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発明してきた。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こっ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 二光合成系の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を細 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: <u>http://noguchi.issp.u-tokyo.ac.jp/ts2017/</u>

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.

- 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が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、スピン依存伝導が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]や高スピン分極強磁性材料と知られる Co 基ホイスラー合金の利用[2]などについて紹介したい。

- 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:渡邉 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

integrable 1d Heisenberg chain. Theoretically more accessible quantities are the moments of the normalized intensity. As suggested by Maeda, Sakai and Oshikawa in 2005 the first two moments determine the resonance shift, measured in ESR experiments on systems that can be seen as small perturbations of the Heisenberg chain. Combining perturbation theory, high-temperature expansions and scaling arguments with exact results I shall discuss applicability and limitations of a general method of moments applied to close to isotropic systems. The resulting insight will then be used for a detailed analysis of ESR and thermodynamic data for the spin chain compound $Cu(py)_2Br_2$ (CPB), where (py) stands for the pyridine molecule NC_5H_5 . The analysis allows us to fully and precisely determine the **g**-tensor and to identify directions and magnitude of the magnetic anisotropies of this compound.

標題:極限コヒーレント光科学セミナー:第 52 回振動分光の医学への応用

日時:2017年6月5日(月) 午前10時~午前11時

場所:物性研究所本館6階第一会議室(A636)

講師:長島 優

要旨:

近年のレーザー技術の急速な発展を追い風に、光を用いて分子そのものの振る舞いを観察できる振動分光法を応用し、 医学における疾患の病態研究や診断につなげる試みが活発化している。従来より分子の同定法として、物理学・化学・ 生化学の分野で広く用いられてきた振動分光法であるが、生体組織を対象にした顕微分光イメージングを医学研究に役 立てようとする際には、いくつかの新しい工夫が必要になる。特に、非常に多くの分子が混在する環境である細胞や組 織の内部で測定した振動スペクトルは、複数の分子由来の信号の重ね合わせとなるため、単純にスペクトル波形の比較 だけで分子の同定ができない場合が出てくることになる。本講演では、演者の専門である神経内科領域の疾患を対象に、 ラマン分光法を用いた疾患病態研究の実際について紹介する。加えて、生体組織の観察において、振動スペクトルが本 来持っている分子特異性の情報を最大限引き出すアイデアと、それを実現する顕微鏡の原理について紹介する予定であ る。

[1] Nagashima, et al., J Chem Phys. 134, 024525 (2011).

標題:理論セミナー:First-principles calculation of magneto-optical effect 日時:2017年6月6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:赤井 久純 所属:東京大学物性研究所 要旨:

Thanks to the development of a new technique of polarization modulation of synchrotron radiation experiment, efficient measurements of magneto-optical effects of magnetic surfaces and interfaces become now possible [1]. In particular, the measurements using resonant scattering such as resonant magneto-optical Kerr effects (RMOKE) combined with this technique are now powerful tools to investigate the detailed electronic and magnetic properties of these systems. In the first part of this talk, first-principles calculations on X-ray absorption and magnetic circular dichroism (XMCD), X-ray resonant scattering and resonant MOKE are briefly reviewed. In the second part, the results of first-principles calculation related to the RMOKE experiments that have been performed recently by Matsuda's group (ISSP) are presented. The difficulty of the calculation of such spectra with photon energy of ~ 1 keV lies in the fact that it is necessary to perform accurate relativistic calculations of the deep cores as well as valence

states up to ~100 eV above the Fermi edge in the same framework. Also since the magnetic dichroism is usually much smaller than the absorption or scattering itself, rather precise calculations are required. In order to cope with these, the KKR Green's function method combined with the linear response theory has been exploited. If time is allowed, the efforts to extend the study to non-linear optical effects targeting the resonant second harmonics generation will be explained.

Reference:

[1] Y. Kubota, et al. to be submitted (2017)

標題:セミナー:2 次元ナノ材料上の自己組織化ペプチドによるバイオ・ナノ界面

日時: 22017年6月8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: 早水 裕平

所属:東京工業大学 物質理工学院 材料系

要旨:

