物性研だより



目	1	KEK-ISSP共同建設分光器「高分解能チョッパー分光器」の 経緯と建設状況について・・・・・・・・・・・・・・・・・・・を 藤 卓
次	3 4	物性研に着任して・・・・・・・・・・・・・・・・・山本 達 近藤 晃弘
	5	物性研を離れて・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 奥 田 太一
	6	研究室だより ○ 加藤研究室・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 加 藤 岳 生
	11	ISSP国際シンポジウム ○ Horiba-ISSP International Symposium on "Hydrogen and water in condensed matter physics" (ISSP11)
	14	物性研究所短期研究会 〇 "ディラック電子系の物性-グラフェンおよび関連物質の最近の研究"
	45	ISSPワークショップ 〇「新励起源による表面界面ダイナミクス研究の展望」
	47	○「界面パイ電子系における新現象と物理」 "Physics and New Phenomena of π-electronic Interfaces"
	51	物性研究所談話会
	53	物性研究所セミナー
		物性研ニュース
	61	
	62	○ 東京大学物性研究所教員公募について
	66	○ 物性研たより第49巻目録(第1号~第4号)

編集後記



ISSP国際シンポジウム参加者集合写真(生命の森リゾート「森のホール」にて)

東京大学物性研究所 Copyright ©2009 Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo. All rights Reserved.



KEK-ISSP 共同建設分光器「高分解能チョッパー 分光器」の経緯と建設状況について

中性子科学研究施設 佐藤 卓

核破砕型パルス中性子源 J-PARC/MLF は 2008 年 5 月に初中性子ビームの発生に成功し、2015 年頃の計画出力 (1MW)達成時には世界最高クラスの加速器駆動型中性子源となる事が予想されています。従って J-PARC/MLF は強度 の制限を常に受けていた中性子物質科学研究に劇的な進歩をもたらすものと大きく期待されています。我々物性研究所附 属中性子科学研究施設でもこの新時代の中性子源に非弾性散乱分光器を建設し中性子科学のフロンティアを開拓すべくこ れ迄努力してきました。しかしながら、昨今の財政状況では単独建設の目処が立たず、多様な選択肢を念頭に可能性を 探ったところ、平成 20 年度補正予算において、高エネルギー加速器研究機構(KEK)との共同建設として J-PARC 物質 生命科学研究施設のビームライン 12 番(BL12)に高分解能チョッパー分光器(HRC)を建設する事が認められました。

HRC は KEK 物質構造科学研究所の伊藤晋一准教授を中心とするグループにより、文字通り非常に高いエネルギー分 解能を達成すべく設計された分光器です。主要な装置パラメータを表 1 に示します。本分光器の大きな特徴であるエネ ルギー分解能は Δ*E*/*E*_i = 1% 以下と設計されていますが、これはこの種の分光器としては世界最高エネルギー分解能で す。このため、入射エネルギー (*E*_i) を高くしても高分解能を保つ事が可能であり、同時に波数 (*Q*) 空間の分解能も高 く出来ます。従って、これ迄分解能が足りず詳細の議論できなかった種々の励起モードの解明が進むと期待されます。一 方で、物性研が計画していた中分解能高強度という性能は、物性研側が担当する大強度化設備、大強度モード用フェルミ チョッパー(中性子単色装置)および大立体角検出器の導入により確保される見通しが立ちました。実際、新たに設計され た大強度モードに対するモンテカルロ法を用いた装置シミュレーションでは、物性研単独計画とほぼ同等の試料位置中性 子束が得られています。本分光器が実現する sub eV-eV 高エネルギー領域での高強度非弾性散乱は、物性研が現在所有 する原子炉 3 軸型分光器では難しい領域であり、原子炉装置群と相補的であるという意味でも非常に有効であると考え られます。

Beam Line	BL12
Moderator	Decoupled liquid H ₂
Planned detector coverage (vertical)	-19°~20°
Planned detector coverage (horizontal)	-31°~124°
Sample size	50mmX50mm (max)
Incident energy	1~2000meV
Energy resolution ($\Delta E/E_i$)	$1{\sim}5\%$ (chopper dependent)

装置の建設は順調に進んでおり、物性研側担当部分に関しても急ピッチで設置が進んでいます。平成 21 年 10 月には 大立体角検出器の一部の設置が完了しました(図 1)。今後も平成 21 年度内に大強度化設備(中性子ガイドスーパーミ ラー)、大立体角検出器用エレクトロニクス、フェルミチョッパー等が導入される予定です。残念ながら中性子検出器に 使用する ³He ガスの価格が高騰を続けており、必要な大立体角検出器全ての導入には時間がかかる見込みですが、平成 22 年度には散乱角 40 度以下の検出器の使用により広い物性実験の実施が可能になる予定です。 本装置は J-PARC センターの共同利用制度を通じて一般共用される予定であり、申請課題は J-PARC での課題審査を 経て物性研中性子もしくは KEK 物構研スタッフのサポートの元で実施されます。一方で、本分光器の装置課題に関して は、物性研側は IRT 課題として、KEK 物構研側は S 型課題として共同公募されます。また、物性研側の IRT 課題に関 してはコミュニティーからの共同研究提案を受け付ける窓口を設ける予定です。このように、来年度から HRC という新 しく強力な物性研究手段が追加されます。物性コミュニティーからの積極的なご利用とご支援をお願い申し上げます。



図 1: (左)高分解能チョッパー分光器と(右)大立体角検出器設置作業風景

物性研に着任して

軌道放射物性研究施設 山本 達

2009 年 10 月 16 日付けで軌道放射物性研究施設・播磨分室の助教として着任致しました山本達と申します。この場をお借りして自己紹介及びこれまでの研究の紹介をさせて頂きたいと思います。

私は物性研告信淳研究室で博士号を取得した後、アメリカ・カリフォルニアにあるスタンフォード放射光研究施設 Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (SSRL) Anders Nilsson 研究室で3年間、オランダ・アムステルダムにあ るオランダ原子分子国立研究所 FOM Institute for Atomic and Molecular Physics (AMOLF) Mischa Bonn 研究室にて 1年半博士研究員として勤務してきました。

私のこれまでの研究を一言でまとめると「光を使って表面・界面化学反応を観る」です。固/気(超高真空〜大気圧) 界面から液/気界面と巾広い環境における表面化学反応を放射光 X 線分光、超高速レーザー分光、赤外分光といった多様 な分光法を用いて原子・分子スケールで理解することを目的とする研究を行ってきました。特に、「表面・界面の水分 子」が関わる反応に興味を持ち研究対象としてきました。

院生時代、私は超高真空・低温下での固体表面における水分子の吸着状態・反応性を赤外分光を用いた調べた研究を行いました。この超高真空・低温下での吸着状態・反応性は触媒反応の実際の反応条件下でも同じなのだろうかという思いから、アメリカでは気体雰囲気下での固体表面における水の吸着状態・反応性を大気圧X線光電子分光法 Ambient Pressure XPS (AP-XPS)を用いて調べました。この AP-XPS は、差動排気されたレンズ系を持つ電子分光器の近くに試料を置くことで従来真空中に限られていた XPS 測定を気体雰囲気(数 Torr)下で可能にします。現在、触媒反応や環境中での化学反応の *in situ* 測定が可能な実験手法として注目を集めています。その後オランダでは、生体膜における水分子を研究対象としました。生体膜の多様な機能・反応を理解するためには、生体膜を構成する分子の静的構造だけでなく、動的性質(ダイナミクス)を分子スケールで解明することが必須です。生体膜界面の水分子を選択的に検出可能かつ極めて高い時間分解能(10⁻¹³ 秒)をもつフェムト秒レーザー分光法(時間分解和周波発生分光法)を用いて、モデル生体膜における生体分子(水・脂質・蛋白質)の超高速振動・回転ダイナミクスを調べました。

次に、今後の研究展開について簡単に紹介させて頂きます。私の所属(軌道放射物性研究施設・播磨分室)が示す通り、 私は大型放射光施設 SPring-8 に整備された東京大学アウトステーション・物質科学ビームライン BL07LSU で勤務して います。この BL07LSU において得られる軟 X 線領域の高輝度・高分解能放射光の特徴を活かし、物質のナノスケール 局所電子状態解析、触媒化学反応ダイナミクスの解析,生体物質の構造や機能解明等、様々な研究が計画されています。 私はその中でも、BL07LSU において得られる短パルス X 線とフェムト秒レーザー光を組み合わせたポンプ・プローブ 時間分解光電子分光法により表面化学反応ダイナミクスを調べる研究を展開していきたいと思います。将来的には、気体 雰囲気下で光電子分光法が行える大気圧光電子分光法と組み合わせることで、触媒化学反応を反応条件下でリアルタイム 観測することを目指したいと考えています。

東京大学アウトステーションでは、10月に完成披露式典が行われ、順調に各エンドステーションでの実験が開始して います。共同利用実験も2010年1月から行われる予定です。この東京大学アウトステーションが、物性研が「共同利 用・共同利用拠点」たる所以を発揮できる場所であるように微力ながら貢献できればと考えております。皆様のご指導・ ご鞭撻宜しくお願い致します。

物性研に着任して

国際超強磁場科学研究施設 近藤 晃弘

本年度の 10 月 16 日付けで国際超強磁場科学研究施設金道研究室の助教に着任致しました近藤と申します。学部から 大学院まで広島大学で過ごし、今年の 9 月に学位を取得しました。ご存知の方も多いかとは思いますが、広島大学は周 りを山で囲まれた盆地に位置しています。自然に囲まれた緑豊かな環境は研究生活を送る上で非常に快適でしたが、私は 平野育ちであったのでほんの少し窮屈な感もありました。一方で物性研は広大な平地に建てられていますので、これまで とは違いのびのびとした気分で研究ができるのではないかと思っております。

はじめに、これまで取り組んできた研究と物性研との関わりについて述べたいと思います。学部 4 年から博士課程後 期まで希土類化合物における多極子秩序の研究を行ってきました。対象とした物質は四極子秩序を示すことで有名な CeB₆です。この物質の Ce を La で置換していきますと、IV 相と呼ばれる新奇の秩序相が出現することがおよそ 10 年前 に発見されました。その後様々な研究が行われた結果、この IV 相は高次の多極子秩序である可能性が高いことがわかっ てきました。しかし、高次の多極子は直接応答する外場が存在しないため、私が学部生の頃はどの様に高次の多極子を調 べていくのかは暗中模索の状態でした。そこで、IV 相に関する知見を得るため Ce_xLa_{1x}B₆に Nd や Pr といった希土類 磁性イオンを添加し、その影響を磁気抵抗、磁化、磁場中比熱測定などで調べていきました。La を 30%以上置換した系 では常磁性相から IV 相への転移温度が 1.4K 以下になるため、磁化測定については共同利用として榊原研究室のファラ デー法による極低温磁化測定装置を使用させていただきました。共同利用で物性研に初めて足を踏み入れたのは博士課程 前期 1 年の夏であったと記憶しています。ほぼ日も傾いた時間帯に柏駅からバスで物性研に向かいました。薄暗い夕闇 から突如として現れた柏キャンパスの建物がとても印象的で、今でもその風景ははっきりと覚えています。首都圏や関西 圏から離れた地方大学では他大学との交流を深める機会はそう多くはないため、広島にいた私としては共同利用が他大学 の方々と交流を深める絶好の機会でした。その後も何度か榊原研で実験させていただきましたが、その度に多くのことを 学ぶことができ、研究に対するモチベーションが上がっていきました。そういった意味では、共同利用で物性研を訪れた ことが研究者としてやっていくきっかけを与えてくれたと言えるのかもしれません。

パルス磁場を用いた研究は、他の研究分野と比べるといくつかの特徴があると思います。まず、手作りの装置が多いこ とが挙げられます。主力装置であるパルスマグネットも手作りですし、測定用プローブも基本的に全て手作りです。私も 大学院時代にプローブを作製した経験がありますが、自分で作った装置で実験して納得のいくデータが得られた時は何と も言えない喜びが湧き上がりました。こういった体験が頻繁に味わえるのは非常に魅力的だと思います。また、これまで 誰も見たことがない新奇現象の発見に遭遇する確率が高いことが挙げられます。特に、国際超強磁場科学研究施設では 近々フライホイール発電機を用いた測定が本格的に行えるようになるため、その確率は一層高くなるはずです。こうして パルス強磁場の特徴をいくつか列挙しますと、非常に恵まれた環境で研究が行えることを改めて感じることができます。 私はこれまでの研究でパルス強磁場未経験という負の要素を持ってはいますが、その部分は野球で培った気合いと根性で カバーしてきたいと思います。逆に強磁場未経験ということを生かして斬新なアイデアを生み出し、それを研究に活かし ていければと考えております。

話は変わりますが、金道研では球技、最近では特にサッカーに力を入れていることでも有名です。私も着任初日から平 日の昼に行われているサッカーに参加しております。毎日サッカーをすると疲労で午後からの研究活動に支障が出るので はないかと当初は危惧しておりましたが、実際は日々の生活にメリハリがつくと共にほどよい気分転換にもなっておりま す。研究と併せて、サッカーの方も日々精進していく所存です。どうぞ、ご指導ご鞭撻のほどよろしくお願い致します。



広島大学放射光科学研究センター 奥田 太一

今年の4月に10年近くお世話になった物性研を離れ広島大学放射光科学研究センターに転勤いたしました。物性研と はいってもわたしの勤務地は、つくばの高エネルギー加速器研究機構内のフォトンファクトリー(PF)と言う放射光施設 のビームライン、BL-18A と 19A、19B を管理している軌道放射物性研究施設のつくば分室であったため、長年お世話に なったにもかかわらず柏の皆様とはあまりお目にかかる機会がなく、その点については少し残念だったなあと感じており ます。軌道放射物性施設には学生の頃から縁があり、PF へは M1 の頃に初めて実験に訪れ、当時の最新のビームライン で良いデータがどんどん取れるのを目の当たりにして、将来はこのようなところで働ければなあと思ったのを記憶してい ます。またその当時は田無にもまだ物性研の放射光リングである SOR-ring があり、そちらでも最後のユーザーとしてド クターの研究を行いました。その後施設の助手として着任した訳ですが、在任中の 10 年近くの間に軌道放射物性研究施 設は、当初予定していた高輝度放射光施設の建設の推進、数度の計画変更、そして計画の中止という苦難の時期を経験し、 その後 SPring-8 に於ける軟 X 線高輝度ビームラインの建設、そして今年 10 月の完成とまさに様々なドラマが有りまし た。そのような激動とも言える期間の間、一方では PF の BL18A、BL19A、B のビームラインに於けるユーザーサポー ト、実験ステーションのアップグレードや新装置の開発、これらの装置や他のビームラインを使った物性研究なども平行 して行ってきました。着任当時のユーザーサポートの大変さは今となっては良い思い出ですが、当時は学生時代にここで 働きたいと思ったのは大きな誤解だったなあと思ったものです。しかし、在任中に新型の高効率スピン分解光電子分光装 置の開発や、放射光と STM を組み合わせた新しい実験手法の開発など苦しみながらも多くの成果が上げられたことは本 当に幸運であったと思います。いずれの成果も柿崎明人、木下豊彦(現 JASRI)両先生や原沢あゆみ技術官や施設の学生 およびスタッフの皆さん、ナノサイエンス部門の長谷川幸雄先生や江口豊明助教、そして研究室の皆さんの協力なしには 成し得なかったものでこの場を借りて感謝申し上げます。

さて広島大学に着任して半年あまりがすぎました。広島大学は広島とはいっても 16 年前に広島市内から郊外に移転し、 現在は東広島市西条に有ります。西条は古くから日本酒の醸造が盛んなところで、醸華町とか酒都と地元では呼ばれてお り、駅前には酒蔵の煙突が林立し休日には観光客が酒蔵に利き酒に訪れる、酒好きの私としてはとても良いところです。 キャンパスは駅から 4km ほど離れた鏡山の麓に有り、今は紅葉した里山が間近に見えています。つまりのんびりした田 舎です。わたしの勤務する放射光センターは PF と同様放射光を使った物性研究を行う施設ですが、PF や SPring-8 と は異なり、朝 9 時から夜 8 時までウィークデーのみ運転している健全な?施設です。おかげでつくばのときに比べてリ ラックスした研究生活を送ることができるようになりました。とは言っても研究自身は大変盛んにおこなわれており、放 射光リングは周長がたったの 21 m という大変小さな低エネルギーリングながら、低エネルギーの特性を生かして世界最 高分解能の光電子分光をはじめ得意分野に特化した研究を行っています。わたしは現在理学部の光物性研究室と協力して、 新・高効率スピン分解光電子分光ステーションを学生と供に立ち上げており、低エネルギー放射光と高分解能スピン分解 光電子分光を生かした物性研究を展開していきたいと考えています。センターは学内利用だけでなく全国共同利用・共同 研究拠点として開放されていますので、興味の有る方はぜひご一報いただければと思います。また広島にこられた際には 施設見学や酒蔵見学にも是非お立ち寄りください。

最後になりましたが、物性研のますますの発展を祈念して筆を置きたいと思います。皆様本当にどうもありがとうご ざいました。



物性理論研究部門 加藤 岳生

1. はじめに

物性研究所に赴任してはや 5 年が経過してしまった。これまでの物性研での日々を一言でまとめると、暗黒の前半と 光が見え始めた後半、というところだろうか。(そんな弱気なこと、と叱咤されそうだが。)物性研に赴任当初は、いった い何をしたらよいのか迷いのなかにあり、本当に強いプレッシャーを受けていた。赴任後初めて物性研に出勤した日に、 柏の葉公園越しに物性研の建物が見えたときの、なんともいえない憂鬱な感じはいまでもありありと覚えている。こうし たある種のスランプから脱出するには、私には多くの時間と、そして多くの人との出会いが必要であったようである。と いうわけでこの研究室だよりでは、私の研究室を卒業した(しようとしている)学生 3 人を軸にして、普段表にでない ような研究の様子をつれづれなるままに書いていきたいと思う。

2. モンテカルロ計算の立ち上げ(松尾武史さん)

松尾君は研究室の初期から在籍して博士課程を卒業したはじめての「留学研究員」である。出会いはとても奇遇なもの であった。東大理物の助教をやっている岡さんから「千葉大にいる博士課程の学生が議論する相手を探しているから議論 してあげてくれないか」と依頼を受けて、会ったのが初めてである。話してみると、私が前にやっていた研究課題と近い ことがわかったので、じゃあ共同研究してみようか、ということになり、留学研究員として迎え入れた。が、ことはそん なに簡単ではない。この段階で実は松尾君は博士 3 年にまでなっており、その時点で論文がなかったのである。という ことで、異例とも言っていいほど短い期間(1年以内)の間に、博士取得のために原著論文を書く必要があった。普通な らお断りするところかもしれないが、強い情熱と決意に心が動かされたのである。また研究室立ち上げ時に、プログラミ ングの知識が豊富な人が研究室にいてくれるのは、大変ありがたいことであった。

彼と取り組んだテーマは、摩擦のある量子二重井戸系の経路積分モンテカルロ計算であった。すでに私は前の勤務地 (大阪市立大学) である程度の計算経験は有していた。しかし量子局在相転移などのような物理的に意味のある結果を得 るには、モンテカルロ更新のアルゴリズム自体に改良が必要なことを、身をもって思い知っていた。たまたまこの手法に クラスター更新を適用する仕事について P. Werner 氏が理論セミナーで話をし、そこであまり理解できなかったので同 僚の川島さんにいろいろと聞いているうちに、私が解きたい問題にその方法がそのまま適用できそうだということがわ かった。そこに松尾君がきたので、もうそれはやればいいじゃない、という感じで、私にとってはほとんど解けている研 究課題であった。が、やりはじめてみると、そんなに簡単ではないことがすぐに判明した。まず Werner の方法を実装す るにあたっては、長距離イジング模型のクラスター更新の実装が必要で、愚直にやるとそこで時間がかかることが判明し た。テクニカルな詳細は論文にも書いてあったのであるが、当時の私と松尾君の力では解読に相当の時間がかかったので ある。バグ取りや数値的解析接続などでも時間がかかり、やっと計算が動き始めたのは松尾君が通常の卒業をあきらめて 半年卒業を延長し、博士4年となった5月頃であった。しかしここまできても、最後に一つだけどうしても超えられな い困難があった。前述の Werner の仕事は周期ポテンシャル系に対応するものであるが、ここでの局所更新の方法が二重 井戸系にそのまま適用できない(適用しても悲惨なほど効率が悪い)のである。よって二重井戸系はそれ専用にモンテカ ルロ更新を工夫しなければいけないのである。ここに至り、松尾君があとで「暗黒の 6 月」と呼ぶ苦難の月が始まった のである。この月は私も非常に苦しかった。毎日松尾君と議論をし、いろいろなアイディアを試しては、だめだと落胆す るという繰り返しであった。松尾君の博士論文のデッドラインを間近に控え、松尾君は就職活動のほうも佳境になり、つ いに我々は追い詰められた。私は腹をくくり、あと一日だけアルゴリズムの改良を考えていいのを思いつかなかったら、 もうあきらめて今のデータで論文を書こうと決意するにいたった。最後のアイディアは夕食中にやってきた。私はそれを

割り箸の袋にメモして、半信半疑のまま松尾君に渡したのであった。

が、これが思わぬことにヒットした。アイディアは単純である。 二重井戸系の一番難しい部分は非線形部分(4 次の項)であるが、 これを離散のガウス分布の和で近似してやるのである(図 1(a))。 こうすることで、離散変数の補助変数の和は残るものの、のこり の部分を2次形式で書ききることができ、効率のよいアルゴリズ ムを構成できる。これは大変うまくいき、これまでできなかった 低温領域の計算が初めて可能となった。そしてこれを利用して二 重井戸系のきれいな相図をすぐに得ることができたのである(図 1(b))。この結果をすぐに JPSJ のレターに投稿したが、実質 3 日後に掲載可の決定がきたことはうれしいことであった。この方 法は一般性があるので、手法を発展させたいと思いつつ、まだ果 たせていない。

松尾君はその後無事博士を取得し、就職も決め、今では幸せに やっている(と思う)。彼は初めて送り出した(他大学の)学生 として、とても感慨深いものがある。松尾君からは私は多くのこ とを学ばせてもらった。まず私自身の Windows から Mac への 強制改宗がなされた。現在研究室のコンピュータ端末がすべて Mac であるのは彼のせいである。もう一つ大きいことは、 Fortran から C++への移行である。前々から C++は気になって いたのであるが、松尾君が C++しか知らない、かつ強くおすす め、ということで、ここで移行に踏み切った。正直、はじめの一



図 1. (a) ガウス分布分割の概念図 (b) 摩擦のある二重井戸系の相図

年はろくにいいコードがかけなかったのであるが、いまではこの改宗はよかったと思っている。Ruby も彼から教わって、 楽しくプログラミングさせてもらっている。松尾君によってプログラミング環境は革命的に更新されたといってよいと思う。

3. 有機とダイアグラムの世界へようこそ(吉見一慶さん)

私の研究室で初の東大の卒業生は、博士課程より在籍し昨年卒業した吉見君である。もともとは隣の森研究室で有機の 実験をやっていたのであるが、あるときモンテカルロ計算の相談を受けたのが縁となって移籍となった。博士課程3年 間で理論研究を立ち上げて完成させるという制約があるので、同じ有機の分野でなにかやりましょうか、という感じで議 論を始めた。

はじめに渡した研究テーマは、そのままの形では遂行できないことがすぐにわかった。本当ならここでちゃんと議論す べきときではあったが、当時の私にはその余力がなく、ほとんど放置放任状態となってしまった。このとき、救世主と なっていただいたのが、高田研究室の前橋助教である。前橋さんに、吉見君の議論の相手になっていただいた。(といっ ても、前橋さんは自身の研究があるために、議論にはつきあうものの、研究はすべて吉見君が自主・自発的に遂行する形 になった。)吉見君は特に博士 2 年によく勉強して本当に伸びたと思う。自分でテーマをみつけてくるようになったので ある。ここまでは吉見君の研究に関して完全に私の貢献はゼロである。というのも、吉見君と前橋さんの議論が途中まで ほとんど理解できなかったからである。おぼろげながらにやっていることがわかったのは吉見君が博士課程 3 年になっ たあたりである。この時期から、だんだん私は昔ながらのダイアグラム展開のおもしろさがわかってきた。吉見君の論文 を書くにあたって、自分でダイアグラムの細かい話をいじりまわすのが楽しくなってきた(共著者は白い目で見ていた が)。いじり回すたびに論文投稿が遅れてしまったから、迷惑だけをかけていたともいえる。本当に申し訳なかったと思う。

