

# 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モータータンパク質キネシンの力計測  
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

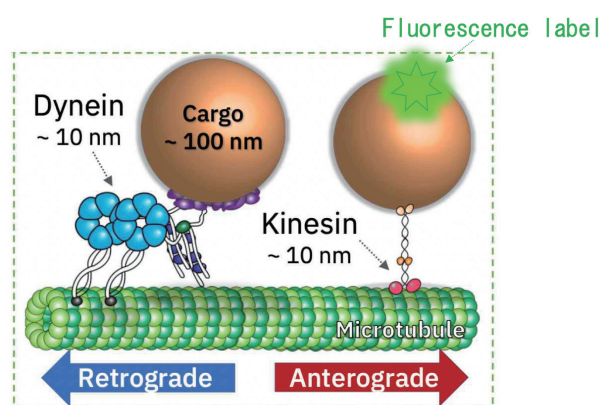
新領域複雑理工学  
Complex. Sci. and Eng., Frontier Sci.

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。

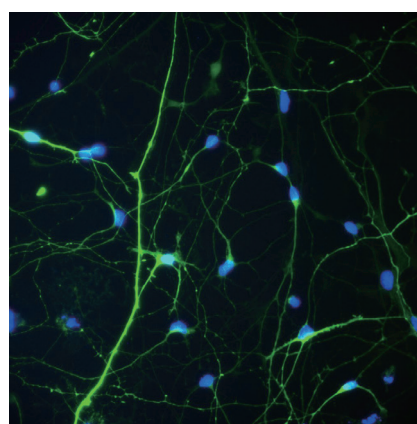
Precise physical measurements are important for cells to understand molecular mechanisms occurred in cells to maintain life activities as well as for solid state materials. However, *in vivo* measurements are difficult because intracellular environments are complex non-equilibrium states and crowded 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。モータータンパク質（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.



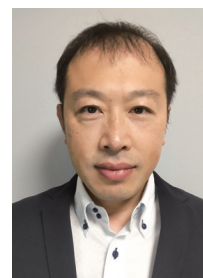
ヒトiPS 由来ニューロンの蛍光イメージング

Fluorescence imaging of human iPSC-derived neurons



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/hayashi\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/hayashi_group.html)

## 小布施研究室 Obuse Group



客員准教授 小布施 秀明  
Visiting Associate Professor OBUSE, Hideaki

物理系が本質的に内包する対称性やトポロジカル相を反映する多様な物理現象についての理論研究を行なう。これらは、系に不純物や欠陥といった不規則性が存在しても保持されるため、不規則系における局在・非局在転移や臨界現象の解明において重要な役割を果たす。さらに、近年、開放系における対称性やトポロジカル相に関する研究が飛躍的に進展したことにより、これらの性質は物理学全体の発展において、ますます重要性を増している。このことから、開放系に特有の新規物理現象の予言・解明にも取り組んでいる。

また、理論研究に留まらず、得られた知見より予見される物理現象の実証実験にも力を入れている。特に、量子ウォークという離散時間量子時間発展を行う系の実証実験の提案を通じて、理論と実験との架け橋を築くことを目指している。このように、基礎理論から実験グループとの共同研究まで、多角的な視点で物理学の新たな可能性を追求している。

We are focused on theoretical research concerning diverse physical phenomena that exhibit symmetry and topological phases inherently present in physical systems. Since these properties are preserved even in the presence of impurities or defects, they take an important role in understanding localization-delocalization transitions and critical phenomena in disordered systems. Furthermore, recent significant advancements in the study of symmetry and topological phases in open quantum systems have highlighted the importance of these properties in various fields of physics. Thus, we aim to predict and clarify novel physical phenomena unique to open systems.

In addition, our work is not limited to theoretical research; we are also interested in experimental verification of physical phenomena anticipated based on the knowledge of our theoretical works. Specifically, we aim to bridge theory and experimentation through proposals for experimental verification using systems that implement discrete-time quantum dynamics known as quantum walks. In this way, we explore new possibilities in physics from foundational theories to collaborative research with experimental groups.

## 張研究室 Zhang Group



外国人客員教授 張 田田  
Visiting Professor ZHANG, Tian-Tian

私は、対称性、トポロジー、量子物質が交差する物理について第一原理計算や解析的理論を用いて探究している。これまで、全 230 の空間群に対する完全な対称性指標理論を構築し、バンドトポロジーの体系的な分類をおこない、高スループット計算による世界初のトポロジカル電子物質データベースを構築し、非磁性材料の 24% がトポロジカルであることを明らかにした。さらに、トポロジカルフォノンの理論を発展させ、関連物質を予測した。現在はカイラルフォノンおよびフロケフォノンに焦点を当てており、ISSP においては、岡教授のグループとともにこれらのテーマをさらに発展させ、特に非平衡フォノンダイナミクスおよびトポロジカルフォノン現象の解明に取り組んでいきたい。

My research explores the intersection of symmetry, topology, and quantum materials through first-principles calculations and single-particle theory. Key contributions include:

- Complete symmetry-based indicator theory for all 230 space groups, enabling systematic classification of band topologies.
- Built the first topological electronic materials database via high-throughput calculations, revealing that 24% of nonmagnetic materials are topological.
- Developed theory for topological phonons and predicted related materials, e.g., double-Weyl (FeSi), quadruple-Weyl (BaPtGe), and PT-protected nodal-line (MoB<sub>2</sub>) phonons, all experimentally confirmed.

My current research focuses on chiral phonons and Floquet phonons, where I have extended chiral phonon studies to 3D chiral crystals, investigated connections between Weyl phonons and chiral phonons, and collaborated to experimentally confirm truly chiral phonons in Te and  $\alpha$ -HgS. At ISSP, I look forward to advancing these topics with Prof. Oka's group, particularly exploring non-equilibrium phonon dynamics and topological phonon phenomena.



# 量子物質研究グループ

## Quantum Materials Group

物性物理学はこれまで、新しい物質、新しい現象、新しい概念の発見によって大きく発展してきた。物性研究所で活発に研究されている強相関電子系は、その顕著な例である。一方、研究のブレークスルーは多くの場合、分野の融合によって実現される。この考えをもとに、本研究グループは量子物質研究のさらなる飛躍を目指し、理論と実験の緊密な連携を核として、従来の研究部門の垣根を超えた共同・連携研究を推進するために新設された。当グループは2つのコアグループと12の連携グループから成り、互いに強く連携しながら、強相関電子系の新しい量子相や新しい機能性物質の開発を目指した研究を進めている。例えば、バルクや薄膜の試料を作製し、その精密物性測定を駆使してスピントロニクス機能の開拓に取り組んでいる。これらの実験研究は、新しいトポロジカルな量子相の開拓を行う理論チームとの協力を通じて、理論手法の開発とともに活発に進められている。

Condensed matter physics has progressed significantly through the discovery of new materials, new phenomena, and new concepts. A prime example is the research on strongly correlated electron systems, a traditional strength of the Institute for Solid State Physics (ISSP). Breakthroughs often occur at the intersection of various research fields. With this in mind, the Quantum Materials Group was established to foster interdisciplinary studies that enhance collaboration between experimental and theoretical groups, transcending traditional research disciplines. The group comprises two core groups and twelve joint groups, all of which vigorously pursue research to discover novel quantum phases and functional materials in correlated electron/spin systems. Their efforts include synthesizing new materials in bulk and thin-film forms and characterizing them using cutting-edge measurement systems. Additionally, device fabrication is undertaken for spintronics applications. These experimental endeavors are complemented by active discussions and close collaboration with theoretical groups, which employ advanced theoretical approaches and numerical methods to explore new topological phases.

---

グループ主任 三輪 真嗣  
Leader MIWA, Shinji

---

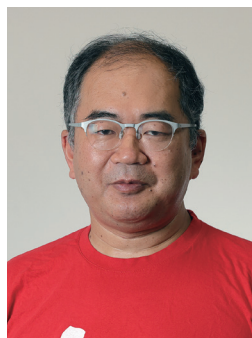


# 押川研究室

Oshikawa Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 場の理論の量子異常と量子相の分類  
Anomaly in quantum field theory and classification of quantum phases
- 2 非線形電気伝導の統一的理論  
Unified theory of nonlinear electrical conduction
- 3 ネットワーク上の電子状態と輸送現象  
Electronic states and transport phenomena on networks
- 4 新奇スピン液体の設計と探求  
Design and study of exotic spin liquids

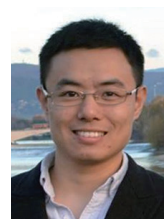


教授 押川 正毅  
Professor OSHIKAWA, Masaki

専攻 Course

理学系物理学

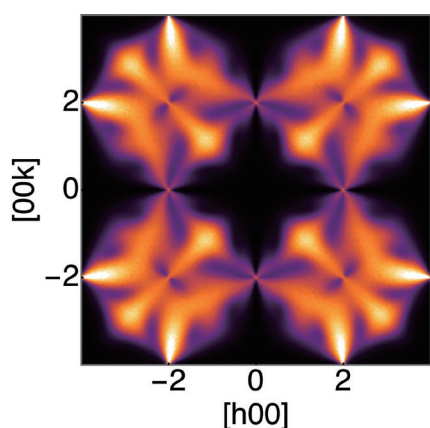
Phys., Sci.



助教 闫 寒  
Research Associate  
YAN, Han

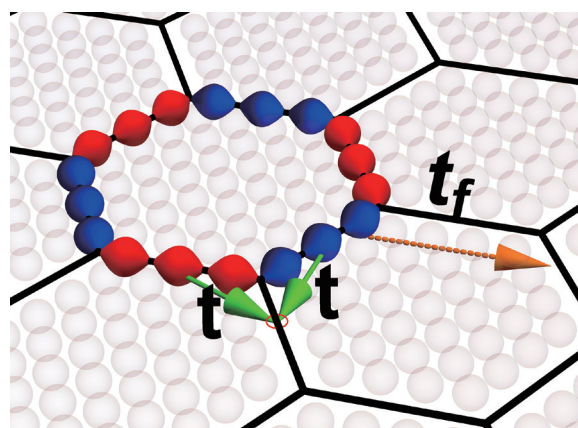
量子多体系の理論を中心として、広範な系で成立する普遍的な概念を探求している。最近の成果の例として、場の理論における量子異常を応用してギャップレスな臨界相の間に新たな分類が生じることを示し、量子相の分類に新たな展開をもたらした。また、理論的な新概念を踏まえて、実験結果の統一的な理解や、新たな実験に対する予言にも取り組んでいる。例えば、電荷密度波物質 1T-TaS<sub>2</sub> の電子状態を記述する量子細線のネットワーク模型を構築し、新たな機構によって対称性に保護される平坦バンドの出現を示した。さらに、フラストレート磁性体における高階ゲージ理論やフラクトントポロジカル相の実現と、その実験的帰結について研究を進めている。これらの研究の多くは、国際共同研究として推進している。

We pursue universal concepts in physics, especially in quantum many-body systems. As an example, based on anomaly in quantum field theory, we introduced a new classification of gapless quantum critical phases in the presence of symmetries. This opened up a new direction in classification of quantum phases. On the other hand, taking advantage of novel theoretical concepts, we also aim to give a unified picture on experimental data and to make testable predictions for experiments. For example, recently we introduced a “network model” of quantum wires in order to describe electronic states in the charge-density-wave material 1T-TaS<sub>2</sub> and demonstrated a realization of flat bands. Unlike most of the known constructions of flat bands, in our novel mechanism, the flatness is protected by symmetries and is robust. Furthermore, we investigate possible realizations of higher-rank gauge theories and fracton topological phases in frustrated magnets and their experimental consequences. Much of our research is carried out in international collaborations.



