

物質設計評価施設

Materials Design and Characterization Laboratory (MDCL)

物質設計評価施設では、物質の「設計 (Design)」、具体的な物質の「合成 (Synthesis)」、合成された物質を総合的に調べる「評価 (Characterization)」の3つの研究をサイクル (DSCサイクル) として有機的に連携させることにより、新しい物性・機能を持つ物質の開発を目指している。本施設は物質設計部と物質合成・評価部からなり、物質設計部には電子計算機室が、物質合成・評価部には物質合成室、化学分析室、X線測定室、電子顕微鏡室、電磁気測定室、光学測定室、高圧合成室の7実験室がある。物質設計部では、最先端の物性専用のスーパーコンピュータを駆使して原子間の相互作用によって生み出される様々な協力現象を解明しつつ新物質の設計を行い、物質合成・評価部では物質の合成、単結晶育成およびその組成の分析や結晶構造評価を行うとともに、新しく開拓された物質群の電氣的・磁氣的・光学的性質の総合評価を行っている。これら物質の総合評価の結果は設計および合成にフィードバックされ、DSCサイクルを通して新しい物質の開発が行なわれる。本施設の全国共同利用は、物質設計評価施設運営委員会により運用されている。

The aim of MDCL is to promote materials science with the emphasis on the “DSC cycle”, where DSC represents three functions in developing new materials, Design, Synthesis and Characterization. The MDCL consists of two divisions; Materials Design Division (MD-D) and Materials Synthesis and Characterization Division (MSC-D). The Super-computer Center of ISSP (SCC-ISSP) belongs to MD-D, while in MSC-D there are seven sections for joint-use; Materials Synthesis Section, Chemical Analysis Section, X-Ray Diffraction Section, Electron Microscope Section, Electromagnetic Measurements Section, Spectroscopy Section, and High-Pressure Synthesis Section. In MD-D, by making use of its supercomputer system, novel mechanisms behind various cooperative phenomena in condensed matter are explored, and theoretical designs of new materials as well as materials with new nanoscale structures are developed. In MSC-D, various types of new materials are synthesized, single crystals are grown, and the structural, electromagnetic and optic properties of the materials are characterized in various ways. The characterization results are immediately fed back to the synthesis and to the design of materials. Through this DSC cycle we aim to develop new materials with new functions. Almost all the facilities of the MDCL are open to domestic scientists through the User Programs conducted by the Steering Committees of the MDCL.