吉見君との共同研究で忘れられない思い出は、吉見君の博士論文提出直前の徹夜作業である。それはクリスマスイブの 夜であった。私と前橋さん、吉見君が悲壮感を抱えながら、最後の執筆作業を行っていた。差し入れのチョコレートの大 半を食べながら、私は途中まで所員室の椅子で爆睡していた。私がちゃんと活動しはじめたのは夜中すぎからである。こ こからなぜかすらすらと文章がでてきて、原稿の赤がスムーズにつけられるようになってきたのである。(吉見君は後に 「神がおりてきた」と冗談めかしていっていたが、神をおろすためにはチョコレートを大量に摂取する必要がありそうで ある。もちろん十分な睡眠もあわせて。)明け方ごろには、一通りの改訂がなんとか終わった。クリスマスイブの夜は最 愛の人と過ごす特別な日であるわけだが、このクリスマスイブは私にとっていろいろな意味で生涯忘れられない日となり そうである。

さて吉見君がやった仕事は大きく分けて二つある。一つは電荷秩序近傍で帯磁率がどう振る舞うかという研究、もう一 つは電荷秩序近傍での一様金属状態の安定性の研究である。そのどちらも、私にとって思い入れの強いものであるが、こ こでは後者の研究を紹介しよう。有機導体系では分子ごとに電荷状態が交互に変化する、いわゆる電荷秩序相と呼ばれる 相がよく観測される。電荷秩序に関連した現象で前から気になっていたのは、NMR 実験である。(理研の妹尾さんが研 究会で強調していたのでよく覚えている。) NMR でみると、電荷秩序転移より高い温度できわめて遅いダイナミクスが 存在していることが示唆されている。これはいったい何であろうか?というのが疑問であった。しかし正直言って、私は しばらくそのことを忘れていた。吉見君が負の圧縮率がでるというニュースをもってくるまでは。吉見君の計算は古式ゆ かしきダイアグラム計算の枠組みにのっとっている。図 2(a),(b)に定式化に必要なダイアグラムののせておく。詳しい説 明は省くが、吉見君の計算の肝は、近似を行った後、応答関数を久保公式で求めるのではなく、粒子数を直接微分するこ

とで求めることである。結果を図 2(c)に示す。相互作 用の大きさ Vを、電荷秩序転移が生じる点 V=V。に近 づけていくと、電荷圧縮率(図ではその逆数)が負に なる。これは一様金属状態が不安定になることを意味 する。これが電荷秩序温度より高温の特異な物性と関 係すると予想される。現在、実際にどのような電荷状 態が実現しているか(おそらくは電荷不均一状態)に ついて、研究を継続しているところである。

吉見君そして前橋さんからも実に多くのことを教え てもらった。なにより場の理論による摂動計算の重要 な概念を習得させてもらったことがとても大きい。今 後、私の研究の軸の一つになることは間違いないとこ ろである。最近では、小さなサイズの数値計算は現象 によっては意味がないかもしれないと思うようになり つつある。それは摂動計算のサイズ依存性を目の当た りにしての、経験に基づく生々しい予想である。吉見 君、前橋さんには、本当に感謝してもしきれない思い でいっぱいである。今現在も、吉見君の博士論文の内 容を論文にまとめるべく、未だに奮闘したり足をひっ ぱったりしている。



有効相互作用のダイアグラム , (c) 得られ た圧縮率と帯磁率

4. 経路積分モンテカルロの集大成(濱本雄治さん)

松尾君の研究を直接ひきついだのは、修士課程から在籍している濱本君である。彼は平成 22 年 3 月に博士を取得予定 であり、無事卒業すれば修士課程から在籍して博士を卒業する初めての学生となる。濱本君との共同研究も、山あり谷あ りであった。修士課程では、濱本君にメゾ系の問題が面白い、とたたき込むだけで終わってしまった。しかしその後、修 士の終わりから3年ほどの間で、まさに松尾君とやった経路積分モンテカルロ法のメゾ系への応用を集大成してくれた。 まず朝永ラッティンジャー流体の不純物問題を取り扱い、続いて電荷 2 チャンネル近藤効果の問題に取り組み、即座に 論文になった。彼はここ数年の研究室のアクティビティの中心となってくれた。大変ありがたい存在である。

濱本君との共同研究で一番思い出深いのは、一番新しい研究テーマである動的抵抗の研究のとりかかりはじめのときである。このテーマは、はじめ私がフランスの Thierry Martin 教授と議論したときに出てきたテーマである。大変魅力的

なテーマであったので、はじめは自分がやってしまおうと考えていた。濱本君にもテーマの内容を伝えつつも、「先に私 にやらせてくれ」と言っておいた。しかし私のほうが忙しくなってしまい、数ヶ月放置状態となってしまった。あるとき、 濱本君がにやにやしながら近づいてくる。なにかと思えば、動的抵抗の計算の最初の結果がでていたのであった。「先生 がやらないから、私がやってしまいました」との弁であった。以後は議論を継続しながら、計算は濱本君が担当した。長 い長い議論や紆余曲折をへて、最後の面白い量子相転移をみつけることができ、フランスのグループと共著論文にまとめ ることができた。

動的抵抗はメゾスコピック系特有の面白い特性である。最近の量子ドットの交流抵抗を測った実験では、直流測定でラ ンダウアー抵抗の値 h/e²×1/T (T は透過係数)となるはずのところで交流測定をすると動的抵抗が透過係数によらずに h/2e² となる現象が観測される。これはコヒーレント伝導でキルヒホッフの法則が成立していないことを示唆しており、 メゾ系のダイナミクスの特徴をよく示している現象である。電子間相互作用を無視できるときの理論はすでに Büttiker らによって構築されていて、実験ともよくあっていた。しかし量子ドットのサイズを変えたときや、分数量子ホールの エッジ状態をつかったときに、多体電子効果が以上の結果に影響をあたえるかどうかについて、ほとんど研究が行われて いなかった。濱本君はモンテカルロ計算と繰り込み群を駆使し、フランス側の摂動計算と組み合わせて、分数量子ホール 効果のエッジ状態で量子ドットをつくると、面白い量子相転移が現れて動的性質を大きく変更することを発見した。図 3 に主要な計算結果を示す。分数量子ホール効果のエッジ状態で量子ドットを作り、ゲートに交流電圧を掛けてアドミッタ ンスを測定するセッティングを考え(図 3(a))、有効回路で示される動的抵抗の測定を考える。得られた動的抵抗を図 3(b)に示す。横軸は量子ドットとリード間の散乱ポテンシャルの強度である。開いたエッジ状態(V=0)から徐々にくびれ の部分にゲート電圧をかけていく(V を大きくする)と、量子ドットを形成しはじめる。まず動的抵抗は V が小さいとこ

ろでは、充填因子vがつくこと以外は、ユニバーサルな抵抗値 $h/e^2 \times 1/v$ をとることがわかる。この領域では Buttiker の理論 からそれほど違った振る舞いは(vの因子をのぞき)みられない。 しかし、充填因子v=1/3, 1/5のときには、ある Vのしきい値 を境にして、動的抵抗が発散する現象がみられる。これは実は 量子相転移現象になっていて、大きい Vでは量子ドットが低 温までいつまでもコヒーレント状態にならずにインコヒーレン トのままいることが原因である。計算結果が得られ始めたとき に、この相転移現象が古崎と Matveev によって予言されてい ることを知った。しかし、彼の結果は動的抵抗での劇的変化ま で予言し、かつモンテカルロ計算によって明確に相転移を示し た点が新しい。

濱本君とは日頃から「中間結合領域での不安定固定点をさが せ!」という合言葉をもっていた。それがメゾで面白い協力現 象をみつける最短の経路だと考えていたからであるが、実際に それを実行して最後のとても面白い結果をだしてくれたのは、 ひとえに濱本君の絶え間ない努力の結果だと思う。濱本君とは 研究以外にも、よく学生部屋でジョークばかりとばしていた。 彼は独特のユーモアの持ち主で、つらいときはお互い笑いに還 元し、笑いでなんとか乗り越えてきたように思う。



5. そのほかにお世話になった共同研究者

ここでは研究室に在籍した 3 名の学生を軸として記事を書いたが、当然ながらそのほかにも多くの共同研究者のお世 話になっている。時系列順に列挙したい。中西毅氏(産総研)は物性研究所客員所員として共同研究を始め、量子ドットの 熱電能の仕事をした。相互作用がない模型でも、本質的で面白い現象が現れるという意味で、私のお気に入りの仕事に なっている。Golubov 氏(Twente 大)には 3 ヶ月の長期滞在に誘っていただき、中村泰信氏(NEC)と共著でπ 接合量子

ビットの論文を完成させた。両氏には大変お世話になり感謝している。川畑史郎氏(産総研)とは昔からの飲み仲間?で、 最近巨視的量子トンネル現象の仕事を手伝わせてもらっている。私の学生時代の論文の延長線なので、懐かしい気持ちに なりながら議論している。妹尾仁嗣氏(理研)はわざわざ物性研究所にネタをもってやってきて、有機の理論研究への手が かりを与えてくれた。この議論から、大塚雄一氏(理研)、求幸年氏(東大工)との研究が始まり、擬一次元有機導体の有限 温度相図の研究が進展した。ただ、途中であまり研究に参加できずたびたび迷惑をおかけしたことをお詫びしたい。いつ か何らかの形でお返ししたいと思っている(期待してないと思うが)。川島研究室の富田裕介氏とは、リラクサー誘電体で 思わぬ形で共同研究が進展しつつある。物性研究所は、昔は誘電体研究が大変盛んであったが、その再来を目指そう!と、 意気込み(だけ?)は大きくがんばっている。井村健一郎氏(東北大理)は一年間ポスドクとして研究室にいてもらい、よき 先輩として学生の面倒をみていただいたり、濱本君の仕事の手伝いをしてもらったりした。Thierry Martin 教授を紹介 してくれたのも彼である。2007 年より助教として赴任した内海裕洋氏には、完全係数統計や揺らぎの定理についていろ いろ教えていただき、オンサーガー関係式の拡張について博士課程学生の伊奥田英輝さんと共同研究を行った。卒業生の 竹内維斗文さんとは Rashba 相互作用がある系の輸送特性について、数値計算の練習を行った。同じく卒業生の田村徳崇 さんとは、中性イオン性転移に関して量子モンテカルロ計算を行い、結果を論文にまとめつつある。修士課程の阿部弘幸 さんとは p 波超伝導接合に関して、留学研究員の湯川英美さんとは有機の電荷秩序に関して、現在研究を進行中である。 2009 年8月からは品岡寛さんがポスドクとして合流し、リラクサーの研究に協力してもらっている。また共同研究者で はないが、多くの事務手続きでお世話になった江口浩子さんに感謝の意を表したい。

6. これからの研究

つれづれなるままに書きすぎたかもしれない。最後に少しだけまじめな今後の研究計画をかきたい。基本は多体電子効 果が効く面白い現象をめざしたいと考えている。いろいろな切り口が考えられる。経路積分モンテカルロ法はまだまだ発 展の余地があるし、場の理論的な方法を現代の数値手法の視点から見直すことも重要なテーマだと思う。具体的な目標と しては、メゾの分野では近藤領域量子ドットの非平衡伝導特性を取り扱う数値手法を作ること、有機や誘電体の分野では 第一原理計算のダウンフォールディングと量子モンテカルロ法などの数値ソルバーと組み合わせによる物性評価をするこ と、が挙げられるかと思う。10 年を研究の一つのピリオドだと考えれば、赴任してからの 5 年は今から振り返れば種ま きの季節という感じで過ぎた。残りの5年で一定の収穫をあげられるよう、がんばりたい。

[紹介した研究内容の文献]

[1] T. Matsuo, Y. Natsume, and T. Kato: J. Phys. Soc. Jpn. 75, 103002 (2006).

- [2] K. Yoshimi, H. Maebashi, and H. Maebashi: in preparation.
- [3] Y. Hamamoto, T. Jonckheere, T. Kato, and T. Martin: arXiv:0911.4101, submitted to Phys. Rev. Lett.





ISSP 国際シンポジウム Horiba-ISSP International Symposium on "Hydrogen and water in condensed matter physics" (ISSP11)

2009年10月12日から10月16日まで、千葉県長生郡の「生命の森リゾート」で、Horiba-ISSP International Symposium on "Hydrogen and water in condensed matter physics" が開催された。今回の第11回 ISSP 国際シンポジム(ISSP11) は、第3回東京大学堀場国際会議基金の全面的な援助を受けて開催された。東京大学堀場国際会議の趣旨には、「開催期 間をとおして参加者全員が宿泊し、計画された講演・討論のほか、個人的な討論など自由な雰囲気で学問的な交流と人間 的な接触を深め、永続する協力の基盤を築くことに配慮する」ことが挙げられている。過去の ISSP 国際シンポジウムは、 各部門や施設が中心となり 2~3 年毎に物性研究所の講義室で行われてきたが、ISSP11 は堀場国際会議の趣旨に則り、 上記の会場に泊まり込みで行った。国内外から22 件の招待講演、19 件の口頭発表(依頼講演+一般講演)および 49 件 のポスター発表(当日、数名の欠席を含む)があった。参加者総数は 103 名であった。国内実行委員と招待講演者を表 1 と表 2 に示す。

	名	前		所属	専 門 分 野
笠	井	秀	明	大阪大学・院・エ	物性理論
香	内		晃	北海道大学・低温研	宇宙惑星科学
青	木	勝	敏	日本原子力研究開発機構	金属水素化物の構造と物性
福	谷	克	之	東京大学・生産研	表面物理
池	田		進	高エネルギー加速器研究機構・物構研	中性子科学
神	取	秀	樹	名古屋工業大学・院・エ	生物物理
北	Ш		宏	京都大学・院・理	固体物性化学
奥	山		弘	京都大学・院・理	表面科学
杉	本	秀	彦	中央大学・理・エ	固体中水素の量子物性
常	行	真	司	東京大学・院・理	計算物性物理
渡	部	直	樹	北海道大学・低温研	氷表面の化学物理
柴	山	充	弘	東京大学・物性研	高分子物性化学
辛			埴	東京大学・物性研	光物性
杉	野		修	東京大学・物性研	計算物性物理
F	床	美	也	東京大学・物性研	高圧固体物性
山	室		修	東京大学・物性研	凝集体の化学物性
八	木	健	彦	東京大学・物性研	超高圧物性
吉	信		淳	東京大学・物性研	表面界面の物理化学

表1 国内実行委員と専門分野

表2 招待講演者と講演内容

名前	所属	講演内容
C. A. Angell	Arizona State Univ.	On the phase behavior of stretched, supercooled and glassy water, and its relation to that of other network and molecular systems
I. Chorkendorff	Tech. Univ. of Denmark	New Catalysts and Electro-Catalysts for Hydrogen Production and Conversion
A. Faraone	National Institute of Standards and Technology	Structural and Dynamical Properties of Water Confined in a Nanoporous Silica Matrix
Y. Fukai	Chuo Univ.	Iron with water/hydrogen at high pressures
Y. Furukawa	Hokkaido Univ.	Ice Crystal Growth - From Space Experiment to Biological Aspect
K. Gerwert	Ruhr- Univ. Bochum	Proteins in Action: Monitored by time-resolved FTIR spectroscopy
R. Griessen	VU Univ.	Shedding light on hydrogen
A. Gross	Univ. Ulm	Ab initio studies of hydrogen adsorption and absorption and water-metal interfaces
R. J. Hemley	Carnegie Institution of Washington	Molecules, Compounds, and Mixtures in the Hydrogen- Oxygen System at High Pressures
C. Heske	Univ. of Nevada	Soft x-ray and electron spectroscopy of the electronic structure of water and materials for photoelectrochemical water splitting
M. Kataoka	Nara Inst. of Sci. and Tech.	Effect of Hydration Water on Protein Dynamics
A. R. Khokhlov	Moscow State Univ.	Computer Simulation of Proton-Conducting Polymer Membranes Structure and Transport Properties
K. Morgenstern	Leibniz Univ. Hannover	Ice on metal surfaces structure and electron dynamics
M. Muthukumar	Univ. of Massachusetts	Aqueous Assembly of Polyelectrolytes
A. Nilsson	Stanford Synchrotron Radiation Lightsource	X-ray studies of hydrogen bonding in water
J. Nørskov	Tech. Univ. of Denmark	Interaction of water, hydrogen and oxygen with surfaces - understanding the water splitting and oxygen reduction processes
T. Okuchi	Okayama Univ.	Proton and hydrogen dynamics in hydrogen - bonded materials at ultrahigh pressures by high resolution diamond anvil cell NMR technique
M. Osawa	Hokkaido Univ.	Structure of Water at the Electrochemical Interface Studied by Infrared Spectroscopy
V. Pirronello	Univ. Catania	Experimental Studies of Molecular Hydrogen Formation on Surfaces of Astrophysical Interest
D. Richter	Forschungszentrum Jülich	Functional dynamics of proteins as revealed by neutron spin echo spectroscopy
M. Salmeron	Lawrence Berkeley National Laboratory	Water adsorption and reactions on metal surfaces
M. E. Tuckerman.	New York Univ.	Proton and hydroxide ion solvation and transport in aqueous environments

会議では、地球および宇宙にユビキタスに存在し、最近エネルギーや環境問題から注目を集めている水素と水について、 物性物理の視点から議論を行った。従来の学会や専門分野の垣根を取り払い「水素と水の物性科学」という観点から、 様々な分野の方々に実行委員になっていただき(表1)、トピックスと招待講演候補者をリストアップした。シンポジウ ムでは、水の凝集相、宇宙や生体における水・氷、物質中(生体から固体まで)のプロトントランスファー、ソフトマ ターと水、材料中の水素、水素結合と水の電子状態、高圧下の水、表面における水素と水、電気化学反応、制限空間にお ける水、水素の量子効果などのトピックスについて、招待講演者(表2)および一般講演者が最新の成果について発表し た。また、若手研究者から非常に質の高いポスター発表が多数あり、ポスターセッションの時間が短くて足りないくらい 熱心に議論が続いた。さらに、参加者は会場の宿泊施設に泊まりこんで数日間過ごしたので、散歩や食事中などイン フォーマルな場でも議論をすることができ、共同研究のきっかけもできたと聞いている

会議後、海外の招待講演者から届いたメールのなかには、"It was a wonderful meeting, perfectly organized, and with an outstanding scientific program - I learned a lot!"というありがたいメッセージもあった。もちろん、会議が成 功裡に運営できた一番の要因は、「東京大学堀場国際会議」からのサポートである。物性研究所からは、国内招待講演者 および学外実行委員を共同利用嘱託研究員としてサポートしていただき、さらにポスターボード、液晶プロジェクターな どシンポジウム運営に必要な資材も利用させていただいた。また、物性研究所の国際交流室、実行委員の研究室に所属す るスタッフ、大学院生および秘書さんには、会議の運営をお手伝いいただいた。この場を借りて改めて感謝したい。

なお、会議のスコープやプログラムの詳細については、下記の Web サイトから情報を得ることができる。

http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/public/issp-11/index.php

まだ、"Extended Abstracts"の残部が多少あるので、興味がある方は実費でおわけします。issp11scrt@issp.u-tokyo.ac.jp まで連絡して下さい。

(文責:東京大学物性研究所 吉信淳)



口頭発表風景 (デンマーク工科大学ネルスコフ教授)



ポスター会場風景

物性研究所短期研究会

"ディラック電子系の物性-グラフェンおよび関連物質の最近の研究"

日時:2009年10月22日(木)~2009年10月24日(土) 場所:東京大学物性研究所本館6階大講義室(A632)

提案者:福山 寛 (東大院理)
 安藤 恒也 (東工大院理工)
 榎 敏明 (東工大院理工)
 齋藤理一郎 (東北大院理)
 樽茶 清悟 (東大院工)
 福山 秀敏 (東京理大総合)
 小森 文夫 (東大物性研)
 長田 俊人 (東大物性研)
 長谷川幸雄 (東大物性研)

英米のグループが単層グラフェン作成に成功して以来この数年間に、線型分散関係に起因した固体中ディラック電子系 としての特異な性質の研究が世界規模で爆発的に進んでいる。今後も、スピン偏極した量子ホールエッジ状態や分数量子 ホール効果、ディラック点における残留量子伝導度、反局在効果などベリー位相がもたらす特異な物性、グラフェンエッ ジ状態およびナノグラフェンの磁性などの研究テーマで、新展開が期待できる。今回の短期研究会は、この分野で活躍し ている理論研究者、輸送特性、光電子分光、走査トンネル顕微・分光など異なる実験技術をもつ研究者、独自の試料作 成・処理技術をもつ研究者、および分子性伝導体やトポロジカル絶縁体など関連するディラック電子系の研究者が、一堂 に会して情報を交換し議論することを目的として、開催された。

以下のプログラムにあるように、3日間でポスター発表を含めて 59件の講演があり、活発な議論が行なわれた。今回の研究会が、世界に発信する研究成果を日本から生み出すきっかけとしたい。

プログラム

10月22日 (12:50-17:35)

12:50 はじめに

グラフェン研究の現状と課題(座長 小森 文夫)

13:00	グラフェンの物理-擬スピン・ゼロモード異常・対称性	安藤 恒也(東工大院理)
13:30	ゼロ質量ディラック粒子系の量子ホール効果	野村 健太郎(東北大院理)
14:00	グラフェンの磁気抵抗	八木 隆多(広大先端物質)
14:30	グラフェン・ナノカーボンのラマン分光	斎藤 理一郎(東北大院理)
15:00	休憩	

スピン流とディラック電子(座長 福山 秀敏)

15:20	Spin transport in graphene.	白石 誠司(阪大院基礎工)
15:50	トポロジカル絶縁体と表面ディラック電子	村上 修一(東工大院理)
16:20	Z2トポロジカル絶縁体におけるバルクと端-有効理論と格子模型の比較	井村 健一郎(東北大院理)
16:40	トポロジカル絶縁体 Bi-Sb が示す異常物性	安藤 陽一(阪大産研)
17:10	ビスマス中ディラック電子のホール効果	伏屋 雄紀(阪大院基礎工)

10月23日 (9:00-17:55)

リノクフノエノ (座文) 原藤 庄一	テ	ナ	ノクワフ	エン	()坐長	簱膝	埋-	一即。
--------------------	---	---	------	----	------	----	----	-----

9:00金属表面上に成長した CVD ラフェン(h-BN)膜大島 忠平(早大理工)9:30ナノグラフェンの電子構造と磁性榎 敏明(東工大院理)10:00ナノ細孔グラフェンの創成・電子状態・物性春山 純志(青山学院大院理工)10:20休憩

分子性ディラック電子系 (座長 長田 俊人)

10:35	ディラックコーンの傾斜に起因する擬スピン強磁性と KT 転移	小林	晃人	(名大学高等研)
11:05	分子性ディラック電子系におけるゼロモード	田嶋	尚也	(理研)
11:35	有機ゼロギャップ半導体における面間磁気抵抗理論	森成	隆夫	(京大基研)
12:00	有機ゼロギャップ伝導体 α(BEDT-TTF)₂I₃の層間ホール効果	佐藤	光幸	(東邦大理)
12:20	昼食			

13:20 <u>ポスターセッション</u>

15:00 休憩

エッジ状態 (座長 福山 寛)

15:20	ナノグラフェンの電子物性と輸送特性	若林 克法(NIMS)
15:50	Edge states and possible magnetic states in nanographene and	
	open-shell conjugated systems.	針谷 喜久雄(産総研)
16:10	ナノグラフェンの端方向識別と電子輸送	高井 和之(東工大院理)
16:30	グラフェンおよびグラファイト表面の STM/STS 観測	河合 直樹(東大院理)
16:50	Edge states of epitaxially grown graphene on $4H$ -SiC(0001) studied	
	by scanning tunneling spectroscopy.	叶 茂 (広大院理)
17:10	グラフェン端における擬スピン反射の理論とラマン分光	佐々木 健一(NIMS)
17:35	honeycomb lattice の異方性により誘起されるトポロジカル量子相転移	佐藤 昌利(東大物性研)

10月24日 (9:00-16:00)

