# THE INSTITUTE (i) FOR http://www.issp.u-tokyo.ac.jp SOLID STATE PHYSICS



Division of Condensed Matter Science Division of Condensed Matter Theory Division of Nanoscale Science Functional Materials Group Quantum Materials Group Materials Design and Characterization Laboratory Neutron Science Laboratory International MegaGauss Science Laboratory Center of Computational Materials Science Laser and Synchrotron Research Center

### THE UNIVERSITY OF TOKYO

# Materials Science — its Scope and Development 物性科学:その対象と発展

自然界に存在する物質は百種類ほどの元素のさまざまな組合せでできており、それぞれが固有の性質(物性)を示します。 たとえば電気伝導という物性に着目すると、物質を絶縁体、半導体、金属、超伝導体に分類することができますが、 同じ物質であっても物理環境(温度、圧力、磁場など)によって絶縁体から金属に変化したり、 金属から超伝導体になったりすることも珍しくありません。物性科学という学問は、そのような多彩な物質の性質を 物理学(特に量子力学と統計力学)や化学の基本原理から解き明かし、統一的物質観の構築を目指す営みです。 物性科学はまた、半導体デバイスや磁気デバイス、光通信など、現代社会を支える先端技術の基盤となる学問です。 物性科学の研究対象は、伝統的な固体結晶から、アモルファス(非晶質)物質、ゲルや液晶などのいわゆるソフトマター、 あるいは人工超格子やナノ系など人為的に設計・作製される系へと広がって来ました。 物性測定の面でも、超強磁場、超低温、超高圧など未踏の極限環境の追求や、 レーザー、放射光、中性子など量子ビームプローブの巧みな活用など 最先端の実験技術が開拓され、研究の最前線を形成して

取え場の実験役柄が用泊され、切先の取前線を形成し います。また、複雑な現象の物理的本質を捉える モデルや理論の構築とともに、高性能スーパー コンピューターを用いた大規模数値計算による 研究も近年とみに重要性を増しています。

Materials occurring in nature are composed of various combinations of a hundred-or-so elements, and each one of them exhibits its own characteristic properties. Take electrical conduction, for instance, materials can be classified into insulators, semiconductors, metals and superconductors.

There are numerous cases in which a particular material changes from an insulator to a metal, or from a metal to a superconductor depending on the physical conditions (temperature, pressure, magnetic field, etc.). Materials science seeks to elucidate the rich variety of materials' properties from the basic principles of physics (quantum mechanics and statistical mechanics, in particular) and chemistry, and aims at understanding the materials world in full perspective. Materials science also forms the basis of state-of-the-art technologies such as semiconductor devices, magnetic devices, optical communication, which supports the modern high-tech society. Over the years, the scope of materials science has been expanded from conventional crystalline solids to amorphous materials, so-called soft matters such as gels and liquid crystals, and artificially fabricated systems such as superlattices and nano-scale systems. Pursuit of unexplored extreme conditions such as ultrahigh magnetic field, ultralow temperature and very high pressure and sophisticated utilization of quantum beam probes such as laser, synchrotron radiation light and neutron beam are at the forefront of

development of experimental techniques. In recent years, large scale numerical computations using high performance supercomputers are gaining importance, as an approach complementary to development of models and

theories that grasp the physical essence of complex phenomena.

History of th ■物性研究所の歴			
1960 1960 1960 1960 1960 1960 1960 1960	●共同利用研究所として発足	1957	• Establishment of the ISSP as a collaborative research institute
	●軌道放射物性研究施設設置	1975	Foundation of Synchrotron Radiation Laboratory
	●研究部門改組、22 部門から 5 大部門へ 習強磁場、極限レーザー、表面物性、 超低温物性、超高圧)の発足	1980	<ul> <li>Reorganization of the institute</li> <li>Start of the "Physics in Extreme Conditions" project which includes Ultra-High Magnetic Fields, Laser Physics, Surface Science, Ultra-Low Temperatures, and Very High Pressures</li> </ul>
	●第一回 ISSP 国際シンポジウム	1989	The first ISSP International Symposium
	●中性子散乱研究施設の新設	1993	Foundation of Neutron Scattering Laboratory
	●柏移転へ向けての研究部門改組 ●物質設計評価施設の新設	1996	<ul> <li>Reorganization of the institute to prepare for the movement to the Kashiwa new campus</li> <li>Foundation of Materials Design and Characterization Laboratory</li> </ul>
	●柏キャンパスへ移転	2000	Relocation to the Kashiwa new campus
	●国立大学法人化	2004	Start of the "National University Corporation"
●国際超強磁場科学研究施設の新設		2006	Foundation of Internarional MegaGauss Science Laboratory
●共同利用・共同研究拠点として認可		2010	Start as a joint-usage/joint-research organization
●計算物質科学研究センターの新設		2011	Foundation of Center of Computational Materials Science
●極限コヒーレント光科学研究センターの発足		2012	• Establishment of Laser and Synchrotron Research Center
●研究部門の改組 ●横断型研究グループ(機能物性、量子物質)の創設		2016	<ul> <li>Reorganization of the institute</li> <li>Foundation of interdisciplinary groups (Functional Materials Group and Quantum Materials Group)</li> </ul>



### Quantum Materials Group ■量子物質研究グループ

**分野融合による新しい量子物質とその機能の創出** 物性物理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、大きく発展してきました。 物性研究所で活発に研究されてきた強相関電子系 は、その顕著な例です。一方、研究のブレークスルー は多くの場合、分野の融合によることが多いのも事 実です。そのような視点のもとに、当グループにお いては量子物質研究のさらなる飛躍を目指して、理 論と実験の緊密な連携を核とし、従来の研究部門の 垣根を超えた共同研究を推進しています。

