

物性研究所セミナー

標題：機能物性セミナー：タンパク質膜透過チャネル Sec トランスロコンを経由するタンパク質輸送のメカニズム

日時：2017年7月6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：塚崎 智也

所属：奈良先端科学技術大学院大学

要旨：

生体内で合成されたタンパク質の多くは生体膜をこえて輸送されたり、生体膜に組込まれたりして、その機能を発揮する。生体膜には Sec トランスロコンとよばれる進化的に保存されたタンパク質膜透過チャネルがあり、ここを経由して多くのタンパク質が運ばれる。大腸菌では、膜タンパク質 SecY, SecE, SecG からなる複合体が Sec トランスロコンを形成しており、ここを経由するタンパク質輸送のモータータンパク質として SecA ATPase, 膜タンパク質 SecDF が存在する。SecDF はプロトンの濃度勾配を利用していると考えられている。これらのモータータンパク質は基質タンパク質を伴ったダイナミックな構造変化を繰り返すことによって膜透過を駆動する。この分子メカニズムの解明は、本研究分野の最優先課題の一つであり、構造情報が必要とされていた。2003年ごろから筆者らのグループをはじめいくつかのグループが Sec ならびに関連因子の構造解析を進めてきた結果、タンパク質の膜透過・膜組込みの理解が深まった。本セミナーでは、我々が進めてきた X 線結晶構造解析ならびに機能解析を中心に解説し、考えられるタンパク質輸送のモデルを紹介する[1]-[5]。また、現在進行中のタンパク質輸送の動的メカニズム解明にむけたリアルタイム計測の試みについてもふれたい。

【参考文献】

[1] Tsukazaki et al., Nature 455, 988-991 (2008).

[2] Tsukazaki et al., Nature 474, 235-238 (2011).

[3] Kumazaki et al., Nature 509, 516-520 (2014).

[4] Tanaka et al., Cell Rep. 13, 1561-1568 (2015).

[5] Furukawa et al., Cell Rep. 19, 895-901 (2017).

標題：量子物質・ナノスケールセミナー：第8回：半導体、半金属、絶縁体二次元界面におけるスピン輸送物性評価

日時：2017年7月10日(月) 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：安藤 裕一郎

所属：京都大学 大学院工学研究科 電子工学専攻

要旨：

純スピン流(スピン角運動量の流れ)やスピン偏極電流(スピン偏極した電流)を生成・輸送・検出する技術はスピントロニクスデバイスにおいて不可欠である。スピン流を情報輸送や演算に用いる場合には非平衡状態のスピン流を用いる必要がある。このような非平衡状態のスピンは必ずスピン緩和を伴う。従って、スピン寿命、スピン拡散長などのスピン輸送物性の理解は、デバイス設計の指針を得る上で極めて重要と言える。スピン輸送物性の解明にはスピン流を強磁性体から対象物質に注入するのが一般的である。対象物質が金属中の場合、スピン流を注入することは比較的容易であり、解析もシンプルな場合が多い。一方、半導体に注入する場合には数多くの障害が発生し困難を極める。しかし、そ



の一方で、注入されたスピン流に関しては豊かな物理を内包しており、基礎学理の観点でも、応用の観点でも極めて重要な研究対象と言える。本講演では一般的な半導体(Si, Ge, GaAs, および GaAs 二次元電子ガス等)中や[1-3], スピン軌道相互作用が大きい半金属 Bi 膜中[4]、d 軌道電子がスピン輸送を担っていると期待されている LaAlO₃/SrTiO₃ 二次元界面[5]におけるスピン流物性の解明に関する、我々の最近の研究成果を中心に紹介する。研究対象は多岐に渡るが、それぞれの特徴を鑑み、適したスピン流評価手法を選択しなければ徒労に帰す恐れもある。各々のスピン輸送物性の評価手法について、利点・欠点、工夫すべき点、注意すべき点等を解説する。

- [1] T. Sasaki, Y. Ando et al., Phys. Rev. Appl. 2, 034005 (2014).
- [2] A. Yamamoto, Y. Ando et al., Phys. Rev. B 91, 024417 (2015).
- [3] S. Dushenko, M Koike, Y. Ando et al., Phys Rev. Lett. 114, 196602 (2015).
- [4] H. Emoto, Y. Ando et al., Phs. Rev. B 93, 174428 (2016).
- [5] R. Ohshima, Y. Ando et al., Nat. Mater. in press.

標題：極限コヒーレント光科学セミナー：第 53 回：Out-of-Equilibrium Electronic Properties of Topological Insulators Investigated by Time Resolved ARPES

日時：2017 年 7 月 11 日(火) 午後 2 時～

場所：物性研究所本館 6 階 第一会議室 (A636)

講師：Alberto Crepaldi

要旨：

Optical injection of spin in topologically protected surface states is a promising route towards realization of spintronics devices based on topological insulators (TIs).

The control over spin current requires the understanding of the electron and spin scattering processes, as well the direct imaging of the coupling between electrons and the optical excitation. Time and angle resolved photoelectron spectroscopy (tr-ARPES) represents the ideal experimental tool to shed light upon these aspects.

We have recently carried out a systematic study of the prototypical TIs, Bi₂Se₃, by combining tr-ARPES with high photon energy, spin resolution and by comparing its out-of-equilibrium electronic properties to one of several other TIs, characterized by different doping level. All together our results suggest that spatial diffusion of the excited electrons towards the bulk plays a critical role. This effect can be mediated by bulk states and by unoccupied surface resonance, whose presence have been identified by means of spin resolved tr-ARPES.