エピタキシ	ィャルグラフェン(座長 長谷川 幸雄)			
9:00	SiC ナノ表面上のエピタキシャルグラフェン	田中	悟	(九大院工)
9:25	SiC 上エピタキシャル数層グラフェンの積層ドメイン	日比野	纾 浩林	射(NTT 基礎研)
9:50	SiC 上グラフェン島の理論検討	影島	博之	(NTT 基礎研)
10:10	SiC 表面に作成したグラフェンの高分解能 ARPES	菅原	克明	(東北大 WPI)
10:30	SiC 上グラフェンの電子状態測定	中辻	寛	(東大物性研)
10:50	休憩			

グラフェン理論(座長 安藤 恒也)

11:05グラフェンの軌道反磁性 越野 幹人 (東工大院理) 11:30 グラフェンのサイクロトロン共鳴に対する多体効果 浅野 建一 (阪大院理) 11:50 グラフェン及びグラフェンナノリボンの電気伝導における金属電極 との接合の影響 相馬 聡文 (神戸大院工) 昼食 12:15輸送現象 (座長 樽茶 清悟) 13:00 グラフェンにおける超伝導近接効果の理論 林 正彦(秋田大教育文化) 13:20 グラフェンの超伝導近接効果 神田 晶申(筑波大院数理物質) 13:40 グラフェン接合におけるスピンホール流 山影 相(東北大院理) 14:00 グラフェンナノ構造の作製と輸送現象 町田 友樹 (東大生産研) 14:20 2層グラフェンの電気伝導 塚越 一仁 (NIMS) 3層グラフェンの電気伝導とバンド構造 14:50 山本 倫久 (東大院工) 15:10グラファイトおよびグラフェンの磁気輸送と Dirac 電子 長田 俊人 (東大物性研) 15:30 Conductance fluctuations in the magnetoresistance of the grapheme quantum dot. 落合 勇一 (千葉大融合科学) 15:50閉会

ポスターセッションプログラム

10月23日 (13:20-15:00)

P1.	SbCl5-GIC から作製したグラフェンの輸送特性	深田	誠也	(広大院先端物質)
P2.	グラフェンにおける弱局在の相図-"Z2-classification"	井村	健一臣	18(東北大院理)
P3.	ディラック電子系における pn 接合-クライン・トンネルとスピン軌道相互作用	井村	健一臣	18(東北大院理)
P4.	正常金属-ナノグラフェンリボン-正常金属接合系の電気伝導	吉岡	英生	(奈良女大院人間文化)
P5.	X 線吸収分光を用いたナノグラフェンの電子状態に関する研究	木口	学	(東工大院理)
P6.	Formation process and local structure of epitaxial graphene.	サミー	-12 -	マッマドフ(阪大院工)
P7.	alpha-(ET)2I3のディラック状態におけるスピン帯磁率	清水	康弘	(名大高等研)
P8.	非接触原子間力顕微鏡によるナノサイズ酸化グラファイトの構造評価	藤井	慎太臣	阝(東工大院理工)
P9.	Zero modes, energy gap, and edge states of anisotropic honeycomb			
	lattice in a magnetic field.	江崎	健太	(東大物性研)
P10.	DFT 計算によるグラフェンシート上の吸着子の電子	中田	謙吾	(鳥取大工)
P11.	強磁場におけるグラフェンのスピン分裂	中原	大介	(東大物性研)
P12.	バリスティックグラフェン接合の作製と電気伝導測定	友利	ひかり)(筑波大数理物質科学)
P13.	グラフェン多層膜におけるスピン伝導の電界制御	後藤	秀徳	(筑波大物理)
P14.	強磁性体 Ni(111)面上に成長したグラフェンのスピン電子状態	黒田	健太	(広大院理)
P15.	グラフェンの作製と走査トンネル顕微鏡によるその評価の試み	江口	豊明	(東大物性研)
P16.	2 層グラフェンにおける電気伝導の電界制御とデバイス応用	宮崎	久生	(NIMS)
P17.	Gain tunable inverter in dual-gated bilayer grapheme	黎	松林	(NIMS)
P18.	Gravitational anomaly and quantized thermal transport in			
	graphene-derived insulators	田中	秋広	(NIMS)
P19.	ビスマス薄膜系における量子スピンホール効果	和田	真樹	(東工大院理)
P20.	量子スピンホール系における熱電効果	高橋	隆志	(東工大院理)

グラフェンの物理-擬スピン・ゼロモード異常・対称性

安藤 恒也(東京工業大学理工学研究科物性物理学専攻)

最近、グラファイトの単原子層からなるグラフェン作製され、電気伝導や量子ホール効果が観測された。その後、スペ クトロスコピーを中心に数多くの新しい実験結果が報告され始めるとともに、毎日のように新しい理論が発表されている。 ごく最近分数量子ホール効果を観測したとの報告もある。グラフェンは蜂の巣格子をもち、フェルミエネルギー付近のバ ンドは、結合への寄与が弱いπ軌道からなり、第一ブリルアン域の端にある K 点と K 点付近で、波数の 1 次に比例する 分散をもつ。グラフェンの性質はこの K 点と K 点付近の状態で決まる。この運動方程式は原点にトポロジカル特異点を もつ。実際、波数を断熱的に原点のまわりで回転させると、ベリーの位相により波動関数の符号が反転する。一方、原点 を含まないように回転させると波動関数の符号は変化せず、もとに戻る。このベリーの位相は金属ナノチューブで不純物 散乱による後方散乱が禁止される完全導体性を引き起こす。また、磁場中のグラフェンでは。ゼロエネルギーにランダウ 準位が存在し、それに伴い、反磁性帯磁率のエネルギー依存性にデルタ関数的特異性が現れる。この特異性は、この他に も、変調磁場に対する応答、静的あるいは動的な電気伝導、弱磁場ホール効果など、さまざまな現象に現れる。ここでは、 このようなゼロモード異常と呼ばれる現象を中心として最近の研究について概観する。

ゼロ質量ディラック粒子系の量子ホール効果

野村 健太郎 (東北大理)

近年、グラフェンや圧力下の有機伝導体など様々な凝縮系において質量ゼロの二次元ディラック粒子の出現が明らかに された。さらに 3 次元トポロジカル絶縁体の表面では奇数個のディラックモードが存在し、その物性が注目を集めてい る。これら新しい系では従来の 2 次元電子系とは劇的に異なる、ディラック粒子に起因する特異なゼロ磁場輸送現象、 量子ホール効果が発見された。これらの実験に触発され、我々はディラックフェルミオンの輸送現象の中でも、特に量子 効果に起因する無磁場での局在問題と磁場下での量子ホール効果の研究に着手した。現実の試料のように不純物ポテン シャルが長距離的[1,2]でバレー間散乱が無視できる領域では以下のような結果が得られた。(1) 無磁場での伝導度のス ケーリング関数は常に正で、アンダーソン局在は起こらない[3]。(2) スペクトルフロー解析から時間反転対称性がある 限りディラックフェルミオンの局在化はトポロジカルに禁止される[3]。(3) 磁場中ではホール伝導度が(e²/h)を単位に 半整数に量子化されるが、弱磁場極限においては±1/2 にのみ量子化される[4]。これらは通常の2次元電子系の弱磁場極 限(ホール伝導度、対角伝導度はともに 0、アンダーソン絶縁相)と対照的である。



- [1] K. Nomura and A.H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. 96, 256602 (2006).
- [2] K. Nomura and A.H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. 98, 076602 (2007).
- [3] K. Nomura, M. Koshino, S. Ryu, Phys. Rev. Lett. 99, 146806 (2007).
- [4] K. Nomura, S. Ryu, M. Koshino, C. Mudry, A. Furusaki, Phys. Rev. Lett. 100, 246806 (2008).

グラフェンの磁気抵抗

八木 隆多 (広島大学大学院先端物質科学研究科)

単層から数層グラフェンの磁気抵抗測定を詳しくおこなった。層数に応じて抵抗のゲート電圧依存性と磁場依存性が、 電子構造の違いを反映して層数に依存して大きく変化するのが観測された。単層と2層のグラフェンでは、S-dH 振動の 位相が πだけずれるために、振動の位相が反転して観測された。3層グラフェンでは、量子振動が顕著でなくなり、 ゲート電圧依存性に関して幅の広い正の磁気抵抗が主として観測された。

単層グラフェンでは、電荷中性点付近の磁気抵抗の磁場依存性に、ポテンシャルの空間揺らぎに起因する特徴的な構 造が現れた。ゼロ磁場から 2T 程度までの磁場領域で、急激に増大する磁気抵抗が観測され、その後、複雑な小振動を見 せつつ、磁気抵抗が正負に変化する。この磁気抵抗の大きさは、2 層や3 層グラフェンよりもかなり大きく、その形も質 的に異なり、単層グラフェン特有の性質を反映している。電荷中性点での高磁場磁気抵抗の磁場依存性は、サンプルに よってさまざまな様相を見せるが、素子のパラメータである、電荷中性点での残留電荷の順に整理すると、残留電荷の小 さなものから大きなものへと変化するとき、高磁場の磁気抵抗が正から負に系統的に変化することが観測された。残留電 荷の大きさは、ポテンシャル空間揺らぎの分散の程度を表すため、単層グラフェンで不可避なポテンシャルの空間電荷揺 らぎが、磁気抵抗として観測されている。高磁場で表れる負の磁気抵抗は、低品質なグラフェンでは、電荷中性点の磁場 に依存した変動によってもたらされている。高品質なグラフェンでは、2 つ以上のディラック点が扇ダイアグラムに表れ るときに負の磁気抵抗が現れた。最も高品質なグラフェンでは、正の磁気抵抗のみが観測された。これらの結果は、ポテ ンシャル空間揺らぎが単層グラフェンの磁場中伝導に大きく影響することを示しており、これを克服するのがグラフェン 研究の課題である。

RAMAN SPETCTRA OF GRAPHENE AND NANOCARBON

R. Saito, K. Sasaki*, J. S. Park, M. Furukawa

(Department of Physics, Tohoku University, Sendai, Japan, *National Institute of Material Science, Tsukuba, Japan)

In this talk, starting from a basic introduction of resonance Raman spectroscopy of grapheme and single wall carbon nanotubes (SWNTs), we will discuss the Raman spectra of graphene edge states and phonon softening phenomena of metallic SWNTs, which are observed by the recent single nanotube Raman spectroscopy with changing the Fermi energy by the electro-chemical doping [1].

It is important to know the structure of the edge structure of graphene, since the electronic structure of graphene is sensitive to the edge structure. In particular, near the zigzag edge, it is known that the localized states of electron or phonon exist which gives an anomalous behavior. Recent calculations and experiments show that some Raman spectra are assigned to the spectra originated by the edge structure [2]. We calculated both electron and phonon structure of edge states and found some Raman spectra can be assigned to the edge phonons.

The other topic is phonon softening mechanism in the metallic SWNTs, which is known as the Kohn anomaly effect of phonon. We calculated the phonon frequencies of single wall carbon nanotubes as a function of the Fermi energy positions (Fig.1) [3]. Not only longitudinal optic (LO) phonon but also transverse optic (TO) phonon show softening or even hardening depending on the chiral angle of single wall carbon nanotubes. This results show that the electron-phonon interaction of graphene and nanotubes are highly anisotropic in the k space around the K point.

The anisotropy of the electron-phonon interaction comes from the wave function of graphene. The two-component wave function of graphene is expressed by a pseudo spin [4]. The edge state of graphene can be understood by the pseudo-spin polarized states. The corresponding field which polarized pseudo spin can be defined by the lattice distortion. We call this field as deformation induced gauge (DIG) field. The concept of the DIG field is useful for understanding the defect states and polarization dependence of Raman spectra of graphene edges [5].

RS acknowledges the MEXT grants (Nos. 20241023, 16076201).

Fig. TO and LO phonon frequencies and broadeining as a function of the Fermi energy for (15,0) metallix zigzag SWNT.

- H. Farhat, H. Son, Ge. G. Samsonidze, S. Reich, M. S. Dresselhaus, and J. Kong, Phys. Rev. Lett. 99, 145506 (2007).
- [2] K. Sasaki, M. Yamamoto, S. Murakami, R. Saito, P. T. Araujo, A. Jorio, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. B 80, 155450 (2009).
- [3] K. Sasaki, R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, H. Farhat, J. Kong, Phys. Rev. B77, 245441 (2008). related papers therein.
- [4] K. Sasaki, and R. Saito, Prog. Theor. Phys. Suppl. 176, 253-278, (2008). A review article for the pseudo spin and deformation induced gauge field.
- [5] K. Sasaki et al, submitted.

グラフェンスピントロニクス

白石 誠司(阪大院・基礎工、JST さきがけ)

グラフェンを用いて様々な興味深い物性が研究されている。室温に至るまでの量子ホール効果[1-3]、超伝導近接効果 [4]、非常に大きな移動度を有する電界効果型トランジスタ[5]、そして遂には分数量子ホール効果の観測[6]も最近では報 告されている。この興味ある物性を有するグラフェンと、近年大きな発展を見せているスピントロニクスを融合した研究 テーマがグラフェンスピントロニクスであり、2007年の日米蘭の独立した3グループによる室温スピン注入の報告を契 機に注目を集めている[7-9]。スピントロニクスの観点から見たグラフェンの魅力は炭素原子のみから構成されることに より良好なスピンコヒーレンスが期待できること、金属材料以外では唯一である室温スピン注入が達成されていること、 グラフェンがゼロギャップ半導体であるために電界効果を利用したスピン輸送特性の変調が可能であることなどがある。 また、非磁性金属の場合同様、純スピン流[10]という時間反転対称性を有し散逸のないカレントを室温で創出できる、と いう魅力も有する。

報告者のグループではまず多層グラフェンを用いた純スピン流の創出・室温スピン注入を報告したのち[7]、グラフェンに注入されたスピンのスピン偏極率がバイアス電圧印加に対して変化しない、といういわゆる robustness を発見し最近報告するとともに[11]、グラフェンスピンバルブ素子の劣化機構の解析を行った[12]。従来のスピントロニクス素子では、注入スピンのスピン偏極率が容易に減少してしまう、という問題があり特にスピントランジスタなどへの応用上大きな問題となっていたが、グラフェンではこの問題を回避できることが明らかとなった。さらに、単層グラフェンに対し電気的に透明なコバルト/グラフェン界面からの室温スピン注入、スピン信号のゲート電圧による変調にも最近成功した

[13]。従来にも同様のスピン信号のゲート変調は報告されていたが[8,9]、理論と一致しない特性であったが、今回の報告 者らの実験ではこの理論との不一致、という問題が解決されている。

本研究の遂行にあたって大変お世話になりました阪大院基礎工の鈴木義茂教授・新庄輝也客員教授・野内亮博士(現東 北大金研)・高野琢博士(現 Spring-8)・野崎隆行博士・大石恵さん(現大日本印刷)・三苫伸彦君・村本和也君に感謝いた します。

[1] K.S. Novoselov et al., Nature 438, 197 (2005).

- [2] Y. Zhang et al., Nature 438, 201 (2005).
- [3] K.S. Novoselov et al., Science 315, 1379 (2007).
- [4] H.B. Heersche et al., Nature 446, 56 (2007).
- [5] K. Bolotin et al., Solid State Comm. 146, 351 (2008).
- [6] K. Bolotin et al., Nature online published on Nov. 5th 2009.
- [7] M. Ohishi, M. Shiraishi et al., JJAP 46, L605 (2007).
- [8] N. Tombros et al., Nature 448, 571 (2007).
- [9] S. Cho et al., Appl. Phys. Lett. 91, 123105 (2007).
- [10] F.J. Jedema et al., Nature 416, 713 (2002).
- [11] M. Shiraishi et al., Adv. Func. Mat. on-line published on Nov. 2nd 2009.
- [12] K. Muramoto, M. Shiraishi et al., submitted.
- [13] N. Mitoma, M. Shiraishi et al., in preparation.

トポロジカル絶縁体と表面ディラック電子

村上 修一(東京工業大学大学院理工学研究科・JST さきがけ)

量子スピンホール系(トポロジカル絶縁体)のエッジ状態・表面状態の性質について研究を行った。量子スピンホール系 は、バルク(内部)は絶縁体であるが、系の表面やエッジに金属的な状態が存在しスピン流を運ぶものであり、非磁性不純 物等があっても金属的なエッジ状態が保たれるという特異な性質がある。ビスマス薄膜がこの系となりうるかどうかにつ いて、第一原理計算の結果を用いて計算を行った。その結果、ビスマス(111) 1-bilayer 薄膜は 2 次元量子スピンホール系 となり、{012}2-monolayer 薄膜はそうでなく通常の絶縁体になることが分かった。このビスマス薄膜での量子スピン ホール系のエッジ状態は、波数空間でブリュアンゾーン全体に広がっている。こうしたエッジ状態の場合には、エッジ状 態はエッジ付近に良く局在しており侵入長は格子定数程度となることを一般的に示した。逆にエッジ状態が波数空間で比 較的に狭い範囲に集中している HgTe 量子井戸では、エッジ状態のバルクへの侵入長は 50nm 程度と、かなり広がって いる。

また、こうした 2 次元量子スピンホール系のエッジ状態が熱電輸送に与える影響について研究した。エッジ状態は非 磁性不純物によって弾性散乱を受けないため輸送の点では有利だが状態数はバルクよりかなり少ないため、幅が nm オーダーの細いリボン状を考える。すると数ケルビン程度以下で、熱電輸送がバルク優勢のものからエッジ優勢のものへ と変化する。これにより、低温で熱電変換性能指数が減少から一旦増加してピークを持つことが予想される。

Z2 トポロジカル絶縁体におけるバルクと端-有効理論と格子模型の比較

井村 健一郎 (東北大院理)

Z2 非自明性の起源であるバルクの 2 次元的なディラック構造と有限系において現れる 1 次元的な端状態との関係を明 らかにする。前者は、連続体極限で定式化されるディラック点近傍の有効理論である。S. -Q. Shen らによれば[1]、この 有効理論から出発し、波動関数が試料の端で消えるという境界条件を課すことで、ヘリカル端状態が得られるという。一 方、「端」という実空間における詳細な構造がそのような低エネルギーの有効理論に含まれているとは考えにくい。本講 演では、HgTe/HgCdTe 量子井戸に対する Bernevig らの有効理論[2]に正方格子上に載せた模型を用い、異なる端の切り 方を比較することによって Z2 絶縁体におけるバルクと端の対応関係を明らかにする。

[1] B. Zhou et al., Phys. Rev. Lett. 101, 246807 ('08).

[2] B.A. Bernevig et al. Science 314, 1757 ('06).

ビスマス中ディラック電子のホール効果

伏屋 雄紀(阪大院基礎工)

磁場中電子の運動を記述する際、ブロッホ表示に基づいたパイエルス位相(あるいはパイエルス置換)の方法がよく採用 される。この方法は一般には非常に有用であるが、原理的には不十分である[1]。磁場中の電子は、ブロッホバンドには もはや閉じ込められておらず、バンド間を行き来する複雑な運動を行う。従って、ブロッホ表示では表現できない効果が 生まれる:これをバンド間磁場効果と呼ぶ[2]。

このバンド間磁場効果は、軌道磁性については詳しく調べられているが[3]、輸送現象に関しては明らかになっていない点が 多い。本研究では、ビスマスにおけるバンド間磁場効果に関して、(1)弱磁場極限におけるホール伝導度と(2)有限磁場中の光 学伝導度について調べることを通して、バンド間磁場効果が輸送現象に如何なる影響を及ぼすのか、その理解を目指す。

- (1) 弱磁場極限におけるホール伝導度を、バンド間磁場効果が適切に扱える、ラッティンジャー-コーン表示に基づき、 ゲージ不変な久保公式を用いて求めた[4,5]。その結果、これまでに知られていない、新たなホール伝導度への寄与 がバンド間磁場効果によって生み出されることが明らかとなった。この新たな寄与は、その性質が軌道電流と酷似 しているため、両者は同一起源を持つと考えられる。
- (2) 有限磁場中での光学伝導度には、スピン-軌道相互作用のない場合、軌道フリップの寄与しか現れない。しかしビスマスの様にスピン-軌道相互作用が強い場合は、従来の軌道フリップに加え、スピンフリップの項が現れることが知られていた。このスピンフリップ項はしかし、バンド"内"遷移のみを考えた場合、非常に小さい寄与しかなく、あまり重要と認識されてこなかった。今回バンド"間"遷移の寄与を注意深く解析した結果、バンド間磁場効果から大きなスピンフリップの寄与が得られることが明らかとなった。特に、絶縁体状態において得られる光学伝導度のピークは、全てスピンフリップ遷移からくるものであることが分かった。
- [1] R. E. Peierls, Quantum Theory of Solids (Oxford University Press, New York, 1955).
- [2] R. Kubo and H. Fukuyama, in Proc. of 10th Intern. Conf. on Physics of Semiconductors, Cambridge, Massachusetts, 1970 (United States Atomic Energy Commission, Springfield, Virginia, 1970).
- [3] H. Fukuyama and R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn., 28 (1970) 570.
- [4] Y. Fuseya, M. Ogata and H. Fukuyama, Phys. Rev. Lett., 102 (2009) 066601.
- [5] Y. Fuseya, M. Ogata and H. Fukuyama, J. Phys.: Conf. Series, 132 (2008) 012004; in Proceedings of the 9th International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology - ISQM-TOKYO'08 edited by S. Ishioka and K. Fujikawa (World Scientific Publishing), p. 174.

金属上のグラフェン(h-BN)CVD 膜

大島 忠平 (早大理工 応物)

グラフェンと h-BN は低圧での熱力学的安定相であり、条件が整えば加熱のみで優れた結晶性の試料が低い圧力下で成 長する。炭化水素の脱水素反応を起こす高温の単結晶表面では、多くの場合、グラフェンのエピタキシャル膜が下地格子 に不整合に成長する。Ni(111) 表面のグラフェン膜は、格子を 1.2%伸ばして、Ni-Ni 原子間隔に整合し、1x1 構造をと る。Ni(111) 面上のグラフェン膜は単位格子中の 2 つの炭素原子のうち、1 つの炭素原子は最表面の Ni 原子の真上に位 置し、もう 1 つの炭素原子は FCC ホロウ位置に配置し、膜と最外層の間隔は 0.21nm で、グラファイト層間の 0.34nm に比べてずっと短く、かなり強い化学結合が層間に発生している。すべて炭素原子はの Ni 原子直上位置かすべての FCC ホロウ位置を占有しており、ステップ等の欠陥のない Ni(111) 表面が準備できれば、グラフェン(h-BN)膜を成長させる 理想的なテンプレートとなる。異なる場所から核成長したグラフェン(h-BN)の単原子層の島状のドメインは、膜の完成 時に他のドメインと粒界を発生させることなしに、連続した 1 枚のグラフェン膜となる。

さらに Ni(111) 基板の特徴として、グラフェン被覆によって、ステップバンチングが起こりステップ端の数が減少し、 テラス面積が増加する。実際、STM 像の観察では、h-BN 被覆 Ni(111) 面の 100nm の範囲のテラスに全く構造は見ら れず一様な h-BN 膜が広がっていることが分かる、拡大した STM 像でも、格子欠陥は見られていない。

Ni(111) 面上に CVD 法で良質かつ大面積のグラフェン膜を成長させ、化学的エッチングで Ni 基板を溶解して、基板 からグラフェン膜を剥離し、TEM グリッド上にグラフェンを自己保持した状態で取り出したことを紹介した。

ナノグラフェンの電子構造と磁性

榎 敏明(東工大院理工)

1. はじめに

任意形状のナノグラフェンシートの周囲構造はジグザグ端とアームチェア端のコンビネーションとして記述される。アー ムチェア端のみからできたナノグラフェンの電子状態は線形の π 及び π*バンドのみにより記述され、端の効果は表れない。 一方、ジグザグ端においてはこれらに加えて非結合状態のフラットバンド(エッジ状態)がフェルミ準位に形成される。また、 このエッジ状態は局在スピンを持ち、その分布はジグザグ端に局在する。このようなエッジ状態は化学的には縮合多環系芳 香族炭化水素化合物の芳香族性と関係し、非 Kekulé 分子の非結合 π 電子状態のラジカル構造に対応する。このようなことか らジグザグ端を有するナノグラフェンは化学反応性活性、特異な電子状態、磁性発現の観点から興味ある対象である。

2. ナノグラフェンのエッジ状態

端炭素原子を水素で終端し、超高真空トンネル顕微鏡/トンネルスペクトル(STM/STS)を用いてグラフェン端を観測した。 アームチェア端は一般に長く、欠陥構造の少ない傾向があるのに対し、ジグザグ端は短く、欠陥が多数見出される。このこ とは、Fermi 準位にエッジ状態が存在するため、ジグザグ端がエネルギー的に不安定であることに起因する。実験結果から は、ジグザグ端にはエッジ状態に起因する大きな局所状態密度(LDOS)が存在し、アームチェア端にはエッジ状態は存在し ない。また、STS スペクトルにはエッジ状態の LDOS に基づく鋭いピークが存在し、アームチェア端にはこれは存在しない。 また、種々の構造を持つグラフェン端では端の局所構造に依存した多様なエッジ状態が形成された。さらに、グラフェンの 層間相互作用にも影響される。有限長のジグザグ端のエッジ状態においては電子閉込め効果が観測された。

3. ナノグラフェンの特異な磁性

磁性研究においては、ナノグラファイト・ドメインが 3 次元無秩序ネットワークを形成する多孔性炭素である活性炭 素繊維(ACF)が興味あるモデル物質である。ACF を構成するナノグラフェンは、ジグザグ端とアームチェア端の適当な 組合せによる不規則な端構造をもち、ジグザグ端では、強い強磁性相互作用(*J*₀~10³ K)により、エッジ状態スピンの強 磁性クラスターを構成し、クラスター同士は、中くらいの強さをもつ π 伝導電子を介した強磁性/反強磁性相互作用 (*J*₁~10⁻¹ – 10²*J*₀)により結合し、結果として、それぞれのナノグラフェンは有限の磁気モーメントをもつフェリ磁性状 態となっている。また、ナノグラフェン間及びナノグラファイト・ドメイン間には弱い反強磁性相互作用が働いている。 温度が低下するとドメイン間ホッピング速度が低下し、20 K 以下では不均一スピン系となり、フェリ磁性に基づく超常磁性的挙動となることが見出された。ACF を熱処理して、ナノグラフェン端周辺にある官能基を取り去ると、ナノグラファイト・ドメイン間の電子的相互作用が増加し、熱処理温度 1200℃で絶縁体 - 金属転移を起こし、それ以上の温度でナノグラファイト・ネットワークは金属状態になる。このような金属-絶縁体転移近傍では、フェリ磁性を持つナノグラフェン/ナノグラファイトが無秩序なドメイン間相互作用のため、スピングラス状態を形成し、磁性が大きな磁場冷却効果を示す。

[1] T. Enoki, Y. Kobayashi, and K. Fukui, Inter. Rev. Phys. Chem. 26, 609 (2007).