教授 (施設長) 廣井 善二
Professor (Director) HIROI, Zenji

教授 川島 直輝
Professor KAWASHIMA, Naoki

准教授 野口 博司
Associate Professor NOGUCHI, Hiroshi

准教授* 杉野 修
Associate Professor SUGINO, Osamu

助教 芝 隼人
Research Associate SHIBA, Hayato

助教 渡辺 宙志
Research Associate WATANABE, Hiroshi

助教 笠松 秀輔
Research Associate KASAMATSU, Shusuke

助教 森田 悟史
Research Associate MORITA, Satoshi

助教 矢島 健
Research Associate YAJIMA, Takeshi

助教 平井 大悟郎
Research Associate HIRAI, Daigorou

技術専門職員 小池 正義
Technical Associate KOIKE, Masayoshi

技術専門職員 山内 徹
Technical Associate YAMAUCHI, Toru

技術専門職員 矢田 裕行
Technical Associate YATA, Hiroyuki

技術専門職員 福田 毅哉
Technical Associate FUKUDA, Takaki

技術専門職員 後藤 弘匡
Technical Associate GOTO, Hirotsada

技術職員 浜根 大輔
Technical Associate HAMANE, Daisuke

技術職員 石井 梨恵子
Technical Associate ISHII, Rieko

特任専門職員 北澤 恒男
Technical Associate KITAZAWA, Tsuneko

学術支援専門職員 荒木 繁行
Technical Associate ARAKI, Shigeyuki

特任研究員 那波 和宏
Project Researcher NAWA, Kazuhiro

特任研究員 本山 裕一
Project Researcher MOTOYAMA, Yuichi

特任研究員 吉見 一慶
Project Researcher YOSHIMI, Kazuyoshi

特任研究員 河村 光晶
Project Researcher KAWAMURA, Mitsuaki

* 物性理論研究部門と併任 /concurrent with Division of Condensed Matter Theory

廣井研究室

Hiroi Group



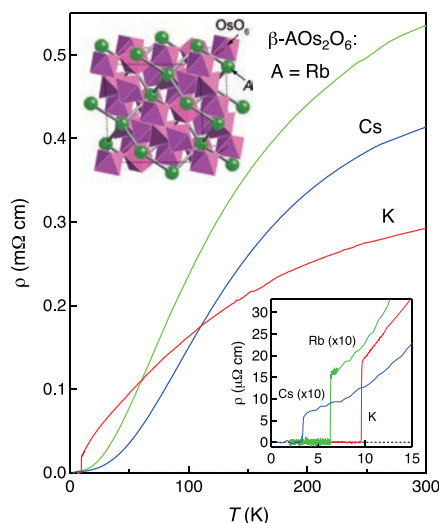
廣井 善二
HIROI, Zenji
教授
Professor



平井 大悟郎
HIRAI, Daigorou
助教
Research Associate

高温超伝導の発見とその後の研究の流れは、新物質の発見が如何に物性物理学に大きなインパクトを与えるかを如実に示した。その波紋は超伝導研究のみならず、強相関電子系一般における局在 - 非局在の概念の確立や磁性と伝導性の興味深い相関の研究へと大きな広がりを見せている。新物質探索を通して未知の物理現象を見出し、物性物理学の新しい方向を切り開くことは今後ますます重要になると考えられる。

遷移金属酸化物は強相関電子系の宝庫である。特に小さなスピン量子数をもつ低次元系（量子スピン系）において、強いクーロン反発によって局在しているd電子がキャリア数やバンド幅の制御によって動き始める時、量子効果による劇的な現象が期待される。本研究室では、様々な遷移金属酸化物の構造と物性の間にみられる相関に着目しながら、新物質探索を行い、強相関電子系の物質科学の面白さを研究している。

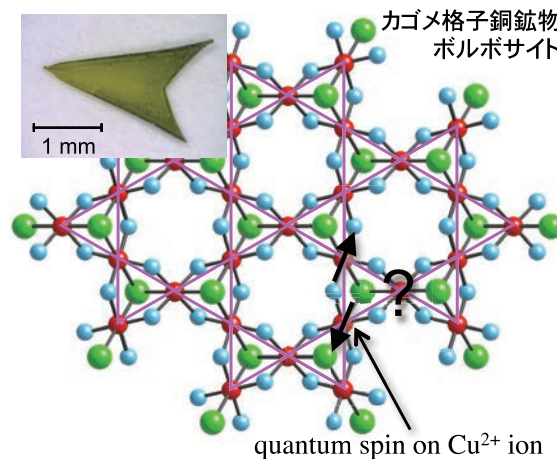


当研究室で発見されたβパイロクロア酸化物超伝導体 AOs_2O_6 の電気抵抗。超伝導転移温度は、3.3K (A = Cs)、6.3K (Rb)、9.6K (K) である。

Superconducting transitions observed in resistivity for the β -pyrochlore oxide superconductors AOs_2O_6 found in the Hiroi laboratory. The T_c s are 3.3, 6.3 and 9.6 K for A = Cs, Rb and K, respectively.

The remarkable discovery of high- T_c superconductivity and the following enthusiastic research in the last decade have clearly exemplified how the finding of new materials would give a great impact on the progress of solid state physics. Now related topics are spreading over not only superconductivity but also unusual metallic behavior, which are often observed near the metal-insulator transition in the strongly correlated electron systems. We believe that for the next few decades it will become more important to explore novel physics through searching for new materials.

A family of transition-metal oxides is one of the most typical systems where Coulomb interactions play a critical role on magnetic and electronic properties. Especially interesting is what is expected when electrons localized due to the strong Coulomb repulsion start moving by changing the bandwidth or the number of electrons. We anticipate there unknown, dramatic phenomena governed by many-body effects and quantum fluctuations.



