

機能物性研究グループ

Functional Materials Group

機能物性研究グループは、生体现象や、化学反応、駆動された量子物質とナノデバイス等において実現する多彩な非平衡多体現象について俯瞰的な立場から研究を進めることで、その隠れた学理と未知の機能を解き明かし応用に資することを目的とする。近年、光遺伝学や細胞内物性計測、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・分光測定などの実験法が飛躍的に進歩し、同時に、計算・データ科学による理論解析や、揺らぎの定理やフロッケ・エンジニアリングなど非平衡統計力学の構築が進展している。これら重点的な研究課題に関連した物性研究所の研究者数名がコアメンバーとなり、さらに数名の所員が従来の部門に属しつつ併任として参加する。

The Functional Materials Group (FMG) is a trans-divisional and interdisciplinary research group aimed at unraveling the underlying principles and unknown functionalities of diverse non-equilibrium many-body phenomena. These phenomena manifest in biological processes, chemical reactions, driven quantum materials, and nanodevices. The group conducts comprehensive research to contribute to the understanding and practical application of these phenomena. In recent years, there have been significant advancements in experimental techniques such as optogenetics, intracellular measurements, time-resolved measurements of non-equilibrium excited states, and spectroscopic measurements at the nanoscale. At the same time, there have been notable developments in computational and data science, as well as in non-equilibrium statistical mechanics. Several ISSP researchers join FMG as core members, while other members participate as concurrent members. Moreover, as a joint-use/research center, FMG actively invites external researchers to collaborate on new subjects, serving as an open platform for such collaborations.

グループ主任 岡 隆史
Leader OKA, Takashi

秋山研究室 Akiyama Group

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 ホタル生物発光と発光計測標準
Firefly bioluminescence and luminescence measurement standards



教授 秋山 英文
Professor AKIYAMA, Hidefumi

専攻 Course
理学系物理学
Phys., Sci.



助教 小林 真隆
Research Associate
KOBAYASHI, Masataka

半導体量子ナノ構造の光物性、半導体レーザーや太陽電池のデバイス物理、ホタル生物発光などを、レーザー分光・顕微分光・光学計測技術や半導体結晶成長・微細加工を用いて研究している。

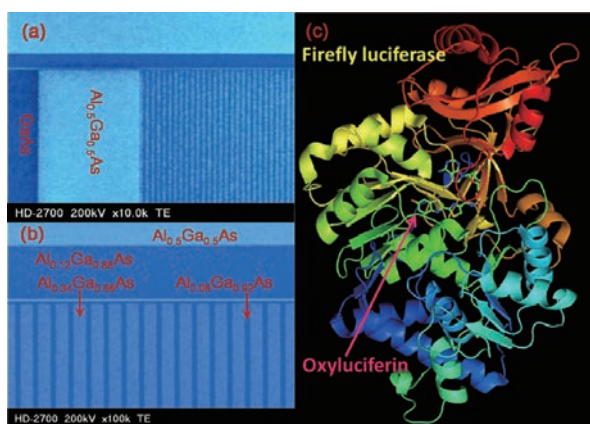
半導体レーザーに対して、極端に強い励起を短時間だけ加え、極端非平衡状態を生み出し、フェムト秒短パルス発生限界を迫る研究、人工衛星用の多接合太陽電池の損失機構を調べ変換効率限界を物理的に理解する研究、高品質な半導体量子構造の量子力学的な光学物性、低次元性、電子正孔系多体問題、半導体レーザー物理、結晶成長、物質科学の研究などを広い興味から行っている。

光学実験技術として、微弱発光を高感度検出する技術、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を開発している。それらの技術を応用し、ホタル生物発光や生物学課題を、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.

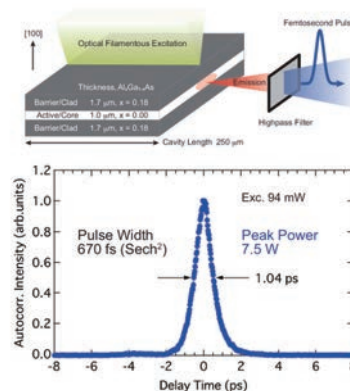
Pico- and femto-second pulse generation directly from gain-switched semiconductor lasers is studied intensively to understand the pulse dynamics and the shortest-pulse limit. High-quality III-V-semiconductor tandem solar cells and their internal loss rates and mechanisms are also studied. We make the 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).



