectroscopy using polarized X-rays by NEXAFS-TXM. We present image stacks and polarization-dependent NEXAFS spectra from individual titanate nanoribbons. The full-field transmission X-ray microscope (TXM) installed at the beamline U41 in BESSY II (Berlin Germany) generates high-resolution, large-area NEXAFS data with high collection rate. This new high-resolution NEXAFS-TXM technique opens the way to advanced nanoscale science studies. Novel X-ray optics is also revolutionising the well-established X-ray photoelectron spectroscopy allowing the characterisation of isolated nanostructures such as carbon nanotubes or graphene. In the second part of the talk we will discuss recent results on doping of carbon nanostructures recorded at the beamline ESCAMICROSCOPY at Elettra (Trieste-Italy).

Nanoscale spectroscopy with polarized X-rays by NEXAFS-TXM(2012) *Nature Photonics* 6, 25–29 Nitrogen implantation of suspended graphene flakes: Annealing effects and selectivity of sp² nitrogen species(2014)*Carbon*, 73, pp. 371-381.

Fluorination of suspended graphene(2017)*Nano Research* (just accepted) Nitrogen ion casting on vertically aligned carbon nanotubes: Tip and sidewall chemical modification(2014)*Carbon*, 77, pp. 319-328

標題：理論セミナー：非慣性系のスピントロニクス

日時：2017年4月21日(金) 午後2時～午後3時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：松尾 衛

所属：東北大学材料科学高等研究所

要旨：

近年の微細加工技術の進展に伴い、固体中にナノ構造を作り込むことによりスピン角運動量の流れ「スピン流」の制御が可能となり、スピン流を媒介とする様々な物性研究が精力的に行われるようになった。我々はこれまでにスピン流生成に利用されてこなかった、物体の巨視的な回転運動に伴う力学的角運動量とスピン角運動量との相互変換機構の探求を目指している。

回転運動する物質は非慣性系なので、その物質中のスピン伝導を調べるにはスピントロニクスを非慣性系に拡張する必要がある。本講演では巨視的運動として剛体回転運動[2,3,4,5]、弾性変形運動[6]、流体運動[7]を対象に、力学的角運動量からスピン角運動量への変換機構によってもたらされるスピン制御およびスピン流生成法を理論と実験の両面から紹介する。

[1] S. Maekawa, S. O. Valenzuela, E. Saitoh, and T. Kimura, ed., “Spin Current”, Oxford, 2012.

[2] M. Matsuo et al., *Phys. Rev. Lett.* 106, 076601 (2011).

- [3] H. Chudo et al., Appl. Phys. Expr. 7, 063004 (2014).
- [4] M. Ono et al., Phys. Rev. B92, 174424 (2015).
- [5] Y. Ogata et al., Appl. Phys. Lett. 110, 072409 (2017).
- [6] M. Matsuo et al., Phys. Rev. B87, 180402(R) (2013).
- [7] R. Takahashi et al., Nature Physics 12, 52 (2016).

標題：理論セミナー：Melting of three-sublattice order: How does a KT phase pinch-off?

日時：2017年4月25日(火)～

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Kedar Damle

所属：Tata Institute of Fundamental Research, Mumbai / ISSP

要旨：

On lattices with triangular symmetry, competition between different antiferromagnetic interactions results in a macroscopic degeneracy of low energy configurations for easy-axis magnets. Small perturbations or quantum fluctuations then seed a three-sublattice ordered state which breaks lattice and spin symmetries. The question in the title has to do with the temperature-driven transition from this long-range ordered state to a high temperature paramagnet: In addition to a direct first order transition, which is certainly possible, two other scenarios are possible on general (symmetry) grounds: a two-step melting process, with an intermediate Kosterlitz-Thouless (KT) phase, or a sequence of two second-order transitions. After introducing this physics, I will try and outline a couple of questions (and some partial answers) about the multicritical point(s?) at which the intermediate KT phase pinches-off to give way to either a first-order transition line or two second-order transition lines.