スピン 1/2 カゴメ格子反強磁性体のモデル物質となる銅鉱物ボルボサイトの結晶構造と単結晶

Copper mineral volborthite representing a spin-1/2 kagome-lattice antiferromagnet

研究テーマ Research Subjects

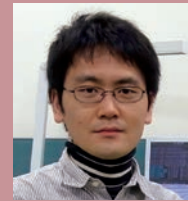
1. 新しい量子スピン系及び強相関電子系物質の開発
Search for new materials realizing quantum spin systems or strongly correlated electron systems
2. スピン 1/2 カゴメ格子反強磁性体の基底状態
Ground state of the spin-1/2 kagome antiferromagnet
3. 高温超伝導体
High- T_c superconductors

川島研究室

Kawashima Group



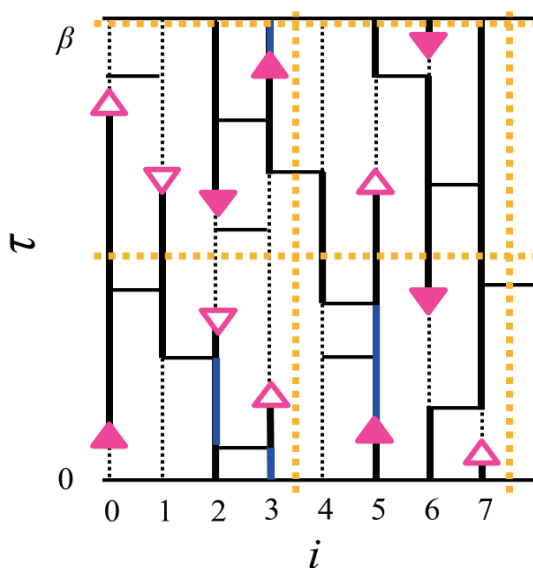
川島 直輝
KAWASHIMA, Naoki
教授
Professor



森田 悟史
MORITA, Satoshi
助教
Research Associate

本研究室では物性研究所スパコンや神戸の京コンピュータなどの大規模並列計算機を利用して、物性論で登場する基本的な問題の解明を行っている。また、そのためのアルゴリズムの研究も行っている。最近数年の研究から例をあげると、量子臨界現象に関しては、新しいカテゴリーの転移現象である脱閉じ込め転移を、 $SU(N)$ ハイゼンベルクモデルにおけるネール状態からVBS状態への相転移として観測する試みや、光格子にトラップされた極低温原子系やグラファイト表面のヘリウム系における超固体相の存在／不在の研究などがある。また、古典系に関しては、 Z_2 渦の乖離メカニズムによる相転移の有無の数値的検証、危険なイレバント演算子が系の対称性を低下させる場合にみられる異常な臨界現象などがある。さらに、最近ではテンソルネットワークなどの新しい方法論の開拓や、計算複雑性と物理的特性との間の関係についての研究なども行っている。

Our group investigates fundamental problems in condensed matter physics through massively parallel computation using ISSP supercomputers and “K-computer” at Kobe. For this purpose, we also develop new algorithms. As for quantum critical phenomena, for example, we are trying to find a “deconfined” critical phenomena, a new category of quantum phase transition, as a transition between Neel state and VBS state in the $SU(N)$ Heisenberg model. Another target in this area of research is the existence/absence of super-solid phase in optical lattices and in ^4He systems adsorbed on graphite surfaces. As for classical systems, we investigate the phase transition due to the Z_2 vortex dissociation, an unconventional critical phenomena caused by the symmetry-breaking dangerously-irrelevant field, etc. Furthermore, we recently work on developments of new computational methods such as tensor networks, as well as the possible relationship between the computational complexity and the thermodynamic properties.



多数の不連続点を持つワームアルゴリズム。これによってワームアルゴリズムの並列計算が可能になった。

Worm algorithm with multiple worms, which makes the worm algorithm parallelizable.