[2] T. Enoki, K. Takai, Solid State Commun. 149, 1144 (2009).

ナノ細孔グラフェンの創成・電子状態・物性:グラフェンエッジの物性探索

中村 仁、清水 台生、春山 純志(青山学院大学大学院機能物質創成コース)

グラフェンの特異性の一つとして、ジグザグエッジ構造においてフェルミエネルギーで分散を持たない局在電子状態 (エッジ状態)の存在、バルクを一桁近く上回る超高電子状態密度と強いスピンコヒーレンスが理論予言され[1]、グラ ファイトでは STM により確認されている[2]。また、点欠陥周辺のジグザグエッジの集団や細孔エッジへの圧力印加でコ ヒーレントスピンが試料全域に広がり強磁性を発現することもグラファイトで報告されている[3]。我々はこのジグザグ エッジを介したスピン伝導物性探索とその新機能素子応用を実現するために、以下の 2 つのエッジ活用系の創製に初め て成功した。

1:CNTを長手軸に沿って自然に開いて生成した「グラフェンナノリボン FET」

2:多孔質アルミナ膜から転写した蜂の巣状「ナノ細孔アレイグラフェン FET」

1:ナノリボンは人工的な加工方法ではエッジにダメージが入ってしまい良好なスピン伝導特性が得られない。そこで今回ライス大学と共同で、ボトムアップ形成のナノリボンとしてカーボンナノチューブ(CNT)を KMnO4溶液に浸すことで炭素原子が酸素原子に置換され CNT が自然に開いて出来るナノリボン[4]を使用し、初めて FET 構造創成に成功した。

2:Geim らの方法でシリコン基板上に作成したグラフェンを多孔質アルミナ膜をマスクとしてエッチングし、蜂の巣 状ナノ細孔アレイを持つグラフェン創成に成功した(図 1(a)(b))。さらに、STM によりこの細孔エッジの高電子状態密度 存在の可能性を同定し、ホールパターンを形成、磁場を印加することで細孔エッジの局在電子波干渉による Aharonov-Bohm 型振動の可能性を持つ磁気抵抗振動の観測に成功した(図 1(c))。

今後これらで高い磁気抵抗比を持つ GMR 素子や、細孔エッジ局在電子とサイクロトロン電子の相互作用による異常分 数量子ホール効果などの新奇量子物性現象の発見を目指して研究を行う予定である。

[1] K. Nakada, M. S. Dresselhaus et al., Phys. Rev. B 54, 17954 (1996)

[2] Y. Niimi, T. Matsui, H. Fukuyama et al., Phys. Rev. B 73, 085421 (2006)

[3] J.Cervenka et al., Nature Physics (4 Oct., 2009)

[4] D.V. Kosynkin, J.M.Tour et al., Nature 458, 872 (2009)

図 1:(a) 多孔質アルミナ膜をマスクとしたグラフェンのエッチン グ断面模式図。(b) グラフェン上に転写されたナノ細孔アレイ。

(c) 直径・間隔の比が大きい(80nm/20nm=4)ナノ細孔グラ フェンでの磁気抵抗振動の観察例。赤い矢印が振動周期。

分子性ディラック電子系におけるゼロモード

田嶋 尚也 (理研)

質量ゼロのディラック電子が伝導性の主役であるゼロギャップ電気伝導体が高圧下にあるα-(BEDT-TTF)₂I₃(及び類塩 物質)で実現した[1-6]。

以下が、この物質における特徴的な電気伝導性の主な例である。

(1)1 つは電気抵抗の温度依存性に見られる。1.5GPa 以上の圧力下でこの物質の電気抵抗はほとんど温度に依存しない。 室温から 4K まで約 2 分の 1 程度である。このような擬 2 次元物質ではシート抵抗を考慮することが大事である。そこ で、どのような抵抗値を持つのかを知るために 1 層あたりの電気抵抗(シート抵抗 *R*s)を見積もると、驚いたことに広い 温度範囲で量子抵抗 *h/e*²=25.8 kΩ近傍に量子化するのである[5]。最も重要なのはこれが不純物濃度にあまりよらないと いう事実である。これがゼロギャップ状態の電気伝導性の特徴である

(2) キャリア濃度 n の温度変化が $n \propto T^2$ に従うのもこの系の特徴である[4, 5]。

(3)層間磁気抵抗に興味深い現象が見られる。ゼロギャップ状態では磁場下でディラックポイントの位置に n=0 のランダ ウ準位(ゼロモード)が常に存在するが、ゼロモードランダウ準位の縮重度が磁場に比例して増大し、Fermi 準位での状 態密度が増大することで層間方向の伝導度が高くなるのである[6]。これは長田の計算結果[7]と定量的によく一致する。 一方、低温・高磁場ではスピン分裂により抵抗が *B*⁻¹exp (*g*µ*B/2*k*B*T*) に従う[6]。

ゼロギャップ電子系としてはグラフェンが大変有名である。しかし、グラフェンはグラファイトを一層だけにした特殊 物質である。それに対して、バルクなゼロギャップ電気伝導体はα-(BEDT-TTF)₂I₃(及び類塩物質)が唯一である。従っ て、この物質を舞台にしてゼロギャップ電気伝導体の物理が発展することが期待される。

[1] A. Kobayashi et al., J. Phys. Soc. Jpn. 73 (2004) 3135.

[2] S. Katayama et al., J. Phys. Soc. Jpn. 75 (2006) 054705.

[3] H. Kino and T. Miyazaki, J. Phys. Soc. Jpn. 75 (2006) 034704.

[4] N. Tajima et al., J. Phys. Soc. Jpn. 75 (2006) 051010.

[5] N. Tajima et al., EPL 80 (2007) 47002.

[6] N. Tajima et al., Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 176403.

[7] T. Osada, J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) 084711.

有機ゼロギャップ半導体における面間磁気抵抗理論

森成 隆夫(京都大学 基礎物理学研究所)

擬 2 次元の有機導体 α-(BEDT-TTF)₂I₃は、常圧下において 135K で電荷秩序形成による金属一絶縁体転移を起す。こ の転移は圧力を加えていくと抑制され、約 2GPa 以上の圧力下でほとんど温度によらない電気抵抗を示し、その一方で ホール係数は大きな温度依存性を示す。この系の電子状態については、小林らによってギャップのないディラック電子系 として記述されることが理論的に示唆され、ディラック電子を特徴付けるディラックコーンが傾いている結果が得られて いる。この結果は、第一原理計算からも確かめられている。

この系がギャップのないディラック電子系であることを示唆する実験として、負の面間磁気抵抗がある。ディラック電 子特有のエネルギーゼロのランダウ準位の波動関数を用いた面間磁気抵抗の表式によって、実験結果をよく再現する結果 が長田によって得られている。また、負の面間磁気抵抗領域において磁場の方位角依存性をみることでこの系のディラッ クコーンの傾きが検証できるという提案がなされている。

本講演では、ディラックコーンが傾いているときのランダウ準位の特徴について述べ、田嶋らの面間磁気抵抗の実験結

果の解析から評価されたディラックコーンの傾きについて報告する。また、低磁場領域で観測されている正の磁気抵抗が、 ランダウ準位間の遷移効果によって理解できることを示す。この系の結晶の対称性と BEDT-TTF 分子の配置を反映して、 面間の電子のホッピングは垂直からずれており、その結果ランダウ準位間の遷移が可能になる。このような低磁場での正 の磁気抵抗と高磁場での負の示磁気抵抗を統一的に記述する理論によって、面間磁気抵抗の実験結果の解析からランダウ 準位のエネルギーを決めるパラメータが見積もられることを述べる。

有機ゼロギャップ伝導体α(BEDT-TTF)2I3の層間ホール効果

佐藤 光幸 (東邦大理)

α (BEDT·TTF)₂I₃ は伝導層と絶縁層が交互に積層した構造を持つ分子性導体であるが、圧力印加によりゼロギャップ状態となる。我々は、この物質の電気伝導特性を、特に、層間方向の伝導に興味を持って調べている。層間伝導は多層膜試料に特有な現象である。最近、我々は、電流を層間方向(z 方向)に流し、磁場を層内(y 方向)にかけて行う層間ホール効果の観測に成功した。図1は、ゼロギャップ状態でのα (BEDT·TTF)₂I₃ について層間ホール抵抗 ρ_{α} を調べた実験結果である。図は、一定強度の磁場を yz 平面内で回転した場合のホール抵抗の磁場方向依存性を示している。通常、ホール効果は電流と垂直な磁場成分に比例するから図1のようなプロットをすると正弦波的な曲線になる。しかし、図1の曲線はそれとはだいぶ違っている。この実験結果は横軸を cot θ に取った図2で、シンプルに整理できる。図2より、層垂直磁場の強い領域($\theta^{~}\pi/2$, したがって、cot θ が小さい)ではどの曲線も cot θ に比例した一本の直線上に乗っていること、cot θ が大きくなるとこの直線から離れてゆくことがわかる。この現象は、磁場を印加したときフェルミ準位の位置にできるゼロモードのランダウ準位によるものである。低温・強磁場では伝導に寄与するキャリアがゼロモードランダウ電子に層平行成分に比例したローレンツ力が働くとすると、量子極限状態での層間ホール抵抗 ρ_{α} は、層平行磁場と、層垂直磁場との比に比例する。その比は cot θ である。比例係数はフォン・クリッツィング定数に層間方向の格子定数をかけた値のオーダーとなっているが、実測値は理想的な値と多少ズレている。このズレは、伝導に寄与するキャリアの数が何らかの理由で減っているのが原因と考えている。

図1:層間ホール抵抗の磁場角度依存性

ナノグラフェンの電子物性と輸送特性

若林 克法 (物質·材料研究機構)

ー原子層のグラファイトシート(グラフェン)が実験的に容易に作製できることが指摘されて以降、グラフェンについて 基礎および応用の観点から爆発的に研究が進められている。さらに最近では、半導体微細加工技術あるいは化学的な手法 によって、ナノスケールの幅をもつリボンのグラフェン(グラフェンナノリボン)の作製も可能になってきており[1]、 エッジ形状を制御する試みも行われている[2]。本研究会では、グラフェンナノリボンの電子状態および電子輸送特性に 焦点をあて[3]、最近のナノグラフェン研究の動向を紹介しつつ、ナノグラフェンにおける特異な電子物性について議論 をした。また、我々の研究グループの成果として、不純物を有するグラフェンナノリボンにおける完全伝導チャネル[4]、 さらにナノグラフェン接合系を介した電子伝導特性[5]について紹介をした。

[1] M. Y. Han et.al. Phys. Rev. Lett. 98, 206805 (2007); X. Li et.al. Science 319, 1229(2008).

- [2] X. Jia, et.al., Science 323, 1701 (2009).
- [3] 若林克法, 草部浩一, 日本物理学会誌, 63, 344(2008).
- [4] K. Wakabayashi, Y. Takane, M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. 99, 036601(2007); CARBON(Elsevier) 47, 124 (2009).
- [5] M. Yamamoto, and K. Wakabayashi, Appl. Phys. Lett. 95, 082109 (2009).

Edge states and possible magnetic states in nanographene and open-shell conjugated systems

K. Harigaya, AIST, Tsukuba

Nanocarbon materials are investigated intensively. In this paper, the edge-state in nanographene materials with zigzag edges is studied theoretically. In particular, while the inter-layer interactions are considered, we prove that edge states exist at the energy of the Dirac point in the doubly stacked nanographene, and in the case of the infinitely-wide lower layer case. This property applies both for the A-B and A-C stackings. We also study possible magnetic properties in fullerenes with defects and buckybowl molecules. When the number of lattice defects in C_{60} is even, we obtain magnetic and nonmagnetic solutions. The total energy of the nonmagnetic solution is lower than that of the magnetic solution. The occurrence of the localized spin is reduced for finite onsite Coulomb repulsions. When the number of defects is odd, magnetic solutions are obtained only. The spin density reflects the symmetry of the molecules. We also consider possible magnetic states in buckybowl molecules. We find localized spin order in the sumanene molecule and a part of the C_{60} .

ナノグラフェンの端方向識別と電子輸送

高井 和之 (東京工業大学大学院理工学研究科)

グラフェンのナノ構造では電子輸送におけるキャリアの散乱などにおいて顕著な端の影響が期待される。しかし、グラ フェン端は zigzag 端におけるスピン分極したエッジ状態の出現など、端方向に強く依存した電子構造を持っており、ナ ノグラフェンの電子物性の解明においては端方向の識別が非常に重要である。グラフェン端識別の方法としては Raman 分光における D バンドの強度を用いた方法が最近報告されたが、我々は今回新たにグラフェン端の方向に依存した G バ ンドのシフトを発見し、端方向識別の有力な方法になることを示した。この G バンドシフトの原因としてはコーン異常 によりソフト化した LO モードが Armchair 端近傍においてのみ活性になるのに対し、zigzag 端近傍ではソフト化の影 響を受けない TO モードのみが活性であるため、グラフェン端方向に依存した見た目の G バンドシフトが起こるものと して理解される。また、ナノグラフェンの電子輸送として、リボン状にナノ加工されたグラフェンの磁気抵抗の SdH 振 動について報告した。バルクグラフェンにおいては線形バンドより期待される、ゲート電圧に比例した大きさを持つフェ ルミ面が観測されるのに対し、ナノグラフェンリボンにおいてはディラック点近傍で大きなフェルミ面に対応づけられる 異常な振動構造が見られ、ディラック点において大きな状態密度を持つエッジ状態の電子輸送への寄与が示唆される。

グラフェンおよびグラファイト表面の STM/STS 観測

河合 直樹、松井 朋裕、福山 寛(東大院理)

講演の前半では、これまで我々が行ってきたグラファイト表面の擬 2 次元電子系の STS 観測のうち、zigzag 端をもつ ステップにおけるグラファイト端状態の観測と、高磁場下でのランダウ準位構造と不純物周りの局在/非局在状態の観測 について紹介した。後半は、これらの研究を1ないし数層のグラフェン試料へ拡張するための予備的な実験について紹介 した。高磁場中では、グラファイト端状態と量子ホール効果の端状態の競合/共生、最低ランダウ準位の試料端における エネルギー分裂など興味深い現象が期待されている。高ドープ SiC 基板 Si 面上に in situ で合成した 2 層エピタキシャ ル・グラフェンの STS 測定を 6 T の磁場中で行ったが、グラファイト表面のときのような明確なランダウ準位構造は観 測されなかった。これは基板とグラフェン界面からの強いポテンシャルの影響によると考えられる。また、STM 探針で 折り曲げたナノグラフェン作成の現状も報告した。

Edge states of epitaxially grown graphene on 4H-SiC(0001) studied by scanning tunneling microscopy and spectroscopy

^AGrad. Sch. Sci., Hiroshima Univ., ^BHSRC, Hiroshima Univ., ^CDep. Phys., Fudan Univ.
 M. Ye^A, Y. T. Cui^B, Y. Nishimura^A, Y. Yamada^A, S. Qiao^C, A.Kimura^A,
 M. Nakatake^B, M. Sawada^B, H. Namatame^B, M. Taniguchi^{A,B}

The edge properties of single layer graphene epitaxially grown on 4H-SiC(0001) have been extensively investigated with scanning tunneling microscopy (STM) and scanning tunneling spectroscopy (STS) at the temperature of 78K. We have observed the armchair- and zigzag-type edges of single layer graphene at the step edge of partially graphitized 4H-SiC(0001) substrate. Super-structure possessing the $(\sqrt{3}x\sqrt{3})R30^\circ$ periodicity with respect to the graphene lattice has been found in the vicinity of graphene edge, which is similar to the case of graphite edge [1] [2]. And the atomic-structure-dependency of the localized electronic states in the vicinity of different types of graphene edges has been directly observed by means of STS. The electron-doped edge states at zigzag-type edge shows double-peak shape in the STS spectra, which indicates the lifting of degeneracy of the edge states of epitaxially grown graphene on SiC substrate, and the local magnetic properties of graphene edge should therefore be attached with extra importance and attention.

- [1] Y. Niimi, T. Matsui, H. Kambara, K. Tagami, M. Tsukada, H. Fukuyama, Phys. Rev. B 73, (2006) 085421.
- [2] Y. Kobayashi, K. Fukui, T. Enoki, K. Kusakabe, Y. Kaburagi, Phys. Rev. B 71, (2005) 193406.
- [3] S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto and A. Lanzara, Nature Materials 6, (2007) 770.

グラフェン端における擬スピン反射の理論とラマン分光

佐々木 健一(独立行政法人物質·材料研究機構)

グラフェン端では、バルクとは異なる物性が実現する可能性があり、国際的にもグラフェン端への関心が高まっていま す。端の物性はその方向性(ジグザグ端やアームチェア端など)と密接に関係していますので、端の方向性を決めることは 重要な課題の一つです。私達は、ラマン分光に現れるGバンドを用いた端の方向性決定の可能性を模索しています。

今回の発表では、グラフェン端での電子状態の特殊性を擬スピンの観点から考察した結果(左下図)と、G バンドに関係する電子格子相互作用と電磁相互作用を、有効質量近似を用いて求めた理論結果について報告します。端でのラマン強度が、ラマンレーザーの偏光方向と端の方向性に強く依存する(右下図)ことなどが分かりました。これを実験と比較することで、端の方向性やジグザグ端とアームチェア端の混成割合を決めることができると考えています。(参考文献: Sasaki *et al.* PRB **80**, 155450 (2009), arXiv:0911.1593)

(左下図)ジグザグ端における電子反射は、谷内反射であり、かつジグザグ端に垂直方向の擬スピンが反転する。アーム チェア端での電子の反射は、谷間反射であり、かつ擬スピンは変化しない。太い(細い)矢印が擬スピン(波数ベクトル)の 方向を表す。(右下図)ジグザグ端とアームチェア端における擬スピンの振舞の違いが、G バンド強度においてラマン レーザーの偏光依存性として現れる。ジグザグ端とアームチェア端が同じ程度存在する端では偏光依存性は消失する。

SiC ナノ表面上のエピタキシャルグラフェン

田中 悟(九州大学大大学院工学研究院エネルギー量子工学部門)

概要

傾斜 SiC 表面にはエネルギー安定構造として周期的ナノファセット(ナノ表面)が形成される[1]。本発表では SiC ナ ノ表面の高温熱分解において形成されるエピタキシャルグラフェンの成長機構について議論を行う。ナノファセットは bi-layer のステップが規則的に配列した構造になっており、表面熱分解によるグラフェン形成において重要な役割を果た す[2]。グラフェン空間層厚分布の成長温度・時間依存性について低速電子顕微鏡(LEEM)[3]により調べた結果、核発生 密度と Si, C 原子の表面拡散長に大きく依存していることがわかった。即ち、より高温での成長では、核形成密度が小さ く、またステップフロー状にグラフェンが形成され、層数分布が抑えられる。ステップフローはステップに平行な方向に 優先的に生じており、Si, C 原子の拡散・供給と関係があると思われる。また、グラフェン層数が増大するに従い、成長 速度がステップ状に減少することから、成長したグラフェン層中の Si の拡散・脱離が律速している可能性が高い。しか しながら、グラフェン中の Si 拡散バリアは非常に高いと考えられ、グラフェン面内の構造欠陥に起因した脱離であると 思われる。今後、実験的に活性化エネルギーを求めることや構造微細解析、および第一原理を使った拡散バリアの計算な どの理論的なアプローチを行い、成長機構を明らかにすることが重要な課題である。

- H. Nakagawa, S. Tanaka, and I. Suemune, "Self-ordering of nanofacets on vicinal SiC surfaces", *Phys. Rev. Lett.* 91, 226107(2003).
- [2] 例えば, J. B. Hannon and R. M. Tromp, Phys. Rev. B 77, 241404(R)(2008).
- [3] H. Hibino et al., Phys. Rev. B 77, 075413(2008).

SiC 上エピタキシャル数層グラフェンの積層ドメイン

日比野 浩樹 (NTT 物性科学基礎研究所)

SiC 基板上にエピタキシャル成長した二層グラフェンの積層構造を低エネルギー電子顕微鏡(LEEM)により調べた。二 層グラフェンは、(0,0) ビームを用いた明視野 LEEM 像では均質に見えるが、(1,0) および(-1,0) ビームを用いた暗視野 LEEM 像には、二種類のドメインが観察される。また、(1,0) と(-1,0) の暗視野 LEEM 像はコントラストが互いに反転 している。二種類のドメインの結晶構造は三回対称で、一方を面内に 180°回転すると他方に一致する。グラフェンは、 単位胞内に二つの炭素原子を A サイトと B サイトに含む。二層グラフェンは、B サイトの炭素原子の上に A'サイトの炭 素原子が位置する AB 積層と、A サイトの炭素原子の上に B'サイトの炭素原子が位置する BA(AC) 積層の、異なる二種 類の安定構造を取り得る。AB 積層と AC 積層構造の対称性は、暗視野 LEEM 像に観察されたドメインのものと一致し、 二種類のドメインが積層順の異なったものであることが示唆される。これを確証するために、バルクのグラファイトに対 して低速電子回折(LEED)強度の電子線エネルギー依存性(I-V 曲線)を計算し、暗視野 LEEM 像から実験的に求めた I-V 曲線と比較した。二種類のドメインに対して測定した I-V 曲線は、(1,0)および(-1,0) ビームに対する計算結果とよ く一致し、二種類のドメインが AB 積層と AC 積層に対応することが示された。また、AB 積層のドメインと AC 積層の ドメインの境界に現われる特有の境界構造も、対称性ならびに LEEM 像と LEED 強度計算結果の比較から解明した。

SiC上グラフェン島の理論検討

影島 博之、日比野 浩樹、永瀬 雅夫、山口 浩司(NTT物性科学基礎研究所)

SiC は熱分解により表面にグラフェンがエピタキシヤルに成長する。この成長を制御することにより、我々はウェハ全面を覆う広大な2層グラフェン領域を形成する[1]のみならず、数+nm程度のサイズの1層・2層のグラフェン島の形成にも成功している[2]。しかも、ナノギャッププローブによる測定は、島の形状に何種類かあることを示唆している。

第一原理計算によると、成長は界面で起こりやすく、Siの脱離サイトは C の供給源にも C の吸い込み口にもなる[3]。 また、SiC 基板に直接接合した 1 層グラフェンはバンド構造にディラックコーンを持たず、バッファ層として働く。これ らの知見を総合すると、グラフェン島としては様々な構造が考えられ(下図参照)、中にはエッジが切れておらずシームレ スであるという特異な形状が現れている可能性もある(下図(b)や(i))[4]。エッジの形状を制御できればエッジ状態も制御 できるため、大変興味深い。

*)本研究の一部は科研費(19310085, 21246006)の補助を得て行われました。

[1] M. Nagase, H. Hibino, H. Kageshima, and H. Yamaguchi, Nanotechnol. 20 (2009) 445704

[2] M. Nagase, H. Hibino, H. Kageshima, and H. Yamaguchi, Nanotechnol. 19 (2008) 495701.

