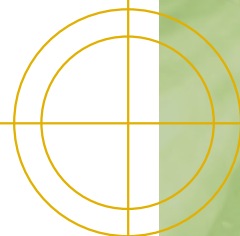


# 機能物性研究グループ

## Functional Materials Group



物性から機能を引き出し利用できるようにするためには、物質の基底状態・平衡状態の静的電子物性を基盤として、励起状態・非平衡状態、さらには化学反応や生体系に至る動的な性質に踏み込む必要がある。近年、励起状態や非平衡状態の時間分解測定、ナノスケールの分析・分光測定、動作・反応中でのオペランド観測などの物性測定法や分光法は飛躍的に進歩した。一方、計算機科学やデータ科学を用いた理論的解析が著しく進展している。物性研究所でもこれらの手法が導入・開発され、先進的な物性研究が行われている。そこで、物性研究所の既存のグループが連携しつつ、新たに取り組むべき分野を具体的に開拓するために、機能物性研究グループが形成された。機能物性研究では、伝統的な固体物性物理が対象としてきた電子・スピン・格子及びそれらの動的過程だけでなく、原子・イオンの移動や原子の組み替え(反応)を含めて、マルチスケール・階層的複合構造をもつ物質システムを扱う。本研究グループでは、重点的な研究テーマに対する共通の関心と相補的な専門技術を有する物性研究所の研究者数名がコアメンバーとなるが、さらに数名の所員が従来の部門に属しつつ本グループの併任として機能物性研究に参加する。

The Functional Materials Group is one of two new trans-divisional and interdisciplinary research groups and deals with excited states and dynamics in systems with hierarchical and inhomogeneous structures, including chemical reactions and dynamical processes in biological systems. Recently, time-resolved spectroscopy of excited states and non-equilibrium states, nano-scale observation and measurement as well as operando spectroscopy/measurement have greatly advanced. Theoretical analysis based on first-principles calculation and data science has achieved a remarkable development. There are already pioneering works done at ISSP along such directions as mentioned above. To get started, several current faculty and staff members of ISSP have been assigned to the core members. The core members are expected to provide seeds of collaboration and organize a research team involving other divisions and facilities as well as researchers outside ISSP. It is particularly important to collaborate with research facilities of ISSP so that their advanced and unique resources can enhance the scientific quality. By taking advantage of being a joint-use/research center, we can always invite external researchers to collaborate on new subjects. The Functional Materials Group should work as an open platform for such collaborations.