当グループは3つのコアグループと9つの連携グ ループからなり、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材料の発見を 目指した研究を進めています。実験的には、バルク や薄膜の試料を作成し、その精密物性測定、スピン トロニクス機能の開拓を行っています。これらは、 理論手法の開発を通じて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強く協力をして進めて います。

### Interdisciplinary research to discover novel quantum materials and their functions

Discovery of new materials, new phenomena, and new concepts has progressed condensed matter physics. A good example can be found in the history of research in strongly correlated electron systems, one of the major fields studied at ISSP. On the other hand, breakthroughs have been often made at an intersection of various different research fields. To facilitate another leap forward in our activity, the quantum materials group has promoted interdisciplinary studies based on the collaboration between the experimental and theoretical groups beyond the conventional research disciplines.

The quantum materials group currently consists of three core groups and nine joint groups. All these groups vigorously conduct collaborative research to discover novel quantum phases and functional materials in correlated electron and spin systems. The activities include new materials synthesis in bulk and thin film forms and their characterization through state-of-art measurement systems. Device fabrication is also made for spintronics applications. These experiments are being conducted through lively discussions and tight collaboration with theory groups, which search for novel topological phases by using new theoretical approach and numerical methods.



反強磁性体 Mn3Snにおける室温巨大異常ホール効果。a, 強磁性体(左図)と反強磁性体 Mn3Sn(右図)における異常ホール効果。b, Mn3Sn のカゴメ格子上の反強磁性構造。c, Mn3Sn における室温 でのホール抵抗率の磁場依存性。

Large Anomalous Hall Effect in the noncollinear antiferromagnet Mn3Sn at room temperature. a, Anomalous Hall effect in ferromagnets (left) and in noncollinear antiferromagnets (right) b, Crystal and spin structure of Mn3Sn. c, Magnetic field dependence on the Hall resistivity in Mn3Sn at room temperature.



キタエフスピン液体の候補物質とし て新たに提案した金属有機構造体。 A Metal-Organic Framework proposed as a new candidate material for the Kitaev Spin Liquid. (a)特徴的なナノ構造を有する新物質・材料 薄膜(b)外部からMgO誘電層に電界をかけ ながら行われた薄膜デバイスにおけるX線 磁気円二色性分光の結果。次世代不揮発性 メモリの駆動技術として重要な磁性金属薄膜 における電気磁気効果の起源を解明。

(a) A novel multilayer with characteristic nano-structure. (b) Results of X-ray magnetic circular dichroism spectroscopy conducted under electric-field application. The origin for the voltage-controlled magnetic anisotropy, which is important for non-volatile random access memory, has been revealed by the atomically controlled device and X-ray spectroscopy.



### **Functional Materials Group** ■機能物性研究グループ

光で様々な機能を発現する微生物型ロドプシン(上)、 ロドプシンのカラーバリエーション(中央)、バクテリ オロドプシンの発色団レチナール結合部位(左下)、レ チナールの光異性化(右下)。 Microbial rhodopsins (top), color-variation of purified rhodopsins (middle), retinal binding pocket of bacteriorhodopsin (lower-left), photo-isomerization of retinal (lower-right). プロトン一電子カップリング界面によ り機能を発現する有機ヘテロ二層膜。 Organic hetero-double-laver with Light (180-700 fs) functional proton-electron coupled interface. 13-cis retinal donor -bonds Cat-TTF acceptor Func. SAM

タンパク質の自己集合による生体膜の構造形成。(左から順に)ストライプ構造、 チューブ形成、ネットワーク構造、出芽。

Structure formation of biomembranes induced by protein self-assembly. (left to right) Stripe assembly, tubulation, network formation, and budding.





ホタル生物発光酵素ルシフェラーゼと発光分 子。ミュータント酵素で発光色が変化する。 Enzyme and luminescent molecule in firefly bioluminescence. Mutation changes bioluminescence color.

ルベアン酸銅水和物のプロトン伝導。水を内 包したナノ多孔性錯体は室温における高性能 プロトン伝導体として利用される。

Proton conduction in copper rubeanate hvdrate. Nano porous complexes containing water molecules are utilized as high-performance proton conductors at room temperature.



#### 機能物性の基礎科学

科学技術や産業の発展は、新しく興味深い機能物 性研究題材を生み出しています。機能物性の基礎研 究を行うには、基底状態・平衡状態の静的電子物性 にとどまらず、励起状態・非平衡状態、さらには化学 反応や生体系にいたる動的な性質という難題に取り 組む必要があります。そのため、分野横断の約10研 究室が連携する機能物性研究グループが発足しまし た(2016年10月)。例えば、タンパク質・脂質膜のよ うなバイオ系、マルチスケール・階層的複合構造をも つ物質系、光・電気・化学エネルギーにより駆動され たアクティブ系など、新しい機能物質系を開拓します。 また、非平衡や励起状態の時間分解分光、ナノスケー ルの空間分解分析・分光、動作・反応中のオペラン ド計測などの実験手法を開発・実践します。さらに計 算機科学やデータ科学をふくむ新しい非平衡・励起・ 動的状態の理論的手法の開発・実践を行います。

#### Basic science in functional mateirals

New interesting materials functions emerge everyday thanks to the developments in science, technology, industry, and society. To investigate fundamental science of materials functions, we must deal with non-equilibrium or/and excitedstate dynamics of complex materials systems, which are much more difficult than the well-established equilibrium ground-state physics and chemistry. The Functional Materials Group, which consists of about 10 faculty members and their lab members, is one of the two new trans-divisional and interdisciplinary research groups in ISSP started in October 2016. They deal with systems with hierarchical and inhomogeneous structures, including chemical reactions and dynamical processes in biological systems. They develop and use time-resolved, nano-scale local-probe, and operando spectroscopy, and other new methods for measurement, and first-principles calculations and data/computer science methods for theoretical analysis. The Functional Materials Group is an open platform for challenging collaborations.