利得スイッチ半導体レーザーからのフェムト秒パルス発生

Direct fs pulse generation from a gain-switched semiconductor laser.



井上研究室 Inoue Group

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 studies on the mechanism of molecular function of photoreceptive membrane proteins, rhodopsins
- 2 先端的分光計測法の生体分子研究への応用
Application of advanced spectroscopy 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 using 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



准教授 井上 圭一
Associate Professor INOUE, Keiichi

専攻 Courses

理学系化学 新領域物質系
Chem., Sci. Adv. Mat., Frontier Sci.



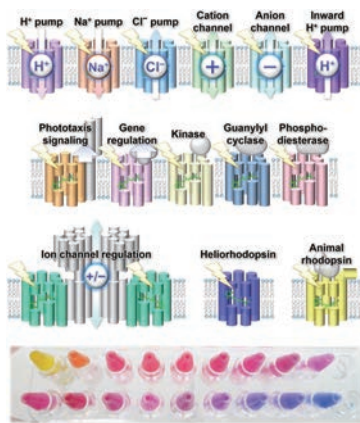
助教 永田 崇
Research Associate
NAGATA, Takashi

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、多様な光受容タンパク質である。

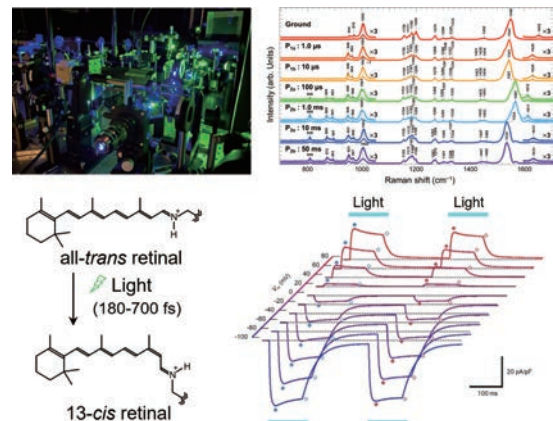
本研究室では、それら多様な光受容タンパク質の機能発現メカニズムを統一的に明らかにすることを目的とし、レーザー時間分解分光実験や振動分光実験などを通じて、高次複雑系である光受容タンパク質分子の化学反応素過程を調べる研究を行っている。さらに電気生理学実験や、生化学的手法と組み合わせることで、原子・分子レベルから細胞・個体レベルにおよぶ多階層的な理解を目指している。またこれらの知見をもとに、光遺伝学などの応用を目標とした機能性生体分子の開発にも取り組む一方で、近年のゲノム解析の発展に伴うビッグデータをもとに、新奇な光生物学的現象とそれに関わる分子群の探索研究や機械学習法の開発を行っている。

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 photoreceptive proteins play the central role.

Our research aims unified understanding of the mechanism of biomolecular functions of various photoreceptive membrane proteins called “rhodopsins”. The chemical elementary process of these supra complex photoreceptive proteins is studied by time-resolved laser spectroscopy and vibrational spectroscopy, and we are promoting further research by combining biochemical and electrophysiological techniques to achieve multi-layer understanding from atomic and molecular to cellular and individual levels. Furthermore, whereas we are developing novel artificial biomolecules for the application to optogenetics and so on, based on the fundamental insights, exploration studies of new photobiological phenomena and related molecular groups, and a development of machine learning technology are being 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 rhodopsins with a variety of functions (upper) and the purified-protein samples (lower).



独自光学系によるロドプシンの時間分解共鳴ラマン分光（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（左下）。ホ乳類細胞に発現させたチャネルロドプシンの光電流（右下）。

Time-resolved resonance Raman spectroscopy of rhodopsin using the original optical system (top) and photo-isomerization process of retinal in rhodopsin (bottom left). Photo currents of ChR2 expressed in mammalian cells (bottom right).



https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/inoue_group.html

研究テーマ Research Subjects

- 1 量子物質のフロケ・エンジニアリング
Floquet engineering of quantum materials
- 2 量子多体系の非平衡状態
Nonequilibrium states in quantum many-body systems
- 3 生体现象、情報物理への場の理論の応用
Application of field theory to biology and information physics