標題：量子物質セミナー：空間群の表現に基づくトポロジカルバンド構造の指標

日時：2017 年 7 月 12 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：渡辺 悠樹

所属：東京大学工学系研究科 物理工学専攻

要旨：

我々の身の回りの非磁性結晶は 230 個の空間群、磁性結晶は 1651 個の磁気空間群に分類される。本講演では「これらの対称性を持つ物質がどのようなトポロジカルバンド構造を実現しうるか？」という重要な問題について議論する。

よく知られているように、Z₂ トポロジカル絶縁体の指標はもともと Paffian を k 空間で積分したもので与えられるが、系が反転対称性を有する場合にはこの煩雑な計算を実行する必要はなく、TRIM における占有軌道のパリティを掛け合わせればよい。この事実は単に指標の計算を簡略化するとどまらず、より一般に「バンド反転 (band inversion)

を起こせばトポロジカル絶縁体になる」という指導原理を与え、具体的なトポロジカル絶縁体の物質を探索する上で役立ってきた。

この「反転対称性のパリティに基づくトポロジカル絶縁体の指標」を一般化した「(磁気)空間群の表現に基づくトポロジカル(結晶)絶縁体・トポロジカル半金属の指標」について説明し、具体例として、磁性体中のワイル半金属について議論する。

[1] Hoi Chun Po, Ashvin Vishwanath, HW, Nature Communications, 8, 50 (2017).

[2] HW, Hoi Chun Po, Ashvin Vishwanath, in preparation.

標題：LASOR セミナー：Ultrafast electronic band gap control in an excitonic insulator

日時：2017年7月13日(木) 午前10時30分～

場所：物性研究所本館6階 第一会議室 (A636)

講師：Claude Monney

所属：University of Zürich, Department of Physics

要旨：

It has been proposed in 1961 by Mott that a semimetal may be unstable towards an insulating ground state, when electrons and holes bind together through the Coulomb interaction and form excitons [1]. On this basis, it was elaborated a few years later that both a semimetal and a semiconductor can undergo this instability [2]. A phase transition occurs at low temperature, when the excitons condense in a macroscopic state, giving rise to the so-called excitonic insulator phase. Experimental observation of this phase has proven to be very challenging since its theoretical prediction and not much is known about the time-domain dynamics of this exotic phase.

In this talk, I will discuss the case of the semiconductor Ta_2NiSe_5 , which has a direct band gap and displays a semiconductor-semiconductor phase transition at about 330 K [3]. Ta_2NiSe_5 has already been proposed for the realization of an excitonic insulator phase, based on angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) data [3]. Its valence band at Γ shows a peculiar flattening at low temperature and is anomalously broad, explained as the consequence of strong excitonic fluctuations [4].

Here I will present time-resolved ARPES data of Ta_2NiSe_5 . I will show how the band gap of Ta_2NiSe_5 can be *controlled* in a pump-probe experiment by varying the pump fluence. While for low fluences the band gap is transiently decreased, we observe that it can be *increased* for high fluences. I will argue that this observation is a direct consequence of the exciton condensate being trapped in a non-thermodynamical state where it is transiently strengthened.

References:

[1] N. Mott, Phil. Mag. 6, 287 (1961).

[2] D. Jérôme et al, Phys. Rev. 158, 462 (1967).

[3] F.J. Di Salvo et al., J. Less Common Metals 116, 51 (1986).

[4] Y. Wakisaka et al., Phys. Rev. Lett. 103, 026402 (2009).

[5] K. Seki et al., Phys. Rev. B 90, 155116 (2014).

[6] S. Mor et al., submitted, arXiv:1608.05586.



標題：理論インフォーマルセミナー：Multiplons and Doublon Dynamics in the Hubbard Model

日時：2017年7月14日(金) 午後2時～

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Roman Rausch

所属：University of Hamburg

要旨：

This talk aims to provide a better understanding of the role and behaviour of “doublons” (repulsively bound holes or electrons) which inevitably govern the physics of the Hubbard model in many regimes.

In the first part, the two-hole excitation spectra of the one-dimensional Hubbard model are studied for all fillings using the density-matrix renormalization group (DMRG) in combination with the Chebyshev polynomial expansion technique. Experimentally, this corresponds to Auger Electron Spectroscopy (AES). The spectra reveal what can be called “multiplon” physics, which means that the relevant final states are not only characterized by two holes (doublon), but also by three (triplon), four (quadruplon) and more; potentially forming stable compound objects or resonances with finite lifetime.

A comparison with the Bethe ansatz reveals the decay channels of the initial doublon excitation into spinons and holons in one dimension. Surprisingly, one discovers that the doublon lifetime becomes infinite at the Brillouin zone edges despite interactions. This can be traced back to the “hidden” charge-SU(2) symmetry of the Hubbard model. In the second part, the fate of a local two-hole doublon excitation is studied in real-time. It shows a mixed ballistic-diffusive propagation through the lattice with a partial decay. The dynamics of this decay is discussed as a function of filling and interaction strength. The ambivalent role of singly occupied sites is key to understanding the time-dependent doublon physics: For high fillings, ground-state configurations with single occupancies strongly relax the kinematic constraints and open up decay channels. For fillings close to half filling, however, their presence actually helps the doublon to propagate ballistically.

標題：理論セミナー：First-principles simulation of electrochemical reactions at solid-liquid interface

日時：2017年7月18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：Dr. Minoru Otani

所属：CD-FMat, AIST

要旨：

Interfacial electrochemistry, which deals with complex catalytic processes in the electrochemical double layer (EDL), is a plentiful source of challenging research as well as a highly dynamic field owing to the rapid development of surface-sensitive techniques and computational tools. We have been working on this subject by developing several methodologies for first-principles molecular dynamics (FPMD) simulations to model an electrochemical interface. First, we proposed a method to incorporate the electric field in the EDL with an appropriate boundary condition by solving the Poisson equation using Green's function method, which is called effective screening medium (ESM) method [1]. Second, we have developed a simulation scheme to mimic a constant electrode potential in which we can control the Fermi energy of the electrode by connecting the system to a potentiostat [2]. Recently we have developed a novel calculation technique for the solvation structure of EDL by combining the FP simulation with the classical liquid theory [3].