### **Division of Condensed Matter Science** ■凝縮系物性研究部門

#### 新物質と新現象

酸化物高温超伝導体、有機伝導体、フラー レン、カーボンナノチューブ、グラフェンな どの例に見られるように、「新物質」の発見 はこれまでに何度となく物質科学の新しい局 面を開いてきました。また、物質系を超低温、 超高圧、強磁場など、「極限環境下」に置くと、 通常の状態とは全く異なる性質を示す様に なります。新奇な物質や物性現象の発見は また将来の新しい素材やデバイスの開発にも つながります。凝縮系物性研究部門では、 遷移金属酸化物、重い電子系物質、有機伝 導体など強い電子相関を示し、トポロジー、 多極子、分子自由度など新たな自由度が加 わった物質における多彩な現象の解明を主 要なテーマの1つとしています。多様な物質 合成や原子層やナノ構造体の作製、構造解 析、常温常圧ばかりでなく、極低温、超高圧、 強磁場下における輸送測定、精密磁化、熱 測定、核磁気共鳴など、高度な実験技術を 駆使した研究が進められています。

#### New materials and new phenomena

Discoveries of new materials have often opened new horizons in materials science. High temperature oxide superconductors, carbon clusters, nanotubes, graphene, and organic conductors are good examples. Materials under extreme conditions such as low temperatures, high pressure, and high magnetic field demonstrate unusual electronic states. New materials and new phenomena also lead to the future development of new devices and technologies. One of the subjects of our current intensive research is the effects of strong electronic correlation, in particular, novel phenomena related to topological, multipoles, molecular degrees of freedoms in transition metal oxides, heavy electron systems, and organic conductors. Here, various advanced experimental techniques are employed, such as materials syntheses, device fabrication, and transport, magnetic and calorimetric measurements. The goal of the Division is to uncover novel phenomena that lead to new concepts of matter, through combined efforts of search, synthesis and characterization of new materials.



有機超伝導体 (BEDT-TTF)/Cu(NCS)/ の定電流電解結晶育成とその単結晶。 Electrocrystallization and single crystals of organic superconductor к(BEDT-TTF)2Cu(NCS)2.



物性研で作製されたスピンアイス化合物 Dy2Ti2O7の 磁化の角度変化。

Angular dependence of the magnetization of the spin-ice compound Dy2Ti2O7 grown at ISSP.

招高圧下角度分解 NMR 測定プローブ。 Angle resolved high pressure NMR probe.



ディラック電子系 α-(BEDT-TTF)2l3 のヘリカ ルな表面状態と層間磁気抵抗。

Helical surface state in the v=0 QH state in the Dirac multilayer and interlayer magnetoresistance scaled by cross sectional area of two samples.



# **Division of Condensed Matter Theory**

■物性理論研究部門

### 物質の性質の基本原理にもとづくミクロなレベ ルからの理解

さまざまな性質をしめす物質も、その構造の内部 に入り原子レベルまで分け入って考えると量子力学 という普遍的な物理法則によって支配されていま す。単純な物理法則から多様な現象が生じる鍵は 10<sup>23</sup>個という天文学的な数の基本粒子がお互いに相 互作用をしていることにあります。物性理論の研究 者は各人のアイディアに導かれて、理論的枠組み やモデルを構成し、その性質を研究することによっ てこれまで未知と考えられてきた現象の理解と新し い現象の予言が可能となることを目指しています。 理論研究を遂行するに当たっては、数理物理学や 場の量子論などの解析的手法や、密度汎関数理論 に基づく第一原理計算や量子モンテカルロシミュ レーションなどの計算物理的手法などが駆使され ています。

#### Microscopic understanding of the nature of matter from the fundamental laws of physics

The microscopic basis for understanding the diversity of properties of matter is the law of quantum mechanics, which is the fundamental law of physics governing the motion of electrons and nuclei. The key aspect producing the remarkable complexity from this simple law of physics is the effect of the interaction among an astronomical number of particles on the order of 10<sup>23</sup>. To understand novel phenomena, a condenced-matter theorist formulates a theoretical model for an interacting many-body system that captures the essential physics of the problem. To conduct a theoretical study on such a model, various approaches developed in theoretical physics are employed: the analytic methods of mathematical physics, field-theoretic methods, and numerical methods including first-principles calculations based on density functional theory and quantum Monte Carlo simulations.

相互作用する非調和振動子の相転 移。原点での振動子の占有率n。の 温度 (T/t) ポテンシャルエネル ギー(ɛ/t)依存性。

Phase transition of interacting Phase transition of interacting anharmonic oscillators. Temperature (T/t) and potential energy (ø/t) dependences of the occupation (n<sub>0</sub>) of the oscillator.







Localized

Incoherent hopping

Coherent

superpositi

Current through a quantum dot calculated by the

time-dependent density matrix renormalization

 $g = \hbar \omega / V$ 

group method.