教授 岡 隆史
Professor OKA, Takashi

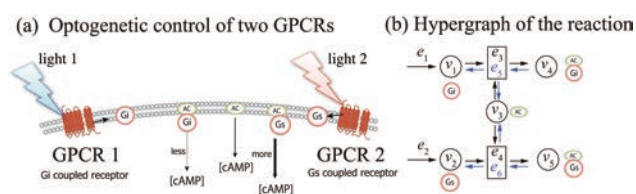
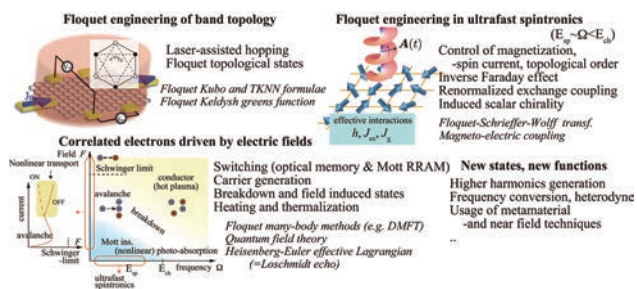
専攻 Course
理学系物理学
Phys., Sci.



助教 沼澤 宙朗
Research Associate
NUMASAWA, Tokiro

量子物質の非平衡状態に潜む未知の自然法則を発見するとともに、その理解をもとに物質相を自在に制御し機能発現させる方法を理論的に研究する。中でもフロケ・エンジニアリングに代表される新しい理論体系が近年注目を集めており、非平衡現象を平衡系に近い深さで理解することが可能になりつつある。さらに乱流、ニューラルネットワークといった古典物理や、生命現象、日常的に非平衡現象が利用されてきた半導体物理などの分野で蓄積されてきた知見を参考にしつつ、場の理論や数値計算などの基礎的な手法を利用することで関連電子系、トポロジカル物質、スピン系などの重要な量子物質の非平衡現象の研究をおこなっていくとともに、化学反応ネットワークや生物系における情報理論など、伝統的な凝縮系物理学の範疇外の問題にも興味を持っている。

Our primary research focus around studying quantum materials driven far from equilibrium by external fields. Our objective is to discover new fundamental laws of physics that govern these exotic states and explore methods to control their collective dynamics. To achieve this, we employ innovative theoretical frameworks like Floquet engineering, which allows us to comprehend nonequilibrium physics at a similar depth as equilibrium systems. Additionally, we draw valuable insights from other research fields such as turbulence, neural networks, and nonlinear semiconductor optics, and apply them to investigate new exotic quantum materials. Our target materials encompass a wide range, including topological systems and strongly correlated systems. We will also investigate novel nonlinear response phenomena, such as the heterodyne Hall effect, wherein the quantum Hall effect is induced by oscillating magnetic fields. Furthermore, we have a keen interest in exploring problems beyond traditional condensed matter physics, such as chemical reaction networks in biological systems and information theory.



量子物質のフロケ・エンジニアリングの広がり。バンドトポロジー、スピン秩序、相関電子系などの相制御や新原理に基づくデバイスの提案につながっている。

Floquet engineering in quantum materials. T. Oka, S. Kitamura, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 10, 387-408 (2019).

フロケ・エンジニアリングの光遺伝学への応用と生体内情報伝達ネットワーク制御

Application of Floquet engineering to optogenetics and control of cell signalling.



https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/oka_group.html

杉野研究室 Sugino Group

研究テーマ Research Subjects

- 1 固液界面の第一原理シミュレーションと電池・燃料電池の科学
First-principles simulation of solid-liquid interfaces and science of batteries and fuel cells
- 2 物質中の水素原子・プロトン・ヒドリドの量子動力学
Quantum dynamics of hydrogen, proton, and hydride ions in materials
- 3 電子格子相互作用の高精度計算
High precision calculation of the electron-phonon coupling
- 4 銅酸化物超伝導体の第一原理計算
First-principles simulation of cuprate superconductors



教授 杉野 修
Professor SUGINO, Osamu

専攻 Course

理学系物理学

Phys., Sci.