研究テーマ Research Subjects

1. 新しい量子相と量子相転移の探索
Search for novel quantum phases and quantum transitions
2. 多体問題の数値解法の研究
Numerical methods for many-body physics
3. 臨界現象の一般論
General theory of critical phenomena
4. ランダム系と計算量
Disordered systems and computational complexity

野口研究室

Noguchi Group

野口 博司
NOGUCHI, Hiroshi
准教授
Associate Professor芝 隼人
SHIBA, Hayato
助教
Research Associate

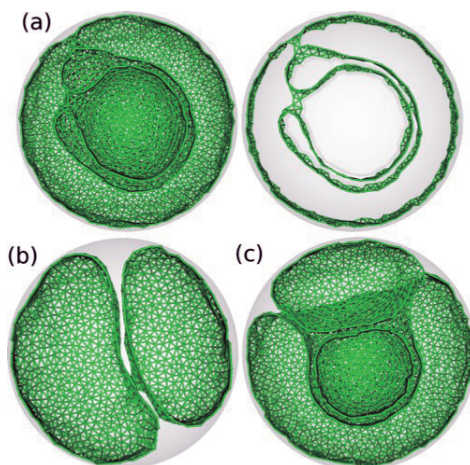
ソフトマター、生物物理学を計算機を駆使して研究している。特に、生体膜や細胞のダイナミクス of 解明に力を入れている。そのためのシミュレーション手法の開発、改良も行っている。

例えば、赤血球や脂質膜からなる小胞のさまざまな環境下での形態変化を調べている。これまで、流れによって赤血球がパラシュート状やスリッパ状に変形することや、脂質小胞が形態変化に伴い、運動モードの転移を起こすことなどを明らかにしている。

また、生体膜の融合、分裂過程についても研究している。生体内では膜の融合、分裂が物質運搬のために頻繁に起こっている。その過程を粗視化分子模型を用いてシミュレーションし、これまで言われていなかった経路も新しく発見した。融合の物理的な機構の全容解明に取り組んでいる。

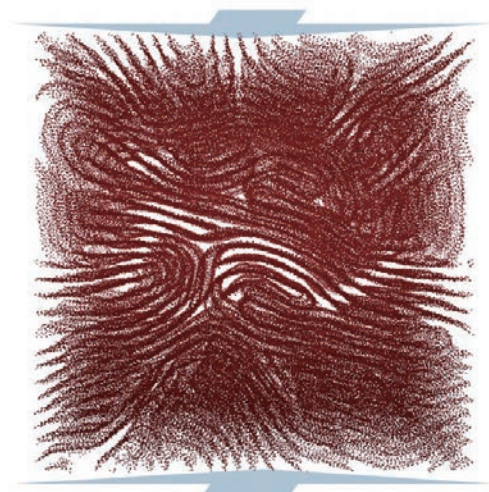
We study soft-matter physics and biophysics theoretically and numerically. Our main target is the physics of biomembrane and cells under various conditions. We develop membrane models and hydrodynamics simulation methods.

We found the shape transitions of red blood cells and lipid vesicles in shear and capillary flows using mesoscale hydrodynamic simulations: discocyte-to-parachute, stomatocyte-to-prolate, and prolate-to-discocyte, etc. We also clarify the several fusion and fission pathways of the membrane using coarse-grained molecular simulations. In particular, the pathway via pore opening on the edge of stalk-like connection was newly found by us, and later supported by an experiment.



球状ベシクルに内包されたベシクル。空間拘束によって様々な形態が形成される。

Snapshot of a lipid vesicle confined in a spherical vesicle.



せん断流下での界面活性剤膜のロール状構造の形成。

Snapshot of the rolled structure of surfactant membranes induced by shear flow.

研究テーマ Research Subjects

1. 細胞、脂質ベシクルの形態形成
Shape transformation of cells and lipid vesicles
2. 生体膜の融合、分裂
Fusion and fission of biomembranes
3. 非平衡下での界面活性剤膜のダイナミクス
Dynamics of membranes out of equilibrium
4. ガラスにおける遅い緩和現象
Slow dynamics in glass

物質設計評価施設

物質設計部 (Materials Design Division)

電子計算機室 Supercomputer Center

担当所員 野口 博司 Chairperson : NOGUCHI, Hiroshi
担当所員 川島 直輝 Contact Person : KAWASHIMA, Naoki
担当所員 杉野 修 Contact Person : SUGINO, Osamu
助 教 渡辺 宙志 Research Associate : WATANABE, Hiroshi
助 教 笠松 秀輔 Research Associate : KASAMATSU, Shusuke