ブリージングパイロクロア格子上の磁性体のモンテカルロシミュレーションによるスピン構造因子。この模型は高階ゲージ理論を実現する。

Spin structure factor found in Monte Carlo Simulation of a magnet on a Breathing Pyrochlore lattice, which realizes a higher-rank gauge theory.



ネットワーク上の電子状態。対称性に守られた干渉効果により、平坦バンドの安定な出現が保証される。

Electronic states on a network. An interference effect protected by symmetries guarantees the robust appearance of flat bands.



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/oshikawa\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/oshikawa_group.html)

# 中辻研究室 Nakatsuji Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 トポロジカル磁性体の室温量子伝導  
Room-temperature topological transport in magnetic materials
- 2 強相関電子系における異常金属相と新しい超伝導体の開拓  
Strange metal behavior and unconventional superconductivity in strongly correlated materials
- 3 トポロジカル量子状態の制御によるスピントロニクスとエネルギーハーベスティング応用  
Manipulation of topological states for spintronics and energy harvesting applications



特任教授 中辻 知  
Project Professor NAKATSUJI, Satoru

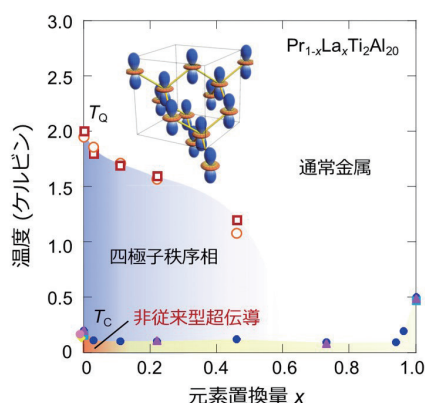
専攻 Course

理学系物理学

Phys., Sci.

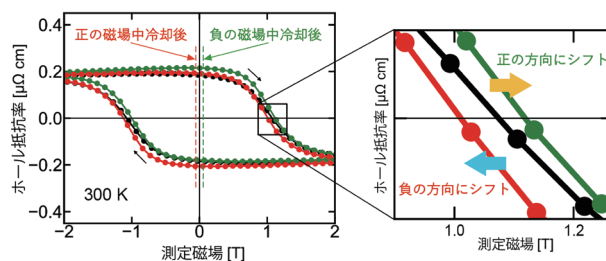
現在、磁性や超伝導、スピントロニクスといった分野が、トポロジーという概念によって再び整理・統合され、多くの新しい物理現象の発見に繋がっている。これらの物性物理の変革には、素粒子論、宇宙論、量子情報などで発展してきた概念が大きく関わっており、既存の分野の枠組みを超えた新しい視点での研究が重要になっている。私達の研究室では、そのような新しい概念を具現化する量子物質を自ら作り出し、世界最高精度の物性測定技術によってその背後にある物理法則の解明を目指して研究を行っている。それだけでなく、量子物質の驚くべき機能性をスピントロニクスやエネルギーハーベスティングに利用するための研究も行っており、産業界からも注目を集めている。

The condensed matter physics is considered one of the most versatile subfields of physics, embracing big ideas from particle physics, cosmology, and quantum information. Recently, the concept of topology has brought up a new era in condensed matter research that integrates a diverse spectrum of fields and topics, bridging basic science with technological innovations. Thus, it is critical to push beyond the traditional disciplines to establish new conceptual framework and to target at the significant problems. Our research activities focus on designing and synthesizing new materials with emergent quantum properties that have never been seen before, then exploring the physics and functionalities of such properties with our world-leading measurement facilities. Our goal is to lead the innovative quest for new quantum materials that bear a far-reaching impact not only on basic science but also on our everyday life in the future.



$\text{Pr}_{1-x}\text{La}_x\text{Ti}_2\text{Al}_{20}$  の低温相図。非従来型超伝導が強四極子秩序（挿入図）相内で現れる。[Nat. Commun. 16, 2114 (2025)]

Low temperature phase diagram for  $\text{Pr}_{1-x}\text{La}_x\text{Ti}_2\text{Al}_{20}$ . Unconventional superconductivity appears in the ferro-quadrupole ordered phase (inset). [Nat. Commun. 16, 2114 (2025)]



$\text{Mn}_3\text{Sn}/\text{MnN}$  積層膜の異常ホール抵抗率の磁場依存性。磁場中冷却後に冷却磁場の方位に依存した横方向のシフトが発生している（挿入図）。[Adv. Mater. 36 2400301 (2024)]

Field dependence of the anomalous Hall resistivity of the  $\text{Mn}_3\text{Sn}/\text{MnN}$  bilayer. The horizontal shift is induced after field cooling and its direction is determined by the sign of the cooling field (inset). [Adv. Mater. 36 2400301 (2024)]



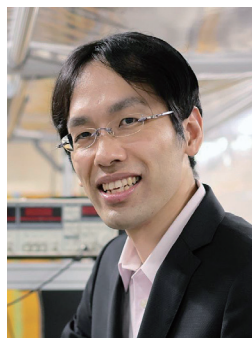
[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/nakatsuji\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/nakatsuji_group.html)

## 三輪研究室

Miwa Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 キラル分子スピントロニクス  
Chiral molecular spintronics
- 2 量子物質スピントロニクス  
Quantum material spintronics
- 3 フェムト秒パルスレーザーや放射光 X 線等のオペランド分光  
Operando spectroscopy using pulse laser and synchrotron radiation
- 4 スピンによる脳型コンピューティング  
Brain-inspired computing using spintronics



准教授 三輪 真嗣  
Associate Professor MIWA, Shinji

専攻 Course

新領域物質系

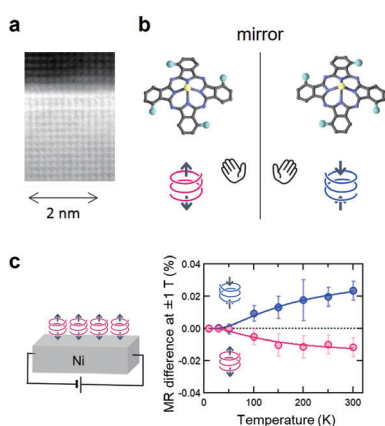
Adv. Mat., Frontier Sci.

特徴的なナノ構造を用いた物性実験研究を行っている。具体的には、半導体工学で発展した超高真空薄膜成長技術を駆使し、異種材料界面を持つ多層膜デバイスを用いて研究を行う。ナノの世界において「スピン」の性質が顕著に現れることに着目し、新物質・材料デバイスが示す新たな物性（物の性質）を見つけて機能化し、物理を把握して室温で大きな効果を示すデバイス物性の創成を目指している。

最近では物質のキラリティを利用した研究に注力している。キラリティは物理学だけでなく、化学、生物学、天文学でも共通して扱われる珍しい性質であり、特に有機分子のキラリティを用いたスピントロニクスデバイスの研究を進めている。また、量子物質であるトポロジカル反強磁性体のデバイス物性、フェムト秒パルスレーザーや X 線分光を用いた「オペランド分光」の開発なども行っている。

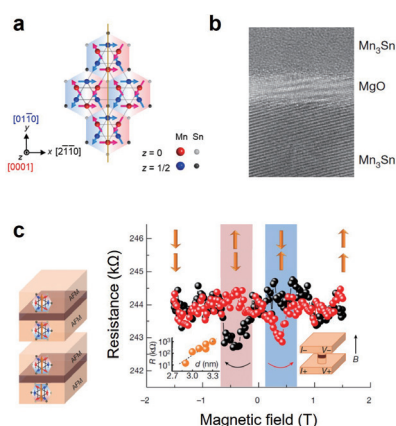
We are conducting experimental research on the physical properties of unique nanostructures. Specifically, we utilize ultrahigh vacuum thin film growth technology, a development from semiconductor engineering, to study multilayer devices composed of interfaces between different materials. Our focus is on the properties of “spin”, which become pronounced at the nanoscale. Our goal is to uncover new physical properties exhibited by novel material devices, to functionalize these properties, and to understand the underlying physics for creating device properties with significant effects at room temperature.

Recently, our research has concentrated on the chirality of materials. Chirality is a property that finds relevance not only in physics but also in chemistry, biology, and astronomy. We are especially progressing in research on spintronic devices that exploit the chirality of organic molecules. Additionally, we are investigating the device properties of topological antiferromagnetic materials—quantum materials—and developing “operando spectroscopy” techniques using femtosecond pulse lasers and X-ray spectroscopy.



キラル分子スピントロニクス: a, 特徴的なナノ構造の例。b, キラル分子と対称性。c, キラル誘起スピン選択性 (Chirality-induced spin selectivity: CISS) による熱励起スピン偏極の実証結果。

Chiral molecular spintronics: a, An example of a unique nanostructure. b, Chiral molecule and symmetry. c, Thermally driven spin polarization induced by chirality-induced spin selectivity (CISS).



量子物質スピントロニクス: a, トポロジカル反強磁性体  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  のスピン及び結晶構造。b, 分子線エビタキシー法により作製した多層膜構造の電子顕微鏡写真。c, トポロジカル反強磁性体によるトンネル磁気抵抗効果。

Quantum materials spintronics: a, Spin and crystal structure of the topological antiferromagnet  $\text{Mn}_3\text{Sn}$ . b, Transmission electron microscope image of the multilayer structure of  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  prepared by molecular beam epitaxy. c, Tunnel magnetoresistance of the topological antiferromagnet.