8

2

**Dissipation Strength** 

1次元ボース凝縮体の Y 字型接合における負 の密度の反射。 Negative density reflection in Y-junction of one-dimensional Bose condensates.

#### AI薄膜と低速入射イオンの摩擦係数の第一原理計算 は設構造を反映した振動を含めて実験をよく再現する。 First-principles calculations of the friction coefficient between a thin aluminum film and low-energy incident ions reproduce experimental results very well, including the oscillatory behavior reflecting the ionic shell structures.



磁場  $\phi$  の下における2次元六角 格子上の電子のエネルギーEと量 子ホール係数 Cky。

Energy spectrum and the Hall conductance of electrons on a honeycomb lattice under a magnetic field.

#### 環境と結合した量子二重井戸系のモンテカルロ 法による相図。

Phase diagram of quantum dissipative double-well systems obtained by Monte Carlo calculation.





白金電極上の水の構造と 分布関数:第一原理分子 動力学計算。

Structure and distribution function of water on a Pt electrode : first-principles molecular dynamics simulation.

## **Division of Nanoscale Science** ■ナノスケール物性研究部門



チタン酸ストロンチウム薄膜内に自己組織的に析出させ たイリジウム金属のナノピラー構造。界面での特異な 性質を生かし、水分解光電極として応用が期待される。 Nanoscale iridium pillar spontaneously phaseseparated from a SrTiO3 matrix, which can be used as an electrode for photoelectrochemical watersplitting reaction.



超伝導体ニオブとの近接効果により超伝導状態にして測定 した希薄磁性半導体インジウム鉄ひ素の電流電圧特性。 Current-Voltage characteristics of superconductivity in a diluted magnetic semiconductor indium-iron-arsenide induced by the proximity effect from niobium.



スピンポンピング法を用いた Cu/Bi2O3 界面におけるスピ ン流 - 電流変換の観測 Observation of spin-tocharge current conversion at Cu/Bi2O3 interface by means of spin pumping.



強磁性窒化鉄原子層のSTM像。 鉄原子が明るくみえている。 STM image of an iron-nitride atomic layer. Bright dots are iron atoms.



階段状基板上の単原子層グラフェ ンのSTM像 STM image of graphene on a step-and-terrace substrate.

#### 走査トンネル顕微鏡による超伝導近接 効果の実空間観察

Real-space observation of the proximity effect of superconductivity by scanning tunneling microscopy.



#### ナノスケール人工物質・表面・界面の物性

構成元素の配列を高度に制御した人工低次元系、 ナノメートルの周期で規則正しく配列した自己組織 化構造、原子レベルで規定された様々な固体表面・ 界面構造などでは、ナノ特有の電気的・磁気的性 質や化学反応性が現れます。最新の薄膜生成技術、 微細加工技術、超精密計測技術、顕微鏡技術など を駆使し、緻密に制御された物質を創成し特異な 物性を探索するとともに、その起源をミクロに解明 することを目標として研究を推進しています。さら に、そのために必要となる新しい実験手法の開発 や観測された物性を応用するための素子作製技術 の開発も行っています。

#### Nanoscale materials, surfaces, and interfaces

In atomically well-controlled artificial low-dimensional systems, self-organized nanoscale structures, and atomically well-defined surfaces/interfaces, novel electronic, magnetic, and chemical properties instrinsic to the nano-size emerge. Using advanced thin-film growth methods, micro fabrication techniques, ultimately precise measurement technologies, and microscopic techniques, we have studied these nano systems to explore the unique properties and elucidate the mechanisms in a microscopic manner. We have also developed new experimental techniques suitable for these studies and device fabrication methods aiming for the application of newly found properties.



液体金属4端子法による単分子 層有機 FET の無侵襲伝導測定 Non-invasive liquid-metal four probe transport measurement of an organic monolayer FET.

### Materials Design and Characterization Laboratory ■物質設計評価施設

物性物理学をリードする物質合成・超高圧物性研究とスーパーコンピュータによる仮想物性実験

物質設計評価施設では、物質の「設計(Design)」、 「合成(Synthesis)」、合成された物質を総合的に 調べる「評価 (Characterization)」の3つの研究を 有機的に連携させる (DSC サイクル) ことにより、 新しい物性・機能を持つ物質の開発を目指してい ます。さらに、15万気圧を越える超高圧下におけ る極限環境物性の開拓を行っています。物質設計 部では、最先端の物性研究専用スーパーコン ピュータを駆使して、原子間の相互作用によって 生み出される様々な協力現象を解明しつつ新物質 の設計を行います。物質合成・評価部では物質の 合成、単結晶育成およびその組成分析や結晶構 造解析 を行うとともに、新しく開拓された物質群 の電気的・磁気的・光学的性質の総合評価を行っ ています。さらに、超高圧物性測定技術の開発と 磁場・低温を組み合わせた多重環境下での物性 探索に力を入れています。また、施設の機器は全 国の研究者も利用できるよう維持・運営されてい ます。

# Materials synthesis, high-pressure measurements and virtual experiments using a supercomputer for solid state physics

The aim of the Materials Design and Characterization Laboratory (MDCL) is to promote materials science with the emphasis on the DSC cycle, where DSC represents the three processes involved in developing new materials; design, synthesis, and characterization. A modern supercomputer is used to reveal novel mechanisms behind various cooperative phenomena in condensed matter and to pursue theoretical design of new materials as well as materials with novel nanoscale structures. Various types of new materials are synthesized and single crystals are grown for physical measurements. The structural, electromagnetic, and optical properties of the materials are characterized in various ways. The results are immediately feedback to the synthesis and design of materials. Moreover, novel phenomena that have never been observed at normal conditions are explored under extreme conditions, especially at high pressures up to 15 GPa. Almost all the facilities of the MDCL are open to domestic scientists through the User Program conducted by the Steering Committee of the MDCL.