標題：機能物性セミナー：三次元分子解像度の1分子蛍光顕微鏡

日時：2017年4月26日(水) 午後2時～午後3時

場所：物性研究所6階第2会議室

講師：藤芳 暁

所属：東京工業大学大学院 物性物理学専攻

要旨：

人類は400年にわたり多種多様な顕微鏡を發明してきた。しかし、その中に生命現象がおこっている細胞内部の三次元情報を分子レベルで観ることができるものはない。たった一つの生命現象にも、無数の分子が関わっており、その実体を知るには細胞内部で何が起きているのかを正確に観察するが必須がある。そこで、我々はこの十年間、対物レンズの独自開発から研究をはじめ、合計20台のクライオ蛍光顕微鏡を開発してきた[1-5]。ごく最近、極限的な光学性能を持ち、0.05 nmのイメージ安定性を持ったクライオ蛍光顕微鏡の開発に成功した。この顕微鏡により、生体染色色素の三次元位置をオングストロームの精度で1分子観察することに成功した。これは既存法の精度よりも1-2桁高く、分子を見分けられる精度である。セミナーでは、上記の成果に加えて、光活性化酵素の1分子分光[1,3]、再構成したミトコンドリアの1分子分光[4]、タンパク質の赤外1分子観察法の開発[2]などの研究成果についても紹介する予定である。

References

- [1]S. Fujiyoshi, et al., Phys. Rev. Lett. 100, 168101, (2008).
- [2]S. Fujiyoshi, et al., J. Phys. Chem. Lett. 1, 2541, (2010).
- [3]S. Fujiyoshi, et al., Phys. Rev. Lett. 106, 078101, (2011).
- [4]D. Uchiyama, et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 13, 11615, (2011).
- [5]H. Inagawa, et al., Sci Rep 5, 12833, (2015).

標題：極限コヒーレント光科学セミナー：第 51 回：Ultrafast manipulation of magnetic structures probed by x-rays

日時：2017 年 4 月 27 日(木) 午前 9 時 30 分～午前 10 時 30 分

場所：SPring-8 会議室 (TV 会議 物性研究所第一会議室)

講師：Dr. Urs Staub

所属：Swiss Light Source, Paul Scherrer Institut

要旨：

Being able to manipulate magnetic structures in non-trivial ways such as by the application of a magnetic field, is interesting from fundamental point of view as well as from that of applications. Manipulating them on ultrafast time scales is even more exciting and challenging. Here I like to address the ultrafast magnetization dynamics of antiferromagnets, for which a microscopic understanding of the spin dynamics can be obtained by x-ray (resonant) diffraction using ultra-short x-ray pulses, today obtainable on X-ray-Free-Electron-Laser (XFEL) sources, such as the LCLS and SACLA. I will give examples on ultra-fast demagnetization on simple elemental Ho [1], on CuO, [2,3] which are in strong contrast to the results obtained on TbMnO₃. [4] At the end I hope I will show you the potential to obtain ultrafast all optical switching in oxides by switching the magnetic structure and the ferroelectric polarization in a multiferroic. [5]

[1] L. Rettig et al., submitted.

[2] S. L. Johnson et al., Phys. Rev. Lett. 108, 037203 (2012).

[3] U. Staub et al., Phys. Rev. B 89, 220401(R) (2014).

[4] J. Johnson et al., Phys. Rev. B in press (arXiv:1507.06628).

[5] T. Kubaka et al., Science 343, 1333 (2014).

標題：機能物性セミナー：海洋性細菌の持つ微生物型ロドプシンによる光を使ったイオン輸送の多様性とメカニズム

日時：2017 年 4 月 27 日(木) 午前 11 時～午後 0 時

場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師：井上 圭一

所属：名古屋工業大学、JST・さきがけ

要旨：

海洋や湖沼、河川などに棲む多くの細菌や古細菌、または藻類などは微生物型ロドプシンと呼ばれる光受容型の膜タンパク質を持つ。全ての微生物型ロドプシンは発色団として all-trans 型のレチナールをタンパク質内部に結合している。そしてこのレチナールが光を吸収すると 13-cis 型へと異性化する共通の光反応を示し、その際に得られる光のエネルギーを使って、様々なタンパク質機能が発現される。中でも特に幅広い生物種で見られるのが光を使ってプロトン細胞外側へ輸送する外向きプロトンポンプ型ロドプシンであるが、近年我々は海洋性の細菌においてナトリウムイオンを外向きに輸送するものや、内向きにプロトンを輸送するロドプシンがあることを発見した[1,2]。このことは海洋環境中でロドプシンが行うイオン輸送が、これまでに考えられていたものより極めて多様性に富むことを示唆している。またこれらの分子について分光学的および構造生物学的な研究を行うことで、ロドプシンがレチナールの異性化という共通したプロセスからどのように異なったイオンを選択して輸送するかという、そのメカニズムについても明らかにされつつある[2,3]。これらの知見は光で生物の神経伝達などの生理応答を制御するオプトジェネティクス分野で用いられる新規分子ツールの開発にも重要であり、それに向けたロドプシンの機能改変・制御などについても紹介する。