In the seminar, I will introduce the simulation techniques developed by us and present recent simulation results for the cyclic voltammogram of oxygen evolution reaction (OER) and oxygen reduction reaction (ORR) [4]. I will

present some possible applications of our latest developed simulation method [3] which can model not only an electrochemical interface but also an ion-exchange membrane.

References

- [1] M. Otani and O. Sugino, Phys. Rev. B 73, 115407 (2006).
- [2] N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugino, and M. Otani, Phys. Rev. Lett. 109, 266101 (2012).
- [3] S. Nishihara and M. Otani, submitted to Phys. Rev. B.
- [4] T. Ikeshoji and M. Otani, Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 4447 (2017).

標題：理論インフォーマルセミナー：Old and New Topological Boundary conditions for Topological Matter

日時：2017年7月19日(水) 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：Juven Wang

所属：Institute for Advanced Study, Princeton

要旨：

I will comment on the recent work on new exotic types of gapped Topological Boundary/Interface Conditions of TQFTs (e.g. SPT and SET states) in any dimension: <https://arxiv.org/abs/1705.06728>. In contrast to known gapped boundaries/interfaces obtained via symmetry breaking (either global symmetry breaking or Anderson-Higgs mechanism for gauge theory), our approach is based on symmetry extension. In this work, we show that a certain anomalous non-on-site G symmetry along the SPT boundary becomes on-site when viewed as a larger H symmetry, via a suitable group extension. Namely, a non-perturbative global (gauge/gravitational) anomaly in G becomes anomaly-free in H . This guides us to formulate exactly soluble lattice path integral and Hamiltonian constructions of symmetric gapped boundaries applicable to any SPT state of any finite symmetry group, including on-site unitary and anti-unitary time-reversal symmetries. The resulting symmetric gapped boundary can be described either by an H -symmetry extended boundary in any space time dimension, or more naturally by a topological K -gauge theory with a global symmetry G on a $3+1$ D bulk or above. Apply our approach to a $1+1$ D boundary of $2+1$ D bulk, we find that a deconfined topologically ordered boundary indeed has spontaneous symmetry breaking with long-range order. The deconfined symmetry-breaking phase crosses over smoothly to a confined phase without a phase transition. (Based on JW's 1705.06728 paper, related 1212.4863 and 1408.6514 and Refs therein.)

標題：理論セミナー：Automatic design of functional molecules and materials

日時：2017年7月25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：Prof. Koji Tsuda

所属：Graduate School of Frontier Sciences, University of Tokyo

要旨：

The scientific process of discovering new knowledge is often characterized as search from a space of candidates, and machine learning can accelerate the search by properly modeling the data and suggesting which candidates to apply experiments on. In many cases, experiments can be substituted by first principles calculation. I review two basic machine learning techniques called Bayesian optimization and Monte Carlo tree search. I also show successful

case studies including Si-Ge nanostructure design, optimization of grain boundary structures and discovery of low-thermal-conductivity compounds from a database.

Reference:

S. Ju, T. Shiga, L. Feng, Z. Hou, K. Tsuda, and J. Shiomi, Designing Nanostructures for Phonon Transport via Bayesian Optimization, *Physical Review X*, 7, 021024, 2017.

S. Kiyohara, H. Oda, K. Tsuda and T. Mizoguchi, Acceleration of stable interface structure searching using a kriging approach, *Japanese Journal of Applied Physics*, 55, 045502, 2016.

A. Seko, A. Togo, H. Hayashi, K. Tsuda, L. Chaput, and I. Tanaka, Prediction of low-thermal-conductivity compounds with first-principles anharmonic lattice-dynamics calculations and Bayesian optimization, *Physical Review Letters*, 115, 205901, 2015.

標題：機能物性セミナー：試験管内タンパク質合成法による人工細胞膜の構築

日時：2017年7月26日(水) 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：車 兪澈

所属：東京工業大学 地球生命研究所

要旨：

試験管内タンパク質合成系は、目的のタンパク質を試験管の中で人工的に合成するバイオ技術である。大腸菌などの生物を利用しないため、理論上夾雑物を全く含まない PURE な状態でタンパク質サンプルを入手することができる。この試験管内合成系は細胞膜上で機能する膜タンパク質に対して特に有効であり、脂質膜と組み合わせることで細胞を模した人工細胞膜を再構築することが可能である[1]。そのため、これまで困難であった細胞膜の機能解析や性状解析を大きく進展させる可能性を持つ、学術的・産業的に重要な技術である。さらに生きた細胞を丸ごと再構築する、人工細胞研究の基盤技術としても注目されている[2]。試験管内合成系を用いてこれまでに、タンパク質を脂質膜に組み込む機能を持つ Sec トランスロコン[3]、膜内外のプロトン濃度勾配依存的に ATP (化学エネルギー貯蔵分子) を合成する ATP 合成酵素[4,5]、光エネルギー依存的にプロトン濃度勾配を形成するバクテリオロドプシンの再構築に成功している。また最近では、脂質分子を膜小胞内部で合成することで誘発される、膜の物性変化や形態変化の解析についても取り組んでいる。本セミナーでは、試験管内合成系を利用した人工細胞膜構築についての取り組みと、その応用について紹介したい。

【参考文献】

[1] Kuruma et al., *Biochem Biophys Acta-Biomem.* (2009) 1788, 567-574.

[2] Stano et al., *Journal of Materials Chemistry* (2011) 21, 18887-18902.

[3] Matsubayashi and Kuruma et al., *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* (2014) 53, 7535-7538.

[4] Kuruma et al., *Biochem. J.* (2012) 442, 631-638.

[5] Kuruma et al., *Nature Protocols* (2015) 10, 1328-1344.