タンパク質などの生体分子は、その特異な分子構造や電子構造から生体内でさまざまな機能を発現する。また、往々 にしてその分子構造がダイナミックに変化し、それに伴い電子構造も変化する。我々は、この生体分子のダイナミック な特性と、これまで発展してきたエレクトロニクスを組み合わせた新たなエレクトロニクスの創生を目指して研究を 行っている。グラフェンや2次元遷移金属カルコゲナイドに代表される2次元ナノ材料は、その物性の理解が進み、広 い分野での応用が期待される。中でも、バイオセンサなどへのバイオ応用に向けた期待は高く、生体分子と2次元ナノ 材料の界面に関する理解はその重要性を増している。近年我々は、グラファイトに特異的に吸着し、単分子厚の自己組 織化膜を形成するペプチド[1]の開発に成功した。グラフェン電界効果型トランジスタの表面に吸着させたペプチドに よってグラフェンの電子特性がどのように変化するかを定量的に調査した結果、ペプチドを用いたバイオセンサの開発 にも成功している[2,3]。また、近年では、二硫化モリブデンなどの2次元金属カルコゲナイド物質を基板に使用するこ とにより、半金属特性を有するグラフェンと比して、半導体特性を有するナノシート上でのペプチドの振る舞いやその 影響によるナノシートの電気・光特性の変化について、詳しく調査してきた[4,5]。特に、乾燥した雰囲気ではなく固液 界面におけるペプチドの振る舞いについて注力して研究を行い、ペプチドのダイナミックな物性が明らかになってきて いる。中でも、水溶液の pH や電解質の濃度や種類によってペプチドの自己集合に変化が出ることや、また、二硫化モ リブデンの発光特性に大きな影響が出ることが解った。これらの結果は、電気化学的な観点からも現象を理解すること の重要性を示唆している。

【参考】

- C. R. So, Y. Hayamizu, H. Yazici, C. Gresswell, D. Khatayevich, C. Tamerler, and M. Sarikaya, "Controlling Self Assembly of Engineered Peptides on Graphite by Rational Mutation," ACS Nano, 6 (2) 1648-1656 (2012)
- 2. T. R. Page, Y. Hayamizu, C. R. So, and M. Sarikaya, "Electrical Detection of Biomolecular Adsorption on Sprayed Graphene Sheets", Biosens. Bioelectron., 33 (1) 304-308 (2012)
- 3. D. Khatayevich, T. Page, C. Gresswell, Y. Hayamizu, W. Grady, and M. Sarikaya, "Selective detection of target proteins by peptide-enabled graphene biosensor" Small 10 (8), 1505-1513 (2014)
- 4. Hayamizu, Yuhei, et al. "Bioelectronic interfaces by spontaneously organized peptides on 2D atomic single layer materials." *Scientific Reports* 6 (2016).
- 5. 早水裕平 「自己組織化ペプチドによるバイオ・ナノ界面の研究」応用物理 第85巻 第12号 p.1010 (2016).

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 selflimiting 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 Al_{0.35}Ga_{0.65}As barriers in a 28% NH₄OH:H₂O, 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).

標題:機能物性セミナー:タンパク質 - 配位子相互作用における動的構造解析と新規イメージング技術

日時:2017年6月22日(木) 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:佐藤 文菜

所属:自治医科大学・助教

要旨:

アロステリックタンパク質の代表格であるヘモグロビンは、結合配位子の個数に依存して自身の分子構造、及び配位 子との親和性を大幅に変化させることが知られている[1]。しかし、タンパク質研究の歴史上非常に古い分子であるにも かかわらず、その構造変化の過程を詳細に原子レベルで観測した例はなく、親和性制御の機構についても未だ不明な点 が多い。我々は、配位子解離過程の構造変形を詳細に捕らえるべく、これまで類似タンパク質にて実績のある低温での 動的結晶構造解析[2-3]をヘモグロビンに対して行い、分子変形の定量的な解析を行った。その結果、ヘモグロビンの各 サブユニット内での段階的な構造変化が伝播し、分子全体の協同的な四次構造変化へと拡張していく様子を追跡するこ とができた。また、近年我々は室温でのポンプ - プローブ Laue 回折実験[4]、蛍光 X 線ホログラフィー法によるタンパ ク質の原子イメージング[5]等も行っており、本セミナーでは新たな研究成果とその展望についても紹介したい。

- [1] M. F. Perutz, Sci. Am. 239 (1978) 92-125.
- [2] A. Tomita et al., Proc. Nat. Acad. Sci. USA 106 (2009) 2612-2616.
- [3] A. Tomita et al., Acta. Cryst. A66 (2010) 220-228.
- [4] 富田文菜 他, 日本結晶学会誌 56 (2014) 253-258.
- [5] A. Sato-Tomita et al., Rev. Sci. Inst., 87 (2016) 063707.