MDCL において発見されたパイロクロア酸 化物超伝導体 AOs<sub>2</sub>O<sub>6</sub> (A = Cs, Rb, K)。 Pyrochlore oxide superconductors found in the MDCL.



キュービックアンビル圧力発生装置。12万気 圧以上の超高圧を低温強磁場と組み合わせた多 重極限環境下での物性測定を行う事が出来る。 Cubic anvil high-pressure apparatus. Cryostat for experiment under multiple extreme conditions of low temperature, high magnetic field, and high pressure.



スーパーコンピュータ システム B SGI ICE XA/UV ハイブリットシステム Supercomputer System B SGI ICE XA/UV hybrid system

3 次元 2 重 XY モデル(2つの XY モデルを双二次 相互作用で結合させたモデル)の数値くり込み群の 流れ図。2つの XY モデルの間の相互作用( $\lambda$ )が 有限のとき、くり込みの流れは独立 XY 固定点から系 統的に遠ざかり、一次相転移が確かめられている領 域( $\lambda = -2$ )に至る。このことは常磁性相から秩序 相への相転移が一次転移となることを意味する。

A flow diagram of the 3D double-XY model obtained by numerical simulation. The flow starting around the decoupled XY fixed point (indicated by a large filled circle) systematically deviates from it, evolving toward the region where a clear first order signature has been obtained ( $\lambda$ =-2). No separatrix is found and it strongly suggests that the transition is always of the first order for this model.





細管を流れる赤血球型ペシクルのシミュレーション。 流速と密度によって異なる性格のダイナミクスが見ら れる。上図:低密度、低速 中図:低密度、高速 下図:高密度

Simulation of red blood cells in capillary flow. We observe different dynamics for different flow rate and density of the cells. Upper: low density, small flow rate Middle: low density, high flow rate Bottom: high density



### Neutron Science Laboratory ■中性子科学研究施設



日本原子力研究開発機構所有 研究用原子炉 JRR-3。 Research Reactor, JRR-3, at Japan Atomic Energy Agency (JAEA)

> J-PARC 物質・生命科学研究 施設に設置された高エネル ギーチョッパー (HRC) 分光器。 High Resolution Chopper (HRC) spectrometer installed at J-PARC/MLF

#### 中性子小角散乱によるナノコンポジットゲル の変形機構の研究。図は応カー延伸比曲線 と対応する2次元中性子散乱パターン。水 分率が90%にもおよぶゲルにもかかわらず、 10倍以上の延伸が可能。その秘密は厚み 1nm 直径30nmの板状粘土鉱物と高分子 の架橋構造にある。

Small-angle neutron-scattering study on deformation mechanism for nanocomposite polymer gels. Stress vs stretchingratio plot with two-dimensional scattering patterns. Although the water content is more than 90%, the gel can be stretched to more than 10 times its original length owing to network structure of polymer chains and clay platelets of 1 nm thickness and 30 nm diameter.



高エネルギーチョッパー分光器で測定された マルチフェロイック物質 NdFe<sub>3</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>4</sub>の中 性子スペクトル。

Neutron spectra of  $NdFe_3(BO_3)_4$  measured by High Resolution Chopper spectrometer.





パルス冷中性子分光器 (AGNES) によるルペアン酸 銅水和物のプロトン伝導の研究。準弾性散乱スペク トル (左下)から拡散係数(右上)を計算し、プロ トン伝導モデル (左上)との比較を行う。

Study on proton conductivity of copper rubeanate hydrates using a pulse cold-neutron spectrometer (AGNES, JRR-3). The diffusion coefficients (upper right) were calculated from the quasielastic spectra (lower left) and compared with the model of proton conduction (upper left).



#### 物質の構造と運動を調べる中性子散乱

物質を構成する最小基本粒子である中性子は、 透過力に優れ、微小磁石(スピン)の性質を持つ ので、原子の中心にある原子核やその周りにある電 子のつくる磁場(磁気モーメント)と力を及ぼし合 います。この性質を利用して多数の中性子を物質 に当て、その散乱の仕方(方向・スピード・スピン の向きの変化)を測り、物質内での原子や磁気モー 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」と言います。この方法により物質の性 質や機能が、原子・分子の配列や運動状態とどの ように関わっているかを解明することができるため、 物性物理のみならず、化学・高分子科学・生物学・ 材料科学などの広い分野で研究に応用されていま す。当施設では、定常中性子源(研究用原子炉 JRR-3、日本原子力研究開発機構、JAEA)とパル ス中性子源(大強度陽子加速器施設、J-PARC)に 実験装置を設置して中性子散乱の全国共同利用を 進めるとともに、米国オークリッジ国立研に設置さ れた実験装置の共同運営も行っています。これら 実験装置を全国の研究者とともに駆使することによ り、ハードマター・ソフトマター・ガラス等の物性 解明を行っています。