【参考文献】

- [1] Inoue K. et al. Nature Commun. (2013) 4, Article number: 1678.
- [2] Inoue K. et al. Nature Commun. (2016) 7, Article number: 13415.
- [3] Kato H. E. et al. Nature (2015) 521, 48-53.

標題：量子物質セミナー：NaCaNi₂F₇: A kinetically arrested spin liquid

日時：2017年5月16日(火) 午前11時～

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Dr. Kemp Plumb

所属：Department of Physics & Astronomy | Institute for Quantum Matter Johns Hopkins University

要旨：

Spin-liquids are peculiar states of matter in that they do not break any symmetries of the high temperature, magnetically disordered state, but nevertheless represent a distinct phase. The spin-liquid state is defined by the emergence of excitations which carry fractional quantum numbers and can be measured directly using neutron spectroscopy. While the existence of a spin-liquid for Heisenberg spins on the pyrochlore lattice was first speculated by Jacques Villain nearly 40 years ago, there have been no controlled experimental realizations — either classical or quantum — of this model. In real materials, the spin-liquid is more often than not preempted by small perturbations or intrinsic disorder that stabilize a broken symmetry state. In this talk, I will discuss a new material, NaCaNi₂F₇, which realizes the isotropic spin liquid of Villain but with the additional complication of random Na⁺ – Ca²⁺ charge disorder in the crystal structure. We use neutron scattering and calorimetric measurements to uncover the magnetic correlations in this material and fully determine the magnetic Hamiltonian. The ionic disorder creates a rugged energy landscape that acts to freeze a small fraction of the magnetic degrees of freedom in time. However, the energy scale set by this disorder is small, and the Heisenberg interactions prevail. In fact, only 40% of the available moment is frozen, and the magnetism in NaCaNi₂F₇ is dominated by a persistently fluctuating component. These measurements provide the first experimental confirmation of Villain’s prediction and a new insight into the interplay between disorder and magnetic exchange interactions in highly frustrated magnets.

標題：理論インフォーマルセミナー：Manybody topological invariants for fermionic topological phases

日時：2017年5月16日(火) 午後3時～午後4時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Ken Shiozaki

所属：RIKEN

要旨：

I present a way to define the manybody topological invariant (“order parameter”) for some classes of fermionic topological phases protected by point group symmetries. We introduced the “partial point group transformation”, which is defined by the point group transformation on a subregion that is closed under the point group transformation. The topological invariant appears as the complex U(1) phase of the ground state expectation value of the partial point group transformation. Since such a topological invariant is made only from the ground state and the symmetry operator, it is applicable to systems with interaction and disorder. I explain why such the quantity gives the topological invariant from the viewpoints of (i) the topological quantum field theory and (ii) the surface gapless theory. I also show the numerical calculations of our topological invariants for some simple free fermionic ground states.



Refs:

Hassan Shapourian, KS, Shinsei Ryu, arXiv:1607.03896

KS, Hassan Shapourian, Shinsei Ryu, arXiv:1609.05970

標題：セミナー：つくばソフトマター研究会 2017

日時：2017年5月16日(火) 午前10時～2017年5月17日(水) 午後3時50分

場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632)

講師：三宅 隆

所属：産業技術総合研究所、物質・材料研究機構

要旨：

物理・化学・生物・工学と分野の垣根を越えてソフトマターの研究に関して議論することを目的とし、つくばエクスプレス沿線の大学、研究所を中心として開催する。

関係 URL : <http://noguchi.issp.u-tokyo.ac.jp/ts2017/>

標題：ナノサイエンスセミナー：Image states and energy dissipation on Bi₂Te₃ surface

日時：2017年5月23日(火) 午後1時30分～

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Ms. Dilek Yildiz

所属：バーゼル大学(スイス)

要旨：

Topological insulators (TIs), belonging into the family of intercalated compounds, have a bandgap in the bulk that makes the crystal insulator, whereas their surfaces (or edges) are conducting. While protected topological states might offer promising playground to observe exotic physical phenomena like Majorana fermion bounded state [1] or magnetic monopoles [2], the effect of friction on topologically protected surface is yet to be reported.