教授  
Professor

吉信 淳  
YOSHINOBU, Jun

教授  
Professor

秋山 英文  
AKIYAMA, Hidefumi

教授  
Professor

杉野 修  
SUGINO, Osamu

教授\*1  
Professor

柴山 充弘  
SHIBAYAMA, Mitsuhiro

教授\*2  
Professor

小森 文夫  
KOMORI, Fumio

教授\*3  
Professor

森 初果  
MORI, Hatsumi

教授\*1  
Professor

山室 修  
YAMAMURO, Osamu

教授\*2  
Professor

リップマー ミック  
LIPPMAA, Mikk

教授\*4  
Professor

原田 慈久  
HARADA, Yoshihisa

准教授  
Associate Professor

井上 圭一  
INOUE, Keiichi

准教授\*4  
Associate Professor

松田 巖  
MATSUDA, Iwao

准教授\*5  
Associate Professor

野口 博司  
NOGUUCHI, Hiroshi

助教  
Research Associate

挟間 優治  
HAZAMA, Yuji

助教  
Research Associate

春山 潤  
HARUYAMA, Jun

技術専門職員  
Technical Associate

向井 孝三  
MUKAI, Kozo

特任研究員  
Project Researcher

薄倉 淳子  
USUKURA, Junko

特任研究員  
Project Researcher

金 昌秀  
KIM, Changsu

特任研究員  
Project Researcher

陶 仁春  
TAO, Renchun

特任研究員  
Project Researcher

中前 秀一  
NAKAMAE, Hidekazu

特任研究員  
Project Researcher

山本 良幸  
YAMAMOTO, Yoshiyuki

特任研究員  
Project Researcher

ヤン レイ  
YAN, Lei

\*1 所内兼務。本務は中性子科学研究施設。  
/ concurrent with Neutron Science Laboratory

\*2 所内兼務。本務はナノスケール物性研究部門。  
/ concurrent with Division of Nanoscale Science

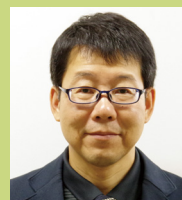
\*3 所内兼務。本務は凝縮系物性研究部門。  
/ concurrent with Division of Condensed Matter Science

\*4 所内兼務。本務は極限コヒーレント光科学研究センター。  
/ concurrent with Laser and Synchrotron Research Center

\*5 所内兼務。本務は物質設計評価施設。  
/ concurrent with Materials Design and Characterization Laboratory

# 吉信研究室

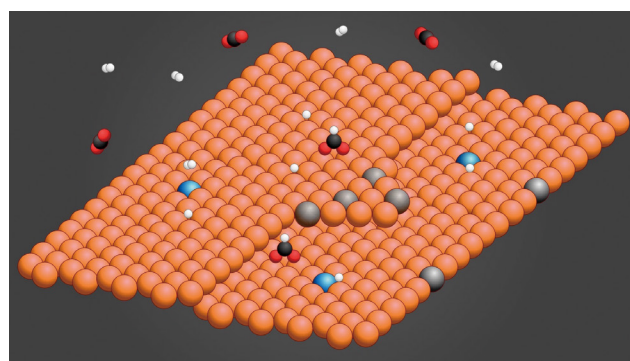
Yoshinobu Group



吉信 淳  
YOSHINOBU, Jun  
教授  
Professor

表面界面の特徴の一つは、バルクの対称性が破れ表面特有の構造や物性が現れることだけではない。外部から原子・分子を自在に表面に供給し、新しい物質を構築する「反応場」であることが最も重要な特徴である。また、表面界面は物質移動の場だけではなく、エネルギー変換の場としても極めて重要である。最近では、原子・分子レベルで制御されたナノスケールの材料（例えば、サイズの整ったクラスター、異方性の強い低次元化合物、配向の特定された分子凝集系など）を作製し、機能を持ったナノ・デバイスを構築することも可能になってきた。原子スケールで物質移動（拡散や反応）を制御し、機能をもつ材料やデバイスを創製するためには、表面・界面における素過程を理解することが不可欠である。表面における原子・分子のダイナミクス研究は、触媒反応・半導体プロセス・分子エレクトロニクスと密接に関連しており、さらに地球環境や宇宙における分子進化についても手がかりを与えてくれる。最近では、二酸化炭素や水素が関わる表面反応過程に興味を持っている。当研究室では、表面界面における原子・分子のダイナミクス（吸着、拡散、成長、脱離）、表面ナノ物質の構築および表面界面の電子物性を、表面振動分光、光電子分光などの表面分光法と、走査型トンネル顕微鏡や独立駆動4探針電気伝導測定法を駆使して研究している。シンクロトロン放射光（KEK-PF、SPring-8など）を用いた雰囲気中のオペランド光電子分光実験も行っている。

Solid surfaces are intriguing objects, because novel structures and electronic properties emerge as a result of symmetry breaking of bulk. Solid surfaces play an important role as “low dimensional reaction field”, on which we can provide atoms and molecules and manipulate them deliberately. In addition, surface and interface are vital in the energy conversion and dissipation processes. In order to fabricate atomically-controlled surface functional materials, we have to understand the dynamical behavior of atoms and molecules on surfaces. The research of these subjects is closely related to the basics of catalysis, semiconductor processes and molecular electronics. Recently, we are interested in surface reactions including CO<sub>2</sub> and hydrogen. In addition, we can simulate chemical reactions on cosmic dust with laboratory experiments in ultrahigh vacuum at low temperature. We have utilized surface vibrational spectroscopy, photoelectron spectroscopy and local probe methods in order to investigate structures, reactions and electronic properties of atoms, molecules and thin films on surfaces. Synchrotron radiation (KEK-PF, SPring8 etc.) is also used to study electronic structure of surface and interface, including operando XPS.