### Neutron scattering - a unique tool to study the structure and dynamics of matter

Neutron is one of ingredients which form nuclei or atoms. It can penetrate deep inside of materials and interact with a nucleus or magnetic fields created by electrons which surround the nucleus. To utilize such neutron properties, crystal and magnetic structures in the materials are investigated by neutrons, and this method is called "Neutron Scattering". The Neutron Science Laboratory (NSL) provides General User Program for Neutron Scattering in Tokai area. Furthermore, we cooperate a neutron instrument installed in Oak Ridge National Laboratory in the United States. Major research areas include solid state physics (strongly correlated electron systems, high-Tc superconductors, heavy fermion systems, low dimensional magnetism, high-pressure physics etc.), fundamental physics and neutron beam optics, polymer, chemistry, biology, and materials sciences

### International MegaGauss Science Laboratory ■国際超強磁場科学研究施設

世界最強のマグネットによる物質極限機能の解明

強磁場を半導体、磁性体、新奇な金属、超伝導 物質などに適用し、極限状態における電子状態を 調べています。また、より強い磁場発生の為のマグ ネット開発も行っています。非破壊型長時間パルス マグネットでは、電気伝導、光学、磁化測定など の精密な物性計測に用いられるだけでなく、高圧、 低温環境と組み合わせた実験にも使用されます。 これらは、強い磁場を必要とする国内外の多くの物 性研究者に利用されています。世界最大の直流発 電機(210メガジュール)によって駆動されるロング パルスマグネットとして100テスラ磁場発生へ向け た研究開発も進めています。また、電磁濃縮法、 および、一巻きコイル法による破壊的手法にて100 テスラ以上の超強磁場発生とそれを用いた物性研 究をおこなっています。

### Investigation of extreme material functions using the world's strongest magnets

Strong pulse magnets are being developed, and the electronic states in semiconductors, magnetic materials, novel metals, and superconducting materials are under study in extreme physical conditions. The measuring techniques by use of the non-destructive and long-pulse magnets are available for electric transport, optical, and magnetization measurements at low temperatures and/or high pressures. The facilities are offered for use by not only domestic users but also those from overseas. It is planned to establish long pulse magnets energized by the world's largest 210 MJ-DC flywheel generator to explore the 100 T regime. Magnetic fields above 100 T are achieved by destructive electro-magnetic flux compression and the single-turn coil techniques, and are used for research in solid-state physics.

世界最大の直流電源;回転蓄積エネル ギー210MJのフライホイール発電機。 The world's largest DC electric power generator; a flywheel generator capable 210 MJ stored by a rotation energy.



爆破保護室内に設置された「電磁濃縮法」による超強磁場発生装置。 An ultra high-magnetic-field generation system using the electromagnetic flux compression method has been installed at ISSP inside protection housing.







電磁濃縮超強磁場発生に用いる銅内張主

コイルと初期磁場発生コイル(両側)。

The copper-lined primary coil and a

pair of seed field coil used for the

electromagnetic flux compression.

1000 テスラ級の磁場が発生可能。

capable of generating 1000 Tesla



ロングパルスマグネットによる磁場波形。 Waveform of the Long Pulsed Magnetic Field.

### Center of Computational Materials Science ■計算物質科学研究センター



「京コンピュータ」(理化学研究所計算科学研究機構,神戸) "K-computer" (AICS/RIKEN, Kobe)



物性研究所計算物質科学研究センターのスタッフ Staff members of CCMS



MateriApps のウェブサイト The website "MateriApps"

#### 超並列計算で切り拓く新しい物質科学

物質科学の目的は、本来的に非常に多数の構成要素か らなる物理系の性質を解き明かすことにあります。そのよ うな問題に対する完全な解答を人間の頭脳だけで導くこと は不可能であり、近年、大規模数値計算によるアプローチ が盛んになったのは当然のことといえます。コンピュータ を利用した精密な物性予測によって、物性物理学の基礎的 な問題から、産業応用に結びつく応用問題に至るまで、広 い範囲で重要な成果が挙がっています。一方で、近年のハー ドウェア開発のトレンドは並列化(=演算器の多数化)で あり、多くのコアにいかに効果的に計算を分業させるかが 計算物質科学の挑戦的課題となっています。本センターは、 「京|コンピュータや、物性研究所共同利用スパコンを始 めとする様々な計算資源を活用し、この課題に組織的に取 り組むと同時に、ソフトウェア普及のためのサイト MateriAppsの運営などのコミュニティ支援活動を行ってい ます。また、本センターは、ポスト京プロジェクト重点課 題7の事務局機能を果たしているほか、ポスト京プロジェ クト萌芽的課題1、計算物質科学人材育成コンソーシアム、 元素戦略<研究拠点形成型>など多くの計算科学関連プ ロジェクトに参画し、これらを推進しています。

### Exploring new frontiers in materials science with massively parallel computing

The goal of the materials science is to understand and predict properties of complicated physical systems with a vast number of degrees of freedom. Since such problems cannot be solved with human brains only, it is quite natural to use computers in materials science. In fact, computer-aided science has been providing answers to many problems ranging from the most fundamental ones to the ones with direct industrial applications. In the recent trends of the hardware developments, however, the growth of computer power is mainly due to the growth in the number of the units. This fact thrusts a very challenging problem before us --- how can we parallelize computing tasks? In order to solve this problem in an organized way, we coordinate the use of the computational resources available to our community. In addition, we support community members through various activities such as administrating the website "MateriApps" for information on application software in computational science. We are also acting as the headquarters of the post-K computer project (priority area 7), as well as participating other national projects such as the post-K computer project (pioneering area 1), Professional Development Consortium for Computational Materials Scientists, and Energy Strategy Initiative.