[3] H. Kageshima, H. Hibino, M. Nagase, and H. Yamaguchi, Appl. Phys. Exp. 2 (2009) 065502.

[4] H. Kageshima, H. Hibino, M. Nagase, and H. Yamaguchi, Proceedings of ICSCRM 2009, Nürnberg, Germany.

図. (a)-(c) 第一原理計算によって示唆される SiC(0001)上での 1 層グラフェンの成長過程の一例。(d)-(j) 実験的に 1 層グラフェン島として観測される可能性のある(b)以外の原子構造。(d)-(g) の構造では sp² 結合が切れているが、それ以外では切れていない。

SiC 上グラフェンの電子状態測定

中辻 寬、柴田 祐樹、小森 文夫 (東京大学物性研究所)

傾斜 SiC(0001) 基板の熱分解によりエピタキシャル成長させた一層および二層グラフェンの原子構造と電子状態について、走査トンネル顕微鏡(STM)と角度分解光電子分光(ARPES)を用いて調べた結果を紹介する。試料は九州大学の田中悟教授のグループで作製されたものを用いた。作製後に大気中で運搬、超高真空槽内で 600℃程度に加熱して不純物を脱離させたのち、測定を行った。1層および2層グラフェンのK点付近のARPES測定では1本および2本の π バンドが観測され、試料の広い領域にわたり、均一な厚さのグラフェンが形成されていることが確認された。1層の場合にDirac点の結合エネルギー(ED)が 0.4 eV 程度であること、直線分散からのずれにより、エネルギーギャップがあるように見えること、また STM 像に 6×6 超構造が観察されることは、これまでの SiC 上グラフェンでの報告例と一致した。

本研究では傾斜 SiC 基板を用いているので、ステップ密度に異方性が存在することや、SiC との界面の存在が電子状態に与える影響に興味がもたれるところである。ステップ端はグラフェンにより、カーペット上に覆われていることを、STM 観察で確認した。ステップに平行方向と垂直方向での K 点付近のバンド分散を ARPES 測定して比較したところ、特にフェルミレベルから Eo での運動量分布幅が、ステップに垂直方向で広いことがわかった。これは、ステップ端付近での散乱により、 π 電子の平均自由行程が短くなったことを反映していると考えられる。また Γ -K 方向の ARPES 測定では、 π バンドのレプリカバンドが観測された。これは 6×6 超構造の逆格子ベクトルによる K 点からの散乱として説明でき、1 層のグラフェンが界面の 6×6 超構造のポテンシャルを感じていることを示している。一方 2 層の試料ではレプリカがみられず、6×6 ポテンシャルが弱いことを反映している。

グラフェンの軌道反磁性

越野 幹人 (東工大院理)

通常の金属における軌道反磁性はランダウ反磁性として知られ、その帯磁率の大きさはフェルミエネルギー上の状態密 度に比例する。一方、価電子帯と伝導帯の間のエネルギーギャップが狭い物質では、一般に軌道反磁性がランダウ反磁性 の値から大きくずれ、強い帯磁率をもつことが知られる。グラフェンのバンド構造は価電子帯と伝導帯が接する究極の狭 ギャップの系であり、これに伴い特異な帯磁率を持つ。ここではグラフェンの軌道反磁性に関する最近の研究のいくつか を紹介する。

一般の空間分布をもった磁場に対するグラフェンの電子応答を計算することで、任意の外部磁気源(磁石、電流)とグラ フェンの間の相互作用を知ることが出来る。線形応答でこれを計算すると、帯磁率は波数の逆数に比例することが示され る[1]。これにより、グラフェン上の応答電流が外部磁場と全く相似な磁場分布を誘起するという一種の鏡像効果が導か れる。これは特定の長さスケールを持たない線形バンド特有の現象である。またグラフェンが積層した多層グラフェンに おいては、層間の相互作用のためにバンド構造が単層と比較して大きく変化する。ここでは多層グラフェンの反磁性帯磁 率を計算しその層数依存性を議論した[2]。単層グラフェンの帯磁率はフェルミエネルギーの関数としてデルタ関数とな るのに対し、2 層では対数型のピークになり、零エネルギーでの特異性は小さくなる。2 層グラフェンの帯磁率は、多層 グラフェンのバンド構造は単層または 2 層グラフェンと等価な部分系に分解でき、帯磁率はそれぞれの和で表される。 単層型の部分系は層数が奇数のものにのみ存在し、これによって層数が偶数のものと比較して大きな反磁性を持つことが

[1] M. Koshino, Y. Arimura and T. Ando. Phys. Rev. Lett. 102, 177203 (2009).

[2] M. Koshino and T. Ando, Phys. Rev. B 76, 085425 (2007).

グラフェンのサイクロトロン共鳴に対する多体効果

浅野 建一(阪大理)

量子井戸等の通常の半導体二次元系では、いわゆる Kohn の定理のため、サイクロトロン共鳴のスペクトルに電子間相 互作用の効果が現れないことが知られている。すべての電子が共通の質量を持ちバンドが放物型であれば、重心運動が相 互作用効果を受けず、光学応答はその重心運動のみを調べることになるからである。ところが、グラフェンでは、K 点 K 点の周りで電子が質量のない Dirac 電子として振る舞う。これは電子が非放物線性の最も強い極限的な状況に置かれ ていることを示している。そのため、この系は Kohn の定理が適用できない系になっており、サイクロトロン共鳴のス ペクトルに相互作用効果が現れうる。実際、最近行われた実験では、相互作用を無視したモデルでは説明できないサイク ロトロン共鳴線のエネルギーシフトが報告されている。

我々は、電子の内部自由度(スピンと谷の自由度)を無視した 簡単化されたモデルを使い、厳密対角化の手法を用いて、サイ クロトロン共鳴スペクトルに現れる電子間相互作用の効果につ いて調べた。フェルミ準位は N=0 のランダウ準位にあるものと し、電子や正孔をドープした場合のドープ依存性も調べた。そ の結果、N=0 から 1 のランダウ準位間遷移に対応するスペクト ルは非常に狭い線幅を持っているのに対して、N=-1 から 2 へ の遷移に対応するスペクトルは、相互作用に起因する大きな幅 を持つことを見出した。

この結果は、N=0から1の遷移では、近似的に Kohn の定理 が成立し、相互作用効果の打ち消し合いが起こるのに対し、 N=-1から2への遷移では、そのような制限が全くなく、N=0 のランダウ準位を部分的に占有している電子が、ある種の散乱 体として働いて線幅がつくからであると解釈できる。

この研究は、安藤恒也氏(東工大)との共同研究である。

[1] M. L. Sadowski et al.: Phys. Rev. Lett. 97, 266405 (2006).

[2] Z. Jiang et al.: Phys. Rev. Lett. 98, 197403 (2007).

[3] R. S. Deacon et al.: Phys. Rev. B76, 081406 (2007).

グラフェン及びグラフェンナノリボンの電気伝導における金属電極との接合の影響

相馬 聡文(神戸大学大学院工学研究科 電気電子工学専攻)

近年グラフェンを使った新しいエレクトロニクスの可能性に注目が集まっており、中でもシリコンに代わるトランジス タのチャネル材料としてグラフェンを利用しようという観点が一つの重要なテーマとなっている。ここでグラフェンを チャネル材料とする場合、シリコン MOSFET などとは異なり、電子の注入、引き出しを行う為のソース/ドレイン金属 電極をグラフェンチャネルに直接蒸着させる必要がある。ここでそのような金属電極の存在はグラフェンの電子状態、引 いてはデバイス特性に大きな影響を与える事が示唆されており、従って、チャネル部分だけでなく、電極まで含む全体を 一つの系として素子を捉え、理解する事が重要である。

我々はデバイス理論、シミュレーション研究の立場から、電極の存在がグラフェンの電気伝導に与える影響を密度汎関 数タイトバインディング法を用いて調べている。なるべく単純な電極構造のモデルで汎用的な議論を行う為、金属電極は 単純立方格子の結晶であり、各原子はs軌道の電子を提供するとする。そのような金属とグラフェンとが接する距離に依 存して、グラフェンの元々持っていたディラックコーン的な分散関係がどの程度保たれるか、又、それぞれの金属・グラ フェン間距離の場合に金属からグラフェンへの電子の注入がどの程度起こるかについて計算した。その結果、金属とグラ フェンの軌道の混成が少ない場合には接触面積を増やしても電子の注入は増えず、十分な電流が流れるためには、両者の 間での軌道の混成が強く起こっている必要がある事、その際グラフェン、金属の接触する面積にはあまり依存しない事な どを指摘した。又、グラフェンチャネルを介して左右の金属電極間で流れる電流のゲート電圧依存性も計算し、金属とグ ラフェンの接合距離に応じて、素子特性が大きく異なる事を指摘、報告した。

グラフェンにおける超伝導近接効果の理論

林 正彦 (秋田大教育文化)

超伝導体と正常金属との接合を作ると、正常金属中にクーパー対がしみ込み、近接効果が生じることが知られている。 このとき、正常金属としてグラフェンを用いた場合にどのような近接効果が起きるのかは、興味の持たれるところである。 われわれは、単層または 2 層グラフェンを介して接合された 2 つの超伝導体間に流れる超伝導電流の臨界値に関して、 tight binding 近似および tunnel Hamiltonian を用いた解析を行った。その結果、単層と 2 層では臨界電流の、温度お よび接合間距離依存性が定性的に異なることが分かった。単層系においては、臨界電流は接合間距離に関して指数関数的 に減少し、その特徴的な長さ(コヒーレンス長)は、温度に反比例するという clean な正常金属の場合と同様の結果が得ら れた。しかし、2 層系においては臨界電流は温度に関して単調に変化せず、振動的な振る舞いが現れることが分かった。 このような振る舞いは、2 層グラフェンのゼロ・ギャプ半導体的なバンド構造に起因するもので、今後その詳細な起源に ついて検討する予定である。

グラフェンの超伝導近接効果

神田 晶申(筑波大学大学院数理物質科学研究科)

従来、超伝導現象における相対論的補正はきわめて小さく、超伝導と相対論はまったく関係のないものと考えられてき た。しかし、単層グラフェンでは 2 つの現象が融合する可能性がある。グラフェン自体を超伝導にしたという報告はま だないが、超伝導近接効果を使えば、クーパー対を単層グラフェン中に注入することができる。この場合、相対論的ジョ セフソン効果が起こり、アンドレーエフ反射が鏡面反射になると予測されている。また、多層グラフェンの場合には、相 対論的効果は期待できないものの、ゲート電界効果によるキャリア密度の(符号まで含んだ)大幅な変調によって、従来の 超伝導近接効果の理解を検証することが可能となる。我々は、このようなことを目的として、単層・多層グラフェンにア ルミニウムの超伝導電極を接続した構造を作製し、近接効果超伝導電流を詳細に調べた。単層グラフェンでは、超伝導電 流とそのゲート変調を観測したものの、その温度依存性が "short and dirty" 接合の理論とよく合うことから、相対論的 効果が期待されるバリスティック接合が実現できていないと結論された。また、多層グラフェン接合では、超伝導電流の 温度依存性は従来の近接効果理論では説明できない振る舞いを示した。この振る舞いは、ゲート電界の遮蔽効果に起因す る可能性があることを指摘した。さらに、単層多層の両方で、超伝導電流が流れ始める温度がゲート電圧に依存すること を例外なく観測したが、これは、従来の実験ではまったく見られなかった現象である。

グラフェン接合におけるスピンホール流

山影 相、井村 健一郎、Jerome Cayssol、倉本 義夫(東北大院理)

スピン軌道相互作用(SOI)を考慮に入れたグラフェンは量子スピンホール効果を示すことが示唆されている[1]。我々 はグラフェン接合において電荷[2]とスピンの輸送における SOI の効果を調べた。グラフェンはスピンの z 成分を保存す るような SOI(以降では内因的と呼ぶ)と、結晶の反転非対称性に由来する Rashba SOI をもつ。後者はスピンの z 成分 を保存しない。つまり、内因的 SOI と Rashba SOI は競合する。

ゲートからのポテンシャルにより、接合面に局在したスピンの z 成分 S_z(グラフェン面を xy 面とする)のホール流が誘 起される。有限系での量子スピンホール系はヘリカル端状態と呼ばれる端に局在したスピン流を運ぶ状態をもつ。これと 接合面に局在したスピンホール流の関係を述べておく。ヘリカル端状態は試料の端に束縛されている状態である。一方、 接合においてはディラック電子はゲートから静電ポテンシャルを受けるだけであり、閉じ込めることは不可能である。 従って接合面に局在したスピンホール流は存在するものの、波動関数は接合面に束縛はされておらず、ヘリカル端状態と は異なる。

接合におけるスピンホール流はゲート電圧によりその大きさを向きまで含めて制御することが可能である。また、内因 的 SOI と Rashba SOI の競合効果も見出される。十分大きいポテンシャルによって作られた pn 接合においては Rashba SOI が優勢である。つまり、Rashba SOI を大きくしていくとスピン流は大きくなる傾向がある。nn 接合においてはこ れと逆の傾向が見られる。グラフェン接合におけるスピンホール流はこのような多彩な振る舞いをもつ。

グラフェンにおける SOI は小さいので、グラフェンと同じ構造をもち、かつ大きな SOI を有する系である HgTe 量子 井戸において接合に局在した Szホール流を実験的に観測できると期待される。

[1] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. 95, 146802 (2005).

[2] A. Yamakage, K.-I. Imura, J. Cayssol and Y. Kuramoto, Eur. Phys. Lett. 87, 47005 (2009).

グラフェンナノ構造の作製と輸送現象

町田 友樹 (東京大学生産技術研究所)

グラファイトの単層膜であるグラフェンは相対論的粒子であるディラックフェルミオンが伝導を担っており特異な物性 を示す。劈開法を用いてシリコン基板上に貼り付けた単層グラフェンを微細加工することにより、グラフェンナノ構造を 作製し、その量子輸送現象を観測した。電子線リソグラフィー法とプラズマエッチングの組み合わせにより、ホールバー 素子、単一量子ドット、二重量子ドットを作製した。単一量子ドットにおいて低温でコンダクタンスのゲート電圧・ソー スドレイン電圧依存性を測定したところ、クーロンブロッケードとクーロンダイアモンドが観測され、グラフェン単一電 子トランジスタとして動作することが確認された。さらに二重量子ドットにおいて二つのドット間の結合を制御し、コン ダクタンスのゲート電圧依存性を測定した。その結果得られた Coulomb Stability Diagram がドット間の結合の強さに よって変化する様子が観測された。一方、原子間力顕微鏡による局所陽極酸化法を用いてグラフェンナノリボン構造を作 製した。低温における伝導度の抑制・非線形性が観測され、伝導ギャップが形成されていることを示唆する結果を得た。

2層グラフェンの電気伝導

塚越 一仁 ^{ABCE}、宮崎 久生 ^{AE}、S.Li^A、神田 晶申 ^{DE} (物材機構 ^A、産総研 ^B、理研 ^C、筑波大数理物質 ^D, CREST^E)

薄膜グラファイト/グラフェンは本質的にバンドギャップがない。現在注目されているスイッチングトランジスタとし ての応用展開には最重要の問題であり、物性を基礎から検討する必要がある。これについて、薄膜グラファイト/グラ フェンのゲート効果を調べた。ゲート電圧印加に対するグラファイトチャネルの電界スクリーニング長を得ることに成功 し、1.5V/nmの強電界を2層グラフェンに印加しバンドギャップの導入を試みた。

薄膜グラファイトチャネルを SiO₂/高ドープ Si 基板上 に剥離法で付着させ、Ti 電極ならびに Al 電極を電子ビー ム露光と金属リフトオフ法で形成した。Al 電極はグラ ファイト上に直接形成するにも関わらず、グラファイト チャネルとは十分な絶縁状態となる。このため、Al 電極 とドープ Si 基板はそれぞれ薄膜グラファイトに対しての

図1 Al トップゲート付きグラファイト電界効果トランジスタ。

トップあるいはボトムゲート電極となる(図 1)。トップゲート電圧を走印すると、薄膜グラファイトの抵抗はホール伝導/ 電子伝導間の切り替えに伴うアンビポーラ特性を示し抵抗にピークが生じる。さらに Si 基板ゲートの電圧を変えると薄膜 グラファイトチャネルの電子状態が変わり、抵抗ピークがシフトする。このシフトの大きさから、電位の侵入長を導き出す ことを提案した。おおよそ 1.2nm の電位侵入長を導出し、グラファイト膜数枚で十分に電界を遮蔽することがわかった。

さらに、2 層グラフェンを用いて電界効果トランジスタを作製しその基礎評価と伝導機構の解明を試みた。バックゲート とトップゲートに印加する電圧を調整して大きな電界を印加すると、ピーク抵抗の増大が再現性よく観測された。これは、 ゲートによるキャリア濃度の変化では説明がつかない現象であり、電界制御バンドギャップとして説明できる。この解明の ために、温度変化を計測し、電界 1.5V/nm において約 0.15eV 程度のバンドギャップが存在していることを見出した。

グラファイトおよびグラフェンの磁気輸送と Dirac 電子

長田 俊人、今村 大樹、菅原滋 晴、中原 大介、内田 和人、鴻池 貴子 (東大物性研)

層状有機導体 α-(BEDT-TTF)₂I₃ においては 2 次元 Dirac 電子系の積層系の特徴である負の層間磁気抵抗が観測され る。グラフェンの多層系であるグラファイトにおいても、試料端で層間が短絡し巨大な面内磁気抵抗が混入しないよう処 理した試料を用いた実験により、同様の負の層間磁気抵抗が現れることを見出した。しかし負性磁気抵抗が Shubnikovde Haas(SdH)振動が見える量子極限以下の磁場でも現れる点は一見有機導体と異なる。グラファイトの層間結合は 40meV と非常に大きく 3 次元系の半金属として扱う必要がある。3 次元波数空間において、K 点近傍の電子バンドは放 物線的分散を持つが、H 点近傍の正孔バンドは 3 次元的にも Dirac 粒子的な線形分散を持つ点が重要である。正孔は Dirac 性のために電子が SdH 振動を示す低い磁場から量子極限状態に入るため、実験では Dirac 正孔の負性磁気抵抗に 電子の SdH 振動が重畳した磁気抵抗が観測されたと解釈できる。

グラフェン 10 層程度からなる超薄膜グラファイトを FET 素子に加工しゲート特性の磁場依存性を調べたところ、 FET 素子の抵抗が極大になるゲート電圧(電荷中性点)が磁場の増加に伴いほぼゼロから 10V 以上変化することを観測し た。層間伝導が磁場中で増大する負性磁気抵抗と同様、磁場中では層間分極応答が大きくなりゲート電場が侵入できる層 間遮蔽長が小さくなったと考えると、キャリアが界面に押し付けられた結果として電荷中性点のシフトを説明できると考 えられる。

グラフェン量子ドットにおける伝導度ゆらぎ (Conductance fluctuations in the magneto-resistance of the graphene quantum dot)

落合 勇一、本岡 正太郎、樋口 真也、青木 伸之、JPバード^b、DKフェリー^c (千葉大学、SUNYバッハロー校^b、アリゾナ州立大学^c)

キッシュグラファイトを用いて、マイクロ壁開法で得られた2層グラフェン片に、Ti/Auの2端子抵抗測定用電極を付けて、2端子量子ドットとしての低温磁気伝導の観測を行った。±8Tまでの磁気伝導実験を行ったところ、これまで半導体の量子細線や量子ドットにて観測されている、電子波量子干渉による伝導度ゆらぎが観測され、量子干渉領域の大きさを推定することができた。またこれらの磁気伝導には、フラクタル構造をもった磁気抵抗が観測されて、フラクタル次元の解析を行うことが可能である。また、2端子量子ドットのバックゲート電極を用いて、このフラクタル的な磁気伝導のゲート電圧依存性を観測した結果、下の図に示すような興味深い現象が確認された。伝導度ゆらぎの成分は、ゼロ磁場に対して対称であるが、準周期的にゆらいでいると考えられ、目立った大小ピークの間隔はほぼ周期であり、ゲート電圧に対してもほとんど不変となっている。今後はこのような現象に対するより詳しい、磁場並びに温度依存性に関して解析を行い、ディラック・ポイントとの関連性についての追及を行う。

Y.Ujiie, S.Motooka, T.Morimoto, N.Aoki, D.K.Ferry, J.P.Bird, and Y.Ochiai, J.Phys.:Condens.Matter 21, 382202, (2009).

深田 誠也、八木 隆多 (広島大院先端物質)

グラファイトの単原子層であるグラフェンは、高い易動度*を*示すことなどから新規半導体材料として期待されており、 様々な作製方法が模索されている。今回我々は、黒鉛層間化合物(GIC)が特定の層間を拡張するという性質を用いることで、 作製されるグラフェンの層数を制御できるのではないかと考えた。グラフェンの作製にあたり、バルク試料として twobulb 法や液相接触反応法により SbCl5をインターカラントとした SbCl5-GIC を作製し用いた。この GIC は、大気中で極め て安定であり、規則正しいステージを形成することから本研究に適している。次に、手法としては最も簡易で高品質なグラ フェンの作製方法として知られているスコッチテープ法を用いた。作製したグラフェンには、変色したものとほとんど通常 のグラフェンと同じ色調をもつものが見られ、前者は EPMA による元素分析から Sb と CI が剥離後も残存していることが 判明した。このことから、変色の少ないグラフェンに対し、光学顕微鏡と CCD カメラによるコントラスト解析を用いて GIC からなるグラフェンの層数を決定した。Fig.1 は、バルク試料を用いたときにできるグラフェン層数の分布を示した結 果である。3rd ステージと 4th ステージの GIC では、それぞれ 3 層と 4 層のグラフェンの作製効率が向上した。しかし、 2nd ステージから作製されたグラフェンにおいては、顕著な層数の偏りが見られなかった。次に、変色の少ないグラフェン と通常のグラフェンに関してゲート電圧依存性を測定し、結果を Fig. 2 に示した。この結果から GIC から作製されるグラ フェンの中には、通常のものと同程度の易動度と電荷不純物密度を示すものも存在することが分かった。

Fig. 1. 作製されるグラフェンの層数分布 縦軸:作製されたグラフェンの数 横軸:グリーンのコントラスト変化と対応する層数

Fig. 2.伝導度のゲート電圧依存性 上:2層グラフェン 下:3層グラフェン

グラフェンにおける弱局在の相図- "Z2-classification"

井村 健一郎 (東北大院理)

内因的、及び外因的スピン軌道相互作用の存在下で、グラフェンは特徴的な弱局在の相図を呈する[1]。とりわけ、局 在のクラスは、活性化された有効スピンの数 Ns を数えることでわかる。例えば、バレー間散乱はバレースピンを、ラ シュバ相互作用は、実スピンを活性化するが、それぞれの状況に応じて、「実効的な時間反転操作」を同定することがで きる。Kane-Mele 模型[2]には、副格子、バレー、実スピンの 3 つがあるので、Ns=1,2,3(副格子スピンは常に活性)。質 量項がない場合、Ns が偶数なら系は弱局在(WL)、奇数なら反局在(AL)である。質量項が実効的な時間反転対称性を破 ると、系はユニタリー(U)になる。

K.-I. Imura, Y. Kuramoto, K. Nomura, Phys. Rev. B 80, 085119 (2009).
 C.L. Kane, E.J. Mele, Phys. Rev. Lett. 95, 226801 (2005).