A schematic model of CO<sub>2</sub> hydrogenation on the Pd-Zn-Cu model catalyst

## 研究テーマ Research Subjects

1. モデル触媒による小分子の活性化と表面反応の研究  
Activation and surface reaction of small molecules by model catalysts
2. 表面や界面における水素が関わる物性と反応（ハイドロジェノミクス）  
Properties and reactions with hydrogen at surfaces and interfaces (Hydrogenomics)
3. 半導体および有機薄膜の電子状態と表面電気伝導の研究  
Electronic states and surface conductivity of semiconductor and organic thin film
4. 低次元物質の電子状態と反応性の研究  
Electronic states and reactivity of low-dimensional materials on surfaces
5. 固体表面における原子・分子の動的過程の研究  
Dynamical processes of atoms and molecules on solid surfaces

# 秋山研究室

Akiyama Group



秋山 英文  
AKIYAMA, Hidefumi  
教授  
Professor

挟間 優治  
HAZAMA, Yuji  
助教  
Research Associate

半導体量子ナノ構造の光物性や、ヘテロ構造・ナノ構造に基づく半導体レーザーや太陽電池のデバイス物理、ホタル生物発光の生物物理などを、レーザー分光・顕微分光・光学計測技術を用いて研究している。

半導体レーザーに対して、最大定格を大きく超える励起を短時間だけ加え、極端非平衡状態を生み出し、フェムト秒短パルス発生限界を迫る研究を行っている。人工衛星用高品質 III-V 族半導体タンデム太陽電池の損失機構を調べ、変換効率限界を物理的に理解するデバイス物理研究も行っている。また、世界一細くかつ均一で制御性の高い半導体量子細線レーザーを作製し、量子力学的な光学物性、低次元性、電子正孔系多体問題、半導体レーザー物理、結晶成長、物質科学など様々な興味から研究を行っている。

光学実験技術として、微細なナノ構造の発光を高感度に検出する技術、絶対量を定量計測する技術、ナノ構造の透過吸収を計測する技術、顕微分光や画像計測の技術、ソリッドイメージング顕微技術などを開発している。さらに、それらの技術を応用し、ホタルやクラゲやウミホタルの生物発光やミノール化学発光などを、生物学・化学・理論の専門家や民間会社と共同で研究している。

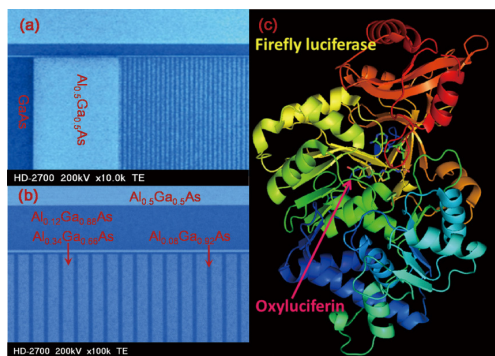
Advanced laser spectroscopy on the basis of lasers and microscopy is developed and applied to semiconductor quantum wires and other nano-structures, in order to understand and control their optical properties quantum mechanically.

Femto-second pulse generation directly from gain-switched semiconductor lasers is studied intensively to understand the pulse dynamics and the shortest-pulse limit. High-quality III-V-semiconductor tandem solar cells and their internal loss rates and mechanisms are also studied. We make the world thinnest and cleanest quantum-wire semiconductor lasers that have superior laser performances such as low threshold currents. Experimental findings and problems provide us fruitful physics subjects related to 1D physics, many-body physics, lasers, solar cells, crystal growth, material science, and semiconductor device physics and engineering.