### Laser and Synchrotron Research Center ■極限コヒーレント光科学研究センター

Yb ファイバー光周波数コム Optical frequency comb based on an Yb-fiber laser





アト秒軟 X 線発生に用いられる 高強度チタンサファイアレーザー Intense ultrashort・pulse Ti:sapphire laser for producing attosecond soft-X-ray pulses



オクテット・ラインノード構造を持つ鉄系超伝導体 KFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> におけるフェルミ面の超伝導ギャップの異方性と軌道成分 Superconducting gap anisotropy and orbital contributions of Fermi surfaces of iron-based superconductor KFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> with octet-line node structure



高強度チタンサファイアレーザー によるコヒーレント軟X線光源 (高次高調波)を用いた時間分解 光電子分光装置

Time-resolved photoemission apparatus using coherent soft x-ray pulses produced from high-power Ti:sapphire laser and its higher harmonic generation

> 100 周期 T 型量子細線レーザー (a,b) と短パルス発生用電流注入 多セクション半導体レーザー (c) Nano-structures in a 100-period T-shaped quantum-wire laser (a,b) and current-injection multisection semiconductor laser for short-pulse generation (c).

#### 物性科学を先導する極限光

二十世紀初頭に量子力学や相対論を生み出す きっかけを作ったのは光でした。現在ではレーザー や放射光により高度に制御された多彩な光の発生 が可能になり、物性研究において活躍しています。 当センターでは、レーザーを用いて極限的な光を発 生させる技術により、軟 X 線などの高エネルギー 光や超高速現象を捉えるためのアト秒(10<sup>-18</sup> 秒)光 を開発しています。また、SPring-8 では世界最高輝 度の放射光ビームラインを使用した軟 X 線科学を 研究しています。これらの最先端光を用いて、各 種の分光計測法を開発し、超伝導体、強相関系物質、 液体、生体物質、半導体ナノ構造、固体表面界面、 光誘起相転移物質などに適用し、幅広く物性研究 を展開しています。

#### Materials science using extreme light

Understanding the nature of light played an important role in establishing the theories of relativity and quantum mechanics at the beginning of the 20th century. These two theories have not only made modern physics but have also been crucial to the development of modern optical technologies such as synchrotron radiation and lasers. It is now possible to produce extremely short bursts of laser light with attosecond (10-18 sec) time scales. The range of available spectral windows of laser-based light sources has also expanded significantly, and now ranges from terahertz frequencies to soft X-rays. In SPring-8, we are studying soft X-ray sciences using the most brilliant synchrotron beamline. We are developing both extreme light sources and various spectroscopic techniques to explore wide ranges of novel materials and phenomena including high-Tc superconductors, strongly correlated materials, photo-induced phase transitions, biological molecules, solid surfaces/interfaces, and semiconductor nanostructures.



# Synchrotron Radiation Laboratory

■軌道放射物性研究施設



長尺クロス型アンジュレー タ:SPring-8 蓄積リング の長直線部に挿入されてい る。高輝度な軟X線放射光 を発生すると共に、その偏 光を自在に制御することが できる。

Polarization-controlled soft X-ray undulator installed in 30m long straight section of SPring-8.

超高分解能軟X線発光分光装置。 固体・液体試料の測定ができる。 Ultrahigh energy resolution soft X-ray emission spectrometer equipped with a manipulator for solids and a flow-through cell for liquid experiments.

### Supporting Facilities

#### 高輝度放射光で物性を解明する

ほぽ光速で運動する電子は磁場によって運動方向を 曲げられると高輝度な光を発生します。この光は放射 光と呼ばれ、基礎科学から応用科学までの広い分野で これまで利用されてきています。本施設は、世界最初 の放射光専用リング(SOR-RING)を有し、わが国の放 射光科学分野のパイオニアとしての役割を果たしてきま した。現在は、我が国を代表する放射光施設 SPring-8(ス プリングエイト)に世界最高性能の高輝度軟X線ビーム ラインを設置して、最先端物質科学研究を行っていると 共に、ビームライン実験設備を共同利用に供しています。

#### Materials science using synchrotron radiation

Synchrotron Radiation Laboratory (SRL) was established in 1975 as a research group dedicating to study solid state physics using synchrotron radiation from SOR-RING, the first dedicated light source for the material science in the world and was operated. SRL holds and maintains a soft X-ray undulator beamlines at the SPring-8. SRL has been studying materials science using synchrotron radiation intensively. And the beamline is fully opened to outside users for experiments.

共通施設

#### ■低温液化室 Cryogenic Service Laboratory

低温実験に必要な液体ヘリウムや液体窒素を供給すると共に、 低温技術に関する開発とサービスを行っています。

Cryogenic Service Laboratory provides liquid helium and liquid nigtrogen, as well as technical advices for low-temperature experiments.

### ■工作室 Machine Shop

研究用の特色ある装置や部品の制作、改良を行っており、独 創的な実験装置の開発に重要な役割を果たしています。

The machine shop, where unique research instruments and devices are made, plays an important role in developing innovative experimental apparatus.

### ■放射線管理室 Radiation Safety Laboratory

放射性物質やX線装置など放射線発生装置の取扱者の安全 を確保すると共に、放射性試料作成や放射線測定にも利用さ れています。

The lab is aimed to protect researchers from irradiation and provides equipment for radiation experiments and radiochemical operations.

### ■図書室 Library

所内研究者の研究や大学院生の教育とともに、全国の共同利

用研究者のために、物性科学を中心とした資料を多数所蔵し、 利用に供しています。

The ISSP library holds many documents concerning materials science for researchers.