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/miwa\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/miwa_group.html)

# パク研究室

Park Group



外国人客員教授 パク ビョンゲック  
Visiting Professor PARK, Byong-Guk

私たちの研究室はスピントロニクス材料及びデバイスの研究に注力しており、磁性ナノ構造における基礎物理の解明を進めている。スピントロニクスには、低消費電力の不揮発性メモリ、再構成可能なロジック、IoT センサーなど、多くの魅力的な応用が存在する。特に、私たちは「スピン軌道トルク (spin-orbit torques: SOTs)」と呼ばれる技術を研究している。これは磁気ランダムアクセスメモリ (magnetic random-access memory: MRAM) で用いられ、超高速かつ低エネルギー消費による磁化反転を可能にする。これまでに、強磁性 / 非磁性の二層膜を利用して、新たなスピン流生成材料を提案し、垂直磁化膜の無磁場反転を可能にする面直方向にスピン偏極を有する非自明な SOTs を実現した。そして、この技術をセキュリティデバイスや確率計算に応用している。

SOTs 以外にも、材料やデバイス開発を通じて、スピントロニクスデバイスの性能指数や機能性の向上に取り組んでいる。私たちは軌道流によるスピントルクや磁化の電界制御、スピン熱電効果、スピン Hall ナノ発振器、そして他の新興技術の研究も進めている。

Our Laboratory focuses on developing spintronic materials and devices and exploring the underlying physics of magnetic nanostructures. Spintronics offers exciting opportunities for various device applications including ultra-low power non-volatile memory, reconfigurable logic, IoT sensors, and so on. In particular, we investigate spin-orbit torques (SOTs), which enable ultrafast and energy-efficient magnetization switching, providing an effective writing scheme for magnetic random-access memory (MRAM). We have proposed new spin current source materials based on ferromagnet/non-magnet bilayers that generate unconventional SOTs with out-of-plane spin polarization, enabling field-free SOT switching of perpendicular magnetization. Furthermore, we have exploited this technology to implement spintronic security devices and probabilistic computing.

Beyond SOTs, we further develop novel materials and devices to enhance the spintronic device performance and functionality. Our research includes orbital current-induced spin torques, electric field control of the magnetization, spin thermoelectrics, spin Hall nano-oscillators, and other emerging technologies.





# 附属物質設計評価施設

## Materials Design and Characterization Laboratory (MDCL)

物質設計評価施設では、物質の設計 (Design)、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 種類の研究を「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・機能をもつ物質の開発を目指している。本施設は物質設計部(以下、設計部)と物質合成・評価部(以下、合成評価部)からなり、設計部には大型計算機室が、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、高压合成室、高压測定室の 8 実験室がある。設計部では、物性専用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さまざまな協力現象を解明しつつ新物質の設計を行い、合成評価部ではさまざまな物質の合成、その化学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気的・磁氣的・光学的性質の総合評価を行っている。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 through the cycle of three research phases, Design, Synthesis, and Characterization, which we call the “DSC cycle”. The MDCL consists of two divisions; Materials Design Division (MDD) and Materials Synthesis and Characterization Division (MSCD). Supercomputer Center (SCC) of ISSP belongs to MDD, while MSCD has eight sections for joint-use; Materials Synthesis Section, Chemical Analysis Section, X-Ray Diffraction Section, Electron Microscope Section, Electromagnetic Measurements Section, Spectroscopy Section, High-Pressure Synthesis Section, and High-Pressure Measurement Section. In MDD, we explore novel mechanisms behind various cooperative phenomena in condensed matter by making use of its supercomputer system, and develop theoretical designs of new materials as well as materials with new nanoscale structures. In MSCD, we synthesize various types of new materials, develop single crystals, and characterize the structural, electromagnetic, and optical properties of the materials by employing various methods. Almost all the facilities of the MDCL are open to domestic scientists through the User Programs conducted by the Steering Committees of the MDCL.

---

施設長 岡本 佳比古  
Leader OKAMOTO, Yoshihiko

---



# 岡本研究室 Okamoto Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 特異な量子現象・革新的な電子機能を示す結晶性固体の新物質探索  
Exploration of new materials that exhibit novel quantum phenomena and innovative electronic functions
- 2 新奇  $d$  電子系物質の開拓  
Exploration of novel  $d$ -electron systems
- 3 際立った電子物性を示す物質開拓手法の確立  
Development of methods to find novel materials that exhibit outstanding electronic properties



教授 岡本 佳比古  
Professor OKAMOTO, Yoshihiko

専攻 Course

新領域物質系

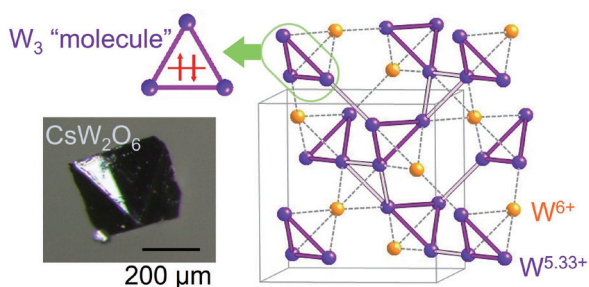
Adv. Mat., Frontier Sci.



助教 大熊 隆太郎  
Research Associate  
OKUMA, Ryutaro

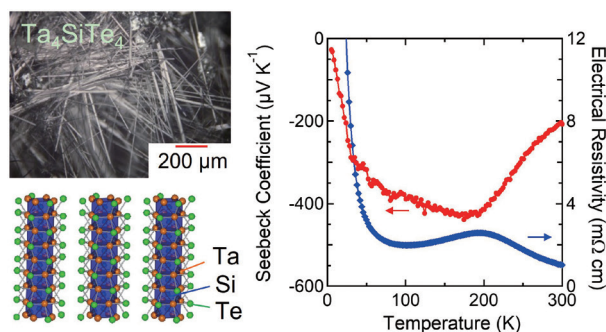
新物質の発見は、物質の性質を理解する学問：物性物理学の進化に大きく貢献する可能性をもつ。我々の研究グループでは、新奇な量子現象や革新的な電子機能を示す結晶性固体の新物質の発見を目指す。遷移金属を含む無機化合物を中心に、あらゆる元素を含む物質を対象として、超伝導、磁性、エネルギー変換、電子自由度、体積機能、幾何学的フラストレーション、トポロジ、スピン軌道結合といった様々なキーワードを見据えながら、様々な合成手法を組み合わせた物質開拓を行うことによりこの目標を達成する。例えば、非常に高い対称性を有しながら複雑な結晶構造をもつ新物質や、究極の低次元結晶といえる新物質を創ることで、変わった性質を示す新超伝導体、高効率なエネルギー変換材料、これまでにない電子スピンの配列をもつような新奇磁性体を開拓する。

The discovery of a new material has a potential to trigger the evolution of condensed matter physics. We aim at discovering new materials of crystalline solids that exhibit novel quantum phenomena and innovative electronic functions. The main target is inorganic compounds containing transition metal elements. We will explore novel materials by using various synthetic methods with various keywords, such as superconductivity, magnetism, energy conversion, electronic degrees of freedom, volumetric functions, geometrical frustration, topological properties, and spin-orbit coupling in mind. For example, by exploring novel materials with a very high symmetry but a complex crystal structure or those with an ultimate low-dimensional crystal structure, we will find unconventional superconductors, high-performance energy conversion materials, and unique magnetic materials that have an unprecedented spin arrangement.



立方晶物質  $\text{CsW}_2\text{O}_6$  における正三角形の“分子”形成。

Regular-triangular “molecule” formation in a cubic material  $\text{CsW}_2\text{O}_6$ .



低温で高い熱電変換性能を示す新材料候補：一次元ファンデルワールス結晶  $\text{Ta}_4\text{SiTe}_4$ 。

A thermoelectric material for low temperature applications: one-dimensional van der Waals crystal  $\text{Ta}_4\text{SiTe}_4$ .



# 尾崎研究室 Ozaki Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 第一原理電子状態計算における高精度・高速計算手法の開発  
Development of efficient and accurate methods for first-principles electronic structure calculations
- 2 OpenMX の開発と公開  
Development of the OpenMX software package
- 3 X線分光スペクトル計算手法の開発  
Development of first-principles methods for X-ray spectroscopies
- 4 物質表面・2次元物質の第一原理電子状態計算  
First-principles calculations of surfaces and two-dimensional structures



教授 尾崎 泰助  
Professor OZAKI, Taisuke

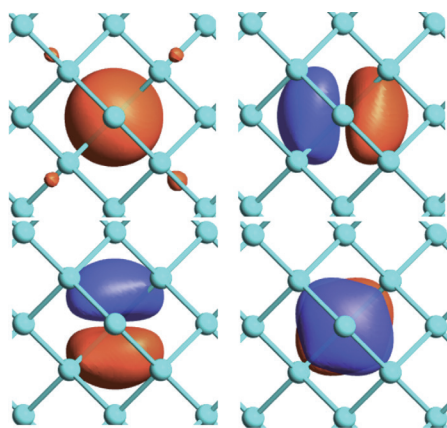
専攻 Course

理学系物理学

Phys., Sci.

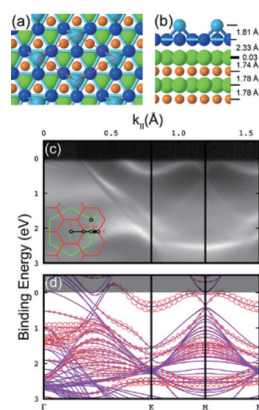
超並列計算機の発展と物質科学の精密化に伴い、第一原理電子状態計算の重要性が増している。我々は密度汎関数理論に基づき、現実に近い系をより精密に取り扱うための新しい計算手法・ソフトウェアパッケージ OpenMX の開発に取り組んでいる。汎用性の高い原子様基底関数法を基盤として、局在自然軌道に基づくオーダー N 分割統治法、修正再帰二分法による領域分割法、最小通信量を持つ高速フーリエ変換並列化法など、様々な高速計算手法を開発し、実験と直接比較できるシミュレーションを可能とした。近年は内殻電子の絶対束縛エネルギーの計算手法、最近接ワニエ関数法、機械学習ポテンシャル法、交換相関汎関数の開発に取り組み、第一原理計算のさらなる進展を目指している。また物質表面や二次元構造の第一原理シミュレーションにも取り組み、実験グループとの共同研究を行っている。

With the development of supercomputers and the refinement of materials science, the importance of first-principles electronic structure calculations has been increasing. We are engaged in developing a new computational method and software package, OpenMX, based on density functional theory, to precisely handle systems close to reality. Based on the versatile atomic-like basis function method, we have developed various efficient computational methods, such as the order-N divide-and-conquer method based on localized natural orbitals, the atom decomposition method by modified recursive bisection, and the Fast Fourier Transform parallelization method with minimal communication volume, enabling simulations that can be directly compared to experiments. Recently, we have been working on the development of calculation methods for the absolute binding energy of core electrons, the closest Wannier function method, machine learning potential methods, and the development of exchange-correlation functionals, aiming for further advances in first-principles calculations. We are also engaged in first-principles simulations of material surfaces and two-dimensional structures, conducting joint research with experimental groups.