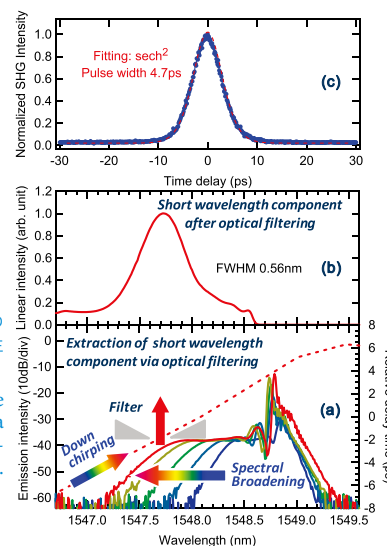
We are developing experimental techniques such as sensitive luminescence detection, absolute luminescence-yield measurements, transmission/absorption measurements of single nano-structures, micro-spectroscopy, imaging, and solid-immersion microscopy. Some of these techniques have been applied to study of bioluminescence of fireflies, jelly fish, and sea fireflies as well as luminol chemiluminescence.

100 周期 T 型量子細線レーザー (a,b) とホタルシフェラーゼ (c) の構造

Nano-structures of a 100 T-shaped quantum-wire laser (a,b) and firefly luciferase protein (c).



半導体レーザーからの 4.7 ps パルス直接発生実験  
Direct 4.7 ps pulse generation from a gain-switched semiconductor laser diode.



## 研究テーマ Research Subjects

1. 利得スイッチング半導体レーザーおよび太陽電池のデバイス物理  
Device physics of gain-switched semiconductor lasers and solar cells
2. 高品質半導体量子細線および井戸における低次元電子正孔キャリアの多体相関と非平衡性  
Many-body interactions and non-equilibrium properties of low-dimensional electron-hole systems in clean semiconductor quantum wires and wells
3. 半導体量子構造およびデバイスの作製、高品質化、構造評価、顕微分光計測、画像計測  
Material physics and development of high-quality semiconductor nano-structures via microscopy
4. ホタル・クラゲ・ウミホタルなどの生物発光と生物化学発光計測標準  
Bioluminescence of firefly, jelly fish, sea firefly, etc. and bio/chemiluminescence measurement standards



# 杉野研究室

Sugino Group



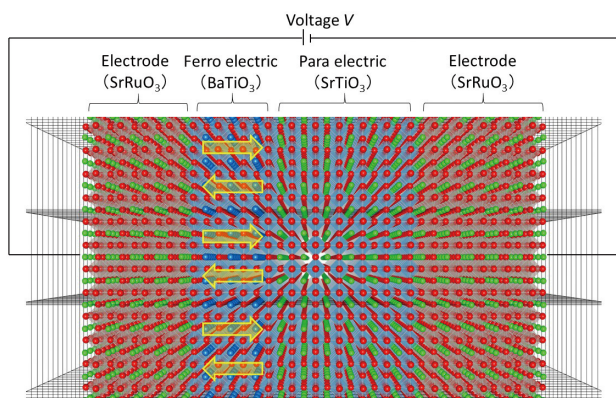
杉野 修  
SUGINO, Osamu  
教授  
Professor



春山 潤  
HARUYAMA, Jun  
助教  
Research Associate

物質の性質を理解するのに、シュレディンガー方程式など物理学の基本方程式を解くところから始めるのが、第一原理計算で用いられるアプローチである。この方法を用いれば、未知の物質の物性予測や興味深い実験結果の説明を、実験と独立に行うことができる。

最近、基本方程式を数値的に解くための手法が急速に整備された結果、かなり複雑な物質であっても信頼できる計算が容易になってきた。そのため、実験と計算がデータを互いに補完しながら、密接に協働して物質探索や機構解明を行える段階になった。本研究室ではこのような「機能物性研究」を推進しており、電池や生体物質、ナノ物質における種々のエネルギー変換機構の解明、新たな高圧相・強磁場相の予測などを行っている。第一原理計算手法が研究の発展の鍵となることから、その開発に関しても力を入れて行っている。