ディラック系における pn 接合-クライン・トンネルとスピン軌道相互作用

井村 健一郎 (東北大院理)

相対論的な量子力学において、ポテンシャル障壁があまりにも(静止質量を超えて)大きい時、逆に古典的には不可能な 領域に粒子がトンネルしていく。グラフェン系だと、これが完全透過になる(クライン・トンネル)。Z₂トポロジカル絶 縁体(Kane-Mele 模型[1])の場合、ラシュバ相互作用により実スピンを活性化してやると、これが完全反射に変わる。一 方、トポロジカル質量項とラシュバ相互作用がうまくバランスした場合には、再び完全透過が可能になる。このような輸 送特性は、トポロジカル質量項に特有のものであり、Z2 絶縁体を特徴づける指紋になると期待される[2]。

C.L. Kane, E.J. Mele, Phys. Rev. Lett. 95, 226801 (2005).
 A. Yamakage, K.-I. Imura, J. Cayssol, Y. Kuramoto, Europhys. Lett. 87, 47005 (2009).

正常金属-グラフェンナノリボン-正常金属接合系の電気伝導

吉岡 英生、望月 よね子 (奈良女子大学大学院人間文化研究科)

ジグザグ端を有するグラフェンナノリボン(以下 zigzag GNR と省略) は、フェルミエネルギー近傍の状態がジグザグ端付近に局在するため フェルミエネルギーにバンドギャップはないがドルーデの重みがゼロと なる特異なバンド構造を持つ系である。本研究では、zigzag GNR と正 常金属からなる接合系の電気伝導を調べ、幅の偶奇による電気伝導特性 の差異や zigzag GNR 領域が有限の長さであることに起因する新奇な 現象について理論的考察を行った。図 1 に我々が用いた模型を示す。 幅 N、長さ $2N_L$ の zigzag GNR の両端に正方格子で表された正常金属 が取り付けられている。そこでは、輸送特性に対するジグザグ端の効果 を調べるため、上端(破線)の電荷移動と下端(点線)の電荷移動をそれぞ

図1: 我々が考察する模型。正方格子で表された 二つの正常金属の間に zigzag GNR(幅N、長さ $2N_t$)が挟まれている。

れ *c×t* および *c'×t* (*t* は実線で描かれたボンドにおける電荷移動であり、正常金属領域と zigzag GNR 領域で同じである とする)とする。得られた結果は以下のとおりである。キャリアのドーピングがない場合(*E* = 0)には、幅 *N* が偶数の場 合コンダクタンス *g* は *N_L* の関数として、 N_L^{-2} で減少してゆく。一方、*N* が奇数の場合には、コンダクタンスの値は *N_L* ≫ 1 で1に近づく。また *N* ≥ 3 では、*N_L* ≫ 1 の場合のコンダクタンスの値は *N* が偶数の場合も奇数の場合も共に *c* と *c'* には依存しない。これは、*N* ≥ 3 の場合、ジグザグ端は *E* = 0、*N_L* ≫ 1 で輸送特性に寄与しないことを意味してい る。ただし、*N* = 2(ジグザグ端のみが存在する)の場合にはこの極限で *g* ≃ 3(*c*² + *c*²)/ N_L^2 となり、各々のジグザグ端が独 立に輸送現象に寄与している。さらに、*E* ≠ 0 の場合や、*N* が偶数の場合のチャネルのフィルタリングについて考察を 行った。

X線吸収分光を用いたナノグラフェンの電子状態に関する研究

¹木口 学、¹Jeseph Joly、¹石橋 悠、¹高橋 拓也、¹高井 和之、²Mauricio Terrones、³Mildred Dresselhaus、¹榎 敏明 (¹東京工業大学理工学研究科、²National Contact Point with the EU on Nanotechnology, ³Massachusetts Institute of Technology)

ナノサイズのグラフェン(ナノグラフェン)はグラフェンとしての物性に加え、ナノサイズに特有の物性発現が期待され 注目を集めている。特にその電子状態に注目すると、エッジに由来する電子状態がフェルミ準位近傍に発現し、さらにこ のエッジ状態が磁性に関連することが理論的に予想されている。これまでナノグラフェンの電子状態については、STM などを用いて研究がなされてきたが、不明な点も多い。本研究では X 線吸収分光を用い、ナノサイズのグラフェンに特 徴的な電子状態の解明を目的とした。

試料には直径 3nm、3 層程度のグラフェンからなる活性化炭素繊維(ACF)およびナノリボンを用いた。実験は高エネルギー加速器研究機構放射光施設 BL-7A で行った。

図には ACF 試料の X 線吸収スペクトルのフッ素のドープ 量依存性および比較のため HOPG の結果を示した。ACF 試 料では π*軌道の下に新たに P1 ピークが観測された。フッ 素ドープ量の増加に伴い、P1 ピーク強度が減少し、新たに P2 ピークが現れ、π*ピーク強度が減少する様子が観測され た。磁気測定との比較から、P1 がナノグラフェンのエッジ に、P2 がダングリングボンドに由来する電子状態に対応す るのではないかと考えている。

また、ナノリボンについても X 線吸収スペクトルを測定 し、ナノリボン加熱に伴う形状変化に対応したスペクトルの 変化が観測された。

図 ACF 試料のX線吸収スペクトルのフッ素ドープ量依存性。

以上、ACF やナノリボンなどのナノグラフェン試料について X 線吸収スペクトルを測定することで、ナノグラフェン に特徴的な電子状態を検出することに成功した。

α-(ET)₂I₃の高圧下 ¹³C NMR

清水 康弘 (名大高等研,名大院理)

分子性導体 α -(ET)₂I₃は、135 K で電荷秩序により絶縁化する擬二次元電子系である。1.1 GPa 以上の高圧下では、電 荷秩序が抑制され、Dirac corn 分散を有する唯一バルク物質となる。本研究では、Dirac 粒子特有の低エネルギー励起を 観測するために、¹³C NMR 測定を行った。これまでに田嶋らの磁気抵抗測定によって、 α -(ET)₂I₃ における zero mode Landau level が観測されているが、異常な角度依存磁気抵抗の振る舞いは理解されていない。一方、磁性に関しては、 低磁場ではビスマスやグラフェン同様に強い反磁性が期待されるが、強磁場の Landau 量子化状態への過程は明らかに なっていない。また、電子相関による絶縁化(Wigner crystallization)近傍で、低エネルギー励起がどのような変調を受 けるのか興味深い。

NMR は、高圧下でも静的および動的スピン帯磁率を高感度に測定できる点において優れている。 α -(ET)₂I₃において 1.5 と 1.75 GPa 下の ¹³C NMR 実験により、ナイトシフト *K* とスピン格子緩和率 1/*T*₁を測定した。80 K 以下で 1/*T*₁ は *T*⁴ に比例、*K* は exponential に近い鋭い減少を示し、反磁性は観測されなかった。これはギャップレスで期待される、 1/*T*₁~*T*³ および *K*~*T* とは異なり、スピン励起に有限のギャップが存在していることを示唆する結果である。磁場依存性 や角度依存性も観測されないことから、スピンギャップは Landau 量子化起源ではないことが分かった。Hall 係数から 見積もられたキャリア密度が非常に小さいことから推測して、高エネルギーのバンド間遷移もスピン励起に関与している と考えられる。

本研究は、小林晃人(名大高等研究院)、伊藤正行(名大院理)、山本浩史(理研)、高橋利宏(学習院大)各氏との共同研究である。

Zero modes, energy gap, and edge states of anisotropic honeycomb lattice in a magnetic field

江崎 健太 (東大物性研)

磁場中 honeycomb lattice におけるゼロモード、ギャップ、及びエッジ状態を、強束縛模型を用いて考察する。特に、 グラフェンの電子物性をより一般的に調べるため、跳び移り積分の異方性を導入して解析を行なう。まず、磁場中におけ るゼロモードの存在条件が解析的に求められる。その条件に基づき、弱磁場中ではグラフェンに対し少しの異方性を導入 するだけでエネルギーゼロまわりにギャップが開くことが見出される。そのギャップは、磁場に関して指数関数的に振る 舞う。この振る舞いは、2 つの Dirac zero mode 間のトンネリング効果として理解される。

また、系に境界がある場合のエッジ状態についても議論を行なう。とりわけ、弱磁場中においては、跳び移り積分の少 しの異方性により、エッジに局在するエネルギーゼロの状態数が急激に変化することが見出される。

K. Esaki, M. Sato, M. Kohmoto, B. I. Halperin, Phys. Rev. B 80, 125405 (2009).

DFT 計算によるグラフェンシート上の吸着子の電子構造と安定性

中田 謙吾 AB、石井 晃 AB (鳥取大院工 A、JST-CRESTB)

近年、実験技術の向上などに伴い、グラフェンを初めとした様々な二次元物質が作られ、実験・理論のみならず幅広く 応用に適応されている。例えば、グラファイト基板上に GaN を成長させる事による青色 LED の成功など、二次元物質 上の三次元化合物半導体に注目が集められており、その成長メカニズムの解明が注目されている。本研究では、これら成 長機構の理解とその物性・機能予想の解明の足がかりとして、計算科学的な手法、特に密度汎関数法を用いた第一原理的 な電子構造計算から、二次元物質であるグラフェンシート上への原子吸着とその安定性について議論を行った。具体的に は、3 倍周期のグラフェンシート上に3 つの吸着サイトを仮定し、様々な原子を吸着させたときの吸着エネルギーを求め、 系統的に安定性について議論をした。吸着させた原子は、アルカリ金属や遷移金属など、原子番号1から 83 まで周期律 表ほぼ全てをカバーした計算を行った。またその際に電荷密度解析により、グラフェンと吸着子間の電荷移動を計算によ り求めた。その結果、吸着サイト及びその傾向に関しては、非金属元素は B サイトへ吸着し、遷移金属元素は H6 サイ トへ吸着する傾向を示した。また、発表においてはいくつかの元素について詳細に電子状態を解析し報告した。このとき、 第二周期の非金属元素においては、結合エネルギーの強さの傾向は、その s-p 混成の強さの傾向として電荷の移動と関連 づけて理解できることを示し、第四周期の遷移金属元素においては、p-d 混成の強さの傾向として、*E*F 近傍のバンドへ の電荷の移動と d バンド幅の変化と移動に関連づけて理解できることを示した。

強磁場におけるグラフェンのスピン分裂

中原 大介、長田 俊人、内田 和人、鴻池 貴子 (東大物性研)

グラフェンの電子状態の broadening 幅の評価と局小化は、物性研究や応用上重要であるが、これをスピン分裂幅 を基準にとって調べた。単層グラフェン FET 素子を作製し、ソース-ドレイン抵抗のゲート電圧依存性を種々の磁場 方位・磁場強度で測定した。磁場絶対値でスピン分裂を、垂直磁場成分で Landau 量子化を、ゲート電圧で Fermi 準位を制御した。

10T までの垂直磁場下では、単層グラフェン特有の半整数量子 Hall 効果を伴う明瞭な Shubnikov-de Haas (SdH) 振動を観測したが、電荷中性点における SdH ピークにスピン分裂を示唆する微細構造は見られなかった。SdH 振動から求めた局所的緩和時間は 0.1ps のオーダーである。Landau 量子化が起きない平行磁場下ではスピン分裂の効果のみ抽出できるが、電荷中性点近傍でのみ磁気抵抗が現れることが観測されたものの、スピン分裂から予想される電荷中性点の抵抗ピークのぼけやキンク構造は観測されなかった。さらにスピン分裂を大きくするため 20T までのパルス強磁場を用いて平行磁場の実験を行ったが、明瞭なスピン分裂は観測されなかった。これは Dirac コーン状態の broadening 幅が 20T におけるスピン分裂(約 2.3meV)より十分大きい(緩和時間が 0.28ps より十分短い) ことを示す。

基板上グラフェンの電子状態は、電子-正孔パドル(ripple)による Dirac 点の空間変動によって大きな broadening を 示すと考えられている。今回の結果は空間変動によるボケが局所的準位ボケより大きいことを示唆しており、電子-正孔 パドルによる説明を支持する結果であると考えられる。

グラフェンの作成と走査トンネル顕微鏡による評価の試み

江口 豊明 (東京大学・物性研究所)

単層のグラファイト膜であるグラフェンは、その特異な電気的熱的特性からナノデバイスへの応用が期待される物質で ある。走査トンネル顕微鏡(STM)による研究は、これまで、加熱された SiC 上に形成されるものや、金属上に生成され たものなどが報告されているが、キャリアのタイプ・密度制御を可能とする絶縁体上のグラフェンの観察は皆無である。 本研究では、繰り返し劈開により作製したグラフェンをシリコン酸化膜上に乗せ、STM 観察を試みた。

テープを用いてキッシュグラファイト(もしくは HOPG)を数十回劈開することにより作製された薄膜グラファイトを 酸化膜上に乗せ、まずは光学顕微鏡によりその干渉色観察から単層と思われるものを選び出した。さらに、原子間力顕微 鏡による高さ測定や、顕微ラマン分光による振動モード測定から、単層グラフェンであることを確認した。

絶縁体基板表面上に作製したグラフェン試料を STM 観察するためには、試料にバイアス電圧を印加してトンネル電流を 検出し、かつ超高真空内で探針直下に試料を置くためにはマーカー等を用いて探針を試料位置まで誘導する必要がある。 これらの目的のために電子線リソグラフィーを用いて電極およびガイド用マーカーを作製した。その結果、超高真空 (~10⁻⁹ Pa)・低温(~7K)環境下で、グラフェン試料位置において STM 観察することに成功した。しかしながら、グラ フェン表面の汚染が激しく、原子分解能像を得るには至らなかった。汚染要因としてはリソグラフィーに用いているレジ スト膜が残存していることが考えられ、これらを除去し清浄表面を得ることが今後の課題である。

2層グラフェンにおける電気伝導の電界制御とデバイス応用

宮崎 久生 AE、 家越 一仁 ABCE、S.L. LiA、神田 晶申 DE (物材機構 A、 産総研 B、 理研 C、 筑波大数理物質 D、 CRESTE)

グラフェンをスイッチングトランジスタとして活用するためには、OFF 抵抗の増大が不可欠であり、そのためにはバ ンドギャップの導入が有効である。我々は、2 層グラフェンに 2 つのゲート電極(Si 基板によるバックゲートと Al 電極 によるトップゲート)によって垂直電場を印加することによってバンドギャップを実現した。そのような 2 層グラフェン をチャネルに用いた FET において、バンドギャッ プの無いときに 10 程度であった ON-OFF 比は、バンドギャップの 導入により最大で約 300 まで増大した(*T* = 77 K)。OFF 状態における伝導メカニズムを調べるため、OFF 抵抗の温度依 存性を測定した。高温側(100-200 K)の温度依存性より 1.5 V/nm の電場下で 0.15 eV のバンドギャップが誘起されてい ることを確認した。低温(*T* <~ 100 K)における温度依存性は variable range hopping のモデルに従い、不純物準位を介 した伝導が残っていることを示唆する。また、このような 2 層グラフェントランジスタを 2 つ用いたインバーターを試 作し、バンドギャップの増大と共にゲインが大きくなることを見出した。

Tunable voltage gain in dual-gate bilayer graphene inverter

 黎 松林(Songlin Li)^A、宮崎 久生 ^{AE}、神田 晶申 ^{DE}、塚越 一仁 ^{ABCE} (物材機構 ^A、産総研 ^B、理研 ^c、筑波大数理物質 ^D, CREST^E)

Graphene is an attractive material for nanoelectronics due to its high carrier mobility and the possibility of largearea fabrication. After the demonstration of high-performance field-effect transistors (FETs), it is interesting to fabricate various digital logic units and fulfill the logic operations. However, due to the metallic nature, the performance of graphene devices is still low. In Ref. 1 (Traversi e al, Appl. Phys. Lett., 94 (2009) 223312), for example, the maximum voltage gain reaches only 0.044 in a single-gate monolayer graphene inverter. Here we report the electrical characteristics in dual-gate bilayer graphene (BLG) inverters. In contrast to the single-gate inverters¹, the top gate (TG) is used as the input terminal and the bottom gate (BG) serves as a specific terminal to apply the perpendicular field to tune the band structure in our devices. The dependence of voltage gain on both the BG and drain biases was systematically measured. Enhanced voltage gains, with a maximum value of 3.2, were demonstrated in the dual-gate BLG inverters. In particular, a complementary p- and n-type FET pairs are fulfilled by only adjusting drain voltage without an additional electrical annealing process¹.

Gravitational anomaly and quantized thermal transport in graphene-derived insulators

田中 秋広(物質·材料研究機構)

グラフェンのディラック点にギャップを開けて形成される様々な絶縁体のトポロジカルな(即ちエッジステートが担う 量子化された)電磁応答/熱輸送応答を調べた。有限な応答の有無はギャップをもたらす摂動の対称性で決まり、Haldane 模型における整数量子ホール効果、Kane-Mele 模型におけるスピン量子ホール効果はその顕著な例といえる。一方、通 常 non-topological と見なされる boron-nitride 型や Kekule 型絶縁体においても ripple ゲージ場や曲率との結合により 非自明なトポロジカル応答(valley 量子ホール効果やその逆応答等)を示し得ることが分かった。更に、計量の微小変化 に応答して流れるエネルギー流は Haldane 模型の場合にはいわゆる重力 Chern-Simons 作用により記述され(これは エッジステートのトレースアノマリーを誘起する)、系は量子化されたホール熱伝導度(Leduc-Righi 伝導度)を示す。こ の結果は等価なスピン系の熱ホール応答にも拡張できると考えられる。

ビスマス薄膜系における量子スピンホール効果

<u>和田 真樹[1]</u>、村上 修一[12]、F. Freimuth^[3]、G. Bihlmayer^[3] (回東工大院理工、^[2]さきがけーJST、^[3]Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich)

二次元量子スピンホール系は無限平面系では絶縁体でありながら、時間反転対称な二状態からなるギャップレスなエッジ状態がスピン伝導を担う。このエッジ状態はトポロジカルに保護され、系は Z₂トポロジカルナンバーによって特徴付けられる。

近年、新しい二次元トポロジカル絶縁体の候補として Bi(111)と Bi{012}の二種類のビスマス薄膜系が注目を集めている。そこで本発表では両薄膜のタイトバインディングモデルから Z₂トポロジカルナンバーを計算し、前者は量子スピンホール相に、後者は絶縁相にあることを示した。またリボン状の系でのバンド構造を計算し、ギャップレスなエッジ状態が存在してトポロジカルナンバーの結果と符合すること、およびその状態がスピン流を運ぶことを示した。

さらに前者のエッジ状態を解析することにより、現実的な系におけるエッジ状態の発現の様子を定性的に論じた。一般 に不純物散乱がある系においても、エッジ状態はトポロジカルに保護されており安定である。加えてビスマス薄膜系では、 その特徴的なバンド構造の帰結としてエッジ状態の侵入長が極めて短いことを示した。これはエッジ状態の観測・操作が 従来の系よりも容易に行えるという実験的な有用性を示唆する。

ISSP ワークショップ

「新励起源による表面界面ダイナミクス研究の展望」

日時:2009年6月19日(金) 場所:東京大学物性研究所本館6階大講義室

提案者:松本	吉泰	(京大院理)
宗像	利明	(阪大院理)
奥山	弘	(京大院理)
小森	文夫	(東大物性研)
吉信	淳	(東大物性研)

表面・界面における電荷移動・輸送、化学反応のダイナミクスには、さまざまな励起状態が関与している。そして、電 子間散乱や電子と原子核運動の結合が関わる励起状態の生起・失活のような非断熱過程を微視的に解明することが、その 理解には不可欠となっている。近年、高輝度放射光や超短パルスレーザーの発達に伴い、さまざまな時間領域の高度な分 光法が開発され、それが表面・界面におけるダイナミックス研究に応用されはじめている。また、理論的にも第一原理計 算における固液界面の記述の定式化や励起状態への展開などの飛躍的な進歩がある。このように、現在、表面・界面にお けるダイナミックスの研究を理論・実験の両面から集中的に取り組み、非断熱過程をより統一的に理解できる段階となっ てきた。そして、このような微視的理解の進展は単に学術的な成果だけでなく、それを応用した光触媒、太陽電池、有機 デバイスなどの開発にも大きく波及すると考えられる。そこで、本研究会では、表面・界面における励起状態に関心を持 つ研究者が集まり、表面界面ダイナミクス研究の将来を展望することを目的として研究会を開催した。以下のプログラム にそって 15 件の講演があり、40 名あまりの参加者が活発な討論を行い、今後の研究の方向性について有意義な議論がで きた。

プログラム

09:20-09:30	松本	吉泰	(京大院理):はじめに
09:30-09:50	渡邊	一也	(京大院理):超高速非線形分光による表面吸着種のダイナミクス
09:50-10:10	上羽	弘	(富山大院理工):フェムト秒レーザ励起による表面吸着子ダイナミックスの理論
10:10-10:30	金	有洙	(理研): State-resolved study of molecular diffusion
10:30-10:50	高岡	毅	(東北大多元研):超音速分子線を用いた表面吸着分子にはたらく摩擦の研究
10:50-11:00	<休憩>	>	
11:00-11:15	松田	巖	(物性研):高輝度軟X線による光電子振動分光の時間分解測定に向けて
11:15-11:30	吉信	淳	(物性研):吸着過程における分子の過渡的表面拡散
11:30-11:50	堂免	一成	(東大院工):水を全分解するエネルギー変換型光触媒の開発
<昼食>			
13:30-13:50	杉野	修	(物性研):励起状態ダイナミクスの第一原理計算に向けて

13:50-14:10 大澤 雅僾 (北大触媒セ): 赤外バルス光による固液界面の緩和タイナミクスの追	「和タイナミクスの追跡」
---	--------------

14:10-14:30 近藤 寛(慶応大理工): 放射光内殻分光による界面でのプロトン移動および電荷移動の研究

14:30-14:50	奥山	弘	(京大院理):トンネル電子に誘起されたプロトンダイナミクス
14:50-15:10	小森	文夫	(物性研): Ge(001)表面におけるホール局在によるダイマー振動励起

15:10-15:20 <休憩>

- 15:20-15:40 宗像 利明(阪大院理):吸着分子の電子励起状態ダイナミクス
- 15:40-16:00 解良 聡 (千葉大院融合): 有機半導体分子薄膜の電荷ダイナミクス
- 16:00-16:20 山下 晃一 (東大院工):表面・界面の電子状態と電子輸送の理論

16:20-16:30 小森 文夫(物性研):まとめ

ISSP ワークショップ 「界面パイ電子系における新現象と物理」

"Physics and New Phenomena of π -electronic Interfaces"

日時:2009年8月10日(月)~2009年8月12日(水) 場所:東京大学物性研究所本館6階大講義室(A632)

提案者:上野 信雄(千葉大融合) 田島 裕之(東大物性研) 長谷川 達生(産総研) 竹谷 純一(阪大理)

近年、有機パイ電子系材料やナノカーボン材料では、デバイス化技術の急速な進展とともに、表面や界面の電子現象を 統一的に理解するための基盤が形成されつつある。本ワークショップでは、パイ電子系界面固有の性質をいかに抽出し、 その物理を理解するのかをテーマとして、高秩序化した界面の構築と、表面・界面の多彩な計測・分光測定技術を適用す る最新のトピックスについて議論した。

ワークショップは千葉大 GCOE、産総研、阪大と共同で開催され、外国人 34 名を含む延べ 160 名の研究者が参加した。発表はすべて英語で行われた。外国人 7 名を含む第一線の研究者 28 名による依頼・招待講演、18 件のポスター セッション(うち外国人 5 名)では、いずれも活発な議論が行われた。

当該分野は、急速に成長し続ける新しい分野であり、参加している研究者のバックグラウンドも、表面科学、デバイス 物理、有機固体物性等、多種多様である。新しい概念、研究成果が常時でており、exciting な分野であることを改めて再 確認した。

最後に、海外から本ワークショップのためにわざわざ時間を割いて参加していただいた 5 人の招待講演者、 V. Podzorov(Rutgers University)、C. Daniel Frisbie(University of Minnesota)、Stefan Tautz(Forschungszentrum Jülich)、Frank Schreiber(Universitaet Tuebingen)、Chen Wei(National University of Singapore)の諸氏(敬称略)に、 この場を借りて感謝する。(文責 田島)

プログラム

1日目 8月10日(月)

[Chair: T. Hasegawa]

13:00 Opening (N. Ueno, Chiba Univ.)

13:10 C. D. Frisbie (Univ. of Minnesota)

"Scanning Probe Microscopy of Ultrathin Pentacene Films: Epitaxy, Defects, and Energetic Disorder"

13:45 M. Nakamura (Chiba Univ.) "Relationship between HOMO-Band and Crystal Structures in Pentacene Polycrystalline Thin-Films"

Coffee Break (14:10 - 14:40)

[Chair: J. Takeya]

14:40 S. Kuroda (Nagoya Univ.)