技術専門職員 矢田 裕行 Technical Associate : YATA, Hiroyuki
技術専門職員 福田 毅哉 Technical Associate : FUKUDA, Takaki
学術支援専門職員 荒木 繁行 Technical Associate : ARAKI, Shigeyuki



渡辺 助教



笠松 助教

1. 全国共同利用スーパーコンピュータ

電子計算機室では計算物性物理学専用のスーパーコンピュータシステムを、スーパーコンピュータ共同利用委員会の審議に基づき全国の物性研究者の共同利用に供している。スパコンシステムは2015年7月に更新された大規模並列計算機 (SGI ICE XA/UV ハイブリッドシステム、3820CPU (Intel Xeon) + 576GPU (Nvidia Tesla K40)) に、2013年4月に導入された大規模並列計算機 (FUJITSU PRIMEHPC FX 10, 384CPU) を加えた複合システムである。システムのベンダーとの密な連絡によって高度なシステム性能を維持するとともに、全国ユーザからの相談にきめ細かく応じながら、システムの管理運用を行っている。スーパーコンピュータの利用申請については、ホームページ (<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/>) を参照されたい。また、2015年度からソフトウェア開発・高度化支援プログラムを開始した。

2. 所内ネットワーク関連

本室では、物性研究所 LAN、および、ファイルサーバ、WWW サーバ (物性研ホームページ <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp>) 他の各種サーバの管理運用を行い、大学院生を含めた所内に提供している。物性研ネットワークでは東京大学キャンパスネットワーク (UTnet) を通したインターネットへの接続のため、ファイアウォールの設置、ウイルス対策ソフトウェアの所内への配布などのセキュリティ対策を行っている。また、所内でのコンピュータおよびネットワーク関係の Q&A、テレビ会議システムなどの機器の管理と利用促進なども行っている。

3. HPCI 戦略プログラム (旧「次世代スパコンプロジェクト戦略プログラム」) の支援

計算資源の管理・運用などを通じて当該プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」の推進をサポートしている。



スーパーコンピュータ システム B (SGI ICE XA/UV hybrid system)
The supercomputer system B (SGI ICE XA/UV hybrid system)

1. Joint-Use Supercomputer System

The Supercomputer Center (SCC) operates a supercomputer system available to all researchers of condensed matter physics in Japan. One can submit a proposal for a User Program to the Supercomputer Steering Committee, and once granted he/she can use the facility with no charge. The supercomputer system consists of two systems: SGI ICE XA/UV hybrid system (3820CPU (Intel Xeon) + 576GPU (Nvidia Tesla K40)) and FUJITSU PRIMEHPC FX 10 (384CPU). The former system and the latter system were renewed in July 2015 and April 2013, respectively. In addition to maintaining high performance of the system in cooperation with the vendors (SGI and Fujitsu), the SCC also responds to questions and inquiries from users on daily basis.

2. In-House Networks and related missions

The SCC also operates the local area network in ISSP, and file servers, WWW servers for the ISSP home page (<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp>), and other servers, to support all the users in ISSP. It takes severe measures of network security of the ISSP, which is connected to the internet via UTnet (the campus network of the University of Tokyo). We, for example, monitor electronic traffics for virus infection and by distributing anti-virus software to in-house users.

3. MEXT, HPCI Project

We support Center of Computational Materials Science, ISSP, which is responsible to the project "Novel materials and energy resources", by providing and managing computer resources.



物性研究所共同利用スーパーコンピュータシステム構成図
The Supercomputer System at the SCC-ISSP

物質合成・評価部 (Materials Synthesis and Characterization Division)

物質合成室 Materials Synthesis Section

担当所員 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
 技術職員 石井 梨恵子 Technical Associate : ISHII, Rieko
 特任専門職員 北澤 恒男 Technical Associate : KITAZAWA, Tsuneo

本室では、新物質の合成、既知物質の良質化、単結晶育成など研究用試料の合成を行っている。また、各種高温電気炉や単結晶育成炉、試料調整加工機などを所内外の共同利用研究機器として供している。

The main purposes of the Materials Synthesis Section are to synthesize new compounds and to prepare well-characterized samples and single crystals of various materials. Various kinds of furnaces are provided for crystal growth experiments.