標題：機能物性セミナー：フェムト秒レーザーを用いたタンパク質の動的構造解析

日時：2017年7月26日(水) 午後3時30分～

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：久保 稔

所属：理化学研究所放射光科学総合研究センター・専任研究員

要旨：

タンパク質は構造変化を起こすことで機能する。したがってその機能発現機構を理解するためには、タンパク質の構造の動的性質やダイナミクス(動的構造)を理解することが重要である。我々は種々のフェムト秒レーザーをヘムタンパク質に適用し、ヘムやタンパク部位の動的構造を調べてきた。

(1) ヘム(鉄ポルフィリン)の電子状態については古くからよく研究されているが、低振動や揺らぎといった核の振る舞いはまだよくわかっていない。そこで我々はフェムト秒コヒーレンス分光(ラマン分光の一つ)を用いて、ヘムタンパク質のヘムの低振動数モードを解析した。その結果、低振動数モードがヘム面の歪みと関連していることを明らかにした[1]。ヘム面の歪みは、鉄-ポルフィリン間相互作用を変化させるため、電子状態との相関について理論研究が待たれる。

(2) ヘムを取り巻くタンパク部分(反応場)の状態解析には赤外分光が有用である。ただし、タンパク質の赤外分光は水の強い赤外吸収が測定の妨害となるため、これまで適用が限られてきた。そこで我々は高輝度のフェムト秒赤外レーザーを用いて、水試料を扱える時間分解赤外分光装置を開発した。装置をチトクロム酸化酵素という巨大なヘムタンパク質(分子量21万)に応用し、配位子脱離後のダイナミクスを観測した結果、構造変化の途中で準安定状態が現れることを明らかにした[2]。

(3) 分光では実空間情報を直接得られないが、X線結晶構造解析は原子分解能でそれが可能である。これまで結晶構造解析はダイナミクス研究に対して十分に力を発揮してこなかったが、X線自由電子レーザー(XFEL)の出現により動的解析に新たな道が拓かれた。我々は最近、フェムト秒のXFELパルスを用いた時間分解結晶構造解析の装置を開発し、光合成タンパク質(光化学系II)などに適用した[3,4]。チトクロム酸化酵素の配位子脱離後の準安定状態の構造解析にも適用し、ヘムのスライドやそれに起因した機能部位への構造変化の伝播を原子スケールで観測した[5]。

本セミナーでは、上記研究を中心にヘムタンパク質の動的性質を紹介するとともに、今後の展望について触れる。

【参考文献】

[1] Kubo et al. J. Am. Chem. Soc. (2008) 130, 9800-9811.

[2] Kubo et al. J. Biol. Chem. (2013) 288, 30259-30269.

[3] Suga, Akita, Sugahara, Kubo, Nakajima et al. Nature (2017) 543, 131-135.

[4] Nango, Royant, Kubo et al. Science (2016) 354, 1552-1557.

[5] Shimada, Kubo, Baba et al. Sci. Adv. (2017) Accepted.

標題：量子物質・ナノスケールセミナー：第9回：Exploration of ferromagnets with large anomalous Nernst effect for energy harvesting applications

日時：2017年7月27日(木) 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：桜庭 裕弥

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磁性材料グループ

要旨：

Developing energy harvesting technologies is an urgent task for coming IoT society to supply electric energy (uW-mW level) to the numerous sensors independently. Thermoelectric power generation is one of the important

標題：理論セミナー：準周期系における強相関効果

日時：2017年8月1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：古賀 昌久

所属：東京工業大学 理学院 物理学系

要旨：

最近、Au-Al-Yb 準結晶において比熱や帯磁率にべき的な発散が出現する量子臨界性が観測され[1]、準結晶に関する研究がさらに注目を集めている。準周期構造の最もシンプルなものとして、二種類の菱形から構成されるペンローズ格子がある。この格子のタイトバインディング模型には、無限に縮退した束縛状態があり、ハーフフィリングにおいては、そのエネルギーがフェルミレベルに一致している特徴がある[2,3]。そのため、この系に相互作用を導入すると、興味深い相関効果が期待されている。本講演では、この束縛状態に関する議論を深めることにより、弱相関極限における磁気秩序に関するいくつかの厳密な結果を導出する。また、異なる磁気構造をもつ強相関極限[4]へどのようにクロスオーバーするのかについても議論する。

[1] K. Deguchi, S. Matsukawa, N. K. Sato, T. Hattori, K. Ishida, H. Takakura, and T. Ishimasa, Nat. Mat. 11, 1013 (2012).

[2] M. Kohmoto and B. Sutherland, Phys. Rev. B 34, 3849 (1986).

[3] M. Arai, T. Tokihiro, T. Fujiwara, and M. Kohmoto, Phys. Rev. B 38, 1621 (1988).

[4] A. Jagannathan, A. Szallás, S. Wessel, and M. Duneau, Phys. Rev. B 75, 212407 (2007).

標題：国際強磁場科学セミナー：2017年度第3回：30 T ミニコイルパルスマグネットを使った強磁場下分光

日時：2017年8月3日(木) 午後3時～

場所：物性研究所本館6階 第2セミナー室 (A612)

講師：勝谷 郁也

所属：ライス大学電気コンピュータ工学科

要旨：

パルス磁場下での分光実験はしばしば光ファイバーを用いて行われるが、ファイバーの分散により超短パルスがチャープされることや、テラヘルツ波を伝搬することができない、また顕微分光が困難である等の欠点がある。我々はピーク磁場 30 テスラを周期約 5 分で繰り返し発生できるテーブルトップ型のミニコイルパルスマグネットを開発した。光学窓一つを通して試料に直接アクセスでき、パルス強磁場下での超高速分光、非線形光学分光、顕微分光に最適である。このシステムを使って行った最近の実験から、近赤外分光およびテラヘルツ分光の幾つかの例を紹介する。