"ESR Observation of Field-Induced Charge Carriers in Organic Transistors"

15:05 T. Hasegawa (AIST) "ESR Study on Charge Dynamics and Distribution of Localized States in Organic Transistors" 15:30 A. S. Mishchenko (RIKEN)

"Distribution of Localized States from the Fine Analyses of Electron Spin Resonance Spectra: Basics of the Method"

Coffee Break (15:55 - 16:25)

[Chair: M. Nakamura]

- 16:25 J. Takeya (Osaka Univ.) "Hall Effect in Field-Effect Transistors of Thin-Film and Single-Crystal Organic Semiconductors"
- 16:50 H. Okamoto (Univ. of Tokyo) "Ultrafast Exciton and Carrier Dynamics in a Rubrene Single Crystal"

Coffee Break (17:15 – 17:30)

17:30 – 18:30 Poster Preview

2日目 8月11日 (火)

[Chair: S. Kuroda]

- 9:00 S. Tautz (Forschung. Juelich) "Highly Ordered Molecular Adsorbate Layers on Metal Surfaces: from Surface Science to Molecular Electronics"
- 9:35 N. Takagi (Univ. of Tokyo) "Spin state, magnetic anisotropy and Kondo effect: Iron(II) phthalocyanine on metal substrates"
- 10:00 Y. Morikawa (Osaka Univ.) "Theoretical Study of Interfacial Dipoles at Metal/Organic Interfaces"

Coffee Break (10:25 – 10:55)

[Chair: Y. Kobozono]

- 10:55 Y. Iwasa (Tohoku Univ.) "Development of Liquid Gated Transistors"
- 11:20 H. M. Yamamoto (RIKEN)
 "Field Effect Transistor Based on an Organic Mott-Insulator"
 11:45 S. Ishibashi (AIST)
 - "Computational Approach to Exotic Electronic Properties at Interfaces"

Lunch Break (12:10 - 13:20)

[Chair: T. Mori]

13:20	M. Hiramoto (IMS)
	"Organic p-i-n Solar Cells Incorporating Seven-nine Purified Fullerene"
13:45	H. Tajima (Univ. of Tokyo)
	"Magnetophotocurrent Effect in Organic Photovoltaic Devices"
14:10	T. Takenobu (Tohoku Univ.)
	"Interface Control and Light Emission"
	Coffee Break (14:35 – 15:05)

[Chair: Y. Iwasa]

15:05 Y. Kubozono (Okayama Univ.)

"Fabrication of High-Performance Field-Effect Transistors with Aromatic Hydrocarbon Molecules by Interface Control"

15:30 T. Mori (TITEC)

"High-Resolution Transparent Carbon Electrodes for Organic Field-Effect Transistors Produced by Solution Method and Laser Sintering Method and Laser Sintering"

Coffee Break (15:55 – 16:25)

[Chair: Y. Morikawa]

- 16:25 F. Schreiber (Univ. Tuebingen)
 "High-Resolution Studies of Organic Adsorbates on Metal Crystals using X-ray Standing Waves: Molecular Distortions and their Implications for Organic Electronics"
- 17:00 W. Chen (Nat. Univ. of Singapore) "STM and Synchrotron Studies of the Molecule-Substrate Interface"
- 17:35 N. Ueno (Chiba Univ.)

"First Principles Measurement of Hole Mobility in Organic Semiconductors with UPS: Bridging Electronic States and Electrical Property"

18:10 – 20:00 Banquet

3日目 8月12日 (水)

[Chair: N. Ueno]

9:00 V. Podzorov (Rutgers Univ.)

"Self-Assembled Monolayers on Organic Semiconductors: Characterization, Growth Mechanism, Transport and Optical Properties"

- 9:35 K. Tajima (Univ. of Tokyo) "Enhanced Charge Transports in Polymer Thin Film Transistors Prepared by Contact Film Transfer Method"
- 10:00 K. Saiki (Univ. of Tokyo) "Control of Organic Film Growth by Physical and Chemical Modification of Substrates"

Coffee Break (10:25 - 10:55)

[Chair: K. Saiki]

- 10:55 Y. Kim (RIKEN) "Electronic Structure of a Carbon Nanotube on Various Electrode Surfaces"
- 11:20 M. Shiraishi (Osaka Univ.)

"Transport and Gate-induced Modulation of Pure Spin Current in Single- and Multi-layer Graphene"

11:45 K. Kusakabe (Osaka Univ.)

"A theoretical Analysis on Reaction Processes of Carbon Nano-structures with Metal Oxides"

- 12:10 K. Tsukagoshi (MANA-NIMS)
 - "Band-gap Modulation in Bilayer Graphene"
- 12:35 Closing (H. Tajima, ISSP)

ポスターセッション

1. T. Uemura (Osaka Univ.)

"Monolithic Complementary Inverters Based on Intrinsic Semiconductors of Organic Single Crystals"

2. H. Yamane (IMS)

"Impact of Geometric Structure on Interface Energetics and Electronic Band Dispersion in Thin Films of Pentacene"

3. J. Inoue (TITEC)

"Organic Field-Effect Transistors with Electrodes Produced from Organic Semiconductors by Laser Irradiation"

4. S. Tao (Univ. of Tokyo)

"Temperature and Excitation Energy Dependence of Ultrafast Dynamics of Photoexcited States in Rubrene Single Crystals"

5. S. Shimizu (Univ. of Tokyo)

"Mediating Role of Magnesium Substrate in n-Type Doping of Tetrathianaphthacene (TTN) to Tris-(8hydroxyquinoline) aluminum (Alq3)"

- K. Mukai (Univ. of Tokyo)
 "The Interaction between F₄-TCNQ and the 2-Methylpropene Terminated Si(100) Surface"
- Y. Kanamori (Univ. of Tokyo)
 "Fabrication of Highly Orientated α-Sexithiophene Grains on Artificially Patterned Substrates: Graphoepitaxy"
- 8. S. Obata (Univ. of Tokyo) "Electrical Properties of Chemically Prepared Graphene"
- Q. Wei (Univ. of Tokyo)
 "Surface-Segregated Monolayers: A New Type of Ordered Monolayer for Surface Modification of Organic Semiconductors"
- S. Kera (Chiba Univ.)
 "Electronic states and spin configuration of Mn-phthalocyanine films"
- T. Nishi (Chiba Univ.)
 "Electronic Structure of TNAP on Bismuth (001)"
- 12. S. Duhm (Chiba Univ.)

"Orientation Dependent Ionization Energy of Organic Thin Films: The Role of Intramolecular Polar Bonds"

- S. Hosoumi (Chiba Univ.)
 "Hole-vibration coupling in an oriented thin film of Perfluoropentacene"
- 14. S. Haas (AIST) "High-Performance Dinaphthothienothiophene (DNTT) Single-Crystal Field-Effect Transistors"
- 15. S. Haas (AIST)

"Charge and Field Modulation Spectroscopy on Organic Thin-Film Transistors"

16. H. Matsui (AIST)

"Spatially-Resolved Frequency Response Analyses on Organic Thin-Film Transistors"

17. H. Yuan (Tohoku Univ.)

"Liquid Gated ZnO Transistor and Its Polarity Selective Operation"

J. T. Ye (Tohoku Univ.)
 "Inducing Superconductivity in Layered Material Based Electronic Double Layer Field Effect Transistors"

物性研究所談話会

標題:Qu-transitions. Phase transitions in the quantum era. (量子時代の相転移) 日時:2009年11月12日(木) 午後4時~ 場所:物性研究所本館6階 大講義室 (A632) 講師:Prof. Piers Coleman 所属:Rutgers University, New Jersey, USA 要旨:

Physicists are often so awestruck by the lofty achievements of the past, we end up thinking all the big stuff is done, which blinds us to the revolutions ahead. We are still firmly in the throws of the quantum revolution that began a hundred years ago. Quantum gravity, quantum computers, qu-bits and quantum phase transitions, are manifestations of this ongoing revolution. Nowhere is this more so, than in the evolution of our understanding of the collective properties of quantum matter.

Fifty years ago, physicists were profoundly shaken by the discovery of universal power-law correlations at classical second-order phase transitions. Today, interest has shifted to Quantum Phase Transitions: phase transitions at absolute zero driven by the violent jiggling of quantum zero-point motion. Quantum, or Qu-transitions have been observed in ferromagnets, helium-3, ferro-electrics, heavy electron and high temperature superconductors. Unlike its classical counterpart, a quantum critical point is a kind of "black hole" in the materials phase diagram: a singularity at absolute zero that profoundly influences wide swaths of the material phase diagram at finite temperature.

I'll talk about some of the novel ideas in this field including "avoided criticality" - the idea that high temperature superconductivity nucleates about quantum critical points - and the growing indications that electron quasiparticles break up at a quantum critical point.

本談話会は東京大学 G-COE プログラム-未来を拓く物理科学結集教育研究拠点-の G-COE セミナーとの共催となります。

標題:STM単一分子分光による表面分子磁性の探索 日時:2009年12月24日(木) 午後4時~ 場所:物性研究所本館6階大講義室(A632) 講師:高木 紀明 所属:東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系 要旨:

走査トンネル顕微鏡(STM)は、原子レベルでの構造観察だけでなく、トンネル分光(STS)による電子状態の計測やトンネル電子の非弾性過程を利用して振動スペクトルやゼーマン分裂の計測ができることから、表面・界面を中心に物質科学研究では必須のツールとなっている。

STM 非弾性トンネル分光(IETS)について簡単に紹介した後、「固体表面において磁性分子の磁気的性質はどうなるか?」という素朴な疑問から始められた最近の研究について述べる。金属表面に吸着した鉄フタロシアニン分子について、「吸着による磁気異方性のスイッチング」と「2次元近藤格子とその電子相」、の2つ話題を現在進行中の結果を含めて紹介する。

標題:超伝導電気回路におけるマイクロ波量子光学

日時:2010年1月28日(木) 午後4時~

場所:物性研究所本館6階大講義室(A632)

講師:中村 泰信

所属:日本電気株式会社ナノエレクトロニクス研究所

要旨:

超伝導電気回路中では、超伝導ギャップのために低エネルギー励起による散逸が抑制され、電磁気的励起モードの量子 化が顕在する。高い Q 値を持つ線形共振回路がその一例である。一方、ジョセフソン効果のもたらす大きな非線形性を 利用することにより、非調和的な励起モードを実現することもできる。超伝導量子ビットとして用いられる量子 2 準位 系はその代表例であり、これを人工原子とみなすこともできる。この人工原子、共振回路、さらには超伝導伝送線路中の 伝播モードの組み合わせを用いて、マイクロ波領域での量子光学実験が可能となる。人工原子の大きな双極子能率と超伝 導回路における電磁場モードの空間的閉じ込めのために両者の結合が非常に大きくなり、従来の原子を用いた量子光学実 験では困難であった現象が次々と実現している。本講演では最近の実験例を紹介する。

物性研究所セミナー

標題:理論セミナー:What is the Haldane gap phase? 日時:2009年10月2日(金) 午後4時~午後5時 場所:物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615) 講師:押川 正毅 所属:東京大学物性研究所 要旨:

Although there is no local order parameter for the Haldane gap phase, it is separated from a trivial disordered phase by a quantum phase transition. We attribute this to a topological order in the Haldane gap phase.

However, the question still remains: what exactly is the topological order? First, we revisit existing characterizations of the topological order in terms of a hidden Z $_2$ x Z $_2$ symmetry breaking, and of edge states. We find a fundamental difference between odd- and even-S Haldane gap phases.

Furthermore, we introduce a novel characterization of the topological order in terms of an intrinsic parity with respect to inversion. Each characterization shows the robustness of the topological order in the presence of an appropriate symmetry. In particular, the "intrinsic parity" protects the topological order as long as the system is invariant under inversion about a center of bond, even when the hidden symmetry breaking and edge states fail to characterize the Haldane gap phase.

Reference:

F. Pollmann, E. Berg, A. M. Turner, and M. O., arXiv:0909.4059 http://jp.arxiv.org/abs/0909.4059

標題:放射光セミナー:Surface Magnon Studies by Spin-Polarized Electron Energy Loss Spectroscopy 日時:2009年10月5日(月) 午後1時30分~午後2時30分 場所:物性研究所本館6階 大講義室(A632) 講師:Prof. J. Kirschner 所属:Max-Planck-Institute für Mikrostrukturphysik, Germany

要旨:

The spin wave spectra of surfaces and ultrathin films in the range of large wave vectors and large energies are largely unexplored. Neither Brillouin light scattering can be used because of insufficient wave vector of the photons or too low scattering cross section of the neutrons, respectively. By contrast Spin-Polarized Electron Energy Loss Spectroscopy (SPEELS) has high surface sensitivity and the scattered electrons can have large energy loss and large wave vector transfer.

The angle resolved scattered intensity of an incident electron beam with spin polarization parallel and antiparallel to the magnetization of the ferromagnetic film is measured. We show that spin wave loss peaks can be observed with SPEELS up to the surface Brillouin zone boundary. They are visible as pronounced peaks in the intensity spectrum for incident minority spin electrons. This is demonstrated for an 8 monolayer thick Co film on Cu(001). Te measured spin wave energy at the zone boundary is about 270meV. The spin wave loss peaks are strongly damped at large energies by the Stoner excitation continuum. Majority spin electrons absorb magnons and therefore lead to energy gain peaks in the spectrum.

標題:国際超強磁場科学研究施設セミナー 日時:2009年10月6日(火) 午前10時~午後0時 場所:物性研究所本館6階 第2セミナー室 (A612) 講師:Prof. Hark Hoe Tan 所属:The Australian National University 要旨: Semiconductor Quantum Dots and Nanowires for Optoelectronic Applications

標題:中性子セミナー:Recent topics of glasses and supercooled liquids 日時:2009年10月16日(金) 午後4時~午後5時50分 場所:物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615) 要旨: Program 16:00-16:50 Austen C. Angell (Arizona State University) A 'big picture' for the thermodynamics of molecular and network glasses

16:50-17:20

K. Ishii and H. Nakayama (Gakushuin University) Liquid-liquid structural relaxation in supercooled liquid state of ethylbenzene and related compounds.

17:20-17:50

O. Yamamuro and S. Tatsumi (ISSP, University of Tokyo) Glass transitions and low-energy excitations of vapor-deposited simple molecular glasses

標題:理論セミナー:A commutative algebra on degenerate CP¹ and Macdonald polynomials 日時:2009年10月23日(金) 午後4時~午後5時 場所:物性研究所本館6階 第5セミナー室(A615) 講師:白石 潤一 所属:東京大学大学院数理科学研究科 要旨:

We introduce a unital associative algebra A over degenerate CP^1. We show that A is a commutative algebra and whose Poincare series is given by the number of partitions. Thereby we can regard A as a smooth degeneration limit of the elliptic algebra introduced by one of the authors and Odesskii. Then we study the commutative family of the Macdonald difference operators acting on the space of symmetric functions. A canonical basis is proposed for this family by using A and the Heisenberg representation of the commutative family. It is found that the Ding-Iohara algebra provides us with an algebraic framework for the free field construction. An elliptic deformation of our construction is discussed, showing connections with the Drinfeld quasi-Hopf twisting a la Babelon Bernard Billey, the Ruijsenaars difference operator and the operator $M(q,t_1,t_2)$ of Okounkov-Pandharipande. 標題:理論インフォーマルセミナー: Monte Carlo approach to transport and non-equilibrium problems 日時:2009年10月29日(木) 午後4時~午後5時 場所:物性研究所本館6階第3セミナー室(A613) 講師: Philipp Werner 所属: Institute for Theoretical Physics, ETH 要旨:

I will discuss the implementation of the diagrammatic Monte Carlo technique on the L-shaped Keldysh contour. This machinery will be applied to quantum dots and used as an impurity solver in non-equilibrium DMFT calculations. Specifically, I will present results on the current-voltage characteristics of the Anderson impurity model and on the relaxation dynamics of the Hubbard model after a sudden change in the interaction strength.

標題:理論インフォーマルセミナー: Electron Polarizability of Crystalline Solids in Quantizing Magnetic Fields and Topological Gap Numbers 日時: 2009 年 11 月 4 日(水) 午後 4 時~午後 5 時

場所:物性研究所本館6階第5セミナー室(A615)

講師:Thibaut Jonckheere

所属: Centre de Physique Theorique, CNRS, France

要旨:

I will present a theory of the static electron polarizability of crystals whose energy spectrum is modified by quantizing magnetic fields. I will show that the polarizability is strongly affected by nondissipative Hall currents induced by the presence of crossed electric and magnetic fields: these can even change its sign. I will illustrate the results in detail for a two-dimensional square lattice. A important consequence is that the polarizability and the Hall conductivity are, respectively, linked to the two topological quantum numbers entering the so-called Diophantine equation. These numbers could in principle be detected in actual experiments. Work done in collaboration with P. Streda and T. Martin.

Reference : P. Streda, T. Jonckheere and T. Martin, Phys. Rev. Lett. 100, 146804 (2008) http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.146804

標題:新物質セミナー:High-field Electron Spin Resonance in Quantum Spin Systems 日時:2009年11月5日(木) 午後3時~午後4時 場所:物性研究所本館6階第5セミナー室(A615) 講師:Dr. Sergei Zvyagin 所属:Dresden High Magnetic Field Laboratory (HLD) Research Center, Dresden 要旨:

In this presentation I will review our recent results obtained in low-dimensional and frustrated spin systems using high-field Electron Spin Resonance (ESR) at the National High Magnetic Laboratory, Tallahassee, USA, and the Dresden High Magnetic Field Laboratory, Germany. It includes the observation of the sine-Gordon behaviour of magnetic excitations in quantum spin-chain material Cu-PM, observation of the two-magnon bound states in the new candidate for the magnon Bose-Einstein condensation (BEC) NiCl₂-4SC(NH₂)₂ (known as DTN), antiferromagnetic resonance in the frustrated hexagonal multiferroic material YMnO₃, observation of the excitation spectrum in the spin-ladder material BPCB and others. The talk will give also a brief introduction into the recent development of the high-field ESR program at the High Magnetic Field Laboratory in Dresden.

```
標題:理論セミナー:Duality Analysis for Spin Glasses
日時:2009年11月6日(金) 午後4時~午後5時
場所:物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)
講師:大関 真之
所属:東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻
要旨:
```

We review recent results on spin glasses using duality arguments. Spin glasses have a poorly-understood frozen phase that can be seen as "ordered in time but disordered in space". Although spin glasses are relatively well understood on a mean-field level, there is little consensus on the nature of the spin-glass state in finite dimensions and real materials. Investigations for spin glasses in finite dimensions rely mainly on numerical studies because there are few analytical methods that work in finite space dimensions. A step towards a deeper understanding of spin glasses is to develop analytical methods that allow one to obtain exact or very precise estimates for characteristic quantities, such as critical parameters to support and judge the reliability of numerical techniques. Recently, we developed a duality analysis using renormalization group techniques, which is known to deliver the exact location of the critical point for non-random spin systems.

In this talk I review recent results central to the study of spin glasses using duality arguments. First, we determine the precise location of the multicritical point as a benchmark of the method. Furthermore, we obtain the first analytical evidence for the absence of a finite-temperature spin-glasses transition in two-dimensional systems. Second, we estimate the slope of the phase boundary which represents the decay of the ferromagnetic phase due to randomness. This shows that the general result by Eytan Domany on the slope of the phase boundary [J. Phys. C 12, L119 (1979)], commonly used as a benchmark for numerical approximations, is not universal.

```
標題:放射光セミナー: 放射光を使った表面・界面反応の研究の現状と今後の展開
日時:2009年11月9日(月) 午後2時~午後3時
場所:物性研究所本館6階 第4セミナー室 (A614)
講師:近藤 寛
所属:慶應義塾大学理工学部
要旨:
```

放射光を使った分光法は表面・界面で起こる化学反応を調べる道具として非常に有用であるが、同時にさらに幅広い応 用を展開するうえで妨げとなっている欠点もある。表面・界面反応研究における放射光分光の有用性を整理したうえで、 今後、そのような欠点を補いつつ、どのような方向への発展が可能かについて考えてみたい。特に、雰囲気制御下で行う 時間分解実験の可能性について議論する。 標題:放射光セミナー: 時間分解軟X線分光法による表面化学ダイナミクス研究の展開

日時:2009年11月9日(月) 午後3時~

場所:物性研究所本館6階第4セミナー室(A614)

講師:山本 達

所属:東京大学物性研究所軌道放射物性研究施設播磨分室

要旨:

触媒反応を初めとした表面化学反応を理解するためには、表面の構造・電子状態のみならず表面吸着種との相互作用、 そしてこれらを通した反応素過程のダイナミクスを明らかにする必要がある。フェムト秒レーザーを用いた超高速分光の 発展により、固体表面での原子や分子の拡散・脱離等の反応ダイナミクスをピコ秒以下の時間分解能で観測することが実 現された。しかし、現在得られる超短パルスレーザーのエネルギー領域は主に赤外あるいは可視領域であり、観測できる 現象には制限がある。一方、放射光のパルス時間構造を利用したX線領域での時間分解測定が近年可能になってきた。本 講演では、SPring-8 に整備された高輝度・高分解能軟X線ビームライン BL07LSU において得られる短パルス X 線と フェムト秒レーザー光を組み合わせたポンプ・プローブ時間分解光電子分光法により表面化学反応のダイナミクスを調べる 研究例について紹介したい。さらに、気体雰囲気下で光電子分光法が行える大気圧光電子分光法と組み合わせた時間分解大 気圧光電子分光法を開発し、触媒反応を反応条件下でリアルタイム観測することを目指す研究提案についても紹介したい。

標題:理論インフォーマルセミナー: Enlarged SU(6) symmetry of Ytterbium ¹⁷³Yb gases and its

consequences for Optical lattice systems and Ferromagnetic states

日時:2009年11月11日(水) 午後1時30分~午後2時30分

場所:物性研究所本館6階 第4セミナー室 (A614)

講師:M. A. Cazalilla

所属: Centro de Fisica de Materiales, CSIC-UPV/EHU

要旨:

We argue that an ultracold quantum degenerate gas of ytterbium ¹⁷³Yb atoms having nuclear spin I = 5/2 exhibits an enlarged SU(6) symmetry. We shall discuss the consequences of this symmetry for ultracold ¹⁷³Yb gases loaded in optical lattices. We argue that, in an optical lattice at current experimentally accessible temperatures, Mott states with different filling are expected to coexist in the same trap. Moreover, within the Landau Fermi liquid theory, stability criteria against Fermi liquid (Pomeranchuk) instabilities in the spin channel will be discussed. Focusing on the SU(n > 2) generalizations of ferromagnets, it is shown, within mean-field theory, that the transition from the paramagnet to the itinerant ferromagnet is generically first order. These SU(n > 2) ferromagnets can become stable by increasing the scattering length using optical methods or in an optical lattice.

```
標題:理論セミナー:Soft Hubbard gaps in disordered itinerant models with short-range interaction
日時:2009年11月13日(金) 午後4時~午後5時
場所:物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)
講師:品岡 寛
所属:東京大学物性研究所
```

要旨:

Interplay of electron correlation and randomness is studied using the Anderson-Hubbard model [1-2]. This model is one of the minimal models of real strongly correlated materials under the influence of inevitable randomness, and its Hamiltonian includes the nearest-neighbor hopping, on-site repulsion and spatially uncorrelated random potential.

Using the Hartree-Fock approximation, we obtain the ground-state phase diagram for three dimensions. One might think that, under the influence of the randomness, the single-particle density of states (DOS) is nonzero at the Fermi energy even in insulating phases because of localized impurity levels induced by randomness. However, we find that the DOS vanishes toward the Fermi energy under the influence of electron correlation. This indicates that an unconventional soft gap emerges from the coexistence of on-site repulsion and randomness. We call it *a soft Hubbard gap*.

As the origin of the soft Hubbard gap, we propose a phenomenology on the basis of the picture of a multivalley energy landscape. The predicted scaling of the DOS by the energy is in perfect agreements with the numerical results. We show further numerical evidence of the soft Hubbard gap in one dimension within the Hartree-Fock approximation and exact diagonalization. Finally, we compare the present theory with experimental results for SrRu_{1-x}Ti_xO₃.

Reference:

[1] H. Shinaoka and M. Imada, Phys. Rev. Lett. 102, 016404(1-4) (2009).

[2] H. Shinaoka and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. 78, 094708(1-20) (2009).