主要設備

フローティングゾーン単結晶育成炉、単結晶引上炉、各種電気炉（抵抗加熱式ブリッジマン炉、フラックス炉、アーク溶解炉、シリコニット炉）、真空蒸着装置（ 10^{-6} Torr）、精密切断機

Main Facilities

Floating-zone furnaces, Czochralski pulling apparatus with an induction heating system, Bridgman-type furnace, Ar-arc furnace, Furnace for flux method, Ultra-high vacuum deposition apparatus, and Cutting machine.



単結晶引上炉

Czochralski pulling apparatus with an induction heating system

化学分析室 Chemical Analysis Section

担当所員 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
 技術専門職員 小池 正義 Technical Associate : KOIKE, Masayoshi
 技術職員 石井 梨恵子 Technical Associate : ISHII, Rieko

本室では、物性研究に有用な物質についての化学分析や新しい物質の分析方法の検討および化学的手法による材料の精製および調整を行うと共に、秤量・分析・化学処理に関わる各種機器を所内外の共同利用に供している。

The Chemical Analysis Section is engaged in determining the chemical composition of specimens and in purifying chemical reagents for preparation of high quality specimens. The analytical equipments, several types of automatic balance and a system for preparation of ultra-high purity water are provided for chemical analysis experiments.

主要設備

誘導結合高周波プラズマ発光分光分析装置、各種顕微鏡、電子天秤、電位差滴定装置、純水製造装置

Main Facilities

ICP-AES, microscopes, Automatic balances, Potentiometric titration apparatus, and the system for preparation of ultra-high purity water.



誘導結合高周波プラズマ発光分光分析装置
ICP-AES

物質設計評価施設

物質合成・評価部 (Materials Synthesis and Characterization Division)

X線測定室 X-Ray Diffraction Section

担当所員 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
助教 矢島 健 Research Associate : YAJIMA, Takeshi



矢島 助教

興味深い物性を示す物質の開発や評価において、結晶構造解析は極めて重要な位置を占める。本室では、X線回折を用いて、新規物質の結晶構造や温度による構造変化など物質構造の研究を行うと共に、所内外の研究者に対して施設利用の提供、依頼研究を行っている。

The main purposes of the X-Ray Diffraction Section are structural analysis and identification of powder and single crystal specimens for solid state physics. By using the 4-circle diffractometer equipped with a warped imaging plate and a refrigerator, the structural analysis is performed in the temperature range of 7-300 K.

主要設備

粉末X線回折装置、単結晶構造解析用 CCD システム、四軸型X線回折計、湾曲イメージングプレート型X線回折計、ラウエカメラ、イメージングプレート読み取り装置

Main Facilities

Powder X-ray diffractometer, CCD system for the single-crystal structure analysis, Automatic 4-circle X-ray diffractometer, Warped imaging plate type diffractometer, Monochromated Laue camera, and Imaging plate reader.



極低温用イメージングプレート型X線回折計
Imaging plate type X-ray diffractometer for low temperature application

電子顕微鏡室 Electron Microscope Section

担当所員 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
技術職員 浜根 大輔 Technical Associate : HAMANE, Daisuke

電子顕微鏡は物質の微細構造評価の有力な手段である。本室では、格子像レベルでの透過像を観察するため、高分解能形と電界放射形分析電子顕微鏡を備え、物質の微細構造研究を行うと共に、設備を所内外の利用に供し、共同利用研究や依頼研究を行っている。

The Electron Microscope Section supports electron diffraction measurements, lattice image observations and microscopic analyses of various solid materials in both crystalline and non-crystalline forms with the atomic-scale resolution by using a high-resolution electron microscope equipped with an x-ray micro-analyzer.

主要設備

200kV 電界放射形分析電子顕微鏡、低温・高温ホルダー、薄膜試料作製のための種々の装置

Main Facilities

200 kV electron microscope with an x-ray micro-analyzer, High- and low-temperature holders, and various apparatuses for sample preparation.