半導体量子井戸での時間分解発光実験では、インコヒーレントに励起された電子・正孔系が巨視的コヒーレンスが自発的に発生する Dicke superradiance の特殊例である superfluorescence を観測した[1]。これにより、有限の遅延時間の後にコヒーレント放射のバーストが生じる。アメリカ国立強磁場研究所における以前の我々の測定[2]と比較して、光パルスの光ファイバーによる分散がないことにより時間分解能を改善し、superfluorescence の遅延時間とパルス幅の最大値を決定することに成功した。

真性シリコン中の光励起キャリアのサイクロトロン共鳴を、30 T パルスマグネットとシングルショットテラヘルツ時間領域分光器を組み合わせることによって測定した[3]。階段状光学素子の導入によって空間的にプローブ光に遅延を与え、単一のパルス光からテラヘルツ帯での時間分解実験が可能となる。光励起キャリアのサイクロトロン共鳴吸収の磁場依存性から、キャリア有効質量 m^* は m_0 を真空中の自由電子質量として $0.19m_0$ と求まる。



我々はまた、近赤外領域のバンド端でのセレン化インジウム (InSe) の円偏光依存磁気吸収分光を行った。0 T で約 1.32 eV に観測される 1s 励起子ピークの磁場による反磁性シフトとゼーマン分裂を 30 T まで測定し、反磁性シフト定数 $\sigma = 4.08 \times 10^{-3} \text{ meV/T}^2$ および有効 g 因子 $g_{\text{eff}} = 2.12$ を決定した。

[1] Rev. Sci. Instrum. 84, 123906 (2013).

[2] Nature Physics 8, 219 (2012).

[3] Optics Express 24, 30328 (2016).

標題：理論セミナー：Molecular simulation and modeling of functional dynamics in biomolecular motor

日時：2017年8月3日(木) 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：岡崎 圭一

所属：分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域

要旨：

EF₀F₁ ATP synthase is one of the most important biomolecules, synthesizing most of ATP in the cell. Especially the catalytic part, F₁-ATPase, has been extensively studied by both crystallography and single-molecule experiments, revealing atomistic structures and detailed mechanochemical coupling scheme, respectively. However, connection between these two aspects are not well established: structural basis of the functional cycle has been controversial. We previously performed systematic structural analysis [1] and molecular dynamics simulations [2] to clarify the connection. We have been recently working on multiscale dynamics of this rotary motor, to understand how the ATP hydrolysis reaction drives the large-scale rotational motion. For the whole F₀F₁ ATP synthase, we built a simple viscoelastic model to explain symmetry mismatch between F₀ and F₁ motors [3].

References:

[1] Mitsuhiro Sugawa, Kei-ichi Okazaki, et al. (2016) "F₁-ATPase conformational cycle from simultaneous single-molecule FRET and rotation measurements" Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 113 (21): E2916-E2924.

[2] Kei-ichi Okazaki and Gerhard Hummer (2013) "Phosphate release coupled to rotary motion of F₁-ATPase" Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 110 (41): 16468-16473.

[3] Kei-ichi Okazaki and Gerhard Hummer (2015) "Elasticity, friction, and pathway of γ -subunit rotation in F₀F₁-ATP synthase" Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 112 (34) 10720-10725

標題：ナノサイエンスセミナー：全反射高速陽電子回折 (Total-reflection high-energy positron diffraction, TRHEPD) による結晶表面の構造解析

日時：2017年8月9日(水) 午後1時30分～

場所：物性研究所本館6階 第一会議室 (A636)

講師：兵頭 俊夫

所属：KEK 物質構造科学研究所

要旨：

物質の特性や機能は、構成原子の種類と配置で決まる。したがって、物質・材料の構造（詳細な原子配置）解析は、物性・機能の研究を支える基盤である。三次元物質では、Bragg等によって見出されたX線回折法が100年の間に発達し、放射光を使った構造解析が、タンパク質や複雑な機能性化合物・合金などの結晶にも有効な、標準的構造解析手法となっている。一方この間、二次元的な表面についてもさまざまな構造解析法が開発されてきたが、単独の標準的手法として、

三次元物質に対する X 線と同じような精度で結晶表面とその直下の詳細な原子配置を決めることができる手法は未だ存在しないといつてよい。

全反射高速陽電子回折 (TRHEPD、トレプト) は、反射高速電子回折 (RHEED) の陽電子 (電子の反粒子) 版[1]であるが、すべての固体に共通な、内部の静電ポテンシャルが正であるという基本物性に基づく、他に類を見ない表面超高感度をもっており、表面構造決定の標準的な手法になる可能性がある[2]。

現在、KEK 物質構造科学研究所低速陽電子実験施設では、高強度低速陽電子ビームを用いた世界唯一の TRHEPD 装置を共同利用に供している。これまでに、起伏が大きいため 10 年来決着していなかった Ge(001)-(4×2)-Pt ナノワイヤ構造[3]、30 年来決着していなかったルチル型 TiO₂(110)-(1×2)表面の構造[4, 5]を決定した。また、基板上に合成したグラフェンの基板との距離が基板の種類 (Cu と Co) によって大きく異なることの実証[6]、Ag(111)面上のシリセンのバックリングの大きさと基板からの距離の実測[7]、Al(111)面上のゲルマネンのバックリングがそれまでの予想と異なって非対称的であることの解明[8]などを行ってきた。

ここでは、TRHEPD 法の原理とその表面超高感度の由来、測定法および具体的な測定例について解説する。

参考文献

- [1] 一宮彪彦, 日本物理学会誌 70, 683 (2015).
- [2] Y. Fukaya, et al., Appl. Phys. Express 7, 056601 (2014).
- [3] I. Mochizuki, et al., Phys. Rev. B 85, 245438 (2012).
- [4] I. Mochizuki et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 7085 (2016).
- [5] 望月出海他, 表面科学 37(9), 451 (2016).
- [6] Y. Fukaya, et al., Carbon 103, 1 (2016).
- [7] Y. Fukaya, et al., Phys. Rev. B 88, 205413 (2013).
- [8] Y. Fukaya, et al., 2D Materials, 3, 035019 (2016).