標題:理論セミナー:Electron on a Sphere: Aharonov-Bohm meet Aharonov-Casher

日時:2009年11月20日(金)午後4時~午後5時

場所:物性研究所本館6階第5セミナー室(A615)

講師: Prof.Yshai Avishai

所属: Department of Physics, Ben-Gurion University, Israel

要旨:

Two seemingly distinct systems are analyzed and, somewhat unexpectedly, shown to be related. System I -The Dirac monopole: A (spinless) electron on a sphere subject to a central magnetic field $B = g r/r^2$. The Aharonov-Bohm effect plays a key role [Wu and Yang, Phys. Rev. D 12, 3845(1975)], as it clarifies the construction of a non-singular vector potential and its relation to the Dirac quantization condition 2eg = nhc (n =0, 1, 2...). I approach this problem from a "condensed matter point of view" using a tight binding model. For highly symmetric lattices, the energy spectrum is calculated analytically as function of n and displays a beautiful pattern, which is entirely distinct from that of the Hofstadter butterfly. The systematics of level degeneracy is unusual and poses some challenges to the theory of point symmetry groups. The spectrum of an electron hopping on the sites of a Fullerene reveals a set of magic (monopole) numbers n_i.

System II -Spin-Orbit in a central field: A (spinfull) electron on a sphere subject to an electric field $E = q r/r^2$. Spinorbit interaction results through the Pauli equation and, in a tight binding formalism, leads to peculiar Aharonov-Casher effect. The spectrum is calculated analytically as function of the (dimensionless) spin-orbit strength and displays rich and beautiful pattern with some unexpected symmetries in which physics and geometry interlace.

Connection between I and II: I expose a remarkable relation between the two seemingly distinct physical problems: The energy spectrum in system II at a certain symmetry point is identical with the energy spectrum in system I at n = 1. Thus, it is principally possible to test the physics of an experimentally inaccessible system (magnetic monopole) in terms of an experimentally accessible one (electron subject to spin-orbit force induced by central electric field). 標題:理論インフォーマルセミナー: Fermi-liquid, non-Fermi-liquid, and Mott phases in iron pnictides and cuprates

日時:2009年11月24日(火) 午後2時~午後3時

場所:物性研究所本館6階第5セミナー室(A615)

講師:Dr. Ansgar Liebsch

所属:Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich

要旨:

The role of Coulomb correlations in the iron pnictide LaFeAsO is studied by generalizing exact diagonalization dynamical mean field theory to five orbitals.[1] For rotationally invariant Hund's rule coupling a continuous transition from a paramagnetic Fermi-liquid phase to a non-Fermi-liquid metallic phase exhibiting frozen moments is found at moderate Coulomb energies. For Ising-like exchange, this transition is first order and occurs at a lower critical Coulomb energy. The correlation-induced scattering rate as a function of doping relative to half-filling, i.e., $\delta = n/5$ -1, where n = 6 for the undoped material, is shown to be qualitatively similar to the one in the two-dimensional single-band Hubbard model.[2] In this scenario, the parent Mott insulator of LaFeAsO is the half-filled n = 5 limit, while the undoped n = 6 material corresponds to the critical doping region $\delta_c \approx 0.2$ in the cuprates, on the verge between the Fermi-liquid phase of the overdoped region and the non-Fermi-liquid pseudogap phase in the underdoped region.

[1] H. Ishida and A. Liebsch, arXiv:0911.1940 submitted to PRB

[2] A. Liebsch and N.H. Tong, Phys. Rev. B 80, 165123 (2009)

標題:理論セミナー:ハイブリッド型第一原理分子動力学法による凝縮系の化学過程の自由エネルギー計算 日時:2009 年 11 月 27 日(金) 午後 4 時~午後 5 時 場所:物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室(A615)

講師:高橋 英明

所属:大阪大学

要旨:

化学反応の経路を支配する本質的に重要な量は、言うまでもなくその過程に伴う自由エネルギー変化である。特に溶液 や生体分子など、熱揺らぎが大きい系においては、系を構成する分子について多くの配置を発生させることによって、自 由エネルギー変化を計算することが必須である。しかし、化学過程を理論的に記述するには量子化学計算が必須であり、 良く知られているようにその計算コストは電子数に対して急激に増大する。また、分子論に基づいて自由エネルギーを計 算することは、古典的な分子シミュレーションの手法を用いたとしても困難であることが知られている。従って、凝縮系 の化学過程の自由エネルギー変化を効率良く、第一原理的に計算する方法の開発は分子科学における挑戦的かつ重要な課 題の一つである。

我々はこの問題を解決する為に、実空間グリッドを基底とするハイブリッド型の第一原理分子動力学(QM/MM)法を開発 し[1]、さらにこれを新規な溶液の理論(エネルギー表示の理論[2])と結合した(QM/MM-ER[3])。QM/MM 法においては、 反応に関与する部分のみを量子化学的に扱い、残りの電子的に静的な部分を古典力場で記述するので計算精度を犠牲にする ことなく配置のアンサンブルを効率良く発生させることが可能である。また、Matubayasiらによるエネルギー表示の理論は、 通常の溶液の理論とは異なり、溶質周りの溶媒の空間分布ではなく溶質-溶媒間の相互作用エネルギーの分布関数を基本変数 として溶媒和自由エネルギーを記述するものである。この方法は理論的枠組みが厳密であり、いかなる溶質--溶媒の組につい ても一次元の分布関数で自由エネルギーを記述するので、空間分布関数を用いる方法と比べて収束が速いという利点がある。

本セミナーでは、QM/MM-ER 法の概略を説明するとともに、その応用例としてプロトンの水への溶媒和をとりあげ、 その種々のイオン形態(H₃O⁺, H₉O₄⁺)について自由エネルギー解析を行う。

- [1] H. Takahashi et al, J. Chem. Phys. 119, 7964 (2003).
- [2] N. Matubayasi et al, J. Chem. Phys. 113, 6070 (2000).

[3] H. Takahashi and N. Matubayasi et al, J. Chem. Phys. 121, 3989 (2004).

```
標題:理論セミナー:スピノール・ボース・アインシュタイン凝縮体で実現する非可換量子渦と衝突ダイナミクス
日時:2009 年 12 月 4 日(金) 午後 4 時~午後 5 時
場所:物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室(A615)
講師:小林 未知数
所属:東京大学大学院総合文化研究科
```

要旨:

Quantized vortices appear in various systems such as superfluid helium, superconductor, ultracold atomic Bose-Einstein condensates (BEC), and so on, and they are characterized by the topological charge. Vortices with the topological charge which obeys non-Abelian algebra can be identified as non-Abelian vortices. Although all integer and fractional vortices which have been studied in superfluid, superconductor, and atomic BEC are Abelian, we show that simplest non-Abelian vortices can appear in the system of a spin2-spinor BEC.

We further show that the non-Abelian properties become remarkable in the collision dynamics of vortices.

For example, when two vortices collide with each other, well known reconnection dynamics is topologically forbidden and a new vortex appears between the two vortices and connects them, following the algebraic manner.

標題:理論インフォーマルセミナー: Effect of nonlocal correlations in strongly correlated electron

systems - Local Vertex Approximation -日時:2009年12月14日(月) 午後3時~午後4時 場所:物性研究所本館6階第5セミナー室(A615) 講師:楠瀬 博明 所属:愛媛大学大学院理工学研究科 要旨:

In strongly correlated electron systems, one should take account of considerably different energy scales of a bare Coulomb repulsion and a renormalized kinetic energy. Additionally, the momentum-dependent correlations among quasiparticles must be relevant in considering 2nd-order phase transitions of superconductivity, magnetism etc. A dual nature of electrons in energy and momentum spaces and its interplay are essential in the vicinity of a quantum critical point.

Weak-coupling approaches such as perturbation and FLEX for low-energy effective models, or (cluster) dynamical mean field theory (DMFT) for strong short-range correlations have been developed to study strongly correlated electron systems. The interplay between electronic states in two opposite extremes is indispensable to show a variety in strongly correlated electron systems, however, which is difficult to treat based on one fixed point.

I propose a hybrid approach, which takes account of nonlocal correlations around DMFT solution. A diagrammatic construction of nonlocal fluctuations using a local vertex is developed to improve DMFT self energy. I will discuss mainly one-particle spectrum in the Hubbard and the Anderson lattice models. I will also touch on recent progress of theories in this direction.

【研究部門等】

○ 平成 21 年 5 月 31 日付け

(辞 職)

氏	名	所 属	職	名	異 動 内 容
阪井	寬 志	附属軌道放射物性研究施設	助	教	高エネルギー加速器研究機構助教へ

○ 平成 21 年 10 月 16 日付け

(採用)

氏	名	所 属	職	名	異	動	内	容	
山本	達	附属軌道放射物性研究施設(播磨分室)	助	教					
近 藤	晃 弘	附属国際超強磁場科学研究施設	助	教					

○ 平成 21 年 12 月 1 日付け

(採用)

氏	名	所 属	職	名	異	動	内	容	
新 見	康 洋	ナノスケール物性研究部門	助	教					

○ 平成 21 年 12 月 31 日付け

(辞 職)

氏	名	所 属	職	名	異 動 内 容
吉 本	芳 英	附属物質設計評価施設	助	教	鳥取大学工学研究科准教授へ

○ 平成22年1月1日付け

(採用)

氏	名	所 属	職	名	異 動 内 容
木俣	基	新物質科学研究部門	助	教	

(勤務地変更)

氏	名	所 属	職 名	異 動 内 容
松田	巌	附属軌道放射物性研究施設(播磨分室)	准教授	附属軌道放射物性研究施設(つくば分室)から

(転 出)

氏 名	所 属	職	名	異 動 内 容
石坂香子	先端分光研究部門	助	教	工学系研究科物理工学専攻准教授へ

(研修出向)

氏 名	所 属	職	名	異 動 内 容
阿部英介	ナノスケール物性研究部門	助	教	オックスフォード大学

○ 平成22年1月16日付け

(採用)

氏	名	所 属	職	名	異	Ę	動	内	容	
小澤	陽	先端分光研究部門	助	教						

下記により助教の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。

記

東京大学物性研究所長家 泰弘

下記により助教の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。

記

1. 研究部門名等および公募人員数 先端分光研究部門(辛研究室) 助教1名 2. 研究内容 先端的な真空紫外・軟 X 線レーザーを用いた超高分解能光電子分光、時間分解光電子分光、顕微光電子分光などに よる光科学と、それを用いた物質科学を推進する。 3. 勤務地 千葉県柏市柏の葉5-1-5 4. 応募資格 修士課程修了、またはこれと同等以上の能力を持つ方。 5.任 期 任期5年、再任可。ただし、1回を限度とする。 6. 公募締切 平成22年4月16日(金)必着 7. 着任時期 決定後なるべく早い時期 8. 提出書類 (イ) 推薦の場合 ○推薦書 ○履歴書(略歴で可) ○業績リスト(特に重要な論文に○印をつけること) ○主要論文の別刷(3編程度、コピー可) ○研究業績の概要(2000字程度) ○研究計画書(2000字程度) (ロ) 応募の場合 ○履歴書(略歴で可) ○業績リスト(特に重要な論文に○印をつけること) ○主要論文の別刷(3編程度、コピー可) ○所属長・指導教員等による応募者本人についての意見書(作成者から書類提出先へ直送) ○研究業績の概要(2000字程度) ○研究計画書(2000字程度) 9. 書類提出先 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号 東京大学柏地区物性研担当課総務係 電話 04-7136-3590 e-mail issp-somu@kj.u-tokyo.ac.jp 10. 本件に関する問い合わせ先 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号 東京大学物性研究所先端分光研究部門 教授 辛 埴 電話 04-7136-3380 e-mail shin@issp.u-tokyo.ac.jp 11. 注意事項 「先端分光研究部門 助教応募書類在中」、または「意見書在中」の旨を朱書し、郵送の場合は書留とすること。 12. 選考方法 東京大学物性研究所教授会にて審査決定いたします。ただし、適任者のない場合は、決定を保留いたします。 13. その他 お送りいただいた応募書類等は返却いたしませんので、ご了解の上お申込み下さい。また、履歴書は本応募の用途に 限り使用し、個人情報は正当な理由なく第三者への開示、譲渡及び貸与することは一切ありません。

平成 22 年 1 月 21 日

東京大学物性研究所長 家泰弘

下記により助教の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。 記 1. 研究部門名等および公募人員数 軌道放射物性研究施設 助教1名 2. 研究内容 本施設では、放射光施設(フォトンファクトリー)に整備したビームラインと実験設備を利用して、角度およびスピ ン分解光電子分光実験による物質の電子状態研究などを行っている。本公募では、放射光を利用する物性研究を精力的 に進めると共に、現有スタッフと協力して共同利用実験の支援も行い、実験技術開発によって新しい研究分野を開拓す ることに意欲ある若手研究者を希望する。 3. 勤務地 茨城県つくば市大穂1-1 高エネルギー加速器研究機構内 4. 応募資格 修士課程修了、またはこれと同等以上の能力を持つ方。 5.任 期 任期5年、再任可。ただし、1回を限度とする。 6. 公募締切 平成22年5月31日(月)必着 7. 着任時期 決定後なるべく早い時期 8. 提出書類 (イ) 推薦の場合 ○推薦書 ○履歴書(略歴で可) ○業績リスト(特に重要な論文に○印をつけること) ○主要論文の別刷(3編程度、コピー可) ○研究業績の概要(2000字程度) ○研究計画書(2000字程度) (ロ)応募の場合 ○履歴書(略歴で可) ○業績リスト(特に重要な論文に○印をつけること) ○主要論文の別刷(3編程度、コピー可) ○所属長・指導教員等による応募者本人についての意見書(作成者から書類提出先へ直送) ○研究業績の概要(2000字程度) ○研究計画書(2000字程度) 9. 書類提出先 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号 東京大学柏地区物性研担当課総務係 電話 04-7136-3590 e-mail issp-somu@kj.u-tokyo.ac.jp 10. 本件に関する問い合わせ先 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号 東京大学物性研究所附属軌道放射物性研究施設 教授 柿崎 明人 電話 04-7136-3400 e-mail kakizaki@issp.u-tokyo.ac.jp 11. 注意事項 「軌道放射物性研究施設 助教応募書類在中」、または「意見書在中」の旨を朱書し、郵送の場合は書留とすること。 12. 選考方法 東京大学物性研究所教授会にて審査決定いたします。ただし、適任者のない場合は、決定を保留いたします。 13. その他 お送りいただいた応募書類等は返却いたしませんので、ご了解の上お申込み下さい。また、履歴書は本応募の用途に 限り使用し、個人情報は正当な理由なく第三者への開示、譲渡及び貸与することは一切ありません。 平成 22 年 1 月 21 日

平成 22 平 1 月 21 日 東京大学物性研究所長 家 泰 弘

下記により助教の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。 記 1. 研究部門名等および公募人員数 物質設計評価施設 助教1名 2. 研究内容 設計部スタッフの一員として、共同利用スパコンの導入、管理、運用の業務に携わっていただく。また、物性科学に おける種々の問題を解明するため、第一原理電子状態計算、分子動力学法、モンテカルロ法などの手法を用いた大規模 数値計算による研究を、物質設計評価施設所員と協力して行っていただく。アルゴリズム/コードの開発、大型計算機 による計算のほか、計算機システム運用に経験がある方を希望する。 3. 勤務地 千葉県柏市柏の葉5-1-5 4. 応募資格 修士課程修了、またはこれと同等以上の能力を持つ方。 5.任 期 任期5年、再任可。ただし、1回を限度とする。 6. 公募締切 平成22年4月5日(月)必着 7. 着任時期 決定後なるべく早い時期 8. 提出書類 (イ) 推薦の場合 ○推薦書 ○履歴書(略歴で可) ○業績リスト(特に重要な論文に○印をつけること) ○主要論文の別刷(3編程度、コピー可) ○研究業績の概要(2000字程度) ○研究計画書(2000字程度) (ロ)応募の場合 ○履歴書(略歴で可) ○業績リスト(特に重要な論文に○印をつけること) ○主要論文の別刷(3編程度、コピー可) ○所属長・指導教員等による応募者本人についての意見書(作成者から書類提出先へ直送) ○研究業績の概要(2000字程度) ○研究計画書(2000字程度) 9. 書類提出先 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号 東京大学柏地区物性研担当課総務係 電話 04-7136-3590 e-mail issp-somu@kj.u-tokyo.ac.jp 10. 本件に関する問い合わせ先 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号 東京大学物性研究所物質設計評価施設 准教授 川島 直輝 電話 04-7136-3260 e-mail kawashima@issp.u-tokyo.ac.jp 11. 注意事項 「物質設計評価施設 助教応募書類在中」、または「意見書在中」の旨を朱書し、郵送の場合は書留とすること。 12. 選考方法 東京大学物性研究所教授会にて審査決定いたします。ただし、適任者のない場合は、決定を保留いたします。 13. その他 お送りいただいた応募書類等は返却いたしませんので、ご了解の上お申込み下さい。また、履歴書は本応募の用途に 限り使用し、個人情報は正当な理由なく第三者への開示、譲渡及び貸与することは一切ありません。 平成 22 年 1 月 21 日

東京大学物性研究所長 家 泰弘

物性研だより第49巻目録(第1号~第4号)

第49巻第1号 2009年4月

物性研	开を退職するにあたって・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	黒田	寛人		 	1
物性研	开を離れて・・・・・・	山口	明		 	2
		田山	孝		 	3
		鳴海	康雄		 	4
		木村	祟		 	6
外国ノ	人客員所員を経験して・・・・・・	Serge	y Nem	irovskii	 	7
		Rash	id. A. (aneev ·	 	8
物性研	开究所短期研究会					
<u>ې</u>	第2 回 極限コヒーレント光科学ワークショップ「極限波長領域における	光科学の	の新展	開」・・・・・	 	9
物性研	开究所談話会 • • • • • • • • • • • • • • • • • • •				 	23
物性研	开究所セミナー・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・				 	24
物性研	开ニュース					
\bigcirc	人事異動・・・・・・				 	28
\bigcirc	東京大学物性研究所教員公募について				 	31
\bigcirc	平成 21 年度前期短期研究会一覧				 	38
\bigcirc	平成 21 年度前期外来研究員一覧				 	39
\bigcirc	平成 21 年度前期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧				 	51
\bigcirc	平成 21 年度中性子回折装置共同利用採択課題一覧				 	56
\bigcirc	平成 21 年度後期共同利用の公募について				 	68
\bigcirc	東京大学旅費規程の改正に伴う出張手続きについて ・・・・・・・・・・				 	69
\bigcirc	平成 20 年度外部資金の受入れについて				 	71
\bigcirc	物性研滞在型国際ワークショップ開催のお知らせ ・・・・・・				 	72
\bigcirc	Horiba-ISSP 国際シンポジウム (ISSP11) 開催のお知らせ ・・・・・・				 	73
その個	也					
\bigcirc	東京大学放射光連携研究機構からのお知らせ ・・・・・・・・・・・・・・				 	74
\bigcirc	第54回物性若手夏の学校開催のお知らせ・・・・・・・・・・・・・・・・・・				 	76
編集後	後記					

物性研だよりの購読について

第49巻第2号 2009年7月

平成 20 年度客員所員を経験して・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	妹尾	仁嗣		1
	春山	純志		3
	柴田	尚和		5
物性研に着任して・・・・・・	野口	良史		7
	望月	敏光		8
	古府麻	祆衣子		9
物性研を離れて・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	阿曽	尚文		10
	松田	真生		11
外国人客員所員を経験して・・・・・	Mike	Zhitor	nirsky ·····	12

物性研究所国際ワー	-ク	ショ	ップ	•	短期研究会
-----------	----	----	----	---	-------

○"Supercomputing in Solid State Physics 2009"(物性物理学における大規模計算 2009) · · · · · · · · · · · 13
ISSP ワークショップ
○東大・KEK パルスチョッパー分光器とそのサイエンス
物性研究所談話会 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
物性研究所セミナー・・・・・ 20
物性研ニュース
○人事異動・・・・・・28
○東京大学物性研究所教員公募について ・・・・・ 29
○出張依頼の廃止について · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
編集後記

第49巻第3号 2009年10月

共同利用・共同研究拠点の認定について ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	家	泰弘	 		 • •	1
物性研をあとにして・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	石本	英彦	 	• • • • •	 • •	3
物性研に着任して・・・・・	芝	隼人	 	• • • • •	 •••	5
研究室だより						
○杉野研究室・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・			 	• • • • •	 •••	7
物性研滞在型国際ワークショップ						
○New Developments in Theory of Superconductivity(超伝導理論の新展開)		 	• • • • •	 •• 1	ί1
物性研究所談話会 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·			 	• • • • •	 •• 1	13
物性研究所セミナー・・・・・			 	• • • • •	 •• 1	ί4
物性研ニュース						
○平成 21 年度後期短期研究会一覧 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·			 	• • • • •	 ••• 2	21
○平成 21 年度後期外来研究員一覧 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·			 	• • • • •	 · · · 2	22
○平成 21 年度後期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧 ・・・・・・・			 	• • • • •	 •• 3	34
○平成 22 年度前期共同利用の公募について ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・			 	• • • • •	 •• 3	36
○平成 21 年度外部資金の受入れについて・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・			 	• • • • •	 •• 3	37
編集後記						

第49巻第4号 2010年1月

KEK-ISSP 共同建設分光器「高分解能チョッパー分光器」の経緯と建設状況について	佐藤	卓		1
物性研に着任して・・・・・・	山本	達		3
	近藤	晃弘		4
物性研を離れて・・・・・・	奥田	太一		5
研究室だより				
○加藤研究室・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	加藤	岳生		6
ISSP 国際シンポジウム				
\bigcirc Horiba-ISSP International Symposium on "Hydrogen and water in cond	ensed	natter	physics" (ISSP11) \cdots	11
物性研究所短期研究会				
○"ディラック電子系の物性−グラフェンおよび関連物質の最近の研究"・・・・				14

ISSP ワークショップ

○「新励起源による表面界面ダイナミクス研究の展望」 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・
〇「界面パイ電子系における新現象と物理」"Physics and New Phenomena of π-electronic Interfaces" ······ 47
物性研究所談話会 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
物性研究所セミナー・・・・ 53
物性研ニュース
○人事異動
○東京大学物性研究所教員公募について・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・
物性研だより第49巻目録(第1号~第4号)
編集後記

編集後記

今回の物性研だよりは盛り沢山である。

まず、KEK と ISSP が共同で J-PARC に建設を推進している高分解能チョッパー分光器の大立 体角検出器の大きさに驚いた。

物性研の着任・離任の記事を読むと、若いうちに様々な大学や研究機関を migrate することがい かに重要であるかがわかる。ポスドクや助教は限られた年数で成果を挙げねばならないので大変だ が、30歳代が忙しいなりにもっとも充実した研究生活を送れる時期だと思う。物性研は梁山泊のよ うなところなので、大学院生および若手研究者は自分の発想を活かしのびのびと活躍してほしい。

加藤所員の着任 5 年後の研究室だよりは、内容が具体的でリアリティ豊かな記事となっている。 1997 年に私が物性研(六本木)に着任したとき、加藤さんは確か今田研の博士課程大学院生だっ た。それから 12 年あまりたち、かつてスマートだった加藤さんは今や貫禄十分である。

本号で報告されたシンボジウムや研究会の内容は時代をかなり反映している。「Hydrogen and water in condensed matter physics (ISSP11)」では、身近な物質ながらエネルギーや環境の 観点から近年重要性が再認識されている水素と水について物性物理の視点から議論を行った。常行 先生(東大院理)と小生が Co-chair を仰せつかったのだが、様々な分野の実行委員の協力を得て結 構面白いシンポジウムになったと自負している。「ディラック電子系の物性」では、グラフェンを 始めとしてここ数年で飛躍的に進展し現在でもホットな話題を提供している低次元・ナノスケール 物質の物性が議論された。「新励起源による表面界面のダイナミクス」では、高輝度放射光や超短 パルスレーザーが実験を先導している。今まで見たくても見えなかったものがどんどん見えてくる ようになり、大変期待している。「界面π電子系」には残念ながら夏休み中で私自身は参加できな かった。"シェーン論文捏造事件"以降しばらくこの分野はダメージを受けたが、現在では様々な バックグラウンドを持つ研究者が参入し、もっともエキサイティングな学際的分野となりつつある。

上記のような内容の研究会が頻繁に開かれるようになり、物性研も変りつつあると言えば、保守 本流の物性物理学者からはおしかりを受けるであろうか?

吉 信 淳