最近接ワニエ関数法で得られた Si 固体のワニエ関数。原子基底の形状を保持している。

Wannier functions of Si bulk calculated by the closest Wannier function method, almost keeping the shape of atomic orbitals.



(a) 及び (b) 第一原理計算により求められた  $\text{ZrB}_2$  上 Ge 層の二重三角格子構造。(c) 角度分解光電子分光の結果と、(d) バンド構造の計算結果が良く一致することから、構造モデルの妥当性が認められる。

(a), (b) Bitriangular structure of Ge determined by DFT calculations. (c) Angle-resolved photoemission spectrum (ARPES) of the bitriangular structure. (d) Unfolded band structure of the bitriangular structure which well reproduces the ARPES measurement.



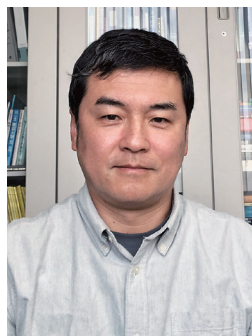
[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/ozaki\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/ozaki_group.html)

## 川島研究室

Kawashima Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 統計力学モデルの諸性質の解明  
Statistical mechanical models
- 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 物性理論における計算量の理論  
Computational complexity in condensed matter physics



教授 川島 直輝  
Professor KAWASHIMA, Naoki

専攻 Course

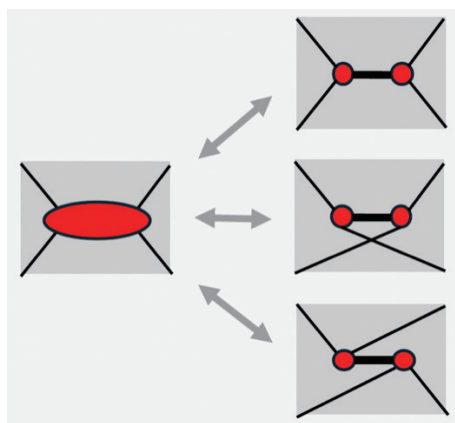
理学系物理学

Phys., Sci.



助教 高橋 惇  
Research Associate  
TAKAHASHI, Jun

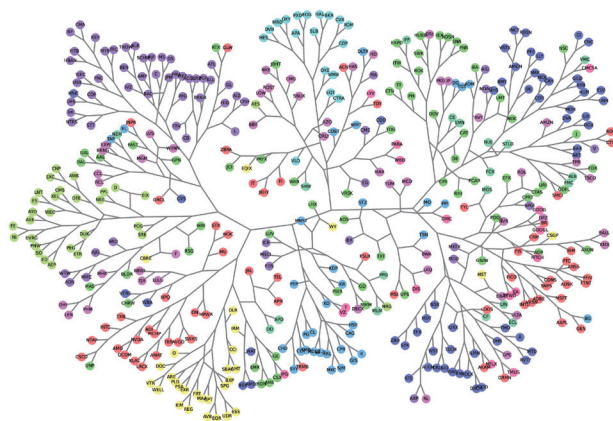
最近、人工知能／機械学習／量子計算などの流行で社会的にも計算機に注目が集まっているが、我々の研究グループでは計算統計力学の方法に含まれる数理的コアを明らかにし、新しい手法を開発することを基本に研究を進めている。その応用として、統計力学の未解決問題の解明や強相関量子系における実験研究との比較計算などを行っている。そこで用いられる量子モンテカルロ法やテンソルネットワーク法はボルツマンマシンやデータ圧縮を通じてデータ科学とも接点を持っている。とくにテンソルネットワーク法は近年急速に発展してきているが、我々は、この手法の一般的なデータ解析への応用の可能性を探求している。例えば、ツリー型テンソルネットワークによって、与えられた多変数サンプル集合からそれを実現する確率分布関数を獲得する生成モデルを構築することに成功した。この生成モデルは、ネットワーク構造を自動最適化するところに特徴があり、新しいタイプの機械学習の可能性を拓くものと期待している。



ツリーの基本変形。3通りの可能性から中央の枝が担う情報流を最小にするものを選ぶ。このような枝のつなぎ換えをツリーの各部分に巡回的に繰り返し適用することで、ツリーの構造を最適化してゆく。

A basic transformation of a tree. From the three possibilities, choose the one that minimizes the information flow carried by the central branch. By repeatedly applying this type of branch reconnection to each part of the tree, the tree structure is optimized.

Recently, the popularity of artificial intelligence, machine learning, and quantum computing has drawn a lot of attention to computers in society. Our research group is conducting research to clarify the mathematical core of computational statistical mechanics and developing new methods. As applications of these methods, we are trying to solve various problems in statistical mechanics and strongly correlated electron systems to compare with experimental research. The quantum Monte Carlo method and tensor network method used there also have connections with data science through Boltzmann machines and data compression. In particular, the tensor network method has been developing rapidly in recent years, and we are exploring the possibility of applying this method to general data analysis. For example, we have succeeded in constructing a generative model using a tree-type tensor network that acquires a probability distribution function that realizes a given multivariate sample set. This generative model is characterized by its automatic optimization of the network structure, and we hope that it will open up new possibilities for machine learning.



米国株価指標 S&P500 に含まれる銘柄の騰落パターンの学習から生成されたツリー構造。業種ごとに色分けされている。同じ業種がツリー上でも近くに来ている様子が分かる。(©2025 Kenji Harada)

A tree structure generated by learning the rise and fall patterns of stocks included in the US stock index S&P 500. They are color-coded by industry category. We can see that stocks in the same category are close to each other on the tree. (©2025 Kenji Harada)



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/kawashima\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/kawashima_group.html)



# 北川研究室 Kitagawa Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 圧力誘起のエキゾチック超伝導と新奇量子磁性相の探索  
Search for pressure-induced exotic superconductivity and novel quantum magnetism
- 2 固体量子センサ等を用いた光検出高圧下先端測定技術の開発  
Development of advanced optical-sensing methods under pressure using quantum sensors with solid-state systems
- 3 多種の電子物性測定を可能にする大容積超高压発生装置の開発  
Development of large-space ultrahigh-pressure device for realization of multi-purpose electronic property measurements



准教授 北川 健太郎  
Associate Professor KITAGAWA, Kentaro

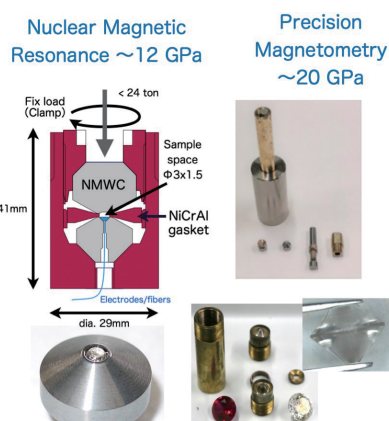
専攻 Course  
理学系物理学  
Phys., Sci.



助教 清水 悠晴  
Research Associate  
SHIMIZU, Yusei

近年、水素化合物や Ni 化合物の高温超伝導体が発見されるなど、高圧環境は超伝導研究のフロンティアである。それだけでなく、圧力は物質の基底状態を研究するための基礎的なパラメータである。一方で、これまでは超高压力で観測困難な物理量が多く、あまり磁性研究はされていない。固体中ではスピン軌道結合と電子相関、多体効果等のバランスにより奇妙な電子相が創り出させることがある。磁気量子臨界点近傍の異方的超伝導や量子スピン液体が例であるが、高圧下で生じるこれらが発掘・実証するには、やはり、スピンの自由度、磁性を観測することが非常に重要となる。当研究室は最先端の超高压下精密磁化測定と核磁気共鳴法を用いて強相関電子系の量子相転移を研究するだけでなく、光をプローブとした固体量子センシングなどの先端技術を用いて従来の物理量と磁気物理量を同時観測可能な新しい高圧力発生装置を開発している。

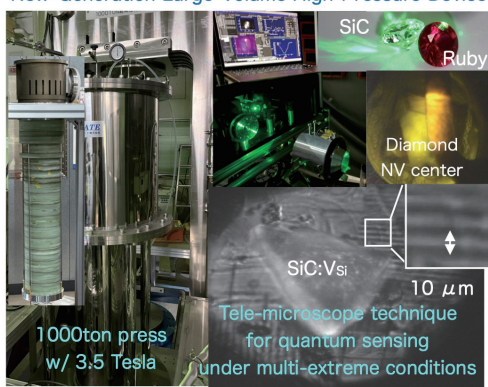
Materials development under pressure has attracted a lot of attention, as demonstrated by recent discoveries of hydride and Ni-based high-temperature superconductors. Moreover, pressure is one of the fundamental parameters for changing the ground state of a material, leading to material characterization. However, magnetic properties under pressure have been little investigated due to difficulties in the detection methods inside pressure cells. Unconventional superconductivities in the vicinities of magnetic quantum critical points, or quantum spin liquids are examples of novel and exotic electronic states caused by a combination of spin-orbit coupling, electronic correlations, multi-body effects, and so on. To understand these states deeply, direct observations for spin degrees of freedom, or for magnetism, are highly desired. Our group aims to study strongly correlated electron systems by use of state-of-the-art ultrahigh-pressure precision magnetometry and nuclear magnetic resonance methods. Besides, we are developing a new high-pressure device that enables us to observe conventional and magnetic properties simultaneously by application of advanced optical detection techniques, including quantum sensing with solid-state systems.



独自開発の超高压下先端測定技術。(左) 核磁気共鳴用高圧セル。実用的な NMR 測定を可能にした。(右) 精密磁化測定技術。ニッケル酸化物高温超伝導のマイスナー効果測定や 2 GPa 以上の常磁性磁化率測定で活躍。

Newly developed measurement techniques under ultrahigh pressure. (Left) High-pressure cell for NMR measurement, realizing practical NMR measurement and in-situ fluorescence measurement. (Right) High-pressure cell for precision magnetometry, capable of sensing paramagnetic susceptibility even above 2 GPa.