標題: LASOR セミナー: Low Dimensional Systems on Silicon Carbide Surfaces

日時: 2017 年 8 月 9 日(水) 午前 10 時 30 分～

場所: 物性研究所本館 6 階 第一会議室 (TV 会議: 播磨)

講師: Dr. Marie D'angelo

所属: Institut des Nanosciences de Paris & 松田巖研

要旨:

Silicon carbide is a wide band gap semiconductor which has attracted a lot of interest due to its physical properties making this material particularly suitable for high temperature, high power and high frequency applications. The different SiC polytypes show a great variety of surface reconstructions which were extensively studied in the last decades. Now, we have reached the point where the surface reconstructions are sufficiently well understood and controlled to move to the next step and use them as a template to create new nanostructures and low dimensional systems.

In this presentation, I will address two examples of these low dimensional nano-objets created on silicon carbide surfaces.

In the first part, I will concentrate on the cubic 3C-SiC and more particularly on hydrogen adsorption on the 3C-SiC(001)-3×2 surface reconstruction. I will explain how, by combining valence-band photoemission, ab-initio calculations and vibrational spectroscopies, we could establish the formation of nano-tunnels due to hydrogen atoms interaction with the subsurface region of the semiconductor[1].

In a second part, I will focus on graphene on hexagonal 6H-SiC samples. Silicon intercalation under the carbon



terminated ($6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$)R30 layer was followed step by step by means of core level photoemission spectroscopy. The results show that sequences of Si deposition and annealing can lead to a fully decoupled graphene layer on 6H-SiC(0001). For partial decoupling, we can evidence the formation of nanometric metal-semiconductor heterojunctions.

[1] P. Soukiassian, E. Wimmer, E. Clasco, C. Giallombardo, S. Bonanni, L. Vattuone, L. Savio, A. Tejada, M. Silly, M. D'angelo, F. Sirotti and M. Rocca, Nature Communications 4, 2800 (2013).

[2] M. Silly, M. D'angelo, A. Besson, Y.J. Dappe, S. Kubsky, G. Li, F. Nicolas, D. Pierucci and M. Thomasset, Carbon 76, 27 (2014).

標題：機能物性セミナー：等方性の高移動度と高発光特性を有する単結晶有機半導体

日時：2017年8月10日(木) 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：後藤 修

所属：北京大学深圳研究生院

要旨：

高いキャリア移動度と高い発光特性を有する有機半導体材料は、高性能発光トランジスタや電流注入型有機半導体レーザの実現に不可欠となる。我々は、単結晶を用いた発光トランジスタ構造をベースに、有機半導体レーザの作製に取り組んでいる。高移動度と高発光特性を同時に満たす有機半導体材料は極めて珍しいが、アントラセンコアを持つ誘導体はこれらの特性を同時に満たす。問題は、単結晶成長では、大きさと膜厚を独立に制御することが極めて難しいことである。

2015年に Wenping Hu 教授のグループが 2,6-diphenylanthracene (DPA)を合成した[1]。単結晶 FET のホール移動度は $34 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 、かつ、高い発光特性を示した。しかしながら、この材料では大きく薄い単結晶を成長することができない。我々は、フェニル基にアルキル基や、O を介したアルキル基を付加し側鎖に用いた誘導体を合成し[2]、単結晶成長条件と単結晶 FET の特性を調べた[3, 4]。

単結晶成長装置は通常、原料を昇華させる領域と結晶を析出させる領域の 2 つの加熱領域を持つ。今回は、結晶成長のメカニズムを理解するために、成長領域が 2 つある合計 3 つの加熱領域を持つ成長装置を用い、核形成と成長を制御するための「飽和-過飽和曲線」を実験的に得た。2,6-bis[4-ethylphenyl]anthracene (BEPAnt)では、成長温度を $210 \text{ }^\circ\text{C}$ から 250°C に変えることで、直径 0.1 mm 、膜厚 400 nm から、直径 1.0 mm 、膜厚 50 nm まで形状を制御できた。大きく薄い単結晶を用い、放射型のソース・ドレイン電極を用いた FET を作製、ホール移動度の角度依存性を調べ、二次元面内で等方的なホール移動度 ($7.2 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$) を得た。2,6-bis(4-methoxyphenyl)anthracene (BOPAnt)でも同様の実験結果が得られ、等方的なホール移動度は $16.6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ に達した。このような単結晶では、デバイス作製の際に電極の形成方向を考慮する必要がないため、デバイス作製上大きな利点となる。なぜ等方的な移動度が得られるのかを調べるために、ホッピング移動度の計算を行った。これらの材料では、二次元面内で P, T1, および T2 方向の移動度に特徴があり、T1 と T2 が同じ値になる一方、P 方向の移動度が T1(T2) に対して無視できるほど小さくなる。私が Zhenan Bao 教授の研究室で扱った 2,7-di-tert-butyl[1]benzothieno[3,2-b]benzothiophene (ditBu-BTBT) もまた等方的な高移動度を示す材料であるが[5]、この材料では P, T1, および T2 方向の移動度はほぼ等しかった。こうした知見は、材料設計上の重要な指針となると考えられる。今後、これら 2 つの有機半導体単結晶のレーザ材料としての特性を調べつつ、デバイス作製プロセスを構築して行く。

[1] J. Liu, H. T. Zhang, H. L. Dong, L. Q. Meng, L. F. Jiang, L. Jiang, Y. Wang, J. S. Yu, Y. M. Sun, W. P. Hu, A. J. Heeger, Nat. Commun. 2015, 6.

[2] L. J. Yan, Y. Zhao, H. T. Yu, X. Hu, Y. W. He, A. Y. Li, O. Goto, C. Y. Yan, T. Chen, R. F. Chen, Y. L. Loo, D. F. Perepichka, H. Meng, W. Huang, J. Mater. Chem. C 2016, 4, 3517-3522.