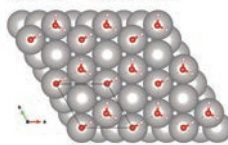


助教 春山 潤
Research Associate
HARUYAMA, Jun

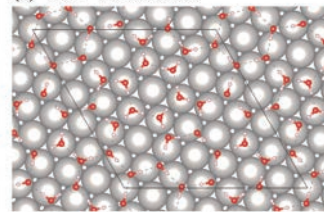
固体表面や固液界面で起こる動的現象には未解決の問題が多い。本研究室では、第一原理計算やモデル計算を駆使して改めてこの問題に挑戦している。特に重視しているのは金属・水界面の構造、界面付近での拡散や化学反応の解明であるが、その実現に必要な手法が近年かなり整備されてきた。具体的には、密度汎関数理論に基づく高精度なエネルギー計算や和周波スペクトル等の応答関数の計算、機械学習ポテンシャルを用いた網羅的な構造サンプリングや長時間シミュレーション、経路積分法を用いた水素原子核の量子効果の考慮、溶媒へのエネルギー散逸を考慮した電子移動非断熱ダイナミクス計算などが挙げられる。これらの最新の手法を用いて例えば、酸素や水素が関与する電極触媒反応が吸着水の影響を大きく受けながら起こる様子が、力場を仮定しない計算から明らかになっている。今後は、データサイエンスの方法を併用することにより、物質予測や設計などにつなげていくことが可能になっていくと考えられる。

There are many unsolved problems in the dynamic phenomena occurring at solid surfaces and solid-liquid interfaces. Particular emphasis should be placed on elucidating the structure of the metal-water interface, diffusion, and chemical reactions near the interface. In this laboratory we approach this problem through the intensive use of first principles and model calculations. In particular, these include high-precision density functional energy calculations and calculation of response functions such as sum frequency spectra, exhaustive sampling of structures and long-term simulations using machine learning potentials, consideration of quantum effects of hydrogen nuclei using path integral methods, and calculations of non-adiabatic electron transfer dynamics. Using these state-of-the-art methods, it has been shown, for example, how electrocatalytic reactions are significantly affected by water molecules present near the interface. The simulation will be combined with data science methods to lead to materials prediction and design.

(a) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ structure



(b) $\sqrt{39} \times \sqrt{39}$ structure



Pt(111)/H₂O 吸着層の構造。 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造 (a) よりも対称性の低い $\sqrt{39} \times \sqrt{39}$ 構造 (b) が現れる。

Structure of the Pt(111)-water interface. Rather than the $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ structure (a), low-symmetry structure $\sqrt{39} \times \sqrt{39}$ (b) appears in reality.



https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/sugino_group.html

林研究室 Hayashi Group

研究テーマ Research Subjects

- 1 ヒト iPS 運動ニューロン内の軸索輸送の蛍光顕微鏡観察
Fluorescence observation of axonal transport in iPS cell derived neuron
- 2 ナノスプリングによる分子モーターキネシンの力計測
Force measurement of motor protein kinesin by using a nano-sized spring
- 3 極値統計学を用いた神経細胞軸索輸送の速度解析 - 個体内 *in vivo* イメージング -
Extreme value analysis applied to axonal transport by motor proteins
- 4 神経細胞軸索輸送に起因するシナプス形成異常の理論モデル構築
Theoretical modeling of synapse formation related to axonal transport



教授 林 久美子
Professor HAYASHI, Kumiko

専攻 Course

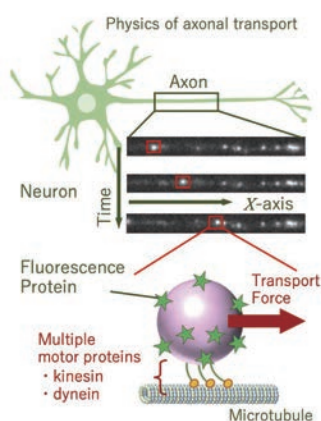
新領域複雑理工学
Complex. Sci. and Eng., Frontier Sci.