Here we study energy dissipation onto Bi₂Te₃ surface by means of pendulum geometry oscillating cantilever of combined AFM/STM [3]. While STM shows well understood image potential states, AFM reports on huge dissipation peaks occur due to charging/discharging of those states by the oscillating tip. Huge dissipation peaks occur few nm above the surface and are localized at relatively large voltages as expected for image states. Moreover the energy dissipation depends on the local defect density. In order to understand the frictional response of Bi₂Te₃ in TI phase as well as its frictional response when the TI phase is partially or fully suppressed, we probe surfaces with different defect density and under external magnetic field. The results show extremely strong dependence of dissipation on external magnetic field since the peaks are shifted to lower energies as the magnetic field increases.

[1] R. Pawlak, et al., Probing atomic structure and majorana wavefunctions in mono-atomic Fe-chains on superconducting Pb-surface, npj Quantum Info 2, 16035 (2016)

[2] M. Z. Hasan and C. L. Kane, Topological insulators, Rev. Mod. Phys. 82, 3045 (2010).

[3] M. Kisiel, et al., Suppression of electronic friction on Nb films in the superconducting state, Nature Materials 10, 119 (2011).

標題：量子物質・ナノスケールセミナー：第6回：スピン依存トンネル伝導に関わるナノスピントロニクス素子の進展

日時：2017年5月25日(木) 午前11時～午後0時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：介川 裕章

所属：国立研究開発法人 物質・材料研究機構磁性・スピントロニクス材料研究拠点

要旨：

巨大磁気抵抗素子(GMR 素子)やトンネル磁気抵抗素子(TMR 素子)はスピントロニクス技術を用いた代表的な素子として知られ、これまで高密度な磁気記録の実現(ハードディスク)や不揮発磁気メモリなどへの応用に重要な役割を果たしてきた。これらの磁気抵抗素子は強磁性体間の相対磁化方向の制御のみで電気抵抗を変化させることができ、動作に原子移動や化学反応などを伴わないことから、高速動作と無限回の状態書換えが可能という特長を有する。これらの素子において良好な磁気抵抗効果を得るためには、スピン偏極した伝導電子を非磁性体層を介して隣の強磁性体へ効率的に輸送することが要求される。特に、TMR 素子では非磁性体に絶縁体(トンネルバリア)を用いるため、トンネル電流の制御のため原子面厚さスケールでの構造最適化を必須とする。そのため薄膜成長技術とナノスケール微細加工技術の向上に加え、新材料の導入が特性の向上に極めて大きな役割を果たしてきた。例えば TMR 素子では、トンネルバリア材料の発見が大きな飛躍につながっており、アルミナ(1995年頃)、MgO(2001～2004年頃)が発見され、実用上の大きなブレイクスルーとなった。また、これらの技術向上に付随して新しい現象、例えばスピン移行トルクによる磁化状態制御や強磁性層/トンネルバリア界面に誘起する垂直磁気異方性など、興味深い現象が明らかになっている。これらの新現象は基礎的な興味にとどまらず、素子応用を目指した実用研究も近年盛んに行われている。

本セミナーでは TMR 素子を中心に、スピン依存伝導に関わる磁気抵抗素子の歴史的経緯から最新の動向までを、特に材料の観点から概括したい。また著者らがこれまでに関わってきたスピネル(MgAl₂O₄)系トンネルバリア[1]や高スピントロニクス材料と知られる Co 基ホイスラー合金の利用[2]などについて紹介したい。

[1] H. Sukegawa et al., Appl. Phys. Lett. 96, 212505 (2010); H. Sukegawa et al., Phys. Rev. B 86, 184401 (2012); M. Belmoubarik et al., Appl. Phys. Lett. 108, 132404 (2016); H. Sukegawa et al., Appl. Phys. Lett. 110, 122404 (2017).