- [3] A. Li, L. Yan, C. He, Y. Zhu, D. Zhang, I. Murtaza, H. Meng, O. Goto, J. Mater. Chem. C 2017, 5, 370-375.
 [4] C. He, A. Li, L. Yan, D. Zhang, Y. Zhu, H. Chen, H. Meng, and O. Goto, to be submitted.
 [5] G. Schweicher, V. Lemaire, C. Niebel, C. Ruzie, Y. Diaoy, O. Goto, W. Y. Lee, Y. Kim, J. B. Arlin, J. Karpinska, A. R. Kennedy, S. R. Parkin, Y. Olivier, S. C. B. Mannsfeld, J. Cornil, Y. H. Geerts, Z. Bao, Adv. Mater. 2015, 27, 3066-3072.

標題 : 理論インフォーマルセミナー : Triply Degenerate Nodal Point Semimetals

日時 : 2017年8月24日(木) 午後4時~午後5時

場所 : 物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師 : Prof. Hongming Weng

所属 : Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences

要旨 :

Searching for the analogues of high-energy particles in solids has become a hot topic since the discovery of Dirac semimetals Na_3Bi and Cd_3As_2 , and Weyl semimetals TaAs family. The massless Dirac fermions described by Dirac equation behave in the similar way as the low energy excitation around the four-fold degenerate nodal points formed by band crossing in solids. The chiral Weyl fermions are described by two-component Weyl equation with two nondegenerate bands touching at a point. In solids, the space group can protect energy nodes with other degeneracies, such as three, six and eight-fold one, which might lead to massless fermions that have no counterpart particles in high-energy physics[1]. In this talk, I will introduce our recent theoretical proposals of triply degenerate nodal point semimetals. They are crystals with symmorphic space group symmetry of WC type crystal structure, including TaN[2], ZrTe[3], HfC[4], MoP[5,6] and WC[7,8]. The unconventional three component fermions in them are formed by crossing of nondegenerate and double degenerate bands, protected by both rotational and mirror symmetries. As an intermediate fermion between Dirac and Weyl fermion, the host semimetal has different magnetoresistance from Dirac semimetal and Weyl semimetal.

- [1] B. Bradlyn et al., 353, aaf 5037 (2016); H. Weng et al., Nat. Sci. Rev. doi:10.1093/nsr/nwx066.
 [2] H. Weng et al., Phys. Rev. B 93, 241202 (2016).
 [3] H. Weng et al., Phys. Rev. B 94, 165201 (2016).
 [4] R. Yu et al., Phys. Rev. Lett. 193, 036401 (2017).
 [5] Z. Zhu et al. Phy. Rev. X 6, 031003 (2016); J. Sun et al. Chin. Phys. Lett. 34, 027102 (2017).
 [6] B. Q. Lv et al., Nature 546, 627 (2017).
 [7] J. B. He et al., Phys. Rev. B 95, 195165 (2016).
 [8] J. Z. Ma et al., arXiv: 1706.02664.

標題 : 物質・物性セミナー : 第13回 : From CaFe_2As_2 to $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$: physical properties and effect of pressure

日時 : 2017年8月28日(月) 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 : Dr. Sergey L. Bud'ko

所属 : Ames Laboratory US DOE, and Department of Physics and Astronomy, Iowa State University, Ames, IA 50011, USA

要旨：

An overview of the synthesis and anisotropic thermodynamic and transport properties of single-crystalline, single-phase CaKFe₄As₄ will be presented. [1] The samples were grown out of a high-temperature, quaternary melt. Temperature-dependent measurements of x-ray diffraction, electrical and thermal transport, magnetization, specific heat, and ⁵⁷Fe Mossbauer spectroscopy measurements, combined with field-dependent measurements of electrical resistivity and field and pressure-dependent measurements of magnetization indicate that CaKFe₄As₄ is an ordered, stoichiometric, Fe-based superconductor with a superconducting critical temperature, T_c = 35 K. Other than superconductivity, there is no indication of any other phase transition for 1.8K < T < 300 K. All of these thermodynamic and transport data reveal striking similarities to those found for optimally or slightly overdoped (Ba_{1-x}K_x)Fe₂As₂, suggesting that stoichiometric CaKFe₄As₄ is intrinsically close to what is referred to as “optimally-doped” on a generalized phase diagram for Fe-based superconductors. Additionally, pressure response of CaKFe₄As₄ will be discussed. [2] With increasing pressure, both resistivity and magnetization data show that the bulk superconducting transition of CaKFe₄As₄ is suppressed and then disappears at P > 4 GPa. High pressure x-ray data clearly indicate a phase transition to a collapsed tetragonal phase in CaKFe₄As₄ under pressure that coincides with the abrupt loss of bulk superconductivity near 4 GPa. Band structure calculations also find a sudden transition to a collapsed tetragonal state near 4 GPa, as As-As bonding takes place across the Ca-layer. Bonding across the K-layer only occurs for P ≥ 12 GPa. These findings demonstrate a new type of collapsed tetragonal phase in CaKFe₄As₄: a half-collapsed-tetragonal phase.

These data will be compared in detailed with the literature data for CaFe₂As₂. [3]

1. W. R. Meier, et al., Phys. Rev. B 94, 064501 (2016).
2. Udhara S. Kaluarachchi et al., arXiv:1702.06622.
3. P. C. Canfield et al., Physica C 469, 404 (2009).

標題：理論インフォーマルセミナー：Skyrmion crystal as a promising thermoelectric converter: A prediction from first-principles

日時：2017年8月29日(火) 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：Mr. Yo Pierre Mizuta

所属：Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University

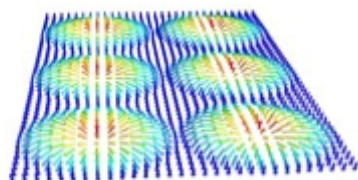
要旨：

The anomalous Nernst effect (ANE), a heat-to-electric conversion in mutually transverse directions, can be driven by an emergent magnetic field *B* originating from inhomogeneous magnetic moments in solids. Large ANE has been experimentally confirmed in various ferromagnets, and only very recently, also in an antiferromagnet [1]. Here we theoretically propose that, the Skyrmion crystal (SkX), in which magnetic topological objects *Skyrmions* are crystallized, is another candidate to host large ANE.