## New-Generation Large-Volume High-Pressure Device



25 年度に建造中のマルチ物理量観測超高压装置。過去最大の試料室体積を実現するハイブリッドアンビル技術と光検出磁気共鳴等の先端測定手段により、伝導、磁化、比熱、光物性の複数試料同時測定を可能にする。

The multi-purpose ultrahigh-pressure device, under construction this FY. Our hybrid-anvil technique realizes the largest-ever sample space, and combination with advanced measurement techniques such as optically-detected magnetic resonance enables us a simultaneous characterization of many samples and many physical properties, transport, magnetization, specific heat, and optical properties.



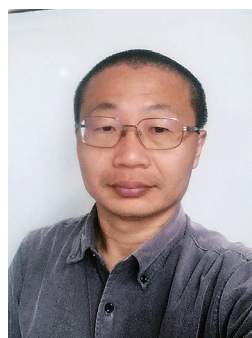
[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/kitagawa\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/kitagawa_group.html)

# 野口研究室

Noguchi Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 生体膜の非平衡ダイナミクス  
Non-equilibrium dynamics of biomembrane
- 2 細胞、脂質ベシクルの形態形成  
Shape transformation of cells and lipid vesicles
- 3 複雑流体のダイナミクス  
Dynamics of complex fluids
- 4 アクティブマターの協同現象  
Self-organization of active matter



准教授 野口 博司  
Associate Professor NOGUCHI, Hiroshi

専攻 Course

理学系物理学

Phys., Sci.



助教 中野 裕義  
Research Associate  
NAKANO, Hiroyoshi

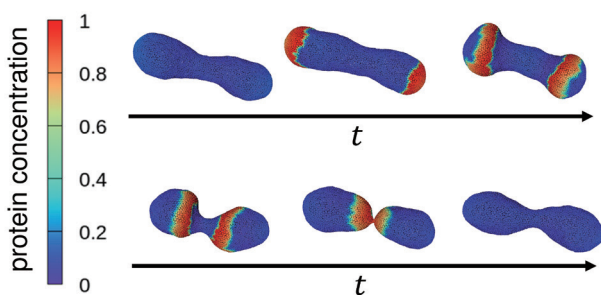
ソフトマター、生物物理を理論、計算機を駆使して研究している。特に、生体膜や細胞の構造形成、複雑流体、アクティブマターのダイナミクスの解明に力を入れている。そのためシミュレーション手法の開発、改良も行っている。

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、流れによる赤血球のパラシュート状やスリッパ状への変形や、曲率誘導タンパク質の吸着、化学反応による生体膜の形態変化などを明らかにしている。特に非平衡下でのダイナミクスを研究している。

また、アクティブマターにおける相転移や時空間パターン、高分子溶液や気泡形成を伴う流れなど通常のナビエーストックス方程式に従わない流体のダイナミクスをスパコンを用いた大規模シミュレーションを駆使して研究している。

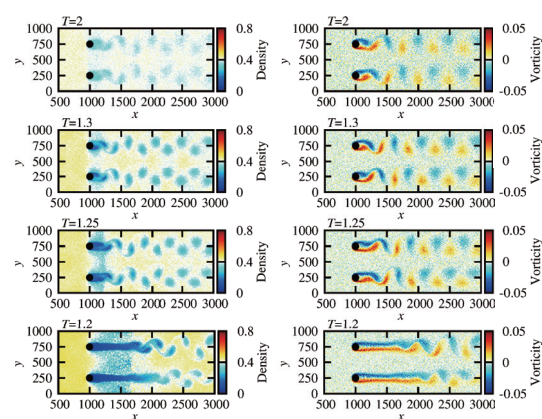
We study soft-matter physics and biophysics using theory and simulations. Our main targets are the structure formation of biomembrane and the dynamics of complex fluids and active matter under various conditions. We develop coarse-grained membrane models, hydrodynamics simulation methods, and the calculation method of material properties.

We found the shape transitions and dynamic modes of red blood cells and lipid vesicles in shear and capillary flows using mesoscale hydrodynamic simulations: discocyte-to-parachute transition, tank-treading, and swinging, etc. We also clarified the shape transformation of membrane induced by curvature-inducing proteins using coarse-grained membrane simulations: membrane tubulation by banana-shaped proteins (BAR superfamily proteins, etc.), budding by laterally isotropic proteins, and the coupling of membrane deformation, chemical reaction, and protein diffusion in membrane (traveling wave and Turing pattern). Membranes exhibit characteristic patterns and fluctuations out of equilibrium. Moreover, we investigated phase transitions of active matter and fluid dynamics of polymer solution and cavitation in the Karman vortex and sound-wave propagation using massively parallel simulations.



曲率誘導タンパク質の反応拡散波に伴うベシクルの形態の時間変化。くびれ形成を周期的に繰り返す。赤色の領域は曲率誘導タンパク質の濃度が高い。

Sequential snapshots of a shape-oscillation vesicle. Budding repeatedly occurs, accompanied by the traveling wave of bound proteins. Color indicates the concentration of the curvature-inducing protein.



周期的に並んだ円筒後方のカルマン渦は上図のように隣り同士で逆位相に同期する。温度Tを下げると、キャビテーションが起こり、気体の層が形成されている。左図は密度、右図は渦度を示す。

Cavitation in Karman vortex behind cylinder arrays.



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/noguchi\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/noguchi_group.html)

# 廣井研究室

Hiroi Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 新しい量子物質の探索  
Search for new quantum materials
- 2 スピン軌道結合金属の研究  
Physics of the spin-orbit-coupled metal
- 3 混合アニオン化合物における物質開発と新奇物性開拓  
Chemistry and physics of mixed-anion compounds



教授 廣井 善二  
Professor HIROI, Zenji

専攻 Course

新領域物質系

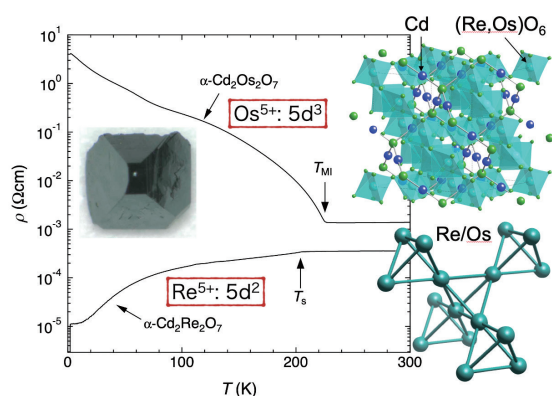
Adv. Mat., Frontier Sci.

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、磁性と伝導性の興味深い相関、スピン軌道相互作用を起源とする様々な現象、特殊なバンド構造に起因する非対角応答など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。

本研究室では、様々な遷移金属化合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。特に最近では、重い 5d 電子系や複数の陰イオンを含む混合アニオン化合物を中心に研究を展開している。

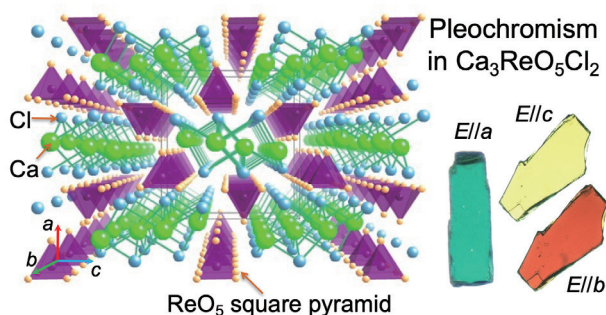
The discovery of high-temperature superconductivity and the subsequent flow of research clearly show how the discovery of new materials has a great impact on condensed matter physics. The ripples are not limited to superconductivity research, but expanded greatly to the establishment of the concept of itinerant-localization in strongly correlated electron systems and interesting correlations between magnetism and conductivity. Moreover, various phenomena originating from spin-orbit interaction and off-diagonal responses due to specific band structures have been focused. It will be more important in the future to discover unknown physical phenomena through the search for new materials and to open up new directions in condensed matter physics.

In our laboratory, we are searching for new materials while paying attention to the correlation between the structure and physical properties of various transition metal compounds, and are enjoying the fantastic materials science. In particular, recently, we have been focusing on heavy 5d electron systems and mixed anion compounds containing multiple anions.



5d 金属パイロクロア酸化物  $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$  は 230 K で時間反転対称性を破り、四面体クラスター磁気八極子秩序を形成して絶縁体となる。 $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$  は 200 K 以下で空間反転対称性を失って遍歴クラスター電気トロイダル四極子秩序を示す。

Two 5d pyrochlore oxides.  $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$  exhibits a metal-insulator transition at 230 K to a tetrahedral-cluster magnetic octupole order with losing time reversal symmetry, while an itinerant electric toroidal quadrupole orders are realized below 200 K in  $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$  with spontaneous spatial inversion symmetry breaking.  $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$  is a spin-orbit-coupled metal candidate.



多色性を示す混合アニオン化合物  $\text{Ca}_3\text{ReO}_5\text{Cl}_2$ 。  
Mixed-anion compound  $\text{Ca}_3\text{ReO}_5\text{Cl}_2$  showing pleochroism.



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/hiroi\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/hiroi_group.html)



## 山浦研究室

Yamaura Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 結晶構造の観点から行う物性研究  
Research of physical properties from the viewpoint of crystal structure
- 2 量子ビームを用いたマルチプローブ・マルチスケール解析  
Multi-probe and multi-scale analysis using quantum beams
- 3 新機能性材料の学理と探索  
Science and exploration of new functional materials



准教授 山浦 淳一  
Associate Professor YAMAURA, Jun-ichi

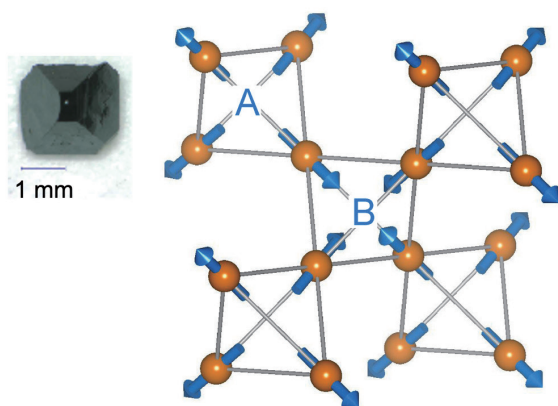
専攻 Course

新領域物質系

Adv. Mat., Frontier Sci.