### ■国際交流室 International Liaison Office

外国人客員所員や研究員のサポート全般及び ISSP 国際シンポ

ジウムの運営に関する業務を行っています。

- $\odot$  Support the ISSP visiting professorship program
- $\odot$  Assist the organization of the ISSP international symposium
- $\bigcirc$  Provide necessary information for overseas researchers

#### ■情報技術室 Information Technology Office

所内 LAN、および、WWW サーバなどの各種サーバの管理運 用を行なっています。

The office operates the local area network in ISSP, WWW server, and other servers to support all ISSP users.

### ■広報室 Public Relations Office

Web・出版物での情報発信や、一般講演会等の社会貢献となるアウトリーチ活動を行っています。

The office offers information of our institute by webpage and publications, and is also in charge of outreach activities.



### **Domestic Joint Research** ■ 各種研究員制度

■採択件数および採択人数 (共同利用の一般・物質合成・中性子・スーパーコンピュータおよび留学研究員と嘱託研究員の合計) Number of subjects and researchers adopted to domestic joint research



全国の物性科学研究者に対する共同利 用・共同研究を促進するための制度です。 1.一般研究員 所外研究者が本所を 利用したい場合の制度で、申請研究計画等 を検討のうえ決定します。

2. 留学研究員 公的研究機関の若い研究者に対し本所への留学の機会を提供する制度で、3か月を超える長期留学研究員と、3か月以下の短期留学研究員の2種類の制度があります。

3. 嘱託研究員——本所の研究計画並び

に共同研究計画の遂行上必要な研究を嘱託 する制度で、6か月を限度としています。

その他、物性研スーパーコンピュータシ ステムは、インターネットを通じ全国の研究 者の利用に供されています。

The facilities of ISSP are open to domestic researchers, who are encouraged to submit joint research proposals. In addition, ISSP provides opportunities for young scientists including graduate students to research on exchange at ISSP. ISSP supports travel and research expenses for visitors.

The supercomputer system of ISSP is used via internet by domestic researchers.

# International Activities ■国際交流

本所では、特徴ある設備を活用した国際共同研究や、国際シンポジ ウム・国際ワークショップの開催など、物性研究の国際的拠点としても 重要な役割を担っています。本所独自制度も含めた様々な外国人招聘 制度などを利用した研究者も多数在籍し、また、1981年以降、中性子 散乱に関する日米協力事業の実施機関の役割も果たしています。 ISSP plays an important role as an international center of condensed matter science, as the unique facilities have been used in many international collaborations and international symposiums and workshops are organized. Many foreign researchers have been staying at ISSP supported by various fellowship programs, including ISSP's own unique ones. ISSP has also been coordinating the Japan-US cooperative research program on neutron scattering since 1981.

### Workshop ■短期研究会

物性研究上興味深い特定テーマについて、2~ 3日程度集中的な討議を行うための制度です。全 国の物性研究者からの申請に基づき、共同利用施 設専門委員会によって採択が審議決定されます。

ISSP holds domestic workshops on specific subjects of condensed matter science typically with a two to three-day schedule. Proposals for workshops are submitted from researchers over the country and selected by the Advisory Committee for Joint Research.



■短期研究会(回数および参加者数)

### Staff Members ■教職員数

教授 Professors	25
特任教授 Project Professors	0
准教授 Associate Professors	15
特任准教授 Project Associate Professors	1
助教 Research Associates	38
特任助教 Project Research Associates	3
技術職員 Technical Associates	30
事務職員 Administrative Staff	12
合計 Total	124

平成 30 年 4 月 1 日現在

### Education ■教育 ■修士課程 Master Course Students



■博士課程 Docter Course Students



本所では、特色ある施設を利用し、物性科学に関 連した大学院教育に力を注いでいます。教員は、研 究分野に応じて、大学院理学系研究科物理学専攻、 化学専攻、工学系研究科物理工学専攻、あるいは新 領域創成科学研究科物質系専攻、複雑理工学専攻に 属していますが、これらの従来の枠を越えた総合的視 野に立つ研究者の養成に力を入れています。例年、 物性科学入門講座と大学院進学希望者のためのガイ ダンスを実施しています。

ISSP contributes to the graduate education in condensed matter science using its unique facilities. The faculties participate in the following departments of the graduate school of the University of Tokyo: Physics, Chemistry, Applied Physics, Advanced Materials, and Complexity Science and Engineering. However, students are encouraged to develop their careers across the established disciplines. Introductory lectures on condensed matter science and a guided tour are held every year.

### Budget ■<sup>予算</sup>

平成29年度予算額(単位:千円) 2017 Fiscal Year (Unit: Thousand Yen)

人件費(A)	1,124,758
物件費(B)	1,663,282
その他補助金(C)	20,030
寄附金(D)	18,808
受託研究·共同研究(E)	714,259
科学研究費(F)	424,530
合計 Total	3,965,667

(A) Regular Budget (Personnel) (B) Regular Budget (Non-Personnel) (C) Other Subsidies from the Government (D) Grant-in-Aid from Private Corporations (E) Grant-in-Aid from Governmental Agencies and Private Corporations (F) Grant-in-Aid from Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology, and Japan Society for the Promotion of Science

#### 東京大学物性研究所

The Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo

〒 277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5 5-1-5 Kashiwanoha, Kashiwa, Chiba 277-8581 TEL:(04)7136-3207 http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/







A棟:本館 B棟:低温・多重極限実験棟 C棟:ショートパルス強磁場実験棟 D棟:先端分光実験棟 E棟:極限光科学実験棟 K棟:ロングパルス強磁場実験棟