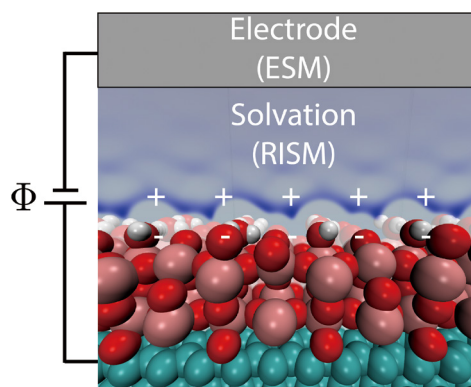


負の誘電率を持つ界面の模型。強誘電体と常誘電体の薄膜を電極で挟み、両側から電位差を印加すると、強誘電体領域に負の誘電率が現れ、界面全体の誘電容量が増加する。この現象は、電子デバイスなどへの応用が考えられる。

Model interface that exhibits negative permittivity. The interface is found to be constituted by a ferroelectric region of negative permittivity and paraelectric region of positive permittivity, which yields enhanced capacitance of the interface. This phenomenon may be applicable to future electronic devices.

The purpose of the first-principles calculation is to solve the basic formula of physics, such as the Schrödinger equation, for the understanding of properties of materials. This approach is eligible for a prediction of the properties of undiscovered materials even in the extreme condition of pressure and temperature, independently of the experiments.

Owing to the recent progress in numerically solving the equation, reliable first-principles simulation can be applied to quite complex materials, enabling thereby serious collaboration to theory and experiment for a material design or a mechanism search. Sugino group is doing such “functional material research” to understand (a) energy conversion processes occurring in batteries and in nano- or bio- materials and (b) stability of new phases that appear in the high pressure or strong magnetic field conditions. The numerical work often requires development of advanced computational method, which is also an important target of the study.



遷移金属酸化物 (TiO<sub>2</sub>) 電極と水界面の模型。計算では、炭素電極 (緑)、Ti (ピンク)、O (赤)、H (白) をあらわに扱い、それを覆う溶媒はRISM法を用いてモデル的に扱う。さらに ESM と呼ばれる連続体を用いて電位差を印可して行う。この模型は最も進化した電気化学界面の一つであり、エネルギー変換の機構、最適電極物質の探索を行なうことができる。

Model for the biased TiO<sub>2</sub> solution interface. The model consists of the layer of carbon electrode (green), Ti (pink), O (red), and H (white), which are covered by implicit solvent model called RISM. By additionally introducing a continuum called ESM, bias potential can be applied to the interface. This is one of the most advanced first-principles models for the electrochemical interface, which allow us to investigate energy conversion processes and to search for the most effective electrode materials.

## 研究テーマ Research Subjects

1. 電極界面でのエネルギー変換機構解明  
Structure of electrode-electrolyte interface and mechanism of energy transfer
2. 多体グリーン関数法に基づく第一原理計算手法の開発  
Development of first-principles many-body Green's function method
3. 高圧・強磁場下での酸素固体相の予測  
First-principles prediction of oxygen solid at high pressure and under strong magnetic field
4. ホタルの生物発光の機構解明  
Elucidation of bioluminescence of a firefly

# 井上研究室

Inoue Group



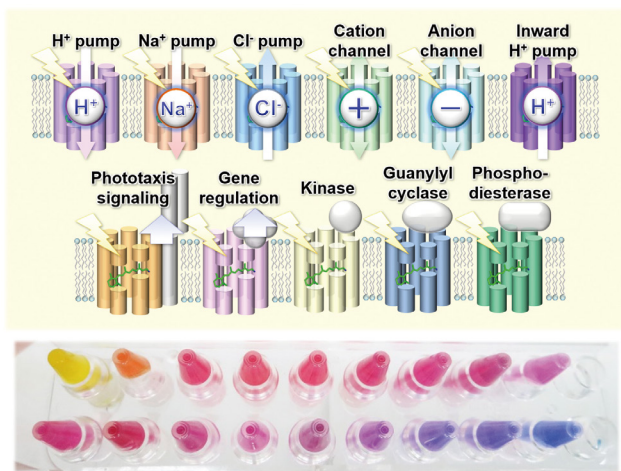
井上 圭一  
INOUE, Keiichi  
准教授  
Associate Professor