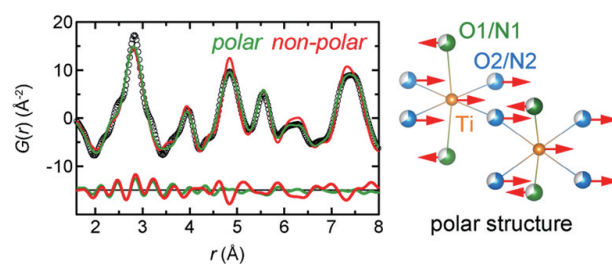
私たちの研究室では、機能性材料の構造物性研究を行なっている。構造物性とは、物質研究の出発点となる結晶構造をベースに物質の性質を明らかにする分野である。実験室系だけでなく、放射光や中性子などの様々な量子ビームを多角的に活用し、かつ、幅広い原子スケールで物質の様々な側面を明らかにする量子マルチプローブ・マルチスケール解析を行い、機能発現機構の本質を理解することに努めている。扱う対象は、新規の超伝導体や磁性体などの基礎材料から、誘電体、半導体、太陽電池などの応用材料まで幅広く手掛けている。機能解明だけでなく、より高い性能を引き出すにはどうすればよいかも考えつつ、「作って測って楽しい研究」をモットーに日々の研究を進めている。

Our laboratory conducts research on the structural physics of functional materials. Structural physics is a field that clarifies the properties of materials based on the crystal structures, which are the starting point for materials research. By utilizing not only laboratory systems but also various quantum beams like synchrotron radiation and neutrons from multiple perspectives, we work to understand the fundamentals of the mechanism of functional expression through quantum multi-probe and multi-scale analysis that reveals various aspects of materials on a wide range of atomic scales. We focus on a broad range of topics, including practical materials like dielectrics, semiconductors, and solar cells as well as fundamental materials like new superconductors and magnetic materials. Under the guiding principle of "research that is pleasant to create and measure," we do our everyday research while considering how to clarify functions and achieve improved performance.



金属絶縁体転移を起こす  $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$  において  $-46^\circ\text{C}$  以下で出現する all-in-all-out と呼ばれる非常に対称性の高い美しいスピン配列。放射光を用いた共鳴 X 線磁気散乱で明らかにされた。

A highly symmetric and beautiful spin arrangement called all-in-all-out appears below  $-46^\circ\text{C}$  in  $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$ , which undergoes a metal-insulator transition. Resonant X-ray magnetic scattering using synchrotron radiation revealed this spin arrangement.



中性子を用いた 2 体相関分布関数解析 (左) から導き出した高誘電体  $\text{LaTiO}_2\text{N}$  の極性 (polar) ナノ構造 (右)。矢印は非極性 (non-polar) 構造からの変位を示している。

Two-body correlation distribution function analysis using neutrons (left). Polar nano-region of high-k dielectric  $\text{LaTiO}_2\text{N}$  (right). The arrows indicate the displacement from the non-polar structure.



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yamaura\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yamaura_group.html)

## 吉見チーム Yoshimi Team



特任研究員 (PI) 吉見 一慶  
Project Researcher (PI) YOSHIMI, Kazuyoshi

大規模計算機室では、物性研究所が管理・運用しているスーパーコンピュータをより簡便に活用できるよう、2015 年度よりソフトウェア開発・高度化プロジェクト (PASUMS) を開始している。本チームでは、本プロジェクトに採択されたプログラムの開発・高度化を実施し、オープンソースソフトウェアとして公開するとともに、講習会支援などの普及活動を行っている。また、高度化されたソフトウェアを活用し、有機伝導体を中心に第一原理計算と組み合わせた有効モデルの構築とその解析や、ベイズ最適化・モンテカルロ法を活用した実験データ解析や有効モデルパラメータの推定などに取り組んでいる。また、高度化ソフトウェアを活用した研究に加え、情報処理技術に着目し、スパースモデリングを活用した量子モンテカルロ法で得られたデータの解析や、機械学習を用いた新物質探索に向けた応用研究などにも取り組んでいる。

From the 2015 fiscal year, the supercomputer center has started the project for the advancement of software usability in materials science to enhance the usability of the supercomputer system of ISSP. We develop and enhance the usability of programs adopted in this project, release them as open-source software, and support dissemination activities such as supporting hands-on lectures. In addition to these activities, using the developed software packages, we theoretically study research subjects such as the derivation and analysis of experimental data and the estimation of effective model parameters using Bayesian optimization and Monte Carlo methods. We also focus on information processing and have been trying to apply this technique to materials science such as analyzing data obtained by the quantum Monte Carlo method by the sparse modeling method and searching new materials using machine learning methods.

[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yoshimi\\_team.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yoshimi_team.html)



## リー研究室 Lee Group



外国人客員教授 リー ヒュンヨン  
Visiting Professor LEE, Hyun-Yong

私の研究では、量子多体系、特に物質のトポロジカル相の理論的および数値的研究に焦点を当てている。私は密度行列繰り込み群や PEPS 状態などのテンソルネットワークアルゴリズムを専門としており、これらは強相関系における量子状態の効率的な表現を提供するものである。これらの方法により、フォールトトレラントな量子コンピューティングにおいて重要な役割を果たすエニオン励起や位相的秩序などのエキゾチックな量子相の探究が可能になる。

My research focuses on the theoretical and numerical study of quantum many-body systems, particularly topological phases of matter. I specialize in tensor network algorithms, including Density Matrix Renormalization Group and Projected Entangled Pair States, which provide efficient representations of quantum states in strongly correlated systems. These methods enable the exploration of exotic quantum phases, such as anyonic excitations and topological order, which play a crucial role in fault-tolerant quantum computing.

## バラザ ロペス研究室

Barraza-Lopez Group

外国人客員教授 バラザ ロペス サルバドール  
Visiting Professor BARRAZA- LOPEZ, Salvador

材料物理学者として、実験的研究に従事する研究者や解析的手法を重視する理論家との交流を軸に研究を進めている。これまで二次元材料の物理的特性に着目し、構造と機能の相関解明において重要な貢献を果たしてきた。これらの研究成果は、後に二次元強誘電体という新たな分野への発展がある。この研究において、局在基底を用いる密度汎関数理論コード SIESTA の改良を実施した。尾崎教授は、局在基底に基づく第一原理計算ツール OpenMX コードの主要開発者であり、物性研においては SIESTA コードに光学的第二次高調波発生の強度計算手法を実装した後に、さらに OpenMX への移植を計画している。また、物性研内で二次元材料に取り組む研究者との交流を一層深めることを期待している。

I am a materials physicist who loves conversing with experimentalists and with theoreticians who have analytical backgrounds. Most of my work is concerned with the properties of two-dimensional materials, and I was an early proponent of structural modifications of those materials (those ideas eventually spanned a field of two-dimensional ferroelectrics). In reaching those conclusions, I have made modifications to the SIESTA density functional theory code, which relies on a localized basis set. Professor Taisuke Ozaki is the lead developer of the OpenMX code, a tool for first principles calculations based on another type of localized basis. At Tokyo, I intend to finalize an implementation of optical second harmonic generation into the SIESTA code, and to port it into OpenMX. I also look forward to interacting with Professor Ozaki and additional colleagues at the ISSP working on two-dimensional materials.

## 物質設計部 (Materials Design Division)

## 大型計算機室

Supercomputer Center

## 担当所員 川島 直輝

Chairperson  
KAWASHIMA, Naoki

## 担当所員 尾崎 泰助

Contact Person  
OZAKI, Taisuke

## 担当所員 杉野 修

Contact Person  
SUGINO, Osamu

## 担当所員 野口 博司

Contact Person  
NOGUCHI, Hiroshi

## 特任研究員 (PI) 吉見 一慶

Project Researcher (PI)  
YOSHIMI, Kazuyoshi

## 技術専門員 矢田 裕行

Senior Technical Specialist  
YATA, Hiroyuki

## 技術専門職員 福田 毅哉

Technical Specialist  
FUKUDA, Takaki

## 技術専門職員 本山 裕一

Technical Specialist  
MOTOYAMA, Yuichi

## 学術専門職員 荒木 繁行

Project Academic Specialist  
ARAKI, Shigeyuki

## 特任研究員 青山 龍美

Project Researcher  
AOYAMA, Tatsumi

助教 福田 将大

Research Associate  
FUKUDA, Masahiro

助教 井戸 康太

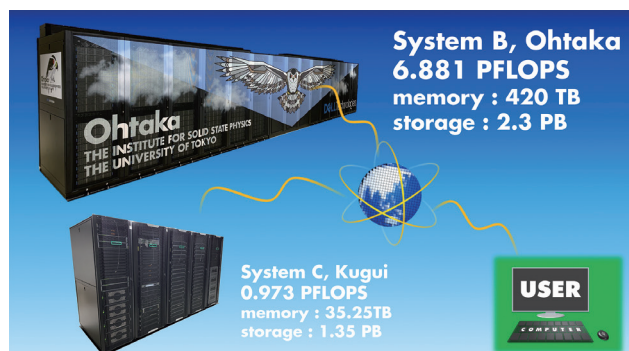
Research Associate  
IDO, Kota

大型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。現有システムは、2020年10月に運用開始した主システム(システムB (ohtaka))、および2022年6月に運用開始した副システム(システムC (kugui)) からなる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 (<https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/>) を参照されたい。また、2015年度から上記スーパーコンピュータシステムのより高度な利用を促進するためソフトウェア開発・高度化支援プログラム(PASUMS)を実施し、ユーザからの提案に基づき毎年2、3件のソフトウェア開発を行っている。

## 主要設備

System B (ohtaka): Dell PowerEdge C6525/R940 (1680 CPU nodes of AMD EPYC 7702 (64 cores) and 8 FAT nodes of Intel Xeon Platinum 8280 (28 cores) 総理論演算性能 6.881 PFLOPS)

System C (kugui): HPE Apollo 2000 Gen10 Plus/HPE Apollo 6500 Gen10 Plus (128 CPU nodes of AMD EPYC 7763 (128 cores) and 8 ACC nodes of AMD EPYC 7763 (64 cores) 総理論演算性能 0.973 PFLOPS)



物性研究所共同スーパーコンピュータシステム構成図

The Supercomputer System at the SCC-ISSP.

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: The main system (System B (ohtaka)), which started operation in Oct. 2020, and the sub-system (System C (kugui)), which started operation in June 2022. Information about project proposals can be found in the center's web page (<https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/>). In addition to maintaining high performance of the hardware in cooperation with the vendors, the SCC also responds to questions and inquiries from users on a daily basis. In 2015, aiming at more efficient usage of the supercomputer systems, we started a new program PASUMS for developing a few applications annually based on proposals from the ISSP supercomputer users.