磁性、超伝導、スピントロニクスなどの固体物理分野を対象とした物性計測だけでなく、生体、特に細胞を対象とした物性計測も細胞内現象のメカニズムを理解するために重要である。生きている、つまり外部からエネルギー注入があり内部でエネルギー消費がある細胞は複雑な非平衡環境にあり、統計力学法則が破綻するため、最も物性計測が難しい対象と言える。

本研究室では蛍光顕微鏡観察をベースに細胞内現象に対して、力・速度・エネルギーなどの物理量を正確に計測する技術を開発する。顕微鏡などのハード部分だけでなく非平衡統計力学、数学や情報科学などを駆使したソフト面の改善を行う。測定量を元に細胞内現象の理論モデルを構築し、細胞内現象を物理として定量的に理解する。神経疾患などの病気の理解に役立て、医学への貢献を目指す。

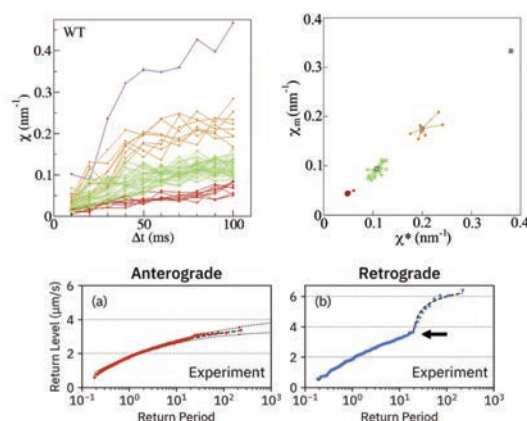
Precise physical measurements are important for cells to understand molecular mechanisms occurred in cells to maintain life activities as well as for solid state materials. However, *in vivo* measurements are difficult because intracellular environments are complex non-equilibrium states and crowded with various proteins and organelles, in which theories of equilibrium statistical physics are often violated. Because physical measurements are often based on theorems of equilibrium statistical physics, the violation of the theorems is serious problem.

In our lab, we develop techniques to precisely measure physical quantities such as force, velocity and energy for proteins and organelle inside cells, based on fluorescence microscopy. We think development of analytical methods (software) using non-equilibrium statistical physics, information science and mathematics is significant as well as development of microscopes (hardware). We also aim to understand cellular phenomena quantitatively by constructing theoretical models using the measured physical quantities. We hope such theories can contribute to the understanding of neurological disorders particularly.



神経細胞内の物質輸送。タンパク質分子モーター(順行輸送:キネシン、逆行輸送:ダイニン)によってシナプスの材料が輸送される。

Material transport in the axon of a neuron (anterograde transport: kinesin, retrograde transport: dynein). Synaptic cargos are transported by motor proteins.



(上) 非平衡統計力学の揺らぎの定理を用いたデータ解析 (下) 極値統計学を用いた速度データ解析

(Top) Data analysis using the fluctuation theorem of non-equilibrium statistical mechanics. (Bottom) Extreme value analysis applied to transport velocity data.





客員准教授 樋山 みやび
Visiting Associate Professor HIYAMA, Miyabi

量子化学計算・合成実験・分光計測を行うことにより、酵素が関与する化学反応を明らかにする研究を推進している。

ホタル生物発光は、pH やタンパク質変異体など実験条件の違いで異なる発光色になることや、その反応物質は生体にとって害が少ないことから、薬剤や細胞などの検出方法として環境・医療・バイオテクノロジーなどの分野で広く利用されている。この発光は、タンパク質酵素中の化学反応の結果おこる。このため発光機構の解明は、ホタル生物発光そのものの理解を進め、応用の可能性を広げるだけでなく、酵素が関与する化学反応を理解する鍵となる。本研究室では、ホタル生物発光の基質 (ルシフェリン) に保護基のついたケージドルシフェリンを、新たに設計・合成し、その性能の評価を行っている。また、生体内可視化技術の標識材料としての利用が期待されるルシフェリン類似体について、その構造と吸収・発光特性の関係を調べている。

The subjects of our research are the elucidation of emission mechanism on the firefly bioluminescence and the application of this reaction with the quantum chemical calculations, spectroscopic measurements, and synthetic experiments.

Firefly bioluminescence, of which emission color depends on the experimental condition, is widely used on environmental field, medical field, and biotechnology field etc., because the substrate and enzyme of this bioluminescence are harmless to living organisms. This luminescence is due to oxidation reaction of substrate, firefly luciferin, in firefly luciferase enzyme. The elucidation of firefly bioluminescence would encourage not only to understand this phenomenon for expanding the availability of applications but also to understand other chemical reactions involved in enzyme. We synthesized a photo-cleave type of caged luciferin and study the physical properties of this chemical species. We also investigate the absorption and luminescence properties of analogues of firefly luciferin for the development of biological imaging labeling materials.