[2] R. Shan et al., Phys. Rev. Lett. 102, 246601 (2009); W. Wang et al., Phys. Rev. B 81, 140402(R) (2010); Z. Wen et al., Adv. Mater. 26, 6483 (2014); T. Scheike et al., Appl. Phys. Express 9, 053004 (2016); H. Sukegawa, Appl. Phys. Lett. 110, 112403 (2017).

標題：機能物性セミナー：人工生体膜チップが実現する膜輸送体の1分子生物物理研究

日時：2017年5月25日(木) 午前11時～

場所：物性研究所本館6階 第4セミナー室 (A614)

講師：渡邊 力也

所属：東京大学 大学院工学研究科

要旨：

生体膜には分子を輸送する膜タンパク質“膜輸送体”が存在し、人間を含む多細胞生物が生存するうえで必要とされる“恒常的な細胞内外の環境”を維持している。近年、その生理的重要性から膜輸送体に関連する疾患が多数報告されており、各々が持つ機能だけでなく物性や作動機序を同時に解明することが学術・産業の両面において急務とされている。この背景をうけ、昨今では膜輸送体の作動機序に関する研究が盛んに行われているが、輸送機能を高感度に解析することは困難であり、依然として不明な点が多い。この膜輸送体研究における問題を解決するため、近年、細胞膜を模倣した“人工生体膜チップ”が世界中で盛んに開発され、また、それらを基盤とした膜輸送体のための1分子機能解析システムが確立しつつある[1,2,3]。本セミナーでは、最新の人工生体膜チップの開発状況を紹介するとともに、膜タンパク質の作動機序に関する1分子生物物理研究、および、それらに立脚した創薬などの応用研究における将来展望を提示したいと考えている[4,5]。



参考文献

- 1, Watanabe et al., *Nature Communications* (2014b) 5, 4519.
- 2, Watanabe et al., *Nature Communications* (2013) 4, 1631.
- 3, Watanabe et al., *IEEE Transactions on Nanotechnology* (2016) 15, 70-73.
- 4, Watanabe et al., *Scientific Reports* (2014) 4, 7076.
- 5, Watanabe et al., *Lab on a Chip* (2016) 16, 3043-3048.

標題：理論セミナー：Absolute binding energies of core levels in solids from first principles

日時：2017年5月30日(火) 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：

The X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) is one of the most important and widely used techniques in studying chemical composition and electronic states in the vicinity of surfaces of materials. In spite of the long history of XPS and its importance in materials science, a general method has not been developed so far to calculate absolute binding energies for both insulators and metals, including multiple splittings due to chemical shift, spin-orbit coupling, and exchange interaction, on equal footing.

Here, we propose a general method to calculate absolute binding energies of core levels in metals and insulators, based on a penalty functional and an exact Coulomb cutoff method in a framework of the density functional theory [1]. It is demonstrated that the absolute binding energies of core levels for both metals and insulators are calculated by the proposed method in a mean absolute (relative) error of 0.4 eV (0.16 %) for eight cases compared to experimental values measured with XPS within a generalized gradient approximation to the exchange-correlation functional. Recent applications of the method including silicene [2], borophene, and platinum atoms will also be discussed in comparison with experimental data together with analysis of the initial and final state effects based on an energy decomposition method.

[1] T. Ozaki and C.-C. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 026401 (2017).

[2] C.-C. Lee, J. Yoshinobu, K. Mukai, S. Yoshimoto, H. Ueda, R. Friedlein, A. Fleurence, Y. Yamada-Takamura, and T. Ozaki, *Phys. Rev. B* **95**, 115437 (2017).