## Main Facilities

System B (ohtaka): Dell PowerEdge C6525/R940 (1680 CPU nodes of AMD EPYC 7702 (64 cores) and 8 FAT nodes of Intel Xeon Platinum 8280 (28 cores) with total theoretical performance of 6.881 PFLOPS)

System C (kugui): HPE Apollo 2000 Gen10 Plus/HPE Apollo 6500 Gen10 Plus (128 CPU nodes of AMD EPYC 7763 (128 cores) and 8 ACC nodes of AMD EPYC 7763 (64 cores) with total theoretical performance of 0.973 PFLOPS)



ソフトウェア開発・高度化プロジェクト (PASUMS) で開発したソフトウェア群

Software developed by "Project for Advancement of Software Usability in Materials Science" (PASUMS)

<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/computer.html>



## 物質合成室

Materials Synthesis Section

担当所員 岡本 佳比古

Contact Person : OKAMOTO, Yoshihiko

技術専門職員 石井 梨恵子

Technical Specialist : ISHII, Rieko

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、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、ボックス炉）、真空蒸着装置（ $10^{-6}$  Torr）、グローブボックス

## Main Facilities

Floating-zone furnaces, Bridgman-type furnace, Ar-arc furnace, Furnace for flux method, Ultra-high vacuum deposition apparatus, glove box.



試料調整用グローブボックス

Glove box for sample preparation

## 化学分析室

Chemical Analysis Section

担当所員 岡本 佳比古

Contact Person : OKAMOTO, Yoshihiko

技術専門職員 石井 梨恵子

Technical Specialist : 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。

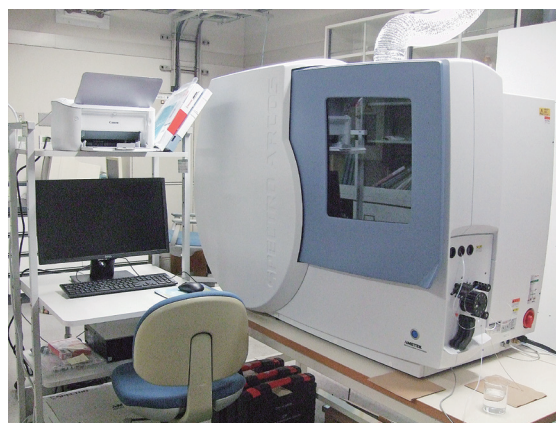
The Chemical Analysis Section is engaged in determining the chemical composition of specimens and in purifying chemical reagents for preparation of high quality specimens. The analytical equipments, several types of automatic balance and a system for preparation of ultra-high purity water are provided 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、電子天秤、超純水製造装置

## Main Facilities

ICP-AES, Automatic balances, 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



## X 線測定室

X-Ray Diffraction Section

担当所員 山浦 淳一

Contact Person : YAMAURA, Jun-ichi

## 電子顕微鏡室

Electron Microscope Section

担当所員 山浦 淳一

Contact Person : YAMAURA, Jun-ichi

技術専門職員 浜根 大輔

Technical Specialist : HAMANE, Daisuke

結晶構造は、物質科学研究の最も基本的な情報である。本室では、X線回折を用いて、結晶学をベースにした物性研究である構造物性研究を行うと共に、所内外の研究者に対して各種回折計の施設利用を提供している。

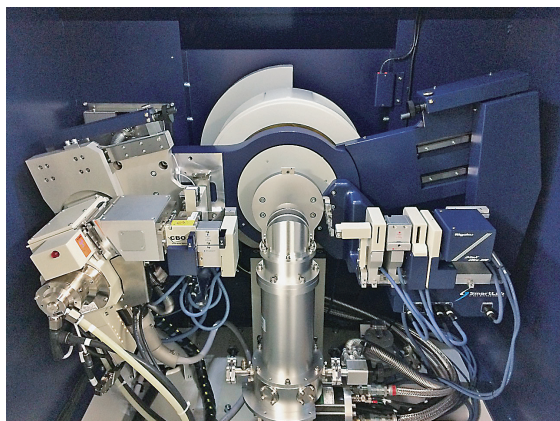
Crystal structure is the most fundamental information for studying materials science. This laboratory uses X-ray diffraction to conduct structural properties research, which is the study of physical properties based on crystallography, and also offers the use of its various diffractometer facilities to researchers both inside and outside the institute.

### 主要設備

汎用粉末X線回折計、極低温 K $\alpha$ 1 粉末X線回折計、高輝度単結晶 X線回折計、汎用単結晶 X線回折計、ラウエカメラ

### Main Facilities

General-purpose powder X-ray diffractometer, Cryogenic K $\alpha$ 1 powder X-ray diffractometer, High-power single-crystal X-ray diffractometer, General-purpose single-crystal X-ray diffractometer, Laue camera.



極低温 K $\alpha$ 1 粉末X線回折計

Cryogenic K $\alpha$ 1 powder X-ray diffractometer

本室では物質の化学組成や微細構造を評価するために走査型電子顕微鏡と透過型電子顕微鏡を備え、ミクロからナノスケールでの観察・分析を行い、所内における研究を強力に下支えすると共に、各種機器を学内外の共同利用に供している。

The Electron Microscope Section supports measurements such as electron diffraction, lattice image observations and chemical analyses for various solid materials in both crystalline and non-crystalline forms by using TEM and SEM equipped with EDX analyzer.

### 主要設備

電界放射形透過型電子顕微鏡、低温・高温・分析ホルダー、鏡面・薄膜試料作成のための種々の装置

### Main Facilities

200 kV TEM and SEM with EDX analyzer, high and low-temperature holders, and various apparatuses for sample preparation. 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



<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/xray.html>



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/electron\\_microscope.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/electron_microscope.html)



## 電磁気測定室

Electromagnetic Measurements Section

担当所員 岡本 佳比古  
Contact Person : OKAMOTO, Yoshihiko担当所員 山下 穰  
Contact Person : YAMASHITA, Minoru担当所員 森 初果  
Contact Person : MORI, Hatsumi技術専門員 山内 徹  
Senior Technical Specialist : YAMAUCHI, Tsuru

## 光学測定室

Spectroscopy Section

担当所員 秋山 英文  
Contact Person : AKIYAMA, Hidefumi担当所員 松永 隆佑  
Contact Person : MATSUNAGA, Ryusuke

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, d.c.susceptibility, a.c. susceptibility, 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)

## Main Facilities

Superconducting magnet (15/17 T), High homogeneity superconducting magnet (16/18 T) for NMR experiments, MPMS (SQUID magnetometer, 7 T), and PPMS (physical properties measurement system, 9 T).



磁気特性測定装置  
SQUID magnetometer (MPMS)

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

## Main Facilities

UV/VIS absorption spectrometer, IR spectrometer, Micro-Raman spectrometer.



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



## 高压合成室

High-Pressure Synthesis Section

担当所員 岡本 佳比古

Contact Person : OKAMOTO, Yoshihiko

技術専門員 後藤 弘匡

Senior Technical Specialist : GOTOU, Hirotada

## 高压測定室

High-Pressure Measurement Section

担当所員 北川 健太郎

Contact Person : KITAGAWA, Kentaro

技術専門員 山内 徹

Senior Technical Specialist : YAMAUCHI, Toru

学術専門職員 長崎 尚子

Project Academic Specialist : NAGASAKI, Shoko

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.



若機型 700 ton キュービックプレス。4 GPa 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.

本室では、高压下で起こる新物性の探索と各種の高压低温物性評価を行っている。また、静水圧性が高い圧力発生装置などを所内外の共同利用研究機器として供している。

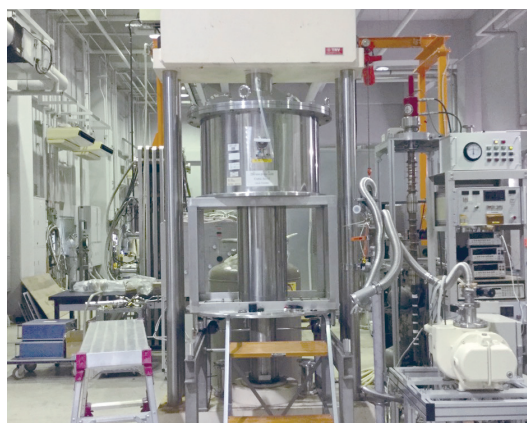
The High-Pressure Measurement Section aims at search for novel phenomena under pressure and characterization of high-pressure low-temperature physical properties. This Section offers high-pressure devices featuring good hydrostaticity for joint research and internal use.

### 主要設備

250 トン定荷重式キュービックアンビル圧力発生装置

### Main Facilities

250 ton-class constant-load cubic-anvil-type high-pressure devices.



定荷重キュービックアンビル高压装置。等方的加圧と液体圧力伝達媒体により、静水圧性の高い高压実験環境を実現する。

The cubic-anvil-type high-pressure apparatus equipped with constant loading force press, realizing highly hydrostatic pressure environment by three-axis compression and liquid pressure transmitting medium.



<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/highpressure.html>



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/highpressure\\_meas.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/highpressure_meas.html)



# 附属中性子科学研究施設

## Neutron Science Laboratory

中性子は  $1\text{ \AA}$  程度の波長の波としての性質と  $100\text{ meV}$  程度の運動エネルギーの粒子としての性質を併せもつ。また、中性子は透過力に優れ、微小磁石の性質をもつので、原子核やその周りの電子がつくる磁場と力を及ぼし合う。これらの性質を利用して物質による中性子の散乱のされ方を観測し、物質内の原子や磁気モーメントの配列や運動の様子を知る実験方法を「中性子散乱」という。物性研究所の中性子科学研究施設では東北大学、京都大学等と協力し、日本原子力研究開発機構の研究用原子炉 JRR-3 に設置された 12 台の中性子散乱装置を用いた共同利用を推進してきた。さらに、KEK と共同で大強度陽子加速器施設 J-PARC に設置された高分解能チョッパー分光器 HRC を用いた共同利用を推進している。これにより、超伝導体、トポロジカル物質、新規量子相などの固体物理研究をはじめとして、ガラスやクラスレート物質など複雑凝縮系、イオン伝導体や水素貯蔵物質などの材料科学、高分子やゲルなどのソフトマター、生体関連物質まで幅広い物質科学、さらには中性子基礎物理などが研究されている。また、当施設は日米協力事業「中性子散乱分野」の実施機関としても活動し、我が国の中性子散乱研究の発展に貢献している。

A neutron has dual nature of a wave with a wave length of about  $1\text{ \AA}$  and a particle with a kinetic energy of about  $100\text{ meV}$ . A neutron also has excellent transparency of matter and a nuclear magnetic moment. Owing to these properties, neutron scattering is a powerful method to investigate the structure and dynamics of atoms and electron spins in condensed matter. Since 1993, Neutron Science Laboratory (NSL) has been playing a central role in neutron scattering activities in Japan not only by performing its own research but also by providing a general user program using the university-owned 12 neutron scattering spectrometers installed at the research reactor JRR-3 ( $20\text{ MW}$ ), JAEA (Tokai, Ibaraki). Furthermore, NSL owns a cutting-edge inelastic neutron scattering spectrometer HRC in J-PARC, which started its operation in 2009 and has been managed with KEK. Major research areas supported by the NSL user program are solid state physics (superconductors, topological materials, novel quantum phases, etc.), soft matter (polymers, gels, etc.), complex systems (glass, liquid, clathrate materials, etc.), material science (ionic conductors, hydrogen systems, etc.), biological physics, and fundamental physics on neutrons. The NSL also operates the US-Japan cooperative program on neutron scattering since 1984.