200 kV 電界放射形分析電子顕微鏡
200 kV electron microscope with an X-ray micro-analyzer

物質合成・評価部 (Materials Synthesis and Characterization Division)

電磁気測定室 Electromagnetic Measurements Section

担当所員 家 泰弘 Contact Person : IYE, Yasuhiro
 担当所員 瀧川 仁 Contact Person : TAKIGAWA, Masashi
 担当所員 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
 技術専門職員 山内 徹 Technical Associate : YAMAUCHI, Touru

本室では、物質の基本的性質である電氣的磁氣的性質を、温度および磁場の広い範囲にわたって測定するとともに、磁気特性測定装置、物理特性測定装置、超伝導磁石などの設備を所内外の共同利用に供している。

The Electromagnetic Measurements Section offers various facilities for measurements of electric and magnetic properties of materials. The followings are types of experiments currently supported in this section: electrical resistivity, magnetoresistance and Hall effect, magnetization, a.c. susceptibility, magnetic torque, and NMR.

主要設備

15/17テスラ超伝導マグネット、16/18テスラ高均一超伝導マグネット (NMR)、SQUID磁化測定装置 (MPMS)、汎用物性測定装置 (PPMS)、クロスコイル型超伝導マグネット

Main Facilities

Superconducting magnet (15/17 T), High homogeneity superconducting magnet (16/18 T) for NMR experiments, SQUID magnetometer (7 T), PPMS (physical properties measurement system), and Cross-coil-type superconducting magnet.



磁気特性測定装置
SQUID magnetometer (MPMS)

光学測定室 Spectroscopy Section

担当所員 末元 徹 Contact Person : SUEMOTO, Tohru
 担当所員 秋山 英文 Contact Person : AKIYAMA, Hidefumi

汎用性のある光学測定機器やレーザー光源を備え、所内外の共同利用に供している。可視・紫外・赤外領域の吸収・反射スペクトル、顕微ラマン分光などの測定が可能である。

The Spectroscopy Section offers joint-use facilities for standard optical measurements. The facilities can be used for measurements of conventional absorption/reflection spectrum in the UV, visible and IR regions and Raman scattering.

主要設備

可視紫外分光光度計、赤外分光光度計、ラマン分光光度計、波長可変パルスレーザー光源

Main Facilities

UV/VIS absorption spectrometer, IR spectrometer, Micro-Raman spectrometer with Ar and He-Ne lasers, Pulsed YAG laser equipped with tunable OPPO and a laser-machining unit, Ar ion laser, Cryostat.



赤外およびラマン分光装置
IR and Raman Spectrometers (Room A468)

物質設計評価施設

物質合成・評価部 (Materials Synthesis and Characterization Division)

高压合成室 High-Pressure Synthesis Section

担当所員 廣井 善二 Contact Person : HIROI, Zenji
技術専門職員 後藤 弘匡 Technical Associate : GOTOU, Hirokata

本室では、百万気圧、数千度までの高温高压下において様々な(新)物質の合成を行うと共に、高压力下における物質の挙動を調べている。さらに各種の高压力発生装置や関連する実験設備を所内外の共同利用に供している。

The main purposes of the High-Pressure Synthesis Section are to synthesize various (new) compounds and to investigate the behavior of some materials at extreme conditions of high pressures up to 100 GPa or more and high temperatures up to several thousand °C. Various types of high-pressure apparatuses and related experimental equipments are provided to joint research and internal use.

主要設備

500/700 トン油圧プレス装置、ダイヤモンドアンビルセル、X線回折装置、顕微ラマン分光装置、YAG レーザー加工機、その他(放電加工機、ダイヤモンド研磨装置、旋盤、NC モデリングマシン)

Main Facilities

500/700 ton press, Diamond Anvil Cell, X-ray diffractometer, Micro-Raman spectrometer, YAG laser cutting machine, and others including Electric discharge machine, Grinding machine for diamond, Lathe machine, and Modeling machine.



若槻型 700ton キュービックプレス。4GPa までの高温高压合成実験用。

Wakatsuki-type 700 ton cubic press for high pressure and high temperature synthesis experiments up to 4 GPa.