標題：理論インフォーマルセミナー：Anisotropic Magnetic Interactions and Spin Dynamics in CPB – An Experimental and Theoretical Study

日時：2017年6月5日(月) 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：Frank Göhmann

所属：Bergische Universität Wuppertal

要旨：

The absorbed intensity of microwaves penetrating a quasi 1d spin chain compound, as measured e.g. in ESR experiments, is determined by the imaginary part of the dynamical susceptibility of the compound. The latter is hard to calculate over the full range of experimentally available values of temperature and magnetic field, even in for the

標題：国際強磁場科学セミナー：2017 年度第 2 回：Biosensing Applications of Digital Photocorrosion in GaAs/AlGaAs Nano-Heterostructures

日時：2017 年 6 月 14 日(水) 午後 4 時～

場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師：Prof. Jan J. Dubowski

所属：Interdisciplinary Institute for Technological Innovation (3IT), Université de Sherbrooke

要旨：

Etching of semiconducting materials at rates approaching atomic level resolution is of high interest to the advancement of technologies addressing fabrication of low-dimensional devices, tunability of their optoelectronic properties and precise control of device surface structure. The so-called digital etching that takes advantage of a self-limiting reaction has the potential to address some of these challenges. However, conventional applications of this approach proposed almost 30 years ago, require specialized and expensive equipment, which contributed to a relatively slow progress in penetration of digital etching to micro/nanofabrication processing schemes. We have observed that for photoluminescence (PL) emitting materials with negligible dark corrosion, it is possible to carry out PLmonitored photocorrosion in cycles analogous to those employed in digital etching. The advantage of this approach is that photocorrosion of materials, such as GaAs/AlGaAs heterostructures, could be carried in a water environment. This digital photocorrosion (DIP) process could be carried out in cycles, each approaching sub-monolayer precision. I will discuss fundamentals of DIP and, in particular, mechanisms responsible for achieving high-resolution etch rates of semiconducting materials. For instance, we have demonstrated a successful dissolution of a 1-nm thick layer of GaAs embedded between $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ barriers in a 28% $\text{NH}_4\text{OH}:\text{H}_2\text{O}$, and we claimed that under optimized conditions a further enhanced resolution is feasible. The nm-scale depth resolution achieved with DIP and lowcost of the instrumentation required by this process is of a potential interest to specialized diagnostics, structural analysis of multilayer nanostructures and, e.g., revealing in situ selected interfaces required for the fabrication of advanced nano-architectures. We have explored the sensitivity of DIP to perturbations induced by electrically charged molecules, such as bacteria, immobilized on semiconductor surfaces. Here, I will highlight our recent studies on detection of *Escherichia coli* and *Legionella pneumophila* bacteria immobilized on antibody functionalized GaAs/AlGaAs biochips. I will also discuss the application of this approach for studying antibiotic reactions of bacteria growing on biofunctionalized surfaces of GaAs/AlGaAs biochips.

標題：量子物質・ナノスケールセミナー：第 7 回：規則合金をベースとしたスピントロニクス材料研究の現状と課題

日時：2017 年 6 月 16 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：関 剛斎

所属：東北大学金属材料研究所 磁性材料学研究部門

要旨：

異種原子が秩序をもって空間配列した規則合金は、無秩序な配列の不規則合金には無い優れた機能性を発現するため、スピントロニクスデバイスの高性能化や多機能化に資するキーマテリアルとなる。本セミナーでは、高い一軸磁気異方性(Ku)を示す規則合金を中心とし、ナノサイズでの磁化ダイナミクスや材料開発に関する話題を提供する。まず、代表的な高 Ku 材料である L10 型 FePt 規則合金について、Ni-Fe 合金(パーマロイ)と交換結合させたナノディスクにおける「磁気渦運動によって誘起される磁化反転」[1]を説明する。そして、新規材料開発の観点から「原子層レベルで積層制御された高 Ku 材料の創製」[2]について紹介する。規則合金スピントロニクスが抱える今後の課題についても議論したい。

[1] W. Zhou, T. Seki et al., Phys. Rev. B 94, 220401(R)-1-5 (2016).

[2] T. Seki et al. (submitted).



a “large” Fermi surface (FS). The physical meaning of this concept is explained in terms of Luttinger’s counting principle [3].

The PAM englobes other scenarios, beyond the Kondo Lattice, such as charge transfer and mixed valent regimes. An overview of possible spectra is presented, as calculated with our code [4]. The PAM predicts damped van Hove singularities in the quasiparticle density of states. One of the new challenges is to demonstrate their presence in the PES data.

A detailed discussion of ARPES and PES results on YbRh₂Si₂ [5] and YbNiSn [6] uses an “asymmetric KL” scenario. We conclude that Doniach’s KL model, based on a single Kramers doublet per RE ion, is not applicable. The excited 4f levels under the crystalline electric field exert a strong influence in stabilising the large FS at temperatures well beyond the Kondo temperature of a Kramers doublet.