多くの生物は太陽光を自身の生理活動のためのエネルギー源や、外界の環境変化を知覚するための情報源として利用する。そしてこのときに中心的な役割を果たすのが、様々な光受容タンパク質である。

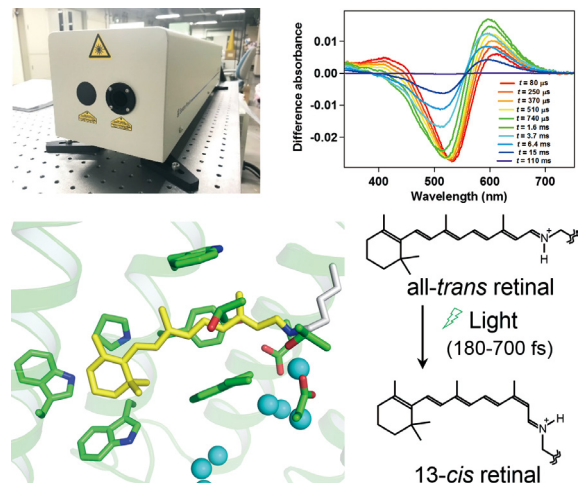
本研究室ではそれら多様な光受容タンパク質の機能発現メカニズムを統一的に明らかにすることを目的とし、レーザー時間分解分光実験や振動分光実験などを通じて高次複雑系である光受容タンパク質分子の化学反応素過程を調べ、さらに生化学的手法と組み合わせることで、原子・分子レベルから細胞・個体レベルにおよぶ多階層的な理解を達成することを目指した研究を推進している。またさらにそれらの知見をもとに、光遺伝学などの応用を目標とした機能性生体分子の開発にも取り組む一方で、近年のゲノム解析の発展に伴うビッグデータをもとに、新奇な光生物学的現象とそれに関わる分子群の探索研究を実施している。

Most living organisms use sun-light as energy source for their biological activity and information source to recognize environmental change. In this photobiological events, a wide variety of photo-receptive proteins play central role.

Our research aims unified understanding of the mechanism of biomolecular function of various photoreceptive membrane proteins. The chemical elementary process of supra complex photoreceptive protein is studied by laser time-resolved spectroscopy and vibrational spectroscopy, and we are promoting further research by combining biochemical technique to achieve multi-layer understanding from atomic and molecular to cellular and individual level. Furthermore, whereas we are developing novel artificial biomolecules on the basis of the fundamental insights for the application to optogenetics and so on, exploration study of new photobiological phenomena and related molecular groups is conducted with big data accompanying the development of genome analysis in recent years.



多様な機能を持つ微生物型ロドプシン（上）とその精製タンパク質試料（下）。  
Microbial rhodopsin with a variety of functions (upper) and the purified-protein sample (lower).



ナノ秒パルスレーザーによる微生物型ロドプシンの過渡吸収測定（上）およびロドプシン分子内におけるレチナールの光異性化過程（下）。

Transient absorption measurement of microbial rhodopsin by a nano-second pulsed laser (upper) and photo-isomerization process of retinal in rhodopsin (lower).

## 研究テーマ Research Subjects

1. 光受容型膜タンパク質ロドプシンの分子機能メカニズムの機能解析および分光研究  
Functional and spectroscopic study on the mechanism of molecular function of photoreceptive membrane protein, rhodopsins
2. 先端的分光計測法の生体分子研究への応用  
Application of advanced spectroscopic measurement method for biomolecular study
3. ゲノムビッグデータをもとにした新奇光受容型タンパク質探索  
Exploration of novel photoreceptive proteins through use of genome big data
4. 機械学習法を用いた生体分子の機能決定因子の同定とそれにもとづく新規機能性分子開発  
Machine-learning study on the determining factor for the function of biological molecules and its application for the development of novel functional molecules