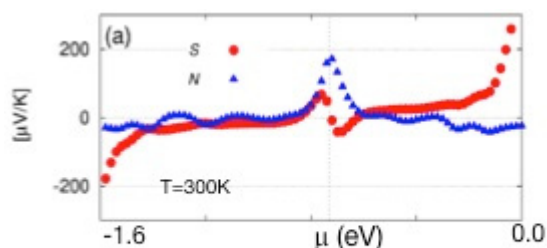
We have found through first-principles calculations on a single *s*-orbital model using the package *OpenMX* [2] and *Wannier90* [3] that, **in a two dimensional SkX phase a large ANE would appear when chemical potential μ is properly tuned** (Figure) [4]. This was interpreted as due to its characteristic distribution of Chern numbers among the bands (each Chern number representing quantized flux of *B* field through each electronic band in momentum space).

Following such an observation in the simplest model of square SkX [4], our subsequent computations on a more realistic oxide film also predict large ANE.

This motivates further studies of ANE in the SkX family, in quest of better thermoelectric materials that exploit this effect.



An example of square SkX



Predicted large ANE coefficient (blue) in a SkX (s-orbital model of Ref. [4])

- [1] M. Ikhlas *et al.*, Nature Physics (2017) doi:10.1038/nphys4181.
- [2] T. Ozaki *et al.*, *Open source package for Material eXplorer*, <http://www.openmx-square.org/>
- [3] A. A. Mostofi *et al.*, <http://www.wannier.org>.
- [4] Y. P. Mizuta and F. Ishii, Scientific Reports 6, 28076 (2016).

標題：ナノサイエンスセミナー：Quantum state readout of individual quantum dots by electrostatic force detection

日時：2017年9月14日(木) 午前10時30分～午前11時30分

場所：物性研究所本館6階 第2会議室 (A635)

講師：Dr. Yoichi MIYAHARA

所属：Department of Physics, McGill University, Canada

要旨：

Electric charge detection by atomic force microscopy (AFM) with single-electron resolution (e-EFM) is a promising way to investigate the electronic level structure of individual quantum dots (QD). The oscillating AFM tip modulates the energy of the QDs, causing single electrons to tunnel between QDs and an electrode. The resulting oscillating electrostatic force changes the resonant frequency and damping of the AFM cantilever, enabling electrometry with a single-electron sensitivity. Quantitative electronic level spectroscopy is possible by sweeping the bias voltage. Charge stability diagram can be obtained by scanning the AFM tip around the QD. e-EFM technique enables to investigate individual colloidal nanoparticles and self-assembled QDs without defining nanoscale electrodes. e-EFM is a quantum electromechanical system where the back-action of a tunneling electron is detected by AFM. The technique can also be considered as a mechanical analog of admittance spectroscopy with a radio frequency resonator, which is emerging as a promising tool for quantum state readout for quantum computing. In combination with the topography imaging capability of the AFM, e-EFM is a powerful tool for investigating new nanoscale material systems which can be used as quantum bits such as nanowires and single molecules and dopants.



標題：極限コヒーレント光科学セミナー：第 54 回：遷移金属ダイテルライドの電子構造と格子ダイナミクス

日時：2017 年 9 月 15 日(金) 午前 10 時～

場所：物性研究所本館 6 階 第一会議室 (A636)

講師：石坂 香子

要旨：

遷移金属ダイカルコゲナイドは超伝導、電荷密度波をはじめとする多彩な電子相を示すファンデルワールス物質群であり、近年ではバレー分極[1]やトポロジカルな性質の観点からも盛んに研究されている。我々はこのなかで、大きな格子歪と金属ジグザグ鎖形成に特徴づけられる特異な構造相転移を示すテルル化合物に注目し、レーザー角度分解光電子分光による電子構造の解明や、時間分解電子線回折[2]による格子ダイナミクスの研究を進めている。本講演では、MoTe₂におけるワイル半金属状態の極性ドメイン依存性[3]、VTe₂の二重ジグザグ鎖状態における電子構造の解明[4]、および VTe₂の構造相転移を利用した新規なコヒーレント音響フォノン生成[5]について、最近得られた成果を紹介する。

[1] R.Suzuki, M. Sakano et al., Nature Nanotechnology 9, 611 (2014).

[2] A.Nakamura et al., Struct, Dyn. 3, 064501 (2016).

[3] M. Sakano et al., Phys. Rev. B 95, 121101(R) (2017).

[4] N. Mitsuishi et al., in preparation.

[5] A. Nakamura et al., in preparation.

標題：LASOR セミナー：When THz meets X-rays: Ultrafast Magnetism

日時：2017 年 9 月 25 日(月) 午前 10 時 30 分～

場所：播磨会議室 (TV 会議：物性研究所第一会議室)

講師：Dr. Ilie Radu

所属：Max-Born Institute Berlin, Germany

要旨：

The fundamental interactions and excitations governing magnetism and correlated matter occur on nanometer length-scales and femtosecond time-scales. Examples are phonons, magnons and electrons as well as their mutual interactions. A direct and selective excitation of these quasiparticles is possible with electromagnetic pulses at THz frequencies, whereas space-, element- and spin-resolved probing is provided by X-rays. Combining these two techniques will allow us to explore magnetic materials with unprecedented temporal, spatial and elemental resolution and to obtain quasiparticle-specific information, these being the key ingredients for understanding ultrafast magnetic phenomena.

Here, I will review the latest developments in our projects on ultrafast magnetism using both X-rays and THz radiation with a focus on magnetization switching phenomena.