---

施設長 佐藤 卓

Leader SATO, Taku J

副施設長 益田 隆嗣

Deputy Leader MASUDA, Takatsugu

---

# 古府研究室

Kofu Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 多様な物質中の水素原子や水分子のダイナミクス  
Dynamics of hydrogen atoms and hydrogen-containing molecules in a wide range of materials
- 2 スピングラスの励起特性  
Excitation characteristics of spin glasses
- 3 単分子磁石のスピンダイナミクス  
Spin dynamics of single-molecule magnets
- 4 中性子散乱装置の開発および新測定への挑戦  
Development of neutron scattering instruments and challenges to new measurements



教授 古府 麻衣子  
Professor KOFU, Maiko

専攻 Course

工学系物理工学

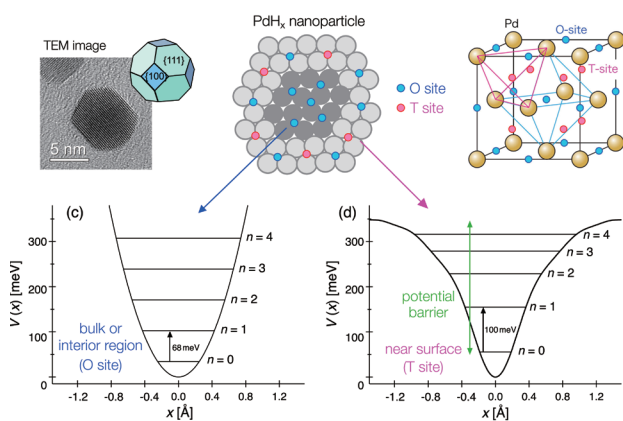
App. Phys., Eng.



助教 秋葉 宙  
Research Associate  
AKIBA, Hiroshi

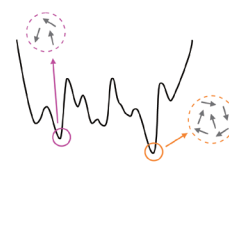
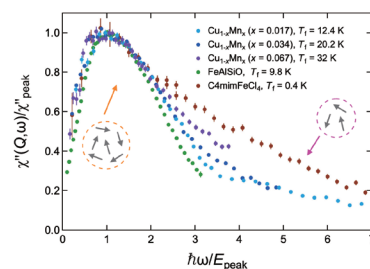
本研究室では、中性子散乱法を用いて、様々な物質中の原子や分子、スピンの動的構造を調べ、幅広い物質に内在する新規な現象や普遍性を見出すことを目指している。中性子は水素原子の観測が得意なプローブであり、水素の量子ダイナミクスやプロトン/ヒドリドイオン伝導の観測が中心的テーマのひとつである。水素は量子性が強い元素として知られているが、水素の量子効果が顕になるケースは稀である。偏極中性子を利用した軽水素の干渉性/非干渉性散乱の分離など、新しい計測法に挑戦し、これまで捉えられなかったダイナミクスを見出したい。水和物や機能性液体、スピングラスや単分子磁石（ナノ磁石のように振る舞う物質群）などの一風変わった磁性体の研究も行っている。これらの研究には、広いダイナミックレンジでの測定が必要であり、国内外のさまざまな中性子分光器を使用するとともに、中性子散乱分光器の開発も行っている。

We study the dynamics of atoms, molecules, and spins in various materials using neutron scattering techniques, to discover novel phenomena and universality inherent in a wide range of materials. Neutron is a powerful probe to detect hydrogen atoms. Observation of hydrogen quantum dynamics and proton/hydride ion conduction is one of our major research interests. Hydrogen is known as a quantum atom, but the quantum nature of hydrogen is rarely manifested. We will try new measurement techniques, such as coherent/incoherent separation of light hydrogen using polarized neutrons, and find dynamics that have not been captured so far. Hydrates, functional liquids, spin glass, and single-molecule magnets (which behave like nanomagnets) are also within our scope. These studies require measurements over a wide dynamic range, and we are using a variety of neutron spectrometers in domestic and foreign facilities, as well as developing a neutron scattering spectrometer.



中性子回折、非弾性、準弾性散乱法によって調べたパラジウム水素化物ナノ粒子中の水素の状態。ナノ粒子の表面近傍では、バルク状態とは異なる四面体サイトにも水素が存在し、非調和振動および速い拡散が生じる。

Hydrogen state in palladium hydride nanoparticles studied by neutron diffraction, inelastic, and quasielastic scattering. Our comprehensive studies showed that some hydrogen atoms near the surface of the nanoparticles are accommodated at the tetrahedral sites, which is different from the bulk state, resulting in anharmonic vibrations and fast diffusion.



さまざまな古典系スピングラス物質で、ボーズ統計に従うブロードな局所磁気励起が観測された。その特徴は構造ガラスの局所振動励起（ボゾンピーク）と類似し、多数の準安定状態の素励起に起因すると考えられる。

Bose-scaled localized magnetic excitation was commonly observed in various classical spin glasses. The excitation is highly reminiscent of localized vibrational modes (“boson peak”) in structural glasses. The broad spectrum with the high-energy tail can be attributed to elementary excitations in a multitude of metastable states.



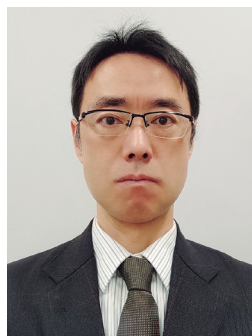
[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/kofu\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/kofu_group.html)



# 佐藤研究室 Sato Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 量子磁性体における巨視的量子現象  
Macroscopic quantum phenomena in quantum magnets
- 2 準周期構造を持つ磁性体の磁気構造やダイナミクス  
Magnetic structures and dynamics of quasiperiodic magnets
- 3 流動するスピン集団の示す非平衡定常状態  
Nonequilibrium steady state of spins under current flow
- 4 新しい中性子散乱手法の開発  
Development of new neutron scattering techniques

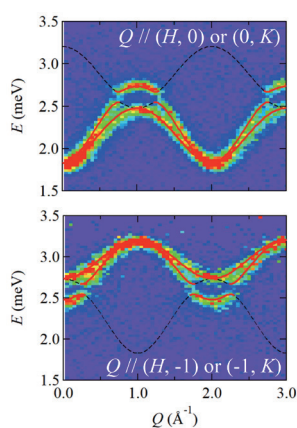


教授 佐藤 卓  
Professor SATO, Taku J

専攻 Course  
理学系物理学  
Phys., Sci.

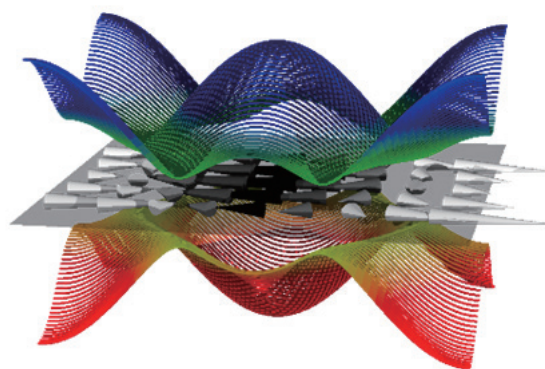
磁性体における電子スピンおよびスピン間相互作用の幾何学的配置はその磁性状態を決定する重要な因子の一つである。我々は結晶対称性やその破れに起因する磁気基底状態や励起状態の研究、さらには準周期構造（準結晶）に代表される、あらわな並進対称性を持たない構造中の磁気基底・励起状態の研究等を行なっている。具体的には反転対称性の破れた磁性体における非相反マグノン励起の観測、螺旋軸を持つ量子反強磁性ダイマー物質におけるトポジカルトリプルの確認、正 20 面体相準結晶磁性体における長距離磁気秩序の発見等があげられる。これらの成果は我々の主要な研究手法である中性子散乱を最大限に活用することで得られたものである。中性子散乱をさらに発展させるため、新中性子散乱手法の開発も行なっている。

Geometrical arrangement of spins and their interaction bonds in magnetic materials is one of the decisive factors for their magnetic states. We are interested in nontrivial magnetic ground states and excitations originating from the crystalline symmetry and its breaking, as well as those in the quasiperiodic magnets where spin arrangement loses apparent translational invariance. Representative examples of our recent findings include observation of nonreciprocal magnons in a magnet without inversion symmetry, confirmation of topological triplon bands in a quantum dimerized antiferromagnet with screw axis, and observation of long-range magnetic order in an icosahedral quasicrystal. Those results have been obtained by maximal utilization of neutron scattering technique, being our primary investigation tool. To further advance this technique, we are also working on the development of novel neutron scattering methods, including inelastic spectrum retrieval using energy-dependent diffuse scattering measurement, and improvement of large curved two-dimensional neutron detector for efficient magnetic structure analysis.



中性子非弾性散乱により量子反強磁性ダイマー物質  $\text{Ba}_2\text{CuSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$  において観測されたトポジカルトリプロンバンド分散

Topological triplon bands in quantum dimerized antiferromagnet  $\text{Ba}_2\text{CuSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$  observed by inelastic neutron scattering



実験を再現するスピン模型から計算されたトリプロンバンド分散と同様に計算された fictitious 磁場の方向（矢印）

Calculated triplon band dispersion based on the spin model, and similarly calculated fictitious magnetic field shown by the arrows



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/sato\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/sato_group.html)