標題:物質・物性セミナー:第8回ディラック半金属と熱電変換材料

日時:2017年6月23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:岡本 佳比古

所属:名古屋大学工学研究科高等研究院

要旨:

冷媒ガスを用いた気体圧縮方式にとって代わる次世代の冷凍技術として、伝導電子の熱輸送を利用した冷却:熱電冷却にかかる期待は大きい。現在、室温付近で動作する Bi2Te3系の材料を使用したペルチエ素子として限られた用途で実用化されている。より低温、例えば液体窒素温度付近で実用できれば、用途が大きく広がると期待される。低温で高い性能を示す材料を得るためには、極めて小さいバンドギャップをもつ物質において新材料開発を行う必要がある。

一方、バンドギャップの大きさがちょうどゼロになった状態が安定に存在するゼロギャップ半導体が、ディラック半 金属またはワイル半金属と呼ばれ、近年大きく注目されている。世界的に物質探索が進み、新たなディラック・ワイル 半金属が毎日のように報告されている。この状況は、特異な電子物性の発現だけでなく、熱電変換材料の開発にとって もブレイクスルーが起こりうるチャンスと考える。

セミナーでは、このような発想に基づき、我々のグループで開拓してきたディラック半金属と熱電変換材料に関する 最近の成果、特に CaAgAs と CaAgP [1,2]、Ca₃SnO [3]、Ta₄SiTe₄ [4]について報告したい。

- [1] A. Yamakage, Y. Yamakawa, Y. Tanaka, and Y. Okamoto, J. Phys. Soc. Jpn. 85, 013708 (2016).
- [2] Y. Okamoto, T. Inohara, A. Yamakage, Y. Yamakawa, and K. Takenaka, J. Phys. Soc. Jpn. 85, 123701 (2016).
- [3] Y. Okamoto, A. Sakamaki, and K. Takenaka, J. Appl. Phys. 119, 205106 (2016).

[4] T. Inohara, Y. Okamoto, Y. Yamakawa, A. Yamakage, and K. Takenaka, Appl. Phys. Lett. 110, 183901 (2017).

標題:理論インフォーマルセミナー:圧縮センシングとその成否診断

日時:2017年6月26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:中西(大野) 義典

所属:東京大学大学院総合文化研究科

要旨:

実験データを解析すると何らかの結果が得られるが、その結果はどのように受け入れられているだろうか。ひょっと すると、慎重になりすぎて必要以上にデータ獲得を行うあまり、非効率な実験計画を立てているかもしれない。もしく は、不十分なデータによる誤った解析結果が、偶然にも予想と一致しているだけかもしれない。本セミナーではこうし た問題について圧縮センシング(Compressed Sensing, CS)の成否診断を題材に議論したい。

CS とは統計科学を活用して実験計測を効率化する手法の総称であり、近年ではスパースモデリング(Sparse Modeling, SpM)に基づくものが物性研究をはじめ様々な分野に広がりを見せている(たとえば走査トンネル顕微・分光 法による準粒子干渉実験[1])。SpM は、計測対象を適切な基底で表現したときに非零成分がごく少数すなわちスパース であるということを活用する。SpM による CS では、閾値となるデータ量を境に解析結果が失敗から成功へと相転移的 に切り替わることが知られている[2,3]。しかし、閾値を知るためには、計測対象がどの程度スパースであるかを予め 知っておく必要があり、問題である。

本セミナーでは、我々が提案する CS の成否を診断する手法を紹介する[4]。本手法は、交差検証と呼ばれるオーソ ドックスな統計手法を、これまでには見られない方法で用いることにより、計測対象のスパース度を事前に知らなくと も、いわばデータ駆動的に、診断することができる。

文献:

- Y. Nakanishi-Ohno, M. Haze, Y. Yoshida, K. Hukushima, Y. Hasegawa, and M. Okada, J. Phys. Soc. Jpn. 85, 093702 (2016).
- [2] D. L. Donoho and J. Tanner, Proc. Natl. Acad. Sci. 102, 9446-9451 (2005).
- [3] Y. Kabashima, T. Wadayama, and T. Tanaka, J. Stat. Mech. 2009, L09003 (2009).
- [4] Y. Nakanishi-Ohno and K. Hukushima, in preparation.

標題:LASOR セミナー:Heavy Fermions" as observed by photoemission and interpreted by the "PAM"

日時: 2017年6月27日(火) 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:Konrad MATHO

要旨:

The general context of this seminar is the experimental and theoretical study of "Heavy Fermion" systems: Metallic compounds containing rare earth (RE) ions such as Ce and Yb. The experimental method considered is photoemission, as carried out either in angle integrated ("PES") or angle resolved ("ARPES") mode. The Periodic Anderson Model ("PAM") has frequently been employed to interpret the spectra. The subject, started half a century ago, is still surprisingly lively and full of new challenges.

I have collaborated with Clemens Laubschat's group at the TU Dresden in Germany. My theoretical contribution was to consult a PhD student in the group, Alla Chikina, in the development of a computer code for the PAM that uses our phenomenological Continued Fraction Method (CFM) [1]. The CFM was generalized from the Hubbard model to the PAM and the code was tested in comparison with results from Dynamical Mean Field Theory [2]. The benchmarking was carried out in the "Kondo Lattice" regime of the PAM, which is characterized by the presence of

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 cristalline 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.