[1] R. Hayn, P. Lombardo, and K. Matho, Phys. Rev. B **74**, 205124 (2006).

[2] A. Benlagra, T. Pruschke and M. Vojta, Phys. Rev. B **84**, 195141 (2011).

[3] R. M. Martin, Phys. Rev. Lett. **48**, 362 (1982); J. Appl. Phys. **53**, 2134 (1982).

[4] A. Chikina, PhD Thesis, Dresden (2016) and t.b.p.

[5] K. Kummer et al., Phys. Rev. X **5**, 011028 (2015).

[6] A. Generalov et al., Phys. Rev. B (accepted May 2017).

標題：量子物質セミナー：四極子秩序と d 波超伝導

日時：2017 年 6 月 28 日(水) 午後 4 時～

場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師：服部 一匡

所属：首都大学東京理工学研究科物理学専攻

要旨：

強相関電子系における軌道自由度は d、f 電子系において 90 年代から活発に研究が行われており、様々な新奇物質の発見や新しい現象の提案が行われている。本講演では最近四極子近藤格子系として注目を集めている Pr1-2-20 系の四極子秩序を念頭に、これまでに行った理論研究とモンテカルロ法を用いた有効古典模型に対する解析を紹介する[1]。また最近の研究として、多軌道系における反強磁性フント結合や異常に大きな軌道間相互作用が、局所的な高エネルギー状態の積分から自然に導出されることを議論する。

具体例として、Pr1-2-20 系物質に関連した立方晶の 2 軌道ハバード模型について、乱雑位相近似を用いて解析を行った。四極子や八極子の秩序の他に、種々の超伝導が発現するが、その対称性が 2 体の結晶場準位と強い相関を持っていることを見出した[2]。講演では、四極子の秩序を扱うときの注意点についても丁寧に議論する予定である。

[1] KH and H. Tsunetsugu, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 034709 (2014), **85**,094001 (2016).

[2] KH, T. Nomoto, T. Hotta, and H. Ikeda, unpublished.

人事異動

【研究部門等】

○平成 29 年 5 月 1 日付け

(採用)

氏名	所属	職名	備考
酒井 明人	量子物質研究グループ	助教	物性研究所 量子物質研究グループ 特任助教から

○平成 29 年 6 月 1 日付け

(採用)

氏名	所属	職名	備考
尾崎 泰助	附属物質設計評価施設	教授	物性研究所 附属計算物質科学研究センター 特任教授から

○平成 29 年 7 月 1 日付け

(採用)

氏名	所属	職名	備考
小濱 芳允	附属国際超強磁場科学研究施設	准教授	物性研究所 附属国際超強磁場科学研究施設 特任助教から
松永 隆祐	附属極限コヒーレント光科学研究センター	准教授	東京大学大学院理学系研究科 助教から

○平成 29 年 8 月 1 日付け

(所属変更)

氏名	所属	職名	備考
三田村 裕幸	附属国際超強磁場科学研究施設	助教	物性研究所 凝縮系物性研究部門 助教から

【事務部】

○平成 29 年 7 月 1 日付け

(転出)

氏名	所属	職名	備考
岩村 ときわ	物性研究所	副事務長	本部監査課監査支援室 副課長へ

(転入)

氏名	所属	職名	備考
大島 潤二	物性研究所	専門職員	独立行政法人日本学術振興会 サンフランシスコ研究連絡センター 副センター長 (本部国際企画課係長) から

編集後記

「まずは本号の発行が遅れてしまいましたことお詫び申し上げます。その間、「物性研だより」の最新号を期待する読者の声をたくさん頂戴することができました。大変ありがたく思っております。物性研からはたくさんの成果が生まれており、今年度も予定通り4号発行致します。今後、通常の定期発行に戻りますので引き続き御愛読の程よろしく願い申し上げます。

さて、本号でも先端研究を分かりやすく解説する記事がたくさんありますが、試料の電子顕微鏡観察で普段お世話になっている浜根氏の記事では研究現場の舞台裏も紹介されています。偉大な成果を歴史に残す際に潜む意外な(?)障壁を、読者は知ることになるでしょう。」

松 田 巖

